

## スーパーコンピュータをしよう (1)

石 井 克 哉

## I. はじめに

現在、名古屋大学情報連携基盤センターには、2005年から稼働している全国共同利用のスーパーコンピュータ FUJITSU HPC2500 があります。この計算機は、学術的な研究で利用したいと思う人が申請書を出し、利用負担金を負担すれば、利用資格のある人は誰でも使うことができます。利用負担金はおおむねコンピュータを使うための電気使用料と考えてかまいません。その額は、ある程度まとまった大きなメモリを使った長時間の計算を行うとすると、研究室で、エアコンをつけて多量のメモリを載せたパソコン(PC)を使う費用とほぼ同じといってよいでしょう。(電気代は、計算機のCPUの速度、内蔵メモリの量、エアコンの冷却性能に依存しています。)

実は、スーパーコンピュータと呼ぶコンピュータが何かというのは、はっきりした定義はありません。最初に、多くの人が使った「スーパーコンピュータ」は1964年クレイが作ったCDC6600という計算機です。この計算機は、高速科学技術計算を実行するために設計開発され、当時の他の計算機に比べ約3-10倍の計算性能を実現したため、スーパーコンピュータと呼ばれました。しかし、この計算機では、高速な浮動小数点演算を行うため、それに特化したハードウェアと少数の命令のソフトウェアで動くように作られていました。この種類の計算機は、計算機産業にとっては経済的にはニッチな規模でしかありませんが、世界中の研究機関を中心に使われ、日本とアメリカの開発競争を起し、現在に至っています。このため、主に計算性能が、スーパーコンピュータでは問題になっています。

計算機の進歩は速く、十数年くらい前のスーパーコンピュータと、現在多くの研究室にある計算機とは、ほぼ同じ能力を持つとよく言われます。しかし、本センターではスーパーコンピュータを中心に、科学技術計算の実行とその結果の処理に特化した環境を作っています。一方、研究室でPCの性能を引き出すため計算を行い、その結果の処理を行うには、誰かがその環境を作る手間暇を覚悟しなければなりません。また、多くの現実の問題を扱おうとすると、例えば三次元で時間的に変化する問題を扱わなければなりません。このため、真面目に計算で研究を行おうとすると膨大な計算や労力が必要です。研究としては、簡単なモデル化を探求する、あるいは、少し複雑なモデル化を行うのかの選択がありますが、後者の選択をできるのは、スーパーコンピュータで計算を行うことだといえます。

スーパーコンピュータを、気軽により多くの人に使っていただくため、これから数回にわたって、本センターのスーパーコンピュータの使い方について紹介をしたいと思います。

## II. スーパーコンピュータの概要

現在、本センターに設置されているスーパーコンピュータ FUJITSU HPC2500 は 24 ノードあります。このうち、1 ノードをアプリケーション・サーバとして調達し、さまざまなアプリケーション・ソフトウェアをインストールしています。このノードだけが、利用者が login コマンドで TSS として利用でき、他の 23 ノードに nqs ソフトを用いて大きな計算 job を分配する投入窓口となっています。

ノードというのは、1 筐体の中に入った複数の CPU と複数のメモリが結合されたもので、各 CPU は PC と同じようにノード内のすべてのメモリにアクセスすることができます。つまり、共有メモリ並列計算機になっています。

センターの HPC2500 は、アプリケーション・サーバのノードと他の 1 ノードの合計 2 ノードが 128CPU を持ち、他の 22 ノードは 64CPU を持っています。各 CPU は富士通の SPARC64V でマシンサイクルは 2.08GHz です。最大 4 命令が同時実行可能であり、理論最大性能は約 8Gflops です。HPC 全体では 1664CPU であり、総合理論最大性能は 13TFlops です。

また、どのノードも、512GB のメモリを持っています。しかし、512GB の中から JOB 制御などにも使う必要があるため現実には約 500GB 弱くらいです。これは、普通の PC の 100 倍程度のメモリに対応しています。また、すべてのノードは高速クロスバー・ネットワーク (4GB/秒) で結合されていますので、あるノードから他のノードへ直接高速にアクセスすることができます。このため、複数ノードを使って大規模な分散並列計算がやりやすくなっています。

なお、128CPU を持つノードには 50TB ずつ、計 100TB の磁気ディスクが付いています。

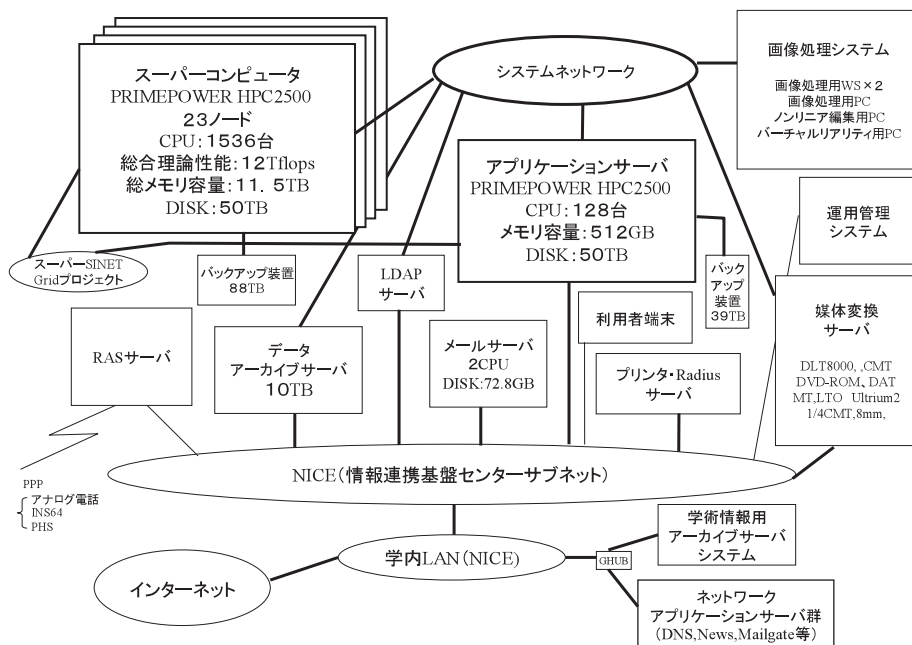


図 1 システム構成図

図1にシステム構成図を示しました。スーパーコンピュータは左上と、中央部のアプリケーション・サーバであらわしています。これらの計算を実行する計算機と同時に、センターには、計算結果の処理をサポートするための画像処理システム(図1右上)があります。これらは、複数のディスプレイをつなげて、4画面や2画面、あるいは立体画像を作るためのSGIの2台の画像処理ワークステーション、ノンリニア編集用PC、バーチャルリアルティ用PCがあり、A0のプリンタが用意されています。これらは、センター1階西側の端末室で、利用者が自由に操作できますが、利用者の要望により、その利用を技官がサポートをしています。また、図左中央にあるように、オープンリールの磁気テープからDTLのカートリッジの読み取り装置が媒体変換サーバとして端末室にはおいてあります。センターでは各種ソフトウェアの講習会を利用者、非利用者を問わず十数回開催していますが、端末室の12台の端末が、その折に使用されています。

また、出力された大きなデータを保存しておくための装置として、読み出しは遅いですが10TBのデータアーカイブサーバ(図1中央左)を持っています。

### Ⅲ. 利用申請方法

センターを利用するには、「名古屋大学情報連携基盤センター全国共同利用システム利用申請書」を提出してください。ただし、申請に当たっては、利用負担金を負担する支払責任者、経理責任者を記入する必要があるので、承認を得てください。また、教員以外の申請者の方は、指導教官の承認を取ってください。申請用紙は、センターの4階事務受付、あるいは

<http://www2.itc.nagoya-u.ac.jp/riyou/sinsei.htm>

から得ることができます。所定の箇所に捺印のうえ、センターの事務受付共同利用掛に、直接申請するか、または郵送ください。利用資格についても上記ホームページを見てください。また、利用資格などに該当するかよく分からない場合には、センターの事務受付共同利用掛に問い合わせてください。

センターは全国共同利用施設として、運営経費の一部は、名古屋大学から予算措置がなされていますが、スーパーコンピュータの24時間運転を維持し、利用者の利益に還元されるべき経費として、利用負担金を利用者に負担していただいています。まず、基本負担金として、利用登録1件につき年10,000円を負担いただきます。これにより、演算負担経費、出力負担経費及びファイル使用負担経費の総額が20,000円に達するまで、利用が可能となります。また、10月以降に利用登録する場合には半額となります。大規模な計算を行うには、追加負担金を払ってください。ただし、追加負担金の額によって、最大5倍まで大型計算をしようとする利用者を優遇しています。そのほか、計算機の演算負担金の計算方法などは

<http://www2.itc.nagoya-u.ac.jp/riyou/futankin.htm>

を参照ください。また、よく分からないところがありましたら、センターの共同利用掛まで問い合わせてください。また、追加負担金の申請用紙は

<http://www2.itc.nagoya-u.ac.jp/riyou/teigku.pdf>

にあります。

#### IV. HPC システムで利用できるソフトウェア

HPC2500 のシステムは Solaris9 の OS と Parallelnavi と呼ばれるソフトによるプログラム開発実行環境で動いています。自分でプログラムを作るときは、これらのシステムの支援を得て最適化を行うこととなります。しかし、本センターのコンピュータを使用する人は、自前でプログラムを書く人だけではありません。このため、センターでは、多くの人が使用するソフトを揃えるようにしています。まず、アプリケーションサーバには、文科系の利用者向けのソフトウェア、一研究室で買い揃えるには高額なソフトウェア、job 投入前後のファイル変換や可視化などのソフトウェアを、主に揃えています。このため、アプリケーションサーバに使用が限定されている多くのソフトウェアは、インタラクティブに使用するアプリケーションパッケージです。アプリケーションサーバでのみ使用できるソフトウェアの一覧を表 1 に示します。

表 1 アプリケーションサーバだけで使用できるソフトウェア

SAS (BaseSAS, SAS/STAT, SAS/GRAPH, SAS/Genetics)
MATLAB (matrix laboratory)
Maple (数式処理システム)
Mathematica (数式処理システム)
IDL (Interactive Data Language)
I-DEAS (総合設計支援システム)
ICEM CFD (汎用メッシュ生成／可視化統合システム)
CADfix (データ検証・修正ツール)
ATLAS (日英・英日翻訳システム)
fastDNAm1 (最尤法による進化系統樹推定プログラム)
MOLPRO (分子軌道計算プログラム)*
MOPAC (半経験的分子軌道法プログラム)*
$\alpha$ -FLOW のプリ／ポストプロセッサ
STAR-CD のプリ／ポストプロセッサ
Material Explorer のプリ／ポストプロセッサ

\* 印のアプリケーションは、並列版が用意されている。

表 2 には、すべてのノードあるいは複数のノードをまたがって利用できるプログラム開発用のソフトウェアとアプリケーションソフトウェアの一覧を示しています。これらの中で、アプリケーションソフトは表 2 の\*印でわかるように、ほとんどが並列化に対応しています。このため、複数の CPU を使うことにより、PC で実行させるより高速に job の実行が可能となっています。

これらのソフトウェアのアップデートや、フリーソフトなど利用者の要望のあるソフトの導入

の相談にも乗っています。詳しくは

[http://www2.itc.nagoya-u.ac.jp/sys\\_riyou/hpc/index.htm](http://www2.itc.nagoya-u.ac.jp/sys_riyou/hpc/index.htm)

を参照ください。

表2 hpc システムのソフトウェア一覧

種類	ソフトウェア名
プログラミング言語	Fortran (JIS X3001-1:1998 準拠)
	C (ISO/IEC 9899:1999 準拠)
	C++ (ISO/IEC 14882:1998 準拠)
	Java
並列処理言語	XPFortran
	OpenMP (Fortran ver. 2.0, C/C++ ver. 2.0)
数値計算ライブラリ	SSL II (科学用サブルーチンライブラリ)
	並列版 SSL II (科学用サブルーチンライブラリ)
	C-SSL II (科学用サブルーチンライブラリ)
	NUMPAC (数値計算ライブラリ)
	BLAS (線形計算ライブラリ)
	LAPACK (線形計算ライブラリ)
ScaLAPAC (MPI 並列処理向き線形計算ライブラリ)	
メッセージパッシング ライブラリ	MPI (MPI2.0 仕様準拠)
アプリケーション	$\alpha$ - FLOW (汎用 3 次元流体解析システム)*
	STAR-CD (非構造格子汎用熱流体解析ソフトウェア)*
	LS-DYNA3D (非線形動的構造解析ソフトウェア)*
	Material Explorer (材料設計システム)*
	Gaussian (分子軌道計算プログラム)*
	AMBER (分子構造計算プログラム)*
	VisLink (リアルタイム可視化ソフトウェア)
	AVS/Express Developer (対話型 3 次元ビジュアライゼーションシステム)
	AVS 並列版*
	eta/FEMB (Finite Element Model Builder)

\* 印のアプリケーションは、並列版が用意されている。

(いしい かつや：名古屋大学情報連携基盤センター)