新汎用計算機システムの紹介

CPU64 個, 総メモリ量 64GB の汎用 UNIX サーバが登場！

伊東栄典* 渡部 善隆**

九州大学大型計算機センター (以下センターと略記) では，2000 年 1 月に汎用計算機システムの更新を行います．新システムの運用開始は 1 月 5 日からの予定です．ここでは更新後の新システムの概要について開設します．なお，機種更新についての情報は下記 URL の大型計算機センターホームページでも随時公開しております．なお，機種更新について質問がございましたら，下記の電子メールアドレスまたは電話番号へお問い合わせ下さい．

センター WWW ホームページ	http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/
質問窓口 E-mail アドレス	request@cc.kyushu-u.ac.jp
電話番号	092-642-2306

1 新システム全体の構成

まず最初に，2000 年 1 月からの新システムの構成を図 1 に示します．

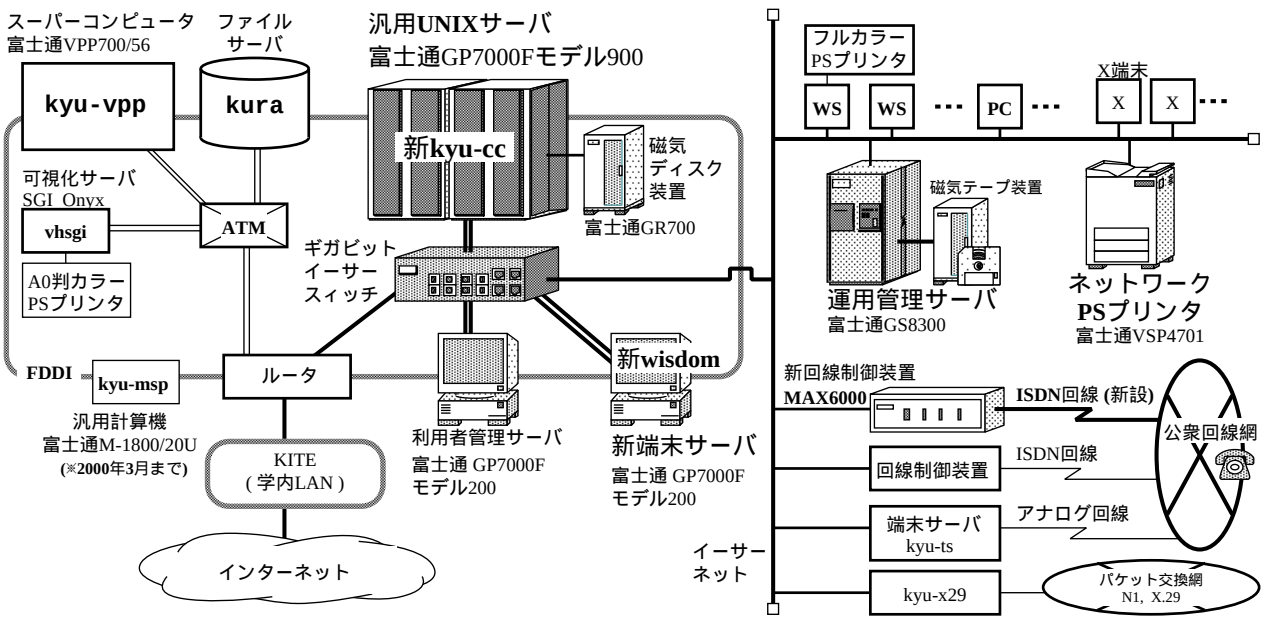

図 1: 新システム構成図

今回の更新の大きな特徴は，前回の大型計算機センター広報の巻頭言 [1] でもお伝えしている通り，(1) 長きに亘って大型計算機センターの計算サービスを支えてきた M シリーズ (富士通 M-1800/20U) が廃止され，並列 UNIX 計算機が導入されることです．これにより本センターでの計算サービスは全て UNIX を介して提供されるようになります．また，(2) 計算機間のネットワークにギガビットイーサネットが導入されます．一方，(3) アプリケーション専用ワークステーション (以下 WS と略記) は廃止いたします．(1),(2),(3) のそれぞれについて説明します．

*九州大学大型計算機センター
E-mail:itou@cc.kyushu-u.ac.jp, http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/RD/itou/
**E-mail:watanabe@cc.kyushu-u.ac.jp, http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/RD/watanabe/

まず，(1) の MSP システムの廃止についてですが，大型汎用機を代表する MSP システムは今後も金融機関等の安定性や信頼性を求める機関では利用されると思います．しかし科学研究用の計算機として考えますと，MSP システム用の数値計算ライブラリや各種アプリケーションは，ほとんど開発されていないのが現状です．現在，高速かつ大規模な数値計算用として研究・開発・販売されている物は，ハードウェアもソフトウェアも UNIX 用の物がほとんどです．このため本センターでは計算サービスを提供する機関として，MSP システムではなく並列 UNIX 計算機を導入することになりました．

次に (2) のギガビットネットワークの導入についてです．年々，計算機間の通信量は増えています．大規模計算用の入力データと出力データが大きくなっており，実行前の研究室からの入力データの転送と，実行後の可視化処理などの後処理を行うための結果データの転送が通信量を増加させています．ファイルサーバと他の計算機との間の NFS を用いた大規模なファイル共有も通信量を増加させています．より高速な計算機間ネットワークを提供するため，ギガビットイーサネットを導入します．

最後に (3) の，アプリケーション専用 WS の廃止についてです．近年，計算機の高性能化および低価格化が進んでおり，特にパーソナルコンピュータ (以下 PC と略記) は飛躍的に性能が向上しています．その結果，以前は汎用機や WS にしか無かった様々な科学技術用アプリケーションが，PC 用にも販売・配布されています．そのため，センターでの高価なアプリケーション専用 WS のサービスに対する需要は減少しています．また，ほとんどの研究機関がインターネットに接続されたため，ほとんどの利用者はインターネット経由でセンター利用を行っています．このため，センターを訪れる一般利用者用の計算機はあまり必要ありません．限られた予算を効率よく用いるために，アプリケーション専用 WS は廃止し，計算サービスに力を集中することになりましたので，ご理解をお願いします．

2　各システムの紹介

この節では，新規導入される各システムについて説明します．

2.1　汎用 UNIX サーバ： 新 kyu-cc

まずは今回の更新の主役となる計算機の汎用 UNIX サーバについて説明します．機種は富士通社の GP7000F モデル 900 です．この汎用 UNIX サーバのインターネット上におけるホスト名は，旧汎用計算機のホスト名と同じ kyu-cc です．ホスト名が同じであることが示しているように，この汎用 UNIX サーバは，1999 年 12 月末に廃止される汎用計算機 kyu-cc(富士通 M-1800/20U, OS:富士通 UXP/M) が担当してきた，Fortran や C プログラムの開発・実行，各種アプリケーションプログラムの利用などの，数値計算やデータ解析に関する機能を引き継ぐ計算機です．また，同様に廃止されるライブラリサーバ wisdom(富士通 S-4/1000E, OS:Solaris2.4) が担当してきたフリーソフトウェアの利用といった機能も同様に引き継ぎます．(wisdom は，その機能の一部としてメールサーバを含んでいました．メールサーバの機能は新しい wisdom が引き継ぎます．2.3 節をご参照下さい) 汎用 UNIX サーバの外観を図 2 に，性能諸元を表 1 に示します．

図 2: GP7000F モデル 900 の外観

表 1: 汎用 UNIX サーバ 諸元

項目	性能
機種	富士通 GP7000F モデル 900
CPU	SPARC64-GP(300MHz)
	プロセッサ ×64 個
主記憶	64GB，共有メモリ型
OS	Solaris7

新汎用 UNIX サーバは，動作周波数 300MHz の CPU SPARC64-GP プロセッサを SMP(Symmetrical Multi Processing) 方式で 64 個搭載しており，主記憶は全体で 64GB あります．主記憶は CPU 間で共有される共有メモリ型の並列計算機です．本センターのスーパーコンピュータ VPP700/56 は行列計算に威力を発揮するベクトルユニットを備えた分散メモリ型のベクトル並列計算機ですが，新汎用 UNIX サーバは共有メモリ方式のスカラー並列計算機です．

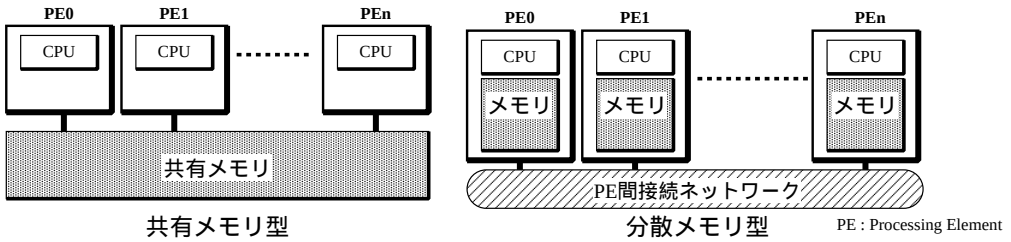

図 3: 共有メモリと分散メモリ

汎用 UNIX サーバに搭載される OS は，サン・マイクロシステムズ社の UNIX 系 OS である Solaris7 です．Solaris は広く用いられているので，Solaris を搭載する WS を持つ研究室も多いのではないでしょうか．Solaris を搭載する計算機上で作成したプログラムのバイナリファイルは，汎用 UNIX サーバでそのまま実行できる可能性があります．Solaris でなくとも UNIX 系 OS で作成したプログラムは，比較的少ない作業で汎用 UNIX サーバに対応したプログラムに変換できるでしょう．

汎用 UNIX サーバの Fortran コンパイラは自動並列化機能も備えています．研究室の WS で Fortran 数値計算プログラムを実行している方は，汎用 UNIX サーバの多数の高速 CPU と大きなメモリ空間で，大規模計算を行ってみてはいかがでしょうか? 汎用 UNIX サーバ上で利用できるプログラミング言語，ライブラリ，アプリケーションソフトウェアについては第 3 節を御参照下さい．

2.2 計算機間のネットワーク

計算機間のネットワークとして，新たにギガビットイーサネットが導入されます．これにより一部の計算機間では最大 1Gbps での通信が可能になります．従来からの FDDI，ATM，100/10Mbps イーサネットといったネットワークも残っていますので，全ての通信が高速になるわけではありませんが，大規模なデータ通信をやり取りしている部分の通信は高速化されます．

2.3 端末サーバ： 新 wisdom

公衆回線経由によるセンターおよびインターネットへの接続は，人気の高いサービスです．従来センターへの接続回線数はアナログ 8 回線，ISDN2 回線であったため，夜間は回線が混雑する場合が発生しています．そこで，今回の更新を機に新たな端末サーバの導入と，公衆回線の増加を行います．

新たに導入される端末サーバの機種は富士通社の GP7000F モデル 200 です．ホスト名は以前のライブラリサーバと同じ wisdom です．しかし旧 wisdom のライブラリサーバしての役割は，電子メールの読み書きなどのメールサーバの機能しか継承しません．2.1 節で述べたように，他の UNIX アプリケーションプログラムの利用は汎用 UNIX サーバで行ってください．

公衆回線の増強として，ISDN 回線を 23 回線追加します．この新しい ISDN 回線用の回線制御装置として ASCEND 社の MAX6000 も導入します．この装置は ISDN 回線を最大 92 回線扱うことが可能な装置です．ただし，従来のアナログ回線と ISDN 回線，および従来の端末サーバ kyu-ts(富士通 S-4/20, OS:SunOS4.1.4) は継続されますので，以前から使われていた方は従来通りに利用することが可能です．

新端末サーバと，公衆回線の構成を図 4 に示します．図 4 はあくまでも予定です．実際の構成とは異なる可能性もあります．ご了承下さい．

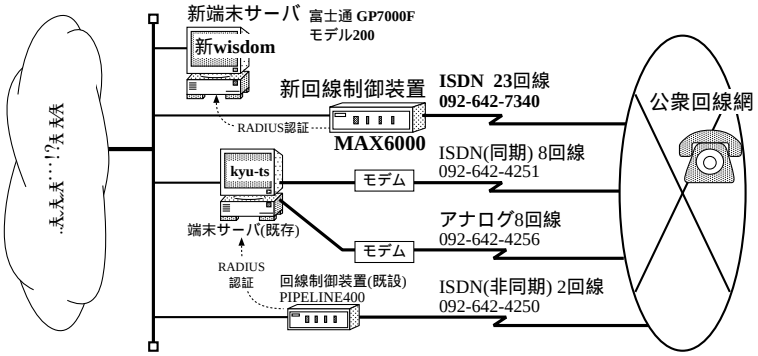

図 4: 端末サーバの利用概略 (予定)

表 2: 端末サーバ 諸元

項目	性能
機種	富士通 GP7000F モデル 200
CPU	SPARC64-GP(300MHz)
	プロセッサ ×2 個
主記憶	256MB
OS	Solaris7

2.4 ネットワークポストスクリプトプリンタ

富士通社の VSP470 プリンタが導入されます．このプリンタは 100Base-TX のイーサネットでインターネットに接続されています．印刷の解像度は 400×400dpi あり，A4 用紙で 1 分間 40 枚の印刷が可能です．このプリンタのはセンター 2 階，オープン端末室に設置されます．従来のネットワークポストスクリプトプリンタとほぼ同様に印刷することができます．

表 3: ネットワークポストスクリプトプリンタ 諸元

項目	内容
機種	富士通 VSP4701
解像度	400 × 400dpi
エミュレーション	ポストスクリプト レベル 2 互換

2.5 その他の機器

センター棟 2 階オープン端末室に設置されている X 端末も更新されます．X 端末は基本的に従来と同様に利用できます．他に導入される計算機としては，運用管理サーバと利用者管理サーバがあります．運用管理サーバは，利用者の計算機利用情報を収集して負担金を計算するための計算機です．利用者管理サーバは，ユーザ名，予算，利用期限といった，アカウント情報を管理する計算機です．どちらも利用者の皆さんへは提供されない管理用の計算機です．

3 新汎用計算機システムのソフトウェア

3.1 プログラミング言語

新汎用 UNIX サーバの最大の特徴は，大容量の記憶領域を確保することのできる共有メモリ型並列計算機であることです．利用者は，自動並列化機能を持つ Fortran 95 コンパイラを用いるか，OpenMP, MPI による並列処理プログラムを記述することにより並列プログラムを作成できます．

汎用 UNIX サーバの Fortran コンパイラは，これまでの Fortran 90, FORTRAN 77 と完全上位互換であるので，旧 kyu-cc, wisdom で作成したプログラムはそのまま新 kyu-cc でも動作します．また，kyu-msp で作成した Fortran ソースプログラムも，OS に依存する一部の機能をのぞいて修正することなく翻訳可能です．また，M-1800/20U で作成した書式なしデータの入出力オプションもサポートします．SSL II, NUMPAC は，これまで旧 kyu-cc, kyu-msp, 旧 wisdom でサポートしてきたサブルーチンがそのまま利用できます．

以下に，汎用 UNIX サーバで利用できるプログラミング言語，プログラム開発支援環境等を紹介します．

◇ プログラミング言語

Fortran	最新の JIS 規格 (JIS X 3000-1) に完全準拠した自動並列化機能を有する Fortran 95 コンパイラです．新しい Fortran は従来の `frt` コマンドに加えて `f90`, `f95` コマンドでも起動することができます．
C	ANSI 規格準拠，K&R 仕様もサポートした C コンパイラです．日本語メッセージの出力が可能です．Fortran と同様の最適化技術を採用しており，相互に言語を乗り入れたプログラム開発も可能です．
C++	ANSI ドラフト版，AT&T 仕様をサポートした C++コンパイラです．C と同様の最適化技術を持ちます．また，Fortran, C との言語間結合も容易に行なうことができます．

◇ プログラミング言語開発支援

Workbench	GUI ベースの操作環境で利用するデバック・チューニングツールです．Fortran, C, C++ プログラムに対して利用できます．ソースコードと対応した会話型のデバッグ，実行コスト分析，実行・入出力状態のモニター表示などを行なうことができます．
Visual Analyzer	Fortran, C, C++プログラムのソースプログラムを静的に解析することにより，サブルーチン，関数の呼び出し関係，内部構造，統計情報，引数の整合性のチェックを行なうプログラム開発・保守・移植・チューニング支援ツールです．プログラムの実行動作範囲，網羅率などを可視化する機能もあります．

◇ 並列処理環境

OpenMP	SMP の並列言語の業界標準となりつつある OpenMP Fortran1.0 仕様に完全準拠した並列言語処理ソフトウェアです．ループ，タスクの並列化，データスコープ，回帰演算の指定，同期 / 排他制御の機能をサポートします．並列化指示行の挿入によって並列化を行なうため，他計算機との広い互換性が保証されます．
MPI	MPI 2.0 規格準拠のメッセージパッシングライブラリです．Fortran または C 言語から関数またはサブルーチンとして呼び出されます．1 対 1・集団通信，多重通信空間，動的プロセス生成 / 管理，並列入出力などの幅広い機能を有します．また，Solaris で並列プログラムを動作させるためのランタイムシステム Apruntime も提供されます．
MPTools	MPI で作成した並列プログラムの解析を GUI により支援するツールです．実行時間，通信時間の詳細，モジュールの負荷分析などを行なうことができます．
並列アナライザ	OpenMP Fortran, MPI プログラム, マルチスレッド，マルチプロセスプログラムのデバッグを支援するツールです．資源消費状況・スレッド・モジュールごとの負荷バランス表示によるチューニング支援環境も提供します．

◇ 数値計算ライブラリ

SSL II	連立 1 次方程式や微分方程式などの数値計算を行う約 230 種類のサブルーチンからなる汎用数値計算ライブラリです．各サブルーチンは Fortran プログラムから使用できます．
C-SSL II	SSL II サブルーチンとの C 言語，C++言語インターフェースです．倍精度実数型 (double) 変数を扱う関数 103 個と単精度実数型 (float) 変数を扱う関数 3 個から構成されています．連立 1 次方程式・最小二乗解・固有値問題・代数方程式・Fourier 変換・数値積分・補間・乱数などの汎用的な計算手続きを提供します．複素数を扱う場合には専用の複素数型 “dcomplex” を定義します．
NUMPAC	線形代数から特殊関数に至る広汎な領域を包含し，精度・速度とも高い性能を有する数値計算パッケージです．
LAPACK, BLAS	約 300 種類，各精度を合計すると約 1,100 本のルーチンが用意されています．連立 1 次方程式，線形最小二乗問題，固有値問題，特異値分解などをサポートします．LAPACK はベクトル演算や行列演算などの核となる部分で BLAS ライブラリを呼び出します．
ScaLAPACK	LAPACK の主要なサブルーチンを並列化した線形計算ライブラリです．連立 1 次方程式，線形最小二乗問題，固有値問題，特異値分解などをサポートします．
NAG Fortran SMP Library	SMP マシン向けにスレッドを用いた並列化・最適化を行なったライブラリです．主に線形計算に対する最適化を施し，内部でこれらを利用する微分方程式，統計解析などの並列化に効果的な 90 種以上の関数をサポートします．
IMSL Fortran90 MP Library	線形計算，固有値解析などの豊富な関数機能を備えた数値計算ライブラリ，基本統計・因子分析・クラスタ分析などの機能を装備した統計解析ライブラリ，Fortran 90 で開発された線形システム・特異値・固有値計算などのプログラムの合計 900 種以上のサブルーチンから構成される統合ソフトウェアです．
IMSL C Library	Fortran の IMSL ライブラリから約 300 種の機能を抜粋し C 言語に移植した関数ライブラリです．

3.2 新汎用計算機で利用できるアプリケーション・ソフトウェア

以下に，汎用 UNIX サーバで利用できる主なアプリケーション・ソフトウェアを紹介します．詳しい利用方法，既存の資産の移行に関する情報はセンターの WWW ページで適宜お知らせします．

◇ 統合数学ソフトウェア

Mathematica	高度な計算機能，数式処理機能，2 次元，3 次元グラフィックス機能を有する汎用数学処理システムです．数式は Fortran, C, TeX, HTML のソースとして出力可能です．グラフィックスの保存は EPS, PDF, TIFF, GIF などの形式で出力することができます．
Maple V	数式処理，数値計算，グラフィックス機能を備えた数学計算システムです．新 kyu-cc では wisdom の Release 4 から Release 5 にバージョンアップします．
MATLAB	行列演算を基本としてデータ解析，可視化機能を提供する科学技術計算支援ソフトウェアです．一連の操作を自然な形で行なうことのできるデータハンドリング機能，500 以上のデータ解析や視覚化を行なう関数，対話型・一括処理環境など豊富な機能をサポートします．

◇ データ解析システム

SPSS	汎用統計解析パッケージです．データ変換機能と各種統計プログラムのもつ解析機能を一つの大きな有機的システムとしてまとめ，各種のデータ処理や計算を一つのジョブの中で連続的に実行できることから世界的に高い評価を受けているソフトウェアです．
SAS	汎用統計解析システムです．用途は，レポート作成，グラフ表示，データ検索，予測・シミュレーション，回帰分析などの高度な統計解析，時系列分析，オペレーションズ・リサーチ，品質管理， 行列演算言語など多岐にわたります．
S	読み取りやすさや表現の正確さに重きを置いた数多くのグラフ表現と最新の研究成果に基づく各種データ解析機能を搭載したデータ解析，グラフィックスソフトウェアです．また，高度な計算を効率的に記述し分析に必要な手順を速やかに構築することが可能です．

◇ グラフィックス

Nova∗GKS	国際標準規格 GKS 準拠のグラフィックス・ライブラリです．C 言語，Fortran から約 100 個の関数が利用できます．
Graphman	グラフィックディスプレイを使用して，あたかもソースプログラムのテキスト編集をするかのように迅速かつ容易に図形編集および図形表示ができます．図形パターンは関数 $y = f(x)$ の表示，2 次元メッシュ図・流れ図，関数 $z = f(x, y)$ の等高線図・鳥瞰図，3 次元物体の透視図，折れ線データ等の作成が可能です．また，PostScript 出力をサポートします．
CalcPS	CALCOMP 形式のサブルーチンによって作図する Fortran プログラムに対してポストスクリプト (PostScript) 出力用のインターフェイスルーチンを提供する作画ライブラリです．CALCOMP の主な関数の他，富士通の PKS や日立の GPSL の一部の関数に対するインターフェースルーチンも含みます．

◇ 分子軌道計算

MOPAC 2000	様々な分子系に対する物性予測，構造解析のために広く利用されている半経験的分子軌道計算プログラムです．MOPAC 2000 では，さらに MOZYME 法による高速ルーチン，アミノ酸の配列の自動認識機能を導入し，1 万原子におよぶ巨大分子系に対する実用的な計算を可能としました．さらに並列計算にも対応しています．
Gaussian 98	Carnegie-Mellon 大学の Pople を中心として開発された分子軌道計算プログラムパッケージで， プログラム構造の明解さ，計算の安定性から急速に普及し，広く計算化学の分野で利用されています．新 kyu-cc では，旧 kyu-cc の Gaussian 94 を Gaussian 98 にバージョンアップして公開する予定です．

その他，現在，汎用 UNIX サーバに移植可能なプログラムライブラリ開発課題，フリーソフトウェアの洗い出し作業を行なっています．これらは確認ができ次第適宜ホームページ，センターニュースでお知らせする予定です．

3.3 MSP のアプリケーション・ソフトウェア

旧汎用計算機 M-1800/20U の MSP システムで公開してきたアプリケーション・ソフトウェアは 2001 年 4 月からは汎用 UNIX サーバに引き継がれます．以下は移行にともなう注意点です．

SAS	Base SAS, SAS/STAT, SAS/GRAPH, SAS/ETS, SAS/IML とも 6.07J 版から 6.12 版にバージョンアップします．ソースレベルの互換性は OS に依存する一部分を除き保証されます．SAS データセットは中間ファイルに一度変換して転送することで再利用可能です．
SPSS	SPSSX3.0 版から SPSS for Unix, Release 6.13 にバージョンアップします．ソースレベルの互換性は OS に依存する一部分を除き保証されます．
ANALYST	SAS, SPSS への移行をお願いします．
Graphman	PDB の変換機能が UNIX 側でサポートされます．
PKS	CalcPS への移行をお願いします．
GKS	NOVA∗GKS への移行をお願いします．
Gaussian 88	Gaussian 98 にバージョンアップします．

具体的な資産の移行方法は下記 URL の WWW ページにて解説を行っております．ご参考下さい．

MSP データの移行方法　`http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/library/MSP/MSP.html`

4　更新の日程

新システムへの更新日程を図 5 に記述します．なお，この記事を記述しているのは 11 月の段階であるため，様々な要因で実際の日程とは異なる可能性があります．予めご了承下さい．

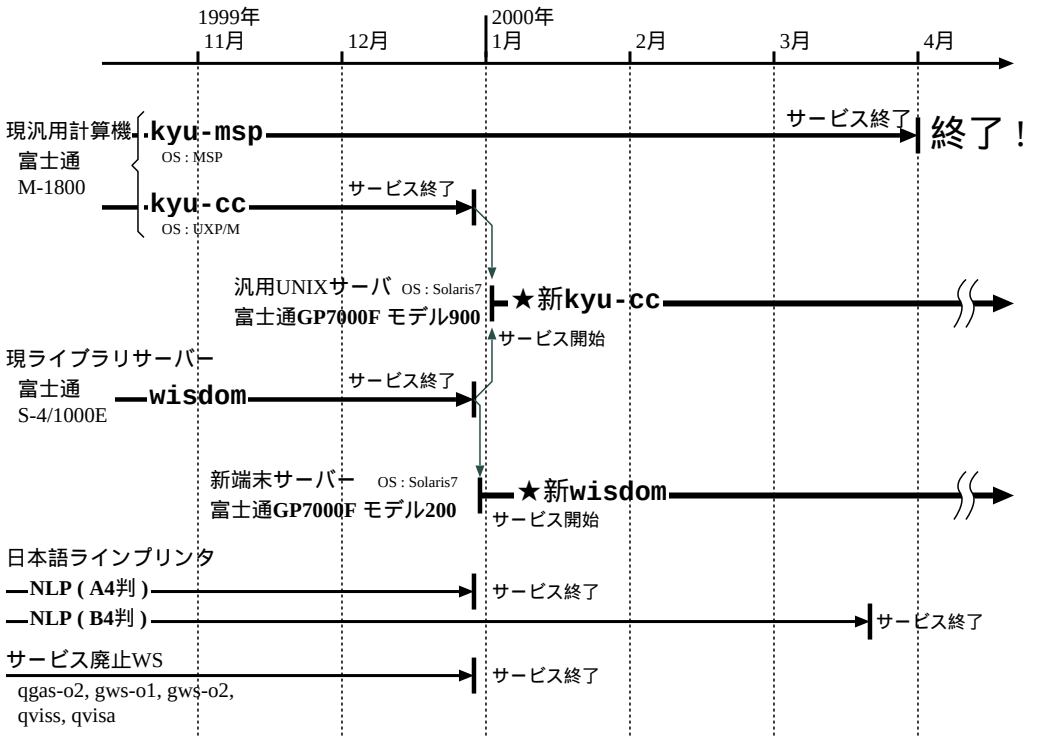

図 5: 更新日程 (予定)

5　サービス終了機器

更新に伴ってサービスが終了される機器を列挙します．サービス停止の時期は，1999 年 12 月末と 2000 年 3 月末の 2 回あります．

5.1 1999 年 12 月末サービス停止機器

- マスストレージ装置
  MSP のマスストレージサービスは停止します．なお，マスストレージ上のファイルは，DASD(磁気テープ装置) に移していますので，2000 年 3 月まで従来通りに利用できます．

- ネットワークポストスクリプトプリンタ
  新しいネットワークポストスクリプトプリンタに更新されます．

- **NLP**(日本語ラインプリンタ) **A4** 判
  A4 判用紙のラインプリンタ印刷サービスを終了します．なお B4 判用紙を印刷するラインプリンタの印刷サービスは 2000 年 3 月末まで継続します．

- パーソナルコンピュータ
  センター 2 階のオープン端末室に設置されていたパーソナルコンピュータの利用は廃止します．その代りに，より高速で使いやすい PC が情報サロンに 32 台設置されています．こちらをご利用下さい．

- ワークステーション
  センター 2 階のオープン端末室に設置されていたワークステーション (WS) のうち，下記の WS が廃止されます．
  - AVS 用 WS(ホスト名:qgas-o2)
    qgas-o2 は廃止します．AVS の利用は可視化処理ワークステーションである vhsgi にて行ってください．
  - α -flow, MASPHYC 用 WS (ホスト名： gws-o1, gws-o2)
    gws-o1 および gws-o2 の 2 つの WS 利用は廃止します．α -flow と MASPHYC は，ワークステーション vhsun で利用してください．
  - WS (ホスト名： qviss, qvisa)
    qviss と qvisa の 2 つの WS は老朽化のためサービスを廃止します．

- **N1** ネットワーク
  NVT や N1 RJE で接続されていたネットワークサービスは廃止します．同時に MSP 用の学情アクセスポイント接続も廃止します．

- **FAX** 出力
  FAX コマンドによる出力は廃止します．

- 専用回線，交換回線
  MSP 用の専用回線および交換回線は廃止します．インターネットまたはダイアルアップによる接続をご利用下さい．

5.2 2000 年 3 月末サービス停止機器

- **MSP** システム
  M-1800/20U の MSP システム (ホスト名： kyu-msp) の稼働は 2000 年 3 月末をもって終了します．

- **NLP**(日本語ラインプリンタ) **B4** 判
  A4 判 NLP に続いて B4 判用紙のラインプリンタ印刷サービスを終了します．新システムでサービスする印刷装置は，ネットワーク PS プリンタ，フルカラー PS プリンタ，A0 版カラープリンタの 3 つです．

- **MT**，**CMT**
  MSP システムに付属していた MT(磁気テープ) 装置，CMT(カートリッジ型磁気テープ) 装置も廃止します．

6　おわりに

2000 年 (平成 12 年)1 月から更新される汎用計算機システムについて概要を紹介しました．新たに導入される汎用 UNIX サーバで様々な科学技術計算が行われ，研究活動が進むことを願っております．

今回の機種更新についての質問がございましたら，冒頭に記述しております電子メールアドレスや電話番号へご連絡下さい．本センターの WWW ページでは随時情報を更新しております．こちらもご参照下さい．

参考文献

[1] 廣川佐千男：“汎用コンピュータシステムの更新について”, 九州大学大型計算機センター広報, Vol.32, No.3, pp.125–126, 1999.