

高性能分子シミュレータを更新

計算科学研究センター 准教授 奥村 久士、技術職員 水谷 文保

高性能分子シミュレータを5年半ぶりに更新し、2017年10月より運用を開始しています。今回はNEC製のスパコンです。このスパコンはノード単位で貸し出すタイプNとコア単位で貸し出すタイプCから構成されています。さらにタイプNは基本量のメモリを積んでいるタイプNN（40コア×794ノード、2.4GHz、192GBメモリ）と大容量のメモリを積んでいるタイプNF（40コア×20ノード、2.4GHz、768GBメモリ）からなっています。一方、タイプCはアクセラレータを積んでいるタイプCA（24コア×96ノード、3.0GHz、192GBメモリ）と積んでいないタイプCC（36コア×159ノード、3.0GHz、192GBメモリ）からなっています。タイプCAは各ノードにGPGPUが2枚ずつ搭載されています。これら全ノードの総演算性能は4.076PFlopsで、これは更新前のスパコンの8.2倍です。これに加えて外部磁気ディスク（DDN SFA14KXE / DDN ExaScaler (Lustre) 実効容量9.4PB）も3.4倍に増設されています。

なお前スパコンは基本的に全て撤去されましたが、例外として「京」用開発サーバ（富士通製PRIMEHPC FX10 96ノード1536コア、20.2TFlops）は継続して供用しています。このマシンは新しいスパコンに比べると計算能力は劣るものの、神戸のスパコン「京」で大規模ジョブを計画している研究者がプログラムを開発するためのニーズがまだあると判断したからです。あわせてご利用ください。

これまで計算科学研究センターでは2年程度時期をずらして超高速分子シミュレータと高性能分子シミュレータの2つを交互に更新してきました。こうすることでユーザーには常に最新の計算機環境を提供していました。しかし年々予算が減っていく状況にあわせて、限られた

予算を集中することでなるべくコストパフォーマンス良く高性能のスパコンを提供しようと考え、前回のスパコン調達時に超高速分子シミュレータと高性能分子シミュレータの契約終了時期を一致させました。当初は2017年4月に新しいスパコンの運用を開始する予定でしたが、CPUの開発状況を調査・検討し、消費電力および発熱量が少ないCPUの導入を目指してスケジュールを半年遅らせることにしました。そしてようやく導入できたのが今回のスパコンです。

今回は全演算ノードに最新の第6世代Intel Xeon (Skylake) を2CPU搭載しています。前スパコンは、第2世代（SandyBridge 2.9GHz 16コア）および第4世代（Haswell 2.6GHz 28コア）のCPUでした。世代が代わるたびにCPUの性能は確実に向上しているのですが、コアの量が増える一方でクロック数が下がってきました。ノード単位でご利用頂いているユーザーには、性能向上の恩恵は得られやすいのですが、コア単位でご利用頂いているユーザーには、このクロックダウンが大きく影響して性能向上の実感が伴わない状況が予想されました。そこで今回のスパコンの特長ですが、コア単位貸出用ノードに

はメインストリートからはずれた低コア、高クロックCPUを導入しました。

さて導入された直後は空いているノード、CPUも散見されましたが、1ヶ月もたたないうちにどのマシンもCPUの空きを待つジョブが見られるようになってきました。仕様を策定した立場としては、それだけユーザーにとって使いやすい環境を用意できたと嬉しく思う反面、今後5年間の運用を考えると早速頭が痛くもなります。

計算科学研究センターとしてはこれらのハード面だけでなく、各種ライブラリの整備も進めており、ソフト面での利便性もますます高めています。さらに、量子化学スクールや分子シミュレーションスクールの開催を通じた人材育成の拠点でもあります。また、計算科学研究センターワークショップを毎年開催し、研究者交流の場も提供しています。現在800人以上のユーザーに計算科学研究センターをご利用いただいています。これは当センター約40年の歴史の中でも最も多い人数です。これからも多くの方に計算科学研究センターの提供する設備、サービスをご活用いただき、分子科学の発展に役立てていただければ幸いです。



NEC製スパコン 高性能分子シミュレータ