

[2007]九州大学情報統括本部年報 : 2007年度

<https://doi.org/10.15017/1470731>

出版情報 : 九州大学情報統括本部年報. 2007, 2008. 九州大学情報統括本部
バージョン :
権利関係 :



第7章 全国共同利用事業

7.1 研究用計算機システムの運用に関する事項

- (1) スーパーコンピュータシステム、高性能アプリケーションサーバシステム及び高性能演算サーバシステムによる大規模計算サービスを提供しています（参考資料1）。スーパーコンピュータ及び高性能アプリケーションサーバは6月からの運用です。新システムの利用申請をすべて新規として受け付けたため、従来利用実績のないまま継続していた利用者の多くが申請を見合わせました（参考資料2）。このため、利用負担金の大幅引き下げを行ったが、利用者総数はほぼ横ばいとなっています（参考資料3）。
- (2) 近隣大学等への包括的な計算サービスを提供しました（参考資料2）。
 - ① 福岡大学（p5 32 コア，平成17年度より継続）
 - ② 宮崎大学（p5 8 コア，平成18年度より継続，PQ8 コア，新規）
 - ③ 長崎大学（p5 16 コア，平成18年度より継続）
 - ④ 九州工業大学（各種システムの共有タイプ計12件，新規）
- (3) 新規導入ソフトウェアのインストール作業，インストール作業支援，動作確認，性能評価を行いました（参考資料4）。
- (4) 計算機システムの各種設定・作業手順の見直しを行い，システムの効率的運用・安定稼働あるいは利用者プログラムの性能向上のため，以下のような変更を行いました。
 - ① Materials Explorer の実行ホストの変更
 - ② SR11000 の設定変更
 - ③ 各システムのバッチ処理記述ファイルのテンプレートの整備
- (5) スーパーコンピュータシステムにファイルシステム障害が多発していましたが，メーカーに原因究明と対処を要求しました。これに関する障害修正は年度末までに終了しました。

7.2 研究用計算機システムの利用者支援・利用促進に関する事項

- (1) 利用者相互の情報交換を図る場を提供するため，広報事業室と共同で以下のような活動を行いました。
 - ① 平成19年9月25日「線形計算フォーラム～線形計算ライブラリへの取組み・概要・性能評価～」
 - ② 平成19年10月22日「線形計算フォーラム～4倍精度・多倍長精度演算への取組みお

よび実装技術の現状と今後～」

(2) 利用促進のため、以下のような活動を行いました。

- ① 旧システムからのソフトウェア資産の移行支援
- ② 新システム利用方法等に関する技術相談
- ③ メーカー技術者を交えたチューニングサポート

(3) 広報事業室と共同で以下に示す講習会及び研究会を開催しました。

- ① 平成 19 年 8 月 28 日 「計算科学ソフトウェア入門」
- ② 平成 20 年 2 月 6, 7 日 「Gaussian 03 & Amber 9 講習会」
- ③ 平成 20 年 2 月 8 日 「先駆的科学計算に関するフォーラム 2008～分子科学計算「研究報告及び紹介と新システムへの声」～」

7.3 先端的計算科学研究の支援に関する事項

(1) 研究用計算機システムを用いた先端的計算科学研究の支援を行わせるため、利用者の研究分野の専門知識を有する計算科学専門研究員（任期 3 年，再任なし）の公募を行い，3 名の採用を決定しました（うち 1 名は 3 月に退職）。また，5 月 1, 2 日開催の「計算科学チュートリアル 2008」は 19 年度に在職した計算科学専門研究員によって企画されたものです。

(2) 高性能計算機を利用した萌芽的・先端的研究の推進に資するため，研究用計算機システムを利用して行う研究プロジェクトの公募を行いました。審査委員会による審査の結果，11 件のプロジェクトが採択され，無料でスーパーコンピュータシステムを利用しました。これらのプロジェクトの研究成果報告会は 4 月 24 日に開催しました。

7.4 研究用計算機システムの将来計画に関する事項

(1) 次期高性能演算サーバシステム（平成 21 年 5 月運用開始予定）の政府調達手続きを開始しました。また，現行の高性能演算サーバシステムおよび次期高性能アプリケーションサーバシステムの運用で得られたノウハウを蓄積し，次期システムの設計に役立てています。

(2) 他の 6 大学の情報基盤系センターとともに，文部科学省が進める「先端研究施設共用イノベーション創出事業」（計画では平成 23 年度まで 5 年間）に参画し，スーパーコンピュータシステムの民間共用によるイノベーション創出に向けた取り組みを開始しました。

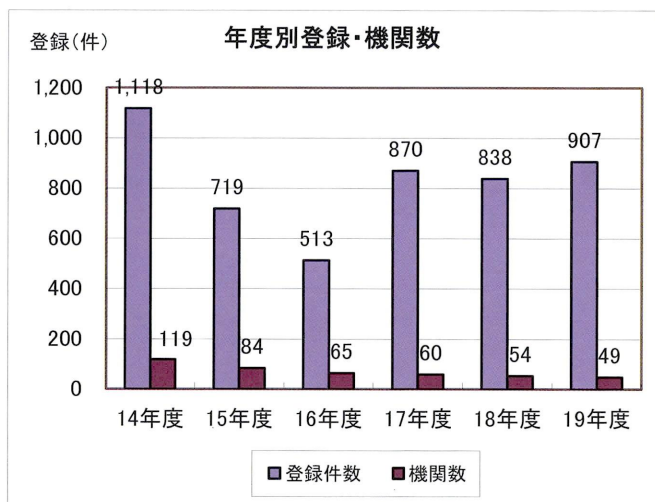
7.5 その他

(1) 大分工業高等専門学校サイエンスパートナーシッププログラム事業に協力し，事業室員を中心として最新のスーパーコンピュータ技術に関する講演・実習・見学を企画および実施しました。（7 月，10 月）

参考資料1 研究用計算機システムの概要

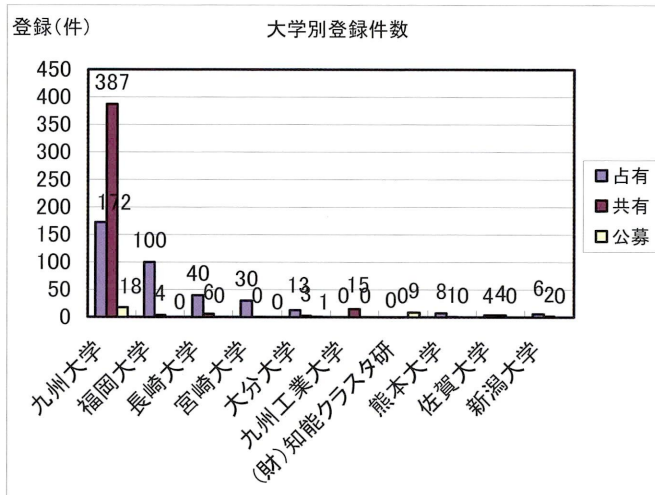
スーパーコンピュータ		高性能 アプリケーション サーバ	高性能演算サーバ
			
富士通株式会社 PRIMEQUEST580	富士通株式会社 PRIMERGY RX200S3 クラスタ	株式会社日立製作所 SR11000 J1/K2	日本アイ・ビー・エム 株式会社 eServer p5 モデル 595
ピーク性能 : 13.1TFLOPS 総主記憶容量 : 4.0TB 総 CPU コア数 : 2,048	ピーク性能 : 18.4TFLOPS 総主記憶容量 : 3.0TB 総 CPU コア数 : 1,536	ピーク性能 : 3.0TFLOPS 総主記憶容量 : 2.9TB 総 CPU コア数 : 368	ピーク性能 : 3.2TFLOPS 総主記憶容量 : 1.9TB 総 CPU コア数 : 416
磁気ディスク : 250TB (実効)		磁気ディスク : 20.7TB (実効)	磁気ディスク : 51TB (実効)
平成 19 (2007) 年 6 月導入		平成 19 (2007) 年 6 月 導入	平成 17 (2005) 年 3 月 導入
平成 23 (2011) 年 2 月まで運用予定		平成 21 (2009) 年 2 月まで運用予定	

参考資料2 利用登録状況



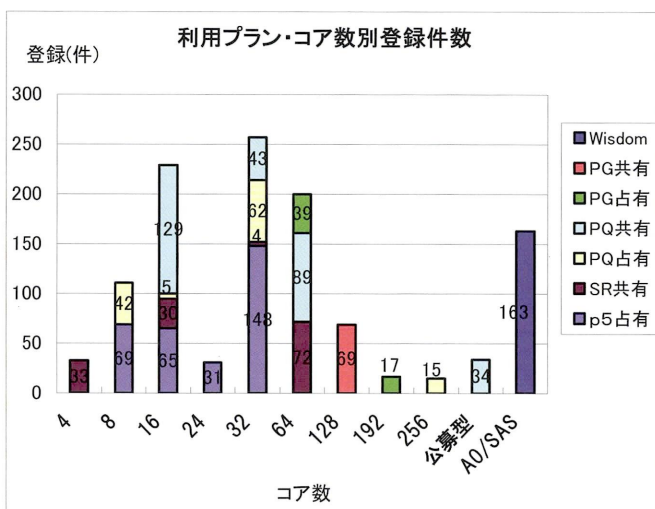
年度別登録・機関数

区分	登録件数	機関数
14年度	1,118	119
15年度	719	84
16年度	513	65
17年度	870	60
18年度	838	54
19年度	907	49



大学別登録件数

順位	大学名	登録件数	
		18年度	19年度
1	九州大学	491	577
2	福岡大学	118	104
3	長崎大学	45	46
4	宮崎大学	17	30
5	大分大学	22	17
6	九州工業大学	9	15
7	(財)知能クラスタ研	0	9
8	熊本大学	3	9
9	佐賀大学	15	8
10	新潟大学	1	8

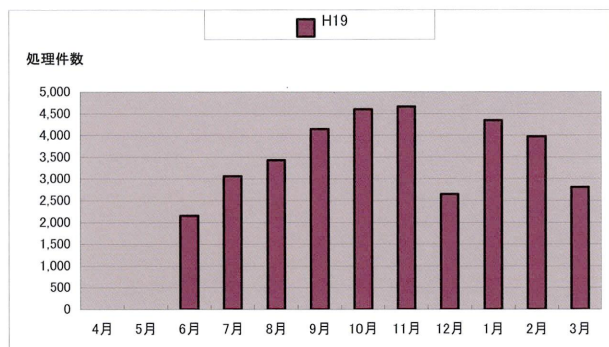


システム	件数
p5占有	313
SR共有	139
PQ占有	124
PQ共有	295
PG占有	56
PG共有	69
Wisdom	163

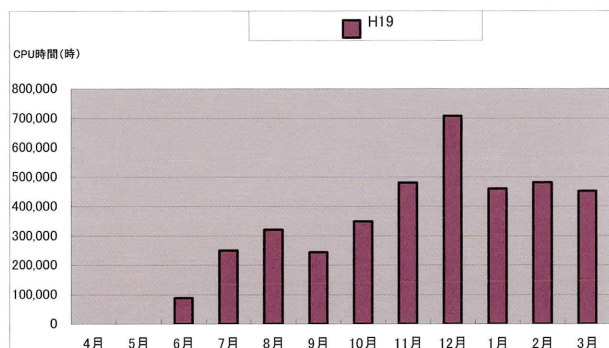
参考資料3 計算機利用状況

1. スーパーコンピュータ FUJITSU PRIMEQUEST 580

(伸び率 ---)

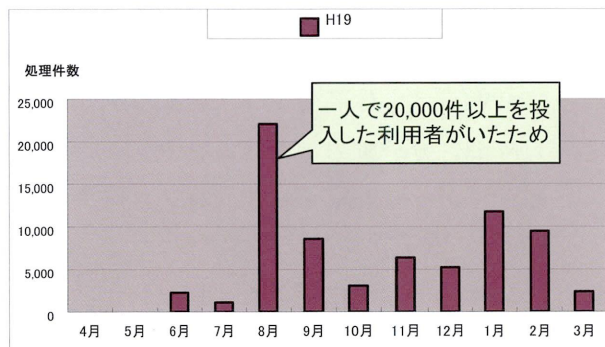


(伸び率 ---)

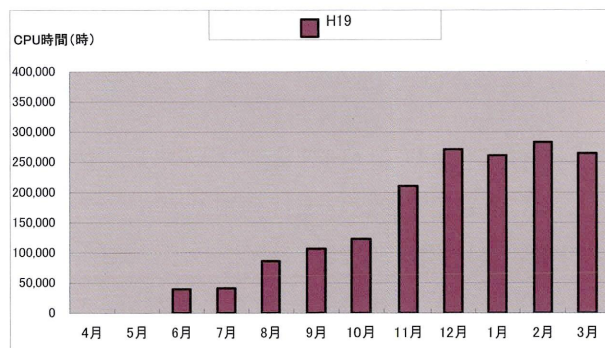


2. スーパーコンピュータ FUJITSU PRIMERGY RS200S3

(伸び率 ---)



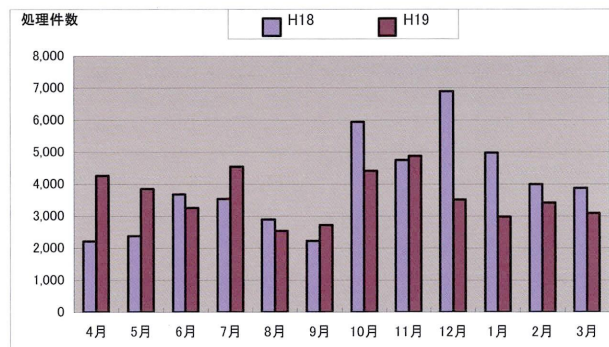
(伸び率 ---)



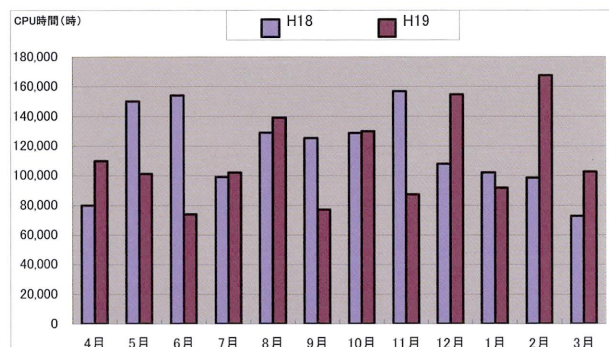
3. 高性能演算サーバ IBM eServer p5モデル595

(伸び率 8.24% 減)

占有タイプ専用



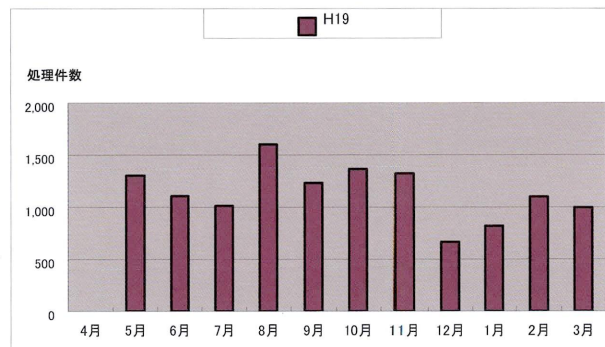
(伸び率 4.76% 減)



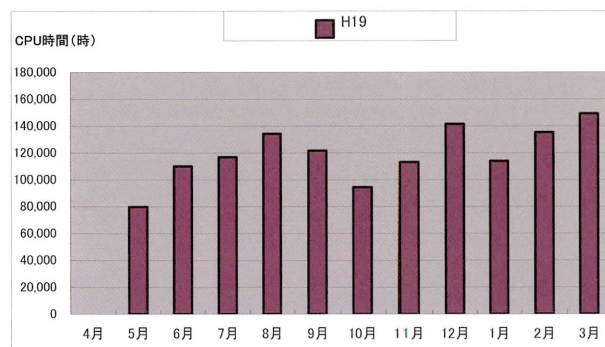
4. 高性能アプリケーションサーバ HITACHI SR11000

(伸び率 ---)

共有タイプ専用



(伸び率 ---)



参考資料4 新規導入したソフトウェアの一覧

- ・ GAMESS: 非経験的分子軌道法/密度汎関数理論計算プログラム
- ・ Molpro: 非経験的分子軌道計算ソフトウェア
- ・ AMBER: モデリング/分子力学/動力学計算シミュレーションプログラム
- ・ CHARMM/m: 生体高分子システムモデリングパッケージ
- ・ TINKER: 分子動力学シミュレーションソフトウェア
- ・ VASP: 第一原理電子状態計算プログラム
- ・ PHASE: 電子状態計算プログラム
- ・ AutoDock: 分子化学シミュレーションツール
- ・ Material Explorer: 分子動力学ソフトウェア
- ・ MicroAVS: 統合可視化システム
- ・ FIELDVIEW: 流体解析用ポストプロセッサ
- ・ ANSYS CFX: 汎用有限体積法熱流体解析ソフトウェア
- ・ CONFLEX: 配座空間探索プログラム
- ・ MATRIX/MPP: 行列計算サブルーチンライブラリ
- ・ MATRIX/MPP/SSS: 疎行列用サブルーチンライブラリ
- ・ MSL2: 汎用数値計算ライブラリ
- ・ IDL: データ解析ビジュアライゼーションソフトウェア
- ・ HPC ポータル: Web ブラウザからの計算機利用システム
- ・ アプリケーションポータル: Web ブラウザからの計算機利用システム