

目 次

| | |
|-----------------------------------------|---|
| 1. スーパーコンピュータの長時間ジョブの利用者へ ～お願い～ | 1 |
| 2. hpc のバッチジョブ・キューp1024 のプロセス数の制限緩和について | 3 |
| 3. 並列プログラミング講習会 | 3 |
| 4. 分子軌道法計算プログラムGaussian03 利用講習会の開催について | 4 |
| 5. 平成 18 年度利用者旅費について | 4 |
| 6. hpc システムの/home ファイルの容量制限の実施について (再掲) | 5 |
| 7. 平成 18 年度講習会計画について (再掲) | 6 |
| 8. 平成 18 年度 I T 相談コーナー担当者について (再掲) | 7 |

1. スーパーコンピュータの長時間ジョブの利用者へ ～お願い～

昨年 3 月にスーパーコンピュータが機種更新され、使用できる CPU 数、メモリ量などが大幅に増大し、ジョブの 1 件当たりの CPU 時間も飛躍的に伸びています。その一方で、システムがエラーを起こした場合には、実行中のジョブが被る影響は甚大になっています。現在、システム的なエラーが起こった場合、ジョブは最初から再実行されるようになっています。ジョブによっては、長時間走っていてあと数時間で終了というような場合もあります。再実行されれば、結果的には同じことなのですが、その時間が無駄になります。長時間ジョブの場合には、そこで費やされる時間はユーザにとっては見過ごせないものとなります。そこで、長時間ジョブの利用者の方には、ジョブがいつ停止してもそのジョブをある時点から再開できるように中間データを書き出すなどの工夫をし、再実行による時間の無駄を最小限に留めるようご協力をお願いします。このような処置をしてあるジョブを流す場合には、再実行を抑止するオプション - nr を qsub コマンドのオペランドに指定してください。 -nr オプションを指定して qsub したジョブについては、システム再開後ご自身でジョブの投入を忘れずに行ってください。なお、スーパーコンピュータ hpc では、月に一回システムの定期保守が行われています。この時の停止に際しても上記と同じようにジョブがキャンセルされ再実行されますので、下記に示すような対処をしておく、保守日を気にせずにジョブを流すことができます。以下に Fortran プログラムの対処例を示します。

【Fortran プログラム例】

このプログラムでは、一番外側の DO ループ（以下のプログラムでは、DO 変数 loop のループ）を 1 回処理するのに数時間かかるので、1 回処理するごとに中間結果を書き出しています。書き出し時に異常終了しても大丈夫なように書き出しファイルを 2 個用意し、交互に書き出しをしています。

```
integer*4 k(2)
character * 20 fname(2)
k(1)=11
k(2)=12
;
**ループに入る前に中間データの読み出し
open(k(1),file=fname(1),status='old')
read(k(1)) is1
open(k(2),file=fname(2),status='old')
read(k(2)) is2
if (is1 > is2 ) then
    ista = is1 + 1
    nn = 1
else
    ista = is2 + 1
    nn = 2
end if
read(k(nn)) xxx,yyy,zzz
close(k(1))
close(k(2))
*
;
do loop = ista, iend
;
do l1 = lsta,lend
;
end do
;
** ループの最後で中間データの書き出し
nn = nn + 1
ik = mod(nn,2)
if(ik.eq.0) ik = 2
open(k(ik),file=fname(ik),status='old')
write(k(ik)) loop
write(k(ik)) xxx, yyy, zzz
close(k(ik))
end do
;
end
```

2. hpc のバッチジョブ・キューp1024 のプロセス数の制限緩和について

5月1日（月）より、hpc のバッチジョブのキューp1024 で実行できるプロセス数の最大を 512 から 1584 に変更します。なお、使用する CPU 数が多い場合には、システムの混雑状況によっては実行待ちとなり、待ち時間が長くなる場合があります。ご了承ください。

ジョブ種別

| | キュー名 | 最大使用可能 CPU 数 | | CPU 使用時間 | | ラージメモリ | | 経過時間 | ユーザ DTU |
|--------|-------|--------------|------|----------|-------|--------|-------|--------|---------|
| | | プロセス | スレッド | 標準値 | 制限値 | 標準値 | 制限値 | 制限値 | |
| バッチジョブ | A8 | 8 | 8 | 10 時間 | 10 時間 | 2GB | 400GB | 2 時間 | 利用不可 |
| | P8 | 8 | 8 | 10 時間 | 無制限 | 2GB | 400GB | 336 時間 | 利用不可 |
| | P16 | 16 | 16 | 10 時間 | 無制限 | 2GB | 400GB | 336 時間 | 利用可能 |
| | P64 | 64 | 64 | 200 時間 | 無制限 | 2GB | 400GB | 336 時間 | 利用可能 |
| | P128 | 128 | 128 | 200 時間 | 無制限 | 2GB | 400GB | 336 時間 | 利用可能 |
| | P256 | 256 | 64 | 200 時間 | 無制限 | 2GB | 400GB | 336 時間 | 利用可能 |
| | P1024 | 1584 | 64 | 200 時間 | 無制限 | 2GB | 400GB | 336 時間 | 利用可能 |
| | TSS | — | 128 | 128 | 2 時間 | 無制限 | — | 128GB | — |

注 1) CPU 使用時間は、各 CPU の合計です。

注 2) ラージメモリは、プロセスあたりの値です。

注 3) バッチジョブで使用可能な最大の CPU 数は、1584 です。

注 4) バッチジョブで使用できる 128CPU のノードは、1 台です。

3. 並列プログラミング講習会

hpc システム（スーパーコンピュータ及びアプリケーションサーバ）でのスカラチューニングの方法と並列プログラミング（言語は、Fortran 及び C）の講習会を下記の内容で開催します。現在お持ちのプログラムが性能が出なくて困っている方は、是非ご参加ください。受講の申込みは、センター 4 階事務受付（052-789-4355）で行います。

日 時 平成 18 年 5 月 12 日（金） 13 時～16 時 30 分

場 所 情報連携基盤センター 4 階演習室

対 象 本センター利用有資格者及び学部学生

内 容

- ・ スカラチューニング
- ・ 自動並列化について
- ・ OpenMP について

定 員 40名

申込締切日 平成18年5月9日(火)ただし、定員になり次第締切ります。

申 込 先 本センター4階事務受付

電 話 : 052-789-4355

メール : koshu@itc.nagoya-u.ac.jp

(電子メールで申し込む場合には所属、職名等の身分も明記してください。)

4. 分子軌道法計算プログラムGaussian03 利用講習会の開催について

分子軌道法計算プログラムGaussian03 利用講習会を下記の内容で開催します。

受講の申込みは、センター4階事務受付(052-789-4355)で行います。

日 時 平成18年6月9日(金) 10時30分～16時

場 所 情報連携基盤センター4階演習室

講 師 岐阜大学地域科学部 和佐田 裕昭助教授

名古屋市立大学 和佐田 祐子氏

岐阜大学地域科学部 橋本 智裕助手

内 容 分子軌道法計算プログラムGaussian03 利用入門

多くの分子軌道法計算に用いられている Gaussian03 の利用方法に関する講習会です。はじめて分子軌道法計算プログラムを利用してみようと思うユーザ向けの講習会です。計算出力の処理・解析に関しても簡単な実習を行います。

対 象 本センター利用有資格者および学部学生

定 員 20名

申込締切日 平成18年6月5日(月)ただし、定員になり次第締切ります。

申 込 先 本センター4階事務受付

電 話 : 052-789-4355

メール : koshu@itc.nagoya-u.ac.jp

(電子メールで申し込む場合には所属、職名等の身分も明記してください。)

5. 平成18年度利用者旅費について

平成18年度の利用者旅費による出張は、下記のように取り扱います。

1) 期 間 平成18年4月1日 ～ 平成19年3月31日

2) 出張計画表

利用者旅費による出張の申請は、センター委員会の審議を経て承認するため、年度当初に出張理由・回数等を記入した年間計画(出張計画表)を提出する。

年度の途中で、出張の必要が生じた場合には、それ以降の計画を記して提出する。

3) 出張申請書

出張計画表の提出により承認された場合は、旅行日の2週間前までに、本センターに利用者旅費申請書を提出する。

(出張計画表、利用者旅費申請書はセンターホームページよりPDFにて印刷が可能です。)

4) 出張期間

センター滞在を3日以内とし、必要な旅行日を加える。ただし、第4地区内の方は日帰りとする（原則として一人当たり5回/月以内）。

5) 支給額

(1) 運賃 普通車運賃。ただし、当該旅行キロ数に応じて所定の急行または特別急行料金を支給する。

(2) 日当及び宿泊料 国立大学法人名古屋大学旅費規程・細則で規定する額を支給する。

6) その他

(1) 旅費の支給方法はすべて精算払いとする。

(2) 科学研究費、受託研究費及び委任経理金による利用者に対しては、旅費を支給しない。

6. hpc システムの/home ファイルの容量制限の実施について（再掲）

最近、/home のファイルシステムが満杯になり、qsub したジョブが異常終了するなどの状況が起きている。このような状況になると、ユーザごとのファイルの使用量の多少に関わらず、すべてのユーザが影響を被ります。そこで、6月5日（月）より、hpc システムの/home のファイルに対して、ユーザ単位での容量制限（ディスク・クォータ）を実施します。このファイルの容量制限の設定では、ハード制限、ソフト制限、猶予期間の3つのパラメータを指定します。それぞれのパラメータの値は、ソフト制限：50GB、ハード制限：100GB、猶予期間：1週間とします。この設定により、以下のような状況になります。

| <u>/home のファイル使用量</u> | <u>状況</u> |
|---------------------------------|-----------------------------------------------------------|
| 50GB 未満 | 従来どおり |
| 50GB 以上 100GB 未満 (ソフト制限超過状態) | 1週間に亘り超過のメッセージをユーザに通知し、1週間を超えた段階で 50GB を超えての書き出しは不可となります。 |
| 100GB 超え (ハード制限超過状態) | 出力できません。 |

ファイルの使用量が 50GB 以上になった場合には、すみやかに高速大容量ファイルへコピーするか、不要なファイルの削除などの対処をお願いします。

このファイル容量制限の設定は、6月5日（月）の定期保守日を予定しています。/home のファイルの使用量の多いユーザの方は、高速大容量ファイルの利用を検討してください（「スーパーコンピュータ利用の手引」参照）。なお、高速大容量ファイルに対しては、従来どおりファイル容量の制限設定は、行いません。

7. 平成18年度講習会計画について（再掲）

2006年度講習会計画

| 月 | 講習会名 | 内容 |
|----|--------------------------|--------------------------------------------------------------------------|
| 5 | 並列プログラミング講習会 | hpc システム(スーパーコンピュータ及びアプリケーションサーバ)でのスカラーチューニングの方法と並列プログラミング(自動並列化、OpenMP) |
| 6 | MPI 講習会 | MPI(Message-Passing Interface)による並列プログラミング入門 |
| 6 | XPFortran 講習会 | スーパーコンピュータの XPFortran による並列プログラミングの講習 |
| 6 | Mathematica 利用講習会(初心者向け) | 数式処理システム Mathematica の利用方法 |
| 6 | MATLAB 利用講習会(初心者向け) | MATLAB(matrix laboratory)の利用方法 |
| 6 | Gaussian 講習会(初心者向け) | 分子軌道法プログラム Gaussian の利用入門 |
| 7 | α -FLOW 利用講習会 | 汎用3次元流体解析システム FUJITSU/ α -FLOW の利用方法 |
| 7 | I-DEAS 利用講習会 | 総合設計支援システム I-DEAS の利用方法 |
| 7 | LS-DYNA & eta/FEMB 利用講習会 | 非線形動的構造解析プログラム LS-DYNA の利用方法 |
| 7 | Material Explorer 利用講習会 | 分子動力学ソフトウェア Material Explorer の利用方法 |
| 7 | MOPAC 利用講習会 | 半経験的分子起動法プログラム MOPAC の利用方法 |
| 7 | STAR-CD & CADfix 利用講習会 | 非構造格子・汎用熱流体解析プログラム STAR-CD の利用方法 |
| 7 | ICEM CFD 利用講習会 | 汎用メッシュ生成・可視化統合システム ICEM CFD の利用方法 |
| 9 | IDL 利用講習会 | 可視化ソフトウェア IDL(Interactive Data Language)の利用方法 |
| 9 | AVS/VisLink 利用講習会 | AVS/VisLink の利用方法(基本的な操作の実習および可視化の演習) |
| 9 | 可視化講習会 | センターの画像処理システムを利用した可視化の講習(立体視、コンテンツ生成) |
| 10 | 並列プログラミング講習会(第2回) | hpc システムでのスカラーチューニングの方法と並列プログラミング(自動並列化、OpenMP) |
| 10 | MPI 講習会(第2回) | MPI(Message-Passing Interface)による並列プログラミング入門 |
| 10 | XPFortran 講習会(第2回) | スーパーコンピュータの XPFortran による並列化プログラミングの講習 |

8. 平成18年度IT相談コーナー担当者について（再掲）

IT相談担当者一覧

【専門分野相談】

| 専門分野 | 担当相談員 |
|------------------------|---------------------------------|
| SAS, SPSS, 統計解析 | 大屋 和夫 (環境学研究科・社会環境学) |
| SAS, 統計解析 | 下木戸 隆司 (教育発達科学研究科・教育心理) |
| Gaussian | 和佐田 裕昭 (岐阜大学・地域科学部) |
| | 和佐田 祐子 (名古屋市立大学・システム自然科学研究科) |
| MOLPRO | 山本 茂義 (中京大学・教養部) |
| NUMPAC | 秦野 甯世 (中京大学・情報理工学部) |
| ネットワーク関連 | 長谷川 明生 (中京大学・生命システム工学部) |
| CAEソフトウェア 可視化ソフトウェア | 高橋 一郎 (センター・運用支援掛) |

【面談相談】

(IT相談コーナー直通 TEL052-789-4366)

(相談時間 14:00~16:00)

| 曜日 | 担当者 | 相談内容 |
|----|-------------------------|-----------------|
| 月 | 大屋 和夫 (環境学研究科・社会環境学) | 統計解析, SAS, SPSS |
| 火 | 長谷川 明生 (中京大学・生命システム工学部) | ネットワーク関連 |
| | 津田 知子 (センター・研究部) | システム全般 |
| 水 | 下木戸 隆司 (教育学発達研究科・教育心理) | SAS, 統計解析 |
| 木 | 和佐田 裕昭 (岐阜大学・地域科学部) | Gaussian, 分子軌道法 |
| 金 | 田島 嘉則 (センター・企画管理掛) | システム全般 |