

目次

- 1. ライブラリー・プログラムの新登録について 1
- 2. スーパーコンピュータで並列処理をしているユーザの方へ 2
- 3. Gaussian98 の並列版の利用開始について 2
- 4. 画像処理システム講習会の開催について（再掲） 3
- 5. AVS/VisLink 講習会の開催について（再掲） 3
- 6. 分子軌道法計算プログラム Gaussian98 利用講習会の開催について（再掲） . . . 4

「速報」のメールアドレスの確認を

速報のメール化実施に伴い、速報が届かなかつたり、一部で配信されず返送されてくるものがありますので、メールの転送先ファイル（.forward）のメールアドレスを確認してください

1. ライブラリー・プログラムの新登録について

次のプログラムが新たに登録されました。

使用手引書はセンター図書室またはホームページのセンター開発ライブラリー一覧（http://www.cc.nagoya-u.ac.jp/sys_riyou/lib/lib.htm）で閲覧できます。

	プログラム名	プログラムの概要	作成者またはその代表者	備考
1	D A F M	3次元非構造格子自動生成プログラム	金子宗嗣 メンショフ イゴール 中村佳朗	コンプリートプログラム

2. スーパーコンピュータで並列処理をしているユーザの方へ

8月14日(月)から16日(水)の計算サービス休止期間に、スーパーコンピュータのシステム変更が行なわれました。このことにより、8月14日以前にコンパイルしたモジュールで、以下の条件を満たすプログラムを実行させた場合、従来より CPU 時間、経過時間が増える場合があります。これを避けるために、以下の条件に該当するプログラムをお持ちの場合には、再翻訳してから実行してください。

【発生条件】

1. 複数 PE を使用した並列実行である。かつ、
2. VPP Fortran または HPF のプログラムである。かつ、
3. 以下の文を実行している。

VPP Fortran プログラムの場合

- SPREAD REGION 文
- 特殊な SPREAD DO 文*
- 特殊な SPREAD MOVE 文*

HPF プログラムの場合

- TASK REGION 指示文
- 特殊な ON 指示文*
- 特殊な ASYNCHRONOUS 指示文*

*) 多次元分割を使用している場合や 1 回転 / 1 リージョンでない場合など。

3. Gaussian98 の並列版の利用開始について

スーパーコンピュータ VPP5000/56 で Gaussian98 の並列版が利用可能になりました。この並列版で並列の効果を得られるのは、大規模システムに対する SCF と DFT の energies, gradients, frequencies の計算の場合です。因みにサンプルプログラム test397.com では、4 PE を使用して、経過時間で 3.4 倍速くなっています。並列版を利用する場合は、入力ファイルの先頭で %NPROCL= で使用する PE の台数を指定し、g98p のコマンドで実行します。なお、使用するキューは、並列ジョブのキューである z または ze をご利用ください。

【利用例】 Gaussian98 の並列版を 4 並列で実行する。

入力ファイル: g98_p.in

```
%NPROCL=4
%mem=16mw
#p rb3lyp/3-21g force test scf=novaracc
:
```

スクリプトファイル

```
# @$-q z -lP 4 -eo -o gaus_p4.list
g98p g98p_in g98p_out
```

4．画像処理システム講習会の開催について（再掲）

画像処理ワークステーション（gamma1, gamma2, alpha15）を使った画像処理システムの講習会を下記の内容で開催します。受講の申し込みは，センター4階事務受付（052-789-4355）で行います。

日 時 平成12年9月6日（水） 13時30分～16時30分
場 所 大型計算機センター3階端末室
対 象 本センター利用有資格者及び学部学生
定 員 15名
申込締切日 平成12年9月1日（金）

なお，申込みは，下記のアドレスに申し込んでいただいても結構です。

koshu@cc.nagoya-u.ac.jp

（電子メールで申し込む場合には所属・職名等の身分も明記してください）

また，センターの利用者は，センターのホームページの講習会案内からも申し込みができます。

<講習内容>

- ・ 静止画像入出力装置の使い方
- ・ 動画入出力装置とビデオ機器の使い方
- ・ アニメーションの作成（ノンリニア編集）

5．AVS/VisLink 講習会の開催について（再掲）

AVS/VisLink講習会を下記の内容で開催します。受講の申し込みは，センター4階事務受付（052-789-4355）で行います。

日 時 平成12年9月7日（木） 10時～16時30分
場 所 大型計算機センター4階演習室
内 容

AVS/Express Viz（汎用可視化システム）

- ・ AVSの概要説明およびデモ
- ・ 基本操作説明
- ・ 可視化実習
 - 1) 構造格子型データの基本ネットワーク
 - 2) 非構造格子型データの基本ネットワーク
 - 3) 可視化結果の出力機能紹介 など

VisLink（リアルタイム可視化システム）

- ・ リアルタイム可視化について
- ・ VisLinkのシステム構成と機能概要

・実習

- 1) VisLib プログラミング
- 2) Reducer の使用方法
- 3) VisLink モジュールの使用法

日 程

10:00	12:00	13:00	14:30	16:30
AVS 概要説明およびデモ 基本操作説明	昼休み	実習 質疑応答	VisLink 概要説明 実習	

対 象 本センター利用有資格者及び学部学生

定 員 15名

申込締切日 平成12年9月4日(月)ただし、定員になり次第締切ります。

なお、申込みは、下記のアドレスに申し込んでいただいても結構です。

koshu@cc.nagoya-u.ac.jp

(電子メールで申し込む場合には所属・職名等の身分も明記してください)

また、センターの利用者は、センターのホームページの講習会案内からも申し込みができます。

<大型パッケージ口メモ>

AVS / Express Viz (AVS6)

汎用可視化システムの一つで、数値シミュレーションの実行結果や実験で測定した数値データを可視化するシステムです。流体解析、構造解析、医療画像など幅広い分野で利用されています。コーディング不要のビジュアルプログラミングにより高度な可視化表示アプリケーションの作成が可能です。可視化の結果は、gif、jpeg、VRML2、MPEG1に出力可能です。

VisLink

VisLinkは、計算サーバ上で実行中の大規模科学技術計算の途中経過をリアルタイムに可視化するためのソフトウェアです。従来、科学技術計算の可視化は、計算終了後の結果を納めたファイルを AVS 等の可視化用ソフトウェアに転送してから可視化する「ポスト・プロセッシング」が主に行われていましたが、VisLinkを用いると計算の途中経過をリアルタイムに可視化できるようになるため、計算の妥当性がいち早く確認でき、研究開発の効率が大きくアップします。

6. 分子軌道法計算プログラム Gaussian98 利用講習会の開催について(再掲)

分子軌道法計算プログラム Gaussian98 利用講習会を下記の内容で開催します。受講の申込みは、センター4階事務受付(052-789-4355)で行います。

日時 平成12年9月8日(金)10時30分～16時
場所 大型計算機センター4階演習室
講師 岐阜大学地域科学部 和佐田 裕昭助教授
名古屋市立大学自然科学教育センター 和佐田 祐子氏
内容 分子軌道法計算プログラム Gaussian98 利用入門
多くの分子軌道法計算に用いられている Gaussian98 の利用方法に関する講習会です。はじめて分子軌道法計算プログラムを利用してみようと思うユーザ向けの講習会です。計算出力の処理・解析についても簡単な実習を行います。

日程

10:30	12:00	13:30	16:00
分子軌道法についての解説	昼休み	Gaussian98 の実習	

対象 本センター利用有資格者および学部学生

定員 20名

申込締切日 平成12年9月5日(火) ただし、定員になり次第締め切ります。

なお、申込みは、電子メールで下記のアドレスに申し込んでいただいても結構です。

koshu@cc.nagoya-u.ac.jp

(電子メールで申し込む場合には所属・職名等の身分も明記してください)

また、センターの利用者は、センターのホームページの講習会案内からも申し込みができます。