

目 次

1 . 6 月 5 日 (月) から hpc システムの/home ファイルの容量制限実施	1
2 . XPFortran 講習会の開催について	2
3 . MPI 講習会の開催について	2
4 . Mathematica 利用講習会の開催について	3
5 . MATLAB 利用講習会の開催について	3
6 . 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
7 . 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 (再掲)	7
8 . 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~ (再掲)	8
9 . 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 (再掲)	9
10 . 平成 1 8 年度利用者旅費について (再掲)	10

1 . 6 月 5 日 (月) から hpc システムの/home ファイルの容量制限実施

既に速報で何度かお知らせしていますが、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	従来どおり使用可能。
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書き出しは不可となります。
100GB 超え (ハード制限超過状態)	書き出し不可。

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実施により、制限を超過した場合にターミナルソフトウェアによっては、ログインが出来なくなる場合があります。そのような場合には、ftp など不要なファイルを消去してください。

ファイルの使用量などは、次に示す quota コマンドで確認できます。

```
hpc% quota -v
```

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。

2 . XPFortran 講習会の開催について

XPFortran による並列プログラミングの初心者向けの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 21 日 (水) 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

1 . 並列プログラミングのキーワード

2 . カーネルループの並列化

3 . 並列プログラミングコーディング例

定 員 30 名

申込締切日 平成 18 年 6 月 16 日 (金) 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

3 . MPI 講習会の開催について

MPI (Message-passing Interface) による並列プログラミングの初心者向けの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 22 日 (木) 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

1 . 並列プログラミングのキーワード

2 . カーネルループの並列化

3 . 基本コーディング

4 . 並列化における留意点

定 員 30 名

申込締切日 平成18年6月19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

4 . Mathematica 利用講習会の開催について

数式処理システムMathematica の初心者を対象とした講習会を、下記の内容で開催します。受講の申込みは、センター4階事務受付で行います。

日 時 平成18年6月27日(火)13時~16時30分

場 所 情報連携基盤センター1階端末室

対 象 本センター利用有資格者及び学部学生

内 容

- ・ Mathematica を利用する前に
- ・ 数値計算 / 数の型
- ・ 数学関数
- ・ 数値行列
- ・ 方程式の解
- ・ 数式処理
- ・ グラフィックス
- ・ データのグラフ化 (アニメーション)
- ・ プログラミング (関数定義 / 条件定義)

定 員 15名

申込締切日 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。)

5 . MATLAB 利用講習会の開催について

MATLAB (matrix laboratory) の初心者を対象とした講習会を、下記の内容で開催します。受講の申込みは、センター4階事務受付で行います。

日 時 平成18年6月28日(水)13時~16時30分

場 所 情報連携基盤センター1階端末室

対 象 本センター利用有資格者及び学部学生

内 容

- ・ データの扱いの基本
- ・ 数値演算
- ・ ファイルの入出力
- ・ プログラミング

定員 15名

申込締切日 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。)

6. 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、下記の内容で開催します。

今回講習を行うパッケージは、

- ・ FUJITSU/ α -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) MOPAC (分子軌道計算プログラム) 利用講習会

日時： 平成18年6月29日(木) 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

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

日時： 平成18年6月30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

3) 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： 平成18年7月4日(火) 10時～16時

平成18年7月5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)

4) ANSYS ICEM CFD (汎用メッシュ生成プログラム)

日時： 平成18年7月6日(木) 10時～16時

平成18年7月7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
- ・ 0-grid 使用方法
- ・ STAR-CD へのデータトランスファー

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

日時： 平成18年7月11日(火) 13時～16時30分

内容：

- ・ FUJITSU/ α -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

6) LS-DYNA (非線形動的構造解析プログラム) 利用講習会

日時： 平成18年7月12日(水) 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)

7) I-DEAS (CAD, 線形構造解析プログラム) 利用講習会

日時： 平成18年7月13日(木) 13時～16時

平成18年7月14日(金) 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)

<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に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。

7. 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（再掲）

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@i tc.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。）

8 . 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~ (再掲)

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 ll = 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

```

9 . 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（再掲）

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。

10. 平成18年度利用者旅費について（再掲）

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。