

目次

1 . スーパーコンピュータの計算サービス一時休止について	1
2 . 計算サービス休止に伴うセンターの閉館について	1
3 . プログラム相談コーナーの休みについて	2
4 . ファイル課金の試行運用について	2
5 . MOLPRO の利用開始について	2
6 . VPP Fortran 利用講習会の開催について	2
7 . HPF 講習会の開催について	3
8 . 計算サービス休止について (再掲)	3

「速報」のメールアドレスの確認を

速報のメール化実施に伴い、速報が届かなかつたり、一部で配信されず返送されてくるものがありますので、メールの転送先ファイル (.forward) のメールアドレスを確認してください

- 1 . スーパーコンピュータの計算サービス一時休止について
緊急障害修正のため、スーパーコンピュータ (vpp) の運用を下記のとおり休止します。
・ 6 月 24 日 (日) 18 : 00 ~ 20 : 00 (メンテナンス終了次第運用開始)
なお、メンテナンス開始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。
- 2 . 計算サービス休止に伴うセンターの閉館について
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)

3. プログラム相談コーナーの休みについて

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)

4. ファイル課金の試行運用について

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

5. MOLPRO の利用開始について

MOLPRO がスーパーコンピュータ vpp と汎用計算サーバー-gpcs 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
```

6. VPP Fortran 利用講習会の開催について

スーパーコンピュータ VPP5000 での VPP Fortran による並列プログラミング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13年7月19日(木) 10時～12時

場 所 大型計算機センター 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 (抜粋して説明)

定 員 30名

申込締切日 平成13年7月16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@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。)

7. HPF 講習会の開催について

スーパーコンピュータ VPP5000 で動作する HPF(High Performance Fortran)を使用した並列プログラミングの講習会を下記のように開催します。受講の申込は、センター4 階事務受付(052-789-4355)で行います。

日 時 平成13年7月19日(木) 13時～15時30分
場 所 大型計算機センター4階演習室
対 象 本センター利用有資格者および学部学生
内 容

- ・ 並列プログラミングのキーワード
- ・ カーネルループの並列化
- ・ 並列プログラミングコーディング例

(使用する HPF の規格： HPF 2.0 および HPF/JA 1.0)

定 員 30名

申込締切日 平成13年7月16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@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(gpcs)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。

休止期間が長期に及びご不便をおかけしますが、早めに利用計画を立てていただきますようお願い致します。

今回のシステム変更により、各種ジョブ制限値の緩和を計画しています。詳細は、別途決まり次第お知らせ致します。