

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.3 2010-7



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

大規模科学計算システム関連案内

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

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

階	係•室名	電話番号(内線) e-mail	主なサービス内容	サービス時間 月~金
一階	共同利用支援係 (受 付)	022-795-3406(3406) FAX:022-795-6099 uketuke@isc.tohoku.ac.jp	各種申請書、講習会、利用相 談、広報、センターへの質問や 要望の受付等	8:30~17:15
	利用相談室 022-795-6153(6153) sodan05@isc. tohoku. ac. jp	計算機利用全般に関する相 談	10:00~16:00	
		sodanosersc. tonoku. ac. jp	大判プリンタ、利用者端末等の 利用	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	9:00~17:00
	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
三階	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]

Express5800/A1080a-D のハードウェア

那須 康之 1 鈴木 健一 1 谷岡 隆浩 2

1. はじめに

Express5800/A1080a-Dは、米インテル®社の最新64bit 8コア インテル® Xeon® プロセッサをノードあたり4台 (32CPUコア) 搭載可能なccNUMA構造のスカラ並列型演算サーバです。1つの筐体内に2つのノードをコンパクトに収容した製品です。Express5800/A1080a-Dはメインフレームやスーパコンピュータの技術とノウハウを取り入れた、NEC独自開発のBIOSやファームウェア、サービスプロセッサにより高性能、高信頼性、高可用性を同時に実現するシステムアーキテクチャを有しています。本稿では、Express5800/A1080a-Dシステムのハードウェアについてご紹介します。

2. ハードウェア構成

2.1. 特長

表1にExpress5800/A1080a-Dの諸元を示します。特長を要約すると以下のようになります。

- (1) ノードあたり最大4台の64ビット 8コア インテル[®] Xeon[®]プロセッサを搭載可能な ccNUMA(Cache Coherent Non-Uniform Memory Access)アーキテクチャサーバです。
- (2) メモリはノードあたり最大1TB搭載可能です。
- (3) IOスロットとしてノードあたり最大7スロット(うち1スロットは内蔵HDDコントローラのスロットと兼用)のPCI-Express 2.0 スロットをサポートします。
- (4) 低いメモリレイテンシと高いメモリ/IO転送性能により、高いシステム性能を追求しています。
- (5) プロセッサ間を高速で広帯域のインターフェイスで直結したグルーレスアーキテクチャを採用しています。
- (6) 高速インターフェイスにはトランザクションリトライ機能によって間欠故障を救済する機能を備え、高信頼システムの構築に対応しています。
- (7) サービスプロセッサを備え、障害情報の収集、障害発生箇所の指摘、障害箇所の自動切り離し/自動再立ち上げを実現しています。
- (8) 冗長構成の電源/ファンを採用する他、電源/ファン/HDDのホットプラグをサポート しており、可用性の向上を図っています。

¹ 日本電気株式会社 IT ハードウェア事業本部 システム製品技術グループ

² 日本電気株式会社 IT ハードウェア事業本部 サーバ事業部

項目	諸元	
プロセッサ	8コア インテル® Xeon® プロセッサ	
	最大 4 台(32CPU コア) × 2 ノード	
最大メモリ容量	1TB (16GB DIMM 使用時)× 2ノード	
標準 IO スロット数	PCI-Express 2.0 × 7 スロット × 2 ノード	
筐体サイズ	448(W)×842(D)×307(H) mm (突起物、レール含む)	
重量	79.6Kg (レール含む)	

表1 Express5800/A1080a-D 諸元

写真1にExpress5800/A1080a-D(2ノード)の外観を示します。



写真1. Express5800/A1080a-D(2ノード)外観

2.2. 基本構造

図1に本体装置のハードウェアシステム構成を示します。本体装置は、プロセッサとメモリを搭載するプロセッサ・メモリモジュール (PMM)をノードあたり最大4式と、メインボード上に配置されるIO HUBおよびIOコントローラハブ (ICH10)を主要部品として構成されます。各々のプロセッサおよびIO HUB間はインテル® Quick Path インターコネクトによりポイント・トゥー・ポイント接続されており、最短経路でCPU間のデータ送受信が可能な論理構造になっています。

プロセッサ・メモリモジュールには、モジュールあたり16枚のDDR3 DIMMを搭載でき、8GB 容量のDIMMを用いた場合ノードあたり512GBまで、16GB容量のDIMMを用いた場合はノードあたり1TBまで拡張可能です。

I/OスロットはノードあたりPCI Express Gen2 x8スロット6本、x16スロット1本がメインボード上に配置されます。InfiniBand 4x QDRや10G Ethernetのような高速インターフェイスボードを利用する際にも十分余裕のあるスループットを確保しており、HPCC(High Performance Computing Clusters)やデータセンター内のクラスタシステム間の接続など、高速な通信イン

ターフェイスが求められる分野での利用にも適しています。なお、装置内に内蔵ハードディスクを搭載する場合には、x8スロットのうち1本にSAS RAIDカードを搭載して内蔵ハードディスクへの接続に用います。

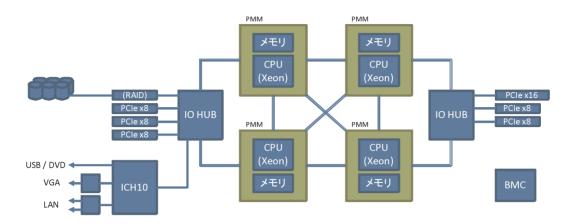


図1 Express5800/A1080a-D System Block Diagram(1ノードあたりの構成)

3. Xeon® プロセッサ 7500番台

3.1. Xeon® プロセッサ 7500番台の特長

Express5800/A1080a-Dは、米インテル®社製のインテル® Xeon® プロセッサ 7500番台を搭載し、サーバあたり最大4台(32CPUコア)搭載可能です。表2にXeon® プロセッサ 7500番台のなかで 最上位プロセッサであるX7560の仕様を示します。

項目	仕様 (X7560)		
コア種別	Nehalem コア (45nm High-k プロセス)		
コア数	8 コア		
マルチスレッド対応	対応 (コアあたり2スレッド)		
汎用レジスタ数	整数 16、浮動小数点 8		
発行ユニット	4 命令(micro-ops)/サイクルを発行		
実行ユニット	6 命令(micro-ops)/サイクルを実行		
	・3 メモリオペレーション		
	・1 ロード		
	・ 1 ストアアドレス		
	・1ストアデータ		
	・ 3つのALU(演算装置)機能		
アドレス空間	仮想メモリ空間 48bit		
	実メモリ空間 44bit		

表 2 インテル® Xeon® プロセッサ X7560 の仕様

Instruction Fetch and Instruction Fetch and PreDecode PreDecode Instruction Queue Instruction Queue Micro-Microcode ROM code ROM Decode Rename/Alloc Rename/Alloc Retirement Unit (Re-Order Buffer) Retirement Unit (Re-Order Buffer) Scheduler Scheduler Stor EXE EXE Stor EXE EXE EXE EXE Load Load е е Unit Unit Unit Unit Unit Unit Cluster Cluster Cluster Cluster Cluster Cluster 5 0 1 5 L1D Cache and DTLB L1D Cache and DTLB L2 Cache L2 Cache Other L2 Inclusive L3 Cache by all cores

図2にXeon® プロセッサ 7500番台の内部構造を示します。

図2 インテル® Xeon® プロセッサ 7500番台の内部構造

Intel QPI Link Logic

MP系(4ソケット以上)のXeon® プロセッサとして初めて、メモリコントローラの内蔵や、これまでのFSB(Front Side Bus)を置き換えるインテル® Quick Path インターコネクトに対応し、広帯域幅かつ低レイテンシでのポイント・トゥー・ポイント接続を実現しました。インテル® Quick Path インターコネクトは、最高6.4GT/sの転送レートで、1リンクあたりの帯域は25.6GB/sに達します。図3に、Express5800/A1080a-Dのトポロジを示します。

Intel® 7500 Chipset intel xeon® 7500 xeon® 7500 intel xeon® 7500 intel xeon® 7500

Express5800/A1080a-D(1 サーバ)

図3 Express5800/A1080a-Dのトポロジ

図4に示すように、プロセッサ内のメモリコントローラは、4つのSMI(Scalable Memory Interface)チャネルを持ちます。SMIには2つのDDR3チャネルを持つSMB(Scalable Memory Buffer) が接続され、SMB あたり最大4枚、プロセッサあたり最大16枚のDDR3 Registered-DIMMを接続可能で、これまでに無い広大なメモリ空間を実現します。

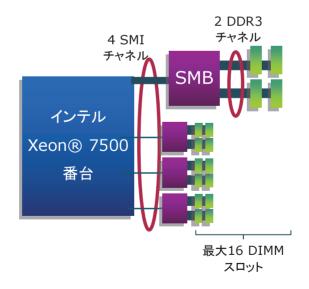


図4 インテル® Xeon® プロセッサ 7500番台でのメモリ接続

3.2. Xeon® プロセッサ 7500番台のキャッシュメモリ仕様

一般的なスカラ型マイクロプロセッサと同様にインテル® Xeon® プロセッサ 7500番台もキャッシュメモリの有効活用が性能向上の鍵となります。表3にXeon® プロセッサ 7500番台のキャッシュメモリ仕様を示します。

表3 インテル® Xeon® プロセッサ (X7560)のキャッシュ詳細仕様

キャッシュ階層	形式	容量
L1 (命令)	コア毎	32KB
L1 (データ)	コア毎	32KB
L2 (命令・データ)	コア毎	256KB
L3 (命令・データ)	コア共有	24MB

4. ハードウェア性能

インテル®Xeon® プロセッサ 7500番台は、1クロックサイクルあたり最大4回の演算を実行可能なNehalemマイクロアーキテクチャと、単一CPUソケット内に最大8プロセッサコアを内蔵したマルチコアCPU構造を採用しています。これによるCPUソケットあたりの最大計算能力は72.3GFLOPSに上ります。Express5800/A1080a-Dは、ノードあたり最大4CPUまで搭載することができますので、ノードあたり最大289.3GFLOPS、従来の機種(TX7/i9610)との比較ではCPUコアあたりで1.4倍、CPUソケットあたりで5.6倍もの計算能力を有します。

メモリのスループットとレイテンシについても、Express5800/A1080a-D では従来の TX7/i9610 に比べても高い性能を得ることができます。

TX7/i9610では、システムのスループットを最大化するため、図5に示すように2個のCPU毎にFSBを分割した論理構造を基本単位(セルノード)とし、最大32CPUまでの密結合マルチプロセッサシステムを構築できる構成を採用しています。

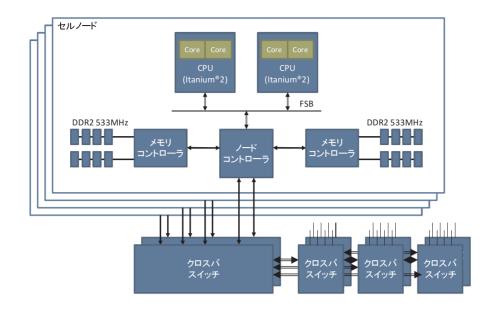


図 5 TX7/i9610 のプロセッサーメモリ間接続構成

一方 Express5800/A1080a-D では、インテル® Xeon® プロセッサ 7500 番台がプロセッサコアとメモリコントローラを単一の CPU ソケット内に実装するため、図 6 に示すようにメモリは SMB(Scalable Memory Buffer)を介して CPU に直接接続される論理構造をとります。このため、プロセッサコアから同一ソケット内のローカルメモリへのアクセス時には DDR3 DIMM のスループットを十分に活用する事ができるとともに、ccNUMA に最適化されたアプリケーション環境下では CPU ソケット数に応じてシステムのスループットを伸ばすことも可能になります。

TX7/i9610とExpress5800/A1080a-D の最大構成でのメモリのスループット(理論値)の比較では、プロセッサコアあたりで Express5800/A1080a-D が約 1.4 倍上回る結果が得られます。

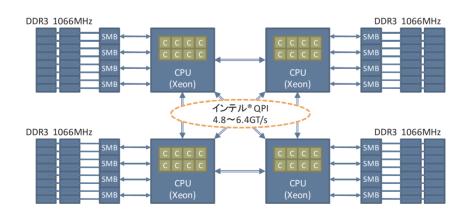


図 6 Express5800/A1080a-D のプロセッサーメモリ間接続構成

このような両者の論理構造の違いにより、Express5800/A1080a-D では良好なメモリレイテンシを得ることが可能になりました。プロセッサコアから最も近いローカルメモリまでのレイテンシで比較した場合、Express5800/A1080a-D のレイテンシは TX7/i9610 の約 40%(理論値)です(図 7)。 さらに、Express5800/A1080a-D ではインテル® Quick Path インターコネクトを介してリモートメモリへも 1 ホップでアクセスできますので、リモートメモリへのアクセスも高速です。

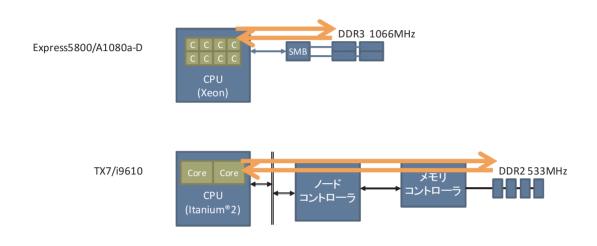


図7 ローカルメモリへのアクセス経路比較

加えて、Express5800/A1080a-D では ccNUMA に対応しています。ccNUMA はメモリが物理的に分散して配置されプロセッサコアからメモリまでのレイテンシが均一でない装置構成で、キャッシュコヒーレンシを維持しながら各々のメモリを全てのプロセッサから共通の物理メモリとして利用できるようにするメモリアーキテクチャです。Express5800/A1080a-D ではACPI(Advanced Configuration and Power Interface)に ccNUMA 対応の機能を実装しており、Linux OS との組み合わせで ccNUMA に対応したアプリケーションを利用する事ができます。

優れたメモリバンド幅とレイテンシを実現する論理構造と、ccNUMA に最適化可能な機能により、Express5800/A1080a-D のアーキテクチャは従来の機種以上に高い性能を実現することができます。

5. むすび

以上、スカラ並列型演算サーバ Express5800/A1080a-D について述べました。科学技術用途における大規模高速演算のみならず、IT 社会基盤の構成要素としても、今後ますますサーバの重要度は増していきます。NEC は、最先端の技術を駆使して、さらに高い処理性能、拡張性、信頼性を実現するサーバ製品を継続して提供してまいります。

「共同研究成果」

平行平板間流れにおける乱流斑点の発達に関する DNS 解析

塚原 隆裕* 會田 紘史** 川口 靖夫*

*東京理科大学 理工学部 機械工学科 **東京理科大学大学院 理工学研究科 機械工学専攻

1. 序論

我々の身の回りには様々な流れが存在し、それらは人間生活に深く関わっているものが多い。これらの流れはそのほとんどが激しく波打ち、複雑に渦を巻く乱流である。乱流は時間的・空間的に不規則であり、つまり三次元的な強非線形現象であるため、その流れを予測することは非常に困難である。乱流現象の解明に向け多くの実験的研究が古くから行われてきた一方で、今ではコンピュータの高性能化と CG(コンピュータ・グラフィックス)技術の進歩により、CFD(Computational Fluid Dynamics)も重要なアプローチの一つとなっている。特に、支配方程式をモデル化せずに厳密に解く直接数値シミュレーション(DNS: Direct Numerical Simulation)は、その信頼性から、乱流構造の解明に大きく貢献してきた。本研究でも行う DNS から得られた解析結果やデータベースは、実験と比較され、理論的解析や乱流モデルに広く応用されている。DNS の実行には膨大な CPU メモリと計算時間を要するものの、実験では得難いデータを DNS によって精度良く得ることができる。また、大型並列計算機を用いることで、実験困難な流路規模(周期境界による仮想無限流路)の数値実験を行うことができるため、本研究対象のような遷移レイノルズ数域の流動現象の解明には適したアプローチである。

平行平板間乱流においてレイノルズ数を遷移域まで下げていった場合,局所的な準層流域と乱流域が縞状に分布した乱流縞構造が発生し維持されることを,Tsukaharaら [1, 2, 3] が DNS を用いて発見した.これは,水平方向の計算領域のサイズに関して,従来の DNS で用いられたものに比べ大規模に設定したことにより, $Re_{\tau} \leq 80$ ($Re_{\tau} = u_{\tau}\delta/\nu$, u_{τ} :壁面摩擦速度, δ :チャネル半幅, ν :動粘性係数)において,過去の(実々験を含む)研究では捉えることが困難であった大スケールの構造を捉えたものである.乱流縞構造では,準層流域と乱流域が主流方向に対して規則的な角度($20^{\circ}-30^{\circ}$)を保ち,ポアズイユ流れでは構造が下流へと移動する.この乱流縞構造は,Hashimotoら [4] の可視化実験においても $Re_{\rm m} < 2000$ ($Re_{\rm m} = u_{\rm m}\delta/\nu$, $u_{\rm m}$:バルク平均速度)で観察されている.以上のように,乱流縞構造は実験・数値計算共に,乱流状態の流れ場からレイノルズ数を下げることにより発生が確認されている.クエット流れにおいては,乱流斑点が発達することで乱流縞構造が発生することを Duguet ら [5] が報告している.

本研究では、平行平板間ポアズイユ流れを解析対象とし、乱流斑点の発達により乱流縞構造が発生すると考え、DNS解析を行った。さらに、乱流斑点の発達速度や渦構造を可視化し、Tsukaharaら [1, 2, 3] により得られた乱流縞構造との比較を行う。

2. 解析手法

2.1 解析対象

解析対象となる流れ場は、非圧縮性ニュートン流体における平行平板間ポアズイユ流れである。図 2.1 に示すように、流れは一定の圧力勾配により駆動される。壁面上では滑り無し条件とし、無限に広い平行平板を模擬するため、主流 (x) 方向及びスパン (z) 方向には周期境界条件を適用した。レイノルズ数は $Re_{\tau}=56$ とした。非常に大規模な計算領域 $(L_x \times L_y \times L_z = 731.4\delta \times 2\delta \times 365.7\delta)$ を適用することで、単独の乱流斑点の成長を長時間追跡した。

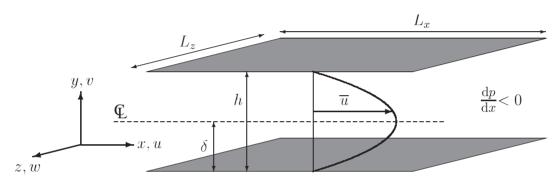


図 2.1 解析対象

2.2 支配方程式

本研究では、非圧縮性流体の運動を記述する以下の支配方程式について、モデル化せず 数値的に直接解くことで乱流現象を忠実に再現する。

• 連続の式

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \tag{2.1}$$

• 運動量方程式 (Navier-Stokes 方程式)

$$\frac{\partial u_i^+}{\partial t^*} + u_j^+ \frac{\partial u_i^+}{\partial x_j^*} = -\frac{\partial p^+}{\partial x_i^*} + \frac{1}{Re_\tau} \frac{\partial^2 u_i^+}{\partial x_j^{*2}}$$
(2.2)

ここで、三次元の直交座標系とし(i=1, 2, 3)、 u_i は速度、p は圧力、t は時間を表す、上添え字($^+$)は u_τ 及び ν で、(*)は δ でそれぞれ無次元化された物理量であることを示す。また、一つの項で繰り返されている添え字(i,j)はアインシュタインの総和規約に従う。

CPU 時間 [h:m:s]	1:39:54
MOPS 値	56797
MFLOPS 値	28710
MOPS 値(実行時間換算)	356440
MFLOPS 値(実行時間換算)	180175
平均ベクトル長	255.98
ベクトル演算率[%]	99.76
メモリサイズ [MB]	97280

表 2.1 プログラム性能 (SX-9 利用)

プロセッサ同時実行時間	
Conc. $Time(>=1)$ (sec)	21847.85
Conc. $Time(>=2)$ (sec)	20891.90
Conc. Time($>=3$) (sec)	19925.18
Conc. $Time(>=4)$ (sec)	18865.85
Conc. Time($>=5$) (sec)	18671.95
Conc. $Time(>=6)$ (sec)	18598.55
Conc. Time($>=7$) (sec)	18315.93

2.3 計算手法

連続の式と Navier-Stokes 方程式のカップリングには Fractional-step 法を用いた. 時間的離散化には、対流項、粘性項(x, z 方向)に 2 次精度 Adams-Bashforth 法、粘性項(y 方向)に 2 次精度 Crank-Nicolson 法を適用した. 空間的離散化には、x 方向と z 方向に 4 次精度中心差分を、y 方向には 2 次精度中心差分を用いている.

2.4 計算条件

本研究では、初期条件として定常状態の層流の流れを与え、さらに撹乱を与えることで 乱流斑点を発生させる。初期撹乱として、Henningson ら [7] による解析に基づき、以下に 示す流れ関数 ψ を用いた。

$$\psi = A \left(1 - y^2 \right)^2 z e^{-x^2 - z^2} \tag{2.3}$$

$$v = \psi_z \tag{2.4}$$

$$w = -\psi_{y} \tag{2.5}$$

式 (2.3)–(2.5) より,壁面垂直方向速度v 及びスパン方向速度w が与えられ,x-y 面について対象な一対の渦が与えられる.また,チャネル中央における主流方向の流速と渦の壁面垂直方向の最大流速が一致するように定数A を与えた.

2.5 プログラム性能

表 2.1 に Proginf の一例を示す.ここで,計算プログラムの解析条件は $Re_{\tau}=56$, $N_x \times N_y \times N_z=4096 \times 64 \times 2048$ とし,10,000 step(無次元時間 $t^*=4$)に亘って解析を行った.格子点数は5 億点を超えており,非常に大規模な計算を行ったものである.

3. 結果及び考察

3.1 速度場の時間変化

図 3.1 に各時刻におけるチャネル中央平面内の流れ場(壁面垂直方向速度 v^+)を示す. 図から明らかなように、速度乱れ($|v^+|$ の値)が大きな領域が局所的に発生しており、局 在した乱流域と判断できる. 初期撹乱として与えられた渦は直ちに崩壊し, 斑点状の乱 流域を形成する. その後, 乱流域の下流側の乱れが減衰することでよく知られる矢尻型 の乱流斑点が確認された(図 3.1(a)). 点線で示された領域の拡大図を,同じ図中に示す. ポアズイユ流れにおける乱流斑点は下流側に乱れの弱い領域が存在し、両端に特徴的な 波 (oblique waves) を生じることが Carlson ら [6] や Henningson ら [7] により報告されて おり、本計算においても同様の結果が得られている. 乱流斑点は発達を続け、乱流域がス パン方向に崩壊し、下流側に開いた V 字型の構造となる(図 3.1(b)). 図 3.1(c), (d)に おいて、乱流域内部の乱れが減衰し、直線状の準層流域が現われる.一対の準層流域と 乱流域の主流方向空間スケール λ_x 及びスパン方向スケール λ_z について、この時点では $\lambda_x \approx 50\delta$ 及び $\lambda_z \approx 20\delta$ であり,Tsukahara ら [2, 3] による乱流縞の空間スケール $\lambda_x \approx 66\delta$ 及び $\lambda_z \approx 22\delta$ に比べて小さな値となっている。また、乱流斑点下流側において乱れが伝 播し、新たな乱流域が生じていることが確認できる. さらに、図 3.1(d)-(f)では、乱流斑 点内部について新たに発生した乱流域がまた別の準層流域と乱流域の間欠構造を作り出 し、その空間スケール $(\lambda_x \approx 60\delta, \lambda_z \approx 20\delta)$ は十分に発達した乱流縞と良く一致して いる. また, 乱流斑点のスパン方向先端において, 乱流域が枝分かれし, 上下3本ずつの 乱流域が直線状に発達する様子が確認できる. 各々の乱流域の先頭では, 矢尻型の乱流斑 点で見られた oblique waves が確認でき、乱流縞構造に比べ、矢尻型の乱流斑点と良く似 た構造を示している. さらに、図 3.1(g)、(h)より、枝分かれによって生じた乱流域内に 準層流域が発生していることが確認できる. スパン方向先端では oblique waves を保って いるが、その主流方向に対する傾斜はおよそ 45° であり、 $t^* = 8$ (図 3.1(a))で見られた oblique wavesの傾斜 30° に比べて大きい、また、準層流域及び乱流域を含めた構造全体で は依然として V字型を維持している.

3.2 空間スケールの変化

図 3.2に示すように、初期撹乱としての渦の発生点から乱流斑点下流先端の主流方向座標を x_A 、上流先端の座標を x_B 及びスパン方向中心から両端までの距離 z_A 、 z_B を定めた。また、各座標の時間進行に伴う移動の様子を図 3.3に示す。図 3.3より、乱流斑点は主流・スパン両方向にほぼ一定の速度で移動・成長することが確認できる。乱流斑点の成長速度が一定であることは Carlson ら [6] や Henningson ら [8] によって実験・数値計算共に確認されている。図 3.3より乱流斑点の各座標における移動速度を算出し、表 3.1に示す。また、表では Henningson ら [8] が示した移動速度と比較している。 Henningson ら [8] は乱流

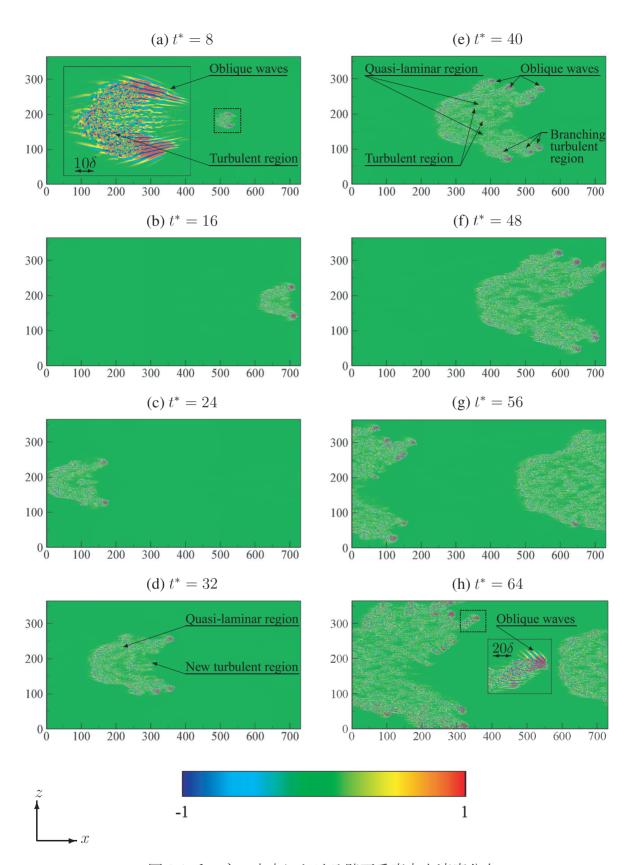
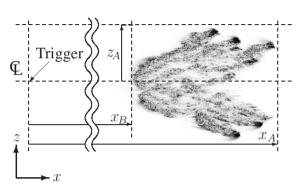


図 3.1 チャネル中央における壁面垂直方向速度分布

域内部における準層流域の発生及び先端における乱流域の枝分かれまでの乱流斑点の発達を観察しておらず、これらの変化を観察した本計算においても一定の速度で乱流斑点が成長することが確認された.



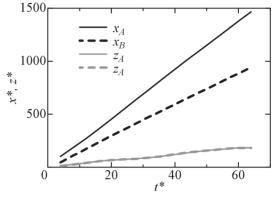


図 3.2 乱流斑点の概念図

図 3.3 乱流斑点の空間スケールの時間変化

Position	Propagation	Propagation velocity
of the spot	the spot velocity By Henningson	
$x_A/\left(tu_c/\delta\right)$	0.82	0.80
$x_B/\left(tu_c/\delta\right)$	0.53	0.54
$z_A/(tu_c/\delta)$	0.11	0.12

表 3.1 乱流斑点の移動速度

3.3 渦構造

各時刻における渦構造を可視化し、図 3.4 に示す. 渦構造の抽出に関しては、変形速度 テンソルの第二不変量による円形または螺旋運動を伴う渦領域の同定法が提案されており、第二不変量の負値を示す領域と渦構造が良く一致することが知られている. 本研究に おいても、渦構造の抽出には変形速度テンソルの第二不変量を適用する.

$$II = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \tag{3.1}$$

ここでも,アインシュタインの総和規約を適用する.また,図 3.4(a) 及び (d) では点線で囲まれた領域の拡大図を示している.図 3.4(a) より, $t^*=8$ における乱流斑点の下流域では渦が存在せず,渦群が V 字型の構造を形成していることが確認できる.また,oblique wavesを生じる乱流斑点スパン方向先端の領域(wing-tip 領域)の渦は,他の渦に比べて主流方向に長く伸びた縦渦を生じている.図 3.4(b) では渦群が直線状に分布し,(c) の $t^*=32$ 以降では V 字型の渦群の中に渦のほとんど存在しない領域が直線状に現われている.渦の分

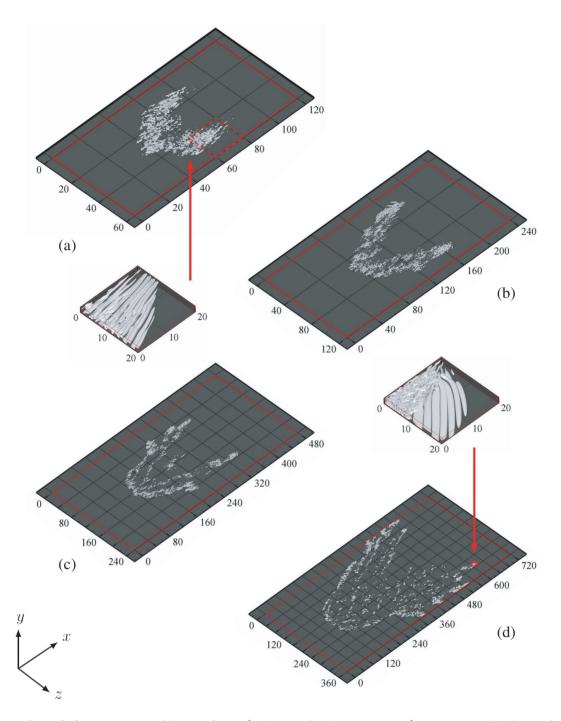


図 3.4 変形速度テンソルの第二不変量($II^+=u_{i,j}^+u_{j,i}^+\leq -0.025$)による渦構造の可視化. (a) $t^*=8$, (b) $t^*=16$, (c) $t^*=32$, (d) $t^*=64$.

布からも準層流域と乱流域の間欠構造が確認でき,それらは主流方向に対して傾斜した縞状の構造を形成することが確認できる.図 3.4(c) 及び (d) において,wing-tip 領域では渦が密集しており,その空間スケールも大きい.また, $t^*=64$ においても $t^*=8$ (図 3.4(a))のときと同様に大規模な渦群が分布しているが,3.1 節にて述べたように, $t^*=64$ では主流方向に対して大きく傾斜している(約 45°).図 3.1 と図 3.4(a)–(d) を比較すれば, $|v^+|$ の値が大きな領域では渦が活発に発生していることが確認できる.

4. 結論

本研究では、平行平板間ポアズイユ流れに乱流斑点を発生させ、乱流縞構造への発達を観察する直接数値シミュレーションを行った。レイノルズ数は乱流縞構造を捉えることができる $Re_{\tau}=56$ に設定し、非常に大規模な計算領域($L_x\times L_y\times L_z=731.4\delta\times 2\delta\times 365.7\delta$)について解析を実施した。これにより、単独の乱流斑点が計算領域を埋め尽くすことなく乱流縞構造へ発達する様子を長時間追跡し、以下の知見を得た。

- 乱流斑点は $t^* = 8$ -16 において、乱流域がスパン方向に分裂し、V字型の構造を取る。さらに乱流斑点は成長を続け、 $t^* = 24$ -32 において乱流域の内部に準層流域が生じることで、乱流斑点内部に準層流域と乱流域の縞状の間欠構造が形成される。また、乱流斑点スパン方向先端において、乱流域が上下共に3本ずつに枝分かれし、主流方向に対しておよそ 30° の角度を保ちつつ直線状に成長する。これにより生じた乱流域は、内部から準層流域及び乱流域へと分裂する。
- 本解析の範囲内 $(t^* = 64 \text{ まで})$ では、準層流域及び乱流域を合わせた乱流斑点全体 は \mathbf{V} 字型の構造を保っている。
- 乱流斑点において、乱流域内部における準層流域の発生やスパン方向先端における 乱流域の枝分かれ等の変化が確認されたが、主流・スパン方向の移動・成長速度は ほぼ一定である.
- 準層流域と乱流域の間欠構造は渦の分布からも確認できる. また, wing-tip 領域では他の領域に比べ空間スケールの大きな渦が存在する.

以上より,発達した乱流斑点内部では,準層流域と乱流域による縞状の間欠構造が確認でき,その間欠構造について乱流縞構造と良く一致したスケールを示すことが確認された.

謝辞

本研究における DNS 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を利用して実行されたものであり、同センターのご協力を頂いたことに謝意を表す.また、本研究の一部は科学研究費補助金(#20860070, #22760136)の助成を受けた.

参考文献

[1] Tsukahara, T., Seki, Y., Kawamura, H., and Tochio, D., "DNS of turbulent channel flow at very low Reynolds numbers," In: Proceedings Fourth International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, Williamsburg, VA, USA, Jun. 27–29, pp. 935–940, 2005.

- [2] Tsukahara, T. and Kawamura, H., "Turbulent heat transfer in a channel flow at transitional Reynolds numbers," In: Proceedings of the First Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, Xi'an, China, Oct. 18–21, p. 62, 2007.
- [3] Tsukahara, T., Kawaguchi, Y., Kawamura, H., Tillmark, N., and Alfredsson, P. A., "Turbulence stripe in transitional channel flow with/without system rotation," In: Proceedings of the Seventh IUTAM Symposium on Laminar-Turbulent Transition, IUTAM Bookseries, Vol. 18, Springer, pp. 421–426, 2009.
- [4] Hashimoto, S., Hasobe, A., Tsukahara, T., Kawaguchi, Y., and Kawamura, H., "An Experimental study on turbulent-stripe structure in transitional channel flow," In: Proceedings of the Sixth International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer, Rome, Italy, Sep. 14–18, pp. 193–196, 2009.
- [5] Duguet, Y., Schlatter, P., and Henningson, D. S., "Formation of turbulent patterns near the onset of transition in plane Couette flow," J. Fluid Mech., **650**, pp. 119–129 2009.
- [6] Carlson, D. R., Widnall, S. E., and Peeters, M. F., "A flow-visualization study of transition in plane Poiseuille flow," J. Fluid Mech., **121**, pp. 487–505, 1982.
- [7] Henningson, D. S. and Kim, J., "On turbulent spots in plane Poiseuille flow," J. Fluid Mech., **228**, pp. 183–205, 1991.
- [8] Henningson, D., Spalart, P., and Kim, J., "Numerical simulations of turbulent spots in plane Poiseuille and boundary-layer flow", Phys. Fluids, **30**, pp. 2914–2917, 1991.



「研究成果」

20年を超える衛星海面水温画像の超高速大量処理

川村宏・細田皇太郎・Huiling Qin・境田太樹・戸間幸大 東北大学大学院・理学研究科

現在進行中の 20 年を超える毎日の衛星海面水温(Sea Surface Temperature: SST)画像を、サイバーサイエンスセンターの設備を用いて一気に解析する研究計画を紹介する。1988 年から開始した NOAA 衛星データ直接受信は現在まで途切れることなく継続し、貴重な長期・広域・高解像度地域環境データベースとなった。それから作成された 0.01 度格子の SST 画像、約 80,000 シーンが蓄積されている。これを用いて SST 長期変動や SST 変動強度のトレンドに関する研究を実施するためには、このすべての画像の個々のピクセルの SST 値が、同様の高い品質を持っていなければならない。20年を超える衛星 SST 画像の統一的な品質管理について紹介する。

1. はじめに

可視赤外放射計を搭載した複数の静止気象衛星と極軌道衛星を用い、全球の気象観測を行うシステムが世界気象機関において構想され、1970年代後半に実現した。1978年、世界中の雲を観測する改良型高解像度放射計(AVHRR)を登載した NOAA シリーズ衛星の運用が開始された。AVHRR 計測の分解能を落とすことなく、センサー計測値を即時に直接地上にディジタル送信する方式(HRPT:High Resolution Picture Transmission)の利便性により、その後広く研究者や現業利用に利用されることになった。

東北大学大学院理学研究科では、1988年より、NOAA衛星のHRPTデータの直接受信を開始した。それ以来、22年が経過したが、受信はほとんど途切れることなく継続し、受信データもすべて保管されている。この間、サイバーサイエンスセンターへの受信局設置と管理移管(1996年頃)、東北アジア研究センター工藤研究室への管理運営移管などがあった。しかし、東北大学において確立された衛星直接受信と地域画像データベース Japan Image Database (JAIDAS、日本画像データベース) は、当 初 の 開 発 意 図 に 沿 っ て 、 高 解 像 度 衛 星 画 像 デ ー タ を 配 信 し 続 け て い る (http://asiadb.cneas.tohoku.ac.jp/jaidas/、http://asiadb.cneas.tohoku.ac.jp/)。JAIDAS を開始してから 10 年ほどたった頃、それまでの経緯と即時衛星画像データベースの意義を論じた解説記事を SENAC に掲載した (川村、2000)。

私たちのグループでは、AVHRR データを用いて海洋の研究を行っている。その際、高解像度 SST 画像を作成する。SST 観測に関し、AVHRR センサーは大変優れた特性を持っていた。AVHRR 赤外バンドの感度がこれまでより格段に向上し、しかも 1km の空間分解能をもっていたので、海洋の100km スケールの総観規模現象を捉えるうえで極めて有効であった。また、ブイなどによる SST 観測を真値とした場合、標準誤差 0.7 度程度で衛星海面水温を推定できることが明らかとなり、大気海洋現象の解析に大きな威力を発揮した。

1988 年に開設された地球観測データ受信解析室において、AVHRR 海面水温計測に関する研究は大いに進み、高精度推定技術の開発を経て(例えば、Sakaida and Kawamura, 1992)、蓄積された毎日の受信データを処理し、長期広域の SST 画像データベース(Highers と呼ぶ)を作成して(Sakaida and Kawamura, 1996)、研究に使用する(例えば、Sakaida et al., 1998)ことができるようになった。しかし、Highers 作成に当たって、受信解析室設置のミニ・コンピュータを使用していたので、その処理能力には限界があった(表 1)。

1988 年以来の HRPT 受信データが 10 年分ほど蓄積された頃、この長期観測データを一括して処

理・解析することを考え始めた。数年かけて、理学部の地球観測衛星データ受信解析室の光ディスク装置(川村・木津、1991)に蓄積された HRPT データを大型計算機センターに設置されていた読み取り装置で読み込み、DTF テープに格納する作業を行った。ワーク・ステーションや大型計算機センターで処理するためである。10 年分の大量衛星データ処理を高速で行うことには大きな意味がある。処理能力の向上は、様々な研究開発を促進するので、最終プロダクトである SST 画像の高度化につながり、それに引き続く海洋学・海洋気象学研究を加速させるからである。そこで、HRPT データを当時最速の SX-3/44R(25.6Gflops)で行うことを考え、開発研究を行った(Kawamura et al., 1997)。

10 年分の大量処理を経て作成される SST 画像は、Advanced・Highers (A・Highers) と呼ばれることになった(Sakaida et al., 2000)。作成された A・Highers 画像を図 1 に示す。北緯 20・60 度、東経 60・120 度の範囲について、約 1km の空間解像度(0.01 度格子)で SST 値が算出される。この画像は、4001x4001 ピクセルから構成され、1 画像 30.5MByte の容量を持つ。開発中に計算機の入れ替えがあり、実際の処理は主に SX・4 で行われた。その結果、10 年分の A・Highers 画像作成を、約 3 週間で行えるようになった(表 1)。

現在、A-Highers 画像はサイバーサイエンスセンターの並列コンピューター(2010 年 4 月の入れ替えで、Express5800 が導入された)で、受信後、即時処理されている。これは、宇宙航空研究開発機構(JAXA)などと共同で行っている新世代海面水温実証運用(http://www.ocean.caos.tohoku.ac.jp/~merge/sstbinary/actvalbm.cgi)で使用するためである(Sakaida et al., 2009)。即時処理を行うためには、高速のネットワーク環境と計算機環境が不可欠である。また、HRPT データの保管領域として、磁気媒体に加えて大容量ハードディスクを使用するようになった(表 1)。

2. 1km 解像度で見る地球温暖化を含む地域の海面水温変動 2.1 新しい課題

A・Higher 画像大量処理に関する諸問題は、サイバーサイエンスセンターの計算機・ネットワーク環境を使用することによってほぼ解決された。2008 年までに作成された A・Highers 画像の年ごとの分布を図 2 に示す。NOAA 衛星データの直接受信は 1988 年に開始されたが、それ以前に日本の他の受信局で受信された HRPT データを収集していたので、それらについても A・Highers 画像を作成している。1982 年から 2008 年まで、84,067 画像が蓄積されている(図 2)。

SST は地球温暖化の重要な指標である。最近の 20 年間で、地球温暖化の影響が多くの地域で顕在化するようになった。全球 SST の増加傾向は、気象機関や専門家によって詳細に調べられ、報告されている(例えば、IPCC, 2007)。しかし、温暖化の現れ方は地域によって異なる。A・Highers 画像は北東アジア海域の SST 分布を捉えている。地球環境変動の影響は、この海域にも及んでいる(例えば、川村、2006)。しかし、北東アジア海域は大変広く、そこに含まれる縁辺海と名のつく海でさえ、オホーツク海、日本海、黄海、東シナ海があり、さらに北西太平洋がそれらの東につながっている。湾や入り江は数え切れないほど在る。1km 格子空間分解能は、縁辺海はもちろんのこと、大きな湾を充分解像することができる。陸奥湾の東湾に生じる昇温現象を捉えた海面水温画像の例を図3に示す(川村、1992)。後に、この現象は陸奥湾固有の海陸分布と日射による陸域加熱に起因する大気循環によって生じていることが明らかとなった(Kawai et al., 2005)。

20 年以上継続して受信された AVHRR データから作成される、A・Highers SST 画像の 1 km 空間解像度の特性をフルに活かし、長期にわたる SST 変動を詳細に解析するためには、何が必要か? A・Highers 画像は、これまでにない多くの優れた特徴を持っているが、それでも 1 km 格子の 1 点 1 点を詳細に調べると不具合が見つかる。その例を図 4 に示す。図 4 a では、中央部の雲(白)の内部と周辺に青の海面水温値が点在しているが、これは雲域除去の失敗による。海洋の 100 km スケールの変動現象を解析する場合、このような小さな低温点は無視するか空間フィルターを適用して取り除

く。図 4b では、沿岸部の岸に沿った低温域は NOAA 衛星軌道計算の誤差に起因する画像の位置ずれで生じており、沿岸海域の解析の際に障害となる。80,000 を越えるシーンの 4001x4001=16M ピクセルのすべてを精査し、図 4 のようなこれまではあまり気にしていなかった小スケールのエラーを検出することが、新たな課題となった。

新しい課題:「個々の A·Highers 画像 4001x4001 ピクセルのすべての SST 値を、沿岸海域の気候変動が議論できるほどの高精度で品質管理を行うこと。」

2.2 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を用いた取り組み

現在、AVHRR データのすべての処理に関し、様々な角度から見直しを行っているところである。 それらの詳細は、衛星海面水温計測に係わる様々な科学技術、大量高速処理、応用分野の観測要求な ど多岐に及ぶので、この解説で全部を紹介することはできない。その中で、全データを一括処理して 行う品質管理は、大量の SST 画像を一気に扱うので、サイバーサイエンスセンターの大規模科学計算 システムの利用が大きなメリットとなる。その処理の概要を図 5 に示す。

仙台受信局で得られる AVHRR データが観測する海面水温変動の中で、最も大きな振幅を有する変動は季節変動である。季節は天文学的要因に支配され、毎年決まったサイクルで出現する。海面到達日射量の変動は、地表付近の大気・海水温度の大きな変動、季節変動を引き起こす。したがって、大気海洋変動解析の基本的な考え方の一つとして、ある観測地点の温度時系列を1年のサイクルで切り出し、季節毎に重ね合わせて平均し、季節変動を算出することがよく行われる。例えば、各月毎に平均値を算出すれば、12点の平均値時系列が算出され、その観測地点のある月の温度はその平均値の周りに分布し、自然現象の常としておおむねガウス分布に従うので、それから大きく外れる観測値をエラーとして取り除くことができる。

新しい高速大量計算の課題:「A·Highers 画像のすべての海面ピクセル (観測点) に関し、季節 平均値 (気候値) と標準偏差(σ)を計算し、それをベースに SST 値の品質管理を 行う。客観的な手法でカレンダー日気候値 (365 日、0.01 度格子) を作成する。」

図5に示した処理は、1997-2006年の10年間について上の課題解決を試みた作業の流れである。この手法では、まず、時間解像度が粗い気候値を作成し、それを参照データとして時間解像度を上げていく方法をとった。まず、すべての海面ピクセルに対して月平均値・標準偏差を計算し、それを第一推定値として5日平均値・標準偏差を計算し、さらに日気候値・標準偏差を求める。最後にEOF解析を行って日ごと気候値を再構築することも試みた(図5)。データを一気に計算機のメモリに読み込み、単純ではあるが多量の計算を実施し、1点1点に品質管理(閾値処理)を実施していくので、大規模科学計算システムの大容量ディスクと並列コンピュータを利用することのメリットは大変大きい。

図5の処理で作成された品質管理済み海面水温値と年変動から再構築した「気候値」を用い、仙台湾の海面水温変動の解析を行った。QC 済み15日平均SST 時系列(1997・2006)を作成し、仙台湾の全格子が埋まる日時をとりだし、EOF 解析を行った。EOF 第一モードの空間パターンと時係数を図6a、bに示す。気候値(365日、1km)を差し引くことで、SST変動偏差を求め、解析の感度を向上させている。仙台湾全体が夏季に急激に昇温し、春季・秋季に急激に降温する現象が抽出されている。EOF第一モードは、SST変動偏差の47.9%を説明する(Hosoda et al., 2010)。

3. 最後に

人工衛星による新しい地球観測体制がまもなく幕を開けようとしている。1978年に運用を開始し、衛星海洋学の展開に大きく貢献した NOAA 衛星シリーズによる全球観測は、まもなくその役目を終える。現在の最新機、NOAA19号がその最後となる。AVHRRという単一センサーによる、長期・広域・高解像度海面水温観測の一括品質管理を考え、実行しようと思い至った背景の一つは、このような衛星地球観測の新展開がある。

約30年間に及ぶAVHRR 観測をひとまとめのデータセットとして扱うことで、これまで判らなかった多くのことが明らかになるはずである。そして、このような活動が次世代の衛星地球観測につながっていくものと考えている。

4. 謝辞

本研究を実施するに当たり、小林センター長をはじめサイバーサイエンスセンターの皆様には大変 お世話になりました。感謝いたします。

5. 参考論文

川村宏: 陸奥湾における昇温期の大気海洋相互作用について.月刊海洋, 24(6), 385-388, 1992.

川村宏: JAIDAS10年, SENAC, 33(1), 3-14, 2000.

川村宏: 地球環境変動下における北東アジア海域の課題, 沿岸海洋研究, 44(1), 3-8, 2006.

川村宏、木津昭一: 大型計算機センターにおける光ディスク装置の利用について, SENAC, 24(3), 88-98, 1991.

Hosoda, K., H. Kawamura, H. Qin and F. Sakaida: Characteristics of sea surface temperature variation patterns in Sendai Bay, (in preparation).

IPCC: IPCC Fourth Assessment Report, 73pp, 2007.

Kawai, Y., K. Otsuka and H. Kawamura: Study on diurnal sea surface warming and a local atmospheric circulation over Mutsu Bay, J. Meteorol. Soc. Japan, 84(4), 725-744, 2006.

Kawamura, H., F. Sakaida and J. Kudo: Super computing of 10-years HRPT data set for analyses of AVHRR-derived SSTs. IGARSS'97, Spons. by IEEE, Pan Pacific Hotel, Singapore, August 1997, 1499–1501, 1997.

Sakaida, F. and H. Kawamura: Estimation of sea surface temperatures around Japan using the Advanced Very High Resolution Radiometer (AVHRR)/NOAA11, J. Oceanogr, 48(2), 179·192, 1992.

Sakaida, F. and H. Kawamura: HIGHERS The AVHRR-dased higher spatial resolution sea surface temperature data set intended for studying the ocean south of Japan, J. Oceanogr., 52(4), 441-455, 1996.

Sakaida, F., H. Kawamura and Y. Toba: Sea surface cooling caused by typhoons in the Tohoku Area in August 1989, J. Geophys. Res., 103, 1053-1065, 1998.

Sakaida, F., J. Kudoh, and H. Kawamura: A-HIGHERS - The system to produce the high spatial resolution sea surface temperature maps of the western North Pacific using AVHRR/NOAA, J. Oceanogr., 56(6), 707-716, 2000.

Sakaida, F., H. Kawamura, S. Takahashi, T. Shimada, Y. Kawai, K. Hosoda, and L. Guan: Research and development of the New Generation Sea Surface Temperature for Open Ocean (NGSST-O) product and its demonstration operation, J. Oceanogr., 65, 859-870, 2009.

表1 東北大学大学院理学研究科におけるNOAA/AVHRRによる海面水温画像データセット作成の変遷

時期	SST画像仕様	計算機環境	HRPT 格納媒体	備考
1992年頃	名前: Highers 解像度: 0.075度格子 範囲: 北緯19.925-36.05度 東経126.75-149.25度 サイズ: 301x216ピクセル	NEC MS- 4170(ミニコ ン)、ネット ワーク無し	光ディスク (5G /枚)	初めての長期 広域衛星海面 水温画像デー タベース
2000年頃	名前: A-Highers 解像度: 0.01度格子 範囲: 北緯20-60度 東経60-120度 サイズ: 4001x4001ピクセル	SX-4	DTFテープ (30G/巻)	10年分の海面 水温画像作成
2008年頃	名前: A-Highers 解像度: 0.01度格子 範囲: 観測範囲の全域 (シーンによって異なる) サイズ: 4001x4001ピクセル	並列スカラー 計算機、高速 ネットワーク	パソコン・ ハードディ スク	即時処理、 融合海面水温 作成

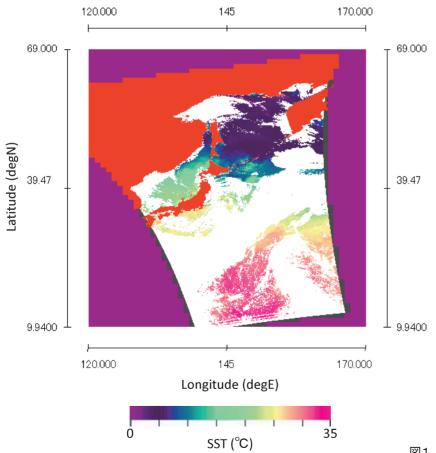


図1 A-Highers海面水温画像の例。

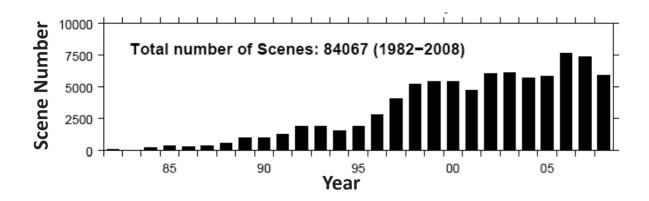


図2 各年のA-Highers画像のシーン数

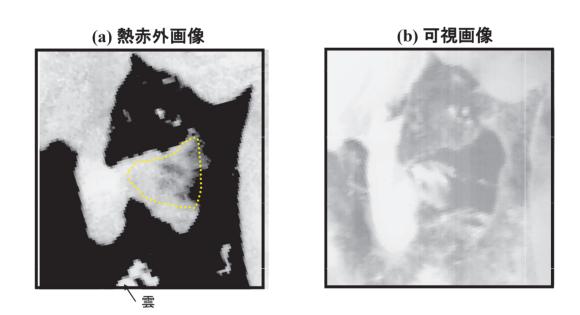


図3 1987年5月7日13:50のNOAA衛星AVHRR画像。(a)熱赤外画像、黄色の破線で示した範囲が周囲より著しく昇温している、(b)可視画像、海上風で波立っている海面が白く、静穏海面(弱風~無風海域)は暗い。暗い海面の範囲と高海面水温海域がよく対応している。

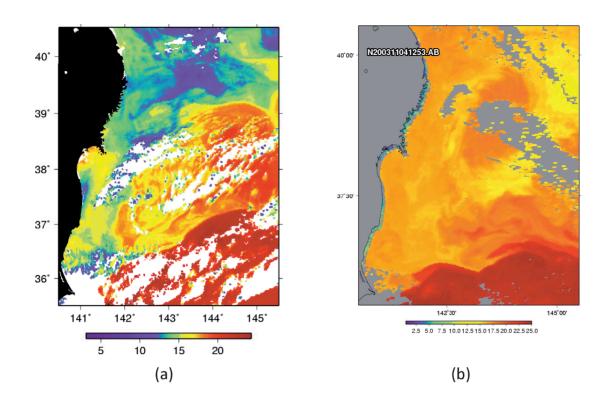


図4 品質管理対象のA-Highers画像の例。(a) 中央部の雲(白)の内部と周辺に青の海面水温値が点在しているが、これは雲域除去の失敗による。(b) 沿岸部の岸に沿った低温域はNOAA衛星軌道計算の誤差に起因する画像の位置ずれで生じており、沿岸海域の解析の際に障害となる。

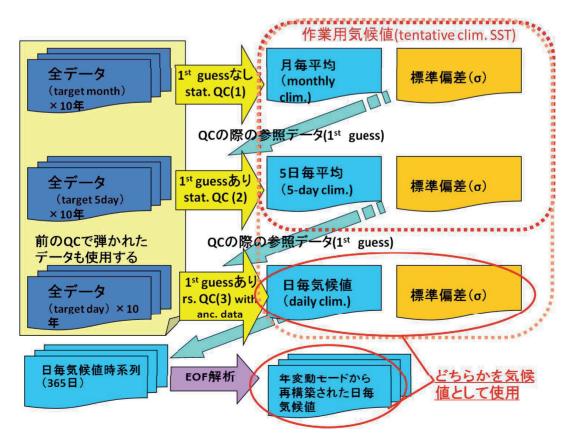


図5 長期間のA-Highers画像データを用いた品質管理の流れ図。

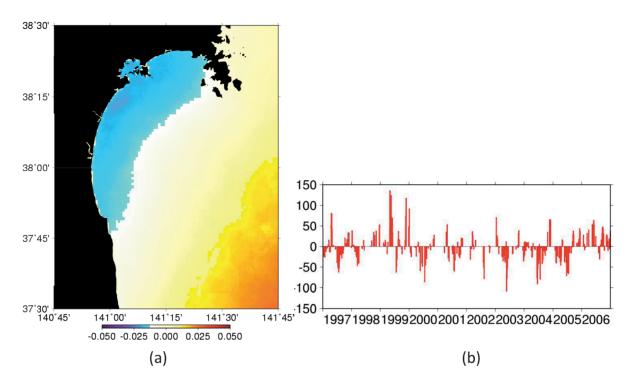


図6 仙台湾の海面水温変動EOF第一モードの(a)空間パターンと(b)時係数。気候値(365日、1km)を差し引くことで、SST変動偏差を求め、解析の感度を向上させている。仙台湾全体が夏季に急激に昇温し、春季・秋季に急激に降温する現象が抽出されている。EOF第一モードは、SST変動偏差の47.9%を説明する。

「研究成果」

時間領域および周波数領域差分法を用いた周期構造の解析

有馬卓司, 宇野 亨 東京農工大学 大学院工学研究科 先端電気電子部門

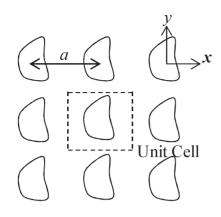
同じ構造を周期的に並べた構造を周期構造と言うが、周期構造を用いることで単体の構造では 得られない電気的特性を得ることができる。より良い特性が得られる周期構造を設計するには大型計算機を用いたシミュレーションが欠かせない。本稿では周期構造を電磁波問題に用いることを主眼に置き、電磁波問題に対する代表的なシミュレーション手法である時間領域および周波数領域差分法を用いた周波数構造の解析について述べる。

1. はじめに

現在,電磁波に対して自然界には存在しえない電気的特性を示す構造が注目されている。これら構造は"メタマテリアル(Metamaterial)"と呼ばれている[1]."メタ"とは超越を表す接頭語なので、超越媒質と言い換えることができる。メタマテリアルの一例として、負の屈折率を示すDNG(Double NeGative:誘電率透磁率共に負の値を持つという意味)媒質[2]、磁気壁として働く EBG(Electromagnetic BandGap)構造[3]などがある。これらの特性を用いることで、平面レンズや低姿勢アンテナなどの開発が行われている。これらはすべて周期構造(図 1)と呼ばれる、電磁波の波長オーダーの構造もしくは媒質を等間隔で周期的に並べる構造により実現されている。より効率よく、高性能なメタマテリアルを設計するには大型計算機を用いたシミュレーションが不可欠である。これら解析には、平面波展開(PWE)法[4]、有限要素(FEM)法[5]、時間領域差分法[6]、周波数領域差分法[7]などがある。どれも長所短所があるが、筆者らのグループでは、定式化が容易で解析対象に制約の少ない時間領域および周波数領域の差分法を主に用いている。本稿では、時間領域および周波数領域の差分法を用いた周期構造の解析について述べる。なお慣例に従い本文中では、時間領域差分法を FDTD 法、周波数領域差分法を FDFD 法と略記する。手法自体も似ているが、略称も非常に似ているので注意していただきたい。

2. FDTD 法における周期構造の解析

FDTD 法とは、解析領域を図 2 に示すような微小空間(セル)に分け、それぞれのセルに対して、時間領域のマクスウェルの方程式を時間および空間について直接差分し解析する手法である。この手法は、アルゴリズムが非常に簡易な事より解析対象の制限がなく、複雑な構造の解析に向いている事からメタマテリアルの解析にしばしば用いられる。この手法を用いて周期構造の解析をする手法としては、sin 波、cos 波それぞれで励起して解析する sin cos 法、周期条件を満たすために新たな関数を導入する Split・Field 法、周波数領域の周期境界条件を導入する Constant・k 法などが知られている。これらの手法は直接に得られる情報が異なるため一概に優劣を比べることはできない。一方、周期構造中の電磁波の解析にはその媒質中を伝搬する電磁波の周波数特性(伝搬モード)によって評価できる場合が多々ある。Constant・k 法は伝搬モードを容易に解析で



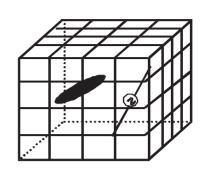


図1周期構造とその単位構造

図2 FDTD 法における解析空間

き、その伝搬方向の制限が少なく広く用いられている. 次節において Constant-k 法について説明する.

2.1 Constant-k FDTD 法による周期構造の解析

周期構造は同じ構造がつながっていることから、電磁界についても周期性がある. その周期性は、周期間隔を a とすると、

$$\varphi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \varphi(\mathbf{r})e^{-jka}$$
 (1)

で示される. これをブロッホの定理という. k は波数ベクトルであり, φ は電界もしくは磁界を表している. 図1のように, x-y 方向の 2 次元周期構造を考え, それぞれの周期間隔を a とすると(1) 式は

$$\varphi(a, y) = \varphi(0, y)e^{-jk_x a}$$

$$\varphi(x, a) = \varphi(x, 0)e^{-jk_y a}$$
 (2)

と表わすことができる. FDTD 法は時間領域の解法のため(2)式をそのままフーリエ変換すると時間シフトの項が出てしまう. 斜め入射においては、時間シフトが未来の値を示すため因果律に反して解析できなくなってしまう. 一方、波数 k を定数と考えるとフーリエ変換しても時間シフトの項は現れない. そこで波数を定数として、(2)式を FDTD 法に組み込み計算する手法を Constant·k FDTD 法という. (2)式は複素数で表わされるため、Constant·k FDTD 法において電界磁界はそれぞれ複素数とする必要がある. Constant·k FDTD 法を用いて伝搬モードを求めるには、周期構造の一つの単位セルの計算領域の端で(2)式を適用した後、解析空間の任意の場位置よりパルスを励起し、それとは異なる点での電界の時間変化を記録する. 記録された時間領域の電界をフーリエ変換すると、伝搬モードの周波数において強いスペクトルが記録される. 図3 に上記手順で得られた時間領域の電界、図4 にそれをフーリエ変換して得られたスペクトルを示す. 解析対象は、3次元の金属ワイヤにより構成されたメッシュ構造である. 図4 から分かるように、周期構造中で伝搬モードは離散的に無数に存在していることが分かり、妥当な解析がで

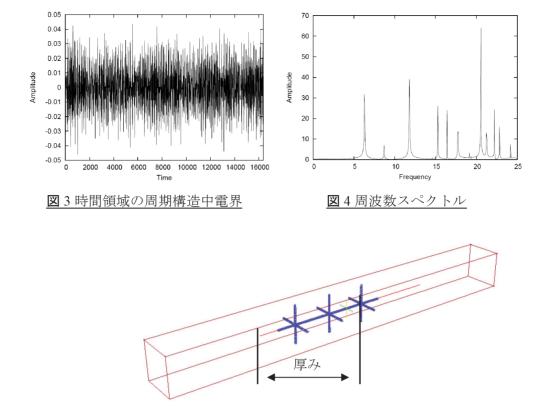


図5有限の厚みを持つ周期構造の単位構造

きていることが分かる.この手法は図 5 に示すような,有限の厚みを持つ周期構造に対して入射角を持つ波が入射した際の反射特性などの計算も可能である.この際は,入射角によらず波数が一定となる入射波を用いて解析する必要がある.

3. FDFD 法による周期構造の解析

FDFD 法は、周波数領域のマクスウエルの方程式を空間について差分する手法であり、FDTD 法と同様に空間を微小空間に分割して計算する手法である。FDTD 法は時間を進めて解析する関係上、マクスウエルの方程式を電界磁界に関する連立微分方程式と考え、それらを交互に計算していく手法であったが、FDFD 法では電界もしくは磁界が満たす波動方程式を考慮することにより電界磁界どちらか一方のみの計算でよくなる。FDFD 法は周波数領域の手法であるので周波数領域の周期境界条件

$$\varphi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \varphi(\mathbf{r})e^{-jka}$$

がそのまま適用できる.ここでは図1に示すような2次元問題を考え,電界はz方向成分のみを持つとする.すると電界に関する周波数領域波動方程式は

$$-\frac{1}{\epsilon\mu} \left(\frac{\partial^2 E_Z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_Z}{\partial y^2} \right) - \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 E_Z = 0 \quad (3)$$

となる. これを各セルについて空間差分し、行列の形で整理すると

$$\left\{ \boldsymbol{B} - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \boldsymbol{I} \right\} \cdot \boldsymbol{E}_Z = 0 \qquad (4)$$

と表わすことができる. ここで、Iは単位行列、 E_z は電界行列、Bは

$$\boldsymbol{B} = -\varepsilon^{-1} \mu^{-1} \{ \boldsymbol{V}_{y} \boldsymbol{U}_{y} + \boldsymbol{V}_{x} \boldsymbol{U}_{x} \}$$

で表わされ, V_y , U_y , V_x , U_x はそれぞれ空間の差分を表す演算子である.このように,FDFD 法は非常にシンプルな式でまとめることができる.(4)式は固有値問題そのものなので,様々な数値計算ライブラリが利用できる.FDFD 法の計算量については,周期構造の単位構造の一辺を 30分割したとすると,2次元問題では E_z 成分のみ解析すればよいので $30\times30=900$ 個の未知数となり 900×900 の大きさの行列に対する固有値を求める問題となる.一方,3次元問題においては E_x E_y , E_z の 3 成分を計算しなければならないので,未知数の数は $30\times30\times30\times30\times3=81,000$ 個となりこれらを求めるために, $81,000\times81,000$ の大きさの行列の固有値を求める問題となる.これは非常に大きな計算量となってしまい,現実的に 3次元空間を FDFD 法を用いて解析するには大型計算機が必要となっている.なお,高速に固有値を求める方法も広く提案されている.

4. 解析結果

本節では、FDTD 法と FDFD 法で計算した結果をいくつか示す。上述したように FDTD 法、FDFD 法ともに多くの計算機資源が必要になる。数値例をあげると、FDTD 法においては数百 G バイト程度のメモリ、FDFD 法においては $10,000\times10,000$ 程度の大きさの行列演算である。そのため、ここに示す解析結果はすべて東北大学サイバーサイエンスセンター大型計算機 SX-9 (1 CPU あたり 102.4G FLOPS)を用いたものである。

4.1 FDTD 法と FDFD 法による計算結果の比較

まず、FDTD 法と FDFD 法の計算特性の違いを確かめるために、図 6 に示す無限長誘電体円柱が周期的に並んだモデルの解析を行った.誘電体の比誘電率は 8.9 であり、その半径は 0.2a とした.また、FDTD 法 FDFD 法ともに解析領域は一辺を 20 セルで分割している.図 7 に解析結果を示す.この図の横軸に示されている Γ 、X、M はそれぞれ図 7 中に小さな模式図で示されている

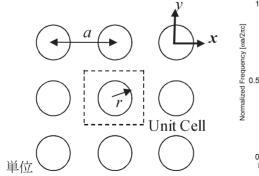


図6解析モデル

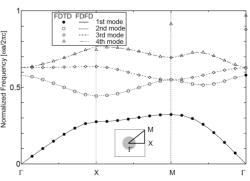


図7 伝搬モード(第1~第4)

構造中の波数空間を示しており、これらは波の伝搬方向ともいえる。また、 Γ 、X、M という点はこの構造周期構造の特徴をよく示す点として知られており、 Γ , X、M で構成される領域をブリルアンゾーンという。図 7 中には伝搬モードを周波数の低い方から 4 個(第 1~第 4 モード)示している。図 8 に、高次の伝搬モード(周波数の低い方から数えて 8 番目から 11 番目:第 8~第 11 モード)を示している。伝搬モードは高次になると密接してくることが知られているが、結果もその通りになっている。FDFD 法の結果はすべてのモードにおいて比較的滑らかな結果が得られており妥当な解析が得られていることが分かる。一方、FDTD 法の結果はあるところにおいて不自然に飛んでいることが分かる。これは、異なる伝搬モードにおいても同じ周波数となるところ(縮退という)においてである。この原因は、FDTD 法で伝搬モードは、上述したように周波数スペクトルより求められる。しかし、2 つ以上の伝搬モードが同じになる(縮退している)ところでは、1 つのスペクトルしか検出されないためである。これを避けるには手作業でグラフを書いて確かめるしかない。このように、FDTD 法と FDFD 法ではその解析手法の違いから結果に違いが出てくるので注意が必要である。

4.2 FDTD 法と FDFD 法による計算時間の比較

次に、4.1 節と同じ 2 次元無限長誘電体円柱の周期構造モデルを用いて、FDTD 法と FDFD 法の計算時間増加の割合を調べた。その結果を図 9 に示す。横軸は解析に用いたセルの総数、縦軸は解析領域を 20×20 セルとした時で規格化した計算時間である。FDFD 法において固有値を求めるには、QR 法と IRA(Implicitly Restarted Arnoldi)法を用いた。図 9 より、FDTD 法はセル数を増やしても計算時間の増加が少ない事が分かる。一方、FDFD 法についてはセルの増加とともに計算時間が大きく増加していることが分かる。また、IRA 法を用いることにより大きく計算時間が抑えられていることが分かる。FDFD 法はこのようにセル数の増加とともに計算時間が大きく増える特徴がある。このため、上述したように 3 次元問題ではその解析に非常に多くの計算時間が必要となってしまい、大規模行列に対すて高速に固有値を求める手法を組み込むことが必要になってくる。なお、FDFD 法において行列は疎行列となっている。

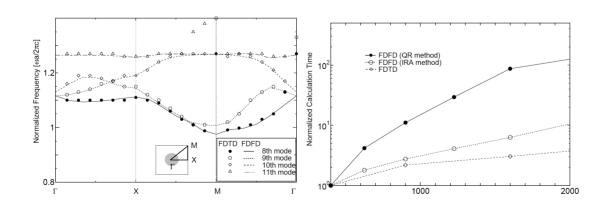


図8高次伝搬モード

図 9 計算時間の増加量の比較

4.3 FDTD 法による有限周期構造の解析

最後に FDTD 法を用いた有限周期構造の解析例を示す.シミュレーション上は無限周期構造と出来るが実際にモノを作るときは必ず有限になる.そのため、実用上の応用をシミュレーションするには、有限の周期構造を解析する必要がある.有限の周期構造では、実際に多くの単位構造を解析する必要があるのでその計算量は膨大な物となる.解析モデルは、図 10 に示すような 3 次元ワイヤメッシュに金属球が装荷されているモデルとし、周期構造の厚さ方向は 2 層とした.この構造に、入射角 50°のある幅を持った入射波が入射する状況を解析した.その結果を図 11 に示す.この結果は、周期構造に入射した電波が、構造の表面を添うように伝搬している状況を示している.

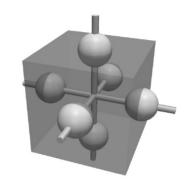


図 10 解析モデル



図11解析結果

5. まとめ

本稿では、現在注目されている周期構造体を時間領域および周波数領域で解析する手法についていくつか例を示しながら説明した。時間領域および周波数領域の手法それぞれにおいて特徴があり、その特徴を理解したうえで解析する必要がある。周期境界を用いることで単位構造のみを解析すればよいので解散量は大幅に減る。しかし、実際の実験で無限周期構造は作製出来ないので、有限の周期構造の計算も必要になる。この際には、大規模計算が必要になる。

6. 参考文献

- [1] Special Issue on Metamaterial Structures Phenomena and Applications, IEEE Trans. Microwave Tech., vo,52, no.2,Feb. 2004.
- [2] V. G. Veselago, "The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of permittivity and permeability," Soviet Physics USPEKI, Vol. 10 No. 509,1968.
- [3] F.Yang, Y.Rahmat-Samii, S.C.Cripps, P.Aaen and J.A.Pla,"Electromagnetic Band Gap Structures in Antenna Engineering", Cambridge Univ. Press, 2008.
- [4] J.D. Joannopoulos, R.D. Meade and J.N. Winn, PhotonicCrystal: Molding the Flow of Light, Princeton UniversityPress, Princeton, NJ, 1995.
- [5] O.C.Zienkiewicz,"The Finite Element Method in EngineeringScience", McGraw-Hill, London, 1971.
- [6]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.
- [7] K.Yasumoto, "Electromagnetic Theory and Applications for Photonic Crystals", CRC press, 2006.



[紹介]

サイバーサイエンスセンター展示室の紹介

共同利用支援係ネットワーク係

サイバーサイエンスセンターではコンピュータ技術の発展を広く知っていただくため、センターで実際に使用した計算機等を平成 10 年頃から収集を始め、平成 14 年からセンター1 階の展示室に展示しています。展示品の主なものとしては、コンピュータの黎明期に東北大学と日本電気が共同開発した科学技術用パラメトロン計算機の資料と、歴代のコンピュータを中心としたその部品や装置などです(写真 1、2)。展示室は平日 9:00~17:00 の公開となっております。

以下に、平成 22 年 6 月現在の計算機/ネットワークの主な展示品とその解説を記載いた します。

なお、前号の記事でご紹介いたしましたように、本展示室は平成 22 年 3 月に情報処理 学会から「分散コンピュータ博物館」に認定されました。



写真 1. 歴代スーパーコンピュータ



写真 2. ネットワーク展示品

1. 計算機関連

分散コンピュータ博物館認定証(2010)

「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。

認定証・紹介記事等

「分散コンピュータ博物館認定証」2010年3月 情報処理学会 「分散コンピュータ博物館のプレート」2010年3月 情報処理学会 「冊子 情報処理技術遺産」2010年3月発行 情報処理学会

SENAC-1 (1958)

国産計算機の黎明期に製作された本格的なパラメトロン式電子計算機です。東北大学電気通信研究所・大泉充郎教授(初代大型計算機センター長)と日本電気(株)との間で共同開発されました。SENAC-1は、語長を2進48桁にして高精度演算を可能にする等、きわめて斬新な設計構想であり、当時の技術レベルを知る上でも貴重なものとして2009年3月「情報処理技術遺産」に認定されました。現在、SENAC-1の筐体はNEC 府中工場に展示されており、パラメトロン信号変換ユニットとパラメトロン演算ユニットの一部は東北大学史料館で展示しています。

説明書・紹介記事等

パンフレット 「SENAC-1 東北大学パラメトロン電子計算機」 昭和 33 年 4 月 (1958 年)発行 電気通信研究所

パンフレット 「SENAC-1 パラメトロン計算機」 昭和 33 年 11 月(1958 年) 発行 電気通信研究所

パンフレット 「NEC パラメトロン式大型電子計算機 NEAC-1102」 NEC 商品カタログ

説明書「SENAC-1 概説」 昭和 32 年 10 月 (1957 年) 発行 電気通信研究所 大泉充郎、本田波雄、出川雄二郎

説明書「SENAC-1 プログラム」 1957.11 再刷

工学部応用理学教室 桂重俊、猪苗代盛 日本電気株式会社電子機器工業 石井善昭

説明書「SENAC-1 演算・制御について」 昭和 32 年 3 月(1957 年)発行 電気通信研究所 松尾正之、小野寺大、野口正一 日本電気技術開発課 渡辺 和

冊子「コンピュータ二十年」東北大学停年記念大泉充郎

当時の雑誌 (雑誌名不明) の記事

「計算センターで活動する電子計算機」 SENAC-1等

一般書籍「コンピュータが計算機と呼ばれた時代」アスキー出版 2005 年発行 「第3章 日本生まれの「パラメトロン」でコンピュータが作られた」 の中で紹介

写真 NEC 府中工場に展示してある装置の写真(2008 年寄贈)

- ・「SENAC-1 全景」
- 「操作卓」
- •「パラメトロン配線面」
- ・「パラメトロン配線詳細」

東北大学史料館に展示してあるユニットの写真

- 「パラメトロン信号変換ユニット」
- ・「パラメトロン演算ユニット」

その他

レプリカ 「情報処理技術遺産認定証 SENAC-1」 2009 年 3 月認定 情報処理学会 冊子 「情報処理技術遺産」 2009 年 3 月発行 情報処理学会

NEAC2200 モデル 700 (1971~1976)

旧大型計算機センター(現サイバーサイエンスセンター)の初期のシステムで、サービス形態はバッチ処理と TSS 処理がありました。バッチ処理の利用法は、プログラムとデータを紙カードに穿孔し、それをカード読取機から入力、演算結果はB4 版の連続紙へ出力されるという方式でした。

写真3 「1971年 計算機室 (モデル 700) 全景」

ACOS900 (1980~1981)

部品 「LSI 技術」

ACOS3900 (1997~2001)

部品 「CPU ユニット(水冷)」

部品 「メモリユニット 32MB/ユニット」



写真 3. NEAC2200 モデル 700(計算機室の一部)

並列コンピュータ TX-7/AzuaA (2002~2006)

ノード当たり 16 台の CPU を持ち、ベクトル処理に不向きなプログラムを並列処理することにより高速演算を行ないました。また、OS は Linux で、フリーソフトウェアの移植が容易になりました。

部品 「CPU/メモリユニット」

並列コンピュータ TX-7/i9610 (2006~2010)

部品 「CPU/メモリユニット」

スーパーコンピュータ SX-1 (1985~1989)

初代のスーパーコンピュータです。ACOS1000 のバックエンドプロセッサと位置づけられ、Fortran ジョブの高速処理を目的としました。プロセッサは演算プロセッサと制御プロセッサで構成されました。

写真 「SX-1 が設置された計算機室」

スーパーコンピュータ SX-2N (1989~1993)

部品 「スーパーコンピュータ SX-2 のテクノロジー」

スーパーコンピュータ SX-3 (1994~1997)

OS が UNIX (SUPER-UX) で、研究室のワークステーションから直接利用可能となりました。

部品 「CPU ユニット (水冷)」

スーパーコンピュータ SX-4 (1998~2002)

メモリを共有する 32 台の CPU からなるシステム 4 ノードで構成されました。SX-4 では並列処理を導入し 1 つのプログラムを複数の CPU で同時に実行することで実行時間(経過時間)を短縮させることができました。

部品 「CPU ユニット」

部品 「メモリユニット 256MB/ユニット」

モックアップ(縮小模型)

スーパーコンピュータ SX-7 (2003~2008)

部品 「CPU ユニット」

部品 「メモリユニット 2GB/ユニット」

モックアップ (縮小模型)



写真 4. スーパーコンピュータ SX-4 筐体

スーパーコンピュータ SX-7C (2006~2010)

部品 「CPU ユニット」

部品 「メモリユニット 2GB/ユニット」

記録媒体等

これまで導入したシステムで使用された紙テープ、紙カード (パンチカード)、磁気ディスク、様々な磁気テープ、MO、CD、DVD、USB メモリなどの記録媒体です。

「ラインプリンターの活字ドラム」

「紙テープ」と「紙テープ巻取り器」

「紙カード」(名古屋大学情報基盤センターより寄贈)

「コーディングシート」

「OCR 用紙」

磁気ディスク

機種	単体容量	年代
「MS135」(写真 5)	$0.085\mathrm{GB}$	$1987 \sim 1992$
$\lceil \text{ACOS} 2020 \rfloor$	1.3GB	$1987 \sim 1992$
$\lceil ACOS 3900/20 \rfloor$	1.5 GB	1993~1996



写真 5. 磁気ディスク MS135

「UP4800」 1.1GB 1994~1997 「iStorage S2400」 300.0GB 2006~2010

「フロッピ媒体」(3.5, 5, 8 インチ)

計算機筐体(一部分)

センターで実際に稼動していたコンピュータの CPU/メモリ筐体の一部です。

「ACOS3900/10 の CPU 筐体部分」

「SX·4 の CPU/メモリ筐体部分」(写真 4)

「SX-7 の CPU/メモリ筐体部分」

「SX-7C 1 筐体」

センター発行資料

大型計算機センター発足時からの利用者への広報誌とセンター利用のために作成された 説明書等です。

「広報誌 SENAC」 (1968.4~)

「センター便り/ニュース」 (1969.3~)

利用者向け利用説明書等(1970~)

地球シミュレータ

地球シミュレータは、2002年に宇宙開発事業団、日本原子力研究所、海洋科学技術センターが約 10年~1000年と言った長い期間の気象予測、地震発生過程の解析を目的に開発されたスーパーコンピュータです。地球シミュレータは、LINPACK Benchmark Test に基づく世界のスーパーコンピュータランキング TOP500 において 2002年 6 月から 2004年 11 月の 2年間半、5 期にわたり、世界第一位の性能を維持し続けました。展示してあるのは地球シミュレータを構成していた計算機筐体であり、地球シミュレータはこの 2 ノード、16 個のベクトルプロセッサからなる計算機筐体を 320 台(640 ノード)、これらの計算機筐体を高速に繋ぐ結合ネットワーク筐体 65 台から構成された、分散メモリ型並列計算機でした。

「地球シミュレータ 2 ノード」(2008 年:独立行政法人海洋開発機構より寄贈)(写真 6)

その他の収集品

「タイガー計算機」(1967年頃)

「TK-80」(1975 年頃)

「PC-9801 FS」(1992年頃)

「PC-9821 Nb7」(1995 年頃)



写真 6. 地球シミュレータ (2 ノード)

「Macintosh SE/30」(1990年頃)

「計算尺」

「雷卓」

2. ネットワーク関連

東北大学では、1988 年から我が国初の本格的学内ネットワーク(LAN)として、東北大学総合情報ネットワークシステム「TAINS」(Tohoku University Academic/All·round/Advanced Information Network System)の運用を開始し、1995 年からは ATM 方式 (622Mbps)を用いたネットワーク TAINS95(SuperTAINS)が、2002 年からは GbE 方式と多重化通信(8~16Gbps)を用いたネットワーク TAINS/Gが、2009 年からは主要な各建物をスター状(1Gbps)に結ぶネットワーク StarTAINS が運用されています。このネットワークにより仙台市内に広く分布する6つの主要キャンパス(片平キャンパス、川内キャンパス、青葉山中キャンパス、厚葉中ヤンパス、原宮キャンパス、雨宮キャンパス)がそれぞれ相互に接続されています。

TAINS88 (1988~1995)

TAINS88は、1988年4月に運用開始された東北大学の初代キャンパスネットワークです。 コピー「イメージメールシステムデモ用原稿」

新聞 「完成当時の関連記事」(毎日新聞 他2紙)

パンフレット 「TAINS 東北大学総合情報ネットワークシステム」

ケーブル 「TAINS88 に使用した光ファイバーのカットモデル」

ケーブル 「TAINS88 に使用したイーサネットケーブルのカットモデル」

写真 「市内ファイバーケーブル敷設イメージ (航空写真)」

機器 「10BASE-5 タップトランシーバ」

機器 「CS (コミュニケーションサーバ)」

機器 「RR (リモートリピーター)」

機器 「LIU (ループインターフェースユニット)」(写真 7)

機器 「光ファイバー成端接続箱」

機器 「パソリンク」(写真8)



写真 7. LIU



写真 8. パソリンク

SuperTAINS (1995~2001)

SuperTAINS (スーパーテインズ) は、1995 年 2月に運用開始された東北大学のバックボーンネットワークです。SuperTAINS は、ATM (155Mbps, 622Mbps) と FDDI/TPDDI (100Mbps) という技術を組み合わせた超高速ネットワーク (当時) でした。

パンフレット 「SuperTAINS 東北大学総合情報ネットワークシステム」 ケーブル 「SuperTAINS に使用した光ファイバーのカットモデル」(写真 9)

機器 「ATM スイッチ」(写真 10)

機器 「FDDI/TPDDI コンセントレータ」(写真 10)



写真 9. SuperTAINS に使用した 光ファイバーのカットモデル



写真 10. ATM スイッチと FDDI/TPDDI コンセントレータ

TAINS/G (2001~2009)

TAINS/G (テインズオーバージー) は、 2001 年 12 月に運用開始された東北大学のバックボーンネットワークです。TAINS/G は、 GbE (Gigabit Ethernet) を基本としたネットワークで、キャンパス間を $8\sim16Gbps$ で接続し、インハウスネットワークを 1Gbps で 収容していました。

機器 「GR (ゲートウェイルータ)」

機器 「BR (バックボーンルータ)」

機器 「MD (ギガビットイーサ多重光伝送装置)」

地域ネットワーク TOPIC (東北学術研究インターネットコミュニティ: 1992~)

東北学術研究インターネットコミュニティ TOPIC は、東北地区の大学・高専などの学内ネットワークを相互に接続し、また国内のインターネットバックボーンに接続することにより、これに参加する学内ネットワーク相互および日本国内はもとより海外の組織ともインターネットワーキングを可能にしています。

パネル 「概要紹介」

パネル 「構成」

 6.8×10^{3}

 100.0×10^{3}

 100.0×10^3

SX-7

SX-7C

SX-9 SX-9

SX-9

2006年

2008年

2010年

付録コン	ピュータの変遷			
運用開始	機種	演算処理能力 (GFLOPS)	主記憶容量 (GB)	ディスク容量 (GB)
0) 計算セ	ンター時代			
1958年	SENAC-1	1.4×10 ⁻⁷	6.0×10^{-6}	_
1963年	NEAC-2230	1.1×10 ⁻⁶	1. 4 × 10 ⁻⁵	磁気ドラム6KB
1) 汎用コ	ンピュータ			
1969年	NEAC2200/500	3. 8 × 10 ⁻⁴	1. 2 × 10 ⁻³	1. 6 × 10 ⁻¹
1971年	NEAC2200/700 NEAC2200/500	1.1×10 ⁻³	1. 2×10 ⁻³	1. 2
1976年	ACOS700	1. 4 × 10 ⁻³	3.0×10^{-3}	2. 0
1980年	ACOS900 II	2. 9 × 10 ⁻³	8. 0 × 10 ⁻³	6. 4
1982年	ACOS1000	2. 6 × 10 ⁻²	4. 0 × 10 ⁻²	18. 5
1987年	ACOS2020	4. 0 × 10 ⁻²	1. 3 × 10 ⁻¹	53. 0
1993年	ACOS3900/20	9. 4 × 10 ⁻²	2. 6 × 10 ⁻¹	157. 0
	ンピュータ			.
1997年	NX7000/460 Exemplar/X ACOS3900/10	3. 8 × 10 ¹	1. 4×10 ¹	1, 130. 0
2002年	TX7/AzusA	3.6×10^{2}	1. 8 × 10 ²	3, 000. 0
2006年	TX7/i9610	1. 3×10 ³	1. 6 × 10 ³	10, 000. 0
2010年	Express5800	1. 7 × 10 ³	3.0×10^3	
3) スーパ				
1984年	HFP	1. 2 × 10 ⁻¹	3. 2 × 10 ⁻²	7. 8
1985年	SX-1	5. 7 × 10 ⁻¹	1. 3 × 10 ⁻¹	13. 0
1989年	SX-2N	0.1×10 ¹	2. 6 × 10 ⁻¹	42. 0
1994年	SX-3R	2. 6×10 ¹	0. 4×10 ¹	114. 0
1998年	SX-4	2. 6×10 ²	3. 2×10 ¹	287. 0
2003年	SX-7	2.1×10^{3}	1.9×10^{3}	6. 8 × 10 ³

2. 1×10^3

 0.6×10^{3}

26. 2×10^3

26. 2×10^3

3. 2×10^3

 1.9×10^{3}

 0.6×10^{3}

 16.0×10^3

 16.0×10^3

2. 0×10^3

「報告]

東北大学サイバーサイエンスセンター講習会 in 弘前大学の開催報告

東北大学サイバーサイエンスセンターは、弘前大学総合情報処理センターとの交流を深めることを目的として、全国共同利用である東北大学大規模科学計算システムに関する講習会を企画し、 平成22年2月19日(金)に弘前大学総合情報処理センターにおいて標記講習会を開催しました。

本講習会では、ベクトル並列型スーパーコンピュータ SX-9 の紹介、システムの運用や研究開発、利用方法の説明ののち、弘前大学のみなさまに実習室にて実際に東北大学のスパコンに遠隔ログインして利用を体験していただきました。多くの方々(講演聴講者 26 名、体験利用参加者 17 名)にご参加いただき、受講者には世界有数のスパコンを気軽に体験できる良い機会となりました。

今回の講習会では、会場となりました弘前大学総合情報処理センターのスタッフのみなさまに 大変お世話になり、厚く御礼申し上げます。また、このような機会を通じて、東北地区における 大規模科学計算利用がますます発展していくことを期待いたします。

講習会のプログラム:

主催:東北大学サイバーサイエンスセンター、弘前大学総合情報処理センター

日時:平成22年2月19日(金) 14:00~17:00

会場:弘前大学総合情報処理センター 第1実習室・第2実習室

14:00~15:00 「1 階・第1 実習室]

「東北大学大規模科学計算システムの運用とベクトルコンピューティングに関する研究開発」 東北大学サイバーサイエンスセンター 小林広明

15:00~15:20 [1階・第1実習室]

「東北大学のスーパーコンピュータの利用手続きや負担金等について」 東北大学情報部情報基盤課 小野敏

15:30~17:00 「2階・第2実習室]

「スーパーコンピュータの体験利用」

東北大学サイバーサイエンスセンター 江川隆輔

東北大学情報部情報基盤課 大泉健治, 小野敏





東北大学サイバーサイエンスセンター講習会 in 弘前大学

佐藤 友暁 弘前大学総合情報処理センター

平成22年2月19日に弘前大学総合情報処理センターを会場として、東北大学サイバーサイエンスセンターの講習会が開催されました。講習会を受講した立場からこの講習会についての感想を述べさせていただきます。

講習会の前半は、東北大学サイバーサイエンスセンター長の小林先生から「東北大学大規模科学計算システムの運用とベクトルコンピューティングに関する研究開発」に関して御講演がありました。全国共同利用施設に設置されているスーパーコンピュータは学術利用のみに活用されていると思っておりましたが、東北大学のスーパーコンピュータは企業主導の産学連携利用も多いことが分かりました。東北大学情報部情報基盤課の小野様による「東北大学のスーパーコンピュータの利用手続きや負担金等について」の御講演から、自分で計算機を用意するよりも、かなりお得にスーパーコンピュータを使えるとの説明がありました。プログラムが暴走してしまった場合に、負担金がかなりの金額に膨らむことが考えられましたが、東北大学ではそのような動作を監視しており、問題がある場合はサイバーサイエンスセンター側で対処していただけるとのことでしたので、費用面でも安心して使えることが分かりました。

後半はパソコン端末が置いてある、総合情報処理センターの第2実習室に移動し、弘前大学のパソコン端末から東北大学のスーパーコンピュータへ接続することで、実際に東北大学のスーパーコンピュータを体験することができました。丁寧に操作方法を説明していただけたこともあり、UNIX のコマンドに不慣れな受講者でも問題無く操作できたようです。また、実際にプログラムをスーパーコンピュータ上で走らせることで、東北大学のスーパーコンピュータのコンピューティングパワーを体験することができました。

最後になりましたが、「東北大学サイバーサイエンスセンター講習会 in 弘前大学」の開催にあたり、東北大学サイバーサイエンスセンターのセンター長の小林先生をはじめ、水木先生、江川先生、東北大学情報部情報基盤課の大泉様、小野様には大変お世話になりました。この場を借りて御礼申し上げます。



「利用相談室便り〕

今年度も 5 月よりサイバーサイエンスセンター本館利用相談室、弘前大学、秋田大学、 山形大学で利用相談を行っています(平成22年度利用相談の詳細は本誌p.58参照)。

本館相談室のテクニカルアシスタント(利用相談員)3名の方に、自己紹介も兼ねご自身の研究や研究室の紹介、また量子化学計算に関するアドバイス等、専門外の方にも分かりやすく記事を書いていただきました。本センターを現在利用されている方、またこれから利用しようと考えている方に、利用相談室へ足を運ぶきっかけとなっていただければうれしく思います。

今年度は相談室のマニュアル・図書の見直しを行い、新しいものを追加いたしましたので、こちらも併せてご利用ください。

(共同利用支援係)









「利用相談室便り〕

研究室紹介、および私とスパコン

沢田 雅洋 東北大学大学院理学研究科地球物理学専攻 産学官連携研究員

昨年度からサイバーサイエンスセンター本館1階で、水曜日の14~16時の利用相談を担当しております。スーパーコンピュータ(以下、スパコン)の使い方やFortran、シェルなどについてサポートできたら、と考えております。

私は流体地球物理学講座に所属しており、本講座にはスタッフ 5 名、院生 13 名、学部生 3 名います. しばしば気象学講座と言われるので、こちらの方が馴染みのある方がいるかもしれません. メンバーの研究内容に関して簡単に触れますと、大気やそれに関わる様々なスケールの現象、地球温暖化やモンスーン、水循環、台風、局地的な豪雨や強風などについて観測データのみならず、数値シミュレーションを用いて研究を進めています. 私見ですが、数値シミュレーションが気象分野において有効になるのは、観測データが不十分な場合や、何らかのメカニズムに対する仮説を検証するのに、複雑な(勿論簡単な場合も含めて)力学や物理的な条件を満たしたモデルによって調べる場合、などと考えています. SX-9 で計算された例を以下に 2 つ挙げます. 図 1 はヤマセの数値シミュレーション結果で、東北地方を 5km 格子で覆い、数ヶ月分の積分を行っています. 北東からの冷涼・湿潤な気流によって、下層雲が形成されている様子が分かります. 図 2 は 500m 格子で再現された蔵王おろしのシミュレーション結果で、蔵王風下には卓越した山岳波が見られ、それに伴い、乱流エネルギーの大きい領域が形成されます[1].

私がスパコンを使い始めたのは学部 4 年生の頃で、当時は SX-4(二世代前のスパコン、8GHz)でした。その頃、自作した Pentium 4(1.9GHz)のパソコン(PC)で海風前線の数値シミュレーションを行っていたのですが、10 日以上かかる計算をスパコンではわずか数時間で実行できてしまったので、すっかり虜にされてしまいました。研究を進める上で、スパコンは数値シミュレーションの計算時間を大幅に削減できるのも有り難かったのですが、そもそも研究室のワークステーションでは計算が出来ない大規模な計算をこなせる、という点が重要でした。その頃、私がターゲットとしていたのは、台風を形成する1つ1つの雲でしたので、少なくとも雲を表現できる解像度(数 km)で、かつ台風全体をカバーする計算領域($\sim1000km$)が必要でした。そのため、膨大な格子数を必要とし、50GByte以上(経験上、約 200GByte まで使用しました)の物理メモリが要求されました。このような計算は研究室で所有している PC クラスターでは扱える規模ではありませんでした。ただ、当時研究を行っている間はメモリサイズに関してあまり意識していませんでした。たり返ると、自分は恵まれた環境にあったのだな、と感じました。もしスパコンがなかったら、数値実験データすら取れない、ということになっていましたので。

簡単に私の研究について紹介しますと、雲の生成・消滅の過程(凝結や蒸発など)で生じる加熱や冷却が台風にどのような影響を及ぼすのか、というものです。図 3 は数値シミュレーションの 1 例で、レインバンドの形成過程を示しています。1 つ 1 つの積雲の中では降水に伴う蒸発冷却が下層に下降流、そして冷気プールを作ります。これがレインバンドの形成・伝播・維持に本質的であることが分かりました[2,3]。

本センターの特徴の1つであり、魅力でもあるのはベクトル型のスパコンが使用できることだと思います。最近ではスカラー型のPCを膨大な数をつなげることで大規模な計算を行うことが多くなっており、研究室単位でもPCクラスターなどを導入することも見られるようになってきました。しかし、実際にそれらのシステムを導入・運営するにはそれなりの知識や労力が必要です。さらに、分散型 (PCクラスターなど)のシステムで並列計算を行うには、ほとんどの場合、プログラム自体の修正、並列化プログラミングが不可欠で、膨大な労力をかけることもありえます。それに対して、ベクトル型のスパコンでは、プログラムの改変をほとんど行わなくても、かなりのパフォーマンスが発揮されます。プログラムのチューニングは非常に骨の折れる作業のため、可能な限り避けて、その分の労力を研究に費やしたい、と思うのがユーザの気持ちではないでしょうか。利用相談員をやっている身ですが、僕は間違いなくその1人です。スパコン、というと敷居が高いように聞こえる方もいらっしゃるかもしれませんが、実際に使ってみると、研究室にあるPCとそれほど変わらない感覚で使っても(コンパイルして実行という作業は特に変わらない!)、処理が圧倒的に速い、ということが実感できるはずです。

もちろん,ある程度のチューニング,高速化や並列化などのためのプログラムの改変が必要となることもあります。あるいは、チューニングした方が、今まで以上に速く計算できる場合も多々ありますので、気になることがありましたら、相談していただければと思います。また、センターには並列コンピュータ(Express5800)もありますので、並列処理向きのプログラムでも十分利用できると思います。

私がスパコンを使い始めた頃のように、皆さんにも出来る限り気軽に使っていただける ようサポートしていきたいと考えておりますので、どうぞ宜しくお願い致します.

- [1] 蔵王おろしに伴った非定常風の数値実験, 沢田雅洋, 岩崎俊樹, SENAC, Vol.42, No.4, pp.1-8, 2009.
- [2] Sawada, M., T. Iwasaki, Impacts of Evaporation from Raindrop on Tropical Cyclone. Part II: Features of Rainband and Asymmetric Structure. J. Atmos. Sci., 67, 84-96, 2010, DOI: 10.1175/2009JAS3195.1
- [3] 台風に伴うスパイラルレインバンドの数値実験, 沢田雅洋, 岩崎俊樹, SENAC, Vol.41, No.4, pp.1-7, 2008.

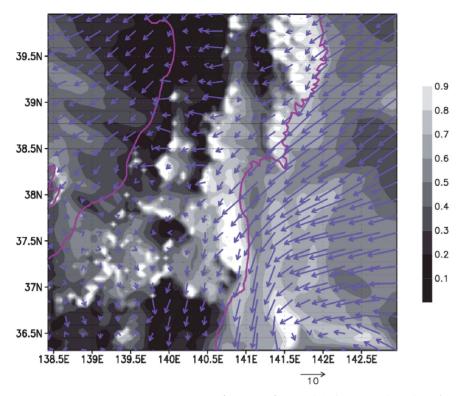


図1:ヤマセのシミュレーション結果.灰色で下層雲量を示す.白い部分ほど雲量が多いことを示す.矢印は高度 10m の風を表す.オホーツク海高気圧から吹き出した冷たい湿った風がヤマセと下層雲(ヤマセ雲)をもたらす様子が見られる.

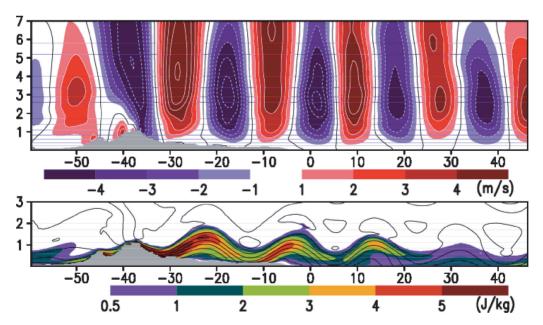


図 2: 蔵王おろしのシミュレーション結果. 上図は鉛直流を, 下図は乱流エネルギーを表す. 灰色の部分は地形(蔵王)を示す. 西北西(左側)から季節風が吹いており, 蔵王の風下で上昇流・下降流の波状構造が見られる.

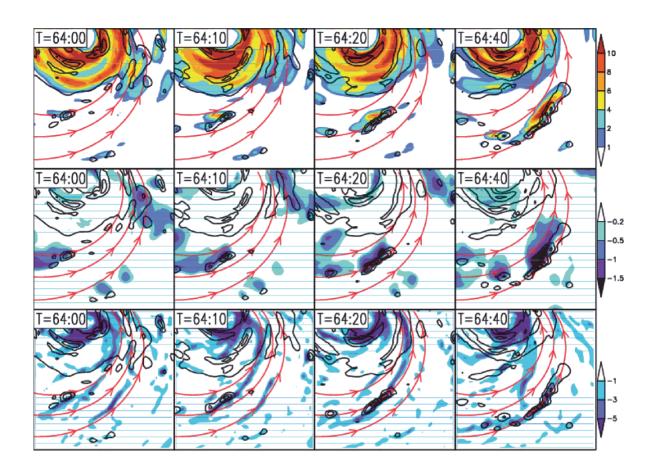


図3:数値モデルによって再現されたレインバンドの形成過程.上段:降水量,中段:温度偏差,下段:水平収束をカラーで示しており,コンターでレインバンド(雨水量)を示す. 左から右に向かって,徐々に時間が経過している.時間の経過とともに,レインバンドが成長していく様子を示す.

表:自分が使ってきた・いる計算機

計算機の世代	CPU	メモリ	コメント
初代	K6-2 500MHz	192MB	出来合い品
二代目	Pentium 4 1.9GHz	1GB	初自作
三代目	Celeron 2.4GHz	1GB	ケチって失敗
四代目	Pentium-D 3.0GHz	2GB	初 dual core まだ現役
五代目	Core2duo 3.2GHz	2GB	Windows で使うんじゃなかった
六代目	Core i7 2.93GHz	12GB	SX-4 は超えている?
六.五代目?	Core2due 2.0GHz	2GB	Mac mini お遊び用(自宅)

「利用相談室便り〕

量子化学計算に必要な下準備は何か? -実験科学者のためのベンチマーク計算入門-

山崎 馨

東北大学大学院理学研究科化学専攻 博士課程前期 1 年

概要

分子の構造やエネルギー等の諸物性を量子力学に基づいて計算する量子化学計算は、分子科学の理論的・実験的研究における主要ツールのひとつである。量子化学計算から正しい結果を適切な計算コストで引き出すためには、予備計算(ベンチマーク計算)が欠かせない。ベンチマーク計算は次のように行うと良い。まず、ターゲットとする分子の構造などの特徴を可能な限り紙に書き出す。次に、ターゲット分子やその類縁分子に関する過去の実験的・理論的研究、そしてベンチマーク計算の論文を収集する。この際には、先ほど書き出したターゲット分子の特徴をキーワードとして文献検索をすると良い。最後に、先行研究で多用されている手法やベンチマーク計算で好成績を残している計算手法を中心に、計算コストが低いものから順に計時しながら計算を行う。これによって、計算精度と計算コストのバランスを取ることが出来る。

1 はじめに

東北大学大学院理学研究科博士課程前期 1 年の山崎 馨と申します. 毎週木曜日の午後 1 時から 3 時の間に Gaussian などのソフトウエアを用いた量子化学計算に関する質問を, サイバーサイエンスセンターの1階にてテクニカルアシスタントとして受け付けております.

分子の構造やエネルギー等の諸物性を量子力学に基づいて計算する量子化学計算は、分子科学の理論的研究における根幹的なツールであるだけでなく、実験的研究においても非常に大きな力を発揮します。例えば、各種スペクトルの予想・同定や反応機構の解析などです。実験を行う際には、先行文献の収集や予備的な実験を事前に行って、実験手法を吟味していくことが通常の手順です。実は、量子化学計算においても同様のことが必要とされるのです[1]。何故ならば、量子化学計算の手法は、その理論的背景の違いに起因する特徴(得手・不得手や計算コストの差)がある [2,3,4] からです。この予備計算をここではベンチマーク計算と呼びます。これは、計算コストと計算精度のバランスをとる上で欠かせないものです。

それでは、ベンチマーク計算はどのように行えばよいのでしょうか. 今回は、量子化学計算に おける下準備としてのベンチマーク作業のやり方を、その準備段階から概説することにします.

2 文献検索をするその前に

多くの人が、文献検索を最初に行おうとすると思いますが、その前にぜひやって頂きたいことが 3 点あります。これらをすることで、文献検索や計算手法の選定を効率化することが出来ます。まず、どの様な物性を自分が計算したいのかを紙に書き出して下さい。分子の構造・活性化エネルギー・各種スペクトルなど、必要とする物性によって最適な計算手法は違います。

次に、ターゲットとする分子の特徴を可能な限り紙に書き出してみてください. 特に、以下の 点に注意してみてください.

- 1. 分子のサイズはどれぐらいか(水素以外の原子がいくつあるか).
- 2. 分子に含まれている元素は何か (ただの有機化合物か, それとも遷移金属や高周期非金属元素を含んでいる分子なのか).
- 3. どの様な置換基が含まれているか.
- 4. どれぐらい共鳴構造式が書けるか.
- 5. 電子励起状態か、それとも電子基底状態か.
- 6. 分子のスピン多重度はどうか・ラジカルではないかどうか.
- 7. 分子の電荷はどうなっているのか. アニオンなのか, それともカチオンなのか.
- 8. 水素結合やファンデルワールス力による分子間相互作用があるかどうか.

この際に、分子模型を組んでみると、なお良いでしょう.

最後に、どのコンピュータを使って、どれぐらいの日時で計算を終わらせたいのかを決めてください。サイバーサイエンスセンターの並列コンピュータで計算するのか、それとも研究室のパソコンで計算するのかによって、使用できる計算手法も変わってきます。また、大きな分子の計算や高精度計算を行いたい場合は、それなりの計算時間が掛かることを覚悟しなければなりません。

3 文献検索のコツ

量子化学計算のための文献検索でターゲットとしたい情報は以下の3点です.これらの3点は自分たちの計算手法を決めるときに役立つだけでなく,自分たちの計算結果の正当性を論文で主張するときにも必要となります.

- 1. 実験によって決められたターゲット分子やその類縁分子の物性(結晶構造・スペクトル・反応エネルギーなど).
- 2. 計算によって求められたターゲット分子やその類縁分子の物性
- 3. 過去に行われたベンチマーク計算.

この際には、自分のターゲット分子そのものだけではなくて、その類縁分子まで対象を広げて 文献を探してください。先ほど書き出した分子の特徴をキーワードにすると良いでしょう。 1 番目の実験データについては、読者の方々の分野の学術雑誌を探せば大体見つかると思います。ただし、2 番目の過去の計算結果と 3 番目のベンチマーク計算については、物理化学系 1 ・計算化学系 2 の学術雑誌を参照することが重要です。この際には、 $SciFinder \cdot Web \ of \ Science \cdot Google \ Schalor$ 等の一般的なデータベースを駆使するのはもちろんのこと、QCLDB といった計算化学専門のデータベースを活用すると良いでしょう。

4 ベンチマーク計算のコツ

まず、ベンチマーク計算の論文や過去の理論的研究の手法を真似してみましょう。特に、幾つもの論文で頻繁に使われている方法や体系的なベンチマーク論文で良い結果を出している手法を中心に試してみることをお勧めします。ただし、基準点を求めるために計算コストが掛かる高精度計算³をしていることがベンチマーク計算の論文ではありますので、注意が必要です。B3LYP 法などの密度汎関数法[4] と 6-31G(d) などのあまり大きくない基底関数の組み合わせのような比較的低コストの計算から始めて、MRCI 法・CASPT2 法・CCSD(T) 法などの電子相関を厳密に取り組む手法やAug-cc-pVTZ などの大型の基底関数を使用する高コストの計算 [2,3] に少しずつ計算レベルを上げていくことが鉄則です。置換基効果の計算のように、分子のサイズが変わる場合には小さい分子から始めて大きな分子を後回しにすることをお勧めします。

ベンチマーク計算をしたら、実験や過去の高精度計算との誤差を計算して必ず表やグラフにまとめてください。この際には計算の精度だけでなく計算に掛かった時間(実時間・CPU time)も併記しておくことが大切です。なお、ベンチマーク計算をするときには使用する CPU の数やメモリとハードディスクの分量は揃えて行ってください。そうしないと、計算に掛かった時間を統一的に比較することが出来なくなります。

計算時間と計算精度を見比べて,妥当な計算精度と計算コストが出ている組み合わせが採用すべき計算手法です.

5 終わりに

今回は、量子化学計算におけるベンチマーク計算の手法を概説しました。量子化学計算の手法 はそれぞれ異なった特徴を持っているため、その理論的背景を理解して使用することが望ましい です。余力のある読者の方々は、今回挙げた参考文献に目を通されることをお勧めします。

何か不明な点があれば、遠慮なく相談にいらしてください. お待ちしております.

¹ 例えば、J. Phys. Chem. A/B/C/Lett. • J. Chem. Phys. • Phys. Chem. Phys. • Chem. Phys. Lett. など.

² 例えば, J. Chem. Theory Comput. • J. Comput. Chem.

³ MRCI 法・CASPT2 法・CCSD(T) 法などの電子相関を高度に取り組む手法やAug-cc-pVTZ などの大型の基 底関数を使用している計算.

参考文献

- [1] 平尾公彦,武次徹也 『すぐできる量子化学計算 量子化学計算ビギナーズガイド』,講談社 サイエンティフィック,2006
- [2] 永瀬茂,平尾公彦 『分子理論の展開』, 岩波書店,2002
- [3] F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, 2nd ed., Wiley, 2006
- [4] W. Koch, M. C. Holthausen, A Chemist's Guide to Density Functional Theory, 2nd ed.; Wiley VCH, 2001

「利用相談室便り〕

自己紹介と研究室の紹介

佐藤 義永

東北大学大学院情報科学研究科情報基礎科学専攻 博士課程後期2年

今年度より,東北大学サイバーサイエンスセンターにおいて火曜日の10:00~12:00に利用相談を担当させていただくことになりました佐藤義永と申します。スーパーコンピュータや並列コンピュータの操作方法、プログラムの高速化について担当しています。

私は東北大学大学院情報科学研究科情報基礎科学専攻の超高速情報処理論講座という研究室に所属しております. 2010 年 7 月現在, 学部生 12 人, 院生 17 人, スタッフ 8 人(うち秘書 2 名)が研究室の構成員です。私たちの研究室で取り組んでいる研究は, 高性能かつ低消費電力なマイクロプロセッサに関する研究や, グラフィックス処理用ハードウェアを用いた高性能計算に関する研究, P2P やグリッド等のネットワークを利用した大規模計算環境に関する研究, そしてサイバーサイエンスセンターで利用されるベクトル型スーパーコンピュータのさらなる性能向上を目指した基礎研究といった計算機アーキテクチャや大規模計算環境に関する研究を行っています。また, 高機能文書認識システムや画像認識, ユビキタスコンピューティングなどのアプリケーションに関する研究にも取り組んでいます。これらの研究の中から本稿では, ベクトル型スーパーコンピュータに関する研究を紹介させていただきます。

大規模かつ高精度な科学技術シミュレーションを実現するには高い演算性能を有する計算機が 求められますが、それだけでは必ずしも期待通りの性能は得られません。科学技術シミュレーションでは、メインメモリからプロセッサへ計算に要する膨大な量のデータ転送が行われます。も しもデータ転送性能が演算性能に見合っていなければ、データの転送に要する時間がプログラム の実行時間の大半を占めることとなり、プロセッサの演算性能が活かせなくなってしまいます。 そこで、高いデータ転送性能を有するベクトルプロセッサに着目し、ベクトルプロセッサにより 構成されるベクトル型スーパーコンピュータのさらなる高性能化を目指しています。

ベクトルプロセッサは、メインメモリを独立してデータ転送可能な複数のメモリバンクに分割するインターリーブ方式のメモリアーキテクチャを採用しています。これにより、メインメモリからプロセッサへとデータを並列に転送することができ、高いデータ転送性能を実現することで演算性能との差を埋めています。このような特徴から、大規模な科学技術計算において、ベクトル型スーパーコンピュータは高い実行効率を実現してきました。

しかし近年では、プロセッサに実装可能な入出力ピン数の物理的限界から、データ転送性能の向上が今まで以上に困難となってきています。一方でプロセッサの演算性能は半導体チップの微細化による集積度向上により、メモリバンド幅以上に向上しています。そこで、演算性能(GFlop/s)とデータ転送性能(GB/s)の関係の指標としてピーク演算性能とメモリバンド幅の比(B/F)に着目すると、B/Fの減少は実行効率の低下を招くことが過去の研究から示されています[1].したがって、データ転送性能の向上によるB/Fの改善が次世代のスーパーコンピュータ開発における重要な課題となっています。

私の研究では、ベクトル型スーパーコンピュータを高効率で利用するためのプログラム最適化 手法に関する研究を行っています。近年のベクトルプロセッサにはデータ転送性能を補うために キャッシュメモリ(ベクトルキャッシュ)の搭載が検討されています。キャッシュメモリとは、プロセッサの内部に設けられる高速なメモリで、メインメモリから読み出したデータをキャッシュ 内部に保存し、次に参照される際にデータを高速に転送する機構です。アプリケーションには、 一度参照したデータは再び利用されやすいという時間的局所性と、参照するデータの付近にある データも参照されやすいという空間的局所性という性質があります。これらの性質から、キャッ シュを用いてデータを高速に転送することでデータ転送性能の改善を図ることができます。

しかし、ベクトルキャッシュは高速である代わりに、データを保存可能な容量がメインメモリに比べて非常に小さいという欠点があります. 現在のプロセッサでは数 MB 程度の容量が一般的です. したがって、大規模科学技術計算では、扱うデータが大規模であることからすべてのデータをキャッシュに格納することは不可能です. このことから、ベクトルキャッシュを用いて性能向上を実現するには、キャッシュを活用するためのプログラム最適化手法が必要になります.

従来のベクトルプロセッサ向けのプログラム最適化では、ベクトル長を長くすることで、ベクトル命令で一度に扱うデータ量を増やし、ループ分岐のオーバーヘッドを隠ぺいすることにより高速化を図ってきました。一方、キャッシュの利用を考えた場合、ベクトル長は短い方が時間的局所性は大きくなる場合があります。したがって、ベクトル長を短くするようにループを分割するキャッシュブロッキングと呼ばれる最適化手法が有効になります。

このように、従来のベクトルプロセッサ向けの最適化とベクトルキャッシュ向けの最適化では 効果が相反する場合があります。私の研究では、複数の最適化の活用を考慮したベクトルキャッ シュを有するベクトルプロセッサのための最適化戦略の確立を目指しています。これを実現する ために、ベクトルキャッシュを加えたベクトルプロセッサを想定した性能モデルを構築し、性能 モデルに基づいて効率的にプログラムを最適化する戦略を現在検討しています。

前述の通り、ベクトルプロセッサで利用される科学技術アプリケーションでは、プロセッサとメインメモリ間におけるデータ転送時間が実行時間の大部分を占めています。そのため、システムの実効性能はプロセッサとメインメモリ間のデータ転送性能に大きく左右されることになります。このことから、ベクトルプロセッサの性能モデルはプロセッサの演算性能だけではなくデータ転送性能も考慮する必要があります。そこで、ルーフラインモデルをベクトルプロセッサの性能モデルとして採用します。ルーフラインモデルの重要な点は、性能指標として演算密度を用いる点にあります。演算密度とは、アプリケーションに含まれる演算量と、演算に必要なデータ転送量(プロセッサーメインメモリ間)の比であり、これを利用することによりシステムとアプリケーションの双方の特徴から性能を考慮することができます。なお、演算密度の単位として、Flops per Byte が一般的に用いられます。結果として、アプリケーション毎に性能のボトルネックの解析が可能となり、アプリケーションとシステムの特徴を踏まえたプログラム最適化の指針を導くことができます。

図1 にメモリバンド幅が2B/F時のルーフラインモデルを示します。この性能モデルより読み取れることは、プログラムの演算密度が1/2 以上であれば、実行効率の上限が100%に達し、データ転送性能はボトルネックにならないため、プロセッサの性能を活かすようにループ内の演算数を増やすループアンローリング等の最適化が求められます。一方で、演算密度が1/2以下でなおかつアプリケーションの実行効率がデータ転送性能の上限に達している場合は、データ転送性能がボトルネックとなっているため、ベクトルキャッシュを活用する必要があります。したがってこの場合はキャッシュブロッキング等の最適化が有効であると考えられます。

性能モデルに基づいてボトルネックの解析を行い、ボトルネックを解消するようにプログラム 最適化を施した際の性能評価を最後に示します。本評価を通じてプログラム最適化の有効性を検 証します。また、プログラム最適化の有無による消費エネルギへの影響も評価し、消費エネルギ の面からもプログラム最適化の有効性を検証します。評価には、地震解析、電磁場解析の分野か ら東北大学サイバーサイエンスセンターで実際に利用されているアプリケーションを用い、流体 解析にはポアッソン方程式をヤコビの反復法で解く際の主要ループで構成される姫野ベンチマー ク[4]を用います。評価アプリケーションを表1にまとめて示します。

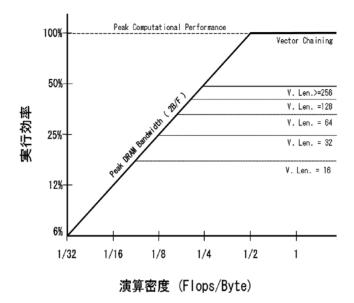


図1 ベクトルプロセッサにおけるルーフラインモデル

3 (1 前間/ / / / ・ 元						
評価アプリケーション	計算手法	問題サイズ	ベクトル化率	ベクトル長		
地震解析 [3]	Friction Law	$2047 \times 2047 \times 257$	99.5 %	256		
流体解析 [4]	3-D Jacobi	512×512×256	99.5 %	256		
地雷探索 [5]	FDTD	$1500 \times 1500 \times 50$	99.7 %	250		

表1 評価アプリケーション一覧

評価結果を図2に示します. 地震解析による評価では、プログラム最適化により約3倍に性能向上しています. 地震解析のアプリケーションはループ内の演算数が少なく、データ転送がプログラムの実行時間の大半を占めています. さらに、ルーフラインモデルの解析により演算密度に対してデータ転送性能はボトルネックになっていないことが分かります. そこで、ループ内の演算数を増加させるためにループアンローリングを施すことによって大幅な性能向上が得られます.

流体解析や地雷探索のプログラムでは、ルーフラインモデルにより、ともに演算密度が低くデータ転送性能の上限に達している、すなわちデータ転送性能がボトルネックであることがわかります。そこで、キャッシュブロッキングによる最適化を施すことにより、ベクトルキャッシュが活用でき、平均で5%の性能向上が得られます。したがって、性能モデルに基づくボトルネック解析により、ベクトルキャッシュを活用したプログラム最適化が適用可能であることがわかります。

次に、評価アプリケーション実行時の消費エネルギの評価結果を図3に示します.プログラム最適化を行わずベクトルキャッシュを利用するだけでも、消費エネルギの大きいメインメモリへのアクセスを、消費エネルギの小さいベクトルキャッシュへのアクセスに置き換えることができ、消費エネルギが削減できます.評価結果より、最大で50%の消費エネルギが削減可能であることがわかります.さらに、プログラム最適化を行うことにより、ループアンローリングによるメモリアクセス削減や、キャッシュブロッキングによるキャッシュヒット率の向上によってキャッシュが活用され、最大で77%の消費エネルギの削減が可能です.このように、提案するプログラム最適化戦略により、実行効率の向上だけでなく消費エネルギも大幅に削減できることができます.

以上述べてきた通り、私の研究はベクトル型スーパーコンピュータをより利用しやすくするための研究であるため、皆様の利用相談のサポートを行いながら、自分の研究にも反映していきたいと考えています。微力ですがどうぞよろしくお願いいたします。

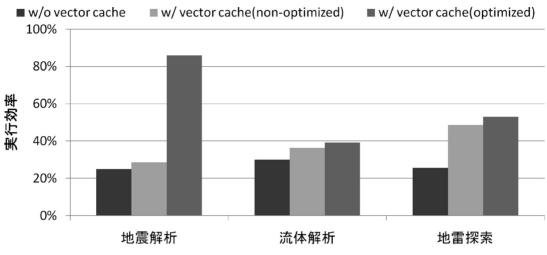


図2 プログラム最適化による実行効率の向上

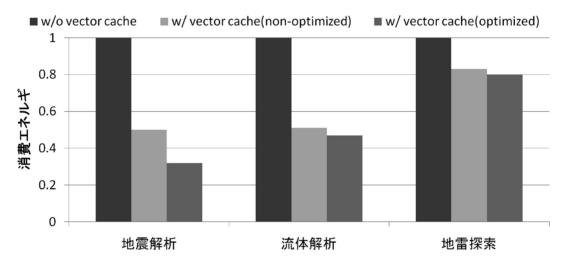


図3 プログラム最適化による消費エネルギの削減

参考文献

- [1] Hiroaki Kobayashi., "Implication of Memory Performance in Vector-Parallel and Scalar-Parallel HEC Systems", High Performance Computing on Vector Systems 2006, Springer-Verlag, pp. 22-50, 2006.
- [2] Samuel Williams, Andrew Waterman, and David Patterson., "Roofline: an Insightful Visual Performance Model for Multicore Architecture", Communications of the ACM, Vol. 52, No. 4, pp. 65-76, 2009.
- [3] Keisuke Ariyoshi, Toru Matsuzawa, and Akira Hasegawa., "The key frictional parameters controlling spatial variations in the speed of postseismic-slip propagation on a subductionplate boundary", In: Earth and Planetary Science Letters, Vol. 256, pp. 136-146, 2007.
- [4] Himeno benchmark, http://w3cic.riken.go.jp/HPC/HimenoBMT
- [5] Takeo Kobayashi, Motoyuki Sato., "FDTD simulation on array antenna SAR-GPR for landmine detection", In: Proceedings of SSR2003, pp. 279-283, 2003.

[Web 版大規模科学計算システムニュース]より

大規模科学計算システムニュースに掲載された記事の一部を転載しています。 大規模科学計算システムニュースのウェブページ http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/tayori/

平成22年度の利用相談について(No.103)

今年度も利用相談室での利用相談を 5 月 10 日 (月) より開始いたしました。相談室では面談、電話、メール等で相談を受け付けます。各相談員の担当時間、担当分野は以下 (表1) をご覧ください。本センターの利用に関する相談は、曜日に関わらずすべて対応いたしますのでお気軽にご相談ください。利用相談室には各種マニュアル、書籍も揃えておりますのでそちらもご活用ください。

弘前大学、秋田大学、山形大学でも利用相談を受け付けます。次頁(表 2)を参考にしてご利用ください。

《 サイバーサイエンスセンター本館 利用相談室 》

仙台市青葉区荒巻字青葉 6-3 (もよりのバス停は「情報科学研究科西」)

Tel: 022-795-6153 学内内線 92-6153 (不在の場合は、022-795-3406 で受け付けます。)

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

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

表 1 平成 22 年度利用相談日程と担当分野(本館)

_				
曜	日・時間	テクニカルアシスタント	主な担当分野	
月	2-4時	坂本 修一(電気通信研究所)	・アプリケーション(MATLAB, SAS) ・センター利用入門	
外	10-12時	佐藤 義永 (情報科学研究科)	・スーパーコンピュータ ・大判プリンタ	
水	2-4時	沢田 雅洋 (理学研究科) 山下 毅 (情報基盤課共同利用支援係)	・並列コンピュータ・スーパーコンピュータ・アプリケーション全般	
木	1-3時	山崎 馨 (理学研究科)	・並列コンピュータ ・アプリケーション(Gaussian)	
金	2-4時	花岡勝太郎(情報基盤課共同研究支援係)	・大判プリンタ・ファイル・ジョブ操作	
\vdash			1	

*上記以外の時間帯に面談・電話での相談を希望の方は、共同利用支援係(1階窓口)まで相談内容をお申し出ください。センター内担当者に取り次ぎます。

表2 平成22年度利用相談日程と相談分野(他機関)

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

(共同利用支援係)

平成22年度 研究開発公募課題の採択について (No.104)

標記の第二次募集分(5月21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
10-02	大規模線形常微分方	助教	中村 真輔	秋田県立大学シス	並列コン	新規
	程式系のための高速			テム科学技術学部		
	ソルバの開発					

(スーパーコンピューティング研究部, 共同研究支援係)

文部科学省 2010年度 先端研究施設共用促進事業 第二期公募説明会のご案内(No.105)

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、文部科学省が2007年度から開始した「文部科学省 研究開発施設共用等促進費補助金(先端研究施設共用促進事業) 先端的大規模計算利用サービス」(旧「先端研究施設共用イノベーション創出事業」)を通して、産学連携共同研究におけるサイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータ学術利用支援を行っております。これまで7件の課題が本学との産学連携共同研究として、本事業に参画しております。

現在、またはこれまで大学・民間企業との産学連携共同研究を推進しており、今後当センターのスーパーコンピュータの利用を予定している方、当センターのスーパーコンピュータを用いた新たな産学連携共同研究を予定している方には、是非、この「先端研究施設共用促進事業」を有効に活用して頂ければと存じます。

つきましては、2010 年度第二期公募説明会を下記のとおり開催いたしますのでご興味ある方は、是非、東北大学サイバーサイエンスセンター・本事業窓口までご連絡ください。

2010 年度 先端的大規模計算利用サービス 第二期公募説明会

日時:2010年7月12日(月)13:30~

場所:東北大学サイバーサイエンスセンター 5階 大会議室

参加申し込み:氏名、所属、E-mail アドレス、電話番号を明記の上、電子メールにて innovation@isc.tohoku.ac.jp 宛に参加申し込みを行ってください。

(※申し込み締め切り7月9日(金))

2010年 第二期公募日程

7月1日(木) 受付開始

9月3日(金) 受付締め切り

9月 下旬 採択通知

10月1日(金) 利用開始

問い合わせ先

東北大学サイバーサイエンスセンター

情報部情報基盤課共同利用支援係 イノベーション窓口

電話: 022(795)3406 Fax: 022(795)6099

E-mail: innovation@isc.tohoku.ac.jp

(スーパーコンピュータ研究部, 共同利用支援係)

夏季休業に伴う閉館について(No.106)

夏季休業に伴い、以下の期間サイバーサイエンスセンターの建物は閉館となります。この期間中、計算機は稼動しており通常どおり利用できますが、利用申請、大判カラープリンタ出力、利用相談などはできませんのであらかじめご了承願います。

平成22年8月12日(木) ~ 8月17日(火)

(共同利用支援係、共同研究支援係)

利用相談室の夏季閉室について(No.106)

8月2日(月)~8月27日(金)の期間、利用相談室を閉室いたします。この期間、相談を希望される場合はe-mailをご利用ください。面談や電話での相談を希望される方は、センター職員が対応いたしますので共同利用支援係までお申し出ください。

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

電話: 022-795-3406 (共同利用支援係)

(共同利用支援係)

平成22年度講習会(9月開催)案内

No.	名 称	開催日時	講師	内 容 概 略
8	スーパーコンピュータ の高速化技法	9月1日(水) 10:00~	NEC担当者	・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(木) 10:00~	NEC担当者他	・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(月) 13:00~	後藤 英昭 (サイバーサイエ ンスセンター)	・UNIX システムの基本的な使い方・エディタの使い方・プログラムの実行方法
11	スーパ゚ーコンピュータと並列コン ピュータの基本的な利用法	9月7日(火) 13:30~	小野 敏 他 (情報部情報基 盤課)	・自動ベクトル化・自動並列化・利用法
12	MARC入門	9月8日(水) 13:00~	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(金) 13:00~	横井 渉央 (情報科学研究科)	·Mathematica の基本的が使い方

<各講習会共通事項>

会場: サイバーサイエンスセンター本館 5 階 講義室又は端末機室 (青葉山キャンパス情報科学研究科西隣)

当日受付: サイバーサイエンスセンター本館1階 受付窓口 (受付は開始5分前までにお願いします)

受講対象: センター利用有資格者(教員、大学院生、学部4年生、技術職員等)

問合せ先: 共同利用支援係 Tel:022-795-3406 E-mail:uketuke@isc.tohoku.ac.jp

その他:プログラムは予定のものです。若干変更する場合がありますのでお含みおきください。

─ 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

サイバーサイエンスセンターでは、東北地区の大学を訪問し本センターの講習会を開催させて頂く …という取り組みを行っております。今年は、2 月に弘前大学、6 月に秋田大学にお邪魔して、本センターの大規模科学計算システム等に関する講習会を開催しました。どちらの大学でも、共催の総合情報処理センターの実習室・端末室をお借りし、リモートログインにより東北大学のスパコンへジョブを投入するという体験利用の実習も実施しました。参加者の皆様には、実感としてスパコンの雰囲気を味わってもらうことができ、好評だったようです。ただ、ご存知のように、本センターの SX-9 の利用率は日常的に極めて高く、体験利用の実習中もしばしばジョブが待たされ(キューにたまり)ました。まぁそれはそれでリアルな体験であり、本センターのスパコンが大いに活用されていることを示せたのかもしれません(言い訳がましい?)。

この講習会の開催にあたっては、東北学術研究インターネットコミュニティ(TOPIC)のヒューマンネットワークを(勝手に)活用しました。TOPIC は、東北地区において学術研究・教育活動を支援するコンピュータネットワーク環境の発展に貢献するコニュニティであり、日頃顔を合わせる機会の多い TOPIC 幹事の方々にお願いして、このような講習会をスムーズに実現することができました。東北地区の大学等において本センターの講習会の希望がございましたら、(夜の交流会の企画とともに?)ご一報いただけますと幸いです。(TM)

新並列コンピュータ Express5800 は運用を開始してから 2 ヶ月が経ちました。この間、障害無く稼動しています。以前の並列コンピュータに比べて演算性能は若干高くなっております。実行してみると gaussian では演算性能が 2 倍 UP しているものもあります。利用者の方の実感はいかがでしょうか。

今月号には、理学研究科の川村先生からの投稿記事が掲載されております。その内容は、20年分の衛星データを新並列コンピュータにより解析するというものです。川村先生は本センターが片平地区にあったときからの 20 年来の利用者であり、これまでにセンターで導入した計算機を使用して衛星データの可視化、データの媒体変換、高速データ転送、大容量ファイル利用等について先進的な取り組みをされてきました。

新並列コンピュータの導入が利用者の方々の研究の促進および発展に結びついていただければ、センター職員にとっては励みとなります。(EI)



サイバーサイエンスセンター前 整備中の青葉山新キャンパス

SENAC 編集部会

小林広明 曽根秀昭 水木敬明 後藤英昭 江川隆輔 伊藤英一 山内 斎 小野 敏 高橋洋一 斉藤くみ子

平成22年7月発行

編集・発行 東北大学

サイバーサイエンスセンター 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-3

郵便番号 980-8578

印刷 大成印刷株式会社

システム一覧

計算機システム	ホスト名	機種
スーパーコンピュータ	super.isc.tohoku.ac.jp	SX-9
並列コンピュータ	gen. isc. tohoku. ac. jp	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
	会話型	(4cpu)	1時間	8GB
		ss (4cpu)	1時間	256GB
		s (4cpu)	無制限	32GB
スーパー コンピュータ	バッチ	p8 (8cpu)	"	512GB
	処理	p16 (16cpu)	"	1024GB
		p32 (32cpu)	11	1024GB×2
		p64 (64cpu)	"	1024GB×4
	会話型	(4 並列)	1時間	8GB
	バッチ al 処理 ai	as (非並列)	無制限	16GB
		am (Marc 専用)	"	16GB
並列 コンピュータ		am2 (Marc 専用)	"	128GB
		a8 (8並列)	"	128GB
		a16 (16 並列)	"	256GB
		a32 (32 並列)	11	512GB

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.3 2010-7

[大規模科学計算システム]	
Express5800/A1080a-D のハードウェア	
[共同研究成果] 平行平板間流れにおける乱流斑点の発達に関する DNS 解析 塚 原 隆 裕 會 田 紘 史 川 口 靖 夫	,
[研究成果] 20年を超える衛星海面水温画像の超高速大量処理川村 宏 細田皇太郎 Huiling Qin 境 田 太 樹 戸 間 幸 大	-
時間領域および周波数領域差分法を用いた周期構造の解析有 馬 卓 司 宇 野 ・ 亨	
[紹 介] サイバーサイエンスセンター展示室の紹介	35
[報 告] 東北大学サイバーサイエンスセンター講習会 in 弘前大学の開催報告	43
東北大学サイバーサイエンスセンター講習会 in 弘前大学佐 藤 友 暁	44
[利用相談室便り]	
量子化学計算に必要な下準備は何か? 山 崎 摩 – 実験科学者のためのベンチマーク計算入門 –	50
自己紹介と研究室の紹介	54
[Web 版大規模科学計算システムニュース]より 平成22年度の利用相談について(No.103)	58
平成22年度 研究開発公募課題の採択について (No.104)	59
文部科学省2010年度 先端研究施設共用促進事業 第二期公募説明会のご案内 (No.105)	60
夏季休業に伴う閉館について (No.106)	61
利用相談室の夏季閉室について (No.106)	61
平成22年度講習会(9月開催)案内	62
執筆要項	63
編集後記	64

