



TOHOKU  
UNIVERSITY

ISSN 0286-7419

東北大学  
サイバーサイエンスセンター

大規模科学計算システム広報

SENAC

Vol.52 No.1 2019-1



Cyberscience  
Center

Supercomputing System  
Tohoku University

[www.ss.cc.tohoku.ac.jp](http://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
				平日
一階	利用相談室	022-795-6153 (6153) sodan@cc.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 自販機	8:30～21:00
	展示室(分散 コンピュータ博物館)*	*見学をご希望の方は共同利用 支援係までご連絡ください。	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
三階	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
	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、見学、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
	情報セキュリティ係	022-795-3410 (3410) i-security@grp.tohoku.ac.jp	情報セキュリティに関すること	8:30～17:15
四階	研究開発部	022-795-6095 (6095)		
五階	端末機室	(3445)	PC 端末機(X 端末)	8:30～17:15

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

### 本誌の名前「SENAC」の由来

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

## [巻頭言]

## サイバーサイエンスセンターと基礎科学としてのコンピュータサイエンス

理学研究科 河野裕彦

私は東北大学理学研究科在学中以来長い間、熱や光によって励起された分子がどのように反応するかを理論的にまたコンピュータを使って明らかにすることに携わってきました。化学反応を時間的・空間的な視点も含めて本質的に理解する上では、コンピュータの力は不可欠で、この分野はコンピュータケミストリーとよばれています。それは量子力学のシュレーディンガー方程式を解いて、分子の構造やその電子的エネルギーを算出する量子化学からはじまり、現在ではタンパク質など巨大な生体分子にまで適用されています。また、時々刻々と変化していく分子中の原子の位置を追跡し、化学結合がどのように組み変わって反応が進行していくのかをシミュレーションすることもできるようになりました。電子励起状態間を乗り移る非断熱遷移が関与する反応も追跡できるようになりました。分子動力学や反応動力学とよばれる分野です。以上のような分野の展開は、コンピュータの計算速度や周辺機器、入出力インターフェースなどのハード面での劇的な発展と量子化学や動力学計算のソフトウェアの充実によって加速され、量子化学計算(1998年)と分子動力学(2013年)の分野でノーベル賞が授与されています。

1970年代中頃の学生時代に片平地区の大型計算機センター(現在のサイバーサイエンスセンター)で、パンチカードに穴をあけ、プログラムの一行一行をカードリーダーに入れていた頃とは隔世の感があります。当時は情報教育整備の萌芽期であり、Fortran 言語の習得からプログラミングまでほとんど自己流でした。単純な級数和の桁落ちなどでも苦労したことを覚えています。数値計算の技法についての情報も少なく、ユーザーとして直面する問題を経験を積み上げながら一つ一つ解決して行くという効率的とは言えない時代でした。今のコンピュータをとりまく環境や情報はユーザーフレンドリーで、コンピュータへの関心を低くすることに大いに貢献しています。サイバーサイエンスセンターもこの点に重きを置き、グラフィカルソフトウェアの導入や様々な講習会の開催などを進めてこられました。私たちの研究グループも一般ユーザーとしてその恩恵に長い間浴してきました。数値計算プログラムの高速化・並列化に対する助言や支援など、枚挙にいとまがありません。あらためて感謝申し上げます。

最近では、並列計算機だけではなく、分子を構成する個々の原子の動きを三次元動画で立体的に見ることができるセンターの可視化機器室にある「三次元可視化システム」を利用させていただくようになりました。様々な可視化機能のモジュールを可視化ソフト AVS のフローチャートの上で組み合わせることによって、簡単に三次元の動画が作れます(菱沼 直樹ら、「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」、SENAC Vol. 50 No. 1, pp. 3-12 参照)。奥行きを視覚的に捉えられる三次元動画を使えば、化学になじみのない人でも、DNA の二重らせん構造やラジカルによる鎖切断の様子など複雑な系の反応を時間的・空間的に理解できます。センターの協力のもと得られた成果は、毎年のオープンキャンパスでの模擬授業「飛び出すデジタル 3D 映像でミクロの世界を体感しよう! ~DNA 鎖切断や分子モーターの動画公開~」などで公開してきました。

コンピュータがもたらすインパクトは化学の分野に限ったことではなく、現在では、理工系、文系のあらゆる領域でコンピュータを利用した新しい研究分野が展開あるいは確立されていると思います。それは単にハードの整備やソフトの充実だけではなく、汎用計算機創造の基礎概念

そのものが事象の本質を抽出する新たなモデル化やアルゴリズムの創成につながっていたからだと思います。コンピュータの概念そのものが科学全般に及ぼす影響は、おそらく、私がコンピュータに関わり始めた 1970 年代の遙か以前からはじまっており、今後もコンピュータサイエンスはその価値観や普遍性を様々な分野と共有しながら発展していくことでしょう。今になると、コンピュータサイエンスが私に与えた最も大きな影響は、コンピュータ自体やその周辺のハード的な能力ではなく、“何をどう考えるか”という問いに答える論理的な構想力ではなかったかと思いません。実践的にコンピュータサイエンスを学ぶことによって、問題設定、モデル構築における必要十分条件の整理、データ処理、数値計算結果の妥当性の検討、論理破綻の検証、間違い探しなどを筋道立てて行えるようになってきました。コンピュータサイエンスの神髄は形而上学的な側面を持つ数学と形而下的な自然科学や工学に新たな展開を促し、それらの間の橋渡しを可能とする基礎科学の側面にあるのではないのでしょうか。一般ユーザーも、コンピュータサイエンスを単なる  $\alpha$  の科目として学ぶのではなく、基幹的な基礎科学としてその最先端まで学ぶ姿勢が必要かもしれません。サイバーサイエンスセンターにはこれからも拡大する情報科学のフロンティアを紹介していただき、ユーザーがトップレベルの研究を続けられるように支援していただきたいと思えます。

センターからの支援を具体化する手段としては、相談員制度があります。様々なバックグラウンドを持つ相談員を配置して、ユーザーの疑問に答えていただいています。十分な知識が無いユーザーでも専門的知識を得ながら目的を達成でき、この制度によって多くのユーザーが助けられたことと思います。私も学生時代、相談員の方々にプログラミングからその実行まで徹に入り細にわたり多くのことを教えていただきました。私の研究室からもこれまで何人かが相談員を務め、一般的なプログラミングから量子化学計算ソフトの使い方までを教えてくださいましたが、これに関連しては反省もあります。相談される方に前もって必要な背景や情報をもっと知っていただくべきだったということです。量子化学計算には様々なパッケージプログラムがあり、分子の安定構造の決定が得意なもの (Gaussian が最も有名)、あるいは電子励起状態のエネルギー算出が得意なもの (Molpro、Molcas、…) など様々です。また、計算精度も計算方法 (密度汎関数法や多配置型電子相関理論など) に依存し、相談者にはどのレベルを要求するのか認識していただく必要があります。実際にどのような道筋で最終的な結果にたどり着けるかに関する情報を相談者に事前に提供していれば、より円滑に相談が進むのではないかということです。簡単どころでは、化学の様々な計算プログラムを使うとどのようなことができるのかを整理したリンク集の作成から始めることが考えられます。私たちもサイバーサイエンスセンターの発展に少しでも寄与できるように尽力したいと思います。

私は過去 40 年のコンピュータを取り巻く環境のめざましい変化を経験してきました。サイバーサイエンスセンターには時代に応じて様々な任務が課せられてきましたが、現在ではネットワーク管理やセキュリティ確保という重大な任務もあります。今後も、サイバーサイエンスセンターが計算科学の拠点として、学生をはじめとする一般ユーザーがコンピュータやネットワークを有効に活用できる環境を整備し続けていただければと願っています。これからは AI など広まり、予測不能な異次元の世界に入っていきます。どのような移り変わりがあろうとも、コンピュータサイエンスは既存の学問の発展のみならず分野横断的な新しい学問の創生にも不可欠だと思います。そのための基幹組織であるサイバーサイエンスセンターが全学の支援のもと、ますます発展していけることを祈ります。

[共同研究成果]

## 複雑系に有効な非断熱分子動力学計算法の開発と

### 分子モーター—光異性化反応への適用

菅野 学,<sup>1</sup> 高橋みなみ,<sup>2</sup> 花崎 浩太,<sup>3</sup> 原田 宣之,<sup>4</sup> 河野裕彦<sup>1</sup><sup>1</sup> 東北大学大学院理学研究科化学専攻<sup>2</sup> 名古屋大学大学院理学研究科物質理学専攻<sup>3</sup> 京都大学福井謙一記念研究センター<sup>4</sup> 東北大学多元物質科学研究所

2016年ノーベル化学賞の対象となった分子モーターは、光や熱による異性化を利用して一方向の回転運動を達成した。このような光化学反応の機構を解明するためには、異なる断熱電子状態間の非断熱遷移を考慮することが不可欠である。非断熱分子動力学の代表的な計算法である surface hopping 法は、断熱ポテンシャル曲面を走る古典トラジェクトリに遷移確率を与えて他のポテンシャル曲面へのホップ（遷移）を起こすことによって、量子力学的な波動関数の分岐（生成物の分岐比）を求める。近年、1次元非断熱問題の完全解である Zhu–Nakamura 理論を多次元に拡張して非断熱遷移確率を評価する新しい surface hopping 法が提案された。この方法は、計算コストの高い電子状態間非断熱結合が不要で大きな分子の非断熱分子動力学計算にも適用可能であるが、ポテンシャル形状によっては遷移確率を誤る場合があった。そこで、我々はこの問題を克服した改良法を開発した。2つの比較的小さな分子系に適用してその実用性を確認した後に、分子モーターの光異性化の経路を探索した。

## 1. 序論

非断熱遷移とは、分子が電子の運動と原子核の運動（分子振動）の間に働く振電相互作用に起因して、異なる断熱電子状態の間を乗り移ることを指す。断熱電子状態は核座標をパラメーターとして扱った電子ハミルトニアン固有状態であり、その固有値が形成する多次元曲面は断熱ポテンシャル曲面と呼ばれる。非断熱遷移は主に断熱ポテンシャル曲面の交差（1次元では同じ対称性を持つ断熱電子状態のポテンシャル曲面は交差できないので擬交差、2次元以上の場合には円錐交差と呼ばれる）点の近傍で起こる。複数の電子状態が関与する光化学反応において、非断熱遷移は反応の分岐比を左右する重要な量子効果である。

非断熱遷移を伴う光化学反応の例として、2016年ノーベル化学賞の受賞テーマとなった分子モーターが挙げられる。図1はノーベル賞受賞者の Feringa と本稿の著者の1人である原田らが1999年に世界で初めて報告した一方向に回転する分子モーター[1]である。この分子はキラリティーを有しており、それによって回転方向が一意に決まる。まず安定なトランス体 a に紫外光を照射すると電子励起が起こり、そこから電子基底状態に非断熱遷移することで反応障壁を越え、シス体 b へ異性化する。次に熱を加えると、ナフタレン環同士の立体障害を乗り越えてシス体 c になる。また光を照射するとトランス体 d になり、加熱によってメチル基とナフタレン環の反発を越えて初期構造 a に戻る。このように、キラル分子モーターは光異性化と熱異性化

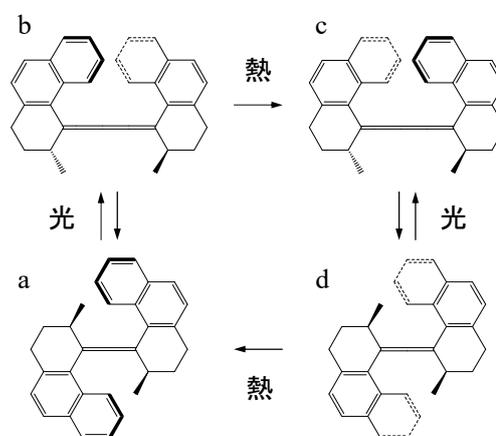


図1 世界で初めて合成された一方向に回転する分子モーター[1].

の組み合わせにより、一方向の連続回転を実現させた。

一般に、このような光化学反応の機構（反応経路・時間など）を探る上で非断熱遷移の考慮は欠かせない。分子モーターのような大きな系に適用可能で非断熱遷移を取り入れた分子動力学計算法が求められている。非断熱分子動力学計算法の例として **surface hopping** 法が挙げられる。この方法では、Newton 方程式に従い断熱ポテンシャル曲面を走る古典トラジェクトリに遷移確率を与えて他の断熱ポテンシャル曲面へのホップ（遷移）を起こす。適切な遷移確率の評価によって、反応経路の分岐に対応する量子力学的な波動関数の分岐を再現する手法である。代表的なものに Tully の **fewest switches** アルゴリズム[2]があるが、これは時間発展のステップ毎に計算コストの高い電子状態間非断熱結合行列の評価が必要であり、大きな系への適用が困難という欠点を抱えていた。

近年になって、Zhu らが大規模系への適用を可能とする非断熱結合計算の不要なアルゴリズムを提案した[3]。これは、1次元非断熱問題に対する完全解を与える Zhu-Nakamura 理論[4-7]を多次元に拡張して取り入れたものである。Zhu-Nakamura 理論では、断熱電子状態の重ね合わせとして表される透熱電子状態の情報から非断熱遷移確率を得ることができる。この重ね合わせの係数はポテンシャル交差（擬交差や円錐交差）点において劇的に変化し、透熱電子状態は交差点の前後で異なる断熱電子状態に漸近する。Zhu らが提案した確率計算アルゴリズムでは、交差点における透熱電子状態のポテンシャル曲面（透熱ポテンシャル曲面）の勾配を断熱ポテンシャル曲面の勾配のみから推定し、遷移確率を求める。しかし、この方法では透熱ポテンシャル勾配の推定に線形補間を利用しており、ポテンシャル曲面の形状によっては遷移確率の評価を誤ってしまう場合がある。

そこで、我々は断熱ポテンシャル曲面の曲率を利用して透熱勾配を推定することによって上記の問題を克服した改良アルゴリズムを開発した[8]。本稿ではまず、Zhu らの従来法が実験データを再現することが報告されているアゾベンゼン光異性化反応[3]、および従来法が実験データを再現できないピラジン超高速無輻射失活[9]に 2 つの手法を適用した結果を比較し、我々の改良法の実用性を確認する。そして、より複雑な系である分子モーター、特に原田らが図 1 の二重結合で繋がった 6 員環を 5 員環に置き換えた新型の分子モーター（立体障害が小さく回転頻度が上昇することが報告されている[10,11]）に改良法を適用した結果から、回転の第一段階であるトランス-シス光異性化反応の機構の理解を試みる。

## 2. 非断熱遷移確率の定式化

最初に、Zhu-Nakamura 理論から導かれる非断熱遷移確率の表式とその多次元系への拡張について概説する。この遷移確率の評価および遷移方向の決定には、多次元の透熱勾配の情報を要する。そこで、Zhu らの従来法と我々の改良法における透熱勾配推定の違いを述べ、従来法が失敗する場合でも改良法は透熱勾配を正しく見積もれることを示す。

### 2.1 Zhu-Nakamura 理論の多次元系への拡張

Zhu-Nakamura 理論は 1次元 2状態のポテンシャル交差問題を扱う理論であり、擬交差の近傍で透熱ポテンシャルを座標の 1次関数、透熱結合を定数とみなしたときの Schrödinger 方程式の解析解を与える[4-7]。擬交差を 1回通過したときの非断熱遷移確率  $P$  は、厳密にはエネルギーや結合強度の大きさによって場合分けされた複雑な式となるが、分子が高いエネルギーを持って擬交差を通過する場合には以下の簡単な式で近似することができる。

$$P = \exp \left[ -\frac{\pi}{4\sqrt{a^2}} \sqrt{\frac{2}{b^2 + \sqrt{|b^4 \pm 1|}}} \right] \quad (1)$$

パラメーター  $a$  と  $b$  はそれぞれ

$$a^2 \equiv \frac{\hbar^2 \sqrt{|F_1 F_2|} |F_1 - F_2|}{2\mu (2V_{12})^3}, \quad b^2 \equiv (E_t - E_x) \frac{|F_1 - F_2|}{\sqrt{|F_1 F_2|} (2V_{12})} \quad (2)$$

と定義される。(2)式において、 $\mu$  は換算質量、 $F_1$  と  $F_2$  は透熱ポテンシャルの傾き (透熱勾配)、 $V_{12}$  は透熱結合、 $E_t$  は系の全エネルギー、 $E_x$  は交差点におけるポテンシャルエネルギーである。(1)式の符号  $\pm$  は  $F_1 F_2 > 0$  ( $F_1$  と  $F_2$  が同符号) ならば+,  $F_1 F_2 < 0$  ( $F_1$  と  $F_2$  が異符号) ならば-を意味する。(1)式や(2)式に非断熱結合が含まれていないことが Zhu-Nakamura 理論の優れた特徴の1つである。

2原子分子より大きな多次元系では、各原子の質量を考慮すべきであり、透熱勾配はベクトルとなる。そこで、Zhu らは(2)式に現れる質量と透熱勾配を含む1次元パラメーターを次のように置き換えることで(1)式を多次元系に適用できる形式へと拡張した[3].

$$\frac{|F_1 - F_2|}{\sqrt{\mu}} \equiv \sqrt{\sum_i \frac{1}{m_i} |\mathbf{F}_1^{(i)} - \mathbf{F}_2^{(i)}|^2}, \quad \frac{\sqrt{|F_1 F_2|}}{\sqrt{\mu}} \equiv \sqrt{\sum_i \frac{1}{m_i} \mathbf{F}_1^{(i)} \cdot \mathbf{F}_2^{(i)}} \quad (3)$$

$m_i$  は  $i$  番目の原子の質量であり、 $\mathbf{F}_1^{(i)}$  と  $\mathbf{F}_2^{(i)}$  は  $i$  番目の原子の透熱勾配ベクトルである。多次元系でもう1つ重要な点は、遷移方向の決定である。Zhu らは、(3)式から遷移方向を次式で定義した。

$$\mathbf{s}_i \equiv \frac{\mathbf{F}_1^{(i)} - \mathbf{F}_2^{(i)}}{\sqrt{m_i}} \quad (4)$$

surface hopping 法では、ホップの前後でトラジェクトリのポテンシャルエネルギーが不連続変化するので、それを相殺するように運動エネルギー (運動量) を設定しなくてはならない。 $\mathbf{s}_i$  に垂直な運動量成分は不変とし、平行な運動量成分は全エネルギー  $E_t$  の保存則を満たすように調整する。

拡張した Zhu-Nakamura 理論を導入した surface hopping 法を実装する上では、 $\mathbf{F}_1^{(i)}$ 、 $\mathbf{F}_2^{(i)}$ 、 $V_{12}$ 、 $E_x$  を量子化学計算から得られる断熱ポテンシャルとその勾配から見積もる必要がある。 $V_{12}$  と  $E_x$  に関しては、交差点において以下の関係式が厳密に成立する。

$$V_{12} = \frac{U_+ - U_-}{2}, \quad E_x = \frac{U_+ + U_-}{2} \quad (5)$$

$U_+$  と  $U_-$  は断熱ポテンシャル ( $U_+ > U_-$ ) を表す。残るのは  $\mathbf{F}_1^{(i)}$  と  $\mathbf{F}_2^{(i)}$  の推定である。

## 2.2 透熱ポテンシャル勾配の推定

Zhu らの従来法では、次のように断熱勾配を線形補間することで交差点での透熱勾配を評価する。

$$F_J^{i\alpha}(t) \approx \frac{-1}{R^{i\alpha}(t_3) - R^{i\alpha}(t_1)} \left\{ \frac{\partial U_{\pm}(t_3)}{\partial R^{i\alpha}} [R^{i\alpha}(t) - R^{i\alpha}(t_1)] - \frac{\partial U_{\mp}(t_1)}{\partial R^{i\alpha}} [R^{i\alpha}(t) - R^{i\alpha}(t_3)] \right\} \quad (6)$$

$R^{i\alpha}$  は  $i$  番目の原子の核座標 ( $\alpha = x, y, z$ ) である。 $J = 1$  のとき複号  $\pm$  と  $\mp$  はそれぞれ  $+$  と  $-$  に対応し、 $J = 2$  に対しては逆になるとする。次頁の図2は(6)式を模式的に示した概念図である。図2(a)のように時刻  $t_1$  と  $t_3$  が十分に離れている (時間ステップが大きい) 場合には、透熱勾配を精度良く近似できる。しかし、図2(b)のように時間ステップが小さく、断熱ポテンシャル曲面が滑らかな場合には、交差点 ( $t = t_2$ ) における透熱勾配を誤って等しく見積もり、(1)式の遷移確率が0になってしまう。

一方、我々が開発した改良法では、透熱勾配を次式で推定する (導出の詳細は文献[8]を参照されたい)。

$$\mathbf{F}_j \approx - \left[ \frac{\nabla U_+ + \nabla U_-}{2} \pm \Delta \dot{\mathbf{G}} \sqrt{\frac{\Delta U}{4(\Delta \dot{\mathbf{G}} \cdot \dot{\mathbf{R}})}} \right] \quad (7)$$

$\Delta U \equiv U_+ - U_-$  および  $\Delta \mathbf{G} \equiv \nabla U_+ - \nabla U_-$  と定義しており, (7)式はトラジェクトリに沿った断熱ポテンシャル, 断熱勾配, 断熱勾配の時間微分  $\Delta \dot{\mathbf{G}}$  (実際の計算では数値差分), 各原子の速度を使って求められる. (7)式の右辺第2項の分母は以下のように変形できる.

$$\Delta \dot{\mathbf{G}} \cdot \dot{\mathbf{R}} = \frac{\partial^2 U_+}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 U_-}{\partial t^2} \quad (8)$$

(8)式には断熱ポテンシャルの時間に関する2階微分が現れている. つまり, 改良法における透熱勾配の推定には, 断熱ポテンシャルの傾きのみでなく曲率の情報も含まれている. 故に, 図2(b)のように線形補間に基づく従来法が失敗する場合でも遷移確率を適切に計算することができる.

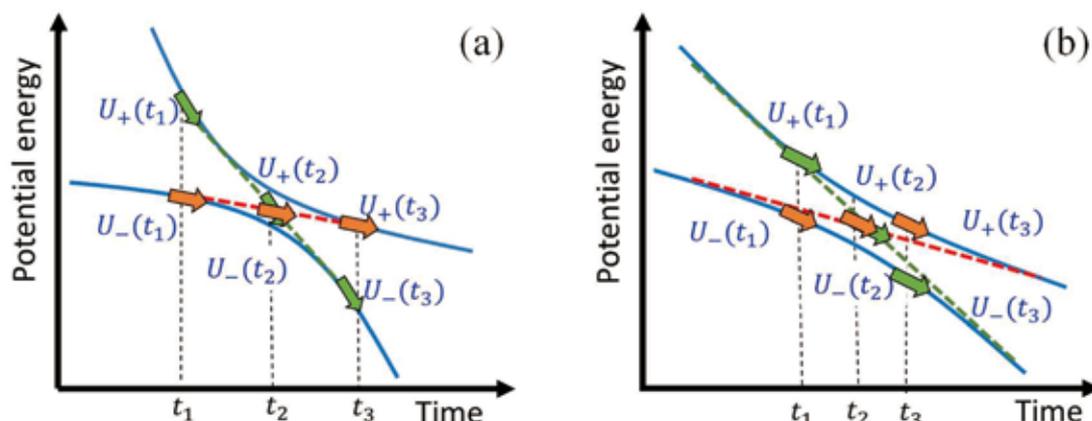


図2 Zhuらの従来法における透熱勾配推定(線形補間)の概念図. 実線は断熱ポテンシャル, 破線は透熱ポテンシャル(赤破線が  $J=1$ , 緑破線が  $J=2$ ), 矢印はポテンシャル勾配を表す. (a) 成功する場合. (b) 失敗する場合.

### 3. 従来法と改良法の比較

従来法と改良法を2つの異なる分子系に適用した数値計算の結果を比較する. 1つ目の系はアゾベンゼンの光異性化反応, 2つ目の系はピラジンの超高速無輻射失活である.

#### 3.1 アゾベンゼン光異性化反応

アゾベンゼンは2つのベンゼン環がアゾ基 ( $N=N$ ) で結合した分子である(図3). シス体は環同士の立体反発により平面構造から歪むため, トランス体と比べて共役による安定化が小さい. アゾベンゼンの光異性化反応は古くから盛んに研究され, 溶媒中でシス体からトランス体への異性化(シス-トランス異性化)はフェムト秒, その逆反応(トランス-シス異性化)はピコ秒の時間スケールで進行することが知られている[12]. 両方向の異性化反応に関して, Zhuらは従来法が量子収率の実験値を再現すると報告した[3]. 我々は改良法も同様にアゾベンゼン光異性化反応の実験データを再現できるかを確認するための計算を実行した. 本稿では, シス-トランス異性化に焦点を絞ってその結果を示す.

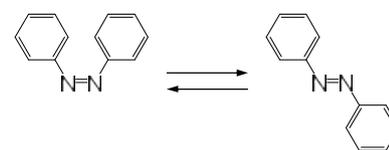


図3 アゾベンゼンの異性化反応.

Zhuらは surface hopping 法の代表的な計算プログラム Newton-X[13-15]に従来法を組み込んでおり, 我々はこのプログラムの提供を受けて改良法を追加実装した. 文献[3]に倣って, アゾベンゼン

ンの断熱ポテンシャルおよび断熱勾配の評価には量子化学計算パッケージ Molpro[16,17]を使い、6電子6分子軌道から成る活性空間を設定した状態平均多配置自己無撞着場(SA-CASSCF)法[18,19]を採用した。分子軌道の記述にはガウス基底関数系 6-31G[20]を用いた。Newton-X には複数の量子化学計算パッケージに対応したインターフェースが搭載されているが、現時点で Molpro には非対応であるため、Molpro の出力を読み込めるように Newton-X のソースコードを修正した。電子基底状態  $S_0$  のシス体に相当する振動基底状態を反映した Wigner 分布[21]を仮定し、アゾベンゼンを構成する各原子の初期位置と初期速度をランダムに生成して第1電子励起状態  $S_1$  に垂直励起した状態を時刻  $t=0$  とした。古典トラジェクトリを走らせながら、断熱ポテンシャルの差 ( $\Delta U$ ) の最小点を検出した。その点における透熱勾配を(6)式または(7)式に従って推定して(1)式の遷移確率を算出し、0 から 1 の一様乱数との大小関係からホップの判断を行った。遷移確率が乱数より大きければ  $S_1$  から  $S_0$  へトラジェクトリをホップさせて(4)式で与えられた遷移方向の運動量成分を調整し、遷移確率が乱数より小さければそのまま  $S_1$  のポテンシャル曲面上を運動させた。時間ステップは 0.5 fs と設定した。

図 4 は従来法と改良法のそれぞれから得られた  $S_1$  の分布変化である。両者は良く一致していることが分かる。表 1 ではトランス体の量子収率と  $S_1$  の励起寿命の計算値を実験値と比較している。これらの結果から、アゾベンゼン光異性化反応に対する従来法と改良法の計算精度はほぼ同じと言える。しかし、量子収率の計算値は実験値と一致しているが、励起寿命の再現性は比較的低い。この反応に関しては、電子状態計算の手法や基底関数系が概ね同一であれば、従来法は fewest switches アルゴリズムを用いた場合と近い結果を与えることが示されている[3]。そこで、fewest switches アルゴリズムで算出された励起寿命の文献値を表 2 に並べた。電子状態計算の手法を SA-CASSCF 法から時間依存密度汎関数 (TDDFT) 法に変えると実験値と合致している。このことから、励起寿命の再現性が低い要因の 1 つは、非断熱遷移アルゴリズムではなく電子状態計算の精度にあるとみなせる。他の要因として、実験が液相中で行われたのに対して計算は気相を仮定したことが影響している可能性も考えられる。

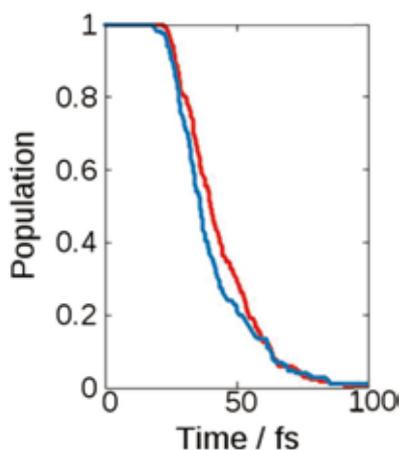


図 4  $S_1$  の分布の時間変化。  
赤線は従来法、青線は改良法の結果。

表 1 量子収率と励起寿命の計算値および実験値。

	従来法	改良法	実験値[12] (溶媒中)
トラジェクトリ数	167	170	
量子収率	0.48	0.51	0.41–0.56
励起寿命 (fs)	40.05	40.76	100–170

表 2 fewest switches アルゴリズムで計算された励起寿命。SA3-CASSCF(10,8)は 10 電子 8 軌道の活性空間で第 2 電子励起状態  $S_2$  も含む 3 状態を平均した SA-CASSCF 法。

	SA3-CASSCF(10,8) [22]	TDDFT [23]
励起寿命 (fs)	67	121

### 3.2 ピラジン超高速無輻射失活

ピラジン  $C_4H_4N_2$  はヘテロ芳香環を有する生体分子 (核酸塩基など) のプロトタイプとみなせる。紫外光を吸収したピラジンは、光学許容  $S_2$  状態と光学禁制  $S_1$  状態の間に存在する円錐交差を經由して超高速の無輻射失活を起こすことが知られている。時間分解ポンプ・プローブ光電子分光実験から、気相中における  $S_2$  の励起寿命は  $22 \pm 3$  fs と見積もられた[24]。

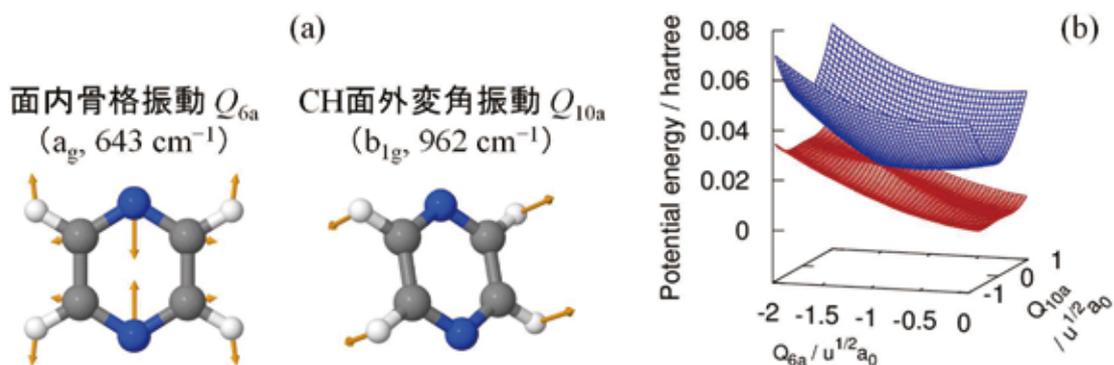


図5 ピラジン超高速無輻射失活の有効2自由度モデル.(a) 基準振動モード  $Q_{6a}$  と  $Q_{10a}$ . 白球は水素 H, 黒球は炭素 C, 青球は窒素 N を表す.(b)  $S_2$  (青) と  $S_1$  (赤) の2次元断熱ポテンシャル曲面.

これまでの我々の研究から、ピラジンの  $S_2$  から  $S_1$  への非断熱遷移は図5の有効2自由度モデルを使って良く記述できることが分かっている[9]. このモデルは、図5(a)に描いた面内骨格振動モード  $Q_{6a}$  と CH 面外変角振動モード  $Q_{10a}$  の2つの自由度を採用したものである. 図5(b)は Molpro を使用して多参照配置間相互作用 (MRCI) 法[25–27]と基底関数系 6-311++G\*\*[20]から得られた  $S_2$  と  $S_1$  の2次元断熱ポテンシャル曲面である. これらのポテンシャル曲面上の量子核波束動力学計算を実行したところ、 $S_2$  の励起寿命は 19.4 fs と算出され、上記の実験値を再現した[9]. そこで、我々は図5(b)の2次元断熱ポテンシャル曲面の数値データを読み込んで surface hopping 計算を行う Fortran プログラムを作成した. アゾベンゼンの場合と同様に、 $S_0$  の振動基底状態に対応する Wigner 分布から初期条件のアンサンブルを作成して  $S_2$  へ垂直励起し、従来法と改良法の計算結果を比較した.

図6は横軸を時間ステップの対数として、縦軸に遷移確率 (円錐交差を1回通過して  $S_2$  から  $S_1$  へ移った分布の量) をプロットしたものである. 改良法は時間ステップの大きさのある程度変えても遷移確率がほぼ同じ値になった.  $S_2$  の励起寿命を見積もると約 18 fs であり、上記の実験値や量子核波束計算値と一致した. 対照的に、従来法は時間ステップを小さくすると、2.2 節で述べたように遷移確率を著しく過小評価した. これらの結果から、改良法は従来法より安定で適用範囲が広いことを確認できた.

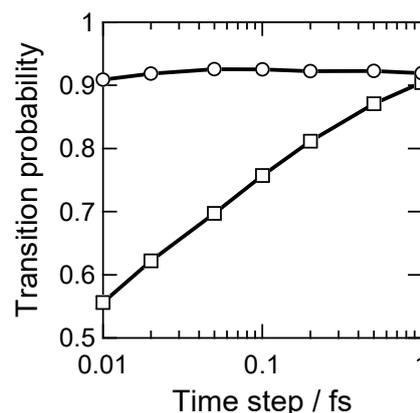


図6 遷移確率の時間ステップ依存性. □は従来法, ○は改良法の結果. いずれの場合もトラジェクトリの総数は 8000 本.

#### 4. 分子モーター光異性化反応への適用

3 章の議論から改良法の実用性を確認できたので、光駆動分子モーターの非断熱分子動力学計算に取り組む準備が整った. 図1の6員環が二重結合で繋がった分子モーターは熱異性化が回転の律速段階であり、 $b \rightarrow c$  の過程ではナフタレン環同士、 $d \rightarrow a$  ではメチル基とナフタレン環の立体障害が大きいため回転速度が遅かった. これを改善するために、原田らは立体障害が小さくなるように上記の6員環を5員環で置き換えた分子モーター (図7) を設計・合成し、回転頻度を上昇させることに成功した[10,11]. 回転の第一段階であるトランス体 a からシス体

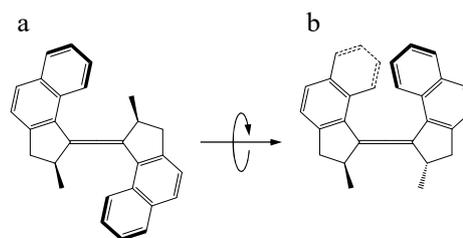


図7 5員環が二重結合で繋がった新型分子モーターのトランス-シス光異性化反応[10,11].

b への光異性化は、メタノール溶媒中において光照射開始から 30 秒ほどで光平衡 (a と b の比が 6 : 94) に達することが分かっている。しかし、トランス体 a 以外の過渡的な構造は観測されておらず、詳細な回転機構は未だ明らかになっていない。改良法をこの反応に適用し、異性化機構の解明を目指した。

#### 4.1 2 状態モデル

分子サイズを考慮し、電子状態計算には時間依存密度汎関数強束縛 (TDDFTB) 法[28]を用いた。TDDFTB 法は TDDFT 法のハミルトニアンをパラメーター化した半経験的手法であり、TDDFT 法に近い精度でより高速に電子励起状態を求めることができる。その中でも Kohn-Sham エネルギー汎関数を電子密度揺らぎに関して 3 次の項まで展開する TDDFTB3 法[29]を選択した。パラメーターセットとして 3ob-3-1[30]、計算プログラムには DFTB+[31]を使った。それに伴い、Newton-X のインターフェースを修正して DFTB+ の TDDFTB ルーチンにも対応させた。トランス体 a に相当する振動基底状態の Wigner 分布を基に用意したトラジェクトリを  $S_0$  から  $S_1$  へ垂直励起し、その後の反応動力学を追跡した。

図 8 はトランス体 a からシス体 b への異性化を起こした典型的なトラジェクトリの結果である。図 8(a)にはトラジェクトリに沿った  $S_1$  と  $S_0$  の断熱ポテンシャル、図 8(b)には回転軸 (C=C 結合軸) 周りの二面角の時間変化を示した。励起から 3.62 ps 後に  $S_1$  から  $S_0$  へ非断熱遷移が起こり、追従するように二面角が著しく減少して異性化する。図 8(c)は非断熱遷移に伴う構造変化を描いたスナップショットである。遷移直前の 3.50 ps の時点では二面角の値が 155.3°でありトランス体 a を形成しているが、遷移を終えた 4.76 ps には 2 つのナフタレン環が近付いてシス体 b (二面角は -7.3°) になった。このように、数 ps という極めて短い時間で異性化が起こる経路が見出された。

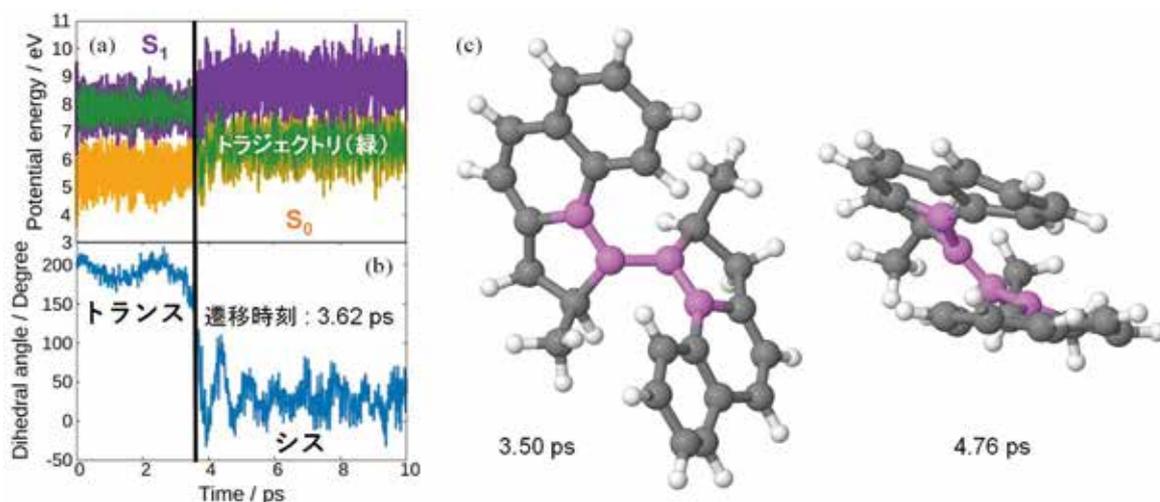


図 8 2 状態モデルにおいてトランス体 a からシス体 b への異性化を起こした典型的なトラジェクトリ。(a)  $S_1$  (紫線) と  $S_0$  (黄線) の断熱ポテンシャルの時間変化。緑線はトラジェクトリの時間発展に使われたポテンシャル。(b) 回転軸 (C=C 結合軸) 周りの二面角の時間変化。(c) 励起から 3.50 ps および 4.76 ps 後の分子構造。紫色の 4 原子で回転軸周りの二面角を定義した。

#### 4.2 5 状態モデル

前節で提示した計算結果は  $S_1$  と  $S_0$  の 2 状態を考慮したものであった。続いて、第 4 電子励起状態  $S_4$  まで含めた 5 状態モデルの下で同様の非断熱分子動力学計算を行ったところ、得られたトラジェクトリは 2 状態モデルの場合とは異なる挙動を示した。次頁の図 9(a)は 5 状態モデルの典型的なトラジェクトリにおける  $S_1$  から  $S_4$  までの断熱ポテンシャルの時間変化である。4 つの電子励起状態が接近し合っており、それらの中で頻りに非断熱遷移が起こっている。 $S_0$  には遷移しにくくなり、回転軸周りの二面角は 220°から 170°の範囲に留まって異性化する様子は見られなかった。

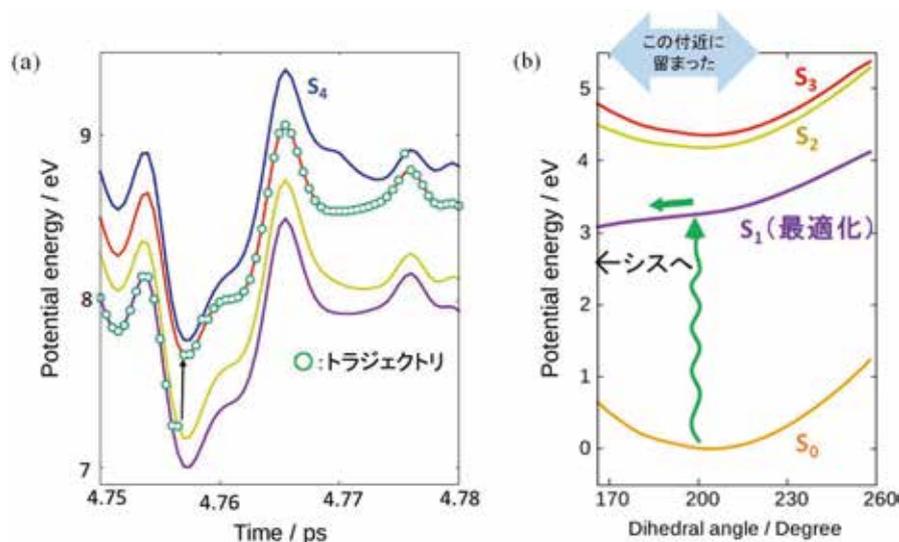


図 9 (a) 5 状態モデルの典型的なトラジェクトリにおける  $S_1$  から  $S_4$  までの断熱ポテンシャルの時間変化.  $\circ$  はトラジェクトリの時間発展に使われたポテンシャル. (b) 異性化の有効ポテンシャル曲線.

図 9(b) は回転軸周りの二面角をパラメーターとして他の自由度を  $S_1$  状態上で最適化することで求めた有効ポテンシャル曲線である. この部分最適化には量子化学計算パッケージ Gaussian 09[32] を使い, TDDFT 法 (汎関数は  $\omega$ B97X-D[33], 基底関数系は 6-31G) を採用した.  $S_1$  の有効ポテンシャル曲線の傾きから, 励起直後はシス体へ向かって二面角が小さくなると予想される. しかし, 図 9(b) から電子励起状態が互いに接近していることが分かる.  $S_0$  と同じく有効ポテンシャル曲線の極小点が  $200^\circ$  近傍に存在している  $S_2$  や  $S_3$  へ遷移することで, 異性化が抑制されると考えられる. 以上の有効ポテンシャル曲線に基づく考察は, 分子動力学計算の結果と合致する.

異性化が起こりにくければ, トランス体 a に戻る経路が存在するはずである. この場合, 分子モーターは再び光を吸収して異性化を試みることになる. 原田らの実験はメタノール溶媒中で行われているため,  $S_1$  より高い電子励起状態は溶媒効果でクエンチされる (急速に失活する) 可能性が考えられる. 実際には 2 状態モデルの方が現実に近いのかもしれない. 今後は, 溶媒分子に囲まれた分子モーターのシミュレーションなども実施し, 検討を進めていきたい.

## 5. まとめと展望

動的機能分子の代表例として有望視される光駆動分子モーターの回転動力学を解明するために, 複雑系に有効な新しい非断熱分子動力学計算法を開発した. これは Zhu-Nakamura 非断熱遷移確率の評価に必要な透熱ポテンシャル勾配を断熱ポテンシャル曲面の曲率を利用して推定することにより実現できた. 本稿で紹介した計算結果の解析から得られた成果を以下にまとめる.

### <アゾベンゼン光異性化反応>

Zhu らの従来法と我々の改良法は同じ計算精度で実験データを再現した.

### <ピラジン超高速無輻射失活>

改良法は従来法より時間ステップの大小に対して安定である.

### <分子モーター光異性化反応>

2 状態モデルでは, 数 ps という極めて短い時間でトランス体 a からシス体 b へ異性化する経路が見つかった. 状態数を増やすと, 近接した電子励起状態の存在によって  $S_0$  への非断熱遷移及び異性化が起こりにくくなる.

分子モーターを始めとするナノマシンの研究分野に対する社会の期待は大きく、実用的な機能の発現が望まれている。例えば、原田らによって DNA に結合させた分子モーターの回転を利用して二重らせん構造を制御する試みがなされているが、成功には至っていない[34]。化学修飾による回転挙動の変化を予測できれば、分子モーターに力学的な仕事をさせることが可能になると見込まれる。これはナノテクノロジーが掲げる究極の目標の1つであり、産業・医療など多方面への応用が期待される。

図7の新型分子モーターでも光平衡に要する時間は秒の単位であり、4章の計算結果から示唆されるように様々な緩和経路が含まれると考えられる。量子収率なども未知であり、機構解明と高速回転可能な分子モーターの設計が喫緊の課題である。大型計算機を活用したシミュレーション研究は、化学修飾や溶媒の存在によって複雑さを増す分子モーターの回転動力学の全貌を解き明かす上で重要な鍵となる。計算から得られる回転挙動の変化を系統的に整理して分子モーターの設計指針を確立し、ナノマシンとしての実用化に向けて一方向の高速回転に起因する機能発現の予測に繋げていきたい。

アゾベンゼンおよび分子モーターの光異性化シミュレーションに用いた Newton-X は、世界中で広く使われている分子動力学計算プログラムである。通常断熱的な（単一の断熱ポテンシャル曲面上を走る）古典トラジェクトリの時間発展はもちろん、fewest switches アルゴリズムに基づいて非断熱遷移を考慮した surface hopping 計算も容易に実行可能である。非商用・非営利目的であれば、ユーザー登録をすることで最新版である version 2.0, build 17 (2017年5月リリース)を無償で入手できる[35]。Newton-X のインターフェースは、化学の分野で最も頻繁に利用されている Gaussian (本来は有償だが、東北大学サイバーサイエンスセンターがアプリケーションサービスとして提供している)を始め、無償ソフトウェアである GAMESS[36]や COLUMBUS[37]など、複数の量子化学計算パッケージに対応している。我々が分子モーターの非断熱分子動力学計算に使った DFTB+も、電子基底状態上の断熱的なトラジェクトリ追跡であれば対応済みである。非対応のソフトウェアであっても、我々が行ったようにその出力を読み込めるよう Newton-X のソースコードを書き換えてコンパイルすれば利用できる。分子動力学のみでなく、吸収・発光スペクトルや光電子スペクトルを評価する機能も備えており、利用価値の高いプログラムと言える。

## 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システム NEC LX 406Re-2 を利用して実行された。従来法を組み込んだ Newton-X のソースコードを提供して下さった台湾国立交通大学の L. Yue 博士と C. Zhu 教授、および TDDFTB 法に関して貴重な助言を下された Université Claude Bernard Lyon 1 (フランス) の T. A. Niehaus 教授に感謝の意を表したい。なお、本研究は JSPS 科研費 JP16H04091, JP26810002, JP18K05022 の助成を受けて行われた。

## 参考文献

- [1] N. Koumura, R. W. J. Zijlstra, R. A. van Delden, N. Harada, and B. L. Feringa, Light-driven monodirectional molecular rotor, *Nature* **401**, 152 (1999).
- [2] J. C. Tully, Molecular dynamics with electronic transitions, *J. Chem. Phys.* **93**, 1061 (1990).
- [3] L. Zhu, C. Xu, Y. Lei, C. Zhu, and Z. Wen, Trajectory-based nonadiabatic molecular dynamics without calculating nonadiabatic coupling in the avoided crossing case: *trans* ↔ *cis* photoisomerization in azobenzene, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**, 25883 (2014).
- [4] C. Zhu, H. Nakamura, N. Re, and V. Aquilanti, The two-state linear curve crossing problems revisited. I. Analysis of Stokes phenomenon and expressions for scattering matrices, *J. Chem. Phys.* **97**, 1892 (1992).
- [5] C. Zhu and H. Nakamura, The two-state linear curve crossing problems revisited. II. Analytical

- approximations for the Stokes constant and scattering matrix: The Landau–Zener case, *J. Chem. Phys.* **97**, 8497 (1992).
- [6] C. Zhu and H. Nakamura, The two-state linear curve crossing problems revisited. III. Analytical approximations for Stokes constant and scattering matrix: Nonadiabatic tunneling case, *J. Chem. Phys.* **98**, 6208 (1993).
- [7] C. Zhu and H. Nakamura, Two-state linear curve crossing problems revisited. IV. The best analytical formulas for scattering matrices, *J. Chem. Phys.* **101**, 4855 (1994).
- [8] K. Hanasaki, M. Kanno, T. A. Niehaus, and H. Kono, An efficient approximate algorithm for nonadiabatic molecular dynamics, *J. Chem. Phys.* **149**, 244117 (2018).
- [9] M. Kanno, Y. Ito, N. Shimakura, S. Koseki, H. Kono, and Y. Fujimura, *Ab initio* quantum dynamical analysis of ultrafast nonradiative transitions *via* conical intersections in pyrazine, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 2012 (2015).
- [10] T. Fujita, S. Kuwahara, and N. Harada, A New Model of Light-Powered Chiral Molecular Motor with Higher Speed of Rotation, Part 1 – Synthesis and Absolute Stereostructure, *Eur. J. Org. Chem.*, 4533 (2005).
- [11] S. Kuwahara, T. Fujita, and N. Harada, A New Model of Light-Powered Chiral Molecular Motor with Higher Speed of Rotation, Part 2 – Dynamics of Motor Rotation, *Eur. J. Org. Chem.*, 4544 (2005).
- [12] H. M. Bandara and S. C. Burdette, Photoisomerization in different classes of azobenzene, *Chem. Soc. Rev.* **41**, 1809 (2012).
- [13] M. Barbatti, G. Granucci, M. Persico, M. Ruckebauer, M. Vazdar, M. Eckert-Maksić and H. Lischka, The on-the-fly surface-hopping program system Newton-X: Application to *ab initio* simulation of the nonadiabatic photodynamics of benchmark systems, *J. Photochem. Photobio. A* **190**, 228 (2007).
- [14] M. Barbatti, M. Ruckebauer, F. Plasser, J. Pittner, G. Granucci, M. Persico, and H. Lischka, Newton-X: a surface-hopping program for nonadiabatic molecular dynamics, *WIREs: Comput. Mol. Sci.* **4**, 26 (2014).
- [15] M. Barbatti, G. Granucci, M. Ruckebauer, F. Plasser, R. Crespo-Otero, J. Pittner, M. Persico, and H. Lischka, NEWTON-X: *a package for Newtonian dynamics close to the crossing seam*, version 1.4, 2013.
- [16] H.-J. Werner, P. J. Knowles, G. Knizia, F. R. Manby and M. Schütz, Molpro: a general-purpose quantum chemistry program package, *WIREs: Comput. Mol. Sci.* **2**, 242 (2012).
- [17] H.-J. Werner *et al.*, MOLPRO, version 2012.1, a package of *ab initio* programs, <http://www.molpro.net>, 2012.
- [18] H.-J. Werner and P. J. Knowles, A second order multiconfiguration SCF procedure with optimum convergence, *J. Chem. Phys.* **82**, 5053 (1985).
- [19] P. J. Knowles and H.-J. Werner, An Efficient Second-Order MCSCF Method for Long Configuration Expansions, *Chem. Phys. Lett.* **115**, 259 (1985).
- [20] I. N. Levine, *Quantum Chemistry*, 6th ed. (Prentice Hall, New Jersey, 2009), pp. 471–635.
- [21] E. Wigner, On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium, *Phys. Rev.* **40**, 749 (1932).
- [22] M. Pederzoli, J. Pittner, M. Barbatti, and H. Lischka, Nonadiabatic Molecular Dynamics Study of the *cis–trans* Photoisomerization of Azobenzene Excited to the  $S_1$  State, *J. Phys. Chem. A* **115**, 11136 (2011).
- [23] A. J. Neukirch, L. C. Shamberger, E. Abad, B. J. Haycock, H. Wang, J. Ortega, O. V. Prezhdo and J. P. Lewis, Nonadiabatic Ensemble Simulations of *cis*-Stilbene and *cis*-Azobenzene Photoisomerization, *J. Chem. Theory Comput.* **10**, 14 (2014).
- [24] Y. Suzuki, T. Fuji, T. Horio, and T. Suzuki, Time-resolved photoelectron imaging of ultrafast  $S_2 \rightarrow S_1$  internal conversion through conical intersection in pyrazine, *J. Chem. Phys.* **132**, 174302 (2010).
- [25] H.-J. Werner and P. J. Knowles, An efficient internally contracted multiconfiguration-reference configuration interaction method, *J. Chem. Phys.* **89**, 5803 (1988).
- [26] P. J. Knowles and H.-J. Werner, An Efficient Method for the Evaluation of Coupling Coefficients in

- Configuration Interaction Calculations, Chem. Phys. Lett. **145**, 514 (1988).
- [27] P. J. Knowles and H.-J. Werner, Internally contracted multiconfiguration-reference configuration interaction calculations for excited states, Theor. Chim. Acta **84**, 95 (1992).
- [28] T. A. Niehaus, S. Suhai, F. Della Sala, P. Lugli, M. Elstner, G. Seifert, and Th. Frauenheim, Tight-binding approach to time-dependent density-functional response theory, Phys. Rev. B **63**, 085108 (2001).
- [29] Y. Yang, H. Zhu, D. York, Q. Cui, and M. Elstner, Extension of the self-consistent-charge density-functional tight-binding method: Third-order expansion of the density functional theory total energy and introduction of a modified effective coulomb interaction, J. Phys. Chem. A **111**, 10861 (2007).
- [30] M. Gaus, A. Goez, and M. Elstner, Parametrization and Benchmark of DFTB3 for Organic Molecules, J. Chem. Theory Comput. **9**, 338 (2013).
- [31] B. Aradi, B. Hourahine, and Th. Frauenheim, DFTB+, a Sparse Matrix-Based Implementation of the DFTB Method, J. Phys. Chem. A **111**, 5678 (2007).
- [32] M. J. Frisch *et al.*, GAUSSIAN 09, Revision A.02, Gaussian, Inc., Wallingford, CT, 2009.
- [33] J.-D. Chai and M. Head-Gordon, Long-range corrected hybrid density functionals with damped atom-atom dispersion corrections, Phys. Chem. Chem. Phys. **10**, 6615 (2008).
- [34] F. Nagatsugi, Y. Takahashi, M. Kobayashi, S. Kuwahara, S. Kusano, T. Chikuni, S. Hagihara, and N. Harada, Synthesis of peptide-conjugated light-driven molecular motors and evaluation of their DNA-binding properties, Mol. BioSyst. **9**, 969 (2013).
- [35] <http://www.newtonx.org> から入手可能.
- [36] <http://www.msg.chem.iastate.edu/gamess> から入手可能.
- [37] <https://www.univie.ac.at/columbus> から入手可能.

## [共同研究成果]

**乱流の生成とその維持機構に関する研究**

伊澤 精一郎：東北大学大学院工学研究科  
吉川 穰：宮城県産業技術総合センター  
李 根燮：岐阜大学大学院工学研究科  
西尾 悠：成蹊大学理工学部  
福西 祐：東北大学大学院工学研究科

**1. はじめに**

本研究課題は昨年度からの継続課題であり，回転円板上に形成される3次元境界層の不安定化機構を解明することと，平板境界層の乱流遷移過程における乱流の初生に関わる現象を捕捉することという2つを目的のもとで，実施したものである。

前者の流れ場では，横流れ成分によって速度分布に変曲点が生じ，非粘性型の横流れ不安定が現れて乱流遷移が早まることが知られており，航空機の後退翼面上に発達する境界層と本質的に同じ遷移過程をたどることから，理論解析や実験，数値計算によってその不安定性が調べられてきた[1]。しかしながら，いずれの方法も一長一短であり，移流不安定性や全体不安定性について限られた条件の中で議論せざるを得ないのが現状であった。そこで，東北大学のスーパーコンピュータ SX-ACE を用いて，回転円板全周を計算領域に設定することで周期境界条件の影響を排除し，実際の流れ場にできるだけ近い条件で直接数値シミュレーションを行った。

また，後者の流れ場としては，平板層流境界層に短時間噴流を噴射した場を取り上げる。昨年度は，乱流遷移が急速に進展する平板境界層のバイパス遷移を想定し，人為的に励起した低速ストリークに対して壁面から短時間噴流を噴射した場を取り上げ，下流で乱流に遷移する場合としない場合の流れ場の様子を詳細に比較することで乱流の誕生に関わる構造を調べた。そこで，本年度はストリークがない場合についての計算を行い，基本流にストリーク構造があるかないかによって乱流遷移の鍵となる構造が異なるのかどうかについて調査した。なお，計算には昨年同様東北大学の並列コンピュータ LX 406Re-2 を用いた。

前者の回転円板流れの全周計算結果については，SENAC 5 1号第1巻に昨年度の成果と一緒に報告済み[2]であるので，本稿では後者のストリークがない層流境界層を刺激した計算結果の概略について述べる。詳細な内容については，参考文献[3]を参照されたい。

**2. 計算方法と問題設定**

計算方法は前報（SENAC 5 1号第1巻）と同様であり，一様流速と流入部境界層の排除厚さで無次元化された Navier-Stokes 方程式と連続の式を有限差分法により解いた。なお，攪乱として導入する速度変動の成長を精度良く捉えるため，基本流として与えた平板層流境界層の速度分布（Blasius 解）からの差分として変動成分を定義し，この変動成分に対する NS 方程式を解くこととした。座標系の原点を流入部スパン方向中央の壁面上に取り，流れ方向を  $x$ ，壁面垂直方向を  $y$ ，スパン方向を  $z$  とし，計算領域の大きさは  $294 \times 25.9 \times 34.6$  とした。格子点数は  $1701 \times 101 \times 201$  点で，境界層内に十分な格子点数を確保している。また，流入境界における排除厚さを代表長さとする Reynolds 数は 613 であり，計算領域全体が線形安定論が予測する臨界 Re 数 520 よりも大きい超臨界領域に位置するように設定した。

層流境界層に加える速度変動攪乱は， $x = 34.6$  ( $Re = 663$ )， $z = 0$  の位置に設けた  $l_x \times l_z$  の小孔か

	$Re_{\delta^*}$	$v_{jet}$	$l_x \times l_z$	$T_{jet}$	Transition
Reference	663	0.18	$1.73 \times 1.73$	13.0	No
		0.20			Yes
Run I	456	0.30	$1.73 \times 1.73$	13.0	No
		0.33			Yes
Run II	867	0.12	$1.73 \times 1.73$	13.0	No
		0.14			Yes
Run III	663	0.25	$1.73 \times 1.04$	13.0	No
		0.28			Yes
Run IV	663	0.16	$1.73 \times 2.76$	13.0	No
		0.18			Yes
Run V	663	0.18	$1.73 \times 1.73$	19.0	Yes

表 1 噴流の噴射条件

ら壁面垂直方向に無次元時間  $T_{jet}$  だけ一様噴射させることで与え、その噴射速度  $v_{jet}$  を変えながら乱流遷移が起こる下限の値を探った。表 1 にその結果をまとめる。表中の Reference が基準となる条件であり、この条件に対して噴射位置 (Run I, II) や噴射孔の幅 (Run III, VI), 噴射時間 (Run V) を変えた計算を行い、それぞれの影響について評価した。なお、Run I のケースでは、噴射孔位置は亜臨界領域にある。1 ケースあたりの演算時間は、OpenMP による 24 並列で 8,000 ステップ計算して 3 日程度であった。

### 3. 結果と考察

乱流遷移を引き起こすのに必要な噴流の噴射速度は、噴射位置の Re 数に逆比例することが知られている。本計算結果から求まる指数の値はおおよそ -1.38 で、境界層厚さを一定とした場合の値である -1.5 に近い値となった[4]。

図 1 は、Reference ケースで乱流に遷移した  $v_{jet} = 0.20$  の流れ場の様子である。渦構造の可視化には速度勾配テンソルの第 2 不変量である Q 値を用い、局所的な流れ方向の渦度成分の強弱に応じてその表面を色付けしている。壁面から噴流を噴射すると、噴射速度によらず、境界層内にはやがて図 1 (a) に示すように流れ方向に並んだヘアピン渦列が形成された。しかし、これらのヘアピン渦は下流へと流れ去るばかりで、その周囲に新たな渦構造を生み出すことはなかった。以下では、このヘアピン渦列を第 1 世代と呼ぶことにする。

噴射速度による違いが現れたのは、この後の時刻の流れ場である。噴射速度が  $v_{jet} = 0.18$  の場合、 $v_{jet} = 0.20$  の場合と同様に、第 1 世代のヘアピン渦とともにその外側には噴射直後に形成された縦渦が見られたが、両者は干渉することなくやがて粘性により散逸してしまった。これに対して、噴射速度が 0.20 まで上昇すると、図 1(a) で最上流に形成されつつある第 1 世代のヘアピン渦が、その外側に伸びた縦渦と合体して脚部と脚部の間隔が広い新たなヘアピン渦が誕生した。このへ

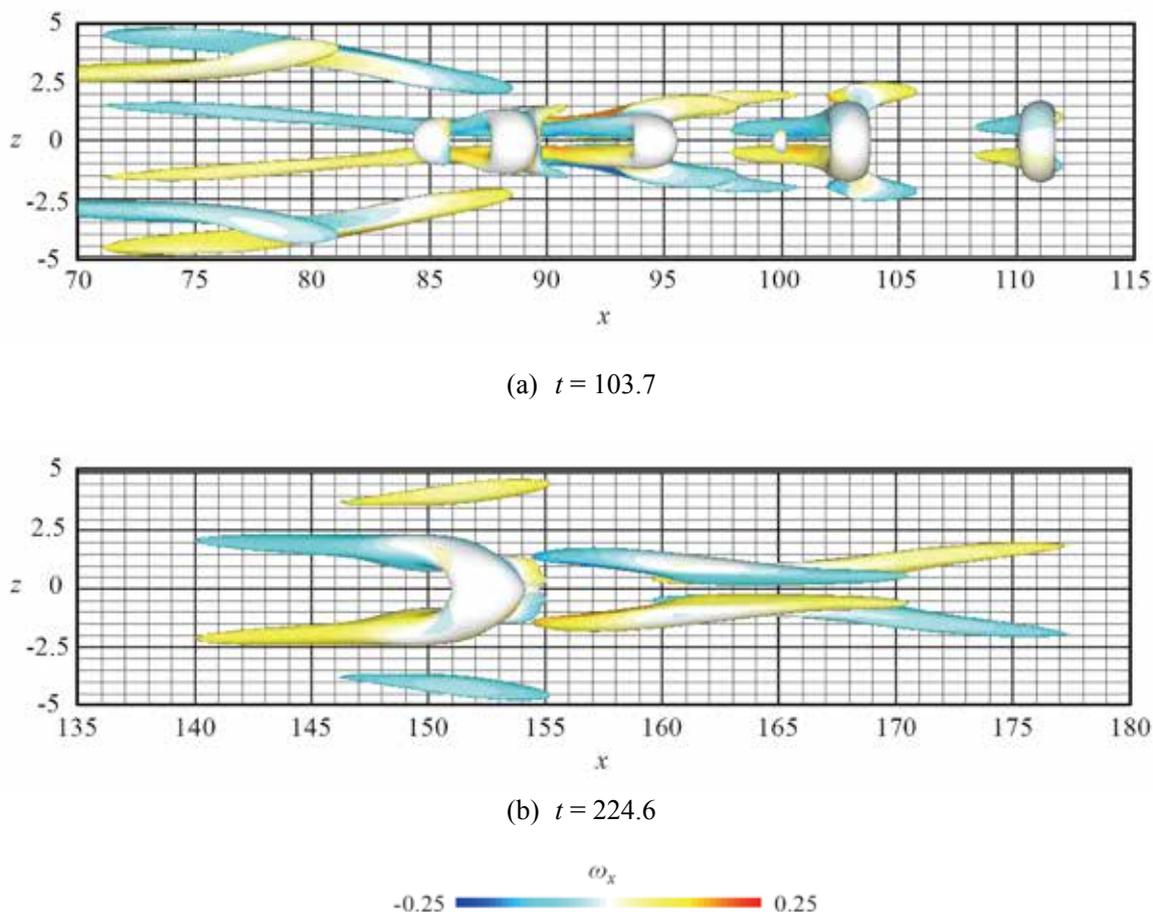


図1 Q = 0.002 の等値面で可視化した渦構造  
 (局所縦渦成分 $\omega_x$ が正の領域を赤、負の領域を青で色付けして表示)

ヘアピン渦を第2世代と呼ぶことにする(図1(b)). ヘアピン渦脚部の渦度の時間変化を調べたところ、新たに誕生した第2世代のヘアピン渦は、第1世代のヘアピン渦とは異なり、その脚部が上流側にハの字状に広がっているため粘性拡散による減衰が遅く、その構造が長時間にわたって維持されることがわかった. 境界層が乱流に遷移することができたのは、この第2世代のヘアピン渦を土壌として渦同士の干渉が促進され、次々に新たな渦が誕生した結果である.

続いて、噴射条件を様々に変えて計算を行った結果について述べる. まず、噴射位置を上流側の亜臨界領域にずらした場合(Run I)と下流側のRe数が大きい超臨界領域にずらした場合(Run II)では、乱流遷移を引き起こすのに必要な噴流の噴射速度が変わるものの、いずれの遷移過程においても現れる渦構造に大きな違いは見られず、鍵となる渦構造に変化はなかった.

次に、噴射孔のパン方向幅を60%にまで狭めた場合(Run III)と1.6倍に広げた場合(Run VI)について調べた. 噴射孔の幅を狭めると生成されるヘアピン渦の脚部の間隔も狭くなるものの、Referenceケースと渦構造の配置に有意な差は認められなかった. これに対して、孔の幅を広げると、乱流遷移が進展した後に現れる渦構造は異なったものとなったが、第1世代の後に第2世代のヘアピン渦が形成されて乱流化するという過程は同じであった.

最後に、噴射時間をReferenceケースの1.5倍弱に伸ばした結果について述べる. もともと噴射

速度が弱く遷移が起こらなかった  $v_{\text{jet}} = 0.18$  のケースでも、噴射時間を長くすることで第2世代のヘアピン渦が形成されるようになり、乱流に遷移するようになった。構造が複雑化する過程で次々に現れる渦の配置は異なるものの、本質的には Reference ケースと同じ遷移過程をたどることがわかった。

以上の結果より、噴射条件の違いに関わらず、第1世代のヘアピン渦の後に続く第2世代のヘアピン渦の誕生が乱流化の鍵であることがわかった。この世代のヘアピン渦は、流れ方向のみならずスパン方向にも傾いた脚部（縦渦対）を有しており、この特徴は低速ストリークに対して噴流を噴射した場合[5]に鍵となった渦構造の特徴と共通するものであった。

#### 4. まとめ

Blasius 境界層に短時間噴流を噴射して境界層内に現れる渦構造の変化を調べ、乱流遷移を引き起こすのに鍵となる構造を探ったところ、脚部の間隔の広いヘアピン渦が形成されるかどうかは鍵となることがわかった。

#### 謝辞

本研究は、東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータ及び並列コンピュータを利用することで実現することができた。また、研究にあたっては同センター関係各位に有益なご指導とご協力をいただいた。ここに記して謝意を表する。

#### 参考文献

- [1] K. Lee, Y. Nishio, S. Izawa, Y. Fukunishi, The effect of downstream turbulent region on the spiral vortex structures of a rotating-disk flow, *J. Fluid Mech.*, Vol. 844, pp. 274-296, 2018.
- [2] 伊澤 精一郎, 吉川 穰, 李 根燮, 西尾 悠, 福西 祐, 乱流の生成とその維持機構に関する研究, *SENAC*, Vol. 51, No. 1, pp. 20-29, 2018.
- [3] J. Yoshikawa, Y. Nishio, S. Izawa, Y. Fukunishi, Key vortical structure causing laminar-turbulent transition in a boundary layer disturbed by a short-duration jet, *Phys. Rev. Fluids*, Vol. 3, 013904, 2018.
- [4] O. Levin and D. S. Henningson, Turbulent spots in the asymptotic suction boundary layer, *J. Fluid Mech.*, Vol. 584, pp. 397-413, 2007.
- [5] 吉川 穰, 西尾 悠, 伊澤 精一郎, 福西 祐, ストリークの存在する境界層において乱流遷移のきっかけとなる流れの構造, *日本機械学会論文集*, 84 巻 857 号, 17-00478, 2018.

[共同研究成果]

## Ar 熱プラズマジェットを用いたSi ナノ粒子大量創製プロセス における軸方向磁場の効果

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シリコンナノ粒子の大量創製プロセスを対象として、外部から印加された軸方向の磁場がプラズマ流の渦構造やナノ粒子群の空間分布等に及ぼす効果を非定常3次元シミュレーションによって明らかにする。

### 1. はじめに

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<sup>[1]</sup>。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<sup>[2]</sup>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<sup>[3]</sup>。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、ナノ粒子の形成現象はナノ秒～ミリ秒の時間的にマルチスケールな過程であり、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、特にアルゴン熱プラズマジェットを用いたシリコンナノ粒子の大量創製プロセスを対象として、非定常3次元シミュレーションによってプラズマ流の渦構造やナノ粒子群の空間分布等を可視化予測する。さらに外部から印加された軸方向の磁場がそれらに与える効果を明らかにする。

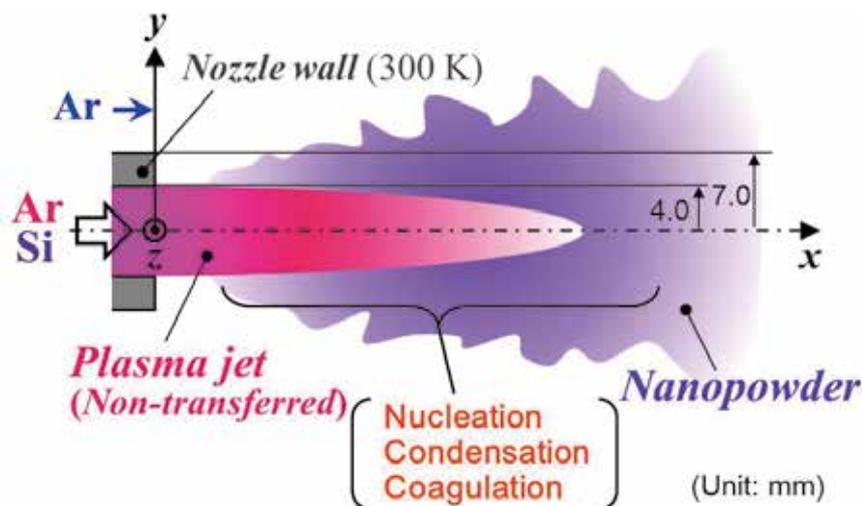


Fig. 1 Schematic illustration of Si nanopowder mass-production using Ar thermal plasma jet.

## 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。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left\{ \eta \left[ (\nabla \mathbf{u}) + (\nabla \mathbf{u})^{tr} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{U} \right] \right\} + \mathbf{J} \times \mathbf{B} \quad (2)$$

$$\frac{\partial (\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} h) = \nabla \cdot \left( \frac{\lambda}{C} \nabla h \right) + \frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla p - q_{rad} + q_{con} + \Phi + \frac{|\mathbf{J}|^2}{\sigma} \quad (3)$$

ここで、 $\rho$  は密度、 $t$  は時間、 $\mathbf{u}$  は速度ベクトル、 $p$  は圧力、 $\eta$  は粘性係数、 $\mathbf{I}$  は単位行列、 $\sigma$  は導電率、 $h$  はエンタルピー、 $\lambda$  は熱伝導率、 $C$  は定圧比熱、 $q_{rad}$  は放射損失、 $q_{con}$  はナノ粒子の凝縮熱、 $\Phi$  は粘性散逸である。また  $tr$  は転置を意味する。 $\mathbf{B}$  は磁束密度ベクトルであり、式(2)の  $\mathbf{J} \times \mathbf{B}$  および式(3)の  $|\mathbf{J}|^2/\sigma$  はそれぞれ Lorentz 力および Joule 熱である。電流密度ベクトル  $\mathbf{J}$  は、電場ベクトル  $\mathbf{E}$  を用いて次式により記述される。

$$\mathbf{J} = \sigma(\mathbf{E} + \mathbf{u} \times \mathbf{B}) \quad (4)$$

### 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<sup>4)</sup>、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。

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{n_p}{\rho} \right) + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \left( \frac{n_p}{\rho} \right) = \nabla \cdot \left[ \rho D_p \nabla \left( \frac{n_p}{\rho} \right) \right] + J - 2\sqrt{2} \beta_0 n_p^{11/6} f^{1/6} - \nabla \cdot \left( K_{th} \eta \frac{n_p}{\rho} \nabla \ln T \right) \quad (5)$$

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{f}{\rho} \right) + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \left( \frac{f}{\rho} \right) = \nabla \cdot \left[ \rho D_p \nabla \left( \frac{f}{\rho} \right) \right] + J g_c + \beta_0 (n_v - n_s) n_p^{1/3} f^{2/3} - \nabla \cdot \left( K_{th} \eta \frac{f}{\rho} \nabla \ln T \right) \quad (6)$$

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{n_v}{\rho} \right) + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \left( \frac{n_v}{\rho} \right) = \nabla \cdot \left[ \rho D_v \nabla \left( \frac{n_v}{\rho} \right) \right] - J g_c - \beta_0 (n_v - n_s) n_p^{1/3} f^{2/3} \quad (7)$$

ここで、 $n$  は数密度、 $D$  は拡散係数、 $J$  は均一核生成率<sup>[5]</sup>、 $K_{th}$  は熱泳動係数<sup>[6]</sup>、 $T$  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。

$$f = n_p g \quad (8)$$

$\beta_0$  は衝突頻度に関するパラメーターであり、以下のように表される。

$$\beta_0 = \left( \frac{3v_v}{4\pi} \right)^{1/6} \sqrt{\frac{6k_B T v_v}{m_v}} \quad (9)$$

$v$  は体積、 $k_B$  はボルツマン定数、 $m$  は質量である。式(5)および式(6)の右辺第4項は熱泳動を表している。式(5)~(7)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<sup>[7]</sup>を参照されたい。

### 3. 計算手法

本研究では、12,000 K に及ぶ超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<sup>[8]</sup>。その一方で、流れ場におけるマッハ数は  $10^{-3} \sim 10^{-2}$  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<sup>[9]</sup>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<sup>[10]</sup>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<sup>[11]</sup>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。

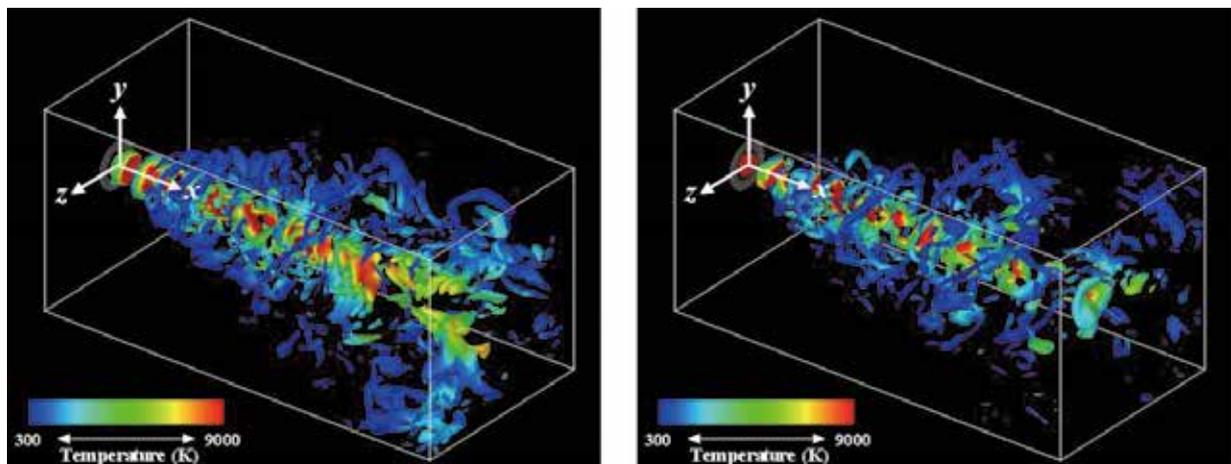
### 4. 計算条件

図1に計算領域を示す。内径 8.0 mm、外径 14.0 mm の円形の噴出孔から最高温度 12,000 K、最大速度 400 m/s の非移行式アルゴン熱プラズマジェットが、大気圧かつ 300 K の非電離アルゴン雰囲気中の計算領域へ、半径方向の分布を持って噴出する<sup>[12]</sup>。ナノ粒子の原料であるシリコン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。これらの条件に加えて、プラズマジェットと同軸方向に 1.0 T の一様磁場を印加する。

3次元の計算領域  $(x, y, z) = (0.0 \sim 255.8 \text{ mm}, -51.2 \sim 51.1 \text{ mm}, -51.2 \sim 51.1 \text{ mm})$  を設け、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  $0.1 \text{ mm}$  の幅を持つスタガード格子を用いて、時間ステップ幅を  $0.1 \text{ ms}$  として計算を進めた。本数値計算は東北大学サイバーサイエンスセンターの SX-ACE を用いて実行された。

## 5. 計算結果

図2にプラズマジェット内部および周囲に形成された渦構造の瞬間像を示す。渦は速度勾配テンソルの第二不変量の等値面 ( $Q = 0.25$ ) によって表現されており、色は温度を表している。ここで描画されている領域は計算領域全体ではなく、プラズマジェット近傍の領域  $(x, y, z) = (0.0 \sim 125.0 \text{ mm}, -31.5 \sim 31.5 \text{ mm}, -31.5 \sim 31.5 \text{ mm})$  であることに留意されたい。多くの渦が高温のプラズマジェットから離れた領域にも生じていることがわかる。これは Pfender ら<sup>[13]</sup>によって撮影された Schlieren 写真と類似している。また大きな渦は高温であり、一方で小さな渦は低温である。このことは Kolmogorov 理論を基にした予測<sup>[11, 14]</sup>とも一致する。磁場を印加した場合には Lorentz 力が発生し、速度変動が抑制されるために渦の数が減ることが示されている。



(a) Without magnetic field (0.0 T)

(b) With magnetic field (1.0 T)

Fig. 2 Snapshots of vortex structures with colors indicating temperatures.

( $Q = 0.25$  (-) is the value normalized by the mean velocity of  $160 \text{ m/s}$  and the diameter of  $8.0 \text{ mm}$  at the nozzle exit.)

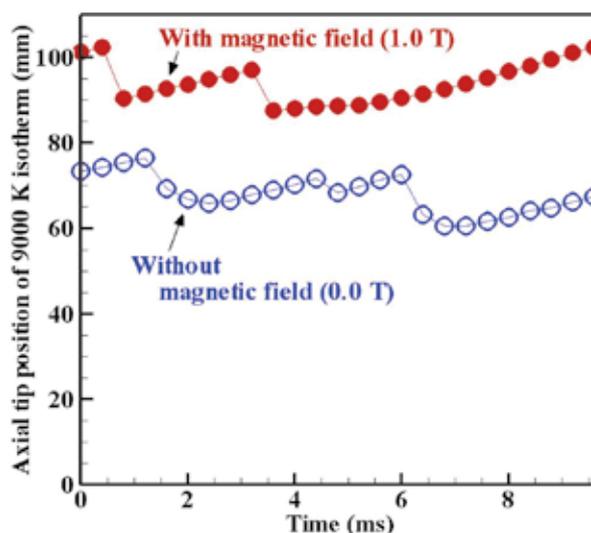
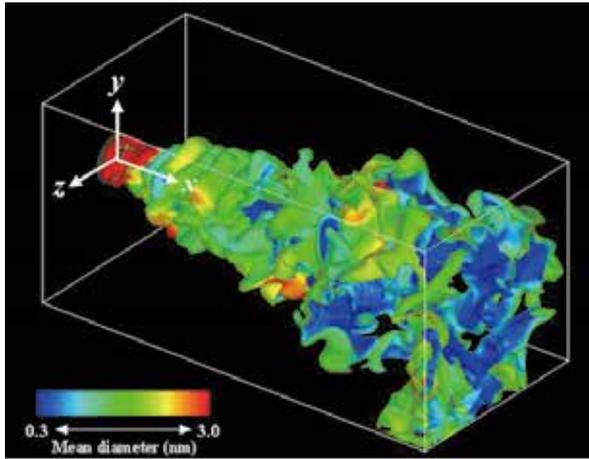
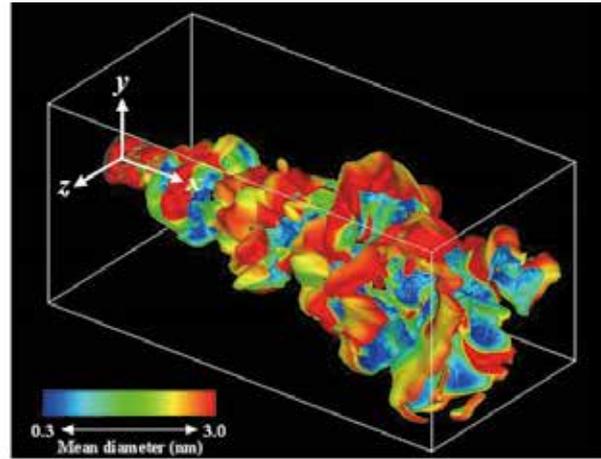


Fig. 3 Time evolutions of axial tip positions of thermal plasma jets.

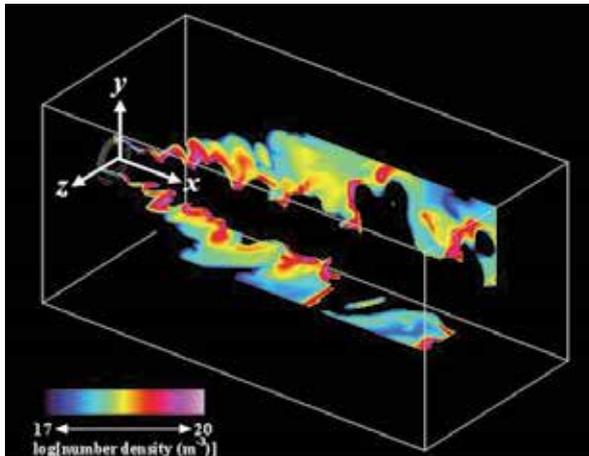


(a) Without magnetic field (0.0 T)

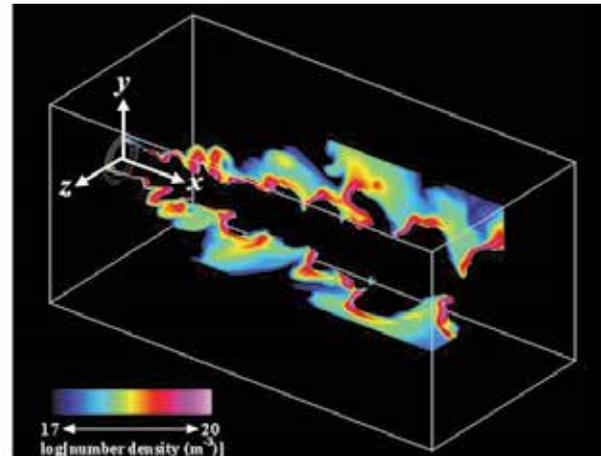


(b) With magnetic field (1.0 T)

Fig. 4 Snapshots of mean diameter distributions of nanopowder on isosurface of particle number density of  $3.2 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$ .

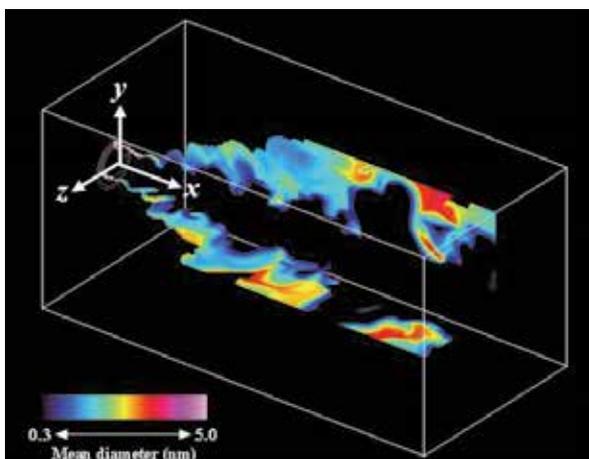


(a) Without magnetic field (0.0 T)

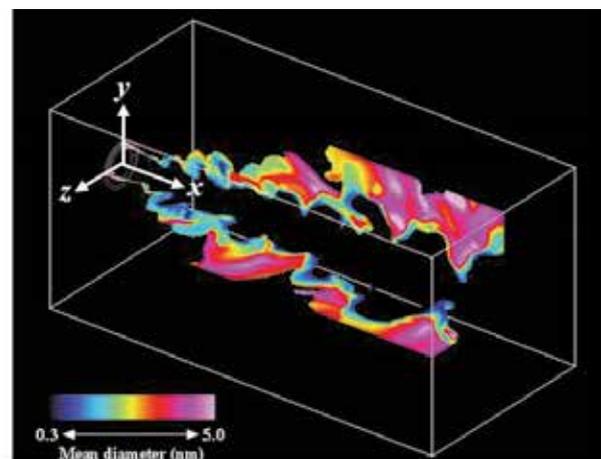


(b) With magnetic field (1.0 T)

Fig. 5 Snapshots of number density distributions of nanopowder on cross-sections of  $y = 0$  ( $z > 0$ ) and  $z = 0$  ( $y > 0$ ).



(a) Without magnetic field (0.0 T)



(b) With magnetic field (1.0 T)

Fig. 6 Snapshots of mean diameter distributions of nanopowder on cross-sections of  $y = 0$  ( $z > 0$ ) and  $z = 0$  ( $y > 0$ ).

図 3 にプラズマジェットのコア領域 (9,000 K 以上の領域) の先端位置の時間変化を示す。コア領域は伸長と分裂を繰り返すが、磁場を印加した場合にはコア領域がより長くなっていることが示されている。この傾向もまた Sato らによる実験観察結果<sup>[2]</sup>と一致している。

図 4 にシリコンナノ粒子群の空間数密度  $3.2 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$  の等値面を示す。色はナノ粒子群の平均粒径を表している。また図 5 および図 6 にそれぞれ対応する空間数密度および平均粒径の 2 次元断面分布 ( $y=0 (z>0), z=0 (y>0)$ ) を示す。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均一核生成および不均一凝縮を経て集団的に生成・成長し、さらに拡散しながら凝集成長するため、境界領域では小さなナノ粒子が多く、外側の領域には少数の大きな粒子が分布し、結果として熱流動場を可視化するトレーサーのように複雑な空間分布を形成することがわかる。磁場を印加すると、乱流拡散が抑制されるために分布はやや細く絞られたような形状になり、平均粒径が増大することも明らかとなった。

## 6. まとめ

アルゴン熱プラズマジェットを用いたシリコンナノ粒子の大量創製プロセスを対象として、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、非定常 3 次元シミュレーションを行った。その際、東北大学サイバーサイエンスセンターの SX-ACE において、メモリ 5,354 GB および MPI 並列による 512 ノードを使用して約 15,300 GFLOPS の数値計算を実現し、条件毎に約 59 時間を要して結果を得た。

本計算により、熱プラズマジェットの内部および周囲の渦構造とナノ粒子群の空間分布が明らかとなった。また外部から軸方向磁場を利用することで、乱流的挙動を抑制し、間接的にナノ粒子群の空間分布および粒子サイズを制御可能であることが示唆された。本研究に関する詳細な記述は文献<sup>[12]</sup>にあるため、そちらも参照されたい。

## 謝辞

本研究は、科学研究費補助金(Grant No. 16K13737)を受け、計算コードの高速化およびデータの可視化にあたり東北大学サイバーサイエンスセンター関係各位よりご協力をいただき、同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。

## 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] Lümnen, 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.
- [5] 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.
- [6] 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.
- [7] Nemchinsky, V.A. and Shigeta, M., "Simple equations to describe aerosol growth," *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 20 (2012), pp. 045017-(11 pages).
- [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] Shigeta, M., “Numerical Study of Axial Magnetic Effects on a Turbulent Thermal Plasma Jet for Nanopowder Production Using 3D Time-Dependent Simulation,” *J. Flow Control, Measurement & Visualization*, 6 (2018), pp. 107-123.
- [13] Pfender, E., Fincke, J., Spores, R., “Entrainment of cold gas into thermal plasma jets,” *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, 11 (1991), pp. 529-543.
- [14] Shigeta, M., “Time-Dependent 3-D Simulation of an Argon RF Inductively Coupled Thermal Plasma,” *Plasma Sources Science and Technology*, 21 (2012), 055029-(14 pages).

[大学 ICT 推進協議会 2018 年度年次大会論文集より]

## 東北大学サイバーサイエンスセンターにおける 高速化推進研究活動の取り組みについて

小野 敏<sup>1)</sup>, 大泉 健治<sup>1)</sup>, 山下 毅<sup>1)</sup>, 齋藤 敦子<sup>1)</sup>, 佐々木 大輔<sup>1)</sup>, 森谷 友映<sup>1)</sup>,江川 隆輔<sup>2,3)</sup>, 滝沢 寛之<sup>2,3)</sup>

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 情報科学研究科

ono@tohoku.ac.jp

### Research Activities to Promote Tuning Program in Cyberscience Center, Tohoku University

Satoshi Ono<sup>1)</sup>, Kenji Oizumi<sup>1)</sup>, Takeshi Yamashita<sup>1)</sup>, Atsuko Saito<sup>1)</sup>, Daisuke Sasaki<sup>1)</sup>, Tomoaki Moriya<sup>1)</sup>, Ryusuke Egawa<sup>2,3)</sup>, Hiroyuki Takizawa<sup>2,3)</sup>

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

2) Cyberscience Center, Tohoku Univ.

3) 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（以下、本センター）は、最新のコンピュータ設備を導入し、大規模シミュレーションの実行環境を整備すると共に、利用者、本センター教員・技術職員、ベンダ技術者が一体となってプログラムの高速化技術および新しいシミュレーション技術に関する研究・開発に取り組み、計算科学・計算機科学の発展に貢献してきた。本稿では、本センターの特徴的な取り組みである高速化推進研究活動について紹介する。

#### 1 はじめに

本センターでは、常に最高・最新鋭の大型計算機を導入し、大規模科学技術計算の要求に答えてきた。現在、本センターの大規模科学計算システムは、主に研究室のワークステーションでは実行できないような大規模シミュレーションに用いられている。2015年2月より運用しているスーパーコンピュータシステムSX-ACE[1]の運用においても、これまでと同様に大規模・長時間シミュレーションの実行を運用の中心として考え、運用環境の構築を行った。

コンピュータのハードウェア技術、ソフトウェア技術の進歩に伴い、コンピュータの機能、および性能は飛躍的に向上してきているが、その潜在的な処理能力を最大限に引き出し、大規模なシミュレーションを実現するためには、コンピュータシステム、およびプログラミング技術に関する高度な専門知識を必要とするのが現

状である。

そこで本センターでは、利用者、本センター教員・技術職員、ベンダ技術者が一体となって利用者アプリケーションの高度化・高速化、並列化に取り組み、高速化支援を行うと共に、その技術的な知見を蓄積し利用者に還元していくことが重要であると考え、高速化推進研究活動を行ってきた。

本稿では、この高速化推進研究活動の取り組みについて紹介する。

#### 2 大規模科学計算システム

高速化推進研究活動の詳細説明に先立ち、本センターの大規模科学計算システムの概要を述べる。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、スカラー型並列コンピュータLX 406Re-2、

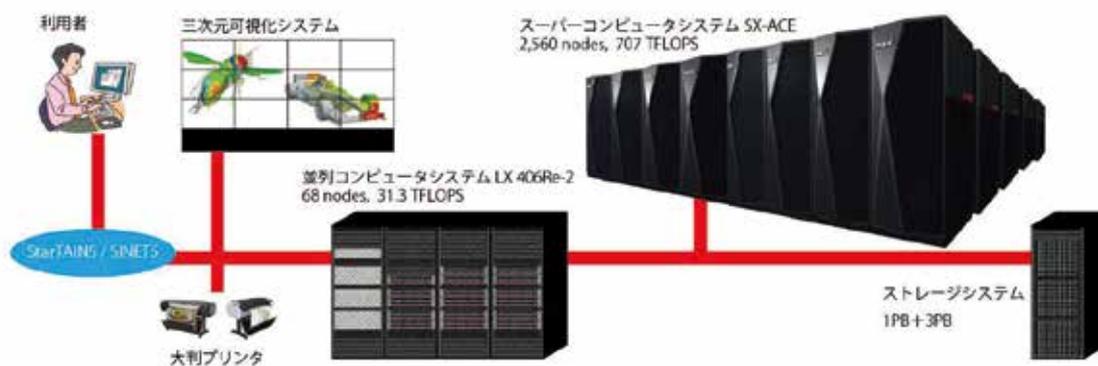


図1 大規模科学計算システム構成図

表1 高速化支援活動実績

	1997	1998	1999	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007
件数	2	9	8	9	10	7	18	20	8	29	10
単体性能向上比	1.9	46.7	4.5	2.5	1.6	2.2	6.7	2.9	1.5	3.1	33.0
並列性能向上比	11.1	18.4	31.7	8.6	4.9	2.8	18.6	4.5	4.1	8.0	1.9
年度	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	
件数	15	8	8	13	6	11	9	6	9	7	
単体性能向上比	9.3	47.0	47.2	16.2	19.7	16.7	10.3	32	19.2	5.9	
並列性能向上比	5.1	3.6	48.5	17.2	15.3	12.9	8.0	5	3	1.2	

ストレージシステム、三次元可視化システム、および大判プリンタから構成される。主力システムはその規模が示すとおり SX-ACE であり、主にユーザが開発した大規模シミュレーションの実行を担っている。一方、SX-ACE には適さないアプリケーションや、汎用・商用のアプリケーションの実行には LX 406Re-2 が活用され、両システムが相補的な役割を担っている。ベクトル型スーパーコンピュータ SX-ACE は 2,560 のノードから構成される。1 つのノードは、理論演算性能 276GFLOPS のベクトルプロセッサ 1 基と 64GB の主記憶容量を有している。各ノードは、ノード間接続装置 (IXS) で高速に相互接続されており、1 ジョブで最大 1,024 ノードを占有する並列処理が可能である。なお、OS は UNIX System V に準拠した SUPER-UX である。スカラ型並列コンピュータ LX 406Re-2 は 68 のノード

から構成される。1 つのノードは理論演算性能 230GFLOPS の Intel Xeon プロセッサ 2 基と 128GB の主記憶容量を有している。なお OS は Linux である。

### 3 高速化推進研究活動

本センターでは 1999 年よりユーザアプリケーションの高度化・高速化、大規模化の支援を目的とした共同研究制度を施行している。利用者、センター教員・技術職員、ベンダ技術者が連携してアプリケーションの高度化・高速化に取り組んでいる。また、本センターでは社会貢献の一環として、サイバーサイエンスセンター共同研究制度の他に、産学連携共同研究に基づく民間企業利用も実施しており、学術分野のみならず産業のイノベーション創出にも貢献している。

さらには全国の情報基盤センター等と連携して JHPCN(学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点)を形成しての学際的な共同利用・共同研究の実施、HPCI(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)への資源提供機関としての活動など近年はその役割を広げ、これらの研究課題を通じて計算科学分野の利用者と共同研究を行い、様々な分野におけるアプリケーションの高度化・高速化、並列化に取り組み高速化推進研究活動を行ってきた。

サイバーサイエンスセンター共同研究は恒常的に年 10 件程度実施されていることに加え、近年 JHPCN、HPCI を介した共同研究課題が増加している。これは、サイバーサイエンスセンター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いるためだと考えられ、継続的な高速化推進研究活動が一定の成果をあげていることがわかる。また、表 1 にこれまで本センターが行ってきた高速化支援の成果を示す。1997 年から 2017 年にかけて 222 件の共同研究に基づくユーザアプリケーションの高度化・高速化に取り組んでおり、単体性能、並列性能ともに大幅な向上を実現している。

このような高速化支援体制のもと、大規模計算利用者との共同研究を実施し、大学の多様な研究分野で活用される様々なシミュレーション計算モデルの大規模化、高精度化、高効率化、並列化に関する研究開発に取り組み、その知見を高速化推進研究活動報告として、2001 年[1]、2003 年[2]、2005 年[3]、2008 年[4]、2011 年[5]、2015 年[6]に出版すると共に本センターweb ページでも広く公開し、日本の大規模科学計算コミュニティにその成果を還元している。

#### 4 SX-ACE におけるユーザアプリケーションの性能改善例

現在運用している SX-ACE 導入後の代表的なユーザアプリケーションの性能改善例を表 2～表 4 に示す。なお、性能向上比は相談を受けた

時点のオリジナルコードに対してのものである。

ユーザアプリケーションの高度化・高速化に取り組み高速化の成果を出すと共に、担当者の技術力強化のため、システムの特徴を有効に活用する高速化の技法に関するノウハウを表 2～表 4 のように年度毎にまとめ蓄積している。

表 2 2015 年度の高速化支援性能向上比

番号	主な改善点	性能向上比	
		単体性能	並列性能
1	作業配列の導入によるベクトル化の促進 ADB ヒット率の改善 未並列ループの MPI による並列化	-	1.8 倍 (64 コア並列)
2	MPI 分割方法の改良によるロードインバランスの改善	-	1.1 倍 (256 コア並列)
3	MPI 転送処理の最適化によるデータ転送量の削減	-	1.4 倍 (32 コア並列)
4	MPI による並列化	-	15.5 倍 (16 コア並列)
5	自動インライン展開によるベクトル化の促進 ループ分割によるベクトル化の促進 ファイルアクセス方法の変更	32 倍	-
6	作業配列の導入によるベクトル化の促進 コンパイラ指示行によるメモリアクセス性能の改善 ファイルアクセス方法の変更	32 倍	-

表 3 2016 年度の高速化支援性能向上比

番号	主な改善点	性能向上比	
		単体性能	並列性能
1	自動インライン展開によるベクトル化の促進 ループ展開によるベクトル化の促進 ループ分割、ループ交換によるベクトル化の促進	45 倍	-
2	自動インライン展開によるベクトル化の促進 ループ分割、ループ交換によるベクトル化の促進	43 倍	-

	コンパイラ指示行によるベクトル化の促進 ファイル出力方法の変更		
3	ストリップマイニングによるメモリアクセス性能の改善	3.3 倍	-
4	ASL ライブラリへの置換 ループ 1 重化とループ融合によるメモリアクセス性能の改善 配列サイズの変更によるメモリバンクコンフリクトの改善	18 倍	-
5	MPI_ISSEND の MPI_ISEND への変更による通信性能の効率化 不必要な MPI_BARRIER の削除	-	1.5 倍 (32 コア並列)
6	作業配列の導入によるベクトル化の促進	3 倍	-
7	リダクション処理 (ALLREDUCE) の最適化 ファイル出力方法の変更	-	3.8 倍 (636 コア並列)
8	多重ループの融合/分割/入れ換えによるベクトル化の促進 IF 文のループ外への移動によるベクトル化の促進 MAX・MIN 関数への置き換え、除算の乗算化、冗長演算の削除による演算の効率化 作業配列の変数化によるメモリアクセス性能の改善 RedBlack 法の間接参照からマスク処理への変更によるメモリアクセス性能の改善 MPI による並列化	3 倍	5.1 倍 (4→16 コア並列)
9	GTHREORDER 指示行の挿入によるリストベクトルアクセスの効率化 MPI_ISSEND の MPI_ISEND への変更による通信性能の効率化	-	1.4 倍 (32 コア並列)

2	配列定義の変更による平均ベクトル長の改善 指示行による再内ループの展開 指示行によるメモリアクセス性能の改善	1.8 倍	-
3	指示行の挿入によるベクトル化の促進 ループブロック化、マスク処理、ループ交換によるベクトル化の促進	10 倍	-
4	計算カーネル部分について、ループブロック化、マスク処理によるベクトル化の促進	1.7 倍	-
5	不要な演算の削減 依存関係解消のための作業配列追加によるベクトル化の促進 MPI 通信性能の改善 ハイブリッド並列の効率化 メモリ使用量の削減	-	約 5000 倍 (512 コア並列・推定値)
6	指示行の挿入による演算効率の改善 指示行の挿入によるメモリアクセス性能の改善	-	1.3 倍 (32 コア並列)
7	複雑な条件分岐の簡略化のためのループ分割によるベクトル化の促進 通信命令の並び替えによる通信性能の改善	10 倍	1.05 倍 (636 コア並列)

表 4 2017 年度の高速度化支援性能向上比

番号	主な改善点	性能向上比	
		単体性能	並列性能
1	グローバルメモリ機能の使用による通信性能の改善 非同期通信への変更による通信性能の改善 演算オーバーラップ機能の使用		1.2 倍 (32 コア並列)

### 5 スーパーコンピュータ SX-ACE のベクトル化・並列化の状況

スーパーコンピュータ SX-ACE システムを導入した 2014 年度から 2017 年度までの各年度における、ベクトル化率および並列化率とノード時間割合との関係を図 2 に示す。SX-ACE を導入した 2014 年度において特徴的なのは、並列化率は 80%以上であるがベクトル化率がほぼ 0%であるジョブのノード時間割合が、15%程度あった点である。これは他のシステムにおいて高度に並列化されているがベクトル化を考慮していないジョブが、SX-ACE で実行されたためであると考えられる。高速化支援によってこのようなジョブのベクトル化が促進されたことにより、翌年の 2015 年度ではベクトル化率および並列化率ともに 80%を超えるジョブのノード時間割合

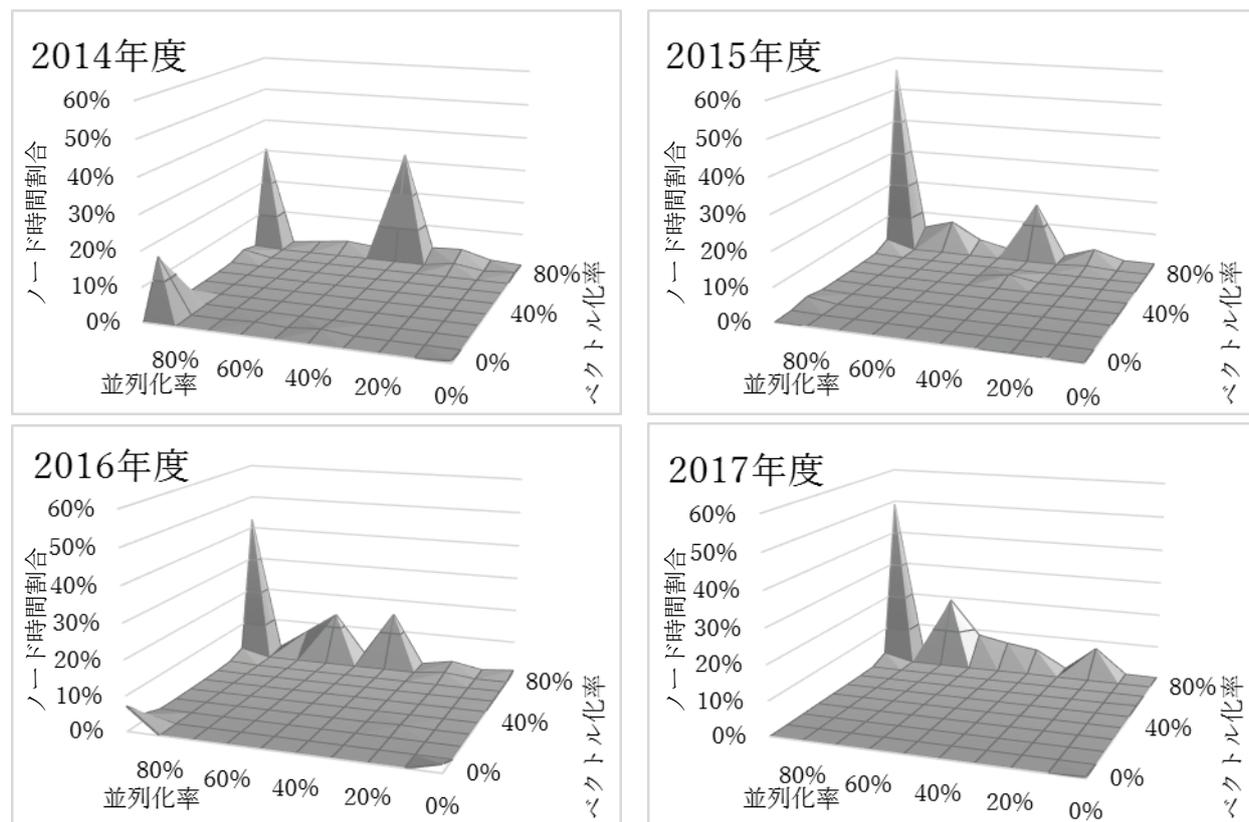


図2 ベクトル化率および並列化率とノード時間割合

は50%を上回った。また、2016年度においては新規利用者が実行したと思われる、ベクトル化率および並列化率ともに10%未満のジョブが見られるが、2017年度ではベクトル化率についてはほぼ80%以上となっている。

## 6 まとめ

本稿では、東北大学サイバーサイエンスセンターにおける高速化推進研究活動への取り組みを紹介し、SX-ACEでの代表的な性能改善例、ベクトル化・並列化の状況を報告した。大規模シミュレーションの実行には高度化・高速化、並列化が不可欠であり、今後も利用者アプリケーションの高速化支援を継続し、その知見を利用者に還元することを推進して行きたいと考える。それとともに、高速化に対する認識を利用者に高めてもらうよう努力していきたい。

## 参考文献

[1] 日本電気株式会社、萩原 孝、浜口 博幸、山信田 恒、スーパーコンピュータ SX-ACE

のハードウェア、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. 48, No. 1, pp. 5-14, 2015.

- [2] 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1号、2001.  
 [3] 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2号、2003.  
 [4] 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3号、2005.  
 [5] 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4号、2008.  
 [6] 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.  
 [7] 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6号、2015.

[大学 ICT 推進協議会 2018 年度年次大会論文集より]

## 『全国洪水氾濫被害額推定のための 2 次元氾濫計算』コードの SX-ACE 向け最適化および MPI 並列化

山下 毅<sup>1)</sup>, 田中 裕夏子<sup>2)</sup>, 江川 隆輔<sup>3,4)</sup>, 滝沢 寛之<sup>3,4)</sup>, 風間 聡<sup>2)</sup>, 多田 毅<sup>5)</sup>

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

5) 防衛大学校 建設環境工学科

yamacta@tohoku.ac.jp

## Performance Optimization and MPI Parallelization of “Nationwide 2D flood simulation for economic damage estimation” code for SX-ACE .

Takeshi Yamashita<sup>1)</sup>, Yukako Tanaka<sup>2)</sup>, Ryusuke Egawa<sup>3,4)</sup>, Hiroyuki Takizawa<sup>3)</sup>  
So Kazama<sup>2)</sup>, Tsuyoshi Tada<sup>5)</sup>

1) Information Infrastructure Division, Information Department, Tohoku University

2) Graduate School of Engineering, Tohoku University

3) Cyberscience Center, Tohoku University

4) Graduate School of Information Sciences, Tohoku University

5) Department of Civil and Environmental Engineering, National Defense Academy

### 概要

東北大学サイバーサイエンスセンターでは大規模科学計算システムの活用と効率的な運用を目的とし、利用者プログラムの高速化支援に取り組んでいる。本稿では、研究室のワークステーション上で開発された『全国洪水氾濫被害額推定のための 2 次元氾濫計算』コードの、ベクトル型スーパーコンピュータ SX-ACE 向け最適化手法、および MPI ライブラリを用いた分散メモリ並列化について報告する。スーパーコンピュータを利用することで従来よりも詳細なモデルを高速に解析することが可能となり、被害額の推定結果の妥当性が向上すると同時に、局地的な現象についても検討することが可能となった。

### 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 の運用を行っている。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の提供を可能としている。表 1 にこれらシステムの諸元を示す。

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と技術職員、および計算機ベンダー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。センターでは共同研究を通じてユーザアプリケーションの高精度化・大規模化をサポートし、JHPCN および HPCI 採択課題へのステップアップを支援している。我々の継続的な高速化支援活動は一定の成果を上げ、またその成果を広く社会に還元している。

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

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	256GB/sec	4.9GB/sec
	ADB / Cache	1MB/コア	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	64GB	128GB
	メモリバンド幅	256GB/sec	9.9GB/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	160TB	8.5TB

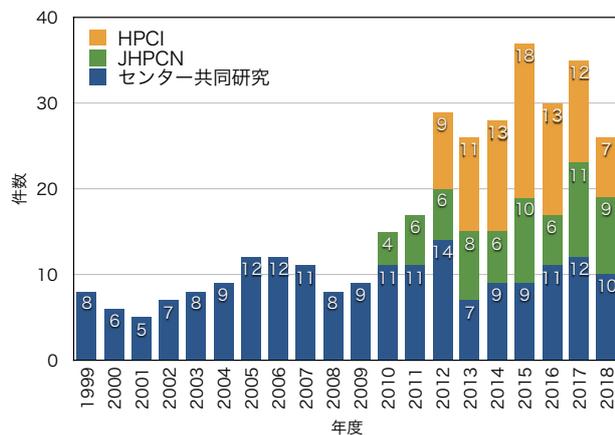


図1 共同研究課題採択数

以下では高速化支援活動の一例として、東北大学工学研究科土木工学専攻の研究グループが開発中の『全国洪水氾濫被害額推定のための2次元氾濫計算』コードの、SX-ACE 向け最適化およびMPI 並列化の事例について報告する。

## 2 アプリケーションの概要

今回 SX-ACE で最適化と MPI ライブラリによる並列化を行ったコード『全国洪水氾濫被害額推定のための2次元氾濫計算』は、FORTRAN77 で記述されたコメント行を含む約 490 行からなり、並列化および特有のシステム向けの最適化は施されていない。

### 2.1 2次元氾濫計算

本コードは図2に示すように、日本全国の洪水氾濫による被害額の分布を定量的に地図の形に示すために、2次元氾濫計算を行うアプリケーションを表現している。全国を詳細なメッシュに分割し、2次元氾濫

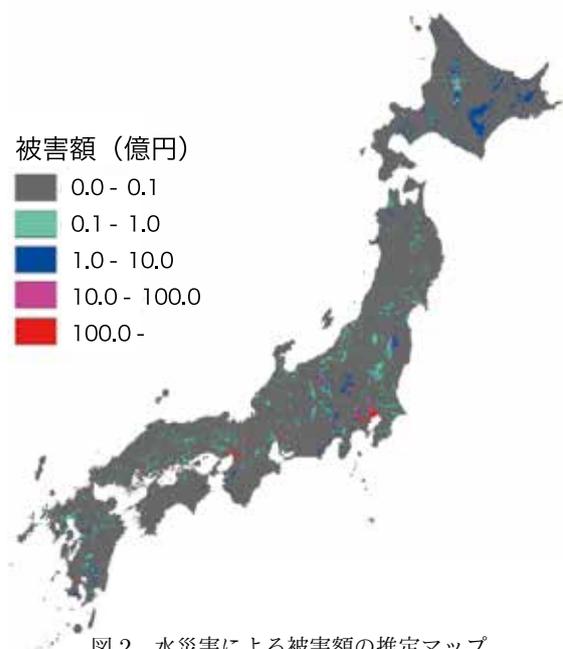


図2 水災害による被害額の推定マップ

計算を行うことで、各メッシュにおける浸水深が求まる。得られた浸水深と土地利用などの情報を組み合わせることによって、各メッシュでの被害額を推定できる [1]。このアプリケーションにより、将来気候や複合災害下における経済被害額を推定し [2]、優先的に投資すべき地域の抽出や地域に即した治水方法の検討が可能となる。

### 2.2 コード概要

氾濫流の計算を実施する際、対象領域を  $IG \times JG$  個のメッシュに分割し、有限差分法を用いて2次元不定流問題を解く。パラメータ  $IG, JG$  は解析の空間解像度を規定するパラメータであり、堤防等の微地形の影響を計算結果に反映させるためには、これらのパ

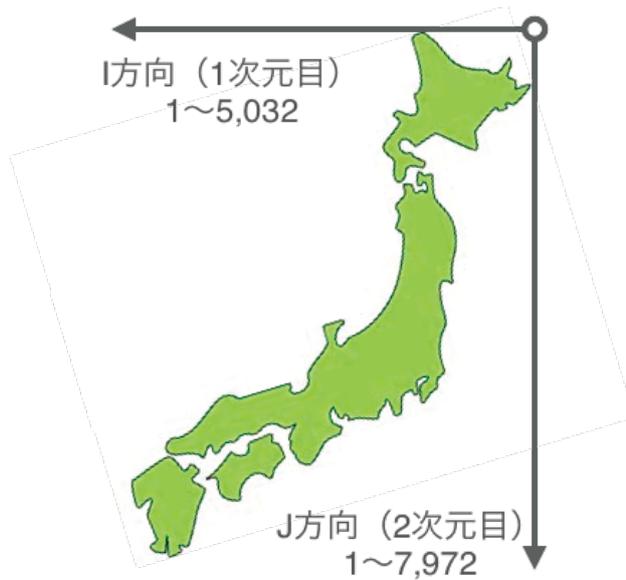


図3 計算対象領域

ラメータをより大きくとる必要がある。時間進行には4段ルンゲクッタ法を採用する。時間刻みDTはIG, JGに依存し、これらの値を大きくとるほど、DTに小さな値を用いる必要がある。以上より、総メッシュ数と時間刻みの両方の影響で、より詳細な結果を得るためにメッシュサイズを小さくすると、その3乗のオーダーで計算時間は増加し、より大容量のメモリと計算時間の短縮が必要となる。

本コードのモデルサイズは日本全土を対象とした計算領域IG=5,032, JG=7,972であり、250m×250mのメッシュサイズに相当する。ステップ数は観測期間4日分に相当する1,382,400ステップの演算を行う。計算領域の概略を図3に示す。諸島は省略している。

研究室のサーバ (Intel<sup>®</sup> Core<sup>™</sup> i7-6700) では日本全土の計算に約32日間を要する。また計算領域を4分割 (北海道、本州、四国、九州) して演算することが可能で、北海道を対象とした場合は約12日間を要する。

本研究においては、初期条件および浸水に関する複数のパラメータを変化させて解析する必要があるため、演算時間の短縮が必要であり、システムへの最適化とマルチノード実行を行うための分散メモリ並列化が要求される。

### 2.3 初期コードの演算時間調査

SX-ACE および LX406Re-2 で初期コードを実行したときの演算時間を表2に示す。SX-ACE 向けにはFORTRAN90/SX (Rev.534)、LX 406Re-2 向けにはIntel Fortran コンパイラ (17.0.4) をそれぞれ使用した。最適化オプションは使用していない。測定時間短

表2 初期コードの演算時間比較 (対象: 北海道)

計算機	並列化	演算コア数	演算時間 [sec]
SX-ACE	なし	1	3,395
SX-ACE	自動並列	4	2,515
LX406Re-2	なし	1	7,984
LX406Re-2	自動並列	24	7,969

縮のために、対象とする計算領域は北海道とし、観測期間が1時間分に相当する14,400ステップとした。コンパイラの自動並列化機能を使用し、ノード内での並列実行についても測定を行った。

1コアあたりの演算性能はSX-ACEはLX406Re-2の約3.6倍の性能比であるが、演算時間比は約1/2.4倍であり、SX-ACEのベクトル最適化が不十分であると推察される。また、コンパイラの自動並列化機能を用いた並列実行では並列コア数に応じた性能向上は得られておらず、MPIライブラリによる並列化が必要であると判断される。

## 3 SX-ACE 向け最適化と性能比較

### 3.1 簡易性能解析機能によるコスト調査

SX-ACEでは、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) 機能を利用した演算時間のコスト分析が可能である。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。初期コードのFTRACE情報を表3に示す。

主要な演算を行うサブルーチン flood100 の演算割合はほぼ100%であるが、このサブルーチンのベクトル化率 (V.OP RATIO) が97.83と低く、改善が必要である事が分かる。

### 3.2 ベクトル化の促進による高速化

FORTRAN90/SXではコンパイラが行ったベクトル化などの最適化に関する情報をソースコードの左側に付記し、編集リスト (ソースコード名.L) として出力する機能がある。この機能を利用して詳細なベクトル化診断メッセージを出力するために、コンパイルオプションとして-R5 -Wf,-pvctl fullmsgを指定した。図4に初期コードの編集リストの一部を示す。なお、282行目のIF文は対象とする計算領域を選択するもので、T.ISLには北海道の領域が指定されている。

278行目のインデックスIを持つDOループにベクトル化された記号“V”が付加されているが、280行目から294行目にかけてベクトル処理が不可であること

```

(編集リストの抜粋)
277: |V----->      DO J=J1,J2
278: |V----->      DO I=I1(J),I2(J)
279: |||
280: |||      AS      IF(X(I,J).LT. 0.5 .OR. X(I+1,J) .LT. 0.5
281: |||      S      &      .OR. X(I,J+1) .LT. 0.5) THEN
282: |||      S      IF(Is1(I,J).EQ.T_ISL .OR. Is1(I+1,J) .EQ. T_ISL (計算領域を限定：北海道)
283: |||      S      &      .OR. Is1(I,J+1) .EQ. T_ISL ) THEN
284: |||      S      OUTMN=0.0
285: |||      S      IF(M(I-1,J) .LT. 0.0) OUTMN=OUTMN-M(I-1,J)
286: |||      S      IF(M(I,J) .GT. 0.0) OUTMN=OUTMN+M(I,J)
287: |||      S      IF(N(I,J-1) .LT. 0.0) OUTMN=OUTMN-N(I,J-1)
288: |||      S      IF(N(I,J) .GT. 0.0) OUTMN=OUTMN+N(I,J)
289: |||      S      OUTD=OUTMN*DT/DX/GV(I,J)
290: |||      S      IF(OUTD .GT. D(I,J)) THEN
291: |||      S      IF(M(I-1,J) .LT. 0.0) M(I-1,J)=M(I-1,J)*D(I,J)/OUTD
292: |||      S      IF(M(I,J) .GT. 0.0) M(I,J)=M(I,J)*D(I,J)/OUTD
293: |||      S      IF(N(I,J-1) .LT. 0.0) N(I,J-1)=N(I,J-1)*D(I,J)/OUTD
294: |||      S      IF(N(I,J) .GT. 0.0) N(I,J)=N(I,J)*D(I,J)/OUTD
295: |||      S      ENDDIF
296: |||      S      ENDDIF
297: |||      S      ENDDIF
298: |||      S      ENDDO
299: |V----->      ENDDO

```

(コンパイル時最適化メッセージの抜粋)

277 vec ( 2): ループの一部をベクトル化する。  
278 vec ( 2): ループの一部をベクトル化する。  
285 opt (1037): 異なる繰り返しで同一の配列要素を定義/参照している。  
287 opt (1036): 異なる繰り返しで定義された値を参照している可能性がある。(nosync/nodepを指定すれば最適化を行う)  
291 vec ( 20): mにベクトル化不可の依存関係がある。  
292 vec ( 20): nにベクトル化不可の依存関係がある。

図4 初期コード

```

(編集リストの抜粋)
60:      REAL*8 OUTD_(IG,JG)
(省略)
322: |V----->      DO J=J1,J2
323: |V----->      DO I=I1(J),I2(J)
324: |||      A      IF(X(I,J).LT. 0.5 .OR. X(I+1,J) .LT. 0.5
325: |||      S      &      .OR. X(I,J+1) .LT. 0.5) THEN
326: |||      A      IF(Is1(I,J).EQ.T_ISL .OR. Is1(I+1,J) .EQ. T_ISL (計算領域を限定：北海道)
327: |||      S      &      .OR. Is1(I,J+1) .EQ. T_ISL ) THEN
328: |||      S
329: |||      S      OUTMN=0.0
330: |||      A      IF(M(I-1,J) .LT. 0.0) OUTMN=OUTMN-M(I-1,J)
331: |||      A      IF(M(I ,J) .GT. 0.0) OUTMN=OUTMN+M(I ,J)
332: |||      A      IF(N(I ,J-1) .LT. 0.0) OUTMN=OUTMN-N(I ,J-1)
333: |||      A      IF(N(I ,J) .GT. 0.0) OUTMN=OUTMN+N(I ,J)
334: |||      S
335: |||      A      OUTD_(I,J)=OUTMN*DT/DX/GV(I,J)
336: |||      S
337: |||      S      ENDDIF
338: |||      S      ENDDIF
339: |||      S      ENDDO
340: |V----->      ENDDO
344: |V----->      DO J=J1,J2
345: |V----->      DO I=I1(J),I2(J)
346: |||      A      IF(X(I,J).LT. 0.5 .OR. X(I+1,J) .LT. 0.5
347: |||      S      &      .OR. X(I,J+1) .LT. 0.5) THEN
348: |||      A      IF(Is1(I,J).EQ.T_ISL .OR. Is1(I+1,J) .EQ. T_ISL (計算領域を限定：北海道)
349: |||      S      &      .OR. Is1(I,J+1) .EQ. T_ISL ) THEN
350: |||      S
351: |||      A      IF(OUTD_(I,J) .GT. D(I,J)) THEN
352: |||      S      OUTD=D(I,J)/OUTD_(I,J)
353: |||      A      IF(M(I ,J) .GT. 0.0) M(I ,J)=M(I ,J)*OUTD
354: |||      A      IF(M(I-1,J) .LT. 0.0) M(I-1,J)=M(I-1,J)*OUTD
355: |||      A      IF(N(I ,J-1) .LT. 0.0) N(I ,J-1)=N(I ,J-1)*OUTD
356: |||      A      IF(N(I ,J) .GT. 0.0) N(I ,J)=N(I ,J)*OUTD
357: |||      S      ENDDIF
358: |||      S
359: |||      S      ENDDIF
360: |||      S      ENDDIF
361: |||      S      ENDDO
362: |V----->      ENDDO

```

(コンパイル時最適化メッセージの抜粋)

322 vec ( 1): ループ全体をベクトル化する。  
323 vec ( 1): ループ全体をベクトル化する。  
344 vec ( 1): ループ全体をベクトル化する。  
345 vec ( 1): ループ全体をベクトル化する。

図5 ベクトル化後コード

表 3 初期コードの FTRACE 情報

【初期コード】													
PROC.NAME	FREQUENCY	EXCLUSIVE TIME[sec]( % )	AVER.TIME [msec]	MOPS	MFLOPS	V.OP RATIO	AVER. V. LEN	VECTOR TIME	I-CACHE MISS	O-CACHE MISS	BANK CPU	CONFLICT PORT	ADB HIT ELEM.%
flood100	1	3395.271(100.0)	3395270.83	14618.1	6206.6	97.83	198.2	1665.816	0.022	163.245	27.664	229.810	53.30
init	1	0.134( 0.0)	134.439	29316.9	3580.7	99.75	255.9	0.134	0.000	0.000	0.004	0.004	0.01
output	3	0.000( 0.0)	0.064	160.2	0.0	1.92	74.0	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.00
total	5	3395.405(100.0)	679081.09	14618.7	6206.5	97.83	198.2	1665.950	0.023	163.245	27.668	229.814	53.29

表 4 ベクトル化後コードの FTRACE 情報

【ベクトル化後コード】													
PROC.NAME	FREQUENCY	EXCLUSIVE TIME[sec]( % )	AVER.TIME [msec]	MOPS	MFLOPS	V.OP RATIO	AVER. V. LEN	VECTOR TIME	I-CACHE MISS	O-CACHE MISS	BANK CPU	CONFLICT PORT	ADB HIT ELEM.%
flood100	1	1850.736(100.0)	1850736.14	27222.3	11498.7	99.53	198.6	1706.915	0.013	0.211	26.722	243.202	52.91
init	1	0.135( 0.0)	134.952	29205.6	3567.1	99.75	255.9	0.135	0.000	0.000	0.006	0.005	0.01
output	3	0.000( 0.0)	0.065	158.2	0.0	1.92	74.0	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.00
total	5	1850.871(100.0)	370174.25	27222.5	11498.2	99.53	198.6	1707.049	0.014	0.211	26.729	243.207	52.91

表 5 IF 文消去後コードの FTRACE 情報

【IF文消去後コード】													
PROC.NAME	FREQUENCY	EXCLUSIVE TIME[sec]( % )	AVER.TIME [msec]	MOPS	MFLOPS	V.OP RATIO	AVER. V. LEN	VECTOR TIME	I-CACHE MISS	O-CACHE MISS	BANK CPU	CONFLICT PORT	ADB HIT ELEM.%
flood100	1	9946.668(100.0)	9946668.215	27367.2	12425.3	99.60	202.2	9232.460	0.225	0.547	327.191	932.144	55.50
init	1	0.273( 0.0)	273.275	29229.4	1762.1	99.44	255.9	0.273	0.000	0.000	0.031	0.014	0.00
output	3	0.116( 0.0)	38.760	26325.1	1.0	98.29	256.0	0.116	0.000	0.000	0.006	0.019	0.00
total	5	9947.058(100.0)	1989411.554	27367.2	12424.9	99.60	202.2	9232.849	0.225	0.547	327.227	932.178	55.50

表 6 性能比較（初期コード、ベクトル化の対象：北海道 IF 文消去後コードの対象：日本全土）

	演算時間 [sec]	演算性能 [GFlops]	実行効率 [%]	平均ベクトル化率 [%]	平均ベクトル長
初期コード	3,395	6.21	9.0	97.83	198.2
ベクトル化後コード	1,850	11.50	16.7	99.53	198.6
IF 文消去後コード	9,947	12.42	18.0	99.60	202.2

を示す記号“S”が付加されている。最適化メッセージから 291 行目および 292 行目の処理に依存関係があるため、DO ループ全体のベクトル化が不可となっていることが分かる。

該当箇所のベクトル化を促進するために、1. 依存関係のある演算順序の変更、2. ループ分割と作業配列の導入、を行った。図 5 にベクトル化後コードの編集リストの一部を示す。

依存関係によりベクトル化が不可であった、291 行目の演算を後に、292 行目の演算を前に行うように演算順序を変更（それぞれ 354 行目と 353 行目に）した。次に、ループ分割を行うことで DO ループ中の IF 文による条件分岐の個数を減らし、コンパイラがベクトル化の判断を行うことが可能となった。ループ分割を行うために後半の DO ループで必要な演算結果を前半の DO ループで保存するための作業配列 OUTD\_を導入した。

### 3.3 IF 文の消去による高速化

SX-ACE では DO ループ中の IF 文については、真偽に基づいてベクトルマスクを作成し、演算については本来の IF 文の真偽にかかわらず演算を行う。DO ループの演算終了後に IF 文を考慮したベクトルマスクにより、IF が真となる演算結果のみをストアすることでベクトル化を可能としている。このことから、図 5 において DO ループ中で対象とする計算領域を指定する IF 文（326 行目および 348 行目）を消去する、すなわち日本全土を対象として演算することで実効性能の改善が期待できる。

### 3.4 性能比較

ベクトル化後コードの FTRACE 情報を表 4 に、対象とする計算領域を指定する IF 文を消去し、日本全土について演算を行ったときの FTRACE 情報を表 5 に示す。また、初期コード、ベクトル化後コードおよび IF 文消去後のコードの性能比較を表 6 に示す。

初期コードでは平均ベクトル化率が 97.83% であっ

たが、ループ分割と演算順序の変更によるベクトル化により99.53%に向上した。また、演算領域を限定するIF文を消去したことで、対象範囲が北海道から日本全土になったために演算時間は増加しているが、実行効率は16.7%から18.0%に向上したことから、日本全土をシミュレーションする場合にはIF文消去後のコードの方が高速であることが分かる。初期コードに対する性能向上比は演算性能値の比較より、それぞれ1.8倍、2.0倍を達成することができた。

## 4 MPIライブラリによる並列化

### 4.1 並列化方針

次に、ベクトル化およびIF文を消去した最適化コードのMPIライブラリによる並列化を行った。分割方向は図3に示したJ方向について1次元分割を行い、各プロセスで分割された領域について演算を行った後に、袖領域のデータ通信を行う。データ通信にはMPISENDRECVを使用した。演算結果は代表プロセスに各プロセスからMPIGATHERVを用いて受信し、バイナリ形式のファイルとして書き出しを行う。

### 4.2 並列化コードの演算時間比較

MPIライブラリによる並列化を行ったコードを実行した結果を表7に示す。

SX-ACEにおいては、128コアを用いた並列実行は逐次実行と比較して演算時間比で約78倍の性能向上が得られた。並列コア数に対する並列性能は理想値の68%程度であるので、通信部分の最適化などによりさらなる性能向上を試みる予定である。

またLX406Re-2において120コアを用いた並列実行は逐次実行と比較して、約73倍の性能向上がみられた。SX-ACE(128コア)とLX406Re-2(120コア)の理論演算性能比は約3.8倍であるが、演算時間比では約5.8倍と、SX-ACEの実効性能の高さが示された。

演算時間計測は観測期間が1時間分に相当する14,400ステップで行ったので、観測期間4日分に相当する1,382,400ステップの演算を行う場合の演算時間は、SX-ACE(128コア)においては約3.4時間と推定される。

## 5 まとめ

本稿では『全国洪水氾濫被害額推定のための2次元氾濫計算』コードのSX-ACE向け最適化およびMPI並列化の事例について述べた。

今回実施したベクトル化およびIF文を消去する最適化により、SX-ACEにおいて約9%であった実行効

表7 並列化コードの演算時間比較(対象:日本全土)

計算機	並列化	演算コア数	演算時間 [sec]
SX-ACE	なし	1	9,946
SX-ACE	Flat MPI	128(32ノード)	128
LX406Re-2	なし	1	53,901
LX406Re-2	Flat MPI	120(6ノード)	739

率を約18%まで高速化することができた。また、MPIライブラリによる並列化により128コアを用いた並列実行では、逐次実行の約78倍の性能向上が得られた。

従来の研究におけるグリッドセルサイズは約1km×1kmであったが、この解像度では、河川ごとに異なる治水施設の整備状況などを十分に反映することができなかった。今回、約250m×250mの解像度が実用的な時間で実行できるようになったことで、被害額の推定結果の妥当性が向上すると同時に、局地的な現象についても検討することが可能となった。

計算速度の向上により様々な条件での計算を多数実行することが容易となったことから、今後は降水量の増加や海面上昇など地球温暖化による影響を考慮した解析[3]、洪水に加え高潮や斜面崩壊、沿岸浸食などによる複合災害のリスクの検討[4]を高解像度で実施する予定である。

今後はMPI通信の最適化などについて高速化を行い、利用者の研究活動の加速を支援する予定である。

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] 国土交通省河川局:治水経済調査マニュアル(案), 2005.
- [2] 手塚翔也, 小野桂介, 風間聡, 小森大輔:極値降雨, 流出量に基づく洪水被害推定およびその将来変化, 土木学会論文集, Vol.70, No.4, pp.1501-1506, 2014.
- [3] 町田宗一郎, 川越清樹, 風間聡, 沢本正樹, 横木裕宗, 安原一哉, 地球温暖化に伴う全国の浸水被害額評価, 地球環境シンポジウム講演論文集, vol.15, pp.155-160, 2007.
- [4] 秋間将宏, 風間聡, 峠嘉哉, 小森大輔, 川越清樹, 多田毅, 年最小気圧を用いた複合水災害潜在被害額の将来推定, 土木学会論文集 B1(水工学), Vol.73, No.4, I.139-I.144, 2017.

[大学 ICT 推進協議会 2018 年度年次大会論文集より]

## 東北大学における教職員を対象とした情報セキュリティ教育

小野崎 伸久<sup>1)</sup>, 曾根 秀昭<sup>2)</sup>, 水木 敬明<sup>2)</sup>

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

i-security@grp.tohoku.ac.jp

### Information Security Training for Staff in Tohoku University

Nobuhisa Onozaki<sup>1)</sup>, Hideaki Sone<sup>2)</sup>, Takaaki Mizuki<sup>2)</sup>

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

2) Cyberscience Center, Tohoku Univ.

#### 概要

東北大学では、平成 29 年度から全教職員を対象にした情報セキュリティ教育を e ラーニング形式で実施しているが、本学の情報セキュリティポリシー及び情報システム利用環境の実態に合わせた教育コンテンツを提供するため、これを内製で作成している。本稿では、この取組みについて紹介する。

#### 1 はじめに

本学では、平成 29 年 3 月に策定した情報セキュリティ対策基本計画をもとに、平成 29 年度から全教職員約 12,000 人を対象にした情報セキュリティ教育を e ラーニング形式で年 1 回実施している。このような情報セキュリティ教育の実施にあたっては、自組織の情報セキュリティポリシー及び情報システム利用環境の実態に合わせて、非現実的な理想論に終始せず、きちんと実践できる内容の教育コンテンツを作成することが重要であると考え、内製で取り組んでいる。

本稿では、この情報セキュリティ教育の取組みについて紹介する。

#### 2 情報セキュリティ教育の概要

##### 2.1 教育コンテンツの構成

教育コンテンツは、動画教材及び理解度確認テストの 2 つである。各コンテンツは日本語版と英語版を作成している。

受講者は動画教材を視聴し、理解度確認テストに合格することで受講完了となる。なお、理解度確認テストは 10 問中 8 問以上の正答で合格となることとした。

##### 2.2 動画教材の作成方法

動画教材は、Microsoft 社の PowerPoint を使用してスライドを作成し、アニメーションや画面切

り替えをクリック操作ではなく自動的に行われるように設定したうえで、エクスポート機能を用いてビデオ形式(mp4)に変換した。また、動画に流す音声は、音声合成ソフトで作成したデータをスライドに挿入し、アニメーションと同じように自動的に再生されるようにした。

##### 2.3 e ラーニング基盤

情報セキュリティ教育のコンテンツ配信と理解度確認テストの実施には、本学の教員向けに提供されている e ラーニング基盤である東北大学インターネットスクール (ISTU) を使用した。

#### 3 教育コンテンツの内製

##### 3.1 平成 29 年度の教育コンテンツ

平成 29 年度では、本学として初の試みであるため、情報セキュリティ関連機関の公開情報及び本学の事前アンケートをもとに教育コンテンツを検討した。

IPA の情報セキュリティ 10 大脅威 2016 [1]によると、この 10 年、様々な脅威が現れ、攻撃者の手口は年々巧妙になってきているが、攻撃の糸口はあまり変わっておらず、表 1 に示す「情報セキュリティ対策の基本」による効果は多いに期待できるとのことであるため、これを動画教材に取り入れることにした。また、事前アンケートによると、OS・ソフトウェアのアップデート状況、セキュリティ対策ソフトのインストール状況及び定時ス

キャンの実施状況、パスワードの設定状況が不十分であることがわかったため、原点に立ち返って、これらの対策の必要性や設定方法などを動画教材に取り入れることにした。その他、当時の情報セキュリティの動向・情勢を踏まえて、表2に示す内容に絞り込んだ。

理解度確認テストについては、どの程度の難易度が適切であるか判断できず、手探りの状態であったため、ひとまずは情報セキュリティの初級者に照準を合わせることにし、表3の通りに作成した。

このようにして作成した動画教材及び理解度確認テストについては、本学の情報セキュリティポリシー等を検討する「情報セキュリティWG(ワーキンググループ)」において審議を行った。

表1 情報セキュリティ対策の基本

攻撃の糸口	情報セキュリティ対策の基本
ソフトウェアの脆弱性	ソフトウェアの更新
ウイルス感染	ウイルス対策ソフトの導入
パスワード窃取	パスワード管理・認証の強化
設定不備	設定の見直し
誘導(畏にはめる)	脅威・手口を知る

表2 平成29年度動画教材

No.	内容
1	最近の動向
2	今回の範囲
3	情報セキュリティ対策 <ul style="list-style-type: none"> <li>・ソフトウェアを最新に保つ</li> <li>・セキュリティ対策ソフト</li> <li>・パスワードの取扱い</li> <li>・騙されないために手口を知る</li> <li>・持ち出し時の対策</li> <li>・インシデント発生時の初動対応</li> </ul>

表3 平成29年度理解度確認テスト(抜粋)

No.	設問・選択肢
2	情報セキュリティ対策は、ウイルス感染のような特殊な技術を駆使したサイバー攻撃だけでなく、人的ミス(メール誤送信、設定ミス、盗難、紛失)についても対策が必要である。

	<ul style="list-style-type: none"> <li>● 正しい</li> <li>○ 正しくない</li> </ul>
4	Windows Update は時間がかかるうえに、パソコンの動作が遅くなるので、業務の繁忙期が終わるまでは行わない。 <ul style="list-style-type: none"> <li>○ 正しい</li> <li>● 正しくない</li> </ul>
5	セキュリティ対策ソフトをインストールすれば安全なので、定期的なフルスキャンは不要である。 <ul style="list-style-type: none"> <li>○ 正しい</li> <li>● 正しくない</li> </ul>
8	普段使用しているパソコンを持ち出すことになった際の対処として、推奨されないものはどれか。 <ul style="list-style-type: none"> <li>○ 事前に、個人情報や機密情報を含むデータを持っていないことを確認した。</li> <li>○ パソコンのログオンパスワードをかけた。</li> <li>○ パソコンのハードディスクを暗号化した。</li> <li>● 出先で困らないように、パスワードのメモをパソコンに貼りつけた。</li> </ul>

### 3.2 平成30年度の教育コンテンツ

平成30年度では、前回の事後アンケートをもとに教育コンテンツを検討した。

動画教材は以下の通りに内容を検討し、表4の通りに作成した。

- ① 本学や他大学のインシデント事例を踏まえて対策例を紹介してほしいという要望を取り入れた。
- ② 前回の内容を復習するため、ダイジェスト版としてブラッシュアップして再度取り扱うことにした。
- ③ クラウドサービス利用時の対策及びソーシャルメディアによる情報発信時の対策に関する要望を取り入れた。
- ④ NII-SOCSの要確認情報の調査時によく見かけられる事例を踏まえて、研究室における私物の持ち込みPC、ルータの設定、及びバックアップについて、取り扱うことにした。
- ⑤ 別途要望があり、情報セキュリティの範囲外ではあるが、情報資産の適切な利用として利用目的の遵守並びに著作権の尊重について、取り扱うことにした。

- ⑥ 前回の動画教材は約 23 分であったが、長すぎて受講の負担が大きいとの意見が寄せられたため、約 13 分に短縮した。この短縮によって、説明が不十分になってしまった部分は、ウェブサイト に 詳細を掲載し、必要に応じて参照できるようにして補った。
- ⑦ 教職員向けの e ラーニングが他にも複数あり、受講者の負担が大きいとの意見を考慮して、各教育の実施時期を合わせ、個人情報保護に関する教育とは合同で実施することにした。

確認テストについては、動画教材を視聴しなくても正答できるほど問題が易しすぎるという意見が多かったため、動画教材を視聴していないと容易に正答できないようにレベルを見直し、表 5 の通りに作成した。

このようにして作成した教育コンテンツについて、今回も情報セキュリティWGで審議した。

表 4 平成 30 年度動画教材

No.	内容
1	はじめに ・ CISO のメッセージ ・ 詳細はウェブサイト
2	情報セキュリティインシデントの事例 ・ 富山大学 ・ 大阪大学 ・ 東北大学
3	基本的な情報セキュリティ対策 ・ ソフトウェアを最新に保つ ・ セキュリティ対策ソフト ・ パスワードの取扱い ・ 騙されないために手口を知る ・ 持ち出し時の対策 ・ インシデント発生時の初動対応
4	クラウドサービス利用時の対策 ・ クラウドサービスとは ・ 主な対策 ・ 心構え ・ アカウント管理 ・ 公開範囲
5	ソーシャルメディアによる情報発信時の対策 ・ ソーシャルメディアの特性を理解する ・ 慎重に取り扱う
6	情報資産の適切な利用

	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 利用目的を遵守する</li> <li>・ 著作権侵害行為を行わない</li> </ul>
7	研究室での対策 <ul style="list-style-type: none"> <li>・ 私物の持ち込み P C</li> <li>・ ルータ</li> <li>・ バックアップ</li> </ul>

表 5 平成 30 年度理解度確認テスト (抜粋)

No.	設問・選択肢
3	クラウドサービスとは、ネットワーク経由で、他人のコンピュータにデータを渡して各種サービスを受けることです。ストレージ、翻訳、PDF 編集、日程調整など、様々なサービスがあります。 そこで、クラウドサービス利用時の対策として、適切なものを全て選択してください。 <ul style="list-style-type: none"> <li>■ 無名だけれども便利そうな翻訳サービスを見つけたが、2015 年 2 月に翻訳サービスに入力した文章がネット上にそのまま公開されていた事例があり、万が一の可能性があるので、利用しないことにした。</li> <li>■ 無料で PDF 編集が行えるサービスを見つけたが、万が一の可能性があるので、個人情報や機密情報を含むファイルを編集しないようにした。</li> <li>■ 日程調整サービスは便利だが、万が一の可能性があるので、氏名や会議内容は書き込まないようにした。</li> <li>□ アカウントのセキュリティオプション (ログイン通知、二段階認証など) が提供されていたが、面倒なので使用しなかった。</li> </ul>
4	ソーシャルメディアによる情報発信では、その特性を理解し、慎重に取り扱うことが重要です。それは組織の公式アカウントのみならず、個人アカウントであっても同様です。それでは、ソーシャルメディアによる情報発信時の対策として、適切なものを全て選択してください。 <ul style="list-style-type: none"> <li>■ 発信した情報は、誰にもコントロールできず、完全に削除できないので、常に慎重に吟味し、責任もてる内容を発信する。</li> <li>■ 匿名のつもりでも、個人を特定されてしまうことがあるので、常に慎重に吟味し、</li> </ul>

	<p>責任のもてる内容を発信する。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ 「東北大学ではなく個人としての発言」と明記していても、社会的問題になれば東北大学の信用を損ねることがあるので、法令を遵守し、他者の人格を尊重する。</li> <li>□ 職務上知り得た個人情報を発信する。</li> </ul>	<p>OS・ソフトウェアが最新版にアップデートしていること、本学が提供するセキュリティ対策ソフトでフルスキャンしていること、海賊版ソフト等の不正ソフトがインストールされていないことを確認する。また、初回だけでなく定期的に確認する。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ ルータは接続機器のログを保存するように設定する。</li> <li>■ 研究データは定期的にバックアップをとる。</li> <li>□ USB型の外付けハードディスクをパソコンデータのバックアップとして使用する場合は、パソコンに常時接続したままにする。</li> </ul>
5	<p>東北大学のネットワークに接続する場合は、例え私物の機器であっても、利用目的を遵守しなければなりません。</p> <p>それでは、不適切な行為を全て選択してください。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ 私的なインターネットゲーム</li> <li>□ 学会出張のための旅行サイトの閲覧</li> <li>□ 研究室の備品購入のためのショッピングサイトの閲覧</li> <li>■ ビットコイン等の仮想通貨の採掘（マイニング）</li> </ul>	
6	<p>知の創造体として社会に貢献してきた東北大学が著作権を尊重しないことは、大学の存在を否定することと同じです。著作権侵害行為を行った場合は、本人に加えて、法人も責任を負うこととなります。</p> <p>それでは、著作権侵害行為にあたるものを全て選択してください。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ 研究・教育などの業務に必要なソフトウェアが高価だったため、海賊版ソフトウェアを入手し、パソコンにインストールして使用した。(海賊版とは、著作権者の許諾を受けずに複製された著作物のこと)</li> <li>■ ソフトウェアの購入を申請したところ、予算の都合で数を減らされたが、「それでも業務上必要だから」「どうせチェックしないだろう」と考え、ソフトウェアを必要台数分インストールした。</li> <li>■ 漫画の切り抜きをスキャナーで取り込みPDFファイルにしてインターネットで公開した。</li> <li>□ 国内の大手家電量販店などの正規販売店で購入したビジネスソフトウェアをインストールして使用した。</li> </ul>	
7	<p>研究室での情報セキュリティ対策として、適切なものを全て選択してください。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ 研究室に持ち込まれた私物パソコンは、</li> </ul>	

#### 4 おわりに

本稿では、情報セキュリティ教育の実施にあたって、自組織の情報セキュリティポリシー及び情報システム利用環境の実態に合わせて、非現実的な理想論に終始せず、きちんと実践できる内容の教育コンテンツを内製で作成するための取組みについて紹介した。

他機関において、教育コンテンツのブラッシュアップに寄与できれば幸いである。

#### 参考文献

- [1] 独立行政法人情報処理推進機構（IPA）、情報セキュリティ 10 大脅威 2016、P12、独立行政法人情報処理推進機構、2016。

#### 謝辞

情報セキュリティ教育コンテンツの作成にあたり、ご助言をいただいた情報セキュリティWGの皆さまに謹んで感謝の意を表します。

[大学 ICT 推進協議会 2018 年度年次大会論文集より]

## 東北大学における標的型攻撃メール対応訓練

小野崎 伸久<sup>1)</sup>, 曾根 秀昭<sup>2)</sup>, 水木 敬明<sup>2)</sup>

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

i-security@grp.tohoku.ac.jp

## Training for Responding to Targeted Email Attacks in Tohoku University

Nobuhisa Onozaki<sup>1)</sup>, Hideaki Sone<sup>2)</sup>, Takaaki Mizuki<sup>2)</sup>

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

2) Cyberscience Center, Tohoku Univ.

### 概要

東北大学では、平成 27 年度から標的型攻撃メール対応訓練（以下、メール訓練）を実施しているが、年度ごとに訓練結果を評価し、次回の訓練に反映することでブラッシュアップを図っている。本稿では、この取組みについて紹介する。

### 1 はじめに

本学では、平成 27 年 6 月に発生した日本年金機構の事案を受けて、平成 27 年度から標的型攻撃に対応するためのメール訓練を実施している。初年度は、事務系職員約 1,600 人を対象に外注で実施したが、次年度となる平成 28 年度以降は、全教職員約 12,000 人を対象に内製で実施している。毎回単調な訓練内容では、メール訓練の有効性が薄まってしまう可能性があるため、年度ごとに結果を評価し、次回に反映することでブラッシュアップを図っている。内製によって、予算・コストによる制約を抑えながら臨機応変に対応できることにもつながっている。

本稿では、このメール訓練の取組みについて紹介する。

### 2 メール訓練の概要

#### 2.1 メール訓練の目的

メール訓練の目的は、身近に起こりうる危機を認識し、典型的な攻撃パターンを体験し、見分ける知識を身に付けることとした。

#### 2.1 メール訓練の流れ

メール訓練は、事前周知、訓練本番、事後アンケートという流れで行った。

事前周知では、訓練の目的、実施期間、訓練手順、メール受信者を騙す手口、それを見抜くための着眼点等を周知した。

訓練本番では、全教職員に付与されている東北大メールアドレス宛てに疑似的な標的型攻撃メール（以下、攻撃メール）を送信した。メール受信者が添付ファイル又は URL リンクをクリックした場合、誰がクリックしたのか集計できるようにした。また、クリックした際には、ウェブサイトが表示されるようにし、このメールが訓練であることを伝えて、メール受信者を騙す手口や、それを見抜くための着眼点等を再確認するように促した。なお、本学には、全教職員からの報告を一挙に受理できるほどの体制がまだ無いため、攻撃メール受信時の報告や、クリック時のネットワーク隔離及び報告作業は訓練に含めなかった。

全教職員分のメール送信が完了してから数日後に、訓練完了メールを一斉送信し、今回のメール受信者を騙す手口や、それを見抜くための着眼点等を周知しつつ、事後アンケートを依頼した。

#### 2.2 各年度のメール訓練の概要

表 1 に各年度のメール訓練の概要を示す。

### 3 平成 27 年度のメール訓練

#### 3.1 攻撃メール

平成 27 年度の訓練では、攻撃メールを送信した。情報システムの利用環境が把握できる事務系職員が対象であり、外注したこともあって、トラブルもなく訓練が完了した。

表 1 各年度のメール訓練の概要

	平成 27 年度		平成 28 年度	平成 29 年度
対象者	事務系職員		全教職員	全教職員
対象人数	1,619		12,206	12,213
回数	1 回目	2 回目	—	—
訓練期間	2 日間	3 日間	12 日間	22 日間
メール文面	1 種類	1 種類	2 種類	13 種類
送信方法	一括	一括	1 日 2,000 通 (東北大 ID 順)	1 日 1,000 通 (ランダム)
メール形式	URL リンク	添付ファイル	添付ファイル	URL リンク
開封数	330	174	639	1,686
開封率	20.4%	10.7%	5.2%	13.8%
外注/内製	外注		内製	内製
費用	約 140 万円		0 円	約 1 万円

## 4 平成 28 年度のメール訓練

### 4.1 攻撃メール

平成 28 年度は、前年度実施のノウハウを生かして内製にて訓練を行うこととした。事務系職員とそれ以外に分類し、表 2 に示す 2 種類の攻撃メールを送信した。

差出人については、IPA [1]によると標的型攻撃メールの 71%がフリーメールから送信されていること、並びに日本年金機構 [2]によると、平成 27 年 6 月の個人情報流出事案においては標的型攻撃メールの送信元はフリーメールアドレスであったことから、フリーメールアドレスを選定した。

メール本文の「実名差し込み」については、日本年金機構[2]によると、平成 27 年 6 月の個人情報流出事案においては非公開のメールアドレスに対して実名を差し込んだメールが送信されたことから、実名差し込みを取り入れることにした。

添付ファイルについては、警察庁 [3]によると標的型攻撃メールの添付ファイルは圧縮形式のファイルであることがほとんどであり、その中には「exe」の実行形式ファイルが最も多く用いられていることから、これを取り入れることにした。

### 4.2 内製作業

添付ファイルについては、アクセスした人を特定するウェブサイトを PHP で用意し、そのサイトにアクセスする exe ファイルをフリーソフトの「Hot Soup Processor」で作成した。一人一人異なるパラメータを設定しないとクリックした人を特

定できないため、人数分のファイルを作成することとなったが、フリーソフトの「UWSC」を用いて短時間で作成した。

メール送信については、Microsoft 社の Excel マクロ及び Outlook を使用して、順次送信した。

### 4.3 評価

フリーメールについては、添付ファイル (zip in exe) が送信できるものが少ないこと、そして Outlook による SMTP 送信ができるものが少ないことにより、訓練に利用できるものを見つけ出すのに苦労した。また、送信数の制限がかけられているが、その閾値が非公開のために、試行錯誤で検証することになってしまった。結果的には、フリーメールは訓練には不適切であった。

添付ファイル (zip in exe) についても、Windows 以外の機器では、実行しても何も反応せず、訓練であることを明示した画面も表示されないため、混乱を引き起こすことになってしまった。また、東北大メールアドレスから普段使用しているメールアドレスに転送している場合、転送時に添付ファイルがエラーに引っかかり、到達しないこともあった。結果的には、様々な情報機器を使用している全教職員に対しては、添付ファイル方式は不適切であった。

訓練開始日に、メール受信者から各部局の情報システム担当者への問い合わせが一挙に発生し、日常の業務に影響してしまった。各部局の情報システム担当者に対しては、事前に攻撃メールの具体的な内容を周知しておくべきであると認識した。

図 3 に示す通り、訓練後半にかけて、開封率が

右肩下がりになっていることが分かる。これは、同じ文面のメールを数日間に渡って送信しているため、時間が経つにつれて、まだ受信していない人に対しても、メール内容が知れ渡ってしまったことが原因とみている。事後アンケートによると、

メール訓練に引っかけた人は満足度が高く、そうではない人は低い傾向があったため、これは大きな問題点であった。数日間に分けて送信するならば、メール文面は日々変更するべきであると認識した。

表2 平成28年度の攻撃メール

	1回目	2回目
件名	人事異動内示について	科研費について
差出人	東北大学<ukagiadukohot@フリーメール5種類>	
本文	●●様（実名差し込み）  参考までに、人事異動案内示を転送します。ご確認のほどよろしくお願いいたします。	●●様（実名差し込み）  先日の教授会で議題になった件について、ご意見を伺いたく、資料を送付させていただきます。ご確認のほどよろしくお願いいたします。
添付	人事異動内示.zip（人事異動内示.exe）	資料.zip（資料.exe）

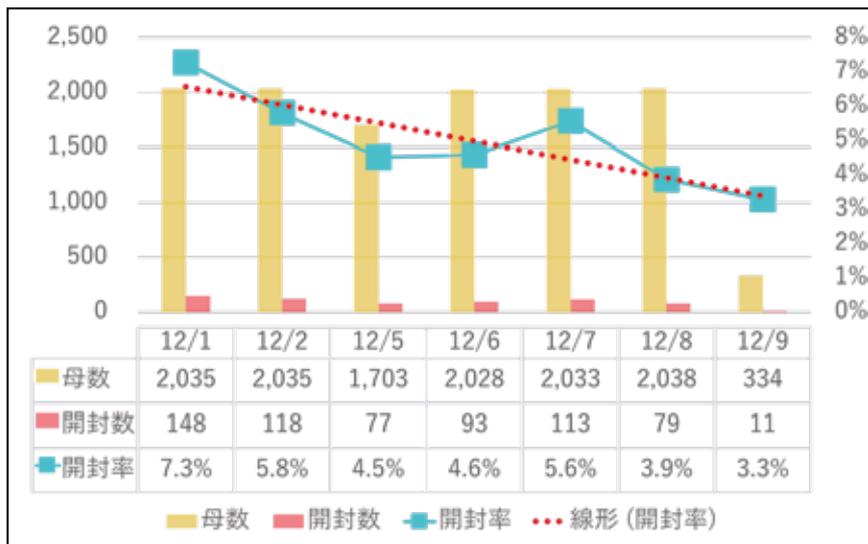


図3 平成28年度の開封率の推移

## 5 平成29年度のメール訓練

### 5.1 攻撃メール

平成29年度の訓練では、前年度の反省を活かし、表4に示す13種類の攻撃メールを送信した。

ウェブサーバ及びメールサーバ、並びに本学公の「tohoku.ac.jp」を模倣した「tohoku-ac-jo.info」というドメインをレンタルし、差出人のメールアドレス及びURLリンクとして使用した。

差出人の苗字は、知人からのメールだと錯覚させるため、本学の教職員に多い苗字を集計し、上

位から順番に使用した。

HTML形式のメールにして、本学のロゴマークを挿入した。これは、本学に実際に到達したことのあるフィッシングメールで用いられていた手口であったため、取り入れることにした。

### 5.2 事前周知

事前周知において、各部署の情報システム担当者に対して、訓練本番で送信する攻撃メールの内容も周知することにした。

### 5.3 内製作業

前年度の添付ファイルと同様に、アクセスした

人を特定するウェブサイトを PHP で用意し、そのサイトにアクセスするための URL リンクを設定した。メール送信についても前年度と同様に、Microsoft 社の Excel マクロ及び Outlook を使用して、順次送信した。

#### 5.4 評価

レンタルのメールサーバから送信したため、前年度のように送信制限などのトラブルにかかるこ

ともなく、スムーズに実施できた。

また、差出人の苗字については、上司だと錯覚して不用意にクリックした人も出ており、名前ではなくメールアドレスを確認することの意識付けにつなげることができたと考えられる。

図 5 に示す通り、訓練後半にかけても開封率が右肩下がりにならなかった。従って、全期間を通して有効な訓練を実施することができた。

表 4 平成 29 年度の攻撃メール

件名	【A】
差出人	【B】
本文	 <p>【C】です。お疲れ様です。</p> <p>先日前お話しした【A】に関する資料が手に入りましたので PDF 化しました。至急、こちらからダウンロードください。  <a href="http://www.tohoku-ac-jp.info/drive/?xxxxxxxxx.pdf">http://www.tohoku-ac-jp.info/drive/?xxxxxxxxx.pdf</a></p> <p>取り急ぎ。</p>
補足	送信日毎に【A】、【B】、【C】を次表の通りに置換

送信日	【A】	【B】	【C】
10 日 (水)	指定国立大学	東北大学 佐藤 <sato@tohoku-ac-jp.info>	佐藤
11 日 (木)	日英表記	東北大学 鈴木 <suzuki@tohoku-ac-jp.info>	鈴木
12 日 (金)	共同研究講座	東北大学 佐々木 <sasaki@tohoku-ac-jp.info>	佐々木
15 日 (月)	中期目標・中期計画	東北大学 伊藤 <ito@tohoku-ac-jp.info>	伊藤
16 日 (火)	運営企画会議	東北大学 高橋 <takahashi@tohoku-ac-jp.info>	高橋
17 日 (水)	自動車入構ルール	東北大学 阿部 <abe@tohoku-ac-jp.info>	阿部
18 日 (木)	グローバルイニシアティブ構想	東北大学 高橋 <takahashi@tohoku-ac-jp.info>	高橋
19 日 (金)	時間外労働縮減	東北大学 齋藤 <saito@tohoku-ac-jp.info>	齋藤
22 日 (月)	寄付講座	東北大学 加藤 <kato@tohoku-ac-jp.info>	加藤
23 日 (火)	部局評価	東北大学 千葉 <chiba@tohoku-ac-jp.info>	千葉
24 日 (水)	競争的資金等公募情報	東北大学 遠藤 <endo@tohoku-ac-jp.info>	遠藤
25 日 (木)	オープンキャンパス	東北大学 小林 <kobayashi@tohoku-ac-jp.info>	小林
26 日 (金)	大学発ベンチャー	東北大学 菅原 <sugawara@tohoku-ac-jp.info>	菅原

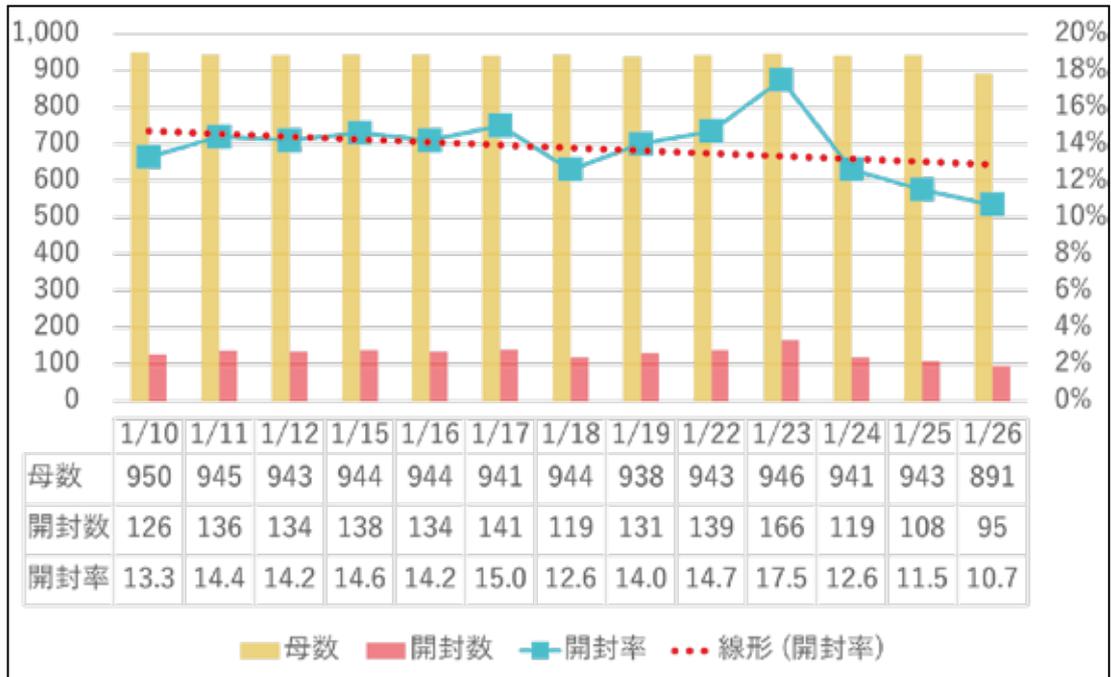


図5 平成29年度の開封率の推移

## 6 おわりに

本稿では、平成27年度から実施しているメール訓練の取組みについて紹介した。

メール訓練の内製化により、前年度の実施結果を反映した手直しは、予算・コストによる制約を受けることなく対応できている。また、毎回単調な訓練内容では、メール訓練の有効性が薄まってしまう可能性があるため、年度ごとに結果を評価し、次回に反映することでブラッシュアップを図っている。

このような本学の取組みが、他機関において参考になれば幸いである。

## 参考文献

- [1] IPA（独立行政法人情報処理推進機構）技術本部 セキュリティセンター、サイバー情報共有イニシアティブ（J-CSIP）2014年度活動レポート、P16、独立行政法人情報処理推進機構、2015
- [2] 日本年金機構 不正アクセスによる情報流出事案に関する調査委員会、不正アクセスによる情報流出事案に関する調査結果報告、日本年金機構、別添資料3-3、2015
- [3] 警察庁広報資料、平成28年上半期におけるサイバー空間をめぐる脅威の情勢等について、警察庁、P3-4、2016

[大学 ICT 推進協議会 2018 年度年次大会論文集より]

## 学術無線 LAN ローミング基盤 eduroam と 次世代ホットスポット基盤 Cityroam のキャンパスへの展開

原田 寛之<sup>1)</sup>, 後藤 英昭<sup>2)</sup>

1) 札幌学院大学 情報処理課

2) 東北大学 サイバーサイエンスセンター

se-harada@e.sgu.ac.jp

### Deploying a Campus-Wide Wireless Network: eduroam and the Next Generation Hotspot Infrastructure Cityroam

Hiroyuki Harada<sup>1)</sup>, Hideaki Goto<sup>2)</sup>

1) Information Processing Division, Sapporo Gakuin University

2) Cyberscience Center, Tohoku University

#### 概要

学術無線 LAN ローミング基盤 eduroam は、国内 228 機関（2018 年 8 月現在）、世界約 90 か国（地域）が参加する基盤へと成長し、参加機関の構成員は相互にキャンパス無線 LAN を利用可能な仕組みが広く運用されることとなった。一方で、大学と地域社会との連携が進む中で、キャンパス無線 LAN を市民に開放しているのはキャリアと連携している一部の大規模な大学に限られている。小規模な大学でもキャンパス無線 LAN の市民へのセキュアな開放を実現するため、本学では eduroam に加えて学内全てのアクセスポイントを 2018 年より次世代ホットスポット基盤 Cityroam に接続し試験運用を開始する。本報告では、これまでの eduroam の運用に加え、キャンパス無線 LAN 開放の 1 つの方法として Cityroam に接続するメリットと今後の課題について報告する。

#### 1 はじめに

本学では 2011 年にキャンパス内に導入学部の違いなどから複数存在していた無線 LAN を統合すると共に、利用可能エリアをキャンパス内全域に拡張し、学生及び教職員がキャンパス内でもどこでも無線 LAN 接続にできる環境を整備した。更に 2012 年に eduroam [1] に参加し、本学構成員のみならず eduroam アカウントを持つ学外者がキャンパス無線 LAN の全てのアクセスポイントを利用できる環境を整備した。eduroam については、本学を会場とする学会等で一時的に参加者にキャンパス無線 LAN を使用させたいという要望に対するゲスト用アカウントの発行基盤としても利用されている。

一方で、本学では江別市文京台に保有するキャンパスに加え、2021 年度に札幌市厚別区新札幌へ分校舎を建設する予定である。これは札幌市の新

さっぽろ駅周辺の再開発に連動したプロジェクトであり、従来以上に大学と地域社会との連携が求められている [2]。また、国の第 3 期教育振興計画（2018 年度から 2022 年度）においても、社会の持続的発展に向けた地域課題解決のための学びの推進として、地域の学校や大学等と学習活動の拠点となる社会教育施設との連携について触れられている [3]。本学の札幌分校舎においても図書館やホール、産学連携拠点といった設備を市民が利用することが想定されているが、キャンパス無線 LAN の市民への開放についてはこれまで実現できていなかった。これを実現するための課題の洗い出しを行う目的で、セキュア公衆無線 LAN ローミング研究会 [4] が 2017 年に次世代ホットスポット (NGH) 基盤として整備した Cityroam [5] に 2018 年より接続し、市民へのキャンパス無線 LAN 開放に向けた実証実験を開始する準備を進めている。

本稿では、第 2 章で本学の eduroam の構成と運用について、第 3 章で市民へのキャンパス無線 LAN 開放を目的とした Cityroam への参加とそのメリットについて述べる。第 4 章は本稿のまとめである。

## 2 本学の eduroam の構成と運用

### 2.1 本学における eduroam の構成

本学の第 1 キャンパスには 11 棟の建屋があり、2 台で冗長化された Aruba 7210 コントローラ配下に 141 台のアクセスポイント (AP) を設置している (図 1)。

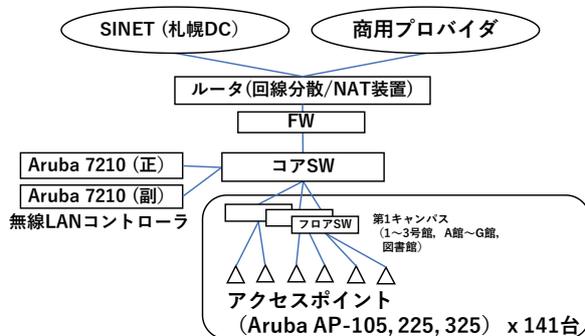


図 1 ネットワーク構成図

本学は eduroam に参加する以前から学生・教員向けに独自の SSID による無線 LAN 接続サービスを提供しており、コンピュータ教室の PC へのログインに利用する Active Directory のアカウントを用いて IEEE802.1X 認証での持込デバイスの無線 LAN 接続を可能としている。また、IEEE802.1X 認証が利用できないデバイスの接続のため、PSK(事前共有キー)とキャプティブポータル認証/MAC アドレス認証による接続方式も継続して運用している。

2012 年に eduroam に参加した際、既に Aruba 製品での IEEE802.1X 認証については問題なく運用できており新たに必要とする機器などの制約はなかったが、図書館で契約している電子ジャーナル等の契約の関係上、eduroam 向けのアクセスネットワークを別途構築する必要があった。このため、国立情報学研究所が試験的に提供している eduroam アクセスネットワーク収容サービスを

利用することとした。具体的には、IPv4 の /30 のアドレスブロックの割り当てを受け、既設 SINET 接続を行っていた回線を VLAN 多重モードに変更し、同回線の VLAN を利用する方法で eduroam アクセスネットワークを確保した。

次に、AP からの eduroam 利用者からの認証要求を処理する RADIUS サーバについて、eduroam のネットワークを学内ネットワークと分離するため、学生・教員向けの無線 LAN 接続サービスの IEEE802.1X 認証で使用していた RADIUS サーバとは独立の RADIUS サーバを構築する必要があった。eduroam JP のサイト上に、FreeRADIUS による RADIUS サーバ構築についての説明が充実しており、これを参考に仮想サーバとして新たに eduroam 向けの RADIUS サーバを構築した。学内には eduroam の RADIUS IdP (ID プロバイダ) は構築せず、AP からの認証要求を全て eduroam JP の RADIUS サーバに転送する RADIUS Proxy として構築している。

本学の構成員が eduroam を利用するための RADIUS IdP については、東北大学が開発・運用し、eduroam JP に提供している eduroam 代理認証システム [6] を 2012 年に採用し、電子計算機センターにて eduroam 利用希望者に都度アカウントを発行する形式とした。また、学術会議・研究会などにおけるゲストアカウント発行の要望があった場合には、同システム上で必要数のアカウントを発行し、責任者に一括で発行するサービスを提供している。

これに加え、2014 年には学術認証フェデレーション (学認) [7] に参加し、国立情報学研究所が提供している eduroam 仮名アカウント発行システム (2017 年度より eduroam JP 認証連携 ID サービスに移行されている) [8] を本学の Active Directory アカウントによる Shibboleth 認証にて利用できるよう環境を整備し、学生・教職員が自ら eduroam JP 認証連携 ID サービスにログインすることで電子計算機センターを経由することなく eduroam アカウントを発行できるように運用

を改善した。学認との接続においては株式会社ネットスプリングのアプライアンス製品である Axiole の IdP オプションを採用し、Shibboleth IdP を短期間で構築することができた。

また、eduroam 仮名アカウント発行システムにより発行されるアカウントは従来利用機関すべてで共通のレルムとなっていたが、eduroam JP 認証連携 ID サービスへの移行と共に、加入機関毎に異なったレルムのアカウントが発行されるよう機能が拡張された [9]。これにより、本学のように自前の eduroam の RADIUS IdP を持たず、学内向けネットワークと eduroam ネットワークを分離するために SSID を複数運用していた大学においても、アカウントのレルムによってネットワークを割り当てる認証 VLAN の仕組みで両者を eduroam に統合することが可能となった。認証 VLAN の導入については今後の検討事項である。

## 2.2 本学における eduroam の運用

本学キャンパスには eduroam に参加している他大学のキャンパスが隣接しており、単位互換・サークル活動などで来訪する他大学の学生は日常的に eduroam を利用している。一方、本学の学生による eduroam アカウントの発行は非常に少ない状況にある。これは、学生はキャンパス内であれば Active Directory アカウントにより直接無線 LAN 接続が行えること、eduroam についての学内での広報が不足していること、他大学を訪れて無線 LAN 接続を行う必要を感じている学生が少ないことなどが理由であろうと推測される。しかし、eduroam により ICT を活用した学習の場はキャンパス内から世界中に広げることが可能であることを周知し、eduroam を利用する学生を増やすことは、深い学びの成果を得る学生を増やすことに繋がっていくと考えられるため、学生の利用率を上げていくことが課題である。

教員に関しては、他大学を非常勤講師として訪れたり、学会会議や研究会等に出席したりする際などに eduroam アカウントを取得して活用している。また、一部の講義で採用されているティー

チング・アシスタントについては他大学の大学院生が多く、既に所属機関で発行した eduroam アカウントを保有しているため、eduroam への接続は日常的に行われている。

eduroam 接続に用いられているデバイスについては、2013 年頃までの一部メーカ製 Android 端末については IEEE802.1X の利用がしにくい機種があったが、2014 年以降の端末においては支障なく利用することが可能となっており、現在では PC およびスマートフォンについては問題がない。但し、スマートスピーカー、スマートウォッチ、プロジェクターへの映像伝送機、プリンターなど IEEE802.1X 接続に対応していないデバイスもあり、これらは現在 eduroam 接続を行うことはできない。

eduroam を利用したユーザによるセキュリティインシデント等の発生時には、アクセスポイントを設置している SP 側は利用者を特定するために、アカウント発行に責任のある IdP 側の協力が必要となる。あるいは、本学が責任を持って発行したアカウントについて、SP 側からインシデント発生に際し協力を求められる場合も想定される。これらについては eduroam JP 実施要領 [10] に定められており、インシデントの対応のため現在は eduroam JP サービス技術基準・運用基準 [11] において少なくとも 6 ヶ月間は規定のログ等を保存するよう定められている。また本学では同技術基準・運用基準に従い、原則として全てのポートについて通信を制限しない運用としているが、これまでのところインシデントは本学では SP (サービスプロバイダ) としても IdP としても発生していない。

eduroam JP に関する技術的な障害事例として、Aruba 製コントローラでは EAP パケットを終端させる Termination という機能があるが、通常終端させないよう無効になっている。これが意図せず有効になっていると、eduroam JP の JP RADIUS は認証要求を受け付けられないため、注意する必要がある。eduroam JP サービス技術基準・

運用基準 [11] においても EAP メッセージは改変せず転送しなければならない、と規定されている。

### 3 Cityroam への参加とそのメリット

#### 3.1 キャンパス無線 LAN の市民への開放

eduroam への参加と環境整備により、eduroam アカウントを所属機関で発行して本学を訪れる他大学の学生・教職員などは本学にてキャンパス無線 LAN への接続が可能となった。また、学会や研究会などで一時的に本学施設を利用する eduroam アカウントを保有していない利用者に対しても、一時的な eduroam アカウントをゲストアカウントとして発行することで、キャンパス無線 LAN のサービス提供が可能となった。しかしながら、本学で開講している市民講座の受講者や、図書館を利用する市民に対してはキャンパス無線 LAN のサービス提供が実現できていない。例えば本学の図書館は、試験期間中を除き学外者に図書の貸出を含めて開放されているが、図書館を利用する学外者がインターネット接続サービスを希望する場合には、事前にキャンパス無線 LAN への接続を機器に対して設定した PC を図書館カウンターで都度貸し出す対応を取っている。

このような状況の中、本学は江別市文京台の第 1・第 2 キャンパスに加え、2021 年に 5km ほど離れた札幌市厚別区の新札幌駅近くへ分校舎を建設することとなった。この分校舎建設と運用にあたっては、多目的ホールや図書館などの地域住民の利用が想定されており、生涯学習機能や多世代交流機能といった地域ニーズに十分応えていく必要がある。加えて、新札幌拠点においては学校機能と商業・先端医療機能を相互に連携させ、より効果的な人材育成や産学連携を展開していくことが掲げられている [2]。また、国の第 3 期教育振興計画 (2018 年度から 2022 年度) においても、社会の持続的発展に向けた地域課題解決のための学びの推進として、地域の学校や大学等と学習活動の拠点となる社会教育施設との連携について触れられているとおりの [3]。本学の学生・教職員ならびに

学術関係者と同等の安全な無線 LAN 接続サービスを市民に提供することは、学生・教職員と市民活動の連携を効果的に行い、双方によりよい成果をもたらす上で不可欠のものとなると考えている。このようなニーズは、本学のみならず全国の大学においても多くなっていくことが想定されるが、キャンパス内での市民への無線 LAN サービス提供については、現在一部の大学が行っているに留まっている。

#### 3.2 他大学におけるキャンパス内での市民への無線 LAN 接続サービスの提供

市街地等の公衆無線 LAN の中には、SSID を暗号化せず認証なしに接続を可能とし、メールアドレスの入力等と利用規約への同意のみでサービス提供しているケースが多数見受けられる。しかし、本人確認がなされておらずインシデント発生時の追跡が困難なことや、通信経路が暗号化されておらず容易に盗聴可能であるなどの問題があり、このような形式での大学内への公衆無線 LAN 設置は好ましくない。

より安全にキャンパス内で無線 LAN 接続サービスを市民へ提供する手法として、広島大学、京都大学、鹿児島大学といった一部の大学ではキャンパス無線 LAN にキャリア Wi-Fi (NTT ドコモ, KDDI, ソフトバンク) を相乗りさせてサービス提供を試み [12] が行われている。これは、キャンパス無線 LAN の AP 側で各キャリア Wi-Fi の SSID を送出するよう設定した上で、キャリア毎に VLAN を分け、専用の回線で各キャリアのネットワークに收容する方式である。この場合、キャンパス内の AP は全て無線 LAN コントローラで一元的に管理されるため、キャリア Wi-Fi 毎に独立した AP をキャンパス内に設置する方式に比べ無線 LAN の電波干渉の問題は発生しづらい。しかし、キャリア毎に複数の SSID を送出すると、SSID の数とエリア内のクライアント数に応じてビーコンやプローブといった制御用の通信の占有時間が増加するため、SSID の数が多すぎると通信品質の低下を招く場合があり、注意が必要である。

またキャリア Wi-Fi は、基本的にはキャリアの電話回線契約のオプション機能として提供されているため、日本のキャリアと契約を結んでいない訪日外国人などはサービスを利用できない。加えて日本国内では、キャリアの回線を借り受けて事業を行う仮想移動体通信事業者 (MVNO) の参入が進み、キャリア Wi-Fi を利用できない MVNO 回線の利用者も増加している状況にある。国内 MVNO 市場規模の推移として、2014 年 3 月末では 173 万回線であったものが、2018 年 3 月末では 1082.8 万回線に達し、急速に普及していることがわかる [13]。この傾向は今後も進むと見られ、大学を訪れる市民にキャリア Wi-Fi のみで対応することは難しくなっている。

### 3.3 次世代ホットスポット (NGH) の登場と世界の公衆無線 LAN の動向

より安全で利便性の高い公衆無線 LAN 接続サービスの提供については世界共通の課題となっているが、この実現に向け「次世代ホットスポット (NGH, Next Generation Hotspot)」という規格が策定された [14]。NGH は、Wireless Broadband Alliance (WBA) と Wi-Fi Alliance が共同で推進している規格で、認証部分については従来の IEEE802.1X 認証を使用しているのに加え、端末が自動的に自組織とローミング接続している AP を探索し接続する Passpoint (Hotspot 2.0) を中心とする規格である。既に米国では AT&T のキャリア Wi-Fi や Boingo などの無線 LAN サービス事業者において Passpoint が採用され [15]、サービス提供が行われている。

NGH の登場以前は、仮に複数の IdP がローミング接続されていても、AP が送出する SSID が異なっている場合は、利用者は事前に訪問先の SSID を知っていないと接続を行うことが難しいという問題があった。このため、eduroam では加入期間は共通で SSID を eduroam として設定することが求められている。NGH の登場以降、複数の IdP をローミング接続し、かつ SP がそれぞれ異なる SSID を送出している状況でも、いずれかの IdP に

より発行されたアカウントを持つ利用者は、自動的に訪問先の SP が提供する公衆無線 LAN サービスに SSID を意識せず接続することが可能となった。

NGH 導入を推進する目的で、海外では 2016 年に、世界各地の都市で提供されている公衆無線 LAN を NGH 基盤で接続することにより、ひとつの IEEE802.1X アカウントで相互利用できる環境を実際に構築しようとする世界規模の実証実験、City Wi-Fi Roaming が WBA の主催で行われた。利用者は NGH 基盤にローミング接続されているキャリアの SIM カードや IdP 事業者が発行する IEEE802.1X アカウントを認証に用いることで、初めて訪れる都市の公衆無線 LAN を安全に利用することを可能とする試みであった。

### 3.4 セキュア公衆無線 LAN ローミング研究会の発足と Cityroam

日本国内でも安全で利便性の高い公衆無線 LAN を提供する仕組みの構築を目指す有志が集まり、2017 年に「セキュア公衆無線 LAN ローミング研究会 (NGHSIG)」[4] を発足するに至った。

同研究会において、RADIUS を中心とする認証基盤、SP がサービス提供に使用する機器や利用者が接続に利用する端末の各種 OS の Passpoint 対応状況などについての情報収集と開発を進めると共に、NGH テストベッド基盤を構築し運用を開始した。また IdP としても NGHSIG クラウド IdP の運用を開始して NGH テストベッドに接続し、複数の通信事業者及び開発者の AP を SP として接続し、日本国内で NGH が利用できる環境を整えた。

並行して NGHSIG では WBA との交渉を進め、2017 年の 6 月から 8 月にかけて開催された第 2 回目の City Wi-Fi Roaming には東北大学が大学としては世界で初めて [16]、また国内の複数の都市において通信事業者が SP としてそれぞれ NGHSIG を通して接続し [17]、実際のサービス提供を行った (図 2)。本学は、2017 年の City Wi-Fi Roaming については利用者が接続に使用する

端末のサポート対応や、利用者へのアカウント配布についてサービス運用できるレベルに至っていないと判断し、参加を行わなかった。



図 2 City Wi-Fi Roaming 2017 参加都市一覧

参加を見送った理由の 1 つに、利用者が接続に利用する端末のうちの Android 端末の Passpoint 実装状況が明確になっておらず、利用者から本学スタッフへの問い合わせなどについての対応体制に懸念があったことがあげられる。Android は 2017 年 8 月にリリースされたバージョン 8.0 の互換性定義（CDD, Compatibility Definition Document）[18]において、それまで端末メーカーに委ねられていた Passpoint 実装について、接続をサポートするべきであること、サポートしない場合の端末内部処理を標準化するように規定された。これにより、Android 8.0 以上が動作する端末についての Passpoint 接続の対応状況を調査することが容易となった。筆者は CDD に沿って Android 8.0 以上の端末で動作する Passpoint 対応状況判定用のアプリケーションを開発し、Google Play ストアを通じて一般に公開 [19]すると共に、Android 8.0 以上の端末を所有している一般の方や端末メーカーに SNS 等を通じて同アプリケーションのスクリーンショット（図 3）の提供を依頼するなどの手法で調査を行った、



図 3 HS2.0 device checker

情報収集は現在も継続しているが、国内外で販売されている Android 端末について、Passpoint 対応状況のキャリア、メーカー毎の対応状況を概ね把握することができ、本学の実証実験参加およびサービス提供に向け懸念の多くを解消することができた。

現在、NGHSIG は実証実験を通じて得られたノウハウを基に、国内でセキュア公衆無線 LAN サービスの展開を本格化させており（図 4）、2018 年 6 月より国内の認証連携基盤及びサービスのブランド名として、Cityroam™ の名称で呼んでいる。

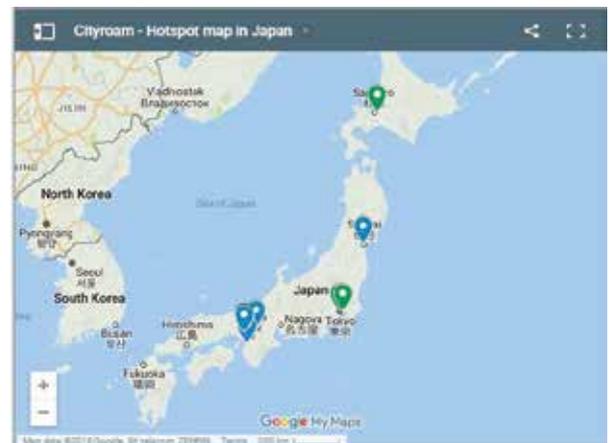


図 4 Cityroam 基地局マップ(2018 年 8 月現在)

2017 年の第 2 回目の City Wi-Fi Roaming においては、実際に利用した利用者は主に NGH に関心のある開発者や事業者の関係者が主体であった。札幌学院大学では、より広い Cityroam の普及に向け、サービス形態の 1 つとして、大学が一般市民へのサービス提供基盤として Cityroam を利用する際の運用上の課題を洗い出すため、2018 年 10 月より行われる第 3 回の City Wi-Fi Roaming に

において、学内全てのアクセスポイントの Cityroam への接続を計画している。これにより、ローミングに参加しているいずれかの IdP 事業者のアカウントを保有している利用者無線 LAN 接続サービスを提供すると共に、NGHSIG クラウド IdP を用いて本学の電子計算機センターにおいて希望する市民に本人確認のもと対面でアカウントの発行を行う予定である。

### 3.3 キャンパス無線 LAN を Cityroam に接続するメリット

キャンパス無線 LAN に単にキャリア Wi-Fi を相乗りさせる方式に比べ、NGH によるローミングの方式では、ローミング参加する事業者が増えても SSID を増やす必要がなく、通信品質の低下が発生しづらい。

また、Cityroam の SP は、通信事業者および eduroam を提供する教育研究機関などに限定されており、各 SP は盗聴や改ざんなどを行わないように義務付けられる。1X 認証では、端末が事前に正しく設定されている限り、偽の AP に対する認証は失敗するため、Cityroam を利用した市民が攻撃者による不正なネットワークに誘導され通信内容が盗聴されることはない。

利用者は、Passpoint に対応している端末であれば SSID を意識することなく自動的に接続が可能である。これにより、大学キャンパス周辺の公共施設や市街地の公衆無線 LAN が Cityroam に接続されると、利用者はシームレスに移動先で公衆無線 LAN を安全に利用可能となる。利用者が利用する端末が Passpoint に対応していない場合でも、認証部分は従来の IEEE802.1X 認証であるため、ユーザに SSID を通知し手動で認証情報を端末に設定してもらうことで利用が可能である。

また、eduroam JP は現在 Cityroam にローミング接続されているが、eduroam を Passpoint に対応させる仕組みの開発が完了していないため、現時点では eduroam アカウントを用いて Cityroam に Passpoint 接続することはできない。将来的には学生・教職員が持つ eduroam アカウ

ンクを用いて Passpoint 認証にてキャンパス無線 LAN のみならず市街地の Cityroam に接続された公衆無線 LAN を安全に利用可能となるように準備を進めている。

## 4 まとめ

本稿では、札幌学院大学におけるこれまでの eduroam の構築と運用について、また今後キャンパス無線 LAN を市民に開放するための Cityroam の展開状況と実証実験への接続計画およびそのメリットについて述べた。キャンパス無線 LAN を市民に安全に開放する手法を提案し、ひいては Cityroam の中核技術の NGH 基盤および Passpoint によるサービス提供についての技術と運用方法を広く国内外に提案・技術協力していくことで、世界の公衆無線 LAN の次世代化に貢献すると共に、eduroam と Cityroam の連携によって学生が安全に利用できる公衆無線 LAN 環境を普及させ、先進的な教育研究環境の拡充を目指している。

## 参考文献

- [1] eduroam JP: <https://www.eduroam.jp/> (2018年8月28日参照)
- [2] “新さっぽろ駅周辺地区 G・I 街区公募提案審査報告書,” 新さっぽろ駅周辺地区 G・I 街区公募提案審査委員会, p.6. [http://www.city.sapporo.jp/toshi/kukaku/kyoten/s\\_hinsapporo/kouboteiann.html](http://www.city.sapporo.jp/toshi/kukaku/kyoten/s_hinsapporo/kouboteiann.html)
- [3] “第3期教育振興基本計画,” 文部科学省, p.7. [http://www.mext.go.jp/a\\_menu/keikaku/detail/14\\_06127.htm](http://www.mext.go.jp/a_menu/keikaku/detail/14_06127.htm)
- [4] セキュア公衆無線 LAN ローミング研究会 (NGHSIG) : <https://nghsig.jp/> (2018年8月28日参照)
- [5] 後藤英昭, “安全で利便性の高い公衆無線 LAN を提供する次世代ホットスポット基盤 Cityroam,” 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.51, No.3, pp.16-19, 2018. [http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/refer/senac.html#2\\_018\\_7](http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/refer/senac.html#2_018_7)
- [6] eduroam 代理認証システム: <https://www.eduroam.jp/deas/> (2018年8月28日参照)
- [7] 学術認証フェデレーション: <https://www.gakunin.jp/>

- (2018年8月28日参照)
- [8] eduroam JP 認証連携 ID サービス:  
<https://federated-id.eduroam.jp/>  
(2018年8月28日参照)
- [9] 中村素典, “eduroam JP 認証連携 ID サービス新機能,” NII 学術情報基盤オープンフォーラム 2018.
- [10] eduroam JP 実施要領:  
<https://www.eduroam.jp/rules/>  
(2018年8月28日参照)
- [11] eduroam JP サービス技術基準・運用基準:  
<https://www.eduroam.jp/rules/>  
(2018年8月28日参照)
- [12] 大東俊博, “広島大学におけるキャンパス無線 LAN システム～キャリア Wi-Fi との共同利用と可搬型アクセスポイントの導入～,” 情報処理学会研究報告, Vol.2014-IOT-26, No.7.
- [13] “国内 MVNO 市場規模の推移 (2018年3月末),” 株式会社 MM 総研:  
<https://www.m2ri.jp/news/detail.html?id=310>  
(2018年8月28日参照)
- [14] 後藤英昭, “次世代ホットスポット (NGH) の世界動向と NGH 対応 eduroam システムの開発,” 信学技報 IA2017-61/IN2017-60, pp.49-54, 2017.
- [15] Boingo Passpoint Secure Hotspot Access:  
<https://passpoint.boingo.com/>  
(2018年8月28日参照)
- [16] “City Wi-Fi Roaming 大学としては世界初参加-世界中でつながる次世代ホットスポット (NGH) と eduroam の連携を推進-” 東北大学プレスリリース, 2017年6月27日.  
<https://www.tohoku.ac.jp/japanese/2017/06/press20170627-01.html>  
(2018年8月28日参照)
- [17] City Wi-Fi Roaming 2017, NGH SIG:  
<https://nghsig.jp/cwr2017.html>  
(2018年8月28日参照)
- [18] Android 8.0 Compatibility Definition, 7.4.2.4. Wi-Fi Passpoint:  
<https://source.android.com/compatibility/8.0/android-8.0-cdd>  
(2018年8月28日参照)
- [19] HS2.0 device checker:  
<https://play.google.com/store/apps/details?id=tech.pirosap.hs20devicechecker>  
(2018年8月28日参照)

## [報告]

## SC18 報告

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

江川 隆輔

2018年11月11日～16日に米国テキサス州ダラス市のKAY BAILEY HUTCHISON コンベンションセンターにおいて、International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC18)が開催されました。SC18は約365の企業や大学、研究所などが展示ブースを構える高性能計算分野における最大規模の国際会議です。今年には世界各国から13,071人の研究者、システム開発者が集い、当該分野における最新の成果発表や技術紹介があり、将来のシステムとアプリケーション開発に関して活発な議論がされました。今年度は、当センター高性能計算(NEC)共同研究部門の小松准教授の論文、情報科学研究科滝沢・江川研究室のMulya Agung君のポスター論文が採択され、発表を行い第一線の研究者らとの議論を行いました。

また、サイバーサイエンスセンターでは、本学の高性能計算に関する研究成果の発信を目的に、流体科学研究所、金属材料研究所、メディカルメガバンクと連携して展示ブースを構えました。展示ブースでは、本センターのシステム紹介、将来の高性能システムのための研究開発に関する展示・成果発表を行いました。展示ブースに多くの訪問者を迎え、広く当センターの活動をアピールできただけでなく、大変有意義な議論と情報交換を行う事ができました。



東北大学展示ブースの様子

[報告]

平成 30 年度サイバーサイエンスセンター講習会報告

No.	講習会名	開催日時	受講者数	講師	内容
1	はじめての Linux	5 月 21 日(月) 15:00-18:00	14	佐々木 (情報部情報基盤課)	・ Linux システムの基本的な使い方 ・ エディタの使い方
2	はじめてのスパコン	5 月 22 日(火) 15:00-17:30	13	小野 (情報部情報基盤課)	・ スーパーコンピュータの紹介と 利用法入門 (見学あり)
3	はじめての Fortran	5 月 23 日(水) 15:00-18:00	6	江川 (サイバーサイエンスセンター)	・ Fortran の入門編
4	はじめての並列化	5 月 24 日(木) 15:00-18:00	11	小松 (サイバーサイエンスセンター)	・ 並列プログラミングの概要
5	はじめての高速化	5 月 25 日(金) 15:00-18:00	4	江川 (サイバーサイエンスセンター)	・ スーパーコンピュータの高速化について
6	MATLAB 入門	6 月 8 日(金) 13:00-17:00	11	陳 (秋田県立大学)	・ MATLAB の基本的な使い方
7	ネットワークとセキュリティ入門	8 月 3 日(金) 13:30-16:00	17	水木 (サイバーサイエンスセンター)	・ ネットワークの基本的な仕組み ・ ネットワークの危険性と安全対策
8	はじめての Linux	8 月 6 日(月) 9:00-12:00	9	山下 (情報部情報基盤課)	・ Linux システムの基本的な使い方 ・ エディタの使い方
9	はじめてのスパコン	8 月 6 日(月) 13:00-15:30	9	大泉 (情報部情報基盤課)	・ スーパーコンピュータの紹介と 利用法入門 (見学あり)
10	Fortran 入門	8 月 7 日(火) 10:00-17:00 8 月 8 日(水) 10:00-12:00	12	田口 (摂南大学)	・ Fortran の初歩から応用まで
11	SX-ACE の性能分析・高速化	8 月 8 日(水) 13:00-17:00	3	江川 (サイバーサイエンスセンター)	・ スーパーコンピュータでの性能 解析から最適化まで
12	並列プログラミング入門 I (OpenMP)	8 月 9 日(木) 13:00-17:00	11	小松 (サイバーサイエンスセンター)	・ OpenMP による並列プログラミングの基礎 ・ 利用法
13	並列プログラミング入門 II (MPI)	8 月 10 日(金) 13:00-17:00	12	小松 (サイバーサイエンスセンター)	・ 並列プログラミングの概要 ・ OpenMP による並列プログラミングの基礎 ・ 利用法
14	Gaussian 入門	8 月 23 日(木) 13:00-17:00	29	岸本 (理学研究科)	・ Gaussian の基本的な使い方
15	三次元可視化システムの紹介	9 月 12 日(水) 13:00-15:00	3	山下 (情報部情報基盤課)	・ 三次元可視化システム (AVS/Express) の紹介
16	Mathematica 入門	9 月 13 日(木) 13:00-16:30	3	横井 (尚絅学院大学)	・ Mathematica の基本的な使い方
17	Marc 入門	10 月 26 日(金) 13:00-17:00	2	内藤 (工学研究科)	・ Marc の基本的な使い方
受講者数合計 (阪大・岩大からの配信による受講者を含む)			169		

## [報告]

## 滝沢・江川研究室の研究グループが最優秀論文賞を受賞しました

スーパーコンピューティング研究部・滝沢教授、江川准教授、情報科学研究科王 震君（博士課程前期 2018 年 9 月修了）、Mulya Agung 君（博士課程後期 3 年）の研究成果が、ビッグデータに関する国際会議 IEEE BigData2018 併設の The 2nd International Workshop on Automation in Machine Learning and Big Data おいて、最優秀論文賞を受賞しました。

なお、論文の情報は以下の通りです。

対象論文：Automatic Hyperparameter Tuning of Machine Learning Models under Time Constraints

著 者：Zhen Wang, Agung Mulya, Ryusuke Egawa, Reiji Suda, and Hiroyuki Takizawa



## [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/>

### MSC. Marc / Mentat のサービス終了について (No. 269)

並列コンピュータ LX406Re-2 にてサービスしている、汎用構造解析プログラム MSC. Marc / Mentat については、提供を継続することが困難となったため、2019年3月31日をもって、サービスを終了いたします。ご利用頂いておりました皆様には、ご迷惑をおかけいたしますが、ご理解を頂きたくお願いいたします。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)

### 利用者番号(アカウント)管理の徹底について (No.269)

当センターの大規模科学計算システムでは、利用に関する内規に記載された利用資格に該当し、利用を承認された本人のみが、利用者番号(アカウント)を利用できます。利用者番号を他者へ貸与することは厳しく禁止されておりますので、改めてご注意をお願いいたします。

利用者番号を登録しても、利用しなければ負担金は発生しませんので、実際に計算機システムを利用する方全員の利用申請を行ってください。また、不正アクセスの危険性が高まりますので、以下のことを行わないよう秘密鍵の管理の徹底もお願いいたします。

- ・ パスフレーズなしの秘密鍵の使用
- ・ 秘密鍵、パスフレーズの使い回し
- ・ 秘密鍵のメール添付、USBメモリやホームディレクトリに保存

情報セキュリティ対策の強化のため、皆様のご理解とご協力をお願いいたします。

(共同利用支援係)

## — SENAC 執筆要項 —

### 1. お寄せいただきたい投稿内容

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。
- (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ページを越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

新年あけましておめでとうございます。

昨年を振り返れば、なかなか思い通りに事を進めることができず、個人的には2019年に向けた課題を多く残した年でした。一方、我が家には新たなメンバー（犬）を迎え、朝晩の散歩の楽しさに目覚めた年でもあります。

センター赴任12年目になる今年は、猪突猛進…。ではなく、慎重に身の回りのこと一つ一つを楽しみながら、積み残すことなく着実にこなして行きたいと思えます。

2019年が皆さんにとって良い年でありますように！（R.E）

新年、明けましておめでとうございます。

私が前回スタッフ便りを執筆した際、仙台国際ハーフマラソン(21.0975km)へ初挑戦することについて触れていました。今回、投稿する機会を頂きましたので、当時のタイムと直近の同じ大会のタイムを恐る恐る比較したところ、30分以上もタイムを短縮することができていて驚きました。今年も5月に行われる仙台国際ハーフマラソンのゼロ次関門を突破することができましたので、新コースを走れる楽しみはもちろんのこと、マラソンを通じて知り合った学内の他部局の方々に負けないう頑張りたいと思えます！さらに今年は、次の段階に進むべく初フルマラソンへ挑戦します。きっと、次の執筆当番の際にはどうなったかをご報告できればと考えています。ご報告つながりで恐縮ですが、昨年ご縁があり結婚しまして、良い運気を今年も継続できればと思っています。

スーパーコンピュータの利用も逐次処理からスタートして、高速化・並列化などのチューニングをすることによって、プログラム実行にかかる処理時間を大幅に短縮させることも夢ではないと思えます。サイバーサイエンスセンターでは、スカラー型とベクトル型のスーパーコンピュータを保有していますので、プログラムの特徴に合わせてご利用いただくことができます。利用に関しては、気兼ねなく利用相談して頂ければと思えますし、青葉山のランニングもご一緒できる方いましたら、ご一報頂ければ嬉しいです。（T.M）

### SENAC 編集部会

滝沢寛之 水木敬明 後藤英昭 江川隆輔  
伊藤昭彦 吉田貴子 大泉健治 小野 敏  
斉藤くみ子



新青葉山キャンパス

平成31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 株式会社 東誠社

# 索引

SENAC Vol. 51 (No. 1~No. 4)

2018.1~2018.10

項目	No.	p.	項目	No.	p.
<b>巻頭言</b>			<b>報告</b>		
情報科学の研究推進における超高速コンピューティングの役割 徳山 豪	1	1	SC17 報告 江川隆輔	1	45
<b>共同研究成果</b>			<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利用報告> 工学部電気情報理工学科「アドバンス創造工学」プログラム「深層学習による歌声音声変換」 伊藤彰則	2	62
X線自由電子レーザーによる分子の超高速崩壊のシミュレーションモデル 中村公亮 他	1	1	第27回高性能シミュレーションに関するワークショップ(WSSP)を開催しました 滝沢寛之	2	64
ベクトル型スーパーコンピュータを用いた八木・宇田アンテナアレーの高利得化 今野佳祐 他	1	14	平成29年度東北大学サイバーサイエンスセンター顕彰について	2	66
乱流の生成とその維持機構に関する研究 伊澤精一郎 他	1	20	八巻助教が「平成29年度トーキン財団奨励賞」を受賞しました	2	67
スーパーコンピュータによるリアルタイム津波浸水被害予測 越村俊一 他	1	30	平成29年度サイバーサイエンスセンターセミナー報告	2	67
コンパクトな計算機によるリアルタイム流体解析の実現に向けて 松岡 浩 他	2	1	JHPCN 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第10回シンポジウム報告 江川 隆輔	3	27
Building-Cube Methodを用いた翼胴形態のRANS解析 牧野真弥 他	2	11	吉澤誠教授が総長教育賞を受賞	3	28
直接数値解析による平面ポアズイコ流の乱流縞形成の研究 塚原隆裕 他	2	22	平成30年度文部科学大臣表彰において小林広明センター長特別補佐、撫佐昭裕客員教授が科学技術賞(開発部門)を受賞	3	29
回転霧化塗装機を用いた蒸発を伴う噴霧塗装のLargeEddy Simulation 松下 洋介 他	3	1	オープンキャンパス2018報告 江川隆輔	4	24
民間航空機開発における大規模CFD解析の適用(その2) 前田 一郎	3	9	「ELyT School 2018 in Sendai」参加者見学報告 江川隆輔	4	25
忍者アレーアンテナ - 後方散乱の小さいフェーズドアレーアンテナ - 今野佳祐 他	4	1	<b>利用相談室便り</b>		
周期構造上に置かれたアンテナの解析手法の開発 有馬卓司 他	4	10	平成30度の利用相談について	3	22
DBDプラズマアクチュエータを用いたフィードバック翼周流れ剥離制御モデルの検討 藤井孝藏 他	4	14	テクニカルアシスタントの自己紹介	3	24
<b>大規模科学計算システム</b>			<b>「Web版大規模科学計算システムニュース」より</b>		
第1原理電子構造計算コードVASPのSX-ACE向け最適化	1	35	利用負担金額の表示コマンドについて(No. 248)	1	60
SSHアクセス認証鍵生成サーバの利用方法	2	32	利用負担金額の表示コマンドについて(No. 252)	2	69
アプリケーションサービスの紹介	2	59	大判カラープリンタのご紹介(No. 252)	2	69
三次元可視化システムの紹介	2	58	Gaussian16のバージョンアップについて(No. 257)	2	70
<b>大学ICT推進協議会 2016年度 年次大会論文集より転載</b>			数式処理プログラムMathematicaのバージョンアップについて(No. 257)	2	70
大規模科学計算システムにおける利用者プログラムの特性分析 大泉健治 他	1	42	科学技術計算言語MATLABのバージョンアップについて(No. 257)	2	71
反応・相変化を伴う多分散系混相流シミュレーションコードの最適化 佐々木大輔 他	1	47	平成30年度利用負担金について(No. 257)	2	72
デジタル時代の教育・研究を支える基盤としてのeduroamと次世代ホットスポット 後藤 英昭 他	1	52	平成30年度共同研究について(No. 258)	2	74
<b>お知らせ</b>			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(No. 258)	2	75
平成30年度サイバーサイエンスセンター講習会のご案内	2	31	民間企業利用サービスについて(No. 258)	2	75
サイバーサイエンスセンター講習会(夏期・秋期開催分)のご案内	3	20	大規模科学計算システムの機関(部局)単位での利用について(No. 258)	2	76
学部学生のためのスーパーコンピュータ無償提供制度について	4	23	利用負担金額の表示コマンドについて(No. 260)	3	30
			利用者番号(アカウント)管理の徹底について(No. 261)	3	30
			コンパイラのバージョンアップについて(No. 263)	4	26
			利用者番号(アカウント)管理の徹底について(No. 264)	4	26
			利用負担金額の表示コマンドについて(No. 265)	4	27

## 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	1～1,024	規定値：1週間 最大値：1ヶ月	60GB×ノード数	sx	利用ノード数
無料	1	1時間	60GB		f
デバッグ	1～16	2時間	60GB×ノード数	debug	利用ノード数
	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週間 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		a
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

# 目次

東北大学サイバーサイエンスセンター

大規模科学計算システム広報 Vol.52 No.1 2019-1

[巻頭言]		
サイバーサイエンスセンターと基礎科学としてのコンピュータサイエンス	河野 裕彦	1
[共同研究成果]		
複雑系に有効な非断熱分子動力学計算法の開発と分子モーター光異性化反応への適用	菅野 学・高橋みなみ・花崎 浩太 原田 宣之・河野 裕彦	3
乱流の生成とその維持機構に関する研究	伊澤精一郎・吉川 穰・李 根燮 西尾 悠・福西 祐	14
Ar熱プラズマジェットを用いたSiナノ粒子大量創製プロセスにおける軸方向磁場の効果	茂田 正哉	18
[大学 ICT 推進協議会 2018 年度年次大会論文集より]		
東北大学サイバーサイエンスセンターにおける高速化推進研究活動の取り組みについて	小野 敏・大泉 健治・山下 毅 齋藤 敦子・佐々木大輔・森谷 友映 江川 隆輔・滝沢 寛之	25
『全国洪水氾濫被害額推定のための2次元氾濫計算』コードのSX-ACE 向け最適化およびMPI 並列化	山下 毅・田中裕夏子・江川 隆輔 滝沢 寛之・風間 聡・多田 毅	30
東北大学における教職員を対象とした情報セキュリティ教育	小野崎伸久・曾根 秀昭・水木 敬明	36
東北大学における標的型攻撃メール対応訓練	小野崎伸久・曾根 秀昭・水木 敬明	40
学術無線 LAN ローミング基盤eduroam と次世代ホットスポット基盤 Cityroam のキャンパスへの展開	原田 寛之・後藤 英昭	45
[報告]		
SC18報告	江川 隆輔	53
平成30年度サイバーサイエンスセンター講習会報告		54
滝沢・江川研究室の研究グループが最優秀論文賞を受賞しました		55
[Web 版大規模科学計算システムニュースより]		
MSC. Marc/Mentatのサービス終了について (No. 269)		56
利用者番号 (アカウント) 管理の徹底について (No. 269)		56
執筆要項		57
スタッフ便り		58