

I 部

目 次

1	巻頭言 計算科学研究センター 齊藤 真司	1
2	スーパーコンピュータワークショップ 2014	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	6
3.3	課金	7
4	一般報告	8
4.1	ライブラリプログラムの開発・公開	8
4.2	データベース開発状況	10
5	2013 年度計算機稼働状況および利用者数	11
5.1	利用申請プロジェクトおよび利用者数	11
5.2	電力使用および計算機稼働状況	11
5.3	計算機利用状況	12
5.4	クラス別 CPU 使用時間	13
5.5	ジョブ処理件数	14
5.6	ジョブの実行状況	15
6	資料	16
6.1	計算科学研究センター運営委員	16
6.2	計算科学研究センター職員	17
6.3	利用者数と CPU 時間の推移	18
6.4	マニュアル	20
7	研究施設の現状と将来計画 (分子研レポート 2013 より転載)	23

計算センター近況

計算科学研究センター、分子科学研究所 齊藤真司

2013 年度の成果報告書が出来上がりました。2013 年度は、施設利用 185 グループ、CMSI 利用枠 19 グループの合計 204 グループの利用がございました。日頃より皆様には、計算センターの運営で様々なご協力・ご理解を賜り心よりお礼申し上げます。近年、計算センターを多くの研究グループにご利用いただいております、この場をお借りしてセンターの近況についてご連絡させていただきます。

計算センターを利用するグループ数はここ数年増加しておりますが、ワークステーションの普及により 90 年代初頭を最後に減少し、グループ数の点では 2003-2005 年度にセンター創設時以来の低迷期を迎えておりました。そこで、従来から行ってきたユーザー支援に加え、施設利用 S の設定や最大 4,096 コアを利用できる専有キューの創設など大規模ユーザーが使いやすい環境の提供を心掛けてきました。さらに、2011 年度からは、できるだけ多くの予算を計算機資源の強化に割り当てられるよう従来のシステムサポート体制を変更し、演算性能の向上にも努めてまいりました。その結果、2004 年から毎年 1%の計算機借料の削減の中、これまでの演算性能向上速度（センター創設以来、5 年で 10 倍つまりムーアの法則に従い演算性能が向上してきました）をも上回る演算性能の高い計算機を導入することができました。この秋にはシステムの一部の更新を行い、さらに演算性能の向上を図る予定であります。また、これまで時期をずらして更新してきたスパコンと汎用コンを、2 年後には同時に更新することによりこれまで以上に演算性能の高いシステムの導入が可能となるものと期待しております。このような演算性能の向上に加え、ライブラリプログラムの整備も進めております。

また、ハード・ソフト両面の整備に加え、計算センターからどのような研究が生み出されているかという点も今後ますます重要となってきます。冒頭に記しましたように、近年多くのグループにご利用いただき多くの研究成果が得られていること、計算センターメンバー一同大変に感謝しております。今後、ホームページなどを通して計算センターを利用して得られた皆様の優れた研究成果の情報発信について強化していきたいと考えております。皆様の研究成果の情報発信の場の一つとしてお考え頂けたら幸いです。皆様からのご連絡をお待ちしております。

今後も皆様からのご要望などにお応えし、自由な発想に基づく新しい理論・計算科学分子研究の推進の支援、理論・計算科学研究者が集える場の提供などを通して、この分野の発展に貢献していきたいと考えております。今後とも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 2014

テーマ：「計算化学の最新の成果と展開」

日時：2014年1月21日（火）～22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：46名

ポスター発表：14件

今年度のワークショップは「計算化学の最新の成果と展開」というテーマを掲げ、当センターを利用されているグループを中心に、計算化学の最前線で活躍されている研究者を講師にお招きして開催した。量子化学の手法を中心に用いた、生体・化学反応、物性、スペクトロスコーピー等の分野における、当センターのスーパーコンピュータや CMSI、京コンピュータを用いた最新の研究成果が紹介された。また、最新の理論展開や、大規模計算に対応したプログラム開発、さらにこの先、計算化学が目指すべき方向についても議論いただいた。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た。実験研究者を含む幅広い方面から、合計14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46名であった。

1月21日（火）	
14:00 - 14:10	はじめに
14:10 - 14:50	中辻 博（量子化学研究協会研究所） 「革新的量子計算科学の創造と大規模シミュレーション」
14:50 - 15:30	中嶋隆人（理研 AICS） 「分子科学計算ソフトウェア「NTChem」
15:30 - 15:50	休憩
15:50 - 16:30	倉重佑輝（分子科学研究所） 「多参照電子相関理論における最近の進展」
16:30 - 17:10	林 重彦（京都大学） 「柔らかいタンパク質の分子機能の理解と設計」
17:10 - 18:20	ポスター発表
18:30 - 20:30	懇親会

1月22日(水)	
9:30 - 10:10	袖山慶太郎 (物質・材料研究機構) 「「京」を用いたLiイオン電池の電解液還元分解およびSEI膜生成反応の解析」
10:10 - 10:50	岸 亮平 (大阪大学) 「閉殻および開殻分子系の電子構造と光学応答・電子動力学の関連についての理論研究」
10:50 - 11:10	休憩
11:10 - 11:50	Stephan Irle (名古屋大学) 「Game-Changing Influence of Excited States Dynamics for Photoemission Properties of π -Conjugated Molecular Dyes」
11:50 - 12:30	河野裕彦 (東北大学) 「分子の振動励起と化学結合ダイナミクス」
12:30 - 12:40	おわりに

計算科学研究センター・ワークショップ

計算化学の最新の成果と展開

開催日 2014年1/21(TUE)・22(WED)

会場 自然科学研究機構 岡崎コングレグションセンター
(愛知県岡崎市明大寺字伝馬8-1)

■ 登壇講演

岸 亮平 (大阪大学)
倉重 佑輝 (分子科学研究所)
河野 裕彦 (東北大学)
袖山 慶太郎 (物質・材料研究機構)
中嶋 隆人 (理研AICS)
中辻 博 (量子化学研究会研究所)
林 重彦 (京都大学)
Stephan Irle (名古屋大学)

■ ポスター発表

■ 参加申込

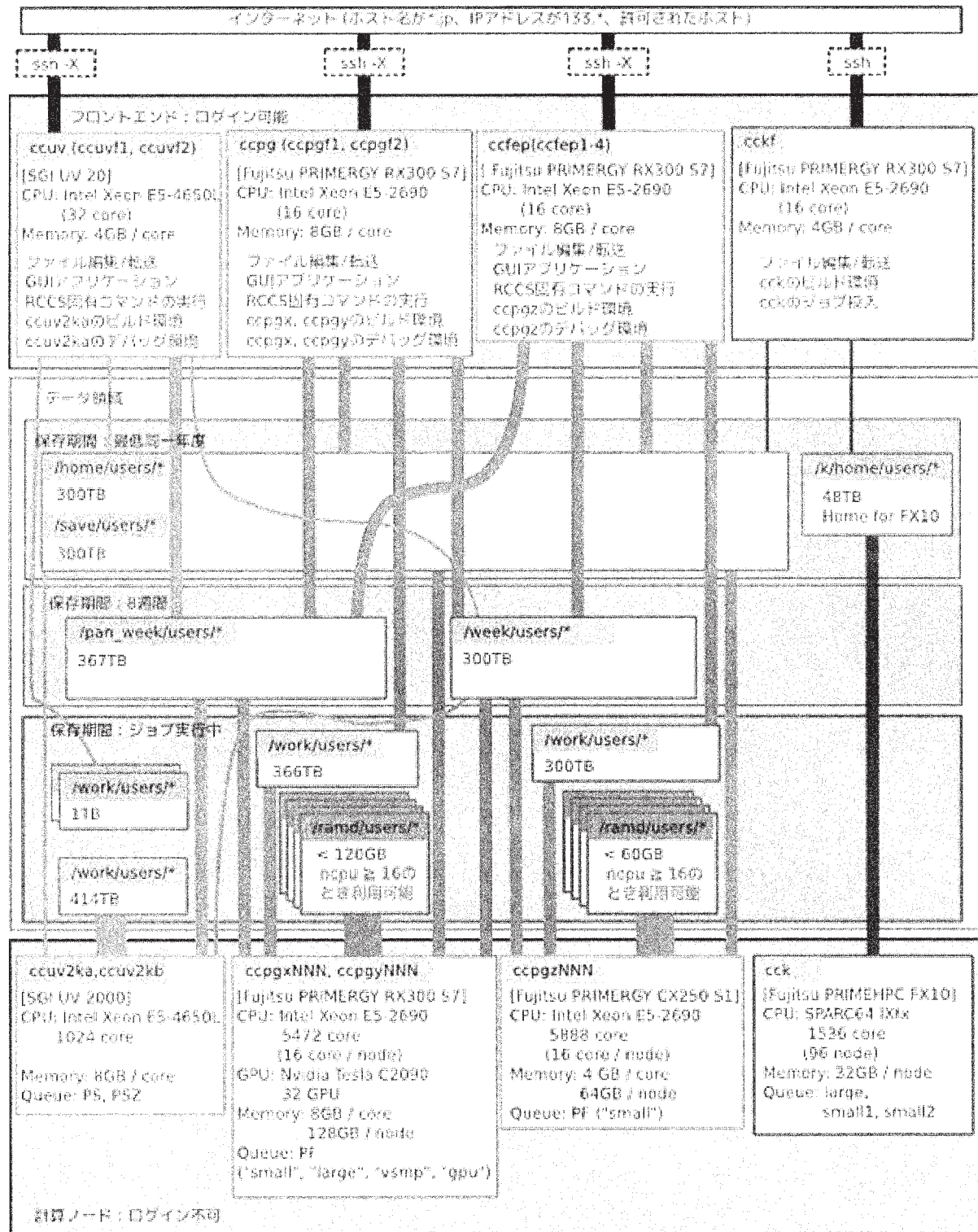
口参加費：無料 口参加方法：下記ホームページをご覧ください。
<https://ccportal.ims.ac.jp/workshop2014/>

■ 問い合わせ

自然科学研究機構 岡崎共同研究施設 計算科学研究センター
TEL: 0564-45-7452 FAX: 0564-55-7925

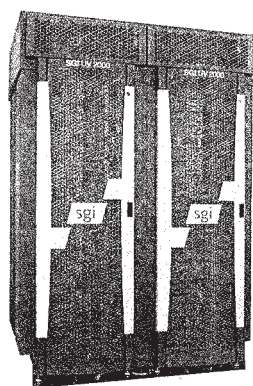
3 計算機システム

3.1 計算機システムの全体像

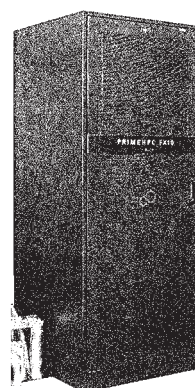


超高速分子シミュレータシステムは 2012 年 2 月運用開始のシステムで、7つのサブシステムから構成されています。高速 I/O 演算サーバは 2013 年 4 月に CPU を更新して SGI 製 UV2000 と IS16000 ストレージシステム、その開発用サーバとして SGI 製 UV20、クラスタ演算サーバとその開発用サーバとして富士通製 PRIMERGY RX300 S7、「京」用開発サーバとして富士通製 PRIMEHPC FX10、外部磁気ディスク装置として PANASAS 製 ActiveStor、高速ネットワーク装置としてフォーステン・ネットワーク製 ZettaScale Z9000 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 32 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。

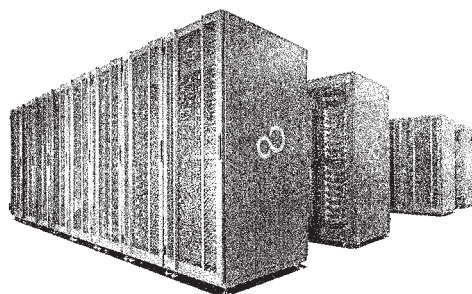
高性能分子シミュレータシステムは 2013 年 3 月運用開始のシステムです。演算サーバとして富士通製 PRIMERGY CX250/400 S1、フロントエンドサーバとして PRIMERGY RX300 S7、外部磁気ディスク装置として富士通製 ETERNUS DX80 S2、高速ネットワーク装置として DELL 製 Force10 S4810 が導入されています。



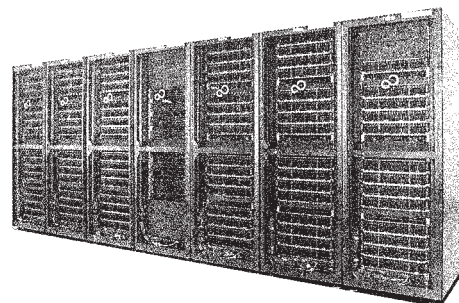
SGI UV2000



富士通 PRIMEHPC FX10



富士通 PRIMERGY RX300 S7



富士通 PRIMERGY CX250/400 S1

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。

• 全利用者が利用可能なキュー

システム	キュー名	制限時間	メモリー	1 ジョブあたりの core 数	グループ制限
ccpg	PF	定期保守 まで	7.75GB/core	最大 512	割当点数が 30 万点以上：1600 core 割当点数が 10 万点以上：1024 core 割当点数が 3 万点以上：640 core 割当点数が 1 万点以上：384 core 割当点数が 1 万点未満：128 core

16 core 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 16 core の倍数に切り上げられ、ノードを占有します。17 core 以上のスレッド並列を行うには、PF キューで jobtype=vsmpp を指定する必要がありますが、計算が動き出すまで 20 分くらいかかります。

PS キューが使えないユーザーは、PSZ キューを使うことができます。ただし、PS キューのジョブの実行が常に優先されるため、長時間実行されない場合があります。

システム	キュー名	制限時間	メモリー	1 ジョブあたりの core 数	グループ制限
ccuv	PSZ	72 時間	7.7GB/core	最大 64	64 core

• 利用申請や追加申請時に希望理由の記述が必要なキュー

システム	キュー名	制限時間	メモリー	1 ジョブあたりの core 数	グループ制限
ccuv	PS	定期保守 まで	7.7GB/core	最大 256	許可時間が 10 万時間以上：512 core 許可時間が 1 万時間以上：256 core 許可時間が 1 万時間未満：128 core
cck	large small1 small2	24 時間	1.8GB/core	72x16 (固定) 12x16 (固定) 12x16 (固定)	システム全体で 1 ジョブ
ccpg	専有利用	7 日間単位	7.75GB/core	最大許可された core 数	許可された core 数 (512 - 4,096)

3.3 課金

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。

割当点数は、課金係数に利用 core 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り、課金係数の一覧は下記の通りです。

システム	課金係数 / (点/(core*時間))
ccuv	0.1980
ccpg	0.1008
cck	0.0648

会話処理の ccfep, 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。

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。

2013 年度のライブラリプログラム開発の申請件数は 3 件でした。2013 年度末のライブラリプログラム一覧は下記の通りです。

名前	内容
AMBER	A package of molecular simulation programs.
GAMESS	General atomic and molecular electronic structure system.
Gaussian	Ab initio molecular orbital calculations.
GROMACS	Fast, Free and Flexible MD
GRRM	Automated Exploration of Reaction Pathways.
Molcas	A quantum chemistry software.
Molpro	A complete system of ab initio programs.
NAMD	A scalable molecular dynamics program.
PSI	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.
SIESTA	Efficient electronic structure calculations and ab initio molecular dynamics simulations of molecules and solids
TURBOMOLE	One of the fastest programs for standard quantum chemical applications.
GaussView	A viewer for Gaussian 03 / 09.
Molden	A visualization program of molecular and structure.
VMD	Molecular graphics viewer

パッケージプログラム名	バージョン	リビジョン	ccpg	ccuv
Amber	12	bugfix 21	○ (2013/12/10)*	○ (2013/12/10)
	12	bugfix 7	◎ (2012/5/17)*	◎ (2012/5/18)
	11	bugfix 26	—	○ (2012/2/1)
	11	bugfix 19	○ (2012/2/1)	—
GAMESS	2013	May01	○ (2013/8/21)	○ (2013/8/21)
	2012	May01	◎ (2012/8/14)	◎ (2012/8/15)
	2011	Aug11	—	○ (2012/2/1)
	2010	Oct01	○ (2012/2/1)	—
Gaussian	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)	—
GROMACS	4.6.1		○ (2013/5/24)*	—
	4.5.5		◎ (2012/6/12)*	○ (2012/6/29)
GRRM	11		◎ (2012/9/26)	◎ (2012/9/26)
Molcas	7.8		※ (2012/10/1)	◎ (2012/11/8)
	7.6		◎ (2012/2/1)	○ (2012/2/1)
	7.4		○ (2012/2/1)	—
Molpro	2010.1	24	◎ (2012/2/1)	◎ (2012/2/1)
NAMD	2.9		◎ (2012/5/15)*	◎ (2012/5/15)
	2.8		○ (2012/4/10)	○ (2012/4/10)
PSI	4.0	b5	○ (2013/10/23)	○ (2013/10/23)
Quantum ESPRESSO	5.0.1		◎ (2012/10/05)*	◎ (2012/10/05)
SIESTA	3.1		◎ (2012/8/16)	—
TURBOMOLE	6.4		◎ (2012/8/15)	◎ (2012/8/15)
	6.3.1		◎ (2012/2/2)	—

名前	バージョン	リビジョン	起動コマンド	ccfep	ccpg	ccuv
GaussView	5.0.9		gview5	◎ (2013/3/13)	◎ (2013/2/19)	◎ (2013/2/19)
Molden	5.0		molden	◎ (2013/4/1)	◎ (2013/2/19)	◎ (2013/2/19)
VMD	1.9.1		vmd	◎ (2013/3/21)	◎ (2013/2/14)	◎ (2013/2/14)

◎: 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2件のデータベースが登録されており、現在公開中です。このうち、1件のデータベース (QCLDB) については、開発の援助を行っており、毎年データの更新を行っています。

(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) 130,782 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、計算科学研究センターのウェブページで公開しています。

2013 年度に新規登録されたデータは、5,136 件です。

(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。2013 年 5 月にデータが追加されました。

5 2013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	時 間		
				申 請	許 可	実 績
分子科学	施設利用	177 (19)	717 (70)	10,837,525 (1,513,000)	10,294,450 (1,513,000)	6,810,790
	協力研究	3	6	16,000	16,000	17,188
	所内	14	39	2,315,000	2,315,000	2,029,078
生理学	施設利用	1	2	60,000	59,400	60,182
基礎生物学	施設利用	9	22	160,200	157,110	119,218
合 計		204	786	13,388,725	12,841,960	9,036,456

※ ()内は、CMSI利用枠の内数

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	*	U2000	*
2013年4月	571,158	661	99	664	100	173	99
5月	632,680	691	100	734	100	724	100
6月	630,335	702	99	710	100	702	99
7月	633,614	734	100	734	100	720	98
8月	610,871	732	100	105	100	727	99
9月	575,529	709	100	667	100	720	100
10月	562,355	704	100	706	100	706	100
11月	540,375	719	100	720	100	720	100
12月	546,158	734	100	734	100	727	100
2014年1月	527,386	734	100	734	100	744	100
2月	456,701	632	100	632	100	630	100
3月	524,328	734	100	735	100	744	100
合 計	6,811,490	8,486	100	7,875	100	8,037	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						
	マシン名	PRIMERGY	*	PRIMEHPC FX10	*	UV2000	*
2013年4月		5,497,660	73	330,505	32	104,616	59
5月		5,847,236	75	452,413	40	635,996	86
6月		6,109,726	77	270,541	25	282,807	39
7月		6,075,437	73	373,598	33	298,739	41
8月		6,490,688	78	69,619	43	216,860	29
9月		7,379,986	92	514,659	50	258,121	35
10月		6,870,972	86	489,489	45	239,519	33
11月		7,658,555	94	308,725	28	247,632	34
12月		7,291,563	87	595,712	53	344,533	46
2014年1月		7,677,593	92	643,359	57	532,159	70
2月		6,608,230	92	554,660	57	364,430	57
3月		7,796,231	94	509,425	45	761,073	100
合計		81,303,877	84	5,112,705	42	4,286,487	52

※ CPU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	合計
2013年4月		26,457	376	658	27,491
5月		37,163	614	1,437	39,214
6月		46,479	274	1,123	47,876
7月		48,852	446	2,812	52,110
8月		29,365	90	1,669	31,124
9月		77,900	261	2,171	80,332
10月		40,268	192	4,081	44,541
11月		31,685	392	2,552	34,629
12月		25,442	814	1,674	27,930
2014年1月		25,384	172	1,510	27,066
2月		57,689	157	3,112	60,958
3月		41,972	442	796	43,210
合計		488,656	4,230	23,595	516,481

5.4 クラス別CPU使用時間

PRIMERGY	PF small	PF large	PF vsmp	PF gpu	PF phi	PF small_z	Queue合計	ETC	総合計
2013年4月	599415:29:23	1253128:02:28	442386:56:32	23873:42:12	0:00:00	3178855:54:50	5497660:05:25	0:00:00	5497660:05:25
5月	573337:26:32	1610111:46:22	476317:39:12	22403:59:52	0:00:00	3165065:13:49	5847236:05:47	0:00:00	5847236:05:47
6月	267583:48:18	2246586:26:46	412043:11:12	29975:45:55	0:00:00	3153537:04:29	6109726:16:40	0:00:00	6109726:16:40
7月	527631:32:47	2358716:57:03	6009:56:32	38298:35:45	0:00:00	3144780:13:29	6075437:15:36	0:00:00	6075437:15:36
8月	1384432:29:57	1965026:30:33	41339:30:40	25031:07:26	0:00:00	3074858:24:49	6490688:03:25	0:00:00	6490688:03:25
9月	1667202:31:27	1875495:39:57	37814:10:56	10302:38:20	0:00:00	3789171:06:24	7379986:07:04	0:00:00	7379986:07:04
10月	804134:55:41	2443132:33:51	52213:08:48	21253:44:07	0:00:00	3550237:44:10	6870972:06:37	0:00:00	6870972:06:37
11月	472930:20:00	2932427:08:14	50016:09:52	19477:52:59	0:00:00	4183703:27:52	7658554:58:57	0:00:00	7658554:58:57
12月	92011:16:33	3348841:45:56	23185:13:04	15347:07:06	0:00:00	3812177:46:20	7291563:08:59	0:00:00	7291563:08:59
2014年1月	474584:35:49	3013853:40:40	56281:34:24	8386:48:28	0:00:00	4124485:49:36	7677592:28:57	0:00:00	7677592:28:57
2月	332613:08:55	2662928:32:11	56756:20:48	9845:56:49	4812:02:40	3541274:01:39	6608230:03:02	0:00:00	6608230:03:02
3月	150704:31:52	3598643:43:25	43019:49:20	13583:12:37	0:00:00	3990279:31:27	7796230:48:41	0:00:00	7796230:48:41
合計	7346582:07:14	29308892:47:26	1697383:41:20	237780:31:36	4812:02:40	42708426:18:54	81303877:29:10	0:00:00	81303877:29:10

PRIMEHPC FX10	cck small	cck large	Queue合計	ETC	総合計
2013年4月	22140:09:36	308364:33:36	330504:43:12	0:00:00	330504:43:12
5月	21954:32:48	430458:18:40	452412:51:28	0:00:00	452412:51:28
6月	2503:07:44	268038:13:20	270541:21:04	0:00:00	270541:21:04
7月	10197:22:24	363400:09:04	373597:31:28	0:00:00	373597:31:28
8月	96:22:24	69523:03:28	69619:25:52	0:00:00	69619:25:52
9月	30477:25:04	484181:54:08	514659:19:12	0:00:00	514659:19:12
10月	67107:20:32	422381:39:12	489488:59:44	0:00:00	489488:59:44
11月	125159:54:56	183564:54:24	308724:49:20	0:00:00	308724:49:20
12月	176502:43:44	419209:32:00	595712:15:44	0:00:00	595712:15:44
2014年1月	142037:54:08	501321:11:28	643359:05:36	0:00:00	643359:05:36
2月	75008:54:24	479650:35:44	554659:30:08	0:00:00	554659:30:08
3月	35448:35:44	473976:53:20	509425:29:04	0:00:00	509425:29:04
合計	708634:23:28	4404070:58:24	5112705:21:52	0:00:00	5112705:21:52

UV2000	PS	PSZ	Queue合計	ETC	総合計
2013年4月	104615:39:15	0:00:00	104615:39:15	0:00:00	104615:39:15
5月	635995:43:23	0:00:00	635995:43:23	0:00:00	635995:43:23
6月	282807:27:21	0:00:00	282807:27:21	0:00:00	282807:27:21
7月	298739:20:09	0:00:00	298739:20:09	0:00:00	298739:20:09
8月	216859:53:17	0:00:00	216859:53:17	0:00:00	216859:53:17
9月	258121:14:40	0:00:00	258121:14:40	0:00:00	258121:14:40
10月	239519:18:38	0:00:00	239519:18:38	0:00:00	239519:18:38
11月	247632:11:44	0:00:00	247632:11:44	0:00:00	247632:11:44
12月	336470:06:26	8063:13:50	344533:20:16	0:00:00	344533:20:16
2014年1月	521259:14:04	10900:08:44	532159:22:48	0:00:00	532159:22:48
2月	347961:29:43	16468:45:16	364430:14:59	0:00:00	364430:14:59
3月	750470:22:07	10602:37:40	761072:59:47	0:00:00	761072:59:47
合計	4240452:00:47	46034:45:30	4286486:46:17	0:00:00	4286486:46:17

5.5 ジョブ処理件数

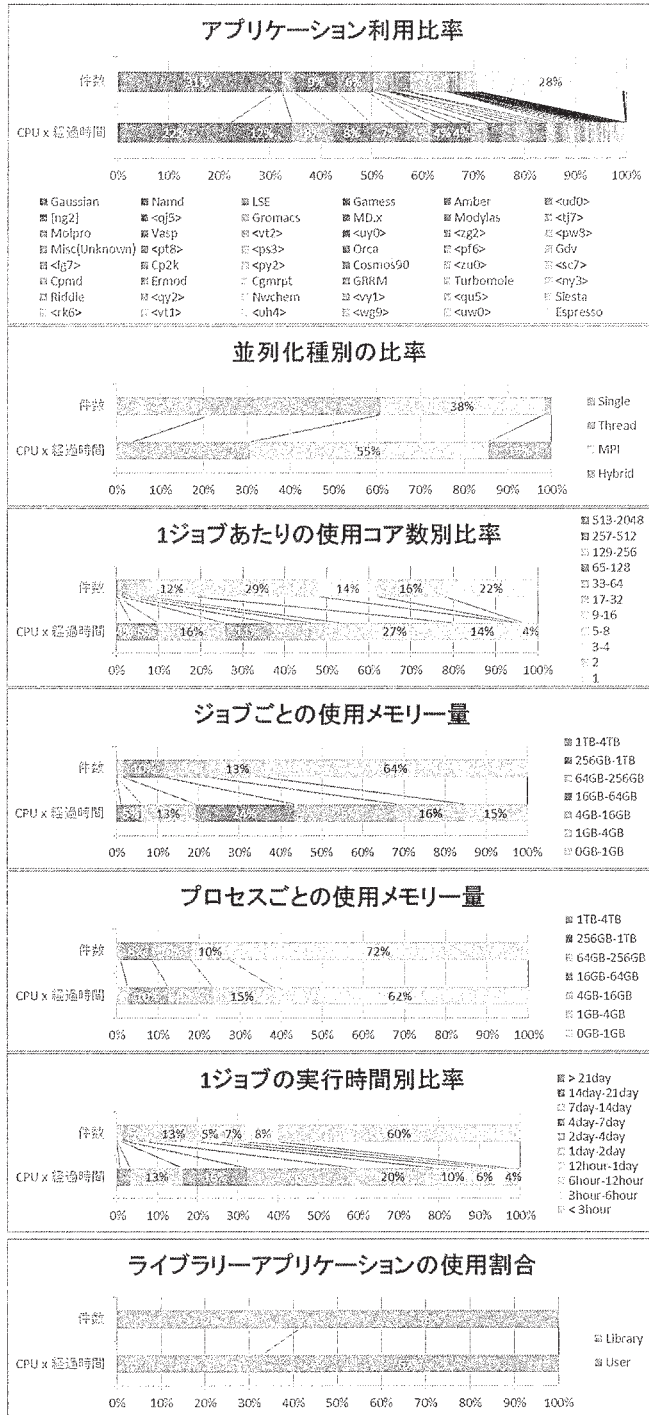
PRIMERGY	PF small_xy	PF large	PF vsmp	PF gpu	PF phi	PF small_z	Queue合計	ETC	総合計
2013年4月	4,228	7,441	2,456	39	0	12,293	26,457	0	26,457
5月	7,558	12,988	2,918	184	0	13,515	37,163	0	37,163
6月	1,302	27,281	2,399	780	0	14,717	46,479	0	46,479
7月	7,525	27,265	52	420	0	13,590	48,852	0	48,852
8月	6,416	14,932	262	56	0	7,699	29,365	0	29,365
9月	9,350	56,104	246	42	0	12,158	77,900	0	77,900
10月	3,162	23,304	401	32	0	13,369	40,268	0	40,268
11月	1,015	17,054	321	39	0	13,256	31,685	0	31,685
12月	522	15,770	140	163	0	8,847	25,442	0	25,442
2014年1月	1,387	15,665	353	458	0	7,521	25,384	0	25,384
2月	2,630	16,038	338	268	13	38,402	57,689	0	57,689
3月	4,090	13,430	221	204	0	24,027	41,972	0	41,972
合計	49,185	247,272	10,107	2,685	13	179,394	488,656	0	488,656

PRIMEHPC FX10	cck small	cck large	Queue合計	ETC	総合計
2013年4月	245	131	376	0	376
5月	396	218	614	0	614
6月	208	66	274	0	274
7月	377	69	446	0	446
8月	86	4	90	0	90
9月	128	133	261	0	261
10月	162	30	192	0	192
11月	245	147	392	0	392
12月	513	301	814	0	814
2014年1月	108	64	172	0	172
2月	72	85	157	0	157
3月	211	231	442	0	442
合計	2,751	1,479	4,230	0	4,230

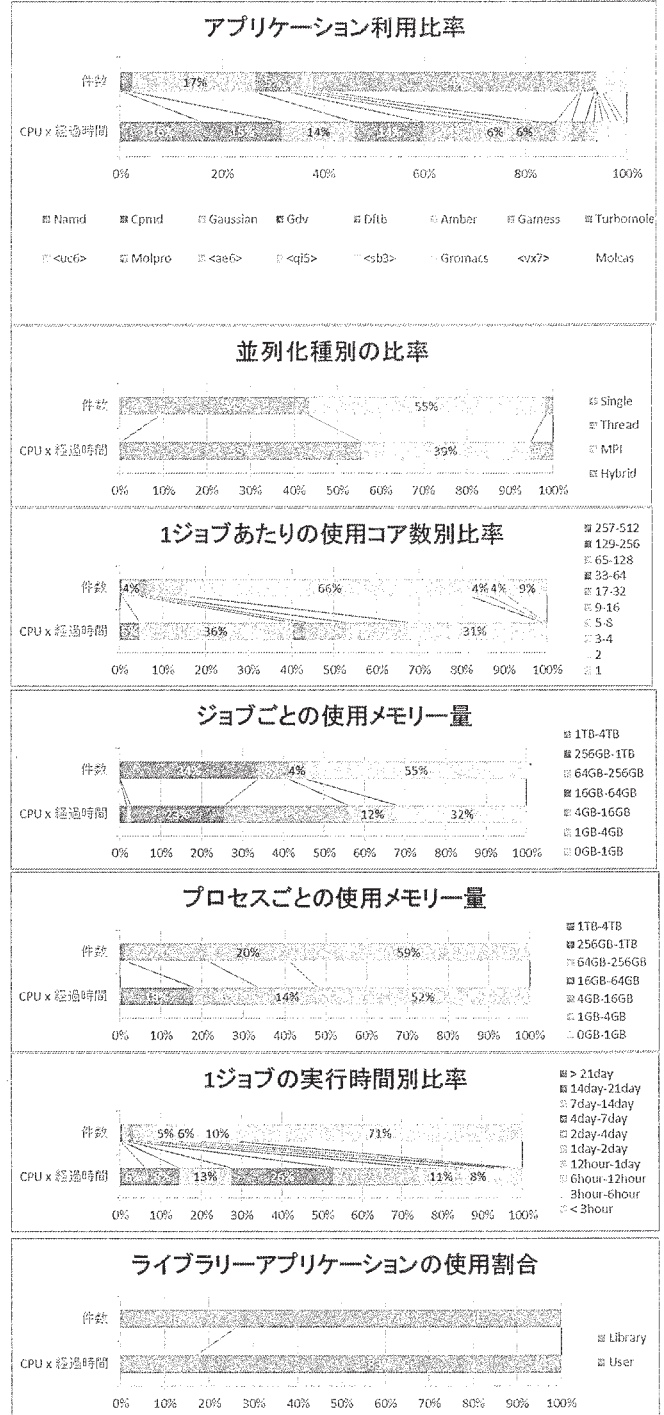
UV2000	PS	PSZ	Queue合計	ETC	総合計
2013年4月	658	-	658	0	658
5月	1,437	-	1,437	0	1,437
6月	1,123	-	1,123	0	1,123
7月	2,812	-	2,812	0	2,812
8月	1,669	-	1,669	0	1,669
9月	2,171	-	2,171	0	2,171
10月	4,081	-	4,081	0	4,081
11月	2,552	-	2,552	0	2,552
12月	1,560	114	1,674	0	1,674
2014年1月	1,427	83	1,510	0	1,510
2月	3,064	48	3,112	0	3,112
3月	730	66	796	0	796
合計	23,284	311	23,595	0	23,595

5.6 ジョブの実行状況

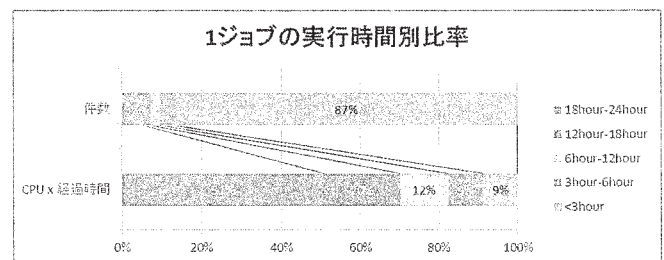
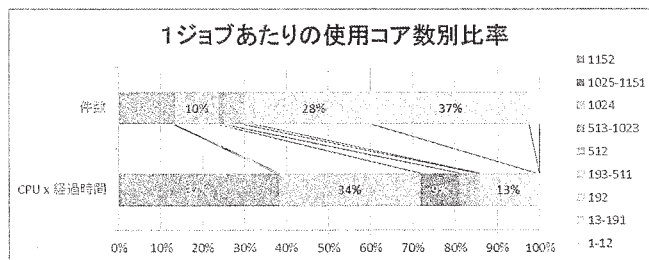
[富士通 PRIMERGY RX300/CX250]



[SGI UV 2000]



[富士通 PRIMEHPC FX10]



6 資料

6.1 計算科学研究センター運営委員

木下 賢吾	東北大学 大学院情報科学研究科	教授
老木 成稔	福井大学 医学部分子生理学	教授
常次 宏一	東京大学 物性研究所	教授
佐藤 啓文	京都大学 大学院工学研究科	教授
波田 雅彦	首都大学東京 大学院理工学研究科	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
小林 悟	基礎生物学研究所 発生遺伝学研究部門	教授
松林 嘉克	基礎生物学研究所 細胞間シグナル研究部門	教授
久保 義弘	生理学研究所 神経機能素子研究部門	教授
村田 和義	生理学研究所 脳機能計測・支援センター 形態情報解析室	准教授

6.2 計算科学研究センター職員

斉藤 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
福田 良一	助教
伊藤 暁	助教
大野 人侍	助教
内山 郁夫	助教
水谷 文保	技術職員（班長）
内藤 茂樹	技術職員（主任）
岩橋 建輔	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

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	1985年度	1986年度	1987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	同1982年度	同1982年度	(~11月) 同1982年度 (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
運 転 方 式	3カ月 有人	9月から無人	200H 無人 180 有人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	63	176	192	183	198	199	207	226	234	213
利 用 者 数										
機 構 内 ^a	48	70	69	91	94	102	110	130	141	143
機 構 外	107	254	325	330	375	426	446	464	496	520
合 計	155	334	394	421	469	528	556	594	637	663
稼働時間(時間)	1,087	6,071	6,553	6,721	6,305	6,170	6,316	6,016	6,368	6,444
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)	(M-680H基準)	(M-680H基準)	(M-680H基準)
申 請	929	4,666	11,033	10,230	11,938	13,053	14,799	15,536	33,832/8,458*	9,880
許 可	816	3,171	7,427	8,306	10,141	10,091	10,768	12,080	28,184/7,046*	7,978
総使用CPU時間 ^{b,c} (時間)	509	2,405	5,405	6,320	8,205	8,489	8,508	12,770	20,092/5,023*	6,624
ジョブ処理件数 ^b	41,521	155,980	183,840	214,847	239,771	236,519	226,727	274,431	289,915	278,956
ライブラリプログラム新規登録数	0	20	43	20	699	10	118	160	39	4
データベース新規登録数	0	2	0	0	3	3	0	1	0	1
センター使用論文数 ^d	0	24	93	118	190	185	202	206	237	223

	1988年度	1989年度	1990年度	1991年度	1992年度	1993年度	1994年度	1995年度	1996年度	1997年度
計算機システム	M-680H S-820/80 疎結合	同1988年度	同1988年度	同1988年度	同1988年度	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~)
運 転 方 式	無 人	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	231	239	256	272	271	225	222	210	201	188
利 用 者 数										
機 構 内 ^a	137	146	140	158	143	127	139	129	139	126
機 構 外	515	544	593	623	661	589	601	597	574	609
合 計	652	690	733	781	804	716	740	726	713	735
稼働時間(時間)	6,091	5,694	6,768	6,749	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~)
CPU時間利用申請(時間)	(M-680H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)	(HSP基準)	(HSP基準)	(HSP基準)
申 請	12,439	14,694	16,622	20,606	21,153	18,311	21,781	40,358	58,425	73,910
許 可	10,418	12,347	14,626	17,846	19,110	16,027	19,393	37,446	51,499	58,650
総使用CPU時間 ^{b,c} (時間)	7,872	8,300	11,975	11,874	12,491	16,306	24,781	156,076	207,790	262,365
ジョブ処理件数 ^b	278,104	253,418	2,955,038	346,987	297,638	227,650	107,194	84,102	70,308	51,738
ライブラリプログラム新規登録数	7	3	0	0	0	10	10	7	15	3
データベース新規登録数	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0
センター使用論文数 ^d	211	218	248	229	282	267	306	275	279	331

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。

*: 下段はM-680H基準

	1998年度	1999年度	2000年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度	2005年度								
計算機システム	SX-3/34R	SX-3/34R (12月まで)	VPP5000 SGI2800,Origin3800	VPP5000 SGI2800,Origin3800	VPP5000 SGI2800,Origin3800	VPP5000 SGI2800,Origin3800	VPP5000 SGI2800,Origin3800	VPP5000 SGI2800,Origin3800								
	HSP															
	SP2	SX-5	SX-5	SX-5	SX-5	SX-5	SX-7	SX-7								
	HPC	SP2	SP2	SP2	SP2	TX-7	TX-7	TX-7								
	SR2201 Origin2000(10月～) SX-5(3月～)	HPC SR2201 Origin2000	HPC	HPC	HPC	HPC										
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	174	166	156	148	144	119	154	132								
利 用 者 数																
機 構 内 ^a	138	125	101	100	104	89	83	30								
機 構 外	566	539	534	504	479	449	516	480								
合 計	704	664	635	604	583	538	599	510								
稼 働 時 間 (時間)	SX3-3/34R	8,579	SX3-3/34R	6,365	VPP5000	8,234	VPP5000	8,492	VPP5000	8,506	VPP5000	8,553	VPP5000	8,502	VPP5000	8,462
	SX5	8,587	SX5	8,301	SGI系	8,319	SGI系	8,422	SGI系	8,324	SGI系	8,545	SGI系	8,496	SGI系	8,492
	SP2	8,574	SP2	8,375	SX5	8,496	SX5	8,558	SX5	8,391	SX-7	8,524	SX-7	8,451	SX-7	8,492
	HPC	8,590	HPC	8,363	SP2	8,492	SP2	8,555	SP2	7,118	TX-7	8,525	TX-7	8,489	TX-7	8,501
	SR2201	8,694	SR2201	8,381	HPC	8,490	HPC	8,555	HPC	8,386						
	Origin2000	3,570	Origin2000	8,380												
CPU時間利用申請 (時間)	(HSP基準)	(SP2 Thin基準)	(SP2 Thin基準)	(SP2 Thin基準)	(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)	(TX-7基準)	(TX-7基準)	(TX-7基準)	(TX-7基準)	(TX-7基準)
申 請	76,804	97,788	249,405	251,785	237,872	278,177	341,788	414,643								
許 可	67,159	79,964	209,393	234,866	229,401	277,697	321,796	368,136								
総使用CPU時間 ^{b,c} (時間)	273,575	239,671	619,294	678,128	2,030,643	1,785,877	1,762,818	1,992,205								
ジョブ処理件数 ^b	45,173	40,697	58,685	70,680	55,522	58,784	28,968	19,896								
ライブラリプログラム 新規登録数	13	14	18	4	15	5	4	4								
データベース新規登録数	0	0	0	0	0	0	0	0								
センター使用論文数 ^d	347	347	391	302	302	281	284	205								

	2006年度	2007年度	2008年度	2009年度	2010年度	2011年度	2012年度	2013年度								
計算機システム	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	Altix4700 PRIMEQUEST SR16000	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) PRIMEQUEST UV1000 PRIMEHPC FX10	PRIMERGY UV2000 PRIMEHPC FX10							
	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	141	145	152	171	170	190	213	204							
	利 用 者 数															
	機 構 内 ^a	40	44	59	49	49	43	49	39							
機 構 外	533	551	589	635	617	645	758	747								
合 計	573	595	648	684	666	688	807	786								
稼 働 時 間 (時間)	VPP5000	1,402	Altix4700	8,245	Altix4700	8,087	Altix4700	8,319	Altix4700	8,513	Altix4700	7,148	SR16000	7,904	PRIMERGY	8,482
	SGI系	1,400	PRIMEQUEST	8,304	PRIMEQUEST	8,486	PRIMEQUEST	8,536	PRIMEQUEST	8,567	PRIMEQUEST	7,180	PRIMEQUEST	8,444	UV2000	8,037
	Altix4700	6,196	SX-7	7,098	SR16000	8,261	SR16000	8,454	SR16000	8,576	SR16000	8,752	UV1000	8,338	PRIMEHPC FX10	7,875
	PRIMEQUEST	6,336	TX-7	7,088							PRIMERGY	1,412	PRIMEHPC FX10	8,558		
	SX-7	8,399									UV1000	1,412				
	TX-7	8,398									PRIMEHPC FX10	1,428				
CPU時間利用申請 (時間)	(TX-7基準)	(TX-7基準)	(SR16000基準)	(SR16000基準)	(SR16000基準)	(SR16000基準)	-	-	-							
申 請	702,270	1,005,486	1,224,945	1,433,895	1,712,430	1,738,115	8,007,910	13,388,725								
許 可	653,468	918,737	1,199,620	1,412,981	1,581,450	1,675,950	7,832,630	12,841,960								
総使用CPU時間 ^{b,c} (時間)	4,384,464	6,307,008	12,579,635	11,954,215	12,232,544	14,958,012	50,685,364	90,703,069								
ジョブ処理件数 ^b	78,130	140,250	149,342	149,177	143,132	204,864	496,719	516,481								
ライブラリプログラム 新規登録数	21	18	22	20	15	22	21	9								
データベース新規登録数	0	0	0	0	0	0	1	0								
センター使用論文数 ^d	214	188	186	196	193	231	257	260								

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: 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。

6.4 マニュアル

全てのマニュアルは電子媒体で提供されています。計算科学研究センターのウェブページ (<https://ccportal.ims.ac.jp/>) にログインし、「利用中の方への情報」の「オンラインマニュアル」から閲覧・取得できます。

6.4.1 UV2000 用マニュアル（日本語版）

プログラミングガイド

6.4.2 UV2000、PRIMERGY 共通インテル製品マニュアル（日本語版）

1. インテル Fortran Composer XE

- ・インテル Fortran Composer XE 2011 入門チュートリアル
- ・インテル Fortran コンパイラー ドキュメント
- ・インテル マス・カーネル・ライブラリー・ドキュメント
- ・インテル デバッガー・ドキュメント

2. インテル C++ Composer XE

- ・インテル C++ Composer XE 2011 入門チュートリアル
- ・インテル C++ コンパイラ・ユーザー・リファレンス・ガイド
- ・インテル インテグレートッド・パフォーマンス・プリミティブ・ドキュメント
- ・インテル スレッディング・ビルディング・ブロック・ドキュメント
- ・インテル マス・カーネル・ライブラリー・ドキュメント
- ・インテル デバッガー・ドキュメント

6.4.3 UV2000、PRIMERGY 共通インテル製品マニュアル（英語版）

1. Intel Fortran Composer XE

- ・Intel Fortran Composer XE 2011 Getting Started Tutorials
- ・Intel Fortran Compiler Documentation
- ・Intel Math Kernel Library Documentation
- ・Intel Debugger Documentation

2. Intel C++ Composer XE

- ・Intel C++ Composer XE 2011 Getting Started Tutorials
- ・Intel C++ Compiler User and Reference Guide
- ・Intel Integrated Performance Primitives Documentation
- ・Intel Threading Building Blocks Documentation
- ・Intel Math Kernel Library Documentation
- ・Intel Debugger Documentation

3. Intel VTune Amplifier XE2011 Documentation

4. Intel Inspector XE 2011 Documentation

5. Intel MPI Library

6.4.4 UV2000、PRIMERGY 共通 Portland Group 製品マニュアル（英語版）

PGI Compilers and Tools Documentation

6.4.5 UV2000 用ログウェブソフトウェア製品マニュアル（英語版）

1. TotalView

2. MemoryScope
 3. ThreadSpotter
- 6.4.6 PRIMEHPC FX10 用マニュアル（日本語版）
1. エンドユーザ向けガイド
 2. Fortran 使用手引書
 3. Fortran 文法書
 4. Fortran コンパイラメッセージ
 5. Fortran/C/C++実行時メッセージ
 6. 実行時情報出力機能使用手引書
 7. XP Fortran 使用手引書
 8. C 言語使用手引書
 9. C++使用手引書
 10. C/C++最適化メッセージ説明書
 11. MPI 使用手引書
 12. デバッガ使用手引書
 13. プロファイラ使用手引書
 14. プログラミング支援ツール使用手引書
 15. ランク配置最適化ツール使用手引書
 16. BLAS LAPACK ScaLAPACK オンラインマニュアル
 17. SSL II オンラインマニュアル
 18. SSL II スレッド並列機能オンラインマニュアル
 19. SSL II/MPI オンラインマニュアル
 20. C-SSL II オンラインマニュアル
 21. C-SSL II スレッド並列機能オンラインマニュアル
 22. 高速 4 倍精度基本演算ライブラリ使用手引書
- 6.4.7 PRIMEHPC FX10 用マニュアル（英語版）
1. End Users Guide
 2. Fortran User's Guide
 3. Fortran Language Reference
 4. Fortran Compiler Messages
 5. Fortran/C/C++ Runtime Messages
 6. Runtime Information Output Function
 7. Technical Computing Language XP Fortran User's Guide
 8. C User's Guide
 9. C++ User's Guide
 10. C/C++ Compiler Optimization Messages
 11. MPI User's Guide
 12. Debugger User's Guide
 13. Profiler User's Guide

14. Programming Workbench User's Guide
15. Rank Map Automatic Tuning Tool User's Guide
16. BLAS LAPACK ScaLAPACK Online Documents
17. SSL II Online Documents
18. SSL II Thread-Parallel Capabilities Online Documents
19. SSL II/MPI Online Documents
20. C-SSL II Online Documents
21. C-SSL II Thread-Parallel Capabilities Online Documents
22. Fast Basic Operation Library for Quadruple Precision User's Guide

7 研究施設の現状と将来計画 (分子研レポート 2013 より転載)

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、理論計算科学研究の場の提供、ネットワーク業務の支援、人材育成等の新たな業務に取り組んでいる。2013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。

2014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」から構成されている。前者は2012年2月に更新され、後者は2013年3月に更新された。両シミュレータは、いずれも量子化学、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、ユーザーサイドの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。

まず、超高速分子シミュレータは富士通社製のPRIMERGY RX300S7とSGI社製のUV1000から構成される共有メモリ型スカラ計算機で、両サーバは同一体系のCPU (Intel Xeon) およびOS (Linux2.6) をもとに、バイナリ互換性を保って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188.7 Tflopsで総メモリ容量55 TByte超である。PRIMERGY RX300S7は、16 CPUコア/128 GB構成のノード342台からなるPCクラスタである。インターコネクトは、InfiniBand QDRを採用し、全台数を40 GB/sで、一部は2系統の80 GB/sで演算ノード間を相互接続しており、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。特徴としては、vSMPが導入してあることで、複数ノードを仮想的に1ノードの巨大共有メモリシステムとして運用でき、これをジョブ毎に制御が可能である。また32ノードには、NVIDIA社製のGPGPU TeslaM2090を搭載している。UV2000は1024 CPUコア/8 TBを有するNUMA型の共有メモリシステムであり、ジョブ作業領域用に実効容量400 TBおよび総理論読み出し性能12 GB/sを有する高速磁気ディスク装置が装備され、大規模で高精度な量子化学計算を可能とする。この2サーバで1000 TBの容量の外部磁気ディスクを共有し、NFSより高速なパラレルNFSが使用できる。PRIMEHPC FX10は、16CPUコア/32GB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。

一方、高性能分子シミュレータは、演算サーバ、ファイルサーバ、フロントエンドサーバ、運用管理クラスタおよびネットワーク装置から構成される。演算サーバは、富士通製のPRIMERGY CX250S1で、16 CPUコア/64 GByte構成のノード368台からなる共有メモリ型スカラ計算機のPCクラスタである。理論総演算性能は136.6 Tflops、総メモリ容量は23 TByteである。インターコネクトはInfiniBand FDRを採用し、全台数を56 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。ファイルサーバは、1800 TByteのディスクを装備しており、演算サーバのインターコネクトに直結している。本ディスクは、演算サーバのワークディレクトリとしてだけでなく、共同利用システム全体のホームディレクトリやバックアップ領域として運用している。本年度はファイルサーバのメモリを32 GBから128 GBに増強することでファイルアクセス速度の大幅な改善に成功した。本演算サーバは、2014年9月に次世代CPUを有するPCクラスタに入れ換えることになっており、その時点では300 Tflops以上に増強される。なお両システムのPCクラスタは一体的に運用が可能であり、この場合総演算性能は263.5 Tflopsにもおよぶ。本構成でlinpackによるCPU性能測定を行った結果237.9 Tflopsを記録することができ、2013年6月版TOP500リストに世界で129位の計算機として掲載された。

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。さらに、量子化学データベース研究会の活動を支援し、同会から提供された量子化学文献データベースをホームページから検索できるようにしている。これまでに合計 125,646 件のデータが収録され、世界 84 カ国から利用されている。

共同利用に関しては、2013 年度は 200 研究グループにより、総数 737 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次世代スーパーコンピュータプロジェクトにおいて、とくにナノサイエンスに関わるアプリケーション開発「ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」において重要な役割の一端を担っている。また、昨年度より、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI) 戦略プログラムが開始された。この中で、HPCI 戦略分野 2 「新物質・エネルギー創成」計算物質科学イニシアティブ (CMSI: Computational Materials Science Initiative) が物性科学分野、分子科学分野、材料科学分野により構成され、CMSI の戦略機関の一つとして分子科学研究所が参加し戦略プログラムを推進している。HPCI 事業の中で、計算科学研究センターは HPCI の資源提供機関の一つとして HPCI 戦略プログラムに参加し、2011 年度より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「計算化学の最新の成果と展開」と 2 つのウィンタースクール「第 3 回量子化学ウィンタースクール～基礎理論と分子物性の理論～」と「第 7 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 25 年度 システム構成

超高速分子シミュレータシステム

クラスタ演算サーバ	
型番:	富士通 PRIMERGY RX300S7
OS:	Linux
CPUCore 数:	5472 (16CPUCore×342 ノード)
総理論性能:	126.9 Tflops (371.2 Gflops×342 ノード) +21.2 Tflops (TeslaM2090 x32)
総メモリ容量:	43.7 TB (128 GB×342 ノード)
高速 I/O 演算サーバ	
型番:	SGI UV2000
OS:	Linux
CPUCore 数:	1024
総理論性能:	21.2 Tflops (20.8 Gflops/CPUCore)
総メモリ容量:	8.0 TB
ディスク容量:	400 TB (/work)

「京」用開発サーバ	
	型番：富士通 PRIMEHPC FX10
	OS：Linux
	CPUCore 数：1536 (16CPUCore×96 ノード)
	総理論性能：20.2 Tflops (13.2 Gflops/CPUCore)
	総メモリ容量：3.0 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：PANASAS PAS12, PAS11
	総ディスク容量：1000 TB
高速ネットワーク装置	
	型番：Force10 Z9000

高性能分子シミュレータシステム

演算サーバ	
	型番：富士通 PRIMERGY CX250S1
	OS：Linux
	CPUCore 数：5888 (16CPUCore×368 ノード)
	総理論性能：136.6 Tflops (371.2 Gflops×368 ノード)
	総メモリ容量：23.5 TB (64 GB×368 ノード)
ファイルサーバ	
	型番：富士通 PRIMERGY RX300S7 (8 ノード)
	OS：Linux
	総メモリ容量：320 GB (64 GB×2 ノード+ 32 GB×6 ノード)
	ディスク容量：1800 TB (/home (300 TB), /save (600 TB), /week (300 TB), バックアップ領域 (600 TB))
フロントエンドサーバ	
	型番：富士通 PRIMERGY RX300S7 (4 ノード)
	OS：Linux
	総メモリ容量：256 GB (64 GB×4 ノード)
運用管理クラス	
	型番：富士通 PRIMERGY RX200S7 (16 ノード)
	OS：Linux
	総メモリ容量：512 GB (32 GB×16 ノード)
高速ネットワーク装置	
	型番：Force10 S4810