The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	大型計算機センターに何を求めるか?
Author(s)	中野, 雅由
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1998, 107, p. 6-8
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/66247
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

特集

大型計算機センターに何を求めるか？

大阪大学大学院理学研究科化学系

中野　雅由

実際，この原稿依頼が来たとき，少し困ってしまった．なぜなら，我々の研究室では，近年，大型計算機センターを本格的な研究に利用したことがないからである．大型計算機センターの課題は，プログラム移植と開発，緊急時の電子メールおよび自宅からのＰＰＰ接続の利用ぐらいのものである．私自身は，学生の頃（１０年以上前），大型計算機センターの汎用機を研究に使用したことがあり，ほんの少し計算しただけで，びっくりするような金額の請求がきたことと，少し実際的な計算を投入すると，センターから「他の人の通常の使用（例えば，エディターなど）に支障が出ていますのでJOBをキャンセルしました」と怒られたという苦い記憶しかない．現在，我々の研究室は，量子化学（広く言えば理論化学）をやっており，物質の化学・物理現象全般（反応，構造など）についての理論構築を行い，現象の解明，先験的予測，新しい物質・反応設計，新規物理化学現象の提案を行っている．理論と言えば，すぐに紙と鉛筆だけでできるではないかと思われるかも知れないが，実際は，（少なくとも化学の場合）そのような領域は極めて小さく，殆どの場合，なんらかの数値計算を必要とする．中でも，最近の量子化学計算の発展は著しく，物理定数さえ与えてやるだけで様々な原子・分子および小サイズの分子集合体の静的・動的なプロパティー，反応や構造のダイナミクスなどがかなり高精度に予測できるようになっている．これが，第一原理計算を基礎とする現代の量子化学の中核をなすアプローチであるが，これがとんでもない計算機資源（演算速度，内部および外部記憶容量）を必要とする．詳しく比較したことはないが，おそらく天気予報や原子核シミュレーション，飛行機の設計に用いるエアロダイナミクスなどの大規模シミュレーションと匹敵するものだと考えられる．

我々の研究室では，これらの第一原理計算を主に自前のワークステーション（IBM Powerstation, SGI Origin200, DEC α互換機など）で行っているが，学生の数や投入JOB数が多いため，いつもどの機械も満杯で，特に学会前ともなると，機械の取り合いがはじまることもよくある．今回，この原稿依頼があったとき，一部の学生さんに現在の大型計算機のパフォーマンス，望むべきこと等を書いてもらった．以下，それを紹介する．（山田，桐林両学生さんにはこの場を借りて感謝します）

我々としては，大型計算機の利用は主にスーパーコンピューターに限られると思われるので，その利用について中心に議論する．北海道，東北，東京，名古屋，京都，九州の各大学の大型計算機センター，および現在利用している岡崎国立分子科学研究所（分子研）の電子計算機センターの性能・サービスを大阪大学のそれと比較する．

【計算機性能】

大学	機種名	CPU台数	主記憶（拡張）	演算性能
北大	HITACHI S-3800/380	3	2(32)GB	24Gflops
東北大	NEC SX-3/44R	4	4(16)	25.6
東大	HITACHI S-3800/480	4	2(16)	32
	SR2201(tran:0.3G/s)	1024	0.256	0.3*1024

名大	Fujitsu VPP500/42	42	1	67.2
京大	Fujitsu VPP500 Fujitsu VP-2600	15	0.256	24
阪大	NEC SX-4/64M2	32n*2	8(16)	128
九大	Fujitsu VPP700	56	2	123
分子研	NEC SX-3/34R	3	2(8)	57.6
	NEC HSP	1	2(6)	0.2

各センターのスーパーコンピューター性能比較表からも，阪大のマシン性能はきわめて高いことがわかる．阪大のスーパーコンピューターを使えば，現在使用している分子研で行うより大規模な計算が可能となることが期待できる．

【使用制限】

大学	CPU 時間		主記憶（ファイル）	CPU 数
名大	20 Hour		0.9 GB	
	10		0.9	16
京大(500)	10		2(2)	10
阪大	80		4(8)	16
九大	20		16	
分子研(SX)	12	2		
(HSP)	6	0.5		

各センターによりコンピューターの利用時間・メモリのクラス分けは様々だが，バッチ処理によるスーパーコンピューターの最大ジョブクラスを比較する．ただし，各センターとも特別申請枠は持っているがこれは考慮しない．

ここでも阪大のサービスは優秀といえる．特に，その利用可能時間が長いことは，CPU 時間で数日にわたる計算が必要になる場合もあることを考えると，評価できる．使用可能なディスク容量も九大に次ぐもので，これだけの容量があれば，我々が現在行なっている１０倍の計算も可能になる．

【利用課金】

大学	CPU 時間(900sec~)		ファイル使用(50M~)
	バッチ処理	会話処理	（1M あたり）
北大	2 円 / sec	1 円(外部)/sec	20 円 / month
名大	0.5	-	20 / month
京大(2600)	1	1	20 / month
(500)	0.5	0.5	20 / month
阪大	0.5	2	1 / day
九大	0.4	3	2 / day

我々が，計算機パフォーマンスに劣る分子研の計算機を利用して大型計算機センターを利用しない最大の原因は，この課金制にある．分子研の利用においては，年度毎に利用申請を行ない，研究室単位での総利用時間が決められる．そして，この時間内であれば我々は無料で使用できる．

例えば，分子研で２０時間，ディスク使用量２００Mの計算を阪大で行なうとする．約２倍の計算時間で行なえるとして，その金額は， 36000sec*0.5 + 200/0.2*0.2 = 18200 円となる．このレベルの計算を５０回．あるいは１０倍の計算を５回行なえば総額で１００万円近くなり，ワークステーションを一台購入したほうがコストパフォーマンスが良い場合があり得る．

分子研と同じサービスは困難であると思えるので，我々が提案するのは定額制サービスの導入である．これは，北海道，京都，九州の各大学で行なわれている（ただし，北大は試験運用として汎用ワークステーションのみ）もので，事前に１０万円分を支払うことで，京大で１００万円分，九大で５０万円分の使用ができるようにするものである．ただし，その期間は（あまり計算機が使用されない）４～９月に限られている．我々の研究室では，毎年１０月に行なわれる学会に出席することが多いので，このようなサービスが行なわれれば，我々も使用しやすくなると考える．また我々だけでなく，化学や物理は春季と秋季に年会が行なわれるので，この期間だけでも定額制サービスが行なわれれば，利用者は増えるのではないかと考えられる．

【データベース・その他】

大学	種類数	総件数
北大	13	約８０万件
東北大	6	約８０万件
東大	4	１０００万件以上
名大	19	
京大	47	約１００万件
阪大	9	約８００万件
九大	12	
分子研	4	

阪大のデータベースは，量的には他の機関に見劣りするものではないが，我々量子化学の研究者が使うデータはあまり用意されていないようである．個人的にはこの分野の充実が望ましいが，国立機関に用意されているデータベース類のインターネットを用いた相互利用がたやすく出来れば，各大学それぞれ特色あるデータベースが用意されているほうが理想的だろう．相互利用はどの程度整備されているのだろうか．

最後に，今回の比較のため各大学の大型計算機センターのホームページを回ったが，阪大のホームページはかなり見やすく，利用者が知りたい情報の探索が容易に行なえた．一部の大学ではホームページではほとんど情報が得られないところもあり，その様なところに比べて阪大の担当者の心遣いが感じられ，好感がもてる．大型計算機は，研究だけでなく教育にも利用する必要があり，ここで要望したことをすべて実現するのは困難なことと考えられるが，先に述べた様に，学外の研究用計算機センターと比較しても阪大のセンターは魅力的な点が多く，条件さえ満たされれば，我々も使用したいと強く望んでいると言うことを理解していただければ幸いである．