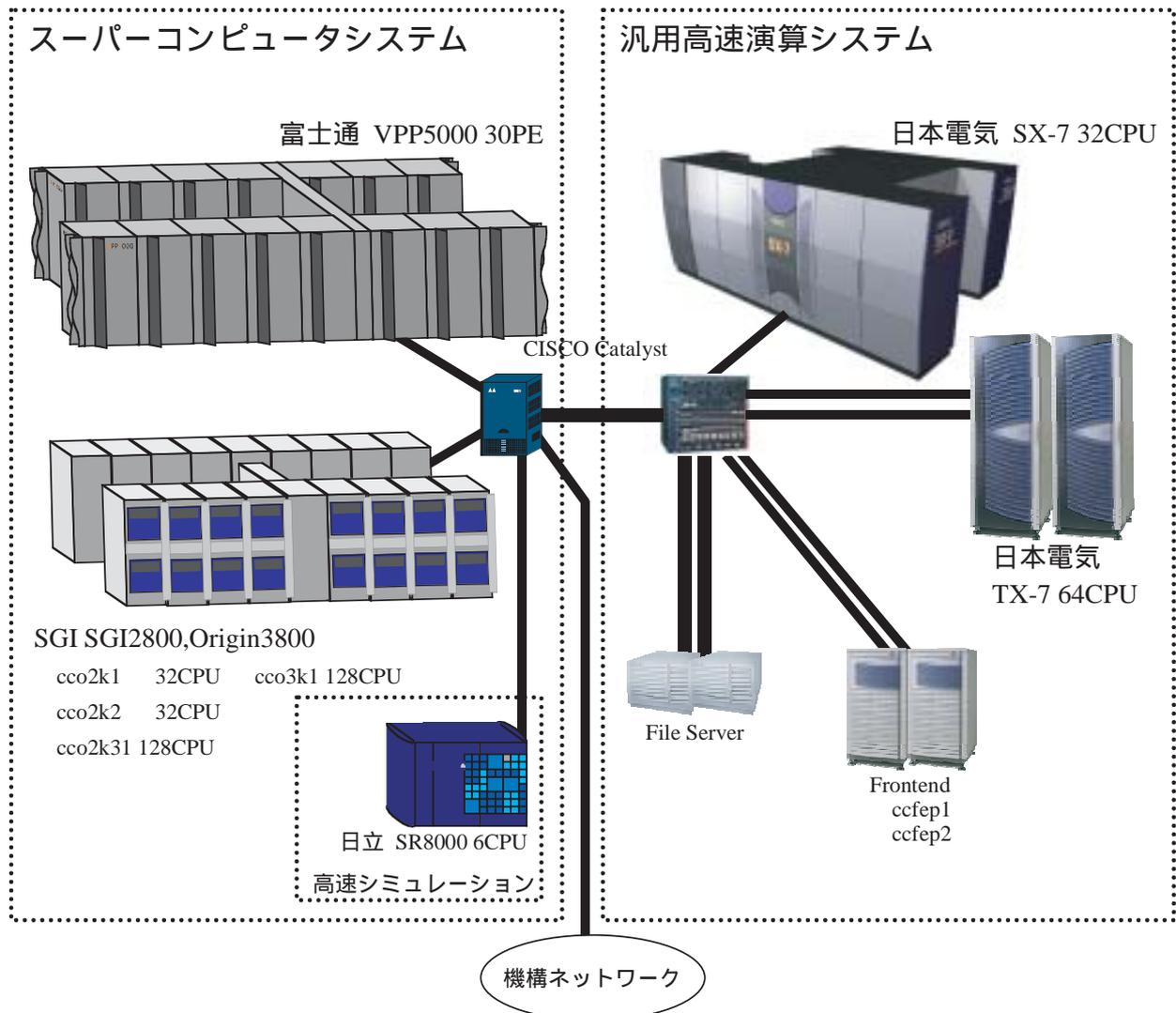


## 5-4 計算科学研究センター

2005年1月現在の計算機システムの概要を下図に示す。図の左側は2000年3月に導入されたスーパーコンピュータシステムで、図の右側は2003年3月に更新されて山手地区に設置された汎用高速演算システムである。



システム構成図

スーパーコンピュータシステムは、富士通製 VPP5000 と SGI 製 Origin から構成されている。VPP5000 は 1 CPU 当たりの最高演算性能が 9.6 Gflops のベクトル演算装置 30 台から構成され、各 CPU に 8 ~ 16 GB の主記憶装置をもつベクトル並列計算機である。一方、SGI Origin は 1 CPU 当たりの最高演算性能が 0.6 ~ 0.8 Gflops のスカラー演算装置 320 CPU から構成され、1 CPU 当たり 1 GB の主記憶をそれぞれの CPU から共有メモリとしてアクセスが可能な分散共有方式の超並列計算機である。VPP5000 では高速なベクトル演算能力を活かした大型ジョブの逐次演算処理や 8 台以上のベクトル演算装置を使った大規模なベクトル並列演算が可能である。Origin2800/3800 は Non Uniform Memory Access (NUMA) 方式と呼ばれる論理的な共有メモリ機構を有する。NUMA は主記憶装置が各 CPU に分散して配置されてい

るためCPUから主記憶へのアクセス速度が非等価ではあるが、利用者プログラムから大容量のメモリを容易に利用することができるので、大規模な並列ジョブの実行が可能となる。高速シミュレーションシステムの日立製SR8000は、主に機構内における利用を目的として運用されている。

一方、2003年3月に導入された汎用高速演算システムは、NEC製SX-7で構成される主システムとTX-7で構成される副システムとから成る。NEC SX-7は1 CPUあたり8.8 Gflopsの最高演算能力を持ち、256 GBの共有メモリに結合された32 CPUの演算装置から構成され、総合演算性能282.5 Gflopsの共有メモリ型ベクトル計算機である。また、TX-7は4 GBのメモリを持ち最大4 Gflopsの演算性能を有するCPUを32台搭載したノードを基本単位として構成されている。本システムは2ノードから成り、合わせて64 CPU、256 GB、256 Gflopsの総合性能を有する分散メモリ型スカラー計算機である。このうち主システムは高速演算、大容量メモリを活用した大規模分子科学計算に用いられ、また副システムは分子科学計算に加え、ホモロジー検索を主としたバイオサイエンス分野での利用に供されている。

2004年度も144の研究グループの550名にもおよぶ全国の利用者に共同利用施設として広くサービスを提供し、計算科学分野の中核的拠点センターとしての役割を果たしている。最近の大規模計算への要求に答えるために、2004年4月から運用の抜本的な変更を行い、これまでと比較してはるかに高度で便利な計算環境の整備を行った。変更の主なポイントは、

(a)CPU時間とメモリーの上限を大幅に緩和して、大きな分子の電子状態計算を可能にした。また、デスク容量の上限を大幅に緩和して、分子動力学計算等の巨大データの保存を可能にした。

(b)大規模計算を高速処理するための並列計算キューを大幅に拡充した。

(c)これまでの特別申請を簡素化した特別利用キューを新設し、申請時に簡単な説明を追記するだけで、360時間(16-32cpu, 128GBメモリー)もの長時間ジョブを可能にした。

(d)アプリケーション利用キューを新設し、機種に依存しないWebからの標準入力で、量子化学計算で最も利用頻度が高いGaussianプログラムの効率的実行を初心者にも簡便に実行可能にした。

これらの変更により、これまでと比較して格段に大規模な計算が実行できるようになった。たとえば、HF/6-31G(d)法で、原子数338、基底関数4,238の分子系のSCF(21回)+forceの計算がTX-7(16cpu)を利用して9時間足らずで終了するので、巨大な分子の理論研究も可能になった。今回の変更によって大規模な計算ばかりでなく、小規模な計算も効率的に実行できるのも特徴である。次年度にスーパーコンピュータを更新することにより、2006年4月からはさらに巨大な分子系の大規模計算を可能にする計算環境を提供する予定である。

計算科学研究センターには、超高速コンピュータ網形成プロジェクト(NAREGI)のナノサイエンス実証研究のために、2004年3月から総理論演算能力が10 Tflopsの大型計算機システムが導入されている。アプリケーション開発拠点としての研究推進はもとより、事務局と計算機システムの運用という重要な役割を果たしている。

分子科学ばかりでなくバイオサイエンス分野の計算科学の唯一の全国共同利用センターとして、計算環境の提供ばかりでなく、分子科学を基盤とする計算科学の裾野を大きく広げて、国際的に先導的な計算科学研究発達の中心拠点としての進展を目指して運営を進めていく。このために、以下のことを現在計画している。

(1)高速パソコンクラスターの最近の普及によりセンターへの期待と役割がこれまでとは大きく変化してきている。これに答えるために、通常の研究レベルでは不可能な大規模計算を実行できる計算環境の整備と強化を引き続き進めて、来年の3月にスーパーコンピュータを更新することにより、これまでと比較して格段に巨大な分子系の理論研究も効率よくできるようにする。このために有用な計算プログラム、分子モデリングプログラム、動画処理プログラム等を強化していく。また、超大規模計算によって計算科学のブレイクスルーや新展開が期待できる特徴ある研究

計画には、計算資源を優先的に大きく解放する方法を検討していく。

(2)物質科学はもとより生命科学分野でも、分子科学を基盤とする計算科学とコンピュータシミュレーションは、実験に並ぶあるいはそれ以上に有力で強力な研究方法として今後ますます重要になる。計算科学研究分野での新機軸を先導的に展開するために、これまでのスーパーコンピューティングやグリッドコンピューティングの豊富な経験を活かして、国内の代表的な「理論化学研究会」と「分子シミュレーション研究会」の協力のもとに、分子科学研究所に本年度新設された計算分子科学研究系を中心にして「巨大計算に基づいた分子・物質シミュレーションナショナルセンター形成」の実現を目指す。このためのシンポジウムや研究会を開催して人的交流を促進すると同時に、内外の研究者の支援のもとに若手研究者や大学院生の育成のための教育プログラムを進めて、計算科学の裾野を広げる。また、ナショナルセンターとして大きく機能していくために、NAREGI プロジェクト「ナノサイエンス実証研究」に代表される大型プロジェクトの推進ばかりでなく、国内に加えて多国間共同研究など国外の研究グループ（特にアジア地域の研究者）との国際共同研究支援のあり方を検討していく。

本年度の外部評価でも指摘されているように、これらの実行にはセンターの人的パワーの補強が強く求められている。