

ライブラリ・アプリケーションソフトウェアの紹介 (2005年4月)

佐藤 多佳子 小野 敏
情報シナジーセンター システム運用係

1 はじめに

本センター大規模科学計算システムでは、プログラミングのための科学技術計算ライブラリや、構造解析、分子軌道計算、統計データ解析、グラフ処理等々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おります。

また、それらをサービスしている各サーバはUNIX OSで統一されており、基本的な操作コマンドも共通です。UNIXの使用経験のある方なら、すぐにでもご利用できることでしょう。研究の良きツールとして、本センターのライブラリ・アプリケーションソフトウェアをご活用いただければ幸いです。

この稿では、スーパーコンピュータ・並列コンピュータ上でサービスしているライブラリプログラム、アプリケーションソフトウェアを紹介をします(表1)。

表1: サービス一覧表

システム	プログラミング言語	ライブラリ	アプリケーション
スーパーコンピュータ super.cc.tohoku.ac.jp	Fortran90(自動並列化、OpenMP) MPI/Fortran HPF	ASL MathKeisan	
	C(自動並列化、OpenMP) C++(自動並列化、OpenMP) MPI/C MPI/C++	ASLCINT MathKeisan (BLASのみ)	
並列コンピュータ gen.cc.tohoku.ac.jp	Fortran95(自動並列化、OpenMP) MPI/Fortran	ASL IMSL(会話型のみ)	MARC MENTAT DIANA iDIANA Gaussian03
	C(自動並列化、OpenMP) C++(OpenMP) MPI/C MPI/C++		Mathematica Matlab SAS Gsharp AVS/Express

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

東北大学情報シナジーセンター 大規模科学計算システム ホームページ (以下 「ホームページ」)
<http://www.cc.tohoku.ac.jp/>

本文中、関連Webページについて、「ホームページ」からのリンクを記載しております。「ホームページ」から項目をクリックして参照ください。

ライブラリ、アプリケーションの紹介は、

「ホームページ」 「ライブラリプログラム」 「アプリケーション」

にあります。本稿中の内容は 2005 年 4 月現在のものですので、今後のバージョンアップや利用方法の最新情報については、これらの Web ページを随時ご確認ください。

また、本文中に記載しているコマンドについて、
スーパーコンピュータにログインして実行するコマンドは、

`[super]$ xxx`

並列コンピュータにログインして実行するコマンドは、

`[gen]$ xxx`

と表記しています。

2 ご利用のまえに

2 - 1 シェルの初期設定

情報シナジーセンター 大規模科学計算システムでは、お勤めの環境設定を用意しております。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を自動的に設定することができます。本センターでは、利用登録時に個々の ID にあらかじめこの設定を行っておりますので、通常は作業の必要はありません。

ライブラリやアプリケーションが利用できないという場合、シェルの設定が変更されている可能性があります。以下の Web ページを参照してご確認ください。

「ホームページ」 「アプリケーション」 「シェルの初期設定」

<http://www.cc.tohoku.ac.jp/service/AP/soft/init.html>

2 - 2 コンパイル・実行・ジョブ

ユーザプログラムのコンパイルや実行、ジョブについては、

「ホームページ」 「スーパーコンピュータ」 「スーパーコンピュータ SX-7 の利用法」

<http://www.cc.tohoku.ac.jp/service/super/>

「ホームページ」 「並列コンピュータ」 「並列コンピュータ TX7/AzusA の利用法」

<http://www.cc.tohoku.ac.jp/service/gen/>

を参照ください。

2 - 3 X Window System 環境の設定

ほとんどのアプリケーションの実行に、X Window System 環境の設定が必要です。

X window System の設定方法については、以下を参照ください。

「ホームページ」 「アプリケーション」 「gen の X のアプリケーションを利用するための設定」

<http://www.cc.tohoku.ac.jp/service/USE/X-Win/>

2 - 4 ファイル転送

マニュアルなどをダウンロードする際のファイル転送については、

「ホームページ」 「システム利用の手引」 「ファイル転送について」

<http://www.cc.tohoku.ac.jp/service/USE/FTP/index.html>

を参照ください。

ライブラリプログラム

- ・スーパーコンピュータ SX-7

 - Fortran90 用

 - ASL/SX 日本電気提供科学技術計算ライブラリ

 - MathKeisan 数学ライブラリ (BLAS、LAPCK、ScaLAPACK、FFT 等)

 - C 言語 用

 - ASLCINT/SX 日本電気提供科学技術計算ライブラリ

 - MathKeisan (BLAS のみ) 数学ライブラリ

- ・並列コンピュータ TX7/AzusA

 - Fortran95 用

 - ASL 日本電気提供科学技術計算ライブラリ

 - IMSL(会話型でのみ利用可能)

 - International Mathematical and Statistical Libraries

MathKeisan や IMSL のいくつかのサブルーチンについては、同機能のものが ASL/SX および ASL にも含まれています。

ASL/SX と ASL は、さらに日本電気製マシン用に最適化されたライブラリですので、同機能であれば、ASL/SX および ASL の利用をお勧めします。

ASL(Advanced Scientific Library)は、科学技術計算の広範な分野の数値シミュレーションプログラムの作成を強力に支援する数学ライブラリです。ASLを用いることによって、難解な数値計算アルゴリズムの詳細に煩わされることなく高度な科学技術計算プログラムを作成することができます。特にSXシリーズ版ASL(ASL/SX)は、SXシリーズのベクトル処理・並列処理機能を利用し、その性能を最大限に発揮する高度なチューニングを行い、超高速処理を実現しています。

オブジェクトコードのFORTRAN サブルーチンライブラリで、ソースプログラムは非公開です。次のような数値計算分野に対応しています。

基本行列演算、連立1次方程式(直接法)、連立1次方程式(反復法)、最小二乗法、固有値・固有ベクトル、フーリエ変換とその応用/時系列分析、近似・補間、スプライン関数、数値微分、数値積分、方程式の根、極値問題・最適化、常微分方程式・積分方程式、特殊関数、乱数、高速フーリエ変換(FFT)、スプライン関数、3次元境界要素法用の数値積分法

バージョン

ASL/SX R19.0

ASL R17

サービスホスト・対応言語

ASL/SX スーパーコンピュータ super.tohoku.ac.jp ・ Fortran90

ASL 並列コンピュータ gen.cc.tohoku.ac.jp ・ Fortran95

利用方法

ASL/SX および ASL ライブラリはコンパイル時に自動的にリンクされます。

設定は特に必要ありません。バッチ処理も全てのジョブクラスで実行可能です。

(「2 - 2 . コンパイル・実行・ジョブ」も参照ください)

関数一覧

日本電気のホームページ上で公開されています。ASL/SX および ASL のページ

「ホームページ」 「ライブラリプログラム」 「ASL/SX」, 「ASL」

<http://www.cc.tohoku.ac.jp/service/LIB/lib/ASLSX.html>

<http://www.cc.tohoku.ac.jp/service/LIB/lib/ASL.html>

からもリンクしていますので参照ください。

マニュアル

PDF 版マニュアルを並列コンピュータ(gen.cc.tohoku.ac.jp)上で提供しています。
並列コンピュータから FTP ソフトでそれぞれの PDF ファイルをダウンロードし、
Adobe Acrobat Reader でご覧ください。
(「2 - 4 . ファイル転送」も参照ください)

ASL/SX

/usr/ap/ASL-man-super/PDF/ASL_SX/pdf/

- 1main.pdf : 基本機能編 第 1 分冊
(基本行列演算、連立 1 次方程式(直接法、反復法))
- 2main.pdf : 基本機能編 第 2 分冊
(最小二乗法、固有値・固有ベクトル、フーリエ変換とその応用/時系列分析)
- 3main.pdf : 基本機能編 第 3 分冊
(補間・近似、スプライン関数、数値微分、数値積分、
方程式の根、極値問題・最適化)
- 4main.pdf : 基本機能編 第 4 分冊
(微分方程式とその応用、特殊関数、乱数、ソート・順位付け)
- 5main.pdf : 高速機能編
- 6main.pdf : 並列処理機能編

ASL

/usr/ap/ASL-man-azusa/ASL/pdf/

- 1main.pdf : 基本機能編 第 1 分冊
(基本行列演算、連立 1 次方程式(直接法、反復法))
- 2main.pdf : 基本機能編 第 2 分冊
(最小二乗法、固有値・固有ベクトル、フーリエ変換とその応用/時系列分析)
- 3main.pdf : 基本機能編 第 3 分冊
(補間・近似、スプライン関数、数値微分、数値積分、
方程式の根、極値問題・最適化)
- 4main.pdf : 基本機能編 第 4 分冊
(微分方程式とその応用、特殊関数、乱数、ソート・順位付け)
- 5main.pdf : スーパーコンピュータ対応機能編

印刷版マニュアルは、情報シナジーセンター本館 1 階 利用相談室に備えてあります。

日本電気提供 C 言語用科学技術計算ライブラリ
ASLCINT/SX

ASLCINT/SX は、科学技術計算ライブラリ ASL/SX に対するインタフェースライブラリです。ASLCINT/SX を用いることによって、ASL/SX の良質かつ高速で多種多様な機能を容易に C 言語プログラムに組み込むことができます。

バージョン

R9.0

サービスホスト・対応言語

スーパーコンピュータ super.tohoku.ac.jp ・ C、C++

利用方法

コンパイル時に自動的にリンクされます。設定は特に必要ありません。
(「2 - 2 . コンパイル・実行・ジョブ」も参照ください)

関数一覧

日本電気のホームページ上で公開されています。ASLCINT のページ
「ホームページ」 「ライブラリプログラム」 「ASLCINT」
<http://www.cc.tohoku.ac.jp/service/LIB/lib/ASLCINT.html>
からもリンクしていますので参照ください。

マニュアル

PDF 版マニュアルを並列コンピュータ(gen.cc.tohoku.ac.jp)上で提供しています。
並列コンピュータから FTP ソフトでそれぞれの PDF ファイルをダウンロードし、
Adobe Acrobat Reader でご覧ください。
(「2 - 4 . ファイル転送」も参照ください)

/usr/ap/ASL-man-super/PDF/CINT_SX/pdf/

1main.pdf : 基本機能編 第 1 分冊

(基本行列演算、連立 1 次方程式(直接法、反復法))

2main.pdf : 基本機能編 第 2 分冊

(最小二乗法、固有値・固有ベクトル、フーリエ変換とその応用/
時系列分析)

3main.pdf : 基本機能編 第 3 分冊

(補間・近似、スプライン関数、数値微分、数値積分、方程式の根、
極値問題・最適化)

4main.pdf : 基本機能編 第 4 分冊

(微分方程式とその応用、特殊関数、乱数、ソート・順位付け)

5main.pdf : 高速機能編

6main.pdf : 並列処理機能編

印刷版マニュアルは、情報シナジーセンター本館 1 階 利用相談室に備えてあります。

数学ライブラリ集

Mathkeisan

MathKeisan は NEC のハイパフォーマンス・コンピュータ用に高度に最適化された数学ライブラリ集です。

MathKeisan に含まれるライブラリは以下のとおりです。

BLAS、LAPACK、ScaLAPACK、BLACS、PARBLAS、CBLAS、SBLAS、
FFT、PARFFT、METIS、ParMETIS、SOLVER、ARPACK

バージョン

MathKeisan 1.4.4 for SX

サービスホスト・対応言語

スーパーコンピュータ super.tohoku.ac.jp ・ Fortran90、 C(BLAS のみ)

利用方法

コンパイル時に各ライブラリのリンクを指定します。

ライブラリ名	リンク方法
BLAS	-lblas
LAPACK	-llapack -lblas
ScaLAPACK	-lscalapack -lblacsF90init -lblacs -lblacsF90init -lblas -lmpi
BLACS	-lblacsF90init -lblacs -lblacsF90init -lmpi
PARBLAS	-lparblas -Popenmp
CBLAS	-lcblas -lblas
SBLAS	-lsblas
FFT	-lfft
PARFFT	-lparfft -Popenmp
METIS	-lmetis_32
	-lmetis
ParMETIS	-lparmetis_32 -lmpi
	-lparmetis -lmpi
SOLVER	-lsolver -lmetis -lblas -Popenmp
ARPACK	-larpack -llapack -lblas

例) LAPACK のリンク方法

コンパイル [gen]\$ **sxf90 オプション ソースプログラム名 -llapack -lblas**
実行 [super]\$ **./a.out**

(「2 - 2 . コンパイル・実行・ジョブ」も参照ください)

マニュアル

HTML 形式のマニュアルを gen 上で提供しています。
gen にログイン後、以下のコマンドをご覧ください。

[gen]\$ **w3m /usr/ap/MathKeisan-man/cover.html**

IMSL

(International Mathematical and Statistical Libraries)

IMSL ライブラリは、約 900 もの関数機能を持った、数値計算・統計解析用の FORTRAN サブルーチンライブラリです。以下の分野に対応しています。

< 数値計算と特殊関数ライブラリ (MATH/LIBRARY) >

数値計算ライブラリ

線形システム・固有システム解析・補間と近似・積分と微分・微分方程式・変換・非線型方程式・最適化・基本的な行列とベクトルの演算・ユーティリティ

特殊関数ライブラリ

基本関数・三角関数と双曲線関数・指数積分と関連する関数・ガンマ関数と関連する関数・誤差関数と関連する関数・ベッセル関数・ケルビン関数・エアリ関数・楕円積分・楕円関数と関連する関数・確立分布関数とその逆関数・マチウ関数・種々の関数

< 統計解析ライブラリ (STAT/LIBRARY) >

基本統計・回帰・相関・分散分析・カテゴリデータと離散データの解析・

ノンパラメトリック統計・適合度と無作為性の検定・時系列解析と予測・共分散構造と因子分析・判別分析・クラスタ分析・標本調査・生存解析、生命検定、信頼性・多次元尺度法・密度関数と危険率推定・ラインプリンターグラフィック・確立分布関数とその逆関数・乱数発生・ユーティリティ・数学的支援

サービスホスト・対応言語

並列コンピュータ gen.cc.tohoku.ac.jp ・ Fortran95

利用方法

環境設定 [gen]\$ **source /usr/skel/imsl.env**

コンパイル [gen]\$ **f95 ソースプログラム名**

実行 [gen]\$ **a.out**

(IMSL ライブラリを使用したプログラムは、バッチ処理での実行はできません)

マニュアル

情報シナジーセンター本館 1 階 利用相談室に備えてあります。

PDF 形式のマニュアル (英文) が公開されています。IMSL のページ

「ホームページ」 「ライブラリプログラム」 「IMSL」

<http://www.cc.tohoku.ac.jp/service/LIB/lib/IMSL.html>

からもリンクしていますので参照ください。

アプリケーションソフトウェア

構造解析

MSC.Marc2005/ MSC.MarcMentat2005 非線形汎用構造解析プログラム
MSC.Patran 構造解析用汎用プリポストプロセッサ
DIANA / iDIANA 汎用構造解析ソフトウェア

分子軌道計算

Gaussian03 非経験的分子軌道計算プログラム
MolStudio Gaussian プリポストシステム

数式処理

MATHEMATICA 数式処理プログラム
MATLAB 科学技術積算言語

データ解析

SAS データ解析システム

データ可視化

Gsharp 科学技術グラフ処理ソフトウェア
AVS/Express Viz 3次元データ表示ソフトウェア

非線形汎用構造解析プログラム MSC.Marc / MSC.Marc Mentat

MSC.Marc (以下 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。

線形 / 大変形 / 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 / 電気電動と熱伝導の連成 / 熱と応力の連成

MSC.Marc Mentat (以下 Mentat) は、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

Marc : gen.cc.tohoku.ac.jp ・ MSC.Marc2005 Linux(64bit)
Mentat : gen.cc.tohoku.ac.jp ・ MSC.Marc Mentat2005 Linux(64bit)

利用方法

一般に構造解析を行う場合の処理の流れは、以下のようになります。

1. 解析対象モデルのデータ作成 (プリ処理)
2. ソルバーでの解析実行
3. 解析結果の表示 (ポスト処理)

1 と 3 を行うプリポストプロセッサが Mentat で、2. の実際に解析を行うソルバーが Marc、という位置づけです。

解析 (計算) は、直接 Marc 起動コマンドで行うだけでなく、Mentat から行うことも可能です。以下に解析を行う方法を示します。

< Marc での解析実行 >

1. 解析実行

run_marc というコマンドに入力データを指定することで、ジョブとして解析を実行します。(ジョブは mb (Marc 専用、無制限) というジョブクラスに投入されます)

Marc の入力ファイルは、拡張子 (サフィックス) として .dat を付けてください。

例) *job_name.dat* の解析を実行

```
[gen]$ run_marc -jid job_name -v no  
・ run_marc コマンドのオプション
```

キーワード	オプション	説明
-jid (-j) (必須)	<i>job_name</i>	入力ファイル名 <i>job_name.dat</i> を指定
-ver (-v)	yes(デフォルト) no	ジョブの開始前に確認を要求する。 ジョブをただちに開始する
-cpu	<i>sec</i>	cpu 時間の制限
-user (-u)	<i>user_name</i>	ユーザサブレーチン <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) を参照ください。

ジョブの状態の確認は [gen]\$ **bjobs**、削除は [gen]\$ **bkill JOBID** として行います。(「2 - 2 . コンパイル・実行・ジョブ」を参照ください)

2. 解析結果

ジョブの終了は [gen]\$ **bjobs** で確認してください。

・出力ファイル

解析が終了すると、以下のファイルが作成されます。

<code>job_name.out</code>	(解析結果)
<code>job_name.log</code>	(解析ログ)
<code>job_name.t19</code>	(ポストファイル)
<code>job_name.sts</code>	(ステータスレポートファイル)
<code>job_name.batch_err_log</code>	(エラーログ)

その他のファイルについては、マニュアル(C編プログラム入力 付録B 表B-1) を参照ください。

・exit number (終了番号)

解析結果ファイル(`job_name.out`)の末尾にある `marc exit number` により、正常終了・エラー終了とその原因がわかります。

番号の意味については、マニュアル(C編 プログラム入力 付録A) を参照ください。

< MENTAT からの解析実行 >

1. 起動 X Window System 環境が必要です。
「2 - 3 . X Window System 環境の設定」を参照ください。

[gen]\$ **mentat**

2. 解析実行

Mentat 上に解析データがある状態で、

ダイナミックメニュー `JOBS` `RUN` `submit1`

とすると、ジョブとして解析を実行します。
(ジョブは `mb` (Marc 専用、無制限) というジョブクラスに投入されます)

実行の状態は `MONITOR` または `UPDATE` で確認できます。

- ・ユーザサブルーチンを指定する場合は、
`RUN` の `USER SUBROUTINE FILE` でサブルーチンファイルを指定してください。
- ・submit 可能なデータを、
スタティックメニュー `FILES` -> MARC INPUT FILE `WRITE`
とすると、Marc の入力ファイル (.dat ファイル) を作成できます。

サンプルプログラム

Mentat : マニュアル「ユーザーズガイド」に掲載されている例題のプロシジャファイルが、並列コンピュータ (gen.cc.tohoku.ac.jp) のディレクトリ /usr/ap/marc2005/mentat2005/examples/marc_ug/ 下にあります。

Marc : マニュアル E 編に掲載されている例題が、並列コンピュータ (gen.cc.tohoku.ac.jp) のディレクトリ /usr/ap/marc2005/marc2005/demo/ 下にあります。

マニュアル・参考資料

PDF 版マニュアルを並列コンピュータ (gen.cc.tohoku.ac.jp) 上で提供しています。並列コンピュータから FTP ソフトでそれぞれの PDF ファイルをダウンロードして Adobe Acrobat Reader でご覧ください。

(「2 - 4 . ファイル転送」も参照ください)

日本語版 (2003 対応版)

/usr/ap/marc2003/mentat2003/doc/japanese/
vola.pdf : A 編 理論およびユーザー情報
volb.pdf : B 編 要素ライブラリ
volc.pdf : C 編 プログラム入力
vold.pdf : D 編 ユーザーサブルーチンおよび特別ルーチン
vole.pdf : E 編 例題集
new_features.pdf : 新機能ガイド
marc_ug.pdf : ユーザーズガイド
mt_help_ref.pdf : Mentat 2003 ヘルプリファレンス
xsec_adden.pdf : ドキュメント補足資料

English version

/usr/ap/marc2005/mentat2005/doc/
vola/vola.pdf : Volume A : Theory and User Information
volb/volb.pdf : Volume B : Element Library
volc/volc.pdf : Volume C : Program Input
vold/vold.pdf : Volume D : User Subroutines and Special Routines
vole/vole.pdf : Volume E : Demonstration Problems
marc_ug.pdf : User's Guide
mt_help_ref.pdf : Mentat Help Reference
release_guide.pdf : Release Guide

参考資料

非線形構造解析汎用プログラム MSC.MARC の紹介、大泉健治、広報誌 SENAC Vol.33-No.2 (2000-4)

改訂 HTML 版 <http://www.cc.tohoku.ac.jp/service/AP/soft/marc/>

有限要素解析向け汎用プリポストプロセッサ

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プロセッサです。当センターでは Marc の利用を補強するためにサービスしております。

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。さらに優れた特徴として、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.Patran 2004r2

会費制でのサービスとなります。

当センターの Marc のプリポストを目的とする、情報シナジーセンター大規模科学計算システムの利用者番号をお持ちの東北大学内の方であればご利用可能です。

詳しくは、東北大学情報シナジーセンター システム運用係 s-unyo@isc.tohoku.ac.jp までお問い合わせください。

土木建築分野向け汎用構造解析プログラム

DIANA / iDIANA

DIANA は、TNO(オランダ応用科学研究機関)により開発された汎用有限要素法解析ソフトウェアで、コンクリートのひび割れ解析、地盤液状化解析等他の汎用ソフトウェアには無い土木建築分野に特有の解析機能を有しており、段階施工、逆解析等も可能です。

iDIANA は、DIANA 用のプリポストプロセッサで、FemGV(英国 FEMSYS Ltd. により開発された有限要素法解析(FEA)・数値流体力学(CFD)用のプリポストプロセッサ)の DIANA 用バージョンです。

利用には事前に登録が必要になります。

詳しくは、東北大学情報シナジーセンター システム運用係 s-unyo@isc.tohoku.ac.jp までお問い合わせください。

Gaussian03

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おります。

並列処理(16 並列まで)が可能で、実行時間を短縮できます。

スクラッチファイル(テンポラリファイル)を専用の高速ディスクに置くことにより、ファイル入出力時間も短縮しております。

サービスホスト・バージョン

gen.cc.tohoku.ac.jp ・ Gaussian03 B05

利用方法

[16 並列実行の指定]

こちらでサービスしている Gaussian では、16 並列ま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。

16 並列で実行するには、ルートセクションに Link 0 コマンドの **%NProc=16** を追加し、ジョブクラス **pa** または **pb** に投入してください。

手入力の場合は、テキストエディタで先頭行に追加、MolStudio 等ではインプットファイル作成画面の Link 0 section の項に追加します。

[使用メモリ量の指定]

デフォルトのメモリサイズは **2GB** です。

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。

例) 16 並列、メモリ 16GB で実行する指定を追加した
インプットファイル **e2_01.com**

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

Formaldehyde Single Point

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

[実行]

subg03 コマンドに、キュー名と入力プログラム名(拡張子.com を除く)を指定することでジョブとして実行が行われます。

例) インプットファイル e2_01.com を、
Gaussian03、ジョブクラス pa (16 並列)で実行する。

```
[gen]$ subg03 pa e2_01
```

プリポストシステム MolStudio から Gaussian を実行することも可能です。

「MolStudio から利用する場合の設定」

<http://www.cc.tohoku.ac.jp/service/AP2/soft/molst/Molsettei.html>
を参照ください。

サンプルプログラム

マニュアル「電子構造論による化学の探求」に掲載されている全ての例題が、並列コンピュータ (gen.cc.tohoku.ac.jp) のディレクトリ/usr/ap/g03/explore/ 下にあります。

マニュアル・参考資料

情報シナジーセンター本館 1 階 利用相談室に備えてあります。

マニュアル

Gaussian 03 User's Reference

Gaussian 03 Programmer's Reference

Gaussian 03 I/Ops Reference

電子構造論による化学の探求(第二版)、ガウシアン社

参考資料

Gaussian94 を使った ab initio 分子軌道計算入門、大槻幸義、
SENAC Vol.31-No.1(1998-1)

Gaussian の使い方、佐藤多佳子、小野敏、SENAC Vol.37-4(2004-10)

Gaussian プリポストシステム

MolStudio

MolStudio 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 搭載のパソコン上で動作し、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。Gaussian が動作する UNIX サーバとネットワーク接続されている場合は、入力データの転送、Gaussian の実行、計算結果の取得をマウス操作などにより簡単に行うことができます。

バージョン

R4

当センターの Gaussian のプリポストを目的とする、情報シナジーセンター大規模科学計算システムの利用者番号をお持ちの東北大学内の方であれば、ご利用可能です。

詳しくは、東北大学情報シナジーセンター システム運用係 s-unyo@isc.tohoku.ac.jp 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 3 つの機能、数値計算、記号計算、グラフィックスが一体となって使いやすいインターフェイスを提供しています。

サービスホスト・バージョン

並列コンピュータ gen.cc.tohoku.ac.jp ・ version 4.2

利用方法

X Window System 環境が必要です。

「2 - 3 . X Window System 環境の設定」を参照ください。

[gen]\$ **mathematica**

MATHEMATICA の基本的な使い方は、マニュアル・参考資料などを参照ください。また、インターネットでも MATHEMATICA の利用法について様々な情報が公開されています。検索エンジンをご活用ください。

マニュアル・参考資料

情報シナジーセンター本館 1 階 利用相談室に備えてあります。

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、サイエンティスト社
Mathematica プログラミング技法、アジソン ウェイスレイ

科学技術計算言語

MATLAB

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

並列コンピュータ gen.cc.tohoku.ac.jp ・ Version 6.5.1 (Release 13)

導入 Toolbox

当センターで導入している Toolbox です。

MATLAB Simulink Communications Blockset Communications Toolbox
Control System Toolbox DSP Blockset Fixed-Point Blockset
Fuzzy Logic Toolbox Image Processing Toolbox LMI Control Toolbox
MATLAB Compiler Model Predictive Control Toolbox

Mu-Analysis and Synthesis Toolbox Neural Network Toolbox
Nonlinear Control Design Blockset Optimization Toolbox
Partial Differential Equation Toolbox Real-Time Workshop
Robust Control Toolbox SB2SL Signal Processing Toolbox
imulink Performance Tools Spline Toolbox Statistics Toolbox
Symbolic Math Toolbox System Identification Toolbox Wavelet Toolbox

利用方法

X Window System 環境が必要です。

「2 - 3 . X Window System 環境の設定」を参照ください。

[gen]\$ matlab

MATLAB の基本的な使い方は、マニュアル・参考資料などを参照ください。また、インターネットでも MATLAB の利用法について様々な情報が公開されています。検索エンジンをご活用ください。

マニュアル・参考資料

「MATLAB クイックスタート」、「MATLAB ヘルプデスク(日本語版)」が公開されています。MATLAB のページ

「ホームページ」 「アプリケーション」 「MATLAB」
<http://www.cc.tohoku.ac.jp/service/AP/soft/matlab.html>

からもリンクしていますので参照ください。

情報シナジーセンター本館 1 階 利用相談室にも、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
Remi Vaillancourt : はやわかり MATLAB、芦野隆一、共立出版
MATLAB ハンドブック、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 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 国躍、鈴木陽一、工藤純一、牧野正三、
佐藤倫子、伊藤英一、 広報誌 SENAC Vol.29-No.4 (1996-10)

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

サービスホスト・バージョン

並列コンピュータ gen.cc.tohoku.ac.jp ・ Release 8.2

導入プロダクト

当センターで導入している SAS プロダクトです。

Base SAS SAS/AF SAS/ASSIST SAS/CALC SAS/EIS
SAS/ETS SAS/FSP SAS/GRAPH SAS/IML SAS/INSIGHT
SAS/LAB SAS/STAT

利用方法

<対話型ディスプレイマネージャの利用>

「対話型ディスプレイマネージャ」とは、ウィンドウ画面を使って対話形式で SAS システムに命令を与えたり、メッセージを受けとることの出来る処理モードです。

1. 起動 X Window System 環境が必要です。
「2 - 3 . X Window System 環境の設定」を参照ください。

[gen]\$ sas

“ Log ”、“ Output ”、“ Program Editor ”、“ ToolBox ”、“ Results ”、“ Explorer ” の 6 つのウィンドウと、“ Session Management ” のアイコンが表示されます。

2. SAS プログラムの作成

“ Program Editor ” ウィンドウで、SAS プログラムを作成します。

3. 実行と結果の表示

“ Program Editor ” ウィンドウのメニュー “ Run ” から “ Submit ” を選択することで、プログラムが実行されます。

結果は “ Output ” ウィンドウに出力されます。

<非対話モードでの実行>

X Window System 環境でなくとも、SAS の利用が可能です。

sas_name.sas (*sas_name* は任意、拡張子 (サフィックス) *.sas* は必須) という名前で SAS プログラムを作成し、*sas* というコマンドに、拡張子を除いた *sas* プログラム名を指定することで実行します。

例) *sas* プログラム *test01.sas* を実行する。

[gen]\$ *sas test01*

実行後、カレントディレクトリに2つのファイルが作成されます。

```
[gen]$ ls  
test01.log  test01.lst  test01.sas
```

.lst ファイルは、SAS プログラムの実行結果、.log ファイルは、SAS ログ です。

マニュアル

日本語版オンラインヘルプ (閲覧を希望の際は、システム運用係 までご連絡ください)

情報シナジーセンター本館 1 階 利用相談室にも、以下の資料を備えてあります。

SAS によるデータ解析入門[第2版]、東京大学出版会

SAS による共分散構造分析、東京大学出版会

SAS による実験データの解析、東京大学出版会

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

Gsharp

数値データに対して科学技術グラフの描画を行うビジュアルイゼーション・ソフトウェアです。例えば観測データや、スーパーコンピュータでの計算結果等を簡単にグラフ化することができます。

サービスホスト・バージョン

並列コンピュータ gen.cc.tohoku.ac.jp ・ Release 3.3

利用方法

X Window System 環境が必要です。

「2 - 3 . X Window System 環境の設定」を参照ください。

[gen]\$ **gsh**

Gsharp の基本的な使い方は、マニュアル・参考資料などを参照ください。

サンプルプログラム

並列コンピュータ (gen.cc.tohoku.ac.jp) のディレクトリ
/usr/ap/gsharp3.3n/7v3/example/Gsharp 下にあります。

マニュアル・参考資料

販売代理店ケイ・ジー・ティーのホームページから「チュートリアルガイド」がダウンロードできます。Gsharp のページ

「ホームページ」 「アプリケーション」 「Gsharp」
<http://www.cc.tohoku.ac.jp/service/AP/soft/gsharp.html>

からもリンクしていますので参照ください。

情報シナジーセンター本館 1 階 利用相談室にも、以下の資料を備えてあります。

マニュアル

Gsharp 日本語簡易マニュアル(和文)

Getting Started

User's Guide

Gsharp Getting Started

Gsharp User's Guide

Gsharp for UNIX チュートリアルガイド

参考資料

科学技術グラフ処理ソフト Gsharp の基本的な使い方、佐藤倫子、伊藤英一、陳 国曜、鈴木陽一、工藤純一、牧野正三、 広報誌 SENAC Vol.29-No.4 (1996-10)

三次元データ可視化ソフトウェア

AVS/Express Viz

AVS/Express Viz は 1989 年に科学技術計算向けに開発されたサイエンティフィック・ビジュアライゼーション・システム「AVS」の後継ソフトです。AVS/Express Viz はプログラミングすることなく、モジュールをつなぎあわせることにより、簡単に様々なデータの可視化を実現します。

サービスホスト・バージョン

並列コンピュータ gen.cc.tohoku.ac.jp ・ version 6.2

利用方法

X Window System 環境が必要です。

「2 - 3 . X Window System 環境の設定」を参照ください。

[gen]\$ vxp

AVS の基本的な使い方は、マニュアル・参考資料などを参照ください。

サンプルプログラム

オンラインマニュアルで使われているプログラムが並列コンピュータ (gen.cc.tohoku.ac.jp) のディレクトリ /usr/ap/express/data/ 下にあります。

マニュアル・参考資料

販売代理店ケイ・ジー・ティーのホームページから「チュートリアルガイド」がダウンロードできます。AVS のページ

「ホームページ」 「アプリケーション」 「AVS」
<http://www.cc.tohoku.ac.jp/service/AP/soft/viz.html>

からもリンクしていますので参照ください。

情報シナジーセンター本館 1 階 利用相談室にも、以下のマニュアルを備えてあります。

AVS/Express Viz 入門コーステキスト(和文)
Tutorials for the AVS/Express Visualization Edition
Release Notes
Release Notes Addendum
AVS/Express ユーザーズガイド
AVS/Express チュートリアルガイド
AVS/Express モジュールリファレンス
Using AVS Express
visualization Techniques
Getting Started
AVS/Express Toolkits