

名古屋大学情報基盤センター

共同利用システム速報

No. 167

平成 29 年 3 月 10 日 発行

1. 年度切り替え及び保守等について・・・・・・・・・・・・・・・・・・[1]
2. 年度末・年度初めのジョブの取り扱いについて・・・・・・・・・・[1]
3. Gaussian16 ワークショップ開催のお知らせ・・・・・・・・・・[1]
4. Intel コンパイラ Ver. 2013 のメーカサポート終了について・・・・・・・・[2]
5. 新しいジョブクラス (FX100) のお知らせ・・・・・・・・・・[2]
6. 平成 29 年度講習会計画について・・・・・・・・・・・・・・・・[2]
7. 期限切れファイルの消去について・・・・・・・・・・・・・・・・[3]
8. 研究成果入力・利用報告書について・・・・・・・・・・・・・・・・[3]

1. 年度切り替え及び保守等について

スパコン (FX100, CX400, UV2000) 年度切替処理&保守

平成 29 年 3 月 31 日 (金) 15:00 ~ 平成 29 年 4 月 3 日 (月) 13:00

メールサーバ(nucc) セキュリティ対策&保守

平成 29 年 4 月 1 日 (土) 13:00 ~ 19:00 頃 (作業終了次第サービス開始します)

次年度継続されてない方は 4 月 3 日 9:00 でメールがご使用いただけなくなります。

2. 年度末・年度初めのジョブの取り扱いについて

今年度の計算サービスは、3 月 31 日(金) 15:00 に終了します。終了時点で実行中や実行待ちとなっているジョブは強制終了となります。継続申請を行った利用者の方は平成 29 年度の計算サービス開始後に再度ジョブ投入をおこなってください。

3. Gaussian16 ワークショップ開催のお知らせ

演題 : Gaussian16 の利用に向けて

～物性や反応性の背景の実測データとともに探る～

講師 : Dr.Roger Amos (オーストラリア国立大学)

Dr.Rika Kobayashi (オーストラリア国立大学)

和佐田 (筒井) 祐子博士 (名古屋工業大学)

日時 : 平成 29 年 3 月 21 日 (火) 13:00 ~ 16:00

場所 : 情報基盤センター 4F 演習室

定員 : 40 名

内容 : 現在の物質科学の研究の現場では、物性や反応性を電子状態に基づいて解釈する

ことが、基礎、応用分野を問わず日常化してきています。電子状態計算プログラム Gaussian シリーズの最新版 Gaussian16 が名古屋大学情報基盤センターのスーパーコンピュータで利用できるようになりました。本 Workshop では Gaussian16 で強化された励起状態計算に関して、紫外・可視吸収スペクトルデータとの比較によく用いられる TDDFT 計算を例にして、計算の理論、応用、実際の計算についての解説を交えて講演します。希望者については Gaussian 利用についての相談を受け付けます。(オーストラリア国立大学講師の方は英語での対応となります)

申込締切：3月17日（金）。ただし定員になり次第締め切ります。

申込方法：<http://www.icts.nagoya-u.ac.jp/ja/center/service/course.html>

【お問い合わせ】

名古屋大学情報基盤センター 高橋

電話：052-789-4372 メール：kyodo@itc.nagoya-u.ac.jp

4. Intel コンパイラ Ver. 2013 のメーカサポート終了について

このたび、Intel コンパイラ Ver.2013 のメーカサポートが終了いたしました。そのため、平成29年4月3日（月）13:00から Ver.2015 をシステムの標準といたします。

詳しくは、利用の手引き P.109 9.1.2 環境設定

<http://www.icts.nagoya-u.ac.jp/ja/sc/pdf/UserGuide.pdf>
をご参照ください。

5. 新しいジョブクラス (FX100) のお知らせ

情報基盤センターでは、平成27年9月のFX100稼働以降、安定運用を重視し、TOFU2によるノード間通信に2レーンを用いた運用をしております。

このたび、安定運用を考慮した上で、さらなる性能向上を目的に、TOFU2のノード間通信に4レーンを用いてリンクバンド幅性能を強化した、新しいジョブクラスを平成29年4月11日（火）より提供（試行）いたします。

<NEW> FX100システム(ノード間通信強化型)のバッチジョブクラス

リソースグループ名	最大ノード数	最大CPUコア数	最大経過時間(標準値)	最大経過時間(制限値)	最大メモリ容量(**)	割当方法(Tofu)	割当方法(離散)(***)	備考
fx4-small(*)	12	384	24時間	48時間	28GiB x 12	不可	標準	ノード間通信 4レーン

* 全ノード(2880ノード)の内、72ノードがこのリソースグループに割当てられています。

** ユーザープログラムが使用可能な最大メモリ容量はノードあたり28GiBです。

*** 割り当てのデフォルトは離散となります。

6. 平成29年度講習会計画について

平成29年度講習会を開催いたします。詳細な開催日時は決まり次第改めてご連絡いたします。

ご参考：講習会 <http://www.icts.nagoya-u.ac.jp/ja/center/service/course.html>

7. 期限切れファイルの消去について

平成29年度に継続申請がされていない利用者のファイル(全システム)は、4月末日に消去しますので、ご承知おきください。

必要なファイルは、3月31日(金)15:00までに外部媒体にバックアップするか、他の継続申請を行う登録番号にファイルを移行してください。

8. 研究成果入力・利用報告書について

<研究成果入力>

下記 URL にアクセスして今年度の研究成果入力をお願いいたします。

<https://q.icts.nagoya-u.ac.jp/index.php/972727>

<継続されない方へ>

利用者が本センターの利用を終了されたときは、報告書提が必要となります。

下記 URL から報告書をダウンロードしてご提出ください。

<http://www.icts.nagoya-u.ac.jp/ja/sc/riyou/apps.html>

提出先

〒464-8601

名古屋市千種区不老町

名古屋大学情報連携統括本部情報推進部情報基盤課 共同利用担当