施設だより

高性能分子シミュレータの演算サーバ更新（2014年12月）

計算科学研究センター長　斉藤 真司

2013年3月から運用を開始した高性能分子シミュレータ（通称、汎用コン）の演算サーバ部を2014年12月に更新し、運用を開始した。今回導入したシステムは、富士通製PRIMERGY CX2550（260ノード、7280コア）である。この更新により、CPUがSandy Bridge系からHaswell系になり1ノードのコア数が16個から28個となった（ノードあたりのコア数は増大したがノードあたりのメインメモリーは同じなので、コアあたりのメインメモリーの容量は8 GBから4.5 GB程度に縮小した）。

計算科学研究センターには汎用コン以外に2012年2月に更新した超高速分子シミュレータ（通称、スパコン）がある。こちらは引き続き運用されており、富士通製PRIMERGY RX300 S7（130 TFlops、350ノード、5472コア）、富士通製PRIMEHPC FX10（20 TFlops、1536コア）、SGI製UV2000（20 TFlops、1024コア）が利用可能である。UV2000は1つのジョブで最大で512コア、4TBの大規模メモリーが利用であり、FX10は「京コンピュータ」のためのチューニング・テスト計算機として使うことができる。RX300 S7および今回導入したCX2550はいわゆるPCクラスターと呼ばれるものである。CX2550は1つのジョブに使えるコア数の点でRX300 S7とUV2000の中間に位置するものと捉えることができる。今回の更新により、汎用コンの総演算性能が136 TFlopsから302 TFlopsに増強され、スパコンと汎用コンを合わせると、総合性能として約470TFlopsのシステムとなった。各ユーザーの研究課題に合わせ、これらの演算サーバを有効に使っていただければ幸いです。

このような計算資源の強化と並行し、計算センターではシステムの省エネルギー化にも努めている。2014年3月からカーテンの設置により（図2）計算機室の空気の流れをコントロールし、さらに2014年8月からは室外機に水を噴射することにより（図3、図4）、空調設備の冷却効率の改善を図ってきた。その結果、昨年度よりも1割程度の電力削減を達成している。さらに、古く消費電力の大きなスパコン用空調設備をこの3月に更新する予定である。消費電力の削減は地球人として対応すべき課題であり、まわりまわって計算機資源の増強にも繋がるものである。計算科学研究センターでは、今後も様々な工夫・努力を通して、分子科学を中心とする研究分野に大規模計算環境を提供していきます。

図1 新しく導入されたPRIMERGY CX2550

図2 計算科学研究センター旧棟のスパコンに設置されたカーテン。

図3 水噴射設備

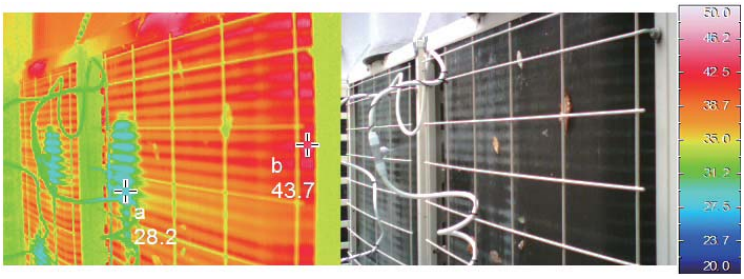

図4 室外機のサーモグラフィ写真。水の噴霧により室外機の温度が約15度低下していることが分かる。