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.47 No.1 2014-1



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 亚 日
	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)	

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

本誌の名前「SENAC」の由来 -

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

[巻頭言]

2014年東北大学及びサイバーサイエンスセンターへの期待

独立行政法人海洋研究開発機構 地球シミュレータセンター センター長 渡邉 國彦

年が明け、2014年となりました。振り返ってみれば、2013 年も様々な自然災害がありました。とりわけ、伊豆大島での長時間に わたる大雨、フィリピンでは巨大な台風が襲い、それらの被害は甚大 なものがありました。2011年3月の東日本大震災以来、世間から は、「シミュレーションで予測だ、予測だと言っているが、計算科学 者はいったい何をしていたのか」と計算科学の研究者は糾弾され続け ています。



確かにその通りで、計算科学は予測の研究です。予測することによって、国民生活に貢献しなければなりません。ただ、地球科学の分野では、台風の進路や地震・津波など、気象業務法によって、一般の計算科学者が予測できたとしても、それを世間に公表することが禁じられています。しかし、何らかの情報発信はできたのではないかということが問題 となっており、そもそも計算科学は何のためにあるのかが議論になっています。

「京コンピュータ」を使うHPCI戦略プログラムには、情報発信をどのように行うか について検討するワーキンググループが2011年に設けられ、更にそのワーキンググル ープを拡大させた情報発信小委員会が学術会議の下に設置されて、約2年半にわたって検 討を行ってきました。そこでは、情報発信の責任をどこが担うのか、また、気象業務法な ど法律との関係、様々な現業機関との関係をどうするのか等が真剣に議論されてきており、 その報告書がまもなく公開されます。ただ、報告書が出て、それで終わりでは無く、計算 科学は何のためにあり、どのようにしていくべきか、この議論はこれからもずっと続いて いくと思います。計算科学者の責務は非常に重いものだと考えます。

その一方、計算機そのものを研究している計算機科学者は、「1位ですか、2位ではいけ ないのですか」で話題になったように、その計算機が何のために使われるのかをあまり考 えていない研究者も一部にはいます。ただただ、計算機は演算速度が速ければいいと考え ている計算機科学者がいるのです。このあたりが、原子力村になぞらえて、コンピュータ 村と呼ばれるゆえんです。

これに対して、現在、「ポスト京」をにらんで、計算機が何のためにいるのか、どのよう な研究分野には、どのような計算機が向いているのかも議論されています。このために3 つの作業部会が文部科学省の下で、2年前に設立されました。この中の一つとして、サイ バーサイエンスセンター、東北大学、海洋研究開発機構の研究者が中心になって、全国の 大学・研究機関と連携しながら、地球科学と物作りを大きなテーマとして、それらに向い た計算機を開発するフィージビリティスタディを行っている作業部会があります。ここで は、演算速度だけで無く、メモリバンド幅、入出力のあり方など、様々な視点から検討し てきました。この最終報告書もまもなく公表されます。ただ、こちらの方も報告書が出て 終わりということではなく、たとえボランティア的であったとしても、まだまだ検討を続 けていく必要性があります。

このような背景の中、サイバーサイエンスセンターの果たすべき役割は、ますます重要 になってきています。地球シミュレータは、今年度より、地球科学の研究者コミュニティ のためのマシンとして大きくその位置づけを変更しました。これに対し、サイバーサイエ ンスセンターは、これからも、全国の計算機やネットワークを用いた研究を行っている、 幅広い研究分野の計算機環境のバックボーンとなるだけでなく、教育や研究の中心機関と しての活躍が期待されています。

大学の基盤センターの中には、その存在意義が問われているセンターもあります。特に 法人化後は、外部からでは無く、大学の経営陣にその必要性が取りざたされているセンタ ーもあります。その中で、サイバーサイエンスセンターは、将来のシステムをも視野に入 れ、広範で積極的な教育・研究・支援活動を行っているセンターの一つであると思います。 ただ、非常に広範な活動を行っている割には、スタッフが少ないことが一番の気がかりで す。これは以前から気になっていることで、人材面での大学サイドのよりいっそうのご配 慮を御願いしたいところです。

2014年がどのような年になるかわかりませんが、東北大学が日本の科学研究のため の要の一つであり、そして東北大学の中で、サイバーサイエンスセンターが要であること は間違いありません。ビッグデータという言葉も取りざたされている昨今、サイバーサイ エンスセンターの今後のますますの活躍を期待しております。

[お知らせ]

並列コンピュータシステムの更新について(1)

並列コンピュータシステムを 2014 年 4 月に更新することが決定しました。新システムは、防災・ 減災分野をはじめとするシミュレーション研究、ものづくり分野における研究、産業利用の促進 および HPCI システムに提供する計算機資源の拡充を目的に導入し、現並列コンピュータシステム の後継機として提供します。提供システムは、スカラ並列演算サーバおよび共有ストレージから 構成され、総合演算性能は現有システムの約 20 倍、ストレージ容量は 40 倍以上にそれぞれ増強 します。また、シミュレーション結果を高速かつ高品質に可視化するための立体映像化が可能な 三次元可視化装置も新たに導入します。

移行スケジュール、利用方法の詳細等は「大規模科学計算システムニュース」および本センタ ーホームページ(http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/)にて、順次お知らせいたします。

1. スカラ並列演算サーバ

・NEC 製 LX シリーズ 4	061	Re-2
総ノード数	:	68 ノード
総演算性能	:	31.3TFLOPS(倍精度)
総メモリ容量	:	8.5 TB
ノード間接続	:	InfiniBand(4xFDR, 56Gbps)
・ノード性能		
ノード演算性能	:	460.8GFLOPS(倍精度)
CPU	:	Intel Xeon (12core/2.4GHz)x2
メモリ	:	128GB
・提供ソフトウェア		
OS	:	Red Hat Enterprise Linux 6 server
プログラム開発環境	:	Intel Cluster Studio
		・Intel Fortran Composer XE(自動並列化、OpenMP 対応)
		・Intel C++ Composer XE(自動並列化、OpenMP 対応)
		・Intel MPI ライブラリ
		 Intel Trace Analyzer/Trace Collector
		・Intel デバッガ
数値計算ライブラリ	:	NEC NumericFactory(ASL,ASLSTAT,ASLQUAD等), Intel MKL
アプリケーション		
ソフトウェア	:	Gaussian, Mathematica, MATLAB, MSC Marc, MSC Mentat

2. 三次元可視化装置

SGI-J 3D Tiled Display Wall Solution Package

・LED プロジェクションモジュール、Full ID (1920x1080) 12 面(縦3面,横4面)

・可視化サーバ (マスターノード x1, ディスプレイ出力ノード x3)

・3 次元可視化ソフトウェア AVS/Express MPE

3. 共有ストレージ

 ・一次ストレージ
 DDN 製 lustre ストレージ
 ユーザデータ用総容量: 1PB
 ・二次ストレージ
 NEC 製 ストレージ
 ユーザデータ用総容量: 3PB



システム構成図

(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)

[お知らせ]

新棟工事期間中の出入口等の変更について

サイバーサイエンスセンターでは、本年1月より新棟工事が始まりました。これに伴い1月22 日からセンターの出入口、駐車・駐輪スペース、入館可能時間等が変更となります。この間皆さ まには、ご不便をおかけしますがご理解とご協力のほどよろしくお願い申し上げます。

工事期間 : 2014年1月22日(水)~8月末日(予定)

出入口 :北側の出入口をご利用ください。

解錠時間 8:30~17:30

なお、大判プリンタ等は従来どおり平日 21:00 まで利用可能ですが、入館 は 17:30 までにお願いいたします。それ以降一旦外に出ますと再入館できま せんのでご注意ください。17:30 以降の利用について特段のお申し出があれ ば、可能な範囲で対応しますので、当日午前中まで共同利用支援係へご連絡 ください。 共同利用支援係 (022-795-6153、uketuke@isc. toohku. ac. jp)

臨時駐車場:本館ゲート附近 10台

新キャンパス内 30台 (電子・マテリアル系仮設駐車場)

(ご利用の際は、本館1階共同利用支援係で臨時駐車許可証を借用ください。) 駐輪場 :サイバーサイエンスセンター本館北側に駐輪場(バイク・自転車)を設置



(会計係, 共同利用支援係)

[お知らせ]

計算科学・計算機科学人材育成のための スーパーコンピュータ無償提供制度について

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、計算科学・計算機科学分野での教育貢献・人 材育成を目的として、大学院・学部での講義実習等の教育目的での利用について、無料(た だし、利用状況によっては上限を設定する場合があります)で大規模科学計算システムをご 利用いただける制度を用意しております。

利用を希望される場合は、以下の情報を添えて、edu-prog@isc.tohoku.ac.jp までお申し込みください。

- ·講義担当者氏名
- ・同所属
- ・同連絡先(住所,電話,電子メール)
- ・講義名
- ・講義実施日時(1セメスターの中で実習を予定している回数)
- ・センターでの実習利用希望の有無(必要であれば予定日)
- ・講師派遣の有無
- ・講義シラバス
- ・講義ウェブ(もし用意されていれば)
- ・受講者数(予定)
- ・必要とする理由(利用目的:例えば、高速数値実験の研修を行うなど)
- ・期待できる教育効果
- ・その他(センターへの要望等)

なお、講義終了後、報告書(広報誌 SENAC へ掲載)の提出をお願いいたします。たくさんのお申し込みをお待ちしております。不明な点は、edu-prog@isc.tohoku.ac.jp までお問い合わせください。

(スーパーコンピューティング研究部,共同利用支援係)

[共同研究成果]

A building-resolving simulation of sea breeze over Sendai downtown with a parallelized CFD model

Guixing Chen, Weiming Sha, and Toshiki Iwasaki

Department of Geophysics, Graduate School of Science, Tohoku University, Sendai, Japan

Hiromu Seko and Kazuo Saito

Meteorological Research Institute, Tsukuba, Japan

In the study, we develop a parallelized CFD model to realize the building-resolving simulation for one whole city. The test run on Sendai downtown at a high resolution of 3 m is conducted by the NEC SX-9 supercomputer at the Cyberscience Center of Tohoku University. The experiment is designed to simulate the winds and temperature during a typical sea breeze event. The general features of turbulent flows in the urban canopy layer are well reproduced. The results suggest that this parallelized CFD model is promising for the high-resolution urban weather forecast in the future.

1. Introduction

In recent years, a research project of high performance numerical weather prediction, as one part of the Strategic Programs for Innovative Research of Japan, is initiated to achieve the high-precision mesoscale forecast [1]. As a part of this project, the building-resolving CFD model is developed to realize the super high-resolution mesoscale modeling of the urban weather [2]. The purpose is to simulate the winds and temperature for big city with every buildings resolved.

One of the major difficulties we faced is the huge demand of calculation amount, and another is the memory limit at a single node. To solve these problems, we convert the source code of CFD model to support the high-performance calculation with the Message Passing Interface (MPI). This parallelized CFD model has been recently tested on the K computer at RIKEN Advanced Institute for Computational Science, for a large domain of 25 km with a resolution of 10 m. In this study, we transfer this CFD model to the NEC SX-9 supercomputer at the Cyberscience Center of Tohoku University. The test run on SX-9 is implemented to understand the performance of the CFD model at an even higher resolution of 3 m for the realistic complex building.

2. System configuration and experiment design

The CFD model used here is a local meteorological model based on large-eddy simulation [3]. The model is based on the Cartesian coordinate, with the block-off technique to treat the buildings and steep topography. The model equations are solved by an algorithm of the semi-implicit method for pressure-linked equation, and a full time-implicit scheme is applied. This CFD model has been applied to simulate the local flows and temperature on the small-scale buildings and street blocks [4]. The CFD code has been revised to support the MPI for parallel calculation. The parallel calculation is made at both X and Y directions, while the auto parallel split is applied at Z direction.

The sea breeze is a typical weather phenomenon during the summer season that greatly influences the local winds and temperature at the coastal areas [5]. At 13 JST June 19, 2007, sea breeze blows over the Sendai City. In this study, the experiment is designed to study this sea breeze penetration over the Sendai downtown. The model domain is centered at Sendai station with a scale of about 3 km (Figure 1). The spatial resolution is 3 m for X, Y, and Z directions. The model top is 300 m, with 100 vertical levels. Therefore, the total grid points are one hundred millions. The forecast time is about 120 seconds. The initial conditions of atmosphere and ground temperature are provided the short-range forecast of non-hydrostatic model [6, 7] from the assimilated data [8]. On SX-9 supercomputer, we use 16 nodes to perform the parallel calculation. It takes about 14 minutes to complete the forecast.



Figure 1. The buildings of Sendai downtown for the CFD model. (a) Full domain; (b) Sendai station

3. Results

Figure 2 shows the general pattern of zonal wind over the Sendai downtown at forecast time T=120 seconds. The tails of low wind speed are elongated at the lees of the buildings, with an horizontal extension of about 2-3 times of the buildings height, which are often interrupted by the downstream buildings. As a whole, the buildings drag is clearly shown to slow down the wind speed. In the vicinity of some tall buildings, the local maximum of high wind speed can be easily identified. Broadly speaking, in the urban canopy, the air flow exhibits strong turbulent characteristics due to the complex buildings structures. Compared to the low wind speed within the urban canopy, the sea breeze exhibits a relatively fast penetration at the high layer from the southeastern regions.

Figure 3 shows the spatial distribution of temperature near Sendai station. It is clearly shown that the air mass trapped in the urban canopy exhibits a strong turbulent feature near the major buildings. There are some warm bubbles that grow at the lees of the buildings, which are generally stretched downstream by sea breeze. Although the wind speed is some low in the urban canopy, there is an active vertical mixing that strongly transports warm air upward and cool air downward. Considering a relatively fast penetration of cool marine air above urban canopy, sea breeze helps to decrease the temperature near surface from top in the presence of strong vertical mixing. This suggests that sea breeze can bring an effective cooling to the urban areas, despite of the low wind speed by building drag. The cooling effect may be estimated by the wind speed of marine air above urban canopy and the vertical mixing within, which is usually related to the urban ventilation.

A building-resolving simulation of sea breeze over Sendai downtown with a parallelized CFD model



Figure 2. Spatial pattern of the zonal wind speed over Sendai downtown.



Figure 3. Spatial distribution of the temperature near Sendai station.

4. Summary

In this study, we have conducted the building-resolving CFD simulation on the sea breeze over the Sendai downtown. The general features of turbulent flows in the urban canopy are well simulated by the CFD model. The results suggest that the parallelized CFD model has a good performance at the very high resolution of 3 m. It should be emphasized that this is a realistic simulation of the weather conditions. With high-precision mesoscale forecast available to drive the CFD model, it seems reasonable to realize the high-resolution forecast of urban weathers for street corners in the coming years [1, 2]. In the ongoing works, we continue to perform more experiments and verify the system performance with intense observation network.

Acknowledgment

This study was partly supported by the Strategic Programs for Innovative Research funded by the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT) of Japan. Numerical calculations had been performed using the K computer at RIKEN Advanced Institute for Computational Science (Proposal number hp120282) and the supercomputing resource at the Cyberscience Center, Tohoku University. Technical supports were given through the collaborative works with NEC company, JAMSTEC Earth Simulator Center, and Tohoku University Cyberscience Center.

References

- [1] Saito, K., T. Tsuyuki, H. Seko, F. Kimura, T. Tokioka, T. Kuroda, L. Duc, K. Ito, T. Oizumi, G. Chen, J. Ito, and the Spire Field 3 Mesoscale NWP group (2013), Super high-resolution mesoscale weather prediction, *J. Phys.: Conf. Ser.*, 454, 012073, doi:10.1088/1742-6596/454/1/012073.
- [2] Chen, G., M. Sawada, W. Sha, T. Iwasaki, H. Iwai, H. Seko and K. Saito (2012), A challenge to realize the ultra-high-resolution weather forecast for big city, Proceeding of K-computer symposium 2012, 71–72.
- [3] Sha, W. (2002), Design of the dynamics core for a new-generation numerical model of the local meteorology, *Kaiyo Monthly* (in Japanese), 2, 107–112.
- [4] Sha, W. (2008), Local meteorological model based on LES over the Cartesian coordinate and complex surface, in *Meteorological Research Note* (in Japanese), edited by Y. Fujiyoshi, 219, pp. 21–26, Meteorological Society of Japan press, Tokyo, Japan.
- [5] Miller, S. T. K., B. D. Keim, R. W. Talbot, and H. Mao (2003), Sea breeze: Structure, forecasting, and impacts, *Rev. Geophys.*, 41, 1011, doi:10.1029/2003RG000124.
- [6] Saito, K., J. Ishida, K. Aranami, T. Hara, T. Segawa, M. Narita, and Y. Honda (2007), Nonhydrostatic atmospheric models and operational development at JMA, *J. Meteorol. Soc. Jpn.*, 85B, 271–304.
- [7] Saito, K. (2012), The Japan Meteorological Agency nonhydrostatic model and its application to operation and research. *InTech, Atmospheric Model Applications*, 85–110. doi: 10.5772/35368.
- [8] Seko, H., T. Tsuyuki, K. Saito, and T. Miyoshi (2013), Development of a two-way nested LETKF system for cloud resolving model, in *Data Assimilation for Atmospheric, Oceanic and Hydrologic Applications II*, Eds. S.K. Park and L. Xu, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 197–218.

[共同研究成果]

高次の CBFM を用いた誘電体近傍アンテナの数値解析

今野 佳祐[†], 陳 強[†], 澤谷邦男 ^{††} 東北大学大学院工学研究科 通信工学専攻[†] 東北大学未来科学技術共同研究センター ^{††}

1 まえがき

CBFM(Characteristic basis function method)は、大規模問題に対する高速モーメント法の1つ として知られている [1]. CBFMは、ブロック単位で新たな基底関数 (CBF, Characteristic basis function)を生成し、CBF を用いて行列を圧縮してから解くという手法である.本報告では、我々 が提案した高次の CBFM を用いて誘電体近傍アンテナを数値解析し、その精度と計算時間を明ら かにする.

2 高次のCBFMの原理

図 1(a) に示す板状アンテナの解析を例にとり,文献 [2] で示されている 3 次の CBFM を拡張した, L 次の CBFM の原理を説明する. なお,従来の CBFM は 2 次の CBFM に相当する. L 次の CBFM では,従来の CBFM と同様に,まず図 1(a) に示すように解析モデルを M 個のブロックに 分割する. そして,解析モデルの分割に対応するように Z 行列 (波源と観測点との電気的なつなが りを意味する値である自己・相互インピーダンスから成る行列.)を M^2 個のブロックに分割し,電 圧ベクトルと電流ベクトルはどちらも M 個のブロックに分割する. なお,図 1(b) において, N は 総セグメント数, M は解析モデルを分割したブロックなが 割する. なお,図 1(b) において, N は 総セグメント数, M は解析モデルを分割したブロック間のオーバーラップセグメント数 (すなわち, N = MKとなる.), K_o は後述するブロック間のオーバーラップセグメント数である. また, \mathbf{Z}_{ik}^{b} は i 番目のブロックと k 番目のブロック間の K × K 相互インピーダンス行列, \mathbf{V}_{i}^{b} と \mathbf{I}_{i}^{b} はそれぞれ K 元のブロック電圧・電流ベクトルである. 役割は後述するが,オーバーラップセグメ ントを含んだ拡張ブロック (Extended block) も CBF(Characteristic Basis Function)を求める過程で用いられ,通常のブロック行列と区別するために図中では上付き文字の e が付けられている.

さて, 高次の CBFM では, *M* 個の CBF に重み係数を乗じたものの和によって, 各ブロック中に 流れる電流を以下のように表す.

$$\mathbf{I}_{i}^{b} = \alpha_{(i,i)}^{l=1} \mathbf{J}_{(i,i)}^{b(l=1)} + \sum_{l=2}^{L} \sum_{\substack{k=1\\i \neq k}}^{M} \alpha_{(i,k)}^{l} \mathbf{J}_{(i,k)}^{b(l)}$$
(1)
(*i* = 1, 2, ..., *M* where $L \ge 2$)

ここで、 $\mathbf{J}_{(i,k)}^{b(l)}$ は第 i ブロックにおける k 番目の l 次 CBF であり、特に i = k で l = 1 のとき Primary basis, $i \neq k$ で l = 2 のとき Secondary basis と呼ばれる. l > 3 の CBF が高次の CBF で ある (なお、文献 [2] で l = 3 の CBF は Tertiary basis と呼ばれている). また、 $\alpha_{(i,k)}^{l}$ はそれぞれの



⁽a) CBFM における板状アンテナのブロック分け.

(b) CBFM における行列方程式のブロック分け.

図 1: CBFM のブロック分け

CBF に乗じる重み係数を表す. $\mathbf{J}_{(i,k)}^{b(l)}$ は,第*i* ブロックにおける電流のうち,第*k* ブロックの寄与に よる成分を表すという物理的な意味を持ち, $\alpha_{(i,k)}^{l}$ は対応する CBF の寄与の大きさを示すものと解 釈することができる. 各ブロックを流れる電流を (1) 式のように表現することは, *N* 個のセグメン トに対応する電流係数を求めるという元の問題を, *M*² 個の CBF 及びその重み係数を求める問題 に変換したことを意味している. 以下では CBF と重み係数を求めて解を得るまでの手順を示す.

まず,全ブロックにおける Primary basis $\mathbf{J}_{(i,i)}^{b(l=1)}$ を求める. Primary basis は,当該ブロック内に 与えた電圧によって当該ブロック内に生じる電流を表しており,一般的には最も寄与の大きな CBF であることが多い. 従って, Primary basis の精度は最終的な解の精度を左右すると考えられるが, ブロック行列方程式を解いて得られる Primary basis は,ブロックの周囲にあるセグメントとの連 続性を無視することで生じる不要なエッジ効果を含んでおり,必ずしもその精度は良くない. そこ で,不要なエッジ効果を除去した Primary basis を得るために,当該ブロック周囲にある K_o 個の セグメントをオーバーラップセグメントとして導入した $(K + K_o) \times (K + K_o)$ の拡張ブロック行 列方程式 (2) を解く.

$$\mathbf{Z}_{ii}^{e} \mathbf{J}_{(i,i)}^{e(l=1)} = \mathbf{V}_{i}^{e} \qquad i = 1, 2, ..., M$$
(2)

そして, (2) 式を解いて得られる ($K + K_o$) 元の解ベクトル $\mathbf{J}_{(i,i)}^{e(l=1)}$ のうち, K_o 個のオーバーラッ プセグメント部分に相当する成分を棄却し, 残り K 個の成分を Primary basis として保存する. オーバーラップセグメントはブロック間の電気的な連続性を担保し, 不要なエッジ効果を除去して Primary basis の精度を高める効果がある. その一方, オーバーラップセグメント数を大きくしす ぎると計算時間が増大するという欠点がある. 従って, オーバーラップセグメント数 K_o は CBFM の精度と計算時間の両方に関わる重要なパラメータであると言える. なお, (2) 式を解く際に求め た逆行列は, Secondary basis 以降の CBF を求める箇所で必要になるため, ハードディスクに出力 して保存しておく.

次に、Secondary basis を求める. Secondary basis は、他のブロックに与えた電圧によって当該

ブロック内に生じる電流を表しており、以下のようなブロック行列方程式を解いて求める.

$$\mathbf{Z}_{ii}^{e} \mathbf{J}_{(i,k)}^{e(l=2)} = \mathbf{V}_{(i,k)}^{e} \quad \text{where} \quad \mathbf{V}_{(i,k)}^{e} = -\mathbf{Z}_{ik}^{e'} \mathbf{J}_{(k,k)}^{b'(l=1)}$$
(3)
(k = 1, 2, ..., i - 1, i + 1, ..., M)

ここで、 $\mathbf{Z}_{ik}^{e'}$ は \mathbf{Z}_{ik}^{e} 中の $(K + K_o) \times K'$ ブロック行列であり、 $\mathbf{J}_{(k,k)}^{b'(l=1)}$ は Primary basis $\mathbf{J}_{(k,k)}^{b(l=1)}$ 中の K' 成分からなるベクトルである.なお、第 *i* ブロックと第 *k* ブロック間のオーバーラップセグメン ト数を K_o^{ik} とすると、 $K' = (K - K_o^{ik})$ が成り立つ. Primary basis を求めるときと同様に、(3) 式 を解いて得られる $(K + K_o)$ 元の解ベクトル $\mathbf{J}_{(i,k)}^{e(l=2)}$ のうち、 K_o 個のオーバーラップセグメント部 分に相当する成分を棄却し、残り K 個の成分を Secondary basis として保存する.

そして, 3 次以上の高次の CBF を求める. *l* 次の CBF は, *l* – 1 次の CBF の和を用いて, 以下の 式から求める.

$$\mathbf{Z}_{ii}^{e} \mathbf{J}_{(i,k)}^{e(l)} = \mathbf{V}_{(i,k)}^{e} \quad \text{where} \quad \mathbf{V}_{(i,k)}^{e} = -\mathbf{Z}_{ik}^{e'} \sum_{\substack{k'=1\\k \neq k'}}^{M} \mathbf{J}_{(k,k')}^{b'(l-1)}$$
(4)
$$(k = 1, 2, ..., i - 1, i + 1, ..., M)$$

このようにして各グループ毎に $M_C = (l-1)(M-1) + 1$ 個, 計 $M \times M_C$ 個の CBF が得られるが, これらは必ずしも正規直交基底とはならない. そこで最後に, 得られた CBF に Gram-Schmidt の 正規直交化法を適用し, CBF の直交性を確保する.

次に, 各 CBF の重み係数 $\alpha^l_{(i,k)}$ を求めるため, CBF によって元の行列方程式を以下のように変換する.

$$\sum_{i=1}^{M} \alpha_{(i,i)}^{l=1} \mathbf{u}_{(i,i)}^{l=1} + \sum_{l=2}^{L} \sum_{i=1}^{M} \sum_{k=1}^{M} \alpha_{(i,k)}^{l} \mathbf{u}_{(i,k)}^{l} = \mathbf{V}$$

$$(\mathbf{u}_{(i,k)}^{l} = [[\mathbf{Z}_{1i}^{b} \mathbf{J}_{(i,k)}^{b(l)}]] [\mathbf{Z}_{2i}^{b} \mathbf{J}_{(i,k)}^{b(l)}] \cdots [\mathbf{Z}_{Mi}^{b} \mathbf{J}_{(i,k)}^{b(l)}]]^{T})$$
(5)

そしてガラーキン法を用い, (5) 式の両辺と $(\mathbf{u}_{(q,r)}^{l})^{*}$ との内積を取って, 元の $N \times N$ 行列方程式を $(M \times M_{C}) \times (M \times M_{C})$ に圧縮する. $M \times M_{C} \leq N$ であれば圧縮した行列方程式のサイズは元 の行列方程式よりも小さくなるので, Gauss-Jordan 法などを用いることで逆行列を計算して $\alpha_{(i,k)}^{l}$ を求めることができる. 最後に, 得られた重み係数と CBF を (1) 式に代入すれば, 元の行列方程式 の解が求まる.

3 数値解析

3.1 解析モデル

図 2(a) に解析モデルを示す. 誘電体はブロックダイポールセグメント及びブロックモノポール セグメントに分割した. 図 2(b) に示すように, ブロック各辺の両側を *w_e* ずつ拡張した範囲に含ま れるセグメント数をオーバーラップセグメント数 *K_o* と定義した. また, ここでは放射問題を取り 扱うことにする.



(a) 誘電体近傍線状ダイポールアンテナ.

(b) 誘電体近傍線状ダイポールアンテナのブロック分け.

図 2: CBFM のブロック分け

3.2 CBFM の次数と数値解析精度との関係

誘電体近傍線状ダイポールアンテナを従来の CBFM で数値解析して得られた入力リアクタンス を,図3(a) に示す.図3(a) から,オーバーラップ領域 we を広げて CBF の質を上げたとしても,従 来の2次の CBFM で得られる解は Full-wave とのずれが大きいことが分かる. CBFM で放射問題 を数値解析する場合,オーバーラップ領域 we を非常に大きくしない限り,給電セグメントを含む ブロック以外では Primary basis が0 になる.放射問題での給電セグメントは1つであることが多 く, Secondary basis は Primary basis から計算されるので,2次の CBFM において各ブロックが 有する CBF は1つだけである. CBFM では,CBF と重み係数との積の重ね合わせで各ブロック内 の電流を表現するため,高い精度の解を得るためには複数の CBF が必要である.従って,ほとん どのブロックで Primary basis が0 となるような放射問題を2次の CBFM で数値解析すると,そ の解は大きな誤差を含む.オーバーラップ領域 we を拡大し,全てのブロックで給電セグメントを オーバーラップすれば Primary basis は0 にならないが,ブロック行列のサイズが大きくなり過ぎ てしまい,高速化が図れなくなる.ゆえに,2次の CBFM を用いて放射問題の解を高い精度で高速 に得ることは困難である.

一方, 誘電体近傍線状ダイポールアンテナを高次の CBFM で数値解析して得られた入力リアク タンスを図 3(b) に示す. 4 次以上の CBFM で得られた解は, Full-wave とほぼ一致していることが 分かる. 3 次以上の高次の CBFM では, 各ブロックに複数の CBF が存在し, 次数を上げるにつれて ブロックあたりの CBF の数も大きくなる. ブロックあたりの CBF の数が大きくなると, ブロック 内の電流を表す自由度が増し, 解の精度が向上する. 従って, 高次の CBFM を用いると, ほとんど のブロックで Primary basis が 0 となるような放射問題でも高い精度で数値解析できると言える.



図 3: 誘電体近傍線状ダイポールアンテナの入力リアクタンス

3.3 高次の CBFM の数値解析時間

ここでは、CBFM の次数 L 及びオーバーラップ領域 we と、その数値解析時間との関係を明らか にする. 誘電体近傍線状ダイポールアンテナを高次の CBFM で数値解析するのに要した計算時間 を表1に示す. なお、数値解析には Intel Core i-7 3820 CPU を用い、シングルコアで計算を行った. 表1から、CBFM の次数 L を上げると計算時間が大きくなることが分かる. CBFM の次数 L を上 げると、行列方程式を圧縮するのに用いる CBF の数が増え、圧縮後の行列方程式のサイズもより 大きくなる. 従って、次数 L を上げると、CBF を生成するのに要する時間、行列方程式を圧縮する のに要する時間、圧縮後の行列方程式を解くための時間が大きくなり、CBFM 全体の計算時間が大 きくなる. また、オーバーラップ領域 we を大きくすると、計算時間が大きくなることが分かる. 誘 電体近傍線状ダイポールアンテナでは誘電体及びアンテナセグメントが1次元方向に分布してい るため、we を大きくしてもオーバーラップセグメント数はさほど増えない. 従って、オーバーラッ プ領域 we を大きくすることによる計算時間の増加は緩やかである. 高次の CBFM と Full-wave の 計算時間を比較すると、今回の数値解析例で示した範囲であれば、L 及び we としていずれの値を 選択しても Full-wave より高速化が図れることが分かる.

一方, スーパーコンピュータ SX-9(4 並列の ss) で高次の CBFM を実行すると, *L* = 5, *w_e* = 20 の場合で 1150 秒の時間がかかった. 4 並列で数値計算したにもかかわらず, シングルコア CPU の 実行時間である 1300 秒に対して計算時間があまり削減できていないことが分かる. その原因とし て, ベクトル化率を向上させるためのチューニングを今回は施さなかったことにより, ベクトル化 率が 30%程度と低くなったことが考えられる. CBFM には計算機メモリの削減効果がないため, 豊 富な計算機メモリを使用できるスーパーコンピュータでの実行に適したチューニングは, 大規模問 題の高速な数値解析を行う上で有効である. 従って, CBFM で最も計算時間を要する部分である

Methods	Size of reduced/	CPU time [sec.]		ec.]
	original matix	$w_e = 0$	$w_e = 10$	$w_e = 20$
$\operatorname{CBFM}(L=2)$	18×18	119	205	236
$\operatorname{CBFM}(L=3)$	263×263	339	377	431
$\operatorname{CBFM}(L=4)$	525×525	638	719	797
$\operatorname{CBFM}(L=5)$	785×785	1041	1191	1301
Full-wave	7235×7235		16632	

表 1: 高次 CBFM の数値解析時間.

ガウス消去法の部分をベクトル化に適した形にチューニングし、CBFMの高速化を図ることが今後の課題である.

4 むすび

本報告では、一般的な高次の CBFM を提案した. そして、高次の CBFM を用いて誘電体近傍ア ンテナの数値解析を行い、CBFM の次数及びオーバーラップ領域の大きさと、解の精度及び計算時 間との関係を明らかにした. CBFM によって得られる解の精度は、CBFM の次数が高く、オーバー ラップ領域が大きいほど良くなることが分かった. その一方で、CBFM の次数が高く、オーバー ラップ領域が大きいと計算時間がかかるため、CBFM の次数とオーバーラップ領域は最適な値に する必要があることも分かった. 今後は、ベクトル型スーパーコンピュータでの実行に適した形へ のチューニングを高次の CBFM のプログラムに対して施し、高速化を図ることが課題である.

謝辞

本研究は, 東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータ SX-9 を利用して行われたものである. 関係各位に深く感謝する.

参考文献

- V.V.S. Prakash and R. Mittra, "Characteristic basis function method: A new technique for efficient solution of method of moments matrix equations," Microw. Opt. Technol. Lett., vol.36, no.2, pp.95-100, Janu. 2003.
- [2] S.G. Hay, J.D. O'Sullivan, and R. Mittra, "Connected patch array analysis using the characteristic basis function method," IEEE Trans. Antennas Propag., vol.59, no.6, pp.1828-1837, June 2011.

[共同研究成果]

数値タービンシステム(NTS)の大規模並列計算

山本悟¹、三宅哲¹、岡崎健志¹、笹尾泰洋² ¹東北大学大学院情報科学研究科 ²帝京大学理工学部航空宇宙工学科

ガスタービンならびに蒸気タービンの多段翼列を通る熱流動をまるごと大規模並列計算するために 開発した数値タービンシステム (NTS) についてその概略を紹介し、東北大学サイバーサイエンスセ ンターSX-9 上で MPI に基づく並列計算における並列処理効率を算出したので報告する。特に、タービ ンまるごとを想定した大規模計算では、64 プロセスの場合には1プロセスに対して計算時間が約 45 分の1になるという結果を得た。

1. 緒言

最新型のガスタービンならびに蒸気タービンの設計には熱流動のみならず、様々な未知の解決すべき問題が表面化しており、それらを数値計算するためにはそれぞれの物理を模擬する数理モデルも合わせて熱流動を数値解析しなければならない。すなわち、熱流動のみならず付加的な物理も同時に計算するマルチフィジックス CFD が要求される。特に、最新の蒸気タービンでは高出力、高効率ならびにコンパクト化を同時に実現するため最終段の長翼化が進んでいる。蒸気タービンを通る水蒸気は最終段付近で急激な圧力降下に伴い非平衡凝縮して液滴に相変化する。液滴は下流に行くにつれて成長して粗大液滴になり最終段長翼に衝突して翼の壊食にもつながる。このようにタービンの効率のみならず安全性にもかかわる複雑熱流動現象は、マルチフィジックス CFD により解明しなければならないのと同時に、タービン全体をまるごと計算しなければ正確な現象を解明することができない。

我々の研究室では、タービン内部の非平衡凝縮を伴う非定常湿り蒸気流れをまるごと大規模数値計 算するためのマルチフィジックス CFD ソフトウェア「数値タービンシステム(Numerical Turbine System、略して以下 NTS)」を開発している。

2. 数値タービンシステム (NTS)

NTSの構成を図1に示す。まず、前処理(Pre-process)として、Mesh Generator(以下、MechG)とMesh Transformer(MeshT)を独自に開発した。MeshG は GUI 環境で翼形状データを入力することにより、三次元多段静動翼列の計算格子を生成することができる格子生成ソフトである。これにより、たとえば図2(a)のような蒸気タービン最終多段長翼列に対して図2(b)のような計算格子が生成される。計算格子は翼列流路ブロックと翼列間をつなぐ緩衝流路ブロックから構成される。MeshT は生成された計算格子を変形することにより、翼にねじり、スタッキング、フィレットなどを付加することができる翼変形ソフトである。新たに計算格子を作成し直すことなく、すでに生成された計算格子の格子点を移動させることにより、翼変形を施した多段翼列の計算格子を作成できる。たとえば、図3(a)のような翼形状に対して、スタッキングとフィレットを施した図4(b)のような翼列ならびにその計算格子を生成することができる。

次にメイン処理(Main Process)は、非平衡凝縮を伴う熱流動を計算するためのプログラムからなる。 NTS では、非平衡凝縮を伴う圧縮性粘性流れの支配方程式として、蒸気の相変化を考慮した蒸気の質量保存式、運動量保存式、エネルギー保存式、液滴の質量保存式、液滴の数密度保存式、乱流運動エネルギーおよびその比散逸率の式を解く。NTS で取り扱う気液二相流は液滴の質量分率が十分に小さい均質流を仮定する。湿り蒸気の状態方程式および音速の式は石坂らにより定式化された式より算出する^[1]。凝縮による液滴の質量生成率は古典凝縮論に基づき、凝縮核生成と液滴の成長による質量増加の和で表される。この場合の凝縮核生成率は Frenkel^[2]の式より、液滴の成長率は Gyarmathy^[3]のモデルより算出する。数値解法として、空間差分には Roe の流束差分離法^[4]および4次精度コンパクトMUSCL TVD スキーム^[5]を用いる。粘性項には2次精度中心差分を用い、乱流モデルには SST モデル^[6]を用いる。時間積分には LU-SGS 法^[7]を用いる。計算プログラムは一部を除き MPI により並列化が施された。本報告では以下にその詳細を示す。

追加処理(Additional Process)には、水蒸気の凝縮により生成された液滴の追跡アルゴリズムや翼列隙間からの蒸気流入出を模擬する数理モデルなどが随時追加されていく予定である(現在開発中)。後処理については、いまのところ既存の市販ソフトを使用している。



図1 数値タービンシステム(NTS)の構成



(a) 蒸気タービン最終多段長翼列



(b) 生成された各流路の計算格子

図2 MeshGにより生成された計算格子



(a) 初期翼列形状



(b) 修正翼列形状

図3 MeshTにより変形された翼列形状

3. NTS の MPI による並列処理

図2(a)に示したように、タービン内部には多くの翼からなる翼列があり、静翼列と動翼列から一段 が構成される多段静動翼列を熱流動が通過してお互いに干渉する。静翼列と動翼列の枚数は基本的に 異なるため、実際の熱流動を数値計算により捕獲するためには、すべての翼列流路、すなわちタービ ンをまるごと計算する必要がある。しなしながら、総翼枚数は千枚を軽く超えることから、このすべ ての流路を同時に計算することは、現存するスーパーコンピュータでも計算時間の点から現実的では ない。現状では、各翼列の翼枚数を近似してタービン周方向の熱流動は類似であると仮定した、いわ ゆる周期境界条件を課して計算している。一方、静翼は固定され、動翼は回転していることから、静 翼列と動翼列間の熱流動計算にはそれぞれの計算格子が接した面の境界における物理量の交換が必要 になる。交換の方法には、定常流れを仮定して境界における物理量を空間平均して受け渡す方法、そ して非定常流れを仮定して回転する動翼列の計算格子と静翼列の計算格子との間で物理量を交換する 方法がある。このような境界条件を、前者は Mixing Boundary (以下 MB)、後者は Sliding Boundary(以 下 SB)と呼ぶ。前者は物理量の交換相手が常に同一であることからこの境界条件は一般的な境界条件と 同様に処理することができるのに対して、後者は物理量を交換する対象が常に変化するため、データ 通信を並列処理する際に工夫が必要になる。NTS はタービンまるごと計算を目指し完全非定常計算を 前提にしているため、SB を採用しなければならない。前報^[8]には、SB を MPI により並列処理するた めに開発した計算アルゴリズムについて報告している。さらに翼列周方向の周期境界条件を課したタ ービン三段静動翼列を通る熱流動の計算に対して、東北大学サイバーサイエンスセンターSX-9上で実 行した場合の並列化処理効率を算出した。これらの詳細については前報^[8]に記載されている。

3.1 周方向流路数増加に伴う並列処理効率

我々が NTS に施した MPI による並列化手法には、SB の処理時に MPI_Bcast および MPI_Allreduce による集団通信を用いた。そのため、流路数が増加して SB で接する流路ブロックの数が増えた際には、 計算時間に対して通信時間が占める割合が増加することが想定される。そこで図4(a)-(d) に示すよう な流路数を変えた計算格子についてそれぞれ計算を行い、MPI 化された NTS の通信時間を評価する。 計算の反復回数は10000回のみとし、最終的な非定常解を得るまでは計算していない。計算時間は frace の値を元に測定した。それぞれの格子のブロック数を Table 1 に示す。ただし、計算時間の都合上、翼 列流路ブロックは 31×31×31 格子点、緩衝流路ブロックは 16×31×31 格子点とした。まず、全周の 1/100 周、1/50 周、1/30 周の 3 つの計算格子について計算した。これらの計算においては全流路ブロッ ク数が SX-9 の最大並列数である 64 以下であるから、計算実行時の並列数は全流路ブロック数と同一 とする。1 プロセスが 1 流路ブロックを計算するため、流路数や並列数の違いはあっても計算時間は同 程度のものになると考えられる。むしろ、計算の初期化や境界処理における通信などによる影響が大 きいと予想される。

Table 2 には流路数の異なる計算における計算全体と主要なサブルーチン (explicit、implicit) の計算 時間および通信サブルーチン (mpisub_comm_bundslid、 mpisub_comm_bundslid_theta、 mpisub comm bundperi)の通信、待機時間を示す。以下、mpisub comm を MSC と略す。計算時間は原 則として全てのプロセスにおける値のうち最も大きな値を代表として用いているが、通信サブルーチ ンの値に限り、ftraceから読み取れる MSC_bundslid_thetaの計算時間のばらつきが非常に大きいことか ら、不適切だと思われる値を除外した上で平均をとった数値を用いた。 いずれの流路数の場合におい ても1プロセスが1流路ブロックを計算するため、全体の流路数が約2倍、3倍と増加しても計算時間 は3%、7%程度しか変化しない。これらのケースにおいては、explicitや implicit といった計算の大部分 を占める空間差分および時間積分の計算時間は、流路数を問わずほぼ等しい。一方、SB における通信 時間については、MPI Allreduce を用いて SB を挟んだ格子間の回転方向ずれ角度を計算する MSC bundslid theta と、MPI Bcast を用いて SB 面における配列データを送受信する MSC bundslid の間 で通信時間に大きな違いが見られた。MSC bundslid は予想通り、流路数の増加に伴い計算時間も急速 に増加した。ただし、その値は計算全体に対して相対的に小さい。これに対して、MPI Allreduce を用 いる MSC bundslid theta は通信時間が MSC bundslid の 10 倍近く長い。MSC bundslid theta の待機時間 が大きい理由としては、MSC bundslid theta が MSC bundslid の直前に CALL されることから、空間差 分や時間積分などの演算にかかる時間の差に対応する待ち合せ時間が MSC bundslid theta において生 じるためである。周期境界処理のために MPI Sendrecy を行う MSC bundperi については、流路数の増 加に対応して通信、待機時間が共に増加する結果が得られた。1/100周の計算においては計算対象が単 流路の格子であり、周期境界を適用する際の情報は同一流路ブロック内から得られることから、通信

は発生しない。1/50 周の格子は翼列部分の拡張 H 型格子は周方向に複数流路あるが、緩衝区間の H 型 格子は周方向に 1 つである。これに対して、1/30 周の格子は全ての流路ブロックが周方向に別の流路 ブロックと接しており必要な通信の量は多く、このような背景から通信時間が増加したと予想される。 以上、流路ブロック間に計算量のインバランスが生じない計算については、通信および待機時間の合 計が計算全体に占める割合は、最も流路数の多い 1/30 周のケースにおいて 3%程度であった。

次に、インバランスが発生した 1/10 周の計算について説明する。1/10 周の計算においては 111 流路 ブロックの計算領域に対して 64 プロセスで計算を行うことから、2 流路ブロックの演算を行う 47 のプ ロセスと 1 流路ブロックの演算を行う 17 のプロセスが混在する。Table 2 に示した 1 流路ブロックの計 算を行う場合の計算、通信、待機時間から、1 ブロックの計算のみを行うプロセスにおいては、1/100 周、1/50 周、1/30 周と同様の空間差分および時間積分の計算時間がかかる。しかし、残りのプロセス においては 2 流路ブロックの計算を行なっていることから、計算に 2 倍程度の時間がかかる。その結 果、 MSC_bundperi に見られるように、それらの計算を待ち合せるための長い待機時間が生じた。

	1S	1R	2S	2R	3S	3R	流路ブロック数
実機	160	116	112	98	106	90	-
1/100 周	100	100	100	100	100	100	13
1/50 周	150	100	100	100	100	100	20
1/30 周	150	120	120	90	120	90	37
1/10 周	160	120	110	100	110	90	111
1/2 周	160	116	112	98	106	90	551

Table 1 各計算格子において仮定した各翼列における翼枚数

		1/100 周	1/50 周	1/30 周	1/10 周
		13 プロセス	20 プロセス	37 プロセス	64 プロセス
計算全体		1065	1092	1134	2118
explicit		656	654	652	671
implicit		198	202	202	199
	通信	0.7	1.1	2.5	3.6
MSC_bundslid	待機	0.1	0.3	0.7	0.8
	通信	24.2	17.1	18.7	66.3
MSC_bundslid_theta	待機	7.2	8.6	10.0	20.6
	通信	_	0.3	0.5	0.5
MSC_bundperi	待機	_	1.7	3.1	728.6

Table 2 流路数の異なる計算における計算、通信、待機時間



(a) 1/10 周 13 流路ブロック



(b) 1/50 周 20 流路ブロック



(c) 1/30 周 37 流路ブロック



(d) 1/10 周 111 流路ブロック



(e) 1/2 周 551 流路ブロック

図4 流路数を変更した計算格子

3.2 1/2 周計算格子による計算の並列処理効率

実機の翼枚数を完全に反映した図4(e)に示した 1/2 周計算格子を用いて並列効率を算出した。ただし、計算の反復回数は10000回のみとし、最終的な非定常解を得るまでは計算していない。また、翼列流路プロックは31×31×31格子点、緩衝流路ブロックは16×31×31格子点とした。計算時間はfraceの値を元に測定した。Table 3 に異なる並列プロセス数における計算時間を示す。いずれの並列プロセス数においてもインバランスが生じることが想定される。例えば、64 並列での計算を行う場合には、8 流路ブロックずつ計算を行う25 のプロセスと、9 流路ブロックずつ計算を行う39 のプロセスが考えられる。図5に Table 3 から算出した計算全体の加速率を示す。並列プロセス数が増加しても並列処理効

率が顕著に低下することはなく、加速率は上昇している。しかしながら、理論値 64 倍に対して、並列 プロセス数が 64 の場合に得られた加速率は、44.8 倍となった。図 6 に異なる並列プロセス数における 通信ならびに待機時間の計算時間に占める割合を示す。1/2 周の計算においては計算領域が 551 流路ブ ロックあるため、64 並列プロセス数でも、プロセス間における計算量のインバランスに起因する通信 および待機時間が起こり得る。一方で、1 プロセス当たりが計算する流路ブロック数が多いことからイ ンバランスによる計算全体への影響は結果として小さくなり、通信および待機時間は最大でも計算全 体の 15%以下に収まっている。1/2 周の計算時に加速率がスケールしない原因の 1 つとして、通信回数 の増加に加えて、メインプログラム main 内における演算部分が並列化されていないことが挙げられる。 main 内には計算領域全体を通した計算が含まれており、それが現在並列化されておらず逐次処理され ている。main は 64 並列プロセス時において計算時間全体の 12%を占めており、通信および待機時間の 15%と同程度の計算負荷となっている。今後、通信の効率化に併せて main の並列化を進めることによ り、全周解析などの大規模並列計算においても更に高い並列処理効率が期待される。

Table 3 異なる並列数における蒸気タービン多段静動翼列半周計算に要した計算時間

並列プロセス数	1	4	8	16	32	64
計算時間(sec)	386429	104127	52947	28493	15202	8627



図5 1/2 周計算時における並列プロセス数の増加に対する計算全体の加速率



図6 異なる並列プロセス数における通信ならびに待機時間の計算時間に占める割合

4. NTS による計算例

2013 年 6 月に San Antonio で開催された ASME Turbo Expo で発表した最新の研究成果^[9]から典型的な 計算結果を紹介する。

三菱重工が設計した蒸気タービン低圧三段の静動翼列を通る非定常三次元湿り蒸気流れを NTS に より数値解析した。入口境界条件として、入口全圧 0.3296MPa、入口全温 384.3K を与えた。これは 25K の過冷却状態に当たる条件である。入口では乾燥した蒸気が流入しているため、タービン三段流路の 適当な位置で非平衡凝縮が起こる。図4(a)に相当する 13 流路ブロックからなる計算格子を用いた。た だし、計算格子はより細かく、翼列流路ブロックを 91×91×91 格子点、緩衝流路ブロックを 46×91 ×91 格子点とした。

図7(a)、7(b)にそれぞれ、計算により得られた全流路ミッドスパンならびに三段動翼列流路断面に おける瞬間湿り度分布を示す。まず図7(a)より、一段目静翼列下流域で凝縮が開始していることがわ かる。凝縮により生成された液滴は下流に行くに従って成長し、三段目動翼下流域では最大4.8%の湿 り度が得られた。また、湿り度は各翼列の後流の影響を受けながら増加していることも示されている。 図7(b)には、三段目動翼断面においては湿り度が極端に偏在化している様子が示されている。湿り度 は断面中央域が全体的に高く、エンドウォールに行くにしたがって減少しているが、エンドウオール 付近ではかなり非定常性が強い分布になっている。これは、前段に位置する、一段目静翼列、一段目 動翼列、二段目静翼列、二段目動翼列、そして三段目静翼列から発生したコーナー渦や翼後流のすべ てが干渉しながら三段目動翼列まで流れ込んでくるため、これらが湿り度の分布に影響した結果であ ると考えられる。実は、湿り度4.8%は翼端近傍で得られており、湿り度がコーナー渦や後流によりか なり偏在化していることを示唆している結果である。詳細については文献[9]をご覧いただきたい。



(a) ミッドスパン



(b) 三段目動翼流路断面

図7 瞬間湿り度分布

5. 結言

我々が開発している数値タービンシステム(NTS)についてその概略を紹介し、特にタービンまるごと 計算を意識して MPI を用いた並列処理効率を評価した。その結果、東北大学サイバーサイエンスセン ターSX-9 による全周計算を仮定したケースでは、64 プロセスによる計算で1プロセスと比較して約 45 分の1に計算時間を短縮することができた。ただし、用いた計算格子は粗いものであり、かつ並列 化がまだ完全に施されていない計算ルーチンなどもある。現状ではビックデータになる全周計算結果 をいかに可視化するかという壁もあり、SX-9 による全周計算は必ずしも現実的ではないが、より高速 なスーパーコンピュータを用いて、可視化手法なども工夫することができれば、2,3 年後にはタービン まるごと計算も実用化できると期待している。

謝辞

本研究は、東北大学サイバーサイエンスセンターおよび NEC の全面的な技術協力、ならびに三菱重 工との共同研究に基づく支援のもとで実施されました。ご協力頂きました皆様に対し厚く御礼申し上 げます。

参考文献

[1] Ishizaka, K., Ikohagi, T. and Daiguji, H., A High-Resolution Numerical Method for Transonic Non-Equilibrium Condensation Flow through a Steam Turbine Cascade, Proc. of the 6th ISCFD, 1, 479-484, 1995.

[2] Frenkel, J., Kinetic Theory of Liquids, Dover, 1955.

[3] Gyarmathy, G., Zur Wachstumsgeschwindigkeit Kleiner Flussigkeitstropfen in Einer Ubersattigten Atmosphare, Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik, 14-3, 280-293, 1963.

[4] Roe, P.L., Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors, and Difference Schemes, Journal of Computational Physics, 43, 357-372, 1981.

[5] Yamamoto, S. and Daiguji, H., Higher-Order-Accurate Upwind Schemes for Solving the Compressible Euler and Navier-Stokes Equations, Computers and Fluids, 22-2/3, 259-270, 1993.

[6] Menter, F.R., Two-equation Eddy-viscosity Turbulence Models for Engineering Applications, AIAA Journal, 32-8, 1598-1605, 1994.

[7] Yoon, S. and Jameson, A. Lower-upper Symmetric-Gauss-Seidel Method for the Euler and Navier-Stokes Equations, AIAA Journal, 26, 1025-1026, 1988.

[8] 笹尾泰洋,山本悟,三宅哲,岡崎健志, MPI による数値タービンの大規模並列計算手法の開発, SENAC, 45, 19-25, 2012.

[9] Miyake, S., Yamamoto, S., Sasao, Y., Momma, K., Miyawaki, T. and Ooyama, H., Unsteady Flow Effect on Nonequilibrium Condensation in 3-D Low Pressure Steam Turbine Stages, Proc. ASME Turbo Expo 2013, San Antonio, GT2013-94832, 2013, CD-ROM.

[共同研究成果]

超低周波地震の活動に基づくプレート間固着の推定

- Characteristics of shallower slow earthquakes occurring near the trench -

有吉 慶介^{*1}·松澤 暢^{*2}·日野 亮太^{*2}·長谷川 昭^{*2} 堀 高峰^{*1}·中田 令子^{*1}·金田 義行^{*1}

*1独立行政法人 海洋研究開発機構 地震津波・防災研究プロジェクト *2 東北大学大学院理学研究科附属 地震・噴火予知研究観測センター

浅部超低周波地震は、これまで西南日本や十勝沖でしか捉えられてこなかったが、東北 地方太平洋沖地震後の詳細な解析により、東北沖でも発生していることが確かめられた. そこで本研究では、数値シミュレーションに基づいて、浅部超低周波地震の活動とプレー ト間固着との関係を調べ、その結果を東北地方太平洋沖地震へ適用することを試みた.

1. はじめに

南海トラフ沿いで発生する"ゆっ くり地震"の一種である超低周波地 震 [1] は, 30km の等深線上にほぼ 分布しているだけでなく,海溝付近 でも発生していることが、最近の海 底観測から明らかとなった [2]. そ こで, 有吉・他 [3] では, 近い将来 起きるとされる東南海地震の前後 で, 超低周波地震の活動への影響を 調べた結果、深部より浅部の方が、 活動の変化が大きくなることを指 摘した.

しかし, ここで想定した海溝型巨 大地震は、約100年に1回の頻度で 発生し、プレート間の平均固着率も 4割程度となっており、東北地方太 平洋沖地震で海溝付近に巨大すべ 抜けた地震性すべりが再現出来て 布の推定結果の一例 [4]. いない (図1).



そこで本研究では、海溝まで地震性すべりが突き抜けるほど強く固着する場合と地震性 すべりが海溝まで突き抜けない弱い固着の場合について、大規模な数値シミュレーション の計算結果を比較し、浅部超低周波地震の活動変化の特徴についての抽出を試みる.

2. 海溝型巨大地震のモデル化

プレート間固着の効果を比較するため、計算手法や想定パラメター値は、前回 [3] と共 通にした.本研究では、速度・状態依存摩擦構成則のうち、ゆっくり地震の発生現象を再 現し易い slowness-law を適用した [5].摩擦安定性の空間分布を図2に示す.ここでは巨大 アスペリティの摩擦特性 (b 値)を変えることによって、固着強度が異なる2つのモデルを 構築した.この2つのモデルについて、本研究では、strong coupling model, weak coupling model と呼ぶことにする.



図2. strong coupling model における摩擦安定性の空間分布図. 暖色系は摩擦安定 (粘性的 なすべり特性), 寒色系は摩擦不安定 (固着と地震性すべりの繰り返し)を示す. 大きな楕 円域内は海溝型巨大地震の震源域に相当し, strong / weak (coupling model) において, γ の値 は, -3.8 / 9.8 [×10⁴] とした. weak coupling model については, 全ての入力パラメターは前 回 [3] と全て同一となっている.

3. プレート間固着の強弱に基づく地震性すべり分布の比較

本研究の2つの モデル (strong / weak coupling model) で再現された海溝 型巨大地震の地震 性すべり分布と特 徴について, それ ぞれ図3と表1に 示す.

図 3 の strong oupling model で は,暖色域におい て、海洋プレート と陸側プレートが ほぼ完全に固着 し,海溝型巨大地 震の際に,海溝ま で 2m 以上のすべ りが突き抜けてい ることが分かる. 一 方 で weak coupling model で

は、 地震性すべり が海溝まで突き抜 けないため,大き な津波が発生しに くい地震であり、

ある.



図3.(上) strong (下) weak coupling model における,地震性すべり (D_{seis}) 1944年の東南海地 の空間分布図. ここでは、3cm/sec より高速なすべりと定義した. プレ 震[3] と調和的で ート間カップリング率 (Cseis) への換算は, (地震性すべり量)/(1サイク ルの総すべり量)から算出した.

表1. strong/weak coupling model での海溝型巨大地震の比較(※図3の注釈を参照.)

物理パラメター / モデル	strong coupling model	weak coupling model
再来間隔・規模	143年; Mw8.3	113年; Mw7.9
D _{seis} , Cs _{seis} の最大値(※)	5.3m : 93%	3.4m : 74%
破壊域	海溝まで突き抜ける	巨大アスペリティ域の一部

4. 海溝型巨大地震サイクルに伴う超低周波地震の長期変化

図4に,浅部側と深部側の小アスペリティ帯 (図2を参照) におけるすべり速度の空間履 歴を示す.時間軸 (横軸) については海溝型巨大地震の発生時刻を開始時刻としている.こ の図では,赤い色をした部分がゆっくり地震に相当し,発生時間間隔・伝播速度(黄・橙 色の傾きから求める)を視覚的に捉える事ができる.

ここで,weak/strong coupling model で比べると,深部側は両者に大きな差は見られない が,巨大地震発生直後 (時刻が0近辺) での浅部側に注目すると,weak coupling model では 頻発する様子が診られるが,深部側では暖色系の色が全くない.これはゆっくり地震の静 穏化を意味し,特に中央付近 (Strike~0) ではその継続時間が長くなる傾向がみられる.



図4. 左が weak coupling model, 右が strong coupling model, 上が浅部,下が深部の小アス ペリティ帯 (図2) でのすべり速度の空間履歴を示す.赤色がゆっくり地震,青色が固着に 相当する. 横軸の時間は,海溝型巨大地震の発生時刻を原点とし,縦軸の原点は図2と同 様に巨大アスペリティの中央に位置する.

本稿では、weak / strong coupling model の2つを例として示したが、他にも多数の数値シ ミュレーションを試行した結果、巨大アスペリティ内の摩擦不安定性が大きいほど、静穏 化の期間が長く、領域が広くなる傾向がみられた.

5. まとめ

4.の結果に基づいて、東北
 沖周辺での超低周波地震の活動
 とプレート間固着との関係を図
 5にまとめた.

東北地方太平洋沖地震発生後 において,ゆっくり地震の一種 である超低周波地震の活動につ いて,宮城沖では静穏化がみら れ,福島・茨城・岩手沖では活 発化した [6].

この結果を図4に当てはめる と、宮城沖付近ではプレート間 固着が非常に強く、福島・茨城・ 岩手沖では、プレート間固着が 宮城沖に比べて弱い、外縁部に 相当すると考えられる.

また,今後の観測から明らか にされる宮城沖での静穏化の継 続期間や,その領域の広がりか ら,東北地方太平洋沖地震で巨 大すべりを発生させた領域につ いて,プレート間固着がどれほ ど強靭なのかを推定する手掛か りとなろう.



142°

possible activation \rightarrow

時すべり分布 [7] に, 2011 年 6 月 1 日~11 月 1 日で確認 された超低周波地震 (VLF event) の震央分布(赤丸) [8], 地震活動の深部境界線 (桃色線) [9 Igarashi],本研究の数 値シミュレーション結果に基づく解釈 (長方形の点線領 域) を重ねたもの.

以上より,浅部超低周波地震の活動を監視することで,プレート間固着の時間変化を追 うという新たなアプローチを,本研究の数値シミュレーションから見出すことができた.

140

40

謝辞

本研究では、東北大学サイバーサイエンスセンターとの共同研究によって開発された、 SX-9向けに最適化された FFT の計算プログラムコードを使用した.これにより、前回のモ デルよりも海溝付近での計算メッシュを細分化し、120万個もの計算メッシュを有する大規 模シミュレーションを実施することが可能となり、解像度の高い連続的なすべり過程を再 現することができた.

40°

144

参考文献

- Ide, S., G. C. Beroza, D. R. Shelly, and T. Uchide, 2007. A scaling law for slow earthquakes, Nature 447, 76-79, doi:10.1038/nature05780.
- [2] Sugioka, H., T. Okamoto, T. Nakamura, Y. Ishihara, A. Ito, K. Obana, M. Kinoshita, K. Nakahigashi, M. Shinohara, Y. Fukao, 2012. Tsunamigenic potential of the shallow subduction plate boundary inferred from slow seismic slip, Nature Geoscience 5, 414-418. doi:10.1038/NGEO1466.
- [3] 有吉 慶介・松澤 暢・日野 亮太・長谷川 昭・堀 高峰・中田 令子・金田 義行,2011. 海 溝付近で発生する浅部ゆっくり地震の特徴,SENAC 44(4),33-46.
- [4] 国土地理院, 2011, 東北地方太平洋沖地震の陸域及び海域の地殻変動と滑り分布モデル, http://www.gsi.go.jp/cais/topic110520-index.html.
- [5] Ampuero, J.-P. and A. M. Rubin, Earthquake nucleation on rate and state faults Aging and slip laws, J. Geophys. Res. 113, B01302, doi:10.1029/2007JB005082.
- [6] Matsuzawa, T., Y. Asano, K. Obara, 2012, Shallow very low frequency earthquakes off the Pacific coast of Tohoku, Japan, 2012 Fall Meeting, AGU, S41D-07.
- [7] Yagi, Y. and Y. Fukahata, 2011, Rupture process of the 2011 Tohoku oki earthquake and absolute elastic strain release, Geophys. Res. Lett. **38**, L19307, doi:10.1029/2011GL048701.
- [8] 防災科学技術研究所, 2012, 日本周辺における浅部超低周波地震活動 (2011 年 6 月~10 月), 地震予知連絡会会報 87, 1-2.
[共同研究成果]

Building-Cube Method を用いた エンジンナセルインレットからの騒音伝播解析

福島裕馬¹,大林茂²,佐々木大輔³,中橋和博⁴ ¹東北大学大学院工学研究科,²東北大学流体科学研究所 ³金沢工業大学工学部,⁴宇宙航空研究開発機構

次世代の数値流体解析手法として提案された Building-Cube Method を用いて,航空分野を中心 に実用的な大規模シミュレーションの取り組みを進めている.本稿では Building-Cube Method の 利点を生かして,航空機エンジンから発生する騒音の解析を行い,その結果を示す.騒音の解析 には高周波を解像するために膨大な格子点数が必要となり計算負荷が高くなる傾向にあるが,ベ クトル化された Building-Cube Method ソルバーとサイバーサイエンスセンターの計算機環境の利 用により大規模空力音響解析を実現した.

1. 緒言

近年,高バイパス比エンジンの採用などによって航空機から発生する騒音は低下している.その一方で,空港付近の騒音規制は以前に増して厳しくなっており,航空機から発生する騒音の更なる低騒音化に向けた研究はより重要になっている.

航空機からの騒音はエンジン騒音,機体騒音に分けることができ,エンジン騒音にはファン騒 音,ジェット騒音がある.エンジンがフルスロットルの状態である離陸時にはファン騒音,ジェ ット騒音が支配的であり,着陸時にはスラットや展開中のフラップなどの高揚力装置,脚などの 降着装置から発生する機体騒音の割合が増加するという傾向が顕著に見られる.

一般的な空力音響場の数値解析は、最初に音源周辺の流れ場をナビエ・ストークス方程式で解 き、その結果から Lighthill の音響学的類推に基づいて遠方音場を予測するという分離方法が用い られる.固体境界の影響を考慮した Curle の式を用いた解析は計算コストの点から優れており、 広く用いられている[1].しかしこの手法には、流れ場の一様性、音源のコンパクト性を仮定して いるという問題点もある.これに対して、圧縮性オイラー方程式を音波成分に対して線形化した 線形オイラー方程式 (Linearized Euler Equation, LEE)を用いた解析法が注目されており、軸対称エ ンジン形状からの騒音解析に用いられている[2].LEE による解析は、解析対象が一様な流れ場の 領域に限定されず、物体近傍での回折や反射も取り入れた騒音の予測に適している.

実践的な複雑形状を取り扱うことを考えると、従来の構造格子、非構造格子を用いた手法では それぞれ課題がある.構造格子を用いた解析では、物体形状に沿った格子を配置するために物体 適合性に優れているが、航空機全機形状やさらに複雑な形状周りに格子を生成するには膨大な時 間を要し、実用的ではない.非構造格子による解析は、複雑形状を扱うのに優れているが、一般 に空間精度が低く、高次精度の解析手法である Discontinuous Galerkin Method (DGM)では格子点当 たりの計算コストが大きくなる.そこで本研究では、単純な直交格子を用いた解析に着目した. 直交格子による解析では、空間を直交に分割するという簡便さのために複雑形状を容易に扱うこ とができる.また、空間高次精度化が容易、計算効率が高いという利点もある.

直交格子を用いた解析は、階段状近似による影響をできるだけ小さくするために、物体近傍に 細かい格子を必要とする.しかし、等間隔格子や不等間隔格子において高密度な格子を用いると、 細かい格子点が不必要な遠方にまで配置される.そこで本研究では、中橋の提案した直交積み上 げ法 (Building-Cube Method, BCM [3])により解析を行う.物体から離れた領域においては必要十分 な密度の格子を用いる一方で、物体近傍にはより細かく細分化された格子を用いることで、格子 点数の増加を抑えながら階段状近似による誤差を抑制できる.しかしながら、局所細分化格子の みでは、物体近傍をどれほど細かく細分化しても、表面に関しては階段状近似の影響は残ってし まうため、より高精度な壁面の取り扱いが望ましい.加えて、陽解法による解析では最小格子幅 によって時間ステップが決定してしまう.これらのことより、精度良い解析を実用的な細かさで 行う必要があり、本研究では埋め込み境界法(Immersed Boundary Method, IBM)による物体表現を用 いる.

本稿では、BCM のアルゴリズムに基づく LEE ソルバーを用いて航空機エンジンを模した Generic Inlet 形状からの騒音伝播の解析を行う. 比較の対象は 50m 遠方における Sound Pressure Level (SPL)分布であり,遠方での指向性の推定は Ffowes Williams-Hawkings (FW-H)法により行う. 計算領域内の Point Per Wavelength (PPW)の変化, FW-H 面の位置による変化, ナセル周りの格子を 細分化した際の変化をそれぞれ比較することにより,本計算手法の騒音解析における有効性を検 証する.

2. 計算手法

2. 1 線形化オイラー方程式(Linearized Euler Equations, LEE)

騒音伝播の支配方程式である LEE を式(1), (2)に示す. LEE は、圧縮性オイラー方程式の物理変数 $Q \in Q = Q_0 + Q'$ のように流れ場の平均成分 Q_0 と変動成分 Q'に分解することで得られる. (1), (2) において H は平均成分の空間変動についての項であり、S は音源項である. また、y は比熱比である. 計算の際は、流れ場の平均成分 Q_0 と音源項 Sを与え、変動成分 Q'の時間発展を計算する.

$$\frac{\partial Q'}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} + \frac{\partial G}{\partial z} + H = S$$
(1)

$$Q' = \begin{bmatrix} \rho'\\ u'\\ v'\\ v'\\ p' \end{bmatrix}, Q_0 = \begin{bmatrix} \rho_0\\ u_0\\ v_0\\ w_0\\ p_0 \end{bmatrix}, E = \begin{bmatrix} \rho_0u' + \rho'u_0\\ u_0u' + \frac{p'}{\rho_0}\\ u_0v'\\ u_0w'\\ u_0p' + \gamma p_0u' \end{bmatrix}, F = \begin{bmatrix} \rho_0v' + \rho'v_0\\ v_0u'\\ v_0v' + \frac{p'}{\rho_0}\\ v_0w'\\ v_0p' + \gamma p_0v' \end{bmatrix}, G = \begin{bmatrix} \rho_0w' + \rho'w_0\\ w_0u'\\ w_0v'\\ w_0w' + \frac{p'}{\rho_0}\\ w_0p' + \gamma p_0w' \end{bmatrix}$$

$$H = \begin{bmatrix} 0\\ u'\left(\frac{\partial u_0}{\partial x} - \nabla\overline{\mathbf{v}_0}\right) + \frac{1}{(\rho_0)^2}\left(\rho'\frac{\partial p_0}{\partial x} + p'\frac{\partial \rho_0}{\partial x}\right)\\ v'\left(\frac{\partial v_0}{\partial z} - \nabla\overline{\mathbf{v}_0}\right) + \frac{1}{(\rho_0)^2}\left(\rho'\frac{\partial p_0}{\partial z} + p'\frac{\partial \rho_0}{\partial y}\right)\\ w'\left(\frac{\partial w_0}{\partial z} - \nabla\overline{\mathbf{v}_0}\right) + \frac{1}{(\rho_0)^2}\left(\rho'\frac{\partial p_0}{\partial z} + p'\frac{\partial \rho_0}{\partial z}\right)\\ (\gamma - 1)\left[p'\nabla\overline{\mathbf{v}_0} - \overline{\mathbf{v}}\nabla p_0\right] \end{bmatrix}$$

$$(2)$$

2.2 計算アルゴリズム

数値計算は BCM の計算アルゴリズムにより行われる[3]. BCM では計算領域全体で等間隔直交 格子を用いることで,前処理・数値計算・後処理のすべての段階で処理を単純化できる.計算格 子の生成は,図 1(a)のように,計算領域を Cube と呼ばれる 2"倍の大きさの違いを持つ正方形領 域に分割し,次に, Cube を図 1(b)のように各軸方向同数の格子点(Cell)で分割する.また,それぞ れの Cube は隣り合う Cube と重なり合った overlap Cell を 3 つ持っており, overlap Cell に物理量 を補間することで隣り合う Cube と情報交換を行いながら計算を進める.図2に LEE ソルバーの 計算アルゴリズムを示す.計算の初期で計算格子や物体形状データを入力し,前処理を行う.本 研究では Runge-Kutta 法により時間積分を行うので,その反復計算の中で,計算領域を占める Cube 内の計算は OpenMP により並列に行われる.BCM の計算格子は,すべての Cube が同数の Cell を 含んでいるので,並列計算の際に負荷の偏りがなく並列化効率に優れている.Cube において計算 する内容は以下である.

1.Cube 境界において隣接する Cube との情報交換

2.支配方程式を計算

3.Runge-Kutta 法における仮の物理量 Q_{sub} を更新

4.緩衝領域で物理量を減衰

空間微分は4次精度の有限差分スキームである Dispersion Relation Preserving (DRP)スキーム[4] を用いる.また,計算で発生する非物理的な振動を取り除くために4次精度の Damper を適用し ている.時間積分には6段4次精度の Low Dissipation Dispersion Runge-Kutta (LDDRK)[5]を用いる. LEE ソルバーの計算では,発生した騒音は計算領域の外部境界で反射してしまう.それを防ぐた め,本研究では外部境界付近に緩衝領域を設定し,緩衝領域では buffer zone 境界条件[6]により物 理量を減衰させる.





2. 3 埋め込み境界法(Immersed Boundary Method, IBM)

本研究で用いる IBM は ghost cell (GC)と image point (IP)を用いたものである[7]. まず,物体形 状を Stereo Lithography (STL)データとして入力し,それを用いて計算 Cell が物体の内部か外部か を判別する.そして,物体内部の一層目の Cell を GC として用いる.そして,GC から物体垂直 方向に,最小 Cell の 1.5 倍の長さの位置に IP を定義する.そして IP に周りの Cell から物理量を 補間し, IP での値を用いて物体表面で滑り壁境界条件を満たすように GC の物理量を決定する. IP への補間を行う際,三次元では IP を囲む $3 \times 3 \times 3$ の 27 点を用いて逆距離加重法によって行う(図 3).



2. 4 Cube 境界での情報交換

大きさの違う Cube の境界では格子点が繋がっていないために、補間によって情報交換を行う必要がある.本研究では高次の多項式補間法であるラグランジュ補間を用いた[8]. これは、式(3)、

(4)に示す距離の重み係数を用いて補間を行うものである.

$$Q_{OC} = \sum_{j,k,l} Q_{j,k,l} w_j(x_{OC}) w_k(y_{OC}) w_l(z_{OC})$$
(3)

$$w_{j}(x_{OC}) = \prod_{i \neq j} \frac{(x_{OC} - x_{i})}{(x_{j} - x_{i})}, \quad w_{k}(y_{OC}) = \prod_{i \neq k} \frac{(y_{OC} - y_{i})}{(y_{k} - y_{i})}, \quad w_{l}(z_{OC}) = \prod_{i \neq l} \frac{(z_{OC} - z_{i})}{(z_{l} - z_{i})}$$
(4)

ここで, Q_{oc} は overlap Cell での物理量であり, $Q_{j,k,l}$ はステンシルでの物理量である. $w_j(x_{oc})$, $w_k(y_{oc})$, $w_l(z_{oc})$ は overlap Cell への補間に用いる重み係数である.また, x_{oc} , y_{oc} , z_{oc} は overlap Cell の x,y,z 座標であり, x_i , y_i , z_i は補間に用いるステンシルの座標である.

図4は二次元での補間に用いるステンシル配置を示している.図4(a)は小さい Cube から大きい Cube への補間に用いるステンシルである. Overlap Cell は1列に対して3つであるが,ルンゲ現 象を抑えるため,補間に用いるステンシルが対称となるように Cube 境界に最も近い Cell は2×2 点での補間,その他2つは4×4 点での補間を行う.図4(b)は大きい Cube から小さい Cube への補間に用いるステンシルである. こちらは overlap Cell 2列分の補間点に対して大きい Cube の3×3 点の同じ Cell の物理量を用いた補間を行う.



2.5 音源の設定方法

ファン騒音の入力は Tyler と Sofrin により提案された spinning mode 入力により与える. これは, ファンや動翼・静翼の相互干渉によって発生する騒音を模したものであり,以下の式によって音 圧変動を与えるものである.

$$p'(x,r,\theta,t) = a[J_m(k_r r) + c_1 Y_m(k_r r)]\cos(kt - k_a x - m\theta)$$
(5)

ここで, J_m , Y_m はそれぞれ m 次の第1種, 2種の Bessel 関数である. k_a は axial wavenumber, k_r は radial wavenumber である. k_r の n 次の解は以下の式に剛壁の境界条件を与えることにより求まる.

$$\frac{d[J_m(r_{outer}k_r)]}{dr}\frac{d[Y_m(r_{inner}k_r)]}{dr} - \frac{d[J_m(r_{inner}k_r)]}{dr}\frac{d[Y_m(r_{outer}k_r)]}{dr} = 0$$
(6)

ここで、router、rinnerはダクトの内半径、外半径である. kaは以下の式から計算される.

$$k_{a} = \frac{k}{1 - M_{j}^{2}} \left(-M_{j} \pm \sqrt{1 - \frac{k_{r}^{2}(1 - M_{j}^{2})}{k^{2}}} \right)$$
(7)

ここで,+は円柱座標において正方向に進む波,-は負方向に進む波を表している.係数 c1 は以 下の式により計算される.

$$c_{1} = -\frac{(d/dr)[J_{m}(r_{outer}k_{r})]}{(d/dr)[Y_{m}(r_{outer}k_{r})]} = -\frac{(d/dr)[J_{m}(r_{inner}k_{r})]}{(d/dr)[Y_{m}(r_{inner}k_{r})]}$$
(8)

2.6遠方での騒音の推定方法

本研究では Ffowcs Williams-Hawkings (FW-H)法を用いて遠方音場を推定する. FW-H 法とは,近 傍の音源を囲む閉曲面上の物理量データの時間変化を用いて、遠方での物理量の時間変化を推定 する計算手法である.この閉曲面を FW-H 面と呼ぶ.遠方場の騒音推定のための計算の流れは以 下のようになる.まず,ファン面に spinning mode 入力を与える.そして, LEE により近傍での 騒音の伝播を解析する. 最後に FW-H 法により遠方での騒音の伝播を推定する.

3. Generic Inlet 周りの騒音伝播解析

三次元軸対称ナセル形状である Generic Inlet からの騒音伝播を解析し,解析パラメータを変化 させた場合の遠方における SPL 分布を比較する.また,DGM を用いた市販の計算ソルバーであ る ACTRAN/DGM による計算結果と比較することで、本手法の計算精度を確認する.

計算対象となる Generic Inlet 形状を図 5 に示す. 図内の点線はファン面の位置である. また, 青線は音響ライナーの設置位置を示しているが、今回の解析では用いない、計算領域の原点は図 5(a)の z=0, y=0 の位置であり,計算領域の大きさも図 5(a)の値を無次元化して用いている.発生 する騒音の周波数は 1,578Hz であり, spinning mode はモード(24,1)を用いる.

計算格子を設定する際にはまず, 音源位置と緩衝領域を考慮して計算領域を設定する. 今回の 解析では計算領域の v.z 方向に無次元長さ3の緩衝領域を持ち,その中に約 80 点の格子点を用い る. これらのパラメータは,過去の研究から十分な減衰効果を持っていると考えられる[9]. +x 方 向はこの倍の領域を持っているが、-x 方向は約 1.5 の緩衝領域を確保している. これはナセルを 回折して後方に回り込む音波は弱く、十分に減衰させることができると考えられるためである. 次に,音源周りの PPW を設定し,それによって一つの Cube の分割数を決定する.今回の解析で は計算領域と緩衝領域を明確にするため、また、ナセル周りの格子の細分化を行うことを考え格 子点を配置した.

図6に、計算領域内のCube配置を、表1に解析に用いた格子情報を示す. 今回の解析ではCube 数が 708 と 1,464 の二つの配置と,Cube 内の一辺の分割数を 30 と 40 として,合計 4 ケースの解 析を行う.図 6(a)の配置では最も小さい Cube の境界に FW-H 面を設置し,これにより遠方での騒 音の推定を行う.ただし,-x 方向の境界はナセルが途切れる位置とする.設置した FW-H 面より も外部に位置する Cube では格子の解像度が少ないことにより騒音が自然に減衰するか、または buffer zone 吸収境界によって減衰される. 図 6(b)に関しては図 6(a)と同じ位置に FW-H 面を設置す るが,このとき-x 方向の FW-H 面では格子が細分化されているため,この分だけ FW-H 面上の格 子点数が増加している. さらに Casel に関して, FW-H 面の位置を変化させて遠方での推定を行 い, これらの結果を Case1-2, Case1-3 とした. FW-H 面の位置は, Case1,2,3,4 では x=[-0.5,4.0], $y=[-3.0,3.0], z=[-3.0,3.0], Case1-2 \ tx=[-0.5,2.5], y=[-2.25,2.25], z=[-2.25,2.25], Case1-3 \ tx=[-0.5,1.75], z=[-2.25,2.25], z=[-2.25,2.25$ *v*=[-1.6,1.6], *z*=[-1.6,1.6]である.



(b) Case2,4 図 6 計算領域内の Cube 配置

表1計算格子の詳細								
	Min. Cell size	Total Number of Cells	Max. PPW					
Case1	0.0188	708	40×40×40	45,312,000	11.68			
Case2	0.0094	1,464	$40 \times 40 \times 40$	93,696,000	23.37			
Case3	0.0250	708	$30 \times 30 \times 30$	19,116,000	8.76			
Case4	0.0125	1,464	$30 \times 30 \times 30$	39,528,000	17.53			

図7に、Case1、Case2での、z=0 断面での圧力変動分布を示す.図7では、緩衝領域となっている部分は省いており、また、下半分にそれぞれの格子点の分布を一点おきに示している.図7を見ると、ファン面で発生した騒音がナセル内壁を伝わり、最終的に出口で回折して、半径方向に伝播している様子が確認できる.また、Case2ではCase1と比較して解像度が高いため、圧力変動のピークが高低共にはっきりと表れている.図8はCase1での圧力変動分布を+x方向から見た図であり、x座標ごとに示している.発生した騒音が回転しながら一旦すぼめられ、それを抜けると半径方向に大きく広がっている様子が確認できる.図8ではファンは反時計回りに回転している. 圧力変動のピークの数は高低共に24個あり、spinning modeの入力モードである(24,1)に対応していることが分かる.



図 8 +x 方向から見た圧力変動分布(Case1)

表2にFW-H 法に入力する圧力変動のサンプリング方法を示す.ここで,Total number of cycle はFW-H 法に入力として用いた合計の周期の数であるが,今回の解析ではLEE での解析の際に10 周期分を出力し,そのデータをコピーして用いている.遠方での音圧変動を測定する位置は,図5(a)に見られる点(1.5,0,0)を中心として半径 50 の位置にある点である. y=0, z=0 となる点を 0 deg として,半径方向に150 deg まで測定した.

衣 2 FV	W-H 伝に八刀する	圧力変動のサンフ	リンク方法
	Total faces on FW-H surface	Time step per one cycle	Total number of cycle
Case1	512,000	29	
Case1-2	268,800	29	
Case1-3	139,400	29	70
Case2	684,800	58	70
Case3	288,000	21	
Case4	385,200	42	

まっ 取り口 決にす カナス 圧力亦動の サンプリング 七汁

図9に Case1, 2, 3 および 4 の解の比較を示す.まず初めに, Case1, 3 の比較を行う. 40 deg より 大きい角度での解にはそれほど差は見られないが, 0 deg から 30 deg での SPL は PPW の低い Case3 の方が大きくなっている. これは Case3 の解像度が低いためにナセル湾曲部での反射が顕著に見 られ、逆にナセル出口における回折はあまり見られないためであると考えられる. 90 deg より大 きい角度での値にも Case3 の方に振動が見られ、伝播する音波を十分に解像できていないことが わかる. ACTRAN/DGM との解析結果と比較すると, 40 deg から 120 deg までの値は Case1,3 共に ほぼ一致している. 0 deg から 30 deg の値は Casel の結果に近い値を示している. また, 120 deg 以上の値は Case1,3 よりも高い値を示している. この結果を見ると, SPL が最大となる 40 deg か ら 70 deg までの指向性は本計算手法で高い精度で推定できることが分かった. ただし, SPL が小 さい 0 deg から 30 deg 位置,120 deg 以上の位置では,より高解像度の格子での解析が必要になる と考えられる.

次に, Case1,2,3,4 全体の比較を行う. Case1,3 は基準となる PPW が約 12 の格子, Case3,4 は約9 の格子である. PPW が小さい Case3 の格子を細分化した Case4 では, 0 deg から 30 deg 位置での SPL がわずかに小さくなった. これはナセル周りのみ格子の細分化によって解像度が上がったた めである.ただし,解全体に見られる振動は細分化によっても改善が見られなかった.これは, FW-H 面における PPW は Case3 と Case4 で変わらないためである. Case1,2 を比較すると, 40 deg より大きい角度の SPL は ACTRAN/DGM での解析結果とよい一致を示しているが, 0 deg から 30 degの SPL は格子細分化による改善は見られなかった.

図 10 に Case1 と Case1-2,1-3 の結果を比較する. すべての結果で大きな差は見られないが, 120 deg より大きい角度位置では Case1 と比較して、Case1-2,1-3 での解析はより ACTRAN/DGM での 解析結果に近い値を示している.この理由として, Case1-2,1-3 での解析では FW-H 面自体が小さ くなるために、遠方音場を推定する際の有効データ率が高くなるためである、実際に、より多く のFW-H面データを用いて解析を行った結果では遠方での解析結果はCase1-3の結果に収束した.

4. 結論

Building-Cube Method のアルゴリズムに基づく線形オイラー方程式コードを用いて, 航空機エンジンを模した軸対称ナセル形状からの騒音伝播解析を行い, 計算格子および遠方場推定における入力データを変えたときの遠方場 SPL の比較,および,非構造格子法による結果との比較を行った.その結果を以下に示す.

非構造格子法での解析と比較すると、すべてのケースにおいて 0 deg から 30 deg までの SPL が 20dB ほど大きくなっている. これは他の部分よりも差が顕著である. ナセル周りの Cube を 細分化した場合にはこの範囲で SPL は減少の傾向を示したため、非構造格子法に見られるように、 この付近における SPL は本来、より小さな値を示すと考えられる. ただし、0 deg から 30 deg で の SPL は他の位置での値と比較して小さいため、エンジンから発生する騒音を評価する際にはそ れほど大きい影響はないと考えられる.

FW-H 面の位置をナセルに近づけた場合には、120 deg 以上の位置での SPL に変化が見られ、非 構造格子法による結果に近付いた. FW-H 面の範囲が小さくなると、その分データ量が小さくな るため、Case1-3 の FW-H 面の配置でも十分であるということは有用な結果であると考えられる.

謝辞

本研究は東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータを利用して行った.研究にあたっては同センター関係各位にご指導とご協力をいただいた.また,LEE コードのベクトル化には,NEC システムテクノロジー 曽我 隆 様,山口 健太 様のご協力と助言をいただいた.本研究は科研費(21226018)の交付を受けたものである.本研究で用いた Generic Inlet 形状のデータ,非構造格子法による計算データは Fluid Dynamics and Acoustic Group, Institute of Sound and Vibration Research, University of Southampton から提供された.記して謝意を表す.

参考文献

- [1] 恩田博ら, "Building-Cube 法を用いた JAXA 主脚モデルの詳細部品の流体解析," 第24 回数値流 体力学シンポジウム講演論文集(USB), 横浜, 2010 年 12 月.
- [2] Huang, X., *et al.* "Efficient computation of spinning modal radiation through an engine bypass duct," AIAA Journal, Vol. 46, pp. 1413-1423, 2008.
- [3] Nakahashi, K., Kim, L-S. "High-Density Mesh Flow Computations by Building-Cube Method," Computational Fluid Dynamics 2004, edited by C. Groth and D.W.Zinggm, Springer, pp. 121-126 2006.
- [4] Tam, C. K. W. "Recent advances in computational aeroacoustics," *Fluid dynamics research,* Vol. 38, pp. 591-615, 2006.
- [5] Berland, J. et al., "Low-dissipation and low-dispersion fourth-order Runge-Kutta algorithm," Computers and Fluids, Vol. 35, pp. 1459-1463, 2006.
- [6] Richards, S. K., *et al.* "The Evaluation of Non-Reflecting Boundary Conditions for Duct Acoustic Computation," *Journal of Sound and Vibration*, Vol. 270, pp. 539-557, 2004.
- [7] 西村康孝ら, "圧縮性 Building Cube Method を用いた翼周りの Euler 解析," 第43 回流体力学講 演会/航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム 2011, 2011 年 7 月.
- [8] Ishida, T. "Study of High-order/High-Resolution Method for Flow Simulation with Cartesian Grid Method," 東北大学 博士論文, 2011.
- [9] 福島裕馬ら, "ブロック構造型直交格子と IB 法を用いた LEE コードの構築,"日本航空宇宙学 会論文集, Vol. 60, pp.56-63, 2012.

[共同研究成果]

超高速第一原理電子状態計算コードの開発と応用

柳澤将^{1,2},田之雪²,木崎栄年²,稲垣耕司²,森川良忠² ¹琉球大学理学部,²大阪大学大学院工学研究科

1. 緒言

自動車排ガス浄化触媒では、ナノスケールの貴金属微粒子を酸化物に担持して用いる。しかし ながら高温の排ガスに曝されるために、微粒子が熱的揺動を受け、徐々に小さな微粒子から大き な粒子へと成長し、触媒作用を持つ表面積の低下により触媒性能が劣化することが大きな問題で ある。貴金属微粒子をペロブスカイト酸化物に担持することによってこの熱劣化を劇的に抑制す ることが可能であることがダイハツグループによって報告された¹⁾。

我々はこれまでにペロブスカイト担持貴金属触媒の自己再生機構を第一原理シミュレーション と熱力学計算を組み合わせることにより解明を進めてきた。²⁻⁴⁾. さらに、得られた知見を元に、 より望ましい自己再生作用を持つ触媒、特に貴金属微粒子の単体であるペロブスカイト酸化物の 探索も行ってきた⁵⁾。

今後の新興国における自動車市場の拡大、先進国における排ガス規制の強化等を考えると、貴 金属の使用を劇的に減らしたより高性能な排ガス触媒の開発が望まれる。高価な貴金属を用いな い触媒として銅酸化物触媒が有望であることが指摘されている 6-8)。そこで、本研究では銅を用い た自己再生機構を持つ触媒の開発を目指して、第一原理熱力学計算による研究を行った⁹。Cu系 インテリジェント触媒の新たな可能性を探索するために、銅酸化物として安定な、レイヤーペロ ブスカイト構造を持つ酸化物の安定性と酸化・還元状態の相図を、第一原理熱力学法を用いて作 成することを試みた。これまで、本研究グループでは様々なペロブスカイト酸化物の母体、およ び貴金属の替わりとなりうる金属触媒の探索を行ったが、理論計算による結果が実験と食い違い を生じるものがある。例えば NO、還元能力も比較的期待でき、入手しやすい Cu 金属について、 様々な母体ペロブスカイト中への固溶-析出状態を計算した結果、現実的な酸素分圧下において Cu は母体ペロブスカイトである LaFeO₃中に固溶しやすい結果となった。しかしながら、実験的 には析出した後に再固溶するのが困難であることが報告されている。この場合、酸化雰囲気にお いては Cu を含むペロブスカイトでは安定に存在しやすい La₂CuO₄等、異なる構造の酸化物を形 成してしまうためだと考えられる。そのため、これまでは ABO3 型ペロブスカイト母体について 考えられてきたが、新たに A2BO4型ペロブスカイト構造をもった新規インテリジェント触媒の開 発の有効性が高いと思われる。そこで、第一原理計算手法に熱力学的な効果を取り入れた計算機 シミュレーションを用いて、A2BO4型ペロブスカイトを母体として、貴金属の代替として Cu 金属 を用いたインテリジェント触媒について種々の計算および考察を開始した。銅を含むレイヤーペ ロブスカイトとして代表的な La₂CuO₄ について詳細な研究を行い、電子スペクトルについては GGA を用いるとバンドギャップを過小評価するものの、その生成エネルギー等、安定性について は精度良く再現できることが明らかとなった。そこで、GGA に基づいて様々なレイヤーペロブス カイト構造を持つ酸化物を母体として、Cuの固溶析出に関する振る舞いを第一原理熱力学法によ り計算した。

2. 計算手法

計算には大阪大学グループで開発している STATE-Senri (Simulation Tool for Atom Technology) を用いた。本研究で述べる全ての計算は第一原理計算パッケージ「STATE (Simulation Tool for Atom TEchnology)」を用いて行った。このコードは東北大学サイバーサイエンスセンターとの共同研究により NEC SX-9 上でのチューニングを行い、かなり効率的に並列計算が行われる様になってきている。密度汎関数理論(DFT) に基づき、GGA で交換相関エネルギーを近似した。また原子核付近の内核部分のポテンシャルはあるカットオフ半径より外側が正しく再現されるウルトラソフト擬ポテンシャルを用い、波動関数は平面波基底用いて展開される。平面波のカットオフは 25Ry、電子密度のカットオフは物質に応じて 225Ry,400Ry を用いている。 各々の物質の計算にはバルクのモデルを用い、格子定数、構造、原子配列、磁性の情報は回折実 験等から得られた実験値を論文から参照した。また酸素分子は化学ポテンシャルの基準が合うように孤立分子で計算した。A2BO4型ペロブスカイトのBサイトに貴金属が固溶する場合は、ユニットセル中のBサイトの原子の一つを貴金属に置換することによって再現している。また貴金属を置換しても格子定数は元の母体物質の実験値で統一し補正は行わなかった。個々の遷移金属酸化物の構造最適化計算はNEC-SX9の1ノードを用いて数日程度で終了するが、母体の遷移金属酸化物をABO3型とA2BO4型の複数考慮したため数十通りの計算を実行する必要がある。

3. 結果と考察

La₂CuO₄, La₂NiO₄, La₂CoO₄, Sr₂MnO₄, Sr₂TiO₄, Sr₂VO₄ Sr₂CrO₄, Ca₂MnO₄の各レイヤーペロ ブスカイトを母体として、これらの酸化物中への銅原子の固溶析出状態を研究した。実験結果を 図1に示す。

この図では、横軸は酸素の化学ポテンシャ ル,縦軸は、金属銅を基準として、銅が酸化 物中に固溶したときの相対的なエネルギー を示している. この図からわかるように La₂CuO₄,および,La₂CoO₄を母体とすると, Cu金属が析出するのはかなり低い酸素の化 学ポテンシャル雰囲気下であり, 通常の雰 囲気では還元しにくいことを示している。一 方、Sr2MnO₄,および,Ca2MnO₄を母体とす ると、逆に酸化物中に固溶することが難しい ことがわかる。La2NiO4, Sr2VO4, Sr2CrO4, および、Sr2TiO4 を母体酸化物とすると、そ の中間的な状況で固溶・析出を繰り返すと考 えられ、インテリジェント触媒としては有望 である。これらの結果は論文にまとめて投稿中 である%。

図1.レイヤーペロブスカイト型酸化物 への銅原子の固溶析出状態の安定性比 較。

4. 結論

第一原理計算手法に熱力学的な効果を取り入れた計算機シミュレーションを用いて、A₂BO₄型 ペロブスカイトを母体として、貴金属の代替として Cu 金属を用いたインテリジェント触媒につ いて種々の計算および考察を行った。銅を含むレイヤーペロブスカイトとして代表的な La₂CuO₄ について詳細な研究を行い、 La₂NiO₄, Sr₂VO₄, Sr₂CrO₄, および, Sr₂TiO₄ を母体酸化物とする と、その中間的な状況で固溶・析出を繰り返す有望な触媒となり得ることを見いだした。

文献

1) Y. Nishihata, J. Mizuki, T. Akao, H. Tanaka, M. Uenishi, M. Kimura, T. Okamoto, and N. Hamada, "Self-regeneration of a Pd-perovskite catalyst for automotive emissions control", Nature, **418**, 164 (2002).

2) Hamada, A. Uozumi, <u>Y. Morikawa</u>, A. Yanase, and H. Katayama-Yoshida, "A Density-Functional Theory Study of Self-regenerating Catalyst LaFe_{1-x} M_x O_{3-y} (*M*=Pd, Rh, and Pt)", J. Am. Chem. Soc., 133, 18506-18509 (2011).

3) Z.-X. Tian, K. Inagaki, and Y. Morikawa, "Density functional theory on the comparison of the Pd segregation behavior at LaO- and FeO₂-terminated surfaces of LaFe_{1-x}PdxO_{3-y}", Current Appl. Phys., **12**, S105-S109 (2012).

4) Z.-X. Tian, A. Uozumi, I. Hamada, S. Yanagisawa, H. Kizaki, K. Inagaki, and Y. Morikawa, "First-principles investigation on the segregation of Pd at LaFe_{1-x}Pd_xO_{3-y} surfaces", Nanoscale Research Letters, **8**, 203 (2013). 5) S. Yanagisawa, A. Uozumi, I. Hamada, and Y. Morikawa, "Search for a Self-Regenerating Perovskite Catalyst Using ab initio Thermodynamics Calculations", J. Phys. Chem. C, **117**, 1278 (2013).

6) N. Mizuno, Y. Fujiwara, and M. Misono, "Pronounced synergetic effect in the catalytic properties of LaMn_{1-x}CuxO₃", J. Chem. Soc., Chem. Comm., pp. 316-318 (1989).

7) R.D. Zhang, and A. Villanueva, and H. Alamdari, and S. Kaliaguine, "Cu- and Pd-substituted nanoscale Fe-based perovskites for selective catalytic reduction of NO by propene", J. Catal., 237, 368 (2006).

8) J. Liu, Z. Zhao, C. Xu, A. Duan and G. Jiang, "The Structures, Adsorption Characteristics of La-Rb-Cu-O Perovskite-like Complex Oxides, and Their Catalytic Performances for the Simultaneous Removal of Nitrogen Oxides and Diesel Soot", J. Phys. Chem. C, **112**, 5930 (2008).

9) S. Yanagisawa, A. Takeda, K. Inagaki, I. Hamada, and Y. Morikawa, "Search for a self-regenerating perovskite catalyst with *ab initio* thermodynamics II: Cu-doped perovskites with K_2NiF_4 structure", submitted.

[大学 ICT 推進協議会 2013年度 年次大会論文集より転載]

東北大学サイバーサイエンスセンターにおける 分子動力学シミュレーションコードの高速化支援について

森谷 友映 †, 佐々木 大輔 †, 山下 毅 †, 小野 敏 †, 大泉 健治 †, 小松 一彦 ‡, 江川 隆輔 ‡, 小林 広明 ‡ † 東北大学 情報部 情報基盤課

‡ 東北大学サイバーサイエンスセンター スーパーコンピューティング研究部

t-moriya@isc.tohoku.ac.jp

概要:東北大学サイバーサイエンスセンター(以下,本センター)は,全国共同利用設備としての 大規模科学計算システムを最大限に活用するために,計算科学者と本センターの計算機科学者が 連携しながら,プログラムの高速化技法の研究・開発に取り組んでいる.本稿では,分子動力学シ ミュレーションの高度化を例として,本センターの高速化支援の取り組みについて概説する.

1. はじめに

東北大学サイバーサイエンスセンター(以下,本 センター)は、全国共同利用設備としての大規模 科学計算システムの管理・運用と、本システムを 最大限に活用可能なプログラムの高速化技法や新 しいシミュレーション技術の研究・開発に取り組 んでいる. 1997 年から行っている計算科学分野の 利用者との共同研究を通じて、さまざまな分野に おける実アプリケーションの最適化や並列化の高 速化支援を行っている.また,センター独自の共 同研究に加え,全国の情報基盤センター等と連携 して、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠 点 (JHPCN) や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) を構成し、共 同研究を実施している.以上のように本センター では、利用者である計算科学者と本センターの計 算機科学の専門家が密に連携しながら、科学・工 学の恒常的な進歩を支える共同研究、利用者プロ グラムの高速化支援活動を推進している.

本稿では、これらの取り組みの中でも特に、産 業技術総合研究所と本センターとの共同研究とし て取り組んだ「分子動力学シミュレーションの高 度化」について紹介する.本稿の構成は以下の通 りである.2節では、大規模科学計算システムつ いて概説する.3節では、本共同研究で対象とす る分子動力学シミュレーションと、そのコードの 最適化について述べる.4節で本稿をまとめる.

2. 大規模科学計算システム

本センターでは、大規模な計算機を必要とする 全国の利用者の幅広いニーズに応えられるシステ ム運用を目的に、ベクトル型スーパーコンピュー タSX-9を提供している.SX-9は、全18ノード でシステムを構成し、1ノードあたり1TBの共有 メモリと16個のベクトルプロセッサを有し、1プ ロセッサ(シングルコア)あたりは102.4Gflop/s の理論演算性能と256GB/sの高いメモリバンド 幅を持つ.特に、ベクトルプロセッサによる高速 なベクトル処理能力や、高いメモリバンド幅を必 要とする流体解析、気象解析及び電磁界解析の分 野によく利用されている.

ベクトルプロセッサは複数のデータを一括して 演算を行うベクトル演算が可能であり,配列のそ れぞれの要素に演算を行うような計算に適してい る.このベクトルプロセッサの性能を引き出すた めには,プログラム中のベクトル処理可能な部分 を示すベクトル化率をできるだけ増やす必要があ る.図1にプログラムをスカラ処理する場合とベ クトル処理する場合の実行時間を示す.

図1 ベクトル処理による実行時間短縮

スカラ処理する場合の総実行時間を T_1 ,そのプログラムでベクトル処理が可能な部分の実行時間を T_{1V} とすると、ベクトル化率 α は以下の式で定義される.

$$\alpha = T_{1V} / T_1$$

また,そのプログラムをベクトル処理する場合の 性能向上比 P は,スカラ処理性能とベクトル処理 性能の比をβとすると以下の式で定義される.

$$P = 1 / ((1-\alpha) + \alpha / \beta))$$

この式から、図2に示すベクトル化率と性能向 上比の関係が導かれる.ベクトル化率が80%以 下では大きな性能向上は見られず、ベクトル化率 が90%を超えると急速に性能が向上する.そのた め、ベクトル型スーパーコンピュータで高い実行 性能を得るためには、ベクトル化率を100%にで きる限り近付ける必要がある.

図 2 ベクトル化率と性能向上比

また,大規模なデータをベクトル演算器で効率的に 処理するためには,メモリから演算器へのデータ 供給を行う必要がある.SX-9はインターリーブ構 成のメモリを持ち,複数のメモリバンクに並列に 読み書きを行い高速なデータ転送を実現する.メ モリバンクは32,768 個に分割され,複数のメモリ バンクにまたがって連続アクセスする場合が最も 効率的で高速なデータ転送となる.逆に不連続で データアクセスした場合,同一メモリバンクに対 して同時にアクセスが発生することがある.これ をバンクコンフリクトと呼ぶ.SX-9におけるバン クコンフリクトは,CPUポート競合とメモリネッ トワーク競合の2つに分類され,CPUポート競合 はCPU内における同一のポートにロード・スト アが集中した時に発生する.メモリネットワーク 競合は同一のメモリバンクへのアクセスで発生す る競合や,CPUと主記憶装置間の経路上で発生す る.バンクコンフリクトが発生するとデータ供給 能力が低下し,高速化の妨げの要因になる.これ を回避するためには,メモリアクセスの間隔が2 のべき乗になるのを避けることや,ループのアン ロールを行うなどしてメモリアクセス回数自体を 減らし,バンクコンフリクトを抑制することが必 要となる [1].

3. 分子動力学シミュレーションの最適化

本センターでは、図3のようにセンター教員・技 術職員・計算機ベンダの技術者が密に連携し、利用 者を支援している.本稿では、共同研究に参画す る産業技術総合研究所、計算機ベンダ、サイバーサ イエンスセンターの三機関で連携して高速化に取 り組んでいる、第一原理計算を用いた3つの分子動 力学シミュレーション(FPSEID、FEMTECK、 QMAS)における SX-9 を対象とした最適化につ いて述べる.

一般的に,最適化を行うためには,まずプログ ラムの特性を把握する必要がある.SX-9が標準で 備える簡易性能解析ツールを用いて,プログラム の解析結果を取得しどのような最適化が有効かを 検討し,最適化を施す.以下に,本報告で対象と する分子動力学シミュレーションについて,それ ぞれコードの概要,解析結果,最適化とその効果 を述べる.

3.1 FPSEID (First-Principles Simulation tool for Electron-Ion Dynamics)

3.1.1 FPSEID の概要

FPSEIDは、時間依存密度汎関数理論に基づい て、電子励起が引き起こす物質中の過渡的なダイ ナミクスを数百フェムト秒の時間スケールで計算 することを目的に作成されたプログラムであり、 時間依存シュレディンガー方程式を数値計算する 際に、高精度な近似公式(鈴木-Trotter 公式)を利 用し通信頻度を減らした並列計算を実現している. これまでの成果としては、光励起化学反応、高強度 レーザー光による物質構造変化、高速イオンと物 質の衝突に付随する諸現象のシミュレーションを 行っており、フェムト秒レーザーやへリウムイオ ン顕微鏡などを用いた先進的な実験技術による研 究の推進に貢献することが期待されている[2][3] [4].

3.1.2 ベクトル化率の向上

はじめにプログラムの解析を行い,実行時間の 長いサブルーチンの選定を行った.今回対象とし たのは3個のサブルーチンで,それぞれサブルー チン1,2,3とする.各サブルーチンの詳細な解 析に取り組み,その後,各サブルーチンの高速化 に取り組む.

サブルーチン1における解析結果を表1に示す. これを見るとベクトル化率が49.66%となってお り、ベクトルプロセッサへの移植に際して性能向 上の可能性があることが分かる.また、図4に示 すループを見ると、データの格納位置を保持する i2g 配列をインデックスとして他の配列を参照す るリストベクトルが用いられている.リストベク トルにより、ベクトル演算が可能かの判断が難し くなる.図5では作業配列に計算結果を一度格納 し、作業配列の値を参照することでリストベクト ルを解消しベクトル化を促進することができる. 作業配列を用いてリストベクトルを解消すること で、ベクトル化率が49.66%から99.06%と向上 し、対象とするサブルーチンの実効性能は16.7倍 に向上した.

表1 サブルーチンの解析結果

PROC -	EXCLUSIVE			V.OP	AVER.	BANK C	ONFLICT
NAME	TIME[sec]	%	MFLOPS	RATIO	V.LEN	CPU PORT	NETWORK
orignal	75.553	6.2	29.6	49.66	255.9	0.176	0.277
modified	4.520	0.4	494.8	99.06	255.9	0.514	3.489

- +: 最適化されなかったループ
- |: ループ構造の範囲

V: ベクトル化されたループ・配列式

+----> do ig=1,nxyz | jg=i2g(ig) | rhog(jg)=rhog(jg)*fdump(ig) +----- enddo

```
図 4 オリジナルコード
```

i	cnt=1
V> 	do ig=1,nxyz rhog_tmp(icnt)=rhog(i2g(ig)) fdump_tmp(icnt)=fdump(ig) icnt=icnt+1
V	enddo
V> V	do ig=1,nxyz rhog_tmp(IG)=rhog_tmp(IG)*fdump_tmp(IG) enddo
V> V	icnt=1 do ig=1,nxyz rhog(i2g(IG))=rhog_tmp(icnt) icnt=icnt+1 enddo

図 5 ベクトル最適化コード

3.1.3 バンクコンフリクトの削減

サブルーチン2における解析結果を表2に示す. 全体の実行時間に対してバンクコンフリクトの占 める割合が大きいことが分かる.該当のサブルー チンでは複素数型配列を利用しているために飛び アクセスが発生していると考えられる.このため, 複素数を実数部と虚数部に分け実数型配列に保存 し、メモリ上の連続する領域へのアクセスとする ことにより、速度低下やバンクコンフリクトを招 く要因となりうる飛びアクセスの削減が期待でき る.図6に最適化前の複素数型配列を利用したオ リジナルコード、図7に最適化後の複素数を実数部 と虚数部に分け実数型配列にしたベクトル最適化 コードを示す.この最適化の結果、サブルーチン 単体の実行時間は1,453 秒から 996 秒となり 457 秒短縮することができた.

表 2 サブルーチンの解析結果

PROC -	EXCLUSI	EXCLUSIVE		V.OP	AVER.	BANK C	ONFLICT
NAME	TIME[sec]	%	MFLOPS	RATIO	V.LEN	CPU PORT	NETWORK
orignal	1453.723	41.5	13481.2	99.62	255.9	255.084	821.097
modifie	d 996.058	34.9	19675.5	99.63	255.9	234.856	466.970

V> DO 101 JG=1,NXYZ
V 101 RHO2(JG)=(0.D0,0.D0)
*VDIR NODEP(RHO1)
V> DO 100 IG=1,NXYZ
JG=J2G(IG)
V 100 RHO1(JG)=P(IG)
中略
CALL FFT3BX_ASL(NRX,NRY,NRZ,NXYZ,RHO1,RHO2,WSAVE_XYZ,IFAC_XYZ)
V> do ig=1,nxyz
VG(ig)=VGG(ig)+Vloc(ig)
V enddo
V> DO 300 I=1,NXYZ
fac=dt*dreal(vg(i))
V 300 RHO2(I)=dcmplx(dcos(fac),-dsin(fac))*RHO1(I)
CALL FFT3FX_ASL(NRX,NRY,NRZ,NXYZ,RHO2,RHO1,WSAVE_XYZ,IFAC_XYZ)
*VDIR NODEP(RHO2)
V> DO 110 IG=1,NXYZ
JG=J2G(IG)
V 110 P(IG)=RHO2(JG)

図 7 ベクトル最適化コード

3.1.4 ファイル読み込みの最適化

サブルーチン3の解析結果を表3に示す.これ によりサブルーチン3ではベクトル化率が1.2%と なっている.詳細な解析により,ループ中でファイ ルからデータを読み込んだ直後に,読み込んだデー タに対して演算が実行されていることが分かった. そこで,ファイルの読み込みと演算を別々に処理 するよう,最適化を施した.その結果,ベクトル 化率が1.2%から98.99%と向上し,サブルーチ ン単位の実行時間は219.190秒から0.095秒へ短 縮することができた.

表3 サブルーチンの解析結果

PROC ·	EXCLUSIVE			V.OP	AVER.	BANK C	ONFLICT
NAME	TIME[sec]	%	MFLOPS	RATIO	V.LEN	CPU PORT	NETWORK
orignal	219.190	12.5	4.1	1.20	248.1	0.395	0.057
modified	0.095	0.0	0.0	98.99	248.0	0.017	0.061

3.1.5 自動最適化レベルの変更

この節では、自動最適化の見直しによる高速化の 検討を行った.従来は、規定レベルのベクトル化 処理を行う-Cvoptオプションを用いていたため、 最大限のベクトル化処理を行う-Choptオプション を採用した.-Choptを使うことで最適化及びベク トル化をより積極的に促進するメリットがある反 面、命令の並び換えに対する最適化が基本ブロッ クをまたがって行われるため、命令の移動に伴う 副作用が生じる可能性がある.しかし、本プログ ラムの場合は、この最適化レベルを変更しても、 演算結果に影響を与えることなく、実行時間を 22 %短縮することが確認できた.これにより、個々 の最適化と併せて、プログラムの振る舞いを見な がら適切なコンパイルオプションを選択すること が重要であることがわかる.

3.2 FEMTECK(Finite Element Method based Total Energy Calculation Kit)

3.2.1 FEMTECKの概要

FEMTECK は原子レベルのミクロな系の性質

を量子力学に基づいてシミュレーションするプロ グラムであり,アルコール等の分子性液体や燃料 電池・リチウム電池の電解質等,非常に複雑な系の 第一原理分子動力学計算に適用されている.有限 要素法を基底関数として使用しているため,並列 計算機での実行に向いており,特にスカラ型並列 コンピュータ上ではピーク性能の30%以上の実効 性能を出すことができる.一方,ベクトル型スー パーコンピュータへの対応は進んでおらず,今後, スカラ型並列コンピュータでは扱うことが困難で あるような大規模なシミュレーションをベクトル 型スーパーコンピュータで実行することが求めら れている [5].

3.2.2 ベクトル化の促進

前述の様に、本プログラムはこれまでに実行され てきた計算プラットフォームが異なるため、SX-9 における高効率実行を実現するためには、ベクト ル化を促進する方針で最適化作業を行った.オリ ジナルコードでは、ループ中にサブルーチンコー ルがあり、これがベクトル化の阻害要因となって いた.このサブルーチンコールをコンパイルオプ ション (-pi) により、インライン展開を行うことで 関数呼び出しが不要になりベクトル化が可能とな る.

また、変数へのメモリ参照がリストベクトルと なっているループでは、コンパイラにより依存関 係の有無が判断できないため自動ベクトル化が行 われない.そこで該当するループに依存関係が無 いことを確認し、コンパイラ指示行 (!cdir nodep) によりベクトル化を行う.あわせて、ループ中の stop 文や if 文もベクトル化の阻害要因となるた め、デバッグ用途で用いられていた stop 文はコメ ントアウトし、if 文による条件分岐はループの前 で行うことで、該当ループのベクトル化を行う.

次にループの繰り返し回数が短く(~16 程度) 実行効率が高くない最内側ループに対しては、コン パイラ指示行 (!cdir expand) によりループ展開を 行い、よりループ長の長い外側のループに対して ベクトル化を行う.また最内側がベクトル化され ているもののそのループ長が 256 に満たないルー プでは、外側のループをコンパイラ指示行 (!cdir unroll) によりループアンローリングを行う.ルー プアンローリングとはループ本体の演算数を n 倍 にし、繰り返し数を 1/n とすることでロード・ス トア回数を削減する高速化技法である [1].コンパ イル指示行をプログラム中に挿入することでコン パイル時に自動的にアンローリングされる.アン ローリング指示行をプログラム中に挿入し,ルー プをアンローリングすることで,ループ中の配列 のロード・ストア回数を削減する.これらの手法 によりベクトル化されたループの実行効率を高め ることが出来る.

また,FPSEIDの時と同様に,自動最適化オプ ションを-Cvoptから-Choptに変更し,最適化お よびベクトル化を促進する.一つのサブルーチン でループ中の不変式をループ外へ移動したことに より結果に差異を生じたため,該当のサブルーチ ンに対しては,不変量の移動を抑制するオプショ ン指示行を適用する.

以上で示した最適化によりベクトル化が促進され、オリジナルコードに対して最適化後のコード は実行時間比で 3.4 倍高速化され、プログラム全 体のベクトル化率は 92.23 %から 99.17 %に向上 することが出来た. さらに、ベクトル型スーパー コンピュータでのピーク性能は 39 %の実効性能を 達成することが出来た.

3.3 QMAS(Quantum MAterials Simulator) 3.3.1 QMAS の概要

QMAS は、平面波基底と Projector Augmente d-Wave (PAW) 法を用いて、密度汎関数理論に基 づき、物質の電子状態および各種物性値を高精度 に計算できるプログラムである.新規な計算技術 をいち早く導入し活用するためのプラットフォー ムでもある.これまでの主たる研究対象としては、 有機導体/強誘電体、鉄系超伝導体、遷移金属酸化 物などを扱ってきた.また、陽電子状態・消滅パ ラメータの計算が可能であり、半導体中の格子欠 陥の研究に利用している.今後、通信部分を減ら し、1CPUでの実行性能を高め、高メモリバンド 幅を活用できるプログラムが求められている [6].

3.3.2 バンクコンフリクトの削減

表4に QMAS のサブルーチンの解析結果を示 す.これを見るとこのサブルーチンにおいてはバ ンクコンフリクトが発生しており,これを削減す ることで性能改善が期待できるが分かった.

表 4 サブルーチンの解析結果

PROC -	EXCLUSIVE			V.OP	AVER.	BANK C	ONFLICT
NAME	TIME[sec]	%	MFLOPS	RATIO	V.LEN	CPU PORT	NETWORK
orignal	203.045	10.0	25237.5	99.72	250.5	15.747	105.658

本プログラムを確認すると,図8に示すように 該当のサブルーチンでは,共通する演算処理やリ ストベクトルがあった.共通する演算処理はルー プの外に括りだすことで演算量を削減することが できる.また,図9のようにリストベクトルを解 消するため,作業配列を導入しバンクコンフリク トを削減する.

また, さらなるバンクコンフリクトを削減する ためにループアンローリングを行う.

do ii=1,nbase do ip=1,nprj(ika) zzz=dcmplx(0.d0,0.d0) do i=igbgn,min0(igend,ngk(ik)) zzz=zzz + +prg(i,ip,ika,ik)*vpr(kdidx(i,ik),ina)
<pre>+ *dconjg(vpr(kdidx(i,ik),inabs(ii)) + *upg(i-igbgn+1,iibs(ii),katm(inabs(ii))))</pre>
end do prjst(ip,ii,ina)=zzz end do end do end do
do ii=1,nbase zzz=dcmplx(0.d0,0.d0)
do i=igbgn,min0(igend,ngk(ik)) zzz=zzz + +vpr(kdidx(i,ik),inabs(ii)) + *upg(i-igbgn+1,iibs(ii),katm(inabs(ii)))
+ *dconjg(vpr(kdidx(i,ik),inabs(jj)) + *upg(i-igbgn+1,iibs(jj),katm(inabs(jj))))
end do

do ii=1,nbase do i=igbgn,min0(igend,ngk(ik))
upg_tmp(ii)= + upg(i·igbgn+1,iibs(ii),katm(inabs(ii)))
dconjg_tmp(ii)=dconjg(vpr(kdidx(i,ik),inabs(ii))
+ *upg_tmp(ii))
enddo enddo
!cdir noloopchg !cdir outerunroll=8 do ii=1,nbase do i=igbgn,min0(igend,ngk(ik)) ztmp2(ii)=ztmp2(ii) + +prg(i,ip,ika,ik)*vpr(kdidx(i,ik),ina)
+ *dconjg_tmp(ii)
end do enddo
<pre>!cdir noloopchg !cdir outerunroll=8 do ii=1,nbase do i=igbgn,min0(igend,ngk(ik)) ztmp2(ii)=ztmp2(ii) + +vpr(kdidx(i,ik),inabs(ii))</pre>
+ *upg_tmp(ii)
+ *dconjg_tmp(jj)
end do enddo

最適化後の解析結果を表5に示す.この最適化 の結果,バンクコンフリクトを大幅に削減するこ とができ,実行時間はオリジナルコードに対して およそ1.8倍に改善した.

表 5 サブルーチンの解析結果

PROC .	EXCLUSIVE			V.OP	AVER.	BANK C	ONFLICT
NAME	TIME[sec]	%	MFLOPS	RATIO	V.LEN	CPU PORT	NETWORK
orignal	203.045	10.0	25237.5	99.72	250.5	15.747	105.658
modified	110.504	9.7	23257.0	99.55	249.8	5.257	39.183

4. まとめ

本稿では、分子動力学シミュレーションの高度 化のために本センターで取り組んでいるプログラ ムの高速化技法について述べた.本センターが計 算資源として提供しているベクトル型スーパーコ ンピュータ SX-9 の性能を最大限に引き出すため には、ベクトル演算が可能な箇所をできるだけ増 やしベクトル化率を向上させることや、効率的な メモリアクセスを実現することによって高いメモ リバンド幅性能を十分に引き出す必要がある.

研究の最前線で利用されている3つの分子動力 学シミュレーションの性能解析に基づいて,ベク トル化を促進させるためのチューニングや,連続 したメモリへのアクセス,バンクコンフリクトの 削減や抑制などの最適化を行った.これにより, FPSEID, FEMTECK, QMAS のそれぞれで1.4 倍, 3.4 倍, 1.8 倍の性能向上を達成することができ た.

これらの高速化支援により, 従来の計算時間では 困難であったシミュレーションを実現でき, 実験だ けでなく計算科学による分子動力学の解析に貢献 することができる [2]. 今後の課題として FPSEID は並列性能向上と主記憶容量の削減を行い, 大規 模・長時間のシミュレーションを現実時間内で実 行することが挙げられる. FEMTECK は, 次期 スーパーコンピュータを見据えた高速化を検討す ることが挙げられる. QMAS は, 通信部分の時間 を削減し, 高メモリバンド幅を活用できるコード が挙げられる.

謝辞

本活動は,共同研究に参画する産業技術総合研 究所の石橋章司博士,土田英二博士,宮本良之博 士,日本電気株式会社の稲坂純様,萩原孝様,磯 部洋子様,百瀬真太郎様に多大なご協力をいただ いた.ここにあらためて感謝の意を表する.

参考文献

- [1] 東北大学サイバーサイエンスセンター, 高速化推進研 究活動報告 第5号」, (2011).
- [2] ダイヤモンド電子放出デバイスの高性能化の 鍵を理論的に解明, http://www.aist.go.jp/ aist_j/press_release/pr2013/pr20130913/ pr20130913.html
- [3] カーボンナノチューブを試験管にした光化
 学反応, http://www.aist.go.jp/aist_j/press_ release/pr2012/pr20120522/pr20120522.html
- [4] フェムト秒レーザーによる酸化グラフェンの
 非熱的還元を提案, http://www.aist.go.jp/ aist_j/press_release/pr2012/pr20120118/ pr20120118.html
- [5] 土田 英二:「有限要素法に基づく第一原理分子動力 学法について」,東京大学情報基盤センターニュース Vol.11,特集号1 (2009).
- [6] What' s QMAS , http://qmas.jp/

・本稿は大学 I CT 推進協議会(AXIES)2013 年 度年次大会で発表したものであり,その著作権は 大学 ICT 推進協議会に帰属している.

[大学 ICT 推進協議会 2013年度 年次大会論文集より転載]

キャンパス無線 eduroam の国内外の最新動向 – 利便性と耐障害・耐災害性の向上 –

後藤 英昭, 曽根 秀昭

東北大学 サイバーサイエンスセンター {hgot,sone}@isc.tohoku.ac.jp

概要: 学術系の無線 LAN ローミング基盤である eduroam は,国内では 2012 年度末 の 43 機関から 56 機関 (2013 年 10 月現在) に成長し,国際的にも新規参加国が相次いで いる.欧州では大学以外にも病院,空港・駅,博物館などでサービス提供される例が見ら れ,応用が広がってきている.また,端末の設定を自動化するツールや,世界の eduroam 基地局マップの開発など,利便性の改善も進められている.本報告では,eduroamの最 新状況を概説するとともに,利便性の向上策と,耐障害・耐災害性を実現する新しい認証 サービスの開発状況を紹介する.

1 はじめに

国際的な学術無線 LAN ローミング基盤である eduroam (エデュローム)は、世界中の大学や研究 所等において、キャンパス無線 LAN の相互利用を 実現する [1]. 日本では, 2006 年の eduroam 参加以 来,東北大学がその運用の責任校として,国立情報 学研究所 (NII) と共同で運用および研究開発を行っ ている. 2013 年 10 月時点での国内の参加機関数は 56 であり,順調に増加している.大学 ICT 推進協 議会年次大会 [2,3] を始め、各種研究会や学会など における広報により, eduroamの知名度も高くなっ てきており、参加に向けて準備中あるいは検討中の 機関も少なくない. しかしながら, 日本国内には 1,200 を超える高等教育機関があり, 普及率では約 4.7%に留まっている. eduroam 導入の障壁を緩和 するために, eduroam の運用主体である eduroam JP では、「eduroam 代理認証システム」(東北大学) や「仮名アカウント発行システム」(京都大学, NII), SINET を利用したゲストネットワークなどを開発・ 提供してきた.

世界に目を向けると,2010 年に eduroam 開発 元の TERENA で GeGC (Global eduroam Governance Committee) が組織され,国際的な運用体 制が整備されて以来,新規参加国が相次いでいる. [2] で既報のとおり,市街地の公衆無線 LAN による eduroam サービスも一部で行われているが,近年 では空港や駅に導入される例も見られる.

一方, eduroam の利便性にはまだ改善の余地が 多く残されており,利便性改善のための様々な開発 も進められるようになった.安定性の改善も必要と されているが,特に耐障害性については,東日本大 震災の経験を生かして,我々の研究グループが重点 的な研究開発を行っている [3]. 本報告では、eduroamの国内外の最新状況を概 説するとともに、利便性の向上策と、耐障害・耐災 害性を実現する新しい認証サービスの開発状況を紹 介する.

2 国内外の eduroam の動向

2.1 国内の状況

eduroamの国内基盤である eduroam JPは, 2006 年に日本が eduroam に参加して以来,徐々に参加 機関が増え、国内の機関数は2011年末に27,2012 年末には 43 となり、2013 年 10 月現在で 56 機関に 至っている.しかしながら、国内には約1,200の高 等教育機関があり、普及率はまだ 4.7%に過ぎない、 eduroam 導入の障壁を緩和するために, eduroam JP では、「eduroam 代理認証システム」(東北大学) や「仮名アカウント発行システム」(京都大学, NII), SINET を利用したゲストネットワークなどを開発・ 提供してきた. 代理認証システムは, 各機関の RA-DIUS IdP (ID プロバイダ)の機能を代行するウェ ブサービスであり,機関の管理者用アカウントをオ ンラインサインアップで取得するだけで,機関内の 利用者のための eduroam アカウントを随時取得で きるようになる.現在,20機関がこのシステムを 利用しており、機関のメインの eduroam IdP とし て利用するほか、機関内に構築した IdP の補助と して利用する例や、学会等のゲスト用アカウントの 発行に利用している例が見られる.

仮名アカウント発行システムは、学術認証フェデ レーション (学認, GakuNin)[4] の ID を用いて、各 利用者が自分の eduroam アカウントを取得できる ようにするウェブサービスである. 既に学認に参加 している機関では、eduroam IdP を機関に導入す る必要がなくなり、システム構築でも運用面でも利

点がある.

キャリア/ISP と eduroam の連携は、残念ながら 進んでいない状況である. eduroam JP では、2010 年に旧ライブドア社と連携し、同社の公衆無線LAN サービスである livedoor Wireless の基地局を利用 して、関東地区の市街地 (屋外) やカフェ、貸し会議 室などでの eduroam サービスを実現した [2]. 同社 の改組・事業移管に伴い、livedoor Wireless は 2013 年 4 月にサービス終息し、屋外 (柱上) 基地局も停 波することになったが、約 130 の屋内基地局につい ては eduroam 連携が継続している.

機関の eduroam システムの構築を支援する機器 が,幾つかの国内企業で開発されるようになった. eduroam の仕様に合わせた RADIUS サーバ/プロ キシ機能を有するアプライアンス製品が市販されて おり,煩雑なインストール作業や設定を行わずに, eduroam 対応のキャンパス無線 LAN システムを構 築できる.

2.2 世界の状況

世界的にも eduroam の参加国 (地域) が徐々に増 加しており, 2013 年現在で 70 弱となっている. こ の二年ほどで,南アフリカ共和国やロシア,南米各 国が参加し,南極を除くすべての大陸に一通り行 き渡ったことになる.アジア地域では,シンガポー ルやタイ,韓国が参加し,11 か国 (地域) に至って いる.

カナダやUS, シンガポール,タイなどは,国内 の普及が比較的速いが,国によっては立ち上がりの 遅い所もある.これは国内事情に依るので,国外か らの支援は基本的に困難であるが,日本の「代理認 証システム」のような IdP ウェブサービスが有効 と考えられるケースもあり,実際に TERENA の会 議においても注目されるようになった.欧米におい ても,小さな機関などのサポートや,ゲストアカウ ント発行の問題が顕在化してきており,集中型のア カウント発行システムの検討が始まっている.

市街地における eduroam サービスについては, [2] でもルクセンブルク市の例などが既報であるが, 最 近目立ったところでは, 北欧の空港等におけるサー ビスがある.スウェーデンでは, 国内の学術ネット ワーク SUNET のプロジェクトにより, 駅や空港を はじめ, The Cloud が提供する市街地の一部のアク セスポイントで eduroam が利用できるようになっ た.ノルウェーの UNINETT でも類似のプロジェ クトがあり, 2013 年に, 国内の 19 の空港において eduroam の試験運用が行われている.

大学のみならず,病院や博物館において eduroam サービスを提供する例も見られるようになった.例 えば,ロンドン自然史博物館にも eduroam の基地 局を見つけることができる.

2.3 利便性の改善

eduroamの利便性を改善するためのツールやサー ビスの開発が進められているので、代表的なものを 紹介する.

eduroam で採用されている IEEE802.1X に基づ く認証方式は、世界標準として広く採用されてお り、Windows シリーズを始め、MacOS、Android, iOS などの様々なオペレーティングシステム (OS) が対応している.しかしながら、一部の OS では 無線 LAN に接続するための設定が煩雑で、多く の利用者にとって難解であるという問題があった. eduroam を利用しやすくするために、設定を容易に 行うためのツール "eduroam CAT (Configuration Assistant Tool" が欧州の DANTE によって開発さ れた [5].現在、eduroam CAT は以下の OS に対応 している.

- Microsoft Windows 8, 7, Vista, XP
- Apple OS X (Mountain Lion, Lion)
- Apple iOS (iPhone, iPad, iPod touch)
- Linux (多くの主要ディストリビューション)

日本の機関はまだ eduroam CAT に情報を提供し ていないので、これを利用できない状況である.ま た、ユーザインタフェースが日本語に対応していな いため、国内の多くの利用者には利用しにくいだろ う.今後の機能拡張あるいは類似ツールの提供が望 まれる.

もう一つの便利なサービスが,eduroam 基地局 マップである.長距離用に特別に設計された基地局 を用いる場合を除いて,一般に無線 LAN の電波の 到達範囲はそれほど広くない.eduroam を利用す る場合は,基地局の概ねの位置を知る必要がある. 自分の所属する機関においても,初めて利用する場 合は eduroam 対応の基地局を探す必要がある.訪 問先で eduroam を利用しようとすれば,よほど密 に基地局が設置された機関でない限り,利用できる 場所を探し出すのが難しいことも多い.慣れない外 国の地で eduroam のある最寄りのキャンパスを探 し出そうとすれば,面倒はなおさらのことである.

世界の eduroam サービス状況のモニタリングを 行ったり,統計情報,参加機関情報などをとりまと めるための, "eduroam database" の構築が進めら れている. このデータベースには,各国の基地局 の位置情報も登録されており,ウェブ上で地図の 上に位置を表示できるサービスが提供されている. さらに,The JNT Association (英国)で開発され た "eduroam Companion" を利用すると, eduroam database の登録情報を元にして,Android や iOS で動作するスマートフォン,タブレットなどの携 キャンパス無線 eduroam の国内外の最新動向 一利便性と耐障害・耐災害性の向上一

帯端末でも eduroam 基地局マップを見ることができる.

日本はまだモニタリングのための情報を eduroam database に提供していないが,基地局マップに必 要な最低限のデータのみ,2013 年 7 月より提供開 始した.執筆時点で一部の先行機関のみが詳細な位 置データを提供しているが,ほとんどの機関は本部 位置が暫定的に登録されている.基地局の位置デー タは各機関より提供してもらうほかないので,その データの収集方法について現在検討中である.

3 耐障害・耐災害性向上のための研究開発

eduroam は世界の無線LAN ローミングのデファ クトスタンダードとなり、既に世界中で便利に利用 されているが、その安定性と効率にはまだ解決す べき課題が残されている. eduroam の耐障害・耐 災害性を向上させるための、最近の研究開発を紹介 する.

3.1 背景

例えば、日本で発行されたアカウントを持って外 国を訪れた場合や、その逆に、外国からの訪問者が 日本で eduroam を利用する場合、ユーザ認証が安 定せず、認証成功までに数分かかったり、無線 LAN の利用中に突然ネットワークが切断されることがあ る. このような不安定性は、他の国でも同様に発生 し、国内のローミングでも発生することがある.

2013 年 3~5 月には、アジア太平洋地域のトップ レベル RADIUS サーバの障害が相次ぎ、完全な復 旧までにかなりの日数がかかった. eduroam の標 準的な構成では、世界のトップレベルの RADIUS サーバや各国、各機関のサーバが、ツリー状の階層 的な認証ネットワークで結ばれている. そのため、 上位のサーバに障害が発生すると、広域に影響があ る. また、多くの RADIUS サーバを中継するほど、 認証処理が不安定になることが経験的に知られて いる.

eduroamの安定性を向上させるために,RadSec と呼ばれる通信方式が開発され,一部の国々では既 に利用されている[6].RadSecはeduroamの安定 性向上に効果的であるが,DNSSECが必要になる ことから,導入のしきいが高くなるという欠点があ る.また,前述したようなサーバ障害には対応でき ない.

eduroam の信頼性を高めていくためには、耐災 害性・強靭性に関する取り組みが必要である.

3.2 研究開発の状況

筆者らは、東日本大震災の経験を受けて、災害に 強いキャンパス無線LANを実現するために、eduroam の耐災害性向上についての研究を遂行してきた.ク

図 1: クライアント証明書を利用したローカル認証

ラウド型代理認証システムによる耐災害性向上については、[3] で既報のとおりである.さらに、公衆 無線LANへの応用も想定して、被災地の避難所な どで利用できるような、耐災害無線LANシステム についての研究を進めてきた[7].後者の研究では、 ネットワークインフラの被災や広域停電などで広 域ネットワーク(WAN)が利用できない場合を想定 し、そのような場合でもユーザ認証を可能とする、 ローカル認証方式を開発した.クライアント証明書 を利用したローカル認証の様子を図1に示す.

このローカル認証方式は, eduroam でも利用さ れている IEEE802.1X に基づいている. eduroam では様々な EAP(拡張認証プロトコル, Extensible Authentication Protocol) が利用できるが, ここで は EAP-TLS (~Transport Layer Security) を利用 しており, プロトタイプシステムは実際に eduroam システム上に構築された.

eduroam で EAP-TLS に基づくユーザ認証を行 う場合,一般的には RADIUS ツリーを利用し,認 証リクエストは利用者の所属機関にある RADIUS IdP まで届けられる.一方,ローカル認証方式では, eduroam アカウントを発行する機関がクライアント 証明書に署名し,その際に利用される秘密鍵とペア になる公開鍵を他機関に配布しておく.無線 LAN 基地局を収容する RADIUS サーバに予めこの公開 鍵を導入しておくことで,WAN を介さないで認証 処理が完結する.この耐災害無線 LAN システムで は,各都道府県がアカウントの発行に責任を持つと いう運用を想定したので,47 個の公開鍵を事前に RADIUS サーバに登録しておけばよい.

eduroam にこのローカル認証方式を応用するこ とで,RADIUS サーバやネットワークの障害にも 強いシステムが実現できると考えられる [8].さら に,WAN を介して認証リクエストを多段にリレー する必要もなくなるので,認証の安定化や高速化に も寄与できる.ただし,eduroamの標準の構成で は世界中の参加機関がアカウント発行機関となるこ とから,図1の構成ではすべてのRADIUS サーバ に世界中の公開鍵をインストールする必要があり,

図 2: 耐障害・耐災害 eduroam のアーキテクチャ

現実的ではない. この問題に対処するために,代 理認証システム (DEAS, Delegate Authentication System) のような集中型の IdP を併用する. 耐障 害・耐災害 eduroam のアーキテクチャを図2に示す.

このシステムを利用しようとする国は,集中型の IdPを用意し,また,国のトップレベルの RADIUS proxy にローカル認証の仕組みを付加し,他国の公 開鍵を取り寄せて事前に登録するか,認証要求に応 じて動的に公開鍵を取得できるようにしておく.世 界の国数は 200 弱であるので,RADIUS proxy に 登録される公開鍵の数も高々200 で済む.

利用者がある国を訪問し、eduroamを利用しよう とする時、訪問国の RADIUS proxy が利用者の国 の有効な公開鍵を利用できる場合は、図2の Path A が選択されて、認証が国のトップレベルで終端さ れる.これにより、大陸をまたぐような長距離の通 信を行うこと無しに認証が完結し、信頼性と速度の 向上に寄与すると考えられる.

もし公開鍵の取り寄せが何らかの障害によって失 敗した場合は、Path Bが選択され、認証要求は利用 者の国まで届けられる.本システムを導入していな い国の場合は、利用者の所属機関の RADIUS IdP まで認証リクエストがリレーされる.これによって 従来システムとの互換性が保たれる.

さらに効率的で安定な認証を実現するために、本 システムを利用する国の各機関は、自国の公開鍵を 基地局に最寄の RADIUS proxy に事前に登録して おく.これにより、自機関の利用者の認証は機関内 のネットワークだけで完結することになり、国のプ ロキシの負荷を大幅に減らすことが可能である.

このシステムの基本的な認証処理は [7] で構築し たプロトタイプで動作確認済みであるが,認証経路 の自動切り替えや公開鍵の交換,不正利用等に対処 するための CRL (Certificate Revocation List) の 交換などの機能を含めたシステムの実装は,現在進 行中である.機能と性能の評価が今後の課題である.

4 むすび

eduroamの国内外の最新状況を概説するとともに、利便性の向上策と、耐障害・耐災害性を実現する

新しい認証サービスの開発状況を紹介した. eduroam の基本的な仕組みにはできるだけ手を付けずに,端 末の設定を支援するツールや,基地局マップなど, 利便性を向上させるためのツールやサービスが徐々 に充実してきている.また,安定で高速な認証が行 えるようにするための技術的な改良も進められてい る.これらは,導入に際して機関の管理者や利用者 にできるだけ負担がかからないように配慮されてい るが,基地局マップのデータ作成のように若干の負 担増もある.余力のある機関には,eduroamの利 用環境の改善のために,データ提供や各種ツール/ サービスの紹介などを行っていただけると幸いで ある.

参考文献

- [1] eduroam JP: http://www.eduroam.jp/
- [2] 後藤英昭, 曽根秀昭, "キャンパス無線 eduroam 導入のメリットと国内外の動向,"大学 ICT 推 進協議会 2011 年度年次大会 論文集 D10-6, pp.259-263, 2011.
- [3] 後藤英昭, 曽根秀昭, "eduroam で作る災害に強い大学間連携キャンパス無線 LAN," 大学 ICT 推進協議会 2012 年度年次大会 論文集 H9-3, pp.326-329, 2012.
- [4] 学術認証フェデレーション (GakuNin): https://www.gakunin.jp/
- [5] eduroam CAT: https://cat.eduroam.org/
- [6] S. Winter, M. McCauley, S. Venaas, and K. Wierenga, "Transport Layer Security (TLS) Encryption for RADIUS," IETF RFC6614, May 2012. Winter, S. et al., 2012.
- [7] S. Kinoshita, T. Watanabe, Y. Yamasaki, H. Goto, and H. Sone, "Fault-Tolerant Wireless LAN Roaming System Using Client Certificates," IEEE 37th International Conference on Computer Software and Applications (COMP-SAC2013), pp.822–823, 2013 (Kyoto, Japan, July 22–26).
- [8] H. Goto, H. Liu, S. Kinoshita, M. Nakamura, and H. Sone, "DISRUPTION-TOLERANT, LARGE-SCALE WIRELESS LAN ROAM-ING ARCHITECTURE FOR EDUROAM," Proc. of IADIS International Conference Applied Computing 2013, pp.191–195, 2013 (Fort Worth, Texas, USA, Oct.23–25).

[大学 ICT 推進協議会 2013年度 年次大会論文集より転載]

東北地区の大学・高専等のウェブサーバにおけるサーバ証明書の利用状況*

水木 敬明, 森 倫子, 曽根 秀昭

東北大学 サイバーサイエンスセンター

東北大学 情報部情報基盤課

tm-paper+axies@g-mail.tohoku-university.jp

概要:東北大学サイバーサイエンスセンターに事務局が置かれている東北学術研究イ ンターネットコミュニティ(TOPIC)には、東北地区の大学・高専・学術研究機関が参 加している。本発表では、各 TOPIC 参加組織が運用するウェブサーバに関して、サー バ証明書の利用状況を考察する。具体的には、証明書の発行者、署名アルゴリズム、 公開鍵、及び Record Protocol で利用される暗号化アルゴリズムについて調査及び考 察する。

1 はじめに

東北地区には、学術研究・教育活動を支援す るコンピュータネットワーク環境の発展に貢献 することを目的とした「東北学術研究インター ネットコミュニティ(TOPIC)」があり、東北地 区の大学・高専・学術研究機関が参加すること によりコミュニティを形成している。2013年11 月現在の会員機関数は57であり、TOPICの事務 局は東北大学サイバーサイエンスセンターに置 かれている。

本稿は,各 TOPIC 参加機関が運用するウェブ サーバに関して,サーバ証明書や SSL/TLS 技術 の利用状況について調査し,その結果をとりま とめたものである。より具体的には,各 HTTPS (HTTP over SSL/TLS)サーバに対して,サーバ 証明書の発行者,署名アルゴリズム,公開鍵, 及び Record Protocol で利用される暗号化ア ルゴリズムについて調査及び考察する。

ハッシュ関数なども含めた暗号化アルゴリ ズムや SSL/TLS 技術の概要については,文献[1] がわかり易く,2008 年当時における政府公共 系・金融系の HTTPS サーバの状況も報告されて いる。本稿の報告は,同様な調査を現在の東北 地区の大学・高専等のサーバに対して試みるも のである。

2 調査対象 HTTPS サーバの列挙

本節では、調査対象とする HTTPS サーバをど

のように選定したかについて説明する。

2.1 Google 検索による発見

TOPIC 参加機関が運用する HTTPS サーバを見 付けるにあたっては, Google 検索を利用した。 すなわち,「allinurl:https://*tohoku.ac.jp/」 等を検索文字列として入力し,得られる検索結 果から各 FQDN に対して代表的な URL を保存し, HTTPS サーバの1つとして記録した。

TOPIC のウェブページの「参加組織一覧」に おいてリンクされている各機関のドメインに基 づいて上述の検索を実施した。実施時期は 2013 年 9 月である(東北大学のドメインのみ 6 月に実施した)。

以上の要領で作成してあった HTTPS サーバの リストに基づき,再度 2013 年 11 月にリスト中 のすべての URL に対してウェブブラウザで接続 を試み,HTTPS として接続可能なもののみを抽 出して,最終的な調査対象 HTTPS サーバとした。

2.2 調査対象サーバの概況

前述の方法で調査対象となった HTTPS サーバ を有する TOPIC 参加機関は 38 機関であり, サー バの合計数は 171 であった。その内訳として, 3 台以上のサーバを持つ機関を表に記す。

TOPIC 参加機関	台数
東北大学(tohoku.ac.jp)	64
秋田大学 (akita-u.ac.jp)	10

北里大学(kitasato-u.ac.jp)	8
弘前大学(hirosaki-u.ac.jp)	7
東北学院大学(tohoku-gakuin.ac.jp)	7
会津大学(u-aizu.ac.jp)	5
岩手県立大学(iwate-pu.ac.jp)	5
山形大学 (yamagata-u.ac.jp)	5
福島大学(fukushima-u.ac.jp)	5
仙台高等専門学校(sendai-nct.ac.jp)	4
岩手医科大学(iwate-med.ac.jp)	4
岩手大学 (iwate-u.ac.jp)	4
石巻専修大学(isenshu-u.ac.jp)	4
八戸工業大学(hi-tech.ac.jp)	4
東北福祉大学(tfu. ac. jp)	3
福島県立医科大学 (fmu.ac.jp)	3

無論,今回対象となったHTTPSサーバでTOPIC 参加機関が運用するすべてのものを網羅してい るわけでは決してなく,ここで見付からなかっ たサーバも潜在的に数多く存在することが予想 される(例えば,もちろん各機関の内部ネット ワーク等で利用されているサーバは見付からな いし,Google検索にクロールされていないサー バも漏れている)。

次に,171 個の各 FQDN から(冒頭の)ホスト 名を取り出して数え上げ,2 個以上のものを並 べると次の表のようになった。

ホスト名	個数
WWW	58
webmail	9
wm	4
portal	4
ia	3
www3	2
wmail	2
ssl	2
menkyo	2
mail	2
lms	2

必ずしもホスト名の文字列がSSL/TLSの上に のっているサービスを表すとは限らないが、お およその傾向は見て取ることができる。文字列 として最も数の多かった「www」は、その機関や 機関内の部局等における情報を発信するウェブ サイトであるケースが多い。また、例えば 「webmail」,「wm」,「wmail」及び「mail」は、 その名の通り、ウェブメールのサービスを提供 するものばかりであった。その他、(ID/PW によ るユーザのログインを必要とする)ポータルサ ービスや VPN サービス、教育コンテンツ系サー ビス等の提供において HTTPS サーバが活用され ている様子がわかる。

3 サーバ証明書の発行者の調査

本節では,調査対象のHTTPS サーバが利用し ているサーバ証明書の発行者の情報を調査する。 具体的には, OpenSSL を用いて, 次のコマンド により得られる Issuer の情報を取得し, とりま とめる。これ以降に記載する調査はすべて 2013 年 11 月に行った。

% openssl s_client -connect www.tohoku.ac.jp:443 -showcerts </dev/null

以下に,発行者となっている数が多かったも のの上位6つを示す。

発行者	サーバ数
NII Open Domain CA - G2	69
VeriSign Class 3 Secure Server CA - G3	23
GlobalSign Domain Validation CA - G2	13
RapidSSL CA	9
Cybertrust Japan Public CA G2	7
AlphaSSL CA - G2	5

最も数の多い「NII Open Domain CA - G2」 は、国立情報学研究所の「UPKI オープンドメイ ン証明書自動発行検証プロジェクト」[2]による もので、このプロジェクトに参加する機関は費 用の負担なくサーバ証明書を発行してもらえる こともあり、TOPIC 参加機関も非常に大いに利 用していることがわかる。すなわち、全体の171 サーバ中、69 サーバが NII の証明書を利用して おり、その率は約4割である。

なお,表には含まれない発行者によるサーバ 証明書の中には,自己署名証明書(いわゆるオ レオレ証明書)のものもいくつか散見された。 また,各サーバから送られてくる(上位のもの も含めた)証明書の数をカウントすると,次の ような結果となった。

送られてくる証明書数	サーバ数
1	27
2	105
3	32
4	7

送られてくる証明書が1つしかない27サーバ のうち,自身の証明書が自己署名証明書ではな かったものは3つであった。

また,送られてくる証明書の数が4である7 サーバについて調べてみると,そのうちの2つ のサーバは,自身のサーバ証明書を2個(同じ ものを)送っていた。残りの5つのサーバは, 自身の証明書,中間証明書,クロス証明書,及 び(1024ビットの)ルート証明書を送っていた (ベリサインのクロスルート方式による検証に 対応しているものと考えられる)。

4 署名アルゴリズムの調査

本節では,サーバ証明書に付いてくる署名に ついて,その生成アルゴリズムを調査する。得 られた結果は次の通りである。

署名アルゴリズム	サーバ数
sha1WithRSAEncryption	166
md5WithRSAEncryption	4
sha256WithRSAEncryption	1

この表からわかる通り,ほとんどのサーバ証明 書では,RSAとハッシュ関数 SHA-1 との組み合 わせによる署名アルゴリズムが用いられていた。 それ以外の組み合わせのものも含めて,RSAの 実体としてはすべて RSASSA-PKCS1-v1_5 が使用 されている。

また,署名に使われた鍵の長さについて,送 られてくる上位のサーバ証明書に基づいて(サ ーバから複数の証明書が送られてくるものを対 象に機械的に) チェックしたところ, 1 つを除 きすべて 2048 ビットであった。その例外の 1 つは鍵長が 1024 ビットであったが, 個別に調査 したところ, 送られてくる(有効期限切れの) 中間証明書に含まれる鍵の長さが 1024 ビット というだけで, 実際の署名は 2048 ビットのもの でなされており, (ストアされているルート証明 書と中間証明書により) ウェブブラウザでの接 続には問題がなかった。

5 公開鍵の調査

本節では、各サーバの公開鍵の情報を調査す る。その結果、すべてのサーバで rsaEncryption が用いられていることがわかり、鍵長も含めた 内訳は次の通りである。

公開鍵	サーバ数
rsaEncryption (2048bit)	149
rsaEncryption (1024bit)	20
rsaEncryption (512bit)	2

近年指摘されているように、2048 ビット未満の RSA 鍵の利用は適切ではないと考えられる。

6 Record Protocol における暗号化通信

本節では、SSL/TLS の Record Protocol にお いて、各サーバがどのような暗号化アルゴリズ ムを受け入れるかを調査する。具体的には、 OpenSSL を用いて、次の 5 つの暗号スイートを 対象にして実験を実施した。

(a)	CAMELLIA256-SHA
(b)	AES256-SHA
(c)	AES128-SHA
(d)	RC4-SHA
(e)	RC4-MD5

実験の結果を次に示す。

(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	サーバ数
	~	~	~	~	109

~	~	~	~	~	39
			~	~	8
~	~	~	~		5
~	~	~			4
	~	~	~		3
		~	~	~	2
	~	~			1

この表では、チェック(✔)の入っている暗 号スイートに対応しているサーバの台数を記載 している。この結果からは、利用可能な暗号ス イートについて、チューニングを行っているサ ーバは少ないように見受けられる。

7 おわりに

本稿では、東北地区の大学・高専・学術研究 機関が参加している TOPIC 参加組織を対象に、 サーバ証明書の利用状況や HTTPS サーバの設定 状況を調査した。

今回の調査はごく基本的なものであるが,お およその動向の把握はできたと考える。よりセ キュリティ脆弱性等に特化した項目も含め大規 模な調査が文献[3]で報告されている。また,サ ーバの暗号設定の確認に適したツールも提案さ れている[4,5]。鍵の作成時に共通の素数を使っ てしまうことによる脆弱性の問題も昨年来,注 目を集めている[6]。今後もよりきめ細かい調査 を継続してゆきたい。なお、ウェブブラウザが 利用可能な暗号スイートの確認には、「SSL Client Test」のサイト[7]が便利である。

謝辞

2.1節で述べた2013年6月と9月の検索によるHTTPSサーバのリスト化にあたっては、東北 大学工学部曽根・水木研究室の4年生の皆さん にご尽力頂いた。

参考文献

 [1] 神田雅透,暗号アルゴリズムの安全性のお話, Internet Week 2008 プレゼンテーション,2008. https://www.nic.ad.jp/ja/materials/iw/20 08/proceedings/H10/IW2008-H10-01.pdf

- [2] 国立情報学研究所, UPKI オープンドメイン証 明書自動発行検証プロジェクト. https://upki-portal.nii.ac.jp/docs/odcert
- [3] 須賀祐治,地方自治体 Web サイトの SSL 設 定状況に関する 2012 年度と 2013 年度の比 較・考察(速報版),コンピュータセキュリ ティシンポジウム 2013, pp. 1002-1009, 2013.
- [4] 佐藤亮太,吉田勝彦,知加良盛,関良明,神田雅透,SSLにおける暗号設定確認ツールの提案と評価,情報科学技術フォーラム,FIT 2011, pp. 119–126, 2011.
- [5] Qualys SSL Labs, SSL Server Test. https://www.ssllabs.com/ssltest/index.html
- [6] 黒川貴司,野島良,盛合志帆, "Mining Your Ps and Qs"のその後,コンピュータセキュリ ティシンポジウム 2013, pp. 986-993, 2013.
- [7] Qualys SSL Labs, SSL Client Test. https://www.ssllabs.com/ssltest/viewMyClient. html

* 本稿は大学 ICT 推進協議会 (AXIES) 2013 年度年 次大会で発表したものであり ,その著作権は大 学 ICT 推進協議会に帰属している。

[報告]

SC13 報告

東北大学サイバーサイエンスセンター 小松一彦

2013年11月17日~22日に米国コロラド州デンバー市において International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (通称 SC)が開催されました。 SC はスーパーコンピューティングとその関連技術に関する世界最大の国際会議であり、1988年か ら年に1回開催されており、今回で25周年目を迎えます。参加者は会議全体で約11,000人と非 常に多く、その年の最新の研究成果・製品が発表されます。今回、SC13に参加し、サイバーサイ エンスセンターにおける研究活動を発表してきましたので、その報告をいたします。

SCは技術論文が発表される本会議と、大学・研究所・企業等が最新の研究成果・製品を発表す る展示会から構成されています。サイバーサイエンスセンターは流体科学研究所と金属材料研究 所と連携し、東北大学としてスーパーコンピューティングに関する活動について、例年展示を行 っています。東北大学展示ブースでは、サイバーサイエンスセンターのスパコンシステムの紹介 や次期システムの導入スケジュールをはじめ、将来のHPCIシステムのあり方の調査研究や2.5・3 次元積層技術を活用したプロセッサに関する研究など、次世代の高性能計算基盤技術に関する最 新の研究成果の展示や発表を行いました。また、CREST「ポストペタスケール高性能計算に資する システムソフトウェア技術の創出」展示ブースにおいても、スパコン研究部の研究成果の一部を 展示いたしました。18~21日の4日間の展示会期間中、東北大学展示ブースへの訪問者は300名以 上にものぼり、活発な議論・情報交換を行うことができました。

今年の SC14 は 11 月 16 日~21 日に米国ルイジアナ州ニューオリンズ市で行われる予定です。

東北大学展示スタッフ

展示の様子

SC25 周年記念パネル

[報告]

八巻俊輔助教、阿部正英准教授、川又政征教授の研究グループが 電子情報通信学会第 27 回信号処理シンポジウムでの発表に対して、 SIP 若手奨励賞を受賞しました

サイバーサイエンスセンターの八巻俊輔助教、工学研究科の阿部正英准教授、川又政 征教授の研究グループが電子情報通信学会第27回信号処理シンポジウムでの発表に対 して、SIP 若手奨励賞を受賞しました。

受賞論文名: 方向統計学に基づく位相限定相関関数の統計的解析 (第 27 回信号処理シンポジウム論文集, pp. 478-483, November 2012.)

著者: 八卷俊輔, 阿部正英, 川又政征

学会 Web ページ: http://www.ieice.org/~sip/symp/2012/

[展示室便り⑪]

地球シミュレータ

板倉 憲一 独立行政法人海洋研究開発機構

今回は、地球シミュレータです。初 代地球シミュレータ(2002 年~2009 年、以下 ES)は、旧宇宙開発事業団(現 (独)宇宙航空研究開発機構)、旧日 本原子力研究所(現(独)日本原子力研 究開発機構)、旧海洋科学技術センタ ー(現(独)海洋研究開発機構、以下 JAMSTEC)の3つの法人によって開 発し、日本電気(株)によって製造され ました。ESはJAMSTEC内の地球シ ミュレータセンターに建造された地 球シミュレータ棟(50m×65m×17m) に設置され、完成しました。

ES は、ピーク性能が 40Tflops を持 ち、2002 年 6 月から 5 期連続で世界 のスーパー・コンピュータの TOP500

図1 地球シミュレータ棟模型写真 中央のスカイブルーのキャビネットがクロ スバスイッチ、その周りを取り囲むブルーの キャビネットが計算ノード、さらに外側の白 いキャビネットが磁気ディスクと左奥がカ ートリッジテープライブラリ

ランキングにおいて、No.1 に認定されました。これは、それまでの No.1 であった米国 ASCI Q システムの 5 倍以上の性能となり、ニューヨークタイムズ紙がソ連の有人人工衛星スプ ートニクの名前をもじり、「コンピュートニクス」と呼び、話題となりました。TOP500 ラ

ンキングは 1993 年に開始され、Linpack テ ストと呼ばれるベンチマークテストを開発 したテネシー大学のドンガラ教授や、米 NERSC のストッ クマイヤー博士とサイモ ン博士、独マンハイム大学のモイヤー博士に よって運営され、このテストによって世界で 最も強力なスーパー・コンピュータ 500 機を 選出し、結果を毎年 2 回ウェブサイトで発表

しています。

_____ ES のハードウェアは、640 台の計算ノー トワークで結合させています。各計算ノードは、ピー

ドを、640×640の単段クロスバネットワークで結合させています。各計算ノードは、ピー ク性能 8Gflops のベクトル型計算プロセッサ 8 台が主記憶装置 16GB を共有する共有メモ リ型並列計算機となっています。ノード間のデータ通信を双方向同時で24.6GB/秒でデータ を送受信することができ、全ネットワークの転送能力は、約8TB/秒です。データ通信を行 う時、ノードはデータを128個に分割し、128本のケーブルを使って並列に相手のノード まで転送され元に形に戻されます。このデータ転送を制御するためにノードあたり2本の ケーブルが使われています。ノード間の結合ネットワークで使われているケーブルの総本 数は640×130 = 83,200本であり総延長は約2,400Kmにもなります。

日本電気は、ES を基本とした SX-6 をリリースしています。これは、展示室便り⑥で紹介した SX-4と SX-7 の間の機種です。主な特徴は、この ES および SX-6 の世代から、1 チップの LSI で CPU が構成された点です。

展示室では、計算ノード筐体と計算プロセッサモジュール、メモリモジュール等を公開 しています(展示品1~展示品3)。

展示品1 計算機ノード筐体

展示品2 計算機プロセッサ、メインメモリユニット、LSI チップ

展示品3 2003年 第32回日本技術産業大賞受賞盾、トロフィー

[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/

スーパーコンピュータ SX-9 への直接ログインの停止について(No. 159)

センターではセキュリティ強化のため、スーパーコンピュータ SX-9 の会話型処理サーバ super. isc. tohoku. ac. jp (以下 super) への直接ログインを停止いたしました。

super ヘログインされる際は、並列コンピュータ Express5800 の会話型処理サーバ gen. isc. tohoku. ac. jp(以下 gen)に一度ログインし、そこから super ヘログインをお願い いたします。ログイン方法は以下の通りです。ログイン方法は以下の通りです。

gen00\$ ssh 利用者番号@super (.isc.tohoku.ac.jp は省略できます) または、 gen00\$ ssh -1 利用者番号 super ユーザ名@super's password: パスワードを入力

利用者の方にはご不便をおかけいたしますが、何卒ご理解ご協力をお願いいたします。ご 不明な点がありましたら、共同研究支援係(sys-sec@isc.tohokuac.jp,022-795-6252)まで お問い合わせ下さい。

(共同研究支援係, 共同利用支援係)

センター講習会資料の公開について(No. 159)

センターでは利用者の方のスーパーコンピュータやアプリケーションの利用をサポートす るため、センターの講習会で使用したテキスト・演習資料・サンプルデータを公開しており ます。

講習会資料のダウンロードページへは、大規模科学計算システムのトップページの「講習 会案内」のリンク、または下記のリンクよりご覧下さい。

http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/guide/archives.html

(共同利用支援係,共同研究支援係)

SAS のサービス終了について(No. 161)

SAS(データ解析システム)のサービスはシステムの更新に伴い、平成26年3月末で終了いた します。長い間のご利用ありがとうございました。

(共同利用支援係)
利用負担金(1月~3月分)の請求について(No. 161)

大規模科学計算システムの平成26年1月~3月分の利用負担金の請求を次のように行いま す(昨年と同じです)。

《学内支払責任者》

1月から2月中旬までの利用負担金を2月下旬に請求します。その後3月末までの利用負担金は、翌年度4月に請求します(平成26年度の大学運営資金で予算の調整を行います)。

なお、事前に費目の指定は必要ありません。請求金額確定後、センター会計係より各部局 の会計担当を通して照会いたします。

《学外支払責任者》

1月から2月中旬までの実績額と3月末までの利用見込額を合算した利用負担金を2月下 旬に請求します。利用見込額は以下のmikomi コマンドで2月14日(金)までに申告してくだ さい。なお、見込額と実績が異なっても精算は行わないのでご注意ください。

また、支払費目名の入った利用負担金請求書を希望する場合や、請求書の適要欄等について不明な点がある場合は、事前に会計係(022-795-3405)へご連絡くださるようお願いいたします。

【 mikomi コマンドの使用例 】

<u>ssh gen. isc. tohoku. ac. jp - 1 利用者番号</u>*並列コンピュータにログイン 利用者番号@gen. isc. tohoku. ac. jp's password: <u>パスワード</u>して下線部を入力します。 gen% mikomi

2月5日 現在の見込み額は次のとおりです。
支払責任者 : OO OO (u23456)
見込み額指定者 : 0円
1. 見込み額の指定 2. 削除 9. 終了
何番の処理を選びますか?1
見込み額を入力してください(円)?200000
登録してよろしいですか (yes/no)?yes
・・・
gen%

負担金全般に関することで不明な点がある場合は、共同利用支援係(022-795-6251)へご 連絡くださるようお願いします。

(共同利用支援係,会計係)

利用負担金額の表示コマンドについて(No. 161)

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)

研究成果リスト提出のお願い(No. 161)

平素、本センターの大規模科学計算システムをご利用いただきありがとうございます。 本センターでは、学術研究を支える世界最高水準の大規模科学計算システムの導入と利用 環境の整備・拡充を行い、研究の発展に資することを心掛けてまいりました。今後もシステ ムの整備を進めていくには、大規模科学計算システムが多くの研究分野で必要不可欠であり、 かつ研究成果が得られていることを広くアピールしていく必要があります。

つきましては、本センター大規模科学計算システムを利用して得られた研究成果を、下記 により提出くださるようお願い申し上げます。なお、提出していただく研究成果は、平成25 年度中に発表されたものとします。

記

- 1. 研究成果リスト:著者名、論文名、掲載誌(巻号頁)、発表年
- 提出方法 :電子メールでお願いします。
 提出先メールアドレス seika@isc.tohoku.ac.jp
- 3. 締切り日 : 平成 26 年 4 月 18 日 (金)
- 4. 問合せ先 : 共同利用支援係 (022-795-6251, uketuke@isc. tohoku. ac. jp)

論文等への利用の明記について

研究成果を論文等で発表する場合には、本センターを利用した旨を明記くださるようお願いい たします。

- 記入例 -

「本研究の実験結果の一部は、東北大学サイバーサイエンスセンター大規模科学計算システムを利用して得られた。」

Part of the experimental results in this research were obtained using supercomputing resources at Cyberscience Center, Tohoku University.

— 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-

- ・<u>用紙サイズ:A4</u>
- ・余白:上=30mm 下=25mm 左右=25mm 綴じ代=0
- ・標準の文字数(45 文字 47 行)

<文字サイズ等の目安>

- ・表題=ゴシック体 14pt 中央 ・副題=明朝体 12pt 中央
- ・氏名=明朝体 10.5pt 中央
- ・所属=明朝体 10.5pt 中央
- ・本文=明朝体 10.5pt
- ・章・見出し番号=ゴシック体 11pt~12pt *余白サイズ、文字数、文字サイズは目安とお考えください。

4. その他

- (1)執筆者には、希望があれば別刷 50 部を進呈します。50 部を超える分については、著者の実費 負担とします。別刷の希望部数等は投稿の際に申し出てください。
- (2) 投稿予定の原稿が15ページを超す場合は以下まで前もってご連絡ください。
- (3)初回の校正は、執筆者が行って、誤植の防止をはかるものとします。
- (4) 原稿の提出先は次のとおりです。

東北大学サイバーサイエンスセンター内 情報部情報基盤課共同利用支援係

- e-mail uketuke@isc.tohoku.ac.jp
- TEL 022-795-3406

スタッフ便り

サイバーサイエンスセンターの玄関前にあった駐車場や植え込みが撤去になり、次のスパコンを収 容する新棟の工事が始まりました。

いまのサイバーサイエンスセンターの建物を新築して、片平の通研の続きの建物にあった大型計算 機センターが移転したのが 1994 年(平成 6 年)の年末でしたので、およそ 20 年ぶりの大規模な工事 になるとおもいます。

当時は東北大学の片平キャンパスの青葉山総合移転の先駆けとも言われましたが、その後に青葉山 の新キャンパスに片平キャンパスから移転した建物がなかったなど、時代の移り変わりもありました。 また、移転してすぐに大型計算機センターの25周年記念式典がありましたが、その後に全国的な大規 模科学計算インフラを取り巻く状況や学内の情報基盤の変化もあったために、何度か改組があって、 情報シナジーセンターの時期を経て、2008年(平成20年)にサイバーサイエンスセンターになってか ら早くも6年が経ちました。

当時はスパコンとして 3 機目の SX-3/44R が 1994 年 1 月に運用を始めた直後で,大規模数値シミュレーションなどの利用者にスパコンへ移行していただいていたころでした。その一方で,まさしく大型計算機であったメインフレームの系統では ACOS3900/20 がピークとなって,その後は段階的に縮小と廃止になりました。学内のネットワークの TAINS は移転と同時に,現在の TAINS とほぼ同じ運用形態の SuperTAINS に切り替わった時期でした。こうしてみると,20 年前は,建物の新築だけでなく,スパコンも TAINS も大きな転換点だったようです。新棟が運用を始める今年がどういう転換点になるのか,楽しみです。(H.S)

新年あけましておめでとうございます。

昨年は仙台市民の念願でした東北楽天ゴールデンイーグルスが日本一となり,楽天ファンには最高 の一年だったのではないでしょうか。さて平成26年の今年は午年です。午は太陽が最も高く上がった 状態を示します。お昼の12時が『正午』と呼ばれるのはそのためです。頂点を表し、上昇していたも のが下降に、また、その逆もある変動の時期でもあると言われています。昨年は楽天イーグルスが頂 点を極め野球で仙台が大変盛り上がりましたが、今年はどんな結果になるのでしょうか。また、昨年 不本意な成績であったサッカーのベガルタ仙台は新監督を迎えていい意味での変革をチーム内にもた らしていただき、優勝を目指して頑張ってほしいと切に願っております。

本センターでも今年はスーパーコンピュータの更新やそれに伴うスパコン新棟の建設などまさに変動の年になりそうな勢いです。「荒午の轡は前から」との故事のように正面から堂々と仕事に邁進したいと思いますので、どうぞよろしくお願いいたします。(H.T)

サイバー	サイ	エンスセンタ	マースタッフ転入・転出	のお知らせ
L転入」 2013.11.	1	八巻俊輔	(先端情報技術研究部)	工学研究科より
[転出] 2012 5	1	木朗叙声	(生態桂恕は海研空室)	医受研究剤・医受知へ
 2015. 5.	1	平间腔尿	(元姉)同報(又)[1019] 元司)	医子侧 九杆· 医子 司· 、



サイバーサイエンスセンター本館前 画面手前:センター新棟工事 画面奥 :整備中の青葉山新キャンパス

SENAC 編集部会

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

平成 26 年 1 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 創文印刷出版株式会社 SENAC Vol. 46 (No. 1~No. 4)

2013. 1~2013. 10

項目	Na	р.	項 目	No.	р.
发皕言			情報処理学会全国大会関連見学者報告		
2013年車北大学及びサイバーサイエンスセンター			一IFFF Computer Society 会長 David Alan Grier		
への期待 野口正一	1	1	氏 和田革一先生 情報処理学会見学ツアー等の		
北同研究成果	1	1	ちょうにご来訪いただきました―	2	50
ダウンスケールシミュレーションにおけろ台風の			登際大規模情報其般土同利用・土同研究拠占	-	00
再現性について 溶田 直之他	1	3	第5回シンポジウム報告 汀川隆輔	4	19
ヤマヤ研究のための再解析・気候モデルデータの	1	0	サイバーサイエンスヤンターオープンキャンパ		10
ダウンスケーリング 良田昭久他	1	9	ス報告	4	27
Convergence Property of Flexible GMRES for the	1	Ŭ	林愿一准教授 本間尚文准教授 水木敬明准		21
Method of Moments Based on a Volume-Surface			教授 青木差文教授 曽根黍昭教授の研究グ		
Integral Equation Hidetoshi Chiha du	1	17	ループが 2013 IFFF FMC International		
Building-Cube Method による大規模流体解析デー	1	11	Symposium on Electromagnetic		
タの圧縮法の開発 坂井玲太郎他	2	3	Compatibility · Best Symposium Paper Award		
初高速第二百冊電子状能計算コードの開発と広田	2	0	た受賞しました	4	28
加湿的 加强 相 引 机 忽 計 算 计 一 2 前 2 已 2 元 5 前 2 元 2 元 5 前 2 1 元 5 m 2 1 元 5 m 2 1 元 5 m 2 1 元 5 m 2 1 元 5 m 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	2	13	菅沼拓夫教授らの研究グループが 2013 IFFF		20
日と火星の全球地震波伝播シミュレーション	2	10	Global Conference on Consumer		
当て 豊富 御田	3	1	Flectronics (GCCF 2013) • Excellent Paper		
DC-RFハイブリッド執プラズマ流の非定堂3次元数	Ŭ	1	Award を受賞しました	4	29
値シミュレーション 茂田正哉	3	1	利用相談室便り		20
降差円般中での磁気乱流生成過程に関する計算機	Ŭ	Ĩ	11月1日 利用相談について	3	44
宇殿	4	1	テクニカルアシスタント自己紹介	3	46
数 GHz の周波数帯における負の透磁率を示す	*	*	展示室便り	Ŭ	10
構造の開発とその広帯域化に関する研究			<u>ルイーエレン</u> (7)ヤンター刊行物	1	69
有馬貞司他	4	7	⑧スカラ並列コンピュータ	2	51
プラズモニック構造体による光エネルギー利用の	*		⑨磁気ディスク装置と磁気記録媒体	3	51
动率化 岩長祐伸	4	13	①1960年代の計算機に関する資料	4	29
研究成果	*	10	「Web版大規模科学計算システムニュース」より	Î	
超大規模数値計算に基づく核融合炉先進ブランケ			負担金の支払費目について(No. 143)	1	72
ットデザイン条件における高精度MHD熱伝達デー			利用負担金(1月~3月分)の請求について		
タベースの構築 山本義暢 他	3	19	(No. 143)	1	72
資料	_		利用負担金額の表示コマンドについて(No. 143)	1	73
Fortran スマートプログラミング			研究成果リスト提出のお願い (No. 143)	1	74
一 第3回もっとスマートなプログラムにしよう ―			「高速化推進研究報告」の公開について(No.144)	2	53
田口俊弘	1	29	計算科学・計算機科学人材育成のためのスー		
高機能数値計算・可視化機能ソフト MATLAB の基本	_		パーコンピュータ無償提供制度について		
的な使い方 陳国躍 他	3	29	(No. 145)	2	53
大規模科学計算システム			民間企業利用サービスについて(No. 145)	2	54
ライブラリ・アプリケーションの紹介	2	21	コンパイラアップデートのお知らせ(No. 148)	2	54
全国共同利用情報基盤センター研究開発論文集			大規模ファイル領域(short 領域)の利用開始		
No. 34 より			について (No. 149)	2	55
東北大学サイバーサイエンスセンターにおける			平成 25 年度の共同研究について (No. 149)	2	56
ユーザコードの高速化支援活動 佐々木大輔 他	1	53	Gaussian 09, GaussView 5 の媒体貸出につい		
キャンパス無線 eduroam の耐災害性・耐障害性向上			て (No. 151)	3	54
と高機能化 後藤英昭 他	1	60	平成 25 年度講習会案内〈8 月 9 月開催分〉		
お知らせ			(No. 151)	3	54
平成25年度サイバーサイエンスセンター講習会案内	2	1	Gaussian09 のバージョンアップについて (No. 154)	4	32
利用負担金の値下げと利用負担金割引制度の実施			Marc/Mentat のバージョンアップについて(No. 154)	4	33
について	2	2	Mathematica のバージョンアップについて(No. 154)	4	34
紹介			MATLAB のバージョンアップについて (No. 154)	4	35
HPCI システムとサイバーサイエンスセンターの提供	1	64	利用負担金額の表示コマンドについて (No. 156)	4	36
資源紹介			利用負担額の変更について (No. 156)	4	36
報告			XDMCP(X Display Manager Control Protocol)		
後藤英昭准教授と曽根秀昭教授の研究グループが			サービス停止のお知らせ(No. 157)	4	37
大学 ICT 推進協議会 2011 年度年次大会・優秀論文賞			平成26年度「京」を含むHPCIシステム共用計算		
を受賞しました	1	67	資源の利用研究課題の募集について (No. 158)	4	37
SC12 報告 小松一彦	1	68	利用相談室のご案内(No. 158)	4	38
第17回高性能シミュレーションに関するワーク					
ショップ(WSSP)報告 小林広明	2	49			
				i	

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. jpSX-9並列コンピュータgen. isc. tohoku. ac. jpExpress5800

システム一覧

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					

計算機システム	処理	ジョブクラス	ジョブクラス CPU時間	
	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
スーパー		p8 (8cpu)	11	512GB
		р16 (16сри)	11	1024GB
		р32 (32сри)	11	$1024GB \times 2$
		p64 (64cpu)	11	1024 GB $\times 4$
	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)	11	16GB
並列 コンピュータ		am2 (Marc 専用)	11	128GB
		a8 (8 並列)	11	128GB
		a16 (16 並列)	11	256GB
		a32 (32 並列)	"	512GB

ジョブクラスと制限値



[巻頭言] 2014年東北大学及びサイバーサイエンスセンターへの期待		…渡邉	國彦	1
[お知らせ] 並列コンピュータシステムの更新について(1) 新棟建築工事期間中の出入口等の変更について				3 5
計算科学・計算機科学人材育成のためのスーパーコンピュータ無 [共同研究成果]	無償提供制	度につい	て…	6
A building-resolving simulation of sea breeze over Sendai with a parallelized CFD model	downtown	n Guixing	Chen	7
	То	Weiming shiki Iw Hiromu Kazuo	g Sha vasaki Seko Saito	
高次の CBFM を用いた誘電体近傍アンテナの数値解析		今野	佳祐	13
		陳澤谷	強 邦男	
数値タービンシステム(NTS)の大規模並列計算		 …山本 三崎 笹尾 	告 哲 建志 秦洋	19
超低周波地震の活動に基づくプレート間固着の推定	言言 慶介	松澤	暢	29
ー 切り 小 の の の の の の の の の の の の の の の の の の	国 完成 國 高峰 全田 義行	安存) 中田	□ 哈 令子	
Building-Cube Method を用いたエンジンナセルインレットから	50	占百	が正	05
與首伍播州	•••••	·····福島 大林 佐々フ	^{裕馬} 茂 木大輔	35
超高速第一原理電子状態計算コードの開発と応用柳	柳澤 将	甲 (倍) (日)	和博 之雪	47
オ ネ	、 崎 栄年 ↓ 川 良忠	稻垣	耕司	
[大学 ICT 推進協議会 2013年度 年次大会論文集より転載] 東北大学サイバーサイエンスセンターにおける				
分子動力学シミュレーションコードの高速化支援についてネ	森谷 友映	佐々2 小野	木大輔 敏	51
بر بر	、泉 健治 「Ⅲ 降輔	小松小林	一彦	
キャンパス無線 eduroam の国内外の最新動向		2 I I	手四	
一利便性と咽障害・咽災害性の向上― 東北地区の大学・高専等のウェブサーバにおける	发膝 央昭	冒恨	<u> </u> 穷昭	57
サーバ証明書の利用状況水本 敬明 系	₹ 倫子	曽根	秀昭	61
SC13報告······		小松	一彦	65
八巻俊輔助教、阿部正英准教授、川又政征教授の研究グループカ 第27回信号処理シンポジウムでの発表に対して、SIP 若手奨励賞	が電子情報: [を受賞し]	通信学会 ました ・	•••••	66
[展示室便り⑪] 地球シミュレータ・・・・・		板倉	・憲一	67
[Web版大規模科学計算システムニュースより] スーパーコンピュータSX-9への直接ログインの停止について(No 159) ••			70
センター講習会資料の公開について(No.159)		•••••	•••••	70
利用負担金(1月~3月分)の請求について(No.161)			•••••	70 71
利用負担金額の表示コマンドについて(No.161) 研究成果リスト提出のお願い(No.161)	• • • • • • • • • • • • • • • • • • • •	•••••	•••••	71 72
執筆要項			•••••	73
スタッフ便り	• • • • • • • • • • • • • • • • • •	•••••	•••••	74

