

iiC-HPC

Vol.10
2007

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

スパコンで解明する、 百年コンクリート

HOKKAIDO UNIVERSITY

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.10

●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〉 スパコンで解明する、百年コンクリート

●北見工業大学准教授 桜井 宏

04-09



10-13

スパコン・アカデミー 第6回「スパコン数値計算ライブラリを使いこなす」

●日本NAG社

連載 スパコン可視化道場

●第4回

「アプリケーションソフトウェアIRIS Explorerで
高品位可視化に挑戦」

14-15



16-19

スパコンInfo

- 数値計算ライブラリBLASおよびLAPACKが更新され、高速になりました。
- 大判プリンタが2台、新規に設置されました。
- 汎用コンピュータシステムが更新されました。
- 戦略的基盤ソフトウェアFrontFlow/Redがスパコンで利用できます。
- ワトソン疎行列ダイレクトソルバWSMPが利用できるようになりました。
- 計算機学術利用北海道地区協議会総会が開催されました。

●相談室Q&A

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.10



今回は写実的な水面の表示を試みた例である。特に、水の色そのものよりも水面での光の反射および屈折に焦点をあてて画像を生成した。水面に発生した波によって、水中にある物体や水面に映りこんだ物体はゆがんだ形に見える。それだけでなく、水面で屈折・反射した光が集光することによって、コースティクスと呼ばれる独特で美しい光のパターンが発生する。これらの計算は、一般に、レイトレーシングと呼ばれる方法が利用されるが、非常に多くの計算コストがかかる。画像一枚あたり数分から数十分必要である。我々のグループでは、これらの計算を極めて高速に行う方法を開発している。我々の方法によって、ピーナス像のような複雑な形状の映りこみやその表面上のコースティクスパターンを1秒以下で計算できる。これによって水面波が時間的に変化した場合の水面やコースティクスのパターンの移り変わりを観察することが容易になる。その映像は非常に興味深いのであるが、紙面ではお伝えできないのが残念である。興味ある方はインターネット等で検索してみてもいいだろうか。

なお、画像は東京大学 西田研究室 および和歌山大学 岩崎慶氏の協力による。

●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の研究に動き続けている。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、北海道大学大学院情報科学研究科の准教授として、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

スパコンで解明する、

百年コンクリート

100年前、廣井勇博士が志した
コンクリートの研究が
スパコン・シミュレーションで
新たな展開を見せる。
百年たっても信頼にたる
コンクリートを指して。

編集 本日は、北見工業大学地域共同研究センターの桜井宏先生の研究室に伺っています。桜井先生はコンクリート工学が専門で、特に寒冷地における巨大コンクリート構造物の設計施工や品質管理にスパコンを積極的に活用されています。さらに、IT技術による高品質化およびコストダウンについて研究されています。本日は、コンクリート構造物のお話とご研究にスパコンがどのように活かされているかについてお聞きしたいと思います。よろしくお願ひします。

桜井 北見までわざわざお越しいただきありがとうございます。よろしくお願ひします。

北海道の厳しい自然が コンクリートを鍛える

編集 先生がこの分野で、ご研究されるようになったきっかけはどのようなことでしょうか。

桜井 1980年頃、北大大学院工学研究科土木工学専攻で佐伯昇先生や藤田嘉夫先生にご教授いただいたのが技術研究者の道に進んだきっかけです。

編集 コンクリートというと、ビルや橋などの大型構造物をイメージしますが、コンクリートが利用されるようになったのはいつごろからなのですか。

桜井 コンクリートには、「有形な」とか「具体的」という意味があります。建設材料としてのコンクリートは、セメント、水、砂や砂利などの骨材、材料としての混和材、薬剤としての混和剤からなっています。コンクリートから砂利を除いたものをモルタルといいます。

古代のセメントは、今から5000年前前に、古代エジプトでピラミッド建設の際に使われた焼き石膏が起源とされています。その後、ギリシャ、ローマ時代を経て徐々に改良されました。19世紀に入ってから、現在の製造法の基礎になる普通ポルトランドセメントが英国で開発されました。我が国では、1875年に日本初の官営セメント工場が東京深川に造られています。コンクリートの特長は常温

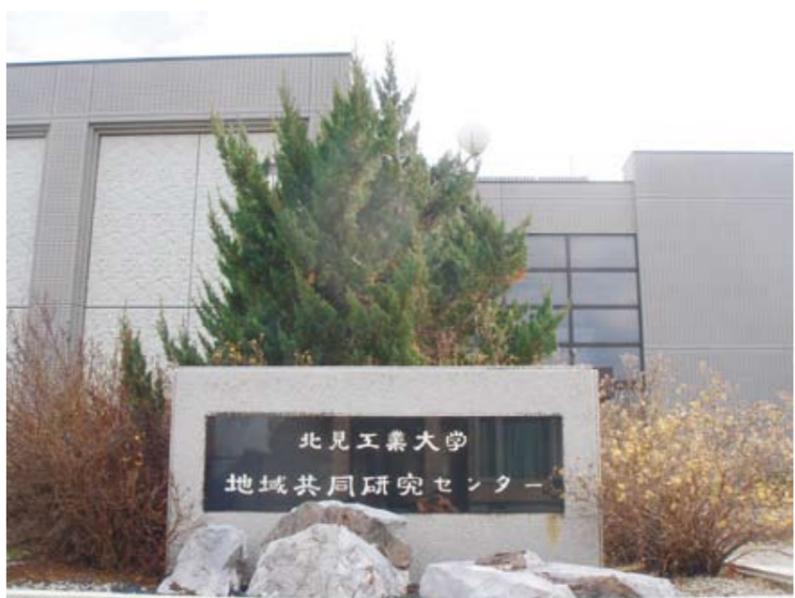
で施工でき、材料になる砂や砂利などが身近にあり安価で、火災等に強いことです。そのため、我が国の構造物の相当数に、部材としてコンクリートが使用されています。

編集 紀元前から利用されているのですね。それでは、北海道でコンクリートを研究することの意義について教えてくださいいただけますか。

桜井 私の研究テーマは、寒冷地の海洋環境下のコンクリート構造物の施工です。寒冷地海洋環境下ですと、冬期間に温度下降が顕著です。だいたいマイナス30℃ぐらいまで下がるので、温度差が大きいということになります。コンクリートが硬化するときには、外気温に近くコンクリートは水和反応で強度が発現してくるのですが、断面が厚い防波堤とか、あるいは平板で上は空気に曝露されていて下が地盤ですと、温度がなかなか下がりにくくなるので、コンクリートの中に熱が溜まってしまふのです。それを水和熱と呼んでいます。

編集 水和熱？

桜井 コンクリートは化学反応で強度



北見工業大学地域共同研究センター
1992年に設立される。地域社会の発展に寄与し、民間機関等との連携を深めるために共同研究を推進し、大学の活性化を図るとともに、真に開かれた大学としての役割を果たすことを設置目的としている。桜井先生は本センターを通して、コンクリート構造物に関する共同研究を推進している。

が発現するときに、だいたいコンクリート主要成分のカルシウムと化合物、それからCO₂、水とかがあるのですね。

編集 コンクリートの化学反応で起こるのでね。
桜井 そうです。マグネシウムとか、そのような物資が水和をして、水和物をつくります。それが結晶化して、強度が出てきます。当然、化学反応に伴って熱が非常に出てきます。これを断熱温度上昇といって、コンクリートの大きな塊の中では、だいたい30度から40度ぐらい外気温より高い水和熱が発生



北見工業大学
1960年に北見工業短期大学として設置され、1966年に北見工業大学となる。「人を育て、科学技術を広め、地域に輝き、未来を拓く」を理念とする。現在、2000人以上の学生が学んでいる。

1875年に日本初の官営セメント工場が東京深川に造られています。コンクリートの特長は常温

します。
編集 常温に対してプラスですね。
桜井 そうなんです。例えば、夏場に気温が30℃ぐらいでコンクリートを打ってしまつと、それが60℃から70℃ぐらいまで上がるケースがあります。今検討している海岸擁壁は、コンクリートの断面が大きいので、どうしても内部に熱が溜まる。
 その状態でコンクリートが固まつて、強度が発現していきます。だいたい3日以後にピークとなり、その後は水和熱がだんだん減少していきます。初めは水和がさかんで、コンクリートを型枠に入れることを打設というんですが、それから徐々に温度が上がります。1週間ぐらい発熱し続けて、それから温度が下がってくるんです。

コンクリートが固まるときの内部温度が60℃とか70℃で、常温の20℃まで下がってきます。その過程でコンクリート表面が収縮します。それによってひび割れが発生してくるんです。場合によっては、コンクリートの中まで、ひび割れが入って、貫通することもあります。本州の場合、平均気温が高いため、ひび割れが出ないことがある。北海道の場合、厳しい冬があり、気温がマイナス20℃とかマイナス30℃まで下がります。一冬を越すと、ひび割れが入っていることがあつて、条件的に非常に厳しいといえます。さらに、オホーツク海には流水が来ますので、凍結融解回数がおよそ数十回以上あり、それによってコンクリートの表面が凍害を受けて、ぼろぼろになることもあります。

ります。それを、剥離といいます。北海道ではこのひび割れと剥離の両方の影響が甚大です。一般に、セメントを増やすと剥離は減つて、水とセメントの比を低くすると、強度が上がって耐久性が上がります。
編集 要は、コンクリート材料の割合を工夫するんですね。
桜井 コンクリートの強度というのは、セメントの量ではなくて、水とセメントの比に依存します。セメントの量が多すぎると、水和熱が非常に高くなります。セメントの強度はあくまでも水とセメントの比なので、それを低くした状態で、セメント量も凍害とか剥離が起きない範囲で適正な量にする、いいコンクリートができます。
編集 なるほど。

クリートの分析調査を行ったことがあります。
編集 それは何か特別な意味があつたんですか？
桜井 1900年頃、国内の港湾で施工されたコンクリートが直後に劣化する事例が発生していました。ちょうどその頃、小樽港北防波堤工事が行われることになり、コンクリートの耐久性を検証して、施工する必要がありました。当時、札幌農学校教授で小樽築港事務所長を兼務されていた北大の先輩である廣井勇博士(注1)が、コンクリートは水合物でできていて、かなり長期的に変化をするということに気づいていらつしやいました。それで、コンクリート材料をさまざまな割合で配合し、1898年頃からモルタルブリケットと呼ばれる供試体を合計6万個ほど造りました(注2)。供試体を解析してみると、空気中とか、水中とか、それから海水中に入れると、強度が変化してくるんですよ。廣井先生は、港湾コンクリートのことに詳しくだったので、オホーツク海だと網走港を計画し、小樽では防波堤などを造られています。小樽防波堤のコンクリートでは、未だに水和している兆候が出ています。
編集 海中のコンクリートですか？
桜井 そうです。温度が上がると急激に起こりますよね、それは、コンクリートを打設してから3日とか4日



北見工業大学准教授

桜井 宏

Hiroshi SAKURAI

1981年に北海道大学大学院工学研究科土木工学専攻修士課程修了後、大成建設(株)に入社。原子力発電所関連施設等の耐震設計およびコンクリート構造物の耐用年数予測評価システム等の研究開発を担当。1986年に北見工業大学に就職し、コンクリート工学、道路・鉄道・港湾等社会基盤の設計施工、信頼性と維持管理に関する研究教育を担当している。

小樽百年コンクリート

編集 コンクリートって、もともと何か生き物のように、時間とともに、常に変化し続けているということですが、中の分子構造はどうなっているのですか？

桜井 平成になってから、北海道開発庁開発局と寒地港湾技術研究センターから委託を受けて、小樽港の港湾コン

クリートの分析調査を行ったことがあります。
編集 それは何か特別な意味があつたんですか？
桜井 1900年頃、国内の港湾で施工されたコンクリートが直後に劣化する事例が発生していました。ちょうどその頃、小樽港北防波堤工事が行われることになり、コンクリートの耐久性を検証して、施工する必要がありました。当時、札幌農学校教授で小樽築港事務所長を兼務されていた北大の先輩である廣井勇博士(注1)が、コンクリートは水合物でできていて、かなり長期的に変化をするということに気づいていらつしやいました。それで、コンクリート材料をさまざまな割合で配合し、1898年頃からモルタルブリケットと呼ばれる供試体を合計6万個ほど造りました(注2)。供試体を解析してみると、空気中とか、水中とか、それから海水中に入れると、強度が変化してくるんですよ。廣井先生は、港湾コンクリートのことに詳しくだったので、オホーツク海だと網走港を計画し、小樽では防波堤などを造られています。小樽防波堤のコンクリートでは、未だに水和している兆候が出ています。
編集 海中のコンクリートですか？
桜井 そうです。温度が上がると急激に起こりますよね、それは、コンクリートを打設してから3日とか4日

ぐらいです。だけど、反応はずっと続いているんです。70〜80年、100年ぐらいたつても、徐々に反応しているんです。できれば、反応のスピードをあまり上げないように制御できれば、ひび割れの発生を防ぐことができます。ただ、現場では型枠の数も限られていますし、転用しなきゃならない、だから、コンクリートの水和温度を高めないう程度スピードも必要ですね。工期も限られているので、ある程度の水和熱はどうしても出さざるを得ない

のです。
編集 工事は早く済ませたいが、建造物は何十年も持たせたいということですね。
桜井 そうですね。工期との兼ね合いが大切です。
編集 先ほど出た、廣井勇先生の造られた供試体は今もあるんですね。
桜井 今は小樽港湾事務所に1万個あつて、あと100年ぐらい継続調査ができると思います。おそらく世界で最も古く、最も長期的な試験ですね。
編集 小樽にあるんですか。そこに保存されて、ずっと実験が行われているんですね。
桜井 はい。特に寒冷地でコンクリートを打設するときに、網走港とかも廣井先生はずいぶん心配されていたそうです。冬期間は流水が来て、かなり気温が下がる。コンクリートの品質が、そういう中でも保てるかどうかと。それを打設したという話も聞いております。今取り組んでいる雄武町(注3)にも流水が来ますし、日本でコンクリートを打つのが、一番難しい場所だと思います。
編集 ですから、そういう意味では、観測試験的な意味もあると。
桜井 そうですね。そこでうまくいけば、小樽には流水は来ませんし、本州へ行けば冬の気温は温暖です。ただ、夏の気温の上がり方が激しいですか

ね。
編集 どちらかというコンクリートというのは、暖かいところよりは寒いところの方が、厳しい条件であるということですか？
桜井 そう、難しいですね。特に、オホーツク海でも、夏は結構気温が上がります。30℃近くになって、冬にまた気温が下がる。だから、温度差が相当あつて、世界的に見ても緯度がそれほど高くないのに流水が来るので、夏に暑くて冬に寒いという、過酷な条件にあります。そういうところで、地元熱心な共同研究者である開発局、西村組や雄武レミコン等と工夫し、上手にコンクリートを打つ方法を研究しています。最近では、前述の共同研究者に加えて米國パッカイ社、小倉貿易、

クワザワ、専修大学北海道短大等と協力し、ひび割れや剥離を防止する環境にもやさしい木材セルロースファイバーによる性能向上の研究を進めています。札幌農学校の廣井先生のころからの伝統ですね。
編集 小樽百年コンクリートを利用して、どのような研究調査をされたのですか？
桜井 東大と北大の情報基盤センター、当時は大型計算機センターでしたが、スパコンで提供されていた統計解析ソフトウェアパッケージSASを利用してました。具体的には、SASで提供されるLINEG、GLMそれとNLIN等のプログラムを活用して、コンクリートモルタルの信頼性解析や性能変化の予測式化を行いました。

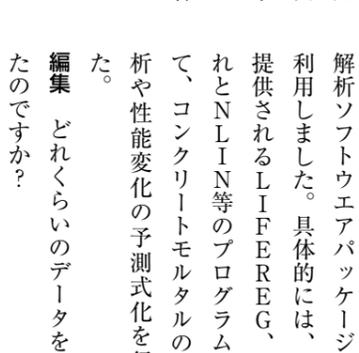


桜井先生が配合設計した雄武町元稲府漁港の海岸擁壁

ます。それを、剥離といいます。北海道ではこのひび割れと剥離の両方の影響が甚大です。一般に、セメントを増やすと剥離は減つて、水とセメントの比を低くすると、強度が上がって耐久性が上がります。
編集 要は、コンクリート材料の割合を工夫するんですね。
桜井 コンクリートの強度というのは、セメントの量ではなくて、水とセメントの比に依存します。セメントの量が多すぎると、水和熱が非常に高くなります。セメントの強度はあくまでも水とセメントの比なので、それを低くした状態で、セメント量も凍害とか剥離が起きない範囲で適正な量にする、いいコンクリートができます。
編集 なるほど。



廣井勇博士によって作られたコンクリートモルタル (モルタルブリケット供試体)



モルタルブリケット抗張力試験器
 国土交通省北海道開発局 小樽港湾事務所みなと資料館で展示中

たのですか？
桜井 1991年までに得られていたのですか？



桜井先生が配合設計した雄武町元稲府漁港の海岸擁壁

ます。それを、剥離といいます。北海道ではこのひび割れと剥離の両方の影響が甚大です。一般に、セメントを増やすと剥離は減つて、水とセメントの比を低くすると、強度が上がって耐久性が上がります。
編集 要は、コンクリート材料の割合を工夫するんですね。
桜井 コンクリートの強度というのは、セメントの量ではなくて、水とセメントの比に依存します。セメントの量が多すぎると、水和熱が非常に高くなります。セメントの強度はあくまでも水とセメントの比なので、それを低くした状態で、セメント量も凍害とか剥離が起きない範囲で適正な量にする、いいコンクリートができます。
編集 なるほど。



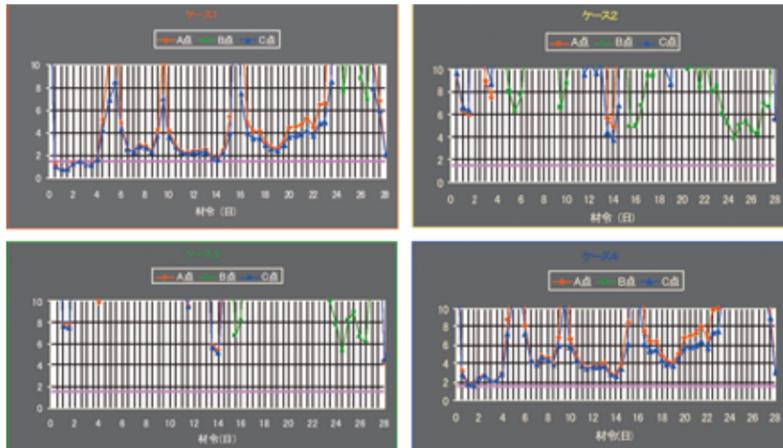
廣井勇博士によって作られたコンクリートモルタル (モルタルブリケット供試体)



モルタルブリケット抗張力試験器
 国土交通省北海道開発局 小樽港湾事務所みなと資料館で展示中

たのですか？
桜井 1991年までに得られていたのですか？

特集
スパコンで解明する、百年コンクリート



解析結果から評価した温度ひび割れ指数
ひび割れ指数が1.5以下(グラフの直線より下)になると、ひび割れが発生する確率が高くなる

編集 この解析ではどの時点でひび割れが生じやすいかというのが、予想ができますよね。今度、どこにひび割れができるのかというの分るんですか？

桜井 それは経験的に？

編集 それは経験的に？

桜井 そうです。ひずみが高まってくると、やっぱり防波堤のスパン中心が一番ひび割れしやすいです。欠陥があると、別なところで切れますけれど、施工時の条件によって、多少場所がずれたりすることはあるかと

《用語解説》

(注1) 廣井勇博士
1862年(文久2年)に高知県に生まれる。工部大学校予科を経て、1881年札幌農学校を卒業した。1883年ミシシッピー川改修工事の技術者募集に応じて渡米。1887年札幌農学校助教、ドイツに転じ、1889年に教授として帰国した。北海道庁技師を兼任し、函館港築堤、小樽港の設計、施工を指揮し、港湾工学の基礎を築いた。この後、1899年東京帝国大学教授となり、近代土木工学の先駆者となった。

(注2) 小樽百年コンクリート
1898年から1908(明治30年から41年)年に、小樽港北防波堤工事が行われた際、当時、国内の港湾で施工されたコンクリートが直後に劣化する事例が発生し、その耐久性を検証して施工する必要があった。札幌農学校教授兼小樽築港事務所長の廣井勇博士等が、1898年から当時のセメント、砂、水(淡水、海水)等、さらに北海道各地や遠く五島列島の九州各地の火山灰や粘土を混練りした。水、セメント、火山灰、砂を各重量比の配合で、抗張力すなわち引張強度試験用の供試体を作成した。その組み合わせは約500種類に及び、1937年まで作成された総数は約6万個である。また、これらの供試体は、淡水中、海水中、空气中に暴露され、現在も継続中である。モルタルブリケットはひょうたん型の形状で、最大長さが80mm、くびれ部分の最小幅が20mm、厚さが22.2mmの長期的な強度のための保存を考えた大変コンパクトなものである。北海道大学総合博物館にも展示されている。

(注3) 雄武町(おうむちょう)
北海道網走支庁管内最北端に位置し、東京23区の合計よりも広い面積に、5,500人が暮らす漁業と酪農を中心とした町。オホーツク海に面し、2月には流水が接岸する。1年間の最高気温33℃、最低気温-17℃、平均風速3.3m。

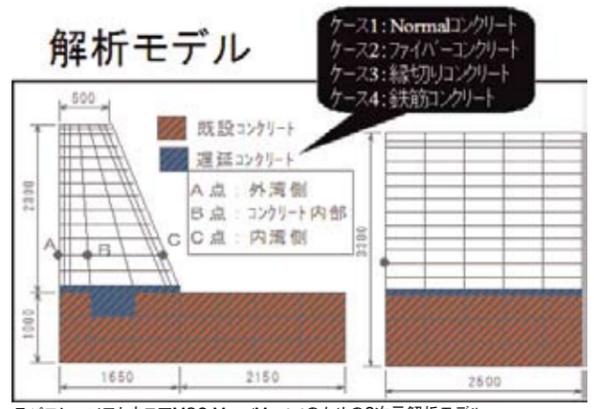
(注4) 連性解析
構造、流体、力、熱、電磁界などのように、異なった物理現象が相互に関係しながら変化するような複雑な現象を、その物理現象が従う方程式を総合に関連付けて解析する手法。

なっています。構造物の中に発生する応力は気象条件に左右され、変動します。ひび割れは、気温が低下したときに入ります。そういったことをシミュレーションすることが可能です。例えば、温度のコントロールですと、打設するときの気温とか、風があるとかないとか、打設してから硬化するまで、外気温の条件によって、ひび割れが入りにくかったり、あるいは入りやすかったり、微妙に絡んできます。それと、当初コンクリートを打設してから、

水和熱発生がどうなっているのか、それがどのように硬化し、強度が発現していくのか、温度応力と強度の増加のバランスをうまく確保して、ひび割れが入らないようにします。解析結果を見ると、ひび割れが入るか入らないのか、だいたいの目安が得られます。ひび割れ指数が1・5より小さくなるとひび割れが入り、大きくなるとひび割れが入りづらくなります。いろいろな施工方法、気温や風速などの環境条件によって変化しますので、それをシミュレーションしたのもなんです。

思います。スパコンは大容量で、高速な処理が可能ですので、ずっと長い材料期間にわたって計算できます。小樽百年コンクリートをシミュレーションし、現在の健全度と比較検証することも可能で、これら結果を活用しコンクリートの性能変化を百年以上も、可視的に予測評価するシステムの開発も現

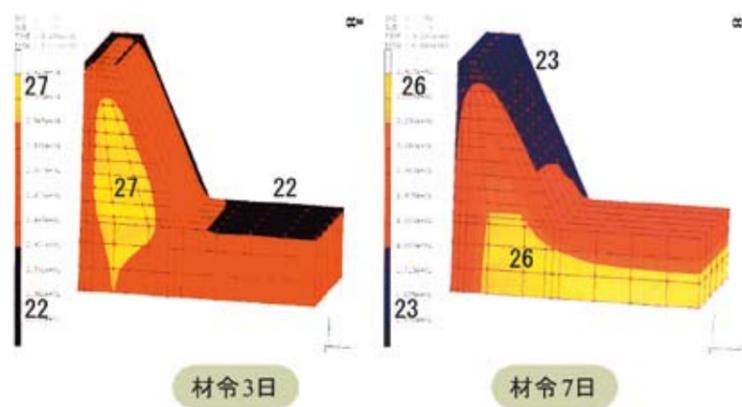
実味を持つてくると思います。
編集 それはすごいですね。百年前には思いつかなかったことが、スパコンで可能になりつつあるということですね。さらなる研究成果を期待しています。本日は、大変ありがとうございました。



スパコン・ソフトウェアMSC.Marc/Mentatのための3次元解析モデル

桜井 それはカップリングで、温度と応力を考慮します。今までは、温度と応力は別々に解析をしていました。ひび割れ指数の定義では、温度の項と応力の項を持ってきて、連立方程式を立てているんです。
編集 温度と応力の2つを同時に考慮しながらという意味ですね？
桜井 コンクリートは発熱し、応力が生じます。それを一組の連立方程式で表現することで解析するのが温度応力連成解析です。MSC.Marcは連成解析

が。 **編集** 連続解析(注4)となっています。 **桜井** それはカップリングで、温度と応力を考慮します。今までは、温度と応力は別々に解析をしていました。ひび割れ指数の定義では、温度の項と応力の項を持ってきて、連立方程式を立てているんです。 **編集** 温度と応力の2つを同時に考慮しながらという意味ですね？ **桜井** コンクリートは発熱し、応力が生じます。それを一組の連立方程式で表現することで解析するのが温度応力連成解析です。MSC.Marcは連成解析



3次元温度応力連成解析による温度分布の解析結果の例

た全データの中から、解析に必要な要因が記録されている約1万データを抽出して、強度経年変化推移解析、強度に影響を及ぼす要因および信頼性の解析を実施しました。
編集 どんな結果が得られたのですか？
桜井 長期抗張力強度については、淡水や海水中よりも空气中で暴露されると成分が溶出しないためや強度が大きいことや、材令との関係、それとセメントや火山灰を水に対して多く配合することで、長期的に強度が高く、安定している傾向を示すことが統計解析や信頼性解析から明らかになりました。
編集 廣井勇博士のモルタルブリケットのお陰で、いろいろなことが解明されたんですね。

編集 小樽百年コンクリートなどの例にもあるように、実際に実験を行うのは結構大変かと思うのですが、計算機シミュレーションならば短期間にいろいろなことを明らかにできるのでないでしょうか？
桜井 そうです。最近では商用ソフトウェアも優れたものがあり、研究に活用しています。
編集 具体的に、どのようなソフトウェアを利用して解析されているんですか？
桜井 MSC.Marc/Mentatです。情報基盤センターのスパコンで利用できるようになっています。
編集 連続解析(注4)となっていますか？
桜井 それはカップリングで、温度と応力を考慮します。今までは、温度と応力は別々に解析をしていました。ひび割れ指数の定義では、温度の項と応力の項を持ってきて、連立方程式を立てているんです。

が。 **編集** 連続解析(注4)となっています。 **桜井** それはカップリングで、温度と応力を考慮します。今までは、温度と応力は別々に解析をしていました。ひび割れ指数の定義では、温度の項と応力の項を持ってきて、連立方程式を立てているんです。 **編集** 温度と応力の2つを同時に考慮しながらという意味ですね？ **桜井** コンクリートは発熱し、応力が生じます。それを一組の連立方程式で表現することで解析するのが温度応力連成解析です。MSC.Marcは連成解析

編集 このアプリケーションソフトウェアでは、横軸が時間で、温度とか応力などのパラメータを解析結果として取り出せるんですか？
桜井 そうです。
編集 普通のコンクリートで、日数が短いちは強度不足で、ひび割れの可能性があるわけですよね。さらに、何日か経つと一時的に構造物内部の応力が高いところが出てきますよね。これは、どういう理由なんですか？
桜井 解析に気象データを入れていきます。寒い日とか暖かい日によって構造物内部の各部分に発生する応力が異

知って得する!!
第6回



「スパコン数値計算ライブラリ
を使いこなす」

日本 NAG 社

SUPERCOMPUTER
ACADEMY



第6回
スパコン数値計算
ライブラリを使いこなす

数値計算プログラムの実行において、その計算結果の信頼性は非常に重要です。特に、スパコンを利用するユーザの皆様においては、パフォーマンスも重要であるかと思えます。しかし、計算プログラムの作成で、信頼性とパフォーマンスを両立するためには多大な労力が必要です。幸いなことに、北海道大学情報基盤センターのスパコンには、ユーザの皆様が即利用可能な、高信頼性、高パフォーマンスの並列数値計算ライブラリが導入されています。今回のスパコンアカデミーでは、この並列数値計算ライブラリを活用することのメリットや方法について明らかにします。さらに、フリーで提供されている線形代数ライブラリ LAPACK との性能比較ベンチマークを行います。

数値計算ライブラリとは？

数値計算ライブラリとは、「F、D、Tを行う」、「連立方程式を解く」、「スパコン補間をする」などさまざまな計算を行うためのサブ

ルーチンをまとめた（ライブラリ化した）ものです。ライブラリの利用者は、ライブラリに含まれるサブルーチンがある特定の計算を行うための

部品として利用することができます。例えば、固有値問題を解くためのサブルーチンを利用する場合、ユーザはプログラム内から必要な計算を行うためのサブルーチンを呼び出します。これにより、固有値問題を計算する部分のコードを自分で作成することなく、目的の計算を行うためのプログラムが作成できます。このような数値計算ライブラリには、無償で利用可能なものから有償で利用可能なものまで、そして性能や質の良い物からそうでないものまで存在します。特に、良質な数値計算ライブラリはその利用者に大きなメリットをもたらします。

良質な数値計算ライブラリを利用するメリット

良質な数値計算ライブラリを利用することのメリットはいくつかあります。まず、自作で同等な機能を実現する場合と比較して、開発時間を著しく短縮できます。ライブラリが提供するようなサブルーチンを自作するために、数値計算アルゴリズム、プログラミング、パフォーマンスチューニングなど、比較的広範囲な知識や経験が要求されます。これらをふまえた上で、自力でルーチンを作成することも勿論可能ですが、テストを含めた開発作業には多くの時間と労力が必要です。

表1.数値計算ライブラリの機能概要

多項式の根	1つ以上の超越方程式の根
級数の和(FFT含む)	求積法
常微分方程式	偏微分方程式
数値微分	積分方程式
メッシュ生成	補間法
曲線及び曲面フィッティング法	関数の最小化・最大化
行列因数分解	固有値と固有ベクトル
行列式	連立一次方程式
直交化	線形代数支援ルーチン
一次方程式	最少二乗と固有値問題
スパース線形代数	大規模固有値問題
単純な計算と統計データ	相関と回帰分析
多変量解析	分散分析
乱数発生法	1変数推定
ノンパラメトリック統計法	平滑化
分割表分析	生存解析
時系列解析	オペレーションズリサーチ
並べ替え	エラー処理
特殊関数の近似	内積
入出力ルーチン	日付と時刻のルーチン

その次に挙げられるメリットとして、計算結果の信頼性があります。信頼性の高い計算プログラムの作成には、計算アルゴリズムの知識の他、特に、計算誤差に関する知識と経験が必要です。また、できあがったコードを体系的に検証し、さまざまな条件下で正確な答えが算出されるかを確かめるためのテスト環境が必要です。この点、良質な数値計算ライブラリは、その道のプロである数値計算エキスパートにより作成されていることと、汎用的な利用を想定して多くのテストが行われていることなどから、優れていると言えます。

さらに、メリットとして挙げられる点にパフォーマンスがあります。良質な数値計算ライブラリは、多くの場合パフォーマンス面でも優れています。NAG Fortran Library
北海道大学情報基盤センターのスパコンに導入済みのNAG Fortran SMPライブラリは、汎用並列数値計算ライブラリです。このライブラリは英国にて1971年に第一版がリリースさ



第6回
スパコン数値計算
ライブラリを使いこなす

LAPACK, Intel
Math Kernel Library
など、さまざまな
ライブラリが提供
されています。本
回は、その中で
最も信頼性の高
いライブラリと
して、NAGライ
ブラリを紹介し
ます。

今回のベンチマークでは、無償で利用可能な通常バージョンのSLAPACKとNAG Fortran SMP ライブラリの比較を行いました。NAG Fortran SMP ライブラリにはLAPACKルーチンが含まれていることから、ソースプログラ

ムは全く同じもの

で、それぞれリンクするライブラリを変えて比較を行いました。

比較対象のLAPACKはnetlib.orgのソースコード

トするための一連のテストプログラム「Stringent Test Programs」が必ず実行

されます。もし問題が見つければ、それらは直ちに修正され、最終的なリリースに至ります。

ここで探し出される問題は、コンパイラが行う最適化の問題は、コンパイラが行う最適化(OMP 1-04等で指定される)が誤っていることや安全ではないことに起因

するものも少なくありません。そのような場合、必要に応じて該当箇所のみ最適化レベルを調整するか、もしくは

当該コンパイラが正しく最適化できるコードに改編するなどして、最終的に正しい答えを算出するライブラリが作成されます。

北海道大学情報基盤センターのスパコンには、NAG Fortranライブラリの中でも特にSMPアーキテクチャ向けに

並列化が行われたNAG Fortran SMPライブラリが導入されています。NAG Fortran SMPライブラリは数値計算

の専門家により、OpenMPを用いてあらかじめ並列化された計算ルーチンを多く含んでいます。

並列化された計算ルーチンはその入口で1つのスレッドですが、ルーチン内で複数のスレッドにわかれて並列に処理を行い、最終的にルーチンの出口では再度1つのスレッドにもどるように設計されています。

そのため、ユーザは通常のシリアス。連立一次方程式、最小二乗法、固有値問題を解くためのルーチンが提供されています。

LAPACKが質の良いライブラリであることから、多くのユーザが利用していることから、他の数値演算ライブラリ(例えば、Intel社製MKL

およびAMD社製ACML)にその機能が含まれています。

NAGライブラリも例外ではなく、その提供機能にLAPACKが含まれています。

NAGライブラリにLAPACKが含まれている理由には、NAGの開発メンバーがLAPACKの開発プロジェクトにも参加していることがあげられます。

NAG Fortran SMPライブラリで提供されているLAPACKルーチンは、専門家によりさらに最適化され、通常のものと比較してより高性能になっています。

今回のベンチマークでは、無償で利用可能な通常バージョンのSLAPACKとNAG Fortran SMP ライブラリの比較を行いました。

NAG Fortran SMP ライブラリにはLAPACKルーチンが含まれていることから、ソースプログラムは全く同じもの

で、それぞれリンクするライブラリを変えて比較を行いました。

比較対象のLAPACKはnetlib.orgのソースコード

トするための一連のテストプログラム「Stringent Test Programs」が必ず実行

されます。もし問題が見つければ、それらは直ちに修正され、最終的なリリースに至ります。

ここで探し出される問題は、コンパイラが行う最適化の問題は、コンパイラが行う最適化(OMP 1-03, 1-04等で指定される)が誤っていることや安全ではないことに起因

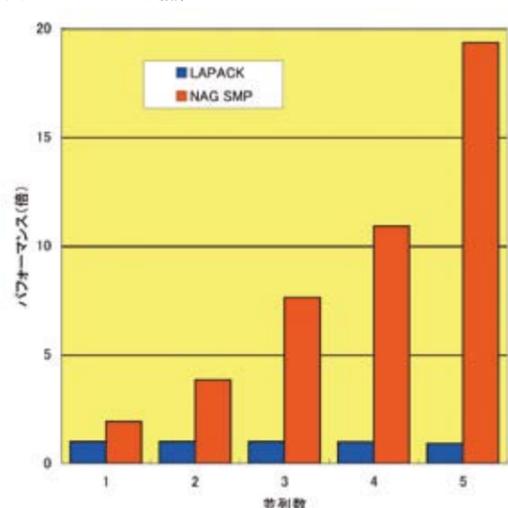
するものも少なくありません。そのような場合、必要に応じて該当箇所のみ最適化レベルを調整するか、もしくは

当該コンパイラが正しく最適化できるコードに改編するなどして、最終的に正しい答えを算出するライブラリが作成されます。

北海道大学情報基盤センターのスパコンには、NAG Fortranライブラリの中でも特にSMPアーキテクチャ向けに

並列化が行われたNAG Fortran SMPライブラリが導入されています。NAG Fortran SMPライブラリは数値計算

グラフ1. ベンチマーク結果



リスト1. プログラム例myprog.f

```

Parameters ..
INTEGER NIN, NOUT
PARAMETER ( NIN = 5, NOUT = 6 )
INTEGER NMAX, LDA, LDZ, LWORK
PARAMETER ( NMAX=8, LDA=NMAX, LDZ=NMAX, LWORK=64+NMAX )
.. Local Scalars ..
INTEGER I, IFAIL, J, N
.. Local Arrays ..
REAL A( LDA, NMAX ), W( NMAX ), WORK( LWORK )
REAL WR( NMAX ), Z( LDZ, NMAX )
.. External Subroutines ..
EXTERNAL F02EAF, X04CAF
.. Executable Statements ..
WRITE( NOUT, * ) 'F02EAF Example Program Results'
Skip heading in data file
READ( NIN, * ) N
READ( NIN, * ) IFAIL
IF ( N .LE. NMAX ) THEN
  Read A from data file
  READ( NIN, * ) ( ( A(I,J), J=1,N,1 ), I=1,N,1 )
  Compute Schur factorization of A
  IFAIL = 0
  CALL F02EAF( 'Vectors', N, A, LDA, WR, W, Z, LDZ, LWORK, IFAIL )
  WRITE( NOUT, * )
  WRITE( NOUT, * ) 'Eigenvalues'
  WRITE( NOUT, 99999 ) ( ( ' ', WR(I), ' ', W(I), ' ' ), I=1, N, 1 )
  WRITE( NOUT, * )
  CALL X04CAF( 'General', ' ', N, N, A, LDA, 'Schur from', IFAIL )
  WRITE( NOUT, * )
  CALL X04CAF( 'General', ' ', N, N, Z, LDZ, 'Schur vectors', IFAIL )
END IF
STOP
99999 FORMAT( 1X, A, F8.4, A, F8.4, A )
END

```

リスト2. コンパイルおよびリンク方法

```

xlf_r -q64 -qsmp=omp -qnosave -o myprog.exe myprog.f -L/opt/common/nag -lnagsmp -lesslmp
NAGライブラリの使用にあたっては、IBM社製コンパイラxlf, xlf90, xlf_rまたはxlf90_rとESSL SMPライブラリ(スレッドセーフESSLサブルーチン)を使用することが条件になります。

```

リスト3. 4スレッドでSMP並列実行を行う例

```

#!/bin/csh
setenv OMP_NUM_THREADS 4
./myprog.exe

```

最後に

北海道大学情報基盤センターのスパコンでは、その性能を十分に生かす数値計算ライブラリ「NAG Fortran SMPライブラリ」が利用可能です。ユーザの皆様が必要とする機能がNAG Fortran SMPライブラリに含まれているれば、最小限の手間で性能が良く、そ

し、オリジナルのSLAPACKよりは105秒でした。

また、並列数を2以上に指定した場合、並列化されていないLAPACKにおいてはパフォーマンスの違いが現れませんでした。

NAG Fortran SMPライブラリをリンクする際に、NAGライブラリをリンクす

る際には、オリジナルのSLAPACKよりは105秒でした。

また、並列数を2以上に指定した場合、並列化されていないLAPACKにおいてはパフォーマンスの違いが現れませんでした。

NAG Fortran SMPライブラリをリンクする際に、NAGライブラリをリンクする

る際には、オリジナルのSLAPACKよりは105秒でした。

利用方法について

NAGライブラリを利用するための主なステップは次のとおりです。

①最初に、必要としている機能を満たすNAGルーチンを探し出します。

②次に、そのルーチンをユーザプログラム内から呼び出す指定を行います。

ライブラリルーチンの呼び出しは、通常CALL文で行います。

リスト1にCALL文でNAGルーチン呼び出す簡単なコード例を示します。

③その後、ユーザプログラムをコンパイル・リンクします。

その際に、NAGライブラリをリンクする

る際には、オリジナルのSLAPACKよりは105秒でした。

また、並列数を2以上に指定した場合、並列化されていないLAPACKにおいてはパフォーマンスの違いが現れませんでした。

NAG Fortran SMPライブラリをリンクする際に、NAGライブラリをリンクする

LAPACK v9.6
比較ベンチマーク

無償で利用可能な線形代数ライブラリの代表格としてLAPACK (Linear Algebra Package) が挙げられます。

LAPACKはnetlib.orgからソースコードも含め無償でダウンロードして利用できる優れた線形代数ライブラリで

して信頼性の高いプログラムを手にする

ことが可能です。これを機に、ユーザの皆様がNAG Fortran SMPライブラリをご活用いただければ幸いです。

無償で利用可能な線形代数ライブラリの代表格としてLAPACK (Linear Algebra Package) が挙げられます。

LAPACKはnetlib.orgからソースコードも含め無償でダウンロードして利用できる優れた線形代数ライブラリで

して信頼性の高いプログラムを手にする

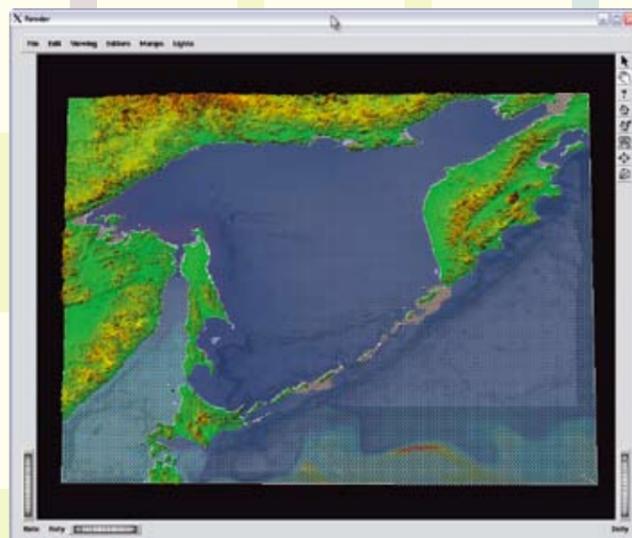
ことが可能です。これを機に、ユーザの皆様がNAG Fortran SMPライブラリをご活用いただければ幸いです。

無償で利用可能な線形代数ライブラリの代表格としてLAPACK (Linear Algebra Package) が挙げられます。

LAPACKはnetlib.orgからソースコードも含め無償でダウンロードして利用できる優れた線形代数ライブラリで

して信頼性の高いプログラムを手にする

ことが可能です。これを機に、ユーザの皆様がNAG Fortran SMPライブラリをご活用いただければ幸いです。



表示された解析結果。海中の塩分濃度が色分けされて表示されています。さらに、海洋部分は半透明になっていて、深度方向の分布も読み取れます。

可視化結果に感激

川口 あ!可視化結果が表示されました。かなり素敵ですね!

大宮 大規模データの処理や地形の詳細を表示していますので、表示が現れるまで多少時間がかかりましたが、みごとな可視化結果だと思います。

川口 周囲の地形などがリアルなので、解析結果がとても引き立っています。

大宮 これが高品位のパワーですね。3次元表示されているので、自由に回転することもできます。深さ方向にすべての解析データが重ねあわされています。透明表示になっているので、海の底のほうまで見る事ができます。また、深度を指定して表示することも可能です。

川口 地形データはどうしたのですか?

大宮 海岸線データおよび地形データは米国地球物理学データセンター NOAA Satellite and Information Service (<http://rimmer.ngdc.noaa.gov/mgg/coast/getcoast.html>) とETOPO2 (<http://www.ngdc.noaa.gov/mgg/fliers/01mgg04.html>) からダウンロードしたデータを使用しています。このように可視化に使えるデータが提供されていますので、それらを上手に利用することで、高品位な可視化を実現することができます。

川口 動画を作成することはできるのですか?

大宮 動画用のモジュールを追加するだけで、ムービーを作成できます。例えば、3ヶ月、6ヶ月あるいは1年間くらいの長い期間にわたって解析したデータをムービーにすることで、塩分濃度の変化がわかるので有効かと思えます。

川口 ここまでできるとは思っていませんでした。たくさん解析データがありますので、活用したいと思います。

大宮 是非そうしてください。次回は、別のアプリケーションソフトウェアにチャレンジしてみましょう。

さっそく、IRIS Explorerを利用してみましょう

大宮 スパコンに導入されているIRIS Explorerを利用します。このソフトウェアは、64ビットアドレッシングモードに対応していて、大規模データも軽快に扱うことができます。

川口 解析データは、前回同様に北海道周辺海域やオホーツク海の塩分濃度の夏季を中心とした解析結果を利用したいと思います。データは緯度、経度および深さ方向にそれぞれ等間隔の362×266×44のスカラ格子データです。

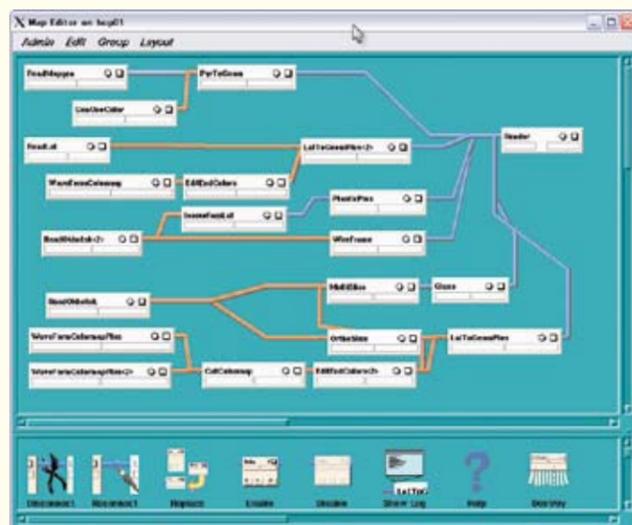
大宮 この画面に表示されているように、マップエディタと呼ばれるワークスペースにモジュールを配置します。モジュールはデータの読み込み、データ抽出や可視化データに変換などの単機能を提供します。また、これらのモジュールをつなぎ合わせることで、データが処理されながら最終的に表示モジュールのレンダーに到達します。モジュールはパラメータ設定機能があるので、設定変更は簡単です。変更点は表示に直ちに反映されます。

川口 どのモジュールを選んで、どのように結合すればよいかか難しそうだな...

大宮 モジュールの選択は、扱うデータの種類や表示方法に依存します。最初に、可視化した結果を頭の中に浮かべて見るのが大切です。いくつかのボタンがありますので、利用すべきモジュールを指定することは可能です。モジュールの種類や機能については、解説書やサンプルファイルを参考してください。また、モジュールの接続では、誤った接続はできないようになっています。モジュールの入力データと出力データタイプが決まっていますので、それらが矛盾しないようにします。

川口 モジュールがたくさん使われていますよね...

大宮 モジュールは単機能です。表示画面はさまざまな可視化結果を重ね合わせて表示しています。ひとつひとつの可視化結果を取り出すと、案外単純なモジュール構成になります。

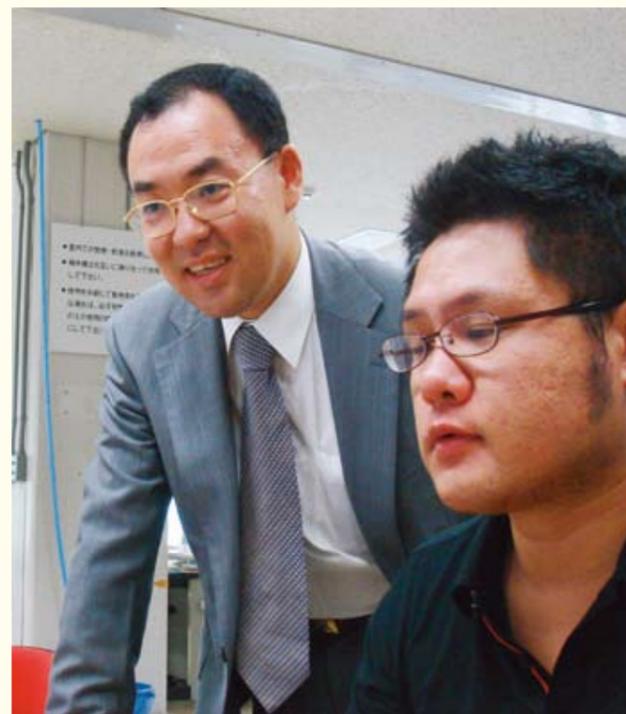


モジュールがたくさん並べられたマップエディタ

スパコン可視化道場

「アプリケーションソフトウェアIRIS Explorerで高品位可視化に挑戦」

連載
(第4回)



大宮 大規模解析と可視化は車の両輪のようなものです。可視化を上手に利用することで、解析結果の有効性が何倍にも増幅されます。これまで説明してきているように、可視化の利点は理解を容易にすることです。また、見ているだけでもワクワクドキドキするものです。

川口 可視化システムは機能が豊富なことから、使い方をマスターするのが大変でないでしょうか?

大宮 そうですね。汎用的なソフトウェアは常に機能強化を行って、さまざまな要求に応えようとしています。それにつれて、だんだんと複雑になってきています。それでも利用を薦めるのは、高品位な可視化を実現できるからです。基本的な可視化プログラミングが完成すれば、さまざまなデータを適用することができますし、改良も容易です。

川口 可視化プログラミングがあるのですか?

大宮 プログラミングといっても、必要なモジュールを並べて、それらをつなぎ合わせるだけでいいですよ。

情報基盤センターで稼動しているスーパーコンピュータHITACHI SR11000モジュールK1では、日々大規模超高速解析が行われています。このような解析では出力される解析結果データは数10から数100GB以上のファイル容量になることが結構あります。このような場合、解析結果データを手持のPCにデータ転送したり、あるいはリムーバブルメディアにコピーすることはデータの信頼性、作業時間あるいは準備すべきハードウェアの点から有効とは考えられません。データは安心して保存できる場所に集中管理すべきです。本センターではこのような状況を踏まえ、高信頼なディスクスペースを低価格で提供しています。大容量データの可視化などのポスト処理はスパコン上で実行するのが合理的です。可視化で得られた画像データ、グラフおよび動画などを普段利用しているPCにダウンロードすることが、さまざまな面で優れていると考えます。

スパコンでの可視化に簡便さを求めるのであれば、前回紹介したようにフリーソフトウェアを導入することになります。スパコンならではの高品位な可視化を求めるのであれば、スパコンに導入されている商用アプリケーションソフトウェアを利用するのがいいでしょう。スパコン等にはいくつかの有名かつよく利用されている可視化用アプリケーションソフトウェアが導入されています。今回からは、これら商用アプリケーションソフトウェアを利用した可視化に挑戦してみましょう。これらソフトウェアは基本的に64ビット・アプリケーションであり、大規模な解析データを巧みに処理し、素敵な結果を提供してくれます。

大宮 こんにちは、今日はスパコンに導入されている可視化アプリケーションソフトウェアを利用して、高品位な可視化に挑戦しましょう。

川口 スパコンには、可視化に利用できるアプリケーションソフトウェアとしてどのようなものがあるのですか?

大宮 スパコンではIRIS ExplorerおよびIDL ENVIが利用できます。また、汎用コンピュータシステムのアプリケーションサーバや学内向けダウンロードソフトウェアとしてAVS/Express Viz、3次元可視化システム(MS Windows)にもAVS/Express VizおよびEnSight Goldが利用できるようになっています。

川口 そんなにたくさんあるんですか!いろいろなシステムでさまざまなアプリケーションソフトウェアが用意されているんですね。

数値計算ライブラリBLASおよびLAPACKが更新され、高速になりました。

ユーザの多くが利用されている数値計算ライブラリBLASおよびLAPACKはnetlibで公開されている数値計算のための各種ライブラリです。本センタースパコンでは、これら数値計算ライブラリのチューニングを行い、従来サービスを行っていた同様のライブラリと比較して処理性能を大幅に向上することに成功しました。下記のディレクトリで公開していますのでご利用ください。なお、このライブラリは日立製最適化コンパイラ(FORTRAN、C/C++)をお使いのときのみご利用いただけます。

```
$ pwd
/opt/common/freeware
$ ls -l
合計 512
drwxr-xr-x 2 root system 32768 Dec 28 2005 ARPACK
drwxr-xr-x 6 bin bin 32768 Jun 04 2005 Acrobat5
drwxr-xr-x 4 root system 32768 Dec 18 22:46 BLAS
drwxr-xr-x 4 root system 32768 Dec 23 2005 BLAS_old
drwxr-xr-x 4 root system 32768 Dec 23 2005 LAPACK
drwxr-xr-x 4 root system 32768 Dec 23 2005 ScaLAPACK
drwxr-xr-x 4 root system 32768 Jul 04 15:16 boost
drwxr-xr-x 5 root system 32768 Apr 07 2006 ruby-1.6.8
```

ディレクトリBLASおよびLAPACK以下のディレクトリ構造は下記のとおりです。

LIB.L：関数名が大文字(ユーザ開発FORTRANプログラムで使用)

LIB.S：関数名が小文字(ユーザ開発C/C++プログラムで使用)
ただし、ディレクトリBLAS_OLDおよびLAPACK_OLDには、オリジナルソースコード(netlibかダウンロード)から作成されたライブラリが保存されています(性能はよくありませんが、利用可能です)。

さらに、これらディレクトリの下に8つのライブラリ(バイナリ)があります。

libblas_p32.a：32ビットSMP並列版BLAS
libblas_s32.a：32ビットシリアル版BLAS
libblas_p64.a：64ビットSMP版BLAS
libblas_s64.a：64ビットシリアル版BLAS
liblapack_p32：32ビットSMP版LAPACK
liblapack_s32.a：32ビットシリアル版LAPACK
liblapack_p64.a：64ビットSMP版LAPACK
liblapack_s64.a：64ビットシリアル版LAPACK
(注意事項)本センターでは、日立製最適化コンパイラのデフォルトは64ビットアドレッシングモードに設定されています(オプション-64が設定されています)。

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

大判プリンタが2台、新規に設置されました。

汎用コンピュータシステムの更新に伴い、従来からご好評を得てまいりました大判プリンタによる印刷出力サービスを強化するため、大判プリンタ2台を新規に設置しました。新大判プリンタはヒューレット・パッカード社製designjet800psで、従来からサービスを行ってききました大判プリンタと同機種です。また、出力専用それぞれのプリンタに接続されたPC(MS Windows XP)およびMac(MacOS UX)を用意しました。それぞれの計算機にはMS Word/PowerPoint/Publisher、Adobe Photoshop CE/Illustrator/ Acrobatなどのアプリケーションソフトウェアを用意しています。さらに、高品位な印刷のためのフォントおよびライセンスフリーのデジタル素材を多数利用できるようにしました。利用方法および出力方法の詳細を説明した利用講習会資料「大判プリンタ利用法」を新たに作成しましたので、ご参照ください。http://www.hucc.hokudai.ac.jp/~a10019/kosyu/kosyu90.html

なお、大判プリンタの利用に関して、ユーザのPCを持ち込んでの印刷出力には対応しませんので、なにとぞ協力いただけますようお願いいたします。



同機種の大判プリンタを2台設置しました。これで、プリントアウトの待ち時間がなくなります。さらに、プリント結果を丹念にチェックすることも可能になります。



MS Windows PCとMac PCの2機種を設置して、さまざまなユーザの要望に応えられるようになりました。

汎用コンピュータシステムが更新されました。

汎用コンピュータシステムの更新(平成19年3月1日)に伴い、4月1日から魅力あふれる新サービスが追加されます。これまで、5年間にわたりご愛用いただきました汎用コンピュータHITACHI Superdomeから、ブレードサーバを基本とするコンピュータで構成される新汎用コンピュータシステムに更新されました。多彩で魅力的なサービスを用意していますので、多くの方々にご活用いただきたいと考えています。新汎用コンピュータシステムとサービスについては、次号の特集記事で詳細にお伝えします。また、平成19年4月1日から利用負担金の一部が変更になります。新汎用コンピュータシステムでの新サービスに適合するための利用負担金制度の改定であり、スパコン関係のサービスはこれまでどおりの負担金でご利用いただけます。なお、詳細についてはセンター大型計算機システムホームページwww.hucc.hokudai.ac.jpをご覧ください。

戦略的基盤ソフトウェアFrontFlow/Redがスパコンで利用できます。

戦略的基盤ソフトウェアで開発が行われたFrontFlow/Redがスパコンで利用できるようになりました。ソフトウェアの公開にあわせて、平成19年1月29日(月)15時から、利用講習会を本センター2階ディスプレイ端末室で実施しました。当日は、ソフトウェアの開発およびスパコンへの移植を担当されたアドバンスソフトウェア株式会社畝村毅氏による講義と実習指導が行われました。参加された12名の受講者は大変満足した感想をもたれていました。なお、当日利用しましたテキスト、自習用資料および使用説明書-実行編-をpdfファイルに変換し、下記URLで公開しています。利用の際の基礎資料としてご活用ください。

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



FrontFlow/Red利用講習会のようす

なお、本ソフトウェアの導入にあたっては北大シミュレーションサロン(HSS)および本学大学院工学研究科大島伸行先生にお世話になりました。

ワトソン疎行列ダイレクトソルバWSMPが利用できるようになりました。

IBM社製数値計算ライブラリWatson Sparse Matrix Package(以後、WSMP)をスパコンに導入しました。WSMPは大規模な疎行列に対する直接解法ライブラリで、高速処理が特徴です。特に、複素数(対称・Hermitian・一般)に対応していることから、高周波あるいは光領域におけるデバイスの設計および解析などにも有効です。シリアル版および1ノード内16SMP並列版をIBM社製FortranコンパイラまたはCコンパイラでリンクできます。ディレクトリ配置は下記のとおりです。

```
WSMP関連ディレクトリ:/opt/common/wsmpl/wsmpl-AIX
ライブラリを含むディレクトリ:/opt/common/wsmpl/wsmpl-AIX/lib
ライブラリ構成
libpwsmp.a 32ビットSMP並列版
libpwsmp64.a 64ビットSMP並列版
libwsmpl.a 32ビットシリアル版
libwsmpl64.a 64ビットシリアル版
```

なお、本ライブラリの導入にあたっては、本学創成科学共同研究機構に所属されていた寺倉清之先生(現在、北陸先端科学技術大学特別招聘教授)にお世話になりました。

計算機学術利用北海道地区協議会総会が開催されました。

平成19年3月26日(月)北海道大学情報基盤センター北館会議室において、平成18年度計算機学術利用北海道地区協議会(以後、地区協)総会が開催されました。地区協は、北海道地区における全国共同利用大型計算機システムの利用促進と計算機利用学術研究の振興を図ることを目的として設置されています。道内の大学(国立、公立、私立)をはじめとして短大および高専等で構成されます。協議事項として、大型計算機システムおよび情報通信基盤の利用に関する事項が議論されます。



計算機学術利用北海道地区協議会総会のようす

総会においては、センタースパコンの現状や利用状況、次世代スパコンに関する報告などがありました。また、各連絡所の責任者およびプログラム指導員の交代、計算機システムあるいは情報基盤等の最新情報について意見交換が行われました。総会終了後、本センター研究部門 大宮教授から「新汎用コンピュータシステムとサービス概要」と題した講演会が行われました。汎用コンピュータシステムやスパコン・アプリケーションソフトウェアの活用方法についてさまざまなアイデアが提案されました。

相談室Q&A

Q スーパーコンピュータシステムのバッチ領域を利用する際、同一ユーザが投入できるジョブ数の最大値はいくつに設定されているのでしょうか？

A スパコンバッチ領域を使用するときには、コマンドllsubmitを利用してジョブの実行を依頼します。コマンドllsubmitによるジョブ投入数の制限を行っていません。ただし、ジョブの同時実行数は、ユーザあたり最大4本とし、利用する演算装置数には依存しません。また、ジョブクラスごとの最大実行数は次の通りです。バッチ領域で利用可能な演算装置台数は33です。

ジョブクラスa	9
ジョブクラスb	25
ジョブクラスc	18

Q スパコンのバッチジョブ実行について、優先順位が高いのにかかわらず、実行待ちの状態になっています。どうしてでしょうか？

A バッチジョブを投入してからおよそ10日以上経過した場合、そのジョブは実行されないと考えられます。その理由として、ジョブコマンドファイルの記述が正しく行われておらず、スケジューラ(ロードレバラー)が実行できないような条件になっていることが考えられます。また、大量のジョブを一度に投入することが原因になることもあります。ジョブコマンドファイルの記述方法に問題がある場合、ロードレバラーがエラーメッセージを出力して、そのジョブをジョブリストから削除します。何らかの理由で、ジョブが実行されなくなった場合、コマンドllcancelを利用して、当該ジョブを一度削除し、もう一度実行してみてください。iiC-HPCニュース7号「相談室Q&A」を併せてご参照ください。

相談員プロフィール



長谷川公嗣

大学院 情報科学研究科

月曜日

15:00 ~ 17:00

担当

情報基盤センター内に、大学院研究室があります。そこで、スパコンを活用した研究を行っていることから、相談員を担当させていただいています。私の研究テーマは大規模電磁界解析です。北大スパコンを利用して、地上デジタル放送波や無線LANに関する室内電波伝搬特性の数値解析を行っています。北大スパコンでは、1演算装置あたり100GBの主記憶容量と16個のプロセッサを使用できるので、大規模な解析が可能です。可視化ソフトウェアを利用して、スパコンでの解析結果を可視化しています。可視化を行うことで、目に見えない電波のふるまいが手に取るように理解でき、一般の方にも興味を持っていただけます。センター職員の方の指導を受けながら、皆様方の質問に対応していますので、気軽にご相談ください。



奥西 武

大学院 工学研究科

月曜日

13:00 ~ 15:00

担当

昨年4月から情報基盤センター利用者相談室で、月曜日の前半を担当している工学研究科の奥西です。私は、海洋の数値モデルを使った研究をしていて、情報基盤センターのスーパーコンピュータを利用させていただいています。スパコン利用経験はまだ1年ぐらいで、初心者の方です。センターの講習会で大宮先生の親切な指導を受けて、難なくスパコンユーザの仲間入りできました。最近ようやく、スパコンの優れたところや、スパコンで利用可能なコンパイラの特徴など少しずつ分かり始めて、徐々に要領よく、スパコンが使えるようになって来た感があります。まだ、皆様方の質問に対して的確に対応できないこともあるかと思いますが、どうぞよろしくお願いいたします。

バッチジョブの状態を調べるコマンド

```
$ llq -u [userID]
Id      Owner Submitted  ST  PRI  Class Running On
hopc01.37926.0 [userID] 1/25 12:11  I   50   c
```

レポート結果から、ジョブIDがhopc01.37926.0のジョブが1月25日12時11分に投入され、現在の状態(ST)が待ち状態(I)であることが分かります。このジョブを削除するためにコマンドllcancelを利用し、その引数にジョブIDを指定します。コマンド例を以下に示します。

```
$ llcancel hopc01.37926.0
```

```
llcancel: Cancel command has been sent to the
central manager.
```

```
$ llq -u [userID]
```

```
llq: There is currently no job status to
report.
```

Q 統計プログラムSASの利用に関する質問です。フリーソフトウエアのFFFTPを使って計算サーバmaltにSASプログラムとテキストデータを送ります。その後、TeraTerm Proを使用して、SAS9による分析を行っています。

- (1) 分析結果(**xxx.lst**)やログ(**xxx.log**)の日本語はEUCコードになっています。パソコン側にダウンロードした後、MS WordにEUCコードで読み込んで確認していますが、問題ありませんか。
- (2) SASプログラムやテキストデータに日本語が入っているときはFFFTPを使ってmaltにアップロードし、その後で**nkf -e**でEUCコードに両方を変換してから分析しています。実際には、EUCコードに変換しなくても分析そのものは正しく行われますか。
- (3) プログラムやテキストデータはmaltに残さず、分析が終わるとパソコンにファイル転送しています。**nkf**を使って変換するとサーバ上に同じプログラムやデータが増えるので、ダウンロードやアップロードを繰り返していると整理するのが大変です。日本語を含むSASプログラムやテキストデータであってもコード変換を一切行わずに正しく分析が行えるのであれば、今後はそのまま分析したいのですが問題ないですか。

A 計算サーバ(malt)でのSAS9の利用サービスは、平成19年2月末日で終了しました。現在、SAS9はスパコンで利用できます。PC端末からスパコンに接続する場合、SSHでの接続のみを許可していますので、ファイル転送はFFFTPの代わりにフリーソフトウェアWinSCP、MS Windows用端末ソフトとしてTeraTerm ProまたはPoderosaのご利用をお勧めします。これらソフトウェアの利用方法について、下記ホームページに掲載されている「A-3. スパコン関連情報」をご覧ください。

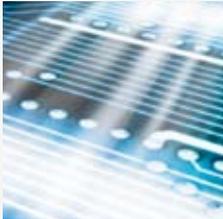


<http://www.hucc.hokudai.ac.jp/~a10019/kosyu/>
ただし、SAS9利用時の接続先サーバは「corn.hucc.hokudai.ac.jp」です。また、コマンド「sas」でSAS9.1が起動し、日本語コードはEUCです。

- (1) 日本語EUCコードのファイルをMS Wordに読み込む際にコード変換指定すれば読み込めます。FFFTPにはファイル転送時にコード変換する機能がありましたが、スパコン使用時のファイル転送WinSCPには漢字コード変換の機能がありません。サーバ側かパソコン側で変換ツールを使って漢字コードをS-JISに変換してください。サーバ(corn.hucc.hokudai.ac.jp)側でEUCのファイル **sample.euc** からS-JISのファイル **sample.sjis** に変換するとき、

```
% nkf -e sample.euc > sample.sjis <Enter>
```

のようにコマンドnkfを使用します。パソコン側は、
 - ・MS Word読み込みの際にコード変換する
 - ・エディタソフト(WZ Editor)等のコード変換機能を使う
 - ・フリーソフトでコード変換ツールを入手する等の手段があります。
- (2) ファイルに含まれる日本語コードによらず、SASによる分析は正しく実行されます。EUC以外の日本語コードが入力ファイルに含まれる場合、SASの実行結果に複数の日本語コードが混在してしまいますので、結果の一部に文字化けが生じます。いづれにしても、コード変換が必要です。
- (3) 日本語コードの混在については、SASを利用して、日本語コードの変換を行わないで分析した結果と、コード変換して得た結果を比較して、結果が同一であることを確認されることをお勧めします。ファイルはスパコンの外部ディスクに一括して管理し、必要なデータのみPCにダウンロードして利用されるのが良いかと考えます。その場合、ダウンロードして利用するファイルのみ、スパコン上で漢字コードの変換をされてはいたがでしょうか。



●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/20060105new_hop.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ニュースも本号で10冊目を数えるようになりました。巻頭インタビューでは、北見工業大学に桜井宏先生をお訪ねし、コンクリートの経年変化をスパコンで明らかにするプロジェクトについてお話をお聞きました。長期耐用のコンクリートの実験は、札幌農学校二期生の廣井勇先生にまでさかのぼるとのこと、実学重視の北大の伝統が、北の海で息長づいていることを実感いたしました。

●次号の特集予告

次号iiC-HPCニュース11号では、平成19年4月1日からサービスを開始した「汎用コンピュータシステム」を紹介させていただきます。

●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担当 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10号

編集・発行：北海道大学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

- | | | | |
|-----------|-------|---------|--------|
| ●低温科学研究所 | 三寺 史夫 | ●理学研究院 | 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 | ●農学研究院 | 谷 宏 |
| ●文学研究科 | 樽本 英樹 | ●北見工業大学 | 桜井 宏 |

