OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	平成10年度定額制試行モニター報告
Author(s)	
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1999, 113, p. 25-38
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/66353
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

平成10年度 定額制試行モニター報告

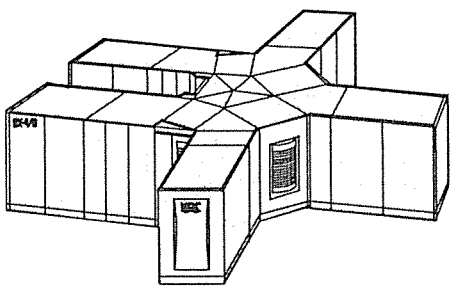
＊ 本センターでは、計算機の利用負担金 ＊
＊ について、これまでの従量制課金では ＊
＊ なく、利用額に関係なく一定額を負担 ＊
＊ していただく定額制の導入を進めるた ＊
＊ め、昨年度定額制を試行してきました。 ＊
＊ この１年間、試行にご協力いただいた ＊
＊ 方の懇談会を本年３月に開催し、また ＊
＊ 報告書として提出いただきましたので ＊
＊ ご参考にしてください。なお、本年度 ＊
＊ も定額制試行のモニターを募集してい ＊
＊ ます（詳細は、センターニュース５月 ＊
＊ 号、８月・９月の速報をご覧下さい)。＊

【報告内容】

１．研究課題について
２．手法
３．計算機利用上のよかった点、問題点
４．課金方式上のよかった点、問題点
５．その他

【報告者】

大阪大学大学院工学研究科応用物理学専攻 八木研究室 Ｄ２ 大崎 浩一
大阪大学大学院工学研究科機械物理工学 粒子複雑系講座 谷田 啓一
大阪大学大学院工学研究科応用物理学専攻 数理情報工学講座 中口 悦史
大阪大学大学院工学研究科知能・機能創成工学専攻
北川 浩・中谷彰宏・尾方成信・河合亮太・安本 弘昭
大阪大学大学院工学研究科機械物理工学専攻 稲葉研究室
利用者代表 齋藤 賢一
大阪大学産業科学研究所 量子物性 吉田研究室
（大学院基礎工学研究科 物理系専攻 Ｍ２） 中島 理志



大阪大学大学院工学研究科
応用物理学専攻 八木研究室 Ｄ２ 大崎 浩一
E-mail:osaki@galois.ap.eng.osaka-u.ac.jp

１．研究課題について

ある放物型偏微分方程式の解の漸近挙動について.

２．手法

偏微分方程式を有限要素法などで離散化し,自作のプログラムを作り,得られたデータを解析する.言語はFortran77で,ライブラリーのIMSLを使用する.

３．計算機利用上のよかった点，問題点

方程式の中にあるパラメータを細かく動かし，解析を行うため，たくさんジョブを投入できたのはよかった．hp_p2 にはジョブがあまり投入できないので，それは困った．懇談会でも挙げられたが，研究室のワークステーションよりCPU時間が遅いこと，修論〆切の時期に故障は問題だと思います.

４．課金方式上のよかった点，問題点

定額制モニターになっていたので，料金を気にせず，方程式中のパラメータを細かく刻んでデータを取れたのがよかった．自分が今いくら使っているかインターネットで見ることが出来るのはとても良い．ジョブを投入して途中で Exemplar が故障した時などの料金はどうなっているのか知りたい．もし，料金が取られるのならば，問題だと思います.

５．その他

利用者会議は，知識の浅い私のようなものでもためになるので，また開催して欲しい.

大阪大学大学院工学研究科
機械物理工学 粒子複雑系講座　谷田 啓一
E-mail：tanida@mupf.mech.eng.osaka-u.ac.jp

1．研究課題について

ラグランジュ的手法による固気混相流および粒子流の流動現象の数値解析

2．手 法

多数の粒子が存在する系に対して、ＤＥＭ、ＤＳＭＣ法といったラグランジュ的な数値解析手法を用いて流動現象の解析を行なう。

3．計算機利用上のよかった点と問題点

複数のＣＰＵがあるので、パラメータを振って計算する場合に便利。

自動並列計算をこころみたが、なかなか並列化度が上がらなかった。
シングルタスクジョブが多く実行されているため、マルチタスクジョブが投入される迄に時間がかかった。
日本語の取り扱いでトラブルがよく発生した。
突然計算機が停止する事が多々あった。
シングルタスクジョブで計算した結果、研究室内で使用しているAlphaシン（21264 500～600Mhz）と比較して1/5～1/10の計算速度しか出なかった。
メモリを多く使う計算を行なうと、Alphaマシンとの性能差は多少縮まったが、計算時間の上限の問題で、結局大規模計算は行なえなかった。（並列化も効果が低かった。）

4．課金方式上のよかった点と問題点

昨年のように、まだ使いはじめの頃に、色々と試してみる事が出来た。

5．その他

並列化をあげるためのツールが欲しい。並列化コンパイルオプション +Oparellel +Oinfo の情報だけでは不十分。

大阪大学大学院工学研究科
応用物理学専攻 数理情報工学講座 中口 悦史
E-mail:nakaguti@ap.eng.osaka-u.ac.jp

1．研究課題について

反応拡散方程式系の数値計算

私たちのグループが提案した，有限要素法とルンゲークッタ法によるスキームを用いて，反応拡散方程式系の解のシミュレーションを行い，定常解の構造やそこに至る経時変化，それらのパラメータ依存性を観察した．

2．手 法

シミュレーションプログラムはFORTRAN77で自作した．大規模帯行列の連立方程式を解く必要があったので，使用経験のあった数値計算ライブラリIMSLを一部に使用した．プログラム開発は基本的に手元のPCあるいはWSで行った．

3．計算機利用上のよかった点と問題点

LSFを通してバッチジョブを投入することで，最初はLSFの利用の仕方など分かりにくいところもあったが，利用の手引きを参照することもできたし，基本的にUNIXということもあって使い勝手が良く便利だった．

利用の手引きはまだ不完全なようなので，早く完成させてほしい．特にLSFやライブラリ，アプリケーションの説明を充実させてほしい．

4．課金方式上のよかった点と問題点

課金を気にせずに利用できるので，有効活用できる．

５０万円という金額は（特に科研費などが当たれば）適当な額だと思う．

可能であれば，汎用機とSX両方利用可能な定額制を作ってほしい．

5．その他

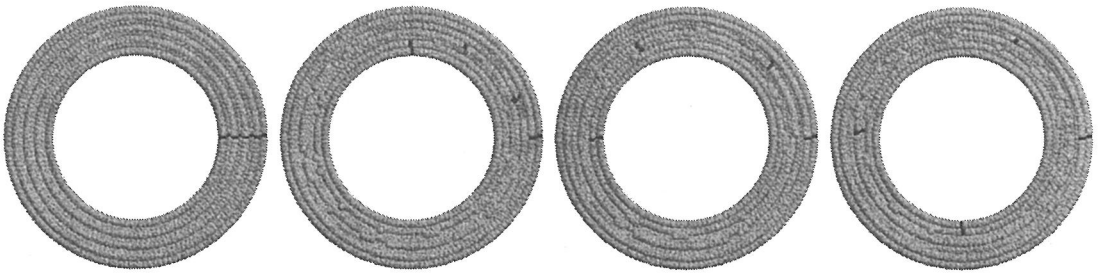
利用者MLをもっと有効活用すべきだと思う．

Exemplerを分子動力学計算に利用して

大阪大学大学院工学研究科 知能・機能創成工学専攻
北川 浩・中谷彰宏・尾方成信・河合亮太・安本弘昭

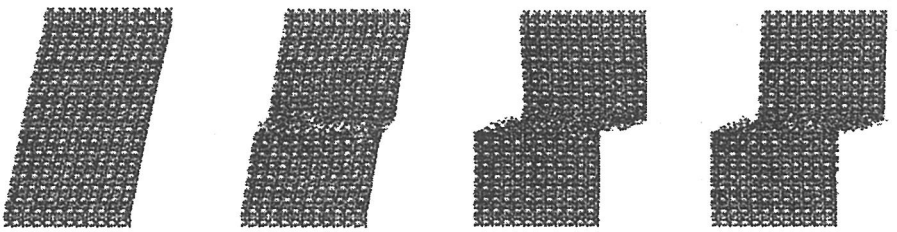
1 研究課題について

本研究課題では主に，原子・分子を直接扱うシミュレーション手法である分子動力学法を用いて，外部より荷重などの力学的拘束を受ける金属およびセラミックス材料内部でおこる原子レベルの現象およびその機構の解明を行った．ここで，得られた結果の一部を紹介する．図1には，アルミニウム原子により構築したナノスケールのリング上での回転運動をシミュレートした結果である．転位の運動により，破壊を生じることなく継続的に回転運動が可能であることを示した．また，図2は，窒化ケイ素セラミックス単結晶にせん断変形を加え，すべりの現象をシミュレートした結果のある1ケースである．変形を加える方向を様々に変化させて計算を行った結果，実験結果とよく合致した．



(a) $\theta = 0$ deg. (b) $\theta = 90$ deg. (c) $\theta = 180$ deg. (d) $\theta = 270$ deg.

図 1: アルミニウムの非分離回転運動のシミュレーション



(a) ひずみ 25% (b) ひずみ 28% (c) ひずみ 31% (d) ひずみ 34%

図 2: 窒化ケイ素のせん断すべり変形のシミュレーション

2 手法

分子動力学法は，原子や分子のダイナミックスを捉える手法として，多くのミクロ現象の解明に積極的に利用されているシミュレーション法である．計算の原理は単純で，系内の各原子について古典的なニュートンの運動方程式を解いていくだけである．分子動力学法の一番の“ミソ”は原子に働く力をどう表現するかであるが，本課題で用いたアルミニウムおよび窒化ケイ素に対する表現 (それぞれ有効媒質理論および3体相互作用近似による表現) は共に多くの計算に用いられ，実際の材料の様々な物性値を良く表現できることが分かっており，十分信頼できるものである．計算に使用したプログラムコードはすべて研究室で開発したもので，MPI を用いて並列化を行って，計算領域を分割して各 CPU がそれぞれの領域を扱うようにしたバージョンと並列処理しないバージョンが存在する．

特にこのような原子レベルのシミュレーションでは，温度や境界条件が強く結果に影響するため，これらの影響を調べるために，温度や境界条件の組合せを様々に変えての計算を必要とする場合が多いのと，時系列的に原子の座標並びに速度データを出力していく必要があるため，大規模な系の長時間のシミュレーションには非常に大きな計算能力および記憶容量が必要である．

3 計算機利用上の良かった点と問題点

3.1 良かった点

- SX-4 並のプログラムサイズ (申請無しで 8GB が使用可能) の計算が実行できるため，計算時間さえ気にしなければ，ある程度大規模な計算にも対応できる．また，計算スピードと実行可能なプログラムサイズの関係は適当であるように感じた．

- 複数の計算を同時進行 (並列処理) で実行できるため，プログラム自体が並列化されていなくとも，本課題の様に条件を様々に変えての計算が必要な場合には，高速なマシンでひとつずつシーケンシャルの計算を実行するより，結果的には効率が良かった．

- 画像処理端末上でジョブを継続して投入するシェルスクリプトを作成，実行することで，CPU 制限時間以上の長時間の計算も実行することができた．

  分子動力学法は，先にも述べたように本質的に運動方程式を積分していく手法であるので，原子の位置と速度のデータさえあれば，任意の時間で計算を中止，再開することができる．このことを利用して，画像処理端末上で，計算終了結果から継続計算用の入力データの作成，計算の再開 (ジョブの投入)，といった一連の作業を行うシェルスクリプトを実行することにより長時間の計算を実施した．

- 本課題ではほとんど使用しなかったが，ライブラリやアプリケーションプログラムが充実している (センターホームページ参照)．

3.2 問題点

- トラブルが多く，計算が途中でストップしてしまうことがよくあった．

- ハードディスクの制限が 1 グループ 2GB では少ないと感じた．

  並列計算を迫られるようなシミュレーションでは，出力データ量が膨大になるのが普通であり，Exempler をその本来の性能を十分引き出すような本格的な計算に利用できるようにするには，利用可能なプログラムサイズよりも大きなディスクスペースを一時的にでもよいから提供できるようにする必要があるように思う．

- 1CPU のスピードでは最近の高速ワークステーションに比べて見劣りがする.

  プログラムコードにも影響されるので一概には言えないと思うが，我々のプログラムでは 1CPU の計算速度は最新の Alpha チップを搭載したマシンの半分程度であった．やはり，ユーザーが自分のプログラムを積極的に並列化しないと計算機本来の性能を発揮できない.

4 課金方式上の良かった点と問題点

4.1 良かった点

- 上記の様な長時間の計算が使用料を気にすること無く実行できた.
- 結果的に実際の課金額 (50 万円) を大幅に上回る計算ができた.
- 本課題ではあまり使用しなかったが，アプリケーションプログラムが充実しているので，これらをかなり頻繁に使用する予定があるなら，研究室などで個々に購入して使用するより得である.

4.2 問題点

問題点は現在のところ特に見当たらないが，高速 CPU を搭載したワークステーションやパソコンがかなりの低価格で提供されつつあるので，50 万円という課金額の設定 (定額でない通常使用者の課金額にもあてはまると思うが) が今後も有効であるかは疑問である.

5 まとめ

Exempler に関しては，1) 計算速度よりもメモリーを多く必要とする，2) 効率の良い並列化がなされたプログラムを実行したい，3) アプリケーションをかなり頻繁に利用する予定がある，などのユーザーに定額制が向いていると感じた.

大型計算機センター定額制利用報告

大阪大学大学院工学研究科
機械物理工学専攻 稲葉研究室（利用者代表 齋藤 賢一）
saitou@mech.eng.osaka-u.ac.jp

はじめに

当研究室では，スタッフをはじめ，博士前期課程学生，学部四年生学生の研究活動に使用する目的で，一年間定額制度のモニターをして参りました．

定額制度のこれまでの計算機センターの利用方式と比べましての特徴は，以下のようなことと思います．それぞれの項目がメリットとデメリットを持っていると思いました(メリット⟷デメリット)．

1. **一定額の課金がなされ，無限に使える**
   使い放題，計算を実行できる．⟷ 混雑も無制限であるので，どんどん使わなくてはいけない．

2. **１０名の複数のユーザーが使う**
   たくさんのユーザーが登録できる．一括して管理できる．⟷ (この場合のように) まとめて何かを報告する場合にまとめる者が手間どる．

3. **複数のコンピュータが使える (並列処理含む)**
   同時に複数の CPU を利用できる．大きいメモリーの計算ができる．⟷ 並列でないと走らせにくい．単発だと遅い．

報告内容は，当グループのメンバーから寄せられたものそのままの内容を整理するようにしました．そのために，既に解決済みの問題点を指摘したりしている場合もございますが，その際には御了承下さい．

1 研究課題

『計算機による流体シミュレーション』をメインテーマとして行なっています．具体的には以下の通りです．

基礎的な流れのパーティクルモデリングに関する研究 ／液体窒素による固体表面の冷却 ／多重曲がり管内の流れと熱伝達の解析 ／高温環境下におけるシリカの分子動力学解析 ／二重管内流れの数値シミュレーション ／波状壁をもつ管内脈動流による軸方向熱拡散促進 ／界面に生じる非平衡現象の分子動力学法による解明 ／他

2 手法

自作のプログラムをコンパイル・実行すること，汎用ソフトを使い実行すること，データを可視化すること，に主に利用しました．具体的には以下のものを使います．

パーティクルモデリング／分子動力学法 ／速度ベルレ法 ／差分法 ／ SIMPLE 法 ／汎用流体解析ソフト，Fluent/UNS を利用 ／乱流モデルを用いる解析 ／ AVS ／ Explorer ／ fortran90 ／ fortran77 ／ C コンパイラ ／他

3 計算機利用上の良かった点と問題点

- 良かった点

- ログインしている人数によってパフォーマンスを落としてしまうことを，余り気にしなくて良い．
- 複数のプログラムを同時に実行できる点．
- パラメータを変えた計算が同時に複数個出来ること
- 一度に多数の計算をさせることができた
- ジョブを複数 (最大 14 個も) 放り込めるのが良かった．
- 1 ノードがアプリケーションサーバとなっていて，他に利用者がいなかったので混雑とは無縁だった．
- vis と ex でホームディレクトリが共通なので利用しやすかった．
- 画像端末が複数台あるので，ログインしやすい (特にセンターで)．
- 並列計算が自動でできること．
- AVS が使い放題使えたこと．

- 悪かった点
  - すぐに障害が発生する．
  - 計算機が止まることが多かった．もう少し安定性を．
  - hp_p2 がムダ．ほとんど使っている人がいない．
  - 80 時間以上の計算も出来るようにして欲しい．
  - 遅い
  - 環境設定用のファイルが各機種用にあったので変更しづらかった．
  - CPU の計算 (つまり課金) が不明確．よって余り速く感じない．
  - メモリーを多く使用して計算することができなかった (単発で)．
  - 使い方，並列の仕方，システム概念，課金のことなど，新しくて分からないことなどによって申請者 (責任者) がかなりフォローしなくてはいけなかった．
  - 自動並列に効用があるかどうか理解できなかった．その評価の仕方も分からない．
  - AVS の画像処理端末の設定と研究室の設定 (バーなどの日本語) が一致しない．
  - AVS 関係と思われる一時ファイルの消去が毎週のようにメールで通達されるが，消される気配がない (ずうと警告するくらいならば消して欲しい)．
  - ディスクの容量がオーバーしているメールが全体に来るが，調整が必要なので手間取る．もうすこし利用可能量を増やすべきだと感じた．

4 課金方式上の良かった点と問題点

- 良かった点
  - 定額制なので課金状況を気にせず計算できた．金額を気にしないでいいこと．
  - 課金を気にしないで計算を実行できた．
  - 計算，可視化，データ解析，等の複数の作業をサーバーへの負荷を気にせずにできた．複数のジョブも計算出来た．
  - トータルで消費額が安いこと．

- 悪かった点
  - 当研究室でほぼ占領してしまうことがあった. (他の使用者が気にしていないのであれば問題ありませんが)
  - とくになし
  - 他の利用者がいないということもあって，煮詰めの甘い計算を気軽に投入しすぎた.
  - ジョブの暴走がちょくちょくあったが，余り気にしなくなった.
  - 金額を気にせず計算が行なえ，計算パラメータ等を細かく変えたときの，計算結果の比較ができたので，研究しやすかったと思う. また，その反面全体的に言えると思うのですが，必要以上の計算を行なってしまうため，計算機が込み合うということも起きていたのではないかと思います.
  - 年末をピークに混んでいて使う気にならなかった.
  - 空いているのにせかされて，データの検討がままならないうちに次のを投入してしまった.
  - 元を取ろうとして，課金ばかりに目が行って，効率にまで気がまわらなかった.
  - このようなレポートを書いたり，頻繁に懇談会などの会合に行かねばならないこと. メールで十分ではないのか.
  - Onyx が一部の人を除いて (オンラインで) 使えないこと.
  - 申請者 (代表者) がグループ内ユーザーの使用状況を把握できないこと (パスワードロックのため).

5 その他

上述以外の意見および報告を羅列します.

- Ghostview, gnuplot plus 等のアプリケーションをインストールして欲しい.
- ソフトの改善をして欲しい (日本語環境，gnuplot plus,ghostview,mule etc)
- hp_p2 がすいていたのが目立ちました.
- シングルジョブクラスを作るか，vis でのジョブの振り分けを実現して欲しい.
- Fluent の使い方とこれを使っての研究成果は鋭意準備中. どこかに提供したい.

6 全体の感想

計算機の効率的な使い方 (セオリー) があろうかと思いますが，我々ユーザー側ではいろいろな用途をもって計算をさせているということが (研究室の中だけでも) わかりました. ユーザーの利用は，水が高いところから低いところに流れて行って全体としてしたに溜って落ち着くように，空いていて使えるものであればすべて使う候補にし，速く結果を得られるところを使うようになるみたいです. 普通は流す水の量，すなわち課金申請額は一定なのですが，今回の定額制度では，この流す水の量が無制限ですので，上のメカニズムがかなりはっきり現れたと思います. このメカニズムを意図的に制御するには別に何らかの仕組みが必要だと思います. 予想外の使われ方をする場合もあると思いますが，使う側にとってみれば，(それが近視眼的なものであっても) 理にかなっているということは言えると思いました.

付録その１

シングルタスクの是非を問うセンター業務側からの質問に対する回答のための資料として，まず，申請代表者が利用状況を把握するために，当研究室内で以下のアンケートを平成１０年秋 (アンケート送付日時: 平成 10 年 11 月 27 日) に行ないました．アンケート内容と回答を示します．

アンケート内容です．

———アンケート (研究室内)———
————————————質問————————————

Q1. Exemplar の利用状況
1. 常に 5 ジョブ以上走らせている
2. 常に 1 ジョブ以上 5 ジョブ未満走らせている
3. たまにジョブを走らせている．
4. 今は使っていない．
5. 使ったことが無い．
6. アカウントが無い．

Q2. 良く使うジョブクラスは？(全体の利用に対する割合を入れて下さい)
1. hp˙p8 [ ] 割
2. hp˙p4 [ ] 割
3. hp˙p2 [ ] 割
4. interactive [ ] 割
5. spp のクラス [ ] 割
6. vis(画像処理端末) [ ] 割
6. onyx [ ] 割

Q3. 並列化の程度は？
1. 手動で並列化チューニングをして実行している．
2. コンパイラで自動並列化をし，実行している．
3. 並列化していない．
4. 並列化がわからない．

Q4. シングルタスク用のジョブクラス設定の賛否
1. 必要である．
2. 必要無い (現状維持)．
3. その他の方策 [ ]

Q5. ジョブクラスが混んでいて困ったことは？
1. 困ったことがある．
2. 困ったことはない．

Q6. その他，定額制，Exemplar，センターに対する要望
1. ある [ ]
2. 特に無い

上のアンケートに対する回答です．

————————————回答 (6 名，[] 内はコメント)————————

Q1. Exemplar の利用状況
2. 常に 1 ジョブ以上 5 ジョブ未満走らせている
2. 常に 1 ジョブ以上 5 ジョブ未満走らせている [現在はデバック中です]
3. たまにジョブを走らせている．
3. たまにジョブを走らせている．
3. たまにジョブを走らせている．[走らせる時は 5 ジョブほどまとめて投入しています．]
4. 今は使っていない．[デバッグがほぼ終了したので，これからは使うことになると思う．]

Q2. 良く使うジョブクラスは？(全体の利用に対する割合を入れて下さい)
1. hp˙p8 [3][ ][3][ ][ ][5] 割
2. hp˙p4 [ ][9][3][5][ ][2] 割
3. hp˙p2 [1][1][2][5][ ][ ] 割
4. interactive [3][ ][2][ ][ ][2] 割
5. spp のクラス [ ][ ][ ][ ][10][ ] 割
6. vis(画像処理端末) [ ][ ][ ][ ][ ][0.5] 割
6. onyx [ ][ ][ ][ ][ ][0.5] 割

Q3. 並列化の程度は？
0. 不明．[投入時は複数の CPU を使用するように指定していますので Fluent 任せ．]
4. 並列化がわからない．
4. 並列化がわからない．
4. 並列化がわからない．
4. 並列化がわからない．
2. コンパイラで自動並列化をし，実行している．

Q4. シングルタスク用のジョブクラス設定の賛否
0. よくわからない

1. 必要である.
1. 必要である. [賛成である.]
1. 必要である.
1. 必要である.
1. 必要である. [とは思うんですけど, 混雑してるっていう実感がないので良く分かりません.]

Q5. ジョブクラスが混んでいて困ったことは?
1. 困ったことがある.
1. 困ったことがある.
1. 困ったことがある.
2. 困ったことはない.
2. 困ったことはない. [アプリケーションサーバである ex01 が全然利用されてないので.]

Q6. その他, 定額制, Exemplar, センターに対する要望
1. ある [何処に何人入っているか分かるようにして欲しい.]
1. ある [できれば SX などもつかわせてほしい. hp-p2 がほとんど使われていないのでもうすこし cpu の割り当てを削ってもいいと思う]
1. ある [アプリケーションに関する情報が少ないので, 講習会をもうすこし丁寧に, 突っ込んだところまでやって欲しい.]
1. ある [いろいろ]
2. 特に無い
2. 特に無い

付録その2

当研究室では, 定額制度を有効に利用するために研究室内部向けに, 利用マニュアルをウェブ上に作成してみました. 現在のところ, 内容が研究室内部向けになっておりますので, 全てを開示できません. 内容が他の利用者の人にも有効であれば, オープンにすることを検討したいと思います.

大型計算機センターの使い方

研究室内の情報です. あなたは [Image] 人目の人です.
ここでは, 主に, センターの新型汎用機 (計算サーバー) Exemplar の使い方について
まとめています.

最終更新は Tue Jan 5 09:18:55 JST 1999 です.

[Image] 目 次 [Image]

1. [Image] センター初心者の方
2. [Image] ログインのための情報
3. [Image] センター提供のマニュアル
4. [Image] 『よくわからないなあ. Exemplar 演算サーバー』
5. [Image] 『f77 が FORTRAN77 だったら, f90って FORTRAN90 のこと?』
6. [Image] 便利なコマンドたちがいるよ
7. [Image] FLUENT を使うのだ
8. [Image] AVSって凄いのよだよね
9. [Image] EXPLORERってなんなのさ
10. [Image] 課金情報を得る!
11. [Image][Image] 秘伝チューニングまにゅある

[Image] センター初心者の方

* rlogin,telnet で以下のセンターの 使用可能のホストに接続して下さい.
* アカウントには以下のあなたの アカウントナンバーを入力して下さい.
* ターミナルは X-window を指定して下さい.
* logout もしくは exit でログアウトして下さい.
* センター利用用語集

目次へ戻る [Image]

:
:
.

(後略)

以上

定額制モニター制度を利用して

大阪大学産業科学研究所 量子物性 吉田研究室
（大学院基礎工学研究科 物理系専攻 M２）中島 理志

１．研究課題について

我々の研究室では第一原理計算を用いて物性予測、物質設計を目的とした研究を行なっている。私の修士研究のテーマは III-V 族化合物半導体中希土類不純物の発光機構と電子状態の理解およびそれを用いた高発光効率材料の物質設計に関するものであった。

このテーマに関しては第一原理計算を用いることにより実験では理解することができない結晶中の発光に寄与する部分の電子状態を直接確認するという点で画期的であるが、その一方で物理的に納得できる計算精度を出すためには莫大な料の数値計算をこなす必要がある。我々の研究室では 98 年度から HP Examplar の定額制モニター制度を申請していたので試しに研究に必要な計算の一部を Examplar 上で実行したものの、計算サイズ、計算精度、そして使い勝手において研究室内の WS に劣るために最終的にはまったく使わなくなった。そこでこの報告書を通して、研究室を代表して利用に対する意見を述べさせていただきたいと思う。

２．手 法

密度汎関数理論に立脚した第一原理 FLAPW 法を用いた電子状態の計算を原子 16 個を含む Supercell 内で計算した。FLAPW 法のプログラムに関しては当研究室の播磨、柳瀬らにより開発された KANSAI94 を用いた。

３．計算機利用上のよかった点と問題点

HP Examplar の使用から遠ざかった理由としてはその計算速度の遅さと計算時間の制約の問題である。私の研究に用いた系の計算１ステップあたりの時間をおおざっぱに見積もると、以下のようになる。

基底関数が 1400 次元の場合
SX-4（大阪大学大型計算機センター内のもので１ CPU 使用）５時間
IBM Power ３（研究室内）８時間
RS10000（研究室内）16 時間
HP Examplar（１ CPU 使用）20 時間

さらに HP Examplar には最高でも 80 時間という時間制約がある。ところが計算の都合上５ステップ以上を一回のジョブとすることがほとんどであり、この場合では明ら

かに利用時間をオーバーしてしまう。これでは少々込み合っているとしても研究室内のWSで計算を行なわざるを得ないことが理解できよう。（この結果はExamplarに搭載されているCPUのスペックを考えるとある程度納得できる数字ではある。）

それではExamplarの最大の売り物である自動並列化がもたらす御利益についてはどうだろうか。そこで当然のようにコンパイラの自動並列オプションを用いたプログラムの並列計算に挑戦してみた。結果は若干の計算速度の向上はあったものの、画期的な向上を得ることはできなかった。これはコンパイラやOSの問題というよりはむしろ計算のアルゴリズムにあると私は考えている。研究期間中、並列化をあれこれ考えるよりは計算を先に進めることが至上命令（！）であった私は大計センター主催の講習会には何度か参加したものの、本気でソースを書き換える気力と体力はなかった。今となっては自分の怠慢を悔やむのだか、普通のユーザーとはこんなものではなかろうか？

4．課金方式上のよかった点と問題点

並列計算機の定額利用という料金体系は心理的圧迫が無くて非常に使い勝手がよいような感じを受けるが、それが本当に有益なのは並列化する事により計算時間が画期的に短縮できるプログラムを持っているユーザーである。我々のような並列化を前提として書かれていないプログラムを使用しているものにとっては定額料金に少し金額を足して新しいWSを購入したほうが計算時間を考えると有意義である。ただ、定額制利用をSXや他の1 CPUでも十分性能を発揮する計算機に拡張していただけるなら、計算機の管理コストを考えると我々にとっても有意義な選択肢である。

5．その他、計算機センターに望むもの

我々のように第一原理計算をテーマとしているものは、時間内に終わらせることのできる最大規模の計算を常に望む。プログラムの並列化は将来的には1 CPUの性能が頭打ちになることが予想されることからも避けては通れないが、2年でほぼ演算性能が2倍に上がる昨今の技術革新下ではプログラムをさほど改造せずにとにかく速い計算機で計算したいと考えるユーザーも多いはずである。そこで我々が今最も望むのは大容量のメモリととにかく速いCPUを兼ね備えた計算機の定額制使用である。