

**[利用相談室便り]****テクニカルアシスタントの自己紹介****佐々木 大輔 (ささき だいすけ)****東北大学情報部情報基盤課共同研究支援係 技術一般職員**

担当は毎週月曜日 14～16 時となっております。主にスーパーコンピュータの運用と関連するサービスに関する仕事に従事しています。

2015 年 2 月からベクトル型のスーパーコンピュータ SX-ACE の運用を開始し、約 3 年経過しました。現在運用中のスーパーコンピュータは利用可能なノード数が以前に比較して大幅に増加し、CPU も 4 つのコアを持つようになりました。スーパーコンピュータの性能を引き出すためには、ベクトル化、並列化を行うことが必要となっております。センターでは基本的な UNIX に関することから、スーパーコンピュータの利用法やチューニング技法に至るまでの多くの講習会を行っておりますので、ご活用いただき、性能を最大限に発揮できるようにしていただければ幸いです。スーパーコンピュータを利用する上で質問等ありましたら、利用相談室にご相談に来ていただくことも可能です。知識不足なところも多々あるかと思いますが、ご相談内容にお答えできるよう努めていきます。今後とも、よろしく願いいたします。

**齋藤 敦子 (さいとう あつこ)****東北大学情報部情報基盤課共同研究支援係 技術一般職員**

センター技術職員の齋藤敦子です。火曜日 (14～16 時) の利用相談を担当しています。主な担当分野は、三次元可視化システム、スーパーコンピュータ、並列コンピュータの利用についてです。

本センターでは、シミュレーション結果を可視化する環境として「三次元可視化システム」を提供しています。AVS/Express での可視化コンテンツ作成や、7,680×3,240 画素の大画面ディスプレイでの迫力ある三次元立体視を行うことができます。三次元可視化システムは、利用相談室隣の可視化機器室に設置しています。見学も可能ですので、ご興味のある方、利用検討中の方など、ぜひお声掛けください。また、具体的な利用にあたり、AVS/Express による可視化コンテンツ作成の技術的な相談も受け付けています。少しでもみなさまのお手伝いできれば幸いです。どうぞお気軽にご相談ください。

**山崎 馨 (やまざき かおる)****東北大学 金属材料研究所 特任助教**

金属材料研究所特任助教の山崎馨と申します。水曜日の 15 時から 17 時を担当しています。昨年度に引き続き、利用相談員として Gaussian 等の量子化学計算パッケージを使った理論計算を中心に皆様の研究のお手伝いをさせていただきます。

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

(1) どのような物理量を計算するのか、またそれはなぜか。

研究の背景も含めて異分野の門外漢が容易に理解できる説明を行えること。

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

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

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

**森谷 友映 (もりや ともあき)**

**東北大学情報部情報基盤課共同研究支援係 技術一般職員**

今年度、木曜日(14~16時)の利用相談員を担当させて頂くことになりました、森谷と申します。現在の主な業務として、スーパーコンピュータ(SX-ACE)、並列コンピュータ(LX406Re-2)の環境整備、ストレージの管理、プログラムのチューニング仕事に従事しています。

サイバーサイエンスセンター内では、A0サイズまでの光沢紙・ソフトクロス紙対応の大判カラープリンタの利用、大画面ディスプレイ(50インチLEDモニターを12面)を設置し、計算結果の数値データを三次元可視化するシステムも利用することができます。また、各言語のプログラミング本、各種マニュアル、講習会で行われた資料の閲覧や科学的、工学的分野に特化したアプリケーションソフト提供もしております。

上記に記載した施設内の利用方法、並びに研究室のワークステーション環境から大規模な計算を実行するための取っ掛かりとして、利用相談室へお気軽にご相談頂ければと思います。利用相談員として、まだまだ未熟な部分もありますが、少しでも利用者のお力になればと思っています。1年間よろしくお願いたします。

**小松 一彦 (こまつ かずひこ)**

**東北大学サイバーサイエンスセンター高性能計算技術開発(NEC)共同研究部門 准教授**

今年度もサイバーサイエンスセンター利用者相談室で利用相談員を担当させていただくことになりました。金曜日14~16時の担当で、担当分野はスーパーコンピュータ(SX-ACE)、並列コンピュータ(LX 406Re-2)の利用方法全般、およびアプリケーションの高速化全般になります。

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

山下 毅 (やました たけし)

東北大学 情報部情報基盤課共同利用支援係 技術専門職員

担当分野は高速化 (ベクトル化、並列化)、およびアプリケーションの利用に関することです。相談時間については事前にご相談ください。

最近では研究室のワークステーションクラスのマシンでも、マルチコア CPU と大規模メモリを使用して数値計算を行えるようになってきました。24 コア×2CPU、最大メモリ 1TB というハイエンドな製品もあるようです。

当センターでサービスを行っているベクトル型スーパーコンピュータ SX-ACE は、MPI ライブラリによる並列化を行えば、最大 1,024 ノード (4,096 コア) での並列実行と 60TB (61,440GB) という広大なメモリ容量を使用することが出来ます。しかしながら、ベクトルマシンである SX-ACE の性能を最大限に引き出すためには、プログラムコードのチューニングが必須となります。研究室のマシンで動かしているプログラムコードをそのまま SX-ACE でコンパイル&実行しても、その性能が発揮されることはまれです。研究室のマシンで開発されたコードを SX-ACE で実行し、「スパコンって言っても、案外遅いなあ。」という経験がある方は、ぜひコードの高速化についてご相談ください。