

## 超高速分子シミュレーター

### 密結合演算サーバーサブシステム

Fujitsu PrimeQuest は、総理論演算性能 4096 GFLOPS、総メモリ容量 2TByte の共有メモリ型スカラ並列コンピューターで、システムは64Core(32CPU)を持つ演算ノード10台から構成されています。ノード間は160Gbpsで相互接続されています。これにより、MPI等の分散処理ライブラリによりノードを超えた大規模計算を高速に処理することが可能であり、タンパク質立体構造シミュレーション等の大規模な分子力学計算、モンテカルロ計算に利用されています。周辺装置として、24TB のRAIDディスク装置を装備し、大容量ディスクを要求する分子力学計算などの一時保管用として利用されています。

### 高速I/Oサーバーサブシステム

SGI Altix4700 は、総理論演算性能 4096 GFLOPS、総メモリ容量 8TByte の CC-NUMA 型論理共有メモリ超並列コンピューターで、システムは 512Core(256CPU)で6TByteメモリーの演算ノードと、128Core(64CPU)で2TByteメモリーの演算ノード2台で構成されています。各演算ノードは主記憶を論理的に共有メモリとして利用でき、大規模な電子状態計算等に利用されています。さらに 114TByteの高速ディスクとの間を40Gbps で接続しており、メモリー転送に匹敵するディスクアクセス速度を実現しています。これによって、メモリーに収まりきれない様なさらに大規模な計算が実現できます。



## 高性能分子シミュレーター

### HITACHI SR16000

HITACHI SR16000は、総理論演算性能5414GFLOPS、総メモリ容量2250GBの共有メモリ型スカラ並列コンピューターで、システムは32Coreを持つ演算ノード9台から構成されています。周辺装置として21TBのRAIDディスク装置を装備し、大容量ディスクを要求する計算の一時記憶用として利用されています。

### フロントエンドサーバ

フロントエンドサーバは、Hitachi EP8000/500Q の8Coreモデル 2台で構成されており、利用者が直接ログインをして会話処理を行います。超高速分子シミュレータ及び汎用高速演算システムへバッチジョブ処理要求を行うために、統括的なジョブ管理を行うジョブキューイングシステム(JQS)を装備しています。

### ファイルサーバ

ファイルサーバは、Hitachi EP8000/500Q の16Coreモデル 2台から構成されており、NFS機構により超高速分子シミュレータシステム及び高性能分子シミュレータシステムへ600人以上の利用者のホームディレクトリを提供しています。120TBの容量をもつRAID型磁気ディスク装置とバックアップ RAID型磁気装置を装備しています。

