

[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.cc.tohoku.ac.jp/tayori/>

SX-ACE 1,024 ノード実行の提供開始について (No. 203)

スーパーコンピュータ SX-ACE での最大実行ノード数が、これまでの 512 ノードから 1,024 ノードに変更になります。

1,024 ノードを利用した場合、理論演算性能 283TFLOPS、(最大ベクトル性能 262TFLOPS)、最大メモリ 60TB での実行が可能です。キューの指定方法等に変更はありません。-b オプションで利用ノード数を指定してください。なお、2 ノード以上を利用した実行の場合、MPI ライブラリの利用が必要です。

257 ノード以上を利用するリクエストの実行時間(経過時間)の制限値は、規定値・最大値ともに 1 ヶ月間(744 時間)です。計算機資源の効率的な利用のため、-l elapstim_req オプションにより必要十分な実行時間の指定をお願いいたします。

最大実行ノード数変更日 : 2015 年 9 月 18 日 (金)

(バッチリクエストファイル例)

```
#!/bin/csh
#PBS -q sx -b 1024          # SX-ACE を 1024 ノード利用する
#PBS -l elapstim_req 01:00:00 # 実行時間を 1 時間に制限する

mpirun -np 4096 -nn 1024 ./a.out # 4,096 プロセスで実行する (Flat MPI)
```

SX-ACE 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.cc.tohoku.ac.jp/super/guide.html>

利用負担金については以下のページをご覧ください。

<http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/utilize/academic.html>

<http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/utilize/business.html>

(共同利用支援係)

非線形構造解析汎用プログラム MSC. Marc/Mentat の バージョンアップについて (No. 203)

非線形構造解析汎用プログラム「MSC. Marc/Mentat」のバージョンアップを行いますのでお知らせいたします。

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す。

Mentat2014 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。

バージョン名	:	2014. 2
バージョンアップ日	:	2015 年 9 月 18 日 (金)
サービスホスト	:	front. cc. tohoku. ac. jp (並列コンピュータ)
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開発元 HP、およびセンターHP をご覧ください。

開発元 HP

<http://www.mscsoftware.co.jp/products/marc/index.php>
https://simcompanion.mscsoftware.com/infocenter/index?page=home&locale=ja_JP

センターHP

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

(共同利用支援係)

数式処理プログラム Mathematica の バージョンアップについて (No. 203)

数式処理プログラム「Mathematica」のバージョンアップを行います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。

バージョン名	:	Mathematica 10.2
バージョンアップ日	:	2015 年 9 月 18 日 (金)
サービスホスト	:	front. cc. tohoku. ac. jp (並列コンピュータ)
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、実行方法については開発元 HP、およびセンターHP をご覧下さい。

開発元 HP

<http://www.wolfram.com/mathematica/new-in-10/>

センターHP

<http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/mathematica.html>

(共同利用支援係)

科学技術計算言語 MATLAB の バージョンアップについて (No. 203)

科学技術計算言語「MATLAB」のバージョンアップを行います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。

バージョン名	:	MATLAB R2015a (Ver. 8.5)
バージョンアップ日	:	2015 年 9 月 18 日 (金)
サービスホスト	:	front.cc.tohoku.ac.jp (並列コンピュータ)
起動コマンド	:	matlab (GUI 版)
	:	matlab -nosplash -nodesktop -nodisplay (テキスト版)

新機能の概要、機能の詳細、実行方法については開発元 HP、およびセンターHP をご覧下さい。

開発元 HP

http://www.mathworks.co.jp/products/new_products/latest_features.html

センターHP

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

(共同利用支援係)

反応経路自動探索プログラム GRRM14 の サービス開始について (No. 203)

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 GRRM11、2014 年に GRRM14 が発表され、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。

- Gaussian プログラム (g09, g03) などの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、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、反応経路自動探索を行うことができます。
- 励起状態のポテンシャル交差を自動的に調べることができます。
- 解離した状態から、人工力誘起反応法で、反応経路を効率的に調べることができます。

バージョン名 : 14. 01
バージョンアップ日 : 2015 年 9 月 18 日 (金)
サービスホスト : front. cc. tohoku. ac. jp (並列コンピュータ)

利用方法についての詳細は NPO 法人 量子化学探索研究所の HP、および当センターの GRRM14 紹介 Web ページをご参照下さい。

NPO 法人 量子化学探索研究所
<http://iqce.jp/>

センターGRRM14 紹介 Web ページ
<http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/grrm14.html>

(共同利用支援係)