



グリッドコンピューティング基盤、次世代スーパーコンピューティング基盤として最先端のナノサイエンス研究を支える 日立アドバンスサーバ「HA8000/110W」と スーパーテクニカルサーバ「HITACHI SR11000 モデル H1」

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

超高速グリッドコンピューティング技術の確立を目的に、文部科学省が2003年度に開始した「超高速コンピュータ網形成プロジェクト(National Research Grid Initiative:通称NAREGI)」の中でグリッドシステムの有効性を実証するためのアプリケーション実証研究の拠点となった分子科学研究所では、日立アドバンスサーバ「HA8000/110W」449台と、スーパーテクニカルサーバ「HITACHI SR11000」で構成されたグリッドコンピューティングシステムによって、新しい計算科学方法論の開発と、グリッド計算環境の有効性を実証する活動を推進しています。

そして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も、そのコンピューティングパワーを駆使するナノ分野でのグランドチャレンジの研究開発を支える重要な基盤として、同システムの活躍が期待されています。

グリッドの実証研究に選ばれたナノサイエンスの中核拠点

1975年、愛知県岡崎市に創設された「岡崎国立共同研究機構 分子科学研究所」は、化学と物理学の境界にある分子科学の研究を推進する中核機関として、幅広い研究者に独創的な研究活動の場を提供し、2004年に独立法人化した現在でも「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」として、わが国の分子科学研究をリードしてきました。

また、日本が世界に誇るナノサイエンスの基礎を作ったことでも有名で、ナノサイエンスの進展に不可欠な計算科学からの



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拠点長 / 分子科学研究所 教授
平田文男氏



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

<http://www.ims.ac.jp/joint/>

・研究施設のご紹介
 錯体科学実験施設
 分子スケールナノサイエンスセンター
 分子制御レーザー開発研究センター
 装置開発室など

分子科学研究所 外観

アプローチに取り組むため、コンピュータを駆使した研究開発にも大きな力を注いでいます。

文部科学省が2003年度に開始したNAREGIプロジェクトにおいて、同研究所はこれまでのナノサイエンス分野の実績と知見を活かし、ナノサイエンスの知的基盤を形成するためのアプリケーション研究開発拠点として位置づけられ、実証研究用の基盤システム構築に取り組むこととなりました。

そして2004年3月、分子科学研究所 計算科学研究センターの指導の下に構築されたのが、日立アドバンスサーバ「HA8000/110W」とスーパーテクニカルサーバ「HITACHI SR11000 モデル H1」による、グリッドコンピューティングシステムです。分子科学研究所の使命とシステムの特徴を平田文男 教授は次のように語っていただきました。

「NAREGIプロジェクトでは、グリッド計算環境の有効性を実証するため、グリッドで機能するミドルウェアの開発と、その環境下で性能を遺憾なく発揮できるアプリケーションの研究開発を行うことが大きなミッションとなっています。その中で私たち分子科学研究所は、アプリケーション研究開発とグリッドコンピューティング



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副拠点長 / 分子科学研究所 教授 / 計算科学研究センター長 岡崎 進氏

環境における実証を担当し、グリッド応用計算分野として、ナノサイエンスを設定したわけです。多様な計算を必要とするナノサイエンスでは、分散メモリ型と共有メモリ型、両方のコンピュータを混在させて利用する必要があります。そこで、メモリを共有せず、複数のコンピュータを並列化する“分散メモリ型”

にはHA8000を449台連携させ、また複数のプロセッサでメモリを共有する“共有メモリ型”にはSR11000を採用し、これらによるグリッドコンピューティングシステムを構築することになりました。」

分散メモリ型と共有メモリ型サーバを柔軟に連携

処理能力の高さとコストパフォーマンスが要求される分散メモリ型サーバに採用された「HA8000/110W」は、1Uサイズの筐体にIntel® Xeon®プロセッサ(3.06GHz)をデュアルで搭載したシステムが449台、並列稼働しています。

一方、共有メモリ型計算サーバとして採用された「SR11000モデルH1」は、日立が開発した科学計算分野向けのスーパーコンピュータで、1ノードにPOWER4+ 1.7GHzプロセッサを16個搭載し、本システムでは50ノード構成となっています。

理論ピーク性能はそれぞれ約5テラFlops¹で合計約10テラFlops。HA8000とSR11000の両システム間はギガビット・イーサネットで接続されており、双方の計算サーバの特性を活かしながら、異なる複数の大規模科学計算プログラムを連成して実行することが可能です。この規模はまさに、世界最大級のグリッドコンピューティングシステムと言っても過言ではありません。

NAREGIにおける両システムそれぞれの長と役割を、システム構築の指導にあたった分子科学研究所 計算科学研究センター長の岡崎 進教授は、次のように語ります。

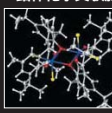


分子科学研究所 技術課 技術班長 水谷文保氏



共有メモリ型計算サーバとして活躍するSR11000。プロセッサはPOWER4+ 1.7GHzを採用。1ノードに16プロセッサを搭載し、今回のシステムでは50ノードが使用されている。OSはAIX 5Lで、ノード間通信には4GB/sec(単方向)×2の高速ネットワークを採用している。SR11000とHA8000の両システム間はギガビット・イーサネットで接続されている。

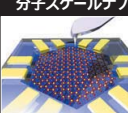
錯体化学実験施設



一つの金属あるいは金属イオンと配位子(原子または分子)から構成された単核錯体、複数の金属イオンと配位子からなる多核錯体、さらにそれらの金属錯体が高分子化した無機固体物質を研究対象とする錯体化学は、金属と配位子の結合を通じて、その構造と物性を追求し、新しい機能を創造することをなす学問領域です。全元素を対象とした物質化学としての錯体化学は他研究領域の発展にも大きな貢献を行っています。


主要研究施設

分子スケールナノサイエンスセンター



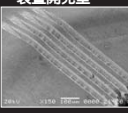
本センターは、規模において大部門に相当する3つの専任研究部門と1つの流動(客員)部門から構成されており、分子スケールナノ構造体の作成から、ナノ構造体の特異な化学反応性や物理的性質を体系的に研究する組織となっています。

分子制御レーザー開発研究センター



分子制御レーザー開発研究センターは、新しい分子科学研究を切り開くための高性能かつ新規なレーザーシステムをみずから開発し、先端的分子科学研究の推進に寄与することを目指しています。

装置開発室



装置開発室では、分子科学研究に必要な実験装置を設計・製作し、また新しい装置を研究・開発しています。

「高性能のPCサーバであるHA8000は使用メモリ量や通信量が比較的少ない計算において非常に高いコストパフォーマンスを発揮します。一方、スーパーコンピュータであるSR11000は、当然のことながら、多くのメモリと通信速度の速さが要求される計算で圧倒的な強みを持っています。こうしたそれぞれの特長をグリッドの中でうまく組み合わせることにより、ナノサイエンスの研究開発に不可欠な応用ソフトウェアやシミュレーションの研究を、かつてない柔軟な環境のもとに実行することが可能となりました。

例えば、SR11000で化学反応の際の電子状態計算を行うと、各原子の上にかかる力が計算できます。一方、化学反応を起こす溶媒との動的過程(ダイナミクス)を解析するには分子動力学法を用いますが、これは小規模のものであればHA8000が得意分野です。つまりSR11000で電子状態を計算し、その結果をHA8000に引き渡して分子動力学計算を行う。その結果を再びSR11000に引き渡し、今度は分子軌道計算を行うわけです。これを交互にやっていると、溶媒が運動し、その中で実際に化学反応が起こるシミュレーションを非常に効率的に計算できることになるのです。」

1 Flops: Floating point number Operations Per Secondの略。コンピュータの処理速度を表す単位の一つで、1テラFlopsは1秒間に1兆回の浮動小数点数演算(実数計算)を実行できることを意味する。

最先端のグリッド環境で信頼性の高さを実証したHA8000とSR11000

このグリッドコンピューティングシステムは、NAREGIのグリッド基盤ソフトウェア研究開発拠点である「情報・システム研究機構 国立情報学研究所」や、NAREGIに参加する全国の大学、公的研究機関、民間企業と学術情報ネットワーク「Super SINET」

で接続されています。この産学連携の共同研究開発体制において分子科学研究所を研究開発拠点として研究開発されているナノサイエンスにおける計算科学の新しい方法論やアルゴリズムは大規模なグリッド計算環境においても実運用に耐えうることを実証しつつあり、グリッド基盤ソフトウェアと、その環境下で動く計算シミュレーションソフトウェアの開発により、次世代ナノ材料設計の学術基盤の形成に大きな成果をもたらす見込みです。

このプロジェクトを支えたHA8000とSR11000のシステムについて、その信頼性と計算能力を高く評価するのは、システム運用責任者である分子科学研究所 技術課 技術班長の水谷文保氏です。

「グリッドシステムはその性格上、障害率を懸念していましたが、導入から現在までHA8000は449台が非常に安定して稼働しており、SR11000も同様に安定稼働しています。このシステムはSuper SINETを通じて大規模実証計算のために本計算リソー

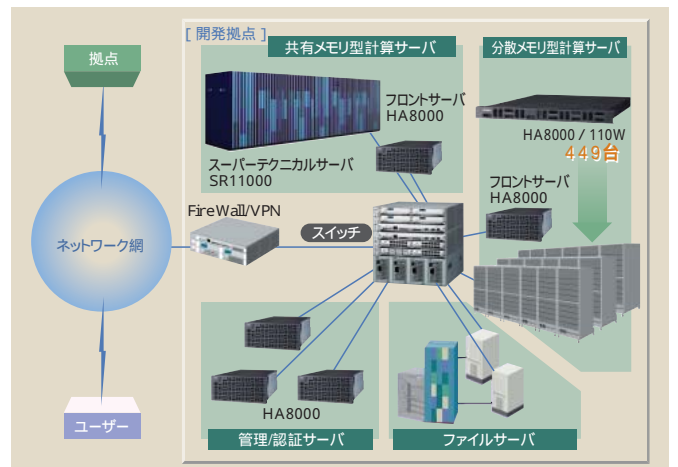
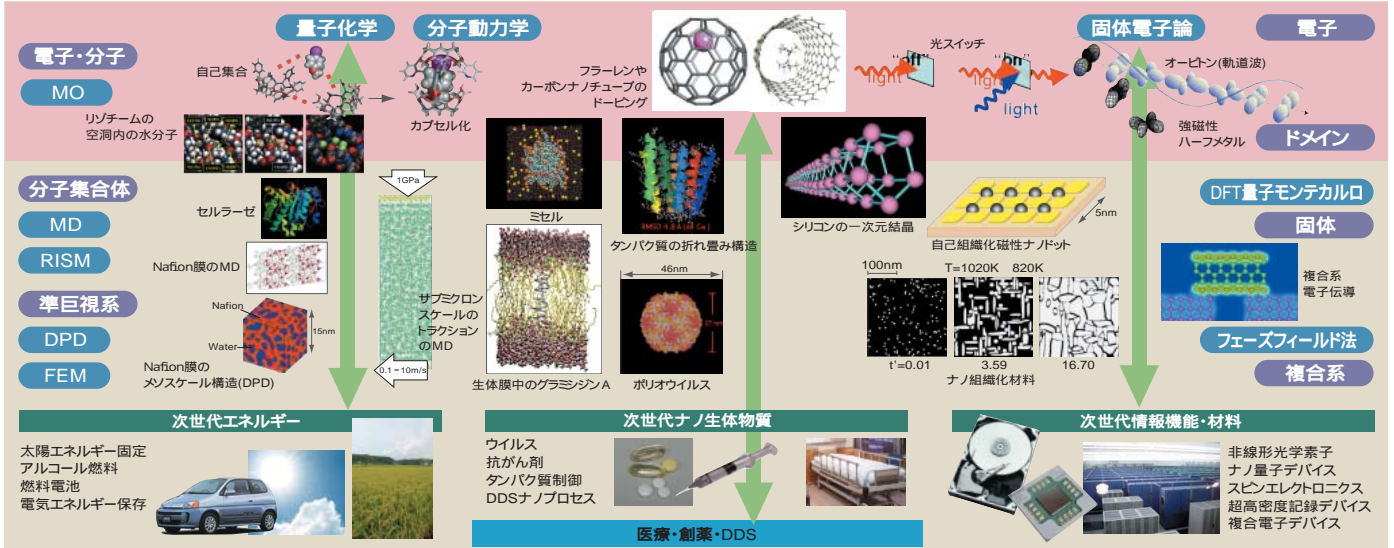


図1 分子科学研究所 - 世界最大級のグリッドコンピューティングシステム - 異なる複数の大規模科学計算プログラムの連携・実施が可能

図2 「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、ナノ分野グランドチャレンジ課題(現在、検討中のものを含む)



スの関係機関に1か月単位で提供していますが、500CPU ~ 600CPUを利用した並列計算中に1台でも障害が起きてしまうと、それまでの計算がすべてやり直しになってしまうんですね。その意味でも障害率が低く、1ノード2CPU構成で並列度の高いHA8000は、研究者にとっても運用者にとっても非常に頼もしい存在となりました。日立さんには今回のシステム構築から運用サポート、アプリケーションプログラムの並列化やグリッド化、性能チューニングなどでトータルにご協力をいただいておりますが、その技術やノウハウはNAREGIプロジェクト全体に大いに活かされています。」

次世代スーパーコンピュータ・プロジェクトでも研究基盤として活躍

2006年度から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」いわゆる“次世代スパコンプロジェクト”について平田文男 教授は次のように語られます。

「本プロジェクトでは、世界最先端・最高性能の次世代スパコンを開発・整備を行い、国際競争力を支えるナノテクノロジー分野やライフサイエンス分野などの革新につなげることが目標となります。

その中で分子科学研究所を中核拠点とする産学連携チームは、NAREGIの実証研究の成果をベースに、次世代スパコンを駆使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に携わることとなっております。それは、電子・原子・分子から、ナノスケール

の分子複合デバイスに至るまで、ナノ材料を丸ごと解析することにより、次世代エネルギーや次世代ナノ生体物質、次世代情報機能・材料設計などを革新する最先端の計算科学方法論を駆使したシミュレーションソフトウェアの研究開発をグランドチャレンジ課題と位置づけられています。

次世代スパコンが完成に至るまでの間、HA8000とSR11000で構成されたグリッド環境を本ソフトウェア開発のためのさまざまな研究やテストなどに使っていくことになります。日立さんには引き続き、システム環境の運用サポートやチューニングなどで、ご協力いただけることを期待しています。」

2010年に稼働を開始予定の次世代スパコンでは、NAREGIで培ったグリッドコンピューティングの技術とノウハウが間違いなく活かせるはずだと語る平田文男教授。第3期科学技術基本計画における国家基幹技術としての世界最先端・最高性能の次世代スパコンを中核としたナショナル・リーダーシップ・インフラストラクチャの開発利用ならびにその一環であるナノテクノロジー分野など各分野でのグランドチャレンジを実現する科学技術・学術の基盤を支えるため、日立はこれからも科学技術の発展と産業競争力の強化、そして安全・安心な社会に貢献するためのシステムを世に送り続けていきたいと考えています。

お問い合わせ先

(株)日立製作所 中部支社 公共情報システム営業部 第二グループ
TEL(052)388-3713 FAX(052)388-3722

情報提供サービス

<http://www.hitachi.co.jp/ha8000/>
<http://www.hitachi.co.jp/hpc/index-j.html>