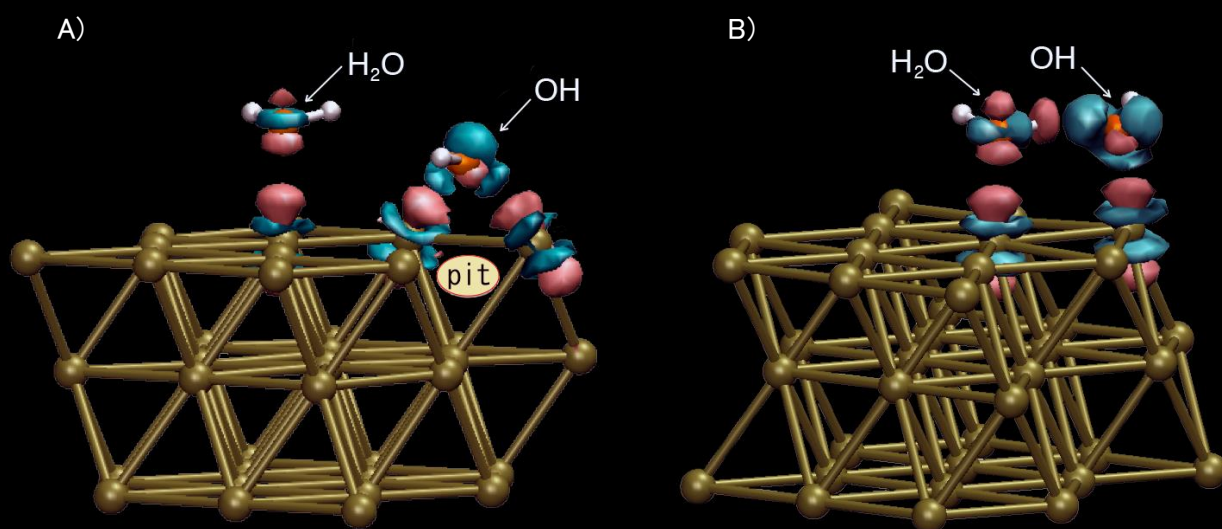


計算材料学センターだより



CONTENTS

- ・ コンパイラのバージョンアップ
- ・ スーパーコンピュータでの Fortran および C/C++プログラム実行の手引き
- ・ SSH 接続手順の簡略化方法
- ・ SC13 に本センター職員が参加
- ・ 金属材料研究所第 125 回講演会で本センター職員が発表
- ・ きんけん一般公開 2013 に本センターが参加

CCMS
NEWS
20

表紙の図について

■ 燃料電池の白金電極上での酸素還元反応における表面欠陥と水分子挙動

燃料電池自動車は、その本格的な量産車の普及のためには、さらなるコストダウンが求められています。電極上での電子移動反応、特に酸素還元反応を高効率にする必要があります。その反応過程をより現実に近い状況で見るために、溶媒の水と電極としての白金にESM法を用いて電場を印加した状態を作りだして第一原理分子動力学シミュレーションを行いました。Pt(111)面に電場印加した時に、電子密度がどのように変化するかを示したのが表紙の図のA)とB)です。白金表面から1原子を抜いたA)の欠陥表面では、OHが欠陥位置に吸着してPt原子上に吸着した水分子と相互作用がなく水分子を分極できません。それに対し、B)に示した平滑なPt(111)面の方では、吸着OHと水分子が水素結合で相互作用できるように配置しているため水分子が分極し、活性が高いことが確認されました。赤色部分は電子が増えているところ、青色部分は電子が減っているところです。

■ First principles molecular dynamics simulation for water dissociation on flat and defect Pt surfaces

First principles molecular dynamics has been used to simulate the interface between liquid water and the flat (111) or defective Pt surfaces. The defective Pt surface contains an atom pit on the Pt (111) surface. Although water dissociation was observed on the flat surface under the electric bias, it was not observed even under the stronger bias on the pitted surface. The adsorbed OH promotes water dissociation on the flat surface because it makes a hydrogen bond with a water molecule adsorbed on the Pt top site, resulting in the OH bond polarization of the water molecule (Figure B)). On the pitted surface, however, water dissociation is prohibited because of an unfavorable configuration of a hydrogen bond between the adsorbed OH on the bridge site and the adsorbed H₂O on the top site (Figure A)). Surface morphology and hydrogen bonding, therefore, have a significant impact.

□ Y. Qian, I. Hamada, M. Otani, T. Ikeshoji, *Catalysis Today*, **202**, 163–167 (2013).

コンパイラのバージョンアップ

スーパーコンピュータSR16000 で以下のコンパイラをバージョンアップしました。

1. 日立最適化 FORTRAN90

日立最適化 FORTRAN90 を 03-02/B にバージョンアップしました。バージョン 03-02/B では主に以下のような機能拡張を行いました。

- IEEE 形式の 4 倍精度実数型と 4 倍精度複素数型をサポート
- 組み込み関数引用に関して、最適化 FORTRAN90 スカラ数学関数を引用するかどうかを指定する機能をサポート
- 並列実行時にスタックオーバーフローを検出する機能をサポート

2. XL Fortran

XL Fortran を 14.1 にバージョンアップしました。バージョン 14.1 では主に以下のような機能拡張を行いました。

- OpenMP 3.1 の完全サポート
- Fortran 2008 プログラミング言語の最新標準に対する部分的サポート
- コンパイル時間およびスケーラビリティの改善
- アプリケーションのパフォーマンスを改善できる条件を識別するうえで役立つ診断レポートの機能拡張
- デバッグ最適化コードの改善
- コンパイラ・オプション、ディレクティブおよび組み込み関数の追加および拡張

3. XL C/C++

XL C/C++ を 12.1 にバージョンアップしました。バージョン 12.1 では主に以下のような機能拡張を行いました。

- OpenMP 3.1 の完全サポート
- C プログラミング言語の最新標準である C11 に対する部分的サポート
- C++ プログラミング言語の最新標準である C++11 に対する追加サポート
- コンパイル時間およびスケーラビリティの改善
- アプリケーションのパフォーマンスを改善できる条件を識別するうえで役立つ診断レポートの機能拡張
- デバッグ最適化コードの改善
- コンパイラ・オプション、ディレクティブおよび組み込み関数の追加および拡張

スーパーコンピュータでの Fortran および C/C++プログラム実行の手引き

スーパーコンピュータSR16000 で Fortran および C/C++のプログラムを実行する方を対象に利用の手引きを作成しました。ログインの方法、ファイルの転送方法、コンパイルの方法(コンパイルコマンドと主なオプション)、利用可能なライブラリとその利用方法、プログラムの実行方法について以下の URL に掲載しましたので、ご覧ください。

SR16000 での Fortran プログラムの実行方法:

<http://www-lab.imr.edu/~ccms/Jpn/document/SR16000-fortran.pdf>

SR16000 での C/C++プログラムの実行方法:

<http://www-lab.imr.edu/~ccms/Jpn/document/SR16000-C.pdf>

SSH 接続手順の簡略化方法

本所ネットワーク外部からスーパーコンピューティングシステム(以下、「スパコンシステム」という)のフロントエンドノードおよび TSS ノードに接続するためには、SSH リレーサーバー (cms-ssh.imr.edu) を経由して接続します。この 2 段階の SSH 接続手順を簡略化する方法を紹介します。

1. Windows

Tera Term のマクロを用いることで、接続手順を簡略化することができます。本センターではホスト固定版とホスト名入力版を作成しました。以下の URL に詳細な手順を掲載しましたので、ご覧ください。

http://www-lab.imr.edu/~ccms/Jpn/basic/outside_win.php#win_macro

1.1 前提条件

- SSH プロトコルバージョン 2 に対応した Tera Term がインストールされていること

1.2 Tera Term のマクロの作成

ホスト固定版ではマクロに記述したホストに接続し、ホスト名入力版では Tera Term 起動時に入力したホストに接続します。ホスト名入力版の Tera Term のマクロを以下に示します。マクロは前述の URL からダウンロードできます。設定内容のうち *username* と *C:¥*****¥id_rsa* をそれぞれスパコンシステムのユーザー ID と秘密鍵の保存場所に変更します。

ホスト名入力版

```
=====
user='username'
keyfile='C:¥*****¥id_rsa'
=====

hostname1='cms-ssh.imr.edu'
message=' Input host name'#13#13
strconcat message 'super1, super2, super3t, super4t'#13
strconcat message ' app1, app2, app3t, app4t'
inputbox message 'Input host name'
hostname2=inputstr
hostname1_prompt='>'
passwordbox 'Enter passphrase ' 'Enter passphrase'
sprintf2 connectstr1 '%s:22 /ssh /auth=publickey /user=%s /keyfile=%s' hostname1 user keyfile
strconcat connectstr1 ' /passwd="'
strconcat connectstr1 inputstr
strconcat connectstr1 '"'
connect connectstr1
wait hostname1_prompt
sprintf2 connectstr2 'ssh %s.imr.edu' hostname2
sendln connectstr2
```

変更後、ファイル名を xxx.ttl のように拡張子を ttl として保存します (例: autologin.ttl)。

マクロを作成後、tppmacro.exe のショートカットを作成し、マクロをリンクします。作成したショートカットのプロパティ

を開き、リンク先に先ほど作成した `ttl` ファイルの場所を追記します。ファイルの場所は、それぞれ「”」と「”」で囲み、間にスペースを入れます（例：“D:¥Program Files (x86)¥teraterm¥¥ttpmacro.exe” ”D:¥user01¥autologin.ttl”）。

1.3 接続の確認

作成したショートカットからマクロを起動し、接続したいホスト名を入力して「OK」をクリックします。次に、「Enter Passphrase」にパスワードを入力し、「OK」をクリックします。最後に、パスワードを入力し、プロンプトが表示されればログイン成功です。

2. Mac および Linux

`ssh_config` ファイルに `ProxyCommand` を設定することで、接続手順を簡略化することができます。以下の URL に詳細な手順を掲載しましたので、ご覧ください。

http://www-lab.imr.edu/~ccms/Jpn/basic/outside_mac.php#mac_login_config

2.1 前提条件

- SSH プロトコルバージョン 2 を利用していること
- Mac OS では OpenSSH 5.4 以降がインストールされていること
- Linux では OpenSSH 5.3 以降がインストールされていること

2.2 `ssh_config` の設定

`ssh_config` ファイルの設定例を前述の URL のページよりダウンロードし、`~/.ssh/config` に保存します。設定内容のうち `username` と `~/.ssh/keys/id_rsa` をそれぞれスパコンシステムのユーザーID と秘密鍵の保存場所に変更します。

```
#=====#
Host cms-ssh super* app*
    User username
Host cms-ssh
    HostName cms-ssh.imr.edu
    IdentityFile ~/.ssh/keys/id_rsa
#=====#
Host super* app*
    ProxyCommand ssh cms-ssh -W %h:%p
Host super1 super1.imr.edu
    HostName super1.imr.edu
Host super3t super3t.imr.edu
    HostName super3t.imr.edu
Host app1 app1.imr.edu
    HostName app1.imr.edu
Host app3t app3t.imr.edu
    HostName app3t.imr.edu
```

`super2.imr.edu` や `super4t.imr.edu` などのホスト名も同様に設定することができます。

変更後、保存し、以下のコマンドで `~/.ssh/config` のパーミッションを変更します。

```
[username@machine]$ chmod 600 ~/.ssh/config
```

2.3 接続の確認

以下のコマンドでスパコンシステムにログインできることを確認します。

```
[username@machine] $ ssh super1
Enter passphrase for key '/home/username/.ssh/keys/id_rsa': <パスワード>
username@super1.imr.edu's password: <パスワード>
```

プロンプトが表示されれば、ログイン成功です。

```
[username@super1 ~] $
```

同様に、super3t や app1 など ~/.ssh/config の Host の行で設定しているエイリアス名を入力することでログインできます。

2.4 その他

scp コマンドや sftp コマンドも ssh_config ファイルの設定を利用し、ファイル転送を行うことができます。また ssh のオプションなども通常と同様に使用できます。

scp コマンド:

```
[username@machine]$ scp test.f super1:/home/username/
```

sftp コマンド:

```
[username@machine]$ sftp super1
```

SC13 に本センター職員が参加

2013年11月17日(日)~22日(金)にColorado Convention Center(米国コロラド州)で行われました標記カンファレンス(Supercomputing Conference 2013)に、毛利哲夫センター長と大滝大河技術一般職員が参加しました。

SC は毎年行われるハイパフォーマンスコンピューティング・ネットワークング・ストレージ分野における世界最大のイベントです。このカンファレンスは各国企業、大学、研究所からの発表や展示で構成されています。今回は335のブース出展、10,000名を超える参加者がありました。東北大学ではサイバーサイエンスセンター、流体科学研究所、金属材料研究所が合同でブースの展示を毎年行っています。今回は本センターの紹介、スーパーコンピューターを使った研究成果や本所独自開発の全電子混合基底法第一原理シミュレーションプログラム TOMBO (TOhoku Mixed-Basis Orbitals *ab-initio* program)に関するパネル展示を行いました。



SC13での展示と大滝大河技術一般職員

金属材料研究所第 125 回講演会で本センター職員が発表

2013 年 5 月 22 日(水)、23 日(木)に行われました標記講演会で、五十嵐伸昭技術専門職員が下記のポスター発表を行いました。

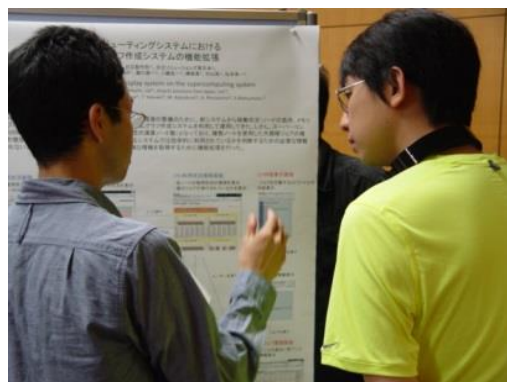
「スーパーコンピューティングシステムにおけるリアルタイムグラフシステムの機能拡張」

○ 五十嵐伸昭、一関京子、大滝大河、藤川源一*1、八鍬友一*2、勝倉真*2、村山英*2、松本秀一*2

*1(株)日立製作所、*2(株)日立ソリューションズ東日本

概要:

スーパーコンピューティングシステムの効率的な運用を行うために、ノードの負荷、メモリー使用量、動作プロセス一覧を Web ブラウザからリアルタイムで確認できるようにしていましたが、より詳細な状況を把握するため、各ノードとキューの対応、ジョブの詳細な情報を表示できるように機能拡張を行いました。また、個々のジョブについての計算資源の利用状況も Web ブラウザで表示し、容易にジョブの状況を把握できるように機能追加を行いました。

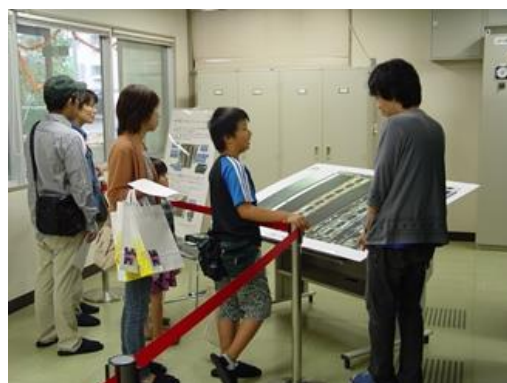


五十嵐伸昭技術専門職員(左)のポスター発表

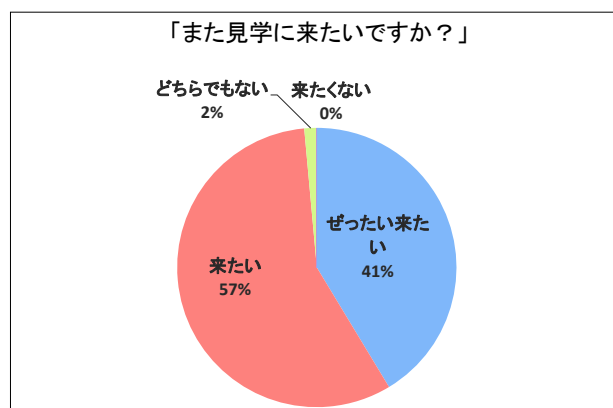
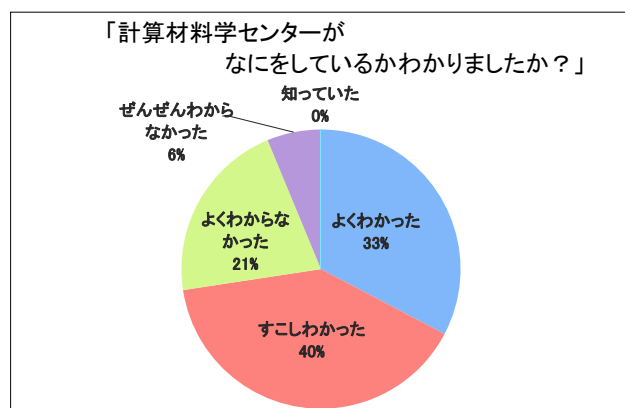
きんけん一般公開 2013 に本センターが参加

2013 年 10 月 12 日(土)、13 日(日)に行われました標記一般公開に、本センターは計算材料科学研究拠点と合同で参加しました。天候が良くなかったため、前回よりも全体での来場者数は減少したとのことでしたが、本センターへは前回より増加し、両日合わせて小学生だけで約 500 名の来場がありました。

本センター来場の小学生を対象にアンケートを行い、以下の回答結果が得られましたので、興味を持って見学していただけたと思います。



来場者へ説明する丹野航太技術一般職員(右)



計算材料学センターだより No.20

2013年12月17日(火)発行

17th Dec. (Tue), 2013

東北大学金属材料研究所 計算材料学センター
〒980-8577 宮城県仙台市青葉区片平二丁目1番1号
電話 (022) 215-2411 FAX (022) 215-2166

URL <http://www-lab.imr.edu/~ccms/>
E-mail ccms-adm@imr.tohoku.ac.jp



Center for Computational Materials Science, IMR,
Tohoku University
2-1-1 Katahira, Aoba-ku, Sendai, 980-8577, Japan
Tel: +81-22-215-2411 (DIAL-IN), FAX: +81-22-215-2166

CCMS
Supercomputing system