

8-6 計算科学研究センター

計算科学研究センターは、2000年度の電子計算機センターから計算科学研究センターへの組織改組にともない、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いる。2011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、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、特に設備の運用等について記す。

2012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2012年2月明大寺地区に設置され、後者は2008年3月に更新されて山手地区に設置されている。両シミュレータは、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社製のPRIMERGYとSGI社製のUV1000から構成される共有メモリ型スカラ計算機で、両サーバは同一体系のCPU (Intel Xeon) 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。これらに加え、京コンピュータと同じアーキテクチャの富士通社製PRIMEHPC FX10があり、システム全体として総演算性能149 Tflopsで総メモリ容量43 TByte超である。PRIMERGYは、16 CPUコア/64 GB構成のノード162台と16CPUコア/128GB構成のノード162台からなるPCクラスタである。前者が40 GB/sで後者は80 GB/sのバンド幅で演算ノード間が相互接続され、大規模な分子動力学計算などノードをまたがる並列ジョブを高速で実行することができる。特に後者においては、vSMPを導入することで複数ノードを仮想的に1ノードの共有メモリシステムとして運用できる機構を有する。UV1000は576 CPUコア/9 TBを有するNUMA型の共有メモリシステムであり、ジョブ作業領域用に実効容量400 TBおよび総理論読み出し性能12 GB/sを有する高速磁気ディスク装置が装備され、大規模で高精度な量子化学計算を可能とする。この2サーバで1000 TBの容量の外部磁気ディスクを共有し、NFSより高速なパラレルNFSが使用できる。PRIMEHPC FX10は、16CPUコア/32GBの96ノードが富士通独自のTofuインターコネクで連結されたシステムである。京コンピュータと互換性があり、京コンピュータのプログラム開発やデータ解析等への活用が期待される。

一方、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にも性能を発揮する。ファイルサーバは、128 TByteのディスクを装備し、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っている。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。2013年2月以降に「高性能分子シミュレータ」を更新するために、2011年9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。

ハードウェアに加え、利用者が分子科学の計算をすぐに始められるようにソフトウェアについても整備を行っている。量子化学分野においては、Gaussian 09, Gamess, Molpro, Molcas, Turbomole, 分子動力学分野では、Amber, NAMD, Gromacsがインストールされている。これらを使った計算は全体の約半数を占めている。さらに、量子化学データベース研究会の活動を支援し、同会から提供された量子化学文献データベースをホームページから検索できるよう

にしている。これまでに合計 113,007 件のデータが収録され、世界 84 力国から利用されている。

共同利用に関しては、2011 年度は 170 の研究グループにより、総数 666 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。また、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施設利用 S を設定し、2011 年度は 5 件の利用グループに従来の共同利用の枠を超えた超大規模計算環境を提供してきた。近年、共同利用における利用者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において、とくにナノサイエンスに関わるアプリケーション開発「ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」において重要な役割の一端を担っている。また、昨年度より、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された。この中で、HPCI 戦略分野 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）が物性科学分野、分子科学分野、材料科学分野により構成され、CMSI の戦略機関の一つとして分子科学研究所が参加し戦略プログラムを推進している。HPCI 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し、昨年度よりコンピュータ資源の一部（20% 未満）を提供・協力している。さらに、ハード・ソフトでの協力以外にも、分野振興および人材育成に関して、スーパーコンピュータワークショップ「バイオサイエンスに対する計算分子科学からのアプローチ」と 2 つのウィンタースクール「第 1 回量子化学ウィンタースクール～基礎理論を中心として～」と「第 5 回分子シミュレーションスクール～基礎から応用まで～」を開催した。

平成 23 年度 システム構成（2012 年 2 月以降）

超高速分子シミュレータシステム

クラスタ演算サーバ	
	型番：富士通 PRIMERGY
	OS：Linux
	CPUCore 数：5184（16CPUCore × 162 ノード × 2 システム）
	総理論性能：120.2TFLOPS（371.2GFLOPS × 162 ノード × 2 システム）
	総メモリ容量：31.1TB（64GB × 162 ノード + 128GB × 162 ノード）
高速 I/O 演算サーバ	
	型番：SGI UV1000
	OS：Linux
	CPUCore 数：576
	総理論性能：6.1TFLOPS（6.4GFLOPS/CPUCore）
	総メモリ容量：9.2TB
	ディスク容量：400TB（/work）
「京」用開発サーバ	
	型番：富士通 PRIMEHPC FX10
	OS：Linux
	CPUCore 数：1536（16CPUCore × 96 ノード）
	総メモリ容量：3.0TB（32GB × 96 ノード）
	ディスク容量：48TB（/k/home）

外部磁気ディスク装置	
	型番：PANASAS PAS12，PAS11
	総ディスク容量：1000TB
高速ネットワーク装置	
	型番：Force10 Z9000

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