



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.51 No.2 2018-4



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) kaikai@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
	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
	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。

**[共同研究成果]****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**

## — 中間報告 —

松岡 浩

東北大学電気通信研究所(客員)  
一般財団法人高度情報科学技術研究機構

菊池 範子

株式会社サイエンス・サービス

**1. はじめに**

筆者らは、東北大学サイバーサイエンスセンターとの共同研究公募制度により、平成 27 年度から「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」を行ってきた。本研究は、平成 29 年度まで実施しているが、ここでは、平成 28 年度までの成果として、特に“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可能性”について中間報告を行う。

筆者らは、これまでの研究を通じて、“リアルタイム流体解析”を実現するには、4つの技術課題を解決する必要があると考えている。本原稿では、このうちの2つ、①“超並列格子点演算”の実現と②“連続動画可視化”の実現に関する考察を述べる。このほか、③実測データ等をシミュレーション過程にリアルタイムでフィードバックする“計測融合機能”の実現、④幅広いレイノルズ数領域で格子ガス法によるシミュレーションを可能にする“粘性制御機能”の実現、が重要な技術課題として挙げられる。後者の2課題は、さらに研究が進んだ時点でご報告したい。

なお、本稿の本文は松岡が執筆し、掲載したシミュレーション事例に関する計算及び可視化は菊池が分担した。

本研究の最終目標は、「流体中を運動する物体に係わる工学システムのものづくり設計において、斬新な設計アイデアの探索に役立つ“リアルタイム流体シミュレーション設計ツール”を実現すること」である。より具体的には、

「ものづくり設計のために必要とされる流体シミュレーションの解像度を維持しながら、  
①流体中または流体周辺に存在する物体や構造物の位置や形状（“設計上の境界条件”）、  
②工学的に制御できるある特定の場所の流体運動の速さや向き（“運転上の環境条件”）、  
などを連続的かつ気ままに変化させながら、その効果を実際の物理現象の実時間に近い応答としてビジュアルに観察できる、コンパクトな規模の計算機による超高速流体シミュレーションシステムの構築」を目指している。

この最終目標への道のりは長いですが、本稿では、中間報告として、第2章で、筆者が用いている流体解析手法である“多速さ格子ガス法”の特徴を述べ、第3章で「円柱後流解析に基づく実時間計算の実現可能性」について、第4章で「1格子点1ビット幅演算の二相流解析への適用性」について考察し、最後に、“超並列格子点演算”と“連続動画可視化”の実現性を総括する。

**2. “多速さ格子ガス法”の特徴**

前章で述べたような“リアルタイム流体解析”を実現していく場合、筆者は、ナビエ・ストークス方程式を差分化して解く従来の王道的なCFD手法よりも、よりミクロな視点でボルツマン方程式を離散化した格子ボルツマン方程式に従い、整数型の確率変数を用いて時間発展を追跡していく“多速さ格子ガス法（整数型格子ボルツマン法）”[1]を用いた方が有利であると考えている。

本手法は、流体が存在する空間中に格子を張り、多数の仮想粒子が、その格子点上のみで他の

仮想粒子と衝突して進行の向きを変えながら格子点間を走行していく様子を平均化(疎視化)して流体の挙動を模擬する方法である。このとき、仮想粒子がもつ質量・運動量・エネルギーが衝突の前後で保存されるような粒子衝突を想定する限り、その挙動は、自然界におけるある条件下の流体挙動とかなり似かよったものになる。しかしながら、仮想粒子は、格子点が存在する位置の間しか移動できないので、速度の大きさも向きも離散的な値をとり、自然界の流体分子のように連続的な値をとることができない。この制約によって、格子ガス法が導くマクロな挙動は、連続流体を仮定している CFD が導く流体挙動とは多少異なったものになる。しかしながら、テシヤラが考案した方法 [2] に従い、異なる速さをもつ仮想粒子どうしの衝突頻度をうまく調節すれば、この“多少の差異”を解消することができる。これにより、“多速格子ガス法”は、CFD を代替できる精度をもったシミュレーション手法となりえる。この詳細は、SENAC の 2016 年 10 月号 [3] に記載しているので、そちらを参照されたい。

筆者が、この“多速格子ガス法”を“リアルタイム流体解析”を実現するツールの最有力候補と考える理由は、本手法が次の特徴をもつからである。

- ①ひとつの格子点に関する衝突等の状態変化演算を 1 ビット幅で超並列に実行することができる。
- ②複雑な形状で時間変化する境界条件でも比較的容易にシミュレーション計算過程に取り込める。
- ③時間発展計算をビット演算で行えるため打ち切り誤差の蓄積もなくどんな流れでも計算はできる。

### 3. 円柱後流解析に基づく実時間計算の実現性可能性

ものづくり産業において“設計アイデアの探索”という目的からみた場合、これまで開発してきた“多速格子ガス法流体解析コード”が、コンパクトな計算機規模で必要な解像度のシミュレーション結果を実時間で連続的に提供できるのか？という課題が重要である。

この実現性を評価するため、本共同研究を開始した時点では、「小型冷蔵庫の大きさで 100V 電源駆動が可能な SX-ACE Lite」を“コンパクトなものづくり設計用計算機”の代表例と考え、それと同一規模の SX-ACE32 ノード (32CPU=128 コア) による計算を実行して性能評価を試みた。

はじめに、3次元空間中に約 5000 万個の格子点を X Y Z の各方向に並べ、直方体形状の格子点配列を作る。各格子点は、その内部に 4次元目の座標として  $R=0, 1, 2, 3$  の位置を識別できる自由度をもつとする。これが図 1 であり、4次元面心超立方体格子を 3次元空間へ投影した姿である。

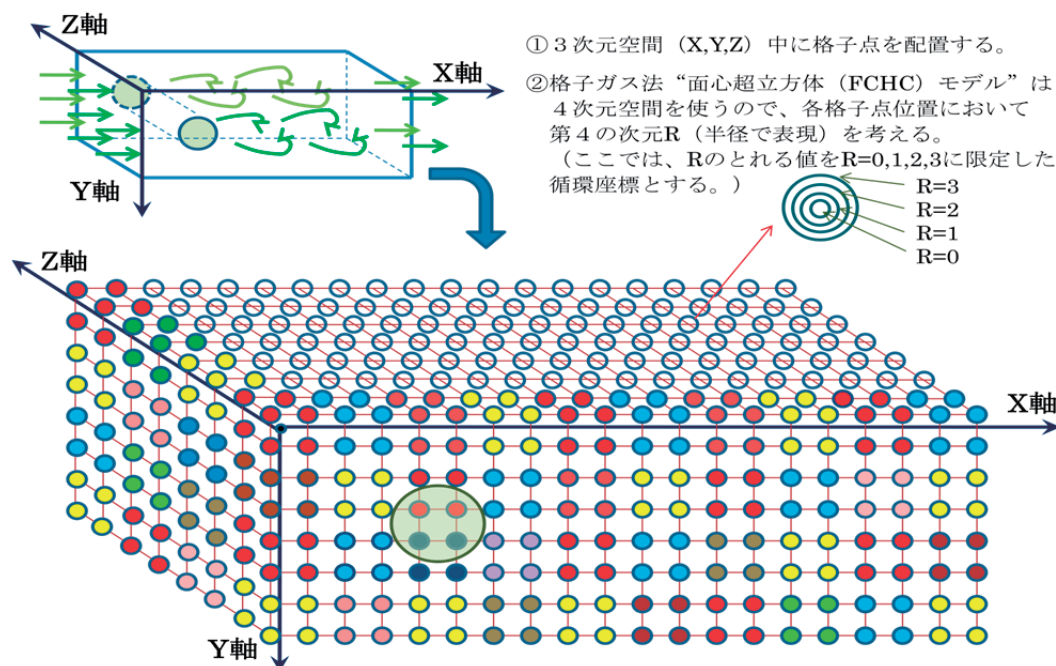


図 1. 円柱後流をシミュレーションするための 4次元面心超立方体格子 (3次元投影)

具体的には、3次元縮退格子として、X方向に768個、Y方向に256個、Z方向に256個の格子点を配置した。また、シミュレーション計算を開始する時刻ステップ0の時点で、各格子点には、そこに存在できる仮想粒子の最大数の20%の数の仮想粒子がランダムな向きに配置されていると仮定した。この結果、疎視化して得られるマクロな流速はゼロであり、流体は、直方体形状の中で静止している。次に、時刻ステップ1の時点から、+X向きの速度をもつ仮想粒子を $X=0$ の位置から注入していく。すると、時刻ステップが進むにつれて、流体全体が+X向きのマクロな速度をもつようになる。このとき、+X側の先にある直方体出口においては、出口直前に存在する格子点上の仮想粒子配置を、出口直後に存在する格子点の仮想粒子配置にコピーして、出口におけるマクロな流速の勾配がゼロになるという境界条件を近似的に実現した。また、±Y方向と±Z方向には、周期的境界条件を適用した。そして、この流れの中の入り口に近い位置に、“Z方向の中心軸をもつ無限大の長さの円柱”を置き、その後流に生じる流体挙動を計算した。

図2は、3次的に生じている円柱後流の流速変化のうち、Z軸に垂直なある平面上の流速分布を示している。はじめ静止していた流体中におかれた円柱の後流には、流体の速度が増すにつれて、最初は双子渦が生成し、次にその長さが伸びて尾が振れ出し、長い尾が切れて、最後は、短い尾が振れ続ける“カルマン渦”になった。これは現実の過渡変化挙動をよく模擬している。

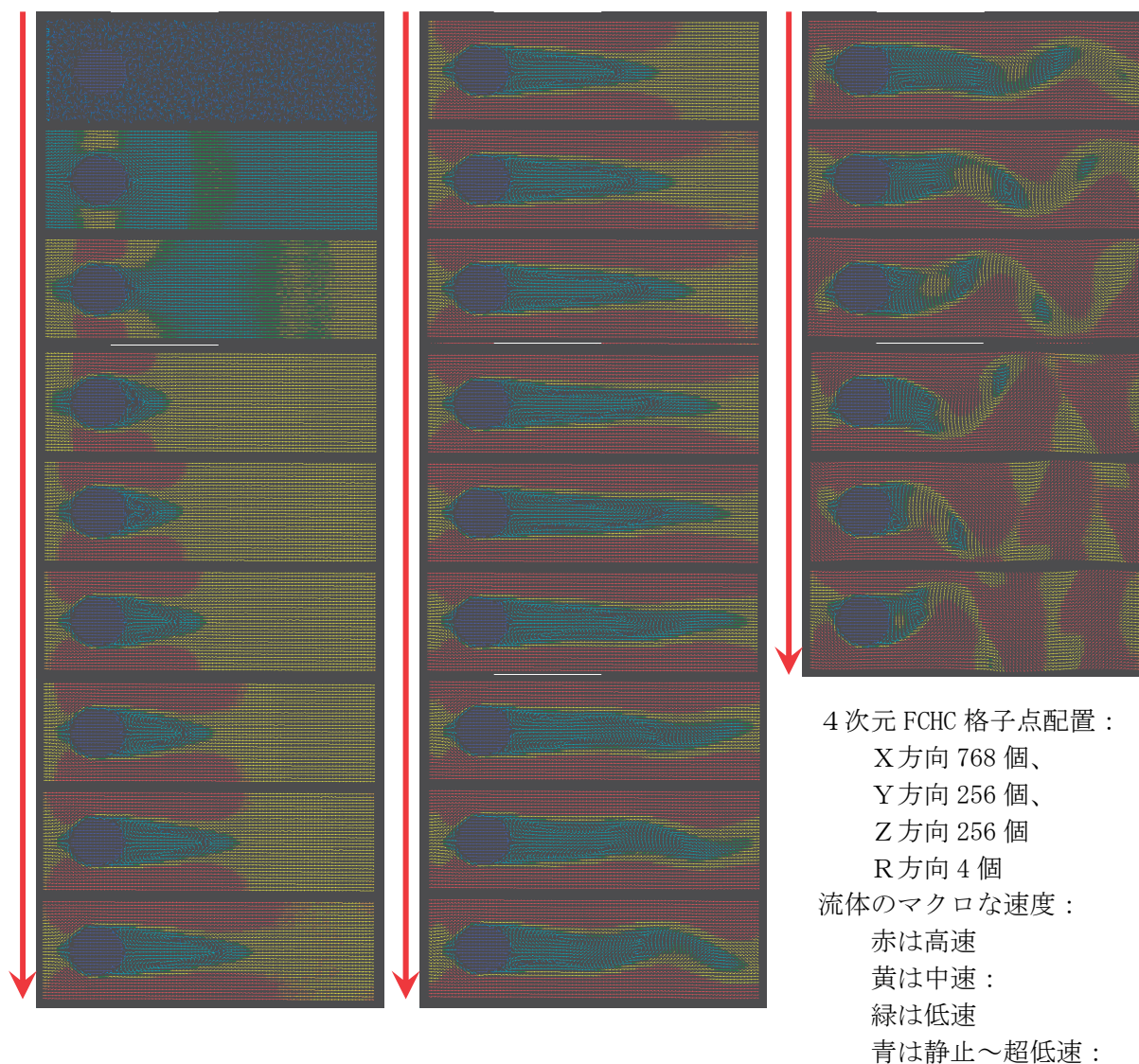


図2. 加速される流体中に置かれた円柱後流に発生する渦の過渡変化(Z軸に垂直なある面上)

本計算は、東北大学サイバーサイエンスセンターの SX-ACE32 ノード(128 ベクトルコア)を利用し、11,776 時刻ステップの計算を実行するのに 716 秒という計算時間を要した。図 2 では、24 個のスナップショットの時系列画像を示しているが、スナップショット画像が得られる時間間隔は、 $716 \text{ 秒} \div 24 \approx 30 \text{ 秒}$  である。従って、格子点規模が約 5000 万個ではなく約 1000 万個であれば、スナップショット画像が得られる時間間隔は約 6 秒と推測される。ここで、本年(2018 年)発売される SX-Aurora Tsubasa を利用した場合を考えると、SX-ACE に比べて CPU 性能が 10 倍程度になっているため、スナップショット画像は 0.5 秒程度の時間間隔で得られるはずである。

他方、図 2 の最後の方のスナップショット画像の数枚を見ると、カルマン渦の尾の振れる周期とスナップショット画像の時間間隔が同程度であることがわかる。そして、カルマン渦の周期は、一般的に  $D/(St \cdot U)$  で与えられ、ここで、 $D$  代表長さ(円柱の直径)、 $U$  代表速さ(マクロな流速)、 $St$  ストローハル数(0.2 程度)であることが知られているので、 $U$  が毎秒  $D$  の 10 倍程度の流れでは、0.5 秒程度になる。これは、上述した SX-Aurora Tsubasa によるシミュレーションで得られると予想されるスナップショット画像の計算時間間隔と同じである。

以上のことから、SX-Aurora Tsubasa の数 10 ノード用いれば、1000 万格子点規模の単相流体挙動解析については、実時間に近いシミュレーションを実現できそうなレベルにあることがわかる。

## 4. “1 格子点 1 ビット幅演算”の二相流解析への適用性

### 4.1 はじめに

第 3 章で、単相流体挙動のリアルタイムシミュレーションの実現性について考察した。しかしながら、現実のものづくり産業では、現実世界におけるもっと複雑な事象に関心がある。たとえば、実船の船舶設計では、海水と空気の二相流中で船舶が進行する際の抵抗力の評価が必要であり、プロペラ部分ではキャビテーションの評価も重要である。また、原子力発電プラントの原子炉冷却系等の設計では、水と水蒸気の気液二相流の評価が必要になる。ところが、二相流の流体解析計算は、同じ格子点数規模の単相流の流体解析計算に比べて、計算負荷が格段に大きくなり、実時間計算の実現は相当困難であるように思われる。

このような背景を踏まえ、ここでは、“多速さ格子ガス法流体解析コード”において超高速計算性能を生み出す源であった“1 格子点 1 ビット幅演算”が、単相流解析だけではなく、二相流解析にも適用できることを確認することとした。このため、まずは、二相流過渡変化の中で一番単純な“無重力下での相分離現象”のシミュレーションを試みた。

### 4.2 仮想粒子の存否情報を表す整数型配列と超並列ビット演算による衝突計算の実現

ここで用いる“多速さ格子ガス法流体解析コード”は、第 3 章で述べたように“4 次元面心超立方体(FCHC)格子”を採用している。多数の仮想粒子が、4 次元空間( $X, Y, Z, R$ )中に張られた FCHC 格子点を動きまわるが、仮想粒子どうしの“衝突”は、格子点上においてのみ生じると仮定する。この結果、エネルギーが 0 でない仮想粒子は、次の時刻ステップで、今いる格子点の近傍にある格子点だけに飛び移るので、有限個の離散的な 4 次元速度だけをもちうる。特にここで用いる“非熱流体 FCHC モデル”では、エネルギーが 0 でない仮想粒子については 48 種類の異なる速度をもちうるが、各格子点において、これらの速度をもつ仮想粒子は、高々 1 個しか存在できないものとする。なお、エネルギーが 0 の静止仮想粒子は、各格子点に複数個( $\alpha$ )存在してもよい。

以上のことから、各格子点における物理状態は、エネルギーが 0 の静止仮想粒子の識別を表す  $\alpha$  個の種類と、エネルギーが 0 でない仮想粒子の速度による識別を表す 48 種類のそれぞれについて、その仮想粒子が存在[1]するか? 否[0]か? という 1 ビット情報を与えることで表現できる。本流体解析コードでは、“1 格子点 1 ビット幅の演算”を効率よく実行させるため、ひとつの格子点ごとに  $(48 + \alpha)$  種類の速度をもつ仮想粒子の存否情報をまとめて配列に記憶するのではなく、ひとつの速度ごとに 32 個の 4 次元格子点における仮想粒子の存否情報をまとめて配列に記憶する。

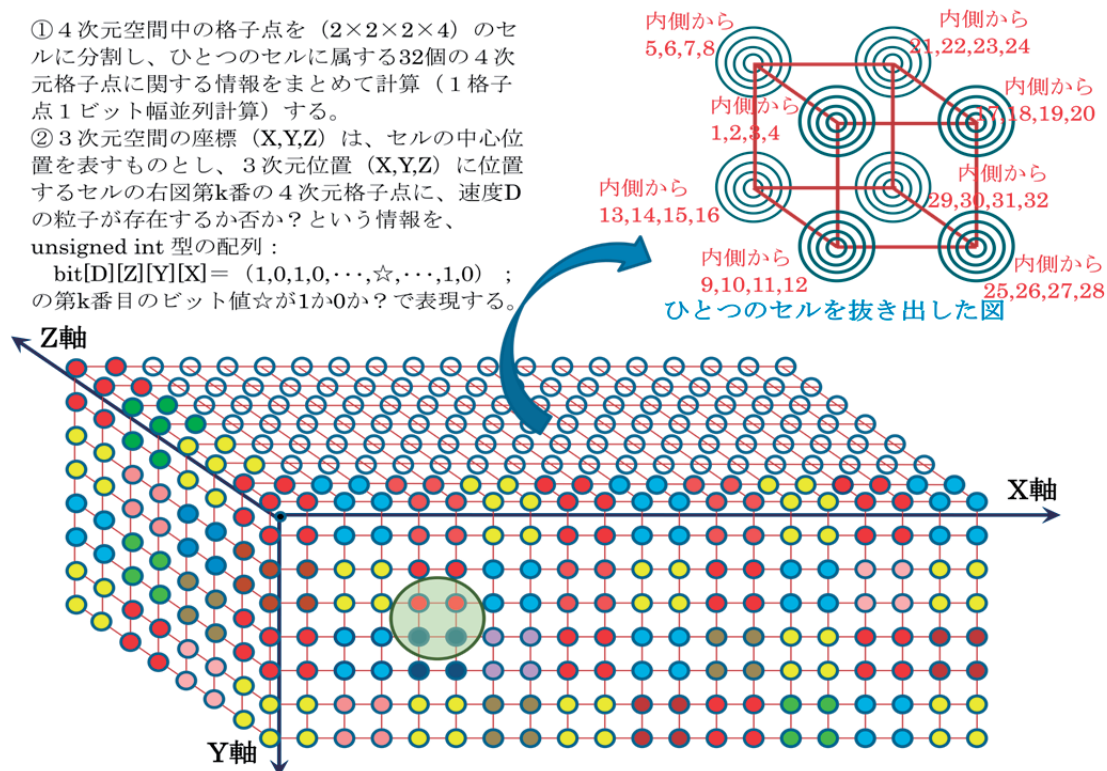


図3. 位置  $(X, Y, Z)$  に存在する  $(2 \times 2 \times 2 \times 4)$  セルとその中に存在する 32 個の格子点(右上)

具体的には、4次元空間中に広がる4次元FHC格子を、2(X方向)×2(Y方向)×2(Z方向)×4(R方向)の4次元直方体領域の“セル”に分割する。ひとつのセルに存在する  $2 \times 2 \times 2 \times 4 = 32$  個の4次元格子点における仮想粒子の存否情報をひとまとめにして、ある特定の速度Dをもつ仮想粒子ごとに、符号なしの32ビット整数型配列(unsigned int型配列)に記憶する。図3は、3次元空間の位置  $(X, Y, Z)$  に存在する“セル”の様子と、そのセルに含まれる32個の4次元格子点を右上の図で表現している。この32個の4次元格子点のそれぞれに速度Dをもつ仮想粒子が存在するか否か？の存否情報が、図3の中の説明文に記載された配列  $\text{bit}[D][Z][Y][X]$  の各ビットに記憶される。

さて、各格子点では、シミュレーション計算の時刻ステップの刻みごとに、隣接格子点から飛来する仮想粒子が自分の格子点に“到着”し、到着した仮想粒子は、衝突によって向きを変えた後、別の隣接格子点に向かって“出発”していく。このとき、仮想粒子の進行向きの変更は、衝突によって瞬時に起こると仮定されているので、同じ時刻ステップでも、速度Dをもつ仮想粒子が位置  $(X, Y, Z)$  の“セル”に存在するか否か？を表現する配列としては、“到着分布用”の  $\text{bitarr}[D][Z][Y][X]$  と“出発分布用”の  $\text{bitstr}[D][Z][Y][X]$  の2種類を考える必要がある。

具体的には、例えば、以下のように、符号なし整数型配列に、仮想粒子の存否情報を記憶する。まずは、“到着粒子の存否情報を記憶した配列”として、次の例を考える。

$$\text{bitarr}[D][Z][Y][X] = 10011001111011011110011101111011;$$

ここで、一番右からn番目のビットが「1」であれば、位置  $(X, Y, Z)$  にあるセルの第n番目の4次元格子点には、速度Dをもった到着粒子が「存在する」ことを示している。もし、一番右からm番目のビットが「0」であれば、位置  $(X, Y, Z)$  にあるセルの第m番目の4次元格子点には、速度Dをもった到着粒子が「存在しない」ことを示している。(  $1 \leq n, m \leq 32$  )

出発粒子の場合も、同様であり、例えば、次のようになる。

“出発粒子の存否情報を記憶した配列”

$$\text{bitstr}[D][Z][Y][X] = 010010011110110111011101111001;$$

速度 a と速度 b をもつ 2 つの仮想粒子が同じ位置の格子点に到着して、運動量とエネルギーを保存しながら、速度 c と速度 d の 2 つの仮想粒子になって出発していく衝突の過程は、 $\text{bitarv}[a][Z][Y][X]$  と  $\text{bitarv}[b][Z][Y][X]$  の対応するビットがともに「1」で、かつ、 $\text{bitarv}[c][Z][Y][X]$  と  $\text{bitarv}[d][Z][Y][X]$  の対応するビットがともに「0」の場合に生じる。そして、衝突した結果は、 $\text{bitstr}[a][Z][Y][X]$  と  $\text{bitstr}[b][Z][Y][X]$  の対応するビットがともに「0」で、かつ、 $\text{bitstr}[c][Z][Y][X]$  と  $\text{bitstr}[d][Z][Y][X]$  の対応するビットがともに「1」になることで表現できる。また、この逆の過程も、運動量とエネルギーを保存するはずであるから、「速度 c と速度 d をもつ 2 つの仮想粒子が同じ位置の格子点に到着して、速度 a と速度 b の 2 つの仮想粒子になって出発していく衝突の過程」も同様に生じるであろう。このような衝突過程における仮想粒子の存在状態の変化は、次のビット演算で計算できる。ただし、「&」は“論理積”、「|」は“論理和”、“~”は“論理否定”、“^”は“排他的論理和”のビット演算を表している。

mk

```
= (bitarv[a][Z][Y][X] & bitarv[b][Z][Y][X] & ~bitarv[c][Z][Y][X] & ~bitarv[d][Z][Y][X])
  | (~bitarv[a][Z][Y][X] & ~bitarv[b][Z][Y][X] & bitarv[c][Z][Y][X] & bitarv[d][Z][Y][X]);
bitstr[a][Z][Y][X] = bitarv[a][Z][Y][X] ^ mk;
bitstr[b][Z][Y][X] = bitarv[b][Z][Y][X] ^ mk;
bitstr[c][Z][Y][X] = bitarv[c][Z][Y][X] ^ mk;
bitstr[d][Z][Y][X] = bitarv[d][Z][Y][X] ^ mk;
```

以上のようなビット演算により、1 ワードの計算をしながら、1 セル 32 個の格子点に関する並列計算を実行できることになる。特に、ベクトル計算機でベクトル長 256 ワードの計算を行えば、1 回のベクトル命令で、 $32 \times 256 = 8192$  個の格子点に係る並列計算を実行できる。

### 4.3 二相流を扱う場合に仮想粒子の存否情報を表す配列の表現

第 3 章で述べたように、“1 格子点 1 ビット幅演算”は、单相流の実時間計算をも実現しうる強い威力をもっている。それでは、二相流のシミュレーションを行う場合にも、“1 格子点 1 ビット幅演算”で全ての計算過程をうまく実現できるであろうか？ここでは、“相分離現象のシミュレーション”について、そのことを検証してみる。

2 相を取扱うため、2 種類の仮想粒子（“赤粒子”と“青粒子”）を考える。各 4 次元格子点において、エネルギーが 0 でない仮想粒子がもつことを許されるそれぞれの速度は、高々 1 個の“赤粒子”かあるいは高々 1 個の“青粒子”がその速度をもつことができるとする。これは、格子ガス法で二相流を模擬する場合によく使われるモデルである。このモデルを使用する場合、各格子点における仮想粒子の存在状態を表現するのに、仮想粒子の存否情報だけではなく、その粒子が“赤粒子”なのか？“青粒子”なのか？という情報も何かの方法で識別できるようにする必要がある。ここでは、上記配列を 32 ビット幅の「unsigned int 型」から 64 ビット幅の「unsigned long int 型」に変更して、右側 32 ビットには、これまでと同じで、仮想粒子の存否情報を記憶させ、左側 32 ビットには、粒子が赤粒子であるか？否か？を「1」or「0」で記憶させることにした。このとき、左側 32 ビットにおける“赤粒子ではない「0」の場合”というのは、“仮想粒子が存在していてそれが「青粒子」の場合”と“そもそも仮想粒子が存在しない空の場合”があることに注意してほしい。

具体的な例を示すと、配列の要素は、次のような 64 ビットの「1」「0」の並びであり、

```
bitarv[D][Z][Y][X]
```

```
=1000110010110110110100011011110111001100111101101111001110111101;
```

例えば、一番右から n 番目のビットが「1」であり、かつ、一番右から n+32 番目のビットが「1」



であれば、位置(X, Y, Z)にあるセルの第 n 番目の 4 次元格子点には、速度 D をもつ到着粒子が存在して、それは「赤粒子」である。(1<n<=32) ここで、一番右から n+32 番目のビットが「1」であれば、仮想粒子は必ず存在するはずなので、一番右から n 番目のビットも必ず「1」になっていなければならない。他方、一番右から n+32 番目のビットが「0」であれば、一番右から n 番目のビットも調べて、このビットが「1」ならば「青粒子」が存在し、このビットが「0」ならば仮想粒子が存在しない空の状態であることがわかる。

#### 4.4 “相分離”を引き起こす計算過程の“1 格子点 1 ビット幅演算”による実現

“赤青粒子モデル”によって“相分離”のシミュレーションを行う場合、赤粒子どうし及び青粒子どうしの間では“引力”を働かせ、赤粒子と青粒子の間では“斥力”を働かせるというモデルが通常採用される。しかしながら、今回のシミュレーションの目的は、“1 格子点 1 ビット幅演算”が二相流解析にも適用できることを確認することにあるので、もっと簡略化したモデル計算を行うことにした。これは、物理的には不適切な部分もあるが、着色された仮想粒子の粒子数をカウントし、その大小を比較する計算を含む点で、“1 格子点 1 ビット幅演算”の適用性を確認するには十分なモデルである。このモデルでは、以下の手順で“相分離”を実現させている。

ある格子点に到着した仮想粒子について、それが“赤粒子”であろうが“青粒子”であろうが気にしないで仮想粒子の衝突による状態変化を計算する。このため、右側 32 ビットに注目して 4.2 節に述べた衝突過程の計算を行う。左側 32 ビットは、右側 32 ビットにおける仮想粒子の入れ替えの動きに追従させて移動させる。次に、各格子点から出発粒子をいろいろな向きに放出する際に、隣接格子点に存在する「“赤粒子”の数」の値を調べ、その値が大きな隣接格子点の向きに“赤粒子”を多く放出し、その値が小さな隣接格子点の向きに“青粒子”を多く放出させることにする。ただし、“赤粒子”、“青粒子”を問わない出発粒子の速度分布配置は変更せずに、その色だけを変更することとする。また、このとき、“赤粒子”の個数と“青粒子”の個数は保存させるものとする。ここでは、この操作をさらに簡略化して、「仮想粒子の出発分布において、互いに同じ速さで向きが正反対に出発しようとしている“赤粒子”と“青粒子”のペアがたまたま存在し、かつ、“赤粒子の行き先格子点に存在する赤粒子の数”と“青粒子の行き先格子点に存在する赤粒子の数”をカウントして前者が後者よりも小さい場合に、今注目している出発粒子ペアの色を入れ替える。」という操作を行った。

ここで重要なことは、「着色された仮想粒子の粒子数をカウントし、その大小を比較する計算」についても“1 格子点 1 ビット幅演算”を適用できることである。

出発粒子については、配列 bitstr[D][Z][Y][X]の右側 32 ビット中のひとつのビット位置に注目して、すべての速度の種類 D について「1」の数を足し上げれば、そのビット位置に対応した 4 次元格子点に存在する全出発粒子数(赤粒子数+青粒子数)を知ることができる。また、左側 32 ビット中のひとつのビット位置に注目して、すべての D について「1」の数を足し上げれば、そのビット位置-32 に対応した 4 次元格子点に存在する赤粒子の出発粒子数を求めることができる。このとき、すべての D について粒子数を足し上げる計算は、以下のようにして行った。これは、“論理積”と“排他的論理和”によって“半加算器”を 6 組構成し、それらを“桁上げ”でつないだ形になっている。

```

wa1 = wa2 = wa3 = wa4 = wa5 = wa6 = 0X0000000000000000U;
in1 = bitstr[1][Z][Y][X];
in2 = wa1 & in1; wa1 = wa1 ^ in1;
in3 = wa2 & in2; wa2 = wa2 ^ in2;
in4 = wa3 & in3; wa3 = wa3 ^ in3;
in5 = wa4 & in4; wa4 = wa4 ^ in4;
in6 = wa5 & in5; wa5 = wa5 ^ in5;
wa6 = wa6 ^ in6;

```

```

in1 = bitstr[2][Z][Y][X];
in2 = wa1 & in1;  wa1 = wa1 ^ in1;
in3 = wa2 & in2;  wa2 = wa2 ^ in2;
in4 = wa3 & in3;  wa3 = wa3 ^ in3;
in5 = wa4 & in4;  wa4 = wa4 ^ in4;
in6 = wa5 & in5;  wa5 = wa5 ^ in5;
wa6 = wa6 ^ in6;
    . . . . .
in1 = bitstr[48+ $\alpha$ ][Z][Y][X];
in2 = wa1 & in1;  wa1 = wa1 ^ in1;
in3 = wa2 & in2;  wa2 = wa2 ^ in2;
in4 = wa3 & in3;  wa3 = wa3 ^ in3;
in5 = wa4 & in4;  wa4 = wa4 ^ in4;
in6 = wa5 & in5;  wa5 = wa5 ^ in5;
wa6 = wa6 ^ in6;

bitnum[1][Z][Y][X] = wa1;
bitnum[2][Z][Y][X] = wa2;
bitnum[3][Z][Y][X] = wa3;
bitnum[4][Z][Y][X] = wa4;
bitnum[5][Z][Y][X] = wa5;
bitnum[6][Z][Y][X] = wa6;

```

以上の計算により、位置  $(X, Y, Z)$  にあるセルの第  $n$  番目の 4 次元格子点に存在する全粒子数を 2 進数で表示したとき、その第 1 ビットの値が  $\text{bitnum}[1][Z][Y][X]$  の第  $n$  ビットに、第 2 ビットが  $\text{bitnum}[2][Z][Y][X]$  の第  $n$  ビットに、 $\dots$ 、第 6 ビットが  $\text{bitnum}[6][Z][Y][X]$  の第  $n$  ビットに表示されることになる。また同様に、位置  $(X, Y, Z)$  にあるセルの第  $n$  番目の 4 次元格子点に存在する赤粒子数を 2 進数で表示したとき、その第 1 ビットの値が  $\text{bitnum}[1][Z][Y][X]$  の第  $n+32$  ビットに、第 2 ビットが  $\text{bitnum}[2][Z][Y][X]$  の第  $n+32$  ビットに、 $\dots$ 、第 6 ビットが  $\text{bitnum}[6][Z][Y][X]$  の第  $n+32$  ビットに表示されることになる。

また、粒子数カウンットの大小比較は、カウンット数の 2 進法表示の各桁が 1 格子点 1 ビット幅の配列で得られているので、第 6 ビット側から順番に比較していけばよい。まず、 $\text{bitnum}[6][Z][Y][X]$  の排他的論理和をとり、これが「1」になるビットについては、そのビットが「1」になっている格子点の方に数多くの粒子が存在している。排他的論理和が「0」になるビットについては、第 5 ビットの比較を行う。すなわち、 $\text{bitnum}[5][Z][Y][X]$  の排他的論理和をとり、これが「1」になるビットについては、そのビットが「1」になっている格子点の方に数多くの粒子が存在している。排他的論理和が「0」になるビットについては、第 4 ビットの比較を行う、と続けていく。

以上のことから、“相分離”を引き起こす計算過程は、“1 格子点 1 ビット幅演算”ですべて実現できることがわかる。

#### 4.5 相分離シミュレーションの実行内容

“相分離”のシミュレーションについても、“コンパクトなものづくり設計用計算機”の規模を想定するという意味で、東北大学サイバーサイエンスセンターにある SX-ACE の 32 ノード (32CPU=128 コア) を用い、128mpi による並列計算を実行した。

流体シミュレーションを行う空間中には、3 次元格子点を

X 方向に  $XX \times S \times 2 = 32 \times 4 \times 2 = 256$  個

Y 方向に  $YY \times Nyranks \times S \times 2 = 2 \times 16 \times 4 \times 2 = 256$  個

Z 方向に  $ZZ \times Nzranks \times S \times 2 = 2 \times 8 \times 4 \times 2 = 128$  個

配置し、総格子点数は、 $256 \times 256 \times 128 = 8388608 \approx 800$  万個とした。

スパコンによるシミュレーション計算では、これら全ての格子点上で、3種類のエネルギー(0, 1, 2)をもちうる赤色か青色の仮想粒子が、互いに衝突と並進をくりかえしながら移動していく。また、境界条件は、X方向、Y方向、Z方向のすべてを周期的境界条件とした。初期条件は、最初の時刻ステップ0で、個々の4次元格子点に赤粒子が存在する確率と青粒子が存在する確率は同じで25%とし、速度の向きをランダムにとって静止流体を表現した。なお、重力等は印加しない。

また、可視化については、公開アプリケーションソフトウェアである“ParaView” (ParaView 5.0.0) を用いることとした。具体的には、相分離の時間発展計算が進行していく過程で、仮想粒子の粒子数密度がどのように変化していくか?を知るため、計算の時刻ステップがある一定の数進むたびに、そのときのスナップショット画像を、ParaView可視化用のvtkファイルフォーマットで作成し、合計24画面のファイル出力を実行した。

#### 4.6 “相分離”シミュレーションの評価

SX-ACEの32CPUによる128mpi並列計算により、約800万格子点規模の計算を約5900ステップ行い、233秒間を要した。ベクトル化率は、99.3%であり、全体としては、二相流の流体解析に対しても“1格子点1ビット幅演算”を適用できることを確認できた。

シミュレーションの結果得られた赤粒子密度の時間発展動画を図4に示す。時刻ステップが進むとともに、赤粒子どうしの引力によって静止流体中に発生した“赤粒子の高密度領域”が次第に大きくなっていく様子が見てとれる。なお、実際のシミュレーション計算では、24画面の動画スナップショットを得ているが、変化がそれほど急速ではないので、図4のスナップショット画像の掲載では、24画面のうち、第1, 5, 9, 23番目に得られた4つの画像データのみを示した。

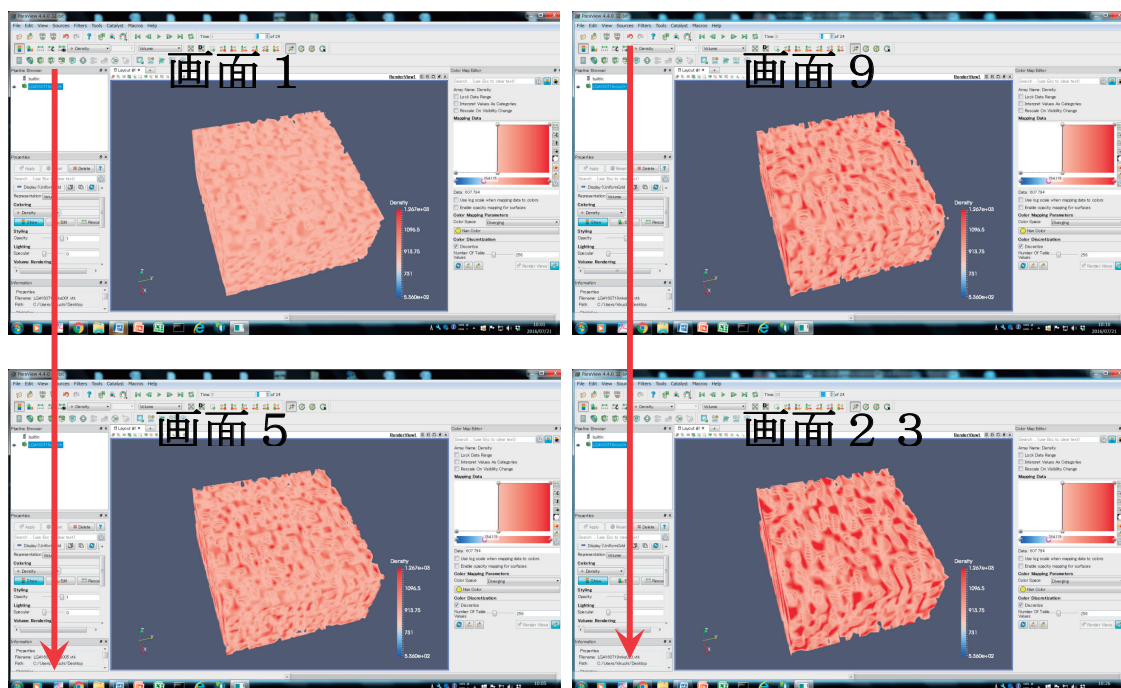


図4. ParaViewによる相分離シミュレーションの連続可視化の結果(4画面を抜粋)

なお、格子ガス法では、2相の界面を境界として捉えることはせず、特定の色がついた仮想粒子の粒子数密度が急激に変化する部分として捉える。これは、界面を追跡するとか、界面での境界条件を適用するとかいった特別な取り扱いを必要としない点で大きなメリットとなる。また、ParaViewの機能を利用すれば、粒子数密度に比例した着色も、あるいは、あるしきい値以上とそれ未満で極端に濃淡の異なる非線形な着色も選択することができる。可視化画像を見ながらリアルタイムでこのような着色方法を微調整することで、可視化画像中の2相界面構造を詳細に観察・把握することもできた。

ただし、4.4節でも述べたとおり、ここで示した相分離シミュレーションの計算は、物理的に不適切な部分もある非常に簡略化された計算モデルを使用しているため、その結果から実現象について何かの物理的考察をできるレベルのものではない。

## 5. おわりに

最後に、“多速さ格子ガス法”による流体解析について、“超並列格子点演算”と“連続動画可視化”の実現性を総括する。以下のことが言えると思われる。

### (1) 超並列格子点演算

①1000万格子点規模の単相流体挙動解析については、コンパクトな計算機（例：SX-Aurora TSUBASAの数10ノード）用いても、実時間に近いシミュレーションを実現できそうなレベルにある。

②二相流のシミュレーションについては、“相分離”を引きおこす計算過程に“1格子点1ビット幅演算”を適用することが可能である。このため、超並列計算による高速化を期待できるが、実時間シミュレーションの実現性については、実現象の種類によって異なると思われる。

### (2) 連続動画可視化

連続可視化については、例えば、オープンソフトウェアであるParaViewを用いて、その機能（例：非線形な着色機能）を活用することにより、かなり実用的な可視化を行うことができる。

## 謝辞

本稿で述べた共同研究の中間報告は、これまで長期にわたり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（特に、SXシリーズのベクトルコンピュータ）を利用することによってはじめて得られたものである。

利用にあたっては同センター関係各位のご親切なご指導とご協力をいただき、心から深く感謝する次第である。

また、今後ますます向上するスパコン性能をすばやく産業展開していくためには、現時点で将来のスパコン利用における新しい可能性を先取りし、関連する技術をしっかり確立しておくことが重要である。この意味で、サイバーサイエンスセンターによる先進的なスパコン利用環境の提供は極めて重要であり、本研究においても、将来のスパコン環境を先取りしたコード開発を試行錯誤できることの有難さを実感している。今後とも、同センターの有意義な活動を発展させつつ継続して頂きたい。

## 参考文献

- [1] Uriel Frisch, Dominique d’Humières, Brosl Hasslacher, Pierre Lallemand, Yves Pomeau, Jean-Pierre Rivet, “Lattice Gas Hydrodynamics in Two and Three Dimensions”, Complex Systems, 1 (1987), pp. 649-707, 1987
- [2] Christopher M. Teixeira, “Continuum Limit of Lattice Gas Fluid Dynamics”, MIT, 1993
- [3] 松岡, 菊池, “多速さ格子ガス法実用化展開への手がかかり”, pp. 1-15, SENAC Vol. 49 No. 4 (2016-10)

## [共同研究成果]

## Building-Cube Method を用いた 翼胴形態の RANS 解析

牧野真弥<sup>1</sup>, 三坂孝志<sup>2</sup>, 大林茂<sup>3</sup>, 佐々木大輔<sup>4</sup><sup>1</sup>東北大学大学院工学研究科, <sup>2</sup>東北大学学際科学フロンティア研究所<sup>3</sup>東北大学流体科学研究所, <sup>4</sup>金沢工業大学航空システム工学科

次世代の数値流体力学を目指して提案された計算手法である Building-Cube Method を用いて、航空分野を中心に実用的な大規模シミュレーションへの取り組みを進めている。本稿では Building-Cube Method の利点を生かすために航空機の翼胴形態に着目して、RANS 解析を行った結果を示す。直交格子法で形状再現精度を向上させるためには膨大な格子点数が必要となり計算負荷が高くなる傾向にある。本研究では、ベクトル化された Building-Cube Method ソルバーとサイバーサイエンスセンターの計算機環境の利用により大規模空力予測解析を実現した。

### 1 緒言

計算機の発展に伴い、数値流体力学(Computational Fluid Dynamics, CFD)は様々な分野で設計・開発に利用されており、航空機産業では風洞試験との組み合わせによる実機性能推算に活用されている。風洞試験では風洞壁や模型支柱等が空力データに影響を及ぼし、特にレイノルズ数の不一致による寸法効果が存在する。一方で、実機レイノルズ数を模擬するための高圧・極低音環境化は膨大なコストを要する。従って、CFD 技術の高度化を図ることで適用範囲を拡大し、風洞試験と CFD の連携による実機性能推算能力を向上させることは航空機産業を発展において非常に重要であるといえる。しかしながら、飛躍的な発展を遂げてきた CFD はこれまでの研究の蓄積から解法、解析手法等にある種のスタンダードが認知浸透し、商用コードの信頼性も向上してきたことから、CFD 開発に停滞感があることも否めない[1]。

この停滞期を打破し、CFD 技術の向上へ向けた知見を得るため、近年各国でワークショップが開催されている。アメリカ航空宇宙学会(The American Institute of Aeronautics and Astronautics, AIAA)は CFD 抵抗予測ワークショップを開催し、航空機の高速度形態を対象に空力性能予測精度に関して議論を行っている。国内では 2015 年に第 1 回目のワークショップが日本航空宇宙学会により開催されて以降、例年数々の研究者が集まり CFD に関する深い議論が行われている。

現在の航空機分野における CFD では、3 次元の複雑形状を解析するにあたり、格子生成の容易さから非構造格子法を採用することが多い。しかしながら、非構造格子は形状融通性に優れる反面、空間スキームの高次精度化が困難であることや大規模計算の後処理負荷が高い等、計算コスト、計算精度の面で多くの課題を抱えている。これらの課題を解決する手法として、近年直交格子法が注目されている。直交格子法の一つとして直交格子積み上げ法(Building-Cube Method, BCM)が中橋によって提案されている。BCM は次世代の大規模計算システムに不可欠な並列計算を容易に実現できるフレームワークとして期待されている。中橋は等間隔直交格子を採用することで BCM へ極めて単純なアルゴリズムを導入し、格子生成の簡素化、空間での高次精度化、後処理の簡素化を容易に実現した。さらに、BCM は分割された小計算領域ごとで計算が独立しており、全ての小領域には同数の等間隔直交格子が生成されるため、並列計算時の計算負荷に偏りがなく並列化効率に優れている[2-4]。

直交格子法は期待されている一方で、実用的な流体解析に向けては物体表面の取り扱いと壁面乱流の解像に課題が残っている。物体表面の取り扱いにおいては埋め込み境界法とカットセル法の 2 つが実用的に有用な手法として確立されつつある。一方、壁面乱流の解像においては未だこ

れといった実用性の高い手法は確立されておらず、様々な手法が提案されている。近年よく取り組まれている手法の一つに壁モデルを用いた計算手法がある[5]。壁モデルは壁法則を基に物体表面の速度分布を得ることができ、物体表面付近での乱流量を正しく予測することが可能である。しかしながら、一般的に壁法則に忠実な壁モデルは衝撃波のような複雑な流れ場では、乱流運動エネルギーの平衡性が保たれる保証がなく、非線形性を捉えることが困難であるといえる。

本研究では直交格子法の課題の一つである境界層の解像に向けて壁モデルを用いない 2 つのアプローチを検討し、BCM の有用性を検証することを目的とする。1 つ目のアプローチでは物体表面の取り扱いには埋め込み境界法を採用し、格子細分化によって境界層の解像を試みる。2 つ目のアプローチでは非構造格子法との重合格子法を検討する。非構造格子法は格子配置の自由度が高く、複雑形状の表現に適した手法であり、境界層の解像度は高い。このアプローチでは物体壁面近傍のみ非構造格子を配置することによって境界層の解像度を向上させている。解析対象には航空機の翼胴形態モデルを使用し、実験値や他計算結果との比較により、BCM の有用性を示す。また、本研究を通して、最終的には航空機周りの流れのような高レイノルズ数流れでの BCM の有用性について議論する。

## 2 計算手法

### 2.1 直交格子積み上げ法 (Building-Cube Method, BCM)

BCM は全計算領域を Cube と呼ばれる小さな立方体領域に分割して計算を行う。それぞれの Cube サイズは  $2^n$  倍の大きさで異なり、すべての Cube は Cube の大きさに関わらず、Cell と呼ばれる等間隔直交格子を同数配置している。図 1 に計算領域内の Cube 配置と 1 つの Cube における Cell の配置の様子を示す。個々の Cube は独立して計算されるため、BCM では計算過程で隣接する Cube と物理量の情報交換を行う必要がある。それぞれの Cube 間での物理量の情報交換は図 1(b) に示すように各 Cube の持つ情報交換用の外枠 3 層の Cell (Overlap cell) を用いて行われる。隣接する Cube が同サイズである場合、補間精度を維持することが可能である。しかし、隣接する Cube のサイズが異なる場合は図 2 のように線形補間を行う必要がある。図 2(a) のように小さい Cube から大きい Cube へ補間する場合は線形 1 次補間によって内挿される。反対に図 2(b) のように大きい Cube から小さい Cube へ補間する場合は 0 次補間により値が内挿される[3]。

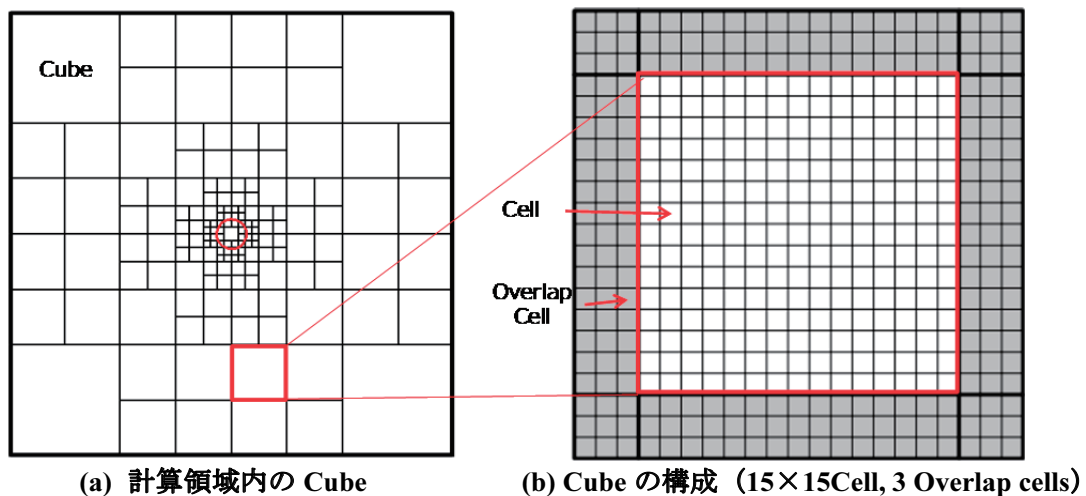
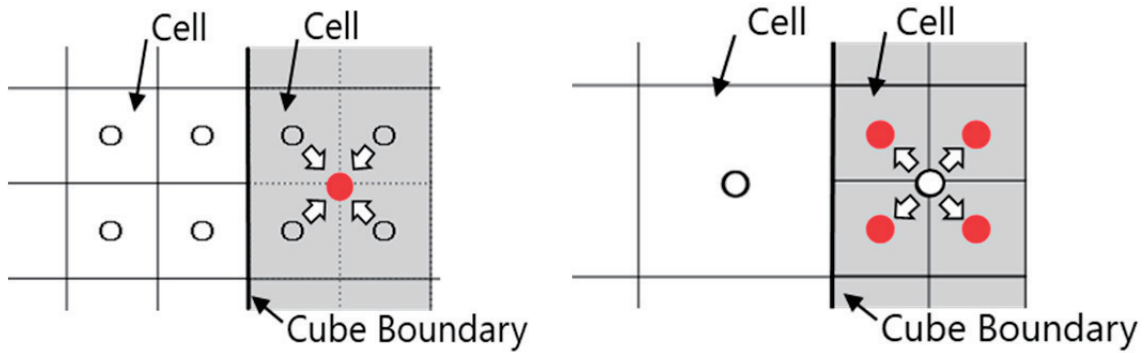


図 1 2次元の計算格子例



(a) 小さい Cube から大きい Cube への補間 (b) 大きい Cube から小さい Cube への補間

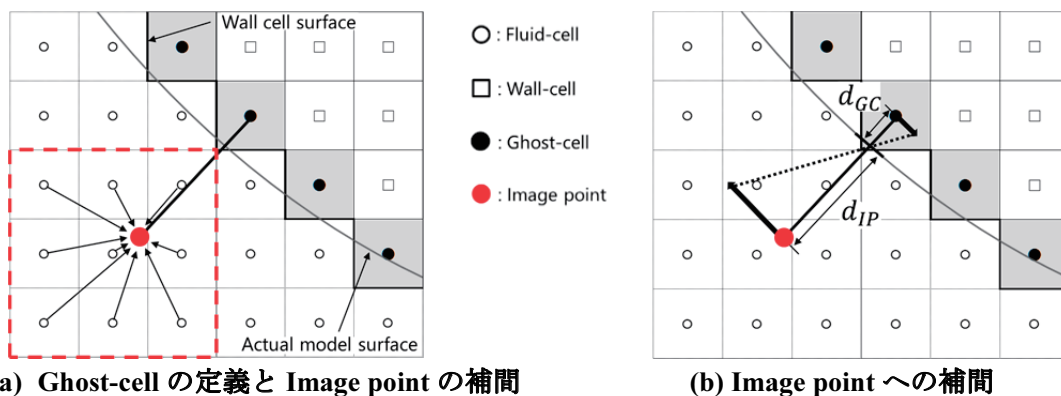
図 2 Cube 境界での物理量の取り扱い

## 2.2 埋め込み境界法と格子細分化によるアプローチ

一つ目のアプローチでは BCM ソルバーに埋め込み境界法と自動格子細分化コードを導入し、BCM 格子のみで境界層の解像度向上を試みる。埋め込み境界法は物体表面を表現する手法として、実装が容易で演算量が非常に少ないことから近年盛んに研究が進められている。この手法を利用することで物体表面において直交格子の格子形状をそのまま維持でき、直交格子の長所である格子生成の容易さとロバスト性を損なうことなく計算が可能となる。また、境界層の解像に関しては BCM が得意とする大規模計算システムを活用し、自動格子細分化を行うことで境界層内に多数の格子点を配置することが可能となる。

### ・埋め込み境界法(Immersed Boundary Method, IBM)

本アプローチでは物体表面を表現する手法として埋め込み境界法を採用する。本研究では Mittal らが提案した Ghost-cell アプローチに基づく手法を採用し、物体壁面へ境界条件を付加した[6]。この手法では、初めに Ghost-cell を定義する。BCM の計算では物体 Cell(Wall-cell)と流体 Cell(Fluid-cell)の2種類に分類される。その2種類の Cell から図 3(a)に示すように Fluid-cell と接している Wall-cell の一層目の Cell を Ghost-cell と定義する。その後、図 3(b)に示すように物体の法線方向に対して、ある一定の距離に Image point と呼ばれる点を定義する。Image point までの距離は壁面に近すぎる場合に計算が不安定化する可能性があるため、本研究では物体表面から Image point までの距離は最小格子幅の 1.75 倍になるように定義している。その後、Image point の周囲の Cell を探索する。この時、探索する Cell 数は 27Cell (2次元の場合は 9 Cell) を必要とする。この Cell のうち、Fluid-cell である Cell のみを用いて、それぞれの距離に基づいて重みづけを行い、Image point に物理量を内挿する。内挿された Image point の物理量を基に、物体表面において速度は Non slip 条件、密度と圧力は Neumann 条件を満たすように Ghost-cell へ値が内挿される。



(a) Ghost-cell の定義と Image point の補間

(b) Image point への補間

図 3 埋め込み境界法

・格子細分化法

本アプローチでは自動細分化コードを導入し、境界層の解像を試みる。BCM では Cube を分割することによって容易に格子細分化を行うことが可能である。また、局所的に Cube を分割することも容易であることから適合格子細分化への拡張も容易に実現できる[7].

BCMにおける格子細分化は図4のように1つの Cube を8つの Cube に分割することで容易に実現可能としている。しかしながら、BCM では隣り合う Cube の大きさはその Cube の大きさの1/2倍, 1倍, 2倍のいずれかになるように変更する必要がある。そこで、本研究では全ての Cube において隣り合う Cube が1/2倍より小さい場合、自 Cube を分割するようにコーディングし、全ての隣り合う Cube が1/2より小さくならないように計算を繰り返し行う。

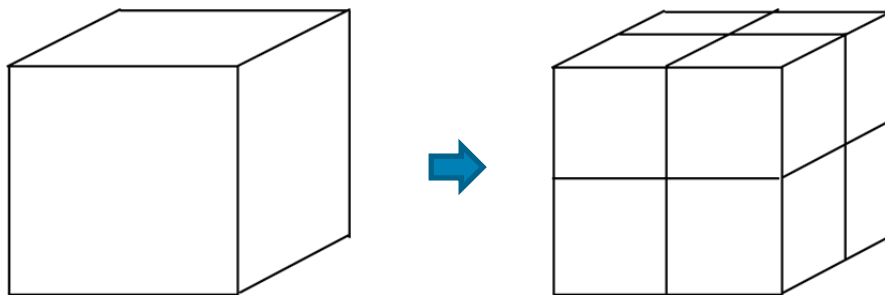


図4 Cube 分割による格子細分化の概要図

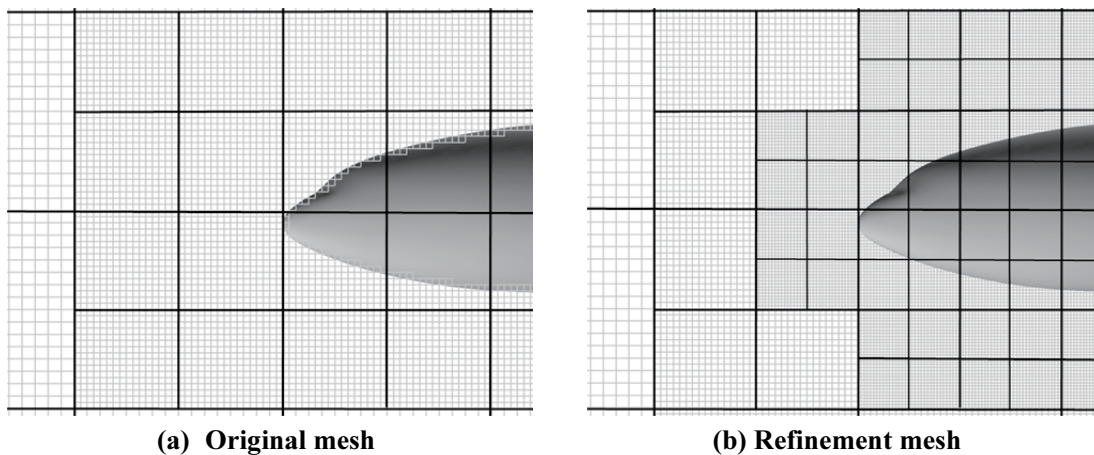


図5 ノーズ付近での格子細分化の様子

2.3 非構造型格子法との重合格子法によるアプローチ

二つ目のアプローチでは非構造型格子ソルバーである TAS-code(Tohoku-university Aerodynamic Simulation code)を BCM ソルバーに組み合わせた BCM-TAS カップリングソルバーを用いる[8]. BCM-TAS カップリングソルバーは図6に示すように背景格子に BCM の直交格子を配置し、物体壁面近傍にのみ TAS の非構造型格子を配置している。TAS-code の詳細については文献[9-11]を参照されたい。

BCM-TAS カップリングソルバーの流体解析手順を図7に示す。BCM-TAS カップリングソルバーでは初めに初期条件を与え、その後に補間係数の計算を行う。補間係数を求めた後、一様流条件を基に BCM 格子の流体計算を行う。その後、BCM 格子から TAS 格子に物理量を補間し、その物理量を境界条件として TAS 格子内の流体計算を行う。そのため、TAS 格子の外部境界面にのみ BCM 格子の物理量を内挿する。流体計算が終わった後、TAS 格子内にある BCM 格子すべてに物理量を補間し、1ステップの流体計算が終了する。以後、BCM 格子と TAS 格子の解析を収束するまで交互に行う。



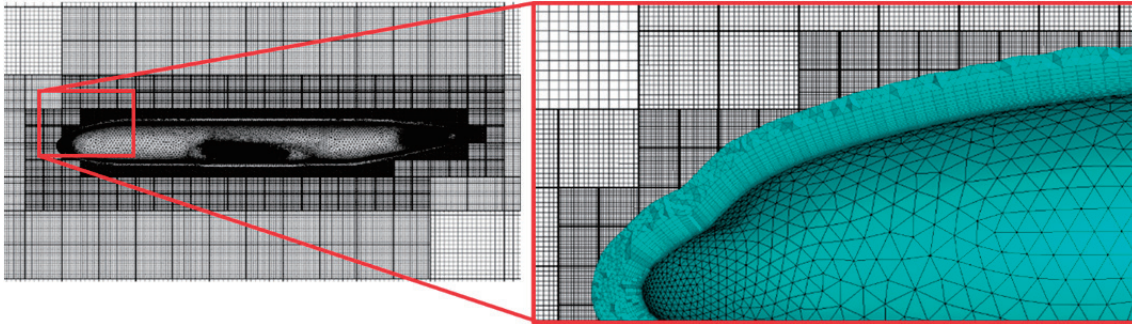


図 6 BCM-TAS カップリングソルバーの格子概要図

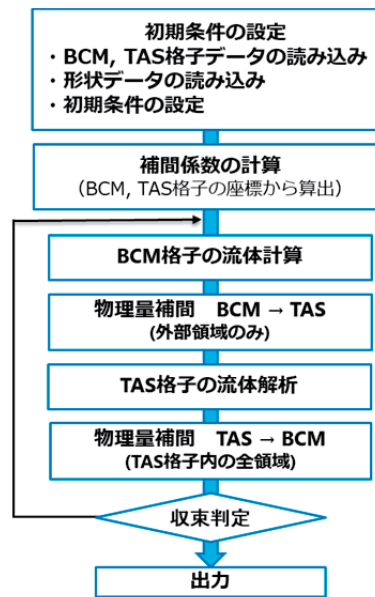


図 7 BCM-TAS カップリングソルバーの流体解析手順

・非構造－直交格子間の物理量補間法

BCM-TAS カップリングソルバーでは非構造格子と直交格子の重ね合わせていることから、双方の格子間の情報交換が必要となる。BCM 格子から TAS 格子への補間に使用する Tri-linear 補間法、TAS 格子から BCM 格子への補間に使用する線形一次式を用いた補間法のイメージ図をそれぞれ図 8 に示す。

Tri-linear 補間法は Linear 補間を  $x, y, z$  方向に重ね合わせた補間法であり、以下の式で示される。

$$Q_p = (1 - u)[(1 - t)\{(1 - s)Q_1 + sQ_2\} + t\{(1 - s)Q_3 + sQ_4\}] + u[(1 - t)\{(1 - s)Q_5 + sQ_6\} + t\{(1 - s)Q_7 + sQ_8\}] \quad (1)$$

ここで、1~8 は BCM 格子の Node,  $p$  は BCM 格子内部に位置する TAS 格子の Node である。  $Q_1 \sim Q_8$  は BCM 格子のそれぞれの Node が持つ物理量、  $Q_p$  は補間後の TAS 格子の物理量を意味する。また、  $s, t, u$  は Tri-linear 補間法で用いる補間係数であり、これらの補間係数は各格子の Node の座標情報より求められる。 BCM-TAS カップリングソルバーでは上記の(1)式により、図 8(a)のように BCM 格子を構成する 8 点の Node から内部に位置する TAS 格子の Node へ補間を行っている。

線形一次近似を用いた補間法は、まず四面体内部の物理量を以下の線形一次式で近似する。

$$Q_0 = Q_{AVE} + Q_x x + Q_y y + Q_z z \tag{2}$$

ここで、 $Q_0$ は四面体内部にある位置の物理量、 $Q_{AVE}$ は四面体内部の物理量の平均値、 $Q_x$ 、 $Q_y$ 、 $Q_z$ は各軸方向の物理量の勾配を示す。物理量の勾配は未知数であるため、(2)式より四面体の各頂点で式を立て、以下にまとめた式の逆行列を解いて求める。

$$\begin{bmatrix} Q_1 \\ Q_2 \\ Q_3 \\ Q_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & y_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & y_3 & z_3 \\ 1 & x_4 & y_4 & z_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_0 \\ Q_x \\ Q_y \\ Q_z \end{bmatrix} \tag{3}$$

ここで、添え字の 1~4 は四面体の頂点を示す。(3)式より、 $Q_0$ 、 $Q_x$ 、 $Q_y$ 、 $Q_z$ を求めた後に、Cell 中心の座標を(2)式に代入し、TAS 格子から BCM 格子へ補間を行う。図 8(b)に示すように TAS 格子を構成する 4 点の Node から物理量分布を(2)式より近似し、四面体内部に位置する BCM 格子へ補間を行う。BCM は Cell 中心に離散点を取るため、この時の BCM への補間は Cell 中心の座標点へ補間している。

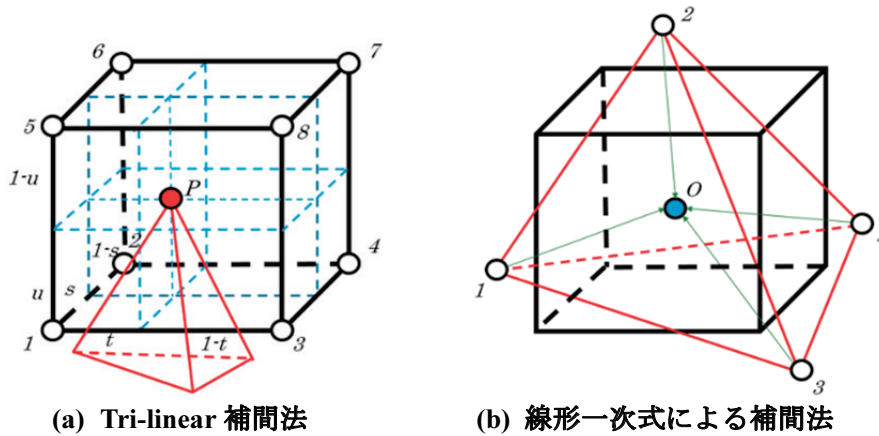


図 8 非構造一直交格子間の補間法

### 2.4 数値計算手法

両アプローチで使用した数値計算手法を表 1 に示す。支配方程式には 3 次元圧縮性 Navier-Stokes 方程式を用いる。しかしながら、BCM-TAS カップリングソルバーでは壁面近傍の TAS 領域のみ Navier-Stokes 方程式を採用し、物体から離れた遠方場では圧縮性 Euler 方程式を採用する。

表 1 数値計算手法

	BCM ソルバー	BCM-TAS カップリングソルバー
支配方程式	圧縮性 Navier-Stokes 方程式	圧縮性 Euler 方程式 (BCM) 圧縮性 Navier-Stokes 方程式 (TAS)
離散化手法	セル中心有限体積法	セル中心有限体積法 (BCM) セル節点有限体積法 (TAS)
非粘性流束	SLAU+3 次精度 MUSCL 法	HLLEW+3 次精度 MUSCL 法 (BCM) HLLEW+線形再構築 (TAS)
時間積分法	陰解法 LU-SGS	陰解法 LU-SGS (BCM) 陰解法 LU-SUS (TAS)
乱流モデル	Spalart-Allmaras (noft2-R)	Spalart-Allmaras (noft2) (TAS のみ)

### 3 解析条件

#### 3.1 計算対象・計算条件

本研究では計算対象に NASA Common Research Model(CRM)の翼胴形態を用いる。図 9 に本研究で用いた NASA CRM の翼胴形態を示す。NASA CRM は AIAA が主催する CFD 抵抗予測ワークショップにおいて、遷音速で巡行する民間航空機をベースに NASA と Boeing 社によって開発されたモデルであり、ワークショップにおいて幅広く検証が行われている[12]。本研究では巡行状態の主翼変形を考慮するため、各迎角での変形を計算モデルに反映させている。この主翼変形は宇宙航空研究開発機構(JAXA)の風洞試験データに基づいて考慮され、公開された計算モデルを使用している。表 2 に JAXA の風洞試験における NASA CRM の模型スケールを示す[13]。

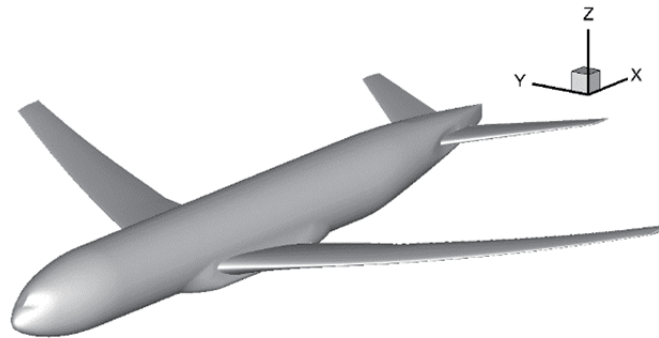


図 9 NASA Common Research Model

表 2 NASA Common Research Model の模型スケール

基準面積 $S_{ref}$ [m <sup>2</sup> ]	0.179014
基準縦長さ $C_{ref}$ [m]	0.15131
基準横長さ $b_{ref}$ [m]	1.2692
モーメント中心 $(x,y,z)$ [m]	(0.72741, 0.0, 0.09762)

計算条件は平成 29 年 6 月に開催されたワークショップ Third Aerodynamic Prediction Challenge(APC-III)にて検証された巡行状態の条件を採用した[1]。それぞれの条件を表 3 に示す。マッハ数は巡行状態を仮定して 0.847 とし、レイノルズ数は  $2.26 \times 10^6$ 、温度は 284[K]とした。迎角は-1.79[deg]から 5.72[deg]までの 9 迎角を設定した。BCM-TAS カップリングソルバーでは上記の 9 迎角で計算を行ったが、BCM ソルバーでは-0.62[deg], 2.94[deg], 4.65[deg], 5.72[deg]の 4 迎角にのみ注目して計算を行った。

表 3 計算条件

マッハ数 [-]	0.847
レイノルズ数 [-]	$2.26 \times 10^6$
温度 [K]	284
迎角 [deg]	-1.79, -0.62, 0.32, 1.39, 2.47, 2.94, 3.55, 4.65, 5.72

#### 3.2 計算格子

表 4 に BCM ソルバーで使用した格子情報、表 5 に BCM-TAS カップリングソルバーで使用した格子情報を示す。

BCM ソルバーでは Coarse 格子と Fine 格子の 2 ケースを用いて、導入した自動細分化コードの検証を行った。Fine 格子は Coarse 格子の物体 Cube(Wall Cube)を細分化することで生成されている。図 10 に Coarse 格子の物体近傍での Cube 配置の様子を示す。

BCM-TAS カップリングソルバーでは図 11 に示すように解析領域全域に BCM 格子を配置し、計算モデルの表面および近傍に TAS 格子を BCM 格子に重ねて配置している。また、物体近傍には図 12 に示すようにプリズム層を生成し、境界層での空間精度向上を図っている。

表 4 格子情報 (BCM ソルバー)

	Coarse	Fine
最小格子幅	0.0001526	0.0000763
格子数	362,527	589,179
Cube 数	1,484,910,592	2,413,277,184
Cube 内 Cell 数	16×16×16	16×16×16
$y^+$	91.0	45.0

表 5 格子情報 (BCM-TAS カップリングソルバー)

	BCM 格子	TAS 格子
最小格子幅	0.0009773	0.0000100
格子数	41,500,000	12,000,000
Cube 数	10,214	-
Cube 内 Cell 数	16×16×16	-
$y^+$	-	0.66

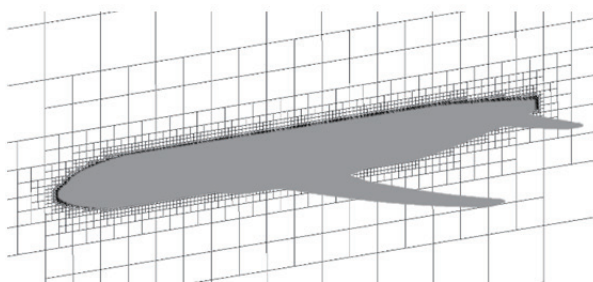


図 10 物体近傍の Cube 配置

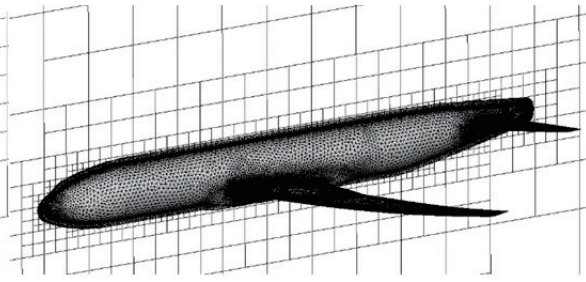


図 11 物体近傍での BCM 格子と TAS 格子

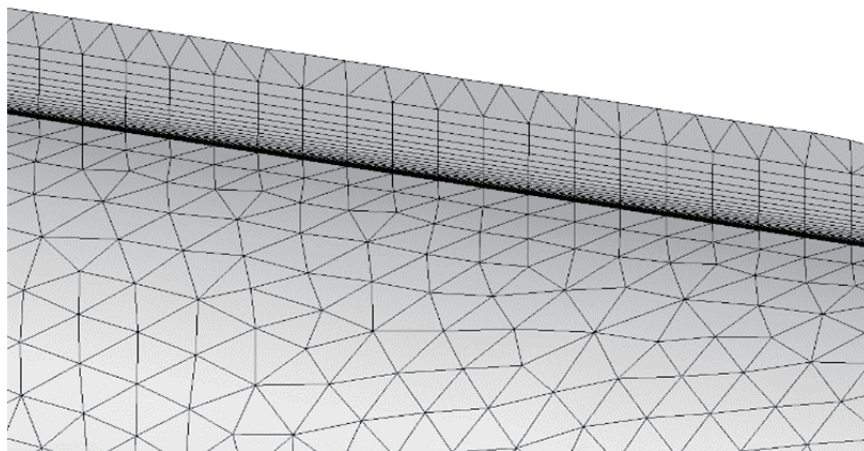


図 12 物体表面の TAS 格子

#### 4 NASA CRM の空力予測解析

図 13, 図 14 にそれぞれの迎角に対する揚力係数( $C_L$ ), 抗力係数( $C_D$ )を示す. 揚力係数は BCM ソルバーでは実験値と比較して全体的に小さく予測されていることが確認できる. 迎角-0.62[deg]においては概ね実験値と同等の結果を示しており, Coarse 格子から Fine 格子に細分化することでほぼ実験値を同等の結果を得ることが可能となった. しかしながら, 高迎角になると実験値との差は大きくなり, 予測精度が低くなっていることがわかる. 特に Coarse 格子では高迎角において揚力傾斜が実験値と大きく異なっている. Fine 格子へ細分化することで高迎角での揚力傾斜はわずかに改善されており, 細分化による予測精度の向上が見込めることが確認できる. 一方, BCM-TAS カップリングソルバーでは大幅に予測精度は向上しており, 実験値と比較して高迎角での予測精度が十分に得られていることが確認できる. 低迎角から負の迎角にかけてみると, 実験値と揚力傾斜がわずかに異なっていることが確認できる. しかしながら, 全計算領域を非構造格子で計算した TAS-code の結果と比較すると, 低迎角でも良く一致していることがわかり, 他ソルバーとの比較では遜色ない結果が得られていることが確認できる. また, この低迎角での揚力傾斜の差異はワークショップでも報告されており, 原因の特定に至っていない.

次に抗力係数における BCM ソルバーの結果を見ると, 揚力係数と同様に全体的に小さく予測されていることが確認できる. また, 迎角-0.62[deg]においてはわずかな実験値との差は見えるが, Fine 格子で概ね実験値と同等の結果を得られていることが確認できる. しかしながら, 高迎角になると予測精度は大幅に低下する結果となった. 一方, BCM-TAS カップリングソルバーでは, 実験値と同様の傾向を示しているが, 全体的に大きく予測されていることが確認できる. TAS-code の結果と比較すると概ね一致しているが, -1.79[deg], 5.72[deg]ではわずかに TAS-code の結果から外れて予測されていることが確認できる.

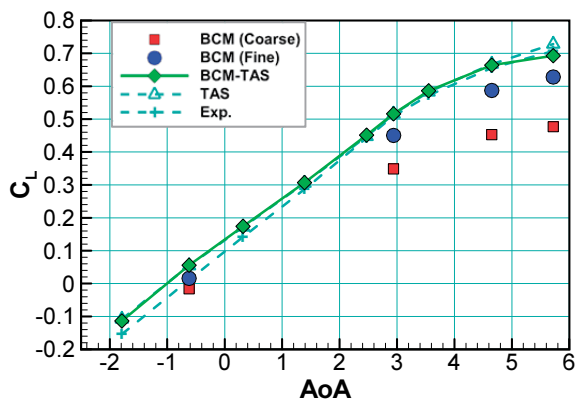


図 13 揚力係数( $C_L$ )分布

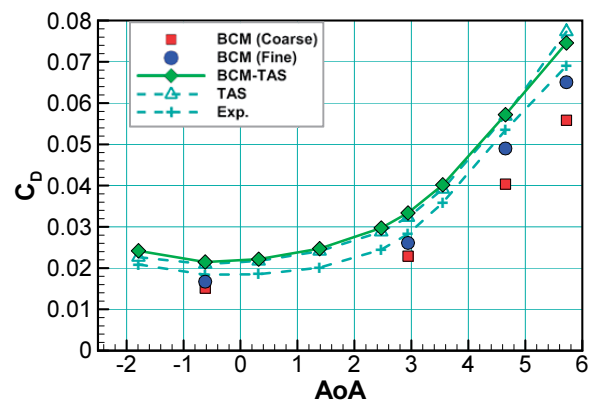
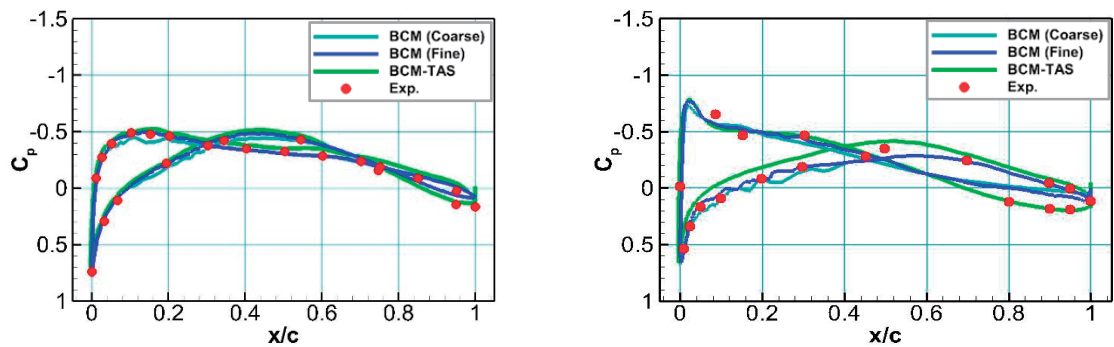


図 14 抗力係数( $C_D$ )分布

次に図 15, 図 16 に迎角-0.62[deg], 4.65[deg]でのそれぞれの主翼表面の圧力係数分布を示す. 図 15 の BCM ソルバーの結果を見ると, 迎角-0.62[deg]で実験値と概ね同等の結果を示していることが確認できる. 特に図 15(a)では Coarse 格子, Fine 格子ともに実験値と良く一致していることが確認できる. 図 15(b)の翼端側では後縁になるに連れて, 実験値との差は大きくなっているが, 前縁では概ね同等の結果を得られていることがわかる. 一方, BCM-TAS カップリングソルバーの結果は翼根, 翼端の双方で実験値と良く一致しており, 翼端部の後縁での予測精度は BCM ソルバーの結果から大幅に改善されていることが確認できる. 図 16 に示す高迎角時の迎角 4.65[deg]時の BCM ソルバーの結果を見ると, 翼根側では衝撃波位置までは実験値を精度良く捉えられているが, 衝撃波位置から後縁にかけて差が大きくなっている. また, 衝撃波位置での圧力勾配が小さくなっていることから, 非線形性を正確に予測できていないことが確認できる. 一方, BCM-TAS カップリングソルバーの結果では, 翼根, 翼端共に実験値と良く一致している. また, BCM ソルバー

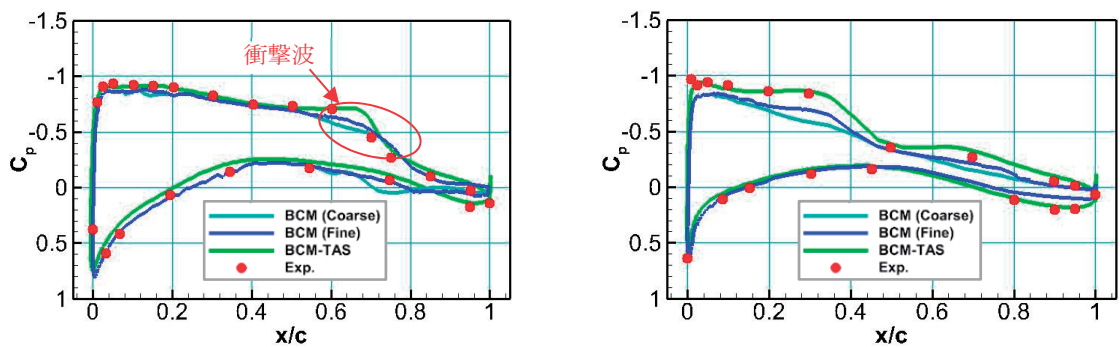
で捉えられなかった衝撃波位置での圧力勾配も正確に予測できており、物体壁面近傍のみ非構造格子を用いることで正確に非線形性を捉えることが可能となった。

さらに、図 17 に迎角 4.65[deg]での表面圧力係数のコンター図を示し、BCM ソルバーの結果と BCM-TAS カップリングソルバーの結果を比較する。BCM ソルバーの結果では翼根部において BCM-TAS カップリングソルバーの結果より負圧が大きく予測されていることがわかる。剥離領域においてはスパン方向に沿って前方へシフトしていることが確認でき、衝撃波が前方で予測されていることがコンター図からも確認できる。また、赤点線部において負圧領域が極めて小さく予測されている。この原因は格子密度の不足による影響が大きいと考えられ、翼変形が正しく再現されていないと考えられる。



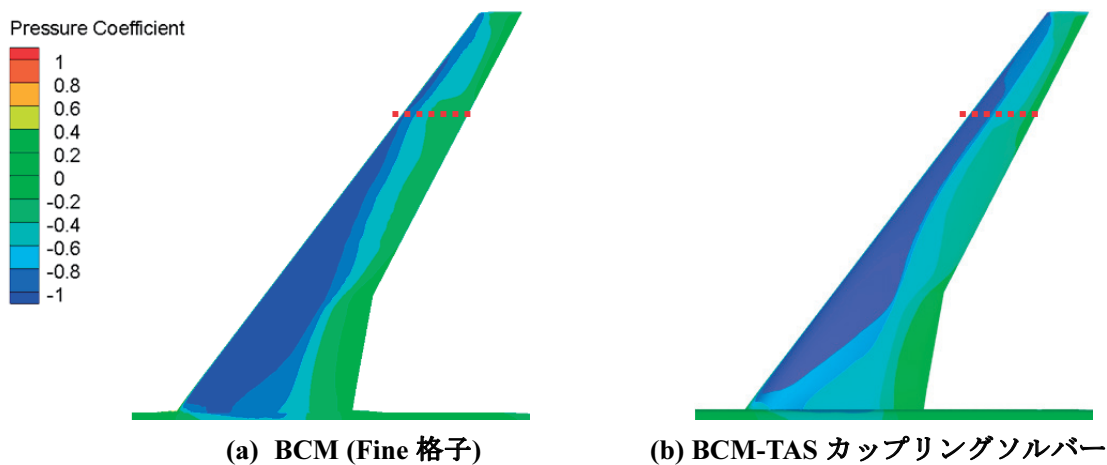
(a) 主翼セミスパン 13.1% 断面 (翼根) (b) 主翼セミスパン 0.950% 断面 (翼端)

図 15 -0.62[deg]の主翼表面圧力係数分布



(a) 主翼セミスパン 13.1% 断面 (翼根) (b) 主翼セミスパン 0.950% 断面 (翼端)

図 16 4.65[deg]の主翼表面圧力係数分布



(a) BCM (Fine 格子) (b) BCM-TAS カップリングソルバー

図 17 迎角 4.65[deg]の主翼表面圧力係数コンター

## 5 結論

本研究では埋め込み境界法と格子細分化手法を採用した BCM ソルバーと直交-非構造格子の重合格子法の2つのアプローチを用いて、高レイノルズ数流れにおける NASA CRM 翼胴形態の空力予測を行った。

BCM ソルバーでは揚力係数、抗力係数共に高迎角で実験値と異なり、全体的に小さく評価された。しかしながら、迎角 $-0.62[\text{deg}]$ では実験値とほぼ一致し、衝撃波の小さい低迎角において有用であることを示した。BCM-TAS カップリングソルバーでは揚力係数、抗力係数共に実験結果の傾向を良く捉えることが、非構造格子ソルバーである TAS-code の結果と良く一致することが確認できた。高迎角の $4.65[\text{deg}]$ においても衝撃波位置での圧力勾配を正確に予測できており、非構造格子を物体近傍に配置することで非線形性を捉えることが可能となった。

以上より、BCM ソルバーでは低迎角において実験値と良く一致することが確認でき、低迎角での空力予測における有用性を示した。さらに、BCM-TAS カップリングソルバーでは低迎角から高迎角にかけて実験値と良く一致することを確認したことで、物体近傍のみ非構造格子を用いる重合格子法は高い空力予測精度を得ることができ、RANS 解析において有用な手法であることを確認した。

## 謝辞

本研究は東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータを利用して行った。研究にあたっては同センター関係各位にご指導とご協力をいただいた。記して謝意を表す。

## 参考文献

- [1] <https://cfdws.chofu.jaxa.jp/apc/> (retrieved on January 20th, 2018).
- [2] Nakahashi, K. and Kim, L. S., "Building-Cube Method for Large-Scale, High Resolution Flow Computations," AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, AIAA 2004-434, 2004.
- [3] Nakahashi, K., "Immersed Boundary Method for Compressible Euler Equations in the Building-Cube Method," 20<sup>th</sup> AIAA Computational Fluid Dynamics Conference, AIAA 2011-3386, 2011.
- [4] Sasaki, D. and Nakahashi, K., "Rapid Large-scale Cartesian Meshing for Aerodynamic Computations," 29<sup>th</sup> Congress of the International Council of the Aeronautical Sciences, ICAS 2014-0842, 2014.
- [5] Larsson, J., Kawai, S., Bodart, J. and Bermejo-Moreno, I., "Large Eddy Simulation with Modeled Wall-Stress: Recent Progress and Future Directions," JSME Mechanical Engineering Reviews, Vol. 3, No. 1, pp. 15-00418-1-23, 2016.
- [6] Mittal, R., Dong, H., Bozluurtas, M., Najjar, F. M., Vargas, A. and Von Loebbecke, A., "A versatile sharp interface immersed boundary method for incompressible flows with complex boundaries," *Journal of Computational Physics*, Vol.227, pp.4825-4852, 2008.
- [7] Misaka, T., Sasaki, D. and Obayashi, S., "Adaptive Mesh Refinement and Load Balancing Based on Multi-Level Block-Structured Cartesian Mesh" *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, Vol. 31, No. 10, pp. 476-487, 2017
- [8] Hashiba, M., Sasaki, D. and Nakahashi, K., "Development of Cartesian-Mesh Based CFD Solver Combined with Unstructured-Mesh," 8<sup>th</sup> International Conference on Flow Dynamics, 2011.
- [9] Nakahashi, K., Ito, Y. and Togashi, F., "Some challenges of realistic flow simulations by unstructured grid CFD," *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol.43, pp.769-783, 2003.
- [10] Ito, Y. and Nakahashi, K., "Direct Surface Triangulation Using Stereolithography Data," *AIAA Journal*, Vol.40, No.3, pp.490-496, 2002.
- [11] Ito, Y. and Nakahashi, K., "Unstructured Mesh Generation for Viscous Flow Computations," *Proceedings of the 11<sup>th</sup> International Meshing Roundtable*, pp.367-377, 2002.
- [12] <https://aiaa-dpw.larc.nasa.gov/> (retrieved on January 20th, 2018).
- [13] Ueno, M., Kohozai, M. and Koga, S., "Transonic Wind Tunnel Test of the NASA CRM: Volume 1," JAXA Research and Development Memorandum, JAXA-RM-13-017E, 2014.

## [共同研究成果]

## 直接数値解析による平面ポアズイユ流の乱流縞形成の研究

— 壁乱流亜臨界遷移の解明に向けて —

塚原 隆裕 ・ 猪岡 翔

東京理科大学 理工学部 機械工学科

円管内や平行平板間などの壁乱流に見られる亜臨界遷移, そのメカニズムと普遍則の解明には, 理論的アプローチが困難で, 従来は風洞や水路実験に頼ってきた. 近年の大型ベクトル並列計算機(東北大学サイバーサイエンスセンター保有のSX-ACE等)の発展により, 直接数値解析(DNS)によるアプローチが, いま可能となってきた. 本研究では, 圧力勾配駆動の平行平板間流を対象にして, 乱流維持限界に近い遷移レイノルズ数域で観察される局在乱流構造に着目することで, 乱流が維持し得る下臨界レイノルズ数の特定を目指している. 特に, 乱流斑点から乱流帯への成長過程をDNSで調査することで, 局所攪乱に対する下臨界レイノルズ数を検討している.

## 1. 緒言

我々を取り巻く空気や水の流れ, 体内の血液流れ, 各種プラントや熱交換器における熱輸送媒体・冷却材といった産業界に見る流れ..., 例を挙げれば枚挙に暇がないほどに多種多様な流体现象で世の中は溢れている. それら流動現象は千差万別であり, 近年の“ものづくり”では模型風洞実験に先立ち, CFD(数値流体力学)シミュレーションによりおおよその設計指針を立てることで, 流れの理解・予測・制御の効率化を図っている. CFD解析の汎用化は, コンピュータの高性能化とCG技術の進歩によるところが大きく, 今後も益々, CFDの担う役割・場面は増加するものと考えられる. 流れ予測を困難にする要因の一つが乱流遷移である. 流れの状態は大別して, 層流と乱流があり, 前者では流れの時空間的变化が規則的または緩やかであり予測も比較的容易である. しかし, 身の回りや産業界に見る流れは, もう一方の乱流状態であることが多く, 非定常で広範な渦スケールを伴う複雑な流動状態を呈する. 一般的に, 微細な乱流構造が流体をかき乱すことで, 運動量・熱・物質の混合が強められ, 結果的に壁面摩擦・熱伝達・物質拡散が層流に比べて桁違いに促進される. そのため, 注目する流れが層流と乱流のいずれであるかを予測し, 熱流動特性などを見積もることは工学的に重要である. よって, 乱流の発生条件または維持限界を事前に知る必要があり, 先ず規範的な(カノニカル)流路で乱流遷移の調査を行っていくこととなる. 閉じた流路内のカノニカル流れとして円管内流と平行平板間流がある. これらは主流方向に無限に長く, 流路断面が一定の流れであり, 古くから乱流および遷移現象の研究対象として頻繁に扱われている. 以下に, 一部の先行研究と本研究目的を記す.

Reynolds [1]は染料による円管内流の可視化を行い, 乱流遷移を定量的に調査した. ここで, 乱流発生条件を整理する指標として無次元数(後年, レイノルズ数  $Re$  と呼ばれる)が導入され, このレイノルズ数がある閾値を超えることで層流から乱流に遷移することを見出している. その後, 詳細な調査が行われ, 多段のレイノルズ数の閾値が提案されている[2].

$Re_E$	これ以下では, 加えた攪乱が単調減衰する
$Re_S$	これ以下では, 加えた攪乱が過渡的成長し得るが, 最終的に減衰する
$Re_T$	これ以上では, 自明でない有限だが長時間維持する解が存在する
$Re_G$	これ以上なら, 乱流が局所的にも維持し得ることができると下臨界値
$Re_L$	これ以上では, 無限小攪乱に対して基本流が不安定となる上臨界値



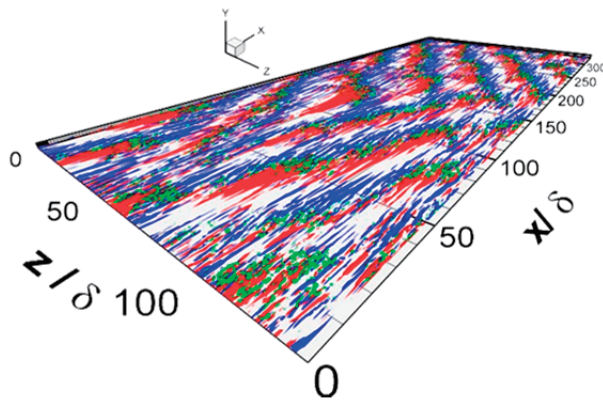


図1 平面ポアズイユ流で発生した縞状の乱流帯。レイノルズ数は  $Re = 1170$  で、遷移域内にある。各色の等値面は主流方向速度変動（赤，高速；青，低速）と渦（緑）を可視化している。主流方向は図の左下から右上に向かって。

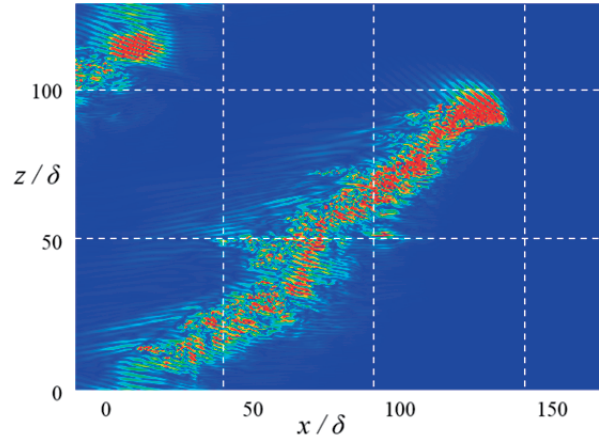


図2 平面ポアズイユ流の  $Re = 840$  付近における乱流帯の観測例。コンターは壁面垂直方向の速度絶対値を示し、赤色がいわゆる局在乱流領域に相当する。計算領域の半分を可視化。

円管内流れでは、線形安定性解析により任意のレイノルズ数において無限小攪乱に対して安定、つまり上臨界値  $Re_L$  は無限大であることが示され[3]、有限攪乱を契機に乱流になる、いわゆる亜臨界遷移を起こす。一般的に、壁乱流の亜臨界遷移過程では、 $Re_E < Re_S$ 、 $Re_G < Re_L$  である。ちなみに本研究対象ではないが、レイリーベナル対流（薬缶の水を沸かす状態に相当するカノニカルな系）などの超臨界遷移では、 $Re_E = Re_S = Re_L$  である。さて、円管内流では  $Re_L = \infty$  であり、あらゆるレイノルズ数で安定と言えるが、現実には管流入口や不可避の微小攪乱により亜臨界遷移が引き起こされるため、実用上はあまり問題にならない。一方で、遷移域の下臨界値  $Re_G$  が工学的にも理学的にも興味を湧くところである。Wynanski ら[4]は、強い初期攪乱で現れる時空間的に局在した乱流領域の塊（乱流パフ）を発見し、これの発生限界が  $Re_G \approx 2000$  であることを報告している。そして近年、Avila ら[5]は非常に長い円管を用いた実験により、乱流パフが有限の寿命を持つことを見出し、パフが分裂に要する時間と消滅に要する時間が等しくなるレイノルズ数を  $Re = 2040 \pm 10$  と決定した。現在では、この値が円管内乱流の下臨界値  $Re_G$  として認識され、この亜臨界遷移のメカニズム解明や物理モデル構築が精力的に行われている[6]。

上記のように、Reynolds の実験から 130 年以上、亜臨界遷移の解明が円管内流について進められてきたが、平行平板間流においても研究が長年に亘り行われている。スパン方向に自由度を有する平行平板間流でも、乱流パフのような局在乱流構造を伴うことが知られており、その形状から初期発達段階では乱流斑点と呼ばれている。乱流斑点は層流場に強い局所攪乱が集中することで発生し、壁面と平行な面で観察すると乱れが集合して楕円状の形をとり流れ場に存在する。平面クエット流（二壁面の相対運動で流れを駆動）において、上臨界値  $Re_L$  は円管内流れ同様、無限大であるが [7]、下臨界値  $Re_G$  は  $Re = 325$  程度と示されてきた[8]（レイノルズ数の定義は円管内流のものと異なることに注意）。Prigent ら[9]は高レイノルズ数から段階的に下げたときに現れる帯状の局在乱流構造（乱流帯）に着目し、 $Re = 415$  を下回った遷移域で乱流帯が現れることを実験により発見した。同様に、圧力勾配駆動の平面ポアズイユ流においては、乱流斑点が Emmons ら[10]によって初めて観測され、Tsukahara ら[11,12]が DNS（直接数値解析：乱流モデルを用いずに、微細な乱流渦を解像する格子数を用いる高負荷の数値計算手法）で図 1 のような乱流帯が発生することを見出した。その後、水路実験においても乱流帯の存在が実証されている[12,13]。平面ポアズイユ流における上臨界値は Orszag [14]によって線形安定性理論から  $Re_L = 5772$ （レイノルズ数の定義は後述）であることが示されている。一方で、下臨界値  $Re_G$  は実験的に  $Re = 1000$

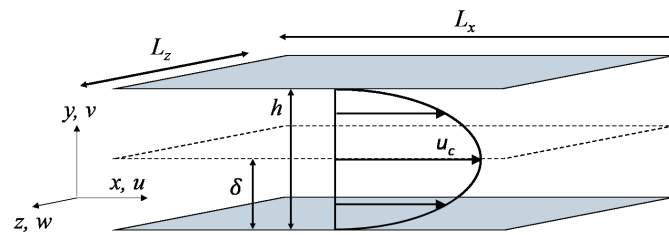


図3 解析対象の平面ポアズイユ流.  $x$  方向に平均圧力勾配 (流量を一定にするため可変) を課して, 流れを駆動している. チャネル幅および半幅をそれぞれ  $h$  と  $\delta$  で表す. 各方向速度成分( $u, v, w$ )の定義も図中に示す.

程度[15,16]とされてきた. しかし, 最近の大規模な DNS [17]により,  $Re = 840$  未満でも, 乱流帯は空間的に局在化して半永久的に維持することが示された. 図2は  $Re = 840$  で成長を続ける乱流帯の可視化例であり, 計算領域の大半は乱れの無い層流域であり, 主流方向とスパン方向に対して傾斜した角度に伸びた帯状の乱流領域が確認できる. その帯の空間スケールはチャネル幅  $h$  の数十から百倍にも達し, 前述の実験[15,16]で乱流帯が観測されなかった理由として流路サイズの不足が考えられる. このとき, 乱流帯の不在が, 高めの下臨界値という結果に繋がったと思われる. 2016年に Sano & Tamai [13]が大規模な水路実験を実施し, 彼らも  $Re = 840$  程度まで乱流帯のような局在乱流を観察しており, 平面ポアズイユ流における下臨界値は 1000 未満ではないか, と考えられるようになった. さらに Sano & Tamai [13]は乱流帯のパターン形成と減衰過程から, 亜臨界の層流・乱流が統計力学モデルにおける DP (有向パーコレーション) 転移であることを示唆した. これを契機に, 層流乱流転移の連続性や, 普遍的法則の存在を巡って現在盛んに研究が行われている[18,19].

以上のように, 平面ポアズイユ流 (および平面クエット流) では下臨界値  $Re_G$  を迎える直前, 乱流帯が局在乱流の延命をもたらし, 下臨界値を下げる傾向が見受けられる. ここで, 乱流斑点が乱流帯に成長したら半永久的に局在乱流を維持すると仮定すると, 平面チャネル流では乱流斑点が成長し帯になるか否かが, 下臨界値  $Re_G$  を定める要となる. よって, 乱流斑点から乱流帯への成長・減衰の過程と条件の調査を本研究の目的とする. 解析手法は既報[11]とほぼ同様であるが, 本研究対象では斑点成長に確率的要素が含まれるため, 乱流帯を捉える大規模な計算領域を用いた高負荷 DNS の試行を多数重ねる必要がある. これの実現には, 東北大学サイバーサイエンスセンターの大型並列ベクトル計算機 SX-ACE の利用が不可欠である.

## 2. 解析対象と支配方程式

解析対象は, 平面ポアズイユ流れ (図3) で,  $x$  方向に一樣な圧力勾配が付加されることで流れは駆動される. 非圧縮性ニュートン流体および物性一定を仮定して, 支配方程式は連続の式とナビエ・ストークス方程式である. 二式のカップリングにはフラクショナルステップ法を, 空間的離散化には有限差分法 (2次中心または4次中心差分) を用いた. 壁に平行な  $x$  および  $z$  方向に周期境界条件を課すことで無限平板を想定し, 壁面は滑り無しとしている. 流量一定の条件下で数値時間積分を行うが, 流動状態によっては壁面摩擦抗力が変動するため, 平均圧力勾配を逐一調整している. 計算領域は  $L_x \times L_y \times L_z = 51.2h \times h \times 51.2h$  または  $102.4h \times h \times 102.4h$  であり, これに応じて格子数も  $N_x \times N_y \times N_z = 256 \times 64 \times 256$  または  $512 \times 64 \times 512$  と変えている.

初期条件として, 層流場に局所攪乱を与えることで乱流斑点を発生させた場を用いる. 初期攪乱は Henningson ら[20]の方法に倣い, 次式の流れ関数  $\varphi$  を用いて流れ方向に伸びた渦対を与える (周期境界をかけているため, 任意で場所を選択).

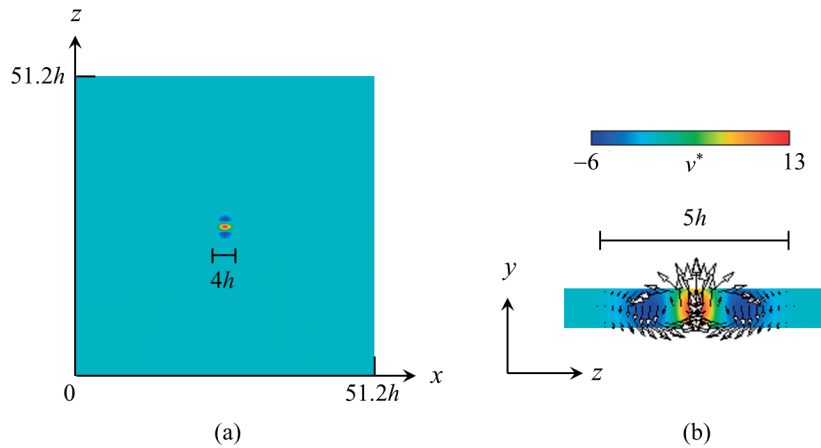


図4 解析対象の初期場 ( $A = 13$  の場合) の可視化図: (a) チャンネル中央平面, (b) 初期攪乱の渦対中央を横切る  $y$ - $z$  流路断面の一部. コンターは壁垂直方向速度  $v$  (バルク平均速度  $U_{\text{bulk}}$  で無次元化) を, ベクトルは可視化断面内の瞬時速度を示す.  $h$  はチャンネル全幅を表す.

$$\varphi = A(1 - y^2)^2 z \cdot \exp(-x^2 - z^2) \quad (1)$$

$$v = \varphi_z \quad (2)$$

$$w = -\varphi_y \quad (3)$$

上式により  $x$ - $y$  面について対称な渦対が与えられる. 図4(a)はチャンネル平面内の初期速度分布を, 図4(b)は  $z$ - $y$  流路断面内で渦を可視化した. 当該攪乱は水平方向に指数関数的な減少をするため, 一对の渦対以外はほぼ強度はゼロである. 空間サイズはスパン方向に約  $5h$ , 主流方向に約  $4h$  である.  $A$  は渦の強さ, より具体的には壁面垂直方向の最大流速に相当するパラメータである.

### 3. SX-ACE における計算性能

前述の計算条件とは異なる (格子数  $N_x \times N_y \times N_z = 1024 \times 64 \times 512$ ) が, 同一コードによる DNS を東北大学サイバーサイエンスセンターの SX-ACE にて実行し, その際のプログラム性能を抜粋して表1に示す. 当該計算は, ノード内 OpenMP 並列化を施したコードでの検証であり, 使用した CPU メモリは 63.4GB である.

ベクトル並列計算機である SX-ACE 上でのプログラム性能と比較するため, 下記仕様のワークステーションで同一コード (但し, ここでも格子点数は異なり, 上記の4倍の  $2048 \times 64 \times 1024$  で, CPU メモリは約 250GB) にて実行した.

CPU: Intel Xeon E5-2690v2, 3.0 GHz, 10 core, cache 25M×2

Memory: ACTICA DDR3 1600, ECC REG, 256GB (16GB×16)

HDD: SATA Enterprise 1 TB

ワークステーションでは平均して 48.18 秒/ステップの計算速度であった. 格子数が 1/4 であれば約 12 秒/ステップと予測され, これに対して SX-ACE は表1より約 0.47 秒/ステップと見積もられる. コア数に差があることを考慮しても, ベクトル計算機 SX-ACE では (市販の) ワークステーションに比べて数十倍の速度性能を有することが分かる.

表 1 プログラム性能 (SX-ACE, 1 ノード 4 コア利用時). 200,000 ステップ分の計算結果.

実行時間 [hh:mm:ss]	26:22:24	プロセッサ同時実行時間	
CPU 時間 [hh:mm:ss]	105:17:34	Conc. Time ( $\geq 1$ ) [sec]	94939.77
Flops 値	$12.6 \times 10^9$	Conc. Time ( $\geq 2$ ) [sec]	94936.70
Flops 値 (実行時間換算)	$50.3 \times 10^9$	Conc. Time ( $\geq 3$ ) [sec]	94917.43
ベクトル長	255.78	Conc. Time ( $\geq 4$ ) [sec]	94260.90
ベクトル演算率	99.68%	MIPS [million instructions/sec]	174.643
CPU バンクコンフリクト [sec]	3019	MIPS (実行時間換算)	697.276

#### 4. 計算結果

図 5, 6 は初期レイノルズ数  $Re = 745$  の計算結果で, それぞれの初期攪乱強さにおいて, 壁垂直方向速度  $v$  の瞬時分布の時間変化を示したものである. ここで, レイノルズ数はチャンネル中心速度  $u_c$ , チャンネル半幅  $\delta$ , および動粘度で無次元化したものである. ただし, チャンネル中心速度は層流を仮定した値であり, 乱流遷移の程度に従い変化するため, ここでは初期値を示す. 本 DNS では, バルク平均流速  $U_{bulk}$  を一定としているため, バルクレイノルズ数 ( $U_{bulk}$  と  $h$  に基づく) は  $Re \times 4/3$  で一定である. 図 5 に示す  $A = 9.2$  のとき, 初期攪乱で与えた渦対は乱流斑点を形成し, その後に乱流帯へと成長した. 計算開始直後の図 5(a)では, 点状の乱流域 (むしろ渦対であり, 厳密には乱流状態に至ってない) が二次元的に時々刻々と拡大し, 図 5(b)では 2 つの乱流斑点に分裂している様子が窺える. その後, 一つの斑点は即座に減衰して, もう一方が図 5(c)-(e) のように  $t^* = tU_{bulk}/\delta = 400$  で典型的な乱流帯を形成している. その後, 乱流帯は減衰していくが, これは依然として狭い計算領域と周期境界のために, 乱流帯の上・下流端で干渉し合ったためと考えている. 図 6 の  $A = 9.5$  では, 初期攪乱が図 5 の場合よりも僅かに強いにも拘らず, 乱流帯は成長せずに  $t^* = 400$  で殆ど層流化する結果となった.

他の初期攪乱強度 ( $A = 14$  まで) やレイノルズ数 ( $Re = 740 \sim 800$ ) での試行も重ねたが,  $A$  または  $Re$  が大きいほど乱流帯へと成長しやすい傾向があった. 但し, 上述の通り, 必ずしも強い初期攪乱が乱流帯になるわけでもなく, 確率的な要素 (もしくはカオスの特徴である初期値鋭敏依存性) を含むことが確認された. つまり, レイノルズ数が小さいほど乱流帯への成長確率が下がり, 著者らの限られた試行回数 (数十回) においては  $Re \leq 740$  で乱流帯形成を確認できなかった. また, 乱流帯へと成長しやすい複数の  $A$  の最適値があることを見出した. この傾向は Schmiegel & Eckhardt [21] の主張と一致している.

図 5 のように  $t^* = 400$  以降は減衰する結果となったが, 各方向領域を  $51.2h$  から倍の  $102.4h$  とし, 4 倍の計算領域で DNS を行った. 図 7(a) は  $Re = 745$  で  $A = 9.2$  の条件における, 乱流エネルギーの時間変化である. 空間平均値であるため, 4 倍の計算領域を用いた場合 (図中の赤線) が約  $1/4$  の値となっているが, 面積で除さない積分値としてはほぼ同値の結果となる. 興味深いことには,  $t^* = 400$  では両計算領域サイズで乱流帯を形成して同程度の乱流エネルギー積分値であるのに対し, 後半 ( $t^* = 800$  頃) になると狭い計算領域では急激に層流化し, 広い計算領域では減衰が緩やかになり層流化が抑えられている. これは周期境界の影響が弱まったためと考えられる. この 4 倍の計算領域サイズを用いて, 次に乱流帯の成長速度に着目した. 詳細は省略するが, 定量的に乱流帯の両端を定め, その 2 点間距離を時々刻々と追跡した. 図 8 に結果の二例を示す. 図 8(a)

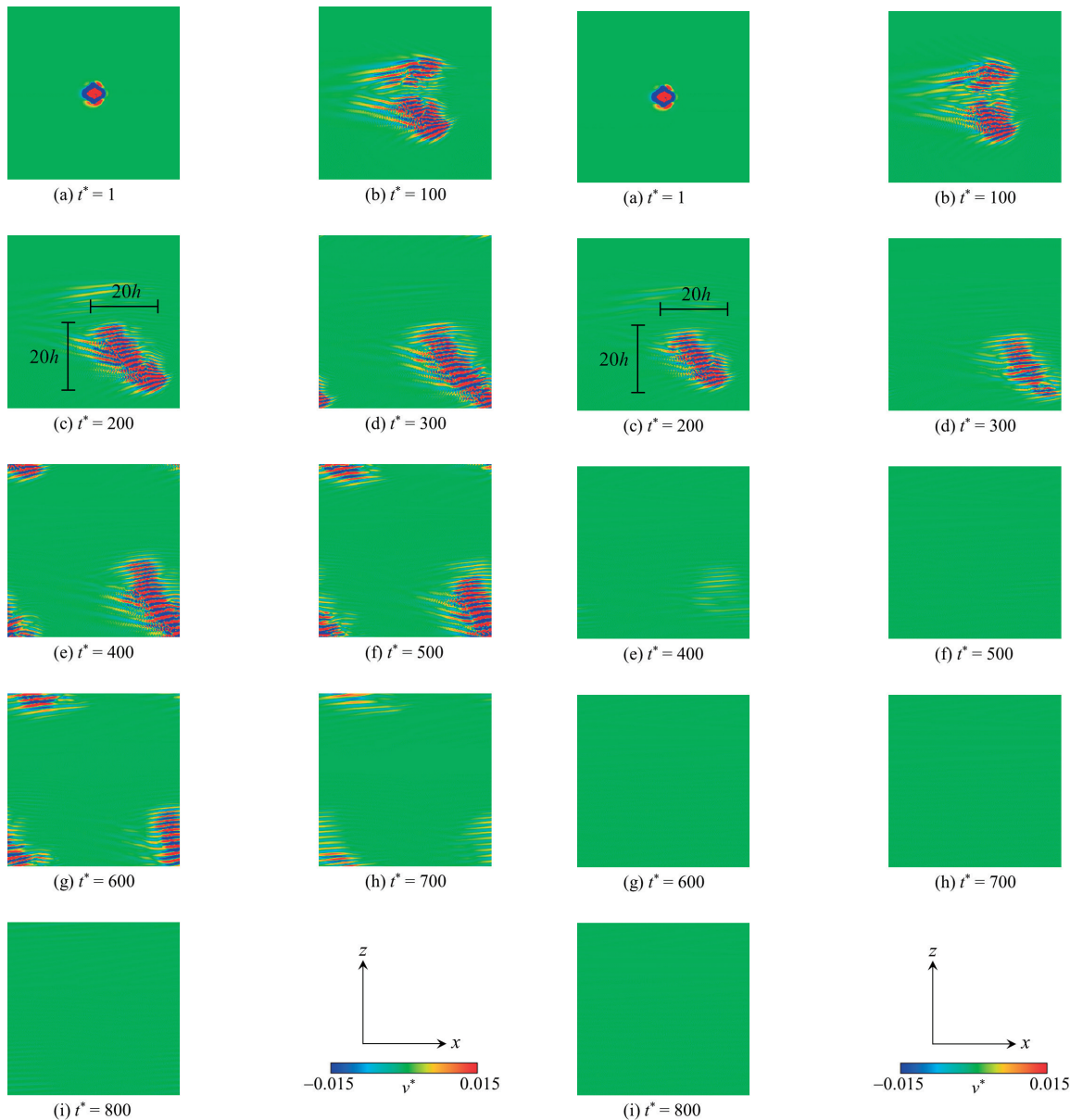


図 5 乱流斑点から乱流帯への発達過程を示す，瞬時速度場の時系列： $Re = 745$ ， $A = 9.2$ ．時間の無次元化は  $\delta/U_{bulk}$  によるもので，領域サイズは  $L_x \times L_z = 51.2h \times 51.2h$  である．

図 6 瞬時速度場の時系列．図 5 と同様，但し初期攪乱強度  $A = 9.5$  の場合を示す．

は乱流帯へ成長しようとしたが減衰した場合の乱流帯の長さの時間変化を，図 8(b)は乱流帯へ成長した場合の乱流帯の長さの時間変化を示したものである．不連続な変化が時折見受けられるが，分裂した乱流帯の一方が打ち消されたことによるものである．また，乱流帯へ成長した場合（図 8(b)）， $t^* = 600$  辺りからグラフの傾きが急になっていることが分かる．これらのグラフから，1 次関数的に増加しているとみなせる所で，最小二乗法により傾き ( $dL/dt$ ) を算出し，これを乱流帯の成長速度と定義した．乱流帯へ成長しようとしたが減少する場合，値が小さい場合もあるが概ね 0.06 程度の値をとる結果となった．乱流帯へ成長する場合，成長初期は減衰する場合と同じような成長速度を呈し，その後成長速度が上昇し安定的な成長を見せた．後者の安定的な成長速度は概ねレイノルズ数が高いほど速いという結果を得ている．このことから帯成長には，準備

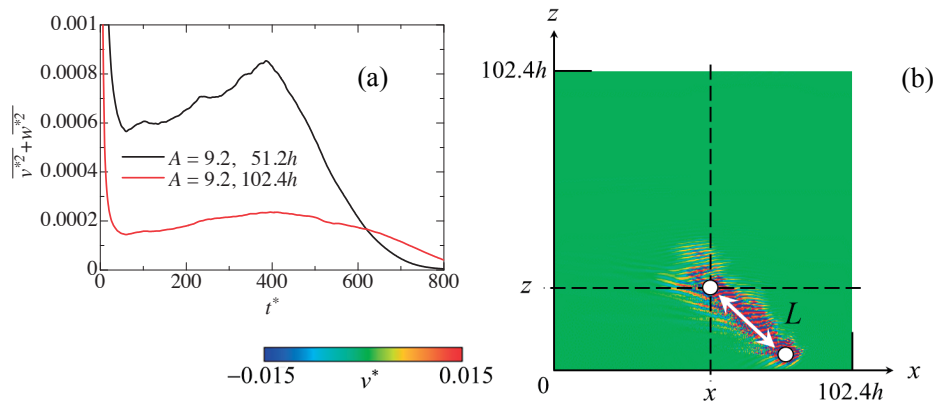


図7 乱流帯の時間発展と瞬時構造 : (a) チャンネル中央平面内における、主流法線方向速度成分の乱流エネルギー  $(v^2 + w^2)/U_{\text{bulk}}^2$  平均値に見る時間変化 ; (b) 成長途中にある乱流帯に対して上流・下流の端を定義し、乱流帯の長さ  $L$  を決定。初期レイノルズ数は  $\text{Re} = 745$  であり、(a)では異なる計算領域サイズの結果を比較し、(b)では大きい場合の結果を示す。

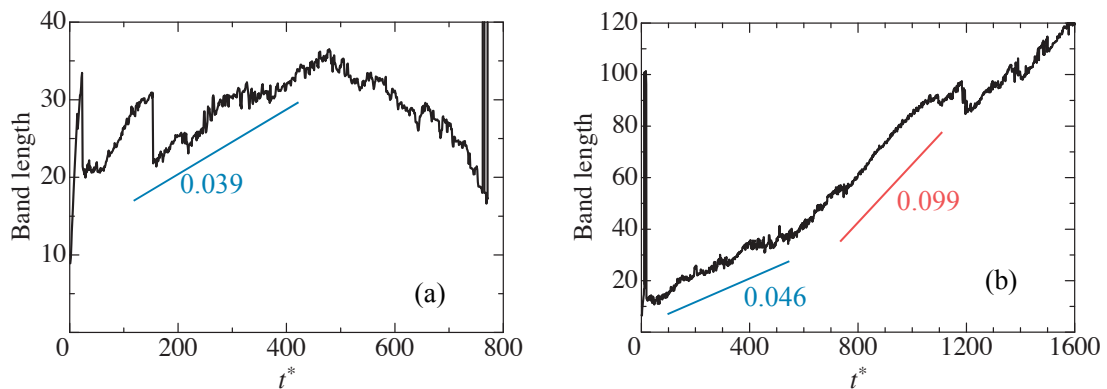


図8 乱流帯長さ  $L$  の時間変化 : (a)  $\text{Re} = 745$ ,  $A = 9.2$  ; (b)  $\text{Re} = 780$ ,  $A = 10$ . いずれも計算領域サイズ  $L_x \times L_y \times L_z = 102.4h \times h \times 102.4h$  の結果である。図中の補助線と数値は平均成長率  $(dL/dt)/U_{\text{bulk}}$  を示す。

期と安定期の2段階が示唆される。安定期の成長速度はレイノルズ数減少に伴い小さくなり、 $\text{Re} = 700$  弱で準備期と同程度になると予測される(結果の詳細は省略)。Taoら[22]は  $\text{Re} = 660$  での乱流帯成長をDNSで実証しているが、これは初期攪乱として安定期の乱流帯を与えているためと考えられる。Taoらが示した成長速度は本研究で見出した準備期の成長速度とよく一致する。

## 5. 結言

平面ポアズイユ流の直接数値解析により、乱流斑点が乱流帯へと成長するレイノルズ数の限界(下臨界値  $\text{Re}_G$ )を調査し、局所攪乱に対して  $\text{Re}_G = 750$  程度であること、および帯成長には準備期と安定期の2段階があることを見出した。準備期と安定期では帯成長速度が異なり、後者はレイノルズ数に依存することが分かった。しかし、帯形成には確率的要素を含むため、より厳密な  $\text{Re}_G$  の決定、および層流乱流転移の連続性の議論には、まだ膨大な試行と大きな計算領域が必要とされる。本解析も含めて、このような数値シミュレーションには高性能のスーパーコンピュータ利用が不可欠であり、MPI並列プログラムの高効率化も必須である。引き続き、東北大学

サイバーサイエンスセンターの共同研究などを通してプログラム高性能化および高度なコンピュータ環境利用が望まれる。

### 謝辞

本研究は、東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータを利用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。研究費の一部は科学研究費補助金として、新学術領域（研究領域提案型）「壁乱流亜臨界遷移の間欠乱流パターン形成の大規模 DNS 解析（16H00813）」および「亜臨界乱流遷移におけるグローバル安定性と大規模間欠構造の複雑流への研究展開（16H06066）」から支援を受けたものである。

### 参考文献

- [1] O. Reynolds, An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and of the law of resistance in parallel channels, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, **174**, 935–982, 1883.
- [2] R. R. Kerswell, Transition scenarios: normality vs non-normality, *Lecture Note* **7**, 2011, <http://www.damtp.cam.ac.uk/user/rrk26/Papers/lecture7.pdf>
- [3] A. E. Gill, The least-damped disturbance to Poiseuille flow in a circular pipe, *JFM*, **61**, 97–107, 1973.
- [4] I. J. Wygnanski and F. H. Champagne, On transition in a pipe. Part 1. The origin of puffs and slugs and the flow in a turbulent slug, *JFM*, **59**, 281–335, 1973.
- [5] K. Avila *et al.*, The onset of turbulence in pipe flow, *Science*, **333**, 192–196, 2011.
- [6] D. Barkley *et al.*, The rise of fully turbulent flow, *Nature*, **526**, 550–553, 2015.
- [7] V. A. Romanov, Stability of plane-parallel Couette flow, *Functional Analysis and its Application*, **7**, 137–146, 1973.
- [8] S. Bottin *et al.*, Discontinuous transition to spatiotemporal intermittency in plane Couette flow, *EPL*, **43**, 171–176, 1998.
- [9] A. Prigent *et al.*, Large-scale finite wavelength modulation within turbulent shear flows. *PRL*, **89**, 014501, 2002.
- [10] H. W. Emmons, The laminar-turbulent transition in a boundary layer, *J. Aeronaut. Sci.*, **18**, 490–498, 1951.
- [11] T. Tsukahara *et al.*, DNS of turbulent channel flow at very low Reynolds numbers. In: *Proc. 4th Int. Symp. Turbulence and Shear Flow Phenomena*, pp. 935–940, 2005; *arXiv Preprint*, 1406.0248.
- [12] T. Tsukahara *et al.*, Turbulence stripe in transitional channel flow with/without system rotation, In: *Proc. 7th IUTAM Symp. Laminar-Turbulent Transition*, Springer Netherlands, 421–426, 2010.
- [13] M. Sano and K. Tamai, A universal transition to turbulence in channel flow, *Nature Phys.*, **12**, 249–253, 2016.
- [14] S. A. Orszag, Accurate solution of the Orr–Sommerfeld stability equation, *JFM*, **50**, 689–703, 1971.
- [15] D. R. Carlson *et al.*, A flow-visualization study of transition in plane Poiseuille flow, *JFM*, **121**, 487–505, 1982.
- [16] M. Nishioka and M. Asai, Some observations of the subcritical transition in plane Poiseuille flow, *JFM*, **150**, 441–450, 1985.
- [17] 塚原隆裕, 石田貴大, 平面ポアズイユ流の亜臨界遷移における下臨界レイノルズ数, 日本流体力学会誌「ながれ」, 第 34 巻 第 6 号, 383–386, 2015.
- [18] M. Chantry *et al.*, Universal continuous transition to turbulence in a planar shear flow, *JFM*, **824**, R1, 2017.
- [19] 佐野雅己, 層流・乱流転移と有向パーコレーション相転移, 土木学会基礎水理シンポ, 2017.
- [20] D. Henningson *et al.*, Numerical simulations of turbulent spots in plane Poiseuille and boundary-layer

- flow, *Phys. Fluids*, **30**, 2914–2917, 1987.
- [21] A. Schmiegel and B. Eckhardt, Fractal stability border in plane Couette flow, *PRL*, **79**, 5250–5253, 1997.
- [22] J. J. Tao *et al.*, Extended localized structures and the onset of turbulence in channel flow, *Phys. Rev. Fluids*, **3**, 011902, 2018.



## [お知らせ]

## 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

平成 30 年度サイバーサイエンスセンター講習会をご案内いたします。多くのみなさまの参加をお待ちしております。

No.	講習会名	開催日時	募集人数	講師	内容
1	はじめてのLinux	5月21日(月) 15:00-18:00	20	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	20	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	20	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	20	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	20	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	15	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	30	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	20	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	20	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	20	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	20	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	20	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
13	並列プログラミング入門 II (MPI)	8月10日(金) 13:00-17:00	20	小松 (サイバーサイ エンスセンター)	・MPI 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	20	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	10	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	20	横井 (尚絅学院大学)	・Mathematica の基本的な使い方
17	Marc 入門	10月下旬 13:00-17:00	15	内藤 (工学研究科)	・Marc の基本的な使い方

備考：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。

[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し、公開鍵暗号方式によるログインのみ許可しています\*1。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*2	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：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\\_info\\_manuals](http://www.hpci-office.jp/pages/hpci_info_manuals)

※2：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**

利用者番号の発行日から 60 日経過後、または鍵を生成すると、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
利用者番号@key.cc.tohoku.ac.jp's 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 (必ず設定)
Enter same passphrase again: 同じパスフレーズを再度入力

(生成された秘密鍵の表示)
'利用者番号' registration is completed.
RSA private key is as follows.

8<-----8<-----8<-----8<-----

-----BEGIN RSA PRIVATE KEY-----
Proc-Type: 4, ENCRYPTED
DEK-Info: DES-EDE3-CBC, A3C27C703A6DF938

gp5U3M6wVIvuGLX80tYBAWC3WwNzX9TPu8eOCA9Pd/i6i jSNcVKp7lGJtuRzjfXV
(中略)
FSwfyL63gRqxPZEmlcZzfDnhyX7ezdNNveZu37U/nq4TQj9+Q+RWHhjF9jwnuW6F
-----END RSA PRIVATE KEY-----

8<-----8<-----8<-----8<-----
```

- (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)

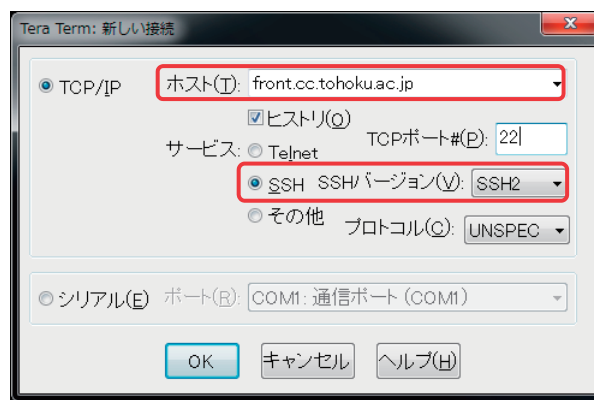
リスト 4 ログインホストへの SSH 接続例

```
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)
```

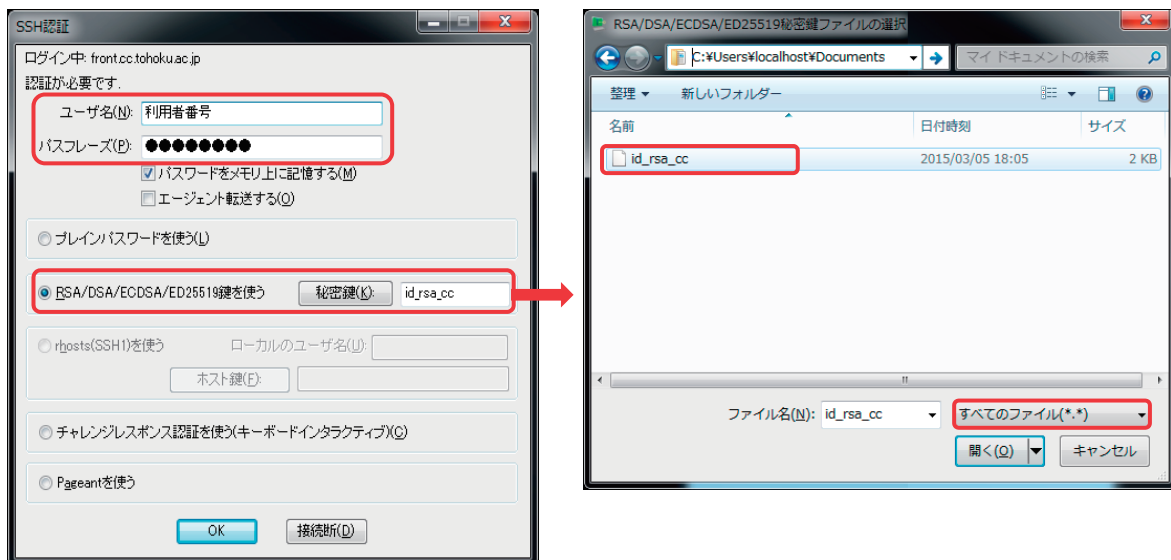
#### 4.2 Windows の Tera Term から接続する方法

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。



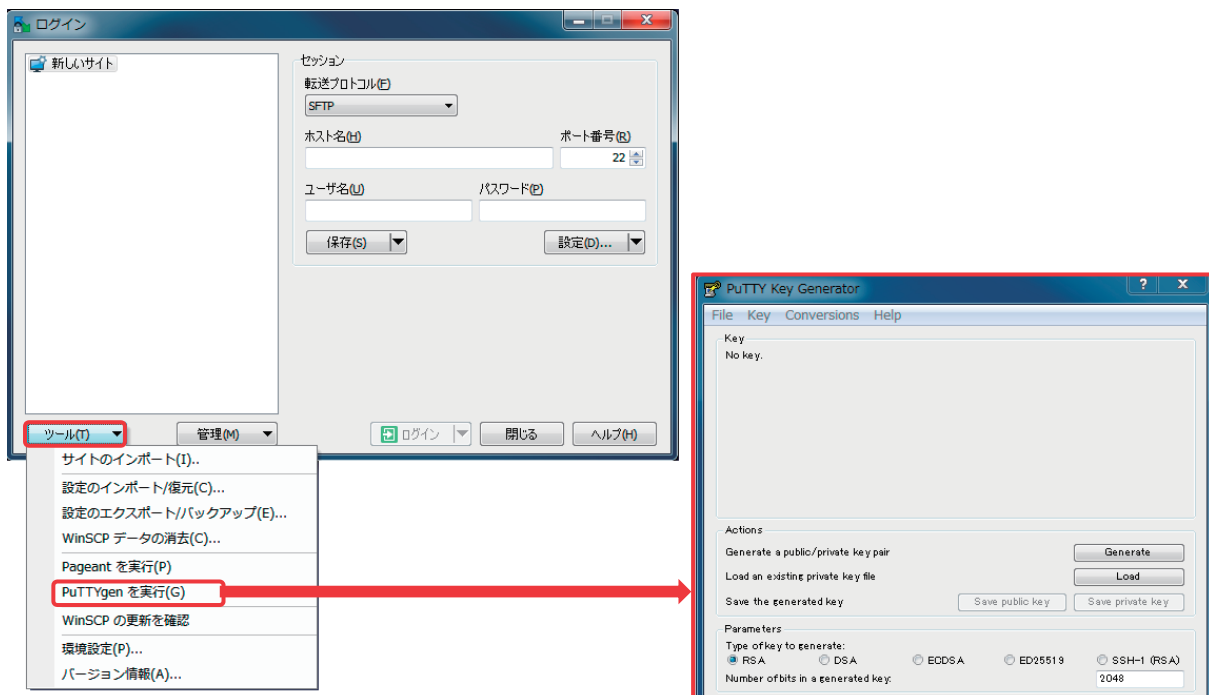
### 4.3 Windows の WinSCP から接続する方法

WinSCP から接続する場合は、PuTTY 形式の秘密鍵を用意する必要があります。初回接続時は、4.3.1 の手順に従い、鍵サーバで生成した秘密鍵を PuTTY 形式に変換してください。

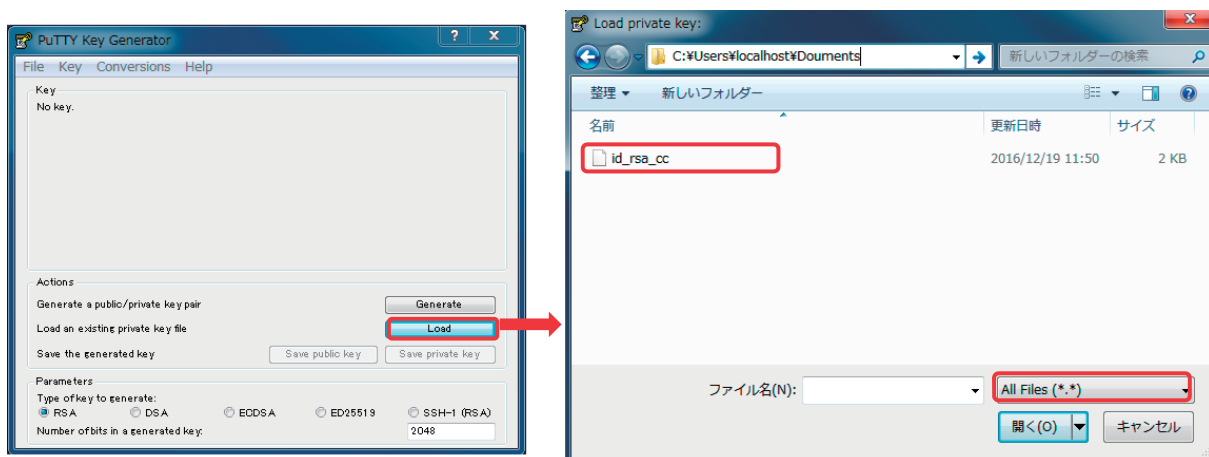
#### 4.3.1 秘密鍵を PuTTY 形式に変換

鍵サーバで生成し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

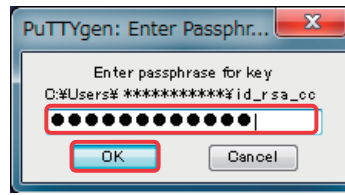
- (1) WinSCP のログイン画面から WinSCP 付属の鍵生成プログラム「PuTTYgen」を起動します。  
([ツール] 押下→[PuTTYgen を実行] を押下)  
PuTTYgen がインストールされていない場合はインストールが必要です。



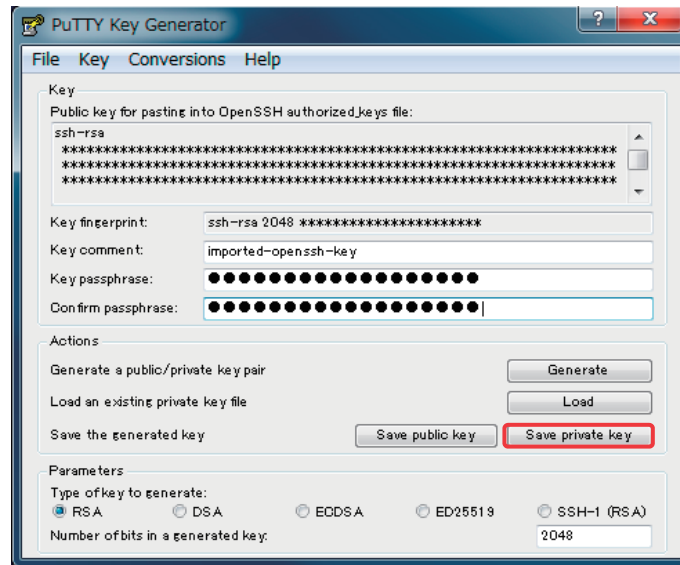
- (2) [Load]を押下し、鍵サーバで生成した秘密鍵ファイルを選択して[開く]を押下します。  
(秘密鍵ファイルの選択画面では、拡張子「All Files (\*.\*)」を選択します)



- (3) 鍵サーバで生成した秘密鍵のパスフレーズを入力し、[OK]を押下します。



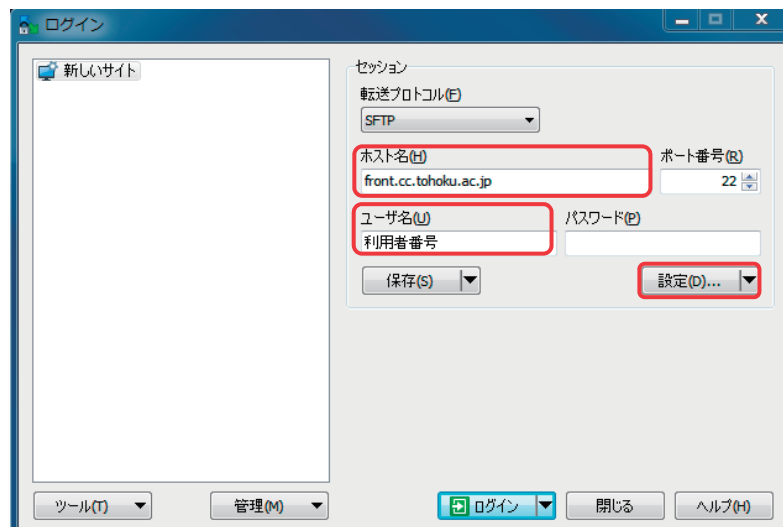
- (4) [Save private key]を押下すると、PuTTY形式に変換された秘密鍵が保存されます。  
(保存先/ファイル名は任意。拡張子は.ppkを推奨)



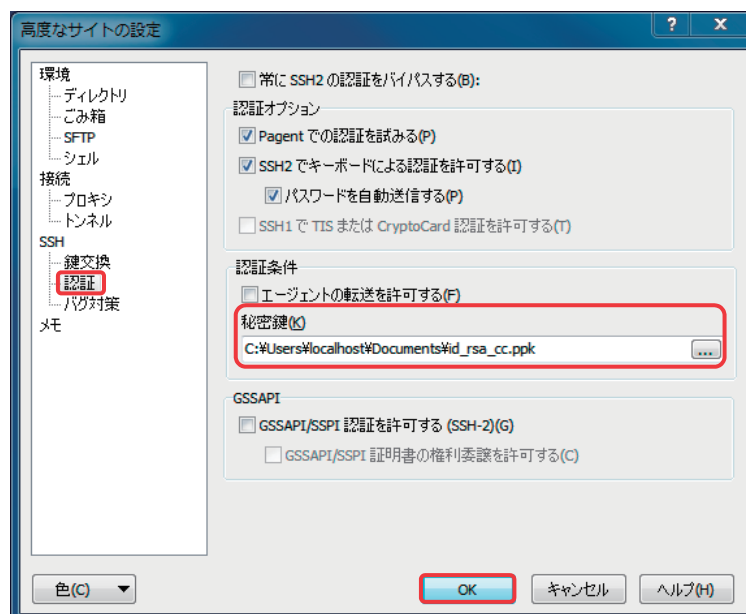
### 4.3.2 ログイン方法

PuTTY形式の秘密鍵をファイル名「id\_rsa\_cc.ppk」として「ドキュメント」以下に保存した場合

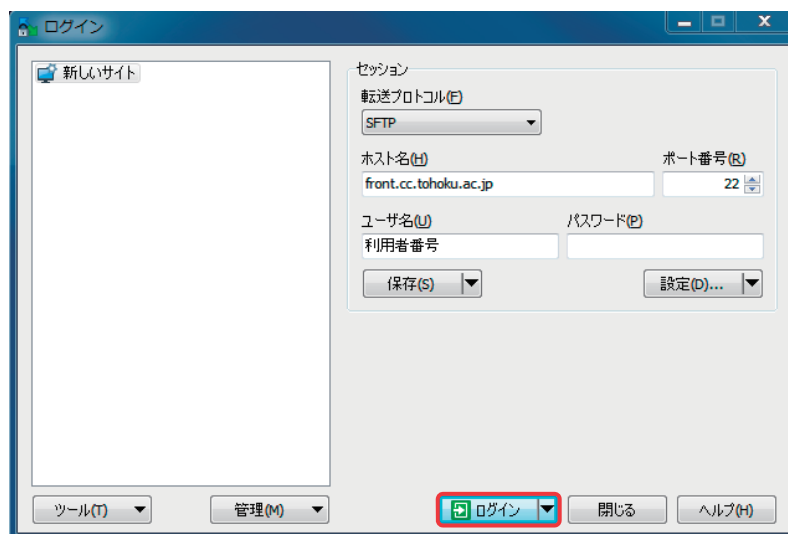
- (1) 「ホスト名」を指定、「ユーザ名」に利用者番号を入力し、[設定]を押下する。



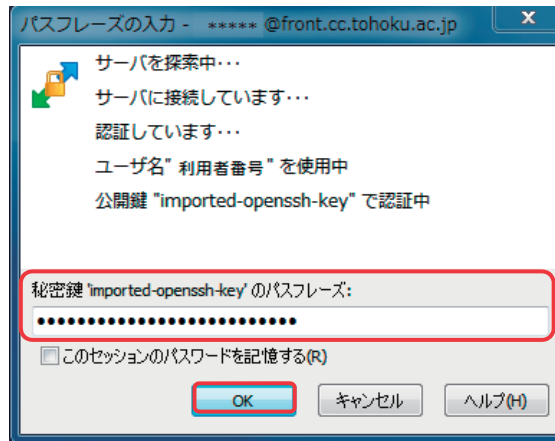
- (2) 「SSH」 → 「認証」 を選択し、「秘密鍵」 に PuTTY 形式の秘密鍵のファイルを指定して[OK]を押下します。



- (3) [ログイン]ボタンを押下します。



- (4) パスフレーズを入力し、[OK]押下すると接続されます。



#### 4.4 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。ご不明な点、ご質問等ございましたら、お気軽にセンターまでお問い合わせください。



## [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	

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 2018 年 4 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, macOS 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<sup>1</sup>。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。

<sup>1</sup> 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 32 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

(認証鍵生成サーバで作成した秘密鍵のファイル名を id\_rsa\_cc として ~/.ssh 以下に保存した場合)

```
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_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
front1 $ (コマンド待ち状態)
```

### 【macOS 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】

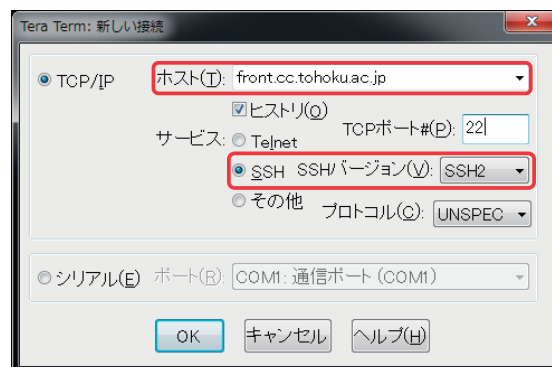
#### ● SSH クライアントソフトのダウンロードとインストール

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。2018 年 4 月現在の最新版は 4.98 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

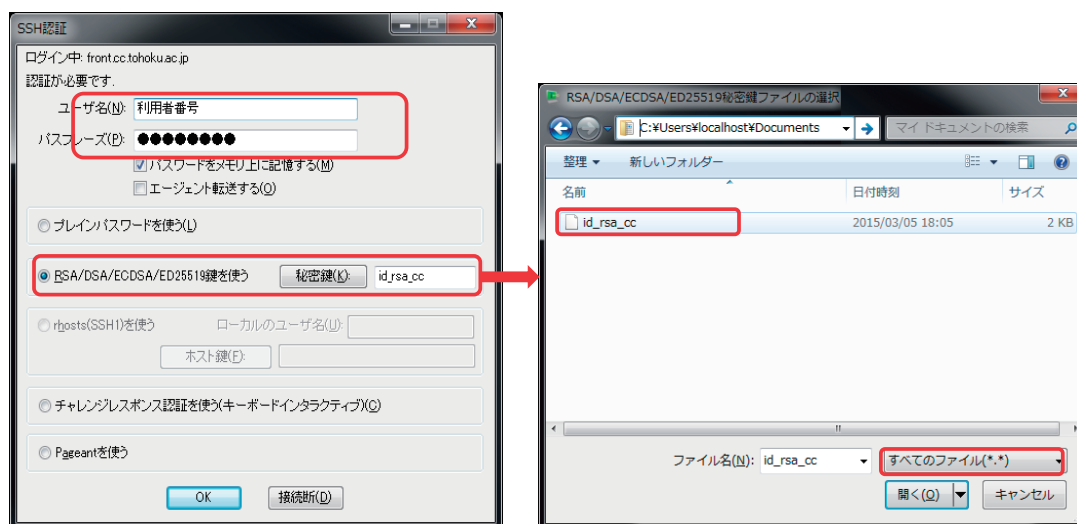
「ホスト名」を指定、「サービス」は SSH2 を選択し、[OK]を押下します。



「ユーザ名」に利用者番号、「パスワード」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 GUI アプリケーションは Linux では「gftp」、Windows では「WinSCP」、macOS では「FileZilla」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よう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_cc -X※1 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp
Enter passphrase for key '/home/localname/.ssh/id_rsa_cc': パスワードを入力
(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ー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。2018 年 4 月現在の最新版は 5.2.8 です。

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

## VirtualBox 5.2.8 の起動画面

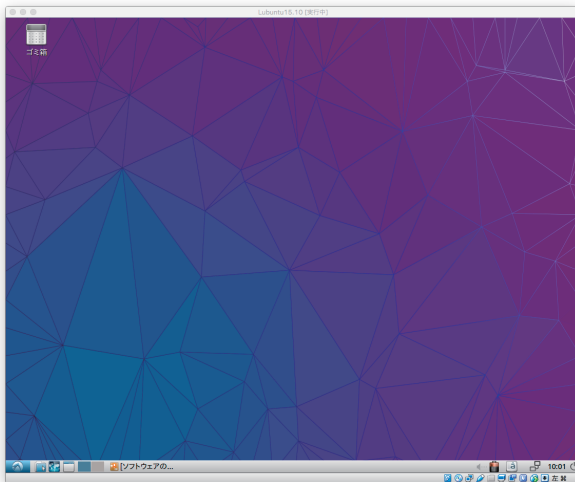


Linux のディストリビューション、バージョンによっては GUI アプリケーションが正しく表示されない場合があります。センターで動作確認を行っているのは、**lubuntu 17.10** です。以下のページからダウンロードし、Virtual Box の仮想環境にインストールしてください。インストール方法の詳細は各マニュアルをご参照ください。

lubuntu ダウンロード: <https://lubuntu.me/>

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 17.10)



## 【macOS からの利用】

macOS では X Window System 環境の「XQuartz」をインストールして下さい。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。

XQuartz ダウンロード: <https://www.xquartz.org/>

## 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 ..... **Gaussian16**

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** ※

MSC ソフトウェア社のアプリケーション ※

数式処理プログラム ..... **Mathematica** ※

科学技術計算言語 ..... **MATLAB** ※

※ 東北大学の構成員のみご利用できます。

## 非経験的分子軌道計算プログラム Gaussian16

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 ・ Gaussian16 B.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、subg16 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

(subg16 コマンドに入カファイルを指定する際は拡張子 .com を省きます)

```
[front1 ~]$ subg16 -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 ~]$ subg16 -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 16.」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 16 at Mon Apr 2 12:00:00 2018.
```

- 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 3 版,ガウシアン社,2017
- 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, Linux, macOS 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

6.0.16

### ■ お申し込み

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

利用条件

- 東北大学内の方



DVD-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下さい。

#### ■ 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 6: <http://www.hulinks.co.jp/software/gaussview/>

並列コンピュータ [front.cc.tohoku.ac.jp](http://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](http://front.cc.tohoku.ac.jp) に転送します。
3. [front.cc.tohoku.ac.jp](http://front.cc.tohoku.ac.jp) にログインします。
4. subg16 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](http://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, (H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>, and Alanine Dipeptide., Chem. Phys. Lett., 2005, 404, 95-99.

#### ● SCW:

S. Maeda, K. Ohno, Conversion Pathways between a Fullerene and a Ring among C<sub>20</sub> 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 (H<sub>2</sub>O)<sub>8</sub>: 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 H<sub>2</sub>CO., 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  $A + B \rightarrow X$  Type Reactions., J. Chem. Phys., 2010, 132, 241102 (4 pages).; S. Maeda, K. Morokuma, Finding Reaction Pathways of Type  $A + B \rightarrow X$ : 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 / 動的な非線形 / 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) <i>job-name</i> (必須)	入力ファイル名 <i>job-name.dat</i> を指定
-cpu <i>秒数</i>	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) <i>user_name</i>	ユーザサブルーチン <i>user_name.f</i> 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](http://front.cc.tohoku.ac.jp) の [usr/ap/MSC2014.2/mentat2014.2/examples/marc\\_ug/](http://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](http://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/](http://usr/ap/MSC2014.2/mentat2014.2/doc/)

<a href="#">release_guide.pdf</a>	: Release Guide (2014.2 英語版)
<a href="#">marcwhatsnew.pdf</a>	: What's new (2014.2 英語版)
<a href="#">mt_help_ref.pdf</a>	: MSC.Marc Mentat Help Reference (2014.2 英語版)

英文マニュアル [usr/ap/MSC2014.2/mentat2014.2/doc/\(vola~vole\)](http://usr/ap/MSC2014.2/mentat2014.2/doc/(vola~vole))

<a href="#">vola.pdf</a>	: Volume A: Theory and User Information
<a href="#">volb.pdf</a>	: Volume B: Element Library
<a href="#">volc.pdf</a>	: Volume C: Program Input
<a href="#">vold.pdf</a>	: Volume D: User Subroutines and Special Routines
<a href="#">vole.pdf</a>	: Volume E: Demonstration Problems

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

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

**MSC Software 社のアプリケーション**

現在センターの並列コンピュータでは Marc/Mentat を提供していますが、以下のアプリケーションを別途研究室のワークステーションや PC 等にインストールして利用可能です。

対象者は東北大学に所属の方(教職員・学生等)で、センターの利用者番号が必要です。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。

動作環境等については MSC Software 社の HP をご参照ください。

- 利用可能アプリケーション
  - ・ Marc/Mentat(センターの並列コンピュータでも実行できます)
  - ・ MSC Nastran
  - ・ Patran
  - ・ Dytran
  - ・ FlightLoads
  - ・ Sinda
- アプリケーション情報と動作環境 (MSC Software 社)
  - <http://www.mscsoftware.com/>
  - <http://www.mscsoftware.com/support/platform-support/>

## 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ー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 11.2

### ■ 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, サイエントリスト社
- **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 ・ R2017b

#### ■ 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 Equation 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

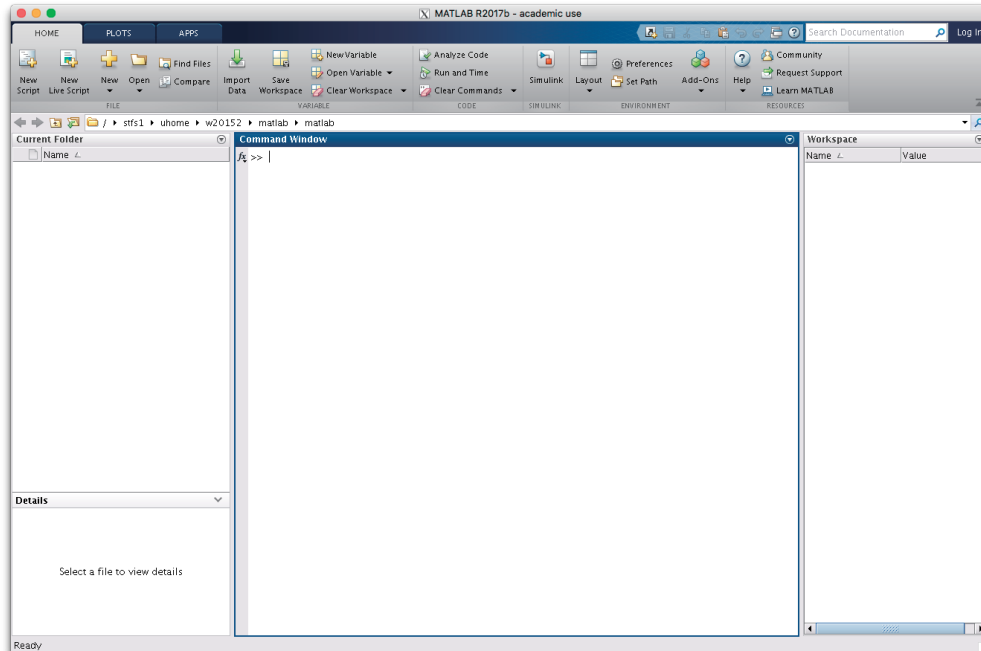
### 【MATLAB の起動】

#### ● 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 1984-2017 The MathWorks, Inc.
    R2017b (9.3.0.713579) 64-bit (glnxa64)
    September 14, 2017

    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 12345.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](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))

[大規模科学計算システム]

## 三次元可視化システムの紹介

共同利用支援係 共同研究支援係

### 1. はじめに

本センターでは、1F 可視化機器室に三次元可視化システムを設置し、以下のサービスを提供しています。

三次元可視化システム	AVS/Express MPE による可視化、および、大画面ディスプレイでの三次元立体視
大画面テレビ会議システム	ポリコムによる大画面テレビ会議システム（最大4地点接続）
大画面ディスプレイ	プレゼンテーション等で利用

本稿では、本システムのサービスについて紹介します。

### 2. 概要

三次元可視化システムは、3D対応50インチLEDモニタを12面配置した大画面ディスプレイと、演算結果の可視化処理およびディスプレイへの描画を行う可視化サーバから構成されます。また、最大4地点接続可能なポリコムを併設しています。スーパーコンピュータSX-ACEおよび並列コンピュータLX406Re-2で得られたデータの可視化にご利用いただけます。また、テレビ会議システムを用いて、遠隔地と可視化結果を共有したテレビ会議も可能です。

大画面テレビ会議システムおよび大画面ディスプレイは、可視化以外の用途でも利用可能です。その場合はセンターの利用者番号をお持ちでなくともご利用いただけます。幅広くご活用いただければ幸いです。

設置場所の可視化機器室は、机（2名掛け）8台、椅子16脚、パイプ椅子6脚、ホワイトボード、演台、マイクを備えています。16～22名程度までご利用可能です。

設置場所	サイバーサイエンスセンター本館 1F 可視化機器室
利用対象者	センターの利用者番号をお持ちの方 (テレビ会議、ディスプレイのみの利用の場合は利用登録なしで利用可能です)
利用可能時間	平日 9:00～21:00
利用負担金	利用予約時間 1時間につき 2,500円 (予約時間を超えた利用があった場合は追加課金が発生します)
利用用途	<ul style="list-style-type: none"> <li>スーパーコンピュータSX-ACEや並列コンピュータLX406Re-2で得られたデータの可視化</li> <li>テレビ会議（遠隔地と可視化結果を共有したテレビ会議も可能）</li> <li>大画面ディスプレイによるプレゼンテーション、DVD等の再生等（上記以外の用途でも利用可能です。ご相談ください）</li> </ul>

ご利用には事前予約が必要です。予約方法について詳しくは4章をご覧ください。

随時、見学も受け付けております。お試しでの利用も可能です。ご興味がある方、利用検討の方など、ぜひご見学ください。



図 1 三次元可視化システム（可視化機器室）

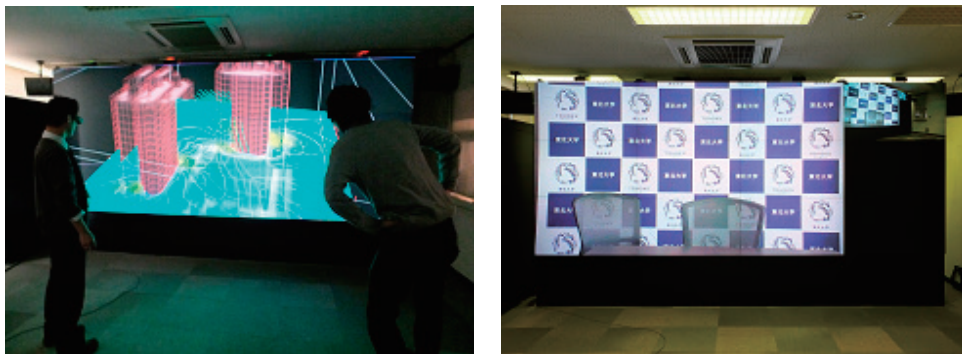


図 2 三次元可視化システム利用の様子  
（左：三次元立体視 右：テレビ会議システム）

### 3. システム構成

#### 【可視化装置】

- ディスプレイ  
2D/3D 表示に対応した、フル HD（1,920×1,080 画素）50 インチ LED モニタを 12 面設置し、最大 7,680×3,240 画素の高精細表示が可能です。
- 可視化サーバ  
1 ノードにインテル Xeon プロセッサ E5-2670 を 2 基、メモリを 64GB、グラフィックボード Quadro K5000 を搭載し、全 4 ノードで構成されます。
- 三次元可視化ソフトウェア  
AVS/Express MPE を採用し、複数画面での 3D 立体視表示が可能です。

#### 【テレビ会議システム】

Polycom HDX8000-1080 を採用し、フルハイビジョン（1080p）での映像接続が可能です。また、入出力インターフェースを利用してユーザの PC 画面、ビデオ映像を送信することができます。自局を含めて最大 4 地点からの接続が可能です。

システムの利用マニュアルは、可視化機器室にて閲覧可能です。

## 4. 利用の流れ

### ① システムの空き状況を予約状況カレンダーで確認

予約状況カレンダーで空き状況をご確認ください。

<http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/service/vsr.html#予約状況カレンダー>

- ・システムの同時利用は1ユーザ/グループのみです。
- ・カレンダーに「予定あり」と入っている時間帯は、他の方はご利用いただけません。

### ② 共同利用支援係まで電話またはメールで予約申請

共同利用支援係（電話：022-795-6251 メール：sys-sec@cc.tohoku.ac.jp）まで、以下の項目をご連絡ください。

- ・お名前
- ・利用者番号
- ・利用日時/時間
- ・用途
- ・利用システム（可視化/テレビ会議/その他）

三次元可視化ソフトウェア（AVS/Express MPE）を利用する場合で、センターの利用者番号をお持ちでない場合は、事前に利用者登録が必要です。テレビ会議およびディスプレイのみの利用の場合は、利用者登録なしでも利用可能です。

### ③ 共同利用支援係より、予約完了をメールで通知

### ④ システム利用

予約時間になりましたら、システムをご利用ください。

（部屋の解錠等については、予約完了メールにてご案内します）

## 5. 課金に関する注意事項

- ・キャンセルする場合は、前日までに必ずご連絡ください。
- ・ご連絡がない場合は、利用の有無にかかわらず予約時間に対して課金が発生します。
- ・予約時間を超えた利用があった場合は、追加課金が発生します。

## 6. 三次元可視化システム活用事例

- ・三次元可視化システムと可視化事例の紹介（SENAC Vol. 49 No. 3（2016-7），pp. 9-15）  
[http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/refer/senac.html#2016\\_7](http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/refer/senac.html#2016_7)
- ・人材育成カリキュラム「組込み適塾」開催  
<http://www.cc.tohoku.ac.jp/NEWS/3D/kashika.html>

## 7. 問合せ先

共同利用支援係

電話：022-795-6251 メール：sys-sec@cc.tohoku.ac.jp

### 三次元可視化システム 《利用の流れ》

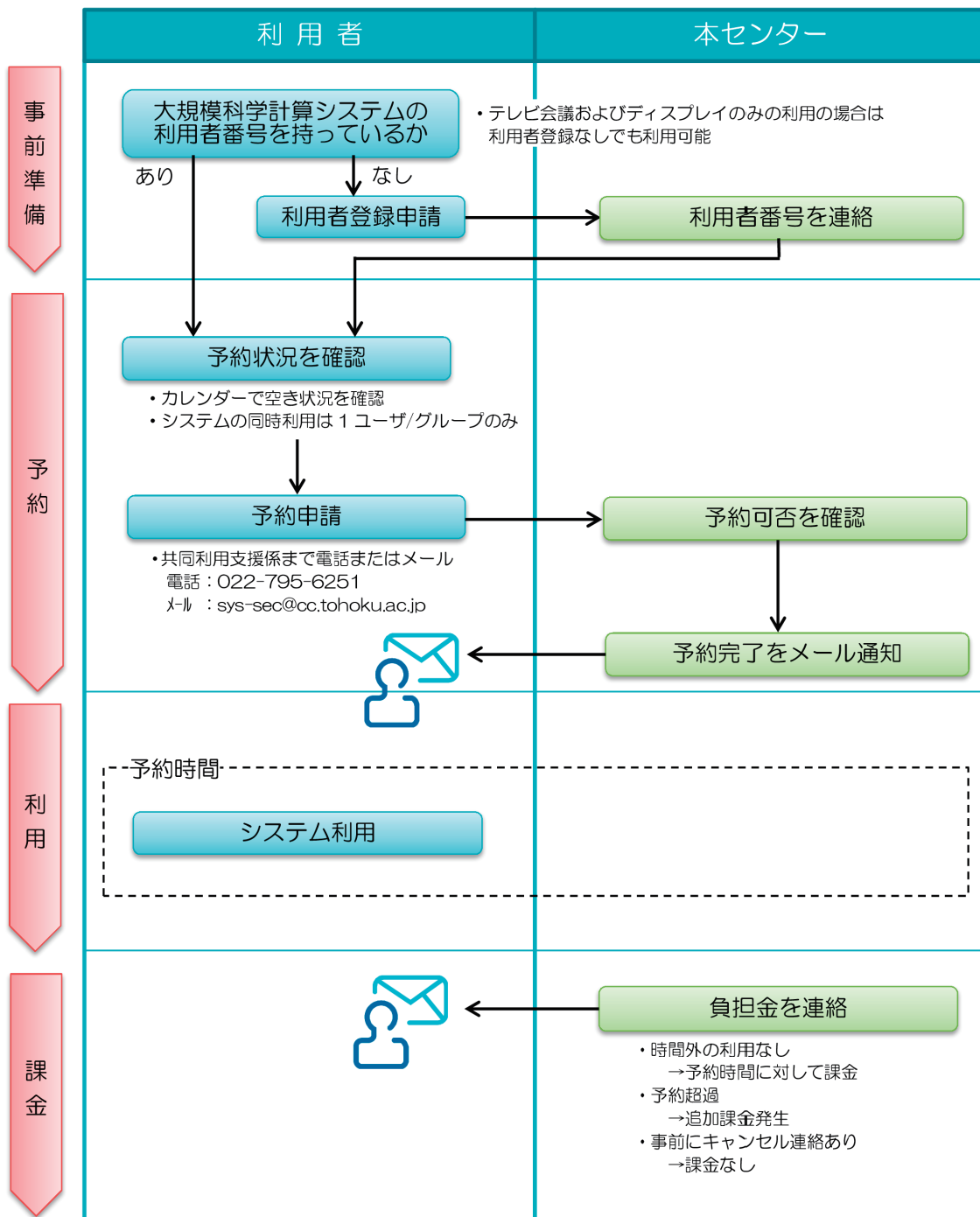


図 3 利用の流れ

## 8. おわりに

本稿では、三次元可視化システムの概要と利用の流れを紹介しました。可視化での利用のほか、テレビ会議やプレゼンテーションなど幅広くご利用いただけます。研究の強力なツールとしてご活用いただければ幸いです。

[報 告] 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

## 工学部電気情報物理工学科「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

工学研究科 通信工学専攻

### 1. 概要

工学部電気情報物理工学科では、「Step-QI スクール」という学部生用の教育プログラムを提供しています。「アドバンス創造工学」はその一環であり、学部2年生・3年生を対象として、研究室での研修を通して研究の体験をするプログラムです。

同学科の伊藤・能勢研究室では、「歌唱音声の操作と評価」という題目で研修を行いました。このテーマで2名の学生が研修を行いました。うち1名は音声操作に深層学習（ディープラーニング）の手法を用いるため、大量の計算を必要とします。そのため、サイバーサイエンスセンター提供のスーパーコンピュータ無償提供制度を利用させていただきました。

### 2. 研修内容

歌唱音声には、基本的な要素である音高やテンポ、歌唱技術であるビブラートやこぶしなどのほか、知覚要素である「熱唱度」があります[1]。本研修では、深層学習を用いた写像関数を利用することにより、熱唱でない音声を熱唱音声に変換する手法を検討しました。

手法は以下の通りです。最初に音声分析合成系 World[2]を利用して歌唱音声を基本周波数(F0)、スペクトルおよび非周期性指標に分解します。次に、F0 およびスペクトルを熱唱音声に変換するためのネットワークを深層学習により推定します。非熱唱音声が与えられたとき、F0 とスペクトルを学習済みネットワークによって変換し、元の非周期性指標と合わせて再合成し、熱唱音声を得ます。

実験には R を利用し、深層学習フレームワークとして RSNNS[3]を利用しました。学習・評価データは 11 名が日本語のポピュラーソングを「熱唱」「非熱唱」の 2 通りで歌唱した音声で、それぞれ 3~5 秒程度の音声を切り出して使っています。スペクトルの変換には通常が多層ニューラルネットワーク、F0 の変換にはエルマン型のリカレントニューラルネットワーク(RNN)を利用しました。

評価実験を行い、スペクトルの変換はあまり効果がなく、F0 の変換はやや効果あり、という結果が得られました。本研修の成果は、2018 年 3 月の電子情報通信学会総合大会の学生ポスターセッションで発表しました[4]。

### 3. 所感など

工学部電気情報物理工学科には教育用計算機がありますが、主に演習用であり、今回のように一つのジョブに数時間を要する計算には向いていません。研究室所有の計算サーバにも空きがなく、今回のスーパーコンピュータ無償提供利用制度は大変助かりました。関係各位に感謝申し上げます。



参考文献

1. R. Daido, M. Ito, S. Makino and A. Ito, “Automatic evaluation of singing enthusiasm for karaoke”, *Computer Speech and Language*, Vol. 28, No. 2, pp. 501-517, 2014
2. M. Morise, F. Yokomori, and K. Ozawa. “WORLD: a vocoder-based high-quality speech synthesis system for real-time applications.” *IEICE TRANSACTIONS on Information and Systems* 99, no. 7 (2016): 1877-1884.
3. C. N. Bergmeir and S. J. M. Benítez, “Neural networks in R using the Stuttgart neural network simulator: RSNNS,” *Journal of Statistical Software*, 2012, Vol. 46, No. i07, 2012.
4. 早坂、伊藤:「RNN を用いた FO 操作による歌唱音声の熱唱化の検討」,電子情報通信学会 2018 年総合大会、2018-3.

## [報告]

**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**

スーパーコンピューティング研究部 滝沢寛之

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)、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN) および NEC のご協力を得て、2018 年 3 月 22 日 (木)～23 日 (金) に高性能計算に関する国際ワークショップ「第 27 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。

本ワークショップは、文部科学省研究振興局計算科学技術推進室 澤田和宏室長補佐による我が国の HPC 政策に関するご講演で始まり、我が国の高性能計算基盤の整備・運用状況と、「FLAGSHIP2020 Project」と呼ばれるポスト京コンピュータの研究開発事業がユーモアを交えながら紹介されました。

技術講演として 30 件の発表があり、日本、ドイツ、ロシアの研究者により、HPC 技術動向、HPC システム評価、アプリケーション開発の幅広い分野のトピックの講演がありました。HLRS の Resch 氏からは、HLRS、ドイツ、およびヨーロッパ全体における高性能計算基盤の整備状況・計画に関する講演がありました。モスクワ州立大学の Voevodin 氏からは、高性能計算で用いられるアルゴリズムの Wikipedia である AlgoWiki を構築するプロジェクトに関する講演がありました。理研の坪倉氏からは、階層的な非構造格子を用いた数値流体シミュレーションに関する講演がありました。また、ドイツ気候計算センターの Ludwig 氏からは、気候シミュレーションで求められる大規模並列計算に再現性がない問題に関する講演がありました。さらに、東北大学サイバーサイエンスセンター運営に多大な功績のあった岩崎俊樹氏にサイバーサイエンスセンター顕彰が授与され、台風進路予測シミュレーションの過去、現在、未来に関する記念講演が行われました。

東北大学の河合氏からは航空機周りの高レイノルズ数の数値流体シミュレーションに関する講演、同じく東北大学の佐野氏からは再構成可能デバイスを用いた高性能計算に関する講演がありました。また、京都大学の深沢氏からは、電磁流体力学シミュレーションを多様なスーパーコンピュータで高効率に実行する研究、山梨大学の山本氏からは乱流の世界最大級直接数値シミュレーションに関する研究の報告がありました。さらに NEC から発売になったばかりの新製品である NEC SX-Aurora TSUBASA に関する紹介や、その性能評価結果の報告がありました。共同主催者である HLRS、サイバーサイエンスセンター、JAMSTEC からも最新の HPC 技術開発状況と将来計画についての講演がありました。その他、WSSP の詳細は web ページ <https://www.sc.cc.tohoku.ac.jp/wssp27/ja/index.html> をご覧ください。



文部科学省計算科学技術推進室室長補佐 澤田和宏氏



ドイツ気候計算センターの Thomas Ludwig 氏

## [報告]

## 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

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、本センターを利用し顕著な貢献があった方や、長年にわたり本センターの運営に貢献した方などに対する顕彰制度を設けており、平成 29 年度は、本学の岩崎俊樹教授に功績賞を授与いたしました。

岩崎教授は、平成 14 年度から継続的に本センターと共同研究を実施するなど、シミュレーション技術の高度化に取り組まれており、高度利用技術に関する研究開発において多くの成果を生み出されました。そこで得られた知見は、本センターの大規模科学計算システムの設計に生かされ、同システムの高度化に多大な貢献をされております。また、本センターで導入したスーパーコンピュータシステムの仕様策定委員長をはじめ、各種委員として長年センター運営に多大な貢献をされてきました。

全国共同利用・共同研究拠点である本センターにとって、大規模科学計算システムの潜在能力を最大限に引き出すための高度利用技術に関する研究開発、利用環境の整備、さらにそこから得られた知見を基に次期システムの設計を行うことは極めて重要であり、これらを円滑に推進するためには、大規模科学計算システムを先端科学分野の研究に実際に活用している研究者とシステム設計者であるサイバーサイエンスセンター研究者との協同が必要不可欠です。

表彰式は、平成 30 年 3 月 23 日（金）本センターで開催されていた第 27 回 Workshop on Sustained Simulation Performance の中で行われ、小林広明センター長特別補佐から岩崎教授へ表彰状が手渡されました。また表彰式の後、「Past, present and future of typhoon forecast」と題した受賞記念講演が行われました。



## 『受賞者のコメント』

東北大学名誉教授 岩崎 俊樹

サイバーサイエンスセンター功労賞を授与していただき、たいへんありがとうございます。ユーザーのひとりとして、我がままとを申し述べてきたことを評価していただき、大変恐縮しております。

1998 年に気象庁から東北大学理学研究科に異動して以来、サイバーサイエンスセンター（当時は大型計算機センター）には大変お世話になりました。大型計算機の役割が時代とともに変化する中、サイバーサイエンスセンターは、ユーザーの目線に立ち、高速化や利便性の向上、若手の教育などに努めてこられました。

地球科学のとりわけ気象学の進展は計算機の進歩によるところが大です。日々の気象予測は最も身近な計算科学の成果です。最尤推定のためのデータ同化や力学系の数値解の精度向上を図ることは、今後とも中心的な課題であり続けるでしょう。それに加え、気象分野ではデータ同化や数値予測によって生み出される膨大なデータを有効活用する研究が活性化し、データ科学との連携が重要な課題となりつつあります。東北大学においても、協力してそのような新しい大きな流れを先導していくことを願っています。

## [報告]

**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**

本センターの八巻俊助教が、公益財団法人トーキン科学技術振興財団より、「平成 29 年度トーキン財団奨励賞」を受賞しました。

この賞は、研究内容が独創性、進歩性に富み、かつ難易度、貢献度も高く、具体的な研究成果を得ている若手研究者に贈られるもので、今回、八巻助教の位相限定相関 (POC) 関数の理論的性質を根本的に見直し、方向統計学と POC 関数を用いた信号マッチング技術の理論的な妥当性を明らかにしたことが高く評価され、受賞となりました。

## [報告]

**平成 29 年度サイバーサイエンスセンターセミナー報告**

本セミナーは、学内外の研究者や学生を対象に学内外から有識者をお招きして、情報通信に関する最新技術動向、関連分野の話題、整備・運用経験等の情報提供・知識共有を行うことを目的としています。

昨年度は以下の3件が開催されましたのでご報告いたします。

**第7回サイバーサイエンスセンターセミナー**

テーマ：「中学生のための CG プログラミング講座 — 3D ゲームプログラミングを学ぼう —」

日時：平成 29 年 12 月 26 日 (火)、27 日 (水) 9:00-17:00

会場：東北大学サイバーサイエンスセンター

主催：東北大学サイバーサイエンスセンター先端情報技術研究部

共催：東北大学 電気・情報系 (工学研究科・情報科学研究科・医工学研究科)

協賛：計測自動制御学会 東北支部

後援：情報処理学会 東北支部

講師：吉澤 誠 (東北大学 サイバーサイエンスセンター)

杉田 典大 (東北大学 大学院工学研究科)

八巻 俊輔 (東北大学 サイバーサイエンスセンター)

参加者：17 名

概要：わが国の小中学生の多くは、テレビゲームに夢中になっています。しかし、テレビゲームが高度な情報技術や数学的アルゴリズムに基づいて作られていることを理解している児童・生徒は、残念ながら少ないと思われます。この講座では、テレビゲーム、映画、アニメ、インターネット、バーチャルリアリティなどで多用されているコンピュータ・グラフィクス(CG)の構成方法や CG の基礎となる数学的アルゴリズムを、やさしいプログラミング技術を習得し、楽しみながら理解することで、日本が得意としている CG やテレビゲームを作るための工学技術や情報技術に興味を持っていただくことを目的としています。

この講座に参加することによって、最近問題となっている子供たちの理科離れ・数学嫌い・ものづくりへの無関心を少しでも防ぐとともに、単なるゲーム・オタクになってしまうのではなく、数学的に高度な技能と幅広い文化的教養をもった未来のゲーム・クリエイターの卵が生まれるきっかけができることを期待しています。

### 第8回サイバーサイエンスセンターセミナー

テーマ：「学校無線 LAN セキュア化及び eduroam 参加についての情報交換会」

日 時：平成 30 年 2 月 26 日(月) 15:00-17:00

会 場：国立情報学研究所 1903 会議室

主 催：東北大学サイバーサイエンスセンター

講演者：小田原 尚範（岩手県立遠野高校，代理発表：後藤英昭（東北大学））

尾崎 拓郎（大阪教育大学）

山口 潤（(株)グローバルサイト）

参加者：7 名

概 要：初等・中等教育機関（学校基本法の小学校、中学校、義務教育学校、高等学校、中等教育学校、特別支援学校）における学校無線 LAN システムについて、現在の課題を明らかにするとともに、セキュア化（安全対策，802.1X 対応）を推進するため、適切なシステム設計・構築のための情報提供・交換及び議論を行う。また、これからの ICT 活用教育環境をサポートするのにふさわしいネットワーク基盤を構築するため、国内外の先進事例を紹介の上で、他校や大学、市街地、外国研修先等でのシームレスな無線 LAN 利用を実現する学術系ローミング基盤「eduroam」への参加を促し、情報交換と議論を行う。

### 第9回サイバーサイエンスセンターセミナー

テーマ：「第 27 回 Workshop on Sustained Simulation Performance (WSSP)」

日 時：平成 30 年 3 月 22 日(木) 10:00-17:40

平成 30 年 3 月 23 日(金) 10:00-17:30

会 場：東北大学サイバーサイエンスセンター 講義室

主催/共催：東北大学サイバーサイエンスセンター

海洋研究開発機構（JAMSTEC）

ドイツ・シュトゥットガルト大学高性能計算センター（HLRS）

NEC

協 賛：学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）

HPCI コンソーシアム

参加者：141 名

概 要：高性能計算に関する国際ワークショップ「第 27 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。詳細は、本誌 p. 64 をご覧ください。

## [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/>

## 利用負担金額の表示コマンドについて (No. 252)

本センター大規模科学計算システムでは、利用者の利用額とプロジェクトごとに集計した負担額、請求情報を表示するためのコマンドとして ukakin, pkakin があります。また、利用者のジャーナル情報とプロジェクトごとに集計したジャーナル情報を CSV 形式で出力するコマンド uelist, plist があります。これらのコマンドは、並列コンピュータ (front.cc.tohoku.ac.jp) にログインして使用します。

コマンド名	機 能
ukakin	利用者ごとの利用額を各システム、月ごとに表示
pkakin	プロジェクトごとに集計した負担額、請求情報を表示
ulist	利用者ごとのジャーナルを CSV 形式で出力
plist	プロジェクトごとに集計したジャーナルを CSV 形式で出力

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

負担金の確認

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

(共同利用支援係)

## 大判カラープリンタのご紹介 (No. 252)

本センターでは、大判カラープリンタ (ヒューレットパッカード社, DesignJetT795, DesignJetZ5400ps) を 1 階利用相談室 (平日 8:30~21:00) に設置しており、A0 サイズまでのポスターなどを光沢紙または、ソフトクロス紙に出力することができます。

- ・ 光沢紙用プリンタ： (1 枚 600 円)                      特徴：光沢感があり、色味が鮮明
- ・ ソフトクロス紙用プリンタ： (1 枚 1200 円)              特徴：織り目がつきにくく、持ち運びが容易

利用法は以下をご参照ください。

<http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/service/printer.html>

研究の発表等の際にご活用いただければ幸いです。

(共同利用支援係, 共同研究支援係)

## Gaussian16 のバージョンアップについて (No. 257)

非経験的分子軌道計算プログラム「Gaussian16」のバージョンアップを行いましたのでお知らせいたします。また、Gaussian09 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。

バージョン名 : Gaussian16 B.01  
サービス開始日 : 2018 年 4 月 2 日 (月)  
サービスホスト : front.cc.tohoku.ac.jp (並列コンピュータ)  
実行コマンド : subg16  
                  subg09 (Gaussian09 E.01 用コマンド)

新機能の概要、機能の詳細、実行方法については開発元 Web サイト、およびセンターWeb サイトをご覧ください。

開発元 Web サイト

<http://gaussian.com/relnotes/>

HPC SYSTEMS Gaussian16 製品情報

<http://www.hpc.co.jp/gaussian.html>

センターWeb サイト

<http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/gaussian.html>

(共同利用支援係)

## 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)

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

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

バージョン名 : Mathematica 11.2  
バージョンアップ日 : 2018 年 4 月 2 日 (月)  
サービスホスト : front.cc.tohoku.ac.jp (並列コンピュータ)  
起動コマンド : mathematica (GUI 版)  
                  : math (テキスト版)

新機能の概要、機能の詳細、実行方法については開発元 Web サイト、およびセンターWeb サイトをご覧ください。

開発元 Web サイト

<http://www.wolfram.com/mathematica/new-in-11/>

センターWeb サイト

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

(共同利用支援係)



## 科学技術計算言語 MATLAB のバージョンアップについて (No. 257)

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

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

バージョン名	:	MATLAB R2017b
バージョンアップ日	:	2018 年 4 月 2 日 (月)
サービスホスト	:	front.cc.tohoku.ac.jp (並列コンピュータ)
起動コマンド	:	matlab (GUI 版)
	:	matlab -nosplash -nodesktop -nodisplay (テキスト版)

新機能の概要、機能の詳細、実行方法については開発元 Web サイト、およびセンター Web サイトをご覧ください。

開発元 Web サイト

[http://www.mathworks.co.jp/products/new\\_products/latest\\_features.html](http://www.mathworks.co.jp/products/new_products/latest_features.html)

センター Web サイト

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

(共同利用支援係)

## 平成 30 年度利用負担金について (No. 257)

平成 30 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)

## 平成 30 年度共同研究について (No. 258)

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 10 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	大規模周期構造上に置かれたアンテナの特性解析に関する基礎検討
A-2	越村 俊一	東北大学 災害科学国際研究所	ベクトル型スーパーコンピュータ SX 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	技術士事務所 A I コンピューティング グラボ	リカレントニューラルネットワークによる高解像度流体解析コードの開発

### [B] 一般課題

No.	申請者	所属	研究課題
B-1	河野 裕彦	東北大学大学院 理学研究科	ナノ・バイオ分子の励起状態ダイナミクスと反応動力学シミュレーション
B-2	茂田 正哉	大阪大学 接合科学研究所	プラズマプロセスにおけるナノ粒子群の集団形成および輸送過程の大規模数値シミュレーション
B-3	高橋 俊	東海大学工学部動力機械 工学科	複数移動物体周りの大規模数値シミュレーション
B-4	陳 強	東北大学大学院 工学研究科	高機能な大規模アンテナの電磁界数値解析法に関する研究
B-5	藤井 孝藏	東京理科大学 工学部	マイクロデバイスの新たな利用法に向けた流れの機構解明とデバイス設定ガイドランスの導出
B-6	前田 一郎	三菱航空機株式会社	民間航空機開発における大規模 CFD 解析の適用範囲拡大
B-7	松下 洋介	東北大学 大学院工学研究科	Flamelet approach に基づくガス燃料を対象とした燃焼シミュレーション

(スーパーコンピューティング研究部、共同研究支援係)

## 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. 258)

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、無料で大規模科学計算システムを利用できる制度を用意しております。提供の対象は、大学院・学部での講義実習等の教育目的(卒業論文、修士論文、博士論文での利用を除く)に限ります。利用を希望される場合は以下の情報を添えて、講義開始の 2 週間前までに edu-prog@cc. tohoku. ac. jp 宛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)
- ・ センター端末機室等での実習利用希望の有無 (必要であれば予定日時)
- ・ 講師派遣の希望の有無
- ・ 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
- ・ 居住性チェックリストの提出 (受講者に外国人が居る場合)  
参照: <http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/utilize/index.html#外国人利用者>
- ・ 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. 258)

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. 258)

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

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

今年、平成30年度は、昭和44年4月に東北大学大型計算機センターが大学の教員、その他の研究者が学術研究等のために利用する全国共同利用施設として設置されてからちょうど50年目になります。この機会に50年間の記録する資料集の編纂に取り掛かっていますが、片平から平成6年12月に青葉山の新棟に移転してから23年が経ち、それ以前を知る職員が私を含めてごくわずかになっていました。また、平成13年度に情報シナジーセンター、平成18年度に情報シナジー機構情報シナジーセンター、そして平成20年度からサイバーサイエンスセンターへとたびたび改組してきたための複雑さや、学内の総合情報システム運用センターが平成8年度から設置されていたことも、軌跡をわかりにくくしているようです。将来の発展に向かって考えていくためには過去にとらわれてはいけなと思います。大型計算機から大規模科学計算システムへの変遷やサービスの発展の足跡を知るとは今後の計画に多少でも参考になると考えており、今の機会にやっておかなくてはと思っております。

23年前に移転したころ、本センターは青葉山キャンパスのはずれに位置し、正面にはゴルフ場がありました。ゴルフ場跡に青葉山新キャンパスが整備されて周囲を多くの建物に囲まれるようになり、地下鉄駅や施設が次々にできて、すっかり風景が変わりました。時代はどんどん進んでいくものですね。(H.S)

早いものでもう新年度が始まります。年を追うごとに1年が過ぎるのが早くなる時いたことがあります。まさに実感しているところです。毎日だらだらと過ごしている自分にも嫌気がさしてきたので、私事ですが今年度いくつか目標をたててみました。

- ・貯金(お酒や趣味への出費を減らしたい)
- ・健康(月1ペースで風邪をひくほど貧弱なため)
- ・肉体改造(風呂上り鏡を見る度ビール腹がひどいので)

特に目標だてするような内容ではないかもしれませんが、宣言することでモチベーションが上がります。皆様も、何か目標設定してみてもいいでしょうか。(T.Y)



開発中の青葉山キャンパス

### 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

平成30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	1～1,024	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.51 No.2 2018-4

## [共同研究成果]

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 1 菊池 範子
Building-Cube Method を用いた翼胴形態の RANS 解析	牧野 真弥 11 三坂 孝志 大林 茂 佐々木大輔
直接数値解析による平面ポアズイユ流の乱流縞形成の研究	塚原 隆裕 22 猪岡 翔

## [お知らせ]

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	31
------------------------------	----

## [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	32
アプリケーションサービスの紹介	39
三次元可視化システムの紹介	58

## [報告]

＜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 62
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 64
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	66
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	67
平成 29 年度サイバーサイエンスセンターセミナー報告	67

## [Web 版大規模科学計算システムニュースより]

利用負担金額の表示コマンドについて (No.252)	69
大判カラープリンタのご紹介 (No.252)	69
Gaussian16 のバージョンアップについて (No.257)	70
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)	70
科学技術計算言語 MATLAB のバージョンアップについて (No.257)	71
平成 30 年度利用負担金について (No.257)	72
平成 30 年度共同研究について (No.258)	74
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)	75
民間企業利用サービスについて (No.258)	75
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)	76

執筆要項	77
------	----

スタッフ便り	78
--------	----