

RESEARCH CENTER FOR COMPUTATIONAL SCIENCE

岡崎国立共同研究機構
計算科学研究センター



1 センター設立の目的と経緯

2000年4月1日付けで、分子科学研究所電子計算機センターは、我が国唯一の分子科学計算のための共同利用基盤センターとしての経験を活かし、バイオサイエンス分野における計算科学的手法を更に強化・高機能化する目的で、既設の分子科学研究所電子計算機センターを機構共通研究施設計算科学研究センターに転換した。

岡崎国立共同研究機構計算科学研究センターの前身である分子科学研究所電子計算機センターは、実験データの収集解析、分子科学プログラムライブラリの開発と整備、分子科学データベースの開発、広域ネットワークへの参加、基礎生物学研究所と生理学研究所の計算処理、特に大学計算機センターでは実行の困難な分子科学の大規模理論計算などを重点的に行うことを目的に1977年5月に分子科学研究所の研究施設として設立された。

1978年6月には日立製作所製 HITAC M-180 2台の導入が決まり、翌年1月より利用者へのサービスを開始した。1979年9月には全国にさきがけて無人運転システムが稼働を始め、長期にわたる連続無人運転を可能にした。1980年4月にはM-200HとM-180それぞれ1台の構成となり、さらに1982年4月にはM-200H 2台のシステムに更新された。

1986年1月には、かねてから分子科学研究者の夢であったスーパーコンピュータ(HITAC S-810/10)が導入され、同時に汎用機として当時、最高性能を誇ったM-680Hへの更新が実現した。その後も分子科学計算の計算規模は拡大の一途をたどり、1988年にはスーパーコンピュータの性能向上(S-820/80)が行われ、1991年には汎用計算機(M-680H)の主記憶増強がなされた。

1994年には、スーパーコンピュータが日本電気製SX-3/34Rに更新され、1995年には、汎用計算機が日本電気製HSP及びIBM製並列計算機SP2を主計算サーバとして含む分散型の高演算システムへと更新された。これによりセンターの全ての計算機がUNIXオペレーティングシステム(OS)を基本とするOSの上で稼働するようになった。



その後、1999年には、汎用計算機が日本電気製SX-5及びIBM製並列計算機SP2に更新され、2000年には、スーパーコンピュータが富士通製VPP5000及びSGI製SGI2800に更新され現在に至っている。今後、機構内の3研究所および機構共通研究施設の計算基盤研究センターとしてはもちろん、国内外の分子科学研究者、

バイオサイエンス研究者に大学等の研究機関では処理が困難な大規模な計算処理環境を提供する共同利用施設としての基盤強化を目指す。

2000年現在におけるセンター職員は、センター長(併任)、助教授1名、助手2名、技官5名から構成されている。



2 利用者サービス

TSSサービス

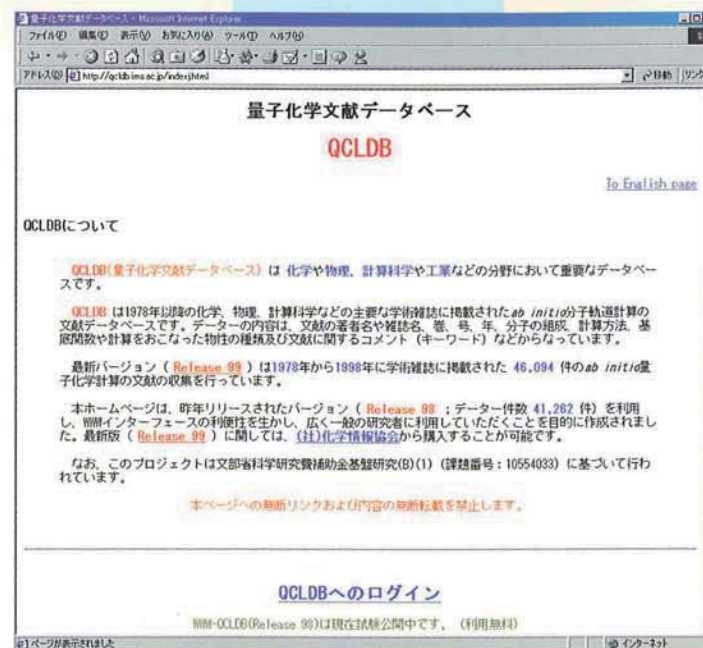
センターの利用はTSSが主体となっており、分子科学研究所の1カ所及びセンター2階に設置されている端末室からの利用、またはSINETやインターネット経由による機構外からの利用が可能である。

データベースサービス

分子科学研究データベースとして次の2件を登録している。特にQCLDBはその設計段階から関与し、現在も毎年行っているデータ更新に協力している。

- (1) QCLDB (量子化学文献データベース)
- (2) FCDB (力の定数に関するデータベース)

QCLDBに関しては、Webからの利用を可能とするための環境整備も行っている。(上図)



URL <http://qcldb.ims.ac.jp/indexj.html>

プログラムライブラリ

センター開設以来、ライブラリの収集と開発に努め、以下の様なスカラーおよびベクトル計算用のプログラムが登録されている。

(a) 分子科学プログラムパッケージ
国内および国外の研究者から提供されたプログラム、ならびに(b)QCPEプログラムや(c)アプリケーションプログラムを現行システムに移植・最適化したものなど、全体で200件以上のプログラムが登録されている。

(b) QCPEプログラム

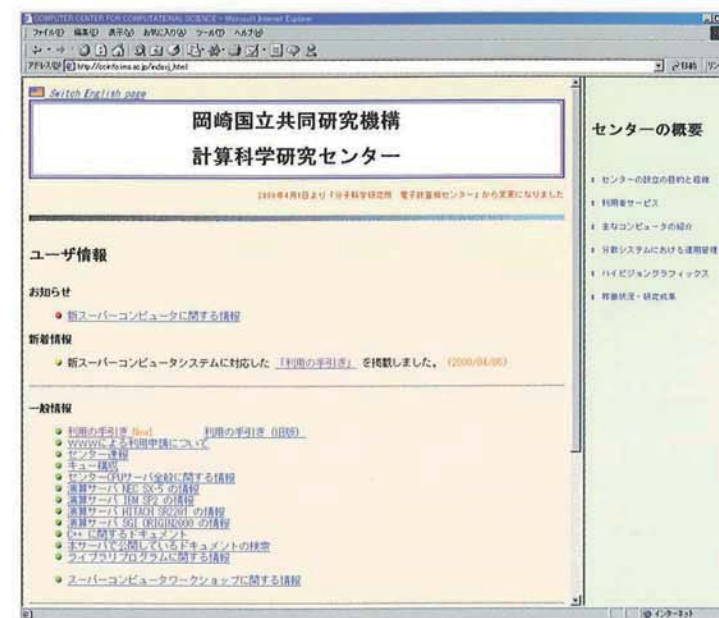
米国インディアナ大学のQCPE(Quantum Chemistry Program Exchange)を通してプログラムを購入しており、量子化学の分野でよく使われている著名なプログラムのみならず、数学、物理、化学の汎用的なプログラムを含め500件以上のプログラムが登録されている。

(c) アプリケーションプログラム

Gaussian98, Molpro2000などの電子状態計算プログラムをはじめ、Insight IIなどの生体関連シミュレーションプログラムが整備されている。

ネットワークサービス

センター内の主要なサーバは、ネットワークスイッチより光ファイバを使ったギガビットイーサネットによって相互に接続されており、高速なデータ転送を可能としている。センターネットワークは、機構ネットワークに接続されており、機構内の端末接続、実験データ、グラフィックデータの転送等に利用されている。さらに、外部ネットワークSINETを通じてインターネットに接続されており、機構外からの利用が可能となっている。センターの利用の手引きなどの情報は、Webによって公開されており、センターのホームページより参照が可能である。(下図)



URL <http://ccinfo.ims.ac.jp/indexj.html>

3 主なコンピュータの紹介



FUJITSU VPP 5000

FUJITSU VPP 5000 は総理論演算性能 288GFLOPSの分散メモリ型ベクトル並列コンピュータで、システムは30PE(Processor Element) から構成される。3 GB から16GBの主記憶を利用した電子構造計算、量子反応動力学計算をはじめ、MPI等のメッセージパッシングライブラリにより10PE以上の演算器を用いた大規模なベクトル並列計算が実行されている。総主記憶容量は 256GBで、周辺装置として、約3TBのRAIDディスク装置を持ち、大容量のディスクを要求する分子動力学計算及び量子波束計算にも利用されている。

NEC SX-5

NEC SX-5 は最高演算性能32GFLOPSの演算速度をもつ共有メモリ型並列コンピュータで、主記憶として32GBを持ち、メモリ・中間作業データを大量に必要とするスカラ演算主体のジョブを効率良く実行することが可能であり、FUJITSU VPP 5000において並列化が困難なプログラムを主に処理することができる。周辺装置として、並列入出力機構による高速読み書きを可能とする約500GBのRAIDディスク装置をもつ。



SGI SGI 2800, Origin 3800

SGI2800 は総理論演算性能115GFLOPSのcc-NUMA型の論理共有メモリ超並列コンピュータで、192CPUから構成されており、総主記憶容量は192GBを持ち、現在の構成では128GBまでの主記憶を論理的に共有メモリとして利用できる。またOrigin 3800は総理論演算性能102 GFLOPSで128CPUから構成されており、総主記憶容量は128GBである。ともに大規模な電子状態計算やタンパク質立体構造シミュレーション等の分子動力学計算、モンテカルロ計算に利用されている。周辺装置として約4TBのRAIDディスク装置を持つ。(写真はSGI 2800)

IBM SP2

IBM SP2は1CPU当たりの最高演算性能が150MFLOPSを超えるCPUノード24台と、75MFLOPSを超えるCPUノード24台の計48CPUノードから構成される疎結合並列計算機である。CPUノード間の通信は、30MB/秒以上の通信速度をもつ高性能クロスバースイッチにより行うことができるので、ノード間において大量のデータ転送を伴う大規模な並列ジョブの実行が可能である。全CPUノードには、作業ファイル領域として各ノードごとに約4GBの磁気ディスク装置を有する。



NEC TX7

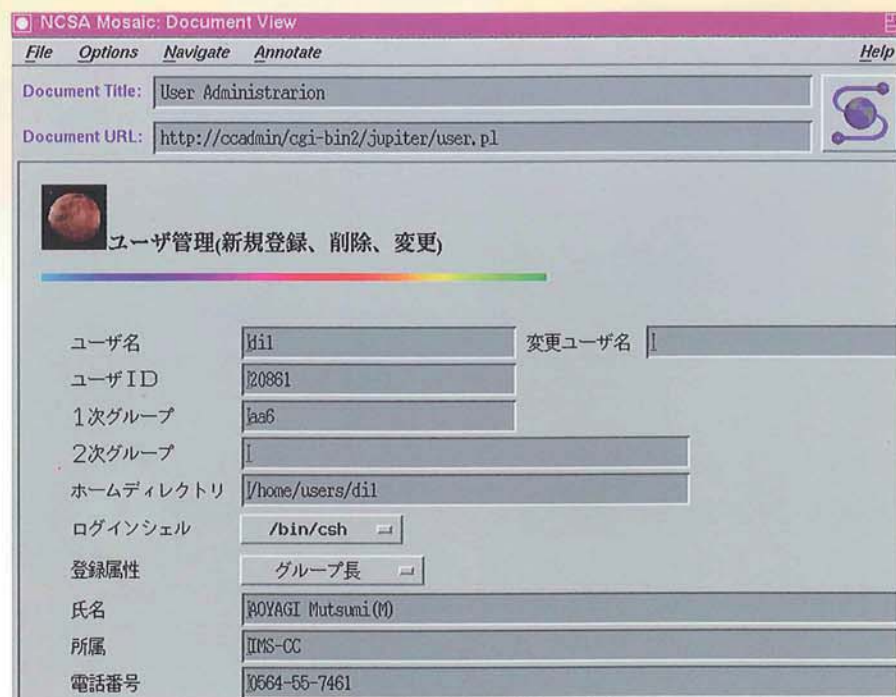
NEC TX7は、ユーザーがそれぞれのマシンに直接ログインしなくてもインタラクティブセッションを行うことができるフロントエンドサーバである。スーパーコンピュータ・システム (FUJITSU VPP5000、SGI SGI2800)、汎用高速演算システム (NEC SX-5、IBM SP2) へのジョブを統括的に管理できるジョブキューイングシステム (JQS) を装備している。(写真手前)

COMPAQ AlphaServer

COMPAQ AlphaServer は、NFS機構によりスーパーコンピュータ (FUJITSU VPP5000、SGI SGI2800)、汎用高速演算システム (NEC SX-5、IBM SP2) の利用者ホームディレクトリを構成し、700人以上の長期保存ファイルを格納するファイルサーバである。約1TBの容量をもつRAID型磁気ディスク装置を持ち、高い信頼性で高速な入出力が可能である。(写真奥)



4 分散システムにおける運用管理

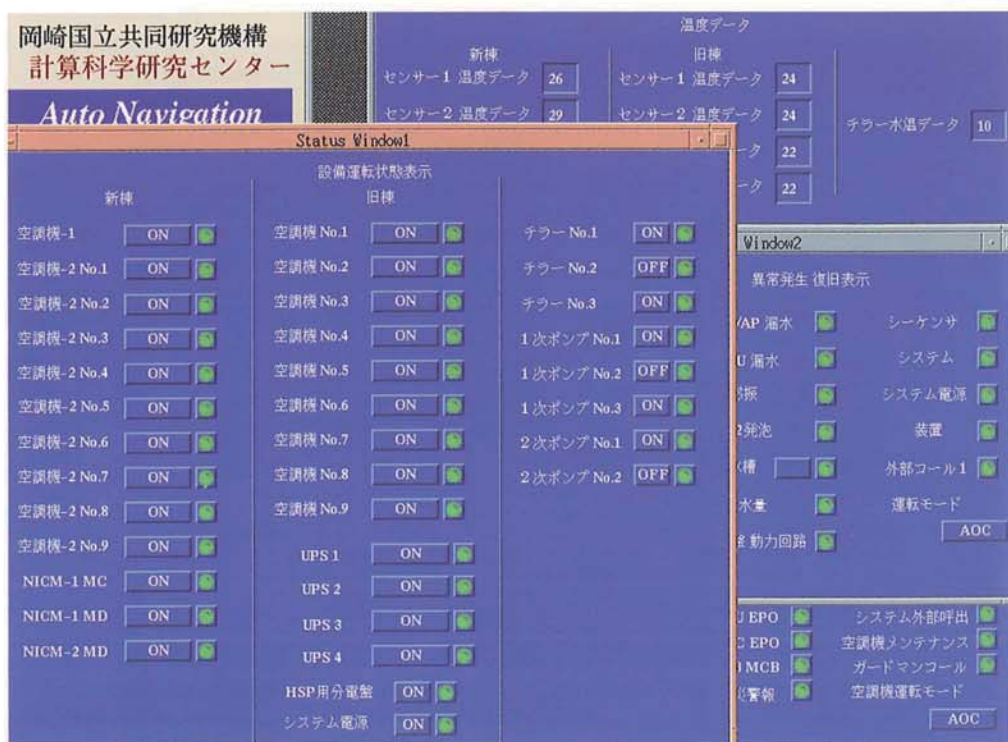


JUPITER

700人以上の利用者のCPU時間、ディスク容量などを統一的に管理する目的で、日本電気(株)と計算科学研究センターの共同開発により利用者情報管理システム(JUPITER)を作成し、センターにおける管理運用業務に役立てている。JUPITERを用いてセンター内にある全ての演算サーバの利用者情報の登録・編集作業が行えるだけでなく、ファイルサーバにおける使用可能ディスク容量の上限値設定などの資源割り当てをグループ及び利用者個人単位で操作できる。全ての操作は簡単なGUI環境下で行うことができる。

自動運転監視システム

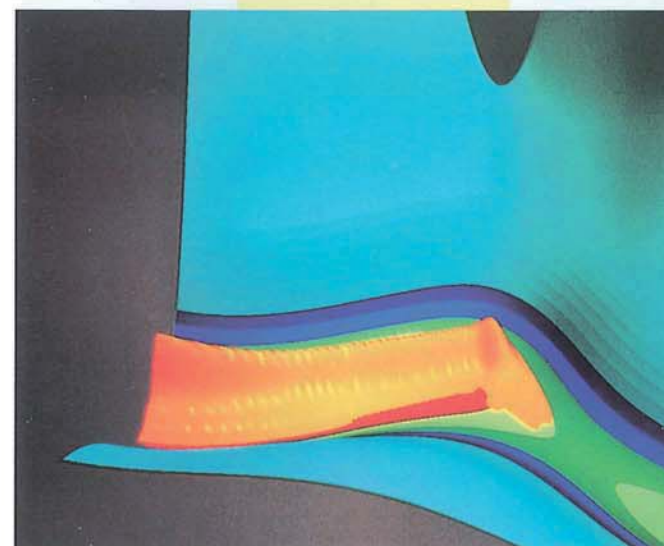
空調機、冷水ポンプなどの計算機の周辺設備を一括に管理できる自動運転監視システムを開発し、長期間の安定連続運転の体制強化に役立てている。



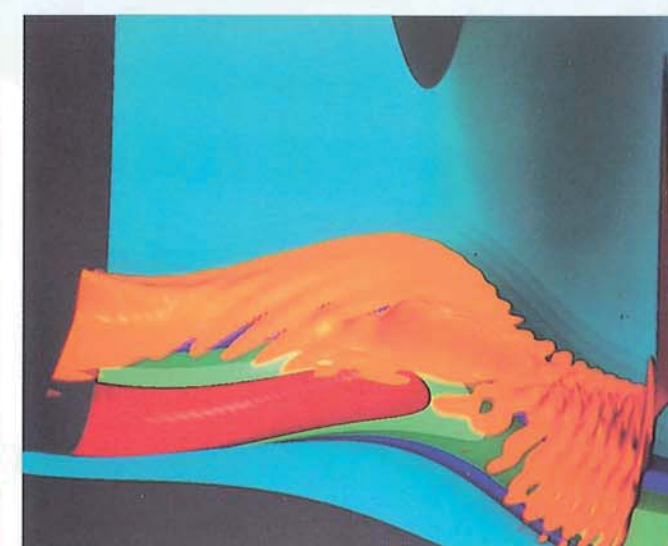
5 ハイビジョングラフィックス

スーパーコンピュータ上で処理された大量の数値データから高精細の静止画像、動画画像を作成し編集・記録するため、センター棟2階にハイビジョングラフィックスシステムが設置され利用者に公開されている。(図は、量子波束伝播法により計算されたLiNC分子の構造異性化のダイナ

ミックスを動画画像グラフィックスとしてハイビジョン端末に表示している様子。)



▲LiNC分子の初期波束



▲0.3フェムト秒後



▲0.6フェムト秒後



▲0.9フェムト秒後

6 稼動状況・研究成果

表1. 計算科学研究センターにおけるCPU能力の変遷

年	機種	スカラー性能 (MFLOPS)	ピーク性能 (MFLOPS)
1979	HITACHI M-180(2台)	3.0	36
	HITACHI M-180	1.5	18
	HITACHI M-200H	4.0	48
	合計	5.5	66
1982	HITACHI M-200H(2台)	8.0	52
	合計	8.0	52
1986	HITACHI M-680H	16.0	16
	HITACHI S-810/10	6.8	315
	合計	22.8	331
	合計	22.8	331
1988	HITACHI M-680H	16	16
	HITACHI S-820/80	18	2000
	合計	34	2016
1991	HITACHI M-680H(+)	32	32
	HITACHI S-820/80	18	2000
	合計	50	2032
1994	HITACHI M-680H(+)	32	32
	NEC SX-3/34R	108	19200
	合計	140	19232
1995	IBM SP2(Wide24台)	3163	6912
	IBM SP2(Thin24台)	1270	2832
	NEC HSP	36	300
	NEC SX-3/34R	108	19200
	合計	4577	29244
1999	IBM SP2(Wide24台)	3163	6912
	IBM SP2(Thin24台)	1270	2832
	NEC SX-5	2000	32000
	NEC SX-3/34R	108	19200
	合計	6541	60944
2000	IBM SP2(Wide24台)	3163	6912
	IBM SP2(Thin24台)	1270	2832
	NEC SX-5	2000	32000
	FUJITSU VPP5000	36000	288000
	SGI SGI 2800	115200	115200
	SGI Origin 3800	102400	102400
	合計	260033	547349

図1. センター利用者数と研究成果報告数の変遷

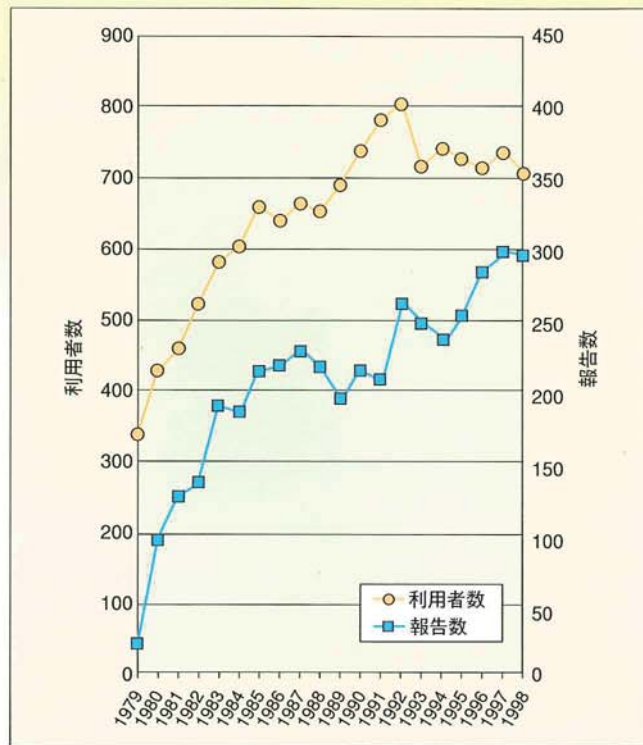


図2. ab initio MO 法についての論文数
QCLDBに登録されている件数（全世界の論文数）とそこに登録されているセンター利用者の成果件数の割合。

