

FAQs

センターの計算機利用に関するよくある質問集です。

FAQs:

- ▶ [CPU点数やディスク使用量の制限値を超えると何が起きるのか](#)
- ▶ [メンバーの追加、削除をしたい](#)
- ▶ [センターへのssh接続ができない/海外出張中にログインしたい](#)
- ▶ [資源\(CPU点数、ディスク容量\)追加を申請したい](#)
- ▶ [ログインシェルを変更するには](#)
- ▶ [GaussianのFreq計算がメモリ不足と思われるエラーで落ちる](#)
- ▶ [Gaussianのchkファイルを可視化のために変換したいがformchkが無い](#)
- ▶ [Python環境\(本体バージョン、ライブラリ等\)構築について](#)
- ▶ [ファイルが破損している](#)
- ▶ [ジョブスクリプトのヘッダ部分のサンプルが欲しい](#)
- ▶ [ソフトウェア導入の要望](#)
- ▶ [SSH 接続エラーについて](#)

[CPU点数やディスク使用量の制限値を超えると何が起きるのか](#)

新規ジョブが投入できなくなります。

[メンバーの追加、削除をしたい](#)

[こちらのページ](#)に申請方法があります。

[センターへのssh接続ができない/海外出張中にログインしたい](#)

日本国内からのアクセスで問題がある場合は[こちらのページ](#)(要ログイン)をご覧ください。
日本国外からのアクセスについては[こちらのページ](#)にある手続きが必要です。

[資源\(CPU点数、ディスク容量\)追加を申請したい](#)

[こちらのページ](#)に申請方法があります。

ただし、CPU点数の追加申請については特別な事情が無ければ以下の制限が適用されます。

- ▶ 施設利用A(3万点までの随時申請): 3万点までのCPU点数追加申請を2回まで
- ▶ 施設利用B(通年/後期): CPU点数合計が1500万点以内かつ初期許可点数の2倍以内、申請回数は2回まで

円滑な運用のため、ご理解とご協力のほどよろしくお願いいたします。

(例) 施設利用Bで初期許可点数が50,000点の場合、特別な事情が無ければ追加申請での上限値は50,000点(合計が100,000点)となります。

[ログインシェルを変更するには](#)

現在はログインシェルを csh (tcsh), bash, zsh の中から選ぶことができますが、その変更はこのウェブページでしか行えません。ログインしている状態であれば、ページ左側メニューに「[アカウント情報](#)」という項目が存在するので、それをクリックしてください。そこから、「編集」タブに移動すると、ログインシェルを選択する項目がありますので、csh, bash, zsh の中から好きなものを選んでください。ログインシェルを選択したあとは忘れずにページ下部にある「保存」をクリックしてください。

[GaussianのFreq計算がメモリ不足と思われるエラーで落ちる](#)

Gaussian の Freq 計算がメモリ不足と思われるエラーでクラッシュし、使用可能なメモリ量を大きくしてもうまくいかないという例がいくつか報告されています。このような状況に遭遇した際、逆に使用可能なメモリ量を「少なく」することで動作するようになったという事例が複数報告されています。

[Gaussianのchkファイルを可視化のために変換したいがformchkが無い](#)

以下のコマンドを実行してからformchkコマンドを実行してください。ログインシェルの種類により実行するコマンドが異なることに注意してください。

ログインシェルが csh (tcsh) の場合:

```
$ source /local/apl/lx/g16/g16/bsd/g16.login
```

ログインシェルが bash, zsh の場合:

```
$ source /local/apl/lx/g16/g16/bsd/g16.profile
```

他のバージョンの Gaussian や違うキューを用いた計算等の場合には適宜ディレクトリの場所を置き換えてください。

また、上記設定の代わりに gaussian の module を load した場合も formchk コマンドは利用可能です。

[Python環境\(本体バージョン、ライブラリ等\)構築について](#)

ディストリビューション提供のパッケージが存在すればそれらをインストールすることもできますが、基本的には[Anaconda](#)による環境構築を推奨しています。センターで利用されるような科学技術系のアプリ、ライブラリについてはディストリビューション標準よりもAnacondaの方が良くまとまっています。

[ファイルが破損している](#)

ファイルキャッシュに問題が発生することで、見かけ上ファイルが壊れたように見える場合があります。

そのような事象が起きているように見えたら、まずは以下のように検証を行ってください。

- ▶ 別のノード(ccfepX; X=1-8 のどれか)にログインする

- ▶ 疑わしいファイルを md5sum や less 等のコマンドで調べ、正常なものと比較する。
- ▶ キャッシュの問題がある場合、同一ファイルのチェックサムが違うなどのおかしな結果が得られます。

この手順で問題があるファイルを見つけた場合、問題に遭遇したホスト名(例: ccfe2)と、ファイルの場所を [ccadm\[at\]draco.ims.ac.jp](mailto:ccadm[at]draco.ims.ac.jp) までご連絡下さい。こちらでキャッシュの掃除を行います。(通常のユーザ権限ではキャッシュの操作はできません。)

キャッシュのみの問題であるため、ご自身でファイルを操作を行って問題を解決することは一応可能と思われるかもしれませんが、できればお問い合わせ下さい。自身で作業される場合は、バックアップをきちんと残した上で慎重に操作を行うようお願いいたします。

一方で、ls -l でファイルを見た場合に以下のような表示が出る場合があります。(別途エラーメッセージも表示されます)

```
-????????? ? ? ? ? (破損ファイル名)
```

ディスク障害時に作成しようとしたファイルにおいてこのような状況が確認されています。この場合はファイルを消去するしかありません。rm コマンドでは消去できないこともありますので、その場合は unlink コマンドで消去をお願いします。

ジョブスクリプトのヘッダ部分のサンプルが欲しい

[こちらのページ](#)にいくつかサンプルを用意しました。

[利用の手引き](#)の情報、各アプリケーション用のサンプル(/local/apl/lx/(アプリ名)/samples 以下に配置しています)も参考になるとと思います。

ソフトウェア導入の要望

下記の項目を全てご記入の上、[ccadm\[at\]draco.ims.ac.jp](mailto:ccadm[at]draco.ims.ac.jp)宛(迷惑メール対策のため、@を[at]に置換しています)に送信してください。有料ソフトウェアの場合、導入できないことがあります。

- ▶ 導入を希望するソフトウェアの名前、バージョン
- ▶ ソフトウェアの概要と特長
- ▶ 共同利用システムに導入を希望する必要性
- ▶ 開発元のURL

SSH 接続エラーについて

```
Permission denied (publickey)
```

```
Permission denied (publickey,hostbased).
```

秘密鍵と公開鍵が一致しないか、公開鍵の登録がされていない場合に表示されます。秘密鍵が存在しない場合(置き場所の指定を間違えた場合も含む)もこのエラーになることがあります。

```
Permission denied (publickey,gssapi-keyex,gssapi-with-mic,hostbased).
```

クライアントで秘密鍵が設定されていない場合に表示されます。

```
ssh:connect:Network is unreachable
```

```
ssh:connect:Host is unreachable
```

ネットワーク設定の不備か、ネットワーク経路の不調によりRCCSとネットワーク接続が出来無かった場合に表示されます。

```
ssh:connect:Connection refused
```

```
ssh:connect:Connection timed out
```

保守や停電のために、センターがサービスを一時的に停止しているか、下記の接続制限により接続が拒否されている場合に表示されます。

```
ssh_exchange_identification: Connection closed by remote host  
Server unexpectedly closed network connection
```

何らかの通信不具合もしくは下記の接続制限のため接続が拒否されています。

接続できない場合、詳細なログを表示させることで原因がわかる場合があります(方法は利用するソフトウェアにより異なります)。例えば、LinuxやMacでターミナルからsshコマンドで接続している場合には、-vオプションをつけることで詳細なログを見ることができます。