

超高速分子シミュレータ（通称、スパコン）を5年半ぶりに更新し、今年2月より新しいスパコンの運用を開始した。今回導入したシステムは、高速I/O演算サーバ（SGI製UV1000 576コア、2013年4月からは1024コア）、クラスタ演算サーバ（富士通製Primergy RX300S7 342ノード5472コア）、「京」用開発サーバ（富士通製PRIMEHPC FX10 96ノード1536コア）、外部磁気ディスク（Panasas製ActiveStor 実効容量1PB）からなる。

近年、センターでは、新規マシンの導入により増加する消費電力、電気料金に頭を痛めてきた。世に出てある程度の期間の経過したCPUは単体当たりの演算は遅いが、価格が安く予算の点からは大量のCPUを導入可能であるが、驚くべき消費電力となる。一方、電気消費量を減らそうとすると、ユーザが期待しているような演算性能を持ったマシンを購入することはできない。今回の調達においては、増加分の電気料を勘案し、調達予算からその分を差し引いた金額でマシンを賄うことを考えた。しかも、電気料の増加をできるだ

け減らすために、演算性能あたりの消費発熱量の少ないCPUの導入を目指しCPU開発状況を調査・検討し、当初予定の2011年7月運用開始のスケジュールを半年遅らせることとした。

また、今回の調達の仕様策定委員会では、これまでの共同利用機の利用実績を踏まえ、高価な大規模共有メモリ演算サーバの導入台数を抑え、コストパフォーマンスのより良いクラスタ演算サーバをできるだけ多く導入する方針を取った。この方針の裏にはvSMPというソフトウェアの導入がある。vSMPにより、複数のクラスタ演算サーバをFirmwareレベルでCPUやメモリなどのリソースを一つに束ねて仮想的に一台のサーバとして扱えるようになる。これにより、中規模な共有メモリを必要とするGaussianなどのジョブをクラスタ演算サーバで処理できるようになり、共有メモリ演算サーバの導入台数を抑えることにした。

さらに、分子科学研究所が「次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム」の分野2「新物質・エネルギー創成」の研究ネットワーク拠点である「計算物

質科学イニシアティブ」の一翼を担っており、京コンピュータで効率よく動くプログラム作成支援の点から、「京」用開発サーバを全国に先駆けて導入した。

CPU性能が向上すると必然的に生成されるデータ量が増える。そこで、容量が大きいというだけではなく、今回導入した外部磁気ディスクではpNFSというプロトコルを採用し、ネットワーク越しのディスクアクセス速度の大幅な向上を図った。導入当初にはトラブルが発生し、利用者にご迷惑をおかけすることとなったが、現在ではそれも沈静化したようである。

上記以外の新機軸として、GPGPUをクラスタ演算サーバの一部のノードに搭載した。センターのアプリケーションライブラリに登録されている分子動力学計算用アプリケーション（Amber、Namd、Gromacs）が既に対応しており、ご利用いただきたい。

キューイングシステムの運用も変更した。これまでは、システムごとに優先度や最大実行時間の異なる三つのキュークラスを設けていたが、今回か



図1 UV1000



図2 Primergy RX300S7



図3 PRIMEHPC FX10

ら全利用者の優先度を平等にした。また、長時間ジョブを実行したいとの希望に応え、最長1か月のジョブの実行を可能にした。

導入当初は空いているノードも見られたが、月を追うごとに利用率が上がり、CPUの空き待ちとなることも多くなってきた。使いやすく演算性能の高いシステムであり、計算が必要な際には是非ご利用頂きたい。

超高速分子シミュレータの更新を終えたばかりだが、既に来年3月には高

性能分子シミュレータ(通称、汎用コン)も更新され、センターの演算性能は現在の約2倍になる。また、これらのハードの導入以外にも、ライブラリ整備についても準備を進めているところである。

ご存知のように、神戸では世界屈指の超並列マシンが本格稼働を控えている。総演算性能ではそのようなマシンに敵うはずもないが、計算センターでは使いやすい環境の導入・提供、そして円滑かつユーザの求める運用に苦心

に苦心を重ねている。自由な発想でこれらのマシンを十二分に利用し、分子科学分野の新しい研究成果の創出に役立てていただければ幸いである。

施設だより

ナノテクノロジープラットフォーム事業始動

分子スケールナノサイエンスセンター長 横山 利彦

平成24年7月2日、文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム事業が10年間の予定で始動しました。本事業は、ナノテクノロジーに関する最先端の研究設備とその活用のノウハウを有する機関が緊密に連携して全国的な設備の共用体制を共同で構築し、本事業を通じて産学官の多様な利用者による設備の共同利用を促進し、産業界や研究現場が有する技術的課題の解決へのアプローチを提供するとともに産学官連携や異分野融合を推進するものです。本事業では、ナノテクノロジー関連科学技術において基本となる微細構造解析、微細加工、分子・物質合成の3つの全国規模のプラットフォームが構築され、分子研は、分子・物質合成プラットフォームの代表機関と実施機関を担うことになりました。分子・物質合成プラットフォームの実施機関は11機関で、北から、千歳科学技術大学、東北大学、物質・材料研究機構、信州大学、分子科学研究所、名古屋大学、名古屋工業大学、北陸先端科学技術大学院大学、奈良先端科学技術大学院大学、大阪大学、九州大学で構成されていま

す。本事業は昨年度まで実施されていたナノテクノロジーネットワーク事業の後継プログラムですが、地区ごとに拠点を形成(分子研は中部地区中核機関)していたナノネット事業から大きく様変わりしました。代表機関窓口には、運営マネージャーが設置され、名工大の産学連携准教授であった金子靖氏が特任専門員として着任しました。

ナノテクノロジープラットフォームは全国規模の共同利用組織であり、可能な限り一体化した運用を行う必要があります。利用形態は、支援要素に応じて、共同研究(分子研の共同研究の協力研究に相当)、設備利用(施設利用に相当)、技術代行(依頼分析など)があり、民間に対しては成果非公開利用に加えて成果公開型利用も実施します。なお、成果公開であっても民間からは利用料を徴収することが義務付けられました。分子研での運営母体は、当面、分子スケールナノサイエンスセンターが担い、ナノセンター運営委員会の下部組織としてナノプラットフォーム委員会(委員は担当責任者全員、委員長は横山)を設け、課題申請の審査を行います。

また、ナノセンターのナノネット室はそのままナノプラット室と改名し事務処理を担当することになりました。平成24年度は始まったばかりであり、利用者の利便性(ナノネットからの継続利用を重視)を考慮した暫定的な運用を行い、25年度以降は新たな運営体制を構築する予定です。平成24年度は、民間企業の成果公開型利用も無料です。表には分子研の支援を一覧にまとめました(次ページ参照)。また、詳細は下記URLにアクセスの上ご参照ください。

ナノテクノロジープラットフォーム事業全体 <https://nanonet.nims.go.jp/>
 プラットフォーム代表機関 <http://nanoims.ims.ac.jp/>
 分子研支援 <http://nanoims.ims.ac.jp/ims/>

まだ始まったばかりのため体制が全くできていない点で大変ご迷惑をおかけすることかと思いますが、皆様のご協力ご支援をよろしくお願いいたします。

表 ナノプラット事業分子研支援要素と担当者一覧

業務・支援要素		担当責任者		担当者	開始年度
代表機関プラットフォーム 運営業務		運営責任者 横山利彦 運営マネージャー 金子靖		船木弓子 遠山 遊	H24
実施機関運営業務		実施責任者 横山利彦			H24
電子顕微鏡支援	高分解能透過分析 電子顕微鏡	機器センター長 大島康裕		齋藤 碧	H24
	集束イオンビーム加工と走査 電子顕微鏡			中尾 聡	H24
放射光利用支援	軟X線透過顕微鏡	UVSOR施設長 加藤政博	小杉信博	大東琢治	H25
	X線磁気円二色性		横山利彦	中川剛志 高木康多	H25
分子物性支援	X線光電子分光	機器センター長 大島康裕	小杉信博	酒井雅弘	H24
	電子スピン共鳴		中村敏和	古川 貢 藤原基靖	一部 H24 ~
	SQUID磁化測定		大島康裕	藤原基靖	H25
	顕微ラマン分光		山本浩史	山本 薫 賣市幹大	H24
	FT遠赤外分光		山本浩史	山本 薫 賣市幹大	H24
超高磁場NMR支援	920MHz 溶液	機器センター長 大島康裕	加藤晃一	山口拓実 中野路子	H24
	920MHz 固体		西村勝之	中野路子	H24
機能性分子材料素子創製 支援	有機薄膜太陽電池の 作製評価	分子スケールナノサイエンス センター長 横山利彦	平本昌宏	嘉治寿彦	H24
	分子性伝導体・有機 トランジスタ作製評価		山本浩史	山本 薫 賣市幹大	H24
	分子触媒		唯 美津木		H24
	有機合成		櫻井英博		H24
	錯体合成		永田 央		H24
	大規模量子計算		江原正博		H24

機器センター 施設利用者控室のご案内

平成23年度までの実験棟改修工事に伴い、明大寺地区における機器センターの設備の部屋割りの見直しが行われ、分光の関係設備を南実験棟1階に集中して配置しました。そこで当センターでは、以前からあった極低温棟の施設利用者控室（2階202室）に加え、今回新たに南実験棟の一室を改修して控室を設けました（1階113室）。測定の合間の休息にご利用ください。個人用のデスクもいくつか用意しておりますのでデータの解析などにもご利用頂けると思います。また、会議用机やホワイトボードも設置しました。当センターの施設利用者の方であれば、どなたでもご利用頂けますが、利用の際は、設備担当者、あるいは事務室（南実験棟1階111室）まで声をかけてください。

お気軽に、ご利用くださいませ。

