

# ベクトル演算コンピュータ CONVEX C3420 の紹介

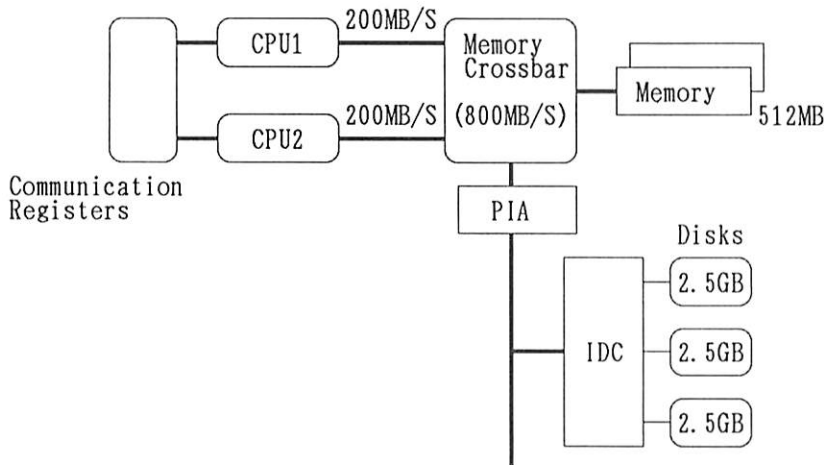
総合情報処理センター 樽磨和幸

平成 4 年度、スカラ/ベクトル/パラレル処理機能を統合した 64 ビット高性能スーパーコンピュータ CONVEX C3420 が新しく導入されました。C3420 は、スカラ演算のエンジンに RISC を採用し、50MHz のクロックレートで動作します。また、最適化ベクトル演算によりシングルジョブの実行速度を大幅にアップでき、32 ビットデータの演算では、64 ビットの場合の 2 倍の速度で実行できます。さらに、2 プロセッサでの並列処理により各々のジョブの実行時間を大幅に短縮できるなどの特徴があります。ユーザの皆さんには 512 MB のメモリ、7.5GB のディスク容量も魅力ではないでしょうか？

CONVEX は、総合情報処理センター分館 1F に置かれ、分館のサブネットにイーサ接続されています(ホスト名 : comet, IP アドレス : 133.30.20.230)。ユーザの皆さんには、24 時間開放されたシステムとなっていますので、どんどんご利用下さい。

## 1 CONVEX C3420 のシステム構成

CONVEX C3420 のシステムアーキテクチャは、図1 のようになっています。



【図1】 CONVEX C3420アーキテクチャ

● 本体

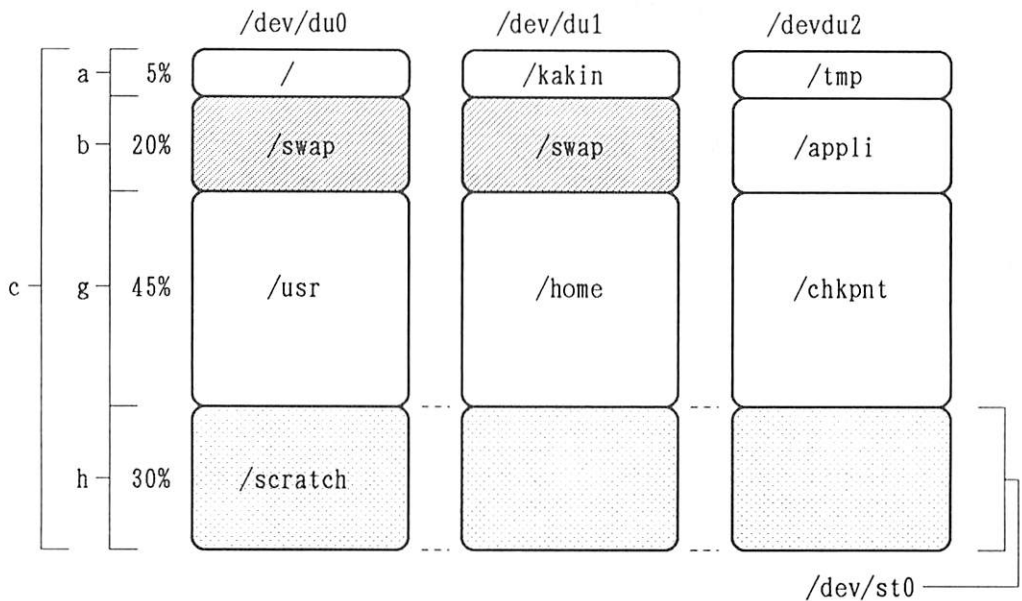
プロセッサ数 2  
 能力 スカラー値 79MIPS/CPU  
       ベクトル値 (単精度)200MFLOPS (100MFLOPS×2)  
                   (倍精度)100MFLOPS (50MFLOPS×2)  
 メモリ容量 512MB

● ディスクシステム(図2)

容量 7.5GB(2.5GB×3)  
 ストライピング機能あり

—— ストライピング機能 ——

異なる物理ディスク間でパーティションを連結して1個の仮想的なパーティションを作成し、あらかじめ設定したサイズ単位で異なる物理ディスクにほぼ同時に write/read する機能のこと。この機能で、大きなファイルを write/read する際のパフォーマンスを高めることができます。comet では、この機能により scratch パーティション(約2.2GB)を作成しています。



【図2】 ファイルシステム構成図

● 磁気テープシステム

オープンリールタイプ  
 磁気密度 6250bpi/1600bpi  
 テープサイズ フルサイズまで可能  
 DAT タイプ  
 データ容量 テープ 1 本当たり 1.3GB

## 2 課金システム \*

使用料金は、CPU 負担のみで、

1800 秒/日以下 1.0 円/秒

1800 秒/日以上 1800 秒からの超過分につき 0.5 円/秒

となっています。

自分の使用状況を知るには reso コマンドをお使い下さい。

## 3 OS および利用可能なソフトウェア

### ● OS

オペレーティングシステムは、IEEE POSIX 1003.1 に準拠の ConvexOS で、4.2BSD および 4.3BSD をサポートしています。

### ● 言語

自動ベクトル化/パラレル化 FORTRAN

・ANSI X.3.9-1978 準拠

・Cray, VAX, SUN Fortran 拡張命令サポート

自動ベクトル化/パラレル化 C

・ANSI C 準拠

・K&R サポート

インタープロシージャ最適化コンパイラ

・アプリケーションレベルでコード解析を行いシステムに適した最適化を行う。

### ● 数値計算ライブラリ

VECLIB(ランタイムベクトルライブラリ)

### ● ユーティリティ

CONSULTANT II (ソフトウェア開発支援ツールセット)

・プロファイラ

・CXdb(X ウィンドウ対応デバッガ)

・CXpa(並列化パフォーマンスモニタ)

CXbatch(ネットワーク対応バッチシステム, IEEE POSIX の NQS 準拠)

AVS(アプリケーション可視化ツール, AVS-3 準拠)

---

\* 平成 6 年度より、課金システムが変更される予定です。新しい課金システムの内容は、センターニュースやメールで案内があると思いますが、ここでは平成 5 年度の課金システムを紹介しています。

● PDS ソフトウェア

/usr/local/bin には約 300 の PDS ソフトが保存されています。CONVEX にある PDS ソフトの簡単な説明付きリストは /usr/local/bin/pds.list にありますのでのぞいてみてください。

● アプリケーションソフト

CONVEX で利用できる主なアプリケーションソフトには、分子軌道計算パッケージ「MOPAC v. 6」および「GAMESS」、数式処理ソフト「Mathematica v2.1」があります。

a) MOPAC

MOPAC は半経験的分子軌道計算ソフトウェアで日本コンベックスコンピュータ(株)より提供いただきました。このソフトはパブリックドメインソフトウェアですので、ノンサポート扱いとなっています。

M O P A C

MOPAC is a general-purpose semi-empirical molecular orbital package for study of chemical reactions. The semi-empirical Hamiltonians MNDO, MINDO/3 and AM1 are implemented, and calculations of vibrational spectra, thermodynamic quantities, isotopic substitution effects and force constants for molecules, radicals, ions and polymers are combined in a fully integrated package. Within the electronic part of the calculation eigenvectors and localized orbitals, chemical bond indices, etc., are calculable. For studying chemical reactions, a transition-state optimizing routines are available.

While MOPAC calls upon many concepts in quantum theory and thermodynamics and uses some fairly advanced mathematics, the user who is not familiar with these specialized topics should not feel excluded from using it. On the contrary, MOPAC is written with the nontheoretician in mind. To this end, the data are kept as simple as possible. This means that users can give their attention to the chemistry involved and not concern themselves with quantum and thermodynamic exotica.

インストール先 /usr/local/mopac

詳しくは、以下のドキュメントファイルをお読み下さい。

```
/usr/local/README
/usr/local/mopac/doc/about_avs.doc
/usr/local/mopac/doc/about_the_tests.doc
/usr/local/mopac/doc/convex_keywords.doc
/usr/local/mopac/doc/how_to_make.doc
/usr/local/mopac/doc/mopac.man
/usr/local/mopac/doc/update.man
```

## b) GAMESS

平成 5 年度のセンター研究開発課題「量子化学計算パッケージ GAMESS の CONVEX システムへの移植と利用環境の整備」の成果として発達科学部蛭名助教授のグループにより GAMESS がインストールされました。

### G A M E S S

GAMESS とは、「The General Atomic and Molecular Electronic Structure System」の略で、原子や分子の電子状態に関する ab initio 量子化学計算のためのパッケージである。このプログラムは、1970 年代の末にアメリカ・エネルギー省の NRCC(National Resources for Computations in Chemistry)プロジェクトのメンバーによって、HONDO など幾つかの既存の量子化学計算プログラムを集大成して作られた。プログラムは無償で公開され、その後、多くの改良を経て今日に至っている。その多くは、North Dakota State University (NDST) と Iowa State University(ISU) でなされ、現在は ISU の Ames Laboratory で Michael W. Schmidt が中心となって改良が続けられている。

GAMESS では、原子番号  $Z=103$  までの任意の元素を含んだ「分子」の波動関数と種々の物理量を計算することができる。原子番号  $Z=1$  の水素から  $Z=86$  のラドンまでの元素(ランタノイドを除く)に関しては、組み込みの基底関数が用意されている。単純な閉殻の SCF(self-consistent-field)から、一般の MCSCF(multiconfiguration self-consistent-field)まで各種の段階の波動関数を扱うことができる。本来 ab initio 計算とは、各原子核の電荷(原子番号  $Z$ )と幾何学的な配置のみをインプットとして、すべての電子に対する波動関数を経験的なパラメータを用いずに計算するものであるが、GAMESS では、そのほかに MOPAC6 の一部を含む半経験的な波動関数や、外殻電子に対有効内殻ポテンシャルを用いることもできる。

インストール先 /home/gamess

詳しくは、/home/gemess/intro.doc(蛭名氏作成「量子化学計算パッケージ GAMESS の概要と利用法」)をお読みください。

またマニュアルは、/home/gamess/documents の中の以下の 6 ファイルです。

INTRO.DOC (Section 1 - Overview)

INPUT.DOC (Section 2 - Input Description)

TESTS.DOC (Section 3 - Input Examples)

REFS.DOC (Section 4 - Further Information)

PROG.DOC (Section 5 - Programmer's Reference)

IRON.DOC (Section 6 - Hardware Specifics)

これらを全部印刷すれば 200 ページを越えるでしょう。

## c) Mathematica

### Mathematica

数式処理システム Mathematica の特徴は、数式処理、数値解析、およびグラフィックスの 3 つの機能がうまく統合されていることであり、700 種類以上の数学関数、グラフィックス、音声応答機能などその機能は多岐にわたる。

アーキテクチャ上の特徴は、システムが 2 つに分かれていることである。1 つはカーネルで、コマンドを実行し、数学計算の中心的な役割を担い、もう 1 つはフロントエンドで、グラフィックスやサウンドをコントロールしユーザはこのフロントエンドに対して接し、ビジュアルで対話的なインターフェースのやりとりが可能になっている。

Mathematica は、基本的にはインタープリタで、モニタ画面上で直接コマンドを入力することにより、対話的に処理することが可能であり、手続きをファイルにエディットしておき、まとめて実行させることも可能である。言語仕様は、C, Pascal などの手続き型言語に近く、オブジェクト指向、再帰呼出しなど現代的プログラミング技術にも対応できるようになっている。また、他システムとのインターフェースも充実しており、出力した数式や数値を、C や Fortran のソースプログラムのフォーマットに変更したり、TeX, PostScript といった文書の印刷に適したフォーマットに変換して出力するコマンドも用意されている。

#### ●インストール先 /usr/local/math

詳しくは、/usr/local/math/README および /usr/local/math/Documents 以下のファイルをお読み下さい。