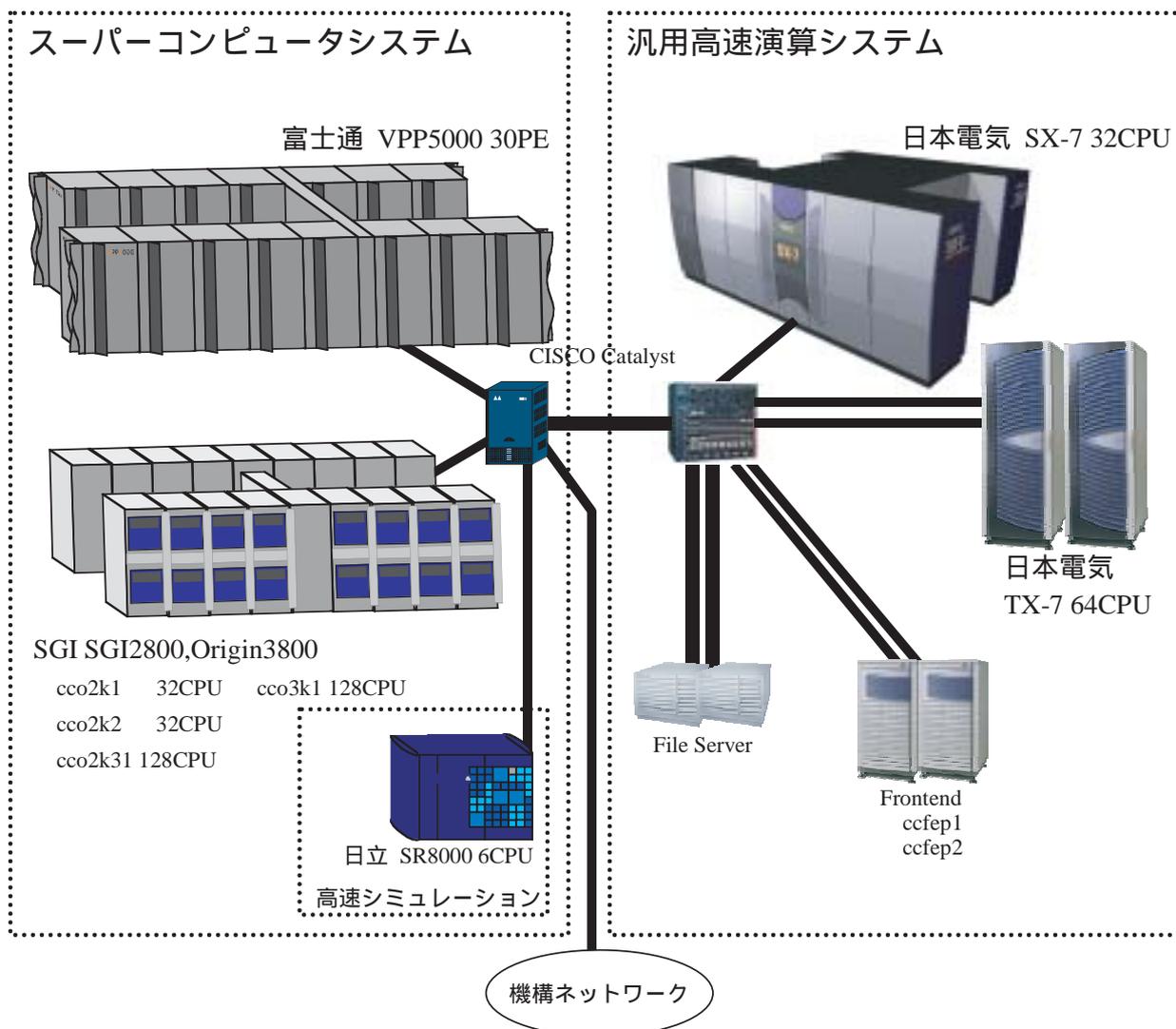


5-5 計算科学研究センター

2006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 1CPU 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 1CPU 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 320CPU から構成され、1CPU 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1CPU 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 32CPU 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 64CPU、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。

2005年度も132の研究グループの総数514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。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。

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、通常の研究室レベルでは不可能な大規模計算を実行できる計算環境を提供するために、2006年6月にスーパーコンピュータを更新する。

2006年7月より運用を開始する新システム「超高速分子シミュレータ」は、これまでの共同利用のスーパーコンピュータシステム(富士通 VPP5000, SGI2800/Origin3800)の後継機である。新システムは、量子化学、分子シミュレーション、固体電子論、反応動力学などの共同利用の多様な計算要求に応えるための汎用性があるばかりでなく、ユーザーサイドのPCクラスターで実行が不可能な大規模計算を実行できる性能がある。新システムは富士通のPrimeQuest とSGIのAltix 4700から構成される共有メモリ型スカラー計算機で、両サブシステムは同一体系のCPU(Intel Itanium2)およびOS(Linux 2.6)をもとに、バイナリ互換性を保って一体的に運用される。システム全体として総演算性能8 Tflops で総メモリ容量 10 TByte 超である。

PrimeQuest サブシステムは、64CPU コア /256 GB からなる SMP ノード10台で構成される。演算ノード間は 16 GB/s のバンド幅で相互接続され、大規模な分子動力学計算などノード間をまたがる並列ジョブを高速で実行することができる。Altix 4700 サブシステムは4 ノード構成からなり、各ノードは 160CPU コア / 2,064 GB を有する NUMA 型の共有メモリシステムである。さらに本サブシステムには、磁気ディスク装置 SGI TP9700 がジョブ作業領域として提供され、実効容量 104 TB および総理論読み出し性能 12 GB/s を有するディスク I/O を実現する。本サブシステムは大容量(最大 2 TB) の共有メモリおよび超高速ディスク I/O に特徴をもち、大規模で高精度な量子化学計算を可能とする。

新システムの導入にあたって運用面でも、世界をリードする計算科学研究を本センターから発信していくことができるよう、大規模ユーザのために新たに施設利用 S を設定する。審査により、年間 3 - 4 件程度の利用グループに本システムを優先的に使用していただき、従来の共同利用の枠を超えた超大規模計算の環境を提供する。また、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、計算科学の裾野を拡げていく。ナショナルセンターとして大きく機能していくために、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。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。