ISSN 0286-7419

TOHOKU
UNIVERSITY

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.49 No.2 2016–4

Cyberscience
Center

Supercomputing System
Tohoku University
www.ss.cc.tohoku.ac.jp

大規模科学計算システム関連案内

＜大規模科学計算システム関連業務は、サイバーサイエンスセンター本館内の情報部情報基盤課が担当しています。＞

http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/

階	係・室名	電話番号(内線)* e-mail	主なサービス内容	サービス時間 平 日
一階	利用相談室	022-795-6153(6153) sodan05@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	8:30～21:00
	展 示 室 (分散コンピュータ博物館)		歴代の大型計算機等の展示	9:00～17:00
	可視化機器室	(3428)	三次元可視化システムの利用	9:00～21:00
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、アプリケーションに関すること	8:30～17:15
	ネットワーク係	022-795-6253(6253) net-sec@cc.tohoku.ac.jp	ネットワークに関すること	8:30～17:15
四階	研究開発部	022-795-6095(6095)		
五階	端末機室	(3445)	PC 端末機(X 端末)	

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

本誌の名前「SENAC」の由来

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

［巻頭言］

センター長に就いて

曽根秀昭
東北大学サイバーサイエンスセンター

今年度から東北大学サイバーサイエンスセンター長に就きましたので，ご挨拶させていただきます。冒頭から個人的なことで失礼いたしますが，私は 1992 年 12 月に当時の大型計算機センターに移ってから 23 年の間，このセンターの業務に関わってまいりました。その間に，青葉山に移転し，組織は情報シナジーセンターの 7 年間を経て，8 年前からサイバーサイエンスセンターに至りました。

前任の小林広明センター長には，サイバーサイエンスセンターに改組して以降の 8 年間にわたってセンター長をお願いし続けてきました。サイバーサイエンスセンターが発足した頃は，大学の情報基盤の環境変化があわただしく，学内では全学共通情報基盤の整備と運用の危機的状況の立て直しに取り組むために情報シナジー機構の再構築があり，一方，全国では次世代のナショナル・フラッグシップ・スーパーコンピュータに代表される研究開発・整備とともに各大学の情報基盤センター群における全国共同利用の在り方から議論されていました。当時の当センターの判断として，大きな変革があるスーパーコンピューティング分野でリーダシップをとることが最優先であるとの思いから，前センター長にお願いし，昨年度まで続きました。

8年前の当センターでは, スーパーコンピュータシステムを更新してSX-9を導入したところで，また，東北大学における最初の電子計算機であった SENAC-1 から 50 周年の年でした。その後，当センターの大規模科学計算システムは昨年にスーパーコンピュータ SX-ACE に更新して，新しく建てた 2 号館で並列コンピュータ LX 406Re-2 とともに運用しています。共同利用の仕組みとして, 一般のコンピュータよりも 2〜3 けた上の性能のコンピュータをどなたの研究にも利用しやすく提供するという使命を継承，強化し，その利用と研究をサポートする体制を整えて，また，その役割を高度化するために共同利用・共同研究拠点などとして広く提供して，大規模計算科学の多くの研究者を支えているものと自負します。

大学の共通情報基盤については，インターネットの利用が電話などよりも広く浸透する時代になり，大学でもネットワークシステムの整備や情報処理システムの導入を推進する時期は過ぎたのではないかと思っております。普遍的に利用できるようになった情報通信基盤をいかに活用して大学の研究・教育や運営をより良く高めていくのかという技術応用や情報通信環境の重要性が増していくところに本センターが適切で十分な役割を果たしていかなければならないと考えます。それらの利用とともに，情報セキュリティ対策が目下の懸案事項ととらえますし，その役目を担える人材育成にも当センターが貢献していくことが必要です。

以上のような課題は，昨年度までに当センターで検討し策定した，今年度からの国立大学第 3 期中期計画期間の目標と計画にも盛り込んでおります。

東北大学サイバーサイエンスセンターの第 3 期中期計画期間における基本的な目標は，以下の通りです。

> 本センターは、世界最先端の情報基盤を整備運用し、先端的な利用技術及び次世代の情報基盤に不可欠な研究開発を行い、独創的な研究推進の環境を創生し、この分野の指導的人材を育成することによって学術研究や産業、地域、文化に貢献する。
>
> 共同利用・共同研究拠点として、全国の大学等に大規模科学計算機資源を提供するとともに、次世代の情報基盤の研究・開発を行う拠点として先端的研究成果を追求する。

この基本的な目標を実現するために，「先端情報基盤とその整備・運用に関する研究を推進し、当該成果の学内外への提供ならびに利活用の支援・促進に努める」こと，および「先端情報基盤に関する研究の実施体制を整備・強化する」こと，「先端情報基盤に関する研究の成果の利活用を支援・促進する」こと，そして「海外の研究機関や研究者との情報交換や共同研究の機会拡大を推進する」ことなどの目標を掲げて，計画を定めました。

中期計画期間である 6 年間は，情報通信技術にとっては長すぎる期間とも言えますので，期末にどのような情報システムや情報サービスを提供しお使いいただくことになるのかは予想しきれませんが，本学内外の関係者の方々，とくに利用される方々のご期待に応えられるよう進めていきたいと考えます。今後もご支援とご指導をよろしくお願いいたします。

［お知らせ］

平成 28 年度サイバーサイエンスセンター講習会のご案内

サイバーサイエンスセンターでは､利用者のみなさまに当センターの計算資源を効率的に利用していただくことを目的に講習会を開催しております｡初めてスーパーコンピュータを利用される方から現在活用されている方を対象に、幅広いカリキュラムを用意しています。特に、昨年度からは利用者のみなさまのコードをお持ちいただいて、当センターの教員、技術職員と共にコードの高速化に取り組むハンズオンセミナーも行っております。

みなさまの参加をお待ちしております。

No.	名　称	開催日程	募集人数	内容概略
1	UNIX 入門	5 月 24 日(火) 13:00-16:00	20	･UNIX システムの基本的な使い方 ･エディタの使い方 ･プログラムの実行方法
2	大規模科学計算システムの利用法	5 月 25 日(水) 13:00-15:30	20	･スーパーコンピュータ SX-ACE と並列コンピュータ LX 406Re-2 の紹介と利用法
3	OpenMP プログラミング入門	5 月 26 日(木) 13:00-17:00	20	･並列プログラミングの概要と OpenMP による並列プログラミングの基礎
4	MPI プログラミング入門	6 月 1 日(水) 10:00-17:00	20	･MPI による並列プログラミングの基礎
5	SX-ACE における高速化技法の基礎＋（ハンズオンセミナー）	6 月 2 日(木) 10:00-14:00 (14:00-17:00)	20 (10)	･実習によるプログラムの高速化を目的としたスーパーコンピュータの最適化および並列化の基礎 ･ハンズオンセミナー（予約制･10 名）
6	MATLAB 入門	6 月 17 日(金) 13:00-17:00	15	･MATLAB の基本的な使い方
7	可視化システムの利用法	6 月 21 日(火) 10:00-17:15	10	･可視化システムの基本的な使い方
8	ネットワークとセキュリティ入門	8 月 2 日(火) 13:30-16:00	30	･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
9	Gaussian 入門	8 月 30 日(火) 13:00-17:00	15	･Gaussian の基本的な使い方
10	Marc 入門	8 月 31 日(水) 13:00-16:50	15	･Marc の基本的な使い方
11	Mathematica 入門	9 月 6 日(火) 13:00-17:00	15	･Mathematica の基本的な使い方
12	UNIX 入門	9 月 26 日(月) 13:00-16:00	20	･UNIX システムの基本的な使い方 ･エディタの使い方 ･プログラムの実行方法
13	大規模科学計算システムの利用法	9 月 27 日(火) 13:00-15:30	20	･スーパーコンピュータ SX-ACE と並列コンピュータ LX 406Re-2 の紹介と利用法
14	OpenMP プログラミング入門	9 月 28 日(水) 13:00-17:00	20	･並列プログラミングの概要と OpenMP による並列プログラミングの基礎
15	MPI プログラミング入門	9 月 29 日(木) 10:00-17:00	20	･MPI による並列プログラミングの基礎
16	SX-ACE における高速化技法の基礎＋（ハンズオンセミナー）	9 月 30 日(金) 10:00-14:00 (14:00-17:00)	20 (10)	･実習によるプログラムの高速化を目的としたスーパーコンピュータの最適化および並列化の基礎 ･ハンズオンセミナー（予約制･10 名）

備考：･申し込みは、ウェブページ　http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/guide/kosyu.cgi　からお願いします。
･プログラムは予定のものです。若干変更になる場合がありますのでお含みおきください。
･問合せ先：共同利用支援係（022-795-3406,uketuke@cc.tohoku.ac.jp）

サイバーサイエンスセンター講習会の様子

サイバーサイエンスセンター全景（右本館、左 2 号館）

[共同研究成果]

従来型観測のみを用いた日本域再解析システムの構築に向けた同化実験

福井真[1,2]　岩崎俊樹[1]　斉藤和雄[2]　瀬古弘[2]　国井勝[2]
[1]東北大学大学院理学研究科　[2]気象研究所

温暖化に対する地域スケールの応答などを研究するために、局地循環や詳細な地形の影響などのメソスケール現象を対象とした、1958 年以降の長期間均質で高精度な高解像度気象データセット作成を目指して、長期に渡り入手可能な測候所等での地上気象観測やラジオゾンデのデータのみを、気象庁非静力学モデルを用いた局所アンサンブル変換カルマンフィルタを利用して同化し、その有効性について検証を行った。同化を行った場合、一般に行われている力学的ダウンスケールに対して、大幅な改善が確認できた。これは、従来型観測のみを用いた長期領域再解析の実施の有効性を支持するものである。

1.　はじめに

近代的な気象観測網が整備されたのは 1960 年頃である。それから、およそ 55 年が経過し、観測データに基づく地球温暖化の直接検証が可能となりつつある。過去数十年程度遡った長期間にわたり均質で高精度な三次元気象データを、最新の数値予報モデルやデータ同化システムを一貫して用いて作成する試み(再解析)が、NCEP/NCAR[1]を筆頭に、世界の主要な現業センターを中心にして行われている。さらに、時間的均質性をより高めるには、数値予報モデルやデータ同化システムだけでなく、長期にわたり入手可能なゾンデや地上での直接観測(従来型観測)のみを同化することが有効であり、既にいくつか試みられている[2,3]。しかしながら、こうした再解析は全球を対象にしたものが主で、最新のものでも数十 km 程度の水平格子間隔である。この程度の解像度では、詳細な地形の効果や局地循環、降水強度などを現実的に再現するには不十分である。

温暖化に対する地域スケールの応答について議論するために、3 次元の高解像度のデータセットが望まれている。また、こうした長期間均質で且つ高解像度のデータは、局地循環や細かい地形の影響などのメソスケール現象を議論したり、洪水予測、積雪診断、農作物病害診断などのために気象データを高度利用したりするにも有用である。さらに、長期間均質なデータは、モデルや同化手法の開発における初期値・境界値や参照データともなりうる。

全球再解析のような低解像度データを高解像度化する手法として、力学的ダウンスケールがある。力学的ダウンスケールでは、低解像度データを高解像度領域モデルに与えて計算することで、対象領域において力学的整合性の取れた高解像度データを作成する。この時に、低解像度データを初期値や側面境界値として与えたり、さらに長期積分の際は spectral boundary coupling 法(SBC 法[4])のような低波数成分を低解像度データに緩和させたりするのが一般的である。しかし、低解像度データのこのような強制だけでは、内部の場を制御するには必ずしも十分ではなく、力学的ダウンスケールの結果が境界値として与えた低解像度データよりも再現性が悪化することも多い。

そこで本研究では、単純な力学的ダウンスケールではなく、データ同化を取り入れた領域再解析の有効性を調査する。レーダーや衛星などの 1980 年以降に導入された観測データは、再解析の品質を大きく変化させる。これらの観測は詳細な解析を可能とするものではあるが、しばしばバイアスを含むため、データに不均一性を生じ経年変化のシグナルに影響する。このため、今回のデータ同化には従来型観測のみを用いることとし、時間的均質性が担保された長期高解像度領域再解析の実施可能性について評価する。

2.　実験設定

本研究では、同化スキームとして、予報モデルに気象庁非静力学モデル(NHM[5])を採用した 4

次元局所アンサンブル変換カルマンフィルタ(LETKF[6])である NHM-LETKF[7]を用いる。
NHM-LETKF では、NHM によるアンサンブル予報(初期条件に含まれる不確実性に対応する摂動を加えた多数のメンバーからなる予報)によって、第一推定値及びその流れに依存した予報誤差共分散を計算し、この予報誤差共分散と事前に設定した観測誤差共分散から求めた最適な重み(カルマンゲイン)に応じた修正を第一推定値に施す。観測していない物理量も含めて、アンサンブル予報による予報誤差共分散に基づいた修正が行われるので、力学的に整合した解析値を得られることが期待できる。また、LETKF では各格子点値を独立に解析するため、並列化効率が非常に高いという特徴がある[8]。

同化に用いた観測データは、品質管理済みの気象庁現業解析用観測データの中から、時間的均質性を重視した再解析である JRA-55C[3]を参考に、従来型観測である地上気圧、ゾンデ(気温、東西風、南北風、水蒸気量)、台風ボーガス(東西風、南北風)を採用した。同化ウィンドウは、解析時刻の前 6 時間とした。アンサンブルメンバー数は、不十分であるとサンプリングエラーの影響で、予報誤差共分散に偽のシグナルが含まれてしまう。偽のシグナルに基づいた解析を行えば精度が悪化してしまう。しかし、モデルの自由度は(予報変数)×(格子数)～10^7 であり、サンプリングエラーを除去出来るだけアンサンブルメンバー数を大きくするのは、計算量が膨大となり現実的ではない。遠方の物理量間の相関が一般に小さいことを利用し、解析格子点からの物理的な距離に応じて観測による修正の効果を緩和させる局所化が、実用的なアンサンブルメンバー数で、サンプリングエラーの影響を抑えるためには、有効である[9]。本実験では、アンサンブルメンバー数を 10、局所化スケールを[7]に倣い、水平に 200 km、鉛直に 0.2 ln$p$ (約 2km)と設定した。また、NHM の非線形性や初期値・境界値やモデルの不確実性の見積もり不足に伴う予報誤差共分散の過小評価を補うため、共分散膨張を行う必要がある。本実験では、共分散膨張係数を対象領域内で一律 1.5 とした。

アンサンブル予報を行う NHM の支配方程式は、完全圧縮非静力学方程式系を採用している。水平格子間隔は 25km として、日本を含む領域(図 1)にとる。今後、図 1 の青枠内側領域を対象に水平格子間隔 5km でデータ同化を実施する予定であるが、本研究では、まず 25km で十分経験を積み同化システムの最適化を図る。鉛直層は、モデル上端 21801m までの 50 層で地形に沿うハイブリッド座標を用いる。初期値・側面境界値には JRA-55[10]を与えた。初期値については、ランダムに選択した年の同月日時刻の場を与えることで、10 のアンサンブルメンバーを作成した。側面境界値には摂動を与えず、予報時刻に対応する場を与えた。湿潤過程は、氷相(雲氷、雪、霰)を含むバルク法による雲物理過程[11]に加え、本実験の水平解像度では十分解像できない積雲対流による効果を評価する Kain-Fritsch スキーム[12]を併用する。サブグリッドスケールの渦によるグリッドスケールへの影響を見積もる乱流過程では、ラージエディシミュレーションの結果を基にクロージャ定数を決めた、Mellar-Yamada-Nakanishi-Niino level3 スキーム(MYNN3)[13]によって扱う。放射過程では、晴天放射過程と雲放射過程を考慮する。この雲放射過程で考慮する雲は、MYNN3 で求めたサブグリッドスケールの非均一性を利用した部分凝結スキーム[14]で評価する。地中温度は、土壌 4 層の熱拡散方程式によって、土壌水分は土壌 3 層の強制復元法によって予報する。地表面フラックスは[15]のスキームを用いて見積もる。対象期間は、2014 年 8 月 1 日 12 UTC から 9 月 1 日 00 UTC にとり、期間平均値を求める際は、初めの 5 日間をスピンアップとして捨て、2014 年 8 月 6 日 12 UTC から 9 月 1 日 00 UTC の結果から求めた。

この NHM-LETKF による同化実験(DA)に加え、同化を行わない 2 つの実験を行った。一方は、同化実験と同じ設定の NHM を用いた力学的ダウンスケール実験(DS)で、他方は、側面境界としてのみではなく、SBC 法により低波数成分も JRA-55 に緩和させた実験(DS-SBC)である。検証データとしては、気象庁現業メソ解析(MA)を用いる(領域は図 1 の青枠内)。MA は、従来型観測のみならず、衛星や地上のリモートセンシングによる最新の観測により得られたデータを 4 次元変分法により同化している[16]。

3. 結果

図 2 は、海面更正気圧についての、根平均二乗誤差(RMSE)の時系列を表したものである。DS は RMSE が期間を通して最も大きく、期間平均で 3.1hPa であった。また、SBC を導入した DS-SBC では、DS よりも境界値として用いた JRA-55 の強制を強く受けるため比較的誤差が小さく、期間平均の RMSE は 1.6hPa 程度であった。DS 及び DS-SBC の結果は、境界値として用いた JRA-55 よりも誤差が大きくなっていた。一方、DA では、実験開始時にあった誤差が、予報-解析サイクルにより軽減され、同化開始から 3 日程度経つと、RMSE が 0.8hPa 前後で安定して推移するようになった。そして、DS や DS-SBC よりも誤差は小さくなり、JRA-55 と同程度となった。尚、6 日から 11 日にかけて RMSE が大きくなっているが、これは台風 11 号が検証領域内に侵入し温帯低気圧化した時期に対応している。台風の位置ずれや強度不足を反映し誤差が大きくなった。図 3 は、500hPa 面のジオポテンシャル高度についての、RMSE の時系列を表したものである。DS は、RMSE が期間を通して最も大きく、期間平均で 40gpm であった。また、SBC を導入した DS-SBC では、期間平均の RMSE が 16gpm 程度であった。DA は、海面更正気圧の場合と違い JRA-55 と比較すると誤差が大きくなったものの、DS や DS-SBC よりは誤差が小さく、期間平均 RMSE が 14gpm であった。図 4 は、MA に対するジオポテンシャル高度の RMSE の期間平均の鉛直プロファイルを示している。DA は、全層で DS よりも誤差は小さく、DS-SBC に対しても、300hPa(高度約 7km)までは誤差軽減が確認できた。

これらの結果から、NHM-LETKF によって安定して同化がなされていることが確認できた。そして、従来型観測しか同化していないが、一般的な力学的ダウンスケールに対し、地上から 300hPa 面程度までは改善することが示された。海面更正気圧の改善に対して、上空に行く程、ジオポテンシャル高度の改善が少ないのは、地上観測に対し、高層観測は空間的にも時間的にも疎らであることが一因である。また、SBC は、高度約 7km 以上の上空に作用させており、DS-SBC では、JRA-55 による強制の影響は上空の方が強い。このため、DA の DS-SBC に対する改善が上空で小さくなっているものと考えられる。さらに、中・上層のジオポテンシャル高度が、解析を行うことで第一推定値である 6 時間予報よりも誤差が大きくなっていた(図 5)。これは、局所化や共分散膨張のために、地上気圧の同化に伴う地上付近の物理量の修正に対して、上空の物理量の修正が不十分になったからであると考えられる。NHM による予報では、解析で力学的整合性が崩れたことで励起された重力波によって上層の修正が散逸される。そのため、第一推定値である 6 時間予報値が解析値よりも RMSE が小さくなったものと考えられる。鉛直局所化スケールを大きくすることで、上空の解析の力学的整合性と精度の向上が期待できる。ただし、局所化スケールを大きくすると、サンプリングエラーの影響を受けやすくなる。特に、本実験では、計算量を考慮し、アンサンブルメンバー数は 10 と、他のアンサンブルカルマンフィルタを用いた研究（例えば［7］では 50 メンバー）と比べても非常に少ないため、精度悪化につながる可能性がある。実際に鉛直局所化スケールのみを $0.4\ln p$(約 0.5km)に拡げた実験(DA_0.4)を行うと、上空に気温修正が入り、地上気圧の修正の影響が下層に限定されるようになった(図 6)。そして、解析による誤差拡大は抑えられたが、誤差の大きさ自体は目立った改善がなかった。今後は、鉛直方向の局所化スケールの調整を行うと同時に、リーズナブルなアンサンブルメンバー数についても調査する必要がある。

アンサンブルメンバー間のばらつき(アンサンブルスプレッド)は、データの場に依存した信頼度情報を与え、カルマンゲインを決める要素ともなる。図 2、3 の右図は、各々海面更正気圧と 500hPa 面ジオポテンシャル高度のアンサンブルスプレッドを示す。スプレッドの大きさは、概ね RMSE と同程度で推移している。台風のあった時期に RMSE が大きくなったのと対応して、スプレッドもピークを持つ。図 7 は、海面更正気圧のスプレッドの時間平均の分布を示している。渤海-日本海-オホーツク海にかけて誤差が大きくなっているがスプレッドの成長は十分ではない。一方、日本の南-東海上では、誤差もスプレッドも大きくなっている。この地域で誤差やスプレッドが大きくなるのは、観測が殆ど無いこととも整合する。ただし、スプレッドの大きさに関しては、この海域では過剰傾向にある。観測が疎らで、解析の際にスプレッドがほとんど小さくならないに

も関わらず、1.5 という大きめの共分散膨張係数を与え続けることが原因と考えられる。観測密度に応じた共分散膨張法(e.g. adaptive inflation 法[17])の導入について検討が必要である。また、本実験で、共分散膨張係数を大きめにとっている理由の一つは、本来存在するはずの境界の不確実性を考慮しないことを補うためである。領域モデルを用いた解析−予報サイクルにおいても側面境界摂動の重要性は大きい[18]ので、今後は境界摂動の影響も併せて検討が必要である。

4. まとめ

従来型観測のみを用いた長期領域再解析実施の有効性を評価するために、2014 年 8 月を対象に NHM-LETKF を用いた同化実験を行った。NHM-LETKF を用いて従来型観測だけを同化することで、一般的に行われてきた力学的ダウンスケールに比べて、対流圏における高精度な気象場の推定を行うことができた。これは、従来型観測のみを用いた長期領域再解析の実施の有効性を支持するものである。本実験で用いた領域再解析システムの改善に向けた検討課題として、計算コストを抑えることを念頭に置きながら、力学的整合性を保つことを目的とした鉛直局所化スケールの拡大、境界の不確実性を考慮するための側面境界摂動の与え方、日本の南−東海域の過剰なスプレッド軽減のための観測密度に応じた共分散膨張の与え方が挙げられる。また、水平格子間隔 25km での再解析を構築後、水平格子間隔 5km での再解析に取り組む予定である。

謝辞

本研究は、東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータを利用することで実現することができた。本研究は、文部科学省の HPCI 戦略プログラムの助成を受けたものである。

参考文献

[1] Kalnay, E., and co-authors: The NCEP/NCAR 40-year reanalysis project, *Bull. Amer. Meteor. Soc.* **77**, 437-471, 1996

[2] Compo, G. P., and co-authors: The twentieth Century reanalysis project, *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **137**, 1-28, 2011

[3] Kobayashi, C., H. Endo, Y. Ota, S. Kobayashi, H. Onoda, Y. Harada, K. Onogi, H. Kamahori: Preliminary results of the JRA-55C, an atmospheric reanalysis assimilating conventional observations only., *SOLA.*, **10**, 78-82, 2014

[4] Yasunaga, K., H. Sasaki, Y.Wakazuki, T. Kato, C. Muroi, A. Hashimoto, S. Kanada, K. Kurihara, M. Yoshizaki, and Y. Sato: Performance of long-term integration of the Japan Meteorological Agency nonhydrostatic model using the spectral boundary coupling method. *Wea. Forecasting*, **20**, 1061-1072, 2005.

[5] Saito, K., J. Ishida, K. Aranami, T. Hara, T. Segawa, M. Narita, and Y. Honda: Nonhydrostatic atmospheric models and operational development at JMA. *J. Meteor. Soc. Japan*, **85**, 271-304, 2007.

[6] Hunt, B. R., E. J. Kostelich, and I. Szunyogh: Efficient data assimilation for spatiotemporal chaos: A local ensemble transform Kalman filter. *Physica D*, **230**, 112-126, 2007.

[7] Kunii, M.: Mesoscale data assimilation for a local severe rainfall event with the NHM-LETKF system. *Wea. Forecasting*, **29**, 1093-1105, 2014.

[8] Miyoshi, T., and S. Yamane: Local ensemble transform Kalman filtering with an AGCM at a T159/L48 resolution. *Mon. Wea. Rev.*, **135**, 3841–3861, 2007.

[9] Kunii, M.: The 1000-Member Ensemble Kalman Filtering with the JMA Nonhydrostatic Mesoscale Model on the K Computer. *J. Meteor. Soc. Japan*, **92**, 623-633, 2014.

[10] Kobayashi, S., Y. Ota, Y. Harada, A. Ebita, M. Moriya, H. Onoda, K. Onogi, H. Kama-

hori, C. Kobayashi, H. Endo, K. Miyaoka, and K. Takahashi: The JRA-55 Reanalysis: General specifications and basic characteristics. J. *Meteor. Soc. Japan*, **93**, 5-48, 2015.

[11] Ikawa, M., and K. Saito: Description of a non-hydrostatic model developed at the Forecast Research Department of the MRI. *MRI Tech. Rep.*, **28**, 238 pp, 1991.

[12] Kain, J. S., and J. M. Fritsch: A one-dimensional entraining/detraining plume model and its application in convective parameterization. *J. Atmos. Sci.*, **47**, 2784-2802, 1990.

[13] Nakanishi, M., and H. Niino: An improved mellor-yamada level 3 model with condensation physics: Its design and verification. *Bound.-Layer Meteor.*, **112**, 1-31, 2004.

[14] Sommeria, G., and J. W. Deardorff: Subgrid-scale condensation in models of nonprecipitating clouds. *J. Atmos. Sci.*, **34**, 344-355. , 1977

[15] Beljaars, A. C. M., and A. A. M. Holtslag: Flux parameterization over land surfaces for atmopheric models. *J. Appl. Meteor.*, **30**, 327-341, 1991.

[16] Honda, Y., M. Nishijima, K. Koizumi, Y. Ohta, K. Tamiya, T. Kawabata, and T. Tsuyuki: A pre-operational variation data assimilation system for a nonhydrostatic model at Japan Meteorological Agency: Formulation and preliminary results. *Quart. J. Roy. Metor. Soc.*, **131**, 3465-3475, 2005.

[17] Miyoshi, T.: The Gaussian approach to adaptive covariance inflation and its implementation with the local ensemble transform Kalman filter. *Mon. Wea. Rev.*, **139**, 1519-153, 20115.

[18] Saito, K., H. Seko, M. Kunii, and T. Miyoshi: Effect of lateral boundary perturbations on the breeding method and the local ensemble transform Kalman filter for mesoscale ensemble prediction. *Tellus*, **64A**, 1-23, 2012.

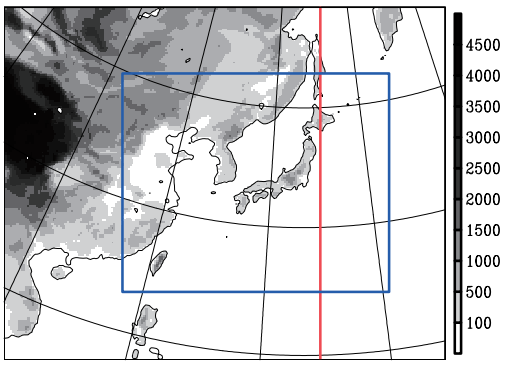


図 1　計算領域。陰影がモデルでの標高。青枠内が MA による検証領域。

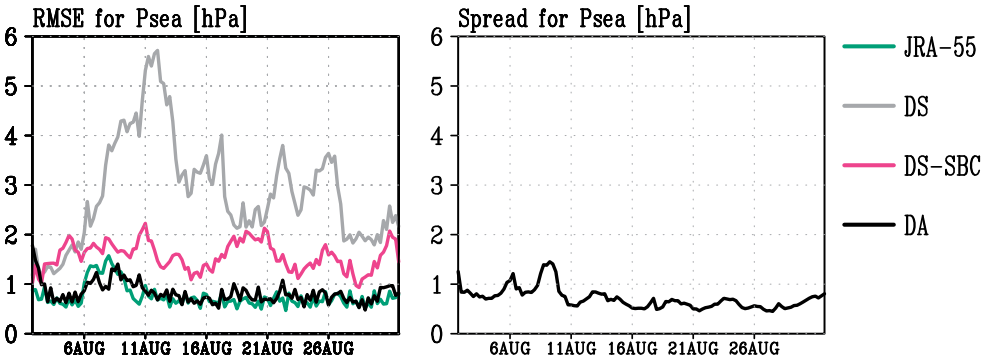


図 2　海面更正気圧の MA に対する RMSE(左図)とスプレッド(右図)。
黒が DA、灰色が DS、赤が DS-SBC, 緑が JRA-55。

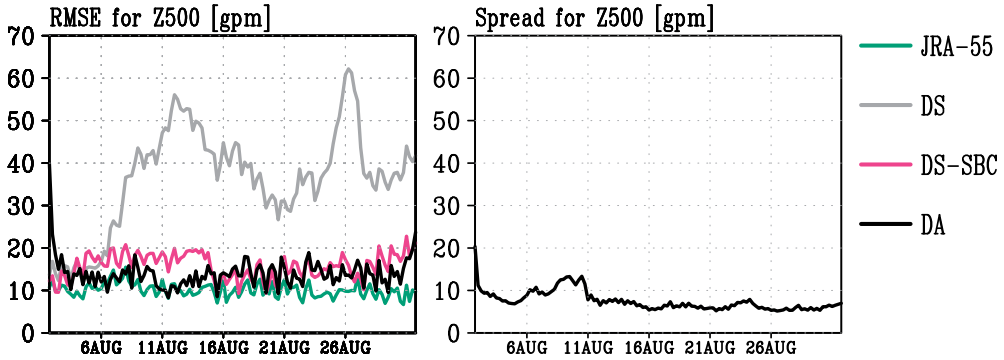


図 3　500hPa 面ジオポテンシャル高度の MA に対する RMSE(左図)とスプレッド(右図)。黒が DA、灰色が DS、赤が DS-SBC, 緑が JRA-55。

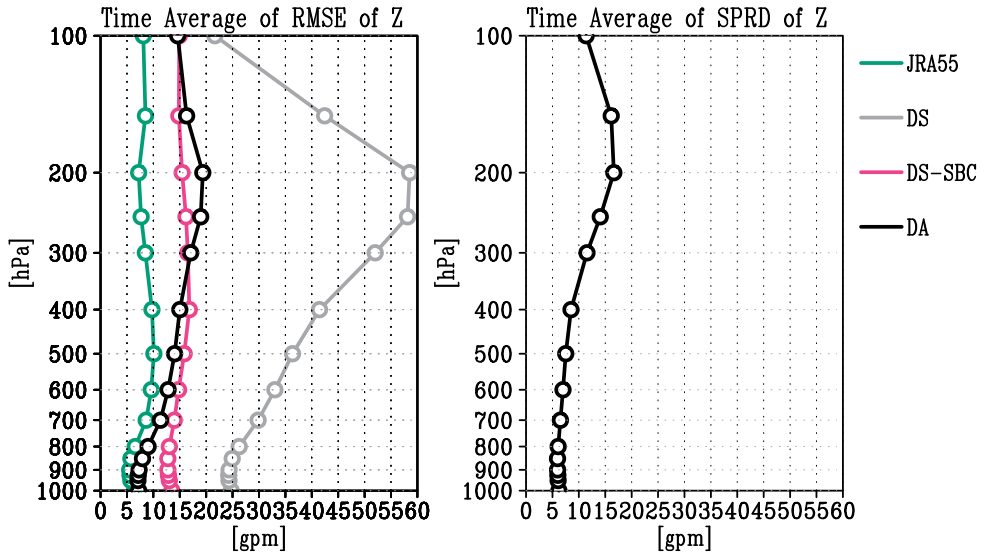


図 4　ジオポテンシャル高度の MA に対する RMSE の 2014 年 8 月 6 日 12UTC から 9 月 1 日 00UTC の平均の鉛直プロファイル。黒が DA、灰色が DS、赤が DS-SBC, 緑が JRA-55。

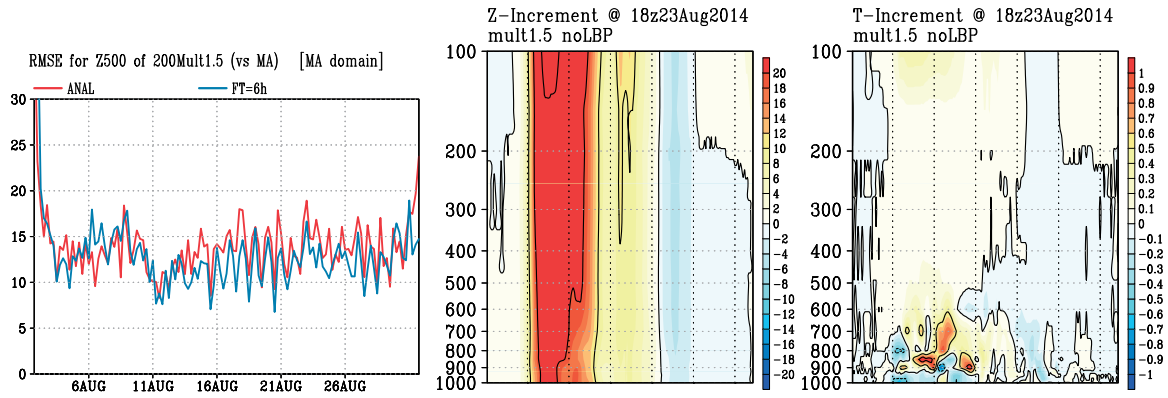


図 5　DA のジオポテンシャル高度の MA に対する RMSE の時系列(左図;赤線が解析、青線が 6 時間予報のアンサンブル平均)と、8 月 23 日 18 UTC における同化によるジオポテンシャル高度(中央図)と気温(右図)の修正量の南北断面(図 1 の赤線分)。

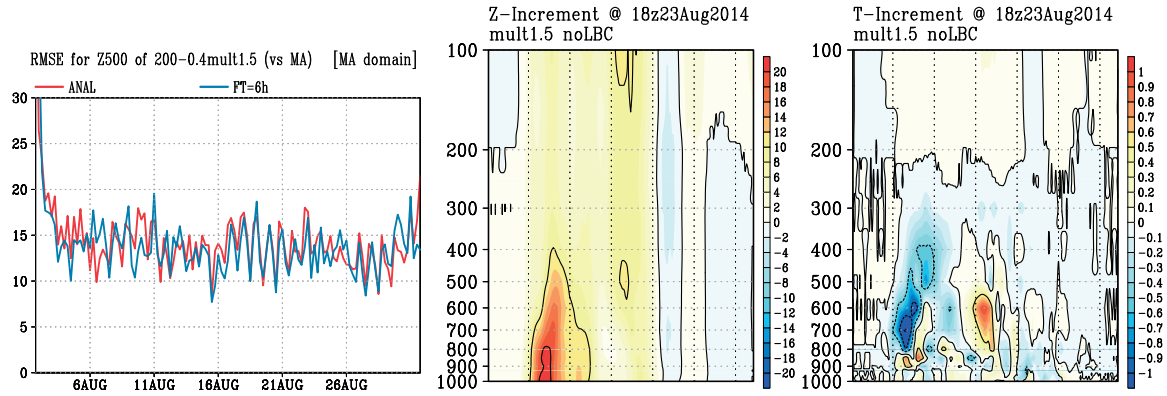


図 6　DA_0.4 のジオポテンシャル高度の MA に対する RMSE の時系列(左図;赤線が解析、青線が 6 時間予報のアンサンブル平均)と、8 月 23 日 18 UTC における同化によるジオポテンシャル高度(中央図)と気温(右図)の修正量の南北断面(図 1 の赤線分)。

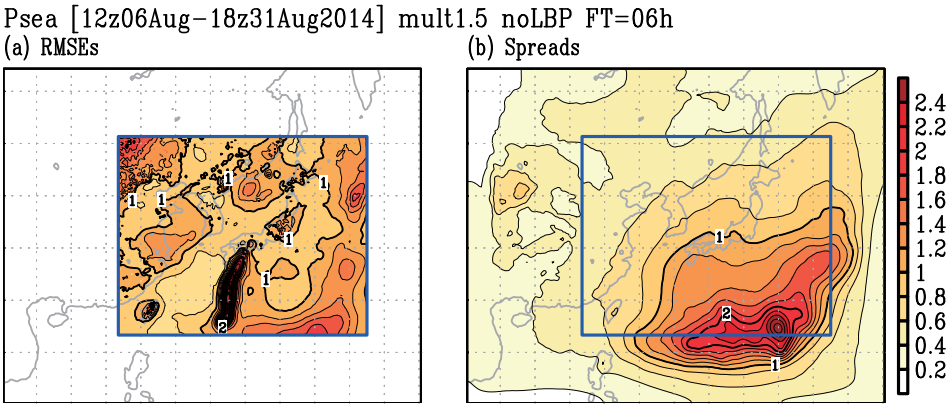


図 7　DA の海面更正気圧の MA に対する 6 時間予報の RMSE(左図)とスプレッド(右図)の 2014 年 8 月 6 日 12UTC から 9 月 1 日 00UTC の平均。

［共同研究成果］

低レイノルズ数流れにおける非定常空力特性の数値解析

児島有哉 [1)]，飯岡大樹 [1)]，佐々木大輔 [2)]
1)　金沢工業大学大学院　工学研究科　機械工学専攻
2)　金沢工業大学　工学部　航空システム工学科

本研究では，直交格子法に基づく Building-Cube Method を用いて薄翼周りの低レイノルズ数流れの 3 次元非定常解析を行う．本研究では翼近傍の格子を細かくし境界層内まで直接解析を行っている．解析対象はレイノルズ数 5,000 以下の平板翼，NACA0012 および円弧翼である．解析の結果平板翼と NACA0012 では実験結果と概ね一致した結果が得られたが，曲率変化の大きい円弧翼においては実験結果と乖離した．曲率が大きく変化する形状において，流れ場の変化を直交格子で捉える手法の研究が今後必要である．

1.　緒言

近年，Micro Air Vehicle (MAV)と呼ばれる超小型航空機が災害調査や撮影といった様々な場所で活用されている．MAV まわりの流れ場や空力特性は低レイノルズ数領域（$Re \leq 10^4$）のため，大型旅客機などとは異なっている．低レイノルズ数域における翼周りの流れは，翼前縁付近の流れは層流であるが，剥離泡によって流れは乱流へと遷移し，後方で再付着が生じる等，複雑な流れ場を形成する[1]．このような複雑な流れは翼の空力特性に大きな影響を与えることから，MAV に用いる翼型には空力的な課題が残されている．そのため，複雑な流れ場を理解し，空力性能の改善を行うことで工学的な応用が期待できる．

現在の航空機設計では風洞実験と併用し，数値流体力学（Computational Fluid Dynamics, CFD）が使用されている．計算機の高速化とともに数値解析法の研究が盛んに行われており，現在では大規模な計算を行うため並列計算が一般的になっている．並列計算を効率的に行う CFD 手法として直交格子法に基づく BCM（Building-Cube Method）が中橋らにより提案されている[2]．BCM を用いることで構造格子と同様に高次精度解法を採用でき，また効率的に格子を配置することができる．そこで，本研究ではレイノルズ数 5,000 以下における平板翼，NACA0012 及び円弧翼まわりの CFD 解析を直交格子により行い，実験における空力係数との比較を行う．低レイノルズ数では境界層が厚く，境界層内部まで格子を解像することが可能であるため，直交格子法により低レイノルズ数域における複雑な流れ場の解明を目指す．

2.　Building-Cube Method

解析には非圧縮性流体解析ソルバーの BCM［3, 4］を用いる．BCM とはブロック型直交格子に分類される CFD 手法である．BCM の特徴として，複雑形状に対しても格子生成が容易であること，計算領域を”Cube”と呼ばれる領域に分割し，Cube 内を等間隔・同数の”Cell”で分割することにより，均等な負荷分散を達成できること，また空間高次精度解法を採用できること等が挙げられる．Fig.1 に物体近傍の Cube および Cell を示す．

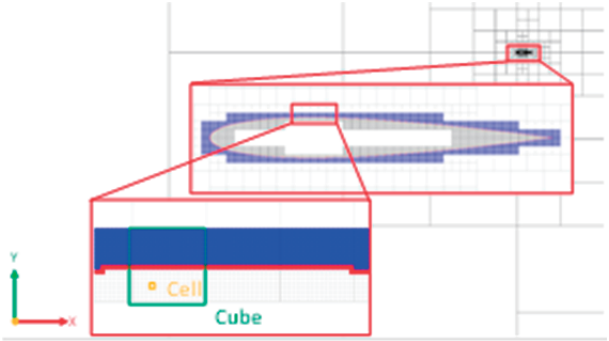
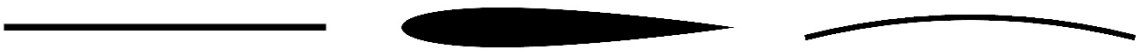


Fig.1 Mesh allocation of NACA0012 airfoil (Cube and Cell definition)

本研究で用いたソルバーの支配方程式は非圧縮性 Navier-Stokes 方程式と連続の式である．ここで，時間積分法は 2 次精度 Adams-Bashforth 法，空間離散化手法は 1 次精度風上差分法（対流項）および 2 次精度中心差分法（拡散項）を使用する．物体形状は階段状表現として解析を行う．

3. 計算対象および計算条件

黒田らの実験[5, 6]と空力係数値を比較検証するために用いた計算対象は, Fig.2 に示すように翼弦長 c を代表長さとした翼厚 0.02c の平板翼，NACA0012 および翼厚 6%c の円弧翼である．計算領域は翼弦長 c を基準に x，y 方向に 48 倍とする．流入条件は層流とし，3 次元解析を行う．計算領域の両端には周期境界条件を適用し，2 次元性を確保している．計算格子数は約 1,200 万～2,000 万セルである．Fig.3 に使用する物体近傍の計算格子（Cube 分割域），Table 1 に計算格子について示す.

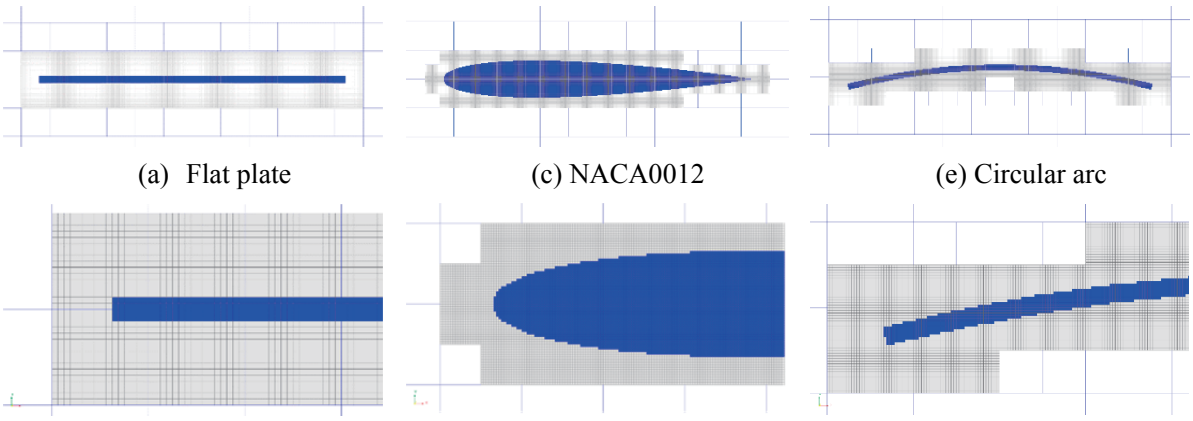


(a) 2% Flat plate　(b) NACA0012　(c) 6% Circular arc

Fig.2 Airfoil shape

Table1 Computational conditions

	Flat plate	NACA0012	Circular arc
Reynolds number	5.0×10^{3}	2.8×10^{3}	2.8×10^{3}
Min. Cell Size	5.86×10^{-3}	2.93×10^{-3}	2.93×10^{-3}
Cells in a Cube	16^{3}	16^{3}	16^{3}
Number of Cubes	3,112	5,112	5,112
Number of Cells	12,746,752	20,938,752	20,938,752



(a) Flat plate　(c) NACA0012　(e) Circular arc

(b) Flat plate (near the leading edge)　(d) NACA0012 (near the leading edge)　(f) Circular arc (near the leading edge)

Fig.3 Computational mesh

4. 結果および考察

平板翼，NACA0012 及び円弧翼まわりの 3 次元非定常流体解析を行い，時間平均の空力係数を求めた．平板では迎角 0deg から 20deg まで 2.5deg ずつ変化させ，NACA0012 および円弧翼では 0deg から 12deg まで 2deg ずつ変化させ，流れが収束するまでそれぞれ独立して解析を行った.

4.1 平板翼の空力特性

Fig.4 に示すのは，平板翼における実験結果と解析結果の空力係数の比較である．図中の Theory とは平板翼の揚力係数理論解である. 実験結果における平板翼の揚力係数 C_L は非線形性を示しているが，解析結果でも同様の傾向を示している．一方，抗力係数 C_D は解析結果のほうが小さい値を示したが，傾向はほぼ同じである．しかし，実験結果における最大揚力係数は 12.6deg であるのに対し，解析結果では 20deg まで揚力係数が伸び続けている．この理由として層流解析を行っていることが挙げられる．実験では高迎角で翼の前縁で剥離した流れがすぐに乱流に遷移していると考えられる．一方で，解析においては翼後方においても層流のまま流れているため，揚力

の低下が起きず失速が緩やかになると考えられる．また，本解析では対流項に 1 次精度風上差分を用いているため，粘性が強く剥離が遅れているのではないかと考えられる．

Fig.5 に時間平均の平板翼周りの流線と主流方向の速度分布を示す．平板翼の流れは低迎角から前縁での剥離が見られる．2.5deg における流れ場は翼周りに渦が見られない．5deg になると翼上面に剥離泡が生じ，非定常性が表れている．10deg になると翼上面の渦は大きく成長し，強い非定常性が表れている．また，コード長 50%位置に 2 次剥離渦と呼ばれる反時計回りに流れる渦も確認できる．これは実験においても確認されている．

4.2 NACA0012 の空力特性

Fig.6 に，NACA0012 における実験結果と解析結果の空力係数の比較を示す．実験結果における NACA0012 の揚力係数 C_L は，やや非線形性を示しているが，解析結果はほぼ線形を示している．一方で抗力係数 C_D は低迎角においては実験結果をやや下回り，高迎角になるほど値が近づいている．

Fig.7 は NACA0012 周りの流線と主流方向の速度分布である．2deg での流れ場は剥離点が翼中央からやや翼後縁よりにあり小さな剥離渦を形成している．6deg になると剥離点はやや前縁方向に移動し後縁に見られる剥離渦が成長している．10deg になると剥離点が翼前縁に移動し翼上面に大きな剥離泡が形成されている．高迎角付近になると揚力傾斜が小さくなることから，この剥離点の移動が揚力係数 C_L の非線形性に影響を与えているものと考えられる．NACA0012 周りの流れは剥離した後再付着することのない流れとなっている．

4.3 円弧翼の空力特性

Fig.8 は，円弧翼における実験結果と解析結果の空力係数の比較を示している．また，Fig.9 は，円弧翼周りの流線と主流方向の速度分布を表している．Fig.8 より，実験結果では円弧翼の揚力係数 C_L はほぼ線形の傾向を示しており，解析結果においても低迎角付近でやや値が大きいが，実験結果と同じような傾向を示している．しかし，高迎角になると実験値との乖離が見られる．この理由としては Fig.9 に示すように，2deg および 6deg では最大キャンバー高さ付近で流れが剥離するのに対し，10deg では流れが前縁から大きく剥離しており，翼上面に現れる大きな渦の影響であると考えられる．しかし，Fig.3 (c)のように翼上面の格子は翼近傍と比較して粗くなっているため流れが正確にとらえられていない可能性がある．解析結果の抗力係数 C_D は低迎角付近では実験結果とほぼ一致している．しかし，同様に高迎角になると実験結果の傾向からそれている．

Fig.9 より，2deg における流れ場は強い非定常性が表れている．しかし，迎角が大きくなると非定常性は弱くなる．低迎角時には後縁付近に渦が形成されているが，高迎角になると剥離点が前縁に移動し渦は翼上面全体に形成されている．このことから高迎角になると急激に揚力係数が増加しているのではないかと考えられる．

4.4 翼型の空力特性比較

実験において平板翼と NACA0012 は揚力係数に非線形性を示し，円弧翼は 2 つの翼型に比べ線形性を示す．また，厚翼である NACA0012 は薄翼である平板翼や円弧翼に対して，揚力係数は低い値を示す．解析結果では，平板翼では 12deg まではその特徴を捉えることができた．NACA0012 に対しては 6deg までは実験の傾向を捉えることができているが，それ以降は傾向からそれている．円弧翼は全体的に実験の傾向を捉えることができていない．NACA0012 と円弧翼において傾向を捉えることができなかった理由は翼近傍では格子が密であるが，そのまわりの格子は粗くなっているため，迎角が増すと成長する渦を正確に捉えることができていない可能性がある．また，これら 2 つの翼型は曲面形状であり，直交格子を用いた階段状表現では，物体形状を正確に表現できていないこともその理由として考えられる．

Fig.10 に示すのは NACA0012 と円弧翼における z 軸方向の等渦度面の上の速度分布である．2deg での NACA0012 における z 方向の速度変化はあまり見られていない．しかし，10deg になると 3

次元的な渦が発生し，z 方向の速度に変化が表れているのがわかる．それに対し，円弧翼では 2deg と 10deg のどちらでも z 方向の速度変化はあまり見られない．NACA0012 と円弧翼では翼の高さは同じであるがキャンバー位置が NACA0012 のほうが前方にある．そのため剥離点が前方にあり，剥離の範囲も大きく強い非定常な流れとなっていると考えられる．

5. 結言

本研究では，BCM を用いて低レイノルズ数流れにおける平板翼，NACA0012 および円弧翼周りの 3 次元非定常流体解析を行い風洞実験値と比較した．今回，平板翼においては高迎角時を除き，実験値と同様の傾向を捉えることができた．しかし，NACA0012 では 6deg 程度まで実験値の特徴を捉えることができる一方，それ以降の迎角では実験値からやや逸れる結果となった．また，円弧翼では全体的に実験値との差があり，その特徴を捉えることができなかった．その原因として翼の近傍では格子が細かいのに対し，周辺では粗くなっていることが挙げられる．また，翼近傍においても階段状表現であるため物体近傍の流れが正確に捉えられていない可能性がある．低レイノルズ数域における複雑流れに対して直交格子法の優位性を示すためには，今後，翼近傍全体の流れの変化が大きい領域に対して細分化格子を適用する等，より大規模な格子による大規模流体解析が必要となる．将来的に，直交格子法に基づく CFD 解析手法の信頼性が実証できると，現在注目されている超小型航空機やマルチコプタの運用時間向上に適用可能である．

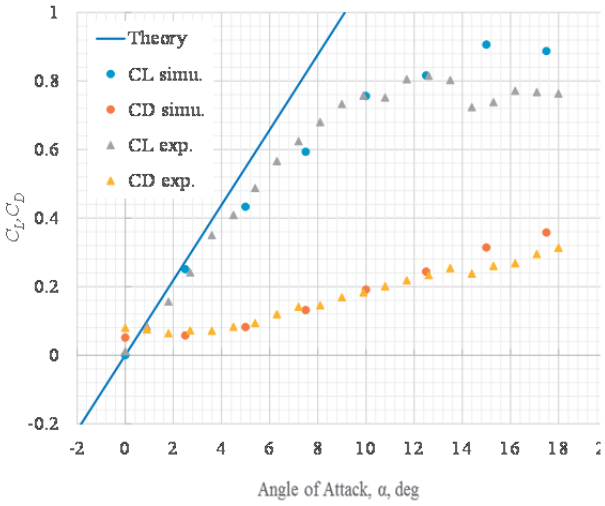


Fig.4 Aerodynamic characteristics of flat plate

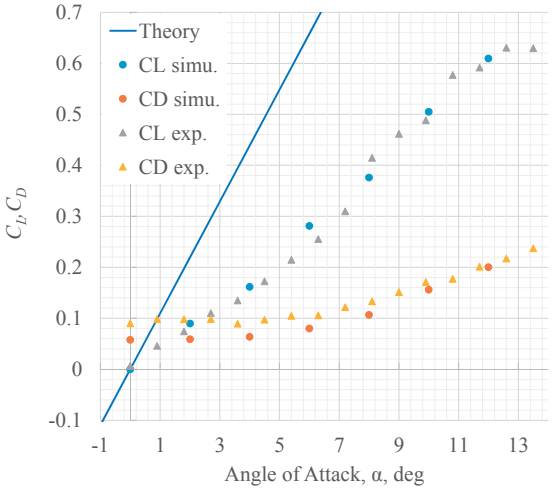
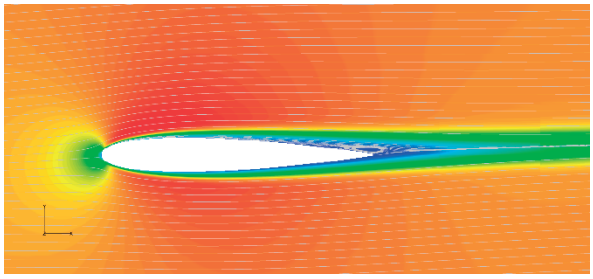
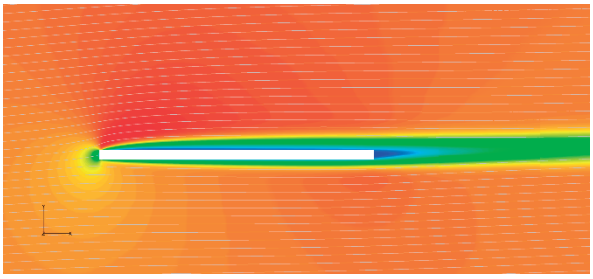


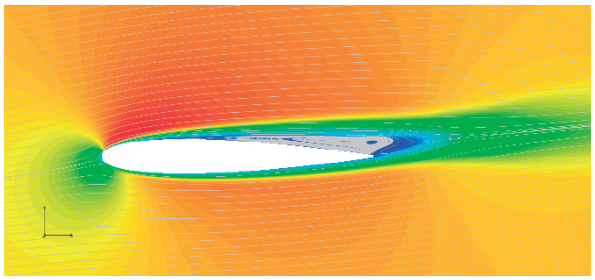
Fig.6 Aerodynamic characteristics of NACA0012



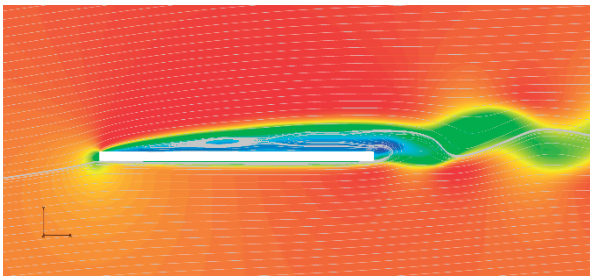
(a) 2deg



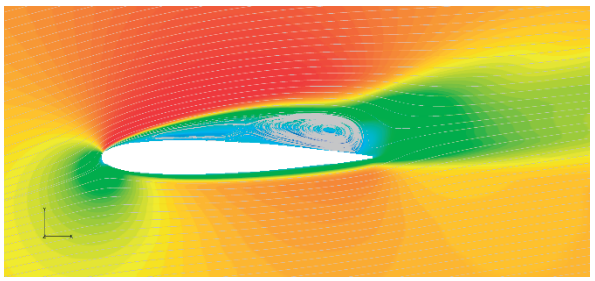
(a) 2.5deg



(b) 6deg



(b) 5deg



(c) 10deg

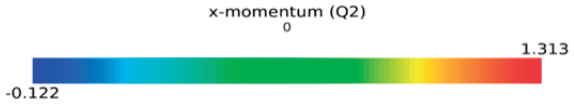
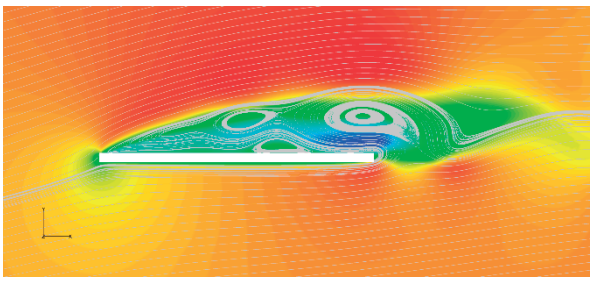


Fig.5 x-direction velocity distributions and streamlines NACA0012



(c) 10deg

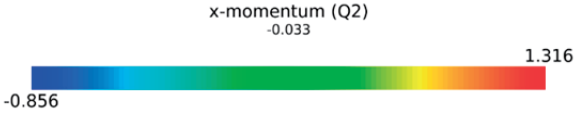


Fig.7 x-direction velocity distributions and streamlines around flat plate

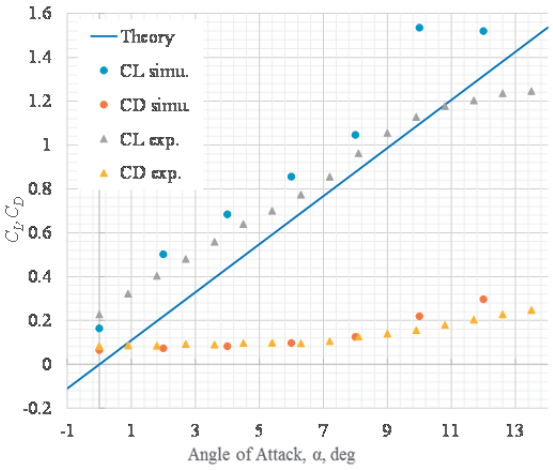
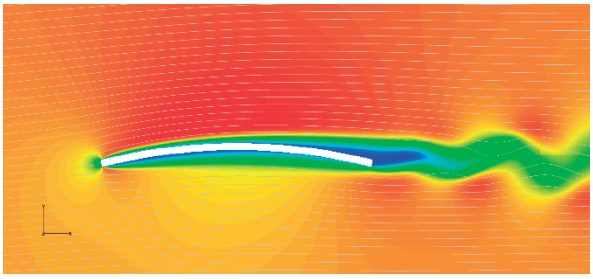
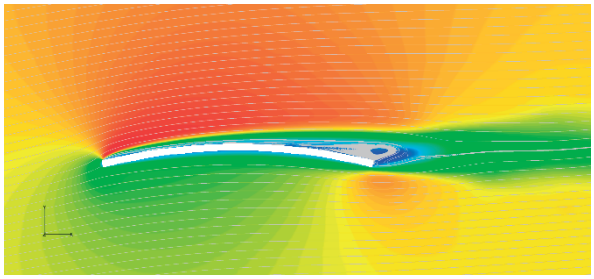


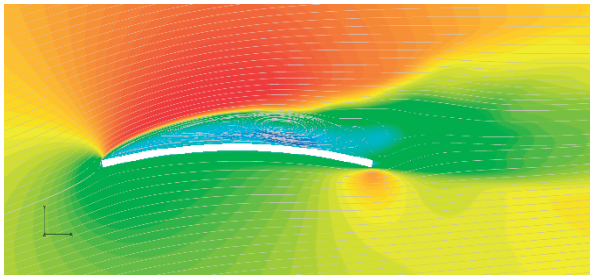
Fig.8 Aerodynamic characteristics of circular arc



(a) 2deg



(b) 6deg



(c) 10deg

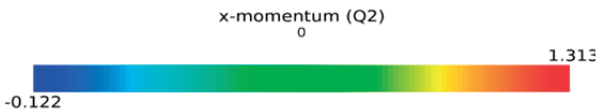
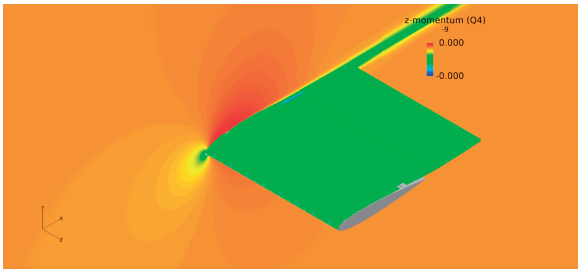
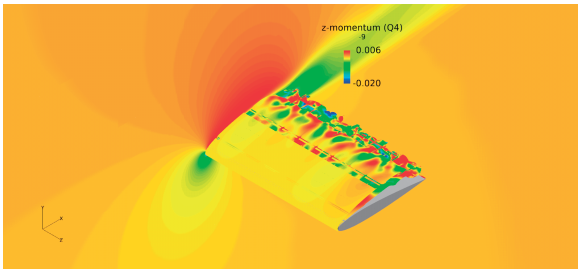


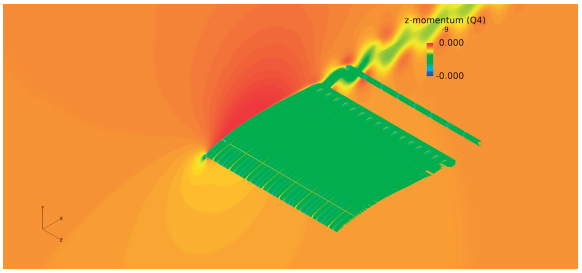
Fig.9 x-direction velocity distributions and streamlines around circular arc



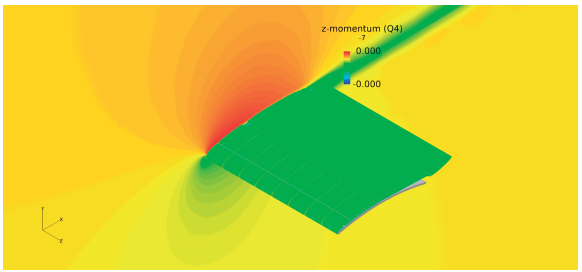
(a) 2deg (NACA0012)



(b) 10deg (NACA0012)



(c) 2deg (Circular arc)



(d) 10deg (Circular arc)

Fig.10 z-direction velocity distributions on z-direction vorticity isosurface

謝辞

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

参考文献

1] 近藤勝俊,“低レイノルズ数で優れた空力性能を持つ翼型設計に向けた CFD を用いたパラメトリック解析”，第 52 回飛行機シンポジウム講演論文集，長崎，(2014).

[2] K. Nakahashi, and Kim, L. S.,“Building-Cube Method for Large-Scale, High Resolution Flow Computations,” AIAA Paper 2004-0423, (2004).

[3] R. Sakai,“Study of Practical Large-Scale Turbulent Flow Simulation Method Using Cartesian Mesh,” Ph.D Thesis，Tohoku University, (2013).

[4] 坂井玲太郎，大林茂，松尾裕一，中橋和博,“Building-Cube Method を用いた実用的な大規模乱流解析手法の構築”， 第 45 回流体力学講演会/航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム 2013，船堀，(2013).

[5] 黒田達哉，岡本正人,“低レイノルズ数翼型フェザリング応答特性”，第 44 回日本航空宇宙学会年会講演会講演集，東京，(2013).

[6] T. Kuroda and M. Okamoto,”Unsteady Aerodynamic Forces Measurements on Oscillating Airfoils with Heaving and Feathering Motions at Very Low Reynolds Number”, Proceedings of APISAT, Takamatsu, (2013).

［大規模科学計算システム］

SSH アクセス認証鍵生成サーバの利用方法

共同利用支援係　共同研究支援係

1. はじめに

大規模科学計算システムでは、セキュリティ強化のため、パスワード認証によるログインを廃止※1し、公開鍵暗号方式によるログインのみ許可しています※2。SSH アクセス認証鍵生成サーバ（以下、鍵サーバ）はセンターに SSH アクセスするために必要な公開鍵と秘密鍵のペアを生成し、ユーザのホームディレクトリに公開鍵を自動登録するサーバです。本稿では、その利用方法についてご紹介します。

表 1　各ホストのログイン認証方式

ログインホスト名	認証方式	利用システム
front.cc.tohoku.ac.jp	公開鍵	スーパーコンピュータ SX-ACE 並列コンピュータ LX 406Re-2
file.cc.tohoku.ac.jp		データ転送サーバ
－	パスワード※3	利用者端末 大判カラープリンタ 三次元可視化システム

※1：パスワード認証でのログインは、2015 年 4 月 13 日 10:00 を以って廃止しました。
※2：HPCI 課題、JHPCN-HPCI 課題で利用する場合は GSI 認証でのログインも可能です。詳しくは、以下のリンク先の「HPCI ログインマニュアル」をご覧ください。
http://www.hpci-office.jp/pages/hpci_manuals
※3：センター内施設（利用者端末・大判カラープリンタ・三次元可視化システム）は、ローカルログインのため、パスワード認証でご利用いただけます。利用にあたり、秘密鍵を持参する必要はありません。

2. 公開鍵暗号方式を使用する上での注意事項

以下のような行為は、不正アクセスのリスク（不正ログイン、クライアントのなりすまし、暗号化された通信の暴露、他サーバへの攻撃等）が非常に高く、大変危険です。ご注意願います。

- パスフレーズなしの秘密鍵を使用
- 秘密鍵、パスフレーズの使い回し
- 秘密鍵のメールへの添付、USB メモリやホームディレクトリへの保存
- 公開鍵と秘密鍵のペアを同一ノード上に保存

3. SSH アクセス認証鍵の生成

鍵を生成すると、鍵サーバへのログインが自動的にロックされます。一度ログアウトすると、以降は鍵サーバにはログインできなくなりますのでご注意ください。鍵の再登録が必要になった場合は共同利用支援係までご連絡下さい。本人確認の上、ロックを解除します。

(1) 鍵サーバに利用者番号と初期パスワード（変更している場合は変更後のパスワード）で SSH 接続します。

SSH アクセス認証鍵生成サーバ

```
key.cc.tohoku.ac.jp
```

リスト 1　鍵サーバへの SSH 接続例

```
localhost$ ssh 利用者番号@key.cc.tohoku.ac.jp
Password? : パスワードを入力
（初回接続時のメッセージ） : yes を入力

key$（コマンド待ち状態）
```

(2) 以下のコマンド（cckey-gen）を実行し、メッセージに従って公開鍵と暗号鍵の鍵ペアを作成します。必ずパスフレーズ（8 文字以上）を設定して鍵を作成してください。

リスト 2　公開鍵と暗号鍵の作成方法

```
key$ cckey-gen
Enter passphrase(8 or more characters) : パスフレーズの入力
Confirm : 同じパスフレーズを再度入力　　↑必ず設定してください

（生成された秘密鍵の表示）
-----BEGIN RSA PRIVATE KEY-----
gp5U3M6wVIvuGLX8OtYBAWC3WwNzX9TPu8eOCA9Pd/i6ijSNcVKp7lGJtuRzjfXV
  （中略）
FSwfyL63gRqxPZEmlcZzfDnhyX7ezdNNveZu37U/nq4TQj9+Q+RWHhjF9jwnuW6F
-----END RSA PRIVATE KEY-----
```

(3) 画面に表示された秘密鍵（---BEGIN RSA PRIVATE KEY--- から ---END RSA PRIVATE KEY--- まで）をコピー&ペーストし、ローカル PC にテキストファイルとして保存します。公開鍵は自動的にユーザのホームディレクトリに登録されます。秘密鍵はセキュリティを考慮して消去されます。

4.　公開鍵暗号方式によるログイン方法

4.1　Linux/OS X のターミナルソフトから接続する方法

生成された秘密鍵をファイル名「id_rsa_cc」として「~/.ssh/」以下に保存した場合

(1) パーミッションを 600 に変更します。(初回のみ)

リスト 3　パーミッションの変更

```
localhost$ chmod 600 ~/.ssh/id_rsa_cc
```

(2) i オプションで使用する秘密鍵を指定して SSH 接続を行います。
(i オプションを省略した場合は ~/.ssh/id_rsa あるいは ~/.ssh/id_dsa が利用されます)

リスト 4　ログインホストへの SSH 接続例

```
localhost$ ssh -i ~/.ssh/id_rsa_cc 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp
Enter passphrase for key '/home/localname/.ssh/id_rsa_cc':パスフレーズを入力
（初回接続時のメッセージ） : yes を入力
```

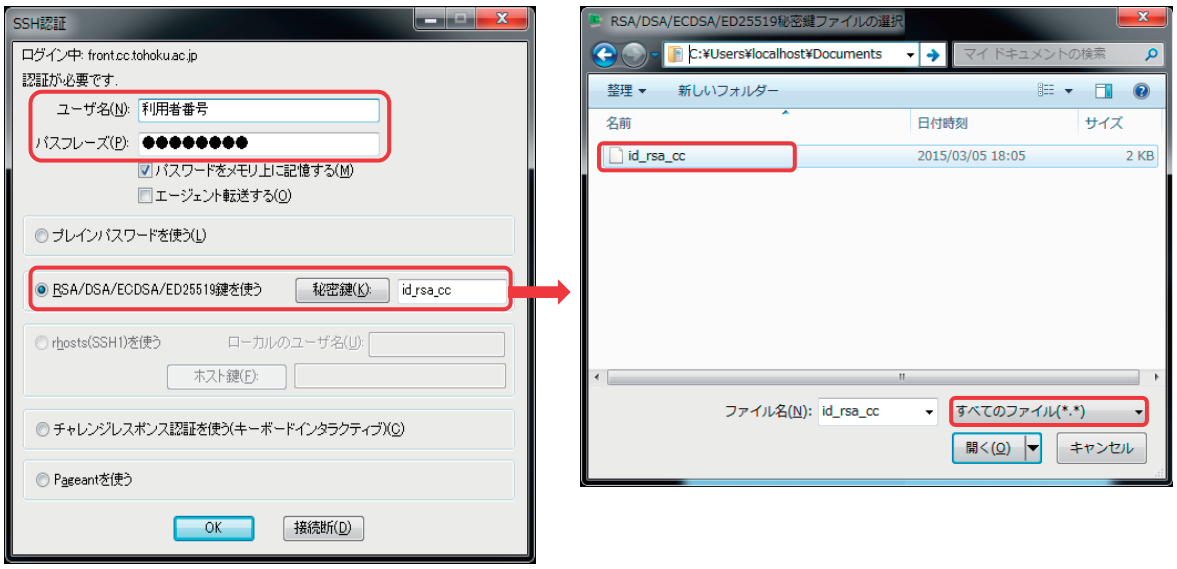
```
front$ （コマンド待ち状態）
```

4.2 Windows の Tera Term から接続する方法

生成された秘密鍵をファイル名「id_rsa_cc」として「ドキュメント」以下に保存した場合

(1) 「ホスト名」を指定、「サービス」は SSH2 を選択し、[OK]を押下します。

(2) 「ユーザ名」に利用者番号、「パスフレーズ」に鍵ペアを作成した際に入力したものを入力、「RSA/DSA 鍵を使う」を選択し、「秘密鍵」に保存した秘密鍵のファイルを指定します。(秘密鍵ファイルの選択画面では、拡張子「すべてのファイル(*.*)」を選択します)
[OK]を押下すると接続されます。



4.3 その他の OS／アプリケーションから接続する場合

各アプリケーションのヘルプを参照ください。

5. おわりに

本稿では、SSH アクセス認証鍵生成サーバの利用方法を紹介しました。公開鍵暗号方式により、より安全にシステムをご利用いただけます。今後とも、研究の強力なツールとしてセンターのシステムをご活用いただければ幸いです。

［大規模科学計算システム］

アプリケーションサービスの紹介

情報部情報基盤課 共同利用支援係

はじめに

本センター大規模科学計算システムでは、分子軌道計算、数式処理、構造解析、データ処理等の各アプリケーションソフトウェアを、利用者の幅広い要望にお応えしてサービスしています。本稿では、並列コンピュータ LX 406Re-2 でサービスを行っているアプリケーションソフトウェアの紹介をします。

表 1. アプリケーションソフトウェアとサービスホスト

アプリケーションソフトウェア		サービスホスト
分子軌道計算ソフトウェア	Gaussian	front.cc.tohoku.ac.jp
反応経路自動探索プログラム	GRRM14	
統合型数値計算ソフトウェア	Mathematica	
汎用構造解析プログラム	Marc/Mentat	
対話型解析ソフトウェア	MATLAB	
構造解析用汎用プリポストソフトウェア	Patran	

アプリケーションソフトウェアの紹介は、以下の URL の本センター大規模科学計算システム Web ページにも掲載しています。

http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/index.html

本稿中の内容は 2016 年 3 月現在のものですので、アプリケーションソフトウェアのバージョンアップや利用方法の最新情報については、Web ページを随時ご確認ください。

ご利用の前に

■ リモートログイン

スーパーコンピュータ、並列コンピュータへリモートログインする手順です。SSH（Secure SHell）接続を行います。アプリケーションを利用する際は、並列コンピュータにログインします。GUI アプリケーションを利用する場合は、**GUI アプリケーションを利用する方法**を合わせてご参照ください。

表 2. 計算機システムと日本語環境

システム	ホスト名	OS	日本語環境
並列コンピュータ LX 406Re-2	front.cc.tohoku.ac.jp	Linux	UTF-8

SSH は通信路上のデータを暗号化することで安全性を高めたプログラムです。利用している端末が UNIX, Linux, OS X の場合は SSH クライアントソフトがインストールされています。インストールされていない場合は端末の管理者にご相談ください。

並列コンピュータの OS は Linux です。公開鍵暗号方式による認証のみ利用できます[1]。アカウント希望の場合は、共同利用支援係に利用申請し利用者番号と初期パスワードを発行してもらいます。

[1] パスワード認証方式は 2015 年 4 月 13 日で廃止しました。

並列コンピュータへの初回ログイン時には公開鍵と秘密鍵のペアを作成する必要があります。鍵ペアの作成方法については本誌 19 ページの「SSH アクセス認証鍵生成サーバの利用方法」をご参照ください。
なお、他人名義の利用者番号でのシステム利用は禁止します。パスワード、秘密鍵、パスフレーズの使い回しは、不正アクセスのリスク（不正ログイン、クライアントのなりすまし、暗号化された通信の暴露、他サーバへの攻撃等）が非常に高く、大変危険です。利用者登録を行うことによる年間維持費等は発生しませんので、利用される方はそれぞれで利用申請をお願いいたします。

【Unix, Linux からのログイン】

「ターミナル」、「端末」、「terminal」などの SSH クライアントソフトを起動します。コマンドを入力するプロンプトが表示され、コマンドの待ち受け状態になります。

リスト 1. 並列コンピュータへのログイン例

（秘密鍵のファイル名を id_rsa_cc として~/.ssh 以下に作成した場合）

```
localhost$ ssh -i ~/.ssh/id_rsa_cc 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp
Enter passphrase for key '/home/localname/.ssh/id_rsa':パスフレーズを入力
（初回接続時のメッセージ） : yes を入力
front1 $ （コマンド待ち状態）
```

【OS X からのログイン】

「ターミナル.app」を起動します。接続方法は上記と同じです。

【Windows からのログイン】

● SSH クライアントソフトのダウンロードとインストール

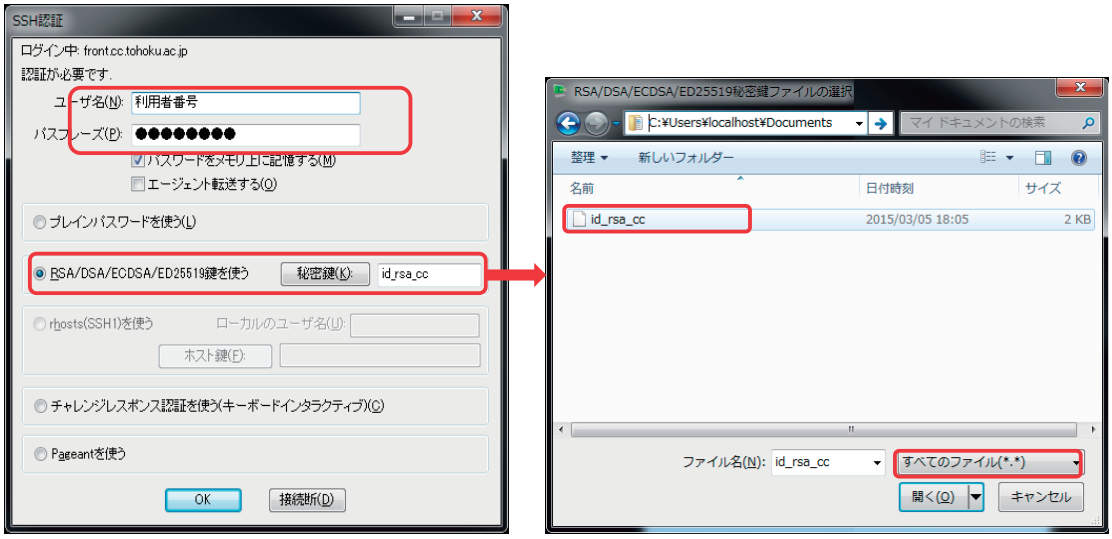
SSH クライアントソフトの一つである「Tera Term」というフリーソフトをインストールします。以下のページからダウンロードできます。2016 年 3 月現在の最新版は 4.90 です。ダウンロード後インストール作業を行ってください。

Tera Term ダウンロードページ： http://sourceforge.jp/projects/ttssh2/

● 並列コンピュータへの接続

「ホスト名」を指定、「サービス」は SSH2 を選択し、[OK]を押下します。

「ユーザ名」に利用者番号、「パスフレーズ」に鍵ペアを作成した際に入力したものを入力、「RSA/DSA 鍵を使う」を選択し、「秘密鍵」に保存した秘密鍵のファイルを指定します。
(秘密鍵ファイルの選択画面では、拡張子「すべてのファイル(*.*)」を選択します)
[OK]を押下すると接続されます。



【シェルの初期設定】

大規模科学計算システムでは、お勧めの初期環境設定を用意しています。これによりパスなどの基本的な設定、また各アプリケーションの環境変数等が自動的に設定されます。これは、利用登録時に個々の ID にあらかじめ行っていますので、通常は作業の必要はありません。

アプリケーションが利用できないという場合には、この設定が変更されていることが考えられます。.cshrc ファイル(csh を利用する場合、センターの規定値) または .login ファイル(sh を利用する場合)に、センターで用意している初期設定ファイル /usr/skel/Cshrc または/usr/skel/Login を読み込む設定となっていることを確認してください。設定を変更した場合は、設定を反映させるためにログインし直してください。

【ファイル転送】

● コマンドラインでのファイル転送

ローカル端末から「scp」、「sftp」コマンドが利用できます。どちらのコマンドも通信経路上は暗号化されていますので安全性の高いファイル転送ができます。利用方法についてはそれぞれのマニュアルをご参照ください。

● アプリケーションを利用したファイル転送

ファイル転送を行う代表的なアプリケーションは Linux では「gftp」、Windows では「WinSCP」、OS X では「Cyberduck」などです。利用方法についてはそれぞれのマニュアルをご参照ください。アプリケーションの設定において、転送プロトコルは SSH2 を選択してください。通信経路上は暗号化されます。

● 入出力端末を利用したファイル転送

センター1F の利用相談室に設置された入出力端末を利用して、USB 接続(USB3.0 対応)の HDD にホームディレクトリのデータをコピーすることができます。センター内ネットワークからのアクセスで、高速なファイルのコピーが可能です。利用方法はセンターまでお問い合わせください。

■ GUI アプリケーションを利用する方法

GUI を用いたアプリケーション（MSC. Mentat, Mathematica, MATLAB）の実行には、ローカルマシンに X Window System 環境の設定が必要です。

【Unix, Linux からの利用】

標準で X Window System がインストールされています。ローカル端末から以下の様にログインしてください。X Forwarding によりローカル画面にアプリケーション画面が表示されます。

リスト 2. Matlab を起動する場合

（秘密鍵のファイル名を id_rsa_cc として~/.ssh 以下に作成した場合）

```
localhost$ ssh -i ~/.ssh/id_rsa -X※1 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp
Enter passphrase for key '/home/localname/.ssh/id_rsa':パスフレーズを入力
（初回接続時のメッセージ） : yes を入力
front1 $ matlab
```

※1 大文字の“X”です。

【Windows からの利用】

● 商用のアプリケーションを利用する場合

Windows 用 X サーバは、X サーバソフトとしていくつかのメーカから販売されています。

・ASTEC-X（アステック・エックス）
・Exceed（Open Text Exceed オープンテキスト・エクシード）

それぞれの利用方法について詳しくは各社の HP をご参照ください。どちらのソフトも無料評価版があります。

● Windows に仮想的な Linux をインストールする場合

Windows に「Oracle VM VirtualBox」（以下「VirtualBox」）という仮想化ソフトウェアをインストールし、その環境に Linux をインストールします。

「VirtualBox」は以下のページからダウンロードできます。「VirtualBox platform packages」（現在使用している OS に合ったもの）と「VirtualBox Extension Pack」の両方をダウンロードし、インストールを行ってください。インストール方法の詳細はマニュアルをご参照ください。2016 年 3 月現在の最新版は 5.0.16 です。

VirtualBox ダウンロード： https://www.virtualbox.org/wiki/Downloads

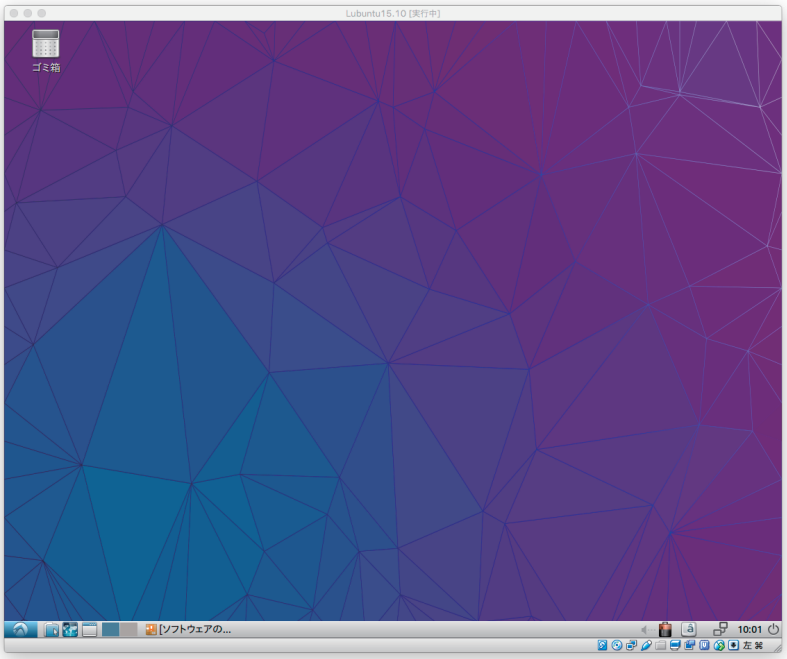
VirtualBox 5.0.16 の起動画面

Linux のディストリビューション、バージョンによっては GUI アプリケーションが正しく表示されない場合があります。センターで動作確認を行っているのは、lubuntu 15.10 です。以下のページからダウンロードし、Virtual Box の仮想環境にインストールしてください。インストール方法の詳細は各マニュアルをご参照ください。

lubuntu ダウンロード:　　http://lubuntu.net

SSH クライアントソフト「LXTerminal」を起動し、【Unix, Linux からの利用】と同様に利用できます。

VirtualBox 上で動作する仮想Linux（lubuntu 15.10）



【OS X からの利用】

OS X では標準で X Window System 環境の「X11.app」がインストールされていますので、OS X の端末から【UNIX, Linux からの利用】と同様に利用可能ですが、GUI アプリケーションによっては表示の不具合がある場合があります。その場合は、**Windows に仮想的な Linux をインストールする場合** と同様の方法で、Linux をインストールしてご利用ください。

アプリケーションソフトウェア

非経験的分子軌道計算プログラム	**Gaussian09**
Gaussian プリポストシステム	**GaussView**
反応経路自動探索プログラム	**GRRM14**
汎用構造解析プログラム	**MSC.Marc / MSC.Marc Mentat**
構造解析用汎用プリポストソフトウェア	**MSC.Patran**
数式処理プログラム	**Mathematica**
科学技術計算言語	**MATLAB**

非経験的分子軌道計算プログラム Gaussian09

Gaussian は、Carnegie-Mellon 大学の Pople を中心として開発された分子軌道計算プログラムパッケージです。広範囲にわたる非経験的モデルおよび半経験的モデルをサポートしています。

本センターの Gaussian には、以下のような特長があります。

- 最大 24 並列までの並列処理が行え、実行時間の短縮が可能です。
- スクラッチファイル(テンポラリファイル)を高速な SSD ディスクに置くことにより、ファイル入出力時間が短縮されます。

■ サービスホスト・バージョン

front.cc.tohoku.ac.jp・Gaussian09 E.01

■ 利用方法

以下は Gaussian 利用方法の概要です。

【実行コマンド】

Gaussian のインプットファイルは、拡張子を .com とします。(例： e2-01.com)
インプットファイルを Windows のエディタで作成した場合、拡張子.com のファイルは Windows では実行ファイルと認識されるため、誤ってダブルクリックなどでインプットファイルを実行しないようご注意ください。また、ファイル転送ソフトで front に転送する際にはアスキーモードを指定し、転送してください。

front.cc.tohoku.ac.jp にログイン後、subg09 コマンドにキュー名と入力プログラム名を指定することにより、バッチリクエストとして実行されます。リクエストはアプリケーション用の利用形態（経過時間無制限、最大並列数 24、最大メモリ 128GB）に投入します。

リスト 3. e2-01.com を解析するコマンド例

(subg09 コマンドに入力ファイルを指定する際は拡張子 .com を省きます)

```
[front1 ~]$ subg09 -q lx -b a e2-01
```

【12 および 24 並列実行の指定】

本センターでサービスしている Gaussian では、12 および 24 並列での並列処理が可能です。大きな分子の解析にぜひご活用ください。

12 または 24 並列で実行するには、ルートセクションに Link 0 コマンドの%NProc=並列数を追加します。手入力の場合は、テキストエディタで先頭行に追加、GaussView 等ではインプットファイル作成画面の Link 0 section の項に追加してください。

【使用メモリ量の指定】

実行して「メモリ量が足りない」というエラーになった場合は、Link 0 コマンド %Mem= で使用メモリ量を増やしてください。

リスト 4. 24 並列、メモリ 16GB の設定をしたインプットファイル e2-01.com を実行する例

```
[front1 ~]$ cat e2-01.com ← インプットファイルの内容を表示

 %NProc=24    ← 並列数
 %Mem=16Gb    ← メモリ量
 # RHF/6-31G(d) Pop=Full Test

 Formaldehyde Single Point

 0 1
 C   0.   0.   0.
 O   0.  1.22  0.
 H  .94  -.54  0.
 H -.94  -.54  0.

[front1 ~]$ subg09 -q lx -b a e2-01
```

【実行結果の確認】

計算が終了すると、インプットファイル名に拡張子.log がつけられた結果ファイル (例: e2-01.log)が作成されます。計算結果をはじめ、CPU 時間などの計算機使用量に関する情報もここに含まれます。

正常終了ならば、このファイルの末尾に「Normal termination of Gaussian 09.」というメッセージが出力されます。ファイルの末尾を表示する tail コマンドで確認できます。

リスト 5. 実行結果の確認

```
[front1 ~]$ tail e2-01.log
 :
Job cpu time:  0 days  0 hours  0 minutes 30.7 seconds.
File lengths (MBytes):  RWF=   11 Int=    0 D2E=    0 Chk=    8 Scr=    1
Normal termination of Gaussian 09 at Mon Apr 2 12:00:00 2016.
```

・　結果ファイルの詳細な見方は、マニュアル等をご参照ください。

【チェックポイントファイル】
チェックポイントファイルは、デフォルトで作成される結果ファイル（.log ファイル）より詳細な結果が出力され、計算のやり直しや結果を画像表示するためなどに使用されます。チェックポイントファイルを出力するには、ルートセクションに Link 0 コマンドの %Chk=***チェックポイントファイル名*** を追加します。

■ マニュアル

本センター本館 1 階 利用相談室に以下の資料を備えてあります。

- 電子構造論による化学の探求 第二版,ガウシアン社,1998
- Gaussian 09 User's Reference
- Gaussian 09 IOps Reference
- Gaussian 09 Online Manual, http://www.gaussian.com/
- Gaussian プログラムによる量子化学計算マニュアル　：　堀憲次, 丸善出版
- すぐできる量子化学計算ビギナーズマニュアル　：　武次鉄也, 講談社
- すぐできる分子シミュレーションビギナーズマニュアル　：　長岡正隆, 講談社
- Gaussian プログラムで学ぶ情報化学・計算化学実験　：　堀憲次, 丸善出版

Gaussian プリポストシステム GaussView

GaussView は、分子軌道計算プログラム Gaussian のプリポストシステムです。Windows 8/7/Vista, Linux 搭載のパソコンなどで動作し、入力データの作成、計算結果の可視化を 3 次元的に行うことができます。

■ バージョン

5.0.9

■ お申し込み

利用ご希望の方に、GaussView の CD-ROM を貸し出しいたします。

利用条件
・東北大学内の方

CD-ROM は、お手数ですが Gaussian 利用申請書をホームページよりダウンロードしてご記入の上、当センターまで直接お越しください。

■ 利用方法

インストール方法、データ作成方法などについては同梱マニュアルまたは以下のHPをご参照ください。

ヒューリンクス Gauss View 5： http://www.hulinks.co.jp/software/gaussview/

並列コンピュータ front.cc.tohoku.ac.jp の Gaussian で解析を実行する手順

1. 入力データ作成後、Gaussian のインプットファイル「.com」としてエクスポートします。
2. インプットファイルを front.cc.tohoku.ac.jp に転送します。
3. front.cc.tohoku.ac.jp にログインします。
4. subg09 コマンドにより解析を実行します。
5. 結果ファイルを転送し GaussView で表示します。

チェックポイントファイル(.chk)は、Gaussian のユーティリティコマンド formchk により書式付(.fchk)に変換後転送してください。

反応経路自動探索プログラム GRRM14

GRRM は、2002 年に東北大学（教授：大野公一、修士 1 年：前田理、当時）で制作が開始され、その後開発が進められて、2011 年に GRRM11、2014 年に GRRM14 が発表され、広く利用されるようになりました。
GRRM には、以下のような特長があります。

- Gaussian プログラム（g09、g03）などの非経験的量子化学計算に基づいて、各化学式で表される構造や反応経路を自動的に探索します。
- 平衡構造から出発し、その周囲に存在する反応経路を、ポテンシャルの非調和下方歪みを検出して、系統的に調べ上げる超球面探索アルゴリズムが搭載されており、反応経路自動探索を行うことができます。
- 励起状態のポテンシャル交差を自動的に調べることができます。
- 解離した状態から、人工力誘起反応法で、反応経路を効率的に調べることができます。

■ サービスホスト・バージョン

front.cc.tohoku.ac.jp・14.01

■ 利用方法

利用方法はセンターのホームページ（http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/grrm14.html）をご覧ください。

■ GRRM プログラムの詳細

GRRM の詳細については、NPO 法人 量子化学探索研究所（http://iqce.jp/）、化学反応経路自動探索の Web ページ(http://grrm.chem.tohoku.ac.jp/GRRM/)を参照してください。また、GRRM プログラムは現在さらに開発が進められています。利用法の詳細や新しい情報を得るには、開発者と連絡をとることをお勧めします。(連絡先アドレス：ohnok@m.tohoku.ac.jp)

■ GRRM プログラムの文献と研究成果発表時の引用義務

GRRM14 を用いて得た成果を公表するときは、次のような形式で、著者名, プログラム名, version 名（GRRM 出力の log ファイル参照）を引用文献として記載してください。

S. Maeda, Y. Harabuchi, Y. Osada, T. Taketsugu, K. Morokuma, and K. Ohno, GRRM14, Version 14.01, 2014.

また、GRRM プログラムに搭載されたオプションの詳細については、それぞれ下記の文献を参照してください。これらのオプションを利用して得た研究成果を公表する際には、次に示す GRRM に関する 3 つの基本文献(1)-(3)および、下に示された各オプションに対応する文献を引用しなければなりません。

● GRRM:
(1) K. Ohno, S. Maeda, A Scaled Hypersphere Search Method for the Topography of Reaction Pathways on the Potential Energy Surface., Chem. Phys. Lett., 2004, 384, 277-282.; (2) S. Maeda, K. Ohno, Global Mapping of Equilibrium and Transition Structures on Potential Energy Surfaces by the Scaled Hypersphere Search Method: Applications to Ab Initio Surfaces of Formaldehyde and Propyne Molecules., J. Phys. Chem. A, 2005, 109, 5742-5753.; (3) K. Ohno, S. Maeda, Global Reaction Route Mapping on Potential Energy Surfaces of Formaldehyde, Formic Acid, and their Metal Substituted Analogues., J. Phys. Chem. A, 2006, 110, 8933-8941.
● 2PSHS:
S. Maeda, K. Ohno, A New Approach for Finding a Transition State Connecting a Reactant and a Product without Initial Guess: Applications of the Scaled Hypersphere Search Method to Isomerization Reactions of HCN, (H2O)2, and Alanine Dipeptide., Chem. Phys. Lett., 2005, 404, 95-99.
● SCW:
S. Maeda, K. Ohno, Conversion Pathways between a Fullerene and a Ring among C20 Clusters by a Sphere Contracting Walk Method: Remarkable Difference in Local Potential Energy Landscapes around the Fullerene and the Ring., J. Chem. Phys., 2006, 124, 174306/1-7.
● LADD, NLowest, NRUN:
S. Maeda, K. Ohno, Structures of Water Octamers (H2O)8: Exploration on Ab Initio Potential Energy Surfaces by the Scaled Hypersphere Search Method., J. Phys. Chem. A, 2007, 111, 4527-4534.
● Frozen Atom:
S. Maeda, K. Ohno, Lowest Transition State for the Chirality-Determining Step in Ru{(R)-BINAP}-Catalyzed Asymmetric Hydrogenation of Methyl-3-Oxobutanoate., J. Am. Chem. Soc., 2008, 130, 17228-17229.
● External Atom:
S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, An Automated and Systematic Transition Structure Explorer in Large Flexible Molecular Systems Based on Combined Global Reaction Route Mapping and Microiteration Methods., J. Chem. Theory Comput., 2009, 5, 2734-2743.
● OptX:
S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, Updated Branching Plane for Finding Conical Intersections without Coupling Derivative Vectors., J. Chem. Theory Comput., 2010, 6, 1538-1545.

● ModelF:
S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, Automated Global Mapping of Minimum Energy Points on Seams of Crossing by the Anharmonic Downward Distortion Following Method: A Case Study on H2CO., J. Phys. Chem. A, 2009, 113, 1704-1710.; S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, Exploring Multiple Potential Energy Surfaces: Photochemistry of Small Carbonyl Compounds, Adv. Phys. Chem. 2012, 2012, 268124.
● Add Interaction and/or MC-AFIR:
S. Maeda, K. Morokuma, A Systematic Method for Locating Transition Structures of A + B → X Type Reactions., J. Chem. Phys., 2010, 132, 241102 (4 pages).; S. Maeda, K. Morokuma, Finding Reaction Pathways of Type A + B → X: Toward Systematic Prediction of Reaction Mechanisms., J. Chem. Theory Comput., 2011, 7, 2335-2345.

■ マニュアル

PDF 形式のマニュアルがセンターのホームページから参照できます。
- GRRM プログラム利用ガイド
- GRRM の実行方法（東北大学サイバーサイエンスセンター編）

本センター本館 1 階 利用相談室に以下の資料を備えてあります。
- GRRM14 User Manual（英語版）

汎用構造解析プログラム MSC.Marc / MSC.Marc Mentat

MSC.Marc は有限要素法による非線形汎用構造解析プログラムです。世界中で広く利用され最も評価を受けているプログラムの一つで、その扱える解析は以下の通り非常に広範囲にわたっています。
非線形／大変形／接触／弾塑性／剛塑性／破壊／熱伝導／動的非線形／境界非線形流体と固体の連成／電気伝導と熱伝導の連成／熱と応力の連成
MSC.Marc Mentat は、汎用構造解析プログラム Marc の会話型プリ／ポストプロセッサとして、有限要素モデルの作成および解析結果の表示が行えます。

■ サービスホスト・バージョン

front.cc.tohoku.ac.jp・MSC.Marc /Mentat 2014.2

■ 利用方法

Marc のプリポストプロセッサとして、Mentat の他に MSC.Patran も提供しています。

【run_marc コマンドでの解析実行】

● 実行コマンド
Marc の入力ファイルは、拡張子を .dat とします。(例： job-name.dat)
front.cc.tohoku.ac.jp にログイン後、 run_marc コマンドに入力ファイル名を指定し実行することにより、バッチリクエストとして解析が行われます。ジョブクラスの指定は必要ありません。自動的にアプリケーション専用の利用形態（経過時間無制限、最大メモリ 128GB）に投入されます。

リスト 6. job-name.dat を解析するコマンド例

(run_marc コマンドに入力ファイルを指定する際は拡張子 .dat を省きます)

```
[front1 ~]$ run_marc -jid job-name -v n
```

表 3. run_marc の入力オプション

オプション	説明
-jid (-j) *job-name* (必須)	入力ファイル名 *job-name*.dat を指定
-cpu *秒数*	cpu 時間の制限
-ver (-v)　yes(デフォルト) no	バッチリクエスト投入前に確認する。 バッチリクエストをただちに投入する。
-user (-u) *user_name*	ユーザサブルーチン *user_name*.f を指定

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

● 解析結果

バッチリクエストが終了すると、主に以下のようなファイルが作成されます。

job-name.out	(解析結果)
job-name.log	(解析ログ)
job-name.t16	(ポストファイル)
job-name.sts	(ステータスレポートファイル)
job-name.batch_err_log	(エラーログ)

解析時の指定によって、この他にもファイルが作成されます。それらのファイルの概要は、「マニュアル C 編プログラム入力 付録 B 表 B-1」をご参照ください。

● 終了番号 (exit number)

解析結果ファイル(job-name.out)の末尾にある marc exit number により、正常に終了したか、エラー終了か、またエラー終了の場合はその原因がわかります。

リスト 7. 終了番号を確認する

(tail コマンドで job-name.out の末尾を表示)

```
 [front1 ~]$ tail job-name.out

************************************************************

MSC.Marc Exit number 3004

check marc exit passed
[front1 ~]$
```

表 4. 終了番号

終了番号	説明
3004	正常終了
13	入力データにデータエラーが検出された。
2004	剛体変位が発生している、または全体剛性マトリクスが非正定マトリクスになっている。
3002	指定したリサイクル数内で収束しない。

・ この他の番号については、「マニュアル C 編 プログラム入力 付録 A」をご参照ください。

【プリポストプロセッサ Mentat からの解析実行】

● Mentat の起動

Mentat の起動には、並列コンピュータに接続する際に X forwarding の設定を行う必要があります。Mentat2014 では新 GUI を採用しています。従来の Classic GUI は mentat.classic というコマンドでご利用できます。

リスト 8. mentat の起動方法

```
localhost$ ssh -i ~/.ssh/id_rsa_cc -X 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp
  :
[front1 ~]$ mentat                （新 GUI 版）

[front1 ~]$ mentat.classic        （Classic 版）
```

● 解析実行 （新 GUI 版）

Mentat 上でモデルを作成し、解析のための設定を行った後、

タブメニュー 解析ジョブ -> 新規 -> 解析タイプを選択 -> 実行 -> 実行(1)

という操作をすることで、バッチリクエストとして解析を実行します。

ツールバーメニュー ファイル(F) -> 書き出し -> Marc 入力...

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

● 解析実行 （Classic 版）

Mentat 上でモデルを作成し、解析のための設定を行った後、

メインメニュー JOBS -> RUN -> submit1

という操作をすることで、バッチリクエストとして解析を実行します。

スタティックメニュー FILES -> MARC INPUT FILE WRITE

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

■ サンプルプログラム

【Marc】

マニュアル E 編に掲載されている例題が、並列コンピュータ front.cc.tohoku.ac.jp の /usr/ap/MSC2014.2/marc2014.2/demo/にあります。コピーしてご利用ください

【Mentat】

マニュアル「ユーザガイド」に掲載されている例題ファイルが、並列コンピュータ front.cc.tohoku.ac.jp の /usr/ap/MSC2014.2/mentat2014.2/examples/marc_ug/にあります。コピーしてご利用ください。

■ マニュアル

PDF 形式のマニュアルを提供しています。

各マニュアルは、並列コンピュータ（front.cc.tohoku.ac.jp）の以下のディレクトリにあります。

/usr/ap/MSC2014.2/mentat2014.2/doc/

release_guide.pdf	:	Release Guide（2014.2 英語版）
marcwhatsnew.pdf	:	What's new（2014.2 英語版）
mt_help_ref.pdf	:	MSC.Marc Mentat Help Reference（2014.2 英語版）

英文マニュアル　/usr/ap/MSC2014.2/mentat2014.2/doc/(vola～vole)

vola.pdf	:	Volume A：Theory and User Information
volb.pdf	:	Volume B：Element Library
volc.pdf	:	Volume C：Program Input
vold.pdf	:	Volume D：User Subroutines and Special Routines
vole.pdf	:	Volume E：Demonstration Problems

和文マニュアル (MSC.Marc2003 版)　/usr/ap/MSC2014.2/mentat2014.2/doc/japanese/

vola.pdf	:	A 編 理論およびユーザー情報
volb.pdf	:	B 編 要素ライブラリ
volc.pdf	:	C 編 プログラム入力
vold.pdf	:	D 編 ユーザサブルーチンおよび特別ルーチン
vole.pdf	:	E 編 例題集
new_features.pdf	:	新機能ガイド
marc_ug.pdf	:	ユーザガイド
mt_help_ref.pdf	:	Mentat 2003 ヘルプリファレンス
xsec_adden.pdf	:	ドキュメント補足資料

有限要素法プログラム汎用プリポストソフトウェア MSC.Patran

MSC.Patran は、有限要素法構造解析プログラム MSC.Nastran 用として開発されたプリポストソフトウェアです。本センターでは Marc の利用をサポートするためにサービスしています。

MSC.Patran は多くの CAD に対応するダイレクトインターフェースを介して、正確で迅速な CAD 形状のインポートが可能です。さらに優れた特長として、高水準のメッシュ作成機能や可視化機能に加え、Marc との親和性が高いことが挙げられます。

■ バージョン

MSC.Patran2014.1 Windows 版, Linux 版

■ お申し込み

利用条件（以下の条件をすべて満たしている方）

・大規模科学計算システムの利用者番号を持っている方
・本センターでサービスしている Marc のプリポストとして利用する方

利用ご希望の方は、共同利用支援係までお問い合わせください。

数式処理プログラム Mathematica

Mathematica は Stephen Wolfram によって作られた、プログラミング言語を備えた数式処理システムです。Mathematica の機能は、数値計算、記号計算、グラフィックスという 3 つに大別でき、この 3 つが一体となって使いやすいインタフェースを提供しています。

■ サービスホスト・バージョン

front.cc.tohoku.ac.jp・version 10.2.0

■ 利用方法

【Mathematica の起動】

● GUI 版
GUI 版の Mathematica の起動には、並列コンピュータに接続する際に X forwarding の設定を行う必要があります。

リスト 9. GUI 版の起動方法

```
localhost$ ssh -i ~/.ssh/id_rsa_cc -X 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp
   :
[front1 ~]$ mathematica
```

リスト 10. テキスト版の起動方法

```
localhost$ ssh -i ~/.ssh/id_rsa_cc -X 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp
    :
[front1 ~]$ math
```

・ Mathematica の基本的な使い方は、マニュアル・参考資料 や、Web などをご参照ください。

■ マニュアル・参考資料

参考資料
本センター本館 1 階 利用相談室に、以下の資料を備えてあります。

- スティーブンウルフラム Mathematica ブック (日本語版) : トッパン
- Mathematica 方法と応用 : J.W. グレイ, サイエンティスト社
- Mathematica プログラミング技法 : R. メーダー, トッパン
- 入門 Mathematica ： 日本 Mathematica ユーザー会, 東京電機大学出版局
- はやわかり Mathematica ： 榊原進, 共立出版
- もっと Mathematica で数学を ： 吉田孝之, 培風館

科学技術計算言語 MATLAB

MATLAB は高機能な数値計算機能と多彩な可視化機能を備えた技術計算ソフトウェアです。科学的、工学的分野の様々な数値計算(特に行列演算)、データ解析、シミュレーション、およびビジュアライゼーションのための統合環境を提供しています。

■ サービスホスト・バージョン

front.cc.tohoku.ac.jp ・ R2015a (8.6.0)

■ Toolbox

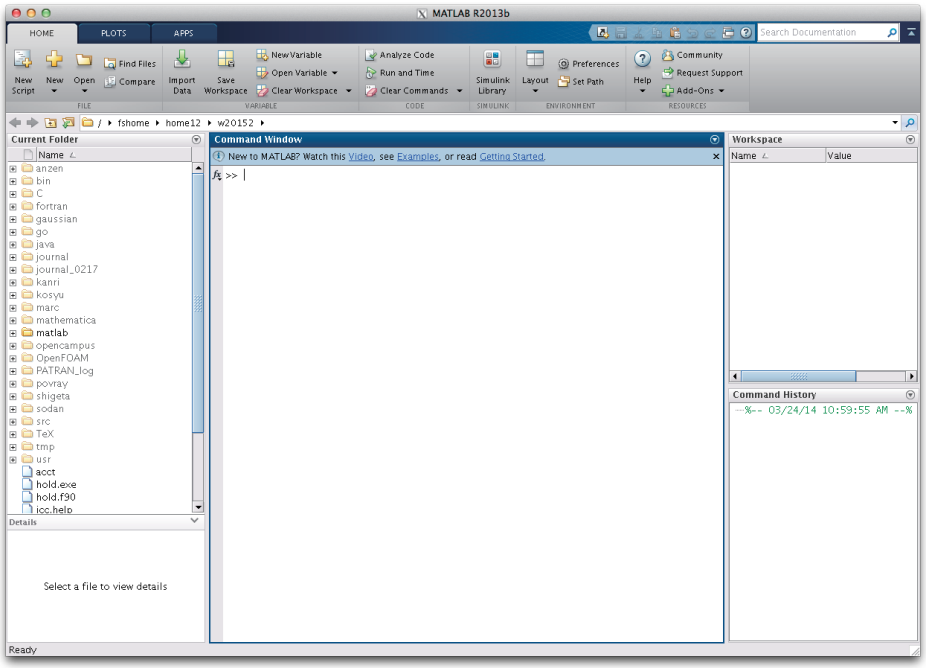
センターで導入している Toolbox です。
MATLAB
Simulink
Curve Fitting Toolbox
Communications System Toolbox
MATLAB Compiler
Control System Toolbox
DSP System Toolbox
Fuzzy Logic Toolbox
System Identification Toolbox
Image Processing Toolbox
MATLAB Corder
Model Predictive Control Toolbox
Neural Network Toolbox
Optimization Toolbox
Partial Differential Eauation Toolbox
Fixed-Point Toolbox
Robust Control Toolbox
Simulink Corder
Simulink Control Design
Signal Processing Toolbox
Symbolic Math Toolbox
Simulink Design Optimization
Statistics Toolbox
Simulink Verification and Validation
Wavelet Toolbox

■ 利用方法

【MATLAB の起動】
● GUI 版
GUI 版 MATLAB の起動には、並列コンピュータに接続する際に X forwarding の設定を行う必要があります。

リスト 11. GUI 版 MATLAB の起動

```
localhost$ ssh -i ~/.ssh/id_rsa_cc -X 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp
   :
 [front1 ~]$ matlab
```



● テキスト版
GUI を使用せず、コマンドライン上で起動することもできます。

リスト 12. テキスト版 MATLAB の起動

```
localhost$ ssh -i ~/.ssh/id_rsa_cc 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp
   :
 [front1 ~]$ matlab -nojvm -nosplash -nodesktop -nodisplay

                    < M A T L A B (R) >
          Copyright 1984-2015 The MathWorks, Inc.
            R2015b (8.6.0.267246) 64-bit (glnxa64)
                      August 20, 2015

  To get started, type one of these: helpwin, helpdesk, or demo.
  For product information, visit www.mathworks.com.
>>
```

● バッチ処理

MATLAB の組み込み並列処理機能を使用し、24 並列までの処理が可能です。最大メモリも 128GB まで利用可能です。大規模な計算にご利用ください。ただし、バッチ処理ではグラフ描画など画面出力のあるプログラムや、対話的な処理は行えません。

function として作成した test を実行するためには以下の様なバッチリクエスト用シェルスクリプトファイルを作成します。リクエストはアプリケーション専用の利用形態に投入します。

リスト 13. バッチリクエストファイル

```
[front1 ~] cat job-m     ←バッチリクエストファイルの中身を表示

#PBS -q lx -b a  ←アプリケーション専用の利用形態を指定
cd $PBS_O_WORKDIR
matlab -nojvm -nosplash -nodesktop -nodisplay -r test
```

以下のコマンドでリクエストを投入します。

リスト 14. リクエストの投入方法

```
[front1 ~]$ qsub job-m
Request 1234.job submitted to queue: ap.
```

MATLAB の基本的な使い方は、マニュアル・参考資料などをご参照ください。

■ サンプルプログラム

MATLAB には豊富なデモがありますので、ご利用ください。MATLAB 上で、demo コマンドを実行すると、デモ画面が開きます。

■ マニュアル・参考資料

【マニュアル】

日本語オンラインマニュアルが公開されています。以下のページをご参照ください。

http://www.mathworks.co.jp/help/ja_JP/techdoc/index.html

【参考資料】

本センター本館1階 利用相談室に、以下の資料を備えてあります。

MATLAB による制御理論の基礎：野波健蔵, 東京電機大学出版局
MATLAB による制御のためのシステム同定：足立修一, 東京電機大学出版局
だれでもわかる MATLAB ： 池原雅章, 培風館
はやわかり MATLAB 第 2 版：芦野隆一, 共立出版
最新 MATLAB ハンドブック第 3 版：小林一行, 秀和システム

MATLAB グラフィックス集：小国 力, 朝倉書店
MATLAB と利用の実際：小国 力, サイエンス社
MATLAB の総合応用 ： 高谷邦夫, 森北出版
最新使える！MATLAB ： 青山貴伸, 講談社
使える！MATLAB/Simulink プログラミング ： 青山貴伸, 講談社
MATLAB による画像＆映像信号処理 ： 村松正吾, CQ 出版

Matlab によるグラフ描画 ： 西村竜一 (広報誌 SENAC Vol.37 No.1 (2004-1))
高機能数値計算・可視化機能ソフト MATLAB の基本的な使い方 ： 陳国曜 他
(広報誌 SENAC Vol.46 No.3 (2013-7))

［報 告］

第 23 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

東北大学サイバーサイエンスセンター　小林　広明

東北大学サイバーサイエンスセンターは、海洋研究開発機構(JAMSTEC)、ドイツのシュトゥットガルト大学高性能計算センター(HLRS)、および NEC のご協力を得て、2016 年 3 月 16 日（水）～17 日(木)に高性能計算に関する国際ワークショップ「第 23 回 Workshop on Sustained Simulation Performance (WSSP)」を開催しました。本ワークショップは、国際的に活躍している計算科学の研究者及びスーパーコンピュータ設計者を招いて、高性能・高効率大規模科学計算に関する最新の研究成果の情報交換を行うとともに、今後のスーパーコンピュータの研究開発のあり方を議論することを目的としています。

ワークショップは、青木孝文東北大学副学長の開会の挨拶のあと、文部科学省研究振興局計算科学技術推進室工藤雄之室長から我が国の HPCI 政策に関するご講演で始まりました。本講演では、HPCI と呼ばれる我が国の高性能計算基盤の整備・運用状況と京コンピュータの次のシステムの研究開発事業「FLAGSHIP2020 Project」の進捗状況に関する報告がなされました。

今回は、2 件の基調講演をモスクワ大学 Vladimir Voevodin 教授と東北大学横堀壽光教授にしていただきました。Voevodin 教授は、ロシアのトップスーパーコンピュータセンターとして 50 年にわたるモスクワ大学でのスーパーコンピュータの整備・運用の歴史をご紹介されたあと、現在同教授が中心となって推進するプログラミングツールの研究開発プロジェクトについて最新の研究成果を報告されました。同プロジェクトでは、多様なスーパーコンピュータシステム向けにアルゴリズムの実装・チューニングを効率よく支援するためのツールの研究開発を進めており、その成果物は AlgoWiki(http://AlgoWiki-Project.org)として広く HPC コミュニティに公開されています。また、横堀教授からは、流れと圧力を連成して解くことにより、動脈瘤を有する血管壁の拍動挙動を数値解析により明らかにする最新の研究成果に関するご講演をいただきました。本成果はスーパーコンピュータを用いた CFD により動脈瘤の存在を明らかにするものであり、今後医療現場での臨床応用が期待されています。

本ワークショップでは、主催者講演として、東北大学、JAMSTEC、HLRS、 NEC からも講演を行い、それぞれの研究機関からは運用するベクトル型スーパーコンピュータ SX-ACE を中心にその活用状況や研究開発に関するご講演を、NEC からは現在取り組む次期ベクトル型スーパーコンピュータ Aurora の研究開発ロードマップが示されました。

このほか、一般講演では、国内外の研究者から、スーパーコンピュータアーキテクチャから応用まで、計算機科学分野と計算科学分野を幅広くカバーする興味深い講演がありました。ご講演についてご興味がございましたら、講演予稿集に残部がございますので、サイバーサイエンスセンターまでお問い合わせください。

文部科学省計算科学技術推進室長　工藤雄之氏

モスクワ大学 Vladimir Voevodin 教授の基調講演

［報 告］

平成27年度サイバーサイエンスセミナー報告

平成27年度より東北大学サイバーサイエンスセンターでは、これまで開催していたシナジー研究会を継承発展し、新たにサイバーサイエンスセミナーを開催することとなりました。今年度は以下の2件が開催されましたのでご報告いたします。

サイバー医療研究会

日時：2016 年 3 月 11 日 14:30～15:30

会場：東北大学電子情報システム・応物系 1 号館 5 階 530 セミナー室

演題：ウェアラブルセンサと光電容積脈波

講師：阿部　誠（信州大学工学部情報工学科准教授）

参加者：20 名

講演要旨：日本では，超高齢化社会に伴う医療費の高騰が社会問題となっており，その対策として予防医療の重要性が注目されている．予防医療における重要な要素として，日常生活における健康管理が挙げられ, Apple 社製の Apple Watch に代表されるウェアラブルデバイスの開発が活発化している．しかし，ウェアラブルデバイスに搭載されている光電容積脈波センサは，従来のセンサと光の波長が異なっており，その基礎的な研究による知見が少ないことが問題となっている．そこで，本講演では，従来の赤外光による光電容積脈波センサと近年使用され始めた緑色光による光電容積脈波センサから得られる情報の比較を行った．その結果，緑色光によるセンサは，従来の近赤外光のセンサに比べて体動などのノイズに強く，自律神経活動を表す指標を算出するための情報を得るセンサとしても有用であることを報告した．

第23回 Workshop on Sustained Simulation Performance

日時：2016 年 3 月 16 日 10:30～11:10

会場：東北大学工学部中央棟 2 階大会議室

演題：Parallel Algorithms: Theory,　Practice and Education

講師：Vladimir Voevodin 教授（ロシア・モスクワ大学スーパーコンピュータセンター長）

参加者：76 名

講演要旨：モスクワ大学 Voevodin 教授を招き，高性能計算他のためのプログラミング開発環境に関する研究プロジェクトの最新の研究成果を紹介戴いた．はじめに，Voevodin 教授がセンター長を務めるモスクワ大学スーパーコンピュータセンターにおける 50 年におよぶスーパーコンピュータの整備，運用の歴史をご紹介されたのち，現在同教授が中心となって推進するプログラミングツールの研究開発プロジェクトについて最新の研究成果が報告された．これらのプロジェクトでは，多様なスーパーコンピュータシステムのためのアルゴリズムの実装・チューニングを効率よく支援するためのツールの研究開発を進めており，その成果物は AlgoWiki　(http://AlgoWiki-Project.org)として広く HPC コミュニティに公開されている。当日は国内外から多数の参加者が集い，将来のスーパーコンピュータシステム，これらを支えるシステムソフトウェアの在り方に関する活発な議論がなされた．

[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/

Gaussian09 のバージョンアップについて

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

Gaussian は、Carnegie-Mellon 大学の Pople を中心として開発された分子軌道計算プログラムパッケージです。広範囲にわたる非経験的モデルおよび半経験的モデルをサポートしています。

サービス開始日　：　2016 年 3 月 18 日 (金)

バージョン名　：　Gaussian09 E.01

サービスホスト　：　front.cc.tohoku.ac.jp

実行コマンド　：　subg09
　　subg09.D01　(D.01 用コマンド)

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

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

HULINKS | Gaussian 09 | Rev E.01 の新しい機能
http://www.hulinks.co.jp/software/gaussian/section01_v09_e01.html

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

(共同利用支援係)

平成 28 年度の共同研究について (No. 218)

本センターでは、大規模科学計算システムの利用者と共同でプログラムやアルゴリズムを開発する共同研究を行っています。今年度の募集に応募されたものについて共同研究専門部会で審査の結果、以下の 11 件が採択されましたのでお知らせします。

[A] 萌芽型課題

No.	申請者	所属	研究課題
A-1	有馬 卓司	東京農工大学 大学院工学研究院	アンテナ放射効率低下メカニズムの解明と放射効率改善手法に関する研究
A-2	越村 俊一	東北大学 災害科学国際研究所	スーパーコンピュータによるリアルタイム津波浸水・被害予測技術の高度化
A-3	松岡 浩	東北大学 電気通信研究所	連続感度解析の実現を目指した整数型格子ボルツマン法流体解析手法の開発
A-4	三坂 孝志	東北大学　学際科学 フロンティア研究所	Building-Cube 法による大規模高レイノルズ数流れ解析に関する研究

[B] 大規模課題

No.	申請者	所属	研究課題
B-1	伊澤 精一郎	東北大学大学院 工学研究科	乱流の生成とその維持機構に関する研究
B-2	河野 裕彦	東北大学大学院 理学研究科	密度汎関数緊密結合法を用いたナノスケール分子のナノ秒化学反応シミュレーション
B-3	陳 強	東北大学大学院 工学研究科	大規模問題のための超高速モーメント法に関する研究
B-4	塚原 隆裕	東京理科大学 理工学部	非平衡臨界現象としての壁乱流遷移のパターン形成解明に向けた超大規模直接数値解析
B-5	藤井 孝藏	東京理科大学 工学部	次世代低騒音タイヤ開発に向けた高精度流体音響解析
B-6	森野 裕行	三菱航空機株式会社	民間航空機開発における大規模 CFD 解析の適用
B-7	柳澤 将	琉球大学 理学部	有機-金属界面での電子準位接続の精密決定に向けた GW space-time コードの高速化

（スーパーコンピューティング研究部，共同研究支援係）

コンパイラのバージョンアップについて (No. 219)

2016 年 4 月 1 日に FORTRAN90/SX コンパイラおよび MPI/SX ライブラリをバージョンアップしました。詳細につきましては、リリースメモ(pdf)をご覧ください。

	旧バージョン	バージョンアップ後	リリースメモ (pdf)
FORTRAN90/SX コンパイラ	Rev. 501	Rev. 520	sxf90_rev520.pdf sxf90_rev510.pdf
MPI/SX ライブラリ	library 10.2.1	library 10.2.3	mpisx-lib_10.2.3.pdf

なお、コンパイルコマンドに変更はありません。オプションの説明は、sxman コマンドや PDF 版マニュアルで参照できます。

参照方法は、以下をご覧ください。

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

（共同利用支援係，共同研究支援係）

平成 28 年度利用負担金について（No.219）

平成 28 年度の利用負担金は、表 1(大学・学術利用)、表 2(民間機関利用)のとおりとなります。
なお、今後電気料金が高騰した場合には、年度途中において負担経費を値上げする場合があります。あらかじめご了承ください。

表１　基本利用負担金【大学･学術利用】

区　分	項　目	利用形態	負　担　額
演　算 負担経費	スーパー コンピュータ	共有	利用ノード数 1(実行数、実行時間の制限有)　無料(備考２)
			利用ノード数 1～32 まで　　経過時間 1 秒につき　0.06 円
			利用ノード数 33～256 まで　経過時間 1 秒につき (利用ノード数-32)×0.002 円+0.06 円
			利用ノード数 257 以上　　経過時間 1 秒につき (利用ノード数-256)×0.0016 円+0.508 円
		占有	利用ノード数 32　利用期間 3 ヶ月につき　400,000 円 利用期間 6 ヶ月につき　720,000 円
			利用ノード数 64　利用期間 3 ヶ月につき　720,000 円 利用期間 6 ヶ月につき　1,300,000 円
			利用ノード数 128　利用期間 3 ヶ月につき　1,300,000 円 利用期間 6 ヶ月につき　2,340,000 円
	並列 コンピュータ	共有	利用ノード数 1～6 まで　　経過時間 1 秒につき　0.04 円
			利用ノード数 7～12 まで　経過時間 1 秒につき　0.07 円
			利用ノード数 13～18 まで　経過時間 1 秒につき　0.1 円
			利用ノード数 19～24 まで　経過時間 1 秒につき　0.13 円
		占有	利用ノード数 1　利用期間 3 ヶ月につき　160,000 円 (可視化システムの 20 時間無料利用を含む) 利用期間 6 ヶ月につき　320,000 円 (可視化システムの 40 時間無料利用を含む)
ファイル 負担経費	1TB まで無料、追加容量 1TB につき年額		3,000 円
出力 負担経費	大判プリンタによるカラープリント　フォト光沢用紙 1 枚につき		600 円
			クロス 1 枚につき　1,200 円
可視化 機器室利用 負担経費	1 時間の利用につき		2,500 円

備考
1　負担額算定の基礎となる測定数量に端数が出た場合は、切り上げる。
2　負担額が無料となるのは専用のジョブクラスで実行されたものとし、制限時間を超えた場合には強制終了する。
3　占有利用期間は年度を超えないものとし、期間中に障害、メンテナンス作業が発生した場合においても、原則利用期間の延長はしない。また、占有利用期間中のファイル負担経費は 10TB まで無料とする。
4　ファイル負担経費については申請日から当該年度末までの料金とする。

表２　基本利用負担金【民間機関利用】

区　分	項　目	利用形態	負　担　額
演　算 負担経費	スーパー コンピュータ	共有	利用ノード数 1(実行数、実行時間の制限有)　無料(備考２)
			利用ノード数 1～32 まで　　経過時間 1 秒につき　0.18 円
			利用ノード数 33～256 まで　経過時間 1 秒につき (利用ノード数-32)×0.006 円+0.18 円
			利用ノード数 257 以上　　経過時間 1 秒につき (利用ノード数-256)×0.0048 円+1.524 円
		占有	利用ノード数 32　利用期間 3 ヶ月につき　1,200,000 円 利用期間 6 ヶ月につき　2,160,000 円
			利用ノード数 64　利用期間 3 ヶ月につき　2,160,000 円 利用期間 6 ヶ月につき　3,900,000 円
			利用ノード数 128　利用期間 3 ヶ月につき　3,900,000 円 利用期間 6 ヶ月につき　7,020,000 円
	並列 コンピュータ	共有	利用ノード数 1～6 まで　　経過時間 1 秒につき　0.12 円
			利用ノード数 7～12 まで　経過時間 1 秒につき　0.21 円
			利用ノード数 13～18 まで　経過時間 1 秒につき　0.3 円
			利用ノード数 19～24 まで　経過時間 1 秒につき　0.39 円
		占有	利用ノード数 1　利用期間 3 ヶ月につき　480,000 円 (可視化システムの 20 時間無料利用を含む) 利用期間 6 ヶ月につき　960,000 円 (可視化システムの 40 時間無料利用を含む)
ファイル 負担経費	1TB まで無料、追加容量 1TB につき年額		9,000 円
出力 負担経費	大判プリンタによるカラープリント　フォト光沢用紙 1 枚につき		1,800 円
			クロス 1 枚につき　3,600 円
可視化 機器室利用 負担経費	1 時間の利用につき		7,500 円

備考

1　負担額算定の基礎となる測定数量に端数が出た場合は、切り上げる。

2　負担額が無料となるのは専用のジョブクラスで実行されたものとし、制限時間を超えた場合には強制終了する。

3　占有利用期間は年度を超えないものとし、期間中に障害、メンテナンス作業が発生した場合においても、原則利用期間の延長はしない。また、占有利用期間中のファイル負担経費は 10TB まで無料とする。

4　ファイル負担経費については申請日から当該年度末までの料金とする。

(共同利用支援係)

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.219）

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

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

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

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

（スーパーコンピューティング研究部，共同利用支援係）

民間企業利用サービスについて（No.219）

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、社会貢献の一環として大学で開発された応用ソフトウェアとスーパーコンピュータを、民間企業の方が無償または有償にてご利用頂ける制度を用意しております。本サービスにおける利用課題区分は以下の２つとなります。

・大規模計算利用(有償利用)
・トライアルユース(無償利用)

詳細については以下を参照し、利用を希望される場合は共同利用支援係までお申し込みください。

http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/utilize/business.html

【問い合わせ先】
共同利用支援係(022-795-6251,uketuke@cc.tohoku.ac.jp)

（共同利用支援係）

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. 219）

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をご利用いただくにあたり、利用負担金を利用者単位のほか、機関（部局）単位で年間定額をお支払いいただくことで利用できるサービスも提供しております。

このサービスは、機関（部局）単位でお申し込みいただくことにより、その構成員であれば、各研究室が個別に利用負担金を支払うことなく、下記システムを利用できる仕組みとなっております。

これまで計算機を利用する機会がなかった研究者による新たなニーズへの対応や研究室の計算機では実行できなかった大規模シミュレーションが実行可能であり、また自前で計算機を導入するためのコストや運用コストも削減可能です。

すでにご利用いただいている機関（部局）からは、当初の予想を上回るご利用をいただき、ご好評をいただいております。

占有利用・共有利用については必要に応じて取り混ぜながら、ご予算に合わせて、年間定額により利用することが可能となっておりますので、ぜひご相談ください。

記

【利用可能なシステム】

- スーパーコンピュータ（SX-ACE）
- 並列コンピュータ（LX 406Re-2）
- ストレージシステム
- 大判カラープリンター（光沢紙、ソフトクロス紙）
- 三次元可視化システム

【問い合わせ先】

共同利用支援係(022-795-6251, uketuke@cc.tohoku.ac.jp)

（スーパーコンピューティング研究部, 共同研究支援係, 共同利用支援係）

— SENAC 執筆要項 —

１．お寄せいただきたい投稿内容

次のような内容の投稿のうち、当センターで適当と判定したものを掲載します。その際に原稿の修正をお願いすることもありますのであらかじめご了承ください。

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

２．執筆にあたってご注意いただく事項

(1)原稿は横書きです。
(2)術語以外は、「常用漢字」を用い、かなは「現代かなづかい」を用いるものとします。
(3)学術あるいは技術に関する原稿の場合､200 字～400 字程度のアブストラクトをつけてください。
(4)参考文献は通し番号を付し末尾に一括記載し、本文中の該当箇所に引用番号を記入ください。
　・雑誌：著者, タイトル, 雑誌名, 巻, 号, ページ, 発行年
　・書籍：著者, 書名, ページ, 発行所, 発行年

３．原稿の提出方法

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

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

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

４．その他

(1)執筆者には、希望により本誌*（10 部以内の希望部数）と本誌 PDF 版を進呈します。
　*2014 年末で、別刷の進呈は終了しました。
(2)投稿予定の原稿が 15 ページを超す場合は共同利用支援係まで前もってご連絡ください。
(3)初回の校正は、執筆者が行って、誤植の防止をはかるものとします。
(4)原稿の提出先は次のとおりです。

東北大学サイバーサイエンスセンター内　情報部情報基盤課共同利用支援係
e-mail　uketuke@cc.tohoku.ac.jp
TEL　　022-795-3406

スタッフ便り

2001 年にサイバーサイエンスセンターの前身であるシナジーセンターに着任して以来，教育・研究に加え，初めての経験であったスーパーコンピュータの運用と利用者支援に取り組んで参りましたが，この 4 月から大学院情報科学研究科に異動となりました．

この 15 年間多くの人に助けられ，研究科では得ることができない貴重な経験を積むことができました．この場を借りて，改めて皆様に感謝したいと思います．

4 月からは引き続きコンピュータアーキテクチャに関する教育・研究に取り組んで参りますが，あわせて，今回拝命いたしましたサイバーサイエンスセンター長特別補佐として，東北大学の高性能計算基盤の高度化や我が国の HPCI の発展にも微力ながら貢献していきたいと思っております．今後ともご指導，ご支援の程，よろしくお願いいたします．（小林広明）

新しい年度が始まり，仙台の桜も咲き始めました．年齢を重ねるとともに，1 年の経過をどんどん短く感じるようになり，これからもっと短く感じるようになるかと思うと，ちょっと怖いところです．

本センターのスーパーコンピュータ SX-ACE も導入から 1 年ちょっとが経過しました．この間，ものづくり分野，防災・減災に関する研究分野，気象・地球シミュレーションに関する研究分野，医療に関する研究分野など様々な分野で活用されています．また導入初年度ということもあり，たくさんの人に SX-ACE を見学して頂きました．これからも研究者の方々が利用しやすい計算環境を提供し，スーパーコンピュータを良き研究ツールとして役立てていただけるように，微力ながらお手伝いできればと考えております．また，本センター分散コンピュータ博物館には，歴史的に価値のある展示品が並んでおります．スーパーコンピュータの現在と過去が見学できますので，ぜひ青葉山まで見学にきて頂ければと思います．（S. O）

サイバーサイエンスセンター・情報部情報基盤課 スタッフ異動のお知らせ

2016. 4. 1 付け

［着任］
曽根　秀昭（センター長）
吉澤　誠　（副センター長）
小林　広明（センター長特別補佐）

［転入］
吉田　貴子（会計係・係長）仙台高等専門学校管理課会計係長（名取）から

［転出等］
小林　広明（センター長）任期満了、情報科学研究科教授へ
高杉　佳奈（会計係・係長）医学部・医学系研究科経理課経理係長へ
佐藤　雅之（研究開発部・研究支援者）任期満了、情報科学研究科助教へ

2016. 1. 31 付け

［退職］
伊藤　英一（共同利用支援係・再雇用職員）

サイバーサイエンスセンター（4 月）

SENAC 編集部会

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

平成 28 年 4 月発行
編集・発行　東北大学
サイバーサイエンスセンター
仙台市青葉区荒巻字青葉 6-3
郵便番号　980-8578
印　刷　東北大学生活協同組合
プリントコープ

システム一覧

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

サーバとホスト名

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

サービス時間

利用システム名等	利用時間帯
スーパーコンピュータ	連　続　運　転
並列コンピュータ	連　続　運　転
サ ー バ	連　続　運　転
可視化機器室	平日 9:00～21:00
館 内 利 用	平日 8:30～21:00

スーパーコンピュータ（SX-ACE）の利用形態と制限値

利用形態	利用ノード数 ※	実行時間制限（経過時間）	メモリサイズ制限	-q オプション	-b オプション
通常	1～256	規定値：2 週間 最大値：1 ヶ月	60GB×ノード数	sx	利用ノード数
	257～1,024	規定値：1 ヶ月 最大値：1 ヶ月			
無料	1	1 時間	60GB		f
デバッグ	1～16	2 時間	60GB×ノード数	debug	利用ノード数
	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 ヶ月 最大値：1 ヶ月	128GB×ノード数	lx	利用ノード数
アプリケーション	1	なし	128GB		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.49 No.2 2016–4

［巻頭言］
センター長に就いて …… 曽根　秀昭　1

［お知らせ］
平成 28 年度サイバーサイエンスセンター講習会のご案内 …… 3

［共同研究成果］
従来型観測のみを用いた日本域再解析システムの構築に向けた同化実験
…… 福井　真・岩崎　俊樹　斉藤　和雄・瀬古　弘　国井　勝　5

低レイノルズ数流れにおける非定常空力特性の数値解析
…… 児島　有哉・飯岡　大樹・佐々木大輔　12

［大規模科学計算システム］
SSH アクセス認証鍵生成サーバの利用方法 …… 19

アプリケーションサービスの紹介 …… 22

［報 告］
第 23 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
…… 小林　広明　42

サイバーサイエンスセンターセミナー報告 …… 44

［Web 版大規模科学計算システムニュースより］
Gaussian09 のバージョンアップについて（No.217） …… 45

平成 28 年度共同研究について（No.218） …… 46

コンパイラのバージョンアップについて（No.219） …… 46

平成 28 年度利用負担金について（No.219） …… 47

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.219） …… 49

民間企業利用サービスについて（No.219） …… 49

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.219） …… 50

執筆要項 …… 51

スタッフ便り …… 52

VEGETABLE OIL INK