

[Web 版大規模科学計算システムニュース]より

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

反応経路自動探索プログラム GRRM11 のサービス開始について (No. 137)

GRRM は、2002 年に東北大学（教授：大野公一、修士 1 年：前田理、当時）で制作が開始され、その後開発が進められて、2011 年には GRRM11（開発者：前田理、長田有人、諸熊奎治、大野公一）として広く利用されるようになりました。GRRM には、以下のような特長があります。

- ・ g09 や g03 プログラムなどを用いた非経験的量子化学計算に基づいて、各化学式で表される構造や反応経路を自動的に探索します。
- ・ 平衡構造から出発して、その周囲に存在する反応経路を、ポテンシャルの非調和下方歪みを検出して、系統的に調べ上げる超球面探索アルゴリズムが搭載されており、従来不可能であった 5 原子以上の反応経路自動探索を行うことができます。

2012 年 8 月 7 日（火）よりサービスを開始しますのでご利用下さい。

サービス開始日 : 2012 年 8 月 7 日（火）
ホスト名 : gen（並列コンピュータ）
バージョン : 11.01

利用方法についての詳細は開発元 Web ページ、および当センターの GRRM11 紹介 Web ページをご参照下さい。

【開発者 Web ページ】

<http://grrm.chem.tohoku.ac.jp/SRPS/GRRM.HTM>

【当センターGRRM11 紹介 Web ページ】

<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/grrm11.html>

(共同利用支援係)

コンパイラアップデートのお知らせ (No. 139)

■2012年8月26日にスーパーコンピュータ用のコンパイラ、ライブラリを下記のバージョンへアップデートします。

FORTRAN90/SX Rev. 451

C++/SX Rev. 093

MPI ライブラリ library 8.0.16

■コンパイル方法は下記となります。

なお、コンパイルコマンドに変更はありません。

Fortran コマンド名 : sxf90

C/C++コマンド名 : sxcc

オプションの説明は、man コマンドでも参照できます。

MPI を利用する場合

Fortran コマンド名 : sxmpif90

C/C++コマンド名 : sxmpicc

オプションの説明は、man コマンドでも参照できます。

■FORTRAN90/SX

詳細についてはリリースメモをご覧ください。

Rev451 リリースメモ

■C++/SX について

C++/SX の新機能等については下記資料をご覧ください。

Rev093 リリースメモ

Rev. 093: 新機能のご紹介

互換性留意事項説明

C/C++言語プリプロセッサ利用の手引

■MPI/SX について

MPI-2.2 使用をサポートしました。

主な新規機能および機能強化は下記のとおりです。

・ 集団通信新規手続き

MPI_REDUCE_SCATTER_BLOCK (全プロセス同一サイズの REDUCE_SCATTER)

MPI_REDUCE_LOCAL (自プロセス内リダクション演算実行)

MPI_OP_COMMUTATIVE (リダクション操作の可換性問合せ)

- ・ 集団通信機能強化

下記手続きで MPI_IN_PLACE 引数をサポート。

MPI_ALLTOALL

MPI_ALLTOALLV

MPI_ALLTOALLW

MPI_EXSCAN

- ・ プロセストポロジー新規手続き

Distributed Graph トポロジー生成および問合せ手続きの追加。

MPI_DIST_GRAPH_CREATE

MPI_DIST_GRAPH_CREATE_ADJACENT

MPI_DIST_GRAPH_NEIGHBORS

MPI_DIST_GRAPH_NEIGHBORS_COUNT

- ・ 新規データ型

C99 規格の新規データ型および MPI_Aint、MPI_Offset 型に対応した MPI データ型の追加。

- ・ MPI トレース機能強化

詳細につきましては下記のリリースメモをご覧ください。

MPI リリースメモ

(共同利用支援係、共同研究支援係)

非線形構造解析汎用プログラム

MSC. Marc2012/Mentat2012のサービス開始について (No. 139)

Marc/Mentat のバージョンを MSC. Marc2012/Mentat2012 として運用を始めましたのでお知らせ致します。Mentat2012 では新 GUI を採用しています。従来の Classic GUI は mentat.classic というコマンドでご利用できます。また旧バージョンは暫定的に run_marc.2010、mentat.2010 というコマンドでご利用できます。

2012年8月27日(月)よりサービスを開始しておりますのでご利用ください。

サービス開始日 : 2012年8月27日(月)

ホスト名 : gen.isc.tohoku.ac.jp (並列コンピュータ)

▼ MSC.Marc2012/Mentat2012

バージョン : 2012

起動コマンド : run_marc, mentat, mentat.classic

新機能の概要、機能の詳細、実行方法についてはマニュアル[1-3]、センターHP、および開発元HPをご覧ください。

マニュアル : PDF形式マニュアルをgen上で提供しています。

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

gen: /usr/ap/MSC2012/mentat2012/doc/

- [1] marc_2012_doc_release.pdf : Release Guide(2012 英語)
- [2] marc_2012_doc_user.pdf : User's Guide(2012 英語)
- [3] marc_2012_doc_release_jpn.pdf : リリースガイド(2012 日本語)

英文マニュアル

- [4] vola.pdf : Volume A: Theory and User Information
- [5] volb.pdf : Volume B: Element Library
- [6] volc.pdf : Volume C: Program Input
- [7] vold.pdf : Volume D: User Subroutines and Special Routines
- [8] vole.pdf : Volume E: Demonstration Problems

和文マニュアル(2003版)

gen: /usr/ap/MSC2012/mentat2012/doc/japanese/

- [1] vola.pdf : A編 理論およびユーザー情報
- [2] volb.pdf : B編 要素ライブラリ
- [3] volc.pdf : C編 プログラム入力
- [4] vold.pdf : D編 ユーザーサブルーチンおよび特別ルーチン
- [5] vole.pdf : E編 例題集
- [6] marc_ug.pdf : ユーザーガイド
- [7] mt_help_ref.pdf : Mentat 2003 ヘルプリファレンス
- [8] xsec_adden.pdf : ドキュメント補足資料

センターHP

http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/application/marc_mentat.html

開発元HP

<http://www.mscsoftware.co.jp/products/marc/index.php>

(共同利用支援係)

ユーザの研究紹介掲載のお知らせ (No. 139)

東北大学オープンキャンパスで展示した研究紹介ポスターをホームページでも閲覧できるように掲載致しました。計算機を利用したユーザの研究紹介を大規模科学計算システムトップページの「成果報告」項目、または下記のリンクよりご覧ください。

「成果報告」→「スーパーコンピュータを用いた成果」

<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/report/super.html>

(共同研究支援係)

負担金の支払い費目について (No. 140)

今回の利用負担金請求（平成 24 年 7 月 1 日から 9 月 30 日までの利用分）は 10 月初旬に行います。負担金の支払費目の指定に関して、これまで shiharai コマンドで指定頂いておりましたが、今年度より廃止いたしました。学内の方については事前に費目の指定は必要ありません（請求金額確定後、センター会計係より各部局の会計担当を通して照会いたします）。

学外の方については、特に支払費目名の入った利用負担金請求書を希望する場合や請求書の適要欄等について不明な点がある場合は会計係（022-795-3405）へご連絡くださるようお願いいたします。また、その他負担金に関することで不明な点がある場合は、共同利用支援係（022-795-6251）へご連絡くださるようお願いいたします。

(共同利用支援係, 会計係)

センター講習会資料の公開について (No. 141)

サイバーサイエンスセンターでは利用者の方のスーパーコンピュータやアプリケーションの利用をサポートするため、センターの講習会で使用したテキスト・演習資料・サンプルデータを公開しております。

講習会資料のダウンロードページへは、大規模科学計算システムのトップページの「講習会案内」のリンク、または下記のリンクよりご覧下さい。

<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/guide/archives.html>

(共同利用支援係, 共同研究支援係)

大規模科学計算システム FAQ ページ開設のお知らせ (No. 141)

サイバーサイエンスセンターでは利用者の方のご質問を元にFAQページを作成いたしました。システムの利用に関してご不明な点がありましたらこちらのページをご一読下さい。

FAQページへは、大規模科学計算システムのトップページ右上のリンク、または下記のリンクよりご覧下さい。

<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/faq/>

(スーパーコンピューティング研究部, 共同利用支援係, 共同研究支援係)

分散コンピュータ博物館 (サイバーサイエンスセンター展示室) ホームページ更新のお知らせ (No. 141)

分散コンピュータ博物館に所蔵されている展示品や資料を、ウェブページから閲覧できるWeb Galley のページを新設いたしました。

分散コンピュータ博物館のホームページへは、サイバーサイエンスセンタートップページのリンク、または下記のリンクよりご覧下さい。

<http://www.isc.tohoku.ac.jp/museum/>

(共同利用支援係)