

[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/>

利用負担金額の表示コマンドについて (No. 234)

本センター大規模科学計算システムでは、利用者の利用額とプロジェクトごとに集計した負担額、請求情報を表示するためのコマンドとして ukakin, pkakin があります。また、利用者のジャーナル情報とプロジェクトごとに集計したジャーナル情報を CSV 形式で出力するコマンド ulist, plist があります。これらのコマンドは、並列コンピュータ (front.cc.tohoku.ac.jp) にログインして使用します。

コマンド名	機 能
ukakin	利用者ごとの利用額を各システム、月ごとに表示
pkakin	プロジェクトごとに集計した負担額、請求情報を表示
ulist	利用者ごとのジャーナルを CSV 形式で出力
plist	プロジェクトごとに集計したジャーナルを CSV 形式で出力

いずれも、前日までご利用いただいた金額を表示します。コマンド使用例は大規模科学計算システムウェブページをご覧ください。

負担金の確認

<http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/utilize/academic.html#負担金の確認>

(共同利用支援係)

研究成果リスト提出のお願い (No. 235)

本センターでは、学術研究を支える世界最高水準の大規模科学計算システムの導入と利用環境の整備・拡充を行い、研究の発展に資することを心掛けてまいりました。今後もシステムの整備を進めていくには、大規模科学計算システムが多くの研究分野で必要不可欠であり、かつ研究成果が得られていることを広くアピールしていく必要があります。

つきましては、本センター大規模科学計算システムを利用して得られた研究成果を、下記により提出くださるようお願い申し上げます。なお、提出していただく研究成果は、平成 28 年度中に発表されたものとしします。

記

1. 研究成果リスト：著者名、論文名、掲載誌（巻号頁）、発表年

- 2. 提出方法 : 電子メールでお願いします。
提出先メールアドレス seika@cc.tohoku.ac.jp
- 3. 締切り日 : 平成 29 年 4 月 21 日 (金)
- 4. 問合せ先 : 共同利用支援係 (022-795-6251, uketuke@cc.tohoku.ac.jp)

＜＜ 論文等への利用の明記について ＞＞

研究成果を論文等で発表する場合には、本センターを利用した旨を明記くださるようお願いいたします。

－ 記入例 －

「本研究の実験結果の一部は、東北大学サイバーサイエンスセンター大規模科学計算システムを利用して得られた。」

Part of the experimental results in this research were obtained using supercomputing resources at Cyberscience Center, Tohoku University.

(共同利用支援係)

コンパイラのバージョンアップについて (No. 238)

2016 年 10 月 24 日に FORTRAN90/SX コンパイラをバージョンアップいたします。
詳細につきましては、リリースメモをご覧ください。

対象システム	コンパイラ名	旧バージョン	新バージョン	リリースメモ
SX-ACE	C++/SX	Rev.110	Rev.111	C++/SX リリースメモ.pdf *

*リリースメモは以下からご参照ください。

http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/PDF/20170321/c++_rev111.pdf

なお、コンパイルコマンドに変更はありません。オプションの詳細は、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)

バッチリクエストの最大経過時間の指定について (No. 239)

バッチリクエストの最大経過時間の指定方法についてご案内します。

適切な最大経過時間を指定して投入することで、より効率的にリソースが割り当てられるようになります。特に実行時間が短いリクエストは、リソースの隙間に割り当てられやすくなり、待ち時間を短くすることができますので、指定することをおすすめします。

【最大経過時間の指定方法】

バッチリクエストファイルに以下のオプションを記述してください。

```
#PBS -l elapstim_req=hh:mm:ss
```

- ・ 設定時間は、時：分：秒を hh:mm:ss の形式で指定します。
- ・ 最大経過時間を超えるとリクエストは強制終了になりますので、必要十分な時間を指定するようご注意ください。

- 省略した場合は、実行時間制限の規定値（通常利用の場合、1 週間）に設定されます。実行時間が規定値を超える場合は、必ず指定してください。最大 1 ヶ月まで指定可能です。（規定値／最大値については表 1, 2 をご参照ください）

(例) バッチリクエストファイル（最大経過時間を 12 時間に設定する場合）

```
#PBS -q sx -b 32
#PBS -l elapstim_req=12:00:00
cd $PBS_0_WORKDIR
./a.out
```

表 1 スーパーコンピュータ (SX-ACE) の利用形態と制限値

利用形態	利用 ノード数 (※1)	実行時間制限 (経過時間) (※2)	メモリサイズ 制限	-q オプション	-b オプション
通常	1~1,024	規定値：1 週間 最大値：1 ヶ月	60GB ×ノード数	sx	利用ノード数
無料	1	1 時間	60GB		f
デバッグ	1~16	2 時間	60GB ×ノード数	debug	利用ノード数
	17~32	24 時間			

表 2 並列コンピュータ (LX 406Re-2) の利用形態と制限値

利用形態	利用 ノード数 (※1)	実行時間制限 (経過時間) (※2)	メモリサイズ 制限	-q オプション	-b オプション
通常	1~24	規定値：1 週間 最大値：1 ヶ月	128GB ×ノード数	lx	利用ノード数
アプリケーション	1	なし	128GB		a
会話型	1 (6 コアまで)	1 時間 (CPU 時間合計)	8GB	-	-

※1：2 ノード以上を利用した並列実行には MPI の利用が必須。

※2：4 月から通常利用の実行時間制限を「規定値：1 週間／最大値：1 ヶ月」に統一。

(共同利用支援係, 共同研究支援係)

Gaussian16 の提供開始について (No. 239)

非経験的分子軌道計算プログラム「Gaussian16」のサービスを開始しましたのでお知らせいたします。また、Gaussian09 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 : 2017 年 4 月 3 日 (月)
バージョン名 : Gaussian16 A.03
サービスホスト : front.cc.tohoku.ac.jp (並列コンピュータ)
実行コマンド : subg16
 subg09 (Gaussian09 用コマンド)

新機能の概要、機能の詳細、実行方法については開発元 HP、およびセンターHP をご覧ください。

開発元 HP

<http://gaussian.com/relnotes/>

HPC SYSTEMS Gaussian16 製品情報

<http://www.hpc.co.jp/gaussian.html>

センターHP

<http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/gaussian.html>

(共同利用支援係)

数式処理プログラム Mathematica のバージョンアップについて (No. 239)

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 11.0.1
バージョンアップ日 : 2017 年 4 月 3 日 (月)
サービスホスト : front.cc.tohoku.ac.jp (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、実行方法については開発元 HP、およびセンターHP をご覧ください。

開発元 HP

<http://www.wolfram.com/mathematica/new-in-11/>

センターHP

<http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/mathematica.html>

(共同利用支援係)

科学技術計算言語 MATLAB のバージョンアップについて (No. 239)

科学技術計算言語「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 R2017a
バージョンアップ日	:	2017 年 4 月 3 日 (月)
サービスホスト	:	front.cc.tohoku.ac.jp (並列コンピュータ)
起動コマンド	:	matlab (GUI 版)
	:	matlab -nosplash -nodesktop -nodisplay (テキスト版)

新機能の概要、機能の詳細、実行方法については開発元 HP、およびセンターHP をご覧ください。

開発元 HP

http://www.mathworks.co.jp/products/new_products/latest_features.html

センターHP

<http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/matlab.html>

(共同利用支援係)

平成 29 年度利用負担金について (No. 239)

平成 29 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

- 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。

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)

平成 29 年度共同研究について (No. 240)

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 12 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	大規模周期構造上に置かれたアンテナの特性解析に関する基礎検討
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	佐々木 大輔	金沢工業大学 工学部	境界埋め込み法を用いた大規模流体解析手法の研究

[B] 一般課題

No.	申請者	所属	研究課題
B-1	青木 秀之	東北大学大学院 工学研究科	Large Eddy Simulation によるベルカップ塗装機における噴霧流動現象の大規模数値解析
B-2	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-3	河野 裕彦	東北大学大学院 理学研究科	ナノ・バイオ分子の励起状態ダイナミクスと反応動力学シミュレーション
B-4	茂田 正哉	大阪大学 接合科学研究所	プラズマプロセスにおけるナノ粒子群の集団形成および輸送過程の大規模数値シミュレーション
B-5	陳 強	東北大学大学院 工学研究科	高性能な大規模アンテナの電磁界数値解析法に関する研究
B-6	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-7	藤井 孝藏	東京理科大学 工学部	マイクロデバイスの新たな利用法に向けた流れの機構解明とデバイス設定ガイドランスの導出
B-8	前田 一郎	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-9	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

(スーパーコンピューティング研究部、共同研究支援係)

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. 240)

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限り、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）
- ・ 講師派遣の希望の有無
- ・ 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. 240)

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. 240）

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)