

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.46 No.4 2013-10



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
				平 日
一階	共同利用支援係 (受付)	022-795-6153 (6153) FAX:022-795-6099 uketuke@isc.tohoku.ac.jp	センター業務全般に関する受付窓口	8:30～17:15
	利用相談室	022-795-6153 (6153) sodan05@isc.tohoku.ac.jp 相談員不在時 022-795-3406 (3406)	計算機利用全般に関する相談 大判プリンタ、利用者端末等の利用	8:30～17:15 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	総務係	022-795-3407 (3407) syomu@isc.tohoku.ac.jp	総務に関すること	8:30～17:15
	会計係	022-795-3405 (3405) kaikei@isc.tohoku.ac.jp	会計に関すること、負担金の請求に関すること	8:30～17:15
	共同研究支援係	022-795-6252 (6252) rs-sec@isc.tohoku.ac.jp	共同研究、計算機システムに関すること	8:30～17:15
	共同利用支援係	022-795-3406 (3406) 022-795-6251 (6251) uketuke@isc.tohoku.ac.jp	利用手続き、利用相談、講習会、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)	

* () 内は東北大学内の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tron式計算機の名前で SENAC-1 (SENdai Automatic Computer-1) からとて命名された。

[共同研究成果]

降着円盤中での磁気乱流生成過程に関する計算機実験

齋和人、加藤雄人、寺田直樹、小野高幸
東北大学 大学院理学研究科 地球物理学専攻

降着円盤中での磁気乱流生成過程として、磁気回転不安定性が重要な役割を果たすと考えられている。本研究は、磁気回転不安定性の成長および非線形段階で生じる乱流の性質が、初期条件として与える背景磁場の方向及び強さに対して持つ依存性を、独自に開発した3次元磁気流体コードを用いた計算機実験により定量的に明らかにした。

1. はじめに

本共同研究課題は、宇宙プラズマ中のプラズマ波動-粒子間のエネルギー交換の素過程を担う電磁プラズマ不安定性について、微視的および巨視的不安定性を扱う計算機実験を実施して、エネルギー交換過程の定量的評価を行う事を目的に行われた。本稿では特に、巨視的不安定性として降着円盤内で生じる磁気回転不安定性を取り上げ、独自に開発した3次元磁気流体コードを用いた計算機実験により得られた成果について報告する。

1.1 降着円盤と磁気回転不安定性

降着円盤とは、原始星やブラックホールなどの天体の周りを取り巻くガスが、その天体の周りを回転運動し、重力と遠心力の釣り合いにより円盤状の構造を形成したものである。円盤ガスは中心天体へ少しづつ落下していることが観測から明らかとなっており、これを質量降着と呼ぶ。質量降着が生じるためには、円盤ガスは持っていた角運動量を失う必要があり、「円盤内が乱流状態となっており、乱流によって生じる応力が効率的に角運動量を外側に輸送している」と考えることにより説明できる。円盤内の乱流を生成するメカニズムとして重要と考えられているのが、本研究で着目する磁気回転不安定性 (Magneto-Rotational Instability、以下 MRI) である。MRI によって生じる円盤内乱流（以下、MRI 乱流）は、質量放出や惑星形成など降着円盤で生じる現象に大きく影響を及ぼすことも指摘されており、MRI 乱流の特性の解明が必要とされている。

降着円盤の円盤ガスは、重力と遠心力とがほぼ釣り合っていると考えられるため、中心天体に近い領域では回転速度が速く、遠い領域では回転速度が遅い差動回転した状態になっていることが分かる。MRI は、磁気流体力学 (Magneto Hydro Dynamics、以下 MHD) において、差動回転する回転円筒内で生じる不安定性である。円盤ガスが完全電離した流体であるとして、差動回転する円盤ガスを磁力線が貫いている状況を考える。ここで、磁力線に擾乱が与えられると、磁力線により繋がれた流体要素は元の回転の軌道から内側もしくは外側へ変位することになる。この時、角運動量の保存から、内側へ移動したものは回転速度が速く、外側へ移動したものは回転速度が遅くなる。この速度差によって磁力線は引き延ばされるが、磁力線の張力により、流体要素には速度差を小さくする方向に力が働く。その結果、流体要素に働く重力と遠心力との釣り合いが崩れ、内側へ移動した流体要素はさらに内側へ、外側へ移動した流体要素はさらに外側へと移動し、始めは小さな揺らぎだったものが大きな変動へと成長していく。以上の一連の過程が、MRI の線形成長過程で生じており、変動が成長し非線形段階に至ることで、MRI 乱流が生成されると考えられる。MRI の詳細については参考文献[1][2]等も参照されたい。

1.2 本研究の目的

MRI 乱流の特性を定量的に理解する上で、計算機実験が大きな役割を果たしている。本研究では独自に開発した3次元のMHDコードを用いて計算機実験を実施し、円盤ガスを貫く磁力線の方向及び強さがMRI 乱流に及ぼす影響を定量的に明らかとする。MHD コードを用いた計算機実験による MRI 乱流の研究は数多く実施されているが、用いられてきた背景磁場の条件は限定的なもの

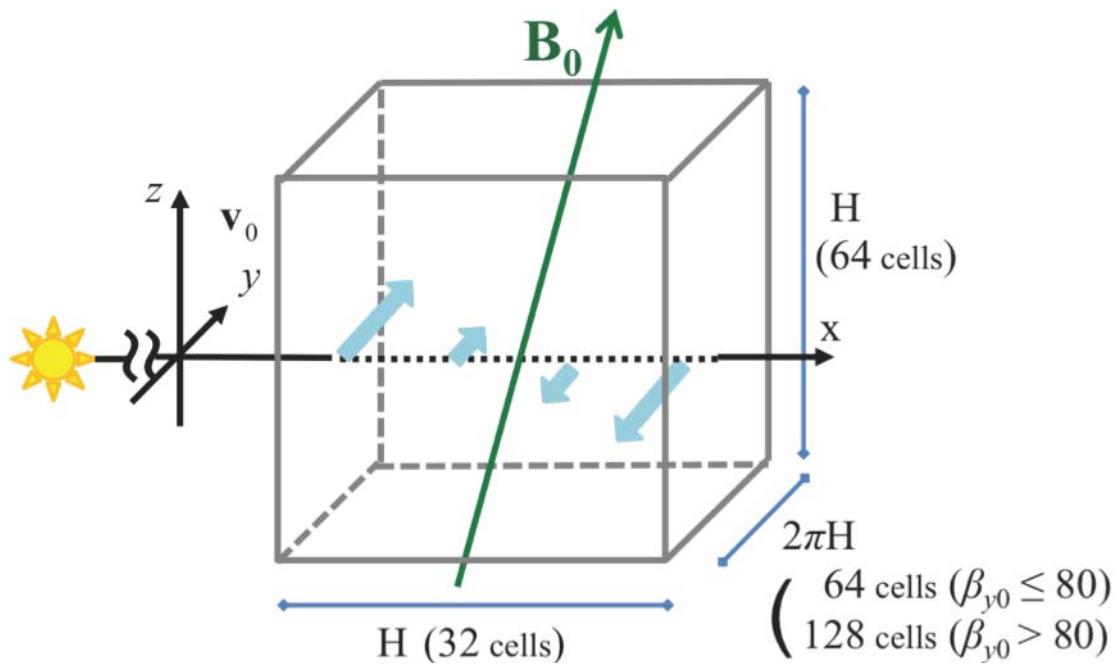


図 1. シミュレーション空間の概要

であった。降着円盤を貫く背景磁場としては、多様な状況が考えられることから、本研究により明らかにされる MRI 乱流の背景磁場依存性は、降着円盤中で生じる MRI 乱流の理解に大きく貢献することが期待される。

2. モデルの概要

本研究では空間 3 次元の抵抗性 MHD シミュレーションコードを独自に構築して用いた。コードの詳細は[1][2]に基づいており、ここでは概要を述べる。

2.1 円盤モデルとシミュレーション空間

MRI の計算機実験では、円盤モデルとして、計算領域内で密度と圧力が一様な「非層化モデル」と、中心天体の重力により円盤ガスの密度および圧力が円盤の回転軸方向に分布を持つ「層化モデル」が用いられる。本稿で示す計算機実験では、MRI 乱流の基本的性質を明らかとするために、パーカー不安定性等の別なプラズマ不安定性が生じず MRI のみの成長が議論できる「非層化モデル」を用いる。

MRI 乱流の空間スケールは降着円盤の大きさに比べて小さいため、計算機実験では円盤ガスの回転に乗った座標系を用いて、円盤の一部分だけを切り取りその内部におけるガスの運動ならびに磁場の変動を解き進める Local shearing box モデル[3]を採用する。このモデルでは、シミュレーション空間として切り取られる領域が十分小さく、曲率による影響が無視できるとして、図 1 に示すような 3 次元直交座標を用いる。中心天体から離れる方向に x 軸、円盤ガスの回転方向に y 軸、円盤ガスの回転軸方向に z 軸を取る。計算機実験の初期条件として背景磁場を y-z 面内に与え、背景磁場の z 成分（以下、鉛直成分）および y 成分（以下、方位角成分）の大きさを変化させた場合における、シミュレーション中で生じる MRI 乱流の様相の変化を調べる。

シミュレーション空間の大きさは、図 1 に示すようにスケールハイト H を基準として設定する。MRI の線形成長率が最大となるモードを精度よく解く為には、十分な空間分解能を確保してシミュレーションを実施する必要がある。そこで本研究では、計算機実験で用いる初期条件での最大成長波長を線形解析から求めて、過去の研究[3]を参考にグリッド幅が MRI の最大成長波長の 1/8 以下となるように、用いる格子点数を定める。

2.2 基礎方程式

基礎方程式として、以下に示す抵抗性 MHD 方程式系を用いる。なお円盤ガスの速度に関しては、回転に由来する成分 (\mathbf{V}_0) と変動成分 (\mathbf{v}) とに分け、 \mathbf{V}_0 は解析的に与えられることから、 \mathbf{v} の時間発展のみを解く。

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

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \{(\mathbf{V}_0 + \mathbf{v}) \cdot \nabla\} \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p - \frac{1}{8\pi\rho} \nabla \mathbf{B}^2 + \frac{1}{4\pi\rho} (\mathbf{B} \cdot \nabla) \mathbf{B} - 2\Omega \mathbf{e}_z \times \mathbf{v} - (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{V}_0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times \{(\mathbf{V}_0 + \mathbf{v}) \times \mathbf{B} - \eta (\nabla \times \mathbf{B})\} \quad (3)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \{(\mathbf{V}_0 + \mathbf{v}) \cdot \nabla\} p = -\gamma p (\nabla \cdot \mathbf{v}) + (\gamma - 1) \eta \left(\frac{|\nabla \times \mathbf{B}|}{4\pi} \right)^2 \quad (4)$$

ここで ρ 、 \mathbf{v} 、 \mathbf{B} 、 p および η はそれぞれ密度、速度、磁場、圧力および抵抗を示し、比熱比 γ は $5/3$ とする。円盤の回転に乗った系を考えているため、運動方程式(2)にコリオリ力(右辺第4項)が含まれている。以上の方程式を、Kudoh and Shibata [4]による CIP-MoCCT 法に独自の改良を加えた計算スキームである RCIP-CMoCCT 法[1]を用いて、シミュレーションコードを構築した。

2.3 初期条件

背景磁場を鉛直成分のみの場合、方位角成分のみの場合、ならびに鉛直成分と方位角成分の双方を持つ場合の 3 パターンを考え、それぞれのパターンで各成分の大きさを変化させて計算機実験を実施し、シミュレーション中での乱流応力の時間発展を調べた。初期条件を設定するにあたって、以下の無次元パラメータ β_{y0} および β_{z0} を導入する。

$$\beta_{y0} \equiv \frac{8\pi p_0}{B_{y0}^2} \quad (5)$$

$$\beta_{z0} \equiv \frac{8\pi p_0}{B_{z0}^2} \quad (6)$$

ここで p_0 は初期条件として与えるプラズマ圧、 B_{y0} および B_{z0} は背景磁場の方位角成分および鉛直成分である。

3. 結果と考察：MRI の背景磁場依存性

図 2 にシミュレーション結果の一例を示す。図 2(a) は背景磁場として鉛直成分のみを与えた場合 ($\beta_{z0} = 400$) の計算結果で、シミュレーション空間中で生じた乱流応力の空間平均値 $\langle W_{xy} \rangle$ の時間発展を示している。乱流応力は円盤内乱流の強さを表す指標とされており、円盤ガスの質量降着率もこの乱流応力に比例することが知られている。ここで、

$$W_{xy} \equiv \rho v_x v_y - \frac{B_x B_y}{4\pi} \quad (7)$$

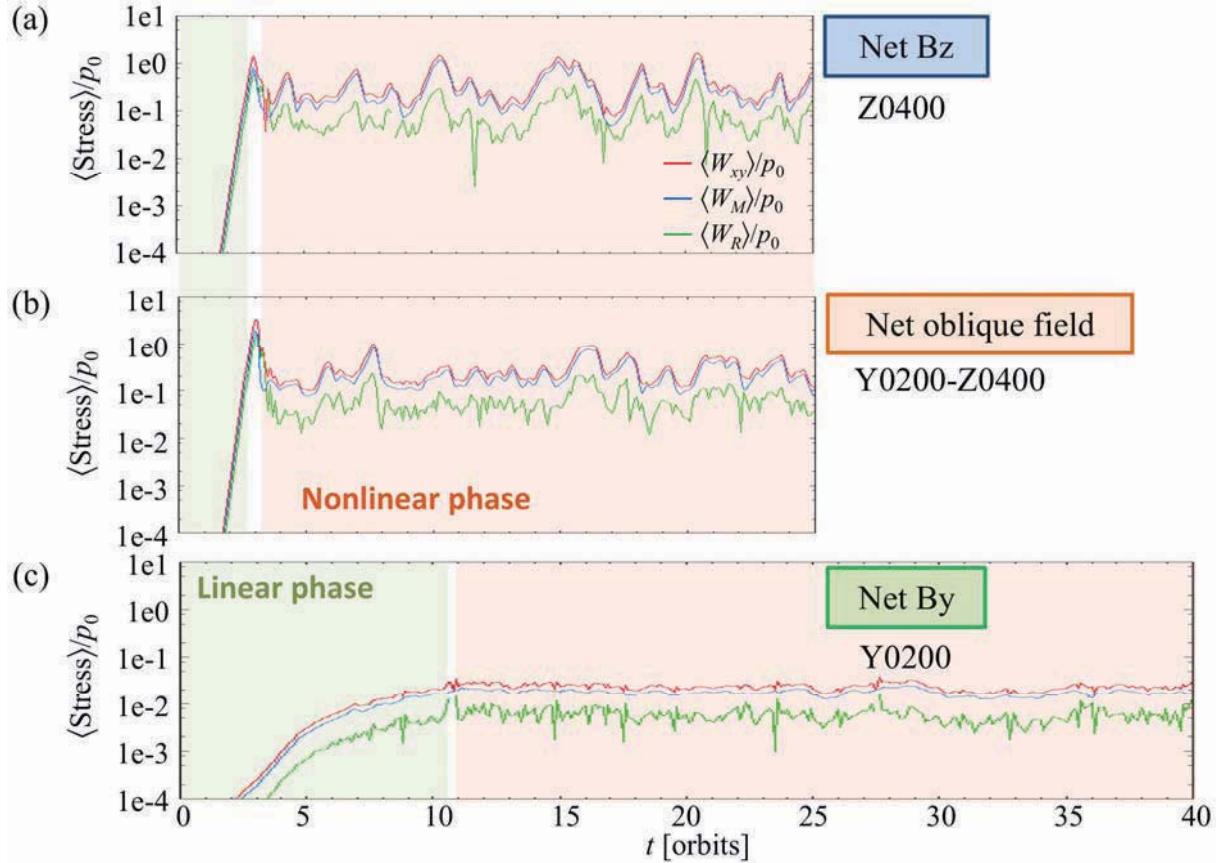


図 2. 背景磁場が(a)鉛直成分のみ、(b)両成分、(c)方位角成分のみの条件での乱流応力の時間発展 (Sai et al.[2]より)

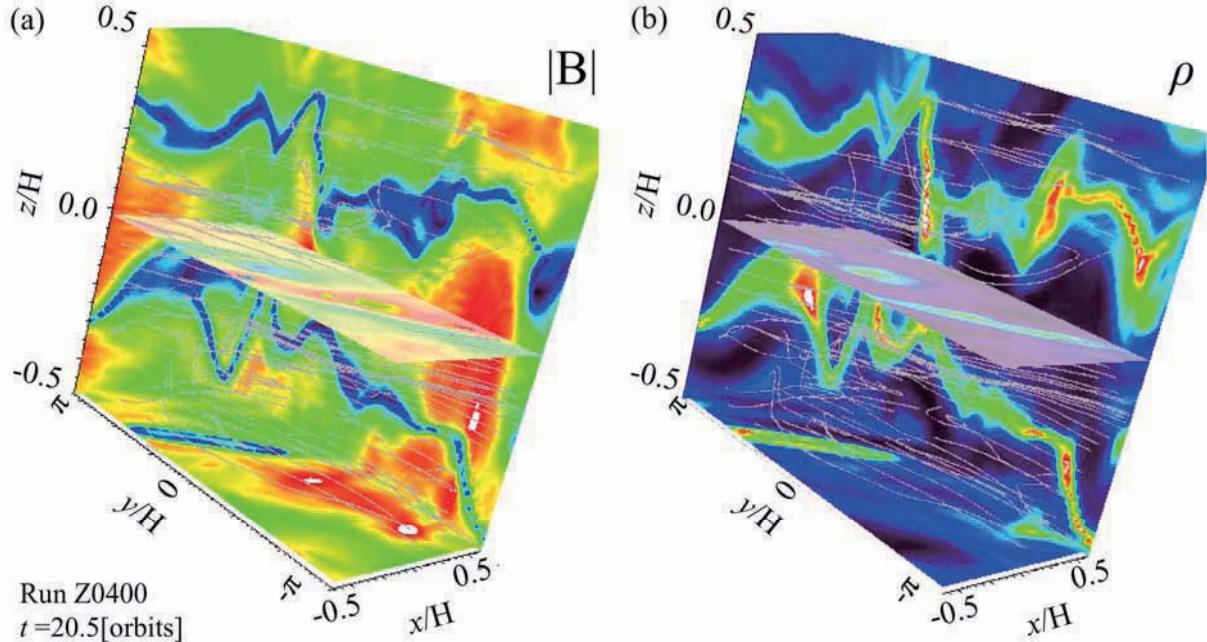


図 3. 背景磁場が鉛直成分のみの条件での計算結果の一例。非線形段階に相当する時間帯での(a)磁場強度および(b)密度の各断面での大きさをカラーコンターで示している。寒色系から暖色系になるほど値が大きいことを示す。図中の白線は磁力線を示している。

である。(6)式の右辺第一項と第二項はそれぞれレイノルズ応力 ($W_R = \rho v_x v_y$) ならびにマクスウェル応力 ($W_M = -B_x B_y / (4\pi)$) に対応し、図2(a)には各成分の時間発展をあわせて示している。図2(a)から、シミュレーションの初期にはMRIが線形成長し、乱流応力が大きくなっていく様相が示されており、また、マクスウェル応力が卓越していることが示されている。シミュレーション結果の解析から、この乱流応力の増加はMRIの成長率が最大となるモードの成長に起因するものであることと、その成長率は線形解析による結果と一致することが確かめられている。MRIの線形成長による乱流応力の増加は3公転周期程で飽和し、非線形段階へと遷移して、乱流応力の増加と減衰が周期的に繰り返される様相が示されている。

図2(a)のシミュレーション結果について、非線形段階に相当する時間帯での、背景磁場強度とプラズマ密度の空間分布を、磁力線とともに図3に示す。この結果から、非線形段階では z 軸方向に波数を持つモードが発生しており、また、磁場強度の小さい領域にプラズマ密度が集中する特徴的な構造が形成されていることが分かる。図2(a)に示されている乱流応力の増加と減衰は、図3に示されている構造の成長と緩和によって生じていることが明らかとされた。

次に、背景磁場に鉛直成分と方位角成分の両方を与えた場合 ($\beta_{y0} = 200$ 、 $\beta_{z0} = 400$) と、方位角成分のみを与えた場合 ($\beta_{y0} = 200$) の計算結果を図2(b)と図2(c)に示す。図2(a)との比較から、図2(b)の時間発展は図2(a)と類似している一方、図2(c)は乱流応力が小さく、成長率(グラフの傾き)も小さいことが分かる。

図2で示されたMRI乱流の背景磁場依存性をより詳細に議論するために、背景磁場の鉛直成分および方位角成分を変化させてシミュレーションを実施した。その結果のまとめを図4に示す。図4(a)は鉛直成分を一定として方位角成分を変化させた場合、図4(b)は方位角成分を一定としてして

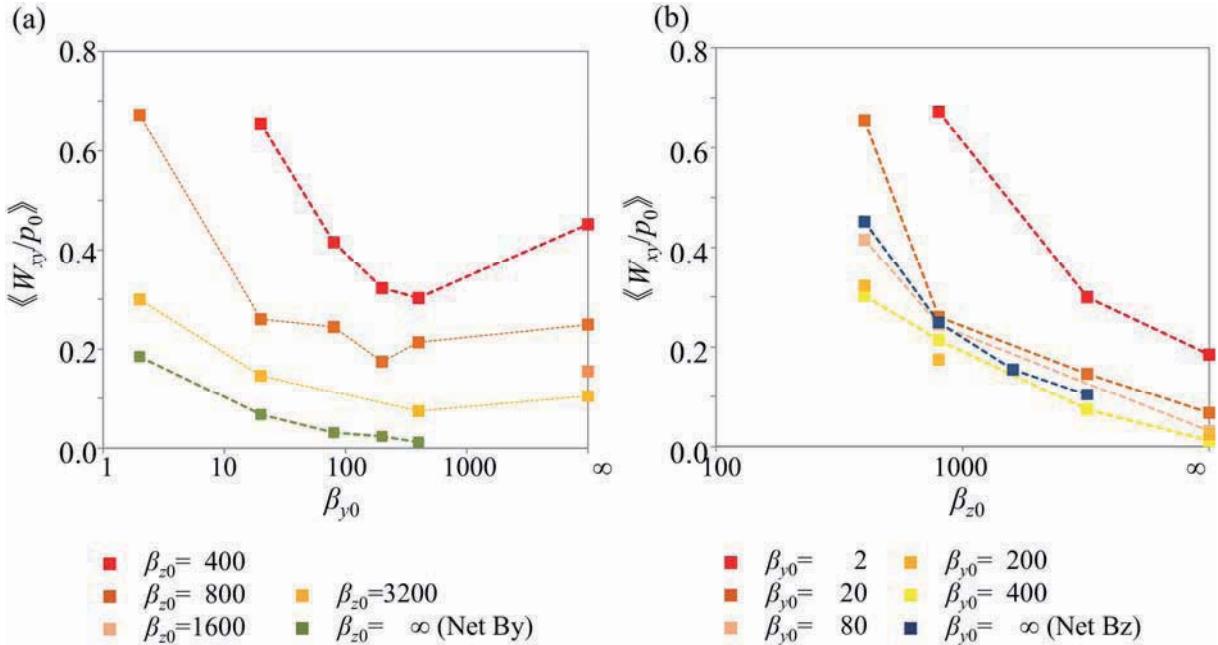


図4. 計算機実験から得られたMRI乱流の初期磁場依存性 (Sai et al.[2]より)。(a)背景磁場の鉛直成分を一定として方位角成分を変化させた場合、および(b)方位角成分を一定として鉛直成分を変化させた場合の、MRI乱流の強さを示している。

鉛直成分を変化させた場合における、乱流応力の時間平均 $\langle\langle W_{xy} \rangle\rangle$ (MRI 乱流の強さ) を示している。図 4(a)から、背景磁場が鉛直成分のみの場合 ($\beta_{y0} = \infty$) に比べて、方位角成分を与えると乱流応力は減少傾向を示すものの ($\beta_{y0} = 400$)、方位角成分を大きく (β_{y0} を小さく) していくと乱流応力は増加傾向を示すことが明らかとなった。一方で図 4(b)から、方位角成分を一定としたまま、鉛直成分を大きく (β_{z0} を小さく) していくと、乱流応力はそれに比例して増加する傾向を示すことが明らかとなった。以上の結果から、MRI 乱流は背景磁場の鉛直成分と方位角成分との双方に依存することを、非線形過程まで含めたシミュレーションにより定量的に明らかにした。

4. まとめ

本稿では、降着円盤内の乱流を生成する物理素過程として重要と考えられている MRI について取り上げ、独自に開発した 3 次元 MHD コードを用いた計算機実験により、MRI 乱流の背景磁場依存性を議論した。計算機実験の結果から、MRI 乱流は背景磁場の鉛直成分と方位角成分の両者に依存し、単調な依存性を示さないことを定量的に明らかにした。以上の結果は、様々な背景磁場配位における MRI 乱流の特性を初めて明らかにする成果として、学術誌に出版済みである[1]。

降着円盤では背景磁場は鉛直成分を持ち、円盤の時間発展に伴ってガスの周回運動により方位角成分がより支配的になると考えられている。背景磁場配位に対する依存性を明らかにした本研究の成果は、円盤の進化に伴う磁気乱流強度の時間発展、延いては中心天体への質量降着、円盤風、円盤ガスの混合、円盤中央面へのダスト沈殿などの時間発展の理解に大きく寄与すると考える。

謝辞

本研究は、東北大学サイバーサイエンスセンターとの平成 24 年度共同研究課題「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」による成果であり、スーパーコンピュータを利用することで実現できた課題である。本研究課題で用いたシミュレーションコードの開発にあたっては、同センター関係各位に有益なご指導とご協力をいただき、計算機実験を実施する上でもご支援をいただいたことで、大きな効果を得ることができた。図 3 の作図にあたっては HPCI 戦略プログラム分野 5 のユーザー支援チームに支援を受け、3 次元可視化手法に関して千葉大学理学研究科の松本洋介博士に多大なサポートをいただいた。

参考文献

- [1] Sai, K., Y. Katoh, N. Terada, and T. Ono, Effect of background magnetic field on turbulence driven by magnetorotational instability in accretion disks, *Astrophys. J.*, 767, 165, 2013.
- [2] 斎和人, 寺田直樹, 加藤雄人, 小野高幸, 降着円盤における磁気回転不安定性の数値実験, SENAC, 43(2), 45, 2010.
- [3] Hawley, J. F., C. F. Gammie, and S. A. Balbus, Local three-dimensional magnetohydrodynamic simulations of accretion disks, *Astrophys. J.*, 440, 742, 1995.
- [4] Kudoh, T., K. Shibata, Magnetically driven jets from accretion disks. II. Nonsteady solutions and comparison with steady solutions, *Astrophys. J.*, 476, 632, 1997.

[共同研究成果]

数 GHz の周波数帯における負の透磁率を示す構造の開発 とその広帯域化に関する研究

有馬 卓司, 宇野 亨
東京農工大学 大学院 工学研究科 電気電子工専攻

周波数が数 GHz の電磁波は波長が数十 cm であり, その伝搬特性や波長がアンテナ作成に適していることなどから, 携帯電話をはじめ, 様々な用途に使用される. 一方, これまで自然界には存在しないと思われていた電気的特性を示すメタマテリアルと呼ばれる構造が注目されている. 筆者らは, 周波数が数 GHz の領域において, このメタマテリアルの一種である負の透磁率を示す構造の開発および負の透磁率を示す帯域の広帯域化を行った. 開発した構造は, ノの字型の導体近傍に寄生素子を付加し, これを周期的に並べたものである. 開発には FDTD (時間領域有限差分) 法による電磁界シミュレーションを行った. シミュレーションはすべて東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータ SX-9 を用いた.

1. はじめに

現在, 我々の生活において, 電磁波は無くてはならない物となっている. 電磁波は周波数によって特性が異なり, 地上デジタル放送では 410MHz～710MHz の周波数が用いられ, 2G, 3G, 4G 携帯電話においてはそれぞれ 1.5GHz 帯, 2GHz 帯, 3.5GHz 帯などが用いられている. さらに高い周波数帯の 3GHz～30GHz の電磁波はマイクロ波と呼ばれ, UWB (超広帯域信号利用) 通信やレーダなどに利用されている.

一方, これら周波数において自然界には存在しない電気的特性を示すメタマテリアル[1][2]と呼ばれる人工媒質の研究が進められている. その中でも負の屈折率[3][4][5]を実現するメタマテリアルの研究が注目を集めている. このメタマテリアルは周期構造体で構成され, 負の屈折率を有するメタマテリアルに電磁波を当てるとき, 既存の媒質とは逆の方向へ屈折をするため, アンテナの小型化やレンズの高性能化に寄与できるとされている. 負の屈折率を実現するには負の誘電率と負の透磁率の組み合わせが必要である. 負の誘電率を実現する構造の開発は現在, 多くされている. 一方で, 負の透磁率を実現する構造の開発はいまだ少なく, また負の透磁率を実現する周波数帯が既存の構造だと狭いため, 実用的な技術応用がされにくいとされている. そこで本研究は, 周波数が数 GHz の領域において負の透磁率を実現する構造の開発および周波数帯の広帯域化を目的とする. 開発には微分形のマックスウェルの方程式を空間および時間について差分する FDTD 法[6]を用いた電磁界シミュレーションを行った. シミュレーションはすべて東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータ SX-9 を用いた.

2. FDTD 法による実効誘電率, および透磁率の解析手法

本研究は, FDTD 法を用いたシミュレーションにより, 構造の透磁率を解析し, 適した構造の設計を行う. FDTD 法による構造の誘電率と透磁率の解析方法を示す. 解析モデルを図 1 に示す. 図 1 は厚さ d の構造が FDTD 法の解析空間中におかれているモデルである. FDTD 法では垂直入射による媒質からの透過波と反射波によって誘電率と透磁率の評価ができる.

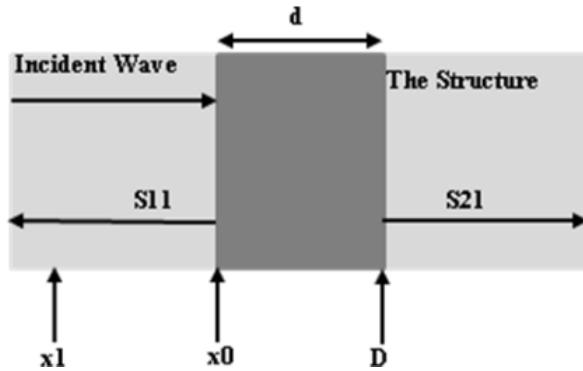


図 1 解析空間中の構造

誘電率 ϵ と透磁率 μ は、媒質の屈折率 n とインピーダンス z を用いて、次のように表現できる。

$$\epsilon = \frac{n}{z} \quad (1)$$

$$\mu = nz \quad (2)$$

さらに、屈折率 n とインピーダンス z は、媒質スラブに対する S パラメータと以下の関係が成り立つ。

$$S_{11} = \frac{R_{01}(1 - e^{j2nk_0d})}{1 - R_{01}^2 e^{j2nk_0d}} \quad (3)$$

$$S_{12} = \frac{(1 - R_{01}^2)e^{ink_0d}}{1 - R_{01}^2 e^{j2nk_0d}} \quad (4)$$

ここで

$$R_{01} = \frac{z-1}{z+1} \quad (5)$$

である。したがって、(3), (4)を n および z について解くことで、媒質の誘電率 ϵ と透磁率 μ を求めることができる。式(3), (4)をインピーダンス z , 屈折率 n について解くと次のようになる。

$$z = \sqrt{\frac{(1 + S_{11})^2 - S_{21}^2}{(1 - S_{21})^2 - S_{11}^2}} \quad (6)$$

$$n = \frac{1}{k_0 d} \left\{ \text{Im}[e^{ink_0d}] + 2m\pi - i \text{Re}[e^{ink_0d}] \right\} \quad (7)$$

ここで m は $\text{Re}[n]$ の分岐の番号を示す整数であり、 $e^{ink_0d} = X \pm i\sqrt{1-X^2}$, $X = 1/2S_{21}(1-S_{11}^2+S_{21}^2)$ である。 m は屈折率 n が連続的になるようにして選ぶ。

次に S パラメータの求め方について説明する。 S パラメータの位相は媒質表面によって定義される。一方で FDTD 法では、反射波と透過波は媒質から少し離れた点で解析をするため、そのまま S パラメータに適用できない。したがって位相の補償をする必要がある。反射率 R と透過率 T の計算は、構造体がある場合とない場合の 2 回行う。まず、構造体がある場合、 $x1$ で記録された電界は

$$V_1(\omega) = A(\omega)e^{-i\beta(\omega)x1} + B(\omega)e^{+i\beta(\omega)x1} \quad (8)$$

で与えられる。一方、構造がない場合の電界は

$$V_2(\omega) = A(\omega)e^{-i\beta(\omega)x1} \quad (9)$$

で与えられるので、 $x1$ における反射率 R は次の式で与えられる。

$$R = \frac{V_1 - V_2}{V_2} = \frac{B(\omega)e^{+i\beta(\omega)x1}}{A(\omega)e^{-i\beta(\omega)x1}} = \frac{B(\omega)}{A(\omega)}e^{+2i\beta(\omega)x1} \quad (10)$$

この R の位相を $x0$ 点を基準にすることで、 $S11$ が与えられる。

$$S_{11} = \text{Re}e^{-2i\beta(\omega)x1} \quad (11)$$

$S21$ についても同様の計算を行う。透過率 T は構造がない場合の透過波と構造がない場合の透過波から与えられる。

$$T = \frac{A'(\omega)e^{-i\beta(\omega)x2}}{A(\omega)e^{-i\beta(\omega)x2}} = \frac{A'(\omega)}{A(\omega)} \quad (12)$$

この T を用いると、 $S21$ は次の式で与えられる。

$$S_{21} = Te^{ik_0d} \quad (13)$$

3. 提案する構造と解析結果

広帯域な負の透磁率を示す構造の開発にあたり、図 2 に示す既存のモデルに対する解析結果を示す。この構造は Split Ring Resonators(SRRs)と呼ばれる。2 節で説明した方法を用いて、負の透磁率を解析した結果を図 3 に示す。解析結果からわかるように、1.3 GHz において約 96 MHz の周波数帯域で負の透磁率を示している。

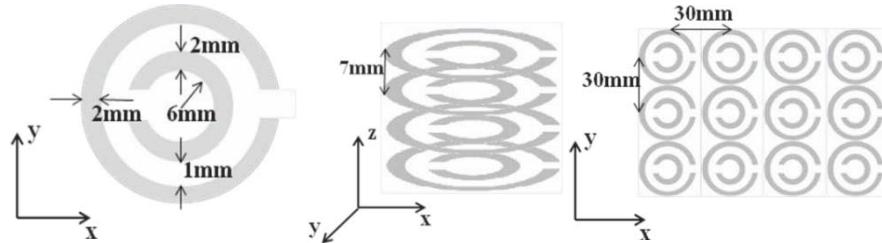


図 2 既存の Split Ring Resonators

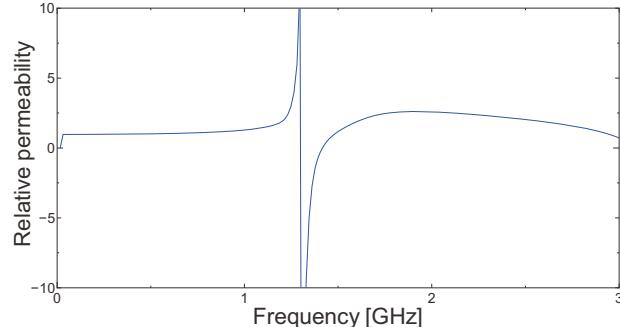


図 3 既存の Split Ring Resonators の解析結果

次に広帯域化を実現するために、広帯域化の理論的考察を行う。まず SRRs における透磁率の理論式は以下で導かれる。

$$\mu = 1 - \frac{F}{1 - \frac{1}{LC\omega^2} + i \frac{Z(\omega)}{L\omega}} \quad (14)$$

ここで、 F はFilling factor、 L はインダクタンス、 C はキャパシタンスである。

(14)から、周波数が $\frac{1}{\sqrt{LC}}$ (共振周波数)で透磁率が発散し、 $\frac{1}{\sqrt{LC}} \frac{1}{\sqrt{1-F}}$ で透磁率が $-\infty$ から 0 に戻る。したがって、負の透磁率を示す周波数帯幅は $\frac{1}{\sqrt{LC}} (\frac{1}{\sqrt{1-F}} - 1)$ である事が分かる。このことより

負の透磁率を示す周波数帯幅は共振周波数が高いか、Filling factorが大きい。つまり周期面積に対する媒質のコイル作用をする面積が大きいほど大きくなる。このことを前提として同じ共振周波数で考えた場合、図4にあるような占有率が大きい右の構造のほうが、周波数帯幅が大きくなるのは必然であると考えられる。また、図4中の右の構造に付随する寄生素子はコ型の切取り部分から少し離したほうが、占有面積が大きくなるので理にかなっているといえる。しかし、離しすぎるとキャパシタンスがあまりに小さくなり変位電流が小さくなりすぎるため、リングがコイルとしての役割を果たさなくなる、負の透磁率を示さなくなるので注意が必要である。

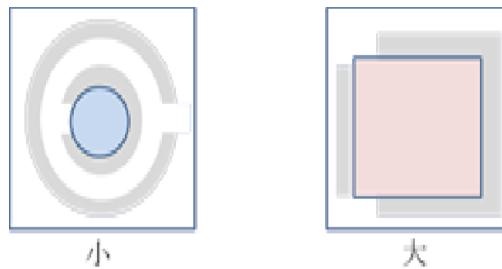


図4 面積占有率の違い

これら理論考察を元に、開発を行った構造を図5に示す。この構造はコイルとして働かせるため、方形ループがカットされている部分に寄生素子を加えたものである。

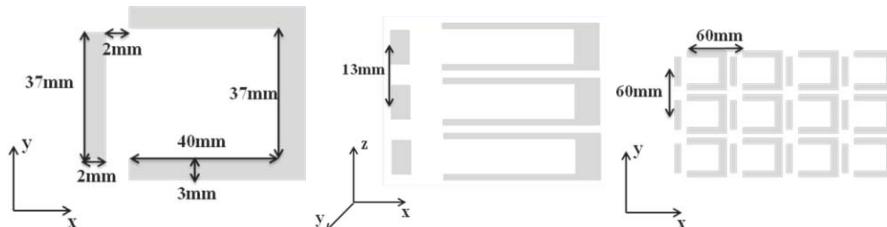


図5 提案構造

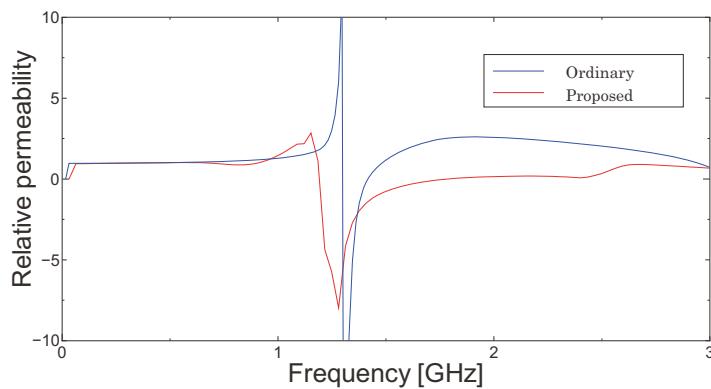


図6 提案モデルの解析結果

図 6 に透磁率の解析結果を示す。この解析結果より提案モデルは 1.3 GHz 付近で約 544 MHz の周波数帯域で負の透磁率を示し、従来の SRRs に比べ広帯域化できたことが分かる。

4. 実験による検証

解析結果の妥当性を示すために実験による測定を行った。以下に実際のモデル、および透過波の解析結果を示す。

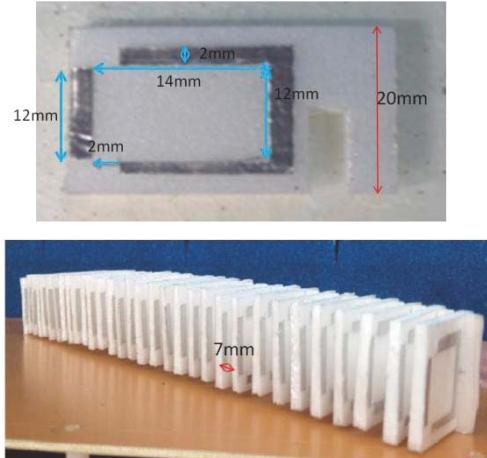


図 7 実験モデル

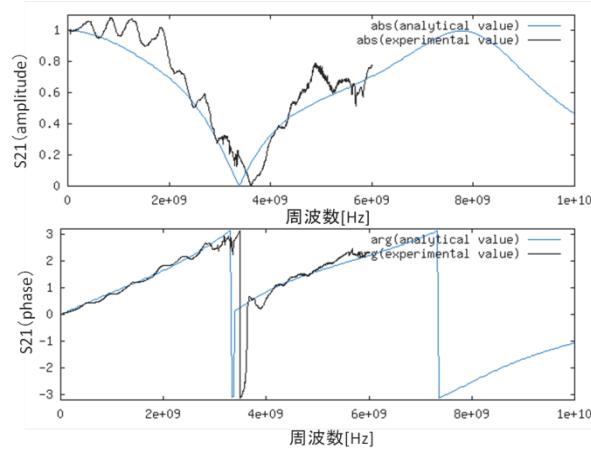


図 8 実験及び解析結果の比較

実験結果から、共振周波数が約 80 MHz ずれているものの、ほぼ一致している。その原因としては、製作誤差によるシミュレーションモデルとのずれ、および吸収体の置き方や導波路から発生してしまったノイズが原因であると考えられる。

5. まとめ

本研究では負の透磁率を実現する周波数帯域の広帯域化をおこなった。既存の構造では 1.3 GHz で約 96 MHz の周波数帯域で負の透磁率を示したのに対し、提案構造では約 544 MHz の周波数帯域で負の透磁率を示し、広帯域化が確認できた。また透過波を測定により求め解析結果と比較することにより、解析結果の妥当性を示した。

謝辞

本研究は、東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータ SX-9 を利用することで実現することができた。また、研究にあたっては同センター関係各位に有益なご指導とご協力をいただいた。

参考文献

- [1] D. Schurig, J. J. Mock, B. J. Justice, S. A. Cummer, J. B. Pendry, A. F. Starr and D. R. Smith, "Metamaterial Electromagnetic Cloak at Microwave Frequencies," *Science*, vol. 314, pp. 977-980, 2006.
- [2] M. Beruete, M. Navarro-Cia, F. Falcone, I. Campillo, and M. Sorolla, "Single negative birefringence in stacked spoof Plasmon metasurfaces by prism experiment," *Optics Letters*, vol. 35, no. 5, March. 2010
- [3] G. Dolling, C. Enkrich, and M. Wegener, J. Zhou and C. M. Soukoulis, S. Linden, "Cut-wire pairs and plate as magnetic atoms for optical metamaterials," *Optics Letters*, vol. 30, no. 23, pp. 3198-3200, December. 2005
- [4] J. B. Pendry, "Negative Refraction," *Contemporary Physics*, vol. 45, no. 3, pp. 191-202, January-February. 2004.
- [5] J. B. Pendry, A. J. Holden, D. J. Robbins, and W. J. Stewart, "Magnetic from Conductors and Enhanced Nonlinear Phenomena," *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, vol. 47, no. 11, pp. 2075-2084, Nov. 1999.
- [6] 宇野亨 "FDTD 法による電磁界およびアンテナ解析" コロナ社, 1998

[共同研究成果]

プラズモニック構造体による光エネルギー利用の効率化

岩長 祐伸

物質・材料研究機構, 科学技術振興機構さきがけ

形状に応じて多彩な共鳴状態を発現するプラズモニック構造体は金属ナノ構造から構成され, ナノサイズで光を吸収し自身の励起状態に変換することができる. これまでに SX-9 上での運用に最適化および MPI 化を実施してきた電磁波散乱行列法のコードはプラズモニック構造体の線形光学応答を高精度に計算できる特長を有するほか, 固有モードの解明にも有用である. 本稿では, 効率的な光エネルギー利用に関する最近の結果と運用に必要な計算リソースについて述べる.

1. はじめに

電磁気学の第一原理であるマクスウェル方程式を様々な対象に対して数値的に解くことが可能になったのは比較的最近のことである. 最も長い間, 数値的な計算法を確立できなかった対象は, 回折格子のような金属を含むプラズモニック構造体である. その数値計算アルゴリズムが 3 次元周期構造まで含めた形で一連の論文が全て発表されたのは 1997 年であるから [1,2], 多くの読者にとっては意外かもしれない. マクスウェル方程式が確立した 1800 年代の終わり [3] から約 1 世紀を経て, ようやく計算法が開発されることになる. 金属を含む周期構造体に対するマクスウェル方程式を解くためにはフーリエ級数展開した方程式を解くことになり, 現在 RCWA (Rigorously Coupled Wave Approximation) 法の名前で比較的よく知られている. フーリエ変換した方程式を有限次で切断して計算することは広く行われているため容易に実行できそうに思われるが, プラズモニック構造体に対するフーリエ級数展開されたマクスウェル方程式を単純に切断した場合, 計算結果が現実的な切断次数では収束しない. そのため, 1997 年までの約 30 年間にわたって数値計算の難問として多くの研究者の挑戦を退けてきたのである.

プラズモニック構造体の特色はナノサイズの極微小構造によって, 光エネルギーを非常に効率良く吸収してプラズモニック共鳴の励起に使うことができる点にある. 図 1 はプラズモニック構造体 (金色と水色のサンドイッチ構造) の一例と光の波長の大小関係を模式的に描いている. 金色が金属, 水色が絶縁体を表している. 赤線で 1 周期を表した光の波長は構造周期長 a や厚さ d よりも長い.

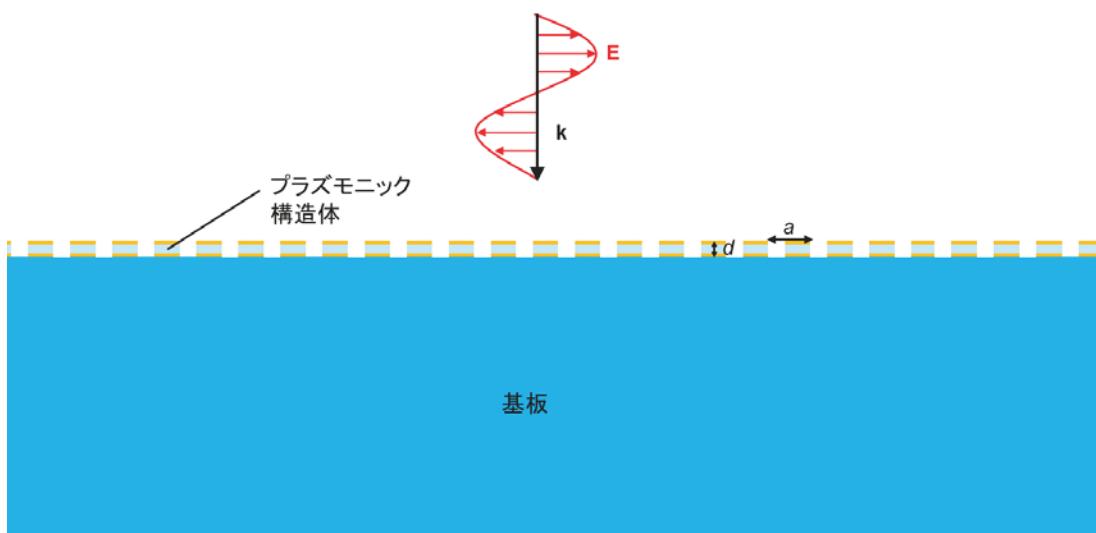


図 1 プラズモニック構造体と入射波長の大小関係.

図 1 で例示したプラズモニック構造体は横方向に周期的で、紙面に垂直な方向に無限に長い 1 次元周期的な構造を模しており、このようなナノ構造体は通常基板上に作製する。周期長 a は光の波長と同程度かそれより短い場合が多く、厚さ d に関しては光の波長の 1/10 程度であることが多い。したがって薄い構造であるが、照射される光エネルギーの数十%から百%をこのナノ構造体で吸収し、局所的な増強電磁場に変換することができる。増強効果は金属内部の伝導電子の集団的な励振状態であるプラズモニック共鳴によって発現する。光エネルギーを特定の位置近傍で使うことを可能にすることから、ラマン散乱などの光散乱増強、光電変換素子の変換効率向上など様々な応用が期待されている。周期系に限定しないプラズモニック構造体を用いた研究分野は「プラズモニクス」と呼ばれて、現在世界中で精力的に研究が行われている。

本稿では最近のプラズモニック構造体の結果から光エネルギー利用に適した具体的な構造をいくつか紹介し（第 2 節）、数値計算を実施する際の実行容量について述べる（第 3 節）。

2. プラズモニック構造体における光エネルギーの利用効率

プラズモニック構造体の反射率や透過率を計算するアルゴリズムやコード自体については本誌上でたびたび報告してきた [4–9] ので繰り返すことは避けるが、フーリエ級数の係数行列に逆積ルールを適用することにより現実的な時間内で計算を実行できる [7]。計算コードの SX-9 上での最適化に関して、ベクトル化率は早い段階から 99% 以上であった。MPI 化による並列化率の向上については昨年本誌上で述べたように所望の成果が得られている [9]。

図 2(a) は金属 (M)、絶縁体 (I) がサンドイッチ状に積層した MIM 構造に空気スリットが入った構造を示している。周期は 830 nm、空気スリットの幅は 200 nm である。金属は金 (Au)、絶縁体はアルミナ (Al_2O_3) として文献値 [10] の誘電率を用いて電磁波散乱行列を数値計算した。

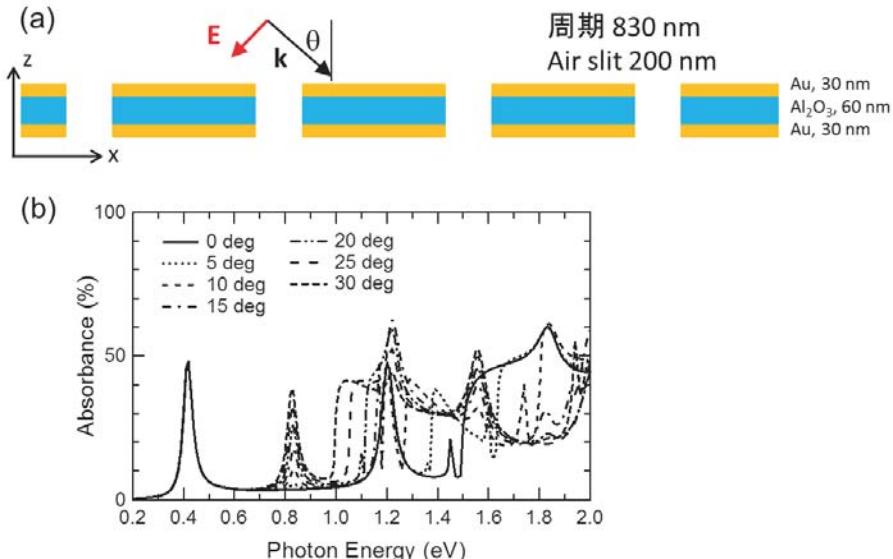


図 2 (a) 1 次元周期の空気スリット貫通型の MIM 導波路構造。基板の図示は省略してある。(b) 入射光角度に依存した吸収スペクトル。

図 2(b) はプラズモニック構造体の光吸収スペクトルを示している。入射平面波の角度 θ を 0 度から 30 度まで 5 度おきに変えて算出したものであり、偏光は図 2(a) に示すように p 偏光である。光吸収 A は

$$A = 100 - \sum_{m,n} (R_{mn} + T_{mn}) \quad (1)$$

によって定義される（単位は%）。ただし、 m 、 n は整数で R_{mn} は mn 次の反射率、 T_{mn} は mn 次の

透過率を表している。00次は通常の反射率、透過率、00次以外は回折光成分に対応する。電磁波散乱行列法が直接算出するのは散乱電磁波成分の R_{mn} , T_{mn} である。エネルギー最低次のピーク(0.42 eV, 波長で 2951 nm)はほとんど入射角度に依存しないが、2次のピーク(0.82 eV, 1511 nm)は角度が大きくなるにしたがって吸収量を増していく特徴がある。とくに入射角度0度で2次共鳴を全く励起ができないことから電磁場分布が非対称なモードであることが分かる。0度入射光は対称な電磁場をもつことから、対称性の不一致で励起できないのである。

図3は空気スリット貫通型のMIM導波路構造における最低次モードの電磁場分布を可視化した結果である。図3(a)は電場分布を示しており、カラープロットは電場強度(絶対値)、赤矢印は電場ベクトルのスナップショットを示している。主に増強されているのは金属に挟まれた空気スリット部分であり、絶縁体層にも電場分布が存在していることが分かる。白矢印で示すように入射光は0度入射(垂直入射)であるが、絶縁体層内の電場ベクトルは入射電場が90度回転した向きになっている。

図3(b)は図3(a)と対応する磁場分布を示している。カラープロットが磁場強度(絶対値)を示している。磁場は金属で挟まれた絶縁体層部分に局在し、なおかつ増強されている。この例では10倍程度の増強効果がある。磁場ベクトルの向きは紙面と垂直である。

以上のように電磁場エネルギーはプラズモニック構造体内部および近傍に強く局在し、かつ入射光強度とカラープロットを比べると増強されていることが分かる。光を局所的な増強電磁場に変換している典型的な分布を図3は示している。高次の共鳴状態については電磁場分布がより複雑なパターンを示す。なお、電磁場分布の可視化には有限要素法を援用した[11]。

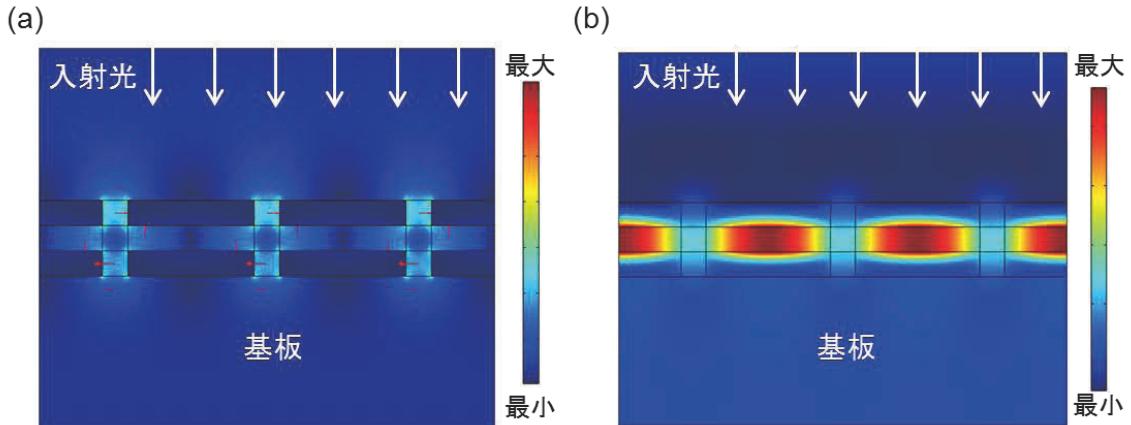


図3 空気スリット貫通型のMIM導波路構造の最低次共鳴。(a) 電場成分。(b) 磁場成分。

図4(a)のプラズモニック構造体はMIM導波路構造を基にしている点で図2(a)の構造と共通しているが、最表層のみが1次元周期的になっている点が異なる。周期は830 nm、空気スリットは200 nmである。金属層、絶縁体層の厚さも図2と共通である。

図4(b)には入射p偏光下の吸収スペクトルを示している。入射角度は0度から30度まで5度刻みで変えて計算した。この構造では光吸収量が図2(b)と比べて増加している。最大値で90%を超えるモードも存在し、光エネルギー利用がより効率的な構造であることが分かる。最低次と2次の共鳴モードについては定性的な振る舞いは図2の空気スリット貫通型と同様であり、最低次が対称モード、2次が非対称モードである。3次以上のモードに関して、入射光角度依存性が顕著でスペクトルが大きく変化することは回折光チャンネルが許容になることと対応している。回折光が入射角度に依存して色が変わることは目で見て確認できるが、共鳴モードの入射角度依存性を反映した現象である。

構造によって光吸収量にこのような違いがあることはプラズモニック構造体に局在する電磁場が主に絶縁体層に存在することを示唆している。図2の空気スリット貫通型では絶縁体層が周期

的に切り離されていたため、光の逃げが起こりやすく、結果として光吸収量が低いと考えられる。

以上のように構造が少し異なることで光学応答や光吸収が定量的に大きく変化することがプラズモニック構造体の面白さの一つである。それだけに構造設計には精度が求められ、SX-9のようなスーパーコンピュータで計算を実行することが必要となってくる。

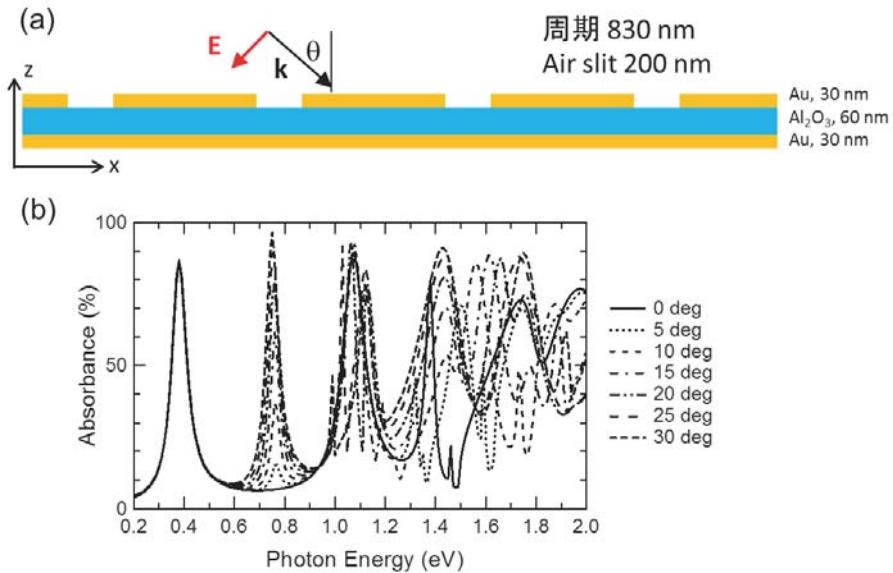


図4 (a) 最表層のみが1次元周期をもつMIM導波路構造。基板の図示は省略してある。(b) 入射光角度に依存した吸収スペクトル。

図5(a)はMIM導波路構造に2次元正方格子状に周期構造を導入したプラズモニック構造体を模式的に示している。金属層、絶縁体層の厚さは図2、図4と共に共通である。周期は830 nm、円孔直径は400 nmである。

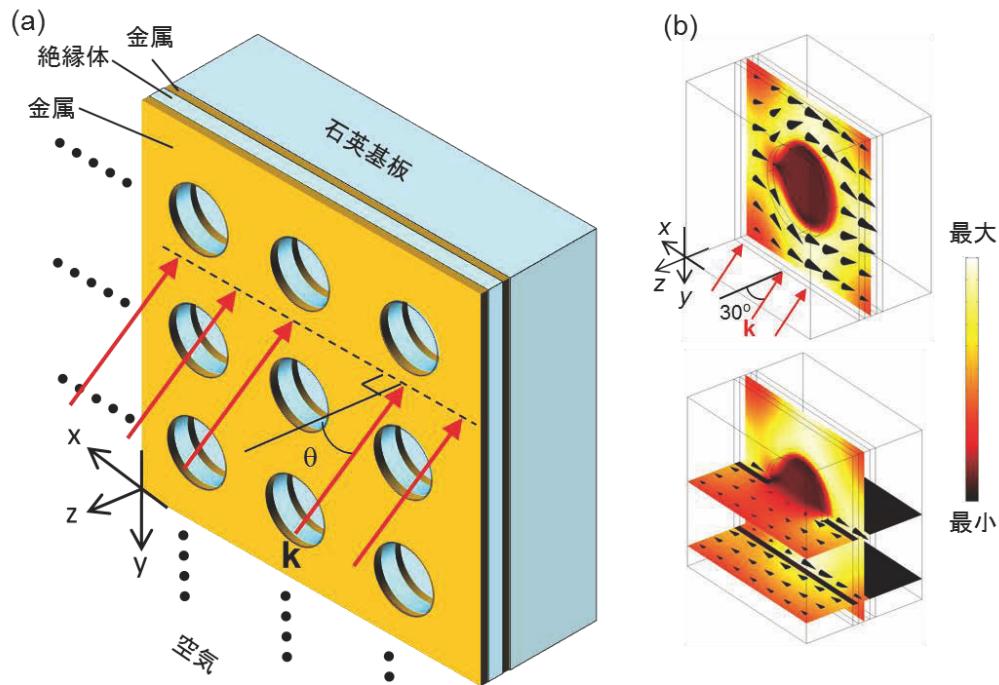


図5 (a) 2次元的な空気円孔配列を導入したMIM導波路構造。(b) 最低次モードを励起したときの電磁エネルギー密度流。

図 5(b) は最低次の共鳴状態を斜め入射下で励起したときの電磁エネルギー密度流を可視化したものである。この場合も図 3 と同様に絶縁体層に電磁エネルギーが集まり、伝搬する。伝搬の向きは黒い三角矢印で示している。下の水平断面から分かるように入射平面波の電磁エネルギーは $+x$ の向きに照射されているが、絶縁体層内では $-x$ の向きに流れている。つまり、入射光と逆向きの電磁波の流れが励起されている。これは負の群速度をもつ平面波モードであることを視覚化した結果である。筆者はこの特徴的な共鳴モードを波数とエネルギーの分散関係から詳しく解析した [13,14]。分散関係は吸収スペクトルの入射角度依存性から求めることができるので、電磁波散乱行列法の数値計算が本質的な役割を果たした成果と言える。

なお、図 5(a) の構造体はフィッシュネット・メタマテリアル [12] と呼ばれているもので、光学領域で初めて負の屈折率をもつとみなせる構造体として大きな注目を集めた。プラズモニック構造体の周期が光の波長よりも 1/2 以下に小さいときには回折光が生じないことから新しい媒体としてメタマテリアルと呼称されている。

3. SX-9 上での数値計算の実行容量

この節では電磁波散乱行列法の数値計算を実行する際に必要となったメモリや計算時間について述べる。

使用するメモリは主にフーリエ展開次数と構造体の単位胞を分割するグリッド数によって決まる [7,9]。1 次元周期系は計算量が少なく、図 2 や図 4 の場合では十分な精度を出すために±75 次程度とればよい。グリッド数も 2 と僅少であるため、必要なメモリは 0.6 GB 程度であった。吸収スペクトルはデータ点を多数回計算して得ており、1 点あたりの計算時間 (SX-9 の出力では Real Time) はジョブクラス s 上で約 3 秒であった。1 次元系だけであればスーパーコンピュータは必要というわけではない。

一方、2 次元系ではメモリ量が激増し、図 5 の場合ではフーリエ次数を xy 方向ともに±18 次までとったときにはメモリ 40 GB 程度、ジョブクラス p16 上で 548 秒／点の計算時間を要した。このときに扱う複素行列は 5476×5476 のサイズであった。同じ計算を MPI 化したコードで実行すると、p64 上では計算時間はほぼ 1/4 になる（ただし、メモリは約 4 倍必要になる）。したがって、2 次元系も含めて高精度かつ速やかな数値計算の実行のためには SX-9 のようなスーパーコンピュータが非常に有効である。

より大きな計算を実行した経験もあり、グリッド数が大きな場合は p16 上でメモリ 840 GB という計算もあった。SX-9 ですらノードメモリの上限に近い。このようにプラズモニック構造体を「解く」には SX-9 クラスの計算リソースが必要であると認識している。

最近では並列コンピュータが主流となってきているが、電磁波散乱行列法では一般複素行列の固有値、固有ベクトルを求める必要があり、この関数を並列化できないと並列コンピュータの長所を生かせない (N 並列なのに 1 CPU だけ稼働して $(N-1)$ CPU は休んでいるという事態に陥る)。幸い ASL 関数では並列版を開発していただいたので、理想的ではないものの並列化率はかなり高い。この点も SX-9 を使用する利点であると考えている。

4. まとめ

プラズモニック構造体の光学特性を解明するために電磁波散乱行列法を使って数値計算を実行した事例を中心に述べてきた。1 次元、2 次元系で全く異なる共鳴モードが発現すること、1 次元系でも単位胞の構造を少しかえると定量的には光吸収に大きな変化が生じることなどを示した。金属ナノ構造の極微細な構造を少し変えるだけで光応答性や共鳴モードが大きく変わることがプラズモニック構造体の醍醐味と言える。それだけに計算精度や構造の詳細を入念に検討する必要があり、大量の数値計算が必要となる。プラズモニック構造体を電子素子などと組み合わせるとさらに大きな計算となり、それらが今後の対象となっていくと考えている。

謝辞

本研究における計算コードの並列化チューニングは東北大学サイバーサイエンスセンターの助力を得て行うことができました。MPI 化の実装は SX-9 開発元 NEC のご協力を得て、東北大学サイバーサイエンスセンターと共同で実施したものであり、関係各位にこの場を借りて厚くお礼を申し上げます。また、本研究の一部は科学技術振興機構さきがけの支援を受けて行われました。

参考文献

- [1] L. Li, “New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings,” *J. Opt. Soc. Am. A* **14** (10), 2758–2767 (1997).
- [2] 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).
- [3] H. Hertz, *Electric Waves*, translated ed. (Dover, New York, 1962).
- [4] 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).
- [5] 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).
- [6] 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).
- [7] 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).
- [8] 岩長祐伸, 「積層プラズモニック結晶における光機能性発現」 *SENAC* **44** (2), 49–56 (2011).
- [9] 岩長祐伸, 「金属ナノ構造を含む一般フォトニック結晶の光学応答計算コード MPI 化による高速化」 *SENAC* **45** (3), 9–16 (2012).
- [10] A. D. Rakic, 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).
- [11] COMSOL Multiphysics, <http://www.comsol.com>
- [12] S. Zhang, W. Fan, N. C. Panoiu, K. J. Malloy, R. M. Osgood, and S. R. J. Brueck, “Experimental Demonstration of Near-Infrared Negative-Index Metamaterials,” *Phys. Rev. Lett.* **95** (13), 137404 (2005).
- [13] M. Iwanaga, “First-principle analysis for electromagnetic eigen modes in an optical metamaterial slab,” *Prog. Electromagn. Res.* **132**, 129–148 (2012).
- [14] M. Iwanaga, “Photonic metamaterials: a new class of materials for manipulating light waves,” *Sci. Technol. Adv. Mater.* **13** (5), 053002 (2012).

[報 告]

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第5回シンポジウム 報告

江川 隆輔

スーパーコンピューティング研究部

平成25年7月11日、12日の両日、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第5回シンポジウムが、東京品川The Grand Hallにおいて開催されました。

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究は、東北大学、北海道大学、東京大学、東京工業大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学にそれぞれ附置するスーパーコンピュータを持つ8つの共同利用の施設を構成拠点とする「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」が、超大規模数値計算系応用分野、超大規模データ処理系応用分野、超大容量ネットワーク技術分野、およびこれらの技術分野を統合した大規模情報システム関連研究分野、更には分野間に亘る複合分野の研究者らと取り組む学際的な共同利用・共同研究です。この取り組みにより我が国の学術・研究基盤の更なる高度化と恒常的な発展が大いに期待されております。平成22年度は37件、平成23年度には39件、平成24年度には44件の課題が学際大規模情報基盤共同利用・共同研究として採択されており、そのうち当センターとの共同研究課題は、平成22年度4件、平成23年度は6件、平成24年度は6件ありました。

本シンポジウムでは、昨年度採択された35件に及ぶ研究課題の成果発表、および今年度採択された44件の研究課題のポスター発表を通して積極的な議論が交わされたばかりでなく、拠点および拠点を構成する各センターにおけるそれぞれの共同研究への取り組みを確認することができました。本報告では、今年度の東北大学との共同研究として採択された課題のうち以下に示す課題のポスターを転載致します。来年度も引き続き、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点の研究公募を行う予定であります。ご興味のあるかたは奮ってご応募ください。また、応募に際して不明な点などあります場合は、お気軽に当センターまでお問い合わせください。

【平成25年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点における当センターとの共同研究課題】

- ・球座標系2.5次元差分法による地球・火星・月の全球地震波伝播モデリング

研究代表者 豊国源知（東北大学）

- ・核融合炉先進ブランケットデザイン条件における高精度MHD熱伝達データベースの構築と乱流モデリング

研究代表者 山本義暢（山梨大学）

- ・大規模シミュレーションによるメタマテリアルを用いたプラズモンポラリトン技術の開発とその応用に関する研究

研究代表者 有馬卓司 (東京農工大学)

- ・機能性界面の大規模第一原理計算手法の開発と応用

研究代表者 森川良忠 (大阪大学)

- ・機械工学分野におけるシミュレーション科学の新展開

研究代表者 滝沢寛之 (東北大学)

- ・次世代ペタスケールCFDのアルゴリズム研究

研究代表者 佐々木大輔 (金沢工業大学)

球座標系2.5次元差分法による地球・火星・月の全球地震波伝播モーデリング



1. 研究の目的

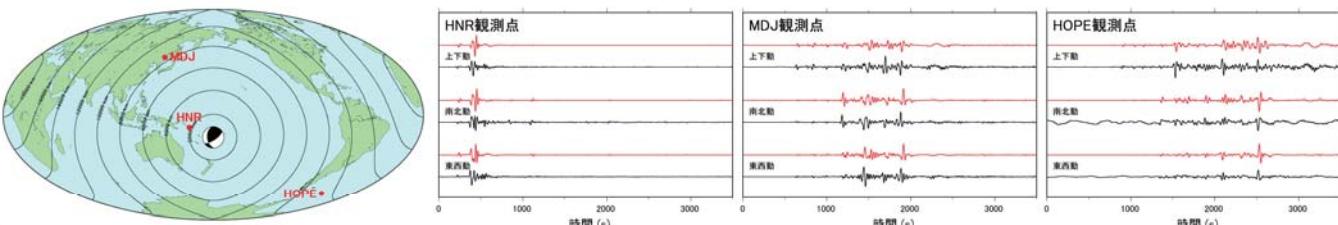
本課題では、既存の地球・火星・月の内部構造モデルと震源に関する情報を用いて、これらの天体の内部を伝播する地震波を、高周波数まで精度よく決定することを第一の目的とする。また3天体におけるシミュレーション結果を比較検討することで、それぞれの天体の地震波伝播の特徴を抽出することを第二の目的とする。

火星や月では1960～70年代に地震計による観測が行われたが、データの質や観測点分布の偏りのために地震波伝播には不明な点が多い。現在はこれらの天体で再度地震探査を行う計画が各国で進められている。本課題では現在までに得られている天体内部構造や震源の知識を活用し、現実的な全球波動場のシミュレーションで各天体の地震波動場の特徴を予測する。これにより、従来の観測の欠点を補完し、将来の地球外地震探査へ向けた機器開発、観測計画への指針を与えられると期待される。

2. モデリング手法 「球座標系2.5次元差分法」

本課題で利用する計算手法は、研究代表者らがこれまで開発を行ってきた、全球地震波伝播を精度と効率よく計算する手法「球座標系2.5次元差分法」である。2.5次元計算とは、媒質の2次元構造断面上で3次元の波動場を計算する方法であり、球座標系を用いたグローバルな地震波伝播計算の場合、通常の3次元計算の1万～10万分の1の計算資源で現実的な波動場を計算できる。図1は、2009年11月9日にフィジーで発生した地震(Mw7.3、震源の深さ604 km)について、3つの観測点で記録された観測波形と、2.5次元計算による理論波形を比較した結果であり、両者がよく一致していることから本手法の計算精度が確認できる。

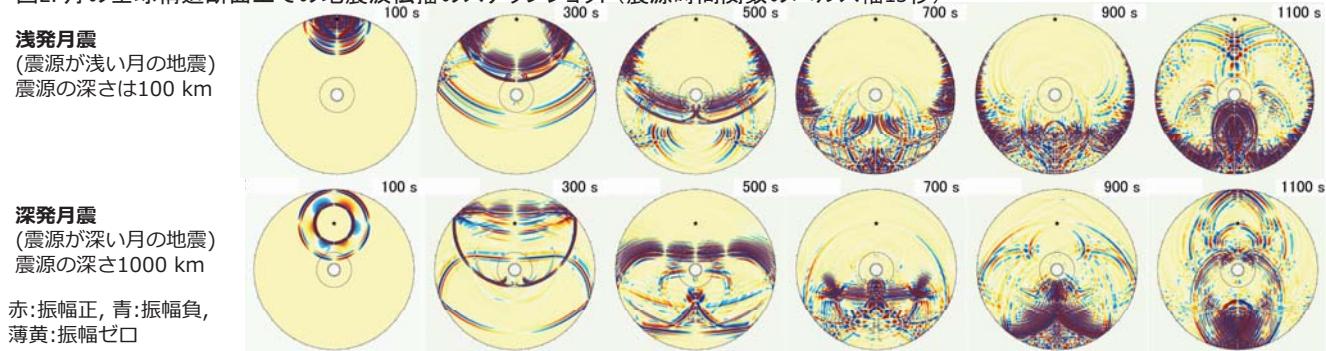
図1. 球座標系2.5次元差分法による3観測点での理論波形(赤線)と観測波形(黒線)の比較。観測点分布は左図に示した。



3. これまでの研究成果：月の地震波伝播シミュレーション

図2は研究代表者らがこれまで東北大学サイバーサイエンスセンターのSX-9を利用して行った、周期15秒での月の地震波伝播シミュレーションの結果である。月の断面を伝わる地震波の様子を、地震発生後100秒から200秒おきに描いたものであり、色の濃い部分が地震の振幅が大きい場所を表す。震源の深さを変えて2通りのシミュレーションを試み、震源が浅い場合には月面での振動が非常に長く続くという、これまでの観測から得られた月の地震の特徴の再現に成功した。

図2. 月の全球構造断面上での地震波伝播のスナップショット(震源時間関数のパルス幅15秒)



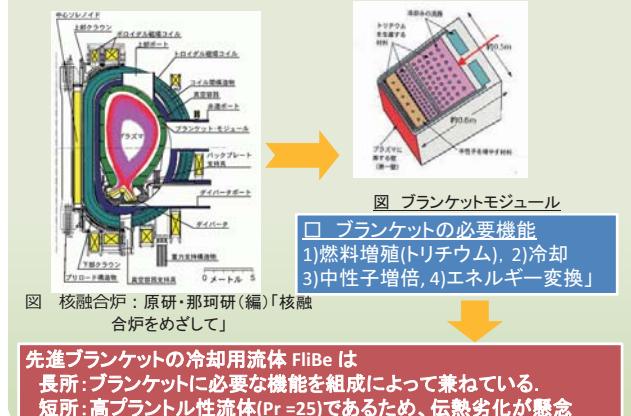
4. これから的研究計画

現実的な地震波シミュレーションのためには、周期2秒程度の短周期まで計算を行う必要がある。周期2秒の場合、月の計算では上で示した計算例の約60倍のメモリーと、400倍の計算時間が必要となる。本課題ではプログラムのチューニングとMPI化を進め、SX-9の4ノード64CPU(ジョブクラスp64)を利用した計算で、月では周期2秒、火星では周期4秒、地球では周期8秒までの現実的な地震波伝播計算を行う予定である。

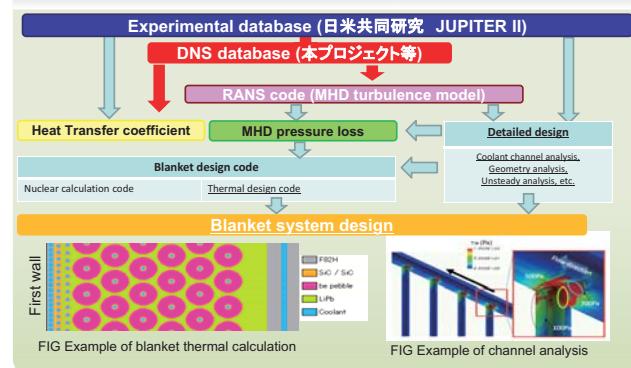
核融合炉先進ブランケットデザイン条件における 高精度MHD乱流熱伝達データベースの構築と乱流モデリング



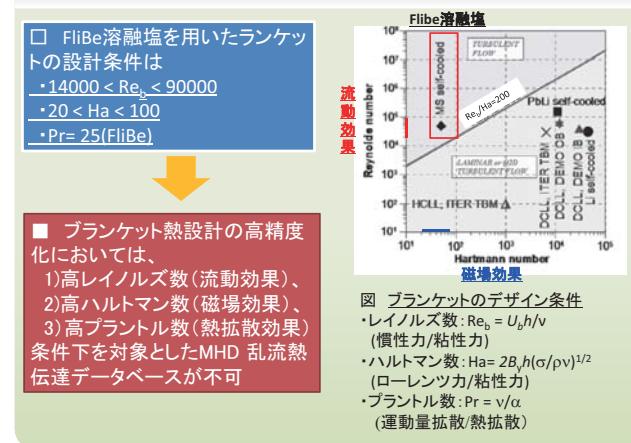
1. 核融合炉・ブランケット



2. ブランケット熱設計



3. ブランケットデザイン条件



4.DNSデータベースの構築とMHD乱流モデリング

■ 現在までに、速度場を対象としたDNSデータベースの構築に成功

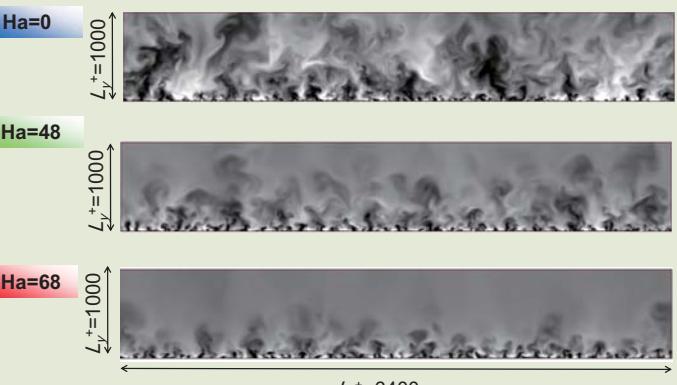
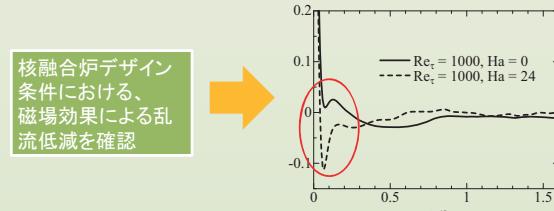


図 主流変動速度のコントラスト
 $-4(\text{black}) < u^+ < 4(\text{white})$, DNSデータベース: $Re_b = 40000$, $Ha = 0, 48, 68$

- 高レイノルズ数条件特有の大規模構造を確認
- 磁場下では、大規模構造の縮退を確認
- 磁場下では、2点間相関に負の相関が出現

→磁場効果のスケーリングと乱流モデル開発における重要な知見



■ MHD乱流モデリング

図 スパン方向への2点間相関

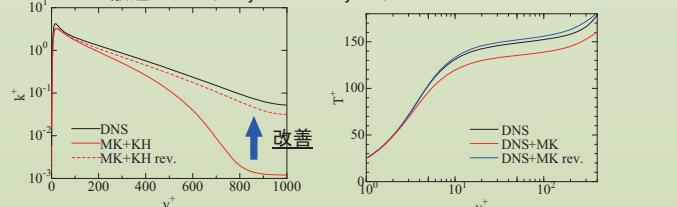
口磁場下のスケーリングパラメータ:

磁場の影響によって、乱流スケールが縮退することから内層乱流構造の強度とスケールをレイノルズ応力の勾配に基づいたレイノルズ数(実効レイノルズ数)をスケーリングパラメータに用いたMHD乱流モデルを開発

■ベースとしたMHD乱流モデル

MK: 低レイノルズ型k-eモデル(Myong & Kasagi)

KH: MHD散逸モデル(Kenjere & Hanjalic)



■ DNSデータベースを用いたMHD乱流モデリングを改良し、予測精度の大幅な向上を達成(DNSデータベースとの誤差は5%以内)

大規模シミュレーションによるメタマテリアルを用いたプラズモンポラリトン技術の開発とその応用に関する研究



1. 背景・目的

メタマテリアルとプラズモンポラリトン

メタマテリアル

電磁界に対する新媒質であり、これまで自然界では見つかっていない特性を示す。周期構造で作製される。

新しい電気特性とは…

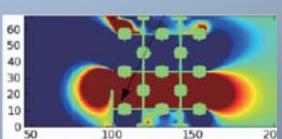
- ・負の透磁率
- ・磁壁
- ・負の誘電率
- など
- ・負の屈折率



写真：代表的なメタマテリアル

プラズモンポラリトン

波長よりも小さな電界が局在する。波長より小さい電界を応用することにより高分解能センサー等への応用を期待。これは負の誘電率を持つ媒質の表面に発生する。



プラズモン解析イメージ

本研究の目的

マイクロ波領域においてプラズモンポラリトンの実用化

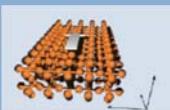
2. 研究内容

構造の開発から基礎技術および応用技術までの一貫した研究を行う

大型計算機



構造の開発



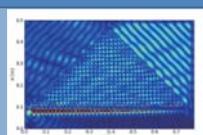
プラズモンポラリトン生成に必要なメタマテリアルの開発を行う。メタマテリアルは周期構造で構成される。

プラズモン生成法の確立



プラズモンを発生させるには、励起方法に工夫が必要であり効率的な歴方法はまだ解明されていない。

応用法の開発



シミュレーションを通してマイクロ波領域におけるプラズモンポラリトン現象の応用技術の開発を行う。

これらすべてを大型計算機で効率的に行う

3. 予想される成果

・電波技術の進歩

モールス信号・ラジオ・TV放送（アナログ・デジタル）・レーダ・医療応用・WIFI（無線LAN）・携帯電話・ETC・携帯電話



電波で便利になった生活。
未来は？

未来は開発技術の更なる応用で
もっともっと便利になる。

本研究で開発する技術の応用でさらに便利な社会を目指す。

森川良忠、稻垣耕司、小野倫也、木崎栄年（阪大院工）、濱田幾太郎（物材機構）
小林広明、江川隆輔、小松一彦（東北大サイバー）、柳澤将（琉球大理）



機能性界面の大規模第一原理計算手法の開発と応用

本研究では、酸化物触媒表面や界面、水/半導体界面、有機デバイス界面等、半導体デバイスや燃料電池、二次電池、触媒等の応用上重要なまでの界面における原子構造や電子構造、および、反応過程を出来る限り現実に近いモデルを用いて精度の高い第一原理シミュレーションを行い、その特性を支配する要因を明らかにすることを目指す。それによって、現象の背後にある原理を解明するのみならず、それらの知見を生かして、より有用な界面を計算機シミュレーションによりデザインする指針を与えることを目指す。

First-Principles analysis of CARE process of GaN - Initial stage of etching process -

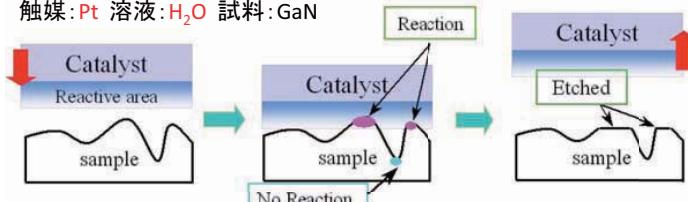
Mari Oue, Kouji Inagaki, Kazuto Yamauchi and Yoshitada Morikawa

Department of Precision Science and Technology, Graduate School of Engineering, Osaka University

Introduction / Catalyst referred etching(CARE)

水中でGaNにPt等を接触させると平坦化加工ができる
結晶性の良いステップ-テラス構造を得られる

触媒: Pt 溶液: H₂O 試料: GaN

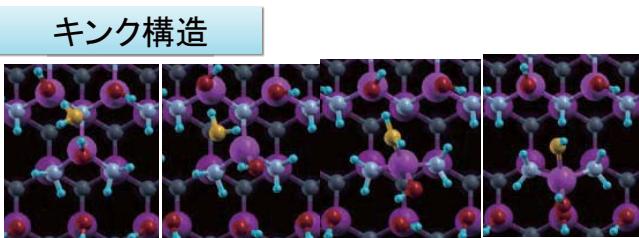
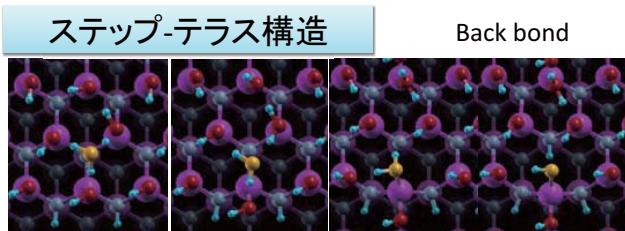


Ref. J. Murata et al, J.Cryst.Growth. 310(2008)1637.
J. Murata et al, Jpn.J.Appl.Phys.48(2009)121001.

問題点
加工速度が遅い



結果



Calculation method and model

STATE (Simulation Tool for Atom TEchnology)

○ 密度汎関数法(DFT)

○ GGA-PBE汎関数

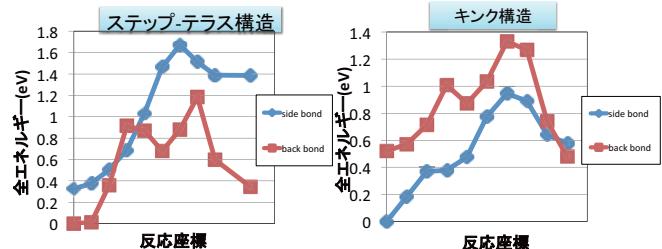
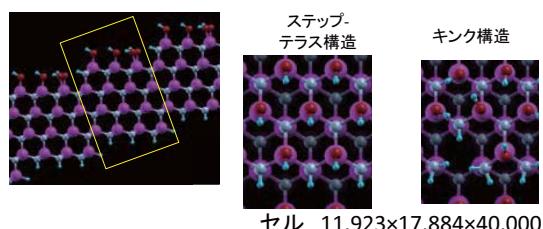
○ ウルトラソフト擬ポテンシャル

○ 平面波展開法

○ Climbing image NEB

(Nudged elastic band) 法

Ref. Henkelman et al,
J. Chem. Phys. 113, 9901 (2000)



Conclusion

- ステップ-テラス構造、キンク構造共にback bondへの解離吸着の反応障壁が低く、終状態は安定化した
 - キンク構造の方がステップ-テラス構造よりも反応障壁は低かった
- 今後の予定
- プロトントリレーを介したH₂O分子の解離吸着について調べる
 - Pt存在下での反応について調べる

13-NA30

滝沢寛之 (東北大学大学院 情報科学研究科)

機械工学分野におけるシミュレーション科学の新展開



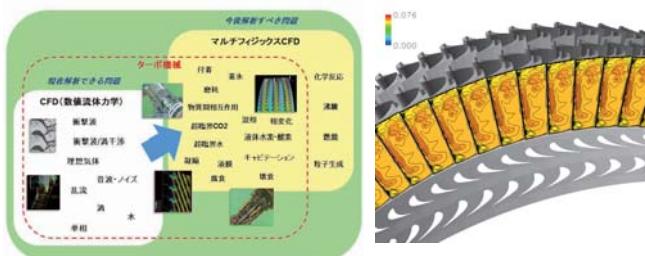
研究目的 機械工学分野では様々な数値シミュレーション技術が研究されているにもかかわらず、そのソフトウェア開発技術やスーパーコンピューター利用技術が共有されているとは言い難い。また、スーパーコンピューターの利用技術は近年ますます高度化しており、機械工学分野の研究者がスーパーコンピューターの演算能力を引き出すために要する労力は年々増大している。本研究の目的は、現在上記の理由からスーパーコンピューターの本格的な利用に至っていない機械工学分野の先進的・萌芽的な数値シミュレーションを対象とし、スーパーコンピューターを有効利用した場合の性能向上とさらなる高度化・高性能化に必要な課題を明確にすることである。

研究計画 スーパーコンピューターの利用によってさらなる発展を期待できる機械工学分野の数値シミュレーションを選定し、どの程度の高度化・高性能化を期待できるのかを定量的に評価する。平成25年度前半には研究室で利用されている以下の4つの数値シミュレーションをスーパーコンピューターで実行してその性能評価を行い、研究室のパソコンレベルの計算能力からスーパーコンピューターレベルに移行することで期待できる研究成果と、それに要する開発コストの見積りを行う。平成25年度後半には、その中でも特に高性能化が期待できるプログラムを開発コストも考慮して選別し、東北大学サイバーサイエンスセンターのSX-9システム向けに並列化・最適化を行って機械工学分野での成果に貢献することを計画している。

発電機器の安全・安心設計に資する熱流動シミュレーション

安全性の高い発電機器を設計することは、電力の安定供給のために必要不可欠である。発電機器における破壊や損傷による熱流動を把握し、安全でかつ高効率な発電機器を開発するためには、複雑な非定常熱流動を数値流体シミュレーションに基づき解明する以外に有効な手段がなく、スーパーコンピューターの高い演算性能が必要である。

本研究では、計算能力の制約から従来困難であったターピン多段流路を用いた非常常3次元の大規模熱流動シミュレーションを、SX-9を用いた大規模並列計算により実現する。また、ターピン効率が向上するターピン翼形状を見出すために、翼形状を変化させたパラメトリック計算を実行する。さらに、ターピンを通る超臨界流体の流体化学的特性をマルチフィジックス数値シミュレーションにより明らかにする。

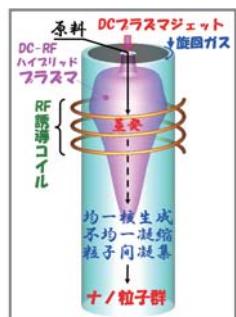


プラズマによるナノ粒子創製システム

右図に示すように、プラズマ流を用いたナノ粒子創製プロセスは、原料を瞬時に蒸発させることから始まる。原料の蒸気は流れによりプラズマ末端部へと運ばれ、そこで温度低下に伴う飽和蒸気圧の急激な減少により、過飽和状態に陥る。この状態は不安定であるため原料は気体の状態を保てず、分子は衝突しあい核を形成し（均一核生成）、その核に蒸気が凝縮する（不均一凝縮）。ここで、ナノメートルスケールの粒子が成長する。これがナノ粒子生成の基本的な機構であるが、加えてナノ粒子同士の衝突・合体（粒子間凝集）も粒子成長過程に寄与する。プラズマ流は、以上のプロセスを一つのステップで実現できるため、効率的なナノ粒子量産システムとみなすことができる。

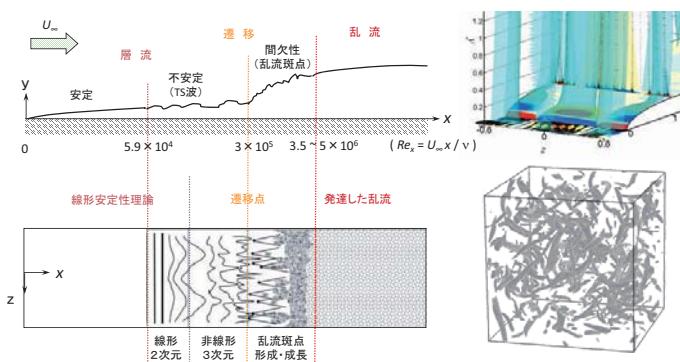
しかし、プラズマ流は強い発光を伴う高温の電磁熱流体であり、また原料の蒸発過程やナノ粒子の形成過程はわずか数ミリ秒の間に完了してしまうため、実測による定量評価は困難を極める。さらにプラズマプロセスにおけるナノ粒子群形成過程の詳細なメカニズムは依然として解明されていないため、求められる粒径や組成を持つナノ粒子を創製するためにはエンジニアの経験に頼らざるを得ず、加えて莫大な時間とコストを要することも問題となつている。

そこで本研究では、上記のような時間・空間とともにマルチスケールかつ複雑な多数の物理プロセスからなるシステムの数理モデルを包括的に構築し、詳細な解析を行うことで、ナノ粒子群形成機構やプラズマ流の複雑熱流動場との干渉現象を解明するのみならず、コンピュータ上で仮想的な実験を低成本で遂行する。



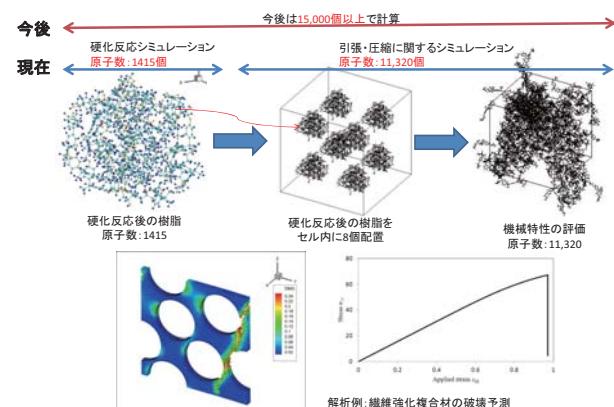
平板境界層の前縁受容性に着目した乱流遷移過程の解明

境界層の乱流への遷移は、一様流中に含まれる外乱が境界層がでかまじめの前縁部近傍で境界層内に入り込み、下流域で成長した結果引き起こされる。一般に受容された変動は極めて微小なため、実験による計測是不可能で、数値計算による現象の解明が期待されている。しかし、変動の成長と組織的な渦構造の発現を捉えるには、十分な計算領域と格子解像度を確保する必要がある。本テーマでは、外乱の受容から成長、そして乱流遷移に至る一連の過程をスーパーコンピュータにより再現し、その物理的な機構を解明することを目指している。



複合材料の破壊に関するマルチスケールシミュレーション

分子シミュレーションによるマトリクス樹脂の機械特性に関する数値シミュレーションを行う。また、複合材の破壊予測を目的として、強化繊維（粒子）及びマトリクス樹脂からなる微視構造モデル（周期セルモデル）を有限要素解析する。樹脂に損傷力学を適用することで、マトリクスクラックの発生を予測する。



期待される成果

機械工学分野の数値シミュレーションの高速化支援のためには、実用的なシミュレーション規模での性能評価が必要不可欠であり、そのための計算資源が必要不可欠である。特に萌芽的研究の段階では、並列化を考慮せずにプログラム開発されてきたコードが多いため、SX-9のように比較的大きな計算ノードで実行できるシステムが有用である。また、東北大学サイバーサイエンスセンターでは、長期にわたって継続的に利用者のアプリケーションの高速化支援を行ってきた実績がある。本研究においてもこれまで蓄積してきたノウハウを十分に活用して萌芽的研究を支援し、機械工学分野での成果につなげる。さらには、本研究を計算機科学者と計算機科学者との効率的な連携のモデルケースとし、そのような連携を支援する基盤ソフトウェアの開発に向けた課題やその必要要件を探る。

年	1997	1998	1999	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012
件数	2	8	8	9	10	7	18	20	8	16	10	15	8	8	13	6
平均ベクトル化性能向上比	1.9	46.7	4.5	2.5	1.6	2.2	6.7	2.9	1.3	2.9	33	9.4	381	47	16.2	19.7
平均並列化性能向上比	11.1	18.4	31.7	8.6	4.9	2.8	18.6	4.5	5.3	8.1	1.9	5.1	3.6	48	17.2	15.3

次世代ペタスケールCFDのアルゴリズム研究



研究背景及び目的

- ◆ 大規模並列計算機の性能をフルに活用できる次世代CFDの実用化を目指す。
- ◆ 航空機をはじめとする流体機械の高性能化と環境適合化が実現できる革新的な設計を可能にする。

90年代～現在

超並列計算機時代

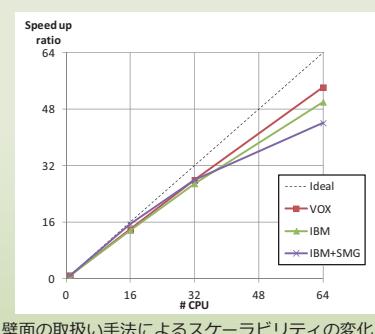
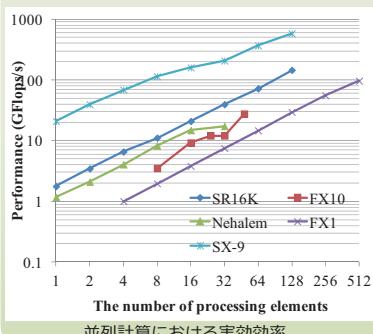


今年度の研究及び研究体制

- 数値流体力学の研究グループ（金沢工大、東北大、東海大、JAXA）及び計算機科学の研究グループ（東北大・サイバー、名大・情報基盤）による共同研究・開発体制
- ◆ ペタスケール向けの超並列化技術開発
 - ◆ ペタフロップス級高解像度流体計算のアルゴリズム開発
 - ◆ 多分野連成や大規模流体解析などの応用工学問題への適用

大規模並列計算に向けた技術開発

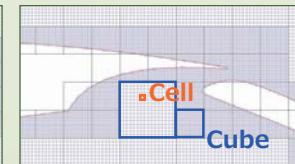
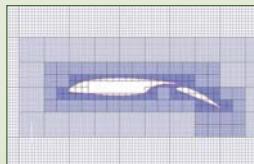
- ◆ 通信遅延の隠蔽手法の導入による並列性能の向上
- ◆ 壁面境界条件を考慮した負荷分散の均一化



計算手法

Building-Cube法 (ブロック型直交格子法)

- ◆ 等間隔直交格子法に基づく手法
- ◆ 多数の小領域Cubeによる領域分割
- ◆ 全てのCubeで等価な計算負荷
- ◆ 高速オバストな格子生成
- ◆ 高解像度解法を容易に構築可能
- ◆ 簡易なデータ構造とアルゴリズム

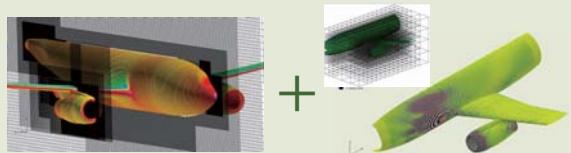


計算領域はCubeに分割され、各Cube内に同数のCellが生成される

F1の格子 (8億点格子)
(最小格子幅は実車サイズで約3mm)

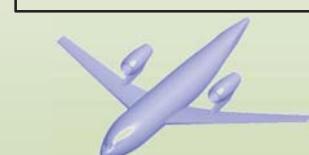
大規模並列解析による革新設計

- ◆ 流体解析と音響解析のカップリングによる空力騒音解析の実現 (流体音響連成解析)



航空機全機モデルの流体解析 + ファン (エンジン) 騒音の音響伝播解析

従来と形状の異なる低騒音航空機の設計



Over-The-Wing-mounted 形態



Hybrid Wing Body形態

サイバーサイエンスセンターオープンキャンパス報告

小松 一彦

スーパーコンピューティング研究部

東北大学では、2013年7月30日と31日の2日間に渡り、オープンキャンパスを開催いたしました。大学や大学院への進学を考えている学生や東北大学での行っている研究や活動に興味・関心を持って頂いている一般の方々に、年に1回開催されております。サイバーサイエンスセンターでは、全国の研究者の大規模科学技術計算を支えるスーパーコンピュータや並列コンピュータ、東北の大学ネットワークを支えるネットワーク機器、大規模計算機の歴史的資料を展示しているコンピュータ博物館を一般に公開しました。また、ネットワーク研究部、スーパーコンピューティング研究部、先端情報技術研究部の研究活動や研究成果の展示を行いました。

近年、テレビなどにも当センターの活動が取り上げられるなど、スーパーコンピュータへの関心も高く、学生達だけでなく一般の方も多く訪れ、今年度も1000人以上の方々にご来場いただきました。コンピュータ博物館では、歴史的価値の高いこれまでの利用してきた実物のスーパーコンピュータやネットワーク機器、それらの部品、資料などを見学して、スーパーコンピュータの歴史をたどっていただきました。また、普段目にする機会が少ない運用中のスーパーコンピュータと並列コンピュータを直接見学して頂き、スーパーコンピュータの大きさ、コンピュータを冷却するための冷風やその音の大きさを肌で感じていただきました。スーパーコンピュータの用途や重要性を、研究成果をもとに説明し、私達の実生活にどのように役立っているのかを知っていただきました。研究開発部の展示では、研究室の研究活動や研究活動に関する話だけでなく、大学生活や大学での講義、入試対策などについても、職員や大学院生、学生と交流しておりました。来年度のオープンキャンパスも一般に公開する予定ですので、みなさまのお越しを心より、お待ちしております。



[報告]

林優一准教授、本間尚文准教授、水木敬明准教授、青木孝文教授、曾根秀昭教授の研究グループが 2013 IEEE EMC International Symposium on Electromagnetic Compatibility・Best Symposium Paper Award を受賞しました

サイバーサイエンスセンターの水木敬明准教授、曾根秀昭教授情報科学研究科の林優一准教授、本間尚文准教授、青木孝文教授が 2013 IEEE EMC International Symposium on Electromagnetic Compatibilityにおいて Best Symposium Paper Award を受賞しました。

受賞論文名 : Map-based Analysis of IEMI Fault Injection into Cryptographic Devices

著者 : 林優一, 本間尚文, 水木敬明, 青木孝文, 曾根秀昭

菅沼拓夫教授らの研究グループが 2013 IEEE Global Conference on Consumer Electronics (GCCE 2013)・Excellent Paper Award を受賞しました

サイバーサイエンスセンターの菅沼拓夫教授、電気通信研究所の白鳥則郎客員教授、和泉諭研究員らの研究グループが、2013 IEEE Global Conference on Consumer Electronics (GCCE 2013)において Excellent Paper Award を受賞しました。

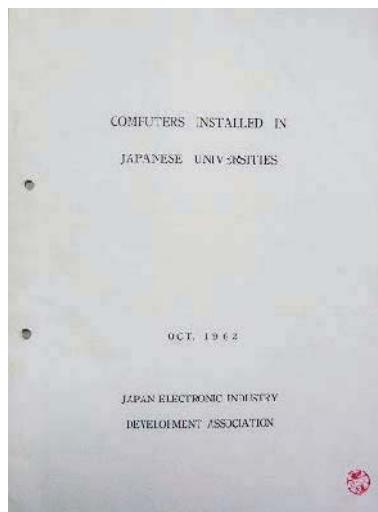
受賞論文名 : G-MIB: Green-oriented Management Information Base and Its Standardization in IETF

著者 : Satoru Izumi, Naoki Nakamura, Hiroshi Tsunoda, Masahiro Matsuda, Kohei Ohta, Takuo Suganuma, Glenn M. Keeni, Norio Shiratori

[展示室便り⑩]

1960 年代の計算機に関する資料

今回は、1960 年代の国内外の計算機や計算機センターに関する冊子、パンフレット、カタログなどについて紹介します。これらの資料は、1960 年代に東北大学の計算センターに携わっていた教職員が蒐集し保存されていたものです。



University Location	Chuo University 2-1, Koishikawa, Bunkyo-ku Tokyo	Hitotsubashi University Kunitachi
Computer Model	NEAC-2101	Burroughs E101
Installation Number	1	
Specification		
Manufacture	Nippon Electric Co., Ltd.	Burroughs Corp.
Major Elements	Transistor	Vacuum Tube, Diode
Clock Pulse	Synchronous, Serial, Cl 192 KC	
Program System	Stored Program	Pinboard
Address System	1/2 (43)	
Index Register	3	
Decimal Point	Fixed, Floating	Fixed
Word Size		

展示品 1 COMPUTER INSTALLED IN JAPANESE UNIVERSITIES の表紙と内容の一部

展示品 1 は、[COMPUTER INSTALLED IN JAPANESE UNIVERSITIES] で、JAPAN ELECTRONIC INDUSTRY DEVELOPMENT ASSOCIATION から 1962 年に発行されています。内容は、国内の大学とそこに設置してある計算機の性能／構成が記載されています。大学は、

会社名	計算機システム 名前(機種名)	頁
富士通株式会社	FACOM-222	1
	FACOM-331	✓
日本電気株式会社	NEAC-2206	✓
	NEAC-2230	2
松下電器日立製作所	HITAC-3010	2
	HIPAC-103	2
東京芝浦電気株式会社	TOSBAC-4200	3
沖電気工業株式会社	OKIAC-5090	3
	OKIAC-5090H	3
三菱電気株式会社	MELCOM-1101D	4
船下道信機械株式会社	MADIC-III	4
近畿電気機械株式会社	HOC-510	4
International Business Machines Corporation	IBM 1400	5
	IBM 1410	5
	IBM 7074	5
	IBM 7094	6
Remington Rand	USS I	6
	UNIVAC II	6

展示品 2
電子計算機性能一覧表の表紙と 1 ページ目

中央、一橋、北海道、金沢、慶應、甲南、神戸、京都、九州、名古屋、日本、岡山、大阪、東海、東京、東北、早稲田、広島の 18 校です。計算機を保有していた大学のほとんどが載っているのではないかと思われますので、当時の大学の計算機環境を知ることができますので、現では計

展示品 2 は「電子計算機性能一覧表」です。東北大学計算センターが作成したもので、1 ページ目には国内外の 13 メーカ名と機種の一覧が載っています。現在では計

算機メーカとして知られてない社名もあります。この冊子は計算センターでの機種選定等のために作成された資料ではないかと思われます。



展示品3 大学／研究所の計算センターのパンフレット

展示品3は、「大学／研究所の計算センターのパンフレット」です。中に掲載されている写真から当時の計算機室の様子が分かります。



「東京大学計算センターのしおり」より

展示品のタイトル、発行者、発行年は次のとおりです。

計算センターのしおり 東京大学 1962

KDC-I 使用申込みのしおり 京都大学 1961

京都大学計算センター 京都大学 1965

電子計算機センター 東海大学 1961

電子計算機室要覧、電子計算機室案内 甲南大学 1963

科学用計算機 FACOM-201 東京理科大学 発行年不明

計算センターニュース NO.2 法政大学 1966

航技研ニュース NO.15 (計数型電子計算機設備完成す) 航空技術研究所 1960

航空技術研究所 航空技術研究所 1961



展示品4 大学以外のパンフレット

展示品4は、「大学以外の計算機センターのパンフレット」です。展示品のタイトルと発行者は次のとおりです。どのパンフレットも発行年が記載されていませんでした。

電子計算機センター 日本電子工業振興協会

電子計算案内 日本電子計算センター(株)

富士電算機センター 富士通信機製造(株)

IBM 計算センター 日本アイ・ビー・エム(株)

機械室概要 東北機械計算(株)



展示品 5 は計算機メーカーのニュースです。FACOM（1963～1966）、UNIVAC（1962～1965）、CONTROL DATA（1964～1966）の各ニュースなどがあります。これらを読むと当時の計算機に関連した社会の様子を知ることができます。

展示品 5 メーカのニュース

[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/taylor/>

Gaussian09 のバージョンアップについて (No. 154)

非経験的分子軌道計算プログラム「Gaussian09」を C.01 から D.01 にバージョンアップしましたのでお知らせいたします。また、C.01 も引き続きご利用いただけます。

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います。

サービス開始日 : 2013 年 8 月 27 日 (火)

バージョン名 : Gaussian09 D.01

サービスホスト : gen.isc.tohoku.ac.jp

実行コマンド : subg09
subg09.C01 (C01 用コマンド)

C.01 から D.01 のバグフィックスとマイナーチェンジについての詳細は以下のページをご覧下さい。

Gaussian 09 Revision D.01 Release Notes
http://www.gaussian.com/g_tech/rel_notes.pdf

HULINKS | Gaussian 09 | Rev D.01 の新しい機能
http://www.hulinks.co.jp/software/gaussian/section01_v09_d01.html

センターの Gaussian09 利用方法については以下のページをご覧下さい。
<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/application/gaussian.html>

(共同利用支援係)

Marc/Mentat のバージョンアップについて (No. 154)

有限要素法による非線形汎用構造解析プログラム「Marc/Mentat」のバージョンを MSC.Marc2013 / Mentat2013 として運用を始めましたのでお知らせいたします。

Mentat2013 では新 GUI を採用しています。従来の Classic GUI は mentat というコマンドで、新 GUI は mentat.new というコマンドでご利用できます。また旧バージョンは暫定的に run_marc.2012、mentat.2012 というコマンドでご利用できます。

サービス開始日 : 2013 年 8 月 27 日 (火)

バージョン名 : MSC.Marc2013 / Mentat2013

ホスト名 : gen. isc. tohoku. ac. jp

実行コマンド : run_marc,
mentat (旧 GUI) , mentat.new (新 GUI)

新機能の概要、機能の詳細、実行方法についてはマニュアル、センターHP、および開発元 HP をご覧下さい。

マニュアル : PDF 形式マニュアルを gen 上で提供しています。並列コンピュータ gen. isc. tohoku. ac. jp にログインし、acoread コマンドでご覧下さい。
各マニュアルは以下のディレクトリにあります。

gen: /usr/ap/MSC2013/mentat2013/doc/

- [1] marc_2013_doc_release.pdf : Release Guide(2013 英語)
- [2] marc_2013_doc_product_information.pdf : Product Information(2013 英語)

英文マニュアル

- [4] vola.pdf : Volume A : Theory and User Information
- [5] volb.pdf : Volume B : Element Library
- [6] volc.pdf : Volume C : Program Input
- [7] vold.pdf : Volume D : User Subroutines and Special Routines
- [8] volet.pdf : Volume E : Demonstration Problems

和文マニュアル(2003 版)

gen: /usr/ap/MSC2013/mentat2013/doc/japanese/

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

センターHP

http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/application/marc_mentat.html

開発元 HP

<http://www.mscsoftware.com/product/marc>

(共同利用支援係)

Mathematica のバージョンアップについて (No. 154)

数式処理プログラム「Mathematica」のバージョンアップを行いましたのでお知らせいたします。 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。

サービス開始日 : 2013 年 8 月 27 日 (火)

バージョン名 : Mathematica 9.0.1

サービスホスト : gen.isc.tohoku.ac.jp

起動コマンド : mathematica (GUI 版)
math (テキスト版)

新機能の概要、機能の詳細については Wolfram 社のページをご覧下さい。

<http://www.wolfram.com/mathematica/new-in-9/>

センターの Mathematica 利用方法については以下のページをご覧下さい。

<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/application/mathematica.html>

(共同利用支援係)

MATLAB のバージョンアップについて (No. 154)

科学技術計算言語「MATLAB」のバージョンアップを行いましたのでお知らせいたします。

MATLAB は、アルゴリズム開発、データの可視化、数値計算を行うための高レベルなテクニカルコンピューティング言語と対話型環境です。MATLAB を利用することにより、C、C++、Fortran といった伝統的なプログラミング言語よりも短時間で科学技術計算の問題を解決することが可能です。

サービス開始日 : 2013 年 8 月 27 日 (火)

バージョン名 : MATLAB R2013a (Ver. 8.1.0)

サービスホスト : gen. isc. tohoku. ac. jp

起動コマンド : matlab (GUI 版)
matlab -nojvm -nosplash -nodesktop -nodisplay
(テキスト版)

新機能の概要、機能の詳細については MathWorks 社のページをご覧下さい。

http://www.mathworks.co.jp/products/new_products/latest_features.html

センターの MATLAB の利用方法については以下のページをご覧下さい。

<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/application/matlab.html>

(共同利用支援係)

利用負担金額の表示コマンドについて (No. 156)

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

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

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

負担金の確認

<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/utilize/academic.html#負担金の確認>

(共同利用支援係)

利用負担額の変更について (No. 156)

平成 25 年度の利用負担金について、上半期(4 月～9 月)の利用をより促進するために、スーパーコンピュータのバッチ処理の負担額を、1 秒につき 0.4 円から 0.3 円に値下げいたしました。

10 月からは、通常の 0.4 円に戻りますのでご留意くださるようお願い申し上げます。

基本利用負担金

区分	項目	負担額
演 算	スーパー コンピュータ	バッチ処理 演算時間 1 秒につき 0.3 円 (4/1～9/30) バッチ処理 演算時間 1 秒につき 0.4 円 (10/1～3/31) 会話型処理 演算時間 1 秒につき 2 円
	並 列	バッチ処理 演算時間 1 秒につき 0.1 円
	コンピュータ	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)

XDMCP(X Display Manager Control Protocol)サービス停止の お知らせ (No. 157)

XDMCP はユーザ端末の X サーバとリモート側の X ディスプレイメーディヤとを接続するためのプロトコルです。このプロトコルには脆弱性があるため、セキュリティ対策のため XDMCP サービスを以下の期日より停止します。

影響を受ける可能性があるのは、X サーバソフトを用いて研究室などの端末から当センターの GUI アプリケーション (Mentat, Matlab 等) を利用している場合です。Linux OS 等からポートフォワーディングによる接続 (ssh -X 利用者番号@gen. isc. tohoku. ac. jp) をしている場合は影響ありません。

ご不明な点がありましたら、共同利用支援係 (uketuke@isc. tohoku. ac. jp, 022-795-6251) までお問い合わせください。

サービス停止日：2013 年 10 月 15 日

(共同利用支援係)

平成 26 年度「京」を含む HPCI システム共用計算資源の 利用研究課題の募集について (No. 158)

HPCI 共用計算資源は、京速コンピュータ「京」および全国基盤センター等の計算機資源で構成される計算環境で、東北大学サイバーサイエンスセンターも計算資源提供機関として参加しています。選定された課題については、希望する計算資源を負担なし（原則無償）で利用できます。多数のご応募をお待ちしております。

申請受付締切：平成 25 年 11 月 11 日（月）17 時

- 課題募集の詳細については HPCI 運用事務局のウェブサイトをご覧ください。
https://www.hpci-office.jp/pages/h26_boshu

- 提供資源情報の詳細については、下記をご覧ください。
https://www.hpci-office.jp/pages/h26_boshu_hpci_resource

（スーパーコンピューティング研究部、総務係、共同利用支援係、共同研究支援係）

利用相談室のご案内 (No. 158)

サイバーサイエンスセンターでは、本館、弘前大学、秋田大学、山形大学に利用相談室を設けています。テクニカルアシスタントの担当分野、日程等詳しくは以下の Web ページをご覧ください。

<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/tayori/tayori/150.html#1>

利用相談は、本館 1 階受付窓口（共同利用支援係）で、平日 8:30～17:15 の間受け付けております。相談室にテクニカルアシスタントが不在の時間帯は、センター職員が対応いたします。メールは 24 時間受け付けますが、回答は上記の時間帯になりますのであらかじめご了承ください。利用申請、利用負担金、プログラムの並列化、高速化、ベクトル化やアプリケーションに関することなど、センター利用に関する質問を受け付けます。また、相談室には各種マニュアルや書籍も揃えています。閲覧のみも可能ですのでお気軽にご利用ください。

<サイバーサイエンスセンター本館 利用相談室>

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

Tel. : 022-795-6153 (利用相談室・1 階受付窓口共通)

(共同利用支援係)

— 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 縫じ代=0
- ・標準の文字数（45文字47行）

<文字サイズ等の目安>

- ・表題=ゴシック体14pt中央 ・副題=明朝体12pt中央
- ・氏名=明朝体10.5pt中央
- ・所属=明朝体10.5pt中央
- ・本文=明朝体10.5pt
- ・章・見出し番号=ゴシック体11pt～12pt

*余白サイズ、文字数、文字サイズは目安とお考えください。

4. その他

- (1) 執筆者には、希望があれば別刷50部を進呈します。50部を超える分については、著者の実費負担とします。別刷の希望部数等は投稿の際に申し出てください。
- (2) 投稿予定の原稿が15ページを超す場合は今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

スタッフ便り

7月30日～31日に開催された今年のオープンキャンパス、サイバーサイエンスセンターにも大勢の方がお越しになりました。

今回私は5階講義室での研究開発部の展示会場に常駐して、「安全な計算～気まずくならない告白って？」というデモを行いました。これは、赤と黒のカード（裏は同じ模様）合計4枚を使うと、論理積（AND演算）を安全に計算できて、これを応用すると、交際成立／不成立の結果だけを知ることができ、たとえ交際不成立でも気まずくならずに済む…というものです。説明を書いたパネルを用意し、それを見て興味を持った方を対象にデモを行いました。たくさんの高校生・大学生・保護者等の方に、実際に手を動かして安全な計算を体感してもらうことができました。学校や自宅でも試したいという方には、アウトリーチ用の自作カードをお持ちいただきました。これを通して、参加した高校生に少しでも計算や情報科学に興味を持つてもらえていたら…と願っています。（T.M）

仙台市民にとって念願だった東北楽天ゴールデンイーグルスのリーグ初優勝が決まりました。創設9年目にして、あの寄せ集めだった集団からよくぞここまで成し遂げてくれたと思います。各地で優勝決定の瞬間が中継され、ベンチでは苦虫を噛み潰したような顔が多かった星野監督が、宙に待った瞬間は涙、涙で感無量でした。

優勝の立役者であるマー君は連勝の世界記録を樹立し、実力もさることながら、インタビューでは、必ずチームワークの必要性を語っていました。また、東京五輪の開催がきまったく時、猪瀬都知事は、「勝因はチームワーク」とも語っていました。「チームワーク」。言うのは簡単ですが、なにかを成し遂げるためには、それが一番必要なものであるのかなと思います。

現在、本センターでは、次期スパコンを導入するためのHPC新棟の建築が計画されています。全国共同利用施設として、多くの研究者の方々にご利用いただけるよう、チームワークを大切に、陰ながら仕事に邁進していく所存ですので、どうぞよろしくお願いします。（E.S）

SENAC 編集部会

小林広明 曽根秀昭 水木敬明 後藤英昭
江川隆輔 佐藤恵美子 大泉健治 小野 敏
斎藤くみ子



サイバーサイエンスセンター前
整備中の青葉山新キャンパス

平成25年10月発行

編集・発行 東北大大学
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 創文印刷出版株式会社

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 バッチ 処理	(4cpu)	1時間	8GB
		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 バッチ 処理	(4並列)	1時間	8GB
		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 Vo.46 No.4 2013-10

[共同研究成果]

降着円盤中での磁気乱流生成過程に関する計算機実験	齋 和人	1
	加藤 雄人	
	寺田 直樹	
	小野 高幸	

数 GHz の周波数帯における負の透磁率を示す構造の開発 とその広帯域化に関する研究	有馬 卓司	7
	宇野 亨	

プラズモニック構造体による光エネルギー利用の効率化	岩長 祐伸	13
---------------------------------	-------	----

[報 告]

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第5回シンポジウム報告.....	江川 隆輔	19
--------------------------------------	-------	----

サイバーサイエンスセンターオープンキャンパス報告	小松 一彦	27
--------------------------------	-------	----

林優一准教授、本間尚文准教授、水木敬明准教授、青木孝文教授、曾根秀昭教授の 研究グループが 2013 IEEE EMC International Symposium on Electromagnetic Compatibility • Best Symposium Paper Award を受賞しました	28
---	----

菅沼拓夫教授らの研究グループが2013 IEEE Global Conference on Consumer Electronics (GCCE 2013) • Excellent Paper Award を受賞しました	28
---	----

[展示室便り⑩]

1960年代の計算機に関する資料	29
------------------------	----

[Web 版大規模科学計算システムニュースより]

Gaussian09 のバージョンアップについて (No.154)	32
Marc/Mentat のバージョンアップについて (No.154)	33
Mathematica のバージョンアップについて (No.154)	34
MATLAB のバージョンアップについて (No.154)	35
利用負担金額の表示コマンドについて (No.156)	36
利用負担額の変更について (No.156)	36
XDMCP (X Display Manager Control Protocol) サービス停止のお知らせ (No.157) ..	37
平成26年度「京」を含む HPCI システム共用計算資源の利用研究課題の 募集について (No.158)	37
利用相談室のご案内 (No.158)	38

執筆要項	39
------------	----

スタッフ便り	40
--------------	----