

## 目 次

1 . 並列プログラミング講習会 ( 第 2 回 ) . . . . .	1
2 . 「先端的大規模計算シミュレーションプログラム利用サービス」開始のお知らせ . . . . .	2
3 . 東海地区 C S I 事業報告会の開催について ( 再掲 ) . . . . .	3
4 . 計算化学アプリケーション・パッケージ利用講習会の開催について ( 再掲 ) . . . . .	3
5 . MATLAB のレベルアップについて ( 再掲 ) . . . . .	4

### 1 . 並列プログラミング講習会

hpc システム ( 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。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 19 年 10 月 26 日 ( 金 ) 13 時 ~ 16 時 30 分

場 所： 情報連携基盤センター 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

- ・ スカラチューニング
- ・ 自動並列化について
- ・ OpenMP について

定 員： 40 名

申込締切日： 平成 19 年 10 月 24 日 ( 水 ) 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@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. 「先端的大規模計算シミュレーションプログラム利用サービス」開始のお知らせ

「先端的大規模計算シミュレーションプログラム利用サービス」は、文部科学省が平成 19 年度に新設した「先端研究施設共用イノベーション創出事業」の「産業戦略利用」プログラムとして採択されたもので、全国共同利用施設としての情報基盤センター群（北大、東北大、東大、京大、大阪大、九大、本学）と東京工業大学が、社会貢献の一環として、各大学が開発した応用ソフトウェアと各大学が所有するスーパーコンピュータをそれらの利用支援サービスと一体化して民間企業に提供し、イノベーション創出を支援するものです。現在、企業では、幅広い分野で計算シミュレーションが利用されており、大学では、こうした企業の計算機利用を「戦略分野利用推進」及び「新規利用拡大」の観点から支援していきます。戦略分野利用推進としては、ライフサイエンス、ものづくり技術、情報通信、環境エネルギー、社会基盤分野を対象に、大学で開発された RSS21 等の先端的シミュレーションソフトウェアとスーパーコンピュータの利用課題を民間企業から募り、「新規利用拡大」としては、企業が有するアプリケーションを利用した課題、新規アプリケーションを開発する課題を募り、企業によるイノベーション創出を支援します。特に、本学では、ものづくり分野の中のソフトマテリアル統合シミュレータ OCTA を提供します。平成 19 年度に各機関が提供する計算機資源は下の表の通りです。

なお本サービスによるジョブは優先的に処理される場合があります。一般の利用者の方にはご理解とご協力をお願いいたします。

機関名	システム	ノード数 (CPU 数)	性能 (TFlops)	総マシントimeに 対する割合
北大	SR1100/K1	2 (32)	0.268	4.96 %
	PC クラスタ	30(60)	0.1875	37.5%
東北大	SX-7	1 (32)	0.282	4 %
	SX-7C	5 (40)	0.64	4 %
	TX7/i9610	1 (64)	0.409	0 %
東大	SR11000/J2	4(64)	0.588	2.00 %
	PC クラスタ	32	0.5632	50.00 %
名大	HPC2500	2 (128)	1.00	7.25 %
京大	HPC2500	2(256)	1.60	18.18 %
阪大	SX-8	20(160)	5.3	2%
	PC クラスタ A	128 (512)	6.1	2 %
	PC クラスタ B	496(1984)	18.3	2%
九大	PC クラスタ	48(192)	2.3	12.5 %

### 3. 東海地区 C S I 事業報告会の開催について (再掲)

第4回東海地区 C S I 事業報告会を下記のように開催いたします。

昨年度の報告会に引き続き、今年度も最先端学術情報基盤 ( C S I ) 事業に関わるさまざまな研究や事業内容の意見交換、情報共有の場として本報告会をご提供できればと考えております。

今回は、「ネットワークとセキュリティ」をテーマとして、名古屋大学のほか国立情報学研究所、名古屋工業大学の先生方のご講演を予定しております。また、報告会終了後に懇親会も開催いたしますので、皆様ふるってご参加ください。

日時 : 平成19年10月5日(金) 13:00~17:55

会場 : 名古屋大学情報連携基盤センター4階 演習室

内容 : SINET3 の概要

国立情報学研究所 アーキテクチャ科学研究系 中村 素典  
SINET3 における情報提供サービスについて

国立情報学研究所 アーキテクチャ科学研究系 阿部 俊二  
UPKI サーバ証明書発行プロジェクト - UPKI イニシアティブ -  
名古屋大学 情報連携基盤センター 平野 靖

UPKI サーバ証明書発行プロジェクト - 名大の例 -

名古屋大学大学院 多元数理科学研究科 内藤 久資  
名古屋大学キャンパスネットワーク NICE の新機能 - e-NICE と Secure-NICE -  
名古屋大学 情報連携基盤センター 八槇 博史  
共有端末における IC カード認証システムの適用  
名古屋大学 情報連携基盤センター 葛生 和人  
名古屋工業大学における IC カード PKI 認証と情報基盤システム構築  
名古屋工業大学 情報基盤センター 松尾 啓志

参加申込みにつきましては、平成19年10月3日(水)までに参加人数、参加者名、懇親会参加の有無を下記メールアドレスまでお知らせいただくか、下記ホームページよりお申込み下さい。(尚、懇親会に参加される方は、アルコール代として当日会場にて会費1000円を徴収させていただきます。ご了承ください。)

名古屋大学情報連携基盤センター 特任准教授 葛生和人

TEL (052) 789-4361 FAX (052) 789-4385

E-mail [kuzuu@itc.nagoya-u.ac.jp](mailto:kuzuu@itc.nagoya-u.ac.jp)

[http://www2.itc.nagoya-u.ac.jp/CSI\\_hokoku-kai/](http://www2.itc.nagoya-u.ac.jp/CSI_hokoku-kai/)

### 4. 計算化学アプリケーション・パッケージ利用講習会の開催について (再掲)

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計算化学アプリケーション・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、

- ・ MOPAC : 分子軌道計算プログラム
- ・ Materials Explorer : 分子動力学計算プログラム

です。受講の申込は、センター4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部学生  
定 員： 15 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 4 階事務受付

電 話： 052-789-4355

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) Materials Explorer (分子動力学計算プログラム) 利用講習会

日時： 平成 19 年 10 月 25 日 (木) 13 時 ~ 16 時 30 分

内容：

- ・ 分子動力学法の基礎と Materials Explorer の基本操作
- ・ 塩化カリウム結晶のシミュレーション演習
- ・ 酢酸水溶液のシミュレーション演習

##### 2) MOPAC (分子軌道計算プログラム) 利用講習会

日時： 平成 19 年 10 月 31 日 (水) 10 時 ~ 16 時

内容：

- ・ 計算化学入門および MOPAC2002 概要
- ・ 分子構造作成と分子特性計算および表示
- ・ 化学反応解析 (1) SN2 反応
- ・ 化学反応解析 (2) Diels-Alder 反応

#### < Materials Explorer 一口メモ >

Materials Explorer は、原子・分子の集合体や結晶構造をモデリングし、定温定圧下で分子動力学シミュレーションを行い、状態変数のグラフ表示、材料の 3 次元挙動表示、各種解析を行うことができます。また、バルクから表面・界面までを原子・分子レベルで取り扱うことができます。

#### < MOPAC 一口メモ >

MOPAC は、様々な分子系に対する物性予測、構造解析のために最も広く利用されている半経験的分子軌道計算プログラムです。

#### 5. MATLAB のレベルアップについて (再掲)

対話型数値解析ソフトウェア MATLAB が、8 月 15 日(水)より、最新の R2007a にバージョンアップしました。

詳しくは、次の URL を参照してください。

<http://www.cybernet.co.jp/matlab/products/release/r2007a.shtml>