

PLAINセンターニュース

Center for PLAnning and INformation Systems

数値シミュレーション専用エンジン (2) 専用エンジンによる数値シミュレーションの方法

図1のように専用エンジンはPC やワークステーションであるホストと組み合わせて使用します。専用エンジンのプロセッサを搭載したボードをホストの外部バスに接続します。この接続方法は例えばPC やワーク

ステーションの外部バスにネットワークカードを接続するのと同様です。重力多体シミュレーション専用エンジンを使うときはホストは各質点の位置と質量を専用エンジンのメモリに書き込みます。これをもとに専用エンジンは各質点に働く重力を計算し、ホストがその計算結果を読みとります。分子シミュレーション専用エンジンを使うときはホストは各粒子の位置、電荷、種類を専用エンジンのメモリに書き込みます。これをもとに専用エンジンは各粒子に働くクーロン力や分子間力を計算し、ホストがその計算結果を読みとります。これらの力の計算以外のシミュレーションの計算はホストが行います。シミュレーションプログラムの開発と実行は汎用コンピュータの場合と同じようにホスト上で行います。C や Fortran のプログラムから専用エンジンにア

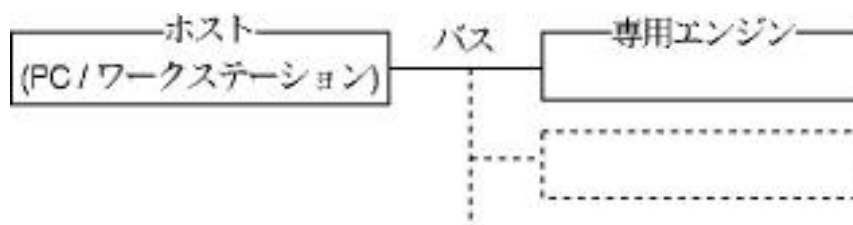


図1 専用エンジンを用いたシステムの構成

クセスするためのライブラリがあり、シミュレーションプログラムはこれを使って専用エンジンにアクセスします。専用エンジンが接続されていないコンピュータでもプログラム開発ができるように専用エンジンのエミュレーションライブラリがある場合もあります。

具体例として、分子シミュレーション専用エンジン MDGRAPE-2 を使って粒子間のクーロン力を計算する場合を説明します。クーロン力を重力に、電荷を質量に読みかえると質点間の重力の計算になります。MDGRAPE-2 ボードは PCI カードですので、PC やワークステーションの PCI 拡張スロットに接続します。N 粒子に働く、自分以外の N-1 粒子からのクーロン力を MDGRAPE-2 で計算する C プログラムは次のようになります。

```

#include "m2_unit.h"

double r[N][3]; /* 各粒子の位置のx、y、z成分 */
double q[N]; /* 各粒子の電荷 */
double f[N][3]; /* 各粒子に働くクーロン力のx、y、z成分 */
M2_UNIT *mu; /* MDGRAPE-2へのポインタ */
int i;
... /* rとqに各粒子の位置と電荷を代入する */
mu = m2_allocate_unit("grav.table", M2_FORCE, 0, 100, NULL_INT);
/* 1辺100の立方体の中で粒子に働くクーロン力を計算するようにMDGRAPE-2を初期化する */
m2_set_positions(mu, r, N); /* MDGRAPE-2に位置を書き込む */
m2_set_charges(mu, q, N); /* MDGRAPE-2に電荷を書き込む */
m2_calculate_forces(mu, r, N, f); /* MDGRAPE-2で電場を計算し、fに返す */
for(i = 0; i < N; i++){
    int k;
    for(k = 0; k < 3; k++){
        f[i][k] *= q[i];
    }
}
}

```

[裏へ続く]

m2_から始まる関数は MDGRAPE-2 にアクセスするライブラリの関数です。MDGRAPE-2 は正確には各粒子の位置における電場を計算しますので、最後に各粒子の電荷を掛けてクーロン力を求めています。実際の分子シミュレーションではこれ以外にいろいろな計算が必要ですが、これらはホストで行いますので、その部分は汎用コンピューター上のプログラムと同様になります。このプログラムをホスト上でコンパイルして MDGRAPE-2 にアクセスするライブラリをリンクし、実行します。

ホストに MDGRAPE-2 ボードを 2 枚以上接続して使う場合もプログラムは同じです。汎用 CPU では 2 つ以上の CPU で並列に計算する場合は一般にプログラムを変更する必要があります。しかし MDGRAPE-2 ではボードを 2 枚以上使う場合はライブラリの内部でボードを並列に動作させますので、プログラムを変更する必要はありません。

MDGRAPE-2 を使った分子シミュレーションの例を図2に示します。これは NaCl の液体が冷えて結晶化する様子をシミュレートしたものです。最初、液体のときは Na イオンと Cl イオンが不規則に混ざり合っていますが、融点以下に冷やすと結晶化して規則正しく並ぶ様子がわかります。イオン間にはクーロン力以外に分子間力も働きますので、MDGRAPE-2 で両方の力を計算しています。

クーロン力を直接計算せず、ほかのアルゴリズムを使う場合には、アルゴリズムの中で粒子間の中心力として表される部分を専用エンジンで行い、それ以外の部分はホストで行います。先の例ではクーロン力を直接計算していますが、周期境界条件の場合や粒子数が多い場合には直接計算は計算量が多いので、計算量を減らすためにいろいろなアルゴリズム

があります。周期境界条件のときにクーロン力の計算量を減らすためにEwald法というアルゴリズムがあります。Ewald 法はクーロン力を実空間と波数空間の2つの部分に分けて計算します。実空間部分はある中心力の形に表されます。分子シミュレーション専用エンジンは任意の中心力を計算できますので、実空間部分は専用エンジンで計算します。プログラムはクーロン力の場合と似たものになります。波数空間部分はホストで計算します。波数空間部分を高速に計算する機能をもった専用エンジンもあり、その場合は波数空間部分も専用エンジンで計算します。粒子数が多い場合にクーロン力の計算量を減らすために高速多重極子法などのアルゴリズムがあります。

専用エンジンを使う場合にはこれらのアルゴリズムを専用エンジン向きに一部変更したものを用います。これらのアルゴリズムの中には、直接計算するより計算量は少ないですが粒子や疑似粒子間のクーロン力の計算をする部分があります。この部分を専用エンジンで計算します。アルゴリズムの中の他の部分はホストで計算します。現在の専用エンジンの性能では粒子数がおおむね数万よりも多い場合は直接計算するよりも高速アルゴリズムを用いた方が速くなります。汎用 CPU の場合と同様に高速アルゴリズムを使うと直接計算よりもプログラムは複雑になります。

よく使われるシミュレーション用のソフトウェアパッケージを専用エンジンを使ったシステムの上で動くように移植したものもあります。この場合専用エンジンはパッケージのバックエンドとして働きます。利用者は、汎用コンピューター上のパッケージと同じインターフェースで使うことができます。

(理化学研究所・計算科学技術推進室

薄田 竜太郎)

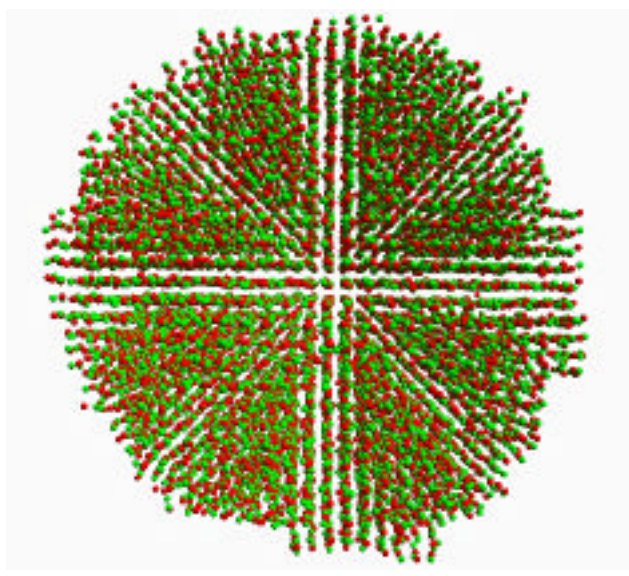
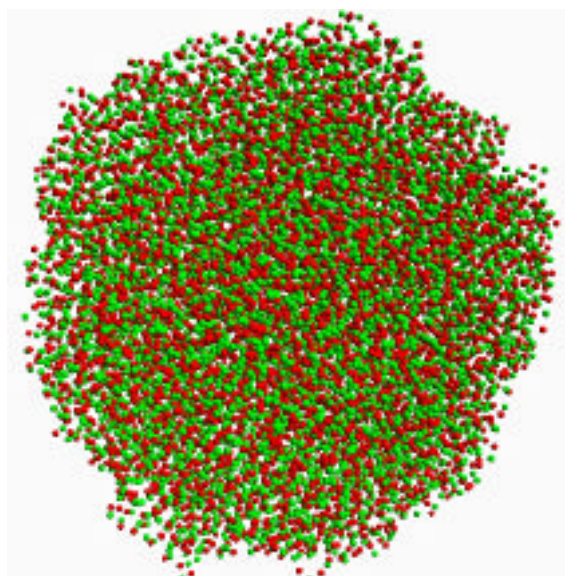


図2 分子シミュレーション専用エンジン MDGRAPE-2 を使った NaCl の結晶化のシミュレーション(古石貴裕氏等による) 赤 Na イオン 緑 Cl イオン
(左)初期状態の液体状態 (右)融点以下に冷却した後の結晶 イオン数 13824

計算機運営委員会・議事録（抄）

2001.10.17(水)に、宇宙科学研究所・計算機委員会が行われました。所内・所外一般ユーザーに波及する項目をピックアップし、若干情報を補足してお知らせします。

I. Super SINET の導入について

平成14年1月を目処に、東北大～阪大までの基幹ノード間が高速の「Gigabit Ethernet (GbE)回線」で相互接続されます。来年度には北大・九大まで延長、理研など SINET 外機関との接続も視野に入るとのこと。この10 Gbps の基幹線と平行に、「宇宙・天文（宇宙研、天文台）」、「高エネルギー物理」、「遺伝子科学」、「ナノテクノロジー」、「GRID」の5分野で専用回線 1 Gbps が別途確保されます。

この一環として、宇宙研は 10 Gbps の基幹線とは別枠で、「天文台（database 接続）東北大、東大、名大、京大」と 1 Gbps の専用回線で接続されます。この回線は、初期設定として「大学側に「ISAS サブネット」を構成」します。つまり、大学 LAN とはつながず、ISAS-Firewall の内側に直結します。初期の接続対象は、衛星データ転送・スパコン利用の需要を持つ研究系にお願いしましたが、今後の拡大も視野に入れていますので、ご希望ありましたら各機関の窓口の方々へお伝えください。

宇宙研 三浦 (miura@plain.isas.ac.jp)

笠羽 (kasaba@plain.isas.ac.jp)

東北大 飯島 (iizima@stpp1.geophys.tohoku.ac.jp)

東京大 星野 (hoshino@eps.s.u-tokyo.ac.jp)

国分 (kokubun@phys.s.u-tokyo.ac.jp)

名大 古澤 (furusawa@u.phys.nagoya-u.ac.jp)

京都大 鶴 (tsuru@cr.scphys.kyoto-u.ac.jp)

能勢 (nose@kugi.kyoto-u.ac.jp)

他機関への拡大は現在のところ不透明（情報研に依存）で、今回新設される回線が十二分に活用されることが大前提となります。現状でのネットワーク用途は、その細さからせいぜい「mail による情報交換」と「単方向のデータ転送」程度ですが、今後、高速ネットワークを活用した新研究形態の創出が我々には期待されています。具体的には、「データ解析システム」、「数値実験システム」、「遠隔実験システム」、「工学設計システム」の4分野が挙げられるでしょう。

初期稼働後の来年1月に、「高速ネットワーク時代の宇宙科学」と題したシンポジウムを企画いたします。所外の接続希望機関、所内の研究部門からの多様な提案を期待いたします。

II. 所内計算機・ネットワークについて

1. 所内 LAN のギガビット化について

所外の「高速化」の前提となる「所内 LAN のギガビット化」は、大枠終了しつつあります。既にバックボーンの多くは移行されつつあり、各居室のギガビッ

ト用コネクタは利用可能です。12月にはセンター計算機群も移行され、ほぼ作業は完了いたします。

完了後は、希望に応じて V-LAN によって任意の部屋を同サブネットに構成できます。これは、「Super-SINET 専用線」接続先の所外機関「ISAS サブネット」を含みます。また、TV 会議サーバーの稼働準備も大詰を迎えています。利用可能となり次第アナウンス致します。

2. センター計算機の NFS サービス試験について

PLAIN センター・スパコンのディスクを、各研究室で NFS マウントを可能とする検討を開始予定です。巨大な数値データのダウンロード・置場確保の苦労軽減を期すためです。

試験は、「センター＝藤井研」間で実施します。具体的には、センター計算機の「特定HD」を VPP 800 と研究室で共有します。「特定HD」は特定ユーザーのみアクセス可能とし、そのユーザーがセンターに持込むことが原則です（「ユーザー側計算機のディスクをマウントできないか？」という意見がありますが、ユーザー側計算機の不具合がセンター計算機に波及してしまうので駄目）。この環境で問題を洗い出し、次期リリースに反映させる予定です。将来は、全所的拡大を視野に入れます。対象には、「Super-SINET 専用線」接続先の所外機関「ISAS サブネット」を含みます。

3. KSC の SINET 回線の増強案について

現在、KSC は鹿児島大まで 1.5 Mbps で接続されていますが、情報研から「希望があれば今年度中に 5 Mbps まで増強可能」との連絡が着ています。ただし、回線費用は、現状の倍です。

現在の相模原＝KSC間は伝送遅延が 100-300 ms もあり、FTP の実効速度の上限は 300k-1Mbps 程度に過ぎず、上記を適用しても実効がありません。これは、「途中の回線で極端な遅延が発生している」ためです。このため、Super-SINET 導入後（H14年1月以降）でないと、どの程度実効性があるか判断できない状況です。

また、「需要があるか」という問題もあります。「次期衛星群（ASTRO-F、ASTRO-E2、SOLAR-B）同時運用のための backup 回線」という意見が出されましたが、まだ数年先であり、かつその頃には専用線を低価格で増強できる可能性もあります。また、SINET 回線は常時接続が保証されているわけではなく、運用関係は常時接続が保証できる「専用回線の増強」が本筋です。

このためすぐには希望せず、「相模原＝KSC 間遅延の実情調査」（自力＆情報研へ要請）と「当面の需要の確認」（ようこう・はるか・打上関係）を進めつつ、来年1月の Super-SINET 導入後に、伝送速度の改善状況を見て結論を出す予定です。

[裏へ続く]

III. ネットワークセキュリティ状況

安全性向上の対策として、7月に「KSC・NTC に対する所外アクセス停止」、9月に「Virus 自動チェッカーの全面導入」を行いました。8月以降、世間では NIMDA などによる混乱に見舞われました

が、幸い上記及び従来からの対策もあって、ISAS ではトラブルは出ていません。

各ユーザーレベルで、今後とも以下を周知・堅持 いただくようお願いいたします。（笠羽 康正）

原則	安全サイドで判断する	トラブルが減ります。加害行為も防げます。
	下記が理解できなければ、周囲の人に聞く。	「最低ライン」の予備知識です。実施できない方は、「潜在的加害者」だということを自覚してください。
一般	OS・Network 関連ソフトを、最新版にアップデートする。	古いものには「孔」があり、危険です。特に「OS の新規インストール時」は注意。最新状態へのアップデートと適切な設定が終わる前につないで、トラブルに巻き込まれる例多し。
	note-PCの持込に注意する。	出張先からの note-PC による Virus 感染例が多い。
	不要なら、Network から外す or 電源を切る。	最強の対策です。
Mailer	HTTP-mail など「自動実行機能」は切る。	自動実行機能を悪用されたトラブルが多発しています。特に Outlook は Default のままで絶対に使わないこと。使っているのは「安全確実な設定にできる」人のみ。それ以外は別の mailer を使うこと。
	Anti-Virus tool を導入する。	最新設定でなければ無意味。Update は必須。
	不審な添付ファイルは開けない。	特に "*.exe" は危険。知人からでも、本人確認が必要。また、疑われるようなファイル・巨大なファイルは送らないこと。
WWW-brouser	最新 version にアップデートする。	特に Internet Exploler (IE)。古いままで不用意にアクセスすると、トラブルに巻き込まれる可能性があります。
	不要な機能は切る。	IE の場合：「Security」や「Privacy」を安全サイドに設定する。
Windows	NT/2000 の「Server 機能 (IIS)」を原則使わないこと。	使っているのは「安全確実な設定にできる」人のみ。
	Network 共有は、上記の「安全な設定」が前提。	共有機能で Virus が一気に広がったケースがあります。「弱い」ものを共有対象に含めないこと。巻き込まれます。

新メンバー 自己紹介

私、本田秀之は 11月1日より PLAIN センターに配置替えになりました。私は 1977 年に故伊藤富造先生の研究室に入り、そこでは成層圏大気微量成分の研究のための大気サンプリング装置の開発や、その気球実験に携わってきました。またその間並行して EXOS-C 衛星関係の仕事にも従事しました。伊藤先生退官後には気球工学部門に移り、気球関係の仕事をしながら今日迄サンプリング実験も継続してき

ました。今後は、PLAIN センターおよび橋本正之先生の衛星関連の業務の一端を担い、三浦さんや長木さんと共に皆様のお役に立てるよう頑張っていきたいと思います。なお、移動に伴う残務整理のため、しばらくの間 PLAIN センターと気球工学部門の仕事とを兼務する事に関しては、長瀬センター長の御了解をいただいております。どうぞよろしくお願い致します。（本田 秀之）

大型計算機に関するお知らせ

1. 大型計算機の11月・12月の保守作業の予定

ホスト名	11月20日(月) 8:00 ~ 13:00	M: システム メンテナンス
GS8300/10N	M	

12月17日（月）に予定していたVPP800/12の定期保守作業は年末に集中保守作業を行いますので中止します。

2. 年末・年始のスケジュール

年末年始の運転・保守作業スケジュールは現在検討中ですので、次回12月号PLAINセンターニュースでお知らせします。

3. 計算機登録予算の移算締切について

前年度と同様、今年度も下記日時で計算機登録予算の移算処理を締め切らせていただきます。

締切日 平成13年12月21日（金） 15:00

尚、上記日時以降も予算追加は出来ませんが、その追加予算は翌年度移算となりますので、配当が確実なものに限ってください。

4. 問い合わせ先

大型計算機利用上の質問・トラブルなどは高橋氏・梶沼氏（内線8391）、ネットワーク関係の質問・トラブルなどは神林氏・杉井氏（内線8393）までお願いします。（三浦 昭）

編集発行：文部科学省宇宙科学研究所 宇宙科学企画情報解析センター

〒229-8510 神奈川県相模原市由野台 3-1-1 Tel. 042-759-8352 e-mail: news@plain.isas.ac.jp