

# I 部

## 目 次

1	巻頭言 計算科学研究センター 江原正博	1
2	計算科学研究センター・ナノテクノロジープラットフォーム 事業合同ワークショップ	2
3	計算機システム	
3.1	計算機システムの全体像	3
3.2	キュー構成	5
3.3	キュー係数	6
4	一般報告	
4.1	ライブラリプログラムの開発・公開	7
5	2020 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	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	
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 2020 より転載)	21



## 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きており、2020年度は共用事業枠を含めてグループ数は271、利用者数は1143名になりました。利用者の方々の研究分野も広がってきており、分子科学、物性科学、生物科学だけでなく、有機化学や錯体化学の実験研究にも活用されてきています。幅広い分野の計算のニーズに対応すべく、アプリケーションライブラリの充実を心掛けており、現在、ソフト26件、インターフェース5件を登録しています。これらのハードやソフトが、ユーザーの皆様の研究に活用していただけるように、利便性を重視した運用を心掛けていく所存です。

現在のクラスター演算サーバーは、2017年度に更新されており、GPUを含めた総演算性能は4.24 PFlopsです。しかし、導入から4年が経過しており、繁忙期にはジョブ待ちすることも増えてきています。2022年12月には新しい計算機が導入される予定ですが、もうしばらく現在のサーバーを有効に活用いただけるよう、お願いしたいと思います。ジョブクラスもいくつかございますので、ユーザーの皆様の計算の内容に合わせた利用をしていただくと効率的に計算が実行されると思います。お気づきの点やご質問がございましたら、当センターまでご連絡いただけますと幸いです。

当センターでは、若手研究者の育成、研究者間の情報交換や交流も重視しています。2020年度は、コロナ禍のため全てオンライン開催となりました。2020年9月4日に「分子シミュレーションスクール」を、2020年12月1～2日に「量子化学スクール」を開催し、それぞれ383名、289名の参加をいただいております。計算科学研究センターワークショップは、2021年1月12～13日にナノテクノロジープラットフォーム事業との合同で「データ科学に基づく理論・計算科学と実験科学の協働を目指して」をテーマとして開催しました。ナノプラットフォームにおけるデータ創出について実験の先生方から、データ科学の最近の展開について当該分野で活躍されている理論計算科学分野の若手の先生方からご講演をいただきました。この合同ワークショップにも173名の参加をいただきました。

最近、当センターでは運営体制にも変化がございました。奥村久士准教授は、2018年度より新たに設立されたExCELLSが本務となりましたが、引き続き当センターにも併任としてご協力いただいております。2020年12月には、岡崎圭一准教授が着任されました。新しい体制で運営に力をいれてまいります。

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、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。今後とも皆様の温かいご指導、ご支援を賜りますようよろしくお願いいたします。

## 2. 計算科学研究センター・ナノテクノロジープラットフォーム事業合同ワークショップ

テーマ：「データ科学に基づく理論・計算科学と実験科学の協働を目指して」

日時：2021年1月12日（火）13時30分～13日（水）16時

会場：Zoomによるオンライン配信

参加者：173名

ポスター発表：4件

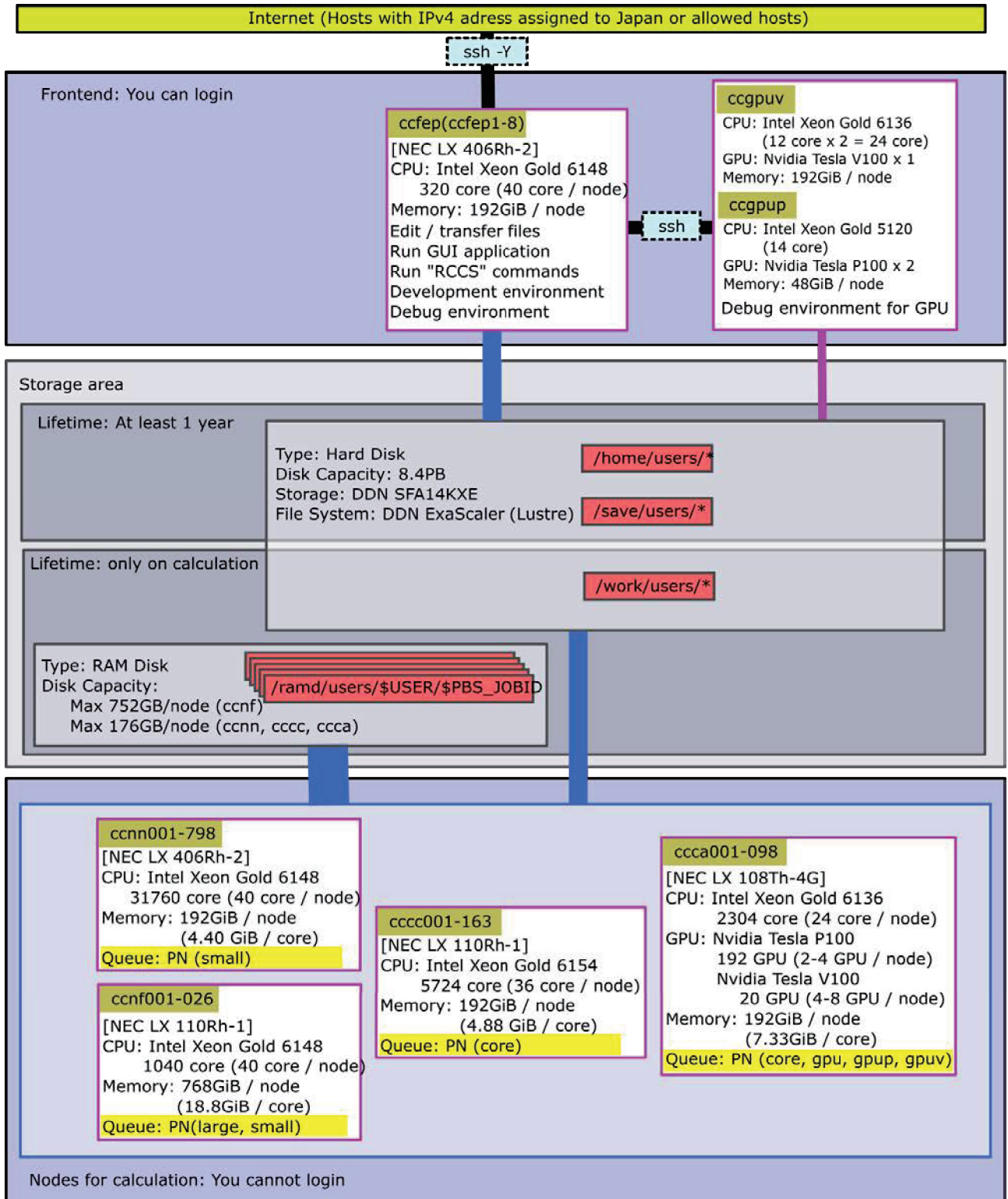
2020年度のスーパーコンピュータワークショップでは、分子科学研究所で実施している計算科学研究センターの共同利用およびナノテクノロジープラットフォーム事業が協力し、分子科学分野におけるデータの活用やマテリアルズインフォマティクスについて議論した。またデータ科学や機械学習に基づく基礎化学や物質・材料科学の最前線で研究を実施している研究者が集まり、研究交流と意見交換をすることによって、将来の物質科学・材料科学研究の展望、また本分野における計算科学研究センターとナノテクノロジープラットフォーム事業の役割についても議論がなされた。オンラインにて合計4件のポスター発表があり、参加者は合計173名であった。

### 講演者

- ・横山 利彦（分子科学研究所）  
「文科省ナノテクノロジープラットフォームの現状と次期マテリアル DX プラットフォームへの期待」
- ・古川 貢（新潟大学）  
「機能性物質の電子スピン共鳴研究の現状」
- ・高見 剛（京都大学）  
「磁化計測技術による機能性材料の理解:マテリアル DX に基づいた材料探索に向けて」
- ・金子 弘昌（明治大学）  
「ケモインフォマティクス・マテリアルズインフォマティクスにおける直接的モデル逆解析とその応用例」
- ・袖山慶太郎（NIMS）  
「マテリアルズ・インフォマティクスによる蓄電池用電解液材料探索」
- ・森 寛敏（中央大学）  
「電子状態インフォマティクスによるイオン液体のガス分離/吸収特性最適化」
- ・畑中 美穂（慶應義塾大学）  
「反応経路のデータベースと機械学習を用いる触媒・発光材料の理解・分子設計」
- ・南谷 英美（分子科学研究所）  
「電子フォノン相互作用の精密計算とその応用」
- ・小林 正人（北海道大学）  
「量子化学計算とデータ科学の併用による触媒・表面吸着系の解析と予測」
- ・田代 基慶（東洋大学）  
「光学活性を持つ有機小分子の de novo 設計」
- ・藤波美起登（早稲田大学）  
「運動エネルギー汎関数の開発、反応予測、反応条件最適化に対する量子化学計算と機械学習の応用」

### 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	4000/72 2560/48 1600/30 960/16 320/12	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 1 日以下で要求コア数が 4-18 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	20	update 9	○ (2021/2/24) <sup>☆</sup>
	20	update 0	○ (2020/6/9) <sup>☆</sup>
	18	bugfix 16	◎ (2019/9/10) <sup>☆</sup>
	18	bugfix 12	○ (2019/2/14) <sup>☆</sup>
	18	bugfix 11	○ (2019/2/14) <sup>☆</sup>
	18	bugfix 1	○ (2018/6/4) <sup>☆</sup>
	16	bugfix 15	○ (2018/7/25) <sup>☆</sup>
	16	bugfix 10	○ (2017/10/01) <sup>☆</sup>
	14	bugfix 11	○ (2015/7/21)
	12	bugfix 21	○ (2013/12/10)
CP2K	7.1.0		◎ (2020/2/27) <sup>☆</sup>
	6.1.0		○ (2018/11/22) <sup>☆</sup>
CRYSTAL	17	1.0.2	○ (2020/1/27)
	14	1.0.4	○ (2016/5/11)
DIRAC	18.0		○ (2019/5/14)
GAMESS	2020	Jun30	○ (2020/8/19)
	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) <sup>☆</sup>
	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	1.6.0		○ (2020/12/28) <sup>☆</sup>
	1.4.0		○ (2019/11/21) <sup>☆</sup>
	1.3.0		○ (2018/9/4) <sup>☆</sup>
	1.1.6		○ (2017/12/13) <sup>☆</sup>
	1.1.5		○ (2017/8/4)
GROMACS	2020.6		○ (2021/3/8) <sup>☆</sup>
	2020.4		○ (2020/10/12) <sup>☆</sup>
	2020.2		○ (2020/5/13) <sup>☆</sup>
	2019.6		◎ (2020/3/5) <sup>☆</sup>
	2019.4		○ (2019/10/8) <sup>☆</sup>
	2019.2		○ (2019/4/18) <sup>☆</sup>
	2018.8		○ (2019/10/8) <sup>☆</sup>
	2018.7		○ (2019/7/19) <sup>☆</sup>
	2018.6		○ (2019/3/27) <sup>☆</sup>
	2018.3		○ (2018/9/4) <sup>☆</sup>
	2018.1		○ (2018/4/17)
	2016.6		○ (2019/2/22) <sup>☆</sup>
	2016.5		○ (2018/4/17) <sup>☆</sup>
	2016.4		○ (2017/10/01) <sup>☆</sup>
	2016.3		○ (2017/3/16) <sup>☆</sup>
	2016.1		○ (2017/2/2) <sup>☆</sup>
	5.1.5		○ (2018/4/17) <sup>☆</sup>
5.1.4		○ (2018/1/19) <sup>☆</sup>	

	4.5.5		○ (2012/6/12) <sup>☆</sup>
GRRM	17		○ (2021/1/27)
	14		◎ (2015/7/29)
	11		○ (2012/9/26)
LAMMPS	29Oct20		○ (2021/3/5) <sup>☆</sup>
	7Aug19		◎ (2019/11/14) <sup>☆</sup>
	22Aug18		○ (2018/11/6) <sup>☆</sup>
	16Mar18		○ (2018/5/10) <sup>☆</sup>
Molpro	2020.1.2		○ (2020/10/20)
	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) <sup>☆</sup>
	2.11		○ (2017/10/1) <sup>☆</sup>
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	20.10		○ (2020/12/7)
	(2019/6/4)		◎ (2019/6/7)
ORCA	4.2.1		○ (2020/1/8)
PSI4	1.1		◎ (2018/1/12)
Quantum ESPRESSO	6.7		○ (2021/1/5) <sup>☆</sup>
	6.5		○ (2020/7/9)
	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	7.5		○ (2020/7/30)
	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. 2020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	243	1,018	309,788,728	272,600,993	200,874,522
	所内	14	53	53,199,400	53,139,400	28,603,281
生理学	施設利用	0	0	0	0	0
	所内	2	3	700,000	700,000	87,070
基礎生物学	施設利用	1	3	1,408,000	1,393,920	660,582
	所内	1	1	300,000	300,000	2,808
計算物質科学スパコン共用事業利用枠		10	65	28,750,000	28,750,000	14,592,328
合計		271	1,143	394,146,128	356,884,313	244,820,591

### 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	*
2020年4月	419,001	664	100	664	100	663	100	661	100
5月	459,243	734	100	734	100	734	100	734	100
6月	473,878	710	100	710	100	710	100	710	100
7月	505,357	734	100	734	100	734	100	734	100
8月	509,510	734	100	734	100	734	100	734	100
9月	478,687	710	100	710	100	710	100	710	100
10月	455,451	699	100	699	100	699	100	699	100
11月	475,843	720	100	720	100	720	100	720	100
12月	469,079	734	100	734	100	734	100	734	100
2021年1月	451,904	734	100	734	100	734	100	734	100
2月	423,446	662	99	662	100	662	100	662	100
3月	459,876	734	100	734	100	734	100	730	100
合計	5,581,275	8,569	100	8,569	100	8,568	100	8,561	100

※ \*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	*
2020年4月		458,661	66	13,656,841	65	2,805,492	74	764,684	50	91,822	72
5月		681,401	89	20,571,540	88	2,383,390	57	739,378	44	119,694	85
6月		604,409	82	19,346,102	86	3,162,594	78	797,898	49	131,764	97
7月		641,405	84	21,094,996	90	3,429,924	82	574,093	34	111,635	79
8月		672,791	88	21,127,885	91	3,526,461	84	493,717	29	78,118	55
9月		688,544	93	21,386,023	95	3,372,368	83	515,196	31	100,653	74
10月		674,754	93	20,915,832	94	3,497,250	87	709,643	44	78,286	58
11月		716,469	96	22,569,582	99	3,952,709	96	1,197,038	72	93,228	67
12月		695,749	91	22,363,127	96	3,424,678	82	1,130,844	67	118,066	84
2021年1月		678,563	89	21,819,372	94	3,202,426	76	885,369	52	98,027	70
2月		592,488	86	20,428,380	97	3,322,171	88	686,707	45	83,157	65
3月		680,984	89	22,104,033	95	3,700,921	88	809,347	48	97,047	69
合計		7,786,216	87	247,383,714	91	39,780,384	81	9,303,914	47	1,201,497	73

※ 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
2020年4月		195	16,137	39,466	10,519	66,317
5月		437	24,855	28,636	4,049	57,977
6月		353	20,460	56,489	20,607	97,909
7月		900	19,882	84,558	29,284	134,624
8月		327	21,319	89,936	33,326	144,908
9月		689	21,516	71,441	71,573	165,219
10月		1,146	24,896	52,295	46,510	124,847
11月		1,419	35,995	92,144	25,819	155,377
12月		3,501	18,178	112,119	64,115	197,913
2021年1月		2,130	26,216	163,816	85,839	278,001
2月		6,388	30,354	74,140	46,595	157,477
3月		6,230	35,019	121,685	97,960	260,894
合計		23,715	294,827	986,725	536,196	1,841,463

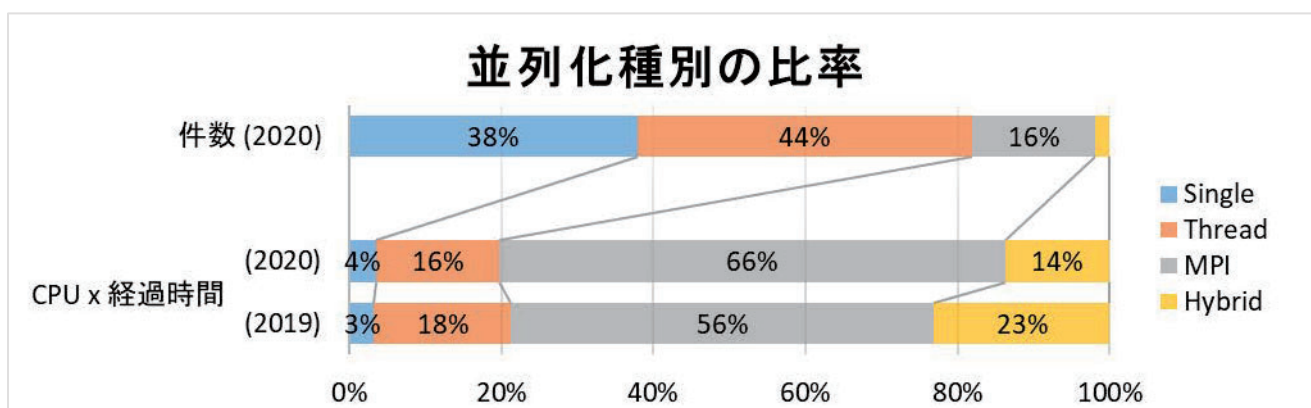
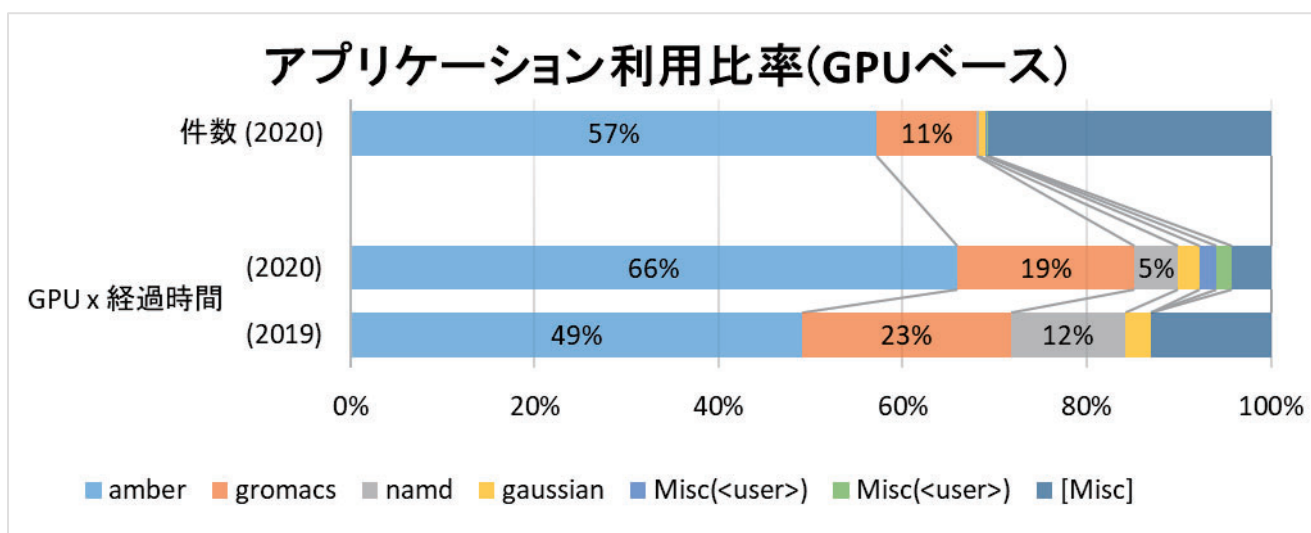
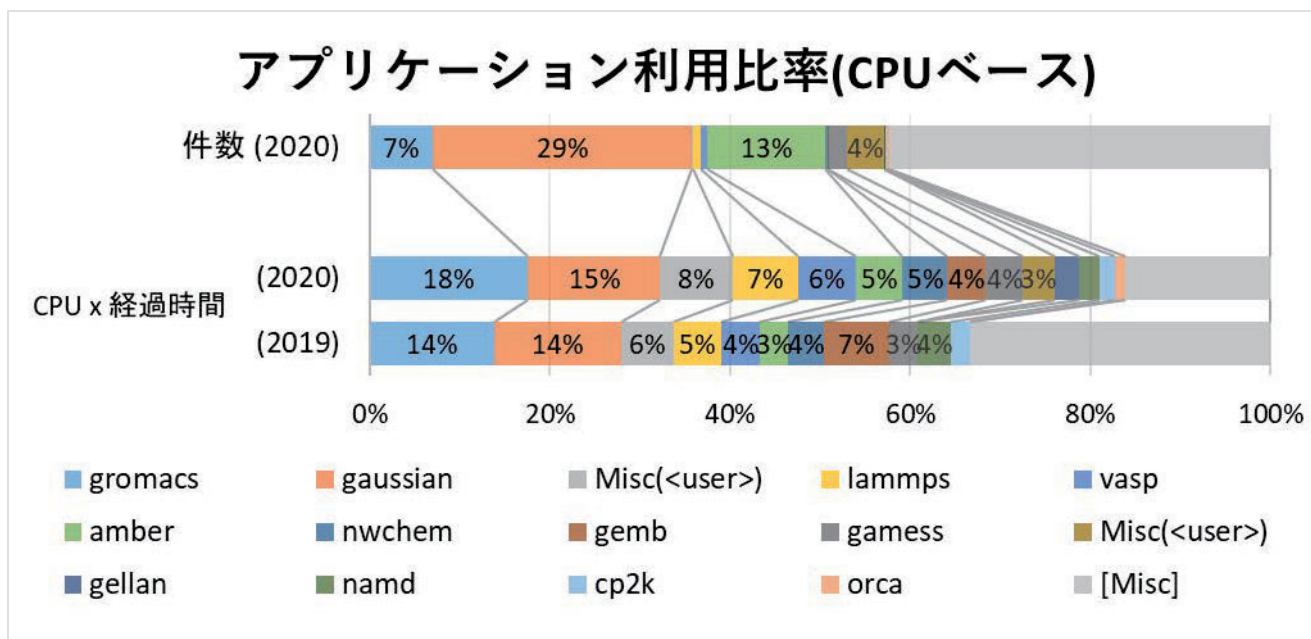
#### 5.4 クラス別CPU使用時間

	PN large	PN small	PN core	PN gpu	Queue 合計	ETC	総合計
2020年4月	453568:27:20	13661933:13:20	3031859:37:36	538316:22:25	17685677:40:41	0:00:00	17685677:40:41
5月	665052:13:20	20587888:30:40	2435847:44:36	686920:25:26	24375708:54:02	0:00:00	24375708:54:02
6月	538525:56:40	19411984:52:40	3227778:02:43	732713:59:55	23911002:51:58	0:00:00	23911002:51:58
7月	544319:11:20	21192081:56:40	3696634:21:57	307382:49:10	25740418:19:07	0:00:00	25740418:19:07
8月	637635:57:20	21163039:13:20	3728305:37:18	291871:50:03	25820852:38:01	0:00:00	25820852:38:01
9月	644861:14:40	21429705:54:40	3575629:13:54	311934:33:05	25962130:56:19	0:00:00	25962130:56:19
10月	485266:51:20	21105318:54:00	3776440:30:33	430451:55:04	25797478:10:57	0:00:00	25797478:10:57
11月	557467:38:00	22728582:56:00	4660193:09:43	489553:40:57	28435797:24:40	0:00:00	28435797:24:40
12月	571253:20:40	22487622:43:20	3760444:39:11	795077:34:17	27614398:17:28	0:00:00	27614398:17:28
2021年1月	635445:35:20	21862491:25:48	3516374:09:46	571419:41:41	26585730:52:35	0:00:00	26585730:52:35
2月	482197:58:40	20538670:07:20	3670327:19:52	338550:22:50	25029745:48:42	0:00:00	25029745:48:42
3月	474364:12:00	22310652:48:40	4033546:11:55	476721:37:49	27295284:50:24	0:00:00	27295284:50:24
合計	6689958:36:40	248479972:36:28	43113380:39:04	5970914:52:42	304254226:44:54	0:00:00	304254226:44:54

#### 5.5 クラス別ジョブ処理件数

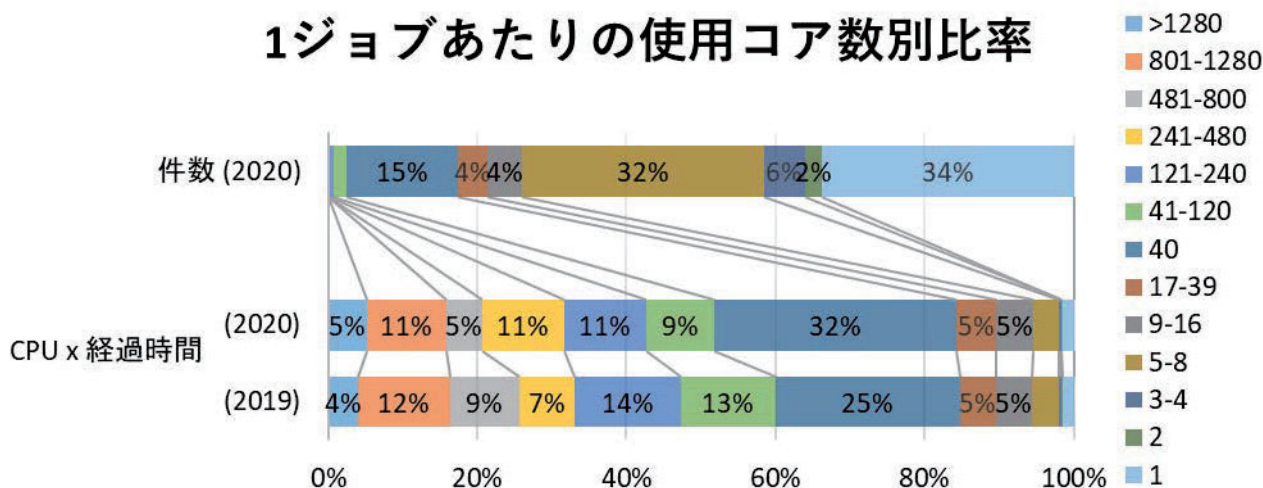
	PN large	PN small	PN core	PN gpu	合計
2020年4月	126	16,206	42,994	6,991	66,317
5月	190	25,102	29,564	3,121	57,977
6月	53	20,760	59,286	17,810	97,909
7月	156	20,626	94,233	19,609	134,624
8月	138	21,508	95,565	27,697	144,908
9月	152	22,053	80,632	62,382	165,219
10月	216	25,826	61,055	37,750	124,847
11月	344	37,070	107,591	10,372	155,377
12月	3,005	18,674	122,289	53,945	197,913
2021年1月	1,566	26,796	206,116	43,523	278,001
2月	344	36,398	82,924	37,811	157,477
3月	2,178	39,071	158,047	61,598	260,894
合計	8,468	310,090	1,140,296	382,609	1,841,463

5.6. ジョブの実行状況

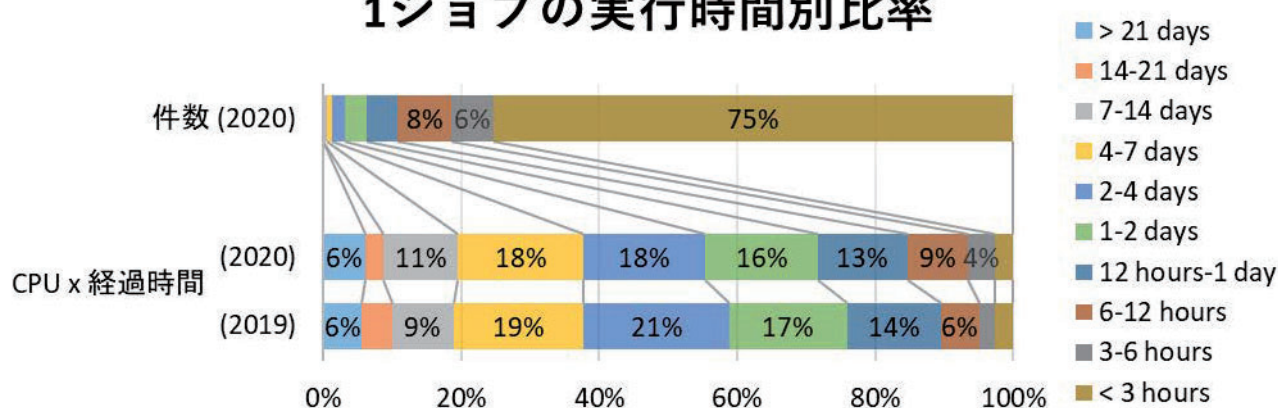




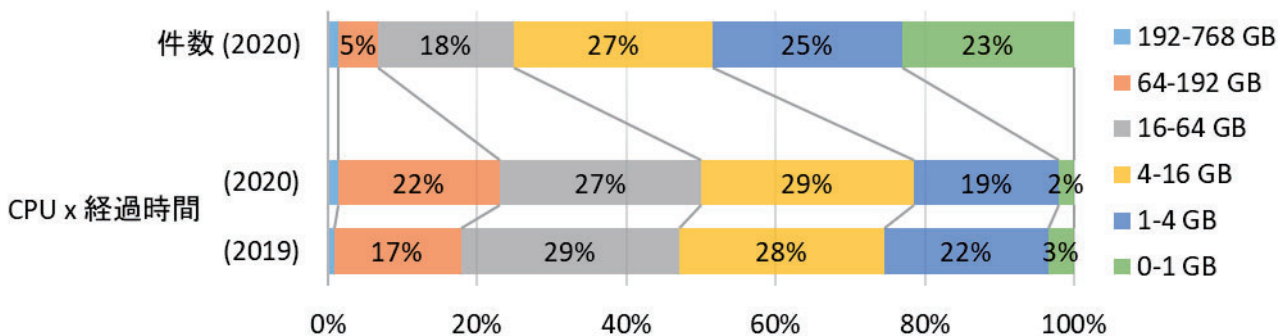
## 1ジョブあたりの使用コア数別比率



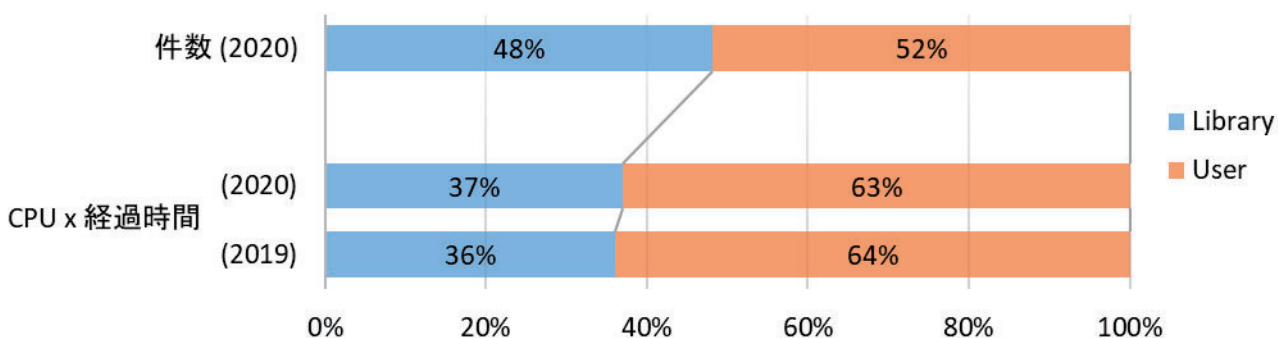
## 1ジョブの実行時間別比率



## ノードジョブのノード平均使用メモリー量



## 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

鷹野 景子	お茶の水女子大学 基幹研究院自然科学系	教授
尾崎 泰助	東京大学 物性研究所	教授
森 寛敏	中央大学 理工学部	教授
村上 慎吾	中央大学 理工学部	教授
望月 敦史	京都大学 ウイルス・再生医科学研究所	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
南谷 英美	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
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
内山 郁夫	基礎生物学研究所 理論生物学領域 ゲノム情報研究室	准教授
北城 圭一	生理学研究所 システム脳科学研究領域 神経ダイナミクス研究部門	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
岩橋 建輔	技術職員（班長）
水谷 文保	技術職員（技術専門員）
内藤 茂樹	技術職員（係長）
澤 昌孝	技術職員（主任）
長屋 貴量	技術職員（主任）
神谷 基司	技術職員
木下 敬正	技術職員
矢崎 稔子	特任専門員
宇野 明子	技術支援員
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 <sup>a</sup>	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 <sup>b,c</sup> (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 <sup>b</sup>	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 <sup>d</sup>	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 <sup>a</sup>	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 <sup>b,c</sup> (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 <sup>b</sup>	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 <sup>d</sup>	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 <sup>a</sup>	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 <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	186,692,673
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	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 <sup>d</sup>	193	231	257	260	253	210	253	328

	2018年度	2019年度	2020年度
計算機システム	PRIMEHPC FX10 (9月まで) NEC LX	NEC LX	NEC LX
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	248	268	271
利 用 者 数			
機 構 内 <sup>a</sup>	52	51	57
機 構 外	933	997	1086
合 計	985	1048	1143
稼働時間 (時間)	PRIMEHPC FX10 4,392 NEC LX 8,525	NEC LX 8,402	NEC LX 8,568
CPU時間利用申請 (時間)	-	-	-
申 請	307,426,854	362,766,273	394,146,128
許 可	292,639,800	331,660,029	356,884,313
総使用CPU時間 <sup>b</sup> (時間)	272,486,299	301,854,255	304,254,227
ジョブ処理件数 <sup>b</sup>	2,520,856	5,494,831	1,841,463
ライブラリプログラム 新規登録数	24	23	15
データベース新規登録数	0	0	0
センター使用論文数 <sup>d</sup>	368	314	252

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2020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年度に分子科学研究所の電子計算機センターから岡崎共通研究施設の計算科学研究センターへの組織改組が行われ、現在は分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所の3研究所により運営されている。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。2020年度においても、計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業や各種スクールの開催をはじめとした様々な活動を展開している。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。

2021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、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、2020年度は271研究グループにより、総数1,103名（2021年3月末現在）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、生物物理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。また最近、錯体化学分野や有機化学分野など幅広い分野の研究者の利用も増加している。

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スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム、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3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、2020年度はこれらプロジェクトにコンピュータ資源の一部（10%以下）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、計算科学研究センター・

ナノテクノロジープラットフォーム事業合同ワークショップ「データ科学に基づく理論・計算科学と実験科学の協働を目指して」と2つのスクール「第10回量子化学スクール」と「第14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。また、東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所、大阪大学ナノサイエンスデザインセンターと協力し、我が国の最先端の計算物質科学技術を振興し、世界最高水準の成果創出と、シミュレーション技術、材料情報科学技術の社会実装を早期に実現するため、計算物質科学協議会を設立・運営し、分野振興を行っている。

## 2020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)