

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 2015	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	7
3.3	課金	8
4	一般報告	9
4.1	ライブラリプログラムの開発・公開	9
4.2	データベース開発状況	11
5	2014 年度計算機稼働状況および利用者数	12
5.1	利用申請プロジェクトおよび利用者数	12
5.2	電力使用および計算機稼働状況	12
5.3	計算機利用状況	13
5.4	クラス別 CPU 使用時間	14
5.5	ジョブ処理件数	15
5.6	ジョブの実行状況	16
6	資料	17
6.1	計算科学研究センター運営委員	17
6.2	計算科学研究センター職員	18
6.3	利用者数と CPU 時間の推移	19
6.4	マニュアル	21
7	研究施設の現状と将来計画 (分子研リポート 2014 より転載)	24

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、今年度のグループ数は約 214、利用者数は約 836 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。

今年は、ハードウェアでは type-z が更新され、総演算性能 302.8TFlops の「高性能分子シミュレータシステム」が稼働し、GPU の取り組みも行いました。現在、計算機は合計 730 ノードから構成され、0.53PFlops になりました。H28 年度には、新規の計算機に更新する計画です。また、ソフトウェアの観点からは、汎用のライブラリプログラムに加えて、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。2014 年 10 月 14～17 日に「第 8 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、2014 年 12 月 15～16 日に「第 4 回量子化学ウインタースクール～大規模系を目指した基礎理論～」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していただきました。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 2015 年 1 月 29～30 日に「様々な対象に応用される計算分子科学」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 2015

テーマ：「様々な対象に応用される計算分子科学」

日 時：2015年1月29日（木）～30日（金）

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：60名

ポスター発表：28件

今年度のワークショップでは「様々な対象に応用される計算分子科学」というテーマを掲げ、計算分子科学分野を中心に様々な分野で活躍されている研究者の方々を講師としてお招きした。講演では生体分子や材料、電池、溶媒、界面といった様々な対象に対してどのような手法、あるいはアイデアで研究を行っているのか、またその研究成果が紹介された。さらに今後どのようなことを目指すのかということについてもご議論いただいた。講演に加えて、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28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60名であった。

1月29日（木）	
14:00 – 14:10	はじめに
14:10 – 14:50	北尾彰朗（東京大学） 「高度な分子動力学によるタンパク質の機能シミュレーション」
14:50 – 15:30	森下徹也（産業技術総合研究所） 「対数平均力ダイナミクスによる反応座標サンプリングと自由エネルギー計算」
15:30 – 15:50	休憩
15:50 – 16:30	天能精一郎（神戸大学・分子科学研究所） 「超並列計算環境によるF12電子状態理論の最近の発展」
16:30 – 17:10	奥村久士（分子科学研究所） 「アミロイド線維の形成初期過程と破壊の分子動力学シミュレーション」
17:10 – 17:50	ポスター発表

1月30日(金)	
9:30 - 10:10	森田明弘 (東北大学) 「溶液界面の分子シミュレーション研究」
10:10 - 10:50	墨 智成 (岡山大学) 「実験と理論の連携による生命科学へのアプローチ」
10:50 - 11:10	休憩
11:10 - 11:50	森川良忠 (大阪大学) 「第一原理シミュレーションと統計力学的手法を組み合わせた触媒反応解析」
11:50 - 12:30	長岡正隆 (名古屋大学) 「複合化学反応シミュレーションによる立体・構造の制御に向けて ～マルチスケールシミュレーションから計算分子技術へ～」
12:30 - 12:40	おわりに

ワークショップ2015

様々な対象に適用される 計算分子科学

2015年
開催日 1月29日(木)～30日(金)

会場 自然科学研究機構 岡山コンファレンスセンター
(愛知県岡崎市明大寺町字伝馬8-1)

■招待講演

- 北原 浩司 (東京大学)
- 墨 智成 (岡山大学)
- 天野 浩一郎 (神戸大学)
- 嶋田 正隆 (名古屋大学)
- 森川 良忠 (大阪大学)
- 山下 敏也 (産業技術総合研究所)
- 森田 明弘 (東北大学)
- 奥村 久士 (分子科学研究所)

■ポスター発表

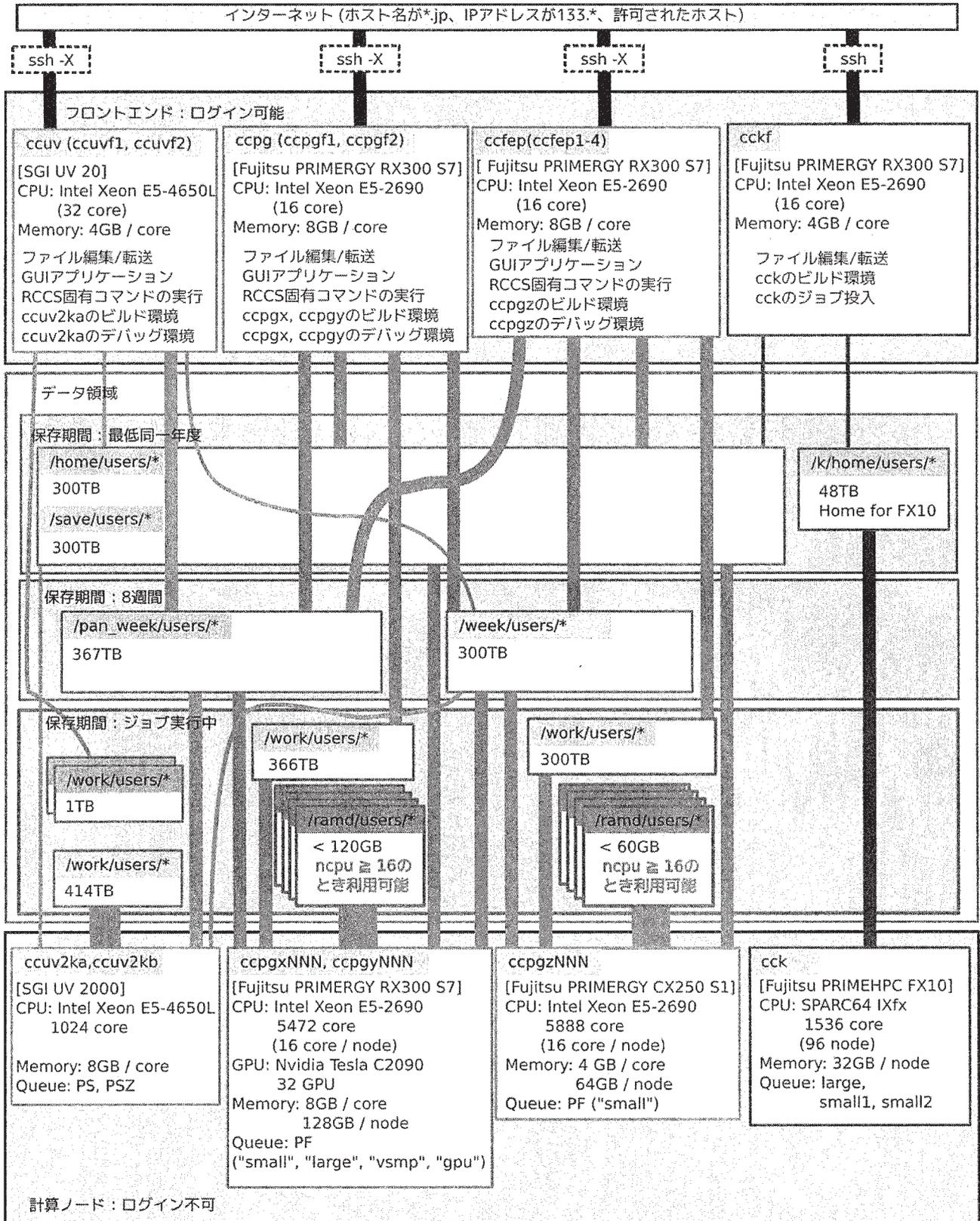
■参加申込
■参加費：無料
■参加方法：下記ホームページをご覧ください
<https://coportal.ims.ac.jp/workshop2015>

■お問い合わせ
大学共同利用機構 岡山大学共同利用機構
岡山県立岡山理学院 計算科学研習センター
TEL:0864-65-7462 FAX:0864-65-7025

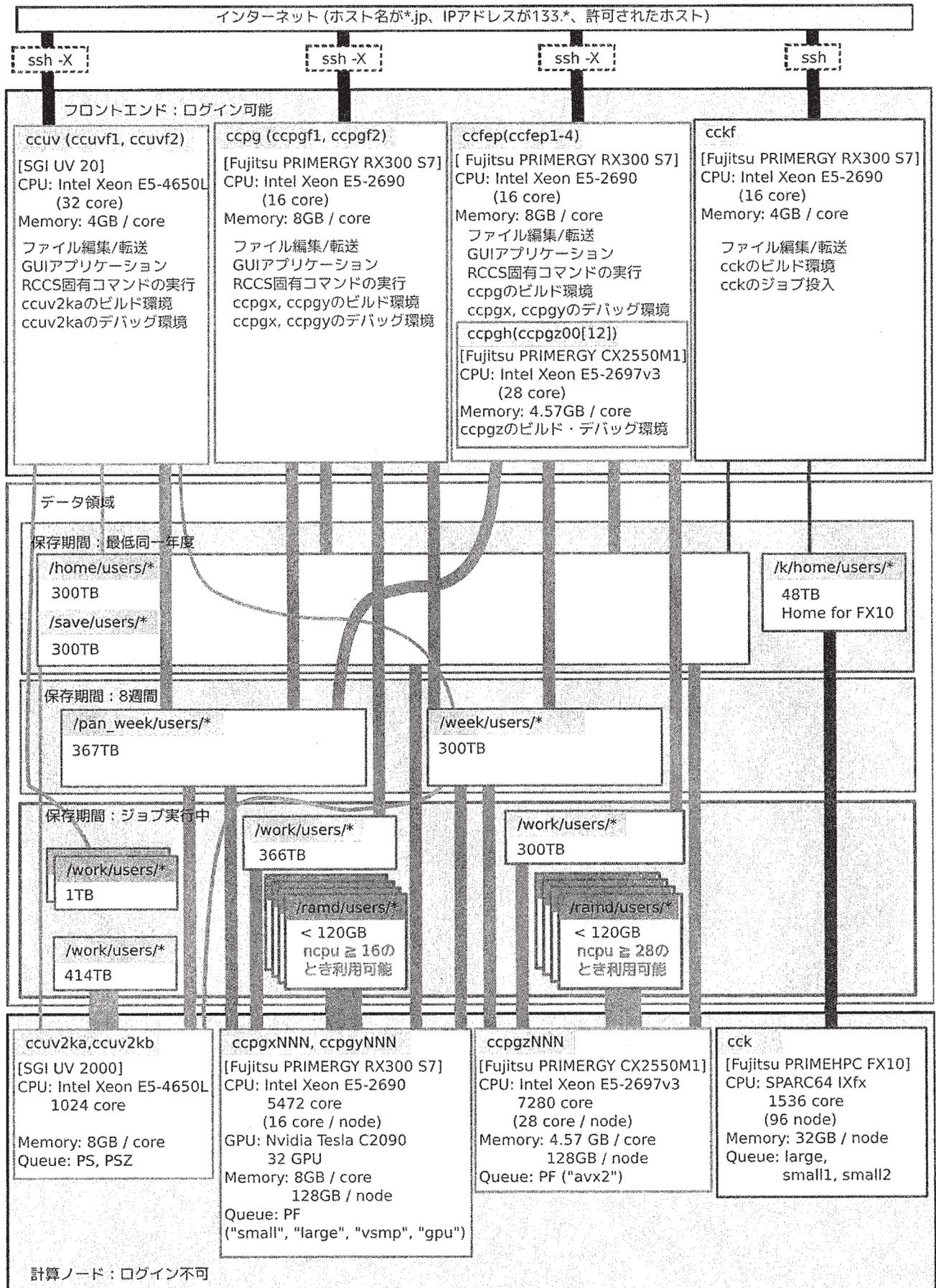
3 計算機システム

3.1 計算機システムの全体像

[2014年11月以前の構成]

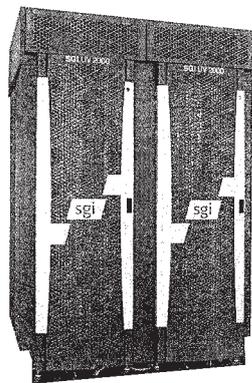


[2014年12月以降の構成]

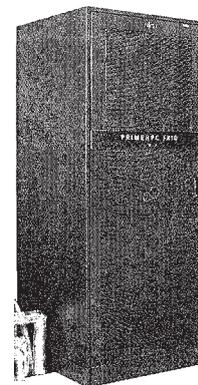


超高速分子シミュレータシステムは 2012 年 2 月運用開始のシステムで、7つのサブシステムから構成されています。高速 I/O 演算サーバは 2013 年 4 月に CPU を更新して SGI 製 UV2000 と IS16000 ストレージシステム、その開発用サーバとして SGI 製 UV20、クラスタ演算サーバとその開発用サーバとして富士通製 PRIMERGY RX300 S7、「京」用開発サーバとして富士通製 PRIMEHPC FX10、外部磁気ディスク装置として PANASAS 製 ActiveStor、高速ネットワーク装置としてフォーステン・ネットワーク製 ZettaScale Z9000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

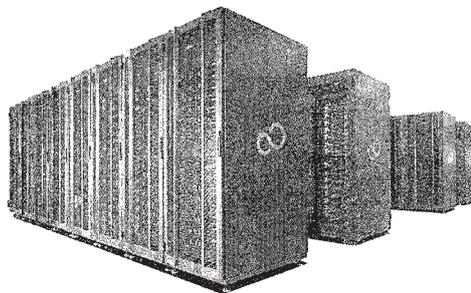
高性能分子シミュレータシステムは 2013 年 3 月運用開始のシステムです。演算サーバとして富士通製 PRIMERGY CX250/400 S1、フロントエンドサーバとして PRIMERGY RX300 S7、外部磁気ディスク装置として富士通製 ETERNUS DX80 S2、高速ネットワーク装置として DELL 製 Force10 S4810 が導入されています。2014 年 12 月に演算サーバの更新が行われ、富士通製 PRIMERGY CX2550 M1 が導入されています。



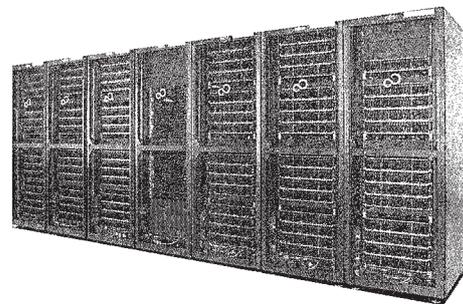
SGI UV2000



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り当て点数が減ります。各グループは割り当てられた割り当て点数を越えて計算機を利用することはできません。

割り当て点数は、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	0.200
ccpg (jobtype=small, large, vsmp, gpu)	0.100
ccpg (jobtype=avx2)	0.150
cck	0.066

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。

2014 年度のライブラリプログラム開発の申請件数は 2 件でした。2014 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
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.
GAMMESS	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.
NTChem	A comprehensive new software of ab initio quantum chemistry made in AICS from scratch.
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
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 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
ABINIT	7.8.2		◎ (2014/8/15)	—
Amber	14	bugfix 10	○ (2015/3/20)*	○ (2015/3/20)
	14		○ (2014/5/21)*	○ (2014/5/21)
	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	5.0.4		○ (2015/1/30)*	—
	5.0		○ (2014/7/15)*	○ (2014/7/15)
	4.6.6		○ (2014/7/17)*	○ (2014/7/17)
	4.6.5		○ (2014/4/21)*	○ (2014/4/21)
	4.6.1		◎ (2013/5/24)*	—
	4.5.5		○ (2012/6/12)*	○ (2012/6/29)
GRRM	11		◎ (2012/9/26)	◎ (2012/9/26)
Molcas	8.0		○ (2014/8/1)	○ (2014/8/1)
	7.8		—	◎ (2012/11/8)
	7.6		◎ (2012/2/1)	○ (2012/2/1)
	7.4		○ (2012/2/1)	—
Molpro	2012.1	15	○ (2014/7/3)	◎ (2014/7/3)
	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)
NTChem	2013.4.0		◎ (2014/6/27)	◎ (2014/6/27)
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)	—
SMASH	1.1.0		◎ (2015/1/8)	◎ (2015/1/8)
TURBOMOLE	6.6		○ (2014/8/11)	○ (2014/8/11)
	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3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）131,771 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。

2014 年度に新規登録されたデータは、989 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。2014 年 10 月にデータが更新されました。

5 2014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	184 (15)	744 (80)	10,626,392 (1676000)	10,474,550 (1676000)	6,910,272
	協力研究	3	7	48,000	48,000	40,143
	所内	17	62	3,398,584	3,398,584	2,585,120
生理学	施設利用	1	2	90,000	90,000	78,514
	所内	1	1	36,000	36,000	4,036
基礎生物学	施設利用	8	20	101,000	100,270	80,644
合計		214	836	14,299,976	14,147,404	9,698,729

※ ()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	*
2014年4月	502,758	664	100	642	100	664	100
5月	542,813	734	100	734	100	744	100
6月	545,030	710	100	711	100	709	100
7月	596,671	734	100	734	100	744	100
8月	580,040	733	100	734	100	730	100
9月	546,330	710	100	710	100	704	100
10月	530,944	706	100	699	100	701	100
11月	492,168	720	100	720	100	720	100
12月	441,880	734	99	734	100	728	100
2015年1月	480,265	734	100	734	100	744	100
2月	436,158	662	100	662	100	642	98
3月	469,959	721	98	734	99	744	100
合計	6,165,016	8,561	100	8,547	100	8,574	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	*
2014年4月		6,846,681	91	394,108	40	389,513	57
5月		7,132,844	86	763,762	68	146,645	19
6月		7,340,799	91	500,163	46	234,892	32
7月		7,469,108	90	323,905	29	342,740	45
8月		7,520,376	90	260,540	23	294,397	39
9月		7,602,565	94	259,817	24	206,193	29
10月		7,381,155	92	285,725	27	233,611	33
11月		7,625,326	93	193,817	18	197,625	27
12月		5,192,151	80	443,205	39	267,625	36
2015年1月		7,934,120	85	218,178	19	404,035	53
2月		7,604,459	90	56,893	6	424,993	65
3月		7,842,508	85	272,524	24	405,016	53
合計		87,492,092	89	3,972,637	30	3,547,285	41

※ 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
2014年4月		29,457	283	1,002	30,742
5月		50,320	193	929	51,442
6月		34,641	193	1,657	36,491
7月		30,155	231	1,804	32,190
8月		133,152	173	1,385	134,710
9月		112,311	403	1,357	114,071
10月		43,985	521	1,488	45,994
11月		46,475	205	1,658	48,338
12月		33,579	304	1,739	35,622
2015年1月		66,334	149	1,255	67,738
2月		161,960	487	1,464	163,911
3月		215,889	473	1,497	217,859
合計		958,258	3,615	17,235	979,108

5.4 クラス別CPU使用時間

PRIMERGY	PF small	PF large	PF avx2	PF vsmp	PF gpu	Queue合計(秒)	ETC	総合計
2014年4月	3564999:22:05	3243327:29:39	0:00:00	25685:00:00	12669:54:16	6846681:46:00	0:00:00	6846681:46:00
5月	3990048:46:03	3065054:08:49	0:00:00	63610:22:40	14131:47:37	7132845:05:09	0:00:00	7132845:05:09
6月	4089522:59:50	3190131:04:21	0:00:00	52523:46:56	8622:45:08	7340800:36:15	0:00:00	7340800:36:15
7月	4660173:19:05	2770939:03:54	0:00:00	31563:28:32	6432:57:59	7469108:49:30	0:00:00	7469108:49:30
8月	4354975:47:11	3037703:35:26	0:00:00	117710:09:52	9987:45:16	7520377:17:45	0:00:00	7520377:17:45
9月	4731126:53:36	2851723:54:01	0:00:00	23:12:32	19692:16:38	7602566:16:47	0:00:00	7602566:16:47
10月	4520275:11:39	2832270:44:13	0:00:00	17518:33:04	11091:35:42	7381156:04:38	0:00:00	7381156:04:38
11月	4874852:19:50	2737649:43:59	0:00:00	3889:29:04	8902:42:34	7625294:15:27	0:00:00	7625294:15:27
12月	2160029:14:58	1344482:19:33	1673633:18:37	6452:00:48	7555:00:57	5192151:54:53	0:00:00	5192151:54:53
2015年1月	2086757:01:42	1511448:25:54	4313739:16:24	489:31:12	21686:27:51	7934120:43:03	0:00:00	7934120:43:03
2月	1866074:04:31	1233383:40:45	4278936:53:12	150116:09:04	75949:44:43	7604460:32:15	0:00:00	7604460:32:15
3月	1804321:32:40	1308419:19:52	4542547:12:18	156262:25:36	30958:41:17	7842509:11:43	0:00:00	7842509:11:43
合計	42703156:33:10	29126533:30:26	14808856:40:31	625844:09:20	227681:39:58	87492072:33:25	0:00:00	87492072:33:25

PRIMEHPC FX10	cck small	cck large	Queue合計	ETC	総合計
2014年4月	16912:53:52	377195:45:52	394108:39:44	0:00:00	394108:39:44
5月	837:22:24	762924:48:00	763762:10:24	0:00:00	763762:10:24
6月	24810:32:48	475352:44:48	500163:17:36	0:00:00	500163:17:36
7月	29978:30:24	293927:21:36	323905:52:00	0:00:00	323905:52:00
8月	20961:29:20	239578:56:00	260540:25:20	0:00:00	260540:25:20
9月	10898:41:04	248918:45:20	259817:26:24	0:00:00	259817:26:24
10月	5158:40:48	280566:52:48	285725:33:36	0:00:00	285725:33:36
11月	16926:54:56	176891:02:24	193817:57:20	0:00:00	193817:57:20
12月	17367:17:52	425838:04:48	443205:22:40	0:00:00	443205:22:40
2015年1月	11074:57:20	207103:49:20	218178:46:40	0:00:00	218178:46:40
2月	5991:20:32	50902:24:00	56893:44:32	0:00:00	56893:44:32
3月	12894:55:44	259629:21:36	272524:17:20	0:00:00	272524:17:20
合計	173813:37:04	3798829:56:32	3972643:33:36	0:00:00	3972643:33:36

UV2000	PS	PSD	PSZ	Queue合計	ETC	総合計
2014年4月	385636:00:06	0:00:00	3877:01:04	389513:01:10	0:00:00	389513:01:10
5月	144631:31:48	0:00:00	2014:03:04	146645:34:52	0:00:00	146645:34:52
6月	225193:29:41	0:00:00	9699:13:25	234892:43:06	0:00:00	234892:43:06
7月	329490:43:58	0:00:00	13249:23:33	342740:07:31	0:00:00	342740:07:31
8月	273041:51:15	0:00:00	21355:49:28	294397:40:43	0:00:00	294397:40:43
9月	196629:46:29	0:00:00	9563:24:58	206193:11:27	0:00:00	206193:11:27
10月	188446:48:12	0:00:00	45164:31:48	233611:20:00	0:00:00	233611:20:00
11月	177575:16:18	0:00:00	20050:23:58	197625:40:16	0:00:00	197625:40:16
12月	184836:36:51	0:00:00	82788:29:10	267625:06:01	0:00:00	267625:06:01
2015年1月	358466:27:53	0:00:00	45568:38:30	404035:06:23	0:00:00	404035:06:23
2月	398929:47:03	0:00:00	26063:35:52	424993:22:55	0:00:00	424993:22:55
3月	365909:11:19	0:00:00	39107:14:48	405016:26:07	0:00:00	405016:26:07
合計	3228787:30:53	0:00:00	318501:49:38	3547289:20:31	0:00:00	3547289:20:31

5.5 ジョブ処理件数

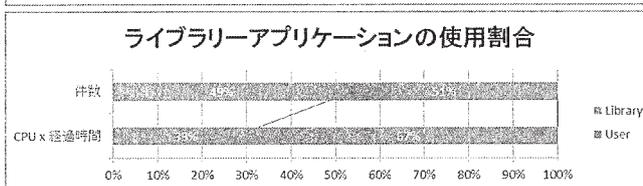
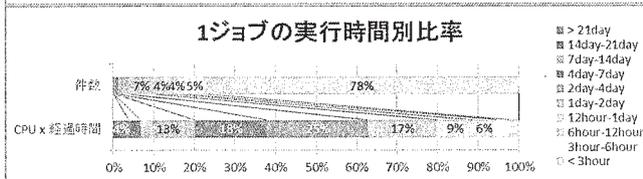
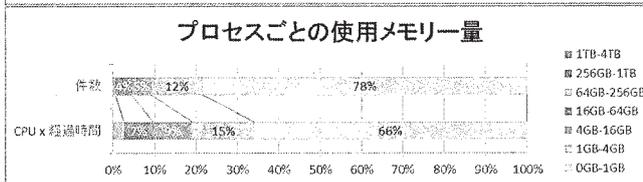
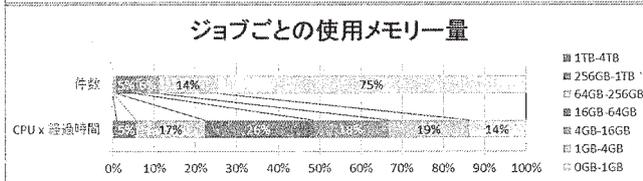
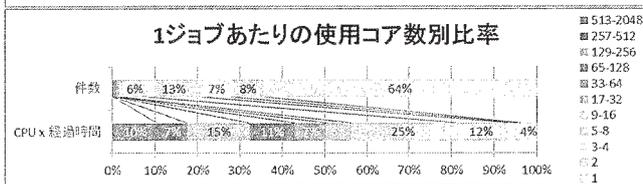
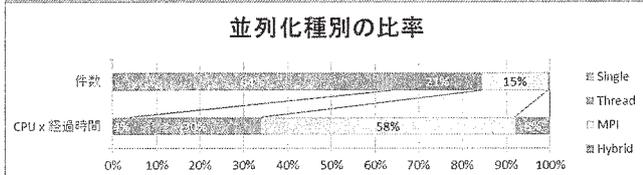
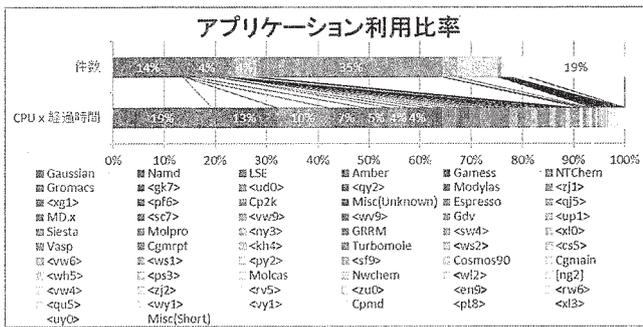
PRIMERGY	PF small_xy	PF large	PF vsmp	PF gpu	PF phi	PF small_z	PF avx2	Queue合計	ETC	総合計
2014年4月	1,120	12,075	167	188	1	15,906	0	29,457	0	29,457
5月	1,374	28,092	582	302	1	19,969	0	50,320	0	50,320
6月	822	19,747	327	137	0	13,608	0	34,641	0	34,641
7月	2,306	18,111	215	93	1	9,429	0	30,155	0	30,155
8月	2,512	115,169	609	175	0	14,687	0	133,152	0	133,152
9月	5,405	91,983	8	149	0	14,766	0	112,311	0	112,311
10月	8,487	15,667	128	166	0	19,537	0	43,985	0	43,985
11月	10,708	16,062	32	102	2	19,569	0	46,475	0	46,475
12月	13,844	13,037	56	20	0	18	6,604	33,579	0	33,579
2015年1月	26,798	14,142	2	97	0	0	25,295	66,334	0	66,334
2月	23,216	134,140	55	214	0	0	4,335	161,960	0	161,960
3月	85,527	97,981	84	129	0	0	32,168	215,889	0	215,889
合計	182,119	576,206	2,265	1,772	5	127,489	68,402	958,258	0	958,258

PRIMEHPC FX10	cck small1	cck large	Queue合計	ETC	総合計
2014年4月	99	184	283	0	283
5月	52	141	193	0	193
6月	52	141	193	0	193
7月	116	115	231	0	231
8月	97	76	173	0	173
9月	284	119	403	0	403
10月	406	115	521	0	521
11月	128	77	205	0	205
12月	147	157	304	0	304
2015年1月	68	81	149	0	149
2月	456	31	487	0	487
3月	272	201	473	0	473
合計	2,177	1,438	3,615	0	3,615

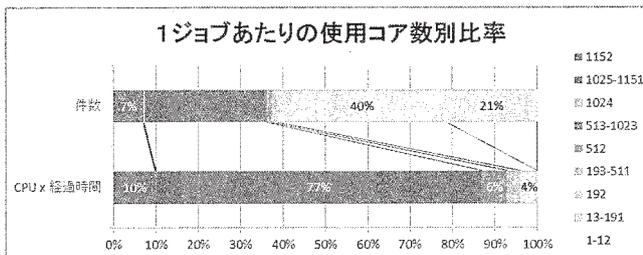
UV2000	PS	PSD	PSZ	Queue合計	ETC	総合計
2014年4月	993	0	9	1,002	0	1,002
5月	903	0	26	929	0	929
6月	1,338	271	48	1,657	0	1,657
7月	1,303	405	96	1,804	0	1,804
8月	1,279	11	95	1,385	0	1,385
9月	1,215	34	108	1,357	0	1,357
10月	1,138	112	238	1,488	0	1,488
11月	1,578	-	80	1,658	0	1,658
12月	1,226	38	475	1,739	0	1,739
2015年1月	946	0	309	1,255	0	1,255
2月	1,007	2	455	1,464	0	1,464
3月	1,277	-	220	1,497	0	1,497
合計	14,203	873	2,159	17,235	0	17,235

5.6 ジョブの実行状況

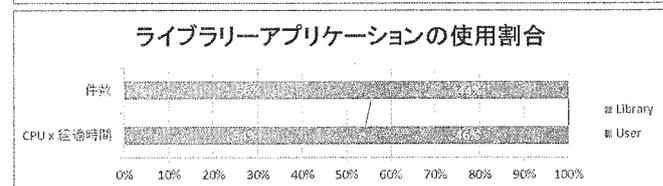
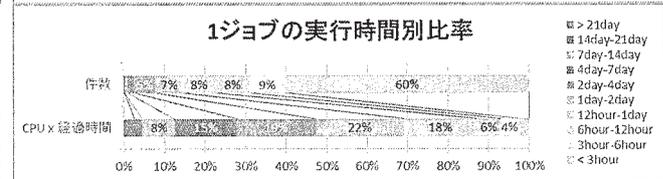
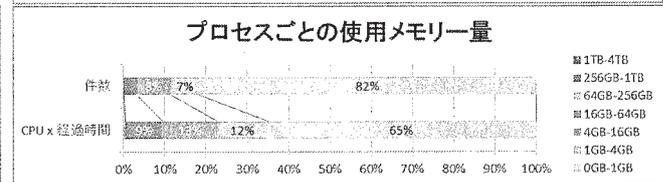
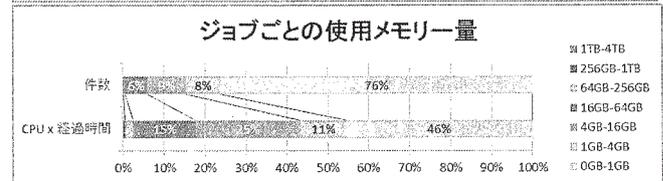
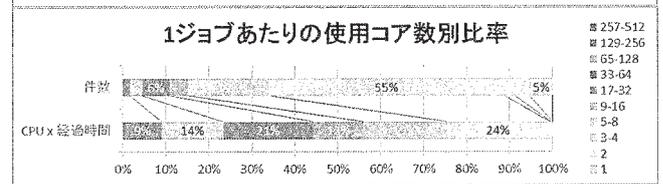
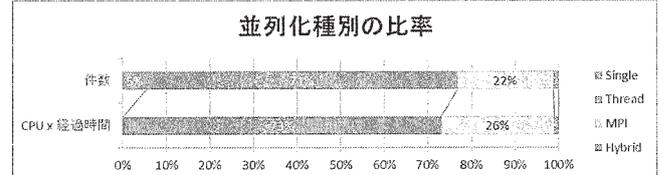
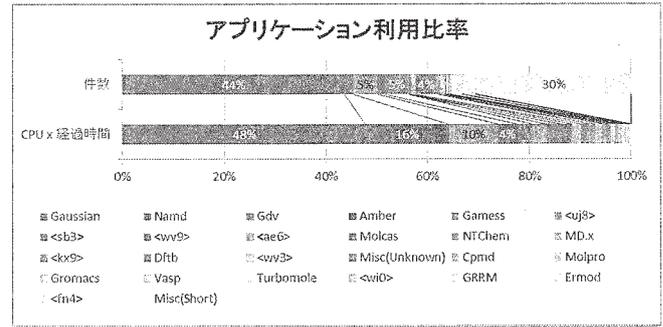
[富士通 PRIMERGY RX300/CX250/CX2550]



[富士通 PRIMEHPC FX10]



[SGI UV 2000]



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 医学部分子生理学領域	教授
常次 宏一	東京大学 物性研究所	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
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
川口 正代司	基礎生物学研究所 共生システム研究部門	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	2006年度
計算機システム	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	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
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	174	166	156	148	144	119	154	132	141
利用者数									
機構内a	138	125	101	100	104	89	83	30	40
機構外	566	539	534	504	479	449	516	480	533
合計	704	664	635	604	583	538	599	510	573
稼働時間(時間)	SX-3/34R 8,579 SX5 8,587 SP2 8,574 HPC 8,590 SR2201 8,694 Origin2000 3,570	SX-3/34R 6,365 SX5 8,301 SP2 8,375 HPC 8,363 SR2201 8,381 Origin2000 8,380	VPP5000 8,234 SGI系 8,319 SX5 8,496 SP2 8,492 HPC 8,490	VPP5000 8,492 SGI系 8,422 SX5 8,558 SP2 8,555 HPC 8,555	VPP5000 8,506 SGI系 8,324 SX5 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
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)	(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	702,270
許可	67,159	79,964	209,393	234,866	229,401	277,697	321,796	368,136	653,468
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	4,384,464
ジョブ処理件数b	45,173	40,697	58,685	70,680	55,522	58,784	28,968	19,896	78,130
ライブラリプログラム新規登録数	13	14	18	4	15	5	4	4	21
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	347	347	391	302	302	281	284	205	214

	2007年度	2008年度	2009年度	2010年度	2011年度	2012年度	2013年度	2014年度
計算機システム	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(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
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	145	152	171	170	190	213	204	214
利用者数								
機構内a	44	59	49	49	43	49	39	63
機構外	551	589	635	617	645	758	747	773
合計	595	648	684	666	688	807	786	836
稼働時間(時間)	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	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
CPU時間利用申請(時間)	(TX-7基準)	(SR16000基準)	(SR16000基準)	(SR16000基準)	-	-	-	-
申請	1,005,486	1,224,945	1,433,895	1,712,430	1,738,115	8,007,910	13,388,725	14,299,976
許可	918,737	1,199,620	1,412,981	1,581,450	1,675,950	7,832,630	12,841,960	14,147,404
総使用CPU時間b,c(時間)	6,307,008	12,579,635	11,954,215	12,232,544	14,958,012	50,685,364	90,703,069	95,012,014
ジョブ処理件数b	140,250	149,342	149,177	143,132	204,864	496,719	516,481	979,108
ライブラリプログラム新規登録数	18	22	20	15	22	21	9	24
データベース新規登録数	0	0	0	0	0	1	0	0
センター使用論文数d	188	186	196	193	231	257	260	253

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 用ローグウェアソフトウェア製品マニュアル（英語版）

1. TotalView

2. MemoryScape
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 2014 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、さらに、研究の場の提供、ネットワーク業務の支援、人材育成等の新たな業務に取り組んでいる。2014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。

2015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。さらに後者は、今年度最新のCPUを有する演算サーバに入れ替えを行い、2015年1月から運用を開始した。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製のPRIMERGY RX300S7とSGI製のUV2000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 メモリ構成のノード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 メモリを有する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、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 CX2550M1で、28 CPU コア、128 GB メモリ構成のノード260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302.8 Tflops、総メモリ容量は33.2 TBである。インターコネクは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。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429.7 Tflopsにもおよぶ。入れ替え以前の総演算性能は263.5 Tflopsであったが、本構成時はlinpackによるCPU性能測定結果は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

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 131,771 件のデータが収録されている。

共同利用に関しては、2014年度は214研究グループにより、総数783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、2011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「様々な対象に应用される計算分子科学」と2つのウィンタースクール「第4回量子化学ウィンタースクール～大規模系を目指した基礎理論～」と「第8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 26 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 CX2550M1
	OS：Linux
	CPUCore 数：7280 (28CPUCore×260 ノード)
	総理論性能：302.8 Tflops (1164.8 Gflops×260 ノード)
	総メモリ容量：33.2 TB (128 GB×260 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：1024 GB (MDS: 128 GB×2 ノード+ OSS: 128 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：512 GB (128 GB×4 ノード)
運用管理クラスター	
	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