

[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.cc.tohoku.ac.jp/tayori/>

Gaussian09 のバージョンアップについて

非経験的分子軌道計算プログラム「Gaussian09」を D.01 から E.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。また、D.01 も引き続きご利用いただけます。

Gaussian は、Carnegie-Mellon 大学の Pople を中心として開発された分子軌道計算プログラムパッケージです。広範囲にわたる非経験的モデルおよび半経験的モデルをサポートしています。

サービス開始日 : 2016 年 3 月 18 日 (金)
バージョン名 : Gaussian09 E.01
サービスホスト : front.cc.tohoku.ac.jp
実行コマンド : subg09
 subg09.D01 (D.01 用コマンド)

D.01 から E.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 E.01 Release Notes
http://www.gaussian.com/g_tech/rel_notes.pdf

HULINKS | Gaussian 09 | Rev E.01 の新しい機能
http://www.hulinks.co.jp/software/gaussian/section01_v09_e01.html

センターの Gaussian09 利用方法については以下のページをご覧ください。
<http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/gaussian.html>

(共同利用支援係)

平成 28 年度の共同研究について (No. 218)

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 11 件が採択されましたのでお知らせします。

[A] 萌芽型課題

No.	申請者	所属	研究課題
A-1	有馬 卓司	東京農工大学 大学院工学研究院	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
A-2	越村 俊一	東北大学 災害科学国際研究所	スーパーコンピュータによるリアルタイム津波浸水・被害予測技術の高度化
A-3	松岡 浩	東北大学 電気通信研究所	連続感度解析の実現を目指した整数型格子ボルツマン法流体解析手法の開発
A-4	三坂 孝志	東北大学 学際科学 フロンティア研究所	Building-Cube 法による大規模高レイノルズ数流れ解析に関する研究

[B] 大規模課題

No.	申請者	所属	研究課題
B-1	伊澤 精一郎	東北大学大学院 工学研究科	乱流の生成とその維持機構に関する研究
B-2	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
B-3	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
B-4	塚原 隆裕	東京理科大学 理工学部	非平衡臨界現象としての壁乱流遷移のパターン形成解明に向けた超大規模直接数値解析
B-5	藤井 孝藏	東京理科大学 工学部	次世代低騒音タイヤ開発に向けた高精度流体音響解析
B-6	森野 裕行	三菱航空機株式会社	民間航空機開発における大規模 CFD 解析の適用
B-7	柳澤 将	琉球大学 理学部	有機-金属界面での電子準位接続の精密決定に向けた GW space-time コードの高速化

(スーパーコンピューティング研究部, 共同研究支援係)

コンパイラのバージョンアップについて (No. 219)

2016年4月1日に FORTRAN90/SX コンパイラおよび MPI/SX ライブラリをバージョンアップしました。詳細につきましては、リリースメモ(pdf)をご覧ください。

	旧バージョン	バージョンアップ後	リリースメモ (pdf)
FORTRAN90/SX コンパイラ	Rev. 501	Rev. 520	sxf90_rev520.pdf sxf90_rev510.pdf
MPI/SX ライブラリ	library 10.2.1	library 10.2.3	mpisx-lib_10.2.3.pdf

なお、コンパイルコマンドに変更はありません。オプションの説明は、sxman コマンドや PDF 版マニュアルで参照できます。

参照方法は、以下をご覧ください。

http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/super/online_manual.html

(共同利用支援係, 共同研究支援係)

平成 28 年度利用負担金について (No. 219)

平成 28 年度の利用負担金は、表 1(大学・学術利用)、表 2(民間機関利用)のとおりとなります。
 なお、今後電気料金が高騰した場合には、年度途中において負担経費を値上げする場合があります。
 あらかじめご了承ください。

表 1 基本利用負担金【大学・学術利用】

区 分	項 目	利用 形態	負 担 額
演 算 負担経費	スーパー コンピュータ	共有	利用ノード数 1(実行数、実行時間の制限有) 無料(備考 2)
			利用ノード数 1~32 まで 経過時間 1 秒につき 0.06 円
			利用ノード数 33~256 まで 経過時間 1 秒につき (利用ノード数-32)×0.002 円+0.06 円
			利用ノード数 257 以上 経過時間 1 秒につき (利用ノード数-256)×0.0016 円+0.508 円
		占有	利用ノード数 32 利用期間 3 ヶ月につき 400,000 円 利用期間 6 ヶ月につき 720,000 円
			利用ノード数 64 利用期間 3 ヶ月につき 720,000 円 利用期間 6 ヶ月につき 1,300,000 円
	利用ノード数 128 利用期間 3 ヶ月につき 1,300,000 円 利用期間 6 ヶ月につき 2,340,000 円		
	並列 コンピュータ	共有	利用ノード数 1~6 まで 経過時間 1 秒につき 0.04 円
			利用ノード数 7~12 まで 経過時間 1 秒につき 0.07 円
			利用ノード数 13~18 まで 経過時間 1 秒につき 0.1 円
			利用ノード数 19~24 まで 経過時間 1 秒につき 0.13 円
		占有	利用ノード数 1 利用期間 3 ヶ月につき 160,000 円 (可視化システムの 20 時間無料利用を含む) 利用期間 6 ヶ月につき 320,000 円 (可視化システムの 40 時間無料利用を含む)
ファイル 負担経費	1TB まで無料、追加容量 1TB につき年額		3,000 円
出力 負担経費	大判プリンタによるカラープリント	フォト光沢用紙 1 枚につき	600 円
		クロス 1 枚につき	1,200 円
可視化 機器室利用 負担経費	1 時間の利用につき		2,500 円

備考

- 負担額算定の基礎となる測定数量に端数が出た場合は、切り上げる。
- 負担額が無料となるのは専用のジョブクラスで実行されたものとし、制限時間を超えた場合には強制終了する。
- 占有利用期間は年度を超えないものとし、期間中に障害、メンテナンス作業が発生した場合においても、原則利用期間の延長はしない。また、占有利用期間中のファイル負担経費は 10TB まで無料とする。
- ファイル負担経費については申請日から当該年度末までの料金とする。

表2 基本利用負担金【民間機関利用】

区分	項目	利用形態	負担額
演算 負担経費	スーパー コンピュータ	共有	利用ノード数1(実行数、実行時間の制限有) 無料(備考2)
			利用ノード数1~32まで 経過時間1秒につき 0.18円
			利用ノード数33~256まで 経過時間1秒につき (利用ノード数-32)×0.006円+0.18円
			利用ノード数257以上 経過時間1秒につき (利用ノード数-256)×0.0048円+1.524円
		占有	利用ノード数32 利用期間3ヶ月につき 1,200,000円 利用期間6ヶ月につき 2,160,000円
			利用ノード数64 利用期間3ヶ月につき 2,160,000円 利用期間6ヶ月につき 3,900,000円
	利用ノード数128 利用期間3ヶ月につき 3,900,000円 利用期間6ヶ月につき 7,020,000円		
	並列 コンピュータ	共有	利用ノード数1~6まで 経過時間1秒につき 0.12円
			利用ノード数7~12まで 経過時間1秒につき 0.21円
			利用ノード数13~18まで 経過時間1秒につき 0.3円
			利用ノード数19~24まで 経過時間1秒につき 0.39円
		占有	利用ノード数1 利用期間3ヶ月につき 480,000円 (可視化システムの20時間無料利用を含む) 利用期間6ヶ月につき 960,000円 (可視化システムの40時間無料利用を含む)
ファイル 負担経費	1TBまで無料、追加容量1TBにつき年額		9,000円
出力 負担経費	大判プリンタによるカラープリント	フォト光沢用紙1枚につき	1,800円
		クロス1枚につき	3,600円
可視化 機器室利用 負担経費	1時間の利用につき		7,500円

備考

- 1 負担額算定の基礎となる測定数量に端数が出た場合は、切り上げる。
- 2 負担額が無料となるのは専用のジョブクラスで実行されたものとし、制限時間を超えた場合には強制終了する。
- 3 占有利用期間は年度を超えないものとし、期間中に障害、メンテナンス作業が発生した場合においても、原則利用期間の延長はしない。また、占有利用期間中のファイル負担経費は10TBまで無料とする。
- 4 ファイル負担経費については申請日から当該年度末までの料金とする。

(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. 219)

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@cc.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、数値シミュレーションの研修を行うなど）
- ・ 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@cc.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. 219)

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お申し込みください。

<http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/utilize/business.html>

【問い合わせ先】

共同利用支援係 (022-795-6251, uketuke@cc.tohoku.ac.jp)

(共同利用支援係)

大規模科学計算システムの機関（部局）単位での利用について（No. 219）

サイバーサイエンスセンターでは、大規模科学計算システムをご利用いただくにあたり、利用負担金を利用者単位のほか、機関（部局）単位で年間定額をお支払いいただくことで利用できるサービスも提供しております。

このサービスは、機関（部局）単位でお申し込みいただくことにより、その構成員であれば、各研究室が個別に利用負担金を支払うことなく、下記システムを利用できる仕組みとなっております。

これまで計算機を利用する機会がなかった研究者による新たなニーズへの対応や研究室の計算機では実行できなかった大規模シミュレーションが実行可能であり、また自前で計算機を導入するためのコストや運用コストも削減可能です。

すでにご利用いただいている機関（部局）からは、当初の予想を上回るご利用をいただき、ご好評をいただいております。

占有利用・共有利用については必要に応じて取り混ぜながら、ご予算に合わせて、年間定額により利用することが可能となっておりますので、ぜひご相談ください。

記

【利用可能なシステム】

- ・スーパーコンピュータ（SX-ACE）
- ・並列コンピュータ（LX 406Re-2）
- ・ストレージシステム
- ・大判カラープリンター（光沢紙、ソフトクロス紙）
- ・三次元可視化システム

【問い合わせ先】

共同利用支援係 (022-795-6251, uketuke@cc.tohoku.ac.jp)

(スーパーコンピューティング研究部, 共同研究支援係, 共同利用支援係)