

九州大学
情報基盤センター

広報

全国共同利用版
2007年 号外版

目次

次期計算機システムの紹介	天野浩文	1
計算機システム運用スケジュール		7
平成19年度前期講習会計画		8
日立 SR11000 お試しキャンペーンのお知らせ		9
スーパーコンピュータシステムメーリングリスト会員登録（無料）のお誘い		10

Computing and Communications Center
Kyushu University

www.cc.kyushu-u.ac.jp

次期計算機システムのご紹介

九州大学情報基盤センター 計算機システム室長 天野浩文¹

本稿では、平成 19（2007）年 6 月 1 日稼働予定の次期スーパーコンピュータ・高性能アプリケーションサーバ両システムの概要を紹介します。

1. はじめに

本センターで運用しておりましたスーパーコンピュータシステム VPP5000 およびスカラー並列サーバ GS320 は、平成 13 年 1 月に導入されたものでした。これまで、本センター全国共同利用計算サービスの主戦力として多くの利用者ジョブを処理してきましたが、導入後 6 年を経過して、最先端の科学技術計算の需要を満たすのは難しくなっております。そこで、VPP5000 および GS320 は平成 19 年 2 月末をもって運用を終了し、現在システム更新作業に入っております。新たに導入される 2 つのシステム：

- 次期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

は、どちらも現在の最先端の計算機技術を採用した、現有システムよりもはるかに大規模かつ高性能のシステムとなっております。

2. 次期スーパーコンピュータシステムの概要

次期スーパーコンピュータシステムは、計算サービスの主力となる 2 種類のバックエンドサーバ、フロントエンドサーバおよびファイルサーバ、ディスクアレイ装置とバックアップ装置から構成されます。本システムは、平成 19（2007）年 6 月から平成 23（2011）年 2 月まで、45 ヶ月間運用する予定です。

2.1 バックエンドサーバ A

バックエンドサーバ A は、富士通株式会社製の共有メモリ型並列計算機 PRIMEQUEST580（図 1）32 ノードです。各ノードは、Intel Itanium2 プロセッサ 1.6GHz（デュアルコア）を 32 プロセッサ（=64 コア）搭載します。各ノードの主記憶容量は 128GB です。

PRIMEQUEST580 の特色は、各ノードが大規模 SMP（symmetric multi-processor）であり、各ノード内のどのプロセッサから当該ノードの主記憶のどの部分にアクセスする



図 1：PRIMEQUEST580
（写真提供：富士通株式会社）

¹ amano@cc.kyushu-u.ac.jp

場合でも、アクセス時間に差異がないことです。この性質は、プログラムを多数のスレッドによって並列化した場合の安定した性能向上に大きく寄与します。

バックエンドサーバ A の性能諸元を表 1 に示します。

表 1：バックエンドサーバ A の性能諸元

演算ノード	富士通株式会社 PRIMEQUEST580 Intel Itanium2 プロセッサ 1.6GHz (デュアルコア) × 32 プロセッサ (=64 コア) 主記憶容量 128 GB
総ノード数	32 ノード
総プロセッサ (コア) 数	1,024 プロセッサ (2,048 コア)
理論演算性能の総和	13.1 TFLOPS
主記憶容量の総和	4 TB
相互結合網	ノードあたり InfiniBand 4x DDR (20 Gbps) × 4 ポート (80 Gbps) =片方向 40Gbps (冗長符号分を除くと理論転送性能は片方向 4GB/s) スイッチ：SiverStorm9240

バックエンドサーバ A に導入される主なソフトウェアを表 2 に示します。

表 2：バックエンドサーバ A のソフトウェア

オペレーティングシステム	Red Hat Enterprise Linux AS (v.4 for Itanium)
ファイルシステム	Parallelnavi SRFS (Shared Rapid File System) for Linux
バッチジョブ管理システム	Parallelnavi for Linux Advanced Edition
言語処理系	Parallelnavi Language Package for Linux Fortran 処理系 (OpenMP 対応, 自動並列化機能有り), C 処理系 (OpenMP 対応, 自動並列化機能有り), C++
メッセージパッシングライブラリ	MPI (動的プロセス生成などを除き MPI 規格 2.0 に対応)
数値計算ライブラリ	Parallelnavi Language Package for Linux (BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, PARDISO 等を含む)
科学技術計算アプリケーション	Gaussian, GAMESS, Molpro, AMBER
その他	デバッグ・チューニングツール等

2.2 バックエンドサーバ B

バックエンドサーバ B として、富士通株式会社製 PRIMERGY RX200S3 192 ノードからなる PC クラスタを、2 セット導入します。PRIMERGY RX200S3 の単体は、図 2 に示すような外観のラックマウント型サーバです。

今回、本センターとして初めて全国共同利用大規模計算サービスのために PC クラスタを導入することにした理由は、ますます増大する計算需要にお応えしていくためにどうしても大規模な PC クラスタの導入が不可欠であったこと、および、研究室等で小規模なクラスタをお持ちの利用者が気軽にセンターを利用できるようにしたいと考えたことです。

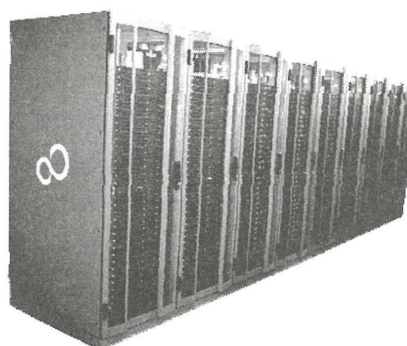


図 2：PRIMERGY RX200S3
(写真提供：富士通株式会社)

バックエンドサーバ B の性能諸元を表 3 に示します。

表 3：バックエンドサーバ B の性能諸元

演算ノード	富士通株式会社 PRIMERGY RX200S3 Intel Xeon プロセッサ 3.0 GHz (デュアルコア) ×2 プロセッサ (=4 コア) 主記憶容量 8 GB
総ノード数	192 ノード×2 セット
総プロセッサ (コア) 数	384 プロセッサ (768 コア) ×2 セット
理論演算性能の総和	18.4 TFLOPS
主記憶容量の総和	3 TB
相互結合網	ノードあたり InfiniBand 4x DDR (20 Gbps) ×1 ポート =冗長符号分を除くと理論転送性能は 2GB/s スイッチ：SilverStorm9240

バックエンドサーバ B に導入される主なソフトウェアを表 4 に示します。

表 4：バックエンドサーバ B のソフトウェア

オペレーティングシステム	Red Hat Enterprise Linux WS (v.4 for x86, AMD64 and EMT64)
ファイルシステム	Parallelnavi SRFS (Shared Rapid File System) for Linux
バッチジョブ管理システム	Parallelnavi NQS for Linux V2.0, PBS Professional (グリッド用)
言語処理系	Parallelnavi Language Package for Linux Fortran 処理系 (OpenMP 対応, 自動並列化機能有り), C 処理系 (OpenMP 対応, 自動並列化機能有り), C++
メッセージパッシングライブラリ	MPI
数値計算ライブラリ	Parallelnavi Language Package for Linux (BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, PARDISO 等を含む)
科学技術計算アプリケーション	GAMMESS, CHARM, AMBER
その他	デバッグ・チューニングツール等, NAREGI ミドルウェア

2.3 フロントエンドサーバおよびファイルサーバ

利用者用のフロントエンドサーバおよびファイルサーバとして、バックエンドサーバ A のノードと同型で主記憶容量を 512GB に増強した富士通株式会社製 PRIMEQUEST580 を 1 台導入します。

本センターでは、この大規模共有メモリ型並列計算機を 2 つのパーティションに分割し、それぞれを 32 コア・主記憶容量 256GB の並列計算機として運用します。平常時には、一方をフロントエンドサーバ、他方をファイルサーバとして使用しますが、いずれかに障害が発生した場合には残りのサーバが機能を代行することができます。

各パーティションが 4 Gbps ファイバーチャネルインタフェースを 16 本ずつ搭載します。

フロントエンドサーバに導入される主なソフトウェアを表 5 に示します。

表 5：フロントエンドサーバのソフトウェア

オペレーティングシステム	Red Hat Enterprise Linux AS (v.4 for Itanium)
ファイルシステム	Parallelnavi SRFS (Shared Rapid File System) for Linux
バッチジョブ管理システム	Parallelnavi for Linux Advanced Edition
言語処理系	Parallelnavi Language Package for Linux Fortran 処理系 (OpenMP 対応, 自動並列化機能有り), C 処理系 (OpenMP 対応, 自動並列化機能有り), C++
メッセージパッシングライブラリ	MPI (動的プロセス生成などを除き MPI 規格 2.0 に対応)
数値計算ライブラリ	Parallelnavi Language Package for Linux (BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, PARDISO 等を含む)
科学技術計算アプリケーション	Gaussian, α -FLOW, LS-DYNA, AutoDock, GAMESS, Molpro, AMBER, CHARMM, ANSYS CFX, FIELDVIEW, AVS, Materials Explorer
その他	デバッグ・チューニングツール等

2.4 ディスクアレイ装置およびバックアップ装置

利用者のデータを格納するディスクアレイ装置およびそのバックアップ装置として、富士通株式会社製 ETERNUS8000 モデル 2100 を 1 台導入します。

近年のディスクアレイ装置の大容量化に伴い、磁気テープメディアを使用したバックアップ装置ではバックアップ作業に多大な時間を要するという問題が顕在化しつつありました。しかし、利用者のデータの安全な保管は本センターの重要な任務であり、バックアップ作業を完全に省略することには大きな問題があります。このため、今回ついに、磁気ディスクのバックアップに磁気ディスクを採用することといたしました。

RAID レベル 5 構成時の総実効容量約 500 TB のうち、半分の 250 TB をオンラインディスクとして、残りの 250 TB をバックアップディスクとして使用します。バックアップディスクは、バックアップ作業時間以外はスピンドルの回転を止めることができます。

ディスクアレイ装置全体で 4 Gbps ファイバーチャネルインタフェースが 32 本搭載されます。

3. 高性能アプリケーションサーバシステムの概要

前述の次期スーパーコンピュータとは別に、新たに高性能アプリケーションサーバシステムを導入します。これは、平成 19 (2007) 年 6 月から平成 21 (2009) 年 2 月まで 21 ヶ月間運用したのち、現行の高性能演算サーバ (IBM eServer p5 モデル 595) と合わせて次々期システムへ更新する予定です。これにより、平成 21 年以降は、ほぼ同規模の計算機システムが 2 年に 1 度、交互に更新されるようになります。

3.1 バックエンドサーバおよびフロントエンドサーバ兼ファイルサーバ

株式会社日立製作所製の共有メモリ型並列計算機 SR11000 (図 3) のモデル J1 を 16 ノード、および、同モデル K2 を 8 ノード導入します。

このうち、モデル J1 の 1 ノードがフロントエ

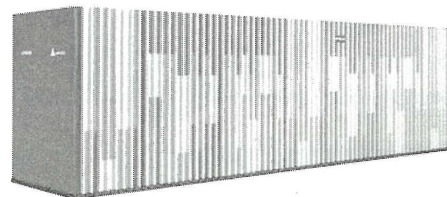


図 3：SR11000
(写真提供：株式会社日立製作所)

ンドサーバ兼ファイルサーバとなり、モデル J1 の残り 15 ノードと K2 の全 8 ノードを合わせたものがバックエンドサーバとなります。

各ノードは POWER5/POWER5+プロセッサ 8 個 (16 コア) を搭載した SMP であり、各ノードの主記憶容量は 128GB です。ノード間は 4GB/s (片方向) ×2 のクロスバーネットワークで接続されます。

バックエンドサーバの性能諸元を表 6 に示します。

表 6：高性能アプリケーションサーバの性能諸元

演算ノード	株式会社日立製作所 SR11000 モデル J1 (16 ノード, うち 1 ノードがフロントエンド兼ファイルサーバ) IBM POWER5 プロセッサ 1.9 GHz (デュアルコア) ×8 プロセッサ (=16 コア) 主記憶容量 128 GB モデル K2 (8 ノード) IBM POWER5+プロセッサ 2.3 GHz (デュアルコア) ×8 プロセッサ (=16 コア) 主記憶容量 128 GB
総ノード数	(バックエンドサーバ合計) 15+8
総プロセッサ (コア) 数	(バックエンドサーバ合計) 184 プロセッサ (368 コア)
理論演算性能の総和	(バックエンドサーバ合計) 3 TFLOPS
主記憶容量の総和	(バックエンドサーバ合計) 2.9 TB
相互結合網	専用クロスバーネットワーク ノードあたり 4 GB/s (片方向) ×2

高性能アプリケーションサーバシステムに導入される主なソフトウェアを表 7 に示します。

表 7：高性能アプリケーションサーバのソフトウェア

オペレーティングシステム	AIX 5L 5.3
ファイルシステム	GPFS (General Parallel File System)
バッチジョブ管理システム	LoadLeveler
言語処理系	最適化 Fortran90 (OpenMP 対応, 自動並列化機能有り), XL C/C++ (OpenMP 対応, 自動並列化機能有り)
メッセージパッシングライブラリ	MPI (動的プロセス生成などを除き MPI 規格 2.0 に対応)
数値計算ライブラリ	BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, PARDISO MATRIX/MPP, MATRIX/MPP/SSS, MSL2
科学技術計算アプリケーション	Gaussian, GAMESS, Molpro, AMBER, CHARMM, TINKER, VASP, PHASE, MSC.Marc/Mentat, MSC.Nastran, MSC.Patran, CONFLEX, CFX, IDL
その他	デバッグ・チューニングツール等

3.2 ディスクアレイ装置およびバックアップ装置

ディスクアレイ装置には、株式会社日立製作所製の SANRISE AMS500 を 2 台導入します。実効容量の総和は、20.7TB となり、SR11000 とは、4 Gbps ファイバーチャネルにより接続されます。

また、このディスクアレイのバックアップ装置として、ソニー株式会社製のテープライブラリ PetaSite S60 を導入します。実効容量の総和は、非圧縮で約 10 TB です。

4. おわりに

本稿では、平成 19 (2007) 年 6 月 1 日稼働予定の次期スーパーコンピュータ・高性能アプリケーションサーバ両システムの概要を紹介しました。

また、今回の更新に合わせ、計算機システムの月額レンタル料金体系を見直し、運転に必要な電力料金をできるだけ本センターに交付される運営費交付金の中から負担できるようにいたしました。これにより、電力料金の不足分にあてるため利用者の皆様にこれまでお支払いいただいた「利用負担金」の金額を大きく引き下げることができる見込みです。大規模かつ高性能のシステムの登場と合わせて、どうぞご期待ください。

これらのシステムと新たな利用負担金制度が皆様の研究活動を大きく前進させる力となりますよう祈念いたしております。

なお、今回の更新から、従来のように後継機を導入したのちに旧機器を撤去する空間的な余裕がなくなりました。また、電源設備や空調設備も現有のままでは次期システムを安全に運用できなくなりました。このため、旧システムの解体・撤去を行った後に、計算機室拡張工事・電源設備改修工事・空調設備増強工事などの一連の工事を行ってから、新システムを導入することとなりました。これに伴い、平成 19 年 3 月～5 月の 3 ヶ月間のサービス停止期間²が必要になり、利用者の皆様に大変ご迷惑をおかけいたしますが、どうか事情をご理解の上、今しばらくご辛抱くださるようお願い申し上げます。

² 高性能演算サーバ IBM eServer p5 モデル 595 は、この間もサービスを継続します。

計 算 機 シ ス テ ム 運 用 ス ケ ジ ュ ー ル

本センター計算機システムの運用スケジュールは以下の通りです。

	4月	5月	6月	7月
富士通 PRIMEQUEST, PRIMERGY			本運用	
日立 SR11000		試験運用	本運用	
IBM eServer p5	無料運用		本運用	

IBM eServer p5 (高性能演算サーバ)

4月、5月は、基本的にこの IBM eServer p5(高性能演算サーバ)のみで運用します。その間の利用は無料ですが、原則として共有タイプのみの利用とさせていただきます。そのため、ジョブ投入には以下のページにあるジョブクラス名を利用してください。

http://spring.cc.kyushu-u.ac.jp/scp/system/general/kyu-cc/03_jobs.html

なお、無料期間中の利用申請方法は、本センターの Web ページ (<http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/scp/>) をご覧下さい。

日立 SR11000

5月より試用運転を開始します。試用運転期間中の利用については、本号外の「日立 SR11000 お試しキャンペーンのお知らせ」をご覧下さい。また、6月より本運用を開始します。

富士通 PRIMEQUEST, PRIMERGY

6月より本運用を開始します。

なお、6月からの本運用における利用申請方法については、本センターの Web ページ (<http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/scp/>)、及び本号外の「スーパーコンピュータシステムメーリングリスト会員登録(無料)のお誘い」で紹介しておりますメーリングリストによりお知らせします。

平成19年度前期講習会計画

日付	時間	題目, 内容
4月4日	13:30～17:30	高性能演算サーバ (IBM eServer p5) 利用法 高性能演算サーバにおけるプログラムの翻訳・バッチジョブの投入方法 計算機の利用に関する質疑
5月7日, 8日	13:30～17:30	UNIX 初級 UNIX のコマンド, エディタの利用法に関する解説と実習
5月11日	13:00～17:00	SR11000 利用法 基本的な利用法: プログラムの翻訳・バッチジョブの投入方法 計算機の特性を考慮した性能重視のコーディング手法 計算機の利用に関する質疑
6月15日	13:00～17:00	Fujitsu PRIMEQUEST & PRIMERGY 利用法 基本的な利用法: プログラムの翻訳・バッチジョブの投入方法 計算機の特性を考慮した性能重視のコーディング手法 計算機の利用に関する質疑
7月		UNIX 初級 UNIX のコマンド, エディタの利用法に関する解説と実習
7月		並列プログラミング (MPI) MPI による並列プログラム作成法の解説と実習
8月		UNIX 中級 UNIX のファイル管理, プロセス管理, シェルプログラミング等に関する解説と実習
8月		プログラミング言語 高性能演算サーバ (IBM p5) における Fortran, C, C++ の利用法に関する解説と実習
8月		並列プログラミング (OpenMP) OpenMP による並列プログラム作成法の解説と実習
8月		Gaussian 入門 分子軌道計算プログラムパッケージ Gaussian03 の利用法の解説及び実習
8月		Gaussian 応用 分子軌道計算プログラムパッケージ Gaussian03 の利用法の, より高度な利用法に関する解説及び実習
9月		High-Performance Computing Servers Seminar for Foreign Students This seminar will give foreign students a “crash-course” on how to use the High-Performance Computing servers. The lecture will be given in English.

講習会の最新情報については、本センターの Web ページ (<http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/scp/>), 及び本号外の「スーパーコンピュータシステムメーリングリスト会員登録 (無料) のお誘い」で紹介しておりますメーリングリストによりお知らせします。

また、上記の他にも各種アプリケーション (Molpro, AMBER, LS-DYNA, ANSYS CFX, FIELDVIEW, Materials Explorer) について、利用法に関する講習会を開催する予定です。

日立 SR11000 お試しキャンペーンのお知らせ

本運用に入る前に性能評価やプログラムの準備等を行いたい方のために、5月より下記の通り日立 SR11000 の試験運転を開始します。

記

○ お試しキャンペーン期間：

平成19年5月上旬～5月28日(月) PM 17:00

備考：試験運用開始日については未確定です。申し込まれた方には日程が確定次第お知らせします。

○ 利用に当たっての注意事項：

本キャンペーン期間は試験運用と並行して導入作業を進めるため、作業の都合により事前の予告無しにシステムを停止したり、ジョブをキャンセルする場合がありますので、予めご了承ください。

また、ファイルシステムのバックアップも行いません。重要なファイルは必ずお手元の計算機にコピーしておいて下さい。

○ 参加方法：

1) 既に本センターの計算機に利用登録をされている方

- 申し込み方法: 申し込みは不要です。キャンペーン期間中、上記システムを無料で利用して頂けます。
- 期間終了後の扱い: キャンペーン期間終了までに処理されなかったジョブはキャンセルさせていただきます。

2) 利用登録をされていない方

- 申し込み方法: 電子メールで、タイトルを「SR11000 利用申込」として、以下の記載事項を記入し、情報基盤センター共同利用係 (E-mail: kyodo@cc.kyushu-u.ac.jp) まで申し込んでください。電子メール受領後、承認書を郵送します。
記載事項: 氏名、所属、職名、電話番号、E-mail アドレス
- 申込み期間: 平成19年4月2日(月)～4月20日(金)
- 参加資格: 本センターの利用資格は、大学・高等専門学校等の教員、大学院生等、及び公的研究機関の研究員等に限定されています。詳細は本センターの Web ページを参照してください。
<http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/scp/>
- 期間終了後の扱い: キャンペーン期間終了までに処理できなかったジョブはキャンセルさせていただきます。また、キャンペーン期間終了後に継続して利用登録をされない場合、作成されたファイルは削除しますので、必要なファイルは期間内にお手元の計算機にコピーしてください。

スーパーコンピュータシステムメーリングリスト 会員登録(無料)のお誘い

4月より、本センターのスーパーコンピュータ並びに各サーバの利用方法や各種キャンペーン等に関する最新情報を配信するメーリングリストを開設します。受信を希望される方は、下記により登録してください。

なお、この登録は計算機利用申請とは異なります。本センターの計算機システムを利用するかどうかまだ分からないが、とりあえず最新情報はチェックしておきたい、という方は、お気軽にご登録下さい。

記

○ メーリングリスト運用期間：

平成19年4月2日(月)～9月28日(金)

○ 登録方法：

受信を希望するメールアドレスから、メールのタイトルを「メーリングリスト登録」として、以下にメールをお送り下さい。(メールの本文は空で構いません。)

kyodo@cc.kyushu-u.ac.jp

○ 削除方法：

メーリングリストを受信されていたメールアドレスから、メールのタイトルを「メーリングリスト削除」として、以下にメールをお送り下さい。(メールの本文は空で構いません。)

kyodo@cc.kyushu-u.ac.jp

なお、削除の作業に1～2営業日を要することがありますので、ご了承下さい。

○ 個人情報の扱い：

本センターでは、本メーリングリスト登録時に頂いた個人情報の保護について、以下のように取り扱います。

1. 個人情報は本メーリングリストの送付先としてのみ利用し、それ以外の目的には利用しません。
2. 個人情報は適切に管理し、法の定めるところによる請求を受けた場合以外は、ご本人の同意を得ずに第三者に提供・開示致しません。
3. 保有している個人情報は、正確かつ最新の内容に保つことに勤め、変更や訂正及び削除のご依頼には迅速に対応いたします。

個人情報保護の取り扱いについてのご質問、お問合せはkyodo@cc.kyushu-u.ac.jpまでご連絡ください。

九州大学情報基盤センター広報
号外版

平成19年3月 発行

編集 九州大学情報基盤センター
広報委員会

印刷 アイメディア株式会社

センター利用案内

092 (642) 内線番号
※は 092 (641) 3131 (トーン信号) 内線番号

担 当 掛	階	業 務 案 内	内 線
研 究 部	6 階	1. 計算機システムに関すること 2. ソフトウェアに関すること 3. データベースに関すること 4. 開発課題に関すること	2296
庶 務 係	5 階	1. 各種委員会に関すること 2. センター案内, 見学に関すること	2303 8226 ※
会 計 係		1. 会計一般に関すること	2304
共 同 利 用 係 (第 七 地 区 協)		1. 利用申請, 登録に関すること 2. 利用の手引き, 広報などの配付に関すること 3. 講習会に関すること 4. プログラム相談に関すること 5. 利用負担金に関すること 6. 出張利用者旅費に関すること 7. 他センター利用の手続に関すること 8. 各大型センター及び連絡所の調整に関すること 9. 連絡所の登録, 変更及び廃止に関すること 10. センターへの要望, 問い合わせに関すること	2305
図 書 室	4 階	1. 図書・マニュアル及びセンター関係資料の保管, 閲覧及び貸出について	8237 ※
シ ス テ ム 運 用 係		1. 計算サービス全般に関すること 2. 計算機システムの運用に関すること	2307 8231 ※
シ ス テ ム 管 理 係		1. オペレーティングシステムに関すること 2. 計算機システムの管理に関すること	2308 8232 ※
ネ ッ ト ワ ー ク 運 用 係		1. ネットワークの運用に関すること	4032
ネ ッ ト ワ ー ク 管 理 係		1. ネットワークの管理に関すること	2309

◇センター利用に関する質問・要望等の e-mail は下記のアドレスで受け付けます。ご利用ください。

e-mail アドレス: request@cc.kyushu-u.ac.jp