



TOHOKU
UNIVERSITY

ISSN 0286-7419

東北大学
サイバーサイエンスセンター

大規模科学計算システム広報

SENAC

Vol.44 No.2 2011-4



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	10:00～16:00
		相談員不在時 022-795-3406(3406)	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
三階	庶務係	022-795-3407(3407) syomu@isc.tohoku.ac.jp	庶務に関すること	8:30～17:15
	会計係	022-795-3405(3405) kaikai@isc.tohoku.ac.jp	会計に関すること、負担金の請求に関すること	8:30～17:15
	共同研究支援係	022-795-6252(6252) rs-sec@isc.tohoku.ac.jp	共同研究、計算機システムに関すること	8:30～17:15
	共同利用支援係	022-795-6251(6251) uketuke@isc.tohoku.ac.jp	ライブラリ、アプリケーションに関すること	8:30～17:15
	ネットワーク係	022-795-6253(6253) net-sec@isc.tohoku.ac.jp	ネットワークに関すること	8:30～17:15
四階	研究開発部	022-795-6095(6095)		
五階	端末機室	(3445)	PC端末機(X端末)	8:30～21:00

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

本誌の名前「SENAC」の由来

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

[センター長メッセージ]

未曾有の事態に直面して

この度の東日本大震災により被災された皆様に、心よりお見舞いを申し上げます。また、本センターに対して多くの皆様からご支援お励ましをいただき感謝申し上げます。

幸いなことに、本センターの安全は確保され、人的な被害はありませんでした。3月11日の大地震直後は、停電に見舞われ、キャンパスネットワーク StarTAINS およびスーパーコンピュータ設備は一時運用停止に追い込まれましたが、電力復旧後、センター職員一丸となってこれら情報基盤設備の点検復旧に務め、StarTAINS とスーパーコンピュータ、そして東北地域ネットワーク TOPIC の基幹サービスをいち早く回復させ、現在、被災により障害を受けている部局の情報基盤の復旧支援に取り組んでおります。

今回の東日本大震災により我が国は様々な社会インフラが被害を受け、日常生活に多くの支障が生じております。特に、原発事故を含む電力設備の甚大な被害による我が国の電力供給能力の著しい低下は、東北関東の広範囲にわたり、あらゆる社会活動の制約になっております。スーパーコンピュータなど情報基盤の運用は大きな電力を必要としますが、その一方で、我が国の先端科学技術の推進ばかりでなく、防災・減災など安全・安心な社会設計に必要な不可欠であります。従って、我が国の震災後の復興を加速させるために重要なこれら学術情報基盤の効率的な運用と活用方法を、我々はこれまで以上に知恵を出し合って、今回の未曾有の事態を乗り越えていかなければなりません。

我が国の大学スーパーコンピュータセンターのうち、東日本大震災の影響による東北・関東地方の電力需給逼迫の影響を受ける東北大学、筑波大学、東京大学、東京工業大学の各センターでは、北海道大学、名古屋大学、大阪大学、九州大学の各センターと協議し、各センターの計算資源を可能な範囲で融通することを合意しました。同様な協議は、当センターと関係が深い、地球シミュレータセンターやドイツの高性能計算センター (HLRS) とも行っております。今後早急に、具体的な資源提供の方法を策定した上で、東北・関東地方の大学センター利用者にアナウンスする予定です。なおこの支援計画は、「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)」構築の準備段階の活動として実施する予定です。またこの取り組みにより、他のスーパーコンピュータを保有している機関のユーザに対する支援も可能な限り実施する準備をしています。

また、東北大学として地域に密接した社会復興への貢献として、安全・安心で持続可能な社会の設計・構築に関係する研究活動分野に対する積極的な支援をしたいと考え、防災・減災・エコ社会の形成に関する研究を行う研究者に対して、シミュレーションに必要なスーパーコンピュー

タ資源を優先的に提供する公募事業を近々行う予定です。

国難とも言える戦後最大の事態に対して、被災地の中心にいる我々が以上に示したこと以外にもどのような貢献ができるか、皆さんと一緒に考え、積極的に取り組んで行く所存です。幅広くご意見をお聞かせいただくと共に、今後とも、様々な面で御支援、御理解と御協力をお願い申し上げます。

平成23年4月1日

東北大学

サイバーサイエンスセンター

センター長 小林広明

[大規模科学計算システム]

ライブラリ・アプリケーションの紹介
(2011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 2011 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な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、acoread コマンドでご覧ください。

[FORTRAN]

- 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++]

- 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 の利用をお勧めします。

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

プログラミング言語・コンパイラ

MathKeisan for SX (スーパーコンピュータ)

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

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

本センター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、MolStudio 等ではインプットファイル作成画面の Link 0 section の項に追加してください。

実行時には、`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、計算のやり直しや、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

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。

電子構造論による化学の探求 第二版,ガウシアン社,1998

Gaussian 09 User's Reference

Gaussian 09 IOps Reference

Gaussian 09 Online Manual,<http://www.gaussian.com/>

Gaussian プログラムによる量子化学計算マニュアル : 堀憲次, 丸善出版

すぐできる量子化学計算ビギナーズマニュアル : 武次鉄也, 講談社

すぐできる分子シミュレーションビギナーズマニュアル : 長岡正隆, 講談社

Gaussian プログラムで学ぶ情報化学・計算化学実験 : 堀憲次, 丸善出版

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

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

解析結果

バッチリクエストが終了すると、主に以下のようなファイルが作成されます。

- job_name.out (解析結果)
- job_name.log (解析ログ)
- job_name.t16 (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 -> ->

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 -> MARC INPUT FILE

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

サンプルプログラム

Marc

マニュアル E 編に掲載されている例題が、並列コンピュータ gen.isc.tohoku.ac.jp の
/usr/ap/MSC/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 コマンドをご覧ください。

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, Linux 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 Window 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) : トップラン
Mathematica 方法と応用 : J.W. グレイ, サイエントリスト社
Mathematica プログラミング技法 : R. メーダー, トップラン
入門 Mathematica : 日本 Mathematica ユーザー会, 東京電機大学出版局
はやわかり Mathematica : 榊原進, 共立出版
もっと Mathematica で数学を : 吉田孝之, 培風館

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、およびビジュアル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

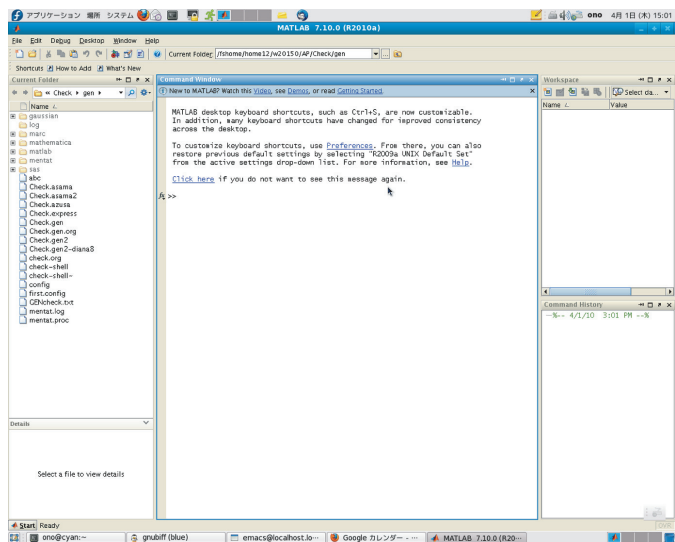
利用方法

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
だれでもわかる MATLAB : 池原雅章, 培風館
はやわかり MATLAB 第2版 : 芦野隆一, 共立出版
最新 MATLAB ハンドブック第3版 : 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 の総合応用 : 高谷邦夫, 森北出版
最新使える! MATLAB : 青山貴伸, 講談社
使える! MATLAB/Simulink プログラミング : 青山貴伸, 講談社
MATLAB による画像&映像信号処理 : 村松正吾, CQ 出版

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 9.2

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。

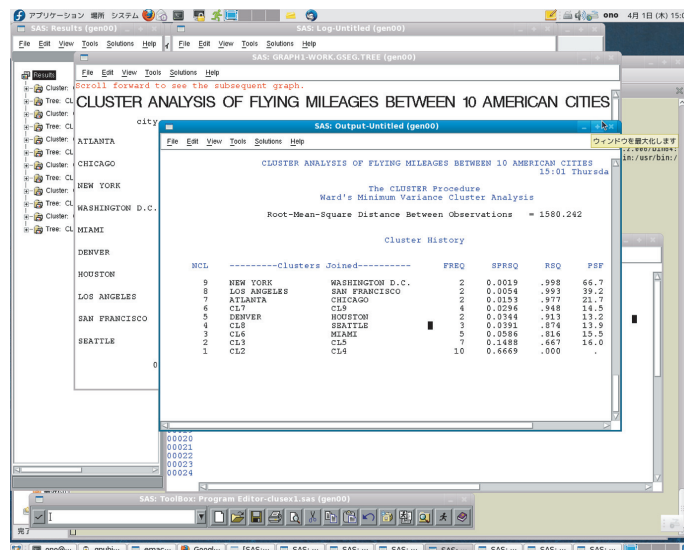
SAS の起動

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] : 市川伸一, 大学出版会

SAS による共分散構造分析 : 野田秀樹, 東京大学出版会

SAS による実験データの解析 : 高橋行雄, 東京大学出版会

SAS による統計分析 : 高柳良太, オーム社

データ解析のための SAS 入門 : 宮岡悦良, 朝倉書店

実用 SAS 生物統計ハンドブック : サイエンティスト社

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



[大規模科学計算システム]

GDB を用いたデバッグ入門

山下 毅[†] 小野 敏[†] 伊藤 英一[†]

[†]東北大学 情報部 情報基盤課

1 はじめに

計算機を利用した数値計算シミュレーションは、コンピュータ性能が向上するとともに、ユーザーの高いニーズにも答えられるようになってきています。それとともにユーザーアプリケーションは複雑なアルゴリズムが生まれ、ユーザーがコーディングするソースファイルは大量で複雑になっています。コーディングが終了した後、コンパイルエラーを全て修正し実行となると、バグによる実行時エラーの発生に悩まされた経験がほとんどの方にあるでしょう。機能の拡張や、ソースファイルの管理を柔軟にするために、ソースファイルはサブルーチン毎に分割されることが一般的です。しかしながら実行時エラーはコンパイルエラーと異なり、エラー位置を特定するための情報が乏しいので、ソースファイルが分割されているとバグの箇所を特定するために時間がかかってしまう、という悪影響もあります。そこで本稿では、サブルーチンが多数ある長いソースファイルや分割されたソースファイルでも、エラー位置の特定とバグの修正（デバッグ）にかかる時間を短縮するための便利なソフト“デバッガ”の初歩的な使用方法を紹介します。

2 GDB とは

GDB(GNU Project debugger) [1] は、Unix プログラマの間で最も一般的に使われているデバッガ（プログラムの不具合、バグの発見や修正を支援するソフトウェア）です。GDB は GNU プロジェクトにより開発されたオープンソースウェアです。関連するソフトウェアとして、グラフィカルユーザーインタフェースシステムの DDD や、統合開発環境 (IDE) の Eclipse からも GDB の機能を使用することが出来ますが、本稿ではコマンドラインからデバッグを行う GDB の初歩的な操作方法について解説します。

2.1 GDB を使うメリット

デバッガを使用しないでも、もちろんデバッグ作業は可能です。C,C++ では printf 文や std 文、Fortran では print 文や write 文といった、「出力文」を使って、エラー位置の特定や変数値の確認ができます。出力文を使用したデバッグの場合、エラー位置の特定に多くの時間を費やした経験があると思います。それに対して、デバッガを使用した場合、プログラムリストの任意の場所に

「ブレークポイント」を設定して、プログラムを一時停止することでエラー位置の特定ができ、また任意の変数の値を逐一確認することができます。特にサブルーチンやソースファイルが大量である場合、デバッガの使用はエラーを引き起こすプログラムの矛盾などのバグの発見と修正に威力を発揮します。

2.2 サポート言語

GDB は C, C++, D, Objective-C, Fortran, Java, OpenCL C, Pascal, assembly, Modula-2, Ada の各言語に対応しています [1]。サイバーサイエンスセンターでは並列コンピュータ (gen.isc.tohoku.ac.jp) にインストールされており、C, C++ および Fortran のデバッグに使用することができます*1。今回は並列コンピュータ上での Fortran のデバッグについて解説します。

3 GDB を使用したデバッグ作業例

3.1 例題プログラム

デバッグ作業を行う例として、リスト 1, 2 に Fortran のプログラムリストを示しました。このプログラムは、配列の各要素同士の掛け算を行いその結果を別の配列に代入します。その後、配列の一部と、処理にかかった時間を出力します。なおこのプログラムはコンパイルは成功しますが、実行時にエラーとなるバグが 4 つ含まれています。

リスト 1 メインプログラム:main.f90

```

1      program main
2
3      implicit none
4      integer           :: I, J                ! 変数型の定義
5      integer,parameter :: M=10000, N=10      ! 配列サイズの設定
6      double precision :: A(M,N), B(M,N), C(M,N) ! 配列の定義
7      real              :: start_time, end_time ! 変数型の定義
8
9      call clock(start_time)                  ! システム時刻の取得 (開始時刻)
10     do J=1,N
11         do I=1,M
12             A(I,J)=I*J*1.0D0                ! 配列の初期値設定
13             B(I,J)=sqrt(I*J*1.0D0)
14         enddo
15     enddo
16     call sub(A,B,C,M,N)                      ! サブルーチンの呼び出し
17     call clock(end_time)                    ! システム時刻の取得 (終了時刻)
18     write(*,'(5F10.3)') C(1:5,100)         ! 計算後の配列の値を表示
19     write(*,*)'user time = ',end_time-start_time ! 経過時間の表示
20     write(*,*)'Program has been finished normally.' ! 正常終了時のメッセージ表示
21
22     end program

```

*1 ベクトル型スーパーコンピュータ (SX-9) 上では NEC 製のデバッガ、DBX/PDBX が動作します。SSH クライアントプログラムを使用し super.isc.tohoku.ac.jp にログイン後、今回解説した操作方法と同様に使用することができます。本稿では DBX/PDBX 向けの解説は省略します。

リスト 2 サブルーチン:sub.f90

```

1  subroutine sub(A,B,C,M,N)
2
3  implicit none
4  integer      :: I, J, M, N          ! 変数型の定義
5  double precision :: A(M,N), B(M,N), C(M,N) ! 配列の定義
6
7  do J=1,M
8      do I=1,M
9          C(I,J)=A(I,J)*B(I,J)      ! 配列の各要素同士の掛け算
10         enddo
11     enddo
12
13 end subroutine

```

3.2 通常のコmpイルと実行

始めに、以下のコマンドで通常のコmpイルを行ってみます。

```
$ f95 -o sample main.f90 sub.f90
```

コンパイラからのエラーメッセージは無く、正常にコンパイルできたようです。以下のコマンドで会話型形式で実行してみます*2。

```
$ ./sample
```

すると、「セグメントエラー」というエラーメッセージを出して、プログラムは正常終了しませんでした。このエラーメッセージだけでは、プログラムのどの位置にエラーがあるのかすぐには分かりません。では、GDB を使って実際にデバッグしてみます。

3.3 GDB を用いたデバッグ手順

3.3.1 デバッグ用コンパイル

GDB を使ってデバッグするためには、コンパイル時に `-g` オプションを付けます

```
$ f95 -g -o sample main.f90 sub.f90
```

3.3.2 GDB の起動

GDB を起動*3します。このとき、コンパイルした実行ファイル名 (sample) を引数にします。

*2 このプログラムの実行時間は `gen` 上で数秒です。もし終了しない場合は `Ctrl-C` コマンドで強制終了するか、それでも終了しない場合は他の端末から以下のコマンドで強制終了してください。

```
$ ps aux | grep 利用者 ID
(ユーザーが実行中のプロセス ID が表示されます.)
$ kill -9 (sample が実行されているプロセス ID)
```

*3 全てのデバッグ作業が終わるまで `gdb` は終了しません。ソースファイルを編集する別の端末を開いてください。

```
$ gdb sample
```

3.3.3 プログラムの実行

プロンプトが (gdb) に変わり、GDB のコマンド待ち状態になります。始めにプログラムを GDB 上で実行してみます。コマンドは run (r) (カッコ内は省略形、以下同じ) です。

```
(gdb) run
```

会話型形式で実行した場合と同じように、以下のエラーメッセージを出してプログラムは正常終了しませんでした。

```
Program received signal SIGSEGV, Segmentation fault.  
0x000000000047fddd in _intel_new_memset ()
```

3.3.4 エラー位置の特定

別端末にエディタソフトでソースファイルを開いて内容を確認することもできますが、GDB ではプログラムをコマンド list(l) により表示させることができます。list コマンドの後に、関数名 (main または sub)、またはソースファイル名:行番号 (main.f90:行番号または sub.f90:行番号) を指定すると、指定した行番号の前後 10 行分のリストが表示されます。

```
(gdb) list main  
(gdb) l main.f90:12
```

コマンドを入力せずに Enter キーを押すと、続く 10 行分のリストが表示されます。^{*4}

次に、プログラムの実行を中断させるブレークポイントを設定して、プログラムのどの行でエラーが発生しているかを特定します。ブレークポイントの設定にはコマンド breakpoint(b) を使い、行番号や関数名で指定します。口安として、main.f90 内の各 CALL 文の前にブレークポイントを設定してみます。

```
(gdb) list main  
(gdb) brake 9  
(gdb) b 16  
(gdb) b 17
```

^{*4} GDB ではコマンドを入力せずに Enter キーを押すと、直前のコマンドが繰り返されます。また、カーソルキーの上を押すと、過去に入力したコマンドを履歴入力することが出来ます。Tab キーによるコマンド補完もできます。

設定されたブレークポイントをコマンド `info(i)` を使って確認します。

```
(gdb) info breakpoint
```

以下のように設定したブレークポイントを確認できます。

Num	Type	Disp	Enb	Address	What
1	breakpoint	keep	y	0x0000000004031be	in main at main.f90:9
2	breakpoint	keep	y	0x000000000403260	in main at main.f90:16
3	breakpoint	keep	y	0x000000000403297	in main at main.f90:17

ブレークポイントを設定したので、プログラムを再実行します。

```
(gdb) r
```

プログラムの始めから実行する確認メッセージが出ますので、"y"を入力します。プログラムリスト 9 行目の `call clock(start_time)` の前で実行が一時停止します。

```
Breakpoint 1, sample () at main.f90:9
9          call clock(start_time)
```

コマンド `continue(c)` で次のブレークポイントまで実行を進めます。プログラムリスト 16 行目で一時停止します。さらに次のブレークポイントまで実行を進めます。17 行目で一時停止します。さらに次のブレークポイントまで実行を進めます。

```
(gdb) continue
(gdb) c
(gdb) (Enter キーのみ)
```

17 行目を実行したときに、先程と同じエラーメッセージで実行が異常終了しました。17 行目の `call clock(end_time)` でエラーが発生しているようです。サブルーチン `clock` はコンパイラの組み込み関数なので、インテル Fortran コンパイラーのライブラリリファレンス [2] を参照すると、`clock` の戻り値はサイズ 8 の `char` 型配列とのことです*5。サブルーチン `clock` の引数に実数型で宣言した変数 (`start_time`, `end_time`) を渡していたので、エラーが発生したようです。そこで、プログラムリスト main.f90 の 9 行目と 17 行目のサブルーチン `clock` を、実数型で CPU 時間を返すサブルーチン `cpu_time` に変更します。別端末で `main.f90` のソースファイルを修正し、変更を保存します。

*5 現在時刻を 00:00:00 の文字列で返します。

3.3.5 再コンパイルと再実行

先程と同様に、`-g` オプションを付けて再コンパイルします。GDB はデバッグ対象の実行ファイルが更新されたことを自動的に検知しますので、GDB を立ち上げ直す必要はありません。GDB 上で更新前のプログラムが実行中だったので、`Ctrl-C` で実行を中断します。更新後のプログラムが読み込まれたことを確認するため、プログラムリストを表示してみます。ファイル名を指定すると、そのファイルに関して `list` コマンドが有効になります。list コマンドの後に行番号を指定するだけでその前後の 10 行が表示されます。

```
(gdb) l main.f90:9
(gdb) l 17
```

ブレークポイントの設定は引き継がれていますので、コマンド `delete(d)` で全てのブレークポイントを削除します。

```
(gdb) delete
```

`delete` コマンドのみ入力すると全てのブレークポイントが削除されます。ブレークポイントを個別に削除する場合は、ブレークポイントの番号を指定します。確認のメッセージが表示されますので、`y` を入力します。ブレークポイントを 18 行目の `write` 文の前に設定して、`run` コマンドでプログラムを再実行します。

```
(gdb) b 18
(gdb) r
```

18 行目で一時停止しました。この行以前でのエラーは解消されたようです。コマンド `next(n)` で 1 行ずつ実行を続けます。

```
(gdb) next
```

以下のエラーメッセージで実行が停止しました。

```
Program received signal SIGSEGV, Segmentation fault.
0x000000000044dec1 in cvt_ieee_t_to_text_ex ()
```

18 行目の `write` 文にエラーがありそうなので、この行を詳しく見てみます。write 文で配列 `C` の一部分の値を表示させようとしています。宣言された配列サイズは `10000 × 10` ですが、配列 `C` の 2 次元目の 100 番目にアクセスしようとしています。そこで、プログラムリスト main.f90 の 18 行目の `C(1:5,100)` を `C(1:5,10)` と修正して再度 `-g` オプションを付けてコンパイルし、GDB で再実行してみます。今度は GDB 上で正常に終了し、結果が表示されました。

3.3.6 変数値の確認

今まではデバッグ用のオプション-gを付けてコンパイルしていましたが、通常のコンパイルを行い、会話型形式で実行してみます*6。

```
$ f95 -o sample main.f90 sub.f90
$ ./sample
```

「セグメントエラー」により異常終了しました。メインルーチン main.f90 にはエラーがなさそうなので、サブルーチン sub.f90 について調査してみます。再度-g オプションを付けてコンパイルします。GDB は立ち上がったままですので、sub.f90 のプログラムリストを表示します。

```
(gdb) l sub.f90:1
```

この操作でブレークポイントを設定する対象ファイルが sub.f90 になります。

GDB 上で実行した場合は、サブルーチン sub の実行ではエラーの発生はありませんでしたので、ブレークポイントを行列計算後の 12 行目に設定します。

```
(gdb) b 12
(gdb) r
```

DO ループの変数 I,J の値を確認してみます。実行中の変数の値はコマンド print(p) で確認できます。引数に確認したい変数を記述します。DO ループの変数 I,J の値を確認します。

```
(gdb) print I
(gdb) p J
```

I は配列サイズ +1 の 1001 で終了しています。J も 1001 となっていますが、これは配列サイズの 10 を超えています。プログラムリスト sub.f90 の 7 行目の DO ループを見ると、DO J=1,M となっています。N と M を間違えているようです。プログラムリスト sub.f90 の 7 行目を DO J=1,M を DO J=1,N と修正して通常のコンパイルと実行をしてみます。今度は正常に実行が終了しました。これで 4 箇所のバグを修正するデバッグ作業が終了しました。

3.3.7 デバッガの終了

GDB を終了させるコマンドは quit(q) です。確認のメッセージが出ますので y を入力します。

```
(gdb) quit
```

*6 オプション-g を付けたデバッグ用のコンパイルはコンパイラによる最適化が一部行われません。プログラムによっては本番の実行に用いると実行速度が遅くなることがあります。

表 1 今回使用した GDB コマンド

コマンド	省略形	引数	動作
gdb		実行ファイル名	GDB の起動
run	r	コマンドライン引数	デバッグ対象ファイルの実行
list	l	file[:line]/line	プログラムリストの表示
break	b	[file:]function/[file:]line	ブレークポイントの設定
info	i	feature	feature の情報を表示
		breakpoints(b)	ブレークポイント一覧を表示
continue	c		ブレークポイント停止後に実行を再開
next	n	[count]	ブレークポイント停止後に次の行を実行
delete	d	[breakpoints][range...]	ブレークポイントを削除
quit	q		GDB を終了

4 おわりに

本稿で使用した GDB コマンドを表 1 に示しました。GDB はマルチスレッドでのデバッグや、動的メモリの参照など様々な機能を持つ高機能なデバッガソフトです。本稿で解説した使い方はごく基本的なものですので、より便利で効率的な使い方を知りたい方は、下記に代表的な参考文献を上げましたのでご参照下さい。効率的なプログラム開発の手助けとして、ぜひデバッガソフトをご活用下さい。

参考文献

- [1] GDB: The GNU Project Debugger, <http://www.gnu.org/software/gdb/documentation/>
- [2] インテル Fortran ライブラリ・リファレンス, http://jp.xlsoft.com/documents/intel/for_lib.pdf
- [3] 実践 デバッグ技法 GDB, DDD, Eclipse によるデバッキング, Norman Matloff, Peter Salzman, 訳:相川愛三, オライリー・ジャパン (2009)
- [4] Debug Hacks デバッグを極めるテクニック&ツール, 吉岡弘隆, 大和一洋, 大岩尚宏, 安部東洋, 吉口俊輔, オライリー・ジャパン (2009)
- [5] GDB ハンドブック, Arnold Robbins, 訳:千住治郎, オライリー・ジャパン (2009)
- [6] GDB を使った実践的デバッグ手法, CQ 出版株式会社 (2007)

[共同研究成果]

量子化学計算パッケージMOLPROの
電子励起状態計算への応用と並列化

山崎 馨・河野 裕彦

東北大学大学院理学研究科化学専攻

E-mail: hirohiko-kono@m.tohoku.ac.jp

要旨

我々は、東北大学サイバーサイエンスセンターとの共同研究として量子化学計算パッケージMOLPROを並列コンピュータ上で並列化し、多配置電子状態理論に基づく電子励起状態計算を高速に行える環境を整備した。ピレンの垂直励起エネルギーを2次の多参照摂動法であるMulti-state complete active space self-consistent field second-order perturbation theory (MS-CASPT2法)に基づいて計算し、その並列化による計算速度の変化と精度を調べた。MS-CASPT2法による垂直励起エネルギーは実験値と定量的な一致を示した。また、並列化によりMS-CASPT2法のルーチンは、16コアを用いてノード内並列計算を行った時に最高の計算速度を示した。並列コンピュータ上のMOLPROは、並列計算機向け線形代数パッケージScaLAPACKや最適化されたMPIの組み込みなどの追加チューニングによって、一層のパフォーマンス向上が期待される。

1. 序論

量子化学計算とは、量子力学に基づいて分子の電子分布やエネルギーを求め、これらから分子構造（結合長や結合角）など分子を特徴付ける諸量を計算する手法の総称である。量子化学計算の問題点としては、計算対象とする分子のサイズの大規模化や計算精度の向上をはかろうとすると、CPU時間やメモリ量などの必要な計算リソースが指数関数的に増大することがあげられる[1]。特に、光などの外場との相互作用によって分子内の電子が高いエネルギーを持った電子励起状態の計算ではこれがさらに顕著である。電子励起状態の計算は、効率の良い太陽電池の開発や光合成機構など光と分子の相互作用を扱う必要がある研究では不可欠である。この為、大規模系や高精度が必要とされる系において電子励起状態計算を効率良く行うことで、光と分子の相互作用が関与する現象の理論解析を迅速かつ正確に行うことが出来る。

量子化学計算パッケージには、サイバーサイエンスセンターに導入されているGaussian 09 [2]をはじめとして、多種多様なものが開発提供されている。その中でも、Wernerらによって開発されたMOLPRO [3]は電子励起状態の高精度計算を高速に実行できることで知られている[4, 5]。このMOLPROを、1ノードあたり32コアのCPUと512GBのメモリを搭載するサイバーサイエンスセンターの並列コンピュータにおいて並列化して運用することで、研究室のワークステーションでは不可能な大規模かつ高精度の電子励起状態計算を迅速に行えるようになることが期待される。そこで我々は、サイバーサイエンスセンターとの共同研究としてMOLPROの並列化版を並列

コンピュータ上でビルド・インストールし、電子励起状態計算を高速に行える環境を整備した。

本稿では、まず量子化学計算、特に電子励起状態の高精度計算の基礎理論である多配置電子状態理論について概説した後に、電子励起状態計算の特徴を実例によって紹介し、最後にMOLPROの並列化とそのパフォーマンスについて議論する。

2. 量子化学計算と多配置電子状態理論の基礎

量子化学において分子のエネルギーや電子の分布を計算する際には、分子を構成する v 個の原子核は空間上に固定されており (Born-Oppenheimer 近似), その周りを N 個の電子が一定のエネルギー E_n を持って束縛運動しているとする描像をとる. 分子内の電子は量子力学に従うため, 分子内の電子がどのように分布しているかを表す電子状態のエネルギー E_n は離散的 (飛び飛び) の値をとる. この電子状態を記述する波動関数 $|\Psi_n\rangle$ は Schrödinger 方程式

$$\hat{H} |\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle \tag{1}$$

に従う. ここで \hat{H} は, 電子が持つ全エネルギーを表すハミルトニアン演算子 (関数) であり,

$$\hat{H} = -\sum_i^N \frac{1}{2} \Delta_i - \sum_{i,\alpha}^{N,v} \frac{Z_\alpha}{r_{i\alpha}} + \sum_{i>j} \frac{1}{r_{ij}} \tag{2}$$

と書ける. この(2)式の第 1 項は電子のもつ運動エネルギー, 第 2 項は原子核と電子の間に働くクーロンポテンシャル, 第 3 項は電子の間に働くクーロンポテンシャルを表す. Z_α は α 番目の原子核が持つ電荷, $r_{i\alpha}$ は α 番目の原子核と i 番目の電子との距離, r_{ij} は i 番目のと j 番目の電子との距離を表す. なおここでは $e = \hbar = m_e = 1$ なる原子単位系を用いた.

計算の対象とする分子中で N 個の電子がまず独立に運動しているとする. この時, 各電子の確率的な空間分布を特徴付ける関数を分子軌道 ϕ_i ($i = 1, 2, \dots, N, \dots$) といい, それぞれ軌道エネルギー ε_i ($\varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \dots$) を持つ. この時, ϕ_i は規格直交化されるように選ぶことが一般的である. 分子内の N 電子がどの分子軌道に収まっているかを電子配置と呼ぶ. この際, 最も低いエネルギーを持つ電子配置 ψ_0 は, エネルギーの低い分子軌道 ϕ_1 から順に N 個の電子を詰めていくことで構築できる. この基底電子配置以外にも, 基底配置から N 個の電子のうち j 個 ($1 \leq j \leq N$) を空軌道 ϕ_a, ϕ_b, \dots ($N+1 \leq a \leq b \leq \dots$) に移し替えた, よりエネルギーの高い j 電子励起配置 ψ_μ ($\mu = 1, 2, \dots$) も考えられる. また, 量子力学的な要請から, 電子配置 ψ_μ は 2 つの電子の自由度 (位置とスピン) を入れ替えたときに符号が反転するように決められる (Pauli の禁制原理). さて, 分子の電子状態 $|\Psi_n\rangle$ は, 取り得る電子配置をすべて考慮し尽くすことで厳密解を得ることが理論的にはできる[6]. つまり $|\Psi_n\rangle$ の厳密解は,

$$|\Psi_n\rangle = \sum_{\mu=0}^{\infty} c_{n\mu} \psi_\mu \tag{3}$$

と形式的に表される．ここで $c_{n\mu}^2$ は、 μ 番目の電子配置 ψ_μ を見いだしうる確率を意味するから、

$$\sum_{\mu=0}^{\infty} c_{n\mu}^2 = 1 \quad (4)$$

を満たす必要がある．この時、波動関数 $|\Psi_n\rangle$ は規格化されているという．また、この様に考慮しうる電子配置を考え尽くしたときにその電子状態におけるエネルギー E_n も厳密解をとりうる．

しかし、 E_n の数値的厳密解は、特殊な方法を用いて原子やごく小さな分子に対してのみ現時点では計算可能であるので[7]、次のような近似が通常行われる．まず、(3) 式の電子状態 $|\Psi_n\rangle$ が**有限個**の電子配置を用いてほぼ正確に近似できると仮定し、そのために必要な M 個の電子配置 $\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_{M-1}$ の寄与のみを第 1 近似として考慮する(多配置展開)．この時、(4) 式の規格化条件は採用した N 個の配置で満足されると仮定する．次に、考慮する分子の電子配置 ψ_μ を構成する分子軌道が、分子を構成する原子が持つ電子の確率的空間分布(原子軌道)の重ね合わせで書けると近似する (LCAO-MO 近似)．さらに、計算を簡略化する為に、Gauss 型関数の線形結合を用いて原子軌道を近似的に表現することにする¹．この原子軌道を表現する Gauss 型関数群のことを Gauss 型基底関数(GTO)と呼ぶ．実際の計算では、 $|\Psi_n\rangle$ の規格直交性を保ったままエネルギーを最小化するように、この GTO の係数と(3) 式の $c_{n\mu}$ を反復法による逐次近似を用いて最適化する[8]．このようにして分子のエネルギーを計算する手法を Multi-configuration-self-consistent-field (MCSCF)法と呼ぶ．また、MCSCF 法とこれを第 1 近似としてより高精度な電子状態やそのエネルギーを求める手法を総称して多配置電子状態理論という．なお、MOLPRO はこの多配置電子状態理論による計算を得意とする量子化学計算パッケージである．また、考慮する電子配置が 1 つである場合 MCSCF 法は単に self-consistent-field (SCF) 法と呼ばれる．SCF 法やこれを出発点としてより精度の高い電子状態や分子のエネルギーを求めていく理論を総称して単配置電子状態理論と呼ぶ．

分子内の電子が取り得る最低エネルギー状態である電子基底状態における分子の安定構造の付近では SCF 法によって計算された近似的な電子状態が良い第 1 近似であることが多い．しかし、電子励起状態においては電子状態を近似するためには安定構造の領域でも多数の電子配置が必要な場合が多く、高精度な計算の出発点として MCSCF 法が頻繁に採用される．

3. 電子励起状態計算の実例

それでは、多配置電子状態理論の電子励起状態計算への適用例を紹介しよう．本稿では、電子基底状態 (S_0) から一重項電子励起状態 S_1 と S_2 それぞれに分子の構造を保ったまま変化させるのに必要なエネルギー (垂直励起エネルギー) を有機分子ピレン

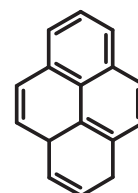


図 1: ピレンの分子構造

¹ 原子や水素分子・窒素分子などの小さな分子では、GTO の代わりに、空間グリッドを用いた数値基底関数を用いることも可能である．この応用例としては文献[10]を参照のこと．

[9](図 1)において計算した. なお, ピレンはバイオテクノロジーにおける試薬の中で光を出すパーツなどとして用いられる蛍光分子である.

今回は, 幾つかの電子状態のエネルギーの加重平均を最小化する多状態の MCSCF 法である State-averaged-CASSCF 法(SA-CASSCF 法)[11,12]と, これを出発点として, 多配置展開に漏れた電子配置の寄与を多項式展開してその2次の項まで取り込む2次の多参照摂動法である MS-CASPT2 法[13]を使った. MCSCF 法において考慮する電子配置としては, 最安定電子配置とこの配置において電子が収容されている分子軌道(被占有軌道)のうちエネルギーが高い順に4個と, 電子が収容されていない分子軌道(空軌道)のうちエネルギーが低い順に4個の計8軌道の中に含まれる8つの電子が取り得る全ての励起配置を考慮した ([8e,8o]-SA-CASSCF 法).

また, 単配置電子状態理論に基づく簡便な電子励起状態計算手法である configuration interaction singles 法 (CIS 法)と CIS(D)法, および電子密度と分子のエネルギーを結びつける汎関数に B3LYP を用いた時間依存密度汎関数法 (TD-B3LYP 法)を比較として用いた. CIS 法と TD-B3LYP 法では, 最安定な電子配置における被占有軌道から空軌道へと1つの電子が移動した(遷移した)電子配置である 1 電子励起配置のみを考慮に入れている. また, CIS(D)法は, 2 電子励起配置の寄与を部分的に取り込むことによって CIS 法で得られた電子状態とそのエネルギーの記述の改善を図っている. なお, ある程度の高精度計算にも対応した中型の GTO である cc-pVDZ と呼ばれる基底関数をエネルギー計算に統一的に用いた.

SA-CASSCF 法と MS-CASPT2 法の計算には MOLPRO 2010.1 [3]を, その他の手法の計算には Gaussian 09 [2]を用いた.

表 1 に, ピレンの S_0 状態から S_1 と S_2 状態への垂直励起エネルギーを上述の計算手法を用いて計算した結果を示す. なおこれまでの実験から, S_1 と S_2 状態は B_{2u} と B_{1u} と呼ばれる対称性をそれぞれ持つことが分かっている[14].

単配置電子状態理論に基づいて 1 電子励起配置のみを考慮した手法である CIS 法と TD-B3LYP 法は, S_1 状態と S_2 状態の順番

を間違えており, 定性的にも一致しない結果となっている. しかし, 2 電子励起配置の寄与を部分的に考慮した CIS(D)法と, 多配置電子状態理論である SA-CASSCF 法は, S_1 状態と S_2 状態の順番を正しく計算できており定性的に正しい計算であるといえる. さらに, SA-CASSCF 法を出発点とする 2 次の多参照摂動法である MS-CASPT2 法は, 0.1eV 以下の誤差で実験値 [15]と定量的に一致している. このことから, 多参照電子状態理論は正しく使用すれば定性的または定量的に実験で得られた垂直励起エネルギーを再現できることが期待できる手法の1つであるといえる.

表 1: 各種の方法を用いたピレンの垂直励起エネルギー. UB3LYP/6-31+G(d)法で構造を最適化し, 基底関数に cc-pVDZ を用いて励起エネルギーを計算した.

Method	$S_1 (B_{2u}) / \text{eV}$	$S_2 (B_{1u}) / \text{eV}$
CIS	4.614	4.450
TD-B3LYP	3.745	3.679
CIS(D)	3.807	4.514
[8e,8o]-SA-CASSCF	4.779	5.448
[8e,8o]-MS-CASPT2	3.257	3.846
Exp. [15]	3.375	3.857

4. MOLPRO の並列化

並列化には, shared memory 型の並列化ライブラリである Grobal Array Tool kit 4.3.2 (GA)[16] を用いた. GA の通信ライブラリには GA に同梱されている TCGMSG を利用した. また, 数値計算ライブラリ MKL に含まれる BLAS と LAPACK を GA と MOLPRO に組み込み, 計算の更なる高速化を図った. ソフトウェアのコンパイルの際には, Intel Compiler version 11.1.069 を用いた. 結果として, MOLPRO を並列コンピュータ上において 1 ノード 32 並列・メモリ容量 460 GB で運用することに成功した.

以下, 本共同研究においてビルドされた並列化版 MOLPRO における MS-CASPT2 法のルーチンの並列化パフォーマンスを示す. 第 3 章で説明した MS-CASPT2 法によるピレンの垂直励起エネルギー計算をテストジョブとして用いた. 使用するメモリ量は 1 コアあたり 1800 MW (14.1 GB) に設定した.

並列化前(並列数 1)と並列化後にノード内並列計算を行った場合(並列数 2・4・8・16・32) の計算所要時間(実時間)の変化を図 2 に,

速度向上率 (n 並列時の計算 実時間

÷ 並列化前の計算実時間)を図 3 に示

す. 並列化前には 16418.129 秒を

本計算に要した. 並列数を増やすに

つれ計算実時間は減少し, 16 並列時に

最短となった. この時の所要時間は

5248.29 秒, 速度向上率は 2.82 を記録

した. しかし, 32 並列時には所要時間

が 16 並列時よりも増加し, 並列化率

も悪化している. これはコア間の

ノード内通信の増加による速度低下

が並列化による並列化による高速化

を上回ってしまったためであると

推論される.

それでは, 更なる MOLPRO の

高速化のためにはどのような方法が

採れるであろうか. 先述したように,

MOLPRO の速度向上率が飽和して

しまう要因はノード内通信の増加

である. MOLPRO の並列化で用いた

GA は内部の通信ライブラリとして

同梱の TCGMSG を用いている. この

ライブラリはサイバーサイエンスセ

ンターの並列コンピュータに最適化

されていないので並列化版 MOLPRO

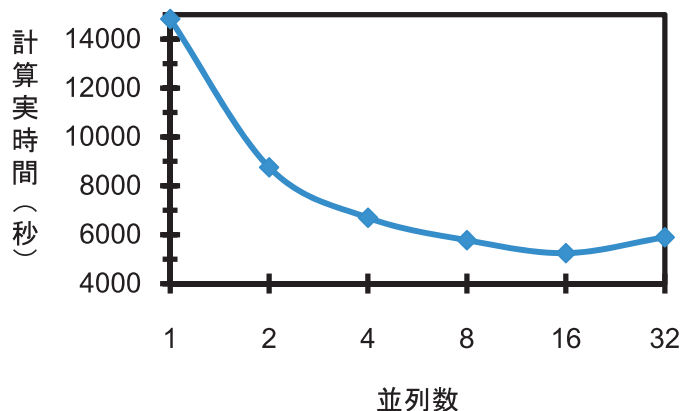


図 2: MS-CASPT2 法によるピレンの垂直励起エネルギー計算の計算実時間

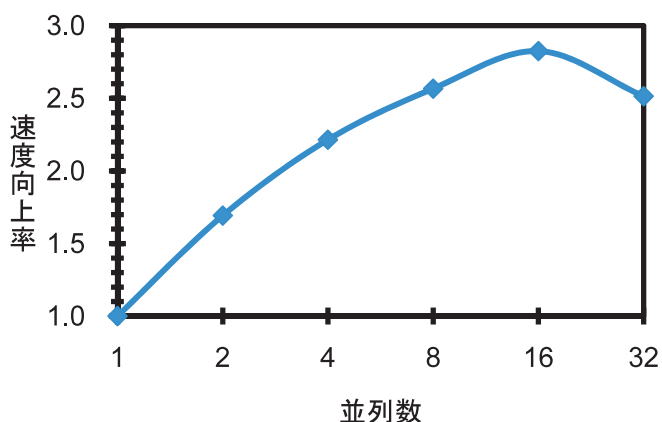


図 3: MS-CASPT2 法によるピレンの垂直励起エネルギー計算の速度向上率

の計算速度低下の要因になっていることが推論される。そのため、TCGMSG をサイバーサイエンスセンターに設置されている並列コンピュータ向けに最適化された MPI に置き換えることが有効であろう。

また量子化学計算の大部分は行列の演算によって行われているため、並列計算機向けの線形代数パッケージである ScaLAPACK の MOLPRO と GA への組み込みも計算速度向上のための有効な手段であると考えられる。

5. 結論

本稿では多配置電子状態理論とその電子励起状態計算の特徴を概説し、量子化学計算パッケージ MOLPRO の並列化について紹介した。サイバーサイエンスセンターの並列コンピュータが持つ潤沢な計算リソースと並列化された MOLPRO を組み合わせることによって、TDDFT 法などの簡便な電子励起状態計算手法では困難な高精度な電子励起状態計算が可能になった。並列コンピュータ上の MOLPRO には計算速度向上の余地が残されているので、更なるチューニングを行うことが望まれる。

謝辞

本稿に掲載した結果の一部はサイバーサイエンスセンターの並列コンピュータを用いて得られた。Intel Compiler version 11.1.069 の導入に当たっては、小野敏氏(共同利用支援係)にご尽力いただいた。また、MOLPRO の並列化とその運用に当たっては、小野敏氏と山下毅氏(同上)から多大な技術的支援をいただいた。これらの支援・協力をこの場を借りて感謝する。

参考文献

- [1] F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, 2nd edition, **2006**, Wiley.
- [2] M. J. Frisch *et al.*, *Gaussian 09*, Revision A.2, **2009**, Gaussian, Inc., Wallingford CT.
- [3] H.-J. Werner *et al.*, MOLPRO, version 2010.1, a package of *ab initio* programs, see <http://www.molpro.net>.
- [4] B. O. Roos, *Theory and Applications of Computational Chemistry: The First Forty Years*, **2005**, Elsevier, 725-764.
- [5] 永瀬茂・平尾公彦 著 『分子理論の展開』, **2002**, 岩波書店
- [6] P. O. Löwdin, *Phys. Rev.*, **1955**, 97, 1474-1489.
- [7] 例えば H. Nakashima *et al.*, *J. Chem. Phys.* **2007**, 127, 224104.
- [8] 金田行雄・笹井理生 監修, 笹井理生 編 『分子システムの計算科学—電子と原子が織り成す多体系のシミュレーション』 **2010**, 共立出版
- [9] A. A. Martí *et al.*, *Acc. Chem. Res.* **2007**, 40, 402-409.

- [10] T. Kato, H. Kono, *J. Chem. Phys.* **2008**, *128*, 184102.
- [11] H.-J. Werner *et al.*, *J. Chem. Phys.*, **1985**, *82*, 5053.
- [12] P. J. Knowles *et al.*, *Chem. Phys. Lett.* **1985**, *115*, 259.
- [13] H.-J. Werner *et al.*, *Mol. Phys.*, **1996**, *89*, 645-661.
- [14] J. Zhang *et al.*, *J. Phys. Chem. A*, **2010** *114* (42), 11117-11124.
- [15] E. A. Mangle *et al.*, *J. Phys. Chem.*, **1986**, *90* (5), 802-807.
- [16] J. Nieplocha *et al.*, *Int. J. High Perf. Comp. App.*, **2006**, *20*, 203.



[共同研究成果]

大気擾乱によって駆動される短周期全球順圧海洋モデルの解像度依存性

稲津大祐・日野亮太・藤本博己

東北大学大学院理学研究科 地震・噴火予知研究観測センター

気圧と風によって駆動される数日から数十日程度の周期帯の全球順圧海洋モデリングを行った。モデル（シミュレーション）結果はモデルの空間解像度に強く依存した。現場海底圧力データによってモデル精度を検証したところ、モデルの解像度が $1/12^\circ$ のとき最も現場再現性がよく、2日以上の周期帯において全球で平均し約 0.6 の相関係数を示した。モデルの解像度はそれよりも粗くても細かくても再現性が低下することがわかった。解像度の向上に伴う現場再現性の低下について、約 10km よりも細かい解像度において活発になる傾圧不安定に伴うエネルギー分配が、順圧モデルでは適切に表現されないことが原因と考えられる。

1. はじめに

海洋の短周期変動のうち潮汐についてはよく研究され精度の高いモデルが開発されてきた[1]。一方、季節変動以上の海洋変動は、気候変動と関係し世界的に多くの研究がなされている[2, 3]。この中間に入る数日から数十日程度の海洋変動は、おおむね総観規模の大気擾乱によって駆動される単層の順圧変動で表現されることが海洋物理学的にわかっている[たとえば、4, 5]。そのモデリングの精度は、衛星観測に代表される各種地球観測データの補正という観点でみると、実用的なレベルにはまだ遠いようである。我々は海底圧力データから、数日から数十日程度の周期帯における海底の鉛直地殻変動（数 cm 以下）を抽出することを目的とし、この短周期海洋変動のできるだけ高精度なモデリングを目指す。

2. モデル概要

緯度経度座標系における単層の順圧海洋モデル[6, 7]を用い、前節で取り上げた短周期海洋変動のシミュレーションモデルを構築する。

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + \mathbf{f} \times \mathbf{v} = \nabla \left(-g\eta + \frac{P}{\rho} \right) + \frac{\tau}{\rho H} - \gamma_b \frac{|\mathbf{v}|}{H} + A_H \nabla^2 \mathbf{v}$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}H) = 0 \quad \tau = \rho_a C_d \mathbf{W} |\mathbf{W}|$$

η : 水位, \mathbf{v} : 水平流速ベクトル,
 P : 海面気圧, τ : 海面風応力ベクトル,
 H : 水位+水深, \mathbf{f} : コリオリ力, g : 重力加速度,
 ρ : 海水密度, γ_b : 海底摩擦係数, A_H : 水平粘性係数,
 ρ_a : 大気密度, C_d : パルク係数, \mathbf{W} : 海面風ベクトル

この偏微分方程式を二次精度の有限差分法に基づき計算機に実装する。Staggered Arakawa C 格子を採用する。同時にポテンシャルエネルギーおよびエンストロフィーを保存させる[8]。時間積分は二次の leapfrog 法によるものとし、Asselin filter [9]を用いることで数値的に安定させる。汎用性

を期待し全球海洋をモデル計算領域とする。通常の緯度経度座標系では、北極海は特異点となり計算不能となるため、今回は対蹠点の位置関係を保ちつつ、両極とも陸地になるような座標変換 [10]により、北極海を含む全球海洋モデリングを実現する (図 1)。この方法により用いる差分方程式は変更しない。モデル海洋は 6 時間毎の大気再解析データによる海面気圧・海上風で駆動する。水深と海岸線は GEBCO'08 [11]または ETOPO1 [12]で与える。

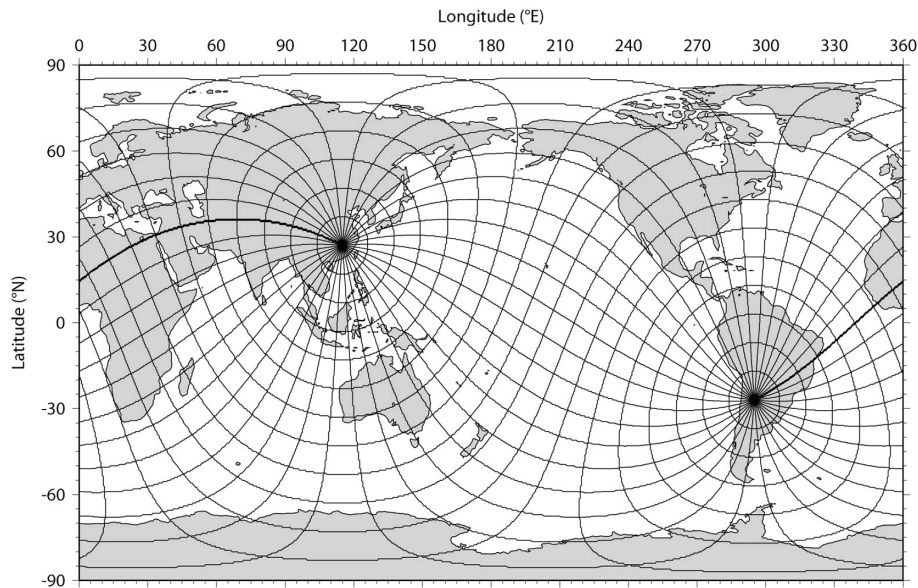


図 1 : 変換後の球面座標。コンターは 10°ごとに示した。

3. 実験設定

モデル内の変数のうち以下のパラメータを変更可能とし、それらを様々に変更することで高精度なモデリングを目指す。

- implicit なパラメータ : 空間解像度
- explicit なパラメータ : 大気再解析データセット (気圧、風)、水深データ、バルク係数、水平粘性係数、海底摩擦係数

空間解像度: 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システム SX-9 を利用し、できるだけ細かい解像度まで実施し解像度依存性を記述する。格子間隔が 1/2°、1/4°、1/6°、1/10°、1/12°、1/15°、1/20°、1/30°の実験を行う。積分すべきモデル変数は 3 つ (水位、東西・南北流速) であり、たとえば、1/12°格子のモデリングを行う場合、約 300 万 (~4320×2160×3) 変数を同時に解くことになる。通常のランである約 1 年分の積分に要する計算時間は、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システム SX-9 のノード内 16CPU (1.6TFLOPS) における自動並列処理で約 3 日であった。この計算時間は、Intel 社の Core2Duo プロセッサ搭載のパソコン (15GFLOPS) での計算と比べ、実性能で約 200 倍であった。

大気再解析データ: ERA-Interim [13]、JRA-25 [14]、NCEP [15]、および、NCEP2 [16]でそれぞれ

強制実験を行う。ERA-Interim のプロダクトには 1.0° と 1.5° のものがあり、この違いによる影響も比較する。

水深データ： $1/120^\circ$ 格子の GEBCO'08 と $1/60^\circ$ 格子の ETOPO1 がある。両者で比較を行う。

バルク係数： [17, 18, 19] などが提案されている。定数 ($C_d = 10^{-3}$) の場合を含め比較実験を行う。

水平粘性係数： 等方的（全領域で一様）とする。解像度の向上に伴い小さな値を用いることが多い[20]。本研究でもそれに従うが、桁を変更する実験でその影響を評価する。

海底摩擦係数： 0.003 がよく用いられる。桁を変更する実験でその影響を評価する。

4. 解像度依存性

シミュレーション結果はモデルの空間解像度に最も強く依存することがわかった。典型例を図2に示す。沿岸域や縁辺海など多少の例外はあるものの、解像度を向上させると計算される海底圧力の振幅が全球にわたり小さくなることがわかる。この原因として、粗い解像度では滑らかな海底地形上におけるエネルギーの消散が小さいのに対し、細かな解像度では急峻な地形が表現され、エネルギーが強く消散することがあげられる[4]。

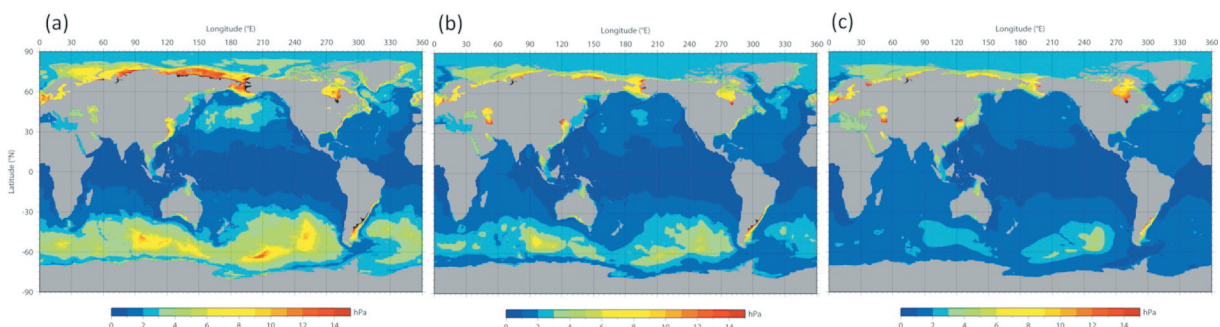


図2：計算された海底圧力の標準偏差。空間解像度が(a) $1/6^\circ$ 、(b) $1/12^\circ$ 、(c) $1/30^\circ$ の結果を示した。

5. 現場データによるモデル精度の検証

モデル精度の検証には全球の 144 個の現場海底圧力データを用いる。ローパスフィルタによって潮汐を除去し 2 日以上周期帯で比較する。現場データの再現性はモデルとデータの相関係数によって評価する。図3に全球データの平均再現性の解像度依存性を示す。現場の再現性は解像度が $1/12^\circ$ のとき最も高かった。解像度がそれよりも粗くても細かくても再現性が低下する。解像度に対する依存性は相関係数で 0.1 のオーダーと大きい。前節では高解像度化に伴うエネルギーの減少が見られたが、 $1/12^\circ$ よりも高解像度のモデリングは現場と比べ振幅が小さくなってしまふ。その他のパラメータに対する依存性は小さく、相関係数で 0.01 のオーダーであった。 $1/12^\circ$ よりも高解像度の場合にモデル精度が低下することについては第7節で述べる。

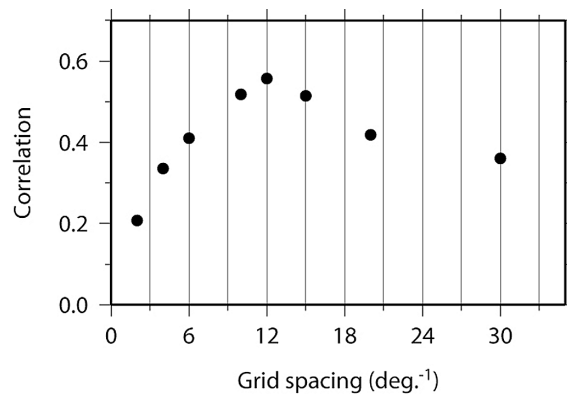


図3：全球海底圧力データの平均再現性のモデル解像度依存性。

6. 1/12°モデルの結果

最も現場再現性のよかった 1/12°モデルの結果について観測結果と比較し議論する。図4に相関係数の分布を示す。渦運動が非常に活発な黒潮続流域[21]や湾流続流域などで再現性が落ちるものの、それ以外ではおおむね全球的に相関が約 0.6 以上と再現性は比較的高い。黒潮続流域などで相関が低下するのは、1 か月以上の周期帯の変動が非常に大きいためである。順圧海洋モデルでは、約 1 か月以上の周期帯の海洋変動はあまり適切に表現できない。2-20 日の短周期帯に限定すれば、黒潮続流域も他の場所と同程度の再現性を示すことがわかる。2 日以上周期帯において、現場データからモデル結果との相関係数は全球で平均し 0.55 であり、両者の残差時系列は、現場データと比べその標準偏差が全球平均で 18%減少した。2-20 日の周期帯に限定すれば、相関係数は 0.65 まで向上し、標準偏差は 25%減少させることができる。図5に宮城県沖で東北大学が実施した海底圧力観測データ（9点）とモデル結果との比較を例として示す。宮城県沖は比較的モデル再現性がよい海域であった。

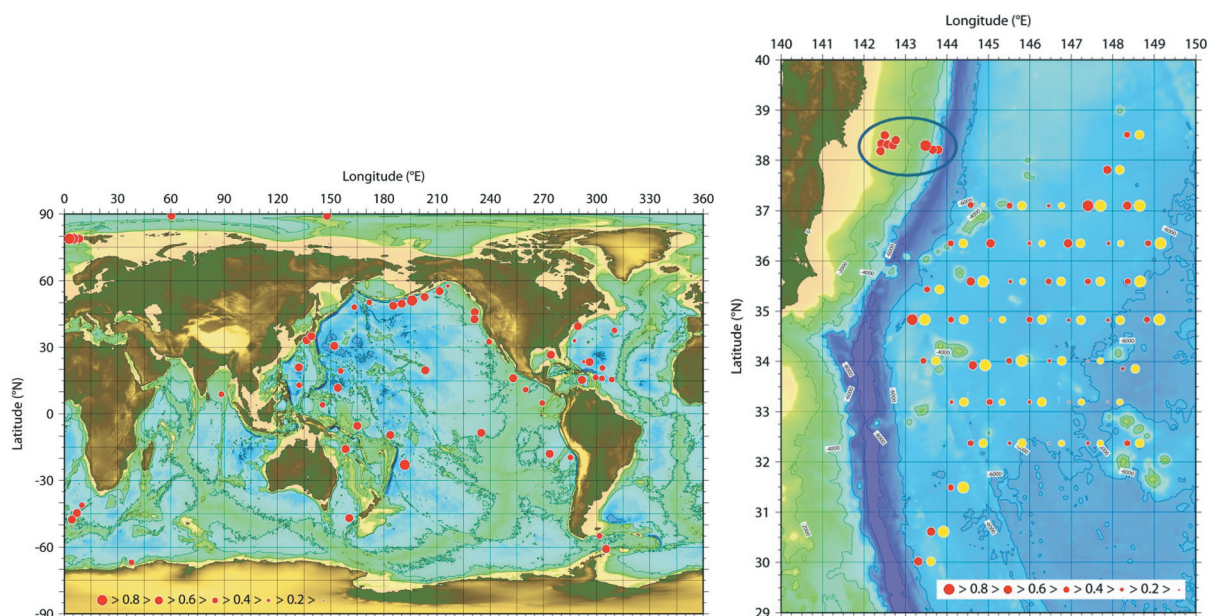


図4：1/12°モデルの現場再現性。相関係数の大きさでプロットした。左図は全球分布で、右図は日本の東海域。黄色丸は2-20日の周期帯で評価した結果であり、赤丸の隣にプロットした。

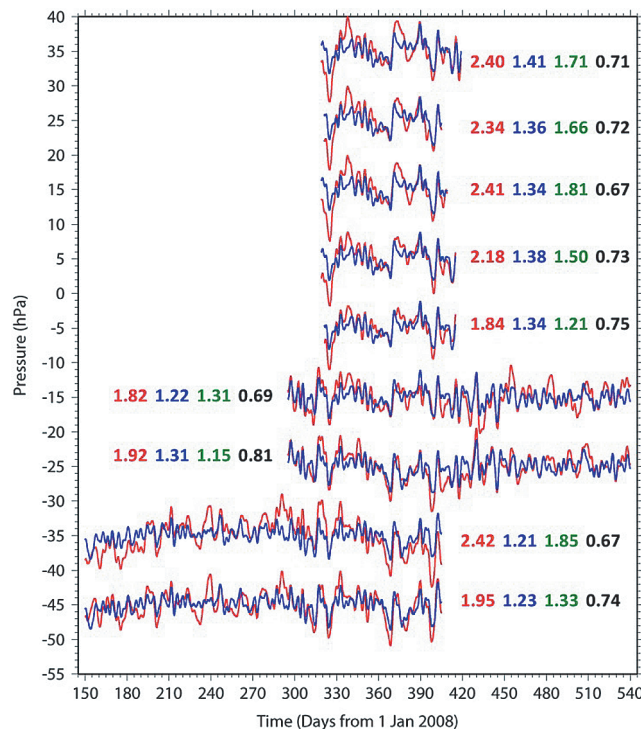


図5：宮城県沖での観測（赤線）とモデル時系列（青線）との比較（図4右側図の楕円で囲った領域）。2日以上周期帯で示した。図中の数字は観測（赤）、モデル（青）、残差（緑）時系列の標準偏差、および、観測とモデルの相関係数（黒）を示す。圧力の1hPaは、水位または海底鉛直変位のほぼ1cmに相当する。

7. 高解像度モデリングにおける現場再現性の低下

本節では、モデルの高解像度化によりかえって現場再現性が低下することについて考察する。本研究における海洋モデルは気圧と風によって駆動されている。実際のところその大部分が風によって駆動されている。まず、風によって駆動される海洋の本来の energetics について概観し、続いて、本研究における順圧場の仮定が、高解像度化したときに破綻することについて説明する。

海面に入力された風エネルギーは、様々なエネルギー消散、交換過程により、順圧、傾圧モードに分配され、現実の風成海洋エネルギー場が形成される[たとえば、22]。大まかには、順圧および傾圧場は周期、波長でそれぞれ数十日、数十 km で分かれる。周期が数十日より長く、波長が数十 km より短いスケールで、主に傾圧不安定現象（数十 km のスケールの中規模渦の発生）を介し、順圧場から傾圧場にエネルギーが分配される。実際、海流を含む海洋の鉛直構造を表現する OGCM (Ocean General Circulation Model) を用いた研究において、約 10km よりも高解像度になると、渦運動の表現が急激に強くなり、渦運動エネルギー場が現実的になると報告されてきている [23]。

ところで、本研究で用いている順圧海洋モデルでは、風のエネルギーは全て順圧モードに注入される。図2で低解像度のときは滑らかな海底地形に伴いエネルギー消散が小さく、また、高解

像度のときは急峻な地形に伴いエネルギー消散が大きくなることを述べた。また、現場海底圧力データと比較することで $1/12^\circ$ モデルが最も高い再現性を示し、さらに高解像度になると相関が下がりつつエネルギーレベルも現場と比べ小さくなることがわかった(図3)。この約10kmの解像度は数十 km の空間スケールが何とか表現できる解像度である。さらに高い解像度は、傾圧現象が顕在化する、数十 km 以下の空間スケールを解像する。この空間スケールでは、本来、傾圧不安定によるエネルギー分配が行われるはずであるが、順圧モデルではエネルギーが水柱(water column)に留まり、海底摩擦によって非現実的に強く消散してしまうと考えられる。これが高解像度モデリングにおける現場再現性の低下の原因と考えられる。

高解像度モデリングにおいてさらなる高精度化を達成するためには、適切なエネルギー分配機構を表現できる OGCM を採用し、十分な空間解像度でモデリングを行う必要があると考えられる。また、今回取り扱っている海洋変動は強制モードの変動であるため、強制力となる大気データの精度が海洋変動の精度に直結する[23]。大気データも十分正確である必要がある。

8. まとめ

本稿では、気圧と風で駆動される短周期(数日~数十日)全球順圧海洋モデルの開発について記述した。様々にパラメータを変化させ数多くの数値実験を行った。モデル結果はモデルの空間解像度に最も強く依存した。空間解像度の向上に伴い計算される海底圧力変動は小さくなることがわかった。

これらの計算結果の精度を全球の現場海底圧力データによって検証した。モデルの空間解像度が $1/12^\circ$ のとき最もよい再現性を示したが、それよりも高解像度化すると、モデル精度は逆に低下した。このことについて、約10km以下の解像度で活発になる傾圧不安定に伴うエネルギー分配機構が、順圧モデルでは適切に表現できないことが原因と考えられる。

今後、さらに高精度なモデリングを行うためには、順圧モデルではなく、より適切なエネルギー消散・分配機構を表現する OGCM を採用する必要があるだろう。

謝辞

本研究は文部科学省の委託研究である「東海・東南海・南海地震の連動性評価研究」の一環として行われている。また、東北大学サイバーサイエンスセンターとの共同研究「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」により数多くの数値実験を行うことができた。一部の計算は、海洋研究開発機構の地球シミュレータの SX-9 によっても行った。結果として順圧海洋モデリングの限界について指摘することができた。シミュレーションコードのチューニングにあたり同センターテクニカルアシスタントの沢田雅洋氏、および、山下毅氏から多大な協力を受けた。ここに謝意を示す。東北大学以外で取得された海底圧力データは、Alfred Wegener Institute (AWI)、National Oceanic and Atmospheric Administration/Pacific Marine Environmental Laboratory (NOAA/PMEL)、海洋研究開発機構、および、国立極地研究所から提供を受けた。図は Generic Mapping Tools によって作成された。

参考文献

- [1] Matsumoto, K., T. Takanezawa and M. Ooe, Ocean tide models developed by assimilating TOPEX/POSEIDON altimeter data into hydrodynamical model: A global model and a regional model around Japan. *J. Oceanogr.*, **56**, 567–581, 2000.
- [2] Hamilton, K. and W. Ohfuchi, *High resolution numerical modeling of the atmosphere and ocean*. Springer, pp 293, 2008.
- [3] Hecht, M. W. and H. Hasumi, *Ocean modeling in an eddying regime*, AGU Geophysical Monograph Series, 177, pp 409, 2008.
- [4] Hirose, N., I. Fukumori, V. Zlotnicki and R. M. Ponte, Modeling the high-frequency barotropic response of the ocean to atmospheric disturbances: Sensitivity to forcing, topography, and friction. *J. Geophys. Res.-Oceans*, **106**, 30987–30995, 2001.
- [5] Stepanov, V. N. and C. W. Hughes, Parameterization of ocean self-attraction and loading in numerical models of the ocean circulation. *J. Geophys. Res.-Oceans*, **109**, C03037, doi:10.1029/2003JC002034, 2004.
- [6] Hirose, N. and J.-H. Yoon, Barotropic response to the wind in the Japan Sea. *Proc. 4th CREAMS Workshop*, 39–43, 1996.
- [7] Kim, C.-H. and J.-H. Yoon, Modeling of the wind-driven circulation in the Japan Sea using a reduced gravity model. *J. Oceanogr.*, **52**, 359–373, 1996.
- [8] Arakawa, A., and V. R. Lamb, A potential enstrophy and energy conserving scheme for the shallow water equations. *Mon. Wea. Rev.*, **109**, 18–36, 1981.
- [9] Asselin, R., Frequency filter for time integrations. *Mon. Wea. Rev.*, **100**, 487–490, 1972.
- [10] Yoshida, S. and N. Hirose, Non-isostatic sea-level variability simulated using a global barotropic ocean model. *Pac. Oceanogr.*, **4**, 27–35, 2008.
- [11] <http://www.gebco.net/>
- [12] Amante, C., and B. W. Eakins, ETOPO1 1 arc-minute global relief model: Procedures, data sources and analysis. *NOAA Tech. Memo. NESDIS NGDC-24*, pp 19, 2009.
- [13] Berrisford, P. and Coauthors, The ERA-Interim archive. *ERA Report Series*, **1**, pp. 16, 2009.
- [14] Onogi, K. and Coauthors, The JRA-25 reanalysis. *J. Meteorol. Soc. Japan*, **85**, 369–432, 2007.
- [15] Kalnay, E. and Coauthors, The NCEP/NCAR 40-year reanalysis project. *Bull. Amer. Meteorol. Soc.*, **77**, 437–471, 1996.
- [16] Kanamitsu, M. and Coauthors, NCEP–DOE AMIP-II reanalysis (R-2). *Bull. Amer. Meteorol. Soc.*, **83**, 1631–1643, 2002.
- [17] Powell, M. D., P. J. Vickery and T. A. Reinhold, Reduced drag coefficient for high wind speeds in tropical cyclones. *Nature*, **422**, 279–283, 2003.
- [18] Black, P. G. and Coauthors, Air–sea exchange in hurricanes: Synthesis of observations from the coupled boundary layer air–sea transfer experiment. *Bull. Amer. Meteorol. Soc.*, **88**, 357–374, 2007.

- [19] Donelan, M. A. and Coauthors, On the limiting aerodynamic roughness of the ocean in very strong winds. *Geophys. Res. Lett.*, **31**, L18306, doi:10.1029/2004GL019460, 2004.
- [20] Hogan, P. J. and H. E. Hurlburt, Impact of upper ocean–topographical coupling and isopycnal outcropping in Japan/East Sea models with $1/8^\circ$ to $1/64^\circ$ resolution. *J. Phys. Oceanogr.*, **30**, 2535–2561, 2000.
- [21] Park, J.-H., D. R. Watts, K. A. Donohue and S. R. Jayne, A comparison of in situ bottom pressure array measurements with GRACE estimates in the Kuroshio Extension. *Geophys. Res. Lett.*, **35**, L17601, doi:10.1029/2008GL034778, 2008.
- [22] Ferrari, R. and C. Wunsch, Ocean circulation kinetic energy: Reservoirs, sources, and sinks. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **41**, 253–282, 2009.
- [23] Hurlburt, H. E. and Coauthors, Eddy-resolving global ocean prediction. in *Ocean modeling in an eddying regime*, ed. by M. W. Hecht and H. Hasumi, p. 353–381, 2009.

[共同研究成果]

積層プラズモニック結晶における光機能性発現

岩長 祐伸

物質・材料研究機構、科学技術振興機構さきがけ

近年、世界的に盛んに研究されているプラズモニクスにおける数値計算は次第に大規模化してきている。今回、プラズモニック結晶、すなわち金属のメゾスコピック（メゾ）スケール周期構造体における光学応答の研究を通じて、プラズモニック結晶の光機能性を明らかにし、極小空間スケールでの光波操作が可能になることを見いだした。その際に対象を積層することで3次元化することが必須であり、そのため数値計算においては使用メモリとCPU時間がさらに増大する。本稿では、積層プラズモニック結晶による光波操作の数値計算例とスーパーコンピュータ SX-9 上での高速化の現状について述べる。

1. はじめに

プラズモニクスにおける光科学は金属のナノ、メゾ構造体におけるプラズモン共鳴や負の屈折など新規な光波伝播操作を主な対象とする。また、それらの特徴的なプラズモニック場と生体分子などの相互作用もプラズモニクス研究の範疇に入り、世界中で研究が行われている。1970年代以降、プラズモン共鳴には顕著な電場増強効果があることが知られているので、一分子の微弱な振動情報などを得ることが期待され、新たなセンシング技術の基盤となることを目指す研究も数多く行われている。

2005年以降、筆者は東北大学サイバーサイエンスセンターと共同研究を行い、光の波長同程度以下の周期長をもつ周期構造体（フォトニック結晶）の線形光学応答（反射率、透過率、回折効率、光吸収率）を高精度に数値計算してきた [1-4]。その内容は1次元周期系に始まり [1]、メタマテリアルと呼ばれる光の波長より周期長が小さい構造体への適用 [2]、遺伝アルゴリズムとの組合せによる未踏な機能性構造の探索 [3]、2次元系の大規模数値計算に至っている [4]。いずれも周期的構造体の光学応答を数値的に計算することを基本としていて、フォトニック結晶、メタマテリアルなどを対象としてきた。

今回、プラズモニック結晶に関する結果について述べる。プラズモニック結晶は純粋に構造の観点からいえば、金属フォトニック結晶である。しかしながら、起こる現象の特徴が明示的でないので、プラズモン共鳴が物理現象の根底にあるという意味を強調するためにプラズモニック結晶と呼ぶことにする。本稿で述べる具体例として、積層することによって3次元化したプラズモニック結晶について述べ、積層化によって著しく向上する偏光操作の結果について述べる。

第2節では実施した数値計算法の概要について述べる。第3節では積層プラズモニック結晶の数値計算の実例と計算上必要になるメモリなどについても言及し、SX-9での動作の現状などについて述べる。

2. 3次元的積層構造における線形光学応答の数値計算

周期的構造体の3次元化は2次元的層状構造を積層することによって実現する。図1(a)は模式的に3層からなる積層構造を示している。層状の周期構造は xy 面に平行であるように配置し、面内に無限に広がっているとして、 z 軸方向に積層しているとする。また、3層積層の例では z 軸正

のほうから順に上層、中層、下層と呼ぶことにする。図中では点線で示した単位胞から上中下層を切り出して示している。灰色部分が金属、水色部分が透明誘電体であることを想定している。光は手前側から平面波を照射する配置を考え、透過率、反射率の数値計算を実施する。同時に回折効率、光吸収率も算出する。実際の実験では、図 1(a)のように積層構造は基板上に作製される場合が多く、 xy 面内の周期構造は照射する光のスポットよりも大きければ、数値計算と直接対比できる。

図 1(b)は積層周期構造の xz 断面を示しており、図 1(a)中の青色点線位置で断面をとったものである。上層と下層の金属部分に着目すると、構造として相補的であることが分かる。このような構造を相補的積層構造と呼ぶことにしよう。中層は上下層間のスペーサーとしての役割を担うことになる。

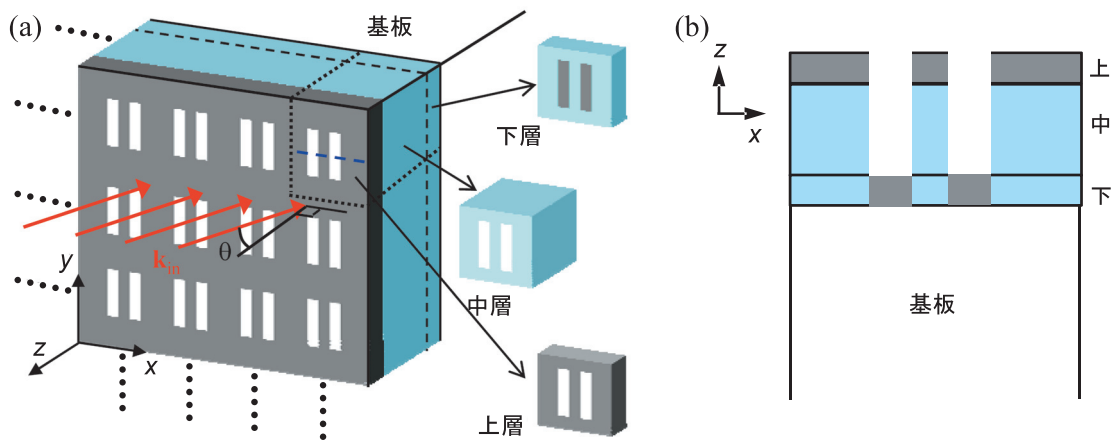


図 1 (a) 積層構造の模式図。周期層が z 軸正のほうから順に上中下層が積層している。(b) 積層構造の xz 面内の断面図。(a)中の青色点線の位置における断面。

つぎに 3 次元化した周期構造体の線形光学応答を算出するアルゴリズムの概要について述べる。基本的な方針は図 2 に示すように、まず各周期層の固有電磁波モードを求め、それらを散乱行列アルゴリズムで接続して、積層構造全体による線形光学応答を算出することになる。この方法は電磁気学の基礎方程式であるマクスウェル方程式を数値的に高精度に解く方法であり、電磁気学における第一原理計算に相当する。図 1 に例示した構造に対して、解析解は存在しないので、上記の方針にしたがって数値的に線形光学応答を算出することが最も信頼できる方法である。

図 2 では 3 周期層からなる積層構造を例に線形光学応答を数値計算するアルゴリズムについて示している。勿論、任意に M 層積層した場合も同様に扱うことができる。図 2 の下のように層に番号付けしたとき、入射層 0 から基板層 4 までの各層に対してマクスウェル方程式をフーリエ変換した方程式①を構成して解くことが最初のステップである [5]。図 2 中の方程式①は層 i における電場をフーリエ展開した係数 $\langle E_x^{(i)} \rangle$ 、 $\langle E_y^{(i)} \rangle$ を変数としている。行列 F 、 G の具体的な表式は文献 [4] にも詳述したので繰り返さないが、層に含まれる構成物質の誘電率が構造情報をすべて含んだ形で取り込まれている。また、電場のフーリエ係数は構造の周期長を d とするとき、振動子 $\exp\left[2\pi\sqrt{-1}(lx+ny)/d\right]$ を使って次数 l, n を $l, n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N$ のように最大 N 次まで

展開したときに生じる係数である。固有値 γ が z 軸方向の電磁波固有モードを特徴づける。各固有モードの z 方向の分布は $\exp(\sqrt{-1}\gamma_k^{(i)}z)$ で表される。一般に固有値 $\gamma_k^{(i)}$ は複素数であり、虚数部が 0 でない場合、指数関数的減衰成分を含むので、近接場光を表すことになる。透過光、反射光、回折光は遠隔場光であるから、固有値 $\gamma_k^{(i)}$ は虚部が 0 である純実数である。

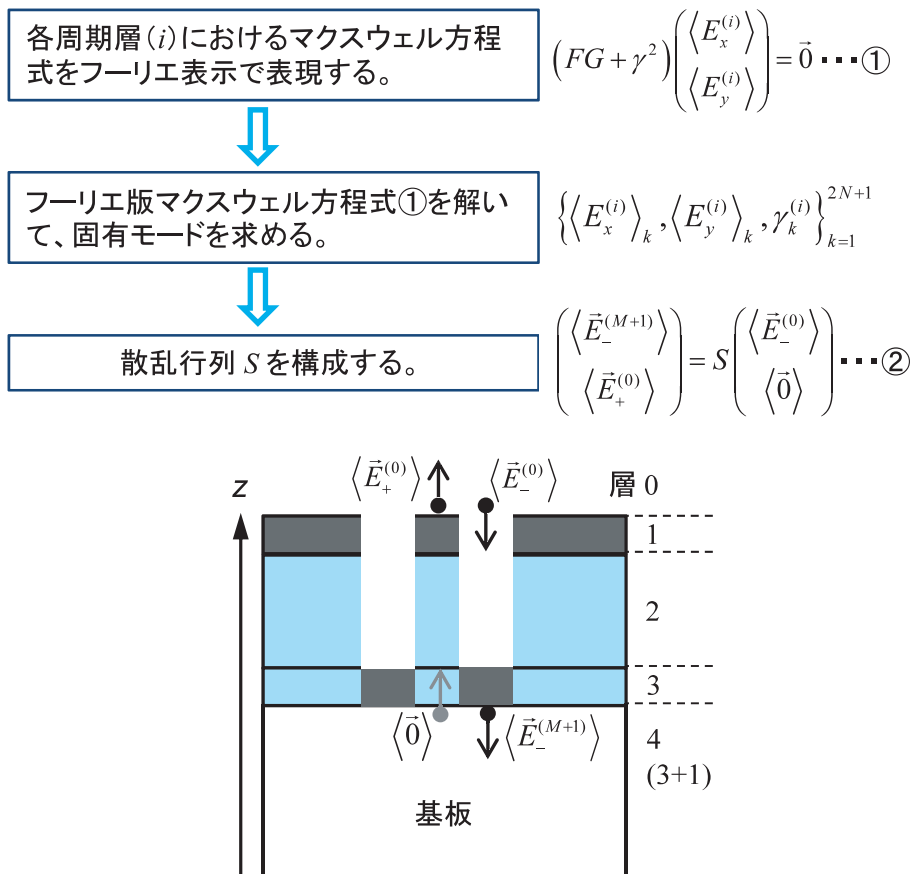


図2 積層した周期構造体の線形光学応答を求めるアルゴリズムの概要。方程式①が各層 i の固有モードを決める固有値方程式。最終的に散乱行列 S を構成して関係式②によって、入射波 $\langle \bar{E}_-^{(0)} \rangle$ から透過波 $\langle \bar{E}_-^{(M+1)} \rangle$ 、反射波 $\langle \bar{E}_+^{(0)} \rangle$ を算出する。図中では、3層積層 ($M=3$) を例に示している。

層 i における固有モードの固有ベクトルの組 $\left\{ \langle E_x^{(i)} \rangle_k, \langle E_y^{(i)} \rangle_k \right\}_{k=1}^{2N+1}$ をまとめて、ひとつの状態ベクトルとして $\langle \bar{E}_\pm^{(i)} \rangle$ と表すことにする。下付の \pm は電磁波の伝播方向が z 軸に対して正負のいずれであるかを明示的に示している。入射波に対応する状態ベクトルは $\langle \bar{E}_-^{(0)} \rangle$ で表される。入射波は平面波であるから、0 でない成分は高々2成分である。一方、透過波に対応する状態ベクトル

$\langle \vec{E}_-^{(4)} \rangle$ はいわゆる透過光のほかに透過方向に放射される回折光と近接場光の電場成分のフーリエ係数をすべて含んでいる。これらの状態ベクトルは $2(2N+1)^2$ 成分のベクトルであり、実際のプラズモニック結晶に対する数値計算では $N \geq 17$ を使用するから数千成分をもつベクトルになる。 $N=17$ である場合、状態ベクトルは 2450 成分をもつ。同様に反射波の状態ベクトルは $\langle \vec{E}_+^{(0)} \rangle$ と表される。

目的の線形光学応答を算出するためには、入力（入射波）から出力（透過波、反射波）を求める式を得なければならない。この関係式は散乱行列 S を構成することによって得られる。図 2 中の式②で示すように入射波の状態ベクトルと透過波、反射波の状態ベクトルを結びつける。層間の境界条件と各層内の電磁波の転送因子 $\exp(\sqrt{-1}\gamma_k^{(i)}z)$ を使って、入射波と反射波の組を透過波と結びつける枠組みは転送行列法としてよく知られており、直観的に理解しやすい [6]。散乱行列法は入射波を透過波と反射波との組に結びつける方法である [7]。両者は数学的には等価であるが、転送行列から散乱行列を導く過程は単純ではないが可能であり、その手順はすでに知られている [7] ので、ここでは割愛する。また、散乱行列法の利点は文献 [1] にも述べたことがあり、数値的な安定性の面で優れている。

散乱行列 S を用いた最終的な関係式②は状態ベクトルの組が $4(2N+1)^2$ 成分を有するから、散乱行列は $4(2N+1)^2 \times 4(2N+1)^2$ 成分からなる大きな行列になる。 $N=17$ である場合、 S 行列は複素数値の 2450×2450 一般行列である。実際の数値計算では多くの場合でこれ以上の大きさの S 行列を構成して線形光学応答を算出することになる。次節では実例について述べる。

3. 数値計算の実例

3.1 プラズモニック偏光子

ここでは相補的積層構造で発現する光機能性に関して一つの具体例を述べる。この例は相補的積層構造では透過率も偏光選択性が劇的に向上することを示す。

図 3(a)は相補的積層構造の単位胞を示しており、長方形の空気孔が 2 つ空いているとする。以降、この単位胞を II 型と呼ぶことにする。図 1(a)に示したように上中下層の 3 層が積層していて、上層と下層の金属が構造的に相補的であるとする。図 3 では比較として単層構造の場合もあわせて示す。図 3 の例では金属は銀とする。数値計算の実行時において銀の誘電率は文献 [8] に集約されている実験値を用いた。一方、誘電体は実験で使用する有機物質を想定して誘電率 2.40 とする。なお、現実の実験を考慮すると、相補的積層構造は試料のナノ加工の工程が簡素化できるという利点がある [9,10]。

単位胞の構造パラメータについて述べると、 xy 面内の大きさは $1000 \times 1000 \text{ nm}^2$ である。空気孔は長方形でそれぞれ縦 500 nm、横 150 nm で、2 つの空気孔は 100 nm 離れて y 軸に平行に配置されているものとする。厚さに関しては、上中下層の厚さがそれぞれ 50、150、50 nm である。したがって、積層構造全体の厚さは 250 nm であり、金属部分の厚さは 50 nm である。

図 3(c)は垂直入射下での図 3(a)の相補的積層構造の透過スペクトルを示していて、入射平面波

の電場ベクトルが x 軸に平行な x 偏光下での透過スペクトルを青線で示している。同様に y 偏光下での透過スペクトルを破線で示している。透過スペクトルの比較から、 x 偏光のときに透過率 T_x が大きいことは明白であり、 y 偏光の透過スペクトルは近赤外光の波長域で 0% に近い値をとっている。透過率の偏光選択性を定量的に評価するために図 3(e) に x 偏光と y 偏光での透過率の比 ($T_x \div T_y$) を示している。 x 偏光の透過率のピークは 1650 nm 付近にあり、透過率の比は 10^4 を超える。この値は市販のプリズム偏光子に比肩し、その性能を厚さ 250 nm、つまり波長の 6.6 分の 1 で達成している点を特筆しなければならない。プリズム偏光子は数 cm に厚さであるから、偏光子の極小化がプラズモニック偏光子で実現できることを示している。

図 3(d)、3(f) は単層構造（相補的積層構造の上層のみからなる層構造）における垂直入射下の透過スペクトルと透過率の比を示している。透過率に関する偏光依存性は相補的積層構造の場合と定性的に同じ傾向にある。しかし定量的には、透過率の比から明らかなように単層構造における偏光選択比は 1000 倍程度小さい。つまり、偏光子として単層構造は性能が劣り、相補的積層構造では偏光子としての性能が劇的に向上することを示している。

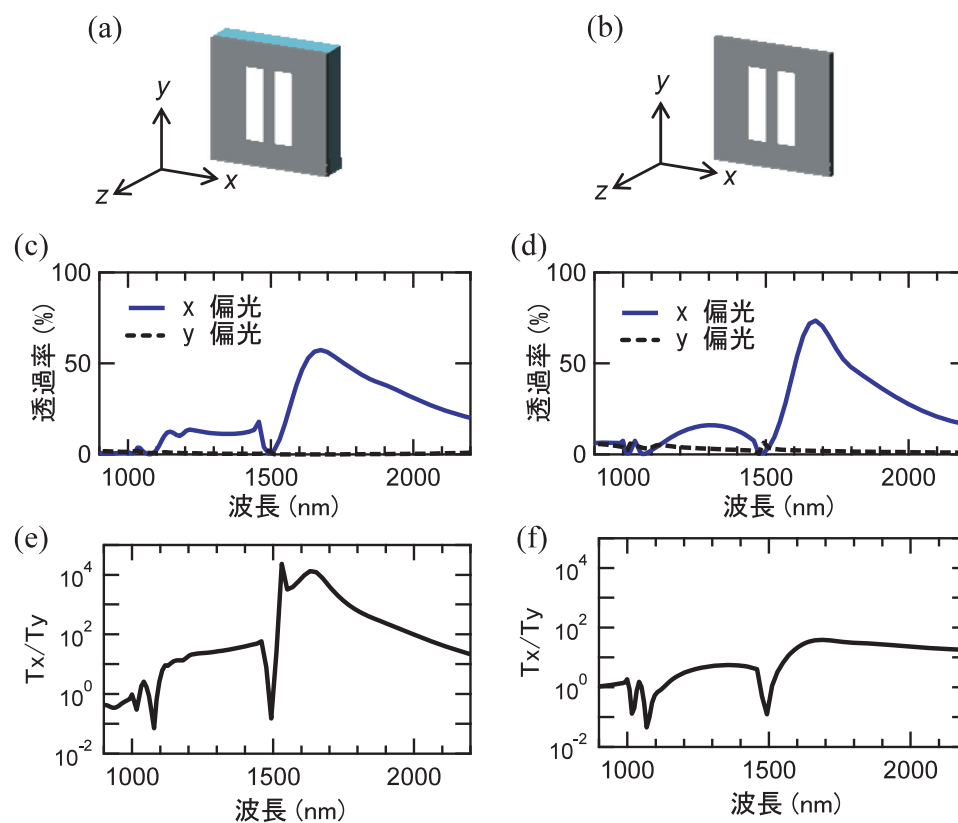


図 3 II 型の単位胞模式図（基板は省略している）：(a) 相補的積層構造、(b) 金属膜に空気孔があいた単層構造。周期長は x, y 方向いずれも 1000 nm。偏光透過スペクトル、青色実線は x 偏光下の透過率 T_x 、黒色破線は y 偏光下の透過率 T_y ；(c) 相補的積層構造、(d) 単層構造。透過率の比：(e) 相補的積層構造、(f) 単層構造。

表 1 では相補的積層構造、単層構造におけるいくつかの特徴的な波長での透過率の比などをまとめて示している。相補的積層構造の透過率の比のピーク波長が 1530.2、1630.9 nm、透過率ピーク波長が 1650.0 nm である。相補的積層構造において単層構造の 1000 倍以上の透過率の比の向上が確認できる。

構造	波長 (nm)	T _x (%)	T _y (%)	T _x /T _y
相補的積層構造	1530.2	8.0	3.5x10 ⁻⁴	2.3x10 ⁴
相補的積層構造	1630.9	52.9	4.0x10 ⁻³	1.3x10 ⁴
相補的積層構造	1650.0	55.0	6.0x10 ⁻³	9.2x10 ³
単層構造	1530.2	9.6	3.0	3.2
単層構造	1630.9	65.0	2.1	31
単層構造	1650.0	70.0	2.0	35

表 1 相補的積層構造と単層構造の比較。透過率の値は図 3(c)、3(d)から採取した。

表 1 に示したような透過率のピークと大きな透過率の比は局在プラズモン共鳴によって起こっていることがこれまでに明らかになっている [11,12]。物理現象として詳細な研究を行うには電磁場分布を数値計算するなどさらなる研究が必要であったが、本稿で述べている計算法とはまた別の方法を用いることになる。なぜなら、散乱行列法は電磁波の転送因子 $\exp(\sqrt{-1}\gamma_k^{(i)}z)$ で発散項が現れないように巧みにアルゴリズムが構成されているが、電磁場分布を空間の各点で求めようとするとコード上での発散項の処理が極めて困難になるからである。したがって電磁場分布の数値計算に関しては有限要素法など空間分割に特化した方法が適している。

3.2 計算実行時間、メモリについて

この小節では、積層構造をもつプラズモニック結晶において図 3 で示したような結果を得るために必要な計算時間やメモリなどの実行時の条件について述べる。

サイバーサイエンスセンターとの共同研究を通じて、S 行列を構成するまでの多数の行列構成における並列化を進めた結果、未実行時と比べて 15 倍の高速化を達成することができた。これによって実用的な実行時間でスペクトル計算ができるようになった。典型的には、相補的積層構造では振動子の最大次数 $N=17$ に設定して、図 3 のスペクトルを得るにはジョブクラス p16 上での実行によって 15 時間程度かかる。計算のデータ点は 100 点程度あるから、1 点あたり数分の計算時間がかかることになる。もしも上記の高速化ができていなければ、15 倍の時間がかかり、 $15 \times 15=225$ 時間と 10 日近い実行時間がかかる。これではごく小数の計算しか実行できず、研究の質を高く保つことは困難である。つまり、実用に耐えない事態に陥る。以上のように、コード並列化の改良に成功したことは大きな成果であった。

メモリに関して述べると、図 3 において計算精度は各点の透過率の値に対して ±1% 程度である

と見積もることができ、精度が良く出ている研究例となっている。振動子の最大次数 $N=17$ と比較的小さめにとるとき、使用メモリは 20 GB 程度と大きくはない。この N に対して約 2 乗に比例して増大するので、 $N=41$ とすると、使用メモリは 100 GB 程度に達する。また、使用メモリは単位胞構造の複雑さに大きく依存し、より複雑な構造を計算した例では $N=17$ でも 50 GB を超える場合もある。また、積層数におおむね比例して使用メモリが増大するので、10 層構造では 150 GB 程度に達する。以上を総合すると、計算対象の一般性を担保しながら、精度を求めて計算を実行するためには、300 GB のメモリは担保したい。これだけのメモリを使う計算はスーパーコンピュータで行う必要がある。

メモリだけみれば、並列クラスターコンピュータでも実施できると考えられるが、筆者の経験では計算速度が 30 倍遅くなるなど、運用に行き詰まった。SX-9 上での運用が現状では最良の選択肢であると考えている。

たびたび SENAC 上で述べてきた [1-4] ので手短かに述べるが、固有値・固有ベクトルを求める ASL 関数だけは並列化できず、さらなる高速化の唯一の障害となっている。今後、スペクトル計算時のループを MPI 化するなどの改良を行うことが必要と考えている。

4. まとめ

積層した 3 次元的プラズモニク結晶の線形光学応答を数値計算して、積層したことによる光機能性の向上を示した。今回示した例は光の波長よりも薄い、極小かつ高性能なプラズモニク偏光子であったが、偏光回転素子など新規な光学素子もこれまでに見いだしている [13]。

計算対象が高度化するにつれて、単位胞構造の複雑化、3 次元化は必然の流れであり、SX-9 の性能が生かされてくる状況が多々現れてきている。今度、一層の材料、構造の多様化により、極小で光機能性に富む新規な素子の設計開発に大規模数値計算を活用していきたい。

謝辞

本研究で用いたコードは東北大学サイバーサイエンスセンターの職員の方々のご支援によって並列化率が向上し、大幅な高速化が実現できた。ここに謝意を表すと同時に、東日本大震災の困難を乗り越えてセンターの活動が今後も維持されることを切に願ってやまない。

この研究の一部は科学研究費補助金 (No. 22760047) によって支援されたことを付記する。

参考文献

- [1] 岩長祐伸, 「散乱行列法を用いたフォトニック結晶の光学応答解析」 SENAC **39**(3), 25-32 (2006).
- [2] 岩長祐伸, 「メタマテリアルにおける有効光学定数の決定法と応用」 SENAC **40**(3), 5-14 (2007).
- [3] 岩長祐伸, 「遺伝アルゴリズムを用いた光機能性人工構造体の探索」 SENAC **41**(3), 43-51 (2008).
- [4] 岩長祐伸, 「メゾ周期構造体における電磁波散乱の高精度数値計算」 SENAC **42**(4), 9-18 (2009).
- [5] L. Li, "New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings," J. Opt. Soc. Am. A **14**(10), 2758-2767 (1997).
- [6] For example, P. Markoš and C. M. Soukoulis, *Wave Propagation from Electrons to Photonic Crystals and Left-handed Materials* (Princeton Univ. Press, 2008).
- [7] L. Li, "Formation and comparison of two recursive matrix algorithm for modeling layered diffraction gratings," J. Opt. Soc. Am. A **13**(5), 1024-1035(1996).
- [8] A. D. Rakíc, A. B. Djurišić, J. M. Elazar, and M. L. Majewski, "Optical properties of metallic films for vertical-cavity optoelectronic devices," Appl. Opt. **37**(22), 5271-5283 (1998).

- [9] M. Iwanaga, “Polarization-selective transmission in stacked two-dimensional complementary plasmonic crystal slabs,” *Appl. Phys. Lett.* **96**(8), 083106 (2010).
- [10] M. Iwanaga, “A new class of plasmonic crystals: the eigen modes, field enhancement, and applications,” *Proc. SPIE* **7496**, 74961I (2011).
- [11] M. Iwanaga, “Subwavelength electromagnetic dynamics in stacked complementary plasmonic crystal slabs,” *Opt. Express* **18**(15), 15389–15398 (2010).
- [12] M. Iwanaga, “Electromagnetic eigenmodes in a stacked complementary plasmonic crystal slabs,” *Phys. Rev. B* **82**(15), 155402 (2010).
- [13] M. Iwanaga, “Subwavelength orthogonal polarization rotator,” *Opt. Lett.* **35**(2), 109–111 (2010).

[研究開発公募の成果]

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天文学専攻

宇宙初期における天体の形成過程の解明は現在の天体物理学の最も重要な課題の一つである。この問題を扱う最も強力な手法は宇宙論的構造形成シミュレーションである。本研究開発では、宇宙初期に重要である物理過程を選択的に取り入れた簡単なシミュレーションコードを作成した。

1. 宇宙論的数値シミュレーション

銀河や銀河団など宇宙の多くの天体は、宇宙初期の密度揺らぎが重力不安定によって成長して形成されたと考えられている。宇宙論的数値シミュレーションとは、宇宙のある代表的な領域（立方体や球体）を切り出し、初期条件としてその中の物質に適切な揺らぎを与え、さまざまな物理過程を考慮しつつ、膨張宇宙における揺らぎの時間発展を計算していく方法である。この方法は素朴であるが、本質的に非線型である天体の形成過程を幾何学的対称性などの制約なしに追跡できる最も忠実な手法と言える。

本研究開発では、Kawata と Gibson[1]による GCD+コードに修正と拡張を加えて初期宇宙のシミュレーションに適したコードを作成した。本コードでは、宇宙の物質成分として、ダークマターとバリオンを考え、与えられた初期条件のもとで、これらの進化をシミュレートする。ダークマターは重力のみが作用する無衝突粒子として N 体シミュレーションで扱う。バリオンはガスと sink particle から成り、ガスは Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)法で取り扱う。SPH 法は、以下に述べるように、連続体としてのガスを粒子の集団でモデル化する方法である[2]。ガスの密度、温度、圧力、化学組成などはすべて個々の SPH 粒子の属性として表現される。また、コードにはガスの冷却と非平衡の化学反応が組み込まれている。ガス密度が局所的に非常に大きくなると、冷却時間が短くなり、そのためにシミュレーションが進まなくなる。Sink particle はある密度以上のガス粒子を無衝突粒子に転換して、この数値的な困難を除くために導入するが、物理的には星形成に対応するものと考えることができる。

本コードは水素分子や重水素分子の生成・消滅、それらによる冷却過程などを組みこんだ半面、超新星爆発などによる重元素放出や加熱は考慮していない。したがって、宇宙初期の天体形成をシミュレートするのに適したコードであり、Population I や II の星生成や、それらを基盤とした大質量銀河の形成など、宇宙後期における重元素による冷却が本質的な現象には向いていない。また、後述するように周期的境界条件には対応していない。

2. Tree-SPH 法

本コードでは粒子に作用する重力は Tree 法によって計算する。Tree 法は次のような考え方に基づいている。ある粒子に作用する重力を近傍粒子による成分と遠方粒子による成分に分けて考える。前者は近傍粒子の偶然的な配置によって大きく変化する可能性があるため個々の粒子からの寄与をきちんと計算して足し合わせる。それに対して、遠方粒子は、お互いに近距離にある複

数個の粒子をまとめて一つのグループとし、グループからの寄与として重力を計算する。このグループ化は階層的に実行でき、近傍粒子は1個の粒子からなるグループと考えることができる。この手法により、 N 個の粒子間に働く重力を計算するための演算の回数を、素朴にすべての粒子ペアについて計算する場合に必要な N^2 のオーダーから、 $N \log N$ のオーダーに減らすことができる。本コードにおけるTree法はBarnesとHutの方法[3]によった。

本コードでは、ガスは理想気体と仮定し、Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法を用いてシミュレーションを行う。SPH法では、ガスは多数の粒子の集合体としてモデル化され、ガス密度など粒子に付随する局所的物理量はカーネルを使って、近傍粒子 (neighbors) からの寄与を考慮して計算される。たとえば、 j 番目のSPH粒子のsmoothing length h_j とカーネル W を使って、 i 番目の粒子の密度は

$$\rho_i = \sum_j m_j W(r_{ij}, h_{ij})$$

と表される。ここで m_j は j 番目の粒子の質量、 $r_{ij} = |x_i - x_j|$ 、 $h_{ij} = \frac{h_i + h_j}{2}$ である。カーネルは

$$W(r, h) = \frac{8}{\pi h^3} \times \begin{cases} 1 - 6(r/h)^2 + 6(r/h)^3 & \text{if } 0 \leq r/h \leq 1/2, \\ 2[1 - (r/h)]^3 & \text{if } 1/2 \leq r/h \leq 1, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

とした[4]。

i 番目の粒子の運動方程式は

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = -\frac{1}{\rho_i} \nabla_i (P + P_{visc}) - \nabla_i \Psi_i$$

となる。ここで、 \mathbf{v} 、 Ψ 、 P 、 P_{visc} はそれぞれ、速度、重力ポテンシャル、圧力、artificial viscous pressure である。圧力勾配は

$$\frac{1}{\rho_i} \nabla_i (P + P_{visc}) = \sum_j m_j \left(\frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_j}{\rho_j^2} + Q_{ij} \right) \nabla_i W(x_{ij}, h_{ij})$$

で計算される[4]。ここで

$$Q_{ij} = \frac{-\alpha c_{s,ij} \mu_{ij} + \beta \mu_{ij}^2}{\rho_{ij}}$$

であり、また

$$\rho_{ij} = \frac{\rho_i + \rho_j}{2}, \quad c_{s,ij} = \frac{c_{s,i} + c_{s,j}}{2},$$

$$\mu_{ij} = \frac{0.5h_{ij}v_{ij} \cdot x_{ij}}{r_{ij}^2 + \eta^2} \quad \text{for } (x_{ij} \cdot v_{ij} > 0), \quad =0 \quad \text{otherwise}$$

と定義した。ただし、 $x_{ij} \equiv x_i - x_j$ および $v_{ij} \equiv v_i - v_j$ 。ここでは、過去のテスト計算から推奨される、 $\alpha = 0.5$ 、 $\beta = 1.0$ 、 $\eta = 0.05h_{ij}$ という設定を用いる。さらに Navarro と Steinmetz [5] によって推奨されている修正、

$$Q_{ij} \rightarrow Q_{ij} \frac{f_i + f_j}{2}$$

を行った。ただし、

$$f_i = \frac{|\langle \nabla \cdot v \rangle_i|}{|\langle \nabla \cdot v \rangle_i| + |\langle \nabla \times v \rangle_i| + 0.0002c_{s,ij} / h_{ij}}$$

i 番目の粒子の速度の発散と回転は、

$$\begin{aligned} \langle \nabla \cdot v \rangle_i &= -\frac{1}{\rho_i} \sum_j m_j v_{ij} \cdot \nabla_i W(x_{ij}, h_{ij}) \\ \langle \nabla \times v \rangle_{i,x} &= -\frac{1}{\rho_i} \sum_j m_j [v_{ij,z} \nabla_{i,y} W(x_{ij}, h_{ij}) - v_{ij,y} \nabla_{i,z} W(x_{ij}, h_{ij})] \end{aligned}$$

によって評価される。ここで $v_{ij,x} \equiv v_{i,x} - v_{j,x}$ 。

i 番目の粒子に作用する重力は

$$\nabla_i \Psi = -G \sum_j \frac{m_j x_{ij}}{(r_{ij}^2 + \varepsilon_{ij}^2)^{3/2}}$$

ここで ε は softening length であり、 ε_{ij} は i 粒子と j 粒子の softening length の平均である。 i 番目の粒子の内部エネルギー u_i の時間発展は

$$\frac{du_i}{dt} = \frac{P_i}{\rho_i^2} \sum_j m_j v_{ij} \cdot \nabla_i W(x_{ij}, h_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_j m_j Q_{ij} v_{ij} \cdot \nabla_i W(x_{ij}, h_{ij}) - \frac{\Lambda_i}{\rho_i}$$

によって計算される[4]。ここで、 Λ_i / ρ_i は単位質量あたりの冷却率である。

それぞれの粒子が常にほぼ等しい数の neighbor を持つようにするため、 $n+1$ ステップにおける粒子の smoothing length h^{n+1} は n ステップにおける粒子の smoothing length h^n から[1]の方法によってアップデートする。ただし h の下限として 10^{-6} シミュレーション単位を設定した。また softening length はダークマターでは $\varepsilon = 0.2h$ 、SPH 粒子では $\varepsilon = 0.05h$ とし、neighbor 数は 40 にした。

粒子の位置と速度は運動方程式を leap-frog 法で積分することによってアップデートする。その際のタイムステップの大きさは粒子によって異なり (individual timesteps)、 i 番目の SPH 粒

子のタイムステップは $\Delta t_i = \min(0.3\Delta t_{CFL,i}, 0.1\Delta t_{f,i})$ によって決める。ただし、Courant-Friedrichs-Lewy condition によるタイムステップは、

$$\Delta t_{CFL,i} = \frac{0.5h_i}{c_{s,i} + 1.2(\alpha c_{s,i} + \beta \max_j |\mu_{ij}|)}$$

で与えられ、また、1ステップの間に重力があまり大きく変化してはいけないという条件によって

$$\Delta t_{f,i} = \sqrt{\frac{h_i}{2} \left| \frac{dv_i}{dt} \right|^{-1}}$$

が定義される。 Δt_i があまりに小さくなるのを防ぐためにさらに下限を 10^{-8} シミュレーション単位に設定した (common.f 中の timemin)。ダークマター粒子および sink particle については $\Delta t = \min[0.16(\varepsilon/v), 0.4(\varepsilon/|dv/dt|)^{1/2}]$ と設定した。

一般に放射冷却のタイムスケールは、力学的タイムスケールに比べてはるかに小さい。そこでエネルギー方程式は、その時点における最小のタイムステップを用い、semi-implicit な方法で解く[6]。

本コードでは、質量は 10^{12} 太陽質量、長さは 100kpc、時間は 4.71×10^8 yr、温度は 10^4 K、密度は 6.77×10^{-26} gcm⁻³、速度は 207.4kms⁻¹、をシミュレーション単位としている。

3. 非平衡反応ネットワーク

Cold Dark Matter 宇宙では最初に小さいスケールの揺らぎが自己重力によってコラプスしてダークマターのハローを形成し、これらが合体をくり返しながら順次大きな質量のハローを形成していく。宇宙初期に形成される質量が 10^8 太陽質量以下のハローではコラプスの際にガスの温度は 10^4 K に到達せず、宇宙で一番豊富に存在する水素原子による冷却は行われぬ。これらの小質量ハローでは水素分子と重水素分子だけが冷却材として作用し得る。

これらの分子の生成と消滅を追跡するため、本シミュレーションコードでは、物質の化学成分として H、H⁺、H⁻、H₂、H₂⁺、D、D⁺、D⁻、HD、HD⁺、He、He⁺、He⁺⁺、そして自由電子 e の時間発展を計算する。つまりすべての SPH 粒子はこれら各成分の個数密度をその属性として持ち、その値は設定した化学反応にしたがって時間的に変化する。考慮した反応および採用した反応率の出典を付録に示した。

これらの反応のタイムスケールは力学時間に比べて一般に非常に短いので、化学平衡は必ずしも成立しない。各成分の個数密度の変化を計算するため、時間積分は backward difference formula (BDF)を用いて以下のように行う[7]。i成分の個数密度 n_i の時間発展が

$$\frac{dn_i}{dt} = -Dn_i + C$$

で与えられているとする。ここで C と D は温度および他の成分の個数密度の関数であり、それぞれ i 成分を生成する反応と破壊する反応をまとめて表したものである。この式の右辺を新しいタイムステップで評価すると、差分方程式は

$$n_i^{new} = \frac{C^{new} \Delta t + n_i^{old}}{1 + D^{new} \Delta t}$$

となる。 C^{new} と D^{new} はまず古いタイムステップの個数密度を代入して計算するが、新しいタイムステップにおける個数密度が求められた成分については順次その値を代入する。本コードは各成分は次の順序でアップデートしている：e、 H^+ 、 H^- 、 H_2 、H、 D^+ 、HD、D。これらのうち、 H^- 、 H_2 の量を決める反応は非常に速いので、これらの個数密度は平衡状態の値を使用する。また水素原子の個数密度は $n_H = n_p - n_{H^+}$ で与えられると仮定した。ここで n_p は水素原子核の個数密度である。また D^+ 、HD も平衡値を使用し、 $n_D = n_d - n_{D^+}$ を仮定する。ここで n_d は重水素原子核の個数密度である。積分の時間刻み Δt は電子密度 n_e の変化率から次のように計算する。

$$\Delta t = \varepsilon \frac{n_e}{\left(\frac{dn_e}{dt} \right)} \quad (\varepsilon = 0.1)$$

BDF 法は semi-implicit なスキームであり、その数値的安定性は確認されている。

冷却過程は、水素とヘリウムの collisional excitation (+ionization) cooling、recombination cooling を主に[8]、すべてのイオンの Bremsstrahlung を [9]、 H_2 による冷却を [10]、HD による冷却を[11]に基づいて計算している。

4. 星形成 (Sink Particle の形成)

構造形成が進行するにつれ、ガスには局所的に密度の高い領域が現れる。そこでは冷却時間が非常に短くなるので、シミュレーションそのものが遅くなり実質的に停止してしまう。しかし、これは必ずしもシミュレーションの破綻を意味するものではない。実際にはガス密度がある程度高くなるとそこで星形成が起こり、その結果ガスは消費されてガス密度は低下すると考えられる。この考えにしたがって、密度が一定値 ρ_{sink} 以上の SPH 粒子を sink particle に転換する。Sink particle は重力以外の相互作用を行わない。ガスの sink particle への転換は原始ガス（重元素で汚染されていないガス）からの宇宙初代の星 (Population III) の形成に対応すると理解できる。

Population III の星は質量が太陽の 100 倍以上で多量の紫外線を放出すると考えられる。そのため、周囲のガスを電離し、その後の宇宙の進化に大きな影響を与えると考えられる。プログラムでは、sink particle の周囲のガスを、紫外線の量に応じて電離するようにした。そのために次のように電離領域の大きさを決める。まずその寿命 t_* の間に星が立体角 $d\Omega$ に放出する電離光子の総数は、星が単位時間に放出する電離光子の数を Q_{ion} とすると $N_{ion} = Q_{ion} t_* \frac{d\Omega}{4\pi}$ となる。一方星からの距離が r から $r + dr$ までの体積において起こる再結合の回数は

$N_{rec} dr = \alpha_B n_p^2 r^2 dr d\Omega$ と書ける。ここで $\alpha_B = 2.6 \times 10^{-13} (\text{cm}^3 \text{s}^{-1})$ は case B recombination coefficient である。与えられた方向における電離領域の半径 r_{ion} は関係式 $\int_0^{r_{ion}} N_{rec} dr = N_{ion}$ によって計算される。Population III からの放射は等方的であると仮定しているので N_{ion} は方向によらないが、 N_{rec} は近傍のガス分布に応じて一般には方向に依存する。つまり、ガスが希薄な方向ほど sink particle からより遠距離まで電離されるという自然なレシピとなっている。プログラムでは、その方向 r_{ion} 以内のガスを完全に電離し、水素分子と重水素分子はともに完全に破壊した。またガスの温度は、電離水素ガスが放射冷却で到達できる下限の 10^4 K に設定した。電離光子の数は $Q_{ion} = 10^{50} \text{ sec}^{-1}$ を採用し、 $t_* = 3 \times 10^6 \text{ yr}$ の間電離が続くと仮定した。

5. 計算例

本シミュレーションコードを用いた計算例を図1と図2に示す。宇宙モデルとしては $\Omega_0 = 0.268$ 、 $\Omega_\Lambda = 0.732$ 、 $H_0 = 71 \text{ kms}^{-1} \text{ Mpc}^{-1}$ 、 $\Omega_b = 0.044$ の ΛCDM モデルを用いた。シミュレーション領域は共動半径 (comoving radius) が約 0.4 Mpc の球である。粒子数はダークマター、SPH 粒子とも 435264 である。シミュレーションは赤方偏移 $z = 82.7$ の時点からスタートした。また ρ_{sink} は 20 シミュレーション単位に設定した (common.f 中の rho_sink で設定)。図は $z = 15.4$ の状態を示す。図1のスナップショットでは各 SPH 粒子は水素分子の質量比 f_{H_2} によってカラー表示されており、 $f_{H_2} < 10^{-7}$ の粒子は青で、 $f_{H_2} > 10^{-5}$ の粒子は赤で示されている。また黒丸は sink particle を示す。ガス密度の高い場所は水素分子が豊富に分布しており、特に高密度の場所で星形成が起こったことがわかる。また、sink particle の影響で、近傍のガスは電離され、水素分子が減少していることも見て取れる。

図2は水素分子の質量比 f_{H_2} をガス密度 n_p に対してプロットしたものである。ガスが高密度になるにつれ全体的に水素分子の比率が高くなる様子が分かるが、この相関から外れて小さい f_{H_2} を持つ SPH 粒子が少数存在することが分かる (赤線枠内)。これは sink particle の周囲の電離領域に存在する粒子であり、電離により一旦は水素分子が完全に消失したが、その後豊富に存在する自由電子を触媒として再び水素分子を作ったものである。このようなガスは、再結合が進んで電離領域が消失した後に、第二世代の星を形成する原料となる可能性がある。

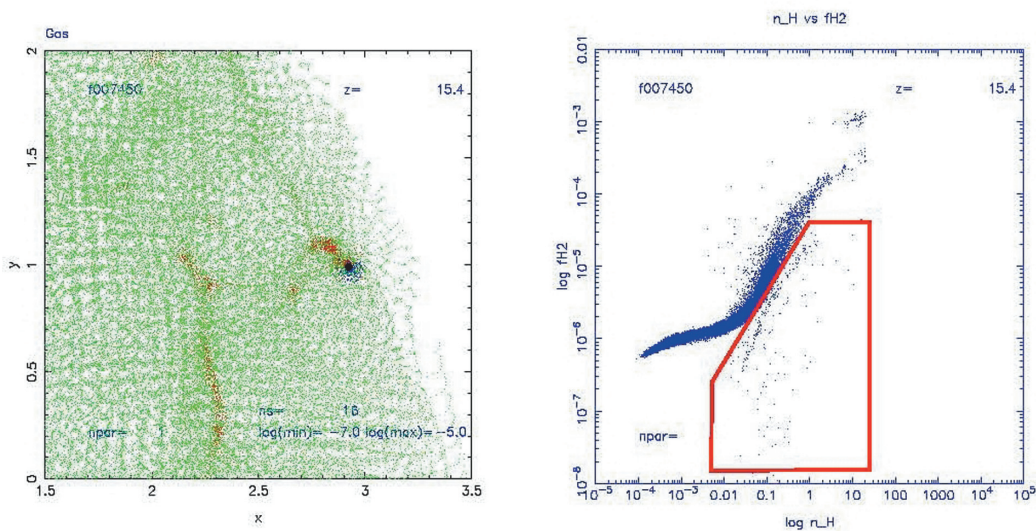
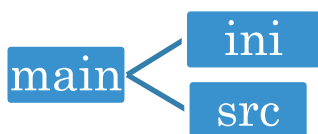


図1 (左) : SPH 粒子の空間分布。長さの単位は共動座標で 100kpc である。図2 (右) : 水素分子の質量比のガス密度に対する変化。ガス密度の単位は 水素原子核数/cm³ である。

6. コードの使用法

6.1 プログラムのダウンロードとコンパイル

本シミュレーションコードは Fortran 77 で書かれており、MPI(Message Passing Interface) を用いて並列化されている。必要なファイルは、gen.isc.tohoku.ac.jp の `/usr/ap/COSMO-ST-SIMU/cosmology.tar.gz` にある。これをダウンロードし、「`tar -xvf cosmology.tar.gz`」として解凍する。解凍するとファイルは次のようなディレクトリに展開される。以下、具体的な説明を行うが、`main` ディレクトリの `README` ファイルも合わせて参照されたい。また、`std.sample` は後で述べるプログラムテスト用の標準出力サンプルである。



ディレクトリ `ini` は後で述べる入力ファイルが置かれる場所である。解凍した段階ではプログラムのテスト用のサンプルが入っている。ディレクトリ `src` はプログラムのソースを格納する場所で、ここでコンパイルを行う。コンパイルは「`make sph`」と入力するだけである。コンパイルが完了すると実行形式 `cosuv` が `main` ディレクトリに作られる。プログラムの実行は `main` ディレクトリからシェルスクリプトで行う。シミュレーション実行前に `main` の下に計算結果を出力するための `output` ディレクトリを作っておく。

要求した CPU 時間でシミュレーションが完了しない場合、コードは継続計算のための情報を `cont.dat` と `pcont.dat` というファイルで、ディレクトリ `output` に出力する。ジョブを継続するには、ディレクトリ `src` で「`make sphc`」としてコンパイルを行い、作られた継続計算用の実行

形式 `cosuvc` を `main` ディレクトリから実行する。するとプログラムは `cont.dat` と `pcont.dat` を読み込み、継続シミュレーションを開始する。CPU 時間はメインプログラムの変数 `JOBTIME` を秒単位で指定して決める。経過 CPU 時間が (`JOBTIME-MARGIN`) になると停止し、それ以降は `cont.dat` と `pcont.dat` の書き出しに入る。

6.2 入力ファイル

以下の入力ファイルが必要である。入力ファイルはディレクトリ `ini` に置かれる。

- (1) **input.dat** : シミュレーションを制御するパラメータを与える。

このファイルはサブルーチン `set_ini` で読み込まれる。書式は次のとおりである。

1行目

`Ini_hyd` : 0 ならばダークマターのみシミュレーション、0 以外ならばダークマター+SPH 粒子のシミュレーションを行う。

`Ini_mul` : シミュレーションのレベル数を与える。本コードでは 0 を指定する。

`SI_flgac` : 0 ならばガスの冷却を考慮し、1 ならば無視する。

`SI_flgas` : 0 ならば `sink particle` を作成し、1 ならば作成しない。

`SI_flgafd` : 本コードでは 1 を指定する。

`SI_flgagrads` : 本コードでは 1 を指定する。

`SI_flgahd` : 0 ならば重水素原子核を含んだ化学成分を考慮し、1 ならば無視する。

2行目

`Modstep` : 出力ファイルを書きだす間隔をタイムステップ数で指定する。サンプルでは 20 ステップ毎に出力する設定になっている。

3行目

`Gam` : ガスの比熱比。

`Ini_OMGg` : 初期状態 (`sink particle` が存在しない状態) でのガスの質量比 (=ガスの質量 ÷ (ガスの質量+ダークマターの質量))。

4行目

`Ini_ze` : シミュレーションを終了する赤方偏移。

5行目

`Ini_T0` : ガスの初期温度。単位は 10^4 K。

6行目以降 (1行ずつ)

上から順に、`e`、`H`、`H+`、`H-`、`H2+`、`H2`、`He`、`He+`、`He++`、重水素原子核、`D`、`D+`、`D-`、`HD`、`HD+` の個数密度の初期値を全プロトンの個数密度に対する比で与えるものである。サンプルは一例であり、宇宙モデルもしくはシミュレーション開始時点が異なる場合は、それに応じて変更しなければならない (後述)。

- (2) **level0d.dat** : ダークマターの初期条件を与える。

サブルーチン `set_ini` で読み込まれる。

1行目 (フォーマットは 「5(1pE13.5)」)

`dx` : ダークマター粒子の位置を設定したときのメッシュサイズ (単位は `comoving Mpc`)。

初期の座標を決めるにあたって、まず各ダークマター粒子が格子サイズ（隣り合う粒子の距離） dx の立方格子に位置している状態を考える。これは密度揺らぎが存在しない状態に対応する。各粒子の実際の座標は密度揺らぎの大きさにしたがってこの位置からわずかにずれる。 dx はサブルーチン `set_ini` の中で粒子の質量を計算するのに用いられる。また、シミュレーション領域は必ずしも格子を設定した立方体領域と等しくなくとも良い。サンプルファイルで与えたように、立方体領域から切り出した球など任意の部分空間を設定できる。

SI_a : シミュレーション開始時の宇宙のスケールファクター。

SI_omg0 : 物質(ダークマター+SPH粒子)の密度パラメータ Ω_0 。

SI_lam0 : 宇宙定数の密度パラメータ Ω_Λ 。

SI_h0 : ハッブル定数 H_0 (単位は $\text{kms}^{-1}\text{Mpc}^{-1}$)。

2行目以降 (フォーマットは「6(1pE13.5)」)

各ダークマター粒子の密度揺らぎを考慮した座標 x , y , z , とそれぞれの方向の速度 v_x , v_y , v_z 。座標の単位は `comoving Mpc` であり、速度は初期時刻における `peculiar velocity` (ハッブル膨張からのずれ) を kms^{-1} 単位で与えるものである。

- (3) **level0p.dat** : SPH 粒子の初期条件を与える。ダークマターのためのシミュレーションを行う場合は不要である。サブルーチン `set_ini` で読み込まれる。

1行目は `level0d.dat` と同じ。

2行目以降 (フォーマットは「6(1pE13.5)」)

各 SPH 粒子の座標 x , y , z , とそれぞれの方向の速度 v_x , v_y , v_z 。

6.3 出力ファイル

計算結果は以下のファイルに出力される。

- (1) **標準出力** (main ディレクトリに出力される。)

装置番号6番 (`write(6,*)`) の出力である。シミュレーションのログとして、各タイムステップにおける基本情報 (粒子数やタイムステップの大きさ等) が出力される。特に注意を払う必要はないが、ジョブが異常終了した場合にはエラーメッセージが出力される。

- (2) **d******* (ディレクトリ `output` に出力される。)

サブルーチン `analysys` で出力される。ダークマターのデータを出力する。***** はタイムステップを6桁の数字で表示し、たとえば3400ステップ目のデータであれば、`d003400` というファイル名になる。

1行目は、ガス粒子数、ダークマター粒子数 `ndm`、`sink particle` 数、スケールファクターが出力される。フォーマットは「*」。

2行目から(ndm+1)行目は各ダークマター粒子について座標 x , y , z , それぞれの方向の速度 v_x , v_y , v_z 、質量 m 、ソフトニングサイズ ϵ を出力する。フォーマットは「8E13.5」であり、各量の単位はシミュレーション単位である (2章参照)。

- (3) **b******* (ディレクトリ `output` に出力される。)

サブルーチン `analysys` で出力される。SPH 粒子および `sink` 粒子のデータを出力する。ファイル名は `d*****` と同じ仕方で命名される。

1行目はガス粒子数 ng 、ダークマター粒子数 ndm 、sink particle 数 ns 、スケールファクター、宇宙時間（ビッグバンから経過した時間で単位はシミュレーション単位）を出力する。フォーマットは「*」。

2行目から $(ng+1)$ 行目までは各 SPH 粒子について x 、 y 、 z 、 vx 、 vy 、 vz 、質量、密度、ダミー、smoothing length、 ts （後述）、ダミー、ダミー、ダミー、それ以降順に、 e 、 H 、 H^+ 、 H^- 、 H_2 、 H_2^+ 、 He 、 He^+ 、 He^{++} 、 D 、 D^+ 、 D^- 、 HD 、 HD^+ のバリオンに対する質量比、ダミー を出力する。フォーマットは「13d13.5, i10, 14d13.5, i10」。

$(ng+2)$ 行目から $(ng+ns+1)$ 行目までは sink particle について同じ変数を出力する。11 番目の変数 ts は SPH 粒子については意味がないが、sink particle については SPH 粒子から sink particle に転換した時刻（シミュレーション単位）を与える。

6.4 プログラムの動作テスト

ダウンロードしたファイルにはテスト用の入力ファイルがサンプルとして含まれている。これを使用してシミュレーションを実行し、標準出力をサンプル `std.sample` と比較することで簡単なチェックができる。詳しい説明は README にある。

6.5 注意

継続シミュレーションを行う場合、シミュレーションのパラメータは `input.dat` から読み込まれるので `input.dat` は変更しないことを推奨する。粒子の情報は、`cont.dat` と `pcont.dat` から読み込まれるのでそれまでに出力された計算結果（“d*****” や “b*****”）は必要ない。

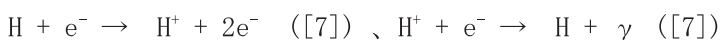
本コードはたとえそれがどんなに非現実的なものであっても与えられた任意の初期条件のもとにシミュレーションを実行できる。しかし、物理的に意味のある結果を得るためには宇宙論的に整合性のある初期条件を設定する必要がある。そのためのプログラムとして、化学組成の初期値については <http://www.astro.ubc.ca/people/scott/recfast.html> にある RECFAST を、粒子の位置と速度の初期条件については <http://ascl.net/cosmics.html> にある COSMICS を使用することを勧める。また周期的境界条件には対応していないので、シミュレーション領域は球状に設定するのが望ましい。

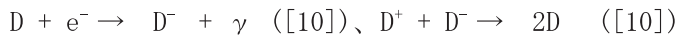
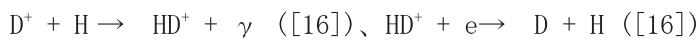
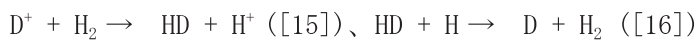
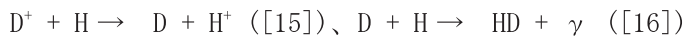
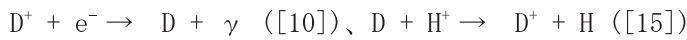
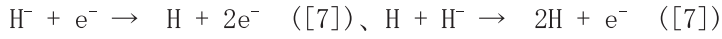
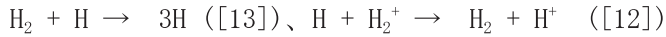
謝辞

本研究は、プログラムの要求する速度とメモリ容量の制限により通常の PC では実行が困難であったが、東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータを利用することで実現することができた。また、Mullard Space Science Laboratory の河田大介氏には GCD+ の使用を快諾していただいたほか、有益な助言をいただいた。

付録

本コードで採用した化学反応とその反応率の出典（括弧内）は次のとおりである。





参考文献

- [1] D. Kawata, and B.K. Gibson, *MNRAS*, 340, 908 (2003)
- [2] R.A. Gingold, and J.J. Monaghan, *MNRAS*, 181, 375 (1977)
- [3] J.E. Barnes, and P. Hut, *Nature*, 324, 446 (1986)
- [4] M. Steinmetz, *MNRAS*, 278, 1005 (1996)
- [5] J.F. Navarro, and M. Steinmetz, *Astrophys.J.*, 478, 13 (1997)
- [6] L. Hernquist, and N. Katz, *Astrophys.J.Suppl.*, 70, 419 (1989)
- [7] V. Bromm, P.S. Coppi, and R.B. Larson, *Astrophys.J.*, 564, 23 (2002)
- [8] R. Cen, *Astrophys.J.Suppl.*, 78, 341 (1992)
- [9] J.H. Black, *MNRAS*, 197, 553 (1981)
- [10] D. Galli, and F. Palla, *Astron. Astrophys.*, 335, 403 (1998)
- [11] D.R. Flower, J. Le Bourlot, G. Pineau des Forets, and E. Roueff, *MNRAS*, 314, 753 (2000)
- [12] T. Abel, P. Anninos, M.L. Norman, and Y. Zang, *New Astronomy*, 2, 181 (1997)
- [13] S. Lepp, and J.M. Shull, *Astrophys.J.*, 270, 578 (1983)
- [14] P.R. Shapiro, and H. Kang, *Astrophys.J.*, 318, 32 (1987)
- [15] D. Galli, and F. Palla, *Planetary and Space Sci.*, 50, 1197 (2002)
- [16] P.C. Stancil, S. Lepp, and A. Dalgarno, *Astrophys.J.*, 509, 1 (1998)



[研究成果]

大規模直接数値計算による高レイノルズ数 MHD 乱流場の内層構造の解明

山本義暢, 功刀資彰

京都大学大学院工学研究科原子核工学専攻

1. はじめに

核融合炉ブランケットにおける冷却材(及び増殖材)の候補の一つである FLiBe(LiF と BeF の混合熔融塩)[1]は, 化学的安定性に優れ及び MHD(Magnet Hydrodynamics)圧損の影響を受けにくいといった利点を持つ反面, 材料腐食, トリチウム回収, 伝熱劣化等の問題が指摘されている. 一般に磁場乱流場においては, 液体金属流(低プラントル数流体: $Pr \ll 1$, $Pr = \nu/\alpha$: プラントル数, ν : 動粘性係数, α : 温度拡散係数)を対象とすることが多いため, その伝熱特性の劣化が問題視されることはあまりない. 一方熔融塩である FLiBe はプラントル数 20-30 程度の高プラントル数流体でありその伝熱特性は乱流熱伝達に依存する.

乱流の直接数値シミュレーション (DNS, Direct Numerical Simulation) は計算機能力の飛躍的發展に伴い, 流体物理を基礎とする各種工学分野において, 理論解析・実験室実験に加えて, 第3の解析手法として確立し, 乱流構造の解明, それに付随する乱流熱・物質移動さらには乱流モデルの評価等において, 重要なツールとなっている. 本研究ではプラントル数 25 程度の高プラントル数流体を対象とするため, 速度場の最小スケール (コルモゴロフスケール) よりもさらに小さいバッチェラスケール (プラントル数の 1/2 乗に比例する) に及ぶ温度変動を解析する必要性が生じる. 従ってその直接数値計算においては計算負荷が増大し, スーパーコンピュータ上で大規模メモリ・並列計算が不可欠である. そのため現段階においても非磁場下においてもせん断乱流場においては DNS の実行例は少なく, 磁場下においては皆無である.

筆者らは MHD 乱流場の直接数値シミュレーションを対象とし, ベクトル並列計算機(NEC・地球シミュレータ)及び, スカラー並列計算機(富士通・HPC2500)上で擬スペクトル法をベースとしたコードの開発を行ってきた[2-4]. 本手法は, 高メモリバンド幅かつ高速ノード間通信能力を必要とするため, ベクトル並列計算機上で非常に優れたコストパフォーマンスを発揮する. さらに今年度東北大学サイバーサイエンスセンターの SX-9 を用いることにより, 核融合炉・ブランケット設計条件を対象とした高レイノルズ数・高プラントル流体の MHD 乱流熱伝達に関する高精度 DNS データベース構築に成功した. 本報ではその概要を紹介する.

2. DNS の概要

2.1 計算条件

高プラントル流体である FLiBe を用いたブランケットの設計条件は, バルクレイノルズ数(Re_b)が 10^4 - 10^5 , 磁場効果を示すハルトマン数(Ha)は 20-100 程度である[5]. DNS における Re_b 数の増加に伴う計算コストの関係を図 1 に示す. ここに縦軸は必要メモリ量[GB](あるいは 1 ケースあたりの計算時間を 1 ヶ月程度とした場合の必要実効演算速度[Gflops])である. $Re_b=10^4$, $Pr=25$ の場合に 1TB のメモリ, 1TFlops 程度の実効演算速度が必要となることがわかる.

また青色で示した領域は, 文部科学省と米国エネルギー省との協力による核融合分野プロジェクト研究(Jupiter-II)[6]により得られた実験データベースの範囲を示す. FLiBe は光学計測等が困難であり, 乱流運動特有の多次元・非定常計測や乱流熱伝達計測が難しい. そこで Jupiter-II 計画では, FLiBe の模擬流体として KOH($Pr=5$ 程度)が使用された. 従って FLiBe のような高プラントル

流体の高レイノルズ数における MHD 乱流熱伝達データは、室内実験においても現在まで得られていない。

図 2 に対象とする流動場の概要及び座標系を示す。座標系は主流方向を x 軸、鉛直方向を y 軸、スパン方向を z 軸とした。流れ場は、主流方向に一定の圧力勾配($F=u_c^2/h$, u_c : 壁面摩擦速度, h : チャンネル半値幅)により駆動される平行平板間流れである。加熱条件としては、上壁加熱の温度差一定条件($\Delta\theta=\theta_{top}-\theta_{bottom}=\text{一定}$, θ_{top} : 上壁温度, θ_{bottom} : 下壁温度)とし、上・下壁温はそれぞれ一定である。また温度場はパッシブスカラーとした。磁場は、低温壁側(下壁側)から上壁に向かって一定磁束密度(B_y)で一様に印加した。表 1 に計算条件を示す。ここに上付き添え字+は、摩擦速度と動粘性係数により無次元化された値であることを示す。本研究では、実験データベースと同等条件(CASE1)及び高レイノルズ数条件(CASE2), そして FLiBe の高プラントル数条件(CASE3)を設定した。すなわち摩擦速度とチャンネル幅($2h$)に基づくレイノルズ数は最大で 1000 であり、バルクレイノルズ数($Re_b=U_b 2h/\nu$, U_b : バルク速度)は約 40000 程度、チャンネル幅($2h$)に基づくハルトマン数 $Ha=B_y 2h(\sigma/\rho\nu)^{1/2}$, σ : 電気伝導度, ρ : 密度)は最大で 68 である。

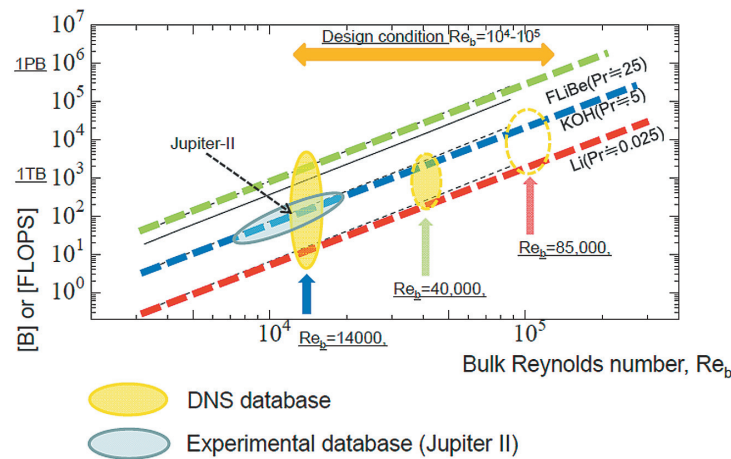


図 1 高プラントル数流体 MHD 乱流の直接数値計算における必要計算機資源

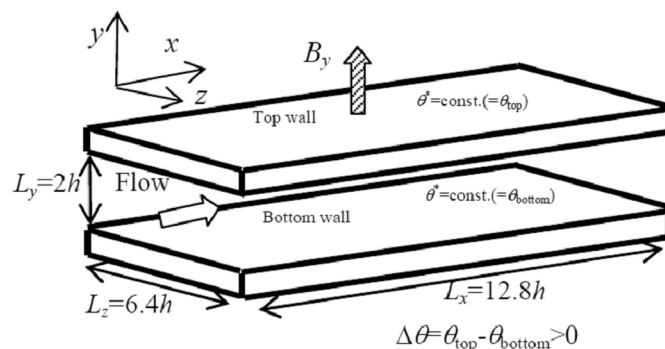


図 2 計算体系と座標系

表1 計算条件

	Computer	Re _τ	Pr	Ha	Grid number N _x , N _y , N _z	Resolution Δx ⁺ , Δy ⁺ , Δz ⁺
CASE1 (KOH)	T2K/ Express5800	400	5.25	0,16,20, 24,28,32	288,432,288	17.8, 0.3-2.0, 8.9
CASE2 (KOH)	SX-9	1000	5	0,24,48,68	768,1032,768	16.7,0.3-2.0,8.3
CASE3 (FLiBe)	SX-9	400	25	0	2048,870,1024	2.5,0.1-1.0,2.5
CASE3 (FLiBe)	SX-9	400	25	20,28	1600,870,800	3.2,0.1-1.0,3.2

2.2 基礎方程式

基礎方程式は次式(1)-(4)に示す，非圧縮性流体における，連続式(1)及び低磁気レイノルズ数の仮定に基づく電位ポテンシャル[7]を用いた Navier-Stokes 式(2)，電位ポテンシャルのポアソン方程式(3)及びエネルギー方程式(4)である．

$$\frac{\partial u_i^*}{\partial x_i} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_i^*}{\partial t} + \frac{\partial u_i^* u_j^*}{\partial x_j} = F \delta_{i1} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{p^*}{\rho} \right) + \nu \frac{\partial^2 u_i^*}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\sigma}{\rho} \varepsilon_{ijk} \left(-\frac{\partial \phi^*}{\partial x_j} + \varepsilon_{jlm} u_l^* B_m \right) B_k, \quad (2)$$

$$\frac{\partial^2 \phi^*}{\partial x_i \partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varepsilon_{ijk} u_j^* B_k \right) \quad (3)$$

$$\frac{\partial \theta_i^*}{\partial t} + \frac{\partial \theta_i^* u_j^*}{\partial x_j} = \alpha \frac{\partial^2 \theta^*}{\partial x_j \partial x_j}. \quad (4)$$

ここに， $u_i (=u, v, w (i=1,2,3))$ は主流($x, i=1$)，鉛直($y, i=2$)，スパン($z, i=3$)方向への速度， t : 時間， p : 圧力， ϕ : 電位ポテンシャル， θ : 温度である．また上付き添え字*は瞬間値であることを示す．さらに δ_{ij} ， $\varepsilon_{ijk} (i,j,k=それぞれ 1,2,3)$ はクロネッカーのデルタ，エディントンのイプシロンであり，繰り返し添え字は縮約規約に従うものとする．

2.3 計算手法

空間の離散化は，主流及びスパン方向にフーリエ・スペクトル法，鉛直方向に2次精度の中心差分を用いた．時間進行は対流項及び磁場項に3次精度のRunge-Kutta法，粘性(拡散)項にCrank-Nicolson法，圧力勾配項にEuler陰解法を用いた．また主流及びスパン方向のエイリアジング誤差は3/2則によりこれを除去した．格子系は，鉛直方向速度成分($u_2=v$)の定義をその他の物理量から半格子分ずらしたスタガード格子[8]を使用した．

2.4 境界条件

境界条件は全物理量に対し，主流及びスパン方向に周期境界条件とし，壁面で速度場にno-slip条件，電位ポテンシャルは絶縁壁を仮定し，勾配0，温度は一定とした．またスパン方向の平均電流は0とした．

3. 並列化の概要

3.1 領域分割とノード間通信

本 DNS コードでは y 方向への 1 次元領域分割とノード間通信方法として MPI(Message Passing Interface)を用いている. 主要通信部分は, y 方向への差分用ステンシルに関する Shift 通信及び図 3 に示すように, y 方向の三重対角行列解法(Tri-Diagonal Matrix Algorithm)に伴う, y 軸から z 軸への分割軸変更によるデータ転置の Alltoall 通信である. これまで, Alltoall 通信に関しては, 派生データタイプを用いた MPI_ISEND/IRECIVE を用いていたが, 今回 SX-9 に適用するにあたり, グローバルメモリ (GM)上でのリモートメモリアクセス(RMA)機能を利用した MPI_PUT による one-side 通信[9]に変更した. さらに Alltoall 通信において特定ノード(及び CPU)に通信が集中することによる通信のコンフリクトを防ぐために, 図 4 のようなノード間通信のスケジューリング[10]をあわせて実装した.

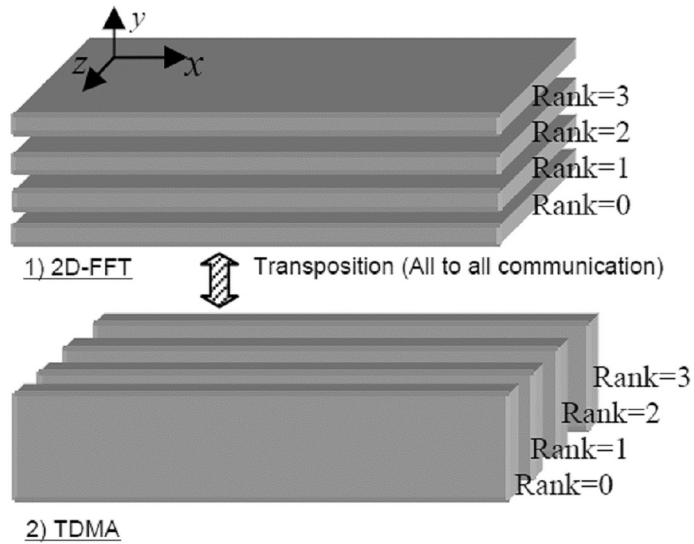


図 3 1次元領域分割方法とデータ転置(4並列の場合)

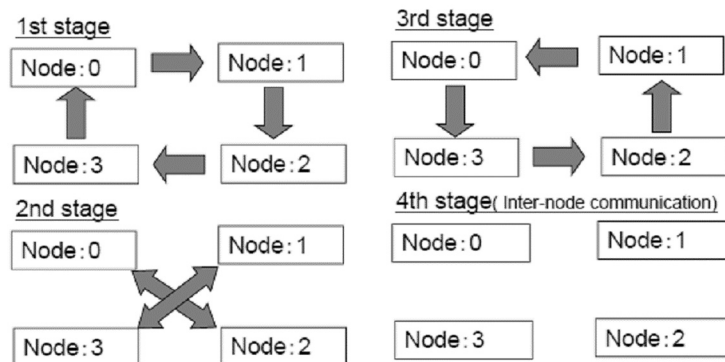


図 4 ノード間通信のスケジューリング(4ノードの場合)

3.2 ハイブリッド並列

多並列計算時の通信量の低減(具体的には Shift 通信の低減)を目的とし、ノード内計算において Microtasking による自動並列[11]を組み合わせたハイブリッド並列化を適用した。しかし一部において不均一な並列効果が現れ、特に三重ループの二重目に自動並列をかける場合に、性能劣化が著しいことがわかった。そこでこの場合は、三重ループの外側に二重目のループを並列化するためのダミーのループを設定することにより均一な並列効果が得られるようになった。さらに自動並列化が適用できない部分については、計算順序の変更あるいは指示行追加[11]によりほぼ全ループを並列化した。

3.3 計算アルゴリズムの変更

プログラムインフォメーションにより、並列数が多くなると演算部分の比率が小さくなる一方で、データコピーの部分の影響が大きくなることがわかった。とくにエイリアジング誤差を取り除く 3/2 則を適用する部分が顕著であったため、3/2 則から位相シフト法[12]への変更も試みた。位相シフト法では、ほぼ同一の演算量でデータコピー量を抑えることができる。しかしアルゴリズム上、同一格子数の場合は 3/2 則と比較し、有効波数が若干減少する。

4. SX-9 上での性能評価

今回、改良した DNS コードを SX-9 に適用しその性能を検討した。さらに東北大学サイバーサイエンスセンターの協力を得て、16 ノード/256 並列の環境まで実行することができた。以下にその結果を報告する。

4.1 MPI 通信時間

表 2 はマルチノード(4 及び 16 ノード)環境での MPI 通信時間(Shift 通信+Alltoall 通信)の計測結果である。理論的には、Alltoall 通信の通信量は MPI プロセス数に依存せず、バイセクションバンド幅に依存し、これの増加により、通信時間は減少する。一方 Shift 通信は MPI プロセス数が増えると、通信量は増加し、通信時間も増加する。

実測値においても、Alltoall 通信部分はノード数が同じ場合はほぼ一定であり、ノード数の増加に伴い通信時間が減少している。16 ノードと 4 ノードの場合の通信比率は 0.38 程度でありこれは、理論値の 82%に達する。但し、4 ノードと 8 ノードの比較においては、ほぼ理論値の通信比率(99%)が得られているため最適化の余地は残っていると思われる。

一方、Shift 通信部分は、MPI 並列数の増加に伴い増加している。特に 16 ノード/256MPI 並列の場合は、Shift 通信部分が Alltoall 通信を上回っていることがわかる。ハイブリッド並列によりノード内 MPI 並列数を減少させると、通信時間も減少する。同一の MPI 並列数(4 ノード/64MPI 及び 16 ノード/64MPI 並列)で比較すると、16 ノード/64 並列の場合が通信時間は短くなっている。これは 16 ノード/64 並列の場合は、1 つの通信あたりのノード間通信幅が増加したことが原因と考えられる。

以上により MPI 通信部分については、グローバルメモリ機能、MPI_PUT による one-side 通信及びノード間通信のスケジューリングにより SX-9 の高速ノード間通信性能を引き出せているものと考えられる。

表2 マルチノード環境での MPI 通信時間

ノード数	MPI 並列数	自動並列数	Alltoall 通信時間[s]	Shift 通信時間[s]
4	64	1	24.43	5.69
4	16	4	24.83	2.83
16	256	1	10.4	12.73
16	64	4	9.5	4.88

4.2 メイン演算部分の並列性能

本 DNS コードにおいては、2次元高速フーリエ変換(2D-FFT)及びy方向差分演算に伴う TDMA 解法がメイン演算部分である。表3は4ノードの場合の FlatMPI 及びハイブリッド並列の比較を示す。ハイブリッド並列は MPI 並列の場合とほぼ同等(約 93%)の並列性能が得られていることが確認できた。なおノード内自動並列は8までは、FlatMPI の90%以上の並列性能が得られたが、16の場合は、並列化効率の劣化がみられた。この点は今後検討する必要があると思われる。

表3 メイン演算部分のハイブリッド並列の性能

ノード数	MPI 並列数	自動並列数	2D-FFT [s]	TDMA [s]
4	64	1	101.63	4.26
4	16	4	102.32	4.48

4.3 並列化効率と実効性能

図5にハイブリッド並列(ノード内は4自動並列)による、ノード数増加による計算実行時間の変化を示す。また計算実行時間は4ノード/64並列の場合を基準に規格化している。4ノードと16ノードの比較により求めた Strong scaling による並列化率(α)は0.99865であり、並列化効率は73.42%となる。4ノード以上の場合は、通常ジョブクラス外であり、1回のみを試行でチューニング等を行うことは今回できなかったことを考えると、良好な並列性能が得られていると考えられる。

図6にハイブリッド並列(ノード内は4自動並列)による、実効演算速度を示す。また比較のため地球シミュレータ(ES)の結果も併記している。3/2則を使用した場合、SX-9では、16ノードで4.3TFlopsの実効演算速度が得られた。これは理論性能の16%程度であり、3/2則を用いた場合の地球シミュレータの2048CPUの演算速度(4.2TFlops)と同等である。

今回時間の都合上、16ノードでは、エイリアジング誤差の除去を位相シフト法に変更した場合のケースを実行することができなかったが、地球シミュレータでは、この場合に2048CPUで5.3TFlops程度の実効演算速度が得られている。SX-9/4ノードの場合における3/2則と位相シフト法の実効演算速度比として、1:1.15倍程度の値が得られているため、SX-9/16ノードでも実効演算速度の向上が期待できる。また今回は16ノードの場合の占有可能時間を考慮して、16ノードの場合の計算実行時間が1分程度となるように設定した。そのため16ノードの場合は、初期化等の影響が多少大きく出ている。従って実行時間が十分に長い場合はより良好な実効演算性能が得ら

れるものと考えている。

以上により、SX-9/16 ノードを利用することにより、通常クラスの4ノードで1ヶ月程度かかる計算が10日程度で実行可能であることが確認できた。また図1の黄色点線で示すブランケット設計条件の上限(バルクレイノルズ数 85000)程度のケースが1ヶ月程度で実行可能となり、SX-9の大規模計算における非常に高い優位性が確認できる。なお Express5800 及びその他スカラー並列計算機での並列化及びその性能評価については文献[13]を参照されたい。

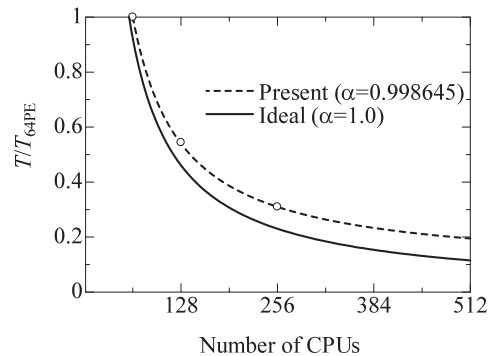


図5 ハイブリッド並列による台数効果

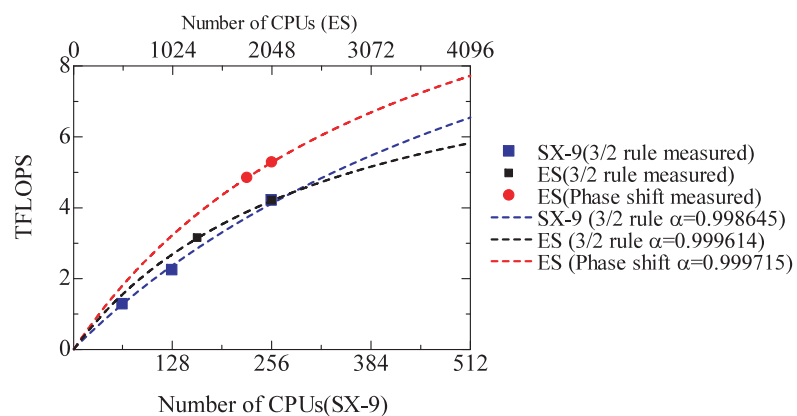


図6 ハイブリッド並列による実効演算速度(地球シミュレータとの比較)

5. DNS データベース

上記の DNS コードを用いて今年度、核融合炉・ブランケット設計条件を対象とした高レイノルズ数・高プラントル流体の MHD 乱流熱伝達に関する高精度 DNS データベース構築に成功した。最後にその一部を簡単に紹介する。

図7に CASE3 におけるチャンネル中央付近での主流方向変動速度と温度変動のコンタを示す。高プラントル流体($Pr=25$)においては、速度場より微細な温度変動が生じていることが確認できる。

図8に CASE2 における主流方向変動速度のコンタを示す。ここに平均流は紙面の垂直方向に流れている。Ha=0 の非磁場化では大規模な渦構造が確認できるが、Ha 数の増加(磁場効果の増加)に伴い渦構造が壁面近傍のみに抑制されていることがわかる。この MHD 効果による乱流低減に

伴う乱流熱伝達の劣化の評価が高プラントル流体をブランケットに適用する際における重要な検討事項の一つとなっている。

図9にCASE1及び3におけるMHD効果($N=Ha^2/Re_\tau$)による伝熱劣化を示す。各ケースにおけるヌッセルト数は、 $Ha=0$ の場合を基準として規格化している。参考のためBlumによる実験相関式[14]とYokomineらにより得られた実験値[6]を併記している。Pr=5.25のDNS結果は、Yokomineらの結果と良好に一致する。またFLiBeを対象としたPr=25の結果は、プラントル数の違いにかかわらず、Pr=5.25の結果ともよく一致する。以上の結果より、熔融塩(FLiBe)を用いるブランケット設計における熱伝達評価式として、次式(5)を提案する。

$$Nu/Nu_{Ha=0}=1-5.5N \quad (5)$$

また高レイノルズ数のMHD乱流場においては、平均流はハルトマン境界厚に基づくレイノルズ数Rによりスケーリングできることが示されている[15]。これは、熱伝達及び乱流諸量も特定の乱流パラメータでスケーリングできる可能性を示している。そこでDNSデータベースを用いて、MHD乱流場の内層(壁面近傍)におけるスケーリングについて検討を行った。その結果、ハルトマン境界層厚に基づくレイノルズ数が等しい流れ場においては、実効乱流レイノルズ数が等しい流れ場であることがわかった。この実効乱流レイノルズ数をスケーリングパラメータとすると、壁面近傍の乱流諸量のみならず、渦構造の空間スケールも相似になることがわかった。

例として図10に示すように $Re_\tau=1000$ 、チャンネル半値幅に基づくハルトマン数34の場合は、ハルトマン境界層厚に基づくレイノルズ数は580程度となる。この時、 $Re_\tau=500$ 、ハルトマン数17の場合と相似になる。そしてこのときの実効乱流レイノルズ数は250程度となり、渦構造のスケールはこの実効乱流レイノルズ数でスケーリングできる。また図11に示すように速度場のみならず温度場においても相似性が確認され、さらにその乱流熱伝達は実効乱流レイノルズ数によりスケーリングできることがわかった。

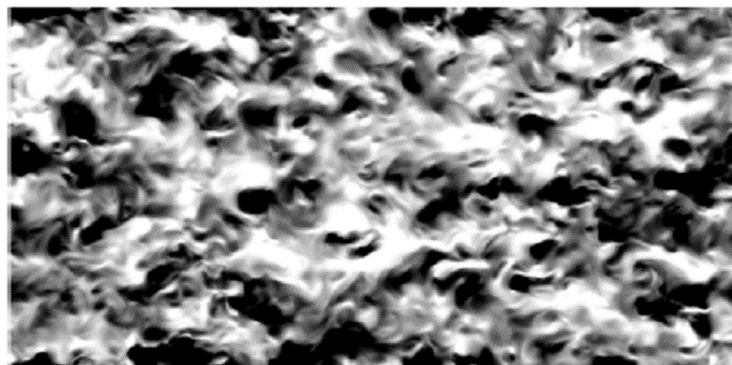
6. おわりに

MHD乱流場の直接数値計算コードに対し、東北大学サイバーサイエンスセンターのSX-9のマルチノードシステムへの改良を実施した。その結果16ノードシステムで評価した結果、4.3TFlopsの実効演算速度を確認でき、高レイノルズ数MHD乱流場大規模直接計算の高速演算が可能となった。

この改良コードを用い核融合炉・ブランケット設計条件を対象とした高レイノルズ数・高プラントル流体のMHD乱流熱伝達に関する高精度DNSデータベース構築に成功した。得られたDNSデータベースにより、熔融塩(FLiBe)を用いた場合のMHD熱伝達相関式を提案するとともに、MHD乱流現象のスケーリング則について検討し、そのスケーリングパラメータ(実効乱流レイノルズ数)を同定した。今後は実効乱流レイノルズ数を基礎パラメータとして、乱流モデリング及び熱伝達輸送機構等に関する詳細解析を実施する予定である。

謝辞

本計算の並列化・高速化及びその性能評価において、東北大学サイバーサイエンスセンター関係各位に有益なご指導とご協力をいただいた。また本研究は、文部科学省科研費(若手B, 21760156)及びグローバルCOEプログラム(J-051)「地球温暖化時代のエネルギー科学拠点」の援助を受けて行ったものである。



1)



2)

図7 主流方向変動速度と温度変動(チャンネル中央部), CASE3, Pr=25, Ha=0

1)主流方向変動速度 $-4(\text{black}) < u^+ < 4(\text{white})$, 2) 温度変動 $-0.04(\text{black}) < \theta/\Delta\theta < 0.04(\text{white})$

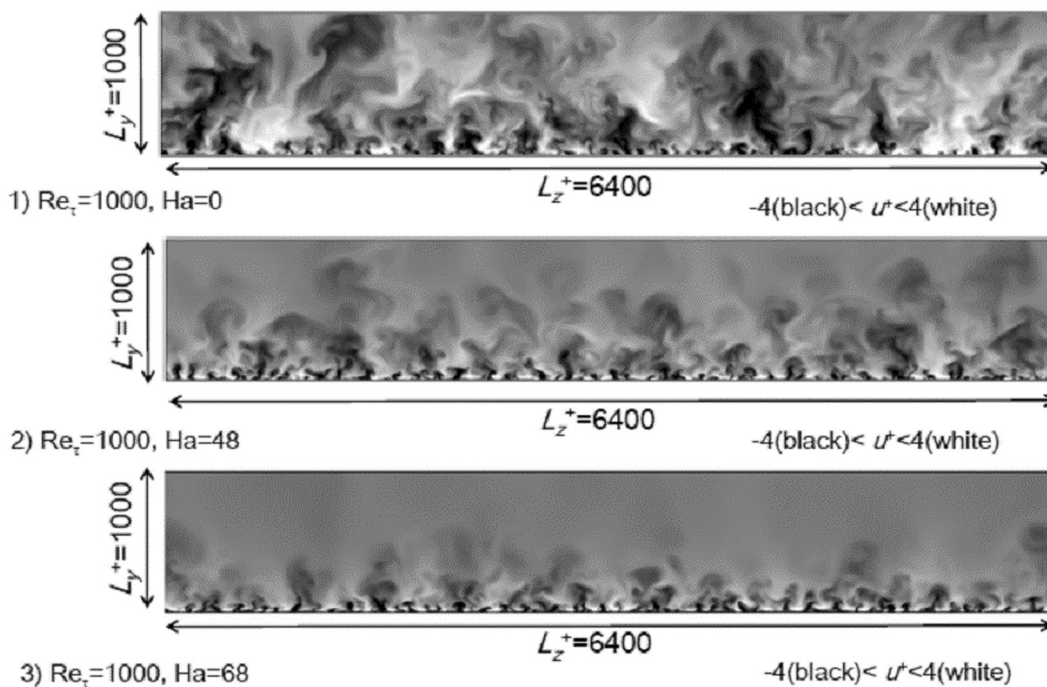


図8 主流方向変動速度(チャンネル横断面), CASE2

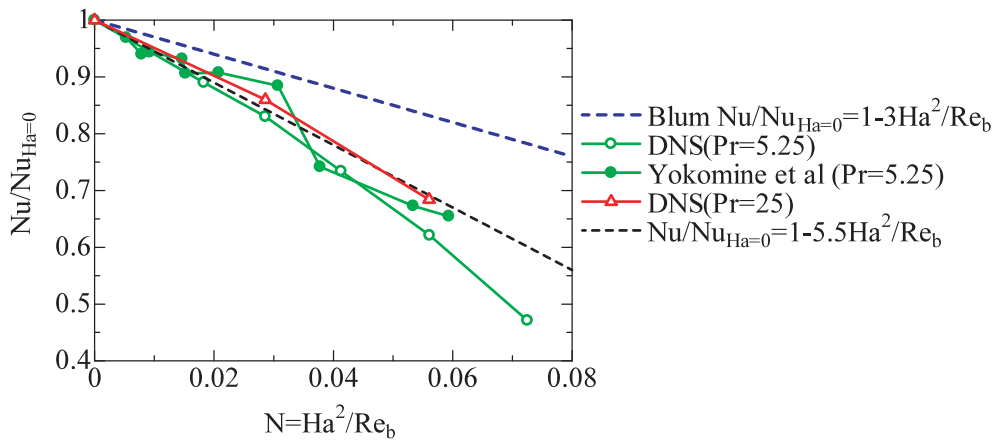


図9 MHD 効果による伝熱劣化(CASE 1 及び 3)

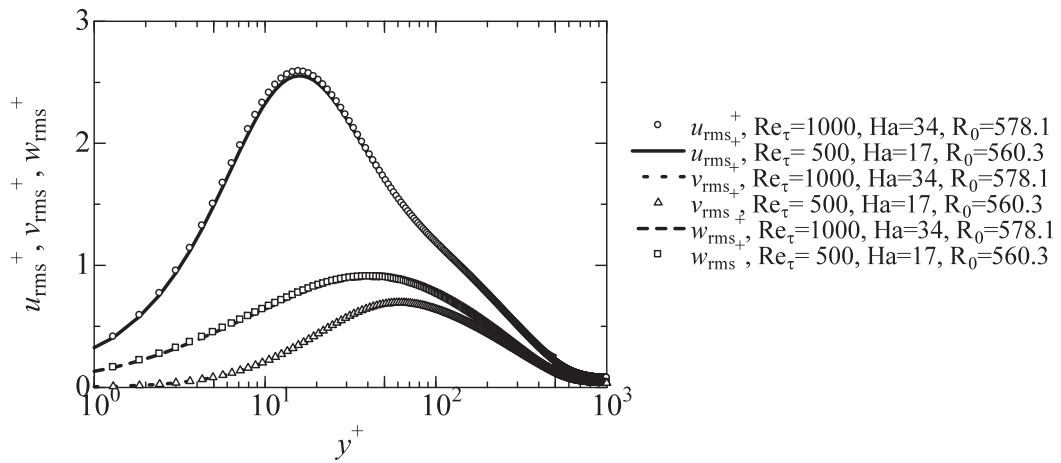


図10 実効レイノルズ数が等しい場合における乱流強度の相似性

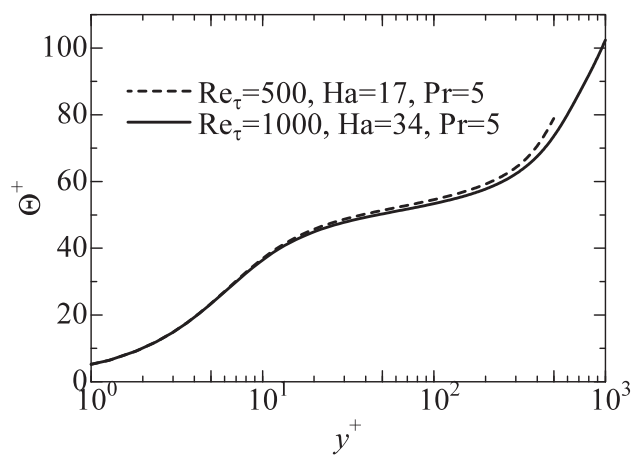


図11 実効レイノルズ数が等しい場合における温度分布の相似性

参考文献

- [1] A. Sagara, O. Motojima, K. Watanabe, S. Imagawa, H. Yamanishi, O. Mitarai, T. Sato, H. Chikaraishi and FFHR Group, Blanket and Divertor Design for Force Free Helical Reactor (FFHR), *Fusion Engineering and Design*, 29 III, 51(1995).
- [2] C. Arakawa, M. Iida, Y. Kaneda, T. Ishihara, H. Kawamura, Y. Yamamoto, T. Gotoh, and T. Watanabe, Direct Numerical Simulations of Fundamental Turbulent Flows with the Largest Grid Numbers in the World and its Application of Modeling for Engineering Turbulent Flows, *Annual Report of the Earth Simulator Center*, ISSN1348-5822, 217(2006).
- [3] Y. Yamamoto, T. Kunugi, S. Satake, and S. Smolensev, DNS and k-epsilon model simulation of MHD turbulent channel flows with heat transfer, *Fusion Eng. Des.*, 83,1309(2009).
- [4] Y. Yamamoto, T. Kunugi and Y. Tsuji, Effects of very-large scale structures in a high-Reynolds turbulent channel flow on medium-high Prandtl number, *Turbulence, Heat and Mass Transfer* 6, K. Hanjalic, Y. Nagao and S. Jakirlic(ed.), 123(2009).
- [5] C. Wong, S. Malang, M. Sawan, I. Sviatoslavsky, E. Mogahed, S. Smolentsev, S. Majumdar, B. Merrill, R. Mattas, M. Friend, J. Bolin, and S. Sharafat, Molten salt self-cooled solid first wall and blanket design based on advanced ferritic steel, *Fusion Eng. Des.* 72, 245(2004).
- [6] T. Yokomine, J. Takeuchi, H. Nakaharai, S. Satake, T. Kunugi, N. B. Morley, and M. A. Abdou, Experimental investigation of turbulent heat transfer of high Prandtl number fluid flow under strong magnetic field, *Fusion Sci, and Tech*, 52, 625(2007).
- [7] Y. Simomura, Large eddy simulation of magnetohydrodynamic turbulent channel flows under a uniform magnetic field, *Phys. Fluids A* 3, 3098(1991).
- [8] S. Satake, T. Kunugi, K. Takase, and Y. Ose, Direct numerical simulation of turbulent flow under a uniform magnetic field for large-scale structures at high Reynolds number, *Phys. Fluids* 18, 125106(2006).
- [9] 大泉健治, 江川隆輔, 伊藤英一, 岡部公起, 小林広明, スーパーコンピュータシステム SX-9 の紹介と性能評価, *SENAC*, Vol.42-1,(2009)
- [10] 小林広明, 滝沢寛之, 小久保達信, 岡部公起, 伊藤英一, 小林義昭, 浅見暁, 小林一夫, 後藤記一, 片海健亮, 深田大輔, HPC チャレンジでの SX システムの性能評価, *SENAC* Vol.38 No.1, (2005-1).
- [11] 橋本ユキ子, FORTRAN90/SX の自動並列化について, *SENAC*, Vol.35-3 (2002)
- [12] G.S. Patterson and S.A. Orszag, Spectral calculations of isotropic turbulence: Efficient removal of aliasing interactions, *Phys. Fluids*, 14, 2538(1971).
- [13] 山本義暢, 功刀資彰, T2K オープンスパコンを用いた高プラントル数流体 MHD 乱流の大規模直接数値計算, 京都大学学術情報メディアセンター 広報, vol.9-2, 2(2010).
- [14] E. YA. Blum, "Effect of a magnetic field on heat transfer in the turbulent flow of conducting liquid", *High Temperature*, 5, 68(1967).
- [15] T. Boeck, D. Krasnov and E. Zienicke, Numerical study of turbulent magnetohydrodynamic channel flow, *J. Fluid Mech.* 572, 179(2007).



[報 告]

山口前研究員と林 COE フェローが
電子情報通信学会学術奨励賞を受賞しました

サイバーサイエンスセンター CSI 研究室の昨年度の産学間連携研究員であった山口一郎氏が、電子情報通信学会 学術奨励賞を受賞しました。

山口氏の受賞は、電子情報通信学会 2010 総合大会における「BS-7-1 大規模ネットワークローミングのための Shibboleth を用いた代理認証システム」(山口一郎・鈴木孝明・後藤英昭・曾根秀昭)の発表の論文が高く評価されたものです。

また、サイバーサイエンスセンター ネットワーク研究部のグループの COE フェロー(工学研究科)である林優一氏も、同賞を受賞しました。

林氏の受賞は、電子情報通信学会 2010 総合大会における「C-5-16 コネクタ接触不良部における電流分布に関する考察」(林 優一・水木敬明・曾根秀昭)と、電子情報通信学会 2010 ソサイエティ大会における「CS-6-3 コネクタの緩みが放射電磁界に与える影響に関する基礎的検討」(林 優一・水木敬明・曾根秀昭)の発表の論文が高く評価されたものです。

(本賞は電子工学および情報通信に関する学問、技術の奨励のために有為と認められる新進の科学者または技術者に贈呈するもので、総合大会およびソサイエティ大会において優秀な論文を発表した者から選定されるものです。)

[退職のご挨拶]

計算機の運用管理に携わって

東北大学情報部情報基盤課 伊藤英一

3月をもちまして定年退職となります。昭和44年4月に当時の大型計算機センターに勤め始めました。振り返れば、あっと言う間のような気がしますし、やはり42年間は長かったとも感じております。

センターの名称は何度か替わりましたが、私の仕事はほとんどが大規模科学計算システムの運用管理と利用者支援でした。

私が計算機に携わった時代は、メインフレームコンピュータの発展期／成熟期、スーパーコンピュータの発展期／成熟期、そして、PC クラスタや GPU などの新しいコンピュータが開発された時期だったようです。

少しだけ、私の42年間で思い出に残ることを述べさせていただきます。当然昔のことなので誤解していることもあると思われまます。

・モニターって何ですか？

私が初めて触れた計算機は NEAC2200/500 です。この計算機では、オペレーティング・システム(OS)のことをモニターと呼んでいました。打合せの時など、よくモニターというキーワードが出てできました。しかし、当時の私には、それは形が見えるのではなく、捕らえ所がなく、モニターとは何なのかさっぱり分かりませんでした。例えば、計算機に対してあるコマンドを操作卓のキーボードから打つと、カード・リーダーが動きだしカード入力が始まります。これは計算機の中でモニターというものがいて働いているからとのことです。先輩方に「モニターって何ですか？」と聞いても、「そのうち分かるから」と言われただけで、しばらくは理解できませんでした。当時はまだオペレーティング・システムに関する本などありませんでした（誤解でなければ）。

・コンパイラの仕組みはどうなっているの？

プログラム言語はアセンブラと FORTRAN(昔はすべて大文字)が使用できました。アセンブラではメモリの割当、レジスタの使用をすべてプログラマが記述するので、計算機の内部を理解することができました。最初に覚えたのは FORTRAN で、プログラミングが面白くいろいろ作成しました。そのうちコンパイラに興味をもち、TSS (Time Sharing System) が利用できるようになってから雑誌に載っていた記事をもとに整数型のみ扱える C 言語風のコンパイラの作成を試みました。アセンブラを体験し、コンパイラの働きを知ったことは、利用相談の対応時に、エラーメッセージからバグの原因を推測するのに非常に役に立ちました (FORTRAN77 の時代までですが)。

・作図が online で利用できたら便利ではないか

DRAFTER という作図装置とその装置で描画するための図形ライブラリ DRAFLIB からなる作図システムをサービスしていました。当初、このシステムはバッチ処理でしか利用できませんでした。この作図システムの利用形態は、利用者が図形ライブラリにより一旦作図データを作成、前日作成された複数の作図データをセンターのオペレータがまとめて磁気テープに移し、そのテープを作図装置にセットして作図を行います。線一本を描くにも1日かかります。昭和53年にテクトロンクス製4006という図形を描けるグラフィックスディスプレイターミナルを購入、その担当になりました。そこで、TSSで図形処理ができるよう、図形ライブラリの機能強化と作図データを描画するためのviewコマンドを作成しました。作図データの読み込み(解析)には、以前コンパイラ作成で用いた字句解析のテクニックが非常に役に立ち、その結果、短時間でコマンドを作成することができました。viewコマンドでは数秒で描画ができるので、この装置は非常によく利用され、また、数社から安価なテクトロンクス互換機が販売されるようになると、研究室で購入するときによく相談を受けました。その後は、計算機更新ごとに新しく入る図形装置に対応するためviewコマンド用ドライバの作成を行いました。

・マイクロプロセッサって面白そう

マイクロプロセッサが出てきた頃、研究開発部の坂田先生と岡部先生が簡易型多重端末制御装置MICLEXの研究開発をしており、8bitのプロセッサを使って装置の開発を行っていました。その開発終了後、実験室にはラッピングツールなどの工具やROMライター、ICチップなどが残っており、それを借りてIC、LSI、コンデンサ、抵抗などを繋いでのマイコン工作を始めました。実務は運用管理と利用者支援でしたので、昼休みと17時以降に組み立てを行いました。小さな論理回路から始め、デジタル回路を覚えていきました。当時、片平キャンパスの北門を出たところに梅澤無線という電子部品を扱っている店があり、よくCPU(Z80)やメモリを買いにいきました。自費で5インチのフロッピー装置とキーボードを買い、最終的にはCP/MというOSが動くマシンを組み立てました。この後16bitプロセッサがでてきましたが、配線が大変なのでマイコン工作はここで終わりです。この工作では、クロック、CPU、メモリ、制御バス、データバス、RS-232C等の動作をチップレベルで扱いハードウェアの体験ができました。この経験は、変な話ですが、その後運用システムのハードウェア障害についてメーカーから説明を受けるときの知識として非常に役立ちました。また、当時は研究室の端末とセンターの計算機はモデムを介して専用線で接続され、そのインターフェイスはRS-232Cです。利用者から、ときどき「接続できない」との問い合わせがあり、調査のためにモデムのランプを確認しますが、原因についての説明は、イマイチ自信がありませんでした。しかし、物作りを通しRS-232Cの仕組みを知った後は自信を持って適切に対応できるようになりました。マイコン工作は、楽しかった思い出の一つです。

・共通利用番号制

最近、数年おきに以前実施された共通利用番号制の話題が復活します。昭和61年から開始され

た共通利用番号制は、七つの大型計算機センターと学術情報センターを利用するための共通 ID の制度です。東北大学のセンターでは加藤先輩らが中心となりシステム構成を設計し、当時の全技術系職員で分担し東北大学サイトのプログラム作成を行いました。このときは一名の欠員が生じ二人分のプログラムを作成させられたことを覚えております。プログラム作成は好きだったので苦にはなりませんでしたが・・・。

・ 計算機の更新に携わる

システム管理掛長になると同時に、SX-3R の導入、一年後には片平キャンパスから青葉山キャンパスへのセンター移転、その後は、数年おきに並列コンピュータ、スーパーコンピュータの更新作業を行ってきました。更新においては、機種決定までは委員会の事務方を、決定後はメーカーとの間で導入スケジュール、設備関係、運用環境について、また、利用者への説明書作りや広報などを担当しました。私が担当した計算機は次のものです。

平成 6 年 スーパーコンピュータ SX-3R

平成 9 年 NX7000/460,Exemplar/X,ACOS3900/10

平成 10 年 スーパーコンピュータ SX-4

平成 14 年 並列コンピュータ TX7/AzusA

平成 15 年 スーパーコンピュータ SX-7

平成 18 年 並列コンピュータ TX7/i9610,スーパーコンピュータ SX-7C

平成 20 年 スーパーコンピュータ SX-9

平成 22 年 並列コンピュータ Express5800, スーパーコンピュータ SX-9

42 年間、多くの方々にお世話になりました。特に、計算機の更新においては事務局・施設部との折衝では庶務係、会計係の方々、利用者対応・講習会関係では旧共同利用係の方々、システムの構築では技術系職員の方々、研究開発部の方々、あわせて導入メーカーの方々に毎回ご協力をいただきました。この紙面を借りてお礼を申し上げます。

最後に、在職中、宮城県沖地震（昭和 53 年 6 月 12 日）と東日本大震災（平成 23 年 3 月 11 日）の二度の大震災を経験しました。今回の震災で、センターでは建家の亀裂、資料の散乱、ライフラインの不通はありましたが、計算機システムへの被害はほとんどありませんでした。一日も早い東北・関東地方の復興と、全ノードによる計算サービスが再開できることを願っております。

[退職のご挨拶]

計算機サービス、赴くままに

東北大学情報部情報基盤課 高橋哲夫

この3月で定年を迎えました。私は昭和44年、東北大学に採用いただき、同年に発足した全国共同利用大型計算機センター業務掛に配属となりました。センターは発足から約25年間は片平キャンパスにありましたが、その後青葉山キャンパスに移転し、名称も情報シナジーセンター、サイバーサイエンスセンターと変更になりました。その間、私は計算機のオペレーション、画像処理システムの開発、利用者管理や共通利用番号制などを担当しました。

現在は、パソコン等をインターネットに接続すればサイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータ、並列コンピュータが、利用できるようになっていました。昭和50年代前半までは、パソコンはなく、カード穿孔機によりプログラムやデータをパンチしたカードを中心としたバッチ処理と、端末機によるオンラインシステムのTSS(Time Sharing System)処理がありました。TSS処理は東北大学が最も早い時期に力を入れた分野です。これらの処理を、センター技術職員が交替で操作・監視していました。

また、大型計算機センターとは別に、青葉山キャンパスには計算センターがありました。私はここに昭和51年～56年までの間勤務しました。計算センターには、富士通の計算機FACOM 230-38が稼働しており、その役割としては①マークカード方式を用いた学生の教育実習、②Lisp、Pascal、Ratfor、Fordapなどのコンパイラ・プリプロセッサの研究開発、③事務電算化の準備、④統計パッケージソフトウェア(BMD、OSP、SAS等)の導入、などがあり多方面から利用されていました。計算センター建物内の一部に、大型計算機センターの青葉山分室が設置され、バッチ処理(カードリーダー、ラインプリンタ、磁気テープ)、TSS処理(TSS端末)のサービスを行い、工学部、理学部等の多くの教員や学生の方々に活用いただきました。この青葉山分室はミリ波で片平-青葉山間を接続していました。

最後に、昭和40年代後半頃のエピソードを紹介いたします。土曜日は、今でこそ休日となっていますが、半日勤務をしたものです。翌日は日曜日で休養日であり、なにか特別の意味があるように思いました。土曜の午後は、レストランなどで簡単な食事をした後に、映画を見たりしました。映画が終わり外に出ると15時を知らせるミュージックサイレン「荒城の月」が鳴っていて、帰りがたら「本屋」を覗くと、クリーニングしたての白衣(作業着)を着用した大型計算機センターの利用者と、よく顔をあわせたものです。また、白衣、作業着の洗濯物を主に取り扱うクリーニングコーナーが、学内の売店に設けられていたことも記憶しています。

乱文をお許しただくとして擱筆といたします。先生方、事務部のみなさま、技術職員のみなさま、大変お世話になりました。みなさまのますますの発展をお祈りいたします。

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

利用負担金割引制度の実施について (No.116)

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 23 年度は以下のとおり実施しますのでご利用願います。

平成 23 年度の利用負担金割引制度の内容

1. 実施期間は平成 23 年 4 月 1 日から平成 24 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。

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 500 万円まで	(100 万円を超える利用額の 1/2) + 10 万円
500 万円を超え 1000 万円まで	(500 万円を超える利用額の 1/3) + 210 万円
1000 万円を超え 2000 万円まで	(1000 万円を超える利用額の 1/4) + 375 万円
2000 万円以上	(2000 万円を超える利用額の 1/5) + 625 万円

請求書は4半期ごとに発行されますが、割引制度は1年間の利用額の累計に対して適用されます。
 (請求額 = 4 月からの利用額の累計に割引制度を適用した金額 - 請求済額)

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

備考

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)

平成23年度講習会計画 (No.116)

No.	名 称	開催時期	講 師	内 容 概 略
1	UNIX入門	5月17日(火)	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18日(水)	小野 敏 花岡勝太郎	・自動ベクトル化 ・自動並列化 ・利用法 ・見学
3	並列コンピュータの 利用法	5月19日(木)	NEC 花岡勝太郎	・最適化 ・並列処理 ・利用法 ・見学
4	MATLAB入門	6月10日(金)	陳 国躍 (秋田県立大)	・MATLAB の基本的な使い方
5	ネットワークと セキュリティ入門	8月2日(火)	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
6	Gaussian入門	8月9日(火)	岸本 直樹 (理学研究科)	・Gaussian の基本的な使い方
7	スーパーコンピュータ の高速化技法	9月1日(木)	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
8	MPIプログラミング 入門	9月2日(金)	NEC 大泉 健治	・MPI による並列プログラミングの基礎 ・利用法
9	UNIX入門	9月6日(火)	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
10	スーパ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(水)	大泉 健治	・自動ベクトル化・自動並列化 ・利用法
11	Mathematica入門	9月8日(木)	横井 渉央 (情報科学研究科)	・Mathematica の基本的な使い方
12	Marc 入門	9月16日(金)	内藤 英樹 (工学研究科)	・Marc 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.5 のみ 30 名)。

(共同利用支援係)

SAS のバージョンアップについて (No.116)

データ解析システム SAS を ver. 9.1.3 から ver. 9.2 にバージョンアップしましたのでお知らせいたします。

バージョン名 : SAS 9.2

バージョンアップ日 : 2011 年 4 月 1 日 (金)

サービスホスト : gen.isc.tohoku.ac.jp

起動コマンド : 2011 年 4 月 1 日 ～
 sas (SAS ver 9.2)

新機能の情報などは、SAS Institute Japan 株式会社 SAS 9.2 製品情報
<http://www.sas.com/offices/asiapacific/japan/platform/sas9/index.html>
をご覧ください。

利用方法については、

大規模科学計算システムホームページ>アプリケーションプログラム>データ解析システム
SAS
<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/AP/soft/sas.html>

をご覧ください。

(共同利用支援係)

平成23年度講習会案内[第1回～第3回] (No.117)

第1回講習会	UNIX 入門	5/17(火)13:00～
第2回講習会	スーパーコンピュータ SX-9 の利用法	5/18(水)13:00～
第3回講習会	並列コンピュータの利用法	5/19(木)10:00～

各講習会の詳細や申込みに関しては、ウェブページをご覧ください。
<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/guide/kosyu.cgi>

みなさまのお申込みをお待ちしております。なお、定員に達した場合は募集を締切ることがあります。あらかじめご了承ください。

(共同利用支援係)

平成23年度の共同研究について (No.117)

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23年度は、特にプログラムのMPI化に積極的に取り組む課題を募集しました。

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	有吉 慶介	海洋研究開発機構 地震津波・防災研究 プロジェクト	海溝型巨大地震サイクルの大規模シミュレーションの 開発
2	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
3	岩崎 俊樹	東北大学大学院 理学研究科 地球物理学専攻	気象・気候の数値シミュレーション
4	岩長 祐伸	独立行政法人 物質・材料研究機構	プラズマニック構造を有する複合光・電子素子の数値的 設計
5	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
6	河野 裕彦	東北大学大学院 理学研究科 化学専攻	量子化学計算パッケージ MOLPRO の MPI を用いた並列化と 高速化
7	澤谷 邦男	東北大学大学院 工学研究科 電気・通信工学専攻	モーメント法の高高速化アルゴリズムに関する研究
8	島田 照久	東北大学大学院 工学研究科 航空宇宙工学専攻	ダウンスケールを用いた東北地方の局地気候と 温暖化予測に関する研究
9	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
10	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
11	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	MPI による数値タービンの大規模並列計算手法の開発

(スーパーコンピューティング研究部, 共同研究支援係)

平成22年度研究開発公募の報告 (No.117)

平成22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
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	プログラム開発によって、宇宙初期の構造形成を一定レベルでシミュレートする計算コードが完成した。	終了
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	松岡 浩	東北大学 電気通信研究所	実行可能な格子ガス法シミュレーションコードの実用規模問題への適応性を確認できた。平成23年度は、“多段2体衝突法”を確立していきたい。	継続
10-02	大規模線形常微分方程式系のための高速ソルバの開発	中村 真輔	秋田県立大学 システム科学 技術学部	アルゴリズムの選定、およびそのプログラム作成と動作検証まで終了している。ライブラリに適合するように書き換えることと、チューニングすることが必要となる。	継続

(スーパーコンピューティング研究部,共同研究支援係)

平成23年度研究開発公募課題の採択について (No.117)

標記の募集(2月18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
10-01	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	継続
10-02	大規模線形常微分方程式系のための高速ソルバの開発	助教	中村 真輔	秋田県立大学 システム科学 技術学部	並列コン	継続
11-01	3次元データのコンパクト差分用並列LU分解ソルバの開発	准教授	三浦 英昭	核融合科学 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)

特別復興研究支援課題の募集について (No.118)

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、社会貢献の一環として、このたびの東日本大震災にかかわる復興研究を支援するために、スーパーコンピューティングに関する特別復興研究支援課題を以下の要領で募集します。(5件程度)

1. 対象

本特別復興研究支援課題は、スーパーコンピュータによるシミュレーションを必要とする研究課題を対象とします。研究分野としては、災害・防災に関する研究分野、安全技術に関する研究分野、環境エネルギーに関する研究分野となります。

2. 応募者の資格

本センター大規模科学計算システムの利用有資格者

3. 要件

- (1) 研究支援期間は平成 23 年 5 月 1 日から平成 23 年 9 月 30 日までの間とします。
- (2) 研究成果、あるいは研究成果であるプログラムにより得られた結果を論文等で公表する際、本事業での支援により行われた旨の記述をお願いします。(例えば、共著者、謝辞等)。また、学会等へ報告した場合は、その別刷等の提出をお願いします。
- (3) 年度末に研究実績報告書(所定の様式)の提出をお願いします。また研究成果は本センター大規模科学計算システム広報誌 SENAC への寄稿もお願いします。

4. 助成内容等

採択された課題の研究代表者に対し、演算負担の全額または一部(一定額もしくは演算負担額の 2/3)を本センターが負担します。全額免除を希望する場合は、緊急性・重要性を申請書に記入願います。

〔※夏期に節電の制度化ないし協力要請があった場合、あるいはシステムの利用状況に応じて利用を制限する場合があります。〕

5. 応募締切

第一次締切：平成 23 年 4 月 28 日(木)、以後随時募集する予定です。

6. 審査方法等

申請された課題は、センター内において審査した後、採択の可否及び助成内容について連絡いたします。

7. 応募方法

応募される方は、本センターのウェブサイト各種申請用紙 (<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/guide/YOSHI/>) の特別復興研究支援課題申請書に記入して電子メールでお申し込みください。

送り先 E-mail : uketuke@isc.tohoku.ac.jp

8. 問い合わせ先

共同利用支援係 TEL:(022)795-3406

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

(スーパーコンピューティング研究部, 共同利用支援係, 共同研究支援係)

— SENAC 執筆要項 —

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ページを超える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

東日本大震災、および、その後の余震などで亡くなられた方々に、謹んで哀悼の意を表します。被災された方々にお見舞いを申し上げます。また、被災地を援助していただいている国内外の皆様に、心より感謝の意を表したいと思います。

この大震災では、被害の大きさに圧倒されると同時に、社会が抱える構造上の問題を目の当たりにし、苦しめられることになりました。大津波や原発事故といった大きなニュースに隠れた感がありますが、大きなビルの倒壊などがなく、3日程度で電気・水道が復旧した市街地においても市民を長く苦しめたのは、停滞した物流と人の流れでした。

支援物資が運べない、食材が手に入れにくい、暖房用の灯油が底を突く、物の移動ができない、配達ができない、職場に通えないなど、元をたどると車の燃料不足が問題の根源にあったと思われます。非常に危うい基盤の上に生活が成り立っているような気がしてなりません。

私事で恐縮ですが、私にとっては一番辛かったのは、22年にわたって震度5を何度も経験し、この建物は比較的安全だと信じていた自宅マンションが近所で最も被害が大きく、分厚い壁が割れて柱の鉄筋が見えるような状態になったこと、そして、電気も通じていない暗闇の中、独りぼっちで家財を引っ張り出し、緊急の引っ越しを行ったことでした。モノに対する価値観も大きく変わりました。センターおよび研究室の被害が大きくなかったことは幸いです。

本学はもちろんのこと、被災地そして日本全体の、いち早い復興、できれば進化的・創造的復興ができることを願っています。[後藤 英昭]

3月に発生した東日本大震災から1ヵ月近く経ちました。地震直後の電気の消えた町並、蛇口から水のでない生活、食料やガソリンを求める長蛇の列など今までに経験したことのないようなことが発生し、先の見えない状況が続いてきましたが徐々にこのような環境から脱しつつあると感じております。センターで提供しているスーパーコンピュータ、並列コンピュータにおいては、計算機自体や建物の被害が計算機サービスを長期間停止するようなものではなく、利用者に提供できる環境にあります。今年度も、これまで以上に利用者の利用しやすい計算機環境を提供し、がんばって参りたいと思いますので、みなさまの研究に役立つツールとしてセンターのスーパーコンピュータ、並列コンピュータを利用して頂ければと思います。[小野 敏]



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 曾根秀昭 水木敬明 後藤英昭
江川隆輔 山内 斎 小野 敏 高橋洋一
斉藤くみ子

平成 23 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.44 No.2 2011-4

[センター長メッセージ]	
未曾有の事態に直面して.....	小林 広明 1
[大規模科学計算システム]	
ライブラリ・アプリケーションの紹介.....	共同利用支援係 3
GDB を用いたデバッグ入門.....	山下 毅 25 小野 敏 伊藤 英一
[共同研究成果]	
量子化学計算パッケージ MOLPRO の電子励起状態計算への応用と並列化	山崎 馨 33 河野 裕彦
大気擾乱によって駆動される短周期全球順圧海洋モデルの解像度依存性.....	稲津 大祐 41 日野 亮太 藤本 博己
積層プラズモニック結晶における光機能性発現.....	岩長 祐伸 49
[研究開発公募の成果]	
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 57
[研究成果]	
大規模直接数値計算による高レイノルズ数 MHD 乱流場の内層構造の解明	山本 義暢 69 功刀 資彰
[報告]	
山口前研究員と林 COE フェローが電子情報通信学会学術奨励賞を受賞しました.....	81
[退職のご挨拶]	
計算機の運用管理に携わって.....	伊藤 英一 82
計算機サービス、赴くままに.....	高橋 哲夫 85
[Web 版大規模科学計算システムニュース] より.....	86
・利用負担金割引制度の実施について (No.116)	
・平成23年度講習会計画 (No.116)	
・SAS のバージョンアップについて (No.116)	
・平成23年度講習会案内[第1回~第3回] (No.117)	
・平成23年度の共同研究について (No.117)	
・平成22年度研究開発公募の報告 (No.117)	
・平成23年度研究開発公募課題の採択について (No.117)	
・特別復興研究支援課題の募集について (No.118)	
執筆要項.....	93
編集後記.....	94

