

## 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、さらに、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。2015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。

2016年3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月に更新され、後者は2013年3月に更新された。さらに後者は、今年度最新のCPUを有する演算サーバに入れ替えを行い、2015年1月から運用を開始した。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製のPRIMERGY RX300S7とSGI製のUV2000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製PRIMEHPC FX10があり、システム全体として総演算性能188.7 Tflopsで総メモリ容量55 TByte超である。PRIMERGY RX300S7は、16 CPU コア、128 GB メモリ構成のノード342台からなるPCクラスタである。インターコネクトは、InfiniBand QDRを採用し、全台数を40 GB/sで、一部は2系統の80 GB/sで演算ノード間を相互接続しており、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。特徴としては、vSMPが導入してあることで、複数ノードを仮想的に1ノードの巨大共有メモリシステムとして運用でき、これをジョブ毎に制御が可能である。また32ノードには、NVIDIA社製のGPGPU TeslaM2090を搭載している。UV2000は、1024 CPU コア、8 TB メモリを有する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、32 GB メモリの96ノードが富士通独自のTofuインターコネクト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に活用されている。

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、運用管理クラスタおよびネットワーク装置から構成される。演算サーバは、富士通製のPRIMERGY CX2550M1で、28 CPU コア、128 GB メモリ構成のノード260台からなる共有メモリ型スカラ計算機のPCクラスタである。理論総演算性能は302.8 Tflops、総メモリ容量は33.2 TBである。インターコネクトはInfiniBand FDRを採用し、全台数を56 GB/sで相互接続しており、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。ファイルサーバは、1800 TByteのディスクを装備しており、演算サーバのインターコネクトに直結している。本ディスクは、演算サーバのワークディレクトリとしてだけでなく、共同利用システム全体のホームディレクトリやバックアップ領域として運用している。なお両システムのPCクラスタは一体的に運用が可能であり、この場合総演算性能は429.7 Tflopsにもおよぶ。

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 131,771 件のデータが収録されている。

共同利用に関しては、2015 年度は 227 研究グループにより、総数 832 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。近年、共同利用における利用者数が増加傾向にあり、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、2011 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、2011 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「複雑な研究対象へと挑戦する計算分子科学」と 2 つのウィンタースクール「第 5 回量子化学ウィンタースクール～基礎理論～」と「第 9 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 26 年度 システム構成

##### 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 RX300S7   |
|              | OS：Linux  |
|              | CPUCore 数：5472 (16CPUCore × 342 ノード)                                      |
|              | 総理論性能：126.9 Tflops (371.2 Gflops × 342 ノード) +21.2 Tflops (TeslaM2090 x32) |
|              | 総メモリ容量：43.7 TB (128 GB × 342 ノード)   |
| 高速 I/O 演算サーバ |   |
|              | 型番：SGI UV2000   |
|              | OS：Linux  |
|              | CPUCore 数：1024  |
|              | 総理論性能：21.2 Tflops (20.8 Gflops/CPUCore)                                   |
|              | 総メモリ容量：8.0 TB   |
|              | ディスク容量：400 TB (/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)     |
|            | 総理論性能：20.2 Tflops (13.2 Gflops/CPUCore) |
|            | 総メモリ容量：3.0 TB (32 GB × 96 ノード)          |
|            | ディスク容量：48 TB (/k/home)                  |
| 外部磁気ディスク装置 |   |
|            | 型番：PANASAS PAS12, PAS11                 |
|            | 総ディスク容量：1000 TB                         |
| 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      |  |
|            | 型番：富士通 PRIMERGY CX2550M1   |
|            | OS：Linux   |
|            | CPUCore 数：7280 (28CPUCore × 260 ノード)   |
|            | 総理論性能：302.8 Tflops (1164.8 Gflops × 260 ノード)                                       |
|            | 総メモリ容量：33.2 TB (128 GB × 260 ノード)  |
| ファイルサーバ    |  |
|            | 型番：富士通 PRIMERGY RX300S7 (8 ノード)  |
|            | OS：Linux   |
|            | 総メモリ容量：1024 GB (MDS: 128 GB × 2 ノード + OSS: 128 GB × 6 ノード)                         |
|            | ディスク容量：1800 TB (/home (300 TB), /save (600 TB), /week (300 TB), バックアップ領域 (600 TB)) |
| フロントエンドサーバ |  |
|            | 型番：富士通 PRIMERGY RX300S7 (4 ノード)  |
|            | OS：Linux   |
|            | 総メモリ容量：512 GB (128 GB × 4 ノード)   |
| 運用管理クラス    |  |
|            | 型番：富士通 PRIMERGY RX200S7 (16 ノード)   |
|            | OS：Linux   |
|            | 総メモリ容量：512 GB (32 GB × 16 ノード)   |
| 高速ネットワーク装置 |  |
|            | 型番：Force10 S4810   |