



## 人と人を結ぶ架け橋

計算科学技術班 岩橋 建輔

2002年名古屋大学大学院理学研究科博士課程後期課程満了、博士（理学）。  
分子科学研究所研究員を経て、2006年2月より現職。

自然科学研究機構岡崎共通研究施設の計算科学研究センターは、共同利用として全国の大学や研究機関の数百名規模のユーザーによって利用されています。本センターを利用することができる研究分野は、分子科学、基礎生物学および生理学に限定されていますが、分子科学分野が大半を占めています。分子科学分野の研究では電子状態計算、分子動力学計算、第一原理計算などの様々な種類があります。

これらの研究に使うコンピューターですが、最近の変遷は目覚ましいものがあり、私が着任した2006年以降だけでも計算科学研究センターで存在したコンピューターは富士通のVPPやNECのSX-5というベクトル機からSGIのAltixや日立のSRなどの共有メモリー並列機、そして、いわゆるPCクラスターの分散メモリー並列機へと移り変わり、最近ではGPUアクセラレーター搭載機や「京コンピューター」互換機も導入されています。

一方、ソフトウェアもハードウェアの変遷とともに変化してきました。ベクトル機全盛の時代には高ベクトル化効率を向上させるプログラミングが中心でしたが、スカラー並列機が全盛を迎えるようになってくるとソフトウェアを取り巻く環境は一変しました。並列数が少ない頃は単にMPI並列を中心にプログラミングしていればよかったのですが、同一ノード内に複数コアがあるのが普通の時代になると全て

をMPIで並列化するFlat MPIでは通信がボトルネックになるようになり並列化効率が劣化するので、ノード内はOpenMPで並列化するのが最近の傾向です。また、GPUアクセラレーターを使うにはCUDAというライブラリーを使うか、通常のFortranやCのループの前にプラグマを加える必要があります。「京コンピューター」互換機を真に使いこなすにはMPI並列やOpenMP並列だけでなくハードウェアのネットワークポロジリーを意識してプログラミングしていく必要があります。

ところで、分子科学研究所の他の共同利用とは異なり、計算科学研究センターの共同利用では利用者の方は岡崎まで来所せずにインターネット経由で利用することができます。そのため、利用者の方々とセンターの技術職員が顔を合わせる機会はほとんどありません。共同利用とインターネットは密接な関係があり、計算科学研究センターの技術職員も高度なネットワークの知識が要求されています。

ここまで書いたように、計算科学研究センターの共同利用と関係が深いものは、研究および計算、ハードウェア、ソフトウェア、ネットワークなどがあり、それ以外に利用申請と利用報告などの事務处理的なものがあります。それぞれのエキスパートは、研究系職員であったり、各メーカーのSE、CEの方々であったり、秘書の方であったりしますが、実際的にはそれぞれの複

合領域が重要であり、いろんな人との間に立って「橋渡しする」のが計算科学研究センターの技術職員の役割だと思っています。全分野を覆るだけの技術力を持つことは、簡単に成し遂げられるものではないですが、広く深い知識を得られるよう日々精進しています。

私が今の職との出会いは偶然でもあり、運命であったと感じています。当時、計算科学研究センターのポスドクであった私に対し、計算科学研究センター長でもあった所属研究室の教授の岡崎先生（現名古屋大学）が着任予定の斉藤教授（現計算科学研究センター長）を山手地区の計算科学研究センターまで車で送ってほしいと頼んだことがきっかけでした。山手地区のセンターを案内している途中、「今度、ライブラリーを担当できるポスドク級の技術職員を採ろうとしています」という話を耳にしました。これが人生の分岐点となる瞬間でした。当時、人生に対し先が見えない時代を過ごしていた私にとっては大海で小舟を見つけたようなもので、最終的には応募して採用されました。

ここまでの内容では、計算科学系のプログラムだけは強いと思われるかもしれませんが、学部4年生の頃からシステム管理者見習いとして研究室で管理業務の一部を受け持っていました。この頃の知識は現在の礎となっていて、今となれば飯の種を手に入れたのでした。システム管理者として共同利

## 分子研技術課

用への貢献はいくつかありますが、今回は **jobinfo** コマンドを紹介したいと思います。古くから分子研の共同利用を使っている方は **jstat** コマンドというのをご存知かと思いますが、**jstat** コマンドは各システムのキューイングシステムの状態を見るコマンドをほぼそのまま出力するものであり、システムごとに異なる書式であることだけでなく利用者に必要な情報が欠落しているものになっていました。そこで、元利用者としての感覚を最大限生かし、各システム共通のインターフェースを持つ **jobinfo** コマンドを作成しました。この **jobinfo** コマンドは内部的にはジョブの情報を得るためのAPIを使っているので、システム管理者は類似コマンドを容易に作成できるようになっています。現在は、過去のジョブに対しても同じAPIが使うように拡張されているので、このAPIを使ったプログラムで、前システムの **Altix4700** と **Prime Quest** が運用時に並列化効率が悪いジョブに関して注意メールを自動送信する仕組みを作成しました。また、利用者の方からのジョブの問い合わせでシステム管

理者はどの演算ノードで実行されていたかを確認する必要がありますが、これも容易にわかるようになっています。このAPIを使った究極のプログラムは、ある時点での実行中のジョブの可視化(図1)です。ウェブブラウザでジョブの実行状況の概観、演算ノードの利用状況、ジョブの一覧を数種類の解析方法で表示させることができ、システム管理者はしばしばこれをモニターしています。

これ以外にUNIXのGUIのプログラミングにも興味があり、X Windowの前の時代のSun Viewの時代からイベント駆動型のプログラムに触れていました。時代はX Windowに移行したのですが、**Xlib** や **Xaw** が主流の時代の開発は原始的なライブラリーであることと開発者向け文章が少なく開発者にとって苦痛な時代でした。その後、**XForms** ライブラリーに出会い、同級生の馬場昭典博士(現、理化学研究所研究員)と協力して、分子動力学計算のトラジェクトリービューアーの **MDView** を開発してきました。その後、**XForms** ライブラリーが廃れていったため、**GTK+**

というGUI開発キットを使用するようになりました。現在でも二大GUI開発キットのうちの一つを若い学生時代に修得したこともまた私の財産です。**NAREGI** プロジェクト・次世代スパコンのプロジェクトの予算を使って開発された **Nano-Ignition** という入力支援プログラム(図2)も **GTK+** を使って開発されており、開発予算が無い現在は一技術職員が細々と開発を続けることが可能になっています。

自分の持っている研究の知識、ハードウェアの知識、ソフトウェア開発の知識を総動員して、分子科学研究所の2009年の一般公開用展示物を2つ作成しました。1つ目は、二次元格子モデルのタンパク質折り畳みに関するもので、見学者がコンピューター上で実際にタンパク質モデルを折り畳んでいる間に、コンピューターが最善となるタンパク質構造を求めるというもの(図3)です。人間が手で折り畳むと難しいのですが、コンピューターが解いた模範解答の構造の美しさを知ってもらえたと思います。こちらは計算科学研究センターのホームページからダウンロードするこ



図1 Primergy RX300の利用状況モニター

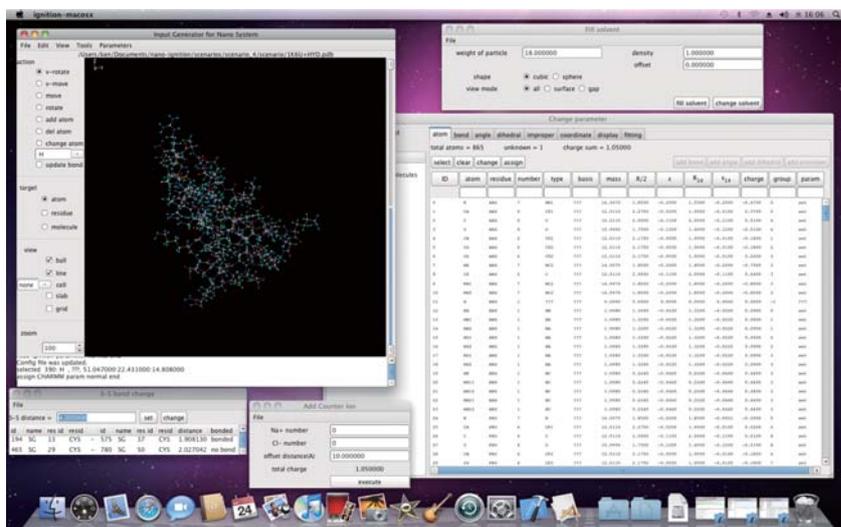


図2 Nano-Ignitionのスクリーンショット

とができます。2つ目は、分子動力学計算で水分子100個のクラスターの系をリアルタイムで計算および三次元立体表示をさせ、外部からの要因として見学者にWiiリモコンを使って別の水分子を動いているクラスターに「投げて」もらうもの(図4)です。その後の分子の動きを見てもらい、コンピューターを使う計算科学の一端を知ってもらうものです。特に後者の展示物は、分子動力学計算、OpenMP、スレッドプログラミング、OpenGL、GTK+といったこれまでに得ていた知識を融合しただけでなく、2台のプロジェクターから

左目用と右目用の出力、偏光を使った立体表示システムの構築、Wiiリモコンからの信号を処理するプログラミングなどの未経験の技術を駆使したものでした。

人と人を結ぶ架け橋になるのにはいろいろなレベルがありますが、技術者が研究者との間で研究に関する架け橋になるのが一番難しいと言えます。研究以外の知識は技術職員になってからでも十分身に付きますが、研究の知識は若い頃に研究者の下で長い時間学んでいないと身に付きにくいものです。研究の知識の有無が顕著に現れる例を

挙げると、計算科学の分野ではプログラムがとりあえず完成し正しい計算結果が得られた後に、プログラム的高速化という段階があります。このとき単にコンピューターやプログラムが得意な人は、研究者が書いたプログラムを局所的に見て高速化を行います。研究の知識がある人が行う場合、アルゴリズムレベルからでも高速化が行えます。前者は「木を見て森を見ず」という状態です。「木も森も見える」技術職員を如何に増やしていくかが技術課の課題です。

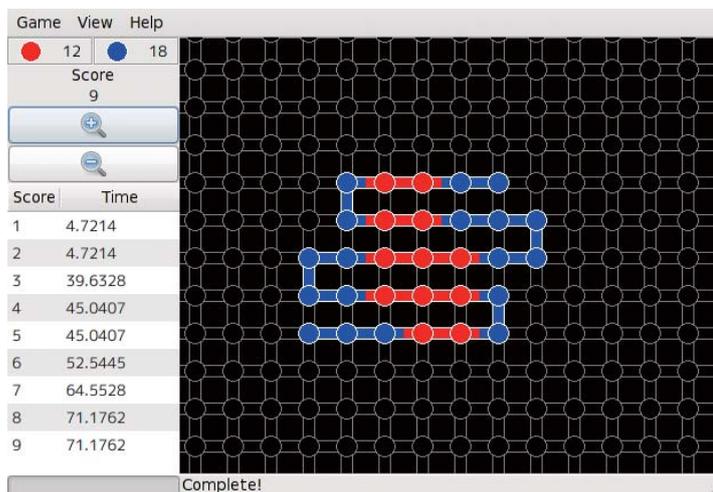


図3 二次元格子タンパク質の折り畳みソフトウェアで最善の折り畳み結果の表示



図4-1 偏光式三次元立体表示システム

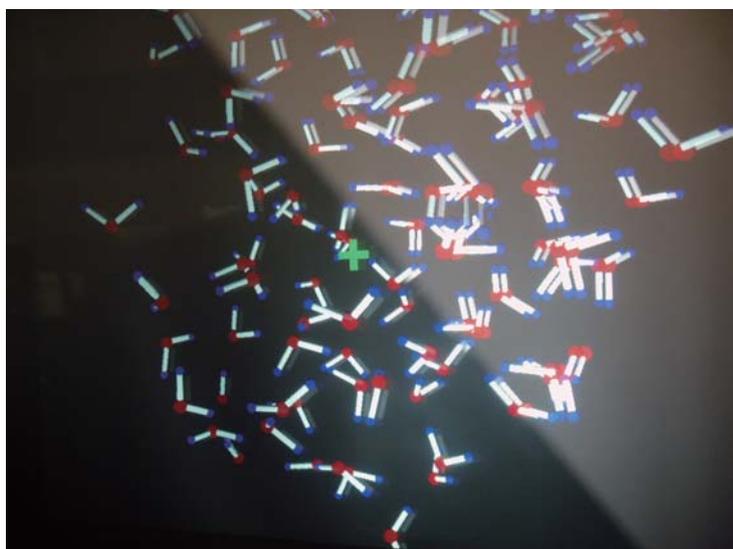


図4-2 実際の三次元立体表示。左斜め下半分は偏光フィルムを通して撮影