

iiC-HPC

Vol.5
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

センタースパコンから ノーベル賞受賞者を!!

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.5

CGを使って博物館の照明シミュレーションを行った例である。リアリティのある照明計算を行うためには、光源からの直接光だけでなく、間接光を考慮しなくてはならない。光源から発した光は、壁面や彫像表面で反射し、別の点に到達する。これが間接光である。間接光を考慮するためには、全ての点の間の光のエネルギーの授受を計算しなくてはならない。この計算は、結局は、巨大な連立一次方程式に帰着される。この例では、30万×30万の係数行列を持つ連立一次方程式を解かねばならない。直接的にこの方程式を解くことはほぼ不可能なため、収束計算により解を求めることになる。さまざまな高速化技法を活用しているが、それでも膨大な計算コストを必要とする。しかし、間接光を考慮することで、柔らかな陰影表現が可能になり、リアリティの高い映像を作成することが可能となる。



●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

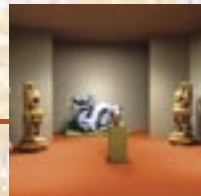
われわれは、スパコンの現在を考えます。

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.5

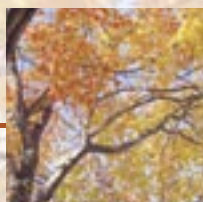
●北海道大学大学院情報科学研究科 土橋 宜典

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 〈インタビュー〉
センタースパコンからノーベル賞受賞者を!!

●北海道大学情報基盤センター長 山本 強

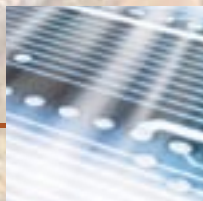
04-09



10-13

新連載
スパコン・アカデミー

●大規模計算システム研究部門 大宮 学



連載
梨紗のスパコン探検記

●第4回
充実したユーザサポートでスパコンもス〜イスイ!

14-15



16-19

スパコンInfo

●生体分子シミュレーションパッケージAMBER8が
利用できるようになりました!!

●相談室Q&A



INTERVIEW

センタースーパーパソコンから ノーベル賞受賞者を!!

情報基盤センターは北大IT化の中核たれ。
現行の20倍の性能を持つ
新スーパーコンピュータ、
ポスト地球シミュレータへの期待。
情報基盤センター長 山本 強が語る
コンピュータと北大、そして北海道の未来。



山本 強

Tsuyoshi YAMAMOTO

■情報基盤センター長

昭和28年北海道生まれ。大学院修了後、富士通株式会社、北海道大学工学部、大型計算機センター（現情報基盤センター）などを経て、平成11年からは大学院工学研究科電子情報工学専攻、平成16年からは大学院情報科学研究科でCG、ギガビットネットワーク応用、医用画像処理などの研究・教育に従事。平成17年4月から情報基盤センター長。株式会社メディカルイメージラボ技術開発担当取締役として産学連携も行っている。平成15年度北海道文化奨励賞受賞。趣味は釣りとかタイ料理。

編集 本日は、本年4月に情報基盤センター長に就任された山本強先生にお話しをおうかがいいたします。

山本 よろしくお願ひします。

編集 情報基盤センターが開設されて2年半がたち、大学も法人化されたわけですが、まず、新センター長としての抱負をお聞かせください。

スマートキャンパス・ヘッドクォーター

山本 まず、センターがこれからどう発展していくべきかという問題を考える際に重要なのは、センターがサービスを提供する対象の問題です。それは単に大学という狭い領域ではなく、広くアカデミックソーサエティーと考えるべきだと思います。そういう意味で、

私は、情報基盤センターの目指すべき姿を一言で言うと、「スマートキャンパス・ヘッドクォーター」という言葉でくくれるのではないかと考えています。

編集 スマートキャンパス・ヘッドクォーターとは具体的にどのような機能ですか。

山本 21世紀の大学は、IT装備された、革新的かつ効率的な大学環境をつくっていくかねばならない。それで研究とか教育を加速する必要がある。それは今、日本だけでなく世界的に求められているわけです。大学内でも、皆さんそういう認識はお持ちではありませんが、各々が固有のビジョンを持っているのではないのでしょうか。それがいささかバラバラに進んでいるのが現状ではないか。サッカーに例えると、個々のプレーヤーが分散して戦っているよ

うなものです。ボランチが全体の流れを制御して強いチームになれるのですが、現在のありようはそうなっていない。

情報について言うと、その司令塔の役割を担うべき組織というのは、ここ情報基盤センターなのです。ただ、そのことをセンターの教職員が勝手に思っているのもダメです。そのためには、質のともなったメッセージを出していかなければならない。私の仕事は、センターの研究者、技術職員、事務職員がメッセージを出しやすい環境をつくることです。

我々はよい素材をたくさん持っていると自負しています。スーパーコンピュータもあるし、情報ネットワークもあり、汎用システムもある。それらをうまく使って我々がその上にメッセージを乗せて、「スマートキャンパス」というビジョンを打ち出してゆきたい。キャンパスの形を変えていきましよう、その仕事を、わが情報基盤センターが率先して行っていきたいと思います。

もう一つ重要なことは、この情報基盤センターは、単に北大のセンターということじゃなくて、北海道、それから日本国内全域に対してサービスを提供する立場にあります。そこで大事なことは模範になることだと思います。我々は北海道大学というキャンパスを使って、スマートキャンパスの形を示していく、それを見てくださいたい。

なぜ北大にスーパーコンピュータが必要なのか

編集 一言でいえば、情報基盤センターは、北大がスマートキャンパスになるための司令塔たるべきであり、また、北海道大学は、全国の大学のIT化のモデルになれということですね。わかりました。次にセンターにとって重要な位置づけである大型計算機についてお話しをおうかがいしたいのですが、今、全国共同利用施設としてのセンターの立場の話がありました。が、全国共同利用施設としての情報基盤センター、そのなかの大型計算機の今後について、山本先生のお考えをお聞かせいただけますか。

山本 まず、勝手な言い分に聞こえるかもしれませんが、北海道にスーパーコンピュータ、つまり全国最大規模、世界でも一流水準ですか、そういった情報処理環境を私は何が残したいと考えています。残したいじゃなくて積極的に置くべきだ。また、新しいものも引っ張れるものなら引っ張ってきたい、これがまず私の考えです。そのための努力を惜しまない。

なぜ、北海道に大型計算機が必要かというと、大学が法人化されましたが、法人化されて何が起るかというと、会計年度単位で物事を考えるようになる。年度単位で見て、必要が必要でないかの判断をしていきますと、長期的ビジョンに欠けるくらいがでる。例え

ば、利用率といった短期的な指数で、スーパーコンピュータがいるかいらな
いかという議論は、単年度会計の議論
ではないか。単年度会計でいったら赤
字部門を切り捨てて、黒字部門を取り
あえず伸ばせばいい。短期で会社を回
す一番いい方法は赤字部門を切ること
です。

しかし、大学というのは本来そうい
うものじゃなくて、我々の会計年度は
1年じゃない。最低でも5年です。な
ぜかという中期計画も5年で書くわ
けです。だから最低でも5年とかそう
いうスパンでもって、この北海道大学
の中で起る研究活動に対して、適切
な計算環境を提供していかねばならな
い。

編集 なるほど

山本 突発的に起こってくるある種の
計算需要なり、研究ニーズにいつ何時



でも応えられる環境を大学として持つ
ているということは大学経営の基本中
の基本だと思っています。さらに言えば、
教育経営と研究経営の考え方の違いも
あると思います。教育経営というのは
ある意味で予算を立てやすい。人口動
態を踏まえた学生数の確保とか、教育
計画をつくるかとそのような問題です
から、どちらかといえば計画ベースの
話です。

それと比べて研究計画は難しい。
特に資金のマネジメントとファシリ
ティーについてはそれが顕著です。
スーパーコンピュータを入れようとし
ると、最低でも2年はかかります。例
えばあるときに世界的な研究のアク
ティビティーが起こったとして、それ
に対して北大が対応しようとしても、
IT環境整備だけで2年ぐらいかかつ
てしまう。今の研究活動の速度を考え
ると、立ち上がったときにはその分野の主導権は他所
に持っていかれてしまいま
す。

私としては北海道大学
の中に、とにかく計算環境
としては最高水準のものを
1つ押さえておく、まずリ
ザーブすることが大切だと
考えます。そういった環境
は日常的な教育や研究に積
極的に使われ、いろいろな
形で皆さんに利用してい
ただけるようにする。安定し
た需要を開拓すると同時

に、必ずヘッドルームといいますか、
空きの部分を確保しておきたいと考え
ています。

編集 確かに、必要があるというのは
理解できるのですが、それがなぜ北海
道なのか、北大なのか、そこについて
は、広く日本国民に説明責任が生じる
と思うのですが。

山本 難しい質問ですね。答えの一つ
の切り口になるかと思うのですが、コ
ンピュータを計算力として見るか、計
算環境として見るかによって考えが異
なってくると思います。計算力は、こ
れはどこにあってもいい。今、グリッ
ドという活動がありますね、日本中の
計算リソースを束にするというアプ
ローチですが、それに対して我々は積
極的に関わっております。我々もグ
リッドのコンポーネントの1つです。
北大情報基盤センターのリソースも当
然ながら全国規模の計算グリッドの1
つのエンジンなわけです。

皆さん、情報処理や大規模シミュ
レーションのときに、計算パワーその
ものを見ているのでしょうか。これか
らはセンサーから可視化まで含めた総
合環境として情報システムを見るよう
になると思うのです。地震に関する研
究はその典型的なものです。地震のシ
ミュレーションというのはシミュレー
ションとは言いながら、実は全国に網
羅されている地震計センサーをいかに
リアルタイムで取り込めるかが決め手
になりますし、研究成果を社会に還元
するためには数値だけでなく、可視化

やネットワークサービスまでを考えた
システム化が必要になってきます。

それから大事なものは、そのような計
算環境を、我々が自分たちの意思で動
かしたり止めたりできることですね。
基本的には共同利用なのですが、ただ、
北海道に例えばある非常に大きな研究
があつて、これを優先させなければ北
海道は生き残れない、そういうことが
発生したときに、我々が自分たちの意
思で、例えば運転のモデルなり何なり
をちゃんと制御できるエンジンをもち
必要があるのではないのでしょうか。僕
はあるべきだと思う。

例えば、レンタカーがあれば車は
全部いらないう議論があります。
ずっと昔からありましたが、いまだに
皆さんそうはならないですね。それ
はやっぱり管理権という問題だと思
うんです。皆さんが乗用車を買うのは、
時間を買っているのではない。いつで
も使えるという権利を買っている。僕
はそれとまったく同じようなことが
スーパーコンピュータにもあるべきだ
とあっていて、大学なり地域なりが自
分たちの意思で運転というか、使用を
管理できるような情報環境というもの
は持つておくべきだと考えます。

編集 山本先生のおっしゃりたいこと
は、北海道という日本のなかでそれな
りの経済規模を持つ地域が、相応の計
算環境を保持する権利は有しておくべ
きだし、そのことは、日本国民も納得
してくれることではないかということ
ですね。では、次の質問ですが、ポス

ト地球シミュレータの動向が注目されていますが、その内外の動向についてどうお考えになつていらっしゃいますか。

ポスト地球シミュレータへの期待

山本 ポスト地球シミュレータというのはナショナルプロジェクトです。これは国家間競争だと思えます。従つてそのマシンが置かれる立地なりは、国としての利益を最大化するようにすべきです。これはおそらくこの先、誘致合戦が始まるだろうし、北大、北海道も候補の一つであり、かつ、その有力な候補になり得る潜在力を持っていると信じています。そのオペレーションの権利は当然、国にある。ゆえに、われわれはそこに口を挟むつもりは毛頭ない。

当然ながら国は賢い選択をするべきである。ここで北海道の宣伝をさせていただくと、北海道の優位性は何点かあると思います。まず環境の問題です。ペタ級のコンピュータになると、消費電力が中規模の発電所1個分ぐらいになる。その発電所1個分のエネルギーを消費するとなると、それに対する発熱の問題が出てきて、運転するためにかかる電力を例えば何割かが冷房とか冷却に食われるわけです。今、日本で一番重要な問題は環境だということは議論の余地のないことだと思うのです。

たとえばCO₂の排出を考えたときに、結局、日本が国力を誇示するために莫大なエネルギーを使っているのではないかという批判を受けることもありえる。では北海道がやることは何かというと、そういった最先端の科学と環境のバランスをとることだと思います。そのために北海道の環境は非常にプラスに働く。これは言い古されていることですが、北海道の優位性はまず平均気温が低いこととです。冷却にかかるエネルギーは温度差です。外気温と発熱体の温度の差が大きければ大きいほど、冷却するためのコストは小さくなる。もう1

つ北海道の優位性は、道全体で見たと

きに、多少のエネルギーを費やしたとしてもトータルで吸収できることです。

編集 つまり北海道は、スパコンの環境負荷を吸収できるということですね。

山本 そうです。もう1つ重要なのはやはり研究のアクティビティーですね。私も最近センター長になって、い

ろいろな研究者の方々と話をする機会があるのですが、ここ北海道にはたくさんさんの研究の芽ができています。特にバイオとかナノテクノロジーの研究分野で国家的なプロジェクトがいくつも動いています。それらは単なるシミュレーションというよりは、実用化、事業化という出口がはっきりしている研究です。これから、北海道発の新しい薬品とか、素材が日本を支えていくかもしれない。



いくかもしれない。そういう研究リソースが北海道にはたくさんあります。いささか手前味噌になりますが、北大、特に北キャンパスにはそういった要件がたくさん

ある。隣接する研究コミュニティがあつて、かつ外気温が低く、しかも市の中心部にある。そこで発生する熱を吸収可能なサイズの緑地エリアも持っている。ポスト地球シミュレータを北海道全体として積極的に誘致すべきだと考えていますし、それは日本全体の利益に合致することでもあるのです。**編集** 確かに北大は都会の利便性と豊かな自然が両立していますね。つい先

日、新しいスーパーコンピュータの調達が決まりました。次に新スパコンへの期待を語っていただけますか。

新スパコン、現機種種の20倍

山本 私は今回の調達は、大成功になるだろうと確信をしています。規模としても現時点でかなり大型のもので、5.3テラフロップスという国内最大級のスーパーコンピュータの導入が決まりました。前の機種が、256ギガフロップスですから、約20倍の規模になる。もともと、スパコンの発展の速度からいって、そのくらいの規模の進化は当然のことなのですが、それによって研究が加速すると思います。

しかしながら、単に速くなったというよりも、私が期待するのはそういった環境を特定の利用者だけに開放するのではなくて、積極的に若い人とか学生とか、そういう人にも使えるような環境を実現していきたいと思うんです。もちろん制度的な問題も残されてはおります。これだけのサイズがあるわけだから、最先端の環境をどんな学生や若い研究者に使っていただきたい。スーパーコンピュータだからこうでなければいけないとか、そういう時代はもう終わったのではないのでしょうか。研究と計算速度が関係するのかわかると、そうとは言い切れない部分もありますが、研究をよりよくするためには一番いい環境が必要なのは異論がないと思います。それ

について言えば、私は今回、その要望にはかなり応えることができたと思います。

センターは情報のハブに

編集 今、若い人々、研究者の話ができましたが、センターは若手の研究者にとってどうあるべきだとお考えですか。

山本 一言でいえば、アカデミック・ネットワーク・ハブです。例えばシミュレーションもそうなんですが、物理とかバイオにしても研究そのものは、やっぱりIT、コンピュータが必須です。これから大学は、社会にとって研究のハブとなるべきなのではないか。研究というのは今まで大学だけのものだけとされていたのですが、今

はそうじゃない。企業や民間機関でも積極的にすすめられている。今、パソコン1台は10万円で買えるわけですから、規模の大小を問わなければIT分野の研究はどこでもできると言っている。研究者のネットワークも大切ですが、それも誰でも作ることができる、と言える。最も重要なことは、研究や教育の核、中心となるハブと言えるものではないか。そのときに意味を持つてくるのは、シンボリックな意味付けとしての最高とか至高と形容されるものではないでしょうか。

変な比喻ですが、これは宗教と似ている。ご本尊ですね。センターのスーパーコンピュータというのはそういう意味を持つていて人的なネットワークのハブになり得るのではないか。ただ人が集まるということはありません。

す。つまりセンターをハブにして、その研究が深まり、その果実は、コミュニケーションに返されていく。そういうことを期待しているんです。

編集 スパコンが菩薩であつたり大仏であつたりするという考えはわからないではないのですが、その前提として、周りの人、学外の人も含めて広く社会が、センターがスパコンを管理しているということに対する合意というのか、理解をもってもらわねばならない。開かれた大学としては、その問題に関する説明責任が求められると思うのですが。

山本 そこについて言えば、やっぱり我々が信頼をしっかりと勝ち得るということではないでしょうか。センターが何か怪しいねとか、何かうまいことをやっているねというのはだめです。やっぱりここにこういう環境があるからよいということを、我々も示さなければいけない。私はその基本は、信頼だと思います。

センターはネットワークのハブ機能を持つています。この情報ネットワークは21世紀型大学では校舎の廊下みたいなもので、大学に不可欠なものです。それに加えて頼りになるコンピュータがあるというのが情報基盤センターの基本的役割なのだと思う。ネットワークと最先端のコンピュータがくっついて、スマートキャンパスが実現されていくのです。我々がいつもその環境を活かして、時代の要請に合ったものを提供していく。それが何年か続いてい

けば、十分信頼されるようになると思う。

**理系が日本を救う、
そのためには若者に最先端の
マシンを与えよ**

編集 分かりました。最後に、今回のスーパーコンピュータの導入があり、センターとしての次のビジョンは何か、ぜひお聞かせください。

山本 是非センターの環境を使った研究からノーベル賞級の受賞者を出したいですね。それぐらいの目標を設定して、我々は支援してゆきたいと思っています。センターと付き合っていたら、行き着くところはノーベル賞だといふ、そのぐらいになってほしい。





或いは、北大のセンターを使った研究から、会社を立ち上げて100億円の利益を上げるとか。夢は大きく持ちたい。

編集 夢のある話ですね。ならば、若い人たちがセンターの環境を使って、大きな研究をしたいと思うような施策をぜひ示していただきたい。

山本 賞を取れるような研究をセンターが募集して、プロジェクトとしてサポートするというのは面白いのではないかと思います。そのためには、若手研究者が、これができたら化学の世界の革命になるとか、ここが解決できれば画期的ということ、事前に我々にプレゼンテーションをし、我々が納得すれば、センターがその若手の研究者をサポートし賞を取りに行くなどという企画は面白い。そのため

なことをやりたいなあ。

そもそも、スーパーコンピュータ設置の目的にはみんなが使えるようにという考えがあった。30年ぐらい前からか、学術会議でコンピュータを全研究者に使わせるにはどうしたらいいかと考えたわけです。よって1時間何円かで使えるような拠点を置きなさいということになった。だから特定の人が集中的に使うというよりは、広く薄く多くの方に使っていたらこうという考えがあった。ところが今、パソコンが普及しちゃって、広く薄くという必要性がなくなった。よって、スパコンなんていらないという議論もではじめた。

さっき申し上げたようにすべての研究者が、それにアクセスできる機会を作ることをやっていたのでは、今はダメなのです。とんがっている人間

のプロジェクトの原資はセンターの情報環境ですから、それが成功したあかつきには情報基盤センターの研究者が堂々とそこに名を連ねる、これは研究の一環ですからね。そん

をどうやって一線を越えさせるか、そのための道具になるべきではないかと思うんです。道具になるというよりは、そのための後押しをする。物と人でね。それをうまくやれるような仕組みをつくっていききたい。ノーベル賞を取るとか、そういったわかりやすい目標を示して、そこに向かってゆきたいと思います。

編集 スパコンの役割が以前とは変わったということですね。

山本 ええそうです。僕は典型的な理系人間なんです。だから、理系は日本を救うと信じています。昔、ラジオ少年だった頃、大人が使っているものと同じものを使いたいとも思っていた。コンピュータだって同じです。皆さん、今は、パソコンがあるじゃないかとおっしゃるけど、例えばこの間、アンダマ海の地震が発生して、地球シミュレータが瞬時にデータを解析した。そういうのを見ると、グッとくるわけです。自分もそういうものに接してみたい。

通常の研究であれば、パソコンでやったって結果は同じなのかもしれないけれど、やっぱり子供たちとか、若い人たちは、世界のトップクラスの研究環境に接したいのだと思う。

例えば、地球シミュレータで計算した経験をする、その体験が記憶に焼きこまれて、自分の可能性が無限に広がっていく

ように感ずるものです。君たちは学生だからこの程度で満足しろというのはダメだ。つまり、スパコンは研究用のものだから、学部学生使用不可とか、あるいは高等機能教育センターで一年生に教えるには早すぎるとかそんなことじゃなくて、北大に入って理系を目指す学生諸君に世界のトップクラスの研究環境に触れる機会を作りたい。そして、そのような一流のものに触れた上で、今はパソコンしか使えないけど、俺は、私は、世界最高水準の研究環境に接した記憶が残ると、将来に対する夢が格段に広がると思うのです。



知 っ て 得

新連載

す
る
!!

スパコン アカデミー

本号から、新しい連載記事としてスパコンに関するさまざまな技術を取り上げ、わかりやすく解説するコーナーを企画しました。スパコンの世界で何が行われているのか、どんな技術が注目されているのかを知る絶好のチャンスです。第1回目の今回は、パーソナルコンピュータ(PC)向けデュアルコアCPUの話題を取り上げます。スパコンではマルチコアCPUが当然ですが、PCでも主流になっていくのは間近です。本編では、PC向けデュアルコアCPUの動向や活用技術を解説します。

大規模計算システム研究部門 大宮 学

SUPERCOMPUTER ACADEMY

デュアルコアCPUとは？

本年第2四半期に、PC向けデュアルコアCPUが2大プロセッサメーカーから発表されました。米国インテル社は4月18日にPentium Extreme Edition 840、5月27日にPentium D 840/830/820を発表しました。

一方、米国AMD社は4月21日にOpteron デュアルコア版およびAthlon 64 X2の製品発表を行っています。さっそく、PCメーカーからこれらデュアルコアCPUを搭載したマシンがリリースされ、すでに利用されている方もいらっしゃるのではないでしょう。

一般に、複数のCPUを1つにパッケージ化したプロセッサを、マルチコアCPUと呼び、そのうち2個のCPUが1つにパッケージ化されているのをデュアルコアCPUと呼んでいます。お気づきかもしれませんが、CPUという言葉がさまざまな意味を持つようになるため、計算機等の調達においては、「1個のCPUが複数のコアを有している場合、コア1基を1 CPUとする」などのCPUの定義を行う必要があります。

高速化とCPUクロック周波数

それでは、なぜ今

デュアルコアCPUが注目されるのでしょうか。一般に、PCのパフォーマンスを評価するときの値として、CPUのクロック周波数に注目するのではないのでしょうか。ハイエンド（高価な）PCにはクロック周波数の高いCPUが使われています。それは、クロック周波数が高いほど、CPU内部で行われる単位時間あたりの処理回数が増加するため、結果として高速な計算処理が実現されるからです。このこ



とは、キャッシュ（チップ内に含まれる高速アクセス可能な記憶領域）のみを利用するようなプログラムでは、効果てき面です。取り扱うデータ量が増加して、主記憶領域を使いながら処理をするようなプログラムでは、CPUのクロック周波数を高くする一方で、キャッシュ容量を増加させたり、主記憶からキャッシュへのデータ転送能力（メモリバンド幅）を増加して、データ

がメモリとCPU間をスムーズに流れるような構造にする必要があります。ですから、CPUのクロック周波数を高くすると同時に、CPU周りのハードウェア構成や性能を向上することが必要です。

PC向けシングルコアCPUのクロック周波数はここ数年で3・8 GHzにまで到達しています。一方で、消費電力は110 Wを超えています。クロック周波数をさらに向上するためには、熱設計や冷却方法などの問題を解決しなければなりません。その解決はとても困難であることが明らかになっています。

クロック周波数からスレッド性能へ

そこで登場したのが、デュアルコアCPUです。デュアルコアCPUのクロック周波数は2から3 GHz程度と必ずしも高くはないのですが、前述の熱設計や冷却の問題をとりあえず回避することができま。さらに、プロセスまたはタスクを2つのCPUでうまく分担して処理できるのであれば、シングルコアCPUでは実現できない性能を実現することが期待できます。このようなことは、スパコンの世界ではすでに常識です。例えば、本センターでサービスを行っている現行スパコンではプロセッサのクロック周波数が800 MHz

しかありません。それにもかかわらず、高い演算性能を実現しています。

いつものことですが、PCユーザとスパコン・ユーザには計算機に対する大きな認識の違いがあるように感じています。普段PCで科学技術計算を行っているユーザから、「PCに比較してスパコンではどれくらい高速になりますか？」と尋ねられることがよくあります。いつも答えるに悩むのですが：少量の主記憶容量で、計算負荷の高いプログラムですと、PCのほうが早く結果がでると考えるのが妥当です。それは、CPUのクロック周波数に依存してほぼ計算時間が決定されるからです。この場合、CPUのクロック周波数が高いほど有利になります。PCで運用しているプログラムをスパコンで実行されて、その遅さに驚かれるユーザがいます。上記の理由を考慮すると当然の結果であると考えます。

それでは、クロック周波数がそれほど高くないCPUのスパコンで、高い処理性能が得られるのはなぜでしょうか。それは、複数のCPUを同時に利用した並列処理を実行することによって、全体の処理性能を向上しているからです。並列処理性能を十分に引き出すためには、並列処理に適した計算アルゴリズムや解析法を適用することが重要です。デュアルコアCPUでは、このような並列処理を念頭においてプログラム開発が求められます。ちなみに、ひとつのプロセスで並列処理を行っている場合、それぞれをスレッ

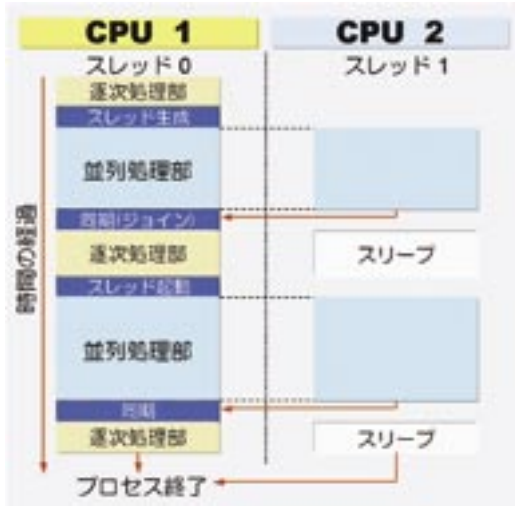


図1. 共有メモリ型並列処理の例

2つ以上のスレッドに分解して実行します。図1で、逐次処理部分とは初期値の設定など、並列処理できない部分を指します。並列処理部では、2つのスレッドが分担して処理を行います。以後は、それらの繰り返しで、プロセスを終了します。

注目していただきたいのは、スレッド0のみが逐次処理部を実行し、スレッド1はスリープ（休止）状態にあることです。マルチスレッドでの性能向上を実現するためには、このスリープ時間の割合をできるだけ小さくしなければなりません。

並列処理の典型的な例は、共有メモリ型並列処理と分散メモリ型並列処理です。図1に共有メモリ型並列処理の計算処理と時間経過の関係を示します。共有メモリ型並列処理ではひとつのメモリ空間を複数のCPUで共有します。そのとき、ひとつのプロセスを

並列処理とは？ 共有メモリ型と分散メモリ型

並列処理の典型的な例は、共有メモリ型並列処理と分散メモリ型並列処理です。図1に共有メモリ型並列処理の計算処理と時間経過の関係を示します。共有メモリ型並列処理ではひとつのメモリ空間を複数のCPUで共有します。そのとき、ひとつのプロセスを

それでは、並列処理部分とはプログラム中のどのようなところでしょう？それは、ループ処理部分です。FORTRANでのDOループやC言語のforループに対応します。マルチスレッドで性能向上を実現するためには、ループ部分の処理時間が全体の処理時間のほとんどを占めることが必要です。それを実現することで、デュアルコアCPUではほぼ2倍近い性能を実現し、高クロック周波数のシングルコアCPUよりも高い総合性能を実現することが可能です。プログラムのマルチスレッド化は、コンパイル時にオプション-parallel（コンパイラに依存します）を追加するだけで自動的に行われます。

したがって、プログラム開発はとて容易です。

共有メモリ型並列処理よりさらに高度な並列化を実現するのが分散メモリ型並列処理です。図2にその概念を示します。解析モデルをCPU負荷が同じになるように分割し、分割したモデルをCPUとメモリの組合せから構成されるノード（ランク）に割り当て、同期をとりながら計算処理を行います。メモリに保存されているデータはランク間で共有されています。したがって、複数の分割領域にわたってデータの連続性を保証するため、分割境界上のデータは2つのランクで重複させます。計算途中でデータの共有が必要になるので、ランク間でデータ送受信を行います。その処理の時間的な流れの例を図3に示します。

分散メモリ型並列処理では、データ送受信やランク間の同期などの複雑な処理をMPIライブラリが担当するので、プログラムは案外容易です。また、

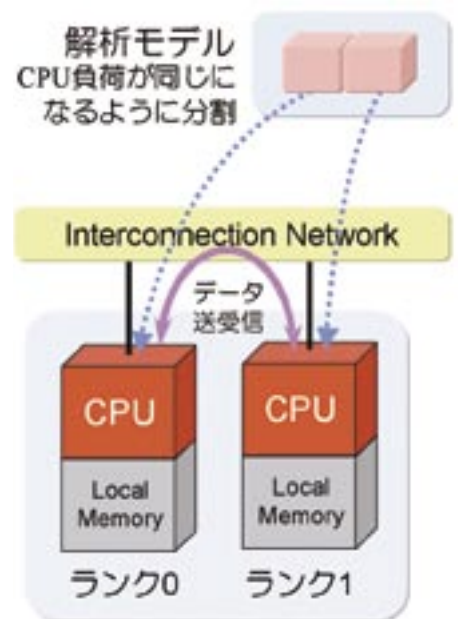


図2. 分散メモリ型並列処理の概念

先に説明したとおり、デュアルコアCPUで高い処理性能を得るために、それに適した計算アルゴリズムや解析法を採用します。計算アルゴリズムや解析法が備えるべき要件は次のとおりです。ループ処理が多く、並列化可能であること。メモリの利用が局所化でき、データの広範囲での利用がないこと。解析モデルの分割が容易であること…

電磁界解析等の研究分野において、このような要件を満足する解析法として

並列計算に適した解析法を利用する

MPIライブラリを利用することで、複数ランクを用いた並列処理をひとつのプログラムとして記述できます。これは、図2および3から明らかのように、ランクごとに取り扱われるデータは異なりますが、処理のほとんどは同じだからです。

第1回 PC向けデュアルコアCPU

ンによる分散メモリ型並列処理を行います。図4下部に示す路線バス前方の3分の1のモデルを10分割し、それを10個のランクに割り当てます。分割断面にお

本センター研究部門で開発を行っている大規模FDTD解析の例(路線バス内の電磁界強度分布)を図4に示します。セルの寸法を5mm(空間分解能と同じ)とすることで、高精度かつ実用的モデルでの解析を可能にします。この解析法では膨大な主記憶容量と計算時間を必要とするため、スパ

コンの利用すると、少ないランク数と演算時間で路線バス全体を解析できます。並列プログラミングに挑戦しよう!!

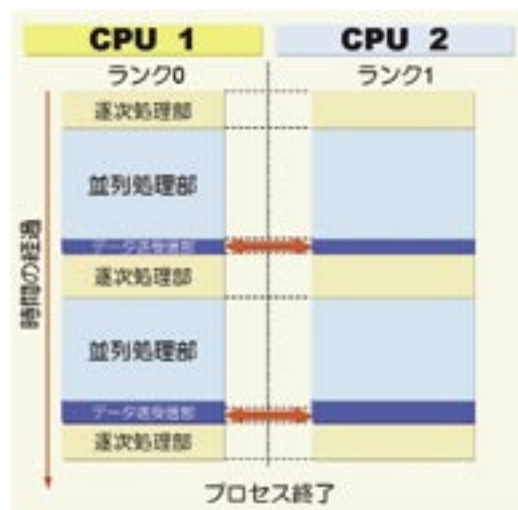


図3. 分散メモリ型並列処理の例

どのようにして、ひとつのプログラムでこのような並列処理を実現できるのか疑問に思っていたり、興味が湧いてきているのではないのでしょうか。これら並列プログラミングはスパコンにとっては欠かすことができない技術です。本センターではユーザサポートの一環として、並列プログラミング講習会を実施しており、そのための資料も一般公開しています(注2)。MPIライブラリを使用した分散メモリ型プログラミングの訓練をすると頭の中に解析モデルのイメージを鮮明に持つことができますようになり、プログラム開発が容易になります。

デュアルコアCPUがPCで利用で

さるデータを共有するため、ランク間でデータ送受信を行い、同期を取りながら処理を進めます。10個のランクで計算された結果をつなぎ合わせて、全体の結果を得ます。これら解析を行うために必要な主記憶容量は50GB、計算時間は本センターのスパコンを使用し

て94・5時間(約4日間)でした。平成18年1月からサービスを開始する新スパコンを利用すると、少ないランク数と演算時間で路線バス全体を解析できます。

並列プログラミングに挑戦しよう!!

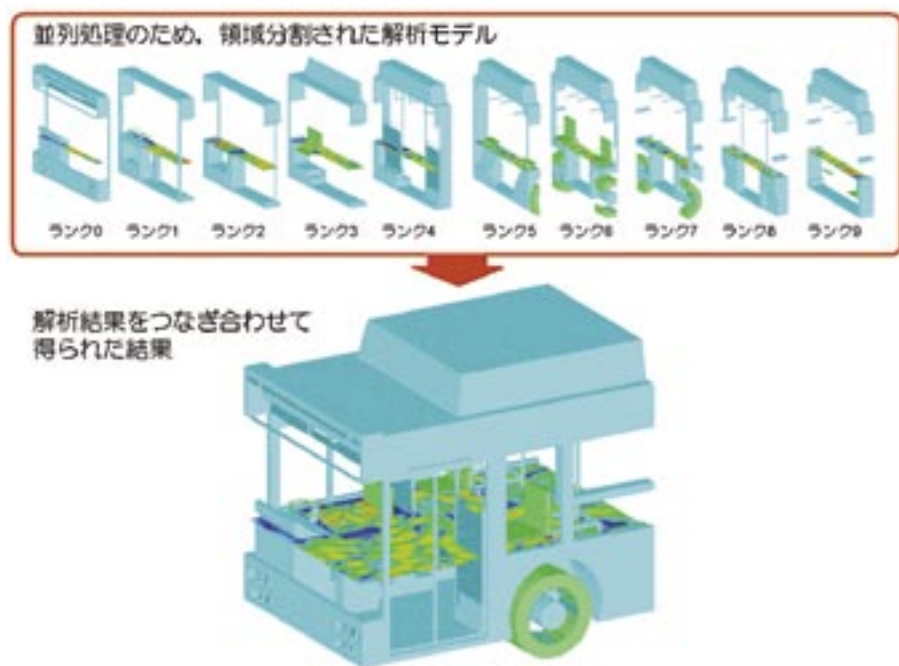


図4. 分散メモリ型並列処理の例。路線バス前方3分の1を用い、車輦内に設置された携帯電話機(周波数800MHz)による電界強度分布を解析。上図のように10個の領域に分割し、並列処理を行い、下図の結果を得る。

きるようになることは、ここで紹介した2つの並列処理プログラミングに挑戦する環境が身近に与えられることを意味します。従来、スパコンなどの限られた計算機環境でしか試すことができなかった高度なプログラム開発を、小規模ではあるけれどもPCで試すことができるようになります。これにより、スパコンユーザの裾野が広がり、スパコンを教育研究等で活用する機会が増加するのではないかと期待しています。

(注1) K. S. Yee, "Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwell's Equations in Isotropic Media", IEEE Trans. Antennas and Propagation, vol. 14, no. 3, pp. 302-307, May 1966.

(注2) 利用講習会ホームページ
<http://www.hucc.hokudai.ac.jp/~a10019/kosyu/kosyu90.html>
各種の利用講習会資料をpdfで公開していますので、是非ご利用ください。

「充実したユーザサポートでスパコンもス〜イスイ！」

ユーザ申請・登録を完了し、ユーザアカウントとパスワードを発行していただきました。いよいよスパコン利用に挑戦です。初めてで、なにも分からないけれど、新しいことに挑戦できるのでワクワクしています。情報基盤センターでは、ユーザサポートの一環としてさまざまな情報の提供を行っています。それを上手に活用することでスパコンといえども案外簡単に利用できることを知りました。私もひとつとしてスパコンの鉄人になれるかな・・・今回は、そんな多彩な情報活用法を紹介します。

大宮 スパコンを利用する準備がすべて整いましたので、さっそく利用してみましょう。スパコンへは直接接続することができなくなっています。図のとおり、スパコンを利用する場合、スーパーサーバ (wine.hucc.hokudai.ac.jp) にログインし、そこで準備を行ってから、スパコンにジョブを投入します。

スパコン利用をするときは、
PC端末から....

梨紗 スパコンの部分にNQSとバッチジョブと書かれています。これらはどんなことを意味しているのですか？

大宮 バッチジョブは、ジョブの開始が計算機の稼動状況と運用スケジュールに基づいて決定されることです。限られた計算機リソースを有効かつ無駄なく利用する目的と、ユーザプロセスが確実に実行されることを保証します。バッチジョブのためのコマンドがNQSで提供されています。

梨紗 それじゃ、ジョブの開始はユーザが決められないんですか？

大宮 鋭い指摘ですね。心配は無用ですよ。本センターのスパコンはユーザにとって快適な稼動状況なので、実行を待たされることはありません。繁忙期には、ジョブ開始まで数時間あるいは数日待たされることがあります。また、一人で複数ジョブを投入している場合、同時実行ジョブ数が制限されることがあります。

梨紗 バッチジョブはユーザにとって安心できる仕組みだと思いますが、センターの運用は難しくありませんか？

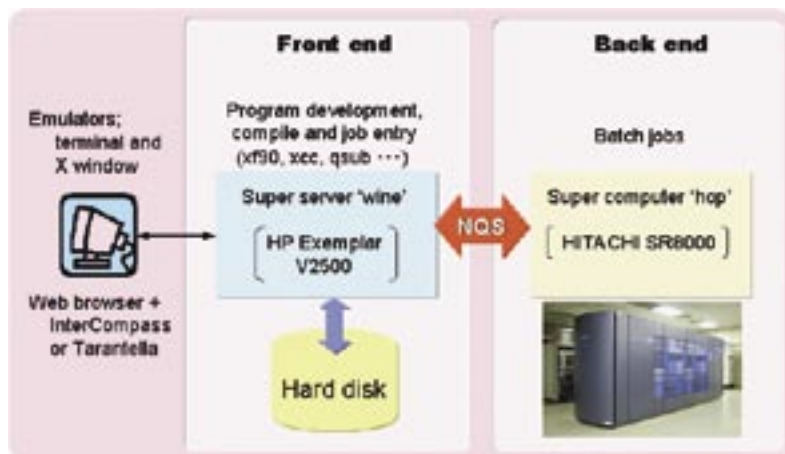
大宮 長所・短所はありますが、安定したスパコンサービスを実現するため、ユーザの皆様にご理解いただけるよう努力しています。それでは、スーパーサーバに接続しましょう。通常はネットワーク経由で研究室のPCからアクセスします。

梨紗 ネットワーク経由でアクセスするためには、どんなソフトウェアを用意しなければならないんですか？

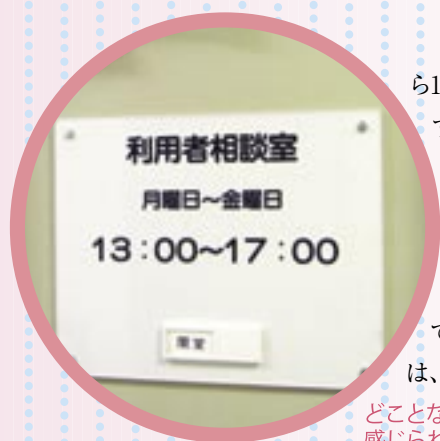
大宮 初めての方でしたらWebブラウザを利用するのが便利です。

梨紗 えっ！Webブラウザだけでいいんですか。

大宮 Webブラウザが利用できれば、その他のソフトウェアは必要ありません。大型計算機システム利用ツールとしてInterCompassを用意しています。このツールはファイル操作やコンパイル実行などの各種ボタンを備えていて、特別なコマンドを覚えなくても、パソコンと同じような操作感覚で処理を実行で



スパコン利用環境と利用法



ら17:00まで相談員が対応します。

梨沙 ヘルプデスクのようなものですね。

大宮 そうです。ヘルプデスクをより高度化・専門化しているともいえます。それでは、ちょっと行ってみましょうか。

どことなく、ユーザへの配慮が
感じられるかも...

利用者相談室において

梨沙 どれくらい相談があるのですか？

相談員 週に2ないし3件程度ですか。利用しはじめと、本格的に使われる時期に多いです。一般的な質問と、アプリケーションの使用法などの質問があります。場合によっては、メカなどに問い合わせないと分からないこともあります。

梨沙 どんないろが大変ですか？

相談員 ここでは当然と思われることでも、それを説明して、理解してもらうのはとても大変です。特に、初心者の方の対応には気を使いますよ。

梨沙 例えば、私のようなユーザですね。

相談員 そうかも...

梨沙 これからちょくちょくお世話になると思いますので、よろしくをお願いします。



相談員が、ユーザの疑問に
親身に対応してくれます

いかがだったでしょうか。情報基盤センターでは、大型計算機システムのユーザサポートとして、さまざまな形で情報提供や支援体制を整備していることをおわかりいただけたでしょうか。私のような初めてのユーザでも、スパコンを利用できそうな気分になりました。かなり苦労はするかもしれませんが...

(注1) 大型計算機システムホームページ

<http://www.hucc.hokudai.ac.jp/>

(注2) 利用講習会資料公開ページ

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

(注3) 利用者のみなさんからの質問(Q&A集)

<http://www.hucc.hokudai.ac.jp/~a10020/www/qanda.cgi>

きます。

梨沙 InterCompassは、どのように使うのですか？

大宮 大型計算機システムホームページ(注1)の「計算機利用・操作」メニュー項目の「ブラウザからスパコンの利用」を選択してください。

梨沙 それじゃ、InterCompassを使ってみます。こんな画面が表示されましたが...

大宮 これはログイン画面です。ユーザIDとパスワードを入力してくれますか。正しく入力しましたらエンターキーを押してください。そうすると、メイン画面が表示されます。ここから、ファイル編集、コンパイル、プログラム実行などさまざまな処理を行います。

梨沙 利用できる機能について勉強したいんですが...

大宮 ホームページに説明書が掲載されているので、参照してください。センターでは、短時間でスパコンを利用できるようにすることを目的に、さまざまな利用講習会を企画しています。利用講習会テキストも公開しているので(注2)、自習も可能です。利用講習会1回あたり実習付で90分ですので、講義のあき時間などを利用して受講してください。

梨沙 いろいろな利用講習会があるんですね。利用講習会の申込みは、どのように行うんですか？

大宮 ユーザの皆様にはメールマガジンで利用講習会の実施予定をお知らせしています。指定のホームページあるいは電話で申し込んでください。オンデマンド講習会も随時行っています。

梨沙 オンデマンド講習会って...

大宮 ユーザのご希望に合わせて、講習会タイトル、時間および場所などを決定します。遠慮なくお申し出いただければ、お一人からでも対応させていただきます。

梨沙 利用講習会を受講できるのはユーザだけですか？

大宮 ユーザ以外の方で、これからスパコンを使ってみたくか、興味を持っている方なども対象にしています。

梨沙 スパコンを使い始めると、分からないことがでてくるのですが... そんなとき、どうしたらいいんでしょうか？

大宮 そうですよ。ホームページにほとんどのマニュアルや情報が掲載されています。でも、分からないことって共通していることが多いんですよ。そこで、過去の質問をセンターホームページの「利用者のみなさんからの質問(Q&A)」に掲載しています(注3)。そちらをご覧ください。検索機能もありますので、目的の答えが簡単に見つけられると思います。役に立つ情報に遭遇することがあると思います。

梨沙 そこで答えが見つからなかったら...

大宮 個別の相談にはセンター北館2階に利用者相談室があるので、気軽にご相談ください。平日の月曜日から金曜日、13:00か



北海道の共有インフラです

解析プログラムSANDER

(プログラム名sander、sander.LES、sander.mpi、sander.LES.mpi)

エネルギー最小化および分子動力学法に基づいた解析を行うソルバーです。プログラム **sander** および **sander.LES** は逐次実行用で、単一演算装置(ノード)を用いて解析を実行します。一方、**sander.mpi** および **sander.LES.mpi** は分散メモリ型並列処理用で、複数の演算装置を使用します。いずれも、スーパーコンピュータのみで利用可能です。

ポストプロセッシングPTRAJ(プログラム名ptraj)

分子動力学解析によって得られた軌跡 (trajectory) や座標等を処理するための Amber 後処理用プログラムです。座標抽出、結合長・結合角、原子座標変位、相関関数解析等を行います。

xleapの利用方法

X ウィンドウ用に開発された **xleap** の利用方法について説明します。このプログラムは計算サーバ malt あるいはスーパーサーバ wine で利用可能です。初めに、malt および wine の環境設定を行います。malt と wine では環境設定ファイルは共通ですので、いずれか一方でファイル編集を行ってください。malt または wine にログインし、ユーザホームディレクトリにある環境設定ファイル **.cshrc** をエディタに読み込み、ファイルの最後に次の行を追加します。

環境設定ファイル.cshrcの設定例

```
....
setenv AMBERHOME/opt/amber8
set path=($path $AMBERHOME/exe)
```

この後、ログインしなおすか、または次のコマンドを実行してください。

\$ source .cshrc (注: 記号 '\$' はコマンドプロンプトです。)

このコマンドは通常ログインプロセスとして実行されるので、次回以降のログイン後に上記コマンドを実行する必要はありません。次に、端末として使用している PC で Web ブラウザを起動し、ASP サーバに接続します。アドレスは次のとおりです。

<http://www.hucc.hokudai.ac.jp/application/asp.html>

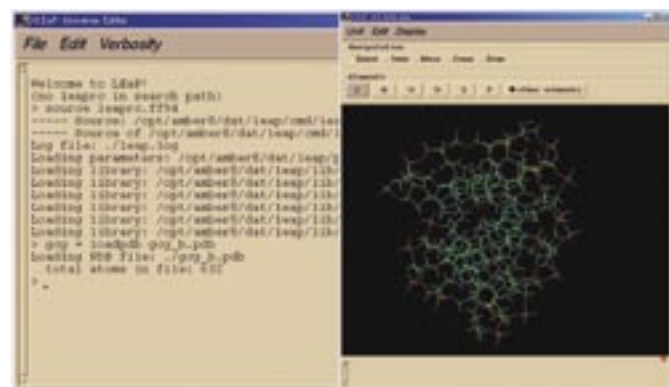
ASP サーバトップ画面の左フレームの項目から、malt_xterm または wine_xterm を選択してください。アカウント名およびパスワードを入力すると xterm が表示されます。



ASPサーバとxterm

次に、xterm 内でコマンド **xleap** を実行します。そうすると、下図左側のような画面が表示されます。下図右側には、チュートリアル「DNA 二重螺旋リファインメント」用入力ファイル **gcg.pdb** に定義された DNA の構造を表示しています。ただし、

使用するファイル **/opt/amber8/dat/ leap/cmd/leaprc.ff94** および **/opt/amber8/test/rdc/gcg.pdb** を前もって実行ディレクトリにコピーするとよいでしょう。X ウィンドウ環境あるいは X ウィンドウエミュレータを使用しても同様に利用できます。



xleapの表示例

スーパーコンピュータでのsanderの実行方法

解析プログラム **sander** は、スーパーコンピュータ hop でバッチ処理により実行します。初めに、スーパーサーバ wine にログインしてください。次に、解析データを保存しているディレクトリに移動してください。以下に示す実行用シェルスクリプトを作成します。ただし、シェルスクリプトのファイル名を **GO.sh** とします。2 台の演算装置を利用する並列処理の設定になっています。

```
#!/bin/csh
setenv AMBERHOME /usr/local/amber8
cd /home/..... (データを保存しているディレクトリ名とします)
mpirun -p SPARA -n 2 -np 2 ¥
    ${AMBERHOME}/exe/sander.mpi ¥
    -O -i mdin -p prmtop.1 -o out.1 < dummy
```

NQS コマンド **qsub** を利用して、ジョブをサブミットします。ただし、キューを **a**、実行ノード数を **2** とします。

\$ qsub -q a -N 2 GO.sh

生体分子シミュレーションパッケージ AMBER8が利用できるようになりました!!

Amber8利用サービスの開始について

北海道大学情報基盤センターは、大型計算機システムでの生体分子シミュレーションパッケージ Amber8 利用サービスを開始しました。Amber8 はカリフォルニア大学の故 P. Kollman 教授らの研究グループによって開発が行われた分子力学および分子動力学のための複数の解析プログラムから構成されています。Amber8 は入力データ作成・パラメータ設定および解析結果評価のためのプリ・ポストおよび解析プログラムを含んでいます。本センター大型計算機システムでは、図に示すようにプリ・ポストプログラムは計算サーバ (malt) およびスーパーサーバ (wine) で利用し、高速演算が必須の解析にはスーパーコンピュータ (hop) を利用するようにしています。

用途	入力データ作成・パラメータ設定およびポスト処理	解析の実行
利用方法	xleap等の 対話モジュールの TSS実行	sander等の 解析モジュールの バッチ実行
計算機	スーパーサーバ wine 計算サーバ malt	スーパーコンピュータ HITACHI SR8000

計算サーバ、スーパーサーバおよびスーパーコンピュータで利用可能なプログラムモジュールを表に示します。以下においては、代表的なプログラムモジュールを利用した解析手順について説明します。

分類	プログラム名	計算サーバ スーパーサーバ	スーパー コンピュータ
addles	addles	○	○
anal	anal	○	○
etc	ambpdb	○	○
	nucgen	○	○
leap	teLeap	○	×
	tleap	○	×
	xaleap	○	-
	xleap	○	-
lib	new2oldparm	○	○
mm_pbsa	make_crd_hg	○	○
	mm_pbsa.pl	○	-
	mm_pbsa_statistics.pl	○	-
	molsurf	○	○
nmode	nmode	○	○

分類	プログラム名	計算サーバ スーパーサーバ	スーパー コンピュータ
nmr_aux	fantasian	○	○
	makeANG_RST	○	○
	makeCHIR_RST	○	○
	makeSIP_RST.dna	○	○
	makeSIP_RST.protein	○	○
	makeDIST_RST	○	○
	makeSHF_RST	○	○
	senergy	○	○
	sviol	○	○
	sviol2	○	○
ptraj	ptraj	○	○
	rdparm	○	○
resp	resp	○	○
sander	sander	-	○
	sander.mpi	-	○
	sander.LES	-	○
	sander.LES.mpi	-	○
	sander.QMMM	-	○

スパコンInfo ご存じですか?スパコンは、

ソフトウェア Amber8 のインストールディレクトリ (Amber ホームディレクトリ \$AMBERHOME) を次に示します。計算機によりインストール先が異なりますので、注意してください。

計算機名称	ホスト名	ホームディレクトリ \$AMBERHOME
スーパーコンピュータ	hop.hucc.hokudai.ac.jp	/usr/local/amber8
計算サーバ スーパーサーバ	malt.hucc.hokudai.ac.jp wine.hucc.hokudai.ac.jp	/opt/amber8

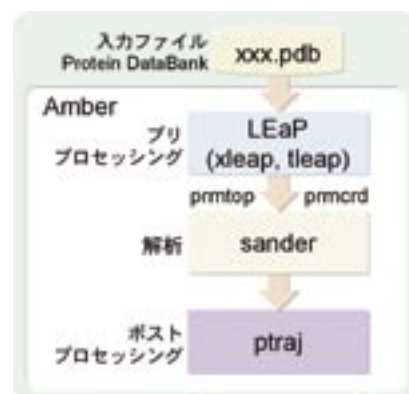
Amber ホームディレクトリ内のディレクトリ構造は次のとおりです。これらディレクトリへのアクセスが可能ですので、ベンチマークプログラムあるいはチュートリアルに示されているデータを、ユーザホームディレクトリにコピーして利用してください。

\$AMBERHOME/ exe/	: ロード (実行) モジュールを置いています。
dat/	: データベースが作成されています。
benchmarks/	: ベンチマーク用プログラムが置かれています。
examples/	: 事例ソースおよびデータが置かれています。
test/	: Test suite が置かれています。

leaprc および pdb ファイルは、\$AMBERHOME/data/leap/cmd/ および \$AMBERHOME/test/rdc/ 等に分散して置かれているので、ディレクトリと格納されているファイルの関係をご確認ください。

プリポスト処理および解析プログラムの紹介

右図に Amber の解析手順と使用するプログラムモジュールの関係を示します。代表的なプログラムモジュールとして、LEaP、SANDER および PTRAJ について説明します。



プリプロセッシング LEaP (プログラム名 xleap または tleap)

解析データ作成・編集、パラメータの設定などを行うための Amber 前処理用プログラムです。X ウィンドウ環境のためのプログラム xleap とテキストベースのプログラム tleap が利用可能です。

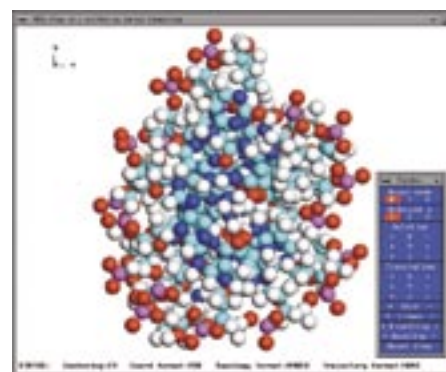
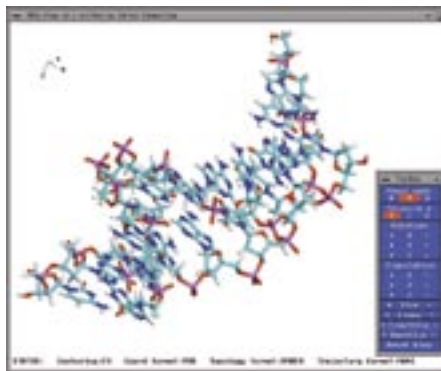
解析手順とプログラムモジュール

その他の情報:MOIL-Viewを利用しよう!

Amber8では、**xleap**などのXウィンドウベースのシンプルな可視化機能が備わっています。一方、高機能かつ高品質な可視化のためのAmber関連ソフトウェアが開発されています。ここで紹介するMOIL-View (MOlecules at ILlinois)はCarlos Simmerling氏によって開発された分子構造やそのダイナミクスを表示および解析するためのプログラムです(注1)。計算機プラットフォームとしてSGI社製可視化サーバを想定し、ソースコード等が下記ホームページで提供されています。

<http://morita.chem.sunysb.edu/mlv.html>

情報基盤センターでは、グリッドコンピューティングシステムの一部として超高速可視化サーバ(日本SGI社製Onyx300)の利用サービスを行っています。本センターがサービスしているグリッドコンピューティングシステムは希望により利用可能で、年度末における利用報告書提出の義務はありますが費用の負担等はありません。SGI Onyx300でのMOIL-Viewのインストールには、デフォルトのMakefileが利用できること、およびロードモジュールの実行が可能であることを確認しています。下図はチュートリアル「DNA二重螺旋リファインメント」用入力ファイルgcg.pdbをMOIL-Viewで読み込み、可視化した例を示しています。Amber8の利用とあわせてグリッドコンピューティングシステム超高速可視化サーバでのMOIL-Viewの利用をご検討ください。



(注1) C. Simmerling, R. Elber and J. Zhang : MOIL-View –A Program for Visualization of Structure and Dynamics of Biomolecules and STO–A Program for Computing Stochastic Paths, in Modeling of Biomolecular Structure and Mechanisms, A. Pullman et al. (eds.) 241-265, 1995.

A

(1) ファイル名が文字化けしているのは、ファイル名が漢字コードであるためです。ファイル名を半角文字のアルファベット、数字に変更してください。

(2) 画面が黒色に反転してしまうのは、FLUENTでビジュアルな解析画面を出力している時にマウスを違う位置でクリックしたためです。解析画面が乱れて色の反転が起こってしまいます。

Q

InterCompassは起動するのですがXエミュレータが起動できなくなりました。対処方法をお知らせください。

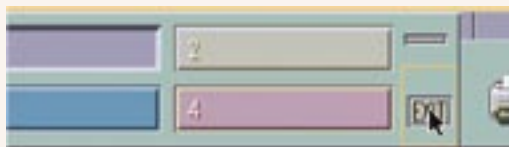
A

InterCompassのXエミュレータツールは1ユーザが複数と同時に起動できないように管理されています。前回使用時に何らかの理由で正式な手順で終了できなかった場合、次回の起動にロックがかかってしまうことがあります。その場合はロックを解除しますのでセンターにご連絡ください。以下にXエミュレータツールの正式な終了方法を示します。

(1) wineデスクトップで端末等を終了(exitコマンド等)する。

(2) wineデスクトップセッションを終了する。

(画面下部の"EXIT"ボタンをクリックし、了解を選択)

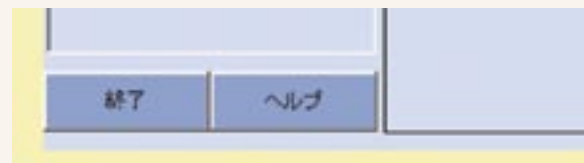


(3) 左上部"Disconnect"ボタンをクリックし、コネクションを切断する。



(4) Xエミュレータの画面を閉じる。

(5) 左下"終了"ボタンでInterCompassを終了する。



InterCompassの操作についての詳細は、本センターホームページに掲載されている、

<http://www.hucc.hokudai.ac.jp/pdf/HowToInterCompass.pdf>
「3.InterCompass機能ツール⑦Xエミュレートツール」を参照してください。

相談室Q&A

Q

Fluent/Gambitを利用したいと考えていますが、不明な点がいくつかありますのでご回答願います。

(1) Fluentを使用する場合、年額12,000円以外に経費がかかる可能性はありますか。

(2) Fluentライセンスは、同時使用可能人数は何人までですか。

A

(1) FLUENTを使用する場合、基本的には年額12,000円以外に経費はかかりません。この場合、ファイルは5MBまで、プロセス時間は10分までの利用が可能です。ファイルを5MB以上使用する場合は、従量制として100MBにつき月額1,000円を負担していただきます。

ファイル容量を多く使う場合は、付加サービス申請をしていただきますとお得です。年額30,000円の負担で20GBまで利用可能となります。何度でも申請できます。

また、実行時間が大きくなりプロセス時間が10分以上となる場合は、年額30,000円の負担でプロセス制限時間10分を解除できます。これは、一度だけ申請します。

従いまして、ファイルを20GBまで利用し、プロセス10分制限解除を含めることとした場合の経費は、

$$12,000円 + 30,000円 + 30,000円 = 72,000円$$

となります。(共通負担額5%は別途負担して頂きます。)

付加サービス申請の方法は、下記を参照願います。

<http://www.hucc.hokudai.ac.jp/tetsuzuki.html#huka>

(2) FLUENTライセンスは、同時5ユーザ利用可能となっています。

(3) FLUENT/GAMBITは本センターの計算サーバ(HITACHI Superdome)と呼ばれるマシンで実行できます。実行には端末側にUNIXのXWindow環境が必要です。telnetでサーバ名malt.hucc.hokudai.ac.jpに接続し、利用

者番号、パスワードを指定してログインし、コマンドfluentで起動できます。詳細は、

http://www.hucc.hokudai.ac.jp/application/malt_fluent.htmlに記載されています。

XWindow環境がない場合は、PCからWebブラウザによって実行することもできます。

<http://www.hucc.hokudai.ac.jp/index-n.html>

の「ブラウザから各種アプリケーションの利用」をクリックしてください。

(4) マシンを利用するための利用者番号、パスワードは「利用申請書」に必要事項を記載し、利用者受付(内線2951)に提出して頂きますと、その場ですぐに発行いたします。

<http://www.hucc.hokudai.ac.jp/tetsuzuki.html#shinki>



Q

自分の講座(工学部)からmaltのアプリケーションFLUENTを使いたい。パソコンのOSは、Windows2000です。

(1) Xサーバエミュレータのインストールは終了したがFLUENT画面よりファイル名が文字化けしている。

(2) FLUENT実行時にXサーバエミュレータの画面が黒色に反転してしまう。

相談員プロフィール



森 正人

大学院地球環境科学研究科

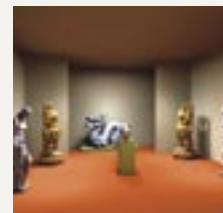
木曜日 15:00~17:00担当

木曜日の後半に相談員を担当している、地球環境科学研究科の森です。今年で3年目になります。私は地球大気の大規模変動について研究しています。我々の研究分野では研究対象が「地球」であるため、理論の検証作業としての実験ができません。そのときにコンピュータは格好の実験場になります。近年のPCの能力向上はめざましいものがありますが、大規模な数値計算をなるべく短時間で実行しようとする、スーパーコンピュータが必要になるのが現状です。コンピュータが身近にあふれ、数値シミュレーションへの敷居が低くなっている現在、スパコンのニーズはこれからもっと増えると思います。そんなときに、みなさんが手軽にスパコンを使えるお手伝いができたらいいと思います。



●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

iiC-HPC 第5号をお届けいたします。本号のタイトルは「センタースパコンからノーベル賞受賞者を!!」。巻頭の新センター長山本強へのインタビューからひろった一言です。この言葉を、空疎なスローガンに終わらせてはならない。ぜひ実現したい。そうなるためにはどうすればよいのか。「!!」に込めた思いは、情報基盤センター一同の決意とご理解ください。
本号より編集を担当する情報基盤センター全国共同利用委員会システム利用専門委員会の委員がかわり、編集長もかわりました。

編集長 渡邊 浩平

●次号の特集予告

次号は「北大スパコン新世紀」というタイトルを掲げ、現行スパコンの20倍の性能を持つ新スパコンの全貌をご紹介します。ユーザのみなさまに、より快適により効率よく使っていただくため、さまざまなご提案も用意しています。

●本誌へのご意見をお聞かせください。

連絡先: kyodo@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5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

- 低温科学研究所
- 情報基盤センター
- 情報基盤センター
- 文学研究科

- 三 寺 史 夫
- 大 宮 学
- 渡 邊 浩 平
- 樽 本 英 樹

- 理学研究科
- 工学研究科
- 農学研究科
- 北見工業大学

- 見延 庄士郎
- 萩 原 亨
- 谷 宏
- 桜 井 宏

印刷: 正文舎印刷株式会社 TEL011-811-7151

