

# I 部

## 目 次

1	巻頭言 計算科学研究センター 斉藤真司	1
2	スーパーコンピュータワークショップ 2016	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	11
5	2016 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
7	研究施設の現状と将来計画 (分子研リポート 2016 より転載)	22



## 1 巻頭言

計算科学研究センター、分子科学研究所 齊藤真司

2016年度の成果報告書をまとめ、ここに上梓させていただきます。

ご存知のように、2015年度から分子科学、物性科学、材料科学の3分野に関係するポスト「京」の事業として、ポスト「京」重点課題アプリケーション開発の重点課題(5)「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」、重点課題(7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」が展開されています。さらに2015年度後半からは、JSTによる科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業として東北大学金属材料研究所(代表機関)および分子科学研究所、東京大学物性研究所、大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センターによる計算物質科学人材育成コンソーシアム事業も開始されました。これらの新しいプロジェクトの開始を受け、分子科学、物性科学、材料科学の3分野に共通性の高い大規模並列計算を志向したプロジェクトを支援し、各分野コミュニティにおける並列計算の高度化へさらなる取り組みを促すことを目的として分子研、東北大金研、東大物性研の3研究所で「計算物質科学スパコン共用事業」を立ち上げ、2016年度より当センターの全CPU資源の20%を上限とする「計算物質科学スパコン共用事業利用枠」を設置いたしました。その結果、2016年度は、施設利用221グループ(813名)に加え、計算物質科学スパコン共用事業利用枠13グループ(53名)の合計234グループ(のべ866名(重複なし833名))の利用がございました。2005年頃より当センターの利用者数が年々増加しており、現在、センター設立以来もっとも多くの方々に利用していただいている次第です。

このように、現在、多くの方々にご利用いただき計算機が慢性的に混雑した状態になっておりますが、朗報がございます。10月1日から現在の汎用コン・スパコンが新しい計算機に更新されます。新システムのCPUの総演算性能は約3.4PTLOPSに、さらに、これまで十分ではなかったGPUの演算性能も0.8PFLOPSに増強しました。また、これまで同様、大規模メモリを必要とするジョブにも配慮したマシン構成となっております。もちろん、演算性能の面では京コンピュータにはまだ及びませんが、効率よくご利用いただき新しい理論・計算科学分子研究の推進・研究成果の創出にご活用いただけますと幸いです。

このような計算機環境の提供とともに、当センターでは引き続き理論・計算科学分野の人材育成および研究交流にも貢献していく所存です。今後とも皆様のご指導、ご支援を賜りますようお願いいたします。

## 2 スーパーコンピュータワークショップ 2016

テーマ：「これまでの理論・計算科学を振り返り今後を展望する」

日 時：2017年2月1日（水）～2日（木）

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：58名

ポスター発表：26件

今年度のワークショップは「これまでの理論・計算科学を振り返り今後を展望する」と題し、計算科学研究センター創設以来約40年にわたる理論・計算科学の進歩を振り返り、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・生物・社会科学などの広範な分野における展望を俯瞰するご講演、ご討論をいただいた。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26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58名であった。

2月1日（水）	
13:30 - 13:40	はじめに 川合眞紀（分子科学研究所長）
13:40 - 14:40	中村宏樹（分子科学研究所） 「半古典分子動力学法の開発－量子効果をどう取り入れるか」
14:40 - 15:20	岡崎 進（名古屋大学） 「ウイルスの全原子分子動力学シミュレーション」
15:20 - 15:30	休憩
15:30 - 16:10	長谷川淳也（北海道大学） 「拘束条件を付したポテンシャル面上の最適化問題」
16:10 - 17:10	中辻 博（量子化学研究協会） 「exact な量子化学理論の構築」
17:20 - 18:30	ポスター発表
18:30 - 20:00	懇親会（会場：岡崎コンファレンスセンター 中会議室）

2月2日(木)	
9:00 - 9:40	藤田貴敏 (分子科学研究所) 「有機分子集合体の光物性と励起子ダイナミクス」
9:40 - 10:20	岡崎圭一 (分子科学研究所) 「生体分子モーターF <sub>1</sub> -ATPaseにおける機能ダイナミクスのシミュレーション」
10:20 - 11:00	柳井 毅 (分子科学研究所) 「拡張多状態多参照擬縮重摂動理論の開発と応用計算」
11:00 - 11:10	休憩
11:10 - 11:50	伊藤伸泰 (東京大学) 「From molecule to human, from substance to society: A HPC challenge」
11:50 - 12:30	谷村吉隆 (京都大学) 「散逸系量子動力学への野望」
12:30 - 12:40	おわりに 奥村久士 (分子科学研究所)

スーパーコンピューターワークショップ2016

これまでの理論・計算科学を  
振り返り今後を展望する

2017年  
開催日 2月1日(水) ~ 2日(木)  
自然科学研究センター  
会場 岡崎コシファレンスセンター  
(愛知県岡崎市岡崎一丁目5番8-1)

■招待講演 (50名)

伊藤伸泰 (東京大学)  
岡崎圭一 (分子科学研究所)  
岡崎 圭 (名古屋大学)  
谷村吉隆 (京都大学)  
中江 博 (量子化学研究会)  
中村宏樹 (分子科学研究所)  
長谷川洋也 (北海道大学)  
藤田貴敏 (分子科学研究所)  
柳井 毅 (分子科学研究所)

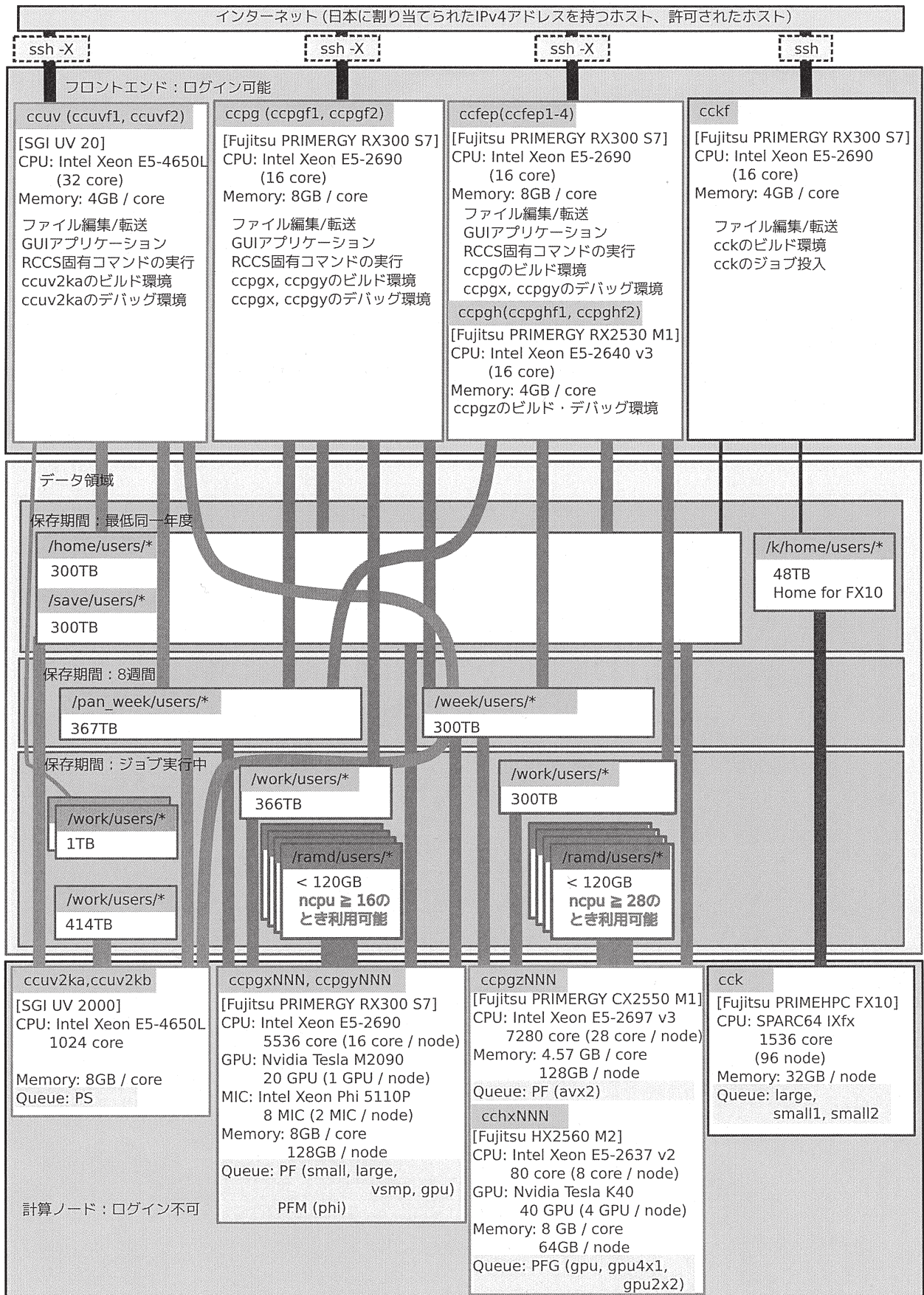
■ホスター発表

■参加申込  
■参加費・送料  
■参加方法: 下記ホームページをご覧ください  
<https://ccportal.niss.ac.jp/workshop2016>

■問い合わせ  
大学高度利用推進課 自然科学研究センター  
岡崎共通研究施設 計算科学研究センター  
TEL: 0564-53-1462 FAX: 0564-53-7023

### 3 計算機システム

#### 3.1 計算機システムの全体像

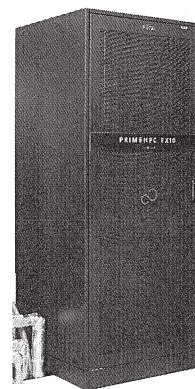


超高速分子シミュレータシステムは 2012 年 2 月運用開始のシステムで、7つのサブシステムから構成されています。高速 I/O 演算サーバは 2013 年 4 月に CPU を更新して SGI 製 UV2000 と IS16000 ストレージシステム、その開発用サーバとして SGI 製 UV20、クラスタ演算サーバとその開発用サーバとして富士通製 PRIMERGY RX300 S7、「京」用開発サーバとして富士通製 PRIMEHPC FX10、外部磁気ディスク装置として PANASAS 製 ActiveStor、高速ネットワーク装置としてフォーステン・ネットワーク製 ZettaScale Z9000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

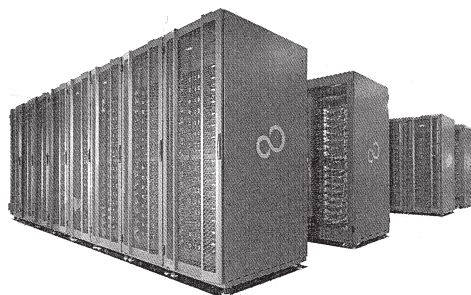
高性能分子シミュレータシステムは 2013 年 3 月運用開始のシステムです。演算サーバとして富士通製 PRIMERGY CX250/400 S1、フロントエンドサーバとして PRIMERGY RX300 S7、外部磁気ディスク装置として富士通製 ETERNUS DX80 S2、高速ネットワーク装置として DELL 製 Force10 S4810 が導入されています。2014 年 12 月に演算サーバの更新が行われ、富士通製 PRIMERGY CX2550 M1 が導入されています。2015 年 8 月に NVIDIA 製の Telsa K40 がノードあたり 4 つ搭載された演算ノードを 5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



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 (jobtype 名)	制限時間	メモリー	ジョブあたりの コア数	グループ実行制限		グループサブミット制限			
					割当点数	コア数	割当点数	ジョブ数		
ccpg	PF (small, large, vsmp)	定期保守 まで	7.75GB/core	最大 512	300 万点以上 100 万点以上 30 万点以上 10 万点以上 10 万点未満	1600 1024 640 384 128	300 万点以上 100 万点以上 30 万点以上 10 万点以上 10 万点未満	1600 1024 640 384 128		
ccpg	PF (gpu)	1 週間		最大 16						
ccpg	PF (avx2)	定期保守 まで	4.2GB/core	最大 532						
ccpg	PFM (phi)	定期保守 まで	124GB/node 7.5GB/mic	16					1 ノード	—
ccpg	PFM (gpu, gpu2x2, gpu4x1)	1 週間	62GB/node 11.2GB/gpu	8					2 ノード	—
ccuv	PS	定期保守 まで	7.7GB/core	最大 256	100 万点以上 10 万点以上 10 万点未満	512 256 128	100 万点以上 10 万点以上 10 万点未満	512 256 128		

ノードに搭載されているコア数(16 コアもしくは 28 コア)以下の並列数は任意の数を指定できますが他のジョブとノードを共有します。それ以上の場合に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。

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



### 3.3 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	1.5/(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)	16/(点/(ノード*時間))
ccpg (jobtype=gpu)	32/(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。

2016 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。2016 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	6.0.16		gview6	◎ (2017/2/2)
	5.0.9		gview5	◎ (2013/3/13)
Molden	5.7		molden	◎ (2016/11/22)
	5.0			○ (2013/4/1)
VMD	1.9.2		vmd	◎ (2015/4/8)
	1.9.1			○ (2013/3/21)

◎: インストール済み。g09 のような別名が設定されている。

○: インストール済み。g09d01 のように指定する必要がある。

☆: GPU 版が用意されている。

パッケージプログラム名	バージョン	リビジョン	ccpg	ccuv
ABINIT	7.8.2		© (2014/8/15)	—
Amber	16	bugfix 3	○ (2016/6/28)*	○ (2016/6/28)
	14	bugfix 11	○ (2015/7/21)*	—
	14	bugfix 10	© (2015/3/20)*	© (2015/3/20)
	14		○ (2014/5/21)*	—
	12	bugfix 21	© (2013/12/10)*	—
	12	bugfix 7	○ (2012/5/17)*	—
	11	bugfix 19	○ (2012/2/1)	—
AutoDock	4.2.6		© (2015/11/27)	—
CRYSTAL	14	1.0.4	○ (2016/5/11)	○ (2016/5/11)
	14	1.0.3	© (2016/1/14)	© (2016/1/14)
GAMESS	2014	Dec05	© (2015/4/1)	© (2015/4/1)
	2013	May01	○ (2013/8/21)	—
	2012	May01	○ (2012/8/14)	—
	2010	Oct01	○ (2012/2/1)	—
Gaussian	16	A.03	○ (2017/22/13)*	○ (2017/22/13)
	09	E.01	○ (2015/12/24)	○ (2015/12/24)
	09	D.01	© (2013/7/25)	© (2013/7/25)
	09	C.01	○ (2012/2/1)	○ (2012/2/1)
	09	B.01	○ (2012/2/7)	○ (2012/2/6)
	03	E.01	○ (2012/5/22)	—
GENESIS	1.1.1		○ (2016/9/13)*	○ (2016/9/13)
	1.1.0		© (2016/8/3)*	© (2016/8/3)
GROMACS	2016.3		○ (2017/3/16)*	—
	2016.1		○ (2017/2/2)*	—
	5.1.4		○ (2016/9/12)*	○ (2016/9/12)
	5.1.2		○ (2016/2/8)*	○ (2016/2/8)
	5.0.6		○ (2015/7/31)*	○ (2015/7/31)
	5.0.4		© (2015/1/30)*	© (2015/4/4)
	4.6.6		○ (2014/7/17)*	—
	4.6.5		○ (2014/4/21)*	—
	4.6.1		○ (2013/5/24)*	—
	4.5.5		○ (2012/6/12)*	—
GRRM	14		© (2015/7/29)	© (2015/7/29)
	11		○ (2012/9/26)	○ (2012/9/26)
Molcas	8.0	sp1	○ (2015/6/24)	○ (2015/6/24)
	8.0		© (2014/8/1)	© (2014/8/1)
Molpro	2015.1	5	○ (2016/4/19)	○ (2016/4/19)
	2015.1		—	○ (2015/11/18)
	2012.1	37	© (2016/4/19)	○ (2016/4/19)
	2012.1	25	○ (2015/7/8)	○ (2015/7/8)
	2012.1	15	○ (2014/7/3)	© (2014/7/3)
	2010.1	24	○ (2012/2/1)	—
NAMD	2.11		○ (2016/8/2)*	○ (2016/8/2)
	2.10		© (2015/4/8)*	© (2015/4/7)
	2.9		○ (2012/5/15)*	—
	2.8		○ (2012/4/10)	—
NTChem	2013.5.0		○ (2015/4/20)	○ (2015/4/20)
	2013.4.0		© (2014/6/27)	© (2014/6/27)
PSI	4.0	b5	○ (2013/10/23)	○ (2013/10/23)

パッケージプログラム名	バージョン	リビジョン	ccpg	ccuv
Quantum ESPRESSO	5.1.2		◎ (2015/4/8)	◎ (2015/4/8)
	5.1.1		○ (2014/12/26)	—
	5.0.1		◎ (2012/10/05)*	—
ReactionPlus	1.0		◎ (2015/11/27)	◎ (2015/11/27)
SIESTA	3.1		◎ (2012/8/16)	—
SMASH	2.1.0		○ (2016/9/12)	○ (2016/9/12)
	2.0.0		○ (2016/8/2)	○ (2016/8/2)
	1.1.0		◎ (2015/1/8)	◎ (2015/1/8)
TURBOMOLE	7.1.1		○ (2016/12/21)	○ (2016/12/21)
	7.1		○ (2016/8/31)	○ (2016/8/31)
	7.0.1		○ (2015/11/6)	○ (2015/11/6)
	7.0		○ (2015/8/10)	○ (2015/8/10)
	6.6		◎ (2014/8/11)	◎ (2014/8/11)
	6.4		○ (2012/8/15)	—
	6.3.1		○ (2012/2/2)	—

## 4.2 データベース開発状況

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

### (1) QCLDB (量子化学文献データベース)

(公開先) <http://qcldb2.ims.ac.jp/>

(開発代表者) 細矢治夫

(総件数) 139,657 件

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

### (2) FCDB (力の定数に関するデータベース)

(公開先) <http://fcdb.ims.ac.jp/>

(開発代表者) 田隅三生

(総件数) 2,394 件

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

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

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

(開発代表者) 野呂武司

(総件数) 1,315 件

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

## 5 2016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 (13)	797 (53)	205,091,228 (43,500,000)	169,759,370 (32,625,000)	108,507,238
	協力研究	3	8	188,500	183,100	
	所内	17	49	44,106,400	42,278,080	
生理学	施設利用	1	2	900,000	873,000	834,161
	所内	1	1	100,000	100,000	98,164
基礎生物学	施設利用	3	9	732,000	644,680	570,375
合計		234	866	251,118,128	213,838,230	143,905,722

※ ( )内は、計算物質科学スパコン共用事業利用枠の内数

### 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	*	UV2000	*
2016年4月	423,761	663	100	664	100	609	100
5月	467,306	734	100	734	100	744	100
6月	471,307	710	100	709	100	671	100
7月	493,860	734	100	734	100	744	100
8月	498,407	734	100	734	100	733	100
9月	481,459	710	100	710	100	720	100
10月	455,644	707	100	708	100	708	100
11月	456,962	720	100	720	100	720	100
12月	457,328	734	100	734	100	733	100
2017年1月	461,722	734	100	734	100	744	100
2月	409,714	662	100	662	100	661	100
3月	456,892	734	100	734	100	744	100
合計	5,534,362	8,576	100	8,577	100	8,530	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					
	PRIMERGY	*	PRIMEHPC FX10	*	UV2000	*
2016年4月	7,311,189	86	846,880	83	336,689	54
5月	8,462,771	90	460,114	41	315,348	41
6月	7,995,991	88	435,939	40	245,740	36
7月	8,233,489	88	505,470	45	531,854	70
8月	8,765,276	94	396,955	35	432,263	58
9月	8,179,049	90	628,527	58	363,764	49
10月	8,786,712	97	579,678	53	527,285	73
11月	8,301,914	90	680,796	62	662,364	90
12月	8,803,965	94	777,152	69	662,204	88
2017年1月	8,778,860	94	938,659	83	697,479	92
2月	7,887,263	93	859,826	85	551,845	82
3月	7,884,895	84	986,047	87	554,627	73
合計	99,391,373	91	8,096,044	52	5,881,463	50

※ 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			
	PRIMERGY	PRIMEHPC FX10	UV2000	合計
2016年4月	40,209	669	932	41,810
5月	77,398	1,053	1,918	80,369
6月	81,132	1,092	3,376	85,600
7月	270,544	4,405	5,554	280,503
8月	61,062	157	2,412	63,631
9月	138,184	731	5,467	144,382
10月	86,760	746	3,850	91,356
11月	39,410	1,583	2,121	43,114
12月	53,634	792	2,240	56,666
2017年1月	47,826	13,457	1,980	63,263
2月	40,926	2,544	2,170	45,640
3月	55,194	851	3,033	59,078
合計	992,279	28,080	35,053	1,055,412

## 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
2016年4月	1296533:07:16	1774558:22:36	4008847:18:35	215663:19:44	15586:22:21	0:00:00	7311188:30:32	0:00:00	7311188:30:32
5月	1589467:04:17	2172355:40:51	4604829:30:18	58172:08:00	37946:26:51	0:00:00	8462770:50:17	0:00:00	8462770:50:17
6月	1565794:00:03	2175681:26:32	4205932:25:41	10309:32:48	38273:17:13	0:00:00	7995990:42:17	0:00:00	7995990:42:17
7月	1479975:48:41	2218126:39:22	4485885:21:13	9492:17:36	40008:29:51	0:00:01	8233488:36:43	0:00:00	8233488:36:43
8月	2036020:13:42	1889979:44:01	4797489:55:56	577:45:04	41208:23:22	0:00:00	8765276:02:05	0:00:00	8765276:02:05
9月	2028723:59:46	1338867:48:03	4578011:38:49	188933:02:24	44512:34:28	0:00:00	8179049:03:30	0:00:00	8179049:03:30
10月	1821863:25:19	1742163:14:25	4993373:22:14	185416:33:04	43895:21:41	0:00:00	8786711:56:43	0:00:00	8786711:56:43
11月	1636508:06:01	1870650:09:38	4596205:49:52	130234:34:56	68315:46:47	32:21:52	8301914:27:14	0:00:00	8301914:27:14
12月	1748590:27:46	1873027:27:18	4985623:02:10	129255:10:08	67468:46:17	0:00:00	8803964:53:39	0:00:00	8803964:53:39
2017年1月	2032789:20:32	1689631:32:19	4929748:07:54	70617:23:12	56073:53:42	0:00:00	8778860:17:39	0:00:00	8778860:17:39
2月	1730745:42:11	1532569:36:19	4465732:34:37	105272:45:20	50167:22:34	0:00:00	7887263:22:53	0:00:00	7887263:22:53
3月	2196469:59:52	1317102:01:19	4309501:46:26	13317:04:00	48503:38:55	0:00:00	7884894:30:32	0:00:00	7884894:30:32
合計	21163481:15:26	21594713:42:43	54961180:53:45	1117261:36:16	551960:24:02	32:21:53	99391373:14:04	0:00:00	99391373:14:04

PRIMEHPC FX10	cck small1	cck large	Queue合計	ETC	総合計
2016年4月	38811:58:40	808067:50:24	846879:49:04	0:00:00	846879:49:04
5月	33185:56:32	426927:49:20	460113:45:52	0:00:00	460113:45:52
6月	8777:12:32	427161:46:40	435938:59:12	0:00:00	435938:59:12
7月	79153:16:16	426316:58:40	505470:14:56	0:00:00	505470:14:56
8月	18662:59:12	378292:09:36	396955:08:48	0:00:00	396955:08:48
9月	5493:01:36	623034:03:44	628527:05:20	0:00:00	628527:05:20
10月	17256:08:32	562421:41:20	579677:49:52	0:00:00	579677:49:52
11月	46729:08:00	634066:52:48	680796:00:48	0:00:00	680796:00:48
12月	15165:05:04	761986:33:36	777151:38:40	0:00:00	777151:38:40
2017年1月	101512:20:00	837146:58:08	938659:18:08	0:00:00	938659:18:08
2月	90009:25:36	769816:57:36	859826:23:12	0:00:00	859826:23:12
3月	142879:02:24	843168:19:12	986047:21:36	0:00:00	986047:21:36
合計	597635:34:24	7498408:01:04	8096043:35:28	0:00:00	8096043:35:28

UV2000	PS	Queue合計	ETC	総合計
2016年4月	336689:12:31	336689:12:31	0:00:00	336689:12:31
5月	315348:13:58	315348:13:58	0:00:00	315348:13:58
6月	245740:25:45	245740:25:45	0:00:00	245740:25:45
7月	531853:37:45	531853:37:45	0:00:00	531853:37:45
8月	432263:26:47	432263:26:47	0:00:00	432263:26:47
9月	363763:59:29	363763:59:29	0:00:00	363763:59:29
10月	527284:56:14	527284:56:14	0:00:00	527284:56:14
11月	662363:42:26	662363:42:26	0:00:00	662363:42:26
12月	662204:16:41	662204:16:41	0:00:00	662204:16:41
2017年1月	697479:17:27	697479:17:27	0:00:00	697479:17:27
2月	551844:30:59	551844:30:59	0:00:00	551844:30:59
3月	554627:22:50	554627:22:50	0:00:00	554627:22:50
合計	5881463:02:52	5881463:02:52	0:00:00	5881463:02:52



## 5.5 ジョブ処理件数

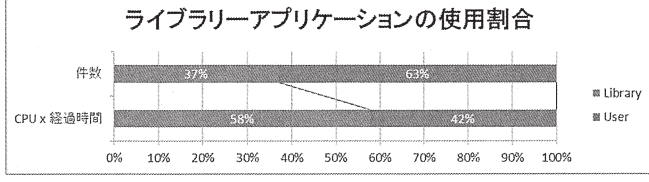
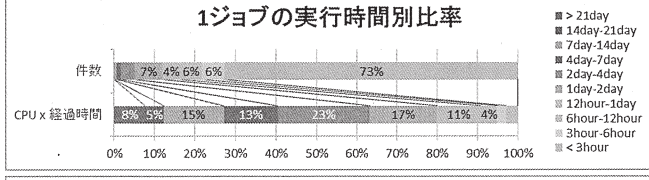
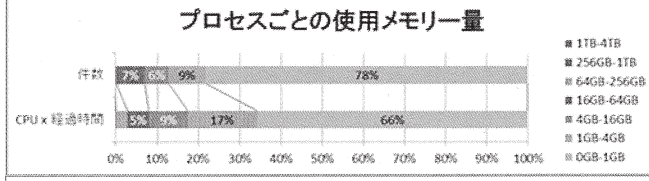
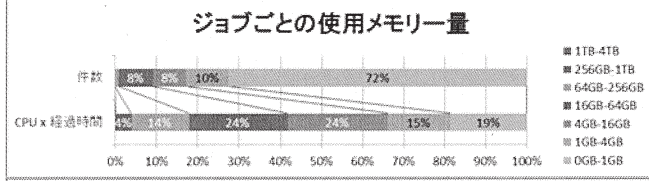
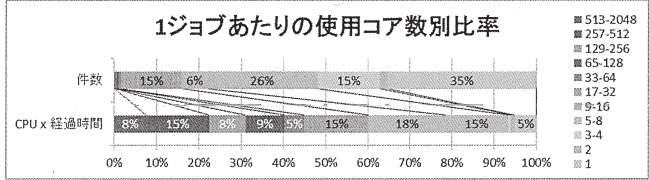
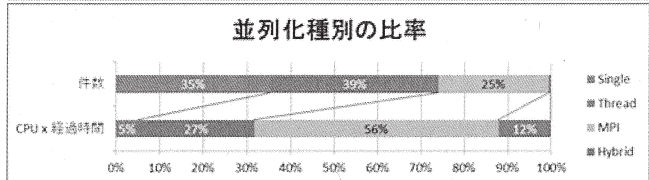
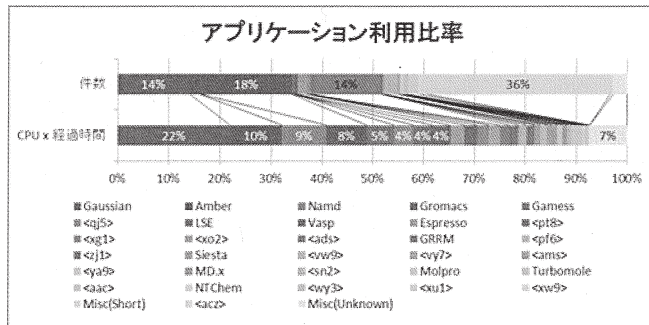
PRIMERGY	PF small	PF large	PF vsmp	PF gpu	PF phi	PF avx2	PFG	Queue合計	ETC	総合計
2016年4月	4,611	9,986	44	210	0	25,291	67	40,209	0	40,209
5月	6,605	11,783	23	212	0	58,463	312	77,398	0	77,398
6月	14,259	14,076	24	240	0	52,177	356	81,132	0	81,132
7月	19,652	86,758	7	154	0	163,625	348	270,544	0	270,544
8月	10,211	12,714	12	121	0	37,606	398	61,062	0	61,062
9月	12,255	88,217	136	173	0	37,018	385	138,184	0	138,184
10月	8,154	14,181	58	205	0	63,766	396	86,760	0	86,760
11月	7,899	11,465	27	104	0	19,280	635	39,410	0	39,410
12月	10,285	13,873	36	235	0	28,440	765	53,634	0	53,634
2017年1月	10,677	10,531	22	121	0	25,964	511	47,826	0	47,826
2月	11,239	19,050	31	93	3	10,077	433	40,926	0	40,926
3月	13,459	14,909	24	63	0	22,835	3,904	55,194	0	55,194
合計	129,306	307,543	444	1,931	3	544,542	8,510	992,279	0	992,279

PRIMEHPC FX10	cck small1	cck large	Queue合計	ETC	総合計
2016年4月	630	39	669	0	669
5月	913	140	1,053	0	1,053
6月	944	148	1,092	0	1,092
7月	1,282	3,123	4,405	0	4,405
8月	110	47	157	0	157
9月	627	104	731	0	731
10月	563	183	746	0	746
11月	529	1,054	1,583	0	1,583
12月	707	85	792	0	792
2017年1月	13,342	115	13,457	0	13,457
2月	2,473	71	2,544	0	2,544
3月	782	69	851	0	851
合計	22,902	5,178	28,080	0	28,080

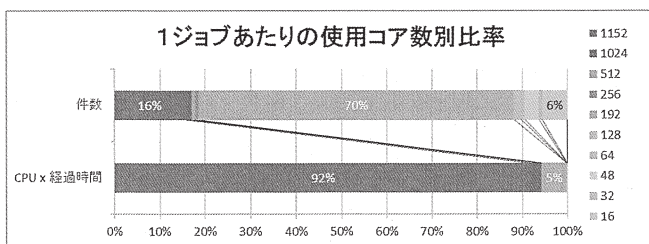
UV2000	PS	Queue合計	ETC	総合計
2016年4月	932	932	0	932
5月	1,918	1,918	0	1,918
6月	3,376	3,376	0	3,376
7月	5,554	5,554	0	5,554
8月	2,412	2,412	0	2,412
9月	5,467	5,467	0	5,467
10月	3,850	3,850	0	3,850
11月	2,121	2,121	0	2,121
12月	2,240	2,240	0	2,240
2017年1月	1,980	1,980	0	1,980
2月	2,170	2,170	0	2,170
3月	3,033	3,033	0	3,033
合計	35,053	35,053	0	35,053

5.6 ジョブの実行状況

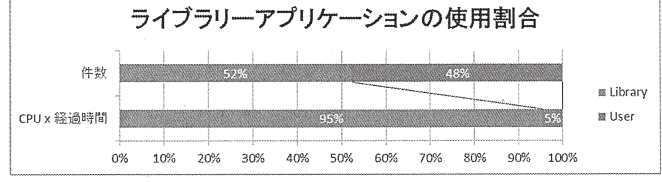
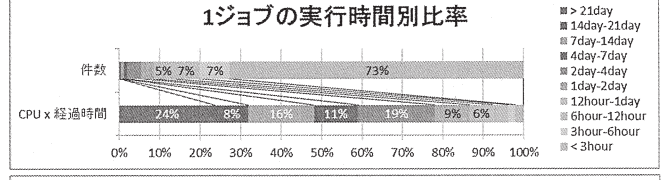
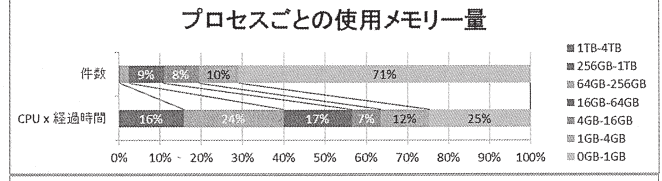
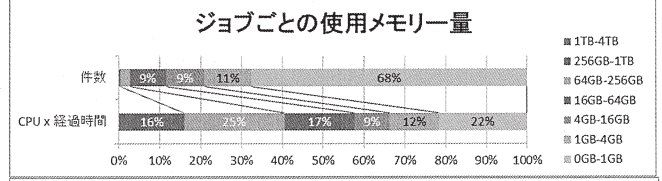
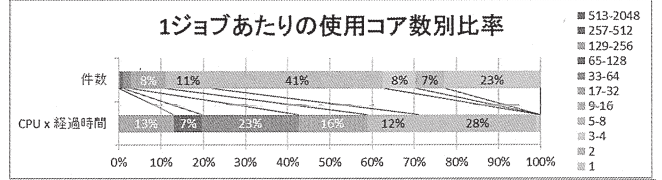
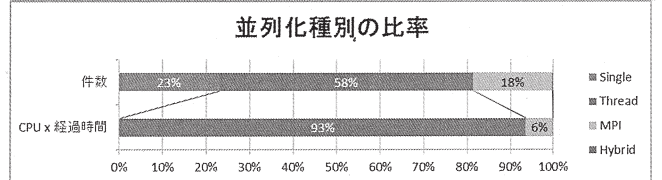
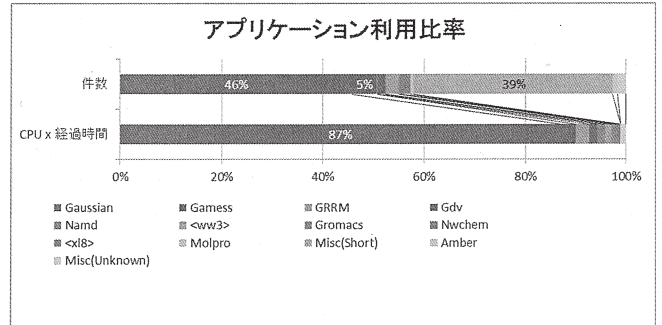
[富士通 PRIMERGY RX300/CX2550]



[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

老木 成稔	福井大学 医学部分子生理学領域	教授
波田 雅彦	首都大学東京 大学院理工学研究科	教授
森田 明弘	東北大学 大学院理学研究科	教授
岡本 祐幸	名古屋大学 大学院理学研究科	教授
野口 博司	東京大学 物性研究所	准教授
斉藤 真司	分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門 (計算科学研究センター)	教授
江原 正博	分子科学研究所 計算科学研究センター (理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門)	教授
奥村 久士	分子科学研究所 計算科学研究センター (理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門)	准教授
信定 克幸	分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門	准教授
柳井 毅	分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第一研究部門	准教授
皆川 純	基礎生物学研究所 環境生物学領域 環境光生物学部門	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
福永 雅喜	生理学研究所 大脳皮質昨日研究系 心理生理学研究部門	准教授

## 6.2 計算科学研究センター職員

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

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

a: 機構内利用者にはアイドル課題のための重複を含めません。

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

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

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

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

	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度	2005年度	2006年度	2007年度	2008年度	2009年度
計算機システム	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-7 TX-7	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-7 TX-7	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-7 TX-7	VPP5000(5月まで) SGI2800,Origin3800 (5月まで) Altix4700(7月から) PRIMEQUEST(7月から) SX-7 TX-7	Altix4700 PRIMEQUEST SX-7(1月まで) TX-7(1月まで) SR16000(3月から)	Altix4700 PRIMEQUEST SR16000	Altix4700 PRIMEQUEST SR16000
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	148	144	119	154	132	141	145	152	171
利 用 者 数									
機 構 内a	100	104	89	83	30	40	44	59	49
機 構 外	504	479	449	516	480	533	551	589	635
合 計	604	583	538	599	510	573	595	648	684
稼働時間(時間)	VPP5000 8,492 SGI系 8,422 SX-5 8,558 SP2 8,555 HPC 8,555	VPP5000 8,506 SGI系 8,324 SX-5 8,391 SP2 7,118 HPC 8,386	VPP5000 8,553 SGI系 8,545 SX-7 8,524 TX-7 8,525	VPP5000 8,502 SGI系 8,496 SX-7 8,451 TX-7 8,489	VPP5000 8,462 SGI系 8,492 Altix4700 8,492 PRIMEQUEST 8,501 TX-7 8,501	VPP5000 1,402 SGI系 1,400 Altix4700 6,196 PRIMEQUEST 6,336 SX-7 8,399 TX-7 8,398	Altix4700 8,245 PRIMEQUEST 8,304 SX-7 7,098 TX-7 7,088	Altix4700 8,087 PRIMEQUEST 8,486 SR16000 8,261	Altix4700 8,319 PRIMEQUEST 8,536 SR16000 8,454
CPU時間利用申請(時間)	(SP2 Thin基準)	(SP2 Thin基準)	(TX-7基準)	(TX-7基準)	(TX-7基準)	(TX-7基準)	(TX-7基準)	(SR16000基準)	(SR16000基準)
申 請	251,783	237,872	278,177	341,788	414,643	702,270	1,005,486	1,224,945	1,433,895
許 可	234,866	229,401	277,697	321,796	368,136	653,468	918,737	1,199,620	1,412,981
総使用CPU時間b,c(時間)	678,128	2,030,643	1,785,877	1,762,818	1,992,205	4,384,464	6,307,008	12,579,635	11,954,215
ジョブ処理件数b	70,680	55,522	58,784	28,968	19,896	78,130	140,250	149,342	149,177
ライブラリプログラム新規登録数	4	15	5	4	4	21	18	22	20
データベース新規登録数	0	0	0	0	0	0	0	0	0
センター使用論文数d	302	302	281	284	205	214	188	186	196

a: 機構内利用者にはアイドル課題のための重複を含めません。

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

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

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

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

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 2016 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、人材育成等に取り組んでいる。2016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。

2017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。後者においては、2015年1月に最新のCPUに更新している。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



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 136,758 件のデータが収録されている。

共同利用に関しては、2016年度は231研究グループにより、総数787名にもおよぶ利用者がこれらのシステムを日常的に利用している。近年、共同利用における利用者数が増加傾向にあり、このことは計算科学研究センターが分子科学分野や物性科学分野において極めて重要な役割を担っており、特色のある計算機資源とソフトウェアを提供していることを示している。

計算科学研究センターは、国家基幹技術の一つとして位置づけられているポスト「京」開発事業（フラッグシップ2020プロジェクト）において、ポスト「京」を用いて重点的に取り組むべき社会的・科学的課題（重点課題）のうち、とくにナノサイエンスに関わるアプリケーション開発「(5) エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」において重要な役割の一端を担っている。また、同重点課題である「(7) 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」、および科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業「計算物質科学人材育成コンソーシアム」とも連携を行っており、2016年度はこれら3つのプロジェクトにコンピュータ資源の一部（20%未満）を提供・協力している。さらに、ハード・ソフトでの協力以外にも、分野振興および人材育成に関して、スーパーコンピュータワークショップ「これまでの理論・計算科学を振り返り今後を展望する」と2つのウィンタースクール「第6回量子化学スクール～基礎理論と複雑分子系の理論～」と「第10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28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