

High Performance Computing System Information Initiative Center





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

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.15**

●北海道大学大学院情報科学研究科 土橋宜典

02



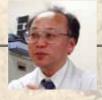


03

情報基盤センター大型計算機システムニュース日次

特集 〈インタビュー〉 電磁波と荷電粒子の世界 ●室蘭工業大学 大学院工学研究科 准教授 川口秀樹

 04^{-0}



##

10-13

スパコン・アカデミー

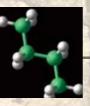
「大規模分散並列処理のための解析領域とランクの関係付け」

●情報基盤センター大規模計算システム研究部門 大宮 学

連載スパコン可視化道場

●番外編 4「分子構造の可視化」

14-15





16-19

スパコンInfo

- ●共同利用・共同研究拠点に認定されました
- でンター公募型共同研究採択課題について
- ●先端的大規模計算利用サービス

平成21年度第2期利用企業の募集について

- ●第8回産学官連携推進会議(京都国際会議)での出展について
- ●先端的大規模計算利用サービス 第3回シンポジウムを開催
- ●相談室Q&A
- ●相談員プロフィール



向性は物体表面の反射分布関数により決定される。物体表面には、四方八方から光が入射してきており、それらが全て指向性を持って拡散する。その拡全て指向性を持って拡散する。その拡を全て足し合わせなくてはならない。この計算にはレイトレーシング法を拡この計算にはレイトレーシング法を拡張した分散レイトレーシング法を用いてぼんやりとした映りシング法を用いてぼんやりとした映り

ルなどに物体が映り込む現象が数多く存在する。これは鏡面反射による効果である。鏡面反射は、大別して、鏡のように物体がはっきりと映り込む場合と金属表面のように物体がぼんやり映り込む場合に分類できる。前者は、比較的計算がやりやすく、CG界では知らめ計算がやりとした映り込みの計算コストを必要とする。ぼんやりと映り込むトを必要とする。ぼんやりということは、金属などの鏡面反射物ということは、金属などの鏡面反射物ということは、金属などの鏡面反射物ということは、金属などの鏡面反射物ということは、金属などの鏡面反射物ということは、金属などの鏡面反射物ということは、金属などの鏡面反射物ということは、金属などの鏡面反射物ということは、金属などの鏡面反射物ということは、金属などの鏡面反射物ということは、金属などの鏡面反射物ということは、金属などの鏡面反射物ということは、金属などの鏡面反射物ということは、金属などの鏡面反射物ということは、金属などの鏡面反射物



●情報科学研究科

体の表面に入射した光が指向性を持っ

て拡散するということである。この指

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。ギター演奏も多りは行う。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

電磁波と荷電粒子の世界

からの電磁ノイズなどです。

粒子同士を大きな力で衝突さ こなごなに壊れるのでしょう

川口

か?

帯電話の電磁波の動き、プリント基板 話から放射される電波、車の中での携 **^べてが**

ます。先生、本日はよろしくお願いし 編集 今日は室蘭工業大学 の基礎電気力学研究室にお伺いしてい よろしくお願いします 川口先生

川口

加速器の規模

と、10の9乗ですから…

る分野を中心に研究を行っ 実験(注2)に使われる加速器に関す 編集 それでは、まず、研究の主な分野 (注1)といわれる分野で、素粒子 もともとは、いわゆる加速器科 していただけますでしょうか。 7 いまし

川口

か?

夫人を思い浮かべますが… そうです。粒子と粒子を衝突さ 素粒子実験というと、 キュリ

川口そうです。

なわけですね。

研究します。今では周長20キロメー しています。 めのコンピュータを使った数値計算を るため、電磁界の振る舞いを調べるた の中のコンポーネントの設計に応用す ル以上の大規模な装置もあります。そ せて、粒子が何からできているのかを

に予測できません。

それから、身近なところでは、携帯電

電こ磁ん **以界解析が…**

何 か例をお話しい ただけます

マイクロ波 イクロ波(注4)を使ってプラズ例えば、半導体を処理する装置で、

ていますが、数百ボルトの電圧で十分 振る舞いを把握しないと、現象を正確 になります。そのためには、電磁界の ますので、かなりの精度の制御が必要 する電磁場の詳細な把握がすごく重要 加速器であり、私の研究分野です ボルトの電圧で加速しないと壊れませ 原子の中の原子核を壊すとなってくる です。原子の中を壊すとか、あるいは 灯は、分子と分子を衝突させて光らせ なるほど、頑丈にできています。 ん。それを可能にする実験装置が粒子 (注3) はミクロンのオーダになり 粒子が小さいから、衝突を制御 そうです。小さい構造になれば 換算すると何十億とか、何百億 えーっ、そんなに大きいんです 実際のスポッ トサイ 蛍光 けています。 に注入できるかを調べていま 口波のエネルギーが加熱空洞 状にすれば、効率的にマイク から、どのような導波路の形 いは、電子レンジです。 ションで調べています。 きるかを計算機シミュレー にすれば均一な良いウェハー できるわけで、どういう電界強度分布 電界強度の強いところと弱いところが 方法があります。そのような装置では、 川口 これは、アスファ これは何です (注6)という装置 か? ある マグ

を加熱する装置です。今、日 路から回収し再処理して利用 けど、今はそのほとんどを道 ファルトを敷いていたんです 千億円という膨大なお金をか 本では、道路の補修に毎年数 なるほど。 昔は新しいアス ルト

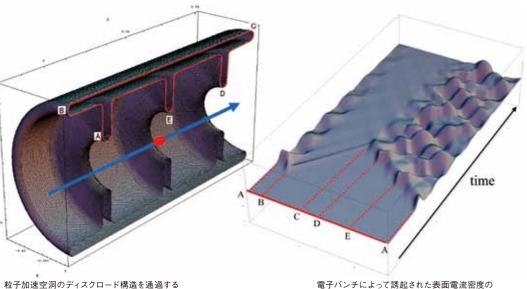
かして柔ら 収する方法は大きく分けて2 がり削る方法、 つあります。ひとつは、がり 川口 そのアスファ かくする方法で 一つは融 トを回

電子バンチの数値モデル

てウェハー上に回路を描いていく処理 (注5)を発生させて、それによっ 川口 がり

と表面が焦げたり、表面だけが熱くな す方法が有効ですが、バーナで燃やす 粉々になって再利用できません。融か がり削ると、砂や砂利は





企業との共同研究を行っていま

どちらがいいんです

電子バンチによって誘起された表面電流密度の

時間領域境界要素法シミュレーション例

ほんの少し前までは、電磁波

のみあるいは荷電粒子のみ

でしか計算できなかった、

電磁波と荷電粒子がまじっ

た複雑な世界が、3次元

でとらえられるようになり、

加速器内で発生する現象

などの3次元的な予測が

ぐっと近づいてきました。

の範囲内だったら変形しても にずれることもあります。

大丈夫

編集

これはだめ、

ح

いうところも

か?

というところをあらかじめシミュ

ションで調べておきます。

ひとつひとつ計

す。川口

共振状態のときは、

ほ

んの

ちょ

つ

コンで一番違うのはメモリ容量で

それがキャビティ

0)

共振状態で

 \Box

私の研究の

場合、

パ

ソ

コ

でしょうか?

川

それが目標です。

ミリ

も違わ

川口

ええ、知識と経験があるつも

いのですか?

ずに作れたとしても、使っているうち

ういうきれいな解が存在することがあ でも、意外なところに予想もしない、そ

なので、こ

編集

でも最適な場所は1カ所しかな

ときだけ存在できるんです。

の未知数が込み入った方程式を満たす

ことがあります。

細かくあたって初めて出てくる

たときに、偶然にいい形が見つかった 造を変えて200パタンぐらいになっ

だいたい5分程度。少しずつ構

1パタンにかかる時間は?

川口

マクスウェル方程式という複数

今度はどの辺を変えるか検討します を可視化しています。可視化しながら、

それは電界強度で、電波の強弱

試しています

この場合、

2

0パタンぐら

平面でないのにびっくりしまし

High Performance Computing System Information

電子パンチ (σ=1mm) ~11 m

粒子加速器航跡場大規模解析例(次世代粒子加速器TESLAの線形加速空洞)

検討されています。 クロ波を使って内側から温める方法が

温めるんですか?

川口 分の形状を検討する研究を行ってい 的に道路を温める方法を検討している 7)のようなカードで、離れたところ のです。それ以外に、S (注8)というシステムのアン からでも読み取れる最新のRF そうです。 電磁界解析で、効率 uica(注 テナ部

最近一般的になってきたカ

電子レンジと同じように道路を 用

ŋ ば、これをパソコンにつなぐことによ も勝手に計算するものです や電磁波解析など計算するタ の高速な計算機を作って、 ボ タブルなハイパフォ マンス

川口 界を利用しています。 り加速器と同じく電磁 数は異なりますが、やは

しなら 専用 計 おう ば 算機 作

ちょっと違う傾向の研川口もうひとつ、 パフォ テ ィング技 マンス

術 するに、いかに速く大き コンピュー 究は、専用計算機による (注9)ですね。要

を絞って、余計な処理をしないそれ専 な考え方です。これに対し専用計算機 の方法とは、視点を変えて、マイクロ波 る、これが従来からある一般的、基本的 のCPUを同時に走らせれば早く終わ のものを早くする、あるいは、たくさん な計算をするかです。CPUの速度そ ッチを入れればプログラムがなくて !こうす あとはス ゲッ

ら」をい

かに制御するか、

その数値計

そうした「ず

れ」や「む

、すな

して

います。

けでいいような。 ね…改札機にかざすだ タイプの乗車券です そうです。 周波 とか、電子回路はいったん作ったらそ ことになります。 コンピューティング環境が実現できる

LSIとか集積回路

レー

ションが必須です。

速な現象を扱う装置は、電磁界シミ

つ 7 換えるんですか?

回路の動作を自由に設定します。 けて、その配線情報を変更することで 配線情報を保存する記憶装置を別に設 して、それら演算器間の配線を変えま ハンダ付けするのと同じですが、 どっさり

発しています。 急速に普及してきて、今ものすごく大 舞いを詳細に計算する専用計算機を開 た状況を追い風に、マイクロ波の振る なら数万円くらいでできます。そうし ト基板の製作費用が、今は小さなもの てきています。またそれに加え、昔は きなハードウェアが使えるようになっ タのプリン

その3つに共通して面白 いと思

ろです

編集

編集 うのは、装置自体を作ってしまうとこ 算機の3つの研究を行っています

高

何百万円もしたコンピュー

設計応用という感じですね。

加速器、 電磁界解析、 専

川口 そうです。ここ10年くらいから これがそうですか?

身を自由に書き換えることができ、 のままですが、最近ではFPGA(注 常に柔軟に設計変更が可能になってい どうやってハ 演算器 ウェアがあって、中 ウェアを書き を用意 非 三次元 うとすると、寸法が100分の1、 をした容器の中に電磁波を閉じ込めよ えて、3次元になったり、ベクトル場と りません。電磁場というのはそれに加 な場合でも中に閉じ込められるとは限 が、波や音や弦の振動には節があり、そ や砂ならば容器に難なく入れられます 0) 一変します。 わち1%変化するだけで中のようす の単位でしか存在できないので、どん これが一番典型的な例で、楕円形状 から、容器の形状に応じて複雑な動 う方向依存性があったりするもので 中に電磁界を閉じ込めたいとき…水

ね 形をちょ これが変化して 11 る画像で

所がすっかり変わる、それが電磁界 難しいところです っと変えるだけで居場 \mathcal{O}

この等高線みたいなのがそうで

編集

続されると理論的な解析は困難になり 理論的にわかっているのは、直方体と のみで、実物のような導波管などが接 か円筒とか球などの簡単な形状のもの に分かっているのものもありますが、 わってしまうので、実用では使いづら との形状 なります。そのような構造は理論的 の変形でまったく様相が変

樹

それで小刻みに全部試してみる

室蘭工業大学 大学院工学研究科 准教授

1962年生まれ。北海道大学工学部電気工学科、同大

道大学工学部電気工学科助手を経て現職。主に、電

磁界理論、電磁界解析に関する研究に従事

ます

Hideki KAWAGUCHI

川ので 編集 けシ 設計をしないといけないため、 をしっかり捕らえて、ここだと決めて はいきません。最初から精度よく現象 置なので、20個も30個も試作する訳に 繰り返して製品化することが良く行わ で、ひとつ何十億円もかかる大きな装 れていますが、 の開発では、試作品を作って ミュレーションが非常に大事です。 装置の開発費はいくらぐらいで そうです。 一方、加速器などは逆 般の電気電子製品 は実験を と り

でしょうか?	に、どれぐらいの計算時間がかかるの	編集 例えばこういう解析をするの	め作って試します。	テクノロジーのところだけ、あらかじ	円かけてもいいから、一番中枢になる	のもあります。なので、まずは何十億	一 才智に作っ億日 一 一 当日 返し	コートをよ可上意り。	すか。	編集 装置の開発費はいくらぐらいで	けシミュレーションが非常に大事です。	言言をしたしとしいたしため といえ
[B	lounda	ry Co		_		formati	ion		_	ıt Sign		
[·	Memor,		e _y lemory1		ory1	Memor		Men	nory1	Men	nory1	1
╟,	(i,j,k) Memor (i,j+1,k		(i,j,k) (emory2 i+1,j,k)	Mem (i+)	ory2	(i,j,k) Memor (i,j-1,i	y2	Men	nory2	Mer	nory2 jk)	1
	Memor (i,j,k+		lemory3		ory3 +1,k)	Memor (i,j,k-	y3	Men	nory3 k-1)	Mer	nory3	1
117	Memory PML e	y4 N	lemory4 ML e.,	_	ory4 L e_	Memor PML			nory4	Men	nory4	1
					Select	or Circ	uit					
		No	rmal Gr	id					PML			i
		1		- J.	4	Ŕ	ل	Ą		Ų		
	Calculation module											

マイクロ波シミュレータ・FDTD/FIT専用計算機のアーキテクチャ



マイクロ波シミュレータ・FDTD/FIT専用計算機の試作マシンプリント基板

例えば、キ し詳しく伺い

ヤビティ

と

いう空洞

たいのですが

れでは、電磁界

り

く可能が

にが

はPCで使えなく

なり、計算規模に応

基礎研究の大切さというか と思いながら聞いていました。

コンに特化され、その同じプログラム はプログラムの書き換えになり、スパ すけど、プログラムをパラレル化しな

いと速くならない。

でも、パラレル化

とうございました。

難しいお話でした 最先端なのだな

かったです。

それと、

それでは先生、今日はどう

あり

いうことです。

それはそれで速いんで

と考えています

15) に変わってしまうのではないかと

ご要望に適したスパコンを導入した

になると、

ースカ

ラ(注

ユー

ザさんの声を聞き

ながら、

心配しているのは、新 -に何かご注文などあり

動かなくなるのが

一番困る。



で、計算時間は? は実行できません。 くにあるパソコンなどの計算機環境で の主記憶容量を使うので、なかなか近 加速器の計算は1 しているので、 (注12)の境界要素法 数時間ぐらい 100ギガバイ 結構時間 ・トです な。 00ギガバ (注13)を がか か…それ か

発生したとき、 発されているのです 用すると、それがブラッ (注14) することがあります。 そうです。 プログラムは先生が最初から ライブラリ か? クボ などを利

とに困ります。 ニングされてなくても、十 その原因を特定するこ だから、完璧にチュ 全に性能が クス化 バグが モリロ

を削減す ソフ ウェア的な工夫により ることも しばしば行 11

編集 時間発展させるのです っています。 なくても、 そうです 時間領域境界要素法とは、 自前でプログラ ね 時間領域境界要素 単に

行

法 川 は 口 1、そ の値をす たり 利用できるので、昔はあきらめていた O手法です。 メモリが必要です。 もできるようになりました。 するんですけど、 スパ ドあたり1 000ステップ前まで べて使って、 コンの発展とともに、以 もちろん、 00ギガバイトまで デー それでも大容量 時間発展させる 北大スパコンが 夕 を圧縮し の過去

の研究もまた再度見直しというわけで

 \mathcal{O}

デ たい

ルを計算し、

3次元では粒子の

だから、2次元では実用的な

ム開発を

飽くなき挑り 戦の

私どもセンタ の公募 型共同研

算できそうな気がしています。

元でも小さいモデルならスパコンで計

す

します。 川口 直線軌道だと一度の 実験が起こりやす か 装置がかなり できます。 器というのは電界を加えて粒子を加速 軌道に沿ってまっすぐ を周回させながら加速するより、直線 質をあげて し、円軌道なら周回させなが 先ほど言 磁場をかけると曲げることも このとき実は、 小さくて済むんです。 いくことができます いましたように、 いように粒子ビ 加速するほう 円 トで衝突実 ら衝突 、加速

境でしかプログラムを実行できなく 複雑になったり、特殊な問題にし パコンでパラレ めに、昔の単純なスキ なったりします。 用できなかったり、 計算機の発展によって、 ル計算をします。

で計算を完了させるための努力はして ルにできるようになったわけです ただし、並列化して、

なるほど

いただけま |形の軌道

·が、通常、それはプログラムが非常に 汎用性を確保するた また、特殊な計算環 ムを使ってス か適

ムをつく

より短時間 シン ね ?

パ 口 験に適した質のい いビ

計算時間とメモリです。 由に設定することができるなどの利点 必要がないため曲線など粒子軌道を では粒子が通過する空間を離散化す め把握する必要があります。 だれが発生したときの影響をあらかじ 場がつくられる加速器の構造、コント あげる必要があり、そのためにも粒子 す。最近までの研究から、何とか3次 い方法を作ることを目的に実験を行っ ねります。 いるのです。 ュレーションする方法として、 コンで計算しています。 なわち、 ルの仕方を知ること、 ムにみだれが生じないような電磁 0 テラバ マ ただし、 イクロ波、 トのメモリが必要で 3次元解析に 大きな欠点は 電磁波を あるいはみ 境界要素法 それをス 新

究に、先生の研究課題が採択されまし たが、それについてお話し

《用語解説》

(注1)加速器科学

加速器に関する研究および加速器を利用した各種の研究。

(注2)素粒子実験

素粒子とはそれ以上分割することができない粒子を指し、主にそれ らの粒子の検出を行う実験を指す。

(注3)スポットサイズ

荷電粒子ビーム、光ビームの断面積サイズ。

(注4)マイクロ波

ギガヘルツ (10⁹Hz) 帯の電磁波を指す。

(注5)プラズマ

イオンと電子に電離した物質の状態。固体、液体、気体につづく第 四の状態とも言われ、電荷と電磁場が相互作用しさまざまな現象が 発生する。

(注6)マグネトロン

高周波を発生させるための装置で、電子レンジなどで用いられている。

(注7) Suica

JR東日本が提供するICカードで、電子マネー機能を備えている。

(注8)RFID

超小型の無線機能を備えたチップ。人、物などに取り付けられて情 報を取り出したり、識別するために利用される。

(注9) ハイパフォーマンス・コンピューティング技術

自然科学現象等を計算機シミュレーションする際に、大規模かつ高 速に処理するための技術。

川口

何とかやりたいと思ってい

そうす

れば世界で唯一動いている

ね

ことを確認しようと思っています。 がぐにゃぐにゃ曲がっても計算できる

ログラムも変更しなければいけなく

、手間がかかるのみならず、絶えず

さらに、比較的古いスペックのコ が混じってしまう危険性が生じま

それは大変興味深い研究で

独自のプログラムになるかと思ってい

編集

それはセンター

としてもやりが

走るからです。

ここではもちろん、

北

ていますので、プログラムがどこでも コンパイラは古いスペックはカバー ンパイラを使っています。それは通常

のある共同研究です。

それでは、

ていってもそのまますぐ走る。それが 大スパコンでも走るし、ドイツに持っ

ます しいスパ

か?

番の

魅力なんです。環境が変わ

って

(注10) FPGA

プログラミング可能なLSI。

(注11)演算器

プロセッサを構成する部品のひとつで、四則演算および論理演算を

(注12) タイムドメイン

時間領域の意味。私たちの日常が時々刻々変化しているのと同じ ように解析を行う。

(注13) 境界要素法

解析モデルを含む領域の境界のみを離散化して解析する方法。

(注14) ブラックボックス化

提供される機能を利用するだけで、内部で利用しているアルゴリズ ムや処理方法が分からない状態にあること。

(注15) スーパースカラ

プロセッサの中に複数の処理系を備えて、複数の命令を並列処理 する仕組み。

発展させようとお考えです な効率的な手法を探し モデル用のコードがあるので、それ メモリアクセスにおいてペ チングが最小限に押さえられ その上で、 3年前に作成した3次元の小さ 今回の共同研究では、どこまで して、 それをまずは2次元で確か 動くことを再度確認しま 行列ごとの並列化手法 か? いと思 - ジス って るよ

を実行

|z軸に対して垂直に領域分割(分割断面 xy 平面) INTGER:: IE, JE, Newvec_z, ierr MPI TYPE VECTOR を使用した場合(前回のスパコンアカデミーで紹介) CALL MPI TYPE VECTOR(IE*JE, 1, 1, MPI DOUBLE PRECISION, Newvec z, ierr) ! MPI_TYPE_CONTIGUOUS を使用した場合 CALL MPI TYPE CONTIGUOUS(IE*JE, MPI DOUBLE PRECISION, Newvec z, ierr) CALL MPI_TYPE_COMMIT(Newvec_z, ierr (注) IE、JE はそれぞれxおよびy軸方向の要素数、MPI_DOUBLE_PRECISION はオリジナルのデータタイプ Newvec_z は定義した派生データタイプ

られなければなりません。その結果 には、誰よりも先に高信頼な成果が得 しているスパコンでは1演算装置あた 世界最先端の研究や開発を行うため 16個のプロセッサと最大128バイ 例えば、本センターでサ か使用できません。 ・ビス

論しました。解析モデルの3次元形状 割法」と題して、MPI並列プログラ に、領域分割を行った境界面上のデ に適合させて、どのように領域分割を ミングのための領域分割法について議 大規模分散並列処理のための領域分 を共有するためのMP 前回のスパコン・アカデミ ーでは

通信で利用する派生デ

領域分割が必須大規模・高速解析 高速解析では

算を行うことができます。 析プログラムに依存することなく、 能なプロセッサ数や主記憶容量は有限 実世界では計算機1台あたりで利用可 想的な計算機があれば、計算規模や解 解析対象があり、それに関して計算 プロセッサや主記憶容量などの計 スを無限に備えた1 ーションを行おうとしま しかし、現 台の理

タタイプの定 タタイ 解析は大規模化し、 それを短時間で処理

解析対象が領域分割 処理を行うためには 計算を活用します。 分散メモリ型並列

環境などの計算機 の流れあるいは無線 下部分の構造を示し できなければなりま して、構造解析、空気 この構造に関 図1に建物廊

ランクの関係付け

後の処理方法について説明します。 明しましたので、今回は領域分割した 領域分割するための基本的な考え方 H P C = 1 ス14号で説

2台の演算装置で解析を行います。2 分し、それぞれを色分けして示してい 憶容量や解析時間を考慮して、解析モ の巨大な計算機を利用したときに得ら で分散メモリ型並列計算を行うことを をプログラム内に記述します。このよ 先あるいは受信先などの具体的な処理 データのタイプや個数、それらの送信 続するネットワ つの解析領域は本来1つの構造で は、解析対象を廊下の長さ方向に2等 デルを適切に領域分割します。図1で て、高精度な解析を行うためには、主記 れる結果と同一になります。 うにして、本来1つの連続した解析モ て分割面内部のデー は両方の領域に重複させ、必要に応じ から、その分割面 に長い構造を有しています。 ルを領域分割して、複数の演算装置 ータの共有は、複数の演算装置を接 分割された2つの領域は異なる 当然、解析結果は1台 (インタフェー クを介して行われ、 タを共有します。 したがっ



義方法を示しました。

を参照してください。派生デー 中で使用している変数については脚注 法が解答としてありましたので、追加 関する課題を大学院講義で実施したと の方法を示していますが、プログラ してお知らせします。ただし、リスト いては同じ結果が得られ | wを定義するために2つ のような単純な設定方 タタイプの指定方法に

必要とし、高速化で た分散メモリ型並列 や演算装置を利用し から、複数の計算機 を満足できないこと では、これらの要求 るいは演算装置だけ 化性能が重視され ちろん、メモリ性能、 はプロセッサ数はも 量やプロセッサ数を では多くの主記憶容 1台の計算機あ

ラの最適 ・ク性能

iiC-HPC 2009

す

る

で指定した数のプロセスが起動されま

2次元モデル

の

場合

は 0

からファ

までの値に ,ので、それ

るように、

ランク番号

意)として記述して

限定されます

以外の値となった場合、

ke N U

値

特

分 別

ح ラ

,ンク番号は同します。 自り

ます。

2 0

この4という値が、

分割数に

一

それぞれ

のプロセスはプログラム

クと呼ば

れ

以上

O

0)

次元解

ムを実行すると、実行時にオプショ

た整数値が割り

当てられます。

それが 連続

8プロ

セスで並列処理を行う

①で、これ

はシステ

ムにより ス A、

自

つ を

いて考えて見ましょう。

この

わ

れます

プロ

セ

В

図3に示す

ような2つの

えら

れます。

を領域分割

した例であり、

ラミングのヒントを提供します

示す

ように M P I

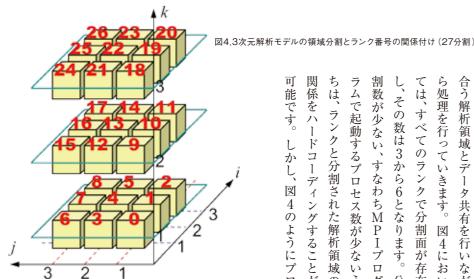
ログラ

と解析領域の対応付けに関するプログ

②を行います。

並列プログラムにおいて、ラン

ク番号



関係を に番号付けを行って 可能です。 ら処理を行 合う解析領域とデ られます。 た。このとき、 ラムで起動するプ は、 ラ す ランク番号はi、 数は3か べて クと分割され って 0) か コ 0) 0 なわち きます。 か ら 26 D · 図 ングすることが M P 0) ようにプ

分割されたあとの解析領域を示してい 軸方向にそれぞれ3分割し、立方体で ラム中で分割後の解析領域に割り当て ムによって与えられ、その値がプログ **ん**軸が追加されます。 分割とラ ク番号の関係付け とデータ共有を行いながのおのの解析領域は隣り ランクで分割面が存在 ら6となります。 3次元では、新たに セス数が少 いると仮定しまし た解析領域の の値がシステ 図4にお kの順番 Iプログ は3つの に関す な らう 分

身

のランク番号myrankおよび軸方向

してあり

分割の順番Corder、

自分自

モ

た。 ブル

ログラムはFortran90で記述

ンSetProcsを作成しま

4に示す

ような

位置情報Loc、

隣り合う解析領域のラ

の分割数Nodeを入力として、

領域の

MPIプログラムを実行 プロセスA 解析領域 (x_1,y_1,z_1) ランク0 プロセスB ランク1 解析領域 (x2, y1, Z1) 解析領域 (x₁,y₂,z₁) プロセスC ランク2 1 図2.MPIプログラム実行

2 6

場合を想定したMP

領域分割数や分割方向

に依存しない、あらゆる

要になります。

さらに、

号を特定することが必

して隣り

相当複雑になります。 セス数が27程度でも、 領域分割結果は したがって、 (b) (a) プ

図3.分割された解析領域とランク番号の関係付け(2次元解析モデルで8 MPIの場合)

とお Oように決定され 分割数をそれぞれ ログラムの開発が求められます します。 りです への変化は4つ飛びになります 取りうる (a) では、*i* そうす 図 3 から変化するので、 値 ます。 0 ラ ン ると、 (a) ではランク番 範囲は図るに示す 4および2で初期 および クはリ ただし、iおよ 自分自身の \boldsymbol{j} スト2の 軸方向

開発者がプログラム中に記述します。 分割された解析領域を対応させる処理 図3は2次元解析モデ この処理を、プログラム 領域分割が考 しています 四角の面積 場合に 場合、 ル はランク 有を行 す \mathcal{O} 送受信を行 色で示して に示すように、 必要に応じてデ ては、隣り合うランク た数値はラン 4を相手にデ 行う部 解析領域の辺を います。 して、デ の実行にお いるの います。 およびラ 分です。 ラン ク 図 3 (a) 番号 タ は、 タ ク 0) タ プ 共 隣 \mathcal{O} 0 を

とランク番号の関係、そ ラム内部で解析領 ようなことから、プロ 合うランク番 域

自分のランク番号 $R = 4 \times (i - 1) + (i - 1)$ for i = 1, 2, 3, 4 and i = 1, 2

 $i = MOD(R, 4) + 1, \quad j = INT(R/4) + 1$ 隣接するランク番号 -i 方向 R-1 for i=2,3,4

ことで行います。

次に、ランク番号と

の制御はすべてランク番号を指定する た数値が重要で、プロセスごとの処理 C…はそれらプロセスに割り当てら

で解析領域の大きさを表

の解析領域内に記載し

+i 方向 R+1 for i=1,2,3

2に示す

処理①で自

動 図

からiとj

O

値を決定

的に決定されるので、

-j 方向 R-4 for j=2

+j 方向 R+4 for j=1(注意) 隣接するランク番号 R が 0 から 7 以外の値となった場合、 R を NULL とする

> 自 な

身の 值)

リスト2.2次元解析モデルでの解析領域とランク番号の関係(図2(a)の場合)

ト2に示すとお

ŋ

します。

計算方法は、

ので、 がすべて決まり に隣接す 領域とランク番号、さら 不す処理②であり、解析 上 あとは解析領域を の計算が図2に るランク番号 ました

法で自分自身の 図 3 ジ しなが (b) につ らプログラムを作成し ランクと隣接す ても、

É

3次元モデル の場合

です。 3次元解析モデ 図 4に3次元解析モデ ルは、 2次 元の拡張 ル O領域

PROGRAM Sample USE MPI IMPLICIT NONE INTEGER:: isize, myrank, ierr INTEGER,DIMENSION(1:3):: Node, Loc, lower, upper CALL MPI_COMM_SIZE(MPI_COMM_WORLD, isize) CALL MPI_COMM_RANK(MPI_COMM_WORLD, myrank READ(1, *) Node ! Node = (/ 3, 3, 3 /) CALL SetProcs('xyz', myrank, Node, Loc, lower, upper) CALL MPI FINILIZE (ierr) END PROGRAM Sample リスト3.サブルーチン呼び出し側のプログラム例

```
!OPTION MP(P(0)), LANGLVL(SAVE(0))
SUBROUTINE SetProcs (Corder, myrank, Node, Loc, lower, upper)
  USE MPI: IMPLICIT NONE
  CHARACTER (LEN=3) , INTENT (IN) :: Corder
  INTEGER, INTENT(IN):: myrank
  INTEGER,DIMENSION(1:3),INTENT(IN):: Node
  INTEGER,DIMENSION(1:3),INTENT(OUT):: Loc, lower, upper
  INTEGER:: I, J
  INTEGER, DIMENSION(:), ALLOCATABLE:: list
  ALLOCATE (list(1:3))
    J = IACHAR(Corder(I:I)) - IACHAR('x') + 1
     IF( J < 1 ) J = J + (IACHAR('x') - IACHAR('X'))
    list(I) = J
  END DO
  Loc(list(3)) = myrank / ( Node(list(1)) * Node(list(2)) )
  Loc(list(2)) = MOD( myrank / Node(list(1)), Node(list(2)) )
  Loc(list(1)) = MOD( myrank, Node(list(1)) )
  lower(list(1)) = myrank - 1
  lower(list(2)) = myrank - Node(list(1))
lower(list(3)) = myrank - Node(list(1)) * Node(list(2))
  upper(list(1)) = myrank + 1
  upper(list(2)) = myrank + Node(list(1))
  upper(list(3)) = myrank + Node(list(1)) * Node(list(2))
     IF(Loc(list(i))==0
                                         ) lower(list(i)) = MPI_PROC_NULL
     IF(Loc(list(i)) == Node(list(i)) -1 ) upper(list(i)) = MPI_PROC_NULL
  END DO
  DEALLOCATE ( list )
END SUBROUTINE SetProcs
```

リスト4.ランク間の関係付けを定義するサブルーチン

適合 来利 たア グ と 要なことです。 利用することも重 に楽しくなります。 関係を理解するこ 係付けです。 ムで か な解析手法に適し で、 M P ま 9 つ ラミングが一気 利用されてい ながる た、この ルゴリズムを た解析手 並列処理 ルゴ Ĭ プ ح よう IJ 従 口 0) な

13 次 は起動しているプロセス数isizeと 分割数を与えます。 定します。 先頭から順に領域分割す 致しなけ のとき、図4 ように'xyz' 配列変数Nodeは各軸方向の 全部で6通りの指定法があ ればなりません。 upper t myrank を参考に P'xzy' こ の る座標軸を指 変数値の積 0) 戻り値の のように、 が

る

ような工夫が必要です

ログラム中で処理の制御を簡便に行え

(/2,2,2/) (/14,16,22/)

upper

順

ムをリ

します

し側の

口

力しま

番Corderは文字列変数で、

IJ 分割の

え ト

た解析領域とランク番号の情報を利用 ログラムでは、ここに 示

> グ 口

して、 ことができます 並列処理を思う まに制御す

まとめ

るための M P リ型並 大 ラムですべて グラミング ついて説明を , 回 の ライ れを可 領域分割とランクの関係付 列プ ・ブラリ の困難さは、 口 行 コ の処理を記述すること ログラミ ムに汎用性を備えさせ いま ンアカデミ を利用 ング た。 が必須で た分散 М Р つのプ ・一では、 口

規 模 高 速 能にするのが領域分割 計 とラ 算 \mathcal{O} ンク番号の関 た め に

CPK表示が可能です。PDBデ

タ 0)

-ションソフト

を自由に設定できます

また、 0

描画に

ルおよびスティックのサイズや色

および図5に示します。

こいはAVS/Express7.2

エア球を利

ルを読

ルとスティック表示および

結果を得ます。

表示方法としては、図

を指定すると、図3に示すような描画

UCDデ

タによる分子構造を可視化

するためのネット

クと描画結果を

PDBファイルとして、 Uviewer3Dと接続する

sample.pdb

とで、独自の可視化が実現できます

造格子型 (UCD) デ

タを利用するこ

前回の可視化道場で紹介した非構

③モジュールRead_PDBを追加して、

指定をKGTに変更する。

②ネットワ

ークエディタのライブラリ

めのデー

タをユーザが独自に開発する

への対応が可能です。

ただし、そのた

ニメーションおよび大規模デ

タなど

等値面合成、分子等の選択表示切替、ア

で、構造や原子などの各種カラー

表示、

Expressは汎用可視化システムですの

視化する方法を紹介しました。

AVS/

ここまでは、流れ作業的な手法で可

ことになります。

モードで起動する。

参考してください

おりです。

なお、説明とともに図2を

応しています。その利用方法は次のと

描画に、専用モジュー

ルを用意して対

AVS/Expressは分子構造等の基本

れています

することで、滑らかな球面となってい

Date E)

(Feed Laters)

Real POD

①AVS/Expressを起動する際、オプ

ション-mavsを指定して、MicroAVS

描画してみた

AVS/Expressド

思證影師回回問題

手構造の可想化

視化ツー トウエアでも見栄えの差こそあれ、可 されています。また、それ以外のソフ システムが用意されていて、よく利用 Gaussianなどでは、それ専用の可視化 分子構造データ になっています。このように、計算化 およびAVS/Express7.2を利用した分 商用アプリケー 構造の可視化について紹介します。 ルは何がしか利用できるよう

COMPND	san	nple							ı
ATOM	1	С		1		1.978	3.123	0.908	ı
ATOM	2	С		1		2.377	1.709	1.178	ı
ATOM	3	H		1		1.674	3.596	1.853	ı
ATOM	4	H		1		2.836	3.661	0.479	ı
ATOM	5	H		1		1.138	3.129	0.198	ı
ATOM	6	H		1		3.217	1.703	1.889	ı
ATOM	7	H		1		1.519	1.170	1.608	ı
ATOM	8	С		1		2.791	1.066	-0.105	ı
ATOM	9	H		1		1.944	1.090	-0.807	ı
ATOM	10	H		1		3.642	1.622	-0.526	ı
ATOM	11	С		1		3.189	-0.348	0.165	ı
ATOM	12	H		1		4.029	-0.354	0.875	ı
ATOM	13	H		1		2.331	-0.886	0.594	ı
ATOM	14	H		1		3.494	-0.821	-0.780	ı
CONECT	1	2	3	4	5				ı
CONECT	2	1	6	7	8				ı
CONECT	3	1							ı
CONECT	4	1							ı
CONECT	5	1							ı
CONECT	6	2							ı
CONECT	7	2							ı
CONECT	8	2	9	10	11				ı
CONECT	9	8							ı
CONECT	10	8							ı
CONECT	11	8	12	13	14				ı
CONECT	12	11							ı
CONECT	13	11							
CONECT	14	11							
TITO									ı

のです。 ションソフトウエア付属の可視化シ 分子構造を確認することで特徴を捉え 学においては、解析結果を可視化して、 のが汎用可視化システムです。 を実現したいと考えるようになるも 工夫ほしいなとか、 はどれも同じような結果になり、ひと ステムを利用していると、可視化結果 一見にしかずです。 ることができます。 専用の可視化システムやアプリケ このようなときに役に立 いわゆる、百聞は 自分なりの表現 本セ

視化に挑戦してみます。

の書式に基づく3次元分子模型ファ

タが利用されています。

て、タンパク質データ・バンク

分子情報の代表的な表現の一つとし

Express7.2を利用した分子構造の可

ます。今回の話題は、Mathematica6 化が楽しくなるような話題を取り上げ らいたい、あるいは知っていると可視

皆様方に是非知っておいても 視化道場番外編では、ユーザの

ており、全国のユーザがそのいずれか スおよびダウンロー Express7.2のサーバでの利用サ ンターでは、Mathematica6やAVS/ ービスを受けることができます ービスを行っ

ションソフ

ウエ

た

図1.Mathematica6 を利用した表示例

本稿では、Mathematica6およびAVS/

Mathematicaで描画してみ

サンプルデ WireframeおよびSpacefillingが用 このほかのレンダリング法として、 回転および拡大・縮小 結果はマウスを利用して、画面内で BallAndStickを指定しました。 図1にMathematica6を利用し レンダ タの描画結果を示 Mathematica6で読 ができます。

ATOM	4	H		1		2.836	3.661	0.47
ATOM	5	H		1		1.138	3.129	0.19
ATOM	6	H		1		3.217	1.703	1.88
ATOM	7	H		1		1.519	1.170	1.60
ATOM	8	С		1		2.791	1.066	-0.10
ATOM	9	H		1		1.944	1.090	-0.80
ATOM	10	H		1		3.642	1.622	-0.52
ATOM	11	С		1		3.189	-0.348	0.16
MOTA	12	H		1		4.029	-0.354	0.87
MOTA	13	H		1		2.331	-0.886	0.59
MOTA	14	H		1		3.494	-0.821	-0.78
CONECT	1	2	3	4	5			
CONECT	2	1	6	7	8			
CONECT	3	1						
CONECT	4	1						
CONECT	5	1						
CONECT	6	2						
CONECT	7	2						
CONECT	8	2	9	10	11			
CONECT	9	8						
CONECT	10	8						
CONECT	11	8	12	13	14			
CONECT	12	11						
CONECT	13	11						
CONECT	14	11						
END								

リスト1.PDBデータの例sample.pdb

されています。

COMPND	sam	рте	
ATOM	1	С	
ATOM	2	С	
ATOM	3	H	
ATOM	4	H	
MOTA	5	H	
ATOM	6	H	
ATOM	7	H	
ATOM	8	С	
ATOM	9	H	
ATOM	10	H	
ATOM	11	С	
ATOM	12	H	
ATOM	13	H	
MOTA	14	H	
CONECT	1	2	3
CONECT	2	1	6

に確認したり、資料作成などに有効で 込んで描画することから、結果を直ち れています。PDBデータを直接読み XYZやMOLデータなどがサポー

(Peut Fett (D

(NoneHOFF)

(Feed at New

The Original Contract of the C

み込み可能な分子モデル形式として、

す。また、インターネットで公開して

いるPDBファイルをリモー

図2.AVS/Expressを利用した描画のためのネットワーク図

AVS/Express

を利用した描画

グラム等について、 しています。

にも対応できるものと考えます。 実現していることから、大規模な構造 形近似と異なり、ソフトウエアで球を ることが分かります。これまでの多角 なお、UCBデータ作成のためのプロ 本センターで対応

まとめ

構造の可視化について、本センター ています。 で積極的にご利用いただきたいと考え 利用できることから、ポスト処理など 紹介しました。いずれも比較的簡単に びAVS/Express7.2を利用する方法を 今回は、計算化学でおなじみの分子 ービスしているMathematica6およ

hsya@iic.hokudai.ac.jpにお問 を利用されている株式会社ケイ・ジー 業」で本センター大型計算機システム す。可視化に関するご質問等があり 端研究施設共用イノベーション創出事 ム利用者相談室あるいは電子メー したら、本センタ 本内容は文部科学省委託事業「先 の協力のもとで行 大型計算機システ われていま 合

Chrost Chrost Chrost Chrost Silvatori olice soi Silvatori nutti de Silvatori nutti de Silvatori de Silvatori de Silvatori de 図4.UCDデータを利用した分子構造描画のためのネットワーク図



図5.描画結果

iiC-HPC 2009

と位置座表、それら原子のコネクシ

サンプルファイ

ルは、原子の種類

- 夕の例をリスト

に示しま

共同利用・共同研究拠点に認定されました

本センターはこれまで全国共同利用施設として、全国の研究者に対してスーパーコンピュータをはじめとする大型計算機システムなど を提供してきました。このたび、文部科学省により創設された共同利用・共同研究拠点認定制度に対して、東北大学サイバーサイエンス センター、東京大学情報基盤センター、名古屋大学情報基盤センター、京都大学学術情報メディアセンター、大阪大学サイバーメディアセ ンター、九州大学情報基盤研究センターおよび東京工業大学学術国際情報センターとともにネットワーク型拠点申請を行い、認められま

本制度では、学術研究の更なる発展を図るため、本センターの研究ポテンシャルを活用して、研究者が共同で研究を行う体制が整備 されます。これにより、大型計算機システム等の大規模研究施設を中心に、共同研究を推進しますので、多くの研究者の皆様方にご活 用いただきたいと考えています。

なお、認定の有効期間は、平成22年4月1日から平成28年3月31日です。共同利用・共同研究拠点に関する詳細について、文部科学省 ホームページをご参照ください。

http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/21/06/1279611.htm

センター公募型共同研究採択課題について

本センターでは、本センターを含む8大学の共同利用施設が連携して文部科学省に申請する「学際大規模情報基盤共同利用・共同 研究拠点 | の目的を踏まえ、超大規模計算機と大容量のメモリ及びネットワーク等の情報基盤を用いたグランドチャレンジ的な研究と、 これを推進するための学際的な共同利用・共同研究に係る研究課題を平成21年3月31日まで公募を行いました。

本センターが重点的に取り組む4研究領域(領域番号A1~A4)とその他の研究領域(領域番号A5)の計5つの研究領域について、 下記のような応募件数がありました。当初予定していました15件を大幅に上回る26件となり、皆様方の関心の高さが明らかになりまし た。そのうち、スパコン等の大型計算機システムの利用を含む研究が20件であり、全体の77%を占めていました。応募書類に基づい て厳正な審査を実施し、応募いただいたすべての課題26件を採択としました。

(1)領域番号A1	大規模計算機シミュレーション ――――	10件
(2)領域番号A2	大規模問題解決の基盤技術	—4件
(3)領域番号A3	大規模データ科学	—5件
(4)領域番号A4	学術情報環境 ————————————————————————————————————	一7件
(5)領域番号A5	その他	0件

随時、利用手続きが行われ、研究代表者を中心に研究が進められています。6月13日(土)には本公募型共同研究による公開研究発 表会「メタ・コミュニケーションとデジタルポートフォリオによる学習動機の維持 ―システムの開発と検証―」が本センター北館で実施 されました。本年度末には、採択された研究グループによる成果発表会の開催を予定しています。

先端的大規模計算利用サービス平成21年度第2期利用企業の募集について

平成21度第2期先端的大規模計算利用サービス公募が本年7月1日(水)から9月4日(金)まで行われています。今回の公募は補助 金事業に移行してからの最初の募集です。公募内容もトライアルユース (無料、成果公開) のほか有償での戦略利用促進などのコース が新設され、従前実施していましたイノベーション事業の特徴と、積極的な事業展開にスパコンを活用しようとされる企業ユーザの利用 に配慮した内容となっています。

なお、従前実施していましたイノベーション創出事業での民間企業ユーザの情報および利用成果について、下記ホームページをご参照 ください。

採択企業·採択課題一覧 http://kyoyo.itc.u-tokyo.ac.jp/adoption.html

利用成果報告書 http://kyoyo.itc.u-tokyo.ac.jp/report.html

第8回産学官連携推進会議(京都国際会館)での出展について

第8回産学官連携推進会議が、平成21年6月20日(土)と21日(日)の2日間にわたって、京都宝ヶ池国際会館で開催されました。内 閣府、総務省、文部科学省、経済産業省、(社)日本経済団体連合会および日本学術会議が主催して実施したものであり、本年度は「オー プン・イノベーション型の産学官連携による新たなる挑戦~環境・資源制約などの世界が直面する様々な制約への対応を成長の糧に~ |







をメインテーマとして、昨年同様に開催されました。 本センターを含む7つの全国共同利用情報基盤セン ターは、文部科学省研究開発施設共用等促進費補 助金 (先端研究施設共用促進事業) による先端的 大規模計算利用サービスの利用を通じて民間企業 のイノベーションを支援するための事業紹介の展示 ブースを開設し、事業の紹介および利用喚起の活動 を行いました。

第8回産学官連携推進会議の詳細は下記ホーム ページを参照してください。

http://www.congre.co.jp/sangakukan/index.

先端的大規模計算利用サービス 第3回シンポジウムを開催

全国共同利用情報基盤センター7センターは東京大学情報基盤センターを幹事センターとして文部科学省の委託事業「先端研究施 設共用イノベーション創出事業 | を平成19年度から実施しています。この事業では、スパコンなどのハードウエアリソースやソフトウエ ア資産の提供に加え、センターが有している高度利用技術、効率的なプログラミングおよび大規模化技術など魅力的なサポートを行って います。

第3回先端的大規模計算利用サービスシンポジウムを下記のとおり開催しました。

日 時:2009年7月3日(金)

場 所: 丸ビルホール (東京都千代田区丸の内2-4-1 丸ビル7階)

シンポジウムでは、企業からの報告(講演)6件、ポスター発表6件がありました。



ポスター発表会場のようす

相談室Q&A

Q

アプリケーションサーバmalt{1,2,3}で利用サービスを行っているMATLAB/SimulinkでMファイルを長時間計算させるため、バックグランドで実行させたいと考えています。MATLABをバックグランドで実行させる方法を教えてください。



Mファイルを利用して、MATLABをバックグラウンドで実行する方法を以下に説明します。

①実行するMファイルと同じディレクトリに、リスト1に示すmatback.shというシェルスクリプトを作成します。ただし、シェルスクリプト内のXXXX.mがMATLABで実行するMファイルの名称であるとします。

リスト1.matback.shの記述例

#!/bin/bash
echo \$DISPLAY
OLDDISP=\$DISPLAY
unset DISPLAY
"

nice nohup /usr/local/bin/matlab -nojvm < XXXX.m > XXXX.out &
export DISPLAY=\$OLDDISP
echo \$DISPLAY

②次に作成したシェルスクリプトファイルのアクセス権を、下記のコマンドにより755に設定します。

- % chmod 755 matback.sh
- ③作成したシェルスクリプトを実行します。
- % matback.sh
- ④バックグラウンドで実行されているのを確認するため、下記のコマンドを実行してみてください。
 - % ps -eaf | grep matback.sh





相談員プロフィール 情報処理支援員 家守智弘

平成21年4月から文部科学省補助金事業「先端研究施設共用促進事業」が実施されることになりました。この促進事業は、スーパーコンピュータなどの先端的研究施設を民間企業の研究開発等に利用していただき、イノベーションの創出を実現しようとするものです。さらに、スーパーコンピュータの潤沢なハードウエアリソースやソフトウェア資産の提供に加え、本センターが有している高度利用技術、効率的なプログラミングおよび大規模化技術などのサポートを行います。

私は情報処理支援員としてセンターに勤務し、主に前述の促 進事業に関わる利用支援およびプログラム相談などの業務に携 わっています。これらの支援には、スーパーコンピュータに関す



スーパーコンピュータにおいて、gccでコンパイルすると以下のようなエラーが出力され処理がとまります。対処方法について教えてください。

Assenbler:

/tmp//ccsbrnGb.s: line 8: Only .llong should be used for relocatable expressions. /tmp//ccsbrnGb.s: line 62: Only .llong should be used for relocatable expressions.



本センターのスパコンでは、環境変数OBJECT_MODEが64に設定されています。この環境下でgccを実行しますと、ご指摘いただきました内容のエラーメッセージが表示され処理が強制終了します。スパコンでgccを利用される場合、OBJECT_MODEを32にするか、unsetenv OBJECT_MODEを実行してください。



スーパーコンピュータでMSC.Marc/Mentatを使用しているのですが、

X11 connection rejected because of wrong authentication.

X connection to 127.0.0.1:13.0 broken (explicit kill or server shutdown). といったメッセージが表示されて現在接続できない状態となっております。対処方法について教えてください。





InterCompassによりスパコンに接続し、コマンドmentatを実行すると、「サーバプロセスの起動に失敗しました」というメッセージが出力されることがわかりました。この原因について調査した結果、ユーザのファイル容量が1GBに達していました。基本サービス経費では、ファイル容量の上限が1GBまでとなっています。既存のファイルを削除するか、ファイル付加サービスの利用申請を行うようお願いします。

(一般的な注意事項) アプリケーションプログラムが突然利用できなくなる場合、ユーザに設定されているファイル容量の上限(基本サービス経費では1GBまでの利用)を超えている可能性があります。ディスク容量不足が原因であっても、ソフトウエア起動時のエラーメッセージはさまざまです。したがって、エラーメッセージが原因を特定しているとは限りません。おかしいなと思われた場合、ファイル容量のチェックをお願いします。ファイル容量のチェックはスパコンコマンドactlistで行います。容量はfile-info欄にkB単位で表示されます。

る高度な知識とそれを利用するための幅広い知識が要求されます。1ヶ月にわたるスパコン導入研修を受け、現在は実践を通じて応用可能な知識の修得と並列処理向きのプログラミングスタイルについて検討を行っています。

本年7月からはプログラム相談員として本センターユーザの質問に対応しています。プログラム相談室員として、毎週月曜日13時~15時を担当しています。ほとんどの質問は大型計算機システムホームページ「利用者の皆さんからのご質問Q&A集」(http://www.hucc.hokudai.ac.jp/~a10020/www/qanda.cgi)を参照していただけると解決しますので、そこで議論されていないような難しい質問がありましたらお役に立てると思います。また、本センターが実施している利用講習会および技術講演会などの受付を行っていますので、ご希望される講

習会等がありましたらお知らせください。

この他に、先端的大規模計算利用サービス関連のホームページの作成・管理を行っています。このホームページは、先の促進事業推進のために本センター独自のサービス内容や7センター群の共通事項等をコンパクトにまとめて情報提供を行っています。(ホームページアドレス http://www.iic.hokudai.ac.jp/kyoyo/)

最後になりましたが、多くの人にスパコンの良さを知ってもらい、ご希望に沿った利用方法を提案していきたいと思っています。よろしくお願いします。





●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。





●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	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 利用者相談室 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15号をお届けします。本号は、室蘭工業大学大学院工学研究科・基礎電気力学研究室の川口先生をお訪ねしました。粒子加速器設計から出発して、電磁波解析や、それを専門に計算させるための専用計算機の設計など、世界でただ一つのものまで。電磁波の動きを分析し、最も効率のよい使用方法を探ること。ほんの3年前には不可能だった計算が、今日のスパコンの性能向上によって夢ではなくなってきています。

●次号の特集予告

次号iiC-HPCニュース16号では、「ユビキタス・センサネットワークの可能性」と題して、本学大学院 生による実験と計算科学の連携による最先端IT研究の成果をご紹介します。

●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15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

●農学研究院 情報基盤センター 棟朝 雅晴 谷 宏 大宮 学 ●情報基盤センター 督 ● メディア・コミュニケーション研究院 長野 樽本 英樹 公共政策学連携研究部 亨 • 文学研究科 萩 原 •理学研究院 見延 庄士郎 • 北見工業大学 桜井 宏

