

## [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.isc.tohoku.ac.jp/tayori/>

### Gaussian09 のバージョンアップについて (No. 128)

Gaussian09 を B.01 から C.01 にバージョンアップしましたのでお知らせいたします。

バージョン名 : Gaussian09 C.01  
サービスホスト : gen.isc.tohoku.ac.jp

B.01 から C.01 のバグフィクスとマイナーチェンジについての詳細は以下のページをご覧ください。

Gaussian 09 Revision C.01 Release Notes

[http://www.gaussian.com/g\\_tech/rel\\_notes.pdf](http://www.gaussian.com/g_tech/rel_notes.pdf)

HULINKS | Gaussian 09 | Gaussian 09 Revisions B.01 から C.01 への変更点

[http://www.hulinks.co.jp/software/gaussian/section01\\_v09\\_c01.html](http://www.hulinks.co.jp/software/gaussian/section01_v09_c01.html)

(共同利用支援係)

### 計算科学・計算機科学人材育成のための スーパーコンピュータ無償提供制度について (No. 129)

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、計算科学・計算機科学分野での教育貢献・人材育成を目的として、大学院・学部での講義実習等の教育目的での利用について、無料（ただし、利用状況によっては上限を設定する場合があります）でベクトル並列型スーパーコンピュータ SX-9（1 ノード、16CPU、1.6Tflop/s、1TB メモリ）システムをご利用いただける制度を用意しております。

利用を希望される場合は、以下の情報を添えて、[edu-prog@isc.tohoku.ac.jp](mailto:edu-prog@isc.tohoku.ac.jp) までお申し込みください。

- ・ 講義担当者氏名
- ・ 同所属
- ・ 同連絡先（住所、電話、電子メール）
- ・ 講義名
- ・ 講義実施日時（1 セメスターの中で実習を予定している回数）
- ・ センターでの実習利用希望の有無（必要であれば予定日）
- ・ 講師派遣の有無
- ・ 講義シラバス
- ・ 講義ウェブ（もし用意されていれば）
- ・ 受講者数（予定）
- ・ 必要とする理由（利用目的：例えば、高速数値実験の研修を行うなど）

- ・期待できる教育効果
- ・その他（センターへの要望等）

なお、講義終了後、報告書（広報誌 SENAC へ掲載）の提出をお願いいたします。たくさんのお申し込みをお待ちしております。不明な点は、edu-prog@isc.tohoku.ac.jp までお問い合わせください。

（スーパーコンピューティング研究部，共同利用支援係）

## 民間企業利用サービスについて (No. 129)

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、文部科学省が平成 19 年度から開始した先端研究施設共用促進事業（旧「先端研究施設共用イノベーション創出事業」）を通して、産学連携共同研究におけるサイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータ学術利用支援を行ってまいりました。平成 23 年度からは、自主事業の制度のもと大学で開発された応用ソフトウェアとスーパーコンピュータを民間企業へ提供しており、平成 24 年度についても引き続き同制度を利用する課題を募集しております。

本サービスにおける利用課題区分は、以下の 2 通りがあります。

- ・大規模計算利用（有償利用）
- ・トライアルユース（無償利用）

詳細については以下を参照し、利用を希望される場合は共同利用支援係まで申し込みください。

<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/minkan/>

問い合わせ先  
東北大学サイバーサイエンスセンター  
情報部情報基盤課 共同利用支援係  
電話：022(795)3406  
E-mail：uketuke@isc.tohoku.ac.jp  
(共同利用支援係)

## コンパイラアップデートのお知らせ (No. 131)

■2012 年 3 月 26 日にスーパーコンピュータ用のコンパイラ、ライブラリを下記のバージョンへアップデートします。

新リビジョンでは、実行性能の向上が期待されますので、ユーザプログラムを再コンパイルして実行することをお勧めいたします。

FORTRAN90/SX	Rev. 450
C++/SX	Rev. 092
MPI ライブラリ	library 8.0.15
MPI デーモン	daemon 7.3.3

■コンパイル方法は下記となります。  
 なお、コンパイルコマンドに変更はありません。

Fortran コマンド名 : sxf90  
 C/C++コマンド名 : sxcc  
 オプションの説明は、man コマンドでも参照できます。

MPI を利用する場合  
 Fortran コマンド名 : sxmpif90  
 C/C++コマンド名 : sxmpicc  
 オプションの説明は、man コマンドでも参照できます。

■FORTRAN90/SX のコンパイラについて  
 【主な追加機能・強化機能】

- (1) 自動ベクトルデータ・バッファリング機能を追加した。この機能はベクトル化される配列式、またはループ内に現われる配列をコンパイラが自動的に選択し、ADB にバッファリングする。
- (2) ADB に関する新規ベクトル化診断メッセージ、および、新規編集リスト表示を追加した。
- (3) ON\_ADB 指示オプションを改善し、以下のように複数の配列変数指定を可能とした。  
     ON\_ADB[(配列変数指定[, 配列変数指定]...)]
- (4) OpenMP Version 3.0 における COLLAPSE 句をサポートした。
- (5) OpenMP の WORKSHARE 構文中にコンパイラ指示オプションを指定できるように、コンパイラを改善した。
- (6) 手続き中に OpenMP の THREADPRIVATE 指示行が指定されている場合に、その手続きから呼ばれる手続きがインライン展開されるようにインライン展開機能を強化した。
- (7) ネストした手続呼出しがインライン展開される場合のベクトル化機能を強化した。
- (8) 組込み手続 SYSTEM\_CLOCK、SYSTEM\_CLOCKX、ETIME の性能を改善した。また、この改善に伴い新規実行時オプション F\_CLOCK を追加した。
- (9) 配列の参照/定義間に重なりがないことを前提とした最適化をサポートした。また、この最適化に関する新規コンパイラオプション -pvctl [no]conflict およびコンパイラ指示オプション NOCONFLICT を追加した。
- (10) ベクトルレジスタ割付け最適化をサポートした。また、この最適化を行うことを指定する新規コンパイラオプション -pvctl vregs=N およびコンパイラ指示オプション ALLOC\_ON\_VREG を追加した。

- (11) `-f2003` オプションが指定された場合、Fortran2003 規格に従って、基本文字型および C 文字種別の文字型のスカラ実引数と仮配列の結合を許すように、コンパイラを改善した。
- (12) `"-f2003 cbind"` オプションによる Fortran2003 の C 相互運用機能と、`"-A idbl/idbl4/idbl8"` 詳細オプションによる明示的な型パラメタ指定のない型の精度自動拡張機能を、同時に利用できるようにコンパイラを改善した。

詳細についてはリリースメモ、紹介資料もご覧ください。

Rev440 リリースメモ

Rev441 リリースメモ

Rev450 リリースメモ

F2003\_JPN.pdf

#### ■C++/SX について

C++/SX の新機能等については下記資料をご覧ください。

C++言語プリプロセッサ利用の 手引.pdf

Rev. 092 新機能のご紹介.pdf

互換性留意事項.pdf

Rev092 リリースメモ

#### ■MPI/SX について

MPI/SX については下記のリリースメモをご覧ください。

MPI リリースメモ

(共同利用支援係, 共同研究支援係)

## MATLAB のバージョンアップについて (No. 132)

数値計算言語「MATLAB」のバージョンアップを行いました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 R2012a (Ver. 7.14.0)
バージョンアップ日	: 2012年3月27日(火)
サービスホスト	: gen (並列コンピュータ)
起動コマンド	: matlab (GUI版)
	: matlab -nojvm -nosplash -nodesktop -nodisplay (テキスト版)

新機能の概要、機能の詳細については MathWorks 社のページをご覧ください。

[http://www.mathworks.co.jp/products/new\\_products/latest\\_features.html](http://www.mathworks.co.jp/products/new_products/latest_features.html)

(共同利用支援係)

## Mathematica のバージョンアップについて (No. 132)

数式処理プログラム「Mathematica」のバージョンアップを行いました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 8.0.4  
 バージョンアップ日 : 2012 年 3 月 27 日 (火)  
 サービスホスト : gen (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、機能の詳細については Wolfram 社のページをご覧ください。

<http://www.wolfram.com/mathematica/new-in-8/>

(共同利用支援係)

## 平成 23 年度 研究開発公募の報告 (No. 133)

平成 23 年度のライブラリ研究開発が、つぎのように終了しましたのでお知らせいたします。

No.	開発課題	開発者	所属	報告	備考
10-01	超 SIMD ビット演算による低消費電力流体シミュレーションコードの開発	松岡 浩	東北大学 電気通信研究所	低消費電力を実現できる流体シミュレーションコードを開発した。新しい格子ガス法シミュレーションコードとして”多段 2 体衝突法”を考案しその効果を SENAC Vol. 44, No3 において発表した。	終了
10-02	大規模線形常微分方程式系のための高速ソルバの開発	中村真輔	秋田県立大学 システム科学 技術学部	放物型の偏微分方程式の空間方向を離散化した場合に現れる、線形定係数の大規模常微分方程式系の高速度ソルバを開発した。	終了
11-01	3 次元データのコンパクト差分用並列 LU 分解ソルバの開発	三浦英昭	核融合科学研究所	各ノード毎に LU 分解を行うソルバを作成し、ベクトル化などの調整を行った。	終了

(スーパーコンピューティング研究部, 共同研究支援係)

## 平成 24 年度共同研究について (No. 133)

本センターでは、大規模科学計算システムの利用者と共同でプログラムやアルゴリズムを開発する共同研究を行っています。特にプログラムの MPI 化に積極的に取り組む課題を募集しました。

ライブラリ・共同研究専門部会で審査の結果、以下の 14 件が共同研究課題として採択されましたのでお知らせします。

No.	申請者	所属	研究課題
1	有吉 慶介	海洋研究開発機構 地震津波・防災研究プロジェクト	海溝型巨大地震サイクルの大規模シミュレーションの開発
2	稲津 大祐	東北大学大学院 理学研究科 地震・噴火予知研究観測センター	海底鉛直地殻変動検出のための数 km スケールを解像する全球海底圧力モデリング
3	岩崎 俊樹	東北大学大学院 理学研究科地球物理学専攻	気象・気候の数値シミュレーション
4	岩長 祐伸	物質・材料研究機構	プラズマ構造を有する複合光・電子素子の数値的設計
5	宇野 亨	東京農工大学大学院 工学研究科先端電気電子部門	大規模有限周期構造モデルを用いたプラズマ波発生メカニズムの解明とその応用技術開発
6	小野 高幸	東北大学大学院 理学研究科地球物理学専攻	惑星磁気圏における電磁プラズマ不安定についての計算機実験
7	河野 裕彦	東北大学大学院 理学研究科化学専攻	量子化学計算に基づくナノカーボンの光化学過程の理論的研究
8	佐々木 大輔	東北大学大学院 工学研究科航空宇宙工学専攻	工学問題に対する Building-Cube 法の高度化に関する研究
9	澤谷 邦男	東北大学大学院 工学研究科電気・通信工学専攻	モーメント法の高速度化アルゴリズムに関する研究
10	茂田 正哉	東北大学大学院 工学研究科 機械システムデザイン工学専攻	プラズマ流によるナノ粒子群創製プロセスの数値シミュレーション
11	島田 照久	東北大学大学院 理学研究科 大気海洋変動観測研究センター	ダウンスケーリングを用いた東北地方の局地気候と温暖化予測に関する研究
12	豊国 源知	東北大学大学院 理学研究科 地震・噴火予知研究観測センター	球座標系 2.5 次元差分法によるローカスケール・グローバルスケールの地震波伝播モデリング
13	森川 良忠	大阪大学大学院 工学研究科 精密科学・応用物理学専攻	超高速第一原理電子状態計算コードの開発
14	山本 悟	東北大学大学院 情報科学研究科情報基礎科学専攻	数値タービンの汎用化と大規模並列計算に関する研究

(スーパーコンピューティング研究部, 共同研究支援係)

## 大規模ファイル領域 (short 領域) の利用開始について (No. 133)

### ○目的

スーパーコンピュータや並列コンピュータで演算を実行する際、大規模な入出力ファイルを必要とする利用者に、大規模ファイル領域(以下、short 領域)を短期間開放します。

### ○利用期間

利用期間は、3ヶ月毎(四半期毎)とします。

4～6月、7～9月、10～12月、1～3月

継続して利用希望の方は、四半期末毎に次の3ヶ月分を申請していただきます。その際、過去の演算利用実績を考慮して継続利用の審査を行います。一定時間の演算利用がなければ、継続利用をお断りする場合もございますのでご承知おきください。目安としては、スーパーコンピュータ、並列コンピュータどちらか支払責任者単位で3ヶ月間の合計が100経過時間程度を予定しています。

### ○利用申請

ご利用希望の際は、支払責任者が登録する利用者番号をまとめて電子メールにて申込み願います。

申込み先: sys-sec@isc.tohoku.ac.jp

例:

件名: short 領域利用申請 (4～6月)

	氏名	利用者番号
支払責任者	〇〇 〇〇	u2xxxx
希望利用者	□□ □□	w2xxxx
	□□ □□	w2xxxx

### ○利用負担額と利用可能なサイズ

short 領域の利用負担額は原則無料とし、4テラバイトのパーティションを複数の利用者で共有してご利用いただきます。ディスク資源には限りがありますので、利用期間中においても使用済みのファイルは速やかに削除・退避するなど、ご協力をお願いいたします。

また、データのバックアップサービスは行いませんので、他のサーバやパソコンに転送するなどして、各自データのバックアップを行うようお願いいたします。

(共同利用支援係, 共同研究支援係)