

名古屋大学情報基盤センター

共同利用システム速報

No. 107

平成 23 年 5 月 31 日 発行

目 次

1. 並列プログラミング講習会の開催について・・・・・・・・・・・・・・・・〔1〕
2. アプリケーション・パッケージ利用講習会の開催について・・・・・・・・〔1〕
3. アプリケーション・パッケージのバージョンアップのお知らせ・・・・・・・・〔4〕
4. 保守時間の延長のお知らせ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・〔4〕
5. スーパーコンピュータへのログイン方法の変更について（再掲）・・・・・・・・〔4〕

1. 並列プログラミング講習会の開催について

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チューニングの方法と並列プログラミング（言語は、Fortran 及びC）の講習会を下記の内容で開催します。現在お持ちのプログラムが性能が出なくて困っている方は、是非ご参加ください。一部のセッションの参加も可能です。

日 時： 平成 23 年 6 月 7 日（火） 13 時～17 時

場 所： 情報基盤センター 4 階演習室

内 容： 並列プログラミング入門

システムの特徴，効率的な利用方法等

プログラミング（チューニング技法，自動並列化，OpenMP など）

申込先： 本センター 1 階事務受付

電 話：052-789-4354

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。）

2. アプリケーション・パッケージ利用講習会の開催について

スーパーコンピュータやアプリケーションサーバで利用可能なアプリケーション・パッケージの初心者向け講習会を、下記の内容で開催します。

今回講習を行うパッケージは、

- ・ Gaussian09 : 非経験的分子軌道計算プログラム
- ・ MOE : 統合計算化学システム

- ・ STAR-CCM+ : 汎用熱流体解析プログラム
- ・ ANSYS ICEM CFD : 汎用格子生成プログラム

です。受講の申込は、センター1階事務受付で行います。

場 所 : 本センター1階端末室

対 象 : 本センター利用有資格者および学生

定 員 : 10名

申込締切日 : 各講習会開催日の4日前までです。ただし、定員になり次第締切ります。

申 込 先 : 本センター1階事務受付

電 話 : 052-789-4354

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。)

<各講習会内容と開催日時>

1) Gaussian 利用講習会

日時 : 平成23年6月3日(金) 10時~16時

講師 : 岐阜大学地域科学部 和佐田裕昭 教授

名古屋工業大学 和佐田祐子 特任助教

岐阜大学地域科学部 橋本智裕 准教授

内容 : 分子軌道法計算プログラムGaussian09利用入門

多くの分子軌道法計算に用いられている Gaussian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向けの講習会です。計算出力の処理・解析・可視化に関しても簡単な実習を行います。

2) MOE講習会

日時 : 平成23年6月28日(火) 10時~17時

内 容 : 医薬分子設計トレーニングコース

- ・ 受容体の表面解析
- ・ リガンド結合部位探索
- ・ ドッキングシミュレーション
- ・ リガンド結合状態の解析
- ・ キナーゼデータベース検索
- ・ 複合体構造に基づくマニュアルでの分子設計

3) STAR-CCM+入門講習会

日時 : 平成23年6月21日(火) 10時~17時

平成23年6月22日(水) 10時~17時

内容 (1日目) :

- ・ 概要と機能説明
- ・ モデル化の基礎(領域・境界・インターフェース・連続体)

- ・ データ管理の基礎(レポート・モニター・プロット)
- ・ 実習 (内部流解析, 外部流解析)

内容 (2日目) :

- ・ 3D CAD 機能の説明(CAD 形状作成からメッシュ作成)
- ・ 実習 (内部流解析 (非定常) , 固体熱連成解析)
- ・ 質疑応答

4) ANSYS ICEM CFD 入門講習会

日 時 : 平成23年6月29日 (火) 10時~17時

内 容 : 初めて ANSYS ICEM CFD (CDAJ-Modeler) を使用される方を対象とした Hexa
メッシュの生成講習

- ・ 概要および機能紹介
- ・ サーフェスデータからのメッシュ作成
- ・ O-grid の利用方法の実習
- ・ ボトムアップ法の実習
- ・ ブロッキングの応用問題の実習

<パッケージ一口メモ>

1) STAR-CCM+

STAR-CCM+は、汎用熱流体解析プログラム STAR-CD の次世代製品として、流体解析の高機能化／解析対象の複雑化／計算格子の大規模化など次世代の CFD への要求に答えるため、単に流れ解析のみではなく、連続体力学分野 (流体、構造一体解析) への拡張を視野に入れて CD-adapco 社により新たに開発されている汎用熱流体解析プログラムです。

2) ANSYS ICEM CFD (CDAJ-Modeler)

ANSYS ICEM CFD は、流体・構造・振動・衝突解析など CAE で必要なメッシュを生成するためのハイエンド統合メッシュジェネレータです。CAD のダイレクトインターフェイスをはじめとする形状のインポート, 100 種類以上の解析コード (ABAQUS, ANSYS, LS-DYNA, STAR-CD など) への出力インターフェイス, 各種メッシュ生成, 解析結果の可視化等の機能が利用できます。

3) MOE

MOE はタンパク質構造解析、化合物ライブラリ設計、*in silico* スクリーニング等、創薬・生命科学研究に必要とされるアプリケーションを搭載し、計算化学の専門家から実験研究者まで幅広く利用されているソフトウェアです。

4) Gaussian09

Gaussian09 は、多種多様な分子系をモデリングするために設計された量子化学計算ソフトウェアです。様々な半経験的・非経験的量子化学計算法に関する機能を持ち、気相中および溶液中の分子のエネルギー、構造、基準振動など様々な物性予測が可能です。また、基底状態のみならず、励起状態の分子の計算も行えます。

3. アプリケーション・パッケージのバージョンアップのお知らせ

HX600 システムで利用可能な下記のアプリケーション・パッケージが、6月6日（月）より最新版にバージョンアップします。詳細は、次のアプリケーション・パッケージの HP をご覧ください。 <http://www2.itc.nagoya-u.ac.jp/center/apl.htm>

名称	バージョンアップ	備考
AVS/Express Developer	7.2 → 7.3	可視化アプリケーション開発・データの可視化
IDL	6.4.1 → 8.0	データ解析、画像解析、アプリケーション開発
ENVI	4.4 → 4.8	リモートセンシングデータの解析および可視化
EnSight	9.1.2a → 9.2	汎用ポストプロセッサ (商用ソルバーにも対応)
MOE	2009.10 → 2010.10	統合計算化学システム

4. 保守時間の延長のお知らせ

6月6日（月）の定期保守は、保守時間を1時間延長いたします。

保守時間：

6月6日（月） 7：00 ～ 18：00

5. スーパーコンピュータへのログイン方法の変更について（再掲）

スーパーコンピュータへのログインは2011年4月4日より公開鍵による認証に変わりました。4月4日以降、従来のパスワードによるログインができなくなっております。すでに公開鍵を使ってスパコンにログインされている方は、ログイン方法を変更する必要はありません。まだ変更されておられない方は早急に公開鍵による認証方式に移行してください。

公開鍵を使ったスパコンへのログイン方法について：

http://www2.itc.nagoya-u.ac.jp/sys_riyou/sshkey.htm