

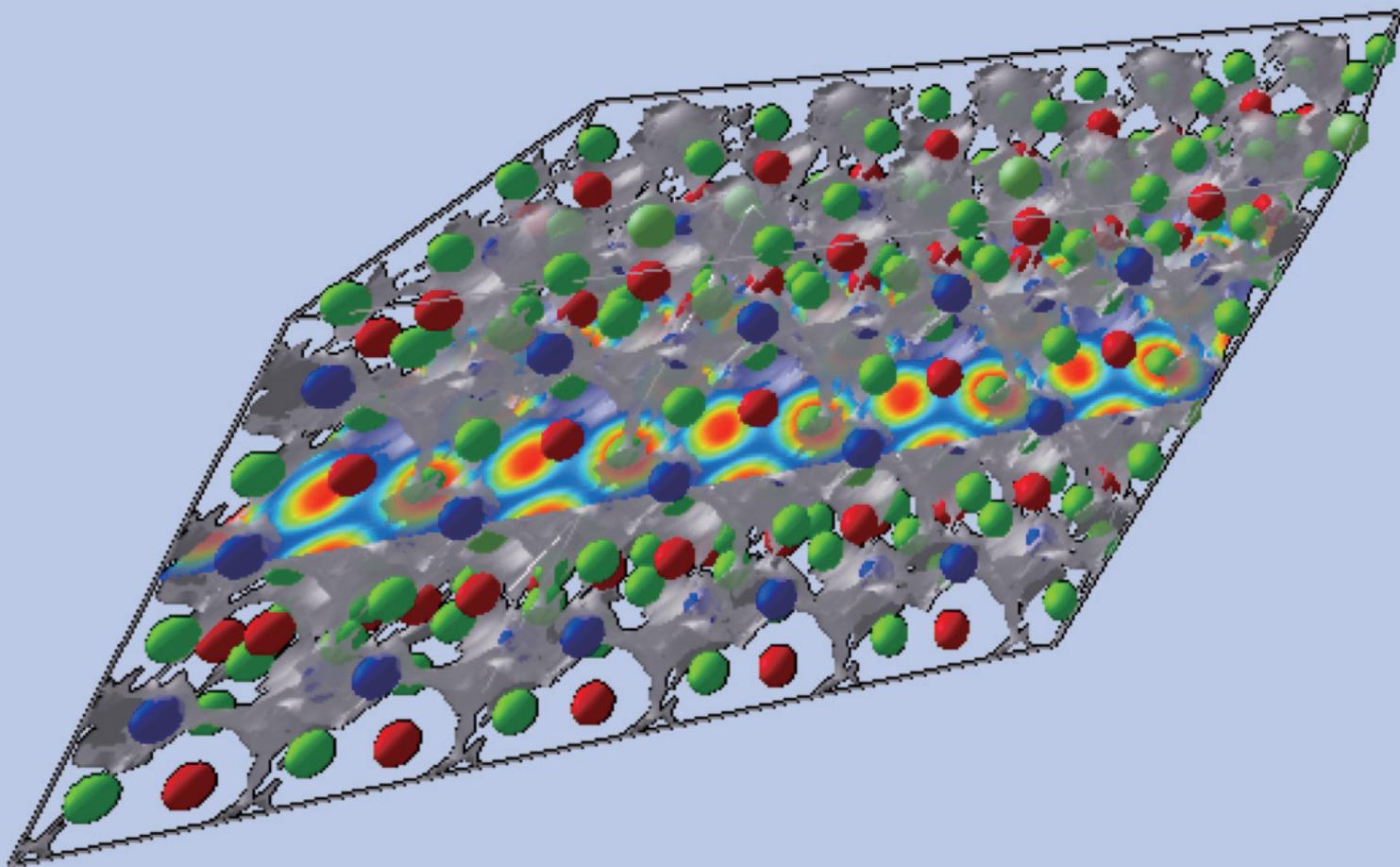


iiC-HPC

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

Hokkaido University

High Performance Computing System Information Initiative Center



【特集】

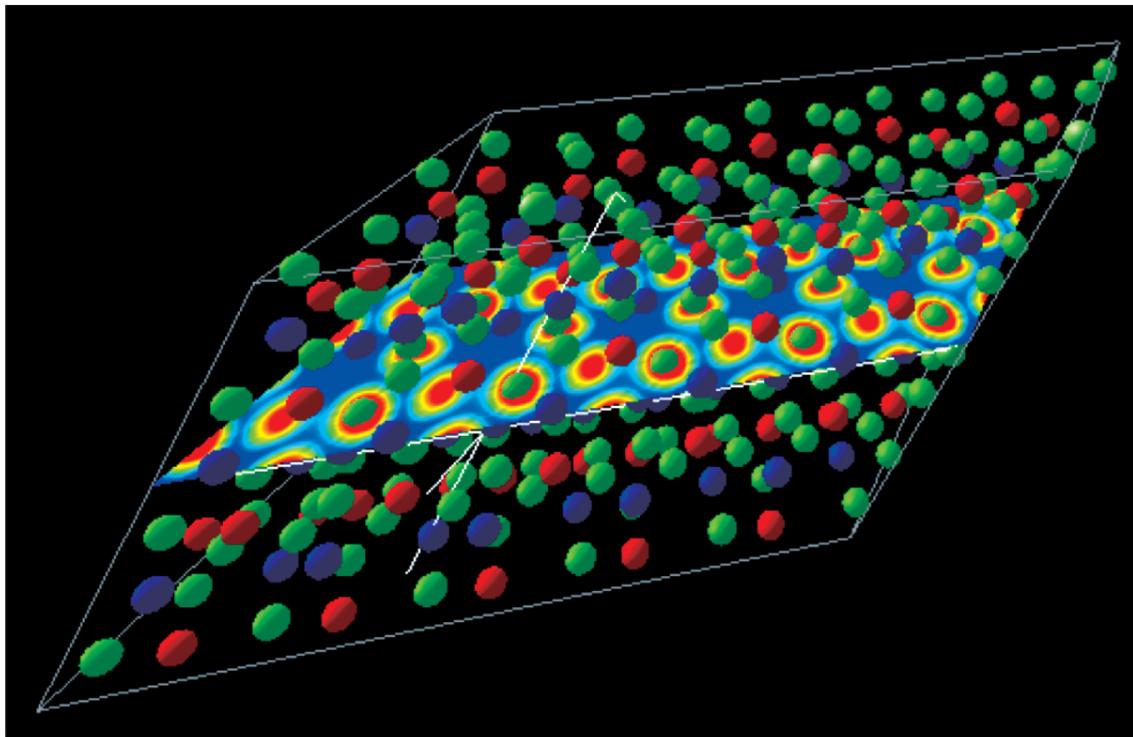
大規模計算技術の
地元企業への展開に向けた
高専研究者への利用推進

Vol.

25

MARCH
2012

酸化物結晶のフォノン計算



色分けされた粒子は、リチウムLi、ニオブNbおよび酸素原子を表現しています。それら原子によって構成されるニオブ酸リチウムLiNbO₃のスーパーセル(4×4×4)について、最適化構造と電荷分布(断面における密度分布)を示しています。ニオブ酸リチウムはレーザなどの非線形光学材料、圧電素子および表面弾性波素子等に利用されています。表面弾性波を利用するフィルタは小型化が可能なことから、携帯電話機用デバイスとして多数用いられています。

解析には、ウーン大学で開発された第一原理計算コードVASPソフトウェアと本センタースーパーコンピュータHITACHI SR11000/K1を使用しました。

スーパーコンピュータでは、コア数および主記憶容量がほぼ無制限に利用できることから、さまざまな構造についてフォノン計算を行うことができます。

特集記事では、釧路工業高等専門学校電気工学科 須田先生が、本センター共同研究(平成23年度)において取り組まれた酸化物結晶のフォノン計算について紹介します。

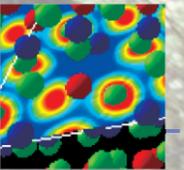
スパコンへのソフトウェアのインストールから始めて、計算機利用環境の整備を行っています。さらに、モデルの開発、ジョブ実行および解析結果評価(可視化)までの一連の手順を確立しました。このような経験と実績は、研究成果の創出、さらに地元企業との産学連携活動にとって有効です。

われわれは、スパコンの現在を考えます。

Contents

酸化物結晶のフォノン計算

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〉
「大規模計算技術の地元企業への展開に向けた
高専研究者への利用推進」

4-9



- 釧路工業高等専門学校機械工学科 准教授 川村淳浩先生
- 釧路工業高等専門学校電気工学科 教授 須田 潤先生



10-13

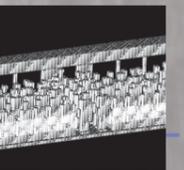
スパコン・アカデミー
第21回
「スパコンHITACHI SR16000モデルM1活用法」

- 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

14-15

- 番外編 14 「大規模データのためのポイントレンダリング」



16-19

- スパコンInfo
- 平成23年度計算機学術利用北海道地区協議会総会を開催
 - 平成24年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(JHPCN)公募型共同研究課題の募集
 - 北大一産業技術総合研究所包括連携等事業ワークショップを開催
 - 北大シミュレーションサロン第10回ワークショップを後援
 - 平成24年度センター共同研究課題の募集
 - ライブラリ・プログラムおよびデータベース開発・維持課題の公募
 - Q&A

道内4高専では、スーパーコンピュータを核とした計算機シミュレーション技術を地元企業等へ展開するべく研究者のスパコン利用推進を図り、そこから具体的な事例と研究成果を引き出すことを目的として、本学との包括連携等事業や本センター共同研究を実施しています。これら活動により、産学連携による地域産業振興への貢献、学学連携による教育・研究交流の強化、そして研究のさらなる高度化を目指しています。

——今日は釧路工業高等専門学校にお伺いしています。センター共同研究で、道内4高専の研究者によるスパコンを利用した数値シミュレーション研究のとりまとめ役を担当されている川村先生とスパコンを利用した研究成果をご紹介いただける須田先生にお越しいただいています。

——最初に、平成23年度情報基盤センター共同研究の研究代表者を担当されている川村先生にお話を伺います。共同研究の趣旨についてお話しいただけますか。

川村 研究分担者として釧路高専、苫小牧高専、函館高専、旭川高専からご参加いただいた先生方と大宮先生を加えた18名で共同研究グループを構成しています。それぞれ専門が異なりますので、各自研究テーマを設定し、共同利用を行うことでリソースの有効活用を図ることを目指しています。そこで共通する認識は、大型計算機システム利用技術を地元企業に広めることによって、北大スーパーコンピュータの利活用を核とした地域のボトムアップを図りたいということです。

他方、私が長く企業に勤務した経験から言えることもあります。すなわち、商品を企画して実際のフィールドに投入し、クレームなどを踏まえてよい商品にしていくという一連のプロセスにおいて、従来の伝統的な手法に加えて、計算機を利用することで、商品化までの期間を短縮し、高品質・高付加価値な製品を生み出すことができるということです。こうしたことは、大企業ですすでに行われていることですが、地域の産業を下支えしている地方企業においても、普及させたいと考えています。

さて、企業の皆さんは時間もありませんから、いきなり難しいことはできません。そこで、われわれ高専の教員・研究者が仲介役となり、地域企業のニーズをとらえて計算機シミュレーション手法を提示し、一緒

Interview with

A. KAWAMURA & J. SUDA

釧路工業高等専門学校機械工学科

釧路工業高等専門学校電気工学科

准教授 川村淳浩 先生 / 教授 須田 潤 先生 インタビュー

大規模計算技術の地元企業 への 展開に向けた高専研究者へ の利用推進

PROFILE



川村 淳浩

Atsuhiro KAWAMURA

独立行政法人国立高等専門学校機構
釧路工業高等専門学校 機械工学科 准教授

豊橋技術科学大学大学院修士課程修了後、ボイラメーカーと国土交通省所管研究所での勤務を経て2010年9月から現職。環境エネルギー工学の視点から、利便性や経済性を損なわずに如何にして持続可能な地域社会を構築するかという研究に取り組んでいる。博士(工学)、技術士(機械部門)。



須田 潤

Jun SUDA

独立行政法人国立高等専門学校機構
釧路工業高等専門学校 電気工学科 教授

金沢大学大学院自然科学研究科にて博士(理学)を取得し、青森職業能力開発短期大学校助教授を経て、2003年から釧路高専助教授、現在は同高専電気工学科教授。海外を含む他機関と共同で酸化物結晶のラマン分光とフォノンの非調和効果の研究を行う。また、現在学科長を務め、多忙な毎日を送っている。

に課題解決を図りたいということです。そのツールとしてスーパーコンピュータは極めて有効です。

——道内4高専との共同研究は3年目になります。今年度、特に目標としていることは何でしょうか。

川村 3年目になって、私自身ならびに各高専の先生方ともに、スパコンを利用する側としては大体スキルが身につけてきたと感じています。あとは、地域のニーズとリンクさせ、具体例を示すことです。ただ、地域の企業の皆さんには説明や宣伝など情報発信を常に行っているのですが、なかなか手を挙げてくださるところがなくて困っています。しかし、「一緒にやってもいい」と言ってくださるところもあります。商品開発の期間短縮につながるという感触をつかめるところまで進められればと考えています。

——共同研究では、魅力的な研究テーマが多数提案されていて、非常に期待しています。そこで、川村先生ご自身の研究についてご紹介いただけますか。

川村 私は燃焼を核にした環境エネルギーの分野が専門です。釧路高専においては、特に道東の省エネルギーと新エネルギーの適用に視点を置いています。十勝に代表されるような地域では、これまで農業の機械化を大規模に進めてきました。そして、釧路は水産業が盛んで、漁船のエネルギー消費量が大きい。林業でも、大規模にエネルギーが消費されています。また、厳冬期間が長く、集落が広く拡散している道東では、移動に係るエネルギー消費量は全国に比べて非常に大きい状態にあります。そこで、省エネルギーと経済性、利便性を同時に叶えつつ、持続可能な地域社会を構築したいと考えています。そして、そのアプローチとして、「省エネの再生可能エネルギーによる地域の低炭素化」というテーマを掲げて、研究に取り組んでいます。視点は、以下のとおり4つあります。

1つは、バイオマスの高度利用です。バイオマスにはいろんな利用方法がありますが、特に視点を置いているのは熱利用で、これには実機能試験とシミュレーションを考えています。具体的な話をしますと、畑作農業での廃棄物がかなり大量に出ます。それと、乳牛

のふん尿です。あと、水産業と水産加工では大量の有機廃棄物やリン酸系の廃棄物が未利用の状態です。それらを高度利用したいと考えています。そのための試験調査と商用アプリケーションソフトウェアを使ったシミュレーションを行いたいということです。商用アプリケーションソフトを使う理由は、最終的にソフトウェアの利用技術を地域の企業に広めていきたいと考えているからです。経済性と時間を最小限に抑えて使えるということで、自分で開発したものより利用しやすいだろうという視点です。

視点の2つ目は、産業部門です。農林水産業、食品、製紙業といった製造業では、かなり大きな熱利用が図られています。そのエネルギーの貯蔵施設とか省エネを目的として、多変量解析という手法とアプリケーションソフトを使って、シミュレーションを行うという視点です。道東の場合、燃料を大量に貯蔵する必要があり、そのためのタンクの需要があります。また、燃料のバイオガスを貯蔵するという用途がありますが、その保温とか、エネルギーの消費を抑えるという需要が現実にあります。その設備を持っている企業も地元であり、そういうところと具体的な作業の検討を進めています。

3番目の視点は、運輸部門の低炭素化です。車がなくては成り立たない社会にあって、このあたりの解析を行っていきたく考えています。

4つ目の視点が、民生部門の低炭素化です。これも大きなテーマで、釧路高専の中でも学科連携を進めています。さらに、地域の工業技術センター、地元のハウスメーカ、住宅工務店、電気設備業者などとも連携し、進めています。北海道の寒冷地住宅は高気密・高断熱住宅ですが、そこでのエネルギーの自立化を目指す研究開発を進めています。実験住宅でのデータを取りつつ、シミュレーションで検証を進め、予測に使いたいと考えています。

——計算機シミュレーションをどのように行っていますか。

川村 商用アプリとして、EFDプロを使用しています。解析対象は、直径17mぐらいのタンク内部の重油やバイオマスガスの流動です。特に、壁境界や電熱管周囲の解析はメッシュを細かくしなければなりません。そこは3次元的な動きになりますから、PCでは取り扱う

ことが困難なスケールになります。

——熱流体シミュレーションで、高精度モデリングが可能ということですね。

川村 そうです。例えば、部屋全体の空調はこれまでに検討されていて、それなりの成果が出ています。ただ、それだとエネルギー消費量が大量になるので、パラダイムシフトを図って、エネルギーの消費量を減らしていきたい。そのためにシミュレーションは非常によいツールです。測定とシミュレーションを一致させるためには大規模なシミュレーションが必要です。しかし、一旦モデルができ上がれば、電卓で計算できるようになりますので、現場で住宅工務店の方にも利用していただけるようになります。

——なるほど、現場技術者のツールになる研究成果は魅力的ですね。そのような目的で研究成果を冊子にまとめ、産学連携シーズ集とされるようですが…

川村 各高専の代表者に集まっていただいて、研究成果や報告書のまとめ方について話し合いを計画しています。すでに、執筆依頼を行っており、最終的には地元企業の方々に興味を持っていただける内容にしたいと考えています。下の図に示す「産学連携共同研究シーズ集」として発行し、高専の各種イベントなどで配布する予定です。

——昨年11月に新システムの利用サービスが開始されました。新システムへの期待や要望をお聞かせください。

川村 計算機性能が格段に向上したことにたいへん期待しています。また、アプリケーションサーバについて



共同研究成果冊子(シーズ集)

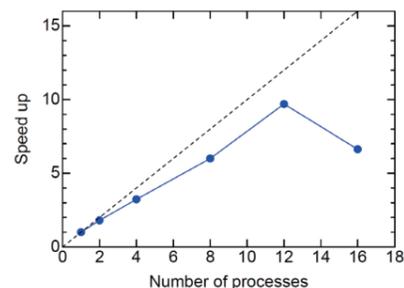
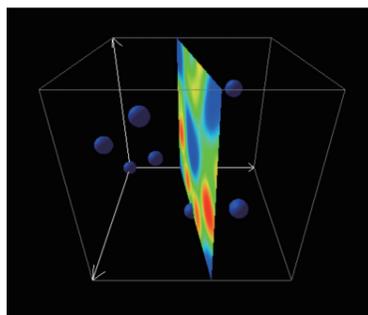
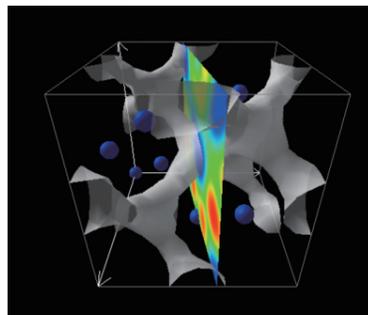


図1. 速度向上度



(a) Siの結晶構造



(b) Siの電荷分布

図2. Siの電荷分布と結晶構造の例

も、最新のIntelサーバであることからさまざまな利用シーンが想定されます。ただし、私が主に利用したいと希望しているのはアプリケーションソフトですから、それらを充実していただくと大変ありがたいと思います。商用ソフトウェアでなくとも、それと同等の機能を有する大学発アプリケーションソフトウェアが利用できれば、将来的に地元企業の皆さんに小さなコストで使っていただくという点に関してよいと思っています。それを進める中で、スピードの速いコンピュータを利用するためのつなぎ役として、アプリケーションソフトをうまく使いたいと思っています。

—それでは、今日はどうもありがとうございました。

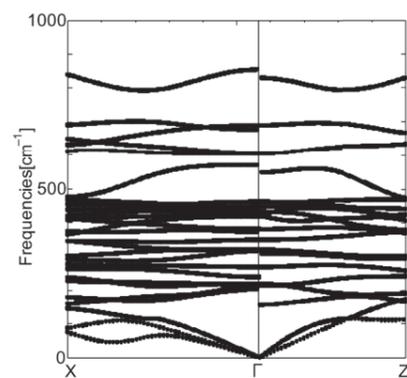
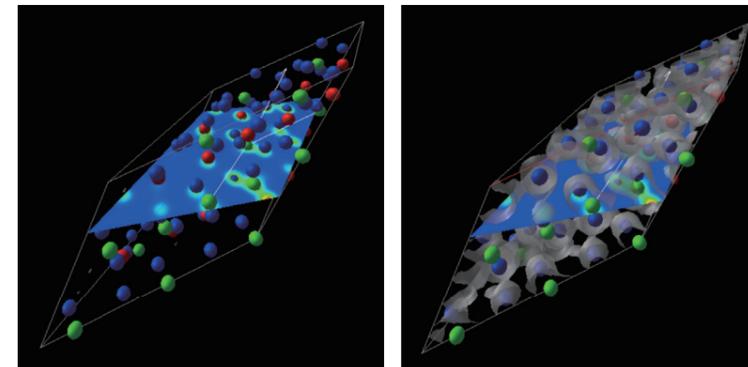
川村 こちらこそ、どうもありがとうございました。

—続きまして、スパコン利用事例として須田先生からお話を伺います。研究内容についてご説明をお願いします。

須田 電気材料や半導体材料の開発を目的として、第一原理コードVASPを利用した酸化物結晶のフォノン計算を行っています。VASPはウィーン大学で開発された固体結晶の電子状態を計算するソフトウェアです。もともと、自前の計算サーバや他機関の研究者の協力を得て、格子力学計算や第一原理を用いたフォノン計算を行っていました。そんな中、酸化物結晶の第一原理コードを利用した大規模なフォノン計算を行うため、北海道大学情報基盤センターのスーパーコンピュータを利用したいと思ったことがきっかけで共同研究に参加させていただきました。2010年度から本共同研究に参加し、情報基盤センターのご協力をいただいて、密度汎関数法の第一原理計算コードVASPVer.4.6をHITACHI SR1100モデルK1に移植しました。それにより、第一原理計算コードによる大規模な計算が可能な環境を構築することができました。これまでとは格段にスケールの異なる解析が、短時間で可能になりました。

—共同研究を行うことができ良かったと思います。これまでのスパコン利用や検討内容についてご説明ください。

須田 まず、ベンチマークテストで良く用いられている、Siのバルク結晶の構造最適化と電荷分布の計算を行いました。シミュレーションにおいては、ベンチマークテストデータを利用し、バッチ領域におけるVASPの実行時間等の検討を行いました。図1に並列数と速度向上度の関係を示します。ただし、破線が理想的な

図4. LiNbO₃結晶のフォノン分散曲線

(a) 構造最適化と電荷分布1

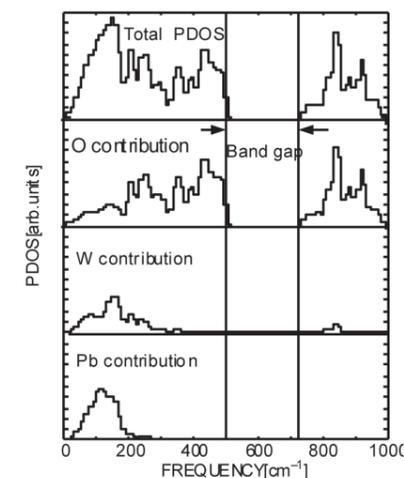
図5. PbWO₄のスーパーセル (4×4×4)

(b) 電荷分布2

場合、実線が測定結果です。解析規模が小さいため、逐次処理でも2分程度の計算時間で結果がでます。1ノードあたり16プロセッサ構成なので、プロセス数を16までとしています。この図から、16プロセスでは性能の低下がみられますが、12プロセスまでは比較的よくスケールしていると思います。さらに、大規模な系であれば16プロセスでもスケールすると予想されます。図2に、解析結果を可視化したSiバルク結晶の構造最適化後の電荷分布を示します。

—きれいにスケールしていますので、より大規模な系の解析が期待できます。

須田 次に、酸化物の非線形結晶として良く知られているニオブ酸リチウムLiNbO₃のスーパーセル (4×4×4) を用いて、構造最適化と電荷分布の計算を行いました。その結果を図3(本誌表紙図面) に示します。厳密なフォノン分散を求めるため、構造最適化された

図6. PbWO₄結晶のフォノンの状態密度

状態からスーパーセル中の各原子にx, y およびz方向にそれぞれ微小変位 (約10⁻⁴Å) としてフォノン振幅を与え、最適化状態とのエネルギー差から、各原子に働くハートリ・フォック (HF) 力の行列を求めます。さらに、その行列を対角化して、フォノン分散やフォノンの状態密度を求めます。フォノン分散の解析結果を図4に示します。この結果とParinskiiらがスーパーセル (2×2×2) を用いて計算した結果が一致していることを確認しています。

—いろいろな解析が寸時にできるんですね。

須田 これもスパコンのおかげです。解析結果がタイミングよく得られるようになると、いろいろなアイデアを試行したくなります。さらに、今までは解析できなかったモデルも、スパコンを利用することでいとも簡単に解くことができますから、自然と研究に熱が入ります。世界最先端の研究設備を利用することで初めて成し遂げられることと感謝しています。

まだ他にも色々なモデルについて解析を行いましたので、引き続き紹介します。タングステン酸鉛PbWO₄結晶について解析を行いました。構造と電荷分布を図5に、フォノンの状態密度を図6に示します。私ども研究グループがすでに報告しているタングステン酸バリウムBaWO₄結晶においては、高振動数の分子振動のラマンスペクトル幅の狭帯化やラマンレーザの高強度特性が、主にフォノンバンドギャップに起因して起こると考えられます。図6に示す同種の灰重石構造PbWO₄結晶において、フォノンバンドギャップが存在していることがわかります。今後は、灰重石構造の高振動数の分子振動のラマンスペクトル線幅やラマンレーザ強度とフォノンバンドギャップの詳細な関係を調べていきたいと思っています。

—スパコンを引き続きご活用ください。本日はありがとうございました。

須田 どうもありがとうございました。

知って得する!!

第21回

スパコンHITACHI SR16000モデルM1活用法

情報基盤センター大規模計算システム研究部門 大宮 学

スパコンHITACHI SR16000モデルM1の利用サービスを開始してから4ヶ月が経ち、ユーザの皆様方は利用方法にもずいぶん慣れたのではないのでしょうか。しかし、ジョブの実行状況を観察していると、バッチ演算ノードに空きがあるにもかかわらず、実行待ちになっているジョブが多数見受けられます。当初、旧システムの利用サービスとの互換性を重視して、ジョブクラスなどを継続して利用できるようにしました。それに加えて、大規模並列領域とジョブクラスを新設しています。これらのサービス内容を理解していただき、高効率なジョブの実行を実現したいと考えています。また、新システムではSMT機能が利用できます。物理コアを2つの論理コアとして利用し、主記憶からのデータ転送中にも演算を実行することで、処理の高速化を実現する機能です。SMT機能の有効/無効はジョブコマンドファイルに記述し、バッチジョブの実行時にロードレベラに指示します。そこで、ジョブコマンドファイルの記述方法とSMT機能に関するベンチマーク結果を紹介します。

バッチジョブクラス

スパコンは物理ノード22台で構成されます。その物理ノードは、図1に示すように8台の論理ノードで構成されています。論理ノードを構成する物理コア数は32、主記憶容量が128GBです。SMT機能により、1つの物理コアは2つの論理コアとして動作します。一方、主記憶容量は100GBのラージページと28GBのsmallページに分割されています。ユーザプログラムはラージページを利用するように設定されていることから、ユーザが利用可能な1演算ノードあたりの主記憶容量は100GBとなります。

さて、本センターに導入されたシステム全体の論理演算ノード台数は22×8=176です。これら論理演算ノードは、表1に示す領域に分けられています。すなわち、大規模バッチ領域128台、中規模バッチ領域38台、TSS領域2台および

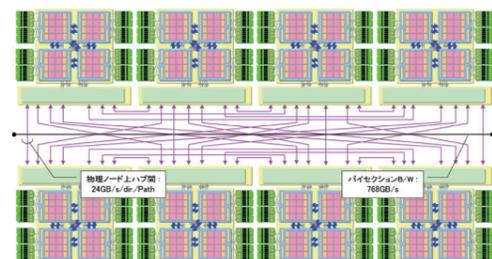


図1. 物理ノードの構成

システム管理ノード8台です。このうち、システム管理ノードは、スパコンシステムを管理・制御するためにセンターが占有して使用します。

表1. 論理演算ノードに割り当てた領域及び機能

ノード数	用途	特徴
128	大規模バッチ領域 (新設) MPIジョブ及びSMPジョブ	最大128ノードまで利用可能 (物理コア数4096、主記憶容量12.8TB)
38	中規模バッチ領域 (継続) SMPジョブ及びMPIジョブ	最大3日間の長時間ジョブ
2	TSS領域 (継続) 小規模SMPジョブ及びMPIジョブ	基本サービス経費で利用可能 計算リソースの50%を上限とする
8	システム管理ノード	ユーザは利用できません

TSS領域はホスト名{hop000,hop001}.hucc.hokudai.ac.jpの2台のノードで構成され、プログラムの編集、コンパイル、インタラクティブジョブ実行およびバッチジョブの登録に利用します。ただし、TSS領域でのジョブ実行においては、利用できる主記憶容量の上限は8GB、CPU時間は24時間、マルチスレッドまたはマルチプロセスジョブに関して計算リソースの50%を上限として利用することができます。TSS領域は多くのユーザによって共用されているので、処理性能が時々刻々変化します。また、TSS領域へのログインに対してロードバランサwine.hucc.hokudai.ac.jpが設置されていて、ログイン数が可能な限り均一になるようにユーザを振り分けます。

残りの166演算ノードがバッチ領域です。バッチ領域は、大規模バッチ領域および中規模バッチ領域の2種類があります。中規模バッチ領域は旧システムと同様に利用できるように配慮しています。このバッチ領域に割り当てている演算ノード数は38台で、主にノード占有SMP並列ジョブおよび経過時間が24時間以上72時間 (3日間) までの比較的長い実行時間を要するジョブの実行にサービスを行っています。また、並列化版OCTA/COGNACなどの特定のアプリケーションソフトウェアは、このバッチ領域でのみ実行が可能です。中規模バッチ領域は大規模バッチ領域への移行用と考えています。将来的には、中規模バッチ領域を大規模バッチ領域に統合することを計画しています。その場合、実行時間の最大値が24時間となりますので、ユーザにおかれましてはプログラムのMPI並列化、プログラム

チューニングあるいは高速計算アルゴリズムの採用により早い時期に大規模バッチ領域に移行していただけますようお願いいたします。そのためのユーザ支援を本センターが担当させていただきます。

一方、大規模バッチ領域では、128演算ノードまでのハイブリッド並列 (SMP並列とMPI並列を組み合わせた実行方法) プログラムの実行が可能です。それとともに、物理コア数4096および主記憶容量12.8TBを利用することができます。新スパコンでは旧システムに比較して演算ノード数、コア数および主記憶容量が大幅に増加しましたので、これまでは不可能であった大規模ハイブリッド並列ジョブの実行が可能になりました。これは、「京」計算機に代表されるスーパーコンピュータシステムの多くが、大規模クラスシステムであることを考慮しています。ユーザプログラムのハイブリッド並列化を推進するとともに、そのプログラムが大規模並列実行においても正当な解析結果を与え、かつ合理的な時間内に計算が終了することを保証することで、さらなる大規模化と高速化を実現していただきたいと考えています。

2つのバッチ領域に対して、表2に示すジョブクラスを設定しています。大規模バッチ領域と中規模バッチ領域で独自のジョブクラスになっています。前述のとおり、中規模バッチ領域は旧システムでの演算サービスの継承性に配慮しています。これまで通り3つのジョブクラスa、b、cがあり、ジョブ実行時間はそれぞれ1時間、24時間 (1日間) および72時間 (3日間) です。また、利用可能な最大演算ノード数を16としています。一方、大規模バッチ領域には4つのジョブクラスG1、G2、G3およびG4を設定し、ジョブ実行時間をそれぞれ1時間、6時間、12時間および24時間 (1日間) としています。また、利用可能な最大演算ノード数は128です。

表2. バッチ領域とジョブクラスの関係

ジョブ実行時間	ジョブクラス	
	大規模バッチ領域	中規模バッチ領域
1	G1	a
6	G2	
12	G3	
24	G4	b
72		c
最大演算ノード数	128	16

(注)この他に、下記のジョブクラスがあります。センターホームページ「演算時間延長申請」から申し込みができます。
ジョブクラスy: 経過時間無制限
ジョブクラスz: 演算ノード129から166までを使用して、経過時間無制限

中規模バッチ領域では、主にSMP並列 (マルチスレッド) ジョブの実行を想定しているため、ジョブ実行時間の最大値を72時間 (ジョブクラスc) としています。それ以上の時間にわたる演算サービスの希望に対応するため、ジョブクラスyを用意しています。月次処理日を除いて連続してジョブを実行し続けることが可能です。一方、大規模バッチ領域ではジョブ実行時間の最大値を24時間 (ジョブクラスG4) に設定しています。これは、多くの演算ノードを利用することで、プログラムの十分な高速化が実現されると想定しているからで、できる限りジョブ実行待ち時間を短縮することを考えています。129以上の演算ノード利用希望に対応するため、ジョブクラスzを用意しています。バッチ領域に含まれる166台の演算ノードを利用したハイブリッド処理が可能で、併せてジョブ実行時間も無制限としています。

表2から分かるように、大規模バッチ領域と中規模バッチ領域においてジョブクラスaとG1、bとG4は同一のジョブ実行時間になっています。これらジョブクラスでは、それぞれのバッチ領域において同じ演算サービスを受けることができます。バッチジョブの実行状況を参考にジョブクラスを指定することで、待ち時間なしでジョブを実行させることができます。バッチジョブの実行状況を確認するためのコマンドを以下に示します。

```
$ llq -f %o %nh %dd %c %id | sort
```

リスト1. バッチジョブ実行状況 (ユーザ名を非表示)

```
76> llq -f %o %nh %dd %c %id | sort
-----
56 job step(s) in queue, 14 waiting, 0 pending, 42 running, 0 held, 0 preempted
Owner  NM  Disp.  Date  Class  Step Id
a****  1  02/27  13:40  b      htcf02c01p02.26305.0
b****  0  02/27  13:40  c      htcf02c01p02.26183.0
bu**** 0  02/27  13:40  c      htcf02c01p02.26201.0
bu**** 4  02/26  10:36  c      htcf02c01p02.25444.0
bu**** 4  02/27  04:00  G4     htcf02c01p02.26202.0
bu**** 1  02/27  13:53  G4     htcf02c01p02.26323.0
bu**** 0  02/27  13:53  b      htcf02c01p02.26269.0
bu**** 0  02/27  13:53  c      htcf02c01p02.26235.0
bu**** 1  02/27  11:48  b      htcf02c01p02.26266.0
bu**** 1  02/27  12:21  b      htcf02c01p02.26267.0
bu**** 4  02/27  13:34  G4     htcf02c01p02.26310.0
bu**** 8  02/27  13:37  G4     htcf02c01p02.26312.0
bu**** 1  02/25  10:48  c      htcf02c01p02.25250.0
bu**** 1  02/25  10:48  c      htcf02c01p02.25251.0
bu**** 1  02/25  10:48  c      htcf02c01p02.25252.0
bu**** 1  02/27  10:58  b      htcf02c01p02.26237.0
bu**** 0  02/27  10:58  b      htcf02c01p02.26215.0
bu**** 0  02/27  10:58  b      htcf02c01p02.26217.0
bu**** 5  02/26  10:36  c      htcf02c01p02.26015.0
bu**** 5  02/27  11:08  G4     htcf02c01p02.26243.0
bu**** 8  02/26  23:55  G4     htcf02c01p02.26199.0
bu**** 8  02/27  01:53  G4     htcf02c01p02.26200.0
bu**** 0  02/27  01:53  c      htcf02c01p02.26278.0
bu**** 0  02/27  01:53  c      htcf02c01p02.26281.0
bu**** 1  02/27  13:52  a      htcf02c01p02.26322.0
bu**** 0  02/27  13:52  c      htcf02c01p02.26167.0
bu**** 1  02/25  14:36  c      htcf02c01p02.25367.0
bu**** 1  02/25  16:38  c      htcf02c01p02.25422.0
bu**** 1  02/26  06:25  c      htcf02c01p02.25504.0
bu**** 1  02/26  20:49  G4     htcf02c01p02.26196.0
bu**** 1  02/26  20:51  G4     htcf02c01p02.26198.0
bu**** 1  02/27  09:01  G4     htcf02c01p02.26210.0
bu**** 1  02/27  11:14  G4     htcf02c01p02.26249.0
bu**** 1  02/27  11:14  G4     htcf02c01p02.26250.0
bu**** 1  02/27  13:24  G4     htcf02c01p02.26307.0
bu**** 1  02/27  13:26  G4     htcf02c01p02.26308.0
e**** 4  02/25  06:20  c      htcf02c01p02.25295.0
e**** 4  02/25  19:43  c      htcf02c01p02.25441.0
f**** 1  02/25  13:43  c      htcf02c01p02.25428.0
f**** 1  02/26  07:57  c      htcf02c01p02.26071.0
f**** 0  02/26  07:57  b      htcf02c01p02.26289.0
f**** 1  02/25  22:30  c      htcf02c01p02.25967.0
f**** 0  02/25  22:30  c      htcf02c01p02.26169.0
f**** 1  02/27  02:41  c      htcf02c01p02.26148.0
f**** 1  02/27  03:59  c      htcf02c01p02.26149.0
m**** 0  02/27  03:59  c      htcf02c01p02.26191.0
m**** 0  02/27  03:59  c      htcf02c01p02.26193.0
m**** 0  02/27  03:59  c      htcf02c01p02.26195.0
m**** 1  02/26  10:36  c      htcf02c01p02.26072.0
m**** 1  02/26  14:02  c      htcf02c01p02.26077.0
m**** 1  02/27  03:59  c      htcf02c01p02.26078.0
m**** 1  02/27  03:59  c      htcf02c01p02.26080.0
n**** 1  02/27  14:25  G1     htcf02c01p02.26340.0
n**** 1  02/27  14:25  G1     htcf02c01p02.26341.0
o**** 1  02/26  06:26  c      htcf02c01p02.26053.0
o**** 4  02/27  12:30  G4     htcf02c01p02.26285.0
```

コマンド実行結果をリスト1に示します。リスト1から分かるように、大規模バッチ領域で稼働中の演算ノードは51であり、最大値の128に比較してかなり余裕があることが分

かります。一方、中規模バッチ領域には実行待ちジョブが多数存在しています。その内、ジョブクラスbが4つあり、これらジョブについてはジョブクラスをG4に変更することで直ちに実行されます。

バッチジョブの実行方法1：SMP並列ジョブ

バッチジョブを実行する場合、ロードレベラ (LoadLeveler) がジョブ管理を行うことから、ユーザはジョブコマンドファイル (jcfと略称) を記述します。例えば、jcfをファイル名 **command.jcf** とします。jcfには、前述のジョブクラス、計算リソースの利用方法、環境変数設定、出力ファイルの名称およびジョブ完了のメール送信などを指定します。新システムでは、デフォルト設定でSMT(Simultaneous Multi-Threading) 機能が有効になっているので、実行ジョブの特性に応じてjcfの内容を適切に設定することでハードウェアの性能を生かしたプログラム実行の高速化を実現できます。

SMP並列ジョブについて、jcfの記述例をリスト2に示します。jcfは3つの部分から構成されています。行頭文字が#@から始まるロードレベラへの指示文、環境変数設定および実行プログラムの指定です。ファイルの先頭でシェルを指定します。リスト2では、**/bin/csh**を利用することが宣言されています。利用するシェルによって、環境変数の設定方法が異なるため明示的に指定します。

リスト2. SMP並列処理用jcf(32スレッド、SMT機能無効)

```
#!/bin/csh -f

#@class = G1
#@resources=ConsumableCpus(64)
#@node_usage = not_shared
#@output = $(jobid).out
#@error = $(jobid).err
#@notify_user = ****@gmail.com
#@queue

unlimit
setenv MEMORY_AFFINITY MCM
setenv HF_90OPTS -F'PRUNST(THREADNUM(32),STACKSIZE(65536))'
setenv LDR_CNTRL LARGE_PAGE_DATA=M

./sample.exe
```

次に、32個の物理コアのみを利用するとします。しかし、デフォルトではSMT機能が有効になっているので、使用するコア数を演算ノードに含まれる論理コア数64と一致させます。その指定は下記のとおりです。

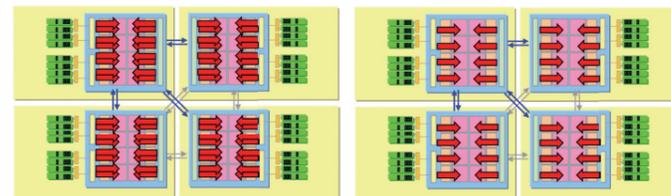
#@resources=ConsumableCpus(64)

実際に使用するコア数32または64を環境変数で定義します。下記の行は日立最適化FORTRANコンパイラで実行モジュールを作成した場合の指定方法です。IBM社製コンパイラを使用して実行モジュールを作成した場合についても同様に示します。これら設定により、論理コア64に対して、ひとつおきにスレッドが割り当てられ、1つの物理コアに1つのスレッドが割り当てられます。そのようすを図2に示します。同様の手法により、起動スレッド数が32以下の場合、**ConsumableCpus()**にはその2倍の数値を記入することで、物理コアごとにスレッドを割り当てることができます。

【日立最適化FORTRANコンパイラ】

setenv HF_90OPTS -F'PRUNST(THREADNUM(32),STACKSIZE(65536))'
【IBM社製コンパイラ】

setenv XLSMPOPTS "spins=0:yields=0:parthds=32"
 ただし、64個の論理コアを使用してジョブを実行する場合、数値を32から64に変更してください。



(a) SMT ON (b) SMT OFF
 図2. SMT機能

もうひとつ必ず設定すべきなのが下記の環境変数です。

setenv MEMORY_AFFINITY MCM

環境変数**MEMORY_AFFINITY**は、AIXメモリ親和性サポートを制御します。図2に示す論理演算ノード内には、複数のプロセッサチップから構成されたモジュールが4つ含まれています。システムメモリがそれらモジュールに均等に接続されています。物理コアは演算ノード内のすべてのメモリにアクセスできますが、物理コアが含まれるモジュールに接続されたメモリを参照するときは、ノード内の他のモジュールに接続されたメモリを参照するときよりも高速にアクセスでき、より高いメモリバンド幅を確保することができます。その結果、より高速な処理が期待されます。**MEMORY_AFFINITY**はメモリの配置を構成するために使用し、MCM (multi chip module) とすることでプロセッサの専用メモリおよび共有メモリをローカルメモリとします。すなわち、使用頻度の高いデータがプロセッサを含むモジュールに接続されたメモリに保存されるようになります。

図3は、本センターで開発を行っているJet FDTDを使用してSMT機能に関するベンチマークを行った結果を示しています。解析空間に含まれるセル数を400×400×4,000として、タイムステップ数1,000までの経過時間を測定しました。このとき、解析に必要な主記憶容量は88.3GBです。z方向のセル数をxまたはy方向のセル数に比較して10倍程度としているのは、スレッド数が多くなったときにも対応でき、かつキャッシュ上にあるデータの有効活用を図ることができるためです。同図から、SMT機能を利用することで計算時間を2分短縮 (経過時間15:28に対して13%短縮) することができました。この他に、すべての軸方向にセル数が同一の場合 (890×890×890、主記憶容量96.5GB)、あるいは小規模解析の場合 (100×100×600、主記憶容量1.2GB) についても同様のベンチマーク試験を実施し、すべての場合においてSMT機能を有効にすることで経過時間を短縮することができることを確認しました。ただし、これらの場合、SMT機能を有効にした場合と無効にした場合の経過時間の差は、図3ほど顕著ではありませんでした。

SMT機能を有効にすることによって、解析時間を短縮することができるか否かは解析アルゴリズム、プログラムコードあるいは解析モデルや解析条件等に依存します。したがって、本格的な解析を行う前に、SMT機能の利用および有効性について検討されることをお勧めします。

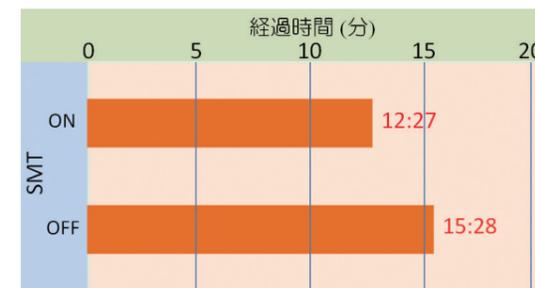


図3. Jet FDTDを使用したSMT機能の検討結果 (SMP並列)

バッチジョブの実行方法2：ハイブリッド並列ジョブ

ハイブリッド並列処理について、ConsumableCpusに比較して処理が高速化されるjcfの例をリスト3に示します。1ノードを使用し、4 SMP × 8 MPIのハイブリッド並列処理で、SMT機能を無効にします。リスト2に示す例と比較して、朱書した部分に変更されています。また、ハイブリッド並列ジョブあるいはMPI並列ジョブ実行のために青色文字で示す指示文を追加しています。さて、1ノードを構成する論理コア数は64ですから、8MPIでは1プロセスあたりの論理コア数は8になります。リスト3ではSMT機能を無効にするので、1プロセスあたり4つの論理コアを割り当てます。それが**task_affinity=cpu(4)**に対応します。この場合、物理コアあたり1つの論理コアを割り当てることに対応するので**cpus_per_core=1**とします。最終的に、1プロセスあたりのスレッド数を4にするため、環境変数**HF_90OPTS**を**THREADNUM(4)**とします。一方、SMT機能を有効にするためには、下記のようにjcfを変更します。

@task_affinity=cpu(8)
@cpus_per_core=2

setenv HF_90OPTS -F'PRUNST(THREADNUM(8),STACKSIZE(65536))'
 この場合、スレッド数は8になるので、ノードあたりのプロセス数 (タスク数) 8と掛け合わせて64個の論理コアを使用します。すなわち、8 SMP × 8 MPIのハイブリッド並列ジョブです。

リスト3. ハイブリッド並列用jcf(4 SMP × 8 MPI並列、SMT機能無効)

```
#!/bin/csh ?f
#@class = G1
#@job_type = parallel
#@network.MPI=sn_single,,US,,instances=1
#@bulkxfer=yes
#@node = 1
#@tasks_per_node = 8
#@task_affinity=cpu(4)
#@cpus_per_core=1
#@rset=rset_mcm_affinity
#@output = $(jobid).out
#@error = $(jobid).err
#@notify_user = ****@gmail.com
#@queue
unlimit
setenv MEMORY_AFFINITY MCM
setenv MP_SHARED_MEMORY no
setenv HF_90OPTS -F'PRUNST(THREADNUM(4),STACKSIZE(65536))'
setenv LDR_CNTRL LARGE_PAGE_DATA=M
poe ./sample.exe
```

図3と同様のベンチマーク試験を行った結果を図4に示します。Jet FDTDを使用し、jcfはリスト3を使用しました。ただし、解析領域をz方向に8個に分割し、1プロセスあたりのセル数を400 × 400 × 502としました。タイムステッ

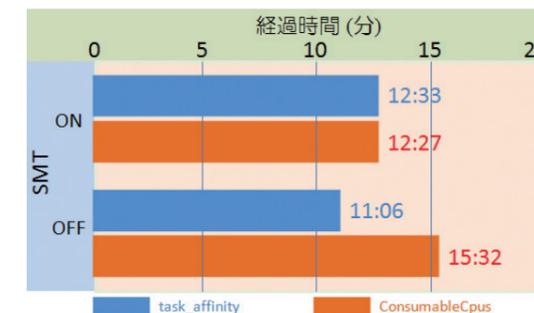


図4. Jet FDTDを使用したSMT機能の検討結果 (ハイブリッド並列)

プ数は1,000で、タイムステップごとに電界成分ExとEyおよび磁界成分HxとHyをメッセージ通信により隣接するプロセス間で送受信する処理が含まれます。ベンチマーク試験においては、SMT機能を有効または無効にした場合、およびtask_affinityまたはConsumableCpusを利用した場合について経過時間を測定しました。ベンチマーク試験結果から、SMT機能を有効にした場合、task_affinityおよびConsumableCpusで差異がないことが分かります。一方、SMT機能を無効にした場合、task_affinityを使用することでConsumableCpusに比較して30%程度の処理時間の短縮が実現され、ベンチマーク試験結果の中で最も処理が高速になっています。

ハイブリッド並列処理ではタイムステップごとにメッセージ送受信が行われますが、すべてのデータがプロセッサモジュールに接続されたシステムメモリに格納されるため、図3に示すSMP並列処理との経過時間に差がない、あるいはそれ以上の処理性能を発揮することができます。特に、ローカルメモリにデータが保存されている場合、スパコンならではの高速メモリアクセス性能が活用できるので、処理の高速化が実現されます。以上のように、プログラムの高速化にあたっては、MPIプログラミングとSMT機能の使い分けが鍵になります。

まとめ

今回は、新スーパーコンピュータシステムHITACHI SR16000モデルM1を有効活用していただくため、ジョブクラスとバッチジョブコマンドファイルの記述方法について解説しました。ジョブクラスaおよびbのジョブ実行時間はそれぞれG1およびG4のそれと同じです。バッチジョブの実行待ち状況を参考にしながら、適切なジョブクラスを選択することによって、待ち時間の少ないジョブ実行を行ってください。また、バッチジョブの実行はロードレベラが管理を行っていることから、jcfを記述することが必要です。jcfの作成においては、SMT機能の有効/無効に配慮してください。解析アルゴリズムやプログラムコードに依存して、SMT機能が有効に動く場合があります。さらに、論理演算ノード内のハードウェア構成に注目して、プログラムのMPI並列化を行うことでジョブ実行の高速化が実現されます。このことは、将来の大規模解析にも有効ですから、プログラムのMPI並列化を検討してください。

今回紹介しました事項は下記ホームページで公開しているスパコン利用講習会資料「HITACHI SR16000入門」で詳細に解説しています。是非ご利用ください。

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

スパコン可視化道場

3次元可視化システムAVS/Express利用講習会で紹介された可視化手法を実践する第7回目です。今回は、構造や解析モデルなどの大規模データをAVS/Expressで高速に描画するためのポイントレンダリング法について紹介します。すべてを点で表現しますので、面の計算や処理が不要になり、大規模データにも十分対応可能です。

番外編14

大規模データのためのポイントレンダリング

ポイントレンダリングはなぜ必要か

ポイントレンダリングは、計算機シミュレーションで使用した解析モデルをシミュレーション結果の可視化結果と同時に表示するために利用できます。図1に示した可視化は電車車輦内電波伝搬解析のために開発した解析モデルです。1辺が10mmの立方体セルを使用して、解析空間を離散化しています。全体のセル数は60×60×355で、その中に電車車体（一部を削除）、シート及びファントムの3種類の媒質を含めています。上記解析空間中のすべてのセルに対してインデックスを割り当て、自由空間と3種類の媒質を区別します。媒質ごとに色分けして表示させることから、それぞれ別々のファイルとして保存します。可視化においては、図2に示すモジュールRead_Fieldおよびisosurfaceから構成されるネットワークを使いま

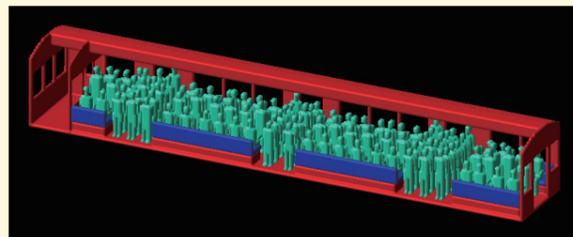


図1. 電車車輦内電磁界解析のための解析モデルの可視化

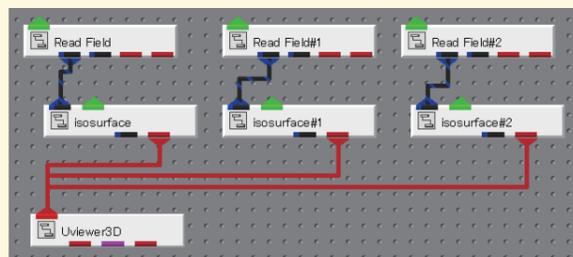


図2. モジュールisosurfaceを利用した可視化手法

す。すなわち、媒質ごとに等値面を計算して表示します。この可視化手法を用いるとエッジが丸みを帯びることがあります。さらに、ファイル容量が2.517MB×3個=7.551MBであり、AVS/Expressへの読み込み、視点を変更させるなどの処理に時間を要します。図1を見て分かるように、電波伝搬等の電磁界解析においては、解析空間に占める媒質の割合は数%から十数%程度であり、ほとんどの部分が自由空間です。可視化においては、媒質の位置や種類の情報が利用できれば十分です。媒質のみを考慮するならば、データファイルの容量を劇的に小さくでき、可視化処理も低負荷にできると考えられます。今回は、上記の目的に適したポイントレンダリングについて、AVS/Expressを使用して説明を行います。

ポイントレンダリングの準備

リスト1および2に、フィールドファイルとデータファイルの例を示します。リスト2のデータファイルは、1列目から3列目までの値が3次元空間における座標値、4列目が媒質のインデックスを表しています。媒質が存在する座標値のみを指定しています。リスト1のフィールドファイルでは、可視化空間を3次元 (nspace=3)、データ次元を1次元 (ndim=1) として、データ個数をdim1=159897で宣言しています。さらに、データ並びは不等間隔 (field=irregular) とします。データファイル名をtrain.datとして、座標値をcoord、値をvariableでそれぞれ指定します。リスト2に示すデータ列の順番を考慮して、offsetおよびstrideを設定します。

リスト1. フィールドファイルの例

```
# AVS field file
#
#
ndim = 1
dim1 = 159897
nspc = 3
veclen = 1
data = short
field = irregular
label = train

variable 1 file=train.dat filetype=ascii skip=0 offset=3 stride=4
coord 1 file=train.dat filetype=ascii skip=0 offset=0 stride=4
coord 2 file=train.dat filetype=ascii skip=0 offset=1 stride=4
coord 3 file=train.dat filetype=ascii skip=0 offset=2 stride=4
```

リスト2. データファイルtrain.datの例

```
4 4 4 1
5 4 4 1
6 4 4 1
7 4 4 1
8 4 4 1
9 4 4 1
10 4 4 1
...
```

以上の設定により準備が完了しました。データファイルの容量は3.415MBとなり、前述のファイル容量に比較して約45%に減少させることができました。

ポイントの表示

ポイントレンダリングのためのネットワークを図3に示します。モジュールRead_Field.Point3Dおよびglyphを利用します。3つの同一構成となっているのは、車輦、シートおよびファントムを個別のファイルから読み込むためです。

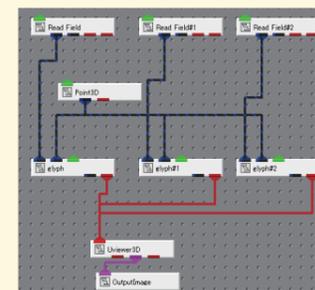


図3. ポイントレンダリングのためのモジュール構成

ポイントの表示はglyphを使用します。glyph表示モードLineのデフォルト値がRegularになっていると、グリフ形状のアウトライン表示が行われるため、処理が大変重くなります。そこで、図4に示す手順によりLine=Noneに変更します。オブジェクトセレクトでglyphを選択したのち、図4(a)に示すとおりメニュー「エディタ」からObjectを選択します。次に、図4(b)に示すとおりObjectメニューから「Modes」を選択し、最後に図4(c)に示すとおりLine RenderingをNoneに変更します。

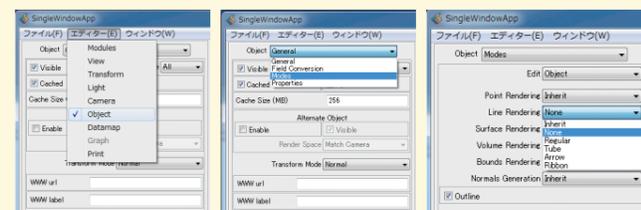


図4. モジュールglyphの表示モードをLine=Noneに変更する

最後に、点の大きさを調整して、隙間を減らします。再度、「エディタ」のObjectに戻り、図5(a)のようにメニューPropertiesを選択します。次に、図5(b)のとおりメニューtypeからPoint/Lineを選択します。そうすると、図5(c)に示す状態になるので、Line Thicknessを0から適当な大きさに変更します。可視化結果は白色で表示されているので、図5(c)の最下段に表示されている「Smooth lines」のチェックを入れると、エッジが表示され見やすくなります。可視化結果を図6に示します。

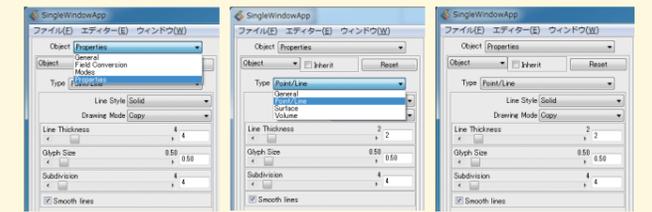


図5. ポイントサイズを変更する方法

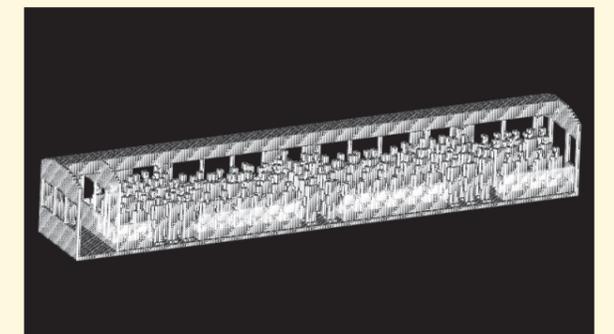


図6. ポイントレンダリングによる可視化例

まとめ

今回は、ポイントレンダリングによる可視化手法について説明を行いました。解析モデルを含めた可視化を行うときに、モジュールisosurfaceなどを利用しているのならば、ポイントレンダリングを試してください。ポイントレンダリングでは、用意すべきファイルの容量を小さくすることができます。さらに、可視化処理が非常に軽いため、マウスによる描画結果の操作が容易です。大規模高精度解析では解析モデルも大規模になるので、ポイントレンダリングを利用することが有効です。実際には、図6に示す構造または媒質を考慮した解析結果を表示することが目的ですので、それら目的を達成するために構造の表示処理を軽くすることは有効な手法であると考えます。

次回は、定型的な可視化処理をバッチ処理で行う方法について解説します。

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。

平成23年度計算機学術利用北海道地区協議会総会を開催

平成23年度計算機学術利用北海道地区協議会総会を、平成23年12月27日（火）13：30から、本センター北館会議室において開催しました。当日は、道内連絡所等から12名の代表者が参加されました。総会では、理事の選出および本センターへの要望等について意見が述べられました。特に、連絡所における所属ユーザの把握と活動の活性化などに関する積極的な議論が行われました。本センターにおいては、寄せられた意見に基づいて適切な情報提供に努めようと考えています。

総会終了後、新システムに関連した講演会「アカデミッククラウドシステムとサービス概要」（講師：棟朝雅晴）および「新スーパーコンピュータシステムと活用法」（講師：大宮 学）が行われ、利活用に関する活発な質疑応答が行われました。

平成24年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）公募型共同研究課題の募集

本センターを含む8センターにより構成されるネットワーク型共同利用・共同研究拠点では、下記のとおり平成24年度拠点共同研究課題を募集しました。すでに、募集が締め切られており、応募のあった39件の課題から35件（本センター関係分5件）が採択となりました。4月1日から採択課題による共同研究が開始されます。

事項／平成24年度公募型共同研究課題募集

募集期間／平成24年1月10日（火）～2月10日（金）

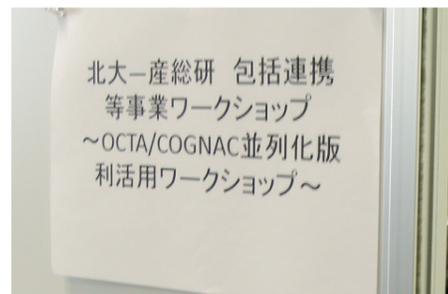
募集要領／<http://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/>

北大 — 産業技術総合研究所包括連携等事業ワークショップを開催

北海道大学と独立行政法人産業技術総合研究所は、「研究開発を通じた社会への貢献」のため相互に有する資源を有機的に活かしながら、より効率的で効果的な協力関係を構築する包括連携協定を平成17年度に締結し、これまで活動しています。平成23年度本学包括連携等事業「高分子・ソフトマテリアルの粗視化分子動力学法シミュレータOCTA/COGNACのスーパーコンピュータ向けSMP並列版利活用に係る情報交換・人材育成とワークショップの開催」の課題が採択されました。COGNACユーザや産学官の研究者の方々に並列化版OCTA/COGNACに関する情報提供を目的として、下記のとおりワークショップを開催しました。粗視化分子動力学法シミュレーションの専門家11名を講師として招聘し、粗視化MD法を用いたシミュレーションおよび並列化版COGNACの利用について、議論を行いました。

日時／2012年1月18日（水）13：00～17：00、19日（木）10：00～17：10

場所／北海道大学東京オフィス会議室 東京都千代田区丸の内1丁目7-12 サピアタワー10階



北大シミュレーションサロン第10回ワークショップを後援

本学における計算科学的研究に関心の強い研究者らが組織している北大シミュレーションサロン(HSS)による第10回ワークショップが開催されました。本センターではこのワークショップの後援を行うとともに、センター教員が研究成果発表ならびに開催のための支援を行いました。今回、「京」計算機の戦略分野「物質と宇宙の起源と構造」をメインテーマとして、宇宙物理および原子核物理の専門家による特別講演を企画しました。さらに、HSSメンバーによる講演が行われました。



日時／2012年2月17日（金）10：00～18：00

場所／北海道大学理学部 5号館 301号室

平成24年度センター共同研究課題の募集

本センターが提供および利用サービスを行っている情報基盤を用いたブ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・共同研究を目指す『平成24年度センター共同研究』の課題の募集を行いました。過去3年間にわたって同様の共同研究を行ってきた実績を踏まえ、公募要領の見直しを行いました。平成24年度公募においては、共同研究募集件数を15件程度とし、6つの領域ごとの最大採択件数を4件程度としています。3月9日（金）の締切日までに36件の申請がありました。3月14日（水）には課題審査を担当する委員会が開催されました。4月中に採否が決定され、5月1日からの実施を予定しています。これまで以上に充実した成果が生まれることを期待します。詳細については、下記ホームページをご参照ください。

http://www.iic.hokudai.ac.jp/kyodo_kenkyu/kyodo_kenkyu1.html

ライブラリ・プログラムおよびデータベース開発・維持課題の公募

平成24年度のライブラリ・プログラムおよびデータベース開発・維持課題を募集します。対象となる開発課題は、学術研究に広く利用可能なライブラリ・プログラムおよびデータベースの作成・移植等です。開発されたライブラリ・プログラムおよびデータベースは本センターに登録され、公開されます。開発期間は下記のとおりです。

ライブラリ 平成24年4月1日～平成24年10月31日

データベース 平成24年4月1日～平成25年 3月31日

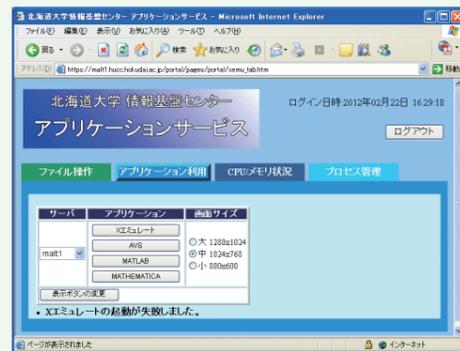
なお、単年度で開発が終了しない場合、次年度に継続できます。開発開始後2年以内に公開してください。応募資格は、北海道大学情報基盤センター学際大規模計算機システム利用有資格者で、開発代表者は教員に限ります。応募申請書は、本センター北館（学際大規模計算機システム）Webページの規定・概要欄にある各種申請用紙ページにPDFファイルで公開しています。

http://www.hucc.hokudai.ac.jp/kyodo/sinseisyo/shinsei_yoshi.html

応募のあった課題は、ライブラリ・データベース専門委員会の審査を経て、承認の可否を開発代表者にお知らせします。開発が終了したときは、所定の開発報告書を提出していただきます。ライブラリは平成25年1月31日が提出期限です。開発期間内に終了しない場合、開発状況報告書を提出し、必要があれば継続申請をしてください。



Q アプリケーションサーバにあるアプリケーションを利用するために、「ブラウザからアプリケーションサーバの利用」(<https://malt1.hucc.hokudai.ac.jp/portal/pages/portal/login.htm>)で「アプリケーション利用」タブの「Xエミュレート」を選択したところ「Xエミュレートの起動が失敗しました。」のメッセージが出力されて、利用することができません。malt1、malt2で利用可能な他のアプリケーション名を選択しても同様のエラーが出力されます。



A 【原因】
ファイル容量に余裕がない場合、Xエミュレート起動時に必要な環境設定ファイルを作成することができません。この場合、「Xエミュレートの起動が失敗しました。」とエラーが出力され、Xエミュレータが起動されません。ファイル容量の初期値は100GBです。

【対策】
環境設定ファイルを作成できるように、ファイルの空き容量を増加してください。そのために、既存のファイルを削除する、または、アプリケーションサーバ用のファイル付加サービス (A1コース) を申請してください。

ファイル容量を確認する場合、**quota**コマンドを使用します。総容量は、**実際の使用量**、**上限値**、**ハード的な上限値**がKB単位で表示されます。

`$ quota -g 利用者番号 <Enter>`

```
Disk quotas for group 利用者番号(gid ***):
Filesystem blocks quota limit grace files quota limit grace
/mnt/ap_webdav_home/cfs2_2/sch2_2/ap_webdav/home
4857700 104857600 110100480 12 0 0
```

Q 「ブラウザからアプリケーションサーバの利用」(<https://malt1.hucc.hokudai.ac.jp/portal/pages/portal/login.htm>)で、「アプリケーション利用」タブのアプリケーション名が書かれたボタンをクリックし、アプリケーションを起動しようとしたところ、アプリケーションが起動しません。

A ご使用のWebブラウザに関して、ポップアップウィンドウをブロックする設定になっていないかを確認してください。ポップアップウィンドウのブロック設定を解除してください。

さらに、アプリケーションが起動しない場合、Javaアプレットの起動に失敗している可能性があります。Javaのバージョン確認ページ (<http://www.java.com/ja/download/installed.jsp>) で**確認ボタン**をクリックしてください。ご使用のWebブラウザでJavaアプレットが正常に動作する場合、Javaのバージョンが表示されます。

正常に動作しない場合、ご使用のWebブラウザに対応したバージョンのJavaをインストールするよう促されますので、その指示に従ってJavaをインストールしてください。Webブラウザ再起動後、改めてアプリケーションが起動するかをご確認ください。

Q アプリケーションを利用するため、アプリケーションサーバにログインしたところ、旧システムで利用していたファイルがなくなっていました。システム更新時に消されてしまったのでしょうか？

A 旧システムでは、スパコンとアプリケーションサーバはディスクを共有し、ユーザディレクトリは同一でした。一方、新システムでは、スパコンとアプリケーションサーバは異なるファイルシステムを使用しています。

ただし、旧システムに保存されていたユーザファイルはスパコンのファイルシステムに移行されています。ファイルの転送については、ユーザご自身で行ってください。ファイル転送方法については、下記のファイルをご参照ください。
http://www.hucc.hokudai.ac.jp/pdf/SC-APS_FT.pdf

Q 情報基盤センター北館のホームページ上 (<http://www.hucc.hokudai.ac.jp/>) の「ソフトウェア」にある「HITACHI SR16000入門」をクリックするとユーザ名とパスワードを入力するダイアログが表示されますが、どのIDを使用するのでしょうか？

A 本センターの利用者番号とパスワード (スパコンまたはアプリケーションサーバを利用するためのアカウント) を入力してください。なお、本資料は本センター大型計算機システム利用者の方に公開を限定しています。また、本資料は下記のページに移動しました。
<http://www.hucc.hokudai.ac.jp/~a10019/kosyu/kosyu90.html>

Q C言語でプログラムを書いており、`fprintf(FILE,"a\n"); fflush(FILE)`という命令で、ファイルに計算結果を出力させています。研究室の計算機で実行したときは、随時計算結果を見ることができます。しかし、同様のプログラムをスーパーコンピュータのバッチノードで実行すると、プログラムが**fclose(FILE)**を実行するまではファイルサイズが0バイトのままになっており、計算結果がファイルに出力されません。計算時間削減のために、ファイルへの出力は最後に行うような仕様になっているのでしょうか？また、途中経過を見るにはどうすればいいのでしょうか？

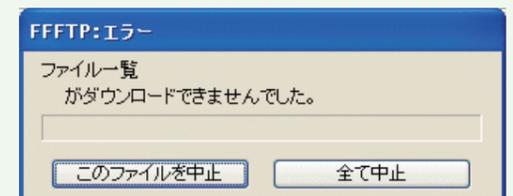
A バッチノードにおけるファイル出力の書込遅延は、本センタースパコン HITACHI SR16000モデル M1で採用しているファイルシステムHSFSの仕様に起因しています。HSFSは、キャッシュを利用したファイルシステムです。データを書き込んだノード(プログラム実行ノード)のキャッシュがフラッシュされて、IOサーバにデータが送信されるまでタイムラグが生じます。

また、プログラム実行ノードと異なるTSSノードからは、キャッシュに書き込まれるデータを認識できません。そのため、TSSノード上でコマンド**ls**を実行しても、実行プログラムの出力処理が終了するまでファイル容量の正確な数値を得ることはできません。

ただし、HSFSの仕様により多少のタイムラグはありますが、実際にはファイルにデータが書き込まれているので、計算結果の途中経過を確認することは可能です。下記のコマンドを実行することで、ファイルに出力された計算結果の経過を確認できます。

`% tail -f 出力ファイル名 <Enter>`

Q 新しいパソコンからフリーソフトウェアFFFTPを利用してホームページサービス (Webサーバrose.hucc.hokudai.ac.jp) に接続したところ、「FFFTP:エラー ファイル一覧がダウンロードできませんでした。」とメッセージが出力され、接続することができません。



A FFFTPは、「**ホストの設定**」にある「**PASVモードを使う**」項目にチェックが付いていると、上記のエラーメッセージが出力され、サーバに接続できません。PASVモードにチェックがついている場合、そのチェックを外してください。FFFTPを新規に利用する場合、PASVモードがONになっていますのでご注意ください。

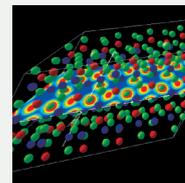


●メールマガジン講読のご案内

本センター学際大規模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://mmag.hucc.hokudai.ac.jp/mailman/listinfo/mmag>



●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	学際大規模計算機システム利用のための登録・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	さまざまな学際大規模計算機システム情報の速報 http://mmag.hucc.hokudai.ac.jp/mailman/listinfo/mmag
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

本号においては、スパコンの活用を核とした道内4高専における地元企業との産学連携への取り組みと研究成果についてご紹介しました。研究者一人ひとりの地道な努力とグラスルーツ的な活動が、スパコン等の大型計算機システムの利用で大きな力を得て、単独では成し遂げることができないであろう発展と成果に結びつくものと信じています。

●次号の特集予告

ナノメータの世界の不思議が計算機シミュレーションによってどのように解明されるのか。センター共同研究で実施されている高分子複合材料の構造解析に関する計算機シミュレーションについて、千歳科学技術大学 寺本先生にお話を伺います。

●本誌へのご意見をお聞かせください。

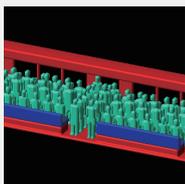
連絡先 : kyodo@oicte.hokudai.ac.jp

北海道大学情報環境推進本部情報推進課共同利用・共同研究担当

TEL 011-706-2956 FAX 011-706-3460

iiC-HPCニュースは本センターホームページ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25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	● 農学研究院	谷 宏
● 情報基盤センター	大 宮 学	● 工学研究院	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	● 情報環境推進本部情報推進課	上 窪 功
● 理学研究院	石 渡 正 樹	● 情報環境推進本部情報推進課	折 野 神 恵

2012年3月発行

印刷：株式会社 正文舎 TEL011-811-7151

