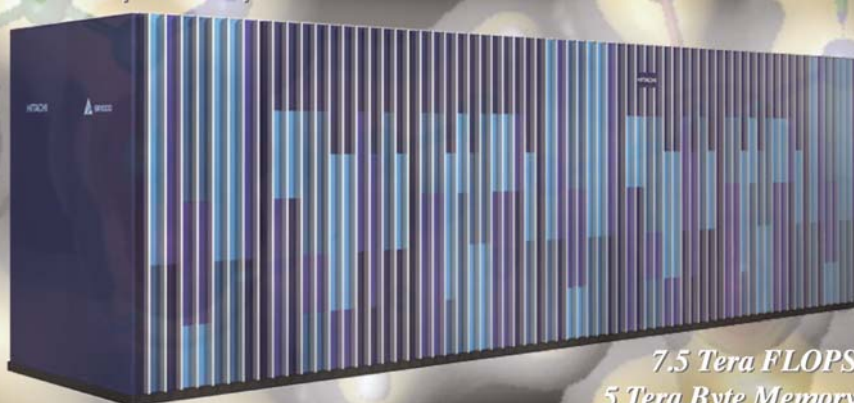


# 計算材料学センターだより

New Super Computer Hitachi SR11000



7.5 Tera FLOPS  
5 Tera Byte Memory

## ■ 新スーパーコンピューティングシステム特集 ■

- I. 移行スケジュール
- II. 新スーパーコンピューティングシステム概要
- III. 利用方法の変更点
- IV. 変更されないもの
- V. アプリケーション一覧
- VI. 注意事項

CCMS  
NEWS  
9

## 表紙の図

新スーパーコンピューターSR11000

HITACHI スーパーテクニカルサーバ SR11000 モデル K2 は、科学技術計算システムに要求される「高性能ノード」「高スケーラビリティ（高いシステム性能）」「高信頼性」を追求するコンセプトに基づいて開発されたシステムです。高性能ノードを実現するために、マイクロプロセッサは、最新の高速 RISC プロセッサ POWER5+ が採用されています。POWER5+ は、最新の半導体テクノロジーが採用されており、周波数、集積度ともに、世界トップレベルです。また、現スーパーコンピューター SR8000 と同様に、日立独自のプロセッサ間高速同期機構が組み込まれ、ショートベクトル性能が改善されています。また、288MB/ノードの大容量 L3 キャッシュにより、高いキャッシュヒット率が確保でき、実効メモリレイテンシの削減により、様々なアプリケーション性能が向上します。また、コンパイルや対話処理等のスカラー処理、IO 処理性能も向上します。さらに、ハードウェアプリフェッチとソフトウェアプリフェッチが採用されており、主記憶データをキャッシュメモリ経由で高速にアクセスする擬似ベクトル機能を有しています。

ハードウェアプリフェッチは、ハードウェアが自動的に主記憶データアクセスのパターンを検出し、起動されるので、チューニングレベルの低いプログラムや、低い最適化レベルでコンパイルしたプログラム、C 言語のようなポインタ型を使用したプログラムにおいても、実効性能を向上させることができます。

( designed by Kazuhiro Sato )

# 新スーパーコンピューティングシステムの概要

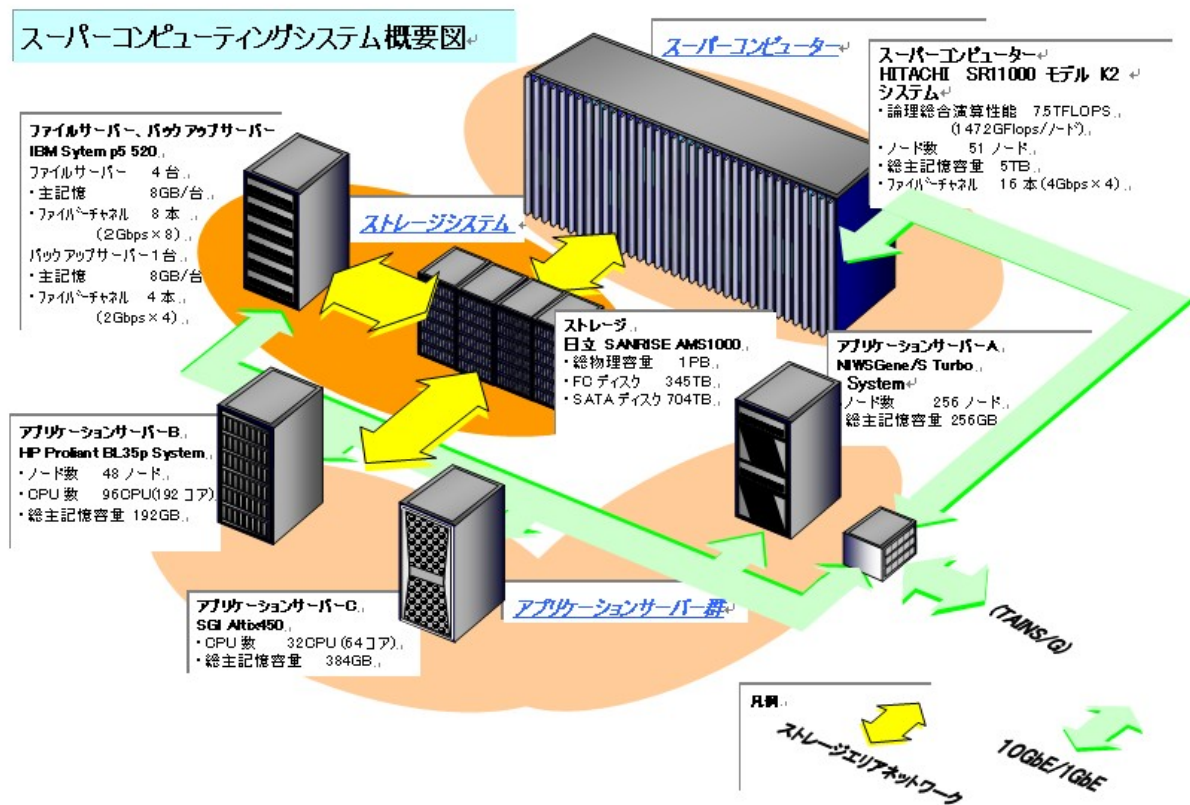
11月1日発行の計算材料学センター便り(Vol.8)ですすでにお知らせしましたが、スーパーコンピューティングシステムの更新を今年度3月に行います。以下にその概要、変更点、ジョブの投入方法、主なアプリケーションなどについて説明します。約1ヶ月の停止になり利用者の方々へはご迷惑をおかけしますが、事情ご拝察の上、どうぞよろしくお願い致します。

## I. 移行スケジュール

現スーパーコンピューティングシステムの停止 : 平成19年2月14日(水) 9時  
 新スーパーコンピューティングシステムの運用開始 : 平成19年3月16日(金) 13時  
 試験期間 : 平成19年3月16日(金)から4月16日(月)まで

## II. 新スーパーコンピューティングシステム概要

「高度情報化社会基盤構築に寄与する超高速スーパーコンピューティングシステム」を目指す新スーパーコンピューティングシステムは以下のマシンより構成されます。



### 1. スーパーコンピューター : HITACHI SR11000 モデル K2

新しいスーパーコンピューターは、現スーパーコンピューターSR8000 に比べ理論演算性能で8倍の7.5TFLOPSの性能を誇ります。メモリーは6.5倍の5TBを搭載しました。またプロセッサのソフトベクトル機能が強化され、より理論性能に近い実行効率を実現できるようになり

ました。ノード当たりでは理論演算性能が従来の 10 倍の 147.2GFLOPS、メモリーは 7 倍以上の 96GB 共有メモリー空間を利用でき、ゆとりある実行が可能になりました。実行ジョブはフロントエンドマシンから投入します。独自に開発したジョブ一元管理システムにより、非常に容易にジョブを投入できます。

- ・ ハードウェア構成

- a. スーパーコンピューター本体

- ノード数： 51

- 総理論性能： 7.5TFLOPS (1ノード 147.2GFLOPS)

- 総主記憶容量： 5TB(64GB:22 ノード, 128GB:29 ノード)

- b. フロントエンド： EP8000 520 × 2

- ・ オペレーティングシステム

- AIX 5L

- ・ ホスト名(フロントエンド)

- super1, super2

2. アプリケーションサーバーA： NIWSGene/S Turbo(IBM eServer Blue Gene Solution) × 2  
アプリケーションサーバーA は高性能密結合分散並列アーキテクチャにより並列実行可能なアプリケーションプログラムの並列度を向上させることに特化した計算サーバーです。実行ジョブの投入はサービスノードから独自に開発したジョブ一元管理システムにより行います。

- ・ ハードウェア構成

- a. NIWSGene/S Turbo(IBM eServer Blue Gene Solution)

- 計算ノード数： コプロセッサモード 256(1台 128)

- バーチャルノードモード 512(1台 256)

- 総理論性能： 1,440GFLOPS(1台 720GFLOPS)

- 総主記憶容量： 256GB(1台 128GB)

- b. サービスノード： IBM pServer システム p5 モデル 520

- ・ オペレーティングシステム(サービスノード)

- SuSE Linux Enterprise Server V9

- ・ ホスト名(サービスノード)

- appa1, appa2

3. アプリケーションサーバーB： hp ProLiant BL35p

アプリケーションサーバーB は汎用性の高いクラスター構成の計算サーバーです。AMD64 のハードウェアアーキテクチャに汎用 OS である Linux を搭載したことにより、ほとんどのアプリケーションソフト、プログラムの実装を可能としました。搭載された多数のアプリケーションは対話型インターフェースまたは独自に開発したジョブ一元管理システムにて実行できます。

- ・ ハードウェア構成

- ノード数： 48(うちログインノードは 1 ノード)

- 総理論性能： 844.8GFLOPS

- 総主記憶容量： 4GB × 48

- ・ オペレーティングシステム  
SuSE Linux Enterprise Server V9
- ・ ホスト名 (ログインノード)  
appb

#### 4. アプリケーションサーバーC : SGI Altix450

アプリケーションサーバーC は分散型共有メモリーアーキテクチャにより 384GB の広大な共有メモリー空間を提供できる計算サーバーです。使用されている Itanium2 プロセッサは Gaussian アプリケーションの実行において定評があります。またスクラッチファイルを高速接続されたディスク上に配置することにより、快適な Gaussian 実行環境を実現しています。アプリケーションの実行は独自に開発したジョブ一元管理システムまたは対話型インターフェースにより可能です。

- ・ ハードウェア構成  
CPU 数 : 32 (64 コア)  
総理論性能 : 409.6GFLOPS  
総主記憶容量 : 384GB
- ・ オペレーティングシステム  
SGI ProPack4 SUSE Linux Enterprise Server 9
- ・ ホスト名  
appc

#### 5. 可視化サーバーA : Silicon Graphics Prism DeskSide

Windows などの環境から、ネットワークを経由して可視化サーバーA のグラフィック機能を使用することにより、パソコンの性能に依存せず可視化をすることができます。

- ・ ハードウェア構成  
CPU 数 : 2
- ・ オペレーティングシステム  
SGI ProPack4 SUSE Linux Enterprise Server 9
- ・ サービスするソフトウェア  
OpenGL Vizserver
- ・ ホスト名  
visa

#### 6. 可視化サーバーB : Tezro Visual Workstation

可視化サーバーB では Cerius2 の実行が可能です。また、Cambridge Structural Database がインストールされますので、X ウィンドウのソフトをインストールすることで Windows や Mac からネットワーク経由で Cambridge Structural Database を利用することができます。

- ・ ハードウェア構成  
CPU 数 : 2
- ・ オペレーティングシステム

IRIX

- ・サービスするソフトウェア

Cerius2

- ・ ホスト名

visb

7. ファイルサーバー : IBM System p5 モデル 520 × 4

利用者のホームディレクトリを管理します。ファイルサーバーへログインすることにより、各自のディスク情報を得ることができます。

- ・ ハードウェア構成

CPU 数 : 8

総主記憶容量 : 32GB

- ・ オペレーティングシステム

AIX 5L

- ・ ホスト名

serv

8. ストレージシステム : HITACHI SANRISE AMS1000

1PB(1000TB)のストレージのうち、FC ディスクはホームディレクトリと各マシンのスクラッチ領域に使用し、SATA ディスクはバックアップ領域として使用します。

- ・ ハードウェア構成

FC ディスク 345TB

SATA ディスク 704TB

### Ⅲ. 利用方法の変更点

3月16日(金)からの利用方法は、以下の点が変わります。

(1) ジョブ一元管理システム

新スーパーコンピューティングシステムのジョブ管理システムは、NQS から LL(LoadLeveler)に変更となります。アプリケーションサーバーは従来どおり LSF です。スーパーコンピューティングシステムとしてジョブ実行コマンドの統一を図るため、ジョブの一元管理を行います。

表1がジョブ実行時の操作コマンドになります。詳しい使い方およびキュー構成については、追って公開予定の Web マニュアルを参照ください。

表 1: ジョブ実行の主なコマンド(旧システムとの比較)

機能	新スーパーコンピューティングシステム全体	スーパーコンピューター(現在)	スーパーコンピューター以外(現在)
ジョブの投入	submit	qsub	bsub
ジョブの状態確認	statj	qstat	bjobs
ジョブの取り消し	jobdel	qdel	bkill
キューの情報	qinfo		bqueues
ジョブ投入時の作業ディレクトリ	submit コマンドを実行したディレクトリ	qsub コマンドを実行したディレクトリ	bsub コマンドを実行したディレクトリ

(例)

- ・ 入力ファイル名が H2O.com である Gaussian ジョブをアプリケーションサーバーC で実行する。  
**submit cg03 H2O.com**
- ・ vasp ジョブをスーパーコンピューターで実行する。  
**submit EB vasp**

#### (2) ファイル管理について

新スーパーコンピューティングシステムではホームディレクトリの容量が一人あたり 50GB となります。現システムでホームディレクトリ直下の migrate ディレクトリ内のデータを自動的にテープライブラリに格納する運用を行っていますが、新スーパーコンピューティングシステムでは廃止します。なお、migrate ディレクトリ内のデータも新スーパーコンピューティングシステムに移行されます。

#### (3) ログイン方法の変更

新スーパーコンピューティングシステムでは、各サーバーへのログインを ssh に統一します。従来は telnet でのログインを可能としていましたが、セキュリティ上の問題があるため、新スーパーコンピューティングシステムではすべてのサーバーにおいて telnet でのログインを禁止します。実際のログイン方法として、スーパーコンピュータネットワーク内(所内ネットワークを含む)のマシンからログインする場合は ssh のパスワード認証となります。ファイヤウォール外のマシンからログインする際は、従来と同様に一旦 SSH リレーサーバー(cms-ssh)に鍵認証でログインしてから、内部の計算サーバー等に ssh のパスワード認証でログインすることになります。

#### (4) ドメイン名の変更

新スーパーコンピュータネットワークのドメインを imr.edu に変更します。したがって、例えば新スーパーコンピューターをフルドメイン名で表記する場合、super1.imr.edu、super2.imr.edu となります。

#### IV. 変更されないもの

メールサーバー(SMTP,POP,IMAP)等のネットワーク関係のサーバーは従来環境との整合性保持のため、これまでと同じホスト名を継承します。

メールサーバー	: cmsmail
SMTP サーバー	: cmssmtp
POP サーバー	: cmspop
IMAP サーバー	: cmsimap
プロキシサーバー	: cmsproxy
NTP サーバー	: cmsntp
SSH リレーサーバー	: cms-ssh

#### V. アプリケーション一覧

以下に新スーパーコンピューティングシステムで導入されるアプリケーションを紹介します。それぞれの使用法については、追って公開予定の Web マニュアルを参照下さい。

- ・Gaussian 社製量子力学計算ソフトウェア Gaussian03 および GaussView3
- ・Scientific Computing & Modeling 社製密度汎関数ソフトウェア ADF2005 および ADF-GUI
- ・Atomistix 社製ナノデバイスシミュレーターソフトウェア Atomistix ToolKit および Virtual NanoLab
- ・Materials Design 社製材料設計支援統合システムソフトウェア MedeA
- ・Accelrys Software 社製マテリアルサイエンスソフトウェア Cerius2 および Materials Studio
- ・ANSYS 社製有限要素法ソフトウェア ANSYS/Multiphysics
- ・CHAM 社製流体解析ソフトウェア PHOENICS
- ・Exa Corporation 社製流体解析ソフトウェア PowerFLOW および PowerVIZ
- ・Advanced Visual Systems 社製可視化ソフトウェア AVS/Express Developer
- ・Tecplot 社製可視化ソフトウェア Tecplot360
- ・Computational Engineering 社製可視化ソフトウェア EnSight
- ・Wolfram Research 社製数式処理ソフトウェア Mathematica
- ・Maplesoft 社製数式処理ソフトウェア Maple
- ・The MathWorks 社製数値解析ソフトウェア MATLAB
- ・結晶格子構造データベースソフトウェア Cambridge Structural Database
- ・混合基底第一原理計算ソフトウェア TOMBO
- ・GW 近似計算ソフトウェア GW
- ・第一原理分子動力学ソフトウェア VASP
- ・第一原理電子状態計算ソフトウェア WIEN2k

その他

SIESTA, ABINIT, CPMD, PWscf



## VI. 注意事項

1. 新スーパーコンピューティングシステムではすべてのマシンが入れ替えとなります。バイナリーファイルは機種依存性があるので、現システムで作成したバイナリーファイルについては、新スーパーコンピューティングシステムでは基本的に利用できないとお考え下さい。

アプリケーションが作成するバイナリーファイルの例

- ・ Gaussian の\*.chk ファイル
- ・ vasp の WAVECAR ファイル

2. 各自においてコンパイルされた実行モジュールはバイナリーファイルです。新スーパーコンピューティングシステムで利用するには再コンパイルが必要となります。コンパイル方法は機種により異なります。追って公開予定の Web マニュアルに記載される各マシンについてのコンパイル方法を参照下さい。
3. ホームディレクトリ直下に.login、.cshrc というファイルがあります。これにはログイン時の環境変数の設定値が記述されています。このファイルは現在そのまま新スーパーコンピューティングシステムに移行されます。現在、各自にて.login、.cshrc ファイルをカスタマイズしている場合は、新スーパーコンピューティングシステムとの不整合を起こす可能性がありますので、ご注意下さい。不都合が発生した場合は、追って公開するデフォルトの.login ファイル、.cshrc ファイルに置き換えてください。
4. 現システムのホームディレクトリのデータは、2 月 14 日時点のものをすべて移行します。ホームディレクトリ以外は移行しません。

**計算材料学センターだより No.9**

**2007年1月31日(水)発行**

**31<sup>st</sup> January (Wed.), 2007**

**東北大学金属材料研究所 計算材料学センター**

**〒980-8577 宮城県仙台市青葉区片平二丁目1番1号**

**電話(022)215-2411 / FAX(022)215-2166**

**URL <http://www-lab.imr.edu/~ccms/>**

**E-mail [ccms-adm@imr.edu](mailto:ccms-adm@imr.edu)**

Center for Computational Materials Science of IMR,

Tohoku University

2-1-1 Katahira, Aoba-ku, Sendai, 980-8577, Japan

Tel +81-22-215-2411(DIAL-IN), FAX +81-22-215-2166