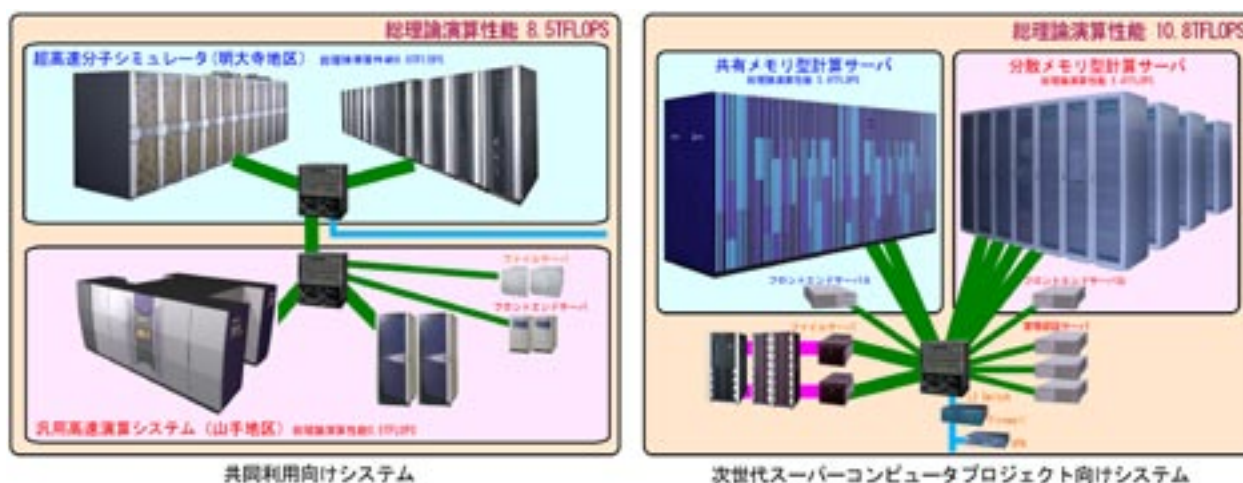


5-5 計算科学研究センター

計算科学研究センターにおいては、2000年度における計算科学研究センター化にともない、従来の共同利用に加えて、理論、方法論の開発等の研究以外にも、研究の場の提供、ネットワーク業務の支援、人材育成等の新たな業務に取り組んできているところであるが、2006年度においても、次世代スーパーコンピュータプロジェクト支援、分子・物質シミュレーション中核拠点形成、ネットワーク管理室支援等をはじめとした様々な活動を展開してきている。上記プロジェクトについてはそれぞれの項に詳しく、ここでは共同利用に関する活動を中心に、特に設備の運用について述べる。

2007年1月現在の計算機システムの概要を下図に示す。システムは大きく分けて2系統からなる。最初のもは共同利用に供している超高速分子シミュレータと汎用高速演算システムからなり、前者は今年度、2006年7月に新たに導入され、後者は2003年3月に更新されて山手地区に設置されている。もうひとつは、次世代スーパーコンピュータプロジェクトにおけるアプリケーションの開発環境であるが、これらはいずれも分子科学やナノサイエンスの計算科学分野における高性能システムである。



システム構成図

まず、2006年7月より運用を開始した新システム「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Altix4700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 (Linux2.6) 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、64 CPU 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。Altix4700 サブシステムは 2 ノード構成からなり、それぞれ 512 CPU コア / 6 TB および 128 CPU コア / 2 TB 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 6 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。

共同利用における新システムの導入にあたり、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 を設定した。これに従い、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している。

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。

共同利用に関しては、2006 年度も 141 の研究グループの総数 555 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。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さらに充実するために、汎用高速演算システムを 2008 年 2 月に更新する。

一方、次世代スーパーコンピュータプロジェクト・ナノ分野グランドチャレンジ研究におけるアプリケーション開発環境として、Hitachi SR11000 と HA8000 を運用している。このうち、SR11000 は、総合理論演算性能 5.44 Tflops、総メモリ容量 3.072 TB の共有メモリ型スカラー並列コンピュータであり、システムは 16way (CPU) を持つ演算ノード 50 台で構成され、ノード間は 8 GByte/s のクロスパーで相互接続されており、周辺装置として 6.8 TB の RAID ディスク装置装備している。HA8000 は、総合理論演算性能 5.495 GFlops、総メモリ容量 1.796 TB の分散型スカラー並列コンピュータで、演算ノードとして 2 CPU を持つ PC サーバ 449 台から構成され、128 ノードごとに 2 Gbps で相互接続してクラスタを形成している。各クラスタは、周辺装置として 1.1 TB の RAID ディスク装置を備えている。

計算科学研究センターは、国家基幹技術の一つとして位置づけられている次世代スーパーコンピュータプロジェクトの中で、ナノサイエンスに関わるアプリケーション開発という重要な役割の一端を担っており、分子科学に関わる計算科学研究のナショナルセンターとでもいふべき分野拠点として、多様な活動の展開がさらに求められている。