

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. 78 平成20年9月29日 発行

目 次

- 1. 停電による計算サービス休止と保守日の変更について……………1
- 2. MPI 講習会の開催について ……………1
- 3. 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) ……………2
- 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)……………3

1. 停電による計算サービス休止と保守日の変更について

平成20年11月16日(日)は構内の電気設備点検のため停電となりますので、下記のとおり計算サービスを休止します。

なお、11月及び12月のhpcシステムの定期保守は、11月17日(月)にまとめて実施します。

システム名	休 止 期 間
スーパーコンピュータ hpc	11月16日(日)6:00 ~ 17日(月)15:00 (11月10日(月)及び12月1日(月)は、平常どおり計算サービスを行います。)
メールサーバ nucc	代替電源により平常どおり運用します。

2. MPI 講習会の開催について

MPI (Message-passing Interface) による並列プログラミングの初心者向けの講習会を下記の内容で開催します。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20年10月21日(火)13時~15時

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

定 員 30名

申込締切日 平成20年10月17日(金)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。)

3. 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。

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ー

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いたします。

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。