

[大規模科学計算システム]

ライブラリ・アプリケーションの紹介

(2013年4月)

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、プログラミングのための科学技術計算ライブラリや、分子軌道計算、構造解析、数式処理、グラフ処理、統計データ解析等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います。

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とアプリケーションソフトウェアの紹介をします。

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-9 super.isc.tohoku.ac.jp	Fortran90/SX C++/SX	ASL MathKeisan for SX	
並列コンピュータ Express5800 gen.isc.tohoku.ac.jp	Fortran95 C++	ASL Math Kernel Library	Gaussian09 GRRM11 MSC.Marc MSC.Marc Mentat SAS Mathematica MATLAB

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います。

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.ss.isc.tohoku.ac.jp/>

本稿中の内容は 2013 年 4 月現在のもので、ライブラリ、アプリケーションの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、ホームページを随時ご確認下さい。

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際は、**GUI アプリケーションを利用する方法**を合わせてご参照下さい。

	ホスト名 (FQDN)	OS	日本語環境
スーパーコンピュータ	super.isc.tohoku.ac.jp	UNIX	EUC-JP
並列コンピュータ	gen.isc.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UNIX, Linux, OS Xの場合は通常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下さい。super, genともにプロトコル version 1,2 両方ご利用できます。

【UNIX, Linux からのログイン】

「ターミナル」、「端末」、「terminal」などと呼ばれるアプリケーションを起動します。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。

並列コンピュータへのログイン例

```
(yourhost)$ ssh 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp

The authenticity of host 'gen.isc.tohoku.ac.jp (xx.xx.xx.xx)' can't be
established.
RSA key fingerprint is fd:c2:9a:11:xx:xx:xx:xx:xx:xx:xx:xx:cd:53:9f.
Are you sure you want to continue connecting (yes/no)? yes ※1
Warning: Permanently added 'gen.isc.tohoku.ac.jp,xx.xx.xx.xx' (RSA) to
the list of known hosts.
利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp's password: パスワード ※2
Last login: Mon Apr 1 09:26:11 2012 from gen.isc.tohoku.ac.jp

[利用者番号@gen ~]$
```

※1 初めての接続時は問い合わせがありますので、**yes**を入力します。

※2 入力した文字は表示されません。

【OS X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】

1. 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。2013年4月現在の最新版は4.77です。ダウンロード後インストール作業を行って下さい。

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

2. サーバへの接続

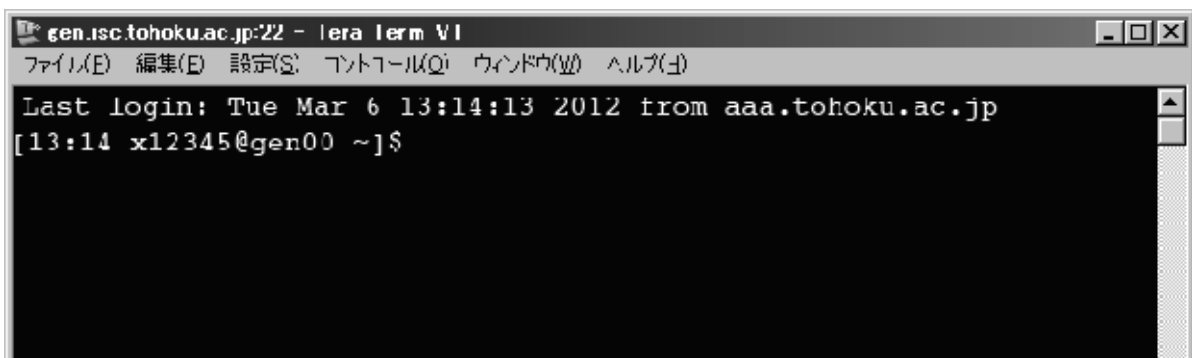
インストールされた Tera Term を起動すると「新しい接続」ダイアログが表示されます。以下の様に入力・設定し、「OK」ボタンを押して下さい。初めて接続する場合、「セキュリティ警告」のウィンドウが表示されます。表示されているホスト名が正しいことを確認し、「続行」ボタンを押して下さい。

ホスト(T): gen.isc.tohoku.ac.jp (並列コンピュータの場合)
サービス: SSH
SSH バージョン: SSH2

「SSH 認証」ウィンドウが表示されたら以下の様に入力・設定し、「OK」ボタンを押して下さい。

ユーザ名(N): 利用者番号
パスフレーズ: パスワード
「プレインテキストを使う(L)」にチェック

以下のプロンプトが表示されるとログインは完了です。



```
gen.isc.tohoku.ac.jp:22 - |era term V1
ファイル(F) 編集(E) 設定(S) ツール(T) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)
Last login: Tue Mar 6 13:14:13 2012 from aaa.tohoku.ac.jp
[13:14 x12345@gen00 ~]$
```

※ 日本語環境を変更する場合は、ツールバーメニューの「設定(S)」→「端末(T)」の「漢字-受信(K)」と「漢字-送信(J)」で設定変更して下さい。

■ 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。

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下さい。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下さい。

■ 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下さい。

【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アプリケーションは Linux では「gftp」、Windows では「WinSCP」、OS X では「Cyberduck」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下さい。アプリケーションの設定において、転送プロトコルは SSH2 を選択して下さい。通信経路上は暗号化されます。

【入出力端末を利用したファイル転送】

センター1Fの利用相談室に設置された入出力端末を利用して、USB接続(USB3.0対応)のHDDにホームディレクトリのデータをコピーすることができます。センター内ネットワークからのアクセスで、高速なファイルのコピーが可能です。利用方法はセンターまでお問い合わせ下さい。

■ 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(MSC. Mentat, Mathematica, MATLAB, SAS)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。(Mathematicaの実行にはフォントパスの設定が必要になる場合があります。「**Mathematicaの利用方法**」をご参照下さい。)

【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下さい。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。

例: Matlab を起動する場合

```
(yourhost) $ ssh -X 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp ※1
利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp's password: パスワード
[利用者番号@gen ~]$ matlab
```

※ 1 大文字の“X”です。

【Windows からの利用】

1. 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 をご参照下さい。どちらのソフトも無料評価版があります。

※ フォントパスの追加 (Mathematica を利用する場合)

Mathematica を利用する場合には、X サーバに tcp/localhost:7100 のフォントを追加する設定をします。X サーバにフォントサーバを追加する設定は、各 X サーバソフトのマニュアルをご参照下さい。

2. 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下さい。インストール方法の詳細はマニュアルをご参照下さい。2013 年 4 月現在の最新版は 4.2.10 です。

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

VirtualBox 4.2.10 の起動画面

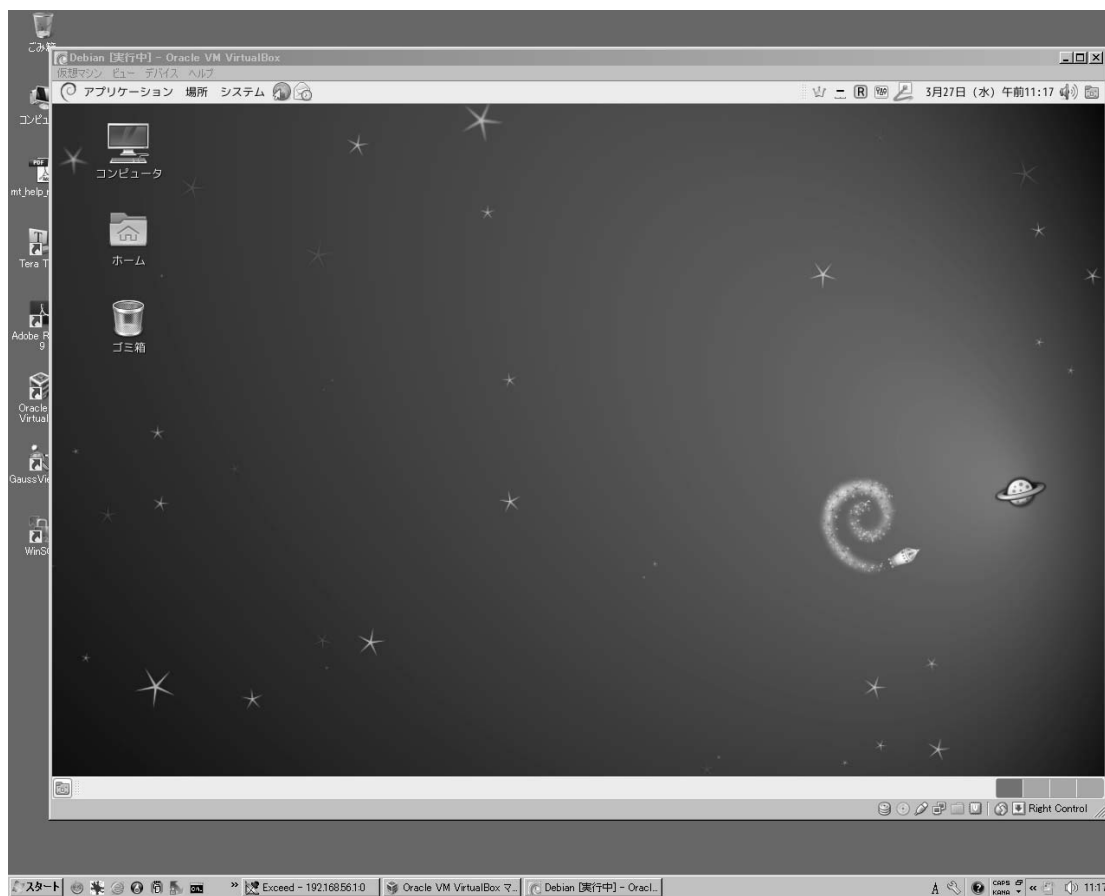


Linux のディストリビューション、バージョンによっては GUI アプリケーションが正しく表示されない場合があります。センターで動作確認を行っているのは、Debian 6.0.7 (2013.02.23 リリース)です。以下のページからダウンロードし、Virtual Box の仮想環境にインストールして下さい。X Window System の利用だけならインストール CD (680MB) のインストールで可能です。インストール方法の詳細は各マニュアルをご参照下さい。

Debian ダウンロード: <http://www.debian.org/CD/>

Linux をインストール後起動し、Linux の端末から【UNIX, Linux からの利用】と同様に利用できます。

Windows 上で動作する仮想Linux (Debian 6.0.7)



【OS X からの利用】

OS X では標準で X Window System 環境の「X11.app」がインストールされていますので、OS X の端末から【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下さい。

ライブラリ

スーパーコンピュータ SX-9

Fortran90/SX,C++/SX 用

科学技術計算ライブラリ..... **ASL**

数学ライブラリ..... **MathKeisan for SX**

並列コンピュータ Express5800

Fortran95,C++ 用

科学技術計算ライブラリ..... **ASL**

数学ライブラリ..... **Math Kernel Library**

科学技術計算ライブラリ **ASL**

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的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無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。次のような数値計算分野に対応しています。

<基本機能>

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,連立1次方程式(直接法),連立1次方程式(反復法),対称連立一次方程式(反復法),非対称連立一次方程式(反復法),フーリエ変換とその応用/時系列分析,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,近似・補間,スプライン関数,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,確率分布,基礎統計量,推定と検定,分散分析・実験計画,ノンパラメトリック検定,多変量解析,近似・回帰分析

<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,乱数,ソート・順位付け

プログラミング言語・コンパイラ

スーパーコンピュータ

Fortran90/SX ・ sxf90,sxmpif90

C++/SX ・ sxcc,sxmpicc

並列コンピュータ

Fortran95 ・ f95,mpif95

C++ ・ cc,mpicc

利用方法

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、ホームページの「スーパーコンピュータシステム SX-9 利用ガイド」、
「並列コンピュータの利用ガイド」をご参照下さい。

スーパーコンピュータ用のコンパイル

```
[gen00 ~]$ sxf90 source.f      ベクトル版 ASL がリンクされます
[gen00 ~]$ sxf90 -Pauto source.f  並列版 ASL がリンクされます

[gen00 ~]$ sxcc source.c
```


並列コンピュータ用のコンパイル

```
[gen00 ~]$ f95 source.f
```

*C、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。

```
[gen00 ~]$ cc -c source.c
```

```
[gen00 ~]$ f95 -cxxlib -nofor main source.o -laslcint -lasl
```

マニュアル

PDF形式の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。並列コンピュータにログイン後、acroread コマンドでご覧下さい。

[FORTRAN]

</usr/ap/ASL-man-super/PDF/ASL/pdf/>

[C/C++]

</usr/ap/ASL-man-super/PDF/CINT/pdf/>

- 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), 対称連立一次方程式(反復法), 非対称連立一次方程式(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
近似・補間, 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)
- 7main.pdf : 統計機能 ASLSTAT 利用の手引
(確率分布, 基礎統計量, 推定と検定, 分散分析・実験計画, ノンパラメトリック検定,
多変量解析, 近似・回帰分析)
- 8main.pdf : 並列処理機能編
(基本行列演算, 連立一次方程式(直接法), 固有値・固有ベクトル, 連立一次方程式(反復法),
フーリエ変換とその応用/時系列分析, 乱数, ソート・順位付け)

数学ライブラリ集 **MathKeisan for SX , Math Kernel Library**

MathKeisan for SX 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。Math Kernel Library は、Intel プラットフォーム用に最適化された数値演算ライブラリです。

MathKeisan for SX および Math Kernel Library に含まれるライブラリは以下のとおりです。
 ※MathKeisan for SX および Math Kernel Library 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 にも含まれています。ASL は、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 の利用をお勧めします。

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、分割ライブラリの並列版 (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

■ 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

Math Kernel Library (並列コンピュータ)

Fortran95 ・ f95,mpif95

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ご参照下さい。

スーパーコンピュータで LAPACK をリンクする例

```
[gen00 ~]$ sxf90 source.f -llapack -lblas
```

マニュアル

[MathKeisan]

HTML 形式のマニュアルを提供しています。

並列コンピュータ(gen.isc.tohoku.ac.jp)にログイン後、以下のコマンドでご覧下さい。

スーパーコンピュータ SX-9 用

```
[gen00 ~]$ w3m /usr/ap/MathKeisan-man/SX-9/J/index.html
```

[Math Kernel Library]

以下の URL を参考にして下さい。

インテル MKL : <http://www.xlsoft.com/jp/products/intel/perflib/mkl/>

アプリケーション

非経験的分子軌道計算プログラム	Gaussian09
Gaussian プリポストシステム	GaussView
反応経路自動探索プログラム	GRRM11
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ポストソフトウェア	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 Gaussian09

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 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 ・ Gaussian09 RevC.01

利用方法

Gaussian のプリポストシステムとして GaussView を提供しています。
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 gen に転送する際にはアスキーモードを指定し、転送して下さい。

gen.isc.tohoku.ac.jp にログイン後、subg09 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。

e2_01.com を解析するコマンド例

(subg09 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)

```
[gen00 ~]$ subg09 a16 e2_01
```

subg09 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	1	無制限	16
a8	8	無制限	128
a16	16	無制限	256

データの大きさなどにより投入するキューを選択して下さい。

8 および 16 並列実行の指定

本センターでサービスしている Gaussian では、8 または 16 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下さい。

8 または 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=並列数** を追加します。手入りの場合は、テキストエディタで先頭行に追加、GaussView 等では入力ファイル作成画面の Link 0 section の項に追加して下さい。

実行時には、subg09 コマンドでキュー **a8** または **a16** を指定して下さい。

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下さい。

16 並列、メモリ 16GB の設定をした入力ファイル e2_01.com を実行する例

```
[gen00 ~]$ cat e2_01.com ← インput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.

[gen00 ~]$ subg09 a16 e2_01
```

実行結果

計算が終了すると、入力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 09.」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。

```
[gen00 ~]$ 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 09 at Mon Nov 1 12:00:00 2006.
```

結果ファイルの詳細な見方は、マニュアル等をご参照下さい。

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 第二版,ガウシアン社,1998

Gaussian 09 User's Reference

Gaussian 09 IOps Reference

Gaussian 09 Online Manual, <http://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 プリポストシステム **GaussView**

GaussView 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 XP, Windows Vista, Windows 7, Linux 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

5.0.9

お申し込み

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

利用条件

- ・東北大学内の方

CD-ROM は、お手数ですが Gaussian 利用申請書をホームページよりダウンロードしてご記入の上、当センターまで直接取りにいらして下さい。

利用方法

インストール方法、データ作成方法などについては同梱マニュアルまたは以下のHPをご参照下さい。

ヒューリンクス Gauss View 5:

<http://www.hulinks.co.jp/software/gaussview/>

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「.com」としてエクスポートします。
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 にログインします。
4. subg09 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 GaussView 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 formchk により書式付(.fchk)に変換後転送して下さい。

反応経路自動探索プログラム **GRRM11**

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。

サービスホスト・バージョン

gen.isc.tohoku.ac.jp ・ 11.01

利用方法

利用方法はセンターのホームページ(<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/application/grrm11.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(<http://grrm.chem.tohoku.ac.jp/IQCE/>)、化学反応経路自動探索の Web ページ(<http://grrm.chem.tohoku.ac.jp/SRPS/GRRM.HTM>)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

GRRM11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。

Satoshi Maeda, Yuto Osada, Keiji Morokuma, and Koichi Ohno, GRRM11, Version 11.01, 2011.

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.

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。

GRRM11 User Manual(英語版)

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。

非線形／大変形／接触／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／電気伝導と熱伝導の連成／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 /Mentat 2012

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 も提供しています。

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 16GB)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)

```
[gen00 ~]$ run_marc -jid job_name -v n
```

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 yes(デフォルト) (-v) 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」をご参照下さい。

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.t16	(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」をご参照下さい。

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、また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)

```
[gen00 ~]$ tail job_name.out
*****
MSC.Marc Exit number 3004
check marc exit passed
[gen00 ~]$
```

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」をご参照下さい。

■ 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。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。

```
yourhost$ ssh -X 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp
:
[gen00 ~]$ mentat (新 GUI 版)

[gen00 ~]$ mentat.classic (Classic 版)
```

解析実行 (新 GUI 版)

Mentat 上でモデルを作成し、解析のための設定を行った後、

タブメニュー **解析ジョブ** → **新規** → 解析タイプを選択 → **実行** → **実行(1)**

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 16GB) というキューに投入されます)

ツールバーメニュー **ファイル(F)** → 書き出し → **Marc 入力...**

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。

解析実行 (Classic 版)

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。

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/MSC2010/marc2010.2/demo/ にあります。コピーしてご利用下さい。

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/MSC2010/mentat2010.2/examples/marc_ug/ にあります。コピーしてご利用下さい。

マニュアル

PDF 形式の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。並列コンピュータにログイン後、acoread コマンドでご覧下さい。

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

marc_2012_doc_release.pdf : Release Guide (2012 英語版)
marc_2012_doc_user.pdf : User's Guide (2012 英語版)
marc_2012_doc_release_jpn.pdf : リリースガイド (2012 日本語版)

英文マニュアル /usr/ap/MSC2010/mentat2010.2/doc/

vola.pdf : Volume A: Theory and User Information
volb.pdf : Volume B: Element Library
volc.pdf : Volume C: Program Input
vold.pdf : Volume D: User Subroutines and Special Routines
vole.pdf : Volume E: Demonstration Problems

和文(MSC.Marc2003 版) /usr/ap/MSC2010/mentat2010.2/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

有限要素法プログラム汎用プリポストソフトウェア **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ソフトウェアです。本センターでは Marc の利用をサポートするためにサービスしています。

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.Patran2012.2.1 Windows 版, Linux 版

お申し込み

利用条件(以下の条件をすべて満たしている方)

- ・大規模科学計算システムの利用者番号を持っている方
- ・本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

利用ご希望の方は、共同利用支援係までお問い合わせ下さい。

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ー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 8.0.4

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 の設定と、フォントパスの設定を行う必要があります。

```
yourhost$ ssh -X -L 7100:gen.isc.tohoku.ac.jp:7100 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp
:
[gen00 ~]$ mathematica
```

[テキスト版]

```
yourhost$ ssh 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp
:
[gen00 ~]$ math
```

Mathematica の基本的な使い方は、[マニュアル・参考資料](#) や、Web などをご参照下さい。

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。
ステューブンウルフラム Mathematica ブック (日本語版) : トップラン
Mathematica 方法と応用 : J.W. グレイ, サイエンティスト社
Mathematica プログラミング技法 : R. メーダー, トップラン
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

gen.isc.tohoku.ac.jp ・ Version 7.14.0 (R2012a)

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

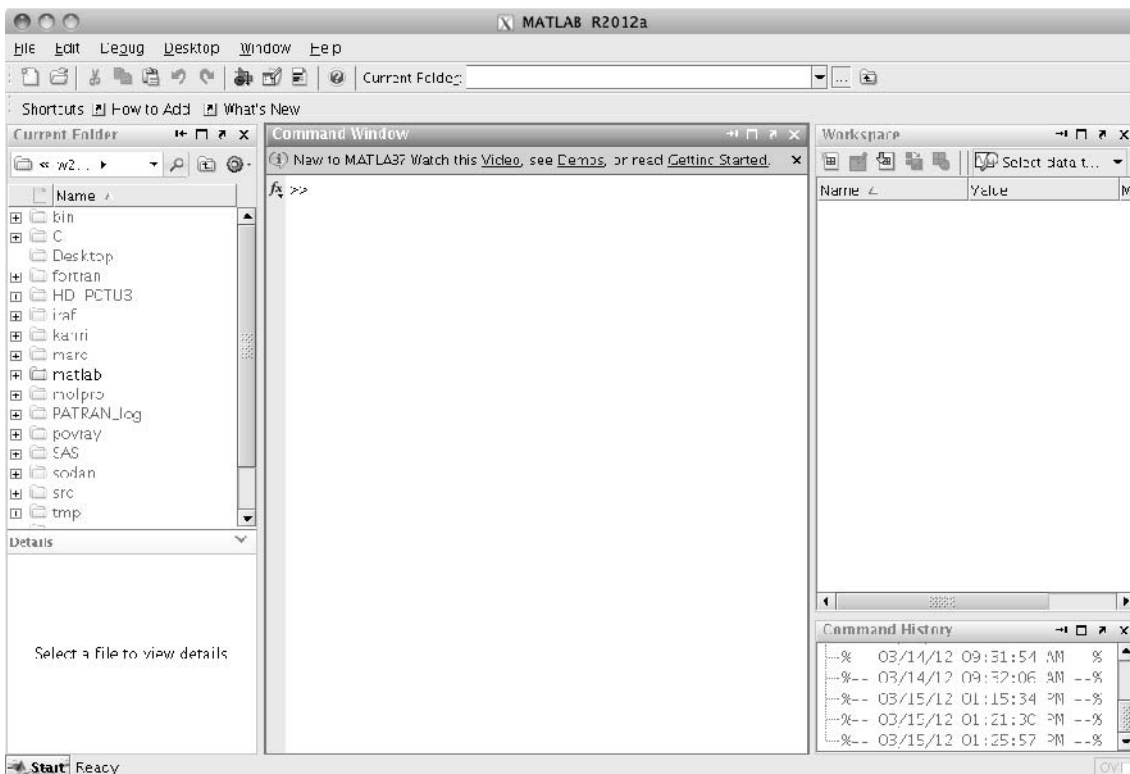
利用方法

MATLAB の起動

[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。

```
yourhost$ ssh -X 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp
:
[gen00 ~]$ 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。

```
(yourhost)$ ssh 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp
:
[gen00 ~]$ matlab -nojvm -nosplash -nodesktop -nodisplay

      < M A T L A B (R) >
      Copyright 1984-2012 The MathWorks, Inc.
      Version 7.14.0.739 (R2012a) 64-bit (glnxa64)
      February 9, 2012

      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、32 並列までの処理が可能です。最大メモリも 512GB まで利用可能です。大規模な計算にご利用下さい。

関数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。ジョブは **m32** クラスに投入します。

```
[gen00 ~] cat job-m ←ジョブファイルの中身を表示

#PBS -q m32
cd $PBS_O_WORKDIR
matlab -nojvm -nosplash -nodesktop -r test
```

以下のコマンドでジョブを投入します。

```
[gen00 ~]$ qsub job-m
Request 1234.job submitted to queue: m32.
```

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下さい。

■ サンプルプログラム

MATLAB には豊富なデモがありますので、ご利用下さい。
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下さい。

http://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.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

gen.isc.tohoku.ac.jp ・ SAS 9.2

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/ETS
SAS/GRAPH
SAS/STAT

利用方法

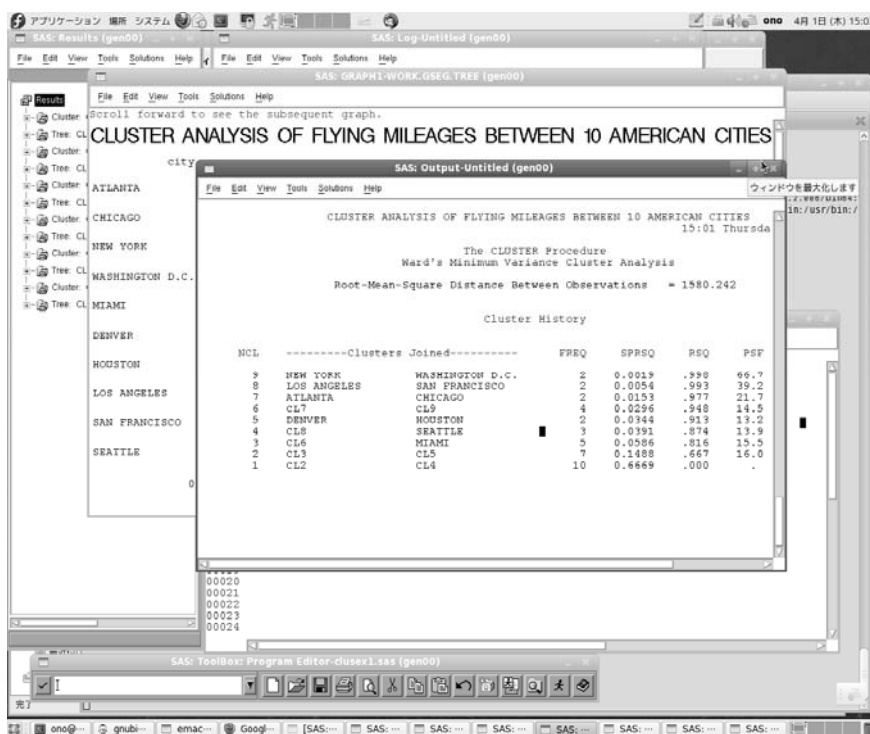
【対話型ディスプレイマネージャでの実行】

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、メッセージを受け取ったりすることのできる処理モードです。

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。

```
yourhost$ ssh -X 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp
:
[gen00 ~]$ sas
```



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 環境がなくても 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、`sas` 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

(`sas` 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)

```
[gen00 ~]$ sas 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。

<code>test01.lst</code>	(実行結果)
<code>test01.log</code>	(ログ)

SAS の基本的な使い方は、参考資料などをご参照下さい。

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。

SAS によるデータ解析入門[第2版] : 市川伸一, 大学出版会
SAS による共分散構造分析 : 野田秀樹, 東京大学出版会
SAS による実験データの解析 : 高橋行雄, 東京大学出版会
SAS による統計分析 : 高柳良太, オーム社
データ解析のための SAS 入門 : 宮岡悦良, 朝倉書店
実用 SAS 生物統計ハンドブック : サイエントリスト社

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