

[30_02]九州大学大型計算機センター広報表紙奥付等

<https://hdl.handle.net/2324/1470304>

出版情報：九州大学大型計算機センター広報. 30 (2), 1997-06. 九州大学大型計算機センター
バージョン：
権利関係：



お 知 ら せ

VPP700/56 版 Gaussian94 公開のお知らせ	192
平成9年3月からの計算サービス時間のお知らせ	194
スーパーコンピュータのTSSサービスの試行運用について (UXP)	195
平成9年度講習会開催計画について	196
「九州大学大型計算機センターの利用に関する暫定措置を定める規定」の一部改正の お知らせ	197
ライブラリの運用停止のお知らせ	198
1997年度(平成9年度)プログラムライブラリ開発計画のお知らせ	199
国際学術共同研究に係わる計算機利用申請の募集について	199
平成9年度利用者旅費について	200

VPP700/56 版 Gaussian94 公開のお知らせ

分子軌道計算プログラム Gaussian94 がスーパーコンピュータ VPP700/56 上で利用可能となりました。

なお、VPP700/56 版 Gaussian94 は 1PE(Processing Element) のみでの動作です。

◇利用環境

VPP700/56 版 Gaussian94 の利用は汎用計算機 M-1800/20U の UXP システム (ホスト名 kyu-cc, IP アドレス 133.5.9.1) からバッチリクエスト (NQS) により行ないます。

◇ Gaussian94 の利用可能なディレクトリ

VPP700/56 版 Gaussian94 のプログラムは、kyu-cc のホームディレクトリ下の VPP ディレクトリに作成してください (Fortran, C プログラムを実行する要領と同じです)。

例として、Gaussian94 用のディレクトリ Gaussian を VPP 下に作成します。

```
kyu-cc% cd ~/VPP      <--- VPP700/56 の作業用ディレクトリに移動
kyu-cc% mkdir Gaussian <--- Gaussian 用のディレクトリの作成 (あくまでも例です)
kyu-cc% cd Gaussian  <--- Gaussian 用のディレクトリ (例) への移動
```

◇ Gaussian94 の環境設定

まず、M-1800/20U の環境設定をおこないます。M-1800/20U の UXP システム (kyu-cc) のホームディレクトリ下の .cshrc に以下を追加してください (既に設定が完了している場合は追加する必要はありません)。

```
setenv g94root /usr/local/gaussian94
setenv GAUSS_SCRDIR /tmp
source $g94root/g94/bsd/g94.login
```

kyu-cc での Gaussian94 の利用方法はセンターニュース No.546 を参照願います。

VPP700/56 で Gaussian94 を利用するには、M-1800/20U と同様の環境設定を行う必要があります。kyu-cc のホームディレクトリ下の VPP ディレクトリに移動し、エディタ (vi, mule) によって以下の内容を (kyu-cc の設定と同じです) “.cshrc” というファイル名で作成します。

```
setenv g94root /usr/local/gaussian94
setenv GAUSS_SCRDIR /tmp
source $g94root/g94/bsd/g94.login
```

.cshrc は必ず VPP 直下 に作成して下さい。

◇ Gaussian94 の動作するキュー

VPP700/56 での Gaussian94 の実行は、Fortran, C と同様「バッチリクエスト」と呼ばれるシェルスクリプトに処理手順を記述し、qsub コマンドでジョブを投入します。また、subg94 コマンドは NQS の手順を簡略化したものです。

投入できるキューは以下の通りです。

キュー名	CPU 時間	記憶域	処理形態
s	60 分	1.7GB	1PE
p1	1200 分	1.7GB	1PE

◇ subg94 コマンド

subg94(/usr/local/gaussian94/g94/bsd/subg94) により、M-1800/20U の UXP システムから簡単にジョブを投入できます。なお、プログラムファイル名は必ずサフィックスを“.com”としてください。

プログラム test.com を s キューに投入する場合は以下のように行います。

```
kyu-cc% subg94 s test  <---s キューへの投入
Request 7308.kyu-cc submitted to queue: s.
kyu-cc%
```

◇ qsub コマンド

一般のバッチ処理と同様に、スクリプトファイルを記述し、qsub(/usr/bin/qsub) コマンドでバッチ処理を依頼することも可能です。

以下はスクリプトファイルの記述例です。

```
#
cd Gaussian
g94 test.com
```

スクリプトファイルを a.sh とし、qsub コマンドにより p1 キューに投入します。

```
kyu-cc% qsub a.sh  <---p1 キューへの投入
Request 7309.kyu-cc submitted to queue: p1.
kyu-cc%
```

(ライブラリ室 ダイヤルイン 092-642-2295)

e-mail : f70029a@kyu-cc.cc.kyushu-u.ac.jp

(センターニュース No.554, 平成9年2月25日発行)

平成9年3月からの計算サービス時間のお知らせ

平成9年3月1日から平成9年11月30日までの計算サービス時間は下記のとおりです。

計算サービス時間

システム利用	サービス時間	各種保守作業による停止時間
UXP MSP	原則通年24時間 ただし、右欄保守作業の停止時間を除く	◇定期保守 毎週水曜日 5時～12時30分 ◇空調機保守 第1,3日曜日 7時30分～18時

センター内利用	曜日	開始時刻	終了時刻
		通年	3月～11月
オープン利用機器	月～火	9:00	22:00
	水	12:30	
	木～金	9:00	

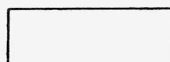
- 備考
- 毎週水曜日は、計算機システムの保守のため12時30分から計算サービスを開始します。
 - 16時45分以降（月～金）と土曜日及び日曜祝日は、無人運転を行っており、システム障害が発生した場合は、約20分後に自動的に計算サービスを再開します。
ただし、30分経過後に再開できない場合は、計算サービスを打切らせていただきます。
 - 臨時の停止を行う場合は、その都度センターニュース等でお知らせします。

サービス時間表

曜日	時間帯			
	5:00	9:00	12:30	23:00
月曜日 火曜日				
水曜日		定期保守		
木曜日 金曜日				
土曜日 日曜日				

ただし、第1,3日曜日は空調機保守のため下記のとおりです。

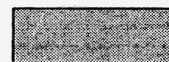
日曜日	7:30	18:00
		空調機保守



利用可能



センター外からの
利用のみ可能



定期保守等で
利用不可

(システム運用掛 ダイヤルイン 092-642-2307)

(センターニュース No.554, 平成9年2月25日発行)

スーパーコンピュータのTSSサービスの試行運用について (UXP)

4月1日からスーパーコンピュータ (VPP700) のTSSサービスの試行運用を次のとおり実施いたします。

1) 計算サービス時間

UXP, MSPの計算サービス時間と同じです。

計算サービス時間

システム利用	サービス時間	各種保守作業による停止時間
UXP MSP	原則通年24時間 ただし、右欄保守作業の停止時間を除く	◇定期保守 毎週水曜日 5時～12時30分 ◇空調機保守 第1,3日曜日 7時30分～18時

- 備考
- 毎週水曜日は、計算機システムの保守のため12時30分から計算サービスを開始します。
 - 16時45分以降 (月～金) と土曜日及び日曜祝日は、無人運転を行っており、システム障害が発生した場合は、約20分後に自動的に計算サービスを再開します。
ただし、30分経過後に再開できない場合は、計算サービスを打ち切らせていただきます。
 - 臨時の停止を行う場合は、その都度センターニュース等でお知らせします。

2) 制限値

CPU時間 60分
リージョンサイズ 100MB

スーパーコンピュータ VPP700/56

適用ジョブ	キュー	CPU時間	リージョン	備考
バッチジョブ	c	60分	100MB	コンパイル専用
	s	60分	1.7GB	非並列
	p1	1200分	1PE 当たり 1.7GB	非並列
	p8			8PE並列
	p16			16PE並列
p32	32PE並列			
TSSジョブ		60分	100MB	

3) 負担金

演算負担金として会話型処理のスーパーコンピュータを利用する場合の1秒につき3円を請求します。

4) IPアドレスとドメイン名

IPアドレス 133.5.9.70
ドメイン名 kyu-vpp. cc. kyushu-u. ac. jp

(システム管理掛 ダイヤルイン 092-642-2308)

(センターニュース No.555, 平成9年3月19日発行)

平成9年度講習会開催計画について

平成9年度 講習会開催計画

開催日	講習会名	内 容	受講対象者	募集人員
4月17日(木) 18日(金)	UXP初級	UNIXコマンド, X-window, エディタ (mule)の基本的な使用方法の解説及び実習		40名
4月24日(木) 25日(金)	MSP初級	PFDとデータセットユーティリティを中心としてMSPにおける会話型処理の基本の解説及び実習		40名
5月 8日(木)	プログラム言語利用法 (UXP)	センターのUXPシステムでFortran, Cなどのプログラム言語を利用するための基本的なコマンド, 環境の解説及び実習 (Fortran, Cプログラムの文法, ベクトル化, 並列化プログラミングの解説は行いません)		30名
5月 9日(金)	プログラム言語利用法 (MSP)	センターのMSPシステムでFortran, Cなどのプログラム言語を利用するための基本的なコマンド, 環境の解説及び実習 (Fortran, Cプログラミングについての解説は行いません)		30名
5月19日(月)	パソコンLAN端末	パソコンをLAN端末にして大型計算機等を利用する方法について解説	LAN利用初心者	50名
6月 5日(木)	電子メール・電子ニュース	UXP, wisdom における電子メール, 電子ニュースの利用法の説明及び実習	初心者 (UXP初級を受講しておくことが望ましい)	40名
6月 9日(月)	ベクトル化プログラミング	VPP700/56の単一PE上でのベクトル化プログラミング, チューニングツールの使用方法の解説 (並列化プログラミングについての解説は行いません)		30名
6月13日(金)	文献情報検索	文献情報検索システムAIRを用いた文献情報の検索と実習 (MSP)	初心者	40名

6月20日(金)	ダイヤルアップIP接続	パソコンを用いてダイヤルアップIP接続で大型計算機センター等を利用する方法についての解説	LAN端末利用初心者(パソコンLAN端末講習会を受講しておくことが望ましい)	50名
6月26日(木)	UXP中級	UXPにおけるファイル・プロセス管理, プリンタ出力及び各種メディアへのバックアップについての解説と実習		30名

その他 並列化プログラミング, AVS, MASPHYC, α-Flow, 統計パッケージ, MARC/Mentatなどを予定しています。
 具体的な日程は決まり次第センターニュースでお知らせします。

(センターニュース No.556, 平成9年4月7日発行)

「九州大学大型計算機センターの利用に関する暫定措置を定める規定」の一部改正のお知らせ

平成9年4月から消費税法と地方消費税法が改正され、消費税が5%となります。これに伴い、「九州大学大型計算機センターの利用に関する暫定措置を定める規程」(利用負担金)別表中「各区分共通負担金」の項を平成9年4月1日より下表(利用負担金表)のとおり改正します。

改正内容は「各区分共通負担金」の現行「利用負担金の合計額に100分の3を乗じて得た額」が「利用負担金の合計額に100分の5を乗じて得た額」になります。

利用負担金表

区 分		負 担 金 の 算 定 基 準		
演 算 負 担 金	演 算	スーパーコンピュータを利用する場合 1件の演算時間のうち 5分まで 1秒(1秒未満の端数があるときは、その端数を切り上げる。以下この表において同じ。)につき 3円 5分を超え15分まで 1秒につき 1円 15分超 1秒につき 0.4円		
		汎用コンピュータを利用する場合 1件の演算時間のうち 5分まで 1秒につき 4円 5分を超え15分まで 1秒につき 2円 15分超 1秒につき 1円		
金	会 話 型 処 理	スーパーコンピュータを利用する場合 1秒につき 3円 汎用コンピュータを利用する場合 1秒につき 4円 分散メモリ型小規模並列コンピュータを利用する場合 1秒につき 1円 ライブラリサーバを利用する場合 1秒につき 0.5円		
		専用回線又は交換回線を利用する場合 接続時間 1分(1分未満の端数があるときは、その端数を切り上げる。以下この表において同じ。)につき 0.5円		
入 出 力 負 担 金	端 末 接 続	専用回線又は交換回線を利用する場合 接続時間 1分(1分未満の端数があるときは、その端数を切り上げる。以下この表において同じ。)につき 0.5円		
	プ リ ン タ	プリンタ用紙 1頁につき 4円 高画質カラープリンタ用紙(A5判) 1頁につき 180円 高画質カラープリンタ用紙(A4判) 1頁につき 360円 大型カラープリンタ用紙(A0判) 1頁につき 4,000円		
フ ァ イ ル 使 用 負 担 金	デ ィ ス ク	使用期間 1日当たり 500キロバイト(500キロバイト未満の端数があるときは、その端数を切り上げる。)につき 1円		
	マ ス ス ト レ ー ジ	使用期間 1月(1月未満の端数があるときは、その端数を切り上げる。)当たり100メガバイト(100メガバイト未満の端数があるときは、その端数を切り上げる。)につき 500円		

ワークステーション 負担金	使用時間 1分につき 3円
データベース負担金	<p>特定データベースを利用する場合 使用期間 1年(1会計年度)当たり</p> <p>1種類のみを利用するとき 3,000円 (1種類のみを利用し、データベース負担金を既に支払った者が、2種類以上利用することとなった場合の同負担金は2,000円を加算するものとする。)</p> <p>2種類以上を利用するとき 5,000円</p>
各区分共通負担金	各区分に従い算出した利用負担金額の合計額に100分の5を乗じて得た額
<p>備考</p> <ol style="list-style-type: none"> 1 演算負担金バッチ処理の項中スーパーコンピュータを並列プログラムで利用する場合の負担金については、各演算時間中その最長の演算時間を基にして算出するものとし、スーパーコンピュータを17並列以上のプログラムで利用した場合の負担金の算出基準は、同項に規定する演算時間の区分に従い各々その単価の2倍とする。 2 演算負担金会話型処理の項中分散メモリ型小規模並列コンピュータ利用の場合の負担金については、フロントエンドプロセッサの演算時間をその算出基準とする。 3 利用負担金は、利用者の登録番号(利用者番号に支払いコードを加えたもの)別に月ごとに集計する。ただし、データベース負担金については、当該利用を開始した月に集計する。 4 利用負担金額(各区分共通負担金を除く。)の合計額が100円に満たない場合は、これを100円に切り上げる。 5 この表において「特定データベース」とは、センターが第三者との有償契約に基づき保有しているデータベースのうちセンターが指定したものをいう。 	

(システム運用掛 ダイヤルイン 092-642-2307)

(センターニュース No.556, 平成9年4月7日発行)

ライブラリの運用停止のお知らせ

以下のプログラムライブラリは、過去のライブラリ統計の結果ここ数年ほとんど利用がないこと、および開発者の意向などの理由から、7月末日をもって運用を停止する予定です。

運用停止により支障の生じる方は、お早めに連絡願います。

<p>MINIMOS GSCF3 FSPICE/VP</p>
--

なお、センターニュース No.553 でお知らせしたセンター2階ワークステーション qviss, medics で公開中の旧バージョンの MENTAT も 4 月末日で運用を停止し、新バージョンに一本化する予定です。

(ライブラリ室 ダイヤルイン 092-642-2295)

e-mail : f70029a@kyu-cc.cc.kyushu-u.ac.jp

(センターニュース No.557, 平成9年4月17日発行)

1997年度(平成9年度)プログラムライブラリ開発計画のお知らせ

1997年度(平成9年度)前期分として承認された開発計画は下表のとおりです。

開発番号	課題名	開発者・所属	開発期間	開発時間	備考
26-1	振動する2次元翼まわりの非定常・圧縮性・粘性流の数値解析プログラムの開発	磯貝 紘二, 新本 康久 九州大学 工学部 航空工学科	1997 4. 1 ～ 1998 3.31	100 時間	継続
26-2	流体の熱物性値機械計算用汎用プログラム・パッケージ PROPATH 第 10.1 版および第 11.1 版の開発	伊藤 猛宏 (代表) 九州大学 工学部 機械工学科	1997 4. 1 ～ 1998 3.31	50 時間	継続
26-3	α -Flow 用データ処理プログラム	井上 雅弘 九州大学 工学部 資源工学科	1997 4. 1 ～ 1998 3.31	50 時間	継続
26-4	量子力学的3体系の束縛状態の厳密解	上村 正康 (代表) 九州大学 理学部 物理学科	1997 4. 1 ～ 1998 3.31	60 時間	継続
26-5	ガウス型基底関数を用いた密度汎関数法プログラム	柏木 浩 (代表) 九州工業大学 情報工学部	1997 4. 1 ～ 1998 3.31	60 時間	継続
26-6	大型海洋構造物の流力弾性数値解析コードの開発	香川 洸二, 安澤 幸隆 九州大学 工学部 船舶海洋システム工学科	1997 4. 1 ～ 1998 3.31	50 時間	継続
26-7	精度保証付き数値計算システム	中尾 充宏, 山本 野人 九州大学 大学院 数理学研究科	1997 4. 1 ～ 1998 3.31	30 時間	継続
26-8	NASA 惑星画像データの画像処理と解析を行なう AVS モジュールの開発	山元 規靖 福岡工業大学 情報工学部 情報通信工学科	1997 4. 1 ～ 1998 3.31	100 時間	新規

(ライブラリ室 ダイヤルイン 092-642-2295)

e-mail : f70029a@kyu-cc.cc.kyushu-u.ac.jp

(センターニュース No.557, 平成9年4月17日発行)

国際学術共同研究に係わる計算機利用申請の募集について

本センターでは、大型計算機センターの利用資格を有する方を代表者とする国際共同研究について、海外の研究者を含む研究グループからの課題申請の受け付けを平成7年度より開始しました。

平成9年度も数件程度の課題を公募し、採択された研究課題に要する計算機利用負担金はセンターが負担することにいたしました。どうぞ奮ってご応募ください。

なお、「国際学術共同研究に係わる計算機利用申請書」の様式は共同利用掛に用意してありますので、ご請求ください。

(共同利用掛 ダイヤルイン 092-642-2305)

(センターニュース No.557, 平成9年4月17日発行)

平成9年度利用者旅費について

遠隔地の利用者が、本センターへ出向き計算機を利用する場合、利用者からの申請に基づいて利用者旅費が支給される制度があります。この制度は本センターを利用するための環境が、不十分な遠隔地の利用者の便宜を図るためのものです。本制度を利用して計算機の利用を希望される方は、下記により手続きをしてください。

記

1. 利用期間 平成9年4月1日～平成10年3月31日
2. 利用者の出張期間及び旅費支給基準

地 区	出 発 地	出張期間	日 当	宿泊料	備 考
1～6	北海道, 東北, 東京, 名古屋, 京都, 大阪, 四国等	4泊5日以内	円 1,700	円 8,700	センター内利用 期間: 3日以内
	鹿児島, 宮崎, 沖縄	3泊4日以内	1,700	8,700	センター内利用 期間: 3日以内
7	広島, 山口, 大分, 長崎, 熊本	2泊3日以内	1,700	8,700	センター内利用 期間: 3日以内
	上記以外の地域 (佐賀, 北九州等)	日帰り	1,700	—	センター内利用 期間: 3日以内

イ. 旅費は、国家公務員等の旅費に関する法律及び文部省所管旅費規則等の定めるところにより、鉄道賃の普通料金を支給します。ただし、片道50Km以上の場合は急行料金片道100Km以上の場合は特急料金を支給します。また、日当・宿泊料については、上表のとおり、行政職俸給表(一)1級相当額を支給します。

ロ. 旅費の支給は、精算払いです。

ハ. 利用者は、所属の機関に設置された連絡所に備付けの「利用者旅費支給申請書」に必要事項を記入して当該連絡所に提出するものとし、提出を受けた連絡所は当該申請書の記入事項を確認の上、連絡所責任者印を押印し、申請者の所属長(実際には人事担当部署)に提出して、本センターに出張利用予定日の10日前までに必ず到着するように手続きをとってください。

ニ. 文部省科学研究費補助金(科研費)による利用者には旅費の支給はできません。

ホ. 出張利用は申請者本人に限ります。代理者による出張利用は認められません。

ヘ. 宿泊所のあっせん等はいりませんので、利用者各自で手配してください。

3. その他

出張利用申請書を連絡所に提出しただけでは、旅費の支給が承認されたことにはなりません。本センターで申請の内容を審査し、該当する場合は、後日出張依頼書を連絡所宛に送付します。なお、旅費については、予算の都合上出張期間の短縮を含め、調整させていただく場合がありますので、予め御了承ください。

(共同利用掛ダイヤル 092-642-2305)

(センターニュース No.557, 平成9年4月17日発行)