



スーパーコンピュータ(富士通製VPP5000)



搬入時の連結作業

計算科学研究センター スーパーコンピュータの 能力と有効活用

1977年5月に分子科学研究所の附属施設として創設された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岡崎国立共同研究機構内はもとより、全国の研究者によって分子科学の大規模理論計算など

を重点に利用されてきました。2000年4月には、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、計算科学研究センターと名称を変え、機構の共通施設として生まれ変わりました。現在約200件の研究グループ、約700名の利用者が、インターネットを通じて使用しています。

本センターは、大きく分けて2つのシステムを運用管理しています。1つは汎用コンピュータ(汎用コン)システムで、もう1つはスーパーコンピュータ(スパコン)システムです。現在の汎用コンは、1999年1月に更新されたもので、日本電気製SX-5およびIBM製SP2が導入されています。スパコンは、2000年2月に更新されたもので、富士通製VPP5000およびSGI製SG12800が導入されています。機器の詳細については、ホームページに掲載していますのでそちらを参照して下さい

い。これらシステムは、4年から6年のレンタル契約がされているため、レンタル期間毎に機種更新されます。昨年より稼働を開始したVPP5000は、理論最大演算性能が9.6GFLOPS(ギガフロップス、小数計算を1秒間に96億回行うことができる)であるPE(プロセッサエレメント)を30台持ったシステムです。この大きな図体を持つコンピュータは、搬入時にはいくつかのラックに分割されており、現地で連結作業が行われました。PEはスーツケース似の専用ケースで搬入され、本体に設置後ケーブル接続して組上がりました。

スパコンが「スーパー」な理由は、計算速度が「スーパー」速いだけではありません。メモリの量が「スーパー」多いことも魅力のひとつです。ディスクの量や速度も同じと言えます。さて私たちが普段利用するパーソナルコンピュー



専用ケースで搬入されたPE(プロセッサエレメント)

タ(パソコン)を純粹に計算する道具としてみた時、スパコンとの違いは計算速度につきます。しかしスパコンよりも速い場合がある、と言ったら驚かれるでしょうか。メーカ公称理論演算速度によって性能を単純比較するのは簡単ですが、計算速度は計算の質や量を無視して一概に比較することはできません。図1は、linpackという計算性能を計測するプログラムをVPP5000と最新のパソコン(Pentium4 1.5GHz)で実行した結果を示しています。このプログラムでは小数を要素を持った2次元行列間計算を行います。グラフの横軸は1次元要素数で、要素数を増やした時に計算性能がどのように変化するかを示しています。要素数を増やせば、使用するメモリがどんどん増えるので、メモリ転送速度を含めた総合的な計算性能が見えてきます。パソコンは要素数290の計算で最大計算能力を示し、そのあと徐々に低下していきます。

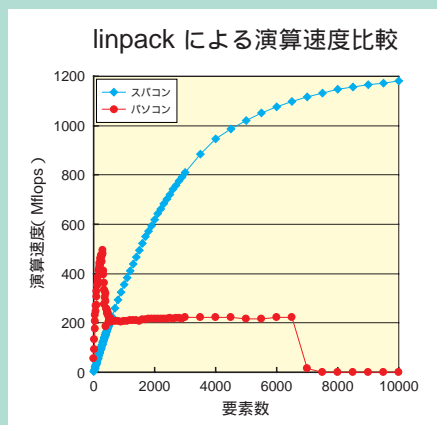


図1

これに比べスパコンは大きい計算になればなるほど速度が増していきます。要素数570の計算まではパソコンが速く、それ以降はスパコンが速いことが分かります。このパソコンは、要素数6500でメモリ不足(128MB内蔵)のため計算不能となっていますが、スパコンはその100倍の量のメモリを持っているのでさらに大きな計算が可能です。グラフから分かるように、スパコンは小規模計算を行うことが不得手なことが分かります。それに対し、「スーパー」な、つまり大規模な計算を行う場合、スパコン性能が最も有効に生かされるのです。このグラフを見る限り、スパコンはパソコンのたかだか3倍程度の性能しかない、と落胆するかも知れません。しかしこれはプログラムを全く変更無しに単純比較したものであって、最

大に得られる性能は、この10倍程度あります。利用者はスパコンの潜在的な能力を引き出すために、プログラムをチューニングして、可能な限り理論性能に近くなる様に努力して利用します。努力しないと最高性能が得られない、という点では「スーパー」使いづらいコンピュータかも知れませんが、努力の結果10日かかる計算が1日でできる、というのは何にも代え難い魅力であると言えます。

最後に、本センターのスパコンを利用した成果を紹介します。本誌表紙の図は、スパコンで計算されたタンパク質分子の折り畳みシミュレーションの過程を示しています。上から下にかけて、段々折り畳まれていく様子が分かります。なお一番下の図はX線回折実験で決定された自然の立体構造です。図2は、本センターの計算機を利用して開発された、新しいシミュレーション手法を用いた計算結果で、表紙と同じタンパク質(protein G)においてC末端側の16残基からなるペプチド(自然界ではヘアピン構造をしている部分)の水中での折り畳み過程におけるエネルギー変化および得られたヘアピン構造を示しています。

Homepage <http://ccinfo.ims.ac.jp>

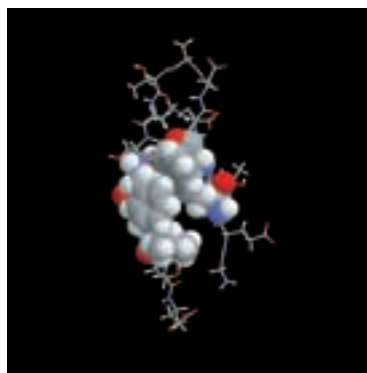
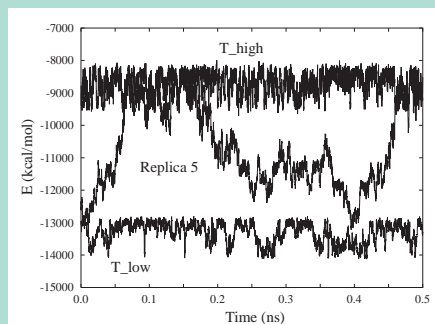


図2

基礎生物学研究所

バイオサイエンス トレーニングコース



基礎生物学研究所バイオサイエンストレーニングコースは、大学院レベルの聴講生を主たる対象として、基礎生物学の一つの分野について、各研究室が1週間(月~金)の実験を指導するコースです。また、コース期間中に、外国から招いた講師を含む、最先端の研究を行っている研究者による講演会を行います。

毎年6月下旬~7月上旬に行われ、今年は6月25日(月)~6月29日(金)を予定しております。開催の具体的な要項は、決まり次第順次基礎生物学研究所ホームページで公開していく予定です。

生理学研究所

生理科学実験技術 トレーニングコース



トレーニングコースの一つである「脳磁図を用いたヒト脳機能の研究」での、参加者とスタッフとの記念写真。

生理学研究所 生理科学実験技術トレーニングコースは、「生体機能の解明に向けて分子・細胞レベルからシステムまで」をテーマとして、毎年7月末から8月初旬にかけて行われます。学部及び大学院学生と若手研究者を対象として、生理科学の様々な分野における実験技術を、基礎的技術と知識の習得からその応用、さらに最先端の技術の修得を目標として、生理学研究所のスタッフが全力で1週間にわたって指導しています。また各分野の一流の研究者による講演も好評で、参加希望者は年々増加する一方です。本年(第12回)は7月30日(月)より8月3日(金)に行う予定であり、内容や申し込み方法は生理学研究所ホームページで4月頃より公開します。