

スーパーコンピュータを使おう (4)

津 田 知 子

I. はじめに

前回までの解説で、本センターのスーパーコンピュータがどのような特徴を持つマシンで、どのようにしたら使えるのか、そして、そのマシンの性能を最大限に発揮するための並列プログラミングに関する情報など、スーパーコンピュータ利用の概略についてお知り頂けたことと思います。今回は、スーパーコンピュータの利用促進のために本センターが行っているプロジェクトを紹介いたします。

II. スーパーコンピュータに関するプロジェクトの紹介

本センターが行っているスーパーコンピュータに関するプロジェクトには、以下の4つがあります。

- ◇お試し計算可能な個別講習プログラム
- ◇ライブラリ・プログラム開発課題
- ◇スパコンの高度利用研究会
- ◇グリッド研究推進実験プロジェクト

本センターの HP (<http://www2.itc.nagoya-u.ac.jp/center/index.html>) からこれらプロジェクトの概要を知ることができますが、本稿でも簡単に紹介します。なお、これらのプロジェクトへの応募や申込みは、上記の HP のアドレスから行うことができます。

【お試し計算可能な個別講習プログラム】

これは、「スーパーコンピュータを使って計算したいのだけれど、手持ちのプログラムがスーパーコンピュータで翻訳・実行できるのだろうか?」「プログラムを並列化して高速化したいのだけれど、並列化のやり方がわからない。」などの理由でスーパーコンピュータの利用を躊躇している方のための試用可能な無料の教育プログラムです。スーパーコンピュータ利用のハードルを少しでも低くする目的で始まったプロジェクトです。利用期間は原則として2週間としていますが、場合によっては延長も可能です。利用可能 CPU 時間は、プログラムの特性によりセンター側でその上限を設定していますが、予測違いやトラブルなどで設定された CPU 時間を超えた場合にも、個別講習の目的を達するまで利用することができます。この個別講習では、プログラムの走らせ方などの初歩的なことからプログラムのチューニングまでお手伝いしています。利用時期については、ほとんどの場合希望した時点で試用可能ですが、個別対応のため場合によっては、センター側と相談して決めることもあります。なお、講習終了後には、この利用に関する報告書

の提出が必要です。報告書には、以下の項目について A4 用紙 2, 3 枚程度にまとめたものをお願いしています。

- ・研究題目, 内容
- ・スーパーコンピュータ利用によって得られる研究成果
- ・スーパーコンピュータの性能についての評価, 感想
- ・今後のスーパーコンピュータの利用予定

なお、この個別講習とは別に本センターの利用者のための講習会も行っています。今年度に計画されている講習会を表 1 に掲げておきます。それぞれの講習会の実施日時、内容などの詳細については「速報」でお知らせしています。

【ライブラリ・プログラム開発課題】

スーパーコンピュータ上で多くの利用者に共通に利用されるプログラムに対して、そのプログラムの開発に係わる計算機利用の経費をセンター側が負担する制度です。対象となるプログラムは、学術研究の発展に寄与するもので多数の利用者に共通に利用されるものであり、応募資格はセンターの利用者に限られます。

【スパコンの高度利用研究会】

21 世紀 COE「計算科学フロンティア」は、コンピュータの高度利用に基づく科学技術の革新を目指し、有能で積極的な若手研究者・技術者を育成しつつ、広く社会に貢献しようとしています。スパコンの高度利用研究会は、計算科学フロンティアと本センターとの共同で一般社会人の方にもスーパーコンピュータを使っていただく産学官連携・社会人向け COE 公開事業として発足しました。一般企業の技術者、国公立研究所・行政等の研究者などでスーパーコンピュータに関心のある方ならどなたでも参加できます。使い方などの相談は、COE の若手メンバー等がわかりやすく指導します。

また、これとは別にスーパーコンピュータの民間企業への提供については、19 年度から文部科学省の「先端研究施設供用イノベーション創出事業」の「産業戦略利用」プログラムとして採択された「先端の大規模計算シミュレーションプログラム利用サービス」が始まっています。これは、全国共同利用施設であるスーパーコンピュータを有する 7 大学（北海道大学、東北大学、東京大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学）が社会貢献の一環として、各大学が開発した应用ソフトウェアと各大学が所有するスーパーコンピュータをそれらの利用支援サービスと一体化して民間企業に提供し、イノベーションの創出を支援するもので、本センターも参画しています。詳細については、<http://kyoyo.itc.u-tokyo.ac.jp/> を参照してください。

【グリッド研究推進実験プロジェクト】

グリッドコンピューティングは、計算機、ストレージ、観測装置や計測装置などの地理的に分散したさまざまな資源をネットワークに接続することにより、これらの資源の所在を意識することなく、仮想的に統一された利用環境を提供するもので、動的で柔軟な資源活用が可能になることにより演算処理能力を高めたり、観測装置や実験装置から得られる膨大なデータを共有したりすることが期待されています。このプロジェクトは、グリッドコンピューティングの研究推進実

表 1 平成 20 年度講習会計画

月	講習会名	内容
5	並列プログラミング講習会	hpc システム (スーパーコンピュータ及びアプリケーションサーバ) でのスカラチューニングの方法と並列プログラミング (自動並列化, OpenMP)
5	Mathematica 利用講習会 (初心者向け)	数式処理システム Mathematica の利用方法
5	MATLAB 利用講習会 (初心者向け)	MATLAB (matrix laboratory) の利用方法
6	MPI 講習会	MPI (Message-Passing Interface) による並列プログラミング入門
6	Gaussian 講習会 (初心者向け)	分子軌道法プログラム Gaussian の利用入門
6	α -FLOW 利用講習会	汎用 3 次元流体解析システム FUJITSU/ α -FLOW の利用方法
6	I-DEAS 利用講習会	総合設計支援システム I-DEAS の利用方法
6	LS-DYNA & eta/VPG 利用講習会	非線形動的構造解析プログラム LS-DYNA の利用方法
7	STAR-CD & CADfix 利用講習会	非構造格子・汎用熱流体解析プログラム STAR-CD の利用方法
7	ICEM CFD 利用講習会	汎用メッシュ生成・可視化統合システム ICEM CFD の利用方法
9	IDL 利用講習会	可視化ソフトウェア IDL (Interactive Data Language) の利用方法
9	AVS/VisLink 利用講習会	AVS/VisLink の利用方法 (基本的な操作の実習および可視化の演習)
9	可視化講習会	センターの画像処理システムを利用した可視化の講習 (立体視, コンテンツ生成)
10	並列プログラミング講習会 (第 2 回)	hpc システムでのスカラチューニングの方法と並列プログラミング (自動並列化, OpenMP)
10	MOPAC 利用講習会	半経験的分子起動法プログラム MOPAC の利用方法
10	Material Explorer 利用講習会	分子動力学ソフトウェア Material Explorer の利用方法
10	MPI 講習会 (第 2 回)	MPI (Message-Passing Interface) による並列プログラミング入門

験を行うためのものです。現在本センターでは、NAREGI (National Research Grid Initiative) で開発された NAREGI グリッドミドルウェアによる実証実験を行っています。本センターの利用者で、この実験に興味ある方の参加を募集しています。NAREGI については、参考文献 [4] を、本センターの NAREGI グリッドミドルウェアに対する取り組みについては、参考文献 [5] を参照してください。

また、プロジェクトではありませんが、大学院等の講義でスーパーコンピュータを利用した

いという先生方のために、リテラシー ID と称して半期単位で利用できる複数の ID の発行も行っていきます。リテラシー ID の詳細については、<http://www2.itc.nagoya-u.ac.jp/center/index.html> を参照してください。

Ⅲ. 【お試し計算可能な個別講習プログラム】あれこれ

【お試し計算可能な個別講習プログラム】とは一体どのようなものなのかをお分かり頂くために、ここ数年に申し込みのあった内容を大まかにご紹介しましょう。お試し計算の内容としては、“アプリケーションの利用”に関するものと“プログラムの実行、性能”に関するものが半々です。アプリケーションの利用に関するお試し計算は、本センターで利用可能な AMBER, Gaussian, Mathematica, SAS などのアプリケーションについて手持ちのデータが解析可能かどうか確かめたいというものや本センターには移植されていないアプリケーションを使いたいというものでした。前者のアプリケーションのうち AMBER や Gaussian では、並列版も用意されています。特に、Gaussian では、大量のメモリを必要とする計算や高精度が要求される計算では、スーパーコンピュータ利用の効果があつたとの報告が寄せられています。後者については、スーパーコンピュータへのアプリケーションの移植から始まり、それぞれのユーザの環境で利用できるようにサポートしています。DOCK (Docking analysis of carbohydrate interaction) や PAUP (分子系統解析ソフト) などのアプリケーションがそれでした。特に、PAUP では、パソコンで 1 ヶ月程掛かる計算が 10 数時間で終わるということで、スーパーコンピュータ利用の有効性が確認できたとの報告を頂きました。しかし、中には並列化の利用環境が整わなくてスーパーコンピュータへの移植がうまくいかず、利用を断念したアプリケーションもありました。

一方、“プログラムの実行、性能”に関するお試し計算では、スーパーコンピュータでのプログラムの並列効果が確認できた場合には、講習終了後そのほとんどの方が、利用申請を行いスーパーコンピュータの利用者になっています。残念ながらお試し計算の結果、利用の開始に至らなかった方々の主な理由は、

- ・自動並列化機能により並列化したが、並列効果が不十分であった。並列化コードを書く必要を感じた。
- ・計算結果が過去に行った他のマシンの結果と一致しなかった。結果の継続性を優先するためスーパーコンピュータの利用はしない。
- ・並列化をしていないので計算時間が余り改善されなかった。
- ・並列化により性能は 10 倍程度になったが、利用負担金が高い。

などでした。これらの状況から、プログラムに関してはそのプログラムが並列化できるかどうか、スーパーコンピュータ利用の大きな鍵となっているようです。

また、お試し計算で得られた性能だけでは満足できず並列性能を追求するために、プログラムのチューニングをメーカーのチューニングサポート部隊に依頼し、OpenMP による並列化により 8CPU で 6.43 倍の性能向上が図られたプログラムもありました。

IV. おわりに

スーパーコンピュータ利用拡大のために本センターが取り組んでいるいくつかのプロジェクトを簡単に紹介してきました。特に，“お試し計算”のプロジェクトは，取っつき難いスーパーコンピュータ利用の第一歩になるのではと思われます。スーパーコンピュータ利用の窓口として気軽に参加してみてください。

参考文献

- [1] 石井克哉：“スーパーコンピュータを使おう（1）”名古屋大学情報連携基盤センターニュース， Vol. 6, No. 3, 263-267 (2007)
- [2] 永井亨：“スーパーコンピュータを使おう（2）”名古屋大学情報連携基盤センターニュース， Vol. 6, No. 4, 355-360 (2007)
- [3] 平野靖：“スーパーコンピュータを使おう（3）”名古屋大学情報連携基盤センターニュース， Vol. 7, No. 1, 42-50 (2008)
- [4] <http://www.naregi.org/>
- [5] 津田知子，石井克哉：“名大情報連携基盤センターにおけるグリッドの取組みについて（その3）”名古屋大学情報連携基盤センターニュース， Vol. 6, No. 3, 268-273 (2007)

(つだ ともこ：名古屋大学情報連携基盤センター)