

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、人材育成等に取り組んでいる。2017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。

2018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」の2システムから構成されていたが、2017年10月に更新した計算機システムでは、「高性能分子シミュレータ」の1システムに統合化した。本シミュレータは、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、研究室で所有する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。

高性能分子シミュレータは、主として日本電気製のLXシリーズで構成される1069ノードの共有メモリ型スカラ計算機クラスタであり、全サーバは同一体系のCPU（Intel Xeon）およびOS（Linux3.10）をもとに、バイナリ互換性を保ち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4.096 PFLOPSで総メモリ容量219 TByte超である。LXシリーズのクラスタは以下の運用形態を念頭に置いて2タイプから構成されている。1つはTypeNと呼ぶノード単位の利用形態向けクラスタで、2.4 GHzのクロック周波数を持つ40 CPUコア、192 GBメモリ構成のノード794台と、メモリ構成を768 GBに強化した20台からなるPCクラスタである。もう1つはTypeCと呼ぶコア単位の利用形態向けクラスタで、3.0 GHzのクロック周波数を持つ36 CPUコア、192 GBメモリ構成のノード159台と、24 CPUコアにGPGPUを2基搭載した演算性能を強化したノード96台からなるPCクラスタである。インターコネクトは、Omni-Pathアーキテクチャを採用し、全台数を100 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。これらPCクラスタは9.4 PBの容量を持つ外部磁気ディスクを共有し、Lustreファイルシステムを構成している。これらとは別に前システムから継続運用しているPRIMEHPC FX10は、16 CPU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。

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。

共同利用に関しては、2017年度は233研究グループにより、総数904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ポスト「京」開発事業（フラッグシップ2020プロジェクト）において、ポスト「京」を用いて重点的に取り組むべき社会的・科学的課題（重点課題）のうち、とくにナノサイエンスに関わるアプリケーション開発「重点課題（5）エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」において重要な役割の一端を担っている。また、同「重点課題（7）次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」、ポスト「京」萌芽的課題アプリケーション開発「萌芽的課題 基礎科学の

挑戦—複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」，科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業「計算物質科学人材育成コンソーシアム」，元素戦略プロジェクト＜研究拠点形成型＞とも連携を行っている。これら5つの大規模並列計算を志向したプロジェクトを支援し，各分野コミュニティにおける並列計算の高度化へさらなる取り組みを促すことを目的として東北大学金属材料研究所，東京大学物性研究所，自然科学研究機構分子科学研究所が共同で「計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業（SCCMS）」を運営しており，2017年度はこれらプロジェクトに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「機能性材料設計への最新の計算科学アプローチ」と2つのウィンタースクール「第7回量子化学スクール～基礎理論と高精度理論の発展～」と「第11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29年度 システム構成（平成29年10月1日以降）

超高速分子シミュレータシステム 4.096 PFLOPS

クラスタ演算サーバ TypeN	
	型番：日本電気 LX 2U-Twin2 サーバ 406Rh-2
	OS：Linux
	CPUCore 数：31,760 CPUCore（40 CPUCore × 794 ノード）2.4 GHz
	総理論性能：2,439 TFLOPS（3,072 Gflops × 794 ノード）
	総メモリ容量：152 TB（192 GB × 794 ノード）
クラスタ演算サーバ TypeNF（メモリ強化）	
	型番：日本電気 LX 1U サーバ 110Rh-1
	OS：Linux
	CPUCore 数：800 CPUCore（40 CPUCore × 20 ノード）2.4 GHz
	総理論性能：61 TFLOPS（3,072 GFLOPS × 20 ノード）
	総メモリ容量：15 TB（768 GB × 20 ノード）
クラスタ演算サーバ TypeC	
	型番：日本電気 LX 1U サーバ 110Rh-1
	OS：Linux
	CPUCore 数：5,724 CPUCore（36 CPUCore × 159 ノード）3.0 GHz
	総理論性能：549 TFLOPS（3,456 GFLOPS × 159 ノード）
	総メモリ容量：30 TB（192 GB × 159 ノード）
クラスタ演算サーバ TypeCA（演算性能強化）	
	型番：日本電気 LX 4U-GPU サーバ 108Th-4G
	OS：Linux
	CPUCore 数：2,304 CPUCore（24 CPUCore × 96 ノード）3.0 GHz
	総理論性能：221 TFLOPS（2,304 GFlops × 96 ノード）+ 806 TFLOPS（NVIDIA Tesla P100 × 192）
	総メモリ容量：18 TB（192 GB × 96 ノード）

「京」用開発サーバ	
	型番：富士通 PRIMEHPC FX10
	OS：Linux
	CPUCore 数：1,536 CPUCore（16 CPUCore × 96 ノード）
	総理論性能：20 TFLOPS（211.2 GFLOPS × 96 ノード）
	総メモリ容量：3 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：DDN SFA14KX
	総ディスク容量：9.4 PB
高速ネットワーク装置	
	型番：Intel Omni-Path Architecture 100Gbps
フロントエンドサーバ	
	型番：日本電気 LX 2U-Twin2 サーバ 406Rh-2
	OS：Linux
	総メモリ容量：1,536 GB（192 GB × 8 ノード）
運用管理クラス	
	型番：日本電気 Express5800/R120g-1M
	OS：Linux
	総メモリ容量：1,024 GB（64 GB × 16 ノード）