

## 目 次

1 . ライブラリー・プログラムの登録について	1
2 . IDL(Interactive Data Language)のサービス開始について	2
3 . 大型アプリケーションパッケージ利用講習会の開催について	2
4 . Fortran と C の利用講習会(第 2 回)の開催について	5
5 . VPP Fortran 利用講習会の開催について	5
6 . HPF 講習会 ( 第 2 回 ) の開催について	6
7 . 計算サービス休止について	7
8 . ライブラリー・プログラムの登録について ( 再掲 )	7
9 . 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 ( 再掲 )	7
10 . Gaussian98 の並列版の利用開始について ( 再掲 )	8

### 1 . ライブラリー・プログラムの登録について

最小二乗法標準プログラム S A L S の倍精度版が登録されました。単精度版についても新しく置換えました。

### 使用法

gpcs%frt file 名-lsals (倍精度の場合は, sals を salsd にする)

### 参考文献

- ・小柳義夫・中川徹 ( 1 9 9 0 ) S A L S 入門, 東京大学出版会
- ・中川徹・小柳義夫 ( 1 9 8 2 ) 最小二乗法による実験データ解析, 東京大学出版会

## 2 . IDL(Interactive Data Language)のサービス開始について

汎用計算サーバ gpcs で IDL が利用できるようになりました。IDL は、データを対話的に分析し可視化するためのソフトウェアで多くの数学的分析機能とグラフィック表示機能を備えています。IDL の主な特徴を以下に示します。

- 高速な 2 次元プロット、多次元プロット、立体可視化、画像表示、アニメーションにより計算結果を即座に分析できる。
- 数値分析や統計分析のルーチンが多く用意されている。
- 標準の画像フォーマット(BMP, GIF, JPEG, XWD 等)や科学データフォーマット(CDF, HDF, NetCDF)をサポート。

IDL の利用については、マニュアルを参照してください。マニュアルは、図書室にあります。なお、現在のところ同時に利用できるユーザ数は 1 です。

## 3 . 大型アプリケーションパッケージ利用講習会の開催について

スーパーコンピュータで利用可能な大型アプリケーションパッケージの講習会を下記のように開催します。今回講習を行うパッケージは、

- I - D E A S (総合設計支援システム)
- P O P L A S / F E M 5 (線形構造解析プログラム)
- S T A R - C D (非構造格子・汎用熱流体解析プログラム)
- L S - D Y N A (非線形動的構造解析プログラム)
- M A S P H Y C / M A S P H Y C - S P (計算材料設計システム)
- F U J I T S U / - F L O W (汎用 3 次元流体解析システム)

です。受講の申込は、センター4階事務受付(052-789-4355)で行います。

場 所 センター演習室(4階)

対 象 本センター利用有資格者および学部学生

定 員 15名

申込締切日 各講習会開催日の3日前まで。ただし、定員になり次第締切ります。

申 込 先 本センター4階事務受付

電 話 : 052-789-4355

メール : 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。)

<各講習会内容と開催日時>

### 1) I - D E A S (総合設計支援システム)利用講習会

日時 : 10月11日(水)10時~17時

内容 : ・ I - D E A S の概要説明とメッシュ作成デモ  
・ 実習(簡単なモデル生成とメッシュ分割)

2) POPLAS / FEM5 (線形構造解析プログラム) 利用講習会

日時: 10月12日(木) 13時~17時

内容: ・FEM5の概要説明  
・実習(FEM5の実行)

3) STAR-CD (非構造格子・汎用熱流体解析プログラム) 利用講習会

日時: 10月17日(火) 10時~17時

内容:

STAR-CD の中級者を対象とします。モデリングへのアプローチとメッシュ作成で使用するコマンド(節点やセルの移動、コピーのコマンドや節点、セルの生成コマンド等)の使用方法を具体的な例を用いて説明します。

この講習は中級者の方を対象としているため、STAR-CD 入門コースを受講している方、もしくは同等の知識(STAR-CD の基本的操作方法)を有している方が対象です。

1. モデリングアプローチ
2. セルの生成
3. ローカル座標系
4. 節点の生成と修正
5. スムージング
6. スプライン
7. 不連続メッシュの定義
8. セルの品質チェック

4) LS-DYNA (非線形動的構造解析プログラム) 利用講習会

日時: 10月18日(水) 10時~17時

内容: ・LS-DYNAの概要と機能の説明  
・実習(eta/FEMBを使ってのモデルの作成・結果評価、LS-DYNA3Dでの計算)

5) MASPBYC / MASPBYC-SP (計算材料設計システム) 利用講習会

日時: 10月19日(木) 13時~17時

内容: ・MASPHYC / MASPBYC-SPの概要と機能の説明  
・実習(固体アルゴンによる分子動力学の演習)

## 6) FUJITSU / - FLOW (汎用3次元流体解析システム) 利用講習会

日時: 10月20日(金) 13時~17時

内容: FUJITSU / - FLOW概要説明

- ・例題演習 「立方体障害物まわりの流れ」解析
- ・例題演習 「偏心二重円管内の自然対流」解析

### <パッケージ一口メモ>

#### 1) I-DEAS

I-DEASは3次元のソリッドモデルを中心に設計(CAD)、有限要素解析のためのメッシュ作成、構造解析の結果の表示機能を持ち、CAE(Computer Aided Engineering)を統合的にサポートするシステムです。FEM5のメッシュ作成と解析結果の表示に利用します。

#### 2) POPLAS / FEM5

FEM5は有限要素法を用いた線形構造解析プログラムで、任意形状の3次元構造物の線形応力解析及び熱伝導解析を行うことができます。I-DEASによって作成された解析メッシュをもとに解析を実施し、I-DEASにより結果の表示を行います。

#### 3) STAR-CD

非構造格子を用いているため複雑な形状に容易に対応。ファン、ポンプ、タービンなどの移動境界問題への適応、固体との熱連成、粒子連成、二相流、自由表面、拡散、燃焼などの化学反応、非圧縮性及び圧縮性など多岐に渡る物理モデルを保有しており、様々な現象の解析が可能。熱伝達係数や温度、圧力データを構造解析ソフトウェアへのデータ受け渡し機能などもあり、現在国内ナンバー1の導入実績を誇るソフトウェア。

#### 4) LS-DYNA3D

LS-DYNA3Dは、衝突安全解析やプレス成形解析の分野で世界中で多くの人に利用されている解析プログラムです。LS-DYNA3Dは、時間積分に陽解法を使用し、大変形・弾塑性・動的接触を含む数万要素を短時間で計算でき、また、構造解析だけでなく熱や流体との連成などの広範な分野に適用可能です。

#### 5) MASPHEC / MASPHEC-SP

MASPHECは、材料の物性・構造を原子・分子レベルのミクロな情報から分子動力学の手法を用いて予測するシステムです。材料の性質を決定する原子・分子間相互作用ポテンシャルがライブラリ化されており、有機化合物から無機化合物まで幅広い材料に適用できるシステムです。並列版(2PE, 4PE, 8PE, 16PE)が用意されています。

MASPHEC-SPは、新材料開発や半導体プロセスなどでもっとも重要な単結晶成長や吸

着・薄膜形成，スパッタリングなどを分子動力学の手法を用いてシミュレーションするシステムです。部材は，セラミックス，半導体，合金などの無機物から樹脂・液晶などの有機物まで幅広く対応しています。並列版（2PE，4PE，8PE，16PE）が用意されています。

#### 6) FUJITSU / - FLOW

以下のような解析機能を用意しており、広範な流体解析が可能です。

- ・非圧縮性流体解析
- ・圧縮性流体解析
- ・自由表面流れ解析
- ・燃焼・化学反応流れ解析

#### 4. Fortran と C の利用講習会(第 2 回)の開催について

スーパーコンピュータ vpp や汎用計算サーバ gpcs での Fortran や C プログラムの実行方法およびエディタの使い方の講習会を下記のように行います。Fortran や C のプログラミングの講習会ではありませんので、それらの言語のいずれかを習得している方を対象とします。受講の申込は、センター4階事務受付（052-789-4355）で行います。

日 時 平成12年10月24日（火）13時30分～15時30分  
場 所 センター演習室（4階）  
対 象 本センター利用有資格者および学部学生  
（ただし、Fortran または C を習得している方）  
定 員 30名  
申込締切日 平成12年10月20日（金） ただし、定員になり次第締切ります。  
申 込 先 本センター4階事務受付  
電 話：052-789-4355  
メール：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。）

#### 5. VPP Fortran 利用講習会の開催について

スーパーコンピュータ VPP5000 での VPP Fortran による並列プログラミングの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10月27日（金）10時～12時

場 所 大型計算機センター 4 階演習室  
対 象 本センター利用有資格者及び学部学生  
定 員 30名

申込締切日 平成12年10月24日(火)

ただし、定員になり次第締切ります。

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@nucc.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)

<講習内容>

1. 並列プログラミングのキーワード
2. カーネルループの並列化
3. 並列プログラミングコーディング例(抜粋して説明)

#### 6. HPF 講習会(第2回)の開催について

スーパーコンピュータ VPP5000 で動作する HPF(High Performance Fortran)を使用した並列プログラミングの講習会を下記のように開催します。受講の申込は、センター4階事務受付(052-789-4355)で行います。

日 時 平成12年10月27日(金) 13時~16時

場 所 センター演習室(4階)

対 象 本センター利用有資格者および学部学生

内 容

- ・ 並列プログラミングのキーワード
- ・ カーネルループの並列化
- ・ 並列プログラミングコーディング例

(使用する HPF の規格: HPF 2.0 および HPF/JA 1.0)

定 員 30名

申込締切日 平成12年10月24日(火) ただし、定員になり次第締切ります。

申 込 先 本センター4階事務受付

電 話: 052-789-4355

メール: 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。)

## 7. 計算サービス休止について

システム・メインテナンスのため、汎用計算サーバ gpcs の計算サービスを下記のとおり休止します。gpcs 以外のサーバは平常どおり運用します。

なお、休止期間中は gpcs から vpp への qsub によるジョブ投入はできませんので vpp から実行してください。

システム名	休止期間
gpcs	平成12年10月21日(土) 8:00 ~ 23日(月) 9:30

## 8. ライブラリー・プログラムの登録について(再掲)

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](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

## 9. 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(再掲)

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。

## 10 . Gaussian98 の並列版の利用開始について (再掲)

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が得られるのは、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
```