

[2020]九州大学情報統括本部年報 : 2020年度

<https://hdl.handle.net/2324/4741344>

出版情報 : 九州大学情報統括本部年報. 2020, pp.1-, 2021-12-01. Information Infrastructure Initiative, Kyushu University

バージョン :

権利関係 :



第22章 HPC 事業室

22.1 科学技術計算サービスに関する事項

- (1) スーパーコンピュータシステム ITO による大規模計算サービスを提供した。
(参考資料 1、2、3)
- また、下記の大学には、包括契約に基づく計算サービスを提供した。
(参考資料 4)
- 福岡大学（平成 17 年度より継続）
ITO サブシステムA（以下 ITO-A）：4 ノード（占有）
 - 長崎大学（平成 18 年度より継続）
ITO-A：4 ノード（共有）
ITO サブシステムB（以下 ITO-B）：1 ノード（共有）
ITO 基本フロントエンド（以下基本 FE）：M プラン
 - 九州工業大学（平成 20 年度より継続）
ITO-B：16 ノード（共有）
基本 FE：L プラン
 - 山口大学（平成 20 年度より継続）
ITO-A：6 ノード（占有）
ITO-B：4 ノード（共有）
基本 FE：M プラン
ITO 大容量フロントエンド（以下大容量 FE）：M プラン
 - 福岡工業大学（令和 2 年度より利用開始）
ITO-A：8 ノード（占有）
 - 広島大学（令和 2 年度より利用開始）
ITO-A：8 ノード（占有）
ITO-B：2 ノード（共有）
- (2) GUI で使用可能なソフトウェアを大容量メモリ・長時間実行する課題に対して、フロントエンドを提供し、131 件の課題から利用され予約数は計 3134 回であった。
(参考資料 3)
- (3) 理化学研究所の京コンピュータシステムを中心とする、革新的ハイパフォーマンスコンピューティングインフラ (HPCI) に、システム構成機関として参画しており、共用計算資源の提供および、他のシステム構成機関と協力してシングルサインオン環境の運用を行った。特に、2019 年 8 月からの京コンピュータの運用停止にともない利用の継続ができなくなった研究者に対して、第 2 階層構成機関として多数の研究課題受入れを行い、計算科学の推進に寄与した。HPCI 全体で 30 申請課題が採択された。
- (4) 平成 22 年度から文部科学省の「全国共同利用・共同研究拠点」に採択されたのを受け、「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」（ネットワーク型）に構成拠点として参加し、他の構成

拠点と協力して、共同研究プロジェクト公募を実施した。九州大学情報基盤研究開発センター関係で 10 申請課題が採択された。

(参考資料 5)

(5) 本センターおよび学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点で平成 28 年度より実施する、JHPCN 萌芽研究の公募事業について公募を行った。

(6) 九州大学情報基盤研究開発センター独自の先端的計算科学研究プロジェクトを募集した（研究期間：2021 年前期と後期の 2 期）。

審査委員会の審査を経て 4 申請課題（前期：3、後期：1）が採択された。

(参考資料 6)

参考 URL：2020 年度後期先端的計算科学研究プロジェクト公募のお知らせ

<https://www.cc.kyushu-u.ac.jp/scp/doc/service/project/Project.pdf>

22.2 利用者支援・利用促進サービスに関する事項

(1) 利用者からの問い合わせ 649 件に対し、メーカーと協力して調査し回答した。

(2) 研究用計算機システム利用法に関する講習会等の利用者支援活動をオンラインにて実施した。令和 2 年度からは、データサイエンス分野の研究推進及び利用者のさらなる裾野拡大のため、「GPU ミニキャンプ」を新たに開始した。

(参考資料 7)

(3) 情報基盤研究開発センターの研究用計算機システムの利用促進・普及活動として、オンライン開催となった以下のイベントに当センター紹介のためのブースを出展した。

- JHPCN 第 12 回シンポジウム（7 月 9 日）
- 第 7 回 HPCI 成果報告会（10 月 29 日 ～ 10 月 30 日）
- SC20（11 月 16 日 ～ 11 月 19 日）

(4) 平成 23 年度より開始した情報基盤研究開発センター民間利用サービスとして、13 申請課題が採択された。

(参考資料 6)

(5) 情報基盤研究開発センターの研究用計算機システム運用スケジュールや講習会、フォーラム等のイベント開催のような即時性が求められる案件について、以下の通り電子メールによる「研究用計算機システムニュース」を配信した。

- 発行回数 21 回（No. 482～ No. 502）

また、同じ内容を以下の情報基盤研究開発センター Web ページで公開した。

<https://www.cc.kyushu-u.ac.jp/scp/>

(6) 利用者が研究成果を Web 形式で報告可能な、成果報告 Web システムを導入し、研究業績リストを Web ページに公開した。





<https://www.cc.kyushu-u.ac.jp/scp/report/result/>

(7) データサイエンス分野の研究推進や国際共同研究の推進等のための共同研究制度およびスーパーコンピュータシステムを講義に活用するための講義利用制度を提供した。

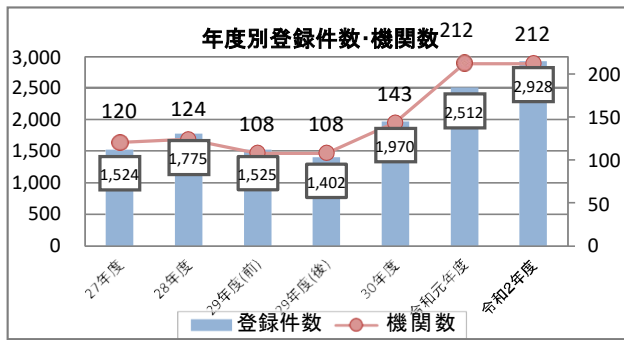
- 共同研究(アカデミック) 1件
- 重点支援制度 14件
- トライアルユース 16件

(参考資料6)

令和 2 年度研究用計算機システムの概要

スーパーコンピュータシステムIT0			
サブシステムA	サブシステムB	基本フロントエンド	大容量フロントエンド
			
富士通株式会社 PRIMERGY CX2550 M4 PRIMERGY CX2560 M4 ピーク性能 : 6.91PFLOPS 総主記憶容量 : 384TB 総 CPU コア数 : 72,000	富士通株式会社 PRIMERGY CX2570 M4 ピーク性能 : 3.05PFLOPS (CPU : 0.34PFLOPS, GPU : 2.71PFLOPS) 総主記憶容量 : 57.19TB 総 CPU コア数 : 4,608	HPE HPE DL380 Gen10 ピーク性能 : 0.42PFLOPS 総主記憶容量 : 62.28TB 総 CPU コア数 : 5,760	SGI SGI UV 300 ピーク性能 : 49.6TFLOPS 総主記憶容量 : 48TB 総 CPU コア数 : 1,408
磁気ディスク : 24.64PB (実効)			
平成 30 年 1 月導入	平成 29 年 10 月導入		
令和 5 年 2 月まで運用予定			

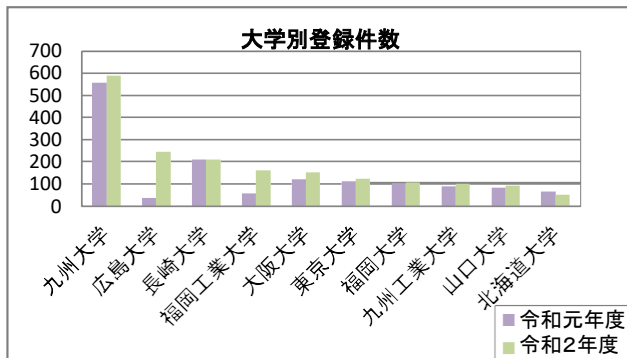
令和 2年度 利用登録件数



年度別登録数・機関数

年度	登録件数	機関数
27年度	1,524	120
28年度	1,775	124
29年度(前)	1,525	108
29年度(後)	1,402	108
30年度	1,970	143
令和元年度	2,512	212
令和2年度	2,928	212

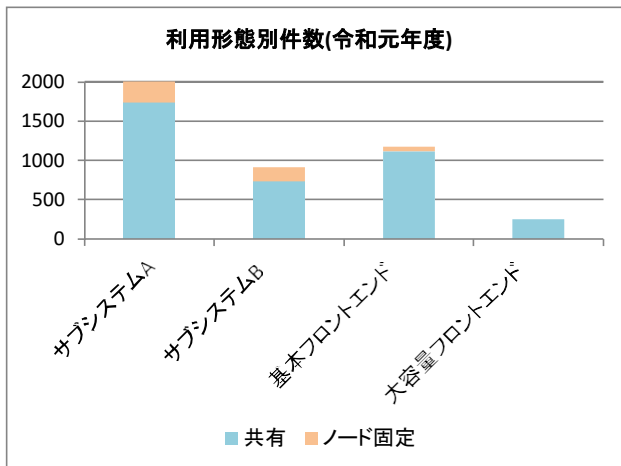
大学別登録件数



大学別登録件数

順位	大学名	登録件数	
		令和元年度	令和2年度
1	九州大学	558	591
2	広島大学	35	246
3	長崎大学	211	209
4	福岡工業大学	58	160
5	大阪大学	120	152
6	東京大学	113	122
7	福岡大学	103	106
8	九州工業大学	89	99
9	山口大学	83	90
10	北海道大学	64	51

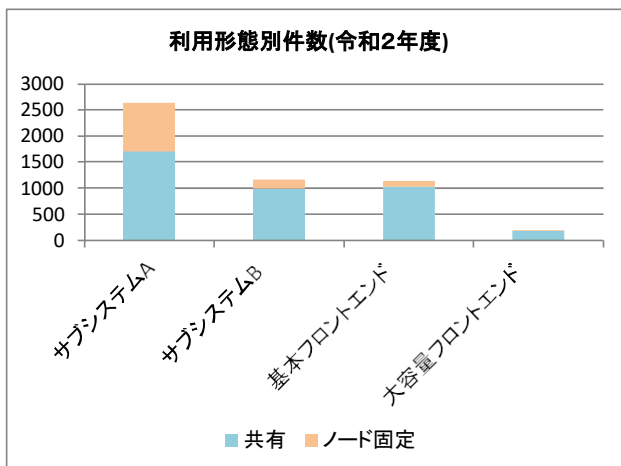
利用形態別件数(令和元年度)



利用形態別件数(令和元年度)

システム	共有	ノード固定
サブシステムA	1732	540
サブシステムB	733	176
基本フロントエンド	1117	57
大容量フロントエンド	249	0

利用形態別件数(令和2年度)

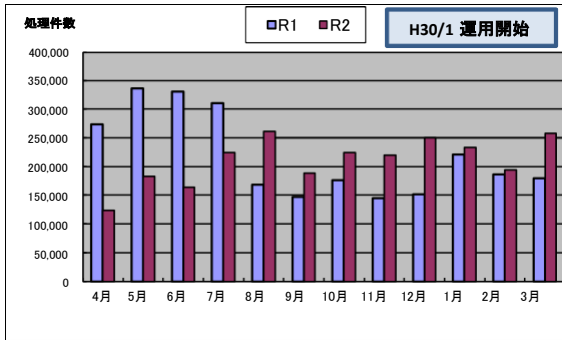


利用形態別件数(令和2年度)

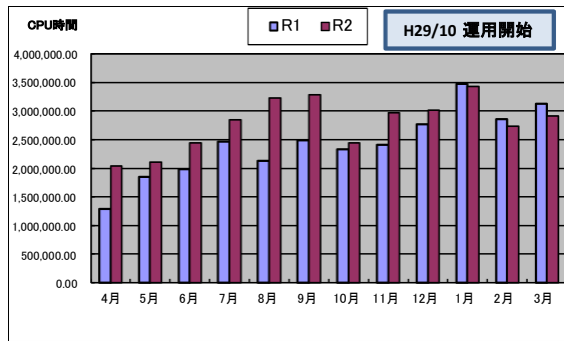
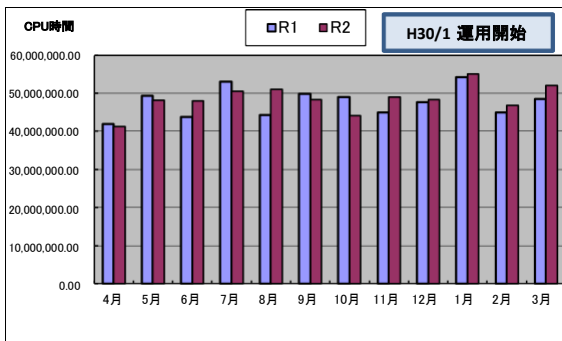
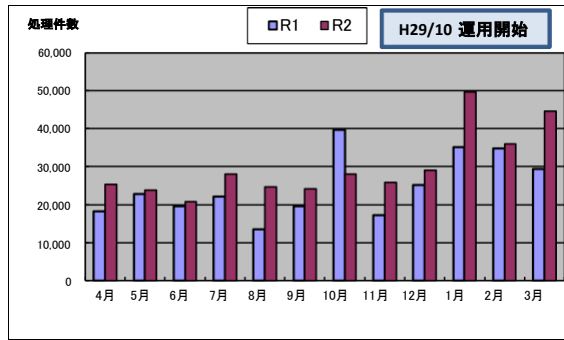
システム	共有	ノード固定
サブシステムA	1703	936
サブシステムB	995	172
基本フロントエンド	1027	106
大容量フロントエンド	185	4

令和2年度研究用計算機利用状況

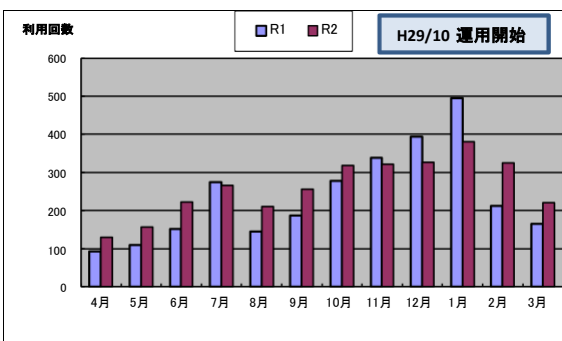
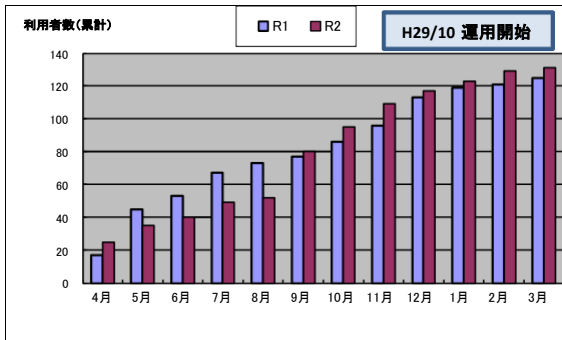
1-1. ITO サブシステムA
FUJITSU PRIMERGY CX400M4



1-2. ITO サブシステムB
FUJITSU PRIMERGY CX400M4



1-3. ITO フロントエンド
基本 : HPE DL380 Gen10
大容量 : SGI UV 300



2020 年度九州大学情報基盤研究開発センター
研究用計算機システム包括契約のご案内

本センターでは、各大学向けに研究用計算機システムの包括契約サービスを提供しております。通常の利用申請とは異なり、代表者の方が事前に必要な数のアカウントを受け取り、必要に応じて個々の利用者に交付することができます。

利用プラン

・ノード固定タイプ（前期分）

割り当てられた計算機資源を準占有的にご利用いただけます。

資源が利用されていない時間に、他ユーザのごく短時間のジョブが流れる場合があります。

2020 年度のノード固定タイプは前期と後期に分けて募集を行います。

今回は前期分（4～9 月）のみの募集となりますのでご注意ください。

・共有タイプ

割り当てられた計算機資源を他のユーザと共有してご利用いただけます。

※ 希望される大学向けに本センターから講師を派遣し出張講習会を行います。

受付

・ノード固定タイプ（前期分）

受付期限は 2020 年 2 月 28 日（金）までで締め切ります。申

請可能な計算機システム

サブシステム A [並列計算向け] サ

ブシステム B [GPU 計算向け] ス

トレージ

・共有タイプ

随時受付します。

申請可能な計算機システム

サブシステム A [並列計算向け]

サブシステム B [GPU 計算向け] 基

本フロントエンド [対話処理向け]

大容量フロントエンド [大規模メモリ利用向け]

ストレージ

提出先

九州大学 情報システム部 情報基盤課 全国共同利用担当
〒819-0395 福岡市西区元岡 744

各システムの利用プランと利用負担金

★★下記表の負担金額は、月額となっております★★

区分	スーパーコンピュータシステムIT0				
	サブシステム A	サブシステムB	基本フロントエンド	大容量フロントエンド	ストレージ
共有タイプ	4 ノード： 3,000 円 16 ノード： 12,000 円 64 ノード： 48,000 円 128 ノード： 96,000 円 256 ノード： 192,000 円	1 ノード： 2,200 円 4 ノード： 8,800 円	S プラン： 864 コア時間積 [2CPU(36コア)*24時間] 920 円 M プラン： 3,456 コア時間積 [8CPU(144コア)*24時間] 3,680 円 L プラン： 6,912 コア時間積 [16CPU(288コア)*24時間] 7,360 円	M プラン： 4,224 コア時間積 [8CPU(176コア)*24時間] 5,280 円 L プラン： 8,448 コア時間積 [16CPU(352コア)*24時間] 10,560 円	10TB： (1000万 ファイル) 350 円 100TB： (1億 ファイル) 3,500 円
ノード固定 タイプ	4 ノード： 24,000 円 16 ノード： 96,000 円 64 ノード： 384,000 円	1 ノード： 17,000 円	なし	なし	10TB： 350 円 (1000万 ファイル) 100TB： (1億 ファイル) 3,500 円

※フロントエンドの予約可能コア時間積は CPU 数(コア数)*24 時間を基準に設定していますがコア数と時間の組み合わせは任意です。例えばS プランでは以下のような予約が可能です。

例) Case1: 18 コア * 48 時間の予約 1 件

Case2: 4 コア * 96 時間の予約 1 件

Case3: 18 コア * 24 時間の予約 1 件 + 36 コア * 12 時間の予約 1 件

利用者情報の報告

利用者にアカウントを配布した場合、翌月の月初めに利用者情報を同封する計算機利用

申請書（包括契約）[利用者報告]を記入頂き、電子データにて送付して下さい。

令和2年度 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点公募 型共同研究 採択課題一覧(九大関係分)

※ 共同研究分野の略称

数: 超大規模数値計算系応用分野, デ: 超大規模データ処理系応用分野ネ: 超

大容量ネットワーク技術分野, 情: 大規模情報システム関連研究分野

No	研究課題名	分野	研究課題 責任者(所属)	共同研究拠点
1	管楽器の大規模流体音響解析	数、デ	高橋公也 (九州工業大学)	名大、九大
2	分子性結晶における水素ダイナミクスと同位体効果の起源解明	数	立川仁典 (横浜市立大学)	九大
3	有限温度量子色力学のダイナミクス	数	鈴木博 (九州大学)	阪大、九大
4	データサイエンスに基づく高分子材料の構造物性相関	数	天本義史 (九州大学)	東大、九大
5	界面に適合するAMR法を用いた非圧縮性気液二相流の完全陽解法計算とGPU実装 - MPF法による泡沫の計算 -	数	青木尊之 (東京工業大学)	九大
6	マルチスケール宇宙プラズマ連成シミュレーションの研究	数	三宅 洋平 (神戸大学)	北大、京大、九大
7	高レイノルズ数乱流のデータ科学プラットフォームの構築	数	石原卓 (岡山大学)	名大、九大
8	粒子法の基盤理論整備とマルチフィジックスシミュレータへの展開	数	荻野正雄 (大同大学)	名大、九大
9	HPCと高速通信技術の融合による大規模データの拠点間転送技術開発と実データを用いたシステム実証試験	デ、ネ、 情	村田健史 (情報通信研究機構)	東北大、東大、名大、京大、九大
10	ハイブリッドクラウド構築とゲノム情報解析の効率的な運用に関する研究	ネ	長崎正朗 (京都大学)	東大、京大、九大

各種制度 採択課題一覧(2020年度)

種別	No	代表者名	所属	課題名
公募型PJ (前期)	1	深沢 圭一郎	京都大学	Itoシステムにおけるコード結合フレームCoToCoAを用いた宇宙プラズマ連成計算シミュレーションの計算・電力性能評価
	2	藤澤 克樹	九州大学	格子暗号の安全性を検証する最短ベクトル問題に対する解読システムの開発
	3	高橋 裕介	北海道大学	はやぶさ型再突入カプセルの動的不安定メカニズムの解明と低減化
公募型PJ (後期)	1	深沢 圭一郎	京都大学	Itoシステムにおけるコード結合フレームCoToCoAを用いた宇宙プラズマ連成計算シミュレーションの計算・電力性能評価
共同研究 (アカデミック)	1	齋藤 泰洋	九州工業大学	自由表面流れ解析プログラムの高速化
共同研究 (民間)	1	濱田 直希	KLab株式会社	機械学習を用いた譜面制作支援の研究
重点支援	1	林 豊洋	九州工業大学	九州工業大学情報科学センターにおける研究用計算機システム利用支援への活用
	2	四橋 聡史	パナソニック株式会社	有機二光子吸収材料計算に向けた機械学習モデルの構築
	3	木野 康志	東北大学	エキゾチック原子分子の反応と構造の理論計算
	4	飯塚 統	メドメイン株式会社	Deep Learningを用いた病理診断支援ソフトウェア「PidPort」の開発
	5	宇都 卓也	国立大学法人宮崎大学	多糖関連材料の溶解と自己組織化に関する計算化学研究
	6	古川 雅人	九州大学	圧縮性内部流れ場における非定常乱流現象の解明
	7	大川 恭行	九州大学	横断的オミクスデータ解析拠点の構築
	8	吉澤 一成	九州大学	メタン酸化触媒の理論的開発
	9	大池 正宏	九州大学	COVID-19の主要プロテアーゼを阻害する大環状化合物の検索
	10	望月 祐志	立教大学	新型コロナウイルスのスパイクタンパク質に関するフラグメント分子軌道計算
	11	四橋 聡史	パナソニック株式会社	有機二光子吸収材料提案に向けた機械学習モデルの構築
	12	青木 尊之	東京工業大学	界面に適合するAMR法を用いた非圧縮性気液二相流の完全陽解法計算とGPU実装 - MPF法による泡沫の計算 -
	13	熊本 創	大成建設株式会社	二酸化炭素地中貯留における井戸の最適配置技術の適用研究
	14	伊藤 一秀	九州大学	健康影響を可視化する in silico 人体モデルの開発と環境設計への展開
民間利用	1	平井 大介	株式会社 村田製作所	強誘電体・反強誘電体の構造安定性の第一原理計算
	2	大塚 順	住友電気工業株式会社	第一原理分子動力学法を用いたアルミめっき液の構造解析
	3	四橋 聡史	パナソニック株式会社	有機二光子吸収材料計算に向けた機械学習モデルの構築
	4	森 穂高	株式会社デンソー	MD シミュレーションを教師データとした高分子の力学物性の予測モデル構築
	5	尹 鍾皓	アズビル株式会社	調節弁のキャビテーションと騒音に関する研究
	6	中田 浩弥	京セラ株式会社	大規模計算方法の開発と、セラミック材料への応用展開
	7	飯塚 統	メドメイン株式会社	Deep Learningを用いた病理診断支援ソフトウェア「PidPort」の開発
	8	大淵 真理	富士通株式会社	グラフェンナノリボンの物性・デバイス特性シミュレーション
	9	大淵 真理	株式会社富士通研究所	計算化学・マテリアルズ・インフォマティクスに基づく材料開発
	10	張 会来	株式会社数値フローデザイン	機械学習を用いた燃焼モデルによる火力発電用ガスタービン燃焼器の超臨界燃焼解析

	11	武田 康助	花王株式会社	抗菌・抗ウイルス製剤の設計に向けたMD計算による生体膜への物質作用メカニズム解析
	12	熊本 創	大成建設株式会社	二酸化炭素地中貯留における井戸の最適配置技術の適用研究
	13	伊藤 嘉晃	鹿島建設株式会社	LESを用いた高層建物に作用する風力・風圧予測
トライアル	1	城崎 知至	広島大学	相対論的高強度レーザーによる加速電子特性の波長依存性評価
	2	近藤 篤史	愛知工科大学	材料微視構造の有限要素解析
	3	山口 正剛	日本原子力研究開発機構	金属材料における水素トラップ解析計算
	4	宮崎 康次	九州工業大学	ヘテロ界面によるフォノン・電子輸送フィルタリング
	5	川向 肇	兵庫県立大学	東アフリカにおける気候変動の衛星データによる予測手法の確立
	6	村松 真由	慶應義塾大学	オイラー型解法による欠陥を含むCFRPに対する構造解析
	7	胡 長洪	九州大学	潮流発電の実用化開発に必要な高精度広域 CFD 解析手法の開発
	8	青木 拓未	九州大学	火星の塵旋風突入時の火星飛行機の空力特性の解明
	9	吉田 健文	東北大学	ヘテロ金属錯体による分子磁石の創生 —ランタノイド・白金相互作用と磁性の相関—
	10	藤川 茂紀	九州大学	CO2分離高分子膜の高機能化
	11	北條 元	九州大学	複合酸化物表面の原子・電子構造と分子吸着挙動
	12	ハザリカ ヘマ ンタ	九州大学	SPH DE M カップリング解析による地表流・浸透流の解析
	13	ハザリカ ヘマ ンタ	九州大学	直下型地震による緩傾斜地盤の長距離流動型災害の原因究明とその防災対策
	14	甲斐 友基	九州大学	細胞画像認識モデルの開発
	15	篠田 岳思	九州大学	船舶のバラスト水の排水問題に関する研究
	16	手嶋 秀彰	大阪大学	固体面上のナノバブルの界面張力に関する分子動力学解析

2020年度イベント開催報告

1. 講習会

	名 称	開催時期	開催場所	内 容	参加者
1	スーパーコンピュータ [™] 超、超入門講習会(伊都)	4月20日	大橋	スーパーコンピュータって「なにがすごいの?」「パソコンとどう違うの?」「なにが出来るの?」「どうやって使うの?」といった疑問に答える講習会	中止
2	スーパーコンピュータ [™] 超、超入門講習会(馬出)	4月22日	馬出	スーパーコンピュータって「なにがすごいの?」「パソコンとどう違うの?」「なにが出来るの?」「どうやって使うの?」といった疑問に答える講習会	中止
3	スーパーコンピュータ [™] 超、超入門講習会(筑紫)	4月27日	筑紫	スーパーコンピュータって「なにがすごいの?」「パソコンとどう違うの?」「なにが出来るの?」「どうやって使うの?」といった疑問に答える講習会	中止
4	スーパーコンピュータ [™] 超、超入門講習会(大橋)	4月30日	伊都	スーパーコンピュータって「なにがすごいの?」「パソコンとどう違うの?」「なにが出来るの?」「どうやって使うの?」といった疑問に答える講習会	中止
5	Linux入門講習会	5月15日	伊都	Linuxのコマンド、エディタの利用法に関する解説と実習	中止
6	スーパーコンピュータ [™] 超、超入門講習会	9月15日	オンライン	スーパーコンピュータって「なにがすごいの?」「パソコンとどう違うの?」「なにが出来るの?」「どうやって使うの?」といった疑問に答える講習会を開催した。 ※配布資料あり	55
7	並列プログラミング [™] 超、入門講習会OpenMPコース	5月11日(中止) 5月12日(中止) 9月17日	オンライン	1台の計算機に搭載された多数の「CPUコア」を使った、並列プログラムでよく用いられる、OpenMPという並列プログラミングモデルを紹介した。	20
8	並列プログラミング入門 [™] 超、入門講習会MPIコース	5月19日(中止) 5月20日(中止) 9月23日	オンライン	主に、複数台の計算機で構成された「クラスタ型」並列計算機向けの並列プログラムでよく用いられる MPIという通信インタフェースを紹介した。	20
9	オンラインGPUミニキャンプ	9月29日 9月30日	オンライン	本ミニキャンプでは、GPUでの解決を目指す課題をお持ちの皆様にご参加いただき、メンターからの助言のもとで、OpenACCやCUDA、Deep Learning等の技術を駆使して、その課題の解決に取り組んでいただいた。期間中、本センター教員の他、GPUの高度なスキルを持った方々も、メンターとして、オンライン会議や、Slackによる情報共有を通じて、参加者を支援した。期間中、および期間後の1週間、本センターのスーパーコンピュータ ITOの GPU搭載ノードを無料で使っていただいた。	13
10	FieldView講習会	1月21日	オンライン	FieldViewは流体解析用のポストプロセッサです。直感的で簡単な操作性、高度な工学評価機能により複雑な流体現象をすばやく把握し、工学設計を支援した。 本講義では、はじめてご利用いただく方に向けてFieldViewの基本機能を操作デモを交えて説明した。以下の内容になります。 内容:(実習あり) ・FieldViewとは ・ウィンドウ構成と基本操作 ・エントリコーストレーニングの内容 ・解析結果ファイルの読み込み ・形状と境界面の表示 ・XYZ断面とスカラー・ベクトル表示 ・カラーマップの表示と設定 ・画像ファイルへの出力 ・関数定義 ・ストリームライン(流線)の表示 ・ムービーファイルへの出力 ・等値面の作成 ・キャプションの入れ方 ・リスタートファイルで可視化の状態を保存 ・ハンズオン課題 ・ヴァイナスによる技術サポート・関連情報	3
11	SCIGRESS講習会	1月29日	オンライン	・分子動力学法の概要 ・基本操作説明1(演習:アルゴン結晶) ・基本操作説明2(演習:アルゴン結晶の溶融) ・基本操作説明3(演習:酢酸水溶液) ・基本操作説明4(演習:水滴) ・基本操作説明5(演習:ポリエチレンのモデリング)	1
12	IDL講習会	2月2日	オンライン	IDLは、豊富な解析機能と多彩なグラフィックス表示機能、またアプリケーション開発機能も備えた統合ツールです。天文・物理・核融合・気象・医療や各種シミュレーションなど、研究分野を問わず利用が可能で、配列指向型言語なので膨大で複雑なデータ処理にも最適です。本講習会は、入門用テキストを用いた実機演習形式で、IDLの概要や基礎的な操作方法を学習した。 内容: ・IDL概要説明、GUIやルーチンなど利用環境の説明 ・IDLのファイルアクセスと基本操作実習 ・IDLの代表的なコマンドを使った可視化実習 -プロット、サーフェイス、コンタ、マッピングなど ・IDLのプログラミングに関して	中止

13	ENVI講習会	2月9日	オンライン	<p>ENVIは、光学衛星やドローンで取得したマルチスペクトル画像の解析処理や、点群データ処理、SAR画像の表示など、豊富な機能を備えたり、モーションデータ解析用の統合パッケージソフトウェアです。</p> <p>本講習会は、入門用テキストを用いた実機演習形式で、ENVIの概要や基礎的な操作方法を学習した。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ENVIの基本操作 <ul style="list-style-type: none"> －インターフェースの概要説明、データファイルの読み込みなど ・画像の表示 <ul style="list-style-type: none"> －ストレッチやコントラストの調整、データマネージャの説明 －レイヤー透過、複数のビューと画像のリンクなど ・データ解析実習 <ul style="list-style-type: none"> －スペクトル指標(NDVI)算出と結果画像の確認 －教師付き分類と結果の確認 －二時期の画像からの差分抽出 	中止
14	Gaussian講習会	2月16日	オンライン	<p>Gaussianは世界で最も広く利用されている量子化学計算ソフトウェアです。分子や分子集合体の構造・物性を電子状態計算により算出します。講習会では、量子化学計算の概要から計算実行までを説明した。</p> <p>内容:(実習なし)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○はじめに <ul style="list-style-type: none"> － Gaussian 概要 － GaussView 概要 － 計算化学プログラム(各種手法の確認) ○使用するファイル <ul style="list-style-type: none"> － ファイル一覧 － 入力ファイル詳細(キーワード/基底関数などの確認) － 出力ファイル詳細 ○計算化学の基礎 <ul style="list-style-type: none"> － 構造最適化(安定状態と遷移状態) － 溶媒効果 ○その他の話題 <ul style="list-style-type: none"> － DFTにおける長距離補正/分散力補正 － よく使うキーワード － 最新版の情報 	19
15	Mathematica講習会	2月17日	オンライン	<p>Mathematicaは最先端の科学技術演算のための世界で最も確立されたシステムです。優れた技術的機能と使いやすさを持った継続的に拡張される単一の統合システムを提供し、技術計算を広く深く取り扱うことを可能にします。講習会では基本的な機能の中でも、数値計算、数式処理、可視化を中心に機能を説明した。</p> <p>内容:(実習あり)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○導入 <ul style="list-style-type: none"> － Mathematicaの実行例を紹介 ○基礎 <ul style="list-style-type: none"> － 計算の実行方法やノートブックの使い方から関数定義などのプログラミングの基礎にあたる部分を説明 ○数式処理・数値解析 <ul style="list-style-type: none"> － 微積分の計算方法と、方程式、微分方程式の解き方について説明 ○データサイエンス <ul style="list-style-type: none"> － オープンデータを読み込み、そのデータからグラフを作成する方法について説明 	1
16	ANSYS講習会	2月18日 2月19日	オンライン	<p>[2/18ANSYS プリ入門トレーニング(SpaceClaim コース)] ANSYS SpaceClaim Direct Modeler と ANSYS Meshing を使ったプリ処理の基本操作を習得していただくためのトレーニングを行った。</p> <p>[2/19 ANSYS Fluent入門トレーニング] ANSYS Fluent を使った流体解析の基本操作を習得していただくためのトレーニングを行った。</p>	2
17	Amber講習会	3月4日	オンライン	<p>内容:(実習なし)</p> <ul style="list-style-type: none"> 分子動力学計算概要 ・ペプチド構造の構築 ・構造最適化と分子動力学計算 <ul style="list-style-type: none"> － 実溶媒中 ・計算ログ解析 ・トラジェクトリー解析 ・様々なPDBファイルの読み込み ・実例紹介(電子ノートブックなど) ・Q&A 	7
18	Nastran/Patran講習会	3月9日	オンライン	<p>MSC Nastran(ソルバー)とPatran(プリポスト)を用いて、構造解析の基礎知識から具体的な操作/実行方法までをワークショップ形式中心で解説</p> <p>内容:(実習あり)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・MSC NastranとPatranの基礎 ・梁構造の線形静解析 ・シェル構造の線形静解析 ・ソリッド構造の線形静解析 ・固有値解析 	中止
19	AVS/Express講習会	3月11日	オンライン	<p>内容:(実習あり)</p> <p>モジュールを組み合わせることで独自の可視化プログラムを作成できる。</p> <p>「AVS/Express」についての説明と実習</p> <p>【午前】(10:00~12:00)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・AVS/Expressの概要 ・AVS/Expressの操作方法 <p>【午後】(13:00~16:00)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・AVS/Expressの入力データフォーマット ・入力データの作成と可視化実習 ・可視化結果画像の出力 	中止

20	MicroAVS講習会	3月12日	オンライン	<p>内容:(実習あり)</p> <p>初心者でも簡単な操作で可視化ができる汎用可視化ソフトウェア「MicroAVS」についての説明と実習</p> <p>【午前】(10:00~12:00)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・MicroAVSの概要 ・MicroAVSの操作方法 <p>【午後】(13:00~16:00)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・MicroAVSの入力データフォーマット ・入力データの作成と可視化実習 ・可視化結果画像の出力 	2
21	Marc/Mentat講習会	3月16日	オンライン	<p>内容:(実習あり)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・MarcおよびMarc Mentatの概要 ・非線形性の要因と非線形問題の数値解析 <ul style="list-style-type: none"> -幾何学的非線形 -接触 -材料非線形 	3
22	ABINIT-MP講習会 ~九州大学情報基盤開発センター ITOサブシステムAを用いたハンズオン~	3月22日	オンライン	<p>Openシリーズ最新のVer. 1 Rev. 22のご紹介と共に、九州大学情報基盤開発センター ITOサブシステムAを用いて、ABINIT-MP/BioStation Viewerの利用を経験していただいた。</p>	10
23	プログラムチューニングツール利用法講習会	3月24日	オンライン	<p>FortranやC言語による科学技術計算プログラムを対象に、プログラムを高速に実行するために必要な、コンパイラ・性能分析ツールの利用方法や、プログラムのチューニング方法(メモリアクセス改善、SIMD化促進、スレッド並列化)を説明した。</p> <p>内容:(実習なし)</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 基本となる考え方 2. プログラムのコンパイル・性能分析 3. プログラムのチューニング 4. プログラムのスレッド並列化 	19

2. イベント

	名 称	開催時期	開催場所	内 容	参加者
1	先駆的計算科学に関するフォーラム2020 ~先端的計算科学研究プロジェクト成果報告~	4月24日	伊都	新型コロナウイルスの影響により中止となったため、報告予定だった各制度の成果報告書のみWeb公開した。	中止
2	フィールドワークとスーパーコンピュータ	11月6日	伊都	本セミナーは、α×SC2020K フィールドワークとスーパーコンピュータに関するシンポジウムとの合同開催とし、九州大学大学院医学研究院の二宮利治氏、秋山雅人氏、京都大学高等研究院 / 京都大学野生動物研究センターの山本真也氏、京都大学学術情報メディアセンターの中村裕一氏、愛知大学地域政策学部の鈴木臣氏にご講演いただいた。	30
3	α×SC2021Q 教育とスーパーコンピュータシンポジウム	3月23日	伊都	これは、「なにか×スーパーコンピュータ(SC)」というテーマを掲げ、その「なにか」の分野で、今までスーパーコンピュータとの関わりがあまりなかった方、および、既にスーパーコンピュータを活用されている方、それぞれに、ご自身の研究や業務の内容を講演していただき、さらに、それらを踏まえた講演者および参加者の意見交換を行うシンポジウムであった。	27