

I 部

目 次

1	巻頭言 計算科学研究センター 岡崎圭一	1
2	スーパーコンピュータワークショップ 2021	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	2021 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 2021 より転載)	21

1 巻頭言

計算科学研究センター
岡崎圭一

自然科学研究機構計算科学研究センターのスーパーコンピューターシステムをご利用頂きありがとうございます。本スーパーコンピューターシステムは、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。2021年度は共用事業枠を含めてグループ数は278、利用者数は1175名となり過去最高を記録し続けております。利用者の方々の研究分野は、分子科学、物性科学の各分野を中心に、生物科学にも広がりを見せております。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28件、ログインノードで利用できるビューア5件を登録しています。一例として、昨年度話題になりましたタンパク質立体構造AI予測ソフトAlphaFoldを一早く導入してご活用頂きました。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。

今年度12月には、いよいよ新しい計算機が導入されます。新しい計算機では、CPUコア数が現行システムの2.6倍になり、GPUもアップデートされます。ますますユーザーの皆様の研究に貢献できることが期待されます。ただし、新システムへの移行のため9月末に現行システムの停止が予定されていますので、ご注意ください。現行システムのデータは新システムへそのまま移行されますが、移行期間の間はデータにアクセスできなくなる可能性がありますので、必要なデータはお手元にコピーされるようお願いいたします。移行期間を念頭に置かれて、計画的な計算機利用をお願いいたします。

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。2021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。2021年9月7～9日に「分子シミュレーションスクール」を、2021年11月30日～12月1日に「量子化学スクール」を開催し、それぞれ377名、482名の参加をいただきました。計算科学研究センターワークショップは、2022年1月11～12日に「生体分子の構造・機能・デザインの計算科学」をテーマとして開催しました。タンパク質、脂質等の生体分子について計算科学を専門とされる先生8名による講演と、企業からお招きした講師によるOpenACCを用いた並列コンピューティング講習会を開催しました。このワークショップにも125名の参加をいただき、おかげさまで盛況に開催できました。

計算科学研究センターでは、今後も大規模高速計算環境やソフトウェアを提供するとともに、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 2021

テーマ : 「生体分子の構造・機能・デザインの計算科学」

日時 : 2022年1月11日(火) ~ 12日(水)

会場 : Zoomによるオンライン配信

参加者 : 125名

ポスター発表 : 10件

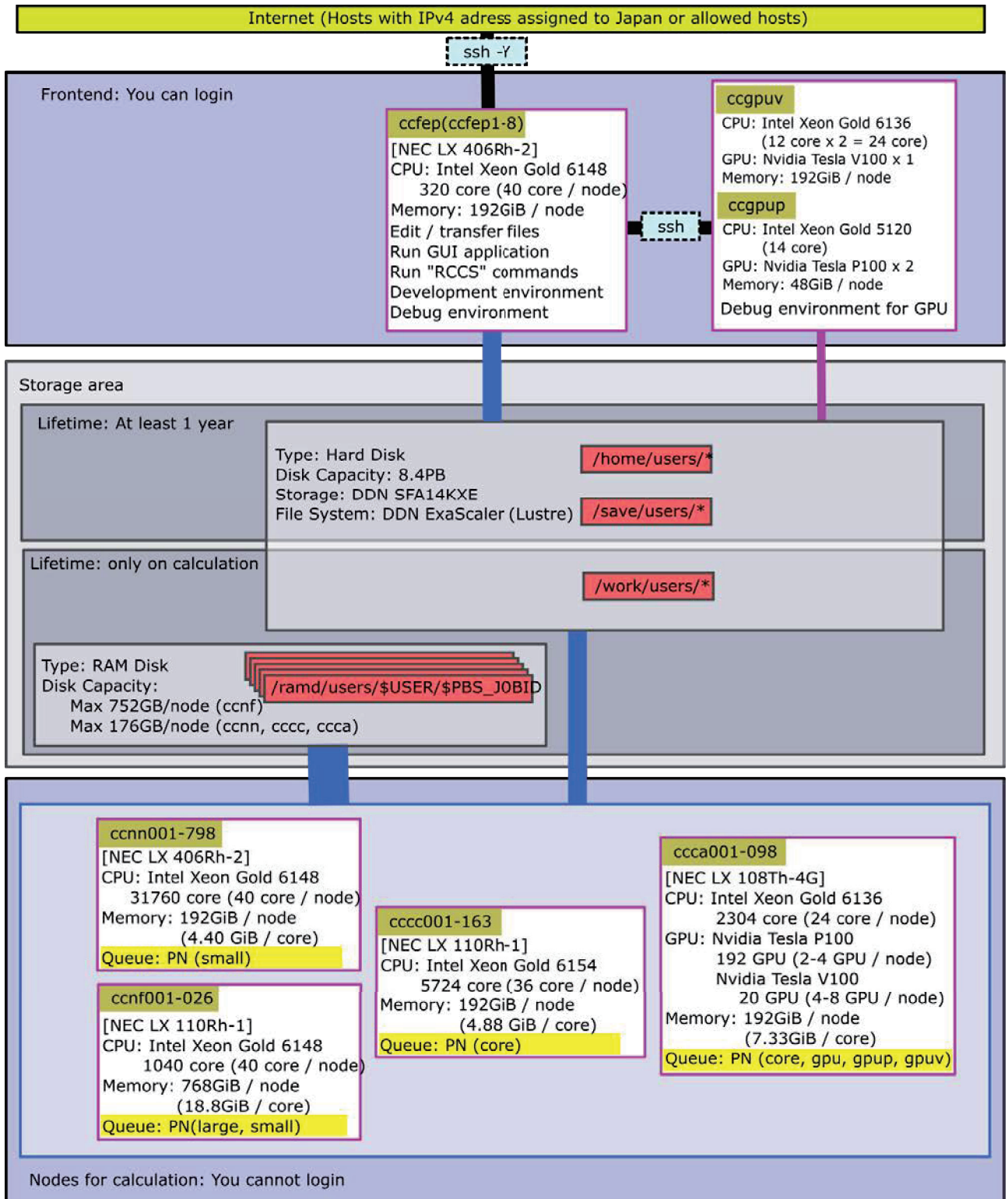
2021年度のスーパーコンピュータワークショップでは、「生体分子の構造・機能・デザインの計算科学」というテーマでワークショップを開催した。理論・計算科学研究に取り組んでおられる方々を講師にお招きし、最新の成果、これからの可能性や展望をご紹介いただくためご講演いただき、質疑応答にてご討論いただいた。多くの方に幅広く参加していただけるようポスターセッションを設け、合計10件の発表があった。また NVIDIA より講師をお招きして OpenACC による GPU プログラミングの講習会を行った。参加者は合計125名であった。

講演者

- ・古賀信康 (ExCELLS)
「整合性原理と新規タンパク質デザイン」
- ・黒田大祐 (東京大学)
「抗体設計に関する分子シミュレーション研究」
- ・高田彰二 (京都大学)
「ATP 合成酵素の分子シミュレーション研究」
- ・丹愛彦 (NVIDIA)
「OpenACC 講習会」
- ・篠田渉 (岡山大学)
「生体高分子自己集合系の分子シミュレーション」
- ・奥村久士 (ExCELLS)
「新型コロナウイルスの増殖とアルツハイマー病の発症に関するタンパク質の分子動力学シミュレーション」
- ・野口博司 (東京大学)
「生体膜のダイナミクス：反応拡散波と膜変形のカップリング、非平衡ゆらぎ」
- ・林重彦 (京都大学)
「分子シミュレーションによるタンパク質分子機能活性化の理論的解明」
- ・古田忠臣 (東京工業大学)
「分子シミュレーションで探る膜トランスポーターの構造ダイナミクス」

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	任意(応相談)	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, ccgpuv は CPU 時間で CPU 点数が消費されます。(ccgpuv は 2019/7 に稼働開始)
- 会話処理の ccgpup では CPU 点数が消費されません。(ccgpup は 2019/10 に公開開始)
- 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.
ABINIT-MP	A software for fast Fragment-Molecular-Orbital (FMO) calculations.
AlphaFold	AI program for predictions of protein structure.
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.
DCDFTBMD	Huge-system quantum mechanical molecular dynamics simulation program
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
	7.8.2		-
ABIINT-MP	Ver2	Rev4	2021/10/19
	Ver1	Rev22	2021/10/19
AlphaFold	2.2.0		2022/3/14
	2.1.1		2021/11/8
	2	(2021/8/19)	2021/8/23
	2	(2021/7/20)	2021/7/26
Amber	20	update 12	2022/1/17
	20	update 9	2021/2/24
	20	update 0	2020/6/9
	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	2017/10/1
	14	bugfix 11	2015/7/21
	12	bugfix 21	2013/12/10
AutoDock	4.2.6		-
CP2K	9.1		2022/2/1
	8.2.0		2021/6/22
	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
DCDFTBMD	2.0		2022/3/1
DIRAC	19.0		2021/5/19
	18.0		2019/5/14
GAMESS	2021	Jun30	2021/8/19
	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.02	2022/3/14
	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	1.7.0		2021/10/22
	1.6.0		2020/12/28
	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	2021.4		2021/11/10
	2021.2		2021/5/13

	2020.7		2021/5/13
	2020.6		2021/3/8
	2020.4		2020/10/12
	2020.2		2020/5/13
	2019.6		2020/3/5
	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	17		2021/1/27
	14		2015/7/29
	11		2012/9/26
LAMMPS	29Sep21		2021/10/13
	29Oct20		2021/3/5
	7Aug19		2019/11/14
	22Aug18		2018/11/6
	16Mar18		2018/5/10
Molpro	2021.3.1		2021/11/29
	2021.1.0		2021/5/21
	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	44	2021/7/14
	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	2013.12.1.1		2021/6/3
	2013.5.0		2015/4/20
NWChem	7.0.2		2022/3/9
	6.8		2018/1/22
OpenMolcas	21.10		2021/12/6
	20.10		2020/12/7
	(2019/6/4)		2019/6/7
ORCA	5.0.3		2022/2/22
	5.0.2		2021/12/9

	4.2.1		2020/1/8
PSI4	1.5		2022/3/15
	1.1		2018/1/12
Quantum ESPRESSO	6.8		2021/12/15
	6.7		2021/1/5
	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	4.1.5		2021/9/27
	4.0.2		2019/3/14
	3.1		2012/8/16
SMASH	2.2.0		2017/5/16
TURBOMOLE	7.6		2021/12/23
	7.5.1		2021/11/22
	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

5. 2021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	253	1,085	344,069,906	255,100,313	195,848,026
	所内	13	46	41,928,900	41,928,900	29,826,356
生理学	施設利用	0	0	0	0	0
	所内	2	3	650,000	650,000	208,566
基礎生物学	施設利用	1	2	1,408,000	1,154,560	1,077,664
	所内	0	0	0	0	0
計算物質科学スパコン共用事業利用枠		9	56	23,300,000	23,300,000	5,916,198
合計		278	1,192	411,356,806	322,133,773	232,876,810

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	*
2021年4月	405,956	664	100	664	100	664	100	662	100
5月	433,278	734	100	734	100	734	100	734	100
6月	433,106	710	100	710	100	710	100	710	100
7月	480,400	734	100	734	100	734	100	734	99
8月	457,727	734	100	734	100	734	100	734	99
9月	444,680	710	99	710	100	710	100	710	99
10月	441,671	699	100	699	100	699	100	699	100
11月	457,569	720	100	720	100	720	100	720	100
12月	450,079	734	99	734	99	734	99	734	99
2022年1月	450,944	734	100	734	100	734	100	734	100
2月	426,461	662	100	662	100	662	100	662	100
3月	466,554	734	100	734	100	734	100	734	100
合計	5,348,425	8,569	100	8,569	100	8,569	100	8,567	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	*
2021年4月		229,782	33	15,897,610	75	2,408,400	63	217,269	14	51,491	41
5月		558,860	73	19,601,577	84	2,261,783	54	631,936	37	123,598	88
6月		169,864	23	17,894,407	79	2,738,000	67	616,258	38	118,209	87
7月		308,514	40	19,694,672	84	3,492,491	83	758,208	45	127,704	91
8月		406,825	53	18,952,493	81	3,422,708	81	463,527	27	98,002	70
9月		483,849	66	18,926,974	84	3,497,638	86	587,365	36	67,728	50
10月		542,036	75	19,113,053	86	3,250,139	81	811,986	50	111,145	83
11月		563,898	75	21,605,116	94	3,352,017	81	594,919	36	124,111	90
12月		695,237	91	21,650,268	93	3,315,751	79	656,255	39	141,410	100
2022年1月		733,584	96	22,256,136	95	3,348,434	80	573,536	34	121,558	86
2月		573,720	83	20,036,192	95	3,254,996	86	692,246	45	117,608	93
3月		717,663	94	22,052,291	95	3,355,776	80	795,021	47	129,033	92
合計		5,983,831	67	237,680,789	87	37,698,135	77	7,398,524	37	1,331,597	81

※ 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
2021年4月		1,974	20,427	106,613	51,723	180,737
5月		466	18,067	210,452	51,356	280,341
6月		805	20,930	373,920	6,321	401,976
7月		1,233	16,136	178,818	27,838	224,025
8月		2,378	43,974	187,676	20,068	254,096
9月		792	36,396	249,076	125,232	411,496
10月		1,071	28,798	146,013	247,640	423,522
11月		1,396	30,586	224,178	71,014	327,174
12月		2,437	56,541	391,246	42,398	492,622
2022年1月		1,825	35,476	1,727,507	173,748	1,938,556
2月		857	39,792	550,655	120,149	711,453
3月		865	37,543	596,790	108,764	743,962
合計		16,099	384,666	4,942,944	1,046,251	6,389,960

5.4 クラス別CPU使用時間

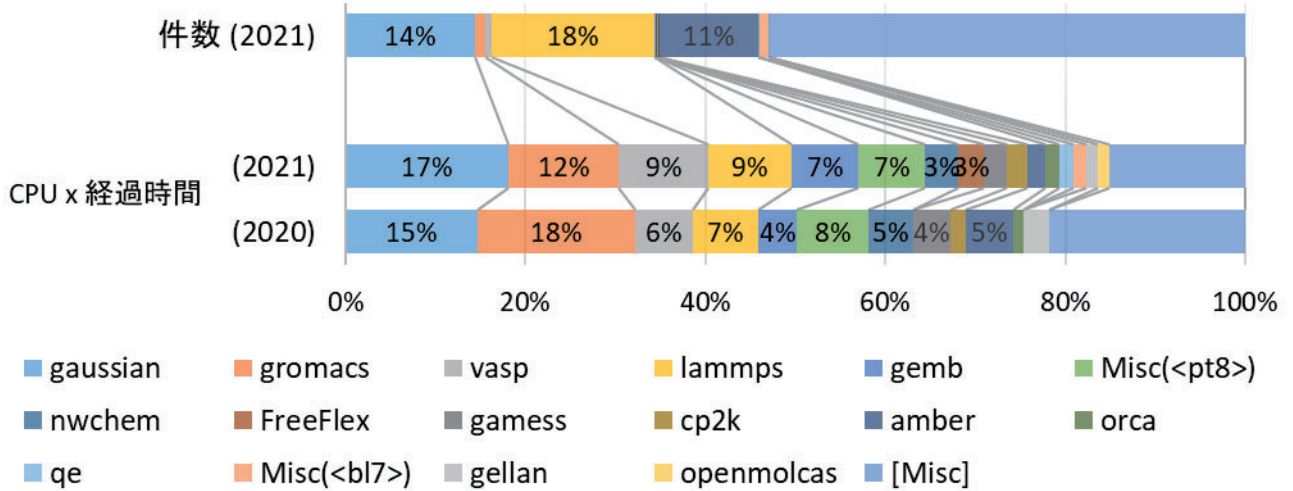
	PN large	PN small	PN core	PN gpu	Queue 合計	ETC	総合計
2021年4月	142743:36:00	15984648:43:20	2468066:00:59	157602:59:09	18753061:19:28	0:00:00	18753061:19:28
5月	516591:03:20	19643845:38:40	2263519:04:26	630199:57:40	23054155:44:06	0:00:00	23054155:44:06
6月	154176:46:00	17910094:44:00	2820467:59:03	533789:41:30	21418529:10:33	0:00:00	21418529:10:33
7月	230070:16:00	19773116:21:20	3799409:55:04	451289:10:30	24253885:42:54	0:00:00	24253885:42:54
8月	390338:45:20	18968978:42:40	3614474:25:08	271760:43:03	23245552:36:11	0:00:00	23245552:36:11
9月	439145:24:40	18971677:18:40	3821805:34:22	263197:09:11	23495825:26:53	0:00:00	23495825:26:53
10月	506737:18:40	19148351:30:40	3528867:21:27	533257:53:22	23717214:04:09	0:00:00	23717214:04:09
11月	482651:56:00	21686362:07:20	3452247:15:01	494688:37:02	26115949:55:23	0:00:00	26115949:55:23
12月	612921:30:40	21732582:41:20	3453029:18:59	518977:13:38	26317510:44:37	0:00:00	26317510:44:37
2022年1月	583082:36:00	22406637:22:00	3509344:07:51	412625:50:15	26911689:56:06	0:00:00	26911689:56:06
2月	506036:18:40	20103875:52:40	3492271:53:53	454970:03:10	24557154:08:23	0:00:00	24557154:08:23
3月	613844:26:40	22156109:03:20	3431136:56:05	719659:48:19	26920750:14:24	0:00:00	26920750:14:24
合 計	5178339:58:00	238486280:06:00	39654639:52:18	5442019:06:49	288761279:03:07	0:00:00	288761279:03:07

5.5 クラス別ジョブ処理件数

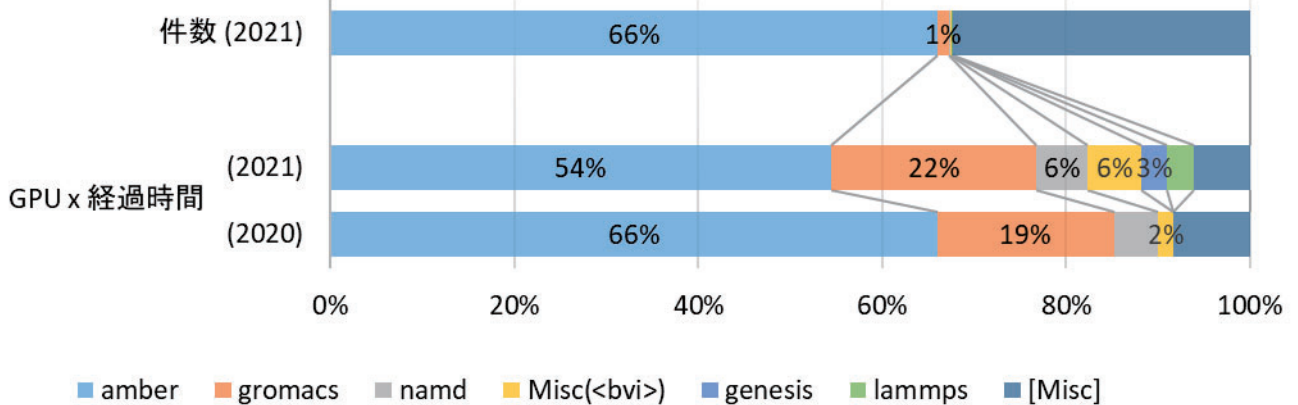
	PN large	PN small	PN core	PN gpu	合 計
2021年4月	101	22,300	110,109	48,227	180,737
5月	267	18,266	210,464	51,344	280,341
6月	613	21,122	374,910	5,331	401,976
7月	253	17,116	192,337	14,319	224,025
8月	296	46,056	191,948	15,796	254,096
9月	460	36,728	281,533	92,775	411,496
10月	550	29,319	155,778	237,875	423,522
11月	748	31,234	242,339	52,853	327,174
12月	557	58,421	394,240	39,404	492,622
2022年1月	325	36,976	1,745,300	155,955	1,938,556
2月	207	40,442	557,633	113,171	711,453
3月	153	38,255	598,715	106,839	743,962
合 計	4,530	396,235	5,055,306	933,889	6,389,960

5.6. ジョブの実行状況

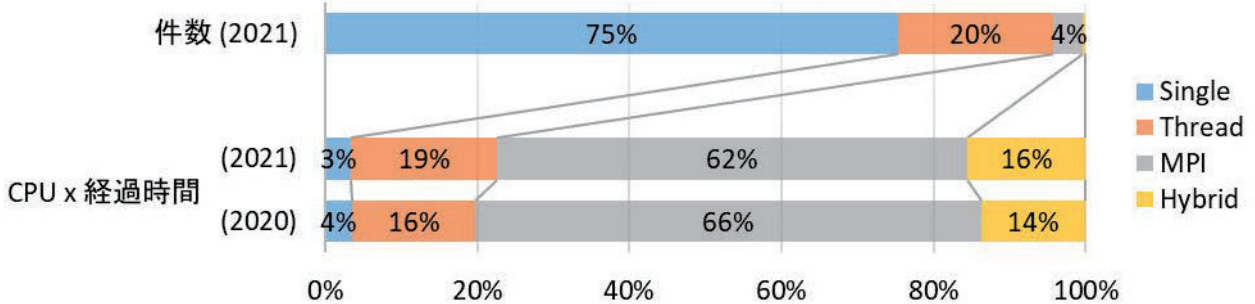
アプリケーション利用比率(CPUベース)



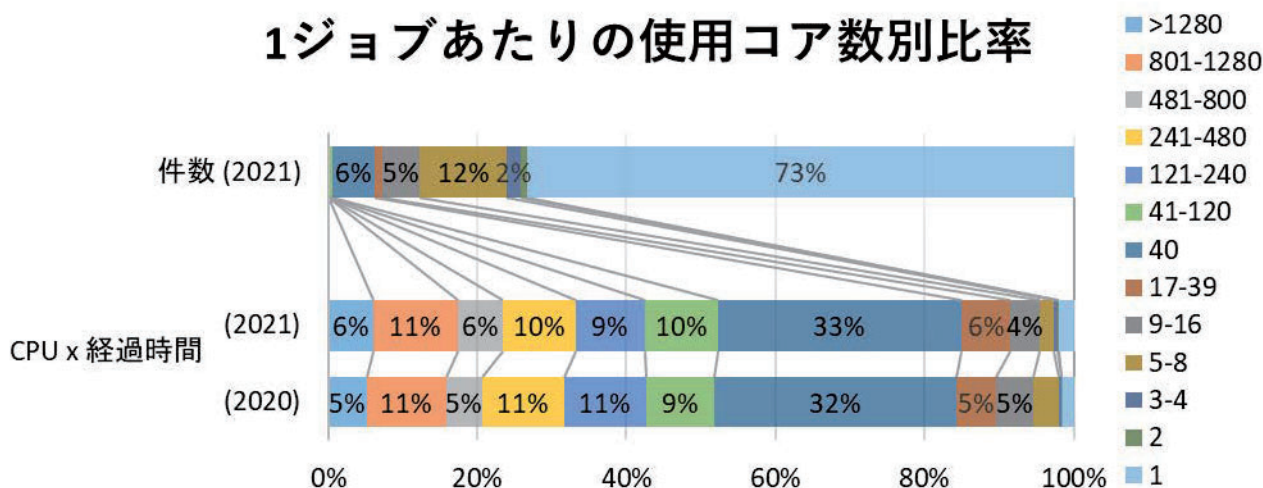
アプリケーション利用比率(GPUベース)



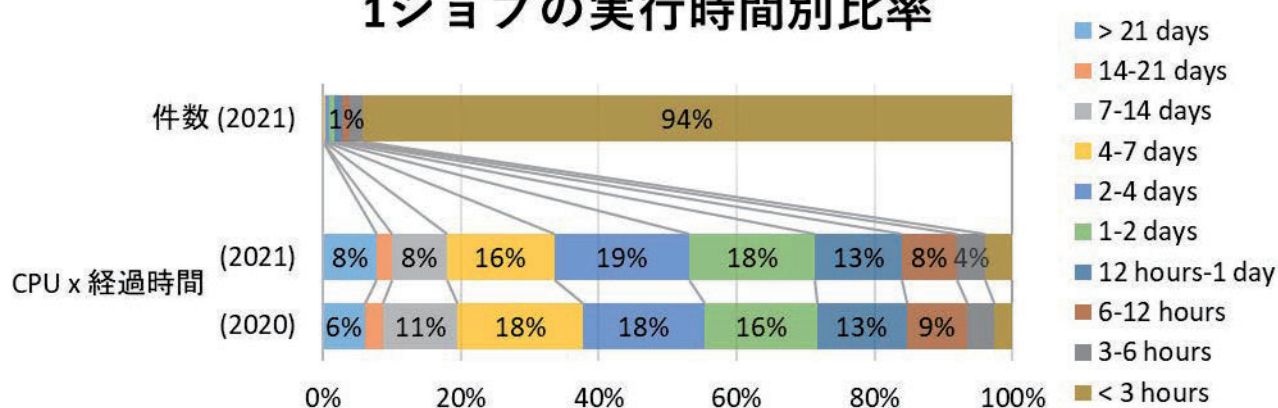
並列化種別の比率



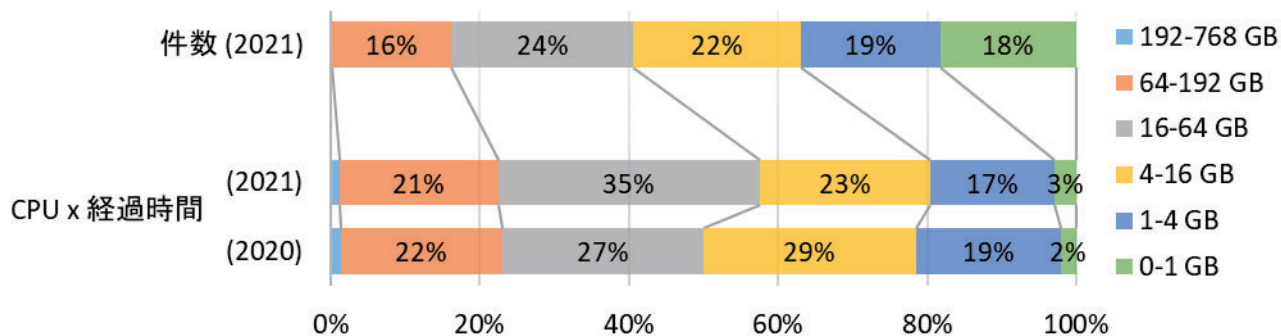
1ジョブあたりの使用コア数別比率



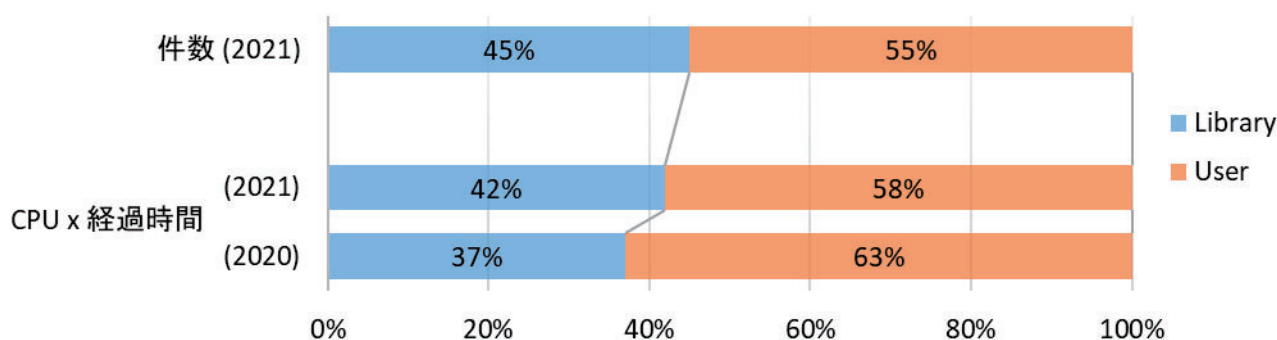
1ジョブの実行時間別比率



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

【 所外委員 】

鷹野 景子	東京家政学院大学	学長
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

【 所内委員 】

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
岡崎 圭一	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 理論・計算分子研究部門)	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
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
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

【 所内オブザーバー 】

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
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
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 (併任)
岡崎 圭一	准教授
奥村 久士	准教授 (併任)
内山 郁夫	准教授 (併任)
大野 人侍	准教授
石田 干城	助教
大貫 隼	助教 (併任)
岩橋 建輔	技術職員 (ユニット長)
水谷 文保	技術職員 (技師)
内藤 茂樹	技術職員 (主任技術員)
神谷 基司	技術職員 (主任技術員)
澤 昌孝	技術職員 (技術員)
長屋 貴量	技術職員 (技術員)
木下 敬正	技術職員 (技術員)
矢崎 稔子	特定契約職員
宇野 明子	技術支援員
浦野 宏子	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～)	SX-3/34R 8,579 SX-5 8,587 SP2 8,574 HPC 8,590 SR2201 8,694 Origin2000 3,570	SX-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 SR16000 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	2020年度	2021年度
計算機システム	PRIMEHPC FX10 (9月まで) NEC LX	NEC LX	NEC LX	NEC LX
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	248	268	271	278
利 用 者 数				
機 構 内a	52	51	57	49
機 構 外	933	997	1086	1143
合 計	985	1048	1143	1192
稼働時間(時間)	PRIMEHPC FX10 4,392 NEC LX 8,525	NEC LX 8,402	NEC LX 8,568	NEC LX 8,569
CPU時間利用申請(時間)	-	-	-	-
申 請	307,426,854	362,766,273	394,146,128	411,356,806
許 可	292,639,800	331,660,029	356,884,313	322,133,773
総使用CPU時間b(時間)	272,486,299	301,854,255	304,254,227	288,761,279
ジョブ処理件数b	2,520,856	5,494,831	1,841,463	6,389,960
ライブラリプログラム新規登録数	24	23	15	29
データベース新規登録数	0	0	0	0
センター使用論文数d	368	314	252	234

- 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2021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。2021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。

2022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、2021年度は278研究グループにより、総数1,187名（2022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、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。また最近では、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、2021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

ワークショップ「生体分子の構造・機能・デザインの計算科学」と2つのスクール「第11回量子化学スクール」と「第15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。

2021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)