

5-4 計算科学研究センターの現状と今後

1977年に設置された分子科学研究所・電子計算機センターは、2000年4月より分子科学ばかりでなくバイオサイエンス分野の計算科学を含めた岡崎国立共同研究機構・計算科学研究センターに改組され今日に至っている。この間、一貫して計算科学分野の学術研究発展の先導的な役割はもとより、全国共同利用センターの中心拠点として大きな貢献をなしてきている。一方、計算科学研究センターを廻る環境は大きく変化しようとしている。その一つは2004年4月から始まる独立法人化およびそれにとまう分子科学研究所および「岡崎国立共同研究機構」の「自然科学研究機構」への再編成である。しかし、分子科学を基盤とする国内の計算科学の裾野をさらに大きくもち上げて、国際的に先導的な研究の発信拠点としての役割と進展に何らの変更があるものではない。

5-4-1 現在の計算機システム

2003年12月現在の計算機システムの概要を下图に示す。図の左側は2000年3月に導入されたスーパーコンピュータシステムで、図の右側は2003年3月に更新されて山手地区に設置された汎用高速演算システムである。

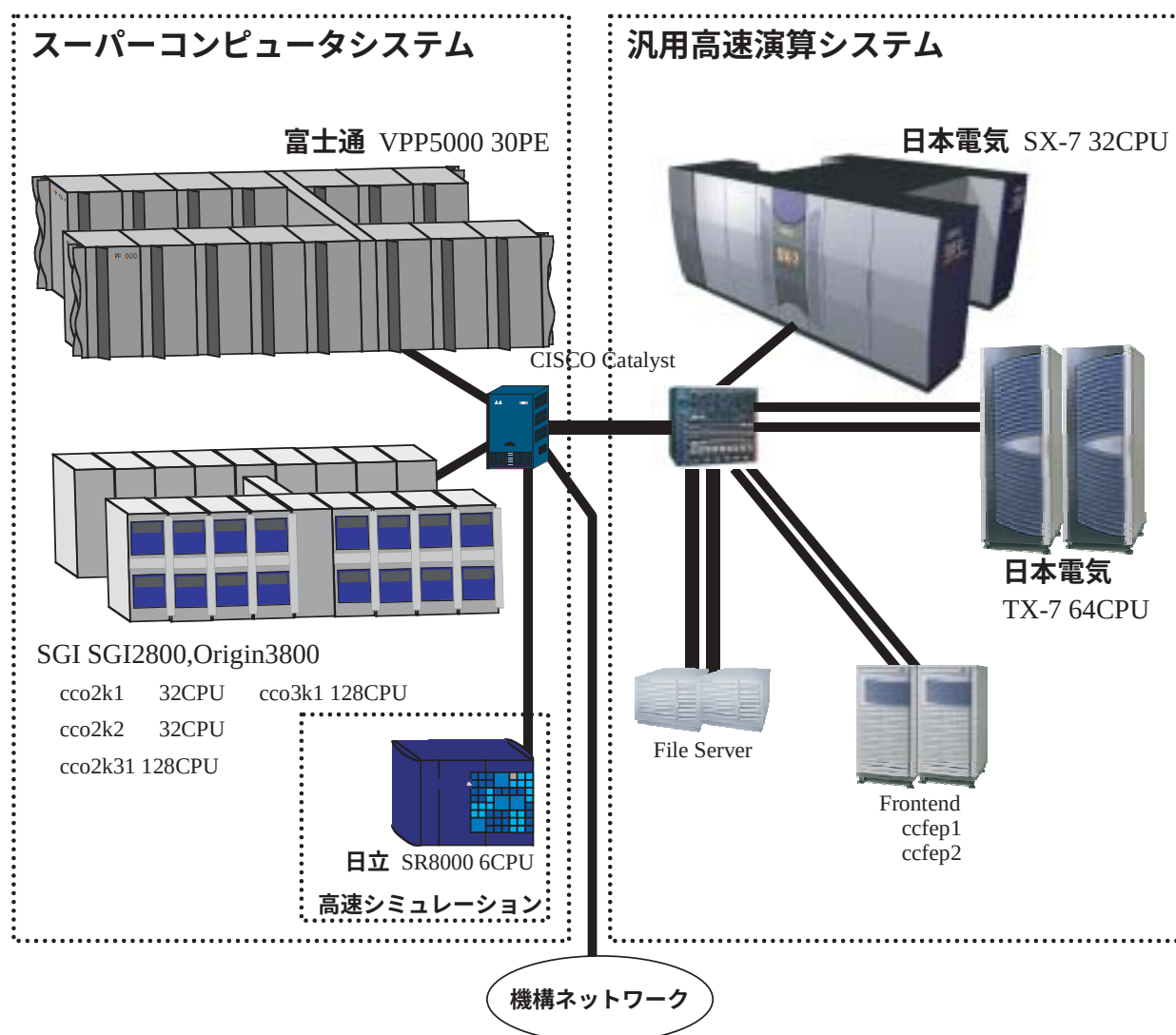


図1 システム構成図（平成15年12月1日現在）

スーパーコンピュータシステムは、富士通製 VPP5000 と SGI 製 Origin から構成されている。VPP5000 は 1 CPU 当たりの最高演算性能が 9.6 Gflops のベクトル演算装置 30 台から構成され、各 CPU に 8 ～ 16 GB の主記憶装置をもつベクトル並列計算機である。一方、SGI Origin は 1 CPU 当たりの最高演算性能が 0.6 ～ 0.8 Gflops のスカラー演算装置 320 CPU から構成され、1 CPU 当たり 1 GB の主記憶をそれぞれの CPU から共有メモリとしてアクセスが可能な分散共有方式の超並列計算機である。VPP5000 では高速なベクトル演算能力を活かした大型ジョブの逐次演算処理はもちろん、例えば 8 台以上のベクトル演算装置を使った大規模なベクトル並列演算が可能である。Origin2800/3800 は Non Uniform Memory Access (NUMA) 方式と呼ばれる論理的な共有メモリ機構を有する。NUMA は主記憶装置が各 CPU に分散して配置されているため CPU から主記憶へのアクセス速度が非等価ではあるが、利用者プログラムから大容量のメモリを容易に利用することができるので、大規模な並列ジョブの実行が可能となる。高速シミュレーションシステムの日立製 SR8000 は、主に機構内における利用を目的として運用されている。

一方、2003 年 3 月に導入された汎用高速演算システムは、NEC 製 SX-7 で構成される主システムと TX-7 で構成される副システムとから成る。NEC SX-7 は 1 CPU あたり 8.8 Gflops の最高演算能力を持ち、256 GB の共有メモリに結合された 32 CPU の演算装置から構成され、総合演算性能 282.5 Gflops の共有メモリ型ベクトル計算機である。また、TX-7 は 4 GB のメモリを持ち最大 4 Gflops の演算性能を有する CPU を 32 台搭載したノードを基本単位として構成されている。本システムは 2 ノードから成り、合わせて 64 CPU、256 GB、256 Gflops の総合性能を有する分散メモリ型スカラー計算機である。このうち主システムは高速演算、大容量メモリを活用した大規模分子科学計算に用いられ、また副システムは分子科学計算に加え、ホモロジー検索を主としたバイオサイエンス分野での利用に供されている。

本年度も約 120 の研究グループの 600 名にもおよぶ全国の利用者に共同利用施設として広くサービスを提供し、計算科学分野の中核的拠点センターとしての役割を果たしている。一方で、世界の最先端研究をリードしこれを推進していくために、各研究室にあるワークステーションやパソコンクラスターはもちろんのこと、他の計算機センターでは不可能な大規模計算を実行可能とするために環境整備を行ってきている。

5-4-2 大規模計算のための環境整備

高速パソコンクラスターの普及などに伴って、計算科学研究センターへの期待と役割が最近変化してきている。このために、利用者の意見を広く集めて、魅力ある中核計算センターとしてさらに大きく発展するために、8 月 25 日から 9 月 8 日にかけて、計算速度、ハード、ソフト、プログラムライブラリ、運用法、利用申請と利用報告等に関する利用者アンケート調査を実施した。また、主な利用者にセンターに集まってもらって、意見交換会を開催した。これらをもとにして議論を重ねて、これまでと比較してはるかに高度で便利な利用形態を目指して、2004 年 4 月より運用の抜本的な変更を予定している。詳細は <http://www.rccs.orion.ac.jp/> にある。変更の主なポイントは、

- (a) CPU 時間とメモリーの上限を大幅に緩和して、大きな分子の電子状態計算を可能にする。また、ディスク容量の上限を大幅に緩和して、MD 計算の巨大データの保存を可能にする。
- (b) 大規模計算を高速処理するための並列計算キューを大幅に拡充する。
- (c) これまでの特別申請を簡素化した特別利用キューを新設し、申請時に簡単な説明を追記するだけで、360 時間（16-32 CPU、128 GB メモリー）もの長時間ジョブを可能にする。
- (d) アプリケーション利用キューを新設し、機種に依存しない Web からの標準入力、最も利用頻度が高い Gaussian プログラムの効率的実行を初心者にも容易にする。

これらの変更により、これまでと比較して格段に大規模な計算が実行できることになる。例えば、HF/6-31G(d)法で、

原子数 338, 基底関数 4,238 の分子の SCF (21 回) +force の計算が TX-7 (16 CPU) を利用して 8 時間 48 分で終了するので、巨大な分子の理論研究が可能になる。今回の変更によって大規模な計算ばかりでなく、小規模な計算も効率的に実行できるのも特徴である。

5-4-3 ナノサイエンス実証研究プロジェクト

2003 年 4 月より「ナノサイエンス実証研究プロジェクト」が分子科学研究所と計算科学研究センターを中心にスタートした。この研究プロジェクトは、我が国にグリッド計算環境を整備することを主眼とする国家プロジェクト「超高速コンピュータ網形成プロジェクト (NAREGI: National Research Grid Initiative)」のアプリケーション開発拠点として、「グリッド計算環境を活かした計算科学をナノサイエンス分野で展開し、グリッド計算の有効性を実証する研究」の推進を目的に 5 年間の計画で行われる。このプロジェクトは、我が国の産業技術の基盤を育成するための「産学連携プロジェクト」としての性格をもっているのが特徴である。

本プロジェクトは、分子研、東大物性研、東北大金研、物構研、京大化研、産総研の 6 研究所を中心にして、いくつもの大学および企業からのナノ計算科学分野の第一線の研究者の参加をえて、我が国の計算科学の総力を結集した取り組みになっている。具体的な研究課題と担当研究機関は、①機能性ナノ分子 (分子研)、②ナノ分子集合体 (分子研)、③ナノ電子系 (東北大・金研)、④ナノ磁性 (東大・物性研)、⑤ナノ複合系設計 (産総研)、⑥総合ナノシミュレーションシステム (産総研)、⑦ナノ設計実証 (産業界から公募) である。これらの課題研究を遂行し、その研究成果を通じてグリッド計算環境の有効性を実証すると同時に、ナノサイエンス分野における統合シミュレーションシステムを構築し、大学や産業界の研究者に広く公開することを目指している。

このナノサイエンス実証研究のために昨年度補正予算が組まれ、2004 年 4 月に運用開始予定で、総理論演算能力が 10 Tflops の大型計算機システムが導入される。計算科学研究センターでは、アプリケーション開発拠点としての研究推進はもとより、事務局と計算機システムの運用という重要な役割を果たすことになる。このためにセンタースタッフは現在万全の準備を行っている。

5-4-4 計算分子科学研究系の新設

自動車、船、飛行機、建物などを合理的に設計するためにはコンピュータでまず仮想実験をすることが早くからルーチン化されているように、物質科学はもとより生命科学分野でも、分子科学を基盤とする計算科学とコンピュータシミュレーションは、実験に並ぶあるいはそれ以上に有力で強力な研究法として今後ますます重要になる。これは、実験では困難な条件もさまざまに設定でき、高速に多数回の仮想実験をクリーンにできるので、新しい機能をもつ分子や集合体を精密・合理的に設計して反応も自在に制御できる。現在の計算科学手法は、比較的小さい分子系を精度良く取り扱えるが、ナノスケールサイズの巨大な分子系の精度の高いコンピュータシミュレーションには飛躍的な進展が望まれている。サイズの大きな分子系は、新規な構造、物性、機能、自己集合の宝庫である。このために、巨大な分子系を精度高く高速に取り扱える理論と超並列演算やグリッド環境を駆使した高度な計算法の開発が、今後の計算科学のきわめて重要な挑戦課題になっている。分子科学を基盤とするナノサイエンスおよびバイオサイエンスとの境界領域において、世界の潮流の先端になるナノ計算科学を展開して発信していくことは緊急の課題である。このことは、分子研の理論研究系の昨年度の外部評価でも指摘されていることで、従来の計算科学の単なる延長ではなく、新機軸を切り開いていくための中核的研究推進体制と人材が求められている。ナノ計算科学分野の独創的な先端研究を集中的に行うために、下記の計算分子科学研究系を分子科学研究所に新設することが煮詰まっている。

(1) 計算分子科学第 1

ナノスケールの分子並びに分子集合体の構造と動力学に関する計算科学の研究を行う。特に、分子の自己組織化による構造形成の原理とその動力学を明らかにし、水中でのタンパク質や生体膜などの構造予測と、その構造に基づいた動力学の解明のための計算科学的方法論を確立する。

(2) 計算分子科学第 2

ナノスケールの分子並びに分子集合体の機能と物性に関する計算科学の研究を行う。特に、巨大分子系やその複合体のもつ機能や物性および化学反応を合理的に設計して解析する計算科学的方法論を確立して、機能性新規触媒や分子エレクトロニクス、分子磁性、機能性高分子などへの応用を目指す。

(3) 計算分子科学第 3（客員部門）

超並列アルゴリズムやグリッドコンピューティング手法を、量子化学計算、分子動力学計算、モンテカルロ計算などへ適用し、大規模計算の最高演算ピーク性能を実現して計算効率の最大化を図るための情報科学的研究を幅広く行う。

計算分子科学研究系の教官は、理論研究系（理論分子科学研究系と改名予定）の協力のもとに、21世紀の計算科学の基盤となる理論と方法論の開発はもとより、計算科学研究センターの運営と発展に中心的な役割を果たす。上記の研究の具体的内容はまだ暫定的であるが、分子科学ばかりでなく生命科学分野のナノ計算科学に新展開と大きなインパクトをもたらすことになる。