

**[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/>

**Gaussian09 のバージョンアップについて (No. 154)**

非経験的分子軌道計算プログラム「Gaussian09」を C.01 から D.01 にバージョンアップしましたのでお知らせいたします。また、C.01 も引き続きご利用いただけます。

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。

サービス開始日 : 2013 年 8 月 27 日 (火)  
バージョン名 : Gaussian09 D.01  
サービスホスト : gen.isc.tohoku.ac.jp  
実行コマンド : subg09  
subg09.C01 (C01 用コマンド)

C.01 から D.01 のバグフィクスとマイナーチェンジについての詳細は以下のページをご覧ください。

Gaussian 09 Revision D.01 Release Notes  
[http://www.gaussian.com/g\\_tech/rel\\_notes.pdf](http://www.gaussian.com/g_tech/rel_notes.pdf)

HULINKS | Gaussian 09 | Rev D.01 の新しい機能  
[http://www.hulinks.co.jp/software/gaussian/section01\\_v09\\_d01.html](http://www.hulinks.co.jp/software/gaussian/section01_v09_d01.html)

センターの Gaussian09 利用方法については以下のページをご覧ください。  
<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/application/gaussian.html>

(共同利用支援係)

## Marc/Mentat のバージョンアップについて (No. 154)

有限要素法による非線形汎用構造解析プログラム「Marc/Mentat」のバージョンを MSC.Marc2013 / Mentat2013 として運用を始めましたのでお知らせいたします。

Mentat2013 では新 GUI を採用しています。従来の Classic GUI は `mentat` というコマンドで、新 GUI は `mentat.new` 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.2012`、`mentat.2012` というコマンドでご利用できます。

サービス開始日 : 2013 年 8 月 27 日 (火)  
 バージョン名 : MSC.Marc2013 / Mentat2013  
 ホスト名 : gen.isc.tohoku.ac.jp  
 実行コマンド : `run_marc`,  
                   `mentat` (旧 GUI) , `mentat.new` (新 GUI)

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、センターHP、および開発元 HP をご覧下さい。

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` コマンドでご覧下さい。各マニュアルは以下のディレクトリにあります。

gen: /usr/ap/MS2013/mentat2013/doc/

- [1] `marc_2013_doc_release.pdf` : Release Guide(2013 英語)
- [2] `marc_2013_doc_product_information.pdf` : Product Information(2013 英語)

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/MS2013/mentat2013/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](http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/application/marc_mentat.html)

開発元 HP

<http://www.mscsoftware.com/product/marc>

(共同利用支援係)

## Mathematica のバージョンアップについて (No. 154)

数式処理プログラム「Mathematica」のバージョンアップを行いましたのでお知らせいたします。  
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。

サービス開始日 : 2013 年 8 月 27 日 (火)  
バージョン名 : Mathematica 9.0.1  
サービスホスト : gen.isc.tohoku.ac.jp  
起動コマンド : mathematica (GUI 版)  
                  : math (テキスト版)

新機能の概要、機能の詳細については Wolfram 社のページをご覧ください。  
<http://www.wolfram.com/mathematica/new-in-9/>

センターの Mathematica 利用方法については以下のページをご覧ください。  
<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/application/mathematica.html>

(共同利用支援係)

## MATLAB のバージョンアップについて (No. 154)

科学技術計算言語「MATLAB」のバージョンアップを行いましたのでお知らせいたします。

MATLAB は、アルゴリズム開発、データの可視化、数値計算を行うための高レベルなテクニカルコンピューティング言語と対話型環境です。MATLAB を利用することにより、C、C++、Fortran といった伝統的なプログラミング言語よりも短時間で科学技術計算の問題を解決することが可能です。

サービス開始日	:	2013 年 8 月 27 日 (火)
バージョン名	:	MATLAB R2013a (Ver. 8.1.0)
サービスホスト	:	gen.isc.tohoku.ac.jp
起動コマンド	:	matlab (GUI 版) matlab -nojvm -nosplash -nodesktop -nodisplay (テキスト版)

新機能の概要、機能の詳細については MathWorks 社のページをご覧ください。

[http://www.mathworks.co.jp/products/new\\_products/latest\\_features.html](http://www.mathworks.co.jp/products/new_products/latest_features.html)

センターの MATLAB の利用方法については以下のページをご覧ください。

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

(共同利用支援係)

## 利用負担金額の表示コマンドについて (No. 156)

本センター大規模科学計算システムでは、利用者の利用額と支払責任者ごとの利用額・負担額を表示するためのコマンドとして kakin, skakin があります。これらのコマンドは、並列コンピュータ (gen. isc. tohoku. ac. jp) にログインして使用します。

コマンド名	機 能
kakin	利用者ごとの利用額を各システム、月ごとに表示
skakin	支払責任者ごとに集計した利用額と負担額を表示 (負担額は割引制度に基づいた金額)

いずれも、前日までご利用いただいた金額を表示します。コマンド使用例は大規模科学計算システムウェブページをご覧ください。

負担金の確認

<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/utilize/academic.html#負担金の確認>

(共同利用支援係)

## 利用負担額の変更について (No. 156)

平成 25 年度の利用負担金について、上半期(4 月～9 月)の利用をより促進するために、スーパーコンピュータのバッチ処理の負担額を、1 秒につき 0.4 円から 0.3 円に値下げいたしました。

10 月からは、通常の 0.4 円に戻りますのでご留意くださるようお願い申し上げます。

### 基本利用負担金

区 分	項 目	負 担 額
演 算 負担経費	スーパー コンピュータ	バッチ処理 演算時間 1 秒につき 0.3 円 ( 4/1～9/30)
		バッチ処理 演算時間 1 秒につき 0.4 円 (10/1～3/31)
		会話型処理 演算時間 1 秒につき 2 円
	並 列 コンピュータ	バッチ処理 演算時間 1 秒につき 0.1 円
会話型処理 演算時間 1 秒につき 0.2 円		
ファイル負担経費		1MB・日につき 0.1 円
出力負担経費		大判プリンタによるカラープリンタ用紙 1 枚につき 600 円

備考

- 1 負担額算定の基礎となる測定数量に端数が出た場合は、切り上げる。
- 2 並列コンピュータで並列処理した場合の演算時間は経過時間とする。

(共同利用支援係)

## XDMCP (X Display Manager Control Protocol) サービス停止のお知らせ (No. 157)

XDMCP はユーザ端末の X サーバとリモート側の X ディスプレイマネージャとを接続するためのプロトコルです。このプロトコルには脆弱性があるため、セキュリティ対策のため XDMCP サービスを以下の期日より停止します。

影響を受ける可能性があるのは、X サーバソフトを用いて研究室などの端末から当センターの GUI アプリケーション (Mentat, Matlab 等) を利用している場合です。Linux OS 等からポートフォワーディングによる接続 (ssh -X 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp) をしている場合は影響ありません。

ご不明な点がございましたら、共同利用支援係 (uketuke@isc.tohoku.ac.jp, 022-795-6251) までお問い合わせください。

サービス停止日 : 2013 年 10 月 15 日

(共同利用支援係)

## 平成 26 年度「京」を含む HPCI システム共用計算資源の利用研究課題の募集について (No. 158)

HPCI 共用計算資源は、京速コンピュータ「京」および全国基盤センター等の計算機資源で構成される計算環境で、東北大学サイバーサイエンスセンターも計算資源提供機関として参加しています。選定された課題については、希望する計算資源を負担なし (原則無償) で利用できます。多数のご応募をお待ちしております。

申請受付締切 : 平成 25 年 11 月 11 日 (月) 17 時

- 課題募集の詳細については HPCI 運用事務局のウェブサイトをご覧ください。  
[https://www.hpci-office.jp/pages/h26\\_boshu](https://www.hpci-office.jp/pages/h26_boshu)
- 提供資源情報の詳細については、下記をご覧ください。  
[https://www.hpci-office.jp/pages/h26\\_boshu\\_hpci\\_resource](https://www.hpci-office.jp/pages/h26_boshu_hpci_resource)

(スーパーコンピューティング研究部, 総務係, 共同利用支援係, 共同研究支援係)

## 利用相談室のご案内 (No. 158)

サイバーサイエンスセンターでは、本館、弘前大学、秋田大学、山形大学に利用相談室を設けています。テクニカルアシスタントの担当分野、日程等詳しくは以下の Web ページをご覧ください。

<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/tayori/tayori/150.html#1>

利用相談は、本館 1 階受付窓口（共同利用支援係）で、平日 8:30～17:15 の間受け付けております。相談室にテクニカルアシスタントが不在の時間帯は、センター職員が対応いたします。メールは 24 時間受け付けますが、回答は上記の時間帯になりますのであらかじめご了承ください。利用申請、利用負担金、プログラムの並列化、高速化、ベクトル化やアプリケーションに関する事など、センター利用に関する質問を受け付けます。また、相談室には各種マニュアルや書籍も揃えています。閲覧のみも可能ですのでお気軽にご利用ください。

<サイバーサイエンスセンター本館 利用相談室>

E-mail : [sodan05@isc.tohoku.ac.jp](mailto:sodan05@isc.tohoku.ac.jp)

Tel. : 022-795-6153 (利用相談室・1 階受付窓口共通)

(共同利用支援係)