

Title	情報ネットワークと計算センター
Author(s)	日置, 慎治
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1997, 103, p. 106-109
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/66199
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

情報ネットワークと計算センター

広島大学理学部物理学科

日置慎治

1 はじめに

現代は情報ネットワーク時代と言われる。我々のいる大学を例にとってみても、現在の環境は10年前とは雲泥の差だ。国際会議出席連絡のため、阪大基礎工に1台あったTelexに向かってせっせとイタリアにメッセージを打った事が旧き良き時代のように懐かしく思い出される。今は部屋まで引き込まれた学内LANのおかげで、目の前の端末1台で、電子メールによる連絡から、ワープロ作業まで、また、海外の研究者とのテレビ会議や電話線を繋げばFAX送受信までもが可能となっている。まったく、ネットワーク様様である。

一方計算センター利用環境はどうであろうか？ネットワークの充実によって、上述した程の恩恵を受けているだろうか？当時（約10年前）私が在籍した基礎工学部数理教室には大型計算機センターからの専用線が来ており、たしか2400bpsながらフルスクリーンエディタを使ったセンター計算機利用が可能であった。また、N1ネットワークを利用した、他大型計算センター利用も一般的に行なわれていたように思う。この様に考えると、インターネットの成長に代表される昨今の情報ネットワークの充実による恩恵は、計算センター利用環境にはそれ程及んでいないかのようにみえる。我々計算センターユーザーはこの状況に満足して良いのだろうか？

もちろん、センターと端末間の通信速度は格段に速くなったし、センターの計算パワーも数段上がった事は確かであり、これらは当然満足されるべき内容だろう。しかしながら私は、我々はもっと情報ネットワークの充実による恩恵を受けるべきであると思う。そのためには現状にただ満足するだけでは駄目で、多少の努力が必要かも知れないが、その結果得るものは非常に大きいと考える。

この稿では、私が実践しているセンター利用法を1例としてとりあげながら、情報ネットワーク時代における計算センター利用方法について考えて見たいと思う。

2 計算センター利用の目的と現状

皆さんの計算センター利用の目的は何ですか？これに対する答えは様々でしょうが、私はセンターの「計算パワー」を利用するためにセンターのユーザーになりました。おそらく、私と同じ目的のユーザーは多数おられる事でしょう。阪大には大型計算機センターがあるわけですから、この「大型」に惹かれてセンターを利用しているわけです。

さて、皆さんはこの「大型」に現在満足していますか？例えば、「演算速度」は十分に足りていますか？「主記憶容量（メモリ）」は十分ですか？これらに対する答えも様々でしょう。私は「否」です。おそらく、私と同じ意見のユーザーも多いと思います。なぜな

ら昔から N1 ネットワークを利用した他センター利用の必要性があったことから分かるように、1箇所のセンター利用だけでは要求が満たされない「大型計算」が現在も存在していると思われるからです。

私を含めた「大型計算」ユーザーは、例えば ACOS 上の \$APPLY コマンドを利用してオンラインで他大型センターの利用申請をしたり、オンラインでできないセンターへは通常の郵便による申請などを行ない、アカウントを取得して必要な計算量を確保しているわけです。アカウント取得後は、使用する計算機で直接プログラムを開発したり、手元のパソコンやワークステーションである程度編集等を行なってから FTP で目的の計算機にファイル転送し、コンパイル・実行するわけです。

ところで、皆さんは複数の計算センターで同じ計算を（例えば、パラメータだけが違うような場合に）行なう場合に、計算センターの数だけ異なったプログラムを用いていませんか？「マシン毎にアセンブラでプログラムを書くわけではあるまいし、FORTRAN や C を使っているから、プログラムは当然 1 つだよ」と答えられるかもしれませんが、本当にそうですか？

現在の計算センターの現状を見てみると、ほとんどの所で「並列計算機」が導入されています。実は、この「並列」部分が今までの FORTRAN や C などの高級言語の範囲を越えており、「並列計算機メーカー」が独自の機能拡張として計算機に実装している場合がほとんどなのです。私の周りの「大型計算」ユーザーを見ても、使う計算機に併せて別々のプログラムを使っている人が多くみられます。「プログラムを一旦作成してしまえば、後は特に困らないのでは？」と思われるかもしれませんが、どこか 1 箇所でも変更しようとする、複数のプログラムに対して、同じ変更を行なう事になり、プログラム間の整合性がとれなくなったり、どこかでミスをする可能性が増えたりするわけです。

情報ネットワークが発達し、通信速度が上がり、遠くの計算センターでも近くにあるかのごとく利用できるにもかかわらず、この「計算機の多様性」は一面、「プログラムの移植性・可搬性」を大きく損なっているのが現状です。これでは全然ユーザーにとって、使いやすいシステムとはいえず、ベクトル計算機時代に比べて、負担はむしろ増えたともいえるかもしれません。

3 MPI 利用によるプログラムの統一

我々はこのような現状に我慢しなければならないのだろうか？少し前までなら、残念ながらその通りだった。しかしながら最近、並列計算における通信部分の標準化の動きが活発になり、その結果、いくつかの標準仕様が提案され、またその仕様に従った実装が利用可能になってきた。ここでは、その中でも特に今後の主流の 1 つになると思われる MPI(Message Passing Interface Standard) の利用について述べたい。

簡単に言うと、MPI は並列化に伴う通信部分の標準ライブラリである。我々プログラム作成者は、通信以外の部分を FORTRAN や C で書き、通信部分を MPI 関数を呼び出す形式で使用する。

特筆すべきは、MPI をサポートしている計算機の圧倒的な数の多さであろう。現在の並列計算機のかなりの数のものが MPI をサポートしているし、将来の計算機でサポートを明らかにしているものも少なくない。例えば、阪大センターの新機種である NEC SX-4 では MPI が標準ライブラリになっているし、東大センターの HITACHI SR2201、富士通 AP1000, AP1000+, AP3000、NEC Cenju、Cray J90 などにおいても利用可能である。加えて注目すべきは、ネットワークで繋がったワークステーションクラスタでも MPI は利用可能であるし、1 台のワークステーションを仮想的な並列計算機とみなして、MPI で並列計算のプログラミング、デバッグ、実行が可能である。今まで、並列計算機毎に異なっているのが普通であった通信部分の統一が MPI によって可能になるのである。

したがって容易に想像できることであるが、一旦 MPI でプログラムを書いておくといくつかの利点がある。まず第 1 に、プログラムの変更は 1 箇所済む。複数の計算機を意識する必要がない。次に、現在の計算機で十分な性能が得られない場合（あるいは、学会前などで急に普段の計算機が使えなくなった場合にも）、他の計算センターのアカウントを取得したら直ちに計算を実行することが可能となる。第 3 に、様々な環境で同じプログラムを実行する事が可能なため、各計算機の性質を深く知る事ができる。（例えば、計算は速いが、通信は遅いなど）これは、ひいては使用するアルゴリズムの選択を左右する有用な情報となることがある。

4 私の 1 例

私は現在、素粒子“クオーク”の力学を記述する量子色力学を研究している。この力学では、結合定数が大きいために、通常有効である摂動論（結合定数が小さいとして、物理量をこれの中で展開して解析する手法：電子の力学である量子電磁力学では非常に有効な手段として知られている）が役に立たず、現在最も有効な方法が、理論を格子状に定義して、物理量を計算機で数値的に求める「格子色力学モンテカルロ計算」である。

この計算には、巨大なメモリと膨大な計算量が要求されるため、私は現在、利用可能な計算機すべてを動員して解析に当たっている。使用している計算機としては、ワークステーション、そしてそのクラスタ、ベクトル型スーパーコンピュータ、スカラー並列型コンピュータ、ベクトル並列型コンピュータ、と広範囲に渡っている。

私は、MPI を使う事により、すべての並列計算機上で共通に利用できるプログラムを開発した。また、ワークステーションやベクトル計算機単体で計算をする必要があるため、並列度 = 1 の場合にも適用できるようにプログラムを拡張した。従って、現在私が使うすべての計算機上で動いているプログラムは厳密に 1 つである。

私は、自分のパソコンに Linux という PC-UNIX をインストールして使っている。ここでは MPI の実装の 1 つである MPICH が利用できるため、プログラム開発とテスト実行はすべてこのパソコンで行なっている。デバッグも終え、実際の実行の時になってから、各計算機センターへプログラムを転送し、コンパイル・実行を行なう。そして、結果をネットワーク経由で自分のパソコンに集めて解析する。

こうすることにより、私の計算環境があたかも、それぞれの計算センターが1つのプロセッサに対応し、中央に指令を出す私のパソコンがあり、そして、それらを結ぶ高速の「情報ネットワーク」があるという状況から、仮想的な巨大並列計算機のように感じられているわけである。

並列計算機においては、プロセッサ間のネットワーク速度は重要な要素であるが、この意味でも、現在の情報ネットワークの充実は、この「仮想巨大並列計算機」にとって必須の要素となっているわけである。

5 まとめ

冒頭で「情報ネットワーク」の充実が、「計算センター」利用に対して、あまり恩恵を与えていないのではないかと疑問をなげかけた。しかし、MPIによるプログラミングの統一化と複数の計算センターをあたかも仮想的な1つの巨大計算処理環境とすることにより、実は「情報ネットワーク」を最大限に利用した「計算センター」利用が可能である事を述べてきた。

最後に MPI によるプログラムの統一の利点について、私なりにまとめておく。皆さんの参考になれば幸いである。

- プラットフォームに依存しないプログラム
つまり、常に1つのプログラムを管理しておけばよい
- 新しい計算環境でも困難なく計算がスタートできる
他の大型センターを利用する時も苦勞しない
- MPI をサポートしている環境が非常に多い
先述したように、UNIX 環境が1台あれば、並列プログラムを開発する事ができる。
開発時には短いプログラムを多数テスト実行するのが普通であるが、このたびに実機での順番待ちに悩まされる必要が全くない。
- 阪大センターの新機種 SX-4 は MPI が利用可能である。