

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.50 No.1 2017-1



Cyberscience Center

Supercomputing System Tohoku University www.ss.cc.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.cc.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
		022-795-6153 (6153)	計算機利用全般に関する相談	8:30~17:15
	利用相談室	sodan@cc. tohoku. ac. jp 相談員不在時 022-795-3406(3406)	大判プリンタ、利用者端末等の 利用	8:30~21:00
一階	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
	可視化機器室	(3428)	三次元可視化システムの利用	9:00~21:00
	総務係	022-795-3407(3407) som@cc.tohoku.ac.jp	総務に関すること	8:30~17:15
	会計係	022-795-3405(3405) kaikei@cc.tohoku.ac.jp	会計に関すること、負担金の請 求に関すること	8:30~17:15
三階	共同研究支援係	022-795-6252(6252) rs-sec@cc.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 (受 付)	022-795-3406(3406) 022-795-6251(6251) uketuke@cc.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@cc.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]

気象予測とコンピュータ

東北大学理学研究科 教授 岩崎 俊樹

今日では、コンピュータを用いた数値シミュレーションが様々な分野で利用されるようになり ましたが、数値気象予測は、その草分けと言えるでしょう。ここで、コンピュータの利用という 視点でその歩みを簡単に振返ります。

第2次世界大戦後、フォン・ノイマンは、弾道計算のために開発された ENIAC を用いて気象 予測実験を行うことを提案しました。1950年には気象学者のジュール・チャーニーらと協力し簡 略化された順圧準地衡風系の渦度方程式の数値積分に成功しました。気象庁は、1959年に、日本 の官公庁として初めて電子計算機 IBM704 を導入し、数千キロメートル四方を計算領域とする短 期の数値予報業務を開始しています。もっとも、当時の予報精度は、予報官が作成した予想天気 図に遠く及ばず、ほとんど見向きもされなかったと言われています。数値モデルの改善や解像度 の向上により、1970年代に徐々に利用されるようになりました。

数値気象予測には観測データに基づく初期条件が必要です。観測データ量は予測すべき変数に 比べて圧倒的に少なく、かつ地域的に著しく偏在しています。このため観測システムの整備が数 値気象予測の大きな課題です。1970年代、計算領域を全球に広げ、予測時期間を短期予報から週 間予報に延長することが世界的な目標となりました。そのためには全球観測を実施する必要があ ります。他方、大気のカオス的な性質(エドワード・ロレンツ、1963)のために誤差が成長するの で、週間予報は不可能で全球観測は大いなる無駄だという意見もありました。議論の果てに、週 間予報の有効性を調べるため、10年の準備期間の後、1979年に、衛星、船舶、ラジオゾンデな どによる壮大な1年間の全球大気の観測システム実験(FGGE; First GARP (Global Atmospheric Research Program) Global Experiment)が実施されました。その結果、初期条件の精密化を図 れば、予測可能期間は1週間より延長できることが実証され、世界各国の気象局は、中期予報(週 間予報)を目指し、全球観測システムを整備し、全球数値予報モデルの性能向上に努めました。 現在でも、観測データ数は数値モデルの自由度に比べて著しく少ない状況は変わりません。限ら れた観測データより大気の3次元構造を解析するために、予測データを第一推定値とする高度な データ同化技術が開発されています。数値気象予測のシステムでは、時間積分のみならず、初期 条件を得るためにも、膨大な計算を実施しています。

数値気象予測の開始当初は1初期時刻1回の予測計算が通例で、計算機に余裕がある限りモデ ルの高解像度化が図られました。しかし、1回限りの計算では、カオスの世界では、予測は確率 密度関数で表すのが望ましい。このため、摂動を加えたたくさんの初期条件から数値積分を行な い、確率密度関数を直接求める、アンサンブル予報が実用化されました。現在の週間予報では、 超高解像度予報1本のと、中解像度50本のアンサンブル予報を実行しています。アンサンブル予 報から予測の信頼度の情報を提供しています。また、初期摂動は何でもよいわけではなく、デー タ同化システムで成長する誤差を抽出する必要があり、空間構造を決めることは重要な技術的課 題となっています。

一般に、数値モデルの仕様は用いる計算機のアーキテクチャーに大きく依存します。数値気象 予測の計算効率に関する第一の難点は、領域が球面であることでした。予測式は緯度経度座標で 最もシンプルに記述できますが、東西方向の格子間隔は極付近で他地域に比べて短くなります。 解像度の不均一は時間積分の効率を著しく低下させます。1970年代に、時間積分に球面調和関数 展開を利用する、いわゆるスペクトル法が実用化され、実効的な解像度が全球一様となる波数切 断を採用することで計算効率の向上が図られました。スペクトル法は数値計算誤差が小さく、物 理量の保存性にも優れているため、ほとんどの全球モデルに採用され、球面の扱いは完了したか に見えました。しかし、スーパーコンピュータがベクトル化から超並列化に向かうと状況は変化 しました。スペクトル法ではタイムステップごとにルジャンドル変換・逆変換を行います。高解 像度化に伴い、ルジャンドル変換が FFT などに較べて計算効率が悪くなることに加え、全球デー タの再配列に伴うメモリー間のデータ転送の問題が生じました。雲や放射、乱流の計算では鉛直 一次元データを同じ処理装置に入力する必要がありますが、東西の FFT では東西一次元データを、 南北のルジャンドル変換では南北1次元データをそれぞれ同じ処理装置に入力する必要がありま す。数値モデルを高解像度化すると、すべての変数を同じメモリーに置くことは難しく、変換の たびにデータ転送が発生します。気象予測の場合、計算時間だけではなく転送時間も含めた経過 時間を抑える必要があります。地球シミュレータではデータ転送時間の短縮を図るため、クロス バーケーブルと呼ばれる膨大な筐体間配線が装着されました。他方、将来を見越し、スペクトル 法を見切り、正 20 面体格子や(2 枚皮を張り合わせた野球ボールのような)Yin-Yang 格子など、 グローバルなデータ転送を必要としない全球モデルが開発されており、今でも、目が離せない研 究分野となっています。

数値気象予測モデルの計算効率低下のもう一つの原因は、非断熱過程の扱いにあります。とり わけ、雲の有無に関連し、対流不安定、凝結過程、雲の放射過程等の計算にはたくさんの条件文 が含まれ、高速化の大きな障害となっています。これらの条件文はベクトル化や並列化の障害と なるばかりではなく、雲の有無とその種類によって計算量が変化するため、処理装置のロードバ ランスを著しく低下させます。非断熱加熱・冷却による温度差は大気運動の主たる駆動力であり、 非断熱過程の計算精度は数値モデルの予測精度を実質的に大きく支配します。精密なモデルほど 湿潤プロセスに計算時間を多く配分しています。また、非断熱過程のプログラムは流体計算など に比べて著しく冗長になり、並列化への対応なども相当の作業量となります。その結果、数値気 象予測モデルは並列化効率が上がらず、計算科学の業界では厄介者扱いされる原因となっていま す。

東北大学のサイバーサイエンスセンターでは、ベクトル化機能を重視した機種選定を行ってい るため、これまで開発したソフトウェアが有効に活用され、この方面の利用者に多大な恩恵を与 えています。また、今年度開始した計算ノードの占有利用は実行スケジュールの自己管理を可能 とし、開発効率を大いに向上させました。特に、気象分野ではリアルタイムで定時起動ジョブを 実行する場合があり、これまでは研究室のサーバーでしか実行できませんでしたが、ノードの占 有利用によりセンターでも実行可能となり、マイコンピュータのイメージでスーパーコンピュー タを利用することができるようになりました。関係者のご尽力に感謝致します。

[共同研究成果]

DNA 鎖切断の反応動力学シミュレーションと AVS/Express を用いた三次元可視化

菱沼 直樹¹,及川 啓太¹,岡田 朝彦²,菅野 学¹,山崎 馨^{1,3},
Wilfredo Credo Chung^{1,4},齋藤 敦子⁵,河野 裕彦¹
¹東北大学大学院 理学研究科 化学専攻,²東北大学 理学部 化学科,
³北海道大学大学院 理学研究院 化学部門,⁴Department of Chemistry, De La Salle University,
⁵東北大学 情報部 情報基盤課

近年,電子状態計算プログラムの高速化や計算機の高性能化が進み,多くの原子を含む複雑な 分子の化学反応動力学シミュレーションが行えるようになってきた[1]。ナノサイエンスにおける 材料の合成や機能評価,あるいは,生体系の構造や反応機構の解明などに実際に適用されている。 また,その対象は平衡状態のみならず,非平衡な問題にも広がっている。実際,生体内の反応は 非平衡開放系の問題として捉えるべきで,反応サイトにおける原子組換えに要するエネルギー(た とえば,反応の遷移状態のエネルギー)の計算だけではなく,エネルギーや電荷がどのような時 間・空間スケールで開放系の中を移動していくかにも答えることが要求されてくるであろう。そ のような問題の一つとして,我々は DNA の鎖切断などの損傷過程を取り上げ,反応動力学シミ ュレーションを適用して,DNA 鎖切断機構の分子論的理解を進めようとしている。本稿では, DNA 鎖切断シミュレーションの結果を概説し,その動力学過程の可視化や解析に用いた東北大学 サイバーサイエンスセンターの三次元可視化システムの利用法について紹介する。

1. はじめに

DNA が放射線に曝されると、核酸塩基の脱離や二量体化、鎖切断が起こることが知られている。 これらは塩基配列の転写において問題となり、人体に発がんなどの悪影響を及ぼす。DNA の損傷 は、放射線のエネルギーが標的 DNA に直接吸収されて影響を及ぼす直接作用と、エネルギーを 吸収した他の分子が DNA と反応して影響を及ぼす間接作用に分けられる。直接作用の一例とし ては、DNA 分子が励起あるいはイオン化し、その際発生する振動エネルギーによって DNA の共 有結合が切れる過程がある。また、代表的な間接作用の一例は、放射線のエネルギーがまず水分 子に吸収されて、ヒドロキシラジカル(•OH)などが生じ、それら活性酸素種が水溶液中を移動 して DNA に作用する過程である。DNA 損傷は放射線だけでなく、様々な粒子源や光源によって も引き起こされる。たとえば、DNA が紫外線を吸収すると、隣り合ったピリミジン塩基(チミン とシトシン)が二量体化し、塩基対の変異を引き起こすことが知られている。また、Mathur らの グループは、DNA を含んだ水溶液に近赤外のパルスを照射すると、様々な鎖切断が起こることを 見出している[2]。彼らは,発生した OH ラジカルの衝突によって DNA の鎖切断が起こり,DNA の2本の鎖が同じ塩基対のところで切れる2本鎖切断は複数のOH ラジカルの衝突が引き金にな ると結論づけている。また,発生した高熱によっても鎖切断は起こるが,それは DNA の2本の 鎖のうち1本が切断する1本鎖切断に限られることを報告している。次節では、放射線により発 生する熱を想定して, 真空条件下の DNA 及びカウンターカチオンや水分子に囲まれた DNA の化 学結合がどのように切れていくかを調べた化学反応動力学シミュレーションの結果[3,4]を紹介す る。

このようなシミュレーションでは、各原子の位置(xyz 座標)とその速度などの情報を時間ス テップごとに出力する。次に、原子の位置を描画ソフトで表し、系がどのように変化していくか を視覚的に追跡する。しかしながら、本研究のように、対象とした DNA 分子とその周囲の分子 やイオンの総原子数が数百から千を超えるような場合,視覚的に結合切断部位を探すのはほぼ不可能である。そのため,座標情報から結合長や結合の組み換えを判定するプログラムを自作して, どこで結合の切断・形成が起こったかを判断している。一方,結合の切断を含む化学反応の理解 には,結合していた2つの原子のみを考える"ミクロ"な情報だけでは不十分で,どのような原子 が周囲に存在し,どのような影響を結合に及ぼしているかという"マクロ"な情報も必要である。 そのような目的には,系全体から結合の切断・形成が起こる領域まで瞬時にズームでき,しかも, 各原子の遠近を正確に捉えることができる可視化システムが力を発揮する。我々は,DNAのよう な複雑な構造の時間変化を様々な視点から効率よく観察するために,東北大学サイバーサイエン スセンターの三次元可視化システムに即したプログラムを開発した。このプログラムの作成には, 光の影や透明感など様々な要素を取り込んで立体形状を画像化するレンダリングソフトウエア POV-Ray (Persistence of Vision Raytracer) [5]の知識を応用した。第3節では POV-Ray の入力ファ イルの作り方を簡単に説明し,第4節で三次元可視化システムを使って,動力学シミュレーショ ンの結果をどのように表示するかを具体的に説明する。

2. DNA の化学反応動力学シミュレーション

最初に, 真空条件での DNA 鎖切断シミュレーションの結果を報告する。 用いたモデル DNA の 構造を図1に示す。この短鎖 DNA は4つのアデニン-チミン塩基対のみからなる2本鎖 DNA で ある。ただし、短鎖 DNA を安定化するために、ヘキサエチレングリコールをリンカーとして用 いて、鎖同士を架橋している。これは、実際に Lewis らによって合成された分子である[6]。反応 動力学シミュレーションでは、各原子が受けている力を各時間ステップで求めるが、それに必要 な電子状態計算には、密度汎関数法に近い精度で高速計算が可能な密度汎関数強束縛(DFTB)法[7] を用いた。今回は, その中でも Kohn-Sham エネルギーを電荷揺らぎに関して 3 次まで展開した DFTB3[8]法とパラメータセット 3ob-3-1 を組み合わせて用いた[9.10]。実際の計算には、量子化学 計算パッケージ DFTB+[11]を利用した。X線による鎖切断では、鎖1本の切断に約100eVのエネ ルギーが使われているという報告[12]を参考に,構造最適化した短鎖 DNA に対し,リンカー以外 の部分へ1原子当たり 0.3 から 0.4 eV の熱エネルギーを与えて動力学計算を行った。得られた鎖 切断の過程を Mulliken 電荷と振動エネルギー移動の観点, すなわち, 有機電子論と動力学の観点 から解析した。なお、エネルギー移動の解析には、分子の全ポテンシャルエネルギーと運動エネ ルギーを各構成原子に分配する手法(原子分割エネルギー法[13,14])を用いた。これによって、 各原子が持つエネルギーを定量化でき、原子や原子団のエネルギー変化を追跡することが可能と なる。つまり、反応ダイナミクスにどのような原子や原子団が関わっているかを明らかにするこ とができる。



図 1 アデニン-チミンの4塩基対で構成されるモデル DNA の構造(左)と模式図(右)。



図 2 真空条件でのモデル DNA の主な切断過程。

この動力学計算の結果は、アデニン側の鎖はほとんど切れず、鎖切断はチミン側の鎖で起こり やすいことを示していた。多くの場合、①チミンが塩基脱離し、②糖からリン酸基への水素移動 が起こり、後に③糖とリン酸基との間で鎖が切断する(図 2)。この一連の過程は初期時刻から 10 ピコ秒程度のオーダーで進行した。1 本鎖 DNA にも同様のシミュレーションを行い、塩基脱 離後に、糖とリン酸基との間で鎖が切断するという結果を得た。この機構は、1 本鎖 DNA に対し て行われたマトリックス支援レーザー脱離イオン化法(Matrix Assisted Laser Desorption/Ionization; MALDI)による詳細な質量分析の結果[15]とも一致しており、DFTB3 法を使った動力学シミュレ ーションが熱効果による鎖切断を適切に再現できることがわかった。

①の塩基脱離過程のエネルギーと電荷変化の一例を図3に示す。結合切断に直接関わる糖とチ ミン塩基の外部からエネルギーが流入し、糖から塩基への電子移動により塩基脱離を引き起こし ていることがわかった。次に、その後の②水素移動と③鎖切断(糖-リン酸基間のC-O結合切断) 過程におけるエネルギーと電荷の変化の一例を図4に示す。C-O結合の切断部分を含む糖とリン 酸基の電荷やエネルギーも鎖切断の前後で変化しており、解析の結果、他の複数のヌクレオチド からの広域的な電子やエネルギーの流入により、鎖切断が引き起こされていることが明らかにな った。①の機構では糖の電子が塩基に移動して塩基脱離が引き起こされるので、その結果アデニ ンよりも電子を引きつけやすいチミン側の鎖が切断されたと考えられる。また、熱による鎖切断 のシミュレーションでは、1本鎖切断しか見られない。これはMathur らの主張[2]を裏付ける結果 になっている。



図 3 ①の塩基脱離時における原子分割エネルギーの変化(左上段),電荷の変化(左中段) 及び C-N 結合長の変化(左下段)。右は解析結果から得られた反応の描像。



図 4 ②水素移動と③鎖切断時における原子分割エネルギーの変化(左上段),電荷の変化 (左中段)及び C-O 結合長の変化(左下段)。右は解析結果から得られた反応の描像。

我々は、Na⁺や Mg²⁺などのカウンターカチオンと水分子が周囲に存在する条件で、DNA の動力 学シミュレーションも行っている。X線結晶構造が既知である 12 塩基対からなる DNA (図 5; 蛋白質データバンク PDB ID: 355D[16])を対象として、カチオンや水分子以外の部分に真空条件 と同程度の熱エネルギーを与えて計算を行った。結果として、図 1 のような真空条件の場合とは 異なり、Na⁺がリン酸基と中間体 (Na⁺-O⁻-P-O の四角形構造)を形成し、リン酸基内の P-O 切断 が誘発されることがわかった (図 6)。カウンターカチオンの存在によって電荷の広域的な移動が 妨げられ、エネルギー移動も局所的になっており、真空条件とは全く異なった鎖切断機構が存在 すると考えられる。これらの詳細な結果は、OH ラジカルとの反応や励起状態を経由した鎖切断 を含めて、別の機会に紹介したい。



図 5 355D の構造。DNA 以外の原子を表す球は小さく表示している。



図 6 Na⁺が関与する DNA の主な鎖切断過程。

3. POV-Ray を用いた分子の画像・動画作成法

本節では、原子の座標情報から POV-Ray を介して立体画像や動画を作成する方法について紹介 する。最近では、Gaussian[17]や GAMESS[18]など、様々な量子化学計算ソフトが用いられている。 例えば、我々が使用している DFTB+の動力学シミュレーションは、その結果が XYZ フォーマッ トで出力され、図 7 のように時間ステップ毎に各原子の元素記号とその xyz 座標の情報が得られ る。パッケージソフトによってはこの出力形式に違いがあるが、元素や座標情報が通常出力され る。GaussView[17]や Jmol、MOLDEN、Avogadro など[19]の量子化学計算の前後処理のためのア プリケーションを用いれば、ひとまずシミュレーション結果を見ることができるが、プレゼンテ ーション用としてより高い品質の画像・動画を作成するには、POV-Ray などのレンダリングソフ トが不可欠である。

[原子数] [コメント行]	3 Step 0 H20 molecule
[元素記号] [座標xyz]	0 0.000 0.000 0.000
:	H 0.787 0.000 -0.545
· 「元表記是1」「応標vvz1	H -0.787 0.000 -0.545
	3
[赤」 奴] [コメント行]	Step 1 H2O molecule
	0 0.031 0.000 0.000
[几条記与][湮保Xyz]	Н 0.539 0.000 -0.373
:	Н -1.035 0.000 -0.717
[元素記号] [座標xyz]	
and the second second second	

図 7 XYZ フォーマットの形式(左),水分子の振動の出力例(右)。座標 xyz の単位は Å(オングストローム)であり, Step n の時刻は時間刻み Δt の n 倍になっている。

しかしながら、レンダリングソフト自身は、元素から球の色や大きさを決めたり、座標から自動的に結合を判定したりすることができない。つまり、分子の画像を作成するためには、シミュレーションの出力である「点」の情報から、各原子を「球」で表し、それらの結合を「円柱」で 表す必要がある。具体的な手順は以下のとおりである。

- 1. ある原子について,元素に対応した球の大きさと色を定義し,その xyz 座標に球を置く
- 2. 全ての原子間の距離を調べ、その中で設定したしきい値を下回った距離の原子同士の間に結 合を表す円柱を配置する

この手順に従って,図7のStep0の水分子の原子の座標から自作プログラムを通して変換した POV-Rayの入力ファイルを図8左に示す。なおPOV-Rayの場合は、球や円柱の位置だけではな く、カメラ位置や光源を設定する必要がある。この入力ファイルに従ってPOV-Rayでレンダリン グすると、図8の右に示したような分子が描かれる。また、各時間ステップでレンダリングした 画像を連続して集めると動画にすることが可能である。AviUtl[19]というフリーソフトで動画編集 を行っているが、どのような動画編集ソフトでも大抵可能な処理である。

POV-Ray による分子描画のメリットは、高画質な画像・動画が得られるだけではなく、原子の 色や結合の色を自由に決められることにある。例えば、原子の Mulliken 電荷に合わせて色の変化 を定義すると、各原子の電荷の変化を動画で確認することが可能である。図9に作成した画像の 一例を示しておく。



図 8 POV-Rayの入力フォーマット POVの入力例(左)と実際の描画後の画像(右)。 重要な結合については,結合の色を変えることも可能であるし,また,重要ではない原子団については小さく出力することも可能である(図 9参照)。



図 9 POV-Ray で DNA の一部を描画した画像例。DNA の鎖に相当する結合はグレーで 目立たせ、周りの水分子などは逆に目立たないよう球や円柱を小さく設定した。白は 水素、灰色は炭素、青は窒素、赤は酸素、オレンジはリンの各原子を表している。

4. AVS/Express を用いたシミュレーション結果の三次元可視化

東北大学サイバーサイエンスセンターの三次元可視化システム[20,21]では、 CYBERNET 社の 可視化ソフトウェア AVS/Express が利用できる。AVS/Express の MGF フォーマットを利用すると、 容易に分子構造の三次元可視化ができる。MGF フォーマットは、多角形、線分、球、円、円柱な どの三次元形状をアスキー形式で簡単に記述できる AVS オリジナルの書式である。POV-Ray の書 式に似ているため、図 8 のような POV-Ray 用のファイルを少し修正するだけで、AVS/Express 用 の MGF フォーマット入力データを作成することができる。入力データの書式を図 10 に、入力例 を図 11 に示す。原子の形状は球 (sphere)、結合部分の形状は円柱 (column)を用いて記述した。

```
# Micro AVS Geom:2.00
# 原子の形状 (球)
sphere
[要素名(コメント行)]
color
[球の個数n]
[1個目の球の中心座標xyz] [半径] [RGB]
[n個目の球の中心座標xyz] [半径] [RGB]
# 結合部分の形状 (円柱)
column
[要素名(コメント行)]
dvertex and color
[円柱の分割数 i]
                   # 円柱は、i角柱で近似表示
[円柱の個数 j]
[1個目の円柱の下底中心座標xyz] [上底中心座標xyz] [半径] [RGB]
[j個目の円柱の下底中心座標xyz] [上底中心座標xyz] [半径] [RGB]
```

図 10 MGF フォーマットの入力データの書式。

```
# Micro AVS Geom:2.00
sphere
ball
color
3
0.000 0.000 0.000 0.37 0.80 0.00
                                      0.00
0.787
       0.000 -0.545 0.16 0.95
                                0.95
                                      0.95
-0.787 0.000 -0.545 0.16 0.95 0.95
                                      0.95
column
stick
dvertex_and_color
6
2
0.787 0.000 -0.545 0.000 0.000 0.000 0.09 1.0 1.0 1.0
-0.787 0.000 -0.545 0.000 0.000 0.000 0.09 1.0 1.0 1.0
```

図 11 入力データの例(図 7の Step 0 における水分子の場合)。

次に,作成した入力データファイルを AVS/Express で読み込み,可視化する方法を説明する。 MGF フォーマットで作成した入力データファイルの読込には Read MGF モジュールを使用する。 MGF フォーマットの場合は入力データファイルに形状や色の情報を全て記述するため, Read MGF モジュールをビューワーモジュール (Uviewer) に接続するだけで簡単に可視化することが できる。Read MGF モジュールを使った可視化ネットワークを図 12 に,可視化結果の例を図 13 に示す。なお,TextString モジュールを使用することで,三次元画面上に 1.00 ps (ピコ秒)のよ うなシミュレーションの経過時間などの情報を表示させることも可能である。



図 12 Read MGF モジュールを使った可視化ネットワーク。



図 13 DNAの可視化結果。液晶シャッターメガネを通すと、三次元可視化システムの 巨大なスクリーン(横4.4 m×縦1.8 m)に映し出された画像が立体的に見える。

5. おわりに

本稿では、DNA の鎖切断の反応動力学シミュレーションとその結果の三次元可視化について 解説した。三次元可視化によって、教科書に載っている二次元の絵ではわかりにくい二重螺旋構 造および主溝・副溝といった DNA の特徴を容易につかみ取ることができる。あたかも自分が DNA の場の中に入り、個々の原子が現実の空間で動いているように感じられる。研究がより捗るため のツールとして三次元可視化システムは有効である。

我々は,今回紹介した DNA の鎖切断やX線自由電子レーザーによる C₆₀のクーロン爆発[22,23] のシミュレーションの結果を東北大学のオープンキャンパスなどですでに一般公開している[21]。 三次元可視化システムは分子構造の立体的な把握を容易にするため,今後は教育での利用価値が 高まると期待している。二次元の絵から空間をイメージして理解することに慣れていない一般の 方々に対しても,三次元可視化システムは理解を促す強力なツールである。

謝辞

本研究の計算の一部は、東北大学サイバーサイエンスセンターの並列コンピューターで実行した。また、本センターの山下毅氏には、計算結果の三次元可視化についてご協力いただいた。DNA の鎖切断の機構に関しては、化学専攻木野康志先生、十川和博先生、多元物質科学研究所秋山公 男先生から重要な情報をいただいた。なお、本研究は科研費(河野: No.24245001, 15K13614, 16H04091)の助成のもとに行われた。

参考文献

- [1] 日本化学会編, CSJ カレントレビュー08 巨大分子系の計算化学, 化学同人, 2012。
- [2] A. K. Dharmadhikari, H. Bharambe, J. A. Dharmadhikari, J. S. D'Souza and D. Mathur, "DNA Damage by OH Radicals Produced Using Intense, Ultrashort, Long Wavelength Laser Pulses", Phys. Rev. Lett. 112, 138105 (2014).
- [3] 菱沼直樹, 菅野学, 木野康志, 秋山公男, 河野裕彦, モデル二本鎖 DNA における鎖切断過 程の電荷・エネルギー移動解析, 第9回分子科学討論会, ロ頭発表 2E10, 2015。

- [4] 及川啓太,菱沼直樹,菅野学,木野康志,秋山公男,河野裕彦,カウンターカチオンが引き 起こす DNA 鎖切断:化学反応動力学シミュレーション解析,第10回分子科学討論会,口頭 発表 3G09,2016。
- [5] オープンソースのソフトである。詳細は, http://www.povray.org/ 参照。
- [6] M. McCullagh, L. Zhang, A. H. Karaba, H. Zhu, G. C. Schatz and F. D. Lewis, "Effect of Loop Distortion on the Stability and Structural Dynamics of DNA Hairpin and Dumbbell Conjugates", J. Phys. Chem. B 112, 11415 (2008).
- [7] M. Elstner, D. Porezag, G. Jungnickel, J. Elsner, M. Haugk, T. Frauenheim, S. Suhai and G. Seifert, "Self-consistent-charge density-functional tight-binding method for simulations of complex materials properties", Phys. Rev. B 58, 7260 (1998).
- [8] M. Gaus, Q. Cui and M. Elstner, "DFTB3: Extension of the Self-Consistent-Charge Density-Functional Tight-Binding Method (SCC-DFTB)", J. Chem. Theory Comput. 7, 931 (2011).
- [9] M. Gaus, A. Goez and M. Elstner, "Parametrization and Benchmark of DFTB3 for Organic Molecules", J. Chem. Theory Comput. 9, 338 (2013).
- [10] M. Gaus, X. Lu, M. Elstner and Q. Cui, "Parameterization of DFTB3/3OB for Sulfur and Phosphorus for Chemical and Biological Applications", J. Chem. Theory Comput. 10, 1518 (2014).
- [11] B. Aradi, B. Hourahine and Th. Frauenheim, "DFTB+, a sparse matrix-based implementation of the DFTB method", J. Phys. Chem. A 111, 5678 (2007). 詳細は, http://www.dftb-plus.info/ 参照。
- [12] J. E. Cleaver, G. H. Thomas and H. J. Burki, "Biological Damage from Intranuclear Tritium: DNA Strand Breaks and Their Repair", Science 177, 996 (1972).
- [13] H. Nakai, "Energy density analysis with Kohn-Sham orbitals", Chem. Phys. Lett. 36, 73 (2002).
- [14] R. F. W. Bader, "A quantum theory of molecular structure and its applications", Chem. Rev. **91**, 893 (1991).
- [15] L. Zhu, G. R. Parr, M. C. Fitzgerald, C. M. Nelson and L. M. Smith, "Oligodeoxynucleotide Fragmentation in MALDI/TOF Mass Spectrometry Using 355-nm Radiation", J. Am. Chem. Soc. 117, 6048 (1995).
- [16] X. Shui, L. McFail-Isom, G. G. Hu and L. D. Williams, "The B-DNA Dodecamer at High Resolution Reveals a Spine of Water on Sodium", Biochemistry 37, 8341 (1998).
- [17] 詳細は, http://www.gaussian.com/ 参照。なお,本学ではサイバーサイエンスセンターにて Gaussian09 と GaussView を提供している。(http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/index.html)
- [18] 詳細は, http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/ 参照。
- [19] 詳細は, 各ソフトのホームページを参照。
- [20] 東北大学サイバーサイエンスセンター 三次元可視化システム http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/service/vsr.html
- [21] 共同研究支援係, 共同利用支援係, 三次元可視化システムと可視化事例の紹介, SENAC, Vol. **49**, No. 3, 9 (2015).
- [22] 山崎馨,上田潔,河野裕彦,X線自由電子レーザーパルスによるフラーレン超多価カチオン C₆₀^{q+}の爆発解離の動力学シミュレーション,SENAC, Vol. 48, No. 3, 1 (2015).
- [23] K. Yamazaki, T. Nakamura, N. Niitsu, M. Kanno, K. Ueda, and H. Kono, "Communication: Two-step explosion processes of highly charged fullerene cations $C_{60}^{q^+}$ (q = 20–60)", J. Chem. Phys. **141**, 121105 (2014).

[共同研究成果]

ベクトル型スーパーコンピュータを用いた 大規模リフレクトアレーの高利得化

今野 佳祐[†], 陳 強[†] 東北大学大学院工学研究科 通信工学専攻[†]

1 まえがき

リフレクトアレーは,入射波を所望の方向に散乱するように設計した構造であり,従来の反射 鏡アンテナに代わる薄型・軽量アンテナとして注目されている[1]-[3].リフレクトアレーは,大き さの異なる多数の散乱体から成る.散乱体の大きさによって散乱電界の位相が制御され,所望の 方向に等位相面が形成される.したがって,リフレクトアレーの設計において,素子の大きさの 決め方はビーム方向や利得を決定する上で重要である.

リフレクトアレーの素子の大きさは、素子の反射係数の位相を用いて決定するのが一般的であ る [4]-[6].素子の反射係数は素子間相互結合の影響を受けるため、その値を正確に求めるにはリフ レクトアレーの構造が予め分かっている必要がある.したがって、リフレクトアレーの素子の大 きさを決めるには正確な反射係数の情報が必要であるが、そのためにはリフレクトアレー素子の 大きさが分かっていなければならないというジレンマがある.そこで従来の研究では、同一の大 きさの素子が有限あるいは無限周期で配置された構造を仮定して近似的に求めた反射係数を利用 してリフレクトアレーを設計している [7]-[9].これらの方法で求めた反射係数は、素子の大きさが 緩やかに変化するような構造中ではある程度正しいことが分かっているが、リフレクトアレーの 構造は必ずしもそうではない、また、これらの方法で求めた反射係数は、リフレクトアレーの素 子間相互結合を正しく評価して得られた値ではないため、素子間相互結合の影響で利得が低下す ることは避けられない.

そこで本研究では、ベクトル型スーパーコンピュータを用いたリフレクトアレーの高利得化法 を提案し、その有効性を明らかにする.提案法では、有限周期構造を仮定して求めた反射係数に よって設計したリフレクトアレーを、素子間相互結合を正しく評価しながら高利得化していく.長 い時間を要する素子間相互結合の計算は、反復法とベクトル型スーパーコンピュータ SX-ACE に よって高速に処理する.素子長を逐次的に変えながら利得を計算し、利得が上昇するように素子 長を変化させていく.数値シミュレーションによって、素子間隔が小さいときに提案法が大きな 効果を発揮することを明らかにする.

2 提案設計法

提案設計法のアルゴリズムは以下に示すとおりである [10].

1. 有限周期構造を仮定し,素子の反射係数を近似的計算.



図 1: 線状素子リフレクトアレーモデル.

- 2. 得られた反射係数から、リフレクトアレー素子長の初期値を求める.
- 3. 第mリフレクトアレー素子長を l_m から $l_m \pm \Delta l$ へ変え、インピーダンス行列の対応部分を 更新する.
- 4. 素子長が更新されたリフレクトアレーの利得 $G(l_m \pm \Delta l)$ を,前処理付き共役勾配法 (Preconditioned Conjugate Gradient Method) によって求める.
- 5. $G(l_m + \Delta l) > G(l_m)$ かつ $G(l_m + \Delta l) > G(l_m \Delta l)$ であるなら, G が極大値になるま で第 m 素子長を増やし続ける. $G(l_m - \Delta l) > G(l_m)$ かつ $G(l_m - \Delta l) > G(l_m + \Delta l)$ で あるなら, G が極大値になるまで第 m 素子長を減らし続ける. $G(l_m) > G(l_m + \Delta l)$ かつ $G(l_m) > G(l_m - \Delta l)$ であるなら, 第 m 素子長をそのままにする.
- 6. *m*が*M*に達するまで3~5を繰り返し実行する.ここで, $M = M_x M_y$ はリフレクトアレー 全体の素子数である.

提案設計法は,起電力法による線状素子リフレクトアレー設計法を用いている [11].前処理付き共 役勾配法を用いても,素子長を更新する都度リフレクトアレー全体の電流を計算するのは非常に 長い時間がかかる.そこで本報告では,サイバーサイエンスセンターのベクトル型スーパーコン ピュータ SX-ACE を用いて計算の高速化を図る.ベクトル型スーパーコンピュータは,ベクトル 演算と呼ばれる機能を持っており,繰り返し演算を一括して実行することが可能である.本報告 の数値計算結果は,プログラムを最適化し,全ての演算に対するベクトル演算の割合 (ベクトル演 算率)を 99.2%まで向上させることで,高速に得られた結果である.



図 2: リフレクトアレーの利得 (F/D = 1).



(a) $d_x = d_y = 0.55\lambda$.



(b) $d_x = d_y = 0.75\lambda$.

図 3: リフレクトアレーの開口位相分布 (F/D = 1).

50×50素子のリフレクトアレーを提案法によって設計した.初期構造の設計にはSurrounded element approach を用い、3×3の有限周期構造中にある素子の反射係数の位相を用いて設計した [8].リフレクトアレーの利得を図2に示す.提案法によって得られたリフレクトアレーの利得は、 初期構造の利得から大幅に改善されていることが分かる.特に、素子間隔が小さいときの改善量 が大きく、4.2 dBもの改善量が得られている.高利得化の要因を明らかにするために、開口位相 分布を図3に示す.図3から、特に素子間隔が小さいとき、開口面上の位相が不連続的に変化し ている部分があることが見て取れる.このことは,反射係数を計算するときに仮定した素子長の 局所的な周期性が,実際のリフレクトアレーでは必ずしも成り立たないことを示唆している.し たがって,特に素子間隔が狭いときは,素子間相互結合を厳密に評価してリフレクトアレーを設 計することが重要であると考えられる.

提案手法によってリフレクトアレーを設計するのに必要な時間は、それぞれ 52,156 秒 ($d_x = d_y = 0.55\lambda$)、37,935 秒 ($d_x = d_y = 0.75\lambda$)であった. Full-wave の数値計算 1 回あたりの計算時間はそ れぞれ 16.2 秒 ($d_x = d_y = 0.55\lambda$)、8.3 秒 ($d_x = d_y = 0.75\lambda$)であった. どちらも未知数 10,000 を 超える大規模な問題なので、PC を用いた場合は 1 回の計算に数時間程度の時間が必要となる. し たがって、ベクトル型スーパーコンピュータによって数千倍程度の高速化が実現できたことが分 かる.

4 まとめ

本報告では、大規模リフレクトアレーの高利得化のための手法を提案した.提案手法は、素子 間相互結合を厳密に評価しながらリフレクトアレーを設計する手法であり、反復法とベクトル型 スーパーコンピュータを併用することによって高速化を実現している.数値シミュレーションの 結果、素子間隔が狭いときに、提案法が大きな効果を示すことが分かった.

謝辞

本研究成果は, 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-ACE を用い て得られたものである. スタッフをはじめ, 関係各位に深く感謝する.

参考文献

- D.G. Berry, R.G. Malech, and W.A. Kennedy, "The Reflectarray Antenna," IEEE Trans. Antennas Propag., vol.11, no.6, pp.645-651, Nov. 1963.
- J. Huang, "Analysis of a microstrip reflectarray antenna for microspacecraft applications," TDA Progress Report 42-120, Feb. 1995, pp. 153-173.
- [3] J. Huang and J.A. Encinar, Refrectarray Antennas, John Wiley and Sons, 2008.
- [4] C. Wan and J.A. Encinar, "Efficient computation of generalized scattering matrix for analyzing multilayered periodic structures," IEEE Trans. Antennas Propag., vol. 43, no. 11, pp. 1233-1242, Nov. 1995.
- [5] L. Li, Q. Chen, Q. Yuan, K. Sawaya, T. Maruyama, T. Furuno, and S. Uebayashi, "Novel broadband planar reflectarray with parasitic dipoles for wireless communication applications," IEEE Antennas Wireless Propag. Lett., vol. 8, pp. 881-885, 2009.

- [6] L. Li, Q. Chen, Q. Yuan, K. Sawaya, T. Maruyama, T. Furuno, and S. Uebayashi, "Frequency selective reflectarray using crossed-dipole elements with square loops for wireless communication applications," IEEE Trans. Antennas Propag., vol. 59, no. 1, pp. 89-99, Jan. 2011.
- [7] F. Venneri, G. Angiulli, and G. Di Massa, "Design of microstrip reflectarray using data from isolated patch analysis," Microw. Optical Technol. Lett., vol.34, no.6, pp.411-414, Sept. 2002.
- [8] M.-A. Milon, D. Cadoret, R. Gillard, and H. Legay, "Surrounded-element' approach for the simulation of reflectarray radiating cells," IET Microw. Antennas Propag., vol.1, no.2, pp.289-293, April 2007.
- [9] C. Yann, R. Loison, R. Gillard, M. Lebeyrie, and J.-P. Martinaud, "A new approach combining surrounded-element and compression methods for analyzing reconfigurable reflectarray antennas," IEEE Trans. Antennas Propag., vol. 60, no. 7, pp. 3215-3221, July 2012.
- [10] K. Konno and Q. Chen, "Enhancing Aperture Efficiency of Reflectarray by Accurately Evaluating Mutual Coupling of Reflectarray Elements," IEICE Commun. Express, vol. 5, no. 9, pp.341-346, 2016.
- [11] K. Konno, Q. Chen, K. Sawaya, S. Kameda and N. Suematsu, "Novel design method for reflectarray by induced electromotive force method," Proc. IEEE AP-S Int. Symp., 429.3, pp.1342-1343, July 2013, Florida, USA.

[共同研究成果]

アルゴン熱プラズマジェットによる鉄ナノ粒子の

大量創製プロセスの3次元シミュレーション

茂田 正哉 大阪大学 接合科学研究所

アルゴン熱プラズマジェットを用いた鉄ナノ粒子の創製プロセスの3次元シミュレーションを 行う.その際,簡潔でありながらナノ粒子群の集団的な形成および移流・拡散輸送過程を記述で きるモデルを用いる.本数値計算により,動的なプラズマの熱流動場および形成途中にあるナノ 粒子群の空間分布を明らかにする.

1. 緒言

直径がナノメートルスケールの超微粒子(ナノ粒子)はバルクの材料とは大きく異なる物質機能を示すことが知られており、磁気記録材料や環境浄化用触媒など様々な工業製品へ応用が期待されている^[1].近年、ナノ粒子の大量創製を可能にするツールとして、高いエンタルピーと化学的活性を有し、さらに外部電磁場によって制御可能^[2]な流体である熱プラズマに注目が集まっており、精力的に研究が進められている^[3].しかし10,000 Kを超える発光体である熱プラズマの流動場について実験によって得られる情報には限りがあるため、プロセスの効率的な制御のために必要な知見は今尚少ない.また流動場だけでなく、ナノ粒子の形成過程はマイクロ秒〜ミリ秒の現象であるため、その集団的形成のメカニズムや輸送現象を直接計測することも困難である.そのため、熱プラズマプロセッシングは依然として現場の技術者や研究者の経験に依っているところが多く、また莫大な時間とコストを要しているのが現状である.そこで本研究では、熱プラズマ流によるナノ粒子の大量創製プロセスを対象として、アルゴン熱プラズマジェットおよび形成過程にある鉄ナノ粒子群の移流・拡散輸送の数値シミュレーションを行う.



Fig. 1 Computational domain

2. 仮定および支配方程式

2.1 熱プラズマ流

熱プラズマ流の通常の生成条件では、圧力は大気圧と同程度で、プラズマを含む流体全域にわたって局所熱平衡が成り立ち、また光学的に薄いと仮定できる.このとき支配方程式は以下のような質量・運動量・エネルギーに関する保存式となる.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \boldsymbol{u}\right) = 0 \tag{1}$$

$$\rho \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + \rho \boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{u} = -\nabla p + \nabla \cdot \left\{ \eta \left[(\nabla \boldsymbol{u}) + (\nabla \boldsymbol{u})^{tr} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \boldsymbol{u}) \boldsymbol{I} \right] \right\}$$
(2)

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho \boldsymbol{u} \cdot \nabla h = \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{C_p} \nabla h\right) + \frac{\partial p}{\partial t} + \rho \boldsymbol{u} \cdot \nabla p - q_{rad} + q_{con} + \boldsymbol{\Phi}$$
(3)

ここで、 ρ は密度、tは時間、uは速度ベクトル、pは圧力、 η は粘性係数、Iは単位行列、 σ は導 電率、Eは電場ベクトル、Bは磁束密度ベクトル、hはエンタルピー、 λ は熱伝導率、 C_p は定圧 比熱、 q_{rad} は放射損失、 q_{con} はナノ粒子の凝縮熱、 σ は粘性散逸である. また trは転置を意味する.

2.2 ナノ粒子群の集団的形成

熱プラズマプロセスにおけるナノ粒子形成過程の概要は次の通りである.

- ① 熱プラズマの高温場において原料が蒸発する
- ② その原料蒸気は温度低下に伴い過飽和状態となる
- ③ 多数の臨界核が生成する(均一核生成)
- ④ その臨界核に原料蒸気が凝縮することでナノ粒子が成長する(不均一凝縮)
- ⑤ 同時にナノ粒子同士も衝突・合体してより大きなナノ粒子となる(粒子間凝集)

ナノ粒子は、時間スケールの異なる均一核生成や不均一凝縮を経るのみならず、2~3桁に及ぶ 直径差を持つ多数の粒子同士が衝突し凝集しながら集団として成長していく.これまで分子動力 学に基づいた数値計算も行われてはいるものの、現在のコンピュータ性能の限界から、数十個の 核の生成過程を数ナノ秒間分ほど追跡することしかできていないため^[5]、ナノ粒子群全体の成長 を取り扱うことは実質的に不可能である.そこでエアロゾル学に基づく理論的および数値的なア プローチが有効とされている.

本稿では, 簡潔なモデルによりナノ粒子の集団的形成過程を表現するために, ナノ粒子は局所 的には同じ粒径を持つ球体であるとする.また帯電の効果は無視し, 粒子温度は周囲の流体の温 度と等しいとする.このとき支配方程式は以下のように記述できる.

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{n_p}{\rho} \right) + \rho \boldsymbol{u} \cdot \nabla \left(\frac{n_p}{\rho} \right) = \nabla \cdot \left[\rho D_p \nabla \left(\frac{n_p}{\rho} \right) \right] + J - 2\sqrt{2}\beta_0 n_p^{11/6} f^{1/6} - \nabla \cdot \left(K_{th} \eta \frac{n_p}{\rho} \nabla \ln T \right)$$
(4)

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{f}{\rho} \right) + \rho \boldsymbol{u} \cdot \nabla \left(\frac{f}{\rho} \right) = \nabla \cdot \left[\rho D_p \nabla \left(\frac{f}{\rho} \right) \right] + J g_c + \beta_0 (n_v - n_s) n_p^{1/3} f^{2/3} - \nabla \cdot \left(K_{th} \eta \frac{f}{\rho} \nabla \ln T \right)$$
(5)

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{n_{\nu}}{\rho} \right) + \rho \boldsymbol{u} \cdot \nabla \left(\frac{n_{\nu}}{\rho} \right) = \nabla \cdot \left[\rho D_{\nu} \nabla \left(\frac{n_{\nu}}{\rho} \right) \right] - J g_{c} - \beta_{0} (n_{\nu} - n_{s}) n_{p}^{1/3} f^{2/3}$$
(6)

ここで, *n* は数密度, *D* は拡散係数, *J* は均一核生成率^[6], K_{th} は熱泳動係数^[7], *T* は温度, *g* は 1つのナノ粒子に含まれるモノマー数の平均である. 添え字 *p*, *v*, *c* および *s* はそれぞれ粒子, 蒸気, 臨界状態および飽和状態を表している. また *f* は次のように定義される変数である.

$$f = n_p g \tag{7}$$

また β_0 は衝突頻度に関するパラメーターであり、体積 v および質量 m を用いて以下のように表される.

$$\beta_0 = \left(\frac{3v_v}{4\pi}\right)^{1/6} \sqrt{\frac{6k_B T v_v}{m_v}} \tag{8}$$

kB はボルツマン定数である.式(4)および式(5)の右辺第4項は熱泳動を表している.式(4)~(6)の 右辺に含まれる粒子成長に関わる項の詳しい導出については文献[4]を参照されたい.

3. 計算手法

本研究では、10,000 K を超える高温のプラズマと常温の非電離気体が相互作用しながら同時に 存在する熱流動場を取り扱わなければならない.両者の間には粘性係数・熱伝導率・定圧比熱・ 導電率といった物性値だけでなく密度にも大きな差がある^[8].その一方で、流れ場におけるマッ ハ数は 10⁻³~10⁻²のオーダーにあり、工学的に有意な時間スケールでの流体運動を捉えるために は熱プラズマ流を「大きな密度変化を伴う非圧縮性流れ」として取り扱うべきである.すなわち、 熱プラズマと周囲の低温気体との間に生じる速度、温度、密度、ナノ粒子濃度の急激な空間勾配 を捉えながら、さらに時間ステップ幅を大きく取っても数値計算を安定的に進められるような計 算手法が必要となる.そこで対流項をハイブリッド型 K-K スキーム^[9]により、時間微分項を3次 精度 Adams-Moulton-Bashforth 法により差分化し、改良型 PISO 法^[10]と組み合わせることによって、 上述の数値計算を実現することとする.熱プラズマ流動のシミュレーションに対するこれらの手 法の有効性については文献[11]を参照されたい.なお、拡散項、圧力勾配項、熱泳動項には2次 精度中心差分を用いる.

4. 計算条件

図1に計算領域を示す. 流量 13.4 sl/min のアルゴンガスに 2.3 kW の電力が投入されることで内 径 4.0 mm, 外径 7.0 mm の噴出孔から約 10,000 K のプラズマジェットが, 300 K・大気圧の非電 離アルゴン雰囲気の計算領域へ噴出する.ナノ粒子の原料である鉄は既にプラズマ生成部で蒸気 になっているものとしてプラズマジェットと共に 0.1 g/min で供給される.

これらの条件の下,3次元の計算領域を設けた.座標系の原点をプラズマジェット噴出孔の中 心に取り,各軸方向にそれぞれ0.2 mmの幅を持つスタガード格子を用いて,時間ステップ幅を 0.2 ms として計算を進めた.噴出孔におけるプラズマジェットの温度および速度には文献[12]の 半径方向分布を適用した.このとき本条件の下で算出される噴出孔におけるプラズマジェットの 最大速度は約400 m/s である.

なお,本計算は SX-ACE において MPI 並列によって 32 ノードを使用して実現した.



Fig. 2 Snapshots of thermal-fluid field: (a) 0.5 ms, (b) 1.0 ms, (c) 1.5 ms, (d) 2.0 ms

5. 計算結果

図2にプラズマジェットが噴出してから0.5 ms, 1.0 ms, 1.5 ms, 2.0 ms後の温度場および流線 を示す.特に温度場についてはプラズマジェット内部を可視化するためにx₃ < 0 の領域のみを描 画している.プラズマジェットはx₁方向に噴出するが,密度の高い非電離気体を押しのけながら 進まなければならないため,きのこ状のプラズマ領域を形成する.時間の経過と共にその領域は 下流へ輸送される.その後はプラズマジェットと非電離気体との間に生じる速度差および密度差 に起因する Kelvin-Helmholtz 不安定性によって,プラズマジェットの側面が複雑な熱流動場を形 成する.

図3に同時刻における鉄ナノ粒子群の空間分布を数密度1.6x10¹⁹~1.9x10¹⁹m⁻³の等値面によっ て示す.ナノ粒子はプラズマジェットと非電離気体の境界領域で集団的に生成・成長するため, 熱流動場を可視化するトレーサーのように複雑な分布を形成することがわかる.

6. まとめ

アルゴン熱プラズマジェットを用いた鉄ナノ粒子群の創製プロセスの3次元シミュレーション を行った.その際,簡潔でありながらナノ粒子群の集団的な形成および移流・拡散輸送過程を記 述できるモデルを導入し,MPI 並列により SX-ACE の 32 ノードを利用することで,動的なプラ ズマの熱流動場だけでなく,形成途中にあるナノ粒子群の空間分布を明らかにすることができた.



1.6 ← Number density (10¹⁹/m³) → 1.9

Fig. 3 Snapshots of nanopowder distribution: (a) 0.5 ms, (b) 1.0 ms, (c) 1.5 ms, (d) 2.0 ms

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すること で実現することができました.また計算コードの高速化およびデータの可視化にあたっては 同センター関係各位よりご協力をいただきました.

参考文献

- [1] 細川, 能城, "ナノパーティクルテクノロジー," 日刊工業新聞社, (2003).
- [2] Sato, T., Shigeta, M., Kato, D., Nishiyama, H., "Mixing and magnetic effects on a nonequilibrium argon plasma jet," Int. J. Thermal Sci., 40 (2001), pp. 273-278.
- [3] Shigeta, M. and Murphy, A.B., "Thermal plasmas for nanofabrication," J. Phys. D: Appl. Phys., 44 (2011), pp. 174025-(16 pages).
- [4] Nemchinsky, V.A. and Shigeta, M., "Simple equations to describe aerosol growth," Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., 20 (2012), pp. 045017-(11 pages).
- [5] Lümmen, N. and Kraska, T., "Homogeneous nucleation and growth in iron-platinum vapour

investigated by molecular dynamics simulation," Euro. Phys. J. D, 41 (2007), pp. 247-260.

- [6] Girshick, S.L., Chiu, C.P. and McMurry, P.H., "Time-dependent aerosol models and homogeneous nucleation rates," Aerosol Sci. Tech., 13 (1990), 465-477.
- [7] Talbot, L., Cheng, R.K., Schefer, R.W. and Willis, D.R., "Thermophoresis of particles in a heated boundary layer," J. Fluid Mech., 101 (1980), pp. 737-758.
- [8] Boulos, M.I., Fauchais, P. and Pfender, E., "Thermal plasmas," Springer, (1994).
- [9] Komurasaki, S., "A Hydrothermal Convective Flow at Extremely High Temperature," 7th Int. Conf. Comp. Fluid Dynamics, (2012), ICCFD7-3001.
- [10]Oliveira, P.J. and Issa, R.I., "An improved PISO algorithm for the computation of buoyancy-driven flows," Numer. Heat Transfer B 40 (2001), pp. 473-493.
- [11]Shigeta, M, "Turbulence modelling of thermal plasmas flows," J. Phys. D: Appl. Phys., 49 (2016), pp. 493001-(18 pages).
- [12]Kanzawa, A. and Kimura, I., "Measurements of viscosity and thermal conductivity of partially ionized argon plasmas," AIAA Journal, 5 (1967), pp. 1315-1319.

[大学 ICT 推進協議会 2016 年度年次大会論文集より]

『銅酸化物の有効モデルに対する揺らぎ交換近似』コードの SX-ACE 向け最適化

山下 毅 ¹⁾, 山崎 国人 ²⁾, 江川 隆輔 ^{3,4)}, 吉岡 匠哉 ²⁾, 土浦 宏紀 ²⁾, 小林 広明 ^{4,3)}, 曽根 秀昭 ^{3,4)}

1) 東北大学 情報部情報基盤課, 2) 東北大学 大学院工学研究科,
 3) 東北大学 サイバーサイエンスセンター, 4) 東北大学 大学院情報科学研究科

yamacta@tohoku.ac.jp

Performance Optimization of "Fluctuation exchange approximation for an effective model for cuprates" code for SX-ACE .

Takeshi Yamashita¹⁾, Kunito Yamazaki²⁾, Ryusuke Egawa^{3,4)}, Takuya Yoshioka²⁾,Hiroki Tsuchiura²⁾,Hiroaki Kobayashi^{4,3)}, Hideaki Sone^{3,4)}

1) Information Infrastructure Division, Information Department, Tohoku Univ.

2) Graduate School of Engineering, Tohoku Univ.

3) Cyberscience Center, Tohoku Univ.

4) Graduate School of Information Sciences, Tohoku Univ.

概要

FFT を用いた数値演算アプリケーションでは、Windows や Linux システム上で実行出来る FFTW ライブラリ が広く利用されている。従来 SX システムでは標準で FFTW ライブラリ、もしくはそのインターフェースは提供 されておらず、このようなアプリケーションを SX-ACE 向け実行オブジェクトとするためには、ASL ライブラリ へのコード修正、もしくは FFTW のソースコードを SX-ACE 向けにコンパイルしてライブラリ化することが必要 である。本稿では FFTW ライブラリを利用したアプリケーションを ASL Wrapper を用いて SX-ACE 向けにコ ンパイルする方法と、SX-ACE における高性能演算の実現を目的とした最適化手法について示す。

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)の大規模科学計算システムは、日本電気株式 会社(以下、NEC)製ベクトル型スーパーコンピュー タ SX-ACE を主力計算機とし、汎用アプリケーション の実行環境として NEC 製スカラ型の並列コンピュー タ LX406-Re2 の運用をしている。異なる特性を有す る二種類の計算機の運用により、利用者の幅広いニー ズに応えるサービスを提供している。表1にこれらシ ステムの諸元を示す。

また本センターでは1999年より、ユーザアプリケー ションの高精度化、大規模化の支援を目的とした共同 研究制度を実施している。利用者、計算機科学を専門 とするセンター教員、技術職員、およびベンダー技術 者が連携してアプリケーションの高速化に取り組ん でいる。図1に1999年から本センターで取り組んで いるセンター独自の共同研究、学際大規模情報基盤共 同利用・共同研究拠点(JHPCN)課題および革新的 ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI)課題採択数の推移を示す。本センター独自の 共同研究は恒常的に年10課題ほど実施されているこ とに加え、近年ではJHPCN、HPCIを介した共同研 究数が増加している。これは、センターの共同研究を 通してユーザアプリケーションが高度化・大規模化し、 JHPCN、HPCI採択課題へとステップアップしてお り、我々の継続的な高速化支援活動が一定の成果を上 げていることが分かる。

以下では高速化支援活動の一例として、『銅酸化物 の有効モデルに対する揺らぎ交換近似』コードの、 SX-ACE向け最適化事例について報告する。

	性能	SX-ACE	LX406Re-2
CPU 性能	名称	NEC ベクトルプロセッサ	Intel(R) Xeon(R) E5-2695v2
	コア数	4 個	12 個
	理論最大演算性能	276GFLOPS	230GFLOPS
	最大ベクトル演算性能	256GFLOPS	-
	メモリバンド幅	256 GB/sec	4.9 GB/sec
	ADB / Cache	$1MB/ \exists \mathcal{T}$	30MB (L3)
ノード性能	CPU 数	1個	2 個
	理論最大演算性能	276GFLOPS	460GFLOPS
	最大ベクトル演算性能	256GFLOPS	-
	メモリ容量	64 GB	128 GB
	メモリバンド幅	256 GB/sec	$9.9 \mathrm{GB/sec}$
	ノード間通信速度	8GB/sec	7GB/sec
システム性能	CPU 数	2,560 個	136 個
	理論最大演算性能	706.6TFLOPS	31.3TFLOPS
	最大ベクトル演算性能	655.4TFLOPS	-
	メモリ容量	160 TB	8.5 TB

表1 サイバーサイエンスセンター大規模科学計算システム諸元





今回 SX-ACE での最適化の対象としたアプリケー ションコードは、東北大学大学院工学研究科応用物理 学専攻で開発中の『銅酸化物の有効モデルに対する揺 らぎ交換近似』コードである。本コードは Fortran90 で記述され、コメント行を含み約 950 行からなり、特 有のシステム向けの最適化は施されていない。

2.1 揺らぎ交換近似手法

今回最適化の対象とするコードは、銅酸化物超伝導 体のうち特に電子ドープ型と呼ばれる物質の電子状 態を記述するために提案された有効2バンド模型に おいて、超伝導および磁気秩序転移を解析するアプリ ケーションである。有効2バンド模型に含まれる電子 間相互作用を揺らぎ交換近似(fluctuation-exchange approximation)を用いて取り扱い、その結果得られ た線型化 Elisashberg 方程式を解くことによって超伝 導転移温度等が求められる。このアプリケーションに より、電子ドープ型銅酸化物超伝導体のアンダードー プ領域で新たに超伝導状態が出現し得るという近年の 実験的報告 [1] について、理論的観点からの解析を与 えることができる。

2.2 コード概要

揺らぎ交換近似を用いた線形化 Eliashberg 方程式 を解く際に、畳み込み積分を行う必要がある。コード のアルゴリズムにおいては、 $N_x \times N_y \times N_\omega$ の3次元 配列に対して3次元 FFT を行うことでこの畳み込み 積分を高速化する。 N_x, N_y, N_ω はそれぞれ2次元実 空間および虚時間軸における解像度を定めるパラメー タである。超伝導状態の研究において重要である低温 での解析を行うためには、より高いエネルギー解像度 が求められるため、これらのパラメータをより大きく とる必要がある。また、温度変化を解析するために、 200K~50K まで 10K 刻みに計16 回の反復実行が行 われる。3次元 FFT の実行には、FFTW ライブラリ を、また固有値の求解には、Lapack ライブラリを使 用する。

現状のモデルサイズは $N_x = N_y = 64, N_\omega = 2,048$ であり、研究室のサーバ (Intel[®] Xeon[®] CPU E5-2630 v2) では計算に約 7 時間を要している。今後は 低温領域における秩序状態を詳細に解析するために、 各次元のサイズを N_x, N_y については 30 倍以上、 N_ω については 10 倍程度拡張する必要があり、より大容 量の物理メモリと計算時間の短縮が必要となる。

2.3 使用ライブラリについて

FFTW ライブラリ [2] は、任意の基数の実数および 複素数配列の FFT を行うライブラリで、GNU ライ センスに基づくフリーソフトウェアである。FFTW ライブラリは商用アプリケーションにも採用されるほ ど幅広く利用されている FFT ライブラリである。ま た開発も継続的に行われており、年に数度のマイナー アップデートが行われている。また SIMD 命令のサ ポートなど、Intel[®] 系 CPU および Intel[®] コンパイ ラ向けの最適化がソースコードになされている。

LX406-Re2 では Intel[®] CPU に最適化された Intel[®] MKL ライブラリから FFTW と Lapack が利 用できるため、コンパイル時に FFTW のインクルー ドファイルの場所と MKL ライブラリをリンクする 指定を行うのみで実行オブジェクトの作成が可能で ある。

ー方 SX-ACE では、FFTW ライブラリやそのイ ンターフェースは標準では提供されていないため、 FFTW ライブラリを利用できない。SX-ACE で高性 能演算を実現するためには、ベクトルチューニングさ れた NEC 製の ASL (Advanced Scientific Library) を FFT ライブラリとして利用する必要がある。そこ で後述の ASL Wrapper を導入し、コード中の FFTW ライブラリをコールする箇所を修正することなく ASL の FFT ライブラリを利用することとした。

3 ASL Wrapper

3.1 概要

ASL Wrapper は FFTW や Intel(R) MKL の FFT ライブラリを用いたプログラムを、SX 上で利用す るためのインターフェースである。ASL Wrapper は Xevolver プロジェクト [3] で開発され、現在 v1.0r1.2 が公開されている。ASL Wrapper を用いることで、 FFTW あるいは Intel(R) MKL の FFT ライブラリ を使用するアプリケーションを SX-ACE へ移植する ことが容易になるとともに、SX 向けに高度にチュー ニングされた ASL ライブラリを利用することで大き な性能向上が期待できる。

ASL ライブラリでは複素引数型の3次元複素フーリ エ変換を行う場合、サブルーチン ZFC3FB を利用す る。このサブルーチンも FFTW と同じく任意基数に 対応した FFT で、データ数を調整できる場合には、配 列の各サイズを 2,3,5 の倍数となるように設定した方 が効率よい計算を行える。また SX では主記憶のバン クコンフリクトを避けるために、配列の整合寸法を奇 数に設定するのが望ましいが、現在の ASL Wrapper では整合寸法を別途指定する方法はないので、配列サ イズの1次元目を奇数となるよう N のサイズを 65 に 設定しバンクコンフリクトの回避を試行した。

3.2 使用方法

ASL Wrapper を利用するには、開発元のウェブペー ジ[4] で提供される tar ファイルを入手して利用者の ホームディレクトリ配下に展開し、アプリケーション のコンパイル時にインクルードファイルのパス指定、 およびリンク時にアーカイブファイルのパス指定とラ イブラリ名の指定を行う。Fortran コードのコンパイ ル時には、-Ep オプションにより C プリプロセッサを 起動する必要がある。

4 SX-ACE への移植と性能比較

4.1 コードの移植方法

ASL.V1.0_r1.2.tar をダウンロードした後、ホーム ディレクトリ配下 (\$HOME/ASL_Wrapper/) に展開 し、SX-ACE 用に移植を行うアプリケーションのコン パイルとリンクを行う。今回のアプリケーションの場 合は Lapack ライブラリも必要であるため、リスト 1 に示すコマンドでコンパイルとリンクを行い、実行オ ブジェクトの作成を行った。

リスト 1 ASL Wrapper のリンク方法

	<pre>sxf90 -Ep -I\$HOME/ASL_Wrapper/FFTW/include \</pre>	
	source.f90 -L\$HOME/ASL_Wrapper/FFTW/lib \	
l	-lfftw2asl -lasl -llapack -lblas	

4.2 FFT ライブラリの性能比較

本センターの LX406Re-2 と SX-ACE でベクトル チューニングを行う前のアプリケーションコード(以 下、初期コード)の演算時間の比較を行った。それぞれ 1 コアでの逐次実行である。なお性能比較を行うコー ドは演算時間短縮のため、単一の温度(iTm=200)の みの計算とした。

LX406Re-2 では Intell[®]MKL ライブラリを用い て FFTW ライブラリおよび Lapack ライブラリの リンクを行った。SX-ACE では ASL Wrapper を用 いた場合と、FFTW ライブラリのソースコードを FORTRAN90/SX コンパイラによりコンパイルして 作成したライブラリを用いた場合との比較を行った。 Lapack ライブラリは SX 向けに最適化された Math-Keisan ライブラリを用いた。それぞれの演算時間を 表 2 に示す。ASL Wrapper を用いて SX-ACE で実 行した場合が最も演算時間が短く、FFTW ライブラリ のソースコードをコンパイルした用いた場合の約 2.5 倍の性能となった。SX 向けに最適化された ASL ライ

FFT ライブラリ・計算機	演算時間 [sec]
FFTW (Inlel MKL) on LX406Re-2	1,036
FFTW using ASL Wrapper on SX-ACE	707
FFTW compiled by FORTRAN90/SX on SX-ACE	1,830

ブラリの効果が見られ、ASL Wrapper を用いて ASL ライブラリを使用する有用性が確認できた。

次節では、本コードの SX-ACE 向け最適化につい て説明する。

5 ベクトルチューニングと性能比較

5.1 簡易性能解析機能によるコスト調査

コード実行時に性能解析情報の取得を行う簡易性 能解析(FTRACE)機能を利用して、演算時間のコ スト分析を行う。FTRACE 機能を利用するにはソー スコードのコンパイル時とリンク時に-ftrace を指定 する。FTRACE 機能の一つであるユーザー指定リー ジョンを利用することで、コードの任意の範囲で性能 2 解析情報の取得が可能である。ASL 等の外部ライブラ リは FTRACE 機能のみでは性能解析情報に表示され ないが、ライブラリ呼び出し前後でユーザー指定リー ジョンを利用することで、外部ライブラリの性能解析 情報も得ることができる。

5.2 配列宣言方法の変更によるループ融合

リスト2に初期コードの編集リストの一部を示す。 ソースコードのコンパイル時の編集リストを出力する ためにはコンパイル時に-R5を指定する。ユーザ指定 リージョン REGION A を 2 箇所の 3 重ループの演算 が行われる箇所に設定した。

内側の2重ループの演算(4、16行目)は、DO ルー プにより1次元目、2次元目とも定義された配列サイ ズの最初から最後まで参照されるため、コンパイラが 自動的に2重ループの演算を1重ループの演算に一重 10 化するはずであるが、編集リストでは最内ループ(5 12 行目および17行目)のみベクトル化されたことが分14 かる (Vマークがベクトル化されたループを示す)。こ れはリスト3に示すように、演算で用いられる配列の 18 宣言が complex 文と pointer 文により行われるため、20 コンパイラが配列サイズと参照範囲が同一である判断 22 ができないためである。

そこでリスト4に示すように、配列の宣言を通常の 26

24

complex 文のみで行い、また実行中に配列サイズに変 更がないことを確認し、静的なサイズで配列の確保を 行った。

配列宣言の変更後の編集リストをリスト5に示す。 最内ループに*記号と2番目のループにW記号が付 き、コンパイラにより2重ループが一重化されたこ とが分かる。コンパイラにより一重化された箇所は、 REGION A の 2 箇所を含む計 30 箇所あった。

リスト2 REGION A (初期コード)

	<pre> CALL FTRACE_REGION_BEGIN('REGION A')</pre>
2	+> do iw=0,Wm-1
3	w=dble(2*iw+1)*pi*Tm
Ł	+> do iky=0,N-1
5	V-> do ikx=0,N-1
3	A Gdd(ikx,iky,iw)=(im*w-Ep(ikx,iky))&
7	<pre>/((im*w-Ed-selfs3(ikx,iky,iw)) &</pre>
3	<pre> *(im*w-Ep(ikx,iky))-V(ikx,iky))&</pre>
,	-1.0d0/(im*w-gza)
)	V- end do
	+ end do
2	+ end do
3	
Ł	+> do iw=0,Wm-1
5	w=dble(2*iw+1)*pi*Tm
3	+> do iky=0,N-1
7	V-> do ikx=0,N-1
3	A Gpp(ikx,iky,iw)=(im*w-Ed &
)	-selfs3(ikx,iky,iw)) &
)	/((im*w-Ed-selfs3(ikx,iky,iw)) &
	<pre> *(im*w-Ep(ikx,iky))-V(ikx,iky))&</pre>
2	-1.0d0/(im*w-gza)
3	V- end do
Ł	+ end do
5	+ end do
3	<pre> CALL FTRACE_REGION_END('REGION A')</pre>

リスト 3 complex, pointer 文による配列宣言

integer,parameter ::N=64,Wm=2048
<pre>complex(kind(0d0)),pointer::Gdd(:,:,:),Gpp(:,:,:)</pre>
<pre>complex(kind(0d0)),pointer::selfs3(:,:,:)</pre>
allocate(Gdd(0:N-1,0:N-1,0:Wm-1))
allocate(Gpp(0:N-1,0:N-1,0:Wm-1))
allocate(selfs3(0:N-1,0:N-1,0:Wm-1))

リスト4 complex	文のみによ	る配列宣言
--------------	-------	-------

integer,parameter ::N=64,Wm=2048
complex(kind(0d0))::Gdd(0:N-1,0:N-1,0:Wm-1)
complex(kind(0d0))::Gpp(0:N-1,0:N-1,0:Wm-1)
complex(kind(0d0))::selfs3(0:N-1,0:N-1,0:Wm-1)

リスト 5 REGION A (ループ一重化後)

<pre> CALL FTRACE_REGION_BEGIN('REGION A')</pre>
+> do iw=0,Wm-1
w=dble(2*iw+1)*pi*Tm
W> do iky=0,N-1
*-> do ikx=0,N-1
A Gdd(ikx,iky,iw)=(im*w-Ep(ikx,iky))&
/((im*w-Ed-selfs3(ikx,iky,iw)) &
*(im*w-Ep(ikx,iky))-V(ikx,iky))&
-1.0d0/(im*w-gza)
*- end do
W end do
+ end do
+> do iw=0,Wm-1
w=dble(2*iw+1)*pi*Tm
W> do iky=0,N-1
*-> do ikx=0,N-1
A Gpp(ikx,iky,iw)=(im*w-Ed &
-selfs3(ikx,iky,iw)) &
/((im*w-Ed-selfs3(ikx,iky,iw)) &
*(im*w-Ep(ikx,iky))-V(ikx,iky))&
-1.0d0/(im*w-gza)
*- end do
W end do
+ end do
CALL FTRACE_REGION_END('REGION A')

5.3 コード修正によるループ融合

REGION A で示した 2 箇所の 3 重ループの演算箇 所は、3 次元目のループ(2 行目および 14 行目)が同 範囲の演算を行い、3 行目および 15 行目のスカラ演算 も共通の演算を行うので、3 次元目のループを融合す ることで、ベクトル演算命令のオーバヘッドを削減す ることが可能である。コンパイラオプションで最適化 レベルを最高の-Chopt、もしくは明示的にループ融合 を行うオプション-pvctl loopfusion を指定することが できるが、この箇所はコンパイルオプションではルー プ融合されなかったため、ソースコードの一部をコメ ントアウトすることでループ融合を促進した。リスト 6 にソースコードの修正により 3 次元目のループが融 合された編集リストを示す。

リスト 6 REGION A (ループ融合後)

1	<pre> CALL FTRACE_REGION_BEGIN('REGION A')</pre>
2	+> do iw=0,Wm-1
3	w=dble(2*iw+1)*pi*Tm
4	W> do iky=0,N-1
5	*-> do ikx=0,N-1
6	A Gdd(ikx,iky,iw)=(im*w-Ep(ikx,iky))&
7	/((im*w-Ed-selfs3(ikx,iky,iw)) &
8	*(im*w-Ep(ikx,iky))-V(ikx,iky))&
9	-1.0d0/(im*w-gza)
10	! end do
11	! end do
12	! end do
13	
14	! do iw=0,Wm-1
15	! w=dble(2*iw+1)*pi*Tm
16	! do iky=0,N-1
17	do ikx=0,N-1
18	A Gpp(ikx,iky,iw)=(im*w-Ed &
19	-selfs3(ikx,iky,iw)) &
20	/((im*w-Ed-selfs3(ikx,iky,iw)) &
21	*(im*w-Ep(ikx,iky))-V(ikx,iky))&
22	-1.0d0/(im*w-gza)
23	*- end do
24	W end do
25	+ end do
26	<pre> CALL FTRACE_REGION_END('REGION A')</pre>

2箇所の3重ループの演算部分が3次元目のループ で融合され、2行目から25行目が1つのループとなっ たことが分かる。

以上2種類のベクトルチューニングを行ったコー ドと、初期コードを実行した際のFTRACE 情報を 表3に示す。上段からそれぞれ、初期コード(A-1)、 ループー重化後(A-2)、さらにループ融合後(A-3)の REGION A の性能解析情報である。

ループー重化後(A-2)は、初期コード(A-1)と比較して FLOPS 値が約 2.8 倍向上した。また平均ベクトル長が 64 から 256 に増加した。これは初期コードでは最内ループの繰り返し数が N=64 であったものが、2 重ループの一重化により 64 × 64=4,096 となり最大ベクトル長の 256 よりも十分長くなったことの結果である。また、バンクコンフリクト(NETWORK)の値は約 32 秒から 2 秒に減少している。これは、ベ

クトルプロセッサではベクトル長が長いほど同じ演算 量を処理する際のメモリアクセスが効率化されるため である。結果として FLOPS 値は約 2.8 倍向上した。

ループ融合後(A-3)はベクトル演算命令のオーバ ヘッド削減により、さらに FLOPS 値が 4% 程度向上 した。

5.4 基数サイズの変更によるバンクコンフリクトの 削減

前述の通り ASL ライブラリの FFT では、基数のサ イズが偶数(特に 2 の冪乗)のときにバンクコンフリ クトが大きくなるので、N のサイズを 64 から 65 に変 更し、リスト 7 に示した FFT 演算部分の REGION B の範囲について性能解析を行った。

2 行目から 5 行目において FFTW ライブラリを コールする箇所では、ASL Wrapper により実際は ASL ライブラリがコールされる。

リスト7 REGION B

11	CALL	FTRACE_REGION_BEGIN('REGION B')
11	call	dfftw_plan_dft_3d(p,N,N,Wm,Gdd,Gdd, &
11		FFTW_FORWARD, FFTW_ESTIMATE)
11	call	dfftw_execute(p)
11	call	dfftw_destroy_plan(p)
11	CALL	<pre>FTRACE_REGION_END('REGION B')</pre>
	call call call CALL	<pre>dfftw_plan_dft_3d(p,N,N,Wm,Gdd,Gdd, & FFTW_FORWARD,FFTW_ESTIMATE) dfftw_execute(p) dfftw_destroy_plan(p) FTRACE_REGION_END('REGION B')</pre>

表4にN=64で実行したとき(B-1)とN=65で実 行したとき(B-2)のFTRACE 情報を示す。基数の サイズが $64 = 2^6$ の場合はバンクコンフリクトの値が 大きく、実行効率は 1%程度であるが、基数のサイズ が 65の場合はバンクコンフリクトの値が約 1/30に短 縮され、実行効率は 28% まで向上している。FFT に よる演算箇所は REGION B の箇所を含む計 9 箇所あ り、この高速化の効果は大きい。

5.5 初期コードとチューニング後コードの性能比較

初期コードと2種類のベクトルチューニングおよび N = 65 で実行した際の性能比較を表5に示す。各項 目の値は、Program Information からの抜粋である。

オリジナルコードでは実行効率は4%程度であった が、ベクトルチューニングと基数サイズの変更による バンクコンフリクトの削減で、実行効率を約30%まで 改善することができた。特にFFT ライブラリを使用 する際の基数サイズの最適化は、ベクトルプロセッサ の性能に大きく影響することが分かる。

次にベクトルチューニング後のコードを表2と同じ 環境で実行した結果を表6に示す。速度向上比は表2 の各演算時間に対する比である。ASL Wrapper を使 用して SX-ACE で実行した場合の速度向上比は約7 倍であった。研究室のサーバでの実行時間と比較し、 約6.5%の実行時間であった。

表3	FTRACE	REGION	А	の性能比較
~~ ~		10101010	_	

PROC.NAME	FREQUENCY	EXCLUSIVE	AVER.TIME	MOPS	MFLOPS V.OP	AVER.	VECTOR	I-CACHE	0-CACHE	BANK CO	NFLICT	ADB HIT
		TIME[sec](%)	[msec]		RATIO	V.LEN	TIME	MISS	MISS	CPU PORT	NETWORK	ELEM.%
REGION A-1	2893	81.90/(11.6)	28.312	22048.5	13630.6 99.44	64.0	81.907	0.001	0.001	0.006	31.853	54.92
REGION A-2	2893	29.389(4.7)	10.159	61210.9	37988.7 99.83	256.0	29.388	0.000	0.000	0.000	1.707	49.99
REGION A-3	2893	20.193(3.3)	6.980	67385.5	39661.6 99.87	256.0	20.193	0.000	0.000	0.000	0.854	49.95

表4 FTRACE REGION B の性能比較

PROC.NAME	FREQUENCY	EXCLUSIVE TIME[sec](%	AVER.TIME) [msec]	MOPS	MFLOPS V.OP RATIO	AVER. V.LEN	VECTOR TIME	I-CACHE MISS	0-CACHE MISS	BANK COI CPU PORT	NFLICT NETWORK	ADB HIT ELEM.%
REGION B-1	142	138.112(22.4) 972.621	1408.9	659.4 98.56	213.6	137.976	0.001	0.051	2.425	112.758	33.33
REGION B-2	142	7.998(8.1) 56.725	43620.8	17917.9 98.37	230.1	7.895	0.001	0.038	0.177	2.123	70.10

表5 初期コードとチューニング後コードの性能比較

Program Information より抜粋	演算時間 [sec]	GFLOPS	実行効率 [%]	平均ベクトル化率 平均ベクトル長 [%]		バンクコンフリクト (CPU PORT) [sec]	バンクコンフリクト (NETWORK) [sec]	
オリジナルコード	707.18	2.69	4.20	77.24	98.68	9.99	495.47	
ベクトルチューニング後	614.98	2.55	3.99	194.56	99.26	9.71	459.71	
N=65に変更後	99.01	18.66	29.16	192.30	98.95	1.24	14.77	

表6 チューニング後コードの演算時間比較 (N=65)

FFT ライブラリ ・計算機	演算時間 [sec]	速度向上比 [倍]
FFTW (Inlel MKL) on LX406Re-2	986	1.05
FFTW using ASL Wrapper on SX-ACE	99.6	7.14
FFTW compiled by FORTRAN90/SX on SX-ACE	1,660	1.10

また、LX406Re-2 での実行においても、初期コード とほぼ同程度の性能が担保され、SX-ACE 向けベクト ルチューニングによる性能低下は見られなかった。

5.6 目標モデルサイズでの実行環境推定

SX-ACE において $N_x = N_y = 65, N_\omega = 2,048$ の パラメータ値で実行した際のメモリ使用量は約 2.4GB であった。コード中で使用されている配列サイズから 算出し、今後のシミュレーションにおける目標モデル サイズとなる $N_x = N_y = 2,000, N_\omega = 20,480$ での メモリ使用量は 15TB と推定される。SX-ACE では 256 ノードの利用でこのメモリ量を使用可能であるの で、今後は MPI ライブラリを用いたコードの並列化 を実施し、引き続き大規模並列での実行を支援する予 定である。

6 まとめ

本稿では『銅酸化物の有効モデルに対する揺らぎ交 換近似』コードの SX-ACE 向け最適化手法について 述べた。ASL Wrapper を用いることで、FFTW ライ ブラリの記述部分を変更することなく SX-ACE での コンパイルと実行が可能であり、また ASL の利用に より高い実行効率を得ることができた。今回実施した 最適化により、SX-ACE において約 30% の実行効率 での演算を可能とした。今後は将来の問題規模拡大に 対応するべく、大規模並列での実行を見据えて MPI 並列化の支援を行う予定である。

サイバーサイエンスセンターの大規模科学計算シス テムが、利用者の研究発展の一助になるために、今後 も高速化推進研究活動に取り組む所存である。

参考文献

- [1] 足立匡、小池洋二、Nd2CuO4 構造 (T'構造) を 有する電子型銅酸化物における還元処理による電 子状態の変化とノンドープ超伝導のメカニズム、 固体物理 vol.49、No.5、333-344、2014.
- [2] FFTW、http://www.fftw.org
- [3] Xevolver, http://xev.arch.is.tohoku.ac.jp/
- [4] ASL Wrapper, http://xev.arch.is.tohoku.ac.jp/software/

[大学 ICT 推進協議会 2016 年度年次大会論文集より]

スーパーコンピュータ SX-ACE の省エネ運用

森谷 友映¹⁾, 齋藤 敦子¹⁾, 佐々木 大輔¹⁾, 山下 毅¹⁾, 小野 敏¹⁾,

大泉 健治¹⁾, 江川 隆輔^{2),3)}, 小林 広明^{3),2)}

1) 東北大学 情報部情報基盤課

2) 東北大学 サイバーサイエンスセンター

3) 東北大学 大学院情報科学研究科

t-moriya@cc.tohoku.ac.jp

Energy-saving operation of the supercomputer SX-ACE

Tomoaki Moriya¹⁾, Atsuko Saito¹⁾, Daisuke Sasaki¹⁾, Takeshi Yamashita¹⁾, Satoshi Ono¹⁾,

Kenji Oizumi¹⁾, Ryusuke Egawa^{2), 3)}, Hiroaki Kobayashi^{3),2)}

Information Infrastructure Division, Information Department, Tohoku Univ.
 Cyberscience Center, Tohoku Univ.
 Graduate School of Information Sciences, Tohoku Univ.

概要

東北大学サイバーサイエンスセンターは、全国共同利用機関として学内外の研究者に対 して大規模科学計算システムを提供している。システムが大規模化するにしたがって、ま た近年の電力料金の上昇により、運用コストは急増している。大規模計算機を運用する上 でも「省エネ対策」は取り組むべき大きな課題である。本稿では、本センターにおける大 規模科学計算システムの省エネ運用の取り組みを設備、運用の面から報告する。

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)では、全国共同利用機関として学 内外の研究者に高性能計算基盤環境である大規 模科学計算システムを提供している。計算シス テムは定期的に更新や増強を実施し、利用分野 の裾野拡大を図り、大規模・高精度化するシミ ュレーションモデルに対応するなどして利用者 の研究開発を促進している。

2011年3月に発生した東日本大震災以降、原 子力発電所の稼働率低下と燃料価格の高騰に伴 う火力発電費の上昇、さらに、2012年7月から 再生可能エネルギー発電促進賦課金が上乗せさ れたことを背景に、スーパーコンピュータ運用 に係る光熱水量経費が急増している。運用コス トを抑えるために、省エネ対策は取り組むべき 大きな課題となっている。 このような状況の下、スーパーコンピュータ SX-ACE の新規導入に合わせ計算機専用棟であ る本センター2号館が竣工された。2号館は、電 源設備、計算機の設置スペース、空冷・水冷方 式の両方に対応した冷却システムを備えている。 これらの整備は計算システムの安定稼働ととも に電気料金等のコスト削減にも寄与する。

本稿では、本センター2号館の冷却設備の紹 介とその省エネ対策、および SX-ACE の省電力運 用に関する取り組みについて述べる。

2 大規模科学計算システムについて

本センター大規模科学計算システムの構成を 図1に示す。本センターの大規模科学計算シス テムはベクトル型スーパーコンピュータ SX-ACE、スカラ型並列コンピュータLX 406Re-2、 ストレージシステムおよび三次元可視化システ ムから構成される。





図1 大規模科学計算システム構成図

ベクトル型スーパーコンピュータ SX-ACE は 2,560 ノードから構成される。1 ノードには、 理論最大演算性能 276GFLOPS のベクトルプロセ ッサ1 基4 コア、メモリ 64GB の主記憶容量・ I/0 制御部・ネットワークの制御部を単一 LSI に搭載している。前機種 SX-9 と SX-ACE の性能 比較を表1に示す。SX-9 システムの理論最大演 算性能が 34.1TFLOPS であったのに対し、 SX-ACE システムでは706.6TFLOPS となり、20.7 倍に性能向上している。なお、理論演算性能あ たりの消費電力については、SX-9 の 1GFLOPS あ たり 15.8W であったのに対し、SX-ACE は 1.69W であり、約 1/10 の低消費電力の設計になってい る。

したがって、システム規模の理論演算性能比 と 1GFLOPS あたりの消費電力比から、SX-9 シス テムに比べ約2倍の電力増加が想定され、更な る省電力に対する取り組みが必要である。

建物・冷却設備における省エネルギ 一対策

3.1 本センター2号館の紹介

2 号館は2 階建ての建屋であり、1 階にスーパ ーコンピュータ SX-ACE、2 階に並列コンピュー タ LX 406Re-2 およびストレージシステムを配置 している。

冷却設備は、屋上に密閉型フリークーリング 方式の冷却塔一体型チリングユニットを設置し、 1階には水冷設備と空冷設備、2階には空冷設備 を備えている。2号館の内部構成を図2に示す。

表 1 SX-9 と SX-ACE の性能比較

	性能	SX-9	SX-ACE	向上比
CPUあたり	コア数	1個	4個	4倍
	理論最大演算性能	118.4GFLOPS	276GFLOPS	2.3倍
	最大ベクトル演算性能	102.4GFLOPS	256GFLOPS	2.5倍
	最大消費電力	1,875W	469W	0.25倍
	性能	SX-9	SX-ACE	向上比
ノードあたり	CPU数	16個	1個	0.06倍
	理論最大演算性能	1,894GFLOPS	276GFLOPS	0.15倍
	最大ベクトル演算性能	1,638GFLOPS	256GFLOPS	0.16倍
	最大消費電力		469W	0.02倍
	性能	SX-9	SX-ACE	向上比
システムあたり	ノード数	18ノード	2,560ノード	142.2倍
	CPU数	288個	2,560個	8.9倍
	理論最大演算性能	34.1TFLOPS	706.6TFLOPS	20.7倍
	最大ベクトル演算性能	29.5TFLOPS	655.4TFLOPS	22.2倍



図2 2号館内部構成

3.2 冷却塔一体型チリングユニット

図3に示すように、冷却塔一体型チリングユ ニットは2号館屋上に設置し4基構成で運用し ている。上部に密閉式冷却塔3台、下部に3台 のチラーを内蔵している。冷却塔部は、冷却コ イルを流れる冷媒を、送風ファンによって取り 込まれた外気と散水槽から散布された水の蒸発 潜熱により冷却する。チラー部は、一般的に用 いられる圧縮機で冷媒を冷却する。冷媒は 15℃で供給するように設定しており、外気の温 度が低い期間は冷却塔のみで冷却(フリークー リング)が可能となる。

冬期や朝晩の気温が低い期間は、消費電力の 高い圧縮機は停止したまま冷却塔のみの運転と なり節電効果は非常に高い。



図3 冷却塔一体型チリングユニット

3.3 アイルキャッピング

更なる省エネルギー運用を目指し、1 階に設置 した SX-ACE ではアイルキャッピングを採用し ている。

アイルキャッピングとは、空調機から供給さ れる冷気と SX-ACE からの高温排気を混流しな いようビニールカーテンで分離する方法である。 分離することにより、効率的な空冷制御が可能 になり、消費電力の削減が期待できる。

図 4 は、アイルキャッピングを設置した SX-ACE である。冷気の吸入側であるラック前 面側を向かい合わせに配置し、2 列の向かい合 うラック間の側面と上面をビニールカーテンで 仕切る。供給される冷気は、仕切った内部のフ リーアクセスフロアの底面から効率的に SX-ACE へ吸入させ、ラック背面からの高温排 気は天井面の吸入口から天井裏を介し、空調機 へ戻している。



図4 アイルキャッピングを設置した SX-ACE

4 システム運用における省エネルギー 対策

SX-ACE は、バッチ処理システム NQSII の拡張 スケジューラ JobManipulator に搭載された省 電力運転機能と連携することで、効率的な省電 力運転を行うことができる。省電力運転機能に はコア縮退とノード縮退の2つがある。本セン ターではこの2つを組み合わせた省電力運転を 行っている。

4.1コア縮退

コア縮退は、0S が最低限動作するのに支障が ない状態に稼動コア数を縮退する機能である。1 ノード4コアのうち最大3コアが休止状態にな る。節電効果はそれほど大きくはないが、休止/ 復帰のレスポンスが速いため、ジョブの実行状 況に応じたきめ細かい省エネルギー運用が可能 である。

4.2ノード縮退

ノード縮退は、一定時間ジョブの実行がない ノードの DC 電源を停止する機能である。

図 5 に、1 クラスタ(512 ノード)最大定格 240kWを100%とした際のコア縮退時、ノード縮





図5 1クラスタあたりの消費電力

退時の消費電力の内訳を示す。ノード縮退は節 電効果が非常に大きく、コア縮退時より消費電 力を約1/10に抑えることができる。

4.3 ノード縮退運用の見直し

ノード縮退では、DC 電源停止/起動時にハー ドウェアに高い負荷がかかる。このため、ハー ドウェアの信頼性を確保するためにはノード縮 退の頻度を制御する必要がある。

SX-ACE 導入当初は、ノード縮退から復帰す るまでの時間間隔を4時間以上あけることでノ ード縮退の頻度を制御していた。これにより、 ハードウェアの信頼性を確保することはできた が、ノード縮退中の4時間の間、サービス提供 が止まってしまう問題があった。

この問題を解決するために、ハードウェア信 頼性確保の要件を洗い直し、図6のように、制 御方法を「ノード縮退の時間間隔」から「ノー ド縮退回数(1日5回まで)」へ見直した。この 結果、以前と同等の信頼性が確保できることは ベンダーに確認済みである。現在は、この見直 しにより利用者へのサービス提供の質を低下さ せることなく省電力運用を行うことが出来てい る。



図6 ノード縮退運用の改善前と改善後

5 省エネルギー対策の効果

図7に、2015年1月から2016年8月までの 外気温、冷却塔一体型チリングユニットの消費 電力を示す。2015年、2016年とも、夏期(6月 ~9月)の消費電力が大きいが、冬期(10月~4 月)は小さい。

 3.2 節のとおり、冬期は冷却塔のみで冷却さ れるフリークーリングとなり節電効果が大きく 発揮されている。

図8は、SX-ACEのノード状況と各設備の消費 電力(SX-ACE、冷却設備)の瞬時値である。実 行中以外のほとんどのノードが、コア縮退状態 やノード縮退状態であり、省電力運転機能が効 いている。よって、消費電力も縮退数に対応し て削減でき、稼動状況に応じた効率のよい省電 力運転ができている。また、図7より2016年1 月は平均気温 2.4℃と低く、いずれの日もフリ ークーリングのみの冷却で、冷却設備において も省エネルギーな運転ができている。約 150kW の電力消費は、空調ファンや冷媒ポンプ等の動 力機器によるもので、冷却に必要な最低限の電 力である。



図7 冷却塔一体型チリングユニットの月間消費電力量と平均外気温度





図9に、SX-9システムとSX-ACEシステムの 消費電力量を示す。SX-9システムは2008年11 月から2015年2月まで運用していた。その中で SX-9システムを運用していた最終年と、 SX-ACEシステムの直近9ヶ月間と比較している。 消費電力は、すべての月においてSX-9システ ムを下回っている。SX-ACEシステムはSX-9シ ステムに比べ全体の理論演算性能が20.7倍で、 1GFLOPS あたりの消費電力が約1/10と、単純に 2倍の電力増加を見込んでいた。しかし、省電 力運転の効果もあり逆に減少したことが確認で きた。

また、冷却設備においては、夏期は両システ ムともさほど差は見られないが、冬期はフリー クーリングの効果により最大 55%の省電力が実 現できている。

6 おわりに

フリークーリングが可能な冷却設備およびア イルキャッピングの導入により冷却効率の向上 をこれまで以上に高めることができ、大幅な省 エネルギー効果を実現できた。また、省電力運 転機能を運用に取り入れたことも節電効果へつ ながっている。

これらの省エネルギー運用をひとつの経験と して蓄積し、今後の大規模科学計算システムの 運用に活かしていきたい。

参考文献

[1] 東北大学情報部情報基盤課共同利用支援係、 共同研究支援係、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、スーパーコンピュータ SX-ACEの運用に ついて、東北大学サイバーサイエンスセンタ ー大規模科学計算システム広報 Vol.49、 No.1、pp.22-27、2016.

[大学 ICT 推進協議会 2016 年度年次大会論文集より]

キャンパス無線 eduroam と関連サービスの最新動向 Updates on eduroam and Related Services

後藤英昭¹, 中村素典², 曽根秀昭¹

¹東北大学サイバーサイエンスセンター
 ²国立情報学研究所

hgot@cc.tohoku.ac.jp

概要: 学術系の無線 LAN ローミング基盤である eduroam は,世界 80 か国,国内 157 機関 (2016 年 9 月現在,昨年末より+30 機関) に成長した.一部の国では初等・中等教育 機関にも導入が始まっており,関連システム及びサービスの開発も盛んである.本報告で

は、eduroamの展開と関連サービスの開発について、国内外の動向を紹介する.

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.日本では、eduroam JP の名称で 2006 年 に実証実験的なサービスが始まり、10 年目となる 2016 年現在で国内 157 機関が参加するに至り [1]、 また、本年4月には国立情報学研究所 (NII)の正式 なサービスになった.世界ではこの一年で5か国が 参加し、総数で80 となった.eduroam は既に大学 の無線 LAN の世界的なスタンダードになっている が、大学以外の学校にも導入が始まるなど、国内外 ともに成長が続いている.

本報告では,eduroamの展開と関連サービスの 開発について,国内外の動向を紹介する.

2 eduroam JPの動向

2.1 eduroam JP の正式サービスへの移行

日本における eduroam は、平成 18 年度からの文 部科学省特別教育研究経費事業「大学間連携のため の全国共同電子認証基盤構築事業」における実証実 験プロジェクトとして、eduroam JP の名称で 2006 年 9 月より運用が開始された.その後、その利便性 や互恵の精神への理解を得て、2016 年 3 月時点で 130 を超える機関が参加するに至り、国内における 重要なサービスであることが実証された.このよう な状況を踏まえて、eduroam JP の活動は、2016 年 4 月より NII の正式なサービスとして引き継がれる こととなった [1].

これまで10年間に渡り,eduroam JPの実質的 な運用は主にNII及び東北大学サイバーサイエンス センターによって行なわれてきたが,eduroam JP の正式サービスへの移行に伴い,運用体制の変更・ 調整が進められてきた.また,これまで十分に整備 されていなかった規定・実施要領・運用基準につい



図 1: eduroam JP 参加機関数の推移



図 2: eduroam JP 参加機関マップ

ても、策定作業が進んでいる (11 月を目途に公開 予定).利用者及び各機関から見た eduroam JP の サービス内容に大きな変更はないが、正式な規定や 基準が定められるため、既に参加している機関に対 しては、後日、参加継続の意思などを問い合わせる 調査が行われる予定である.機関側で特に支障がな い限り、世界の eduroam コミュニティのメンバー として、継続することを強くお奨めしたい.

eduroam JP の参加機関数は 2016 年 9 月時点で 157 となり, 2015 年末より 30 機関の増加となった. 欧州の多くの国々を上回る規模に成長したが,国内 には約 1,200 の高等教育機関があることから,普及 率では約13%に留まり,更なる普及が望まれる.図 1 に機関数の推移を,図2に参加機関のマップ(ピンは本部の位置)を示す.概ね全国に展開されているが,参加機関が一つもない県がまだ8つあることから,全国で利用できる利便性を達成するためにも、早期の導入を期待したい.特に,国際会議がよく開催されるような都市及び会議施設では,国内外の利用者からの期待が非常に高いことから,セキュリティ面で不安の大きいフリーWi-Fiばかりではなく,802.1X認証で安全性の高いeduroamの導入を推奨したい.

2.2 会議向け期間限定 eduroam アカウント

国際会議では、参加者がネットワークを利用でき るように、一時的に基地局を設置したり、既設の基 地局のためのゲストアカウントを用意するのが通例 である.会場に eduroam 対応の基地局がある場合、 eduroam 参加機関の利用者は各自のアカウントで そのままネットワークが利用できる.しかし、国内 外ともに eduroam に未参加の機関もまだ多く、企 業の研究所のように eduroam に参加できない機関 からの参加者も多い.そのため、会議運営者が自身 の責任の下でゲストアカウントを容易に取得、発行 できる仕組みとして、eduroam JP では 2014 年 7 月より、「会議向け期間限定 eduroam アカウントの 試行」を行なってきた [3].

このサービスでは,2016年9月時点までに25の 会議を支援した.これまでの試行運用において,以 下のような課題が明らかになった.

最も大きな課題は、 サービスの提供可否の基準作 りである.eduroamは個人認証まで行う信用に基づ いたシステムであることから,万一,偽の会議など がでっち上げられて申請された場合は、これを排除 し、アカウントの不正取得やネットワークの不正利 用を未然に防ぐ必要がある.しかしながら,規模・ 内容ともに様々な会議が多数あることから,小さな 事務局で各会議の採否を判定することは難しい.現 在は,著名な学会などが主催ないし後援となってい ることを一つの目安にしているが、分野が多岐に及 ぶことから, 信頼できる組織かどうかの判断すら難 しい.一方,大きな研究プロジェクトの打ち合わせ のように、後援団体がなくても、サービス対象とし てできる限り拾いたい例もある. 今後もしばらく調 査を継続し、明確な基準と、事務手続き上可能な落 としどころを検討していく予定である.

第2の課題として,事務局の負担軽減が挙げられ る.これまでの実績では,平均してひと月あたり1件 程度の申請であったが,会議の担当者がeduroamや 認証システムの操作に不慣れなことが多く,サポー トの手間が非常に大きくなるケースが幾つか認め られた.申請数が徐々に増加していることもあり, 全国の会議を eduroam JP の一か所で受け付ける ことは,長期的視点で現実的ではない.そのため, eduroam 参加機関で開催される会議を当サービス の対象外として,ゲストアカウントを発行する仕組 みを各機関で用意するように,依頼していく予定で ある.また,小規模のミーティングなどで容易に利 用できるよう,eduroam のアカウントを利用でき る研究者が個人でゲストアカウントを少数だけ発行 できるシステムについても,検討を進めている.

第3の課題として、ゲストアカウントの有効範囲 の制御がある.会議の主催者ないし担当者からは、 法的な責任範囲を狭めるという自衛の目的で、ゲ ストアカウントの有効範囲を、会場内やせいぜい国 内にとどめたいという要望が聞かれる.学内のみ有 効なアカウントは、大学内の認証システムと基地局 システムに仕組みを作り込むことで実現できる.標 準的な eduroam には、国(地域)のレベルで利用者 認証の範囲を制御する仕組みがないことから、その ニーズの分析も必要である.

ゲストアカウントについては,国際的にも関心 が高く,GÉANT(eduroamの国際運用の中心機関) を中心としたコミュニティで,現在でも盛んに議論 が行われている.

3 世界の eduroam の動向

3.1 普及状況及び新システムの開発

執筆時点で世界の参加国 (地域) 数は 80 であり, 前年同時期より+5となった.昨年発表 [4] のように, アジア太平洋地域では, Trans-Eurasia Information Network (TEIN) の支援を受けて,オーストラリ アの AARNet が中心となって XeAP (Extending eduroam in the Asia Pacific, ジープと読む) プロジ ェクトが進められた.当プロジェクトでは, eduroam 参加と,それぞれ国内 3 機関の接続を支援する,7 か国が選ばれた (当初は5か国の予定).具体的には, ブータン,インドネシア,マレーシア,ネパール, パキスタン,フィリピン,スリランカで eduroam 接続支援が行われ,8月に香港で開催された APAN (Asia-Pacific Advanced Network) meeting で報告 があった.

GÉANT では、世界規模で利用できる集中型の IdP (Identity Provider)を共同開発するプロジェク トが2016年に立ち上がった.この集中型 IdP は、従 来の ID・パスワード認証に代わり、より安全と考えら れるクライアント証明書認証 (EAP-TLS 方式)の実 現を目指しており、端末に無線接続のためのプロフ ァイルを含むツール eduroam CAT (Configuration Assistant Tool)とも連携する.システムは完全な 集中型ではなく、例えば国単位で中間証明書を管理 できるようなアーキテクチャが考えられている.細 かい仕様については,執筆時点でも活発な議論と 調整・変更が続いている.なお,このシステムの構 想段階では,日本の集中型認証システムである「代 理認証システム」及び「仮名アカウント発行システ ム」も参考にされた [5].

一部の国では、高等教育機関に加えて、初等教 育・中等教育機関にも eduroam が導入される例が 見られるようになった.これについては、日本国内 の動向と併せて次章に述べる.

3.2 govroam

欧州では,政府関係機関の間でも無線LANを相 互利用可能として,政府関係者のネットワーク利用 の便を図りたいというニーズがあり,セキュリティ やプライバシーなどに関して様々な議論があった 後,SURFNet(オランダ)とBelnet(ベルギー)の間 で2016年に, "govroam"の名称でパイロットサー ビスが開始された[6].さらに,欧州の数か国が参 加を検討している.

現在の govroam は, eduroam と同様の仕組みに より認証連携を実現しているが, SSID には専用の "govroam"を用い, eduroam との間には認証連携 を行わない,独立したシステムである.プライバ シー保護について,ネットワーク側では特に何も行 わず,各端末に VPN の利用を強制することが想定 されている.また,常に VPN の利用を保証するた めに,基地局システムで透過させるべき VPN プロ トコルの取り決めなどが行われる予定である.執筆 時点において,日本が govroam に参加する動きは ない.

初等教育・中等教育機関における eduroam 展開

海外では、高等教育機関に加えて初等・中等教育機 関にも eduroam を導入する事例があり、この数年で その動きが活発化している. eduroam Compliance Statement には、研究または教育を行なう機関が IdP(Identity Provider) になれると規定されており、 高等教育機関という縛りはないため、初等・中等教 育機関の参加にも支障はない.

ハンガリーでは、NIIF と Hungarnet によって全 国の小中学校に eduroam を導入するプロジェクトが 立ち上がり、そのフェーズ1となる 2014 年から 2016 年の間に、1,700 校以上が接続された [7].フェーズ 2 で、さらに多くの学校が接続される予定である.

オーストラリアでは,2016年,タスマニア州にお いて公立学校への eduroam 導入が開始された [8]. アメリカ合衆国でも,幾つかの学区において,小中 高校に eduroam の導入例がある.

台湾では, 英語名で Taiwan Academic Network

Roaming と呼ばれるローミングシステムと,その 運用センターがあり,eduroam 互換ではないもの の,一部の初等・中等教育機関に無線 LAN ローミ ングが導入されている [9].

日本では,2006年の eduroam 導入からこれまで の間,高等教育機関と研究機関のみを対象として, eduroam JP の整備を進めてきた.初等・中等教育 機関を受け入れようとすると,機関数が大きいこと から,NII のみでは労力に余裕がないと考えられる. そのため,認証連携システムの運用や事務手続きを 引き受ける,補助的な組織が別途必要になると考え られる.

現在,小学校や中学校,高校等では,政府による 教育の情報化の推進に従って,生徒用端末や無線 LAN システムなどの ICT を活用した教育環境づく りが進められている.しかしながら,無線 LAN シ ステムのセキュリティ対策が不十分な例も見られ, 個人情報の漏洩などの深刻なトラブルも実際に発生 している.少なくとも教職員が利用する無線 LAN システムには,企業並みの高いセキュリティが要求 される.一部の高校では,既に IEEE802.1X によ る利用者認証 (1X 認証)を導入して,無線 LANの セキュリティを高めているところがある.1X 認証 が導入されれば,その学校が eduroam に参加する ことも技術的に容易になり,学校間の交流や大学と の連携,海外との交換留学などで,ネットワーク利 用環境の充実を図ることができると考えられる.

以上のような背景から,我々は初等・中等教育機 関における無線LANシステムのセキュリティ向上, 及び,eduroamの展開が必要と考え,2016年8月 より,その実現に向けた組織構成・基盤構築の検討 を開始した.初期のシステム構築や実証実験に参加 を希望または検討可能な学校や教育委員会,地方自 治体,業者等団体を募集しており,早期の連絡をお 願いしたい(窓口は本稿第一著者).

5 むすび

eduroamの展開と関連サービスの開発について, 国内外の動向を紹介した.世界の eduroam は,単 に参加国・参加機関の拡大のみならず,現在でも関 連システム及びサービスの開発が盛んである.新し い動きの一つに,初等・中等教育機関への展開があ り,国内でもそれに対応できるように準備を開始し た.現在,学校や関連団体,企業等に対して,初期 のシステム構築と実証実験に協力を依頼している. ICT 担当者が不在の学校でも容易かつ安全に利用 できる無線 LAN システムの開発が課題である.

参考文献

[1] eduroam JP: http://www.eduroam.jp/

- 40 —
- [2] "「諸外国の教育統計」平成 27(2015) 年版," 文部科学省, 2015.
 http://www.mext.go.jp/b_menu/toukei/ data/syogaikoku/1366171.htm (2016 年 9 月 21 日参照)
- [3] 後藤英昭, 新妻 共, 中村素典, 曽根秀昭, "キャンパス無線 eduroam の最新動向と国内機関向 け新サービス,"大学 ICT 推進協議会 2014 年 度年次大会 論文集 F3B-2, 2014.
- [4] 後藤英昭, 中村素典, 曽根秀昭, "キャンパス無線 eduroamの国内外の最新動向,"大学 ICT 推進協議会 2015 年度年次大会 論文集 3E3-2, 2015.
- [5] S. Winter, "Service Approach Specification to Small Site eduroam Adoption," GÉANT GN4-1 Project Deliverables, D9.3, 2016. https://www.geant.org/Projects/GEANT_ Project_GN4-1/Pages/Deliverables.aspx (2016 年 9 月 21 日参照)
- [6] E. Lemmens, "Harmonizing govroam worldwide – Same eduroam-technology, another community –," The TNC16 Networking Conference, Mobility working group meeting, 2016.
- [7] J. Mohácsi, "How NIIF/Hungarnet became a large WiFi provider in Hungary?," The TNC16 Networking Conference (poster), 2016.
 https://tnc16.geant.org/core/poster/ 36 (2016年9月21日参照)
- [8] "eduroam for schools takes off across Australia." http://news.aarnet.edu.au/ eduroam-for-schools-takes-off-across -australia/ (2016年9月21日参照)
- [9] Taiwan Academic Network Roaming: https: //roamingcenter.tanet.edu.tw/en/ (2016 年 9 月 21 日参照)

東北大学自営光ファイバーの経年劣化調査

七尾 晶士1), 森 倫子1), 千葉 実1), 水木 敬明2), 曽根 秀昭2)

1) 東北大学 情報部情報基盤課

2) 東北大学 サイバーサイエンスセンター

nanao@tohoku.ac.jp

Aging Investigation on Optical Fibers Owned by Tohoku University

Masashi Nanao¹⁾, Noriko Mori¹⁾, Minoru Chiba¹⁾, Takaaki Mizuki²⁾, Hideaki Sone²⁾

Information Infrastructure Division, Information Department, Tohoku University.
 Cyberscience Center, Tohoku University.

概要

東北大学では、各キャンパス間、並びに建物間において自営の光ファイバーを敷 設しネットワークを構成している。本稿では、敷設から20年が経過し途中東日本 大震災をも経験した光ファイバーの劣化状況の調査を行ったので、その結果につい て報告する。

1 はじめに

東北大学では、キャンパスネットワーク TAINS (Tohoku Academic/All-around/Advanced/ Information Network System)の運用を 1988 年 から開始しているが、現在使用している光フ ァイバーは 1995 年にスタートした第2世代キ ャンパスネットワーク SuperTAINS (TAINS95) 以降に敷設した物である。その後、第3世代 TAINS/G (2003 年)、第4世代 StarTAINS (2009 年)、そしてその更新 (2016 年)と、基幹ネ ットワーク機器の更新を行っており、その間、 ネットワークの構成の変化や建物の新築・移 転に合わせ順次光ファイバーも拡張と増強を 行ってきた。今回、敷設より 21 年経過した光 ファイバーが通信品質にどの程度影響を与え ているかを調査したので、本稿で報告する。

2 光ファイバーの構成

東北大学は大きく分けて、5 つのキャンパ ス(片平地区、川内地区、青葉山北地区、青葉 山南地区、星陵地区)から構成されており、そ れぞれのキャンパスを接続するように自営の 光ファイバーが敷設されている。キャンパス 間光ファイバーは、1995 年当初、シングルモ ード光ファイバー(SM)の 40 芯を敷設し、それ ぞれのキャンパスに 10 芯ずつ割り当てを行 ない直接接続可能な構成[1]となっていたが、 現在は改修や拡充を経て、次のような構成(図 1) となっている。

- ・青葉山北・青葉山南間
 40SM 1995 年敷設
 - 128SM 2009 年敷設
- ・青葉山北・川内間
 40/60SM 1995 年、2002 年敷設混在
 120SM 2009 年敷設
- ・青葉山南・川内間
 40/60SM 1995 年、2002 年敷設混在
 ・片平・川内間
- 40/80SM 1995年、2009年敷設混在
- ・星陵・川内間
 40/80SM 1995年、2009年敷設混在



図1 光ファイバーの構成図

3 調査方法

今回の調査にはOTDR、B-OTDR、概観評 価の3種類の手法を用いた。それぞれの検査 の方法と結果につて説明する。

3.1 OTDR (光パルス試験器) による検査

OTDR(Optical Time Domain Reflectometer) は、一方の光ファイバー端から計測用の光パ ルスを入射することにより、光ファイバーの 長さ方向の損失状態を測定し異常を検知する ことができる。したがって、この測定により 融着接続やコネクタ接続などの接続損失の影 響を調べることができる。



写真1 OTDR(光パルス試験器)

3.2 B-OTDR (歪分布測定器) による検査

B-OTDR(Brilllouin Optical Time domain Reflectometer)は、一方の光ファイバー端から 計測用のパルス光を入射することにより、フ ァイバーに生じている長手方向の歪みや温度 変化を高精度に測定することができる。した がって、この測定により光ファイバーへの物 理的な曲げ応力や荷重負荷による圧縮などの 影響を調べることができる。



写真 2 B-OTDR (歪分布測定器)

3.3 撤去ケーブルの芯線状態の概観評価

同時期に敷設し先に撤去された一部のファ イバーに対して、デジタルマイクロスコープ を使用してその芯線の目視検査を行う。この 検査では外的要因による劣化具合を調査する。

4 調査結果

4.1 OTDR (光パルス試験器)結果

4.1.1 キャンパス間光ファイバー(川内~片 平)

川内キャンパスと片平キャンパス間の光ケ ーブルの芯線の内、#35 と#36 を調べた結果、 図 2 に示す通り伝送損失がほぼ新品状態の光 ファイバーの典型値に一致する結果が得られ た。このことから、芯線の劣化はないものと 推定できる。



4.1.2 キャンパス間ファイバー(川内~星陵)

川内キャンパスと星陵キャンパス間の光ケ ーブルの芯線の内、#27 と#28 を調べた結果、 共に川内側から 1km のところで、比較的大き な損失(図3)が発生しているが、これは 1995 年に敷設した光ファイバーと 2009 年に敷設 した光ファイバーの相互の接続点による損失 と思われる。また図4 で示す通り#28 の芯線 は伝送損失がほぼ新品状態の光ファイバーの 典型値に一致する結果が得られており、距離 あたりの伝送損失はほぼ典型値に一致する結 果が得られたことから、芯線の劣化はないも のと推定できる。





4.2 B-OTDR (歪分布測定器) 結果

川内~星陵間の#27、#28 のいずれも川内か ら 2.8km 付近に歪を確認した(図 5,図 6)。こ の歪は曲げ等の影響ではなく、製造時期の異 なる芯線同士を接続していることから生じた ブリルアン周波数シフトの変化によって生じ たものであり、芯線自体は問題ないと思われ る。



4.3 撤去ケーブルの芯線状態の概観評価結果

1995 年に敷設し、その後拡充のため 2002 年に新しい光ファイバーと交換のため撤去さ れたケーブルを使用して調査を行った。デジ タルマイクロスコープでの観察結果では、い ずれのテープ芯線も接着部に気泡が見つかっ た(写真3)。この気泡は接着剤部分にのみに 見られることからテープ芯線接着時に混入 (発生)したものと推測され、気泡自体は光 ファイバーの被覆の外側に存在しているので 問題ないと思われる。

また、図 2,4 に示した伝送損失は典型値に 近い値であり、長波長ほど損失が増加すると いうマイクロベンドロスの特徴は確認されな かった。したがって、この接着部の気泡は光 ファイバーの損失には影響を与えていないと 思われる。



写真3 芯線観察写真

5 おわりに

当初想定された光ファイバーの劣化は、測 定の結果ほとんど確認できなかった。また震 災による影響も受けていないことがわかった。 今後は、ファイバーの外装皮膜の強度試験や 浸水による浸潤など、多角的な劣化調査につ いても考えていきたい。

謝辞

本調査にあたり、技術的な調査協力、助言 をしてくださった東日本電信電話株式会社の 皆様に感謝申し上げます。 参考文献

[1] 亀山 幸義、千葉 実、"SuperTAINS の設 計から完成まで"、 TAINS ニュース 、No.3、 pp.4-10、1995.

SC16 報告

東北大学サイバーサイエンスセンター 小松一彦

スーパーコンピュータに関する最大の国際会議 SC16(International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis)が 2016 年 11 月 13 日~18 日に米 国ユタ州ソルトレイクシティのソルトパレス会議場において開催されました。SC16 は、81 件の論 文発表をはじめとする研究・技術成果を発表する本会議と、349 の企業・大学・研究所等がスー パーコンピュータに関連する製品や研究成果を発表する展示会から構成されています。今年の総 参加人数は 1 万 1000 人超えと非常に多く、会場周辺でも多数のワークショップや技術交流が行わ れ、街全体がスーパーコンピュータ関連の話題で包まれていました。

サイバーサイエンスセンターでは、流体科学研究所、金属材料研究所、東北メディカル・メガ バンク機構と合同で、展示会へ参加いたしました。今年は展示ブースのレイアウトを一新し、ブ ース中央に配置したプロジェクタを活用し、各機関の動画による紹介や研究成果のプレゼンテー ションを行いました。また、スーパーコンピュータSX-ACEの紹介、SX-ACEを利用したシミュレー ションの高速化、スーパーコンピュータを容易に使うためのシステムソフトウェアや次世代のプ ロセッサなど、最新の研究成果をポスター展示しました。14~17日の4日間の展示会期間中の訪問 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。

また、スーパーコンピューティング研究部では、本会議ポスターでの発表、企業ブースでの発 表、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」ブースで の展示も行いました。本会議ポスター発表では、既存コードを極力複雑化させることなく自動チ ューニングを適用する方法について発表し、多くの研究者と有用な議論を交わしました。

次回の SC17 は 11 月 12 日~17 日に米国コロラド州デンバーで行われる予定です。



SC16 会場

東北大学展示メンバー集合写真

ポスター発表の様子

[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.cc.tohoku.ac.jp/tayori/

コンパイラのバージョンアップについて (No. 232)

2016年10月24日にFORTRAN90/SXコンパイラをバージョンアップいたします。 詳細につきましては、リリースメモをご覧ください。

対象システム	コンパイラ名	旧バージョン	新バージョン	リリースメモ
SX-ACE	FORTRAN90/SX	Rev. 530	Rev. 532	FORTRAN90/SX リ
				リースメモ.pdf

*リリースメモは以下からご参照ください。

http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/PDF/20161020/sxf90_rev532.pdf

なお、コンパイルコマンドに変更はありません。オプションの詳細は、sxman コマンドや PDF 版 マニュアルで参照できます。参照方法は、以下をご覧ください。

http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/super/online_manual.html

(共同利用支援係,共同研究支援係)

— SENAC 執筆要項 —

1. お寄せいただきたい投稿内容

サイバーサイエンスセンターでは、研究者・技術者・学生等の方々からの原稿を募集しております。 以下の内容で募集しておりますので、皆さまのご投稿をお待ちしております。なお、一般投稿いただ いた方には、謝礼として負担金の一部を免除いたします。

- 一般利用者の方々が関心をもたれる事項に関する論説
- ・センターの計算機を利用して行った研究論文の概要
- ・プログラミングの実例と解説
- ・センターに対する意見、要望
- ・利用者相互の情報交換

2. 執筆にあたってご注意いただく事項

(1) 原稿は横書きです。

(2)術語以外は、「常用漢字」を用い、かなは「現代かなづかい」を用いるものとします。

- (3)学術あるいは技術に関する原稿の場合、200字~400字程度のアブストラクトをつけてください。
- (4)参考文献は通し番号を付し末尾に一括記載し、本文中の該当箇所に引用番号を記入ください。
 - ・雑誌:著者,タイトル,雑誌名,巻,号,ページ,発行年
 - ・書籍:著者,書名,ページ,発行所,発行年

3. 原稿の提出方法

原稿のファイル形式はWordを標準としますが、PDFでの提出も可能です。サイズ*は以下を参照してください。ファイルは電子メールで提出してください。

- -Word の場合-
 - ・用紙サイズ:A4
 - ・余白:上=30mm 下=25mm 左右=25mm 綴じ代=0
 - ・標準の文字数(45 文字 47 行)
- <文字サイズ等の目安>
 - ・表題=ゴシック体 14pt 中央 ・副題=明朝体 12pt 中央
 - ・氏名=明朝体 10.5pt 中央
 - ・所属=明朝体 10.5pt 中央
 - ・本文=明朝体 10.5pt
 - ・章・見出し番号=ゴシック体 11pt~12pt *余白サイズ、文字数、文字サイズは目安とお考えください。

4. その他

- (1)執筆者には、希望により本誌*(10部以内の希望部数)と本誌 PDF 版を進呈します。 *2014 年末で、別刷の進呈は終了しました。
- (2) 一般投稿を頂いた方には謝礼として、負担金の一部を免除いたします。免除額は概ね1ページ 1万円を目安とします。詳細は共同利用支援係までお問い合わせください。
- (3) 投稿予定の原稿が15ページを超す場合は共同利用支援係まで前もってご連絡ください。
- (4)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。
- (5) 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@cc.tohoku.ac.jp
- TEL 022-795-3406

スタッフ便り

新年明けましておめでとうございます.本年もどうぞよろしくお願いいたします.

一昨年開通した仙台市営地下鉄東西線,青葉山新キャンパス移転に伴い,センターから見える 景色が大きく変わりました.青葉山キャンパスへのアクセスも大変便利になりましたので,お気 軽に青葉山駅前スパコンセンターにお立ち寄りください.

さて、本年1月よりスーパーコンピューティング研究部には滝沢寛之教授が着任されました. 新たな体制の下、これまで以上に、ユーザの皆様にご満足いただける安定した大規模科学システムの運用はもちろん、ユーザの皆様との共同研究活動をさらに活性化していければと思います.

個人的には健康第一で、日々積み残しの無い日々を過ごしたいと考えております.元旦の初詣, 1月14日のどんと際とおみくじを引いてみたものの、2回とも末吉... 出だしは今イチでは ありますが(笑),めげずにがんばって行きます! (R.E)

平成25年7月よりセンターに異動となり早いもので4回目の新年を迎えることができました. 以前の勤務も青葉山キャンパス内でしたので、年数を計算してみたところ12年目に入っており、 最初に青葉山キャンパスに来た頃を思い出しては「あの建物の立っていたところは確か雑木林だ ったよなぁ.」などと懐かしく眺めています.それと同時に着々と開発が進み、教育・研究環境 が年を追うごとに整備されていき、新たな発明や発見、それを継承しながらより高い目標に向か う人材が育って行く場所で、微力ながらも仕事として携わっていることを嬉しく感じています.

また、開業一周年を迎えた仙台市営地下鉄東西線による青葉山キャンパスへのアクセスの向上 も本当に大きな変化でした.開業前はバスでの通勤でしたので天候による遅延も多く、特に冬場 の大雪や凍結時は寒い中をバス停でいつ来るのかもはっきりとしないバスを待つ長蛇の列が年に 何回かあり、それに絶望して凍った歩道を転びながら市内まで歩いて行ったことも何度かありま した.それが地下鉄の開通で寒いところで待つことも、渋滞で時間を気にすることも無くなった のは本当に便利です.もう戻れません!(笑)

多くの夢や希望が創造されていくであろう其々の教育研究機関の,そしてその基盤となるこの センターに貢献できるように今後も日々頑張って行きたいと思います. (K.M)

サイバーサイエンスセンター・情報部情報基盤課スタッフ異動のお知らせ
2017.1.1 付け [転入] 滝沢 寛之 スーパーコンピューティング研究部教授(情報科学研究科准教授から) 平澤 将一 産学官連携研究員(情報科学研究科から)
[転出]和泉 諭 産学官連携研究員(情報科学研究科特任准教授(教育)へ)



開発中の青葉山キャンパス (1月に食堂・売店も開店して人通りが増えてきました.)

SENAC 編集部会

小林広明 江川隆輔 大泉健治	水木敬明 佐藤恵美子 小野 敏	後藤英昭 吉田貴子 斉藤くみ子
編集・発行	平成 29 年 テ 東北大学 サイバー 仙台市書	1 月発行 : ·サイエンスセンター ·華区芸業空書葉 6-3
印刷	画 町 町 町 町 町 町 町 町 町 町 町 町 町 町 町 町 町 町 町	米区加容子有米0-3 - 980-8578 :生活協同組合 コープ

SENAC Vol. 49 (No. 1~No. 4)

2016. 1~2016. 10

項目	No.	р.	項目	No.	p.
		<u>^</u>			
卷頭言			小松助教らの研究グループが、レガシーコー		
先端スーパーコンピュータが利用できる幸せ			ドの移植に関する国際ワークショップ		
藤井孝蔵	1	1	LHAM2015 において Best Workshop Paper		
センター長に就いて 曽根秀昭	2	1	Award を受賞しました	1	42
			第23回高性能シミュレーションに関するワー		
共同研究成果			クショップ(WSSP)を開催しました 小林広明	2	43
拍動流下における動脈瘤を有する血管壁挙動の数値			サイバーサイエンスセンターセミナー報告	2	44
解析法とその臨床応用 西川優他	1	3	第 25 回東北 CAE 懇話会を開催しました		
一様磁場下の熱プラズマジェットに輸送されるナノ			小林広明	3	24
粒子群の集団的形成過程の数値シミュレーション			第23回NECユーザグループミーティング参加		
茂田正哉	1	21	報告 江川隆輔	3	25
従来型観測のみを用いた日本域再解析システムの	-		学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点	Ū	-
構築に向けた同化実験福井誠他	2	5	(THPCN) 第8回シンポジウム報告 江川隆輔	4	34
低レイノルズ数流れにおける非定常空力特性の数		_	サイバーサイエンスセンターオープンキャンパス	_	
值解析 · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	2	12	報告	4	35
Building-Cube Method に基づく解摘合格子細分化	-	10	く計算科学・計算機科学人材育成のためのス	1	00
と動的負荷分散 三坂孝志他	3	1	ーパーコンピュータ毎僧提供利用報告>		
多速さ格子ガス法実用化展開への手がかり	Ŭ	1	東北大学大学院データサイエンスプログラム		
- "テシャラの方法"から"マクスウェルの達人			における疑似プロジェクト演習の中尾光之他	4	36
	4	1	<プレリリース報告> 気象データン挿動し	1	00
電流の偏りに注目したアンテナ放射効率の解析	Т	1	た執中症リスク評価システムの開発		
電視の備りに住口 Uにり マ ノ ノ 成引効中の肝内 有 再 自 司 他	4	16	- 幼児60分で執中症リスク 直夏にアスファルト		
	Т	10	の歩行 —	4	38
研究成果			<プレスリリース報告> 血行骨能モータリング	т	00
信報科学研究科グループ利用制度を利用して-			とうで、「「」、「私日ン 血门(()急 ビーノ) ジノ 生置「磨決の錇」の開発に成功	4	40
「 T K H 子 M J C H フ / ア フ 不 M I M 及 を 不 M C C Shang Ontimization に ト ス 非 定 党 流 h 堪 の 安 定 性			表面「NBIAの) 死」 の用元(CNAの)	т	UF
当 御 加 ア 上 市 に よ る チ ア 上 市 小 は い の の 文 上 上 一 一 一 一 二 二 二 二 二 二 二 二 二 二 二 二 二	1	21	利田相談支通り		
四四 11年回	т	21	<u>140111月秋王区9</u> 亚成 28 年度の利用相談について	3	20
十相増科学計質システム			テカーカルアシスタントの自己初合	3	20
<u>パパ快行ナロサンハノム</u> SSHアクセス認証鍵生成サーバの利田古法	2	19	ノノースルノンハノン 100日 山柏川	5	21
3511 ノノビハ記班王成り パットの市力伝	2	13 22	「Wab 版十相構刻学計質システムーュース」トロ		
ニッティー ションリー こへの相力	2	22	11日台田を学の表示コマンドについて(No 907)	1	42
二次九可祝伯システムと可祝伯事例の相力	5	9	利用 貢担 並手の スパコマンドに $\mathcal{O}(0, 207)$ Caucai an 00 の バージョンアップについて (No. 217)	1	45 45
十学 ICT 雄准協議合 2015 年度 年次十合塾文集			ussian05000、 ションノリノ(こり) 正成 28 年度廿同研究について (No. 218)	2	40
<u>ハナ101 祖廷励戦去 2015 中後 中次八去哺犬来</u> トト 転載			〒10,20 千反共同前月1に りいて (No. 210)	2	40
<u>より招戦</u> スーパーコンピュータ SV-MCE の運用について			工成 28 年度利田台扣会について (No. 210)	2	40
ハ ハ ユシビユ デ SA ACL の建用に SV C 小野敏仙	1	22	1版20 平反利用負担並に りゃく (10.215) 計質科学・計算機科学人材否成のためのスーパー	2	41
	T	22	可昇付于。可昇版付于八的有成の元ののハーハ コンピュータ毎億提供制度について(No 210)	2	40
			29 ビュー ア 無償促民間反(こ) V · ((10.215) 早期企業利田サービスについて (No.210)	2	49
エック SA ACE Cの同座山と並列山 佐ヶ木士輔仙	1	28	大相提利受計質システムの機関(如局) 単位での	2	49
ビベル八軸 たわいパフ無線 aduraam の国内外の是新動向	1	20	利用について(No 210)	2	50
、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、	1	2/	コンパイラのバージョンアップについて (Ma 990)	2 2	96
東北大学全学ファイアウォールの 運用に関する	1	51	ーン・コンジーンコンノックパーン (NO. 220) 被災地域研究者への大相構科学計質システトの	J	20
ホーレハナエナィノイノフォールの定用に因りる 報告 昭田十諸師	1	27	12502-1253-191711日 - 1270501(天日十日) 昇マハノムの 毎億提供について (No 999)	Q	26
報日 到田八輔恒	1	51	新順進係に りいて (Mo.220) 利田角扣会学の表示コマンドについて (Mo.994)	3	20
な知らせ			利用負担並手の扱いコマンドに りいて (No. 224) コンパイラのバージョンアップについて (No. 997)	4	43
<u>やかりに</u> 地下鉄圭茜山即国辺安内	1	44	コンパープログラム Mathematics の バージョン	4	40
地下以目来山脉向起来的 亚式 98 在 由 サイバー サイエンスセンター	1	44	\mathcal{X}	4	42
干成20平反リイバーリイエンバビング 建羽合のご安内	9	2	ノソノにリバ (WO.220) 利労は抵決管手充 MATIAD のバージョンアップに	4	40
時日云のこ来(1) サイバーサイエンスセンター講習へのご安内	2	16	イイナ12(Nn) 昇音品 MAILAD () 、 ションノソノに ついて (Na 200)	4	44
リイバ リイエンバビング 時日云のこ来的	5	10	JV・C (NO. 220) MSC Software 社アプリケーションの利用につい	4	44
超 生			$T (N_{0} 200)$	1	11
<u>11日</u> 〈計質科学・計質機科学/ 材本市のためのフー			く (NO. 440) バッチIIカエストの中能確認コーンドについて	4	44
N町 舟付ナー町 昇100付 ナ八竹 月八 (7)にの)の一 パーコンピュータ 毎億担冊利田報生、			ハンテリンエクトの仏態唯能ユマントについて	Λ	45
/ ーイレム / ボ県ル田和田和口/ 直体书に起生 _ 計算到学、計算機利学の率			いい. 223) 亚武 90 年度の「古」 た合む IDOI ショニ / 共田	4	40
	1	40	〒JJK 43 午後Vノ「床」を召む IITUI ンヘノム共用 計質次酒の利田研究課題の貫体にへいて (M_ 000)	Λ	16
CCICがAUG (山川生朝) SC15 報告 小松一卒	1	40 /1	ロ 开貝(ハヘレ/ヤリ/ロカリ/ 元味感い) 新朱(こう(、) (No. 230) コンパイラのバージョンアップについて (No. 001)	4 1	40 16
	1	41		4	40
	1				

システム一覧

計算機システム	機 種
スーパーコンピュータ	SX-ACE
並列コンピュータ	LX 406Re-2

サーバとホスト名

フロントエンドサーバ	front.cc.tohoku.ac.jp
SSH アクセス認証鍵生成サーバ	key.cc.tohoku.ac.jp

サービス時間

利用システム名等	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			
サーバ	連 続 運 転			
可視化機器室	平日 9:00~21:00			
館内利用	平日 8:30~21:00			

スーパーコンピュータ (SX-ACE) の利用形態と制限値

利用形態	利用ノード数 ※	実行時間制限 (経過時間)	メモリサイズ制限	-q オプション	-b オプション
通常 -	1~256	規定値 : 2 週間 最大値 : 1 ヶ月	60GB×ノード数	SX	利用ノード数
	257~1,024	規定値 : 1 ヶ月 最大値 : 1 ヶ月			
無料	1	1時間	60GB		f
デバッグ	1~16	2 時間	60GB×ノード数	debug	利田ノード巻
	17~32	24 時間			

※ 2ノード以上を利用した並列実行にはMPIの利用が必用

並列コンピュータ(LX 406Re-2)の利用形態と制限値

利用形態	利用ノード数 ※	実行時間制限 (経過時間)	メモリサイズ制限	-q オプション	-b オプション
通常	1~24	規定値 : 1 ヶ月 最大値 : 1 ヶ月	128GB×ノード数	lx	利用ノード数
アプリ ケーション	1	なし	128GB		а
会話型	1(6コアまで)	1 時間 (CPU 時間合計)	8GB	_	_

※ 2ノード以上を利用した並列実行にはMPIの利用が必用

東北大学サイバーサイエンスセンター 大規模科学計算システム広報 Vol.50 No.1 2017-1

 [巻頭言] 気象予測とコンピュータ< 岩崎 俊樹 	1
 [共同研究成果] DNA 鎖切断の反応動力学シミュレーションと AVS/Express を用いた三次元可視化 菱沼 直樹・及川 啓太 岡田 朝彦・菅野 学 山崎 馨 Wilfredo Credo Chung 齋藤 敦子・河野 裕彦 	3
ベクトル型スーパーコンピュータを用いた大規模リフレクトアレーの高利得化 	13
アルゴン熱プラズマジェットによる鉄ナノ粒子の大量創製プロセスの 3次元シミュレーション茂田 正哉	19
[大学 ICT 推進協議会 2016 年度年次大会論文集より] 『銅酸化物の有効モデルに対する揺らぎ交換近似』コードの SX-ACE 向け最適化 	25
スーパーコンピュータ SX-ACE の省エネルギー運用 	31
キャンパス無線 eduroam と関連サービスの最新動向 後藤 英昭・中村 素典・曽根 秀昭	37
東北大学自営光ファイバーの経年劣化調査 	41
[報 告] SC16 報告小松 一彦	45
[Web 版大規模科学計算システムニュースより] コンパイラのバージョンアップについて(No.232)	46
執筆要項	47
スタッフ便り	48

