



目 次

- 1. VPP700/56版 Gaussian94 公開のお知らせ 1
- 2. 平成9年3月からの計算サービス時間のお知らせ 3

大型計算機センターWWWホームページ
<http://www.cc.kyushu-u.ac.jp>

1. VPP700/56版 Gaussian94 公開のお知らせ

分子軌道計算プログラム Gaussian94 がスーパーコンピュータ VPP700/56 上で利用可能となりました。

なお、VPP700/56 版 Gaussian94 は 1PE(Processing Element) のみでの動作です。

◇利用環境

VPP700/56 版 Gaussian94 の利用は汎用計算機 M-1800/20U の UXP システム (ホスト名 kyu-cc, IP アドレス 133.5.9.1) からバッチリクエスト (NQS) により行ないます。

◇ Gaussian94 の利用可能なディレクトリ

VPP700/56 版 Gaussian94 のプログラムは、kyu-cc のホームディレクトリ下の VPP ディレクトリに作成してください (Fortran, C プログラムを実行する要領と同じです)。

例として、Gaussian94 用のディレクトリ Gaussian を VPP 下に作成します。

```
kyu-cc% cd ~/VPP [ ] <--- VPP700/56 の作業用ディレクトリに移動
kyu-cc% mkdir Gaussian [ ] <--- Gaussian 用のディレクトリの作成 (あくまでも例です)
kyu-cc% cd Gaussian [ ] <--- Gaussian 用のディレクトリ (例) への移動
```

◇ Gaussian94 の環境設定

まず、M-1800/20U の環境設定をおこないます。M-1800/20U の UXP システム (kyu-cc) のホームディレクトリ下の .cshrc に以下を追加してください (既に設定が完了している場合は追加する必要はありません)。

```
setenv g94root /usr/local/gaussian94
setenv GAUSS_SCRDIR /tmp
source $g94root/g94/bsd/g94.login
```

kyu-cc での Gaussian94 の利用方法はセンターニュース No.546 を参照願います。

VPP700/56 で Gaussian94 を利用するには、M-1800/20U と同様の環境設定を行う必要があります。kyu-cc のホームディレクトリ下の VPP ディレクトリに移動し、エディタ (vi, mule) によって以下の内容を (kyu-cc の設定と同じです) “.cshrc” というファイル名で作成します。

```
setenv g94root /usr/local/gaussian94
setenv GAUSS_SCRDIR /tmp
source $g94root/g94/bsd/g94.login
```

.cshrc は必ず VPP 直下 に作成して下さい。

◇ Gaussian94 の動作するキュー

VPP700/56 での Gaussian94 の実行は、Fortran, C と同様「バッチリクエスト」と呼ばれるシェルスクリプトに処理手順を記述し、qsub コマンドでジョブを投入します。また、subg94 コマンドは NQS の手順を簡略化したものです。

投入できるキューは以下の通りです。

キュー名	CPU 時間	記憶域	処理形態
s	60 分	1.7GB	1PE
p1	1200 分	1.7GB	1PE

◇ subg94 コマンド

subg94(/usr/local/gaussian94/g94/bsd/subg94) により、M-1800/20U の UXP システムから簡単にジョブを投入できます。なお、プログラムファイル名は必ずサフィックスを “.com” としてください。

プログラム test.com を s キューに投入する場合は以下のように行います。

```
kyu-cc% subg94 s test          <---s キューへの投入
Request 7308.kyu-cc submitted to queue: s.
kyu-cc%
```

◇ qsub コマンド

一般のバッチ処理と同様に、スクリプトファイルを記述し、qsub(/usr/bin/qsub) コマンドでバッチ処理を依頼することも可能です。

以下はスクリプトファイルの記述例です。

```
#
cd Gaussian
g94 test.com
```

スクリプトファイルを a.sh とし、qsub コマンドにより p1 キューに投入します。

kyu-cc% qsub a.sh <---p1 キューへの投入
 Request 7309.kyu-cc submitted to queue: p1.
 kyu-cc%

(ライブラリ室 ダイヤルイン 092-642-2295)
 e-mail : f70029a@kyu-cc.cc.kyushu-u.ac.jp

2. 平成9年3月からの計算サービス時間のお知らせ

平成9年3月1日から平成9年11月30日までの計算サービス時間は下記のとおりです。

計算サービス時間

システム利用	サービス時間	各種保守作業による停止時間
U X P M S P	原則通年24時間 ただし、右欄保守作業 の停止時間を除く	◇定期保守 毎週水曜日 5時～12時30分 ◇空調機保守 第1,3日曜日 7時30分～18時

センター内利用	曜日	開始時刻	終了時刻
		通年 3月～11月	
オープン利用機器	月～火	9:00	22:00
	水	12:30	
	木～金	9:00	

- 備考 1. 毎週水曜日は、計算機システムの保守のため12時30分から計算サービスを開始します。
 2. 16時45分以降(月～金)と土曜日及び日曜祝日は、無人運転を行っており、システム障害が発生した場合は、約20分後に自動的に計算サービスを再開します。
 ただし、30分経過後に再開できない場合は、計算サービスを打切らせていただきます。
 3. 臨時の停止を行う場合は、その都度センターニュース等でお知らせします。

サービス時間表

曜日	時間帯			
	5:00	9:00	12:30	23:00
月曜日 火曜日				
水曜日		定期保守		
木曜日 金曜日				
土曜日 日曜日				

ただし、第1,3日曜日は空調機保守のため下記のとおりです。

日曜日	7:30	18:00
		空調機保守

利用可能
 センター外からの利用のみ可能
 定期保守等で利用不可

(システム運用掛 ダイヤルイン 092-642-2307)