

## テクニカルアシスタント自己紹介

### 《サイバーサイエンスセンター本館相談室》

山崎 馨 (やまざき かおる)

東北大学 大学院理学研究科化学専攻 博士課程前期

理学研究科化学専攻博士課程後期 2 年の山崎馨と申します。水曜日の 15 時から 17 時を担当しています。昨年度に引き続き、利用相談員として Gaussian 等の量子化学計算パッケージを使った理論計算を中心に皆様の研究のお手伝いをさせていただきます。

物理的・化学的に意味のある量子化学計算を実行して研究に活かすためには、次の 3 点に注意する必要があります。

(1) どの様な物理量を計算するのか、またそれはなぜか。

研究の背景も含めて異分野の門外漢に容易に理解できる説明が行えること。

(2) 適正な計算手法を選択する。使用できる計算リソースの能力の範囲内で、可能な限り正確かつ短時間で目的の物理量を計算できる手法を選ぶ。

(3) 以上の 2 点を達成するために、研究の背景も含めた十分な文献探索と予備計算を行う。

私は、テクニカルアシスタントとして、この様な計算の準備と計算手法の選択からインプットファイルの作成、そして計算結果の解釈のこつにいたるまで、量子化学計算において突き当たる問題のトータルサポートを one-stop で実現していきたいと考えております。1 年間よろしく願います。

坂本 修一 (さかもと しゅういち)

東北大学 電気通信研究所 准教授

木曜日を担当している電気通信研究所准教授の坂本です。長いものでサイバーサイエンスセンターの利用相談員は今年度で 12 年目になりました。

私は、人間の聴覚情報処理過程の解明及び工学応用を念頭に、様々な環境での音・音声の聞こえを調べ、その知見に根ざした音響通信システムの開発を進めています。そのためには多くの知覚心理実験を行って結果の統計解析が必要となるため、サイバーサイエンスセンターで提供している SAS を初めとする統計解析パッケージを利用しています。また、刺激作成などで MATLAB もよく利用しています。

ネットワークやスーパーコンピュータに関する知識はほとんどありませんが、Windows 端末の使い方や、SAS、MATLAB などのアプリケーションの使い方、みなさんのお役に立てることがあるかと思っています。お気軽に声をかけていただけたら幸いです。

**小松 一彦** (こまつ かずひこ)

東北大学サイバーサイエンスセンタースーパーコンピュータ研究部 助教

昨年度に引き続き、サイバーサイエンスセンター利用者相談室で利用相談員を担当させていただくことになりました。金曜日 14~16 時の担当で、担当分野はスーパーコンピュータ (SX-9)、並列コンピュータ (Express 5800) の利用方法全般、およびアプリケーションの高速化全般になります。

計算機アーキテクチャ・大規模並列計算を専門として研究に従事しており、様々な大規模計算環境におけるアプリケーションの最適化を通じて、次世代大規模計算機の要素技術を研究しております。利用相談では、特に、大規模計算機の計算機アーキテクチャやネットワークシステム構成などを考慮したアプリケーションの最適化・高速化に関して、微力ながらみなさまのお力になればと思います。どうぞよろしく願いいたします。

**山下 毅** (やました たけし)

東北大学 情報部情報基盤課共同利用支援係 技術専門職員

担当時間は火曜日 14~16 時で、担当分野は高速化 (ベクトル化、並列化)、およびアプリケーションの利用に関することです。MATLAB、Marc/Mentat、Patran については操作方法のご相談もお受けできますので、お気軽にご利用相談室までお越し下さい。

最近では研究室のワークステーションクラスのマシンでも、マルチコア CPU と大規模メモリを使用して数値計算を行えるようになってきました。8 コア×4CPU、最大メモリ 512GB という製品もあるようです。当センターでサービスを行っている SX-9 は、MPI を使用すれば最大 64CPU と 4TB (4,096GB) という広大なメモリ容量を使用することが出来ます。しかしながら、ベクトルマシンである SX-9 の性能を最大限に引き出すためには、プログラムコードのチューニングが必須となります。研究室のマシンで動かしているプログラムコードをそのまま SX-9 でコンパイル&実行しても、SX-9 の性能が発揮されることはまれです。研究室のマシンで開発されたコードを SX-9 で実行し、「スパコンって言っても、案外遅いなあ。」という経験がある方は、ぜひコードの高速化についてご相談下さい。

**佐々木 大輔** (ささき だいすけ)

東北大学 情報部情報基盤課共同研究支援係 技術一般職員

平成 23 年度に東北大学の技術職員として採用され、本年度で 3 年目となりました佐々木と申します。担当は毎週月曜日 14~16 時となっております。

センターでは主にスーパーコンピュータの運用と関連するサービスに関する仕事に従事しております。また、最近では高速化支援活動を通して利用者の方のプログラムのチューニングも行っております。センターにはベクトル型のスーパーコンピュータがあり、プログラムをベクトル向けにチューニングすることで高いパフォーマンスを得ることが出来ます。センターでも利用法、チューニング技法等講習会を行っておりますので、そちらもご活用いただければと思います。スーパーコンピュータに触れるようになって 2 年ほどたちましたが、知識不足なところも多々あるかと思えます。そのため、質問に対して十分にお答えすることができない場合もあると思いま

すが、皆様の質問、相談内容にお答えできるよう努めていきます。今後とも、よろしくお願いいたします。

**森谷 友映**（もりや ともあき）

東北大学情報部情報基盤課共同研究支援係 技術一般職員

平成24年度から東北大学の技術職員として採用され、昨年度に引き続き、サイバーサイエンスセンター利用者相談室で金曜日(14~16時)の利用相談員を担当させて頂くことになりました、森谷と申します。現在の主な業務として、スーパーコンピュータ(SX-9)、並列コンピュータ(Express 5800)の環境整備やプログラムのチューニング作業に従事しています。特に、スーパーコンピュータに関する分野は技術の進歩が早いので、その変化に対応できる基礎知識・能力の向上に取り組み、質の高いサービスを提供できるよう心がけています。

サイバーサイエンスセンターでは、A0サイズ対応の大判カラープリンタの利用、各言語のプログラミング本、各種マニュアル、資料の閲覧も可能です。また、科学的、工学的分野に特化した様々なアプリケーションソフトの提供もしており、利用相談などを通じて、是非有効活用して、研究に役立てて欲しいと思っております。

利用相談員として、まだまだ未熟な部分もあり、ご迷惑もお掛けするかと思っておりますが、少しでもみなさまのお力になればと思っております。よろしくお願いいたします。

## 《弘前大学・秋田大学・山形大学》

**佐藤 裕之**（さとう ひろゆき）

弘前大学 大学院理工学研究科 准教授

センターには大変長くお世話になっています。ソフトウェアを含めた計算資源は、より高性能になるとともに机上にすべてを揃えるには高価になりすぎてきており、共同利用施設の存在をありがたく感じています。相談の内容や件数は、計算機の力の変化とともに変わってきていると感じていますが、広い意味での計算機への接続とデータのやりとりに関する内容は、さまざまな分野や立場の方々から、常に質問される事柄の一つであるようです。ネットワークの資源が普及するにつれて、接続の方法が多様にもなり、またセキュリティとの兼ね合いで複雑にもなってゆくのを身近に感じるのは、面白くもありまた面倒なものでもあります。遠隔地からの利用に、物理的な距離は感じなくなってきたものの、ネットワークの安全という質の異なる壁を越えるのには、まだまだ距離を感じる場合があります。正しい情報を手に入れること、相談相手を見つけることが、楽をするための秘訣です。微力ですがお役にたちたいと思っております。どうぞご利用下さい。

**宮本 量** (みやもと りょう)

弘前大学 大学院理工学研究科 准教授

専門は量子化学であって、コンピュータとはもっぱらユーザーとしての付き合いです。大学院生の時にスペクトルのシミュレーションをするのに自作のプログラムを作製したのが、大型計算機との付き合いはじめてでした。現在ではセンターの計算機は Unix 環境になっており、操作性やプログラム作成環境は汎用化されて充実していると感じます。さらに最近の計算機は並列化も著しいのですが、とてもその能力を生かすに至っていません。また、分子科学の分野では超有名な Gaussian というプログラムパッケージで、分子の電子状態の計算も行っています。東北大には最新のバージョンが導入されており、大規模な計算も可能です。所属の関係で利用相談を受けることはほとんど無いのですが、少しでも利用者のお役に立てればと思います。

**田中 元志**(たなか もとし)

秋田大学 大学院工学資源学研究科 准教授

平成 14 年度から相談員をさせて頂いております。学生時代から UNIX 環境には触れており、C 言語、TeX は使用しておりました。現在は、この他に MATLAB を使用しております。FDTD (Finite Difference Time Domain : 有限差分時間領域) 法による計算機シミュレーションを行っておりました頃は、Fortran90 も使用しました。解析モデルにもよりますが、パソコンで実行すると丸 1 日かかるような計算が 1 時間程度で済んでしまいました。すごいですね。このような計算には、本センターのスーパーコンピュータの利用は欠かせません。皆さんも本センターを大いに利用して下さい。質問に対して十分にお答えすることができない場合があると思いますがよろしくお願い致します。

**板垣 幸由** (いたがき ゆきよし)

山形大学 理学部 技術専門職員

私は、理学部の所属ですが、通常は学術基盤センターで学内LANと各種サーバ群の管理を行っています。以前はサイバーサイエンスセンターの前身である大型計算機センター・システム管理係に所属しスーパーコンピュータ等大規模計算機システムの管理を行っていた時期もありましたが、山形大学に赴任してきた平成9年度以降はネットワークの管理・運用業務が多くなりました。昔はセキュリティといった言葉もあるにはありましたが、今ほど意識する必要はありませんでした。しかし近年コンピュータ・ネットワークが一般家庭に普及するにつれ、これらを取り巻く環境は劇的に変化してきました。SPAMメールの嵐、ウィルスメールによる被害、ファイル交換ソフトを使った著作権侵害等、問題が山積された世の中となり、それらを監視している私達の仕事も増え、日々頭を悩ませているというのが現状です。

サイバーサイエンスセンターを利用されているみなさんも、計算機の利用や、ネットワークに関する悩みを抱えている方は少なくないと思います、そのような場合は、迷わずテクニカルアシスタントにご相談ください。きっと、良い解決法やヒントが見つかるはずです。

**高野 勝美** (たかの かつみ)

山形大学 大学院理工学研究科 准教授

光ファイバ通信の研究を行っております。通信システムという多数のパラメータからなる非線形システム的设计に数値計算を使っています。また、大学院生の頃から現在も電磁波・光波の電磁界解析も行っており、境界要素法、ビーム伝搬法、FD-TD法などを使った数値計算にも携わってきました。Fortranを使った計算が主ですが、MATLABなども使います。東北大学の計算機や山形大学のベクトル計算機を使った経験があります。

数値計算は、予測しにくいものや目に見えないものを可視化することができます。解析的に解くことが難しい問題や実験をすることが困難な課題の全体像をイメージすることができます。PCソフトウェア開発のプログラム作りとはまた違った、数値計算の楽しさを相談者と分かち合えたらと思っています。

**鈴木 勝人** (すずき かつひと)

山形大学 工学部学術情報基盤センター 技術専門職員

私は米沢市にある工学部でネットワークや各種サーバ類の面倒をみています。計算機と係わって40年ほど。最近では学生さんなどの質問で、意味不明というか本来の意味と違う表現に思わず笑いながら答えることもしばしばです。

サイバーサイエンスセンターの素晴らしい計算資源を活用していただき、時間的余裕を楽しんでみてはいかがでしょうか。時間距離を考える事なく、本当に速い計算機を自分のPCを使う感覚で利用できる現在は、非常に恵まれた環境にあるといえます。費用も発生しますが、青葉山の速い計算機を皆さんでフルに使ってみましょう。どうぞ宜しくお願いします。