

I 部

目 次

1	巻頭言 計算科学研究センター 奥村 久士	1
2	スーパーコンピュータワークショップ FY2015	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	2015 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
7	研究施設の現状と将来計画 (分子研リポート 2015 より転載)	20

1. 巻頭言

計算科学研究センター
奥村久士

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 235、利用者数は 844 名に上りました。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。

現在の稼働中のスーパーコンピューターは 2011 と 2012 年度に導入された 2 システムで構成していますが、これらのシステムがあと 1 年ほどで更新の時期を迎えます。現在は Fujitsu PRIMERGY CX2550 と RX300 を主力として理論総演算性能が 559.1 TFlops ありますが、次期はシステムを統合して 1 桁上回る演算性能を導入することを目標にマシン選定を進めています。次期マシンでも皆様の研究のお役にたてていただけるよう努力してまいります。

計算科学研究センターでは単に計算環境を提供するだけでなく、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。2015 年 10 月 13～16 日に「第 9 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、2015 年 11 月 16～17 日に「第 5 回量子化学ウインタースクール～基礎理論～」を開催し、分子シミュレーション分野と量子化学分野それぞれにおいて先導的な立場で活躍されている先生方に講義していただきました。これらのスクールでは基礎から最先端まで平易に解説していただくので大学院生や若手研究者の育成の場として好評を博しています。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 9 月 7～8 日に「複雑な研究対象へと挑戦する計算分子科学」をテーマとして開催いたしました。分子科学とその周辺、生物物理学や溶液化学など広い分野から精力的に取り組んでおられる研究者の方々を講師にお招きし、理論および計算科学の視点から今後取り組むべき問題と必要とされる方法論、そしてそれらを念頭においたこれからの可能性について広く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 FY2015

テーマ：「複雑な研究対象へと挑戦する計算分子科学」

日時：2015年9月7日（月）～8日（火）

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：55名

ポスター発表：17件

今年度のワークショップは「複雑な研究対象へと挑戦する計算分子科学」と題し、21世紀に入ってから計算機性能の進歩とそれに伴う理論及び計算方法論の洗練・発展を受けて分子・物性・生物科学などの広範な分野における様々な研究対象に存在する複雑系（システム）の問題へと取り組む研究者の方々を講師にお招きして開催した。ワークショップでは講師の先生方の研究成果の紹介と合わせ、理論および計算科学の視点から今後どのような計算分子科学的手法・アイデアが必要とされるのかという点も含めてこれからの可能性について広く展望し、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17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55名であった。

9月7日（月）	
14:00 - 14:10	はじめに 石田干城（分子科学研究所）
14:10 - 14:50	藤谷秀章（東京大学） 「Molecular dynamics simulations for pharmaceutical target proteins」
14:50 - 15:30	寺田智樹（名古屋大学） 「ミオシンのバイアスブラウン運動を自由エネルギーランドスケープから考える」
15:30 - 15:50	休憩
15:50 - 16:30	上田一義（横浜国立大学） 「セルロース系分子の構造と物性に関する分子シミュレーション」
16:30 - 17:10	甲賀研一郎（岡山大学） 「均一および不均一溶液における疎水効果」
17:10 - 17:50	ポスター発表

9月8日(火)	
10:00 – 10:40	武次徹也 (北海道大学) 「光励起反応のポテンシャル曲面とダイナミクス」
10:40 – 11:20	岡本祐幸 (名古屋大学) 「古典系および量子系の拡張アンサンブルシミュレーション」
11:20 – 13:00	昼食
13:00 – 13:40	諸熊奎治 (京都大学) 「複雑分子系の化学反応の計算化学」
13:40 – 14:20	池口満徳 (横浜市立大学) 「回転分子モーターF ₁ -ATPaseの分子シミュレーション」
14:20 – 15:00	江原正博 (分子科学研究所) 「不均一系触媒の理論計算科学」
15:00 – 15:10	おわりに 奥村久士 (分子科学研究所)

ワークショップ FY2015

複雑な研究対象へと挑戦する 計算分子科学

2015年
開催日 9月7日(月)~8日(火)

会場 自然科学研究機構 岡崎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 (50名額)

池口満徳 (横浜市立大学)
上田一義 (横浜国立大学)
江原正博 (分子科学研究所)
岡本祐幸 (名古屋大学)
甲賀研一郎 (岡山大学)
武次徹也 (北海道大学)
寺田智樹 (名古屋大学)
藤谷秀章 (東京大学)
諸熊奎治 (京都大学)

■ポスター発表

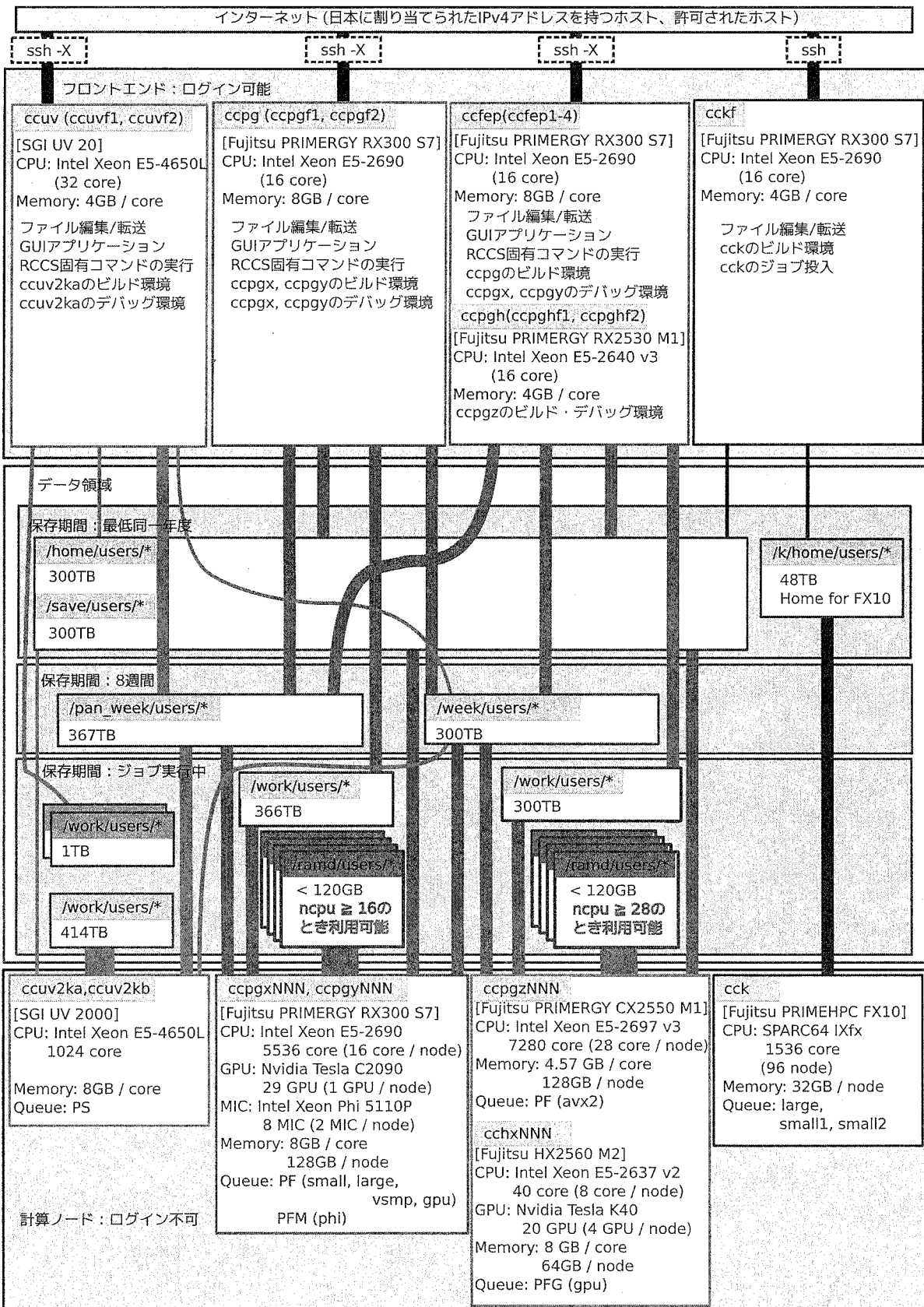
■9月9日(水)-11日(金) Hands-on Workshop on Computational Biophysics at Okazaki
本国立イライ大学のRitsus Schul Gen教授が中心になって開発したHMD(分子シミュレーションプログラム)と
 HMD(分子シミュレーション)の使用方法などについての講習会を開催します。
 (本講習会の詳細は <https://registration.ims.ac.jp/mdworkshop2015> をご参照ください。)

■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://ccportal.ims.ac.jp/workshopFY2015>

■お問い合わせ
 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構
 岡崎共通研究施設 計算科学研究センター
 TEL: 0564-55-7402 FAX: 0564-55-7025

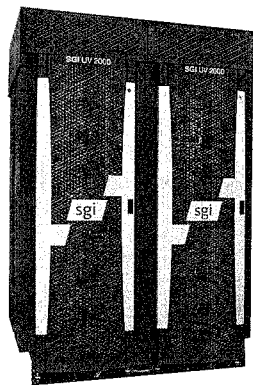
3 計算機システム

3.1 計算機システムの全体像

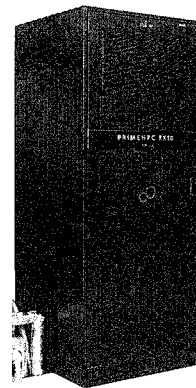


超高速分子シミュレータシステムは 2012 年 2 月運用開始のシステムで、7つのサブシステムから構成されています。高速 I/O 演算サーバは 2013 年 4 月に CPU を更新して SGI 製 UV2000 と IS16000 ストレージシステム、その開発用サーバとして SGI 製 UV20、クラスタ演算サーバとその開発用サーバとして富士通製 PRIMERGY RX300 S7、「京」用開発サーバとして富士通製 PRIMEHPC FX10、外部磁気ディスク装置として PANASAS 製 ActiveStor、高速ネットワーク装置としてフォーステン・ネットワーク製 ZettaScale Z9000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

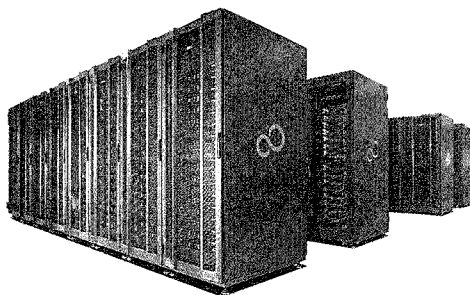
高性能分子シミュレータシステムは 2013 年 3 月運用開始のシステムです。演算サーバとして富士通製 PRIMERGY CX250/400 S1、フロントエンドサーバとして PRIMERGY RX300 S7、外部磁気ディスク装置として富士通製 ETERNUS DX80 S2、高速ネットワーク装置として DELL 製 Force10 S4810 が導入されています。2014 年 12 月に演算サーバの更新が行われ、富士通製 PRIMERGY CX2550 M1 が導入されています。2015 年 8 月に NVIDIA 製の Telsa K40 がノードあたり 4 つ搭載された演算ノードを 5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



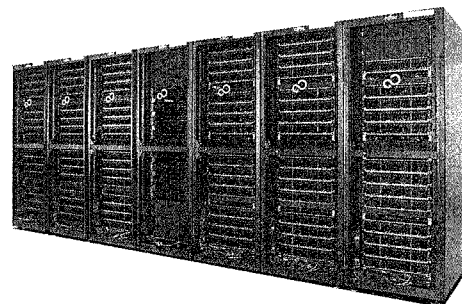
SGI UV2000



富士通 PRIMEHPC FX10



富士通 PRIMERGY RX300 S7



富士通 PRIMERGY CX2550/400 M1

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	グループ実行コア数制限
ccpg	PF (jobtype=small, large, vsmp, gpu)	定期保守 まで	7.75GB/core	最大 512	割当点数が 300 万点以上 : 1600 core 割当点数が 100 万点以上 : 1024 core 割当点数が 30 万点以上 : 640 core 割当点数が 10 万点以上 : 384 core 割当点数が 10 万点未満 : 128 core
ccpg	PF (jobtype=avx2)		4.2GB/core	最大 532	
ccpg	PFM (jobtype=phi)		124GB/node 7.5GB/mic	16	1 ノード
ccpg	PFG (jobtype=gpu)		62GB/node 11.2GB/gpu	8	1 ノード
ccuv	PS		7.7GB/core	最大 256	許可時間が 100 万時間以上 : 512 core 許可時間が 10 万時間以上 : 256 core 許可時間が 10 万時間未満 : 128 core

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。

PF キューと PS キューにはグループのサブミットジョブ数制限があり、グループ実行コア数制限の数と同じ本数です。

- 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
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 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。

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	課金係数
ccuv	2/(点/(コア*時間))
ccpg (jobtype=small, large, vsmp, gpu)	1/(点/(コア*時間))
ccpg (jobtype=avx2)	1.5/(点/(コア*時間))
ccpg (jobtype=phi)	32/(点/(ノード*時間))
ccpg (jobtype=gpu)	128/(点/(ノード*時間))
cck	0.5/(点/(コア*時間))

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。

2015 年度のライブラリプログラム開発の申請件数は 1 件でした。2015 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.
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.
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.
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 03 / 09.
Molden	A visualization program of molecular and structure.
VMD	Molecular graphics viewer

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	1.9.2		vmd	◎ (2015/4/8)	◎ (2015/4/8)	◎ (2015/4/8)
	1.9.1			○ (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。

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)	—
	14	bugfix 11	○ (2015/7/21)*	—
	14	bugfix 10	◎ (2015/3/20)*	◎ (2015/3/20)
Amber	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	1.0.3	◎ (2016/1/14)	◎ (2016/1/14)
	2014	Dec05	◎ (2015/4/1)	◎ (2015/4/1)
GAMESS	2013	May01	○ (2013/8/21)	—
	2012	May01	○ (2012/8/14)	—
	2010	Oct01	○ (2012/2/1)	—
	09	E.01	○ (2015/12/24)	○ (2015/12/24)
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)	—
	5.1.2		○ (2016/2/8)*	○ (2016/2/8)
GROMACS	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	8.0	sp1	○ (2015/6/24)	○ (2015/6/24)
	8.0		◎ (2014/8/1)	◎ (2014/8/1)
	2015.1		○ (2015/11/18)	○ (2015/11/18)
Molpro	2012.1	25	○ (2015/7/8)	○ (2015/7/8)
	2012.1	15	◎ (2014/7/3)	◎ (2014/7/3)
	2010.1	24	○ (2012/2/1)	—
	2.10		◎ (2015/4/8)*	◎ (2015/4/7)
NAMD	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)
	5.1.2		◎ (2015/4/8)	◎ (2015/4/8)
Quantum ESPRESSO	5.1.1		○ (2014/12/26)	—
	5.0.1		◎ (2012/10/05)*	—
SIESTA	3.1		◎ (2012/8/16)	—
SMASH	1.1.0		◎ (2015/1/8)	◎ (2015/1/8)
	7.0.1		○ (2015/11/6)	○ (2015/11/6)
TURBOMOLE	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)	—

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）136,758 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。

2015 年度に新規登録されたデータは、4,987 件です。

(2) FCDB（力の定数に関するデータベース）

（公開先）<http://fcdm.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 2015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	209 (18)	777 (86)	140,096,800 (23,700,000)	134,782,120 (23,700,000)	90,250,108
	協力研究	5	12	220,000	220,000	96,843
	所内	15	43	34,873,404	34,873,404	29,391,722
生理学	施設利用	1	2	900,000	900,000	906,624
	所内	2	3	130,000	130,000	18,684
基礎生物学	施設利用	3	7	416,000	412,440	342,081
合計		235	844	176,636,204	171,317,964	121,006,062

※ ()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	*
2015年4月	429,652	662	100	663	100	544	100
5月	467,525	733	100	734	100	727	99
6月	466,975	699	100	710	100	704	99
7月	490,098	734	100	734	100	734	100
8月	488,810	734	100	734	100	727	98
9月	424,873	710	100	710	100	705	100
10月	429,477	708	100	708	100	707	100
11月	427,016	720	100	720	100	720	100
12月	425,331	734	100	734	100	734	100
2016年1月	433,349	734	100	734	100	744	100
2月	419,553	686	100	686	100	680	99
3月	439,364	734	100	734	100	744	100
合計	5,342,023	8,588	100	8,600	100	8,470	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	*
2015年4月		7,269,940	86	138,921	14	289,915	52
5月		7,732,169	83	439,686	39	532,641	72
6月		7,315,867	82	731,308	67	305,808	42
7月		7,496,980	80	785,771	70	388,007	52
8月		7,661,529	82	541,495	48	266,467	36
9月		6,914,671	76	444,595	41	230,593	32
10月		7,629,068	85	402,094	37	216,427	30
11月		7,648,194	83	395,919	36	277,582	38
12月		7,774,916	83	375,399	33	396,363	53
2016年1月		7,724,043	83	512,711	45	653,842	86
2月		8,027,299	92	435,657	41	433,590	62
3月		8,199,224	88	771,381	68	662,333	87
合計		91,393,900	84	5,974,938	47	4,653,568	54

※ 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
2015年4月		37,960	236	859	39,055
5月		197,182	714	1,483	199,379
6月		36,421	487	1,622	38,530
7月		44,430	266	1,187	45,883
8月		30,556	175	1,780	32,511
9月		30,732	233	1,154	32,119
10月		42,663	156	2,316	45,135
11月		48,651	152	1,476	50,279
12月		41,520	181	1,958	43,659
2016年1月		44,997	382	2,862	48,241
2月		68,136	212	3,244	71,592
3月		57,243	207	1,637	59,087
合計		680,491	3,401	21,578	705,470

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
2015年4月	1497749:21:30	1795503:13:00	3950670:07:08	23131:07:44	2876:34:34	9:09:20	7269939:33:16	0:00:00	7269939:33:16
5月	1468840:54:02	1907582:38:15	4354529:39:54	0:06:24	1215:38:23	0:00:00	7732168:56:58	0:00:00	7732168:56:58
6月	1982710:57:18	1647718:11:18	3677533:58:47	3033:12:32	4871:02:24	0:00:00	7315867:22:19	0:00:00	7315867:22:19
7月	2502324:39:21	1273452:05:34	3709781:22:36	0:25:36	11417:57:46	3:57:20	7496980:28:13	0:00:00	7496980:28:13
8月	2252290:56:44	1421790:51:14	3968564:45:51	0:07:28	18881:48:47	0:00:00	7661528:30:04	0:00:00	7661528:30:04
9月	1401731:35:19	1977178:39:24	3520279:51:30	1:18:56	15479:51:32	0:00:00	6914671:16:41	0:00:00	6914671:16:41
10月	2111643:37:02	1649644:00:05	3851688:11:55	0:55:28	16091:22:35	0:00:00	7629068:07:05	0:00:00	7629068:07:05
11月	1501640:57:52	1759893:22:47	4213861:23:51	161116:41:36	11681:21:00	0:00:00	7648193:47:06	0:00:00	7648193:47:06
12月	1624022:45:10	1730819:59:20	4304443:49:16	106886:41:36	8742:16:45	0:00:00	7774915:32:07	0:00:00	7774915:32:07
2016年1月	1289401:44:10	2134144:04:54	4191969:57:33	100260:30:56	8266:49:34	0:00:00	7724043:07:07	0:00:00	7724043:07:07
2月	1501448:07:14	2042341:20:28	4343798:40:07	119226:49:52	20484:25:52	0:00:00	8027299:23:33	0:00:00	8027299:23:33
3月	1394244:47:18	2152571:22:07	4615775:31:51	10387:49:20	26244:44:30	0:00:00	8199224:15:06	0:00:00	8199224:15:06
合計	20528050:23:00	21492639:48:26	48702897:20:19	524045:47:28	146253:53:42	32:21:53	91393900:19:35	0:00:00	91393900:19:35

PRIMEHPC FX10	cck small1	cck large	Queue合計	ETC	総合計
2015年4月	6318:41:04	132602:24:00	138921:05:04	0:00:00	138921:05:04
5月	5639:32:00	434046:18:56	439685:50:56	0:00:00	439685:50:56
6月	178610:21:52	552698:04:48	731308:26:40	0:00:00	731308:26:40
7月	257856:16:00	527914:33:36	785770:49:36	0:00:00	785770:49:36
8月	170883:04:32	370611:51:28	541494:56:00	0:00:00	541494:56:00
9月	173506:47:28	271088:26:40	444595:14:08	0:00:00	444595:14:08
10月	120473:34:40	281620:54:24	402094:29:04	0:00:00	402094:29:04
11月	165525:24:32	230393:20:00	395918:44:32	0:00:00	395918:44:32
12月	137326:12:16	238073:14:40	375399:26:56	0:00:00	375399:26:56
2016年1月	54700:41:52	458010:19:44	512711:01:36	0:00:00	512711:01:36
2月	3093:30:24	432563:50:24	435657:20:48	0:00:00	435657:20:48
3月	37920:28:00	733460:24:32	771380:52:32	0:00:00	771380:52:32
合計	1311854:34:40	4663083:43:12	5974938:17:52	0:00:00	5974938:17:52

UV2000	PS	PSZ	Queue合計	ETC	総合計
2015年4月	286020:26:36	3894:21:28	289914:48:04	0:00:00	289914:48:04
5月	532640:58:22	0:00:00	532640:58:22	0:00:00	532640:58:22
6月	305808:05:19	0:00:00	305808:05:19	0:00:00	305808:05:19
7月	388006:42:08	0:00:00	388006:42:08	0:00:00	388006:42:08
8月	266467:11:08	0:00:00	266467:11:08	0:00:00	266467:11:08
9月	230593:12:22	0:00:00	230593:12:22	0:00:00	230593:12:22
10月	216427:18:18	0:00:00	216427:18:18	0:00:00	216427:18:18
11月	277581:39:12	0:00:00	277581:39:12	0:00:00	277581:39:12
12月	396363:12:16	0:00:00	396363:12:16	0:00:00	396363:12:16
2016年1月	653841:45:27	0:00:00	653841:45:27	0:00:00	653841:45:27
2月	433589:54:07	0:00:00	433589:54:07	0:00:00	433589:54:07
3月	662333:25:53	0:00:00	662333:25:53	0:00:00	662333:25:53
合計	4649673:51:08	3894:21:28	4653568:12:36	0:00:00	4653568:12:36

5.5 ジョブ処理件数

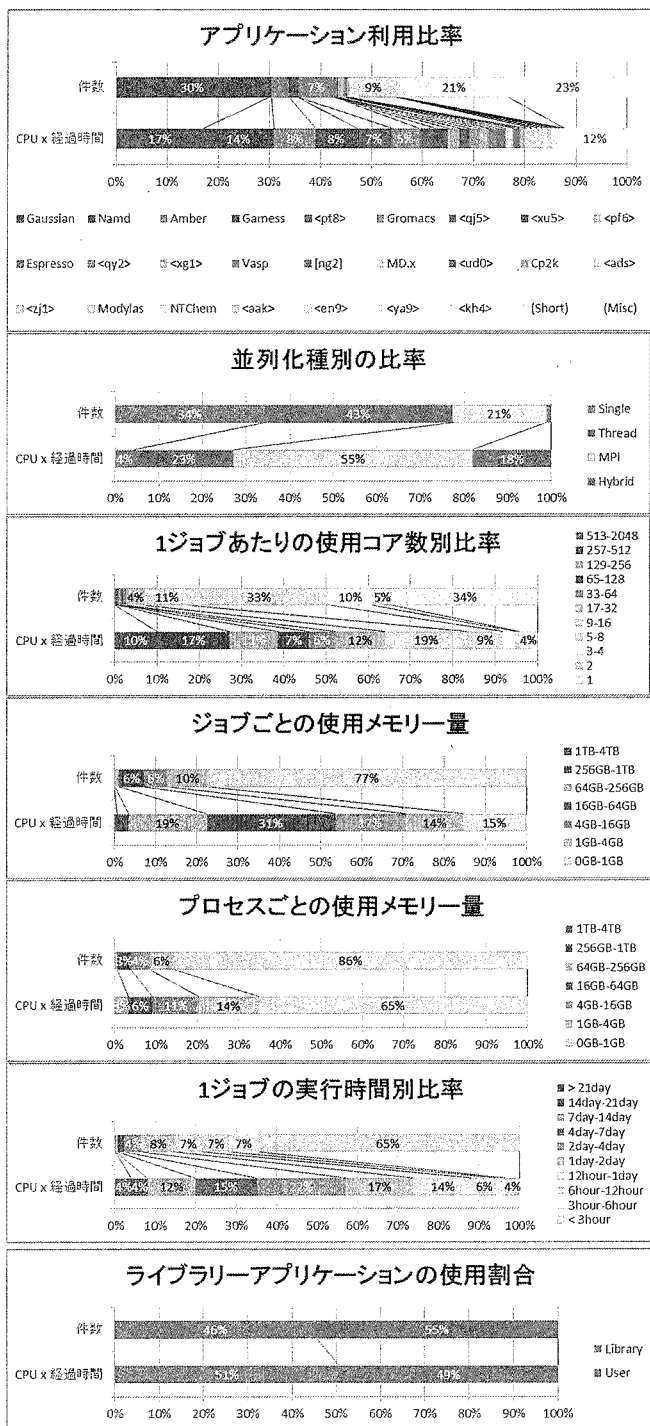
PRIMERGY	PF small_xy	PF large	PF vsmp	PF gpu	PF phi	PF avx2	PFG	Queue合計	ETC	総合計
2015年4月	12,496	16,510	51	178	24	8,701	-	37,960	0	37,960
5月	14,656	10,641	3	227	0	171,655	-	197,182	0	197,182
6月	14,922	7,136	4	200	0	14,159	-	36,421	0	36,421
7月	21,870	6,713	8	274	1	15,564	-	44,430	0	44,430
8月	7,297	8,246	2	373	0	14,622	16	30,556	0	30,556
9月	8,807	7,940	12	238	0	13,710	25	30,732	0	30,732
10月	19,715	7,843	18	127	0	14,956	4	42,663	0	42,663
11月	21,442	8,444	22	147	0	18,592	4	48,651	0	48,651
12月	10,469	9,257	9	172	0	21,612	1	41,520	0	41,520
2016年1月	11,267	7,933	24	251	0	25,508	14	44,997	0	44,997
2月	13,031	12,729	96	183	0	41,949	148	68,136	0	68,136
3月	8,281	17,647	15	157	0	30,952	191	57,243	0	57,243
合計	164,253	121,039	264	2,527	25	391,980	403	680,491	0	680,491

PRIMEHPC FX10	cck smallI	cck large	Queue合計	ETC	総合計
2015年4月	89	147	236	0	236
5月	386	328	714	0	714
6月	315	172	487	0	487
7月	121	145	266	0	266
8月	88	87	175	0	175
9月	154	79	233	0	233
10月	77	79	156	0	156
11月	90	62	152	0	152
12月	117	64	181	0	181
2016年1月	260	122	382	0	382
2月	69	143	212	0	212
3月	141	66	207	0	207
合計	1,907	1,494	3,401	0	3,401

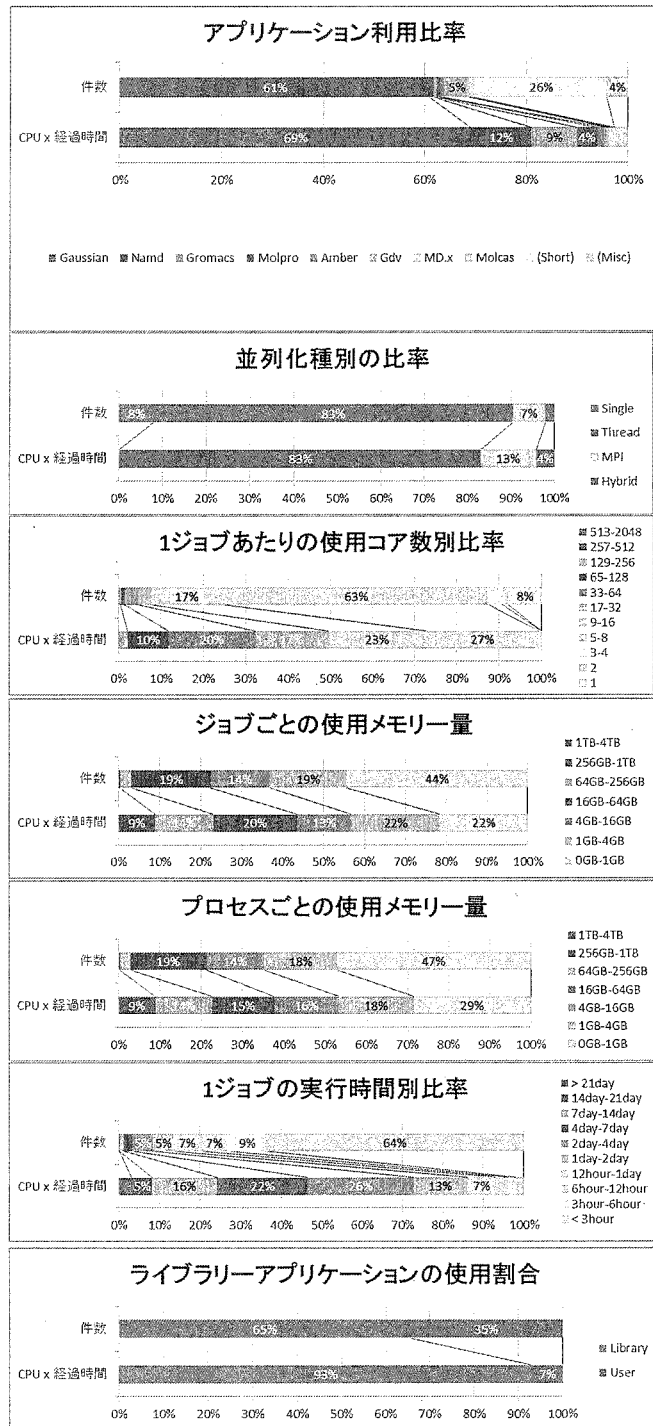
UV2000	PS	PSD	PSZ	Queue合計	ETC	総合計
2015年4月	825	4	30	859	0	859
5月	1,483	0	0	1,483	0	1,483
6月	1,622	0	0	1,622	0	1,622
7月	1,187	0	0	1,187	0	1,187
8月	1,780	0	0	1,780	0	1,780
9月	1,152	2	0	1,154	0	1,154
10月	2,316	0	0	2,316	0	2,316
11月	1,476	0	0	1,476	0	1,476
12月	1,958	0	0	1,958	0	1,958
2016年1月	2,862	0	0	2,862	0	2,862
2月	3,244	0	0	3,244	0	3,244
3月	1,637	0	0	1,637	0	1,637
合計	21,542	6	30	21,578	0	21,578

5.6 ジョブの実行状況

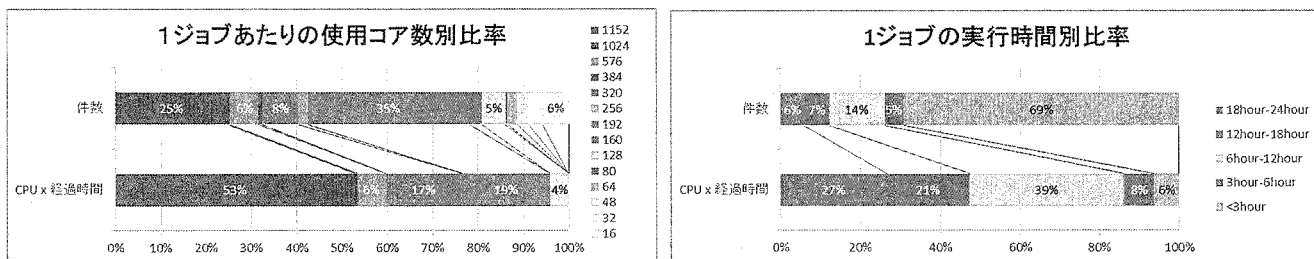
[富士通 PRIMERGY RX300/CX2550]



[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
川口 正代司	基礎生物学研究所 進化多様性生物学領域 共生システム研究部門	教授
椎名 伸之	基礎生物学研究所 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
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

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
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）
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

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	VPP5000 SGI2800,Origin3800	VPP5000 SGI2800,Origin3800	VPP5000 SGI2800,Origin3800	VPP5000 SGI2800,Origin3800	VPP5000 SGI2800,Origin3800	VPP5000 SGI2800,Origin3800	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 Altix4700 6,196 PRIMEQUEST 6,336 SX-7 8,399 TX-7 8,398	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	2015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	PRIMERGY UV2000 PRIMEHPC FX10
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	145	152	171	170	190	213	204	214	235
利用者数									
機構内a	44	59	49	49	43	49	39	63	46
機構外	551	589	635	617	645	758	747	773	798
合計	595	648	684	666	688	807	786	836	844
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	PRIMERGY 8,588 UV2000 8,470 PRIMEHPC FX10 8,600
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	176,636,204
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	171,317,964
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	102,022,406
ジョブ処理件数b	140,250	149,342	149,177	143,132	204,864	496,719	516,481	979,108	705,470
ライブラリプログラム新規登録数	18	22	20	15	22	21	9	24	36
データベース新規登録数	0	0	0	0	0	1	0	0	0
センター使用論文数d	188	186	196	193	231	257	260	253	210

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。

7 研究施設の現状と将来計画 (分子研レポート 2015 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。2015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。

2016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。インターコネクタは、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インターコネクタ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。インターコネクタは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タに直結している。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。

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 131,771 件のデータが収録されている。

共同利用に関しては、2015 年度は 227 研究グループにより、総数 832 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「複雑な研究対象へと挑戦する計算分子科学」と 2 つのウィンタースクール「第 5 回量子化学ウィンタースクール～基礎理論～」と「第 9 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	
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