



TOHOKU  
UNIVERSITY

ISSN 2436-0066

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.56 No.2 2023-4



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。>

<https://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) cc-sodan@grp.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  9:00～21:00
	利用者談話室	(3444)	自販機	8:30～21:00
	展示室* (分散コンピュータ博物館)*	*見学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	9:00～16:00
三階	総務係	022-795-3407 (3407) cc-som@grp.tohoku.ac.jp	総務に関すること	8:30～17:15
	会計係	022-795-3405 (3405) cc-kaikei@grp.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) cc-uketuke@grp.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) i-network@grp.tohoku.ac.jp	ネットワークに関すること	8:30～17:15
四階	研究開発部	022-795-6095 (6095)		
五階	端末機室	(3445)	PC 端末機 (X 端末)	

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

### 本誌の名前「SENAC」の由来

昭和 33 年に東北地区の最初の電子計算機として、東北大学電気通信研究所において完成されたパラメ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 ]

## DBD プラズマアクチュエータを用いた

## NACA0015 翼流れ剥離制御へのガーニーフラップの適用

浅田 健吾：東京理科大学工学部情報工学科

稲向 隆：東京理科大学工学部機械工学科

関本 諭志：東京農工大学工学部機械システム工学科

藤井 孝藏：東京理科大学工学部情報工学科

## 1. はじめに

流体機器における流れの剥離は機器の性能を著しく低下させる現象で、古くからこれを制御する試みがなされてきた。近年、DBD (Dielectric Barrier Discharge：誘電バリア放電)プラズマアクチュエータ (以下 PA) と呼ばれる流体制御デバイス[1, 2]が注目され、世界的に多くの研究がなされている。国内でも 2013 年から日本機械学会にプラズマアクチュエータ研究会が設けられ、実用化に向けて産業界を巻き込んだ議論が活発に行われている[3]。PA は、対象とする流れ場に局所的な変動を与えることで周囲の大きな流れを制御するマイクロ流体制御デバイスで、2 枚の電極とそれに挟まれた誘電体からなる単純な構造を持つ (図 1)。全体の薄さは数百マイクロメートルと非常に薄く軽量で、取り付けることによる形状変化が極めて小さいために既存システムへの導入が容易であることが特徴である。電極間に高周波・高電圧の交流電圧を印加することで露出電極周辺にプラズマが発生し、非定常な流体変動が誘起される。この印加電圧の ON/OFF に対して瞬時に応答するのも利点である。他にも機械的な駆動部を持たない、消費電力が少ないなど多数の利点を有するために航空機の翼[4-10]、風力発電タービン[11, 12]、ガスタービン[13]、換気ダクト[14]、自動車[15-18]など様々な流れに適用するための基盤研究が進められている。

特に翼流れに対する研究は数多く存在し、限られた条件下ではあるものの剥離制御メカニズムや PA の適切な駆動条件などが明らかになってきている[8-10]。失速迎角付近の低レイノルズ数 NACA0015 翼流れにおいて、PA の ON と OFF を周期的に切り替えるバースト駆動を用いることで流れの剥離抑制が効果的に行えることがわかっている。駆動条件を表現するために無次元バースト周波数  $F^+$  が用いられるが、失速迎角付近では  $F^+=6$  付近の周波数が有効であることがわかっている。 $F^+=6$  を用いた制御は流れの乱流遷移を促進し、翼前縁からの大規模な剥離は抑制され、これによって揚抗比は大きく改善する。このように  $F^+=6$  を用いたバースト駆動は翼性能を大きく改善するが、一方で、翼後縁付近で流れが再度剥離することが知られており、この後縁剥離を抑制できればさらなる性能向上が期待できる。翼後縁の圧力分布になんらかの方法で変化を加えられれば剥離を抑制できる可能性があるが、その一つの手段としてガーニーフラップがある。

ガーニーフラップ (以下 GF) は 1970 年代に Daniel Gurney がレースカー用に開発したフラップで、翼後縁において翼に対して垂直に突出する小さな固定タブである。航空機用の翼に対しては翼下面に GF を設置することで一定の揚力増加が得られる事がわかっている[19]。GF に関する研究は GF が揚力を増加させるメカニズムに関する研究[20-22]などが行われているが、PA を用いた前縁剥離制御と後縁のガーニーフラップを併用した研究はなく、その効果については明らかにされていない。そこで本課題では、高忠実度シミュレーションを実施することで PA と GF の併用が PA 単体での剥離制御に比べて効果的であるかどうかを検証し、空力係数と流れ場との関係を明らかにする。

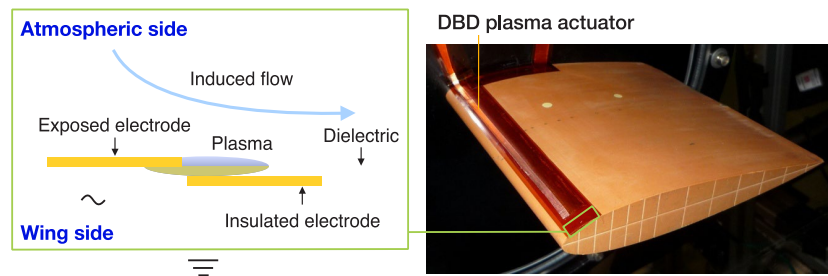


図 1: DBD プラズマアクチュエータの構造と翼型への設置例

## 2. 問題設定と計算条件

### 2.1 翼型とガーニーフラップ形状, 流れ条件, 計算条件

図 2 に対象とする GF を取り付けた NACA0015 翼を示す. NACA0015 翼はこれまで PA を用いた剥離制御に関して多くの研究がなされており[8-10], 筆者らも豊富な知見を有する翼型である. GF の形状は Troolin らによって行われた先行研究[19]と同一の形状とし, コード長に対して高さを 4%, 幅を 1%, 取り付け角度をコード方向に対して垂直とした.

翼型のコード長と一様流に基づくレイノルズ数は過去多くの実験[6]や数値計算[8]がなされている  $Re = 6.3 \times 10^4$  とする. 迎角は失速前の 8 度と失速直後の 12 度とする. PA の設置位置は過去の研究[8]と同様に剥離制御効果が確認されている失速時の剥離点付近 (翼前縁からコード長の 5%位置) に設置する.

PA 制御も GF も用いないケースを “Clean”, PA 制御を行うケースを “PA”, GF を取り付けたケースを “GF”, PA 制御と GF を併用したケースを “GF&PA” とする.



図 2: ガーニーフラップ付き NACA0015 翼

### 2.2 プラズマアクチュエータのモデル化

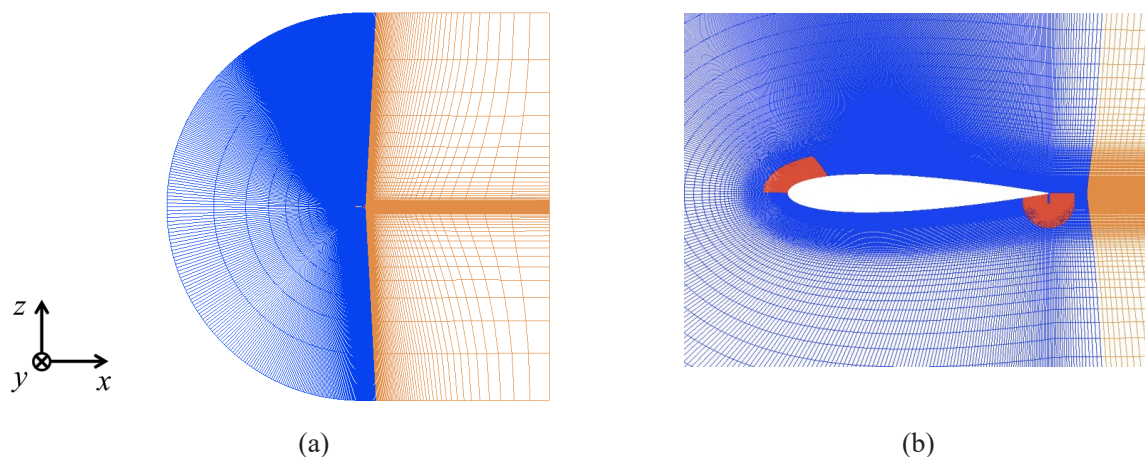
PA による流れ場への運動量供給は, 支配方程式に体積力項を導入することで模擬する. 体積力のモデル化によるプラズマ効果と流体支配方程式のカップリングには, 幾つかの種類が存在するが, 本研究では比較的単純なモデルである Suzen と Huang ら[23]の定常体積モデル (以下 Suzen モデル) を非定常に拡張した体積モデルを用いる. この修正モデルの数値計算への導入方法やその信頼性に関する詳細の記述, および数値計算の妥当性については既出論文を参照されたい[24, 25]. アクチュエータの出力を決めるパラメータ  $Dc$  を 0.4 とした. この値はこれまで行ってきた翼流れ制御[8]において一様流  $U_\infty$  とアクチュエータの誘起流速  $U_{DBD}$  の比が  $U_{DBD}/U_\infty \sim 1$  となる現実的な値である. また, PA は連続駆動を用い, 周波数は一様流と代表長さを基準とした無次元周波数で 60 である.

## 2.3 計算手法

数値計算手法は基本的に過去の SENAC への寄稿[26]と同じである。3次元圧縮性 Navier-Stokes 方程式を支配方程式とし、implicit LES (Large Eddy Simulation)によるモデル化を行った基礎方程式を差分法により離散化して数値シミュレーションを実施する。対流項および粘性項の離散化には高解像度スキームである6次精度コンパクト差分法[27]を用いる。メトリックス、ヤコビアンについても同様の評価を採用する。また、数値振動を抑えるために10次精度3重対角フィルタをともに用いる。時間積分にはADI-SGS[28]陰解法を用いるが、内部反復の導入によって大きな時間ステップ幅でも時間精度が維持されるようにしている。一様流とコード長基準の無次元時間刻みは  $4 \times 10^{-5}$  (クーラン数は約2)とした。

## 2.4 計算格子と境界条件

図3に計算格子を示す。計算格子は翼周り全体の流れを解く格子 (Zone 1)、後流を解く格子 (Zone 2)、PAが誘起する微小な変動を解像格子する格子 (Zone 3)、GF周りの流れを解く格子 (Zone 4) の4つゾーンからなる。各ゾーンの格子点数を表1へ示す。総格子点数は約2400万点である。翼面から外部境界までの距離はコード長基準で25、スパン方向領域は0.2である。翼とGFの表面は滑りなし断熱境界条件、スパン方向には周期境界条件、外部境界は静圧を一様流圧力に固定した流入流出境界条件を用いる。





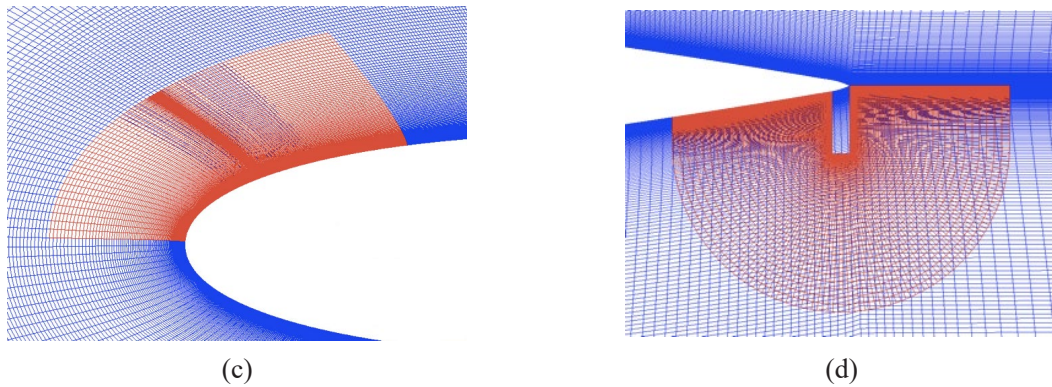


図 3 : 計算格子

表 1 : 計算格子点数.

	jmax x kmax x lmax	Number of grid points
Zone 1	693 x 179 x 134	16,622,298
Zone 2	71 x 357 x 134	3,396,498
Zone 3	149 x 111 x 134	2,216,226
Zone 4	250 x 60 x 134	2,010,000
Total	N/A	24,245,022

## 2.5 計算機に関して

計算機には、東北大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-Aurora TSUBASA を利用した。計算には 8VE を利用し、分割した計算領域を割当てて計算を実施した。ノード内はスレッド並列（自動並列）、VE 間は MPI によるハイブリッド並列を用いた。1 ケースの計算時間はおよそ 50 時間である。

## 3. 計算結果

### 3.1 瞬間流れ場

図 4 に GF&PA ケースのシミュレーションで得られた瞬間流れ場を示す。迎角は 8 度である。等値面は速度勾配テンソルの第 2 不変量で、コード方向速度で色付けしている。流れは翼前縁では層流であるが、下流に向かって PA によって誘起されたスパン方向の渦が細かな 3 次元的な渦に崩壊していく様子が見てとれる。また、翼後縁のガーニーフラップ背後では流れがわずかに剥離しているのがわかる。このような非定常な渦崩壊や剥離現象を解像できるのは高解像度スキームを用いた LES を実施したためである。

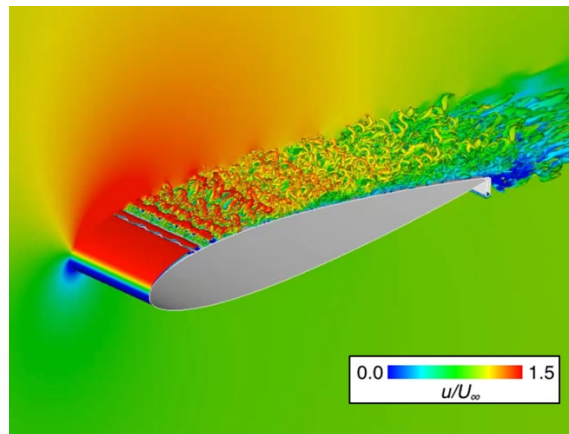


図 4: 瞬間流れ場 (GF&PA, 迎角 8 度)

### 3.2 GF と PA の併用による空力係数の変化

空力係数評価に用いる平均流れを取得するために準定常状態になってから無次元時間で 6 の区間 (15 万ステップ) の平均を行う。ただし, 12 度における GF&PA ケースのみ, 図 5 に示すように剥離が抑制され  $C_L$  の高い状態から流れが一時的に剥離した  $C_L$  の低い状態が現れるため, それらを合わせて平均をとった流れと付着した区間のみ平均した流れに分けて議論を行う。10 万から 90 万 step の流れを剥離領域を含めた平均とし, 15 万から 30 万 step を付着した流れの平均区間とした。

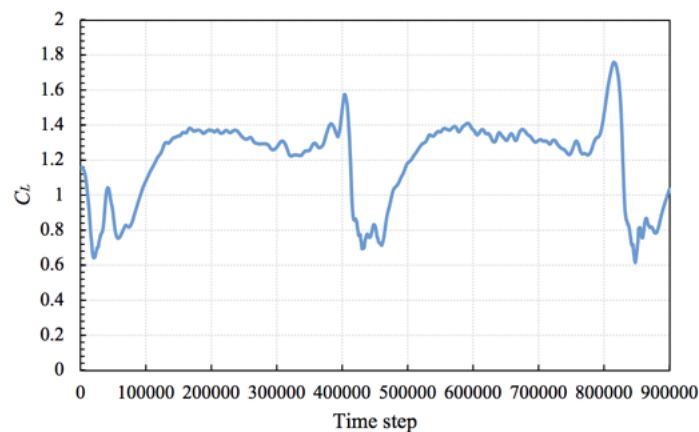


図 5: GF&PA 揚力係数の時間履歴 (12 度)

図 6-8 に平均流れから得られる空力係数と迎角 8 度, 12 度のコード方向平均速度分布をそれぞれ示す。図 6b の GF&PA ケースにおいて薄い色で表される値は流れの付着区間のみ平均した値である。迎角 8 度では GF も PA も付加していない NACA0015 翼流れ (Clean) は失速していない。そのため PA による流れ制御を行ったケース (PA) と比較しても  $C_L$  の値は高いが,  $L/D$  は PA ケースの方が高い。これは図 7a に示す翼前縁付近から形成される剥離泡が PA の駆動によって抑制され,  $C_D$  が減少したためである (図 7b)。また, PA を用いることで剥離泡が縮小する一

方で、後縁で剥離が生じているのがわかる。GF を用いたいずれのケース (GF, GF&PA) においても揚力が Clean に比べて大きく向上している。GF のみ付加した場合は抗力も増加するので  $L/D$  は低下しているが、GF と PA を併用した場合は剥離泡の縮小によって抗力が低減されるために  $L/D$  は4 ケース中で最も高くなっている。また、図 7d に示すように PA のみ使用した場合に見られた後縁剥離も縮小しているのがわかる。

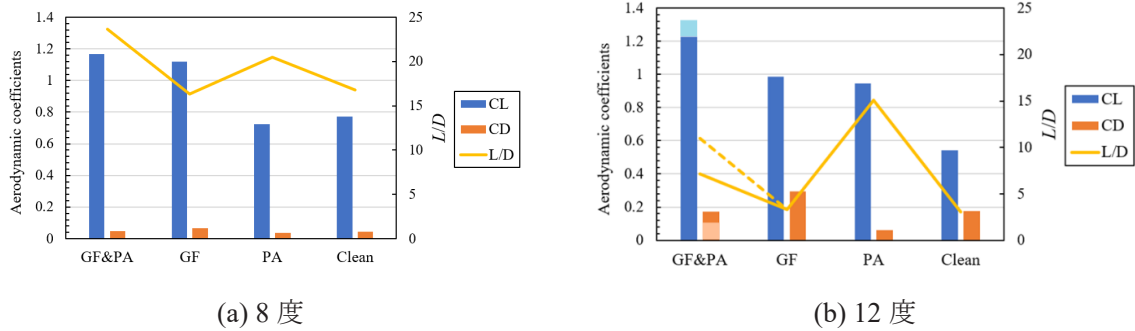


図 6: 空力係数比較

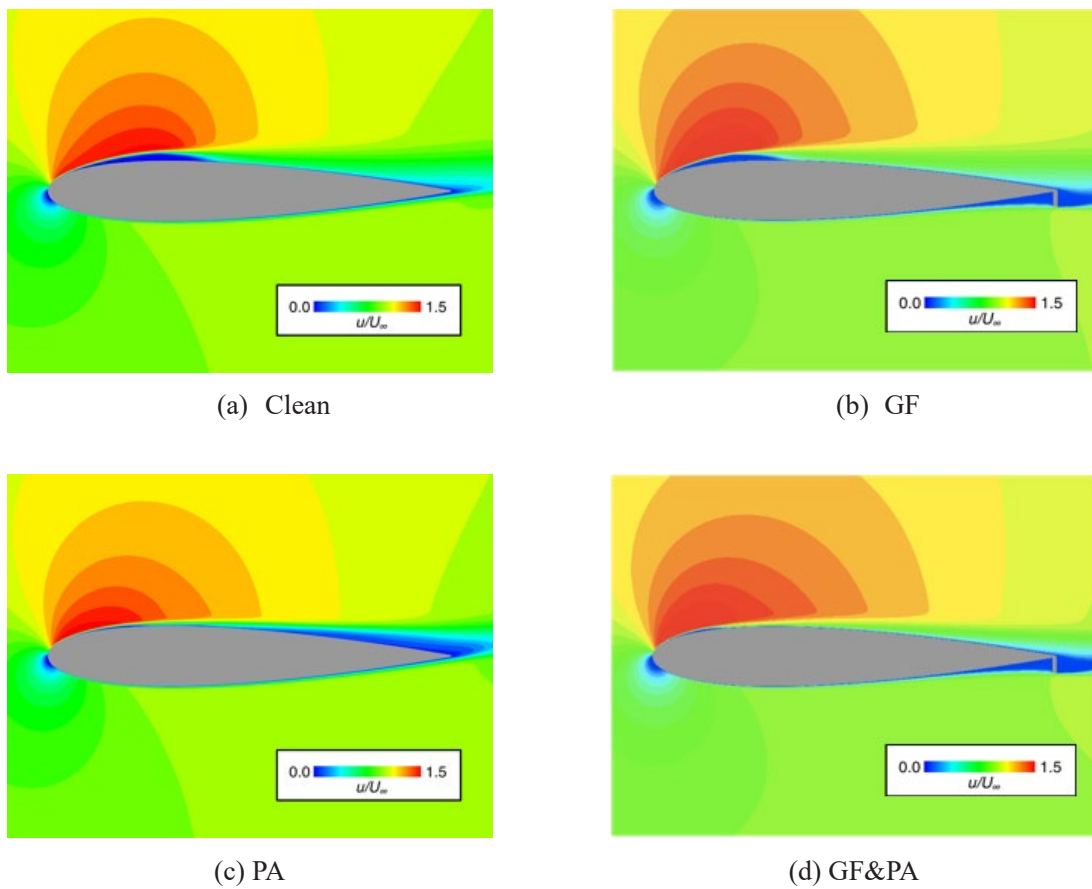


図 7: 平均流れ場 (コード方向速度分布, 8 度)



12 度において Clean ケースの流れは失速しており，図 8a に示すように前縁から流れが大きく剥離しているため， $C_L, L/D$  ともに 8 度の Clean ケースや 12 度における他のどのケースよりも低い値となっている．また，GF ケースも図 8b において流れが大きく剥離している．この剥離によって  $C_D$  が大きくなり， $C_L$  が GF の効果で大きくなっているものの， $L/D$  は Clean ケースに近い低い値となっている．一方で PA を用いたいずれのケース（PA, GF&PA）も図 8 に示すように平均場においては前縁からの大規模剥離は抑制されている． $C_L$  の値は GF&PA のケースがもっとも高いが， $L/D$  の値は PA ケースがもっとも高い（図 6b）．

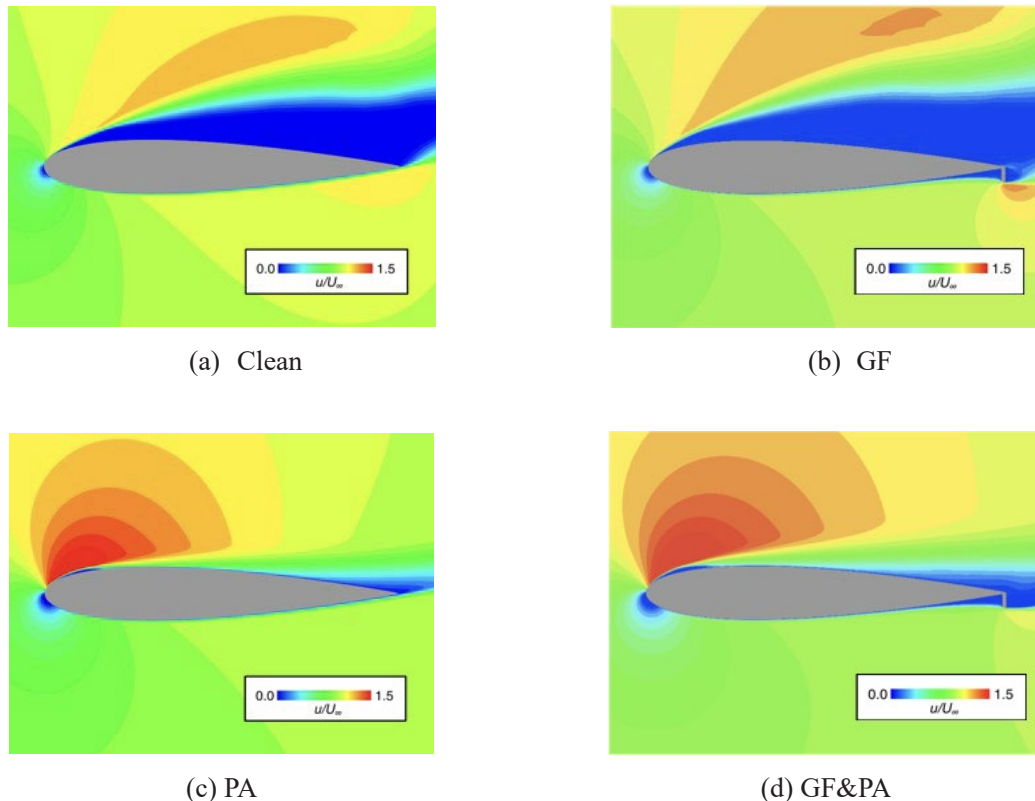


図 8: 平均流れ場（コード方向速度分布, 12 度）

ここまで GF や PA の使用によって空力係数が大きく変化することを示したが，それぞれの効果をもう少し理解するために図 9, 10 に 8 度，12 度における各ケースの翼面  $C_p$  分布を示す．8 度では Clean, GF ケースともに流れは大規模剥離せずに剥離泡が形成されているため， $x/c=0.1$  から 0.3 の範囲で平らな  $C_p$  分布を示している．Clean と GF ケースの違いは翼前縁付近の負圧 ( $-C_p$ ) の値が GF ケースの方が大きく，GF ケースの翼下面全体で GF が流れをせき止めることによって圧力が高いことである．このように下面と上面の圧力差が大きくなるために GF を用いたケースでは図 6 で示したように  $C_L$  が大きく向上する．さらにこの GF を付加した翼に PA を用いると翼前縁付近の剥離泡が抑制されるために図 9a で見られた平らな  $C_p$  分布の領域が図 9b では縮小し，翼前縁の負圧のピーク値が大きくなっている．これによって  $C_L$  の値は大きくなり，剥離泡に伴う抵抗も軽減されるために図 6a において  $L/D$  が全てのケース中最も大きくなっている．

迎角 12 度においては Clean, GF ケースともに流れが大規模に剥離しているために翼上面の圧力係数分布は翼前縁から後縁にかけて平らである．一方で PA を用いたケースは大規模剥離が抑えられるために前縁に明確な負圧のピークが形成され， $C_L, L/D$  ともに非制御時に比べて高くな

る。GF&PA ケースでは流れが翼前縁から大規模に剥離する現象が定期的に生じるが、その原因について考えてみる。図 11 に迎角 8 度における翼下面前縁付近の淀み点周辺の  $C_p$  分布を示す。GF を用いた場合のいずれのケースも淀み点 ( $C_p=1$  の点) の位置が下流側に移動している。また、図 7 の(a)と(b)を改めて比較すると、GF を用いることで翼上面の速度が増加し、下面の速度が減少していることがわかる。これらの特徴は GF を用いない通常の翼型において迎角を大きくしたときに見られる特徴と似ている。すなわち GF は仮想的に迎角を上昇させる効果を持つと考えることができる。12 度においてはこの効果が PA による剥離抑制効果を上回るために前縁からの大規模な剥離が時折生じると考えられる。

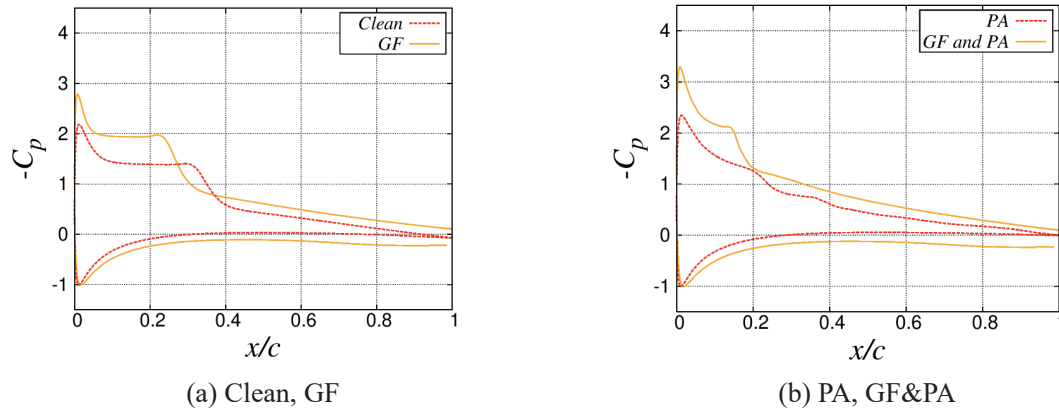


図 9:  $C_p$  分布, 8 度

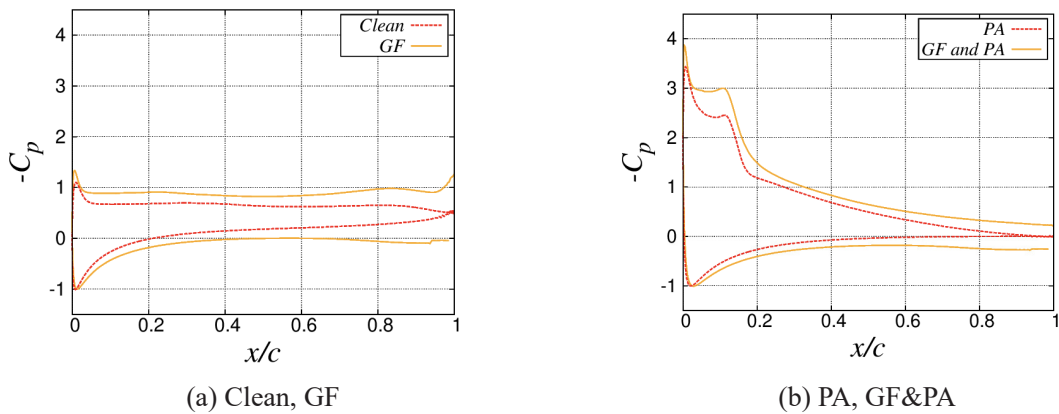
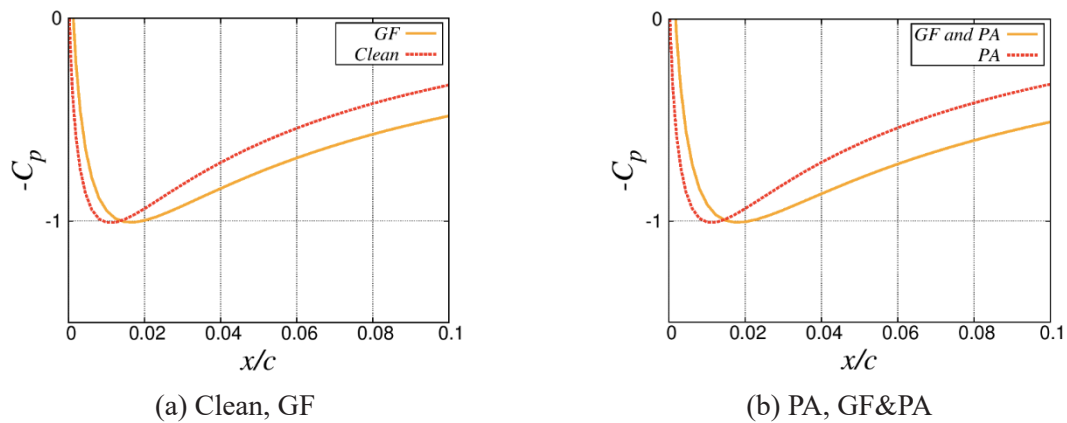


図 10:  $C_p$  分布, 12 度

図 11:  $C_p$  分布拡大図, 8 度

### 3.3 GF による後縁剥離抑制

前節 3.2 で PA に GF を併用することで後縁の剥離を抑制できることを示したが、詳しく流れ場を見ることでそのメカニズムについて議論する。図 12-14 に PA, GF&PA ケースの翼後縁付近の瞬間流れ場をコード方向速度、圧力係数、スパン方向渦度でそれぞれ色付けした分布を示す。図 12 のコード方向速度が青い部分は剥離領域であるが、PA ケースでは翼上面で後縁剥離する一方で、GF&PA ケースは上面での剥離が生じないかわりに GF の前後で剥離領域が生じている。図 13 の圧係数力分布を見ると翼後縁付近で PA ケースの圧力変化は少ないが、GF ケースでは翼上面と下面の圧力差が大きいことがわかる。特に、下面の GF 付近では流れがせき止められるために急激に圧力が高くなっている。また、GF 後方に局所的に圧力の低い箇所が見られるが、これは GF の先端付近から放出されるスパン方向の渦によるものである。図 14 に示すスパン方向の渦度で見るとよりわかりやすく、反時計回りの渦が下面の剥離剪断層から放出されている様子がわかる。これらの渦が後縁から吹き下ろす流れを作るために PA ケースで生じていた後縁の剥離が抑制されていると考えられる。

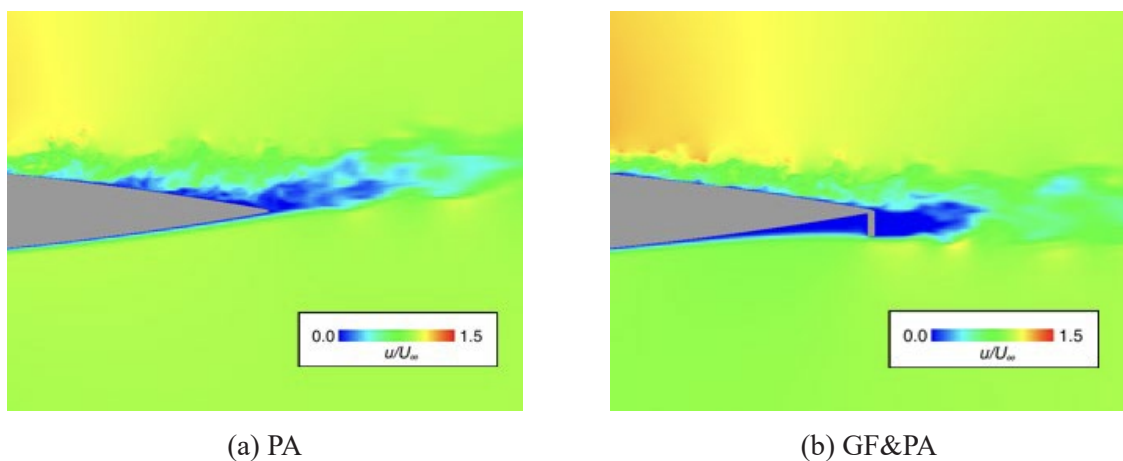
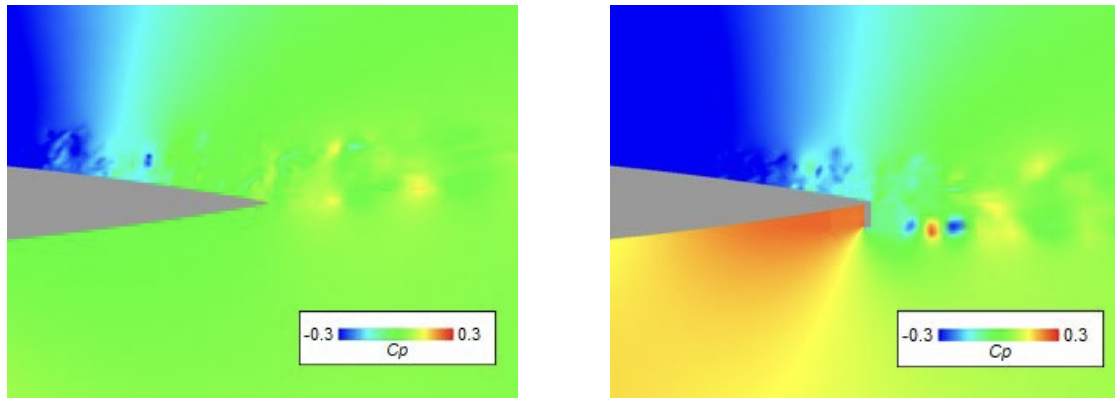


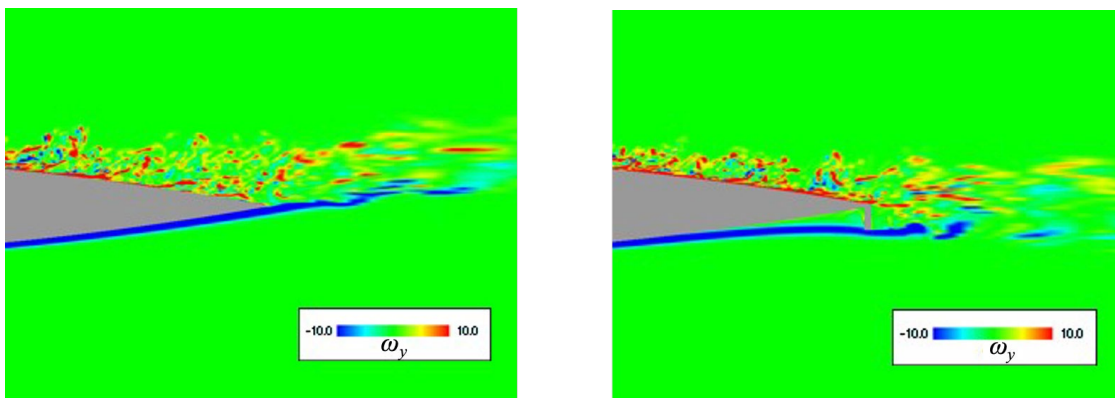
図 12: コード方向速度分布



(a) PA

(b) GF&PA

図 13: 圧力係数 ( $C_p$ ) 分布



(a) PA

(b) GF&PA

図 14: スパン方向 ( $y$  方向) 渦度分布

### 3.4 今後の研究計画

今回 12 度において PA 制御に GF を併用した場合、安定した付着流れは維持できなかった。しかしながら GF 形状は 1 種類しか検討しておらず、GF 形状を変化させることで適度に後縁剥離を抑えつつ付着を維持できる可能性があると考えられる。今後流れ条件に対して適切な GF 形状と調査するとともに GF の長さや迎角の違いによって後流渦がどう変化するのかとそれによって上面の後縁付近の流れの付着状態がどう変わってくるのかを明らかにしたい。また、GF の効果を PA によって仮想的に再現できれば動的にその高さも変更できるため、PA を用いた GF 効果の導入についても検討する。

## 4. まとめ

高解像度スキームを用いた NACA0015 翼周り流れの LES を実施し、PA を用いた流れ制御に GF を併用した際の有用性を評価するとともに空力係数と流れ場の関係を明らかにした。

失速前の 8 度においては PA と GF を併用することで  $C_L$ ,  $L/D$  ともに大きく向上できた。GF を用いた場合、PA のみで剥離制御を行った場合に生じる後縁剥離は抑制することができたが、こ

これは GF の先端から放出された反時計回りの渦が翼後縁より下流で吹き下ろす流れを誘起するためであると考えられる。失速後の 12 度では PA のみ使用した場合は前縁からの大規模な剥離を安定して抑制できるのに対して GF を併用した場合、流れを一時的に付着させ  $C_L$  を大幅に向上させることはできるものの周期的に翼前縁からの大規模剥離を生じる流れとなった。これは GF が仮想的に迎角を上昇させる効果をもつためであると考えられる。今後 GF の長さを変化させるなどしてより適切な PA と GF の併用方法を検討するとともに GF の長さや迎角の違いによって後流渦と後縁付近の剥離がどう変化するかを明らかにしたい。

## 謝辞

ここに記載させて頂いた成果は、東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータを利用することで実現することができたものである。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頂いた。センターの皆様はこの場を借りて謝意を示したい。

## 参考文献

- [1] T. C. Corke, C. L. Enloe, and S. P. Wilkinson, “Dielectric Barrier Discharge Plasma Actuators for Flow Control,” *Annual Review of Fluid Mechanics*, Vol. 42, pp. 505–529, 2010.
- [2] T. C. Corke, M. L. Post, and D. M. Orlov, “Single Dielectric Barrier Discharge Plasma Enhanced Aerodynamics: Physics, Modeling and Applications,” *Experiments in Fluids*, Vol. 46, No. 1, pp. 1–26, 2009.
- [3] 日本機械学会, プラズマアクチュエータ研究会, <http://plasma-actuators.jp/>
- [4] M. L. Post and T. C. Corke, “Separation Control on High Angle of Attack Airfoil Using Plasma Actuators,” *AIAA Journal*, Vol. 42 No.11,2004.
- [5] N. Benard, J. Jolibois, and E. Moreau, “Lift and Drag Performances of an Axisymmetric Airfoil Controlled by Plasma Actuator,” *Journal of Electrostatics*, Vol. 67, No. 2-3, pp. 133–139, 2009.
- [6] K. Asada, Y. Ninomiya, A. Oyama, and K. Fujii, “Airfoil Flow Experiment on the Duty Cycle of DBD Plasma Actuator,” 47th AIAA Aerospace Sciences Meeting, The New Horizons Forum and Aerospace Exposition, Orlando, Florida, January 2009.
- [7] K. Fujii “High-Performance Computing Based Exploration of Flow Control with Micro Devices” *Philosophical Transaction A, The Royal Society*, Vol. 372, Article ID 20130326, 2014.
- [8] M. Sato, H. Aono, A. Yakeno, T. Nonomura, K. Fujii, K. Okada, and K. Asada, “Multifactorial Effects of Operating Conditions of Dielectric Barrier Discharge Plasma Actuator on Laminar Separated Flow Control,” *AIAA Journal*, Vol. 53, No. 9, 2015.
- [9] H. Aono, S. Kawai, T. Nonomura, M. Sato, K. Fujii and K. Okada, “Plasma-Actuator Burst-Mode Frequency Effects on Leading-Edge Flow-Separation Control at Reynolds Number  $2.6 \times 10^5$ ,” *AIAA Journal* Vol. 55, pp. 3789-3806, 2017.
- [10] K. Fujii, “Three Flow Features behind the Flow Control Authority of DBD Plasma Actuator: Result of High-Fidelity Simulations and the Related Experiments,” *Applied Science* 2018, Vol. 8, Issue 4, 2018.
- [11] H. Matsuda, M. Tanaka, S. Goshima, K. Amemori, M. Nomura and T. Osako, “Experimental Study on Plasma Aerodynamic Control for Improving Wind Turbine Performance,” *Asian Congress on Gas Turbines* 2012, Shanghai, P. R. China, August 2012.
- [12] D. Greenblatt, A. B. Harav, and H. M. Vahl, “Dynamic Stall Control on a Vertical Axis Wind Turbine Using Plasma Actuators,” *AIAA Journal*, Vol. 52, No. 2, pp. 456–461, 2014.
- [13] D. P. Rizzetta and M. R. Visbal, “Simulation of Plasma-based Flow Control Strategies for Transitional Highly Loaded Low-Pressure Turbines,” 37th AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit, Fluid Dynamics and Co-located Conferences, Miami, Florida, June 2007.



- [14] 渡部航太郎, 浅田健吾, 関本諭志, 藤井孝藏, “プラズマアクチュエータと付加物体を併用した直角曲がり部を有する大型流路内の流れ制御,” 日本機械学会 2022年度年次大会講演論文集, S051-17, September, 2022.
- [15] K. Shimizu, T. Nakajima, S. Sekimoto, K. Fujii, T. Hiraoka, Y. Nakamura, T. Nouzawa, J. Ikeda and M. Tsubokura, “Aerodynamic drag reduction of a simplified vehicle model by promoting flow separation using plasma actuator, JSME Mechanical Engineering Letters, Bulletin of the JSME, Vol.5, No. 19-00354,2019.
- [16] Z. Hui, X. Hu, P. Guo, Z. Wang and J. Wang, “Separation Flow Control of a Generic Ground Vehicle Using an SDBD Plasma Actuator,” MDPI, Open Access Journal, vol. 12, issue 20, pp. 1-14, 2019.
- [17] S. Shadmani, S. M. Mousavi Nainiyan, M. Mirzaei, R. Ghasemiasl and S. G. Pouryoussefi, “Experimental Investigation of Flow Control over an Ahmed Body using DBD Plasma Actuator,” Journal of Applied Fluid Mechanics, Vol. 11, No. 5, pp. 1267-1276, 2018.
- [18] 浅田健吾, 藤井孝藏, “DBDプラズマアクチュエータを用いた自動車後流制御による抵抗低減,” SENAC, Vol. 53, No. 1, Jan. 2020.
- [19] Troolin, D.R., Longmire, E.K. and Lai, W.T., “Time resolved PIV analysis of flow over a NACA 0015 airfoil with Gurney flap,” Experiments in Fluids, Vol. 41, pp. 241-254, 2006.
- [20] Liebeck, R., “Design of subsonic airfoils for high lift,” J Aircraft, Vol.15, No.9, pp. 547-561, 1978. Neuhart, D. and Pendergraft, O., “A water tunnel study of Gurney flaps,” NASA TM 4071, 1988.
- [21] Jeffrey, D., Zhang, X. and Hurst, D., “Aerodynamics of Gurney flaps on a single element high lift wing,” J Aircraft, Vol.37, No.2, pp. 295-301, 2000.
- [22] Storms, B. and Jang, C., “Lift enhancement of an airfoil using a Gurney flap and vortex generators,” J Aircraft, Vol.31, No.3, pp. 542-547, 1994.
- [23] Y. B. Suzen and P. G. Huang, “Simulations of Flow Separation Control using Plasma Actuators,” 44th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Aerospace Sciences Meetings, Reno, Nevada, January 2006.
- [24] K. Asada, T. Nonomura, H. Aono, M. Sato, K. Okada, K. Fujii, “LES of Transient Flows Controlled by DBD Plasma Actuator over a Stalled Airfoil,” International Journal of Computational Fluid Dynamics, Vol. 29, 2015.
- [25] H. Aono, S. Sekimoto, M. Sato, A. Yakeno, T. Nonomura, and K. Fujii, “Computational and Experimental Analysis of Flow Structures Induced by a Plasma Actuator with Burst Modulations in Quiescent Air” Bulletin of the JSME Mechanical Engineering Journal Vol. 2, No. 4, 2015.
- [26] 藤井孝藏, 小川拓人, 浅田健吾, “DBDプラズマアクチュエータを用いたフィードバック翼周り流れ剥離制御モデルの検討,” SENAC, Vol. 51, No. 4, Oct. 2018.
- [27] S. K. Lele, “Compact finite difference schemes with spectral-like resolution,” Journal of Computational Physics, Vol. 103, pp. 16-42, 1992.
- [28] K. Fujii, “Simple Ideas for the Accuracy and Efficiency Improvement of the Compressible Flow Simulation Methods.” Paper presented at International CFD Workshop for Super-sonic Transport Design, Tokyo, March, 1998.



## [ 共同研究成果 ]

**低レイノルズ数領域における円弧翼周りの非定常流体解析**

佐々木大輔  
大阪公立大学

高瀬拓海, 岡本正人  
金沢工業大学

本研究では、直交格子法の一つである Building-Cube Method を用いて、レイノルズ数 1,000 と 10,000 における円弧翼周りの非定常流体解析を行った。解析の結果、それぞれのレイノルズ数において、風洞実験で得られた空力係数と同様の傾向を得ることができ、レイノルズ数効果を確認することができた。更に、迎角を上げた際の流れ場の変化について、可視化図より明らかにした。

**1. 緒言**

近年、様々な宇宙探査計画が各国で計画されている。その一つに火星探査が挙げられる。火星は、過去にも多くの探査計画が実施されてきた。例えば、無人探査ローバー「キュリオシティ」やランダー型探査機「インサイト」等、様々な手法で数多くの探査が行われてきた。その結果、火星に対する理解が進む一方、火星で起きる事象の普遍的な理解には程遠い状態にある。したがって、現在も火星は研究の対象とされている。例えば、宇宙航空研究開発機構 (JAXA) は、地表面を詳細にかつ広範囲に探査可能な「火星探査飛行機」を提唱している。

火星探査飛行機を実現するためには、火星の大気環境が地球と異なることから、火星大気環境に適した飛行機を設計する必要がある。例えば、火星大気の空気密度は地球の 1/100 程度しかないため、揚力を得るのが困難となる。その大気条件で飛行する場合、レイノルズ数は  $10^4 \sim 10^5$  のオーダーとなることから、低レイノルズ数領域において空力性能に優れた翼型の設計が必要となる [1]。レイノルズ数とは、慣性力と粘性力の比で表される無次元量であり、火星飛行機のレイノルズ数域は粘性力の強い流れと言える。地球上において、このレイノルズ数域を飛行するものは鳥や昆虫であり、これらの翼型を模倣することで火星大気環境下でも飛行可能な飛行機が開発できると考えられる。

岡本らは火星大気環境を模した低圧風洞を用いることで、種々の翼型に対して風洞試験を実施しており、その知見から低レイノルズ数領域においては一般的に薄翼が適していることがわかっている。また、岡本らはコガネムシに着目し、様々なキャンバーを持つ円弧翼に対して風洞試験を行うことで低レイノルズ数領域における空力特性を明らかにしている [2]。円弧翼の空力性能にはレイノルズ数依存性があることが風洞実験で確認されているため、異なるレイノルズ数領域での解析を実施することで、Computational Fluid Dynamics (CFD) においても同様の傾向が得られるかを本研究では確認する。そして空力性能のレイノルズ数依存性と流れ場の関係性について考察を行う。今回、風洞試験で空力性能の差が顕著であった  $Re=1,000$  と  $Re=10,000$  について解析を実施する。一般的に  $Re=1,000$  では流れが 2 次元的事であることが知られていることから 2 次元ソルバーを用いて解析を実施する。また  $Re=10,000$  においては流れに 3 次元性が強く表れることが知られているため、3 次元ソルバーを用いて大規模非定常流体解析を実施する。

## 2. 解析手法

解析には非圧縮性流体解析ソルバーの Building-Cube Method (BCM) を用いる[3]. BCM は, ブロック型直交格子に分類される CFD 手法である[4, 5]. BCM の特徴として, 複雑形状に対しても格子生成が容易であること, 計算領域を Cube と呼ばれる領域に分割し, Cube 内を等間隔・同数の Cell で分割することにより, 均等な負荷分散を達成できること, また空間高次精度解法を採用できること等が挙げられる. 図1に物体近傍の Cube および Cell を示す.

本研究で計算に用いた支配方程式は非圧縮性 Navier-Stokes 方程式と連続の式である. ここで, 時間積分法は 2 次精度 Adams-Bashforth 法, 空間離散化手法は 3 次精度風上差分法 (対流項) および 2 次精度中心差分法 (拡散項) を使用する. 今回, 境界埋め込み法等は使用せず, 物体形状は階段状表現として解析を行う.

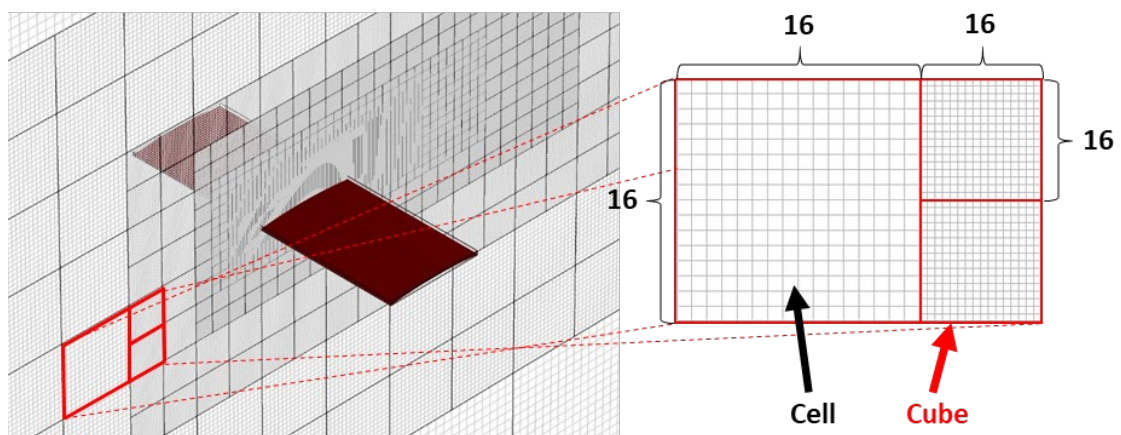


図1 Cube と Cell

## 3. 解析対象及び解析条件

本研究で使用する解析モデルはコガネムシの翼型を模した薄い円弧翼である. 解析モデルを図2に示す. 解析モデルの翼弦長  $c$  を基準として, キャンバーを  $3\%c$ , 翼の板厚を  $0.01c$  としている. 解析領域は翼弦長  $c$  を基準に  $x, y$  方向に 48 倍とする. 3次元解析の際は,  $z$  方向に翼を延伸し, 1.5 倍の解析領域とする. 流入条件は層流とし, レイノルズ数 1,000 では2次元解析, レイノルズ数 10,000 では3次元解析を行う. なお, 3次元解析の際, 計算領域の両端には周期境界条件を適用し, 2次元性を確保している.

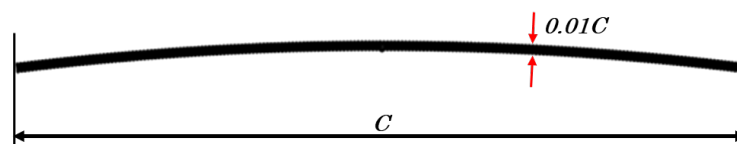


図2 円弧翼

本研究では異なるレイノルズ数での解析を実施するに当たって、2次元ソルバーと3次元ソルバーを用いた。どちらも Cube と呼ばれる立方体(2次元では正方形)の中に等間隔の Cell を配置している。今回は翼型に迎角を付けた解析を複数回行うため、それぞれの迎角に適した格子を作成する必要がある。本解析では表1に示すような4種類の格子を使用し、低迎角と高迎角で異なる格子を使用する。2次元解析では約100万格子、3次元解析では最大で約1億格子となる。図3に2次元における円弧翼周りの低迎角用 Cube 配置を示す。本研究では、AOBA-Bを使用した並列計算を実施することで、約1億格子規模の非定常流体解析を行い、平均場を取得する。

表1 格子情報

Type of Airfoil	2D model		3D model	
Type of mesh	Low AOA	High AOA	Low AOA	High AOA
Number of cubes	3,547	5,149	10,530	15,808
Number of cells in a cube	$16^2$	$16^2$	$16^3$	$18^3$
Number of cells	908,032	1,318,144	43,130,880	92,192,256
Min. cell size	0.0007324	0.0007324	0.002930	0.002604
Outer size	$48 \times 48$	$48 \times 48$	$48 \times 48 \times 1.5$	$48 \times 48 \times 1.5$

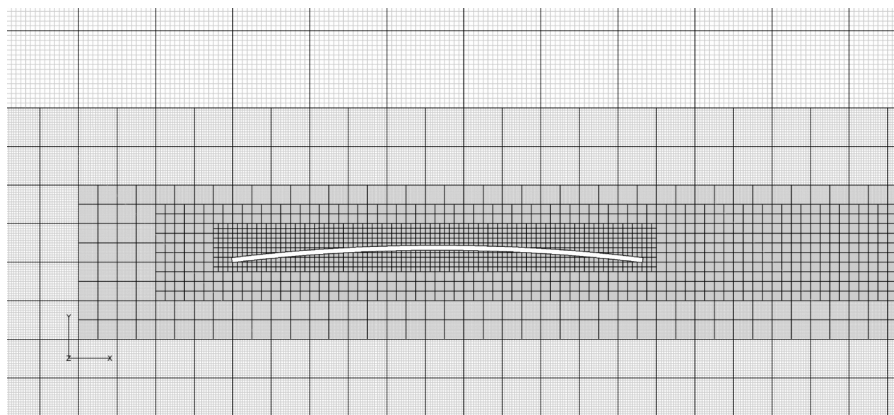


図3 円弧翼周りの Cube 配置

#### 4. 解析結果

揚力係数、抗力係数、モーメント係数の解析値と実験値を比較したグラフを図4、図5、図6にそれぞれ示す。図4より、実験では $Re=1,000$ に比べて $Re=10,000$ の方が揚力傾斜が大きいことが分かる。解析でも同様の傾向が得られている。図5より、抗力係数の実験値は低迎角において、レイノルズ数依存性が顕著に確認できる。本解析で得た解析値においても同様のレイノルズ数依存性が確認でき、低迎角では $Re=1,000$ に比べて $Re=10,000$ の方が小さい。また、図6より、 $Re=1,000$ においてモーメント係数が広い範囲で一定となっているのに対して、 $Re=10,000$ では高迎角でモーメント係数が減少する傾向にあることが確認できる。以下では、揚力係数の迎角変化に着目し、流れ場と対比させることで、流れ場の理解を試みる。

2次元解析を実施した $Re=1,000$ において、迎角6度までは揚力係数がよく一致しているが、それ以降では実験値との差が広がる傾向にある。図7に迎角3度と迎角9度における可視化図を示す。迎角3度では、定常的な流れ場となっており、前縁から後縁まで流れが剥がれることなく翼

型に沿って流れている。一方、迎角 9 度では剥離した流れが循環渦を形成して後縁付近に停滞している。更に、迎角 12 度の場合、翼型下面から上面に回り込もうとする流れが後縁で停滞していた渦と干渉することで後流域に非対称な渦を発生させ、非定常流れとなる。これらの高迎角域では流れが 2 次的ではないと考えられ、揚力係数が大きく実験値と乖離している原因と考えられる。

また、3 次元解析を実施した  $Re=10,000$  において、揚力係数の解析値は迎角 3 度以下で実験値と近い値を取っており、迎角 6 度以上では実験値と離れていることがわかる。実験値では迎角 6 度付近で揚力傾斜が減少し始めており、揚力係数の分布が非線形となっている。実験値同様、解析値でも同様に揚力係数の減少傾向が確認できる。図 8(a)に 0.75 度、図 8(b)に 3 度の迎角における瞬間的な 3 次元渦構造を示す。これらの低迎角では 2 次元な流れ場となっており、翼型後縁から 2 次元な非対称渦が放出されていることが確認できる。一方、高迎角における瞬間的な 3 次元渦構造を図 8(c) (d)に示す。図 8(c)は迎角 6 度、図 8(d)は迎角 9 度の可視化図である。どちらの迎角においても非周期的な 3 次元流れ場となっていることが確認できる。揚力係数が非線形になっている迎角と一致していることから、非線形性は 3 次元流れによる影響が大きいと考えられる。

以上のことから、本研究で得られた解析値においても実験値と同様のレイノルズ数依存性が確認できた。そのため、3%キャンバーを持つ円弧翼の性能は、 $Re=1,000$  に比べて  $Re=10,000$  の方が引き出せることがわかった。

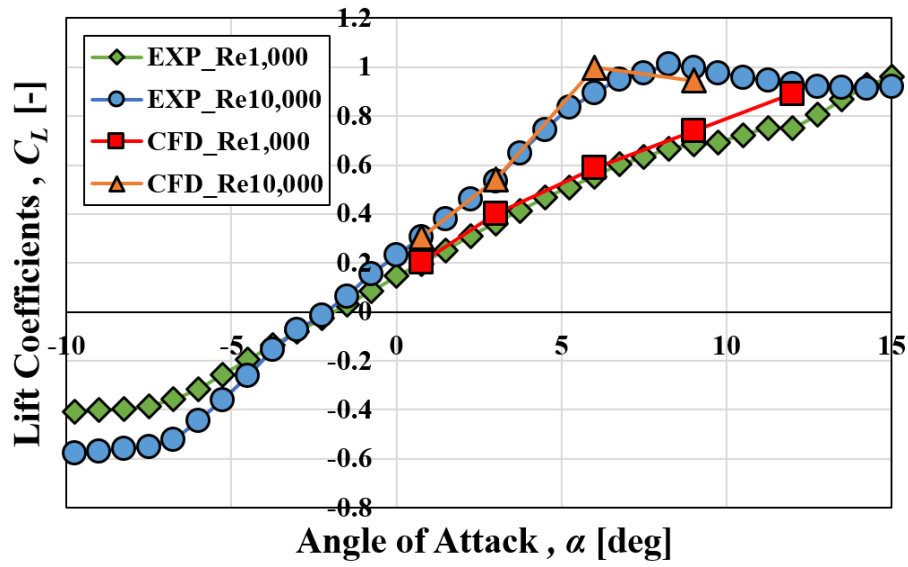


図4 揚力係数

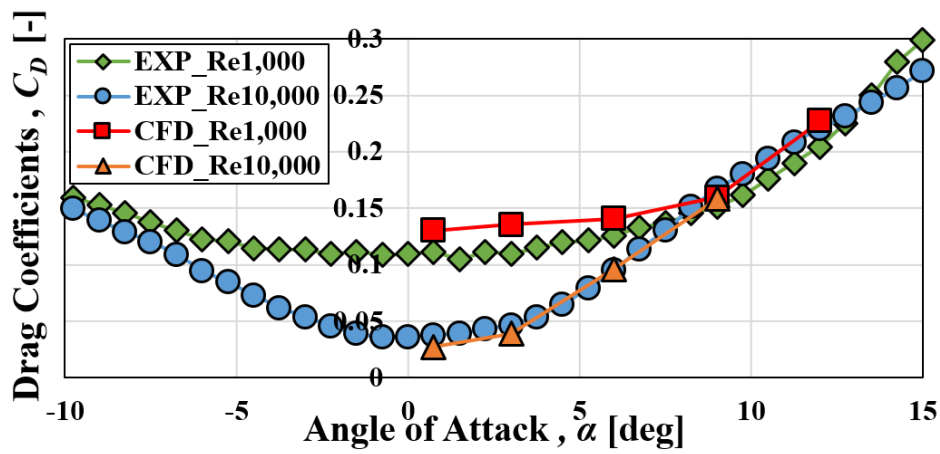


図5 抗力係数

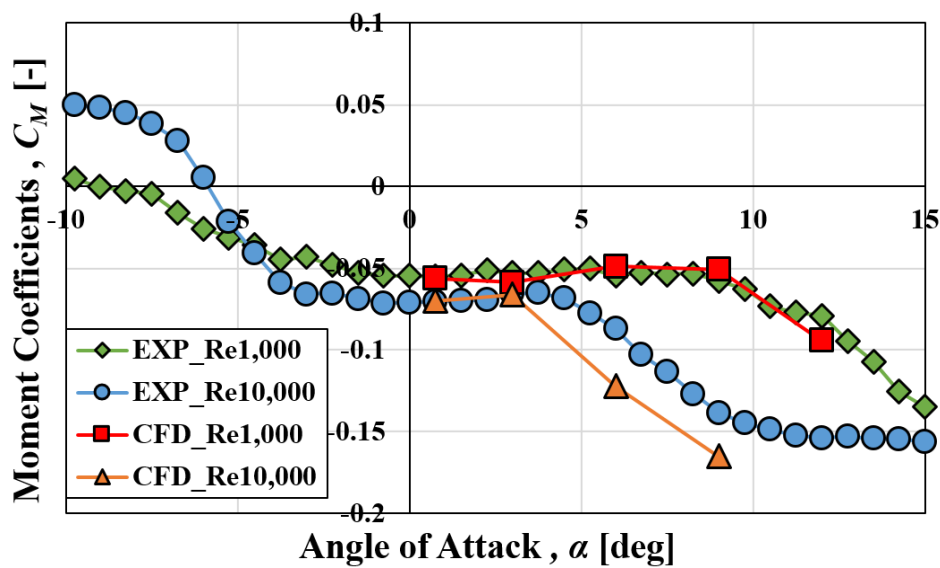
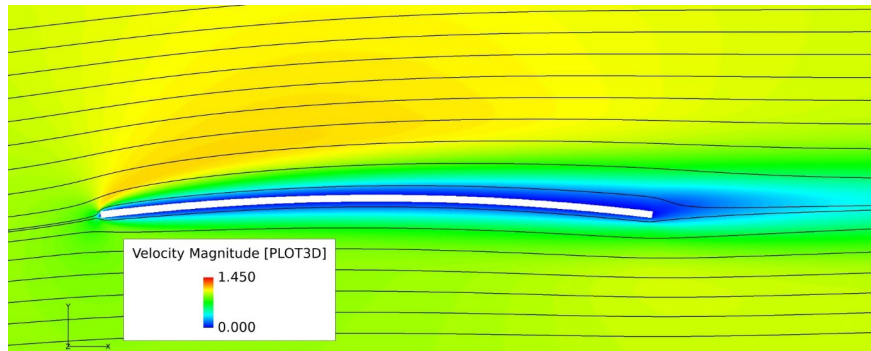
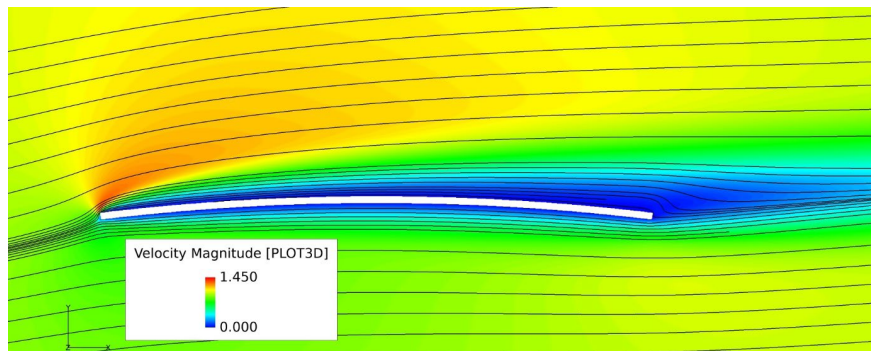


図6 モーメント係数

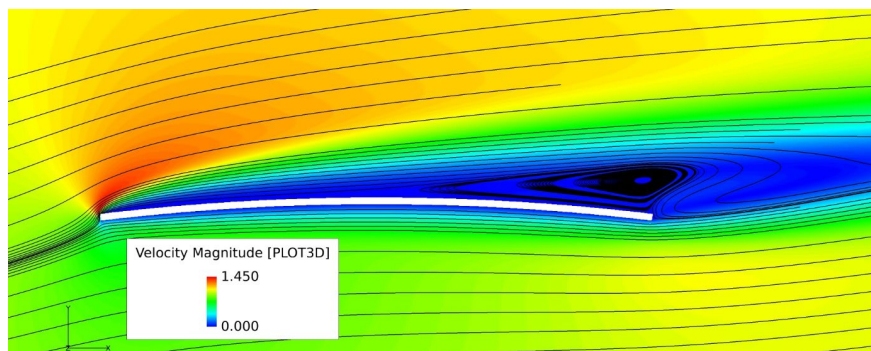




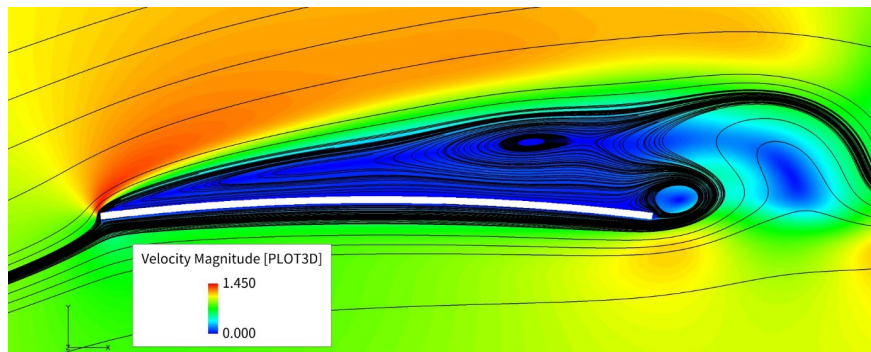
(a) 迎角 3 度



(b) 迎角 6 度



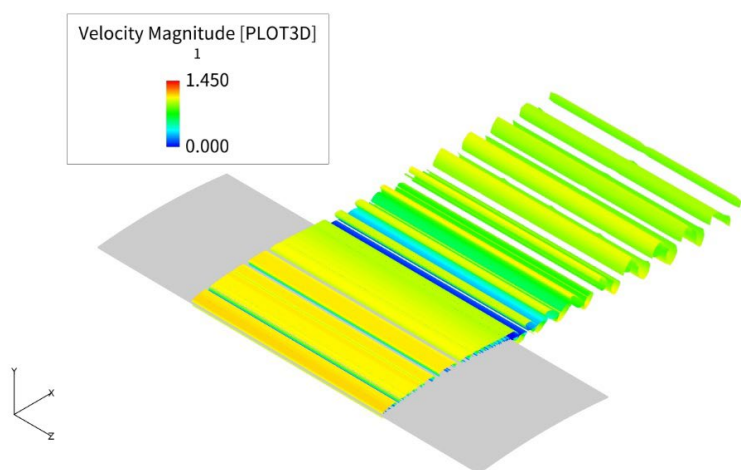
(c) 迎角 9 度



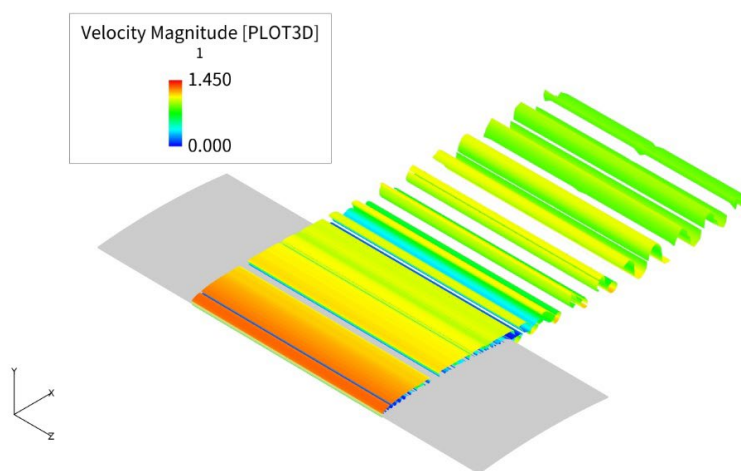
(d) 迎角 12 度

図 7  $Re=1,000$  における瞬間場の速度コンター図

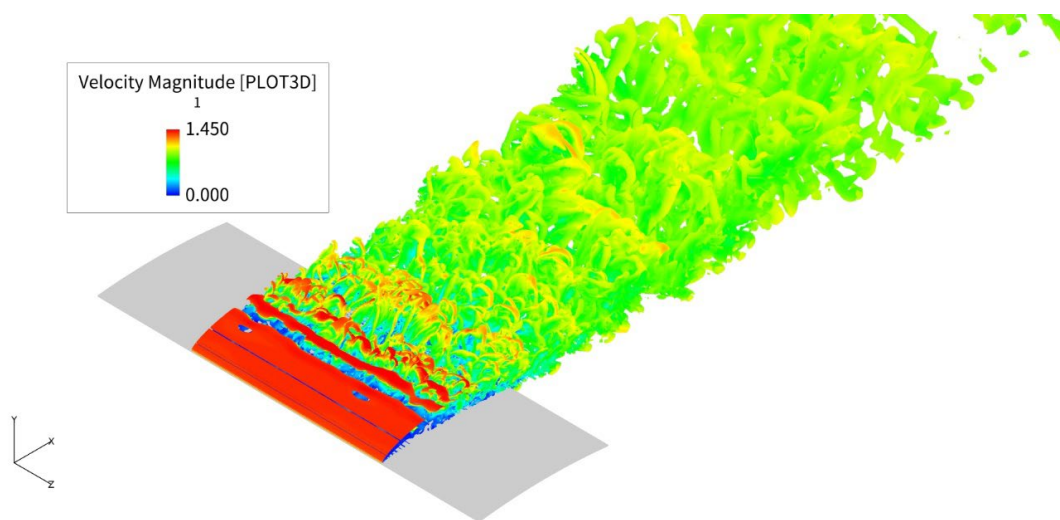




(a) 迎角 0.75 度

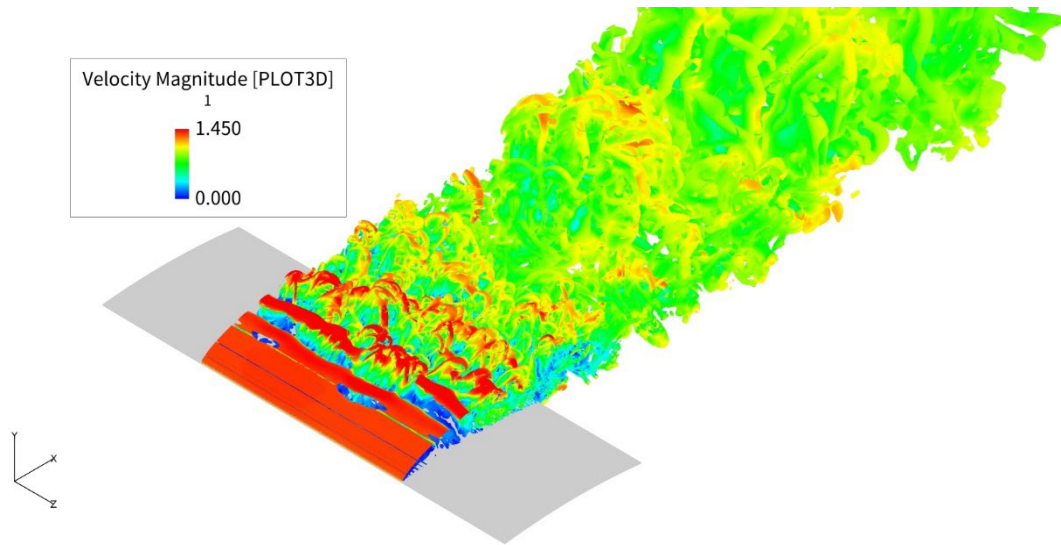


(b) 迎角 3 度



(c) 迎角 6 度

図 8  $Re=10,000$  における瞬間場の速度コンター図 (続く)



(d) 迎角 9 度

図 8 Re=10,000 における瞬間場の速度コンター図

## 5. 結言

本研究では 2 次元/3 次元非圧縮性 BCM ソルバーを用いた数値計算により、低レイノルズ数領域における 3%キャンバーを持つ円弧翼周りの流れ場の解析を実施した。その結果、異なるレイノルズ数領域 ( $Re=1,000$  と  $Re=10,000$ ) においても、実験値と同様の空力係数を得られることを示し、円弧翼の空力特性がレイノルズ数に依存することを明らかにした。また、流れ場の可視化を通して、円弧翼周りの空力現象を明らかにした。

## 謝辞

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

## 参考文献

- [1] H. Hidaka and M. Okamoto, “An Experimental Study of Triangular Airfoils for Mars Airplane”, *Aerospace Technology Japan*, Vol. 12, No. ists29, Pk\_21-Pk\_27, 2014.  
[https://doi.org/10.2322/tastj.12.Pk\\_21](https://doi.org/10.2322/tastj.12.Pk_21)
- [2] M. Okamoto and K. EBINA, “Effectiveness of Large-Camber Circular Arc Airfoil at Very Low Reynolds Numbers”, *Transactions of the Japan Society for Aeronautical and Space Sciences*, Vol.59, No.5, pp295-304, 2016. <https://doi.org/10.2322/tjsass.59.295>
- [3] 坂井玲太郎, 大林茂, 松尾裕一, 中橋和博, “Building-Cube Method を用いた実用的な大規模乱流解析手法の構築”, JSASS-2013-2116-A, 第 45 回流体力学講演会/航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム 2013 講演論文集, 船堀, 2013.
- [4] K. Nakahashi and L. S. Kim, “Building-Cube Method for Large-Scale, High Resolution Flow Computations”, AIAA Paper 2004-0423, 2004.
- [5] D. Sasaki and K. Nakahashi, “Rapid Large-scale Cartesian Meshing for Aerodynamic Computations”, ICAS Paper 2014-0842, *Proceedings of 29th Congress of the International Council of the Aeronautical Sciences (ICAS2014)*, St. Petersburg, Russia, 2014.

## [ 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

情報部デジタルサービス支援課 共同利用支援係

## 1 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、スーパーコンピューター AOBA 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。

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

■アプリケーションサービス <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/software-service/>

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	
非経験的分子軌道計算プログラム	Gaussian16	AOBA-B
反応経路自動探索プログラム	GRRM17 ※ 1	AOBA-B
統合型数値計算ソフトウェア	Mathematica ※ 2	フロントエンドサーバ
数値解析ソフトウェア	MATLAB ※ 1	フロントエンドサーバおよび AOBA-B
熱流体解析ソフトウェア	OpenFOAM	AOBA-B
第一原理計算統合パッケージ	Quantum Espresso	AOBA-A および AOBA-B
分子動力学シミュレーション	GROMACS	AOBA-B
古典分子動力学計算プログラム	LAMMPS	AOBA-B
コンテナプラットフォーム	Singularity	AOBA-B
プログラム対話型実行環境	Jupyter Notebook	フロントエンドサーバ
RIST が整備するアプリケーションソフトウェア		AOBA-A および AOBA-B

※ 1 学術目的での利用（非商用利用）のみ可能です。

※ 2 東北大学の構成員のみ利用可能です。

## 2 ご利用の前に

## 2.1 リモートログイン

アプリケーションを利用するためには、フロントエンドサーバに SSH (Secure SHell) を用いてリモートログインする必要があります。フロントエンドサーバにリモートログインする方法については、「利用申請からログインまで」をご参照下さい。

■利用申請からログインまで <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/first-use/>

## 2.2 ファイル転送

ローカル PC で作成したインプットファイルをストレージシステムに転送したり、アプリケーションで実行した結果ファイルをローカル PC に転送する場合は、ファイル転送が必要になります。ファイル転送については、「データ転送 (ストレージ)」をご参照下さい。

■データ転送 (ストレージ) <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/storage/>

## 2.3 バッチジョブ形式での実行方法

バッチジョブ形式で実行するアプリケーションは、並列数の指定方法などが計算機やコンパイルに使用したコンパイラによって異なります。詳しくは各計算機の利用方マニュアルをご参照ください。

■ジョブの実行方法 <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/nqs/>

■AOBA-A の概要と利用方法 <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/sx/>

■AOBA-B の概要と利用方法 <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/lx/>

## 2.4 GUI アプリケーションの利用

GUI アプリケーション (Mathematica および MATLAB) を利用する場合は、ローカル PC に X Window System 環境の設定が必要です。

### 2.4.1 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 PC からリスト 1 のように -X オプション (または -Y オプション) を付けてログインしてください。

リスト 1 GUI アプリケーションを利用する場合のログイン方法

(秘密鍵のファイル名を id\_rsa\_cc としてローカル PC の ~/.ssh 以下に作成した場合)

【ローカル PC からログインサーバに SSH 接続】

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

【ログインサーバからフロントエンドサーバに SSH 接続】

```
login$ ssh -X front
```

X Forwarding によりローカル PC の画面にフロントエンドサーバで動作する GUI アプリケーション画面が表示されます。

### 2.4.2 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。Linux からの利用と同様に利用可能です。接続方法はリスト 1 と同様です。

- XQuartz (<https://www.xquartz.org/>)

### 2.4.3 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 (<http://www.astec-x.com>)
- OpenText Exceed (<https://www.macnica.net/opentext/exceed.html/>)

■無償のアプリケーションを利用する場合 VcXsrv Windows X Server が無料で利用できます。VcXsrv のインストールには WSL2 が必要になります。

- XcXsrv (<https://sourceforge.net/projects/vcxsrv/>)
- WSL2 (<https://docs.microsoft.com/ja-jp/windows/wsl/>)

### 3 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。

AOBA-B での Gaussian の実行には、以下のような特長があります。

- 最大 128 並列までの並列処理（1 ノード内）が可能です。
- 256GB の搭載メモリを用いて、大規模なモデルの解析が可能です。
- 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（マウントポイント /SSDTMP 容量 50GB）に置くことにより、ファイルの入出力時間が短縮されます。

#### ■サービスホスト AOBA-B

#### ■バージョン Gaussian16 C.01

### 3.1 利用方法

以下は Gaussian 利用方法の概要です。

#### 3.1.1 実行コマンド

Gaussian のインプットファイルは、拡張子を .com として作成します。（リスト 2：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ストレージシステムにインプットファイルを転送する際には、アスキーモードを指定して転送してください。

フロントエンドサーバにログイン後、subg16 コマンドにキュー名 (lx) と利用ノード数 (1)、入力プログラム名およびジョブの最大経過時間（例では 1 時間）を指定することにより、AOBA-B のバッチリクエストとして実行されます。（リスト 3）

バッチリクエストについては、「ジョブの実行方法」をご参照下さい。

#### ■ジョブの実行方法 <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/nqs/>

リスト 2 サンプルファイル e2-01.com

```
%NProc=128      #並列数
%Mem=240Gb      #確保メモリ量
# 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.

（最終行にも空行が必要）
```

リスト 3 e2-01.com を解析するジョブ投入コマンド

```
[front1 ~]$ subg16 -q lx -b 1 e2-01 -l elapstim_req=01:00:00
(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)
プロジェクトコード：un0000 にリクエストを投入します
Request 12345.job submitted to queue: lx.
```

### 3.1.2 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 4)

リスト 4 実行結果の確認

```
[front1 ~]$ tail e2-01.log
:
Job cpu time:      0 days  0 hours  0 minutes 10.9 seconds.
Elapsed time:     0 days  0 hours  0 minutes  0.7 seconds.
File lengths (MBytes):  RWF=    72 Int=    0 D2E=    0 Chk=    8 Scr=    8
Normal termination of Gaussian 16 at Fri Apr  1 12:00:00 2021.
```

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。

### 3.1.3 高速一時領域の利用

Read-Write ファイルの書き出し場所を/SSDTMP に指定することで、ファイルアクセス性能が向上します。ルートセクションに Link 0 コマンドの %RWF=/SSDTMP/name と指定することで Read-Write ファイル「name.rwf」が/SSDTMP に書き出されます。また、ジョブ終了後にファイルが削除されるよう、%NoSave の指定も行って下さい。

### 3.1.4 /SSDTMP 利用の注意事項

/SSDTMP を利用する場合は、以下の点にご注意の上ご利用ください。

- 一時領域に書き出したデータは、フロントエンドサーバやファイル転送サーバからのアクセスはできません。
- 書き出したデータがジョブ終了時に削除されるよう、ジョブスクリプトファイルや環境変数の設定をお願いします。
- /SSDTMP は共有領域のため、他利用者のジョブ実行時に容量不足とならないようご注意ください。
- ファイルアクセス権の設定によっては、他利用者のジョブがノードを利用する際にファイル参照が可能となっています。

### 3.1.5 ユーティリティプログラム

formchk などのユーティリティプログラムは、/mnt/stfs/ap/g16 以下に配置されています。実行パスの設定を行うか、絶対パスでユーティリティプログラムを実行します。

## 3.2 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 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



### 3.3 利用方法についての問合せ

Gaussian の利用方法については、開発元のオンラインマニュアルをご参照下さい。

■Gaussian 16 Online Manual <https://gaussian.com/techsupport/>

AOBA-B でのジョブ実行方法についてのご質問は、サイバーサイエンスセンターの利用相談フォームをご利用下さい。

■利用相談 <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/consultation/>

### 3.4 Gaussian、GaussView サイトライセンス

東北大学では Gaussian および GaussView のサイトライセンスを取得しており、東北大学内のコンピュータにインストールすることができます。

東北大学所属の教職員または学生の利用が可能です。学外で利用するコンピュータにインストールすることはできません。東北大学内でインストールしたコンピュータを学外に持ち出すこともできません。

#### 3.4.1 申込み方法

インストールに必要な情報をお知らせしますので、利用を希望される方はサイトライセンス利用申請書フォーム <https://forms.gle/w7tiXm6sPND3qLEi7> から申請を行って下さい。インストールに必要な情報がメールで送信されます。なお、申請には東北大メール (Gmail) アドレスが必要です。

## 4 反応経路自動探索プログラム GRRM17

GRRM は、NPO 法人 量子化学探索研究所 (<https://iqce.jp/>) で開発される反応経路自動探索プログラムです。利用の方法、最新情報については <https://iqce.jp/GRRM/> をご参照ください。

■サービスホスト AOBA-B

### 4.1 利用方法

フロントエンドサーバにログイン後、ジョブスクリプトファイルと入力データファイル (.com) を作成またはアップロードし、AOBA-B のバッチリクエストとして実行します。

バッチリクエストについては、「ジョブの実行方法」をご参照下さい。

■ジョブの実行方法 <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/nqs/>

#### 4.1.1 ジョブスクリプトファイルの作成

GRRM プログラムを実行するためのスクリプトファイルの作成例です。リスト 5 の例ではファイル名を run.sh としてテキストファイルで保存します。

リスト 5 ジョブスクリプトファイル run.sh

```
#!/bin/sh
#PBS -q lx -b 1                #投入するキュー名とノード数を指定 (固定)
#PBS -l elapstim_req=1:00:00   #実行する時間を指定
#PBS -N grrm-test             #リクエスト名を指定。指定しない場合はリクエスト番号が指定される
source /usr/ap/etc/GRRM17/config.sh #GRRM17の環境変数ファイルを読み込む
cd $PBS_O_WORKDIR             #リクエストを投入したディレクトリに移動
GRRMp test -p16 -h1          #GRRMを起動
```

#この例では test.com ファイルを実行し、GRRM の JOB 並列数が 16、計算時間の上限値が 1 時間になる

#### 4.1.2 入力データファイル(.com)の作成、またはファイルの転送

入力データファイルの拡張子は.com にします。リスト 6 では test.com ファイルを例に解説します。test.com ファイルはフロントエンドサーバにログインしてテキストエディタで作成するか、ローカル PC の GaussView などで作成したものを、ストレージシステムにテキストモードでアップロードします。

リスト 6 入力データファイル test.com

```
# GRRM/MP2/6-31G
0 1
C -0.0000000000000000 -0.0000000000000000 -0.549482561269
O 0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.708343639882
H 0.0000000000000000 0.934113144104 -1.131025039307
H -0.0000000000000000 -0.934113144104 -1.131025039307
Options
GauProc=2
(最終行にも空行が必要)
```

この入力データファイルの場合、Gaussian の並列度は「2」になります。GRRM の並列 JOB 数との積が AOBA-B 1 ノードの利用可能コア数 (128) を越えないように注意して下さい。test.com を「ジョブ スクリプトファイルの作成」で作成した run.sh でジョブを投入した場合、並列数は以下のようになります。

$$(\text{Gaussian 並列度 } 2) \times (\text{GRRM 並列 JOB 数 } 16) = (\text{並列数 } 32)$$

#### 4.1.3 ジョブの投入、状況確認、取り消し・削除

front のコマンドプロンプト上で、以下のコマンドでリクエストを投入します。(リスト 7)

リスト 7 ジョブの投入

```
[front1 ~]$ qsub run.sh
プロジェクトコード：un0000にリクエストを投入します
Request 12345.job submitted to queue: lx.
```

ジョブが投入され、待ち順に従ってリクエストが実行されます。リクエストを投入したディレクトリに test.com が保存されている必要があります。また、計算結果のファイルも同じディレクトリに作成されます。

投入したリクエストの状況確認と、取り消しは以下のコマンドで行います。(リスト 8)

リスト 8 リクエストの状況確認と、取り消し

```
[front1 ~]$ reqstat (リクエストの状況確認、リクエスト番号の確認)
[front1 ~]$ qdel 12345.job (リクエストの取り消し・削除)
```

#### 4.1.4 実行結果の確認、ファイルの転送

reqstat コマンドで実行したリクエストが表示されなければ実行が終了しています。実行結果のファイルはリクエストを投入したディレクトリに作成されます。テキストエディタでファイルの内容を確認するか、ローカル PC にダウンロードして下さい。

#### 4.1.5 実行についての注意事項

作業ディレクトリに「test.log」が存在する状態で、その GRRM JOB を開始する際に投入したものと同一のシェルスクリプトを再投入すると、再び GRRMp が起動され、GRRM JOB が再開されます。GRRM のジョブを最初からやり直すときは、作業ディレクトリから識別子が.log や.rrm の全ファイルを消去してから (あるいは新しいディレクトリを作成して) 行う必要があります。

## 5 統合型数値計算ソフトウェア 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 フロントエンドサーバ

■バージョン version 13.2

### 5.1 利用方法

#### 5.1.1 Mathematica の起動

■GUI 版 GUI 版の Mathematica の起動には、フロントエンドサーバに接続する際に X forwarding の設定を行う必要があります。(2.4 項を参照)

リスト 9 GUI 版の起動方法

```
[front1 ~]$ mathematica
```

GUI 版の Mathematica が起動します。(図 1)



図 1 GUI 版 Mathematica の起動画面

■CUI 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 10)

リスト 10 テキスト版の起動方法

```
[front1 ~]$ math
Mathematica 13.2.0 Kernel for Linux x86 (64-bit)
Copyright 1988-2023 Wolfram Research, Inc.

In[1]:=
```

### 5.2 マニュアル・参考資料

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

- Wolfram 社 <https://www.wolfram.com/>

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

## 6 数値解析ソフトウェア 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、およびビジュアルイゼーションのための統合環境を提供しています。提供される全ての Toolbox が利用可能です。

■サービスホスト フロントエンドサーバ、AOBA-B

■バージョン R2023a

### 6.1 利用方法

#### 6.1.1 MATLAB の起動

■GUI 版 GUI 版 MATLAB の起動には、フロントエンドサーバに接続する際に X forwarding の設定を行う必要があります。(2.4 項を参照)

リスト 11 GUI 版 MATLAB の起動方法

```
[front1 ~]$ matlab
```

GUI 版の MATLAB が起動します。(図 2)

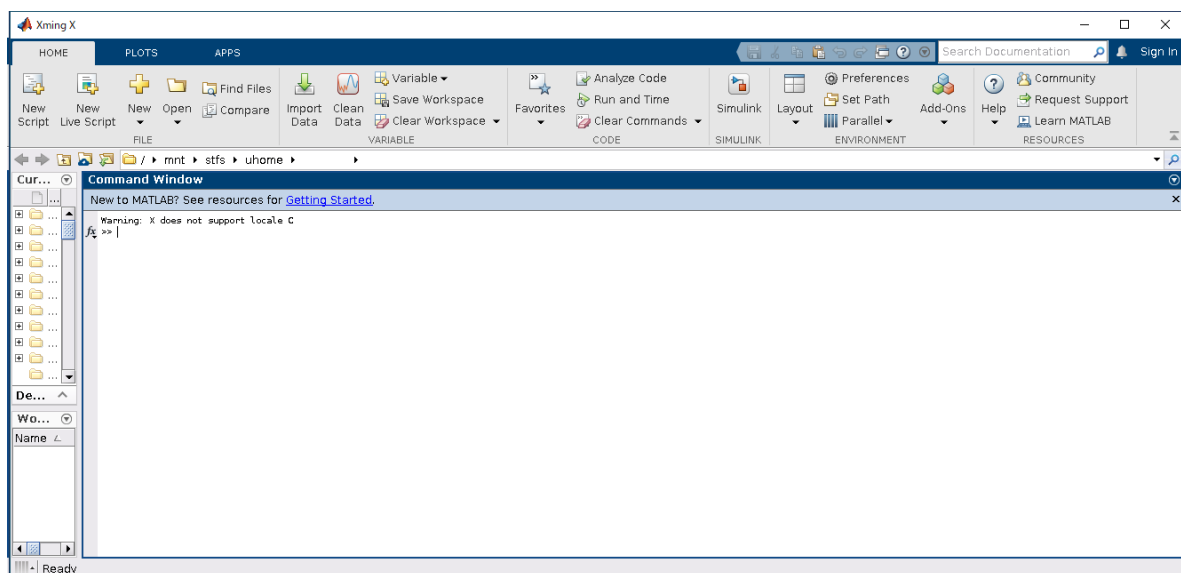


図 2 GUI 版 MATLAB の起動画面

## ■CUI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)

リスト12 CUI版 MATLAB の起動方法

```
[front1 ~]$ matlab -nojvm -nosplash -nodesktop -nodisplay

                < M A T L A B (R) >
      Copyright 1984-2023 The MathWorks, Inc.
      R2023a (9.14.0.2206163) 64-bit (glnxa64)
      February 22, 2023

For online documentation, see https://www.mathworks.com/support
For product information, visit www.mathworks.com.

>>
```

## 6.2 バッチジョブ実行

MATLAB の並列処理機能を使用し、AOBA-B の 1 ノードを利用して 128 並列までの処理が可能です。最大メモリも 256GB まで利用可能です。大規模な計算にご利用ください。

バッチジョブ実行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。

バッチリクエストについては、「ジョブの実行方法」をご参照下さい。

### ■ジョブの実行方法 <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/nqs/>

function として作成した test (リスト13) を実行するためにはジョブスクリプトファイル (リスト14) を作成します。

リスト13 サンプルファイル test.m

```
function test
p=parpool('local',128) % 並列プールを作成 (128個)

n = 1024;
A = 500;
a = zeros(1,n);
parfor i = 1:n
    a(i) = max(abs(eig(rand(A))));
end

poolobj = gcp('nocreate');
delete(poolobj) %並列プールを削除
```

リスト14 バッチリクエストファイル run.sh

```
#!/bin/sh
#PBS -q lx -b 1          #投入するキュー名とノード数を指定 (固定)
#PBS -l elapstim_req=1:00:00 #実行する時間を指定
cd $PBS_0_WORKDIR       #リクエストを投入したディレクトリに移動
matlab -batch test      #バッチジョブ形式で実行
```

以下のコマンドでリクエストを投入します。

リスト15 バッチリクエストの投入方法

```
[front1 ~]$ qsub run.sh
プロジェクトコード : un0000にリクエストを投入します
Request 12345.job submitted to queue: lx.
```

## 6.3 Parallel Server による複数ノード実行

Parallel Server の機能により、AOBA-B の複数ノードを利用した実行が可能です。利用方法については以下のマニュアルをご参照下さい。

### ■AOBA-B での MATLAB Parallel Server の使い方

<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/pdf/AOBA-B-Parallel-Server.pdf>

## 6.4 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。

## 6.5 マニュアル・参考資料

MATLAB の使い方は、マニュアル・参考資料などをご参照ください。

■**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://jp.mathworks.com/help/matlab/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)）

## 6.6 利用方法についての問合せ

利用方法についてのご質問は、MathWorks サポート窓口、コミュニティ Q&A サイトをご利用下さい。

■**MathWorks サポート窓口** [https://jp.mathworks.com/support/contact\\_us.html](https://jp.mathworks.com/support/contact_us.html)

■**コミュニティ Q&A サイト** <https://jp.mathworks.com/matlabcentral/answers/>



## 7 熱流体解析ソフトウェア OpenFOAM

OpenFOAM (Open source Field Operation And Manipulation の略称) は数値解析開発、及び数値流体力学を含む連続体力学の前後処理用の C++ 製ツールボックスです。

使い方についての問合せは開発元 Web サイトやユーザコミュニティをご利用下さい。

### 7.1 OpenCFD 版

■開発元 Web サイト <https://www.openfoam.com>

■サービスホスト AOBA-B

■バージョン v2212

■使用コンパイラ Intel OneAPI

OpenFOAM の実行文を記述したジョブスクリプトファイル (リスト 16) を作成して qsub コマンドでリクエストを投入します。

リスト 16 ジョブスクリプトファイル例 job.sh

```
#!/bin/sh
#PBS -T intmpi
#PBS -l elapstim_req=24:00:00
#PBS -q lx -b 1
source /usr/ap/etc/OpenFOAM/v2212/config.sh
cd $PBS_O_WORKDIR

... OpenFOAM実行文 ...
```

以下のコマンドでリクエストを投入します。

リスト 17 バッチリクエストの投入方法

```
[front1 ~]$ qsub job.sh
プロジェクトコード : un0000 にリクエストを投入します
Request 12345.job submitted to queue: lx.
```

### 7.2 The OpenFOAM Foundation 版

■開発元 Web サイト <https://openfoam.org>

■サービスホスト AOBA-B

■バージョン 9

■使用コンパイラ Intel OneAPI

OpenFOAM の実行文を記述したジョブスクリプトファイル (リスト 18) を作成して qsub コマンドでリクエストを投入します。

リスト 18 ジョブスクリプトファイル例 job.sh

```
#!/bin/sh
#PBS -T intmpi
#PBS -l elapstim_req=24:00:00
#PBS -q lx -b 1
source /usr/ap/etc/OpenFOAM/9/config.sh
cd $PBS_O_WORKDIR

... OpenFOAM実行文 ...
```

以下のコマンドでリクエストを投入します。

## リスト 19 バッチリクエストの投入方法

```
[front1 ~]$ qsub job.sh
プロジェクトコード：un0000にリクエストを投入します
Request 12345.job submitted to queue: lx.
```

バッチリクエストについては、「ジョブの実行方法」をご参照下さい。

■ジョブの実行方法 <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/nqs/>

## 8 第一原理計算統合パッケージ Quantum Espresso

Quantum ESPRESSO は、第一原理電子構造計算と材料モデリングのためのオープンソース統合パッケージです。

使い方についての問合せは開発元 Web サイトやユーザコミュニティをご利用下さい。

■開発元 Web サイト <https://www.quantum-espresso.org>

■サービスホスト AOBA-A および AOBA-B

### 8.1 AOBA-A での実行

■バージョン 6.3 (pw.x のみの提供)

Quantum Espresso の実行文を記述したジョブスクリプトファイル (リスト 20) を作成して qsub コマンドでリクエストを投入します。

## リスト 20 ジョブスクリプトファイル例 job.sh

```
#!/bin/sh
#PBS -l elapstim_req=24:00:00
#PBS -q sx --venode=1
source /usr/ap/etc/QE/SX/6.3/config.sh
cd $PBS_O_WORKDIR
... Quantum Espresso実行文 ...
```

以下のコマンドでリクエストを投入します。

## リスト 21 バッチリクエストの投入方法

```
[front1 ~]$ qsub job.sh
プロジェクトコード：un0000にリクエストを投入します
Request 12345.job submitted to queue: sx.
```

### 8.2 AOBA-B での実行

■バージョン 7.1

■使用コンパイラ Intel OneAPI

Quantum Espresso の実行文を記述したジョブスクリプトファイル (リスト 22) を作成して qsub コマンドでリクエストを投入します。

## リスト 22 ジョブスクリプトファイル例 job.sh

```
#!/bin/sh
#PBS -T intmpi
#PBS -l elapstim_req=24:00:00
#PBS -q lx -b 1
source /usr/ap/etc/QE/LX/7.1/config.sh
cd $PBS_O_WORKDIR
... Quantum Espresso実行文 ...
```

以下のコマンドでリクエストを投入します。

## リスト 23 バッチリクエストの投入方法

```
[front1 ~]$ qsub job.sh
プロジェクトコード：un00000にリクエストを投入します
Request 12345.job submitted to queue: lx.
```

バッチリクエストについては、「ジョブの実行方法」をご参照下さい。

■ジョブの実行方法 [urlhttps://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/nqs/](https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/nqs/)

## 9 分子動力学シミュレーション GROMACS

GROMACS は、分子動力学 (MD) 計算プログラムです。MPI あるいはスレッドでの効率のよい並列計算を用いて高速処理が可能です。

使い方についての問合せは開発元 Web サイトやユーザコミュニティをご利用下さい。

■開発元 Web サイト <https://www.gromacs.org/>

■サービスホスト AOBA-B

■バージョン 2021.2

■使用コンパイラ Intel OneAPI

GROMACS の実行文を記述したジョブスクリプトファイル (リスト 24) を作成して qsub コマンドでリクエストを投入します。

## リスト 24 ジョブスクリプトファイル例 job.sh

```
#!/bin/sh
#PBS -T intmpi
#PBS -l elapstim_req=24:00:00
#PBS -q lx -b 1
source /usr/ap/etc/GROMACS/2021.2/config.sh
cd $PBS_O_WORKDIR

... GROMACS実行文 ...
```

以下のコマンドでリクエストを投入します。

## リスト 25 バッチリクエストの投入方法

```
[front1 ~]$ qsub job.sh
プロジェクトコード：un00000にリクエストを投入します
Request 12345.job submitted to queue: lx.
```

バッチリクエストについては、「ジョブの実行方法」をご参照下さい。

■ジョブの実行方法 <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/nqs/>

## 10 古典分子動力学計算プログラム LAMMPS

LAMMPS は古典分子動力学 (MD) 計算プログラムです。金属や半導体などの固体、生体分子やポリマーなどのソフトマター、メゾスコピック系物質などに対応した多彩なポテンシャルが用意されています。

使い方についての問合せは開発元 Web サイトやユーザコミュニティをご利用下さい。

■開発元 Web サイト <https://www.lammps.org/>

■サービスホスト AOBA-B

■バージョン 29Sep2021

### ■使用コンパイラ Intel OneAPI

LAMMPSの実行文を記述したジョブスクリプトファイル（リスト 26）を作成して qsub コマンドでリクエストを投入します。

リスト 26 ジョブスクリプトファイル例 job.sh

```
#!/bin/sh
#PBS -T intmpi
#PBS -l elapstim_req=24:00:00
#PBS -q lx -b 1
source /usr/ap/etc/LAMMPS/29Sep2021/config.sh
cd $PBS_O_WORKDIR
... LAMMPS実行文 ...
```

以下のコマンドでリクエストを投入します。

リスト 27 バッチリクエストの投入方法

```
[front1 ~]$ qsub job.sh
プロジェクトコード：un0000にリクエストを投入します
Request 12345.job submitted to queue: lx.
```

バッチリクエストについては、「ジョブの実行方法」をご参照下さい。

### ■ジョブの実行方法 <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/nqs/>

## 11 コンテナプラットフォーム Singularity

Singularity は HPC (High Performance Computing) 環境向けに設計されたオープンソースのコンテナ型プラットフォームです。様々なアプリケーションのイメージファイルがインターネット上で公開されており、インストールが複雑なアプリケーションでも容易に実行環境を構築することができます。

### ■サービスホスト AOBA-B

Singularity の利用方法については、以下のマニュアルをご参照下さい。

### ■Singularity の利用方法 <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/pdf/AOBA-B-Singularity.pdf>

## 12 プログラム対話型実行環境 Jupyter Notebook

Jupyter Notebook（ジュピター・ノートブック）は、ブラウザ上で動作するプログラムの対話型実行環境です。

ノートブックと呼ばれるファイルに python などのプログラムを記述し、実行結果を逐次確認しながら、データ分析を進めることができます。Jupyter Notebook 上では、様々なライブラリを使うことができ、TensorFlow（テンソルフロー）などの機械学習やディープラーニング用のライブラリも動作させることができます。

### ■サービスホスト フロントエンドサーバ

Jupyter Notebook の利用方法については、以下のマニュアルをご参照下さい。

### ■Jupyter Notebook の利用方法 <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/pdf/AOBA-jupyterNotebook.pdf>

## 13 RIST が整備するアプリケーションソフトウェア

RISTでは「富岳」を中核としたHPCIにおいて利用が多いOSS（オープンソースソフトウェア）や、ポスト「京」重点課題アプリケーション開発に関するプロジェクトなどより推薦された、利用が多いためまたは今後期待される日本で開発されたアプリケーションソフトウェアを対象として、プリインストールや利用者に有益な情報を提供し、容易に利用いただけるように整備しています。

サイバーサイエンスセンターではその一部のアプリケーションソフトウェアについて利用環境を提供しています。利用方法については、以下のリンク先の情報をご参照ください。

■RIST が整備するアプリケーションソフトウェア [https://www.hpci-office.jp/for\\_users/appli\\_software](https://www.hpci-office.jp/for_users/appli_software)

■サービスホスト AOBA-A

材料バイオ分野 ABINIT-MP PHASE/0 H Φ

■サービスホスト AOBA-B

材料バイオ分野 ABINIT-MP PHASE/0 GENESIS MODYLAS NTChem SALMON  
H Φ OpenMX SMASH mVMC AkaiKKR ALAMODE Phonopy

CAE 分野 FrontFlow/blue FrontISTR



[ 講習会 ]

## 令和5年度 サイバーサイエンスセンター講習会のご案内

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、今年度以下の講習会の開催を予定しています。多くの皆様のご参加をお待ちしております。申し込み方法等、詳しくは以下をご覧ください。

<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/lectures/>

No.	講習会名 開催方式	開催日時	募集 人数	講 師	内 容
1	はじめてのLinux	5月23日(火) 13:00-15:00	15	小野 (情報部デジタル サービス支援課)	<ul style="list-style-type: none"> <li>Linux システムの基本的な使い方</li> <li>エディタの使い方</li> </ul>
	ハイブリッド型				
2	はじめてのスパコン	5月25日(木) 13:00-15:00	15	山下 (情報部デジタル サービス支援課)	<ul style="list-style-type: none"> <li>スーパーコンピュータの紹介と利用法入門</li> </ul>
	ハイブリッド型				
3	はじめての並列化	5月31日(水) 13:00-15:00	15	小松 (サイバーサイ エンスセンター)	<ul style="list-style-type: none"> <li>並列プログラミングの概要</li> </ul>
	オンライン				
4	MATLAB 入門	6月30日(金) 13:00-16:30	15	陳 (秋田県立大学)	<ul style="list-style-type: none"> <li>MATLAB の基本的な使い方</li> </ul>
	対面				
5	ネットワークとセキュ リティ入門	8月3日(木) 13:30-15:30	上限 なし	水木 (サイバーサイ エンスセンター)	<ul style="list-style-type: none"> <li>ネットワークの基本的な仕組み</li> <li>ネットワークの危険性と安全対策</li> </ul>
	オンライン				
6	Gaussian 入門	8月23日(水) 13:00-16:30	15	岸本 (理学研究科)	<ul style="list-style-type: none"> <li>Gaussian の基本的な使い方</li> </ul>
	対面				
7	Fortran 入門	9月7日(木) ~8日(金)	15	田口 (日本原子力 研究開発機構)	<ul style="list-style-type: none"> <li>Fortran の入門編</li> </ul>
	対面	7日 10:00-17:00 8日 10:00-12:00			
8	Mathematica 入門	9月12日(火) 13:00-16:00	15	横井 (尚絅学院大学)	<ul style="list-style-type: none"> <li>Mathematica の基本的な使い方</li> </ul>
	対面				
9	新システムの紹介と 利用法	9月中旬 13:00-14:30	上限 なし	滝沢(サイバーサイエン スセンター)、山下(情報部 デジタルサービス支援課)	<ul style="list-style-type: none"> <li>新スーパーコンピュータ AOBA-S の紹介</li> <li>利用方法、利用負担金について</li> </ul>
	オンライン				
10	はじめてのLinux	9月中旬 13:00-15:00	15	大泉 (情報部デジタル サービス支援課)	<ul style="list-style-type: none"> <li>Linux システムの基本的な 使い方</li> <li>エディタの使い方</li> </ul>
	ハイブリッド型				
11	並列プログラミング 入門 I (OpenMP)	10月上旬 13:00-16:00	15	小松 (サイバーサイ エンスセンター)	<ul style="list-style-type: none"> <li>並列プログラミングの概要</li> <li>OpenMP による並列プログラミング の基礎</li> <li>利用法</li> </ul>
	オンライン				
12	並列プログラミング 入門 II (MPI)	10月上旬 13:00-16:00	15	下村 (サイバーサイ エンスセンター)	<ul style="list-style-type: none"> <li>MPI による並列プログラミングの 基礎</li> <li>利用法</li> </ul>
	ハイブリッド型				
13	SX-Aurora TSUBASA の 性能分析・高速化	10月中旬 13:00-16:00	15	江川 (サイバーサイ エンスセンター)	<ul style="list-style-type: none"> <li>スーパーコンピュータでの性 能解析から最適化まで</li> </ul>
	ハイブリッド型				
14	スーパーコンピュータ AOBA を使った高速な統 計的機械学習	未定	15	未定	<ul style="list-style-type: none"> <li>機械学習の概要説明</li> <li>Frovedis の紹介と AOBA での Frovedis の使い方</li> </ul>
	未定				

備考：プログラムは予定のものです。変更になる場合がありますのでお含みおきください。

## 令和4年度 サイバーサイエンスセンター講習会実施報告\*

No.	講習会名	開催日時	受講者数	講師	内容
1	はじめてのLinux	5月24日(火) 13:30-15:30	5	小野 (情報部情報基盤課)	<ul style="list-style-type: none"> <li>Linux システムの基本的な使い方</li> <li>エディタの使い方</li> </ul>
2	はじめてのスパコン	5月26日(木) 13:30-15:30	7	山下 (情報部情報基盤課)	<ul style="list-style-type: none"> <li>スーパーコンピュータの紹介と利用法入門</li> </ul>
3	はじめての並列化	6月6日(月) 13:30-15:30	4	小松 (サイバーサイエンスセンター)	<ul style="list-style-type: none"> <li>並列プログラミングの概要</li> </ul>
4	MATLAB 入門	6月24日(金) 13:30-16:30	6	陳 (秋田県立大学)	<ul style="list-style-type: none"> <li>MATLAB の基本的な使い方</li> </ul>
5	ネットワークとセキュリティ入門	8月3日(水) 13:30-15:30	34	水木 (サイバーサイエンスセンター)	<ul style="list-style-type: none"> <li>ネットワークの基本的な仕組み</li> <li>ネットワークの危険性と安全対策</li> </ul>
6	Gaussian 入門	8月25日(木) 13:30-16:30	3	岸本 (理学研究科)	<ul style="list-style-type: none"> <li>Gaussian の基本的な使い方</li> </ul>
7	Mathematica 入門	8月30日(火) 13:30-16:30	2	横井 (尚絅学院大学)	<ul style="list-style-type: none"> <li>Mathematica の基本的な使い方</li> </ul>
8	Fortran 入門	9月9日(金) 13:30-16:30	3	田口 (日本原子力研究開発機構)	<ul style="list-style-type: none"> <li>Fortran の入門編</li> </ul>
9	はじめてのLinux	10月18日(火) 13:30-15:30	5	大泉 (情報部情報基盤課)	<ul style="list-style-type: none"> <li>Linux システムの基本的な使い方</li> <li>エディタの使い方</li> </ul>
10	はじめてのスパコン	10月20日(木) 13:30-15:30	4	佐々木 (情報部情報基盤課)	<ul style="list-style-type: none"> <li>スーパーコンピュータの紹介と利用法入門</li> </ul>
11	SX-Aurora Tsubasa の性能分析・高速化	10月25日(火) 13:30-16:30	2	江川 (サイバーサイエンスセンター)	<ul style="list-style-type: none"> <li>スーパーコンピュータでの性能解析から最適化まで</li> </ul>
12	並列プログラミング入門 I (OpenMP)	10月27日(木) 13:30-16:30	3	小松 (サイバーサイエンスセンター)	<ul style="list-style-type: none"> <li>並列プログラミングの概要</li> <li>OpenMP による並列プログラミングの基礎</li> <li>利用法</li> </ul>
13	並列プログラミング入門 II (MPI)	10月31日(月) 13:30-16:30	2	下村 (サイバーサイエンスセンター)	<ul style="list-style-type: none"> <li>MPI による並列プログラミングの基礎</li> <li>利用法</li> </ul>
14	SMASH 講習会 (RIST、センター共催)	11月10日(木) 13:30-17:00	4	石村和也 (株式会社クロスアビリティ)	<ul style="list-style-type: none"> <li>SMASH の概要紹介</li> <li>SMASH を用いた演習</li> </ul>
15	AOBA-Bを利用したカンタン MATLAB 並列処理ハンズオンセミナー (MathWorks 社、センター共催)	11月16日(水) 13:30-16:30	20	MathWorks 担当者	<ul style="list-style-type: none"> <li>AOBA を利用した MATLAB の活用事例の紹介</li> <li>サンプルデータを用いた演習</li> </ul>
16	スーパーコンピュータ AOBA を使った高速な統計的機械学習	12月22日(木) 13:30-15:30	16	NEC 担当者	<ul style="list-style-type: none"> <li>機械学習の概要説明</li> <li>Frovedis の紹介と AOBA での Frovedis の使い方</li> </ul>
参加者合計			120		

\*令和4年度講習会はすべてオンラインで開催しました。

## [ 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制度〉

## 大学院講義・先進化学国際講義 I (GP-Chem) における 量子化学演習の実施報告

岸本 直樹

東北大学大学院理学研究科化学専攻

2023年1月4日から30日までの間に、大学院講義「先進化学国際講義 I (GP-Chem)」の一環として量子化学演習を、大学院生9人を対象に実施しました。この演習では、サイバーサイエンスセンターの実習室でコンピュータを使った量子化学計算を経験することで、各自の化学研究に活用できるようになることと、広い視野に立った若手研究者の育成を目的としました。今回、大学院生は計3回の演習に参加する必要がありましたが、センターの実習室を6回分の時間(9時間)お借りして各人の予定に対応しました。

3回は以下の構成で、各自がWindows PCでGaussian社のソフトウェアを使って演習に取り組みました。以前に東北大学1年生の基礎ゼミで用意した内容を高度化し、基礎理論をレポート課題として加えています。

1. GaussViewで分子モデルを作り、Gaussian16Wを用いて構造の最適化(安定化)を行う。
2. Gaussian16Wを用いて気相あるいは水溶液中で安定な分子の構造と振動スペクトルを計算する。
3. Gaussian16Wを用いて分子の反応の経路や励起状態を計算する。また分子が持つ電子の密度を図で表現する。

GaussViewは量子化学計算ソフトウェア Gaussian 専用の可視化ソフトウェアで、Windows上で分子のモデルを作成しGaussian16Wを実行させることができます。温暖化問題に関係した二酸化炭素の振動、水中でのアミノ酸の構造変化、小分子の異性化反応、多環芳香族分子の励起状態などの内容を課題として、毎回の演習内容を各人にPDFファイルで配布することで感染対策を取りながら、教員とTAで質問に対応しました。また一般に分子の計算は電子数に応じて処理時間が掛かるようになるため、授業時間内で終了できる近似手法を用いました。なお、筆者はサイバーサイエンスセンターの利用者講習会(Gaussian入門)を担当しておりますが、広範な研究分野で分子の量子化学計算が必要とされていることを実感しておりますので、今回のような取り組みは大変重要であると思います。

本演習の開催に当たっては、サイバーサイエンスセンターの「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」を活用させていただきました。関係各位に大変お世話になり、厚く御礼申し上げます。

## [ 報 告 ]

**後藤英昭准教授が 2022 年度大学 ICT 推進協議会 (AXIES) 優秀論文賞を受賞**

後藤英昭准教授（ネットワーク研究部）が、2022 年度大学 ICT 推進協議会（AXIES）年次大会優秀論文賞を受賞しました（2023 年 3 月 13 日）。

**【題目】**

Wi-Fi プロファイルを用いた eduroam/OpenRoaming のパスワードレス設定

**【著者】**

後藤英昭（ネットワーク研究部）

原田寛之（札幌学院大学）

漆谷重雄（国立情報学研究所）

**【理由】**

本論文では、無線ネットワークの ID・パスワード入力を、組織のアカウントなどを用いてログイン済みのウェブサイトから、プロファイルを電子的手段で端末に流し込み、ID・パスワードレスな設定を実現できるフレームワークを教育・研究機関向けの無線 LAN ローミング基盤である eduroam で実現している。これにより、利用者による入力ミス・設定ミスの可能性を極力排除されることで、サービスの利便性と安定性の向上が期待されることが高く評価された。

**【詳細 URL】**

<https://axies.jp/news/5102/>

[スーパーコンピュータ AOBA のお知らせより]

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ウェブサイトに掲載されたお知らせの一部を転載しています。

<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/information/>

## コンパイラのバージョンアップについて

2023年4月3日にAOBAのコンパイラをバージョンアップいたします。

システム	コンパイラ名	旧バージョン	新バージョン	ドキュメント
AOBA-A, AOBA-C	Fortran Compiler	3.5	4.0	<a href="#">マニュアル&amp;リリースノート</a>
	C/C++ Compiler	3.5	4.0	
	MPI※1	3.0.0	3.2.0	
AOBA-B	AOCC Compiler	3.2	4.0	<a href="#">マニュアル&amp;リリースノート</a>
	Intel Compiler ※2、※3	oneAPI 2022.2	oneAPI 2023.0	<a href="#">oneAPIマニュアル関連</a>

※1 MPI を利用するプログラムは再コンパイルが必要

※2 Intel oneAPI 2023.0 の環境変数設定ファイルは、bash 向けのみの提供

※3 HPCI 用フロントエンドサーバの OS が oneAPI 2023.0 に未対応のため、AOBA のフロントエンドサーバをご利用ください。

(共同利用支援係, 共同研究支援係)

## 商用アプリケーションのバージョンアップについて

値解析ソフトウェア「MATLAB」および、数式処理システム「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。

新機能の概要、機能の詳細については開発元 Web サイトをご参照ください。

### MATLAB

- バージョン : R2023a
- バージョンアップ日 : 2023 年 4 月 3 日
- サービスホスト : フロントエンドサーバ、AOBA-B
- 起動コマンド : (GUI 版) matlab (コマンドライン版) matlab -nojvm -nosplash -nodesktop -nodisplay
- 開発元 Web サイト : [https://jp.mathworks.com/products/new\\_products/latest\\_features.html](https://jp.mathworks.com/products/new_products/latest_features.html)

### Mathematica

- バージョン : 13.2
- バージョンアップ日 : 2023 年 4 月 3 日
- サービスホスト : フロントエンドサーバ
- 起動コマンド : (GUI 版) mathematica (コマンドライン版) math
- 開発元 Web サイト : <https://www.wolfram.com/mathematica/new-in-13/>

(共同利用支援係)



## 令和5年度共同研究について

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。令和5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、13件が採択されましたのでお知らせします。

### [A] 若手・女性研究者支援課題

No.	申請者	所属	研究課題
A-1	大野 詩歩	東北医科薬科大学 分子生体膜研究所	分子動力学計算による抗 iPS 細胞抗体と糖鎖リガンドの相互作用様式の同定
A-2	小寺 紗千子	名古屋工業大学 工学研究科	環境因子を考慮したミリ波ばく露における安全性評価
A-3	松川 嘉也	東北大学 大学院工学研究科	熱分解反応場における温度の変動が化学反応速度に及ぼす影響の解明
A-4	屋山 巴	工学院大学 先進工学部	窒化物半導体におけるキャリアのドーパント準位への無輻射緩和過程の解明
A-5	Enriquez John Isaac Guinto	大阪大学 大学院工学研究科	Oxidative etching of the diamond surface by O <sub>2</sub> and H <sub>2</sub> O

### [B] 萌芽型課題

No.	申請者	所属	研究課題
B-1	有馬 卓司	東京農工大学 大学院工学研究院	互いが移動する車と車 (Vehicle to Vehicle:V2V) での電波伝搬状況の解明
B-2	春日 貴志 林 優一	長野工業高等専門学校 奈良先端科学技術大学院 大学	通信用コネクタ構造を組み込んだプリント基板解析の高速化
B-3	松岡 浩	技術士事務所 AI コンピューティングラボ	リカレント型ビット演算による縦渦挙動のマルチスケール創発解析

### [C] 一般課題

No.	申請者	所属	研究課題
C-1	越村 俊一	東北大学 災害科学国際研究所	SX-Aurora TSUBASA の津波のリアルタイム予測計算の国際展開
C-2	小林 敬生	東北大学 大学院理学研究科	VHF (60MHz) レーダによる小惑星内部構造探査における電波伝搬・電波散乱シミュレーション
C-3	塚原 隆裕	東京理科大学 創域理工学部	表面粗さ・主流乱れが影響した後退平板境界層における乱流遷移の直接数値解析
C-4	藤井 孝藏	東京理科大学 工学部	複雑流れ現象の理解とその効果的制御法に関する研究- 2
C-5	山崎 剛	東北大学 大学院理学研究科	日本領域長期再解析 (RRJ-Conv.) の長期データ整備と関連する研究開発

(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

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](mailto: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: <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/apply-for-use/#toc3>
- ・ 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](mailto: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

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。

<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/business/>

### 【問い合わせ先】

共同利用支援係 (cc-uketuke@grp.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

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】

- ・サブシステム AOBA-A
- ・サブシステム AOBA-B
- ・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）

#### 【問い合わせ先】

共同利用支援係 (cc-uketuke@grp.tohoku.ac.jp)

(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。

—用紙サイズ・文字サイズ等の目安—

- ・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)
- ・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)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。
- (2)投稿予定の原稿が15ページを超す場合は共同利用支援係まで前もってご連絡ください。
- (3)初回の校正は、執筆者が行って、誤植の防止をはかるものとします。
- (4)原稿の提出先は次のとおりです。

東北大学サイバーサイエンスセンター内 情報部デジタルサービス支援課共同利用支援係  
e-mail cc-uketuke@grp.tohoku.ac.jp  
TEL 022-795-3406

## スタッフ便り

先日、画像処理のパフォーマンス向上のため、既存の PC の GPU を交換しました。新しい GPU を PC に差し込んだままでは良いのですが

1. GPU への給電ケーブルが飛び出し、PC ケースの蓋が閉まらない
  2. PC の電源容量が不足のためか、新しい GPU だと PC が起動しない
- という問題が生じました。

どうしたものかと考えていると、GPU の電源コネクタへ L 字で接続できる延長ケーブルが販売されているのを見付け、これを使うことで問題 1 は解決できました。問題 2 については、不要になった別の PC の電源ユニット (PSU) があつたので、これを取り外し、元の PC の PSU とこの PSU の 2 つから GPU に給電すれば何とかかなりそうです。しかし、PC 本体から取り外した PSU には電源スイッチが付いておらず、起動の方法が分かりません。再び、どうしたものかと考えていると、本来マザーボードに接続する PSU のケーブルへ直接取付可能な電源スイッチが販売されているのを見付け、これを使うことで 2. の問題も解決できました。ということで、色々悩んだ割には、いずれもありふれた問題であり、先人が既に解決策を考えていたということに気付かされた次第です。

ちなみに、GPU を交換した PC で、1948 年のミュージカル映画「イースター・パレード」でフレッド・アステアが “Steppin’ Out with My Baby” を歌い踊るシーン (640x360 画素, 25fps) へ、Convolutional Neural Network (CNN) により人物の姿勢推定を行う OpenPose を適用したところ、処理速度が 21fps 程度出るようで (GPU 交換前だと 17fps 程度) そこそそ高速化できたようです。(T. A.)

仙台の桜も例年より早く開花宣言が発表されました。今年は新型コロナウイルスによる行動制限が緩和され、桜の名所での桜まつりが開催されるなど明るい話題が取り上げられ気分が弾みます。

去年は子どもをベビーカーに乗せてゆっくり桜を眺めてましたが、最近では「た、た、た」とかけっこができるようになったので、今年は公園内にある桜の花びらが舞い落ちる中と一緒にかけっこできればと思っています。

さて、今年度は新しいスーパーコンピュータが 8 月稼働に向けて設置中になります。既設システムと比較して、ベクトル演算性能が 14 倍以上に増強しますので、多くの利用者にご利用いただければ嬉しいです。また現地には最新のスーパーコンピュータ以外に博物館もあり、歴代のスーパーコンピュータで実際に使用していた各部品や装置、レトロパソコンまで見学が可能です。青葉山駅の近くなので、大学見学のコースの一環などで気軽に立ち寄って頂ければと思います。(T. M.)



### SENAC 編集部会

滝沢寛之 水木敬明 後藤英昭 高橋慧智  
今野義則 早坂和勝 大泉健治 小野 敏  
斉藤くみ子

令和 5 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  
PDF 作成 株式会社 東誠社

## スーパーコンピュータ AOBA システム一覧

計算機システム	機種
サブシステム AOBA-A	SX-Aurora TSUBASA
サブシステム AOBA-B	LX 406Rz-2
クラウドサービス AOBA-C	SX-Aurora TSUBASA

### サーバとホスト名

ログインサーバ	login.cc.tohoku.ac.jp
データ転送サーバ	file.cc.tohoku.ac.jp

### サービス時間

利用システム名等	利用時間帯
サブシステム AOBA-A	連続運転
サブシステム AOBA-B	連続運転
クラウドサービス AOBA-C	連続運転
各種サーバ	連続運転
大判プリンタ	平日 9:00～21:00

### サブシステム AOBA-A の利用形態と制限値

利用形態	キュー名	VE 数※	実行形態	最大経過時間 既定値/最大値	メモリサイズ
無料	sxf	1	1VE (VH を共用する)	1 時間/1 時間	48GB×VE 数
共有	sx	1	1VE (VH を共用する)	72 時間/720 時間	
		2～256	8VE 単位で確保 (VH を共用しない)		
	sxmix	2～8	1VE 単位で確保 (VH を共用する)		
占有	個別設定				

※ 2VE以上を利用した並列実行にはMPIの利用が必用

### サブシステム AOBA-B の利用形態と制限値

利用形態	キュー名	ノード数※	最大経過時間 既定値/最大値	メモリサイズ
共有	lx	1～16	72 時間/720 時間	256GB×ノード数
占有	個別設定			

※ 2ノード以上を利用した並列実行にはMPIの利用が必用

### クラウドサービス AOBA-C の利用形態と制限値

利用形態	キュー名	VE 数※	実行形態	最大経過時間 既定値/最大値	メモリサイズ
共有	sxc	1	1VE (VH を共用する)	72 時間/720 時間	48GB×VE 数
		2～512	8VE 単位で確保 (VH を共用しない)		
占有	個別設定				

※ 2VE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.56 No.2 2023-4

## [共同研究成果]

DBDプラズマアクチュエータを用いたNACA0015翼流れ剥離制御への ガーニーフラップの適用 .....	浅田 健吾 1 稲向 隆 関本 諭志 藤井 孝藏
低レイノルズ数領域における円弧翼周りの非定常流体解析 .....	佐々木大輔 13 高瀬 拓海 岡本 正人

## [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 .....	21
-----------------------	----

## [講習会]

令和5年度サイバーサイエンスセンター講習会のご案内 .....	36
令和4年度サイバーサイエンスセンター講習会実施報告 .....	37

## [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制度> 大学院講義・先進化学国際講義I (GP-Chem) における 量子化学演習の実施報告 .....	岸本 直樹 38
後藤英昭准教授が2022年度大学ICT推進協議会 (AXIES) 優秀論文賞を受賞 .....	39

## [スーパーコンピュータAOBAのお知らせより]

コンパイラのバージョンアップについて .....	40
商用アプリケーションのバージョンアップについて .....	41
令和5年度年度共同研究について .....	42
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 .....	43
民間企業利用サービスについて .....	44
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 .....	44

執筆要項 .....	45
------------	----

スタッフ便り .....	46
--------------	----