

iiC-HPC

Vol.4
2005

情報基盤センター大型計算機システムニュース

High Performance Computing System
Information Initiative Center

特集

HSS

シミュレーションの可能性

HOKKAIDO UNIVERSITY

ヴァーチャル空間への欲望 アルゴリズムが創造する光の幻想 No.4

CGを使った雲のシミュレーション例である。地表で暖められた空気は浮力によって上昇する。上昇するにつれてその温度が低下し、水蒸気が凝結して微小な水滴が発生する。この空中に浮遊する微小水滴が雲である。この過程の数値シミュレーションによる再現を試みた。実際の自然界で起きている現象から必要な要素のみを選んで計算しているのが、それでも非常に多くの計算コストがかかる。そして、長い時間をかけて計算した雲のデータから、今度は雲の色を求めるために、雲の中での複雑な光の振る舞いを計算する。雲に入射した光が微小水滴によって乱反射される過程を追跡するのである。こうした長い計算の後に、やっと画像を生成することができる。しかし、生成された画像は自然界の一面を見事に再現している。

なお、画像は東京大学 西田研究室・宮崎玲氏の協力による。



●情報科学研究科
土橋 宜典

広島県出身。広島大学での卒業研究以来、ひたすらCGの研究に励み続けている。CG界における世界最大の国際会議SIGGRAPHにて、三つの論文を発表している。現在は、北海道大学情報科学研究科の助教授として、CGの新たな可能性の探求を続けている。プライベートでは、音楽、特にロックを中心にブルースや、ハードロックを好む。ギター演奏も多少は行う。かつてはライブ活動も行っていたが、現在は忙しくて休止中。※表紙のグラフィックも土橋氏による。

Yoshinori Dobashi

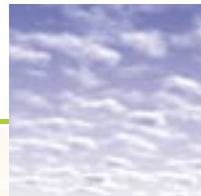
われわれは、スパコンの現在を考えます。

Contents

ヴァーチャル空間への欲望 アルゴリズムが創造する光の幻想No.4

●北海道大学大学院情報科学研究科 土橋 宜典

02



03

情報基盤センター大型計算機システムニュース 目次

特集1 見えないものを観る

●北海道大学創成科学研究機構 寺倉 清之

05-09



10-13

特集2 作れないものを創る

●北海道大学大学院工学研究科 毛利 哲夫

連載 梨紗のスパコン探検記

●第3回
はじめてのスパコン：あっ！という間のユーザ登録に感激

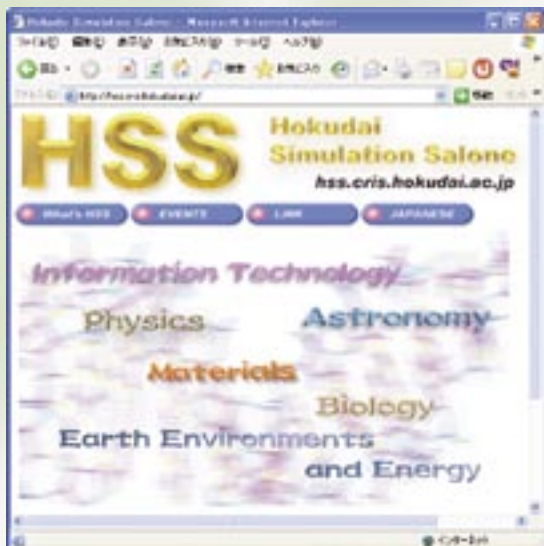
14-15



16-19

スパコンInfo

- 研究成果を東京で体験できます!!
ワイヤレスコミュニケーション可視化システム
Radio Wave Viewerの紹介
- 大規模固有値計算ライブラリARPACKについて
- スーパーコンピュータでのノード内分散メモリ並列計算実行方法
- 相談室Q&A



<http://hss.cris.hokudai.ac.jp/>

北大シミュレーションサロン (HSS) という

コミュニティが誕生しました

既成の実験科学の限界を超え

計算機科学の提供する

究極のツールを利用しながら

新たな学問的地平を切り開く

アンビシャスな研究者集団です

HSS

シミュレーションの可能性

今回の特集は、
この新たなコミュニティの
主要メンバーである二人の先生に
お話を伺い
シミュレーションの魅力と
新たな学問領域の可能性について
考えてみたいと思います

特集1

見えないものを観る

見えないものを観る
シミュレーション

編集 寺倉先生、本日は宜しくお願ひ致します。まず最初に先生の専門のお話を伺えればと思うのですが。

寺倉 もともと私の専門は物性物理という分野で、固体の電子状態を量子力学的に解明していたのですが、最近はそのから発展していったんですけど、最近のシミュレーションとか生体での酵素反応とか、そういうこともやり始めま

した。

編集 シミュレーションが可能になってきたのは最近の話ですか？

寺倉 ええ。1985年にカーとパリネロによって新しい手法が開発されたんです。電子状態の計算をしながら、分子動力学という手法で原子の動きを追いかけることが可能になりました。
編集 つまり、電子状態の計算から今まで見えなかった原子の動きまで見えるようになったということですか？

寺倉 そうなんです。初め、われわれ

はこの方法を固体における表面の研究に使うかと思いましたが。固体の表面の構造というのは、必ずしも実験的にはよく分からないんですよ。例えばSTM（注1）なんかです。表面の原子しか見えません。表面のすぐ下はどうなっているのかは見えません。

編集 実験で見えなかったものが見えるようになったと…？

寺倉 ええ。昔は実験で得られた構造というものがあって、それをもとに電子の状態を計算したんですけど、今はもう電子の状態を計算しながら安定な構造まで決められるようになった。つまり、実験では得られないところまで計算で決められるようになったわけです。

編集 素人感覚で質問すれば、よりダイナミックな視点から見られるようになった分だけ、そのシミュレーションに関する計算負荷が相当高くなってきた…？

寺倉 そうです。めちゃくちゃ計算負荷は高いですね。昔は1個の原子構造に関して1個電子状態の計算をやっていた。今はダイナミックにやろうとすると、動きのある原子に対して、それ

ぞれの原子配置について電子状態を計算しますので、めちゃくちゃ負荷は多いですね。

編集 それが先生の研究の出発点ですね。

寺倉 そう。最初、カー・パリネロ法というのは、安定構造を探すのに結構役に立ちました。ただ、安定構造を探すだけだと、本当の分子動力学法の特徴を生かしていきません。分子動力学法の特徴を生かすには、実際に原子が動き回っている状況は一番魅力的なんです。それで化学反応のダイナミクスを扱うということになりました。

編集 なるほど。ここで、化学反応のシミュレーションという先生の流れが出てくるわけですね。

寺倉 特に溶媒の中での反応のシミュレーション、その辺のところは今後の重要課題だと思っていますね。

編集 どの程度の計算をすることになるのですか？

寺倉 これはめちゃくちゃ大変で、例えば原子のダイナミクスをやろうとすると、少なくとも原子振動の時間スケールよりは短い時間刻みでないと原子の振動が見られない。原子振動の周期はだいたい 10^{-12} から 10^{-13} 秒ぐらいですね。そうすると、 10^{-12} 秒とか 10^{-13} 秒の時間刻みで追いかけていくことになる。昔なら1個の原子配置について電子状態を計算すればよかったんですけど、今はこの短い時間刻みごとに全部電子状態を計算しないといけないんです。

寺倉 清之

Kiyoyuki TERAURA

■北海道大学創成科学研究機構

1942年生まれ、従って、当年63歳。1969年に大阪大学理学部に就職して以来、1978年に東京大学物性研究所、1994年にはつくばの工業技術院の研究所（現在の産業技術総合研究所）、2003年に北海道大学、とひたすら北上を続けてきた。博士課程の後半から固体の電子状態計算を始め、それ以来ずっと関連の研究を続けているが、カー・パリネロの方法を用いた研究を始めてから、化学反応の動的過程の研究に興味を持つようになった。しばらく前までは下手の横好きで水彩画を折りこみにふれて描いたりしていたが、このところそのゆとりを失っている。せいぜい、アパートで一人で音楽を聴くくらいしかできていない。

超臨界水において、シクロヘキサノンオキシムからεカプロラクタムが生成される過程の初期の反応。

白、黄：水素

灰色：炭素

赤：酸素

青：窒素

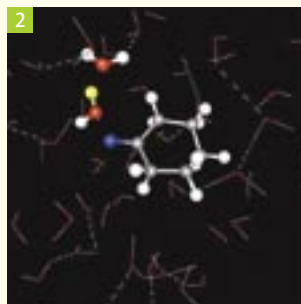
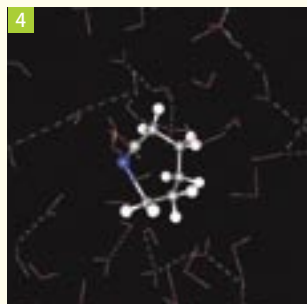
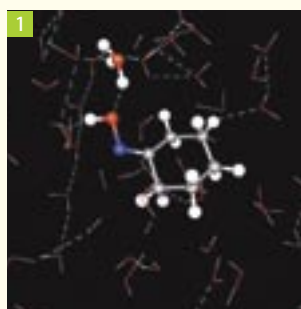
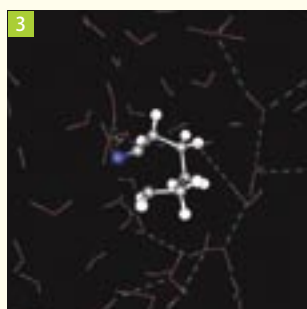
①プロトンが H_3O^+ となって水の中のシクロヘキサノンオキシムの酸素を攻撃し、

②プロトンの組み換えがあって、OH基が水分子となって離れる。分子の残りの部分は不安定なため、

③NのところのC-C結合が開き

④Nがそこに挿入されて7員環ができる。

εカプロラクタムは、ナイロンの原料。



…。
編集 つまり桁違いの負荷というレベルの話？
寺倉 そう。タフとかそういうものではなくて、まさに桁違いの負荷に…。それでも、今やれる時間はせいぜい10ピコ秒（ $1\text{ピコ}=10^{-12}$ ）ぐらいしか追いつ

かけられない。
編集 北大レベルのスパコンでということですか？
寺倉 ええ。ただ、かなりCPUタイムを長く取らせて頂きますが…。(笑)
編集 今、10ピコ秒とおっしゃいますけど、どのくらいのCPUタイムだと先生の研究のイメージに近いものになるのですか？

寺倉 CPU時間であれば1月程度かな…。その位までやると結構リライアブルというか…。要するに溶液中の話は基本的に統計力学の話になってくるので、統計平均を取らないといけないんですよ。実際には時間平均を取ることになる。1990年位だったと思うけど、つくばでアトムテクノロジーという大型の国のプロジェクトが動きだしたんですね。当

時世界ランキング10位以内に入っていた計算機を使って、ゼオライトの中の反応のシミュレーションをやったのですが、一番ヘビーなものは2カ月半回し通して計算した経験がありますね。

HSSの可能性

編集 先生の研究スケールをお伺いしますと、より速くて大きなマシンを求めることになりますよね。そんな中で、北大のような規模のスパコンが手元にあったときのメリットというのは、いったい何でしょうか？

寺倉 やはり、利用方針をある程度明確にした方がいいかもしれませんね。1つは教育用に今後並列計算をより広くやってもらうための教育的配慮とか…。もう1つは、大規模な計算をかなり優遇するとか。もちろん、そういう計算に対する需要がなければ何にもならないんですけど、それをどうやってプロモートするかというのは、われわれがやっている北大シミュレーションサロン（HSS）の中心的課題なんですけど。

編集 ただ実際には、大規模な計算をする力のあるグループは、計算機まで自前の傾向がありますよね。

寺倉 確かに一般的にそのような傾向があります。力のあるグループは自分で外部資金を取ってきて、PCクラスターとか何か大きなシステムを買い込んでそこで自前でやる。たとえばセン

ターで大きなコンピュータを動かしても、やっぱりセンターにあるのは自分の好き勝手にはできませんよね。自分の手元にあればまったく好きに運用できるから、全体としてのコストパフォーマンスとか労力の負荷ということを考えたらプラスにはならないけど、好き勝手に使えるということはサイロジカルなメリットになっている。

編集 センターから見ると、研究実績が離れていくことも問題なんですけど…。

寺倉 そう。力のあるグループがセンターをあまり使わなくなっちゃうと、



センターから目立った結果が出てこなくなってくるという傾向がある。どこでも同じ問題を抱えている。それだからこそ、最近は大きなプロジェクトに関しては優遇策というものをセンターで考えなければならなくなってくるのが実状ですね。

編集 本当のビッグプロジェクトというのはもう独立してしまうのだとすれば、そこに至るまでのプロセスをサポートするとか、または育てるとか、そういう機能が重要になってくる…?

寺倉 北大のセンターがもし何かやるとしたら、センターでテクニカルなサポートだけじゃなしに、われわれがセンター教員らと一緒にやりだしたようなシミュレーションの重要さみたいなものをアピールして、その機運を盛り上げるとか…、そんな思いでHSSを始めたわけだね。

編集 HSS活動のポイントは何ですか？

寺倉 たぶん問題設定ということになるのかな。周りを見ていると、挑戦的問題をやるうという思いとか、機運の高まりがないと思うんですね。私らの分野だと研究者の数とかも含めて、アメリカ、ヨーロッパの方がそういう挑戦的なことは多いんですね。

編集 日本の他の大学と比べるとどうですか？

寺倉 例えば名古屋大学の計算理工学研究科とか、筑波大の計算科学研究センターとか、そういうところを見ていると、やっぱり学内で計算科学みたい

なものの重要性に対して共鳴する人が相当なコミュニティをつくって活動している。つまり、コアになる集団が重要な役割を担っている。そうすると、ハードウェア的にもソフトウェア的にも情報や資金を取りやすくなってくるからますます発展する。ところが北大では、実力のあるグループは自前で成果を出し、センターは学内の助け船みたいな感があって、あまり目立った成果は出てこないという悪循環に陥っている。

編集 定式化して言えば、大きなプロジェクトの動きと、この動きと、中から作り上げるか外と連携して持ってくるかしかない。その二つの動きでは、どちらが効率的なんですか？

寺倉 やっぱり中に核があれば、外から持ってきてても駆動力や動機が維持できなくてちよつとむなしいですね。HSSは全体的な盛り上げを狙っているんだけど、これからそういう計算科学関係のプロジェクトの募集があったときに、すぐに対応できるようなネットワークを作っておくことも考



えている。できるだけインターディシプリナリーにチームを作って、何か外から募集があれば3つでも4つでも応募ができるというのが理想ですね。

編集 ネットワーク作りの具体策は始まっているんですか？

寺倉 バイオと材料、それから地球科学や環境エネルギー関係のテーマでワークショップをまわしています。それぞれの先生方が、かなりきちつと

包括連携 何うところによると、北大と産総研の包括連携を仕込んだのは先生だそうで…。(笑)この包括連携の狙いは何なんですか？

やってくださっていて、そういうものが積み重なっていけば…。4つか5つでも応募すれば、1個か2個は通るかなという感じ…。(笑)

編集 HSSの取組に何か日常的なメリットというものはあるんですか？例えばリソースの共有とか情報交換に関して？

寺倉 それは一般的にあまり容易ではないですね。計算科学と一言で言うけれど、インターディシプリナリーで、テーマも結構バラバラ。一般講演として聞くには楽しいけれど…。アルゴリズムに関しては毎年あるわけじゃなくて、それこそ10年とか20年に1個ポ

編集 産総研の計算科学研究部門は30名ぐらいの専門家が集まった集団なんですね。30名ぐらいいると、結構基本的な手法やプログラムの開発に力を入れてやれる規模なんですよ。HSSのコミュニティを見ると、個々のグループが小さ過ぎてあまりやれていないと思うんですね。そうすると、市販とかよそにあるソフトに頼ってしまう。

編集 なるほど。逆に、産総研から見た北大のメリットは何ですか？

寺倉 ある意味で初歩的なあるいは汎用のツールで、物理、化学や生物の非常に先端的な研究が行われている。そういう意味では、産総研と北大のコミュニティというのは相補性があると思っています。

編集 そうすると、これは包括連携ではなくて実は共同研究という枠組みの



化学の実験研究は北大で結構や

られています。化学には魚崎先生がいらつしやるし、触媒研には大澤先生とかいろいろな先生がいらつしやいます。私も関わっている化学反応のシミュレーションというのは、かなり重要なターゲットになっています。

編集 なるほど。学内のそういう人やテーマが浮かんできて、それをプロジェクトとして動かすとき、次に行くポイントは何ですか？

寺倉 ちゃんとやらないといけないと思いつながらできていない部分なんです。産総研や日立の包括連携で深くかわりになりそうな人との合同のミーティングをやろうと思つていたんですよ。メールレベルでやりとりをしながら、何か具体的なターゲットをセットアップしないといけない。みんな忙しいから走りまわってますが、そこに時間と労力を投入して具体的に始めなければならぬ。

編集 つまりそういう意味では、テーマ設定からの議論が最初にあるべきだと……？

寺倉 そこが計算科学と他の分野との違うところなんです。計算科学というのは、極端にいえばまず道具がある。この道具を使つてやるものは何でもやりましようというスタンスだから、具体的なテーマ設定というのは他に比べてちょっと難しいところがある。

センターへの要望

編集 先ほど、力のあるグループにはそれなりのケアをというお話がありましたが、センターへの要望などをここで聞きたいのですが。例えば、センターはバルク課金制度のように、ヘビーユーザーに対してインセンティブを与える料金制度を持っているのですが、それを含めていかがですか？

寺倉 バルク制度はもちろん重要でしょう。これからは必ずコストパフォーマンスを問われる研究になってくるので。ただ、このようにお金で全てが解決するとも思わない。他の方法として、例えば課題選定委員会みたいなものを作る選択の余地はあると思います。

編集 なるほど。課題選定委員会ですか。

寺倉 ええ。なぜかというところ、それが情報が情報の交流につながる。学内でどんな課題が動かそうとされているか、それをそこでピアレビューをやるわけです。研究者の間で回して、お互いに点を付けてもらうんです。

編集 センターも研究紹介や研究成果の広報体制はやっているのですが、それでは事が始まらないということですね。

寺倉 小さいジョブについてはやる必要はないと思うんですが、大きいジョブでは、ピアレビューの結果、優先的に課金を緩やかにするとか、時間の査定とかプライオリティーの査定も行う。

編集 課題選定なのだから、特定領域のエンカレッジではなくて、単発の課題をプッシュするという意味合いなわけですね。

寺倉 そう、課題を促進するためにね。私も産総研時代に、促進課題という名前と同じようなことをやってきた経験があります。あくまでも、並列計算や挑戦的な課題のエンカレッジという意味合いのものです。

編集 実得的を得た提案を頂きましたが、要望という点ではいかがですか？

寺倉 厳しい質問でいいにくいな。

(笑)

編集 ずばりとお願ひします。(笑)

寺倉 本当に忌憚らないことを言えば、情報基盤センターを初めて見学したときは、実は少しがっかりした。(笑) つくばの計算科学研究部門なんかのリリースと比べて、本当に優れているのかなと。結構、深刻だと思つんですけど……。北大の地理的なものを含めた制約の中での特色って何かなと考えてしまふ。

編集 地域的に特徴のある研究をしろということですか？

寺倉 そういう研究レベルの話もあるけど、チョッと細かいことを言わせて頂くと、産総研や筑波大とかの仲間もかわつてきているのですが、プロジェクトを狙つてその準備に動きだしたんですよ。ところが、アンバー(注2)が今の北大のスパコン上で動かない。そこで、実際の計算が名古屋大のスパコン



に流れようとしている。それはちょっと困ると思って、日立の人に聞いたんですよ、本当に北大のSRの上でアンバーが使えないのかと。何か使われた例がないのかって。

編集 メーカーも含めたサポート体制の問題ですね？

寺倉 要するに、やっぱりローカルのところでも無理してもやろうかと思うのは、そういうときの可能な限りのサポートですね。そんなこんなで一度動き始めれば、わざわざまた他のところに移ったりはしない。その辺のところの、もうちよつときめの細かい対応は是非とも必要になる。

編集 今のお話は、センターの話というよりは、メーカーのお話ということに……？

寺倉 そう。

編集 でもその意味では、センターとメーカーさんのお付き合いの仕方というか、どうやって契約や日常的なオペレーションをコントロールするかというセンターの話にもなるかな。

寺倉 そこは結構、ケンケンガクガクとやらないといけない。例えば、私がかつて参加したアトムテクノロジ・プロジェクトのときは、富士通のマシンがあっただけで、それはものすごくプレッシャーかけましたね。そんなものができないなんて会社

の恥じゃないかといつてね。

編集 かなり恨まれましたか？(笑)

寺倉 いや、それが逆だった。数年たってから富士通の人に言われたのは、あのときのすごくプレッシャーかけてもらってすごく進んだと。少なくともそれまでできなかったところがあったと。えらく感謝まですされたですね。だから、できないはずはないと思うんですよ。いい成果が出てきたら、お宅のマシンでこんな成果が出てきましたということは公表するんだしね。

編集 サポートマンの個人的な質という問題もありますよね？

寺倉 私は、本当に会社の上の人にまで連絡して、もつといいのをよこせとギヤーギヤーやりましたよ。(笑)

編集 今の先生のお話が当てはまるのは、やはり一部の先端ユーザに限られますよね？

寺倉 そうですね。私も2、3年つくばの計算センター長をやられていたので、難しいことはよく分かるんですよ。そういう挑戦的で大がかりなことをやろうとする人のサポートって、ついついしたくなっちゃうんですね。だけど、それだけやっていると一般の人が離れていってしまう。そこは非常に矛盾していて、どういうバランスでやるのかというところは難しいところだと思いますよ。

編集 むしろ、北大の問題点は、裾野のユーザたちから、あまり声が上がってこない。例えば、こんなソフトが使いたいんだっていうような話……。

寺倉 ほかを探しちゃうっていうことでしよう。だから、そういう要望が出た人を離さないようにしなければいけないと思うんですね。何か言ってくる人は結構熱心な人なんです。その人らの要望がちゃんと満足できるようにしていくことがやっぱり非常に重要なことだと思うんです。いったん離れちゃうと、またわざわざ戻るのは煩わしいですよ。

編集 なるほど。とかくぬるま湯的風土を有している北大の中で、これから

もHSSからピリッと引き締まった新たな提言を発信して頂けると助かります。本日は、どうもありがとうございました。

注1 STM(Scanning Tunneling Microscopy: 走査トンネル顕微鏡)

1982年にBinnig およびRohrerらによって発明された顕微鏡。尖った先端をもつ針と試料の間に電圧をかけ、針の先端で試料の表面を走査する。針と試料の間に流れるトンネル電流の強さをはかることにより、試料表面の原子スケールの凹凸を測ることができ、それによって表面の原子配列が分かる。また、針の先端を試料の特定の位置に固定して、トンネル電流の電圧依存性を測ることにより、試料のその場所での電子状態を知ることができる。表面科学、材料科学、生物科学の研究に広く活用されている。BinnigとRohrerは1986年にノーベル物理学賞を得た。

注2 アンバー(Amber)

分子力学、分子動力学のためのプログラムパッケージである。故P. Kollmanらが中心になって開発した。分子力学、分子動力学では、原子間あるいは分子間の相互作用を正確に与えないといけないが、これは非常に困難な作業である。そのため、分子動力学法のパッケージは、しばしば原子間相互作用についてのデータベースと一緒にになっている。Amberの場合、そうしたデータベースはAmber Force Fieldと呼ばれ、多くの研究に利用されている。Amber Home Pageのアドレスは<http://amber.scripps.edu/>

(株)日立製作所のご協力により、平成17年4月から本センターのスーパーコンピュータ HITACHI SR8000でアンバー(Amber8)が利用できるようになりました。詳細については、次号「スパコンInfo」をご覧ください。

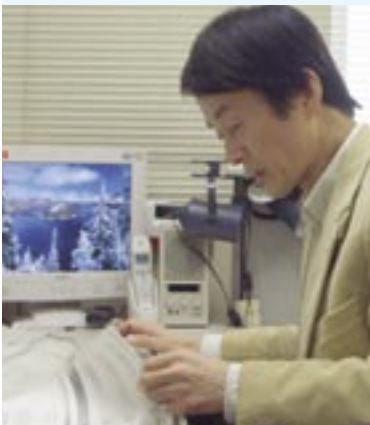
特集2

作れないものを創る

材料工学と シミュレーション

編集 毛利先生、本日は宜しくお願
いたします。まず最初にお伺いしたい
のは、先生の専門のお話を、分かりや
すくお願いできますでしょうか？

毛利 材料工学というところに所属に
しています。素材から見れば、金属、
セラミックス高分子材料等々。また、
用途別に見れば、耐熱材料、電磁気材
料、今はやりの生体材料とか、超伝導
材料等と分類できますね。このような
素材をニーズに合わせて、いかに安く、
効率よく作るかということを研究して
います。基本的には、金属やセラミッ
クスが主流を占めていたのですが、
今後はもう少し別の方向にも伸ばして
いきたい。



編集 素人の印象ですと、材料工学で
は疲労実験や破壊実験が真っ先に浮
かびますが、先生の研究とシミュレ
ーションがどのように結びついてくるの
でしょうか？

毛利 基本はやっぱり実験科学なので
すが、開発という意味からいうと、原
子だとか電子のレベルから材料の性質
を制御するということが可能になって
きたので、もう少し計算機を使った研
究へと進展しつつあるというところで
しょうか。

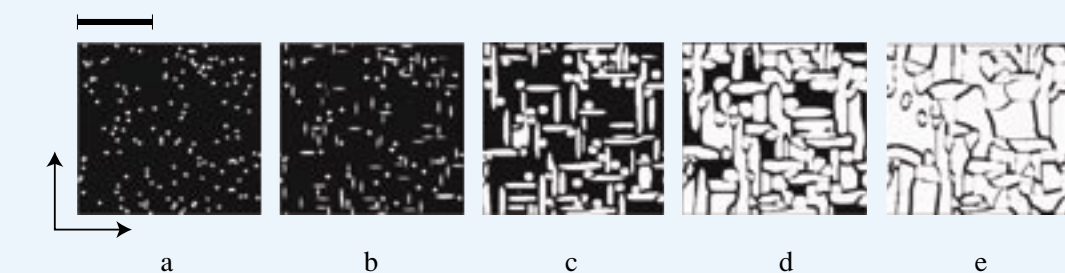
編集 すると、ターゲットは新素材開
発ということになりますか？

毛利 確かに新素材というと、原子・分
子レベル、いわゆるナノ材料という分
野がまだまだ小さく、これからの整備
が求められています。だけど従来の構
造材料、ビルディングだとか橋げただ
とか、強度に耐えられるような強い材
料、そういう構造材料の強度を上げよ
うとすると、非常にミクロなところで
制御する必要があります。その
意味では、新素材だけではなくて、従
来の材料に対してもやはりシミュレ
ーションというものが重要になる。

編集 なるほど。何か先生の研究の具

体例で説明して頂
けると助かるので
すが…。

毛利 例えば、これ
は鉄の中にパラジ
ウムを混ぜ合わせ
るときの状態図な
んですが…。純鉄
から10%、20%とパ
ラジウムを増して
いきます。縦軸の
温度との関係で、ゲ
ラフの上下で固体
部分と液体の相の
違いが分かる。ただ
し、50%ぐらいパラ
ジウムが入ってく
ると、液体の温度が
下がってきます。下
がってくるという
ことは、比較的溶け
やすいものができ
るということが分
かります。



鉄-パラジウム合金の内部組織の形成過程を、原子番号のみの情報から、量子力学と統計力学を使って算出したもの。(北大と東大との共同研究の成果)従来の合金の平衡状態図の第一原理計算は、理論とコンピューターのパワーの進展により、組織形成の計算にも応用が可能になりつつある。“材料シミュレーター”の実現への第一歩。

毛利 そう。ただ単に混じり合ってい
るという原子の混在ではなくて、鉄と
パラジウムが規則的に配列すれば、別
な合金ができるということになりま
す。つまり、ランダムに混じり合っ
ているときとは違った性質が出てくる
んです。

編集 つまり、原子

配列が物性を作り出
している…？

毛利 その通りです
が、それに加えて、
工学的にはマルチス
ケール性という問題
が重要になってきま
す。

編集 マルチスケ
ール性？

毛利 ええ。電子・
原子・分子のレベル
というのは非常にミ
クロなレベル。そし
て、その1つ上に原
子・分子が集まって
内部組織を作るとい
うマクロ的な巨視構
造がある。これが、
実際の材質を作っ
ているんです。われ
われ、この材料は
強いとか軟らかいと
言っている巨視的な
性質というのは、直
接的にはこの内部組
織のレベルから出て



毛利 哲夫

Tetsuo MOHRI

■北海道大学 大学院工学研究科

昭和27年生まれ、カリフォルニア大学バークレー校Ph.Dコース修了。大学院工学研究科では計算材料科学の研究に従事。材料と機械・物理・数学の境界を包括する“材料数理学”を立ち上げたい。

趣味は乱読、学生時代はサッカー部所属の体育会系人間。

くるわけなんです。状態図の相を作るのはあくまでも原子・分子レベルのミクロな話なんですけれど、この議論だけで終わってはいけません。物理の世界になってしまふ。工学として意味があるのはやっぱりもう1つ上のマルチスケールの上位の階層なんです。編集 なるほど。すると、いろいろ異なる条件を与える実験科学的アプローチを行うことになりますか？

毛利 ええ。状態図は基本的に実験的に作ったもので、昔はこれ1つ作るとそれが博士論文になるぐらいの重要なものだったんです。しかし、高い温度になると原子は活発に動き合い、十分拡散して容易に一番安定な状態に行くんですけれど、低温状態ではなかなか原子が動かない。そうすると、われわれが「準安定状態」と呼んでいる、平衡状態とは異なる状態を見ていることに

なる。そういう意味で、従来の実験状態図というものにはかなり不備があるわけです。

編集 これを、目的別に繰り返していくことになる？

毛利 例えば、1つの元素は電気の伝導性が非常にいい。もう1つの元素は高温になるほど強くなる。では、二つ合わせれば高温で強く、なおかつ電気の伝導性がいいものができ上がるというような発想です。実際にはそうはならなくて共に悪くなってしまうたりすることが多いんですけれど…。(笑)

編集 組み合わせを考えるだけで膨量がしてきます…。(笑)

毛利 実際そうですね。今説明したのは2元素の状態図ですが、三つ目の元素を入れてみればという3元素系とか、さらにはもっと多元素系について調べていかないといいけない。それから、

温度だけではなく、圧力等の他の要素が加わったときには予期しないようなものが出てきたりもします。組み合わせというのとはほとんど無限にあると。編集 そこで、遂にシミュレーションが出てくる。(笑)

作れないものを創る

毛利 計算をやって、状態図をまず理論的に予測してみようというのが1つのポイント。それから、先ほどの低温状態の実験のように、必ずしも正確なものが得られていない可能性があるものの。このあたりが計算をやっていく意味かなと思っています。

編集 先にお話を伺った寺倉先生の場合、「見えにくいものを観る」がポイントでしたが、先生の場合は、どのようなシミュレーションになりますか？

毛利 おそらく、計算物理や化学の人たちがやっておられるのは、従来の実験では見えないようなものを見ていくんだということです。それに合わせた材料工学の言い方をすれば、「作れないものを創る」となるかな。工学的な発想からいうと、作れないものを計算機の中で創ってみるというのが面白いところじゃないかなと思います。

編集 ある意味、シミュレーションは理想状態に近い想定です。材料工学から見た作れないものを創るというのは、もしかすると本当に作れないという可能性が…。例えば無重力じゃないと作れないとかがあり得るわけですよ。ね？

毛利 そういうことです。現在の状態で作れないということは、どういう状態になったら作れるのかという条件を押さえることに工学としての意味があると思います。今は作れないけど、シミュレーションでその性質を測り、測定して見る。すると、こんな新しい特性が出てくるというようなことは分かる。そうしたら、こんなものを作ってみる価値があるんじゃないですかというふうにフィードバックすることは重要だと思っています。

スパコンの使い方

編集 現在シミュレーションを行うとき、先生はどのようなスパコンの使い方をしているのですか？

毛利 お恥ずかしい話、現在ではあまり…。かつてはヘビィユーザだったんですが。

編集 では、そのときの使い方は？

毛利 電子論的ともいいますか…、もうちょっと基本のところの話をしたいといけません？

編集 お願ひできますか？(笑)

毛利 ミクロで材料を見たときには原子の集合があり、原子と原子が相互作用をして、できるだけ安定な性質になるようにしている。ところが、もう一方において、乱雑になろうとするエントロピーの効果がある。その2つの力の



兼ね合いとして一番安定な状態ができていると考えるわけです。

編集 すると、その二つの力を計算してやらなければならない……?

毛利 ええ。エネルギーの計算というのはシュレーディンガー方程式。いわゆる量子力学の方程式です。エントロピーの計算というのは、多体系の粒子の統計力学の問題になるんです。つまり、量子力学と統計力学を2つ組み合わせたいような計算をやるんですけれども、特に量子力学の計算が非常にへ

戻りたいという気持ちはいつも持っています、その予算も一応毎年計上はしているんですけど。

編集 実際にP C クラスタは自分で組んでやってらっしゃるのですか?

毛利 そこまではね。やっぱり私は単なるユーザです……。効率よく結果を出したいだけで、自分で組むとなると、手間を含めたコストパフォーマンスがきついですよ。

編集 現在はどういうにして計算処理をされているのですか?

ビーな計算で、そのあたりが当時はずいぶんお金がかかったんです。学内でもトップクラスのヘビーユーザだった……。

編集 使わなくなった理由は、そうすると課金の問題ですか?

毛利 もう限界と違って、ワークステーションに切り替えたんです。それからなかなかスパコンに復帰していないというのが現状です。

編集 そうすると、現在はほとんどワークステーションもしくはP C で十分ということですか?

毛利 ワークステーションやP C クラスタでできるといふふうなレベルなんだと思います。ただ、常にスパコンにもう1回

毛利 単純な計算ですと、日々自分でプログラムを書いて、FORTRAN を動かしていくというのをします。ヘビーな計算というのは、入力して時間がたってから取り出すということになります。それから共同研究者がいますので、そちらの方はスパコンを使ってやっています。東大ですけど。

編集 かつてのヘビーユーザがスパコンから遠ざかっていくというのは、ありがちなのですが、経験者としてスパコン離れを分析すると、こういった理由が考えられますか? (笑)

毛利 基盤センターはここごろずいぶん広報活動をされていると思うんですけど、存在意義を具体的に訴えることが重要だと思うんですよ。P C やワークステーションでの研究スケールに比べて、センターではどれだけ進んだことが、同じ使い勝手できるといふことを。

編集 ただ、非常に難しいのは、スパコンさえ使えば全ての成果が画期的に上がるかというところ、そんな単純な話でもない。絶大な効果が期待できるものと、そうでないものがある。そうでないものは、やはりアルゴリズムから見直す必要があるし、サポートする側にも強い領域とそうじゃない領域がある。この辺になると、センターの限界点になってしまふ。

毛利 そうすると、センターの役目というのは、結局、計算機資源の集約とメンテナンス。そこでやる計算そのものについてはお任せという、従来とあ



まり変わらないことになってしまふ。プラスアルファのサポートも少しだけ……。プログラム相談員がヘビーユーザの領域まで踏み込めるわけではない……。

編集 何とか変えていこうと日々努力はしているんですが……。例えば、初心者クラスに関しては講習会でサポートはできても、先端ユーザになると難しい。そのような時、H S S のようなコミュニティが力強い存在となってもらえればと思うのですが。

**H S S が生み出す
新たな学問のかたち**

編集 H S S での活動は、やはりお互いの関心やノウハウの共有がメインになりますか?

毛利 ええ。そもそも計算機科学とかシミュレーションというのは、学際性

が非常に強い分野ですよ。大規模なデータをどのように処理するかとか、速いアルゴリズムを作るためにどうしたらいいとか、この辺は皆さんの共通項じゃないかと思うんです。だから、皆さんで知識や情報を共有して、自分の研究に役立てられればありがたい。

編集 なるほど。HSSにはセンターの教員も入っていますから、効果的な議論ができますよね。ただ、ユーザーサイドの話ではなく、研究という側面から見た

いえば情報の人たちしか使わなかったけど、今では物理、化学、機械の人、さらには人文科学の方も使っておられる。それと同じように、シミュレーションという分野の進化もあり得るのではと思っています。

創れるようになってきた」というのは、やはり、それ自体で大きな変革ですよね。今までは、実験的にとにかく試行錯誤を繰り返しながら新しいモノを作ってきた。それが理論的に予測することができるようになり、従来の平衡状態では存在し得ないような物質の性質を、コンピュータの中で作って測定することができるようになってきた。

毛利 例えば、各研究室で並列機やPCCクラスタを持っていたとしても、そういうものは必ずしもフル稼働はしていない。そういうものを集めて、学内の人間で共有して使えるようになることがありがたい。つまり、学内にある計算機資源の管理、これは、やはりセンターでなければできないと思うんです。

毛利 そういう意味では、いわゆるグリッド・コンピューティングという今はやりのテーマですが…。

毛利 そうです。この間、科研の申請を出したんですよ。従来の科研プロジェクトというのは、研究対象が同じ人たちが集まっていたんですが、手法で集まる科研というのはあまりなかったんじゃないかと思っています。

この可能性はかなり大きくて、いわば工学そのものの在り方が変わってきているわけですよ。

毛利 それをメンテナンスも含めて、異なった機種も含めてやってくれるとありがたいと思います。

毛利 確かに技術的な問題というのは

が、この間、科研の申請を出したんですよ。従来の科研プロジェクトというのは、研究対象が同じ人たちが集まっていたんですが、手法で集まる科研というのはあまりなかったんじゃないかと思っています。

計算機から生み出されたサイエンスをまとめるような、そういうもう一つのセンターが必要になるんじゃないかと思っていますけどね。そのセンターでお互いの知識を共有することにより、各自の既成の学問分野の革新が行われる。願わくば、HSSがそういう組織の1つの核になっていくことができるんだっただけいいなと思います。

編集 ただ、実際に計算機資源は、使いたい時に使うためには余裕を持たせておかねばならないという矛盾がありますよね。スパコンのように稼働率が70%を越えれば、当然順番待ちが出てくる。異機種のコンピュータを並べてパフォーマンスを上げるためにはプログラムをどうすべきかという問題も…。

毛利 そうですね。シミュレーションという定義には非常に難しいところがあるのだけど、かつてコンピュータと

が、この間、科研の申請を出したんですよ。従来の科研プロジェクトというのは、研究対象が同じ人たちが集まっていたんですが、手法で集まる科研というのはあまりなかったんじゃないかと思っています。

計算機から生み出されたサイエンスをまとめるような、そういうもう一つのセンターが必要になるんじゃないかと思っていますけどね。そのセンターでお互いの知識を共有することにより、各自の既成の学問分野の革新が行われる。願わくば、HSSがそういう組織の1つの核になっていくことができるんだっただけいいなと思います。



…。さらに、PCCクラスタ、中型、大型となると、使えるリソースもそれぞれ違ってくるとか…。

毛利 確かに技術的な問題というのは

が、この間、科研の申請を出したんですよ。従来の科研プロジェクトというのは、研究対象が同じ人たちが集まっていたんですが、手法で集まる科研というのはあまりなかったんじゃないかと思っています。

計算機から生み出されたサイエンスをまとめるような、そういうもう一つのセンターが必要になるんじゃないかと思っていますけどね。そのセンターでお互いの知識を共有することにより、各自の既成の学問分野の革新が行われる。願わくば、HSSがそういう組織の1つの核になっていくことができるんだっただけいいなと思います。

…。

毛利 そうですね。シミュレーション

が、この間、科研の申請を出したんですよ。従来の科研プロジェクトというのは、研究対象が同じ人たちが集まっていたんですが、手法で集まる科研というのはあまりなかったんじゃないかと思っています。

計算機から生み出されたサイエンスをまとめるような、そういうもう一つのセンターが必要になるんじゃないかと思っていますけどね。そのセンターでお互いの知識を共有することにより、各自の既成の学問分野の革新が行われる。願わくば、HSSがそういう組織の1つの核になっていくことができるんだっただけいいなと思います。

梨紗のスパコン探検記

「はじめてのスパコン：あっ！という間のユーザ登録に感激」

北海道も夏になりましたが、皆さんお元気ですか。これまでスパコンのこととか、運用管理などの実際についてご案内してきました。どれもこれも初めてのことばかりで興味津々でした。今回のテーマは「はじめてのスパコン：あっ！という間のユーザ登録に感激」です。初めてi i C・HPCを利用される方の参考にしていただけるとうれしいな。

大宮 大型計算機システムを初めて利用するときには、利用登録が必要になりますので、「利用申請書」と「経費負担の責任者登録書」を提出してくださいね。申請書はすべてセンターホームページ(http://www.hucc.hokudai.ac.jp/shinsei_yoshi.html)からダウンロードできます。

梨沙 利用申請書には、名前、所属、連絡先、研究分野、それと支払責任者名を記入するんですね。この支払責任者って何ですか。

大宮 とっても仰々しい名前がついていますが、学生の皆さんでしたら所属している研究室の先生と理解してください。研究費を持っている教員ならば、自身が支払責任者になります。

梨沙 私の場合、指導教官の先生にお願いすることになりますね。

大宮 支払責任者の捺印が必要なので、先生によくお話をしてくださいね。理解ある先生が多いのでだいじょうぶだと思います。

梨沙 そうだといいいんだけど？

大宮 そのときに、いっしょに予算額を決めてもらいましょう。大型計算機システムは利用負担金で運営しています。この利用負担金は主に計算機などが消費する電気代を支払うために利用されています。だから、びっくりするような低価格で大型計算機システムが利用できるんですよ。どのような目的でセンターを利用しようと考えていますか？

梨沙 私は計算サーバに導入されているSASという統計パッケージソフトウェアを使って、データ解析と予測分析を行いたいと考えています。

大宮 それならば、基本サービス経費12,000円の負担だけで使っていただけます。もし、大規模長時間処理が必要でしたら、とてもお得なコースがありますのでご紹介しましょう。基本サービス経費12,000円、計算サーバの演算時間制限解除3万円、ディスク使用量3万円の合計72,000円となります。これですと処理時間

研究内容を熱く語られ、タジタジの大宮先生。完全にお株を奪われています。



【ご参考】共同利用係は情報基盤センター北館1階正面玄関右側にあります。平日(月曜日から金曜日まで)午前9時から正午、午後1時から4時30分まで受付しています。各種申請書の受付のほかに利用講習会や利用相談の受付になっていますので、お気軽にご利用ください。

受付 WEB画面で必要事項を入力して、「実行」ボタンを押すと自動的に処理が行われ... ほら、ユーザIDやパスワードが印刷されてプリンタから出てきました。



ユーザ登録用WEB画面。
必要事項を入力して、
「実行」ボタンを押すと
完了です。

梨沙 これが私のユーザIDとパスワードですか？

受付 そうですよ。計算機のアカウント(ユーザ)管理、課金管理、それと...ジョブ管理機能が連携して、すべての設定が完了しています。ですから、すぐにスパコンや計算サーバなどをお使いいただけます。

梨沙 3つの管理機能って何ですか？

受付 アカウント管理はユーザの氏名、所属などの利用者情報やコンピュータへのログイン/ログアウトを管理します。課金管理は利用する計算機とジョブの種類に応じて課金をしたり、ディスクの使用料やプリンタ出力枚数に応じて課金情報を収集しています。最後のジョブ管理はスパコンなどのバッチ・ジョブ実行時間や同時実行ジョブ数をウォッチして、運用ポリシーに従ったユーザ利用環境を提供します。

梨沙 とっても難しそう!それってたいへんじゃないですか？

受付 センターが長年かけて開発してきた専用のソフトウェアがあって、それとデータベースを組合わせて自動実行

できるようになってますから、登録作業自体は簡単です。

梨沙 とても便利ですね。いろいろな方の努力があって、今のセンターがあるんですね。よくわかりました。聞けば聞くほど奥が深いな... 感激しました!

受付 センターの申請などで疑問点や分からないことなどありましたら、いつでもお気軽にお訪ねください。今日は、利用申請にお越しいただきありがとうございます。

梨沙 連載3回目ですが、いつも驚かされてばかりです。スパコンはすごいって感心しちゃったけど、運用管理さらにユーザ対応も“すごい”って思いました。スパコンのことで、いつも新しい発見をして、得したみたいです。

**次回はいよいよスパコンの利用に挑戦です。
でも、分からないことばかりで...**

やファイル容量などをさほど気にせず使っていただけます。

梨沙 私は初心者なので基本サービス経費から始めてみます。それから、友達から聞いたのですが、学会発表のポスターを作るのに大判プリンタが利用できるんですね?

大宮 もちろんです。どんどん使って立派な研究成果を挙げてください。

梨沙 頑張って研究しなくちゃと、気合いが入ってきちゃった。

大宮 予算額が決められているので、利用負担金が予算額の上限に達するとそれ以上使えなくなるけど、予算オーバーしたときの対策として理解してもらえると、支払責任者にとっては安心です。

梨沙 結構考えられているんだなと感心しました。

大宮 それでは申請書を整えて、明日1階の共同利用係に提出してください。

梨沙 明日は頑張るぞ!

翌日、共同利用係を訪問

梨沙 失礼します。ユーザ登録をお願いできますか。

受付 いらっしゃいませ。ユーザ登録でしたらここで受け付けています。どうぞ中にお入りください。

梨沙 昨日教えてもらったとおりに、利用申請書と責任者登録書に記入してきました。

受付 はい、これで結構です。今すぐ手続きしますからね。

梨沙 え!すぐできるんですか。

受付 はい。ユーザ登録の作業はすべてオンライン化されているので、お待たせしません。すべて自動的に処理が行われます。

梨沙 すごいですね。どのように操作するんですか?



勇気を出してドアを開けました!



ドキドキしながら申請書を提出!
親切な対応にホッとしました。

スパコンInfo

ご存じですか?スパコンは北海道の共有インフラです

え、電車内部の電磁界強度を解析データとして表示しています。電車車体は半透明、人体およびシートをソリッドで表示しています。この図は 870 枚のシーンから構成される動画のうちの 1 シーンです。



Radio Wave Viewerで作成した
可視化結果の例

Radio Wave Viewerの特徴として、動画を表示しながら拡大・縮小、視点移動およびオブジェクトの移動が可能です。さらに、Onyx300 グラフィックボードからのアナログ出力をPCで動画キャプチャすることで、簡単に立派なプレゼンテーション用コンテンツを作成できます。

Radio Wave Viewerを東京で体験できます!!

(日本SGIのReality Centerで電車内の携帯電話の電磁波コンテンツを提供)

紹介を行った Radio Wave Viewer のデモンストレーションを、東京の日本 SGI 株式会社(以後、日本 SGI と略称)Reality Center で見学していただくことができます。日本 SGI Reality Center は、デモンストレーション、アプリケーション検証、データ検証および開発アプリケーションの試験環境とすることを目的に設置されています。日本 SGI のお客様およびアプリケーションパートナーを対象として、エンタテインメント、3D GIS、サイエンス、文化の可視化等さまざまなコンテンツのデモンストレーションを行っています。

3 枚の写真は、日本 SGI Reality Center でのデモンストレーションのようすを撮影したものです。当日は研究部門から大宮が参加し、たまたま見学に来られていた方々に Radio Wave Viewer を利用した研究成果の紹介を行いました。大型スクリーンに映し出される可視化結果は想像以上の迫力と説得力がありました。したがって、見学者からも質問が絶えることなく、講演者にとって研究発表とは異なった充実感が得られました。また、見学者にとっても思わず引き込まれるほどの魅力があったに違いありません。

機会がありましたら、是非とも見学・体験していただければと考えています。

大規模固有値計算ライブラリARPACKについて

大規模固有値問題解析のための計算ライブラリ ARPACK をスーパーコンピュータ HITACHI SR8000 で利用するための試験的な検討を行いました。作成したライブラリは 32 ビットアドレスモードおよび 64 ビットアドレスモードに対応しています。ライブラリの作成にあたって、スーパーコンピュータで提供されている自動並列化コンパイラを用い、ノード内共有メモリ並列処理(SMP)に適合させています。したがって、ノード内共有メモリ並列処理を行う場合、ライブラリをリンクするだけで ARPACK の機能を利用することができます。ご興味のあるユーザは本センターまでご連絡ください。

ARPACKについて

数値計算ライブラリ ARPACK(<http://www.caam.rice.edu/software/ARPACK/>) は 米国 Rice 大学 の R. Lehoucq, K. Maschhof, D. Sorensen および Chao Yang によって開発されました。今回検討を行ったソフトウェアはバージョン 2 で、1996 年に公開されたものです。このライブラリは PC Linux、ワークステーションおよびメインフレームなど多くの計算機プラットフォームに移植され、利用できるようになっています。

ARPACK は大規模固有値問題を解くために開発された FORTRAN77 準拠のサブルーチン集です。このライブラリを利用して、正方行列の固有値およびその固有ベクトルを求めます。エルミート行列、非エルミート行列および一般的な大規模疎行列に適用でき、大規模計算には不可欠なライブラリの一つです。現バージョンでは、行列要素として実数および複素数、精度として単精度および倍精度に対応しています。

PC Linux で解析をされているユーザで、

- (1) 大規模な固有値問題を合理的な時間内で解析したい
 - (2) パラメータを変更しながら、同時に多数の解析を実行したい
- などのご要求をお持ちでしたら、スーパーコンピュータを活用してはいかがでしょうか。数値計算ライブラリに関するご要望・お問合せ、ならびにソフトウェアのポータリング支援等について本センターにお気軽にご相談ください。

研究成果を東京で体験できます!!

ワイヤレスコミュニケーション可視化システムRadio Wave Viewerの紹介

大規模計算システム研究部門では、電磁波、特に高周波電波のさまざまな特性解析および高周波デバイスの設計等にスーパーコンピュータを活用した研究を展開しています。電磁波は五感で感知できないので、それに関する物理現象を把握するためには計算機シミュレーションと可視化が有効です。電磁波解析のためのツールとして、グリッドコンピューティングシステムSGI Onyx300上にワイヤレスコミュニケーション可視化システムRadio Wave Viewerを開発しました。本センターを利用されている方からデータを提供していただける場合、可視化およびアニメーションの作成を支援しますので、ご利用ください。

以下においては、Radio Wave Viewerの概要および日本SGI Reality Centerのデモンストレーションについて紹介します。

(1) データの準備



(2) 可視化実行



ワイヤレスコミュニケーション可視化システム Radio Wave Viewer

Radio Wave ViewerはSGI Onyx300をプラットフォームとする可視化システムです。利用方法は、上図に示すように(1)可視化データの準備と(2)可視化実行の2つのステップからなっています。ユーザは解析結果および構造データを用意します。解析データは電磁界強度等の物理量で、実数データを含むアスキーファイルです。解析結果ファイルが1つの場合静止画を作成し、複数個の場合動画(アニメーション)を作成します。さらに、解析対象の構造を可視化表示に含めることができます。構造データはCADソフトウェアを使用して作成し、DXF形式のファイルとして出力します。可視化に含める構造データの個数に制限はないので、部品ごとに構造データファイルを作成し、それぞれの部品に対してプロパティ(色など)を指定します。

可視化を実行する際には、コンフィグファイルを準備します。このファイルにフレーム数、ボリュームファイル、構造データおよびプロパティの指定を行います。可視化結果の例を右ページに図示します。電車、人体および座席シートは構造データとして与



日本SGI Reality Centerの外観。巨大なスクリーン、3台のプロジェクタおよびコントロールセクションが備えられ、室内では20名程度の参加者がデモンストレーションを見学できます。可視化サーバは隣接する計算機ルームに設置されています。



Radio Wave Viewerを使用したアニメーション表示により研究成果(電車内電界強度分布)について見学者に説明しているところ。大きなスクリーンに表示することで解析結果の迫力が見学者に伝わっているのを感じつつ、いつも以上にハイテンションで説明を行っています。さらに、ソフトウェアのすべての機能が実行可能ことから、質問内容や説明意図に応じたシーンに直ちに移行することが可能です。



大型スクリーンに表示される可視化結果を見ながら、解析結果について議論しているところ。スーパーコンピュータによる精緻な解析結果に見学者の質問は絶えない。見えないもの(電磁波)を可視化することで理解が格段に進むことから、説明を素直に理解でき、研究内容が見学者にとって身近なこととして感じられたのではないかと。

日本SGI Reality Center

営業時間 / 9:00~17:00

(見学の際には事前予約をお願いします。)

所在地・連絡先 / 〒150-6031

東京都渋谷区恵比寿4-20-3

恵比寿ガーデンプレイスタワー 地下1階

TEL: 03-5488-1811 (大代表)

スーパーコンピュータでのノード内分散メモリ並列計算実行方法

PC クラスタを利用して分散メモリ並列処理を行っている場合、計算機環境として

- ①多数のプロセッサを利用して並列計算をしたい。
- ②単一プロセスに必要な主記憶容量はせいぜい1GB程度であり、総主記憶容量はプロセス数×1GB程度になる。
- ③MPIライブラリを利用したオープンソースプログラムあるいはPCクラスタ用に開発されたプログラムを活用したい。
などのご要求があるのではないのでしょうか。本センターがサービスしているスーパーコンピュータがこれらご要求に応えます!!

本センターでサービスしているスーパーコンピュータ HITACHI SR8000 を利用して、ノード内分散メモリ並列計算を実行できます。さらに、複数ノードを利用することも可能なので、プロセッサ数に依存して処理性能が決定される MPI プログラムを、効率よく実行できます。

図にスーパーコンピュータ HITACHI SR8000 の構造を示します。全体は 32 個のノードで構成され、それらノードが高速バスで結合されています。また、各ノードは 9 個のプロセッサと主記憶装置から構成され、ユーザは 8 個のプロセッサと主記憶容量 6.5GB または 13GB を利用できます。バッチキューイングシステム NQS のオプションとしてノード数とジョブクラス (総主記憶容量および実行最大時間) を指定することで、ジョブが使用する計算機リソースを割り当てることができます。

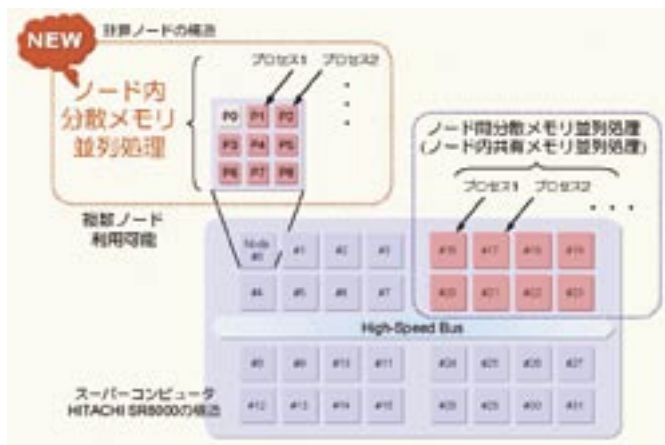
現行の利用法のほとんどはノード間分散メモリ並列処理であり、ノード内での処理は自動並列化コンパイラによる共有メモリ並列処理です。このような分散メモリ並列処理の適用範囲、長所・短所は下記のとおりです。

- ①少数プロセス (少数ノード) で大規模計算を実行するため、プログラム開発が容易です。
- ②各プロセスが大容量主記憶を利用する場合に適しています。
- ③逆に、プロセス数 (利用するノード数) が16程度になると、通常運用ではこれら多数のノードを占有利用することが困難になりがちで、待ちの状態が長く続くことになります。

一方、下記のようなノード内分散メモリ並列処理に基づく利用方法が可能です。

- ①多くのプロセスによる並列処理を実現できます。単一プロセスで1ないし2個のプロセスを実行できるので、少ないノード数 (8 プロセッサ / ノード) で多数のプロセスによる並列計算が可能です。ただし、1 プロセッサで2プロセスを実行すると処理性能が2分の1になりますので、1 プロセッサで1プロセスを実行させるのが適当です。
- ②比較的少容量の主記憶 (1GB 程度) で実行可能な並列プロセスを多数実行するのに適しています。

スーパーコンピュータのサービスはノード占有方式ですので、他のプロセスの影響を受けません。したがって、スーパーサーバ wine や計算サーバ malt に比較して実行が高速です。また、PC クラスタに比較して、スーパーコンピュータは信頼性 / 可用性に優れています。MPI ライブラリを利用した並列計算は大規模計算に欠かせない計算方式です。さらに、ナノテクおよびバイオ等の研究領域では PC クラスタ用オープンソースプログラムが開発されてきています。これらプログラムを高速に実行したいとお考えでしたら、ノード内分散メモリ並列処理を利用してください。また、現在スーパーサーバ wine および計算サーバ malt で分散メモリ並列計算を行っているユーザの皆様方にも、スーパーコンピュータのノード内分散メモリ並列処理を利用して、計算の高速化および大規模化を実現していただきたいと考えています。



ノード内分散メモリ並列処理に関して、利用講習会ホームページの「(3-2)スーパーコンピュータ SR8000 の複数ノードを利用した分散メモリ並列処理(MPI)」スライド資料の付録で紹介していますので、ご参考の上是非お試しください。また、利用講習会を定期的に実施していますので、受講してください。個別相談にも随時応じています。

備考：利用講習会ホームページ

<http://www.hucc.hokudai.ac.jp/~a10019/kosyu/kosyu90.html>



相 談 員 プ ロ フ ィ ー ル

近 本 善 光



大学院
地球環境科学研究科

金曜日
13:00~15:00
担当

地球環境科学研究科の近本です。相談員を始めて2年目になります。私は大気と海洋における相互作用の研究をしています。具体的にはエルニーニョ現象に対する大気海洋系の応答を調べています。情報基盤センターでは大気の大循環場を数値シミュレーションしたモデルを用い、スーパーコンピュータで計算しています。以前は、情報基盤センターのコンピュータを使うことに対して敷居が高いという先入観があったのですが、いざ利用してみると、それが思い違いであっただけでなく、研究を効率的に行えることに気づかされました。情報基盤センターのコンピュータにはいろいろなソフトウェアがインストールされており、例えば、複雑な数式を解きたい場合にはMathematicaが計算してくれますし、データがあればその統計処理をSPSSやSASで簡単に行えます。これらのソフトウェアの使い方を一度覚えてしまえばすぐに結果がでますし、多少、計算時間がかかったとしても自分で計算するよりも明らかに速いです。ただし、これらのソフトウェアを初めて使用する場合、ソフトウェアの起動方法が分からなかったり、マニュアルもぶ厚かったりするので、一人で習得するのはとても大変です。そんなときは、是非、気軽に相談員に質問してみてください。とは言うものの、情報基盤センターには非常に多くのソフトウェアがありますので、質問に対してすぐに適切な解答を見出せないことが数多くあるかと思いますが、どうぞ、よろしくお願いします。

嶋 田 陽 一



大学院
地球環境科学研究科

月曜日
13:00~15:00
担当

博士課程1年から相談員をさせてもらい今年で3年目になりました。専門は海洋物理学で、研究対象はオホーツク海のサハリン東岸沿いを南下する東サハリン海流です。私はこの海流をシンプルなモデルを用いて研究しています。シンプルな故に?いろいろな条件を設定した実験を多く計算するので、スパコンには大変お世話になっています。プログラムはFORTRAN77を使っています。また、初心者ですが、Mathematicaを使って高次の代数方程式や微分方程式を解いたりしています。他にも類似した機能をもつソフトウェアがありますが、Mathematicaはとても便利だと実感しました。自分でプログラムを作るよりもこのようなソフトウェアを利用することは、研究の効率化のために有益かもしれません。情報基盤センターのホームページを御覧になるとおわかりになるように、情報基盤センターでは多くのソフトウェアがありますのでぜひお試しください。使い方検索サイトからすぐわかりますし、相談室のマニュアルを閲覧したり借りることができます。計算機のトラブルで初心者の方によくありますが、リモートマシンの接続に苦慮している方が多いみたいです。相談室ではこのようなトラブルも親切に対応しますのでどうぞお訪ねください。

相談室Q&A

Q 統計プログラムシステムSASを使用するときのデータの作成や入力方法を知りたい。

A SASで処理するための文字データや数値データは、パソコンWindows上で作成する場合はメモ帳などのテキストエディタやExcelを利用できます。Excelで作成した場合、保存形式を.xlsではなく.txtもしくは.csvとします。



パソコン上で作成したデータは、ファイル転送ソフト(FFFTP等)を用いて本センターのディスクに転送します。

SASプログラム(.sasファイル)の中でのデータ入力の指定は、次のようにfilenameステートメントでフルパス名を指定し、infileステートメントで「aaa」のように任意のファイル参照名で関連づけます。

```
filename aaa '/home/a10010/testapp/sas/sintai/sintai.dat';
:
data;
infile aaa;
input namae $ seibetu $ sincho taiju iro $;
:
```

また、malt上で直接データの作成・編集を行う場合は、テキストエディタとしてviエディタやemacsを利用します。

Q 名寄からSASを使いたい。ダイヤルアップで使えるのはわかるが、その他の方法はあるか。

A SASを実行するには、以下のような方法があります。



(1) パソコンから接続するときは、TeraTerm(フリーソフト)等の端末ソフトを使いtelnetでmalt.hucc.hokudai.ac.jpに接続し、ログインします。SASのプログラムをsample.sasとした場合、次のようにコマンド名「sas」で実行できます。

```
%sas sample.sas
```

実行結果は、sample.lstに出力されます。また、ログ情報はsample.logに出力されます。先のQ&Aで示したとおり、SASのプログラムやデータはパソコンで作成・編集しftpでmaltにファイル転送し、実行結果もftpでパソコンに取り込んで検証する方法が手軽な使い方です。

(2) Internet Explorer等のブラウザがあればASPサーバの機能によりXWindowのGUIによるSASが実行できます。詳細は本センターのHPの「ブラウザからの各種アプリケーションの実行」を参照ください。

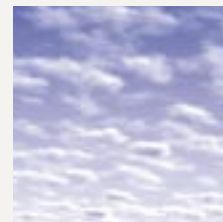
(3) クライアントマシンとしてLinux環境があれば、telnetによる利用、XWindow環境でのGUIによる実行が可能です。

(4) SAS関係のマニュアルは相談室で閲覧・貸出が可能です。



●メールマガジン講読のご案内

本センター大型計算機システムに関するさまざまなお知らせ(運用予定、利用講習会、講演会案内、トピックス)、また、利用法に関するヒントをメールマガジンでお届けしています。メールマガジンを講読されるためには登録が必要です。下記ホームページで登録または削除を受け付けています。本センターの利用登録の有無に関わらず、メールマガジンの講読が可能(無料)ですので、この機会に是非登録されてはいかがでしょうか。
メールマガジンの登録または削除 <http://mag.hucc.hokudai.ac.jp/>



●スパコンのための情報サービス一覧

情報サービス	内 容
利用 者 受 付	スパコン利用のための登録・総合情報 TEL 011-706-2951
利用 講 習 会	使い方・プログラム講習 http://www.hucc.hokudai.ac.jp/~a10019/kosyu/kosyukai.html
利用者相談室	プログラム相談 http://www.hucc.hokudai.ac.jp/support.html TEL 011-706-2952
メルマガ情報	さまざまなスパコン情報の速報 http://mag.hucc.hokudai.ac.jp/
技 術 情 報	スパコンの使い方・技術情報 http://www.hucc.hokudai.ac.jp/gijyutsu_jyoho.html
iiC-HPC	大型計算機システムニュース、その他ダウンロード http://www.hucc.hokudai.ac.jp/koho_syuppan.html 大型計算機システムニュース郵送申し込み http://www.hucc.hokudai.ac.jp/~a10019/iic-HPC/

●編集後記

第4号の特集は「HSS:シミュレーションの可能性」と題してお送りしました。特集中に「シミュレーションという概念は難しい」という発言が出てきます。この難しさの由来は、計算機科学の進歩とともに、シミュレーションも成長を続けているからに他なりません。見えないものを観て、作れないものを創れるようになった現在、その成果を既存の学問領域に持ち返るだけで良いのかどうかをわれわれは問いかけられています。ツールやセンサーが学問領域や世界観を変えた例は、科学史の中では枚挙にいとまがありません。果たしてシミュレーションがそれに匹敵するのかどうか、われわれは、そろそろ解答を出す時代にさしかかっているようです。

編集委員長 伊藤 直哉

●次号の特集予告

次号のiiC-HPCから、広報誌内容を改編します。今までの特集枠は残しながら、スパコンの利用法に関する新連載がスタートします。コンピュータ関連の内外の最新情報、トピックスおよびトレンドなど、さまざまな角度から興味を持って読んでいただける話題を提供します。さらに、スーパーコンピュータの活用法を具体的な例を示しながら、分かりやすく解説していくのが連載の狙いです。特集ともども、新たなiiC-HPCの進化形に御期待ください。

●本誌へのご意見をお聞かせください。

連絡先: koho@iic.hokudai.ac.jp

北海道大学情報基盤センター共同利用係 TEL 011-706-2956 FAX 011-706-3460

iiC-HPCニュースはインターネットからダウンロード可能です。

URL http://www.hucc.hokudai.ac.jp/koho_syuppan.html

..... iiC-HPC第4号

編集・発行: 北海道大学情報基盤センターシステム利用専門委員会

●国際広報メディア研究科

伊藤 直哉

●理学研究科

見延 庄士郎

●情報基盤センター

大宮 学

●工学研究科

萩原 亨

●情報基盤センター

渡邊 浩平

●農学研究科

谷 宏

●文学研究科

樽本 英樹

●北見工業大学

桜井 宏

印刷: 正文舎印刷株式会社 TEL011-811-7151

