

8-6 計算科学研究センター

計算科学研究センターは、2000年度の組織改組（電子計算機センターから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、2010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。

2011年2月現在の共同利用サービスを行っている計算機システムの概要を図と表に示す。本システムは、「超高速分子シミュレータ」と「高性能分子シミュレータ」から構成されている。前者は2006年7月に導入し明大寺地区に設置され、後者は2008年2月に更新されて山手地区に設置されている。「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SR16000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。

さらに、2012年2月以降に「超高速分子シミュレータ」を更新するために、2010年1月に仕様策定委員会を設置し、導入に向けた手続きを開始している。

共同利用に関しては、2010年度も169の研究グループにより、総数662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、2010年度は5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。また、近年、共同利用における利用者の数が増加傾向にある。このことは、計算科学研究センターが分子科学分野や物性科学分野において、極めて重要な役割を担っており、特色のある計算機資源とソフトウェアを提供していることを示している。

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べき分野拠点として、活動を展開している。この中で、本年度は計算科学研究センターワークショップとして、「分子科学プログラムライブラリの充実にむけて」をテーマとしたワークショップを開催した。

また、本年度より、次世代スーパーコンピュータプロジェクトである「ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」と平行して、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（HPCI）戦略プログラムが開始した。その中で、物性科学分野、分子科学分野、材料科学分野が、HPCI 戦略プログラム分野2「新物質・エネルギー創成」計算物質科学イニシアティブ（CMSI: Computational Materials Science Initiative）を構成し、HPCI 戦略プログラムを推進している。今後、分子科学研究所は、CMSI の戦略機関の一つとして参加し、分子科学分野の中核として戦略プログラムを推進する。その事業の中で、計算科学研究センターは、HPCI の資源提供機関の一つとして HPCI 戦略プログラムに参加する。具体的には、本年度後期より、コンピューター資源の一部（20% 未満）を提供することで協力を開始した。

平成 22 年度 システム構成

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

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 SR16000 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	2.3TB (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

システム構成図

