

# 東 北 大 学 サイバーサイエンスセンター

大規模科学計算システム広報

# SENAC

Vol.50 No.2 2017-4



Cyberscience Center

Supercomputing System Tohoku University

www.ss.cc.tohoku.ac.jp

# 大規模科学計算システム関連案内

<大規模科学計算システム関連業務は、サイバーサイエンスセンター本館内の情報部情報基盤課が担当しています。>

http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/

階	係•室名	電話番号(内線)* 主なサービス内容		サービス時間
門白	床 主有	e-mail	土なり「ころとう谷	平日
	利用相談室	022-795-6153 (6153) sodan@cc. tohoku. ac. jp	計算機利用全般に関する相談	8:30~17:15
	70円作吹至	相談員不在時 022-795-3406(3406)	大判プリンタ、利用者端末等の 利用	8:30~21:00
一階	利用者談話室	(3444)	各センター広報の閲覧 自販機	8:30~21:00
	展 示 室 (分散コンピュータ博物館)*	*見学をご希望の方は共同利用 支援係までご連絡ください。	歴代の大型計算機等の展示	9:00~17:00
	可視化機器室	(3428)	三次元可視化システムの利用	9:00~21:00
	総務係	022-795-3407(3407) som@cc.tohoku.ac.jp	総務に関すること	8:30~17:15
	会計係	022-795-3405(3405) kaikei@cc. tohoku. ac. jp	会計に関すること、負担金の請求に関すること	8:30~17:15
三階	   共同研究支援係 	022-795-6252(6252) rs-sec@cc. tohoku. ac. jp	共同研究、計算機システムに関すること	8:30~17:15
	共同利用支援係 (受 付)	022-795-3406(3406) 022-795-6251(6251) uketuke@cc.tohoku.ac.jp	利用手続き、利用相談、講習会、ライブラリ、見学、アプリケーションに関すること	8:30~17:15
	ネットワーク係	022-795-6253(6253) net-sec@cc. tohoku. ac. jp	ネットワークに関すること	8:30~17:15
四階	研究開発部	022-795-6095 (6095)		
五階	端末機室	(3445)	PC 端末機 (X 端末)	8:30~17:15

\*()内は東北大学内のみの内線電話番号です。青葉山・川内地区以外からは頭に92を加えます。

#### 本誌の名前「SENAC」の由来

昭和33年に東北地区の最初の電子計算機として、東北大学電気通信研究所において完成されたパラメトロン式計算機の名前でSENAC-1(SENdai Automatic Computer-1)からとって命名された。

### [巻頭言]

# スーパーコンピューティング研究部教授に着任して

#### 滝沢寛之

#### 東北大学サイバーサイエンスセンター

平成 29 年 1 月 1 日付で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ティング 研究部の教授に着任いたしましたので、一言ご挨拶申し上げます。

唐突ですが、仙台といえば伊達政宗が有名ですが、歴史に名が残るような「伊達政宗」は二人いるというのはご存知でしょうか?一般的に有名な独眼竜の伊達政宗は伊達氏17代当主(仙台藩初代藩主)ですが、その先祖の9代当主の名前も同姓同名の伊達政宗です。もともと9代当主のほうの伊達政宗が伊達家の中興の祖と称えられており、その輝かしい事績にあやかって、梵天丸と呼ばれていた独眼竜の少年も同じ伊達政宗と命名されたのです。このことは大河ドラマでも政宗元服のシーンで説明されていましたので、ご存知の方は多いかもしれません。

将来,歴史を振り返ったとき,私の前任の小林広明教授は東北大学サイバーサイエンスセンターにおけるスパコン運用の中興の祖と評価されることでしょう。もちろん,前身の大型計算機センターから脈々と続く歴史あるサイバーサイエンスセンターは,これまでに多くの方々が尽力し,作り上げてきたものであることも大いに強調しなければなりません。しかし,小林先生はその歴史と伝統をうまく継承しつつ,2001年からスーパーコンピューティング研究部教授として,さらには2008年からはセンター長としても現在のサイバーサイエンスセンターのスパコン関係の方針や様々な仕組み,体制を形作ってきました。「普通の人々のためのスーパーコンピュータセンター」(Supercomputers for the rest of us)を目指すことを基本路線として,システム整備計画から利用者支援までを戦略的に考えてきました。小林先生は今後も引き続き現役教授ですし,私の学生時代からの恩師の一人であり,2003年以降は一緒に研究室や研究グループを運営してきた上司でもあります。このため,今このタイミングで,私の立場で小林先生をあまりベタ褒めするのは憚られる面もあるのですが,その多大な功績を書き記す機会はなかなかありませんので,長く記録に残るSENAC巻頭言という場を借りて最大限の敬意を表したいと思います。

なお、伊達政宗の故事に倣えば、小林先生の事績にあやかって私もヒロアキに改名すれば活躍できるのかもしれませんが、両親からもらった大切な名前を変えるわけには行きませんので、 一字違いのヒロユキのままでご容赦ください(笑)。

さて、そのような偉大な前任者が率いていたスーパーコンピューティング研究部とその基本 路線を継承し、さらに発展させていくことを期待されて、私が後任の教授として着任いたしま した。現在、世界中で熾烈なスパコン開発競争が行われており、極端に演算性能を偏重した システム構成や使い勝手を利用者に強いることによってスパコン性能競争で優位に立つ、という戦略が世界トップのスパコン設計において採られています。スパコンの性能競争に勝つためにはそのような思い切った戦略が現在ではある意味で必要不可欠であり、またそのような戦略で構築されたスパコンを必要としている研究分野が多くあることも事実です。しかし、そのようなシステムだけでは、広範で多様な計算科学分野のすべてをカバーすることはできません。少なくとも、そのようなシステムでは性能を出せずに苦しむ研究者が多く出てきます。そこで東北大学サイバーサイエンスセンターは、メモリ性能と演算性能とのバランスを重視したシステム運用によって、演算重視のシステムでは性能を出しにくい研究分野の計算需要を支える役割を担ってきました。今後も引き続き、そのような研究分野を強く意識した特色あるスパコン設計および運用を考え、システム性能だけではなく顧客満足度のさらなる向上を追求していきたいと考えています。

様々な技術的課題や物理的限界から、将来のスパコンの複雑化と大規模化は避けられそうにありません。すでに現在でもスパコンの性能を引き出すためには多様な知識や工夫が必要になっていますが、今後その傾向に拍車がかかることは間違いないでしょう。そのような状況の下で「利用者の利便性をいかにして高めるか」という課題を時代に合わせて真摯に考えていくということが、これまでの路線を堅持して発展させていくということなのだろうと思います。まさに身に余る重責ではありますが、まずは周りをよく観察し、多くの方々に支えていただきながら、なんとかこの大役を果たせるよう全身全霊を傾けて努力していく所存です。今後ともご支援とご指導のほどよろしくお願いいたします。

# [共同研究成果]

# 数値シミュレーションから見出された

# 余効すべり伝播速度と摩擦特性の関係

- Relationship between afterslip propagation speed and frictional properties -

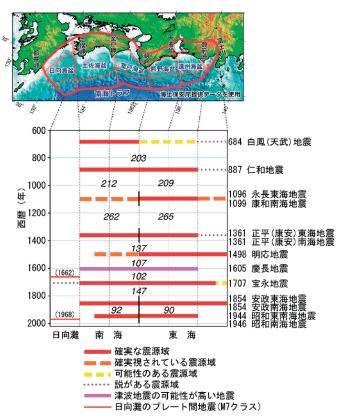
有吉 慶介\*1・松澤 暢\*2・Roland Burgmann\*3・ 長谷川 昭\*2・日野 亮太\*2・堀 高峰\*1

巨大地震発生後に付随する余効すべりの伝播過程を再現するために、これまでの数値シミュレーションでは入力パラメターを試行錯誤的に決めていた。本研究では、多数の数値シミュレーション結果から共通の特徴を見出したことで、摩擦パラメターとの関係式を解析的に導出することに成功した。これにより、本震から余震が発生するまでの時間差を事前に見積もったり、逆に、観測された時間差から摩擦特性を絞り込めることが期待される。

#### 1. はじめに

巨大地震が発生して断層にずれが 生じた後、その歪を解消するために、 その周辺にすべりが広がる現象は、 「余効すべり」[1]と考えられてい る.この「余効すべり」は、地震波 伝播速度よりもはるかに遅く、前震 →本震や本震→余震の時間差が生じ る原因の一つだと考えられている.

例えば、近い将来に巨大地震が発生すると考えられている南海トラフ沿い (図1) では、1707年の宝永地震では全体が一気に壊れ、1854年の安政地震では東海→南海で30時間が生じ、1944/1946年の昭和地震では東南海→南海で2年間の時間差が生じているが、このように地震が連動する時間差が毎回異なる理由については未解明のままである.



震が連動する時間差が毎回異なる理 図1.南海トラフで過去に起きた主要な地震 [2].

<sup>\*1</sup>独立行政法人 海洋研究開発機構 地震津波・防災研究プロジェクト

<sup>\*2</sup>東北大学大学院理学研究科附属 地震・噴火予知研究観測センター

<sup>\*3</sup>カリフォルニア大学バークレー校

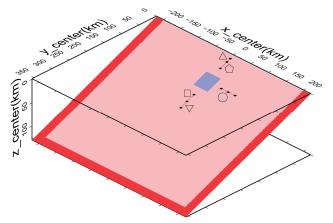
一方で、これまでの数値シミュレーション研究では、東北地方太平洋沖地震をはじめと する海溝型巨大地震の発生サイクルを再現すべく、その時間差が実際に観測されたものに 近づけるために、入力値となる摩擦パラメターを試行錯誤的に多数のモデルを導入してき た [3]. そのため、実際に地震が発生してからモデルが構築されるまでに何年もの時間を要 し、即応的な地震発生予測をするのが難しいという問題を抱えている.

そこで本研究では、余効すべりと摩擦特性との関係について、単純化したモデルの数値 シミュレーション結果に基づいて近似条件を見出すことで、両者の関係を解析的に導出し、 その妥当性を検証すると共に、過去の地震活動に基づいて摩擦特性を考察した.

#### 2. 数値シミュレーションに基づく余効すべり伝播速度と摩擦パラメタ―との関係

余効すべりの伝播速度は,摩擦特性 だけでなく断層の形状や弾性定数など にも影響を受ける. そこで, 他の要因 を排除するために、地震サイクル数値 シミュレーションとして単純化された 数値モデル(図2)を適用した [4]. 計 算手法等の詳細については,過去の文 献を参照されたい [5].

数値シミュレーションから再現され ていることが分かった.



た余効すべり伝播過程の特徴として、 図2.適用した3次元沈み込みプレート境界面の バケツリレーのようなかたちで伝播し 数値モデル. 各区間の指標として記号で示す.

これを言い換えると,ある物体(スライダー)がすべると,隣のスライダーとつなぐバ ネが縮み、その後、隣のスライダーがすべる・・・、という過程が連鎖的に続く、という ものである. この近似条件を, 岩石実験から得られた摩擦法則(速度・状態依存摩擦構成 則)に適用すると、伝播速度  $V_{\text{prop}}$  は、摩擦パラメタ $-(a,b,d_c)$ 、有効法線応力  $(\sigma)$ 、断層 形状に基づくばね定数 (k), スライダーがすべる直前までに負荷する応力擾乱振幅 (H) を 関数として,

$$V_{prop}(a, b, d_c, \sigma, k, H \mid i) = \frac{\Delta s_i \mu_b}{a \log \left( L_{func} + \frac{\mu_b}{\gamma V_{fact}} \right) - \frac{H}{\mu_b}}$$

と記述することが出来た.ここで、i はスライダーの指標、 $\Delta s_i$  はスライダーの間隔 (メッ シュサイズ), L は応力擾乱の時間関数 (ramp 関数, step 関数) で決まる因子,  $\gamma$ は (b, dc,  $k, \sigma$ ) で決まる因子,  $V_{fact}$  は (a, b, dc) で決まる因子,  $\mu_b$ はプレート運動速度と  $(k, \sigma)$  で決 まる因子である(詳細な記述は省略する).この導出にあたっては、摩擦構成則の数式を展 開しただけでは不十分で,大規模数値計算を共同研究開発によって多数実行することによ り, 共通した近似条件を見出すことが出来た点が大きく寄与している.

この関係式で得られる伝播速度と、地震サイクル数値シミュレーションから再現された 伝播速度を比較すると、自由表面効果が強い地表付近を除いて、全ての場所で一桁以内の 精度で再現することが出来た(図3). この際、東北大学サイバーサイエンスセンターとの 共同研究によるプログラム開発によって多数の数値モデルで検証することになったため、 妥当性を客観的に示すことが出来た.

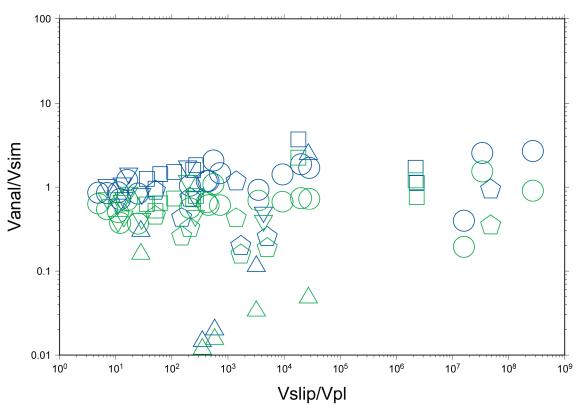


図3. プレート収束速度( $V_{\rm pl}$ ) で規格化した最大すべり速度と、本研究で適用した伝播速度の理論値 ( $V_{\rm ana}$ ) を数値実験から求められた値 ( $V_{\rm sim}$ ) で規格した精度評価との関係. 記号は、図1の区分に対応し、青色は  $L_{\rm func}$  における ramp 関数、緑色は step 関数をそれぞれ示す. 自由表面の効果が残る $\Delta$ 以外は、全て一桁以内の範囲に収まっている.

#### 3. 有効法線応力と余効すべり伝播速度との関係

本研究の数値シミュレーションから示された特徴について、ここでは一例として、余効すべり伝播速度と有効法線応力との関係を示す。図4を見ると、応力変化量 $\Delta$   $\tau$  が大きく、その時間率が大きい(ramp < step =  $\infty$ )ほど、有効法線応力に対する伝播速度の依存性が大きいことが分かる。また、(a),(b) と(c),(d) が異なることから、沈み込み方向と走行方向でも伝播速度に違いがあることが示された。灰色の部分は、解析解の伝播速度が負の値となり、物理的に不合理なものとなった。これは、上記で述べた、ばねスライダーモデルにおいて、ばねが縮まらないことを意味する。

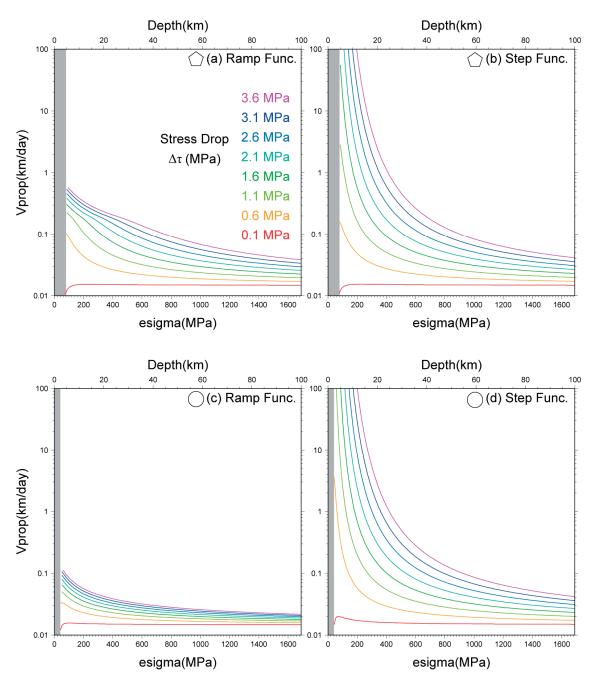


図4. 有効法線応力と余効すべり伝播速度との関係. 記号は、図1の区間に対応し、応力変化量 $\Delta$   $\tau$  は、H  $\sigma$  に相当する. 参考として、間隙圧が静水圧と仮定した場合の深さへの変換値も付記した. 灰色の部分は、伝播速度が負の値となるため、プロットの対象外とした.

この結果を東北地方太平洋沖地震など、既に既存観測から捉えられたデータに適用することが出来れば、地震発生メカニズムの過程を知る上で重要な情報が得られると期待される。JFASTによる東北沖の掘削では、断層が 50m も滑った付近での見かけ摩擦係数は 0.08程度と推定された [6]. これは、有効法線応力が極めて小さく、図4の灰色部分に相当することになる。これをばねスライダーモデルに立ち返って考察すると、ばねが縮まずに棒のような状態のままスライダーと一緒にすべったことを意味し、時間遅れを伴う余効すべり

が起こらない環境であったことを示唆するものである.

他にも最近では、スロー地震が南海トラフの走行方向に沿って移動する現象が地震計の 観測網から捉えられているが [7]、これが小地震の余効すべりに伴う連鎖破壊として説明出 来ると考えると、見かけ摩擦係数や応力降下量を推定することが出来る可能性がある。同 様に、2011年3月11日の2日前に発生したM7の前震についても、前震の余効すべりが本 震M9の震源域まで伝播したとすれば、その間の摩擦特性を推定することが期待される。同 様のことは、伝播方向を推定した釜石沖地震 [1] についても当てはまる。今後はこのよう な現象について、現在整備中の海底観測網 (DONET, S-net) の観測データと併せて検証する ことで、今後発生する巨大地震が連動する時間差について事前に定量的な評価を示すこと を目指す。

#### 謝辞

本研究は、東北大学サイバーサイエンスセンターとの共同研究の一環であり、研究費の一部は科学研究費補助金として、新学術領域(研究領域提案型)「余効すべり過程の理論解析と数値モデリングに基づく摩擦特性の推定 (15H01148)」および「低速変形から高速すべりまでの地球科学的モデル構築 (16H06477)」から支援を受けたものである.

# 参考文献

- [1] 有吉 慶介・内田 直希・松澤 暢・日野 亮太・長谷川 昭・堀 高峰・金田 義行, 2015. 東北地震に伴う固有地震活動の揺らぎから推定された摩擦特性と余効すべり伝播過程, SENAC 48(1), 33-38.
- [2] 地震調査研究推進本部 地震調査委員会, 2013, 南海トラフの地震活動の長期評価 (第二版), pp. 96.
- [3] R. Nakata, T. Hori, M. Hyodo, K. Ariyoshi, 2016, Possible scenarios for occurrence of M∼7 interplate earthquakes prior to and following the 2011 Tohoku-Oki earthquake based on numerical simulation, *Scientific Reports*, vol. 6, No. 25704, doi:10.1038/srep25704.
- [4] K. Ariyoshi, T. Matsuzawa, A. Hasegawa 2007, The key frictional parameters controlling spatial variations in the rate of postseismic slip propagation on a subduction plate boundary, *Earth and Planetary Science Letters*, vol. **256**, 136-146, doi:10.1016/j.epsl.2007.01.019
- [5] 有吉 慶介・松澤 暢・長谷川 昭, 2005. 沈み込みプレート境界における余効すべり伝播 速度の空間分布, SENAC 38(4), 3-11.
- [6] K. Ujiie, et al. 2013, Low Coseismic Shear Stress on the Tohoku-Oki Megathrust Determined from Laboratory Experiments, *Science*, vol. 342, No. 6153, 1211-1214, doi: 10.1126/science.1243485
- [7] 有吉 慶介・松澤 暢・日野 亮太・長谷川 昭・堀 高峰・中田 令子・金田 義行, 2014. 超 低周波地震の活動に基づくプレート間固着の推定, SENAC 47(1), 29-34.

# [お知らせ]

# 平成29年度サイバーサイエンスセンター講習会のご案内

サイバーサイエンスセンターでは、利用者のみなさまに当センターの計算資源を効率的に利用 していただくことを目的に講習会を開催しております。初めてスーパーコンピュータを利用され る方や現在活用されている方を対象に、幅広いカリキュラムを用意しています。 みなさまの参加をお待ちしております。

No.	講習会名	開催日時	募集 人数	講師	内容
1	UNIX 入門	5月24日(水) 9:00-12:00	20	山下(共同利用支援系)	・UNIX システムの基本的な使い方 ・エディタの使い方
2	大規模科学計算システム の利用法	5月24日(水) 13:00-15:30	20	小野(共同利用支援系)	・スーパーコンピュータ SX-ACE と 並列コンピュータ LX 406Re-2 の 紹介と利用法
3	MATLAB 入門	6月23日(金) 13:00-17:00	15	陳 (秋田県立大学)	・MATLAB の基本的な使い方
4	Marc 入門	7月28日(金) 13:00-17:00	15	内藤 (工学研究科)	・Marc の基本的な使い方
5	ネットワークとセキュリ ティ入門	8月1日(火) 13:30-16:00	30	水木 (ネットワーク研究部)	・ネットワークの基本的な仕組み ・ネットワークの危険性と安全対策
6	Gaussian 入門	8月3日(木) 13:00-17:00	20	岸本 (理学研究科)	・Gaussian の基本的な使い方
7	UNIX 入門	8月7日(月) 9:00-12:00	20	山下(共雨川支援系)	・UNIX システムの基本的な使い方 ・エディタの使い方
8	大規模科学計算システム の利用法	8月7日(月) 13:00-15:30	20	小野(共同利用支援係)	・スーパーコンピュータ SX-ACE と 並列コンピュータ LX 406Re-2 の 紹介と利用法
9	Fortran 入門	8月8日(火) 10:00-17:00 8月9日(水) 10:00-12:00	20	田口 (摂南大学)	·Fortran の初歩から応用まで
10	SX-ACE における高速化 技法の基礎	8月9日(水) 13:00-17:00	20	スーパーコンピ ューティング研 究部	・高速化を目的としたスーパーコンピュ ータの最適化および並列化の基礎
11	OpenMP プログラミング 入門	8月10日(木) 9:00-12:00	20	スーパーコンピ ューティング研 究部	・並列プログラミングの概要と OpenMP による並列プログラミングの基礎 ・利用法
12	MPI プログラミング入門	8月10日(木) 13:00-17:00	20	スーパーコンピ ューティング研 究部	・MPI による並列プログラミングの基礎 ・利用法
13	三次元可視化システムの 利用法	9月6日(水) 10:00-17:00	10	齋藤 (共同研究支援係)	・三次元可視化システム(AVS/Express)の 基本的な使い方
14	Mathematica 入門	9月7日(木) 13:00-17:00	20	横井 (尚絅学院大学)	・Mathematica の基本的な使い方
15	UNIX 入門	10月11日(水)9:00-12:00	20	佐々木(共同研究支援系)	・UNIX システムの基本的な使い方 ・エディタの使い方
16	大規模科学計算システム の利用法	10月11日(水) 13:00-15:30	20	大泉(共同研究支援係)	・スーパーコンピュータ SX-ACE と並 列コンピュータ LX 406Re-2 の紹介 と利用法
17	SX-ACE における高速化 技法の基礎	10月12日(木) 13:00-17:00	20	スーパーコンピ ューティング研 究部	・高速化を目的としたスーパーコンピュ ータの最適化および並列化の基礎
18	OpenMP プログラミング 入門	10月13日(金)9:00-12:00	20	スーパーコンピ ューティング研 究部	・並列プログラミングの概要と OpenMP による並列プログラミングの基礎 ・利用法
19	MPI プログラミング入門	10月13日(金) 13:00-17:00	20	スーパーコンピ ューティング研 究部	・MPI による並列プログラミングの基礎 ・利用法

備考:・申し込みは、ウェブページ http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/guide/kosyu.cgi からお願いします。 ・プログラムは予定のものです。若干変更になる場合がありますのでお含みおきください。

問合せ先: 共同利用支援係 (022-795-3406, uketuke@cc. tohoku. ac. jp)

スーパーコンピュータに関する出張講習会の開催も検討いたします。希望される方は共同利用支援係までご相談ください

## 昨年の講習会受講者の感想

#### UNIX入門

- ・初心者にとって、基本的かつ実用的なも のであってとても参考になった。
- 入門として非常にわかりやすかった。
- ・vi の使い方に触れてもらってよかった。



#### OpenMP プログラミング入門

- ・全く OpenMP を知らない人にもわかりやすい 内容でした。
- すぐ応用に使えそうだ。
- ・演習が充実していてとてもよかった。

#### SX-ACE における高速化技法の基礎

- ・ボリュームがあり難しかったけど、その分原因などが分かるので充実した内容だった。
- ・並列化・ベクトルカの改善方法をざっくり 知ることができた。

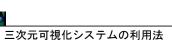
#### Gaussian 入門

- ・講義から実践まで新鮮でした。
- ・化学にほとんど詳しくない自分にとっても理解でした、とてもありがたい。
- ・先生の説明は判り易かったです。
- ・コンピュータに関する知識がうといのでかなり難しい内容だった。



#### ネットワークとセキュリティ入門

- ・初心者にとってわかりやすかった。
- ・役立つワンポイント情報が豊富だったので、 自習に役立ちます。
- ・「サブネット」「Mac アドレス」など聞いたことがあるが、なんだかわからない呪文の意味がわかってとてもうれしかった。



- ・モジュールの意味や関係性について とても参考になった。
- ・プログラミングについての知識があまり無いので難しく感じる単語が多かった。
- ・実習がよかった。また、3D 大画面 は臨場感が大いにあった。



#### 大規模科学計算システムの利用法

- ・スーパーコンピュータのことはまったく知らなかったので興味深かった。
- Fortran についてよく知りませんでしたが、資料が判りやすく理解することができた。
- ・スパコンを実際に見ることができて良かった。

#### MPI プログラミング入門

- ・講習会用の資料がすごくわかりやすかったです(プログラム例、図)。
- ・とても判り易く参考になった。充実していて面白かった。
- ・講習内容に対して演習がわかりやすくてよかった。



#### MATLAB 入門

- ・初心者にわかりやすかった。
- ・講師の方が大変丁寧でよかった。
- ・GUI の説明は興味深かったです。
- ・機能一覧の表は便利そう。多くの機能 がわかってよかったです。

#### Marc 入門

- ・実際に操作しながら学べて判り易かった。
- ・複雑でしたが、設計から実行までひとつのソフトで扱え面白かったです。
- たいへんわかりやすい説明だったと思います。
- ・楽しみながら学ぶことができた。

#### Mathematica 入門

- ・基本的なことがよくわかった。丁寧に解説いただきありがとうございました。
- ・自分で操作してそれをチェックしてもらえるのでよかった。





#### [大規模科学計算システム]

# SSH アクセス認証鍵生成サーバの利用方法

共同利用支援係 共同研究支援係

#### 1. はじめに

大規模科学計算システムでは、セキュリティ強化のため、パスワード認証によるログインを廃止し、公開鍵暗号方式によるログインのみ許可しています<sup>※1</sup>。SSH アクセス認証鍵生成サーバ(以下、鍵サーバ)はセンターに SSH アクセスするために必要な公開鍵と秘密鍵のペアを生成し、ユーザのホームディレクトリに公開鍵を自動登録するサーバです。本稿では、その利用方法についてご紹介します。

ログインホスト名	認証方式	利用システム
front.cc.tohoku.ac.jp	公開鍵	スーパーコンピュータ SX-ACE 並列コンピュータ LX 406Re-2
file.cc.tohoku.ac.jp		データ転送サーバ
_	パスワード**2	利用者端末 大判カラープリンタ 三次元可視化システム

表 1 各ホストのログイン認証方式

※1: HPCI 課題、JHPCN-HPCI 課題で利用する場合は GSI 認証でのログインも可能です。詳しくは、以下のリンク先の「HPCI ログインマニュアル」をご覧ください。

http://www.hpci-office.jp/pages/hpci\_manuals

※2:センター内施設(利用者端末・大判カラープリンタ・三次元可視化システム)は、ローカルログインのため、パスワード認証でご利用いただけます。利用にあたり、秘密鍵を持参する必要はありません。

#### 2. 公開鍵暗号方式を使用する上での注意事項

以下のような行為は、不正アクセスのリスク(不正ログイン、クライアントのなりすまし、暗号化された通信の暴露、他サーバへの攻撃等)が非常に高く、大変危険です。ご注意願います。

- パスフレーズなしの秘密鍵を使用
- 秘密鍵、パスフレーズの使い回し
- ・ 秘密鍵のメールへの添付、USBメモリやホームディレクトリへの保存
- 公開鍵と秘密鍵のペアを同一ノード上に保存

#### SSH アクセス認証鍵の生成

鍵を生成すると、鍵サーバへのログインが自動的にロックされます。一度ログアウトすると、 以降は鍵サーバにはログインできなくなりますのでご注意ください。鍵の再登録が必要になっ た場合は共同利用支援係までご連絡下さい。本人確認の上、ロックを解除します。

(1) 鍵サーバに利用者番号と初期パスワード (変更している場合は変更後のパスワード) で SSH 接続します。

SSH アクセス認証鍵生成サーバ

key.cc.tohoku.ac.jp

#### リスト1 鍵サーバへの SSH 接続例

localhost\$ ssh 利用者番号@key.cc.tohoku.ac.jp

利用者番号@key.cc.tohoku.ac.jp's password: パスワードを入力

(初回接続時のメッセージ) : yes を入力

key\$(コマンド待ち状態)

(2) 以下のコマンド (cckey-gen) を実行し、メッセージに従って公開鍵と暗号鍵の鍵ペアを作成します。必ずパスフレーズ (8 文字以上) を設定して鍵を作成してください。

リスト2 公開鍵と暗号鍵の作成方法

#### key\$ cckey-gen

Enter passphrase(8 or more characters): <u>パスフレーズ</u>の入力(必ず設定) Enter same passphrase again: 同じパスフレーズを再度入力

#### (生成された秘密鍵の表示)

'利用者番号' registration is completed.

RSA private key is as follws.

----BEGIN RSA PRIVATE KEY----

Proc-Type: 4, ENCRYPTED

DEK-Info: DES-EDE3-CBC, A3C27C703A6DF938

gp5U3M6wVIvuGLX80tYBAWC3WwNzX9TPu8e0CA9Pd/i6ijSNcVKp7IGJtuRzjfXV(中略)

FSwfyL63gRqxPZEmlcZzfDnhyX7ezdNNveZu37U/nq4TQj9+Q+RWHhjF9jwnuW6F-----END RSA PRIVATE KEY----

8<------8<-------

- (3) 画面に表示された秘密鍵 (---BEGIN RSA PRIVATE KEY--- から ---END RSA PRIVATE KEY--- まで)をコピー&ペーストし、ローカル PC にテキストファイルとして保存します。 公開鍵は自動的にユーザのホームディレクトリに登録されます。秘密鍵はセキュリティを考慮して消去されます。
- 4. 公開鍵暗号方式によるログイン方法
- 4.1 Linux/OS X のターミナルソフトから接続する方法

生成された秘密鍵をファイル名「id\_rsa\_cc」として「~/.ssh/」以下に保存した場合

(1) パーミッションを600に変更します。(初回のみ)

リスト3 パーミッションの変更

localhost\$ chmod 600 ~/.ssh/id rsa cc

(2) i オプションで使用する秘密鍵を指定して SSH 接続を行います。 (i オプションを省略した場合は ~/.ssh/id rsa あるいは ~/.ssh/id dsa が利用されます)

#### リスト 4 ログインホストへの SSH 接続例

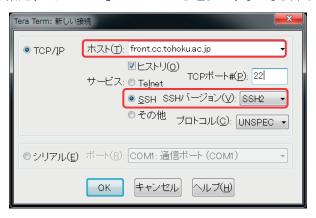
localhost\$ <u>ssh -i ~/. ssh/id\_rsa\_cc 利用者番号@front.cc. tohoku.ac. jp</u>
Enter passphrase for key '/home/localname/.ssh/id\_rsa\_cc':<u>パスフレーズ</u>を入力
(初回接続時のメッセージ): <u>yes</u> を入力

front\$ (コマンド待ち状態)

#### 4.2 Windows の Tera Term から接続する方法

生成された秘密鍵をファイル名「id\_rsa\_cc」として「ドキュメント」以下に保存した場合

(1) 「ホスト名」を指定、「サービス」はSSH2 を選択し、[OK]を押下します。



(2) 「ユーザ名」に利用者番号、「パスフレーズ」に鍵ペアを作成した際に入力したものを入力、「RSA/DSA 鍵を使う」を選択し、「秘密鍵」に保存した秘密鍵のファイルを指定します。 (秘密鍵ファイルの選択画面では、拡張子「すべてのファイル(\*.\*)」を選択します) [OK]を押下すると接続されます。



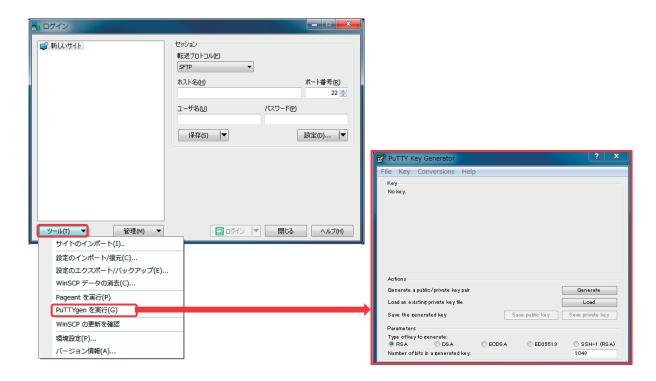
#### 4.3 Windows の WinSCP から接続する方法

WinSCP から接続する場合は、PuTTY 形式の秘密鍵を用意する必要があります。初回接続時は、4.3.1 の手順に従い、鍵サーバで生成した秘密鍵を PuTTY 形式に変換してください。

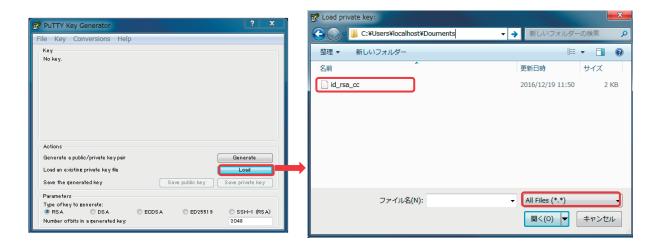
## 4.3.1 秘密鍵を PuTTY 形式に変換

鍵サーバで生成した秘密鍵をファイル名「id\_rsa\_cc」として「ドキュメント」以下に保存した場合

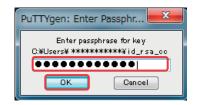
(1) WinSCP のログイン画面から WinSCP 付属の鍵生成プログラム 「PuTTYgen」 を起動します。 ([ツール] 押下→[PuTTYgen を実行] を押下) PuTTYgen がインストールされていない場合はインストールが必要です。



(2) [Load]を押下し、鍵サーバで生成した秘密鍵ファイルを選択して[開く]を押下します。 (秘密鍵ファイルの選択画面では、拡張子「All Files(\*.\*)」を選択します)



(3) 鍵サーバで生成した秘密鍵のパスフレーズを入力し、[OK]を押下します。



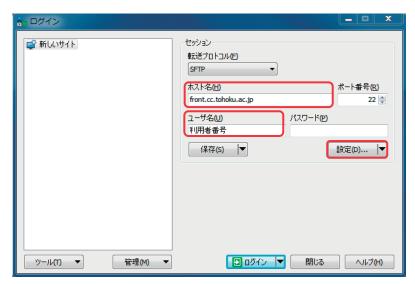
(4) [Save private key]を押下すると、PuTTY 形式に変換された秘密鍵が保存されます。 (保存先/ファイル名は任意。拡張子は.ppk を推奨)



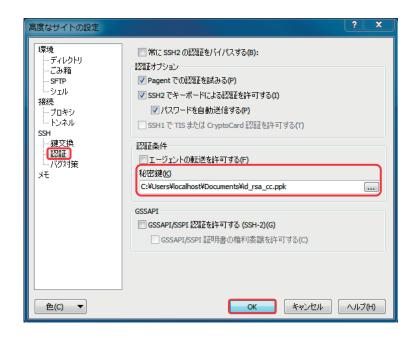
#### 4.3.2 ログイン方法

PuTTY 形式の秘密鍵をファイル名「id\_rsa\_cc.ppk」として「ドキュメント」以下に保存した場合

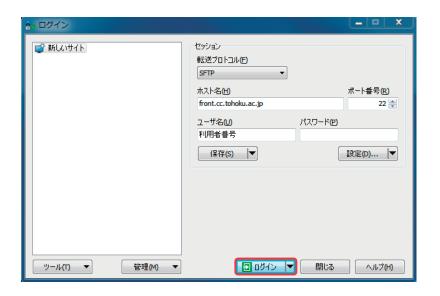
(1) 「ホスト名」を指定、「ユーザ名」に利用者番号を入力し、[設定]を押下する。



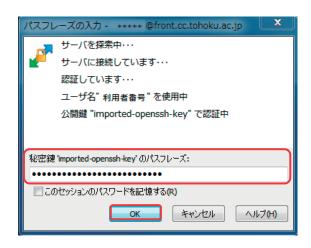
(2) 「SSH」 $\rightarrow$ 「認証」を選択し、「秘密鍵」に PuTTY 形式の秘密鍵のファイルを指定して[OK]を押下します。



(3) [ログイン]ボタンを押下します。



(4) パスフレーズを入力し、[OK]押下すると接続されます。



# 4.4 その他の OS/アプリケーションから接続する場合

各アプリケーションのヘルプを参照ください。

# 5. おわりに

本稿では、SSH アクセス認証鍵生成サーバの利用方法を紹介しました。ご不明な点、ご質問等ございましたら、お気軽にセンターまでお問い合わせください。

# [大規模科学計算システム]

# アプリケーションサービスの紹介

情報部情報基盤課 共同利用支援係

#### はじめに

本センター大規模科学計算システムでは、分子軌道計算、数式処理、構造解析、データ処理等の各アプリケーションソフトウェアを、利用者の幅広い要望にお応えしてサービスしています。本稿では、並列コンピュータ LX 406Re-2 でサービスを行っているアプリケーションソフトウェアの紹介をします。

#### 表 1. アプリケーションソフトウェアとサービスホスト

アプリケーションソフト	サービスホスト	
分子軌道計算ソフトウェア	Gaussian	
反応経路自動探索プログラム	GRRM14	
統合型数値計算ソフトウェア	Mathematica	front.cc.tohoku.ac.jp
汎用構造解析プログラム	Marc/Mentat	
対話型解析ソフトウェア	MATLAB	

アプリケーションソフトウェアの紹介は、以下の URL の本センター大規模科学計算システム Web ページにも掲載しています。

#### http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/index.html

本稿中の内容は 2017 年 3 月現在のものですので、アプリケーションソフトウェアのバージョンアップや利用方法の最新情報については、Web ページを随時ご確認ください。

#### ご利用の前に

#### ■ リモートログイン

スーパーコンピュータ、並列コンピュータへリモートログインする手順です。SSH(Secure SHell)接続を行います。アプリケーションを利用する際は、並列コンピュータにログインします。GUI アプリケーションを利用する場合は、GUI アプリケーションを利用する方法を合わせてご参照ください。

#### 表 2. 計算機システムと日本語環境

システム	ホスト名	os	日本語環境
並列コンピュータ	front on tohoku on in	Linux	UTF-8
LX 406Re-2	front.cc.tohoku.ac.jp		

SSH は通信路上のデータを暗号化することで安全性を高めたプログラムです。利用している端末が UNIX, Linux, macOS の場合は SSH クライアントソフトがインストールされています。インストールされていない場合は端末の管理者にご相談ください。

並列コンピュータの OS は Linux です。公開鍵暗号方式による認証のみ利用できます1。アカウント希望の場合は、共同利用支援係に利用申請し利用者番号と初期パスワードを発行してもらいます。

<u>並列コンピュータへの初回ログイン時には公開鍵と秘密鍵のペアを作成する必要があります。</u>鍵ペア の作成方法については本誌 10 ページの「SSH アクセス認証鍵生成サーバの利用方法」をご参照ください。

<sup>1</sup> パスワード認証方式は 2015 年 4 月 13 日で廃止しました。

なお、他人名義の利用者番号でのシステム利用は禁止します。パスワード、秘密鍵、パスフレーズの使い回しは、不正アクセスのリスク(不正ログイン、クライアントのなりすまし、暗号化された通信の暴露、他サーバへの攻撃等)が非常に高く、大変危険です。利用者登録を行うことによる年間維持費等は発生しませんので、利用される方はそれぞれで利用申請をお願いいたします。

#### 【Unix, Linux からのログイン】

「ターミナル」、「端末」、「terminal」などの SSH クライアントソフトを起動します。コマンドを入力するプロンプトが表示され、コマンドの待ち受け状態になります。

#### リスト 1. 並列コンピュータへのログイン例

(認証鍵生成サーバで作成した秘密鍵のファイル名をid rsa cc として~/.ssh 以下に保存した場合)

localhost\$ ssh -i ~/.ssh/id\_rsa\_cc 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp

Enter passphrase for key '/home/localname/.ssh/id\_rsa':パスフレーズを入力

(初回接続時のメッセージ) : yes を入力

front1 \$ (コマンド待ち状態)

#### 【macOS からのログイン】

「ターミナル.app」を起動します。接続方法は上記と同じです。

#### 【Windows からのログイン】

#### ● SSH クライアントソフトのダウンロードとインストール

SSH クライアントソフトの一つである「Tera Term」というフリーソフトをインストールします。以下のページからダウンロードできます。2017 年 3 月現在の最新版は 4.94 です。ダウンロード後インストール作業を行ってください。

Tera Term ダウンロードページ: http://sourceforge.jp/projects/ttssh2/

#### ● 並列コンピュータへの接続

「ホスト名」を指定、「サービス」は SSH2 を選択し、「OK」を押下します。



「ユーザ名」に利用者番号、「パスフレーズ」に鍵ペアを作成した際に入力したものを入力、「RSA/DSA 鍵を使う」を選択し、「秘密鍵」に保存した秘密鍵のファイルを指定します。

(秘密鍵ファイルの選択画面では、拡張子「すべてのファイル(\*.\*)」を選択します)

[OK]を押下すると接続されます。



#### 【シェルの初期設定】

大規模科学計算システムでは、お勧めの初期環境設定を用意しています。これによりパスなどの基本的な設定、また各アプリケーションの環境変数等が自動的に設定されます。これは、利用登録時に個々の ID にあらかじめ行っていますので、通常は作業の必要はありません。

アプリケーションが利用できないという場合には、この設定が変更されていることが考えられます。.cshrc ファイル(csh を利用する場合、センターの規定値) または .login ファイル(sh を利用する場合)に、センターで用意している初期設定ファイル /usr/skel/Cshrc または/usr/skel/Login を読み込む設定となっていることを確認してください。設定を変更した場合は、設定を反映させるためにログインし直してください。

#### 【ファイル転送】

#### ● コマンドラインでのファイル転送

ローカル端末から「scp」、「sftp」コマンドが利用できます。どちらのコマンドも通信経路上は暗号化されていますので安全性の高いファイル転送ができます。利用方法についてはそれぞれのマニュアルをご参照ください。

#### ● アプリケーションを利用したファイル転送

ファイル転送を行う代表的なアプリケーションは Linux では「gftp」、Windows では「WinSCP」、macOS では「Cyberduck」などです。利用方法についてはそれぞれのマニュアルをご参照ください。アプリケーションの設定において、転送プロトコルは SSH2 を選択してください。通信経路上は暗号化されます。

#### ● 入出力端末を利用したファイル転送

センター1F の利用相談室に設置された入出力端末を利用して、USB 接続(USB3.0 対応)の HDD にホームディレクトリのデータをコピーすることができます。センター内ネットワークからのアクセスで、高速なファイルのコピーが可能です。利用方法はセンターまでお問い合わせください。

#### ■ GUI アプリケーションを利用する方法

GUI を用いたアプリケーション (MSC. Mentat, Mathematica, MATLAB) の実行には、ローカルマシンに X Window System 環境の設定が必要です。

#### 【Unix, Linux からの利用】

標準で X Window System がインストールされています。ローカル端末から以下の様にログインしてください。 X Forwarding によりローカル画面にアプリケーション画面が表示されます。

#### リスト 2. Matlab を起動する場合

(秘密鍵のファイル名をid rsa cc として~/.ssh 以下に作成した場合)

localhost\$ <u>ssh -i ~/.ssh/id\_rsa -X<sup>\*1</sup> 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp</u>
Enter passphrase for key '/home/localname/.ssh/id\_rsa':パスフレーズを入力
(初回接続時のメッセージ): <u>yes</u> を入力

front1 \$ matlab

※1 大文字の"X"です。

#### 【Windows からの利用】

● 商用のアプリケーションを利用する場合

Windows 用 X サーバは、X サーバソフトとしていくつかのメーカから販売されています。

- ·ASTEC-X (アステック・エックス)
- ・Exceed (Open Text Exceed オープンテキスト・エクシード)

それぞれの利用方法について詳しくは各社の HP をご参照ください。どちらのソフトも無料評価版があります。

● Windows に仮想的な Linux をインストールする場合

Windows に「Oracle VM VirtualBox」(以下「VirtualBox」)という仮想化ソフトウェアをインストールし、その環境に Linux をインストールします。

「VirtualBox」は以下のページからダウンロードできます。「VirtualBox platform packages」(現在使用している OS に合ったもの)と「VirtualBox Extension Pack」の両方をダウンロードし、インストールを行ってください。インストール方法の詳細はマニュアルをご参照ください。2017 年 3 月現在の最新版は 5.1.18 です。

VirtualBox ダウンロード: https://www.virtualbox.org/wiki/Downloads

#### VirtualBox 5.1.18 の起動画面



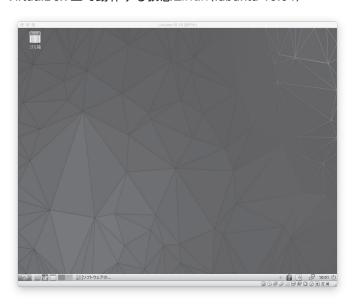
Linux のディストリビューション、バージョンによっては GUI アプリケーションが正しく表示されない場合があります。センターで動作確認を行っているのは、lubuntu 16.04 です。以下のページからダウンロードし、Virtual Box の仮想環境にインストールしてください。インストール方法の詳細は各マニュアルをご参照ください。

lubuntu ダウンロード:

http://lubuntu.net

SSH クライアントソフト「LXTerminal」を起動し、【Unix, Linux からの利用】と同様に利用できます。

#### VirtualBox 上で動作する仮想Linux(lubuntu 16.04)



#### 【macOS からの利用】

macOS では標準で X Window System 環境の「X11.app」がインストールされていますので、macOS の端末から Unix, Linux からの利用と同様に利用可能ですが、GUI アプリケーションによっては表示の不具合がある場合があります。その場合は、Windows に仮想的な Linux をインストールする場合 と同様の方法で、Linux をインストールしてご利用ください。

#### アプリケーションソフトウェア

非経験的分子軌道計算プログラム Gaussian16

Gaussian プリポストシステム GaussView

反応経路自動探索プログラム GRRM14

汎用構造解析プログラム MSC.Marc / MSC.Marc Mentat ※

MSC ソフトウェア社のアプリケーション ※

数式処理プログラム Mathematica ※

科学技術計算言語 MATLAB ※

※ 東北大学の構成員のみご利用できます。

# 非経験的分子軌道計算プログラム Gaussian 16

Gaussian は、Carnegie-Mellon 大学の Pople を中心として開発された分子軌道計算プログラムパッケージです。 広範囲にわたる非経験的モデルおよび半経験的モデルをサポートしています。

本センターの Gaussian には、以下のような特長があります。

- ・ 最大 24 並列までの並列処理が行え、実行時間の短縮が可能です。
- ・ スクラッチファイル(テンポラリファイル)を高速な SSD ディスクに置くことにより、ファイル入出力時間が短縮されます。

#### ■ サービスホスト・バージョン

front.cc.tohoku.ac.jp · Gaussian16 A.03

#### ■ 利用方法

以下は Gaussian 利用方法の概要です。

## 【実行コマンド】

Gaussian のインプットファイルは、拡張子を.com とします。(例: e2-01.com)

インプットファイルを Windows のエディタで作成した場合、拡張子.com のファイルは Windows では実行ファイルと認識されるため、誤ってダブルクリックなどでインプットファイルを実行しないようご注意ください。また、ファイル転送ソフトで front に転送する際にはアスキーモードを指定し、転送してください。

front.cc.tohoku.ac.jp にログイン後、subg16 コマンドにキュー名と入力プログラム名を指定することにより、バッチリクエストとして実行されます。リクエストはアプリケーション用の利用形態(経過時間無制限、最大並列数24、最大メモリ128GB)に投入します。

リスト 3. e2-01.com を解析するコマンド例

(subg16 コマンドに入力ファイルを指定する際は拡張子.comを省きます)

[front1 ~]\$ subg16 -q lx -b a e2-01

#### 【12 および 24 並列実行の指定】

本センターでサービスしている Gaussian では、12 および 24 並列での並列処理が可能です。大きな分子の解析にぜひご活用ください。

12 または 24 並列で実行するには、ルートセクションに Link 0 コマンドの%NProc=並列数を追加します。手入力の場合は、テキストエディタで先頭行に追加、GaussView 等ではインプットファイル作成画面の Link 0 sectionの項に追加してください。

#### 【使用メモリ量の指定】

実行して「メモリ量が足りない」というエラーになった場合は、Link 0 コマンド %Mem= で使用メモリ量を増やしてください。

リスト 4. 24 並列、メモリ 16GB の設定をしたインプットファイル e2-01.com を実行する例

[front1 ~]\$ cat e2-01.com ← インプットファイルの内容を表示

%NProc=24 ← 並列数

**%Mem=16Gb** ← メモリ量

# RHF/6-31G(d) Pop=Full Test

Formaldehyde Single Point

0 1

C 0. 0. 0.

0 0. 1.22 0.

H .94 -.54 0.

H -.94 -.54 0.

[front1 ~]\$ <u>subg16 -q lx -b a e2-01</u>

#### 【実行結果の確認】

計算が終了すると、インプットファイル名に拡張子.log がつけられた結果ファイル (例: e2-01.log)が作成されます。計算結果をはじめ、CPU 時間などの計算機使用量に関する情報もここに含まれます。

正常終了ならば、このファイルの末尾に「Normal termination of Gaussian 16.」というメッセージが出力されます。ファイルの末尾を表示する tail コマンドで確認できます。

#### リスト 5. 実行結果の確認

# [front1 ~]\$ <u>tail e2-01.log</u>

Job cpu time: 0 days 0 hours 0 minutes 30.7 seconds.

File lengths (MBytes): RWF= 11 Int= 0 D2E= 0 Chk= 8 Scr= 1

Normal termination of Gaussian 16 at Mon Apr 2 12:00:00 2017.

• 結果ファイルの詳細な見方は、マニュアル等をご参照ください。

#### 【チェックポイントファイル】

チェックポイントファイルは、デフォルトで作成される結果ファイル(.log ファイル)より詳細な結果が出力され、計算のやり直しや結果を画像表示するためなどに使用されます。チェックポイントファイルを出力するには、ルートセクションに Link 0 コマンドの %Chk=チェックポイントファイル名 を追加します。

#### ■ マニュアル

本センター本館1階利用相談室に以下の資料を備えてあります。

- 電子構造論による化学の探求 第二版,ガウシアン社,1998
- Gaussian 09 User's Reference
- Gaussian 09 IOps Reference
- Gaussian 09 Online Manual, http://www.gaussian.com/
- Gaussian プログラムによる量子化学計算マニュアル : 堀憲次, 丸善出版
- すぐできる量子化学計算ビギナーズマニュアル : 武次鉄也, 講談社
- すぐできる分子シミュレーションビギナーズマニュアル: 長岡正隆, 講談社
- Gaussian プログラムで学ぶ情報化学・計算化学実験: 堀憲次, 丸善出版

# Gaussian プリポストシステム GaussView

GaussView は、分子軌道計算プログラム Gaussian のプリポストシステムです。Windows, Linux,macOS 搭載のパソコンなどで動作し、入力データの作成、計算結果の可視化を 3 次元的に行うことができます。

#### ■ バージョン

6.0.16

#### ■ お申し込み

利用ご希望の方に、GaussView の DVD-ROM を貸し出しいたします。

利用条件

東北大学内の方

DVD-ROM は、お手数ですが Gaussian 利用申請書をホームページよりダウンロードしてご記入の上、当センターまで直接お越しください。

#### ■ 利用方法

インストール方法、データ作成方法などについては同梱マニュアルまたは以下のHPをご参照ください。

ヒューリンクス Gauss View 6: http://www.hulinks.co.jp/software/gaussview/

並列コンピュータ front.cc.tohoku.ac.jp の Gaussian で解析を実行する手順

- 1. 入力データ作成後、Gaussian のインプットファイル「.com」としてエクスポートします。
- 2. インプットファイルを front.cc.tohoku.ac.jp に転送します。
- 3. front.cc.tohoku.ac.jp にログインします。
- 4. subg16 コマンドにより解析を実行します。
- 5. 結果ファイルを転送し Gauss View で表示します。

チェックポイントファイル(.chk)は、Gaussian のユーティリティコマンド formchk により書式付(.fchk)に変換後転送してください。

# 反応経路自動探索プログラム GRRM14

GRRM は、2002 年に東北大学(教授:大野公一、修士 1年:前田理、当時)で制作が開始され、その後開発が進められて、2011 年に GRRM11、2014 年に GRRM14 が発表され、広く利用されるようになりました。 GRRM には、以下のような特長があります。

- Gaussian プログラム(g09、g03)などの非経験的量子化学計算に基づいて、各化学式で表される構造や 反応経路を自動的に探索します。
- ・ 平衡構造から出発し、その周囲に存在する反応経路を、ポテンシャルの非調和下方歪みを検出して、系統的に調べ上げる超球面探索アルゴリズムが搭載されており、反応経路自動探索を行うことができます。
- 励起状態のポテンシャル交差を自動的に調べることができます。
- 解離した状態から、人工力誘起反応法で、反応経路を効率的に調べることができます。

#### ■ サービスホスト・バージョン

front.cc.tohoku.ac.jp • 14.01

#### ■ 利用方法

利用方法はセンターのホームページ(http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/grrm14.html)をご覧ください。

## ■ GRRM プログラムの詳細

GRRM の詳細については、NPO 法人 量子化学探索研究所(http://iqce.jp/)、化学反応経路自動探索のWebページ(http://grrm.chem.tohoku.ac.jp/GRRM/)を参照してください。また、GRRM プログラムは現在さらに開発が進められています。利用法の詳細や新しい情報を得るには、開発者と連絡をとることをお勧めします。(連絡先アドレス:ohnok@m.tohoku.ac.jp)

#### ■ GRRM プログラムの文献と研究成果発表時の引用義務

GRRM14 を用いて得た成果を公表するときは、次のような形式で、著者名, プログラム名, version 名 (GRRM 出力の log ファイル参照)を引用文献として記載してください。

S. Maeda, Y. Harabuchi, Y. Osada, T. Taketsugu, K. Morokuma, and K. Ohno, GRRM14, Version 14.01, 2014.

また、GRRM プログラムに搭載されたオプションの詳細については、それぞれ下記の文献を参照してください。これらのオプションを利用して得た研究成果を公表する際には、次に示す GRRM に関する3つの基本文献(1)-(3)および、下に示された各オプションに対応する文献を引用しなければなりません。

#### • GRRM:

(1) K. Ohno, S. Maeda, A Scaled Hypersphere Search Method for the Topography of Reaction Pathways on the Potential Energy Surface., Chem. Phys. Lett., 2004, 384, 277-282.; (2) S. Maeda, K. Ohno, Global Mapping of Equilibrium and Transition Structures on Potential Energy Surfaces by the Scaled Hypersphere Search Method: Applications to Ab Initio Surfaces of Formaldehyde and Propyne Molecules., J. Phys. Chem. A, 2005, 109, 5742-5753.; (3) K. Ohno, S. Maeda, Global Reaction Route Mapping on Potential Energy Surfaces of Formaldehyde, Formic Acid, and their Metal Substituted Analogues., J. Phys. Chem. A, 2006, 110, 8933-8941.

#### • 2PSHS:

S. Maeda, K. Ohno, A New Approach for Finding a Transition State Connecting a Reactant and a Product without Initial Guess: Applications of the Scaled Hypersphere Search Method to Isomerization Reactions of HCN, (H2O)2, and Alanine Dipeptide., Chem. Phys. Lett., 2005, 404, 95-99.

#### SCW:

- S. Maeda, K. Ohno, Conversion Pathways between a Fullerene and a Ring among C20 Clusters by a Sphere Contracting Walk Method: Remarkable Difference in Local Potential Energy Landscapes around the Fullerene and the Ring., J. Chem. Phys., 2006, 124, 174306/1-7.
- LADD, NLowest, NRUN:
- S. Maeda, K. Ohno, Structures of Water Octamers (H2O)8: Exploration on Ab Initio Potential Energy Surfaces by the Scaled Hypersphere Search Method., J. Phys. Chem. A, 2007, 111, 4527-4534.
- Frozen Atom
- S. Maeda, K. Ohno, Lowest Transition State for the Chirality-Determining Step in Ru{(R)-BINAP}-Catalyzed Asymmetric Hydrogenation of Methyl-3-Oxobutanoate., J. Am. Chem. Soc., 2008, 130, 17228-17229.
- External Atom:
- S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, An Automated and Systematic Transition Structure Explorer in Large Flexible Molecular Systems Based on Combined Global Reaction Route Mapping and Microiteration Methods., J. Chem. Theory Comput., 2009, 5, 2734-2743.
- OptX:
- S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, Updated Branching Plane for Finding Conical Intersections without Coupling Derivative Vectors., J. Chem. Theory Comput., 2010, 6, 1538-1545.

#### ModelF:

S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, Automated Global Mapping of Minimum Energy Points on Seams of Crossing by the Anharmonic Downward Distortion Following Method: A Case Study on H2CO., J. Phys. Chem. A, 2009, 113, 1704-1710.; S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, Exploring Multiple Potential Energy Surfaces: Photochemistry of Small Carbonyl Compounds, Adv. Phys. Chem. 2012, 2012, 268124.

#### • Add Interaction and/or MC-AFIR:

S. Maeda, K. Morokuma, A Systematic Method for Locating Transition Structures of A + B  $\rightarrow$  X Type Reactions., J. Chem. Phys., 2010, 132, 241102 (4 pages).; S. Maeda, K. Morokuma, Finding Reaction Pathways of Type A + B  $\rightarrow$  X: Toward Systematic Prediction of Reaction Mechanisms., J. Chem. Theory Comput., 2011, 7, 2335-2345.

#### ■ マニュアル

PDF 形式のマニュアルがセンターのホームページから参照できます。

- GRRM プログラム利用ガイド
- GRRM の実行方法(東北大学サイバーサイエンスセンター編)

本センター本館 1階 利用相談室に以下の資料を備えてあります。

• GRRM14 User Manual (英語版)

# 汎用構造解析プログラム MSC.Marc / MSC.Marc Mentat

MSC.Marc は有限要素法による非線形汎用構造解析プログラムです。世界中で広く利用され最も評価を受けているプログラムの一つで、その扱える解析は以下の通り非常に広範囲にわたっています。

非線形/大変形/接触/弾塑性/剛塑性/破壊/熱伝導/動的非線形/境界非線形流体と固体の連成/電気伝導と熱伝導の連成/熱と応力の連成

MSC.Marc Mentat は、汎用構造解析プログラム Marc の会話型プリ/ポストプロセッサとして、有限要素モデルの作成および解析結果の表示が行えます。

#### ■ サービスホスト・バージョン

front.cc.tohoku.ac.jp · MSC.Marc /Mentat 2014.2

#### ■ 利用方法

Marc のプリポストプロセッサとして、Mentat の他に MSC.Patran も提供しています。

#### 【run\_marc コマンドでの解析実行】

#### ● 実行コマンド

Marc の入力ファイルは、拡張子を .dat とします。(例: job-name.dat)

front.cc.tohoku.ac.jp にログイン後、 run\_marc コマンドに入力ファイル名を指定し実行することにより、バッチリクエストとして解析が行われます。ジョブクラスの指定は必要ありません。自動的にアプリケーション専用の利用形態(経過時間無制限、最大メモリ 128GB)に投入されます。

#### リスト 6. job-name.dat を解析するコマンド例

(run\_marc コマンドに入力ファイルを指定する際は拡張子.dat を省きます)

#### [front1 ~]\$ run\_marc -jid job-name -v n

#### 表 3. run marc の入力オプション

	オプション	説明	
-jid (-j) <i>job-name</i> (必須)		入力ファイル名 <i>job-name</i> .dat を指定	
-cpu 秒数		cpu 時間の制限	
-ver (-v)	yes(デフォルト) no	バッチリクエスト投入前に確認する。 バッチリクエストをただちに投入する。	
-user (-u) user_name		ユーザサブルーチン user_name.f を指定	

• その他のオプションは、「マニュアル C編 プログラム入力 付録 B表 B-2」をご参照ください。

#### ● 解析結果

バッチリクエストが終了すると、主に以下のようなファイルが作成されます。

job-name.log (解析結果) job-name.log (解析ログ) job-name.t16 (ポストファイル)

job-name.sts (ステータスレポートファイル)

job-name.batch\_err\_log (エラーログ)

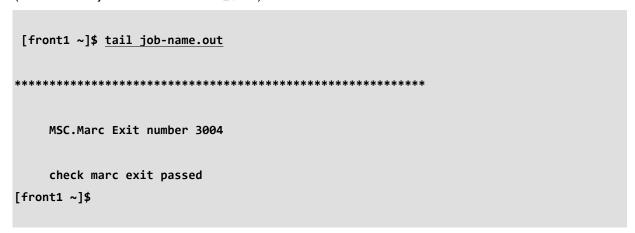
解析時の指定によって、この他にもファイルが作成されます。 それらのファイルの概要は、「マニュアル C 編プログラム入力 付録 B 表 B-1」 をご参照ください。

#### ● 終了番号 (exit number)

解析結果ファイル(job-name.out)の末尾にある marc exit number により、正常に終了したか、エラー終了か、またエラー終了の場合はその原因がわかります。

#### リスト 7. 終了番号を確認する

(tail コマンドで job-name.out の末尾を表示)



#### 表 4. 終了番号

終了番号	説明
3004	正常終了
13	入力データにデータエラーが検出された。
2004	剛体変位が発生している、または全体剛性マトリクスが非正定マトリクスになっている。
3002	指定したリサイクル数内で収束しない。

• この他の番号については、「マニュアル C 編 プログラム入力 付録 A | をご参照ください。

#### 【プリポストプロセッサ Mentat からの解析実行】

#### ● Mentat の起動

Mentat の起動には、並列コンピュータに接続する際に X forwarding の設定を行う必要があります。 Mentat2014 では新 GUI を採用しています。 従来の Classic GUI は mentat.classic というコマンドでご利用できます。

#### リスト 8. mentat の起動方法

localhost\$ <u>ssh -i ~/.ssh/id\_rsa\_cc -X 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp</u>

:

[front1 ~]\$ mentat (新 GUI 版)

[front1 ~]\$ mentat.classic (Classic 版)

#### ●解析実行 (新 GUI 版)

Mentat 上でモデルを作成し、解析のための設定を行った後、

タブメニュー 解析ジョブ -> 新規 -> 解析タイプを選択 -> 実行 -> 実行(1)

という操作をすることで、バッチリクエストとして解析を実行します。

ツールバーメニュー ファイル(F) -> 書き出し -> Marc 入力...

とすることで、run\_marc コマンド用入力ファイル(.dat ファイル)を作成することができます。

#### ● 解析実行 (Classic 版)

Mentat 上でモデルを作成し、解析のための設定を行った後、

メインメニュー JOBS -> RUN -> submit1

という操作をすることで、バッチリクエストとして解析を実行します。

スタティックメニュー FILES -> MARC INPUT FILE WRITE

とすることで、run marc コマンド用入力ファイル(.dat ファイル)を作成することができます。

#### ■ サンプルプログラム

#### [Marc]

マニュアル E 編に掲載されている例題が、並列コンピュータ front.cc.tohoku.ac.jp の /usr/ap/MSC2014.2/marc2014.2/demo/にあります。コピーしてご利用ください

#### [Mentat]

マニュアル「ユーザガイド」に掲載されている例題ファイルが、並列コンピュータ front.cc.tohoku.ac.jp の /usr/ap/MSC2014.2/mentat2014.2/examples/marc\_ug/にあります。コピーしてご利用ください。

#### ■ マニュアル

PDF 形式のマニュアルを提供しています。

各マニュアルは、並列コンピュータ(front.cc.tohoku.ac.jp)の以下のディレクトリにあります。

#### /usr/ap/MSC2014.2/mentat2014.2/doc/

release\_guide.pdf : Release Guide (2014.2 英語版) marcwhatsnew.pdf : What's new (2014.2 英語版)

mt\_help\_ref.pdf : MSC.Marc Mentat Help Reference (2014.2 英語版)

#### 英文マニュアル /usr/ap/MSC2014.2/mentat2014.2/doc/(vola~vole)

vola.pdf : Volume A: Theory and User Information

volb.pdf : Volume B: Element Library volc.pdf : Volume C: Program Input

vold.pdf : Volume D: User Subroutines and Special Routines

vole.pdf : Volume E: Demonstration Problems

#### 和文マニュアル (MSC.Marc2003 版) /usr/ap/MSC2014.2/mentat2014.2/doc/japanese/

vola.pdf : A 編 理論およびユーザー情報

volb.pdf: B編要素ライブラリvolc.pdf: C編プログラム入力

vold.pdf : D編 ユーザサブルーチンおよび特別ルーチン

vole.pdf : E編 例題集 new\_features.pdf : 新機能ガイド marc\_ug.pdf : ユーザガイド

mt\_help\_ref.pdf : Mentat 2003 ヘルプリファレンス

xsec\_adden.pdf : ドキュメント補足資料

#### MSC Software 社のアプリケーション

現在センターの並列コンピュータでは Marc/Mentat を提供していますが、以下のアプリケーションを別途研究室のワークステーションや PC 等にインストールして利用可能です。

対象者は東北大学に所属の方(教職員・学生等)で、センターの利用者番号が必要です。利用ご希望の方は、共同利用支援係までお問い合わせください。

動作環境等については MSC Software 社の HP をご参照ください。

#### ■ 利用可能アプリケーション

- ・Marc/Mentat(センターの並列コンピュータでも実行できます)
- MSC Nastran
- Patran
- Dytran
- FlightLoads
- Sinda

#### ■ アプリケーション情報と動作環境(MSC Software 社)

http://www.mscsoftware.com/

http://www.mscsoftware.com/support/platform-support/

# 数式処理プログラム Mathematica

Mathematica は Stephen Wolfram によって作られた、プログラミング言語を備えた数式処理システムです。 Mathematica の機能は、数値計算、記号計算、グラフィックスという 3 つに大別でき、この 3 つが一体となって使いやすいインタフェースを提供しています。

#### ■ サービスホスト・バージョン

front.cc.tohoku.ac.jp · version 11.0.1

#### ■ 利用方法

#### 【Mathematica の起動】

#### ● GUI 版

GUI 版の Mathematica の起動には、並列コンピュータに接続する際に X forwarding の設定を行う必要があります。

#### リスト 9. GUI 版の起動方法

localhost\$ <u>ssh -i ~/.ssh/id\_rsa\_cc -X 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp</u> :

[front1 ~]\$ mathematica

#### リスト 10. テキスト版の起動方法

localhost\$ <u>ssh -i ~/.ssh/id\_rsa\_cc -X 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp</u> :

[front1 ~]\$ math

- Mathematica の基本的な使い方は、マニュアル・参考資料 や、Web などをご参照ください。
- マニュアル・参考資料

#### 参考資料

本センター本館 1 階 利用相談室に、以下の資料を備えてあります。

- スティーブンウルフラム Mathematica ブック (日本語版): トッパン
- Mathematica 方法と応用: J.W. グレイ, サイエンティスト社
- Mathematica プログラミング技法: R. メーダー, トッパン
- 入門 Mathematica : 日本 Mathematica ユーザー会, 東京電機大学出版局
- はやわかり Mathematica : 榊原進, 共立出版
- もっと Mathematica で数学を : 吉田孝之, 培風館

# 科学技術計算言語 MATLAB

MATLAB は高機能な数値計算機能と多彩な可視化機能を備えた技術計算ソフトウェアです。科学的、工学的分野の様々な数値計算(特に行列演算)、データ解析、シミュレーション、およびビジュアライゼーションのための統合環境を提供しています。

#### ■ サービスホスト・バージョン

front.cc.tohoku.ac.jp · R2017a

#### ■ Toolbox

センターで導入している Toolbox です。

**MATLAB** 

Simulink

Curve Fitting Toolbox

Communications System Toolbox

MATLAB Compiler

Control System Toolbox

DSP System Toolbox

Fuzzy Logic Toolbox

System Identification Toolbox

Image Processing Toolbox

MATLAB Corder

Model Predictive Control Toolbox

**Neural Network Toolbox** 

**Optimization Toolbox** 

Partial Differential Eauation Toolbox

Fixed-Point Toolbox

Robust Control Toolbox

Simulink Corder

Simulink Control Design

Signal Processing Toolbox

Symbolic Math Toolbox

Simulink Design Optimization

Statistics Toolbox

Simulink Verification and Validation

Wavelet Toolbox

#### ■ 利用方法

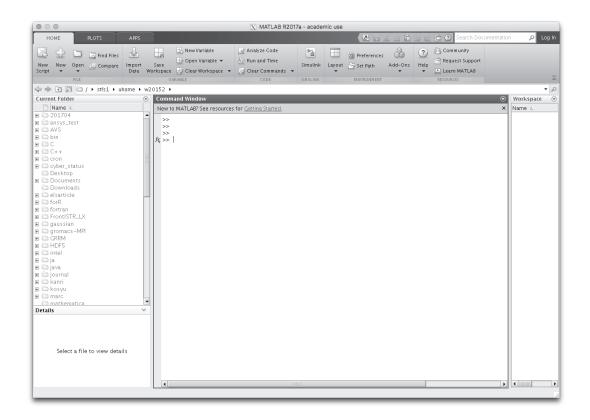
#### 【MATLAB の起動】

● GUI 版

GUI 版 MATLAB の起動には、並列コンピュータに接続する際に X forwarding の設定を行う必要があります。

#### リスト 11. GUI 版 MATLAB の起動

localhost\$ <u>ssh -i ~/.ssh/id\_rsa\_cc -X 利用者番号@front.cc.tohoku.ac.jp</u>
:
[front1 ~]\$ <u>matlab</u>



#### ● テキスト版

GUIを使用せず、コマンドライン上で起動することもできます。

#### リスト 12. テキスト版 MATLAB の起動

#### ● バッチ処理

MATLAB の組み込み並列処理機能を使用し、24 並列までの処理が可能です。最大メモリも 128GB まで利用可能です。大規模な計算にご利用ください。ただし、バッチ処理ではグラフ描画など画面出力のあるプログラムや、対話的な処理は行えません。

function として作成した test を実行するためには以下の様なバッチリクエスト用シェルスクリプトファイルを作成します。リクエストはアプリケーション専用の利用形態に投入します。

#### リスト 13. バッチリクエストファイル

[front1 ~] cat job-m ←パッチリクエストファイルの中身を表示

#PBS -q 1x -b a ←アプリケーション専用の利用形態を指定 cd \$PBS\_O\_WORKDIR

matlab -nojvm -nosplash -nodesktop -nodisplay -r test

以下のコマンドでリクエストを投入します。

#### リスト 14. リクエストの投入方法

[front1 ~]\$ qsub job-m

Request 12345.job submitted to queue: ap.

MATLAB の基本的な使い方は、マニュアル・参考資料などをご参照ください。

#### ■ サンプルプログラム

MATLAB には豊富なデモがありますので、ご利用ください。MATLAB 上で、demo コマンドを実行すると、デモ画面が開きます。

#### ■ マニュアル・参考資料

#### 【マニュアル】

日本語オンラインマニュアルが公開されています。以下のページをご参照ください。 http://www.mathworks.co.jp/help/ja\_JP/techdoc/index.html

#### 【参考資料】

本センター本館1階利用相談室に、以下の資料を備えてあります。

MATLAB による制御理論の基礎:野波健蔵,東京電機大学出版局 MATLAB による制御のためのシステム同定:足立修一,東京電機大学出版局

だれでもわかる MATLAB : 池原雅章, 培風館 はやわかり MATLAB 第 2 版: 芦野隆一, 共立出版 最新 MATLAB ハンドブック第3版:小林一行,秀和システム

MATLAB グラフィックス集: 小国 力, 朝倉書店 MATLAB と利用の実際: 小国 力, サイエンス社 MATLAB の総合応用: 高谷邦夫, 森北出版 最新使える! MATLAB: 青山貴伸, 講談社

使える! MATLAB/Simulink プログラミング : 青山貴伸, 講談社 MATLAB による画像&映像信号処理 : 村松正吾, CQ 出版

Matlab によるグラフ描画 : 西村竜一 (広報誌 SENAC Vol.37 No.1 (2004-1)) 高機能数値計算・可視化機能ソフト MATLAB の基本的な使い方 : 陳国曜 他 (広報誌 SENAC Vol.46 No.3 (2013-7))

## [大規模科学計算システム]

## 三次元可視化システムの紹介

共同利用支援係 共同研究支援係

### 1. はじめに

本センターでは、1F可視化機器室に三次元可視化システムを設置し、以下のサービスを提供しています。

三次元可視化システム	AVS/Express MPE による可視化、および、大画面ディスプレイでの三次元立体視
大画面テレビ会議システム	ポリコムによる大画面テレビ会議システム(最大 4 地 点接続)
大画面ディスプレイ	プレゼンテーション等で利用

本稿では、本システムのサービスについて紹介します。

### 2. 概要

三次元可視化システムは、3D対応50インチLEDモニタを12面配置した大画面ディスプレイと、 演算結果の可視化処理およびディスプレイへの描画を行う可視化サーバから構成されます。また、 最大4地点接続可能なポリコムを併設しています。スーパーコンピュータ SX-ACE および並列コン ピュータ LX 406Re-2 で得られたデータの可視化にご利用いただけます。また、テレビ会議システムを用いて、遠隔地と可視化結果を共有したテレビ会議も可能です。

大画面テレビ会議システムおよび大画面ディスプレイは、可視化以外の用途でも利用可能です。 その場合はセンターの利用者番号をお持ちでなくともご利用いただけます。幅広くご活用いただければ幸いです。

設置場所の可視化機器室は、机(2名掛け)8台、椅子16脚、パイプ椅子6脚、ホワイトボード、演台、マイクを備えています。16~22名程度までご利用可能です。

設置場所	サイバーサイエンスセンター本館 1F 可視化機器室
利用対象者	センターの利用者番号をお持ちの方 (テレビ会議、ディスプレイのみの利用の場合は利用登録なしで利用 可能です)
利用可能時間	平日 9:00~21:00
利用負担金	利用予約時間 1時間につき 2,500円 (予約時間を超えた利用があった場合は追加課金が発生します)
利用用途	<ul> <li>スーパーコンピュータ SX-ACE や並列コンピュータ LX 406Re-2 で得られたデータの可視化</li> <li>テレビ会議(遠隔地と可視化結果を共有したテレビ会議も可能)</li> <li>大画面ディスプレイによるプレゼンテーション、DVD 等の再生等(上記以外の用途でも利用可能です。ご相談ください)</li> </ul>

ご利用には事前予約が必要です。予約方法について詳しくは4章をご覧ください。 随時、見学も受け付けております。お試しでの利用も可能です。ご興味がある方、利用検討中 の方など、ぜひご見学ください。



図 1 三次元可視化システム (可視化機器室)





図 2 三次元可視化システム利用の様子 (左:三次元立体視 右:テレビ会議システム)

## 3. システム構成

### 【可視化装置】

● ディスプレイ

2D/3D 表示に対応した、フル HD (1,920×1,080 画素) 50 インチ LED モニタを 12 面設置 し、最大  $7,680\times3,240$  画素の高精細表示が可能です。

- 可視化サーバ
  - 1 ノードにインテル Xeon プロセッサ E5-2670 を 2 基、メモリを 64GB、グラフィックボード Quadro K5000 を搭載し、全 4 ノードで構成されます。
- 三次元可視化ソフトウェア AVS/Express MPE を採用し、複数画面での 3D 立体視表示が可能です。

#### 【テレビ会議システム】

Polycom HDX8000-1080 を採用し、フルハイビジョン(1080p)での映像接続が可能です。また、入出力インターフェースを利用してユーザの PC 画面、ビデオ映像を送信することができます。自局を含めて最大 4 地点からの接続が可能です。

システムの利用マニュアルは、可視化機器室にて閲覧可能です。

### 4. 利用の流れ

① システムの空き状況を予約状況カレンダーで確認

予約状況カレンダーで空き状況をご確認ください。

http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/service/vsr.html#予約状況カレンダー

- システムの同時利用は1ユーザ/グループのみです。
- カレンダーに「予定あり」と入っている時間帯は、他の方はご利用いただけません。

### ② 共同利用支援係まで電話またはメールで予約申請

共同利用支援係(電話:022-795-6251 メール:sys-sec@cc.tohoku.ac.jp)まで、以下の項目をご連絡ください。

- お名前
- 利用者番号
- 利用日時/時間
- 用途
- ・ 利用システム (可視化/テレビ会議/その他)

三次元可視化ソフトウェア (AVS/Express MPE) を利用する場合で、センターの利用者番号をお持ちでない場合は、事前に利用者登録が必要です。テレビ会議およびディスプレイのみの利用の場合は、利用者登録なしでも利用可能です。

③ 共同利用支援係より、予約完了をメールで通知

#### ④ システム利用

予約時間になりましたら、システムをご利用ください。 (部屋の解錠等については、予約完了メールにてご案内します)

### 5. 課金に関する注意事項

- キャンセルする場合は、前日までに必ずご連絡ください。
- ・ ご連絡がない場合は、利用の有無にかかわらず予約時間に対して課金が発生します。
- 予約時間を超えた利用があった場合は、追加課金が発生します。

### 6. 三次元可視化システム活用事例

- ・ 三次元可視化システムと可視化事例の紹介(SENAC Vol. 49 No. 3(2016-7), pp. 9-15) http://www.ss.cc. tohoku.ac.jp/refer/senac.html#2016\_7
- ・ 人材育成カリキュラム「組込み適塾」開催 http://www.cc.tohoku.ac.jp/NEWS/3D/kashika.html

### 7. 問合せ先

共同利用支援係

電話:022-795-6251 メール:sys-sec@cc.tohoku.ac.jp

## 三次元可視化システム 《利用の流れ》

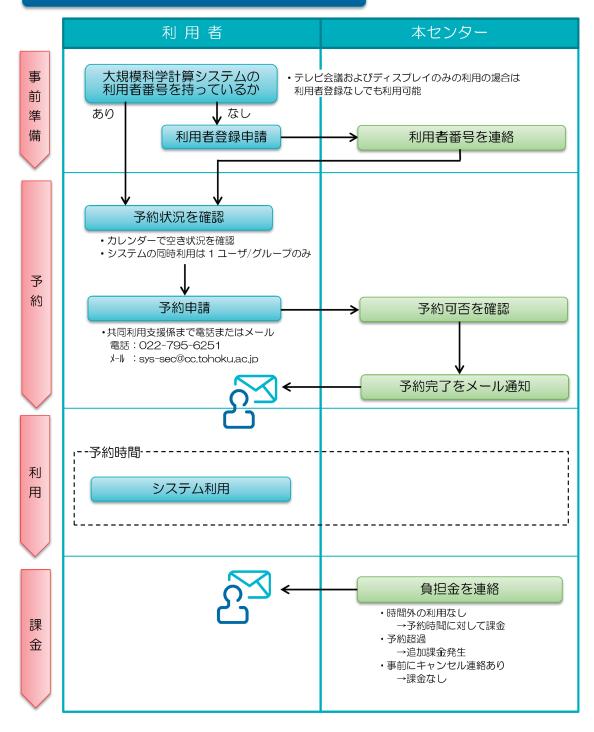


図 3 利用の流れ

## 8. おわりに

本稿では、三次元可視化システムの概要と利用の流れを紹介しました。可視化での利用のほか、 テレビ会議やプレゼンテーションなど幅広くご利用いただけます。研究の強力なツールとしてご 活用いただければ幸いです。

## [紹介]

## サイバーサイエンスセンター高性能計算技術開発(NEC)共同研究部門のご紹介

部門主任教授 小林広明

#### 1. はじめに

東北大学とNECは、東北大学サイバーサイエンスセンター内に「高性能計算技術開発(NEC)共同研究部門」を2014年7月1日に設置し、4年間の活動期間を設けて、将来の学術基盤・社会基盤として期待される次世代スーパーコンピュータの技術研究を行っています。本稿では、本研究部門の活動について簡単にご紹介します。

### 2. 設置の背景

東北大学と NEC は 1958 年にパラメトロン式の電子計算機 SENAC-1 (NEAC-1102) を共同開発しており、その後も継続して高性能計算技術の研究や、ユーザアプリケーションの高速化・並列化に関する研究を行ってきました。東北大学で稼働してきたベクトル型スーパーコンピュータは、高いメモリ性能を活かし、地震・津波・気候変動シミュレーション解析などの防災・減災に関する研究開発や、最新の航空機開発など、最先端のものづくり分野を含む幅広い計算科学分野において活用され、多くの研究成果をあげています。2015年2月から運用し全国の研究者に活用していただいているサイバーサイエンスセンターの新スーパーコンピュータシステム「SX-ACE」の開発においても、これらのノウハウが活用されております。また東北大学と NEC は、文部科学省の委託業務である「将来のHPCI システムのあり方の調査研究」(2012~2013年度)に共同で参画し、エクサスケールコンピューティングに向けて、特に高いメモリバンド幅を要するアプリケーションに適したシステムの実現性について、有用な知見を得てきました。このように東北大学と NEC は、60年近くもコンピュータシステムとその高性能化、およびシステムソフトウェアとアプリケーションに関する共同研究を実施して参りました。

### 3. 設置の目的

このような背景のもと、東北大学に高性能計算に関する産学共同研究拠点を形成し、次世代スーパーコンピュータ実現のための要素技術とそれを最大限に活用した高度シミュレーションの研究開発を行い、それをもって我が国のHPCI基盤の強化・発展に資すことを目的として、東北大学の研究者とNECの技術者が密接に連携して研究に取り組む「高性能計算技術開発(NEC)共同研究部門」がサイバーサイエンスセンターに設置されました。活動を通じて、日本の高性能計算環境の強化・発展に貢献するとともに、高性能シミュレーション技術の先端科学技術分野や学際融合分野への応用を促進していきたいと考えています。そしてこれらの成果を、近年特に重要性が高まりつつある防災・減災、ものづくり分野に還元することにより、災害に強い国土づくり、グロ

ーバルな産業競争力の形成に貢献していきます。また、東北大学の関連する大学院研究科や国内 外の研究機関等と積極的な共同研究や人材交流を通じて、今後の計算科学・計算機科学分野にお ける実践的な人材育成にも取り組みます。

### 4. 共同研究部門の体制と研究内容

本共同研究部門の開設に伴い、東北大学サイバーサイエンスセンターおよび同情報科学研究科から研究者および技術系職員、NEC から技術者が参加し、研究活動を行っています。また、外部から客員教授2名、客員准教授1名を任用し、本学の教員と連携して研究教育に従事しています。また、本年10月以降には専任の教員を配置する予定です。図1に現在の体制(サイバーサイエンスセンター組織図)を示します。

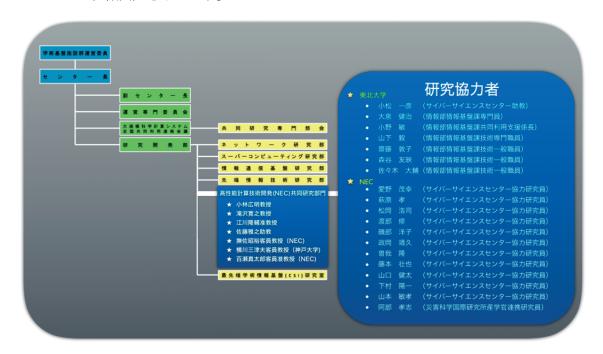


図1 高性能計算技術開発 (NEC) 共同研究部門体制図

主な研究内容は、次世代スーパーコンピュータに必要とされる要素技術と、地震・津波・気候変動シミュレーション解析などの防災や、最新航空機開発など先進ものづくりなど様々な科学的・社会的課題を解決するためのアプリケーションプログラムの研究開発に取り組みます。

#### ・次世代スーパーコンピュータに向けた要素技術の研究

プロセッサアーキテクチャ、ノード・メモリシステム、ネットワークシステム、I/O・ストレージシステムの設計と、それらの実現に求められるデバイステクノロジーなどを対象としています。またマルチノード・ベクトルスーパーコンピュータシステムにおいて求められる高効率のベクトル処理や、大規模並列化技術の研究開発を実施します。

### ・アプリケーションプログラムの高速化・並列化技術の研究

防災・減災、ものづくり分野などのアプリケーションプログラムの特性解析技術、高速化技法、 大規模並列化技術などの研究を行います。また、その知見を次世代・次々世代のスーパーコン ピュータ設計へ活かします。

取り組みの具体的な例をご紹介すると、先ず、世界的な性能評価指標である HPCG を使った SX-ACE の性能評価があります。他のペタフロップス級のスーパーコンピュータがピーク性能の 0.3%~5%程度しか性能を引き出せないのに対し、本研究部門では HPCG の SX-ACE 用チューニング を施し、ピーク性能の 10%を超える実効性能を達成しました。このことは、量に頼らず質の高い高性能計算が実現できることを示唆します。本成果は 2014 年 11 月に米国ニューオリンズで開催 された世界最大のスーパーコンピュータに関する国際会議 SC14 の HPCG ベンチマークに関するセッションにおいて報告され、その潜在能力が高く評価されました(文献 1, 2)。

また、実用的な高性能アプリケーション開発では、本学災害科学国際研究所や国際航業株式会 社と連携して取り組むリアルタイム津波浸水被害予測システムの研究開発があります。本研究開 発では、大規模地震発生時の地震情報や GNSS 測位技術を活用した地殻変動データから、サイバー サイエンスセンターのスーパーコンピュータ「SX-ACE」を用いて、東北大学と国際航業が開発し た津波浸水被害予測シミュレーションを高速に実行することによって、津波による浸水被害の予 測を地震発生から約20分以内といったリアルタイムで行うことを目指すものであり、スーパーコ ンピュータを用いてリアルタイム津波浸水被害予測を行う実証実験は、世界で初めての取り組み となります。これにより、スーパーコンピュータで高速・高精度な予測を行うことで、大規模地震 発生時の迅速かつ高精度な広域被害把握と地方自治体の災害対応の効率化に貢献します(文献3)。 現在,本システムはいつでも動作できる状態にあり、サイバーサイエンスセンターの「SX-ACE」 は通常は学術用プログラムの実行を行いながら、大規模地震発生時には瞬時にジョブを切り替え、 津波浸水予測システムとして機能するようになっております。実際、昨年11月22日に発生した M7.2の東日本大震災の余震では、システムが自動的に起動され、本津波浸水予測システムが無人 で動作し、浸水被害予測データを生成できたことが確認できました。この他、センター利用者の 研究者と取り組む高性能アプリケーションの研究開発でも多くの成果が得られています(例えば、 文献 4)。

#### 5. まとめ

現在、2020 年頃に実現可能なスーパーコンピュータシステムの基本設計とその性能評価に取り 組んでおります。今後、国際会議等でその成果を随時発表していきたいと思います。今後ともご 支援のほど、よろしくお願いいたします。 (文献1) Kazuhiko Komatsu, Ryusuke Egawa, Yoko Isobe, Ryusei Ogata, Hiroyuki Takizawa, Hiroaki Kobayashi, "An Approach to the Highest Efficiency of the HPCG Benchmark on the SX-ACE Supercomputer," International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC15) Poster, 2015.

(文献 2) Ryusuke Egawa, Kazuhiko Komatsu, Shintaro Momose, Yoko Isobe, Akihiro Musa, Hiroyuki Takizawa, Hiroaki Kobayashi, "Potential of a modern vector supercomputer for practical applications: performance evaluation of SX-ACE," Journal of Supercomputing, pp. 1-29, DOI 10.1007/s11227-017-1993-y, 2017.

(文献3) 井上拓也,阿部孝志,越村俊一,撫佐昭裕,村嶋陽一,小林広明,"多角形領域接続・MPI 並列による広域津波解析の効率化,"土木学会論文誌 B2 (海岸工学), Vol. 72, No. 2 (11 月号) pp. I\_373-I\_378, 2016.

(文献4) Raghunandan Mathur, Hiroshi Matsuoka, Osamu Watanabe, Akihiro Musa, Ryusuke Egawa and Hiroaki Kobayashi, "A Memory-Efficient Implementation of a Plasmonics Simulation Application on SX-ACE," International Journal of Networking and Computing, Vol. 6, No. 2, pp. 243-262, 2016.

#### 「報 告] 計算科学・計算機科学人材育成のためのスーパーコンピュータ無償提供利用報告

# 東北大学大学院データサイエンスプログラムにおける プログラミングトレーニング演習

#### 瀨川悦生

#### 東北大学大学院情報科学研究科

#### 1. 概要

2017年2月13日から15日の3日間,東北大学情報科学研究科のデータサイエンスプログラムの講義, DSP Training camp I で大量の問題を解きながらプログラミング手法を身につける,または,ブラッシュアップする演習を行いました.

本プログラムに参加した学生は、情報科学研究科所属の学生のみならず、経済学研究科および生命科学研究科と多岐に渡り、様々な能力水準の学生に対して、並行して教育を行う必要がありました。そのため、同じ場所で同一の環境を整え、可能な限り不確定要素を排除するために、サーバーサイエンスセンターによって提供されるスーパーコンピュータ無償提供制度を利用させていただきました。

実際の実習では、端末室をお借りし、その場で受講者 9 名が提供していただいたスーパーコンピュータをはじめとする計算機を駆使することで問題を解決しました。同一の場所・環境で同一の課題に取り組むことで学生間における相乗的な教育効果が得られました。

以下では、その内容について簡単にご報告いたします.

#### 2. 取り組んだ問題

取り組んだ問題はPythonプログラムを構築する50 間です.数値と数値の足し算にはじまり、文字列の出力、繰り返し処理、条件分岐、配列の取り扱い、データ構造の理解、関数の取り扱い、行列の演算、ライブラリの使い方、乱数の取り扱い等の基本的な Python プログラミングの問題を経て、より実践的な文字列処理、簡単な機械学習法の問題や勾配降下法、進化戦略アルゴリズムの実装まで行ないました.

以上の問題はどれも基本的な実装の問題でありましたが、昨今のビッグデータの時代において、今後、大量のデータを取り扱うために必要とされる技術の一部です。ビッグデータに関する計算は、現段階においては、Linux 環境下においてキャラクターベースの操作ができることが前提でありますが、この度、サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータをお借りすることで、特にこの点を意識して技術を習得することができました。

#### 3. 実習の様子および所感

参加した学生のプログラミング能力の水準が多岐に渡るため、実習中には不測の問題が発生することを憂慮していたものの、実際の実習が開始されてからは、プログラミング初心者に対して経験者が教えたり、プログラミング初心者の質問によって経験者に新たな発見があったりと、学生間において教育的な相乗効果が生じ、大きな問題なく実習は終了しました。これは、サイバーサイエンスセンターの端末室をお借りし、同一の場所に一同が会し、同一の計算環境を整えたために生



学生によるコード解説発表会: 勾配降下法の説明

じた良い効果であったように思います。また、利用させていただいた端末室には各デスクに教室前面に設置されているスクリーンと同様の内容を表示させることができるモニターが備え付けられており、これによって、講義部分を円滑に進めることができました。実習最終日に行ったソースコードの解説発表会でも、各々のモニターで詳細にコードを理解することができました。

#### 4. 最後に

本実習は、サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータを利用することではじめて 実現することができました。また、実習の準備段階においては、Python プログラミング環境の 構築をはじめとする技術的なサポートを頂きましたことを感謝申し上げます。

## [報告]

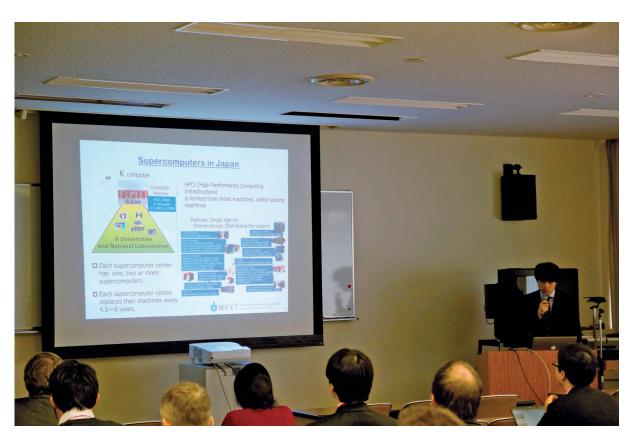
## 第25回高性能シミュレーションに関するワークショップ(WSSP)を開催しました

WSSP 組織委員長 小林広明

東北大学サイバーサイエンスセンターは、海洋研究開発機構(JAMSTEC)、ドイツのシュトゥットガルト大学高性能計算センター(HLRS)、および NEC のご協力を得て、2017 年 3 月 13 日 (月) ~ 14 日 (火) に高性能計算に関する国際ワークショップ「第 25 回 Workshop on Sustained Simulation Performance(WSSP)」を開催しました。本ワークショップは、国際的に活躍している計算科学の研究者及びスーパーコンピュータ設計者を招いて、高性能・高効率大規模科学計算に関する最新の研究成果の情報交換を行うとともに、今後のスーパーコンピュータの研究開発のあり方を議論することを目的としています。

ワークショップは、文部科学省研究振興局計算科学技術推進室工藤雄之室長から我が国のHPCI 政策に関するご講演で始まり、HPCI と呼ばれる我が国の高性能計算基盤の整備・運用状況と京コンピュータの次のシステムの研究開発事業「FLAGSHIP2020 Project」の進捗状況に関する報告がなされました。

技術講演は21件の発表が、HPC技術動向、HPCシステム評価、アプリケーション開発の幅広い 分野のトピックをカバーして、日本、ドイツ、ロシア、米国の研究者により行われました。理研 の姫野氏からはGREEN500で一位を獲得したShoubuとその冷却技術についての講演がありました。 同じく理研の佐藤氏からは、「FLAGSHIP2020 Project」におけるベクトル拡張や分散メモリ環境に おける指示行ベースの並列言語 XcalableMP の最新の研究動向についての講演がありました。また、 モスクワ大学の Voevodin 氏からは、様々なアーキテクチャでのアプリケーション開発を効率化す るツールの紹介がありました。テキサス大学の Arora 氏からは、最新のプロセッサ向けにコード を現代化(modernization)するツールについての講演がありました. さらに、NEC からは来年出 荷が予定されているベクトル型スーパーコンピュータ Aurora の開発状況報告がありました。併せ て NEC ドイツの Bez 氏からは、TOP500 の 500 位の計算システムに着目した近年の計算機の動向分 析や将来の計算システムの展望についての示唆に富む講演がありました.共同主催者であるHLRS、 サイバーサイエンスセンター、JAMSTEC からは現在運用している SX-ACE での HPC 技術開発と将来 計画にいての講演がありました。その他、 WSSP の詳細は web ページ https://www.sc.cc.tohoku.ac.jp/wssp25/ja/index.html をご覧ください。また、ご講演につい てご興味がございましたら、講演予稿集に残部がございますので、サイバーサイエンスセンター までお問い合わせください。



文科省計算科学技術推進室長工藤雄之氏



理化学研究所 姫野龍太郎氏

### 「報告]

## 平成28年度サイバーサイエンスセミナー報告

本セミナーは、学内の情報通信基盤の企画・整備・運用・管理に携わる方々や研究者を対象に 学内外から有識者をお招きして、情報通信に関する最新技術動向、関連分野の話題、整備・運用 経験等の情報提供・知識共有を行うことを目的としています。

昨年度は以下の3件が開催されましたのでご報告いたします。

### 第3回サイバーサイエンスセンターセミナー

テーマ:「電気通信研究所本館ネットワークについて」

日 時: 平成28年4月20日(水) 15:00-17:00

会 場:東北大学電気通信研究所本館 1F オープンセミナールーム

主 催:東北大学サイバーサイエンスセンター情報通信基盤研究部

講演者:佐藤 正彦 (東北大学電気通信研究所)

太田 憲治 (東北大学電気通信研究所)

参加者:30名

概 要:新築された電気通信研究所(通研)本館のネットワークを新規に設計・構築し運用している通研・やわらかい情報システムセンターの職員の方に、通研のネットワーク、サービスの詳細や構築・運用に関する知見・ノウハウなどについて講演をいただいた。

### 第4回サイバーサイエンスセンターセミナー

テーマ: 「スーパーコンピュータに期待すること」

日 時:平成28年5月13日(金) 10:30-16:45 交流会 17:00-18:30

会 場:東北大学サイバーサイエンスセンター 講義室

主 催:東北 CAE 懇話会

共 催:東北大学サイバーサイエンスセンター, INS デジタルエンジニアリング研究会

講演者:小林 広明(東北大学サイバーサイエンスセンター)

橋本 学(東京大学新領域創成科学研究科)

伊藤 徹 (アルプス電気株式会社)

久田 哲弥 (宮城県産業技術総合センター)

小山田 耕二 (京都大学学術情報メディアセンター)

徳田 明彦 (三ツ星ベルト株式会社)

参加者:60名

概要:講演に先立ち、サイバーサイエンスセンター設備およびコンピュータ博物館の見学ツアーが行われ、その後の以下のように講演会が開催された。終了後は質疑応答、交流会が行われた。また、別会場において東京大学・橋本氏による「Front ISAR および Cistr による並列構造解析」の実習を行った。

基調講演:「東北大学大規模科学計算システムとその利用支援について」(小林) 講演1:「ユーザと共に成長する並列有限要素法ソフト「FrontISTR」」(橋本)

講演 2 : 「車載製品開発における照光解析の活用」(伊藤)

講演3 :「宮城県産業技術総合センターの企業支援の取組み」(久田)

講演 4 : 「HPC とクラウド可視化」(小山田)

講演 5 :「産業用ゴムベルト構造解析へのスパコン・オープンソース CAE 適用の試み」

(徳田)

#### 第5回サイバーサイエンスセンターセミナー

テーマ:「第2回・初等・中等教育機関の学校無線 LAN セキュア化及び eduroam 参加についての情報交換会」

日 時:平成29年3月10日(金) 13:45-15:15

会 場:東北大学東京分室 会議室 A

主 催:東北大学サイバーサイエンスセンター

参加者:11名

概 要:初等・中等教育機関(学校基本法の小学校、中学校、義務教育学校、高等学校、中等教育学校、特別支援学校)における学校無線 LAN システムについて、現在の課題を明らかにするとともに、セキュア化(安全対策,802.1X 対応)を推進するため、適切なシステム設計・構築のための情報提供・交換及び議論を行った。

また、これからの ICT 活用教育環境をサポートするのにふさわしいネットワーク基盤を構築するため、国内外の先進事例を紹介の上で、他校や大学、市街地、外国研修先等でのシームレスな無線 LAN 利用を実現する学術系ローミング基盤「eduroam」への参加を促し、国内における運用基盤立ち上げ及び各校への導入について、情報交換と議論を行った。最初に 20 分ほど発起人より概要・方針説明の後、希望者によるプレゼンテーション、続いて、全員で自由に課題提起や意見交換・情報交換を行った。

#### 第6回サイバーサイエンスセンターセミナー

テーマ:「第25回 Workshop on Sustained Simulation Performance (WSSP)」

日 時:平成29年3月13日(月) 10:30-17:05 平成29年3月14日(火) 10:15-17:20

会 場:東北大学サイバーサイエンスセンター 講義室

主催/共催:東北大学サイバーサイエンスセンター

海洋研究開発機構(JAMSTEC)

ドイツ・シュトゥットガルト大学高性能計算センター(HLRS)

NEC

協 賛:学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN)

HPCI コンソーシアム

参加者:152名

概要:高性能計算に関する国際ワークショップ「第25回 Workshop on Sustained Simulation Performance (WSSP)」を開催した。本ワークショップは、国際的に活躍している計算科学の研究者及びスーパーコンピュータ設計者を招いて、高性能・高効率大規模科学計算に関する最新の研究成果の情報交換を行うとともに、今後のスーパーコンピュータの研究開発のあり方を議論することを目的としている。詳細は、本誌 p.46 をご覧ください。

### 「報告]

## プレスリリース報告

平成29年2月24日、以下の内容でプレスリリースしましたのでご報告いたします。

## 世界中のビッグデータ利活用を可能とするプラットフォームの構築 ~プライバシーに配慮した iKaaS プラットフォームの実証実験を開始~

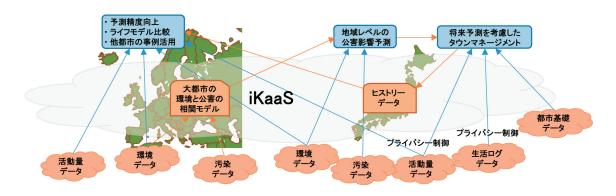
株式会社 KDDI 総合研究所 国際航業株式会社 国立大学法人東北大学サイバーサイエンスセンター 株式会社日立ソリューションズ東日本 国立研究開発法人理化学研究所

株式会社 KDDI 総合研究所、国際航業株式会社、国立大学法人東北大学サイバーサイエンスセンター、株式会社日立ソリューションズ東日本、理化学研究所は、欧州委員会が実施する Horizon 2020\*1 と連携して、プライバシーに配慮した iKaaS (intelligent Knowledge-as-a-Service) \*2 プラットフォームの実用性を検証するため、宮城県仙台市宮城野区田子西地区(以下、田子西地区)に設置されたセンサー等から取得したデータを利活用する実証実験を、欧州と共同で2017年2月24日より9月30日まで実施します。

なお、本実証実験は総務省が研究委託する「プライバシーに配慮した情報提供を可能にする高度知識集約プラットフォームの研究開発」の一環によるものです。

#### (1) iKaaS プロジェクトの背景

スマートシティ実現に向けて、IoT データやビッグデータの活用が検討されています。しかし、十分な量のデータ収集や最適な解析手法構築にかかるコストや、プライバシーに関わるデータの適切な扱いなど様々な問題が活用への障壁となっています。これらを解決するため、既存システムを有効に活用しつつ複数のシステムを結合することでデータや解析手法の共有化を図り、さらにデータごとにそれぞれ異なるアクセス権に応じて適切な開示を行うことが求められます。特に、国際間においてデータや解析手法を共有する場合には、国家間のプライバシー法制度の違いなども考慮した開示制御を実現しなければなりません。そこで、こうした課題を解決し、世界中で生成・蓄積された知識\*3の利活用を可能とするiKaaS プラットフォーム構築の研究開発を開始しました。



iKaaS プラットフォーム概念図

## (2) これまでの取り組み

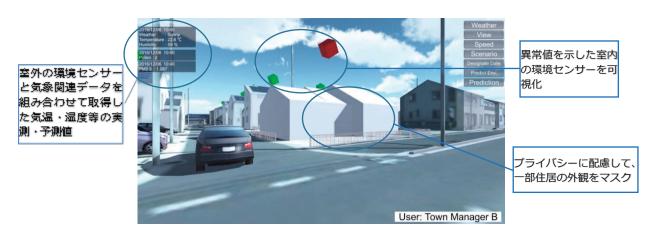
これまで日欧の研究機関が共同でiKaaSプラットフォームを実現するための要件を策定するとともに、プラットフォームの基盤技術について分担して開発を進めてきました。

- ・サービス連携の基盤となる空間情報に対する表現形式の拡張
- ・各クラウドから集めたデータを結合して解析することで得られた知識の再利用 方法
- ・センシティブなデータを適切に開示制御するセキュリティゲートウェイの構築
- ・田子西地区、マドリッド市でのローカルクラウドの構築
- ・タウンマネジメントアプリケーションの実装
- ・プライバシーに配慮したデータ取得の手続き・運用方法の構築

さらに、国際間の連携を実現するため、データ提供の可否を国ごとにセキュリティゲートウェイで厳密に判断する仕組みを実現しました。

### (3) 実証実験の概要

今回、日欧の研究機関で構築したiKaaSプラットフォームを介して、田子西地区のタウンマネジメントサービスを想定した実証実験を実施します。屋内外に取り付けたセンサー情報や、異なるクラウドに存在する都市空間データ、気象関連データなど様々なデータを、プライバシーなどに配慮した開示制御をしつつ統合して処理することで、消費電力や発電量予測の効率化につなげることを目指します。あわせて、過去・現在・未来の町の様子を利用者にわかりやすく示すことができるよう、データのリアルタイムの変動やデータ処理結果を体感的に表示するアプリケーションを用意し、地方自治体・街づくりに関わる事業者や住民の防災・省エネ・都市計画等に役立つことを目指します。



iKaaS プラットフォームを活用したデータ表示例 (都市空間データと各種データを組み合わせ町の様子をイメージしやすく表示)

#### (4) 本プロジェクトの今後の予定

本プロジェクトは2017年9月30日をもって終了しますが、プロジェクト終了までプラットフォーム・アプリケーションの有用性を実証する実験を日欧で連携して行い、その結果を最終報告として取りまとめます。また、各研究機関では、その後の普及展開についても引き続き研究開発を進めてまいります。

#### <語句説明>

- \*1 Horizon 2020: 2014年~2020年の7年間にわたる総額800億ユーロ規模のEU研究イノベーション枠組み計画。本プロジェクトにおける欧州側参加機関は、University of Surre (イギリス)、CREATE-NET (イタリア)、ATOS (スペイン)、Wings ICT Solutions (ギリシャ)、InnoTec21 (ドイツ)、University of Oulu (フィンランド)、EMT Madrid (スペイン)、Madrid市 (スペイン)、Community of Madrid (スペイン)。
- \*2 iKaaS (intelligent Knowledge-as-a-Service):多種多様なデータやそのデータから得られた知識を、国を越えて流通させるために、プライバシーやセキュリティに配慮する機能等を組み込んだ高度知識集約型プラットフォーム。
- \*3 知識:大量データを活用して生成された付加価値の高い情報あるいは解析手法。

## ○お問い合わせ先

東北大学

サイバーサイエンスセンター (担当: 菅沼)

E-Mail: suganuma@tohoku.ac.jp

## [退職のご挨拶]

## 退職にあたって

### 東北大学情報部情報基盤課 千葉 実

送別会などで自分の経歴を聴く機会が多く、改めて気づいたのは、31 年間もここ(大型計算機センター → 情報シナジーセンター → サイバーサイエンスセンター(情報部情報基盤課))に勤め、人生の半分以上を過ごしたということです。その中で、たくさんの方に迷惑を掛け、いろいろな方に助けられ、多くの方と楽しい時間を過ごし、少しの悲しい出来事もあり、多くの経験をもらいました。思い起こせば感慨深いものがあります。また、同じ組織内での関わりはもちろんのこと、外部の方との出会いも多かったことにも驚きます。

ちょっと思いつくものだけでも以下のような感じです。

○ 新入りの当時。「ふ~ん…こういうものもあるのか…」的な周囲の空気の中、担当したスパコンの前身である HFP (High speed Fortran Processor) というマシンが導入され、上司からの指示は、「HFP から出力されるエラーメッセージなどの妥当性や正確性をすべてチェックしなさい」というもの。

四苦八苦して取り組んでいた時、利用者でもあった大学院生が手伝いを申し出てくれ、一緒 にチェックすることで新人なりに理解も深まり、無事終了することができました。

○ ネットワークというものの認知度がまったく無かった 1987 年頃。

無理解と非難の中で「ネットワークを敷設させてください」と頭を下げながら来る日も来る日も部局の現場調査を行っていました。複数の部局で調査の許可が下りず困りはてている時、 偉い先生方に対し一緒に必要性を説いてくれた方々がいました。おかげでスムーズに調査する ことができ、大いに助けられました。

ちなみに、この頃ネットワークが何者なのか知っている人は殆ど見当たらず、ネットワーク 構築に否定的な偉い先生方を悪く言うつもりはありません。何を隠そう私自身もまったく理解 していませんでした。従って、無理解や非難は無理もないことだと思います。

- 某大手企業の研究所が WS (UNIX Work Station) を大量に丁寧 (?) に廃棄するとの情報を 得て拾得、その後の修理を経てルータやサーバとして多くの場所で活用し普及させるという、 一部怪しげな活動に関わった学生や研究者や会社の方との関係はかけがえのないものの一つ です。
- 大学が学内ネットワークを整備することが当たり前でなかった頃、地域のネットワークの草の根的活動というか、不適切な表現をお許しいただければゲリラ的活動により東北地区の地域ネットワークを構築すべく私も何もわからないまま参加していました。当時、先頭に立って努力していた多くの個性的な方々も忘れることができません。

この活動は、現在も TOPIC として認知され、地域ネットワークコミュニティとして活動しています。

○ 説明やお願い(陳情?)のため本部事務当局の様々な担当者の所に通った頃。多くの先輩方から、事務の「しきたり」や組織や人についての「力学」や「理不尽さ」について、多くのお叱りやご指導をいただきました。今となっては懐かしい思い出です。そのことは、たまたま、今読み返しているカフカの「城」(官僚組織を扱った小説)も若い時とは比べ物にならないほどのリアリティを感じてしまうことからも実感します。(「審判」も本棚から探そうと思います。)

などなど…他にも数えきれない経験と思い出があります。今思い返してもとても不思議なこと や普通では考えられないこともたくさん溢れてきましたので、この辺で止めておきます。

多くの教職員、学生や企業の方に出会うという機会に恵まれ、出会いにより得られた多く経験や特に多様な価値観は、在職中の大きな糧となり、定年まで勤めることができたと思っています。 もし、経験の浅い方々とお話しする機会があれば、経験と出会いの大切さや物事の真意(陰にあるのが自己の利益なのか侠気なのかとか(狂ではなく侠))を見極めることの重要性などもお話しできたらと思います。

本当にありがとうございました。

私は引き続き同じ建物に居ることが決まりました。多少くたびれてはおりますが、そういえば 記憶も薄れ気味、視野も多少ぼやけるなど機能低下も感じ始めているところですが、若い職員の 邪魔にならないよう励みたいと思います。特に、老害と呼ばれることは何としても避けなければ なりません(これがなかなか難しいようです)。

今後とも目にすることがあれば、今まで同様に声を掛けてくだされば幸いです。

## [Web 版大規模科学計算システムニュースより]

大規模科学計算システムニュースに掲載された記事の一部を転載しています。 http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/tayori/

## 利用負担金額の表示コマンドについて(No. 234)

本センター大規模科学計算システムでは、利用者の利用額とプロジェクトごとに集計した負担額、請求情報を表示するためのコマンドとして ukakin, pkakin があります。また、利用者のジャーナル情報とプロジェクトごとに集計したジャーナル情報を CSV 形式で出力するコマンド ulist, plist があります。これらのコマンドは、並列コンピュータ (front. cc. tohoku. ac. jp) にログインして使用します。

コマンド名	機能
ukakin	利用者ごとの利用額を各システム、月ごとに表示
pkakin	プロジェクトごとに集計した負担額、請求情報を表示
ulist	利用者ごとのジャーナルを CSV 形式で出力
plist	プロジェクトごとに集計したジャーナルを CSV 形式で出力

いずれも、前日までご利用いただいた金額を表示します。コマンド使用例は大規模科学計算システムウェブページをご覧ください。

#### 負担金の確認

http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/utilize/academic.html#負担金の確認

(共同利用支援係)

## 研究成果リスト提出のお願い (No. 235)

本センターでは、学術研究を支える世界最高水準の大規模科学計算システムの導入と利用環境の整備・拡充を行い、研究の発展に資することを心掛けてまいりました。今後もシステムの整備を進めていくには、大規模科学計算システムが多くの研究分野で必要不可欠であり、かつ研究成果が得られていることを広くアピールしていく必要があります。

つきましては、本センター大規模科学計算システムを利用して得られた研究成果を、下記により提出くださるようお願い申し上げます。なお、提出していただく研究成果は、平成28年度中に発表されたものとします。

記

1. 研究成果リスト:著者名、論文名、掲載誌(巻号頁)、発表年

2. 提出方法 : 電子メールでお願いします。

提出先メールアドレス seika@cc. tohoku. ac. jp

3. 締切り日 : 平成29年4月21日(金)

4. 問合せ先 : 共同利用支援係 (022-795-6251, uketuke@cc. tohoku. ac. jp)

#### 〈〈 論文等への利用の明記について〉〉

研究成果を論文等で発表する場合には、本センターを利用した旨を明記くださるようお願いいたします。

#### - 記入例 -

「本研究の実験結果の一部は、東北大学サイバーサイエンスセンター大規模科学計算システム を利用して得られた。」

Part of the experimental results in this research were obtained using supercomputing resources at Cyberscience Center, Tohoku University.

(共同利用支援係)

## コンパイラのバージョンアップについて(No. 238)

2016 年 10 月 24 日に FORTRAN90/SX コンパイラをバージョンアップいたします。 詳細につきましては、リリースメモをご覧ください。

対象システム	コンパイラ名	旧バージョン	新バージョン	リリースメモ
SX-ACE	C++/SX	Rev.110	Rev.111	C++/SX リリースメ モ.pdf *

\*リリースメモは以下からご参照ください。

http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/PDF/20170321/c++\_rev111.pdf

なお、コンパイルコマンドに変更はありません。オプションの詳細は、sxman コマンドや PDF 版マニュアルで参照できます。参照方法は、以下をご覧ください。

http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/super/online\_manual.html

(共同利用支援係, 共同研究支援係)

## バッチリクエストの最大経過時間の指定について(No. 239)

バッチリクエストの最大経過時間の指定方法についてご案内します。

適切な最大経過時間を指定して投入することで、より効率的にリソースが割り当てられるようになります。特に実行時間が短いリクエストは、リソースの隙間に割り当てられやすくなり、待ち時間を短くすることができますので、指定することをおすすめします。

#### 【最大経過時間の指定方法】

バッチリクエストファイルに以下のオプションを記述してください。

#### #PBS -1 elapstim\_req=hh:mm:ss

- 設定時間は、時:分:秒を hh:mm:ss の形式で指定します。
- 最大経過時間を超えるとリクエストは強制終了になりますので、必要十分な時間を指定するよう ご注意ください。

・ 省略した場合は、実行時間制限の規定値(通常利用の場合、1週間)に設定されます。実行時間が規定値を超える場合は、必ず指定してください。最大1ヶ月まで指定可能です。(規定値/最大値については表1,2をご参照ください)

## (例) バッチリクエストファイル (最大経過時間を 12 時間に設定する場合)

#PBS -q sx -b 32

#PBS -1 elapstim\_req=12:00:00

cd \$PBS\_O\_WORKDIR

./a.out

表1 スーパーコンピュータ (SX-ACE) の利用形態と制限値

	11 1	/ /	> (DV UOT) (>\dagger)		
利用形態	利用 ノード数 ( <b>※</b> 1)	実行時間制限 (経過時間) (※2)	メモリサイズ 制限	-q オプション	-b オプション
通常	1~1,024	規定値 : 1 週間 最大値 : 1 ヶ月	60GB ×ノード数	SX	利用ノード数
無料	1	1 時間	60GB		f
デバッグ	1~16	2 時間	60GB	dobug	利用ノード数
1/190	17~32	24 時間	×ノード数	debug	が用ノート数

表 2 並列コンピュータ (LX 406Re-2) の利用形態と制限値

利用形態	利用 ノード数 ( <b>※</b> 1)	実行時間制限 (経過時間) (※2)	メモリサイズ 制限	-q オプション	-b オプション
通常	1~24	規定値 : 1 週間 最大値 : 1 ヶ月	128GB ×ノード数	1x	利用ノード数
アプリケ ーション	1	なし	128GB	1X	a
会話型	1(6コアまで)	1 時間 (CPU 時間合計)	8GB	-	-

※1:2 ノード以上を利用した並列実行には MPI の利用が必用。

※2:4月から通常利用の実行時間制限を「規定値:1週間/最大値:1ヶ月」に統一。

(共同利用支援係, 共同研究支援係)

## Gaussian16 の提供開始について (No. 239)

非経験的分子軌道計算プログラム「Gaussian16」のサービスを開始しましたのでお知らせいたします。 また、Gaussian09 も引き続きご利用いただけます。

Gaussian は、Carnegie-Mellon 大学の Pople を中心として開発された分子軌道計算プログラムパッケージです。広範囲にわたる非経験的モデルおよび半経験的モデルをサポートしています。

サービス開始日 : 2017年4月3日 (月)

バージョン名 : Gaussian16 A.03

サービスホスト: front.cc. tohoku.ac. jp (並列コンピュータ)

実行コマンド : subg16

subg09 (Gaussian09用コマンド)

新機能の概要、機能の詳細、実行方法については開発元 HP、およびセンターHP をご覧ください。

開発元HP

http://gaussian.com/relnotes/

HPC SYSTEMS Gaussian16 製品情報

http://www.hpc.co.jp/gaussian.html

センターHP

http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/gaussian.html

(共同利用支援係)

## 数式処理プログラム Mathematica のバージョンアップについて(No. 239)

数式処理プログラム「Mathematica」のバージョンアップを行いましたのでお知らせいたします。 Mathematica は Stephen Wolfram によって作られた、プログラミング言語を備えた数式処理システムです。Mathematica の機能は、数値計算、記号計算、グラフィックスという3つに大別でき、この3つが一体となって使いやすいインターフェイスを提供しています。

バージョン名 : Mathematica 11.0.1 バージョンアップ日 : 2017 年 4 月 3 日 (月)

サービスホスト : front. cc. tohoku. ac. jp (並列コンピュータ)

起動コマンド : mathematica (GUI版)

: math (テキスト版)

新機能の概要、機能の詳細、実行方法については開発元 HP、およびセンターHP をご覧ください。

開発元HP

http://www.wolfram.com/mathematica/new-in-11/

センターHP

http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/mathematica.html

(共同利用支援係)

## 科学技術計算言語 MATLAB のバージョンアップについて (No. 239)

科学技術計算言語「MATLAB」のバージョンアップを行いましたのでお知らせいたします。
MATLAB は、アルゴリズム開発、データの可視化、数値計算を行うための高レベルなテクニカルコン
ピューティング言語と対話型環境です。 MATLAB を利用することにより、C、C++、Fortran といった
伝統的なプログラミング言語よりも短時間で科学技術計算の問題を解決することが可能です。

バージョン名 : MATLAB R2017a

バージョンアップ日 : 2017年4月3日 (月)

サービスホスト : front. cc. tohoku. ac. jp (並列コンピュータ)

起動コマンド : matlab (GUI 版)

: matlab -nosplash -nodesktop -nodisplay (テキスト版)

新機能の概要、機能の詳細、実行方法については開発元 HP、およびセンターHP をご覧ください。

#### 開発元HP

http://www.mathworks.co.jp/products/new\_products/latest\_features.html

#### センターHP

http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/matlab.html

(共同利用支援係)

## 平成 29 年度利用負担金について (No. 239)

平成29年度の利用負担金は、表1(大学・学術利用)、表2(民間機関利用)のとおりとなります。 なお、今後電気料金が高騰した場合には、年度途中において負担経費を値上げする場合があります。 あらかじめご了承ください。

	3	長1 基	本利用負担金【大学・学術利用】
区 分	項目	利用	負 担 額
		形態	
			利用ノード数1(実行数、実行時間の制限有) 無料(備考2)
演算			利用ノード数 1~32 まで 経過時間 1 秒につき 0.06 円
負担経費		共有	利用ノード数 33~256 まで 経過時間 1 秒につき
			(利用ノード数-32)×0.002円+0.06円
	<b>→</b> . °		利用ノード数 257 以上 経過時間 1 秒につき
	スーパー コンピュータ		(利用ノード数-256)×0.0016円+0.508円
	コンヒュータ		利用ノード数32 利用期間3ヶ月につき 400,000円
			利用期間 6 ヶ月につき 720,000円
		占有	<b>イ川田 ) 19世 0.4 「イ川田田 0.11 19 19 19 19 19 19 19 19 19 19 19 19 1</b>
			利用ノード数 64 利用期間 3 ヶ月につき 720,000円
			利用期間 6 ヶ月につき 1,300,000円
			利用ノード数 128 利用期間 3 ヶ月につき 1,300,000円
			利用期間6ヶ月につき 2,340,000円
			利用ノード数1~6まで 経過時間1秒につき 0.04円
		共有	利用ノード数 7~12 まで 経過時間 1 秒につき 0.07円
	並列		利用ノード数 13~18 まで 経過時間 1 秒につき 0.1円
	コンピュータ		利用ノード数 19~24 まで 経過時間 1 秒につき 0.13円
		占有	利用ノード数1   利用期間3ヶ月につき 160,000円
			(可視化システムの 20 時間無料利用を含む)
			利用期間 6 ヶ月につき 320,000円
		<u> </u>	(可視化システムの 40 時間無料利用を含む)
ファイル	1TB まで無料、	追加容量	1TB につき年額3,000 円
負担経費			
出力	大判プリンタに	よるカラ	
負担経費			クロス1枚につき 1,200円
可視化	1時間の利用に	つき	2,500 円
機器室利用			
負担経費			

表 1 基本利用負担金【大学・学術利用】

## 備考

- 1 負担額算定の基礎となる測定数量に端数が出た場合は、切り上げる。
- 2 負担額が無料となるのは専用のジョブクラスで実行されたものとし、制限時間を超えた場合に は

強制終了する。

- 3 占有利用期間は年度を超えないものとし、期間中に障害、メンテナンス作業が発生した場合に おいても、原則利用期間の延長はしない。また、占有利用期間中のファイル負担経費は 10TB まで無料とする。
- 4 ファイル負担経費については申請日から当該年度末までの料金とする。

区 分	項目	利用	負 担 額
		形態	
			利用ノード数1(実行数、実行時間の制限有) 無料(備考2)
演算			利用ノード数 1~32 まで 経過時間 1 秒につき 0.18 円
負担経費		共有	利用ノード数 33~256 まで 経過時間 1 秒につき
			(利用ノード数-32)×0.006円+0.18円
	<b>→</b> . °		利用ノード数 257 以上 経過時間 1 秒につき
	スーパー コンピュータ		(利用ノード数-256)×0.0048 円+1.524 円
	コンヒュータ		利用ノード数32 利用期間3ヶ月につき 1,200,000円
			利用期間 6 ヶ月につき 2, 160, 000円
		占有	和田 ) 12年11日 和田 0 、日 2 0 5 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
			利用ノード数 64 利用期間 3 ヶ月につき 2,160,000 円
			利用期間6ヶ月につき 3,900,000円
			利用ノード数 128 利用期間 3 ヶ月につき 3,900,000 円
			利用期間6ヶ月につき 7,020,000円
			利用ノード数 1~6 まで 経過時間 1 秒につき 0.12 円
	<i>₩</i> ₹11	共有	利用ノード数 7~12 まで 経過時間 1 秒につき 0.21 円
	並列		利用ノード数 13~18 まで 経過時間 1 秒につき 0.3 円
	コンピュータ	1	利用ノード数 19~24 まで 経過時間 1 秒につき 0.39 円
		占有	利用ノード数1 利用期間3ヶ月につき 480,000円
			(可視化システムの 20 時間無料利用を含む)
			利用期間 6 ヶ月につき 960,000円 (可視化システムの 40 時間無料利用を含む)
ファイル	1TR まで無料	 	
負担経費	コロよく無付、	地州台里	3,000 円
出力	大判プリンタに	・トスカラ	ラープリント フォト光沢用紙1枚につき 1,800円
負担経費	/C 11/ / V / (C	-50/0/	クロス1枚につき 3,600円
可視化	1時間の利用に	つき	7, 500 円
機器室利用	7 - 4 153 -> -1 4) 13 (0		1,000   1
負担経費			
/ \\ \	1		

表 2 基本利用負担金【民間機関利用】

## 備考

- 1 負担額算定の基礎となる測定数量に端数が出た場合は、切り上げる。
- 2 負担額が無料となるのは専用のジョブクラスで実行されたものとし、制限時間を超えた場合に は

強制終了する。

- 3 占有利用期間は年度を超えないものとし、期間中に障害、メンテナンス作業が発生した場合に おいても、原則利用期間の延長はしない。また、占有利用期間中のファイル負担経費は 10TB まで無料とする。
- 4 ファイル負担経費については申請日から当該年度末までの料金とする。

(共同利用支援係)

## 平成 29 年度共同研究について (No. 240)

本センターでは、大規模科学計算システムの利用者と共同でプログラムやアルゴリズムを開発する 共同研究を行っています。今年度の募集に応募されたものについて共同研究専門部会で審査の結果、 以下の12件が採択されましたのでお知らせします。

### [A] 萌芽型課題

No.	申請者	所属	研究課題
A-1	有馬 卓司	東京農工大学	大規模周期構造上に置かれたアンテナの特性解
		大学院工学研究院	析に関する基礎検討
A-2	越村 俊一	東北大学	スーパーコンピュータによるリアルタイム津波
		災害科学国際研究所	浸水・被害予測技術の高度化
A-3	佐々木 大輔	金沢工業大学	境界埋め込み法を用いた大規模流体解析手法の
		工学部	研究

### [B] 一般課題

[D]	<u> </u>		
No.	申請者	所属	研究課題
B-1	青木 秀之	東北大学大学院	Large Eddy Simulationによるベルカップ塗装機
		工学研究科	における噴霧流動現象の大規模数値解析
B-2	伊澤 精一郎	東北大学大学院	乱流の生成とその維持機構に関する研究
		工学研究科	
B-3	河野 裕彦	東北大学大学院	ナノ・バイオ分子の励起状態ダイナミクスと反応
		理学研究科	動力学シミュレーション
B-4	茂田 正哉	大阪大学	プラズマプロセスにおけるナノ粒子群の集団形成
		接合科学研究所	および輸送過程の大規模数値シミュレーション
B-5	陳強	東北大学大学院	高機能な大規模アンテナの電磁界数値解析法に
		工学研究科	関する研究
В-6	塚原 隆裕	東京理科大学	非平衡臨界現象としての壁乱流遷移のパターン
		理工学部	形成解明に向けた超大規模直接数値解析
В-7	藤井 孝藏	東京理科大学	マイクロデバイスの新たな利用法に向けた流れ
		工学部	の機構解明とデバイス設定ガイダンスの導出
B-8	前田 一郎	三菱航空機株式会社	民間航空機開発における大規模 CFD 解析の適用
B-9	松岡 浩	東北大学	連続感度解析の実現を目指した整数型格子ボル
		電気通信研究所	ツマン法流体解析手法の開発

(スーパーコンピューティング研究部、共同研究支援係)

## 計算科学・計算機科学人材育成のための スーパーコンピュータ無償提供制度について(No. 240)

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、計算科学・計算機科学分野での教育貢献・人材 育成を目的として、大学院・学部での講義実習等の教育目的での利用に限り、無料(ただし、 利用状況によっては上限を設定する場合があります)で大規模科学計算システムをご利用いただ ける制度を用意しております。

利用を希望される場合は、以下の情報を添えて、edu-prog@cc. tohoku. ac. jp までお申し込みください。

- •講義担当者氏名
- 同所属
- ・同連絡先(住所,電話,電子メール)
- 講義名
- ・講義実施日時(1セメスターの中で実習を予定している回数)
- ・センターでの実習利用希望の有無(必要であれば予定日)
- ・講師派遣の希望の有無
- 講義シラバス
- 講義ウェブ(もし用意されていれば)
- · 受講者数 (予定)
- ・必要とする理由(利用目的:例えば、数値シミュレーションの研修を行うなど)
- ・期待できる教育効果
- ・その他(センターへの要望等)

なお、講義終了後、報告書(広報誌 SENAC へ掲載)の提出をお願いいたします。たくさんのお申し込みをお待ちしております。不明な点は、edu-prog@cc.tohoku.ac.jp までお問い合わせください。

(スーパーコンピューティング研究部, 共同利用支援係)

## 民間企業利用サービスについて(No. 240)

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、社会貢献の一環として大学で開発された応用ソフトウェアとスーパーコンピュータを、民間企業の方が無償または有償にてご利用頂ける制度を用意しております。本サービスにおける利用課題区分は以下の2つとなります。

- ・大規模計算利用(有償利用)
- ・トライアルユース(無償利用)

詳細については以下を参照し、利用を希望される場合は共同利用支援係までお申し込みください。

http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/utilize/business.html

#### 【問い合わせ先】

共同利用支援係(022-795-6251, uketuke@cc. tohoku. ac. jp)

(共同利用支援係)

## 大規模科学計算システムの機関(部局)単位での利用について(No. 240)

サイバーサイエンスセンターでは、大規模科学計算システムをご利用いただくにあたり、利用負担金を利用者単位のほか、機関(部局)単位で年間定額をお支払いいただくことで利用できるサービスも提供しております。このサービスは、機関(部局)単位でお申し込みいただくことにより、その構成員であれば、各研究室が個別に利用負担金を支払うことなく、下記システムを利用できる仕組みとなっております。

これまで計算機を利用する機会がなかった研究者による新たなニーズへの対応や研究室の計算機では実行できなかった大規模シミュレーションが実行可能であり、また自前で計算機を導入するためのコストや運用コストも削減可能です。すでにご利用いただいている機関(部局)からは、当初の予想を上回るご利用をいただき、ご好評をいただいております。

占有利用・共有利用については必要に応じて取り混ぜながら、ご予算に合わせて、年間定額により 利用することが可能となっておりますので、ぜひご相談ください。

記

#### 【利用可能なシステム】

- ・スーパーコンピュータ (SX-ACE)
- ・並列コンピュータ (LX 406Re-2)
- ・ストレージシステム
- ・大判カラープリンター(光沢紙、ソフトクロス紙)
- ・三次元可視化システム

### 【問い合わせ先】

共同利用支援係(022-795-6251, uketuke@cc. tohoku. ac. jp)

(スーパーコンピューティング研究部, 共同研究支援係, 共同利用支援係)

## ─ SENAC 執筆要項 ─

#### 1. お寄せいただきたい投稿内容

サイバーサイエンスセンターでは、研究者・技術者・学生等の方々からの原稿を募集しております。 以下の内容で募集しておりますので、皆さまのご投稿をお待ちしております。なお、一般投稿いただいた方には、謝礼として負担金の一部を免除いたします。

- ・一般利用者の方々が関心をもたれる事項に関する論説
- ・センターの計算機を利用して行った研究論文の概要
- ・プログラミングの実例と解説
- ・センターに対する意見、要望
- ・利用者相互の情報交換

## 2. 執筆にあたってご注意いただく事項

- (1) 原稿は横書きです。
- (2) 術語以外は、「常用漢字」を用い、かなは「現代かなづかい」を用いるものとします。
- (3)学術あるいは技術に関する原稿の場合、200字~400字程度のアブストラクトをつけてください。
- (4)参考文献は通し番号を付し末尾に一括記載し、本文中の該当箇所に引用番号を記入ください。
  - 雑誌:著者,タイトル,雑誌名,巻,号,ページ,発行年
  - 書籍:著者,書名,ページ,発行所,発行年

#### 3. 原稿の提出方法

原稿のファイル形式はWordを標準としますが、PDFでの提出も可能です。サイズ\*は以下を参照してください。ファイルは電子メールで提出してください。

- -Word の場合-
  - 用紙サイズ:A4
  - ・余白:上=30mm 下=25mm 左右=25mm 綴じ代=0
  - ·標準の文字数(45文字47行)

#### <文字サイズ等の目安>

- ・表題=ゴシック体 14pt 中央 ・副題=明朝体 12pt 中央
- ・氏名=明朝体 10.5pt 中央
- 所属=明朝体 10.5pt 中央
- ・本文=明朝体 10.5pt
- ・章・見出し番号=ゴシック体 11pt~12pt \*余白サイズ、文字数、文字サイズは目安とお考えください。

#### 4. その他

- (1)執筆者には、希望により本誌\*(10部以内の希望部数)と本誌 PDF 版を進呈します。 \*2014年末で、別刷の進呈は終了しました。
- (2) 一般投稿を頂いた方には謝礼として、負担金の一部を免除いたします。免除額は概ね1ページ 1万円を目安とします。詳細は共同利用支援係までお問い合わせください。
- (3) 投稿予定の原稿が15ページを超す場合は共同利用支援係まで前もってご連絡ください。
- (4) 初回の校正は、執筆者が行って、誤植の防止をはかるものとします。
- (5) 原稿の提出先は次のとおりです。

東北大学サイバーサイエンスセンター内 情報部情報基盤課共同利用支援係

e-mail uketuke@cc.tohoku.ac.jp

TEL 022-795-3406

## スタッフ便り

新年度になり、入学、進学、就職と新しい環境での生活が始まった方も多いことでしょう。私もこの4月に仙台へ単身赴任し、新しい生活を始めました。一人暮らしは学生以来です。学生時代には家賃8千円の6畳一間、台所とトイレは8人の共同利用で、お風呂もありませんでした。冬には雪がしんしんと降る中、銭湯へ行き、一回20円のドライヤー代をけちり、家に着くころには髪の毛が"つらら"のように凍っていました。そして暖房器具はコタツだけ。コタツの中に潜り込んで凍った髪の毛を乾かしながら寒さに耐えていました。あれから30年以上たち、学生時代とは見違えるような住環境を仙台に準備しました。地下鉄の駅から歩いて5分の新築アパートで、お風呂とトイレも分かれています。しかし、関西で学生生活している息子の家賃とは1万円違い。社会人として給料をもらっているのに学生と同じレベルなのかと思いつつ、上野の山の桜を見て、一人新幹線で仙台へと赴任してきました。これから、皆さん、よろしくお願いいたします。(A.M)

Google が開発したディープラーニングを用いた囲碁プログラム「AlphaGo」が、2016 年 3 月に世界的な囲碁棋士のトッププロである、イ・セドル九段に 4 勝 1 敗で勝ち越したことが大きな話題となりました。さらに改良版のプログラム「Master」は 2017 年 1 月、ネット上の非公式戦ながら各国のプロ棋士相手に 60 連勝したと報じられています。数年前まではプログラムがプロの囲碁棋士に、ハンディキャップ無しで勝利するにはあと 20 年はかかるというのが通説でした。

各国のプロ棋士を破った囲碁プログラムは、画像認識の AI を囲碁プログラムに応用したもので、プログラム同士が膨大な局数を対局して得られた盤面の画像を統計的に判断し、最善と判断される次の着手を決定する方法だそうです。日本囲碁界で前人未踏の七冠を達成した、井山裕太棋聖(現六冠)はこのプログラムの好手を「人間ではなかなか発想できない斬新な手」と評しています。2000 年以上と言われる囲碁の歴史の中でも発見できなかった手を、AI が発見してしまったのでしょうか。

AI が世界的なトッププロに勝ったことは衝撃的でしたが、囲碁は「棋道」とも呼ばれる芸術文化です. 技術の創造と文化の発展には「競争」と「協調」の両輪が必要なのでは、と深く感じました. (T.Y)

#### サイバーサイエンスセンター・情報部情報基盤課スタッフ退職者と異動のお知らせ

2017. 3. 31 付け

[退職]

千葉 実 情報基盤課長(定年退職、再雇用職員へ)

岡部 公起 スーパーコンピューティング研究部 産学官連携研究員(任期満了退職)

2017.4.1付け

[転入]

大沼 忠弘 情報基盤課長(福島大学学術情報課長から) 魚住 洋佑 先端情報技術研究部 産学官連携研究員

(医学系研究科産学官連携研究員から)

[採用]

Muhammad Alfian Amrizal スーパーコンピューティング研究部 研究支援者 (情報科学研究科大学院生から)

[転出]

栗原 尚志 情報基盤課長補佐(災害科学国際研究所専門員へ)



サイバーサイエンスセンター西側から

### SENAC 編集部会

滝沢寛之 小林広明 水木敬明 後藤英昭 江川隆輔 佐藤恵美子 吉田貴子 大泉健治 小野 敏 斉藤くみ子

平成29年4月発行

.....

編集・発行 東北大学

サイバーサイエンスセンター 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-3

郵便番号 980-8578

印 刷 東北大学生活協同組合

プリントコープ

## システム一覧

計算機システム	機種
スーパーコンピュータ	SX-ACE
並列コンピュータ	LX 406Re-2

## サーバとホスト名

フロントエンドサーバ	front.cc.tohoku.ac.jp
SSH アクセス認証鍵生成サーバ	key.cc.tohoku.ac.jp

## サービス時間

利用システム名等	利用時間帯				
スーパーコンピュータ	連続運転				
並列コンピュータ	連続運転				
サーバ	連続運転				
可視化機器室	平日 9:00~21:00				
館内利用	平日 8:30~21:00				

## スーパーコンピュータ (SX-ACE) の利用形態と制限値

利用形態	利用ノード数 <b>※</b>	実行時間制限 (経過時間)	メモリサイズ制限	-q オプション	-b オプション
通常	1~1,024	規定値:1週間 最大値:1ヶ月	60GB×ノード数	SX	利用ノード数
無料	1	1 時間	60GB		f
デバッグ	1~16	2 時間	60GB×ノード数	debug	利用ノード数
	17~32	24 時間			小川 / 一下数

<sup>※ 2</sup>ノード以上を利用した並列実行にはMPIの利用が必用

## 並列コンピュータ (LX 406Re-2) の利用形態と制限値

利用形態	利用ノード数 ※	実行時間制限 (経過時間)	メモリサイズ制限	-q オプション	-b オプション
通常	1~24	規定値:1週間 最大値:1ヶ月	128GB×ノード数	1x	利用ノード数
アプリ ケーション	1	なし	128GB	1A	а
会話型	1(6コアまで)	1 時間 (CPU 時間合計)	8GB	_	-

※ 2ノード以上を利用した並列実行にはMPIの利用が必用

# 東北大学サイバーサイエンスセンター

# 大規模科学計算システム広報 Vol.50 No.2 2017-4

[巻頭言] スーパーコンピューティング研究部教授に着任して	1
[共同研究成果] 数値シミュレーションから見出された	
余効すべり伝播速度と摩擦特性の関係 ·······················有吉 慶介・松澤 暢Roland Burgmann	3
長谷川 昭·日野 亮太 堀 高峰	
[お知らせ] 平成 29 年度講習会サイバーサイエンスセンター講習会のご案内	8
[大規模科学計算システム] SSH アクセス認証鍵生成サーバの利用方法	10
アプリケーションサービスの紹介	17
三次元可視化システムの紹介	36
[紹介]	
サイバーサイエンスセンター高性能計算技術開発 (NEC) 共同研究部門のご紹介 	40
[報告]	
<計算科学・計算機科学人材育成のためのスーパーコンピュータ無償提供利用報告> 東北大学大学院データサイエンスプログラムにおける	
プログラミングトレーニング演習 瀬川 悦生	44
第 25 回高性能シミュレーションに関するワークショップ(WSSP)を開催しました 	46
平成 28 年度サイバーサイエンスセンターセミナー報告	48
<プレスリリース報告>	
世界中のビッグデータ利活用を可能とするプラットフォームの構築 ~プライバシーに配慮した iKaaS プラットフォームの実証実験を開始~	50
[退職のご挨拶]         退職にあたって	53
[Web 版大規模科学計算システムニュースより]	
利用負担金額の表示コマンドについて(No.234) ····································	55
研究成果リスト提出のお願い(No.235) ····································	
ゴンハイラのハーションテックについ C (No.238)	56
Gaussian16 の提供開始について(No.239)	58
数式処理プログラム Mathematica のバージョンアップについて(No.239)	58
科学技術計算言語 MATLAB のバージョンアップについて(No.239) ·······	59
平成 29 年度利用負担金について (No.239)	60
平成 29 年度共同研究について (No.240)計算科学・計算機科学人材育成のためのスーパーコンピュータ無償提供制度に	
ついて (No.240) ····································	63
大規模科学計算システムの機関(部局)単位での利用について(No.240)	
執筆要項	
スタッフ便り	

