



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.47 No.2 2014-4



Supercomputing System  
Cyberscience Center  
Tohoku University  
[www.ss.isc.tohoku.ac.jp](http://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	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  大判プリンタ、利用者端末等の利用	8:30~17:15  8:30~21:00
	利用者談話室	(3444)	各センター広報の閲覧	8:30~21:00
	展示室(分散 コンピュータ博物館)		歴代の大型計算機等の展示	9:00~17:00
	可視化機器室	(3428)	可視化システムの利用	8:30~21:00
三階	総務係	022-795-3407 (3407) syomu@isc.tohoku.ac.jp	総務に関すること	8:30~17:15
	会計係	022-795-3405 (3405) kaikai@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 (受付)	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
	研究開発部	022-795-6095 (6095)		
四階	端末機室	(3445)	PC 端末機(X 端末)	
五階				

\* ( ) 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。

[大規模科学計算システム]

並列コンピュータ LX 406Re-2 の利用法

情報部情報基盤課 共同利用支援係 共同研究支援係  
サイバーサイエンスセンター スーパーコンピューティング研究部

はじめに

並列コンピュータ LX 406Re-2 は、最大 576 コアによる並列処理や、ベクトル化に不向きなプログラムの高速な演算が可能です。また、Gaussian 等のアプリケーションプログラムは、高速ディスクアクセスが可能な SSD ドライブを搭載する専用ノードで実行されます。バッチ処理はジョブ管理システム NQS II を使用しています。この資料では、LX 406Re-2 の利用法について説明します。

システム構成

システム構成は、既設のシステムを含め図1のようになっています。

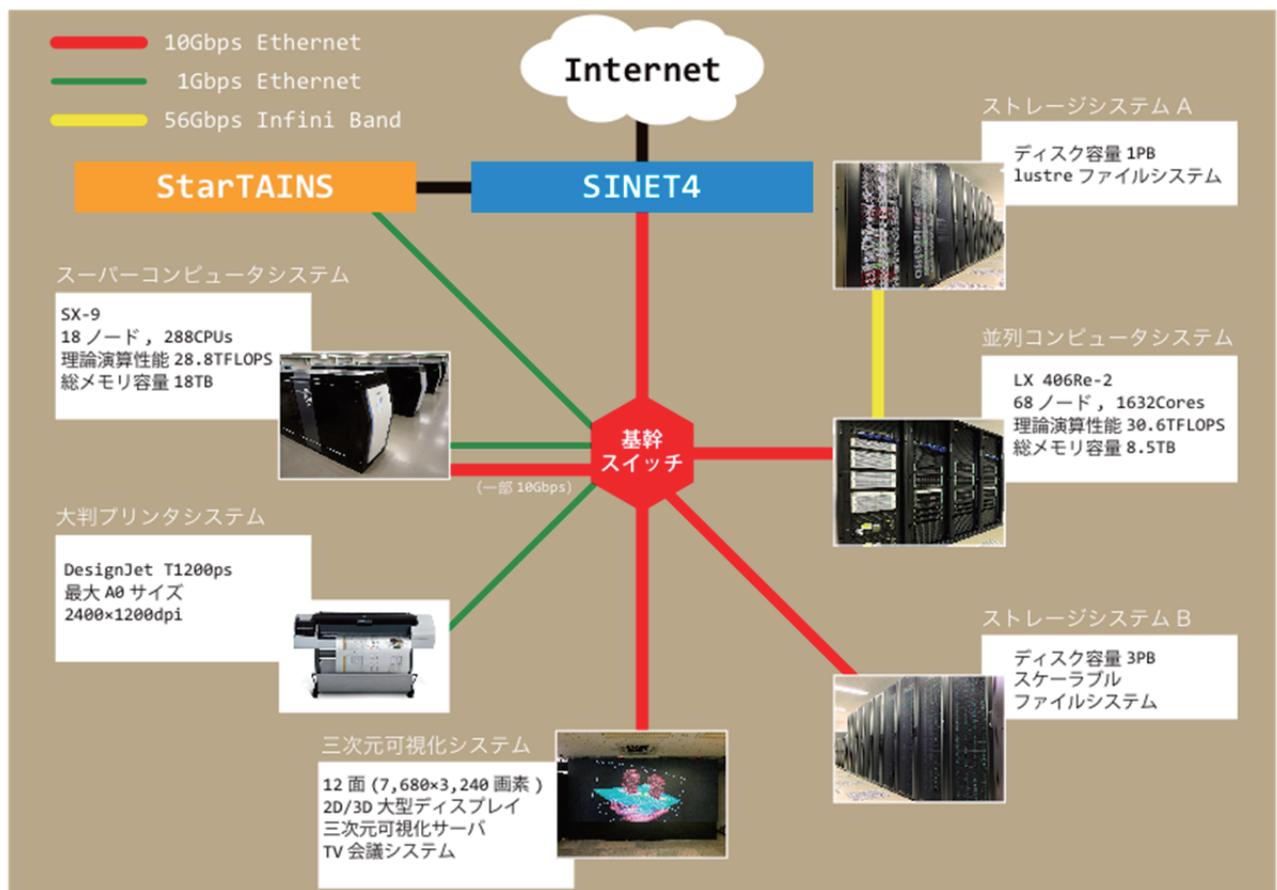


図 1. 大規模科学計算システム構成図

## 並列コンピュータ LX 406Re-2

並列コンピュータ LX 406Re-2 は 1 ノードに、インテル Xeon プロセッサ E5-2695v2 (12 コア) を 2 基と 128GB の主記憶装置を搭載し、合計 68 ノードで構成されます。自動並列化・OpenMP・MPI を利用したノード内の並列処理は 24 並列まで可能で、ノードあたりの最大演算性能は 460.8GFLOPS (倍精度) となります。複数のノードを使用した並列処理は、MPI の利用により最大 576 並列まで実行可能です。ベクトル演算に不向きなプログラムの高速な実行が可能です。また、スーパーコンピュータ SX-9 のフロントエンドサーバとしての役割も担っています。

## スーパーコンピュータ SX-9

スーパーコンピュータ SX-9 は 1 ノードに、16 個の CPU と 1TB の主記憶装置を搭載し、合計 18 ノードで構成されます。自動並列化・OpenMP・MPI を利用したノード内の並列処理は 16 並列まで可能で、ノードあたりの最大演算性能は 1.6TFLOPS (倍精度) となります。複数のノードを使用した並列処理は、MPI の利用により最大 64 並列まで実行可能です。

## ログイン

並列コンピュータにログインします。ログインは、SSH(Secure SHell)プログラムを利用します(リスト1)。接続ホスト名は `front.isc.tohoku.ac.jp` です。

はじめて接続する場合はコマンド入力後に

"Are you sure you want to continue connecting (yes/no)?"

と問い合わせがありますので `yes` を入力してからパスワードを入力します。

### リスト1 並列コンピュータへのログイン

```
yourhost$ ssh front.isc.tohoku.ac.jp -l 利用者番号
```

```
Password: パスワード
```

```
[利用者番号@front1 ~]$
```

・Windows からログインする場合は、TeraTerm 等の SSH 対応のリモート接続ソフトをご利用ください。

センターに利用登録すると、図1すべてのシステムが利用可能となります。ログイン名とパスワードは各システムで共通です。ログイン名は利用者番号を用い、パスワードは初期パスワードが設定されていますので `yppasswd` コマンドで速やかに変更してください(リスト2)。また、パスワードはセキュリティ保護のため、定期的な変更をお願いします。公開鍵暗号方式によるログインも可能です。

利用登録時のログインシェルは `csh` を設定しています。`bash` 等に変更したい場合は `ypchsh` コマンドをご利用後、再ログインしてください(リスト3)。

ホームディレクトリはファイルサーバの「/uhome/利用者番号」となります。NFS(Network File System)によるファイル管理を行っていますので、スーパーコンピュータ、並列コンピュータから共通に利用できます。

## リスト2 パスワードの変更

```
front1$ yppasswd
Changing password for 利用者番号.
Changing password 利用者番号
(current)UNIX Password: 現在のパスワード
New UNIX password: 新しいパスワード
Retype new UNIX password: 新しいパスワード (再度)
Password: all authentication tokens updated successfully.
```

## リスト3 ログインシェルの変更(bash への変更例)

```
front1$ ypchsh
Changing NIS account information for 利用者番号 on front.
Please enter Password: パスワード

Changing login shell for 利用者番号 on front.
To accept the default, simply press return.
Login Shell [/bin/csh]: /bin/bash
The login shell has been changed on kanri-ux.
```

- ・ 並列コンピュータの日本語環境は UTF-8 です。日本語を表示させる場合には、接続ソフトウェアの文字コードを UTF-8 としてください。

## プログラミング言語、ライブラリ

プログラミング言語および科学技術計算用ライブラリとして表1に示すものが利用できます。

表1. プログラミング言語およびライブラリ

Fortran	Intel Fortran Composer XE
C/C++	Intel C++ Composer XE
MPI	Intel MPI ライブラリ
数値演算ライブラリ	NEC NumericFactory, Intel MKL 他

## ファイルエディット

ソースファイルは、並列コンピュータにログインし、**emacs** エディタまたは **vi** エディタで作成します。研究室等のパソコンにあるソースファイルを利用するには、**front.isc.tohoku.ac.jp** の利用者ディレクトリにファイル転送してください。送り元のホストが **Windows** の場合、転送モードの設定を“**ASCII**”にすることで適切な改行コードで転送できます。転送手順につきましては、以下の **Web** ページをご参照ください。

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

## コンパイル

**Fortran** および **C/C++**コンパイラの基本的な使用方法です。詳しいオプション等については **man** コマンド、および 14 ページの**マニュアル**をご覧ください。

### ■ Fortran

**【形式】 ifort オプション Fortran ソースファイル名**

**mpiifort オプション Fortran ソースファイル名 (MPI)**

#### 主なオプション

<b>-parallel</b>	自動並列化機能を利用する。
<b>-par-report</b>	自動並列化されたループの行番号を表示する。
<b>-openmp</b>	<b>OpenMP</b> を利用する。
<b>-openmp-report</b>	<b>OpenMP</b> 指示行により並列化されたループ、領域、セクションの行番号を表示する。
<b>-O0</b>	最適化を無効にする。
<b>-O1</b>	最適化を行うが、コードサイズが増える最適化は行わない。
<b>-O2</b> または <b>-O</b>	一般的な最適化を行う。(規定値)
<b>-O3</b>	高度の最適化(プリフェッチ、スカラープレースメント、ループ変換等)を行う。
<b>-ip</b>	インライン展開を行う。
<b>-c</b>	コンパイルのみ行う。(リンクはしない)
<b>-o</b>	実行可能形式のオブジェクトファイルの名前を指定する。省略時は <b>a.out</b> になる。
<b>-w90</b>	非標準 <b>Fortran</b> 機能に関する警告メッセージを抑止する。
<b>-r8</b>	精度の自動拡張を行う。(倍精度化)
<b>-help</b>	オプションの種類と説明を表示する。

## ソースファイル名

Fortran のソースプログラムファイル名を指定します。複数のファイルを指定するときは、空白で区切ります。

ソースファイル名には、サフィックス `.f90` か `.F90` (自由形式)、または `.f` か `.F` (固定形式) が必要です。

## ■ C/C++

<b>【形式】</b>	<code>icc</code>	オプション	C ソースファイル名
	<code>icpc</code>	オプション	C++ソースファイル名
	<code>mpiicc</code>	オプション	C ソースファイル名 (MPI)
	<code>mpiicpc</code>	オプション	C++ソースファイル名 (MPI)

## 主なオプション

<code>-parallel</code>	自動並列化機能を利用する。
<code>-par-report</code>	自動並列化されたループの行番号を表示する。
<code>-openmp</code>	OpenMP を利用する。
<code>-openmp-report</code>	OpenMP 指示行により並列化されたループ、領域、セクションの行番号を表示する。
<code>-O0</code>	最適化を無効にする。
<code>-O1</code>	最適化を行うが、コードサイズが増える最適化は行わない。
<code>-O2</code> または <code>-O</code>	一般的な最適化を行う。(規定値)
<code>-O3</code>	高度の最適化(プリフェッチ、スカラープレスメント、ループ変換等)を行う。
<code>-ip</code>	インライン展開を行う。
<code>-c</code>	コンパイルのみ行う。(リンクはしない)
<code>-o</code>	実行可能形式のオブジェクトファイルの名前を指定する。省略時は <code>a.out</code> になる。
<code>-help</code>	オプションの種類と説明を表示する。

## ソースファイル名

C/C++のソースプログラムファイル名を指定します。複数のファイルを指定するときは、空白で区切ります。

ソースファイル名にはサフィックス `.c`、C++プログラムのソースファイル名にはサフィックス `.cc` または `.C` が必要です。

## ライブラリ

Fortran,C/C++ 用

数値計算ライブラリ集	NEC NumericFactory
数値演算ライブラリ	Intel MKL
画像処理ライブラリ	Intel IPP
マルチスレッドライブラリ	Intel TBB

### ■ 数値計算ライブラリ集 NEC NumericFactory

#### 【機能概要】

NumericFactory は、NEC が独自に開発している数値計算ライブラリと、数値シミュレーションプログラムで頻繁に利用される OSS (Open Source Software) により、多彩な数値計算アルゴリズムを提供します。NumericFactory の使用により、プログラム開発の時間を短縮でき、高品質なプログラムを開発することが出来ます(表 2)。

NumericFactory は、全 12 種類のライブラリで構成されています。ライブラリにより、使用できる言語が異なります(表 3)。また、並列化された機能を含むものと含まないものがあります。OpenMP 並列の機能がないライブラリでも、下位で使用する Intel MKL が並列化されている場合、マルチスレッドで動作することがあります。OpenMP 並列、または、MPI 並列機能がないライブラリでも、OpenMP/MPI プログラムから利用することは可能です。

表 2. NumericFactory の機能概要

ライブラリ名	機能概要
ASL	行列積、疎行列用連立 1 次方程式(直接法/反復法)、固有値方程式、FFT、乱数、特殊関数、近似・補間、スプライン、微分方程式、数値微積分、方程式の根、数値計画法、ソート・順位付け
ASLSTAT	乱数、基礎統計量、推定・検定、分散分析・実験計画、多変量解析、フーリエ解析、回帰分析
ASLQUAD	四倍精度演算機能(基本演算、連立 1 次方程式、固有値方程式、特殊関数)
SFMT	メルセンヌツイスター擬似乱数生成(整数)
dSFMT	メルセンヌツイスター擬似乱数生成(実数)
SuperLU	疎行列用連立 1 次方程式(直接法)
MUMPS	疎行列用連立 1 次方程式(直接法)
Lis	疎行列用連立 1 次方程式、疎行列用固有値方程式(反復法)
ARPACK	大規模固有値問題
PARPACK	大規模固有値問題(MPI 版)
XBLAS	精度拡張/精度混合行列積
METIS	行列、グラフ並べ替え、グラフ分割

表 3. NumericFactory のライブラリと利用可能言語

ライブラリ名	Fortran から利用	C から利用	OpenMP 並列機能	MPI 並列機能
ASL	○	○	○	×
ASLSTAT	○	○	×	×
ASLQUAD	○	× (C++可)	○	×
SFMT	×	○	×	×
dSFMT	×	○	×	×
SuperLU	×	○	×	×
MUMPS	○	○	×	○
Lis	○	○	○	○
ARPACK	○	×	×	×
PARPACK	○	×	×	○
XBLAS	○	○	×	×
METIS	○	○	×	×

## 【ライブラリのリンク方法】

## ● 逐次版/OpenMP 版プログラムの場合

各ライブラリのリンクには、`ifort`、`icc` コマンドを使用します。利用するプログラム言語に応じて、リスト 4、5 のようにリンクしてください。リンクオプションは使用するライブラリと言語に応じて指定します(表 4、表 5)。

NumericFactory でサポートしているライブラリを使用する場合、ライブラリによってはユーザプログラム側でモジュールファイルやヘッダファイルをインクルードする必要があります(表 6)。

Fortran から ASL または ASLSTAT の 64 ビット整数に対応したライブラリを利用する場合、コンパイル時に必ずオプション"`-i8`"を付けてコンパイルしてください。このオプションは、`integer` 型を 64 ビット整数と翻訳する Intel コンパイラのオプションです。

## リスト 4. Fortran の場合(逐次版/OpenMP 版)

```
[front1 ~]$ ifort source.f90 <リンクオプション>
```

## リスト 5. C の場合(逐次版/OpenMP 版)

```
[front1 ~]$ icc source.c <リンクオプション>
```

表 4. NumericFactory のリンクオプション (逐次版/OpenMP 版 Fortran プログラムから利用する場合)

ライブラリ名	リンクオプション	
ASL	32bit 整数/逐次版	-lasl -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core
	64bit 整数/逐次版	-lasl64 -lmkl_intel_ilp64 -lmkl_sequential -lmkl_core
	32bit 整数/OpenMP 版	-lasl -lmkl_intel_lp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core
	64bit 整数/OpenMP 版	-lasl64 -lmkl_intel_ilp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core
ASLSTAT	32bit 整数版	-laslstat -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core
	64bit 整数版	-laslstat64 -lmkl_intel_ilp64 -lmkl_sequential -lmkl_core
ASLQUAD	32bit 整数/逐次版	-laslquad
	32bit 整数/OpenMP 版	-laslquad
Lis	逐次版	-llis_seq
	OpenMP 版	-llis_omp
ARPACK	-larpack -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core	
XBLAS	-lxblas	
METIS	-lmetis	

表 5. NumericFactory のリンクオプション (逐次版/OpenMP 版 C プログラムから利用する場合)

ライブラリ名	リンクオプション	
ASL	32bit 整数/逐次版	-laslcint -lasl -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -pthread -lifcore -limf
	64bit 整数/逐次版	-laslcint64 -lasl64 -lmkl_intel_ilp64 -lmkl_sequential -pthread -lmkl_core -lifcore -limf
	32bit 整数/OpenMP 版	-laslcint -lasl -lmkl_intel_lp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core -lifcore -limf
	64bit 整数/OpenMP 版	-laslcint64 -lasl64 -lmkl_intel_ilp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core -lifcore -limf
ASLSTAT	32bit 整数版	-laslstatc -laslstat -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -pthread -lifcore -limf
	64bit 整数版	-laslstatc64 -laslstat64 -lmkl_intel_ilp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -pthread -lifcore -limf

ASLQUAD	32bit 整数/逐次版	-laslquadc++ -laslquad -lifcore -limf
	32bit 整数/OpenMP 版	-laslquadc++ -laslquad -lifcore -limf
dSFMT	-ldsfmt	
SFMT	-lsfmt	
SuperLU	-lsuperlu -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -pthread	
Lis	逐次版	-llis_seq
	OpenMP 版	-llis_omp
XBLAS	-lxblas	
METIS	-lmetis	

表 6. モジュール/ヘッダファイル(逐次版/OpenMP 版)

ライブラリ名	使用する言語	モジュール/ヘッダファイル
ASL	Fortran	不要
	C	asl.h
ASLSTAT	Fortran	不要
	C	aslstat.h
ASLQUAD	Fortran	aslquad.mod
	C++	aslquad.h
dSFMT	C	dSFMT.h
SFMT	C	SFMT.h
SuperLU	C	slu_sdefs.h (単精度実数版) slu_ddefs.h (倍精度実数版) slu_cdefs.h (単精度複素数版) slu_zdefs.h (倍精度複素数版)
Lis	Fortran	lisf.h
	C	lis.h
ARPACK	Fortran	不要
XBLAS	Fortran	不要
	C	blas_extended.h
METIS	C	metis.h

- MPI 版プログラムの場合

各ライブラリのリンクには、`mpiifort`、`mpiicc` コマンドを使用します。利用するプログラム言語に応じて、リスト 6、7 のようにリンクしてください。リンクオプションは使用するライブラリと言語に応じて指定します(表 7、表 8)。

NumericFactory でサポートしているライブラリを使用する場合、ライブラリによってはユーザプログラム側でモジュールファイルやヘッダファイルをインクルードする必要があります(表 9)。

Fortran から ASL または ASLSTAT の 64 ビット整数に対応したライブラリ利用する場合、コンパイル時に必ずオプション"-i8"を付けてコンパイルしてください。このオプションは、integer 型を 64 ビット整数と翻訳する Intel コンパイラのオプションです。

リスト 6. Fortran の場合(MPI 版)

```
[front1 ~]$ mpiifort source.f90 <リンクオプション>
```

リスト 7. C の場合(MPI 版)

```
[front1 ~]$ mpicc source.c <リンクオプション>
```

表 7. NumericFactory のリンクオプション (MPI 版 Fortran プログラムから利用する場合)

ライブラリ名	リンクオプション	
ASL	32bit 整数/逐次版	-lasl -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core
	64bit 整数/逐次版	-lasl64 -lmkl_intel_ilp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -ilp64
	32bit 整数/OpenMP 版	-lasl -lmkl_intel_lp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core
	64bit 整数/OpenMP 版	-lasl64 -lmkl_intel_ilp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core -ilp64
ASLSTAT	32bit 整数版	-laslstat -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core
	64bit 整数版	-laslstat64 -lmkl_intel_ilp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -ilp64
ASLQUAD	32bit 整数/逐次版	-laslquad
	32bit 整数/OpenMP 版	-laslquad
MUMPS	単精度実数版	-ismumps -lmumps_common -lpord -lmetis -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_blacs_intelmpi_lp64 -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core
	倍精度実数版	-ldmumps -lmumps_common -lpord -lmetis

	倍精度実数版	-ldmumps -lmumps_common -lpord -lmetis -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_blacs_intelmpi_lp64 -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core
	単精度複素数版	-lcmumps -lmumps_common -lpord -lmetis -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_blacs_intelmpi_lp64 -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core
	倍精度複素数版	-lzmumps -lmumps_common -lpord -lmetis -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_blacs_intelmpi_lp64 -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core
Lis	逐次版	-llis_seq
	OpenMP 版	-llis_omp
	MPI 版	-llis_mpi
	MPI 版+OpenMP 版	-llis_omp_mpi
ARPACK	-larpack -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core	
PARPACK	MPI 版	-lparpack -larpack -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core
	BLACS 版	-lparpack-blacs -larpack -lmkl_blacs_intelmpi_lp64 -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core
XBLAS	-lxbblas	
METIS	-lmetis	

表 8. NumericFactory のリンクオプション (MPI 版 C プログラムから利用する場合)

ライブラリ名	リンクオプション	
ASL	32bit 整数/逐次版	-laslcint -lasl -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -pthread -lifcore -limf
	64bit 整数/逐次版	-laslcint64 -lasl64 -lmkl_intel_ilp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -lifcore -limf -ilp64
	32bit 整数/OpenMP 版	-laslcint -lasl -lmkl_intel_lp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core -lifcore -limf
	64bit 整数/OpenMP 版	-laslcint64 -lasl64 -lmkl_intel_ilp64 -lmkl_intel_thread

		-lmkl_core -pthread -lifcore -limf -ilp64
ASLSTAT	32bit 整数版	-laslstatc -laslstat -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -pthread -lifcore -limf
	64bit 整数版	-laslstatc64 -laslstat64 -lmkl_intel_ilp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -pthread -lifcore -limf -ilp64
ASLQUAD	32bit 整数/逐次版	-laslquadc++ -laslquad -lifcore -limf
	32bit 整数/OpenMP 版	-laslquadc++ -laslquad -lifcore -limf
dSFMT	-ldsfmt	
SFMT	-lsfmt	
SuperLU	-lsuperlu -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core	
MUMPS	单精度实数版	-ismumps -lmumps_common -lpord -lmetis -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_blacs_intelmpi_lp64 -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -pthread -lifcore -limf
	倍精度实数版	-ldmumps -lmumps_common -lpord -lmetis -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_blacs_intelmpi_lp64 -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -pthread -lifcore -limf
	单精度複素数版	-lcmumps -lmumps_common -lpord -lmetis -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_blacs_intelmpi_lp64 -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -pthread -lifcore -limf
	倍精度複素数版	-lzmumps -lmumps_common -lpord -lmetis -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_blacs_intelmpi_lp64 -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -pthread -lifcore -limf
Lis	逐次版	-llis_seq
	OpenMP 版	-llis_omp
	MPI 版	-llis_mpi
	MPI 版+OpenMP 版	-llis_omp_mpi
XBLAS	-lxblas	
METIS	-lmetis	

表 9. モジュール/ヘッダファイル (MPI 版)

ライブラリ名	使用する言語	モジュール/ヘッダファイル
ASL	Fortran	不要
	C	asl.h
ASLSTAT	Fortran	不要
	C	aslstat.h
ASLQUAD	Fortran	aslquad.mod
	C++	aslquad.h
dSFMT	C	dSFMT.h
SFMT	C	SFMT.h
SuperLU	C	slu_sdefs.h (単精度実数版) slu_ddefs.h (倍精度実数版) slu_cdefs.h (単精度複素数版) slu_zdefs.h (倍精度複素数版)
MUMPS	Fortran	smumps_struc.h (単精度実数版) dmumps_struc.h (倍精度実数版) cmumps_struc.h (単精度複素数版) zmumps_struc.h (倍精度複素数版)
	C	smumps_c.h (単精度実数版) dmumps_c.h (倍精度実数版) cmumps_c.h (単精度複素数版) zmumps_c.h (倍精度複素数版)
Lis	Fortran	lisf.h
	C	lis.h
ARPACK	Fortran	不要
PARPACK	C	不要
XBLAS	Fortran	不要
	C	blas_extended.h
METIS	C	metis.h

■ Intel 製ライブラリ

【機能概要】

表 10 で示したライブラリが利用可能です。

表 10. Intel 製ライブラリの機能概要

ライブラリ名	機能概要
数値演算ライブラリ MKL (Math Kernel Library)	工学、科学、金融向けの数値演算関数を提供する。最適化とマルチスレッド化されたライブラリです。
画像処理ライブラリ IPP (Integrated Performance Primitives)	マルチメディア、データ処理、通信／信号処理などのアプリケーションを作成するための、最適化された基関数から構成されるライブラリです。
マルチスレッドライブラリ TBB (Threading Building Blocks)	アプリケーションをマルチスレッド化する場合に最適な C++テンプレート・ライブラリです。

【ライブラリのリンク方法】

● MKL

以下の Intel Math Kernel Library リンクアドバイザーをご利用ください。Select Intel Product では Intel MKL 11.1 を選択してください。

<http://software.intel.com/en-us/articles/intel-mkl-link-line-advisor>

● IPP, TBB

各ライブラリのマニュアルをご覧ください。

マニュアル

■ NEC NumericFactory

ライブラリのマニュアルを並列コンピュータ上で提供しています。front.isc.tohoku.ac.jp にログインし、以下のディレクトリから閲覧してください。

`/usr/ap/NFMAN200`

■ Intel コンパイラ、Intel 製ライブラリ

コンパイラと各ライブラリのマニュアルを並列コンピュータ上で提供しています。front.isc.tohoku.ac.jp にログインし、以下のディレクトリから閲覧してください。

`/opt/intel/composerxe/Documentation`

## プログラムの実行

コンパイルして作成された実行形式ファイルを実行するには、以下の2つの処理方法があります。通常はバッチ処理を利用します。

### 【バッチ処理】

バッチ処理は、実行の手続きをジョブという単位でジョブ管理システムに登録し、一括に処理します。ジョブ管理システムは **NQS II (Network Queuing System II)** を用意しており、ジョブの操作は **NQS II** のコマンドで行います。通常のプログラム(長時間実行するプログラム、並列実行するプログラム等)はバッチ処理で実行します。

### 【会話型処理】

会話型処理は、コマンドラインでプログラムを実行する形式です。CPU 時間や使用できるメモリサイズに制限がありますので、短時間の演算やデバッグ作業にお使いください。

### ■ バッチ処理

プログラムの実行は、**NQS II** のコマンドを用いて操作します。図2は作業の流れを示しています。まず **NQS II** にプログラムの実行を依頼するため、ジョブの実行手続きを書いたシェルスクリプト(バッチリクエスト)を作成します。作成したファイルを **NQS II** に投入することで、ジョブの実行依頼をします。**NQS II** では並列数やメモリサイズの違いにより複数のジョブクラスを設定しています。プログラムに合わせ適切なジョブクラスを選択し、そのキュー名を指定してバッチリクエストを投入します。バッチリクエストの実行順番が来ると、**NQS II** が自動的にジョブを実行します。

バッチリクエストの投入後は、リクエストの状態確認や、キューの混雑状況の確認、投入済みのリクエストをキャンセルすることが可能です。プログラムが終了するとリクエストはキュー情報から消え、標準出力ファイルと標準エラー出力ファイルが出力されます。

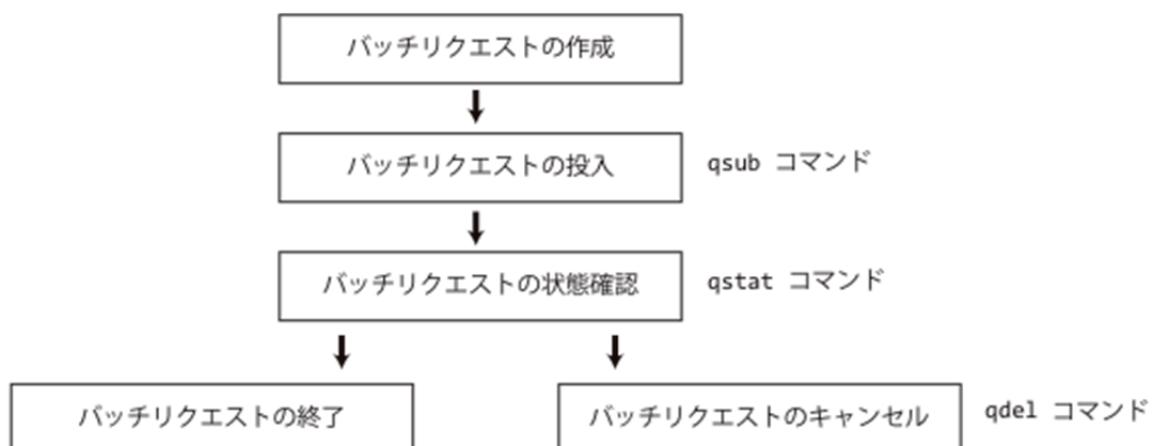


図 2 NQSII によるリクエストの流れ

### 【バッチリクエストの作成】

バッチリクエスト用のシェルスクリプトファイルを作成します。プログラムの実行手続きを、通常のシェルスクリプトと同じ形式で記述します。**cs**h スクリプトと **sh** スクリプト、どちらでも記述できます(以降、解説は **cs**h スクリプトとします)。リクエストファイル名は任意です。

リスト 8 はバッチリクエストファイルの一例です。実行形式ファイル `a.out` を実行する手続きを記述しています。

#### リスト 8. バッチリクエストファイル例

```
# test job-a          コメント行
cd work              作業ディレクトリへ移動
a.out                実行形式ファイル名
```

- ・`#`が先頭の行は、コメント行です。動作には影響しません。
- ・`cd work` で作業ディレクトリ(実行形式ファイルのあるディレクトリ)へ移動します。省略するとホームディレクトリを指定したことになります。
- ・`a.out` はコンパイルして作成した実行形式ファイルです。あらかじめ会話型処理で作成しておきます。自動並列、OpenMP 用オブジェクトも、同じ形式で指定します。

#### ● 作業ディレクトリの指定

NQS II 用の環境変数のひとつとして `PBS_O_WORKDIR` 変数があります。この変数には、`qsub` コマンドを実行した時点のカレントディレクトリが設定されます(リスト 9)。

NQS II の作業ディレクトリは規定値でホームディレクトリとなりますので、通常 `cd` コマンドで実行ファイルのある作業ディレクトリに移動する必要があります。`PBS_O_WORKDIR` 変数を設定することで、ディレクトリの具体名を記述する必要がなくなります。

#### リスト 9. バッチリクエストファイル(環境変数 `PBS_O_WORKDIR` の指定)

```
# test job-a1
cd $PBS_O_WORKDIR      作業ディレクトリを環境変数で指定
a.out
```

#### ● 実行時のデータファイル指定

Fortran で、入出力ファイルを割り当てる環境変数 `FORT $n$`  です。 $n$  が 1~9 の場合には 0 をつけず 1 桁で指定します(リスト 10)。

正しい指定方法:        `setenv FORT2 datafile`

#### リスト 10. バッチリクエストファイル(入出力ファイルの指定例)

```
# test job-b
setenv FORT1 datafile   装置番号 1 に、ファイル datafile を割り当てる
cd $PBS_O_WORKDIR
a.out < infile > outfile 標準入出力ファイルはリダイレクションでも可能
```

## 【バッチリクエストの投入】

プログラムの実行は、作成したバッチリクエストを **NQS II** に投入して行います。投入されたリクエストは、順番が来ると自動的に実行されます。

<p><b>【形式】</b>        <b>qsub オプション バッチリクエストファイル名</b></p>
---

- ・システムからのメッセージがリスト 11 の形式であれば、リクエストは正常に受け付けられています。
- ・リクエスト ID(1234)は一意的なもので、リクエストの状況確認やキャンセル等ジョブの操作の際に必要となります。

### リスト 11. qsub コマンドの実行例

```
front1$ qsub -q n6 job-a
Request 1234.job submitted to queue: n6.
```

### qsub コマンドオプション

-q	リクエストを投入するキュー名を指定します。(必須)
-N	リクエスト名(ジョブ名)を指定します。指定がなければ、バッチリクエストファイル名がリクエスト名になります。
-o	標準出力のファイル名を指定します。指定がなければ、リクエスト投入時のディレクトリに「リクエスト名.o リクエスト ID」のファイル名で出力されます。
-e	標準エラー出力のファイル名を指定します。指定がなければ、リクエスト投入時のディレクトリに「リクエスト名.e リクエスト ID」のファイル名で出力されます。
-j o	標準エラー出力を標準出力と同じファイルへ出力します。
-l	実行打ち切りの <b>CPU</b> 時間を指定します。設定時間は、時:分:秒を <b>hh:mm:ss</b> の形式で指定します。この指定がなければ無制限となります。並列処理で実行するときは、各プロセスの合計 <b>CPU</b> 時間を指定します。
-m b	リクエストの実行が開始したときにメールが送られます。
-m e	リクエストの実行が終了したときにメールが送られます。
-M メールアドレス	リクエストに関するメールの送信先を指定します。指定がなければ、「利用者番号@front.isc.tohoku.ac.jp」宛に送られます。

#### ● キュー名

-q オプションで指定するキュー名の一覧です(表 11)。並列化されていないプログラムは **ns** キューに、自動並列/OpenMP により並列化されているプログラムは **nh**, **n1** どちらかのキューに、MPI により並列化されているプログラムは **nh**, **n1**, **n6**, **n12**, **n24** のいずれかのキューに投入します。プログラムの並列数に応じて適

切なキューにリクエストを投入してください。2 ノード以上を利用した並列実行には MPI の利用が必用です。mg はアプリケーション専用のキューです。

表 11. 並列コンピュータのジョブクラス

キュー名	利用ノード数 (コア数)	時間制限 [時間]	メモリ容量 [GB]
ns	1 (1)	無制限	5
nh	1 (24)	1 (経過時間)	128
n1	1 (24)	無制限	128
n6	6 (144)	//	128×6
n12	12 (288)	//	128×12
n24	24 (576)	//	128×24
mg(アプリケーション専用)	1 (24)	//	128

● qsub コマンドオプションの埋め込み

qsub コマンドに毎回オプションを入力することもできますが、手間を省くためバッチリクエストファイルに指定しておくこともできます。

指定方法は、最初のシェルコマンドより前の行に、#PBS という文字列を先頭に指定します。#PBS の後に空白を一文字以上入れ、指定したいオプションを続けます。一行に複数のオプション指定も可能です。リスト 12 は、2 行目で n6 のキュー名を指定(-q)、3 行目で標準エラー出力を標準出力ファイルにひとまとめにする(-jo)、さらにリクエスト名を reqname とする(-N)を、それぞれ指定しています。

またコマンド列と埋め込みオプションに、同じオプションを指定した場合にはコマンドオプションの方を有効とします。

リスト 12. バッチリクエストファイル(オプションの埋め込み)

```
# test job-a2
#PBS -q n6                埋め込みオプション
#PBS -jo -N reqname      埋め込みオプション (複数)
cd $PBS_O_WORKDIR
a.out
```

【バッチリクエストの状態確認 (1)】

投入したリクエストの状態を表示します。実行待ち状態のときは、待ち順も表示します(リスト 13)。

【形式】	qstat
------	-------



【バッチリクエストの状態確認（2）】

キューの情報を表示します。各キューの件数が表示されますので、サーバの混雑度がわかります(リスト15)。

```
【形式】      qstat -Q
```

リスト 15. -Q オプションの表示例

```
front1$ qstat -Q
[EXECUTION QUEUE] Batch Server Host: job
=====
QueueName      SCH JSVs  ENA STS  PRI  TOT ARR WAI  QUE PRR RUN POR EXT HLD HOL RST SUS MIG STG CHK
-----
ns              0   0 ENA ACT  32   1  0  0  0  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0
nh              0   0 ENA ACT  32   1  0  0  0  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0
n1              0   0 ENA ACT  32   1  0  0  0  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0
n6              0   0 ENA ACT  32   1  0  0  0  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0
n12             0   0 ENA ACT  32   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
n24             0   0 ENA ACT  32   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
mg              0   0 ENA ACT  32   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
p16             1   4 ENA ACT  32   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
p32             1   2 ENA ACT  32   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
p8              1   0 ENA ACT  32   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
s               0   1 ENA ACT  32   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
ss              0   1 ENA ACT  32   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
-----
<TOTAL>                1  0  0  0  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
-----
```

・枠で囲った箇所が、並列コンピュータのキューです。



## ■ ハイブリッド並列プログラムの実行（MPI と自動並列/OpenMP を組み合わせた並列）

ハイブリッド並列プログラム実行時の並列数は「プログラム並列数=MPI 並列数×SMP 並列（自動並列/OpenMP）」になります。MPI プログラムの並列数は `mpirun` コマンドの `-ppn` オプションと `-np` オプションで制御し、自動並列/OpenMP 並列数は `OMP_NUM_THREADS` 環境変数で制御します（リスト 18）。

### リスト 18. ハイブリッド並列プログラム用バッチリクエストファイル例

（MPI 並列数 6、自動並列数/OpenMP 並列数 24 の 144 並列で実行する場合）

```
# test job-a           コメント行
#PBS -q n6             埋め込みオプション（n6 キューに投入）
setenv OMP_NUM_THREADS 24  自動並列/Open MP での並列数
cd work                作業ディレクトリへ移動
mpirun -ppn 1 -np 6 a.out  MPI プログラムの実行
```

## ■ 会話型処理

会話型処理は、短時間の演算やデバッグ作業に使用します。一般的な UNIX を利用する手順と同様で、コマンドラインから実行形式ファイル名を入力し実行する形式です（リスト 19）。表 12 は会話型処理の制限値です。時間制限は CPU 時間の合計ですので、並列実行した場合はそれぞれの CPU 時間の合計値となり、1 時間経過する前にジョブが終了します。

### リスト 19. 会話型処理の例(a.out を実行する)

```
yourhost$ ssh front.isc.tohoku.ac.jp -l 利用者番号      front にログインする
:
front1$ a.out
（プログラム実行中）
front1$
（実行終了）
```

表 12. 会話型処理の制限値

利用ノード数 (最大並列数)	時間制限 [時間]	最大メモリ [GB]
1(6)	1 時間 (CPU 時間合計)	8

## その他

### ■ プログラムの使用メモリサイズ

プログラムを実行した際、使用するメモリサイズをバイト単位で表示します(リスト 20)。あらかじめ、必要とするメモリサイズが判断できます。なお、`allocate` 等で動的に確保するメモリサイズは含まれません。

**【形式】**      `size` 実行形式ファイル名

### リスト 20. 使用メモリサイズの表示

```
front1$ size a.out
1046912 + 140272 + 418928 = 1606112          1,606,112 バイト使用します
```

### ■ バイナリファイルの扱い(Fortran の場合)

センター以外のマシンで作成したバイナリファイルを扱う場合、注意が必要です。センターでは、並列コンピュータ LX 406Re-2 のエンディアン仕様は **Big-Endian** に設定しています。**Little-Endian** のバイナリファイルを扱う場合は、環境変数 `F_UFMTENDIAN` の設定をクリアします。設定はホームディレクトリの `.chsrc` やバッチリクエストファイルに記述します。

#### Little-Endian 仕様のファイルを扱う設定 (csh 形式)

**【形式】**      `unsetenv F_UFMTENDIAN`

### ■ メモリ使用量が 2GB を越える配列を扱う方法

コンパイルオプションに `"-mcmmodel=medium"` または `"-mcmmodel=large"` の指定とともに `"-shared-intel"` を指定してください。

- ・ `-mcmmodel=medium`    コードは IP 相対アドレス指定、データは絶対アドレス指定でアクセスされます
- ・ `-mcmmodel=large`      コードもデータも絶対アドレス指定でアクセスされます

メモリ使用量が 2GB を越える配列を扱う場合のコンパイル方法

【形式】 ifort -mcmmodel=large -shared-intel オプション ソースファイル名

## アプリケーションプログラム

表 13 は、センターでサービスを行うアプリケーションプログラム一覧です。それぞれの詳しい利用方法は、センターの Web ページをご覧ください。

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

表 13. アプリケーションソフトウェアとサービスホスト

アプリケーションソフトウェア		サービスホスト
分子軌道計算ソフトウェア	Gaussian	front.isc.tohoku.ac.jp
反応経路自動探索プログラム	GRRM11	
統合型数値計算ソフトウェア	Mathematica	
汎用構造解析プログラム	Marc/Mentat	
対話型解析ソフトウェア	MATLAB	

## おわりに

ジョブ管理システム NQS II を中心に利用方法の解説と、ライブラリの紹介をしました。研究の強力なツールとしてセンターのシステムをご活用いただければ幸いです。ご不明な点、ご質問等ございましたら、お気軽にセンターまでお問い合わせください。

## [大規模科学計算システム]

## アプリケーションサービスの紹介

情報部情報基盤課 共同利用支援係

## はじめに

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

表 1. アプリケーションソフトウェアとサービスホスト

アプリケーションソフトウェア		サービスホスト
分子軌道計算ソフトウェア	Gaussian	front.isc.tohoku.ac.jp
反応経路自動探索プログラム	GRRM11	
統合型数値計算ソフトウェア	Mathematica	
汎用構造解析プログラム	Marc/Mentat	
対話型解析ソフトウェア	MATLAB	

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

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

本稿中の内容は 2014 年 4 月現在のものですので、アプリケーションソフトウェアのバージョンアップや利用方法の最新情報については、Web ページを随時ご確認ください。

## ご利用の前に

## ■ リモートログイン

スーパーコンピュータ、並列コンピュータへリモートログインする手順です。SSH(Secure SHell) 接続を行います。アプリケーションを利用する際は、並列コンピュータにログインします。GUI アプリケーションを利用する場合は、28 ページの **GUI アプリケーションを利用する方法** を合わせてご参照ください。

表 2. 計算機システムと日本語環境

システム	ホスト名	OS	日本語環境
並列コンピュータ LX 406Re-2	front.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ください。

### 【UNIX, Linuxからのログイン】

「ターミナル」、「端末」、「terminal」などの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。

#### リスト 1. 並列コンピュータへのログイン例

```
(yourhost)$ ssh front.isc.tohoku.ac.jp -l 利用者番号

The authenticity of host 'front.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 'front.isc.tohoku.ac.jp,xx.xx.xx.xx' (RSA) to
the list of known hosts.
利用者番号@front.isc.tohoku.ac.jp's password: パスワード ※2
Last login: Mon Apr  1 09:26:11 2012 from aaa.isc.tohoku.ac.jp

[利用者番号@front1 ~]$
```

※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】

#### ● 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。2014年4月現在の最新版は4.82です。ダウンロード後インストール作業を行ってください。

Tera Term ダウンロードページ:

<http://sourceforge.jp/projects/ttssh2/>

### ● サーバへの接続

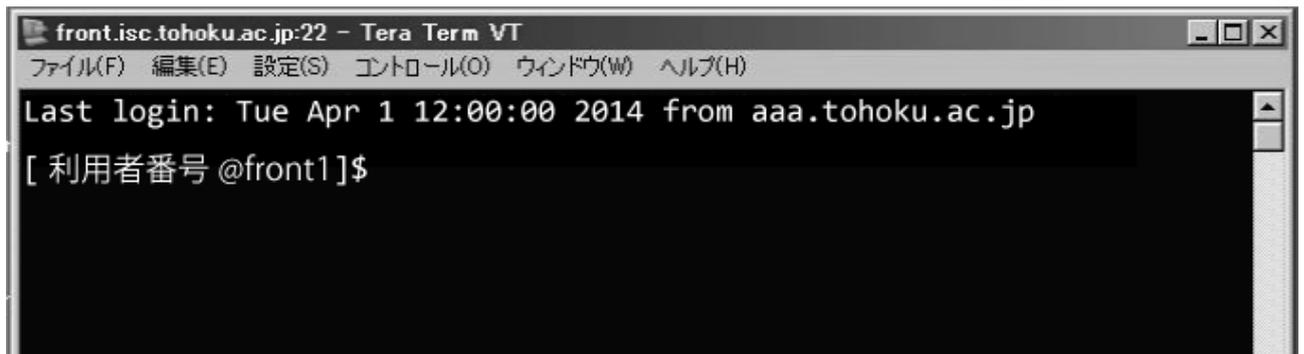
インストールされた Tera Term を起動すると「新しい接続」ダイアログが表示されます。以下の様に入力・設定し、「OK」ボタンを押してください。初めて接続する場合、「セキュリティ警告」のウィンドウが表示されます。表示されているホスト名が正しいことを確認し、「続行」ボタンを押してください。

ホスト(T):	front.isc.tohoku.ac.jp
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」ボタンを押してください。

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。



・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)」で設定変更してください。

### 【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。

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

## 【ファイル転送】

### ● コマンドラインでのファイル転送

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

### ● アプリケーションを利用したファイル転送

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

### ● 入出力端末を利用したファイル転送

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

## ■ GUI アプリケーションを利用する方法

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

## 【UNIX, Linux からの利用】

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

### リスト 2. Matlab を起動する場合

```
(yourhost) $ ssh -X front.isc.tohoku.ac.jp -l 利用者番号 ※1
```

```
利用者番号@front.isc.tohoku.ac.jp's password: パスワード
```

```
[利用者番号@front1 ~]$ matlab
```

※1 大文字の“X”です。

## 【Windows からの利用】

### ● 商用のアプリケーションを利用する場合

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

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

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

### ● Windows に仮想的な Linux をインストールする場合

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

「VirtualBox」は以下のページからダウンロードできます。「VirtualBox platform packages」(現在使用している OS に合ったもの)と「VirtualBox Extension Pack」の両方をダウンロードし、インストールを行ってください。インストール方法の詳細はマニュアルをご参照ください。2014 年 4 月現在の最新版は 4.3.10 です。

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

### VirtualBox 4.3.10 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 7.4.0 (2014.02.08 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ください。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ください。

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 7.4.0)



#### 【OS X からの利用】

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

## アプリケーションソフトウェア

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

### 非経験的分子軌道計算プログラム Gaussian09

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

本センターの Gaussian には、以下のような特長があります。

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

#### ■ サービスホスト・バージョン

front.isc.tohoku.ac.jp ・ Gaussian09 D.01

#### ■ 利用方法

以下は Gaussian 利用方法の概要です。

#### 【実行コマンド】

Gaussian のインプットファイルは、拡張子を **.com** とします。(例: e2-01.com)

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

front.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。ジョブはアプリケーション専用の mg キュー (CPU 時間無制限、最大並列数 24、最大メモリ 128GB) に投入します。

### リスト 3. e2-01.com を解析するコマンド例

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

```
[front1 ~]$ subg09 mg e2-01
```

### 【12 および 24 並列実行の指定】

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

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

### 【使用メモリ量の指定】

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

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

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

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

```
Formaldehyde Single Point
```

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

```
[front1 ~]$ subg09 mg e2-01
```

## 【実行結果の確認】

計算が終了すると、インプットファイル名に拡張子 `.log` がつけられた結果ファイル (例: `e2-01.log`) が作成されます。計算結果をはじめ、CPU 時間などの計算機使用量に関する情報もここに含まれます。正常終了ならば、このファイルの末尾に「Normal termination of Gaussian 09.」というメッセージが出力されます。ファイルの末尾を表示する `tail` コマンドで確認できます。

### リスト 5. 実行結果の確認

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

## 【チェックポイントファイル】

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

## ■ マニュアル

本センター本館 1 階 利用相談室に以下の資料を備えてあります。

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

## Gaussian プリポストシステム **GaussView**

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

## ■ バージョン

5.0.9

## ■ お申し込み

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

利用条件

- ・東北大学内の方

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

## ■ 利用方法

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

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

並列コンピュータ [front.isc.tohoku.ac.jp](http://front.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 [front.isc.tohoku.ac.jp](http://front.isc.tohoku.ac.jp) に転送します。
3. [front.isc.tohoku.ac.jp](http://front.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)に変換後転送してください。

## 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

front.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](mailto: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, (H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>, and Alanine Dipeptide., *Chem. Phys. Lett.*, 2005, 404, 95-99.

## ● SCW:

S. Maeda, K. Ohno, Conversion Pathways between a Fullerene and a Ring among C<sub>20</sub> Clusters by a Sphere Contracting Walk Method: Remarkable Difference in Local Potential Energy Landscapes around the Fullerene and the Ring., *J. Chem. Phys.*, 2006, 124, 174306/1-7.

## ● LADD, NLowest, NRUN:

S. Maeda, K. Ohno, Structures of Water Octamers (H<sub>2</sub>O)<sub>8</sub>: Exploration on Ab Initio Potential Energy Surfaces by the Scaled Hypersphere Search Method., *J. Phys. Chem. A*, 2007, 111, 4527-4534.

## ● Frozen Atom:

S. Maeda, K. Ohno, Lowest Transition State for the Chirality-Determining Step in Ru{(R)-BINAP}-Catalyzed Asymmetric Hydrogenation of Methyl-3-Oxobutanoate., *J. Am. Chem. Soc.*, 2008, 130, 17228-17229.

## ● External Atom:

S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, An Automated and Systematic Transition Structure Explorer in Large Flexible Molecular Systems Based on Combined Global Reaction Route Mapping and Microiteration Methods., *J. Chem. Theory Comput.*, 2009, 5, 2734-2743.

## ● OptX:

S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, Updated Branching Plane for Finding Conical Intersections without Coupling Derivative Vectors., *J. Chem. Theory Comput.*, 2010, 6, 1538-1545.

## ● ModelF:

S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, Automated Global Mapping of Minimum Energy Points on Seams of Crossing by the Anharmonic Downward Distortion Following Method: A Case Study on H<sub>2</sub>CO., *J. Phys. Chem. A*, 2009, 113, 1704-1710.; S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, Exploring Multiple Potential Energy Surfaces: Photochemistry of Small Carbonyl Compounds, *Adv. Phys. Chem.* 2012, 2012, 268124.

## ■ 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

front.isc.tohoku.ac.jp ・ MSC.Marc /Mentat 2013

### ■ 利用方法

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

### 【run\_marc コマンドでの解析実行】

#### ● 実行コマンド

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

**front.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。ジョブクラスの指定は必要ありません。自動的にアプリケーション用の **mg** キュー (CPU 時間無制限、最大メモリ 128GB) に投入されます。

リスト 6. **job-name.dat** を解析するコマンド例

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

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

表 3. run\_marc の入力オプション

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

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

● 解析結果

バッチリクエストが終了すると、主に以下のようなファイルが作成されます。

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

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

● 終了番号 (exit number)

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

リスト 7. 終了番号を確認する

(tail コマンドで *job-name.out* の末尾を表示)

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

*****

MSC.Marc Exit number 3004

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

表 4. 終了番号

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

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

### 【プリポストプロセッサ Mentat からの解析実行】

#### ● Mentat の起動

Mentat の起動には、並列コンピュータに接続する際に X forwarding の設定を行う必要があります。Mentat2013 では新 GUI を採用しています。従来の Classic GUI は `mentat.classic` というコマンドでご利用できます。

#### リスト 8. mentat の起動方法

```
yourhost$ ssh -X front.isc.tohoku.ac.jp -l 利用者番号
:
[front1 ~]$ mentat                (新 GUI 版)

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

#### ● 解析実行（新 GUI 版）

Mentat 上でモデルを作成し、解析のための設定を行った後、

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

という操作をすることで、バッチリクエストとして解析を実行します。

(バッチリクエストは **mg(CPU 時間無制限、最大メモリ 128GB)** 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 [front.isc.tohoku.ac.jp](http://front.isc.tohoku.ac.jp) の `/usr/ap/MSC2013/marc2013/demo/` にあります。コピーしてご利用ください。

### 【Mentat】

マニュアル「ユーザガイド」に掲載されている例題ファイルが、並列コンピュータ [front.isc.tohoku.ac.jp](http://front.isc.tohoku.ac.jp) の `/usr/ap/MSC2013/mentat2013/examples/marc_ug/` にあります。コピーしてご利用ください。

## ■ マニュアル

PDF 形式のマニュアルを提供しています。

各マニュアルは、並列コンピュータ ([front.isc.tohoku.ac.jp](http://front.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` コマンドでご覧ください。

`/usr/ap/MSC2013/mentat2013/doc/`

<code>release_guide.pdf</code>	: Release Guide (2013 英語版)
<code>release_guide.pdf</code>	: What's new (2013 英語版)
<code>mt_help_ref.pdf</code>	: MSC.Marc Mentat Help Reference (2013 英語版)

英文マニュアル `/usr/ap/MSC2013/mentat2013/doc/(vola~vole)`

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

和文マニュアル (MSC.Marc2003 版) `/usr/ap/MSC2013/mentat2013/doc/japanese/`

<code>vola.pdf</code>	: A 編 理論およびユーザー情報
<code>volb.pdf</code>	: B 編 要素ライブラリ
<code>volc.pdf</code>	: C 編 プログラム入力
<code>vold.pdf</code>	: D 編 ユーザサブルーチンおよび特別ルーチン
<code>vole.pdf</code>	: E 編 例題集
<code>new_features.pdf</code>	: 新機能ガイド
<code>marc_ug.pdf</code>	: ユーザガイド
<code>mt_help_ref.pdf</code>	: Mentat 2003 ヘルプリファレンス
<code>xsec_adden.pdf</code>	: 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.Patran2013 Windows 版, Linux 版

### ■ お申し込み

利用条件(以下の条件をすべて満たしている方)

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

利用ご希望の方は、共同利用支援係までお問い合わせください。

## 数式処理プログラム Mathematica

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

### ■ サービスホスト・バージョン

front.isc.tohoku.ac.jp ・ version 9.0.1

### ■ 利用方法

#### 【Mathematica の起動】

##### ● GUI 版

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

## リスト 9. GUI 版の起動方法

```
yourhost$ ssh -X front.isc.tohoku.ac.jp -l 利用者番号
:
[front1 ~]$ mathematica
```

## リスト 10. テキスト版の起動方法

```
yourhost$ ssh front.isc.tohoku.ac.jp -l 利用者番号
:
[front1 ~]$ math
```

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

## ■ マニュアル・参考資料

## 参考資料

本センター本館1階 利用相談室に、以下の資料を備えてあります。

スティーブンウルフラム **Mathematica** ブック (日本語版) : トッパン

**Mathematica** 方法と応用 : J.W. グレイ, サイエンティスト社

**Mathematica** プログラミング技法 : R. メーダー, トッパン

入門 **Mathematica** : 日本 **Mathematica** ユーザー会, 東京電機大学出版局

はやわかり **Mathematica** : 榊原進, 共立出版

もっと **Mathematica** で数学を : 吉田孝之, 培風館

## 科学技術計算言語 **MATLAB**

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

## ■ サービスホスト・バージョン

front.isc.tohoku.ac.jp ・ R2013b (8.2.0)

## ■ Toolbox

センターで導入している **Toolbox** です。

**MATLAB**

Simulink  
Curve Fitting Toolbox  
Communications System Toolbox  
MATLAB Compiler  
Control System Toolbox  
DSP System Toolbox  
Fuzzy Logic Toolbox  
System Identification Toolbox  
Image Processing Toolbox  
MATLAB Coder  
Model Predictive Control Toolbox  
Neural Network Toolbox  
Optimization Toolbox  
Partial Differential Equation Toolbox  
Fixed-Point Toolbox  
Robust Control Toolbox  
Simulink Coder  
Simulink Control Design  
Signal Processing Toolbox  
Symbolic Math Toolbox  
Simulink Design Optimization  
Statistics Toolbox  
Simulink Verification and Validation  
Wavelet Toolbox

## ■ 利用方法

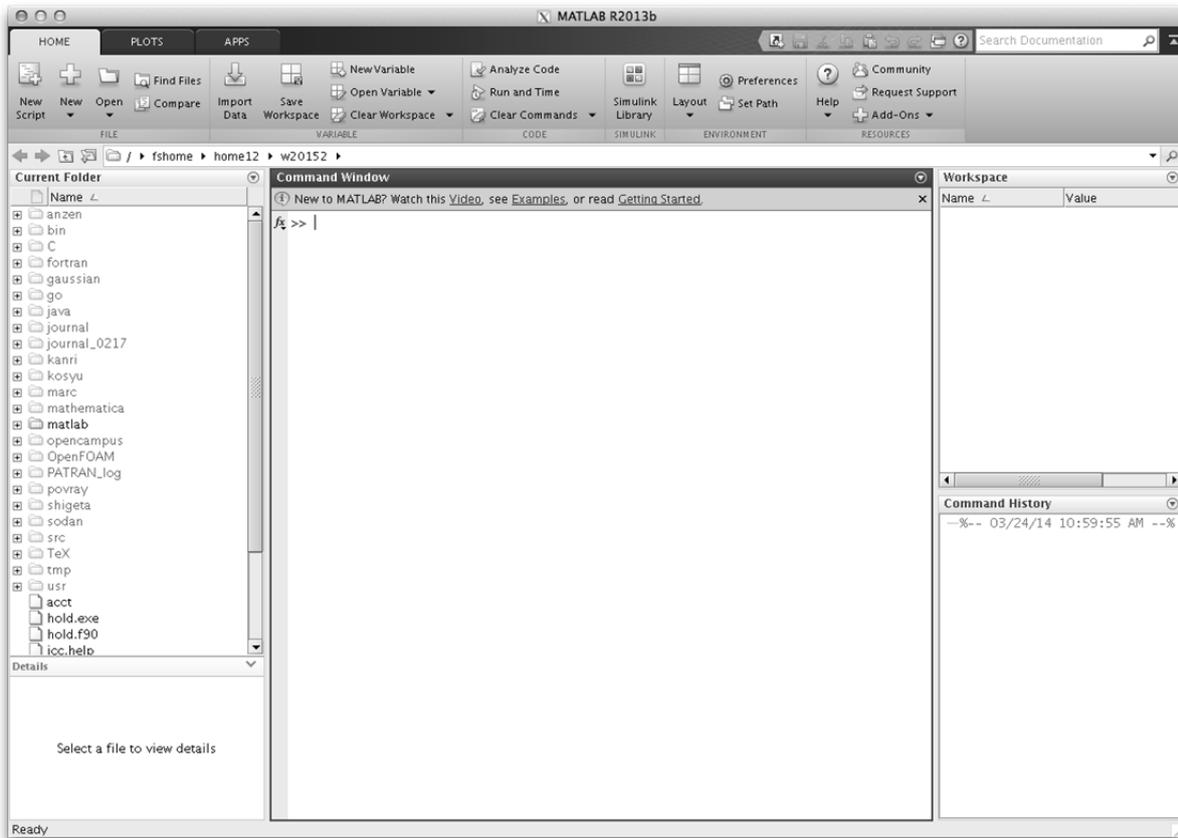
### 【MATLAB の起動】

#### ● GUI 版

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

### リスト 11. GUI 版 MATLAB の起動

```
yourhost$ ssh -X front.isc.tohoku.ac.jp -l 利用者番号
:
[front1 ~]$ matlab
```



### ● テキスト版

GUI を使用せず、コマンドライン上で起動することもできます。

### リスト 12. テキスト版 MATLAB の起動

```
(yourhost)$ ssh front.isc.tohoku.ac.jp -l 利用者番号
:
[front1 ~]$ 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、24 並列までの処理が可能です。最大メモリも 128GB まで利用可能です。大規模な計算にご利用ください。ただし、バッチ処理ではグラフ描画など画面出力のあるプログラムや、対話的な処理は行えません。

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

#### リスト 13. バッチジョブファイル

```
[front1 ~] cat job-m ←ジョブファイルの中身を表示

#PBS -q mg ←投入キューを指定
cd $PBS_O_WORKDIR
matlab -nojvm -nosplash -nodesktop -nodisplay -r test
```

以下のコマンドでジョブを投入します。

#### リスト 14. ジョブの投入方法

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

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

### ■ サンプルプログラム

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

### ■ マニュアル・参考資料

#### 【マニュアル】

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

[http://www.mathworks.co.jp/help/ja\\_JP/techdoc/index.html](http://www.mathworks.co.jp/help/ja_JP/techdoc/index.html)

**【参考資料】**

本センター本館1階 利用相談室に、以下の資料を備えてあります。

**MATLAB** による制御理論の基礎：野波健蔵，東京電機大学出版局

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

だれでもわかる **MATLAB**：池原雅章，培風館

はやわかり **MATLAB** 第2版：芦野隆一，共立出版

最新 **MATLAB** ハンドブック第3版：小林一行，秀和システム

**MATLAB** グラフィックス集：小国 力，朝倉書店

**MATLAB** と利用の実際：小国 力，サイエンス社

**MATLAB** の総合応用：高谷邦夫，森北出版

最新使える！**MATLAB**：青山貴伸，講談社

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

**MATLAB** による画像&映像信号処理：村松正吾，CQ 出版

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

高機能数値計算・可視化機能ソフト **MATLAB** の基本的な使い方：陳国曜 他  
(広報誌 SENAC Vol.46 No.3 (2013-7))

## [大規模科学計算システム]

### 三次元可視化システムの紹介

情報部情報基盤課 共同研究支援係 共同利用支援係  
サイバーサイエンスセンター スーパーコンピューティング研究部

#### はじめに

三次元可視化システムは、3D 対応 50 インチ LED モニタを 12 面配置した大画面ディスプレイと、演算結果の可視化処理およびディスプレイへの描画を行う可視化サーバから構成されます。スーパーコンピュータ SX-9 および並列コンピュータ LX 406Re-2 で得られたデータの可視化にご利用いただけます。またテレビ会議システムを用いて、遠隔地と可視化結果を共有したテレビ会議も可能です。

#### 可視化装置

##### ■ ディスプレイ

2D/3D 表示に対応した、フル HD (1,920×1,080 画素) 50 インチ LED モニタを 12 面設置し、最大 7,680×3,240 画素の高精細表示が可能です。

##### ■ 可視化サーバ

1 ノードにインテル Xeon プロセッサ E5-2670 を 2 基、メモリを 128GB、グラフィックボード Quadro K5000 を搭載し、全 4 ノードで構成されます。

##### ■ 三次元可視化ソフトウェア

AVS/Express MPE を採用し、複数画面での 3D 立体視表示が可能です。

#### テレビ会議システム

Polycom HDX8000-1080 を採用し、フルハイビジョン (1080p) での映像接続が可能です。また、入出力インターフェースを利用してユーザの PC 画面、ビデオ映像を送信することができます。最大 3 地点からの接続が可能です。

#### 利用方法

##### ■ 設置場所

サイバーサイエンスセンター1F 可視化機器室

##### ■ 利用対象者

センターの利用者番号をお持ちの方

##### ■ 利用予約方法

電話・メールによる事前連絡

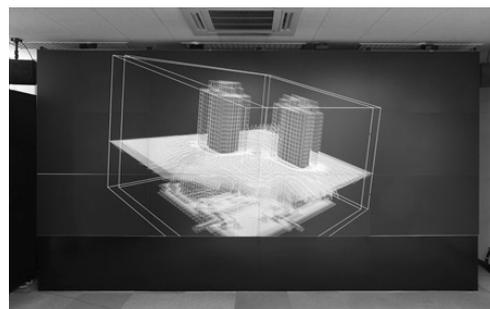
TEL: 022-795-6251 e-mail: sys-sec@isc.tohoku.ac.jp

##### ■ 利用負担金

利用予約時間 1 時間につき 2,500 円

##### ■ 利用マニュアル

可視化機器室にて閲覧可能



[お知らせ]

平成 26 年度サイバーサイエンスセンター講習会案内

	名 称	開催日程	講師	内容概略
1	UNIX 入門	5 月 26 日(月) 13:00-16:10	スーパーコンピューティング研究部	・UNIX システムの基本的な使い方 ・エディタの使い方 ・プログラムの実行方法
2	大規模科学計算システムの紹介と利用法	5 月 27 日(火) 13:00-16:00	共同利用支援係 共同研究支援係	・システムの紹介 ・大規模科学計算システムの利用法
3	大規模科学計算システムにおける高速化技法の基礎	5 月 28 日(水) 13:00-17:00	スーパーコンピューティング研究部	・実習によるプログラムの高速化を目的とした計算サーバの最適化および並列化の基礎
4	並列プログラミングの概要と Open MP プログラミング入門	5 月 29 日(木) 13:00-17:00	スーパーコンピューティング研究部	・Open MP による並列プログラミングの基礎 ・利用法
5	MPI プログラミング入門	5 月 30 日(金) 10:00-17:00	スーパーコンピューティング研究部	・MPI による並列プログラミングの基礎 ・利用法
6	可視化システムの利用法	6 月 3 日(火) 13:00-17:00	メーカー担当者	・可視化システムの基本的な使い方
7	MATLAB 入門	6 月 6 日(金) 13:00-17:00	陳(秋田県立大)	・MATLAB の基本的な使い方
8	ネットワークとセキュリティ入門	8 月 6 日(水) 13:30-16:00	水木(ネットワーク研究部)	・ネットワークの基本的な仕組み ・ネットワークの危険性と安全対策
9	Gaussian 入門	8 月 8 日(金) 13:00-17:00	岸本(理)	・Gaussian の基本的な使い方
10	Mathematica 入門	9 月 3 日(水) 13:00-17:00	横井(情科)	・Mathematica の基本的な使い方
11	Marc 入門	9 月 4 日(木) 13:00-17:00	内藤(工)	・Marc の基本的な使い方
12	UNIX 入門	9 月開催予定	共同利用支援係 共同研究支援係	・UNIX システムの基本的な使い方 ・エディタの使い方 ・プログラムの実行方法
13	大規模科学計算システムの利用法	9 月開催予定	スーパーコンピューティング研究部	・大規模科学計算システム(スーパーコンピュータ、ストレージ、計算サーバを含む)の紹介と利用法
14	計算サーバにおける高速化技法の基礎	9 月開催予定	スーパーコンピューティング研究部	・実習によるプログラムの高速化を目的とした計算サーバの最適化および並列化の基礎
15	スーパーコンピュータにおける高速化技法の基礎	9 月開催予定	スーパーコンピューティング研究部	・実習によるプログラムの高速化を目的としたスーパーコンピュータの最適化および並列化の基礎
16	並列プログラミングの概要と Open MP プログラミング入門	9 月開催予定	スーパーコンピューティング研究部	・Open MP による並列プログラミングの基礎 ・利用法
17	MPI プログラミング入門	9 月開催予定	スーパーコンピューティング研究部	・MPI による並列プログラミングの基礎 ・利用法
18	可視化システムの利用法	9 月開催予定	メーカー担当者	・可視化システムの基本的な使い方

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。

・7月～8月に新スーパーコンピュータシステムの紹介と利用法の臨時講習会を数回開催する予定でおります。決まり次第ウェブ、メールマガジン等でお知らせいたします。

## [お知らせ]

## 平成 26 年度(4 月～9 月)の負担金制度について

平成26年度(4月～9月)の負担金については、大規模科学計算システムの更新に伴い、表1(大学・学術利用)、表2(民間機関利用)のとおり変更になります。なお表3(大学・学術利用)、表4(民間機関利用)の利用負担金割引制度については、従来と異なりスーパーコンピュータ(SX-9)の演算負担経費のみが対象となりますのでご注意ください。並列コンピュータの演算負担経費は割引制度の対象外です。

また、電気料金が高騰した場合には、年度途中において負担経費を値上げする場合があります。

表1 基本利用負担金【大学・学術利用】

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 0.4 円
		会話型処理	演算時間 1 秒につき 2 円
	並列 コンピュータ	利用ノード数 1～6 まで	経過時間 1 秒につき 0.04 円
		利用ノード数 7～12 まで	経過時間 1 秒につき 0.07 円
		利用ノード数 13～18 まで	経過時間 1 秒につき 0.1 円
	利用ノード数 19～24 まで	経過時間 1 秒につき 0.13 円	
ファイル 負担経費	1TB まで無料、追加容量 1TB につき年額		3,000 円
出力 負担経費	大判プリンタによるカラープリンタ用紙	1 枚につき	600 円
可視化 負担経費	1 時間の利用につき		2,500 円

備考：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。

表2 基本利用負担金【民間機関利用】

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 0.4 円
		会話型処理	演算時間 1 秒につき 2 円
	並列 コンピュータ	利用ノード数 1~6 まで	経過時間 1 秒につき 0.12 円
		利用ノード数 7~12 まで	経過時間 1 秒につき 0.21 円
		利用ノード数 13~18 まで	経過時間 1 秒につき 0.3 円
	利用ノード数 19~24 まで	経過時間 1 秒につき 0.39 円	
ファイル 負担経費	1TB まで無料、追加容量 1TB につき年額		3,000 円
出力 負担経費	大判プリンタによるカラープリンタ用紙	1 枚につき	600 円
可視化 負担経費	1 時間の利用につき		2,500 円

備考：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。

表3 利用負担金割引制度【大学・学術利用】

演算負担経費	負 担 額
10 万円を超えない場合	基本利用負担金と同じ
10 万円を超え 100 万円を超えない場合	10 万円
100 万円を超え 500 万円を超えない場合	(100 万円を超える利用額の 1 / 2) +10 万円
500 万円を超え 1,000 万円を超えない場合	(500 万円を超える利用額の 1 / 3) +210 万円
1,000 万円を超え 2,000 万円を超えない場合	(1,000 万円を超える利用額の 1 / 4) +375 万円
2,000 万円を超える場合	(2,000 万円を超える利用額の 1 / 5) +625 万円

備考：1 利用負担金割引制度の対象は、スーパーコンピュータの演算負担経費が 10 万円を超える場合にのみ適用されます。並列コンピュータの演算負担経費、ファイル負担経費、出力負担経費及び可視化負担経費は対象になりません。

- 2 支払責任者ごとの累計利用額に応じて負担額が減額されます。
- 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 7 月と 10 月に発行されますが、割引額は半年の利用額の累計に対して適用されます。

表 4 利用負担金割引制度【民間機関利用】

演算負担経費	負 担 額
10 万円を超えない場合	基本利用負担金と同じ
10 万円を超える場合	(10 万円を超える利用額の 1 / 2) +10 万円

- 備考：1 利用負担金割引制度の対象は、スーパーコンピュータの演算負担経費が 10 万円を超える場合にのみ適用されます。並列コンピュータの演算負担経費、ファイル負担経費、出力負担経費及び可視化負担経費は対象になりません。
- 2 支払責任者ごとの累計利用額に応じて負担額が減額されます。
- 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 7 月と 10 月に発行されますが、割引額は半年の利用額の累計に対して適用されます。

[お知らせ]

## 新棟建設工事期間中の出入口等の変更について

サイバーサイエンスセンターでは、本年 1 月より新棟建設工事行っております。これに伴い 1 月 22 日からセンターの出入口、駐車・駐輪スペース、入館可能時間等が変更となりました。この間皆さまには、ご不便をおかけしますがご理解とご協力のほどよろしくお願い申し上げます。

工事期間 : 2014 年 1 月 22 日 (水) ~ 8 月末日 (予定)

出入口 : 北側の出入口をご利用ください。

解錠時間 8:30~17:30

(大判プリンタ等は従来どおり平日 21:00 まで利用可能ですが、17:30 以降利用される方は、出入口にあるインターホンで守衛室までご連絡ください。)

臨時駐車場\*: 本館ゲート附近・新キャンパス内 (電子・マテリアル系仮設駐車場)

\*駐車スペースが限られております。なるべく一般交通機関をご利用くださるようご協力をお願いいたします。

駐輪場 : サイバーサイエンスセンター本館北側に駐輪場 (バイク・自転車) を設置



## [共同研究成果]

## グリーン関数法を用いた有機分子における

## 紫外光電子スペクトルの理論計算

山崎 馨, 河野 裕彦

東北大学 大学院理学研究科 化学専攻

有機分子は、適切な置換基を導入することによってその光・電子物性を幅広く制御できるため、次世代の光・電子デバイスとしての利用が提案されており、その応用研究が進められている。一般に、有機デバイスの性能など有機分子の性質はその分子軌道の形状やエネルギーによって支配されている。分子軌道のエネルギー準位の実験的な決定には紫外光電子分光法（UPS）が有用であるが、その帰属と解釈には量子力学に基づく理論計算を必要とする。そこで本稿では、有機分子の UPS スペクトルを帰属するために有用な量子力学的手法である一電子グリーン関数法について、その第 0 次近似となる Koopmans の定理から電子相関を考慮した高精度な手法である Outer valance Green's function 法まで、実際の計算例も交えながら概説する。

## 1. 序論：有機分子の光・電子物性と紫外光電子スペクトル

有機分子は、適切な置換基を導入することによってその光・電子物性を幅広く制御できるため<sup>1,2</sup>、色素増感型太陽電池や有機 EL ディスプレー等の光・電子デバイスへの応用が積極的に進められている<sup>4,5</sup>。有機電子デバイスの動作においては有機分子・電極間で電子の受け渡し（酸化・還元）がおきる。有機分子が電子を電極に渡す（酸化される）場合には、電子が詰まっている最高エネルギー準位（最高被占有軌道 HOMO）から電子が受け渡される。また、有機分子が電子を受け取る（還元される）場合には電子が詰まっていない最低エネルギー準位（最低空軌道 LUMO）に電子が収容される。このため、これらの酸化と還元反応は、それぞれ、分子の HOMO と電極の伝導帯及び分子の LUMO と電極の価電子帯の相対的なエネルギーが小さくなると起こりやすくなる。このため、デバイスに使用する機能性有機分子の HOMO や LUMO 等のエネルギー準位を実験的・理論的に決定することは、優れた有機デバイスを作成するための第一歩となる。

有機分子の占有エネルギー準位を実験的に決定する有用な方法の 1 つが紫外光電子分光法（UPS）である。UPS では、図 2 に示す様に分子にエネルギー  $\hbar\omega$  の紫外光を照射すると、その紫外光と  $i$  番目のエネルギー準位のイオン化エネルギー  $I_i$  の差に相当する電子が

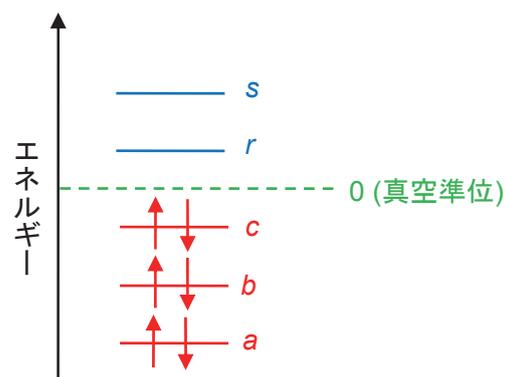


図 1：有機分子中のエネルギー準位の模式図。電子のイオン化エネルギーが 0 になる真空準位をエネルギーの原点とした。Koopmans の定理によれば、占有準位  $c$  から一電子を取り除くのに必要なイオン化エネルギー  $I_c$  は占有準位  $c$  の軌道エネルギー  $\varepsilon_c$  の -1 倍と近似できる。

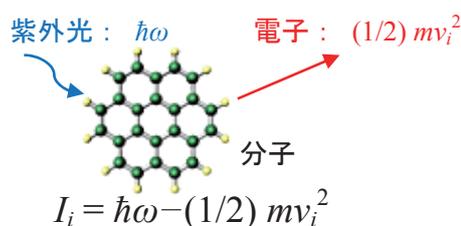


図 2：UPS の原理。振動数  $\omega$  の紫外光を分子に入射すると速度  $v_i$  の電子が放出される。このときの光子と電子のエネルギー差がイオン化エネルギー  $I_i$  である。

放出されることを利用して  $I_i$  を求める。しかし、後述するように、有機デバイスに利用されるような比較的大型の有機分子における UPS では近接するエネルギーを持つ複数ピークが重なり合っただけでバンド状のスペクトルを形成する。このため、実験のみではそれぞれのピークがどのエネルギー準位に由来するのかを帰属するのは困難な場合が多く、量子力学に基づく理論計算が必須となる。それでは、有機分子の UPS スペクトルを理論的に予測・帰属するためにはどのような手法を用いれば良いのであろうか。本稿では、分子のエネルギー準位とイオン化エネルギーを結びつける基本定理である Koopmans の定理を解説した後、有機分子の UPS スペクトルを比較的低い計算コストで定量的に再現できる一電子グリーン関数法の基礎について解説する。そして、実際の有機分子の計算例をとって、一電子グリーン関数法の有用性について述べる。

## 2. Hartree-Fock 方程式と Koopmans の定理

本章では、 $N$  電子を持つ原子・分子のエネルギー  $E_N$  を量子力学に基づいて計算する最も基本的な方程式である Hartree-Fock (HF) 方程式及び HF 方程式を解いて得られるエネルギー準位 (軌道エネルギー)  $\varepsilon_i$  とイオン化エネルギー  $I_i$  の関係を表す Koopmans の定理について概説する。

### 2.1 Hartree-Fock 方程式: 原子・分子の電子状態の基礎方程式<sup>6-8</sup>

量子化学において分子のエネルギーや電子の分布を計算する際には、分子を構成する  $\nu$  個の原子核は空間上に固定されており (Born-Oppenheimer 近似)、その周りを  $N$  個の電子が一定のエネルギー  $E_{N,n}$  を持って束縛運動しているとする描像をとる。分子内の電子は量子力学に従うため、分子内の電子がどのように分布しているかを表す電子状態のエネルギー  $E_n$  は飛び飛びの離散的な値をとる。この電子状態を記述する波動関数  $|\Psi_n\rangle$  は Schrödinger 方程式

$$\hat{H} |\Psi_n\rangle = E_{N,n} |\Psi_n\rangle \quad (1)$$

に従う。ここで  $\hat{H}$  は、電子が持つ全エネルギーを表すハミルトニアン演算子 (関数) であり、

$$\hat{H} = -\sum_i^N \frac{1}{2} \Delta_i - \sum_{i,\alpha}^{N,\nu} \frac{Z_\alpha}{r_{i\alpha}} + \sum_{i>j} \frac{1}{r_{ij}} \quad (2)$$

と書ける。この(2)式の第 1 項は電子のもつ運動エネルギー、第 2 項は原子核と電子の間に働くクーロンポテンシャル、第 3 項は電子の間に働くクーロンポテンシャルを表す。 $Z_\alpha$  は  $\alpha$  番目の原子核が持つ電荷、 $r_{i\alpha}$  は  $\alpha$  番目の原子核と  $i$  番目の電子との距離、 $r_{ij}$  は  $i$  番目と  $j$  番目の電子の距離を表す。なおここでは  $e = \hbar = m_e = 1$  なる原子単位系を用いた。(1) 式を厳密に解くことができれば、その固有値や波動関数から正確な物理量が得られるが、そのような分子はまだごく一部に限られている。<sup>9</sup> このため、原子や分子の持つエネルギーを求めるためには近似的な解法が必要であり、その中で最も単純で基本的な方程式が Hartree-Fock (HF) 方程式である。HF 方程式は次の 3 つの仮定に基づいて導出される：

- 各電子の確率的な空間分布を特徴付ける 1 電子波動関数を分子軌道  $\phi_i$  ( $i = 1, 2, \dots, a, b, c, \dots, N, \dots, r, s, \dots$ ) といい、それぞれ軌道エネルギー  $\varepsilon_i$  ( $\varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \dots$ ) を持つ。この時、 $\phi_i$  は規格直交化されるように選ぶ。
- 各電子がそれぞれ独立に運動しているとして、一つの電子とその周りの  $N-1$  個の電子との相互作用を平均的に扱う。分子の電子基底状態  $|\Psi_0\rangle$  はエネルギーの低い分子軌道から順に  $N$  個の電子を詰めていくことで構築できる最も低いエネルギーを持つ電子配置  $\psi_0$  (図 2) のみで記述できる。

- $\psi_0$  は2つの電子の自由度 (空間位置とスピン) を入れ替えたときに符号が反転するように決められる (Pauli の禁制原理).

以上の仮定を満たすように基底状態の軌道エネルギー (エネルギー準位)  $\varepsilon_i$  を求める次の HF 方程式を変分法によって決めると,

$$\hat{F} |\phi_i\rangle = \varepsilon_i |\phi_i\rangle \quad (3)$$

と表される. ここで  $\hat{F}$  はフォック演算子と呼ばれ, 分子軌道  $\phi_i$  に収容されている1つの電子がそれ以外の分子軌道に収容されている電子が作る「平均的な」クーロンポテンシャルの中での運動を表す. (3)式の方程式は正準形の HF 方程式とよばれ, その解を正準軌道という.

## 2.2 Koopmans の定理 : 垂直イオン化エネルギー $I_i$ と軌道エネルギー $\varepsilon_i$ の関係

分子の構造を変化させないで軌道  $\phi_i$  から電子を1つ引き抜くために必要な垂直イオン化エネルギー  $I_i$  は, HF 方程式を数値的に解いて得られる軌道  $\phi_i$  の形状がイオン化前後で変化しないと仮定すると ( $N$  電子系の正準軌道を使って,  $N-1$  電子系の HF 方程式を解いた場合に対応),  $N$  電子系の軌道エネルギー  $\varepsilon_i$  を用いて次の様に評価できる.

$$I_i = -\varepsilon_i \quad (4)$$

この定理を Koopmans の定理と呼ぶ. この HF 方程式に基づいた手続きで求めた(4)式を, 第一次近似とし, UPS スペクトル帰属の出発点として利用することが多い. 表1に炭素の1枚のシートであるグラフェンのモデル系として注目されている多環芳香族分子コロネン<sup>10</sup> (図3)の  $I_i$  の実験値(UPS)と Koopman の定理(HF/6-311G(2d,p)法)によって求めた理論値の比較を示す. Koopmans の定理によって求められた垂直イオン化エネルギー理論値は, UPS によって測定された実験値と 9 eV 程度の得られるエネルギー領域までは 0.3 eV 程度の誤差で一致しており, 実験をよく再現しているといえる. しかし, 9 eV 以上の領域になると, 実験値と Koopmans の定理の値は 1 eV 以上乖離してしまい, 定性的な一致しか示さない. これは,

- **電子相関**: 「分子に含まれる  $N$  個の電子はそれぞれ独立に運動している」という HF 方程式の基本仮定が完全には成り立っていないこと
- **軌道緩和**: Koopmans の定理が考慮していないイオン化による分子軌道の変形が顕著になっていること

の2つの効果に由来する.<sup>6</sup> この2つの効果を取り込ん



図 3 : 多環芳香族分子コロネン ( $C_{24}H_{12}$ ) の分子構造

表 1 : コロネンの UPS 実験による垂直イオン化エネルギーと Koopmans の定理による理論値の比較.

UPS/eV <sup>*1</sup>	Koopmans / eV <sup>*2</sup>
7.29	6.99
8.62	8.97
9.13	9.42
	9.93
10.20	11.48
10.55	12.12
10.55	12.50

\*1 文献 3

\*2 HF/6-311G(2d,p)法による結果

で UPS スペクトルの理論計算を行う代表的な手法の一つが一電子グリーン関数法である。

### 3. 一電子グリーン関数法の基礎

一電子グリーン関数法では、分子軌道のエネルギー変化や変形は、図 4 に示す様に、HF 方程式を解いて得られる分子軌道  $\phi_i$  の平均場ポテンシャル中を運動する電子が、 $\phi_i$  以外の分子軌道に収容されている電子からの電子相関エネルギーを表す自己エネルギーポテンシャル  $\Sigma_i$  によって散乱されることで起こると考える。<sup>11</sup> Koopmans の定理が(少なくとも定性的には) 垂直イオン化エネルギーの良い 0 次近似となるような場合は、

$$I_i = -\varepsilon_i' = -\varepsilon_i + \Sigma_i(\varepsilon_i') \quad (5)$$

という具合に  $\Sigma_i$  を適切に取り込めば  $I_i$  を高精度に計算できる。<sup>6</sup> ここで、 $\varepsilon_i'$  は図 4 に示す電子相関の効果を取り込んだ  $\phi_i'$  の軌道エネルギーである。ただし、 $\Sigma_i$  の解析解を厳密に求めることは非常に困難であるため、通常は  $\Sigma_i$  を  $\varepsilon_i'$  のべき級数で展開して主要項のみを取り入れる摂動法によって  $\Sigma_i$  を近似的に計算する。例えば、代表的な量子化学計算パッケージである *Gaussian 09*<sup>12</sup> に実装されている Outer-valance Green's function (OVGF)法では、 $\Sigma_i(\varepsilon_i')$  の計算において 3 次の項までは摂動法に基づいて厳密に数値計算し、4 次以上の高次項の効果も繰り込みによって評価することで、精度の高い計算を比較的低い計算コストで可能にしている。<sup>13</sup>

また、 $\phi_i$  からのイオン化確率を評価する Pole strength  $P_i$  は OVGF 法では次式で表される。<sup>14</sup>

$$P_i \equiv |\langle \Psi^{N-1} | c_i | \Psi^N \rangle|^2 = \left[ 1 - \frac{\partial \Sigma_i(\varepsilon_i')}{\partial \varepsilon_i'} \right]^{-1}, \quad (6)$$

$$0 \leq P_i \leq 1.$$

ここで  $\Psi^N$  は  $N$  電子系全体の波動関数、 $c_i$  は  $\Psi^N$  を構成する  $i$  番目の分子軌道  $\phi_i$  から 1 電子をイオン化させることを表す消滅演算子である。実際の数値計算では (6) 式を (5) 式と連立させ、 $P_i$  と  $\Sigma_i$  が十分収束するまで反復計算をすることで  $I_i$  と  $P_i$  を求める (軌道エネルギーの初期値には  $\varepsilon_i$  を採用する)。<sup>14</sup>  $P_i$  はイオン化前後の波動関数の重なり(類似度)を表しており、イオン化の前後における波動関数の変化が小さいほどイオン化が起こりやすいことを示している。仮に Koopmans の定理が完全に成り立つとすると、イオン化の前後で軌道の形状の変化は起こらず  $P_i = 1$  となる。逆に電子相関や軌道緩和の効果が非常に大きく Koopmans の定理が著しく破綻する場合は  $P_i < 0.80$  となり、OVGF 法で求められた  $I_i$  が十分に正確であるかは保証できない。<sup>14</sup> この様な電子相関が強く寄与する UPS の計算をする際には、電子相関の効果をより厳密に取り入れた ADC(3)法<sup>14</sup> や SAC-CI 法<sup>15</sup> を用いることが望ましい。

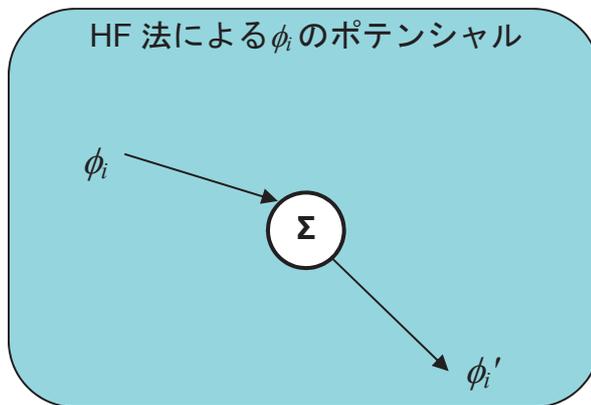


図 4: グリーン関数法に基づく分子軌道  $\phi_i$  の変形 の概念図。  $\phi_i$  に収容されている電子に対する他の電子からの電子相関を表す自己エネルギーポテンシャル  $\Sigma_i$  によって  $\phi_i$  が散乱され、  $\phi_i'$  へと変形する。

#### 4. 一電子グリーン関数法による UPS スペクトルの計算例

それでは、一電子グリーン関数法に基づく UPS スペクトルの理論計算を第2章で取り上げたコロネンを例に見ていこう。今回は、OVGF 法にガウス型基底関数 6-311G(2d,p) を組み合わせて用いた (OVGF/6-311G(2d,p) 法)。

図5にClarらによるコロネン分子の気相中における UPS の実験スペクトル<sup>3</sup>と筆者が計算した OVGF/6-311G(2d,p) 法による理論スペクトルの比較を示す。図5に示すように、OVGF 法は実験スペクトルのピーク位置を良く再現している。また表2に示す様に、Koopmans の定理による結果と比較すると、全体的に実験値との誤差が縮小し、実験値との誤差が Koopmans の定理では 1-2 eV にもなっていたバンド c も OVGF 法では 0.3 eV 以内の誤差で定量的に再現することができた。この様に、一電子グリーン関数法を用いて電子相関や軌道緩和の効果を取り入れることで、有機分子の UPS スペクトルを定量的に再現し、実験で得られるスペクトルを正確に帰属することが可能である。

#### 5. 結論

本稿では、有機分子の UPS スペクトルを帰属するために有用な量子力学的手法である Koopmans の定理や一電子グリーン関数法 (特に OVGF 法) について、実際の計算例

も交えながら概説した。東北大学サイバーサイエンスセンターの並列コンピュータ等にインストールされている *Gaussian 09* では、コロネンなどの大型の有機分子でも比較的短時間で OVGF 法による UPS スペクトルのシミュレーションを実行することが可能である。機能性有機分子の光・電子物性を研究対象としている利用者の方には是非有効に活用していただければ幸いである。

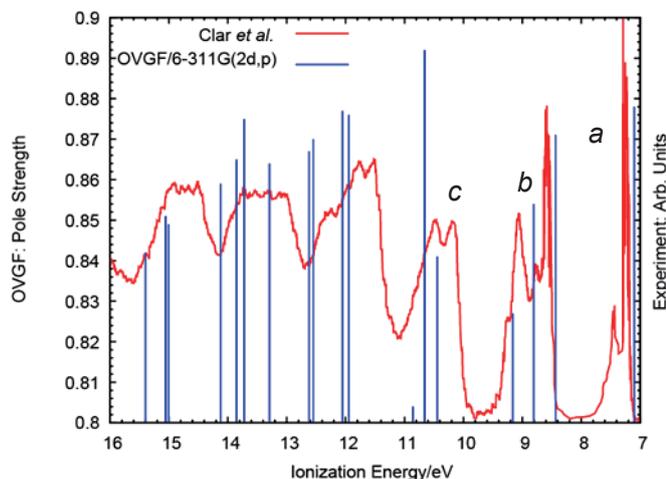


図5: コロネン分子の気相中における UPS. Clarらによる実験スペクトル(赤線)<sup>3</sup>と OVGF/6-311G(2d,p) 法(青線)によるピーク位置・ピーク強度との比較. イオン化エネルギーが低いバンドから a, b, c,...と命名した.

表2: コロネン分子の気相中における UPS の実験ピークと Koopmans の定理と OVGF 法による各占有軌道のイオン化エネルギーの理論値の比較.

Peak	UPS/eV	Koopmans/eV	OVGF/eV	Pole strength	Band
1, 2	7.29	6.99	7.10	0.88	a
3, 4	8.62	8.97	8.44	0.87	b
5	9.13	9.42	8.81	0.85	b
6		9.93	9.16	0.83	b
7	10.20	11.48	10.45	0.84	c
8, 9	10.55	12.12	10.86	0.80	c
10, 11	10.55	12.50	10.66	0.89	c

\*1 文献3

\*2 HF/6-311G(2d,p) 法による結果

## 謝辞

本稿で取り上げた OVGf 法によるコロネンの計算例はサイバーサイエンスセンターの並列コンピュータを用いて得られた。また、本研究は日本学術振興会特別研究員特別奨励費 (No. 251672) の支援を受けて行われた。

## 参考文献

1. J. Tibbelin, A. Wallner, R. Emanuelsson, F. Heijkenskjold, M. Rosenberg, K. Yamazaki, D. Nauroozi, L. Karlsson, R. Feifel, R. Pettersson, J. Baumgartner, S. Ott and H. Ottosson, *Chem. Sci.* **5**, 360-371(2014).
2. C. Dahlstrand, K. Yamazaki, K. Kilsa and H. Ottosson, *J. Org. Chem.* **75**, 8060-8068 (2010).
3. E. Clar, J. M. Robertson, R. Schloegl and W. Schmidt, *J. Am. Chem. Soc.* **103**, 1320-1328 (1981).
4. S. R. Forrest, *Nature* **428**, 911-918 (2004).
5. W. Brütting and C. Adachi (ed.), *Physics of organic semiconductors*, 2nd, Completely New Revised ed. (Wiley-VCH, 2012).
6. A. Szabo. and N. S. Ostlund, *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*. (Dover, New York, 1996).
7. F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, 2nd ed. (Wiley, 2006).
8. 藤永茂, 「分子軌道法」. (岩波書店, 1980).
9. H. Nakashima and H. Nakatsuji, *J. Chem. Phys.* **127** (22), 224104 (2007).
10. J. Wu, W. Pisula and K. Müllen, *Chem. Rev.* **107** (3), 718-747 (2007).
11. 高田康民, 「多体問題特論」. (朝倉書店, 2009).
12. M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski and D. J. Fox, (Wallingford CT, 2009).
13. L. S. Cederbaum, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **8**, 290-303 (1975).
14. W. von Niessen, J. Schirmer and L. S. Cederbaum, *Comput. Phys. Rep.* **1**, 57-125 (1984).
15. M. Ehara, J. Hasegawa and H. Nakatsuji, in *Theory and Applications of Computational Chemistry*, edited by C. E. Dykstra, G. Frenking, K. S. Kim and G. E. Scuseria (Elsevier, Amsterdam, 2005), pp. 1099-1141.

## [共同研究成果]

# 気候モデルデータのダウンスケーリングによるヤマセの将来変化

島田照久<sup>1</sup> 沢田雅洋<sup>2</sup> 吉田龍平<sup>1</sup> 岩崎俊樹<sup>1</sup>

1 東北大学大学院理学研究科

2 東京大学大気海洋研究所

気候モデルデータのダウンスケーリングによって、東北地方の冷夏の要因となるヤマセの将来変化を調べた結果、地球温暖化によって夏季の平均気温が上昇した後も、将来気候の平年偏差で見るとヤマセが出現することがわかった。ただ、ヤマセの頻度と強度はやや減少する。このダウンスケーリングデータセットを利用して、東北地方の夏季気候の将来変化とその影響評価についての研究を進めている。

## 1. はじめに

東北地方の夏季気候は、間欠的に発達するオホーツク海高気圧から北日本の太平洋側に吹きつける冷たい東風(ヤマセ)の影響を大きく受ける。この東風とともに、背の低い(<1000m)下層の冷気が北日本のオホーツク海側と太平洋側に押し寄せて低温をもたらす。さらに、下層雲や霧が低地を覆い、放射冷却により低温を維持する。一方、ヤマセの発生頻度や低温の程度は、オホーツク海高気圧の消長に合わせて、経年変動が顕著であり、卓越したヤマセは夏季の異常気象(冷夏)と言われることもある。ヤマセのこのような特徴は、地域気象・気候、そして社会活動(農業、海洋安全、航空安全等)に影響を与えるため、ヤマセの理解は、特に東北地方の冷害の歴史[1]を背景に、社会的に重要な課題でありつづけている。

卓越したヤマセが異常気象と言われる大きな要因は、ヤマセの発生頻度や低温の程度の経年変動が大きいことにある。しかしながら、ヤマセの持続期間や低温の程度に経年変動があるとはいえ、毎年繰り返し発生しているという事実が重要である(例えば、2013年は、7月17-23日にかけて東北地方の太平洋側で、顕著な低温低日射の状態が続いた)。また、防災や避難等に関わる台風や集中豪雨などの顕著現象とは対照的に、ヤマセとその影響には、“日々の生活、業務、操業のなかで対応していかなければならない”という面が強いと言える。例えば、農業にとっては、毎年発生する数日程度のヤマセによる低温期が、農作物の重要な成長期に当たるかどうかが大ききリスクとなっている[2]。また、下層雲と霧の発生は、船舶の航行や航空の安全に関わる[3]。一方、海上の業務に従事する人々にとってヤマセは時化と認識されており、特に沿岸域では、ヤマセが地形の影響を受けて局地的強風を発生させ、それに伴う高波高域が出現する[4]。このように、北日本の気象・気候・海況に大きな影響を与えるヤマセについて、顕在化する気候変動に伴うヤマセの将来変化の理解と影響評価が求められている。

そこで私達は、再解析データや気候モデルデータの力学的ダウンスケーリング(数値気象モデルを用いた再計算によるデータの詳細化のこと。以下、ダウンスケーリングという)によって、東北地方の夏季気候に重要な役割を果たすヤマセとその将来変化について研究を進めている[5, 6]。ダウンスケーリングによって、低解像度の気候モデルによる大規模場の計算結果に対して高解像度の地形等を入力することで、下部境界の状態に大きく依存した小さな現象を解像し、気候予測の結果に付加価値を付けることができる。北日本の気候について考えてみると、温暖化シミュレーションを行うほとんどの気候モデルの空間解像度は100kmより粗く、気候モデルではヤマセにと

って重要な役割を果たす北日本の地形(脊梁山脈等)を十分に解像することはできていない。そこで、ダウンスケーリングによって、気候モデルで表現された気候変動が地域スケールではどのように現れるのかを明らかにする。さらに、このダウンスケーリングデータは、起こりうる将来の気候を想定した気候データ(気候シナリオ)となるため、温暖化の影響評価や適応策の検討、リスク管理のために活用される。本稿では、これまでの取り組みについて述べる。

## 2. ダウンスケーリング

気象庁・気象研究所の数値気象モデル(気象庁非静力学モデル JMA-NHM[7])を用いて、再解析データと気候モデルデータを、北日本全体(東北地方と北海道)を含む領域について、10km 解像度までダウンスケーリングする。北日本全体を計算領域に含めることによって、北日本の脊梁山脈を境にした太平洋側と日本海側の気候の対照性や海峡地峡からの日本海側へのヤマセの下層冷気の流出も考慮することができる。また、今回は長期間の気候データセットを作成することが目的であるので、ダウンスケーリングする解像度は、計算時間とのトレードオフで決める必要がある。今回選択した 10km という解像度は、北日本全体の長期積分(現在気候と将来気候)に必要な計算時間が妥当な範囲でありながら、ヤマセにとって重要な地形(脊梁山脈、山地と平野、海峡や地峡、半島等)を解像し、地域スケールの解析が可能となる解像度である。実際、20-30km 解像度では、北日本の脊梁山脈全体は表現できるものの、平野の形状再現や海峡の解像が難しく、標高の過小評価が著しい。鉛直方向には 38 層設定し、1 時間間隔でデータを出力する。データ作成の対象期間は、各年の 6-8 月である。

表 1 ダウンスケーリングの初期・境界条件に用いた再解析データと気候モデルデータ

データ/ モデル	再解析データ	気候モデルデータ	
	JRA-25/JCDAS[8]	MRI-AGCM3. 2S[11]	MIROC5[14]
種類	再解析	大気モデル	大気海洋結合モデル
期間	1979-2011 年 (33 年)	現在: 1979-2003 年 (25 年) 将来: 2075-2099 年 (25 年)	現在: 1981-2000 年 (20 年) 将来: 2081-2099 年 (19 年)
シナリオ	-	SRES A1b	RCP4. 5
解像度	1. 25° /6 h	20km/6 h	1. 4° /6 h
ネスティ ング	2 回	1 回	2 回 (気象研究所で 20km, 1 時間にダウンスケーリングされたデータを利用 [15])
海面水温 (SST)	NOAA-OISST v2[9] (COBE-SST[10] (1979-1981))	現在気候: HadISST[12] 将来気候: CMIP3 の 18CGCM の 平均のトレンドに現在気候の 経年変動を加算 [13]	-

ダウンスケーリングに用いた気候モデルデータは、気象研究所のグループが開発した超高解像度全球大気モデル (MRI-AGCM) と東京大学大気海洋研究所/国立環境研究所/海洋研究開発機構が

共同開発した MIROC5 の現在気候と将来気候(21 世紀末)である(表 1)。MRI-AGCM は現在気候の再現性を重視した大気モデルで、水平格子間隔は 20km である。MIROC5 は、第 5 期結合モデル相互比較計画(CMIP5)に提出された気候モデルの一つであり、気候変動に関する政府間パネル(IPCC)の第 5 次報告書にその結果が用いられている。同じ仕様で、再解析データ JRA-25/JCDAS を境界条件とする現在気候データも作成して、現在気候の再現性の評価基準に用いる。以上のようにして作成したデータセットは、東北地方の地域特性を考慮できる空間解像度(10km)と日変化を解析できる時間解像度(1 時間)を有し、ヤマセの経年変動を現在気候・将来気候ともに扱える長期間の均質な(同じモデル、スキーム、計算領域)データとなり、このような特徴を持つデータセットは初めてである。

数値気象モデルによるダウンスケーリングデータの作成は、東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータ SX-9 で行った。各年の 6-8 月の 3 ヶ月分の JRA-25(MRI-AGCM, MIROC5)の 2(1)段階のダウンスケーリングにかかる時間は、ノード内の 8CPU(ジョブクラス p8)を用いた MPI による並列処理で、約 25(12)時間である。この計算を JRA-25 については 33 年分、MRI-AGCM については計 50 年分、MIROC5 については、計 39 年分実施した。このような長期間の気候データセットの作成は、スーパーコンピュータの利用によって初めて可能となる。

### 3. 結果

#### (1) CMIP5 の気候モデル群における MRI-AGCM と MIROC5 の位置づけ

まず、気候モデルデータそのものを用いて、ヤマセの発生要因となるオホーツク海高気圧の変動を中心に、CMIP5 の気候モデル群(47 個)における MRI-AGCM と MIROC5 の現在気候(1979-2003 年, 6-8 月)の再現性を調べた。その結果、MRI-AGCM, MIROC5 の順で再現性がよく、両気候モデルは、比較的バイアスが小さく、経年変動が JRA-25/JCDAS に近いグループにあることがわかった。例えば、オホーツク海高気圧が発達した時の空間分布についてもこの特徴が確認できる(図 1)。

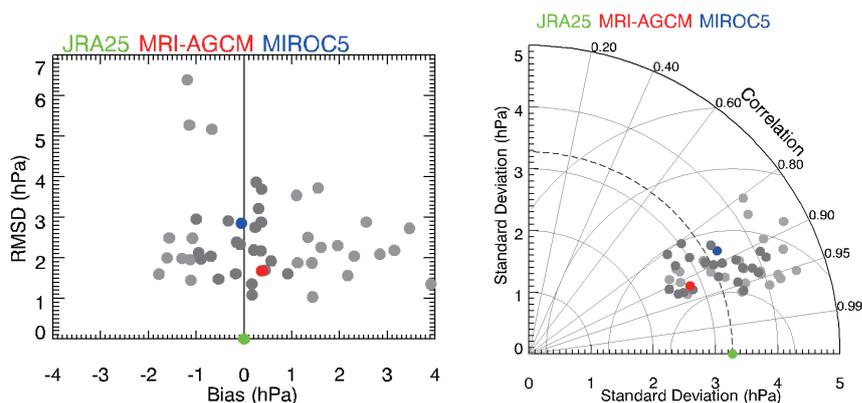


図 1 月平均のオホーツク海高気圧インデックスの 1979-2003 年の上位 8 事例の海面気圧の平均場(30-62°N, 120-165°E)の比較。(左) JRA-25 に対する領域平均バイアスと平均場の 2 乗平均平方根誤差。(右)空間相関と差の標準偏差を関連づける Taylor Diagram。灰色の点は、MIROC5 以外の CMIP5 の各モデルの結果で、濃い灰色の点はバイアスが-1hPa から 1hPa の間にあるものを示す。

次に、21 世紀末のデータが存在する CMIP5 の気候モデル(39 個, MIROC5 を含む)と MRI-AGCM について、オホーツク海高気圧の将来変化を調べた(図 2)。オホーツク海高気圧の発達の指標とし

てよく用いられるオホーツク海高気圧インデックス(オホーツク海での領域平均海面気圧)の変化を見ると、80%以上の気候モデルがオホーツク海高気圧インデックスの下降を示し、その中にMRI-AGCMとMIROC5も含まれる。両モデルは、0.2-0.3hPaの下降を示しており、オホーツク海高気圧インデックスの弱化を示唆するものの、その程度は比較的低い方に位置する。なお、オホーツク海高気圧インデックスの顕著な増加を示したのは、3つの気候モデルだけである。

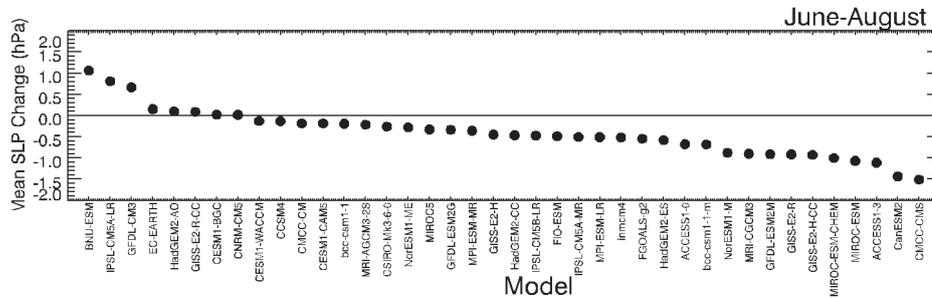


図 2 オホーツク海高気圧インデックスの将来変化(将来気候平均と現在気候平均の差)。増加するものから順に並べた。

一方、MRI-AGCMとMIROC5のシナリオの違いについて検討した。MRI-AGCMのシナリオは、SRESA1bの排出シナリオであり、今回用いたMIROC5データのシナリオは、濃度シナリオRCP4.5である。夏季(6-8月)の気温の将来変化を調べた結果、シナリオは違うものの、どちらのダウンスケーリング場においても東北地方の陸上(ドメイン全体)で約2.9(3.0-3.2)℃の気温上昇がみられた(図3)。これにより、両気候モデルのデータセットは、「21世紀末に、北日本の陸上(北日本とその周辺)の気温上昇が2.9(3.0-3.2)℃する気候シナリオ」と位置づけることができる。つまり、シナリオの違いとモデルの気候感度を、気温が2.9(3.0-3.2)℃上昇する時期の違いに持たせるのである。これにより不確実性の原因を一つ減らすことができる。ここで用いるMRI-AGCMとMIROC5では、2.9(3.0-3.2)℃の気温上昇を示す時期も一致していることになる。なお、両モデルとも気温のパターンは、海面水温のパターンを反映しており、MIROC5の北日本東方の気温極大域は、MIROC5における黒潮が将来北上していることを示すと考えられる。

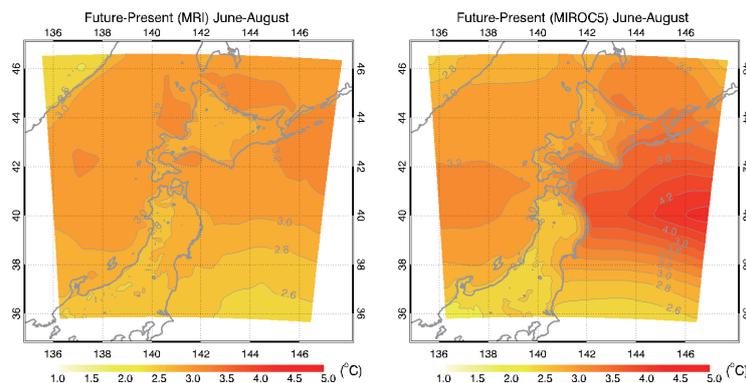


図 3 現在気候(1981-1999)に対する21世紀末(1981-2099年)の6-8月平均の気温の将来変化。(左)MRI-AGCM、(右)MIROC5。

以上の結果より、MRI-AGCMとMIROC5の特徴は下記のようにまとめられる。1)オホーツク海高気圧の変動や空間分布に関して、現在気候の再現性のよいモデル群に属し、MRI-AGCM、MIROC5の

順で現在気候の再現性がよい。2) オホーツク海周辺の海面気圧の将来変化はやや減少となり、CMIP5 の気候モデルの 80%と一致する。3) シナリオおよび気候モデルは違うが、21 世紀末に北日本の陸上(北日本とその周辺)の気温上昇は 2.9(3.0-3.2)°C で一致している。

(2) ヤマセの将来変化

気温の変動パターンを調べるために、北日本の気象官署に対応する地点のデータを用いて主成分解析を行った。北日本全体の気温変動(日変化、季節変化、トレンド)を表す第 1 モード(寄与率約 80%)、南北変動(梅雨前線等の影響)を示す第 2 モード(寄与率約 7%)に加えて、北日本の山地を境にした太平洋側と日本海側の変動(ヤマセ時に強調される)を示す第 3 モード(寄与率約 3%)が各データセット間に共通してみられる。図 4 には、各データセットについて、第 3 モードの空間パターンと寄与率を示す。各データセット間で、地形に依存した同様のパターンが見られ、寄与率は同じ程度であることがわかる。この結果は、現在気候については気候モデルの再現性の良さを示す。将来気候については、ヤマセに伴う気温の変動パターンが将来気候においても見られることを示す。また、MRI-AGCM と MIROC5 の各モードの寄与率の将来変化は一致しており、第 1 モードの寄与率は増加し気温のトレンドが強化すること、第 2 モードの寄与率は減少し北部での気温上昇が大きいこと、第 3 モードの寄与率は減少しヤマセが弱化的ることが示唆される。

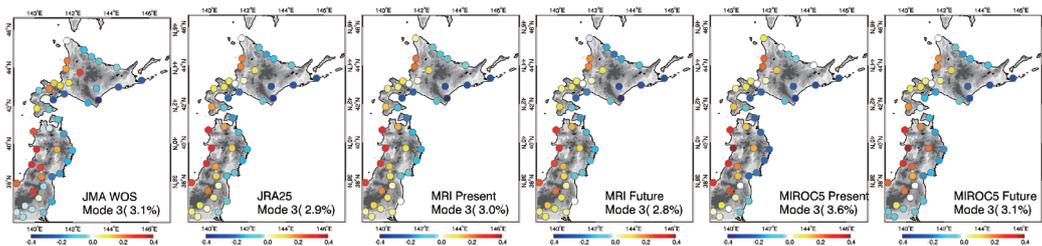


図 4 気象官署の観測地点における地表気温の主成分解析の第 3 モードの空間分布(6-8 月)。左から、気象官署の観測、JRA-25 からのダウンスケーリングデータ、MRI-AGCM からの現在気候と将来気候のダウンスケーリングデータ、MIROC5 からの現在気候と将来気候のダウンスケーリングデータを用いた結果を示す。

ヤマセの頻度と強さの将来変化をヤマセインデックスで検証する。ヤマセインデックスには、津軽海峡の東西気圧差で定義されるものを用い、このインデックスは南東北まで南下したヤマセをよく表現する[16]。図 5 には、バイアス補正したヤマセインデックスの頻度分布の将来変化を示す。現在気候の 1 標準偏差を越える領域をヤマセ卓越時と考えると、MRI-AGCM では、低温をもたらす強いヤマセが減少し、MIROC5 では、強弱によらず全体的にヤマセの頻度が減少している。MRI-AGCM と MIROC5 の結果を、現在気候と比べると、ヤマセの頻度は 1-3%の減少となる(表 2)。また、ヤマセインデックスの変化は約-0.2hPa である。これは、ヤマセの下層冷気層の気温が上昇して日本海側との気温差が小さくなることを意味し、高度 1500m(1000m)以下で温度一定の下層冷気を仮定すれば、ヤマセの冷気が 0.3°C(0.5°C)上昇することに対応する。

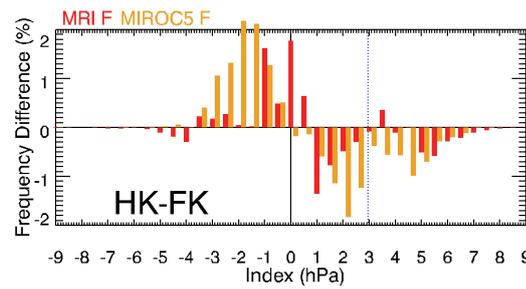


図5 ヤマセインデックスの頻度分布の将来変化。横軸がヤマセインデックス、縦軸がヤマセインデックスの各レンジの変化(%)。青い点線が現在気候の1標準偏差を示す。

表2 現在気候の1標準偏差を越えるときのヤマセインデックスの平均値と頻度

	現在気候	MRI 将来気候	MIROC5 将来気候
平均値 (hPa)	4.10	3.89	3.91
(将来変化)	-	(-0.21)	(-0.18)
頻度 (%)	16.2	15.2	13.0

#### 4. まとめと今後の方針

本稿では、2つの気候モデルデータのダウンスケーリングを用いた、東北地方の夏季気候に重要な役割を果たすヤマセの将来変化についての研究を紹介した。地球温暖化によって気温上昇した後も、将来気候の平年偏差で見るとヤマセが出現していると言え、下層大気に対する地形の影響は現在気候のものと同様であることがわかった。しかし、ヤマセの頻度と強度はやや減少することがわかった。今後の課題は、この2つのモデルの将来変化の原因がどこにあるのかを検証することである。

一方で、私達の研究グループ内では、今回作成したダウンスケーリングデータを気候シナリオとして用いた影響評価研究も現在進行中である。まず、水稲について、現在の品種別の収量変化推定を行っており、東北・北海道品種が最大収量となるエリアは北へ移動し、中京品種が東北で主要品種となる可能性が示されている。また、低温が水稲の生育に影響を及ぼす指標である冷却量(20℃以下の日平均気温の積算)を調べた結果、21世紀末のある最も低温な年(冷夏年)においても、冷害危険域は北東北沿岸だけに限られることがわかった。これについては、同時に温暖化によって出穂時期が早まること、出穂後の高温日への移行の問題を含めて検討中である。さらに、一時的な低温期の影響に加えて、水稲の高温障害への影響の評価にも取り組んでいる。農作物の病虫害発生予測モデルを用いて、温暖化とそれに伴う夏季気候の将来変化により、病虫害の発生リスクがどのように変化するかについての研究も進行中である。

#### 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から有益なご指導とご協力をいただいた。MRI-AGCM3.2S データは、気象研究所から提供いただいた。MIROC5 データは、環境省の地球環境研究総合推進費戦略研究開発プロジェクト S-5 の成果として提供を受けた。本研究は、文部科学省の委託事業「気候変動適応研究推進プログラム」に採択されている課題「東北地域の

ヤマセと冬季モンスーンの先進的ダウンスケール研究」(代表 岩崎俊樹)の一環として実施した。

### 参考文献

- [1] 卜蔵建治, 2001: ヤマセと冷害: 東北稲作のあゆみ, 成山堂書店.
- [2] 下野裕之, 2012: 地球温暖化でも冷害はなくなる—そのメカニズムと対策, 農山漁村文化協会.
- [3] 青森県青森空港管理事務所, 青森空港: 計器着陸システム CAT-3a: 霧の壁を突き破れ, [http://www.aomori-airport.jp/wordpress/wp-content/uploads/hpb-media/pdf/pamph/pamph\\_rjsa.pdf](http://www.aomori-airport.jp/wordpress/wp-content/uploads/hpb-media/pdf/pamph/pamph_rjsa.pdf).
- [4] Shimada, T. and H. Kawamura, 2007: Case study of wind jet transition and localized responses of wind wave along the Pacific coast of northern Japan by synergetic use of satellite and in situ observations, *J. Oceanogr.*, **63**, 953-966.
- [5] 文部科学省 気候変動適応研究推進プログラム: <http://www.mext-isacc.jp>
- [6] 島田照久, 沢田雅洋, 岩崎俊樹, 2013: ヤマセ研究のための再解析・気候モデルデータのダウンスケーリング, *SENAC*, **46(1)**, 9-15.
- [7] Saito, K., J. Ishida, K. Aranami, T. Hara, T. Segawa, M. Narita, and Y. Honda, 2007: Nonhydrostatic atmospheric models and operational development at JMA. *J. Meteor. Soc. Japan*, **85B**, 271-304.
- [8] Onogi, K., J. Tsutsui, H. Koide, M. Sakamoto, S. Kobayashi, H. Hatsushika, T. Matsumoto, N. Yamazaki, H. Kamahori, K. Takahashi, S. Kadokura, K. Wada, K. Kato, R. Oyama, T. Ose, N. Mannoji and R. Taira, 2007: The JRA-25 Reanalysis, *J. Meteor. Soc. Japan*, **85**, 369-432.
- [9] Reynolds, R. W., T. M. Smith, C. Liu, D. B. Chelton, K. S. Casey and M. G. Schlax, 2007: Daily High-resolution Blended Analyses for sea surface temperature. *J. Climate*, **20**, 5473-5496.
- [10] Ishii, M., A. Shouji, S. Sugimoto, and T. Matsumoto, 2005: Objective Analyses of Sea-Surface Temperature and Marine Meteorological Variables for the 20th Century using ICOADS and the Kobe Collection. *Int. J. Climatol.*, **25**, 865-879.
- [11] Mizuta, R., H. Yoshimura, H. Murakami, M. Matsueda, H. Endo, T. Ose, K. Kamiguchi, M. Hosaka, M. Sugi, S. Yukimoto, S. Kusunoki, and A. Kitoh, 2012: Climate simulations using MRI-AGCM 3.2 with 20-km grid. *J. Meteor. Soc. Japan*, **90A**, 233-258.
- [12] Rayner, N. A., D. E. Parker, E. B. Horton, C. K. Folland, L. V. Alexander, D. P. Rowell, E. C. Kent, A. Kaplan, 2003: Global analyses of sea surface temperature, sea ice, and night marine air temperature since the late nineteenth century *J. Geophys. Res.*, **108**, 4407 doi:10.1029/2002JD002670.
- [13] Mizuta, R., Y. Adachi, S. Yukimoto, and S. Kusunoki, 2008: Estimation of the future distribution of sea surface temperature and sea ice using the CMIP3 multi-model ensemble mean. MRI Tech. Rep. 56, 28 pp. [Available at [http://www.mrijma.go.jp/Publish/Technical/DATA/VOL\\_56/56.html](http://www.mrijma.go.jp/Publish/Technical/DATA/VOL_56/56.html).]
- [14] Watanabe, M., and Coauthors, 2010: Improved Climate Simulation by MIROC5: Mean States, Variability, and Climate Sensitivity. *J. Climate*, **23**, 6312-6335.

[15] 環境省 地球環境研究総合推進費戦略研究開発プロジェクト S-5:

<http://www-iam.nies.go.jp/s5/materials/newsletter.html>

[16] Shimada, T., M. Sawada, and T. Iwasaki, 2014: Indices of cool summer climate in northern Japan: Yamase indices, *J. Meteor. Soc. Japan*, **92**, 17-35.

## [民間企業利用サービス利用成果]

### 民間航空機開発における大規模空力弾性解析シミュレーションの適用

森野裕行  
三菱航空機株式会社

三菱航空機株式会社では、平成 20 年度第 2 期の先端的大規模計算シミュレーションプログラム利用サービスに始まり、平成 23 年度からは民間企業利用サービスの枠組みで、東北大学サイバーサイエンスセンター所有のベクトル計算機 SX-9 を利用している。この大規模計算機を利用することで、数値流体力学 (CFD) による空力弾性解析シミュレーションを MRJ 開発で本格的に活用することが可能となった。これにより、フラッタに代表される空力弾性不安定問題に対する設計リスクを最小限に抑え、飛行安全上のリスク低減を図ることができた。本稿では、この空力弾性解析シミュレーションの内容と、MRJ 開発における適用状況を紹介する。

#### 1. はじめに

三菱航空機株式会社では、平成 20 年度より YS-11 以来半世紀ぶりとなる国産旅客機、三菱リージョナルジェット (MRJ: 図 1) の開発を進めている。MRJ の開発では、環境負荷低減のため、同クラスの現行ジェット旅客機の燃費に対して、機体の軽量化・低抵抗化と新エンジンの搭載を含めて 2 割以上の燃費削減を目標としており、これを支える要素技術の開発に東北大学や宇宙航空研究開発機構と連携した産官学の共同研究を積極的に活用してきた。その内容は、空気力学、空力弾性、材料/構造、装備、飛行制御等の各要素技術や、多分野統合最適化/多目的設計探査の研究など、広範囲にわたっている。本稿では、東北大学との共同研究で開発した数値流体力学 (CFD) を用いた空力弾性解析コードについて、東北大学所有の SX-9 による解析例と MRJ 開発における適用状況を紹介する。



図 1 三菱リージョナルジェット (MRJ)

## 2. 民間航空機開発における空力弾性設計

航空機の燃費削減を実現するためには、機体の低抵抗化と軽量化が必要となる。航空機の軽量化を進めると機体構造の剛性は低下することになるため、高速飛行時においてフラッタと呼ばれる自励振動現象の発生が懸念される。フラッタの発生は最悪の場合機体構造の破壊につながるため、民間航空機の安全性を担保する型式証明を取得するためには、解析、風洞試験、飛行試験の3本柱で15%マージンを含めた運用領域内でフラッタ等の空力弾性上の不安定現象が起こらないことを示す必要がある。

フラッタに関する風洞試験、飛行試験は開発フェーズの最終段階で実施され、その実施条件も限定されることから、開発フェーズの各段階で設計進捗に応じた空力形状・構造特性（マス、剛性分布など）を反映した解析を行い、軽量化（低剛性化）によるフラッタ特性変化を高い精度で確認しておくことが設計上のキーポイントとなる。

航空機設計におけるフラッタ解析については商用ソフト NASTRAN の使用実績が世界的にも多く、当社でも NASTRAN をフラッタ解析の主力ソフトとして利用している。ただし、NASTRAN のフラッタ解析では線形揚力面理論に基づく非定常空力計算を適用しているため、衝撃波や粘性に起因する空気力の非線形特性が支配的となる遷音速条件ではフラッタ解析精度が低下する。解析精度の低下は構造剛性の設計要求に安全マージンを加えることに繋がるため、機体構造に対して重量ペナルティを負う可能性がある。そのため当社では、Euler/Navier-Stokes 方程式を用いた CFD 解析をフラッタなどの空力弾性解析に適用する研究開発を東北大学との共同研究で行い、MRJ の空力弾性設計に活用している。しかしながら、このような CFD を利用した空力弾性解析は、非定常計算で1ケースあたり数千~数万ステップの時間進行計算が必要となることから、一民間企業の計算機環境では設計ツールとして積極利用するのが大変厳しいのが現状である。研究目的の解析であれば数ケースで十分であるが、航空機設計における空力弾性解析となると、運用領域を包含する飛行条件及び想定されるあらゆる故障条件を考慮して数百~数千規模の解析ケースが必要となる。これら全てを CFD 空力弾性解析で実行するのは現実的ではないものの、NASTRAN による解析では精度低下が懸念される特定のケースを抽出して CFD 空力弾性解析を適用できれば、フラッタに対する設計リスクを最小限に抑えることができる。当社では、平成 20 年度第 2 期の先端的大規模計算シミュレーションプログラム利用サービスに始まり、平成 23 年度からは民間企業利用サービスの枠組みで東北大学のベクトル計算機 SX-9 を利用している。この大規模計算機を活用することで、計算機環境の問題を解決し、MRJ 開発における CFD 空力弾性解析の本格適用を実現することができた。以降に CFD 空力弾性解析コードの内容とその解析例を紹介する。

## 3. 空力弾性解析コード

開発した空力弾性解析コードは、東北大学の非構造格子ソルバーTAS (Tohoku University Aerodynamic Simulation) コード[1-5]をベースとしており、流体側の計算では Euler/Navier-Stokes 方程式をセル節点有限体積法で解く。計算格子の移動変形に伴う 3 次元圧縮性 Euler 方程式は以下のようになる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega(t)} Q dV + \int_{\partial\Omega(t)} (F(Q) - U_g Q) \cdot ndS = 0 \quad (1)$$

$$Q = [\rho, \rho u, \rho v, \rho w, e]^T \quad (2)$$

$$F(Q) = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (e+p)u \end{bmatrix} i + \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ (e+p)v \end{bmatrix} j + \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho vw \\ \rho w^2 + p \\ (e+p)w \end{bmatrix} k \quad (3)$$

$$U_{g_i}^n = \frac{r_i^{n+1} - r_i^n}{\Delta t} \quad (4)$$

$$p = (\gamma - 1) \left[ e - \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2 + w^2) \right] \quad (5)$$

ここで  $Q$  は保存量ベクトル、 $F(Q)$  は非粘性流束ベクトル、 $U_{g_i}^n$  は各格子点の移動速度である。セル境界での流束計算には HLEW 近似リーマン解法 [6] で高精度化を図り、空間精度を悪化させず、かつ収束性の高い Venkatakrishnan の流束制限関数を用いている。時間積分には LU-SGS 法と 3 点後退差分による Newton 反復を組み合わせた 2 次精度の陰解法を用いた。また計算格子の変形には Murayama らの方法 [7] を採用した。

構造側の弾性振動方程式は次式で与えられる。

$$[M]\{\ddot{d}\} + [K]\{d\} = \{F\} \quad (6)$$

ここで  $M$  は質量マトリクス、 $K$  は剛性マトリクス、 $d$  は変位、 $F$  は空気力である。式 (6) にレーリー・リッツ法を適用して運動方程式を構築し、振動変位  $d$  を次式のように幾つかの固有振動モードの重ね合わせで表現するモーダル法により解析を行う。

$$\{d\} = [\Phi]\{q\} \quad (7)$$

ここで  $\Phi$  は固有振動モードを表す変換マトリクス、 $q$  は一般化変位である。式 (6) 及び式 (7) より、最終的な支配方程式は次のようになる。

$$\dot{S} + \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ \omega_i^2 & 0 \end{bmatrix} S = \begin{bmatrix} 0 \\ [\Phi]_i^T F / M_i \end{bmatrix} \quad (8)$$

$$S = [q \quad \dot{q}] \quad (9)$$

ここで  $\omega_i$  は  $i$  番目振動モードの固有角振動数である。

流体と構造の連成には Fully Implicit Coupling 法 [8] を採用し、時間積分の際に内部反復を行なうことで時間遅れのない完全な時間 2 次精度を確保した。

開発した解析コードはベクトル計算機向けにチューニングされており、効率の良い計算領域分割による MPI 並列化を用いて大規模並列計算を実現している。

#### 4. 空力弾性解析例

当社では、MRJ の開発試験として、主翼と尾翼を対象としたフラッタ風洞試験を実施している。本章では、風洞試験 (WTT) で使用した弾性模型のフラッタ解析を開発コードで実施した解析例を紹介する。また、風洞試験データを利用した開発コードの精度検証についても紹介する。

### 4.1 MRJ 主翼フラッタ風洞試験

風洞試験には、弾性翼、パイロンナセル部、胴体フェアリングで構成されるセミスパン模型を使用し、試験は三菱重工業（株）名古屋航空宇宙システム製作所（名航）の高速風洞（ブロードダウン式、計測部 0.6m×0.6m）で実施した。模型の洞内設置状態を図 2 に、模型の 3 面図を図 3 に示す。弾性翼の主構造はアルミ製の梁要素とリブ・ウェブ要素で構成される。主翼の弾性特性は梁要素で模擬し、空力形状は樹脂で整形した。パイロンナセル部はアルミ製パイロンと光造形で製作したフロースルーナセルで構成される。この弾性翼模型は風洞壁に片持ち支持するのではなく、板要素を有するソフト支持装置に固定する方式とし、機体が空中状態にある支持条件での振動特性を再現可能とした。模型のマス分布と剛性分布は、想定される主翼フラッタモードのうち、最も重要となるエンジン系モードを再現するよう設計した。このエンジン系フラッタモードは主翼の曲げ 1 次モード（WB1）とナセルのピッチングモード（NCP）の連成により発生する。模型の構造解析モデルを NASTRAN で作成し、振動解析を行った。振動解析結果を表 1、図 4 に示す。代表的な振動モードについて、解析結果は振動試験（GVT）結果と良好に対応しており、作成した構造解析モデルの妥当性が確認された。

風洞試験では、マッハ数を固定して風洞総圧（動圧）を段階的に上昇させ、フラッタが発生するポイントを慎重に調査し、複数のマッハ数条件でフラッタポイントを取得した。図 5 に模型のフラッタ境界について、風洞試験結果と解析結果を比較した例を示す。図中の縦軸・横軸の数値については、公開できない情報のため削除しているが、試験のマッハ数条件は遷音速領域であることに留意されたい。解析は開発コードの Euler 計算（非粘性流）で実施した。解析に使用した計算格子と定常圧力分布を図 6 に示す。解析で予測したフラッタポイント（安定から不安定に移行するポイント）は試験結果と良好に対応しており、開発コードは主翼の遷音速フラッタを高精度に予測できることが確認された。

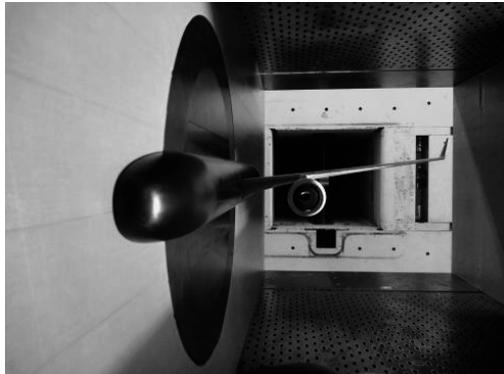


図 2 MRJ 主翼フラッタ模型 洞内設置状態

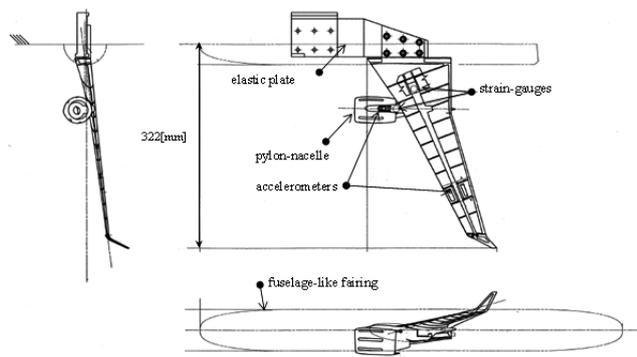


図 3 MRJ 主翼フラッタ模型 3 面図

表 1 MRJ 主翼フラッタ模型 代表モードの固有振動数

Mode	GVT [Hz]	NASTRAN [Hz]	GVT/ NASTRAN [-]
Wing 1 <sup>st</sup> Bending (WB1)	82.0	81.9	1.00
Fuselage 1 <sup>st</sup> Bending (FB1)	152.0	150.0	1.01
Nacelle Pitching (NCP)	180.0	179.6	1.00

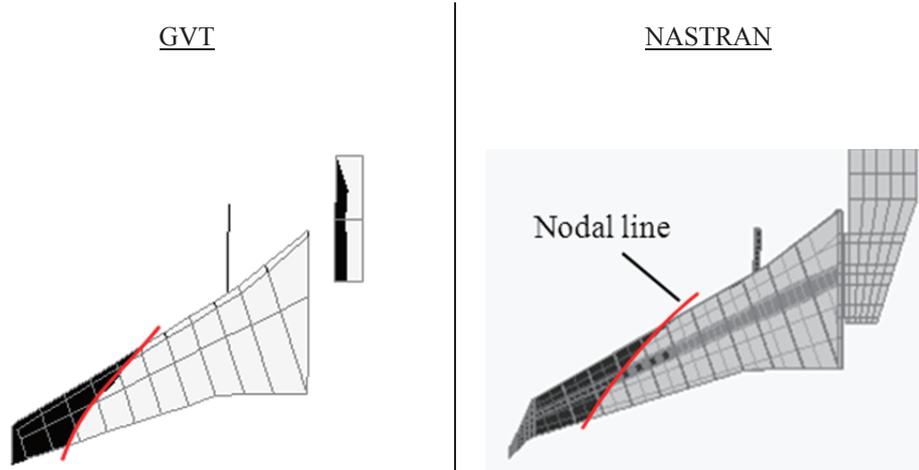


図4 MRJ主翼フラッタ模型 振動モード形の比較 (NCP)

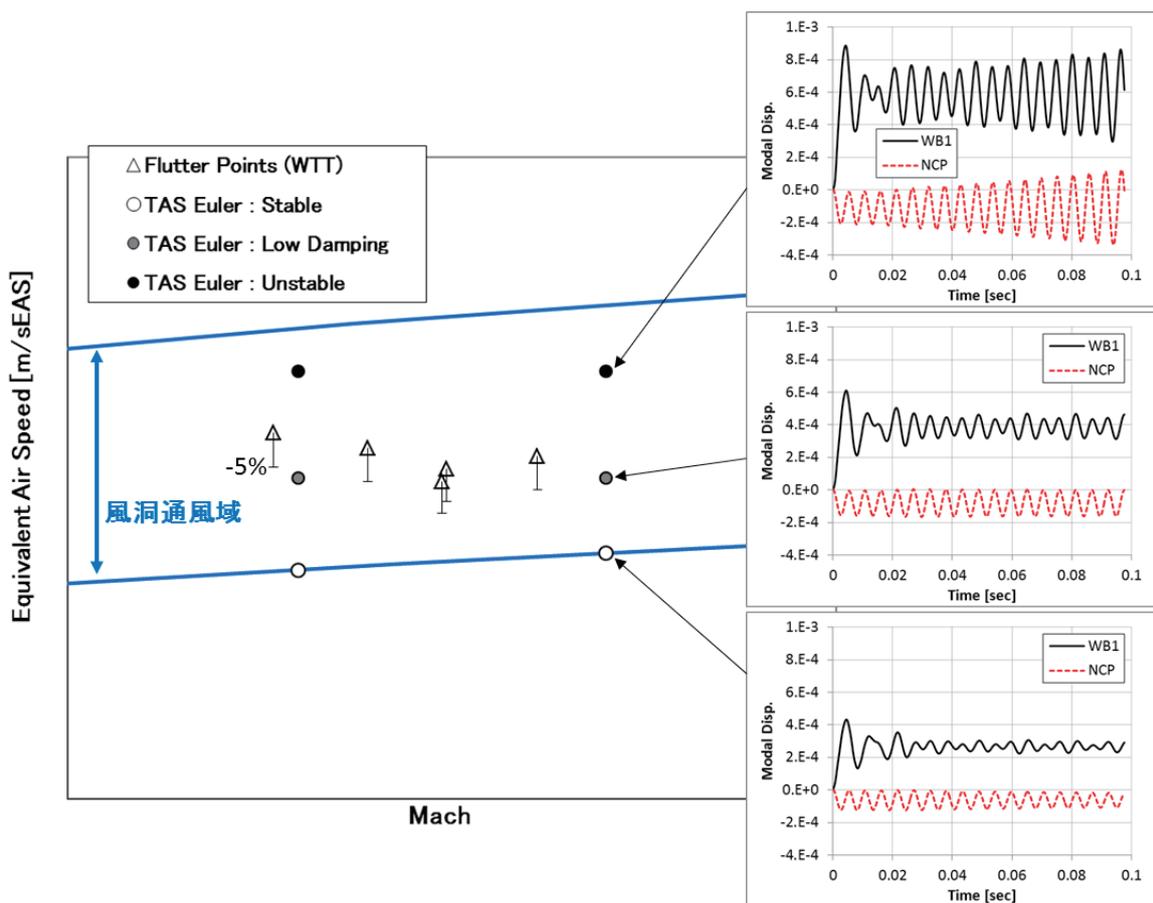


図5 MRJ主翼フラッタ模型 フラッタ境界

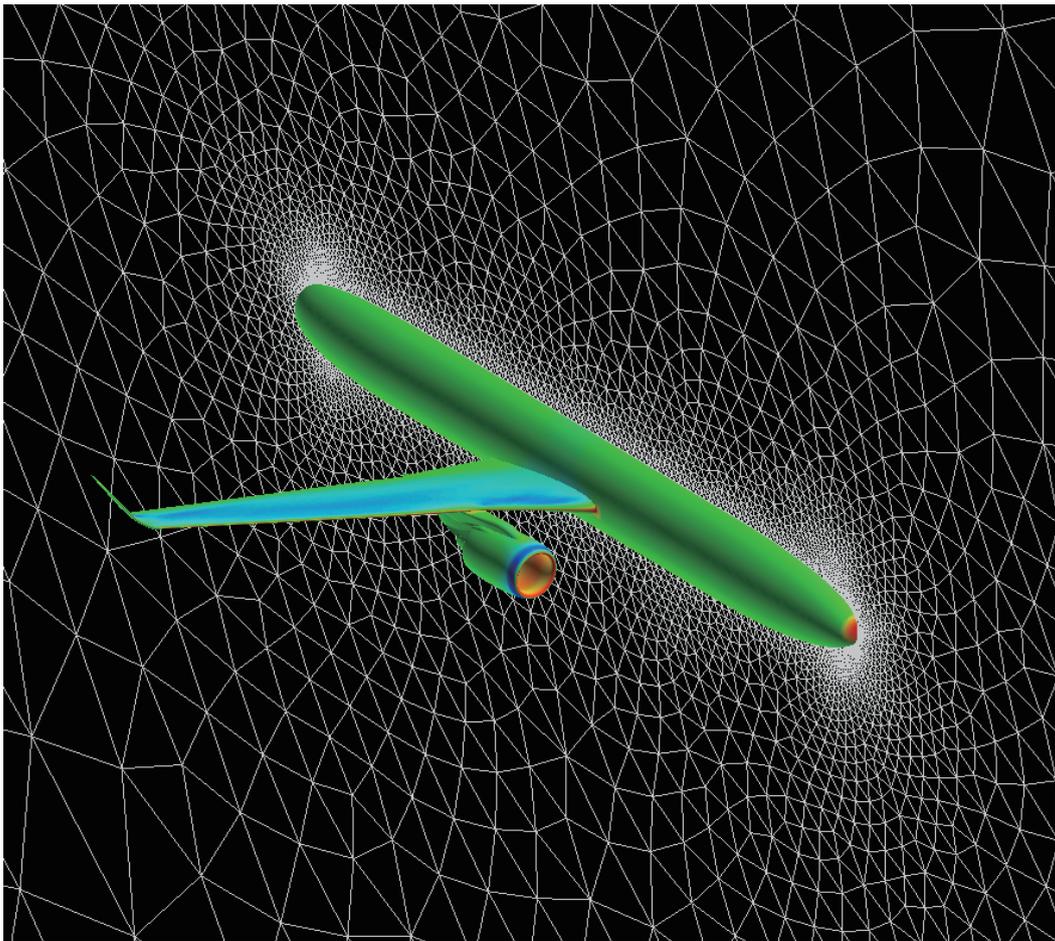


図6 MRJ主翼フラッタ模型 Euler計算格子と定常圧力分布

#### 4.2 MRJ尾翼フラッタ風洞試験

風洞試験では、エレベータ付きの水平尾翼と胴体フェアリングで構成されるセミスパン模型を使用し、試験は主翼フラッタ風洞試験と同様、三菱重工業（株）名航の高速風洞で実施した。模型の洞内設置状態を図7に、模型の3面図を図8に示す。水平尾翼とエレベータの主構造はアルミ製の桁リブ要素とCFRP外板で構成され、空力形状はバルサ材と樹脂で整形した。エレベータ部は3カ所のヒンジ金具で水平尾翼と結合し、翼根部のトルクチューブを介して風洞壁に固定する方式とした。模型のマス分布、剛性分布は想定される尾翼フラッタモードのうち、最も重要となる舵面フラッタを再現するよう設計した。この舵面フラッタはエレベータの回転モード（ELV-R）と水平尾翼の振り1次モード（HT1）の連成により発生する。模型の構造解析モデルをNASTRANで作成し、振動解析を実施した。振動解析結果を表2、図9に示す。代表的な振動モードについて、解析結果は振動試験結果と良好に対応しており、作成した構造解析モデルの妥当性が確認された。

風洞試験では、マッハ数を固定して風洞総圧（動圧）を段階的に上昇させ、フラッタが発生するポイントを慎重に調査し、複数のマッハ数条件でフラッタポイントを取得した。図10に模型のフラッタ境界について、風洞試験結果と解析結果を比較した例を示す。図中の縦軸・横軸の数値については、公開できない情報のため削除しているが、試験のマッハ数条件は遷音速領域であることに留意されたい。解析は開発コードのNavier-Stokes計算（粘性流）で実施した。解析に使用した計算格子と定常圧力分布を示す。解析で予測したフラッタポイントは試験結果と良好に対応しており、開発コードは尾翼の遷音速舵面フラッタを高精度に予測できることが確認された。

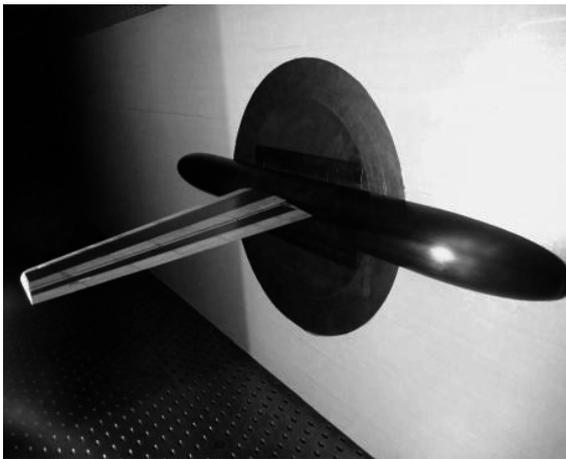


図7 MRJ尾翼フラッタ模型 洞内設置状態

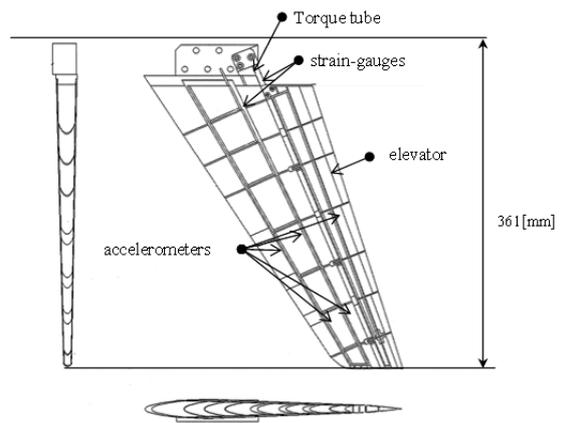


図8 MRJ尾翼フラッタ模型 3面図

表2 MRJ尾翼フラッタ模型 代表モードの固有振動数

Mode	GVT [Hz]	NASTRAN [Hz]	GVT/ NASTRAN [-]
HT 1 <sup>st</sup> Bending (HB1)	90.6	92.5	0.98
Elevator Rotation (ELV-R)	283.0	303.9	0.93
HT 1 <sup>st</sup> Torsion (HT1)	527.0	549.5	0.96

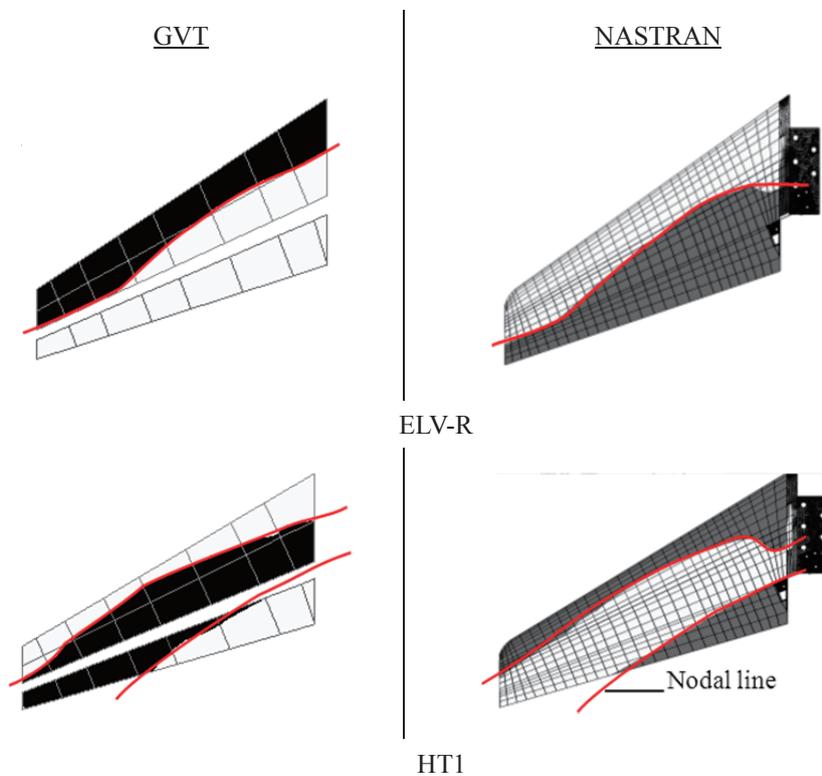


図9 MRJ尾翼フラッタ模型 振動モード形の比較 (ELV-R、HT1)

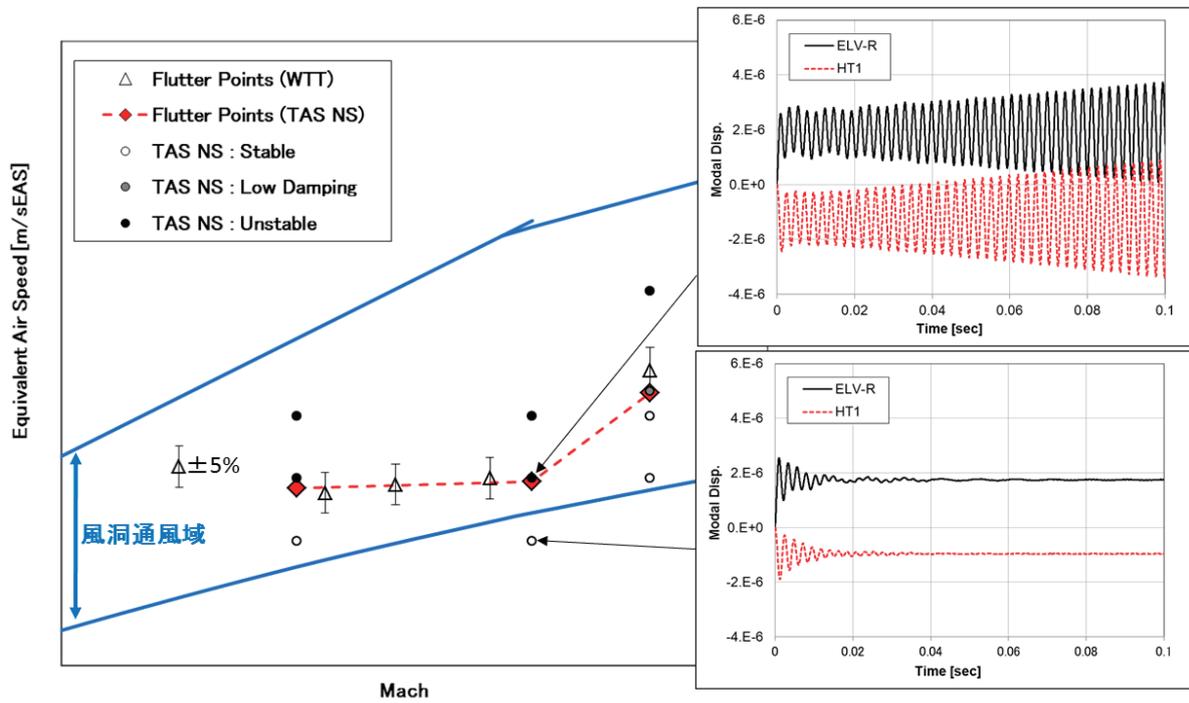


図 10 MRJ 尾翼フラッタ模型 フラッタ境界

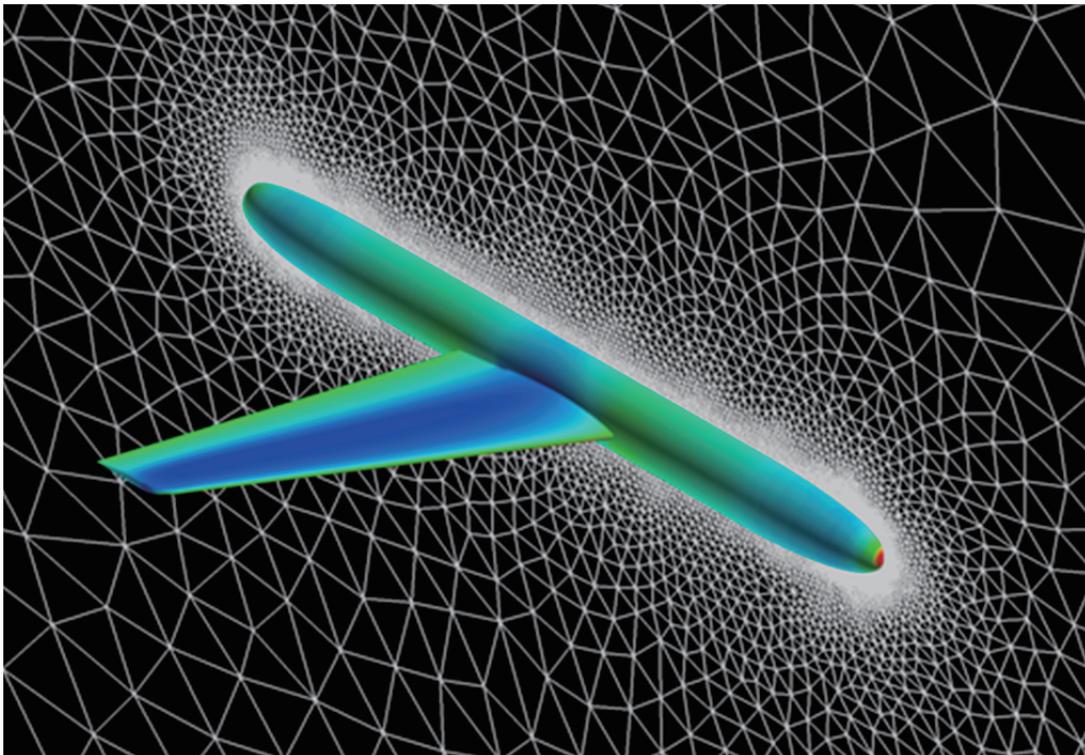


図 11 MRJ 尾翼フラッタ模型 Navier-Stokes 計算格子と定常圧力分布

## 5. おわりに

民間企業利用サービスにより、世界でもトップレベルの計算機環境を利用することで、当社の計算機環境では困難であった CFD 空力弾性解析の本格活用を MRJ 開発で実現することができた。解析コードの精度検証をフラッタ風洞試験で行い、主翼、尾翼で重要となる遷音速フラッタを高精度で予測できることが確認された。この解析コードを MRJ の設計段階から積極活用することにより、フラッタに代表される空力弾性不安定問題の設計リスクを最小限に抑え、飛行安全上のリスク低減を図ることができた。今後は飛行試験に向けた準備の中で解析コードを活用するとともに、飛行試験データを用いて解析コードのさらなる精度向上と高度化を図る予定である。

## 謝辞

本研究開発は、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。解析コードの開発では、東北大学の大林研究室、旧中橋研究室にご協力いただいた。また、計算機利用と解析コードのチューニングにあたっては、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。ここに感謝の意を表します。

## 参考文献

- [1] Nakahashi, K., Togashi, F., Fujita, T. and Ito, Y., “Numerical Simulations on Separation of Scaled Supersonic Experimental Airplane from Rocket Booster at Supersonic Speed,” AIAA Paper 2002-2843, June 2002.
- [2] Murayama, M. and Yamamoto, K., “Comparison Study of Drag Prediction for the 3<sup>rd</sup> CFD Drag Prediction Workshop by Structured and Unstructured Mesh Method,” AIAA Paper 2007-0258, June 2002.
- [3] Ito, Y. and Nakahashi, K., “Surface Triangulation for Polygonal Models Based on CAD Data,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 39, Issue 1, 2002.
- [4] Shrov, D. and Nakahashi, K., “A Boundary Recovery Algorithm for Delaunay Tetrahedral Meshing,” Proceedings of 5<sup>th</sup> International Conference on Numerical Grid Generation in Computational Fluid Simulations, Mississippi State, Mississippi, 1996, pp.229-238.
- [5] Ito, Y. and Nakahashi, K., “Improvements in the Reliability and Quality of Unstructured Hybrid Mesh Generation,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 45, Issue 1, May 2004, pp.79-108.
- [6] Obayashi, S., et al., “Convergence Acceleration of a Navier-Stokes Solver for Efficient Static Aeroelastic Computations,” *AIAA Journal*, Vol.33, No.6, 1995, pp.1134-1141.
- [7] Murayama, M., et al, “Unstructured Dynamic Mesh for Large Movement and Deformation,” AIAA paper 2002-0122.
- [8] Melville, R. B., et al., “Implementation of a Fully-Implicit, Aeroelastic Navier-Stokes Solver,” AIAA paper 97-2039.



## [報告]

## 平成 25 年度全国共同利用情報基盤センター顕彰について

第 21 回全国共同利用情報基盤センター長会議において、東北大学サイバーサイエンスセンター大泉健治共同研究支援係長に、平成 25 年度全国共同利用情報基盤センター顕彰「功績賞」を授与することが決定されました。本賞は、全国共同利用情報基盤センター及び国立情報学研究所の運用に顕著な貢献があった者に授与されるものです。

大泉健治氏は平成 7 年に東北大学大型計算機センターに採用となり、その後 18 年の永きにわたり全国共同利用の大規模計算システムの導入、運用管理等に多大な貢献をされてきました。

同氏は、システムの運用管理に従事するとともに、利用者である研究者からのプログラムに関する相談対応や利用者講習会の講師を長年努めており、特にサイバーサイエンスセンターがシステムの効率化を図るために実施している「プログラム高速化支援業務」にも中心的な立場で従事しています。

さらに、平成 22 年には、その経験を見込まれ、文部科学省研究振興局情報課にて日本における HPCI 整備を担当し、理化学研究所の「京」や情報基盤センター群のスーパーコンピュータから構成される我が国の高性能計算基盤の完成に大きく貢献しました。

以上のように、長年にわたり全国共同利用を推進し、情報基盤サービスの管理・運用に多大な貢献をしていることが、今回の受賞に至った理由となっています。

授賞式は、昨年 11 月 29 日（金）に開催された第 22 回全国共同利用情報基盤センター長会議・第 12 回学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点合同懇親会の冒頭で行われ、大泉健治係長他 5 名（北大・東京大・名古屋大）の受賞者の方々に表彰状と副賞（楯）が、手渡されました。



## 『受賞者のコメント』

東北大学情報部情報基盤課 大泉 健治

栄誉ある賞をいただき大変光栄に存じます。この受賞は、ひとえにシステム運用に関わるスタッフをはじめシステムをご利用くださる皆様のご指導とご支援によるものと心より感謝申し上げます。これを機に、情報基盤サービスの運用・管理業務に一層精進し、研究成果の創出に、また計算科学技術の発展につながるよう微力ながら尽力をいたす所存でございます。どうもありがとうございました。

## [報告]

## 平成 25 年度東北大学サイバーサイエンスセンター顕彰について

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、本センターを利用し顕著な貢献があった方や、長年にわたり本センターの運営に貢献した方などに対する顕彰制度を設けており、平成 25 年度は、本学の澤谷邦男名誉教授に功績賞を授与いたしました。

澤谷名誉教授は、平成 16 年度から継続的に本センターと共同研究を実施するなど、シミュレーション技術の高度化に取り組まれており、高度利用技術に関する研究開発において多くの成果を生み出されました。そこで得られた知見は、本センターの大規模科学計算システム的设计に生かされ、同システムの高度化に多大な貢献をされております。また、本センターの各種委員としてもセンター運営に多大な貢献をされてきました。

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

表彰式は、平成 26 年 2 月 24 日（月）本センターで行われた第 12 回情報シナジー研究会冒頭で行われ、小林広明センター長から澤谷名誉教授へ表彰状と副賞が手渡されました。



## 『受賞者のコメント』

東北大学名誉教授 澤谷 邦男

サイバーサイエンスセンター功績賞の授与、誠にありがとうございました。私が東北大学大型計算機センター（当時）を初めて利用したのは、1970 年に学部 4 年生になって研究室に配属され、卒業研究でプラズマ中のアンテナから放射される電子プラズマ波に関する研究を行った時です。それ以来、退職するまでの 44 年間、ユーザとして大型計算機のお世話になってきました。当初は余り複雑な問題を扱うことができませんでしたが、計算機の進歩に伴ってより複雑な問題にも挑戦することができ、いつも大型計算機の性能をフルに使わせてもらったと思います。海外のアンテナ・電磁界の研究者に比べると我が国の大学の研究者はいつも最新の計算機を使える環境にあり、計算の内容もかなり高度であります。ユーザはこの優位性を認識し、東北大学の大型科学計算システムを大いに活用して優れた研究成果をあげて下さる様に願っております。

## [報告]

**八巻研究員と渡辺前研究員と木下前研究員が  
電子情報通信学会学術奨励賞を受賞しました**

サイバーサイエンスセンター先端情報技術研究部の助教の八巻俊輔氏と、CSI 研究室の平成 23～24 年度の産学官連携研究員であった渡辺俊貴氏と木下峻一氏が、電子情報通信学会学術奨励賞を受賞しました。

八巻氏の受賞は、電子情報通信学会 2013 年総合大会における「A-4-23 方向統計学に基づく実信号の位相限定相関関数の統計的解析」(八巻俊輔・阿部正英・川又政征)と、電子情報通信学会 2013 年ソサイエティ大会における「A-4-28 方向統計学に基づく位相限定相関関数の評価指標」(八巻俊輔・阿部正英・川又政征)の発表の論文が高く評価されたものです。

渡辺氏の受賞は、電子情報通信学会 2013 年総合大会における「B-16-10 無線端末過密環境において優先度制御を実現するアクセス制御システム」(渡辺俊貴・木下峻一・山崎康広・後藤英昭・曾根秀昭)の発表の論文が高く評価されたものです。

木下氏の受賞は、電子情報通信学会 2013 年総合大会における「B-16-9 クライアント証明書を利用した耐災害性・耐障害性を有する無線 LAN ローミングシステム」(木下峻一・渡辺俊貴・山崎康広・後藤英昭・曾根秀昭)の発表の論文が高く評価されたものです。

(本賞は電子工学および情報通信に関する学問、技術の奨励のために有為と認められる新進の科学者または技術者に贈呈するもので、総合大会およびソサイエティ大会において優秀な論文を発表した者から選定されるものです。)

## [報告]

## サイバーサイエンスセンターとドイツジーゲン大学情報メディア技術センターが 研究協定締結

2014年3月26日(水)にサイバーサイエンスセンターとドイツジーゲン大学情報メディア技術センターは、これまでの高性能計算に関する協力関係をより一層強化発展させるために、研究協定を締結しました。

協定の締結は、サイバーサイエンスセンターにおいて、小林広明センター長とジーゲン大学情報メディア技術センターのローラーセンター長との間で調印されました。

今回、研究協定を締結することにより、計算科学分野、および計算機工学分野における研究領域において、両センターが連携・協力を効果的に実施し、両国の学術及び科学技術の振興を推進することとしています。

具体的には次の事項について、連携・協力を推進します。

1. 技術交流・情報交換、及び人材交流・人材育成
2. セミナー、シンポジウム等の共同実施
3. 技術的な評価のためのコンピュータシステムおよびプログラムの相互利用
4. コンピュータプログラムや高性能計算技術に関する共同研究等による研究開発
5. 情報通信インフラの構築運用技術と学術応用

また、両センターは、次の事項について共同研究・開発を推進します。

1. ハイブリッドコンピュータアーキテクチャ
2. 大規模・高メモリバンド幅並列処理技術
3. 大規模アプリケーションとそれらのハードウェア特性
4. マルチスケール・マルチフィジックス連成計算技術
5. ビッグデータ管理技術
6. セキュア、かつスケーラブルなネットワーク技術
7. 遠隔可視化

ジーゲン大学(University of Siegen)は、1972年に設立されたドイツ中西部ノルトライン＝ヴェストファーレン州に位置する総合大学です。ジーゲン大学は4つの学部から構成され、2014年現在、約2万人の学生を擁しています。

今回共同研究協定を締結したジーゲン大学情報メディア技術センターは、ジーゲン大学の学内ネットワーク、高性能計算資源を含む情報基盤の整備・運用と高性能計算技術、ネットワーク技術、メディア管理技術に関する研究開発を目的に2005年に設立されました。



## [報告]

## 第19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は、ドイツのシュトゥットガルト大学高性能計算センター(HLRS)と NEC の協力を得て、2014年3月27日(木)～3月28日(金)に第19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」(通称 HPCI FS)の最終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とそのためのアプリケーションの分析、およびこれらアプリケーションに適した HPC システム実現のための要素技術に関する調査研究結果の報告を中心にプログラムを編成しました。また、東京大学情報基盤センター長石川裕先生からは石川先生が中心となって理研で検討を進めているフラグシップマシンについてのご講演と、理研丸山直也氏からは理研 HPCI FS アプリチームで検討を進めている将来のエクサスケールシステムの評価のためのベンチマークアプリケーションの検討結果についてのご講演をいただきました。さらに NEC 星宗王氏には、昨年6年ぶりに発表があった新しいベクトル型スーパーコンピュータ SX-ACE に関する講演をお願いしました。

ワークショップの冒頭、文部科学省研究振興局計算科学技術推進室川口悦生室長から我が国の HPCI 政策に関するご講演があり、また HLRS マイケルレッシュセンター長をはじめ海外有識者からは、今後のスーパーコンピュータセンターのあり方や、HPC のクラウド化やビッグデータ解析、さらには防災・減災、ものづくりのための最新のシミュレーション技術に関する研究成果の発表がありました。

2日間のワークショップでは、延べ約130名の参加者を得て、活発な議論が交わされました。第20回ワークショップは、2014年12月15～16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。



青木孝文東北大学副学長（情報担当）のご挨拶



HLRS レッシュ教授の基調講演

## [報告]

## 第12回 情報シナジー研究会報告

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、先端的情報技術の研究発表と情報交換を目的として情報シナジー研究会を企画・開催しております。第12回研究会が以下のとおり開催されました。

日時：平成26年2月24日（月） 10:00～12:00

会場：サイバーサイエンスセンター・本館5階・講義室

プログラム：

10:00-10:10

平成25年度 東北大学サイバーサイエンスセンター顕彰 表彰式

10:10-10:15

開会

10:15-10:35

OpenMP Parallelization using Compile Log of Automatic Parallelization

Azmir Ridzuan bin Azlan <sup>(1)</sup>, Kazuhiko Komatsu <sup>(2)</sup>, Ryusuke Egawa <sup>(2)</sup>, Hiroyuki Takizawa <sup>(3)</sup>, Hiroaki Kobayashi <sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup> Faculty of Engineering, Tohoku University, <sup>(2)</sup> Cyberscience Center, Tohoku University,

<sup>(3)</sup> Graduate School of Information Sciences, Tohoku University

10:35-10:55

アクセラレータのためのプログラム最適化とその性能評価

平井亮太 <sup>(1)</sup>, 平澤将一 <sup>(2)</sup>, 滝沢寛之 <sup>(2)</sup>, 小林広明 <sup>(3)</sup>

<sup>(1)</sup> 東北大学工学部, <sup>(2)</sup> 東北大学大学院情報科学研究科, <sup>(3)</sup> 東北大学サイバーサイエンスセンター

10:55-11:15

TOPIC参加組織におけるHTTPSサーバの運用状況

水木敬明 <sup>(1)</sup>, 森倫子 <sup>(2)</sup>, 曾根秀昭 <sup>(1)</sup>

<sup>(1)</sup> 東北大学サイバーサイエンスセンター, <sup>(2)</sup> 東北大学情報部情報基盤課

11:15-11:35

フリーアドレスオフィスにおけるネットワークシステムの省電力化のための自律的制御手法

栗原孝太 <sup>(1)</sup>, 和泉諭 <sup>(2)</sup>, 阿部亨 <sup>(3)</sup>, 菅沼拓夫 <sup>(3)</sup>

<sup>(1)</sup> 東北大学大学院情報科学研究科, <sup>(2)</sup> 東北大学電気通信研究所, <sup>(3)</sup> 東北大学サイバーサイエンスセンター

11:35-11:55

方向統計学に基づく位相限定相関関数の統計的解析

八巻俊輔 <sup>(1)</sup>, 阿部正英 <sup>(2)</sup>, 川又政征 <sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup> 東北大学サイバーサイエンスセンター, <sup>(2)</sup> 東北大学大学院工学研究科

11:55-12:00

閉会

## [展示室便り⑫]

## 古 Mac、ワークステーション、PDA

佐藤 大

東北大学病院メディカル IT センター

サイバーサイエンスセンター展示室（情報処理学会認定分散コンピュータ博物館）には、大型コンピュータや関連資料の他にも収蔵品があります。最近昔の Macintosh（通称：古 Mac）などの収蔵品が増え、その一部が展示されていますので、ご紹介します。

## 【古 Mac たち】

## ・ Macintosh Plus, Macintosh SE/30

アップル社は 1984 年 1 月にパーソナルコンピュータ Macintosh を発表しました。9 インチ CRT 内蔵の一体型のデザインは、その後のモデルにも引継がれました。メモリが 128KB だった初期型の 2 年後、1986 年に発売されたのが Macintosh Plus で、日本語が使える初めての Macintosh でした。展示品には、内蔵のファンで筐体内部を強制的に冷やす System Saver Mac (Kensington) がついています。

名機として名高い SE/30 もほぼ同形の一体型ですが、CPU に MC68030 を搭載し最大で 128MB ものメモリを搭載できました。



写真 1 右が Macintosh Plus  
左が Macintosh SE/30

## ・ Macintosh II, Macintosh IIcx

一方 Macintosh II は、大型の筐体を持つ初期のデスクトップ機です。NuBus スロット 6 基を備え、カラー表示も可能でした。このモデルを小さくしたのが IIcx で。縦にも横にも置けるデザインになっていました。A4 版全体を表示できる縦型モニタ Macintosh Portrait Display と一緒に展示してあります。



写真 2 右が Macintosh II  
左が Macintosh IIcx

## ・ Macintosh LC575

1992 年になると、15 インチ CRT 内蔵の一体型モデルのシリーズ展開が始まりました。数多くの機種が続々と登場しましたが、その中で 1994 年に発売されたのが LC575 です。CPU は低コスト化のためにコプロセッサを省略した MC68LC040 を搭載し、標準 5MB（最大 68MB）のメモリを搭載していました。

古 Mac 改造マニアの間では、ロジックボードが ColorClassic の高速化に使える機種として有名です。



写真 3 Macintosh LC575

#### ・ Macintosh Quadra 840AV, Power Macintosh 8500

モトローラの MC680\*0 シリーズの CPU を搭載した Macintosh (m68k Mac) では、最上位機種に Quadra の名前が与えられていました。中でも 1993 年に発売された Quadra 840AV は、m68k Mac では最高の性能を誇る、憧れのフラッグシップモデルでした。

CPU に m68k シリーズを使用していたそれまでの Macintosh に代わり、PowerPC (PPC) を搭載した機種が Power Macintosh (PM) シリーズです。初代 PM は PowerPC 601 を搭載しましたが、PM8500 は 2 代目で、当時最速とうたわれた PowerPC 604 を搭載していました。初代 PM には NuBus や SIMM が使われていましたが、2 代目からは PCI スロットと DIMM が取って代わりました。



写真4 右が Macintosh Quadra 840AV  
左が Power Macintosh 8500

#### ・ Apple Workgroup Server 95

あまり知られていないのですが、アップル社の製品には Macintosh と並んでサーバ機もありました。その中で最初に発売されたのが Apple Workgroup Server 95 で、1993 年に登場しています。Quadra 950 をベースにしており CPU は MC68040、メモリは最大 256MB まで搭載できます。OS は、A/UX 3.0.1 が同梱されていました。これはアップル社が開発した System V 系の UNIX で、MacOS 用のアプリが使えるエミュレータがついていました。このため Mac OS アプリと X Window System 用のウィンドウが同じ画面に並ぶという、不思議な光景を見ることができました。ちなみに Mac OS でも動作します。



写真5 Apple Workgroup Server 95

#### ・ Power Macintosh G3 DT, Power Macintosh PMG4

代々の Macintosh の機種展開の中で、m68k から PPC (つまり CISC から RISC) への転換と並んで、大きな転換点となっているのが、この Power Macintosh G3 です。展示品はデスクトップタイプである PM G3 DT ですが、ミニタワータイプの PM G3 MT も同時に発売されました。

同じ名前を持つ PM G3 でも、1 年半ほど後には青/白ツートンのモデルが発売されました。円筒形になる直前の PM G5 のデザインにも繋がる形状 (通称ポリタンク) を持つこのモデルは、一世を風靡した iMac など、カラフルなデザインの製品シリーズの先駆けとなりました。

ポリタンマシンの 2 代目が、この PMG4 です。外観は青/白ツートンからグレーになりました。この筐体の特徴は、何よりも内部アクセスが非常に簡単なことにあります。展示品は側面を開いた状態になっていますが、この状態にするのに必要なのは、指 2 本だけ (1 本はロックを外す、もう 1 本は開放レバーを引っ張る) です。これだけの操作で筐体内部の全ての要素にアクセスできるという、画期的なデザインでした。



写真6 右が Power Macintosh G3 (PM G3 DT)  
左が Power Macintosh PMG4

・ノートパソコン (PowerBook 100, PowerBook 5300)

Macintosh シリーズには、ノートパソコンもあります。その初代が 1991 年に発売された PowerBook (PB)100 です。1989 年に発売された Macintosh Portable の重量が 7kg 強だったのに対して PB100 は約 2.3kg と、現実的に持ち運べそうな重さになりました。当時はまだトラックパッドが無く、トラックボールを使用していました。

一方 PB シリーズの後期 1995 年に登場した PB 5300 は、PowerPC 603e を搭載し 100MHz で駆動します。重量は約 2.8kg で、トラックパッドを搭載していますが、全体的なデザインや色は PB 100 と大きくは変わっていません。



写真 7 右が PowerBook 100  
左が PowerBook 5300

・PIONNER MPC-GX1

PM が出始めた 90 年代半ばには、各社から Macintosh 互換機が出ていました。1995 年にパイオニアから発売された MPC-GX1 は、PM 6100 相当の中身にアンプと大型スピーカを内蔵して、当時流行っていた DTM (DeskTop Music) に特化したモデルでした。その音質は (パソコンとしては) 圧巻です。



写真 8 PIONNER MPC-GX1

・Newton Message Pad 130

Newton は世界初の個人用情報端末 (PDA) で、1992 年に発表されました。非常に優秀な手書き文字認識システム Rosetta を搭載し、自然で直感的なインターフェイスを持っていました。ファックスやメール、赤外線通信などの機能も備え、熱烈なファンを獲得していました。しかしさすがに当時の技術レベルでは持ち歩くには大きすぎて、あまり売れなかったようです。MessagePad130 は 1996 年に発売されたモデルです。



写真 9 Newton Message Pad 130

【NeXT, SUN 製品他】

・NeXTstation Turbo

スティーブ・ジョブズが 1985 年に創業した NeXT が発売したワークステーション NeXTstation の第 2 世代が、この Turbo です。搭載 OS である NeXTSTEP は、オブジェクト指向を大幅に取り入れ革新的なユーザインタフェースを持つことで有名です。NeXT 社は 1996 年にアップル社に買収され、NeXTSTEP は Mac OS X の基盤となりました。



写真 10 NeXTstation Turbo

・Sun SPARCStation IPX

SPARCstation は、サン・マイクロシステムズのワークステーションシリーズです。1989 年からピザボックス、ランチボックス、モニター体型の多くの製品を展開し、1997 年発売の SPARCStation20 に至るまで、絶大な人気を博しました。IPX はランチボックス型の筐体を持ち、ほぼ同じサイズの HDD と重ねるととても収まりが良いデザインでした。

### ・ Sun Ultra 20

サン・マイクロシステムズは、SPARCstation の後に 64bit の Ultra シリーズを展開しました。当初は CPU に UltraSPARC を使用していましたが、後に PCI や ATA などの採用による低価格化で、当時増えつつあったパソコン+Linux の組合せに対抗しました。タワー型の大型筐体を持つ Sun Ultra 20 は、そのような時期 2005 年に登場しました。



写真 11  
右が Sun SPARCStation IPX  
真ん中が Sun Ultra 20  
左が Sun Cobalt QUBE

### ・ Sun Cobalt QUBE

Cobalt 社は 1996 年に創業したサーバアプライアンスのメーカーです。2000 年にサン・マイクロシステムズに買収されました。

CobaltQUBE は、その名の通りコバルト色の立方体の美しい筐体を持っています。展示機は買収後の製品です。メール、ウェブ等の多彩なサーバ機能を持ちながら、簡単な設定だけで使用することができました。

### ・ Sony NEWS NWS-5000UA

以前はソニーもワークステーションを作っていました。NEWS というシリーズ名で 1987 年から発売されていますが、NWS-5000UA はかなり後期の 1993 年に登場しました。搭載していた NEWS-OS Release 4 は、とても素直な 4.3BSD でした。ちなみに、その次の Release 6 は System V Release4.2 をベースにしていました。



写真 12 Sony NEWS NWS-5000UA

### ・ ぴゅう太

トミーから 1982 年に発売されたゲーム機です。モニタの代わりにテレビに繋いで使います。トミー製なので玩具なのですが、日本語 BASIC を搭載していて自分で 16 色カラーのグラフィックゲームを作ることもできました。ちなみにファミコンの登場は、ぴゅう太の翌年です。



写真 13 ぴゅう太

今回ご紹介した古 Mac 等の多くは、私の手元にあった物を寄贈させて頂きました。東日本大震災による書籍流をくぐり抜けた品々です。私の収集癖を知った TAINS 利用研究会（というのが以前あった）の仲間たちから、捨てるくらいならと送りつけて頂いた物が多く含まれます。そのような経緯もあり東北大に保管されるのが一番と考えた結果、ご担当の方々に四畳半一部屋分の機材を整理するという大変なお手間を取らせてしまいました。

スーパーコンピュータ関連・ネットワーク関連の展示とともに、多くみなさまにご覧いただければ幸いです。平日午前 9 時から午後 5 時までどなたでも見学が可能です。見学希望の方は、当日でも構いませんので共同利用支援係（022-795-3406）までご連絡ください。



**[Web 版大規模科学計算システムニュースより]**

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

**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. 163)**

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

利用を希望される場合は、以下の情報を添えて、edu-prog@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. 163)**

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)6251  
 E-mail：uketuke@isc.tohoku.ac.jp

(共同利用支援係)

## 並列コンピュータシステムの更新について（3）(No. 165)

### —新並列コンピュータ試験運用について—

新並列コンピュータ LX 406Re-2 の導入に伴う試験運用を4月1日（火）10:00から開始します。以下では、試験運用期間中の注意点について説明します。利用法の詳細は、以下のホームページから「並列コンピュータ LX 406Re-2」および「アプリケーションサービス」をご覧ください。  
 なお、正式運用の開始は、4月7日（月）10:00です。

大規模科学計算システムホームページ：<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/>

#### 1. 試験運用期間の利用負担金について

試験運用期間は、4月1日(火)10:00から4月7日（月）10:00までです。試験運用期間における並列コンピュータの演算負担経費については、課金いたしません。SX-9の演算負担経費については、通常通り課金いたします。なお、この期間内に終了しないジョブは、正式運用に引継ぎ処理いたします。4月7日（月）10:00を超えて実行されたジョブは、ジョブの開始時から課金の対象となりますのでご注意ください。ジョブを中断する場合は、正式運用開始前にジョブの削除をお願いいたします。

#### 2. ログインサーバの変更について

新システムでは接続先ホスト名が以下の通り変更となります。試験運用開始後は、従来のホスト名（gen.isc.tohoku.ac.jp）では接続できません。

接続先ホスト名：[front.isc.tohoku.ac.jp](http://front.isc.tohoku.ac.jp)

また、並列コンピュータのコンパイラが更新されましたので、ジョブの投入前に再コンパイルをお願いいたします。SX-9のコンパイラに変更はありません。

表1. コンパイルコマンドの変更

旧システム	f95	mpif95	cc	c++	mpicc	mpic++
新システム	ifort	mpiifort	icc	icpc	mpiicc	mpicpc

3. ジョブクラス

試験運用期間における並列コンピュータのジョブクラスは、次表の通りです。

表2. 並列コンピュータのジョブクラス

システム	処理方法	キュー名	利用ノード数 (コア数)	時間制限 [時間]	メモリ容量 [GB]
並列コンピュータ LX 406Re-2	会話型処理	-	1 (6)	1 ※2	8
	バッチ処理 ※1	ns	1 (1)	無制限	5
	〃	nh	1 (24)	1 ※3	128
	〃	n1	1 (24)	無制限	128
	〃	n6	6 (144)	〃	128×6
	〃	n12	12 (288)	〃	128×12
	〃	n24	24 (576)	〃	128×24
	〃	mg (アプリケーション専用)	1 (24)	〃	128

※ 1. 2ノード以上を利用した並列実行にはMPIの利用が必用

※ 2. CPU時間の合計時間

※ 3. 経過時間

(スーパーコンピューティング研究部, 共同利用支援係, 共同研究支援係)

### 共同利用支援係（受付窓口）の移動について (No. 165)

これまで、1階で行っていた本センター利用者向けの窓口業務（各種申請書の受付、GaussView CD-ROMの貸し出し等）は、3月13日より3階共同利用支援係で行うことになりましたのでお知らせいたします。

以下、本館内案内を参考にセンターをご利用くださるようお願い申し上げます。

<本館案内> <http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/contact/>

(共同利用支援係)

### 大規模ファイル領域の利用について (No. 166)

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用とする利用者に、高速な入出力が可能な大規模ファイル領域を提供しています。大規模ファイル領域へは並列コンピュータからのみアクセス可能です。

**【利用方法】**

並列コンピュータ ([front.isc.tohoku.ac.jp](http://front.isc.tohoku.ac.jp)) にログイン後、ユーザディレクトリ上で以下のコマンドを実行し、大規模ファイル領域に作成されたディレクトリのシンボリックリンクを作成します。大規模なデータは、シンボリックリンクとして作成したディレクトリ内に保存してください。大

規模ファイル領域は従来のユーザ領域と比べ、並列コンピュータとの I/O 性能が優れています。

```
yourhost$ ssh front.isc.tohoku.ac.jp -l xxxx (利用者番号)
```

```
[front1 ]$ ln -s /par/short/xxxx (利用者番号) ./dir_A (任意のディレクトリ名)
```

#### 【ファイル負担経費】

ファイル負担経費は 1TB まで無料、追加容量 1TB につき年額 3,000 円です。追加容量の申請は、以下のページより「ファイル容量【追加／削減】申請書」をダウンロードして必要事項を記入の上、共同利用支援係までご提出ください。

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

送付先については以下のページをご覧ください。

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

(共同利用支援係, 共同研究支援係)

## 新並列コンピュータでのアプリケーションサービスについて (No. 166)

並列コンピュータの更新に伴い、サービスしている各アプリケーションのバージョンが以下の通りとなります。どうぞご利用ください。

MSC. Marc/Mentat 2013  
Gaussian09 D.01  
Mathematica 9.0.1  
MATLAB R2013b

利用方法については下記ページをご覧ください。

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

また利用に関してご不明な点等がありましたら、利用相談までお問い合わせください。

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

(共同利用支援係)

## 平成 26 年度の共同研究について (No. 167)

本センターでは、大規模科学計算システムの利用者と共同でプログラムやアルゴリズムを開発する共同研究を行っています。今年度の募集に応募されたものについて共同研究専門部会で審査の結果、以下の 9 件が採択されましたのでお知らせします。

No.	申請者	所属	研究課題
1	有馬 卓司	東京農工大学大学院 先端電気電子部門	アンテナ放射効率低下メカニズムの解明と放射効率改善手法に関する研究
2	岩崎 俊樹	東北大学大学院理学 研究科	ダウンスケール数値シミュレーションに関する研究
3	大見 敏仁 横堀 壽光	東北大学大学院工学 研究科	動脈瘤による血管壁拍動挙動乱れの数値解析
4	河野 裕彦	東北大学大学院理学 研究科	密度汎関数緊密結合法を用いたナノスケール分子のナノ秒化学反応シミュレーション
5	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
6	茂田 正哉	大阪大学接合科学研究 所	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
7	陳 強	東北大学大学院工学 研究科	大規模問題のための超高速モーメント法に関する研究
8	豊国 源知	東北大学大学院理学 研究科	円筒座標系 2.5 次元差分法による地震波伝播モデリング手法の開発
9	森川 良忠	大阪大学大学院工学 研究科	界面反応の第一原理シミュレーション

(スーパーコンピューティング研究部、共同研究支援係)

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

東北大学サイバーサイエンスセンター内 情報部情報基盤課共同利用支援係

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

TEL 022-795-3406

## スタッフ便り

「京」の100倍の演算性能持つスーパーコンピュータを開発する旨、3月末に理研より発表がありました。計算機はいったいどこまで速くなるのでしょうか。

さて、当センターのスーパーコンピュータシステムは、規模は小さいものの、見学者の多くがその大きさに圧倒されます。昭和の流行語に「大きいことはいいことだ」というのがありますが、計算機は同じ性能なら小さければ小さいほど良いというのを、すっかり忘れてしまいそうです。電気信号は光速を越えられないので、数GHzで動作しているCPUから見ると、数十cmほど先にあるメモリまでデータを取りに行くだけでも、演算回数の大きなロスになります。そこで、大規模なシステムでは演算の局所性が重要になるわけですが、このことは、高速に解ける問題に制約があることを意味します。昔のプログラムをそのまま新しい計算機に乗せても、性能が出ないことが多々あります。CPUやネットワークの高速化ばかりでは不十分で、問題の解法をいかに工夫して計算機に乗せるか……この辺が、利用者とセンター職員の腕の見せどころです。

スーパーコンピュータの更新時期が近づいてきましたが、新しい建物で新システムが稼働する日が、とても楽しみです。[後藤英昭]

青葉山キャンパス、新キャンパスの建築もいよいよ本格化してきました。これまで仮設の建物で苦労されていた方々は一日も早い完成を待っていることでしょう。環境が整い、さらに東北大学の研究・教育の発展が加速することが楽しみです。

しかし、その一方で青葉山キャンパス全体での駐車場の問題も気になるところです。

CO<sub>2</sub>を排出する、限りある化石燃料を消費する等、悪者にされがちな車ですが、通勤の時間が短縮できる、荷物を運ぶのに便利、体力的に楽、安全、みんなが車を購入・維持することで日本の経済に貢献する、等々メリットも大きいと思います。いずれも場合によって逆に短所になることもあるかもしれませんが、多くの教職員や学生が車で通勤・通学しているという事実はやはり代えがたいメリットがあるからではないでしょうか。とは言え、駐車場の土地、整備費用という大きな問題もありますし難しいですね。みんなで知恵（やお金）を出しあって解決できるといいのですが…。あるいは地下鉄東西線の開通によって無事解決して杞憂になるといいですね。[N.M]

### 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 新規採用・退職者のお知らせ

#### [新規採用]

2014. 4. 1 齋藤敦子 (共同研究支援係・技術一般職員)  
2014. 4. 1 和泉 諭 (情報通信基盤研究部・産学官連携研究員)  
2014. 4. 1 堀野 碧 (情報通信基盤研究部・事務補佐員)

#### [退職]

2014. 3. 31 澤田宏史 (CSI研究室・産学官連携研究員)

### 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 佐藤恵美子 大泉健治 小野 敏  
斉藤くみ子



サイバーサイエンスセンター本館前  
整備中の青葉山新キャンパス

平成 26 年 4 月発行

編集・発行 東北大学  
サイバーサイエンスセンター  
仙台市青葉区荒巻字青葉 6-3  
郵便番号 980-8578

印刷 東北大学生生活協同組合  
プリントコープ

## システム一覧

計算機システム	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	front.isc.tohoku.ac.jp	LX 406Re-2

## 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

## スーパーコンピュータのジョブクラスと制限値

計算機システム	処理方法	キュー名	CPU 時間制限 [時間]	メモリ容量 [GB]
スーパー コンピュータ SX-9	会話型処理	- (4cpu)	1	8
	バッチ処理	ss (4cpu)	1	256
		s (4cpu)	無制限	32
		p8 (8cpu)	〃	512
		p16 (16cpu)	〃	1024
		p32 (32cpu)	〃	1024×2
		p64 (64cpu)	〃	1024×4

## 並列コンピュータのジョブクラスと制限値

計算機システム	処理方法	キュー名	利用ノード数 (コア数)	時間制限 [時間]	メモリ容量 [GB]
並列コンピュータ LX 406Re-2	会話型処理	-	1 (6)	1 ※2	8
	バッチ処理 ※1	ns	1 (1)	無制限	5
		nh	1 (24)	1 ※3	128
		n1	1 (24)	無制限	128
		n6	6 (144)	〃	128×6
		n12	12 (288)	〃	128×12
		n24	24 (576)	〃	128×24
		mg (アプリケーション専用)	1 (24)	〃	128

※ 1. 2ノード以上を利用した並列実行にはMPIの利用が必須

※ 2. CPU時間の合計時間

※ 3. 経過時間

# 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.47 No.2 2014-4

[大規模科学計算システム]	
並列コンピュータ LX 406Re-2 の利用法 .....	1
アプリケーションサービスの紹介 .....	25
三次元可視化システムの紹介 .....	47
[お知らせ]	
平成 26 年度サイバーサイエンスセンター講習会案内 .....	48
平成 26 年度(4 月～9 月)の負担金制度について .....	49
新棟建築工事期間中の出入口等の変更について .....	52
[共同研究成果]	
グリーン関数法を用いた有機分子における 紫外光電子スペクトルの理論計算 .....	山崎 馨 53 河野 裕彦
気候モデルデータのダウンスケーリングによるヤマセの将来変化 .....	島田 照久 59 沢田 雅洋 吉田 龍平 岩崎 俊樹
[民間企業利用サービス利用成果]	
民間航空機開発における大規模空力弾性解析シミュレーションの適用 .....	森野 裕行 67
[報告]	
平成 25 年度全国共同利用情報基盤センター顕彰について .....	77
平成 25 年度東北大学サイバーサイエンスセンター顕彰について .....	78
八巻研究員と渡辺前研究員と木下前研究員が電子情報通信学会学術奨励賞を 受賞しました .....	79
サイバーサイエンスセンターとドイツゲーゲン大学情報メディア技術センターが 研究協定締結 .....	80
第 19 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 .....	81
第 12 回情報シナジー研究会報告 .....	83
[展示室便り⑫]	
古 Mac、ワークステーション、PDA .....	佐藤 大 84
[Web 版大規模科学計算システムニュースより]	
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.163) .....	88
民間企業利用サービスについて(No.163) .....	88
並列コンピュータシステムの更新について(3)(No.165) .....	89
共同利用支援係(受付窓口)の移動について(No.165) .....	90
大規模ファイル領域の利用について(No.166) .....	90
新並列コンピュータでのアプリケーションサービスについて(No.166) .....	91
平成 26 年度の共同研究について(No.167) .....	92
執筆要項 .....	93
スタッフ便り .....	94