

目 次

1 . 平成 1 3 年度利用者旅費について	1
2 . AMBER V.6 の利用開始について	2
3 . 4 月からの汎用計算サーバ gpcs における並列実行の方法について	3
4 . VPP のコンパイラの障害について	4
5 . 平成 1 3 年度講習会計画について	6
6 . 平成 1 3 年度プログラム相談コーナー担当者について	7
7 . 汎用計算サーバ gpcs の課金の試行運用について (再掲)	8
8 . 汎用計算サーバ gpcs のキュー m の変更について (再掲)	8
9 . 年度切替えに伴う計算サービス休止について (再掲)	9
10 . 期限切れファイルの消去について (再掲)	9

* 新年度への継続申請が済んでいない方は、手続きをお早めに

1 . 平成 1 3 年度利用者旅費について

平成 1 3 年度の利用者旅費を、下記のように取り扱います。

1 . 期 間 平成 1 3 年 4 月 1 日 ~ 平成 1 4 年 3 月 3 1 日

2 . 出張期間

センター滞在を 3 日以内とし、必要な旅費を加える。ただし、第 4 地区内の方は日帰りとする
(原則として一人当たり 5 回 / 月以内)

3 . 支給額

(1) 運 賃 普通車運賃。ただし、当該旅行キロ数に応じて所定の急行または特別急行
料金を支給する。

(2) 日当及び宿泊料 文部科学省所管旅費規則で規定する額を支給する。

4 . 申込み

旅行日の 2 週間前までに、直接本センターに利用者旅費申請書を提出する。

(利用者旅費申請書はセンターホームページより P D F にて印刷が可能です。)

5 . その他

(1) 旅費の支給方法はすべて精算払いとする。

(2) 文部科学省科学研究費、産学連携等研究費及び委任経理金による利用者に対しては、
旅費を支給しない。

2 . AMBER V.6 の利用開始について

AMBER V.6 が利用できるようになりました。AMBER V.6 は、スーパーコンピュータ vpp と汎用計算サーバ gpcs の両システムで利用できます。また、AMBER V.6 では、並列版も用意されています。並列版を利用するときのプロセス数は、2 のべき乗を指定してください。なお、AMBER V.6 の sander は、V.4 の sander と入力データの互換がありません。入力データの互換をとる必要がある場合には、AMBER V.6 の sander_classic をご利用ください。

vpp 版のディレクトリ

プログラム： /opt/apl/amber6/exe (serial 版)
/opt/apl/amber6/exe_mpi (parallel 版)

データベース： /opt/apl/amber6/dat

gpcs 版のディレクトリ

プログラム： /opt/local/amber6/exe (serial 版)
/opt/local/amber6/exe_mpi (parallel 版)

データベース： /opt/local/amber6/dat

なお、gpcs の AMBER の並列版は、3 月中は TSS でのみ動作します。

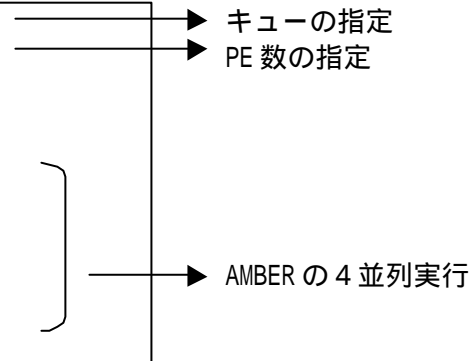
vpp の並列版の実行例(4 並列での実行例)

以下に示すようなスクリプトファイルを作成する。

qsub コマンドの -q オプションに並列実行のキュー z または ze を、-IP オプションで割り当てる PE 数 (この例では 4) を指定する。また、環境変数 np でプロセス数を指定する。

スクリプトファイル名：amber.sh

```
# @$-q z -eo o amber.out
# @$-IP 4
setenv AMBEXE /opt/apl/amber6/exe_mpi
setenv np 4
$AMBEXE/sander_classic ¥
    -i amber/samp.in ¥
    -o amber/samp.out ¥
    -c amber/samp.rst ¥
    -p amber/samp.top ¥
    -r amber/samp.rst
```



qsub コマンドで実行を依頼する。

```
vpp% qsub amber.sh
```

gpcs の並列版の実行例 (4 並列での実行例) この実行例は、4 月から利用可能です。

以下に示すようなスクリプトファイルを作成する。

qsub コマンドの -q オプションに並列実行のキュー m を、-IP オプションで割り当てる CPU 数 (この例では 5) を指定する。AMBER の並列実行は、MPI で実現されているので、mpiexec コマンドで実行する。mpiexec コマンドの -n のオプションでプロセス数を指定する。

スクリプトファイル名 : amber.sh

```
# @$-q m -eo o amber.out
# @$-IP 5
setenv AMBEXE /opt/local/amber6/exe_mpi
mpiexec -n 4 $AMBEXE/sander 0 ¥
-i amber/samp.in ¥
-o amber/samp.out ¥
-c amber/samp.rst ¥
-p amber/samp.top ¥
-r amber/samp.rst
```

qsub コマンドで実行を依頼する。

```
gpcs% qsub amber.sh
```

3.4 月からの汎用計算サーバ gpcs における並列実行の方法について

gpcs で並列実行する場合、主に

- ・ コンパイラの自動並列化機能により並列実行する。
- ・ MPI により並列処理をする。

の 2 通りの方法があります。それぞれの実行方法を以下に示します。なお、自動並列化機能が提供されているコンパイラは、Fortran, C, C++です。

(その 1) Fortran による並列実行 (利用の詳細は、センターニュース Vol.31, No.2, pp129 を参照のこと。)

コンパイラオプション-Kparallel を指定して、並列用モジュールを作成する。

```
gpcs% frt Kparallel -o mprog prog.f
```

バッチ処理用のスクリプトファイルを作成する。

qsub コマンドの-q オプションに並列実行のキュー m を、-lp オプションで割り当てる CPU 数 (この例では 8) を指定する。

スクリプトファイル名 : exe_p1.sh

```
# @$-q m -eo o mprog.out
# @$-lp 8
cd pg
./mprog
```

qsub コマンドで実行を依頼する。

```
gpcs% qsub exe_p1.sh
```

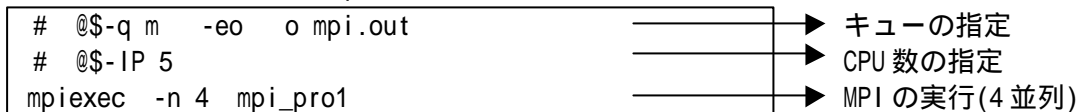
(その 2) MPI による並列実行

以下に示すようなスクリプトファイルを作成する。

qsub コマンドの-q オプションに並列実行のキュー m を、-IP オプションで割り当てる CPU 数 (この例では 5) を指定する。MPI の実行は mpiexec コマンドで行なう。mpiexec コマンドの-n のオプションでプロセス数を指定する。

スクリプトファイル名 : exe_p2.sh

```
# @$-q m -eo o mpi.out
# @$-IP 5
mpiexec -n 4 mpi_pro1
```



qsub コマンドで実行を依頼する。

```
gpcs% qsub exe_p2.sh
```

4 . VPP のコンパイラの障害について

VPP のコンパイラに下に示す(障害 1)及び(障害 2)の障害があることが判明しました。この障害に該当する計算は再計算しますので、プログラム相談室 (789-4359) までお申し出ください。なお、今回の障害については、自分のプログラムがこれらの障害に該当するかどうかのチェックがコマンドでできるようになっています。

《障害に該当するか否かのチェック方法》

```
Fortran   :      vpp% chk_frt   ソースファイル名
C         :      vpp% chk_vcc   ソースファイル名
C++      :      vpp% chk_CC    ソースファイル名
```

障害に該当する場合には、"***** Pnnnnnn found *****" のメッセージが標準出力に出力されます。

ここで、nnnnnn は 6 桁の数字です。

(障害 1) Fortran , C および C++コンパイラ

以下の条件のとき、実行結果異常となる場合がある。

- 1) 翻訳時オプション-Kfmadd と-Kunroll が有効である。かつ
- 2) 内側がベクトル化された多重ループが存在している。かつ
- 3) 2)の内側ループには 配列要素に代入する負の符合のついた括弧付きの演算が存在している。
かつ
- 4) 3) の演算には、2 つ以上の乗算と 1 つ以上の加算が存在している。かつ
- 5) 4) の乗算と加算の対象は、単純変数である。

<Fortran プログラム例 >

```
REAL A(5,5)
DO I=1,5
  DO J=1,5
    A(J,I)=-(I*I+J*J)
  END DO
END DO
PRINT *,A(1,2)
END
```

< 障害のあった期間 >

Fortran : 1999.12.1 ~ 2001.2.18

C , C++ : 1999.12.1 ~ 2001.3.4

< この障害に該当した時に出力されるメッセージ >

```
Fortran : ***** P643041 found *****
C       : ***** P140580 found *****
```

C++ : ***** P140594 found *****

(障害2) Fortran, C および C++コンパイラ

以下の条件の場合, 実行結果に誤りが生じる場合がある。

- 1) 多重ループが存在している。かつ
- 2) 1) の最内には, 同じネストレベルのループが複数存在している。かつ
- 3) 2) のループはベクトル化されている。かつ
- 4) 2) のループは, 同じ繰り返し回数を持つループである。かつ
- 5) 2) のループの間に, 代入文が存在している。かつ
- 6) 5) の代入文の直後のループには, 総和演算または最大値 / 最小値検索演算が含まれている。かつ
- 7) 6) の総和演算または最大値 / 最小値検索演算の結果を表す変数は, 5) の代入文で参照されている。かつ
- 8) 5) の代入文の定義要素は, その直後のループでは参照されずにループを跨いで参照されている。かつ
- 9) 4) のループにおいて, JPC1201i-i のメッセージが出力されている。(このメッセージは, 翻訳時オプション-Wv, -m3 を指定した場合に出力される。)

< Fortran プログラム例 >

```
integer a(100),b(100),c(10),d(10)
integer res,no
data b/1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,90*90/
data c/10,9,8,7,6,5,4,3,2,1/
data d/11,12,13,14,15,16,17,18,19,20/
do j=1,10
  do i=1,100
    a(i)=b(j)*2
  end do
  no=res
  do i=1,100
    res=res+a(i)
  end do
end do
print *,no,res
end
```

< 障害のあった期間または修正予定日 >

Fortran, C : 1999.12.1 ~ 2001.3.18

C++ : 3月31日修正予定

< この障害に該当した時に出力されるメッセージ >

Fortran : ***** P643047 found *****

C : ***** P140660 found *****

C++ : ***** P140661 found *****

5. 平成13年度講習会計画について

平成13年度講習会計画

月	講習会名	内 容
5	Gaussian98 講習会	分子軌道法プログラム Gaussian98 利用入門 (初心者向け)
6	Fortran と C の利用講習会 (第1回)	・スーパーコンピュータ vpp と汎用計算サーバ gpcs における Fortran と C の利用方法 ・ gpcs における並列処理
7	VPP Fortran 講習会	スーパーコンピュータ vpp の VPP Fortran による並列化プログラミングの講習
9	画像処理講習会	大型計算機センターがサービスする画像処理システムの概要と静止・動画入出力装置の使い方
	AVS (汎用可視化システム) 講習会	AVS の利用方法(基本的な操作の実習および可視化の演習)
	Mathematica 利用講習会	数式処理システム Mathematica の利用方法
10	Fortran と C の利用講習会 (第2回)	・スーパーコンピュータ vpp と汎用計算サーバ gpcs における Fortran と C の利用方法 ・ gpcs における並列処理
	VPP Fortran 講習会	スーパーコンピュータ vpp の VPP Fortran による並列化プログラミングの講習
	HPF 講習会	スーパーコンピュータ vpp で動作する並列処理言語 HPF (High Performance Fortran) による並列プログラミングの講習
	- FLOW 利用講習会	汎用3次元流体解析システム FUJITSU / - FLOW の利用方法
	FEM 5 利用講習会	線形構造解析プログラム POPLAS / FEM 5 の利用方法
	LS - DYNA3D 利用講習会	非線形動的構造解析プログラム LS - DYNA3D の利用方法
	MASPHYC 利用講習会	計算材料設計システム MASPHYC / MASPHYC - SP の利用方法
	I - DEAS 利用講習会	総合設計支援システム I - DEAS の利用方法
STAR - CD 利用講習会	非構造格子・汎用熱流体解析プログラムの利用方法	

UNIXシステム講習会については、今年度開催しませんが、出張講習会を行いますので御希望の方は、共同利用掛(内線 4355)までお問い合わせください。

6.平成13年度プログラム相談コーナー担当者について

プログラム相談担当者一覧

(プログラム相談コーナー直通 TEL 0 5 2 - 7 8 9 - 4 3 6 6)

(相談時間 14:00 ~ 16:00)

平成13年度

曜日	担当者	相談内容	相談場所 (相談方法)	連絡先
月	大屋 和夫 (文・心理学)	統計解析, SAS SPSS	プロ相コーナー	TEL 0 5 2 - 7 8 9 - 2 2 2 1 a40193a@cc.nagoya-u.ac.jp
	永井 亨 (センター・研開部)	システム全般	プロ相コーナー	TEL 0 5 2 - 7 8 9 - 4 3 6 4
火	下木戸隆司 (教・教育心理)	SAS, 統計解析	プロ相コーナー	TEL 0 5 2 - 7 8 9 - 2 6 5 8 m47031a@cc.nagoya-u.ac.jp
	業務掛担当者	システム全般	プロ相コーナー	TEL 0 5 2 - 7 8 9 - 4 3 6 6
水	和佐田祐子 (名市大・自科教センター)	Gaussian98, 数値計算分子 軌道法	電話又はメール	TEL 0 5 2 - 8 7 2 - 5 7 9 1 f43621a@cc.nagoya-u.ac.jp
木	和佐田裕昭 (岐大・地域科学)	Gaussian98, 数値計算分子 軌道法	プロ相コーナー	TEL 0 5 8 - 2 9 3 - 3 0 6 3 wasada@gumail.cc.gifu-u.ac.jp
	津田 知子 (センター・研開部)	システム全般	プロ相コーナー	TEL 0 5 2 - 7 8 9 - 4 3 5 9 a49937a@cc.nagoya-u.ac.jp
金	伊藤 義人 (附属図書館)	C, 図形処理, Fortran	電話又はメール	TEL 0 5 2 - 7 8 9 - 3 6 6 3 a40247a@cc.nagoya-u.ac.jp
	山本 茂義 (中京大・教養部)	Fortran	メール	TEL 0 5 2 - 8 3 2 - 2 1 5 1 (6504) e43363g@cc.nagoya-u.ac.jp

特定分野専門指導員	相談分野	相談時間及び連絡先
秦野 甯世 (中京大・情報科学)	NUMPAC, 数値計算	随時 TEL 0 5 6 5 - 4 5 - 0 9 7 1 (6652) hatano@sccs.chukyo-u.ac.jp

7. 汎用計算サーバ gpcs の課金の試行運用について（再掲）

gpcs の演算負担経費 1 秒 0.1 円に！
並列処理では CPU 1 台だけに課金！

*** gpcs でのお勧め利用 ***

- ・大容量ジョブ（メモリは 32GB まで利用可能）
- ・WS で長時間かかる Fortran プログラムの実行時間を簡単に短縮したい。

gpcs の frt コマンドで -kparallel のオプションを指定して並列実行をする。

（利用の詳細は、センターニュース Vol.31, No.2, pp129 参照）

- ・MPI などでも並列処理している場合（最大 16 並列まで可能）

本センターには、ベクトル向きでない汎用的計算を行う目的で、汎用計算サーバが導入されています。この汎用計算サーバ gpcs は、64 台の CPU と 64GB の共有メモリを備えていますので、大容量ジョブの実行が可能であるとか、並列処理による処理時間の短縮が期待できます。しかしながら、現在の負担金体系のもとでは、長時間ジョブの実行や並列処理を行うと演算負担経費がスーパーコンピュータに比して割高になります。そこで、4月2日（月）より、汎用計算サーバの演算負担経費を演算時間 1 秒につき 1 円を 0.1 円とする試行運用を行います。また、バッチジョブによる並列処理においては、従来は各 CPU の合計値に対して課金がなされていましたが、4月2日（月）より使用した CPU のうち最大の CPU 時間に対して行うように変更します。大いにご利用ください。

8. 汎用計算サーバ gpcs のキュー m の変更について（再掲）

4月2日（月）より、汎用計算サーバ gpcs のキュー m の利用資源の制限値を次表のように変更します。

キュー m における変更は、次の 2 点です。

- 1) CPU は、最大 16 台まで利用可能とする。
- 2) 課金の対象となる演算時間は、各 CPU 使用時間の合計値ではなく、使用した CPU のうち最大の CPU 使用時間とする。なお、CPU 時間の制限は、従来どおり各 CPU 使用時間の合計値に対して行なわれます。

利用形態	キュー名	CPU 使用時間		メモリサイズ		経過時間	備考
		標準値	制限値	標準値	制限値	制限値	
TSS	-	60 分	無制限	200MB	2GB	-	
バッチ ジョブ	a	60 分		500MB	2GB	600 分	
	b	600 分		500MB	4GB	1440 分	
	m	600 分	9600 分	4GB	32GB	900 分	CPU16 台 まで利用可

*) m キューの CPU 使用時間は、各 CPU の合計です。

**) m キューの CPU 使用時間の制限値は、600 分 × 16 台の時間に相当します。

9．年度切替えに伴う計算サービス休止について（再掲）

年度切替え処理及びシステム・メンテナンスのため、つぎのとおり計算サービスを休止します。

・スーパーコンピュータ（vpp）

3月30日（金）1：00～4月1日（日）9：30の間サービス休止
（4月2日（月）1：00～13：00は、定期保守のためサービス休止）

・汎用計算サーバ(gpcs)

3月30日（金）8：00～4月2日（月）13：00の間サービス休止

・メールサーバ(nucc)

3月30日（金）9：00～15：00の間サービス休止（注2）

注1）年度切替え作業開始時までに実行が終了しないジョブはキャンセルする場合がありますのでご了承ください。

注2）メールサーバは年度切替え作業が終了次第、新年度としての計算サービスを開始します。

注3）年度切替え処理を行った後は、継続手続きがされていない利用者はシステムの利用ができなくなります。メール等の利用もできなくなりますので早めに手続きをしてください。

注4）年度切替え後は新年度のサービスになりますので、新年度からの新規利用申請をされた方も利用できます。

システム名	3月30日 （金）	31日 （土）	4月1日 （日）	2日 （月）
スーパー コンピュータ vpp	1:00 ----- 9:30 計算サービス休止			9:30 サービス開始 ----- 1:00 13:00 定期保守 午前中定期保守
汎用計算 サーバ gpcs	8:00 ----- 13:00 計算サービス休止 午前中定期保守			
メールサーバ nucc	9:00 ----- 15:00 サービス休止			

10．期限切れファイルの消去について（再掲）

平成13年度に継続申請がされていない利用者のファイル（全システム）は、4月中旬に消去しますので、ご承知おき下さい。

必要なファイルは、3月末日までに外部媒体にバックアップするか、他の継続申請を行う登録番号にファイル名を変更してください。