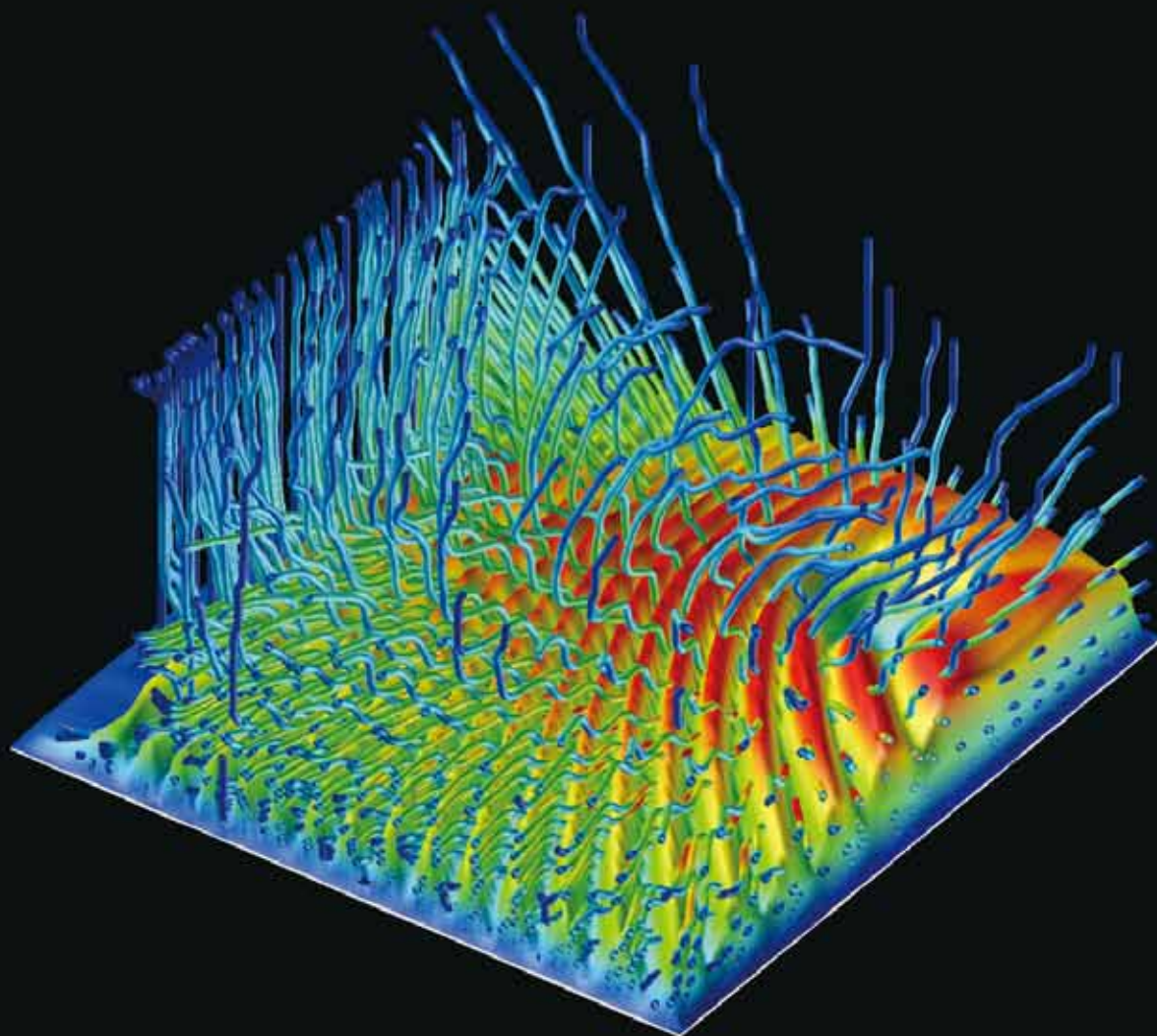


iiC-HPC

HOKKAIDO
UNIVERSITY

北海道大学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



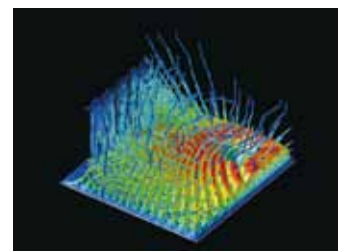
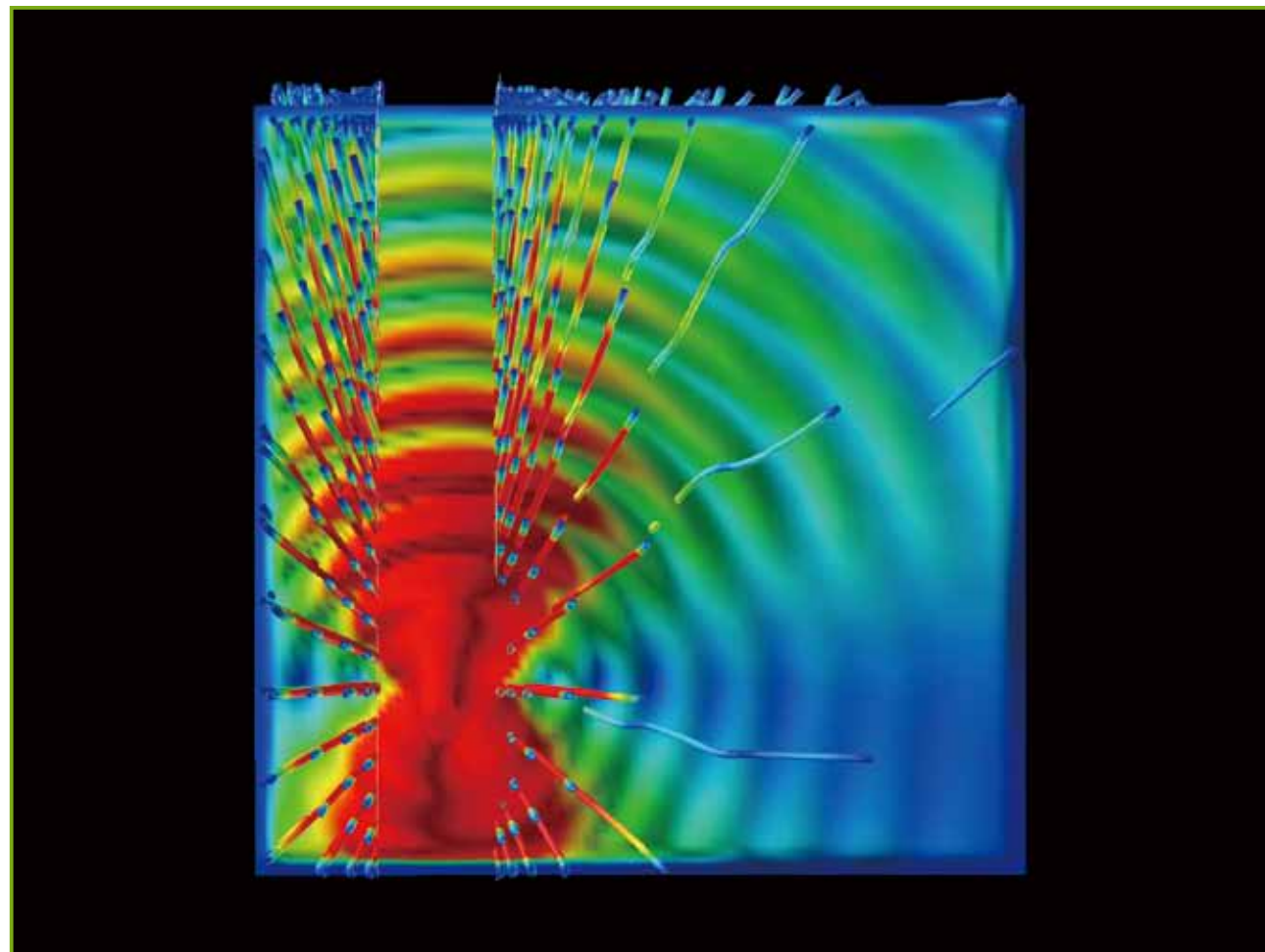
【特集】

世界一の スーパーコンピュータと その必要性

VOL.

18

JUNE
2010



ポインティングベクトルと電界強度分布の関係を示しています。平面で示しているのが電界強度分布で、左下の赤色の部分に半波長ダイポール素子を設置しています。ダイポール素子の長さ方向は水平であることから、電界強度の大きい部分が上下に広がっていくようになります。

また、太さを持ったラインはポインティングベク

トル流を現しています。ポインティングベクトル方向は電界および磁界に対して垂直であることから、ポインティングベクトルの方向は電界強度の広がる方向に一致していることがわかります。可視化結果のラインが多少よろよろしているところは目に見てください。数十年前に同様の図面をプロッタ出力して、ぱらぱら漫画のように8mmカメラで撮影したアニメーション制作が感慨深く思い出されます。

可視化手法に関する詳細について、本号「可視化道場 番外編7」をご覧ください。

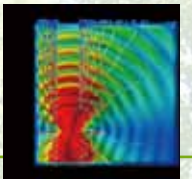


われわれは、スパコンの現在を考えます。

Contents

表紙CGの解説

2



3

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》
「世界一のスーパーコンピュータとその必要性」

●テネシー大学 ジャック・ドンガラ教授

4-9



10-13

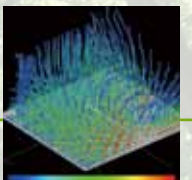
スパコン・アカデミー
第14回
「簡易ユーザインタフェースの開発と解析」

●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 7
「ポインティングベクトルの可視化」

14-15



16-19

スパコンInfo
●科学・技術フェスタin京都
（平成22年度産学官連携推進会議）
●学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）
公募型共同研究
●北館1階玄関ロビーの整備
●大学院共通授業「計算科学の拓く世界」の実施について
●お知らせと今後の予定
●相談室Q&A



Interview with Jack Dongarra

SC09(米国ポートランド)におけるオークリッジ研究所のブース

ジャック・ドンガラ教授 インタビュー

世界一のスーパーコンピューターとその必要性

本日はテネシー大学計算機科学科特別栄誉教授でいらっしゃるJack Dongarra先生をお招きしまして、情報基盤センター主催の講演会において御講演いただくとともに、インタビューの機会をいただくことができました。先生は、数値アルゴリズム、並列処理、スーパーコンピュータ利用技術、プログラミング手法、並列ソフトウェアに関する研究を長年行われており、LINPACK, BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, Netlib, PVM, MPI, NetSolve, TOP500などの仕様策定、実装に関わられてきました、この分野を代表する研究者の一人です。先生はまた、現在世界で最速のスーパーコンピュータを有する米国オークリッジ研究所の特別栄誉研究員も務められています。

—先生、本日は本学情報基盤センターまでお越し下さり、誠にありがとうございます。どうぞよろしくお願い申し上げます。

ドンガラ教授 よろしくお話しします。

—早速ではございますが、日本におきましては、「事業仕訳け」におきまして次世代スーパーコンピュータプロジェクトの是非につきまして、大きな国民的議論が巻き起こりました。なかでも議論を呼びましたのが、「本当に世界一の性能が必要なのかどうか」という疑問です。現在、世界のスーパーコンピュータランキングであるTOP500において第1位となっている(編集注:インタビュー時点にて)オークリッジ研究所の特別栄誉研究員として、また、第3位のスーパーコンピュータを有するテネシー大学の特別栄誉教授としまして、そのような世界のトップを目指すねらいについてお聞かせいただけますでしょうか。

ドンガラ教授 一番であること自体が最も重要なことであるという訳ではありませんが、一番であることにより注目が集まるということがあります。「最も優れている」ことは重要ですし、そのためには最も難しい問題に挑戦することが必要です。最速の計算機を有するということは、サイエンスにおいて最も困難な問題を解くことができるということを意味します。そして、最も難しい問題を解くということはサイエンス全体を前進させるために必要なことですし、そのために計算シミュレーションの果たす役割は大きなものがあります。

より高い精度でシミュレーションを行うことで、より困難な問題を解くことができますから、より高速な

PROFILE



ジャック・ドンガラ 教授

Prof. Jack Dongarra

テネシー大学計算機科学科特別荣誉教授。オークリッジ国立研究所計算機科学・数学部門特別荣誉研究員、ライス大学計算機科学科客員教授を兼任。マンチェスター大学計算機科学科・数学科チューリングフェロー。テネシー大学 Innovative Computing Laboratory創立者。

線形代数分野の数値アルゴリズム、並列処理、スーパーコンピュータ利用技術、プログラミング手法、並列計算ソフトウェアなどを専門とし、高品質な数学ソフトウェアの開発及び評価、文書化を行う。EISPACK、LINPACK、BLAS、LAPACK、ScaLAPACK、Netlib、PVM、MPI、NetSolve、TOP500、ATLAS、PAPIなどの仕様策定・実装に携わった他、200以上の論文・著書を執筆。アメリカ科学振興協会、ACM、IEEEフェロー。全米技術アカデミー会員。

計算機が必要となりますし、最も高速であるということとは、サイエンスにおける問題を解決する上で、最善の成果をもたらすことにつながります。すなわち、一番であることの本当の理由は、サイエンスにおける最も重要な問題を解くことができるということにあります。最も重要な問題を解けるということは、サイエンスの発展に寄与できるということです。もし性能において劣った計算機しかなければ、それができないことになります。

また、計算能力で一番であるということは、指導的な研究者の注目を集めることにもなり、より有能な研究者を集めるのに役立ちます。一番であること自体に意味があるのではなく、それにより多くのことがもたらされることが重要なのです。研究機関に多くの優秀な人々を集め、研究のレベルを向上させるために重要であり、そのために私は一番のスーパーコンピュータを導入すべく模索を続けてきたのです。より良い計算機を導入し、より良い研究者を集めることで、より多くの研究資金も集めることができ、研究機関全体の利益にもなるのです。

最も優れた望遠鏡があれば、優れた天文学者を集めることができるように、最も優れた加速器があれば、優れた物理学者を集めることができるように、最も優れたスーパーコンピュータがあれば、優れた計算科学者を集めることができ、様々な分野の科学の発展に寄与することが期待されるのです。

——どうもありがとうございます。世界一のスーパーコンピュータに対して、研究者からの数多くの利用要求があるかと思いますが、いかがでしょうか？

ドンガラ教授 世界一のスーパーコンピュータを有するオークリッジ研究所は米国エネルギー省の予算により設置された組織ですので、基本的にエネルギー関連の研究者に対してサービスを提供しています。エネルギー省関連の研究所に所属する研究者、もしくは、エネルギー省の研究資金を得た研究者が、利用申請を行う資格を有しており、その申請を委員会により判断し、利用の許可を与えることになります。すなわち、どの研究が計算時間を与えるに値するかを判断し、その重要度に応じて計算時間を割り当てることになります。

また、エネルギー省には2つの側面があり、一方では国防に関連した研究を行う研究所群があります。



ロスアラモス研究所、ローレンスリバモア研究所とサンディア研究所は国防のための研究所で、それぞれ大規模なスーパーコンピュータを有しています。ロスアラモスのスーパーコンピュータは少し前まで世界一でしたが、現在は世界第2位となっています。

一方で、オークリッジ研究所、アルゴンヌ研究所、ローレンスバークリー研究所の3つは一般的な科学研究を行うための研究所であり、その成果は公開されます。オークリッジのスーパーコンピュータが最も速く、次いでアルゴンヌ、ローレンスバークリーの順になります。うち、オークリッジとアルゴンヌについては、エネルギー省により "Leadership class computer" と呼ばれるスーパーコンピュータを有しており、極めて大規模な問題を解くことをその目的としています。これは、長時間にわたって計算機全てを占有するような極めて大規模の問題を解く研究者に対してサービスを提供することを意図しています。ローレンスバークリーについては、そのような大規模な問題を解くというよりも、多くの利用者にサービスを提供することを目的としており、数多くの比較的小さなジョブが実行されることになります。

オークリッジのスーパーコンピュータは、もちろん数多くの研究分野の研究者に利用されていますが、中でも2つの分野の研究者に多く利用されています。一つは気象モデルに関する研究分野で、もうひとつは材料科学分野です。両者はエネルギーに関連した極めて多くの計算量を必要とする研究分野であり、オークリッジにある世界一のスーパーコンピュータを活用して数多くの研究成果を挙げているところです。他の研究分野についても、例えば、化学、生物学、天文学などについても利用はされていますが、上記の2つの分野がオークリッジにおける主な利用者となっています。

Interview

High Performance Computing System

す。気象モデルと材料科学は極めて多くの計算資源を必要とする重要な研究分野であるために、利用が多くなっていると考えられます。

——気象モデルについては、一般にも良く知られているところですが、材料科学については、どのようなプロジェクトが行われているのでしょうか？

ドンガラ教授 私は材料科学の専門家ではないのですが、いくつかのプロジェクトについてお話することはできます。例えば、超電導体に関するプロジェクトが進められています。そこでは、 -250°C といった低い温度ではなく、常温に近い高い温度においても超電導特性を持つ材料を探そうとしています。また、オークリッジには、スーパーコンピュータに加えて、巨大な加速器も有しており、中性子をターゲットに打ちこむことができます。その結果として起こる現象について、スーパーコンピュータを用いた計算機シミュレーションを行っています。加速器が巨大ですので、そのシミュレーションに用いるスーパーコンピュータにも高性能なものが求められます。

——テネシー大学の有する世界第3位のスーパーコンピュータについてはいかがでしょうか？

ドンガラ教授 テネシー大学のスーパーコンピュータについては、NSF(National Science Foundation, 米国立科学財団)からの資金により設置されています。NSFは数年毎にスーパーコンピュータセンター設置の公募を行います。それに対して、設置を希望する大学がそれぞれ応募し、選ばれた大学に予算が割り当てられ、スーパーコンピュータが設置されることになります。例えば、イリノイ大学にはスーパーコンピュータセンター(編集注：NCSAとして有名なセンターで、インターネットのブラウザの開発なども行ってきました)が以前からあります。サイディエゴには以前ありましたが、現在はありません。テキサス大学、ピッツバーク大学にはあり、テネシー大学も最近選ばれました。選ばれた場合、設置されるスーパーコンピュータはその大学においても一部は利用されますが、原則として研究者コミュニティ全体に対して提供されるものとなります。自分たちで占有することはできず、NSFから研究資金を得た研究者全体に提供されます。利用したい研究者はセンターに対して利用申請を行い、

その内容を精査し、より優れた研究プロジェクトに計算時間を与えることになります。

また、テネシー大学のスーパーコンピュータは、テネシー大学内には設置されておらず、オークリッジ研究所の、世界一のスーパーコンピュータの隣に設置されています。

——大学内にスーパーコンピュータの設置スペースが無いからでしょうか？

ドンガラ教授 我々の大学からの申請では、もしスーパーコンピュータの設置が認められた場合、オークリッジ研究所に設置することになっていました。我々の大学には十分な電気設備がありませんし、十分な設置スペース也没有ありません。ネットワークやセキュリティの関係もあり、オークリッジ研究所に設置を依頼して、認められたわけです。我々の提案の特徴でもあり、審査においてもプラスに働きました。オークリッジ研究所の世界第1位のスーパーコンピュータのすぐ隣に、世界第3位のスーパーコンピュータが設置されることになったのです。アーキテクチャの面でもほぼ同等のCray XTのスーパーコンピュータであり、テネシー大学により運営されています。すなわち、テネシー大学のスタッフが研究所にいて、彼らが管理運営を行っているわけです。

——テネシー大学のスーパーコンピュータの運営に何人ぐらいの人々が関わっていますか？オークリッジ研究所とスタッフを共有していますか？

ドンガラ教授 オークリッジ研究所とはスタッフを共有してはいません。それぞれ独立したスーパーコンピュータとして運営しています。アーキテクチャもほぼ同等ですので、もちろん互いに協力してはいます。大学のスタッフとしては40名ほどいます。彼らはシステムの管理や利用者教育などを行っています。

——テネシー大学においては、どのような研究にスーパーコンピュータが良く使われていますか？

ドンガラ教授 テネシー大学においては、私もスーパーコンピュータを使った研究をしていますし、オークリッジと同様、気象モデルや材料科学にも使われています。大学においては、数多くの比較的小規模なプロジェク

トに使われており、化学や生物学などの研究者もスーパーコンピュータを使っています。

——今後有望となるスーパーコンピュータの新たな適用分野についてもお聞かせ願いますでしょうか。我々のセンターにおいても最適化や機械学習など新たな分野への適用を模索していますが、先生のご見解はいかがでしょうか？

ドンガラ教授 もちろん数多くの分野への適用が期待されます。現在どのような分野にスーパーコンピュータが使われているかを見てみると、興味深いことに、TOP500(編集注：世界の上位500のスーパーコンピュータを集めたランキング <http://www.top500.org/>)にあるスーパーコンピュータのうち60%は、研究所に設置されているものではなく、産業界において利用されているものです。

産業界においては、映画会社から日用品を生産する会社まで、我々が予想もしなかったような様々な用途で活用されています。例えば、TOP500でニュージーランドは1.6%のシェアを有していますが(編集注：日本のシェアが3.2%であることを考えると、予想外に高いシェアと言えます)、その多くは映画制作のために用いられています。また、プロクター・ギャンブル社はスーパーコンピュータを有していて、プリングルスと呼ばれるポテトチップを作る生産ラインを最適化するための計算に用いています。ポテトチップを作る際に、コンベアのベルトが速すぎるとうまく焼けません。そ



北海道大学情報基盤センター主催講演会(2010年1月25日 百年記念会館にて)

こで、彼らは流体力学のシミュレーションをスーパーコンピュータ上で行って、ポテトチップがどのようにコンベア上を流れていくのかという問題を解くことで、生産のスピードを向上させました。

自動車や航空機的设计、気象モデルなど、従来からある分野においても数多くのスーパーコンピュータが用いられていますが、他にも数多くの問題に対するスーパーコンピュータの重要性に産業界も気付きつつあります。シミュレーションを行いつつ、さまざまな可能性を検証し、その中で最適な設計や製品を探し出す「最適化」が、企業戦略において重要になってきています。

——スーパーコンピュータの10年後、20年後について将来の方向性についてお聞かせいただけますでしょうか。どのような分野が活発になると予想されますか？

ドンガラ教授 数多くの研究分野においてスーパーコンピュータが必要とされています。気象モデリングや材料科学、自動車や航空機などの製品をより安全に、より安価にするための最適化問題など、従来から必要とされてきた分野について、今後ともその重要性は変わらないでしょう。

計算機の世界は急速に進化しており、将来のエクサスケール・コンピューティングを前提として、その適用領域について検討する必要があると思います。現状では、1秒間に 10^{15} 回の演算を行うことができる「ペタスケール」の段階にいます。現状の予測では2018年ぐらいに、これが1秒間に 10^{18} 回の演算が可能となる「エクサスケール」の時代となることが予想されます。我々はエクサスケールのスーパーコンピュータを構築するつもりですし、それは十分可能となるでしょう。問題は、それが本当に必要となるか、現状のスーパーコンピュータの延長線上で構築できるかです。

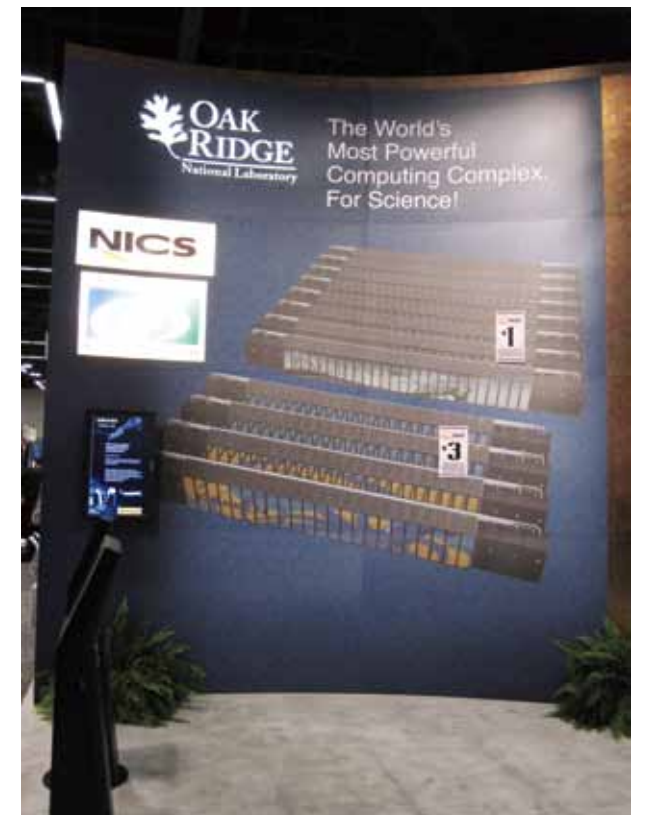
前者については、ペタスケールのスーパーコンピュータを使用している現状から、特に問題ではないでしょう。米国では、現在、計算科学者たちが、生物学、化学、核物理学、気象学などの研究者たちとともに議論をしていますが、すべての分野において、次世代の問題を解くためエクサスケールのスーパーコンピュータが必要であるとの結論に達しています。

後者については、エクサスケールのスーパーコンピュータのアーキテクチャがどのようになるかですが、現状の認識としては、マルチコアもしくはメニーコ

アによるコモディティのプロセッサと、GPU(編集注：Graphic Processing Unitの略で、グラフィック処理などに用いられる専用のプロセッサであり、大規模な並列計算が可能なおことから、近年注目を集めている)などによるアクセラレータの組み合わせになるのではないかと予想されています。このようなハイブリッド型のスーパーコンピュータが近い将来、今後10年ぐらいの間に出てくるでしょう。20年後については、予測するのは難しいですね。10年後でも難しく、20年後は予測の範囲外でしょうか。10年前に現在のペタスケールを予測することを考えてみるとわかると思います。

——本日は世界一のスーパーコンピュータとその必要性、将来の方向性などにつきまして興味深いお話をいただき、ありがとうございました。

ドンガラ教授 ありがとうございました。



SC09オークリッジ研究所のブース展示より、上が世界第1位のスーパーコンピュータであるオークリッジ研究所の“Jaguar”、下が世界第3位のスーパーコンピュータである、テネシー大学の“Kraken”

知 っ て 得 する !!

第14回

スパコンアカデミー

簡易ユーザインタフェースの開発と解析

情報基盤センター大規模計算システム研究部門 大宮 学

スーパーコンピュータでの利用を前提としたアプリケーションソフトウェアの開発においては、ユーザインタフェース (UI) をどのように構築すべきかが問題となります。PCなどではMicrosoft Windowsベースのグラフィカルユーザインタフェース (GUI) を構築することが一般です。しかし、スパコンでは大規模解析をできるだけ短時間で実行することに主眼が置かれ、UIまで手が回らないのが現状かと考えます。また、GUIを作成するにもUNIXベースの開発の知識が乏しく、あわせて利用者が少ないことから時間をかけてまで作成しようという気になれないのが本音ではないでしょうか。商用アプリケーションソフトウェアでも状況は同じかと考えます。

入力データとユーザインタフェース

プログラム開発者であれば、ソースコードを直接変更し、再コンパイル後に解析を実行することで充分です。しかし、解析モデルの構造や解析パラメータの変更を行いながら所望の特性に近づけていくためには、必要最小限のユーザインタフェース機能を備えた汎用的な実行モジュールを作成したいと考えます。

今から40年前に、コンピュータシミュレーションが利用され始めた頃に米国ローレンス・リバモア研究所 (<https://www.llnl.gov/>) が開発した数値電磁気学プログラム (Numerical Electromagnetics Code: NEC、

<http://www.nec2.org/>) があります。モーメント法に基づくアンテナ等の数値設計・評価ツールとして現在でも利用されています。

NECでは、パンチカード入力を想定して、1行80文字以内にデータ入力が行えるように考慮されていました。その後、ファイル入力が可能になりましたが、基本的な入力方法は継続されました。入力データの例を図1に示します。入力データは3つの部分、すなわちコメント、構造定義および解析定義です。各行はキーワードとそれに続くパラメータで構成されます。CMおよびCEはコメント行、GWおよびGEはワイヤ定義と構造定義の終了、FR、EXおよびRPは周波数、励振方法および放射指向特性、ENは入力の終了を意

味します。アンテナなどの設計・評価では周波数範囲と励振方法が定義されると、それに関する入力特性などは自動的に決定します。したがって、解析定義は単純な方法で充分対応可能であるといえます。

本センターで開発している大規模電磁界解析ソフトウェアJet FDTDではNECと同様にアンテナ等の設計評価が可能です。このたび、NEC入力方式に基づいたユーザインタフェースの構築を行いましたので、その詳細について紹介します。

Jet FDTD用入力ファイル

Jet FDTDでは表1に示す4種類の

CM NEC Input File										コメント
CE										
GW	1	7	0.693	-0.305	0.000	0.693	0.305	0.000	0.0025	構造定義
GW	2	7	1.113	-0.305	0.000	1.113	0.305	0.000	0.0025	
GW	3	7	1.533	-0.305	0.000	1.533	0.305	0.000	0.0025	
GE 0										
FR	0	1	0	0	2.2D2	0.0D0	0.0D0	0.0D0	0.0D0	解析定義
EX	0	16	4	0	1.0D0	0.0D0	0.0D0	0.0D0	0.0D0	
RP	0	31	73	1001	0.0D0	0.0D0	3.0D0	5.0D0	1.0D4	
EN										

図1.NECの入力ファイルの例

	ファイル名	説 明
(1)	../INI.PML	CPML の設定パラメータ。初期値のまま使用する。
(2)	../INI.MEDIA	解析で仮定する媒質の電気定数。
(3)	./Media_Data/in_node/xyz.dat	モデル構造の定義。box 1 50 45 50 1 911 1
(4)	../INI.PARAMETERS	解析実行のための各種パラメータを設定する。以下において、詳細に解説する。

表1.入力用パラメータファイル

imp	1
spa	160 290 146
cel	10.0D-3 10.0D-3 10.0D-3
exc	0 2 80 145 72 75.0D0
frq	190.0D6 180.0D6
tms	10001

表2.ファイルINI.PARAMETERS例

初期値設定ファイルを入力データとしています。このうち、解析モデルの構造定義をxyz.datで行い、解析パラメータの設定をINI.PARAMETERSで行えるようにしました。これら2つの入力ファイルを図1に示すNEC入力ファイルに基づいて作成しています。FDTD解析モデルは直方体セルで分割されるので、キーワードbox、媒質番号、セル開始番号及び座標軸方向のセル数で構造を定義することが可能です。一般的には、セル自動生成ツールを目的に応じて作成します。

一方、INI.PARAMETERSを表2に示します。3文字からなるキーワードとそれに続く数値で定義しています。以下に、キーワードとパラメータについて説明します。

(1) **imp** ①

インピーダンス解析を行うことを指示します。この他に、放射指向特性を

解析するための**prn**を用意しています。数値①は整数で、給電点の数を示します。

(2) **spa** ① ② ③

解析空間全体に含まれるセル数を定義します。数値①から③は整数で、それぞれ**x**、**y**および**z**方向におけるセル数を表します。

(3) **cel** ① ② ③

セル寸法を定義します。数値①から③は倍精度実数で、それぞれ**x**、**y**および**z**方向におけるセル寸法を単位としてメートルで指定します。

(4) **exc** ① ② ③ ④ ⑤ ⑥

励振源を定義します。数値①から⑤はすべて整数です。①は励振源の形式を定義し、例えば0はデルタギャップ電圧源 (ハードソース) で、正弦波で変調されたガウシヤパルス意味します。②は励振電界成分を指定するための

定数であり、1、2および3のみが入力可能で、それぞれ x 、 y および z 方向の電界を励振します。数値③から⑤は励振座標をセル番号で入力します。ただし、構造は必ず厚みを有することから、デルタギャップ給電では印加電圧座標 (i,j,k) を与えることで、印加方向と垂直な平面内の隣り合う4つの要素に自動的に展開します。また、電流を求めるための磁界の線積分経路は4つの電界成分を取り囲むループとします。最後の⑥は反射係数等を評価するときの特性抵抗とします。

(5) **frq** ① ②

解析周波数を指定します。①は中心周波数、②は帯域幅を単位Hzで指定します。解析結果出力は周波数範囲①-②/2から①+②/2となります。

(6) **tms** ①

解析を実行するタイムステップの総数を指定する。①は整数で、1000の倍数に1加えた数（例えば、9001）とします。このように設定することで、1000の倍数分だけデータが保存されるようにしました。

解析実行と結果評価

以上の入力ファイルが作成できたら、いよいよ解析を実行します。解析においては、設定パラメータのチェック用ファイルおよび解析結果ファイルを随時出力します。解析が終了した後、これらファイルを利用して、再計算や既成の特性評価以外にも利用できるように配慮しています。

(1) **../INI.prevSetting**

解析パラメータの確認および励振パルス波形のパラメータを表示します。出力例を表3に示します。破線から上側は設定パラメータで、破線下は自動設定された励振パルスのパラ

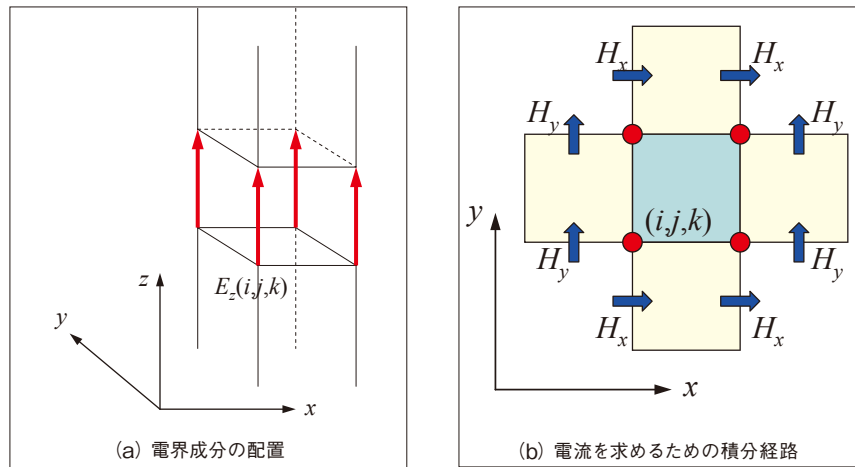


図2.デルタギャップ給電における電圧と電流の評価

(Kx,Ky,Kz)	160	290	146	
(Dx,Dy,Dz,Dt)	1.00E-02	1.00E-02	1.00E-02	1.67E-11
Axis: 2, Feed point:	81	146	73	
Frequency and bandwidth (Hz):	1.90E+08	1.80E+08		
Characteristic resistance, R0 =	75.0	(Ohm)		

Ndecay	57			
N0:	235			
amplitude	0.249547761993220360E-001			

表3.ファイルINI.prevSettingの出力例

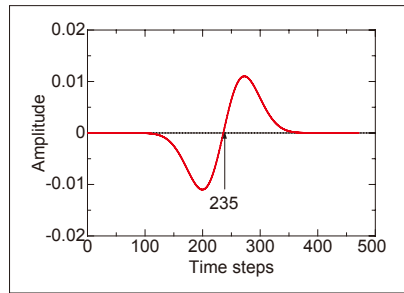


図3.励振パルス波形

ガウシヤンパルスを中心周波数の正弦波で変調したパルス。
パルス波形データは下記ファイルに出力されている。

../DATA/JetFDTD_waveform.dat

0.103507694108434954E-008
0.119477926820217106E-008
0.137772557278723664E-008
0.158707452735985279E-008
0.182637900526515861E-008

表4.ファイルJetFDTD_waveform.datの出力例

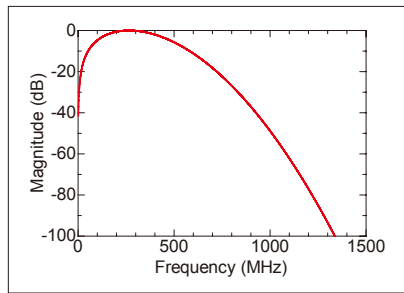


図4.周波数スペクトル

左図に示すパルス波形をフーリエ変換して得られた結果。このスペクトル波形は下記ファイルに出力されている。

../DATA/JetFDTD_spectrum.dat

ファイル1列目が周波数 (MHz)、2列目が大きさ (dB) を表している。

149.1	-2.05
150.0	-2.01
151.4	-1.96
152.3	-1.92
153.2	-1.89

表5.ファイルJetFDTD_spectrum.datの出力例

0.111492810464325575E-008	0.109898339996005931E-010
0.128625242049469930E-008	0.154333319164201551E-010
0.148240005007354399E-008	0.129920108206484437E-010
0.170672676631250477E-008	0.946348984711176683E-011
0.196300447119215152E-008	0.923061823284943741E-011

表6.ファイルJetFDTD_VI.datの出力例

100.2	0.209E+02	-0.237E+03	0.965	-0.31	56.41	0.884	-0.388
100.6	0.212E+02	-0.234E+03	0.964	-0.32	54.64	0.881	-0.391
101.1	0.214E+02	-0.232E+03	0.963	-0.33	52.93	0.879	-0.394
101.6	0.217E+02	-0.229E+03	0.962	-0.34	51.26	0.876	-0.397
102.0	0.219E+02	-0.227E+03	0.961	-0.35	49.65	0.873	-0.401

表7.ファイルJetFDTD_impedance.datの出力例

メータを示しています。励振パルス波形は次式で表現されます。

$$g(t) = E_0 \sin(2\pi f_c n \Delta t) \exp\left\{-\left(\frac{n - N_0}{N_{decay}}\right)^2\right\} \dots (1)$$

式 (1) において、 N_{decay} は規格化パラメータで、スペクトル波形のピーク値が設定された帯域内に存在し、かつ離散時間間隔で決定されるサンプリング周波数において大きさが-100dB以下になるような比較的大きな値に自動的に設定されるようにしています。

N_0 は時間オフセット量をタイムステップ数で示しています。この値はピーク値と比較して、打ち切り点での振幅が 10^{-7} 以下になるように設定します。励振パルス波形はステップタイム0から $2*N_0+1$ まで存在するので、タイムステップ総数は $2*N_0+1$ 以上でなければなりません。振幅 E_0 は図4に示すスペクトル波形において、ピーク値が0 dBになるように設定します。

このファイルから、空間離散間隔10mmで周波数範囲100MHzから280MHzでの解析を行うことが確認できます。解析モデルは共振周波数155MHzのダイポールアンテナを仮定しています。空間離散間隔が10mmであることから、ダイポールアンテナの断面は10mm×10mmです。解析に要した時間は、スパコンバッチ領域を使用し、タイムステップが10001の場合7分でした。

(2).**../DATA/JetFDTD_waveform.dat** および **JetFDTD_spectrum.dat**

図3および4に示す励振パルス波形ならびに周波数スペクトルの数値データを出力します。その例を表4および5に示します。表5の1列目は周波数 (MHz)、2列目が大きさ (dB) です。

(3) **../DATA/JetFDTD_VI.dat**

1000タイムステップごとに、計算された電圧および電流波形を出力します。ただし、電圧は電界から、電流は磁界から計算されることから、FDTD解析では両者の間に0.5タイムステップの時間差が存在します。そのまま計算するとインピーダンス特性が不正確になるので、本プログラムでは電圧のタイムステップ間での平均を求め、電圧と電流の観測時間を一致させています。

(4) **../DATA/JetFDTD_impedance.dat**

入力特性に関する諸量をひとつのファイルにまとめて出力します。出力例を表7に示します。左列から周波数 (MHz)、インピーダンスの実部および虚部、電圧反射係数の絶対値、リター

ンロス (dB)、VSWR、電圧反射係数の実部および虚部です。

図6に、アンテナ設計および評価において一般的に利用される特性評価結果を示します。ただし、特性インピーダンスを75 Ωにしています。

まとめ

本稿においては、スパコンなどの大規模計算をバッチ領域で実行に有効なユーザインタフェースと解析パラメータ設定法について示しました。米国ローレンス・リバモア研究所で開発が行われたNECと同様の設定法により、比較的単純な設定手法で所望の解析を実行することが可能になります。

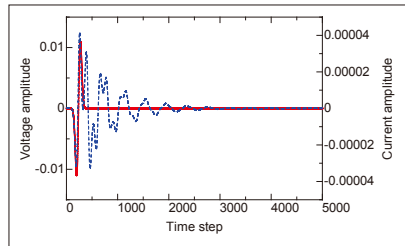
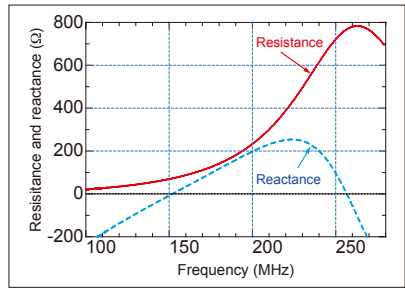
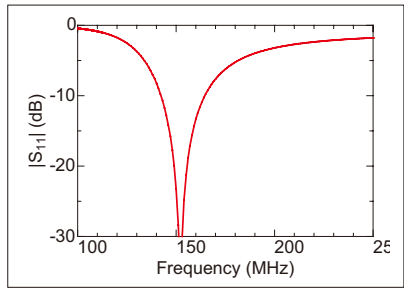


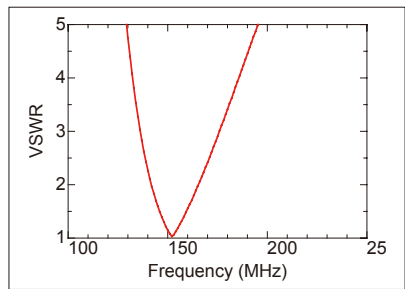
図5.電圧および電流波形
実線が電圧波形、破線が電流波形である。4000タイムステップで収束しているように判断される。



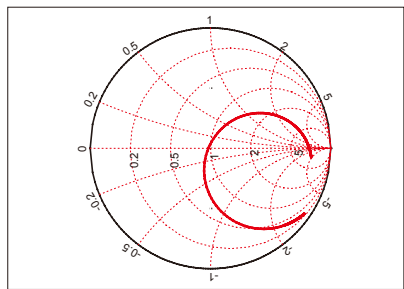
(a) 入力インピーダンス



(b) リターンロス



(c) VSWR



(d) 入力特性 (スミスチャート表示)

図6.アンテナ解析結果の各種グラフ表示

スパコン可視化道場

これまでAVS/Expressを利用したさまざまな可視化について解説を行ってきました。今回の可視化道場では、AVS/Expressで提供されているストリームライン (streamline) およびチューブ (tube) モジュールを利用して、ポインティングベクトルの可視化に挑戦します。ポインティングベクトルは、電磁気学におけるエネルギーの方向と大きさを表す物理量で、流体力学における空気の流れの方向や速度を可視化して表現することと基本的に同一であるといえます。ポインティングベクトルの計算方法は電磁気学の教科書を参照してください。

ポインティングベクトルの計算

本センターで開発しているJet FDTDでは解析モデルを正弦波励振することで、解析空間格子点におけるポインティングベクトルを計算し、3つの座標成分ごとにファイル出力します。解析モデルを図1に示します。導体平板の前に置かれた半波長ダイポール素子を周波数2480MHzで励振したときのポインティングベクトル流と電界強度分布を求めます。得られるデータはAVSフィールドデータです。これらデータを読み込むためにリスト1に示すフィールドファイルを作成します。3次元空間で、各軸方向に98個のデータから構成されます。

ポインティングベクトルの可視化

```
# AVS field file
ndim = 3
dim1 = 98
dim2 = 98
dim3 = 98
nspace = 3
veclen = 3
data = float
field = uniform
label = element x element y element z
variable 1 file=.Y100.x filetype=ascii skip=0 offset=0 stride=1
variable 2 file=.Y100.y filetype=ascii skip=0 offset=0 stride=1
variable 3 file=.Y100.z filetype=ascii skip=0 offset=0 stride=1
```

リスト1.ポインティングベクトル表示用フィールドファイル

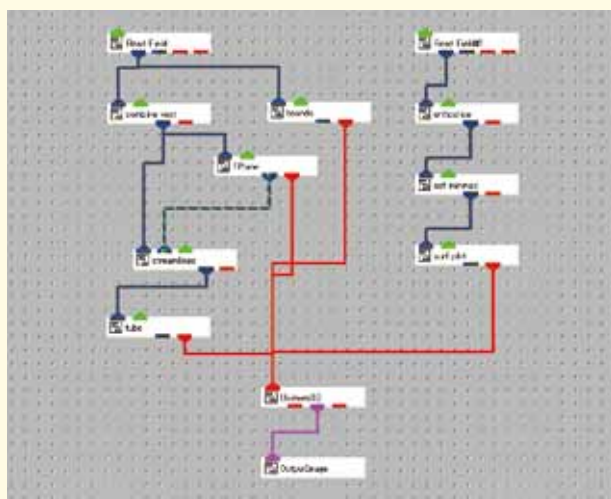


図2. AVS可視化モジュール構成

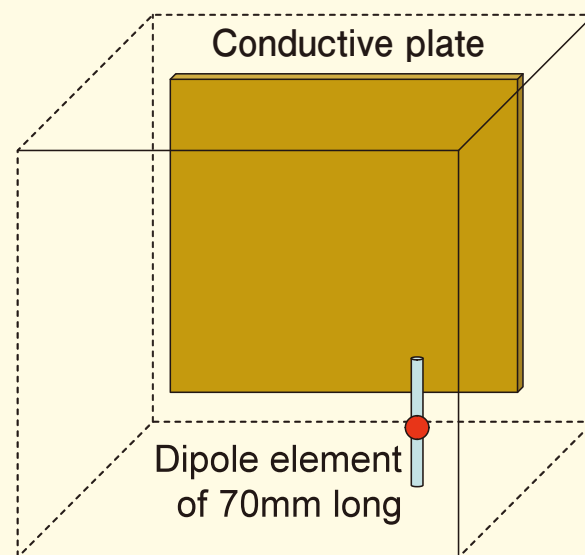


図1. 解析モデル

ポインティングベクトル可視化のためのモジュール構成を図2に示します。左側がポインティングベクトルの可視化部分で、その主要モジュールはcombine vect、FPlane、streamlineおよびtubeです。ストリームラインでは、流線を開始するための平面あるいは直線を指定する必要があり、そのためにモジュールFPlaneを使用します。モジュールtubeは流線に太さを与えるために使用しています。一方、同図右側は指定した断面における電界強度分布を表示するための可視化部分です。モジュールsurf plotを使用して、強度分布を色あるいは凹凸で表現し、ポインティングベクトルとの関係を分かりやすくします。

可視化結果

図3にポインティングベクトルの可視化結果を示します。解析領域をバウンディングボックスで示しています。FPlaneをダイポール素子の上方にとっていますので、その面からの上部の流線と強度分布を同時に示しています。ポインティングベクトルの可視化結果が

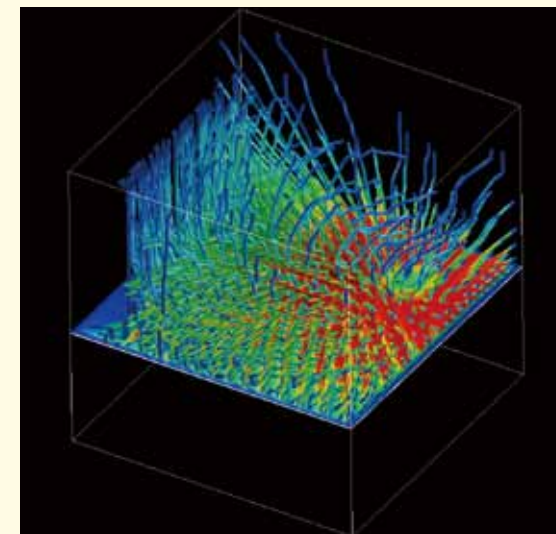


図3. ポインティングベクトルの可視化結果

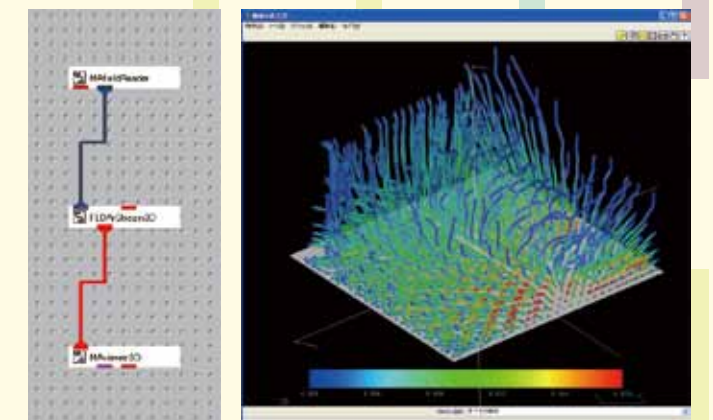


図4. MicroAVSモジュールを用いた流線の可視化

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。

科学・技術フェスタin京都（平成22年度産学官連携推進会議）

平成22年6月5日（土）に、京都宝ヶ池国際会館で開催された標記会議において、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が担当している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）「先端的大規模計算利用サービス」紹介の展示ブースを開設し、民間企業研究者に対して事業の紹介および利用喚起の活動を行いました。



大学院共通授業「計算科学の拓く世界」の実施について

これまで2年続けてきました標記授業を本年も引き続き実施しています。計算科学関連人材の育成を目指す大学院生向け授業です。本年度は、本学工学系教育研究センターの協力のもとe-Learningコンテンツの製作に挑戦しています。



お知らせと今後の予定

先端的大規模計算利用サービス 第4回シンポジウム

日時：平成22年7月1日（木）13:30～18:30
場所：丸ビルホール（東京都千代田区丸の内）
内容：利用企業による講演およびポスター発表

先端的大規模計算利用サービス 平成22年度第2期課題募集

募集期間：平成22年7月1日（木）から9月3日（金）
利用開始：平成22年10月1日（金）
詳細について、下記ホームページをご参照ください。
なお、本センターでは公募説明会を実施します。
<http://kyoyo.itc.u-tokyo.ac.jp/index.html>

平成22年度センター 公募型共同研究課題募集（予告）

本センターでは、平成21年度からセンター公募型共同研究を開始し、多くの研究成果が得られています。平成22年度においても引き続き同公募型共同研究を行う予定です。

なお、共同利用・共同研究拠点として実施する公募型共同研究として採択される課題との関係から、センター公募型共同研究について本年10月からの開始を目指して、現在課題募集要項の検討を行っています。詳細が決定しましたら、本センターホームページおよびメールマガジン等でお知らせします。

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）公募型共同研究

標記拠点は、北海道大学、東北大学、東京大学、東京工業大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学にそれぞれ附置するスーパーコンピュータを持つ8つの共同利用の施設を構成拠点、東京大学情報基盤センターを中核拠点とする「ネットワーク型」共同利用・共同研究拠点です。文部科学大臣の認定を受

け、平成22年4月より本格的に活動を開始しました。このたび、平成22年度共同研究課題募集を行い、厳正な審査を経て、採択課題が決定しました。本センターを利用する共同研究は6件採択され、本年6月から研究を開始しました。わが国における、学術・研究基盤の更なる高度化と発展に資するものと期待しています。

北館1階玄関ロビーの整備

本センター北館には大型計算機システム関係の利用者端末および大判プリンタ装置、さらに定期的に開催される利用講習会などスパコン利用者が多く訪問されます。



本年3月までに玄関ロビーを整備し、利用者の皆さま方に快適な環境での利用ならびにセンター業務の可視化を実現しました。併せて、入館者受付を設置し、ご案内などの業務を開始しました。



お持ちですか？

これまでご好評をいただいております『スパコン活用ガイド』および『MPIプログラミングマスターコース』を配布しています。スパコンユーザ必携の解説書です。本センター大型計算機システム利用者に限り、無料で提供します。なお、冊数に限りがありますので、これまで配布を受けた方はご遠慮ください。

お申し込みは、「氏名」および「利用者番号」を電子メールアドレス hsay@iic.hokudai.ac.jp までお知らせください。利用登録されている連絡先宛に本冊子を送付します。また、本センター利用者受付（北館2階）でも配布しています。



相談室Q&A

Q 現在は学内の部局サーバを使用して研究室のホームページを公開していますが、今後は情報基盤センターのサーバを利用して研究室のホームページを公開したいと考えています。情報基盤センターのサーバを利用する場合の経費についてお尋ねします。

- (1)100MBほどのデータを使用しますが、年間管理費はどのくらいになりますか？
(2)学内の経費でなく、直接支払い（振込）の形をとることは可能でしょうか？

A ご質問について、下記のとおり回答します。
(1)利用申請時に基本サービス経費として年額12,600円を負担していただきます。基本サービス経費に含まれるサービスとしてWebサーバ（ホームページサービス）が利用可能になります。ファイル容量の上限は1GBです。また、ホームページアドレスは下記のとおりとなります。
www.hucc.hokudai.ac.jp/~利用者番号/...
詳細について、http://www.hucc.hokudai.ac.jp/user_homepage.htmlをご参照ください。また、付加サービスとしてホスティングサーバまたはプロジェクトサーバを利用することが可能です。機能内容・料金について下記ホームページを参照してください。
http://www.hucc.hokudai.ac.jp/hosting_server.html
(2)学内の経費の支払い方法としては、支払費目が運営費交付金等の振り替えのみとなります。

Q 情報基盤センターのMathematicaをパソコンにインストールし、ダウンロード版Mathematicaインストールガイドに従ってMathematicaのセットアップ、ライセンスサーバの設定をした。その後、Mathematicaを起動すると、「Mathematicaのパーソナライズ」が開き、ユーザ情報など何も入力せずに終了を押すと、Mathematicaが終了してしまいます。対処方法を教えてください。

A ライセンスサーバの設定を正しく行っていただくと、通常はダイアログが表示されずにMathematicaが起動します。本件の場合、「mathpass」ファイルが正常に作成されていない可能性が考えられます。mathpassファイルがテキストファイル「mathpass.txt」になっていないかをご確認ください。MS Windowsの場合、フォルダオプションの表示設定で「登録されている拡張子は表示しない」のチェックをはずすことで、ファイルの拡張子を確認できます。もし、拡張子を含めたファイル名が「mathpass.txt」となっていましたら、「mathpass」とファイル名を変更してください。

Q スーパーコンピュータのアプリケーションソフトウェアを使用するためにwine.hucc.hokudai.ac.jpに接続し、DISPLAY環境を設定しているのですが、下記のエラーメッセージが表示されて、アプリケーションが起動しません。

can't open display

なお、コマンドxhostを実行して接続先ホスト名の追加をしました。このほかに設定が必要なのでしょうか？

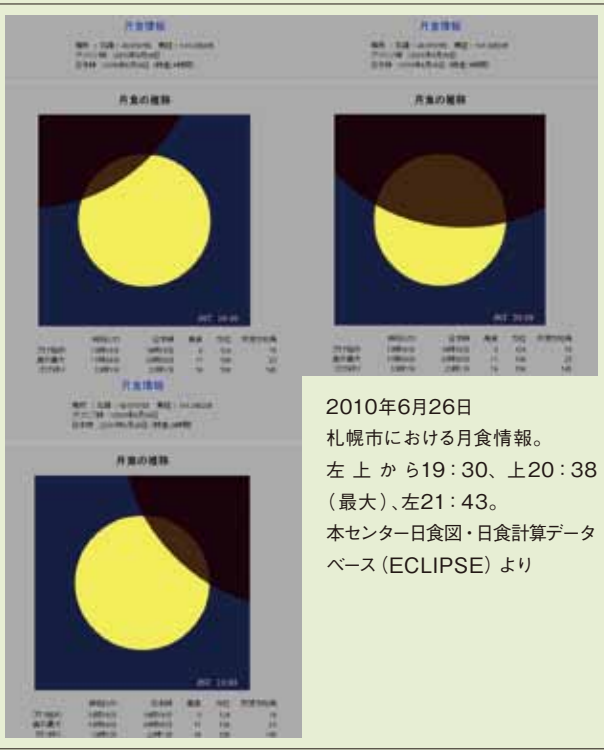
A 情報基盤センターのXアプリケーションを学外からリモートでご利用いただくには、本センターで公開しているInterCompassをご利用いただくか、sshポートフォワードでサーバに接続していただくが必要です。クライアント環境がLinuxやMac OS X等で、X Windowシステムが利用できる環境の場合、sshコマンドでオプションを指定（-Xまたは-Y）し、サーバに接続してください。その際、setenv DISPLAY ***の設定は不要です。上記以外の環境の場合、X端末ソフトウェアおよびssh接続対応の端末ソフトを利用し、X通信のポートフォワードを行ってサーバに接続します。

Q スーパーコンピュータで使用するファイルは、1ファイルあたりの容量に上限がありますか？

A スーパーコンピュータのTSS（{wine, corn}.hucc.hokudai.ac.jp）領域で作成できる1ファイルあたりの最大容量は10 GBです。下記のように、コマンドulimitで確認できます。
file (blocks) の値が20972510 blocksと表示されます。これは1 blockが512 Bなので10 GBとなります。

【コマンド実行結果】

```
$ ulimit -a
time(seconds)      86400
file(blocks)        20972510
data(kbytes)        8389004
stack(kbytes)       1048576
memory(kbytes)      unlimited
coredump(blocks)    0
nofiles(descriptors) 20002
```



技術支援員紹介

先端研究施設共用促進事業

技術支援員 宮下 渉



私は、技術支援員として情報基盤センターに勤務し、先端研究施設共用促進事業利用支援業務を担当しています。利用支援業務では、

スーパーコンピュータに関する高度な知識が要求されます。これまで携わってきた業務での経験を生かすことはもちろん、新たな知識修得のための勉強を日々楽しく続けています。

平成21年度から実施されている「先端研究施設共用促進事業」は、大学・独立行政法人等の研究機関が保有する先端研究施設を民間企業に提供し、民間企業における基礎研究からイノベーション創出に至るまでの科学技術活動全般の高度化を図るとともに、我が国の経済発展に貢献することを目指しています。本センターではスーパーコンピュータ、大学発アプリケーションソフトウェアならびにセンターが有する高度利用技術を提供することで、科学技術と大規模並列計算分野の発展に寄与しています。

民間企業ユーザの方々には、スーパーコンピュータを有効活用していただけるよう、きめ細かな支援を行いたいと考えています。利用支援に加えて、先端的大規模計算利用サービスホームページや共用ナビの情報管理を担当しています。これらのホームページでは、先端研究施設共用促進事業のために、本センターが提供する特色ある利用サービスや7センターの共通事項をまとめて情報提供しています。

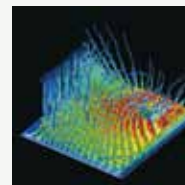
本センターに勤務してから3ヶ月が過ぎました。これからも、民間企業利用者にとって満足していただける支援を行いたいと張り切っていますので、よろしくをお願いします。

[先端的大規模計算利用サービスホームページ]
<http://www.iic.hokudai.ac.jp/kyoyo/>
[共用ナビホームページ]
<http://kyoyonavi.mext.go.jp/facility/show/65>



●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18号をお届けします。本号の巻頭インタビューでは、LINPACKベンチマーク等の開発にも携わられた、この分野の権威であられるテネシー大学のJack Dongarra教授をお迎えすることができました。世界一のスーパーコンピュータを有することの必要性や、さまざまな分野への波及効果について熱く語っていただくことができました。科学技術計算にとどまらず、産業界においても、ポテトチップの生産ライン設計から映画の製作など、幅広い分野でスーパーコンピュータは必要とされているのです。

●次号の特集予告

次号iiC-HPCニュース19号では、「コンクリート矩形床板の弾塑性衝撃応答解析」と題して、専修大学北海道短期大学みどりの総合科学科教授の三上敬司先生によるスパコンを活用された研究成果についてご紹介します。

●本誌へのご意見をお聞かせください。

連絡先: kyodo@iic.hokudai.ac.jp
北海道大学企画部情報基盤課共同利用・共同研究担当
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18号

編集・発行：北海道大学情報基盤センター共同利用・共同研究委員会システム利用専門委員会

- | | | | |
|-----------|---------|--------------------|---------|
| ●情報基盤センター | 棟 朝 雅 晴 | ●メディア・コミュニケーション研究院 | 長 野 督 |
| ●情報基盤センター | 大 宮 学 | ●公共政策学連携研究部 | 萩 原 亨 |
| ●情報基盤センター | 田 邊 鉄 | ●北見工業大学 | 桜 井 宏 |
| ●文学研究科 | 樽 本 英 樹 | ●企画部情報基盤課 | 伊 藤 和 彦 |
| ●理学研究院 | 見延 庄士郎 | ●企画部情報基盤課 | 上 窪 功 |
| ●農学研究院 | 谷 宏 | ●企画部情報基盤課 | 折 野 神 恵 |

2010年6月発行

印刷：正文舎印刷株式会社 TEL011-811-7151

