

I 部

目 次

1 巻頭言 計算科学研究センター 江原正博	1
2 スーパーコンピュータワークショップ 2017	2
3 計算機システム	4
3.1 計算機システムの全体像	4
3.2 キュー構成	8
3.3 キュー係数	10
4 一般報告	11
4.1 ライブラリプログラムの開発・公開	11
4.2 データベース開発状況	15
5 2017 年度計算機稼働状況および利用者数	16
5.1 利用申請プロジェクトおよび利用者数	16
5.2 電力使用および計算機稼働状況	16
5.3 計算機利用状況	17
5.4 クラス別 CPU 使用時間	18
5.5 ジョブ処理件数	19
5.6 ジョブの実行状況	20
6 資料	22
6.1 計算科学研究センター運営委員	22
6.2 計算科学研究センター職員	23
6.3 利用者数と CPU 時間の推移	24
7 研究施設の現状と将来計画 (分子研レポート 2017 より転載)	27

1 巻頭言

計算科学研究センター
江原正博

自然科学研究機構計算科学研究センターでは、スーパーコンピューターシステムを全国の研究者の方々に共同利用を通じてご利用いただいております。利用者数はここ数年増えており、2017年度のグループ数は236、利用者数は914名になりました。我々の超高速かつ大規模な計算環境は分子科学、物性科学、生物科学の研究に活用されており、分子理論・物性理論・生体シミュレーションに基づく多彩な研究が行われています。近年では、実験においても反応解析や反応設計、物性の研究に理論計算は広く利用されるようになりました。この計算科学研究センターレポートには利用者の方々の研究成果が収録されています。

2017年度に更新されたクラスター演算サーバーは、CPUの総演算性能は約3.3PFlopsあり、1,069ノード、40,588コアから構成されます。GPUの演算性能も約0.8PFlopsと向上しました。大規模なメモリを必要とするジョブにも対応できる構成となっております。また、ソフトウェアの観点からは、いくつかの汎用のライブラリプログラムが更新され、国内の研究者の方が開発したソフトウェアも新たに実装し、公開しています。今後、開発されたソフトウェアを当センターを利用して公開していただけますと幸いです。

計算科学研究センターでは、若手研究者の育成、研究者間の情報交換や交流にも力を入れています。2017年9月4～7日に「第11回分子シミュレーションスクールー基礎から応用までー」を、2017年11月20～21日に「第7回量子化学ウインタースクールー基礎理論と高精度理論の発展ー」を開催し、それぞれの分野において先進的な研究をされている先生方に講義いただきました。これらのスクールは、全国の大学院生や若手研究者の方々が量子化学と分子シミュレーションを基礎から応用まで勉強できる場として、ご利用いただいております。また、毎年、計算科学研究センターワークショップを開催しています。今年度は2018年1月23～24日に「機能性材料設計への最新の計算科学アプローチ」をテーマとして開催しました。分子科学、物性科学や材料科学など広い分野において、最先端の研究を推進されている研究者の方々を講師にお招きし、理論・計算科学が様々な分野で展開されている状況を講義いただきました。また、今後、取り組むべき課題にも展望していただきました。

計算科学研究センターでは、今後も大規模高速計算環境やソフトウェアを提供するとともに、理論・計算科学分野の人材育成や研究交流を通じて理論分子科学の発展の一翼を担うことができると考えております。今後とも皆様のあたたかいご指導、ご支援を賜りますようよろしくお願いいたします。

2 スーパーコンピュータワークショップ 2017

テーマ：「機能性材料設計への最新の計算科学アプローチ」

日 時：2018 年 1 月 23 日（火）～ 24 日（水）

会 場：自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター

参加者：52 名

ポスター発表：20 件

2017 年度のスーパーコンピュータワークショップでは、「機能性材料設計への最新の計算科学アプローチ」を主題とした。依然として重要度の高まり続ける課題であるエネルギー変換、およびその効率的な活用、各種材料および排出物質の低毒化・無毒化などに関わる根幹部分としての分子科学と、その物質設計に向けた取り組みについて、最新計算科学による多彩な視点からご講演いただき、また質疑応答にてご討論いただいた。また若手・実験研究者の方々にも積極的に参加していただけるようにポスターセッションを設け、合計 20 件のポスター発表があり、質の高い研究交流がなされた。ワークショップには幅広い分野からの参加があり、参加者は合計 52 名であった。

1 月 23 日(火)	
13:30 - 13:40	はじめに 齊藤真司（計算科学研究センター長）
13:40 - 14:30	中嶋隆人（理化学研究所） 「スーパーコンピュータによるペロブスカイト太陽電池・光触媒の材料探索」
14:30 - 15:20	重田育照（筑波大学） 「3重項消光アップコンバージョンの理論解析と物質設計」
15:20 - 15:40	休憩
15:40 - 16:30	山下晃一（東京大学） 「光エネルギー変換材料の計算科学」
16:30 - 17:20	森 寛敏（お茶の水女子大学） 「電子状態の揺らぎを考慮した機能分子の設計」
17:20 - 18:30	ポスター発表
18:30 - 20:00	懇親会（会場：岡崎コンファレンスセンター 中会議室）

1 月 24 日 (水)	
9:00 - 9:50	今村 穰 (首都大学東京) 「計算科学を用いた次世代太陽電池材料の研究」
9:50 - 10:40	佐藤 徹 (京都大学) 「高次三重項状態を利用した有機 EL 素子の新規発光機構」
10:40 - 11:00	休憩
11:00 - 11:50	奥村光隆 (大阪大学) 「ヘテロ接合界面が開く触媒機能に関する理論的研究」
11:50 - 12:40	武次徹也 (北海道大学) 「元素戦略にもとづく触媒開発研究: 理論計算と実験実証のインタープレイ」
12:40 - 12:50	おわりに 伊藤聡一 (分子科学研究所)

スーパーコンピュータワークショップ2017

機能性材料設計への 最新の計算科学アプローチ

2018年
開催日 1月23日(火) ~ 24日(水)
会場 岡崎コンファレンスセンター
(愛知県岡崎市明大寺町字佐馬8-1)

■招待講演 (50分)

- 今村 穰 (首都大学東京)
- 奥村光隆 (大阪大学)
- 佐藤 徹 (京都大学)
- 重田育朗 (筑波大学)
- 武次徹也 (北海道大学)
- 中嶋隆人 (理化学研究所)
- 森 寛敏 (お茶の水女子大学)
- 山下晃一 (東京大学)

■ポスター発表

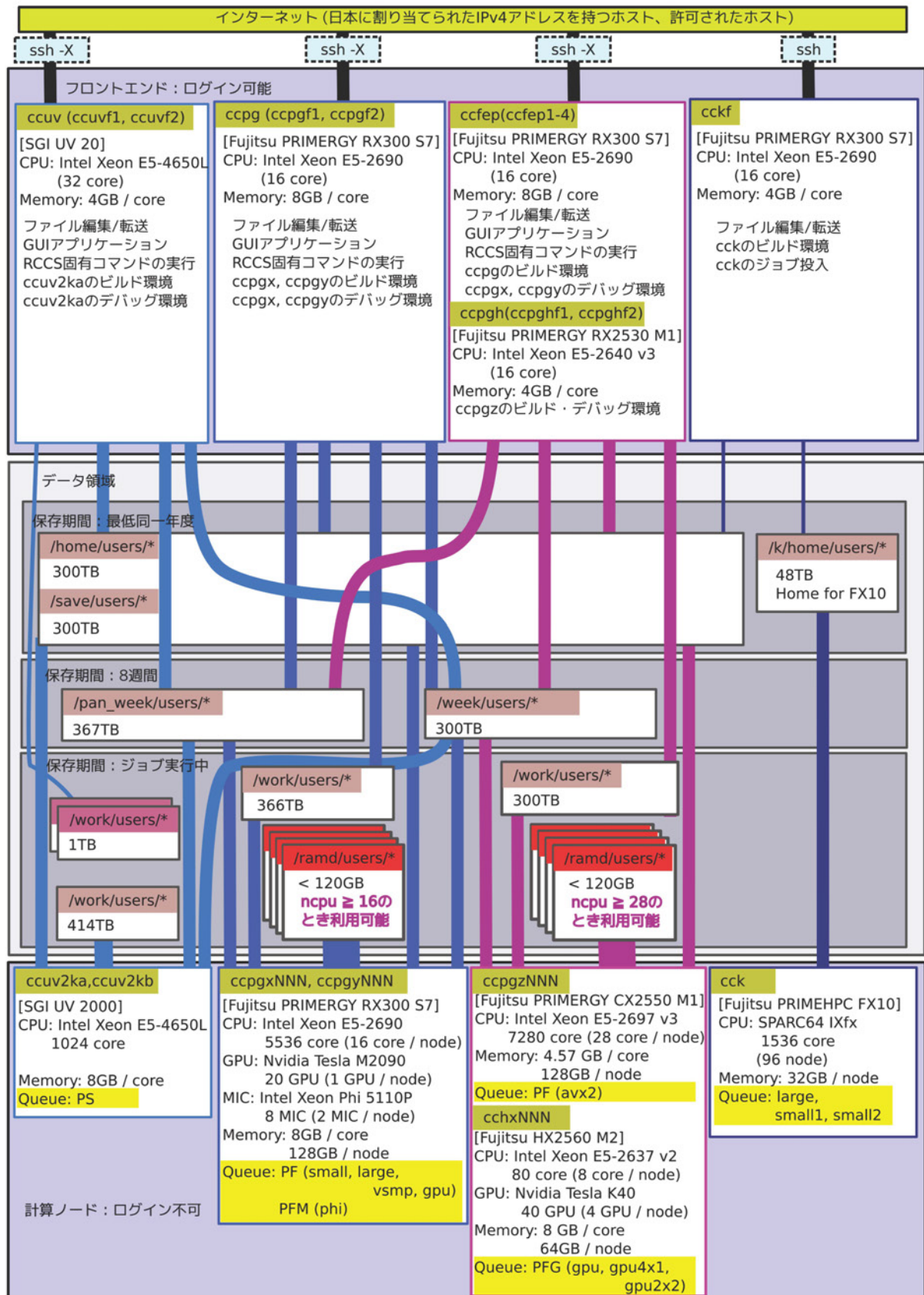
参加申込
■参加費: 無料 ■申込方法: 下記ホームページをご覧ください
<https://portal.ms.ac.jp/workshop2017>

お問い合わせ
大学・研究所関係者: 分子科学研究所 岡崎先進研究施設 計算科学研究センター
TEL: 0564-55-1462 FAX: 0564-55-3325

3. 計算機システム

3.1. 計算機システムの全体像

3.1.1. 2017 年 9 月までのシステム



超高速分子シミュレータシステムは 2012 年 2 月運用開始のシステムで、7つのサブシステムから構成されています。高速 I/O 演算サーバは 2013 年 4 月に CPU を更新して SGI 製 UV2000 と IS16000 ストレージシステム、その開発用サーバとして SGI 製 UV20、クラスタ演算サーバとその開発用サーバとして富士通製 PRIMERGY RX300 S7、「京」用開発サーバとして富士通製 PRIMEHPC FX10、外部磁気ディスク装置として PANASAS 製 ActiveStor、高速ネットワーク装置としてフォーステン・ネットワーク製 ZettaScale Z9000 と S4810 が導入されています。また、クラスタ演算サーバのうち 20 ノードに NVIDIA 製の Tesla C2090 を搭載し、GPU を使った計算ができます。2015 年 5 月に Intel Xeon Phi 5110P が利用できる演算ノードを 4 ノード増強しました。

高性能分子シミュレータシステムは 2013 年 3 月運用開始のシステムです。演算サーバとして富士通製 PRIMERGY CX250/400 S1、フロントエンドサーバとして PRIMERGY RX300 S7、外部磁気ディスク装置として富士通製 ETERNUS DX80 S2、高速ネットワーク装置として DELL 製 Force10 S4810 が導入されています。2014 年 12 月に演算サーバの更新が行われ、富士通製 PRIMERGY CX2550 M1 が導入されています。2015 年 8 月に NVIDIA 製の Telsa K40 がノードあたり 4 つ搭載された演算ノードを 5 ノード増強し、2016 年 5 月にさらに 5 ノード増強しました。

超高速分子シミュレータシステムと高性能分子シミュレータシステムは「京」用開発サーバを除き 2017 年 9 月に運用を停止しました。



SGI UV2000



富士通 PRIMEHPC FX10

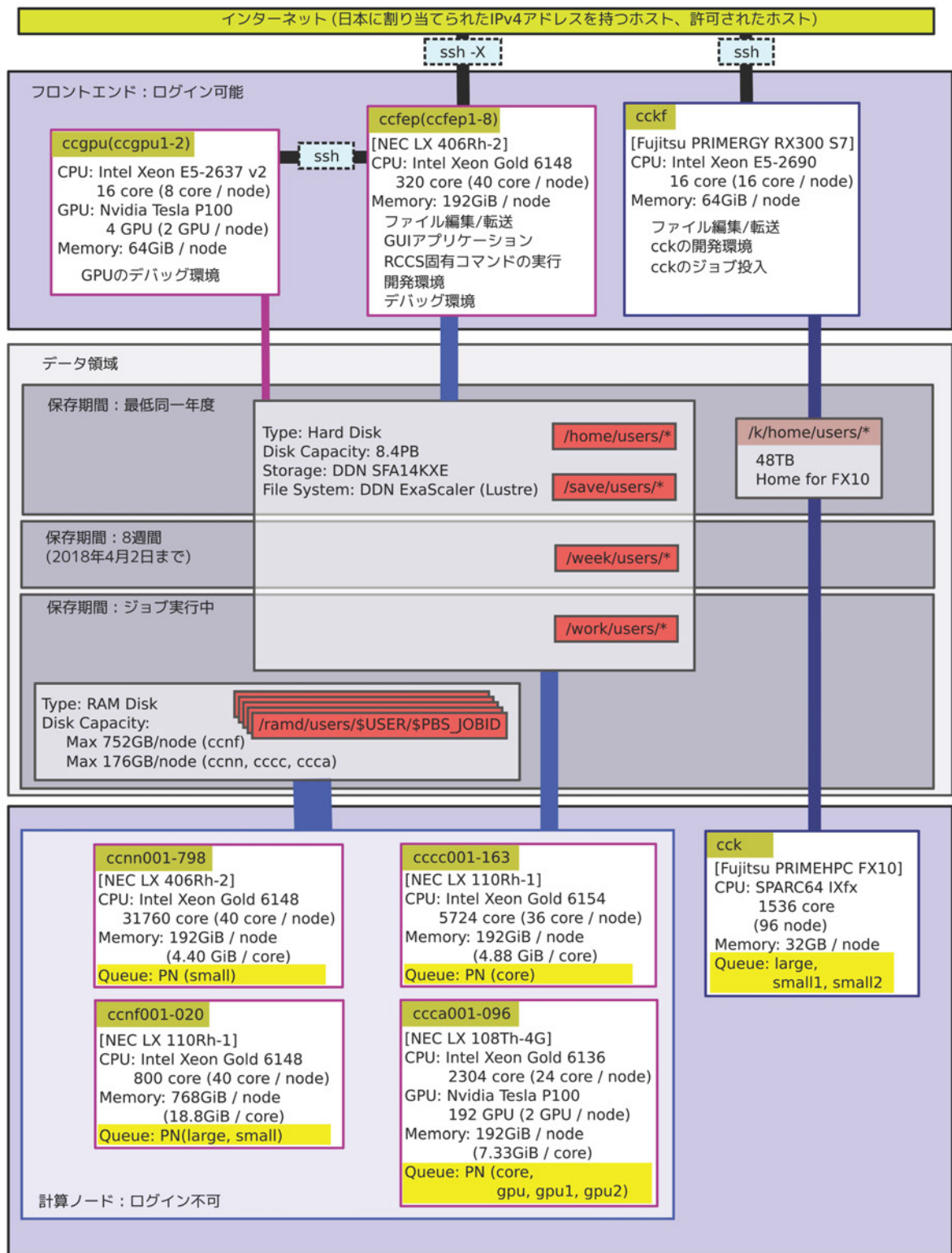


富士通 PRIMERGY RX300 S7



富士通 PRIMERGY CX2550/400 M1

3.1.2. 2017 年 10 月からのシステム



前システムの超高速分子シミュレータシステムを高性能分子シミュレータシステムに統合して、新たな高性能分子シミュレータシステムとして 2017 年 10 月に運用を開始しました。演算サーバとして NEC 製シリーズ (LX 406Rh-2、LX 110Rh-1、LX 108Th-4G の 3 機種)、フロントエンドサーバとして NEC 製 LX 406Rh-2、外部磁気ディスク装置として DDN 製 SFA14KXE とその並列ファイルシステムの DDN ExaScaler (Lustre)、計算ネットワークとして Intel Omni Path (100Gbps) が導入されています。

前システムの「京」用開発サーバの富士通製 PRIMEHPC FX10 は移設完了後の 2017 年 12 月から運用を再開しました。



NEC LX シリーズの筐体

3.2. キュー構成

制限時間は経過時間で制限されます。閑散期ではグループ制限を緩和することがあります。

3.2.1. 2017 年 9 月までのシステム

• 全利用者が利用可能なキュー

システム	キュー名 (jobtype 名)	制限時間	メモリー	ジョブあたりの コア数	グループ実行制限		グループサブミット制限	
					割当点数	コア数	割当点数	ジョブ数
ccpg	PF (small, large, vsmp)	定期保守 まで	7.75GB/core	最大 512	300 万点以上 100 万点以上 30 万点以上 10 万点以上 10 万点未満	1600 1024 640 384 128	300 万点以上 100 万点以上 30 万点以上 10 万点以上 10 万点未満	1600 1024 640 384 128
ccpg	PF (gpu)	1 週間		最大 16				
ccpg	PF (avx2)	定期保守 まで		最大 532				
ccpg	PFM (phi)	定期保守 まで		124GB/node 7.5GB/mic				
ccpg	PFG (gpu, gpu2x2, gpu4x1)	1 週間	62GB/node 11.2GB/gpu	8	2 ノード	—		
ccuv	PS	定期保守 まで	7.7GB/core	最大 256	100 万点以上 10 万点以上 10 万点未満	512 256 128	100 万点以上 10 万点以上 10 万点未満	512 256 128

ノードに搭載されているコア数(16 コアもしくは 28 コア)以下の並列数は任意の数を指定できますが他のジョブとノードを共有します。それ以上の場合はノード搭載のコア数の倍数に切り上げられ、ノードを専有します。

PF キューにおいて ccpgy ノードで 17 コア以上のスレッド並列を行うために、vSMP を用意しています。jobtype=vsmp を指定し、必要コア数は 16 の倍数を指定してください。ただしマシンの割当順番が来ても、vSMP 環境構築のため計算が動き出すまでに数分余分に時間がかかります。

jobtype が vsmp の場合、コアあたりの利用可能なメモリー量は 20%程度少なくなります。

• 別途申請が必要なキュー

システム	キュー名	制限時間	メモリー	1 ジョブあたりの コア数	グループ制限
cck	large small1 small2	24 時間	1.8GB/core	72x16 (固定) 12x16 (固定) 12x16 (固定)	(システム全体) 実行ジョブ数: 1 サブミットジョブ数: 2
ccpg	専有利用	7 日間単位	7.75GB/core	最大許可されたコア数	許可されたコア数 (512 - 4,096)

3.2.2. 2017 年 10 月からのシステム

• 全利用者が利用可能なキュー

システム	キュー名 (jobtype 名)	演算 ノード	メモリー	1 ジョブの制限	グループ実行制限		グループサブミット制限	
					割当点数	コア数/ GPU 数	割当点数	ジョブ数
cclx	PN (large)	ccnf	18.8GB/コア	1~10 ノード (40~400 コア)	300 万点以上 100 万点以上 30 万点以上 10 万点以上 10 万点未満	4000/48 2560/32 1600/20 960/12 320/8	300 万点以上 100 万点以上 30 万点以上 10 万点以上 10 万点未満	4000 2560 1600 960 320
cclx	PN (small)	ccnn ccnf	4.4GB/コア	1~30 ノード (40~1200 コア)				
cclx	PN (core)	cccc ccca	4.8GB/コア	1~18 コア				
cclx	PN (gpu,gpu1, gpu2)	ccca	7.3GB/コア	1~48GPU 2~24 コア/ノード(2GPU/ノード) 1~12 コア/ノード(1GPU/ノード)				

- ジョブの最大時間は、定期メンテナンスまでです。ただし、1 週間を越えるジョブが実行できる演算ノードは全体の半数です。
- 526 ノード並列までのジョブは、同一 OmniPath グループ内に接続された演算ノードで実行されます。
- 8 ノード並列までのジョブは、同一 OmniPath スイッチに接続された演算ノードで実行されます。
- 演算ノード ccnn のうち 264 ノードは 4 ノード以上のジョブ専用です。
- ジョブの最大時間が 1 日以下のジョブタイプ small のジョブは、演算ノード ccnf で実行される場合があります。
- ジョブの最大時間が 3 日以下で要求コア数が 6-12 のジョブタイプ core のジョブは、演算ノード ccca で実行される場合があります。
- ジョブタイプ core, gpu, gpu1, gpu2 のジョブは他のジョブとノードを共有します。
- 演算ノード ccca には 2 GPU が搭載されていますが構成が 2 種類あります。1 つの CPU 配下に 2 GPU がある演算ノードを明示的に指定する場合は、jobtype=gpu2 を指定してください。2 つの CPU 配下にそれぞれ 1GPU がある演算ノードを明示的に指定する場合は、jobtype=gpu1 を指定して下さい。どちらの演算ノードでもよい場合は、jobtype=gpu を指定して下さい。GPU 間通信が主の場合は jobtype=gpu2 が適しています。CPU-GPU 間通信が主の場合は jobtype=gpu1 が適しています。
- グループ制限を判断する点数には追加点数を含みません。

• 別途申請が必要なキュー

システム	キュー名	制限時間	メモリー	1 ジョブあたりの コア数	グループ制限
cck	large small1 small2	24 時間	1.8GB/コア	72x16 (固定) 12x16 (固定) 12x16 (固定)	(システム全体) 実行ジョブ数: 1 サブミットジョブ数: 2
cclx	専有利用	7 日間単位	4.4GB/コア	応相談	許可されたコア数

- 制限時間は、経過時間で制限されます。

3.3. キュー係数

実際の利用料金は無料です。プロジェクト課題ごとに CPU 点数が割り当てられます。CPU を使うことによって割当点数が減ります。各グループは割り当てられた割当点数を越えて計算機を利用することはできません。

3.3.1. 2017 年 9 月までのシステム

消費点数は、課金係数に利用コア数または利用ノード数と実行時間をかけたものです。課金係数はシステムごとに異なっており、課金係数の一覧は下記の通りです。

システム	キュー係数
ccuv	$1.5 / (\text{点}/(\text{コア} \times \text{時間}))$
ccpg (jobtype=small, large, vsmp, gpu)	$1 / (\text{点}/(\text{コア} \times \text{時間}))$
ccpg (jobtype=avx2)	$1.5 / (\text{点}/(\text{コア} \times \text{時間}))$
ccpg (jobtype=phi)	$16 / (\text{点}/(\text{ノード} \times \text{時間}))$
ccpg (jobtype=gpu)	$32 / (\text{点}/(\text{ノード} \times \text{時間}))$
cck	$0.5 / (\text{点}/(\text{コア} \times \text{時間}))$

会話処理の ccfe, ccuv, ccpg は CPU 時間で課金しますが、cckf は課金しません。演算ノードは経過時間で課金します。

3.3.2. 2017 年 10 月からのシステム

消費点数はシステム毎に設定されている CPU キュー係数と GPU キュー係数により求められます。

システム	CPU キュー係数	GPU キュー係数
cclx (jobtype=large)	$60 / (\text{点}/(\text{ノード} \times \text{時間}))$	-
cclx (jobtype=small)	$40 / (\text{点}/(\text{ノード} \times \text{時間}))$	-
cclx (jobtype=core)	$1.5 / (\text{点}/(\text{コア} \times \text{時間}))$	
cclx (jobtype=gpu, gpu1, gpu2)	$1.5 / (\text{点}/(\text{コア} \times \text{時間}))$	$15 / (\text{点}/(\text{GPU} \times \text{時間}))$
cck	$0.5 / (\text{点}/(\text{コア} \times \text{時間}))$	

- 会話処理の ccfe は CPU 時間で CPU 点数が消費されます。
- 会話処理の cckf, ccgpu1, ccgpu2 では CPU 点数が消費されません。
- 他のシステムは、経過時間で CPU 点数が消費されます。

4. 一般報告

4.1. ライブラリプログラムの開発・公開

ライブラリプログラム開発は、新規プログラムの開発もしくは既存プログラムの改良・発展というかたちで行われたプログラム開発申請に基づいて、CPU 時間、ファイル容量などの計算資源を提供する代わりに、ライブラリプログラムのひとつとしてソフトウェアをセンターで実行可能な形式で登録し、一般ユーザーに向けて公開するものです。その他に、メーカー・ベンダーにソフトウェアのインストール作業を依頼したり、センター職員がインストール作業を実施したりしたものも、ライブラリプログラムとして公開しています。

名前	内容
ABINIT	A package for material science within density functional theory, using a plane wave basis set and pseudopotentials.
AMBER	A package of molecular simulation programs.
AutoDock	Suite of automated docking tools.
CRYSTAL	General-purpose programs for the study of crystalline solids.
GAMESS	General atomic and molecular electronic structure system.
Gaussian	Ab initio molecular orbital calculations.
GENESIS	Molecular dynamics and modeling software for bimolecular systems such as proteins, lipids, glycans, and their complexes.
GROMACS	Fast, Free and Flexible MD
GRRM	Automated Exploration of Reaction Pathways.
LAMMPS	Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator.
Molcas	A quantum chemistry software.
Molpro	A complete system of ab initio programs.
NAMD	A scalable molecular dynamics program.
NBO/NBOView	Discovery tool for chemical insights from complex wave functions.
NTChem	A comprehensive new software of ab initio quantum chemistry made in AICS from scratch.
NWChem	Computational chemistry tools that are scalable both in their ability to treat large scientific computational chemistry problems
PSI4	An open-source suite of ab initio quantum chemistry programs designed for efficient, high-accuracy simulations of a variety of molecular properties.
Quantum ESPRESSO	An integrated suite of Open-Source computer codes for electronic-structure calculations and materials modeling at the nanoscale.
Reaction Plus	Program to obtain the transition state and reaction path along the user's expected reaction mechanism.
SIESTA	Efficient electronic structure calculations and ab initio molecular dynamics simulations of molecules and solids
SMASH	Scalable Molecular Analysis Solver for High performance computing systems
TURBOMOLE	One of the fastest programs for standard quantum chemical applications.
GaussView	A viewer for Gaussian
Molden	A visualization program of molecular and structure.
VMD	Molecular graphics viewer

4.1.1. 2017 年 9 月末のライブラリプログラム一覧

パッケージプログラム名	バージョン	リビジョン	ccpg	ccuv
ABINIT	7.8.2		◎ (2014/8/15)	—
Amber	16	bugfix 3	◎ (2016/6/28) [☆]	◎ (2016/6/28)
	14	bugfix 11	○ (2015/7/21) [☆]	—
	14	bugfix 10	○ (2015/3/20) [☆]	○ (2015/3/20)
	14		○ (2014/5/21) [☆]	—
	12	bugfix 21	○ (2013/12/10) [☆]	—
	12	bugfix 7	○ (2012/5/17) [☆]	—
	11	bugfix 19	○ (2012/2/1)	—
AutoDock	4.2.6		◎ (2015/11/27)	—
CRYSTAL	14	1.0.4	◎ (2016/5/11)	◎ (2016/5/11)
	14	1.0.3	○ (2016/1/14)	○ (2016/1/14)
GAMESS	2017	Apr20	○ (2017/6/1)	○ (2017/6/1)
	2014	Dec05	◎ (2015/4/1)	◎ (2015/4/1)
	2013	May01	○ (2013/8/21)	—
	2012	May01	○ (2012/8/14)	—
	2010	Oct01	○ (2012/2/1)	—
Gaussian	16	A.03	◎ (2017/2/13) [☆]	◎ (2017/2/13)
	09	E.01	◎ (2015/12/24)	◎ (2015/12/24)
	09	D.01	○ (2013/7/25)	○ (2013/7/25)
	09	C.01	○ (2012/2/1)	○ (2012/2/1)
	09	B.01	○ (2012/2/7)	○ (2012/2/6)
	03	E.01	○ (2012/5/22)	○ (2012/7/31)
GENESIS	1.1.5		○ (2017/8/4) [☆]	○ (2017/8/4)
	1.1.1		◎ (2016/9/13) [☆]	◎ (2016/9/13)
	1.1.0		○ (2016/8/3) [☆]	○ (2016/8/3)
GROMACS	2016.3		◎ (2017/3/16) [☆]	—
	2016.1		○ (2017/2/2) [☆]	—
	5.1.4		○ (2016/9/12) [☆]	◎ (2016/9/12)
	5.1.2		○ (2016/2/8) [☆]	○ (2016/2/8)
	5.0.6		○ (2015/7/31) [☆]	○ (2015/7/31)
	5.0.4		○ (2015/1/30) [☆]	○ (2015/4/4)
	4.6.6		○ (2014/7/17) [☆]	—
	4.6.5		○ (2014/4/21) [☆]	—
	4.6.1		○ (2013/5/24) [☆]	—
	4.5.5		○ (2012/6/12) [☆]	—
GRRM	14		◎ (2015/7/29)	◎ (2015/7/29)
	11		○ (2012/9/26)	○ (2012/9/26)
Molcas	8.2		○ (2017/6/1)	○ (2017/6/1)
	8.0	sp1	◎ (2015/6/24)	◎ (2015/6/24)
	8.0		○ (2014/8/1)	○ (2014/8/1)
Molpro	2015.1	19	○ (2017/5/1)	○ (2017/5/1)
	2015.1	5	◎ (2016/4/19)	◎ (2016/4/19)
	2015.1		—	○ (2015/11/18)
	2012.1	37	○ (2016/4/19)	○ (2016/4/19)
	2012.1	25	—	○ (2015/7/8)
	2012.1	15	—	○ (2014/7/3)
NAMD	2.11		◎ (2016/8/2) [☆]	◎ (2016/8/2)
	2.10		○ (2015/4/8) [☆]	○ (2015/4/7)
	2.9		○ (2012/5/15) [☆]	—
	2.8		○ (2012/4/10)	—
NTChem	2013.5.0		◎ (2015/4/20)	◎ (2015/4/20)
	2013.4.0		○ (2014/6/27)	○ (2014/6/27)

PSI	4.0	b5	◎ (2013/10/23)	◎ (2013/10/23)
Quantum ESPRESSO	6.1		○ (2017/9/14)	—
	5.1.2		◎ (2015/4/8)	◎ (2015/4/8)
	5.1.1		○ (2014/12/26)	—
	5.0.1		○ (2012/10/05)☆	—
ReactionPlus	1.0		◎ (2015/11/27)	◎ (2015/11/27)
SIESTA	3.1		◎ (2012/8/16)	—
SMASH	2.2.0		○ (2017/5/16)	○ (2017/5/16)
	2.1.0		◎ (2016/9/12)	◎ (2016/9/12)
	2.0.0		○ (2016/8/2)	○ (2016/8/2)
	1.1.0		○ (2015/1/8)	○ (2015/1/8)
TURBOMOLE	7.2		○ (2017/8/4)	○ (2017/8/4)
	7.1.1		◎ (2016/12/21)	◎ (2016/12/21)
	7.1		○ (2016/8/31)	○ (2016/8/31)
	7.0.1		○ (2015/11/6)	○ (2015/11/6)
	7.0		○ (2015/8/10)	○ (2015/8/10)
	6.6		○ (2014/8/11)	○ (2014/8/11)
	6.4		○ (2012/8/15)	—
	6.3.1		○ (2012/2/2)	—

名前	バージョン	リビジョン	ccfep, ccpq, ccuv
GaussView	6.0.16		◎ (2017/2/2)
	5.0.9		◎ (2013/3/13)
Molden	5.7		◎ (2016/11/22)
	5.0		○ (2013/4/1)
VMD	1.9.2		◎ (2015/4/8)
	1.9.1		○ (2013/3/21)

◎: インストール済み。g09 のような別名が設定されている。

○: インストール済み。g09d01 のように指定する必要がある。

☆: GPU 版が用意されている。

4.1.2. 2018 年 3 月末のライブラリアプリケーション一覧

パッケージプログラム名	バージョン	リビジョン	導入日
Amber	16	bugfix 10	◎ (2017/10/01)☆
	14	bugfix 11	○ (2015/7/21)
	12	bugfix 21	○ (2013/12/10)
CRYSTAL	14	1.0.4	◎ (2016/5/11)
GAMESS	2018	Feb14	○ (2018/3/19)
	2017	Nov11	○ (2017/12/15)
	2017	Apr20	◎ (2017/10/1)
Gaussian	16	B.01	○ (2018/3/12)☆
	16	A.03	◎ (2017/2/13)
	09	E.01	◎ (2015/12/24)
	09	D.01	○ (2013/7/25)
	09	C.01	○ (2012/2/1)
	09	B.01	○ (2012/2/7)
GENESIS	1.1.6		◎ (2017/12/13)☆
	1.1.5		○ (2017/8/4)
GROMACS	2016.4		◎ (2017/10/01)☆
	2016.3		○ (2017/3/16)☆
	2016.1		○ (2017/2/2)☆
	5.1.4		○ (2018/1/19)☆
	4.5.5		○ (2012/6/12)☆
GRRM	14		◎ (2015/7/29)
	11		○ (2012/9/26)
Molcas	8.2		◎ (2017/10/1)
Molpro	2015.1	27	○ (2017/12/14)
	2015.1	19	◎ (2017/10/1)
	2012.1	37	○ (2016/4/19)
NAMD	2.11		◎ (2017/10/1)☆
NBO	6.0		○ (2018/2/6)
NTChem	2013.5.0		◎ (2015/4/20)
NWChem	6.8		◎ (2018/1/22)
PSI4	1.1		◎ (2018/1/12)
Quantum ESPRESSO	6.1		○ (2017/9/14)
	5.1.2		◎ (2015/4/8)
ReactionPlus	1.0		◎ (2018/1/22)
SIESTA	3.1		◎ (2012/8/16)
SMASH	2.2.0		○ (2017/5/16)
TURBOMOLE	7.2.1		◎ (2017/12/12)
	7.2		○ (2017/8/4)

名前	バージョン	リビジョン	導入日
GaussView	6.0.16		◎ (2017/2/2)
	5.0.9		◎ (2013/3/13)
Molden	5.7		◎ (2016/11/22)
NBOView2	2		◎ (2018/2/6)
VMD	1.9.3		◎ (2018/2/19)

◎: インストール済み。g09 のような別名が設定されている。

○: インストール済み。g09d01 のように指定する必要がある。

☆: GPU 版が用意されている。

4.2. データベース開発状況

計算科学研究センターのデータベースサービスとして、以下の3件のデータベースが登録されており、現在公開中です。QCLDBについては、2016年度まで開発の援助を行っていましたが、2016年度をもって開発は終了しました。

(1) QCLDB (量子化学文献データベース)

(公開先) <http://qcldb2.ims.ac.jp/>

(開発代表者) 細矢治夫

(総件数) 139,657 件

主要学術雑誌に掲載された *ab initio* 分子軌道計算を扱った文献のデータベースです。新規開発は 2016 年度で中止になりました。

(2) FCDB (力の定数に関するデータベース)

(公開先) <http://fcdb.ims.ac.jp/>

(開発代表者) 田隅三生

(総件数) 2,394 件

力の定数 (Force Constant) に関する文献のデータベースで、WWW 版 FCDB を原則利用制限なしで公開サービスしています。新規開発は 2001 年度で中止になっています。

(3) SGBS (Segmented Gaussian Basis Set; Sapporo 基底関数のデータベース)

(公開先) <http://sapporo.ims.ac.jp/sapporo/>

(開発代表者) 野呂武司

(総件数) 1,315 件

基底関数の種類は全部で 29 種類あり、延べ 1,315 個の元素の基底関数が登録されています。基底関数の出力時に、diffuse 関数を加えることができ、ユーザーの選択した 9 種類のデータ書式のいずれかで出力することができます。北海道大学の研究室で公開されていたものを、2013 年 3 月から計算科学研究センターでも公開しています。2014 年 10 月にデータが更新されました。

5 2017年度 計算機稼働状況および利用者数

5.1 利用申請プロジェクトおよび利用者数

利用分野	利用区分	プロジェクト数	ユーザ数	CPU点数		
				申 請	割 当	実 績
分子科学	施設利用	218	863	220,494,932	209,970,270	140,927,107
	所内	13	42	40,638,000	40,638,000	24,391,569
生理学	施設利用	2	3	1,890,000	1,890,000	1,454,278
	所内	2	3	330,000	330,000	46,465
基礎生物学	施設利用	1	3	960,000	960,000	941,124
計算物質科学スパコン共用事業利用枠		12	77	37,180,000	37,180,000	26,386,672
合 計		236	914	264,312,932	253,788,270	194,147,215

5.2 電力使用および計算機稼働状況

年月	電力量 (kWh)	システム稼働時間															
		PRIMERGY	*	PRIMEHPC FX10	*	UV2000	*	Type-NF	*	Type-NN	*	Type-CC	*	Type-CA	*		
2017年4月	432,192	664	100	664	100	664	100	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
5月	495,658	734	100	734	100	744	100	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
6月	477,286	710	100	710	100	710	100	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
7月	519,577	734	100	734	100	735	100	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
8月	538,286	735	100	735	100	735	100	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
9月	482,302	674	99	674	100	674	100	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
10月	510,017	-	-	-	-	-	-	675	100	673	100	675	100	674	100		
11月	449,860	-	-	-	-	-	-	712	99	711	99	716	99	718	100		
12月	434,801	-	-	168	100	-	-	703	96	718	98	733	100	730	100		
2018年1月	555,430	-	-	734	100	-	-	725	99	728	99	731	100	720	99		
2月	414,406	-	-	662	100	-	-	660	100	661	100	662	100	658	100		
3月	419,753	-	-	734	100	-	-	734	100	709	100	734	100	725	100		
合 計	5,729,568	4,251	100	6,549	100	4,262	100	4,209	99	4,199	99	4,250	100	4,225	100		

※ *は、マシン稼働率（マシン稼働時間＋計画停止時間）÷通電時間（暦月度）です。

5.3 計算機利用状況

5.3.1 CPU使用時間

年月	CPU使用時間														GPU使用時間	
マシン名	PRIMERGY	*	PRIMEHPC FX10	*	UV2000	*	Type-NF	*	Type-NN	*	Type-CC	*	Type-CA	*	Type-CA	*
2017年4月	7,222,160	85	827,583	81	532,765	78	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
5月	9,044,364	97	812,765	72	635,855	84	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
6月	8,338,019	92	823,298	75	631,541	87	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
7月	8,791,409	94	896,127	79	608,835	81	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
8月	8,464,332	90	856,728	76	559,573	74	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
9月	7,598,600	88	829,507	80	431,040	63	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
10月	-	-	-	-	-	-	519,681	96	16,921,420	79	3,041,015	79	663,008	43	29,177	23
11月	-	-	-	-	-	-	555,778	98	18,345,087	81	3,077,195	75	758,985	46	32,205	23
12月	-	-	1	0	-	-	550,025	98	18,978,939	83	2,566,382	61	1,015,034	60	59,580	43
2018年1月	-	-	29,386	3	-	-	536,784	93	19,279,382	83	2,763,347	66	641,837	39	66,026	48
2月	-	-	35,172	3	-	-	437,999	83	15,656,054	75	2,879,658	76	900,973	59	101,404	80
3月	-	-	144,008	13	-	-	475,797	81	15,247,730	68	2,419,476	58	348,020	21	76,383	55
合 計	49,458,883	91	5,254,575	48	3,399,610	82	3,076,064	91	104,428,612	78	16,747,073	69	4,327,856	45	364,775	45

※ CPU時間、GPU時間の単位は時間です。

※ *は、マルチCPUの計算機における1CPU当たりのCPU稼働率(%)です。

5.3.2 バッチジョブ処理件数

年月	バッチジョブ処理件数							
マシン名	PRIMERGY	PRIMEHPC FX10	UV2000	Type-NF	Type-NN	Type-CC	Type-CA	合計
2017年4月	62,984	1,304	2,289	-	-	-	-	66,577
5月	43,923	2,353	5,553	-	-	-	-	51,829
6月	68,562	707	4,904	-	-	-	-	74,173
7月	39,268	557	5,757	-	-	-	-	45,582
8月	43,363	213	6,207	-	-	-	-	49,783
9月	36,958	646	7,007	-	-	-	-	44,611
10月	-	-	-	773	15,074	140,382	70,057	226,286
11月	-	-	-	729	15,884	56,275	15,382	88,270
12月	-	8	-	1,608	15,349	45,014	14,634	76,613
2018年1月	-	1,685	-	3,542	23,366	87,242	36,076	151,911
2月	-	2,097	-	1,406	15,563	67,050	43,490	129,606
3月	-	837	-	1,126	8,749	87,723	36,955	135,390
合 計	295,058	10,407	31,717	9,184	93,985	483,686	216,594	1,140,631

5.4 クラス別CPU使用時間

PRIMERGY	PF small	PF large	PF avx2	PF vsmp	PF gpu	PF phi	Queue合計(秒)	ETC	総合計
2017年4月	1322186:38:13	1331900:13:03	4091205:07:17	446702:29:52	30162:27:27	2:38:24	7222159:34:16	0:00:00	7222159:34:16
5月	1620314:51:41	2190932:16:59	5155770:44:29	37951:37:36	39394:06:51	0:00:00	9044363:37:36	0:00:00	9044363:37:36
6月	1581148:51:25	1971285:40:45	4696552:51:48	40259:04:00	48772:50:25	0:00:00	8338019:18:23	0:00:00	8338019:18:23
7月	1748350:15:45	2020249:48:32	4891697:51:19	75466:30:24	55644:17:16	0:00:00	8791408:43:16	0:00:00	8791408:43:16
8月	1555522:10:04	2152863:23:33	4672434:09:21	32705:06:08	50807:00:28	0:00:00	8464331:49:34	0:00:00	8464331:49:34
9月	1311729:16:56	2005220:47:02	4206870:39:26	45158:22:24	29620:39:29	0:00:00	7598599:45:17	0:00:00	7598599:45:17
10月	-	-	-	-	-	-	-	-	-
11月	-	-	-	-	-	-	-	-	-
12月	-	-	-	-	-	-	-	-	-
2018年1月	-	-	-	-	-	-	-	-	-
2月	-	-	-	-	-	-	-	-	-
3月	-	-	-	-	-	-	-	-	-
合 計	9139252:04:04	11672452:09:54	27714531:23:40	678243:10:24	254401:21:56	2:38:24	49458882:48:22	0:00:00	49458882:48:22

PRIMEHPC FX10	ckk small1	ckk large	Queue合計	ETC	総合計
2017年4月	74633:09:04	752949:26:24	827582:35:28	0:00:00	827582:35:28
5月	18044:44:16	794720:00:00	812764:44:16	0:00:00	812764:44:16
6月	42621:09:20	780677:07:12	823298:16:32	0:00:00	823298:16:32
7月	39072:32:16	857054:24:00	896126:56:16	0:00:00	896126:56:16
8月	917:07:12	855811:12:00	856728:19:12	0:00:00	856728:19:12
9月	75479:43:28	754027:44:00	829507:27:28	0:00:00	829507:27:28
10月	-	-	-	-	-
11月	-	-	-	-	-
12月	0:57:52	0:00:00	0:57:52	0:00:00	0:57:52
2018年1月	718:41:20	28667:05:52	29385:47:12	0:00:00	29385:47:12
2月	2252:40:32	32919:38:40	35172:19:12	0:00:00	35172:19:12
3月	8396:27:28	135611:36:32	144008:04:00	0:00:00	144008:04:00
合 計	262137:12:48	4992438:14:40	5254575:27:28	0:00:00	5254575:27:28

UV2000	PS	Queue合計	ETC	総合計
2017年4月	532764:45:27	532764:45:27	0:00:00	532764:45:27
5月	635855:28:41	635855:28:41	0:00:00	635855:28:41
6月	631541:10:01	631541:10:01	0:00:00	631541:10:01
7月	608835:17:41	608835:17:41	0:00:00	608835:17:41
8月	559572:30:10	559572:30:10	0:00:00	559572:30:10
9月	431040:20:07	431040:20:07	0:00:00	431040:20:07
10月	-	-	-	-
11月	-	-	-	-
12月	-	-	-	-
2018年1月	-	-	-	-
2月	-	-	-	-
3月	-	-	-	-
合 計	3399609:32:07	3399609:32:07	0:00:00	3399609:32:07

NEC LX Series	PN large	PN small	PN core	PN gpu	Queue合計	ETC	総合計
2017年4月	-	-	-	-	-	-	-
5月	-	-	-	-	-	-	-
6月	-	-	-	-	-	-	-
7月	-	-	-	-	-	-	-
8月	-	-	-	-	-	-	-
9月	-	-	-	-	-	-	-
10月	406096:37:20	17035003:49:20	3640381:32:36	63642:02:01	21145124:01:17	0:00:00	21145124:01:17
11月	390048:22:00	18510817:10:00	3709678:27:07	126501:10:39	22737045:09:46	0:00:00	22737045:09:46
12月	211864:06:00	19317099:39:20	3392695:15:19	188720:48:36	23110379:49:15	0:00:00	23110379:49:15
2018年1月	169122:36:00	19647043:32:40	3268763:12:43	136420:16:03	23221349:37:26	0:00:00	23221349:37:26
2月	131286:26:00	15962766:45:20	3561192:57:02	219437:52:30	19874684:00:52	0:00:00	19874684:00:52
3月	383305:59:20	15340221:09:20	2665621:21:00	101873:51:29	18491022:21:09	0:00:00	18491022:21:09
合 計	1691724:06:40	105812952:06:00	20238332:45:47	836596:01:18	128579604:59:45	0:00:00	128579604:59:45

5.5 ジョブ処理件数

PRIMERGY	PF small	PF large	PF vsmp	PF gpu	PF phi	PF avx2	PFG	Queue合計	ETC	総合計
2017年4月	9,938	24,152	30	61	1	27,323	1,479	62,984	0	62,984
5月	13,663	11,709	17	106	0	17,258	1,170	43,923	0	43,923
6月	25,653	14,318	11	164	0	25,011	3,405	68,562	0	68,562
7月	13,558	10,955	25	192	0	10,728	3,810	39,268	0	39,268
8月	17,048	11,156	30	174	0	11,713	3,242	43,363	0	43,363
9月	12,820	11,586	37	134	0	11,260	1,121	36,958	0	36,958
10月	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
11月	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
12月	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
2018年1月	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
2月	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
3月	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
合 計	92,680	83,876	150	831	1	103,293	14,227	295,058	0	295,058

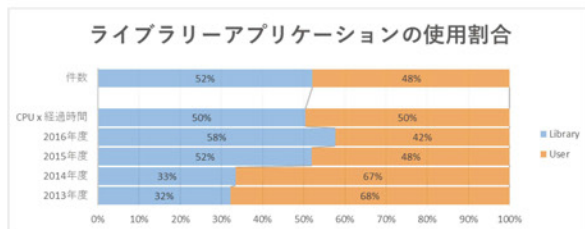
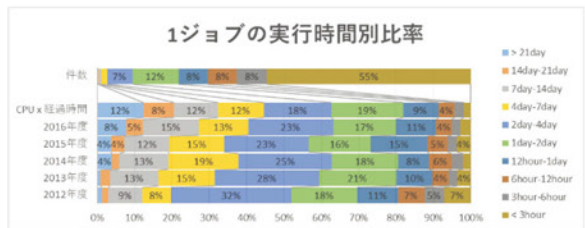
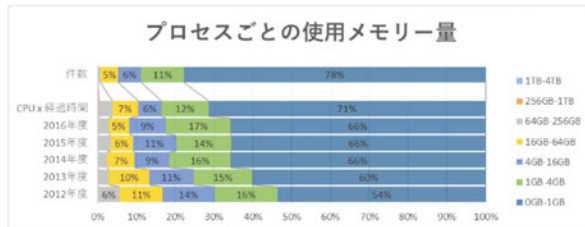
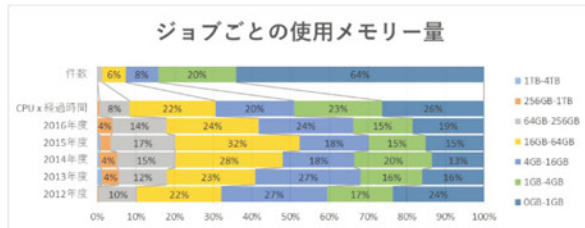
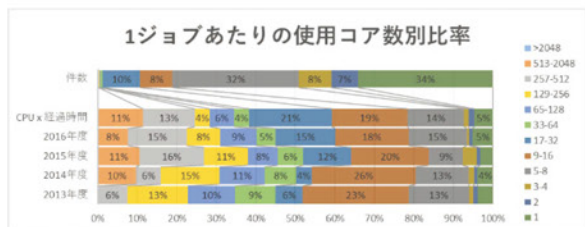
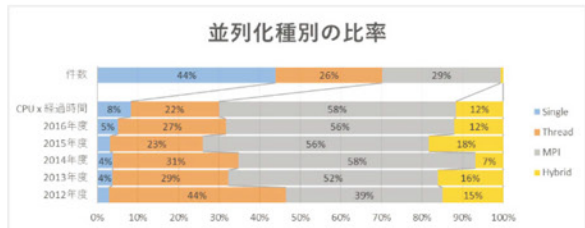
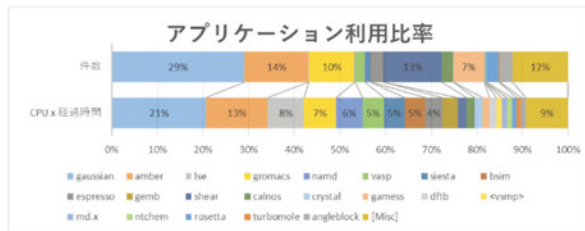
PRIMEHPC FX10	cck small1	cck large	Queue合計	ETC	総合計
2017年4月	1,225	79	1,304	0	1,304
5月	2,262	91	2,353	0	2,353
6月	649	58	707	0	707
7月	511	46	557	0	557
8月	165	48	213	0	213
9月	581	65	646	0	646
10月	-	-	-	-	-
11月	-	-	-	-	-
12月	8	0	8	0	8
2018年1月	1,555	130	1,685	0	1,685
2月	1,640	457	2,097	0	2,097
3月	413	424	837	0	837
合 計	9,009	1,398	10,407	0	10,407

UV2000	PS	Queue合計	ETC	総合計
2017年4月	2,289	2,289	0	2,289
5月	5,553	5,553	0	5,553
6月	4,904	4,904	0	4,904
7月	5,757	5,757	0	5,757
8月	6,207	6,207	0	6,207
9月	7,007	7,007	0	7,007
10月	-	-	-	-
11月	-	-	-	-
12月	-	-	-	-
2018年1月	-	-	-	-
2月	-	-	-	-
3月	-	-	-	-
合 計	31,717	31,717	0	31,717

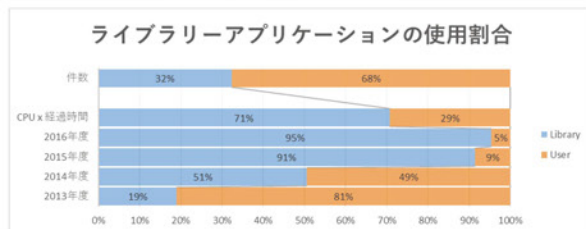
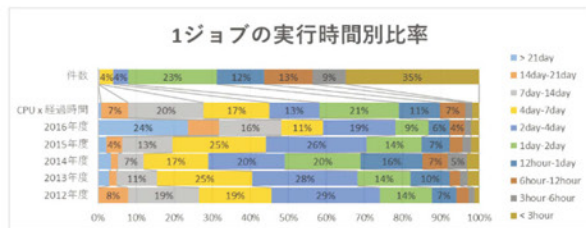
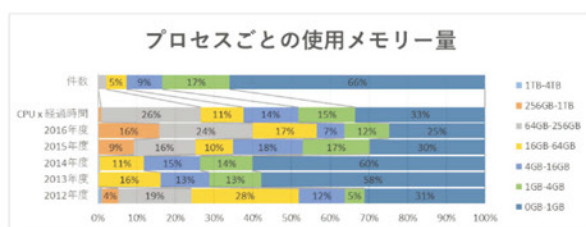
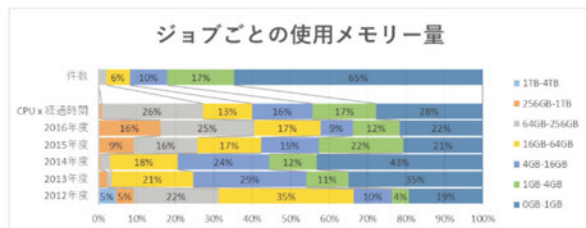
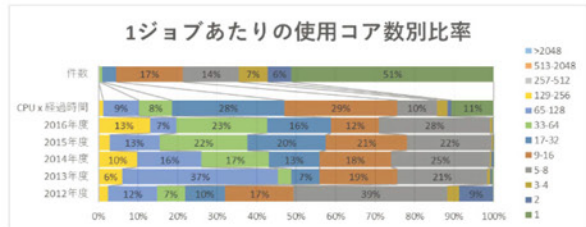
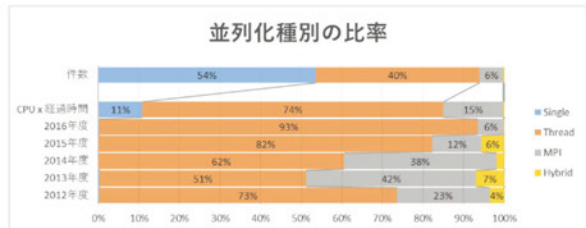
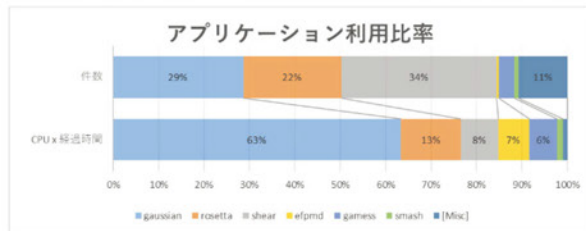
NBC LX Series	Type-NF	Type-NN	Type-CC	Type-CA	Queue合計	ETC	総合計
2017年4月	-	-	-	-	-	-	-
5月	-	-	-	-	-	-	-
6月	-	-	-	-	-	-	-
7月	-	-	-	-	-	-	-
8月	-	-	-	-	-	-	-
9月	-	-	-	-	-	-	-
10月	773	15,074	140,382	70,057	226,286	0	226,286
11月	729	15,884	56,275	15,382	88,270	0	88,270
12月	1,608	15,349	45,014	14,634	76,605	0	76,605
2018年1月	3,542	23,366	87,242	36,076	150,226	0	150,226
2月	1,406	15,563	67,050	43,490	127,509	0	127,509
3月	1,126	8,749	87,723	36,955	134,553	0	134,553
合 計	9,184	93,985	483,686	216,594	803,449	0	803,449

5.6. ジョブの実行状況

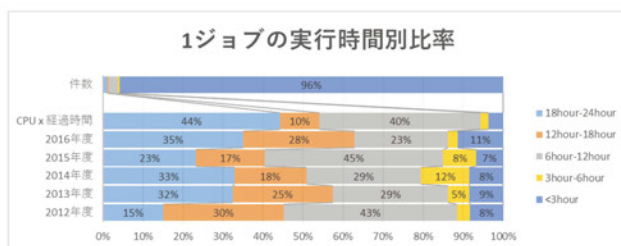
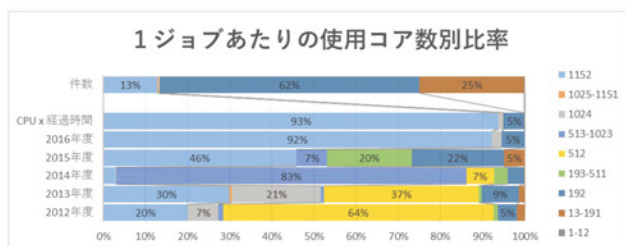
[富士通 PRIMERGY RX300/CX2550]



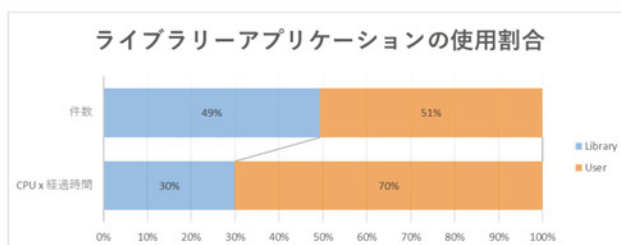
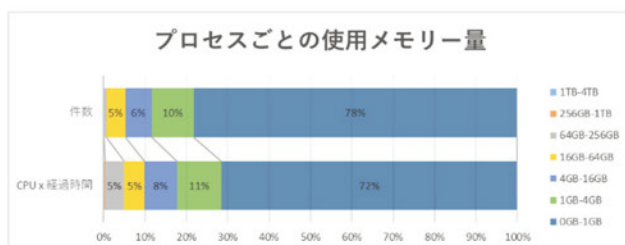
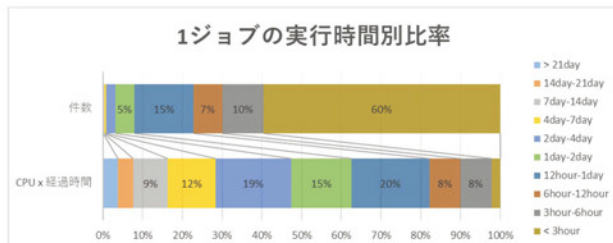
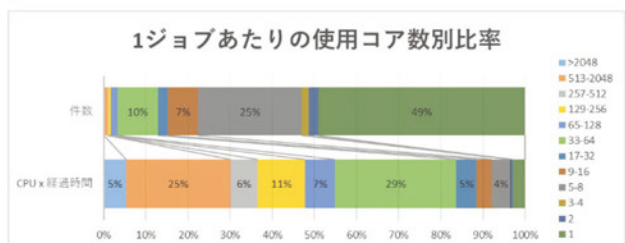
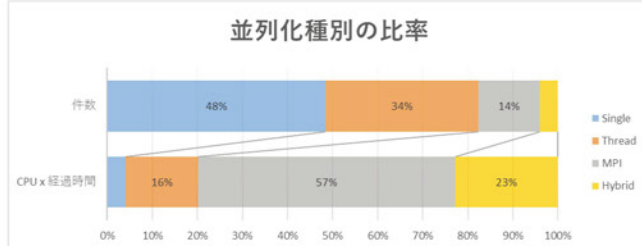
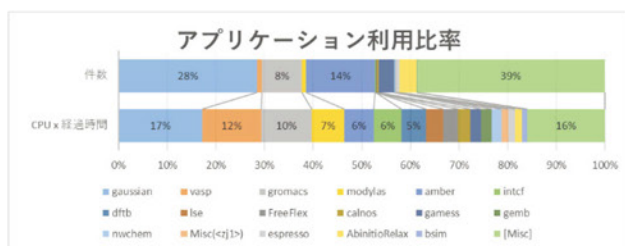
[SGI UV 2000]



[富士通 FX10]



[NEC LX シリーズ]



6 資料

6.1 計算科学研究センター運営委員

老木 成稔	福井大学 医学部分子生理学領域	教授
波田 雅彦	首都大学東京 大学院理工学研究科	教授
森田 明弘	東北大学 大学院理学研究科	教授
岡本 祐幸	名古屋大学 大学院理学研究科	教授
野口 博司	東京大学 物性研究所	准教授
斉藤 真司	分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 (計算科学研究センター)	教授
江原 正博	分子科学研究所 計算科学研究センター (理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門)	教授
奥村 久士	分子科学研究所 計算科学研究センター (理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門)	准教授
信定 克幸	分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門	准教授
柳井 毅	分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門	准教授
青木 一洋	基礎生物學研究所 細胞生物学領域 定量生物学研究部門	教授
椎名 伸之	基礎生物學研究所 細胞生物学領域 神経細胞生物学研究室	准教授
久保 義弘	生理学研究所 分子生理研究系 神経機能素子研究部門	教授
福永 雅喜	生理学研究所 大脳皮質昨日研究系 心理生理学研究部門	准教授

6.2 計算科学研究センター職員

齊藤 真司	教授・センター長
江原 正博	教授
奥村 久士	准教授
石田 干城	助教
伊藤 暁	助教
伊藤 聡一	助教
大野 人侍	助教
内山 郁夫	助教
水谷 文保	技術職員（班長）
岩橋 建輔	技術職員（係長）
内藤 茂樹	技術職員（主任）
澤 昌孝	技術職員
松尾 純一	技術職員
長屋 貴量	技術職員
石原 麻由美	事務支援員
戸谷 明子	事務支援員
近藤 直子	事務支援員

6.3 利用者数とCPU時間の推移

	1978年度	1979年度	1980年度	1981年度	1982年度	1983年度	1984年度
計算機システム	M-180 2台	M-180 2台	M-200H M-180	M-200H M-180 疎結合	M-200H 2台 疎結合	M-200H 2台 疎結合	M-200H 2台 疎結合
運 転 方 式	3 カ月 有人	9 月から無人	200H 無人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	63	176	192	183	198	199	207
利 用 者 数							
機 構 内a	48	70	69	91	94	102	110
機 構 外	107	254	325	330	375	426	446
合 計	155	334	394	421	469	528	556
稼 働 時 間 (時間)	1,087	6,071	6,553	6,721	6,305	6,170	6,316
CPU時間利用申請 (時間)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)
申 請	929	4,666	11,033	10,230	11,938	13,053	14,799
許 可	816	3,171	7,427	8,306	10,141	10,091	10,768
総使用CPU時間b,c (時間)	509	2,405	5,405	6,320	8,205	8,489	8,508
ジョブ処理件数b	41,521	155,980	183,840	214,847	239,771	236,519	226,727
ライブラリプログラム 新規登録数	0	20	43	20	699	10	118
データベース新規登録数	0	2	0	0	3	3	0
センター使用論文数d	0	24	93	118	190	185	202

	1985年度	1986年度	1987年度	1988年度	1989年度	1990年度	1991年度
計算機システム	(～11月) M-200H 2台 疎結合 (1月～) M-680H S-810/10	M-680H S-810/10 疎結合	M-680H (～1月) S-810/10 (2月～) S-820/80 疎結合	M-680H S-820/80 疎結合	M-680H S-820/80 疎結合	M-680H S-820/80 疎結合	M-680H S-820/80 疎結合
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	226	234	213	231	239	256	272
利 用 者 数							
機 構 内a	130	141	143	137	146	140	158
機 構 外	464	496	520	515	544	593	623
合 計	594	637	663	652	690	733	781
稼 働 時 間 (時間)	6,016	6,368	6,444	6,091	5,694	6,768	6,749
CPU時間利用申請 (時間)	(200H基準)	(200H基準 / M-680H基準)	(M-680H基準)	(M-680H基準)	(M-680H基準)	(M-680H基準)	(M-680H基準)
申 請	15,536	33,832 / 8,458	9,880	12,439	14,694	16,622	20,606
許 可	12,080	28,184 / 7,046	7,978	10,418	12,347	14,626	17,846
総使用CPU時間b,c (時間)	12,770	20,092 / 5,023	6,624	7,872	8,300	11,975	11,874
ジョブ処理件数b	274,431	289,915	278,956	278,104	253,418	2,955,038	346,987
ライブラリプログラム 新規登録数	160	39	4	7	3	0	0
データベース新規登録数	1	0	1	0	0	0	0
センター使用論文数d	206	237	223	211	218	248	229

a: 機構内利用者にはアイドル課題のための重複を含めません。

b: CPU時間、件数ともライブラリ開発、センター業務使用分などすべてを含みます。

c: S-810、S-820のCPU時間については、スカラー時間とベクトル時間の単純な和です。

d: センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたものです。

	1992年度	1993年度	1994年度	1995年度	1996年度	1997年度	1998年度	1999年度	2000年度
計算機システム	M-680H S-820/80 疎結合	M-680H S-820/80(～12月) SX-3/34R(1月～)	M-680H(～11月) SX-3/34R HSP(1月～) SP2(1月～)	SX-3/34R HSP(1月～) SP2(1月～)	SX-3/34R HSP SP2 HPC(9月～)	SX-3/34R HSP SP2 HPC SR2201(11月～)	SX-3/34R HSP SP2 HPC SR2201 Origin2000(10月～) SX-5(3月～)	SX-3/34R (12月まで) SX-5 SP2 HPC SR2201 Origin2000	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	271	225	222	210	201	188	174	166	156
利 用 者 数									
機 構 内a	143	127	139	129	139	126	138	125	101
機 構 外	661	589	601	597	574	609	566	539	534
合 計	804	716	740	726	713	735	704	664	635
稼 働 時 間 (時間)	7,156	M-680H系 6,689 SX-3/34R 2,101	M-680H系 5,722 SX-3/34R 8,506 HSP 2,133 SP2 2,022	SX-3/34R 8,352 HSP 8,293 SP2 8,333	SX-3/34R 8,425 HSP 8,431 SP2 8,336 HPC 4,872 (9月～)	SX-3/34R 8,494 HSP 8,513 SP2 8,515 HPC 8,501 SR2201 3,561 (11月～)	SX3-3/34R 8,579 SX-5 8,587 SP2 8,574 HPC 8,590 SR2201 8,694 Origin2000 3,570	SX3-3/34R 6,365 SX-5 8,301 SP2 8,375 HPC 8,363 SR2201 8,381 Origin2000 8,380	VPP5000 8,234 SGI系 8,319 SX-5 8,496 SP2 8,492 HPC 8,490
CPU時間利用申請 (時間)	(M-680H基準)	(M-680H基準)	(M-680H基準)	(HSP基準)	(HSP基準)	(HSP基準)	(HSP基準)	(SP2 Thin基準)	(SP2 Thin基準)
申 請	21,153	18,311	21,781	40,358	58,425	73,910	76,804	97,788	249,405
許 可	19,110	16,027	19,393	37,446	51,499	58,650	67,159	79,964	209,393
総使用CPU時間b,c (時間)	12,491	16,306	24,781	156,076	207,790	262,365	273,575	239,671	619,294
ジョブ処理件数b	297,638	227,650	107,194	84,102	70,308	51,738	45,173	40,697	58,685
ライブラリプログラム 新規登録数	0	10	10	7	15	3	13	14	18
データベース新規登録数	0	1	1	1	0	0	0	0	0
センター使用論文数d	282	267	306	275	279	331	347	347	391

	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度	2005年度	2006年度	2007年度	2008年度	2009年度
計算機システム	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-7 TX-7	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-7 TX-7	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-7 TX-7	VPP5000(5月まで) SGI2800,Origin3800 (5月まで) Altix4700(7月から) PRIMEQUEST(7月から) SX-7 TX-7	Altix4700 PRIMEQUEST SX-7(1月まで) TX-7(1月まで) SR16000(3月から)	Altix4700 PRIMEQUEST SR16000	Altix4700 PRIMEQUEST SR16000
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	148	144	119	154	132	141	145	152	171
利 用 者 数									
機 構 内a	100	104	89	83	30	40	44	59	49
機 構 外	504	479	449	516	480	533	551	589	635
合 計	604	583	538	599	510	573	595	648	684
稼 働 時 間 (時間)	VPP5000 8,492 SGI系 8,422 SX-5 8,558 SP2 8,555 HPC 8,555	VPP5000 8,506 SGI系 8,324 SX-5 8,391 SP2 7,118 HPC 8,386	VPP5000 8,553 SGI系 8,545 SX-7 8,524 TX-7 8,525	VPP5000 8,502 SGI系 8,496 SX-7 8,451 TX-7 8,489	VPP5000 8,462 SGI系 8,492 SX-7 8,492 TX-7 8,501	VPP5000 1,402 SGI系 1,400 Altix4700 6,196 PRIMEQUEST 6,336 SX-7 8,399 TX-7 8,398	Altix4700 8,245 PRIMEQUEST 8,304 SX-7 7,098 TX-7 7,088	Altix4700 8,087 PRIMEQUEST 8,486 SR16000 8,261	Altix4700 8,319 PRIMEQUEST 8,536 SR16000 8,454
CPU時間利用申請 (時間)	(SP2 Thin基準)	(SP2 Thin基準)	(TX-7基準)	(TX-7基準)	(TX-7基準)	(TX-7基準)	(TX-7基準)	(SR16000基準)	(SR16000基準)
申 請	251,785	237,872	278,177	341,788	414,643	702,270	1,005,486	1,224,945	1,433,895
許 可	234,866	229,401	277,697	321,796	368,136	653,468	918,737	1,199,620	1,412,981
総使用CPU時間b,c (時間)	678,128	2,030,643	1,785,877	1,762,818	1,992,205	4,384,464	6,307,008	12,579,635	11,954,215
ジョブ処理件数b	70,680	55,522	58,784	28,968	19,896	78,130	140,250	149,342	149,177
ライブラリプログラム 新規登録数	4	15	5	4	4	21	18	22	20
データベース新規登録数	0	0	0	0	0	0	0	0	0
センター使用論文数d	302	302	281	284	205	214	188	186	196

a:機構内利用者にはアイドル課題のための重複を含めません。

b:CPU時間、件数ともライブラリ開発、センター業務使用分などすべてを含みます。

c:S-810、S-820、SX-3、SX-5、SX-7、VPP5000のCPU時間については、スカラー時間とベクトル時間の単純な和です。

d:センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたものです。

	2010年度	2011年度	2012年度	2013年度	2014年度	2015年度	2016年度	2017年度
計算機システム	Altix4700 PRIMEQUEST SR16000	Altix4700(1月まで) PRIMEQUEST(1月まで) SR16000 PRIMERGY (2月から) UV1000(2月から) PRIMEHPC FX10 (2月から)	SR16000(2月まで) PRIMERGY UV1000 PRIMEHPC FX10	PRIMERGY UV2000 PRIMEHPC FX10	PRIMERGY UV2000 PRIMEHPC FX10	PRIMERGY UV2000 PRIMEHPC FX10	PRIMERGY UV2000 PRIMEHPC FX10	PRIMERGY(9月まで) UV2000(9月まで) PRIMEHPC FX10 NEC LX(10月から)
運 転 方 式	無人	無人	無人	無人	無人	無人	無人	無人
プロジェクト数	170	190	213	204	214	235	234	236
利 用 者 数								
機 構 内a	49	43	49	39	63	46	50	45
機 構 外	617	645	758	747	773	798	816	869
合 計	666	688	807	786	836	844	866	914
稼 働 時 間 (時間)	Altix4700 8,513 PRIMEQUEST 8,567 SR16000 8,576	Altix4700 7,148 PRIMEQUEST 7,180 SR16000 8,752 PRIMERGY 1,412 UV1000 1,412 PRIMEHPC FX10 1,428	SR16000 7,904 PRIMERGY 8,444 UV1000 8,338 PRIMEHPC FX10 8,558	PRIMERGY 8,482 UV2000 8,037 PRIMEHPC FX10 7,875	PRIMERGY 8,561 UV2000 8,574 PRIMEHPC FX10 8,547	PRIMERGY 8,588 UV2000 8,470 PRIMEHPC FX10 8,600	PRIMERGY 8,576 UV2000 8,530 PRIMEHPC FX10 8,577	PRIMERGY 4,251 UV2000 4,262 PRIMEHPC FX10 8,519 NEC LX 4,209
CPU時間利用申請 (時間)	(SR16000基準)	-	-	-	-	-	-	-
申 請	1,712,430	1,738,115	8,007,910	13,388,725	14,299,976	176,636,204	251,118,128	264,312,932
許 可	1,581,450	1,675,950	7,832,630	12,841,960	14,147,404	171,317,964	213,838,230	253,788,270
総使用CPU時間b (時間)	12,232,544	14,958,012	50,685,364	90,703,069	95,012,014	102,022,406	113,368,880	186,692,673
ジョブ処理件数b	143,132	204,864	496,719	516,481	979,108	705,470	1,055,412	1,140,631
ライブラリプログラム 新規登録数	15	22	21	9	24	36	29	32
データベース新規登録数	0	0	1	0	0	0	0	0
センター使用論文数d	193	231	257	260	253	210	253	322

a: 機構内利用者にはアイドル課題のための重複を含めません。

b: CPU時間、件数ともライブラリ開発、センター業務使用分などすべてを含みます。

d: センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたものです。

8-6 計算科学研究センター

計算科学研究センターは、2000年度の電子計算機センターから計算科学研究センターへの組織改組にともない、従来の共同利用に加えて、理論、方法論の開発等の研究、さらに、研究の場の提供、ネットワーク業務の支援、人材育成等に取り組んでいる。2017年度においても、次世代スーパーコンピュータプロジェクト支援、ネットワーク管理室支援等をはじめとした様々な活動を展開している。上記プロジェクトについてはそれぞれの項に詳しく、ここでは共同利用に関する活動を中心に、特に設備の運用等について記す。

2018年3月現在の共同利用サービスを行っている計算機システムの概要を示す。本システムは、「超高速分子シミュレータ」と「高性能分子シミュレータ」の2システムから構成されていたが、2017年10月に更新した計算機システムでは、「高性能分子シミュレータ」の1システムに統合化した。本シミュレータは、量子化学、分子シミュレーション、固体電子論などの共同利用の多様な計算要求に応えうるための汎用性があるばかりでなく、研究室で所有するPCクラスタでは不可能な大規模計算を実行できる性能を有する。

高性能分子シミュレータは、主として日本電気製のLXシリーズで構成される1069ノードの共有メモリ型スカラ計算機クラスタであり、全サーバは同一体系のCPU（Intel Xeon）およびOS（Linux3.10）をもとに、バイナリ互換性を保ち一体的に運用される。これらに加え、京コンピュータと同じアーキテクチャの富士通製PRIMEHPC FX10があり、システム全体として総演算性能4.096 PFLOPSで総メモリ容量219 TByte超である。LXシリーズのクラスタは以下の運用形態を念頭に置いて2タイプから構成されている。1つはTypeNと呼ぶノード単位の利用形態向けクラスタで、2.4 GHzのクロック周波数を持つ40 CPUコア、192 GBメモリ構成のノード794台と、メモリ構成を768 GBに強化した20台からなるPCクラスタである。もう1つはTypeCと呼ぶコア単位の利用形態向けクラスタで、3.0 GHzのクロック周波数を持つ36 CPUコア、192 GBメモリ構成のノード159台と、24 CPUコアにGPGPUを2基搭載した演算性能を強化したノード96台からなるPCクラスタである。インターコネクトは、Omni-Pathアーキテクチャを採用し、全台数を100 GB/sで相互接続しており、大規模な分子動力学計算などノードをまたがる並列ジョブを高速で実行することができる。これらPCクラスタは9.4 PBの容量を持つ外部磁気ディスクを共有し、Lustreファイルシステムを構成している。これらとは別に前システムから継続運用しているPRIMEHPC FX10は、16 CPUコア、32 GBメモリの96ノードが富士通独自のTofuインターコネクトで連結されたシステムである。京コンピュータと互換性があり、京コンピュータのプログラム開発やデータ解析等に活用されている。

ハードウェアに加え、利用者が分子科学の計算をすぐに始められるようにソフトウェアについても整備を行っている。量子化学分野においては、Gaussian 09, Gamess, Molpro, Molcas, Turbomole, 分子動力学分野では、Amber, NAMD, Gromacsがインストールされている。これらを使った計算は全体の約半数を占めている。

共同利用に関しては、2017年度は233研究グループにより、総数904名にもおよぶ利用者がこれらのシステムを日常的に利用している。近年、共同利用における利用者数が増加傾向にあり、このことは計算科学研究センターが分子科学分野や物性科学分野において極めて重要な役割を担っており、特色のある計算機資源とソフトウェアを提供していることを示している。

計算科学研究センターは、国家基幹技術の一つとして位置づけられているポスト「京」開発事業（フラッグシップ2020プロジェクト）において、ポスト「京」を用いて重点的に取り組むべき社会的・科学的課題（重点課題）のうち、とくにナノサイエンスに関わるアプリケーション開発「重点課題（5）エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」において重要な役割の一端を担っている。また、同「重点課題（7）次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」、ポスト「京」萌芽的課題アプリケーション開発「萌芽的課題 基礎科学の

挑戦—複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」，科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業「計算物質科学人材育成コンソーシアム」，元素戦略プロジェクト＜研究拠点形成型＞とも連携を行っている。これら5つの大規模並列計算を志向したプロジェクトを支援し，各分野コミュニティにおける並列計算の高度化へさらなる取り組みを促すことを目的として東北大学金属材料研究所，東京大学物性研究所，自然科学研究機構分子科学研究所が共同で「計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業（SCCMS）」を運営しており，2017年度はこれらプロジェクトにコンピュータ資源の一部（20% 未満）を提供・協力している。さらに，ハード・ソフトでの協力以外にも，分野振興および人材育成に関して，スーパーコンピュータワークショップ「機能性材料設計への最新の計算科学アプローチ」と2つのウィンタースクール「第7回量子化学スクール～基礎理論と高精度理論の発展～」と「第11回分子シミュレーションスクール—基礎から応用まで—」を開催した。

平成29年度 システム構成（平成29年10月1日以降）

超高速分子シミュレータシステム 4.096 PFLOPS

クラスタ演算サーバ TypeN	
型番：日本電気 LX 2U-Twin2 サーバ 406Rh-2	
OS：Linux	
CPUCore 数：31,760 CPUCore（40 CPUCore × 794 ノード）2.4 GHz	
総理論性能：2,439 TFLOPS（3,072 Gflops × 794 ノード）	
総メモリ容量：152 TB（192 GB × 794 ノード）	
クラスタ演算サーバ TypeNF（メモリ強化）	
型番：日本電気 LX 1U サーバ 110Rh-1	
OS：Linux	
CPUCore 数：800 CPUCore（40 CPUCore × 20 ノード）2.4 GHz	
総理論性能：61 TFLOPS（3,072 GFLOPS × 20 ノード）	
総メモリ容量：15 TB（768 GB × 20 ノード）	
クラスタ演算サーバ TypeC	
型番：日本電気 LX 1U サーバ 110Rh-1	
OS：Linux	
CPUCore 数：5,724 CPUCore（36 CPUCore × 159 ノード）3.0 GHz	
総理論性能：549 TFLOPS（3,456 GFLOPS × 159 ノード）	
総メモリ容量：30 TB（192 GB × 159 ノード）	
クラスタ演算サーバ TypeCA（演算性能強化）	
型番：日本電気 LX 4U-GPU サーバ 108Th-4G	
OS：Linux	
CPUCore 数：2,304 CPUCore（24 CPUCore × 96 ノード）3.0 GHz	
総理論性能：221 TFLOPS（2,304 GFlops × 96 ノード）+ 806 TFLOPS（NVIDIA Tesla P100 × 192）	
総メモリ容量：18 TB（192 GB × 96 ノード）	

「京」用開発サーバ	
	型番：富士通 PRIMEHPC FX10
	OS：Linux
	CPUCore 数：1,536 CPUCore (16 CPUCore × 96 ノード)
	総理論性能：20 TFLOPS (211.2 GFLOPS × 96 ノード)
	総メモリ容量：3 TB (32 GB × 96 ノード)
	ディスク容量：48 TB (/k/home)
外部磁気ディスク装置	
	型番：DDN SFA14KX
	総ディスク容量：9.4 PB
高速ネットワーク装置	
	型番：Intel Omni-Path Architecture 100Gbps
フロントエンドサーバ	
	型番：日本電気 LX 2U-Twin2 サーバ 406Rh-2
	OS：Linux
	総メモリ容量：1,536 GB (192 GB × 8 ノード)
運用管理クラス	
	型番：日本電気 Express5800/R120g-1M
	OS：Linux
	総メモリ容量：1,024 GB (64 GB × 16 ノード)