

ソフトウェアの紹介

総合情報処理センター

山口正道

yamaguti@net2.nagasaki-u.ac.jp

1. はじめに

研究専用サーバ (rdhost) および汎用サーバ (eduhost) で利用できる各種のソフトウェアを紹介します。

2. 研究用サーバで利用可能なソフトウェア

(1) α -FLOW	3次元流体解析システム
(2)MATLAB R12	会話型数値計算ソフト
(3)AVS/Express Viz	可視化ソフト
(4)MARC /MENTAT	非線型構造解析プログラム
(5)maple6	数式処理ソフトウェア
(6)NOVA*PLOT	図形処理インターフェース
(7)NOVA*GKS	2次元グラフィックスライブラリ
(8)MOPAC 2000 V1.0	巨大分子系対応分子軌道計算プログラム
(9)Workbench 4.0.2	Fortran,C言語のプログラム開発支援ツール
(10)Visual Analyzer 4.0.2	アナライザー

(1) α -FLOW

機能概要

項目	主な機能
入力	形状生成 格子生成 形状データ以外のデータも対話操作入出力可能 データの入力方法はメニューとコマンドの組み合わせ 入力データのチェックをグラフィック表示により対話操作で行える
出力	対話操作 データ管理機能 データ抽出 データ編集 可視化のための計算 作画
エキスパートシステムによる解析支援	既存のデータ利用 計算時間の見積り 解析モジュールの選択 解析格子生成支援 物理モデル選択支援 数値解法選択支援 再計算アドバイス
データ管理	保存用ファイルの管理(登録、削除、検索など)を行う。

	高速検索を可能とするため、管理情報ファイルを生成し、維持する。
ゲートウェイ・モジュール	入力モジュールの専用形式で書かれたファイルを読み込み、解析モジュールの入力データ形式に変換する。 標準ファイルフォーマットで書かれた解析モジュールの出力データファイルを読み、出力モジュールの形式に変換する。 標準ファイルフォーマットで書かれた入力データを、ユーザプログラムの入力データに変換する。また、ユーザプログラムの出力データ形式を標準ファイルフォーマットに変換する。この機能はユーザが必要に応じて作成する。
解析	以下の解析モジュールが組み込まれている。 非圧縮性流体解析 自由表面を含む非圧縮性流体解析 燃焼、化学反応を含む流れ解析 物質移動解析 熱伝導解析

【各モジュールと実行コマンド名】

モジュール名	実行コマンド名
入力モジュール 形状生成	afmodel
入力モジュール 格子生成 デカルト座標格子生成	afdes
入力モジュール 格子生成 円筒座標格子生成	afcyl
入力モジュール 格子生成 BFC 格子生成	afbfc
入力モジュール 解析条件入力	afcond
出力モジュール	afpost
データ管理モジュール	afdata
解析モジュール実行コマンド	afsol

(2) MATLAB R12

【機能】

〔解析、数学機能〕

データ補間

常微分方程式の解法

信号処理

統計処理

最適化

〔グラフィックス機能〕

2次元グラフィックス

3次元グラフィックス

アニメーション

画像処理

ウェーブレット解析

【実行例】

%matlab

(3) AVS/Express Viz

AVS: Application Visualization System

【適用分野】

独自開発プログラムのビジュアライゼーション

実験結果、解析結果の可視化

構造解析、流体解析、計算化学など科学技術計算結果

各種実験計測結果

医療画像

画像処理やボリュームレンダリングリモートセンシング、画像認識など

意匠検討、景観シミュレーション、VR

各種インフォメーションビジュアリゼーション

【実行例】

%vxp -nohw

(4)MARC /MENTAT

【MARC 機能一覧】

〔要素ライブラリ〕

3次元トラス要素	接触/摩擦要素
パイプ、エルボー要素	軸対称シェル要素
はり要素	平面応力要素
平面ひずみ要素	軸対称ソリッド要素
一般化平面ひずみ要素	曲げを考慮した軸対称要素
3次元膜要素	曲面シェル要素
3次元シェル要素	3次元ソリッド要素
非圧縮性要素	リバー要素
熱伝導要素	ケーブル要素
その他の要素	磁場要素
半無限要素	

〔材料ライブラリ〕

線形弾性材料	弾塑性材料
エラストマー	粘弾性材料
粘塑性モデル	大ひずみ粘弾性モデル
複合材料	ダメージモデル
地盤モデル	

〔機能ライブラリ〕

局所座標系	弾性床
タイイング (MPC)	境界条件
スプリング	加重増分自動調節機能
自重	遠心力/コリオリカ
熱加重	バンド幅縮小機能
ユーザーサブルーチン	リスタート機能
多層サブストラクチャ	リゾーニング機能
アダプティブメッシュ機能	

〔解析ライブラリ〕

線形弾性解析	弾塑性解析
クリープ解析	熱応力解析

粘弾性解析
 有限ひずみ弾塑性解析
 剛塑性解析
 粉末冶金解析
 流体・熱・構造体連成解析
 音響解析
 熱応力連成解析
 最適化設計

大変形解析
 有限ひずみ弾性解析
 コンクリートラック
 動解析
 熱伝導解析
 ベアリング解析
 感受性解析

プログラムは倍精度で計算されます。

[ユーザーサブルーチンについて]

ユーザーサブルーチンとは MARC への組み込みが可能な Fortran サブルーチンのことです。ユーザーサブルーチンは多数用意されており、公開されているのでコピーして参照することができます。

[MARC の動作するキュー]

UNIX システムでの MARC の実行は、Fortran,C と同様「バッチリクエスト」と呼ばれるシェルスクリプトに処理手順を記述し、qsub コマンドでジョブを投入します。

[利用可能な端末]

MARC はテキスト画面で実行可能ですが、MENTAT は X ウィンドウが使える端末が必要です。

-jid jobname	ジョブファイル名を与えます。通常は” jobname.dat” という名前の入力データファイルとなります。
-prog progname	ユーザーサブルーチン付のジョブを実行した時にセーブした実行ファイル” progname.marc” を実行します。
-user username	ユーザーサブルーチン” username.f” を使って” username.marc” という名前の実行ファイルを新規に作成し、実行します。
-save yes	ユーザーサブルーチンを組み込んで作成した実行ファイル username.marc を保存することを指示します。
-rid restart-name	リスタートファイルを出力するように指定して前もって実行したジョブのジョブファイル名を与えます。
-pid postname	温度情報を持ったポストファイルを作成するために前もって実行したジョブのジョブファイル名を与えます。
-pid substructure	サブストラクチャを使用するジョブで使用します。サブストラクチャファイル名は” substructure.t31"” となります。

[実行例]

```
%run_marc -jid e2x1
```

ジョブ e2x1 の実行。入力データは e2x1.dat

```
%run_marc -jid e2x14 -user u2x14 -save yes
```

ジョブ e2x14 を実行します。ユーザーサブルーチン名は u2x14 (ファイル名は u2x14.f)

新規に作成された実行ファイル u2x14.marc をジョブの終了後も保存します。

```
%qsub marc.sh
```

[MENTANT について]

MENTANT は会話型プリ・ポストプロセッサで、メッシュモデルを生成する事ができ、プリ・プロセッシングを容易にしています。

MENTANT はプリ・プロセッシングからポスト・プロセッシングまでの過程をいくつかの段階に分けて、その段階を MENTANT 起動時の MAIN MENU のメニューボタンで提供しています。

【実行例】

```
%mentat .... グラフィック画面用コマンド
```

(5)maple6

【機能】

[記号計算]

微分積分	線形代数
方程式の解析解	初等関数と特殊関数
常微分方程式と偏微分方程式	組合数学
複素数	微分形式
金融解析	論理演算
幾何学	グラフ理論
群論	ガロア群
数論	線形最適化
Lie 対称	べき級数
統計	

[数値計算]

数値アルゴリズムによる線形代数	データ入出力ユーティリティ
複素数データ構造	浮動小数点におけるゼロの扱い

【実行例】

```
%maple --- テキスト画面用  
%xmaple --- グラフィック画面用
```

(6)NOVA*PLOT

NOVA*PLOT ライブラリは、CALCOMP 社のプロット用基本ソフトウェアである HCBS で書かれた FORTRAN プログラムを、Postscript 形式で出力できる機能があります。

【実行例】

下記はテストプログラムを使った実行例です。

①環境変数の再設定

ログイン後に環境変数を再設定します。

```
%unsetenv LD_LIBRARY_PATH
%setenv LD_LIBRARY_PATH /opt/NOV_PLOT/LIB/
%unsetenv GKSDIR
%setenv GKSDIR /opt/NOV_PLOT/LIB/
```

一度コンパイルしたプログラムを利用するだけの場合は、LD_LIBRARY_PATH の設定は必要ありません。

②ディレクトリの作成とテストプログラムのコピー

テストプログラムは以下のディレクトリにありますので、コピーします。

```
/opt/NOVA_PLOT/LIB/PROG
%mkdir test
%cd test
%cp /opt/NOVA_PLOT/PROG/sample.f
%cp /opt/NOVA_PLOT/PROG/makefile
%ls
makefile sample.f
```

③コンパイル

```
%make test=sample (.fは省略)
```

④実行モジュールの確認

```
%ls
makefile sample sample.f sample.o
```

⑤実行

```
% ./sample
```

(7)NOVA*GKS

【実行例】

下記はテストプログラムを使った実行例です。

①環境変数の再設定

ログイン後に環境変数を再設定します。

```
%unsetenv LD_LIBRARY_PATH
%setenv LD_LIBRARY_PATH /opt/GKS/c_ver3.1/usrfiles/
%setenv GKSDIR /opt/GKS/c_ver3.1/usrfiles/
```

一度コンパイルしたプログラムを利用するだけの場合は、LD_LIBRARY_PATH の設定は必要ありません。

②ディレクトリの作成とテストプログラムのコピー

テストプログラムは以下のディレクトリにありますので、コピーします。

```
/opt/GKS/c_ver3.1/test/csrc ...C 言語
```

```
/opt/GKS/c_ver3.1/test/fsrc ...Fortran 言語
```

```
/opt/GKS/c_ver3.1/test/levelc...event,sample,mode テストプログラム
```

```
%mkdir test
```

```
%cd test
```

```
%cp /opt/GKS/c_ver3.1/test/csrc/* .
```

```
%ls
```

```
colours.c inqgkssl.c .... aardvark.c ..
```

③コンパイル

```
%make -f makex test=aardvark (.c は省略します)
```

④実行

```
%./aardvark
```

(8)MOPAC 2000 V1.0

MOS-F V4.2

【機能】

MOZYME 法による Linear Scaling SCF 計算

蛋白質構造入出力に関するユーティリティ機能

構造最適化 (EF,BFGS,NLLSQ,SIGMA 法)

遷移状態計算

エネルギー分割

溶媒効果計算 (COSMO 法,TOMASI モデル)

内部反応座標計算 (IRC)

動的反応座標計算 (IRC)

項間交差構造の解析

超分極率計算

対称性の自動認識 (8 次までの点群表記)

赤外スペクトル計算

紫外、可視スペクトル計算

基準振動解析

励起状態計算

解殻系、ラジカルの計算

周期境界条件を用いた計算

Parametric Molecular Electrostatic Potential

ESP 計算による原子電荷

【サンプルプログラムによる実行例】

①サンプルデータのコピー

下記に示すディレクトリ下のサンプルデータをコピーします。

```
/opt/MOPAC2000/mopac2000/examples/exsamples_data
%mkdir test2
%cd test2
%cp /opt/MOPAC2000/mopac2000/examples/exsamples_data/*.dat .
%ls
intersystem_crossing.dat  symmetry.dat
cosmo.dat  layers.dat  transition_states.dat
examples_in_manual.dat  polymers.dat
exotic.dat  solids.dat
```

②実行

```
%mopac cosmo
```

複数のファイルが生成されます。

```
%ls cosmo*
cosmo.arcag
cosmo.arc      cosmo.dat
cosmo.arcaa   cosmo.end
cosmo.arcab   cosmo.log
cosmo.arcae   cosmo.out
cosmo.arcad   cosmo.syb
cosmo.arcae
cosmo.arcaf
```

[MOS-F の実行例]

【サンプルプログラムによる実行例】

①サンプルデータのコピー

下記に示すディレクトリ下のサンプルデータをコピーします。

```
/opt/MOPAC2000/mosf4.2/inputs/*.mos
%mkdir test3
%cd test3
%cp /opt/MOPAC2000/mosf4.2/inputs/*.mos .
%ls testdata*
testdata.mos
```

②実行


```
%mosf testdata.mos
```

```
%ls testdata*
```

```
testdata.wms
```

```
testdata.mos
```

```
testdata.oms
```

(9) Workbench 4.0.2

【実行例】

```
%workbench
```

(10) Visual Analyzer 4.0.2

【実行例】

```
%xanalyzer
```

3. 汎用サーバ (eduhost) で利用可能なソフトウェア

(1) SAS 6.12 統計解析システム

(2) MATHEMATICA 4.1 数式処理ソフト

(3) S-PLUS 3.4J 対話型データ解析システム

(1) SAS 6.12

SAS: Statistical Analysis System

【ソフトウェアと機能】

- ・ Base SAS : 情報の記憶と検索、データの変更とプログラミング
レポート作成、記述統計、ファイル操作、
統合操作環境 DMS(Display Manager System)の処理
- ・ SAS/STAT: 統計解析プロシジャの集合体。回帰分析、分散分析、
多変量解析、判別分析、クラスター分析、カテゴリカル
分析、生存時間分析などの統計処理機能
- ・ SAS/GRAPH : プロット図、チャート図、3次元グラフ、等高線図、
地図グラフの作成

【実行モードと利用可能な端末】

SAS システムを起動する場合、下記の (a) ~ (d) の実行方法があります。

UNIX フォアグラウンド----SAS 対話モード (a) SAS 対話型ラインモード

UNIX フォアグラウンド-----SAS 対話モード (b) SAS ディスプレイマネージャモード

UNIX フォアグラウンド----- (c) SAS 非対話モード

UNIX バックグラウンド----- (d) SAS バッチモード

[表示モード変更のオプション]

-fsdevice ascii.vt100: キャラクターベースのディスプレイマネージャモード (DMS) で SAS を実行する場合に指定します。

-nodms : 非ディスプレイマネージャモード (ラインモード) で実行する場合に指定

(b) は X ウィンドウ上での利用ができます。vt100 などのエミュレーション機能が利用できるパソコンでも利用可能です。

(a) (c) (d) はテキスト画面から利用可能です。

【実行例】

(a) 対話型ラインモード (テキスト画面用)

```
%sas -nodms
```

(b) ディスプレイマネージャモード

・グラフィック画面用

```
%sas
```

%/opt/sas612/sas.nodbc -config /opt/sas612/config.sas612.english 英文で表示する場合

・ vt100 などのエミュレーション端末上でディスプレイマネージャモードで実行する

```
%sas -fsd ascii.vt100
```

(c) SAS 非対話モード

```
%sas example
```

(d) バッチモード

```
%sas example &
```

上記の (c), (d) の場合、実行する前に example.sas に SAS プログラムやデータを作成しておく必要があります。

(2) MATHEMATICA 4.1

【機能】

[数値計算]

1. 数値タイプ

整数

有理数

浮動小数点

複素数

2. 整数関数

モジュラス	最大公約数	最小公倍数
因数	約数	n 番目の素数
モービウス関数	約数関数	ヤコビの記号
格子変換	階乗	多項式係数
ベルヌーイ	オイラー	スターリング数
分配関数		

3. 数学関数

初等超越関数	直交多項式	ガンマ関数
ベータ関数	ポリガンマ関数	リーマンゼータ関数
対数関数	レルヒ関数	指数積分
対数積分	誤差関数	ベッセル関数
エアリ関数	ルジャンドル関数	合流型超幾何関数
2F1 超幾何関数	楕円積分	
ヤコビとワイエルシュトラスの楕円積分		

4. 数値マトリックス

逆行列	行列式	零行列
固有値	固有ベクトル	特異値分解

5. データ解析

フーリエ変換	一般最小自乗近似
--------	----------

6. 関数の数値演算

積分	総和	積和
求根	最小化	

[数式処理]

1. 多項式演算

展開	因数分解	最大公約数
終結式	分解	

2. 有理関数演算

公分母	部分分数	発見的簡約化
-----	------	--------

3. 微積分

偏微分、全微分 積分 べき級数
極限

4. 方程式の求解

連立方程式、多項式の解析解

5. 記号マトリックス演算

逆行列 行列式 零行列
固有値 固有ベクトル

6. リスト演算

部分抽出 除去及び置換 和集合
積集合 補集合 ソート
統合 分割 順列

7. テンソル演算

一般内積 一般外積 一般転置

【実行例】

(a) グラフィック画面用

```
%/usr/opemwin/bin/xset +fp tcp/eduhost:7100 : フォントサーバの設定  
%mathematica
```

(b) テキスト画面用

```
% math
```

(3) S-PLUS 3.4J

対話型データ解析システム

【統計解析機能】

基本統計量	多変量解析	回帰分析
分散分析	時系列解析、信号処理	生存時間解析
検定	品質管理図	制約付き非線型最小 2 乗法による最適化

【実行例】

```
%Splus
```

4. 終わりに

上記の記事の中の機能、機能概要についてはメーカーの紹介記事を掲載しましたので、ソフトウェアを利用される場合は、マニュアルで確認のうえご利用下さい。