

Research
Center
for
Computational
Science

National Institutes of Natural Sciences
Okazaki Joint Research Facility

1 History and Mission

センター設立の目的と沿革



自然科学研究機構 岡崎共通研究施設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、大型計算機を導入し、共同利用サービスとして、国内の研究者に広く利用されてきました。その後、2000年4月、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、分子科学やバイオサイエンス分野における計算科学理論、方法論のさらなる展開をはかるべく研究機能を強化し、岡崎国立共同研究施設 共通研究施設 計算科学研究センターへと転換しました。これに伴い、共同利用サービスに加え、2003年4月より分子科学研究所において開始された文部科学省「超高速コンピュータ網形成プロジェクト(通称 NAREGI)」における「ナノサイエンス実証研究」では、グリッドコンピューティングシステムの導入・運用を行うなど、プロジェクトの中核施設としての活動を行ってまいりました。

2005年4月には、大学共同利用機関法人 自然科学研究機構として再編され法人化されたことに伴い、岡崎共通研究施設 計算科学研究センターとして再出発いたしております。同年、機構による「分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成」事業の一環として分子科学研究所を中心に組織された「巨大計算新手法の開発と分子・物質シミュレーション中核拠点の形成」にも積極的に参画しています。さらには、2006年4月より開始した「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用プロジェクト」における「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」においても中心的役割を果たしてきており、単なるCPUサービスにとどまらず、分子科学、ナノサイエンスに関わる計算科学研究の中核拠点としての活動を活発に行ってまいりました。

今後、岡崎地区3研究所および岡崎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のこと、全国の分子科学研究者、バイオサイエンス研究者に、大学等の研究機関では不可能な大規模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していくと同時に、プロジェクトの場を提供し理論・方法論開発などの研究活動も推進していく予定です。

2006年現在におけるセンター職員は、教授2名、助教授1名、助手6名、技官5名から構成されています。

The Computer Center of IMS, which was the forerunner of the Research Center for Computational Science, was established in May, 1977, primarily in order to provide an opportunity for large scale computation in molecular science which could not be carried out at regional university computer centers. Further, the Center supported experimental data collection and analysis, developed and maintained the program library and database in molecular science, and provided the computational service to neighboring National Institute for Basic Biology and National Institute for Physiological Sciences.

In April, 2000, the Center was reorganized into the Research Center for Computational Science of the Okazaki National Research Institutes in order to extend its activity to the frontier between molecular and bio sciences. Since then, the Center has been engaged not only in the facility service but also in science, for example, development of new theory and simulation method in these fields. After April, 2005, when Okazaki National Research Institute, itself, was reorganized into the National Institute of Natural Sciences, the Center has been showing its activity as a member of Okazaki Research Facilities.

The Center made a major contribution to the project, "Grid Application Research in Nanoscience", by IMS as a grid computer center, which was a part of the activity of the national project, "National Research Grid Initiative(NAREGI)", by MEXT, Japan, from 2003 to 2005. Now, the Center is working for the project, "Development of New Computational Methods for Large-Scale Systems and Establishment of Bases for Advanced Simulation of Molecular and Material Systems", by IMS forming a part of the project, "Formation of Interdisciplinary and International Bases Across Fields of Study", by NINS. The Center is playing an important role, too, in the national project, "Grand Challenge to Next Generation Nanoscience", by IMS in "Development & Application of Advanced High-Performance Supercomputer Project" by MEXT, Japan.

In September, 2006, the Center is managed and operated by two professors, one associate professor, six research associates, and five technical staffs.

2 Services of open facilities

共同利用サービス

本センターの共同利用は全国の大学や公的研究機関の研究者などに開かれており、利用申請と審査に基づいて、許可されたユーザーは無料で計算資源を利用することができます。センターの利用には、比較的小規模な分子軌道計算による実験研究のサポートから超大規模な電子状態計算や分子シミュレーションなど多岐にわたっており、ユーザーの用途に応じて利用申請にもA(小規模)、B(中・大規模)、S(超大規模)のクラスに分かれています。利用申請はセンターのホームページからも可能です。ユーザーは主としてインターネット経由によってセンターのフロントエンドマシンに接続し、さらにセンター内の各マシンの会話処理およびバッチジョブを利用できます。バッチジョブでは、PCの10倍程度の計算資源を単位として提供しており、各ユーザーのPCよりも格段に大きな計算能力を必要とする要望に応えています。また、分子・物質科学でよく用いられるアプリケーションプログラムやデータベースも提供し、ユーザーの研究を支援しています。また利用の手引きや運用状況などユーザーに役立つ情報をセンターのホームページにて公開しています。

◎ 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ます。センター内のネットワークは、スーパーSINET を通じてインターネットに接続されており、外部からの利用が可能となっています。

◎ プログラムライブラリ

センターでは分子・物質科学分野を中心にして、国内外の研究者から提供されたプログラムや、公開・商用アプリケーションプログラムを整備しており、ユーザーは自由に利用できます。現在提供しているライブラリプログラムには、Gaussian03, GAMESS, Molpro, Molcasなどの量子化学計算用、Amber, Prest, VASPなどの分子動力学計算用、さらに汎用数値計算ライブラリなどがあります(2006年10月現在)。

◎ 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件を登録しています。特にQCLDBはその設計段階から関与し、現在も毎年行うデータ更新に協力しています。

- (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)

◎ スーパーコンピューターワークショップ

計算センターでは、毎年スーパーコンピューターワークショップを開催し、ユーザーの交流や情報交換の機会をつくっています。そこではユーザーによる成果発表に加えて、センターの計算資源の効率的な利用についての講習会、運営に関するセンタースタッフとユーザーとの情報交換、計算分子科学の動向についての招待講演などが行われています。

◎ 施設利用S(超大規模計算)クラス

本センターの計算資源を最大限に活用して世界に発信する成果をあげるために、超大規模計算の利用申請を年に数件受け付けています。厳格な審査のもとで採用されたSクラスのユーザーは、年間を通じて超大型計算を優先的に実行することができます。共同利用の中から先鋭的な大規模計算の成果をあげる機会が開かれています。

The facilities of RCCS are open to all academic researchers in Japan. An eligible researcher can gain an allocated amount of resources for free after the proposal is accepted by the RCCS committee. The proposal can be submitted via the web page of RCCS. The review processes are categorized by the required amount of resources into class A (small), B (medium and large), and S (extremely large). Permitted users can connect the front-end machines via internet, and further access the interactive nodes and batch queuing system of the RCCS computers. The batch queuing system provides cpu resources more than 10 times as much as that of a current high-end PC for each user. RCCS is also equipped with a variety of application programs and databases in the field of computational molecular and material sciences. Useful information for the RCCS users is provided on the web page of RCCS as follows.

◎ Network System

The servers of RCCS are interconnected by gigabit Ethernet using optical fiber from the network switch, which enable high-speed data transfer between the servers. The RCCS network is connected to the internet via the super SINET, and the users can thereby access the RCCS machines from outside the campus.

◎ Program Libraries

RCCS provides application programs in the field of molecular and material sciences, to all the users. As of October, 2006, RCCS is equipped with quantum chemistry program packages, including Gaussian03, GAMESS, Molpro and Molcas, molecular dynamics program packages, such as Amber, Prest and VAST, and general mathematical subroutines optimized to each server.

◎ Database Services

The following two databases are open to all users. RCCS has also been supporting and collaborating with the QCLDB project.

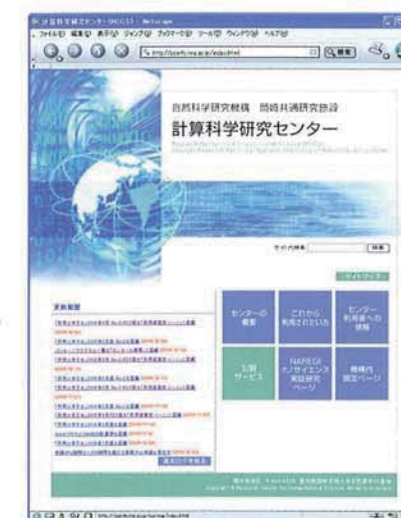
- (1) QCLDB (Quantum Chemistry Literature Data Base)
- (2) FCDB (Force Constant Data Base)

◎ Supercomputer Workshop

RCCS hosts annual workshop for the users, called Supercomputer Workshop, where users report their achievements by using the RCCS resources. The Supercomputer workshop also provides instructions on efficient use of RCCS computers, meeting of RCCS staff and users, and invited lectures on the current progress in computational science.

◎ S (extremely large) Class

The users in S class have privilege of performing extremely large jobs by making full use of RCCS resources. A few users are nominated per year in the S class through rigorous screening, and these selected users have great chances of outstanding achievements in the computational molecular and material sciences.



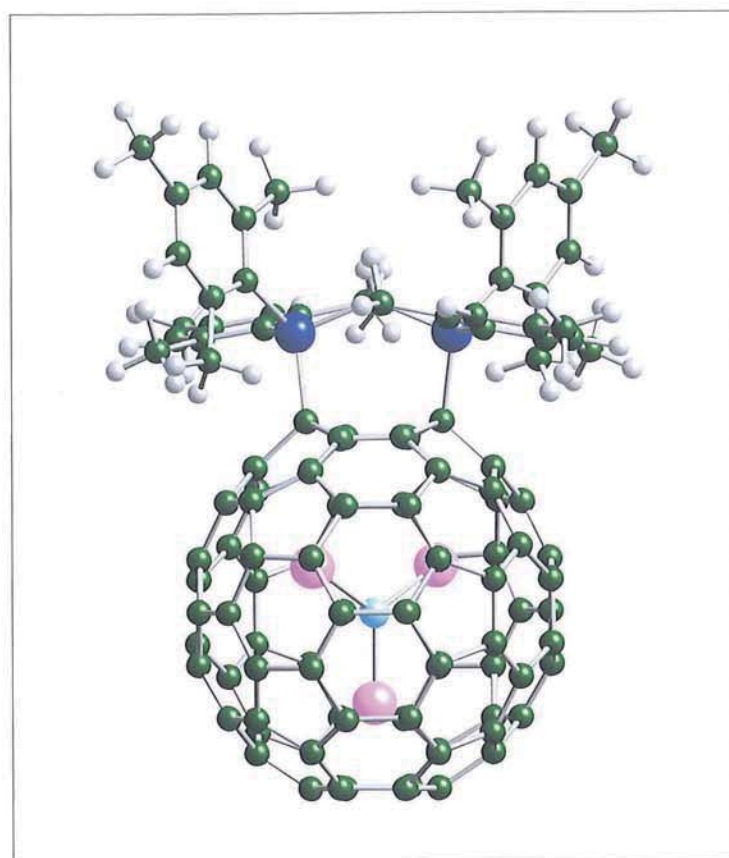
<http://ccinfo.ims.ac.jp>

3 Researches

研究紹介

本センターの利用者の研究分野は、量子化学、分子動力学シミュレーション、化学反応動力学、統計力学、固体電子論など多岐にわたっています。センターの計算機は、それらの多様なヘビーユーザーの要望に応えるように、巨大なメモリ空間、超高速で大容量のディスクI/O、高速なネットワーク通信、ベクトル計算機など多くの特徴ある計算機環境が活用されています。

The research activities of the RCCS users range over a variety of fields, including quantum chemistry, molecular dynamics simulation, chemical reaction dynamics, statistical mechanics, and solid state physics. The computational facilities of RCCS provide a variety of solutions to these users, with large shared memory, high-performance disks, fast interconnect, and vector processors. The following examples illustrate some typical calculations performed in RCCS.



金属内包フラーレン誘導体のMP2 gradient計算
(846電子/1267基底)
資料提供:M. Schmidt (Iowa State), 石村、永瀬 (分子研)

MP2 gradient calculation of metal fullerene derivative
(846 electrons/1267 basis sets),
by courtesy of Dr. M. Schmidt (Iowa State),
Dr. K. Ishimura and Prof. S. Nagase (IMS).

(1) 量子化学計算

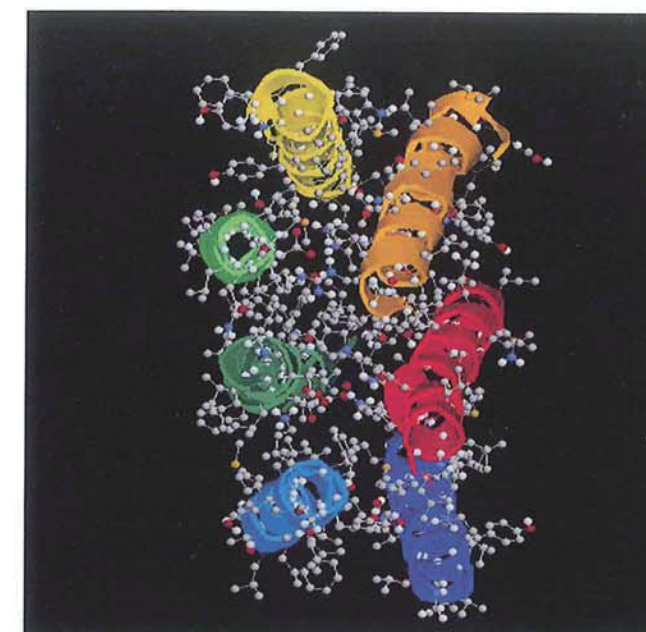
大規模かつ高精度の量子化学計算では、しばしばメモリ空間やディスクI/Oの制約が大きな問題となりますが、本センターの計算機はその限界を広げる計算を可能とします。本センターのAltix4700上のGAMESSで実際に行われた計算の例です。

(1) Quantum Chemistry

Modern ab initio calculations of large molecules incorporating electron correlation often suffer from the limitation of memory and/or disk spaces and their I/O performance. The computers of RCCS extend the limitation toward large and accurate calculations, as illustrated in the following example. This system was calculated by GAMESS on the Altix 4700 machine.

膜タンパク質 (バクテリオロドプシン) の折れたたみ構造
のレプリカ交換モンテカルロ計算
資料提供:岡本 (名古屋大学)

Replica Monte Carlo calculation for the folding
structure of bacteriorhodopsin in a membrane,
by courtesy of Prof. Y. Okamoto (Nagoya Univ.).



(2) 分子シミュレーション

凝縮系 (液体、固体) の分子シミュレーションの計算では、大きなcpuパワーと高速なインターコネクトが求められます。並列化の容易な共有メモリ型クラスターを用いて、世界をリードする計算分子科学の研究が行われています。

(2) Molecular simulation

For the molecular dynamics simulation in condensed phases, ample cpu power and fast interconnect are crucial to perform massive parallel calculations. The shared memory clusters of RCCS are extensively utilized by the users in the field of molecular simulation.

4 Project-1

プロジェクト-1

文部科学省「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発 —ナノ分野グランドチャレンジ課題—

計算科学研究センターは、2006年度より開始された文部科学省「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクトにおいて、分子科学研究所が担当しているアプリケーション開発拠点(ナノ分野)の中核施設として活動しています。本開発拠点におきましては、ナノ分野のグランドチャレンジとして、将来の社会や科学技術基盤を支える重要な要素となり得る (1) 次世代ナノ情報機能・材料、(2) 次世代ナノ生体物質、(3) 次世代エネルギーの3領域に対して計算科学方法論の学術基盤を形成すべく、理化学研究所が開発する次世代スーパーコンピュータ(10PFLOPS級)を最大限活用する次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発を産学官のオールジャパン体制で行っています。

ナノスケールの物質がはじめて示す新たな現象、機能をシミュレーションによりとらえ、解析、予測することのできる計算科学技術確立するためには、電子、原子、分子を直接扱うミクロからのアプローチが不可欠です。このため、本拠点においては、特に量子化学、分子動力学法、統計力学理論、そして固体電子論等の基礎方程式から出発し、ナノスケールの物質を取り扱う理論、方法論の開発からベータフロップスの高度並列アルゴリズムの開発、そして異種方法論間の連携ツールを含む統合ソフトウェアの開発に至るまで系統的に研究開発を進めています。

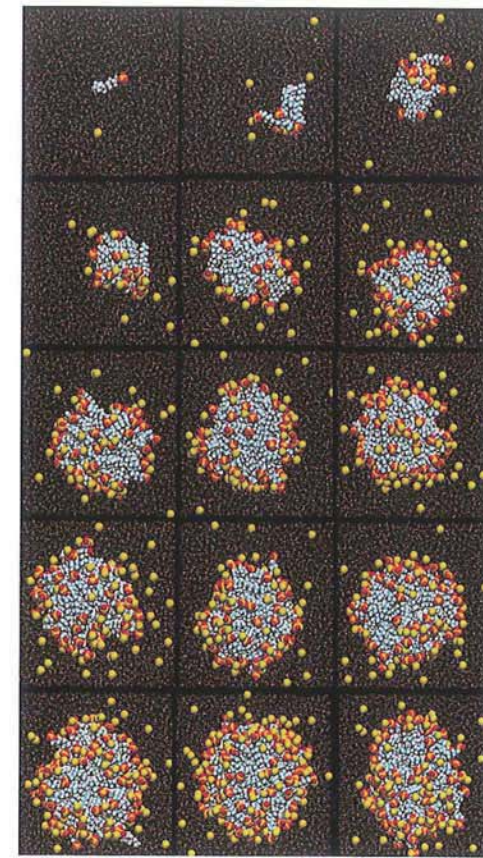
Development & Application of Advanced High-Performance Supercomputer Project, MEXT, Japan Next Generation Integrated Nanoscience Simulation Software —Grand Challenge to Next Generation Nanoscience—

We have been playing a central role in the national research project of Development of Next Generation Integrated Nanoscience Simulation Software: the Grand Challenge to Next Generation Nanoscience, where we are establishing a basis of computational nanoscience targeting on (1) Next Generation Nano Information Function and Materials, (2) Next Generation Nano Biomolecules, and (3) Next Generation Energy. The software we are developing is designed to make usage of full performance of the Advanced High-Performance Supercomputer developed by RIKEN. A nationwide project team consisting of the national institutes, universities, and industries has been organized.

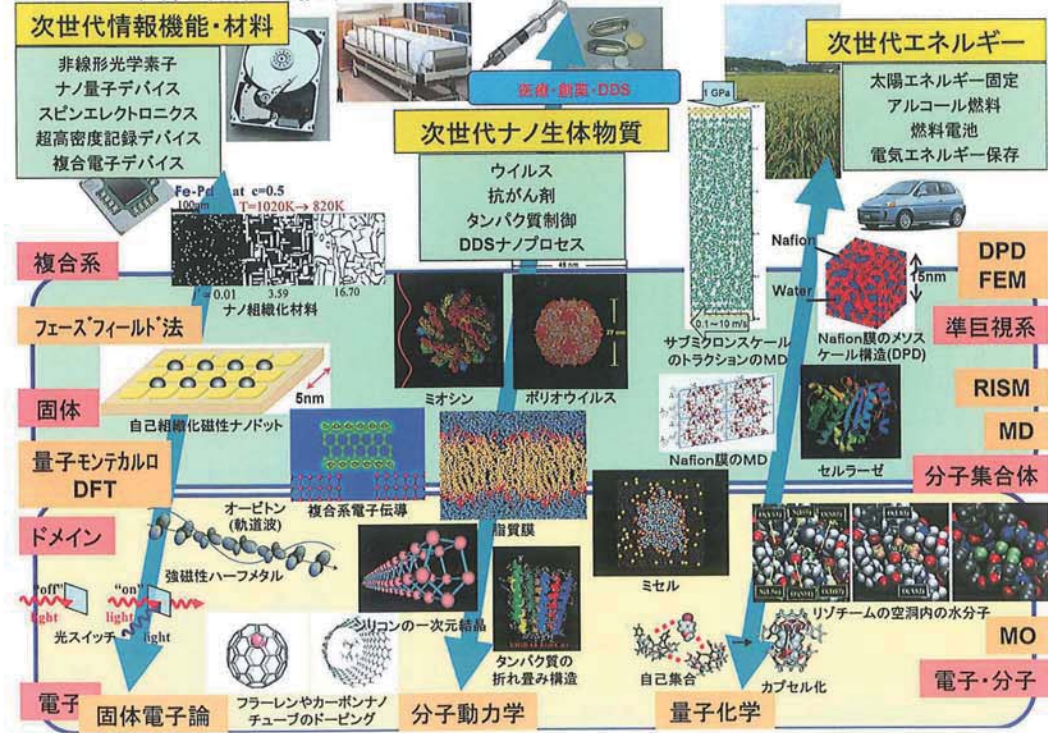
Scientific approaches giving explicit descriptions of electrons, atoms, and molecules are indispensable to reach new phenomena and new functions which are shown by the nano-scale materials. Based upon microscopic theories such as quantum chemistry, molecular dynamics method, statistical mechanics, and solid-state electronic theory, we are developing new simulation methods, new parallelizing algorithms for peta-flops computation, and the general-purpose connecting tool between different simulation programs for the coupled simulations.

様々なサイズの球状ミセルの分子動力学計算。
分子が水中に形成するナノスケールの構造の中で、
最も単純な例のひとつである。

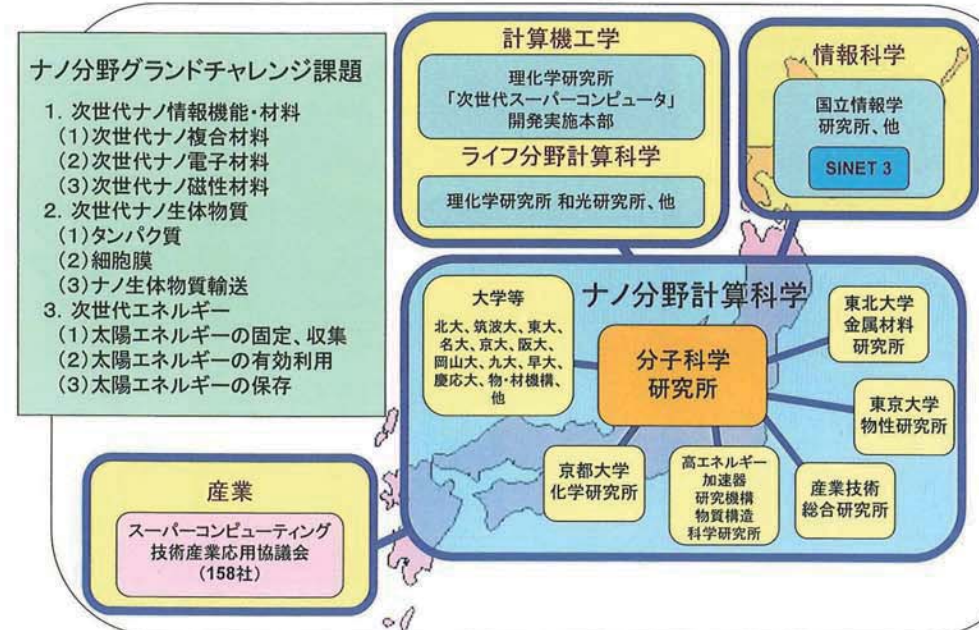
Molecular dynamics calculation of spherical micelle of various sizes. A simple example of nano-scale molecular assembly formed in water.



次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発



研究開発体制



4 Project-2

プロジェクト-2



分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成 「巨大計算新手法の開発と分子・物質シミュレーション中核拠点の形成」

平成17年度より自然科学研究機構「分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成」事業の一環として分子科学研究所を中心に進められている本プロジェクトでは、大規模複雑系を構成する分子・物質に対する計算科学研究にブレークスルーを実現し、計算科学に関する学際的新分野の形成を目指している。そのために、自然科学研究機構の各研究機関および他大学や他研究機関と連携し、分子科学、核融合科学、生命科学、天文学などの異なる自然科学階層に属する各分野での異なる物質観、方法論を共有・融合することにより、電子状態理論、統計力学をはじめとする理論に基づく新しい方法論の開発、それらの分子、物質に関わる大規模複雑系のシミュレーションへの応用、また超並列演算など高度な計算科学手法の開発を進めている。さらに、巨大計算新手法の開発や大規模系シミュレーションの理論解析に関するセミナーや研究会、人材育成のための講習会を開催している。

Formation of Interdisciplinary and International Bases Across Fields of Study, "Development of New Computational Methods for Large-Scale Systems and Establishment of Bases for Advanced Simulation of Molecular and Material Systems"

This project aims to establish a core computational science base for molecular and material systems and the development of methodologies for advanced calculations. The project has been organized by five of the institutes within the National Institutes of Natural Sciences, i.e. Institute for Molecular Science, National Institute for Fusion Science, National Institute for Basic Biology, and National Institute for Physiological Sciences, another university and research institute. We are trying to create a new interdisciplinary field by integrating the different views and methodologies traditionally associated with each of the fields that belong to different hierarchies within the natural sciences. Structures and dynamics of large-scale complex systems, such as nanomaterials and biological systems, are investigated by using a variety of sophisticated computational methods based on theories of electronic structure, statistical mechanics, and so on. The development of new computational methods and cooperation on improving the efficiency of calculations utilizing parallel operations have also been furthered as a consequence of the members having different scientific backgrounds. Seminars and workshops for the development of new methodologies for advanced calculations and study sessions for the human resources development are conducted by this project.

5 Operating status

演算性能と利用数の変遷

表1. 演算性能値の変遷
History of the CPU performance in RCCS

年 YEAR	機種 Machine type	理論演算性能 MFLOPS
1979	HITACHI M-180 (x 2)	36
1980	HITACHI M-180	18
	HITACHI M-200H	48
	TOTAL	66
1982	HITACHI M-200H (x 2)	52
1986	HITACHI M-680H	16
	HITACHI S-810/10	315
	TOTAL	331
1988	HITACHI M-680	16
	HITACHI S-820/80	2,000
	TOTAL	2,016
1991	HITACHI M-680 (+)	32
	HITACHI S-820/80	2,000
	TOTAL	2,032
	TOTAL	19,232
1994	HITACHI M-680 (+)	32
	NEC SX-3/34R (3 CPU)	19,200
	TOTAL	19,232
	IBM SP2 (Wide x 24)	6,912
	IBM SP2 (Thin x 24)	2,832
1995	NEC HSP	300
	NEC SX-3/34R (3 CPU)	19,200
	TOTAL	29,244
	IBM SP2 (Wide x 24)	6,912
	IBM SP2 (Thin x 24)	2,832
1999	NEC SX-5 (8 CPU)	64,000
	NEC SX-3/34R (3 CPU)	19,200
	TOTAL	92,944
	IBM SP2 (Wide x 24)	6,912
	IBM SP2 (Thin x 24)	2,832
2000	NEC SX-5 (8 CPU)	64,000
	Fujitsu VPP5000 (3 OPE)	288,000
	SGI SGI 2800 (256 CPU)	153,000
	TOTAL	514,744
	IBM SP2 (Wide x 24)	6,912
	IBM SP2 (Thin x 24)	2,832
2001	NEC SX-5 (8 CPU)	64,000
	Fujitsu VPP5000 (3 OPE)	288,000
	SGI SGI 2800 (192 CPU)	115,200
	SGI Origin 3800 (128 CPU)	102,400
	TOTAL	579,344
	2003	NEC SX-7 (32 CPU)
NEC TX-7 (64 CPU)	332,800	
Fujitsu VPP5000 (3 OPE)	288,000	
SGI SGI 2800 (192 CPU)	115,200	
SGI Origin 3800 (128 CPU)	102,400	
TOTAL	1,120,960	
2004	NEC SX-7 (32 CPU)	282,560
	NEC TX-7 (64 CPU)	332,800
	Fujitsu VPP5000 (3 OPE)	288,000
	SGI SGI 2800 (192 CPU)	115,200
	SGI Origin 3800 (128 CPU)	102,400
	Hitachi SR11000 (16wayx50Node)	5,440,000
Hitachi HA8000 (8 CPUx449Node)	5,495,000	
TOTAL	12,056,720	
2006	NEC SX-7 (32 CPU)	282,560
	NEC TX-7 (64 CPU)	332,800
	Fujitsu Primequest (640Core)	4,096,000
	SGI Altix4700 (640Core)	4,096,000
	Hitachi SR11000 (16wayx50Node)	5,440,000
	Hitachi HA8000 (8 CPUx449Node)	5,495,000
TOTAL	19,743,120	

図1. 演算性能値の変遷
Fig. 1 History of the CPU performance in RCCS

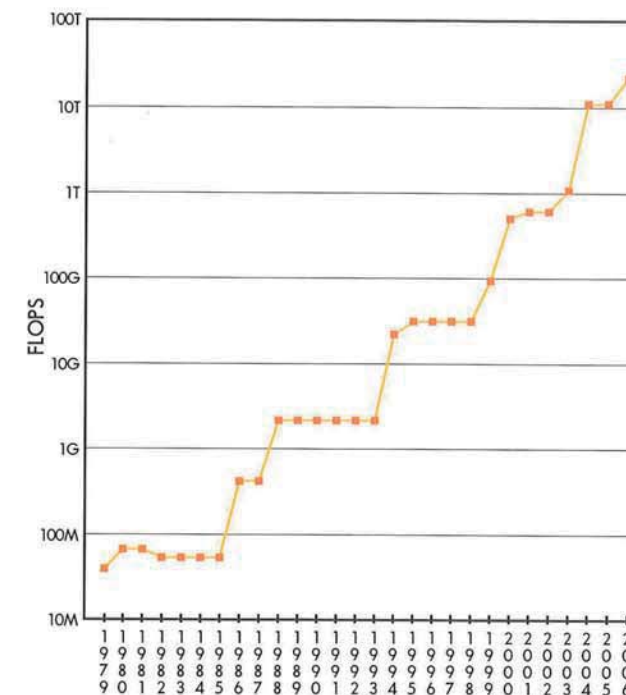
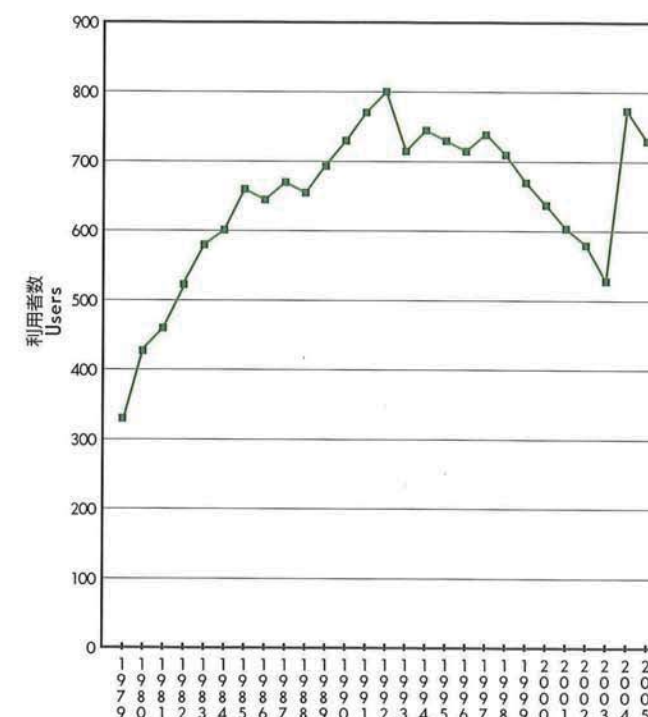


図2. 利用者数と変遷
Fig. 2 Number of users



6 Resources-1

主なコンピュータの紹介-1

超高速分子シミュレータシステム



◎ 高速I/O演算サーバ/SGI Altix4700

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で、システムは512Core(256CPU)、6TByteメモリと128Core(64CPU)、2TByteメモリの演算ノード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で40Gbpsで接続しており、メモリ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、メモリに取まらざるに大規模な計算が実現できます。

◎ SGI Altix4700

SGI Altix4700 is a super-parallel computer with the peak performance of 4096 GFLOPS. This system consists of two nodes; one has 512 Cores (256 dual-core CPUs) with 6 TB shared memory, and the other 128 Cores (64 CPUs) with 2 TB, where the extensive shared memory is logically provided by the cc-NUMA architecture. As a peripheral configuration, the system has also a high-performance RAID disk device with the total effective amount of about 114 TB and with the I/O speed of 40 Gbps. This I/O speed of the disk is nearly equivalent to that of the memory transfer. This system is particularly suitable to large and accurate calculations of electronic states and other purposes which require huge memory and/or disk space.



◎ 密結合演算サーバ/Fujitsu PRIMEQUEST

Fujitsu PRIMEQUEST は、総理論演算性能 4096 GFLOPS、総メモリ容量 2TByte の共有メモリスカラ並列コンピュータで、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動力学計算、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動力学計算などの一時保管用として利用されています。

◎ Fujitsu PRIMEQUEST

Fujitsu PRIMEQUEST has scalar-parallel architecture, providing the total performance of 4096 GFLOPS by 10 nodes. Each node consists of 64 Cores (32 dual-core CPUs) and 256 GB of shared memory. The nodes are connected with the fiber interconnect, and any pair of nodes can thereby communicate at the bandwidth of 160 Gbps using the message-passing library (MPI). The system is also equipped with a RAID disk device about 24 TB for temporal storage. This server is mainly used for large-scale molecular dynamics and Monte Carlo calculations, including application to biomolecules.

6 Resources-2

主なコンピュータの紹介-2

汎用高速演算システム

◎ NEC SX-7

NEC SX-7 は、総理論演算性能282GFLOPS、総メモリ容量256GByteの共有メモリ型ベクトル並列コンピュータで、スカラ機での並列計算が困難な大規模プログラムを高速に処理することができます。周辺装置として、4.5TByteのRAIDディスク装置を装備しています。

◎ NEC SX-7

NEC SX-7 is a vector-parallel computer which provides the performance of 282 GFLOPS, shared memory of 256 GB, and a RAID disk device of about 4.5 TB. This system has vector computing units, which enable high-speed processing of some application programs not amenable to efficient parallel processing by other scalar machines.



◎ NEC TX7

NEC TX7 は、総理論演算性能332GFLOPS、総メモリ容量256GByteの共有メモリ型スカラ並列コンピュータで、32CPUを持つ演算ノード2台で構成されています。スカラ処理の速さを生かした小規模なジョブや共有メモリを生かした並列ジョブの実行が可能です。周辺装置として、3TByteのRAIDディスク装置を装備しています。

◎ NEC TX7

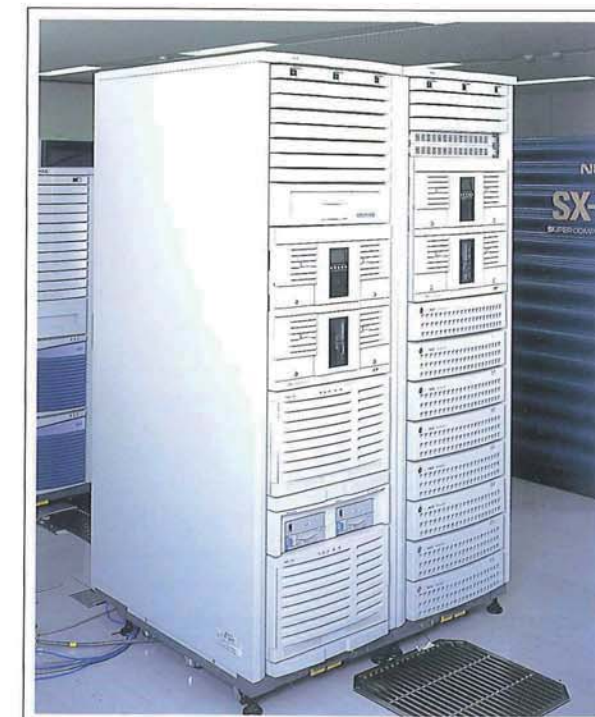
NEC TX7 is a scalar parallel computer with the total peak performance of 332 GFLOPS. This system is constructed with 2 nodes, each of which has 32 CPUs and 128 GB of shared memory, and a RAID disk device of about 3 TB. This machine is used for multi purposes, mostly for executing medium and small jobs.

◎ フロントエンドサーバ

フロントエンドサーバは、NEC TX7 の2CPU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および汎用高速演算システムへの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。

◎ Front-end server

The front-end server of RCCS consists of 2 nodes of NEC TX7. The front-end machines are open to the RCCS users via telnet, ssh or other protocols for interactive use. The job-queuing system (JQS) for the batch uses of other systems is also controlled by the front-end server.



◎ ファイルサーバ

ファイルサーバは、PA-8600 CPUを採用したNEC TX7の1CPU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および汎用高速演算システムへ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。10TByteの容量をもつRAID型磁気ディスク装置とテープバックアップ装置を装備しています。

◎ File Server

The file server consists of 2 sets of NEC TX7 (1 CPU model) with 10 TB RAID disk device and backup tape device. The disk device is NFS mounted by other systems, and is used as the home directories of the RCCS users.

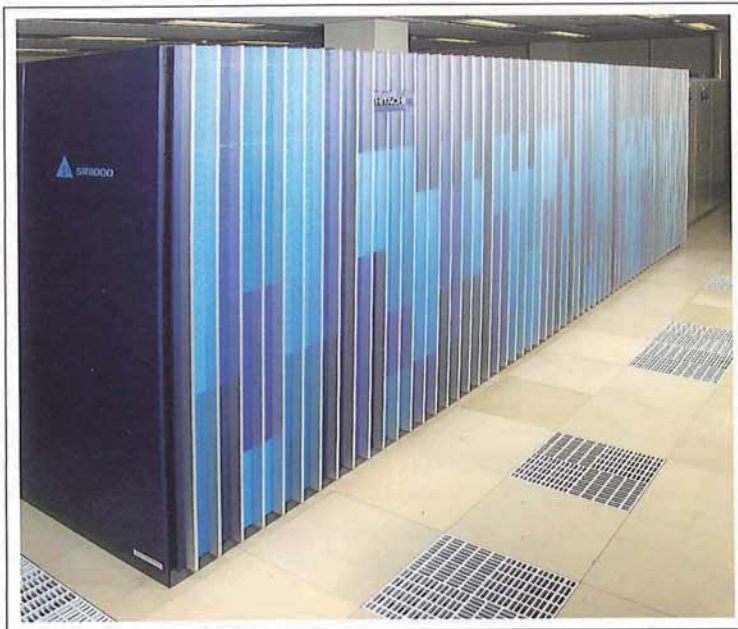
6 Resources-3

主なコンピュータの紹介-3

グリッドコンピューティングシステム

分子科学研究所が参加する文部科学省のNAREGIプロジェクトの遂行のため、日立製SR11000とHA8000が2004年に導入されました。グリッドコンピューティング環境をナノサイエンス分野の大型計算で実証するため、アーキテクチャの異なる同程度の規模の計算機を運用しています。本システムは、2006年度より開始された「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトにおいても、ナノサイエンスの大規模計算を実行する主力の計算機として利用されています。

The following two systems by Hitachi, SR11000 and HA8000, have been introduced to RCCS in 2004 as two main computers for the NAREGI project by MEXT, Japan. The two systems, which have comparable peak performances though different architectures of memory configuration, provide a suitable test environment of the grid computation. These two systems are currently utilized as main computational resources for the Nanoscience in the new national project, the Development and Application of Advanced High-Performance Supercomputer Project by MEXT, Japan.

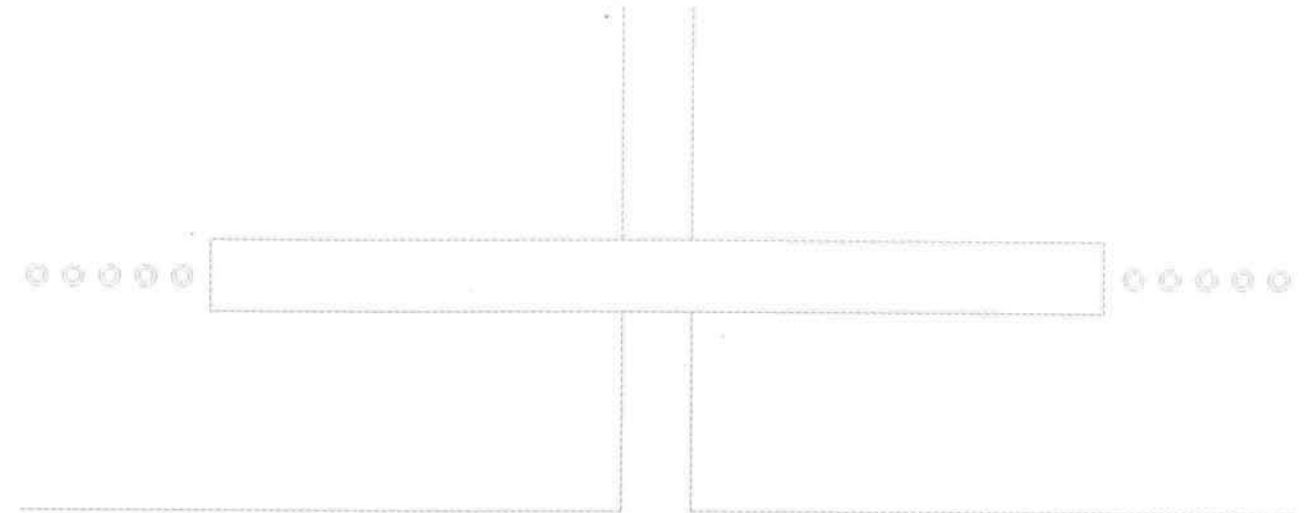


◎ Hitachi SR11000

Hitachi SR11000は、総合理論演算性能 5440 GFLOPS、総メモリ容量 3072GB の共有メモリ型スカラ並列コンピュータです。システムは 16way(CPU)を持つ演算ノード50台から構成されています。ノード間は 8GByte/s のクロスバーで相互接続されています。周辺装置として、6.8TB のRAIDディスク装置を装備しています。

◎ Hitachi SR11000

Hitachi SR11000 is a scalar-parallel SMP computer with the peak performance of 5440 GFLOPS and 3072 GB total memory by 50 nodes. Each node consists of 16 ways (CPUs) and 64 GB (4 I/O nodes are 32GB) of shared memory. Each node is connected with crossbar switch network it has 8GByte/s performance. As a peripheral configuration, the system has also a RAID disk device with the total effective amount of about 6.8 TB.



◎ Hitachi HA8000

Hitachi HA8000は、総合理論演算性能 5495 GFLOPS、総メモリ容量 1796GBの分散メモリ型スカラ並列コンピュータです。このシステムは、演算ノードとして 2CPUを持つPCサーバ449台から構成されています。さらに128ノード毎に 2Gbps で相互接続してクラスタを形成しています。各クラスタは、周辺装置として 1.1TB のRAIDディスク装置を装備しています。

◎ Hitachi HA8000

Hitachi HA8000 has scalar-parallel architecture, providing the total performance of 5495 GFLOPS and total memory is 1796GB by 449 nodes. Each node consists of 2 CPUs and 4 GB memory. 128 nodes are connected with the fiber inter-connect by 2Gbps, and structured cluster. The each cluster is also equipped with a RAID disk device about 1.1 TB for temporal storage.

計算科学研究センター

Research Center for Computational Science

自然科学研究機構 岡崎共通研究施設
National Institutes of Natural Sciences, Okazaki Joint Research Facility
〒444-8585 岡崎市明大寺町字西郷中38
Myodaiji, Okazaki 444-8585, JAPAN TEL 0564-55-7462 FAX 0564-55-7025