

## 目 次

1 . hpc システムの tcsh の変更について	1
2 . MPI 講習会の開催について	1
3 . XPFortran 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	2
5 . MATLAB 利用講習会の開催について	3
6 . Materials Explorer 講習会の開催について	3
7 . 平成 17 年度利用者旅費について	4
8 . 平成 17 年度講習会計画について (再掲)	5
9 . 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)	6
10 . 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)	6
11 . プリンタの利用について (再掲)	7

### 1 . hpc システムの tcsh の変更について

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。

### 2 . 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 17 年 6 月 16 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17年6月13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。)

3. 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17年6月17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

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17年6月13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。)

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(052-789-4355)で行います。

日 時 平成17年6月23日(木)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 16名

申込締切日 平成16年6月20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 . 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 (052-789-4355) で行います。

日 時 平成17年6月24日(金) 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 16名

申込締切日 平成16年6月20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。)

#### 6 . Materials Explorer 講習会の開催について

Materials Explorer による分子動力学シミュレーションの講習会を、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17年7月1日(金) 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

1. 分子動力学法の基礎と Materials Explorer 3.0 の基本操作
2. 塩化カリウム結晶のシミュレーション演習
3. 酢酸水溶液のシミュレーション演習

定 員 15名

申込締切日 平成17年6月30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。)

### <Materials Explorer 一口メモ>

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. 平成17年度利用者旅費について

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。

## 8.平成17年度講習会計画について(再掲)

## 2005年度講習会計画

月	講習会名	内容
5	新システムの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化プログラミング(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
	XPFortran講習会	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
	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
	MATLAB利用講習会(初心者向け)	MATLAB(matrix laboratory)の利用方法
	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	-FLOW利用講習会	汎用3次元流体解析システム FUJITSU/ -FLOW の利用方法
	I-DEAS利用講習会	総合設計支援システム I-DEAS の利用方法
	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
	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
	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
	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
	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
	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)
	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	新システムのプログラミング講習会	hpcシステムでのスカラーチューニングの方法と並列化プログラミング(自動並列化、OpenMP)
	MPI講習会	MPI(Message-Passing Interface)による並列プログラミング入門
	XPFortran講習会	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

## 9. 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 17 年 6 月 3 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ー向けの講習会です。計算出力の処理・解析に関しても簡単な実習を行います。

### 日 程

10:30	12:00	13:30	16:00
分子軌道法についての解説		昼休み	Gaussian03 の実習

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 17 年 5 月 31 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。)

## 10. 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 .
```

#### 11. プリンタの利用について (再掲)

センター 1 階端末室のプリンタは、A 4 サイズの用紙にカラー又はモノクロで両面印刷が可能です。出力は hpc システム又は nucc システムから、印刷形式をプリンタ名で指定してください。

印刷形式	プリンタ名	負担金
モノクロ片面印刷	npr (省略値)	3 円 / ページ
モノクロ両面印刷	nprd	3 円 / ページ (両面 6 円)
カラー片面印刷	cpr	8 円 / ページ
カラー両面印刷	cprd	8 円 / ページ (両面 16 円)

出力例(モノクロ両面印刷の場合)

```
hpc% lp -d nprd mytext
又は
hpc% lpr -P nprd mytext
```