

[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/>

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. 163)

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）で大規模科学計算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 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. 163)

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、社会貢献の一環として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、民間企業の方が無償または有償にてご利用頂ける制度を用意しております。本サービスにおける利用課題区分は以下の2つとなります。

- ・ 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/utilize/business.html>

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)6251
E-mail : uketuke@isc.tohoku.ac.jp

(共同利用支援係)

並列コンピュータシステムの更新について（3）(No. 165)

－新並列コンピュータ試験運用について－

新並列コンピュータ LX 406Re-2 の導入に伴う試験運用を4月1日（火）10:00から開始します。以下では、試験運用期間中の注意点について説明します。利用法の詳細は、以下のホームページから「並列コンピュータ LX 406Re-2」および「アプリケーションサービス」をご覧ください。

なお、正式運用の開始は、4月7日（月）10:00です。

大規模科学計算システムホームページ： <http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/>

1. 試験運用期間の利用負担金について

試験運用期間は、4月1日(火)10:00から4月7日（月）10:00までです。試験運用期間における並列コンピュータの演算負担経費については、課金いたしません。SX-9の演算負担経費については、通常通り課金いたします。なお、この期間内に終了しないジョブは、正式運用に引継ぎ処理いたします。4月7日（月）10:00を超えて実行されたジョブは、ジョブの開始時から課金の対象となりますのでご注意ください。ジョブを中断する場合は、正式運用開始前にジョブの削除をお願いいたします。

2. ログインサーバの変更について

新システムでは接続先ホスト名が以下の通り変更となります。試験運用開始後は、従来のホスト名（gen.isc.tohoku.ac.jp）では接続できません。

接続先ホスト名：front.isc.tohoku.ac.jp

また、並列コンピュータのコンパイラが更新されましたので、ジョブの投入前に再コンパイルをお願いいたします。SX-9のコンパイラに変更はありません。

表1. コンパイルコマンドの変更

旧システム	f95	mpif95	cc	c++	mpicc	mpic++
新システム	ifort	mpiifort	icc	icpc	mpiicc	mpicpc

3. ジョブクラス

試験運用期間における並列コンピュータのジョブクラスは、次表の通りです。

表2. 並列コンピュータのジョブクラス

システム	処理方法	キュー名	利用ノード数 (コア数)	時間制限 [時間]	メモリ容量 [GB]
並列コンピュータ LX 406Re-2	会話型処理	—	1 (6)	1 ※2	8
	バッチ処理 ※1	ns	1 (1)	無制限	5
	〃	nh	1 (24)	1 ※3	128
	〃	n1	1 (24)	無制限	128
	〃	n6	6 (144)	〃	128×6
	〃	n12	12 (288)	〃	128×12
	〃	n24	24 (576)	〃	128×24
	〃	mg (アプリケーション専用)	1 (24)	〃	128

※ 1. 2ノード以上を利用した並列実行にはMPIの利用が必用

※ 2. CPU時間の合計時間

※ 3. 経過時間

(スーパーコンピューティング研究部, 共同利用支援係, 共同研究支援係)

共同利用支援係（受付窓口）の移動について（No. 165）

これまで、1階で行っていた本センター利用者向けの窓口業務（各種申請書の受付、GaussView CD-ROMの貸し出し等）は、3月13日より3階共同利用支援係で行うことになりましたのでお知らせいたします。

以下、本館内案内を参考にセンターをご利用くださるようお願い申し上げます。

<本館案内> <http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/contact/>

(共同利用支援係)

大規模ファイル領域の利用について（No. 166）

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用とする利用者に、高速な入出力が可能な大規模ファイル領域を提供しています。大規模ファイル領域へは並列コンピュータからのみアクセス可能です。

【利用方法】

並列コンピュータ (front.isc.tohoku.ac.jp) にログイン後、ユーザディレクトリ上で以下のコマンドを実行し、大規模ファイル領域に作成されたディレクトリのシンボリックリンクを作成します。大規模なデータは、シンボリックリンクとして作成したディレクトリ内に保存してください。大

規模ファイル領域は従来のユーザ領域と比べ、並列コンピュータとの I/O 性能が優れています。

```
yourhost$ ssh front.isc.tohoku.ac.jp -l xxxx (利用者番号)
```

```
[front1]$ ln -s /par/short/xxxx (利用者番号) ./dir_A (任意のディレクトリ名)
```

【ファイル負担経費】

ファイル負担経費は 1TB まで無料、追加容量 1TB につき年額 3,000 円です。追加容量の申請は、以下のページより「ファイル容量【追加／削減】申請書」をダウンロードして必要事項を記入の上、共同利用支援係までご提出ください。

<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/utilize/form.html>

送付先については以下のページをご覧ください。

<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/contact/index.html>

(共同利用支援係，共同研究支援係)

新並列コンピュータでのアプリケーションサービスについて (No. 166)

並列コンピュータの更新に伴い、サービスしている各アプリケーションのバージョンが以下の通りとなります。どうぞご活用ください。

MSC. Marc/Mentat 2013

Gaussian09 D.01

Mathematica 9.0.1

MATLAB R2013b

利用方法については下記ページをご覧ください。

<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/application/index.html>

また利用に関してご不明な点等がありましたら、利用相談までお問い合わせください。

<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/sodan/index.html>

(共同利用支援係)

平成 26 年度の共同研究について (No. 167)

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。今年度の募集に応募されたものについて共同研究専門部会で審査の結果、以下の 9 件が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	有馬 卓司	東京農工大学大学院 先端電気電子部門	アンテナ放射効率低下メカニズムの解明と放射効率改善手法に関する研究
2	岩崎 俊樹	東北大学大学院理学 研究科	ダウンスケール数値シミュレーションに関する研究
3	大見 敏仁 横堀 壽光	東北大学大学院工学 研究科	動脈瘤による血管壁拍動挙動乱れの数値解析
4	河野 裕彦	東北大学大学院理学 研究科	密度汎関数緊密結合法を用いたナノスケール分子の ナノ秒化学反応シミュレーション
5	佐々木大輔	金沢工業大学工学部	工学問題に対する Building-Cube 法の高度化に関する研究
6	茂田 正哉	大阪大学接合科学研 究所	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
7	陳 強	東北大学大学院工学 研究科	大規模問題のための超高速モーメント法に関する研 究
8	豊国 源知	東北大学大学院理学 研究科	円筒座標系 2.5 次元差分法による地震波伝播モデリ ング手法の開発
9	森川 良忠	大阪大学大学院工学 研究科	界面反応の第一原理シミュレーション

(スーパーコンピューティング研究部、共同研究支援係)