

## 5-2 電子計算機センター将来計画 - 1999年と2000年の計算機更新に向けて -

### 5-2-1 現有計算機の構成と利用状況

平成10年1月現在の利用者の総計は約716名、研究課題は187件である。電子計算機センターの計算機システムは、平成6年1月からスーパーコンピュータNEC SX-3が、平成7年1月より並列計算機IBM SPと高速汎用計算機NEC HSPがそれぞれ導入された。この時からオペレーティングシステム(OS)もUNIXに統一された。また汎用演算性能および並列演算性能を増強する目的で、平成8年9月よりNEC HPC計算機、平成9年10月より日立製作所SR2201を導入し公開運用を行っている。

SX-3は3個のベクトル演算器を持ち最高性能は19.2ギガフロップスである。また2ギガバイトの主記憶容量とジョブの一時作業領域として高速に読み書きが可能なRAIDディスクを約60ギガバイト持つ。現在では大規模な配置間相互作用(CI)計算や分子動力学計算など、ベクトル化率が高くしかも大容量の主記憶と一時記憶装置を必要とする大型ジョブを中心に利用されている。

分散メモリ型並列計算機SP2は、平均100メガフロップスの性能をもつ48個の演算装置(CPUノード)から構成されており、各CPUノードは40メガバイト/秒以上の高速度で互いに通信を行うことが出来る高速ネットワークスイッチにより結合されており、メッセージパッシング型の並列計算プログラムの実行を効率よく行うことが出来る。SP2は現在約3分の2のCPUノードは主に逐次実行型のジョブによって利用され、残りの3分の1は並列計算ジョブ用に利用されている。SP2の導入後約3年が経過し現在では並列ジョブ処理環境を利用するユーザの数が徐々に増え、また利用法が高度化する傾向が見られる。

HSPは、高性能の汎用高速計算機であり2ギガバイトの主記憶装置と約20ギガバイトのRAIDディスクをもつ。HSP計算機は、ベクトル化率はあまり高くないが、SP2の逐次専用ノードでは実行が困難な大容量メモリと一時作業ディスクを必要とするジョブの実行に利用され、その意味でスーパーコンピュータと並列コンピュータそれぞれの役割を補間する重要な役目を果たしている。さらに平成8年9月より高速汎用システムの演算能力を増強する目的でNEC HPCを導入した。1ギガバイトの主記憶と2ギガバイトの拡張記憶装置を有し、HSPと同様に中規模なベクトルジョブの処理に利用されている。また、平成9年11月から日立製並列計算機SR2201(16CPU)を比較的低い課金係数で公開運用しているが、並列ジョブの利用率はまだあまり高くない。

分子研計算機センターのCPUサーバーとしての能力は平成6年1月にはそれまでのおよそ9倍、平成7年1月には平成6年1月以前のおよそ14倍になったが、年間平均でもその全CPU能力の約70%が利用されており、常時数十件の待ちジョブが待機している状況になっている。当センターの計算機は、365日24時間運転を行っているため、実稼働率が7割を超えた場合には、平日の日中には常に待ちジョブがある状況となる。特に学会前の混雑時には投入したジョブが実行されるまでの待ち時間が数日に及び状況も発生している。各計算機のCPU能力の増強により、このような事態を早急に改善しなければならない。

### 5-2-2 1999年と2000年の計算機システム更新

平成9年度、文部省に概算要求をしていたスーパーコンピュータ借料の増額によるCPU能力の増強は認められなかった。また導入一時経費もつかないという厳しい結果となったため、外部委員を含む「スーパーコンピュータ検討小委員会」の結論に従い、来年度(平成11年1月)に機種を更新することを断念し、更新を1年延期することとした。平成10年の春より再度、文部省への増額による更新要求を行う。

スーパーコンピュータ検討小委員会では、スーパーコンピュータの更新を1年延期したことから、汎用システムの機種更新を1年早めて、平成11(1999)年1月に行うことが望まれるとの結論を得た。これを受けて、文部省と協議の結果、現有の汎用高速演算システムであるIBM SP2とNEC HSPを平成11年1月に新たな機種に更新するための準備を進めている。現在、計算機メーカー各社からの資料提供の招請と仕様書原案の提示を行い、各社からの提案を求めている段階である。最高演算性能が5ギガフロップスを上回る機種の導入を予定していることから、スーパーコンピュータに準ずる調達手続きを採用することとなった。今後、平成10年5月1日に最終仕様書が完成し、6月22日入札、7月7日開札(機種決定)、8月から新機種への移行作業を開始し平成11年

1月から2月に公開運用開始の予定で調達手続きを進めている。

### (1) 汎用高速演算システムに要求される演算性能

大学の研究室では実行が困難な大容量の主記憶及び一時作業ディスク容量を要求するジョブや、多数のCPUを利用する並列ジョブを実行できる計算環境を提供するため、現有の中規模ベクトル計算機 HSP と並列計算機 SP2 といった2つの異なるタイプの計算機を汎用システムとして更新する。ベクトル計算機としては、従来の半分程度のマシクロックと2倍程度の数のベクトルパイプラインを備えた新型機が来春、スーパーコンピュータメーカー各社から出荷されるため、並列度は5～6程度と低い。単体演算性能が6ギガフロップス程度のベクトル並列計算機を導入できる予定である。また今後、分子科学分野において並列プログラムを積極的に開発してゆくための環境として、各演算器の性能が100メガフロップス程度でできるだけ多くのCPUを有する並列計算機を導入する必要がある。汎用高速演算システム全体の性能としては、更新前の10倍以上の演算能力が必要である。

また計算機開発の技術進歩が非常に速いことから、今回のシステム更新を機会に、汎用高速演算システムのレンタル期間が4年に定着化されることが望まれる。

### (2) スーパーコンピュータシステムに要求される性能

スーパーコンピュータの更新目的の第一は、分子科学分野において大学等では実行が困難である大規模なベクトル並列計算を行う計算環境を整備することにある。一方、現状のように投入したジョブが実行されるまでの待ち時間が数日に及び状況を早急に改善しなければならないため、中小規模のシリアルジョブの実行スループットを向上させる配慮も重要である。このように、ある意味では相反する更新要求を、レンタル期間中の運用変更によって適応可能とする計算機構成を選択することが重要である。すなわち、高い単体ベクトル演算性能を持つ計算ノードをできる限り多数導入し、CPUリソースの分割運用によって、大規模ベクトル並列計算の実行と中小規模ベクトル計算の両方が干渉することなく実行できることが重要である。これを実現するためには、システム全体として大容量の主記憶と一時作業ディスクが必要である。

具体的には、現有スーパーコンピュータの単体CPU能力を上回る8ギガフロップス程度のベクトル計算ノード64以上が必要であり、16ノードと48ノードのようにリソースを分割運用する。主記憶は128ギガバイト以上、作業ディスクは1000ギガバイト以上必要である。平成8年に発足した次期スーパーコンピュータ検討委員会では単体CPU性能を重視するかCPU台数(並列計算の規模)を重視するかで活発な議論がおこなわれた。並列度の高いプログラムへ比較的容易に移行が可能な分子動力学(MD)分野の研究者からはCPU台数を重視すべきとの意見がだされ、一方、大規模な分子軌道(MO)計算や配置間相互作用計算などに代表される並列化が困難な電子状態分野の研究者からは単体のベクトル演算性能と大容量の主記憶および拡張記憶装置の重要性が示された。上記のCPUリソースの分割運用は、大規模ジョブの実行と中小規模ジョブのスループットを運用によりバランスをとってゆく観点としてだけでなく、MD計算とMO計算分野の要求に柔軟に答えて行くための方策としても重要である。

又、CPUリソースの利用状況によっては、超大型計算を奨励する新しい運用方法の導入も検討する必要がある。従来の課金制度とは違う形で、研究課題を募集し、従来のCPU時間やメモリー利用制限の枠を大幅に越えた計算機利用を可能にして、優れた研究成果を引き出すような施策の検討である。

### (3) センターの運用方針

前回の報告にもあるように、計算機センターの利用者は大別すると4つに分類される。

グループA: 分子研理論部門(計算センター含む)。

グループB: 所外の大きな理論グループ。

グループC: 所外の小さな(一人ないし三人程度の若い)理論グループ。

グループD: 実験を主体とする研究グループ。

それぞれのグループで計算機を利用する分野・形態や、必要なCPU時間に相違があり、どのグループを重点的にサポートして

行くかの議論には慎重を要す。最近では、研究所内外のいくつかの研究室単位で強力な計算環境を持つことも一部では可能になってきている。そのような研究グループがさらに強力な演算性能を必要とする研究プロジェクトで成果を上げるためには、グループAとBに一層力点を置いた運営方針を取ることが望ましい。一方、グループCとDの研究者にとって、本センターは研究遂行上不可欠なものであることも事実であり、今後とも適切な配慮が必要である。

#### (4) 世界のスーパーコンピュータの動向とセンターの立場

現在の計算機は様々な観点から分類することができる。たとえば、単体CPU性能の観点からは、1CPUのベクトル性能が5ギガフロップス以上の高価な計算機、4ギガフロップス以下のもの、そしてワークステーションに代表されるベクトル演算器を持たない安価なものという分け方ができる。また、並列度の観点から見ると、並列度の高い（3桁以上の）超並列計算機、並列度の少ないものの、並列計算ができないものという分け方ができる。またCPUとメモリの構成の違いからは、全てのCPUがシステム全体のメモリを共有する「共有メモリ型」と各CPUがそれぞれ局所メモリを持つ「分散メモリ型」、そして分散メモリのハードウェア構成を持ちながら基本ソフトウェアにより論理的に共有メモリ計算機として利用できる「分散共有メモリ型」に分類することができる。さらに、並列計算機ではCPU間を結ぶ通信経路のトポロジーと通信性能の違いによって幾つかの形態がある。

欧米では、計算機アーキテクチャの研究を専門とする分野はもちろんのこと、科学計算分野においても単体CPU性能の向上に頼る時代は終わり、基本ソフトウェアと高速通信技術における並列計算技術の発展に将来の大規模計算環境を委ねる機運が高まっている。ここで並列化の基本ソフトウェア技術として分散共有メモリ計算機におけるマルチスレッドや分散メモリ計算機のメッセージパッシングが挙げられる。たとえば米国では1996年よりAccelerated Strategic Computing Initiative (ASCI)を国家プロジェクトとして提案し、コンピュータメーカーと国立研究所が共同で大規模な超並列計算機の開発を推進している。我が国でも欧米の計算機動向に追従し、かつて単体CPU性能で世界1、2位を争っていたスーパーコンピュータメーカーも、超並列計算機のみ開発に方針転換している。このような状況の中、電子計算機センターは将来にわたり最先端の大規模計算環境を分子科学者に提供することを最重要と考え、計算機アーキテクチャの動向に注視する努力を怠ってはならない。一方、現状では並列コンパイラや並列プログラム開発のための支援ツールが未成熟な状況であることもまた事実であり、分子科学計算分野はあくまで高速計算機を研究道具として利用し続ける1研究分野であり、安易に並列計算機一辺倒の運営に踏み切ることも慎重にしなければならない。

### 5-2-3 分子研における計算分子科学分野の重要性とセンターの役割

今日、理論化学的手法の発展と計算機の進歩によって、従来では不可能と考えられていたような複雑な系を不必要なモデル化を行わずそのまま研究对象として扱うことができるようになってきている。分子科学における計算科学は、単に実験の解析にとどまらず実験の先導的な役割を果たしており、90年代の後半に至り計算的手法の重要性は質的転換を遂げたと言える。21世紀において計算分子科学は一層の発展が期待されている。特に、分子研の理論部門は平成7年度から1部門が増設され、計算機センターのグループを加えると専任の研究グループは7になった。各研究グループは独自にワークステーションを持ちプログラム開発や応用計算を進めているが、同時に計算機センターの計算機利用の中で大口利用者でもある。計算機センターは、研究所内の理論グループに卓越した計算環境を提供していく必要がある。そのためには、所外には公開しない特別な運用を行う計算機の導入も検討していく必要がある。その一環として、理論研究系と計算機センターのスタッフが中心となって、たとえば文部省研究基盤重点設備費に「計算分子科学の展開」を要求していくなどの努力も必要である。

1986年のベクトル型スーパーコンピュータのセンターへの導入は、分子動力学計算と反応動力学計算分野の研究者に大きな刺激を与えた。この様に将来の超並列スーパーコンピュータの導入が、新たな分子科学計算分野の進展を促す可能性も十分にあり、前述のように超並列時代を見据えた方法論の開拓が重要である。計算機のハード・ソフトの両面の進歩は速く、またその最新の成果を研究に取り入れることによって、質的な変化をもたらす研究を進めることが可能になる。計算機センターの現スタッフは

あくまで計算機利用者の一員として、計算機アーキテクチャの動向や並列ソフトウェアの進展状況を冷静に判断し、プログラム開発やアルゴリズム理論の非専門家である分子科学者に適切な計算環境をバランスよく提供するための人員構成をとっている。一方、計算機の発展に密着しベクトル並列型、超並列及び分散共有メモリの並列計算機などの新しいアーキテクチャの計算機の能力をフルに活用するためのスタッフも重要であり、分子科学計算アルゴリズムの開拓や、計算機アーキテクチャの特徴を生かした分子シミュレーションプログラムの開発研究を行うことのできる研究グループが、計算機センター内に新たに1グループ(助教授1 助手1 技官1)は必要である。また研究要素として大規模なソフトウェアの構築を含む研究開発テーマなど、多くの若手研究者を必要とする分野(この分野は欧米に依然立ち後れていると言わざるを得ない)では、研究系教官と共同でプロジェクト研究課題を提案し、大学等では困難な課題にも挑戦してゆく必要がある。

#### 5-2-4 国際分子科学計算センターとして

分子理論部門における外国人長期滞在研究者の割合は高い。インターネットを通じての計算機利用が可能になった今日、これら長期滞在者は帰国後も共同研究が継続されるようになっている。このようなインターネットを通じた国際共同研究を進めていく必要がある。また、現在分子研が概算要求している「多国間国際協力事業」の一つとしてプロジェクト方式の研究課題を新たに設定することが可能であろう。

アジア諸国を中心に、計算環境が十分備わっていないが潜在的に優秀な分子科学研究者を持つ国々の研究者に対し、プロジェクト申請の道を開き、国際的な計算機センターへ飛躍させる事は今後の検討課題である。この制度の実現のためには、計算環境の一層の充実が何より前提であり、さらに課題審査制度の確立、専任の助手(出来る限り外国人の)の採用など多くの課題を解決しなければならない。

#### 5-2-5 センターライブラリ開発の研究プロジェクト化

センターライブラリ開発制度を見直し、件数を絞って集中的に開発支援できる形にしなければならない。外部研究者に開発プロジェクトを公募すると同時に、予算的措置を伴ったプロジェクト開発制度を発足させることも検討する必要がある。

#### 5-2-6 QCLDBの事業化

センターのスタッフが過去に積極的に参加し、量子化学者のみならず広く化学・物理学研究者から高い評価を受けているQCLDB (Quantum Chemistry Literature Data Base)の開発に対し今後も予算的にはもちろんのこと、センターの業務として支援する体制をとり続ける必要がある。現在、米国のいくつかの国立研究機関では、WWW(World Wide Web)を通じてその機関が作成したデータベースを全世界に公開している。このような形の全世界の学会に対する寄与は、特に生物学や素粒子・原子核の分野などではその研究機関の一つの「業績」として高く評価されている。

我が国ではデータベース作成による世界の学会への寄与は、QCLDBを除いて皆無であると言われているが、平成9年夏からはQCLDBも、WWWを通じて登録制の公開を試験的に開始した。この公開をハード・ソフトの両面で長期的に安定運用をするためには、正式に分子科学研究所の事業の一つとする必要がある。1)データベース作成・管理・運用のためのハードウェア整備 2)データベース作成のための謝金と事務費の確保のために予算的措置をとる必要がある。もちろんQCLDBを開発・作成しているQCDB (Quantum Chemistry Data Base)研究会と緊密に連携をとってこの事業は進めなければならない。

### 5-2-7 情報ネットワークと計算機センター

平成7年度末に完成した岡崎国立共同研究機構の超高速ATMネットワークシステム(新ORIONと呼ぶ)によって、分子研のスタッフ・学生の電子メール・インターネットの利用は著しく向上し、ほとんどの研究者にとって情報収集と発信のための不可欠な手段になっている。計算機センターは機構情報ネットワークの構築と運用に当初はたずさわらなかったが、平成7年度に情報ネットワークの担当技官が採用され、センターに配属されたのを契機に、センターは分子研内のネットワーク業務に関与するようになった。計算機センターの主要目的は、分子科学における計算科学の支援であり、情報ネットワーク、特に電子メールなど情報交換を支援する業務はこれまで軽視されてきた。これからも、このような業務は主要業務とはならないが、上述のように、研究所内はもとより国内外との高速情報交換網は、計算科学を推進する上に非常に重要な基盤設備であり、また、情報ネットワークを企画・管理・維持するのに必要な知識や技術は計算機センターのスタッフに要求されている知識や技術と多くの共通部分があるので、センターは、分子研内はもとより、岡崎国立共同研究機構内のネットワークの企画・運用に関与する必要がある。

センターの計算機を国内外の研究機関から高速かつ安定に利用するために、名古屋-岡崎間の情報交換速度を主要大学間と同じ速度に常に維持していく必要がある。そのための一つ的手段として計算機センターの予算の中で学術情報センターへの専用回線を契約する可能性も追求する必要がある。