

8-6 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、2007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、特に設備の運用とセンターの将来構想の検討の必要性について述べる。

2008年2月現在の計算機システムの概要を図と表に示す。システムは大きく分けて2系統からなる。最初のものは共同利用に供しているシステムであり、超高速分子シミュレータと高性能分子シミュレータからなる。前者は2006年7月に導入し明大寺地区に設置され、後者は今年度2008年2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。

「超高速分子シミュレータ」、「高性能分子シミュレータ」は、いずれも量子化学、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う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クラスターでは不可能な大規模計算を実行できる性能を有する。

まず、「超高速分子シミュレータ」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。

一方、2008年3月に導入された「高性能分子シミュレータ」は、演算サーバ、ファイルサーバ、フロントエンドサーバおよびネットワーク装置から構成される。演算サーバは、日立製作所製のSR11000後継機であり、1 CPU コアあたり18.8 Gflopsの演算性能を持ち、1ノードが32 CPU コアと256 GByteメモリを有する共有メモリ型スカラー計算機である。理論総演算性能は5.4 Tflops、総メモリ容量は2.3 TByteであり、一時作業領域として23 TByteのディスクを装備している。本演算サーバは、浮動点少数演算量が多い分子科学計算はもちろんのこと、高クロック周波数CPUの強みを生かし、従来性能が出しにくかった整数演算や論理演算を多用するプログラムも性能を発揮することが期待される。ファイルサーバは、共同利用システム全体のホームディレクトリ等のサービスを行い、128 TByteのディスクを装備している。またバックアップ領域として60 TByteのディスクも装備している。

共同利用に関しては、2007年度も144の研究グループにより、総数589名にもおよぶ利用者がこれらのシステムを日常的に利用しているが、システムの運用にあたり、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、特に大規模ユーザのために施設利用Sを設定している。これに従い、審査により、平成19年

度は4件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。

さらに、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のクロスバーで相互接続されており、周辺装置として6.8 TBのRAIDディスク装置を装備している。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、活動を展開している。

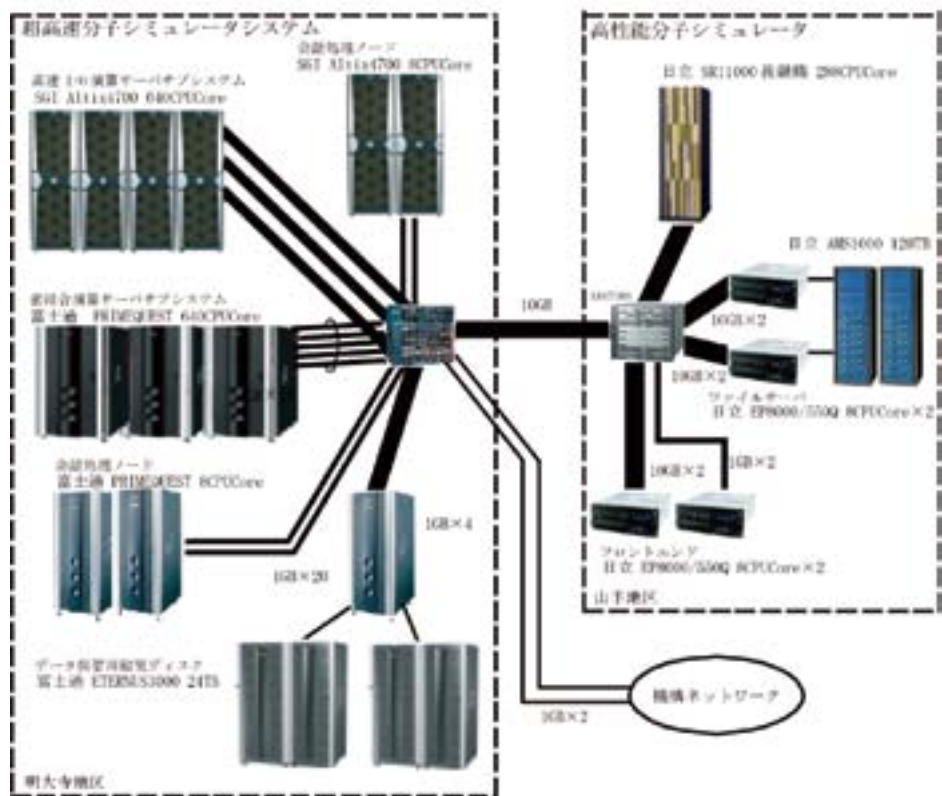
この中で、昨年度は計算科学研究センターの前身である分子科学研究所電子計算機センター設立30周年にあたり、2007年2月に開催された設立30周年記念スーパーコンピュータワークショップにおいては、基調講演、パネルディスカッション等を通して理論・計算分子科学研究コミュニティから計算科学研究センターに対する将来にわたる期待が寄せられた。これを受けて、計算科学研究センターを事務局としてセンターユーザーをはじめとした理論・計算分子科学研究コミュニティの主だった先生方により懇談会が組織され、次世代スーパーコンピュータへの関わりを中心に計算科学研究センターの位置づけ、果たすべき役割等について検討がなされた。そこでの議論は、次世代スーパーコンピュータへの提言として意見書の形にまとめられ、文部科学省へ提出される予定となっている。

その中で計算科学研究センターに期待されている重要なアクティビティの大筋は以下の通りである。

- (1) 神戸に設置される次世代スーパーコンピュータの共用に際して、理論・計算分子科学領域を含め、計算科学研究センターがナノサイエンス分野、分子科学分野の分野拠点として機能していくこと、つまり神戸センターが計算機の運用に対して責任を持つ一方で、分子研は分野の研究に対して責任を持ち、研究をリードし、取りまとめを行っていくこと。
- (2) このため、分子科学研究所に理論・計算ナノサイエンス特別研究センターを設置し、計算科学研究に加えてソフト開発を含めたライブラリの整備や研究支援活動を行っていくこと。

このような提言を受け、計算科学研究センターではこれらを実施していくための体制や事業計画等、具体的な方策を検討するために運営委員会に外部の先生も含めた将来構想委員会を設置し、議論を開始しようとしているところである。

システム構成図



高性能分子シミュレータシステム

演算サーバシステム	
型番	HITACHI SR11000 次世代モデル
OS	AIX
CPUCore 数	288 (32CPUCore × 9 ノード)
総理論性能	5.4TFLOPS
総メモリ容量	2.2TB (256GB × 9 ノード)
ディスク容量	23TB (/work)
ファイルサーバシステム	
型番	HITACHI EP8000/550Q (2 ノード)
OS	AIX
総メモリ容量	64GB (32GB × 2 ノード)
ディスク容量	120TB (/home (37.4TB)、/week (20.0TB)、/save (37.4TB))
	60TB (バックアップ用)
フロントエンドサーバ	
型番	HITACHI EP8000/550Q (2 ノード)
OS	AIX
総メモリ容量	64GB (32GB × 2 ノード)
高速ネットワーク装置	
型番	Alaxala AX6708S

超高速分子シミュレータシステム

蜜結合演算サーバサブシステム	
	型番：富士通 PRIMEQUEST
	OS：Linux
	CPUCore 数：640 (64CPUCore × 10 ノード)
	総理論性能：4.096TFLOPS (409.6GFLOPS × 10 ノード)
	総メモリ容量：2.56TB (256GB × 10 ノード)
	ディスク容量：800GB × 10 ノード (/work)
	：8TB (/week)
高速 I/O サーバサブシステム	
	型番：SGI Altix4700
	OS：Linux
	CPUCore 数：640 (128CPUCore + 512CPUCore)
	総理論性能：4.096TFLOPS (819.2GFLOPS + 3276.9GFLOPS) (6.4GFLOPS/CPUCore)
	総メモリ容量：8TB (2TB + 6TB)
	ディスク容量：114TB (/work)
高速ネットワーク装置	
	型番：Catalyst 6504