



TOHOKU
UNIVERSITY

ISSN 0286-7419

東北大学
サイバーサイエンスセンター

大規模科学計算システム広報

SENAC

Vol.46 No.2 2013-4



Supercomputing System
Cyberscience Center
Tohoku University
www.ss.isc.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.isc.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	共同利用支援係 (受付)	022-795-6153 (6153) FAX:022-795-6099 uketuke@isc.tohoku.ac.jp	センター業務全般に関する 受付窓口	8:30~17:15
	利用相談室	022-795-6153 (6153) sodan05@isc.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	8:30~17:15
			大判プリンタ、利用者端末等の 利用	8:30~21:00
	利用者談話室	(3444)	各センター広報の閲覧	8:30~21:00
	展示室(分散 コンピュータ博物館)		歴代の大型計算機等の展示	9:00~17:00
三階	庶務係	022-795-3407 (3407) syomu@isc.tohoku.ac.jp	庶務に関すること	8:30~17:15
	会計係	022-795-3405 (3405) kaikei@isc.tohoku.ac.jp	会計に関すること、負担金の請 求に関すること	8:30~17:15
	共同研究支援係	022-795-6252 (6252) rs-sec@isc.tohoku.ac.jp	共同研究、計算機システムに 関すること	8:30~17:15
	共同利用支援係	022-795-3406 (3406) 022-795-6251 (6251) uketuke@isc.tohoku.ac.jp	利用手続き、利用相談、講習 会、ライブラリ、アプリケーション に関すること	8:30~17:15
	ネットワーク係	022-795-6253 (6253) net-sec@isc.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。

[お知らせ]

平成 25 年度サイバーサイエンスセンター講習会案内

No.	名 称	開催日時	講 師	内 容 概 略
1	UNIX入門	5月28日(火) 13:00-16:10	小松 一彦	・UNIX システムの基本的な使い方 ・エディタの使い方 ・プログラムの実行方法
2	スーパーコンピュータ と並列コンピュータの 基本的な利用法	5月29日(水) 13:00-16:00	小野 敏	・スーパーコンピュータ、並列コンピュータの紹介 ・見学 ・利用法
3	スーパーコンピュータ と並列コンピュータの 高速化技法の基礎(実習 形式)	5月30日(木) 9:30-17:00	江川 隆輔	・実習によるプログラムの高速化を 目的とした最適化および並列化 の基礎
4	MPIプログラミング 入門(実習形式)	5月31日(金) 10:00-17:00	滝沢 寛之	・MPIによる並列プログラミングの基礎 ・利用法
5	MATLAB入門	6月14日(金) 13:00-17:00	陳 国躍 (秋田県立大)	・MATLAB の基本的な使い方
6	ネットワークと セキュリティ入門	8月2日(金) 13:30-16:00	水木 敬明	・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
7	Gaussian入門	8月9日(金) 13:00-17:00	岸本 直樹 (理学研究科)	・Gaussian の基本的な使い方
8	Mathematica入門	9月3日(火) 13:00-17:00	横井 涉央 (情報科学研究科)	・Mathematica の基本的な使い方
9	UNIX入門	9月9日(月) 13:00-16:10	後藤 英昭	・UNIX システムの基本的な使い方 ・エディタの使い方 ・プログラムの実行方法
10	スーパーコンピュータ と並列コンピュータの 基本的な利用法	9月10日(火) 13:00-16:00	大泉 健治	・スーパーコンピュータ、並列コンピュータの紹介 ・見学 ・利用法
11	スーパーコンピュータ と並列コンピュータの 高速化技法の基礎(実習 形式)	9月11日(水) 9:30-17:00	江川 隆輔	・実習によるプログラムの高速化を 目的とした最適化および並列化 の基礎
12	MPIプログラミング 入門(実習形式)	9月12日(木) 10:00-17:00	小松 一彦	・MPIによる並列プログラミングの基礎 ・利用法
13	Marc入門	9月13日(金) 13:00-17:00	内藤 英樹 (工学研究科)	・Marc の基本的な使い方

備考：プログラムは予定のものです。若干変更になる場合がありますのでお含みおきください。詳細は、URL：
<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/guide/kosyu.cgi> でご確認ください。このウェブページで受講
 申込を受け付けます。受講資格はセンター利用有資格者（教員、職員、学生等）となります。

利用負担金の値下げと利用負担金割引制度の実施について

平成 25 年度の利用負担金について、上半期(4 月～9 月)の利用をより促進するために、スーパーコンピュータのバッチ処理の利用額を、1 秒につき 0.4 円から 0.3 円に値下げいたします。対象となるジョブは 4 月 1 日から 9 月 30 日に終了したものととなります(表 1)。また大規模科学計算システムを有効に利用して頂くために、利用額に応じて負担額を軽減する割引制度についても、昨年と同じ内容で引き続き実施いたしますのでご活用願います(表 2)。

表 1 負担金項目と利用額

区 分	項 目	利 用 額
演 算 負担経費	スーパー コンピュータ	バッチ処理 演算時間 1 秒につき 0.3 円 (4/1～9/30)
		バッチ処理 演算時間 1 秒につき 0.4 円 (10/1～3/31)
		会話型処理 演算時間 1 秒につき 2 円
	並 列 コンピュータ	バッチ処理 演算時間 1 秒につき 0.1 円
		会話型処理 演算時間 1 秒につき 0.2 円
ファイル負担経費		1MB・日につき 0.1 円
出力負担経費		大判プリンタによるカラープリンタ用紙 1 枚につき 600 円

備考

- 1 負担額算定の基礎となる測定数量に端数が出た場合は、切り上げる。
- 2 並列コンピュータで並列処理した場合の演算時間は経過時間とする。

表 2 利用負担金割引制度

利 用 額	負 担 額
10 万円まで	利用額と同じ
10 万円を超え 100 万円まで	10 万円
100 万円を超え 500 万円まで	(100 万円を超える利用額の 1/2) + 10 万円
500 万円を超え 1000 万円まで	(500 万円を超える利用額の 1/3) + 210 万円
1000 万円を超え 2000 万円まで	(1000 万円を超える利用額の 1/4) + 375 万円
2000 万円以上	(2000 万円を超える利用額の 1/5) + 625 万円

備考

- 1 利用負担金割引の対象は、スーパーコンピュータ、並列コンピュータの演算負担経費の負担額が 10 万円を超える場合に適用されます。ファイル負担経費及び出力負担経費は対象になりません。
- 2 支払責任者ごとに集計した累計利用額に応じた利用負担額となります。
- 3 申請は不要で、全ての支払責任者(利用者)が適用となります。
- 4 請求書は 4 半期ごとに発行されますが、割引制度は 1 年間の利用額の累計に対して適用されます。
(請求額 = 4 月からの利用額の累計に割引制度を適用した金額 - 請求済額)

[共同研究成果]

Building-Cube Method による大規模流体解析データの圧縮法の開発

坂井玲太郎¹、大林茂²、佐々木大輔³、中橋和博⁴

¹ 東北大学大学院工学研究科、² 東北大学流体科学研究所

³ 金沢工業大学航空システム工学科、⁴ 宇宙航空研究開発機構

次世代の数値流体力学を目指して提案された手法 **Building-Cube Method** を通じ、実用的な大規模シミュレーションへの取り組みを航空分野を中心に進めている。その一方で大規模計算から得られる出力データの肥大化が新たな課題として顕在化しつつある。そこで本稿では **Building-Cube Method** の直交格子構造と画像符号化手法を組み合わせたデータ圧縮法を紹介し、それにより得られた圧縮結果について述べる。

1. 緒言

今日の数値流体力学 (**Computational Fluid Dynamics: CFD**) は実験と並んでツールとしての地位を確立しており、その用途に応じて境界適合格子もしくは非構造格子がよく用いられている。しかし近年では計算機の高性能化に伴い、**CFD** の黎明期に用いられた直交格子法が再び注目を集めている。直交格子法は過去に物体境界での精度などの理由で用いられなくなったものの、本手法には自動格子生成、高次精度解法といった特長はもとより、計算構造が圧倒的にシンプルにできるという大きな利点がある。将来的に計算が大規模化すればするほど、直交格子 **CFD** はその計算構造の単純さの点で有利になることが予想される。こうした観点から、直交格子法の利点を生かしつつさらに計算空間の解像度制御と組み合わせた手法として **Building-Cube Method (BCM)** が提案された [1]。本手法ではこれまでに複雑形状に対する高速でロバストな自動格子生成 [2]、大規模シミュレーションにおける高効率計算 [3] を達成したほか、航空機翼周りの非粘性流体解析 [4, 5]、航空機主脚周りの非定常流解析 [6, 7]、エンジンファンノイズの伝搬解析 [8] への応用が進んでおり、新たな **CFD** 技術としての基盤を確立しつつある。

一方、**BCM** を用いた大規模シミュレーションの実現に向けて進むなかで、実用性の観点からは出力データのサイズが無視できない問題として顕在化しつつある。オイラー方程式に基づく定常解析であればまだしも、非定常な流れ場の解析には時系列の膨大なデータが必要である。例えば前述の航空機主脚周りの非定常流解析 [7] では音響解析のための時系列データとして約 1000 ステップ分の時系列データを取得している。本解析における格子点数は約 1 億点であり、仮にこのステップ分だけ速度と圧力の物理量を保持しようとする、単精度換算でも約 1.6 TB と非常に膨大なものになってしまう。これら膨大なデータは単純にストレージを圧迫するだけでなく、シミュレーション中のデータ入出力にかかる時間が無視できなくなることから、計算効率を下げる要因にもなりうる。出力データサイズの問題は **BCM** に限らずあまねくシミュレーションに潜在し、シミュレーションの大規模化にあわせて直面を余儀なくされる課題であるといえる。

そこで本稿ではデータサイズの課題に対するこれまでの取り組みとして、**BCM** の直交格子構造と画像符号化手法を組み合わせたデータ圧縮法を紹介するとともに、その圧縮結果について述べる。**CFD** より得られた流体解析データの圧縮法として、これまでにウェーブレットを使った手法 [9] や、特異値分解を使った手法 [10] が提案されている。しかし **BCM** の特徴の 1 つに等方等間隔直交格子 (ボクセル) の採用があり、その格子はデジタル画像表現におけるピクセルの 3 次元への拡張と捉えることができる。さらに、画像符号化手法が画像の連続性を仮定してデータを圧縮する一方、流体もまた連続性をもっており、連続性について画像と流体のアナロジーが成立する。したがって **BCM** を用いた流体シミュレーションにとって画像符号化手法は容易に適用が可能であり、しかも画像圧縮に準じた圧縮率も期待できる有効な手法といえる。そこで本研究

では画像符号化手法として利用され、かつ CFD への応用事例を幅広く持つ離散ウェーブレット変換を中心にデータ圧縮法を構成した。そしてこれまでの BCM の応用事例から得られた圧縮性非粘性流体解析データ、および非圧縮性粘性流体解析データに適用し、その効果を検証した。

2. Building-Cube Method

本手法では計算領域全体で等方等間隔直交格子を採用することで、シミュレーションにおける前処理・数値計算・後処理のすべての段階で処理を単純化することを目指している。さらに局所細分化を格子ではなく計算小領域毎に適用し、小領域の演算量をみな等価にすることで、大規模並列計算への対応の容易さも狙っている。

図 1 に BCM で用いる計算格子を示す。流れ場は複数の立方体小領域に分割され、これら 1 つ 1 つを cube と呼んでいる (図 1 左)。それぞれの cube は各軸方向に格子点数の等しい直交格子、すなわち等方等間隔直交格子を内包しており、これを cell と呼んでいる (図 1 右)。BCM は直交格子が持つ特長をそのまま引き継いでおり、高品質格子の自動生成・高次精度解法の容易な導入・単純な計算構造といった利点を持つ。さらに BCM では cube 構造により局所細分化も容易に導入でき、かつ cube 毎の演算負荷が等しいことから高い並列化効率も期待できる。なお cube による小領域分割は数値計算面でのメリットだけではなく、計算領域を適切な粒度で分解できるという点で後処理においても恩恵を与える。とりわけ本稿の主題であるデータ圧縮においてはこの領域分割法が重要な役割を果たしており、詳細を次章で述べる。

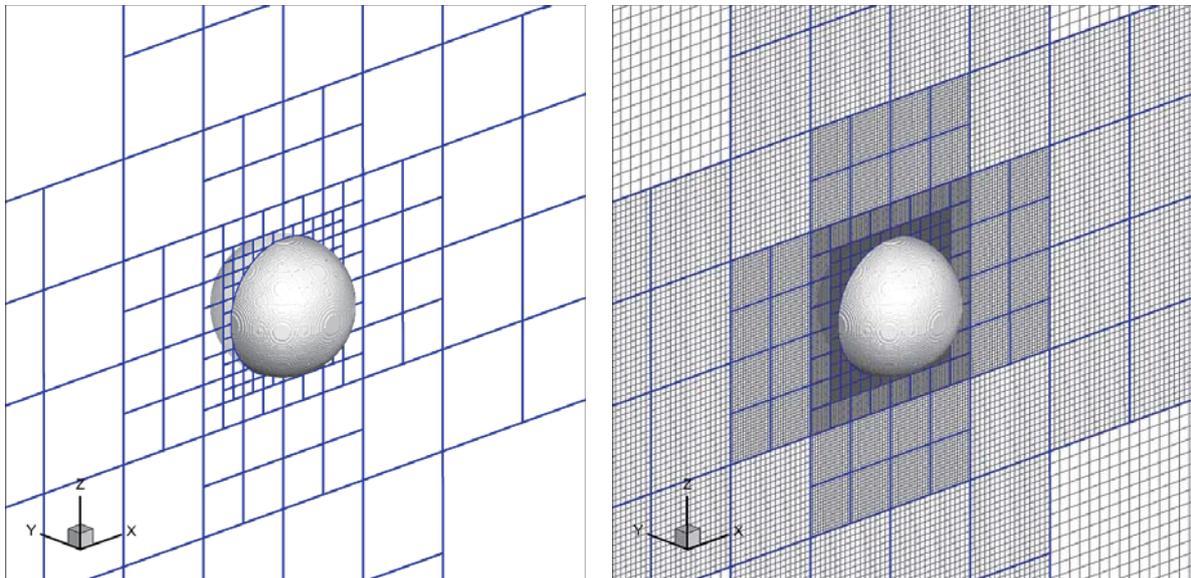


図 1 Building-Cube Method による球周りの格子生成例 (左 : cube、右 : cell)

3. データ圧縮手法

3.1 離散ウェーブレット変換と Embedded Zerotree Wavelet 符号化

離散ウェーブレット変換は幅広い工学分野で利用されている信号処理技術であり、特に CFD の分野においては格子細分化 [11]、衝撃波検出 [12]、乱流の渦抽出 [13] などに利用されている。本変換により入力信号は低周波数成分である近似成分と、高周波数成分である詳細成分に分解される。変換によって得られた近似成分に対して再帰的に変換を実行することで、信号を周波数に応じて分解することができる。

図 2 に 2 次元流体解析データに対して離散ウェーブレット変換を実行した結果を示す。ここでは等方等間隔直交格子を利用した円柱周りの流体解析データ（格子点数 256×256 ）のうち主流方向速度を例にとり（図 2 左）、変換を実行している。各軸の変換で得られた低周波数成分を近似成分とみなすことで、データは変換前の 4 分の 1 のサイズ（格子点数 128×128 ）の近似成分と、4 分の 3 のサイズ（格子点数 128×128 の 3 領域）の詳細成分に分離される（図 2 中央）。変換後のデータでは近似成分は変換前データとほぼ同じ分布を持つ一方、詳細成分の持つ値は小さくなっている。このことは、今回例にとった流れ場のエネルギーのほとんどが低周波数成分に集約されており、逆に高周波数成分のエネルギーが小さいことを示している。さらに近似成分に対して再帰的に離散ウェーブレット変換を実行することができ、信号は再び近似成分と詳細成分に分離される（図 2 右）。再帰的な変換においてもやはり詳細成分の持つ値は小さい。本例から示されるように、一般に連続性を持つ信号においては変換後の近似成分は大きく、詳細成分は小さくなる。

図 2 右で示した変換後の成分は図 3 に示すように、近似成分に近い側を親、遠い側を子とする木構造とみなすことができる。この木構造を応用した画像符号化手法が **Embedded Zerotree Wavelet (EZW)** 符号化 [14] である。先の変換例をふまえると、一般に連続性を持つ信号では木構造の根に近いノードでは値が大きくなり、逆に根から離れるほど値が小さくなる、という傾向がある。そして **EZW** 符号化ではこの偏りを利用することでデータを圧縮する。なお本符号化手法はもともと画像に対して提案されたものであり、2 次元ピクセルデータを対象としているが、これを **BCM** が取り扱う 3 次元ボクセルデータへと拡張するのは容易である。また図 3 から示されるように、離散ウェーブレット変換でバランスのとれた木構造を構築するには各軸方向で同じ数だけデータがなければならないという制約がある。しかし **BCM** においてはすべての **cube** が各軸で同数の **cell** を持っているため、この制約は問題にならない。図 4 に **BCM** を用いて得た 2 次元円柱周りの流体解析データ（主流方向速度）と、その離散ウェーブレット変換結果を示す。**BCM** の直交格子構造のおかげで離散ウェーブレット変換が **cube** 単位で実行できるだけでなく、常にバランスのとれた木構造を構築し効率的に符号化することが可能となる。

なお **EZW** 符号化では入力として整数をとる一方、圧縮対象の流体解析データは一般に実数であるため、前処理として量子化を実行している。量子化も含めた圧縮実行手順については次節で詳述する。

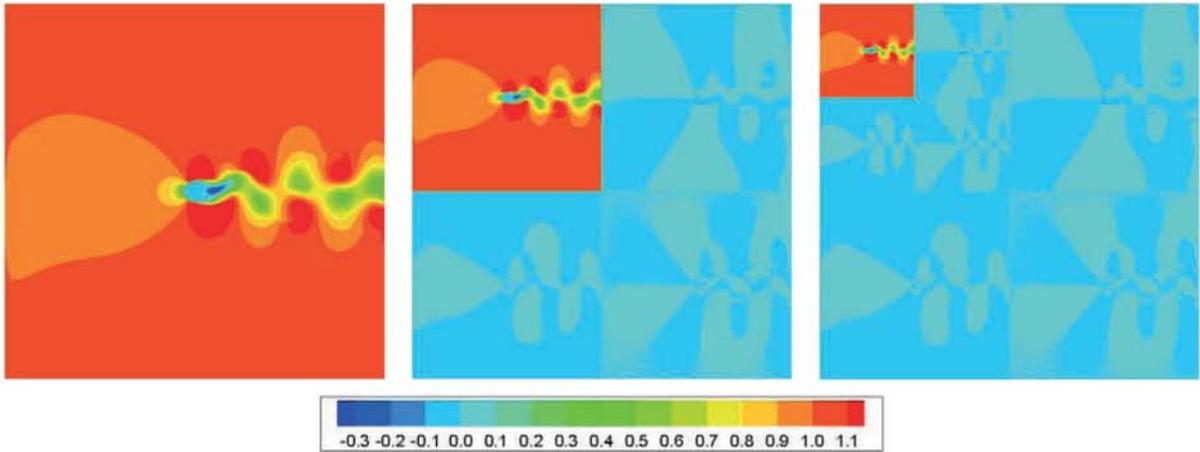


図2 2次元流体解析データ（主流方向速度）に対する離散ウェーブレット変換の適用
（左：変換前、中央：1回変換後、右：2回変換後）

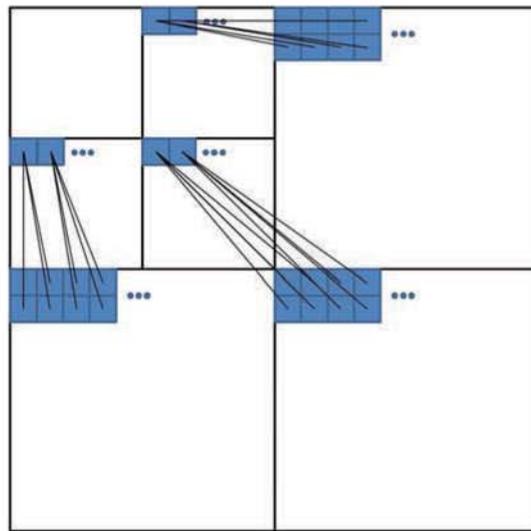


図3 近似成分に対する再帰的な離散ウェーブレット変換より構築される木構造

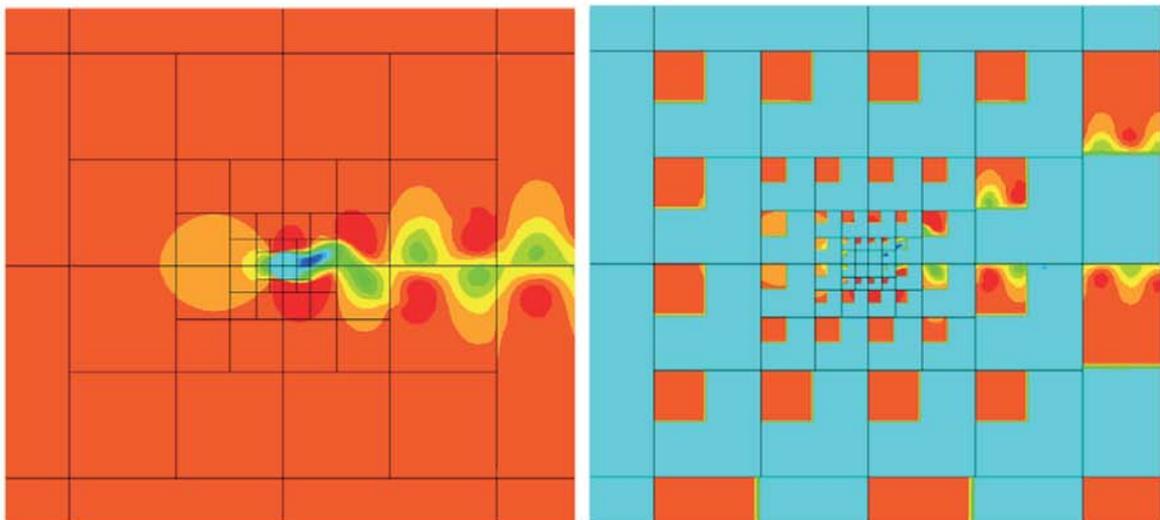


図4 2次元BCM流体解析データ（主流方向速度）に対する離散ウェーブレット変換の適用
（左：変換前、右：1回変換後）

3.2 データ圧縮手順

データ圧縮のメインプロセスは前節で紹介した離散ウェーブレット変換と続く EZW 符号化であり、前処理として量子化、後処理としてデータサイズをさらに削減するためのエントロピー符号化を設けている。本研究では離散ウェーブレット変換に Cohen-Daubechies-Feauveau 9/7 ウェーブレット [15]、エントロピー符号化にレンジコーダー [16] を用いている。また量子化は以下の式で表される：

$$q_{integer} = \text{round} \left(\frac{q_{real}}{\Delta_q} \right) \quad (1)$$

上式において q_{real} は入力信号としての実数、 $q_{integer}$ は出力としての整数、 round は四捨五入整数化の関数である。量子化を通じて入力データは非可逆に圧縮され、 Δ_q が量子化後のデータサイズとデータ品質のトレードオフを決定する。 Δ_q が小さいほど量子化後のデータ品質は維持されるが、出力される整数の幅が大きくなることからデータサイズは大きくなる。逆に Δ_q が大きい場合には量子化後のデータサイズは小さくなるものの、そのデータ品質は低くなってしまう。本稿で示す圧縮事例においては量子化ステップサイズを一樣流音速もしくは一樣流速度を基準として $\Delta_q = 1.2 \times 10^{-4}$ とし、さらに Capizzano [17] の局所細分化の指標を参考にして流れ場の様相に応じて量子化ステップサイズに重み付けを行なっている。

4. データ圧縮結果

4.1 ONERA M6 翼周りの流れ計算結果データの圧縮

BCM 非粘性圧縮性流体解析コード [4] を用いて ONERA M6 翼周りの流れ場を計算し、得られた流体解析データを圧縮した。計算に用いた総 cell 数は約 2100 万点で、相当するデータサイズは 1 物理量あたり約 85 MB (単精度換算) である。保存量である密度、運動量 (3 成分)、エネルギーの計 5 物理量を保存する場合、合計のデータサイズは 1 ステップあたり約 430 MB となる。シミュレーションにおけるマッハ数と迎え角は実験条件に基づき、それぞれ 0.84 と 3.06° と設定した。

圧縮前後でのマッハ数分布および表面圧力係数分布の比較をそれぞれ図 5、6 に示す。圧縮後のデータからは、圧縮前のデータとほぼ同じ分布が得られていることが見て取れる。また図 7 に 65% および 90% スパン断面での圧力係数プロットを示す。それぞれの断面において圧縮後のデータから得られるプロットは、圧縮前のデータのプロットを良く再現している。これらの結果から、本圧縮手法より得られる圧縮データが定性的・定量的に妥当な品質を持つことを確認した。一方でデータサイズについては、圧縮後のデータサイズは 5 物理量の圧縮で合計約 15 MB となり、圧縮前データサイズ (約 430 MB) の約 3.5% まで小さくすることができた。

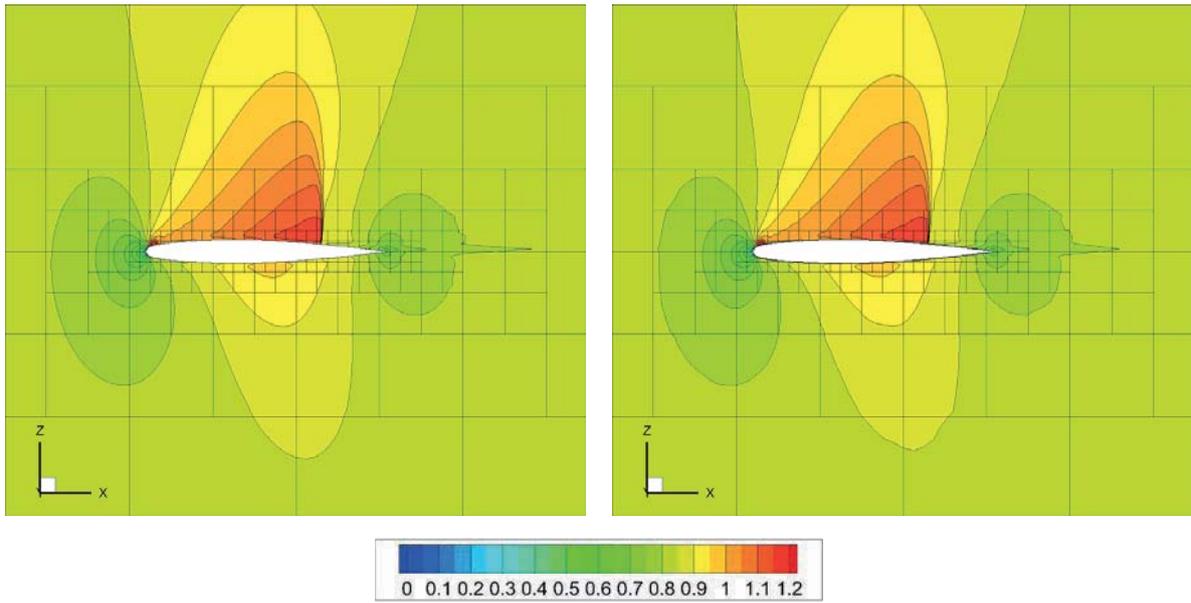


図5 ONERA M6 翼断面マッハ数分布比較 (左：圧縮前、右：圧縮後)

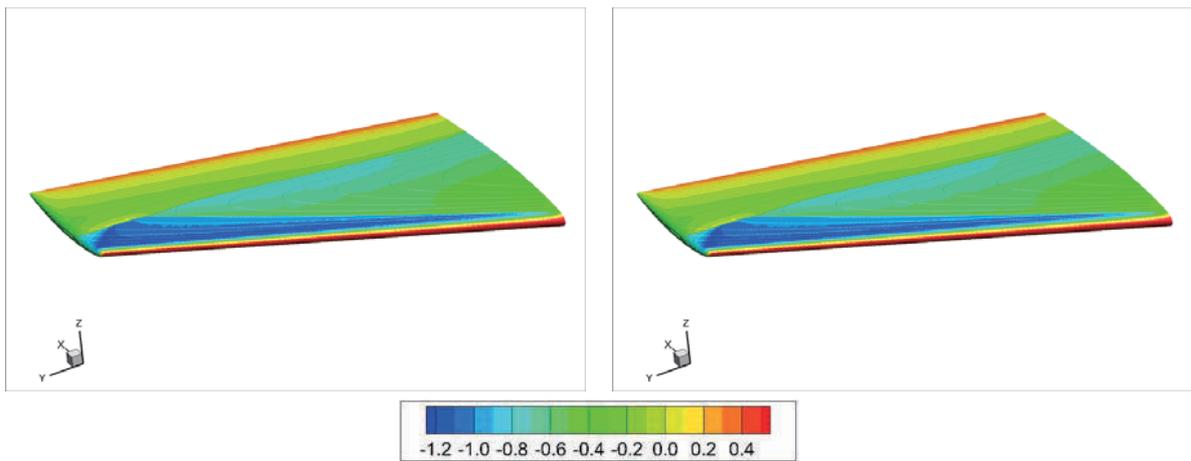


図6 ONERA M6 翼表面圧力係数分布比較 (左：圧縮前、右：圧縮後)

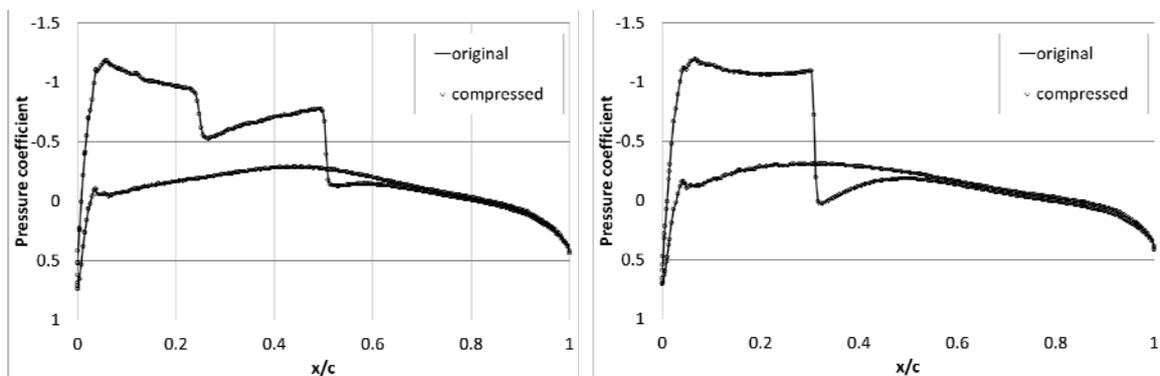


図7 ONERA M6 翼表面圧力係数プロット比較 (左：65%スパン断面、右：90%スパン断面)

4.2 F1 レーシングカー周りの流れ計算結果データの圧縮

BCM 粘性非圧縮性流体解析コード [7] を用いて F1 レーシングカー周りの流れ場を計算し、得られた流体解析データを圧縮した。計算に用いた総格子点数は約 2.4 億点で、相当するデータサイズは 1 物理量あたり約 970 MB (単精度換算) である。流体の非圧縮性の仮定から密度は常に一定とし、速度 (3 成分) と圧力の計 4 物理量を保存する場合、合計のデータサイズは 1 ステップあたり約 3.8 GB に達する。シミュレーションにおけるレイノルズ数は車体長を基準として 1.5×10^7 と設定した。本レイノルズ数においては物体表面の境界層は即座に乱流に遷移し、車体形状ともあいまって非常に複雑な流れ場を形成する。

圧縮前後での主流方向速度分布の比較を図 8 に示す。複雑な流れ場ながらも圧縮後のデータから圧縮前のデータと遜色のない結果が得られていることが見て取れる。また図 9 には、主流方向速度分布に渦度等値面を重畳した結果を示している。流れ場と同様に等値面は非常に複雑な構造ではあるものの、圧縮後のデータからも良く再現されていることがわかる。一方でデータサイズについて、圧縮後のデータサイズは 4 物理量の圧縮で合計約 140 MB となり、圧縮前データサイズ (約 3.8 GB) の約 3.7% まで小さくすることができた。前節の圧縮事例では非粘性流体を取り扱っていたために物理量の変化は物体近傍に限られていたが、本節の圧縮事例からは後流も含めた高レイノルズ数非定常流れについても良好な圧縮率と圧縮後データ品質を示すことができた。

本計算事例において、緒言で述べた主脚の非定常解析事例にならって仮に 1000 ステップ分のデータを出力する場合、そのデータサイズは合計で約 3.8 TB にまで達する。これに対して本節で示した圧縮率が流体計算を通じて保たれると仮定するならば、圧縮によりデータサイズを約 140 GB まで抑えることができる。これにより、流体解析データの取り回しについて劇的な改善が期待できる。

5. 結論

BCM の直交格子構造を活用して画像符号化手法を応用したデータ圧縮手法を構成し、非粘性流体ならびに粘性流体の解析データに適用した。その結果、データサイズは圧縮前の 4% 以下まで圧縮できることを示すとともに、圧縮後のデータからは圧縮前のデータと遜色のないマッハ数分布、圧力係数分布、速度分布が得られることを確認した。今後は圧縮処理の時間短縮を図るとともに、領域毎の重み付けを最適化することでさらに効率的な圧縮を図り、実用的なツールとして発展させていく予定である。

謝辞

本研究は東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータを利用することで実現することができた。また研究にあたっては同センター関係各位にご指導とご協力をいただいた。本研究は科研費 (21226018) の助成を受けたものである。記して謝意を表す。

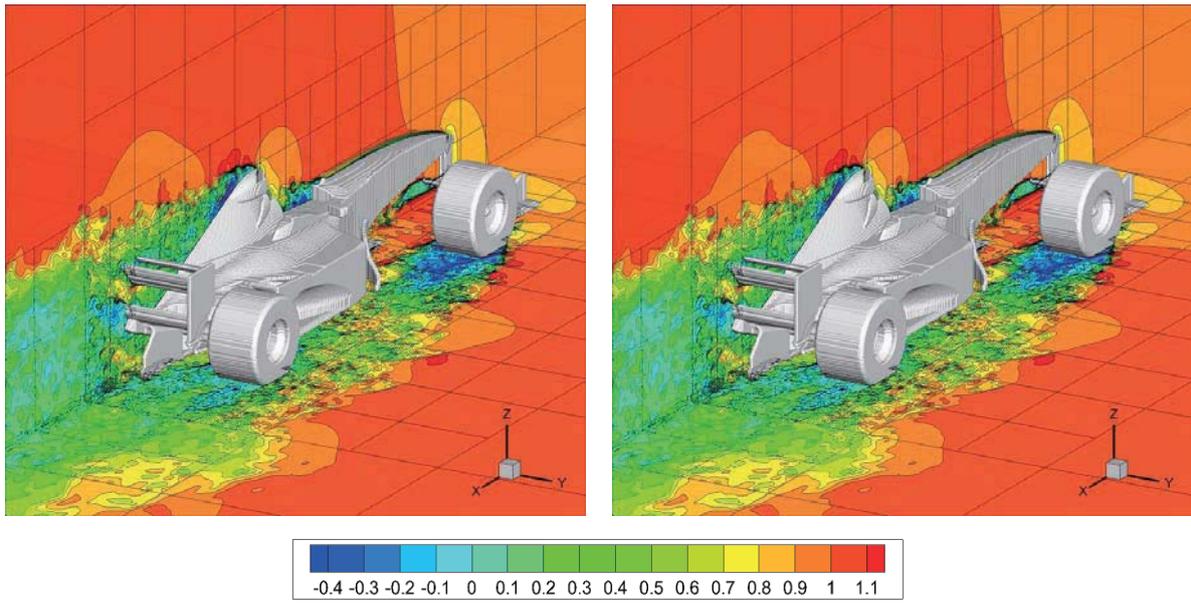


図8 F1 レーシングカー周りの主流方向速度分布
(左：圧縮前、右：圧縮後)

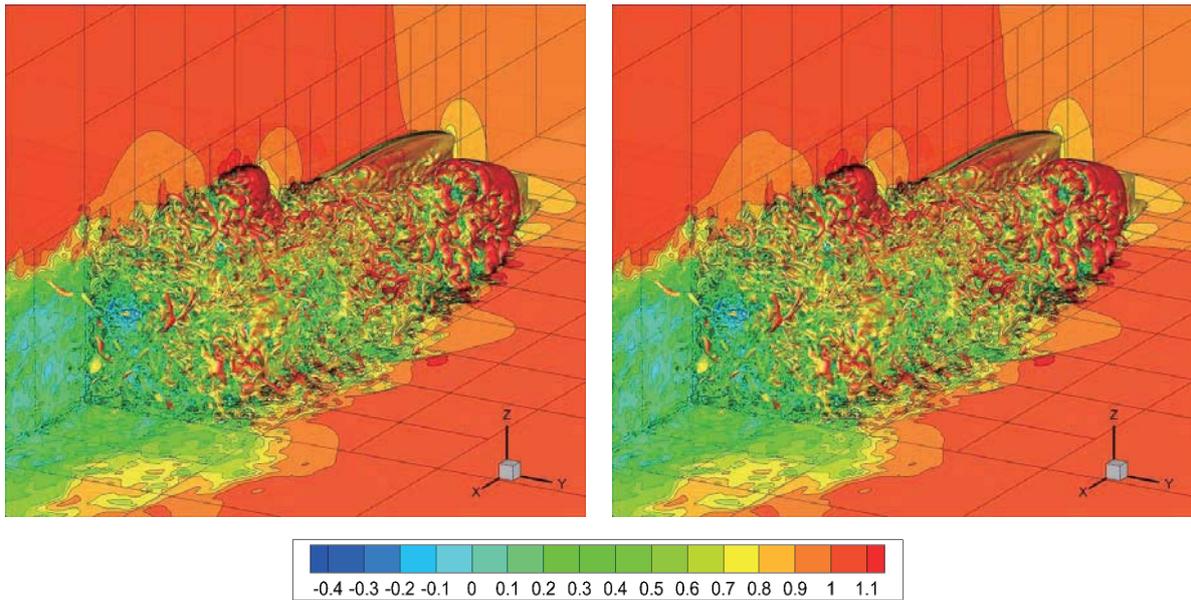


図9 F1 レーシングカー周りの主流方向速度分布と渦度等値面の重畳
(左：圧縮前、右：圧縮後)

参考文献

- [1] Nakahashi, K., "High-Density Mesh Flow Computations with Pre-/Post- Data Compressions," AIAA Paper 2005-4876, 2005.
- [2] Ishida, T., Takahashi, S., Nakahashi, K., "Efficient and Robust Cartesian Mesh Generation for Building-Cube Method," *Journal of Computational Science and Technology*, Vol. 2, No. 4, pp. 435-446, 2008.
- [3] 高橋俊, 石田崇, 中橋和博, 小林広明, 岡部公起, 下村陽一, 曾我隆, 撫佐昭裕, "大規模非圧縮性流体シミュレーションの工学問題への応用," SENAC Vol. 42, No. 1, pp. 107-114, 2009.
- [4] Nakahashi, K., "Immersed Boundary Method for Compressible Euler Equations in the Building-Cube Method," AIAA Paper 2011-3386, 2011.
- [5] 西村康孝, 佐々木大輔, 中橋和博, "圧縮性 Building-Cube Method を用いた翼周りの非定常非粘性流れ解析," 第 25 回数値流体力学シンポジウム講演集, 2011.
- [6] 佐々木大輔, 恩田博, 中橋和博, "Building-Cube 法による非定常流体解析と空力音推定," SENAC Vol. 44, No. 1, pp. 33-45, 2011.
- [7] Deguchi, A., Sasaki, D., Nakahashi, K., Murayama, M., Yamamoto, K., Yokokawa, Y., "Aeroacoustic Simulation of JAXA Landing Gear by Building-Cube Method and Non-compact Curle's Equation," AIAA Paper 2012-0388, 2012.
- [8] Fukushima, Y., Sasaki, D., Nakahashi, K., "Code Development of Linearized Euler Equation on Block-Structured Cartesian Mesh for Complicated Geometries," AIAA Paper 2012-0832, 2012.
- [9] Kang, H., Lee, D., Lee, D., "A Study on CFD Data Compression Using Hybrid Supercompact Wavelets," *KSME International Journal*, Vol. 17, No. 11, pp. 1784-1792, 2003.
- [10] Lorente, L.S., Vega, J.M., Velazquez, A., "Compression of aerodynamic databases using high-order singular value decomposition," *Aerospace Science and Technology*, Vol. 14, pp. 168-177, 2010.
- [11] Vasilyev, O., Paolucci, S., "A dynamically adaptive multilevel wavelet collocation method for solving partial differential equations in a finite domain," *Journal of Computational Physics*, Vol. 125, pp. 498-512, 1996.
- [12] Gerritsen, M., "Designing an efficient solution strategy for fluid flows," Ph.D. Thesis, Stanford University, 1996.
- [13] Farge, M., Schneider, K., Pellegrino, G., Wray, A.A., Rogallo, R.S., "Coherent vortex extraction in three-dimensional homogeneous turbulence: Comparison between CVS-wavelet and POD-Fourier decompositions," *Physics of Fluids*, Vol. 15, No. 10, pp. 2886-2896, 2003.
- [14] Shapiro, J.M., "Embedded Image Coding Using Zerotrees of Wavelet Coefficients," *IEEE transactions on signal processing*, Vol. 41, No. 12, pp. 3445-3462, 1993.
- [15] Cohen, A., Daubechies, I., Feauveau, J.C., "Biorthogonal Bases of Compactly Supported Wavelets," *Communication on Pure and Applied Mathematics*, Vol. 45, pp. 485-560, 1992.
- [16] Martin, G.N.N., "Range encoding: an algorithm for removing redundancy from a digitized message," Video and Data Recording Conference, 1979.
- [17] Capizzano, F., "Turbulent Wall Model for Immersed Boundary Methods," *AIAA Journal* Vol. 49, No. 11, pp. 2367-2381, 2011.

超高速第一原理電子状態計算コードの開発と応用

柳澤将^{1,2}, 小野倫也², 稲垣耕司², 森川良忠², Arno Schindlmayr³

¹琉球大学理学部, ²大阪大学大学院工学研究科, ³Univ. Paderborn

1. 緒言

本共同研究プロジェクトの目的は、ナノ構造の電子状態を大規模なモデルを用いて予測するための、第一原理計算コードを開発することである。特に、ペタコン世代の計算環境でグローバルスタンダードとなるコードを開発することに重点をおいているため、従来の計算手法に捉われず、ベクトル計算機・並列計算機に適した計算アルゴリズムを採用するようにしている。特に小野がこれまで開発してきた実空間差分法に基づく計算手法は、その代表的なものである。この方法は、並列化が難しい従来法のように波動関数を平面波に展開する代わりに、空間内に配置したグリッドポイント上の波動関数やポテンシャルの値を直接求める。そのため、計算空間をサブドメインに分割し、サブドメイン内の計算を各 CPU に分担させて計算させることが容易にできる。このような並列方法を用いれば、CPU 間の通信も非常に少ないので並列計算に適している。また、本プロジェクトで開発する計算コードは、上記の MPI によるノード間並列のみでなく、マイクロタスク処理等によるノード内並列にも適していることが、サイバーサイエンスセンターおよび他大学の計算機センターの計算機リプレースの際のベンチマーク試験において実証されている。さらに、森川はこれまでのサイバーサイエンスセンターとの共同研究により、SX シリーズ上でチューニングされた高効率な第一原理計算アルゴリズムの開発に精通している。

平成 24 年度は、京コンピュータの利用も念頭にチューニングに注力した。平成 23 年度中に OpenMP によるハイブリッド並列化を組み込んだが、更なる高効率化が必要であった。そこで、プログラム STATE について、平面波基底ではベクトルの直交化部分に時間がかかり、並列化効率を落としていることが分かっていた。ここを格段に高効率な並列化するために、ブロック化グラムシュミットを導入した。MPI による並列化で格段の並列効率を実現した。

以上のプログラム開発と平行して、基礎科学的にも、また、応用上の観点からも重要な系について適用し、以下に示すような成果を上げた。

2. GW 近似による有機結晶の第一原理バンド計算

有機半導体を材料とする電子デバイスは、次世代の電子材料として国際的に研究開発がさかんである。有機分子からなる結晶では分子を中心に広がるパイ電子雲間の結合が弱く、電気伝導を担うキャリア(電子・正孔)は電子雲を飛び移るように伝導(ホッピング伝導)すると考えられ、移動度は無機半導体のバンド伝導よりはるかに小さいとされてきた。

しかし最近の実験では、ルブレ単結晶[1]などで無機半導体に劣らない正孔移動度が報告され、ルブレ単結晶での有効正孔質量も 0.7 前後(静止電子質量比 $[m_h^*/m_e]$)と決められた[2]。

一方、理論的には密度汎関数理論(DFT)による第一原理バンド計算で、実験に近いルブレのバンド構造が得られた[3]が、孤立分子や分子二量体の電子構造や飛び移り積分を DFT などで計算し、それをパラメータに用いて典型的なホッピングを考慮したモデルでも、実験で観測された伝導度を説明できる[4]、という報告もある。

これらの研究の基盤となる DFT 計算では、近似交換・相関ポテンシャルの問題でバンド構造が実験と必ずしも一致しないことがある。本研究[5]では、より理論研究の精密さを高める

ため、ルブレン単結晶のバンド構造をいまだ計算報告例のないGW近似[6]によって計算した。

2. 1 計算方法

ルブレン単結晶の単位格子は4分子からなる斜方晶(図1a, b)で、格子定数は実験値に固定した。STATEプログラムコード[7]を用い、格子内の原子位置を最適化した。原子核のクーロンポテンシャルをノルム保存擬ポテンシャルで表し、価電子波動関数を平面波基底で展開した。電子の交換・相関ポテンシャルにはPBE汎関数を用い、分子間のファンデルワールス(vdW)力の記述のため、半経験的にvdW力をPBE汎関数に取り込んだ[8]。

こうして得られた固有関数・固有エネルギーを0次とし、GW近似に基づく自己エネルギーの計算を行った。GW近似で得られる準粒子エネルギーは光電子分光の実験で観測される占有・非占有状態と物理的に対応する[6]。GW近似はDFTと比べ計算機負荷が膨大だが、我々は、一般的なGW近似のプログラムよりも、計算系のサイズに対するスケールリングで有利なGW space-time法[9]のプログラムを、サイバーサイエンスセンターSX-9上で整備し研究を進めた。本研究のシミュレーションは主にSX-9上で64コア(可能な場合128コア)を使用して行われた。

2. 2 計算結果・考察

PBEによるバンド構造(図2)は先行研究[3]とよく一致した。以降、GW近似による結果を、PBEと比較して述べる。GW近似の計算で十分な収束を達成するのは一般に容易でないが、本研究ではSX-9を利用し大規模な系での計算実行を可能にしたため、収束の達成も容易になり、以降の議論に十分な収束(HOMOバンド幅: 0.02 eV以内)に達している。

実験[2]では、最高占有(HOMO)バンドのブリルアンゾーン(BZ)内の Γ -Y方向(結晶の**b**軸に対応; 図1)に沿うバンド幅0.4 eVに対し、 Γ -Y方向(**a**軸に対応)にほとんど幅のない、異方的なバンド構造が見られた。本研究のPBEのバンド構造でも先行研究[3]同様それが再現された。GW近似の自己エネルギー補正で幅は大きくなり、特に Γ -Y方向で0.12 eV増加した。

Γ 点での直接バンドギャップはPBEより1.2 eV増加し、大幅な改善が見られる。LUMOバンド幅はHOMOバンド幅の半分で、先行研究と一致した[3]。HOMOバンドを Γ 点付近で放物線にフィットし、有効正孔質量 $[m_h^*/m_e]$ はPBEで1.0、GW近似で0.89と求められた。自己エネルギー補正で実験値[2]により近づき、バンド伝導的描像を支持する結果が得られた。

自己エネルギー補正によるバンド幅の増加は、絶縁体や分子結晶など、原子または分子間で波動関数が節をもつ場合に見られることを以前Shirleyが指摘した[10]。DFTの交換・相関エネルギーは、原子または分子間位置に電子雲が集中すると過剰に下がり、その傾向は特に原子・分子間の波動関数に多くの節が見られる程顕著で、したがって波動関数の節構造に依存することも指摘された[10]。

このバンド幅の説明は本研究にも適用される。図3に、HOMOバンドの Γ 点とY点の波動関数を示す。 Γ 点では分子を中心に広がるが、隣接分子同士は混成せずに孤立分子の描像を保つ一方、Y点の波動関数は明らかに、結晶**b**軸方向の分子のスタックとともに、波動関数の位相が揃って混成している。このように、 Γ 点のHOMOバンドの波動関数は、Y点よりも分子サイトに集中し、その結果、 Γ 点でのDFTのバンドエネルギーは過剰に下がり、GW近似よりバンド幅が小さくなる、と説明できる。PBEとGWによる交換・相関エネルギー寄与 V_{xc} と Σ の、HOMO[Γ]と[Y]での差(表1)は、バンド幅の差と同じであるのが分かる。

このように、**b**軸方向の分子スタックによる波動関数の混成とバンド幅・有効質量への効果を定量的に明らかにできた。さらに従来 of 正孔移動度の測定で見られた、**b**軸方向の伝導チャンネルとも今回の結果は一致しているように見える。従来よりも精密なバンド計算によっ

て、実験で示唆されたバンド伝導の描像を電子状態の観点から明らかにできた。今後は、ホッピング伝導の支配性がより高いとされるルブレン以外の有機結晶にも本研究の方法を適用し、有機結晶での伝導機構のさらなる理解に寄与したいと考える。

3. フラーレンポリマーの電子状態・輸送特性計算

C_{60} フラーレン堆積膜に電子線を照射すると、 C_{60} 同士が重合して導電性を持った C_{60} フラーレンポリマーが形成されることが報告されている[11]。第一原理計算により C_{60} フラーレンポリマーの電子状態も調べられ、六方晶構造のポリマーが金属的な性質を示すことが分かっている[12]。近年、ポリマーの原子構造に関して走査型トンネル顕微鏡を用いた詳細な実験が行われ、重合した C_{60} フラーレンポリマーが菱面体晶構造を形成することが発見された[13]。この結果は、第一原理計算が示す六方晶構造と一致しないが、堆積膜も菱面体晶構造を形成することから、ポリマーが菱面体晶構造を形成している可能性が高い。そこで本研究では、第一原理計算を用いて、金属的な性質を示す菱面体晶構造の C_{60} フラーレンポリマーの電子状態と電子輸送特性を調べた。

3. 1 計算方法

我々の用いた第一原理シミュレーションプログラムは、実空間差分法と呼ばれる計算手法に基づいている[14,15]。この計算手法は、固体表面の電子状態計算によく用いられている平面波展開法と異なり基底関数を全く用いないため、任意の境界条件の設定が可能である。特に、従来の平面波展開法では、表面のように深さ方向に半無限に結晶が続くようなモデルを扱うことが困難であるため、薄膜が周期的に続くスラブ構造で近似せざるを得なかったが、本計算手法ではこのような問題はない。したがって、半無限の表面深部からの続く波動関数が重要な役割を担う物理現象、たとえば電極間に挟まれた分子の電子輸送特性などを正確に計算することができる。

本研究で用いた計算条件は次の通りである。実空間差分法におけるグリッドの幅を 0.5 bohr とし、ポテンシャルが急峻に変化する原子の近傍のみ Timesaving Double-grid 法を用いて 0.17 bohr とした。原子核からのクーロンポテンシャルは、ノルム保存型擬ポテンシャルを用い、電子間相互作用は、密度汎関数理論における局所密度近似を用いた。電極間に挟まれたナノ構造体の散乱波動関数は、Overbridging boundary-matching 法を用いて求め、コンダクタンスは散乱波動関数の透過係数をランダウアーの公式に代入して計算した。計算条件の詳細については参考文献[16]に示す。一般に電気輸送特性計算は、電子状態計算に比べて計算時間・記憶容量ともに約 10 倍の計算資源が必要である。本研究で行う 2~3 百原子からなるモデルの輸送特性計算には、SX-9 のようなスーパーコンピュータを用いることにより、効率的に研究を実施することができる。

図 4 に電子状態計算に用いた C_{60} ポリマー、図 5 に輸送特性計算に用いた C_{60} ダイマーの原子構造を示す。図 4 では、層内の C_{60} は [2+2] の 4 員環結合で結ばれ、層同士は、重合前は隣り合う層の 6 員環が向き合った 3 つのダンベル型結合、重合後は 3 つのダンベル型結合のうち 1 つの 6 員環が解けたピーナツ型結合で結ばれている。輸送特性計算では、重合前のダンベル型結合で結ばれた C_{60} 、重合後のピーナツ型結合で結ばれた C_{60} をダイマーとして切り出し、結合部分の原子構造の違いによる輸送特性の変化を調べた。

3. 2 電子状態と輸送特性

図 6 に層構造の場合のフラーレン重合膜のバンド図を示す。図 4(a) のダンベル結合で結ば

れたモデルではフェルミ準位近傍に 0.5 eV のバンドギャップが存在するが、図 4(b)のようにピーナツ型結合に変化することでバンドギャップが消滅する。これは、ダンベル型は分子間が sp^3 軌道で結合されていたのに対し、ピーナツ型は sp^2 軌道で結合されている。一般に、カーボン系材料の電子輸送を担う電子は sp^2 軌道を構成する電子であると考えられていることから、ピーナツ型への構造遷移がポリマーの金属的な性質に寄与しているものと示唆される。

次に、ダンベル型/ピーナツ型の結合構造の遷移が、 C_{60} 分子間の輸送特性に与える影響を調べた。図 7 に電極からの入射電子のエネルギーに対するコンダクタンスの変化を示す。フェルミ準位より少し上のピークは、 C_{60} 分子の 3 つの縮退した最低空軌道 t_{1u} によるものである。ピーナツ型に遷移すると、分子間結合が sp^3 軌道から sp^2 軌道に変わり、 t_{1u} 軌道から構成される準位がエネルギー的に分散するため、ピークが低くなる。また、結合状態の変化により、フェルミ準位よりも低い位置に新たな結合準位が生成されるため、ピーナツ型ではフェルミ準位よりも低いエネルギーでコンダクタンスが大きくなる。この結果、ピーナツ型ではダンベル型に比べコンダクタンススペクトルがなだらかになる。この結果は走査トンネル分光の実験結果とも一致しており、図 4(b)のモデルが金属的な性質を示すフラーレンポリマーの原子構造であると考えられる。本研究の詳細については、参考文献[16]にて紹介してある。

4. 結言

以上記述してきた様に、本共同研究によって第一原理電子状態計算プログラム STATE-Senri と RSPACE のさらなる高度化を進めたとともに、それらを用いて有機デバイスで重要となるルブレンの固体やフラーレンポリマー等の構造と電子状態に関する研究を展開し、第一原理計算機シミュレーションによる物質科学分野への貢献を行った。

参考文献

- [1] J. Takeya et al., Appl. Phys. Lett. **90**, 102120 (2007).
- [2] S. Machida et al., Phys. Rev. Lett. **104**, 156401 (2010).
- [3] Z. Q. Li et al., Phys. Rev. Lett. **99**, 016403 (2007); D. A. da Silva Filho, E.-G. Kim, and J.-L. Brédas, Adv. Mater. **17**, 1072 (2005).
- [4] G. Nan et al., Phys. Rev. B **79**, 115203 (2009); S.-H. Wen et al., J. Phys. Chem. B **113**, 8813 (2009).
- [5] S. Yanagisawa, Y. Morikawa and A. Schindlmayr, *submitted*.
- [6] L. Hedin, Phys. Rev. **139**, A796 (1965).
- [7] Y. Morikawa, H. Ishii and K. Seki, Phys. Rev. B **69**, 041403 (2004).
- [8] S. Grimme, J. Comput. Chem. **27**, 1787 (2006).
- [9] M. M. Rieger et al., Comput. Phys. Commun. **117**, 211 (1999); C. Freysoldt *et al.*, Comput. Phys. Commun. **176**, 1 (2007).
- [10] E. L. Shirley, Phys. Rev. B **58**, 9579 (1998).
- [11] J. Onoe, T. Nakayama, M. Aono, and T. Hara, Appl. Phys. Lett. **82**, 595 (2003).
- [12] J. Onoe, T. Ito, S.I. Kimura, K. Ohno, Y. Noguchi, and S. Ueda, Phys. Rev. B **75**, 233410 (2007).

- [13] M. Nakaya, M. Aono, and T. Nakayama, *Carbon* **49**, 1829 (2011).
 [14] J.R. Chelikowsky, N. Troullier, and Y. Saad, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1240 (1994)
 [15] K. Hirose, T. Ono, Y. Fujimoto, and S. Tsukamoto, *First Principles Calculations in Real-Space Formalism, Electronic Configurations and Transport Properties of Nanostructures* (Imperial College, London, 2005).
 [16] T. Ono and S. Tsukamoto, *Phys. Rev. B* **84**, 165410 (2011).

表 1 結晶中での HOMO のバンドエネルギーに対する、DFT 交換・相関エネルギー(V_{xc})と、GW 近似での交換・相関エネルギー(Σ)の寄与。単位は eV。 Γ 点で、 V_{xc} が Y 点よりも 0.59 eV 下がり、 Σ よりも 0.12 eV 余計に下がるのが分かる。

	V_{xc}	Σ_x	Σ_c	Σ
HOMO[Γ]	-14.50	-15.10	0.71	-14.40
HOMO[Y]	-13.91	-14.84	0.93	-13.92
HOMO[X]	-14.37	-15.02	0.74	-14.28

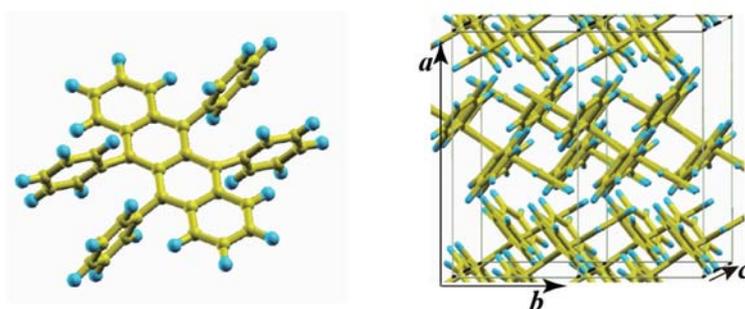


図 1. ルブレンの単分子(左)と、単結晶(右)の図。 a, b, c は結晶軸を表し、 b 軸方向に分子がスタックする様子が示されている。単位格子の長さは、 a : 1.41289 nm, b : 0.71455 nm, c : 2.67450 nm。

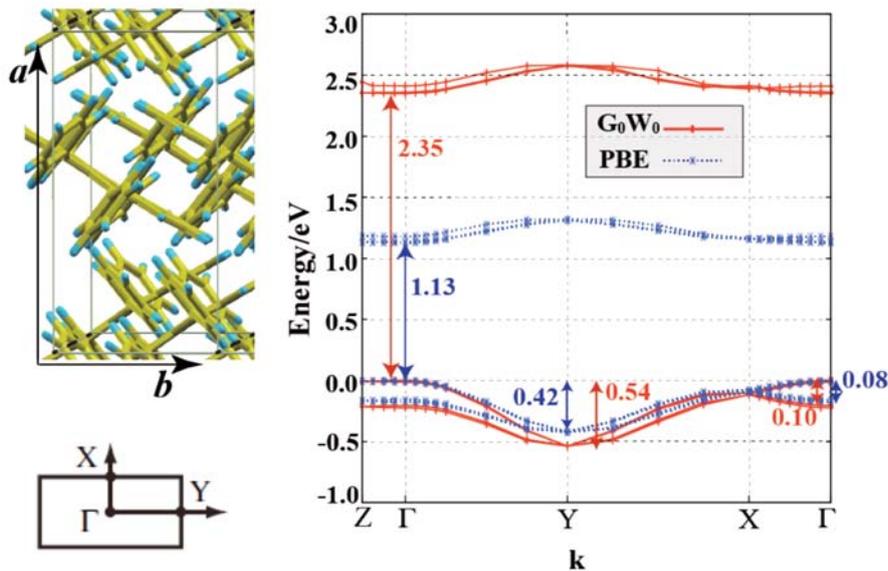


図 2. ルブレン単結晶のバンド計算の結果。Γ-X、Γ-Y 方向がそれぞれ結晶 *a*, *b* 軸に対応(左上下参照)。右のバンド図は、Γ 点の HOMO バンドエネルギーを基準とするエネルギー分散を表す。

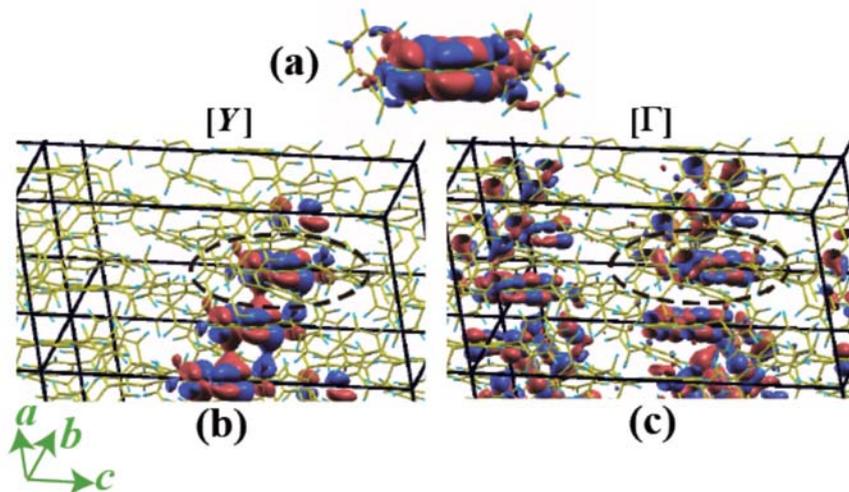


図 3. ルブレン単結晶での HOMO[Y] (左、(b))、HOMO[Γ](右、(c))の波動関数の等高面図。等高面は大きさ $7.14 \text{ \AA}^{-3/2}$ に対応し、色の違いは波動関数の符号の違いを表す、単位格子を太い実線で示す。比較のため、結晶の図の黒破線で囲まれたのと同じ配向・原子位置を持つ、孤立したルブレン単分子の HOMO 波動関数の等高面(a)も示す。

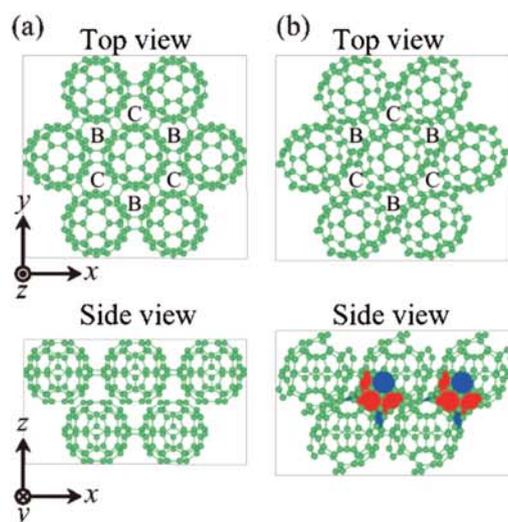


図4 計算モデル。Top view の B、C は上面、下面の C_{60} の位置である。(b)の青色、赤色で塗りつぶした部分は、6員環、7員環である。

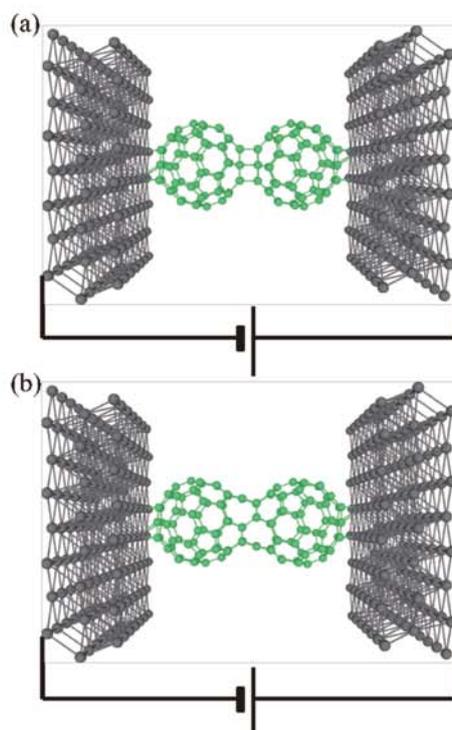


図5 輸送特性計算のモデル図。(a)はダンベル型、(b)はピーナッツ型である。

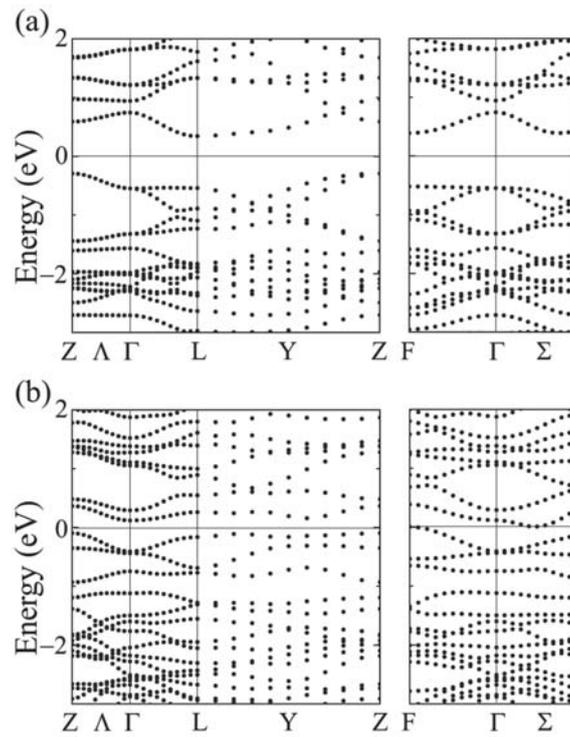


図 6 C_{60} ポリマーのバンド図。(a)ダンベル型結合、(b)ピーナッツ型結合。

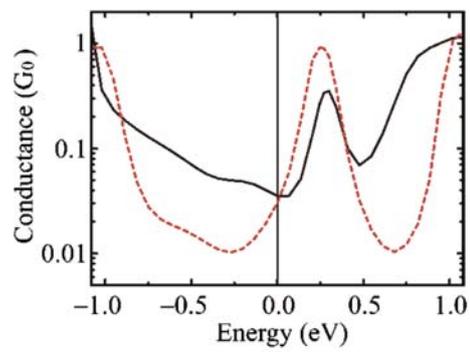


図 7 コンダクタンススペクトル。赤破線がダンベル型、黒実線がピーナッツ型である。

[大規模科学計算システム]

ライブラリ・アプリケーションの紹介

(2013年4月)

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、プログラミングのための科学技術計算ライブラリや、分子軌道計算、構造解析、数式処理、グラフ処理、統計データ解析等の各アプリケーションソフトウェアを、利用者の幅広い要望にお応えしてサービスしています。

この稿では、スーパーコンピュータ・並列コンピュータ上でサービスしているライブラリプログラムとアプリケーションソフトウェアの紹介をします。

サービス一覧表

システム	プログラミング言語	ライブラリ	アプリケーション
スーパーコンピュータ SX-9 super.isc.tohoku.ac.jp	Fortran90/SX C++/SX	ASL MathKeisan for SX	
並列コンピュータ Express5800 gen.isc.tohoku.ac.jp	Fortran95 C++	ASL Math Kernel Library	Gaussian09 GRRM11 MSC.Marc MSC.Marc Mentat SAS Mathematica MATLAB

ライブラリ・アプリケーションの紹介は、以下の URL の本センター大規模科学計算システムホームページにも掲載しています。

大規模科学計算システム ホームページ(以下「ホームページ」)

<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/>

本稿中の内容は 2013 年 4 月現在のもので、ライブラリ、アプリケーションの今後のバージョンアップや利用方法の最新情報については、ホームページを随時ご確認下さい。

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際は、**GUI アプリケーションを利用する方法**を合わせてご参照下さい。

	ホスト名 (FQDN)	OS	日本語環境
スーパーコンピュータ	super.isc.tohoku.ac.jp	UNIX	EUC-JP
並列コンピュータ	gen.isc.tohoku.ac.jp	Linux	UTF-8

SSHは通信路上のデータを暗号化することで安全性を高めたプログラムです。利用している端末がUNIX, Linux, OS Xの場合は通常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下さい。super, genともにプロトコル version 1,2 両方ご利用できます。

【UNIX, Linux からのログイン】

「ターミナル」、「端末」、「terminal」などと呼ばれるアプリケーションを起動します。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。

並列コンピュータへのログイン例

```
(yourhost)$ ssh 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp

The authenticity of host 'gen.isc.tohoku.ac.jp (xx.xx.xx.xx)' can't be
established.
RSA key fingerprint is fd:c2:9a:11:xx:xx:xx:xx:xx:xx:xx:xx:cd:53:9f.
Are you sure you want to continue connecting (yes/no)? yes ※1
Warning: Permanently added 'gen.isc.tohoku.ac.jp,xx.xx.xx.xx' (RSA) to
the list of known hosts.
利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp's password: パスワード ※2
Last login: Mon Apr 1 09:26:11 2012 from gen.isc.tohoku.ac.jp

[利用者番号@gen ~]$
```

※1 初めての接続時は問い合わせがありますので、**yes**を入力します。

※2 入力した文字は表示されません。

【OS Xからのログイン】

「ターミナル.app」を起動します。接続方法は上記と同じです。

【Windows からのログイン】

1. 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。2013年4月現在の最新版は4.77です。ダウンロード後インストール作業を行って下さい。

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

2. サーバへの接続

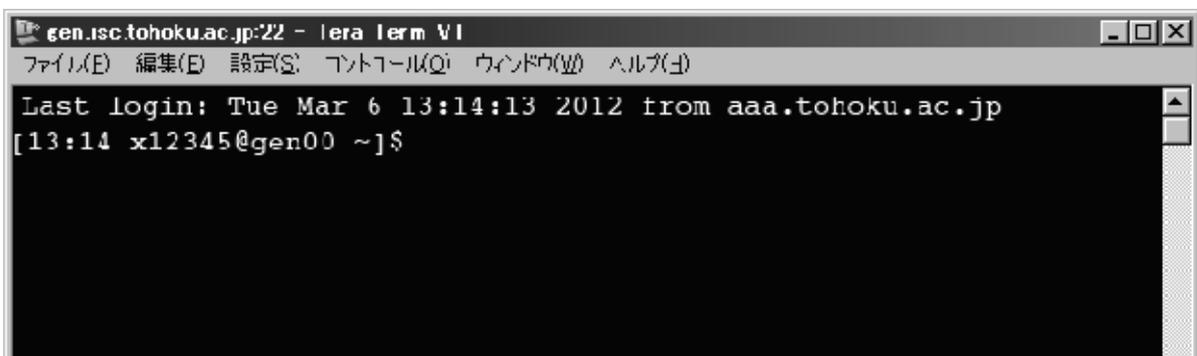
インストールされた Tera Term を起動すると「新しい接続」ダイアログが表示されます。以下の様に入力・設定し、「OK」ボタンを押して下さい。初めて接続する場合、「セキュリティ警告」のウィンドウが表示されます。表示されているホスト名が正しいことを確認し、「続行」ボタンを押して下さい。

ホスト(T): gen.isc.tohoku.ac.jp (並列コンピュータの場合)
サービス: SSH
SSH バージョン: SSH2

「SSH 認証」ウィンドウが表示されたら以下の様に入力・設定し、「OK」ボタンを押して下さい。

ユーザ名(N): 利用者番号
パスフレーズ: パスワード
「プレインテキストを使う(L)」にチェック

以下のプロンプトが表示されるとログインは完了です。



```
gen.isc.tohoku.ac.jp:22 - |era term V1
ファイル(F) 編集(E) 設定(S) ツール(T) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)
Last login: Tue Mar 6 13:14:13 2012 from aaa.tohoku.ac.jp
[13:14 x12345@gen00 ~]$
```

※ 日本語環境を変更する場合は、ツールバーメニューの「設定(S)」→「端末(T)」の「漢字-受信(K)」と「漢字-送信(J)」で設定変更して下さい。

■ 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。

ライブラリや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下さい。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下さい。

■ 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下さい。

【アプリケーションを利用したファイル転送】

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

■ GUI アプリケーションを利用する方法 ■

GUIを用いたアプリケーション(MSC. Mentat, Mathematica, MATLAB, SAS)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。(Mathematica の実行にはフォントパスの設定が必要になる場合があります。「**Mathematica の利用方法**」をご参照下さい。)

【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下さい。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。

例:Matlab を起動する場合

```
(yourhost) $ ssh -X 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp ※1
利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp's password: パスワード
[利用者番号@gen ~]$ matlab
```

※ 1 大文字の“X”です。

【Windows からの利用】

1. 商用のアプリケーションを利用する場合

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

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

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

※ フォントパスの追加 (Mathematica を利用する場合)

Mathematica を利用する場合には、X サーバに tcp/localhost:7100 のフォントを追加する設定をします。X サーバにフォントサーバを追加する設定は、各 X サーバソフトのマニュアルをご参照下さい。

2. 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下さい。インストール方法の詳細はマニュアルをご参照下さい。2013 年 4 月現在の最新版は 4.2.10 です。

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

VirtualBox 4.2.10 の起動画面

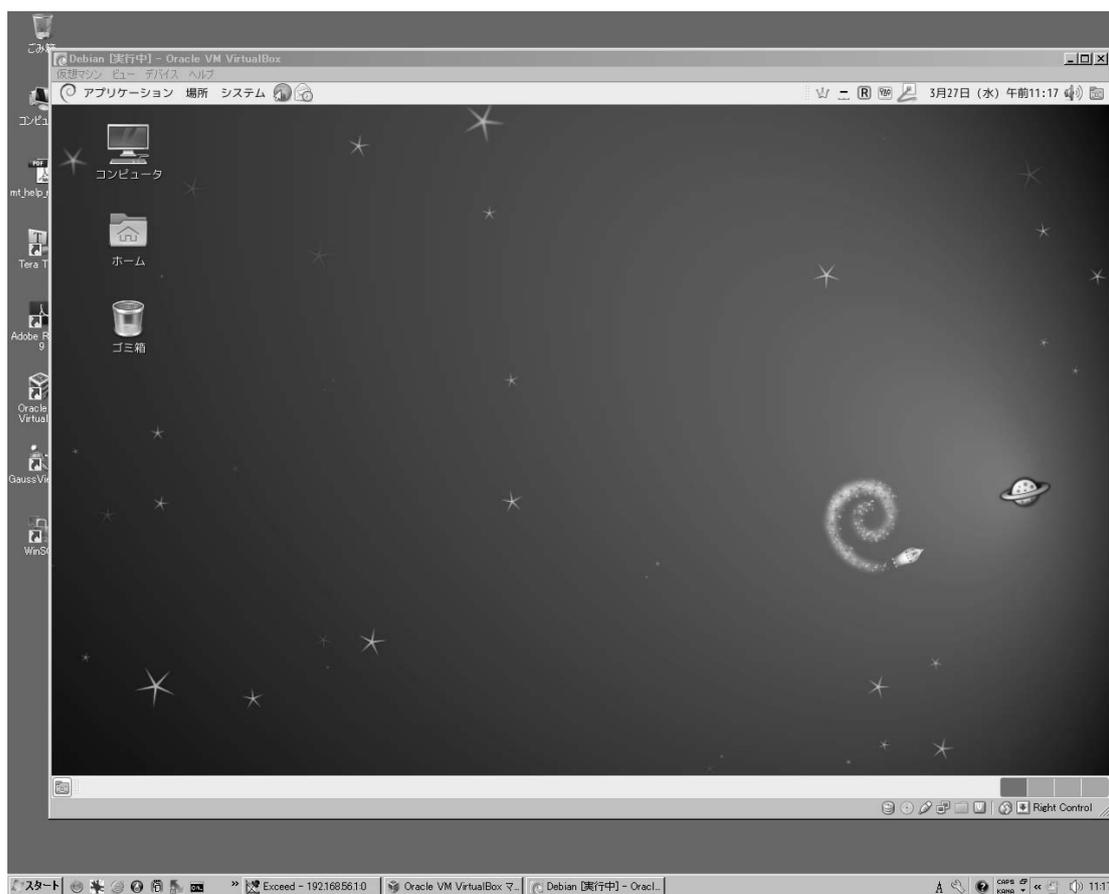


Linux のディストリビューション、バージョンによっては GUI アプリケーションが正しく表示されない場合があります。センターで動作確認を行っているのは、Debian 6.0.7 (2013.02.23 リリース)です。以下のページからダウンロードし、Virtual Box の仮想環境にインストールして下さい。X Window System の利用だけならインストール CD (680MB) のインストールで可能です。インストール方法の詳細は各マニュアルをご参照下さい。

Debian ダウンロード: <http://www.debian.org/CD/>

Linux をインストール後起動し、Linux の端末から【UNIX, Linux からの利用】と同様に利用できます。

Windows 上で動作する仮想Linux (Debian 6.0.7)



【OS X からの利用】

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

ライブラリ

スーパーコンピュータ SX-9

Fortran90/SX,C++/SX 用

科学技術計算ライブラリ..... **ASL**

数学ライブラリ..... **MathKeisan for SX**

並列コンピュータ Express5800

Fortran95,C++ 用

科学技術計算ライブラリ..... **ASL**

数学ライブラリ..... **Math Kernel Library**

科学技術計算ライブラリ **ASL**

ASL(Advanced Scientific Library)は、科学技術計算の広範な分野の数値シミュレーションプログラムの作成を強力に支援する数学ライブラリです。ASL を用いることによって、難解な数値計算アルゴリズムの詳細に煩わされること無く高度な科学技術計算プログラムを作成することができます。次のような数値計算分野に対応しています。

<基本機能>

格納モードの変換,基本行列演算,最小二乗法,固有値・固有ベクトル,連立1次方程式(直接法),連立1次方程式(反復法),対称連立一次方程式(反復法),非対称連立一次方程式(反復法),フーリエ変換とその応用/時系列分析,微分方程式とその応用,数値微分,数値積分,3次元境界要素法用の数値積分法,近似・補間,スプライン関数,特殊関数,乱数,ソート・順位付け,方程式の根,極値問題・最適化,確率分布,基礎統計量,推定と検定,分散分析・実験計画,ノンパラメトリック検定,多変量解析,近似・回帰分析

<並列処理機能>

基本行列演算,連立1次方程式(直接法),固有値・固有ベクトル,フーリエ変換とその応用/時系列分析,乱数,ソート・順位付け

プログラミング言語・コンパイラ

スーパーコンピュータ

Fortran90/SX ・ sxf90,sxmpif90

C++/SX ・ sxcc,sxmpicc

並列コンピュータ

Fortran95 ・ f95,mpif95

C++ ・ cc,mpicc

利用方法

ASL ライブラリは自動的にリンクされます。設定は特に必要ありません。

コンパイルはすべて並列コンピュータ上で行います。

プログラムのコンパイルについては、ホームページの「スーパーコンピュータシステム SX-9 利用ガイド」、[「並列コンピュータの利用ガイド」](#)をご参照下さい。

スーパーコンピュータ用のコンパイル

```
[gen00 ~]$ sxf90 source.f      ベクトル版 ASL がリンクされます
[gen00 ~]$ sxf90 -Pauto source.f  並列版 ASL がリンクされます

[gen00 ~]$ sxcc source.c
```

並列コンピュータ用のコンパイル

```
[gen00 ~]$ f95 source.f
```

*C、C++言語の場合は、オブジェクトを作成した後、f95 でASLライブラリをリンクする。

```
[gen00 ~]$ cc -c source.c
```

```
[gen00 ~]$ f95 -cxxlib -nofor main source.o -laslcint -lasl
```

マニュアル

PDF形式のマニュアルを提供しています。

各マニュアルは、並列コンピュータ (gen.isc.tohoku.ac.jp) の以下のディレクトリにあります。並列コンピュータにログイン後、acroread コマンドでご覧下さい。

[FORTRAN]

</usr/ap/ASL-man-super/PDF/ASL/pdf/>

[C/C++]

</usr/ap/ASL-man-super/PDF/CINT/pdf/>

- 1main.pdf : 基本機能編 第1分冊
(格納モードの変換, 基本行列演算, 最小二乗法, 固有値・固有ベクトル)
- 2main.pdf : 基本機能編 第2分冊
(連立1次方程式(直接法))
- 3main.pdf : 基本機能編 第3分冊
(連立1次方程式(反復法), 対称連立一次方程式(反復法), 非対称連立一次方程式(反復法))
- 4main.pdf : 基本機能編 第4分冊
(フーリエ変換とその応用/時系列分析)
- 5main.pdf : 基本機能編 第5分冊
(微分方程式とその応用, 数値微分, 数値積分, 3次元境界要素法用の数値積分法
近似・補間, スプライン関数)
- 6main.pdf : 基本機能編 第6分冊
(特殊関数, 乱数, ソート・順位付け, 方程式の根, 極値問題・最適化)
- 7main.pdf : 統計機能 ASLSTAT 利用の手引
(確率分布, 基礎統計量, 推定と検定, 分散分析・実験計画, ノンパラメトリック検定,
多変量解析, 近似・回帰分析)
- 8main.pdf : 並列処理機能編
(基本行列演算, 連立一次方程式(直接法), 固有値・固有ベクトル, 連立一次方程式(反復法),
フーリエ変換とその応用/時系列分析, 乱数, ソート・順位付け)

数学ライブラリ集 **MathKeisan for SX , Math Kernel Library**

MathKeisan for SX は NEC のハイパフォーマンス・コンピュータ用に高度に最適化された数学ライブラリ集です。Math Kernel Library は、Intel プラットフォーム用に最適化された数値演算ライブラリです。

MathKeisan for SX および Math Kernel Library に含まれるライブラリは以下のとおりです。
 ※MathKeisan for SX および Math Kernel Library のいくつかのサブルーチンについては、同機能のものが ASL にも含まれています。ASL は、日本電気製マシン用に最適化されたライブラリですので、同機能であれば、ASL の利用をお勧めします。

BLAS	ベクトル、行列の基本演算
LAPACK	高性能コンピュータ用連立一次方程式、固有値解析
ScaLAPACK	連立一次方程式、固有値解析 (MPI による並列版、PBLAS を含む)
BLACS	ベクトル、行列の基本演算のためのメッセージパッシングライブラリ
PARBLAS	共有メモリ用の並列版 BLAS (for SX のみ)
CBLAS	BLAS の C インタフェース
SBLAS	スパース BLAS (ACM Algorithm 692 参照)
FFT	HP VECLIB 並びに SGI/CRAY LIBSCI 3.1 のインタフェースを持つ FFT
PARFFT	HP VECLIB 並びに SGI/CRAY LIBSCI 3.1 のインタフェースを持つ共有メモリ用の並列版 FFT (for SX のみ)
METIS	行列、グラフの並べ変え、分割ライブラリ
ParMETIS	行列、グラフの並べ変え、分割ライブラリの並列版 (MPI による並列版)
SOLVER	対称疎行列線形問題の直接法ソルバ
ARPACK	大規模固有値解析

■ プログラミング言語・コンパイラ

MathKeisan for SX (スーパーコンピュータ)

Fortran90/SX ・ sxf90,sxmpif90
 C++/SX ・ sxcc,sxmpicc

Math Kernel Library (並列コンピュータ)

Fortran95 ・ f95,mpif95
 C++ ・ cc,mpicc

利用方法

各ライブラリをリンクするには、コンパイル時にオプションを指定します。
それぞれのリンク用オプションについてはマニュアルをご参照下さい。

スーパーコンピュータで LAPACK をリンクする例

```
[gen00 ~]$ sxf90 source.f -llapack -lblas
```

マニュアル

[MathKeisan]

HTML 形式のマニュアルを提供しています。
並列コンピュータ(gen.isc.tohoku.ac.jp)にログイン後、以下のコマンドでご覧下さい。

```
スーパーコンピュータ SX-9 用  
[gen00 ~]$ w3m /usr/ap/MathKeisan-man/SX-9/J/index.html
```

[Math Kernel Library]

以下の URL を参考にして下さい。
インテル MKL : <http://www.xlsoft.com/jp/products/intel/perflib/mkl/>

アプリケーション

非経験的分子軌道計算プログラム	Gaussian09
Gaussian プリポストシステム	GaussView
反応経路自動探索プログラム	GRRM11
汎用構造解析プログラム	MSC.Marc / MSC.Marc Mentat
構造解析用汎用プリポストソフトウェア	MSC.Patran
数式処理プログラム	Mathematica
科学技術計算言語	MATLAB
データ解析システム	SAS

非経験的分子軌道計算プログラム Gaussian09

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

本センターの Gaussian には、以下のような特長があります。

- * 最大 16 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)を専用の高速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

gen.isc.tohoku.ac.jp ・ Gaussian09 RevC.01

利用方法

Gaussian のプリポストシステムとして GaussView を提供しています。
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 gen に転送する際にはアスキーモードを指定し、転送して下さい。

gen.isc.tohoku.ac.jp にログイン後、subg09 コマンドに、キュー名と入力プログラム名を指定することにより、バッチリクエストとして実行されます。

e2_01.com を解析するコマンド例

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

```
[gen00 ~]$ subg09 a16 e2_01
```

subg09 コマンドで指定できるキュー

キュー名 (ジョブクラス)	利用可能 CPU 数 (並列数)	CPU 時間	メモリサイズ制限 (GBytes)
as	1	無制限	16
a8	8	無制限	128
a16	16	無制限	256

データの大きさなどにより投入するキューを選択して下さい。

8 および 16 並列実行の指定

本センターでサービスしている Gaussian では、8 または 16 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利用下さい。

8 または 16 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 の項に追加して下さい。

実行時には、subg09 コマンドでキュー **a8** または **a16** を指定して下さい。

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下さい。

16 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

```
[gen00 ~]$ cat e2_01.com ← インプットファイルの内容を表示

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

Formaldehyde Single Point

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

[gen00 ~]$ subg09 a16 e2_01
```

実行結果

計算が終了すると、インプットファイル名に拡張子.log がつけられた結果ファイル (例: e2_01.log) が作成されます。計算結果をはじめ、CPU 時間などの計算機使用量に関する情報もここに含まれます。

正常終了ならば、このファイルの末尾に「Normal termination of Gaussian 09.」というメッセージが出力されます。

ファイルの末尾を表示する tail コマンドで確認できます。

```
[gen00 ~]$ tail e2_01.log
:
Job cpu time:  0 days  0 hours  0 minutes 30.7 seconds.
File lengths (MBytes):  RWF=  11 Int=   0 D2E=   0 Chk=   8 Scr=   1
Normal termination of Gaussian 09 at Mon Nov 1 12:00:00 2006.
```

結果ファイルの詳細な見方は、マニュアル等をご参照下さい。

チェックポイントファイル

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

マニュアル

本センター本館 1 階 利用相談室に以下の資料を備えてあります。

電子構造論による化学の探求 第二版,ガウシアン社,1998

Gaussian 09 User's Reference

Gaussian 09 IOps Reference

Gaussian 09 Online Manual, <http://www.gaussian.com/>

Gaussian プログラムによる量子化学計算マニュアル : 堀憲次, 丸善出版

すぐできる量子化学計算ビギナーズマニュアル : 武次鉄也, 講談社

すぐできる分子シミュレーションビギナーズマニュアル : 長岡正隆, 講談社

Gaussian プログラムで学ぶ情報化学・計算化学実験 : 堀憲次, 丸善出版

Gaussian プリポストシステム **GaussView**

GaussView は、分子軌道計算プログラム Gaussian のプリポストシステムです。

Windows XP、Windows Vista、Windows 7、Linux 搭載のパソコンなどで動作し、入力データの作成、計算結果の可視化を 3 次元的に行うことができます。

バージョン

5.0.9

お申し込み

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

利用条件

- ・東北大学内の方

CD-ROM は、お手数ですが Gaussian 利用申請書をホームページよりダウンロードしてご記入の上、当センターまで直接取りにいらして下さい。

利用方法

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

ヒューリンクス Gauss View 5:

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

並列コンピュータ gen.isc.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 gen.isc.tohoku.ac.jp に転送します。
3. gen.isc.tohoku.ac.jp にログインします。
4. subg09 コマンドにより解析を実行します。
5. 結果ファイルを転送し GaussView で表示します。

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

反応経路自動探索プログラム **GRRM11**

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 年には GRRM11(開発者: 前田理、長田有人、諸熊奎治、大野公一)として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。

- g09やg03プログラムなどを用いた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て、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、従来不可能であった 5 原子以上の反応経路自動探索を行うことができます。

サービスホスト・バージョン

gen.isc.tohoku.ac.jp ・ 11.01

利用方法

利用方法はセンターのホームページ(<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/application/grrm11.html>)をご覧ください。

GRRM プログラムの詳細

GRRM の詳細については、NPO 法人 量子化学探索研究所(<http://grrm.chem.tohoku.ac.jp/IQCE/>)、化学反応経路自動探索の Web ページ(<http://grrm.chem.tohoku.ac.jp/SRPS/GRRM.HTM>)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

GRRM11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。

Satoshi Maeda, Yuto Osada, Keiji Morokuma, and Koichi Ohno, GRRM11, Version 11.01, 2011.

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.

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。

GRRM11 User Manual(英語版)

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

MSC.Marc は有限要素法による非線形汎用構造解析プログラムです。世界中で広く利用され最も評価を受けているプログラムの一つで、その扱える解析は以下の通り非常に広範囲にわたっています。

非線形／大変形／接触／弾塑性／剛塑性／破壊／熱伝導／動的非線形／境界非線形流体と固体の連成／電気伝導と熱伝導の連成／熱と応力の連成

MSC.Marc Mentat は、汎用構造解析プログラム Marc の会話型プリ／ポストプロセッサとして、有限要素モデルの作成および解析結果の表示が行えます。

サービスホスト・バージョン

gen.isc.tohoku.ac.jp ・ MSC.Marc /Mentat 2012

利用方法

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

run_marc コマンドでの解析実行

実行コマンド

Marc の入力ファイルは、拡張子を .dat とします。(例: job_name.dat)

gen.isc.tohoku.ac.jp にログイン後、run_marc コマンドに入力ファイル名を指定し実行することにより、バッチリクエストとして解析が行われます。

(バッチリクエストは **am** (Marc 専用、CPU 時間無制限、最大メモリ 16GB)というキューに投入されます)

job_name.dat を解析するコマンド例

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

```
[gen00 ~]$ run_marc -jid job_name -v n
```

run_marc の入力オプション

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

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

解析結果

バッチリクエストが終了すると、主に以下のようなファイルが作成されます。

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

解析時の指定によって、この他にもファイルが作成されます。

それらのファイルの概要は、「マニュアル C 編プログラム入力 付録 B 表 B-1」をご参照下さい。

終了番号 (exit number)

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

終了番号を確認する

(tail コマンドで *job_name.out* の末尾を表示)

```
[gen00 ~]$ tail job_name.out
*****
MSC.Marc Exit number 3004
check marc exit passed
[gen00 ~]$
```

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

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

■ プリポストプロセッサ Mentat からの解析実行 ■

Mentat の起動

Mentat の起動には、並列コンピュータに接続する際に X forwarding の設定を行う必要があります。Mentat2012 では新 GUI を採用しています。従来の Classic GUI は `mentat.classic` というコマンドでご利用できます。

```
yourhost$ ssh -X 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp
:
[gen00 ~]$ mentat (新 GUI 版)

[gen00 ~]$ mentat.classic (Classic 版)
```

解析実行 (新 GUI 版)

Mentat 上でモデルを作成し、解析のための設定を行った後、

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

という操作をすることで、バッチリクエストとして解析を実行します。

(バッチリクエストは **am** (Marc 専用、CPU 時間無制限、最大メモリ 16GB) というキューに投入されます)

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

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

解析実行 (Classic 版)

Mentat 上でモデルを作成し、解析のための設定を行った後、

メインメニュー **JOBS** → **RUN** → **submit1**

という操作をすることで、バッチリクエストとして解析を実行します。

スタティックメニュー **FILES** → MARC INPUT FILE **WRITE**

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

サンプルプログラム

Marc

マニュアル E 編に掲載されている例題が、並列コンピュータ gen.isc.tohoku.ac.jp の /usr/ap/MSC2010/marc2010.2/demo/ にあります。コピーしてご利用下さい。

Mentat

マニュアル「ユーザガイド」に掲載されている例題のプロシジャファイルが、並列コンピュータ gen.isc.tohoku.ac.jp の /usr/ap/MSC2010/mentat2010.2/examples/marc_ug/ にあります。コピーしてご利用下さい。

マニュアル

PDF 形式のマニュアルを提供しています。

各マニュアルは、並列コンピュータ (gen.isc.tohoku.ac.jp) の以下のディレクトリにあります。並列コンピュータにログイン後、acoread コマンドでご覧下さい。

gen:/usr/ap/MSC2012/mentat2012/doc/

marc_2012_doc_release.pdf : Release Guide (2012 英語版)
marc_2012_doc_user.pdf : User's Guide (2012 英語版)
marc_2012_doc_release_jpn.pdf : リリースガイド (2012 日本語版)

英文マニュアル /usr/ap/MSC2010/mentat2010.2/doc/

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

和文(MSC.Marc2003 版) /usr/ap/MSC2010/mentat2010.2/doc/japanese/

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

有限要素法プログラム汎用プリポストソフトウェア **MSC.Patran**

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

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

バージョン

MSC.Patran2012.2.1 Windows 版, Linux 版

お申し込み

利用条件(以下の条件をすべて満たしている方)

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

利用ご希望の方は、共同利用支援係までお問い合わせ下さい。

数式処理プログラム **Mathematica**

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

サービスホスト・バージョン

gen.isc.tohoku.ac.jp ・ version 8.0.4

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 の設定と、フォントパスの設定を行う必要があります。

```
yourhost$ ssh -X -L 7100:gen.isc.tohoku.ac.jp:7100 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp  
:  
[gen00 ~]$ mathematica
```

[テキスト版]

```
yourhost$ ssh 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp
:
[gen00 ~]$ math
```

Mathematica の基本的な使い方は、[マニュアル・参考資料](#) や、[Web](#) などをご参照下さい。

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) : トップラン
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, トップラン
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、およびビジュアル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

gen.isc.tohoku.ac.jp ・ Version 7.14.0 (R2012a)

Toolbox

センターで導入している Toolbox です。

- MATLAB
- Simulink
- Communications Blockset
- Communications ToolboxControl
- System Toolbox
- Extended Symbolic Math
- Fixed-Point Toolbox
- Fuzzy Logic Toolbox
- Image Processing Toolbox
- MATLAB Compiler
- Model Predictive Control Toolbox
- Neural Network Toolbox
- Optimization Toolbox
- Partial Differential Equation Toolbox
- Real-Time Workshop

Robust Control Toolbox
 Signal Processing Blockset
 Signal Processing Toolbox
 Simulink Accelerator
 Simulink Control Design
 Simulink Fixed Point
 Simulink Response Optimization
 Simulink Verification and Validation
 Spline Toolbox
 Statistics Toolbox
 Symbolic Math Toolbox
 System Identification Toolbox
 Wavelet Toolbox

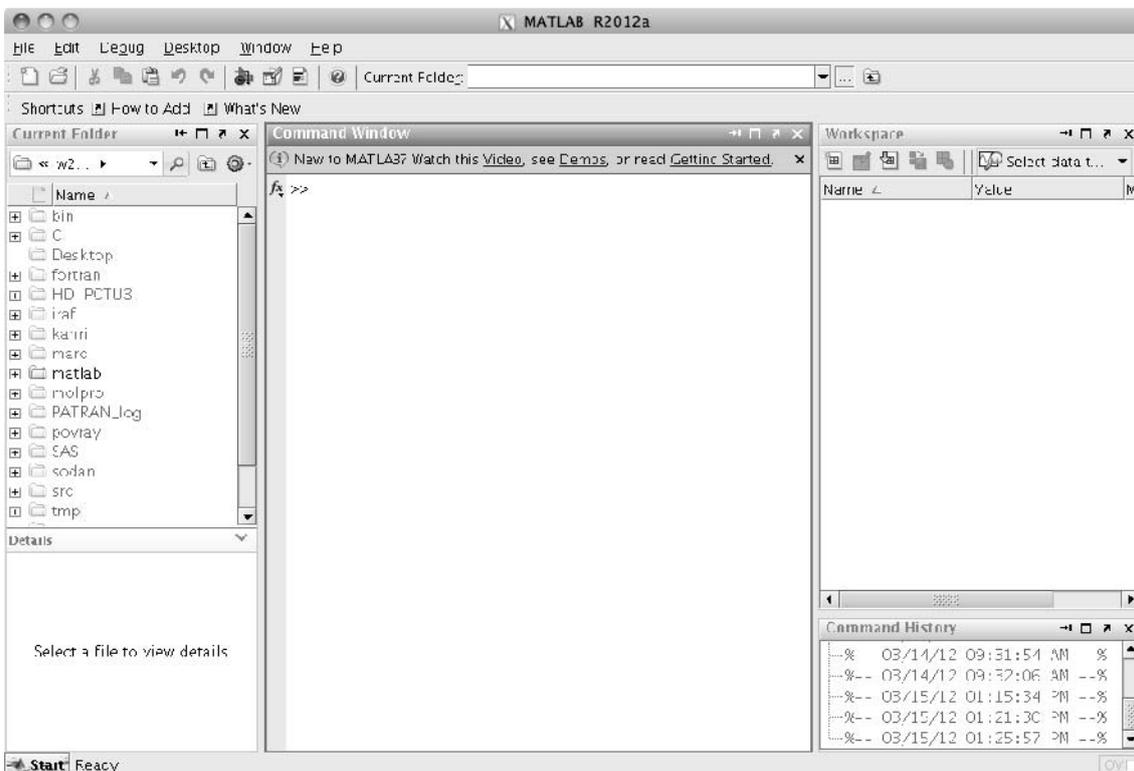
利用方法

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。

```
yourhost$ ssh -X 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp
:
[gen00 ~]$ 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。

```
(yourhost)$ ssh 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp
:
[gen00 ~]$ matlab -nojvm -nosplash -nodesktop -nodisplay

          < M A T L A B (R) >
    Copyright 1984-2012 The MathWorks, Inc.
    Version 7.14.0.739 (R2012a) 64-bit (glnxa64)
          February 9, 2012

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

>>
```

[バッチ処理]

Matlab の組み込み並列処理機能を使用し、32 並列までの処理が可能です。最大メモリも 512GB まで利用可能です。大規模な計算にご利用下さい。

関数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。ジョブは **m32** クラスに投入します。

```
[gen00 ~] cat job-m ←ジョブファイルの中身を表示

#PBS -q m32
cd $PBS_O_WORKDIR
matlab -nojvm -nosplash -nodesktop -r test
```

以下のコマンドでジョブを投入します。

```
[gen00 ~]$ qsub job-m
Request 1234.job submitted to queue: m32.
```

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下さい。

■ サンプルプログラム

MATLAB には豊富なデモがありますので、ご利用下さい。
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下さい。

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

参考資料

本センター本館1階 利用相談室に、以下の資料を備えてあります。

MATLAB による制御理論の基礎 : 野波健蔵, 東京電機大学出版局

MATLAB による制御のためのシステム同定 : 足立修一, 東京電機大学出版局

だれでもわかる MATLAB : 池原雅章, 培風館

はやわかり MATLAB 第2版 : 芦野隆一, 共立出版

最新 MATLAB ハンドブック第3版 : 小林一行, 秀和システム

MATLAB グラフィックス集 : 小国 力, 朝倉書店

MATLAB と利用の実際 : 小国 力, サイエンス社

MATLAB の総合応用 : 高谷邦夫, 森北出版

最新使える! MATLAB : 青山貴伸, 講談社

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

MATLAB による画像&映像信号処理 : 村松正吾, CQ 出版

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

高機能数値計算・可視化機能ソフト MATLAB の基本的な使い方 : 陳国曜 他
(広報誌 SENAC Vol.29 No.4 (1996-10))

データ解析システム **SAS**

SAS(Statistical Analysis System) は、基本システムである BaseSAS ソフトウェアを中心とした汎用統計パッケージです。

■ サービスホスト・バージョン

gen.isc.tohoku.ac.jp ・ SAS 9.2

導入プロダクト

当センターで導入している SAS プロダクトです。

Base SAS
SAS/ETS
SAS/GRAPH
SAS/STAT

利用方法

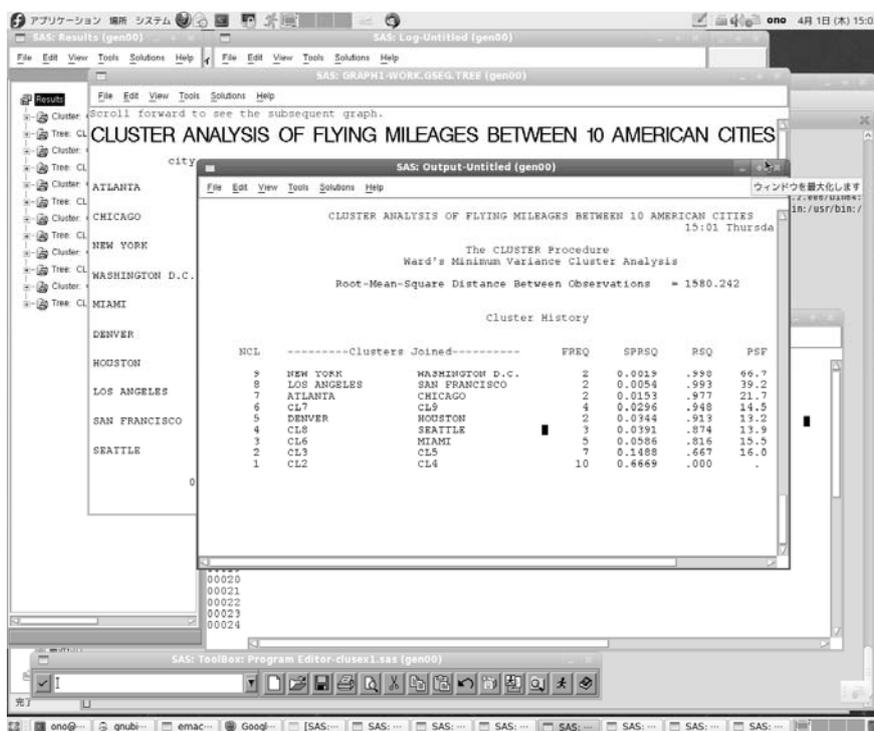
【対話型ディスプレイマネージャでの実行】

対話型ディスプレイマネージャとは、ウィンドウ画面を使って対話形式で SAS システムに命令を与えたり、メッセージを受け取ったりすることのできる処理モードです。

SAS の起動

SAS 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。

```
yourhost$ ssh -X 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp
:
[gen00 ~]$ sas
```



Log、Output、Program Editor、ToolBox、Results、Explorer の 6 つのウィンドウが開きます。
Program Editor ウィンドウで、SAS プログラムを作成した後、**Program Editor** ウィンドウ上のメニュー「Run」→「Submit」で、プログラムが実行されます。結果は **Output** ウィンドウに出力されます。
【コマンドでの実行】

X Window System 環境がなくても SAS の利用が可能です。

実行コマンド

SAS の入力ファイルは、拡張子を `.sas` とします。(例: `test01.sas`)

`gen.isc.tohoku.ac.jp` にログイン後、`sas` コマンドに入力ファイル名を指定し実行することにより、会話型処理として実行が行われます。

例) `test01.sas` を実行する

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

```
[gen00 ~]$ sas test01
```

実行結果

実行後、カレントディレクトリに 2 つのファイルが作成されます。

<code>test01.lst</code>	(実行結果)
<code>test01.log</code>	(ログ)

SAS の基本的な使い方は、参考資料などをご参照下さい。

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。

SAS によるデータ解析入門[第2版] : 市川伸一, 大学出版会
SAS による共分散構造分析 : 野田秀樹, 東京大学出版会
SAS による実験データの解析 : 高橋行雄, 東京大学出版会
SAS による統計分析 : 高柳良太, オーム社
データ解析のための SAS 入門 : 宮岡悦良, 朝倉書店
実用 SAS 生物統計ハンドブック : サイエントリスト社

SAS による統計分析入門 : 八巻邦次 (広報誌 SENAC Vol.35 No.2 (2002-7))

[報 告]

第 17 回高性能シミュレーションに関するワークショップ(WSSP)報告

東北大学サイバーサイエンスセンター 小林広明

東北大学サイバーサイエンスセンターと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)は、2013年3月12日(火)～3月13日(水)に第17回 Workshop on Sustained Simulation Performance (WSSP)を開催しました。本ワークショップは、サイバーサイエンスセンターとHLRSとの間の高性能計算に関する組織的連携協定に基づき両センターのスーパーコンピュータシステムの利用者、並びに国際的に活躍する計算科学者・計算機科学者を招いて、毎年、春と秋にシュトゥットガルト大学と東北大学で交互に開催しているものです。

今回のワークショップは、文部科学省の2年間の事業として東北大学が取り組む「高メモリバンド幅アプリケーションに適した将来のHPCIシステムに関する調査研究」の成果報告会として位置付け、特にスーパーコンピュータを用いた防災・減災、地球環境、最先端ものづくりなどを対象に、将来解決が希求される社会的・科学的課題の明確化に向けたアプリケーション、および必要なHPCシステムのあり方を中心にプログラムを編成しました。また、東北大チームに加え、将来のHPCIシステムの検討に関して東京大学チームと筑波大学のチーム、アプリケーションに関しては理化学研究所のチームも本文科省事業に取り組んでいることから、これら3チームもお招きし、その活動状況に関するご講演もいただきました。

ワークショップの冒頭、文科省研究振興局情報課林計算科学技術推進室長から我が国のHPCI政策に関するご講演があり、また海外有識者からはポストペタ・エクサスケールコンピューティングに向けての、アプリケーション、システム、デバイスそれぞれのレベルでの研究開発のあり方や今後の技術動向が示されました。

2日間のワークショップでは、延べ約160名の参加者を得て、活発な議論が交わされました。第18回ワークショップは、2013年12月9～10日にシュトゥットガルト大学で行われる予定です。また、2013年度に開催されたワークショップの論文集が後日Springer社から出版されます。講演予稿集および論文集にご興味ございましたら残部がございますので、センターまでお問い合わせください。



[報 告]

情報処理学会全国大会関連見学者報告

— IEEE Computer Society 会長 David Alan Grier 氏、和田英一先生、
情報処理学会見学ツアー等の皆さまにご来訪いただきました —

平成 25 年 3 月 6 日～8 日に東北大学川内キャンパスにおいて、情報処理学会全国大会が開催されました。この期間、大会の招待講演で来日されていた IEEE Computer Society 会長 David Alan Grier 氏、また、大会に参加されていたパラメトロコンピュータの開発者で、日本のコンピュータのパイオニアの 1 人である和田英一先生他多数の皆さまにセンターをご訪問いただきました。また 8 日には学会主催の見学ツアーも行われ、5 名の方に参加をいただきました。

今回の皆さまのご訪問にあたり、小林センター長やセンタースタッフが案内役をつとめ、情報処理学会分散博物館（サイバーサイエンスセンター展示室）やスーパーコンピュータ室を見学していただきました。みなさん、大変興味をもたれた様子で質問も多数あり、予定時間をオーバーして見学される方も多くおられました。



IEEE CS 会長（右）と当センター長（左）

展示室を熱心に見学いただきました



展示品 SENAC-1 と和田英一先生（右から 2 人目）



情報処理学会全国大会開催期間中、情報処理学会見学ツアー他多くの皆さまにご来訪いただきました



当センター展示室（情報処理学会 分散博物館）は、平日 9:00～17:00 まで、予約なしでどなたでも見学することが可能です。皆さまのお越しをお待ちしております（問い合わせ先 共同利用支援係 022-795-3406）。

[展示室便り⑧]

スカラ並列コンピュータ

今回は、1997年から2010年にセンターでサービスを行っていた日本電気(株)製のスカラ並列コンピュータ Exemplar/X、TX7/AzusA、TX7/i9610です。これらのコンピュータは、1つのプログラムを複数のCPUで実行する並列処理によって高速演算を行いました。センターでは、1997年にExemplar/Xから並列処理のサービスが始まりました。表1「スカラ並列コンピュータの変遷」は、センターで導入したスカラ並列コンピュータの演算処理能力とメモリ容量、CPU数、ノード数を表したものです。

機種	演算性能 GFLOPS	メモリ容量 GB	CPU数	ノード数
Exemplar/X 1997-2002年	SPECint92: 360 SPECfp92 :550	12	48	3
TX7/AzusA 2002-2006年	358.4	160	112	7
TX7/i9610 2006-2010年	1,228.8	1,536	96	3

表1 スカラ並列コンピュータの変遷

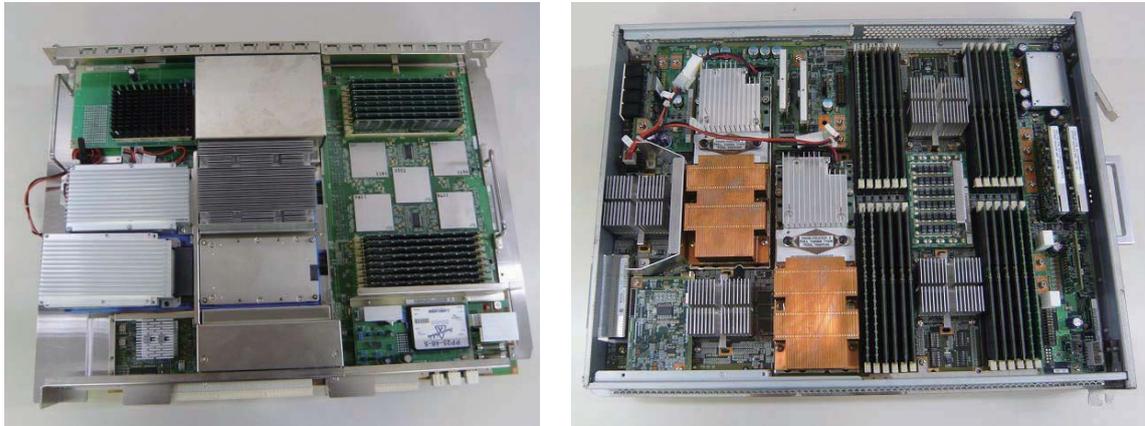
Exemplar/Xは3ノード導入され、1ノードは16個のCPU(PA8000プロセッサ)と4GBのメモリで構成、TX7/AzusAは7ノード導入され、1ノードは16個のCPU(Intel Itaniumプロセッサ800MHz)と32GB(4ノードは16GB)のメモリで構成、TX7/i9610は3ノード導入され、1ノードは32(64Core)個のCPU(Intel Itanium2プロセッサ1.6GHz)と512GBのメモリで構成されていました。写真1は各コンピュータの筐体です。



写真1 コンピュータの筐体(計算機室) Exemplar/X(左)、TX7/AzusA(中)、TX7/i9610(右)

展示品1はTX7/AzusAとTX7/i9610のCPUとメモリが搭載されたCELL cardです。裏面も同じ構成となっています。どちらも左側にCPU、右側にメモリが搭載されています。1つのCELL card両面で、TX7/AzusAは4個のCPUと8GBのメモリ、TX7/i9610は4個のCPUと64GB

のメモリが搭載されています。図1はTX7/AzusAとTX7/i9610のシステム構成図で赤枠の部分が展示品1のCELL cardに対応します。



展示品1 TX7/AzusA(左)とTX7/i9610(右)のCELL card

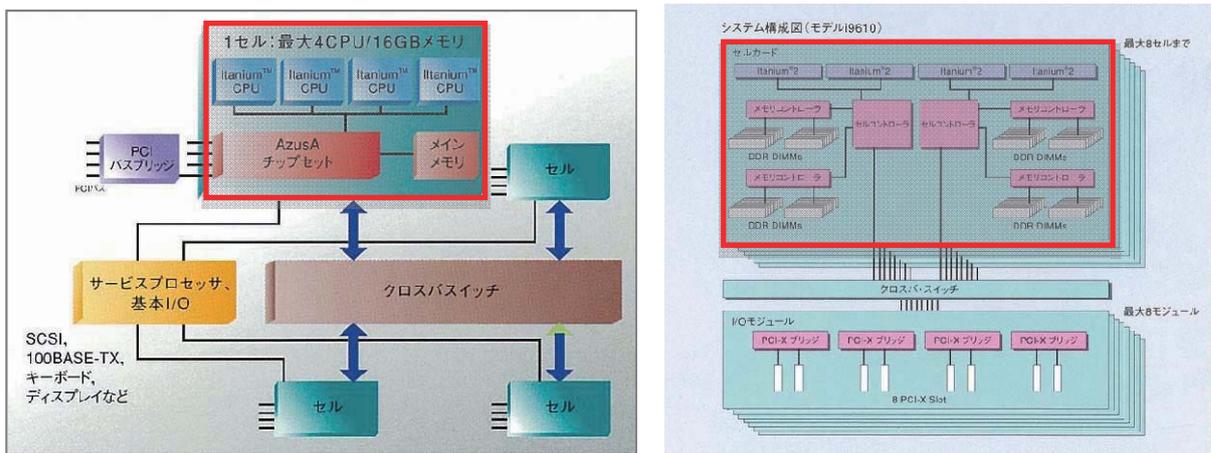


図1 TX7/AzusA(左)とTX7/i9610(右)のシステム構成図

利用形態は、Exemplar/Xはオペレーティングシステム(OS)がHP-UXでありバッチ処理専用でサービスし、TX7/AzusAとTX7/i9610はOSがLinuxとなり、会話型処理とバッチ処理でサービスを行いました。並列処理はFortranとC言語から利用でき、コンパイラによる自動並列化機能、OpenMPそしてMPIライブラリを用いて並列実行することができました。

スカラ並列コンピュータTX7/AzusA、TX7/i9610は、Gaussianをはじめとするアプリケーションプログラムでの計算や、スーパーコンピュータによるベクトル演算が困難なプログラムの高速な演算サーバとして、また大規模科学計算システムのフロントエンドとして利用されました。

[Web 版大規模科学計算システムニュースより]

大規模科学計算システムニュースに掲載された記事の一部を転載しています。 <http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/tayori/>

「高速化推進研究活動報告」の公開について (No. 144)

サイバーサイエンスセンターでは、利用者・センター教職員・計算機メーカーが一体となって推進している高性能計算に関する共同研究の成果報告を目的として、「高速化推進研究活動報告」を発行しております。

PDF版の高速化推進研究活動報告のダウンロードページは、大規模科学計算システムのトップページの「成果報告」のリンク、または下記のリンクよりご覧下さい。

<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/report/speed-up.html>

(共同利用支援係, 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. 145)

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、計算科学・計算機科学分野での教育貢献・人材育成を目的として、大学院・学部での講義実習等の教育目的での利用について、無料（ただし、利用状況によっては上限を設定する場合があります）でベクトル並列型スーパーコンピュータ SX-9（1 ノード, 16CPU, 1.6Tflop/s, 1TB メモリ）システムをご利用いただける制度を用意しております。

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

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

なお、講義終了後、報告書（広報誌 SENAC へ掲載）の提出をお願いいたします。たくさんのお申し込みをお待ちしております。不明な点は、edu-prog@isc.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. 145)

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、文部科学省が平成 19 年度から開始した先端研究施設共用促進事業（旧「先端研究施設共用イノベーション創出事業」）を通して、産学連携共同研究におけるサイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータ学術利用支援を行ってまいりました。平成 23 年度からは、自主事業の制度のもと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へ提供しており、平成 25 年度についても引き続き同制度を利用する課題を募集しております。

本サービスにおける利用課題区分は、以下の 2 通りがあります。

- ・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申し込みください。

<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/utilize/business.html>

問い合わせ先
 東北大学サイバーサイエンスセンター
 情報部情報基盤課 共同利用支援係
 電話：022(795)3406
 E-mail：uketuke@isc.tohoku.ac.jp

(共同利用支援係)

コンパイラアップデートのお知らせ (No. 148)

■2013 年 3 月 26 日にスーパーコンピュータ用のコンパイラを下記のバージョンへアップデートいたしました。

FORTRAN90/SX Rev. 460
 C++/SX Rev. 094

■コンパイル方法は下記となります。

なお、コンパイルコマンドに変更はありません。

Fortran コマンド名：sxf90

C/C++コマンド名：sxcc

オプションの説明は、man コマンドでも参照できます。

■FORTRAN90/SX

主な機能強化は下記の通りです。

- (1) 実行時にトレースバック情報を出力することを指定する新規コンパイラ指示オプション TRACEBACK を追加した。また、この指示オプションを有効とすることを指定する新規コンパイラオプション -dir [no]debug を追加した。詳細については、添付のマニュアル差分情報 release.j を参照のこと。

- (2) インライン展開される手続中の EXPAND 指示オプションがインライン展開後のコード上でも有効になるようにコンパイラを改善した。(DWD0119)
- (3) エラーの原因であるファイルのパス名を出力するように実行時エラー#52 に対するメッセージを改善した。
- (4) 実行時に一つのプロセスで同時にオープンできるファイル数の上限を 100 から 255 に拡張した。

詳細についてはリリースメモをご覧ください。

Rev460 リリースメモ

マニュアル差分(release. j)

Fortran2003 機能 ※前回から変更なし

■C++/SX について

C++/SX の新機能等については下記資料をご覧ください。

Rev094 リリースメモ

Rev. 094: 新機能のご紹介(c++sx-rev094-001j. pdf)

(共同利用支援係, 共同研究支援係)

大規模ファイル領域(short 領域)の利用開始について (No. 149)

○目的

スーパーコンピュータや並列コンピュータで演算を実行する際、大規模な入出力ファイルを必要とする利用者に、大規模ファイル領域(以下、short 領域)を短期間開放します。

○利用期間

利用期間は、3ヶ月毎(四半期毎)とします。

4～6月、7～9月、10～12月、1～3月

継続して利用希望の方は、四半期末毎に次の3ヶ月分を申請していただきます。その際、過去の演算利用実績を考慮して継続利用の審査を行います。一定時間の演算利用がなければ、継続利用をお断りする場合もございますのでご承知おきください。目安としては、スーパーコンピュータ、並列コンピュータどちらか支払責任者単位で3ヶ月間の合計が100経過時間程度を予定しています。

○利用申請

ご利用希望の際は、支払責任者が登録する利用者番号をまとめて電子メールにて申込み願います。

申込み先: sys-sec@isc.tohoku.ac.jp

例:

件名: short 領域利用申請(4～6月)

	氏名	利用者番号
支払責任者	○○ ○○	u2xxxx
希望利用者	□□ □□	w2xxxx
	□□ □□	w2xxxx

○利用負担額と利用可能なサイズ

short 領域の利用負担額は原則無料とし、4 テラバイトのパーティションを複数の利用者で共有してご利用いただきます。ディスク資源には限りがありますので、利用期間中においても使用済みのファイルは速やかに削除・退避するなど、ご協力をお願いいたします。

また、データのバックアップサービスは行いませんので、他のサーバやパソコンに転送するなどして、各自データのバックアップを行うようお願いいたします。

(共同利用支援係, 共同研究支援係)

平成 25 年度の共同研究について (No. 149)

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 7 件が採択されましたのでお知らせします。

No.	申請者	所属	研究課題
1	有吉 慶介	海洋研究開発機構 地震津波・防災研究プロジェクト	海溝型巨大地震サイクルの大規模シミュレーションの開発
2	岩崎 俊樹	東北大学大学院 理学研究科	気象・気候の数値シミュレーション
3	河野 裕彦	東北大学大学院 理学研究科	ナノカーボンにおける光誘起転位・解離反応の動力学シミュレーション
4	佐々木大輔	金沢工業大学工学部	工学問題に対する Building-Cube 法の高度化に関する研究
5	茂田 正哉	東北大学大学院 工学研究科	プラズマ流によるナノ粒子群創製プロセスの数値シミュレーション
6	陳 強	東北大学大学院 工学研究科	モーメント法の高高速化アルゴリズムに関する研究
7	山本 悟	東北大学大学院 情報科学研究科	ビルディングキューブ法に基づく超臨界流体数値解法(SFS+BC)による並列計算

(スーパーコンピューティング研究部, 共同研究支援係)

— SENAC 執筆要項 —

1. お寄せいただきたい投稿内容

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

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

2. 執筆にあたってご注意いただく事項

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

3. 原稿の提出方法

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

—Wordの場合—

- ・用紙サイズ：A4
- ・余白：上=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、希望があれば別刷50部を進呈します。50部を超える分については、著者の実費負担とします。別刷の希望部数等は投稿の際に申し出てください。
- (2)投稿予定の原稿が15ページを超す場合は以下まで前もってご連絡ください。
- (3)初回の校正は、執筆者が行って、誤植の防止をはかるものとします。
- (4)原稿の提出先は次のとおりです。

東北大学サイバーサイエンスセンター内 情報部情報基盤課共同利用支援係

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

TEL 022-795-3406

スタッフ便り*

新しい年度が始まりました。少し前の話ですが、今年の3月11日も震災のときと同じようにセンターで過ごしておりました。時間の経つのは早いもので、当時おなかの中に居た愚息も、いまでは歩き？走り？回っています。

黙祷の際に、あのときのことは忘れないようにと思いながらも、当時の思いや記憶が徐々に薄れていることにふと気がつきました。日常生活が、「何となく」震災前に戻りつつある今だからこそ、当時をしっかりと振り返る必要があるのかもしれませんが。我がセンターとしても、防災・減災を支えるコンピューティングサービスを提供し続けていくことで、引き続き安全な暮らしを支える科学の発展に貢献していきたいと考えています。(R.E)

春は新生活のスタート。といっても、就職してからというもの、入学する学生さんの姿を見かけては、ほほ笑ましく感じるくらいで、私自身は何も変化がない生活をしていました。しかし、今年は身近にライバル登場で、状況一変です。わが子は保育園で早く進級することを目標にし、新しいことに色々とチャレンジ。成功をすると、「進級できる！」と大興奮。そんな姿を見ると、社会人として、そして親として日々充実させ、成長しなければとあらためて思うようになりました。

センターに異動してきて、約2ヶ月。スパコンという名前は何度も聞いたことがありましたが、実物を見るのは初。コンピュータの知識はほぼゼロに近いですが、少しずつ情報を吸収し、みなさまのお役にたてるよう頑張ります！(K.T)

サイバーサイエンスセンター・情報部情報基盤課スタッフ 転入・転出・退職者のお知らせ

[転入]

2013.2.16 高杉佳奈 (会計係・係長) 工学部・工学研究科より
2013.4.1 野田大輔 (ネットワーク係・技術一般職員) 新規採用

[転出]

2013.2.16 梶原泰則 (会計係・係長) 経済学部・経済学研究科へ
2013.4.1 花岡勝太郎 (共同研究支援係・技術専門職員) 加齢医学研究所へ

[退職]

2013.3.31 澤田勝己 (ネットワーク係・技術一般職員)
2013.3.31 加藤 昇 (共同利用支援係・再雇用職員)
2013.3.31 淵辺恵子 (会計係・事務補佐員)
2013.3.31 村田善智 (スーパーコンピューティング研究部・産学官連携研究員)
2013.3.31 渡辺俊貴 (CSI研究室・産学官連携研究員)
2013.3.31 木下峻一 (CSI研究室・産学官連携研究員)



サイバーサイエンスセンター前
整備中の青葉山新キャンパス

SENAC 編集部会

小林広明 曾根秀昭 水木敬明 後藤英昭
江川隆輔 早坂哲夫 大泉健治 小野 敏
斉藤くみ子

* 編集部会では、より多くのセンタースタッフからの話題もお届けできればと
考え、前号より「編集後記」を改め「スタッフ便り」といたしました。

平成 25 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 創文印刷出版株式会社

システム一覧

計算機システム	ホスト名	機種
スーパーコンピュータ	super.isc.tohoku.ac.jp	SX-9
並列コンピュータ	gen.isc.tohoku.ac.jp	Express5800

サービス時間

利用システム名	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
館内利用	月曜日～金曜日は8:30～21:00、 土・日・祝日は閉館

ジョブクラスと制限値

計算機システム	処理	ジョブクラス	CPU時間	メモリ容量
スーパー コンピュータ	会話型	(4cpu)	1時間	8GB
	バッチ 処理	ss (4cpu)	1時間	256GB
		s (4cpu)	無制限	32GB
		p8 (8cpu)	〃	512GB
		p16 (16cpu)	〃	1024GB
		p32 (32cpu)	〃	1024GB×2
		p64 (64cpu)	〃	1024GB×4
並列 コンピュータ	会話型	(4並列)	1時間	8GB
	バッチ 処理	as (非並列)	無制限	16GB
		am (Marc専用)	〃	16GB
		am2 (Marc専用)	〃	128GB
		a8 (8並列)	〃	128GB
		a16 (16並列)	〃	256GB
		a32 (32並列)	〃	512GB

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 Vo.46 No.2 2013-4

[お知らせ]

- 平成25年度サイバーサイエンスセンター講習会案内 1
利用負担金の値下げと利用負担金割引制度の実施について 2

[共同研究成果]

- Building-Cube Method による大規模流体解析データの圧縮法の開発 坂井玲太郎 3
大林 茂
佐々木大輔
中橋 和博

- 超高速第一原理電子状態計算コードの開発と応用 柳澤 将 13
小野 倫也
稲垣 耕司
森川 良忠
Arno Schindlmayr

[大規模科学計算システム]

- ライブラリ・アプリケーションの紹介 21

[報告]

- 第17回高性能シミュレーションに関するワークショップ(WSSP)報告.....小林 広明 49

情報処理学会全国大会関連見学者報告

- IEEE Computer Society 会長 David Alan Grier 氏、和田英一先生、
情報処理学会見学ツアー等の皆さまにご来訪いただきました — 50

[展示室便り⑧]

- スカラ並列コンピュータ 51

[Web 版大規模科学計算システムニュースより]

- 「高速化推進研究活動報告」の公開について (No.144) 53
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について (No.145) 53
民間企業利用サービスについて (No.145) 54
コンパイラのアップデートについて (No.148) 54
大規模ファイル領域(short 領域)の利用開始について (No.149) 55
平成25年度の共同研究について (No.149) 56

- 執筆要項 57

- スタッフ便り 58



再生紙と大豆の油を主成分とした「ソイインク」を使用しています。