

目次

1 . 平成 1 3 年度(後期)のライブラリー・プログラム開発課題募集について . . . . .	1
2 . 第 2 回大型計算機センター連続講演会のお知らせ . . . . .	1
3 . スーパーコンピュータのジョブ種別の変更について . . . . .	2
4 . スーパーコンピュータで fdfs のファイルをお使いの方へ . . . . .	2
5 . 画像処理システム講習会の開催について . . . . .	3
6 . AVS/VisLink 講習会の開催について . . . . .	3
7 . Mathematica 利用講習会の開催について . . . . .	4
8 . 計算サービス時間の一部変更について . . . . .	5
9 . 計算サービス休止について(再掲) . . . . .	5
10 . 計算サービス休止に伴うセンターの閉館について(再掲) . . . . .	6
11 . プログラム相談コーナーの休みについて(再掲) . . . . .	6
12 . MOLPRO の利用開始について(再掲) . . . . .	6
13 . ファイル課金の試行運用について(再掲) . . . . .	6

1 . 平成 1 3 年度(後期)のライブラリー・プログラム開発課題募集について

平成 1 3 年度(後期)のライブラリー・プログラム開発課題を次のように公募します。

- 1) プログラムの内容 : 学術研究の発展に寄与するものであって、多数の利用者に共通に利用されるもの
- 2) プログラムの種類 : 新しく開発しようとするもの。(改良及び書き換えを含む)及び既登録プログラムの改良又は書き換え。
- 3) 応募資格 : 本センターの利用者
- 4) 応募手続き : 所定の申請書類により申請する。申請用紙及び公募要領は、共同利用(052-789-4355)へ申し出てください。
- 5) 締切日 : 平成 1 3 年 8 月 3 1 日(金)

2 . 第 2 回大型計算機センター連続講演会のお知らせ

第 2 回大型計算機センター連続講演会が、下記のとおり開催されます。関心ある方の多数の来聴をお待ちしています。

日時 : 9 月 2 8 日(金) 1 3 時 3 0 分 ~ 1 5 時 3 0 分

場所 : 名古屋大学大型計算機センター 4 階演習室

## 分子動力学計算によってわかるタンパク質のふるまい

21世紀はゲノム科学の時代といわれる。ゲノムはタンパク質に翻訳されて、はじめて生物の種々の営みを担う。タンパク質のダイナミックな性質を知ることは、いろいろな生命現象を分子レベルで理解するために大切である。名大大型計算機センターのスーパーコンピュータに移植されている分子動力学計算プログラム「Amber」が、タンパク質の動的描像と生命現象の理解にどのように役立っているか、その具体例をいくつか紹介する。

### 《講演内容》

#### 「ゲノム時代におけるタンパク質分子動力学計算の役割」

郷 通子 氏（名古屋大学大学院理学研究科 生命理学専攻 教授）

#### 「プリオン病の要因解明に向けての分子動力学計算」

篠田 和紀 氏（名古屋大学大学院理学研究科 生命理学専攻 博士後期課程）

### 3. スーパーコンピュータのジョブ種別の変更について

メモリサイズの制限値の緩和を下記のように行います。

キュー-x : 制限値を 7.5GB 15.5GB

キュー-z, z e : 制限値を 7.5GB 15.5GB

なお、下記ジョブ種別による運用は、9月3日(月)からです。

スーパーコンピュータ VPP5000 のジョブ種別

利用形態	キュー名	使用可能PE数	CPU使用時間	メモリサイズ		経過時間 標準値	利用目的
				標準値	制限値		
バッチジョブ	c	1	60分	500MB	2GB	-	非並列ジョブ
	x	1	1200分	2GB	15.5GB	-	非並列ジョブ
	z	2~16	600分	1PEあたり 2GB   15.5GB		-	並列ジョブ
	ze	17~32	600分	1PEあたり 2GB   15.5GB		-	並列ジョブ
TSS	-	1	60分	500MB	2GB	-	会話型非並列
	-	1~8	300分	1PEあたり 2GB   15.5GB*		720分	会話型並列

\* ) 使用PE数が5以上の場合には、1台のPEに2個の仮想プロセッサを割り当てるため、使用できるメモリの最大は、15.5GBの1/2になります。

### 4. スーパーコンピュータで fpfs のファイルをお使いの方へ

8月20日(月)よりスーパーコンピュータのファイルシステムが変更され、/homeのファイルがfpfsのファイルシステムになります。現在の/homeのファイルは、センター側で新しい/homeへコピーします。しかしながら、/home/fpfsのファイルは、ファイル名が重複する可能性がありますので、新しい/homeへのコピーは行いません。お手数ですが、8月10日(金)までに、/home/fpfsから/homeまたは/home/dpfsへのコピーをお願いします。

## 5. 画像処理システム講習会の開催について

画像処理ワークステーション (gamma1, gamma2, alpha15) を使った画像処理システムの講習会を下記の内容で開催します。受講の申し込みは、センター 4 階事務受付 (052-789-4355) で行います。

日 時 平成 13 年 9 月 5 日 (水) 13 時 30 分 ~ 16 時 30 分

場 所 大型計算機センター 3 階端末室

対 象 本センター利用有資格者及び学部学生

定 員 15 名

申込締切日 平成 13 年 8 月 31 日 (金) ただし、定員になり次第締切ります。

なお、申込みは、下記のアドレスに申し込んでいただいても結構です。

koshu@cc.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)

また、センターの利用者は、センターのホームページの講習会案内からも申し込みができます。

### < 講習内容 >

- ・ 静止画像入出力装置の使い方
- ・ 動画入出力装置とビデオ機器の使い方
- ・ アニメーションの作成 (ノンリニア編集)

## 6. AVS/VisLink 講習会の開催について

AVS / VisLink 講習会を下記の内容で開催します。受講の申し込みは、センター 4 階事務受付 (052-789-4355) で行います。

日 時 平成 13 年 9 月 7 日 (金) 10 時 ~ 16 時 30 分

場 所 大型計算機センター 3 階端末室

内 容

AVS / Express Viz (汎用可視化システム)

- ・ AVS の概要説明およびデモ
- ・ 基本操作説明
- ・ 可視化実習
  - 1) 構造格子型データの基本ネットワーク
  - 2) 非構造格子型データの基本ネットワーク
  - 3) 可視化結果の出力機能紹介 など

VisLink (リアルタイム可視化システム)

- ・ リアルタイム可視化について
- ・ VisLink のシステム構成と機能概要
- ・ 実習
  - 1) VisLib プログラミング
  - 2) Reducer の使用方法
  - 3) VisLink モジュールの使用方法

## 日 程

10:00 12:00 13:00 14:30 16:30

AVS 概要説明およびデモ 基本操作説明	昼休み	実習 質疑応答	VisLink 概要説明 実習
-------------------------	-----	------------	--------------------

対 象 本センター利用有資格者及び学部学生

定 員 15名

申込締切日 平成13年9月3日(月)ただし、定員になり次第締切ります。

なお、申込みは、下記のアドレスに申し込んでいただいても結構です。

[koshu@cc.nagoya-u.ac.jp](mailto:koshu@cc.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)

また、センターの利用者は、センターのホームページの講習会案内からも申し込みができます。

### <大型パッケージ口メモ>

#### AVS / Express Viz (AVS6)

汎用可視化システムの一つで、数値シミュレーションの実行結果や実験で測定した数値データを可視化するシステムです。流体解析、構造解析、医療画像など幅広い分野で利用されています。コーディング不要のビジュアルプログラミングにより高度な可視化表示アプリケーションの作成が可能です。可視化の結果は、gif、jpeg、VRML2、MPEG1に出力可能です。

#### VisLink

VisLinkは、計算サーバ上で実行中の大規模科学技術計算の途中経過をリアルタイムに可視化するためのソフトウェアです。従来、科学技術計算の可視化は、計算終了後の結果を納めたファイルをAVS等の可視化用ソフトウェアに転送してから可視化する「ポスト・プロセッシング」が主に行われていましたが、VisLinkを用いると計算の途中経過をリアルタイムに可視化できるようになるため、計算の妥当性がいち早く確認でき、研究開発の効率が大きくアップします。

### 7. Mathematica 利用講習会の開催について

汎用計算サーバgpsで動作する数式処理システム 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13年9月18日(火)13時~16時

場 所 大型計算機センター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. Mathematica の概要
2. Mathematica の基本操作につて
  - ・ 数式処理
  - ・ グラフィックス
  - ・ 関数定義

定 員 16名

申込締切日 平成13年9月14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

メール : koshu@cc.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. 計算サービス時間の一部変更について

平成13年9月より、汎用計算サーバの計算サービス時間をスーパーコンピュータとの連携強化に伴いスーパーコンピュータと同一に変更します。(変更箇所は下表のアンダーラインの部分です。)

システム	サービス時間	センター内端末の利用
汎用計算サーバ (GP7000F) gpsc	連続運転。 ただし、第1,第3月曜日(1:00~13:00)は、 計算機システムの保守のためサービス休止。	月曜日~金曜日 9:30~20:00
スーパーコンピュータ (VPP5000) vpp	連続運転。 ただし、第1,第3月曜日(1:00~13:00)は、 計算機システムの保守のためサービス休止。	第1,第3月曜日 13:00~20:00
メールサーバ nucc	連続運転。 ただし、第1,第3月曜日(8:00~13:00)は、 システムメンテナンスのためサービスを休 止する場合があります。	(土,日,祝日は閉館)
画像処理システム	月~金曜日 9:30~20:00	

注1) 第1,第3月曜日が祝日又は休日の場合は、計算サービスを行いますのでセンター外から利用できます。

注2) 緊急を要する場合は、上記運用時間中でもサービスを休止し保守を行う場合があります。

#### 9. 計算サービス休止について(再掲)

計算機システムの変更のため、下記のとおり計算サービスを休止します。

##### 1) スーパーコンピュータ(vpp)の休止

・8月11日(土)1:00 ~ 8月20日(月)13:00

##### 2) 汎用計算サーバ(gpsc)の休止

・8月18日(土)8:00 ~ 8月20日(月)13:00

システムの停止時まで実行が終了しないジョブはキャンセルする場合がありますのでご了承ください。

10．計算サービス休止に伴うセンターの閉館について（再掲）

スーパーコンピュータ（vpp）の計算サービス休止に伴い下記の期間、センターを閉館します。  
平成13年8月15日（水）～平成13年8月17日（金）

11．プログラム相談コーナーの休みについて（再掲）

このことについて、下記の期間プログラム相談コーナーを休みます。  
平成13年8月6日（月）～平成13年8月17日（金）

12．MOLPROの利用開始について（再掲）

MOLPROがスーパーコンピュータvppで利用できるようになりました。MOLPROは、非経験的分子軌道法プログラムで、CASSCF, MRCI, MRPT2等の計算ができます。MOLPROは、Gaussianプログラムに比べ post-HF 計算が強力です。特に CASSCF 法は大次元を扱うことができ、収束性が高く、高速です。利用の詳細はマニュアルを参照してください。マニュアルは図書室にあります。

< 利用例 >

```
vpp% molpro mol1.in
```

13．ファイル課金の試行運用について（再掲）

7月2日(月)より、ファイル負担経費の軽減を目的とする試行運用を行います。ファイル使用負担経費を下記のようにします。この試行では、特に、大容量ファイルの利用者に過度の負担がないよう配慮しています。

< ディスクファイル使用負担経費 >

200MB までの部分	1MB につき 1 日	0.3 円
200MB を超え 1GB までの部分	1MB につき 1 日	0.1 円
1GB を超える部分	1MB につき 1 日	0.01 円