

## 目 次

1 . Q&A SYSTEM の運用開始について . . . . .	1
2 . ジョブ種別の制限値の変更について . . . . .	2
3 . スーパーコンピュータのジョブの再実行について . . . . .	2
4 . hpc システムにある旧スーパーコンピュータ vpp のファイルの整理のお願い . . . . .	3
5 . アプリケーション・パッケージ利用講習会の開催について . . . . .	4
6 . センター休館のお知らせ . . . . .	7
7 . 計算サービス休止について . . . . .	7
8 . I T 相談コーナーの休止について . . . . .	7
9 . hpc システムの tcsh の変更について (再掲) . . . . .	7
10 . 平成 1 7 年度利用者旅費について (再掲) . . . . .	7
11 . ホームディレクトリのアクセス権 (パーミッション) について (再掲) . . . . .	8

### 1 . Q&A SYSTEM の運用開始について

従来のメール相談にかわる相談システムとして Q&A SYSTEM の運用を開始しました。本システムは、ユーザからの質問をWebで受け付け、回答をメールで送付します。Q&A SYSTEMのURLは以下の通りです。

<https://qa.itc.nagoya-u.ac.jp/>

これに伴い、センターホームページに対しても、上記「質問者向けトップページ(質問入力画面)」への直接リンクを張るなど若干の変更を加えました。

なお、面談相談は従来通り行います。Q&A SYSTEMや面談相談を含むセンターのIT相談室の詳細については、以下のページをご覧ください。

<http://www2.itc.nagoya-u.ac.jp/service/it.html>

従来のメール相談では、質問は専門分野ごとに決まったメールアドレスに送付されていました。Q&A SYSTEMでは、質問の受付を従来のようなメールではなくWeb経由にしたため、質問メールアドレス向けのスパムメールの問題がなくなります。また、質問は、分野ごとの回答者に自動転送され、質問と回答

はすべてデータベースに格納されます。そのため、回答者による質問や回答の検索、再利用などが容易になります。これらのことにより、従来に比べると、質問の確実な受領、質問および回答の状態把握、回答作成の効率化が可能となり、ユーザへのサービスが向上すると考えております。是非、Q&A SYSTEMをご活用下さい。

なお、本システムに関するご質問、ご意見等は、[qadb@itc.nagoya-u.ac.jp](mailto:qadb@itc.nagoya-u.ac.jp)宛にお寄せ下さい。

## 2. ジョブ種別の制限値の変更について

7月4日(月)より、hpcシステムのp8およびp16のキューの経過時間の制限値を200時間に変更します。なお、使用可能CPU数については、今までの表では分かりにくかったので、プロセスとスレッドに分けてそれぞれの使用可能CPU数を表示しています。

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	200時間	利用不可
	p16	16	16	10時間	無制限	2GB	400GB	200時間	利用可能
	p64	64	64	200時間	無制限	2GB	400GB	200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	512	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) 現在のところ、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。

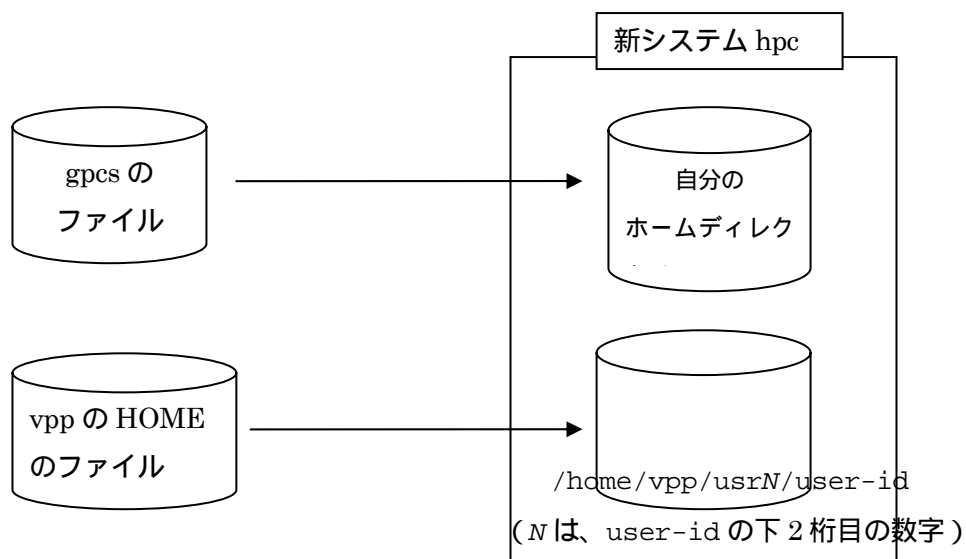
## 3. スーパーコンピュータのジョブの再実行について

現在、hpcシステムでは、第1月曜日に計算機システムの定期保守を行っています。定期保守を行う時点で、実行中のバッチジョブは実行が中止され、定期保守終了後に、自動的に再実行(最初から)されます。また、システムクラッシュなどシステムが異常をきたした場合にも同じように、実行中のジョブは、再実行されます。再実行することにより無駄な計算を行うことになるジョブ(途中結果をファイルに出力し、そこから実行可能なプログラム)や、再実行により結果が異常となるジョブの場合には、qsubコマンドの-nrオプションを指定することにより再実行を阻止することができます。このような場合には、-nrオプションを指定してqsubしてください。

#### 4 . hpc システムにある旧スーパーコンピュータ vpp のファイルの整理のお願い

新システム hpc のファイルは、以下のように gpcs のファイルは、hpc のホームに、旧スーパーコンピュータ vpp のホームディレクトリのファイルは、

/home/vpp/usrN/user-id にコピーされています。ここで、N は、user-id の下 2 桁目の数字です。



これらのファイルのうち必要なものは、適宜、自分のホームディレクトリにコピーするようお願いしていますが、/home/vpp/usrN/user-id のファイルをそのまま利用しているユーザの方を多く見かけます。このままでは、利用時に不便ですので、必要なファイルは、以下のように自分のホームディレクトリにコピーしてください。なお、

/home/vpp/usrN/user-id のファイルは、6 月末日で消去しますので、それまでにコピーをお願いします。

例 1 ) /home/vpp/usr9/a49999a にある prog のディレクトリをディレクトリごとホームディレクトリの下にコピーする。

```
hpc% cd
hpc% cp -rp /home/vpp/usr9/a49999a/prog .
```

例 2 ) vpp というディレクトリを作成し、取り合えず vpp の下にすべてのファイルをコピーする。

```
hpc% mkdir vpp
hpc% (cd /home/vpp/usr9/a49999a/ ; tar chf - . )|(cd vpp; tar xvf - )
```

《必要なファイルがコピーされたのを確認後、以下のようにして

/home/vpp/usrN/user-id のすべてのファイルを消去する》

```
hpc% rm -rf /home/vpp/usr9/a49999a
```

## 5. アプリケーション・パッケージ利用講習会の開催について

スーパーコンピュータやアプリケーションサーバで利用可能なアプリケーション・パッケージの初心者向け講習会を、下記のように開催します。

今回講習を行うパッケージは、

- ・ FUJITSU/ $\alpha$ -FLOW：汎用3次元流体解析プログラム
- ・ STAR-CD：非構造格子・汎用熱流体解析プログラム
- ・ ANSYS ICEM CFD：汎用メッシュ生成プログラム
- ・ CADfix：CADデータの変換・検証・修正・簡易化プログラム
- ・ I-DEAS：CAD，線形動的構造解析プログラム
- ・ LS-DYNA：非線形動的構造解析プログラム
- ・ MOPAC：分子軌道計算プログラム
- ・ Materials Explorer：分子動力学計算プログラム

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

場 所：本センター1階端末室

対 象：本センター利用有資格者および学部学生

定 員：15名

申込締切日：各講習会開催日の4日前までです。

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。）

### <各講習会内容と開催日時>

#### 1) Materials Explorer（分子動力学計算プログラム）利用講習会

日時：7月1日（金）13時～16時30分

内容：

- ・ 分子動力学法の基礎とMaterials Explorerの基本操作
- ・ 塩化カリウム結晶のシミュレーション演習
- ・ 酢酸水溶液のシミュレーション演習

#### 2) MOPAC（分子軌道計算プログラム）利用講習会

日時：7月6日（水）10時～16時

内容：

- ・ 計算化学入門およびMOPAC2002 概要
- ・ 分子構造作成と分子特性計算および表示
- ・ 化学反応解析（1）SN2 反応
- ・ 化学反応解析（2）Diels-Alder 反応

3) FUJITSU/ -FLOW (汎用3次元流体解析プログラム) 利用講習会

日時: 7月7日(木) 13時~17時

内容:

- ・ FUJITSU/ -FLOW の概要と機能説明
- ・ 演習 「立方体障害物まわりの流れ」解析
- ・ 演習 「偏心二重円管内の自然対流」解析

4) I-DEAS (CAD, 線形構造解析プログラム) 利用講習会

日時: 7月19日(火) 13時~16時30分

7月20日(水) 10時~16時

内容:

- ・ I-DEAS の概要と機能説明・デモ
- ・ 実習 (モデル生成, メッシュ生成, 境界条件設定, 解析実行, 可視化)

5) LS-DYNA (非線形動的構造解析プログラム) 利用講習会

日時: 7月22日(金) 10時~16時

内容:

- ・ LS-DYNA3D の概要と機能説明
- ・ 実習 (モデル生成, メッシュ生成, 境界条件設定, 解析実行, 可視化)

6) STAR-CD (非構造格子・汎用熱流体解析プログラム)・CADfix 利用講習会

日時: 7月26日(火) 10時~16時

7月27日(水) 10時~16時

内容:

- ・ STAR-CD の概要と機能説明
- ・ STAR-CD 実習 (モデル生成, メッシュ生成, 境界条件設定, 解析実行, 可視化)
- ・ CADfix の概要と機能説明
- ・ CADfix の実習 (CAD の自動修正, CAD のマニュアル修正, 簡易化等)

7) ANSYS ICEM CFD (汎用メッシュ生成プログラム)

日時: 7月28日(木) 10時~16時

7月29日(金) 10時~16時

内容:

- ・ Tetra/Prism・Hexa メッシュ生成を対象とした機能説明
- ・ サーフェスデータからのメッシュ作成
- ・ チェック及び修正方法
- ・ ブロック分割手法について
- ・ O-grid 使用方法
- ・ STAR-CD へのデータトランスファー

## <パッケージ口メモ>

### 1 ) FUJITSU/ -FLOW

構造格子を用いているため、熱流体解析、空力解析、燃焼解析などの広範な流体解析を容易に行うことができます。非圧縮性流体解析モジュール、圧縮性流体解析モジュール、自由表面流れ解析モジュール、燃焼・化学反応流れ解析モジュールが利用できます。

### 2 ) STAR-CD

非構造格子を用いているため複雑な形状に対応できます。ファン、ポンプ、タービンなどの移動境界問題への適応、固体との熱連成、粒子連成、二相流、自由表面、拡散、燃焼などの化学反応、非圧縮性及び圧縮性など多岐に渡る物理モデルを保有しており、様々な現象の解析が可能です。熱伝達係数や温度、圧力データを構造解析ソフトウェアへのデータ受け渡し機能などもあり、現在国内ナンバー 1 の導入実績を誇るソフトウェアです。

### 3 ) LS-DYNA

LS-DYNA は、衝突安全解析やプレス成形解析の分野で世界中で多くの人に利用されている解析プログラムです。LS-DYNA3D は、時間積分に陽解法を使用し、大変形・弾塑性・動的接触を含む数万要素を短時間で計算でき、また、構造解析だけでなく熱や流体との連成などの広範な分野に適用可能です。

### 4 ) I-DEAS

I-DEAS は 3 次元のソリッドモデルを中心に設計 (CAD)、有限要素解析のためのメッシュ作成、境界条件設定、線形構造解析、結果の表示機能を持ち、CAE (Computer Aided Engineering) を統合的にサポートするシステムです。

### 5 ) ANSYS ICEM CFD

ANSYS ICEM CFD は、流体・構造・振動・衝突解析など CAE で必要なメッシュを生成するためのハイエンド統合メッシュジェネレータです。CAD のダイレクトインターフェイスをはじめとする形状のインポート、100 種類以上の解析コードへの出力インターフェイス、各種メッシュ生成、解析結果の可視化等の機能が利用できます。

### 6 ) CADfix

CADfix は、CAD データを他の CAD/CAE ソフトウェアで確実に読み込めるように、不具合の修正や品質の向上を実行するツールです。CADfix では、必要に応じて CAE に不要な形状を検索・削除することができる形状簡易化機能を標準装備しており、これにより設計で作成された形状を CAE に最適な形状へ変換が可能です。

### 7 ) MOPAC

MOPAC は、様々な分子系に対する物性予測、構造解析のために最も広く利用されている半経験的分子軌道計算プログラムです。

## 8) Materials Explorer

Materials Explorer は、原子・分子の集合体や結晶構造をモデリングし、定温定圧下で分子動力学シミュレーションを行い、状態変数のグラフ表示、材料の3次元挙動表示、各種解析を行うことができます。また、バルクから表面・界面までを原子・分子レベルで取り扱うことができます。

## 6. センター休館のお知らせ

8月15日(月)・16日(火)は、名古屋大学一斉夏季休暇になりますので、センターを休館いたします。

## 7. 計算サービス休止について

名古屋大学の夏季休暇に伴いシステムの効率的運用を図るため、スーパーコンピュータ(hpc)の計算サービスを、下記のとおり休止します。

なお、8月2日(月)の定期保守は、17日の休止期間に日移して実施します。

・休止期間 8月13日(土)0:00 ~ 8月17日(水)15:00

メールサーバ(nucc)は、平常どおり運用します。

## 8. IT相談コーナーの休止について

8月8日(月)~8月19日(金)まで、IT相談コーナーは休みますのでご了承ください。なお、緊急相談はホームページのIT相談室を活用ください。

## 9. hpc システムの tcsh の変更について(再掲)

hpcシステムでは、tcshとして/bin/tcshが実行されていましたが、/usr/local/bin/tcsh(tcsh-6.14)を実行するように変更しました。 .login, .login.local, .cshrc, .cshrc.localのファイル内で/bin/tcshを直接指定されている場合は、/usr/local/bin/tcshを指定するように変更してください。

## 10. 平成17年度利用者旅費について(再掲)

平成17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17年4月1日 ~ 平成18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。

### 11. ホームディレクトリのアクセス権（パーミッション）について（再掲）

hpc システムや nucc システムのホームディレクトリのアクセス権を確認してください。

ホームディレクトリのパーミッションの設定がオーナーである所有者以外からの参照が可能になっていると、他の利用者からファイルを参照されます。

#### ・ホームディレクトリのパーミッションの確認と設定の変更方法

```
hpc% cd [ ホームディレクトリに移動 ]
```

```
hpc% ls -ld [ 現在の設定を確認 ]
```

```
drwxr-xr-x 13 a49999a user 1024 Mar 1 00:01 .
```

パーミッションの確認には `ls -ld` コマンドを用います。先頭に `d` が付いているのはディレクトリを表します。`r` と `w` で表示されているのがパーミッション情報です。パーミッション情報は、オーナー、グループ、その他のユーザの3つのパートに分かれています。

例では、所有者以外のグループ `user` とその他のユーザに `read` 権と実行権が設定されています。

(`r`:read 権, `w`:write 権, `x`:実行権)

```
hpc% chmod 700 ./ [ 自分以外のパーミッションを不許可に設定 ]
```

パーミッションを変更するには、`chmod` コマンドを用います。`chmod` コマンドは、英字表記と8進表記がありますが、ここでは8進表記を用います。8進表記では、`rwX` を2進数に対応させます。

```
hpc% ls -ld [ 設定変更を確認 ]
```

```
drwx----- 13 a49999a user 1024 Mar 1 00:01 .
```