

東 北 大 学 サイバーサイエンスセンター

大規模科学計算システム広報

SENAC

Vol.52 No.2 2019-4



Cyberscience Center

Supercomputing System Tohoku University

www.ss.cc.tohoku.ac.jp

大規模科学計算システム関連案内

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

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

階	K. 🕁 k	電話番号(内線)*	ナかけ 1827中央	サービス時間
陷	係•室名	e-mail	主なサービス内容	平日
	利用相談室	022-795-6153(6153) sodan@cc. tohoku. ac. jp 相談員不在時	計算機利用全般に関する相談	8:30~17:15
		022-795-3406 (3406)	大判プリンタ、利用者端末等の 利用	8:30~21:00
一階	利用者談話室	(3444)	各センター広報の閲覧 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
	総務係	022-795-3407(3407) som@cc.tohoku.ac.jp	総務に関すること	8:30~17:15
三階	会計係	022-795-3405(3405) kaikei@cc.tohoku.ac.jp	会計に関すること、負担金の請求に関すること	8:30~17:15
	共同利用支援係 (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トロン式計算機の名前でSENAC-1(SENdai Automatic Computer-1)からとって命名された。

「巻頭言]

センター長就任のごあいさつ

で紹 拓夫 東北大学サイバーサイエンスセンター

平成31年4月1日より、サイバーサイエンスセンター長に就任いたしましたので、一言ご挨拶させていただきます。

まず私事で恐縮ですが簡単に自己紹介をさせていただきますと、私は、平成22年10月に、東北大学電気通信研究所から本センターに着任し、それ以来8年間、情報通信基盤研究部に所属し、主に統合電子認証システムや全学メールなど、学内情報基盤・サービスの企画・運用支援を担当してまいりました。本センターに勤務する以前は、センターとの関わりは薄かったのですが、少し年代を遡ると、私が学位を取得した千葉工業大学の情報工学科は、本センターの前身である東北大学大型計算機センターの初代センター長を務められてその後千葉工大に移られた、大泉充郎先生の多大なご尽力により創立された学科であるとお聞きしています。また学部時代は、本センターとも深く関わりがありその後千葉工大に移られた城戸健一先生の研究室に学び、さらに大学院時代には、野口正一先生の研究室出身の先生の研究室に在籍して、ネットワークの研究に従事しました。千葉という遠い地で、本センターと関連の深い先生方の下で育てていただきました。この度のセンター長着任も何かのご縁以上の強い結びつきを感じずにはおられませんが、これまでのご恩返しをするつもりで精いっぱい努めてまいりたいと思います。

さて、本センターは、大型計算機センターが 1969 年に設置されて以来、今年で 50 周年を迎えます。その間、平成 13 年の情報シナジーセンターへの改組を経て、平成 20 年の発展的改組により現在のサイバーサイエンスセンターとなりました。現在の形となって 10 年が経過しましたが、センター長としての小林広明先生、曽根秀昭先生の強いリーダーシップの下、大規模科学計算システムの利用と研究をサポートする体制を整え、また、その役割を高度化するために共同利用・共同研究拠点などとしてサービスを広く提供して、大規模計算科学の多くの研究者の皆様方の研究活動をご支援させていただいてきました。現在、本センターの第 3 期中期目標・中期計画期間 (2016 年~2021 年) における目標として以下を掲げ、センター業務の運用や研究開発を推進しています。

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

これらの目標を引き継ぎ、特に大規模科学計算機資源としては、スーパーコンピュータ SX-ACE と並列コンピュータ LX 406Re-2 の運用を通じて、一般のコンピュータよりも 2~3 けた上の計算能力をどなたの研究にも利用しやすく提供するという使命を継承しつつ、世界最先端の大規模科学計算システムの整備・運用・応用の支援に関する研究開発を推進してまいります。また、学内情報基盤については、安定的に運用が可能になった学内ネットワークインフラ上で、情報基盤をいかに活用して研究・教育や大学運営をより充実させるかといった応用の視点で、クラウド化や BYOD、ディジタルトランスフォーメーションなどの時代の流れに対応しつつ、情報セキュリティ等の喫緊の課題を解決しながら、情報基盤の整備と人材育成に取り組んでまいります。

本センターが我が国をリードする優れたサービスを提供し、本学内外の関係者の方々、とくに本センターを利用される方々のご期待に応えられるよう全力で取り組んでまいりますので、今後ともご支援とご指導を賜りますよう、よろしくお願い申し上げます。

[共同研究成果]

リアルタイム津波浸水被害予測の全国展開に向けた検討

越村俊一·阿部孝志:東北大学災害科学国際研究所 井上拓也:東北大学大学院工学研究科、国際航業株式会社

撫佐昭裕:東北大学サイバーサイエンスセンター、NEC

村嶋陽一・鈴木崇之:東北大学災害科学国際研究所、国際航業株式会社

太田雄策・日野亮太:東北大学大学院理学研究科 佐藤佳彦:NEC ソリューションイノベータ株式会社

加地正明:株式会社エイツー

小林広明:東北大学大学院情報科学研究科

巨大津波発生直後のきめ細かな津波情報や、迅速な被害情報の推計・把握と配信を通じて被災地を支援し、災害に対するレジリエンス(回復力)の向上と我が国の国土強靱化に資する、リアルタイム津波浸水被害予測システムを構築し、内閣府の津波浸水被害予測システムとして 2017年11月より運用を開始した。本稿では、リアルタイム津波浸水被害予測システムの全国展開に向けた計算リソースの検討を行った。10分以内の 30m 格子での全国リアルタイム津波浸水予測には 140Tflop/s 程度の計算性能が必要であることが分かった。

1. はじめに

巨大災害後の災害対応や救援活動において最も重要なことの一つは被害の全容把握である。地震や津波災害といった巨大災害の発生直後は、激甚な被害を受けた地域からの情報が断片的となり、被害全容の把握がきわめて困難になるとともに、被災地の救援活動や復旧活動も難航する。著者らは、2011 年東北地方太平洋沖地震津波災害の教訓を踏まえ、効果的な災害対応、被災地の救援を目的として、リアルタイム津波浸水被害予測システムを構築した。

本稿では、リアルタイム津波浸水被害予測システムの全国展開に向けた検討結果を報告する。 具体的には、著者らが開発した津波解析モデルの効率化を、スーパーコンピュータの潜在能力を 引き出すためのベクトル化・並列化の観点から実施し、全国沿岸への適用のために計算領域の系 統的な自動設定手法を検討する。ケーススタディとして、解像度 270 m、90 m、30 m で、10 分以 内に全国即時津波浸水予測を完了するために必要となる計算機リソースを検討する。なお本稿は、 井上ら[1]の結果の概略を述べるものであり、詳細については原著論文を参照されたい。

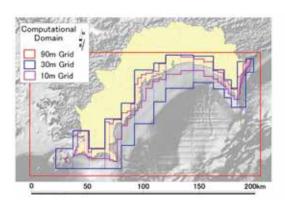
2. 津波解析モデルの最適化

ここでは、井上ら[1]による多角形領域接続・MPI 並列津波解析モデル(以下、「本モデル」と呼ぶ)を利用して検討を行う。本モデルは、平面 2 次元非線形長波理論及び有限差分法による、世界的に用いられている TUNAMI (Tohoku University Numerical Analysis Model for Inundation) コード(既報)[2]に基づく。解析領域及びネスティングの形状を従来の矩形から多角形に拡張し、高精度解析の対象地域を津波の遡上しうる沿岸域に限定することで、解析格子数を削減し安定条件を緩和した、特に広域津波解析で効率的なモデルである。多角形領域は、矩形の「ブロック」を積み重ねることで表現する(図-1 左)。 本モデルでは TUNAMI コードに対して解析領域形状のみを複雑なものに拡張し差分スキーム等は変更していないため、解析精度に関して高知市を対象としたケースでは、対象沿岸域の津波解析結果が従来の矩形モデルによるものと概ね同様となることが分かっている。

本研究では、高性能計算資源として東北大学サイバーサイエンスセンターの運用するベクトル型スーパーコンピュータ SX-ACE を使用した。SX-ACE はメモリ集約的な津波解析コードの実行

で高い性能を発揮することが明らかにされている[3]。また、恒常的に稼働率の高い高性能計算資源にあって、災害時に緊急ジョブにより稼働中のジョブをサスペンドし、防災上重要なプログラムのために優先的にリソースを確保できることも、即時津波予測技術の実用化に向けた強みである。

本モデルにおけるブロック及び MPI 領域分割手法は、津波解析領域の外側計算ループ(南北方向)を複数のブロックに 1 次元的に分割し、さらにブロック内の外側計算ループを MPI 領域分割(プロセスごとに割り当てる解析範囲を設定)することを基本とする。そして、内側計算ループ(東西方向)の演算はベクトル実行する。ブロック及び MPI 領域の分割が 1 次元的であり、高知県沿岸のように海岸線が東西方向へ延び、複数の岬(潮岬及び室戸岬)が海へ張り出すような地形条件に対しては大水深の地域を避けて多角形解析領域のブロックを南北に積み上げられないため、東西・南北方向を転置して解析を実施できるよう機能拡張されている(図 1 左)。



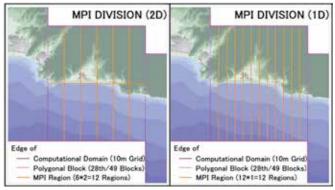


図1 高知県津波予報区を対象とした多角形領域設定(左)と MPI 領域分割(右:2次元・1次元)の概略。左図の実線は多角形解析領域端を、点線は東西方向ブロック分割位置を表す。ここでは東西・南北方向が転置されている。右図は、左図の10m格子領域(ピンク実線)において西から28個目のブロック周辺を拡大した図であり、2次元的なMPI 領域分割において南北のMPI 領域で海域(青)・陸域(緑)の格子数にインバランスが生じている。

高知県津波予報区に対する空間解像度 10 m の津波浸水解析を対象に、まずベクトル演算の効率化を行った。SX-ACE のベクトル演算においては一度に 256 データ(解析格子)を対象に計算を行うことができる。条件分岐式(if 文)が存在する場合、真偽両方の場合を計算し、後で真となる場合の結果を採用するマスク処理が行われる。従って、条件分岐式が少ない方が総演算量が少なくなる。そこで、解析実行時間の 90%以上を占める運動方程式の演算において、各格子の浸水判定を行っている複雑な条件分岐式を整理し、より少ない分岐で同様の処理を実行できるよう改良した。

MPI 領域分割手法に関しては、2次元から1次元に変更した。2次元平面の解析領域を1次元的にMPI 領域分割する場合、一般に、並列数が大きくなると隣接プロセスと情報通信する必要のある境界格子が多くなり効率が低下するので、2次元的なMPI 領域分割により境界格子を減らす工夫がなされる。本モデルでは1次元的なMPI 領域分割を基本とするが、大規模並列時のMPI 領域分割の自由度を高めるため、計算の内側ループを外側ループに比較して粗く分割する2次元分割を採用した(図1右、2次元)。井上ら[1]で報告されている通り、128ノード(512並列)による6時間積分の実行時間は315秒と、10分以内のリアルタイム性を十分確保できている。

しかし、本モデルでは計算の内側ループが海岸線に直交する方向となるよう設計されているため、南北の MPI 領域で海域・陸域の格子数に大きなインバランスが生じるブロックが存在しうる。一般に、津波浸水解析では海域格子の方が計算負荷が高いので、外側ループのみを 1 次元的に分割することにすると(図 1 右)、上述のベクトル演算の効率化も含めて、実行時間は 270 秒に削減

できた(約14%削減)。これは、プロセスごとの海陸格子のインバランスが緩和するだけでなく、同じ空間解像度の解析領域内でのMPI通信相手も減ることが理由として考えられる。

計算の外側ループや内側ループにおいて MPI 領域ごとの幅を変化させる不等分割機能も実装し性能を検証したが、最適な MPI 領域分割位置はブロック形状や使用リソース量(プロセス数)だけでなく、海陸格子の配置や波源モデルごとに異なる浸水程度にも依存しうることが分かった。様々な地形条件に対して最適な MPI 領域分割位置を得るスキームについては、今後の課題である。ここでは、ばらつきが小さく常に一定程度のパフォーマンスを得られることを重要視し、純粋な1次元 MPI 領域分割を採用することとした。

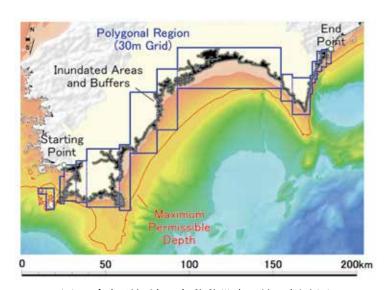


図2 多角形領域の自動動設定手法の概略図

全国沿岸での多角形領域の設定を効率的かつ系統的に実施するため、領域の自動設定手法を提案する(図2)。以下に手順(ルール)を示す。この手法により、系統的なルールの下で並列実行が効率的となる多角形領域を自動設定できた。

- A) 空間解像度 Δx を定める。
- B) 評価対象地域の地形条件(海底勾配の大小)を考慮し、 Δx に対して安定条件を満たし、整数 倍して 1 秒となる計算時間間隔 Δt を定める。
- C) 安全率 α を定め、 Δt を α で割った場合でも安定条件を満たす許容最大水深 Hmax を算定する。
- D) 沖側接続位置は、Hmax を満たす中で極力沖側に設定する。
- E) 陸側接続位置は、汀線あるいは空間解像度が一段階高い領域における Hmax の等深線に対する 30 格子幅のバッファより沖側とする。
- F) 浸水評価対象とする遡上域は、南海トラフの巨大地震モデル検討会[4]の最大浸水範囲に設定 した 30 格子幅のバッファを包含するよう決定する。
- G) 開始・終了点を与える(評価対象範囲を指定)。
- H) 上記ルールを満たし、ブロック数を最小化しブロック幅が最大化されるブロック位置を探索・設定し、その集合として多角形領域を設定する。

3. 全国展開に向けた適用性検討

南海トラフの巨大地震モデル検討会[4](以下「既往検討」と略記する)で評価された沿岸全域に対して10分以内の津波解析を実行するための所要リソースを、空間格子間隔270m、90m、30mの複数解像度で算定した。

解像度 270 m 及び 90 m の解析は UTM53 帯で全国一律に実施した。解像度 30 m の解析は津波 予報区と座標系の組み合わせごとに平面直角座標系で実施した。既往検討の評価範囲に含まれる 津波予報区は 37 区であるが、伊勢・三河湾は平面直角座標系 VI 系と VII 系に、奄美群島・トカラ列島は I 系と II 系にまたがるため、解析領域数は計 39 となった。本研究では、既往検討で堤防が地震発生 3 分後に破壊するシナリオの結果が提供されている神奈川県三浦半島から鹿児島県佐多岬までの計 21 領域を解析対象とした(表 1、「津波予報区」列を参照)。積分時間は地震発生から 6 時間とした。

既往検討で水位時系列情報が提供されている沿岸海域の観測点における、最大津波高(初期水位からの水位変動の最大値)に関する K-κ値(比の対数の平均と標準偏差)を評価し、多角形領域設定による計算結果と、多角形ブロックの最大包絡として得られる矩形領域設定による計算結果を比較した(図-3)。精度検証は、解像度 30 m の場合のみ実施した。

各解析に対して実行時間を 10 分以内に収めるために必要となる SX-ACE のノード数を 2 の冪乗単位を基本として評価し、所要ノード数に 1 ノードあたり浮動小数点演算能力である 276 Gflop/s を掛けて計算コストを見積もった。解析しない 18 領域については、井上ら[1]の解像度 10mでの算定結果を利用して、重み付けをすることにより全領域のコストを概算した (表 1)。

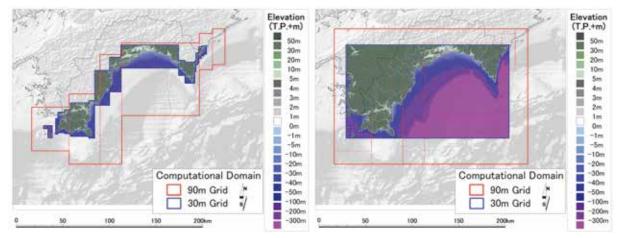


図3 多角形領域設定と矩形領域設定の概略図(高知県)。左:多角形領域設定、右:多角形ブロックの最大包絡としての矩形領域設定(点線は上の多角形ブロック)。

表1空間解像度30mにおける精度検証及び計算コスト算定の結果表。	右2列は既往検討での
空間解像度 10 m の矩形領域に対する井上ら[1]の計算コスト算定結果(-	一部修正加筆)。

	津波予報区							或設定・		
番号		精度検証		計算コスト算定			空間解像度10 m			
		幾何平均 K	幾何 標準偏差 ĸ	サンプル 数	所要 ノード数	計算 時間間隔 △t [s]	総格子数 [Mil.]	総プロ ック数	解析 領域数	所要 ノード数
8	相模湾・三浦半島	1,001	1,005	9	- 8	0, 25		1.1	6	176
9	静岡県	1.001	1,018	39	16	0.20	12.1	16	20	496
10	愛知県外海	1.007	1.008	4	8	0.50	8.0	10	3	32
11-1	伊勢・三河湾(愛知)	1.002	1.004	20	. 8	0.50	9.6	10	13	144
11 - 2	伊勢・三河湾 (三重)	1.000	1.004	7	8	0.50	10.5	8	10	144
12	三重県南部	1.008	1.018	21	16	0, 25	10.9	12	10	216
13	兵庫県瀬戸内海沿岸	1.005	1.007	22	16	0, 25	14.0	. 8	9	144
14	淡路島南部	1.003	1.004	9	16	0.25	9.8	6	4	96
15	大阪府	1.001	1.004	13	4	0,50	7.8	8	4	64
16	和歌山県	0.999	1.013	25	16	0, 25	10.4	14	9	240
17	岡山県	1.007	1.009	17	16	0.25	12.3	9	9	136
18	広島県	1,006	1.014	33	16	0, 25	15.2	15	15	232
19	香川県	1.006	1.012	28	16	0.25	12.0	14	11	168
20	愛媛県瀬戸内海沿岸	1.014	1.015	36	16	0.25	17.4	14	23	440
21	爱媛県宇和海沿岸	1.002	1.005	22	16	0.25	10.4	9	6	128
22	徳島県	1.000	1.003	16	16	0.25	10,0	8	7	136
23	高知県	0.996	1.016	30	16	0.50	10.5	28	17	384
28	大分界瀬戸内海沿岸	1.000	1,006	27	- 8	0.50	10.1	11	9	112
29	大分県豊後水道沿岸	1.000	1.002	10	. 8	0.50	9.4	12	5	88
30	宮崎県	0.987	1.038	29	8	0.50		16	11	144
31	鹿児島県東部	0.992	1,035	8	4	0.50	7.6	7	4	56
-	その他地域	_	=	_	262	-	_	=	195	3720

全体・合計 1.002 1.017 425 518

※その他地域における所要ノード数は、矩形領域設定・空間解像度10 mの結果より。全体の約51 %と概算 ※Κ (幾何平均) ・κ (幾何標準偏差) の算定における比は、「矩形領域設定の結果/多角形領域設定の結果」と定義

表 1 に、津波予報区ごとの精度検証結果(K- κ 値)及び計算コスト算定結果(所要ノード数と計算時間間隔、領域情報)を示す。前述の算定手法に基づき、計 39 領域に対して、10 分以内のシミュレーション完了のためには 518 ノード(140Tflop/s 程度)必要であることが分かった。

精度検証結果については、全ての領域において K-κ 値の両方がほぼ 1 となった。すなわち、神 奈川県の三浦半島から鹿児島県の佐多岬に至る、多様な地形条件を含む広域沿岸において、多角 形領域接続モデルによる結果が従来の矩形領域モデルとほぼ同じとなることが示された。全領域 に対する最大津波高の散布図を図 4 に示す。

解像度 30m の解析により、本モデルでの並列化効率(1 プロセスの単体解析に対する所要時間 削減率を並列数で割った値)の観点において以下の 2 種類の地域が存在することが明らかになった(図 5)。

- A)ブロック数が多く多角形領域形状が複雑であり、低並列数で低効率(例:高知県、図3左) B)ブロック数が少なく多角形領域形状が単純であり、低並列数でも高効率(例:淡路島南部、 図6)
- 8 ノード(32 並列)の場合には、高知県の並列化効率が低く淡路島南部の方が所要時間が短いが、並列数を増やすと計算時間間隔 Δt が大きい高知県の方が所要時間を短くできた。すなわち、複雑な領域形状により Δt を大きく取れることが、本モデルが効率的であることの主要因であるが、複雑な領域形状とすることは特に低並列数において並列化効率とトレードオフの関係にあるので、求められる解析時間と地形特性を考慮し、適切な Δt 、多角形領域、使用計算リソース量の設定が必要となる。

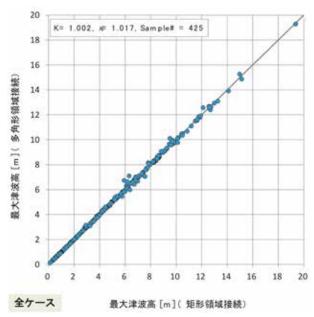


図4最大津波高解析結果の散布図による比較検証

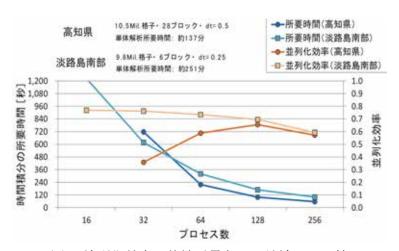


図5 並列化効率の特性が異なる2地域での比較

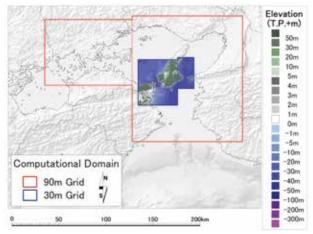


図6 多角形領域設定の概略図(淡路島南部,沿岸域)

4. まとめ

リアルタイム津波浸水被害予測システムの全国展開を目指し、計算領域接続・MPI 並列モデルをベクトル化・並列化両方の観点から最適化し、約 14 %の効率化を達成した。また、計算領域の自動設定手法を提案し、この手法による多角形領域設定を用いる場合、従来の矩形領域設定による津波解析結果と概ね同じ結果が得られることを、神奈川県から鹿児島県にかけての広域での解像度 30m の津波浸水解析により検証した。

ベクトル型スーパーコンピュータ SX-ACE を用いた 2 次元非線形長波理論による津波解析を空間解像度 270m、 90m、 30m で実施し、6 時間分の浸水被害予測を 10 分以内で完了するためのリアルタイム津波解析の計算コストがそれぞれ 2、10、140 Tflop/s 程度となることを明らかにした。空間解像度 10m での全国即時津波浸水予測には東北大学サイバーサイエンスセンターの運用する SX-ACE 全 2,560 ノード程度が必要であると評価されているが[1]、解像度 30 m で必要となる計算コストはこの 1/5 程度であり、解像度 30 m であれば概略的な全国即時津波浸水予測・被害推定が実用化可能であることが示された。解像度 90 m の場合は、同じリソースでさらに概略的な全国一律の即時解析を 10 シナリオ程度、270 m であれば 100 シナリオ程度実行可能であることが実証できた。

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指導と協力をいただいた。基礎研究に際しては、JSTのCREST(グラントナンバーJPMJCR1411)の補助を受けた。ここに記して謝意を表する。

参考文献

- [1] 井上拓也, 阿部孝志, 越村 俊一, 撫佐 昭裕, 村嶋 陽一, 小林 広明, 多角形領域接続・MPI 並列津波解析モデルの複数解像度における全国津波解析への適用性検討, 土木学会論文集 B2(海岸工学), 73 巻, 2 号, I 319-I 324, 2017.
- [2] 越村俊一,阿部孝志,撫佐昭裕,村嶋陽一,鈴木崇之,井上拓也,太田雄策,日野亮太,佐藤佳彦,加地正明,小林広明,スーパーコンピュータによるリアルタイム津波浸水被害予測, SENAC Vol. 51, No. 1、2018.
- [3] Musa, A., H. Matsuoka, O. Watanabe, Y. Murashima, S. Koshimura, R. Hino, Y. Ohta, H. Kobayashi, A Real-Time Tsunami Inundation Forecast System for Tsunami Disaster Prevention and Mitigation, The International Conference for High Performance Computing, Networking, Strage and Analysis (SC15), Austin, Texas, Nov. 2015.
- [4] 南海トラフの巨大地震モデル検討会:第二次報告, 2012 http://www.bousai.go.jp/jishin/nankai/taisaku/pdf/20120829 2nd report01.pdf

[共同研究成果]

直接数値解析による環状流路ポアズイユ流の亜臨界遷移の研究

一壁乱流遷移における局在乱流パターン形成の解明に向けて 一

塚原 隆裕[†]• 石田 貴大[‡]

- †東京理科大学 理工学部 機械工学科
- ‡宇宙航空研究開発機構 航空技術部門

円管内や平行平板間などの壁乱流に見る亜臨界遷移、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。近年は、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)により、直接数値シミュレーション(DNS)を用いたアプローチが可能となってきた。本研究では、圧力勾配駆動の二重円管内環状ポアズイユ流を対象にして、乱流維持の最小臨界レイノルズ数付近で観察される層流-乱流共存パターンに着目することで、パターン形成の有無と変化の連続性を明らかにすることを目指した。特に、円筒比およびレイノルズ数依存性の調査により亜臨界遷移現象の普遍性を検討している。

1. 緒言

現在の流体工学関連の"ものづくり"では、模型実験に先立って CFD (数値流体力学) シミュレ ーションにより設計指針を立て、機器形状や運転条件の最適化をある程度まで図ることが一般的 な開発プロセスになっている. 計算機環境と CG 技術の進歩によって益々, CFD 解析の担う役割・ 場面は増えてきたが、依然として予測困難の現象が層流-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変化が規則的または緩やかなため予測も比較的容易 である。しかし、航空機の気流や発電プラントの冷却材循環系など、様々な流体流れの多くは乱 流状態にある、微細な乱流渦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格段に促進される.これが機器性能に直結す るため、問題となる流れが層流と乱流のいずれであるかを予測し、伝熱量などを見積もることは 工学的に非常に重要である.よく教科書では、円管内流れの臨界レイノルズ数(一解釈として"層 流⇔乱流が切り替わる無次元流速の閾値") は 2000 や 2300 [1-4]と明記されているが, これは飽く までも経験則であり、数学的または物理学的な裏付けに乏しい、実際、撹乱条件や入口形状の影 響[5-7]を受ける上に、異なる流動形態(例えば矩形管やクエット流)になれば臨界レイノルズ数 が大きく変わり未知であることも多い. 最近では、後述する大規模な層流-乱流共存パターンを伴 う場合には臨界値が下がることが, 本研究を含め最新の実験や DNS によって明らかにされてきて いる[8-12]. しかし、そのパターン形成を十分に捉えるには巨大な水路や計算領域を要求されるた め、大型並列計算機の利用は避けられない.

以上のように、乱流遷移の解明は未だに困難な課題であるが、より厳密な最小臨界レイノルズ数(あるいは乱流維持限界)の特定を目標に、直接数値シミュレーション(DNS)を用いた研究を行っている。本研究対象は二重円筒間を圧力勾配により駆動されて流れる、いわゆる環状ポアズイユ流とした。当該系は、規範的(カノニカル)な流れとして古くから乱流および遷移現象の研究対象として扱われている円管内流と平行平板間流において、その中間的な流路形態に相当するものである。内外円筒の半径比に応じて円管内流または平行平板間流に漸近することから、異なる流路形態に見るそれぞれの遷移過程を統一的に説明できる可能性を有した場である。以下に、円管内流と平行平板間流の先行研究と本研究目的を記す。

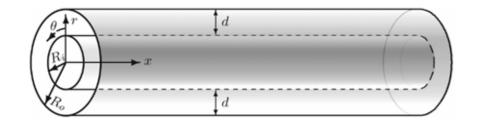


図 1 解析対象の環状ポアズイユ流. x 方向に一定の平均圧力勾配を課して、流れを駆動している. 円筒座標系 (x,r,θ) において、各方向速度成分を (u_x,u_r,u_θ) と定義する. 主流方向 (x) には周期境界条件を課している.

壁面せん断流れの乱流遷移は亜臨界過程(線形安定性理論に基づく臨界値よりも低いレイノルズ数で生じる,有限撹乱誘起の乱流遷移過程)でよく特徴づけられ,最小臨界レイノルズ数付近では乱流と層流状態が空間的に同時に現れる層流-乱流共存パターンが発生し,最近では有向パーコレーションの普遍クラスとの関連も示唆されている[13-16]. パターンは流路形態に依存して,流れ方向に局在化した一次元的構造である乱流パフが円管内流[1,7,17,18]で,層流-乱流界面が主流に対して傾きを有する縞状の二次元的パターンが平行平板間流[8-16]で生じることが知られている. いずれの層流-乱流共存パターンも,流路代表長さ(直径またはチャネル幅)に比べて数十倍~数百倍のスケールを有し,最小臨界レイノルズ数を下回るまで支配的な構造となっている. 各構造のメカニズムは乱流パフ[19]と縞状パターン[20]のそれぞれについて議論が進められている. 円管と平行平板間の本質的差異はスパン(円周)方向自由度の有無と曲率の影響にあると考えられる. そして,スパン方向空間領域の制限度合によって乱流パフと縞状パターンの異なる形状間で変化するものと推測される. しかし,既存研究では個々の系に対する調査に限られており,パターンの維持機構の流動形態依存性及びパターン形状の変化過程が明らかではない.

本研究では、乱流パフと縞状パターンを繋げ得る同心二重円筒間(図 1 を参照)の環状ポアズイユ流を用いることで、円筒比依存のパターン形成(図 2)とパターン変化の連続性について調査した。層流—乱流共存パターンは大規模なスケールで生じるため、東北大学サイバーサイエンスセンター保有のベクトル計算機 SA-ACE を利用し、大規模計算領域による DNS を実施した。

2. 解析対象と計算手法

解析対象は、図 1 のような同心二重円筒間の環状ポアズイユ流れで、軸方向に一様な圧力勾配が付加されることで流れは駆動される.重要な幾何学パラメータである円筒比 $\eta=r_i/r_o$ (r_i : 内円筒半径, r_o :外円筒半径)を変えることで、周方向に閉じた系としてスパン方向長さが決定される.特に $\eta\to 0$ の場合は事実上、円管内流のものに似た流路となり、 $\eta\to 1$ では平行平板間流に漸近する.内外円筒半径差は d とする.

支配方程式は、円筒座標系での非圧縮性流体の連続の式とナビエ・ストークス方程式であり、

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u}$$
 (2)

ここで、 \mathbf{u} は速度ベクトル、 ρ は密度、v は動粘度、p は圧力である.空間的離散化に有限差分法を用いた.時間的離散化に二次精度 Crank-Nicolson 法と二次精度 Adams-Bashforth 法を用いた.

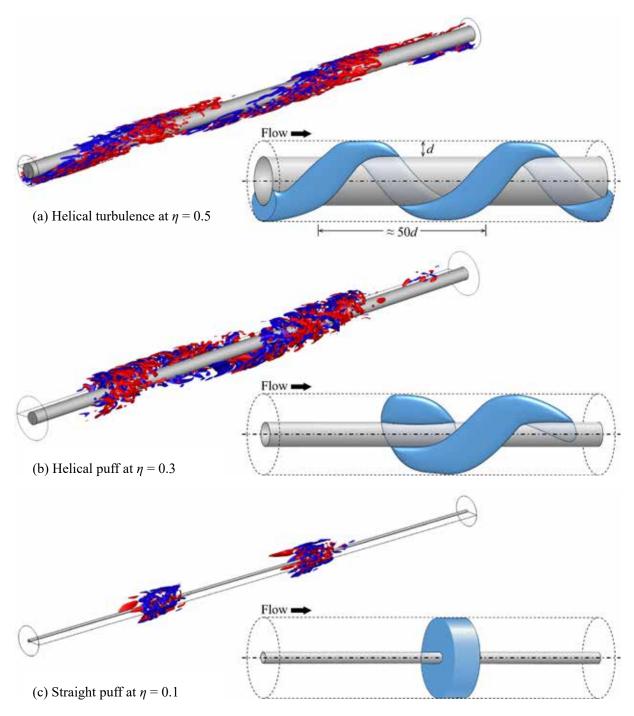


図 2 環状ポアズイユ流における層流-乱流共存パターン. 円筒比 (η =0.5, 0.3, 0.1) に応じて, 螺旋乱流, 螺旋パフ, (直線型) 乱流パフを形成する. 左側は三次元可視化図: (a, b) 周方向速度 (赤 u_{θ} >+1 [x 下流方向に向かって時計回転], 青 u_{θ} <-1 [反時計回転]); (c) 主流方向速度変動 (赤 u_{x} '>+4, 青 u_{x} '<-1). 右側は局在乱流領域の模式図.

円筒比に依存したパターンの変化を捉えるため、円筒比 η は $0.1 \sim 0.8$ の範囲で、完全に発達した乱流場の解析からはじめ、摩擦レイノルズ数 $Re_\tau = u_\tau d/2v$ (摩擦速度 u_τ)を段階的に下げることで遷移レイノルズ数域の解析を行った($Re_\tau = 48 \sim 150$). 計算領域はパターンを捉えるため、軸方向に十分長い領域($L_x/d = 51.2 \sim 180$)を設け、周方向は全周($L_\theta = 2\pi$)としている。格子数は軸方向に最大 4096、周方向に最大 1024、壁垂直方向には不等間隔格子を用いて 128 点とした。

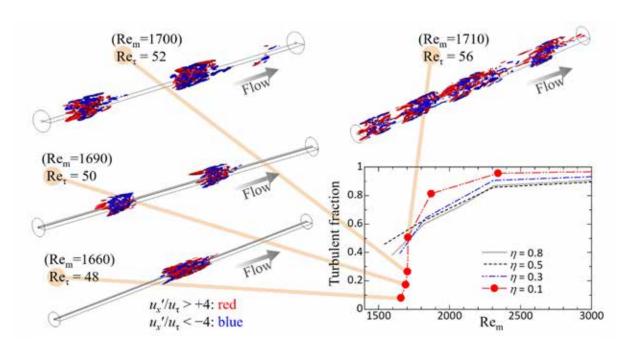


図3 円筒比 η = 0.1 の環状ポアズイユ流における(直線型)乱流パフ,及び各円筒比の乱流間欠率のレイノルズ数依存性. 三次元可視化図は瞬時の主流方向速度変動分布を示す. グラフの横軸 Re_m は、バルク平均速度とdに基づくレイノルズ数.

3. 結果と考察

3.1 層流-乱流パターン変化

各極限と中間の円筒比におけるパターン発生の有無を調査し、図 2 のように円筒比に依存して (a) 螺旋乱流, (b) 螺旋パフ, (c) 乱流パフの異なった特徴をもつパターン形成が明らかになった. さらに、乱流パフについてはレイノルズ数の減少に伴い、乱流パフの主流方向間隔が長くなることでより間欠的な乱れ場となる傾向が観測された. 図 3 には円筒比 0.1 で見られた乱流パフのレイノルズ数依存性を示し、合わせて乱流間欠率とバルクレイノルズ数の関係を円筒比毎にプロットした. 乱流間欠率は、計算領域に対する局在乱流領域の占有率を意味し、0 は完全に層流、1 に近いほど全域が乱流状態であることを示す、レイノルズ数が減少するにつれ、乱流間欠率は単調に減少するが、円筒比によって変化傾向に違いがある。特に、図に示したケースの内で唯一、乱流パフを形成する円筒比 0.1 では $Re_m = 1600$ 付近で急激な変化が見られた。これは、僅かなレイノルズ数の変化で乱流パフの個数が増減するためであり、有限な計算領域を用いている限りは連続的遷移と言うよりはむしろ階段状のグラフになってしまう。厳密な最小臨界レイノルズ数を特定するには主流方向に長い計算領域の設定が肝要である。今後、MPI 並列計算を用いた超長流路解析による連続的遷移および最小臨界レイノルズ数の解明が期待される。

本研究では、図2のようにパターン形成が円筒比に依存して変化する際の特徴と原因について、 特に螺旋乱流で見られる大規模二次流れに注目して、さらなる調査を行った.

3.2 縞状パターンの傾斜性

螺旋乱流のように縞状パターンの維持機構は、空間的局在化した乱流領域の縁で生じる大規模 二次流れによって説明され、小規模と大規模流れの明確なスケール分離が重要な仮定となる[20]. 小規模流れは、準秩序的な乱流運動であるストリークと縦渦構造に対応し、内層スケール(u-/v)

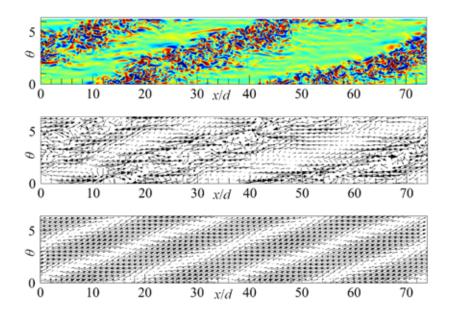


図 4 螺旋乱流における瞬時の $x-\theta$ 二次元速度分布: (上段) ギャップ中央の半径方向速度 u_r 分布で赤・青は正・負の速度を示し、緑は層流領域に相当する; (中) 半径方向平均された $x-\theta$ 面内速度ベクトル (U_x , U_θ); (下) ローパスフィルタで抽出された大規模二次流れを表す速度ベクトル ($\mathcal{L}U_x$, $\mathcal{L}U_\theta$). DNS の計算条件は $\eta=0.5$, $\mathrm{Re}_\tau=56$.

によって特徴付けられ、パターンの乱流領域域内の微細構造に相当する。これに対して大規模流れは、外層スケール (d) で特徴付けられ、パターンの大域的な水平方向のサイズを表す。従って、両スケールの間には大きな隔たりが存在する。縞状パターンの(主流方向に対する)傾斜性の起源は大規模流れの質量平衡に由来するものと考えている。小規模流れと大規模流れ($U_i = \mathfrak{L}u_i$ 、 \mathfrak{L} : ローパスフィルタ)が明確に分類でき、大規模流れのみを抽出できたと仮定すると、以下に示す大規模流れの連続の式が得られる。

$$\frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial r U_r}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial U_{\theta}}{\partial \theta} = 0 \tag{3}$$

縞状パターンは半径方向に対してほぼ一様となり、主流 U_x とスパン方向 U_θ の二次元流れとみなせるため、半径方向平均を施すことで壁面すべり無し条件から以下の式のように変換できる.

$$\int_{R_i}^{R_o} \frac{\partial U_x}{\partial x} dr = -\int_{R_i}^{R_o} \frac{1}{r} \frac{\partial U_\theta}{\partial \theta} dr$$
(4)

パターン発生時における $\int U_x dr$ は層流領域と乱流領域で値が異なり、その界面では局所的に、主流方向の勾配が生じる.

$$\int_{R_i}^{R_o} \frac{\partial U_x}{\partial x} \, \mathrm{d}r \neq 0 \tag{5}$$

これにより、式(4)でスパン方向速度成分と釣り合う必要が生じ、速度変化が顕著な層流-乱流界面においてスパン方向二次流れが誘起され縞状パターンは維持される.

図4は螺旋乱流の瞬時速度場に対してローパスフィルタを適用し、大規模二次流れを抽出した結果を示す. 但し、速度ベクトルは式(4)で施しているように半径方向の空間平均された値を用いている. 図4内の三図を比較すれば、局在乱流の傾斜帯に沿うような二次流れが上流側・下流側で対向して生じているのが分かる.

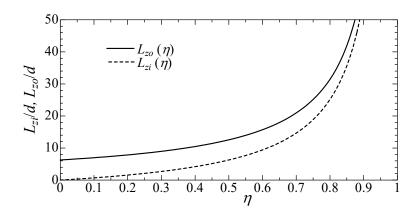


図 5 円筒比に依存する周方向空間長さ(内円筒円周 Lzi と外円筒円周 Lzo).

4.2 環状流におけるパターン形状の変化

環状流中のパターン形成変化の主要因は、円筒比 η に依存した周方向領域サイズ $L_{zi}=2\pi R_i$ または $L_{zo}=2\pi R_o$ と考えられる。図 5 に、円筒比に対する内円筒と外円筒壁面における周方向長さを示す、円筒比が大きい場合、周方向長さは無限大に漸近し、低円筒比では周方向長さは最大でも 6d程度となる。縞状パターンの維持機構は小規模と大規模流れの明確なスケール分類が重要となる。しかし、円筒比が小さい場合、大規模流れ自体が維持可能な周方向領域を確保できないことが考えられる。図 2 からも推察して、円筒比 0.3 程度を下回ると螺旋形状が失われていくことから、おおよそ 10d が限界の外円筒円周の狭さと言える。

パターン形状の変化を定量的に捉えるため、大規模流れの局所速度の向き(主流方向に対する角度) α を抽出することで、その確率密度分布を得る.ここで大規模流れを得るために主流方向は、パターンのサイズを基にして 20d 以下の波長を除去した.また、周方向に関しては円筒比が小さい場合、大規模流れ相当の計算領域を保有できないため、ストリーク相当の小規模流れ (2d) のみを除去した.遷移レイノルズ数域における α の確率密度分布の結果を図 6 に示す.円筒比が大きい場合に $\alpha \neq 0$ °でピークを有し、円筒比低下に従って $\alpha = 0$ °でシングルピークの凸分布となる.前者の傾向は大規模二次流れの傾斜性を、一方で後者は特徴的な二次流れの不在を示唆している.ここで、 $\alpha = 0$ °付近の分布を偶関数、例えば二次曲線近似し、

$$PDF(\alpha) = a\alpha^2 + c \tag{6}$$

で定義される係数 $a(\eta, Re_t)$ に着目する. 当係数が正ならば $a \neq 0$ で,負ならば a = 0 でピークを有した確率密度分布であることに相当する. さらに $a(\eta, Re_t) = 0$ が得られれば,パターン変化(螺旋パフ ⇔直線型乱流パフ)の臨界条件 $\eta_{critical}(Re_t)$ が特定できる.図 7 には,図 6 で示すような α の確率密度分布のピーク位置,いわゆる最頻角度 $M(\alpha)$ と,係数 $a(\eta, Re_t)$ を示す. $Re_t = 80$ の比較的に高いレイノルズ数では発達した乱流状態(小規模流れ支配)であるため,円筒比に依存せずに $M(\alpha) = 0^\circ$ となる.これに対して,低いレイノルズ数では高円筒比で $M(\alpha) \approx 10^\circ$ の高い値を示すことから,周方向大規模流れが顕著に現れていることが分かる.一方,0.4 以下の低円筒比では $M(\alpha)$ が小さくなり,大規模流れの特徴が無くなっている.同様の結論が,係数 $a(\eta, Re_t)$ の結果からも伺える.特に注目すべきは, $\eta = 0.2 \sim 0.4$ の範囲で連続的な変化を示すことである.これは,円筒比に応じて螺旋乱流から乱流パフへの変化に連続性を有することを示唆している.

この結果から層流-乱流共存パターン形状の変化原因を考察する. 円筒比が十分に大きい場合, 平板間流れの理論を直接適用することが可能となり,主流方向大規模流れの変化が周方向大規模 流れの変化と釣り合うことにより,環状流では螺旋乱流を形成する. しかし,円筒比が小さくな

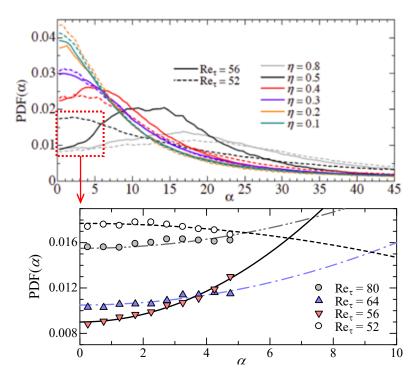


図 6 大規模流れ中の局所風向 α の確率密度分布. 下図は $\eta = 0.5$ のものに限定.

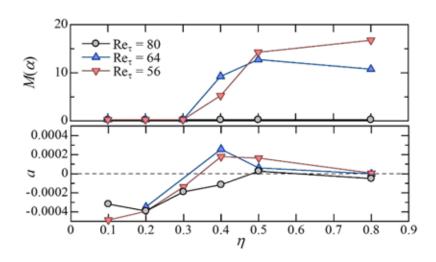


図 7 大規模流れ中の局所風向 α の確率密度分布(図 6)に関する最頻角度 $M(\alpha)$,及び式(6)で定義される係数 α の円筒比依存性.

ると,周方向空間が狭くて大規模流れが存在しなくなり,結果として周方向二次流れが消失した. 螺旋乱流から乱流パフへと,中間的な形態である螺旋パフを介して,層流-乱流共存パターンの形状変化が起きたと考えられる.

5. 結言

環状ポアズイユ流の亜臨界遷移過程について、特に層流-乱流共存パターンの円筒比依存性およびレイノルズ数依存性を調査した. 大規模な計算領域による DNS 実施によって、螺旋乱流・螺旋パフ・乱流パフの発生を捉え、円筒比 0.3 ~ 0.4 で局在乱流領域の傾斜性を徐々に失い、低円筒比

にて円管内流れのものと酷似した亜臨界遷移過程を経ることを見出した.これは異なる層流-乱流 共存パターン形状の強い関連性を示唆するものである.

当該研究成果は文献[21,22]にて詳細に報告している. さらに、摩擦係数や各種乱流統計量については Ishida & Tsukahara [23]で、駆動方法の異なる環状クエット流については Kunii et al. [24,25] を参照されたい.

層流-乱流転移の連続性の議論には、まだ膨大な試行と巨大計算領域が必要とされる。本解析も含めて、そのような DNS の実現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 SX-ACE を利用することで実現した。計算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] 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, *J. Fluid Mech.*, **59**, 281–335, 1973.
- [2] F. M. White, Fluid Mechanics (4th edition), McGraw-Hill, New York, pp. 325–332, 2001.
- [3] 日野幹雄,流体力学,朝倉書店,1992
- [4] JSME テキストシリーズ,流体力学,日本機械学会,2005.
- [5] 小川益郎,河村洋,円管内ガス流の遷移域の圧力損失と熱伝達に及ぼす入口形状の影響,日本機械学会論文集 B 編,第 52 巻 第 477 号,2164-2169,1986.
- [6] B. Hof, A. Juel, and T. Mullin, Scaling of the turbulence transition threshold in a pipe. *Phys. Rev. Lett.*, **91**, 244502, 2003.
- [7] J. Peixinho and T. Mullin, Finite-amplitude thresholds for transition in pipe flow, *J. Fluid Mech.*, **582**, 169–178, 2007.
- [8] A. Prigent *et al.*, Large-scale finite wavelength modulation within turbulent shear flows. *Phys. Rev. Lett.*, **89**, 014501, 2002.
- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] 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.
- [12] J. J. Tao, B. Eckhardt, and X. M. Xiong, Extended localized structures and the onset of turbulence in channel flow, *Phys. Rev. Fluids*, **3**, 011902, 2018.
- [13] M. Sano and K. Tamai, A universal transition to turbulence in channel flow, *Nature Phys.*, **12**, 249–253, 2016.

- [14] G. Lemoult *et al.*, Directed percolation phase transition to sustained turbulence in Couette flow. *Nature Phys.* **12**, 254–258, 2016.
- [15] M. Chantry, L. S. Tuckerman, and D. Barkley, Universal continuous transition to turbulence in a planar shear flow, *J. Fluid Mech.*, **824**, R1, 2017.
- [16] M. Shimizu and P. Manneville, Bifurcations to turbulence in transitional channel flow. *arXiv Preprint*:1808.06479, 2018.
- [17] K. Avila et al., The onset of turbulence in pipe flow, Science, 333, 192–196, 2011.
- [18] D. Barkley et al., The rise of fully turbulent flow, Nature, **526**, 550–553, 2015.
- [19] M. Shimizu and S. Kida, A driving mechanism of a turbulent puff in pipe flow, *Fluid Dyn. Res.*, **41**, 045501, 2009.
- [20] Y. Duguet and P. Schlatter, Oblique laminar–turbulent interfaces in plane shear flows. *Phsy. Rev. Lett.*, **110**, 034502, 2013.
- [21] T. Ishida, Y. Duguet, and T. Tsukahara, Transitional structures in annular Poiseuille flow depending on radius ratio, *J. Fluid Mech.*, **794**, R2, 2016.
- [22] T. Ishida, Y. Duguet, and T. Tsukahara, Turbulent bifurcations in intermittent shear flows: from puffs to oblique stripes, *Phys. Rev. Fluids*, **2**, 073901, 2017.
- [23] T. Ishida and T. Tsukahara, Friction factor of annular Poiseuille flow in a transitional regime, *Adv. Mech. Eng.*, **9**, 1, 2017. doi: 10.1177/1687814016683358
- [24] 國井康平,石田貴大,塚原隆裕,遷移域スライディング・クエット流の局在乱流構造と統計量に及ぼす壁面曲率の影響,日本流体力学会誌「ながれ」,第35巻第6号,475-480,2016.
- [25] K. Kunii *et al.*, Laminar-turbulent coexistence in annular Couette flow, *J. Fluid Mech.*, under review, 2019; arXiv Preprint, 1904.09160.

[共同研究成果]

仮想粒子の並進移動過程に干渉効果を加味した流体解析の可能性

整数型格子ボルツマン法における連続的な粘性制御機能の実現に向けて一

松岡 浩 一般財団法人高度情報科学技術研究機構 東北大学電気通信研究所(客員) 菊池 範子 技術士事務所AIコンピューティングラボ

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29年度まで「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。ここでは、本研究を通じて得られた知見のうち、"仮想粒子の並進過程に干渉効果を加味することによって、数値シミュレーションで模擬できる流体粘性の範囲を幅広く調整できる可能性"について述べる。円柱後流の解析事例から定性的ではあるが、大きく変化する不規則な流動が発生し、その変化は流体粘性が小さくなり乱流化したように見えた。

1. はじめに

筆者らが本研究で最終的に目指すものは、昨年4月の SENAC 誌[1]に記載したとおり、「流体中を運動する物体が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"リアルタイム応答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が、筆者らは"整数型格子ボルツマン法(多速さ格子ガス法[2])"を基礎にして、上記のような"リアルタイム応答流体解析"を実現するために必要な新しい機能をひとつひとつ付加しつつある。本稿で述べる新しい機能は、"連続的な粘性制御機能"であるが、現時点では定性的な評価にとどまっている。今後さらなる改良も必要であるため、本稿の表題では、「可能性」という表現に留めている。

なお、本稿の本文は松岡が執筆し、掲載した数値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。

2. "整数型格子ボルツマン法 (多速さ格子ガス法)"の特徴

"リアルタイム応答流体解析"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、かつ、整数型の確率変数を用いて時間発展を追跡していく"整数型格子ボルツマン法"とも呼ぶべき「多速さ格子ガス法[2]」を用いた方が有利だと考えている。

以下、本手法の概要や特徴は、昨年4月の SENAC 誌等[1,3]にも記載したところであるが、本稿における説明の流れ上不可欠な部分だけを繰り返し記載させていただく。

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(サイト)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(サイト)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(サイト)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、テシャラが考案した方法 [4] 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、"多速さ格子ガス法"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。[5]

筆者が、この"整数型格子ボルツマン法(多速さ格子ガス法)"を"リアルタイム応答流体解析" 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 状態変化を各速度の仮想粒子の存否情報に分割して 1 ビット幅で追跡し超並列計算ができる。
- ② 時間発展計算を誤差の蓄積がないビット演算で行いどんな激しい流れでも安定に計算できる。
- ③ 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に取込みできる。

3. 円柱後流の数値シミュレーションによる考察

3.1 仮想粒子が飛び移る"サイト"の位置座標の設定

3次元空間が静止流体で満たされ、その中に無限の長さをもつ円柱が存在していたとする。時刻ステップゼロにおいて、円柱軸に垂直な方向に流体が動きはじめた場合、円柱の後流がどのような挙動を示すかを調べる。

これは典型的な流体解析の問題で幾何学的な形状は2次元であるが、レイノルズ数が少し大きくなると、すぐに3次元構造の流れが発生することが知られている。このため、本質的に3次元計算が必要である。しかし、ここで、格子ガス法によって3次元の流体シミュレーションを行う場合の特殊事情がある。すなわち、仮想粒子の速度ベクトルから構成されるテンソルの等方性を向上させる必要があり、そのひとつの方法として、筆者らは"4次元面心超立方体(FCHC)格子"を用いることにしている。このため、3次元問題であっても4次元空間において仮想粒子の動きを追跡する必要がある。

そこで、まずは3次元直交座標系(X,Y,Z)を設定する。円柱軸と平行にZ軸をとり、流体が動 き出す向きに+X軸をとる。Y軸は、X軸にもZ軸にも垂直であるから、結果的に円柱断面のあ る直径と平行な方向になる。また、上述のとおり、仮想粒子は4次元空間中を飛び移るので、そ の位置を特定するには、通常の3次元位置座標(X,Y,Z)に加えて第4次元目の位置座標(R)が 必要になる。3次元位置座標(X,Y,Z)が変化する範囲は、現実に流体が存在する3次元空間中の 位置に対応して定まるが、R 座標については複数の位置座標値をもてばよく、現実に流体が存在 する位置の広がりからは何の制約も受けない。このため、ここでは最も簡単に、R の位置座標値 は2個の値($\pm \ell/2$)のみをとるものとする。ここで、 ℓ (>0) は、シミュレーションの時間発展計 算において時刻ステップがひとつ刻まれる時間⊿t の間に仮想粒子が1方向に進む距離である。 仮想粒子のその方向の速度成分が c であれば、 $\ell = c$ /t となる。 $R = -\ell/2$ の座標位置から出発 した仮想粒子が R 方向成分速度+c をもっていれば、次の時刻ステップで仮想粒子は R = +0/2 の 座標位置に到着する。これが R = +0/2 の座標位置から出発した仮想粒子であれば、次の時刻ステ ップで R = +30/2 の座標位置に到着すべきであるが、"周期座標"を仮定して、R = +30/2 ではな く $R = -\ell/2$ の座標位置に到着するものとする。同様に、 $R = -2/\ell$ の座標位置から出発した仮想粒 子が R 方向成分速度-c をもっていれば、次の時刻ステップでは、R = -30/2 の座標位置に到着す べきであるが、周期座標の仮定により R = +0/2 の座標位置に到着するものとする。

以上の考察も含め、4次元空間中において仮想粒子が飛び移れる場所については、以下のとお

- りまとめることができる。
 - ① 4 次元空間中に直交座標 (X, Y, Z, R) を設定し、一辺が ℓ の"4 次元超立方体セル $(2 \times 2 \times 2 \times 2)$ " を、その中心が X, Y, Z の各方向に間隔 2ℓ で並ぶように配置する。R 方向には、R=0 の位置にセルの中心がくるようにして 1 列の奥行き分だけを並べる。
 - ②すべての仮想粒子は、それがもつ速度に従って 4 次元超立方体セルの頂点の位置(以下、この位置を "サイト" と呼ぶ。具体的な座標位置は($X\pm 0/2, Y\pm 0/2, Z\pm 0/2, \pm 0/2$)である。)を飛び移って並進移動することができる。また、"サイト"においてのみ、他の仮想粒子と衝突することができ、質量、運動量及びエネルギーの保存則を満たしながら、その速度を変化させて散乱することができる。
 - ③各サイトの位置を識別するためには、そのサイトが属する 4 次元超立方体セルの中心位置 (X,Y,Z,0) と、そのセルの各頂点に付された $1\sim16$ の位置識別番号を指定すればよい。
- 図1に"サイト"の位置を「 \bigcirc 」で示す。「 \bigcirc 」の内側の丸は4次元目の座標位置が $R = -\ell/2$ 、「 \bigcirc 」の外側の丸は4次元目の座標位置が $R = +\ell/2$ のサイトに対応している。

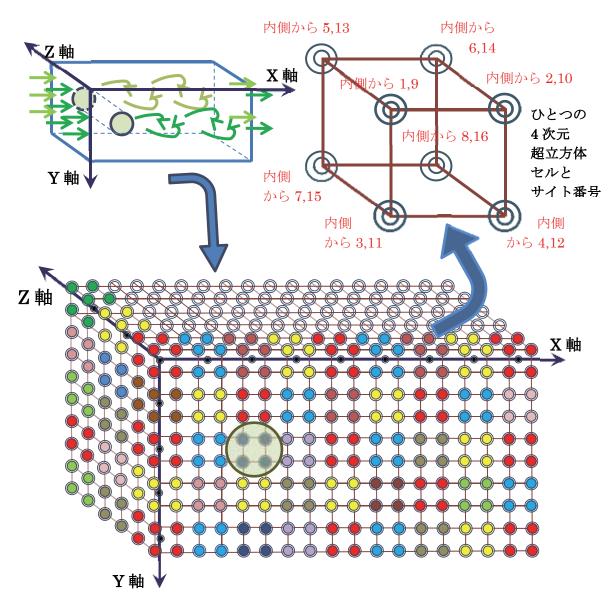


図1. 仮想粒子が飛び移ることができる4次元サイトの配置

3.2 シミュレーション計算の体系規模

今回おこなったシミュレーション計算では、図1におけるセルの配列は、X方向に 512 個、Y方向に 256 個、Z方向に 128 個である。ひとつのセルには 3 次元空間で考えると 8 個の頂点があるので、頂点数としては、約 1 億 3400 万個の規模に対応している。

疎視化については、スナップショットをとるべき時刻ステップがやってくるたびに、XYZ方向に $4\times4\times4$ 個並ぶ64個のセルをひと塊にしてその中に存在する仮想粒子の運動量の合計を求め、 $128\times64\times32$ 個の流速ベクトルを導出した。ただし、3次元ベクトルは紙面上で表現しにくいため、 \mathbf{Z} 3に後述するシミュレーション結果は、 \mathbf{Z} 4軸に垂直なある平断面上における流速ベクトル分布の時間変化を示すこととした。

3.3 仮想粒子の存在状態の記述と並列ビット演算

格子ガス法のシミュレーションでは、通常「ひとつのサイトには、複数個の静止粒子と、ある特定の指定された速度をもつ運動粒子がそれぞれの速度ごとに高々1個まで存在できる。」と仮定する。ここで「特定の指定された速度」というのは、解析の目的に応じて適切なモデルを選定する。今回のシミュレーション計算の目的は、流体粘性を幅広い範囲で連続的に制御できる方法を探ることにあり、定量的な厳密性は追求しない。このため、仮想粒子がもちうる速度としては、もっとも単純な"単速さ面心超立方体(FCHC)格子 24 速度モデル"を採用した。このモデルでは、仮想粒子は次の 24 種類の 4 次元速度をもつことができる。

 $(\pm c, \pm c, 0, 0)$ 、 $(\pm c, 0, \pm c, 0)$ 、 $(\pm c, 0, 0, \pm c)$ 、 $(0, \pm c, \pm c, 0)$ 、 $(0, \pm c, 0, \pm c)$ 、 $(0, 0, \pm c, \pm c)$ 仮想粒子は4次元空間内を動くのでその速度成分は4つある。また、仮想粒子の速さは、すべて

同じで大きさで、 $\sqrt{(\pm c)^2 + (\pm c)^2 + 0^2 + 0^2} = \sqrt{2}$ c である。(c: 基準となる仮想粒子の速さ)

各サイトにおける仮想粒子の存在状態は、仮想粒子の速度 D (=1,・・・,24) ごとに、その粒子が存在する場合は「1」、存在しない場合は「0」とし、1 ビット幅で表現できる。ここでは、並列計算を効率よく行うため、同じ速度 D をもつ仮想粒子について、セルごとに 16 個の頂点サイトにおける仮想粒子の存否情報を 16 ビット幅のビット列情報にまとめる。そして、時間発展計算に必要な演算は、この 16 ビット列を複数個まとめて 32 ビット幅や 64 ビット幅等で一括計算を行う。

3.4 仮想粒子の並進移動過程における干渉効果の加味

時間発展計算の過程において、仮想粒子は、**図1**に示した4次元空間中のサイトを飛び移りながら移動していく。あるサイトに到着した仮想粒子は、"衝突散乱過程"に入り、同じサイトに到着した別の速度をもつ仮想粒子と衝突してその向きを変える。次に、この仮想粒子がそのサイトからの"出発粒子"になり、次の時刻ステップがくるまでの間、その粒子がもつ速度に従って次のサイト位置に到着するまで"並進移動過程"が続く。

今回の新しい試みは、この"並進移動過程"に、仮想粒子の干渉効果を導入することである。 しかし、できるだけモデルを複雑にしたくはない。できるだけミクロなレベルで要素還元的なし くみを考えて、そこから自己組織化によりマクロな挙動を発現させたい。

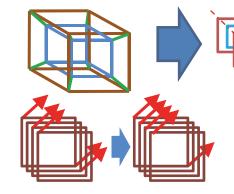
さて、仮想粒子の動きをアニメーション的に想像すると、"衝突散乱過程"を経てたまたま同じ向きに出発することになった複数の仮想粒子は、同じセルの各サイトから同じ向きに飛び出してくる。これらの仮想粒子は、相互にある一定の近距離を保ちながら時刻ステップ間隔⊿t のあいだ同じ向きに同じ速さで並進移動していく。このとき、「もし粒子間力が働けば、仮想粒子の並進軌道が曲げられ、到着先のサイトの位置が確率的にずれてしまうことになるだろう」と想像してみる。この想像が現実の物理現象のある側面の特徴を反映できているか否かは別にして、ここでは「同じセルの異なるサイトから同じ速度で出発する仮想粒子の個数分布を観察して、出発粒子の個数分布の凸凹を強調した分布に置き換える操作を行う」こととした。これは、仮想粒子の並進移動過程に仮想粒子間の相互作用による干渉効果を加味するひとつの試みである。

また、できるだけ要素還元的なしくみにするため、図2に示すように、各セルをその中に存在

する6組の平行4枚組超平面に分けて考えることにする。すると、4枚の平行な超平面上にある4つ正方形の各頂点からは合計で最大4個の仮想粒子が同じ速度をもって飛び出すことになる。さらに、この速度に垂直な方向をもつ正方形対角線に属する2つの頂点に注目し、その4組の2頂点間で仮想粒子をやりとりして出発粒子の個数分布の凸凹を強調することとした。具体的には、相対する4頂点における仮想粒子の存否分布のANDをとって出発粒子の少ない側の4頂点における仮想粒子の存否分布を置き換え、4頂点における仮想粒子の存否分布のORをとって出発粒子の多い側の4頂点における仮想粒子の存否分布を置き換えることにした。さらに、この置き換えを確率的に行い、その確率の大小が円柱後流の様相にどのような違いをもたらすかを観察した。

4次元セル

6組の平行4枚組超平面とその垂直軸



上記の平行4枚組超平面のそれぞれにおいて、左図のように仮想粒子がもつ速度に垂直な方向をもつ正方形対角線に属する2つの頂点に注目し、その4組の2頂点間で仮想粒子をやりとりして出発粒子個数分布の凸凹を強調する。粒子数の多い側の4項点をOR操作で得た粒子配置で、少ない側の4項点をAND操作で得た粒子配置で置き換える。左図の例では、この操作で粒子数分布が3:2から4:1に変化し、分布の凸凹が強調されている。

図2. 4次元セルに含まれる6組の平行4枚組超平面上における出発粒子分布の凸凹強調操作

3.5 時間発展計算における仮定

時間発展計算を開始する時刻ステップ 0 の時点で、各サイトには、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サイト上の仮想粒子配置を、出口直後に存在するサイト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、 \pm Y 方向と \pm 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。

3.6 シミュレーション結果の説明

図3に、3次元的に生じている円柱後流の流速変化のうち、Z軸に垂直なある平断面上における流速ベクトル分布の時間変化を示した。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いろいろな変化が生じる。図3では、紙面の都合から、こうした変化がほぼ似た様相の繰り返しになった時点で、その変化の特徴をよく表す連続した2枚のスナップショットを抜粋した。(注:スナップショット間には何回の揺らぎがある。)流速ベクトルの色が赤色なら高速、黄色なら中速、緑色なら低速、青色なら静止〜超低速であることを表している。

"出発粒子数分布の強調操作"を行う確率をゼロから上げていくと、円柱後流の様相が大きく変化し不規則な渦発生に至る。その変化は、円柱からの層流剥離→再付着→乱流剥離と見られる様相を含み、流体粘性が小さくなって乱流化したように見えた。

これらの計算は、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) を利用して行い、どのケースも約 39000 時刻ステップの計算を約 55 分で実行している。

4. 考察

"整数型格子ボルツマン法"による流体解析において、流体粘性を幅広い範囲で連続的に制御できる可能性について総括する。

- (1)「同一セルの異なるサイトから出発した同じ速度をもつ仮想粒子が比較的長時間相互にある一定の近距離を保ちながら移動する」というイメージをヒントに、並進移動過程において同じ速度をもつ仮想粒子どうしが相互作用を及ぼし、その軌道がゆがめられて、到着先のサイトがずれるという仕組みを考えた。これは、仮想粒子の到着先のサイトからみると、出発粒子の個数分布が確率的に変化したように見えるはずなので、「出発粒子数分布の凸凹を強調する操作」としてこの効果をシミュレーションに取り入れてみた。
- (2) 現時点では定量的な評価を行うには至っていないが、"出発粒子数分布の強調操作"を行う確率をゼロから上げていくと、円柱後流の様相が大きく変化し不規則な渦発生に至る。その変化は、円柱からの層流剥離→再付着→乱流剥離と見られる様相を含み、流体粘性が小さくなって乱流化したように見えた。他方、別に行った数値シミュレーションにおいて、静止流体にこの方法を適用し、"出発粒子数分布の強調操作"を行う確率を高く設定(20%)したところ、自発的なうずの発生が見られた。これは、"負の粘性"を発現させたものと考えられるので、"出発粒子数分布の強調操作"を行う確率を適切な値に制御すれば、ゼロに非常に近い正の粘性を発現させることも可能であると思われる。このことは、高いレイノルズ数の流体挙動を、格子点の数を増やさずに模擬できる可能性を示唆するものである。
- (3) 本手法は、時間発展計算をビット演算で行うため誤差の蓄積が全くないので「どんなに激しい変化をする流れに対しても、安定な計算を実行できて必ず答えを出せる」という特徴をもつ。このように、経験的なモデルを使用せずに要素還元的な簡易な仕組みから乱流挙動を自己組織化により再現しようするアプローチにも(AI学習との組合せなど)有望な可能性があると考えられる。ただし、今後、定量的な評価を行い詳細な検討が必要であることは言うまでもない。

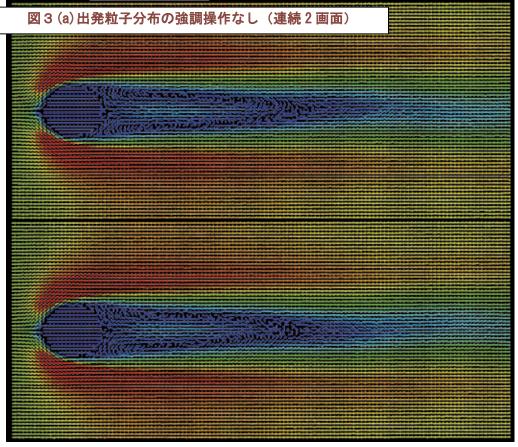
辛糖

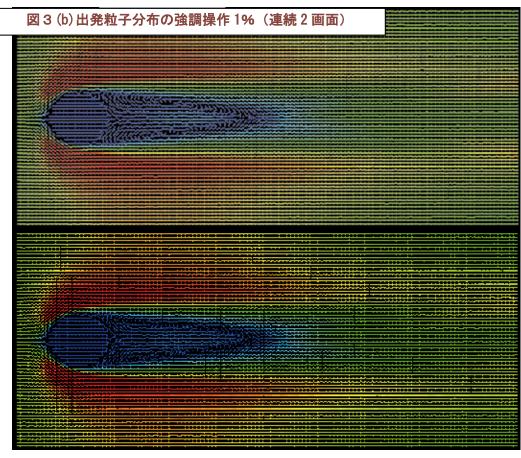
本稿で述べた共同研究の報告は、これまで長期にわたり東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータ SX-ACE を利用することによってはじめて得られたものである。利用にあたっては同センター関係各位のご親切なご指導とご協力をいただき、心から感謝する次第である。また、急速に向上していくスパコン性能をすばやく産業展開していくためには、現時点で将来のスパコン利用における新しい可能性を先取りし、関連する技術をしっかり確立しておくことが重要である。この意味で、サイバーサイエンスセンターによる先進的なスパコン利用環境の提供は極めて有益であり、将来のスパコン環境を先取りしたコード開発を試行錯誤できて大変うれしく思っている。今後とも同センターの有意義な活動を継続的に発展させられることを期待する。

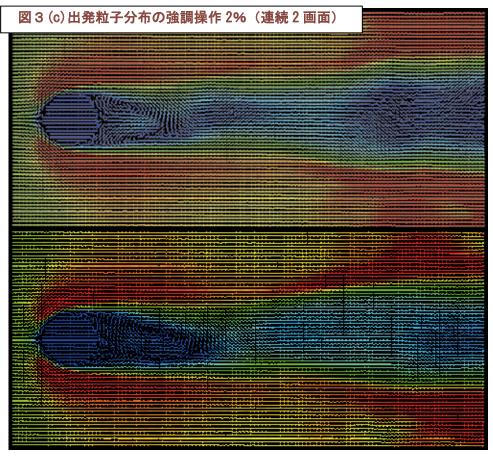
参考文献

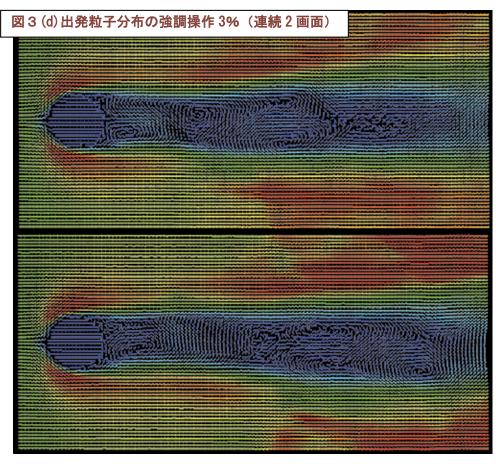
- [1]松岡, 菊池, "コンパクトな計算機によるリアルタイム流体解析の実現に向けて", SENAC Vol. 51 No2, pp. 1-10, 2018
- [2] Uriel Frisch, Dominique d'Humières, Brosl Hasslacher, Pierre Lallemand, Yves Pomeau, Jean-Pierre Rivet, "Lattice Gas Hydrodynamics in Two and Three Dimensions", Complex Systems, 1 (1987), pp. 649-707, 1987
- [3]松岡, 菊池, "多速さ格子ガス法実用化展開への手がかり", SENAC Vol. 49 No. 4, pp. 1-15, 2016 [4] Chistopher M. Teixeira, "Continuum Limit of Lattice Gas Fluid Dynamics", MIT, 1993 [5]松岡, "ビット演算による CFD と等価な高精度流体解析手法", RIST News No. 64, pp. 17-28, 2018

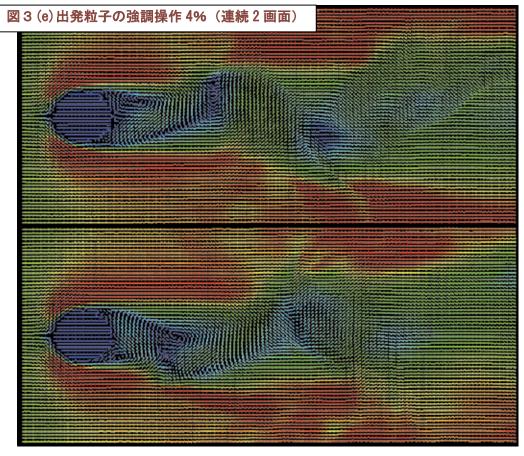
図3. 円柱後流の時系列スナップショットの典型的な連続2画面(ある2断面の流速分布)

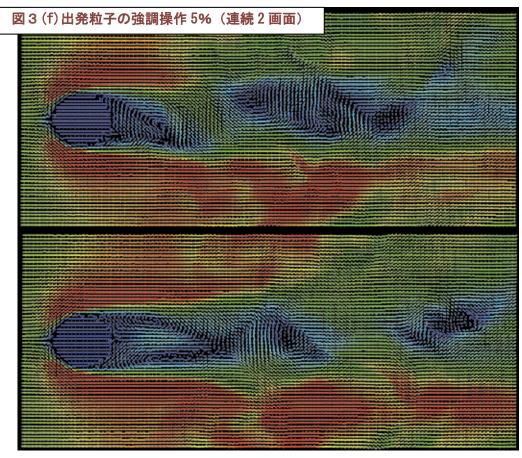


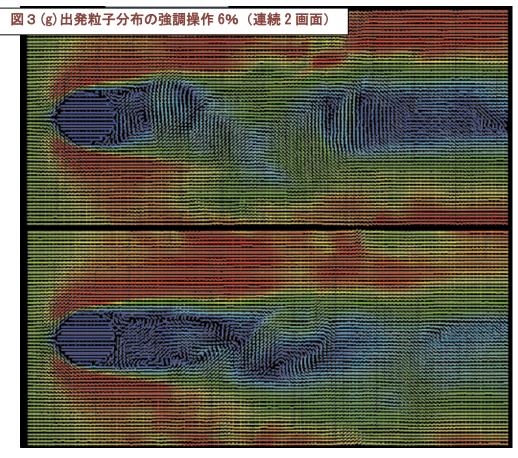


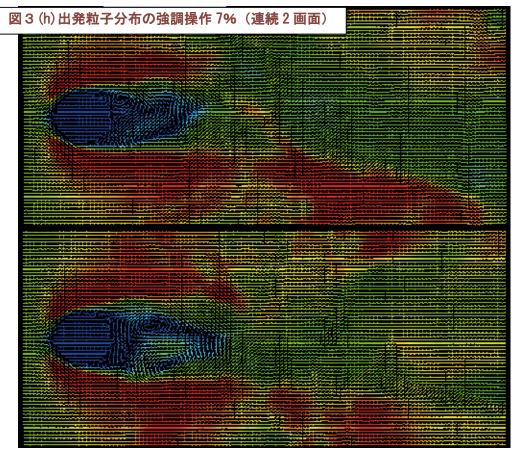












[お知らせ]

2019 年度サイバーサイエンスセンター講習会のご案内

2019年度の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27日(月) 15:00-18:00	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
2	はじめてのスパコン	5月28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29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30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31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21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2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	Fortran 入門	8月8日(木) 10:00-17:00 8月9日(金) 10:00-16:00	20	田口 (摂南大学)	・Fortran の初歩から応用まで
9	Gaussian 入門	8月21日(水) 13:00-17:00	20	岸本 (理学研究科)	・Gaussian の基本的な使い方
10	Mathematica 入門	9月6日(金) 13:00-16:30	20	横井 (尚絅学院大学)	・Mathematicaの基本的な使い方
11	はじめてのLinux	9月9日(月) 13:00-16:00	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
12	はじめてのスパコン	9月10日(火) 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)
13	SX-ACE の性能分析・ 高速化	9月11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
14	並列プログラミング 入門 I (OpenMP)	9月12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
15	並列プログラミング 入門Ⅱ (MPI)	9月13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

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。

講習会受講者の感想

Linux 入門

- ・初心者にとって、基本的かつ実用的なものであってとても参考になった。
- 入門として非常にわかりやすかった。
- コマンドの復習になってよかった。
- 資料がよかった。

並列プログラミング入門 I (OpenMP)

- ・全く OpenMP を知らない人にもわかりやすい 内容でした。
- すぐ応用に使えそうだ。
- ・演習が充実していてとてもよかった。



Fortran 入門

- ・Fortran の基礎を学ぶことができた。大変判り易かった。
- ・間違いやすい点など学生指導の経験をもとに 丁寧に教えていただき、ほとんどの内容を理 解できるようになった。



はじめてのスパコン

- スーパーコンピュータのことはまったく知らなかったので興味深かった。
- ・実際に手を動かす講習だったので判り易く大変 ためになる講習だった。
- ・スパコンを実際に見ることができて良かった。

並列プログラミング入門Ⅱ (MPI)

- ・講習会用の資料がすごくわかりやすかったです (プログラム例、図)。
- ・とても判り易く参考になった。充実していて 面白かった。

MATLAB 入門

- ・初心者にわかりやすかった
- ・講師の方が大変丁寧でよかった。
- ・GUI の説明は興味深かったです。



Gaussian 入門

- ・講義から実践まで新鮮でした。
- ・化学にほとんど詳しくない自分にとっても理解ができ、とてもありがたい。
- ・先生の説明は判り易かったです。

Mathematica 入門

- ・基本的なことがよくわかった。丁寧に解説いただきありがとうございました。
- ・自分で操作してそれをチェックしてもらえるのでよかった。

ネットワークとセキュリティ入門

- 初心者にとってわかりやすかった。
- ・役立つワンポイント情報が豊富だったので、自習に役立ちます。
- ・「サブネット」「Mac アドレス」など聞いたことがあるが、なん だかわからない呪文の意味がわかってとてもうれしかった。



[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。

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		

表 1 各ホストのログイン認証方式

※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

※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 follws.

----BEGIN RSA PRIVATE KEY-----

Proc-Type: 4, ENCRYPTED

DEK-Info: DES-EDE3-CBC, A3C27C703A6DF938

gp5U3M6wVIvuGLX80tYBAWC3WwNzX9TPu8e0CA9Pd/i6ijSNcVKp7IGJtuRzjfXV(中略)

FSwfyL63gRqxPZEmlcZzfDnhyX7ezdNNveZu37U/nq4TQj9+Q+RWHhjF9jwnuW6F-----END RSA PRIVATE KEY----

- (3) 画面に表示された秘密鍵 (---BEGIN RSA PRIVATE KEY--- から ---END RSA PRIVATE KEY--- まで)をコピー&ペーストし、ローカル PC にテキストファイルとして保存します。 公開鍵は自動的にユーザのホームディレクトリに登録されます。秘密鍵はセキュリティを考慮して消去されます。
- 4. 公開鍵暗号方式によるログイン方法
- 4.1 Linux/OS X のターミナルソフトから接続する方法

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

(1) パーミッションを600に変更します。(初回のみ)

リスト3 パーミッションの変更

localhost\$ chmod 600 ~/.ssh/id_rsa_cc

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

リスト 4 ログインホストへの SSH 接続例

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



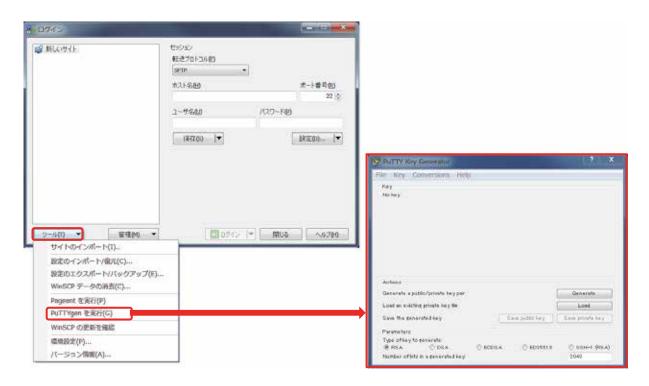
4.3 Windows の WinSCP から接続する方法

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。

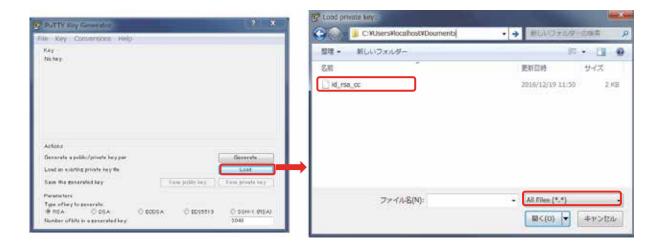
4.3.1 秘密鍵を PuTTY 形式に変換

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。



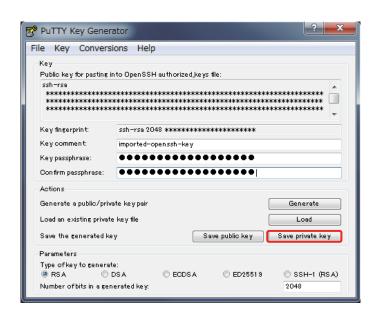
(2) [Load]を押下し、鍵サーバで生成した秘密鍵ファイルを選択して[開く]を押下します。 (秘密鍵ファイルの選択画面では、拡張子「All Files(*.*)」を選択します)



(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。



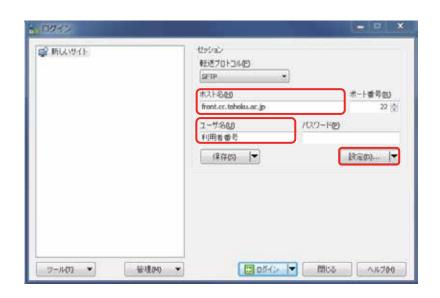
(4) [Save private key]を押下すると、PuTTY 形式に変換された秘密鍵が保存されます。 (保存先/ファイル名は任意。拡張子は.ppk を推奨)



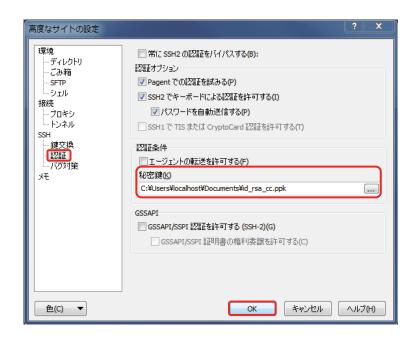
4.3.2 ログイン方法

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。



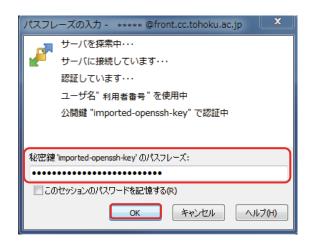
(2) 「SSH」 \rightarrow 「認証」を選択し、「秘密鍵」に PuTTY 形式の秘密鍵のファイルを指定して[OK] を押下します。



(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、データ処理等の各アプリケーションソフトウェアを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	サービスホスト	
分子軌道計算ソフトウェア	Gaussian	
反応経路自動探索プログラム	GRRM14	front on talkalını on in
統合型数値計算ソフトウェア	Mathematica	front.cc.tohoku.ac.jp
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。

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

本稿中の内容は 2019 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			LITE O
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 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1。アカウント希望の場合は共同利用支援係に利用申請し、利用者番号と初期パスワードを発行してもらいます。

¹ パスワード認証方式は 2015 年 4 月 13 日で廃止しました。

<u>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。</u>鍵ペアの作成 方法については本誌 30 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、秘密鍵および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。

【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。2019 年 4 月現在の最新版は 4.102 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: https://sourceforge.jp/projects/ttssh2/

● 並列コンピュータへの接続

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



「ユーザ名」に利用者番号、「パスフレーズ」に鍵ペアを作成した際に入力したものを入力、「RSA/DSA 鍵を使う」を選択し、「秘密鍵」に保存した秘密鍵のファイルを指定します。

(秘密鍵ファイルの選択画面では、拡張子「すべてのファイル(*.*)」を選択します)

[OK]を押下すると接続されます。



【シェルの初期設定】

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

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

【ファイル転送】

● コマンドラインでのファイル転送

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

● アプリケーションを利用したファイル転送

ファイル転送を行う代表的な 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 (Mathematica, MATLAB) の実行には、ローカルマシンに X Window System 環境の設定が必要です。

【Unix, Linux からの利用】

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

リスト 2. Matlab を起動する場合

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

localhost\$ ssh -i ~/.ssh/id_rsa_cc -X^{**} 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) : <u>yes</u> を入力

front1 \$ matlab

※ 大文字の"X"です。

【Windows からの利用】

● 商用のアプリケーションを利用する場合

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

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

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

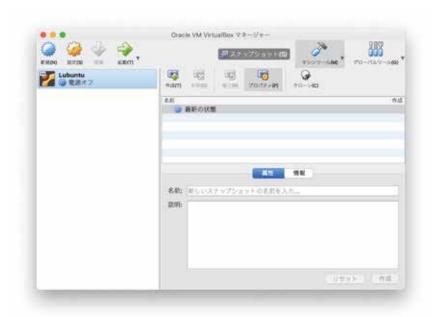
● Windows に仮想的な Linux をインストールする場合

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

「VirtualBox」は以下のページからダウンロードできます。「VirtualBox platform packages」(現在使用している OS に合ったもの)と「VirtualBox Extension Pack」の両方をダウンロードし、インストールを行ってください。インストール方法の詳細はマニュアルをご参照ください。2019 年 4 月現在の最新版は 6.0.4 です。

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

VirtualBox 6.0.4 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 18.10 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 18.10)



【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

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 コマンドに入力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.

0 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 2019.

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, https://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ださい。

■ 利用方法

インストール方法、データ作成方法などについては同梱マニュアルまたは以下のHPをご参照ください。 ヒューリンクス Gauss View 6: https://www.hulinks.co.jp/software/gaussview/ 並列コンピュータ front.cc.tohoku.ac.jp の Gaussian で解析を実行する手順

- 1. 入力データ作成後、Gaussian のインプットファイル「.com」としてエクスポートします。
- 2. インプットファイルを front.cc.tohoku.ac.jp に転送します。
- 3. front.cc.tohoku.ac.jp にログインします。
- 4. 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 Gauss View で表示します。

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

反応経路自動探索プログラム GRRM14

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

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

■ サービスホスト・バージョン

front.cc.tohoku.ac.jp · 14.01

■ 利用方法

利用方法はセンターのホームページ(https://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(https://iqce.jp/)、化学反応経路自動探索のWeb ページ(https://iqce.jp/GRRM/)を参照してください。また、GRRM プログラムは現在さらに開発が進められています。利用法の詳細や新しい情報を得るには、開発者と連絡をとることをお勧めします。(連絡先アドレス:ohnok@m.tohoku.ac.jp)

■ GRRM プログラムの文献と研究成果発表時の引用義務

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

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

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

• GRRM:

- (1) K. Ohno, S. Maeda, A Scaled Hypersphere Search Method for the Topography of Reaction Pathways on the Potential Energy Surface., Chem. Phys. Lett., 2004, 384, 277-282.; (2) S. Maeda, K. Ohno, Global Mapping of Equilibrium and Transition Structures on Potential Energy Surfaces by the Scaled Hypersphere Search Method: Applications to Ab Initio Surfaces of Formaldehyde and Propyne Molecules., J. Phys. Chem. A, 2005, 109, 5742-5753.; (3) K. Ohno, S. Maeda, Global Reaction Route Mapping on Potential Energy Surfaces of Formaldehyde, Formic Acid, and their Metal Substituted Analogues., J. Phys. Chem. A, 2006, 110, 8933-8941.
- 2PSHS:
- S. Maeda, K. Ohno, A New Approach for Finding a Transition State Connecting a Reactant and a Product without Initial Guess: Applications of the Scaled Hypersphere Search Method to Isomerization Reactions of HCN, (H2O)2, and Alanine Dipeptide., Chem. Phys. Lett., 2005, 404, 95-99.
- SCW:
- S. Maeda, K. Ohno, Conversion Pathways between a Fullerene and a Ring among C20 Clusters by a Sphere Contracting Walk Method: Remarkable Difference in Local Potential Energy Landscapes around the Fullerene and the Ring., J. Chem. Phys., 2006, 124, 174306/1-7.
- LADD, NLowest, NRUN:
- S. Maeda, K. Ohno, Structures of Water Octamers (H2O)8: Exploration on Ab Initio Potential Energy Surfaces by the Scaled Hypersphere Search Method., J. Phys. Chem. A, 2007, 111, 4527-4534.
- Frozen Atom:
- S. Maeda, K. Ohno, Lowest Transition State for the Chirality-Determining Step in Ru{(R)-BINAP}-Catalyzed Asymmetric Hydrogenation of Methyl-3-Oxobutanoate., J. Am. Chem. Soc., 2008, 130, 17228-17229.
- External Atom:
- S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, An Automated and Systematic Transition Structure Explorer in Large Flexible Molecular Systems Based on Combined Global Reaction Route Mapping and Microiteration Methods., J. Chem. Theory Comput., 2009, 5, 2734-2743.
- OptX
- S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, Updated Branching Plane for Finding Conical Intersections without Coupling Derivative Vectors., J. Chem. Theory Comput., 2010, 6, 1538-1545.
- ModelF
- S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, Automated Global Mapping of Minimum Energy Points on Seams of Crossing by the Anharmonic Downward Distortion Following Method: A Case Study on H2CO., J. Phys. Chem. A, 2009, 113, 1704-1710.; S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, Exploring Multiple Potential Energy Surfaces: Photochemistry of Small Carbonyl Compounds, Adv. Phys. Chem. 2012, 2012, 268124
- Add Interaction and/or MC-AFIR:
- S. Maeda, K. Morokuma, A Systematic Method for Locating Transition Structures of A + B → X Type Reactions., J. Chem. Phys., 2010, 132, 241102 (4 pages).; S. Maeda, K. Morokuma, Finding Reaction

Pathways of Type A + B \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)

数式処理プログラム Mathematica

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

- サービスホスト・バージョン front.cc.tohoku.ac.jp・version 11.3
- 利用方法

【Mathematica の起動】

● GUI 版

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

リスト 9. GUI 版の起動方法

localhost\$ ssh -i ~/.ssh/id_rsa_cc -X 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp

[front1 ~]\$ mathematica



リスト 10. テキスト版の起動方法

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

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

■ マニュアル・参考資料

参考資料

本センター本館 1階 利用相談室に、以下の資料を備えてあります。

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

科学技術計算言語 MATLAB

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

- サービスホスト・バージョン front.cc.tohoku.ac.jp ・ R2018b
- Toolbox

センターで導入している Toolbox です。

MATLAB

Simulink

Curve Fitting Toolbox

Communications System Toolbox

MATLAB Compiler

Control System Toolbox

DSP System Toolbox

Fuzzy Logic Toolbox

System Identification Toolbox

Image Processing Toolbox

MATLAB Corder

Model Predictive Control Toolbox

Neural Network Toolbox

Optimization Toolbox

Partial Differential Eauation Toolbox

Fixed-Point Toolbox

Robust Control Toolbox

Simulink Corder

Simulink Control Design

Signal Processing Toolbox

Symbolic Math Toolbox

Simulink Design Optimization

Statistics Toolbox

Simulink Verification and Validation

Wavelet Toolbox

■ 利用方法

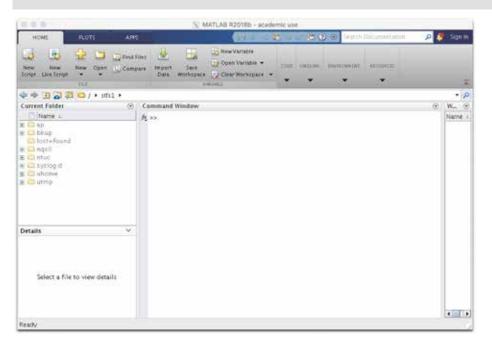
【MATLAB の起動】

● GUI 版

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

リスト 11. GUI 版 MATLAB の起動

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



● テキスト版

GUIを使用せず、コマンドライン上で起動することもできます。

リスト 12. テキスト版 MATLAB の起動

● 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 ←パ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。 https://www.mathworks.co.jp/help/ja_JP/techdoc/index.html

【参考資料】

本センター本館1階利用相談室に、以下の資料を備えてあります。

MATLAB による制御理論の基礎:野波健蔵,東京電機大学出版局

MATLAB による制御のためのシステム同定:足立修一,東京電機大学出版局

だれでもわかる MATLAB : 池原雅章, 培風館

はやわかり MATLAB 第2版: 芦野隆一, 共立出版

最新 MATLAB ハンドブック第3版:小林一行,秀和システム

MATLAB グラフィックス集:小国力,朝倉書店

MATLAB と利用の実際:小国力,サイエンス社

MATLAB の総合応用 : 高谷邦夫, 森北出版

最新使える!MATLAB: 青山貴伸,講談社

使える! MATLAB/Simulink プログラミング : 青山貴伸, 講談社

MATLAB による画像&映像信号処理 : 村松正吾, CQ 出版

Matlab によるグラフ描画 : 西村竜一 (広報誌 SENAC Vol.37 No.1 (2004-1))

高機能数値計算・可視化機能ソフト MATLAB の基本的な使い方 : 陳国曜 他

(広報誌 SENAC Vol.46 No.3 (2013-7))

[報告] 平成30年度東北大学サイバーサイエンスセンター顕彰報告

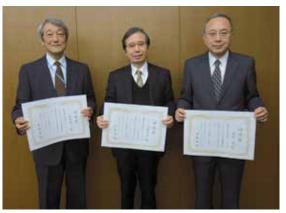
平成30年度東北大学サイバーサイエンスセンター顕彰について

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30年度は、国立情報学研究所の安達淳教授、本学の河野裕彦教授、鈴木陽一教授の3名に功労賞を授与いたしました。

本センターは、全国共同利用の学内共同教育研究施設等かつ共同利用・共同研究拠点として研究、教育等に係る情報化を推進するための研究開発並びに情報基盤の整備及び運用を行い、本学の情報化推進において中核的な役割を担っています。今回の功労賞の3名の皆様には、これまで上記に関わる多くの場面でその卓越した見識を持って、大きな力を発揮いただきました。

安達教授は、平成26年度及び29年度に行われたサイバーサイエンスセンター外部評価委員会委員長として、本センターの運営・取組みに対し、適切な指導・





助言をいただきました。また、本センター大規模科学計算システム全国共同利用連絡会議の構成員としても、長年にわたって本センターの発展のセンター運営に多大な貢献をされてきました。

河野教授は、平成 22 年度から継続的にサイバーサイエンスセンターと共同研究を実施し、三次元可 視化システムなどを使って分子シミュレーション技術の高度化に取り組み、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しました。あわせて、そこで得られた知見はセンターの大規模科学シ ステムのシステム設計にも活かされており、同システムの高度化にも多大な貢献をされてきました。

鈴木教授は、昭和 62 年から平成元年 6 月まで専任教官として、それ以降は兼任教官として本センターを支えてこられました。また、組織運営に関する重要事項を審議するための運営委員会構成員として、適切な助言・指導を行なうなど、長きにわたりセンターの管理・運営に多大な貢献をされてきました。表彰式は、平成 31 年 1 月 30 日 (水) 本センター大規模科学計算システム全国共同利用連絡会議の中で行われ、曽根秀昭センター長から安達教授、河野教授、鈴木教授へ表彰状が手渡されました。

『受賞者のコメント』

国立情報学研究所 副所長・特任教授 安達 淳

この度はサイバーサイエンスセンター功労賞をいただきまして大変ありがと うございます。

私には、サイバーサイエンスセンターおよびその前身との間に大変長いお付き合いがあります。全国 7 大学に設置されていた大型計算機センターの仕事に 1980 年代から加わったのが発端で、その後、大学共同利用機関の学術情報センター、その後身の国立情報学研究所の様々な仕事で協力してきました。

東北大学が全国に先駆けて構築した学内ネットワーク TAINS は大変インパクトがありましたし、SINET の前身の広域ネットワークの構築や初期のインターネ



ットによる研究ネットワークの構築でも、新しい試みに共にチャレンジしてきた間柄です。その後は、eduroam の全国展開や高等教育機関の情報セキュリティポリシーの策定などで、国立情報学研究所としましても大変お世話になっております。

近年はセンターの共同利用連絡会議のメンバーとしても頻繁に伺うことになり、センターの活動全般に関して情報を得る機会を得ることができました。また、2015年および2018年の3月にはセンターの外部評価委員会の委員長を拝命しまして、評価とりまとめの作業を行いました。スーパーコンピュータを擁する情報基盤センターは、それぞれの大学毎に特徴があり、東北大学は地域ネットワークも含めた情報環境の総合的な整備に留意して先導的に活動していると受け止めています。私も、センターの活動の持続的なチェックに微力ながら貢献できたのではないかと自負しつつ、今回の望外の受賞を光栄に思っております。

東北大学 名誉教授 河野 裕彦

私は、東北大学理学部在学中の1970年代中頃から長い間、熱や光によって励起された分子がどのように反応するかを理論的にまたコンピュータを使って明らかにする研究に携わってきました。その間、コンピュータの計算速度や周辺機器、入出力インターフェースなどのハード面での劇的な変化を目の当たりにし、またそれらの発展を享受してきました。とくに、東北大学では、大型計算機センターから現在のサイバーサイエンスセンターの時代まで、最先端のコンピュータ環境を利用することができ、量子化学計算や動力学計算の並列化などを進めることができました。今日では、電子励起状態間を乗り移る非断熱遷移



確率を高速で計算する手法も開発され、東北大学の並列コンピュータを使えば分子モーターのような大きな分子の光化学反応も追跡できるようになりました。ここに改めて御礼申し上げます。

このように、一般利用者としてサイバーサイエンスセンターの力添えで研究を進めてきた私にとって、サイバーサイエンスセンター功労賞をいただいたことは望外の喜びです。サイバーサイエンスセンターとともに量子化学計算ソフトの並列化に取り組んできたことなどを評価していただいたようですが、感謝に堪えません。最近では、並列計算機だけではなく、分子を構成する個々の原子の動きを三次元動画で立体的に見ることができるセンターの可視化機器室にある「三次元可視化システム」を利用させていただくようになりました。奥行きを視覚的に捉えられる三次元動画を使えば、化学になじみのない人でも、DNAの二重らせん構造やラジカルによる鎖切断の様子など複雑な系の反応を時間的・空間的に理解でき

ます。センターの協力のもと得られた成果は、毎年のオープンキャンパスでの模擬授業「飛び出すデジタル3D映像でミクロの世界を体感しよう!~DNA鎖切断や分子モーターの動画公開~」や高校教員を対象にした「教師のための化学教育講座」などで公開してきました。未就学児、小中高校生から一般参加者まで、熱心に耳を傾けていただき、3D動画の世界を堪能していただいたようです。好奇心旺盛な子供たちのなかから、コンピュータやその関連科学の未来を切り拓く科学者がでてくるに違いありません。私は過去40年のコンピュータとその周辺科学のめざましい進歩を見てきました。今後も、サイバーサイエンスセンターには、学生をはじめとする一般ユーザーがコンピュータやネットワークを有効に活用できる環境を整備し続けていただければと願っています。その基幹組織である貴センターが全学の支援のもと、ますます発展していかれることを祈っております。

東北大学 名誉教授 鈴木 陽一

私は卒業研究から現サイバーサイエンスセンターの前身である大型計算機センターの利用者となり、博士課程では聴覚の知覚モデルのシミュレーションを当時のACOS700、ACOS900で行いました。それから40年ほど経ったことになります。昭和62(1987)年に大型計算機センターの助教授を拝命しました。この人事は(現在TAINS88と呼ばれている)日本で最初の全学ネットワーク構築に向けて大型計算機センターの強化が必要になったためと聞かされました。電気通信研究所の助手時代とは違い、技官、事務官、教官が一体となって業務を進めていく経験を持ったことは、当時の私に大きな意識改革を引き起こし、そ



の後の大学人としての心構えを形成するかけがえのない経験になりました。当時の大型計算機センターでは汎用機のソフトウェアパッケージ担当となりました。NEC の統計ソフトウェアパッケージ担当者と泊まり込みの合宿を行ったのが懐かしく思い出されます。SASやSPSSなど商用パッケージの時代を経て、現在では R がオープンソースの雰囲気の下で広く用いられているのをみると隔世の感があります。また図形システムでは ISO 規格となった図形描画システム GKS を導入しました。さらに GKS を核として高エネ研が開発した多機能グラフ描画パッケージ KEK DRAWER の移植を担当するとともに、若い仲間と一緒に GKS ベースのグラフ描画マクロ (EZ-Graph)を開発して解説を SENAC に連載したこともよい思い出です。また、研究開発部の一員として、当時 virtual instrument と呼ばれていた AD 変換器ベースの測定環境構築に取り組んだことは、電気通信研究所に配置換えになってからも私の研究の特徴(芸風)になった気がします。

その後もこの平成 30 (2019) 年 3 月まで兼務にしていただき、superTAINS のお披露目、SENAC や TAINSnews 編集、さらには情報シナジー機構などで実務的な仕事をする機会をいただいてきたのは、大型計算機センターの助教授に任じられたことが原点であったと考えています。その意味で、兼務とはいえセンターの一員である私がこの度の顕彰のお知らせをいただいたときには、なぜ私がと驚きました。しかし、本務ではないのに少しは役に立ったよと褒めていただけたのだと考えますと、定年を迎える節目にあたって、私の東北大学教官・教員としての 38 年間に大きな花を添えていただいたものと心から感謝しています。本当にありがとうございました。これからはセンターの学外応援団の一員として、センターが支える情報基盤の充実、高度化、そして研究の発展を心から願い、かつ確信しています。

[報告]

第29回高性能シミュレーションに関するワークショップ(WSSP29)開催報告

江川隆輔 1,2, 小松一彦2

¹スーパーコンピューティング研究部,²高性能計算技術開発(NEC)共同研究部門

東北大学サイバーサイエンスセンターは、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) と NEC と共に 2019 年 3 月 19 日 (火) \sim 20 日 (水) にかけて高性能計算に関する国際ワークショップ「第 29 回 Workshop on Sustained Simulation Performance (WSSP29)」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き、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に開催されております。

今回のワークショップは、本学の青木孝文理事・副学長のご挨拶、文部科学省研究振興局参事官(情報担当)付計算科学技術推進室長 坂下鈴鹿氏のSociety5.0を見据えた我が国のHPC政策、ならびにポスト京コンピュータの研究開発事業に関する講演で幕を開けました。また、ドイツシュトゥットガルト大学高性能計算センター(HLRS)の Michael Resch センター長からは将来の高性能計算(HPC)と人工知能(AI)の在り方に関する講演、本学の小林広明教授からは、現在取り組んでいる文科省次世代領域開発事業「量子アニーリングアシスト型次世代スーパーコンピューティング基盤の開発」に関する講演、理化学研究所計算科学研究センターの石川裕氏からは2021年に稼働予定の次期フラグシップスパコン「ポスト京」の最新の開発状況に関する講演など、日本、ドイツ、ロシアの研究者により、アプリケーション開発、HPCシステム開発と性能評価、システム運用技術など、最新のHPC 技術動向に関する幅広い分野の25件の技術講演がありました。2日間を通して延べ158名の参加者が集い、将来の高性能計算の在り方に関する活発な議論が行われ、大変有意義なワークショップとなりました。その他ワークショップに関する詳細はweb ページhttps://www.sc.cc.tohoku.ac.jp/wssp29/ja/index.htmlをご覧ください。

末筆ではございますが、本ワークショップ開催にあたり多大ならご支援を賜りました学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(JHPCN)、一般社団法人 HPCI コンソーシアム、年度末のお忙しい中ご参加、ご講演いただいた皆様に深く感謝いたします。



坂下氏のご講演



ワークショップの様子

[報告]

第1回日本オープンイノベーション大賞において、 本センター・撫佐昭裕客員教授らの研究グループが総務大臣賞を受賞しました

無佐客員教授らの研究グループは、2013年より理学・工学・情報科学の研究者と企業の技術者による産学連携研究を開始し、スーパーコンピュータの災害時緊急利用技術と世界初のリアルタイム津波浸水被害予測技術を開発、実用化しました。また、実用化した技術を国内外の防災技術として普及させるため、東北大学発ベンチャー企業株式会社RTi-cast (https://www.rti-cast.co.jp)を2018年3月に設立しました。これらの成果と取り組みが高く評価されたものです。なお、業績名、受賞者は以下のとおりです。

○ 第1回オープンイノベーション大賞(注1) 総務大臣賞

業績名:「リアルタイム津波浸水被害予測システムの開発と運用」

受賞者: 越村俊一 (代表者:東北大学災害科学国際研究所教授、株式会社RTi-cast 最高技術責任者)

太田雄策 (東北大学理学研究科准教授、 株式会社RTi-cast 技術顧問)

村嶋陽一 (国際航業株式会社 防災情報チームリーダー、株式会社RTi-cast

代表取締役、東北大学災害科学国際研究所特任教授)

撫佐昭裕 (日本電気株式会社 主席システム主幹、株式会社RTi-cast 最高執行責任者、

東北大学サイバーサイエンスセンター客員教授)

加地正明 (株式会社エイツー取締役、株式会社RTi-cast 最高財務責任者)



受賞者の方々。(一番右が撫佐客員教授)

(注1) 日本オープンイノベーション大賞は、我が国のオープンイノベーションをさらに推進するために、今後のロールモデルとして期待される先導性や独創性の高い取組を表彰するもので、2017 年度までの「産学官連携功労者表彰」の継続表彰として、2018 年度より開始されました。

[報告]

平成30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4件が開催されましたのでご報告いたします。

第10回サイバーサイエンスセンターセミナー

テーマ:「International Workshop on Security (IWSEC2018)」

日 時: 平成30年9月3日(月)11:00-19:30

9月4日(火) 9:00-13:00

9月5日(水) 9:00-13:00

会 場:東北大学片平さくらホール

主 催:一般社団法人 情報処理学会 コンピュータセキュリティ研究会

一般社団法人 電子情報通信学会 情報セキュリティ研究会

東北大学サイバーサイエンスセンター

参加者:94名

概 要:このワークショップは、情報処理学会コンピュータセキュリティ研究会 (CSEC) および 電子情報通信学会情報セキュリティ研究会 (ISEC) が主催する、セキュリティ分野にお ける日本を開催地とする国際会議です。13回目の今回は、東北大学サイバーサイエンス センターも主催に加わり、採択論文による7セッションおよび2つの招待セッションを 合わせて、計24件の最新の研究成果の発表が行われ、参加者による活発な議論、意見交 換が行われました。招待セッションでは、本学本間尚文教授とタイ・マヒドン大学・ヴァサカ准教授にご講演いただきました。

第 11 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30年12月26日(水)9:00-17:00

12月27日(木) 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:6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12回サイバーサイエンスセンターセミナー

テーマ:「ICT-DM2018 (The 5th International Conference on Information and Communication Technologies for Disaster Management, 第5回災害管理用情報通信技術に関する国際会議)」

日 時:平成30年12月4日(火)~12月7日(金)

会 場:東北大学片平さくらホール

主 催:東北大学サイバーサイエンスセンター

共 催: IEEE, IEEE Communications Society, SIG on Big Data with Computational Intelligence The Research Centre on Scientific and Technical Information

日本災害情報学会

東北大学大学院情報科学研究科

助 成:仙台観光国際協会 電気通信普及財団

参加者:100名(うち、海外居住参加者数28人、参加国数14ケ国)

概要: ICT-DM は災害管理用情報通信技術(ICT)に関する最新研究・技術・経験等を共有し、今後の課題や取組について意見交換、議論を行うことを目的とした国際会議であり、欧州以外で初めての開催を主催しました。

一般投稿 75 編があり、これを査読(採択率上限 40%)し、一般講演 28 件のほかに、キーノート講演 3 件 (Guoliang Xue (Arizona State University, USA), Chuan-Yao Lin (Academia Sinica, Taiwan), Hiroaki Kobayashi (Tohoku University, Japan))、ポスター講演 35 件を 3 日間で実施し、講演と議論により国際連携を深めることができました。また、4 日目に、震災被災地を視察する Excursion とした。Proceedings(電子版)を配布し、開催後に一般講演論文を IEEE Xplore に掲載しました。

第13回サイバーサイエンスセンターセミナー

テーマ:「第29回 Workshop on Sustained Simulation Performance (WSSP)」

日 時: 平成31年3月19日(木) 10:00-17:30

3月20日(金) 9:50-17:40

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

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

参加者:158名

概要:高性能計算に関する国際ワークショップ「第29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. 55 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/

ホームディレクトリの無料ストレージ増量および 2019 年度の利用負担金について(No. 275)

2019 年度は、利用者が無料で利用できるホームディレクトリ (/uhome/利用者番号 配下)のストレージ容量を、これまでの 1TB から 5TB に増量し、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 こと、あらかじめご了承ください。

		1 坐件	·利用貝坦金【八子·子附利用】
区分	項目	利用	負 担 額
		形態	
		7.12 7.2	利用ノード数 1(実行数、実行時間の制限有) 無料(備考2)
演算			
		共有	利用ノード数 1~32 まで 経過時間 1 秒につき 0.06 円
貝担胜貝		共作	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
	スーパー		(利用ノード数-256)×0.0016円+0.508円
	コンピュータ		利用ノード数32 利用期間3ヶ月につき 400,000円
			,
		Ь →	利用期間 6 ヶ月につき 720,000円
		占有	 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
			利用期间 6 ケ月につさ 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
			利用ノード数 1~6 まで 経過時間 1 秒につき 0.04 円
		共有	利用ノード数 7~12 まで 経過時間 1 秒につき 0.07 円
	並列	77 H	
	业分 コンピュータ		利用ノード数 13~18 まで 経過時間 1 秒につき 0.1 円
	コンヒュータ		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	5TB まで無料。	追加容量	1TB につき年額 3,000円
負担経費	3. 3,		
出力	大判プリンタに	・トスカ	ラープリント フォト光沢用紙1枚につき 600円
負担経費		· A 'U //	クロス1枚につき $1,200$ 円
可視化	1 吐用の利用)~	- + .	
機器室利用	1時間の利用に	つさ	2,500円
負担経費			
	1		

表 1 基本利用負担金【大学·学術利用】

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。

区分	項目	利用	負 担 額
		形態	(利用) 以来((中に来、中に吐用の地間ナ) 何収((世共の)
>++			利用ノード数 1(実行数、実行時間の制限有) 無料(備考2)
演算		ш.≠-	利用ノード数 1~32 まで 経過時間 1 秒につき 0.18 円
負担経費		共有	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
	スーパー コンピュータ		(利用ノード数-256)×0.0048円+1.524円
	コンヒュータ		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
		占有	
			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
			13/13/24/19 9 / / 37 (= 1 C
			利用ノード数1~6まで 経過時間1秒につき 0.12円
		共有	利用ノード数7~12まで 経過時間1秒につき 0.21円
	並列		利用ノード数 13~18 まで 経過時間 1 秒につき 0.3 円
	コンピュータ		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	5TB まで無料、	追加容量	1TB につき年額 9,000円
負担経費			
出力	大判プリンタに	よるカラ	ラープリント フォト光沢用紙1枚につき 1,800円
負担経費			クロス1枚につき 3,600円
可視化	1時間の利用に	つき	7,500 円
機器室利用			
<u>負担経費</u> 備者			

表 2 基本利用負担金【民間機関利用】

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)

科学技術計算言語 MATLAB のバージョンアップについて (No. 275)

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 R2018b

バージョンアップ日 : 2019年4月1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

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 31 年度共同研究について (No. 276)

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9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	大規模周期構造上に置かれたアンテナの特性解析
		大学院工学研究院	に関する基礎検討
A-2	松岡 浩	技術士事務所	リカレントニューラルネットワークによる高解像
		A I コンピューティン	度流体解析コードの開発
		グラボ	

[B] 一般課題

No.	申請者	所属	研究課題
B-1	青木 秀之	東北大学大学院	不均一反応により変化する固体燃料の大規模シミ
		工学研究科	ュレーション
B-2	茂田 正哉	大阪大学	熱プラズマ材料プロセスにおける熱・物質輸送の非
		接合科学研究所	平衡過程の大規模数値シミュレーション
B-3	陳 強	東北大学大学院	高機能な大規模アンテナの電磁界数値解析法に関
		工学研究科	する研究
B-4	塚原 隆裕	東京理科大学	層流ー乱流が共存する亜臨界遷移流れを対象とし
		理工学部	た大規模計算領域による直接数値解析
B-5	藤井 孝藏	東京理科大学	プラズマアクチュエータの新たな利用推進と関連
		工学部	課題の解決に関する研究
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
В-7	横堀 壽光	帝京大学	マルチマテリアルにおける水素拡散凝集挙動に及
		戦略的イノベーション	ぼすポテンシャル誘起駆動力特定解析プログラム
		研究センター	の開発

(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. 276)

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. 276)

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. 276)

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ページを超す場合は共同利用支援係まで前もってご連絡ください。
- (4) 初回の校正は、執筆者が行って、誤植の防止をはかるものとします。
- (5) 原稿の提出先は次のとおりです。

東北大学サイバーサイエンスセンター内 情報部情報基盤課共同利用支援係

e-mail uketuke@cc.tohoku.ac.jp

TEL 022-795-3406

スタッフ便り

桜爛漫の季節を迎えました。日本各地に桜の名所がありますが、私には毎年訪れるところがあります。ネットでその場所を検索してみると、「日本の道 100 選」に選定されていて、桜花のトンネルが形成される4月上旬の開花時には「さくらまつり」が開かれ、約50万人の人出がある、と説明されていました。この地は、私が社会人になってから住み始め、結婚、子供の誕生と5年ほど暮らした場所です。長く暮らしたわけではありませんが、そこの桜が人生の節目と重なり、私にとっては一番の桜の名所となっています。数年前から老木を若木に入れ替える作業が行われていて、以前より桜のトンネルに迫力がなくなりましたが、今年も若木の生長を楽しみに足を運びました。数十年後には、また、以前のようなトンネルが見られるようになるかと思うと大変楽しみです。(A.M)

この便りを書いているのは4月。まだ平成です。SENAC がお手元に届くころには新しい元号に変わっているんですね。何だか不思議です。

少しずつ暖かく春を感じる日が増えてきました。春といえば桜。毎年桜の写真を撮りにあちらこちら出かけるのがこの時季の楽しみです。桜並木もいいですが、昨年は、家でも桜を楽しみたいと思い、小さな桜の盆栽を買いました。つぼみの状態からゆっくりゆっくり開いていく過程も楽しむことができ、これもまた贅沢な時間でした。遅咲きの品種なので、SENACが届く頃にようやくつぼみが開きはじめると思います。さて、今年もきれいに咲いてくれるでしょうか。楽しみです。(A.S)

サイバーサイエンスセンタースタッフ着任・退任のお知らせ

2019.4.1付け

[着任]

菅沼 拓夫(センター長)

滝沢 寛之(副センター長)

小林 広明 (センター長特別補佐)

2019.3.31 付け

[退任]

曽根 秀昭(センター長)

吉澤 誠 (副センター長)



センター本館5階窓から西方向の景色

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31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 株式会社 東誠社

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	dobug	利用ノード数
フハック	17~32	24 時間		debug	利用ノード数

^{※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	1 v	利用ノード数
アプリ ケーション	1	なし	128GB	1x	а
会話型	1(6コアまで)	1 時間 (CPU 時間合計)	8GB	_	_

※2ノード以上を利用した並列実行にはMPIの利用が必用

東北大学サイバーサイエンスセンター

大規模科学計算システム広報 Vol.52 No.2 2019—4

[巻頭言] センター長就任のごあいさつ 	
[共同研究成果] リアルタイム津波浸水被害予測の全国展開に向けた検討	2
直接数値解析による環状流路ポアズイユ流の亜臨界遷移の研究 塚原 隆裕・石田 貴大	9
仮想粒子の並進移動過程に干渉効果を加味した流体解析の可能性 松岡 浩・菊池 範子	18
[お知らせ] 2019 年度サイバーサイエンスセンター講習会のご案内	28
[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	30
アプリケーションサービスの紹介	37
[報告]平成30年度東北大学サイバーサイエンスセンター顕彰報告>平成30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	52
受賞者のコメント	53 53 54
第 29 回高性能シミュレーションに関するワークショップ(WSSP29)開催報告 	55
第1回日本オープンイノベーション大賞において、 本センター・撫佐昭裕客員教授らの研究グループが総務大臣賞を受賞しました	56
平成 30 年度サイバーサイエンスセンターセミナー報告	57
[Web 版大規模科学計算システムニュースより] ホームディレクトリの無料ストレージ増量 および 2019 年度の利用負担金について(No.275)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	60
科学技術計算言語 MATLAB のバージョンアップについて (No.275)	61
平成 31 年度共同研究について (No.276)	62
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.276)	63
民間企業利用サービスについて (No.276)	63
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.276) ······	64
執筆要項	65
スタッフ便り	66

