



TOHOKU
UNIVERSITY

ISSN 0286-7419

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.3 2017—7



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)* e-mail	主なサービス内容	サービス時間
				平 日
一階	利用相談室	022-795-6153 (6153) sodan@cc.tohoku.ac.jp 相談員不在時 022-795-3406 (3406)	計算機利用全般に関する相談 大判プリンタ、利用者端末等の利用	8:30～17:15 8:30～21:00
	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
三階	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) kaikai@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
	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。

本誌の名称「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。

[共同研究成果]

有機-金属界面での電子準位接続の精密決定に向けた
GW space-time コードの高速化

琉球大学理学部 柳澤 将

1. 緒言

有機分子からなる半導体は、材料の柔軟性や印刷工程に近い安価な製造工程、低消費電力などを利点とし、次世代エレクトロニクス材料の候補として注目されている。

材料の効率・性能を本質的に支配すると考えられる基礎電子物性として、i) 結晶での注入電荷（電子・正孔）の移動度の支配要因[1]、ii) 有機層と金属電極層の接触する界面での電荷注入障壁の形成要因[2]、という問題が注目されてきた。

i)について、ルブレナなどの一部の有機分子単結晶・薄膜で、無機半導体で典型的な伝導機構（バンド伝導）の重要な寄与の可能性が指摘された[3, 4]。報告された角度分解光電子分光によるバンド構造や、そこから示唆される正孔伝導の性質について洞察を得るため、筆者らはルブレナ単結晶において高精度なバンド計算法(*GW* 近似[5])を適用した。そこから、バンド伝導的な正孔移動の起源として、隣接分子間に非局在化する分子軌道の役割を指摘した[6]。他の有機結晶にも *GW* 近似の適用を進め、結晶構造と電子状態との関係[7,8]や、結晶中の注入電荷に対する動的分極の効果の大きさについても知見を得てきた [9,10]。

一方、ii)の有機-金属界面での準位接続の問題でも、*GW*近似の適用により、準位接続を支配する要因について洞察を得られると期待できる。特に、有機-金属界面では、結晶中の注入電荷が金属表面に近づく際に受ける鏡像ポテンシャルの効果の重要性が、*GW* 近似の適用により指摘された[11]。しかしながら、その後、*GW*近似が有機-金属界面の準位接続に適用された例は、一部の典型的な場合を除くと少なく、長距離的な非局所ポテンシャルの計算を要する *GW*近似の計算を、表面・界面系に適用するのが容易でないことを示唆していると言える。

本共同研究では、筆者がこれまで有機結晶系に適用を進めてきた *GW* space-time(GWST)法[12-14]を、一般的な有機-金属界面や表面の電子準位を決定する問題に適用できるよう、計算プログラムを高速化・高度化することを目的とした。本稿では、計算法やプログラムの概要紹介とともに、本研究で行ったプログラム上の工夫や、計算方法の高度化による成果について示し、今後の高速化・高度化の指針も述べる。

2. 理論、計算法

GW 近似では、固体内の注入電荷（電子・正孔）の周囲に反対符号の分極雲が動的に誘起されることによる、電子間クーロン相互作用の遮蔽を正しく記述する。このような取り扱いのため、*GW* 近似で計算されるエネルギー（準粒子準位）は、光電子・逆光電子分光の実験で測定される

注入電荷の準位と物理的に対応する。

遮蔽された相互作用 W は、固体内の微視的な誘電関数 ϵ と、(裸の)クーロン相互作用 v_{coulomb} とによって次のように表される。

$$W = \epsilon^{-1} v_{\text{coulomb}}$$

ここで、これら物理量は、本質的には空間での任意の 2 点 $(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ にある粒子間の相互作用を表すため、一般に $W(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ のような非局所な量の計算を要する。固体のバンド計算で広く用いられる密度汎関数理論(DFT)の計算では一般に局所的な一体ポテンシャルを取り扱い、計算に必要な資源は N^2 から N^3 のオーダーで増えるが、 GW 近似は N^4 のオーダーであり、DFT 計算よりも膨大になる。

一般に計算資源を要する GW 近似の計算プログラムでは、数値計算を実行可能にするため、プログラムごとで様々な工夫がされている。一般に周期的な物質系の電子状態計算では、波動関数は波数 $\mathbf{k}$ を良い量子数とするブロッホ波で、平面波基底で展開できるため、計算では高速フーリエ変換(FFT)が使われる。 GW 近似も同様であるが、GWST 法では、畳み込み積分を行わずに単純な積で計算が済むよう、計算量の変数を FFT でスイッチする。たとえば、遮蔽相互作用 W は逆格子点 $(\mathbf{G}, \mathbf{G}')$ と、虚振動数 $i\omega$ を変数として以下のように表される。

$$W(\mathbf{G}, \mathbf{G}'; i\omega) = \epsilon^{-1}(\mathbf{G}, \mathbf{G}'; i\omega) v_{\text{coulomb}}(\mathbf{G}, \mathbf{G}')$$

粒子の準粒子エネルギー演算子 Σ は、

$$\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\tau) = iG(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\tau)W(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\tau)$$

のように、実空間点 $(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ と虚時間 $i\tau$ に依存する。このようにして計算は簡素化され、計算速度は一般に FFT の速さに依存する。ただし、実空間グリッド上のデータが必要なため、一般にメモリやディスクの要求が多くなっている。

現状では多量のデータのディスク I/O による遅延を避けるため、計算データを極力メモリにロードして計算を行っており、多くのメモリを使用できる SX-ACE 上で主に使用している。元々のプログラムは英・独の研究グループで開発され[12-14]、並列計算は不可であったが、筆者がフラット MPI を実装している。

3. 結果・考察

3-1. プログラムの効率上の工夫

GWST コードによる大規模な実行を見据え、SX-ACE 上や PC クラスタ上での動作の検討・効率化を進めた。東北大学サイバーサイエンスセンターの技術専門職員の助力を得て、LX 406Re-2 と SX-ACE での以下のテストをもとにコードの改善を進めた。

テスト A(小規模: シリコン単結晶):

4~24 プロセス並列、メモリ使用: 30 GB 程度、演算時間数分

テスト B(中規模: ナフタレン単結晶):

144 プロセス並列、メモリ使用: 400 GB 程度、演算時間 30-50 分

テストの結果、テスト A は LX 406Re-2 上での実行が有利である一方、将来的に目指す大きな系のシミュレーションには SX-ACE の方が有利であることが分かった。コード改良前の段階で SX-ACE での平均ベクトル化率は A: 83.7 %、B: 95.9 %となった。小規模な A の方がかなり低いベクトル化率であるのは、ファイルからのデータ読み込み・ロードなど、比較的ベクトル化しにくいプロセスが実行の少なからぬ部分を占めるため、数値演算の割合が増すテスト B でベクトル化率が上がる。それでもベクトル化の余地がまだあり、ベクトル化率が低い部分を改善した。

ファイルから、一電子軌道などの数値を読み込みストアする部分で、インデックス配列を用いて配列にストアしていた。技術専門職員によって、一旦、一時配列に一括して読み込んだ後にインデックス配列を用いたストアに一時配列から読んでストアするよう改変された。結果、平均ベクトル化率は若干下がったものの、SX-ACE 上でのテスト A で 5%程度の全演算時間短縮、テスト B で 250%の全演算時間短縮が見られ大幅な効率化につながった。しかし LX 406Re-2 では効率化せず、テスト B で 10%程度の全演算時間増につながった。演算の重複化が原因と考えられ、LX 406Re-2 では改良前の方が効率的だが、LX 406Re-2 上の実行で想定されるデータ量に応じ、SX-ACE と別のコードを実装する必要があると考えられる。

それ以外にも、do-loop 内の依存関係でベクトル化が不可であったパートについて、コードの見直し・改訂を行ない、テスト A で 90 %、テスト B で 98 %までベクトル化率が上がり、実行時間もさらに 10%前後の短縮が見られた。

GWST コードでは高速フーリエ変換が多用されるが、特にグリッドサイズの異なる二種類のフーリエ変換($\mathbf{r}$ と $\mathbf{G}$ および実格子点 $\mathbf{R}$ と $\mathbf{k}$)が必要であり、適切な FFT コードの選択が重要である。一般に $\mathbf{r}$ と $\mathbf{G}$ のフーリエ変換は数万~十万程度の次元に対し、もう一方は数 10~100 程度の次元となる。前者の FFT は、特に ASL ライブラリを使用すると高ベクトル化率での高速処理が可能だが、後者の FFT ではベクトル化のロードが負荷となり、ASL の使用だと効率が悪い。これまで、小グリッドサイズの FFT には FFTW を使用したが、技術専門職員による解析の結果、多グリッドの FFT での高ベクトル化率と、比較的グリッドが少ない場合でも性能を有する FFTE[15]を使用するのが良さそうであることが分かった。GWST コードでは $\mathbf{R}$ と $\mathbf{k}$ の FFT のルーチンが数万回以上コールされるが、FFTE はソース自体入手が可能で、ソースからコンパイルしインライン展開を行なうことによるルーチンのロードの負荷もある程度軽減できると見込まれる。テスト A、B で試した限りでは大幅な高速化は見られなかったが、将来的に、テスト B よりもさらに

大規模な系を対象とし、よりグリッドサイズが大きくなると利点は増すと期待される。**SX-ACE**の自動並列化機能が**FFTE**で有効なようであり、ハイブリッド並列の導入による効率化も期待される。

並列化について、**GWST** コードの現状はフラット **MPI** 並列のみである。現状、100 並列程度まではまずまず効率的だが、それを越えると効率はかなり低下する。テスト B 以上の規模の計算でもっとも時間を要するのは微視的誘電行列 $\epsilon_{\mathbf{gg}}$ の逆行列化で、現在 **ScaLAPACK** を使用している。**ScaLAPACK** による複素行列の LU 分解・逆行列化は、ある程度の並列度・ノード数で効率的だが、現状ではコードの序盤のブロック分割から **ScaLAPACK** での 2 次元サイクリック分割に合うようにノード間で冗長な通信処理を追加しているため、コードの見直しを行って並列化効率を上げる必要がある。対策として、**SX** の自動並列化機能を用い、**OpenMP/MPI** のハイブリッド並列を実装する作業を進め、通信の軽減による効率化を目指している。

3-2. 計算精度・対象の高度化

計算アルゴリズム上の改善に加え、物性予測の精度の向上や、計算対象をより高度化する工夫も行った。上述の効率化の達成により、様々な有機半導体結晶の *GW* 近似による計算が可能になった。

通常、**DFT** 計算による解をゼロ次として準粒子エネルギー補正を一度行う (G_0W_0)。しかし、**DFT** 計算によるゼロ次エネルギーでのエラーが大きい場合、 $(n-1)$ 回目の準粒子補正のエネルギー ($n \geq 2$) を、 n 回目の準粒子補正におけるゼロ次エネルギーとして用いることを繰り返す自己無撞着 (self-consistent) な計算を行うことで、精度を向上させることができる (*evGW*)。このような計算は元の **GWST** コードにすでに組み込まれていたが、これを現状のコード向けに改良し使用できるようにした。結果、より実験値に近いバンドギャップの予測を達成した (表 1) [10]。

また、現状のプログラムでは表面 (2 次元周期系) などの、非周期性を持った系への適用が計算のコスト上、容易ではない。そのため、よく規定された真空準位を *GW* 近似の計算で定義しイオン化ポテンシャル (IP) や電子親和力 (EA) を決定するのが難しい。しかし、IP と EA の差 (バンドギャップ) が 3 次元周期系 (バルク) の性質で本質的に決まり、表面の分子配向に依存する静電効果で IP・EA が真空準位に対してシフトすると仮定すれば、*GW* 近似による 3 次元バルクのバンドギャップと **DFT** 計算による表面系 (周期的スラブモデル) での静電効果の見積もりを合わせて、表面の配向に依存した IP・EA を見積もることができると考えられる。

図 1 に、そうして見積もった IP・EA の例 (ペンタセン結晶) を示す。ここでは、*GW* 近似で記述される動的分極効果により、結晶・バルク相で、注入された正孔・電子が周囲の分極雲により安定化される (図 1 の E_p に相当。大きさは、正孔と電子で共通と仮定)。

一方、表面配向に依存する静電効果により、真空準位に対して同じ方向にシフトする (図 1 の W_{es})。 W_{es} は、孤立分子と表面のスラブモデルのエネルギーギャップ中心の差として見積もった。

W_{es} は正孔・電子で共通で、表面分子の電気四重極モーメントによって決まると議論されている[16,17]。

このような見積もりにより、実験的に確認された、異なる表面の分子配向を反映した $IP \cdot EA$ の変化を計算で再現することができ、 $IP \cdot EA$ の数値も実験値[17]とまずまず一致する[18]。相違の原因として、 E_p が正孔・電子とで共通と仮定したことなどが考えられる。将来的には、表面のスラブモデル自体の GW 近似の計算によって $IP \cdot EA$ の決定を目指し、表面での電荷注入準位を支配する物理的要因の解明を目指す。

4. 結言

本共同研究では、次世代電子材料として注目される有機エレクトロニクス材料との関連で、有機-金属界面や有機結晶表面などのより複雑な物質系での電子準位の理論的決定を目標に GW space-time コードの効率化・高速化を進めた。一般に、非局所な物理量を計算するため、DFT に基づく従来の第一原理計算シミュレーションよりも大量の数値データを取り扱う必要がある。現在、数百程度の並列度で $SX-ACE$ 上での実行を主としており、実際、中程度以上の規模の計算では PC クラスタよりも $SX-ACE$ で高速に計算が実行される。本共同研究でもベクトル化率向上をはじめ、 $SX-ACE$ 上での効率向上を達成した。当面は、非周期性を持った系への適用性向上のため、 $SX-ACE$ 上での 1000 並列度以上での効率化を目指す。誘電行列の逆行列化を、ノード内のスレッド並列・ノード間の MPI 並列のハイブリッド並列によって並列効率を高めることを目標に進める。より将来的には、ベクトル機実行も含め、メニーコア計算機向けの高効率化も考えていく。

謝辞

本共同研究を進めるにあたり、東北大学サイバーサイエンスセンター共同利用支援係技術専門職員の山下 毅氏には、大変お世話になりました。この場を借りて御礼申し上げます。GWST コードの実行および整備・開発について、ドイツ・ユーリッヒ固体物理研究センターの Arno Schindlmayr 研究員(現ドイツ・パーダーボルン大学 教授)にも感謝申し上げます。

参考文献

- [1] V. Coropceanu, J. Cornil, D. A. da Silva Filho, Y. Olivier, R. Silbey, and J.-L. Brédas, Chem. Rev. **107**, 926 (2007).
- [2] H. Ishii, K. Sugiyama, E. Ito, and K. Seki, Adv. Mater. **11**, 605 (1999).
- [3] J. Takeya, M. Yamagishi, Y. Tominari, R. Hirahara, Y. Nakazawa, T. Nishikawa, T. Kawase, T. Shimoda, and S. Ogawa, Appl. Phys. Lett. **90**, 102120 (2007).
- [4] S. Machida, Y. Nakayama, S. Duhm, Q. Xin, A. Funakoshi, N. Ogawa, S. Kera, N. Ueno,

- and H. Ishii, Phys. Rev. Lett. **104**, 156401 (2010).
- [5] L. Hedin, Phys. Rev. **139**, A796 (1965).
- [6] S. Yanagisawa, Y. Morikawa, and A. Schindlmayr, Phys. Rev. B **88**, 115438 (2013).
- [7] S. Yanagisawa, Y. Morikawa, and A. Schindlmayr, Jpn. J. Appl. Phys. **53**, 05FY02 (2014).
- [8] S. Yanagisawa, K. Yamauchi, T. Inaoka, T. Oguchi, and I. Hamada, Phys. Rev. B **90**, 245141 (2014).
- [9] S. Yanagisawa, S. Hatada, Y. Morikawa, J. Chin. Chem. Soc. **63**, 513 (2016).
- [10] S. Yanagisawa and I. Hamada, J. Appl. Phys. **121**, 045501 (2017).
- [11] J. B. Neaton M. S. Hybertsen, and S. G. Louie, Phys. Rev. Lett. **97**, 216405 (2006).
- [12] M. M. Rieger, L. Steinbeck, I. D. White, H. N. Rojas, and R. W. Godby, Comput. Phys. Commun. **117**, 211 (1999).
- [13] L. Steinbeck, A. Rubio, L. Reining, M. Torrent, I. D. White, and R. W. Godby, Comput. Phys. Commun. **125**, 105 (2000).
- [14] C. Freysoldt, P. Eggert, P. Rinke, A. Schindlmayr, R. W. Godby, and M. Scheffler, Comput. Phys. Commun. **176**, 1 (2007).
- [15] <http://www.ffte.jp/>
- [16] B. J. Topham and Z. G. Soos, Phys. Rev. B **84**, 165405 (2011).
- [17] H. Yoshida, K. Yamada, J. Tsutsumi, and N. Sato, Phys. Rev. B **92**, 075145 (2015).
- [18] S. Yanagisawa, AIP Conference Proceedings, *in press*.

表 1. 典型的なオリゴセン結晶でのバンドギャップ。DFT 計算でのゼロ次エネルギーに一度だけ準粒子補正した場合(G_0W_0)と、自己無撞着に繰り返した場合($evGW$)。単位は eV。

	ナフタレン	アントラセン	テトラセン
G_0W_0	4.72	3.37	2.40
$evGW$	5.70	4.17	3.09
Exp.	5.0~5.5	3.9~4.2	2.9~3.4

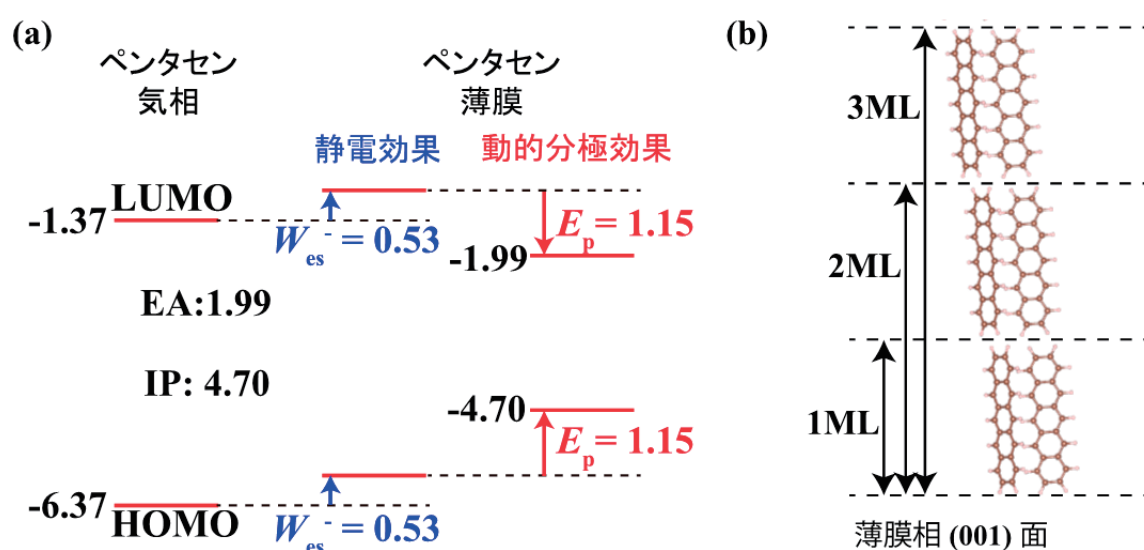


図 1 (a): ペンタセン薄膜相の(001)面における電荷注入準位の決定。イオン化ポテンシャル・電子親和力は、それぞれ 4.70 eV・1.99 eV。実験値[17]は、4.90 eV・2.35 eV。

[共同研究成果]

民間航空機開発における大規模 CFD 解析の適用

前田一郎
三菱航空機株式会社

三菱航空機株式会社では、平成 20 年度の先端的大規模計算利用サービスに始まり、平成 23 年度からは民間企業利用サービスの枠組みで、東北大学サイバーサイエンスセンターにて運用しているベクトル計算機、SX-9/SX-ACE を利用している。このスーパーコンピュータを利用することで、数値流体力学 (CFD) による空力解析シミュレーションを MRJ 開発で本格的に活用することが可能となった。これにより、空力に関連する設計リスクを最小限に抑え、飛行安全上のリスク低減を図ることができた。本稿では、この空力解析シミュレーションの内容と、MRJ 開発における適用状況を紹介する。

1. はじめに

三菱航空機株式会社では、平成 20 年度より YS-11 以来半世紀ぶりとなる国産旅客機、三菱リージョナルジェット (MRJ: 図 1) の開発を進めている。MRJ の開発では、環境負荷低減のため、同クラスの現行ジェット旅客機の燃費に対して、機体の軽量化・低抵抗化と新エンジンの搭載を含めて 2 割以上の燃費削減を目標としており、これを支える要素技術の開発に東北大学や宇宙航空研究開発機構と連携した産官学の共同研究を積極的に活用してきた。その内容は、空気力学、空力弾性、材料／構造、装備、飛行制御等の各要素技術や、多分野統合最適化／多目的設計探索の研究など、広範囲にわたっている。本稿では、東北大学との共同研究で開発した数値流体力学 (CFD) を用いた空力解析コードについて、東北大学所有の SX-9/SX-ACE による解析例と MRJ 開発における適用状況を紹介する。



図 1 三菱リージョナルジェット (MRJ)

2. MRJ 開発における CFD 解析

MRJ の開発においては、平成 20 年度より東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータ及び解析ツールを利用して、空力設計、空力データ設定、空力に関連する装備品設計等に対して CFD 解析を活用してきた。本稿では、その中でも設計や現在実施中の飛行試験において特に重要となる項目に対する解析について紹介する。尚、本稿には記載した解析以外にも、本システムの利点を活用した計算も数多く実施しており、MRJ 開発に大きく貢献して頂いている。その例としては、飛行試験（主には荷重飛行試験）のデータ処理に必要な CFD データベースの構築や飛行試験対応解析等が挙げられる。前者の飛行試験データ処理に関しては膨大なケース数の解析が必要となるため、スーパーコンピュータを適用することで飛行試験データ処理を効率的に実施することが出来た。また、後者の飛行試験対応解析に関しては、スーパーコンピュータの適用により迅速により詳細な CFD 解析を実施することが可能となり、飛行試験で観察された事象の把握や理解に役立てることで飛行試験をより効率的かつ効果的に実施することが出来ている。

3. CFD 解析コード

MRJ 開発には主に東北大学の非構造格子ソルバーTAS (Tohoku University Aerodynamic Simulation) コード[1-5]を使用している。主に 3 次元の圧縮性・粘性流体に本ソルバーを適用している。図 2 に解析形状例を、図 3 に解析格子例をそれぞれ示す。

開発した解析コードは SX-ACE 向けにチューニングされており、効率の良い計算領域分割による MPI 並列化を用いて大規模並列計算を実現している。



図 2 解析形状例（巡航形態）

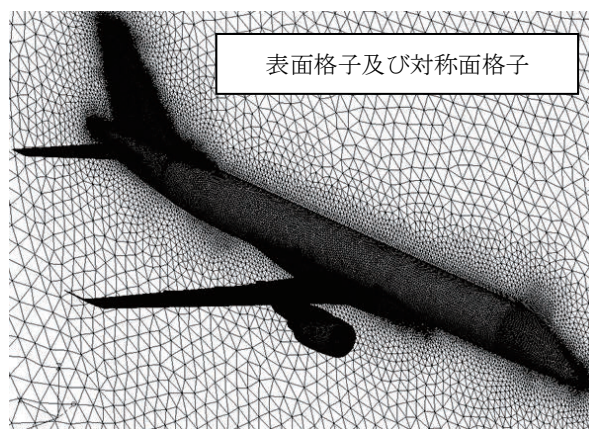


図 3 解析格子例（巡航形態）

4. 空力解析例

本章では、MRJ の開発における空力関連の設計評価・確認への解析適用例及び飛行試験に対する解析適用例を紹介する。解析例は機体表面の C_p 分布として示す（図 6 については流線）。

4.1 設計評価・確認への CFD 解析適用

4.1.1 各飛行形態

MRJ の開発においては、航空機の離陸から着陸後の静止までの一連の形態に対して CFD 解析を適用している。その中には、比較的規模の大きな解析が必要となる形態が含まれる。その適用例について図 4～6 に示す。

図 4 は着陸形態における解析例である。脚・脚扉については計算格子点数が膨大となりデータの生産性等の理由から模擬しない場合が多いが（風洞試験においては、脚・脚扉は模擬されている）、脚・脚扉の影響を把握するためにこれらを模擬した解析を実施した。

図 5 は舵面（スポイラ）操舵形態に対する解析例である。航空機には操舵面が幾つかあり、それぞれの舵面の操舵舵角にも多くのパターンがあるため形態の数が膨大となる。そのため、これまでは CFD の適用は限定的であったが、スーパーコンピュータの利用により解析が可能となった。

図 6 は着陸後に制動方法として使用されるスラスト・リバーサーに対する解析例である。スラスト・リバーサーには多数の空気吹き出し口があり、その開口方向等のパラメータが多数存在する。これらのパラメータに対して制動能力等を最適化する組み合わせを決定する必要があり、風洞試験等も実施している。その際、事前に CFD 解析によりパラメータの絞り込みを実施することで試験を効率的に実施することが出来た。また、CFD 解析により詳細に流れ場を確認することが可能となり飛行試験でのリスクの低減を図ることが出来た。



図 4 着陸形態（脚下げ状態）



図 5 舵面操舵形態

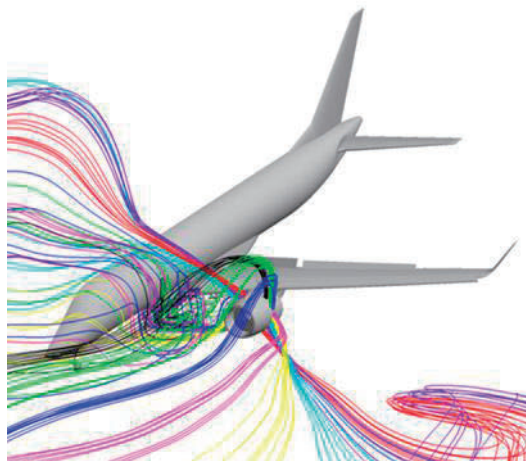


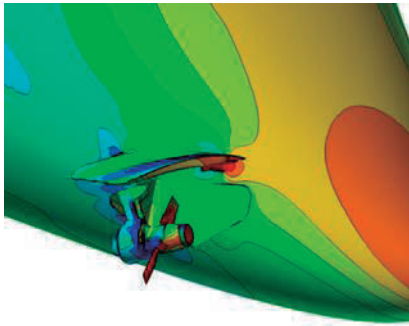
図 6 スラスト・リバーサー作動状態

4.1.2 機外装備品

航空機には機外に展開される装備品が数多く存在し、それらの多くが機体のサイズと比較して小さいため、風洞試験での評価が困難な場合がある。MRJ の開発においてはこれらの機外装備品等に対して CFD 解析を適用した（図 7, 8 参照）。

図 7 は RAT（Ram Air Turbine）に対する解析例である。通常のジェット機では、エンジンに付属する発電機により機内で必要な電力を供給しているが、エンジン故障等によりエンジンからの電力供給が途絶えた場合に RAT が展開される。RAT は風車のようにブレードを回転させることで発電し、機内で最低限必要な電力を一時的に供給する。CFD 解析はこの RAT を安全に展開するために必要な空気力データの取得に適用された（風洞試験も実施しているが、速度域が限られるため CFD 解析で補完した）。

図 8 は脚扉開状態の解析例である。通常の下脚状態（4.1.1 参照）に加えて、脚扉のリンクが故障した場合に脚扉が展開する場合（不時展開）についても解析を実施した。リンク故障は高速域についても検討する必要があるため、風洞試験では確認が難しいため CFD 解析を活用した。



CFD 解析例



実機



図 7 RAT 展開状態

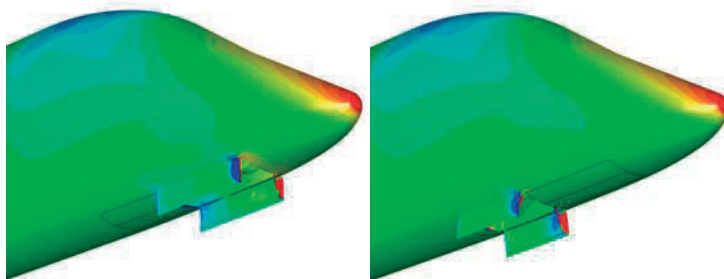


図 8 脚扉開形態（不時展開時）

4.2 飛行試験への空力解析適用

4.2.1 飛行試験計装

飛行試験においては、各飛行試験を実施するために必要な個別の計装が必要となる。それらの計装の中には機外に取り付けられるものがあり、機体の飛行特性や飛行試験計測への影響を検討する必要がある。これらの計装についても通常の機外装備品同様に風洞試験での確認が困難なものが多く、それらに対して CFD 解析を適用した。

図 9 に圧力ベルトの影響評価への適用例を示す。圧力ベルトは飛行時の荷重を計測する荷重飛行試験に必要な計装であり、機体表面圧力を計測する圧力センサが計装されている。そのため圧力ベルト自体による圧力場の変化を最小化する必要がある、CFD 解析により圧力ベルトの影響を最小化するように圧力センサ配置等を決定した。

図 10 にフラッター加振装置への適用例を示す。飛行試験においては空力弾性不安定現象であるフラッターが飛行中に発生しないこと確認する必要がある、本装置はフラッター飛行試験において強制的に主翼や尾翼を加振するための装置である。風洞試験についても実施し、全機の飛行特性等については確認しているが、主翼（ウィングレットを含む）や尾翼の局所的な空気力に対する影響を把握するため、CFD 解析を実施した。

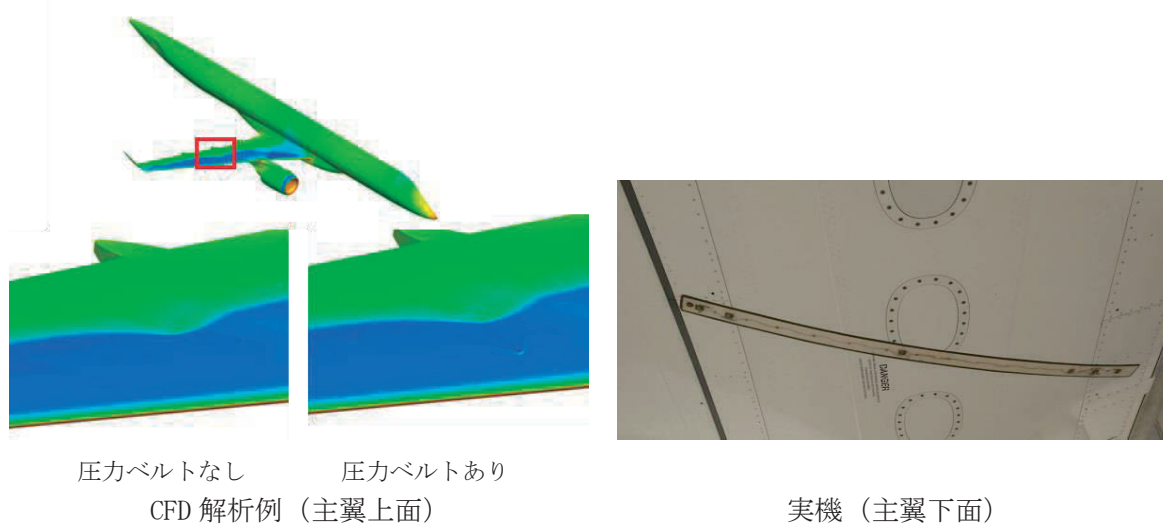


図 9 圧力ベルトの影響評価（主翼）

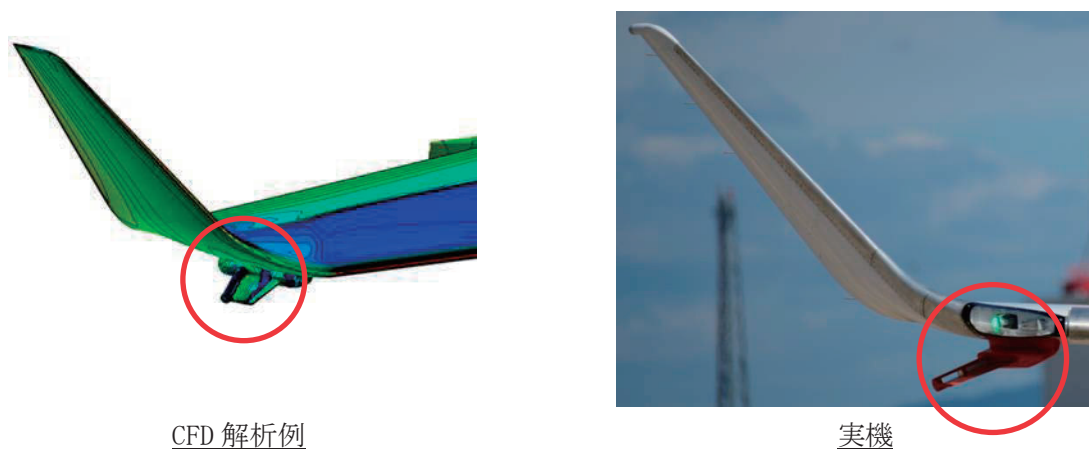


図 10 フラッター加振装置の影響評価（主翼）

4.2.2 着氷飛行試験

飛行試験においては、計測するための計装品の他に、着氷形状のような機体形状変化を模擬するための部品を使用する。航空機がある条件下を飛行した場合に、機体先端部（機首や翼前縁）付近に氷が付着する（着氷）。飛行試験では、実際にそのような条件下を飛行して着氷の状態を確認する試験（自然着氷試験）や着氷状態を模擬して安全に飛行することが出来るかを確認する試験（模擬着氷試験）を実施する必要がある。いずれの試験においても飛行安全の観点で、予め着氷時の空力特性変化を把握しておく必要があり、MRJ の開発においても風洞試験を実施している。ただし、これらの風洞試験は主には全機の空力特性把握が目的であり、局所的な空気力変化については把握が難しいため CFD 解析を適用した（図 11 参照）。しかしながら、着氷形状はその後方に大きな剥離領域を伴うため通常の CFD 解析では定量的な評価は困難である。そのため、CFD 解析結果だけでなく、風洞試験で計測された全機空力特性も考慮した上で検討に使用している。着氷形状に対する定量的な空力評価に関しては、LES や DNS 等を適用出来る可能性はあるが、航空機設計へ適用するためには今後の検討が必要である。

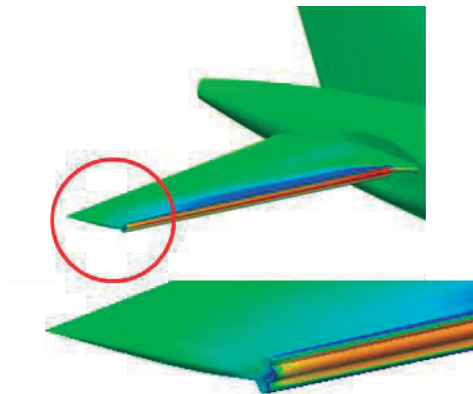


図 11 着氷の影響評価（水平尾翼）

5. おわりに

民間企業利用サービスにより、世界でもトップレベルの計算機環境を利用することで、当社の計算機環境では困難であった CFD 空力解析の本格活用を MRJ 開発で実現することができた。東北大学で開発された解析コードやスーパーコンピュータを MRJ の設計段階から積極活用することにより、空力に関連する設計リスクを最小限に抑え、飛行試験における飛行安全上のリスク低減を図ることができた。今後も引き続き飛行試験や設計確認作業のためにスーパーコンピュータを活用させて頂くとともに、飛行試験データを用いて解析コードの検証や精度向上を図る予定である。

謝辞

本研究開発は、東北大学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実現することができた。解析コードの開発では、東北大学の大林研究室、旧中橋研究室にご協力いただいた。また、計算機利用と解析コードのチューニングにあたっては、同センター関係各位に有益なご指導とご協力をいただいた。ここに感謝の意を表します。

参考文献

- [1] Nakahashi, K., Togashi, F., Fujita, T. and Ito, Y., “Numerical Simulations on Separation of Scaled Supersonic Experimental Airplane from Rocket Booster at Supersonic Speed,” AIAA Paper 2002-2843, June 2002.
- [2] Murayama, M. and Yamamoto, K., “Comparison Study of Drag Prediction for the 3rd CFD Drag Prediction Workshop by Structured and Unstructured Mesh Method,” AIAA Paper 2007-0258, June 2002.
- [3] Ito, Y. and Nakahashi, K., “Surface Triangulation for Polygonal Models Based on CAD Data,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 39, Issue 1, 2002.
- [4] Shrov, D. and Nakahashi, K., “A Boundary Recovery Algorithm for Delaunay Tetrahedral Meshing,” Proceedings of 5th International Conference on Numerical Grid Generation in Computational Fluid Simulations, Mississippi State, Mississippi, 1996, pp.229-238.
- [5] Ito, Y. and Nakahashi, K., “Improvements in the Reliability and Quality of Unstructured Hybrid Mesh Generation,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 45, Issue 1, May 2004, pp.79-108.

[研究成果]

HPGMG-FV を用いた SX-ACE の性能評価

江川隆輔^{1,2}, 磯部洋子^{2,4}, 加藤季広⁴, 小松一彦¹, 滝沢寛之^{1,2}, 小林広明^{2,3}, 撫佐昭裕^{2,4}

¹ 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

² 東北大学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

³ 東北大学大学院 情報科学研究科

⁴ 日本電気株式会社

1. はじめに

世界で最も高速なスーパーコンピュータの上位 500 位までをランク付けするための指標として, Jack Dongarra らが 1977 年に開発した LINPACK が用いられている. TOP500[1]は 1993 年から現在に至るまでのスーパーコンピュータの性能評価結果を公開しており, その資料的価値が高く評価されている一方で, 実アプリケーションと LINPACK 性能の乖離や, システムの大規模化に伴う実行時間の長さなどの問題が近年指摘されてきた. これらの問題を解決するべく, より実アプリケーションに近い性能特性を示し, 現実的な時間で解くことが可能なベンチマークとして, 前処理付き共役勾配法を用いた HPCG(High Performance Conjugate Gradient benchmark)が, 同じく Dongarra らによって提案されている[2][3]. LINPACK は大規模な密行列の連立一次方程式を直接法で解くのに対し, HPCG は大規模疎行列の連立一次方程式を反復法で解く. この結果, LINPACK の性能は演算性能に律速されるのに対し, HPCG の性能はメモリバンド幅に律速されることが知られている[4].

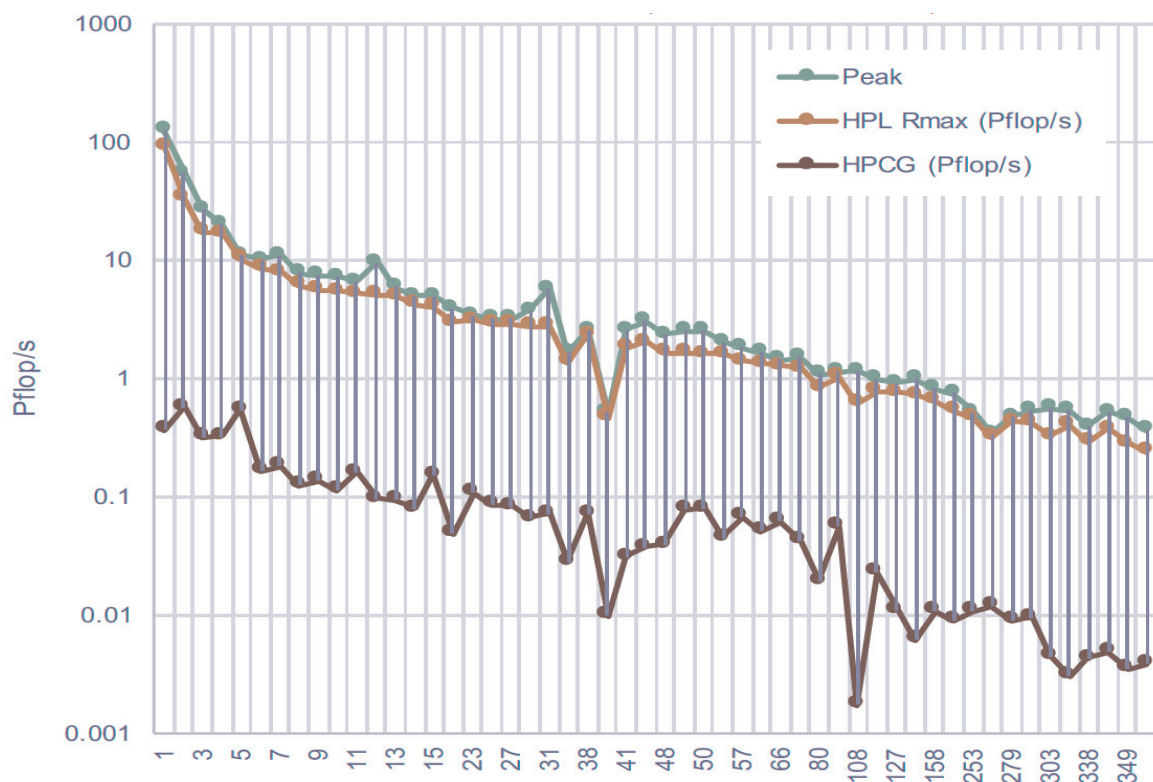


図 1 TOP500 システムの理論性能, HPL 性能, HPCG 性能.

図 1 に 2016 年の高性能計算に関する国際会議 ISC'16 で発表された TOP500 ランキングと HPCG ランキングに登録されたスーパーコンピュータの LINPACK, HPCG の性能を示す。縦軸は各システムの理論演算性能, LINPACK 性能, HPCG 性能をそれぞれ Pflop/s で示しており, 横軸は各システムを示す。このグラフから見ても明らかなように, LINPACK ベンチマークの性能はシステムの理論性能に追従している一方で, HPCG 性能はこれらの 2 つの性能と大きく乖離している。HPCG の性能はスーパーコンピュータのメモリ性能に依存しており, メモリバンド幅律速のアプリケーションの挙動を再現していると見ることができる。しかし, 近年のスーパーコンピュータ, およびスーパーコンピュータを用いたシミュレーションコードの多様化は著しい速さで進んでおり, これらのアプリケーションを演算性能律速, メモリバンド幅律速と 2 つに分類する事は極めて困難である。Dongarra は, HPL と HPCG が対照的な性能値を評価していることを踏まえ, 今後はこれら 2 つのベンチマークが”bookends”として相補的にスーパーコンピュータの性能を評価するベンチマークとして活用されるとしている[2]。

一方, このような状況下で, LINPACK, HPCG の間を補完する新たなベンチマークとして, 2014 年に米国ローレンスリバモア研究所が, 幾何的マルチグリッド法による大規模疎行列連立一次方程式の求解プログラムである HPGMG(High-Performance Geometric Multigrid)を提案している[5]。本報告では, HPGMG を用いた SX-ACE の性能評価結果について報告する。本稿の構成は以下の通りである。次節では HPGMG, 特に本稿で性能評価の対象としている HPGMG-FV について概説する。第 3 節では HPGMG-FV の性能評価について述べ, 第 4 節にて本報告をまとめる。

2. HPGMG ベンチマーク

HPGMG は幾何学的マルチグリッド法による連立一次方程式求解のベンチマークであり, 現在 ver0.3 が, HPGMG ウェブページ(<https://hpgmg.org/>)で公開されている。HPGMG は離散化に有限体積法を用いる HPGMG-FV と有限要素法を用いる HPGMG-FE から構成され, HPGMG-FV はメモリバンド幅に律速され, HPGMG は演算性能やキャッシュ性能に律速されるという特徴を持つ[6]。本稿では以降, HPGMG-FV を対象にする。

HPGMG-FV は C で実装され, 本稿ではその MPI 版を用いて性能評価を行う。実行時に 1 ノードあたりの問題サイズとノード数を指定し, 性能は DoF/s (degree of Freedom/sec)で算出される。DoF/s に 1,200 を乗じることで flop/s 値を得ることが出来る。HPGMG の性能はフルマルチグリッドアルゴリズム(FMA)における F-cycle で, 最も細かいメッシュサイズ, その 2 倍のメッシュサイズ, およびその 4 倍のメッシュサイズまで解いたときの DoF/s が性能値として示される。基本的には, 最も細かいメッシュサイズで解いた時の性能が着目すべき指標となる。これらの性能評価は毎年, 高性能計算に関する国際会議 SC でアップデートされ, 前述の HPGMG ウェブページにおいて公開されている。2015 年には我が国のフラッグシップシステムである京コンピュータは第一位の性能を達成している。

図 2 に HPGMG-FV において標準設定となっている性能計測の対象となるマルチグリッド処理における F-cycle と V-cycle の概念図を示す。マルチグリッド法は与えられた解析格子に対して, それよりも粗い格子を複数用意し, これらの格子群を活用し誤差を修正しながら求解する。HPGMG-FV におけるフルマルチグリッド法では, はじめに最も粗い格子において連立一次方程式を解き, 次に補間演算により一段細かなグリッドを構成し, スムージング処理と残差集約を行う。その後制約演算を行い, 一段粗い粒度において再び求解を行う。これを対象としている格子のサイズになるまで繰り返す。本ベンチマークでは, スムージング処理と残差集約が性能を決定づけるメインルーチンとなる。詳細は文献[6][7][8]を参照されたい。

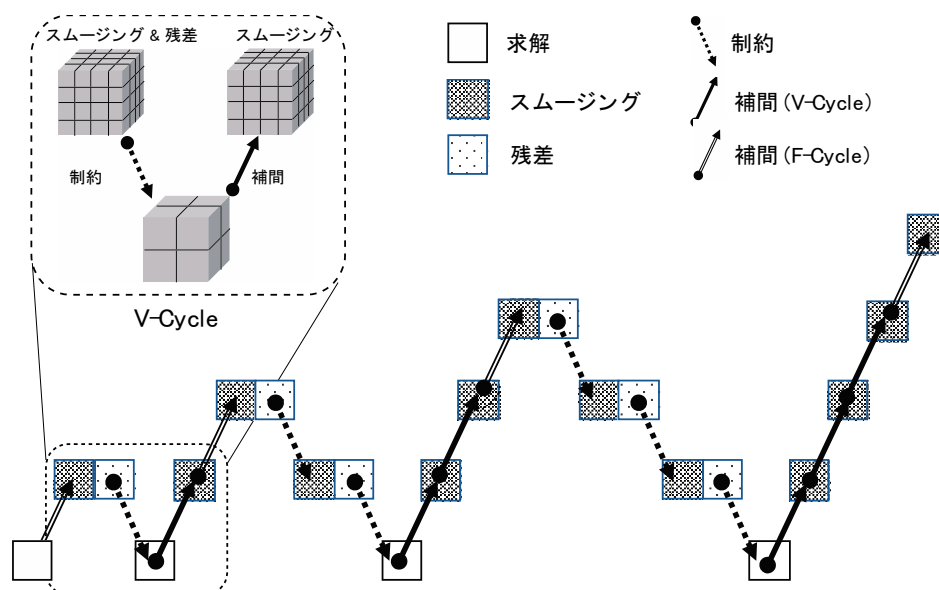


図2 HPGMG-FV における F-Cycle と V-Cycle.

3. 性能評価

本節では HPGMG-FV の性能結果について述べる. 本評価では, ボトムソルバーに BiCGStab 法, スムーザーには Gauss-Seidel Red-Black 法を選択した. 評価には拡張筐体で結合された SX-ACE 2 クラスタ(1,024 ノード), C++/SX コンパイラ Rev.102, MPI/SX ライブラリ Ver.10.2.3 を用いて, 4,096 プロセスのフルフラット MPI による評価を行った. 表 1 に評価に用いた SX-ACE の諸元を示す. コンパイラオプションには, “-Kc99 -C hopt”, 問題サイズはノード間の負荷のインバランス軽減を目的に $\log_2 \text{box_dim} = 9$ とした. 問題サイズの選定以外の最適化は, 本評価では施していない. 表 2 に HPGMG のホームページにおいて公開されている 2016 年 11 月時点における HPGMG ランキングを示す. 当センターの SX-ACE は最も細かなグリッドサイズにおける求解において, $73.8 \times 10^9 \text{DoF/s}$ を達成しており, 世界第七位の性能を達成している.

この表の, HPGMG の実行効率を見てみると, HPGMG は HPCG に比べて比較的高い実行効率を示す事がわかる. その中でも当センターの SX-ACE の実行効率は 33%強と他のシステムを大きく凌駕して世界第一位の実行効率を達成している. これらの結果をみても分かるように, HPGMG においても, 演算性能とメモリバンド幅のバランスの取れたシステムが極めて有用であることがわかる.

現在, HPGMG は GPU, アクセラレータの評価を容易にするべく, OpenMP のみならず OpenACC 実装版の開発が, 精力的に進められている. 今後多様化の進むスーパーコンピュータの一つの性能評価指標, 特に, HPL と HPCG のギャップを埋める実アプリケーションの挙動や性能を再現可能なベンチマークとして, HPGMG の開発状況にも注目していきたい.

表 1 サイバーサイエンスセンター大規模科学計算システム (SX-ACE) 諸元.

	ノード	クラスタ	システム
CPU/ノード数	1CPU (4 Cores)	512 Nodes	5 Clusters
演算性能	256Gflop/s (64GF/Core)	131Tflop/s	655Tflop/s
メモリバンド幅	256GB/s	131TB/s	655TB/s
メモリ容量	64GB	32TB	160TB

表2 HPGMG ランキング (2016 年 11 月) .

(https://crd.lbl.gov/departments/computer-science/PAR/research/hpgmg/results/results-201611/)

Rank	Site	System	10 ⁹ DOF/s	MPI	OMP	Acc	DOF/Process	HPGMG Efficiency	System Arch.
1	米国アルゴンヌ国立研究所	Mira	500	49152	64	0	36M	5.96	BlueGene
2	独シュトゥットガルト高性能計算センター	Hazel Hen	495	15408	12	0	192M	8.03	CrayXC40 (Xeon)
3	米国オークリッジ国立研究所	Titan	440	16384	4	1	32M	N/A	CRAY (Xeon+K20)
4	キング・アブドゥッラー科学技術大学	ShaheenII	326	12288	16	0	144M	5.41	CrayXC40 (Xeon)
5	米国国立エネルギー研究科学計算センター	Edison	296	10648	12	0	128M	14.48	CrayXC30 (Xeon)
6	スイス国立高性能計算センター	Liz Daint	153	4096	8	1	32M	14.97	CrayXC30 (Xeon+K20)
7	東北大学サーバーサイエンスセンター	SX-ACE	73.8	4096	1	0	128M	33.78	NEC SX
8	独ライプニッツ研究センター	Super MUC	72.5	4096	8	0	54M	12.29	Idataplex (Xeon)
9	米国国立再生可能エネルギー研究所	Peregrine	10	1024	12	0	16M	2.65	Apollo 8000 (Xeon)
10	米国国立再生可能エネルギー研究所	Peregrine	5.29	512	12	0	16M	5.38	Apple 8000 (Xeon)

4. まとめ

本報告では、SX-ACEにおけるHPGMG-FVの性能評価に関して報告した。評価の結果、当センターが運用するSX-ACEは、HPCGにおける評価と同様に、世界第一位（2017年7月現在）の高い実行効率を達成でき、世界最高レベルの高い実行効率を有するシステムであることを改めて明らかにした。将来のスーパーコンピュータは限られた電力、コストの下で高い性能を提供することが求められている。これを実現するためにはシステムの高性能化に加えて、与えられた計算資源を無駄なく活用できる実行効率の高いシステムが必要になると考えられる。今後はこれらの知見を基に、実アプリケーションを効率的に加速することが可能な大規模科学計算システムの設計に取り組んでいきたい。

参考文献

- [1] “TOP500 Supercomputer Site,” <http://www.top500.org/>.
- [2] Jack Dongarra, Michael Heroux, Piotr Luszczek, “HPCG UPDATE ISC'16,” hpcg-benchmark.org.
- [3] “HPCG Results (Nov. 2016),” <http://www.hpcg-benchmark.org>.
- [4] V. Marjanovic, J. Gracia, C. W. Glass, “Performance Modeling of the HPCG Benchmark,” High Performance Computing Systems, Performance Modeling, Benchmarking, and Simulation, pp 172 – 192, Springer 2014.
- [5] “HPGMG Ranking web page,”
- [6] V. Marjanovic, J. Gracia, C. W. Glass, “HPC Benchmarking: Problem Size Matters,” in proceedings of 7th International Workshop on Performance Modeling, Benchmarking and Simulation of High Performance Computing Systems, pp. 1– 10, 2016.
<https://crd.lbl.gov/departments/computerscience/PAR/research/hpgmg/results/results-201611/>.
- [7] Y. Ao, et al. (2015) Performance Evaluation of HPGMG on Tianhe-2: Early Experience. In: Wang G., Zomaya A., Martinez G., Li K. (eds) Algorithms and Architectures for Parallel Processing. Lecture Notes in Computer Science, vol 9531.
- [8] 下坂健則, 村井均, 佐藤三久, “マルチグリッド法プログラムの京での評価と並列言語 XcalableMP による実装,” HPC 研究会報告(2015-HPC-150), pp.1 - 7. July 2015.
- [9] K. Komatsu, R. Egawa, R. Ogata, Y. Isobe, H. Takizawa, and H. Kobayashi, “An Approach to the Highest Efficiency of the HPCG Benchmark on the SX-ACE Supercomputer,” in Proceedings of the Conference on High Performance Computing Networking, Storage and Analysis (SC15), Poster, Nov 2015, pp. 1-2 (USB).

[お知らせ]

サイバーサイエンスセンター講習会(夏季、秋季開催分)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
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	15	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 (共同利用支援係)	・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 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	並列プログラミング入門 I (OpenMp)	8月10日(木) 9:00-12:00	20	スーパーコンピュー 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	並列プログラミング入門 II (MPI)	8月10日(木) 13:00-17:00	20	スーパーコンピュー 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 (共同研究支援係)	・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 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	並列プログラミング入門 I (OpenMp)	10月13日(金) 9:00-12:00	20	スーパーコンピュー 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	並列プログラミング入門 II (MPI)	10月13日(金) 13:00-17:00	20	スーパーコンピュー 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。
・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へ
ご相談ください

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

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。



並列プログラミング入門 I (OpenMP)

- ・全く OpenMP を知らない人にもわかりやすい内容でした。
- ・すぐ応用に使えるそう。
- ・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・ベクトル化の改善方法をざっくり知ることができた。



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。



三次元可視化システムの利用法

- ・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きいにあった。



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。

並列プログラミング入門 II (MPI)

- ・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。



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。

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。



[利用相談室便り]

平成29年度の利用相談について

今年度も5月よりサイバーサイエンスセンター本館利用相談室で利用相談を行っています。日程等詳細は次頁をご覧ください。相談内容によってはメーカー等に問い合わせる場合や、時間を要する場合もありますが、利用者の問題解決にむけて努めております。直接面談のほかに、メールや電話での相談も受けておりますのでお気軽にご相談ください。

- ・ プログラムを高速化するにはどうしたらいいの？
- ・ プログラムを並列化してもっと速く計算したい！
- ・ スパコンでプログラムを動かしても速さがPCと変わらないんだけど、どうして？
- ・ 研究室のコンピュータではメモリが足りない！
- ・ 研究室の電気代高騰で困っている。
- ・ コンピュータの管理は面倒。研究に専念したい。
- ・ サービスしているアプリケーションを研究室から利用するにはどうすればいいの？

このような、スーパーコンピュータ利用に関する疑問や問題をお持ちの方、これから利用してみたいとお考えの方、一度相談してみてもいいでしょうか。また、サイバーサイエンスセンター本館相談室には、各種マニュアル、書籍も揃えています。相談室での閲覧、貸し出し（一部の書籍、マニュアルを除く）も可能ですのでご活用ください。

東北大学サイバーサイエンスセンター本館1階 利用相談室

所在地： 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-3 （地下鉄東西線青葉山駅 北1出口より徒歩3分）

Tel : 022-795-6153 学内内線 92-6153

不在の場合は 022-795-3406 (3階共同利用支援係)

e-mail : sodan@cc.tohoku.ac.jp

e-mail の場合、曜日、時間帯によっては回答に少しお時間をいただくことがあります。あらかじめご了承ください。



新キャンパス側から見たサイバーサイエンスセンター 手前2号館、奥本館



利用相談室

平成 29 年度利用相談日程と主な担当分野

曜日・時間		テクニカルアシスタント（所属）	主な担当分野
月	14～16 時	佐々木大輔（情報基盤課共同研究支援係）	・スーパーコンピュータ ・並列コンピュータ ・Fortran ・大判プリンタ
火	14～16 時	齋藤 敦子（情報基盤課共同研究支援係）	・可視化システム ・スーパーコンピュータ ・並列コンピュータ ・大判プリンタ
水	15～17 時 要事前予約	山崎 馨（金属材料研究所）	・アプリケーション（Gaussian）
木	14～16 時	森谷 友映（情報基盤課共同研究支援係）	・スーパーコンピュータ ・並列コンピュータ ・Fortran ・大判プリンタ
金	14～16 時	小松 一彦（サイバーサイエンスセンター）	・スーパーコンピュータ ・並列コンピュータ ・高速化（ベクトル化、並列化） ・Fortran ・C/C++
事前予約		山下 毅（情報基盤課共同利用支援係）	・アプリケーション全般 ・高速化（ベクトル化、並列化） ・Fortran ・負担金
*上記以外の時間帯に面談・電話での相談を希望の方は、3 階窓口（共同利用支援係）まで相談内容をお申し出ください。センター内担当者に取り次ぎます。			

[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

情報科学研究科 超高速情報処理論利用報告

滝沢寛之 後藤英昭 江川隆輔

東北大学サイバーサイエンスセンター

1. はじめに

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・学部における講義実習等の教育目的でのスーパーコンピュータ利用に対する負担金(利用料金)免除プログラム(以下、「スパコン教育利用制度」と呼ぶ)を平成 20 年度から始めています。現在この制度では、スーパーコンピュータ NEC SX-ACE システムや並列コンピュータ NEC LX406Re-2 を教育目的であれば無償で利用することができます。この制度を利用して、共有メモリ型並列処理 (OpenMP 等)、分散メモリ型並列処理 (MPI 等) など、計算科学分野のシミュレーション開発で広く用いられている様々な高速化技術を実際のスーパーコンピュータ (スパコン) を使って学ぶことができます。

本稿では、スパコン教育利用制度を利用して行われた東北大学大学院情報科学研究科の超高速情報処理論について報告します。

2. 超高速情報処理論

現在、ケータイからスパコンまで、ありとあらゆるコンピュータのプロセッサは様々な方法でプログラムの並列性を利用することで、高性能を達成しています。特に、科学技術計算を実行するような大規模な高性能計算システムでは、プログラムの並列性をプログラマが明示的に指定しなければ、その性能を引き出すことができません。

東北大学大学院情報科学研究科博士課程前期 2 年の課程(修士課程)1 年生向けの講義である超高速情報処理論では、高性能計算を実現するスーパーコンピュータシステムについて、ハードウェアとソフトウェアの両面から概観します。本講義では、並列処理の重要性を述べた後に並列処理システムのハードウェア構成方式、並列アルゴリズム設計法、並列プログラミング手法、および性能評価方法について学習します。さらに、近年の計算システムでは性能への影響が大きいメモリシステムについても学びます。

平成 27 年度まで、同講義では並列プログラミングについて座学で基本的な概念を紹介していました。しかし、プログラミングの学習は「書いてナンボ、動かしてナンボ」の世界であり、机上で基本概念だけ説明しても理解しづらいのではないかと懸念がありました。例年、並列プログラミングを試す環境を自力で用意し、レポート課題に取り組む受講生も何人かはいましたが、受講生全員にそれを期待するのは難しい状況でした。そこで平成 28 年度からスパコン教育利用制度を利用し、超高速情報処理論の講義で並列プログラミングを実際に試せる環境を提供することにしました。

3. 講義におけるスパコン利用方法

超高速情報処理論のように、東北大学サイバーサイエンスセンターのスパコンを講義で使うためには、講義中の短い時間で多くの受講生にスパコンへのログイン方法を説明する必要がありますし、いくつかの事前準備も必要です。スパコン教育利用制度を利用した講義を企画する際に参考となるように、事前の準備や説明が必要だった項目を以下に紹介します。

(1) ネットワーク接続

本講義ではネットワーク経由でスパコンに遠隔ログインしますので、受講者にはネットワークにアクセスする手段を提供する必要があります。そこで本講義では、eduroam[1]を使ってネットワーク接続する方法を受講生に説明しました。多くの受講生はすでにアカウントを持っていたため、本講義のこの段階で苦勞する人はほとんどいませんでした。

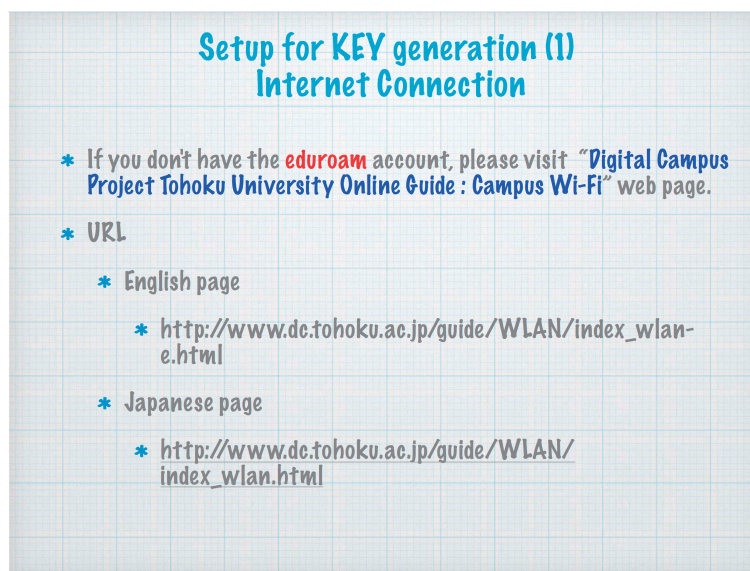


図 1: eduroam に関する説明

(2) SSH 接続用ソフトウェア

Windows には標準ではインストールされていないので、SSH 端末ソフトウェアやファイル転送ソフトウェアをインストールして利用する必要があります。本講義では、SSH 端末ソフトウェアを対象として、PuTTY[2]のインストール方法と基本的な使い方を説明しました。また、ファイル転送ソフトウェアとしては WinSCP[3]のインストール方法と基本的な使い方を説明しました。

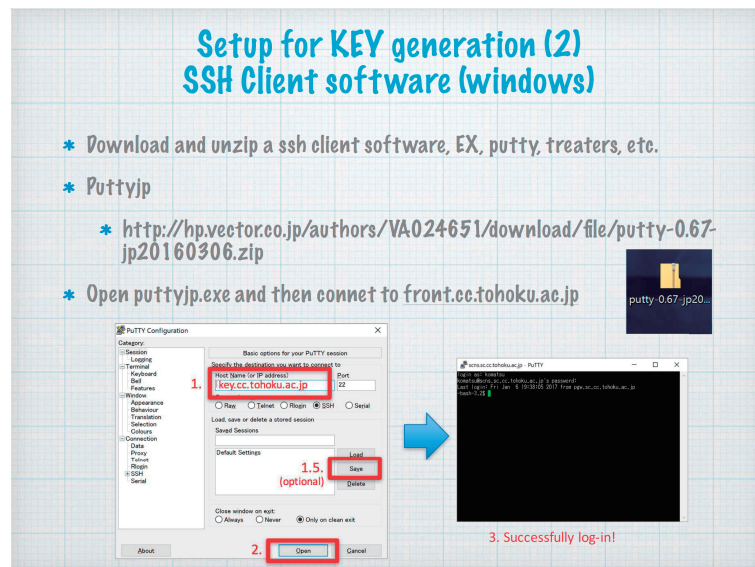


図 2 : PuTTY に関する説明

(3) SSH 鍵生成

東北大学サイバーサイエンスセンターのスパコンでは、セキュリティ上の理由からパスワード認証でのログインを許しておらず、鍵認証でログインする必要があります。このため、同センターでは「鍵サーバ」(key.cc.tohoku.ac.jp)を用意しており、受講生には鍵サーバで SSH 鍵を生成してもらう必要があります。具体的には、利用者番号(ユーザアカウント)と初期パスワードを各受講生に渡し、鍵サーバにパスワード認証で SSH 接続してもらいます。鍵サーバには専用の cckey-gen コマンドが用意されており、一定の強度をもつパスフレーズ付きの SSH 鍵を生成することができます。鍵生成方法の詳細に関しては同センターのウェブページ[4]をご覧ください。

(4) ジョブ管理システム

学生には、プログラミングの講義等で UNIX/Linux 環境の使い方を習う機会があったかもしれませんが、スパコンを使う機会はほとんどなかったはずですが。両者の大きな違いの一つとして、スパコンではプログラム実行時にジョブ管理システムを使う必要がある点が挙げられます。ジョブ管理システムを使わなければならない理由として、スパコンは多数の利用者に共用されており、その公平で効率的な利用が非常に重要であることを説明し、さらにスパコンの大まかなシステム構成や、フロントエンドサーバから計算サーバにジョブを投入する方法などを説明しました。

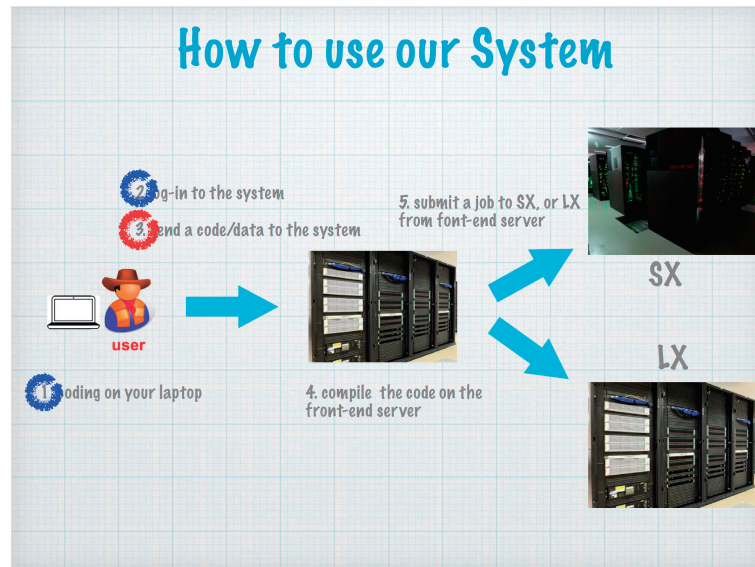


図3：ジョブ投入等のスパコン利用のイメージ

これらの項目のうち、(3)と(4)に関しては講義時間中にも説明する必要がありますが、(1)と(2)に関しては受講生自身が事前に用意することで講義時間内の作業時間を削減することができます。また、(3)や(4)の説明用の講義資料もありますので、必要な方は東北大学サイバーサイエンスセンターの共同利用支援係までご連絡ください。

4. スパコン利用の目的と効果

例年、担当教員の都合に合わせて順番が多少前後しますが、シラバスに記載されている授業計画は以下のとおりです。

1. 並列処理入門
2. 並列アーキテクチャ
3. 並列アルゴリズム設計 (1)
4. 並列アルゴリズム設計 (2)
5. メッセージパッシングプログラミング
6. 共有メモリプログラミング
7. 並列処理の性能解析
8. メモリ設計とデータ管理
9. 仮想メモリ
10. キャッシュメモリ (1)
11. キャッシュメモリ (2)
12. 並列計算システム
13. マルチプロセッサ用メモリシステム (1)
14. マルチプロセッサ用メモリシステム (2)

並列アルゴリズムを実装するための手段・道具として、第 5 回と第 6 回では MPI (Message Passing Interface) と OpenMP の基本概念をそれぞれ学びます。一回の講義時間は 90 分であり、かなり時間が限られていますので、細かいことを説明する時間的余裕はありません。また、受講生ごとにプログラミングの知識や経験には大きな差があります。そこで本講義では、MPI における SPMD (Single Program, Multiple Data) モデルや、OpenMP におけるスレッドの fork-join モデルといった基本的概念や世界観を説明し、詳しい文法や機能などを書籍やインターネットなどでさらに調べるために最低限必要な知識を中心に学びます。また、実装して実機上での性能を計測することを前提とすることで、第 7 回で説明する性能解析手法、性能モデルを使って、実際に計測された性能データをレポート課題で考察することもできるようになりました。

5. まとめ

本稿で述べたように、東北大学大学院情報科学研究科の講義「超高速情報処理論」でスパコン教育利用制度を利用することによって、座学では体験できない実践的な内容を実際のスパコンを使って学べるようになりました。並列処理やプログラミングに関する基礎知識はもちろんのこととして、具体的なソフトウェアのインストール方法、その基本的な使い方、およびスパコン利用方法など、講義のあとにも役に立つ実用的な知識を提供できたものと思います。また、普通の日常生活では使うことのできないスパコンを使えるということで、受講生のやる気を引き出し、維持するうえでも効果的だったのではないかと思います。

本講義でスパコンを利用するのは初めての試みでしたので、実施方法にはまだまだ改善の余地があると考えています。この講義を契機としてスパコンを活用できる学生が一人でも増えるように、今後も講義内容の見直しと改善に努めていくつもりです。また、講義のノウハウの蓄積を通じて、東北大学サイバーサイエンスセンターのスパコン教育利用制度の利用促進にも貢献していきたいと思っています。

[1] eduroam JP, <https://www.eduroam.jp/>.

[2] PuTTY, <https://www.chiark.greenend.org.uk/~sgtatham/putty/>.

[3] WinSCP, <https://winscp.net/>.

[4] 東北大学サイバーサイエンスセンター, “SSH アクセス認証鍵生成サーバの利用方法,” <http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/key.html>.

[報 告]

プレスリリース報告

平成 29 年 5 月 25 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。

東北大・大阪大・NEC・国際航業・エイツー 世界初、地震発生から 30 分以内にスーパーコンピュータを用いて津波浸水被害を 推計するシステムが内閣府「津波浸水被害推定システム」として採用

国立大学法人 東北大学（注 1、以下 東北大学）、国立大学法人 大阪大学（注 2、以下 大阪大学）、日本電気株式会社（注 3、以下 NEC）、国際航業株式会社（注 4、以下 国際航業）、株式会社エイツー（注 5、以下 エイツー）は「津波浸水・被害推計システム」（注 6）を共同で開発し、本システムが、内閣府が運用する「総合防災情報システム」の一機能として採用されることになりました。

本システムは地震発生直後に津波シミュレーションを行い、被害推計を行うものです。南海トラフ域で発生する地震を想定し、地震発生直後に総距離 6,000Km におよぶ太平洋沿岸地域における津波被害の推計を、地震発生から約 30 分以内で行います。30 分以内の短時間で津波浸水被害推計を行うシステムは、世界初となります。

また、システムの耐障害性向上のため、東北大学（仙台）と大阪大学（大阪）の 2 拠点で NEC のスーパーコンピュータ「SX-ACE」（注 7）を使用した同一システムを構築・運用し、24 時間 365 日の稼働を実現します。

これは、科学技術振興機構（JST）戦略的創造研究推進事業（CREST）－「大規模・高分解能数値シミュレーションの連携とデータ同化による革新的地震・津波減災ビッグデータ解析基盤の創出」における基礎研究（注 8）、総務省「G 空間シティ構築事業」（注 9）の一プロジェクトである「G 空間情報（注 10）と耐災害性 ICT を活用した津波減災力強化ーリアルタイム津波浸水・被害予測・災害情報配信による自治体の減災力強化の実証事業」にて開発されたシステムの有効性が確認され、本格導入されるものです。本システムの運用は 2017 年度後半を予定しています。本システムにより、大規模地震発生時の津波による広域的な被害を迅速に推定することが可能となり、災害時における政府の迅速な対応に貢献します。

1. 背景

津波災害発生時における対応は、人・建物の被害分布の把握や交通網を含むライフライン等の被害状況の早期把握（広域被害把握）が必要です。本事業は、2011 年に発生した東北地方太平洋沖地震津波災害の教訓から迅速な災害救援計画・体制の確立をめざした取り組みの一つに位置づけられます。

本システムは、東北大学 災害科学国際研究所（注 11、以下 災害科学国際研究所）越村俊一教授を責任者として、複数の大学・民間事業者が連携し、地震発生時の断層推定から津波による浸水・被害推計、情報提供までを迅速に行う世界最先端の防災システムを開発・構築・運用しているもので、日本の災害対応力強化に貢献しています。

2. システムの概要

地震発生時に東北大学 大学院理学研究科（注 12）とエイツーから提供される断層推定データを使って、災害科学国際研究所と国際航業が高速計算用に改良した「津波浸水・被害推計シミュレーションプログラム」を実行します。これにより、津波による被害推計が可能となります。

これら断層推定から津波浸水被害推計までの処理を自動化し、処理時間を短縮するため、東北大学 サイバーサイエンスセンター（注 13、以下 サイバーサイエンスセンター）と大阪大学 サイバーメディアセンター（注 14、以下 サイバーメディアセンター）と NEC が NEC 製スーパーコンピュータ「SX-ACE」を活用したプログラムの高速化と並列化を行います。

産学の連携および理学・工学・情報科学の学際連携により、従来の手法では数日かかっていた被害推計を、地震発生から 30 分以内で実現します。今回のシステムでは南海トラフ地震を想定し、地震発生直後に総距離 6,000Km にもおよぶ範囲（静岡県から鹿児島県までの沿岸域）において 30m の格子サイズで、津波被害（浸水建物棟数、等）の推計を可能にします。

また、仙台と大阪の 2 拠点で同一システムを構築・運用することにより、24 時間 365 日、無停止での運用を実現します。

3. 各分担・役割について

【津波発生予測】

- ・東北大学 大学院理学研究科 日野亮太教授、太田雄策准教授
- ・エイツー

地震によって沖合で励起された津波の高さ分布（津波波源モデル）を、津波浸水・被害推計シミュレーションの初期条件として提供するために必要となる震源断層モデルの即時推定（地震発生後 10 分以内）を行います。震源断層モデルの即時推定には、気象庁が公表する震源情報に加え、国土交通省 国土地理院と東北大学大学院理学研究科で共同開発を進めてきたリアルタイム GNSS（注 15）観測データによる地殻変動検知技術等を活用します。

【津波伝播・浸水予測モデル、被害推計モデル】

- ・東北大学 災害科学国際研究所 越村俊一教授
- ・国際航業

越村教授は本事業の実施責任者であり、国際航業は越村教授とともに本事業全体の計画・事業推進を行います。

約 6,000Km にわたる静岡県から鹿児島県までの太平洋沿岸域に対し、高精度な津波被害推計を可能とするモデル開発を行います。また、より精緻な被害推計を行うため、地形モデルおよび被害推計システムの開発を行います。

【モデル高速化・並列化、システム開発・実装】

- ・東北大学 サイバーサイエンスセンター
小林広明センター長特別補佐・教授
- ・大阪大学 サイバーメディアセンター 下條真司センター長・教授
- ・NEC

NEC 製「SX-ACE」を利用した「津波浸水・被害推計シミュレーションプログラム」の高速化と大規模並列化を共同で行います。通常時は全国共同利用計算機として運用しているスーパーコンピュータを、津波発生時には、津波シミュレーション専用運用に迅速に切り替え、シミュレーションを実行します。

今回の事業の推進を通じて、ICTを活用した大規模地震津波災害発生時における災害情報の効果的な把握を産学官で連携して行うことにより、災害に対するリスク対応力・危機管理能力の向上に貢献して行きます。

以上

脚注

1. 国立大学法人東北大学（所在地：宮城県仙台市、総長：里見 進）
2. 国立大学法人大阪大学（所在地：大阪府吹田市、総長：西尾 章治郎）
3. 日本電気株式会社（本社：東京都港区、代表取締役 執行役員社長 兼 CEO：新野 隆）
4. 国際航業株式会社（所在地：東京都千代田区、代表取締役社長：土方 聡）
5. 株式会社エイツー（所在地：東京都品川区、代表取締役社長：加地 宏行）
6. 津波浸水・被害推計システム プレスリリース「東北大・NEC・国際航業、大規模地震発生時の津波浸水被害をリアルタイムに予測する実証事業を推進」
http://jpn.nec.com/press/201408/20140801_01.html
7. スーパーコンピュータ「SX-ACE」
<http://jpn.nec.com/hpc/>
 マルチコア型ベクトルCPUを搭載し、世界一のコア性能と世界一のコアメモリ帯域を実現した新しいベクトル型スーパーコンピュータ。一般に多数のプロセッサ利用を必要とするスカラ型並列コンピュータと比較して、少ないプロセッサ数でも、複雑な科学技術計算において高い性能が得られ、並列プログラミングの負担も軽減されるという特徴がある。
8. 科学技術振興機構（JST）戦略的創造研究推進事業（CREST）－「大規模・高分解能数値シミュレーションの連携とデータ同化による革新的地震・津波減災ビッグデータ解析基盤の創出」（代表：越村俊一）
<https://www.jst.go.jp/kisoken/crest/project/44/14531840.html>
9. G空間シティ構築事業
http://www.soumu.go.jp/menu_seisaku/ictseisaku/ictriyou/geo-spatial_ict/g-city/index.html
 G空間情報のICTによる利活用を促進し、経済の成長力の底上げ及び国土の強靱化を図るため、「G空間×ICT推進会議」で提言された実証プロジェクトを実施するもの。「世界最先端のG空間防災モデルの確立」及び「先進的・先導的なG空間利活用モデルの確立」について公募を行い、全国10事業が採択された。
10. G空間情報
https://www.geospatial.jp/gp_front/
 位置情報、または位置情報とそれに関連づけられた情報のこと。GPS（全地球測位システム）等による位置情報の測定、GIS（地理情報システム）によるG空間情報の管理・利活用など、G空間情報とICTを組み合わせることで、位置や地図に関する様々なサービス、システムが実現される。
11. 東北大学 災害科学国際研究所（所長：今村 文彦）
<http://irides.tohoku.ac.jp/>
12. 東北大学 大学院理学研究科（理学研究科長：寺田 眞浩）
<http://www.sci.tohoku.ac.jp>
13. 東北大学 サイバーサイエンスセンター（センター長：曾根 秀昭）
<http://www.cc.tohoku.ac.jp/>
14. 大阪大学 サイバーメディアセンター（センター長：下條 真司）
<http://www.cmc.osaka-u.ac.jp>
15. GNSS：Global Navigation Satellite Systems

[報 告]

プレスリリース報告

平成 29 年 6 月 27 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。

City Wi-Fi Roaming 大学としては世界初参加 － 世界中でつながる次世代ホットスポット (NGH) と eduroam の連携を推進 －

【発表のポイント】

- ・次世代ホットスポット (NGH)^{注1}の実証実験システムを開発し、「City Wi-Fi Roaming トライアル^{注2}」を通じて世界の NGH 基盤に接続しました。これにより公衆無線 LAN の安全性向上(セキュア化)や利便性向上、スマートシティの基盤構築などに貢献します。
- ・携帯電話やプロバイダなどのアカウントを利用することで、訪問先ごとの手続きなしに、世界のフリーWi-Fi を安全かつ自動接続で使える仕組みを提供します。
- ・大学等で広く利用される学術系無線 LAN ローミング基盤 eduroam(エデュローム)^{注3}のアカウントで、公衆無線 LAN を安全に利用できるようになり、ICT を活用した教育・研究環境の拡充に貢献します。

【概要】

東北大学サイバーサイエンスセンターの後藤英昭准教授らの研究グループは、同教員が開設し幹事を務めている「セキュア公衆無線 LAN ローミング研究会 (<http://nghsig.jp/>)」とともに、Wireless Broadband Alliance (WBA)による「City Wi-Fi Roaming トライアル」に参加しました。このトライアルにおいて、世界の通信事業者との共同作業により、次世代ホットスポット (NGH) の導入・普及を促進するための課題整理、技術開発、実証実験等に取り組みます。期間中に国内数か所に設置する NGH 対応基地局でサービス提供するほか、大学等キャンパス無線 LAN との連携を通じて、ICT を活用した教育・研究環境の拡充を目指します。

【詳細な説明】

後藤英昭准教授らの研究グループおよび「セキュア公衆無線 LAN ローミング研究会」では、これまで、次世代ホットスポット (NGH) 関連システムの研究開発や啓発活動のために、NGH テストベッド(実験システム)の開発および運用方法の検討などを進めてきました。今回、このテストベッドが国際的な NGH ハブに接続され、「City Wi-Fi Roaming トライアル」における無線 LAN 相互利用が実現しました。大学として、本トライアルへの参加は、世界初の事例となります。世界の通信事業者との共同作業により、次世代ホットスポット (NGH) の導入・普及を促進するための課題整理、技術開発、実証実験等に取り組むことで、国内外における公衆無線 LAN の安全性向上(セキュア化)や利便性向上、スマートシティの基盤構築などに貢献します。

トライアル参加のもう一つの目的に、学術系無線 LAN ローミング基盤 eduroam(エデュローム)と公衆無線 LAN を連携させる技術・仕様の開発があります。eduroam は、大学や研究機関の間でキャンパス無線 LAN の相互利用を実現し、ネットワーク時代の教育・研究を支えるインフラとして重要性が評価されています。キャンパスを超える、市街地における eduroam 利用のニーズが国内外で大きいものの、従来、その実現はごく一部の都市に限られていました。今回のトライアル参加は、世界の eduroam

関係者の中で初のものであり、世界のフリーWi-Fi との連携を通じて、実用化についての知見を蓄積し、世界の教育・研究基盤の発展・拡充を目指すものです。

【用語説明および参考 URL】

注1 次世代ホットスポット (NGH, Next-Generation Hotspot) :

Wireless Broadband Alliance (WBA) が提唱する、公衆無線 LAN を快適・安全に利用できるようにするための技術や運用ルールなどを取りまとめた仕様。現在は事業者ごとに異なるアカウント(利用者 ID)が必要だったり、盗聴や偽基地局による犯罪に対して無防備だったりする公衆無線 LAN(フリー Wi-Fi を含む)を置き換え、携帯電話並みの使い勝手を実現するもので、ICT 技術を活用する新しい都市「スマートシティ」を支える基盤の一つとしても期待されている。

注2 City Wi-Fi Roaming トライアル :

WBA が主催し、世界各地の都市で提供される公衆無線 LAN を NGH 基盤で結ぶことにより、ひとつのアカウントで相互利用(ローミング利用)できる環境を構築しようとする、世界規模のトライアル。2016 年にニューヨーク、サンフランシスコ、サンノゼ、シンガポールを結ぶ第1回が開催された。第2回目となる 2017 年は、6 月 20 日の World Wi-Fi Day を起点とする 8 月末までの期間、20 程度の都市を結んで開催される。

City Wi-Fi Roaming: <http://worldwifiday.com/city-wi-fi-roaming/>

注3 eduroam (エデュローム) :

欧州で 2003 年に開発が始まり、TERENA(現 GÉANT)で実用化された、教育・研究機関などのキャンパス無線 LAN の相互利用(ローミング)を実現するシステム。現在 89 か国が加盟し、国内では 181 機関が参加している。日本では東北大学が 2006 年に初導入し、eduroam JP の名称で、現在は国立情報学研究所によって運用されている。大学キャンパス内ばかりではなく、日本では主に関東圏、一部の国では空港・駅、市街地無線 LAN にも導入されている。海外では病院への導入事例も多く、近年では初等・中等教育機関への導入も進められるようになり、学術・教育関係の世界標準の基盤となっている。

eduroam (世界): <https://www.eduroam.org/>

eduroam JP : <https://www.eduroam.jp>

【問い合わせ先】

(研究に関すること)

東北大学サイバーサイエンスセンター

担当 後藤英昭

電話 022-795-6090

E-mail nghsig@rd.cc.tohoku.ac.jp

(報道に関すること)

東北大学情報部情報基盤課総務係

電話 022-795-3407

E-mail som@cc.tohoku.ac.jp

[報 告]

平成 29 年 4 月 25 日、以下のコンテンツ提供を開始いたしましたのでご報告いたします。

日本気象協会が本センタースーパーコンピュータ（NEC SX-ACE）を活用して「熱中症ゼロへ」プロジェクト『熱中症セルフチェック』を新たに開発

一般財団法人日本気象協会は、名古屋工業大学と東北大学と共同で研究した熱中症リスクを評価する技術を応用し、個人ごとの熱中症の危険度を簡易的に診断する『熱中症セルフチェック』を開発しました。

本コンテンツの提供は、「熱中症ゼロへ」のウェブサイトにて 2017 年 4 月 25 日（火）から開始されました。

この『熱中症セルフチェック』の運用にかかわる基礎的技術の開発には、本センターのスーパーコンピュータ SX-ACE が活用されました。

『熱中症セルフチェック』詳細ページ

(PC・スマートフォン対応)

<https://www.netsuzero.jp/selfcheck>

[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. 243)

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)

コンパイラのバージョンアップについて (No. 244)

2017 年 7 月 18 日に FORTRAN2003/SX コンパイラをバージョンアップいたしました。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	FORTRAN2003/SX	Rev. 051	Rev. 060	FORTRAN2003/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/20170718/F2003_rev060.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)

— 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

最近、連勝が29でストップしてしまいましたが、藤井聡太四段の快進撃は大きなニュースになりました。このニュースを見て、私も「いつか時間と心に余裕ができれば将棋を勉強してみようかな」と少しだけ考えていたのを思い出しました。今でも基本的なルールくらいは知っているつもりですが、飛行機の機内で提供されている将棋ゲームをたまにやってみると、初級モード相手ですら歯が立たないという、まったくもって不甲斐ない腕前です。そんな、旗色が悪くなるとすぐにゲームを終了してしまう私から見ると、10時間以上も指し続けるプロの将棋というのは想像を絶する厳しい舞台です。そんな舞台で勝ち続けるのはもちろん素晴らしい快挙ですが、中学生の藤井四段が深夜遅くまで将棋をして次の日の学校や勉強は大丈夫だろうかと余計な心配までしてしまいました。

さて、早いもので今年もすでに7月、ふと気付けばもう一年の半分終わってしまいました。今年1月に異動してきて以来、知らないことばかり、戸惑ってばかり、失敗ばかりの日々が続いていますが、周りの方々に支えていただくことで、失敗は多くても致命的な状況には何とか陥らずに今日まで過ごすことができました。そのような果報者の私が半年過ぎて改めて思うことは、組織力、チームワークの大切さです。上述のような棋力の私が語るのはおこがましいのですが、きっと将棋と同じです。たとえ一つ一つの駒は大した戦力ではなくとも、様々な駒がそれぞれの役割を果たしていけばチームとして大きな力を発揮できることを、今更ながら体験学習した半年でした。今の私はまだ「歩」くらいの貢献しかできていないかもしれませんが、いつかは「飛車」「角行」として活躍できるように、これからも日々精進してまいります。

今後ともご指導、ご支援のほどよろしくお願いいたします。(滝沢寛之)

天気予報では毎年猛暑猛暑と言っている気がしますが、今年は「スーパー猛暑」とのこと。仙台の夏は短いとはいえ、どれほどスーパーなのか…想像しただけで夏バテになりそうです。個人的には楽天の試合のようなアツさなら大歓迎なのですが、梨田監督が率いた球団はいずれも就任2年目に優勝しているそうなので、今年がその2年目になる楽天もこの勢いのまま優勝！と期待しています。さて、7月はオープンキャンパスの時期でもあり、東北大学では今年も7月25日、26日と開催されます(この号がお手元に届く頃には終了しているかもしれません)。私がセンターに来た当初(約10年前)は、2日間の来場者合計が100人程だったと記憶しています。が、今や、10倍の1000人超え。昨年にはいたっては2日間で1760人の方が見学に来てくださり、受付も大賑わいで嬉しい悲鳴状態でした。農学部が近くの新キャンパスに移転してきましたし、今年もどうなるのかとても楽しみです。オープンキャンパス後も随時見学が可能ですので、是非サイバーサイエンスセンターにお立ち寄りください。(K.N)

情報部情報基盤課スタッフ異動のお知らせ

2017.7.1 付け

〔転入等〕

大川 俊治	情報基盤課長〔情報部長〕(情報推進課長から)
伊藤 昭彦	総務係長(医工学研究科 総務係長から)
山口 貴大	会計係事務一般職員(工学部・工学研究科 経理課外部資金第一係から)
齋藤 信	ネットワーク係技術専門職員(情報推進課 事務情報係技術専門職員から)
加茂 博史	情報セキュリティ係長(情報推進課 情報セキュリティ係長から)
小野崎 伸久	情報セキュリティ係主任(情報推進課 情報セキュリティ係主任から)
北澤 秀倫	情報セキュリティ係技術一般職員(ネットワーク係から)

〔転出〕

大沼 忠弘	情報基盤課長	(情報推進課長へ)
佐藤 恵美子	総務係長	(仙台高等専門学校 総務課総務係長へ)
村山 一弘	会計係主任	(花山青少年自然の家 管理係主任へ)



青葉山新キャンパス

SENAC 編集部会

滝沢寛之 水木敬明 後藤英昭 江川隆輔
伊藤昭彦 吉田貴子 大泉健治 小野 敏
斉藤くみ子

平成29年7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 ※	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			

※ 2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	lx	利用ノード数
アプリ ケーション	1	なし	128GB		a
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

目次

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.3 2017-7

[共同研究成果]

有機-金属界面での電子準位接続の精密決定に向けた GW space-time コードの高速化	柳澤 将	1
民間航空機開発における大規模 CFD 解析の適用	前田 一郎	8

[研究成果]

HPGMG-FV を用いた SX-ACE の性能評価	江川 隆輔・磯部 洋子 加藤 季広・小松 一彦 滝沢 寛之・小林 広明 撫佐 昭裕	15
----------------------------------	--	----

[お知らせ]

サイバーサイエンスセンター講習会（夏季、秋季開催分）のご案内	19
--------------------------------------	----

[利用相談室便り]

平成 29 年度利用相談について	21
------------------------	----

[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＞ 情報科学研究科 超高速情報処理利用報告	滝沢 寛之	23
---	-------	----

＜プレスリリース報告＞

東北大・大阪大・NEC・国際航業・エイター世界初、地震発生から 30 分以内にスーパーコンピュータを用いて津波浸水被害を推計する システムが内閣府「津波浸水被害推定システム」として採用	28
--	----

City Wi-Fi Roaming 大学としては世界初参加

ー 世界中でつながる次世代ホットスポット（NGH）と eduroam の連携を推進 ー	31
---	----

＜成果報告＞

日本気象協会が本センタースーパーコンピュータ（NEC SX-ACE）を活用して 「熱中症ゼロへ」プロジェクト『熱中症セルフチェック』を新たに開発	33
---	----

[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.243)	34
コンパイラのバージョンアップについて (No.244)	34

執筆要項	35
------------	----

スタッフ便り	36
--------------	----