

# 名古屋大学情報基盤センター

共同利用システム速報

No. 119

平成 24 年 5 月 31 日 発行

## 目 次

1. 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】
2. 保守時間の変更のお知らせ・・・・・・・・・・【4】
3. HPCI 研究課題公募のお知らせ（再掲）・・・・・・・・・・【5】

### 1. 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
- ・ MATLAB : 数値計算・制御解析システム
- ・ 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
- ・ LS-DYNA : 非線形動的構造解析プログラム
- ・ ABAQUS : 汎用有限要素法解析プログラム
- ・ ANSYS ICEM CFD : 汎用格子生成プログラム

です。受講の申込は、情報基盤センターホームページから行います。

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 : 各 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 方 法 : 下記の URL から行えます

<http://www2.itc.nagoya-u.ac.jp/cgi-bin/kousyu/csvview2.cgi>

※全国共同利用システムの登録番号をお持ちでない方は、登録番号の欄に a11111a をご記入ください。

<各講習会内容と開催日時>

#### 1) Gaussian 利用講習会

日時 : 平成 24 年 6 月 8 日 (金) 10 時～16 時

講師 : 岐阜大学地域科学部 和佐田裕昭 教授

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) MATLAB 利用講習会

日時：平成24年6月29日(金) 10時～17時

内容：MATLAB 利用入門

データの扱いの基本, 数値演算, ファイルの入出力, プログラミングに関する実習を行います。

## 3) MOE 講習会

日時：平成24年7月24日(火) 10時～17時

内容：初めてMOEを使用される方を対象とした初心者向けの講習

- ・ MOE の概要説明
- ・ MOE の基本操作 (分子の表示、構築)
- ・ 分子シミュレーション基礎 (分子力学法、配座解析)
- ・ MOE データベースの基本操作
- ・ タンパク質の基本操作

## 4) STAR-CCM+入門講習会

日時：平成24年7月5日(木) 10時～17時

平成24年7月6日(金) 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

## 5) LS-DYNA 入門講習会

日時：平成24年7月19日(木) 10時～16時

内容：初めてLS-DYNA3Dを使用される方を対象とした初心者向けの講習

- ・ 概要と機能説明
- ・ モデル生成, メッシュ生成
- ・ 境界条件設定
- ・ 解析実行方法
- ・ 可視化など

#### 6) ABAQUS 入門講習会

日 時： 平成24年6月28日（木）10時～17時

内 容： 初めて Abaqus/Standard を使用される方を対象とした初心者向けの講習

- ・ 概要と機能説明
- ・ キーワードによる入力データの作成方法, 解析実行方法
- ・ 解析で発生する問題の解決方法
- ・ Abaqus/Viewer による後処理, 結果の見方など

#### 7) ANSYS ICEM CFD 入門講習会

日 時： 平成24年7月26日（木）10時～17時

内 容： 初めて ANSYS ICEM CFD (IDAJ-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
- ・ 0-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) LS-DYNA

LS-DYNA は、衝突安全解析やプレス成形解析の分野で世界中で多くの人に利用されている解析プログラムです。LS-DYNA3D は、時間積分に陽解法を使用し、大変形・弾塑性・動的接触を含む数万要素を短時間で計算でき、また、構造解析だけでなく熱や流体との連成などの広範な分野に適用可能です。

### 3) ABAQUS

高度な内容の構造解析と伝熱解析を行うことのできる汎用有限要素プログラムです。線形および非線形の静的応力/変位解析、モーダル法による各種の線形動的応力/変位解析、直接積分法による非線形動的応力/変位解析、クリープおよびスウェリング解析、座屈固有値解析、非定常および定常の伝熱解析、温度-変位連成解析、圧電連成解析、熱-電気連成解析、有効応力-間隙圧連成解析、音響-構造連成解析、質量拡散解析、そして破壊力学的評価などを行うことができます。

### 4) ANSYS ICEM CFD (IDAJ-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 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。

### 5) 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もち、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。

### 6) 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。

## 2. 保守時間の変更のお知らせ

6月4日(月)の定期保守日から、毎月の定期作業の保守時間を下記のとおりに変更いたします。

ホスト名	定期保守日
スーパーコンピュータ,アプリケーションサーバ (M9000,HX600,FX1 システム)	第1月曜 7:00~20:00

### 3. HPCI 研究課題公募のお知らせ（再掲）

特定高速電子計算機施設「京」、HPCI(革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ)システムを構成する機関が提供する計算機資源及びHPCI共用ストレージで構成されるHPCI共用計算資源について、平成24年9月末を目指して共用が開始される予定です。HPCI共用計算資源は、科学技術・学術研究、産業利用、医療など広汎な分野での利用が可能です。HPCI共用計算資源の能力を最大限活用し優れた成果を上げることが期待されるプロジェクトを推進するため、HPCI共用計算資源を利用する利用研究課題を公募します。

詳細につきましては下記ホームページを参照ください。

<http://www.hpci-office.jp/>