

# 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. 65

平成 19 年 8 月 27 日 発行

## 目 次

- 1 . 東海地区 C S I 事業報告会の開催について . . . . . 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 . . . . . 2
- 3 . MATLAB のレベルアップについて . . . . . 3
- 4 . プロバイダ等を経由したメールサーバ nucc の利用について (再掲) . . . . . 3
- 5 . 電気室改修工事に伴う計算サービス休止について (再掲) . . . . . 4
- 6 . Amber のレベルアップについて (再掲) . . . . . 4
- 7 . XPFortran 講習会の開催について (再掲) . . . . . 4
- 8 . 可視化アプリケーション講習会の開催について (再掲) . . . . . 5

### 1 . 東海地区 C S I 事業報告会の開催について

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/)

## 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、

- ・ 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。

## 3. MATLAB のレベルアップについて

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>

## 4. プロバイダ等を経由したメールサーバ nucc の利用について(再掲)

民間プロバイダ等では不正なメールの送信を抑止するため、メールの送信に通常用いられる 25 番ポートを遮断(OP25B: Outbound Port25 Blocking)している場合があります。

このようなプロバイダを利用している場合には、nucc を SMTP のメール送信サーバに設定したメールソフトからはメールの送信ができなくなっていました。

メールサーバ nucc では、これに対処するためにサブミッションポート (Port587) を用意しました。

なお、設定方法はメールソフトによって違いはありますが、メールアカウントの設定で、使用している SMTP 送信メールサーバのポート番号(デフォルトは 25)に "587" を設定します。

Outlook Express の設定方法は、以下のホームページを参照してください。

[http://www2.itc.nagoya-u.ac.jp/sys\\_riyou/nucc/0E.pdf](http://www2.itc.nagoya-u.ac.jp/sys_riyou/nucc/0E.pdf)

#### 5．電気室改修工事に伴う計算サービス休止について（再掲）

情報連携基盤センター内の電気室改修工事に伴い、スーパーコンピュータ(hpc)システムの計算サービスを下記のとおり休止しますので、ご了承ください。

なお、休止期間中に定期保守も実施します。

##### ・休止期間

10月1日(月)7:00 ~ 3日(水)15:00

メールシステム(nucc)は、代替電源により平常どおり運用します。

#### 6．Amber のレベルアップについて（再掲）

生体分子シミュレーション・ソフトウェア Amber が、7月2日(月)より、Amber9 にバージョンアップしました。逐次・並列版が利用できます。

詳しくは、次の URL を参照してください。

<http://amber.scripps.edu/>

#### 7．XPFortran 講習会の開催について（再掲）

XPFortran 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階事務受付で行います。

日 時： 平成19年9月27日(木)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：

- ・ 並列プログラミングのキーワード
- ・ カーネルループの並列化
- ・ 並列プログラミングコーディング例

定 員： 30名

申込締切日： 平成19年9月25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

(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。)

## 8. 可視化アプリケーション講習会の開催について（再掲）

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](mailto: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5日（水）13時～17時

9月6日（木）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) IDL 利用講習会（中級編）

日時：9月13日（木）10時～17時

9月14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

### 3) 可視化入門講習会

日時：9月19日(水)13時～17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

#### <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。