

[大規模科学計算システムの利用法]

ライブラリ・アプリケーションの紹介 (2007年4月)

システム運用係 システム管理係

はじめに

本センター大規模科学計算システムでは、プログラミングのための科学技術計算ライブラリや、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。

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の紹介をします

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 SX-7,SX-7C super.isc.tohoku.ac.jp | Fortran90/SX C++/SX | ASL/SX MathKeisan for SX | |
| 並列コンピュータ TX7/i9610 gen.isc.tohoku.ac.jp | Fortran95 C++ | ASL MathKeisan | MSC.Marc MSC.Marc Mentat Gaussian03 Mathematica Matlab SAS |

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。

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、ホームページの「ライブラリ」、「アプリケーション」にあります。本稿中の内容は2007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。

ご利用の前に

シェルの初期設定

大規模科学計算システムでは、お勧めの環境設定を用意しております。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は、この設定が変更されていることが考えられます。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>

接続、ファイル転送

スーパーコンピュータ、並列コンピュータへの接続方法やファイル転送の方法については、

「ホームページ」 → 「ログイン・転送等」 → 「リモートログイン」

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

「ホームページ」 → 「ログイン・転送等」 → 「ファイル転送」

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

を参照ください。

Windows から X アプリケーションを利用する方法

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。Microsoft Windows から X window System アプリケーションを利用するための方法については、以下を参照ください。

「ホームページ」 → 「ログイン・転送等」 → 「Windows からの X アプリケーションの利用」

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

ライブラリ

スーパーコンピュータ SX-7,SX-7C

Fortran90/SX,C++/SX 用

科学技術計算ライブラリ **ASL/SX**

数学ライブラリ **MathKeisan for SX**

並列コンピュータ TX7/i9610

Fortran95,C++ 用

科学技術計算ライブラリ **ASL**

数学ライブラリ **MathKeisan**

科学技術計算ライブラリ **ASL/SX**、**ASL**

ASL/SX は SX シリーズ用の科学技術計算ライブラリで、数値計算が必要とされるさまざま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します。

ASL/SX はスーパーコンピュータのベクトル機能を十分利用した基本機能、アルゴリズムレベルからスーパーコンピュータに対応した高速機能、SX の並列機能を十分発揮する並列機能の 3 つの機能から構成されています。また、並列コンピュータにも **ASL** が提供されており、分散開発に最適です。

次のような数値計算分野に対応しています。

< 基本機能 >

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

< 高速機能 >

行列のデータ格納変換, 連立 1 次方程式(直接法), 対称連立 1 次方程式(反復法), 最小二乗法, 固有値・固有ベクトル, 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

< 並列処理機能 >

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

プログラミング言語・コンパイラ

ASL/SX (スーパーコンピュータ)

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

ASL (並列コンピュータ)

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

利用方法

ASL/SX、ASL ライブラリは自動的にリンクされます。設定は特に必要ありません。

コンパイルはすべて並列コンピュータ上で行います。

プログラムのコンパイルについては、「ホームページ」 → 「スーパーコンピュータ」 および「並列コンピュータ」の「コンパイル」を参照ください。

ASL/SX のコンパイル

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

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

ASL のコンパイル

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

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

```
[gen ~]$ cc -c source.c
[gen ~]$ f95 -nofor_main source.o -laslcint -lasl
```

コンパイル後の実行方法については、「ホームページ」 → 「スーパーコンピュータ」 および「並列コンピュータ」の「プログラムの実行」を参照ください。

マニュアル

PDF 形式マニュアルを提供しています。

各マニュアルは、並列コンピュータ gen.isc.tohoku.ac.jp の以下のディレクトリにあります。ファイルを FTP ソフトでダウンロードした後、Adobe Acrobat Reader でご覧ください。

[FORTRAN]

| | |
|---------------|--|
| 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 |

[C/C++]

ASL/SX

/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

[FORTRAN]

ASL /usr/ap/ASL-man-gen/PDF/ASL/

- 1MAIN.PDF : 基本機能編 第1分冊
(格納モードの変換、基本行列演算、最小二乗法、固有値・固有ベクトル)
- 2MAIN.PDF : 基本機能編 第2分冊
(連立1次方程式(直接法))
- 3MAIN.PDF : 基本機能編 第3分冊
(連立1次方程式(反復法)、対称連立1次方程式(反復法)、非対称連立1次方程式(反復法))
- 4MAIN.PDF : 基本機能編 第4分冊
(フーリエ変換とその応用/時系列分析)
- 5MAIN.PDF : 基本機能編 第5分冊
(微分方程式とその応用、数値微分、数値積分、3次元境界要素法用の数値積分法、補間・近似、スプライン関数)
- 6MAIN.PDF : 基本機能編 第6分冊
(特殊関数、乱数、ソート・順位付け、方程式の根、極値問題・最適化)
- 8MAIN.PDF : 並列処理機能

[C/C++]**ASL** /usr/ap/ASL-man-gen/PDF/CINT/

- 1MAIN.PDF : 基本機能編 第1分冊
(格納モードの変換、基本行列演算、最小二乗法、固有値・固有ベクトル)
- 2MAIN.PDF : 基本機能編 第2分冊
(連立1次方程式(直接法))
- 3MAIN.PDF : 基本機能編 第3分冊
(連立1次方程式(反復法)、対称連立1次方程式(反復法)、非対称連立1次方程式(反復法))
- 4MAIN.PDF : 基本機能編 第4分冊
(フーリエ変換とその応用/時系列分析)
- 5MAIN.PDF : 基本機能編 第5分冊
(微分方程式とその応用、数値微分、数値積分、3次元境界要素法用の数値積分法、補間・近似、スプライン関数)
- 6MAIN.PDF : 基本機能編 第6分冊
(特殊関数、乱数、ソート・順位付け、方程式の根、極地問題・最適化)
- 8MAIN.PDF : 並列処理機能

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 for SX**、**MathKeisan**

MathKeisan for SX および **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 for SX および **MathKeisan** に含まれるライブラリは以下のとおりです。

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

※ MathKeisan for SX および MathKeisan 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、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。

プログラミング言語・コンパイラ

MathKeisan for SX (スーパーコンピュータ)

Fortran90/SX ・ sxf90,sxmpif90

C++/SX ・ sxcc,sxmpicc

MathKeisan (並列コンピュータ)

Fortran95 ・ f95,mpi95

C++ ・ cc,mpicc

利用方法

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

Fortran/SX で LAPACK をリンクする例

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

コンパイルはすべて並列コンピュータ上で行います。

プログラムのコンパイル、コンパイル後の実行方法については、「ホームページ」 → 「スーパーコンピュータ」 および 「並列コンピュータ」 の 「コンパイル」、「プログラムの実行」 を参照ください。

マニュアル

HTML 形式のマニュアルを提供しています。
gen.isc.tohoku.ac.jp にログイン後、以下のコマンドでご覧ください。

スーパーコンピュータ SX-7 用

```
[gen]$ w3m /usr/ap/MathKeisan-man/SX-7/J/cover.html
```

スーパーコンピュータ SX-7C 用

```
[gen]$ w3m /usr/ap/MathKeisan-man/SX-7C/J/cover.html
```

並列コンピュータ用

```
[gen]$ w3m /usr/ap/MathKeisan-man/gen/J/cover.html
```

アプリケーション

非経験的分子軌道計算プログラム **Gaussian03**

Gaussian プリポストシステム **MolStudio**

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

構造解析用汎用プリプロセッサ **MSC.Patran**

数式処理プログラム **Mathematica**

科学技術計算言語 **MATLAB**

データ解析システム **SAS**

非経験的分子軌道計算プログラム **Gaussian**

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。

本センターの Gaussian には、以下のような特長があります。

- * 最大 16 並列までの並列処理が行え、実行時間の短縮が可能です。
- * スクラッチファイル(テンポラリファイル)を専用の高速ディスクに置くことにより、ファイル入出力時間が短縮されます。

サービスホスト・バージョン

gen.isc.tohoku.ac.jp ・ Gaussian03 IA64L-G03RevD.01

利用方法

Gaussian のプリポストシステムとして MolStudio を提供しております。

「MolStudio」 <http://www.cc.tohoku.ac.jp/service/AP/soft/molst.html>

Gaussian の利用方法は

「Gaussian の使い方」 <http://www.cc.tohoku.ac.jp/service/AP/soft/gaussian/>
をご覧ください。以下は抜粋です。

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、FTP ソフトで gen に転送する際には、アスキーモードを指定して転送を行ってください。

gen.isc.tohoku.ac.jp にログイン後、subg03 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が行われます。

e2_01.com を解析するコマンド例

(subg03 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)

```
[gen ~]$ subg03 a16 e2_01
```

subg03 コマンドで指定できるキュー

| キュー名 (ジョブクラス) | 利用可能 CPU 数 (並列数) | CPU 時間 | メモリサイズ制限 (GBytes) |
|------------------|---------------------|--------|----------------------|
| as | 4 | 無制限 | 8 |
| a8 | 8 | 無制限 | 64 |
| a16 | 16 | 無制限 | 128 |

データの大きさなどにより選択してください。

バッチリクエストの状態確認、キャンセルについては、「ホームページ」 → 「並列コンピュータ」の「バッチ処理」を参照ください。

16 並列実行の指定

こちらでサービシしている 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利用ください。

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` を追加します。
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 の項に追加してください。

実行時には、subg03 コマンドでキュー **a16** を指定してください。

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。

16 並列、メモリ 16GB の設定をしたインプットファイル e2_01.com を実行する例

```
[gen ~]$ cat e2_01.com ← インプットファイルの内容を表示
%NProc=16 ← 並列数
%Mem=16Gb ← メモリ量
# RHF/6-31G(d) Pop=Full Test

Formaldehyde Single Point

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

[gen ~]$ subg03 a16 e2_01
```

実行結果

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

正常終了ならば、このファイルの末尾に「Normal termination of Gaussian 03.」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。

```
[gen ~]$ 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 03 at Mon Nov 1 12:00:00 2006.
```

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、計算をやり直したり、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

[1]~[4]のマニュアルは情報シナジーセンター本館1階 利用相談室備えてあります。

- [1] 電子構造論による化学の探求 第二版,ガウシアン社,1998
- [2] Gaussian 03 User's Reference
- [3] Gaussian 03 Programmer's Reference
- [4] Gaussian 03 IOps Reference
- [5] Gaussian 03 Online Manual,<http://www.gaussian.com/>

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。

Windows98/98SE、WindowsMe、WindowsXP、WindowsNT4.0 / Windows 2000 搭載のパソコンなどで動作し、入力データの作成、計算結果の可視化を 3 次元的に行うことができます。

バージョン

R4

お申し込み

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

利用条件

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

CD-ROM は、お手数ですが当センターまで直接取りにいらしてください。
お申し込みは、以下の内容のメールでお願いいたします。

宛先：東北大学情報シナジー機構 システム運用係
(SENAC 表紙裏の「大規模科学計算システム関連案内」をご覧ください)

件名：MolStudio 利用申請

内容：

| |
|--|
| お名前と利用者番号： 身分： 所属： 学内の電話番号： 取りに来られる予定日時： |
|--|

利用方法

CD-ROM を入れると、自動的にインストールが開始されます。
データ作成方法などについてはマニュアルを参照ください。

並列コンピュータ gen.isc.tohoku.ac.jp の Gaussian で解析を実行する手順

1. 入力データ作成後、Gaussian のインプットファイルとしてエクスポートします。
エクスポートの手順は、マニュアル「2.7 Gaussian 入力データのエクスポート」を参照してください。
拡張子は「.gjf」とします。
2. インプットファイルを gen.isc.tohoku.ac.jp に転送します。
3. gen.isc.tohoku.ac.jp にログインし、mv コマンドによりインプットファイルの拡張子を「.com」に変更します。

転送したインプットファイル h2o.gjf の拡張子を .com に変更するコマンド

```
[gen ~]$ mv h2o.gjf h2o.com
```

4. subg03 コマンドにより解析を実行します。
5. 結果ファイルを転送し MolStudio で表示します。
チェックポイントファイル(.chk)は、Gaussian のユーティリティコマンドにより書式付(.fchk)に変換後転送してください。

マニュアル

インストール時に、PDF 形式のマニュアルが Molstudio インストールディレクトリに作成されます。

また、NEC の MolStudio の Web ページで公開されている MolStudio ワークブック（目的別に具体的な MolStudio の操作手順を解説）も参照ください。

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

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

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

サービスホスト・バージョン

gen.isc.tohoku.ac.jp ・ MSC.Marc 2005r2 64bit

利用方法

Marc のプリポストプロセッサとして、Mentat の他に MSC.Patran も提供しております。
「MSC.Patran」 <http://www.cc.tohoku.ac.jp/service/AP/soft/patran.html>

Marc/Mentat の利用方法は

「MSC.Marc の使い方」 <http://www.cc.tohoku.ac.jp/service/AP/soft/marc/>
をご覧ください。以下は抜粋です。

run_marc コマンドでの解析実行

実行コマンド

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

gen.isc.tohoku.ac.jp にログイン後、run_marc コマンドに入力ファイル名を指定し実行することにより、バッチリクエストとして解析が行われます。
(バッチリクエストは **am** (Marc 専用、CPU 時間無制限、最大メモリ 8GB) というキューに投入されます)

job_name.dat を解析するコマンド例

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

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


バッチリクエストの状態確認、キャンセルについては、「ホームページ」 → 「並列コンピュータ」の「バッチ処理」を参照ください。

run_marc の入力オプション

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

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

解析結果

バッチリクエストが終了すると、主に以下のようなファイルが作成されます。

```

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

```

解析時の指定によって、この他にもファイルが作成されます。

それらのファイルの概要は、「マニュアル C 編 プログラム入力 付録 B 表 B-1」を参照ください。

終了番号 (exit number)

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

終了番号を確認する

(tail コマンドで *job_name.out* の末尾を表示)

```

[gen ~]$ tail job_name.out
*****
MSC.Marc Exit number 3004

      check marc exit passed
[gen ~]$

```

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

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

■ プリポストプロセッサ Mentat からの解析実行 ■

Mentat の起動

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

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

「Windows からの X アプリケーションの利用」<http://www.cc.tohoku.ac.jp/service/USE/X-Win/> をご覧ください。

解析実行

Mentat 上でモデルを作成し、解析のための設定を行った後、

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

という操作をすることで、バッチリクエストとして解析を実行します。
(バッチリクエストは **am** (Marc 専用、CPU 時間無制限、最大メモリ 8GB) というキューに投入されます)

* バッチリクエストの状態確認、キャンセルについては、「ホームページ」 → 「並列コンピュータ」の「バッチ処理」を参照ください。

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

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

サンプルプログラム

Marc

マニュアル E 編 に掲載されている例題が、並列コンピュータ [gen.isc.tohoku.ac.jp の /usr/ap/msc/marc2005/demo/](http://gen.isc.tohoku.ac.jp/usr/ap/msc/marc2005/demo/) にあります。コピーしてご利用ください。

Mentat

マニュアル「ユーザガイド」に掲載されている例題のプロシジャファイルが、並列コンピュータ [gen.isc.tohoku.ac.jp の /usr/ap/msc/mentat2005/examples/marc_ug/](http://gen.isc.tohoku.ac.jp/usr/ap/msc/mentat2005/examples/marc_ug/) にあります。コピーしてご利用ください。

マニュアル

PDF 形式マニュアルを提供しています。

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

和文(MSC.Marc2003 版) [/usr/ap/msc/mentat2005/doc/japanese/](http://usr/ap/msc/mentat2005/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/msc/mentat2005/doc/](http://usr/ap/msc/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 Subr /outines and Special Routines |
| vole/vole.pdf | : Volume E: Demonstration Problems |

有限要素法プログラム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。

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

バージョン

MSC.Patran2005r2 Windows 版

お申し込み

利用条件

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

会費制でのサービスとなります。

利用ご希望の方は、システム運用係 までお問い合わせください。

数式処理プログラム **Mathematica**

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

gen.isc.tohoku.ac.jp ・ version 5.2

利用方法

Mathematica の起動

[X Windows 版]

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。

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

「Windows からの X アプリケーションの利用」 <http://ccws.cc.tohoku.ac.jp/service/USE/X-Win/> をご覧ください。

[テキスト版]

```
[gen ~]$ math
```

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

マニュアル・参考資料

オンラインマニュアル(英文) が公開されています。以下のページを参照ください。

「ホームページ」 → 「アプリケーション」 → 「Mathematica」

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

参考資料

情報シナジーセンター本館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 : 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**

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

サービスホスト・バージョン

gen2.isc.tohoku.ac.jp ・ Version 7.1.0 (R14SP3)

Toolbox

センターで導入している Toolbox です。

- MATLAB
- Simulink
- Communications Blockset
- Communications ToolboxControl
- System Toolbox
- Extended Symbolic Math
- Fixed-Point Toolbox
- Fuzzy Logic Toolbox
- Image Processing Toolbox
- MATLAB Compiler
- Model Predictive Control Toolbox
- Neural Network Toolbox
- Optimization Toolbox
- Partial Differential Equation Toolbox
- Real-Time Workshop
- Robust Control Toolbox
- Signal Processing Blockset
- Signal Processing Toolbox
- Simulink Accelerator
- Simulink Control Design
- Simulink Fixed Point
- Simulink Response Optimization
- Simulink Verification and Validation
- Spline Toolbox
- Statistics Toolbox
- Symbolic Math Toolbox
- System Identification Toolbox
- Wavelet Toolbox

利用方法

MATLAB の起動

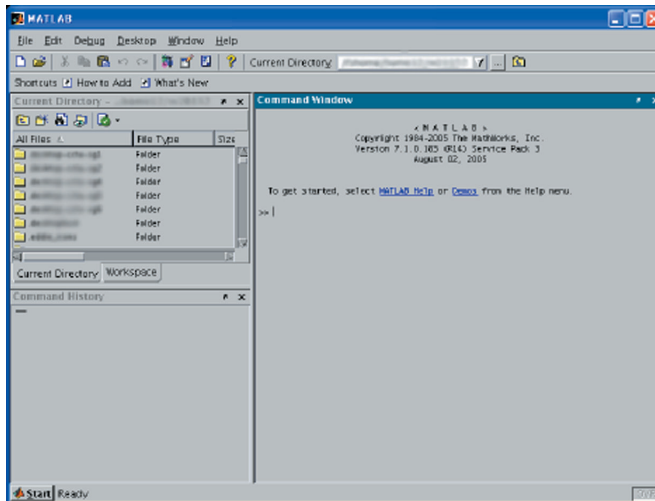
MATLAB の起動には、並列コンピュータに接続する際に X forwarding の設定を行う必要があります。

さらに gen2.isc.tohoku.ac.jp にログインし、matlab コマンドを実行します。

```
yourhost$ ssh -X -Y 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp
:
[gen ~]$ ssh -X -Y 利用者番号@gen2.isc.tohoku.ac.jp
:
[gen2 ~]$ matlab
```

「Windows からの X アプリケーションの利用」<http://www.cc.tohoku.ac.jp/service/USE/X-Win/> をご覧ください。

Java 版 MATLAB が起動されます。



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。

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。以下のページを参照ください。

「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>

参考資料

情報シナジーセンター本館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
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
(広報誌 SENAC Vol.29 No.4 (1996-10))

データ解析システム **SAS**

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

サービスホスト・バージョン

gen2.isc.tohoku.ac.jp ・ SAS 9.1.3 Service Pack 3

導入プロダクト

当センターで導入している SAS プロダクトです。

Base SAS
SAS/ETS
SAS/GRAPH
SAS/STAT

利用方法

対話型ディスプレイマネージャでの実行

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

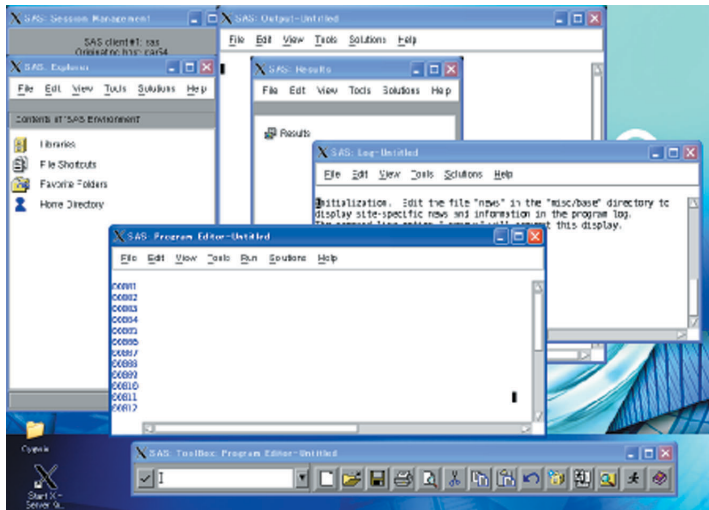
SAS の起動

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

さらに gen2.isc.tohoku.ac.jp にログインし、sas コマンドを実行します。

```
yourhost$ ssh -X -Y 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp
:
[gen ~]$ ssh -X -Y 利用者番号@gen2.isc.tohoku.ac.jp
:
[gen2 ~]$ sas
```

「Windows からの X アプリケーションの利用」<http://www.cc.tohoku.ac.jp/service/USE/X-Win/> をご覧ください。



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

コマンドでの実行

X Window System 環境でなくとも、SAS の利用が可能です。

実行コマンド

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

`gen.isc.tohoku.ac.jp` にログイン後、さらに `gen2.isc.tohoku.ac.jp` にログインし、`ssh` コマンドに入力ファイル名を指定し実行することにより、会話型処理として実行が行われます。

例) `test01.sas` を実行する

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

`gen.isc.tohoku.ac.jp` にログイン後

```
[gen ~]$ ssh gen2.isc.tohoku.ac.jp -l 利用者番号
:
[gen2 ~]$ ssh test01
```

実行結果

実行後、カレントディレクトリに2つのファイルが作成されます。

| | |
|------------|--------|
| test01.lst | (実行結果) |
| test01.log | (ログ) |

SAS の基本的な使い方は、参考資料などを参照ください。

参考資料

情報シナジーセンター本館1階 利用相談室に、以下の資料を備えてあります。

SAS によるデータ解析入門[第2版]：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))