

名古屋大学情報連携基盤センター

共同利用システム速報 No. 77 平成20年8月25日 発行

目 次

1. 並列プログラミング講習会(第2回)の開催について	1
2. 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	1
3. 可視化アプリケーション講習会の開催について (再掲)	3
4. スーパーコンピュータ、アプリケーションサーバーの更新について(再掲)	4

1. 並列プログラミング講習会(第2回)の開催について

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。なお、内容は、5月に実施した講習会と同じです。

日 時 平成20年10月3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

- ・ スカラーチューニング
- ・ 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20年9月30日(火)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

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

(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. 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

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、

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

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20年10月9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20年10月10日(金) 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。

3. 可視化アプリケーション講習会の開催について

可視化アプリケーション講習会を、下記のように開催します。

講習会の特定セッションの受講や可視化相談のみの参加も受け付けます。

なお、可視化相談で、手持ちのデータがある方は当日お持ちください。

受講の申込は、センター4階事務受付(052-789-4355)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

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

(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) AVS/Express と VisLink 利用講習会

日時：9月4日(木)13時～17時

9月5日(金)10時～16時

内容(1日目)：

- ・ AVS/Express の概要と機能説明
- ・ AVS/Express のファイルフォーマットの説明
- ・ AVS/Express の基本操作
- ・ 可視化相談

内容(2日目)：

- ・ AVS/Express を使ったプログラミングと可視化実習
- ・ リアルタイム可視化システム VisLink の概要と機能説明
- ・ VisLink を使ったプログラミングと可視化実習
- ・ 可視化相談

2) 可視化入門講習会

日時：9月12日(金)13時～16時

内容：

- ・ 可視化の概要・事例紹介
- ・ 可視化機器の紹介(バーチャルリアリティシステム等)
- ・ 可視化実習と3次元動画コンテンツ作成(VisPlusシステムを使用)
- ・ 可視化相談

3)IDL 利用講習会(中級編)

日時:9月18日(木)10時~17時

9月19日(金)10時~17時

内容:

- ・ IDL の開発環境 IDLDE の機能説明
- ・ プログラミング(変数, 構造, 制御ステートメント, データの入出力等)
- ・ ダイレクトグラフィックスの概要
- ・ 信号処理, 画像処理, 地図データ処理

<パッケージ一口メモ>

1)AVS/Express

ビジュアル・プログラミングにより、独自のグラフィックスアプリケーションの開発および可視化を行うツールです。流体解析, 構造解析, 計算化学, 医療画像などの幅広い分野で利用されています。大規模データにも対応しています。

可視化結果は、本センター1階端末室に設置してある可視化機器を使って、様々な可視化(大画面, 立体視, フライスルー等)を行うことができます。

2)VisPlus

VisPlus は、AVS/Express 上で動作し、3次元時系列データや各種のシミュレーション計算データの可視化を目的としたシステムです。可視化するオリジナルデータを基に、入力データの生成から、可視化処理、結果の保存までを一貫してサポートします。

詳しくは、次のURLを参照してください。

<http://sora.cc.nagoya-u.ac.jp/visplus/main.html>

3)VisLink

VisLink は、利用者の解析プログラムと AVS/Express とを連携させてリアルタイムに可視化を行うツールです。VisLink は、解析途中のプログラムの計算プロセスの把握や、早期エラーの発見、対処を目的としたもので、トラッキング機能とステアリング機能が利用できます。

4)IDL

計測・実験, 数値計算, 統計解析, シミュレーション, ビジュアライゼーションなどで使用されているソフトウェアです。主に、データ解析, 可視化, アプリケーション開発に利用されています。地球科学, 宇宙科学の分野でよく利用されています。

4. スーパーコンピュータ、アプリケーションサーバーの更新について

更新に伴うサービスの休止について

現在稼働中のスーパーコンピュータ、アプリケーションサーバのレンタル期間は2009年2月28日までとなっています。現在、新機種の仕様策定をすると共に、更新スケジュールの調整をしてい

ます。しかし、設備の整備、ファイル移行等などの作業のため2009年3月1日～2009年5月17日までの間は利用ができなくなります。利用者の方々には大変迷惑をおかけしますが理解と協力をお願いします。

また、長期にわたりサービスの休止をしますので、使用計画を立てるに当たっては考慮されますようお願いします。

詳しいスケジュールにつきましては、追ってお知らせします。