



TOHOKU
UNIVERSITY

ISSN 2436-0066

東北大学
サイバーサイエンスセンター

大規模科学計算システム広報

SENAC

Vol.53 No.2 2020—4



Cyberscience
Center

Supercomputing System
Tohoku University

www.ss.cc.tohoku.ac.jp

大規模科学計算システム関連案内

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

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

階	係・室名	電話番号(内線)* e-mail	主なサービス内容	サービス時間
				平 日
一階	利用相談室	022-795-6153 (6153) sodan@cc.tohoku.ac.jp 相談員不在時 022-795-3406 (3406)	計算機利用全般に関する相談 大判プリンタ、利用者端末等の利用	8:30～17:15 8:30～21:00
	利用者談話室	(3444)	各センター広報の閲覧 自販機	8:30～21:00
	展 示 室 (分散 コンピュータ博物館)*	*見学をご希望の方は共同利用 支援係までご連絡ください。	歴代の大型計算機等の展示	9:00～17:00
	可視化機器室	(3428)	三次元可視化システムの利用	9:00～21:00
三階	総務係	022-795-3407 (3407) cc-som@grp.tohoku.ac.jp	総務に関すること	8:30～17:15
	会計係	022-795-3405 (3405) cc-kaikai@grp.tohoku.ac.jp	会計に関すること、負担金の請求に関すること	8:30～17:15
	共同利用支援係 (受 付)	022-795-3406 (3406) 022-795-6251 (6251) uketuke@cc.tohoku.ac.jp	利用手続き、利用相談、講習会、ライブラリ、見学、アプリケーションに関すること	8:30～17:15
	共同研究支援係	022-795-6252 (6252) rs-sec@cc.tohoku.ac.jp	共同研究、計算機システムに関すること	8:30～17:15
	ネットワーク係	022-795-6253 (6253) i-network@grp.tohoku.ac.jp	ネットワークに関すること	8:30～17:15
	情報セキュリティ係	022-795-3410 (3410) i-security@grp.tohoku.ac.jp	情報セキュリティに関すること	8:30～17:15
四階	研究開発部	022-795-6095 (6095)		
五階	端末機室	(3445)	PC 端末機(X 端末)	8:30～17:15

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

本誌の名称「SENAC」の由来

昭和 33 年に東北地区の最初の電子計算機として、東北大学電気通信研究所において完成されたパラメロン式計算機の名前で SENAC-1 (SENdai Automatic Computer-1) からとって命名された。

[共同研究成果]

非断熱分子動力学法の分子会合体への適用： CO₂ 二量体カチオンの光解離反応シミュレーション

前田 憲哲,¹ 菅野 学,¹ 花崎 浩太,² 中島 祐司,¹ 伊藤 悠吏,¹
奥津 賢一,¹ 中野 元善,¹ 大下 慶次郎,¹ 美齊津 文典,¹ 河野 裕彦¹
¹ 東北大学大学院理学研究科化学専攻
² 京都大学福井謙一記念研究センター

分子は原子核と電子から構成され、それぞれの運動は異なった時間スケールを持つ。両者の間に働く振電相互作用に起因して異なる断熱電子状態の間を乗り移る非断熱遷移は、分子の光化学反応の分岐比を決める重要な量子効果である。本稿ではまず、多原子分子における非断熱遷移の代表的な計算法を概説する。我々は、その中でも最も広く利用されている *surface hopping* 法に組み入れることを目的として、計算負荷が低く数値的に安定な新しい非断熱遷移確率の計算アルゴリズムを開発した。それを分子会合体の分子間ダイナミクス、特に二酸化炭素 CO₂ の二量体カチオンである (CO₂)₂⁺ の光解離反応シミュレーションに適用して得られた成果を報告する。

1. 序論

分子は 2 個以上の原子が互いに結びついたものである。原子は原子核と電子で構成されるので、分子は原子核と電子の集合体と言える。熱などの外的刺激によって、化学結合の生成・切断などを伴うように原子核の配置が大きく変化すると、化学反応が起こったと解釈される。原子核は電子よりはるかに重いため（陽子と電子の質量比は約 1800 倍）、原子核が静止していると見なせる間に電子が原子核に即座に追従できるとする断熱近似（または Born–Oppenheimer 近似）が一般に良く成立する。原子核に断熱的に追従した電子が形成する新たな力の中を原子核が動き、反応が進行していく。量子力学では、核座標を断熱パラメーターとして扱った電子ハミルトニアン固有状態を断熱電子状態、そのエネルギー固有値が形作る多次元超曲面を断熱ポテンシャル曲面と呼ぶ。断熱近似は、原子核の運動（分子振動）が 1 つの断熱ポテンシャル曲面（通常は最も低い電子基底状態のポテンシャル曲面）に従うことを意味する。これは化学の根幹を成す概念であり、実際に多くの化学反応（特に熱化学反応）は断熱近似の範疇で説明できる。

一方、電子基底状態から電子励起状態への光学遷移に起因する光化学反応では、原子核の運動と電子の運動が強く相関して断熱近似が破綻し、異なる断熱ポテンシャル曲面の間を分子が乗り移ることがある。この現象は非断熱遷移と呼ばれる。非断熱遷移は断熱ポテンシャル曲面の交差（1 次元の場合には、同じ空間対称性を有する断熱電子状態のポテンシャル曲線は交差できないので擬交差）点の近傍で局所的に発生し、核波動関数（核波束）の分岐を引き起こす。光化学反応の生成物はどの断熱ポテンシャル曲面を通過して反応が進行するかで決まるため、非断熱遷移は生成物の分岐比に多大な影響を及ぼす重要な量子効果である。

非断熱遷移の理論的研究の歴史は古い。Born と Oppenheimer が断熱近似を提唱したのは量子力学の誕生から間もない 1927 年であったが[1]、5 年後の 1932 年には Landau, Zener, Stückelberg によって 1 次元 2 状態の線形ポテンシャル交差問題における非断熱遷移確率の近似式が導出された[2–4]。その適用範囲は 2 つのポテンシャル曲線の傾きが同符号の場合かつ高エネルギー条件に限られていたが、更に 60 年が経過した 1992 年に Zhu と Nakamura が上記の不完全性を克服した完全解を得ることに成功した[5–8]。1 次元 2 状態のポテンシャル交差は非断熱問題の最も基本的なモデルであり、それを厳密に扱った Zhu–Nakamura 理論はこの研究分野における 1 つの金字塔と言える。Zhu–Nakamura 理論が与える完全解は 5 通りに場合分けされるが、その中で最も広範囲に適用

できて使い勝手の良い非断熱遷移確率の表式は SENAC Vol. 52, No. 1 への寄稿[9]を参照されたい。

化学的に興味ある実際の多原子分子は多次元多状態系であり、それらの断熱ポテンシャル曲面の間には無数の交差が存在し得る。多原子分子の化学反応を理論解析するためには、ポテンシャル曲面上の反応動力学シミュレーションが必要になる。自由度の数が膨大な多原子分子のダイナミクスの評価には、原子核の運動を古典力学に基づいて記述する半古典的手法が広く用いられており、非断熱遷移の効果の導入が長く試みられてきた。また、原子核と電子の両方の自由度を量子力学的に表現し、ある程度の大きさの多原子分子まで適用可能な手法も開発されている。

本稿ではまず、多原子分子における非断熱遷移の代表的な計算法を簡単に紹介する。その中でも最も頻繁に使われている **surface hopping** 法[10]では、断熱ポテンシャル曲面上を走る核座標の古典トラジェクトリに適切な遷移確率を与えて、他のポテンシャル曲面へのホップ(遷移)を起こす。これまでに様々な遷移確率の評価法が提案されているが、我々は計算負荷が低く数値的に安定な新しい非断熱遷移確率の計算アルゴリズムを **Zhu-Nakamura** 理論に基づいて考案した[11]。実際にそれを **surface hopping** 法に組み入れて、人工分子モーターの光異性化反応(分子内回転運動)シミュレーションなどに適用した結果を SENAC Vol. 52, No. 1 にて報告している[9]。本稿では、分子会合体の分子間ダイナミクスにまで対象を広げ、二酸化炭素 CO_2 の二量体カチオンである $(\text{CO}_2)_2^+$ の光解離反応シミュレーションに適用して得られた成果を解説する。

2. 多原子分子における非断熱遷移の代表的な計算法

2.1 surface hopping 法

Tully と Preston が開発した **surface hopping** 法[10]は、その使い易さ(実装の容易性や計算負荷の低さ)から、上述のようにこれまで最も広く利用されてきた非断熱分子動力学法である。この手法では、初期条件が異なる古典トラジェクトリを多数用意し、断熱ポテンシャル曲面上を走らせる。ポテンシャル交差領域に達したら、トラジェクトリに遷移確率を与えて他のポテンシャル曲面へのホップを起こすことで、量子力学的な核波動関数の分岐を再現する(図 1)。主な遷移確率の評価法としては、Tully の **fewest switches** アルゴリズム(トラジェクトリに沿って電子の時間依存 **Schrödinger** 方程式を解いて各断熱電子状態の分布を求め、それと合致するように遷移確率を決定する[12])や **Zhu-Nakamura** 理論の応用[13–15]などが挙げられる。**surface hopping** 法には分岐した核波動関数の干渉効果を適切に記述できないという難点があるが、それを解決する方法も数多く提案されている[16]。

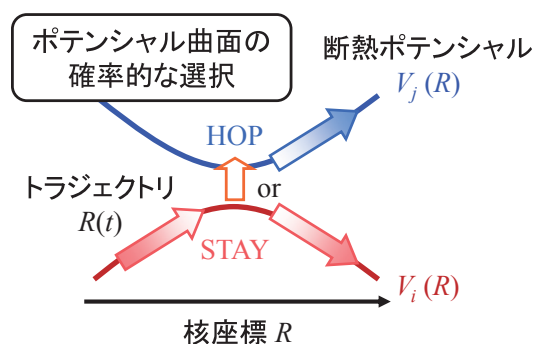


図 1 surface hopping 法の概念図。

2.2 半古典 Ehrenfest 法

Meyer と Miller による半古典 Ehrenfest 法[17]は **mean field** (平均場) 法とも呼ばれる。その名の通り、電子の時間依存 **Schrödinger** 方程式を解き、交差を成す複数の断熱ポテンシャル曲面が平均されたポテンシャル曲面上で古典トラジェクトリを走らせる(図 2)。物理量の期待値(平均値)を求めるには強力な手法である。引き換えに、各断熱ポテンシャル曲面に分岐した核波動関数が著しく離れた空間領域を進む場合には、平均場でそれを追跡することは難しい。

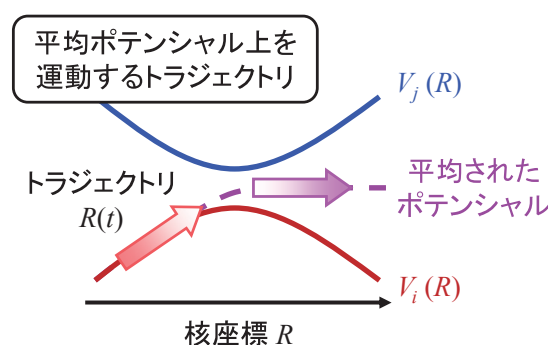


図 2 半古典 Ehrenfest 法の概念図。

2.3 古典トラジェクトリの分岐

近年では、ポテンシャル交差領域を通過した後古典トラジェクトリを分岐させる試みがなされている[18–20]. 例として、Yonehara と Takatsuka の phase-space averaging and natural branching 法[18]では、半古典力学に基づいて「力の行列」を定義し、その固有値 (eigenforce) を求める. 個々の eigenforce を作用させることでトラジェクトリを分岐させる. 交差領域外では力の行列の固有状態は断熱電子状態と一致するので、分岐したトラジェクトリはやがて各断熱ポテンシャル曲面上を走ることになる (図3). 単一の古典トラジェクトリから始まっても、それを分岐させることで原子核と電子の量子もつれ状態 (エンタングルメント) を表現できる.

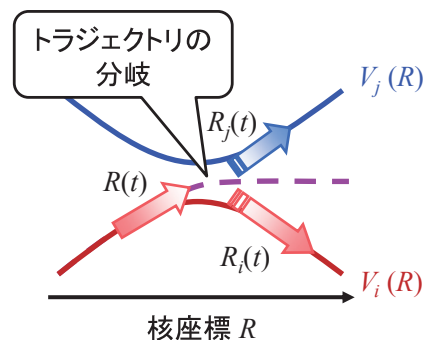


図3 phase-space averaging and natural branching 法の概念図.

2.4 古典トラジェクトリに沿って伝搬するガウス基底

古典トラジェクトリが通過する経路上の各断熱電子状態の情報のみで時間発展を追う半古典的手法の利点を生かしつつ、原子核の量子性を取り入れるために、トラジェクトリを中心として伝搬するガウス基底の重ね合わせで核波動関数を近似する理論も発表されている. Kondorskiy と Nakamura は surface hopping 法とガウス基底を組み合わせた[21]. Shalashilin らは平均場に従う複数のトラジェクトリにガウス基底を付随させる多配置 Ehrenfest 法[22], Martinez らはトラジェクトリを分岐させて新たなガウス基底を生成する multiple spawning 法[23]を開発した. 更に、平均場に従うトラジェクトリを分岐させることで多配置 Ehrenfest 法と multiple spawning 法の長所を融合した multiple cloning 法[24]も報告されている.

2.5 完全に量子力学的な非断熱分子動力学法

前節までに挙げた手法とは対照的に、古典トラジェクトリを利用せず、完全に量子力学的な多原子分子の非断熱分子動力学法も存在する. Meyer らの多配置時間依存 Hartree 法[25]では、 i 番目の N 次元ポテンシャル曲面上の核波動関数 $\Psi_i(R_1, R_2, \dots, R_N, t)$ を次式のように時間依存 1 粒子関数の Hartree 積で展開する (R_n は n 番目の核座標, t は時間).

$$\Psi_i(R_1, R_2, \dots, R_N, t) = \sum_{m_1} \sum_{m_2} \dots \sum_{m_N} a_{m_1 m_2 \dots m_N}^{(i)}(t) \prod_{n=1}^N \chi_{m_n}^{(ni)}(R_n, t) \quad (1)$$

$\chi_{m_n}^{(ni)}(R_n, t)$ は R_n に関する m_n 番目の 1 粒子関数 (Ψ_i を展開するので i にも依存), $a_{m_1 m_2 \dots m_N}^{(i)}(t)$ は展開係数である. 時間依存変分原理に基づいて展開係数と 1 粒子関数の連立運動方程式が導かれる. 系統的に計算精度を調整でき、数 10 次元系までは適用可能である. 1 粒子関数をガウス基底に置き換えることで計算をより効率化することもできる[26]. 従来の多配置時間依存 Hartree 法は大域的なポテンシャル曲面を必要とするが、最近では局所的なポテンシャル情報のみで核波動関数の時間発展を追跡する量子力学的手法も提案されている[27–29].

3. 分子会合体の分子間ダイナミクス : (CO₂)₂⁺ の光解離反応シミュレーション

1 章で言及したように、我々は Zhu–Nakamura 理論に基づく新しい非断熱遷移確率の計算アルゴリズムを考案して surface hopping 法に組み入れた. 本章では、それを分子会合体の分子間ダイナミクス、特に (CO₂)₂⁺ の光解離反応のシミュレーションに適用した結果を報告する.

3.1 断熱ポテンシャル勾配の時間微分を用いた非断熱遷移確率

最初に、我々が開発した非断熱遷移確率の計算アルゴリズムの要点を述べる. Zhu–Nakamura 理

論では「透熱電子状態」の情報から非断熱遷移確率が得られる。透熱電子状態は断熱電子状態の重ね合わせとして表され、ポテンシャル交差点の前後で異なる断熱電子状態に漸近する。Zhu らは 1 次元非断熱問題の完全解である Zhu-Nakamura 理論を多次元系に適用できる形式へと拡張した[15]。この方法では、交差点における透熱勾配（透熱電子状態のポテンシャル曲面の傾き）を断熱勾配の線形補間から推定するが、ポテンシャル形状によっては遷移確率の評価を誤ってしまう。一方、本手法では断熱ポテンシャル曲面の勾配のみでなく曲率の情報も使って透熱勾配を推定するため、Zhu らの従来法が失敗する場合でも遷移確率を適切に計算できる。詳しくは SENAC Vol. 52, No. 1 への寄稿[9]を参照されたい。

3.2 $(\text{CO}_2)_2^+$ の光解離実験

$(\text{CO}_2)_2^+$ は火星の電離層や超臨界状態にある CO_2 中のラジカル種の研究で注目されている[30,31]。 $(\text{CO}_2)_2^+$ は図 4 のような C_{2h} 対称性の安定構造を持つ。 $(\text{CO}_2)_2^+$ の可視光解離実験[32,33]で得られた CO_2^+ フラグメントの速度分布は、図 5 のように 2 種類のガウス関数でフィッティングすることができる。つまり、図 5 の分布は 2 つの速度成分で構成されている。速い成分は斥力的な電子励起状態ポテンシャル曲面上の直接的な解離、遅い成分は電子励起状態上の統計的な解離に起因すると推測されているが、詳しい機構は明らかになっていない。この仮説では電子励起状態上のダイナミクスのみが考慮されている。 $(\text{CO}_2)_2^+$ の光解離の機構を解明するには、更に非断熱遷移の効果を取り込んだシミュレーションが必要である。

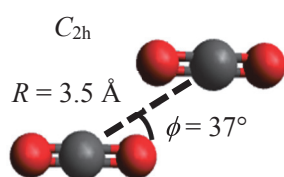


図 4 $(\text{CO}_2)_2^+$ の電子基底状態 $\tilde{X}$ における安定構造。計算レベルは SA-CASSCF(7,4)/cc-pVTZ。

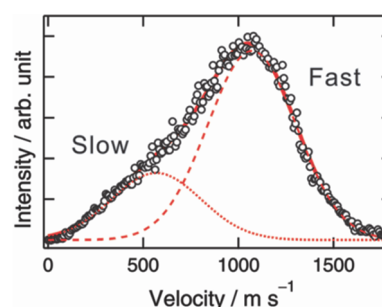


図 5 CO_2^+ フラグメントの速度分布。文献[33]から転載。

3.3 計算条件

$(\text{CO}_2)_2^+$ の断熱ポテンシャルの評価には量子化学計算プログラム Molpro [34,35]を使った。分子軌道の記述に aug-cc-pVTZ ガウス基底関数[36]を採用し、17 電子 13 軌道で構成される活性空間内の状態平均多配置自己無撞着場 (SA-CASSCF) 法[37,38]を用いて、C-C 間距離 R に関する断熱ポテンシャル曲線を計算した（図 6）。他の自由度は図 4 の安定構造における値に固定した。実験で使われた波長 532 nm の可視光を吸収すると、電子基底状態 $\tilde{X}$ から第 3 電子励起状態 $\tilde{C}$ へ遷移する。より高い電子励起状態のポテンシャル曲線は十分に離れているため、これらの光解離過程への寄与は無視できる。

反応動力学シミュレーションは、我々が考案した非断熱遷移確率の計算アルゴリズムを surface hopping 法の代表的なソフトウェアである Newton-X [39–41]に実装して行った。計算負荷を

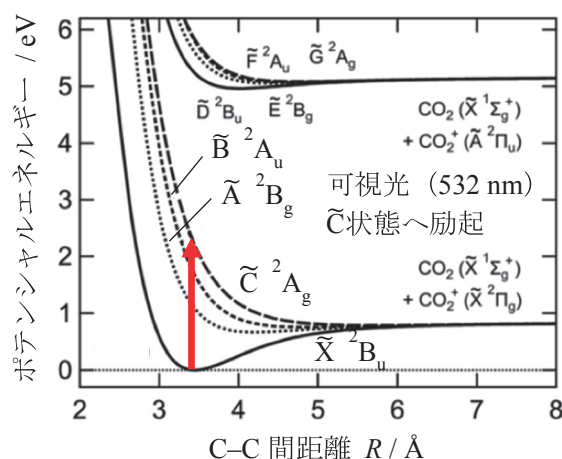


図 6 $(\text{CO}_2)_2^+$ の C-C 間距離 R に沿った断熱ポテンシャル曲線。計算レベルは SA-CASSCF(17,13)/aug-cc-pVTZ。文献[33]から改変して転載。

低減した上で $\tilde{X}$ から $\tilde{C}$ までの4状態を適切に記述するために、cc-pVTZ 基底関数[36]と7電子4軌道の活性空間を設定した SA-CASSCF 法を用いた。この計算レベルで求めた4状態のポテンシャル曲線は、図6の SA-CASSCF(17,13)/aug-cc-pVTZ レベルの結果をほぼ再現する。 $\tilde{X}$ の振動基底状態に対応する Wigner 分布[42]から10通りの各原子の初期位置と初期速度をランダムにサンプリングし、 $\tilde{X}$ のポテンシャル曲面上で各古典トラジェクトリの運動を400 fs まで計算した。それらの結果から各原子の位置と速度をサンプリングして約300個のトラジェクトリを生成した(温度0 Kに相当)。更に $\tilde{C}$ へ垂直励起させた状態を時刻 $t=0$ とし、各トラジェクトリの時間発展を追跡した。

3.4 非断熱遷移の効果

図7は結果として得られた典型的なトラジェクトリにおけるポテンシャルエネルギーの時間変化である。この例のように、フラグメントの終端速度に関わらず、全てのトラジェクトリにおいて約20 fs ほどで $\tilde{C}$ から $\tilde{X}$ への非断熱遷移が起こることが確認された。全く同じ初期条件にして非断熱遷移を考慮した場合と無視した場合の各トラジェクトリにおけるC-C間距離 R の時間変化を図8にプロットした。非断熱遷移を無視した場合は解離速度の遅いトラジェクトリが発生せず、実験結果を再現できなかったが、非断熱遷移を考慮すると遅いトラジェクトリも発生した。図9は非断熱遷移を考慮した計算から得られたフラグメントの終端速度のヒストグラムである。終端速度分布の範囲は200 – 1500 m s⁻¹であり、1100 m s⁻¹程度の速度を持つフラグメントが最も多く、図5の実験結果と概ね合致した。

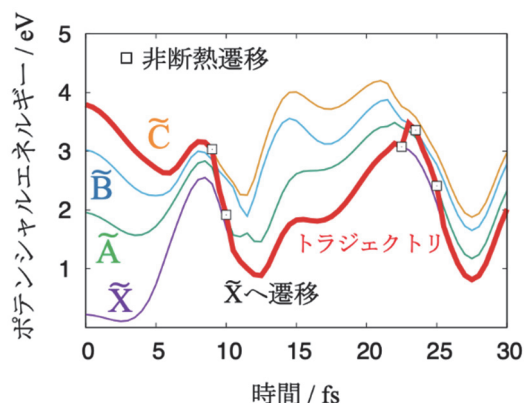


図7 典型的なトラジェクトリにおけるポテンシャルエネルギーの時間変化。

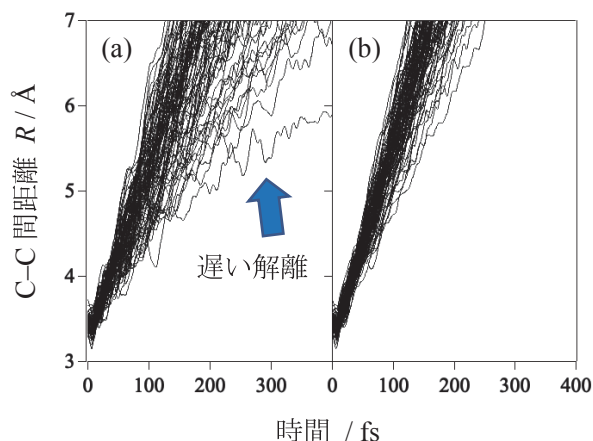


図8 C-C 間距離 R の時間変化. (a) 非断熱遷移を考慮した場合. (b) 非断熱遷移を無視した場合.

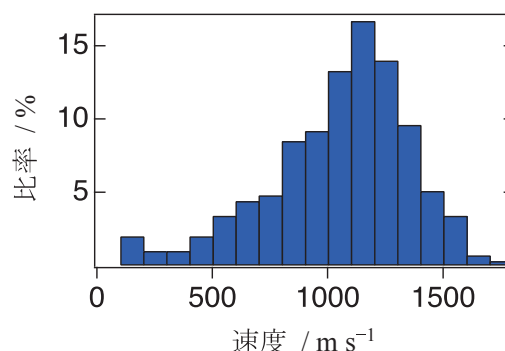


図9 フラグメントの終端速度分布のヒストグラム(非断熱遷移を考慮)。

3.5 fewest switches アルゴリズムとの比較

本手法の妥当性を確かめる目的で、2.1節で触れた Tully の fewest switches アルゴリズムを使用した計算を実行した。計算精度の点で優れているが計算負荷は高い fewest switches アルゴリズムと比較するため、6-31G 基底関数[36]を用いて、トラジェクトリ数は93

表1 遅い解離の割合と200 fs までの平均計算時間。

	本手法	fewest switches	実験値 [33]
遅い解離の割合 (%)	37	28	19
平均計算時間 (分)	53	120	

とした. 200 fs の時点で C-C 間距離 R が 7.0 Å (図 4 の安定構造における値の 2 倍) 以下であったものを遅い解離のトラジェクトリと定義する. 表 1 は全トラジェクトリに占める遅い解離の割合と 200 fs に達するまでの平均計算時間をまとめたものである. fewest switches アルゴリズムから得られた遅い解離の割合は, 図 5 に示した 2 つのガウス関数の面積から得られる実験値に近い. 本手法による結果を見ると, fewest switches アルゴリズムと比べて遅い解離の割合に生じた差は 10 % 未満であり, 平均計算時間は半分ほどに短縮されている.

我々は, より分子サイズの大きいアゾベンゼン $C_{12}H_{10}N_2$ の光異性化反応シミュレーションにおいても, 本手法が fewest switches アルゴリズムの結果と同程度の量子収率を与えることを確認した. 計算負荷が低い本手法は, 膨大な計算時間を要する大規模系のシミュレーションに適している.

3.6 2次元モデルを用いた解離機構の解析

$(CO_2)_2^+$ の解離機構を具体的に説明する. 典型的な速い解離のトラジェクトリと遅い解離のトラジェクトリにおける C-C 間距離 R と C-C-O 角度 ϕ の変化を図 10 に示す. フラグメントは回転しながら解離することが分かる. 200 fs の時点での R の値は, 速いトラジェクトリでは 8 Å を越えているが, 遅いトラジェクトリでは 6 Å 未満である.

図 4 の安定構造から R と ϕ を変化させた 2 次元断熱ポテンシャル曲面と解離経路を図 11 に示す. $\tilde{X}$ の安定構造付近で励起したトラジェクトリ (赤矢印参照) は, $\tilde{C}$ のポテンシャル曲面の急勾配によって大きなエネルギーを得る. $\tilde{X}$ へ非断熱遷移した後も, その勢いを保って急速に解離する. 一方, この領域から離れた位置 ($R > 3.5$ Å) で $\tilde{C}$ へ励起すると (青矢印参照), 獲得するエネルギーは小さく, 非断熱遷移後は $\tilde{X}$ のポテンシャル井戸 ($\phi \approx 140^\circ$) の影響でフラグメントが回転し, 解離が遅くなると考えられる. すなわち, 非断熱遷移が起こる場所によって速い成分と遅い成分が生じる.

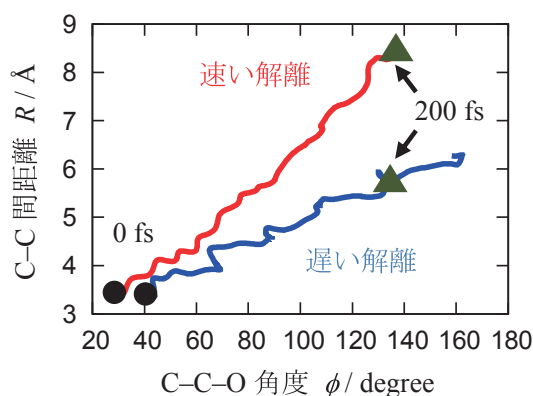


図 10 典型的なトラジェクトリにおける C-C 間距離 R と C-C-O 角度 ϕ の変化.

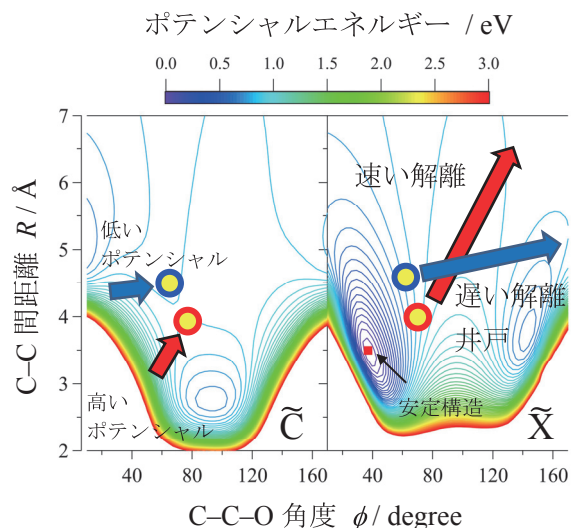


図 11 C-C 間距離 R と C-C-O 角度 ϕ に関する 2 次元断熱ポテンシャル曲面と解離経路. 計算レベルは SA-CASSCF(17,13)/cc-pVTZ.

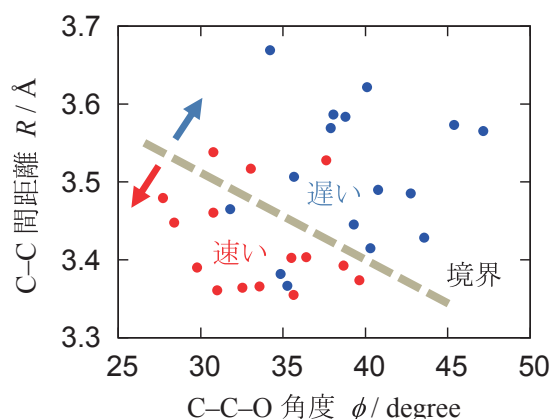


図 12 いくつかのトラジェクトリの $t = 0$ における C-C 間距離 R と C-C-O 角度 ϕ .

いくつかのトラジェクトリの $t=0$ における R と ϕ の値を図 12 にプロットした（終端速度が 500 m s^{-1} 以下のトラジェクトリと 1400 m s^{-1} 以上のトラジェクトリを選んだ）。 $t=0$ において R と ϕ が大きいと遅いトラジェクトリになり、逆に R と ϕ が小さいと速いトラジェクトリになる傾向が見られる。これはフラグメントの挙動が初期構造（光励起直後の構造）に依存することを示しており、上述の 2 次元断熱ポテンシャル曲面の形状から予想される解離機構と合致している。

4. まとめと展望

光励起した $(\text{CO}_2)_2^+$ の反応動力学シミュレーションにおいて、非断熱遷移の効果によって実験と同様に速い解離と遅い解離が起こることが確認できた。第 3 電子励起状態 $\tilde{C}$ から電子基底状態 $\tilde{X}$ に至る非断熱遷移後に、 $(\text{CO}_2)_2^+$ が $\tilde{X}$ のポテンシャル井戸から影響を受け、遅い解離が生じる。解離方向の異方性を比較すると、遅い成分の方が速い成分より異方性が低いことが実験で示されている [33]。フラグメントの解離方向の異方性の違いについても検討を進めたい。

本研究で使用した非断熱分子動力学法は、計算負荷が低く数値的に安定で、大規模系にも適用可能である。今後は、分子クラスターなどの分子数の多い複雑な会合体に適用し、分子間ダイナミクスにおける非断熱遷移の役割を明らかにしていきたい。また、凝縮相中の化学反応、例えば、溶媒分子に囲まれた分子モーターの光駆動分子内回転や、放射線による生体内 DNA 損傷の非断熱動力学シミュレーションも視野に入る。このような大型計算機を駆使したシミュレーションにより、ナノテクノロジーや生物学などの周辺分野と化学を結び付ける学際的研究の一層の発展が期待される。

謝辞

本研究の計算の一部は、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システム NEC LX 406Re-2 を使って実行された。Newton-X のソースコードの改変に関して、台湾国立交通大学の L. Yue 博士と C. Zhu 教授に感謝する。なお、本研究は JSPS 科研費 JP16H04091 と JP18K05022 の助成を受けて行われた。

参考文献

- [1] M. Born and J. R. Oppenheimer, Zur Quantentheorie der Molekeln, Ann. Phys. (Leipzig) **389**, 457 (1927).
- [2] L. D. Landau, Zur Theorie der Energieübertragung. II, Phys. Z. Sowjetunion. **2**, 46 (1932).
- [3] C. Zener, Non-Adiabatic Crossing of Energy Levels, Proc. R. Soc. London, Ser. A **137**, 696 (1932).
- [4] E. C. G. Stückelberg, Theorie der unelastischen Stöße zwischen Atomen, Helv. Phys. Acta **5**, 369 (1932).
- [5] C. Zhu, H. Nakamura, N. Re, and V. Aquilanti, The two-state linear curve crossing problems revisited. I. Analysis of Stokes phenomenon and expressions for scattering matrices, J. Chem. Phys. **97**, 1892 (1992).
- [6] C. Zhu and H. Nakamura, The two-state linear curve crossing problems revisited. II. Analytical approximations for the Stokes constant and scattering matrix: The Landau–Zener case, J. Chem. Phys. **97**, 8497 (1992).
- [7] C. Zhu and H. Nakamura, The two-state linear curve crossing problems revisited. III. Analytical approximations for Stokes constant and scattering matrix: Nonadiabatic tunneling case, J. Chem. Phys. **98**, 6208 (1993).
- [8] C. Zhu and H. Nakamura, Two-state linear curve crossing problems revisited. IV. The best analytical formulas for scattering matrices, J. Chem. Phys. **101**, 4855 (1994).
- [9] 菅野 学, 高橋 みなみ, 花崎 浩太, 原田 宣之, 河野 裕彦, 複雑系に有効な非断熱分子動力学計算法の開発と分子モーター光異性化反応への適用, SENAC **52**, 3 (2019).

- [10] J. C. Tully and R. K. Preston, Trajectory Surface Hopping Approach to Nonadiabatic Molecular Collisions: The Reaction of H^+ with D_2 , *J. Chem. Phys.* **55**, 562 (1971).
- [11] K. Hanasaki, M. Kanno, T. A. Niehaus, and H. Kono, An efficient approximate algorithm for nonadiabatic molecular dynamics, *J. Chem. Phys.* **149**, 244117 (2018).
- [12] J. C. Tully, Molecular dynamics with electronic transitions, *J. Chem. Phys.* **93**, 1061 (1990).
- [13] C. Zhu, K. Nobusada, and H. Nakamura, New implementation of the trajectory surface hopping method with use of the Zhu–Nakamura theory, *J. Chem. Phys.* **115**, 3031 (2001).
- [14] C. Zhu, H. Kamisaka, and H. Nakamura, New implementation of the trajectory surface hopping method with use of the Zhu–Nakamura theory. II. Application to the charge transfer processes in the 3D DH_2^+ system, *J. Chem. Phys.* **116**, 3234 (2002).
- [15] L. Zhu, C. Xu, Y. Lei, C. Zhu, and Z. Wen, Trajectory-based nonadiabatic molecular dynamics without calculating nonadiabatic coupling in the avoided crossing case: *trans* $\leftrightarrow$ *cis* photoisomerization in azobenzene, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**, 25883 (2014).
- [16] L. Wang, J. Qiu, X. Bai, and J. Xu, Surface hopping methods for nonadiabatic dynamics in extended systems, *WIREs: Comput. Mol. Sci.* **10**, e1435 (2020).
- [17] H.-D. Meyer and W. H. Miller, A classical analog for electronic degrees of freedom in nonadiabatic collision processes, *J. Chem. Phys.* **70**, 3214 (1979).
- [18] T. Yonehara and K. Takatsuka, Phase-space averaging and natural branching of nuclear paths for nonadiabatic electron wavepacket dynamics, *J. Chem. Phys.* **129**, 134109 (2008).
- [19] A. K. Belyaev and O. V. Lebedev, Nonadiabatic nuclear dynamics of atomic collisions based on branching classical trajectories, *Phys. Rev. A* **84**, 014701 (2011).
- [20] S. Bai, W. Xie, and Q. Shi, A New Trajectory Branching Approximation to Propagate the Mixed Quantum-Classical Liouville Equation, *J. Phys. Chem. A* **118**, 9262 (2014).
- [21] A. Kondorskiy and H. Nakamura, Semiclassical theory of electronically nonadiabatic chemical dynamics: Incorporation of the Zhu–Nakamura theory into the frozen Gaussian propagation method, *J. Chem. Phys.* **120**, 8937 (2004).
- [22] K. Saita and D. V. Shalashilin, On-the-fly *ab initio* molecular dynamics with multiconfigurational Ehrenfest method, *J. Chem. Phys.* **137**, 22A506 (2012).
- [23] T. J. Martinez, M. Ben-Nun, and R. D. Levine, Multi-Electronic-State Molecular Dynamics: A Wave Function Approach with Applications, *J. Phys. Chem.* **100**, 7884 (1996).
- [24] D. V. Makhov, W. J. Glover, T. J. Martinez, and D. V. Shalashilin, *Ab initio* multiple cloning algorithm for quantum nonadiabatic molecular dynamics, *J. Chem. Phys.* **141**, 054110 (2014).
- [25] A. D. Hammerich, U. Manthe, R. Kosloff, H.-D. Meyer, and L. S. Cederbaum, Time-dependent photodissociation of methyl iodide with five active modes, *J. Chem. Phys.* **101**, 5623 (1994).
- [26] I. Burghardt, K. Giri, and G. A. Worth, Multimode quantum dynamics using Gaussian wavepackets: The Gaussian-based multiconfiguration time-dependent Hartree (G-MCTDH) method applied to the absorption spectrum of pyrazine, *J. Chem. Phys.* **129**, 174104 (2008).
- [27] G. W. Richings and S. Habershon, MCTDH on-the-fly: Efficient grid-based quantum dynamics without pre-computed potential energy surfaces, *J. Chem. Phys.* **148**, 134116 (2018).
- [28] K. G. Komarova, F. Remacle, and R. D. Levine, On the fly quantum dynamics of electronic and nuclear wave packets, *Chem. Phys. Lett.* **699**, 155 (2018).
- [29] T. Murakami and T. J. Frankcombe, Non-adiabatic quantum molecular dynamics by the basis expansion leaping multi-configuration Gaussian (BEL MCG) method: Multi-set and single-set formalisms, *J. Chem. Phys.* **150**, 144112 (2019).
- [30] G. J. Molina-Cuberos, H. Lichtenegger, K. Schwingenschuh, J. J. López-Moreno, and R. Rodrigo, Ion–neutral chemistry model of the lower ionosphere of Mars, *J. Geophys. Res. Planets* **107**, 3 (2002).
- [31] N. M. Dimitrijevic, K. Takahashi, D. M. Bartels, C. D. Jonah, and A. D. Trifunac, Charged Species in

- the Radiolysis of Supercritical CO₂, J. Phys. Chem. A **104**, 568 (2000).
- [32] A. J. Illies, M. F. Jarrold, W. Wagner-Redeker, and M. T. Bowers, Photodissociation of Gas-Phase (CO₂)₂⁺ in the Visible Wavelength Range: Observation of Two Photodissociation Processes, J. Phys. Chem. **88**, 5204 (1984).
- [33] Y. Nakashima, K. Okutsu, K. Fujimoto, Y. Ito, M. Kanno, M. Nakano, K. Ohshimo, H. Kono and F. Misaizu, Visible photodissociation of the CO₂ dimer cation: fast and slow dissociation dynamics in the excited state, Phys. Chem. Chem. Phys. **21**, 3083 (2019).
- [34] H.-J. Werner, P. J. Knowles, G. Knizia, F. R. Manby and M. Schütz, Molpro: a general-purpose quantum chemistry program package, WIREs: Comput. Mol. Sci. **2**, 242 (2012).
- [35] H.-J. Werner *et al.*, MOLPRO, version 2012.1, a package of *ab initio* programs, <http://www.molpro.net>, 2012.
- [36] I. N. Levine, *Quantum Chemistry*, 6th ed. (Prentice Hall, New Jersey, 2009), pp. 471–635.
- [37] H.-J. Werner and P. J. Knowles, A second order multiconfiguration SCF procedure with optimum convergence, J. Chem. Phys. **82**, 5053 (1985).
- [38] P. J. Knowles and H.-J. Werner, An Efficient Second-Order MCSCF Method for Long Configuration Expansions, Chem. Phys. Lett. **115**, 259 (1985).
- [39] M. Barbatti, G. Granucci, M. Persico, M. Ruckebauer, M. Vazdar, M. Eckert-Maksić and H. Lischka, The on-the-fly surface-hopping program system Newton-X: Application to *ab initio* simulation of the nonadiabatic photodynamics of benchmark systems, J. Photochem. Photobiol. A **190**, 228 (2007).
- [40] M. Barbatti, M. Ruckebauer, F. Plasser, J. Pittner, G. Granucci, M. Persico, and H. Lischka, Newton-X: a surface-hopping program for nonadiabatic molecular dynamics, WIREs: Comput. Mol. Sci. **4**, 26 (2014).
- [41] M. Barbatti, G. Granucci, M. Ruckebauer, F. Plasser, R. Crespo-Otero, J. Pittner, M. Persico, and H. Lischka, NEWTON-X: *a package for Newtonian dynamics close to the crossing seam*, version 1.4, 2013.
- [42] E. Wigner, On the Quantum Correction for Thermodynamic Equilibrium, Phys. Rev. **40**, 749 (1932).

[共同研究成果]

リアルタイム津波浸水被害推計シミュレーションの性能評価

撫佐昭裕^{1,5,8)}, 岸谷拓海²⁾, 阿部孝志³⁾, 佐藤佳彦^{6,8)}, 田野邊睦^{7,8)}, 鈴木崇之^{7,8)},
村嶋陽一^{3,7,8)}, 佐藤雅之²⁾, 小松一彦¹⁾, 伊達 進⁴⁾, 越村俊一³⁾, 小林広明²⁾

- 1) 東北大学サイバーサイエンスセンター
- 2) 東北大学大学院情報科学研究科
- 3) 東北大学災害科学国際研究所
- 4) 大阪大学サイバーメディアセンター
- 5) 日本電気株式会社
- 6) NEC ソリューションイノベータ
- 7) 国際航業株式会社
- 8) 株式会社 RTi-cast

リアルタイム津波浸水被害推計シミュレーションは、スーパーコンピュータ SX-ACE を用いて津波発生から 20 分以内に浸水範囲やその被害状況を推計することを目的に開発されたものである。本研究では、本シミュレーションプログラムにおいて最新のスーパーコンピュータである SX-Aurora TSUBASA に加え、Intel 製の Xeon Gold と Xeon Phi (Knights Landing) を用いて性能評価を行い、全国規模の被害推計を行うためのコンピュータ資源量の算出を行った。その結果、SX-Aurora TSUBASA と Xeon Gold を用いた場合、10m 格子を用いて 5 分以内に国内の太平洋全沿岸の被害推計のシミュレーションが可能であることを明らかにした。

1. はじめに

2011 年 3 月 11 日に発生した東日本大震災では、関東地方から北海道にかけて津波が襲来し、その被害範囲は沿岸距離 2,000km、浸水面積 500km² を超えるものであった[1, 2]。政府・自治体はこの広範囲に及ぶ被害把握に多くの時間を要し、発災直後の救援活動や被災者への支援活動の初動に遅れが生じてしまった[3]。この教訓をもとに、本研究グループでは、発災直後に津波被害の全体像を把握するため、コンピュータシミュレーションを活用したリアルタイム津波浸水被害推計システムの開発を行っている。本システムは、東北大学サイバーサイエンスセンターと大阪大学サイバーメディアセンターのスーパーコンピュータ SX-ACE を用いて、津波を起こす地震が発生してから 20 分以内に沿岸部の浸水範囲や被害状況を 10m 格子を用いて推計することができる[4, 5]。本システムは内閣府の総合防災情報システムの一機能として採用され、2017 年 11 月から南海トラフ地震を対象に鹿児島県から静岡県までの被害状況をシミュレーションする体制を整えている [6]。内閣府のシステムでは被害推計を行う範囲が広いため、推計精度を 30m、処理時間を 30 分以内としている。今後、推計精度を 10m に向上させ、推計範囲を全国に拡大するためには、より高い計算性能が必要になる。

本稿では、津波浸水被害推計シミュレーションを様々な特徴を持つスーパーコンピュータを用いて性能評価を行う。そして、その結果から日本の太平洋全沿岸を推計するために必要なコンピュータ資源量について明らかにする。ここで性能評価に用いたシステムは SX-ACE, SX-Aurora TSUBASA[7], Xeon Gold, Xeon Phi (Knights Landing) である。

2. リアルタイム津波浸水被害推計システム

(1) システムの概要

リアルタイム津波浸水被害推計システムは、図1に示したように断層設定サーバ、スーパーコンピュータ、データ処理サーバからなる。断層設定サーバは、気象庁の地震・津波情報と国土地理院の衛星測位情報をもとに、津波発生判定と断層の動きを推計する。スーパーコンピュータは津波発生が予測された場合に断層設定サーバの断層推定結果をもとに津波浸水被害推計シミュレーションを実行する。この時、スーパーコンピュータで動作していたジョブは一時的に停止し、津波浸水被害推計シミュレーションを最優先で実行する。そして、データ処理サーバは、津波浸水被害推計シミュレーションで得られた津波浸水の範囲や建屋被害について地図上に可視化し、その情報を政府や自治体等に配信する。これらの処理時間は、南海トラフ地震発生時の高知県の例において、断層設定サーバで約7分、スーパーコンピュータで約5分、可視化・配信で約4分、そしてトータル処理時間は約16分である[5]。

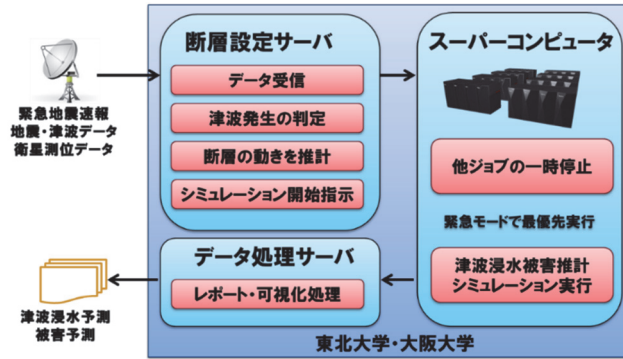


図1 リアルタイム津波浸水被害推計システム構成

(2) 津波浸水被害推計シミュレーション

津波浸水被害推計シミュレーションは、式(1)から(5)の非線形長波理論式を Staggered Leap-frog 法と移流項の風上差分を用いて差分化し、津波波源を求める Okada の式と建屋等の被害推計を行うモデルを組み込んでいる[8, 9]。

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial M}{\partial x} + \frac{\partial N}{\partial y} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial M}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{M^2}{D} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{MN}{D} \right) + gD \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{gn^2}{D^{7/3}} M \sqrt{M^2 + N^2} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{MN}{D} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{N^2}{D} \right) + gD \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{gn^2}{D^{7/3}} N \sqrt{M^2 + N^2} = 0 \quad (3)$$

$$M = \int_{-h}^{\eta} u dz = \bar{u}(\eta + h) \quad (4)$$

$$N = \int_{-h}^{\eta} v dz = \bar{v}(\eta + h) \quad (5)$$

ここで、 η は静水面からの垂直変位、 M と N は x と y 方向の全量流量、 D は全水深、 g は重力加速度、 n は粗度係数、 u と v は x と y 方向の流速、 h は静水深である。

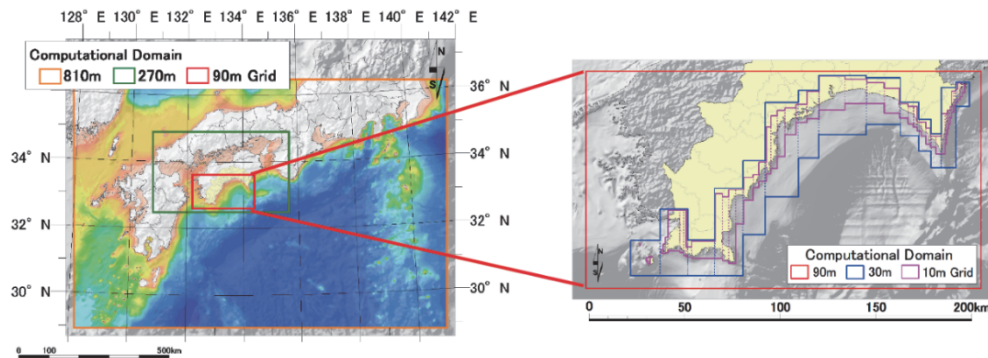


図 2 高知県をシミュレーションした格子構造

本シミュレーションでは計算格子において階層型格子を用いているが、シミュレーションの時間刻み Δt を大きくするため、水深の深い領域を避けるように格子を組んでいる[10]。図2が本評価で用いている格子構造である。格子サイズが30m、10mの領域では水深の深いところを避けるように多角形になっている。

本シミュレーションプログラムの並列化はMPIライブラリを用いて領域分割法で行った。図2における10mから810mの計算格子において南北方向をベクトル化し、東西方向を分割して並列化を行った。計算負荷を均一にするために、格子810m、270m、90mの領域は長方形になっているのでその長方形を均等に分割した。また、格子30mと10mの領域は複数の長方形を組み合わせた多角形になっているので、図3に示したような領域分割を行った。図3は多角形の領域を5つのプロセスで分割した例である。P0～P4はプロセス番号であり、各プロセスが演算する格子数を等しくするように長方形を跨いで分割している（茶色の領域が長方形を跨がった分割）。ここで、シミュレーションの諸条件を表1に示す。

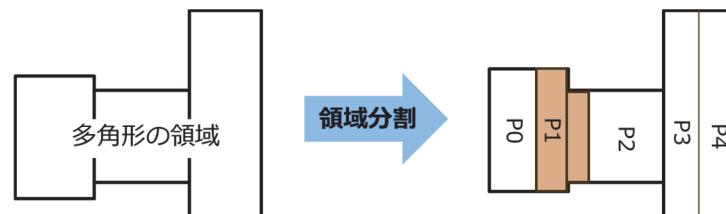


図 3 多角形領域の領域分割の仕方

表 1 シミュレーションの諸条件

項 目	内 容
対象地域	高知県
範囲	1,288km × 1,025km
座標系	直角座標系
格子構造	多角形格子
格子サイズ	810m, 270m, 90m, 30m, 10m
総格子数	3.5×10^7
Δt	0.2 秒
再現時間	6 時間
潮位	朔望平均満潮面
実数データ型	単精度浮動小数点

3. 評価システム

本シミュレーションの性能評価対象として、SX-ACE, SX-Aurora TSUBASA, Xeon Gold, Xeon Phi の4つのシステムを用いた。それぞれのシステム諸元を表2に示す。なお、Xeon Phi の MCDRAM は FLAT モードで利用した。

表 2 性能評価を行ったシステムの諸元

		SX-ACE	SX-Aurora TSUBASA	Xeon Gold	Xeon Phi
CPU	CPU 型番	—	10AE	6126	7210
	動作周波数 (GHz)	1	1.584	2.6	1.3
	コア数	4	8	12	64
	理論コア性能 (Gflop/s)				
	・単精度	64	608.25	166.4	83.2
	・倍精度	64	304.13	83.2	41.6
	理論 CPU 性能 (Gflop/s)				
	・単精度	256	4866.0	1996.8	5324.8
	・倍精度	256	2433.0	998.4	2662.4
	メモリ容量 (GB)	64	48	96	192
ノード	メモリバンド幅 (GB/s)	256	1350	128	115.2
	MCDRAM 容量 (GB)	—	—	—	16
	MCDRAM バンド幅 (GB/s)	—	—	—	490
	CPU 数	1	8	2	1
	メモリ容量 (GB)	64	384	192	192
	ノード間バンド幅 (GB/s)	8	25	12.5	12.5

ここでは、新しいシステムである SX-Aurora TSUBASA (Type 10AE は 2019 年度リリース) について概要を説明する。SX-Aurora TSUBASA は SX-ACE の後継システムで図4に示したカード型のベクトルスーパーコンピュータである。この赤色のカードにメモリやベクトルプロセッサ1台が実装されていて、このカードを Linux サーバに PCI 接続して利用する。図4の右図が Linux サーバに8つのカードを搭載したもので、本評価で使用したモデルである。一つのカードが1ノード(1 CPU)に相当し8コアからなる。利用者は今までのベクトル処理が利用でき、OpenMP や自動並列化により8コアまでの並列実行が行える。また、カード間や Linux サーバ間を跨がった並列実行もでき、その場合には MPI による並列化が必要になる。特徴的なのは、カード上で実行しているプログラムが Linux

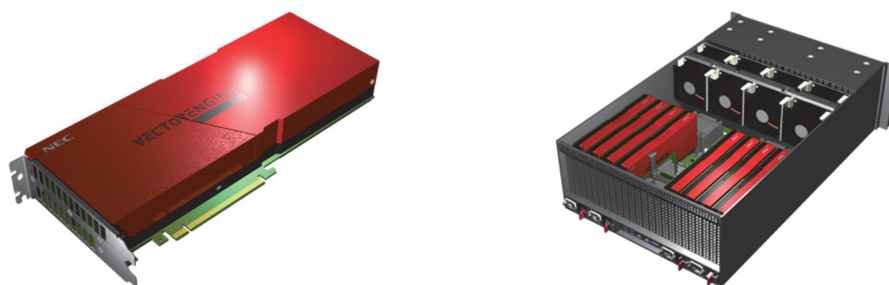


図 4 SX-Aurora TSUBASA : 左が本体のカード、右が Linux サーバに 8 カード装備したモデル

サーバのCPUを呼び出して利用できることであり、その逆としてLinuxサーバ上のプログラムがカード上のベクトルプロセッサを呼び出して利用することもできる。この機能を利用することによって、ベクトル化しているルーチンはカード上のベクトルプロセッサで、ベクトル化できないルーチンはLinuxサーバ上のCPUで実行することができる。なお、本評価ではカード上のベクトルプロセッサで津波浸水被害推計シミュレーションを実行した。

また、表3に使用したFortranコンパイラのバージョンとコンパイルオプションを示した。ここでXeon GoldとXeon PhiはIntel製のFortranコンパイラを使用した。Intel製のコンパイラは自動ベクトル化機能を有し、D0ループに対してベクトル化を行うことができる。しかし、コンパイラがベクトル化によって性能が低下すると判断した場合にはベクトル化を行わない仕様になっている。そのため、本プログラムの主要なD0ループはベクトル化可能であるにもかかわらずベクトル化されなかった。ベクトル化はコンパイラ指示行「vector always」をプログラムに挿入することによりコンパイラの判断を無視してベクトル化が行えるので、本評価ではベクトル化を行わなかった場合と指示行を挿入してベクトル化を行った場合の性能を比較した。なお、SX-ACEとSX-Aurora TSUBASAでは、コンパイラ指示行を使用しなくても効果的にベクトル化が行われている。

表3 使用したFortranコンパイラとオプション

システム	バージョン	オプション
SX-ACE	FORTRAN 90/SX Rev. 536	-Chopt -pi
SX-Aurora TSUBASA	Fortran compiler for Vector Engine 2.5.20	-O3 -msched-block -finline-functions
Xeon Gold	Intel Fortran 18.0.3.222	-O3 -ipo -xCORE-AVX512
Xeon Phi	Intel Fortran 18.0.3.222	-O3 -ipo -xMIC-AVX512

4. 評価結果

(1) シングルコアの評価

性能評価はシミュレーションの実行時間を計測して行った。各システムにおけるシングルコアでの実行時間を図5に示す。ここで、図中の「メモリストール」はメモリからデータを読み込む間にCPUがストールしている時間、「CPU」はCPUでの処理時間である。なお、本プログラムはファイルの入出力は少なく、無視できる程度である。「Xeon Phi + direc.」と「Xeon Gold + direc.」は前章で説明した通り、プログラムのベクトル化を行うためにコンパイラ指示行を挿入したものである。

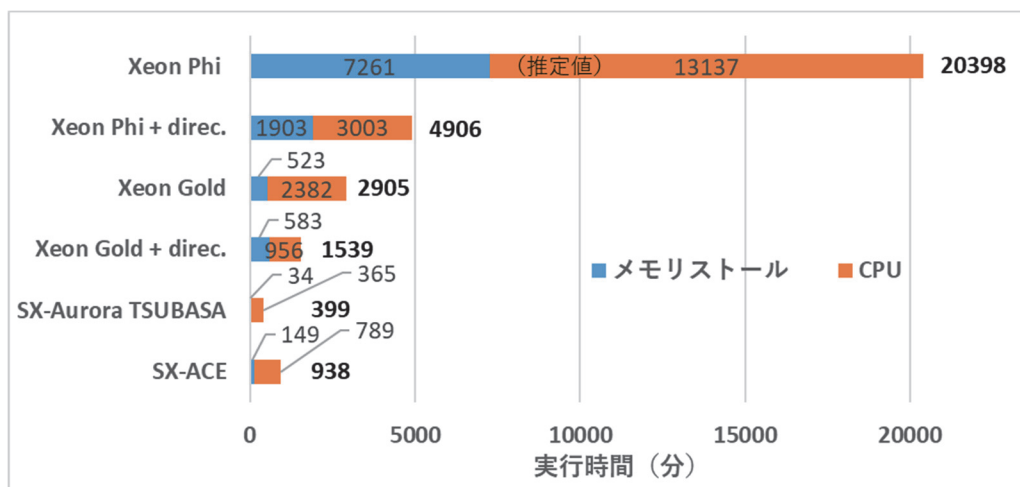


図5 シングルコアでの実行時間

また、「Xeon Phi」は実行時間が長く、計測に使用したシステムの運用時間内に処理が終わらなかったため、津波の再現時間を6時間から2時間に短縮して、その結果から6時間分のシミュレーション実行時間を推定したものである。

Xeon GoldとXeon Phiにおいて、ベクトル化を行わなかった場合（「Xeon Gold」と「Xeon Phi」）と行った場合（「Xeon Gold + direc.」と「Xeon Phi + direc.」）を比較すると、ベクトル化を行った場合の処理時間の方が短いことがわかる。Xeon Goldで約1/2、Xeon Phiで約1/5の実行時間になっている。この結果から一般にスカラーCPUと呼ばれているIntel製のCPUでも高速化を行うためには、プログラムのベクトル化が必要であることがわかる。また、ベクトル化については、Intelのコンパイラの判断に任せず、コンパイラ指示行を用いてベクトル化を行うことが重要である。

次にメモリストール時間を見える。ベクトル型スーパーコンピュータSX-ACEとSX-Aurora TSUBASAの「メモリストール」時間は、Xeon GoldやXeon Phiに比べて短いことがわかる。特にSX-ACEの「メモリストール」時間は「Xeon Gold + direc.」の約1/4、SX-Aurora TSUBASAでは約1/17であった。これは2つの要因があり、一つ目はSX-ACEとSX-Aurora TSUBASAのメモリバンド幅がXeon GoldやXeon Phiに比べて大きいことである（ここでXeon Phiはバンド幅の高いMCDRAMを利用したが、本プログラムのメモリ使用量が17GBでMCDRAMの容量を超えたため、メインメモリのメモリバンド幅で律速されてしまった）。また、もう1つは両SXのベクトル処理のベクトル長が256と長く、ベクトル演算パイプラインの処理とメモリからのデータ転送をオーバーラップさせ、メモリエイテンシを隠蔽できていることである。

全処理時間では、SX-Aurora TSUBASAが最も短く、SX-ACEの約2/5、「Xeon Gold + direc.」の約1/4、「Xeon Phi + direc.」の約1/11になっている。しかし、SX-Aurora TSUBASAとSX-ACEの理論コア性能の比から見ると、SX-Aurora TSUBASAの実行効率は低下している。これはSX-Aurora TSUBASAのキャッシュメモリのバンド幅が律速となり、ベクトル処理ユニットを十分に活用できていないからである。一方、SX-ACEは評価したシステムの中で最も理論コア性能が低いが、全処理時間は「Xeon Gold + direc.」の約2/3、「Xeon Phi + direc.」の約1/4になっており、実行効率が高いことがわかる。

（２）マルチコアの評価

図6が各システムにおけるマルチコアでの実行時間である。左図がコア数で実行時間を比較したもの（SX-ACE、SX-Aurora TSUBASA、Xeon Phiはコア数を 64×2^n （ n は0以上の整数）、Xeon Goldは 72×2^n でデータをプロットした）、右図がCPU数で実行時間を比較したものである（SX-ACEはCPU数を 16×2^n 、SX-Aurora TSUBASAとXeon PhiはCPU数を 8×2^n 、Xeon Goldは 6×2^n でデータをプロットした）。右図にはSX-ACE、SX-Aurora TSUBASA、Xeon Goldそれぞれにおいて実行時間が5分以下になった時のCPU数を記載した。

図6の左図においてXeon Phiは他のシステムより実行時間が長いように見える。しかし、Xeon Phiは、もともとコア性能を抑え、CPU内に多くのコアを搭載することによってCPU全体の性能をあげることを目的に作られたものである。そのため、右図のCPU数による実行時間を見ると、Xeon PhiはXeon GoldとSX-ACEより実行時間が短くなっている。これはコア数が多いだけでなく、プログラムが使用するメモリが各CPUに分散され、MCDRAMの容量を超えなかったため、図5のシングルコア実行より効率的に処理が行われたためである。しかし、32 CPUでは演算粒度が小さくなり並列効果が低下している。さらにXeon PhiのCPU数を増やして、どこまで実行時間が短縮できるか評価したかったが、測定に利用したシステムが44 CPUまでであったため調査はできていない。

次にSX-ACEでは、左図において同じコア数ではXeon Goldより実行時間が短くなっている。しかし、右図では逆転し、同じCPU数ではXeon Goldの方が実行時間が短い。これは、SX-ACEのCPU当たりのコア数がXeon Goldの1/3の4であり、SX-ACEとXeon GoldのCPU性能に差があるからである。また、右図においてSX-ACEとXeon Goldが5分を達成するCPUを見ると、Xeon GoldはSX-ACEの約3/5のCPU数で良いことがわかる。

最も新しいシステムである SX-Aurora TSUBASA では、コア数 (左図) と CPU 数 (右図) において、共に実行時間が最も短いことがわかる。左図のコア数 512 では SX-Aurora TSUBASA の実行時間は SX-ACE の約 1/3, Xeon Gold の約 1/5, Xeon Phi の約 1/30 である。また、右図の実行時間 5 分では CPU 数として Xeon Gold の約 1/3 である。SX-Aurora TSUBASA は今回評価したシステムの中で、もっともコンピュータ資源として CPU 数が少なく、かつ短時間で津波浸水被害予測が行えるシステムであることがわかる。これは、SX-Aurora TSUBASA は高いメモリバンド幅と高性能のベクトルコアを有しているからである。

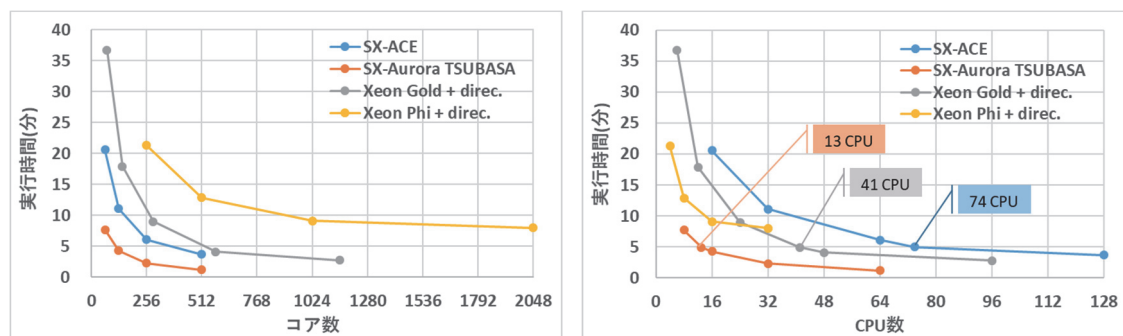


図 6 マルチコアでの実行時間：(左) コア数, (右) CPU 数

(3) システム拡張のためのコンピュータ資源

リアルタイム津波浸水被害推計システムは、現在、南海トラフ地震をターゲットとして図 7 の「西日本の 810m 格子の範囲」(西日本地域と記載する)を 30m 格子を用いてシミュレーションしている。そして、このシミュレーションを 5 分以内に完了させるために SX-ACE 388 CPU を利用している。今後、シミュレーションの精度を上げるため格子サイズを 10m, そして国内の太平洋全沿岸をシミュレーションするためにどの程度の CPU 数を必要とするかについて、SX-ACE, SX-Aurora TSUBASA, Xeon Gold で見積もりを行った。

西日本地域を 10m の格子サイズでシミュレーションを行うことを考える。リアルタイム津波浸水被害推計シミュレーションは直交座標系を用い、かつ潮位の計算を行っていることから、西日本地域を座標系と潮位を考慮した 15 の領域に分割し、その領域ごとにシミュレーションを行っている。各領域はその地形に合わせて多角形格子を組み、また海域の水深に合わせた Δt を設定している。西日本地域の演算量は、式 (6) より本評価で実施した高知県の約 27 倍の演算量になる。

$$\text{演算量の倍率} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\text{領域}i\text{の格子数}}{\text{高知県の格子数}} \cdot \frac{\text{高知県の}\Delta t}{\text{領域}i\text{の}\Delta t} \right) \quad (6)$$

次に、国内の太平洋全沿岸のシミュレーションでは、南海トラフ地震だけでなく、相模トラフ、日本海溝、千島海溝などで発生する地震による津波のシミュレーションを行う必要がある。そのため、東日本地域での 810m 格子の範囲を相模トラフ、日本海溝、千島海溝を含むように設定する (図 7 の赤色の矩形)。東日本領域での座標系と潮位を考慮すると、東日本地域も 15 の領域に分割してシミュレーションを行うことになる。そして、地形に合わせた多角形格子と水深に合わせた Δt から式 (6) より、太平洋全沿岸の演算量は西日本地域の約 3 倍になる。また、西日本地域で発生した津波の東日本地域への伝搬やその逆もシミュレーションする必要があるために、日本全体を取り囲む計算領域 (図 7 の 2430m 格子の範囲) も設定した。

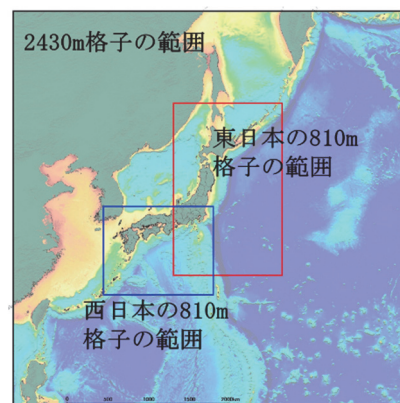


図 7 太平洋全沿岸の計算範囲

この計算領域を増やしたことにより太平洋全沿岸の演算量は西日本地域の約 3.5 倍となる。

以上から各システムの CPU 数は表 4 のようになる (1 の位を切り上げた)。現在, SX-ACE において西日本領域の 30m 格子を 388 CPU でシミュレーションをしているが, 約 5 倍の CPU 数で 10m 格子のシミュレーションができることがわかる。例えば, サイバーサイエンスセンターの SX-ACE の CPU 数は 2,560 であるので, このシミュレーションを実行することが可能である。しかし, 10m 格子の太平洋全沿岸のシミュレーションは, サイバーサイエンスセンターの SX-ACE の全 CPU 数を超えるため実行できない。(ちなみに, SX-ACE の最大構成を持つ海洋研究開発機構の地球シミュレータも CPU 数が 5,120 なので実行することはできない)。Xeon Gold においては, 西日本地域で 1,110 CPU なので学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点[11]のスーパーコンピュータなどで実行可能である。太平洋全沿岸では 3,900 に近い CPU 数が必要であり, この規模のシステムを有する機関は少なく, 国内では気象庁のスーパーコンピュータシステムなどになる。SX-Aurora TSUBASA では, まだ大規模システムの導入がないが, 太平洋全沿岸のシミュレーションは図 4 の右図のサーバ 154 台で実行可能であり, 今回評価したシステムの中でもっと小規模なシステム構成で実現可能である。

表 4 実行時間 5 分を達成するための CPU 数

	高知県 10m	西日本 10m	太平洋全沿岸
SX-ACE	74	2,000	7,000
SX-Aurora TSUBASA	13	350	1,230
Xeon Gold	41	1,110	3,880

5. まとめ

本稿では, リアルタイム津波浸水被害推計システムに実装されているシミュレーションプログラムを用いて, SX-ACE, SX-Aurora TSUBASA, Xeon Gold, Xeon Phi の 4 つの代表的なスーパーコンピュータで性能評価を行った。SX-ACE は, シングルコアでの実行時間で Xeon Gold の約 2/3, Xeon Phi の約 1/4 であり, Xeon Gold や Xeon Phi に比べて実行効率が高いことを示した。また, 2018 年にリリースされた SX-Aurora TSUBASA では, シングルコアでの実行時間は SX-ACE の約 2/5, Xeon Gold の約 1/4, Xeon Phi の約 1/11 であり, さらに, 512 コアでの実行時間は SX-ACE 512 コアの約 1/3, Xeon Gold 576 コアの約 1/5, Xeon Phi 512 コアの約 1/30 の時間であった。SX-Aurora TSUBASA は, 評価したスーパーコンピュータの中でもっとも高速にシミュレーションを処理できることを明らかにした。また, リアルタイム津波浸水被害推計システムの今後の拡張として, 10m 格子による国内の太平洋全沿岸の 5 分以内のシミュレーションに必要なコンピュータ資源量は, SX-ACE が約 7,000 CPU, Xeon Gold が約 3,900 CPU, SX-Aurora TSUBASA が約 1,230 CPU となり, Xeon Gold と SX-Aurora TSUBASA で実現できることが示せた。

今後は, 本評価で得られた知見を用いてさらなる高速化を行うために, 各システムにおいて命令レベルの最適化と, 並列数の拡大による MPI 通信の最適化を行っていく予定である。

謝辞

本研究は東北大学サイバーサイエンスセンターの大規模科学計算システム SX-ACE と大阪大学サイバーメディアセンターの大規模計算機システム OCTOPUS を利用した。研究にあたって両センターの関係各位にご指導とご協力を頂いたことに感謝いたします。また, 本研究の一部は, 科研費 (17H06108, 18K11322), 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (jh190030-NAH), 文部科学省「次世代領域研究開発」(高性能汎用計算機高度利用事業費補助金) の助成のもとに行われた。

参考文献

- [1] Imamura, F., Anawat, S., “Damage due to the 2011 Tohoku Earthquake Tsunami and its Lessons for Future Mitigation,” In Proceedings of the International Symposium on Engineering Lessons Learned from the 2011 Great East Japan Earthquake, Tokyo, Japan, March 2012.
- [2] Mori, N., Takahashi, T., Yanagisawa, H., “Survey of 2011 Tohoku earthquake tsunami inundation,” *Geophysical Research Letters*, 38 L00G14, 2016.
- [3] Koshiyama, K., “Characteristics of Emergency Response at the Great East Japan Earthquake,” In 5th International Disaster and Risk Conference Davos 2014 [poster], Davos, Switzerland, August 2014.
https://idrc.info/fileadmin/user_upload/idrc/documents/IDRC14_PosterCollection.pdf.
- [4] 越村俊一, 阿部孝志, 撫佐昭裕, 村嶋陽一, 鈴木崇之, 井上拓也, 太田雄策, 日野亮太, 佐藤佳彦, 加地正明, 小林広明, スーパーコンピュータによるリアルタイム津波浸水被害予測, *SENAC Vol. 51, No. 1*, 2018.
- [5] Musa, A., Watanabe, O., Matsuoka, H., Hokari, H., Inoue, T., Murashima, Y., Ohta, Y., Hino, R., Koshimusa, S., Kobayashi, H., “Real-time tsunami inundation forecast system for tsunami disaster prevention and mitigation,” *J. Supercomput.*, 74(7), 3093–3113, 2018. <https://doi.org/10.1007/s11227-018-2363-0>.
- [6] 東北大学, 大阪大学, 日本電気株式会社, 国際航業株式会社, 株式会社エイツー, “東北大・大阪大・NEC・国際航業・エイツー 世界初, 地震発生から 30 分以内にスーパーコンピュータを用いて津波浸水被害を推計するシステムが内閣府「津波浸水被害推定システム」として採用, 2017 (広報).
- [7] NEC SX-Aurora TSUBASA WEB サイト <https://jpn.nec.com/hpc/sxaurooratsubasa/index.html>
- [8] Okada, Y., “Internal Deformation due to Shear and Tensile Faults in a Half-Space,” *Bulletin of the Seismological Society of America*, 82(2), 1018–1040, 1992.
- [9] Koshimura, S., Oie, T., Yanagisawa, H., Imamura, F., “Developing fragility functions for tsunami damage estimation using numerical model and post-tsunami data from Banda Aceh, Indonesia,” *Coastal Engineering Journal*, JSCE, 51(3), 243–273, 2009.
- [10] 井上拓也, 阿部孝志, 越村俊一, 撫佐昭裕, 村嶋陽一, 小林 広明, “多角形領域接続・MPI 並列による広域津波解析の効率化”, *土木学会論文集 B2 (海岸工学)*, Vol. 72, No. 2, I_373–I_378, 2016.
- [11] 学祭大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 WEB サイト <https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/ja/>

[共同研究成果]

民間航空機開発における大規模 CFD 解析の適用（その 4）

前田一郎

三菱航空機株式会社

三菱航空機株式会社では、平成 20 年度の先端的大規模計算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にて運用しているベクトル計算機、SX-9/SX-ACE を利用している。このスーパーコンピュータを利用することで、数値流体力学（CFD）による空力解析シミュレーションを SpaceJet（旧 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、空力に関連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、これまでの報告[1-3]に引き続き、この空力解析シミュレーションの内容と、SpaceJet 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、Mitsubishi SpaceJet（旧三菱リージョナルジェット（MRJ）：図 1）の開発を進めている。SpaceJet 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／多目的設計探索の研究など、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）を用いた空力解析コードについて、東北大学所有の SX-9/SX-ACE による解析例と SpaceJet 開発における適用状況を紹介する。



図 1 Mitsubishi SpaceJet

2. SpaceJet 開発における CFD 解析

SpaceJet の開発においては、平成 20 年度より東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータ及び解析ツールを利用して、空力設計、空力データ設定、空力に関連する装備品設計等に対して CFD 解析を活用してきた。本稿では、その中でも設計や現在実施中の飛行試験において特に重要となる項目に対する解析について紹介する。尚、本稿に記載した解析以外にも、本システムの利点を活用した計算も数多く実施しており、SpaceJet 開発に大きく貢献して頂いている。その例としては、飛行試験（主には荷重飛行試験）のデータ処理に必要な CFD データベースの構築や飛行試験対応解析等が挙げられる。前者の飛行試験データ処理に関しては膨大なケース数の解析が必要となるため、スーパーコンピュータを適用することで飛行試験データ処理を効率的に実施することが出来た。また、後者の飛行試験対応解析に関しては、スーパーコンピュータの適用により迅速により詳細な CFD 解析を実施することが可能となり、飛行試験で観察された事象の把握や理解に役立てることで飛行試験をより効率的かつ効果的に実施することが出来ている。

3. CFD 解析コード

SpaceJet 開発には主に東北大学の非構造格子ソルバーTAS (Tohoku University Aerodynamic Simulation) コード[4-8]を使用している。主に 3 次元の圧縮性・粘性流体に本ソルバーを適用している。図 2 に解析形状例を、図 3 に解析格子例をそれぞれ示す。

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。



図 2 解析形状例（巡航形態）

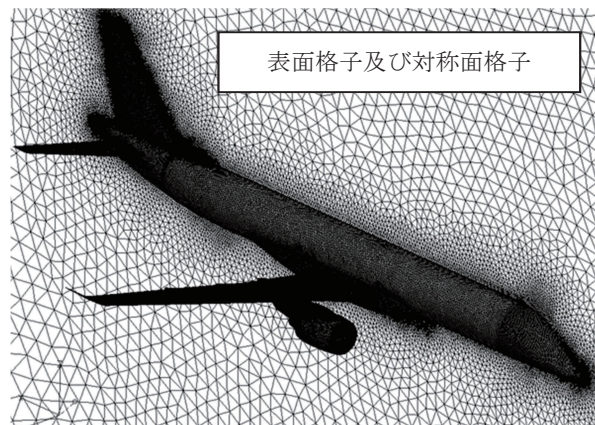


図 3 解析格子例（巡航形態）

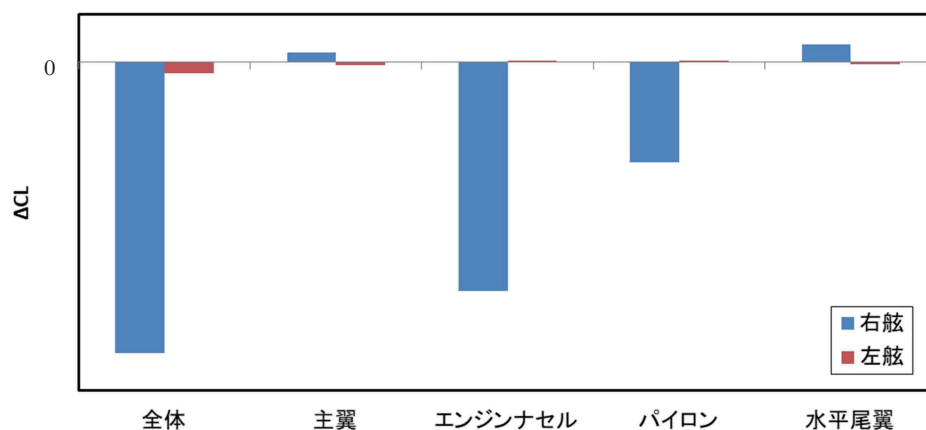
4. 空力解析例

本章では、SpaceJet の開発における空力関連の設計評価・確認への解析適用例を紹介する。

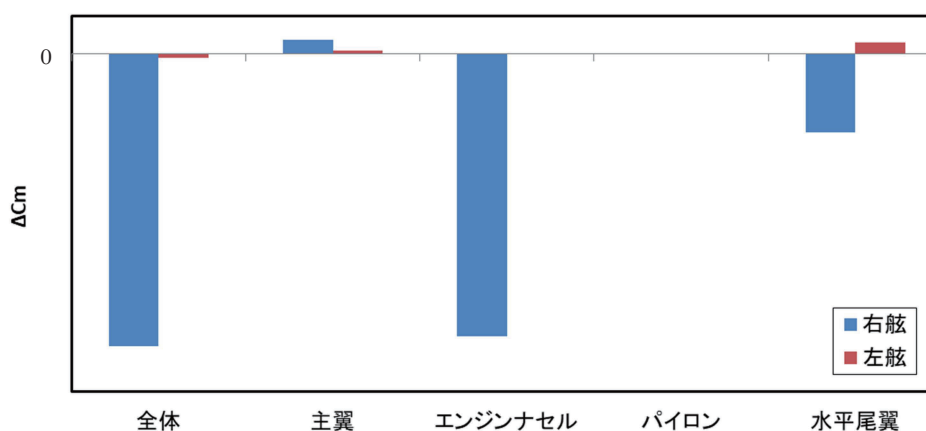
SpaceJet の開発においては、航空機の離陸から着陸後の静止までの一連の形態に対して CFD 解析を適用している。その中には、比較的規模の大きな解析が必要となる形態が含まれる。これまでに、各飛行形態への適用例として離着陸形態（脚下げを含む）、舵面操舵形態、地面効果、スラスト・リバーサー作動状態に対する適用例を紹介したが[1-3]、今回は左右 2 つあるエンジンのうち片方のエンジンが停止した非対称推力状態について紹介する（図 4～6）。

航空機のエンジンは様々な要因により飛行中に停止する可能性があり、その場合にも飛行を継続し無事に着陸する必要がある。エンジン停止によりその推力が非対称となる場合には機体に非対称の空気が発生することになる。エンジンの推力も含めて、この状態を風洞試験で模擬することは困難であり、飛行試験のリスク低減及び物理現象の把握のために解析を実施している。今回は離陸上昇中に右舷側のエンジンが停止した場合について空力的な影響について検討する（離陸形態（脚下げ）、エンジン推力はエンジンの吸気面及び排気面の境界条件で模擬）。

図 4 に右舷エンジンが停止した場合の空力係数の変化を示す。エンジン推力が減少する右舷側において、エンジンナセル及びパイロンの空気力変化が大きく、エンジン停止により揚力が減少している。水平尾翼については揚力が増加しているが、これはエンジンナセルやパイロンを含む主翼全体の揚力が減少することで吹き下ろしが減少したためである。ピッチングモーメントに関



(a) 揚力変化



(b) ピッチングモーメント変化

図 4 空力係数変化

しては、前述の揚力変化と機軸方向のモーメント基準位置の関係により、基準位置より前方のエンジンナセルでは減少、基準位置付近のパイロンでは変化小、基準位置よりも後方の水平尾翼では減少となる（水平尾翼は揚力が増加）。片舷のエンジンが停止することで、揚力等の力が変化だけでなく、ピッチングモーメントも変化し、左右舷での揚力変化の違いによるローリングモーメントや推力そのものの非対称によるヨーイングモーメントも発生する。

図5に機体全体の表面圧力分布 (C_p 分布) を示す。エンジン停止による影響はエンジンナセル、パイロン及び水平尾翼付近に限定されており、その傾向は前述の空力係数の変化と対応している。

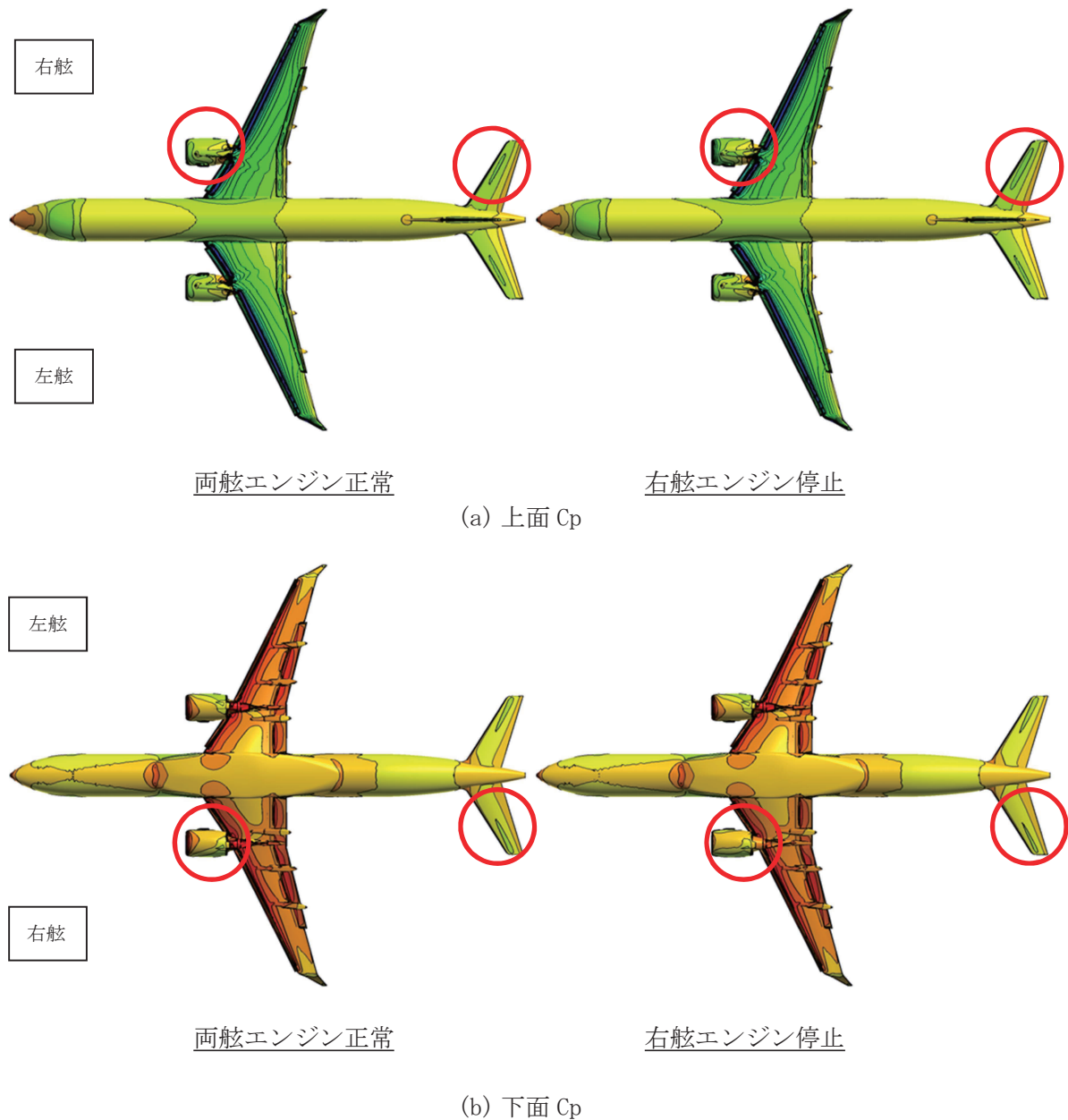


図5 機体表面圧力分布—機体全体

図 6 に右舷エンジン付近の表面圧力分布（ C_p 分布）の拡大図を示す。エンジン停止により吸気量が変わるため、エンジンナセル前縁付近の激点位置が変化し圧力分布も変化するが、高压の排気の影響（図中の赤部分）がエンジン停止により減少することの方が影響としては大きいと考えられ、エンジンナセル、パイロンともエンジン停止により下面側の圧力が減少（揚力減少）していることが分かる。

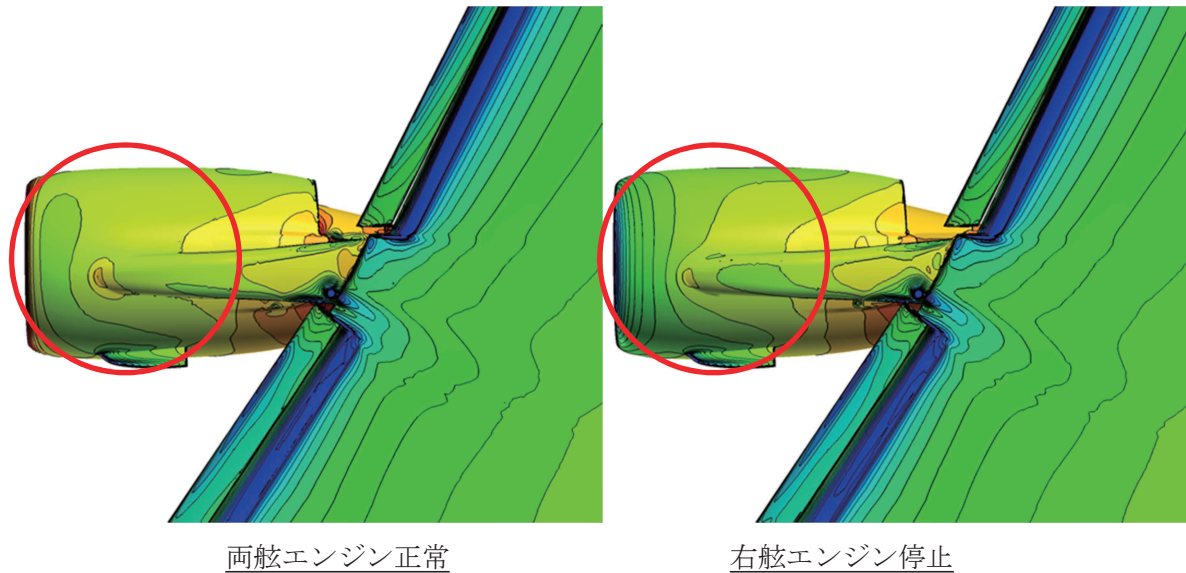
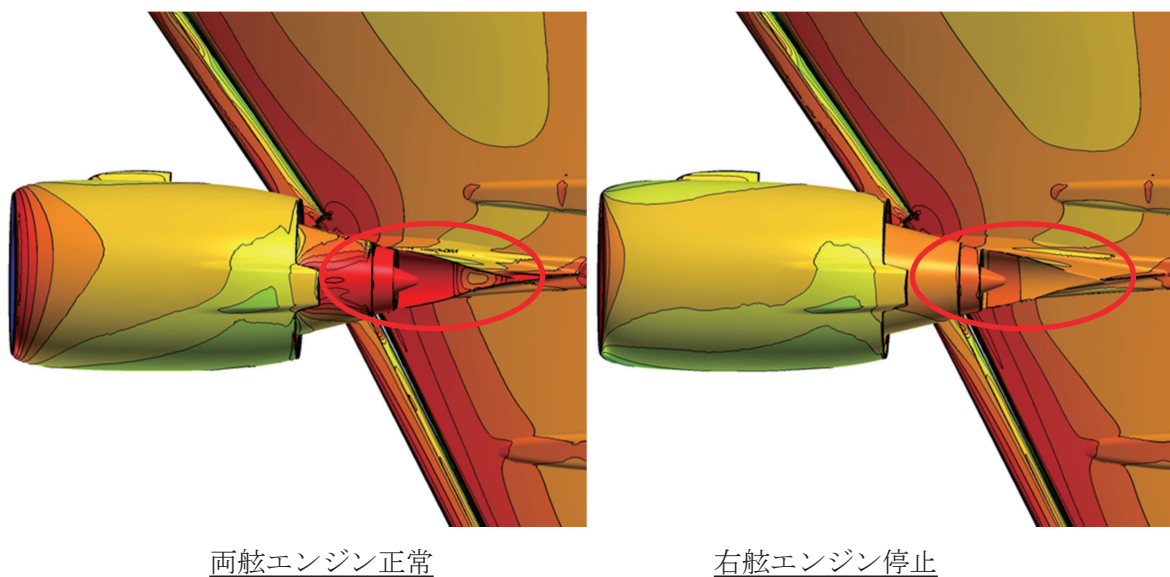
(a) 上面 C_p (b) 下面 C_p

図 6 機体表面圧力分布—エンジン付近（右舷）

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空力解析の本格活用をSpaceJet 開発で実現することができた。東北大学で開発された解析コードやスーパーコンピュータをSpaceJet の設計段階から積極活用することにより、空力に関連する設計リスクを最小限に抑え、飛行試験における飛行安全上のリスク低減を図ることができた。今後も引き続き飛行試験や設計確認作業のためにスーパーコンピュータを活用させて頂くとともに、飛行試験データを用いて解析コードの検証や精度向上を図る予定である。

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] 前田一郎, “民間航空機開発における大規模 CFD 解析の適用”, SENAC, Vol. 50, No.3, 2017, pp.8-14.
- [2] 前田一郎, “民間航空機開発における大規模 CFD 解析の適用（その 2）”, SENAC, Vol. 51, No.3, 2018, pp.9-15.
- [3] 前田一郎, “民間航空機開発における大規模 CFD 解析の適用（その 3）”, SENAC, Vol. 52, No.3, 2019, pp.8-14.
- [4] 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.
- [5] Murayama, M. and Yamamoto, K., “Comparison Study of Drag Prediction for the 3rd CFD Drag Prediction Workshop by Structured and Unstructured Mesh Method,” AIAA Paper 2007-0258, June 2002.
- [6] 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.
- [7] Shrov, D. and Nakahashi, K., “A Boundary Recovery Algorithm for Delaunay Tetrahedral Meshing,” Proceedings of 5th International Conference on Numerical Grid Generation in Computational Fluid Simulations, Mississippi State, Mississippi, 1996, pp.229-238.
- [8] 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.

[大規模科学計算システム]

SSH アクセス認証鍵生成サーバの利用方法

共同利用支援係 共同研究支援係

1. はじめに

大規模科学計算システムでは、セキュリティ強化のため、パスワード認証によるログインを廃止し、公開鍵暗号方式によるログインのみ許可しています※1。SSH アクセス認証鍵生成サーバ（以下、鍵サーバ）はセンターに SSH アクセスするために必要な公開鍵と秘密鍵のペアを生成し、ユーザのホームディレクトリに公開鍵を自動登録するサーバです。本稿では、その利用方法についてご紹介します。

表 1 各ホストのログイン認証方式

ログインホスト名	認証方式	利用システム
front.cc.tohoku.ac.jp	公開鍵	スーパーコンピュータ SX-ACE 並列コンピュータ LX 406Re-2
file.cc.tohoku.ac.jp		データ転送サーバ
—	パスワード※2	利用者端末 大判カラープリンタ

※1：HPCI 課題、JHPCN-HPCI 課題で利用する場合は GSI 認証でのログインも可能です。詳しくは、以下のリンク先の「HPCI ログインマニュアル」をご覧ください。

https://www.hpci-office.jp/pages/hpci_info_manuals

※2：センター内施設（利用者端末・大判カラープリンタ）は、ローカルログインのため、パスワード認証でご利用いただけます。利用にあたり、秘密鍵を持参する必要はありません。

2. 公開鍵暗号方式を使用する上での注意事項

以下のような行為は、不正アクセスのリスク（不正ログイン、クライアントのなりすまし、暗号化された通信の暴露、他サーバへの攻撃等）が非常に高く、大変危険です。ご注意願います。

- ・ パスフレーズなしの秘密鍵を使用
- ・ 秘密鍵、パスフレーズの使い回し
- ・ 秘密鍵のメールへの添付、USB メモリやホームディレクトリへの保存
- ・ 公開鍵と秘密鍵のペアを同一ノード上に保存

3. SSH アクセス認証鍵の生成

利用者番号の発行日から 60 日経過後、または鍵を生成すると、鍵サーバへのログインが自動的にロックされます。一度ログアウトすると、以降は鍵サーバにはログインできなくなりますのでご注意ください。鍵の再登録が必要になった場合は共同利用支援係までご連絡下さい。本人確認の上、ロックを解除します。

- (1) 鍵サーバに利用者番号と初期パスワード（変更している場合は変更後のパスワード）で SSH 接続します。

SSH アクセス認証鍵生成サーバ

```
key. cc. tohoku. ac. jp
```

リスト 1 鍵サーバへの SSH 接続例

```
localhost$ ssh 利用者番号@key. cc. tohoku. ac. jp
利用者番号@key. cc. tohoku. ac. jp's password: パスワードを入力
(初回接続時のメッセージ) : yes を入力
key$ (コマンド待ち状態)
```

- (2) 以下のコマンド (ckey-gen) を実行し、メッセージに従って公開鍵と暗号鍵の鍵ペアを作成します。必ずパスフレーズ (8 文字以上) を設定して鍵を作成してください。

リスト 2 公開鍵と暗号鍵の作成方法

```
key$ ckey-gen
Enter passphrase(8 or more characters) : パスフレーズの入力 (必ず設定)
Enter same passphrase again: 同じパスフレーズを再度入力
```

(生成された秘密鍵の表示)

```
'利用者番号' registration is completed.
RSA private key is as follows.
```

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

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

```
Proc-Type: 4, ENCRYPTED
```

```
DEK-Info: DES-EDE3-CBC, A3C27C703A6DF938
```

```
gp5U3M6wVIvuGLX80tYBAWC3WwNzX9TPu8e0CA9Pd/i6i jSNcVKp7lGJtuRz jfXV
```

(中略)

```
FSwfyL63gRqxPZEmIcZzfDnhyX7ezdNNveZu37U/nq4TQj9+Q+RWHhjF9jwnuW6F
```

```
-----END RSA PRIVATE KEY-----
```

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

- (3) 画面に表示された秘密鍵 (---BEGIN RSA PRIVATE KEY--- から ---END RSA PRIVATE KEY--- まで) をコピー&ペーストし、ローカル PC にテキストファイルとして保存します。公開鍵は自動的にユーザのホームディレクトリに登録されます。秘密鍵はセキュリティを考慮して消去されます。

4. 公開鍵暗号方式によるログイン方法

4.1 Linux/OS X のターミナルソフトから接続する方法

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

- (1) パーミッションを 600 に変更します。(初回のみ)

リスト 3 パーミッションの変更

```
localhost$ chmod 600 ~/.ssh/id_rsa_cc
```


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

リスト 4 ログインホストへの SSH 接続例

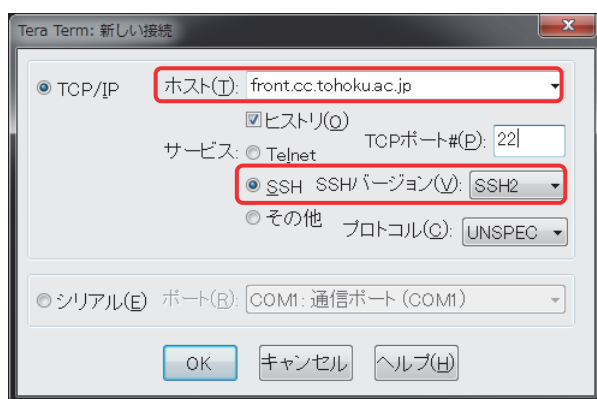
```
localhost$ ssh -i ~/.ssh/id_rsa_cc 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp
Enter passphrase for key '/home/localname/.ssh/id_rsa_cc': パスフレーズを入力
(初回接続時のメッセージ) : yes を入力

front$ (コマンド待ち状態)
```

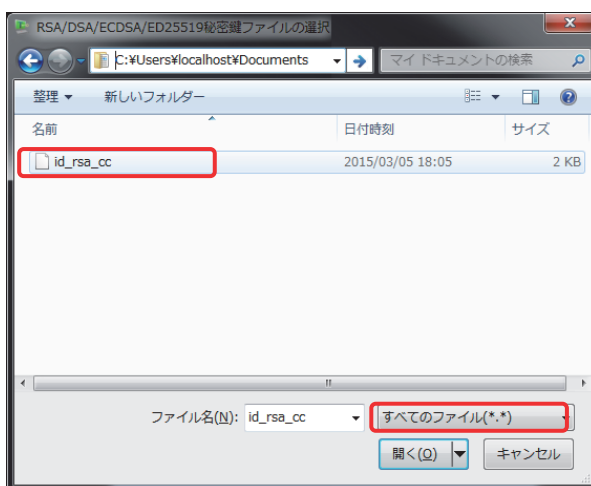
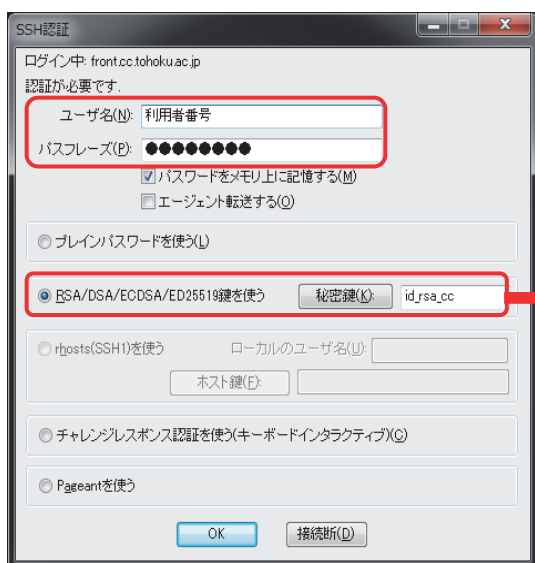
4.2 Windows の Tera Term から接続する方法

生成された秘密鍵をファイル名「id_rsa_cc」として「ドキュメント」以下に保存した場合

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



- (2) 「ユーザ名」に利用者番号、「パスフレーズ」に鍵ペアを作成した際に入力したものを入力、「RSA/DSA 鍵を使う」を選択し、「秘密鍵」に保存した秘密鍵のファイルを指定します。
 (秘密鍵ファイルの選択画面では、拡張子「すべてのファイル(*.*)」を選択します)
 [OK]を押下すると接続されます。



4.3 Windows の WinSCP から接続する方法

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

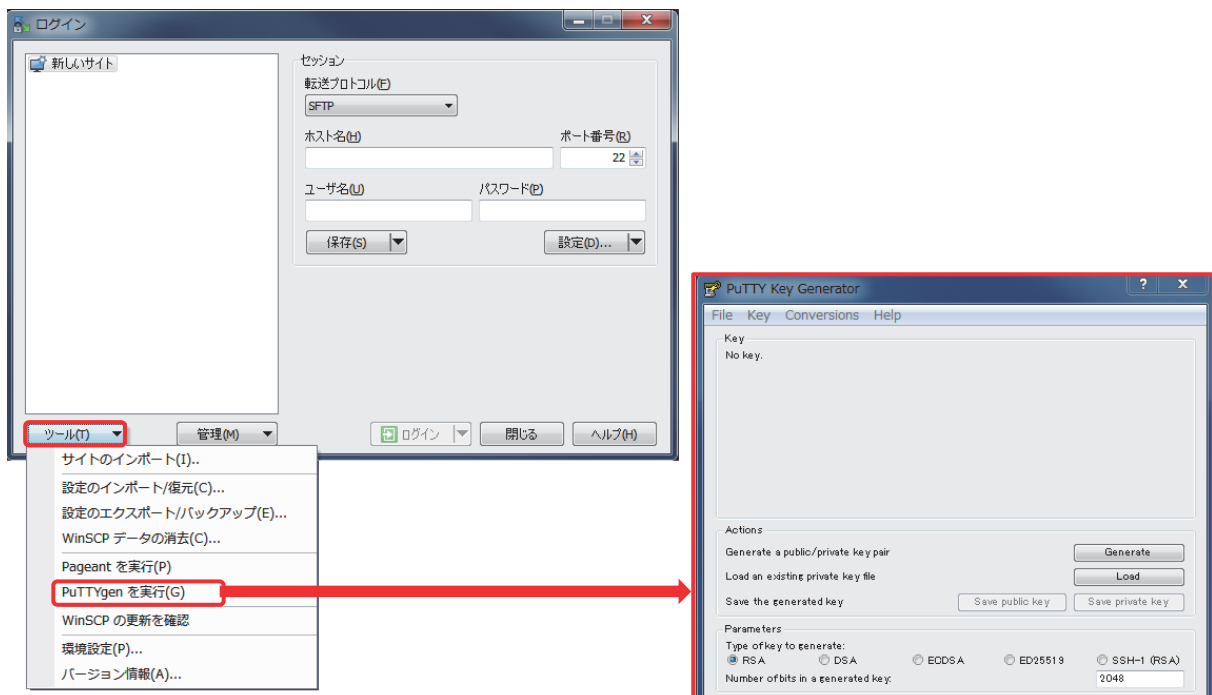
4.3.1 秘密鍵を PuTTY 形式に変換

鍵サーバで生成した秘密鍵をファイル名「id_rsa_cc」として「ドキュメント」以下に保存した場合

(1) WinSCP のログイン画面から WinSCP 付属の鍵生成プログラム「PuTTYgen」を起動します。

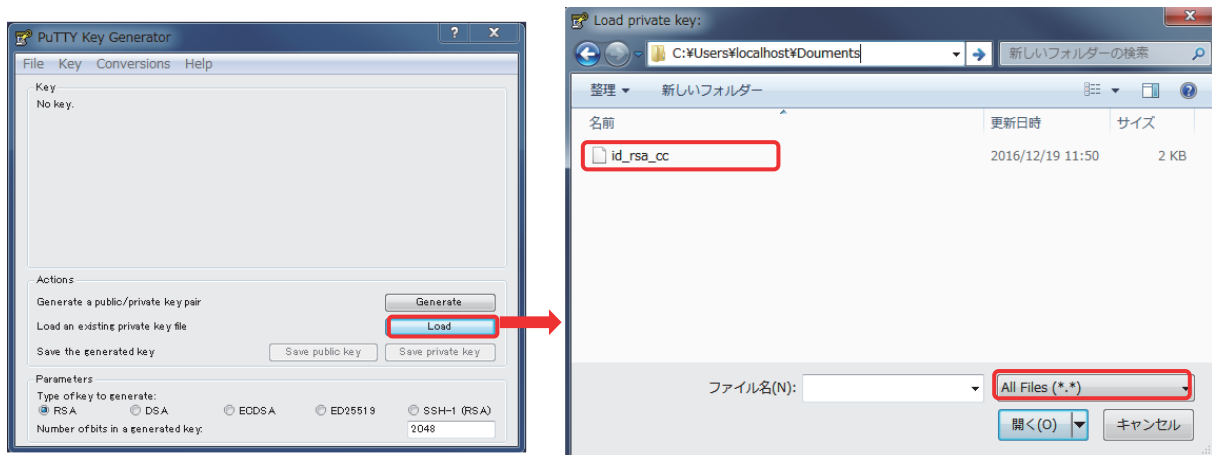
([ツール] 押下→[PuTTYgen を実行] を押下)

PuTTYgen がインストールされていない場合はインストールが必要です。

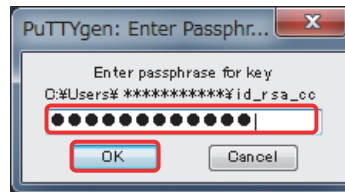


(2) [Load]を押下し、鍵サーバで生成した秘密鍵ファイルを選択して[開く]を押下します。

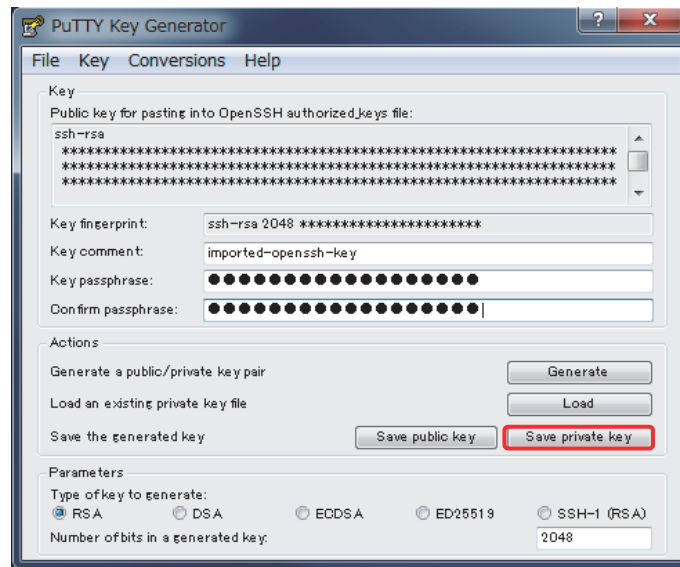
(秘密鍵ファイルの選択画面では、拡張子「All Files(*.*)」を選択します)



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



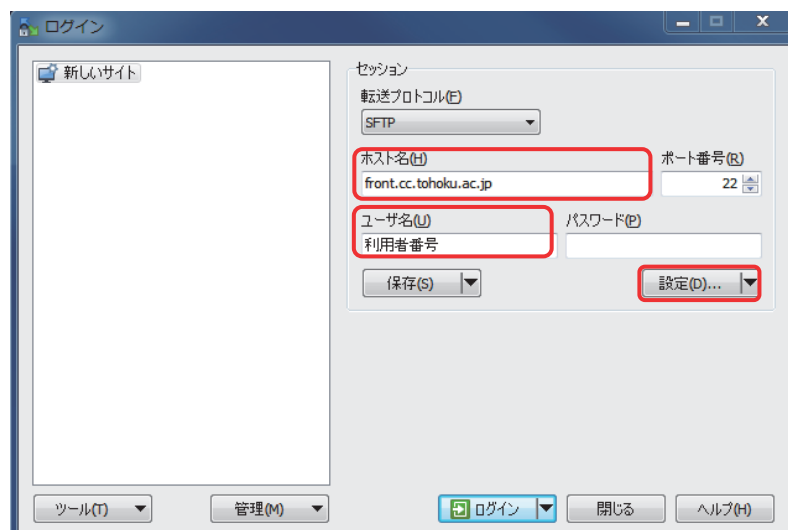
- (4) [Save private key]を押下すると、PuTTY形式に変換された秘密鍵が保存されます。
(保存先/ファイル名は任意。拡張子は.ppkを推奨)



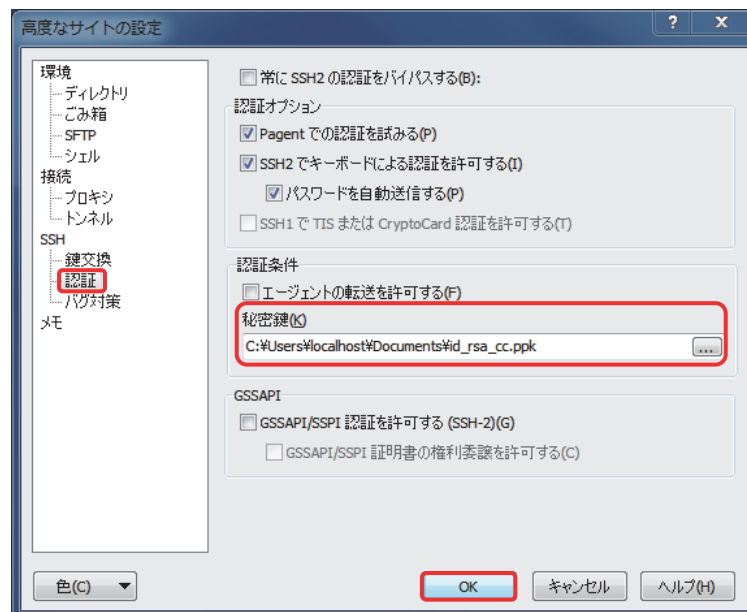
4.3.2 ログイン方法

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

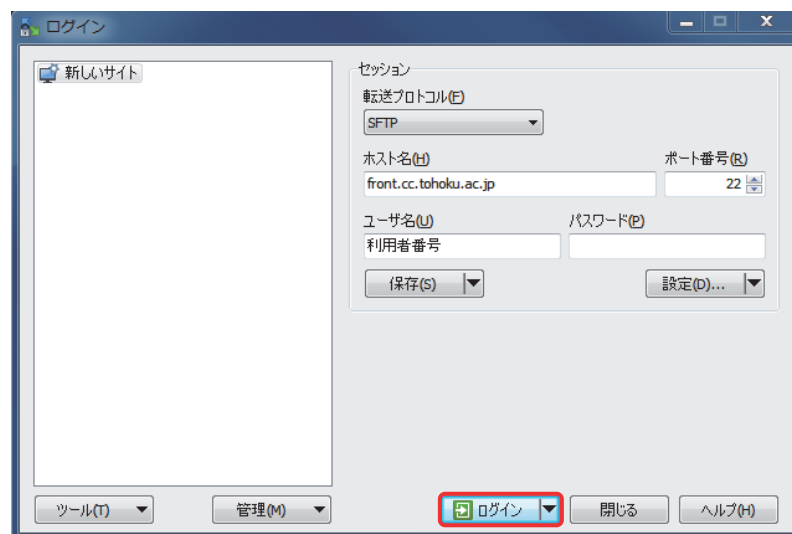
- (1) 「ホスト名」を指定、「ユーザ名」に利用者番号を入力し、[設定]を押下する。



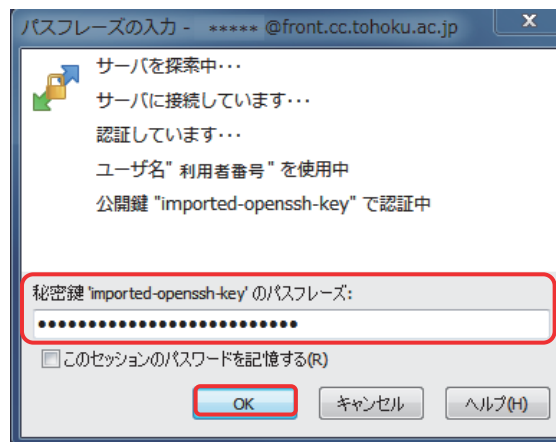
- (2) 「SSH」→「認証」を選択し、「秘密鍵」に PuTTY 形式の秘密鍵のファイルを指定して[OK]を押下します。



- (3) [ログイン]ボタンを押下します。



- (4) パスフレーズを入力し、[OK]押下すると接続されます。



4.4 その他のOS／アプリケーションから接続する場合

各アプリケーションのヘルプを参照ください。

5. おわりに

本稿では、SSH アクセス認証鍵生成サーバの利用方法を紹介しました。ご不明な点、ご質問等ございましたら、お気軽にセンターまでお問い合わせください。

[大規模科学計算システム]

アプリケーションサービスの紹介

情報部情報基盤課 共同利用支援係

はじめに

本センター大規模科学計算システムでは、分子軌道計算、数式処理、データ処理等の各アプリケーションソフトウェアをサービスしています。本稿では、並列コンピュータ LX 406Re-2 でサービスを行っているアプリケーションソフトウェアの紹介をします。

表 1. アプリケーションソフトウェアとサービスホスト

アプリケーションソフトウェア		サービスホスト
分子軌道計算ソフトウェア	Gaussian16	front.cc.tohoku.ac.jp
反応経路自動探索プログラム	GRRM14	
統合型数値計算ソフトウェア	Mathematica	
対話型解析ソフトウェア	MATLAB	

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

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

本稿中の内容は 2020 年 4 月現在のものですので、アプリケーションソフトウェアのバージョンアップや利用方法の最新情報については、Web ページを随時ご確認ください。

ご利用の前に

■ リモートログイン

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

表 2. 計算機システムと日本語環境

システム	ホスト名	OS	日本語環境
並列コンピュータ LX 406Re-2	front.cc.tohoku.ac.jp	Linux	UTF-8

SSH は通信路上のデータを暗号化することで安全性を高めたプログラムです。利用している端末が Linux, macOS の場合は SSH クライアントソフトがインストールされています。インストールされていない場合は端末の管理者にご相談ください。

並列コンピュータの OS は Linux です。公開鍵暗号方式による認証のみ利用できます¹。アカウント希望の場合は共同利用支援係に利用申請し、利用者番号と初期パスワードを発行してもらいます。

¹ パスワード認証方式は 2015 年 4 月 13 日で廃止しました。

並列コンピュータへの初回ログイン時には公開鍵と秘密鍵のペアを作成する必要があります。鍵ペアの作成方法については本誌 26 ページの「SSH アクセス認証鍵生成サーバの利用方法」をご参照ください。

なお、他人名義の利用者番号でのシステム利用は禁止します。パスワード、秘密鍵およびパスフレーズの使い回しは、不正アクセスのリスク(不正ログイン、クライアントのなりすまし、暗号化された通信の暴露、他サーバへの攻撃等)が非常に高く、大変危険です。利用者登録を行うことによる年間維持費等は発生しませんので、利用される方はそれぞれで利用申請をお願いいたします。

【Linux からのログイン】

「ターミナル」、「端末」、「terminal」などの SSH クライアントソフトを起動します。コマンドを入力するプロンプトが表示され、コマンドの待ち受け状態になります。

リスト 1. 並列コンピュータへのログイン例

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

```
localhost$ ssh -i ~/.ssh/id_rsa_cc 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp
Enter passphrase for key '/home/localname/.ssh/id_rsa_cc': パスフレーズを入力
(初回接続時のメッセージ) : yes を入力
front1 $ (コマンド待ち状態)
```

【macOS からのログイン】

「ターミナル.app」を起動します。接続方法は上記と同じです。

【Windows からのログイン】

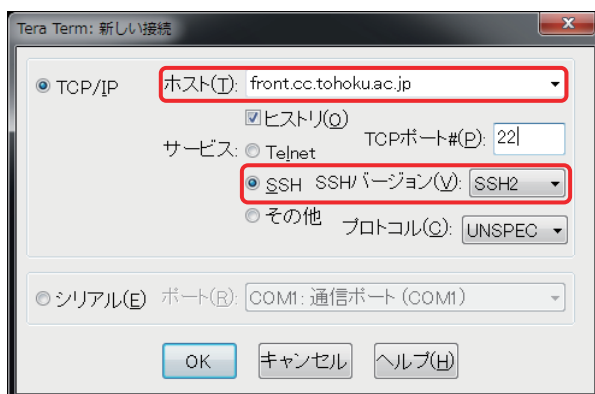
● SSH クライアントソフトのダウンロードとインストール

SSH クライアントソフトの一つである「Tera Term」というフリーソフトをインストールします。以下のページからダウンロードできます。2020 年 4 月現在の最新版は 4.105 です。ダウンロード後インストール作業を行ってください。

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

● 並列コンピュータへの接続

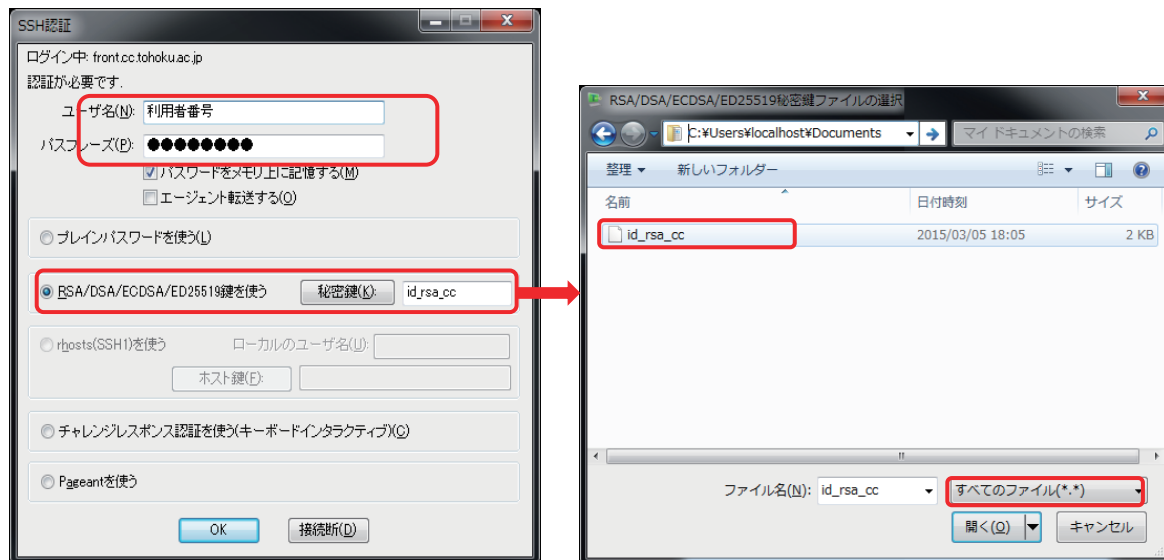
「ホスト名」を指定、「サービス」は SSH2 を選択し、[OK]を押下します。



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

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

[OK]を押下すると接続されます。



【シェルの初期設定】

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

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

【ファイル転送】

● コマンドラインでのファイル転送

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

● アプリケーションを利用したファイル転送

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

■ GUI アプリケーションを利用する方法

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

【Unix, Linux からの利用】

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

リスト 2. Matlab を起動する場合

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

```
localhost$ ssh -i ~/.ssh/id_rsa_cc -X※ 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp
Enter passphrase for key '/home/localname/.ssh/id_rsa_cc': パスワードを入力
(初回接続時のメッセージ) : yes を入力
front1 $ matlab
```

※ 大文字の“X”です。

【Windows からの利用】

● 商用のアプリケーションを利用する場合

Windows 用 X サーバは、X サーバソフトとしていくつかのメーカ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。

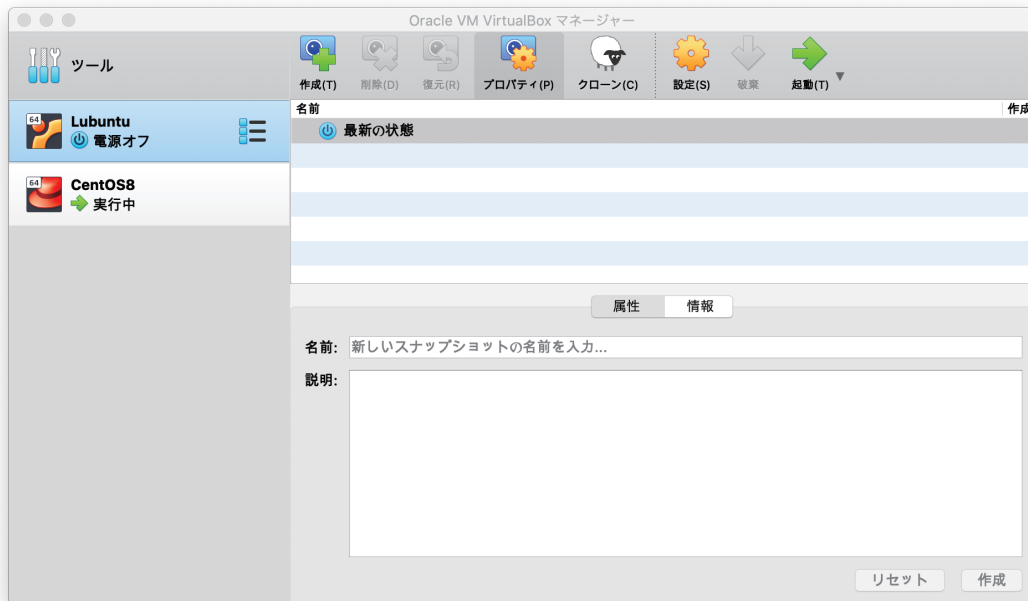
● Windows に仮想的な Linux をインストールする場合

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。2020 年 4 月現在の最新版は 6.1.4 です。

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

VirtualBox 6.1.4 の起動画面

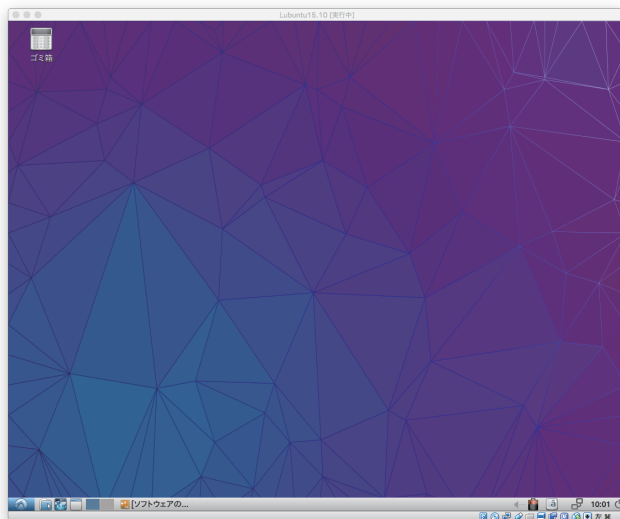


Linux のディストリビューション、バージョンによっては GUI アプリケーションが正しく表示されない場合があります。センターで動作確認を行っているのは、**lubuntu 18.10** です。以下のページからダウンロードし、Virtual Box の仮想環境にインストールしてください。インストール方法の詳細は各マニュアルをご参照ください。

lubuntu ダウンロード: <https://lubuntu.me/>

SSH クライアントソフト「LXTerminal」を起動し、【Unix, Linux からの利用】と同様に利用できます。

VirtualBox 上で動作する仮想Linux(lubuntu 18.10)



【macOS からの利用】

macOS では X Window System 環境の「XQuartz」をインストールして下さい。**Unix, Linux からの利用**と同様に利用可能ですが、GUI アプリケーションによっては表示の不具合がある場合があります。その場合は、Windows に仮想的な Linux をインストールする場合と同様の方法で、Linux をインストールしてご利用ください。

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

アプリケーションソフトウェア

非経験的分子軌道計算プログラム **Gaussian16**

反応経路自動探索プログラム **GRRM14**

数式処理プログラム **Mathematica** ※

科学技術計算言語 **MATLAB** ※※

※ 東北大学の構成員のみ利用できます。

※※ 東北大学と岩手大学の構成員のみ利用できます。

非経験的分子軌道計算プログラム Gaussian16

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

本センターの Gaussian には、以下のような特長があります。

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

■ サービスホスト・バージョン

front.cc.tohoku.ac.jp ・ Gaussian16 C.01

■ 利用方法

以下は Gaussian 利用方法の概要です。

【実行コマンド】

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

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

front.cc.tohoku.ac.jp にログイン後、subg16 コマンドにキュー名と入力プログラム名を指定することにより、バッチリクエストとして実行されます。リクエストはアプリケーション用の利用形態(経過時間無制限、最大並列数 24、最大メモリ 128GB)に投入します。

リスト 3. e2-01.com を解析するコマンド例

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

```
[front1 ~]$ subg16 -q lx -b a e2-01
```

【12 および 24 並列実行の指定】

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

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

【使用メモリ量の指定】

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

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

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

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

```
Formaldehyde Single Point
```

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

```
[front1 ~]$ subg16 -q lx -b a e2-01
```

【実行結果の確認】

計算が終了すると、インプットファイル名に拡張子 **.log** がつけられた結果ファイル (例: **e2-01.log**) が作成されます。計算結果をはじめ、**CPU** 時間などの計算機使用量に関する情報もここに含まれます。

正常終了ならば、このファイルの末尾に「**Normal termination of Gaussian 16.**」というメッセージが出力されます。ファイルの末尾を表示する **tail** コマンドで確認できます。

リスト 5. 実行結果の確認

```
[front1 ~]$ tail e2-01.log
:
Job cpu time:  0 days  0 hours  0 minutes 30.7 seconds.
```

```
File lengths (MBytes):  RWF=   11 Int=    0 D2E=    0 Chk=    8 Scr=    1
Normal termination of Gaussian 16 at Mon Apr 2 12:00:00 2019.
```

- ・ 結果ファイルの詳細な見方は、マニュアル等をご参照ください。

【チェックポイントファイル】

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

■ マニュアル

本センター本館 1 階 利用相談室に以下の資料を備えてあります。

- ・ 電子構造論による化学の探求 第 3 版,ガウシアン社,2017
- ・ Gaussian 09 User's Reference
- ・ Gaussian 09 IOps Reference
- ・ Gaussian 09 Online Manual, <https://www.gaussian.com/>
- ・ Gaussian プログラムによる量子化学計算マニュアル : 堀憲次, 丸善出版
- ・ すぐできる量子化学計算ビギナーズマニュアル : 武次鉄也, 講談社
- ・ すぐできる分子シミュレーションビギナーズマニュアル : 長岡正隆, 講談社
- ・ Gaussian プログラムで学ぶ情報化学・計算化学実験 : 堀憲次, 丸善出版

Gaussian, GaussView 媒体貸出

東北大学では Gaussian および GaussView のサイトライセンスを取得しており、東北大学内のコンピュータにインストールすることができます。東北大学所属の教職員または学生の利用が可能です。

■ お申し込み

インストールに必要な情報をお知らせしますので、利用を希望される方はサイトライセンス利用申請書作成フォーム https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/cgi-bin/gaussian_license.html (東北大学内からのみアクセス可能)で PDF ファイルを作成し、押印(またはサイン)の上、共同利用支援係までご送付(学内便またはメール添付)ください。なお、申請には東北大メール(Gmail)アドレスが必要です。

反応経路自動探索プログラム GRRM14

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

GRRM には、以下のような特長があります。

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

■ サービスホスト・バージョン

front.cc.tohoku.ac.jp ・ 14.01

■ 利用方法

利用方法はセンターのホームページ(<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/grrm14.html>)をご覧ください。

■ GRRM プログラムの詳細

GRRM の詳細については、NPO 法人 量子化学探索研究所(<https://iqce.jp/>)を参照してください。また、GRRM プログラムは現在さらに開発が進められています。利用法の詳細や新しい情報を得るには、開発者と連絡をとることをお勧めします。(連絡先アドレス:ohnok@m.tohoku.ac.jp)

■ GRRM プログラムの文献と研究成果発表時の引用義務

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

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

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

● GRRM:

(1) K. Ohno, S. Maeda, A Scaled Hypersphere Search Method for the Topography of Reaction Pathways on the Potential Energy Surface., Chem. Phys. Lett., 2004, 384, 277-282.; (2) S. Maeda, K. Ohno, Global Mapping of Equilibrium and Transition Structures on Potential Energy Surfaces by the Scaled Hypersphere Search Method: Applications to Ab Initio Surfaces of Formaldehyde and Propyne Molecules., J. Phys. Chem. A, 2005, 109, 5742-5753.; (3) K. Ohno, S. Maeda, Global Reaction Route Mapping on Potential Energy Surfaces of Formaldehyde, Formic Acid, and their Metal Substituted Analogues., J. Phys. Chem. A, 2006, 110, 8933-8941.

● 2PSHS:

S. Maeda, K. Ohno, A New Approach for Finding a Transition State Connecting a Reactant and a Product without Initial Guess: Applications of the Scaled Hypersphere Search Method to Isomerization Reactions of HCN, (H₂O)₂, and Alanine Dipeptide., Chem. Phys. Lett., 2005, 404, 95-99.

● SCW:

S. Maeda, K. Ohno, Conversion Pathways between a Fullerene and a Ring among C₂₀ Clusters by a Sphere Contracting Walk Method: Remarkable Difference in Local Potential Energy Landscapes around the Fullerene and the Ring., J. Chem. Phys., 2006, 124, 174306/1-7.

● LADD, NLowest, NRUN:

S. Maeda, K. Ohno, Structures of Water Octamers (H₂O)₈: Exploration on Ab Initio Potential Energy Surfaces by the Scaled Hypersphere Search Method., J. Phys. Chem. A, 2007, 111, 4527-4534.

● Frozen Atom:

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

● External Atom:

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

● OptX:

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

● ModelF:

S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, Automated Global Mapping of Minimum Energy Points on Seams of Crossing by the Anharmonic Downward Distortion Following Method: A Case Study on H₂CO., J. Phys. Chem. A, 2009, 113, 1704-1710.; S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, Exploring Multiple Potential Energy Surfaces: Photochemistry of Small Carbonyl Compounds, Adv. Phys. Chem. 2012, 2012, 268124.

● Add Interaction and/or MC-AFIR:

S. Maeda, K. Morokuma, A Systematic Method for Locating Transition Structures of A + B → X Type Reactions., J. Chem. Phys., 2010, 132, 241102 (4 pages).; S. Maeda, K. Morokuma, Finding Reaction Pathways of Type A + B → X: Toward Systematic Prediction of Reaction Mechanisms., J. Chem. Theory Comput., 2011, 7, 2335-2345.

■ マニュアル

PDF 形式のマニュアルがセンターのホームページから参照できます。

- GRRM プログラム利用ガイド
- GRRM の実行方法(東北大学サイバーサイエンスセンター編)

本センター本館 1 階 利用相談室に以下の資料を備えてあります。

- GRRM14 User Manual (英語版)

数式処理プログラム Mathematica

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

■ サービスホスト・バージョン

front.cc.tohoku.ac.jp ・ version 12.0

■ 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 6. GUI 版の起動方法

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



リスト 7. テキスト版の起動方法

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

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

■ マニュアル・参考資料

参考資料

本センター本館 1 階 利用相談室に、以下の資料を備えてあります。

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

科学技術計算言語 **MATLAB**

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

■ サービスホスト・バージョン

front.cc.tohoku.ac.jp ・ R2019b

■ 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

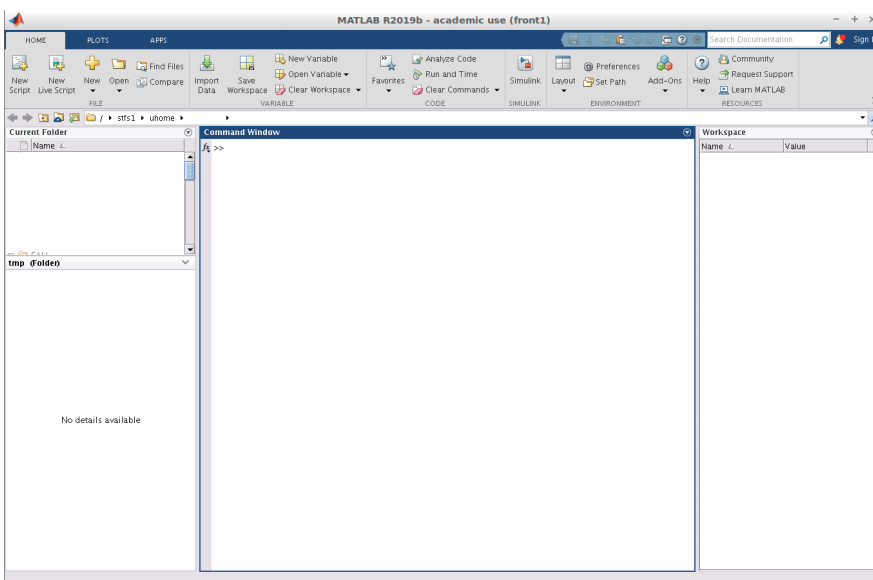
【MATLAB の起動】

● 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 8. GUI 版 MATLAB の起動

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



● テキスト版

GUI を使用せず、コマンドライン上で起動することもできます。

リスト 9. テキスト版 MATLAB の起動

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

```
< M A T L A B (R) >
Copyright 1984-2019 The MathWorks, Inc.
R2019b (9.7.0.1261785) 64-bit (glnxa64)
November 27, 2019
```

To get started, type one of these: helpwin, helpdesk, or demo.

For product information, visit www.mathworks.com.

```
>>>
```

● バッチ処理

MATLAB の組み込み並列処理機能を使用し、24 並列までの処理が可能です。最大メモリも 128GB まで利用可能です。大規模な計算にご利用ください。ただし、バッチ処理ではグラフ描画など画面出力のあるプログラムや、対話的な処理は行えません。

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

リスト 10. バッチリクエストファイル

```
[front1 ~] cat job-m    ←バッチリクエストファイルの中身を表示
```

```
#PBS -q lx -b a    ←アプリケーション専用の利用形態を指定
cd $PBS_O_WORKDIR
matlab -nojvm -nosplash -nodesktop -nodisplay -r test
```

以下のコマンドでリクエストを投入します。

リスト 11. リクエストの投入方法

```
[front1 ~]$ qsub job-m
Request 12345.job submitted to queue: ap.
```

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

■ サンプルプログラム

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

■ マニュアル・参考資料

【マニュアル】

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

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

【参考資料】

本センター本館1階 利用相談室に、以下の資料を備えてあります。

MATLAB による制御理論の基礎：野波健蔵，東京電機大学出版局

MATLAB による制御のためのシステム同定：足立修一，東京電機大学出版局

だれでもわかる MATLAB：池原雅章，培風館

はやわかり MATLAB 第 2 版：芦野隆一，共立出版

最新 MATLAB ハンドブック第 3 版：小林一行，秀和システム

MATLAB グラフィックス集：小国 力，朝倉書店

MATLAB と利用の実際：小国 力，サイエンス社

MATLAB の総合応用：高谷邦夫，森北出版

最新使える！MATLAB：青山貴伸，講談社

使える！MATLAB/Simulink プログラミング：青山貴伸，講談社

MATLAB による画像&映像信号処理：村松正吾，CQ 出版

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

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

[報 告]

第 14 回 サイバーサイエンスセンターセミナー

テーマ：「中学生のための CG プログラミング講座」

開催日：令和元年 12 月 26 日(木)、27 日(金)

会 場：東北大学サイバーサイエンスセンター

主 催：東北大学サイバーサイエンスセンター

共 催：東北大学 電気・情報系（工学研究科・情報科学研究科・医工学研究科）

協 賛：計測自動制御学会 東北支部

後 援：情報処理学会 東北支部

代 表：吉澤 誠（東北大学 サイバーサイエンスセンター）

顧 問：菅沼 拓夫（東北大学 サイバーサイエンスセンター）

幹 事：杉田 典大（東北大学 大学院工学研究科）

八巻 俊輔（東北大学 大学院工学研究科）

湯田 恵美（東北大学 大学院工学研究科）

参加者：6 名

概 要：わが国の小中学生の多くは、テレビゲームに夢中になっている。しかし、テレビゲームが高度な情報技術や数学的アルゴリズムに基づいて作られていることを理解している児童・生徒は、残念ながら少ないと思われる。この講座では、テレビゲーム、映画、アニメ、インターネット、バーチャルリアリティなどで多用されているコンピュータ・グラフィクス(CG)の構成方法やCGの基礎となる数学的アルゴリズムを、やさしいプログラミング技術を習得し、楽しみながら理解することで、日本が得意としている CG やテレビゲームを作るための工学技術や情報技術に興味を持っていただくことを目的としている。この講座に参加することによって、最近問題となっている子供たちの理科離れ・数学嫌い・ものづくりへの無関心を少しでも防ぐとともに、単なるゲーム・オタクになってしまうのではなく、数学的に高度な技能と幅広い文化的教養をもった未来のゲーム・クリエイタの卵が生まれるきっかけができると期待される

[Web 版大規模科学計算システムニュースより]

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

令和 2 年度利用負担金について (No. 293)

令和 2 年度の利用負担金は、表 1(大学・学術利用)、表 2(民間機関利用)のとおりとなります。なお、今後電気料金が高騰した場合には、年度途中において負担経費を値上げする場合があります。あらかじめご了承ください。

表 1 基本利用負担金【大学・学術利用】

区 分	項 目	利用 形態	負 担 額	
演 算 負担経費	スーパー コンピュータ	共有	利用ノード数 1(実行数、実行時間の制限有) 無料(備考 2)	
			利用ノード数 1～32 まで	経過時間 1 秒につき 0.06 円
			利用ノード数 33～256 まで	経過時間 1 秒につき (利用ノード数-32)×0.002 円+0.06 円
			利用ノード数 257 以上	経過時間 1 秒につき (利用ノード数-256)×0.0016 円+0.508 円
		占有	利用ノード数 32	利用期間 3 ヶ月につき 400,000 円 利用期間 6 ヶ月につき 720,000 円
			利用ノード数 64	利用期間 3 ヶ月につき 720,000 円 利用期間 6 ヶ月につき 1,300,000 円
			利用ノード数 128	利用期間 3 ヶ月につき 1,300,000 円 利用期間 6 ヶ月につき 2,340,000 円
	並列 コンピュータ	共有	利用ノード数 1～6 まで	経過時間 1 秒につき 0.04 円
			利用ノード数 7～12 まで	経過時間 1 秒につき 0.07 円
			利用ノード数 13～18 まで	経過時間 1 秒につき 0.1 円
			利用ノード数 19～24 まで	経過時間 1 秒につき 0.13 円
		占有	利用ノード数 1	利用期間 3 ヶ月につき 160,000 円 利用期間 6 ヶ月につき 320,000 円
ファイル 負担経費	5TB まで無料、追加容量 1TB につき年額		3,000 円	
出力 負担経費	大判プリンタによるカラープリント		フォト光沢用紙 1 枚につき	600 円
			クロス 1 枚につき	1,200 円

備考

- 1 負担額算定の基礎となる測定数量に端数が出た場合は、切り上げる。
- 2 負担額が無料となるのは専用のジョブクラスで実行されたものとし、制限時間を超えた場合には強制終了する。
- 3 占有利用期間は年度を超えないものとし、期間中に障害、メンテナンス作業が発生した場合においても、原則利用期間の延長はしない。また、利用期間が 3 ヶ月に満たない場合は、3 ヶ月の負担額を月割りした額とする。なお、占有利用期間中のファイル負担経費は 10TB まで無料とする。
- 4 ファイル負担経費については申請日から当該年度末までの料金とする。利用期間が 1 年に満たない場合は、月割りをもって計算した額とする。

表2 基本利用負担金【民間機関利用】

区 分	項 目	利用 形態	負 担 額
演 算 負担経費	スーパー コンピュータ	共有	利用ノード数 1(実行数、実行時間の制限有) 無料(備考2)
			利用ノード数 1～32 まで 経過時間 1 秒につき 0.18 円
			利用ノード数 33～256 まで 経過時間 1 秒につき (利用ノード数-32)×0.006 円+0.18 円
			利用ノード数 257 以上 経過時間 1 秒につき (利用ノード数-256)×0.0048 円+1.524 円
		占有	利用ノード数 32 利用期間 3 ヶ月につき 1,200,000 円 利用期間 6 ヶ月につき 2,160,000 円
			利用ノード数 64 利用期間 3 ヶ月につき 2,160,000 円 利用期間 6 ヶ月につき 3,900,000 円
			利用ノード数 128 利用期間 3 ヶ月につき 3,900,000 円 利用期間 6 ヶ月につき 7,020,000 円
	並列 コンピュータ	共有	利用ノード数 1～6 まで 経過時間 1 秒につき 0.12 円
			利用ノード数 7～12 まで 経過時間 1 秒につき 0.21 円
			利用ノード数 13～18 まで 経過時間 1 秒につき 0.3 円
			利用ノード数 19～24 まで 経過時間 1 秒につき 0.39 円
		占有	利用ノード数 1 利用期間 3 ヶ月につき 480,000 円 利用期間 6 ヶ月につき 960,000 円
ファイル 負担経費	5TB まで無料、追加容量 1TB につき年額		9,000 円
出力 負担経費	大判プリンタによるカラープリント	フォト光沢用紙 1 枚につき クロス 1 枚につき	1,800 円 3,600 円

備考

- 1 負担額算定の基礎となる測定数量に端数が出た場合は、切り上げる。
- 2 負担額が無料となるのは専用のジョブクラスで実行されたものとし、制限時間を超えた場合には強制終了する。
- 3 占有利用期間は年度を超えないものとし、期間中に障害、メンテナンス作業が発生した場合においても、原則利用期間の延長はしない。また、利用期間が 3 ヶ月に満たない場合は、3 ヶ月の負担額を月割りした額とする。なお、占有利用期間中のファイル負担経費は 10TB まで無料とする。
- 4 ファイル負担経費については申請日から当該年度末までの料金とする。利用期間が 1 年に満たない場合は、月割りをもって計算した額とする。

(共同利用支援係)

科学技術計算言語 MATLAB のバージョンアップについて (No. 293)

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

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

バージョン名 : MATLAB R2019b
 バージョンアップ日 : 2020 年 4 月 3 日 (金)
 サービスホスト : front.cc.tohoku.ac.jp (並列コンピュータ)
 起動コマンド : matlab (GUI 版)
 : matlab -nosplash -nodesktop -nodisplay (テキスト版)

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

開発元 Web サイト

https://www.mathworks.co.jp/products/new_products/latest_features.html

センターWeb サイト

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

(共同利用支援係)

令和 2 年度共同研究について (No. 294)

本センターでは、大規模科学計算システムの利用者と共同でプログラムやアルゴリズムを開発する共同研究を行っています。今年度の募集に応募されたものについて共同研究専門部会で審査の結果、以下の 10 件が採択されましたのでお知らせします。

[A] 萌芽型課題

No.	申請者	所属	研究課題
A-1	有馬 卓司	東京農工大学 大学院工学研究院	大規模電磁界解析を可能とする複数領域 FDTD 法の開発に関する研究
A-2	春日 貴志	長野工業高等専門学校 電気電子工学科	MPI によるプリント基板の電磁界解析法の高速度化
A-3	佐々木 大輔 高橋 俊	金沢工業大学 工学部 東海大学 工学部	直交格子法による移動境界問題の解法に関する研究
A-4	松岡 浩	技術士事務所 A I コンピューティングラボ	リカレントニューラルネットワークによる高解像度流体解析コードの開発

[B] 一般課題

No.	申請者	所属	研究課題
B-1	大山 聖	宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所	自動車用タイヤ横溝の空力騒音予測
B-2	陳 強	東北大学 大学院工学研究科	先進的な電磁界数値解析法の構築とその応用に関する研究
B-3	塚原 隆裕	東京理科大学 理工学部	層流－乱流が共存する亜臨界遷移流れを対象とした大規模計算領域による直接数値解析
B-4	藤井 孝藏	東京理科大学 工学部	プラズマアクチュエータの新たな利用推進と関連課題解決に関する研究その 2
B-5	前田 一郎	三菱航空機株式会社	民間航空機開発における大規模 CFD 解析の適用範囲拡大
B-6	松下 洋介	東北大学 大学院工学研究科	大きな熱損失を伴う乱流燃焼場への Flamelet approach の適用

(スーパーコンピューティング研究部、共同研究支援係)

計算科学・計算機科学人材育成のための スーパーコンピュータ無償提供制度について (No. 294)

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、計算科学・計算機科学分野での教育貢献・人材育成を目的として、無料で大規模科学計算システムを利用できる制度を用意しております。提供の対象は、大学院・学部での講義実習等の教育目的(卒業論文、修士論文、博士論文での利用を除く)に限ります。利用を希望される場合は以下の情報を添えて、講義開始の2週間前までに edu-prog@cc.tohoku.ac.jp 宛お申し込みください。

- ・ 講義担当者氏名
- ・ 同所属
- ・ 同連絡先（住所，電話，電子メール）
- ・ 講義名
- ・ 講義実施日時（1 セメスターの中で実習を予定している回数）
- ・ センター端末機室等での実習利用希望の有無（必要であれば予定日時）
- ・ 講師派遣の希望の有無
- ・ 講義シラバス
- ・ 講義ウェブ（もし用意されていれば）
- ・ 受講者数（予定）
- ・ 必要とする理由（利用目的：例えば、数値シミュレーションの研修を行うなど）
- ・ 期待できる教育効果
- ・ 居住性チェックリストの提出（受講者に外国人が居る場合）
参照：<http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/utilize/index.html#外国人利用者>
- ・ その他（センターへの要望等）

なお、講義終了後、報告書（広報誌 SENAC へ掲載）の提出をお願いいたします。

たくさんのお申し込みをお待ちしております。不明な点は、edu-prog@cc.tohoku.ac.jp までお問い合わせください。

（スーパーコンピューティング研究部, 共同利用支援係）

民間企業利用サービスについて (No. 294)

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、社会貢献の一環として大学で開発された応用ソフトウェアとスーパーコンピュータを、民間企業の方が無償または有償にてご利用頂ける制度を用意しております。本サービスにおける利用課題区分は以下の2つとなります。

- ・大規模計算利用(有償利用)
- ・トライアルユース(無償利用)

詳細については以下を参照し、利用を希望される場合は共同利用支援係までお申し込みください。

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

【問い合わせ先】

共同利用支援係 (022-795-6251, uketuke@cc.tohoku.ac.jp)

(共同利用支援係)

大規模科学計算システムの機関（部局）単位での利用について (No. 294)

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、大規模科学計算システムをご利用いただくにあたり、利用負担金を利用者単位のほか、機関（部局）単位で年間定額をお支払いいただくことで利用できるサービスも提供しております。このサービスは、機関（部局）単位でお申し込みいただくことにより、その構成員であれば、各研究室が個別に利用負担金を支払うことなく、下記システムを利用できる仕組みとなっております。

これまで計算機を利用する機会がなかった研究者による新たなニーズへの対応や研究室の計算機では実行できなかった大規模シミュレーションが実行可能であり、また自前で計算機を導入するためのコストや運用コストも削減可能です。すでにご利用いただいている機関（部局）からは、当初の予想を上回るご利用をいただき、ご好評をいただいております。

占有利用・共有利用については必要に応じて取り混ぜながら、ご予算に合わせて、年間定額により利用することが可能となっておりますので、ぜひご相談ください。

記

【利用可能なシステム】

- ・スーパーコンピュータ (SX-ACE)
- ・並列コンピュータ (LX 406Re-2)
- ・ストレージシステム
- ・大判カラープリンター (光沢紙、ソフトクロス紙)

【問い合わせ先】

共同利用支援係 (022-795-6251, uketuke@cc.tohoku.ac.jp)

(スーパーコンピューティング研究部, 共同研究支援係, 共同利用支援係)

新型コロナウイルス (COVID-19) 対策への取り組みについて (No. 295)

東北大学サイバーサイエンスセンターは HPCI (革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ) の一員として、新型コロナウイルス (COVID-19) 対策に資する研究課題を臨時募集しています。

詳しくは以下のウェブサイトをご参照ください。

https://www.hpci-office.jp/pages/hpci_covid19

また、当センターの並列コンピュータは、利用者ジョブが実行されていない待機時に、分散コンピューティングプロジェクトの一つである Rosetta@home に計算リソースを提供することでもウイルス対策への貢献に努めています。

Rosetta@home については以下のウェブサイトをご参照ください。

<http://boinc.bakerlab.org/rosetta/>

(スーパーコンピューティング研究部、共同研究支援係、共同利用支援係)

— SENAC 執筆要項 —

1. お寄せいただきたい投稿内容

サイバーサイエンスセンターでは、研究者・技術者・学生等の方々からの原稿を募集しております。以下の内容で募集しておりますので、皆さまのご投稿をお待ちしております。なお、一般投稿いただいた方には、謝礼として負担金の一部を免除いたします。

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

2. 執筆にあたってご注意いただく事項

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

3. 原稿の提出方法

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

—Word の場合—

- ・用紙サイズ：A4
- ・余白：上=30mm 下=25mm 左右=25mm 綴じ代=0
- ・標準の文字数（45 文字 47 行）

<文字サイズ等の目安>

- ・表題=ゴシック体 14pt 中央 ・副題=明朝体 12pt 中央
- ・氏名=明朝体 10.5pt 中央
- ・所属=明朝体 10.5pt 中央
- ・本文=明朝体 10.5pt
- ・章・見出し番号=ゴシック体 11pt～12pt

*余白サイズ、文字数、文字サイズは目安とお考えください。

4. その他

- (1) 執筆者には、希望により本誌（10 部以内の希望部数）と本誌 PDF 版を進呈します。
- (2) 一般投稿を頂いた方には謝礼として、負担金の一部を免除いたします。免除額は概ね 1 ページ 1 万円を目安とします。詳細は共同利用支援係までお問い合わせください。
- (3) 投稿予定の原稿が 15 ページを超す場合は共同利用支援係まで前もってご連絡ください。
- (4) 初回の校正は、執筆者が行って、誤植の防止をはかるものとします。
- (5) 原稿の提出先は次のとおりです。

東北大学サイバーサイエンスセンター内 情報部情報基盤課共同利用支援係

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

TEL 022-795-3406

スタッフ便り

私ごとではございますが、2007年4月からこれまでの13年間お世話になったサイバーサイエンスセンターを離れることとなりました。在職中は、本学、本センターの教職員、利用者の皆様に限らず、高性能計算分野のコミュニティの皆様には大変お世話になりました。あらためまして御礼申し上げます。サイバーサイエンスセンターにおいては、様々な分野の研究者の皆様とお会いし、新たな課題に挑戦させていただく機会を得るなど、大変充実した日々を過ごすことができました。また、当センター教職員、全国の基盤センターの皆様とは、「使い易い、使えるスーパーコンピュータ」の実現に向けて、議論を重ね、試行錯誤をしながら、全国共同利用施設としての学術情報基盤、我が国の高性能計算基盤の構築、運営に携わったことは、私にとって掛け替えのない貴重な経験でした。今後は本センターでの経験を活かして、教育、研究に真摯に取り組みながら、私自身、次のステップに進んで行きたいと思います。

昨今、大変な状況が続いておりますが、皆様無事に過ごされていること、一刻も早く事態が収束することを心から願っております。最後になりますが、サイバーサイエンスセンターはじめ全国の基盤センター、利用者の皆様のますますのご発展を祈念しております。(R. E)

この号が発行されるころにはどうなっておりますでしょうか？最近、日を追うごとに緊迫感が増し、テレビを見てもインターネットでニュースを見ても世界中がコロナウィルスと戦っている情報で溢れています。クラスター、オーバーシュート、ロックダウンと日頃あまり聞きなれない言葉を耳にする機会も増えました。国内では、オリンピックも延期、色々なイベントが中止、延期を余儀なくされ、プロ野球は開幕せず、また楽しみにしていた海外サッカーも中断したまま再開の目途がたっていません。不要不急の外出自粛要請など、今まで経験したことのないようなことが起こっています。一刻も早く世界が落ち着くことを願っております。

さて、本センターのスーパーコンピュータは様々な研究分野で活用され、各分野の研究の重要なツールとして認識されております。今年度も新しい利用者のご利用をお待ちしております。(S. O)

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退職者と異動のお知らせ

2020. 3. 31 付け

[退職]

江川 隆輔 スーパーコンピューティング研究部准教授（辞職・東京電機大学教授へ）
大川 俊治 情報部長兼情報基盤課長（定年退職）

2020. 4. 1 付け

[転入]

八巻 俊輔 先端情報技術研究部助教（工学研究科助教から）
宇和野周一 情報基盤課長（宮城教育大学財務課長から）
川村 眞 本部事務機構付課長（情報基盤担当）（情報推進課長から）
早坂 和勝 会計係長（理学研究科経理課経理係長から）

[転出]

吉田 貴子 会計係長（共通事務センター川内南キャンパス事務センター資産・調達係長へ）



開発中の青葉山キャンパス

SENAC 編集部会

滝沢寛之 水木敬明 後藤英昭 伊藤昭彦
早坂和勝 大泉健治 小野 敏 斉藤くみ子

令和2年5月発行
編集・発行 東北大学
サイバーサイエンスセンター
仙台市青葉区荒巻字青葉 6-3
郵便番号 980-8578
印刷 株式会社 東誠社

システム一覧

計算機システム	機 種
スーパーコンピュータ	SX-ACE
並列コンピュータ	LX 406Re-2

サーバとホスト名

フロントエンドサーバ	front.cc.tohoku.ac.jp
SSH アクセス認証鍵生成サーバ	key.cc.tohoku.ac.jp

サービス時間

利用システム名等	利用時間帯
スーパーコンピュータ	連 続 運 転
並列コンピュータ	連 続 運 転
サ ー バ	連 続 運 転
可視化機器室	平日 9:00～21:00
館 内 利 用	平日 8:30～21:00

スーパーコンピュータ（SX-ACE）の利用形態と制限値

利用形態	利用ノード数 ※	実行時間制限 (経過時間)	メモリサイズ制限	-q オプション	-b オプション
通常	1～1,024	規定値：1 週間 最大値：1 ヶ月	60GB×ノード数	sx	利用ノード数
無料	1	1 時間	60GB		f
デバッグ	1～16	2 時間	60GB×ノード数	debug	利用ノード数
	17～32	24 時間			

※ 2ノード以上を利用した並列実行にはMPIの利用が必用

並列コンピュータ（LX 406Re-2）の利用形態と制限値

利用形態	利用ノード数 ※	実行時間制限 (経過時間)	メモリサイズ制限	-q オプション	-b オプション
通常	1～24	規定値：1 週間 最大値：1 ヶ月	128GB×ノード数	lx	利用ノード数
アプリケーション	1	なし	128GB		a
会話型	1 (6 コアまで)	1 時間 (CPU 時間合計)	8GB	-	-

※ 2ノード以上を利用した並列実行にはMPIの利用が必用

目次

東北大学サイバーサイエンスセンター

大規模科学計算システム広報 Vol.53 No.2 2020—4

[共同研究成果]

非断熱分子動力学法の分子会合体への適用：

CO₂ 二量体カチオンの光解離反応シミュレーション

.....前田 憲哲・菅野 学・花崎 浩太 1
中島 祐司・伊藤 悠吏・奥津 賢一
中野 元善・大下慶次郎・美齊津文典
河野 裕彦

リアルタイム津波浸水被害推計シミュレーションの性能評価

.....撫佐 昭裕・岸谷 拓海・阿部 孝志 10
佐藤 佳彦・田野 邊睦・鈴木 崇之
村嶋 陽一・佐藤 雅之・小松 一彦
伊達 進・越村 俊一・小林 広明

民間航空機開発における大規模 CFD 解析の適用（その 4）

.....前田 一郎 19

[大規模科学計算システム]

SSH アクセス認証鍵生成サーバの利用方法 26

アプリケーションサービスの紹介 33

[報告]

令和元年度サイバーサイエンスセンターセミナー報告 48

[Web 版大規模科学計算システムニュースより]

令和 2 年度の利用負担金について (No.293) 49

科学技術計算言語 MATLAB のバージョンアップについて (No.293) 50

令和 2 年度共同研究について (No.294) 51

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.294) 52

民間企業利用サービスについて (No.294) 53

大規模科学計算システムの機関（部局）単位での利用について (No.294) 53

新型コロナウイルス（COVID-19）対策への取り組みについて (No.295) 54

執筆要項 55

スタッフ便り 56