

自然科学研究機構 分子科学研究所 様

従来の16倍もの大幅な性能向上を実現 性能とコストのバランスも追求

分子科学研究所の「計算科学研究センター」は、大学などでは処理が困難な大規模かつ超高速の演算処理機能などを国内外の研究者に提供している。このほど稼働させた「超高速分子シミュレータ」は、「密結合演算サーバサブシステム」と「高速I/O演算サーバサブシステム」から構成される。このうち、密結合演算サーバサブシステムを支えるのが富士通の基幹IAサーバPRIMEQUESTだ。

分子科学研究所は、大学共同利用機関として設立され、分子に関する基礎研究を行っている。同研究所が運営する共通研究施設「計算科学研究センター」は、大学などの計算機環境では処理が困難な、大規模かつ超高速の演算やライブラリなどを全国の研究者に提供している。利用者は公募で選ばれ、分子科学だけではなくバイオサイエンスの研究者も利用している。

国家プロジェクトの一翼を担う

計算科学研究センター長である岡崎進教授は「単に計算機環境の提供にとどまらず、物質にかかわる計算科学分野における学術的発展そのものを中心的な役割を果たすことが、もう1つの大きな使命」という。2003年度に発足した



分子科学研究所
計算科学研究センター
センター長 教授 工学博士

岡崎 進氏



分子科学研究所
計算科学研究センター
助教授 博士(理学)

森田 明弘氏



分子科学研究所
計算科学研究センター
技術班長

水谷 文保氏

国家プロジェクトである文部科学省の「超高速コンピュータ網形成プロジェクト」では、理論分子科学研究系、計算分子科学研究系とともに、グリッド・コンピューティングに基づいた「ナノサイエンス実証研究」を担当している。さらに2006年度からは「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」において、ナノ分野の「グランド・チャレンジ研究」へと展開している。

計算科学研究センターでは、基本的に5年のサイクルでコンピュータ・システムをリプレースしており、2000年より稼働を始めた旧システムのリプレースの時期が迫っていた。そこで2004年から次期スーパーコンピュータ・システム(超高速分子シミュレータ)について検討を開始し、翌2005年にシステムの仕様書を策定、入札を実施した。そして、富士通が提案するシステムが選定された。

選定理由について、岡崎教授は「新システムは、はっきり言えば計算性能が高ければ高いほど良いわけです。同時にさまざまな計算要求に応える高い汎用性も求められます。一方、限られた予算の中でいかに最高性能を実現するかが最重要課題でした。選定は性能、汎

ユーザープロフィール

大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 分子科学研究所、
岡崎共通研究施設 計算科学研究センター

所在地 愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38番地
設立 1977年5月
代表者 岡崎進 センター長
従業員数 12人
URL <http://ccinfo.ims.ac.jp/index.html>



計算科学研究センターのシステム構成図

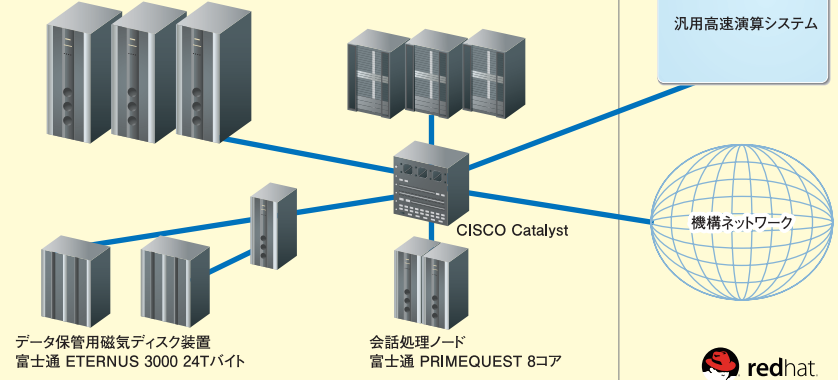
超高速分子シミュレータ・システム

密結合演算サーバサブシステム
富士通 PRIMEQUEST

64コア・256GBメモリ×10ノード
ノード間通信 InfiniBand×16 → 16G/バイト/秒
理論ピーク性能 4TFLOPS

高速I/O演算サーバサブシステム
SGI Altix 4700

512コア・6T/バイト・メモリ
+
128コア・2T/バイト・メモリ
理論ピーク性能 4TFLOPS



用性、信頼性を含めた総合評価の結果ですが、富士通の提案はItanium 2プロセッサを搭載したサーバを採用しており、性能とコストのバランスが良く、採用を決定しました」と語る。

従来の16倍、8TFLOPSを達成

計算科学研究センターが導入した超高速分子シミュレータは、PRIMEQUESTで構成する密結合演算サーバサブシステム、日本SGIのスーパーコンピュータ「Altix 4700」で構成する高速I/O演算サーバサブシステムからなり、2つのサブシステムを一体として運用している(図)。2つのサブシステムはOSにLinuxを採用。理論ピーク性能はそれぞれ4TFLOPSで、あわせて8TFLOPS、メモリ容量は10.5Tバイト、ディスク容量は160Tバイトという大規模なシステムだ。2006年7月1日より稼働を始めた。

計算科学研究センターの森田明弘助教授は、「旧システムは0.5TFLOPSですから、超高速分子シミュレータは単純に16倍の性能を実現しています。今回の新システム導入で、ベクトル型CPUを搭載したスーパーコンピュータから、スカラー型CPUであるインテルのItanium 2を搭載したIAサーバへの移行があったわけですが、その結果、大幅な性能向上が実現できました。センターのシステムは、日本の分子科学およびバイオサイエンス分野の研究者に広く利用されています。多岐にわたるアプリケーションはスカラー・プロセッサへの移植が進んでおり、また研究室レベルで所有している計算環境とスケラビリティが確保される点を評価しています」と語る。

計算科学研究センターの技術班長である水谷文保氏も「新システム導入を検討する際、デュアルコア版Itanium 2がタイミングよく登場したことは幸運でした。利用者は倍増した性能を特に意識せずに利用できるようになり、CPUの能力アップの恩恵をそのまま享受できるのがスカラー型のSMP(対称型マルチプロセッサ)の大きなメリットですね」と語る。

640コアのHPCシステムを構成

2つのサブシステムのうち密結合演算サーバサブシステムは、PRIMEQUESTを32CPU/64コアのフル構成で10ノード、合計640コアで構成。PRIMEQUESTを使用したHPCシステムとしては最大規模のシステムとなる。システム・ボード間は高速のクロスバーで接続し、高速なSMP並列処理を実現する。さらにノード間は毎秒16Gバイトのネットワークで結合し、分散並列とSMP並列をあわせた大規模なハイブリッド高速並列演算が可能だ。

水谷氏は「PRIMEQUESTを使用する複数プロセスの並列処理などでは、パフォーマンスが劣化する要因となるプロセス間の処理を高速クロスバーがうまく

解消してくれます。また、PRIMEQUESTはInfiniBandの規格をサポートしているため、プロセス間通信もInfiniBandを16本束ねて16Gバイト/秒と非常に広い帯域幅を確保し、高速クロスバーのスループットをうまく生かしていると思います。富士通は以前からInfiniBandを使用したPCクラスタの技術を積み重ねており、その技術とノウハウがPRIMEQUESTに反映され、高い性能の実現に貢献していますね」と解説する。

日本の分子科学の発展に貢献

2006年、計算科学研究センターが公募した利用課題の中で、センターの利用が認められた課題は約120。「超高速分子シミュレータによって、より広範かつ高度な課題に対応できるようになったので、分子科学計算の可能性を拡大するとともに、学術的発展にも大きく貢献すると期待しています」と岡崎教授は語る。

お問い合わせ先

富士通コンタクトライン

0120-933-200

受付時間 9:00～17:30(土・日・祝日・年末年始を除く)

富士通株式会社

〒105-7123 東京都港区東新橋1-5-2
汐留シティセンター