

## [大規模科学計算システム]

## アプリケーションサービスの紹介

情報部情報基盤課 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、分子軌道計算、数式処理、構造解析、データ処理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。本稿では、並列コンピュータ LX 406Re-2 でサービスを行っているアプリケーションソフトウェアの紹介をします。

表 1. アプリケーションソフトウェアとサービスホスト

アプリケーションソフトウェア		サービスホスト
分子軌道計算ソフトウェア	Gaussian	front.cc.tohoku.ac.jp
反応経路自動探索プログラム	GRRM14	
統合型数値計算ソフトウェア	Mathematica	
汎用構造解析プログラム	Marc/Mentat	
対話型解析ソフトウェア	MATLAB	

アプリケーションソフトウェアの紹介は、以下の URL の本センター大規模科学計算システム Web ページにも掲載しています。

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

本稿中の内容は 2017 年 3 月現在のものですので、アプリケーションソフトウェアのバージョンアップや利用方法の最新情報については、Web ページを随時ご確認ください。

## 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場合は、**GUI アプリケーションを利用する方法**を合わせてご参照ください。

表 2. 計算機システムと日本語環境

システム	ホスト名	OS	日本語環境
並列コンピュータ LX 406Re-2	front.cc.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, macOS の場合は 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ください。

並列コンピュータの OS は Linux です。公開鍵暗号方式による認証のみ利用できます<sup>1</sup>。アカウント希望の場合は、共同利用支援係に利用申請し利用者番号と初期パスワードを発行してもらいます。

**並列コンピュータへの初回ログイン時には公開鍵と秘密鍵のペアを作成する必要があります。**鍵ペアの作成方法については本誌 10 ページの「SSH アクセス認証鍵生成サーバの利用方法」をご参照ください。

<sup>1</sup> パスワード認証方式は 2015 年 4 月 13 日で廃止しました。

なお、他人名義の利用者番号でのシステム利用は禁止します。パスワード、秘密鍵、パスフレーズの使い回しは、不正アクセスのリスク(不正ログイン、クライアントのなりすまし、暗号化された通信の暴露、他サーバへの攻撃等)が非常に高く、大変危険です。利用者登録を行うことによる年間維持費等は発生しませんので、利用される方はそれぞれで利用申請をお願いいたします。

### 【Unix, Linux からのログイン】

「ターミナル」、「端末」、「terminal」などの SSH クライアントソフトを起動します。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。

#### リスト 1. 並列コンピュータへのログイン例

(認証鍵生成サーバで作成した秘密鍵のファイル名を id\_rsa\_cc として ~/.ssh 以下に保存した場合)

```
localhost$ ssh -i ~/.ssh/id_rsa_cc 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp
Enter passphrase for key '/home/localname/.ssh/id_rsa': パスフレーズを入力
(初回接続時のメッセージ) : yes を入力
front1 $ (コマンド待ち状態)
```

### 【macOS 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】

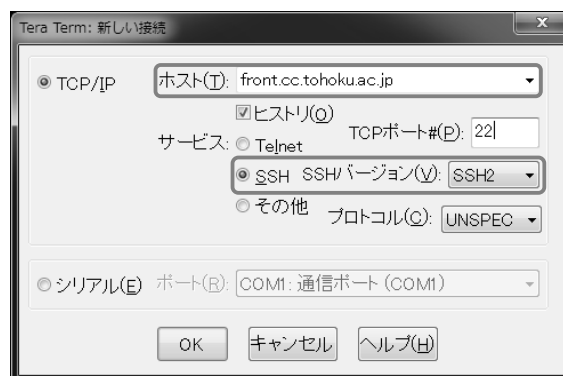
#### ● SSH クライアントソフトのダウンロードとインストール

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。2017年3月現在の最新版は 4.94 です。ダウンロード後インストール作業を行ってください。

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

#### ● 並列コンピュータへの接続

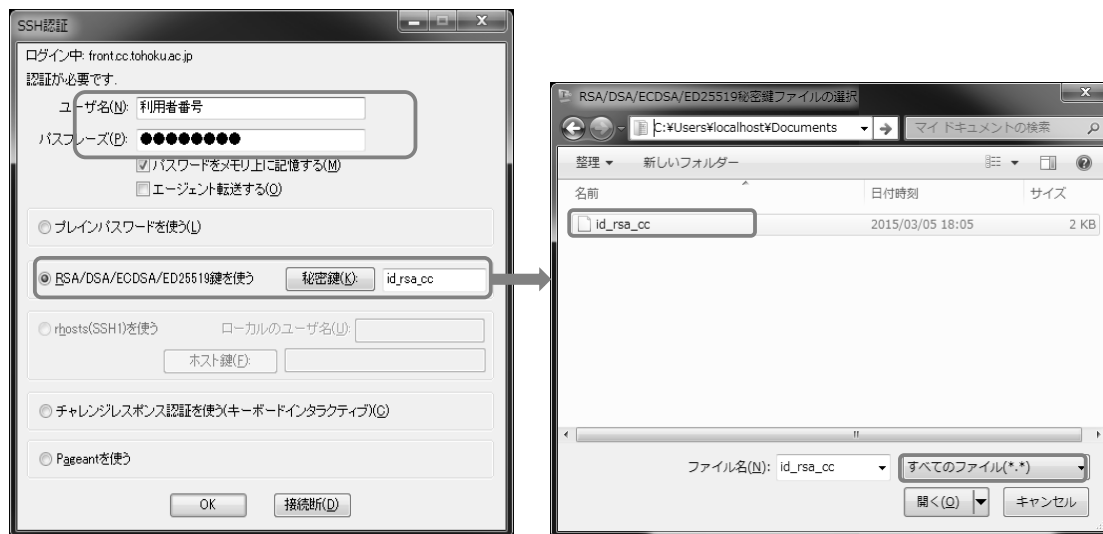
「ホスト名」を指定、「サービス」は SSH2 を選択し、[OK]を押下します。



「ユーザ名」に利用者番号、「パスフレーズ」に鍵ペアを作成した際に入力したものを入力、「RSA/DSA 鍵を使う」を選択し、「秘密鍵」に保存した秘密鍵のファイルを指定します。

(秘密鍵ファイルの選択画面では、拡張子「すべてのファイル(\*.\*)」を選択します)

[OK]を押下すると接続されます。



## 【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。

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ください。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ください。

## 【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ください。

### ● 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」、macOS 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ください。アプリケーションの設定において、転送プロトコルは `SSH2` を選択してください。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ください。

## ■ 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)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。

### 【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ください。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。

#### リスト 2. Matlab を起動する場合

(秘密鍵のファイル名を id\_rsa\_cc として ~/.ssh 以下に作成した場合)

```
localhost$ ssh -i ~/.ssh/id_rsa -X※1 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp
Enter passphrase for key '/home/localname/.ssh/id_rsa': パスワードを入力
(初回接続時のメッセージ) : yes を入力
front1 $ matlab
```

※1 大文字の“X”です。

### 【Windows からの利用】

#### ● 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 をご参照ください。どちらのソフトも無料評価版があります。

#### ● 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ください。インストール方法の詳細はマニュアルをご参照ください。2017 年 3 月現在の最新版は 5.1.18 です。

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

## VirtualBox 5.1.18 の起動画面

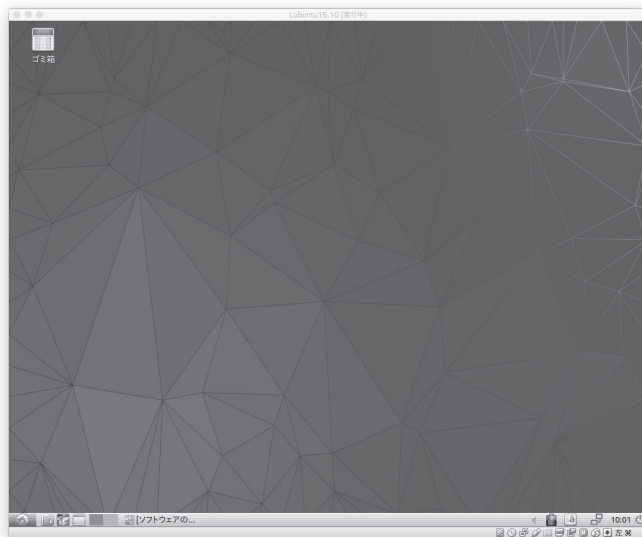


Linux のディストリビューション、バージョンによっては GUI アプリケーションが正しく表示されない場合があります。センターで動作確認を行っているのは、**lubuntu 16.04** です。以下のページからダウンロードし、Virtual Box の仮想環境にインストールしてください。インストール方法の詳細は各マニュアルをご参照ください。

lubuntu ダウンロード: <http://lubuntu.net>

SSH クライアントソフト「LXTerminal」を起動し、【Unix, Linux からの利用】と同様に利用できます。

## VirtualBox 上で動作する仮想Linux(lubuntu 16.04)



## 【macOS からの利用】

macOS 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、macOS 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ください。

## アプリケーションソフトウェア

非経験的分子軌道計算プログラム	<b>Gaussian16</b>
Gaussian プリポストシステム	<b>GaussView</b>
反応経路自動探索プログラム	<b>GRRM14</b>
汎用構造解析プログラム	<b>MSC.Marc / MSC.Marc Mentat</b> ※
MSC ソフトウェア社のアプリケーション	※
数式処理プログラム	<b>Mathematica</b> ※
科学技術計算言語	<b>MATLAB</b> ※

※ 東北大学の構成員のみご利用できます。

## 非経験的分子軌道計算プログラム Gaussian16

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 24 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)を高速な SSD 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

front.cc.tohoku.ac.jp ・ Gaussian16 A.03

### ■ 利用方法

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 front に転送する際にはアスキーモードを指定し、転送してください。

front.cc.tohoku.ac.jp にログイン後、subg16 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。リクエストはアプリケーション用の利用形態(経過時間無制限、最大並列数 24、最大メモリ 128GB)に投入します。

## リスト 3. e2-01.com を解析するコマンド例

(subg16 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)

```
[front1 ~]$ subg16 -q lx -b a e2-01
```

## 【12 および 24 並列実行の指定】

本センターでサービスしている Gaussian では、12 および 24 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ください。

12 または 24 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。手入力の場合は、テキストエディタで先頭行に追加、GaussView 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。

## 【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。

## リスト 4. 24 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

```
[front1 ~]$ cat e2-01.com ← インプットファイルの内容を表示
```

```
%NProc=24    ← 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.
```

```
[front1 ~]$ subg16 -q lx -b a e2-01
```

## 【実行結果の確認】

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 16.」というメッセージが出力されません。ファイルの末尾を表示する `tail` コマンドで確認できます。

#### リスト 5. 実行結果の確認

```
[front1 ~]$ 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 16 at Mon Apr 2 12:00:00 2017.
```

- ・ 結果ファイルの詳細な見方は、マニュアル等をご参照ください。

#### 【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, Linux, macOS 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

6.0.16

#### ■ お申し込み

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



#### 利用条件

- ・東北大学内の方

DVD-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お越しください。

#### ■ 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をご参照ください。

ヒューリンクス Gauss View 6: <http://www.hulinks.co.jp/software/gaussview/>

並列コンピュータ [front.cc.tohoku.ac.jp](http://front.cc.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 [front.cc.tohoku.ac.jp](http://front.cc.tohoku.ac.jp) に転送します。
3. [front.cc.tohoku.ac.jp](http://front.cc.tohoku.ac.jp) にログインします。
4. subg16 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)に変換後転送してください。

## 反応経路自動探索プログラム GRRM14

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。

#### ■ サービスホスト・バージョン

[front.cc.tohoku.ac.jp](http://front.cc.tohoku.ac.jp) ・ 14.01

#### ■ 利用方法

利用方法はセンターのホームページ(<http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/grrm14.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://iqce.jp/>)、化学反応経路自動探索の Web ページ (<http://grrm.chem.tohoku.ac.jp/GRRM/>) 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](mailto: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

GRRM14 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。

**S. Maeda, Y. Harabuchi, Y. Osada, T. Taketsugu, K. Morokuma, and K. Ohno, GRRM14, Version 14.01, 2014.**

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, (H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>, and Alanine Dipeptide., *Chem. Phys. Lett.*, 2005, 404, 95-99.

### ● SCW:

S. Maeda, K. Ohno, Conversion Pathways between a Fullerene and a Ring among C<sub>20</sub> 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 (H<sub>2</sub>O)<sub>8</sub>: 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 H<sub>2</sub>CO., 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.

**● Add Interaction and/or MC-AFIR:**

S. Maeda, K. Morokuma, A Systematic Method for Locating Transition Structures of A + B → X Type Reactions., J. Chem. Phys., 2010, 132, 241102 (4 pages).; S. Maeda, K. Morokuma, Finding Reaction Pathways of Type A + B → X: Toward Systematic Prediction of Reaction Mechanisms., J. Chem. Theory Comput., 2011, 7, 2335-2345.

**■ 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。

- GRRM14 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**

front.cc.tohoku.ac.jp ・ MSC.Marc /Mentat 2014.2

**■ 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)

front.cc.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。ジョブクラスの指定は必要ありません。自動的にアプリケーション専用の利用形態(経過時間無制限、最大メモリ 128GB)に投入されます。

リスト 6. 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)

```
[front1 ~]$ run_marc -jid job-name -v n
```

表 3. 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」をご参照ください。

● 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.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、またエラー終了の場合はその原因がわかります。

リスト 7. 終了番号を確認する

(tail コマンドで job-name.out の末尾を表示)

```
[front1 ~]$ tail job-name.out

*****

MSC.Marc Exit number 3004

check marc exit passed
[front1 ~]$
```

表 4. 終了番号

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。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。

#### リスト 8. mentat の起動方法

```
localhost$ ssh -i ~/.ssh/id_rsa_cc -X 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp
:
[front1 ~]$ mentat                (新 GUI 版)

[front1 ~]$ 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。  
 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 front.cc.tohoku.ac.jp の /usr/ap/MSC2014.2/marc2014.2/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ファイルが、並列コンピュータ front.cc.tohoku.ac.jp の /usr/ap/MSC2014.2/mentat2014.2/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 ([front.cc.tohoku.ac.jp](http://front.cc.tohoku.ac.jp)) の以下のディレクトリにあります。

`/usr/ap/MSC2014.2/mentat2014.2/doc/`

release\_guide.pdf : Release Guide (2014.2 英語版)  
 marcwhatsnew.pdf : What's new (2014.2 英語版)  
 mt\_help\_ref.pdf : MSC.Marc Mentat Help Reference (2014.2 英語版)

英文マニュアル `/usr/ap/MSC2014.2/mentat2014.2/doc/(vola~vole)`

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

和文マニュアル (MSC.Marc2003 版) `/usr/ap/MSC2014.2/mentat2014.2/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

## MSC Software 社のアプリケーション

現在センターの並列コンピュータでは Marc/Mentat を提供していますが、以下のアプリケーションを別途研究室のワークステーションや PC 等にインストールして利用可能です。

対象者は東北大学に所属の方(教職員・学生等)で、センターの利用者番号が必要です。利用ご希望の方は、共同利用支援係までお問い合わせください。

動作環境等については MSC Software 社の HP をご参照ください。

### ■ 利用可能アプリケーション

- Marc/Mentat (センターの並列コンピュータでも実行できます)
- MSC Nastran
- Patran
- Dytran
- FlightLoads
- Sinda

### ■ アプリケーション情報と動作環境 (MSC Software 社)

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

<http://www.mscsoftware.com/support/platform-support/>

## 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フェースを提供しています。

### ■ サービスホスト・バージョン

front.cc.tohoku.ac.jp ・ version 11.0.1

### ■ 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 の設定を行う必要があります。

#### リスト 9. GUI 版の起動方法

```
localhost$ ssh -i ~/.ssh/id_rsa_cc -X 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp
:
[front1 ~]$ mathematica
```

#### リスト 10. テキスト版の起動方法

```
localhost$ ssh -i ~/.ssh/id_rsa_cc -X 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp
:
[front1 ~]$ math
```

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

### ■ 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 : J.W. グレイ, サイエントリスト社
- Mathematica プログラミング技法 : R. メーダー, トッパン
- 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

front.cc.tohoku.ac.jp ・ R2017a

### ■ Toolbox

センターで導入している Toolbox です。

MATLAB

Simulink

Curve Fitting Toolbox

Communications System Toolbox

MATLAB Compiler

Control System Toolbox

DSP System Toolbox

Fuzzy Logic Toolbox

System Identification Toolbox

Image Processing Toolbox

MATLAB Corder

Model Predictive Control Toolbox

Neural Network Toolbox

Optimization Toolbox

Partial Differential Eauation Toolbox

Fixed-Point Toolbox

Robust Control Toolbox

Simulink Corder

Simulink Control Design

Signal Processing Toolbox

Symbolic Math Toolbox

Simulink Design Optimization

Statistics Toolbox

Simulink Verification and Validation

Wavelet Toolbox

### ■ 利用方法

#### 【MATLAB の起動】

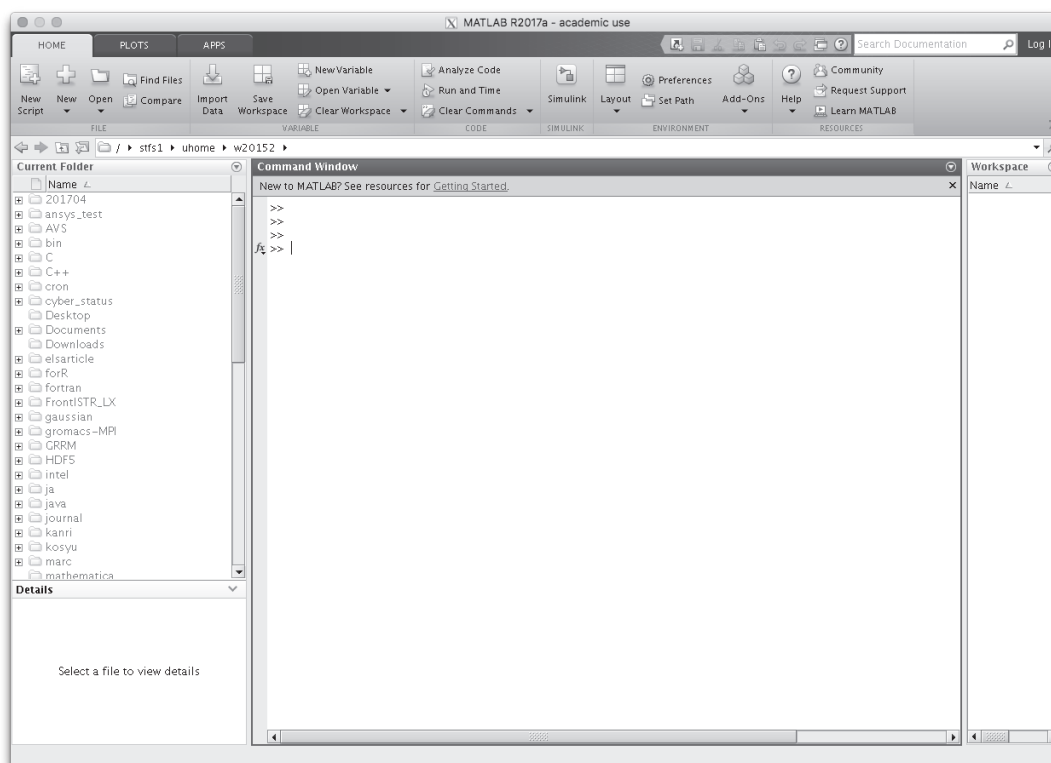
##### ● GUI 版

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。



## リスト 11. GUI 版 MATLAB の起動

```
localhost$ ssh -i ~/.ssh/id_rsa_cc -X 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp
:
[front1 ~]$ 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。

## リスト 12. テキスト版 MATLAB の起動

```
localhost$ ssh -i ~/.ssh/id_rsa_cc 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp
:
[front1 ~]$ matlab -nojvm -nosplash -nodesktop -nodisplay
```

```
< M A T L A B ( R ) >
Copyright 1984-2017 The MathWorks, Inc.
R2017a (9.2.0.538062) 64-bit (glnxa64)
February 23, 2017
```

To get started, type one of these: helpwin, helpdesk, or demo.

For product information, visit [www.mathworks.com](http://www.mathworks.com).

```
>>
```

### ● バッチ処理

MATLAB の組み込み並列処理機能を使用し、24 並列までの処理が可能です。最大メモリも 128GB まで利用可能です。大規模な計算にご利用ください。ただし、バッチ処理ではグラフ描画など画面出力のあるプログラムや、対話的な処理は行えません。

function として作成した 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。リクエストはアプリケーション専用の利用形態に投入します。

#### リスト 13. バッチリクエストファイル

```
[front1 ~] cat job-m ←バッチリクエストファイルの中身を表示
```

```
#PBS -q lx -b a ←アプリケーション専用の利用形態を指定
```

```
cd $PBS_O_WORKDIR
```

```
matlab -nojvm -nosplash -nodesktop -nodisplay -r test
```

以下のコマンドでリクエストを投入します。

#### リスト 14. リクエストの投入方法

```
[front1 ~]$ qsub job-m
```

```
Request 12345.job submitted to queue: ap.
```

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。以下のページをご参照ください。

[http://www.mathworks.co.jp/help/ja\\_JP/techdoc/index.html](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.46 No.3 (2013-7))