

8-4 計算科学研究センター

計算科学研究センターは、2000 年度に分子科学研究所の電子計算機センターから岡崎共通研究施設の計算科学研究センターへの組織改組が行われ、現在は分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所の3研究所により運営されている。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。2021 年度においても、計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業や各種スクールの開催をはじめとした様々な活動を展開している。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。

2022 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、旧来「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きたが、2017 年10月の更新以降「高性能分子シミュレータ」の1システムに統合した。本シミュレータでは、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。

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 1077 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 (Linux 3.10) をもとに、バイナリ互換性を保ち一体的に運用される。システム全体として総演算性能 4.24 PFlops で総メモリ容量 222 TByte 超である。LX シリーズのクラスタは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 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 26 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 コア、192 GB メモリ構成のノード 159 台と、24 コアに GPGPU を2基搭載した演算性能を強化したノード 98 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。

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 16, GAMESS, Molpro, Molcas, TURBOMOLE, 分子動力学分野では、Amber, NAMD, GROMACS など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 1/3 強を占めている。

共同利用に関しては、2021 年度は 278 研究グループにより、総数 1,187 名 (2022 年2月現在) に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、物性科学分野、生物物理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。また最近では、錯体化学分野や有機化学分野など幅広い分野の研究者の利用も増加している。

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スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム、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3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、2021 年度はこれらプロジェクトにコンピュータ資源の一部 (10% 以下) 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、計算科学研究センター

ワークショップ「生体分子の構造・機能・デザインの計算科学」と2つのスクール「第11回量子化学スクール」と「第15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。また、東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所、大阪大学ナノサイエンスデザインセンターと協力し、我が国の最先端の計算物質科学技術を振興し、世界最高水準の成果創出と、シミュレーション技術、材料情報科学技術の社会実装を早期に実現するため、計算物質科学協議会を設立・運営し、分野振興を行っている。

2021 年度 システム構成

高性能分子シミュレータシステム 4.24 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
	コア数：31,760 コア (40 コア × 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
	コア数：1,040 コア (40 コア × 26 ノード) 2.4 GHz
	総理論性能：79 TFlops (3,072 GFlops × 26 ノード)
	総メモリ容量：19 TB (768 GB × 26 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
	コア数：5,724 コア (36 コア × 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
	コア数：2,352 コア (24 コア × 98 ノード) 3.0 GHz
	総理論性能：226 TFlops (2,304 GFlops × 98 ノード) + 944 TFlops (NVIDIA Tesla P100 × 192, V100 × 20)
	総メモリ容量：19 TB (192 GB × 98 ノード)
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)
運用管理クラスタ	
	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)