

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 2019	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	キュー係数	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
5	2019 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	クラス別ジョブ処理件数	13
5.6	ジョブの実行状況	14
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 (分子研レポート 2019 より転載)	21

1. 巻頭言

計算科学研究センター 齊藤真司

2019年度末から2020年度前半の約4ヶ月間は、日本にとどまらず世界中で、これまで経験したことのない不自由な生活を強いられる事態となりました。卒業式や入学式の中止など会合や移動の行動は著しく制限され、新年度の授業開始の延期、そしてその後のオンライン授業の準備などの中、利用者の方々には成果報告書を纏めていただき、心よりお礼申し上げます。

活動制限中に行われた将棋の対局において、藤井聡太七段の妙手によりタイトル挑戦の最年少記録を更新したとの報道に接しました。さらに、活動制限により生まれた時間を活かし、新しいことに着手した・挑戦を始めたなどの声も耳にします。ネガティブなきっかけであっても、後になって振り返ると、それまでの流れを変える妙手、さらに新手になっているかもしれません。

ところで、2019年度の計算科学研究センターの利用者数が、設立以来はじめて1,000名を越えました（施設利用985名、共用事業63名の、のべ1,048名）。実は、1990年代前半から2000年代初めまで利用者数・グループ数ともに減少の一途をたどっていました。そこで、計算科学研究センターでは、高性能の計算機の導入にとどまらず、2005年頃から大規模利用に対する積極的な取り組みも進めてきました。幸いなことに、その方向性が大規模利用グループに浸透し、ご利用していただけたのかもしれません。

しかし、喜んでばかりもいられません。2004年から予算の1%が、さらに、2016年度からは1.6%の削減が進んでいます。そのため、前々回の計算機更新から、予算の中で可能な限り高性能な計算機を導入するため、サポート体制の見直しなど、これまでいくつもの検討を行ってきました。

まもなく、次期計算機導入の検討が開始されます。今後の計算機の動向、そしてこのような予算状況のもと、どのような計算機を導入していけるのか、どのような方向性での資源提供が可能であるのか。「新手一生」は、新手を探求し続けた故升田幸三棋士の言葉だと最近知りました。将棋や研究にとどまらず、本センターの研究支援においても、現状を打開すべく妙手、新手を編み出す必要がありそうです。

2. スーパーコンピュータワークショップ 2019

テーマ：「凝縮系の構造、物性、ダイナミクス」

日時：2019年12月19日（木）～20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：46名

ポスター発表：22件

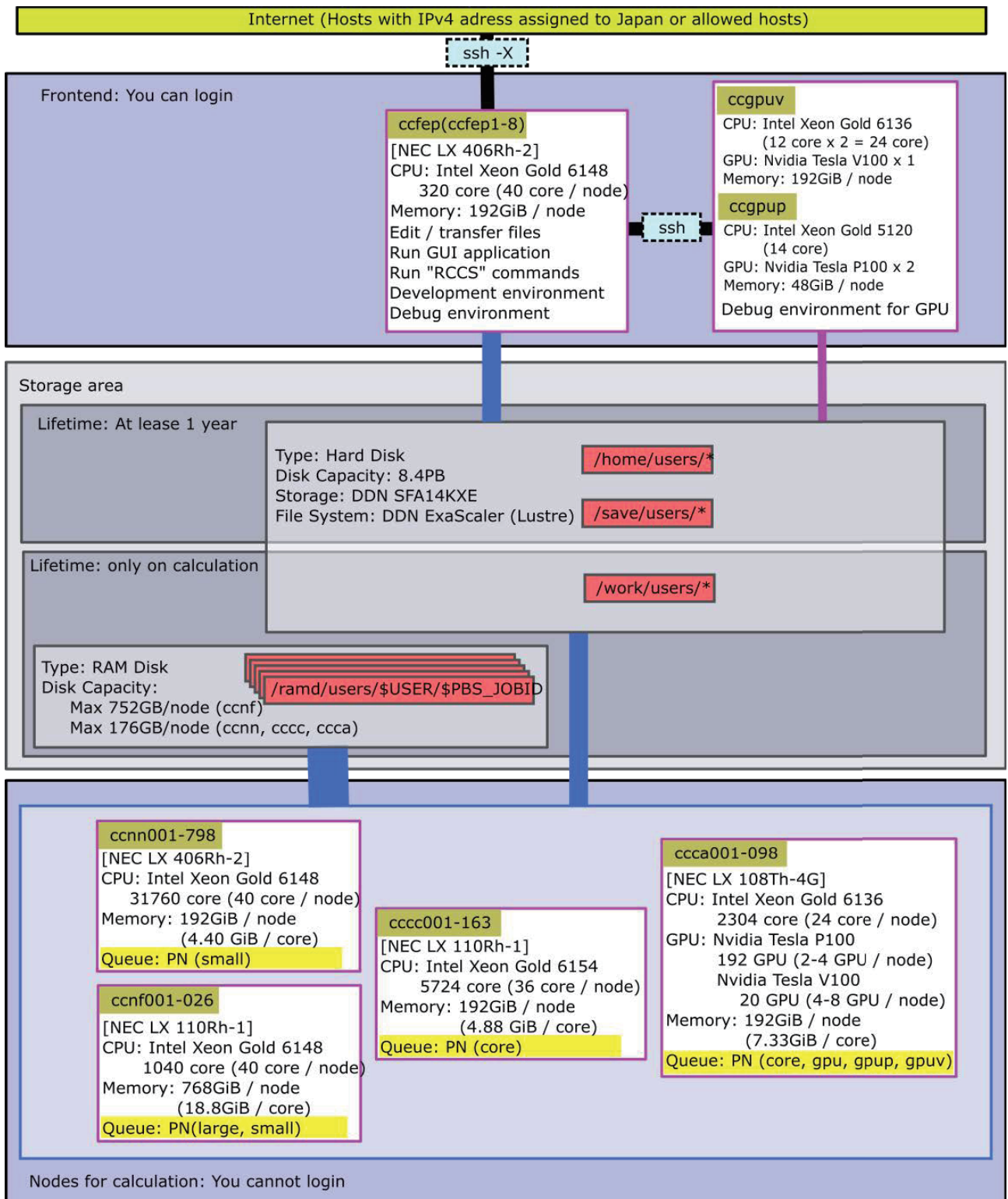
2019年度のスーパーコンピュータワークショップでは、「凝縮系の構造、物性、ダイナミクス」というテーマでワークショップを開催した。理論・計算科学研究に精力的に取り組んでおられる研究者の方々を講師にお招きし、最新の成果、これからの可能性や展望をご紹介いただくためご講演いただき、また質疑応答にてご討論いただいた。若手・実験研究者の方々にも積極的に参加していただけるようにポスターセッションも設け、合計22件のポスター発表があり、質の高い研究交流がなされた。ワークショップには幅広い分野からの参加があり、参加者は合計46名であった。

12月19日(水)	
13:25 - 13:30	はじめに 齊藤真司（計算科学研究センター）
13:30 - 14:10	岡本祐幸（名古屋大学） 「生体分子系の拡張アンサンブルシミュレーション」
14:10 - 14:50	高田彰二（京都大学） 「分子シミュレーションと1分子イメージングの融合による生体分子動態研究」
14:50 - 15:10	休憩
15:10 - 15:50	杉田有治（理化学研究所） 「レプリカ交換法による蛋白質・基質結合自由エネルギー計算」
15:50 - 16:30	鳥居 肇（静岡大学） 「液体系の THz および赤外スペクトルの理論計算に関わる現状と展望」
16:30 - 17:50	ポスター発表
18:00 - 19:30	懇親会（会場：岡崎コンファレンスセンター 中会議室）

12月20日(金)	
8:45 - 9:25	谷村吉隆 (京都大学) 「凝縮相中の分子の動的過程：散逸系の量子階層方程式 (HEOM) と多次元分光」
9:25 - 10:05	石田干城 (分子科学研究所) 「分子動力学シミュレーションによるイオン液体中でのセルロースの溶解・分解メカニズムの解明」
10:05 - 10:45	森田明弘 (東北大学) 「液体界面の構造と機能を解明する計算分子科学」
10:45 - 11:05	休憩
11:05 - 11:45	田中秀樹 (岡山大学) 「水、氷、包接水和物の安定性と熱物性」
11:45 - 12:25	岡崎 進 (名古屋大学) 「全原子分子動力学計算の高分子研究への展開」
12:25 - 12:30	おわりに 江原正博 (計算科学研究センター)

3. 計算機システム

3.1. 計算機システムの全体像



これまで超高速分子シミュレータシステムと高性能分子シミュレータシステムの二系統だったシステムを統合して、新たな高性能分子シミュレータシステムとして2017年10月に運用を開始しました。演算サーバとしてNEC製シリーズ（LX 406Rh-2、LX 110Rh-1、LX 108Th-4Gの3機種）、フロントエンドサーバとしてNEC製LX 406Rh-2、外部磁気ディスク装置としてDDN製SFA14KXEとその並列ファイルシステムのDDN ExaScaler (Lustre)、インターコネクットのIntel Omni Path (100Gbps)が導入されています。

P100を搭載したGPUアプリケーション開発用のフロントエンドサーバは、計算科学研究センターで維持管理しています。



NEC LX シリーズの筐体

3.2. キュー構成

制限時間は経過時間で制限されます。閑散期に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)	演算 ノード	メモリー	1 ジョブの制限	グループ実行制限		グループサブミット制限	
					割当点数	コア数/ GPU 数	割当点数	ジョブ数
cclx	PN (large)	ccnf	18.8GB/コア	1~10 ノード (40~400 コア)	300 万点以上 100 万点以上 30 万点以上 10 万点以上 10 万点未満	4000/48 2560/32 1600/20 960/12 320/8	300 万点以上 100 万点以上 30 万点以上 10 万点以上 10 万点未満	4000 2560 1600 960 320
	PN (small)	ccnn ccnf	4.4GB/コア	1~32 ノード (40~1280 コア)				
	PN (core)	cccc ccca	4.8GB/コア	1~36 コア				
	PN (gpu,gpup)	ccca	7.3GB/コア	1~48GPU 1~12 コア/GPU				
	PN (gpuv)			1~8GPU 1~3 コア/GPU				

- ジョブの最大時間は、定期メンテナンスまでです。ただし、1 週間を越えるジョブが実行できる演算ノードは全体の半数です。
- 526 ノード並列までのジョブは、同一 OmniPath グループ内に接続された演算ノードで実行されます。
- 5 ノード以上のジョブを実行可能な ccnn ノード数は 526 です。
- ジョブの最大時間が 1 日以下のジョブタイプ small のジョブは、演算ノード ccnf で実行される場合があります。
- ジョブの最大時間が 3 日以下で要求コア数が 6-12 のジョブタイプ core のジョブは、演算ノード ccca で実行される場合があります。
- ジョブタイプ core, gpu, gpup, gpuv のジョブは他のジョブとノードを共有します。
- 演算ノード ccca には GPU として P100 を搭載しているものと、V100 を搭載しているものとがあります。P100 を利用する場合には gpup を、V100 を利用する場合には gpuv を指定する必要があります。gpu を指定した場合には P100 か V100 のどちらかを利用することになります。
- グループ制限を判断する点数には追加点数を含みません。

• 別途申請が必要なキュー

システム	キュー名	制限時間	メモリー	1 ジョブあたり のコア数	グループ制限
cclx	専有利用	7 日間単位	4.4GB/コア	応相談	許可されたコア数

- 制限時間は、経過時間で制限されます。

3.3. キュー係数

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

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

システム	CPU キュー係数	GPU キュー係数
cclx (jobtype=large)	42 / (点/(ノード*時間))	-
cclx (jobtype=small)	28 / (点/(ノード*時間))	-
cclx (jobtype=core)	1.0 / (点/(コア*時間))	
cclx (jobtype=gpu, gpup)	1.0 / (点/(コア*時間))	10 / (点/(GPU*時間))
cclx (jobtype=gpuv)	1.0 / (点/(コア*時間))	15 / (点/(GPU*時間))

- 会話処理の ccfep, ccgpv は CPU 時間で CPU 点数が消費されます。(ccgpv は 2019/7 に稼働開始)
- 会話処理の ccgpu1, ccgpu2, ccgpup では CPU 点数が消費されません。(ccgpu1, ccgpu2 は 2019/10 に公開停止、代わりに ccgpup を公開)
- 他のシステムは、経過時間で CPU 点数が消費されます。

4. 一般報告

4.1. ライブラリプログラムの開発・公開

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

名前	内容
ABINIT	A package for material science within density functional theory, using a plane wave basis set and pseudopotentials.
AMBER	A package of molecular simulation programs.
AutoDock	Suite of automated docking tools.
CP2K	A quantum chemistry and solid state physics software package.
CRYSTAL	General-purpose programs for the study of crystalline solids.
DIRAC	Computes molecular properties using relativistic quantum chemical methods (named after P. A. M. Dirac).
GAMESS	General atomic and molecular electronic structure system.
Gaussian	Ab initio molecular orbital calculations.
GENESIS	Molecular dynamics and modeling software for bimolecular systems such as proteins, lipids, glycans, and their complexes.
GROMACS	Fast, Free and Flexible MD
GRRM	Automated Exploration of Reaction Pathways.
LAMMPS	Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator.
Molpro	A complete system of ab initio programs.
NAMD	A scalable molecular dynamics program.
NBO/NBOView	Discovery tool for chemical insights from complex wave functions.
NTChem	A comprehensive new software of ab initio quantum chemistry made in AICS from scratch.
NWChem	Computational chemistry tools that are scalable both in their ability to treat large scientific computational chemistry problems
OpenMolcas	Quantum chemistry software
ORCA	An ab initio quantum chemistry program package
PSI4	An open-source suite of ab initio quantum chemistry programs designed for efficient, high-accuracy simulations of a variety of molecular properties.
Quantum ESPRESSO	An integrated suite of Open-Source computer codes for electronic-structure calculations and materials modeling at the nanoscale.
Reaction Plus	Program to obtain the transition state and reaction path along the user's expected reaction mechanism.
SIESTA	Efficient electronic structure calculations and ab initio molecular dynamics simulations of molecules and solids
SMASH	Scalable Molecular Analysis Solver for High performance computing systems
TURBOMOLE	One of the fastest programs for standard quantum chemical applications.
GaussView	A viewer for Gaussian
Luscus	A portable GUI for Molcas and other chemical software
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	導入日
ABINIT	8.8.3		◎ (2018/7/10)
Amber	18	bugfix 16	○ (2019/9/10) [☆]
	18	bugfix 12	◎ (2019/2/14) [☆]
	18	bugfix 11	○ (2019/2/14) [☆]
	18	bugfix 1	○ (2018/6/4) [☆]
	16	bugfix 15	○ (2018/7/25) [☆]
	16	bugfix 10	○ (2017/10/01) [☆]
	14	bugfix 11	○ (2015/7/21)
	12	bugfix 21	○ (2013/12/10)
CP2K	7.1.0		○ (2020/2/27) [☆]
	6.1.0		○ (2018/11/22) [☆]
CRYSTAL	17	1.0.2	○ (2020/1/27)
	14	1.0.4	○ (2016/5/11)
DIRAC	18.0		○ (2019/5/14)
GAMESS	2019	Sep30	○ (2019/12/13)
	2018	Sep30	◎ (2018/11/9)
	2018	Feb14	○ (2018/3/19)
	2017	Nov11	○ (2017/12/15)
	2017	Apr20	○ (2017/10/1)
Gaussian	16	C.01	○ (2019/8/2)
	16	B.01	◎ (2018/3/12) [☆]
	16	A.03	○ (2017/2/13)
	09	E.01	◎ (2015/12/24)
	09	D.01	○ (2013/7/25)
	09	C.01	○ (2012/2/1)
	09	B.01	○ (2012/2/7)
GENESIS	1.4.0		○ (2019/11/21) [☆]
	1.3.0		○ (2018/9/4) [☆]
	1.1.6		○ (2017/12/13) [☆]
	1.1.5		○ (2017/8/4)
GROMACS	2019.4		○ (2019/10/8) [☆]
	2019.2		○ (2019/4/18) [☆]
	2018.8		○ (2019/10/8) [☆]
	2018.7		○ (2019/7/19) [☆]
	2018.6		◎ (2019/3/27) [☆]
	2018.3		○ (2018/9/4) [☆]
	2018.1		○ (2018/4/17)
	2016.6		○ (2019/2/22) [☆]
	2016.5		○ (2018/4/17) [☆]
	2016.4		○ (2017/10/01) [☆]
	2016.3		○ (2017/3/16) [☆]
	2016.1		○ (2017/2/2) [☆]
	5.1.5		○ (2018/4/17) [☆]
	5.1.4		○ (2018/1/19) [☆]
	4.5.5		○ (2012/6/12) [☆]
GRRM	14		◎ (2015/7/29)
	11		○ (2012/9/26)
LAMMPS	7aug19		○ (2019/11/14) [☆]
	22Aug18		◎ (2018/11/6) [☆]
	16Mar18		○ (2018/5/10) [☆]
Molpro	2019.2.3		○ (2019/12/10)
	2019.1.2		○ (2019/4/16)

	2018.2		◎ (2018/12/20)
	2015.1	33	○ (2018/6/12)
	2015.1	27	○ (2017/12/14)
	2015.1	19	○ (2017/10/1)
	2012.1	37	○ (2016/4/19)
NAMD	2.13		◎ (2018/12/7) [☆]
	2.11		○ (2017/10/1) [☆]
NBO	7.0	7	○ (2020/1/6)
	7.0	2	◎ (2019/1/23)
	6.0	18	◎ (2018/3/16)
	6.0	16	○ (2018/2/6)
NTChem	2013.5.0		◎ (2015/4/20)
NWChem	6.8		◎ (2018/1/22)
OpenMolcas	(2019/6/4)		◎ (2019/6/7)
PSI4	1.1		◎ (2018/1/12)
Quantum ESPRESSO	6.3		◎ (2018/12/17)
	6.1		○ (2017/9/14)
	5.4		○ (2018/12/17)
	5.1.2		○ (2015/4/8)
ReactionPlus	1.0		◎ (2018/1/22)
SIESTA	4.0.2		◎ (2019/3/14)
	3.1		○ (2012/8/16)
SMASH	2.2.0		○ (2017/5/16)
TURBOMOLE	7.4.1		○ (2020/3/2)
	7.4		○ (2019/8/20)
	7.3		◎ (2018/7/23)
	7.2.1		○ (2017/12/12)
	7.2		○ (2017/8/4)

名前	バージョン	リビジョン	導入日
GaussView	6.1.1		○ (2019/10/29)
	6.0.16		◎ (2017/2/2)
	5.0.9		◎ (2013/3/13)
Luscus	0.8.6		◎ (2019/6/10)
Molden	5.7		◎ (2016/11/22)
NBOView2	2		◎ (2018/2/6)
VMD	1.9.3		◎ (2018/2/19)

◎: インストール済み。g16 のような別名が設定されている。

○: インストール済み。g16a03 のように指定する必要がある。

☆: GPU 版が用意されている。

5. 2019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	233	930	273,916,057	242,849,813	185,969,220
	所内	13	44	43,961,216	43,961,216	30,751,890
生理学	施設利用	1	2	30,000	30,000	33,844
	所内	4	6	729,000	729,000	331,049
基礎生物学	施設利用	2	2	1,990,000	1,950,000	1,687,334
	所内	1	1	30,000	30,000	2,150
計算物質科学スパコン共用事業利用枠		14	63	42,110,000	42,110,000	21,747,210
合計		268	1,048	362,766,273	331,660,029	240,522,697

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							
		Type-NF	*	Type-NN	*	Type-CC	*	Type-CA	*
2019年4月	434,568	664	100	664	100	664	100	664	100
5月	481,385	734	100	734	100	734	99	734	100
6月	470,443	710	100	710	100	710	100	710	100
7月	431,215	575	100	575	100	575	100	575	100
8月	520,218	703	100	703	100	703	100	703	100
9月	495,971	710	98	710	100	710	100	710	100
10月	468,740	699	99	699	100	699	100	698	100
11月	462,143	720	95	720	95	720	95	720	95
12月	479,685	734	95	734	95	734	95	734	95
2020年1月	470,586	734	100	734	100	734	99	734	100
2月	443,687	686	99	686	100	686	100	686	100
3月	448,206	734	99	734	99	733	99	730	99
合計	5,606,847	8,403	99	8,403	99	8,402	99	8,398	99

※ *は、計算機稼働率(%) : 計算機稼働時間 ÷ (通電時間 (暦月度) - 定期保守時間) です。

5.3 計算機利用状況

5.3.1 CPU使用時間

年月	CPU使用時間								GPU使用時間		
	マシン名	Type-NF	*	Type-NN	*	Type-CC	*	Type-CA	*	Type-CA	*
2019年4月		565,208	82	18,229,090	86	2,684,183	71	694,487	45	90,195	71
5月		641,942	84	21,397,422	92	3,108,790	74	1,065,793	63	107,114	76
6月		640,454	87	20,758,544	92	2,837,033	70	1,019,428	62	97,927	72
7月		533,434	89	17,157,607	94	2,528,061	77	763,437	58	81,970	74
8月		707,487	97	21,930,979	98	3,203,506	80	978,334	60	91,014	67
9月		712,454	96	21,612,023	96	3,119,194	77	1,070,947	65	122,819	90
10月		607,852	84	20,370,850	92	3,105,667	78	1,000,223	62	111,686	83
11月		636,595	85	21,523,635	94	3,535,032	86	780,979	47	136,492	99
12月		701,654	92	22,289,904	96	3,888,918	93	999,410	59	115,640	82
2020年1月		673,789	88	21,009,117	90	3,865,942	92	1,006,594	60	122,080	87
2月		677,660	95	20,208,642	93	3,259,427	83	855,874	54	111,887	85
3月		677,403	89	18,952,129	81	2,815,645	67	451,476	27	88,875	63
合計		7,775,932	89	245,439,945	92	37,951,397	79	10,686,982	55	1,277,699	79

※ CPU時間、GPU時間の単位は時間です。

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

5.3.2 バッチジョブ処理件数

年月	バッチジョブ処理件数					
	マシン名	Type-NF	Type-NN	Type-CC	Type-CA	合計
2019年4月		554	11,713	67,294	8,392	87,953
5月		1,717	12,076	315,157	15,736	344,686
6月		679	13,300	362,981	12,114	389,074
7月		650	12,495	64,237	16,174	93,556
8月		540	12,428	111,125	20,623	144,716
9月		568	9,457	64,222	19,452	93,699
10月		921	12,954	187,048	19,354	220,277
11月		1,262	21,461	990,739	24,496	1,037,958
12月		712	15,933	694,264	51,124	762,033
2020年1月		565	48,408	522,756	39,858	611,587
2月		355	11,503	1,294,898	301,066	1,607,822
3月		1,522	28,951	58,359	12,638	101,470
合計		10,045	210,679	4,733,080	541,027	5,494,831

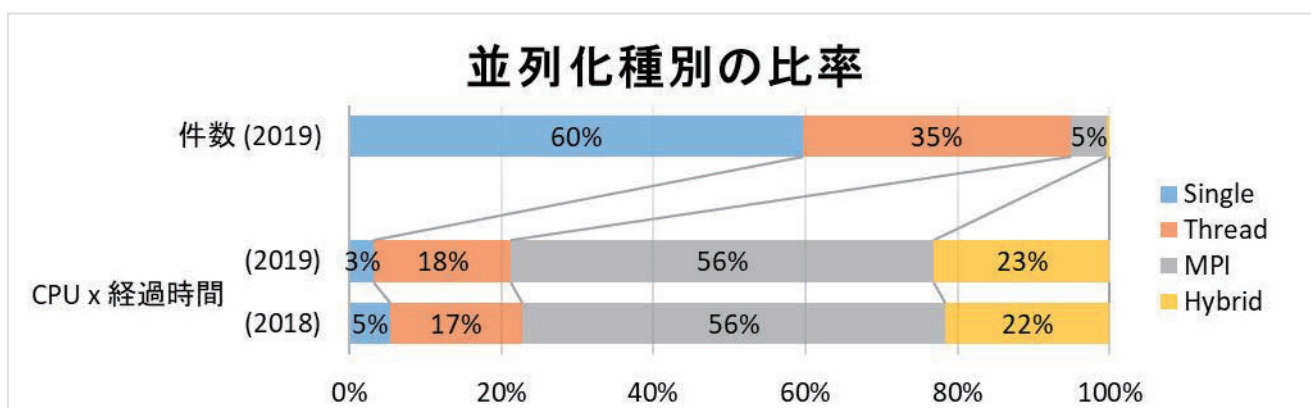
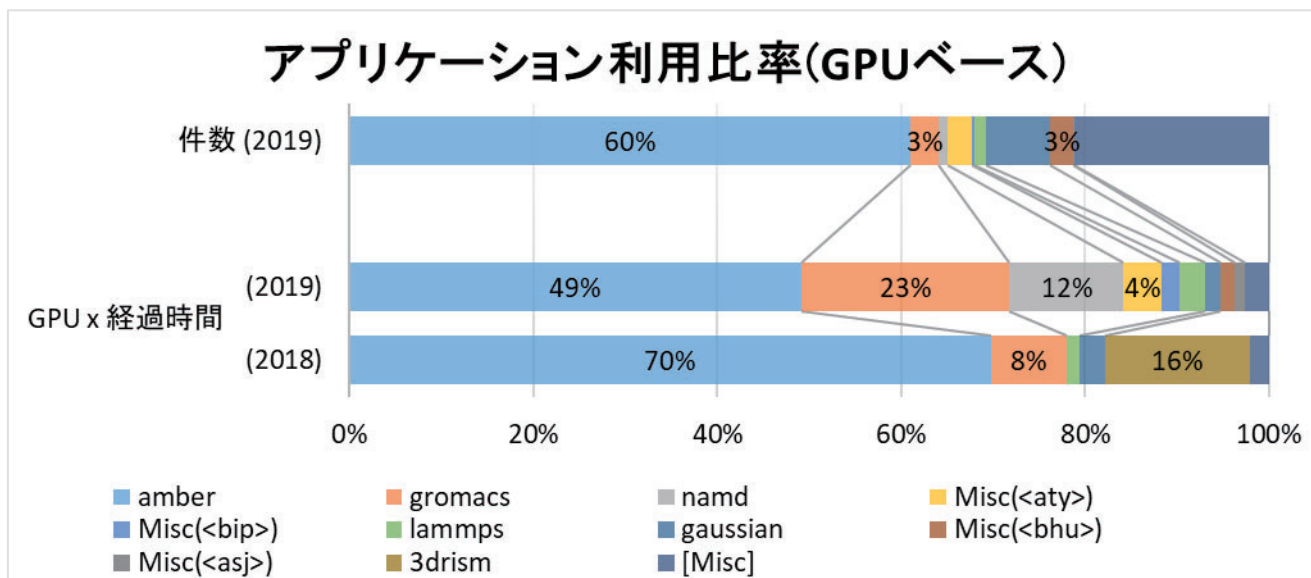
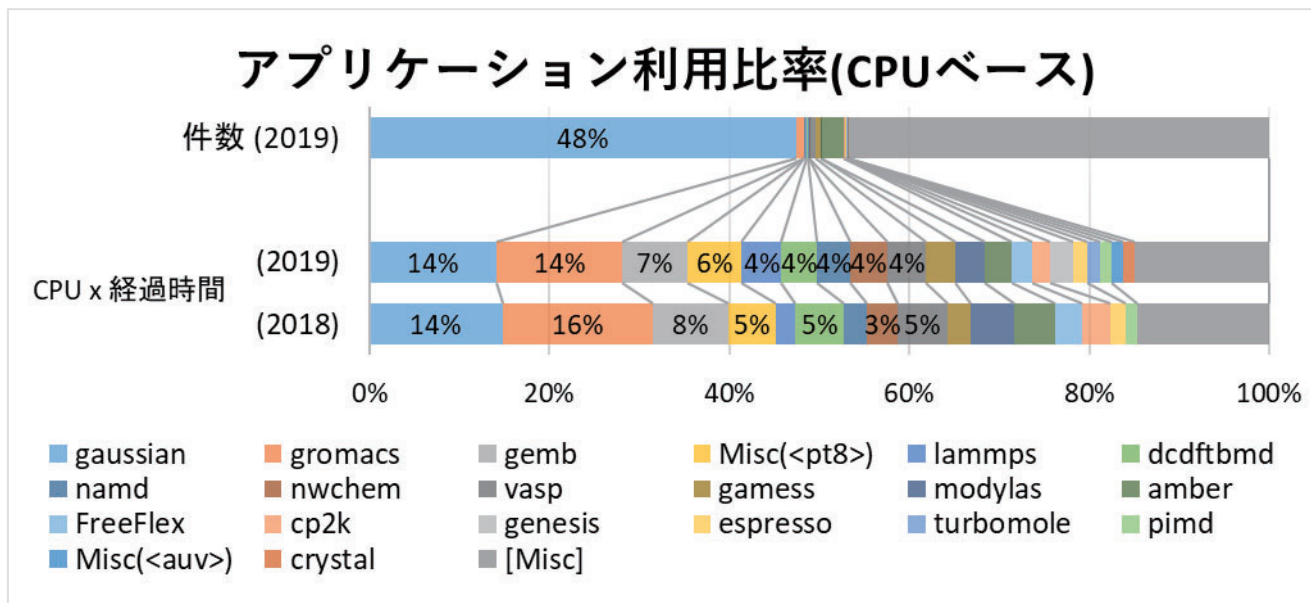
5.4 クラス別CPU使用時間

	PN large	PN small	PN core	PN gpu	Queue 合計	ETC	総合計
2019年4月	525483:00:40	18268815:18:40	2800509:33:21	578161:03:08	22172968:55:49	0:00:00	22172968:55:49
5月	515741:11:20	21523622:20:40	3260979:12:22	913604:04:30	26213946:48:52	0:00:00	26213946:48:52
6月	583970:10:40	20815028:39:20	2991491:07:30	864969:18:24	25255459:15:54	0:00:00	25255459:15:54
7月	478718:25:20	17212322:40:00	2690522:41:17	600975:11:47	20982538:58:24	0:00:00	20982538:58:24
8月	690622:44:40	21947842:57:20	3538213:20:38	643626:36:37	26820305:39:15	0:00:00	26820305:39:15
9月	658490:29:20	21665987:16:00	3395458:26:33	794682:35:12	26514618:47:05	0:00:00	26514618:47:05
10月	516410:20:40	20462291:35:20	3521692:43:46	584196:28:24	25084591:08:10	0:00:00	25084591:08:10
11月	463369:26:00	21696861:21:20	3712396:51:56	603613:28:19	26476241:07:35	0:00:00	26476241:07:35
12月	626889:22:40	22364668:43:20	4401012:41:43	487315:22:10	27879886:09:53	0:00:00	27879886:09:53
2020年1月	637807:02:40	21045099:45:20	4122627:06:41	749908:43:03	26555442:37:44	0:00:00	26555442:37:44
2月	658679:24:00	20227622:31:20	3642078:20:26	473222:06:37	25001602:22:23	0:00:00	25001602:22:23
3月	648344:45:20	18981187:26:40	2903659:09:01	363462:14:50	22896653:35:51	0:00:00	22896653:35:51
合 計	7004526:23:20	246211350:35:20	40980641:15:14	7657737:13:01	301854255:26:55	0:00:00	301854255:26:55

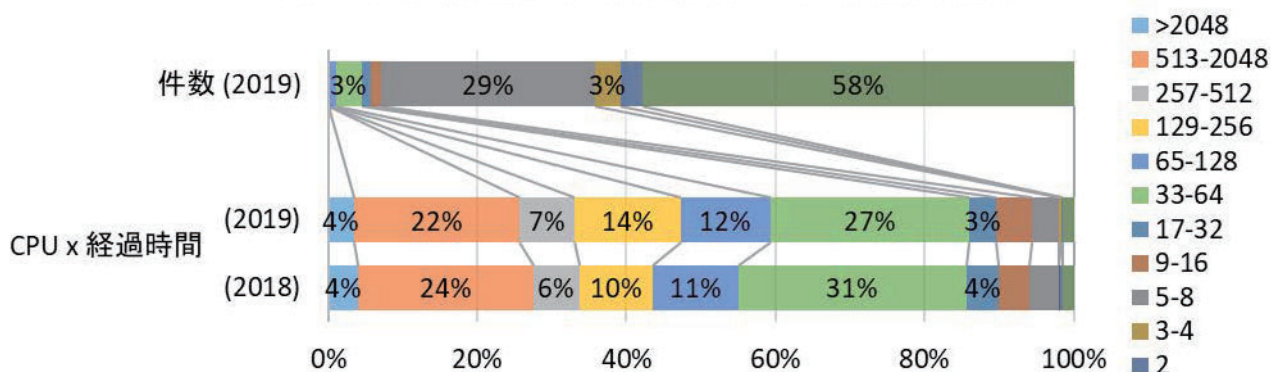
5.5 クラス別ジョブ処理件数

	PN large	PN small	PN core	PN gpu	合 計
2019年4月	333	11,934	72,414	3,272	87,953
5月	1,115	12,678	325,946	4,947	344,686
6月	519	13,460	371,544	3,551	389,074
7月	307	12,838	67,770	12,641	93,556
8月	386	12,582	124,473	7,275	144,716
9月	244	9,781	70,344	13,330	93,699
10月	458	13,417	196,037	10,365	220,277
11月	463	22,260	995,145	20,090	1,037,958
12月	224	16,421	714,858	30,530	762,033
2020年1月	294	48,679	534,412	28,202	611,587
2月	209	11,649	1,577,462	18,502	1,607,822
3月	468	30,005	60,897	10,100	101,470
合 計	5,020	215,704	5,111,302	162,805	5,494,831

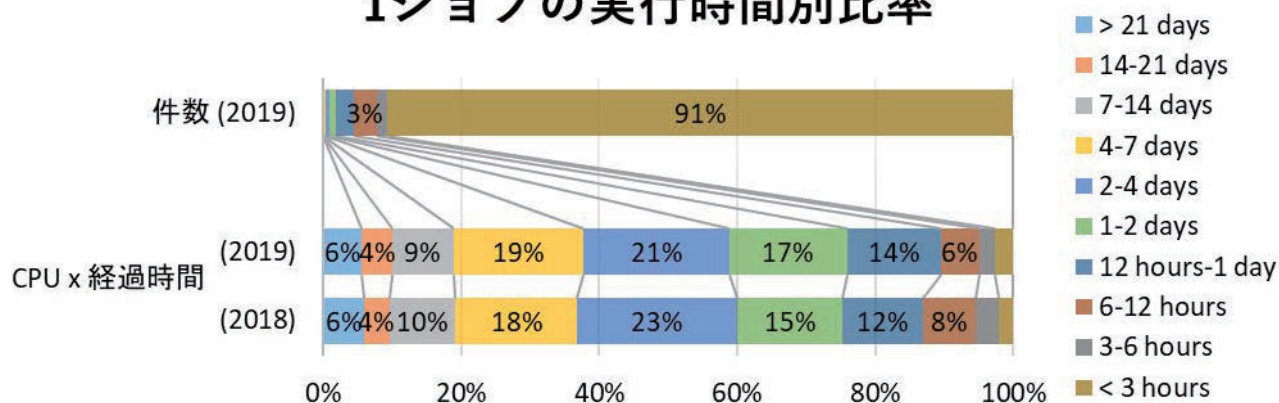
5.6 ジョブの実行状況



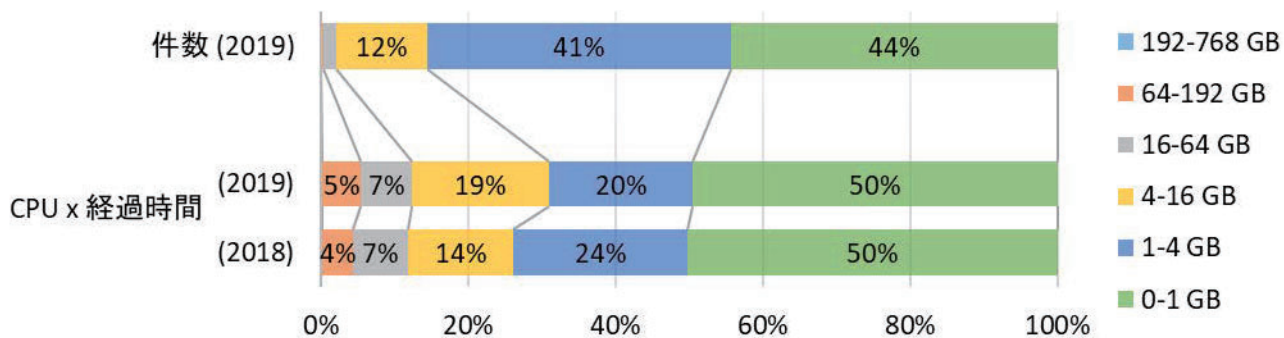
1ジョブあたりの使用コア数別比率



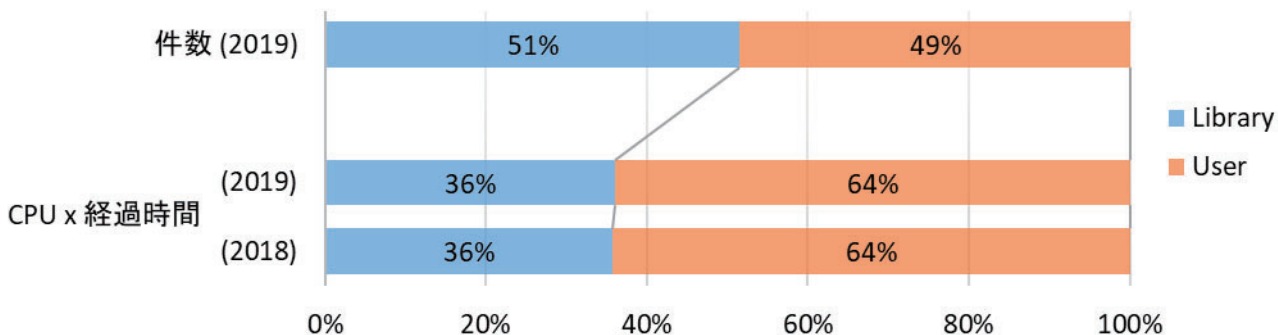
1ジョブの実行時間別比率



プロセスごとの使用メモリー量



ライブラリーアプリケーションの使用割合



6. 資料

6.1 計算科学研究センター運営委員

波田 雅彦	首都大学東京 大学院理工学研究科	教授
岡本 祐幸	名古屋大学 大学院理学研究科	教授
鷹野 景子	お茶の水女子大学 基幹研究院自然科学系	教授
村上 慎吾	中央大学 理工学部	教授
野口 博司	東京大学 物性研究所	准教授
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
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
奥村 久士	分子科学研究所 生命創成探究センター (理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門) (計算科学研究センター)	准教授
石崎 章仁	分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門	教授
古賀 信康	分子科学研究所 生命創成探究センター (協奏分子システム研究センター)	准教授
青木 一洋	基礎生物学研究所 細胞生物学領域 定量生物学研究部門	教授
椎名 伸之	基礎生物学研究所 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 分子細胞生理研究領域 神経機能素子研究部門	教授
福永 雅喜	生理学研究所 システム脳科学研究領域 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

江原 正博	センター長・教授
斉藤 真司	教授
奥村 久士	准教授
石田 干城	助教
大野 人侍	准教授
内山 郁夫	准教授
水谷 文保	技術職員（技術専門員）
岩橋 建輔	技術職員（班長）
内藤 茂樹	技術職員（係長）
澤 昌孝	技術職員（主任）
松尾 純一	技術職員（主任）
長屋 貴量	技術職員
神谷 基司	技術職員
木下 敬正	技術職員
宇野 明子	技術支援員
石原 麻由美	事務支援員
近藤 直子	事務支援員
近藤 紀子	事務支援員

6.3 利用者数とCPU時間の推移

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

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

- a: 機構内利用者にはアイドル課題のための重複を含めません。
b: CPU時間、件数ともライブラリ開発、センター業務使用分などすべてを含みます。
c: S-810、S-820のCPU時間については、スカラー時間とベクトル時間の単純な和です。
d: センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたものです。

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

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

a: 機構内利用者にはアイドル課題のための重複を含めません。

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

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

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

	2010年度	2011年度	2012年度	2013年度	2014年度	2015年度	2016年度	2017年度
計算機システム	Altix4700 PRIMEQUEST SR16000	Altix4700(1月まで) PRIMEQUEST(1月まで) SR16000 PRIMERGY(2月から) UV1000(2月から) PRIMEHPC FX10 (2月から)	SR16000(2月まで) PRIMERGY UV1000 PRIMEHPC FX10	PRIMERGY UV2000 PRIMEHPC FX10	PRIMERGY UV2000 PRIMEHPC FX10	PRIMERGY UV2000 PRIMEHPC FX10	PRIMERGY UV2000 PRIMEHPC FX10	PRIMERGY(9月まで) UV2000(9月まで) PRIMEHPC FX10 NEC LX(10月から)
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	170	190	213	204	214	235	234	236
利 用 者 数								
機 構 内 ^a	49	43	49	39	63	46	50	45
機 構 外	617	645	758	747	773	798	816	869
合 計	666	688	807	786	836	844	866	914
稼働時間(時間)	Altix4700 8,513 PRIMEQUEST 8,567 SR16000 8,576	Altix4700 7,148 PRIMEQUEST 7,180 SR16000 8,752 PRIMERGY 1,412 UV1000 1,412 PRIMEHPC FX10 1,428	SR16000 7,904 PRIMERGY 8,444 UV1000 8,338 PRIMEHPC FX10 8,558	PRIMERGY 8,482 UV2000 8,037 PRIMEHPC FX10 7,875	PRIMERGY 8,561 UV2000 8,574 PRIMEHPC FX10 8,547	PRIMERGY 8,588 UV2000 8,470 PRIMEHPC FX10 8,600	PRIMERGY 8,576 UV2000 8,530 PRIMEHPC FX10 8,577	PRIMERGY 4,251 UV2000 4,262 PRIMEHPC FX10 8,519 NEC LX 4,209
CPU時間利用申請(時間)	(SR16000基準)	-	-	-	-	-	-	-
申 請	1,712,430	1,738,115	8,007,910	13,388,725	14,299,976	176,636,204	251,118,128	264,312,932
許 可	1,581,450	1,675,950	7,832,630	12,841,960	14,147,404	171,317,964	213,838,230	253,788,270
総使用CPU時間 ^b (時間)	12,232,544	14,958,012	50,685,364	90,703,069	95,012,014	102,022,406	113,368,880	186,692,673
ジョブ処理件数 ^b	143,132	204,864	496,719	516,481	979,108	705,470	1,055,412	1,140,631
ライブラリプログラム 新規登録数	15	22	21	9	24	36	29	32
データベース新規登録数	0	0	1	0	0	0	0	0
センター使用論文数 ^d	193	231	257	260	253	210	253	328

	2018年度	2019年度
計算機システム	PRIMEHPC FX10 (9月まで) NEC LX	NEC LX
運 転 方 式	無 人	無 人
プロジェクト数	248	268
利 用 者 数		
機 構 内 ^a	52	51
機 構 外	933	997
合 計	985	1048
稼働時間(時間)	PRIMEHPC FX10 4,392 NEC LX 8,525	NEC LX 8,402
CPU時間利用申請(時間)	-	-
申 請	307,426,854	362,766,273
許 可	292,639,800	331,660,029
総使用CPU時間 ^b (時間)	272,486,299	301,854,255
ジョブ処理件数 ^b	2,520,856	5,494,831
ライブラリプログラム 新規登録数	24	23
データベース新規登録数	0	0
センター使用論文数 ^d	368	314

- 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(分子研リポート2019より転載)

8-4 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。2019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。

2019年12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、旧来「超高速分子シミュレータ」と「高性能分子シミュレータ」の2システムから構成されてきたが、2017年10月の更新以降「高性能分子シミュレータ」の1システムに統合した。本シミュレータでは、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。

高性能分子シミュレータは、主として日本電気製のLXシリーズで構成される1077ノードの共有メモリ型スカラ計算機クラスタであり、全サーバは同一体系のCPU (Intel Xeon) およびOS (Linux 3.10) をもとに、バイナリ互換性を保ち一体的に運用される。システム全体として総演算性能4.24 PFlopsで総メモリ容量222 TByte超である。LXシリーズのクラスタは運用形態を念頭に置いて2タイプから構成されている。1つはTypeNと呼ぶノード単位の利用形態向けクラスタで、2.4 GHzのクロック周波数を持つ40コア、192 GBメモリ構成のノード794台と、メモリ構成を768 GBに強化した26台からなるPCクラスタである。もう1つはTypeCと呼ぶコア単位の利用形態向けクラスタで、3.0 GHzのクロック周波数を持つ36コア、192 GBメモリ構成のノード159台と、24コアにGPGPUを2基搭載した演算性能を強化したノード98台からなるPCクラスタである。インターコネクトは、Omni-Pathアーキテクチャを採用し、全台数を100 Gb/sで相互接続しており、大規模な分子動力学計算などノードをまたがる並列ジョブを高速で実行することができる。これらPCクラスタは9.4 PBの容量を持つ外部磁気ディスクを共有し、Lustreファイルシステムを構成している。

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 16, GAMESS, Molpro, Molcas, TURBOMOLE, 分子動力学分野では、Amber, NAMD, GROMACSなど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1/3強を占めている。

共同利用に関しては、2019年度は268研究グループにより、総数1,007名(2020年2月現在)におよぶ利用者がこれらのシステムを日常的に利用している。近年、共同利用における利用者数が増加傾向にあり、このことは計算科学研究センターが分子科学分野や物性科学分野において極めて重要な役割を担っており、特色のある計算機資源とソフトウェアを提供していることを示している。

計算科学研究センターは、国家基幹技術の一つとして位置づけられているポスト「京」開発事業(フラッグシップ2020プロジェクト)において、ポスト「京」を用いて重点的に取り組むべき社会的・科学的課題(重点課題)のうち、とくにナノサイエンスに関わるアプリケーション開発「重点課題(5) エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」において重要な役割の一端を担っている。また、同「重点課題(7) 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」、ポスト「京」萌芽的課題アプリケーション開発「萌芽的課題 基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」、科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業「計算物質科学人材育成コンソーシアム」、元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>とも連携を行っている。これら5つの大規模並列計算を志向したプロジェクトを支援し、各分野コミュニティにおける並列計算の高度化へさらなる取り組みを促すことを目的として東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所、自然科学研究機構分子科学研究所が共同で

「計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業 (SCCMS)」を運営しており、2019年度はこれらプロジェクトにコンピュータ資源の一部 (20% 未満) を提供・協力している。さらに、ハード・ソフトでの協力以外にも、分野振興および人材育成に関して、スーパーコンピュータワークショップ「凝縮系の構造, 物性, ダイナミクス」と2つのウィンタースクール「第9回量子化学スクール」と「第13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。

2019年度 システム構成

高性能分子シミュレータシステム 4.24 PFlops

クラスタ演算サーバ TypeN	
型番	日本電気 LX 2U-Twin2 サーバ 406Rh-2
OS	Linux
コア数	31,760 コア (40 コア × 794 ノード) 2.4 GHz
総理論性能	2,439 TFlops (3,072 GFlops × 794 ノード)
総メモリ容量	152 TB (192 GB × 794 ノード)
クラスタ演算サーバ TypeNF (メモリ強化)	
型番	日本電気 LX 1U サーバ 110Rh-1
OS	Linux
コア数	1,040 コア (40 コア × 26 ノード) 2.4 GHz
総理論性能	79 TFlops (3,072 GFlops × 26 ノード)
総メモリ容量	19 TB (768 GB × 26 ノード)
クラスタ演算サーバ TypeC	
型番	日本電気 LX 1U サーバ 110Rh-1
OS	Linux
コア数	5,724 コア (36 コア × 159 ノード) 3.0 GHz
総理論性能	549 TFlops (3,456 GFlops × 159 ノード)
総メモリ容量	30 TB (192 GB × 159 ノード)
クラスタ演算サーバ TypeCA (演算性能強化)	
型番	日本電気 LX 4U-GPU サーバ 108Th-4G
OS	Linux
コア数	2,352 コア (24 コア × 98 ノード) 3.0 GHz
総理論性能	226 TFlops (2,304 GFlops × 98 ノード) + 944 TFlops (NVIDIA Tesla P100 × 192, V100 × 20)
総メモリ容量	19 TB (192 GB × 98 ノード)
外部磁気ディスク装置	
型番	DDN SFA14KX
総ディスク容量	9.4 PB
高速ネットワーク装置	
型番	Intel Omni-Path Architecture 100Gbps
フロントエンドサーバ	
型番	日本電気 LX 2U-Twin2 サーバ 406Rh-2
OS	Linux
総メモリ容量	1,536 GB (192 GB × 8 ノード)
運用管理クラスタ	
型番	日本電気 Express5800/R120g-1M
OS	Linux
総メモリ容量	1,024 GB (64 GB × 16 ノード)