

I 部

目 次

1	巻頭言 計算科学研究センター 奥村久士	1
2	スーパーコンピュータワークショップ 2022	2
3	計算機システム	
3.1	NEC 製システム	
3.1.1	計算機システムの全体像	3
3.1.2	キュー構成	5
3.1.3	キュー係数	6
3.2	日本ヒューレット・パッカード社製システム	
3.2.1	計算機システムの全体像	7
3.2.2	キュー構成	9
3.2.3	キュー係数	10
4	一般報告	
4.1	ライブラリプログラムの開発・公開	
4.1.1	NEC 製システム	11
4.1.2	日本ヒューレット・パッカード社製システム	14
5	2022 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	17
5.2	電力使用および計算機稼働状況	17
5.3	計算機利用状況	18
5.4	クラス別 CPU 使用時間	19
5.5	クラス別ジョブ処理件数	19
5.6	ジョブの実行状況	
5.6.1	NEC 製システム	20
5.6.2	日本ヒューレット・パッカード社製システム	22
6	資料	
6.1	計算科学研究センター運営委員	24
6.2	計算科学研究センター職員	25
6.3	利用者数と CPU 時間の推移	26
7	研究施設の現状と将来計画 (分子研レポート 2022 より転載)	29

1. 巻頭言

計算科学研究センター
奥村久士

自然科学研究機構計算科学研究センターでは、スーパーコンピュータシステムを全国の研究者の方々に共同利用を通じてご利用いただいております。利用者数はここ数年増えており、2022年度のグループ数は298、利用者数は1242名に上りました。これは当センター40年余りの歴史の中でも最も多い人数です。これからも多くの方に計算科学研究センターの提供する設備、サービスをご活用いただき、研究の発展に役立てていただければ幸いです。我々の超高速かつ大規模な計算環境は分子理論・物性理論・生体シミュレーションなど多彩な研究が行われています。理論的研究だけでなく、実験においても反応解析や反応設計、物性の研究に理論計算は広く利用されるようになりました。この計算科学研究センターレポートには利用者の方々の研究成果が収録されています。

今年度はスパコンの更新がありました。2022年9月30日にこれまで利用されていたNEC製のスパコンが運用停止し、2023年2月1日より新しくヒューレット・パカード製のスパコンの運用を開始しました。スパコンの切り替えのために4カ月間皆さんに計算資源を提供できなかったことは誠に申し訳なく思います。しかしながら、スパコンの総演算性能は4.096PFlopsから6.68PFlopsに増強されました。皆さまには新しいスパコンを存分にご活用いただき、是非研究成果の創出にお役立ていただければと思います。

計算科学研究センターでは単に計算環境を提供するだけでなく、若手研究者の育成、研究者間の情報交換や交流にも力を入れています。具体的には、毎年「分子シミュレーションスクール」と「量子化学スクール」を開催し、分子シミュレーション分野と量子化学分野それぞれにおいて先導的な立場で活躍されている先生方に講義していただいております。これらのスクールでは先生方に基礎から最先端まで平易に解説していただいておりますので、大学院生や若手研究者の育成の場として好評を博しています。また毎年、「スーパーコンピュータワークショップ」も開催しています。今年度は2023年1月16～17日に「複雑電子状態の理論・計算科学」をテーマとして開催いたしました。主に量子化学分野から精力的に研究に取り組んでおられる方々を講師にお招きし、理論・計算科学の視点から今後取り組むべき問題と必要とされる方法論、そしてそれらを念頭においたこれからの可能性について広く展望していただきました。いずれのイベントも全国の研究者、学生の皆さん誰でも参加できますので、あわせて活用いただければと思います。

計算科学研究センターでは、今後も大規模高速計算環境を提供するとともに、理論・計算科学分野の人材育成や研究交流を通じて理論分子科学の発展の一翼を担うことができると考えております。今後とも皆様のあたたかいご指導、ご支援を賜りますようよろしくお願いいたします。

2. スーパーコンピュータワークショップ 2022

テーマ : 「複雑電子状態の理論・計算科学」
日時 : 2023年1月16日(月)～17日(火)
会場 : Zoomによるオンライン配信(一部ハイブリッド)
参加者 : 121名
ポスター発表 : 4件

2022年度のスーパーコンピュータワークショップは、「複雑電子状態の理論・計算科学」というテーマで開催した。複雑な電子状態を研究対象として先進的な研究を展開されている先生方を講師にお招きし、これまでの研究成果や将来の展望についてご講演、ご討論いただいた。また新たにライブラリにご登録いただいた2つのアプリケーションプログラムについて、ユーザーの方々に広くご活用いただけるよう、それらの機能についてご紹介いただいた。ポスターセッションにおいては4件のポスター発表があり、参加者は合計121名であった。

講演者

- ・望月祐志(立教大学)【ライブラリ登録: ABINIT-MP】
「FMOプログラム ABINIT-MP の現状と今後」
- ・北河康隆(大阪大学)
「多核金属錯体の機能発現機構解明に向けた量子化学的アプローチ」
- ・長谷川淳也(北海道大学)
「系間交差を含む触媒反応経路に関する理論的研究」
- ・清野淳司(早稲田大学)
「量子化学計算と人工知能技術の融合」
- ・波田雅彦(東京都立大学)
「相対論的電子状態理論の開発と NMR 化学シフトの計算」
- ・土持崇嗣(神戸大学)
「人工光合成触媒の理解を目指した半導体表面計算」
- ・藤田貴敏(量子科学技術研究開発機構)
「大規模電子状態計算を用いた有機半導体材料の光電子物性」
- ・西村好史(早稲田大学)【ライブラリ登録: DCDFTBMD】
「量子的分子動力学計算プログラム DCDFTBMD の開発状況と最近の応用事例」
- ・柳井毅(名古屋大学)
「ニューラルネットワーク符号化波動関数計算の量子アルゴリズムの開発」

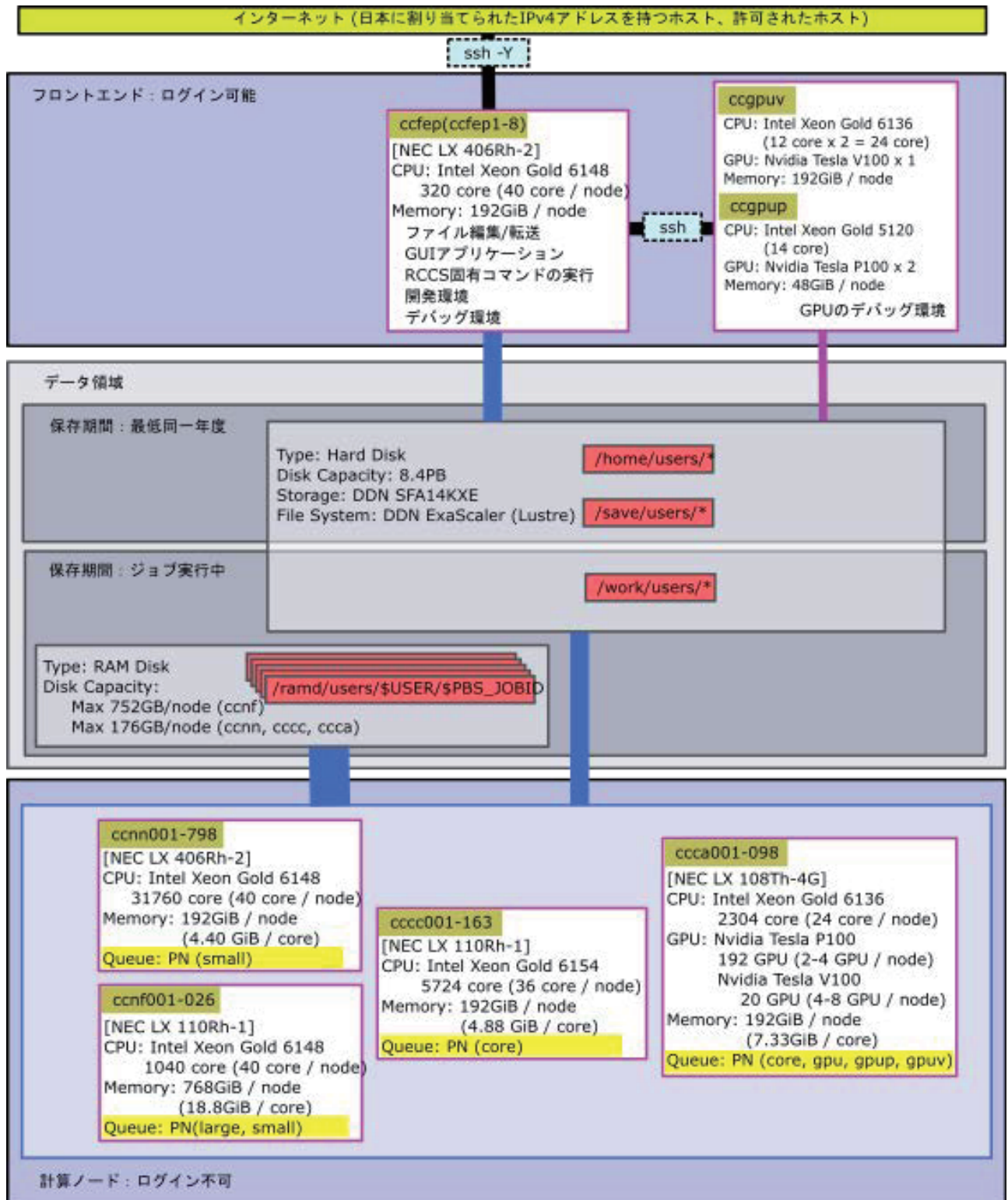
ポスター発表

- ・P-1 酵素反応の QM/MM 解析
(筑波大学) ○庄司光男
- ・P-2 アミノ酸シッフ塩基銅(II)錯体の系統的な励起状態計算
(東京理科大学大学院) ○宮崎亮太郎
- ・P-3 ビリン還元酵素 PcyA-ビリベルジン IX α 複合体の計算科学研究
(茨城大学大学院) 萬代充裕, 飯島愛璃, ○坏優佳, 海野昌喜, 城塚達也, 森聖治
- ・P-4 相対論的 EOM-CC 法を用いた CHFClBr 分子の電子励起状態計算: パリティを破る鏡像異性体間エネルギー差の増大
(京都大学) ○黒田直也, 砂賀彩光, 瀬波大土

3. 計算機システム

3.1. NEC 製システム (2022 年 9 月末まで)

3.1.1 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。

本システムは2022年9月で運用を終了しました。



NEC LX シリーズの筐体

3.1.2. 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。

3.1.3. 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消費されます。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。

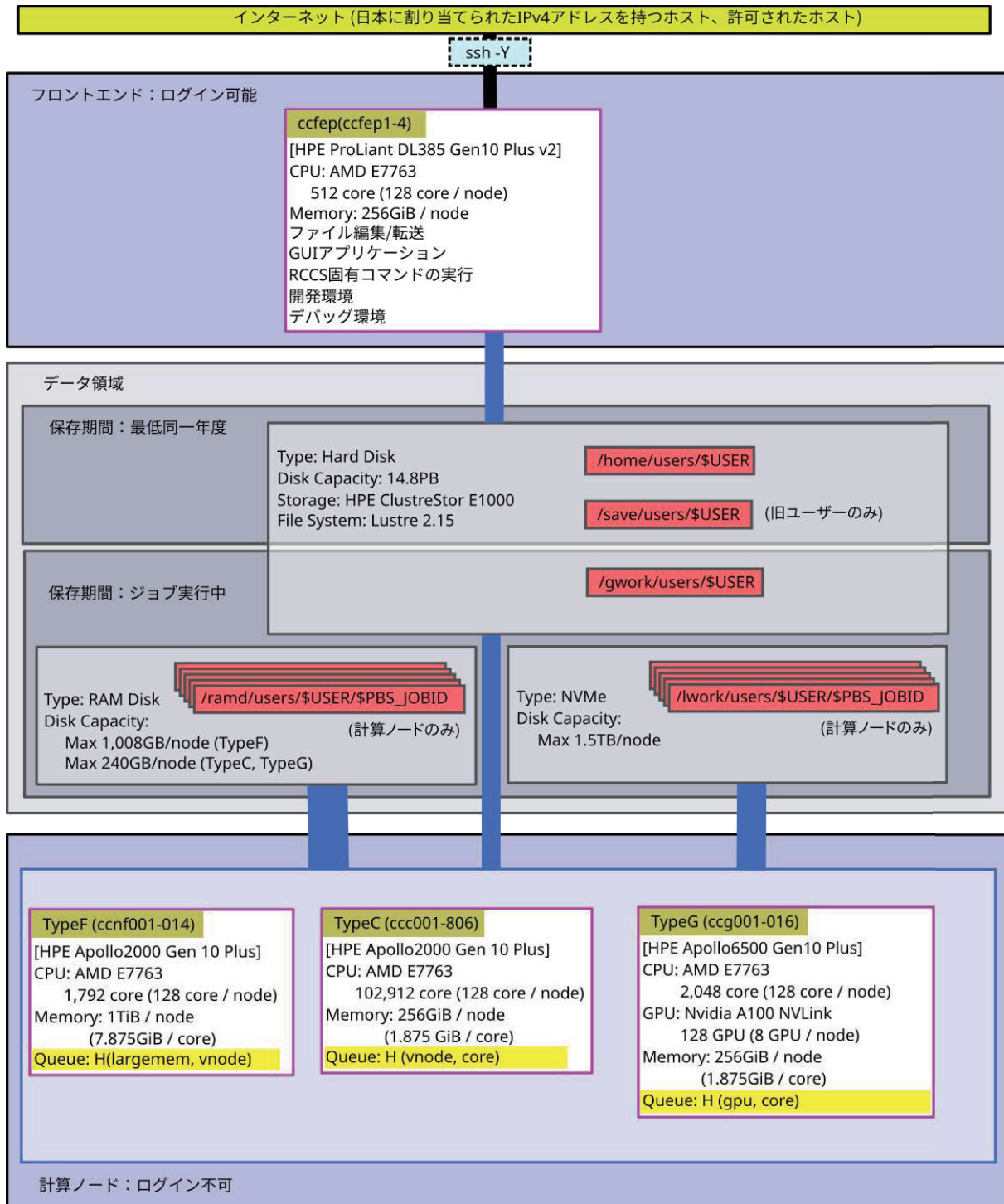
消費点数はジョブタイプ毎に設定されている CPU キュー係数と GPU キュー係数により求められます。

ジョブタイプ(jobtype)	CPU キュー係数	GPU キュー係数
large	42 / (点/(ノード*時間))	-
small	28 / (点/(ノード*時間))	-
core	1.0 / (点/(コア*時間))	-
gpu, gpup	1.0 / (点/(コア*時間))	10 / (点/(GPU*時間))
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)
- 他の場合は、経過時間で CPU 点数が消費されます。

3.2. 日本ヒューレット・パカード社製システム (2023年2月から)

3.2.1. システムの全体像



新たな高性能分子シミュレータシステムとして 2023 年 2 月に運用を開始しました。計算ノードには HPE Apollo2000/Apollo6500 Gen 10 Plus、ログインサーバーには HPE Proliant DL385 Gen Plus v2、外部磁気ディスク装置には HPE ClusterStor E1000 (lustre)、インターコネクには InfiniBand (200 Gbps/100 Gbps)が導入されています。計算ノードの CPU/GPU は直接水冷により効率的に冷却され、さらに、システム全体を HPE Adaptive Rack Cooling System (ARCS)の密閉ラックに格納することで屋内への暖気排気をゼロとし、空調を必要としないシステムとなっています。



図 ラックの外観

3.2.2. 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。

キュー名 (jobtype 名)	計算 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	ジョブ数
H (largemem)	ccf	7.875GiB/ コア	1~14 vnode(s) (64~896 コア)	720 万点以上 240 万点以上 72 万点以上 24 万点以上 24 万点未満	9,600/64 6,400/42 4,096/28 3,200/12 768/8	1,000
H (vnode)	ccc ccf	1.875GiB/ コア	1~50 vnode(s) (64~3,200 コア)			
H (core)	ccc ccg	1.875GiB/ コア	1~63 コア			
H (gpu)	ccg	1.875GiB/ コア	1~48GPU 1~16 コア/GPU			
(専有利用)	ccc	1.875GiB/ コア	応相談			応相談

- 1つの vnode は 64 コアで構成されます。
- 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程度です。
- ジョブの最大時間が 1 日以内のジョブタイプ vnode のジョブは、計算ノード ccf で実行される場合があります。
- ジョブの最大時間が 3 日以内で要求コア数が 4-24 のジョブタイプ core のジョブは、演算ノード ccg で実行される場合があります。
- ジョブが他のジョブとノードを共有する場合があります。
- 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。
- 制限時間は、経過時間で制限されます。

3.2.3. キュー係数

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消費されます。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。

消費点数はジョブタイプ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。

ジョブタイプ(jobtype)	CPU キュー係数	GPU キュー係数
largemem	60 / (点/(ノード*時間))	-
vnode	40 / (点/(ノード*時間))	-
core	1.0 / (点/(コア*時間))	-
gpu	1.0 / (点/(コア*時間))	30 / (点/(GPU*時間))

- 通常は経過時間で CPU 点数が計算、消費されます。
- 会話処理の ccfep では CPU 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。

4.1.1. NEC 製システム (2022 年 9 月末まで) 向けライブラリプログラム一覧

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	22		2022/6/6
	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
Gaussian	2017	Apr20	2017/10/1
	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
GENESIS	2012	B.01	2012/2/7
	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	2022.2.2		2022/7/15
	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

4.1.2. 日本ヒューレット・パッカード社製システム (2023年2月より) 向けライブラリプログラム一覧

名前	内容
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.
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.
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
TURBOMOLE	One of the fastest programs for standard quantum chemical applications.
GaussView	A viewer for Gaussian
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
ABIINT-MP	Ver2	Rev4	2023/2/21
	Ver1	Rev22	2023/2/21
AlphaFold	2.3.1		2023/2/6
	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	22	update 1	2023/1/-
	20	update 13	2023/1/-
CP2K	9.1		2023/1/-
CRYSTAL	17	1.0.2	2023/1/-
DIRAC	19.0		2023/1/27
GAMESS	2022	R2	2023/1/-
	2021	R1	2023/1/-
Gaussian	16	C.02	2022/3/14
	16	C.01	2019/8/2
	16	B.01	2018/3/12
	09	E.01	2015/12/24
GENESIS	2.0.3		2023/1/-
GROMACS	2022.4		2023/1/-
	2021.6		2023/1/-
	2021.4		2023/1/-
GRRM	17		2021/1/27
	14		2015/7/29
LAMMPS	23Jun22		2023/1/-
	29Sep21		2023/1/-
Molpro	2022.3.0		2023/1/-
	2022.2.2		2023/1/-
	2015.1-44		2023/1/-
NAMD	2.14		2023/1/-
NBO	7.0	10	2023/2/14
	7.0	7	2023/1/-
NWChem	7.0.2		2023/3/6
	6.8		2023/1/-
OpenMolcas	22.10		2023/3/6
	21.10		2023/3/6

ORCA	5.0.4		2023/3/20
	5.0.3		2022/2/22
	4.2.1		2020/1/8
PSI4	1.7		2023/1/30
Quantum ESPRESSO	6.8		2023/1/26
ReactionPlus	1.0		2018/1/22
SIESTA	4.1.5		2023/1/-
SMASH	2.2.0		2017/5/16
TURBOMOLE	7.6		2021/12/23

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
VMD	1.9.4	alpha	2023/1/-

5. 2022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	268	1,132	286,235,369	233,404,192	114,241,194
	所内	15	59	36,800,950	35,740,722	18,048,178
生理学	施設利用	1	1	1,550,000	1,200,000	961,711
	所内	2	3	986,000	960,000	398,951
基礎生物学	施設利用	3	4	1,116,000	746,400	2,866
	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	53	25,460,000	25,460,000	3,671,059
合計		298	1,252	352,148,319	297,511,314	137,323,959

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													
		NEC LX								HPE Apollo					
		Type-NF	*	Type-NN	*	Type-CC	*	Type-CA	*	Type-F	*	Type-C	*	Type-G	*
2022年4月	426,375	667	100	667	100	667	100	667	100	-	-	-	-	-	-
5月	446,252	734	99	734	99	734	99	734	99	-	-	-	-	-	-
6月	471,506	710	100	710	100	710	100	710	100	-	-	-	-	-	-
7月	513,500	734	100	734	100	734	100	734	100	-	-	-	-	-	-
8月	508,489	734	100	734	100	734	100	734	100	-	-	-	-	-	-
9月	462,392	701	99	701	99	701	99	701	99	-	-	-	-	-	-
10月	103,193	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
11月	79,931	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
12月	84,935	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
2023年1月	184,409	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
2月	405,029	-	-	-	-	-	-	-	-	672	100	672	100	666	100
3月	444,557	-	-	-	-	-	-	-	-	734	100	734	100	729	100
合計	4,130,568	4,280	100	4,280	100	4,280	100	4,280	100	1,406	100	1,406	100	1,395	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	
	NEC LX	Type-NF	*	Type-NN	*	Type-CC	*	Type-CA	*	Type-CA
2022年4月	440,329	63	17,824,133	84	2,217,621	58	791,498	52	115,176	90
5月	258,557	34	21,265,224	91	2,599,907	62	658,909	39	141,972	100
6月	375,692	51	21,205,857	94	3,050,682	75	691,121	42	129,579	95
7月	548,784	72	22,142,890	95	3,224,980	77	997,774	59	138,723	98
8月	688,587	90	23,080,513	99	3,480,843	83	674,457	40	139,975	99
9月	573,216	79	20,917,288	94	3,292,424	82	839,018	52	125,544	93
合計	2,885,166	65	126,435,906	93	17,866,456	73	4,652,777	47	790,969	96

年月	CPU使用時間						GPU使用時間	
	HPE Apollo	Type-F	*	Type-C	*	Type-G	*	Type-G
2023年2月	830,543	69	38,764,722	56	419,690	31	61,029	72
3月	818,023	62	43,141,534	57	387,645	26	74,596	80
合計	1,648,566	66	81,906,256	57	807,335	28	135,625	76

※ 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				
	NEC LX	Type-NF	Type-NN	Type-CC	Type-CA
2022年4月	1,812	16,516	28,521	26,951	73,800
5月	1,519	24,987	51,532	92,234	170,272
6月	3,079	21,920	517,422	117,803	660,224
7月	21,153	58,520	412,415	228,974	721,062
8月	14,200	64,903	266,183	69,958	415,244
9月	2,087	39,943	287,120	70,434	399,584
合計	43,850	226,789	1,563,193	606,354	2,440,186

年月	バッチジョブ処理件数			
	HPE Apollo	Type-F	Type-C	Type-G
2023年2月	1,542	123,393	23,373	148,308
3月	837	220,728	8,404	229,969
合計	2,379	344,121	31,777	378,277

5.4 クラス別CPU使用時間

NEC LX	PN large	PN small	PN core	PN gpu	Queue 合計	ETC	総合計
2022年4月	386641:15:20	17877821:14:00	2217620:57:02	791498:24:15	21273581:50:37	0:00:00	21273581:50:37
5月	137101:30:40	21386679:54:40	2614517:10:01	644298:11:50	24782596:47:11	0:00:00	24782596:47:11
6月	251481:42:40	21330067:10:40	3171257:39:36	570545:22:08	25323351:55:04	0:00:00	25323351:55:04
7月	369690:12:00	22321983:41:20	3330641:33:20	892112:53:21	26914428:20:01	0:00:00	26914428:20:01
8月	541077:20:00	23228022:59:20	3608399:15:47	546900:27:49	27924400:02:56	0:00:00	27924400:02:56
9月	428785:24:00	21061718:52:40	3490734:49:43	640706:57:15	25621946:03:38	0:00:00	25621946:03:38
合計	2114777:24:40	127206293:52:40	18433171:25:29	4086062:16:38	151840304:59:27	0:00:00	151840304:59:27

HPE Apollo	H largemem	H vnode	H core	H gpu	Queue 合計	ETC	総合計
2023年2月	830543:05:36	33208587:23:44	5740653:14:12	235171:48:22	40014955:31:54	0:00:00	40014955:31:54
3月	818022:41:04	37501839:35:28	5755855:20:15	271484:31:14	44347202:08:01	0:00:00	44347202:08:01
合計	1648565:46:40	70710426:59:12	11496508:34:27	506656:19:36	84362157:39:55	0:00:00	84362157:39:55

5.5 クラス別ジョブ処理件数

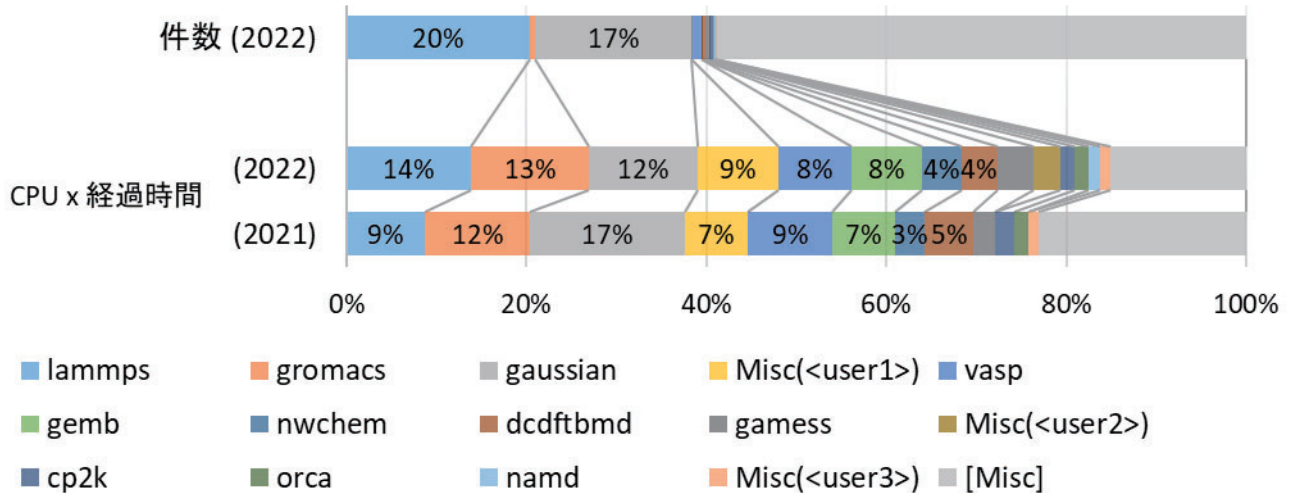
NEC LX	PN large	PN small	PN core	PN gpu	合計
2022年4月	445	17,883	28,521	26,951	73,800
5月	291	26,215	51,723	92,043	170,272
6月	357	24,642	563,391	71,834	660,224
7月	452	79,221	415,535	225,854	721,062
8月	524	78,579	289,557	46,584	415,244
9月	479	41,551	298,346	59,208	399,584
合計	2,548	268,091	1,647,073	522,474	2,440,186

HPE Apollo	H largemem	H vnode	H core	H gpu	合計
2023年2月	1,542	59,430	68,607	18,729	148,308
3月	837	27,854	195,373	5,905	229,969
合計	2,379	87,284	263,980	24,634	378,277

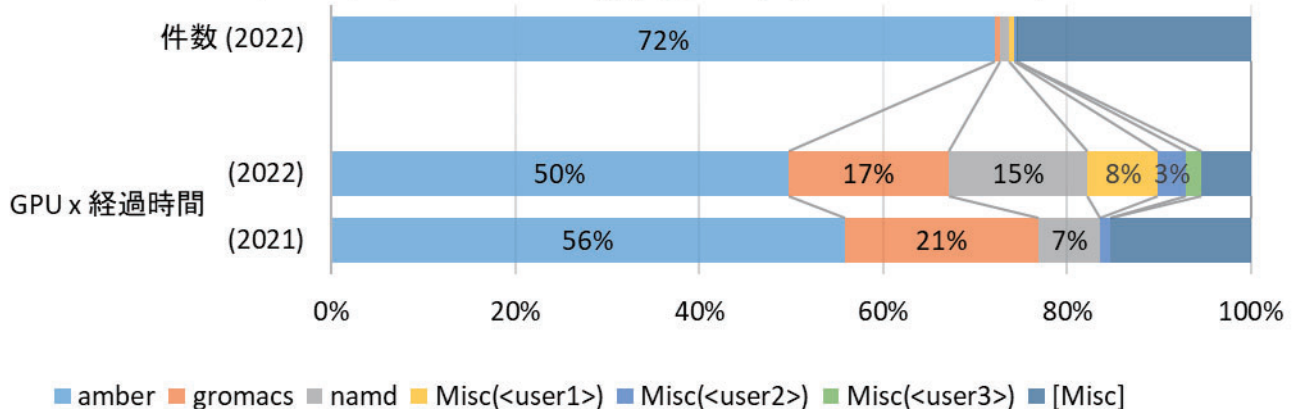
5.6. ジョブの実行状況

5.6.1. NEC 製システム(2022 年 9 月末まで)

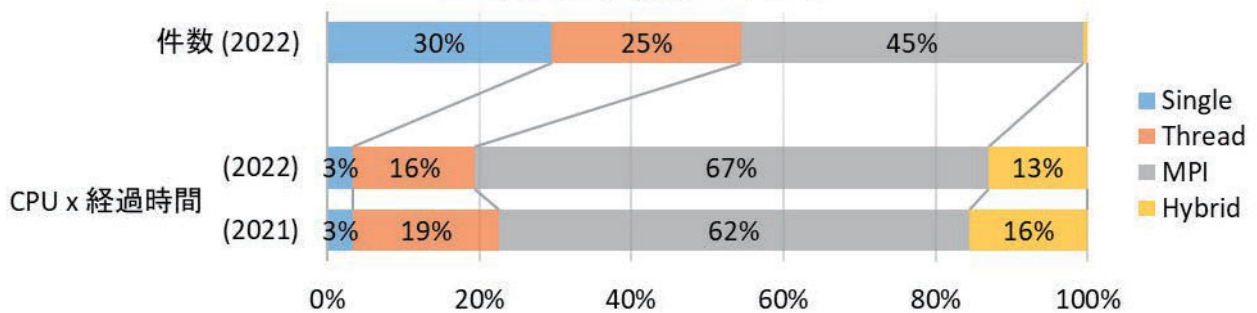
アプリケーション利用比率(CPUベース)



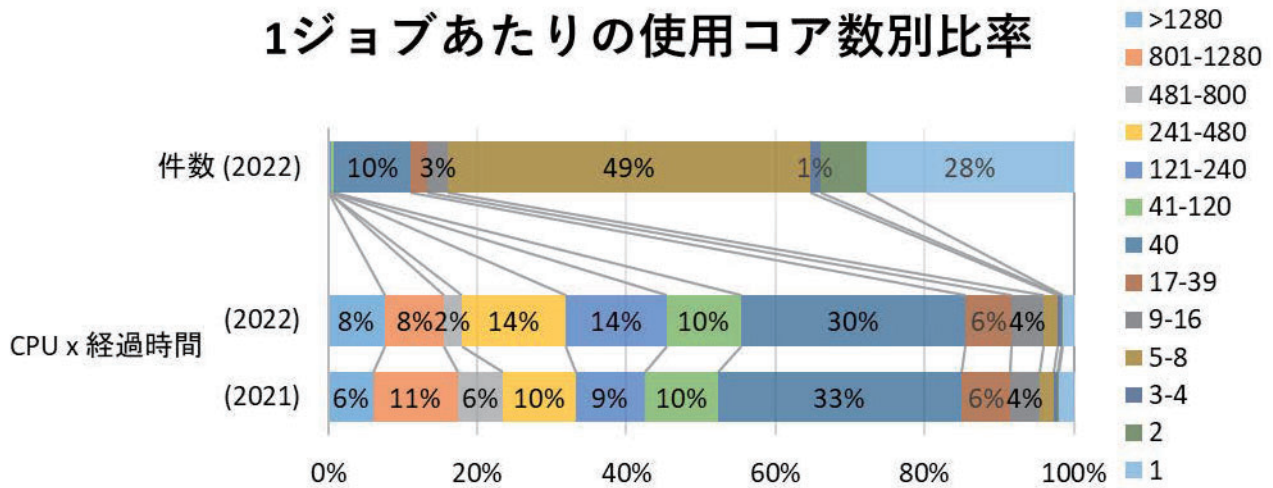
アプリケーション利用比率(GPUベース)



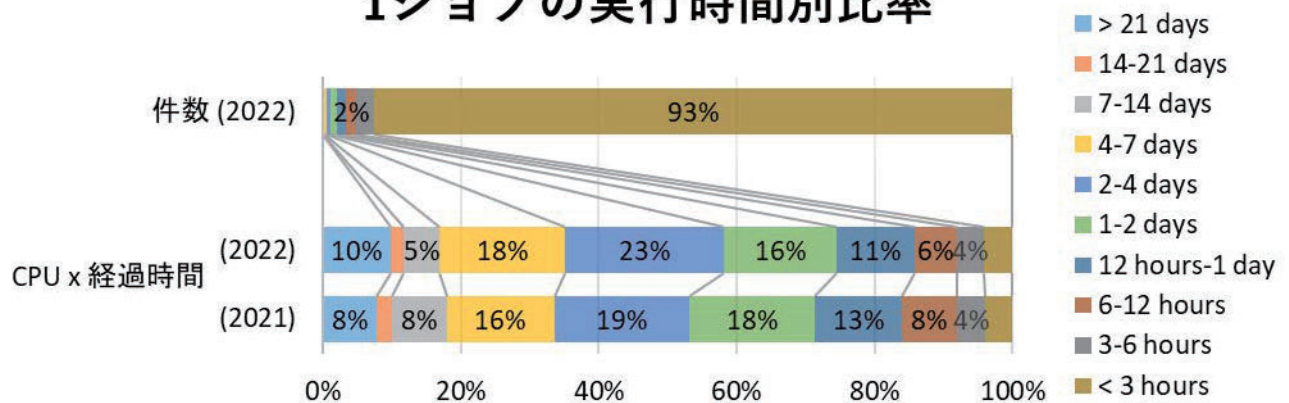
並列化種別の比率



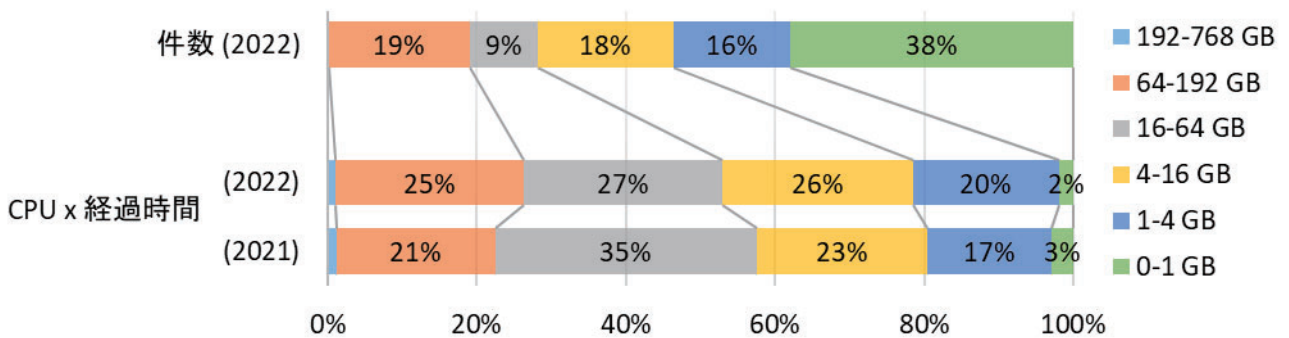
1ジョブあたりの使用コア数別比率



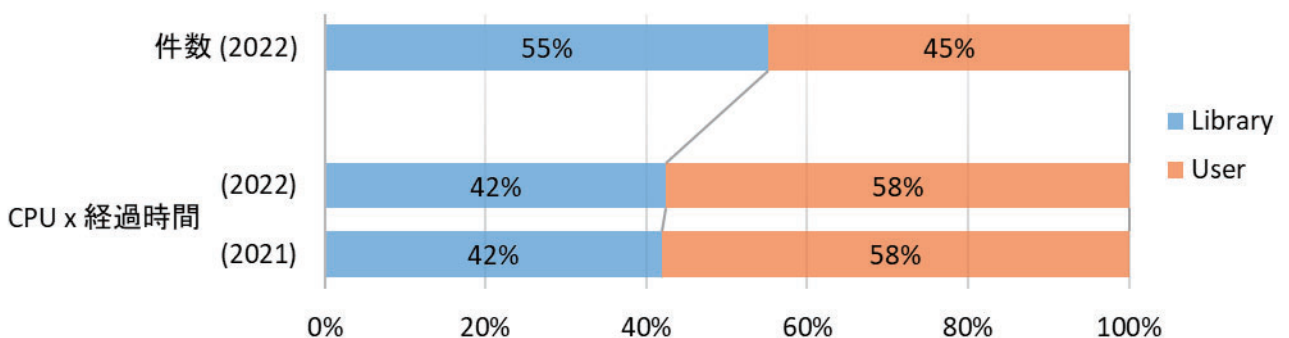
1ジョブの実行時間別比率

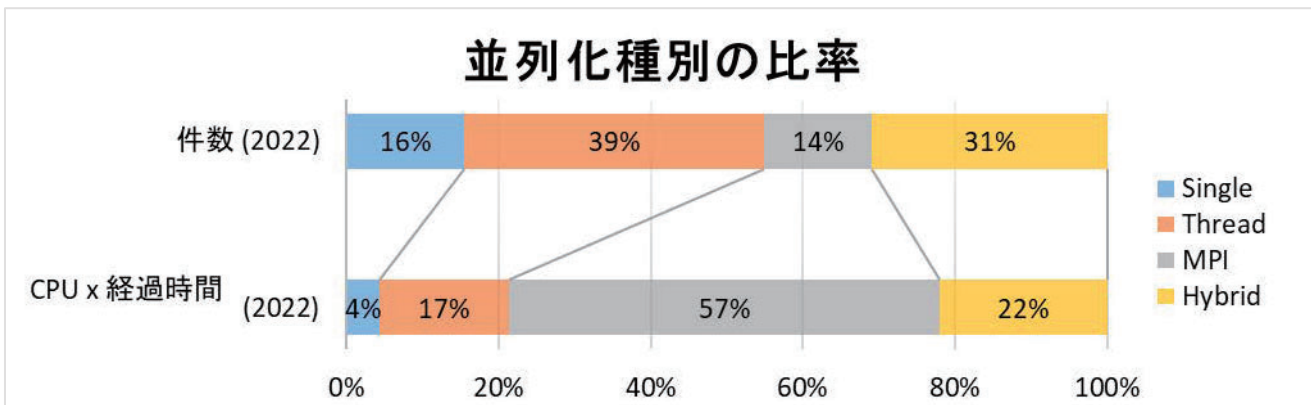
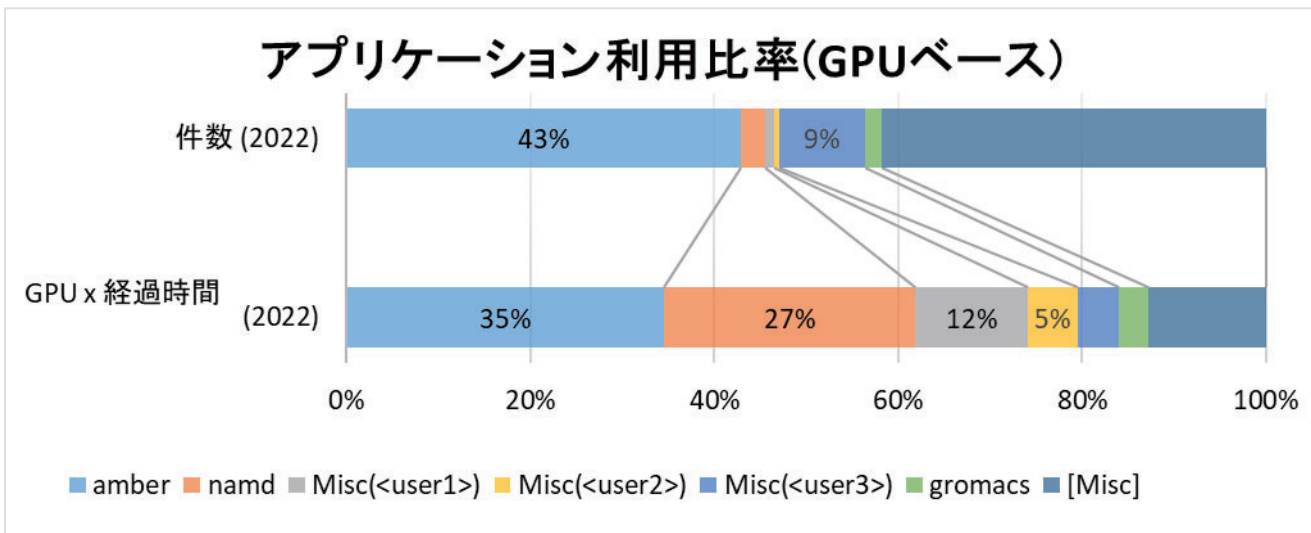
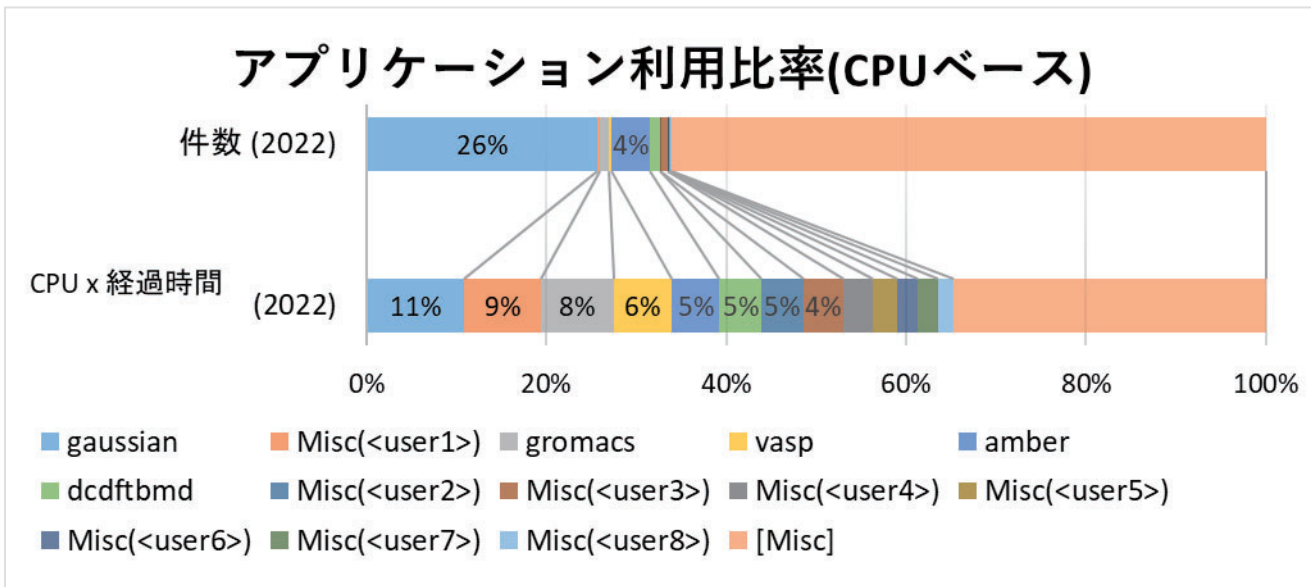


ノードジョブのノード平均使用メモリー量

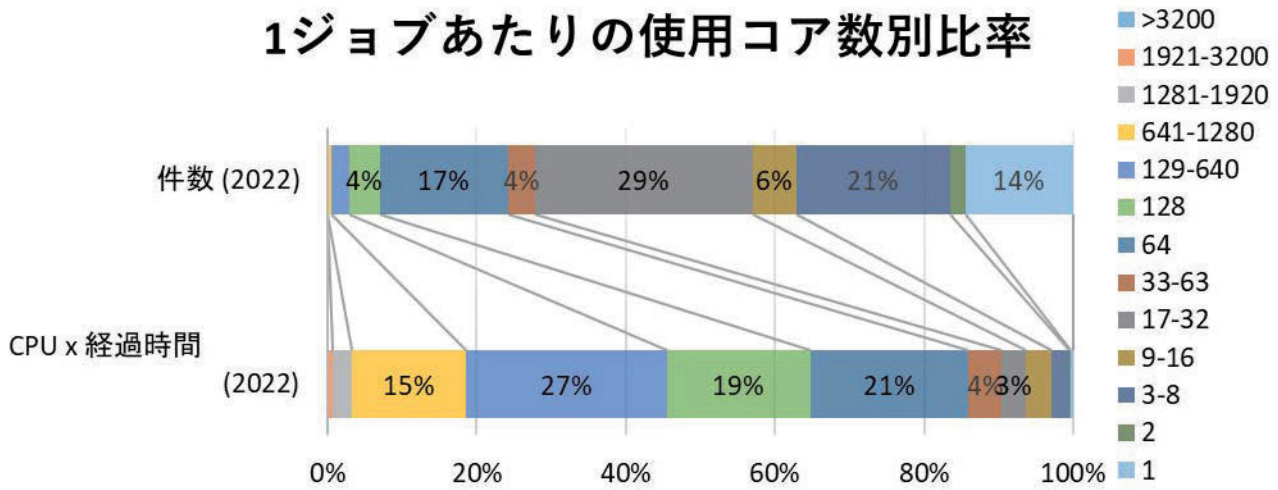


ライブラリーアプリケーションの使用割合

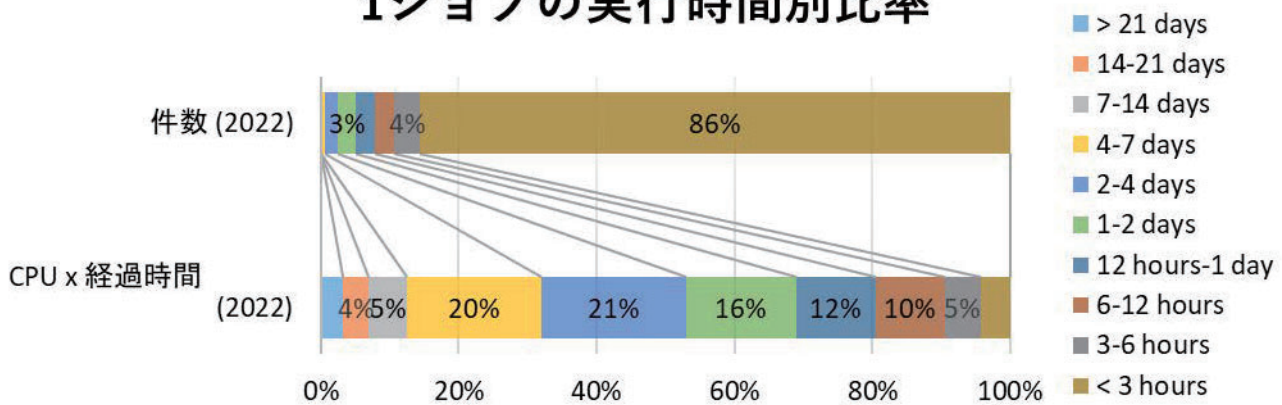




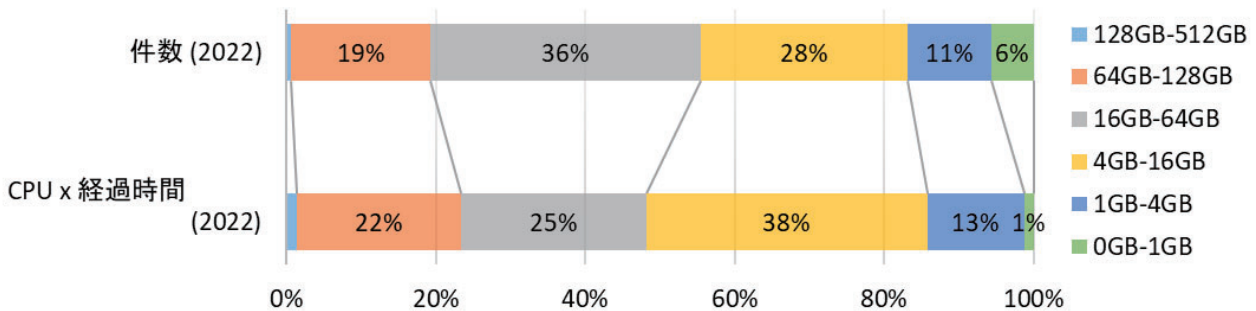
1ジョブあたりの使用コア数別比率



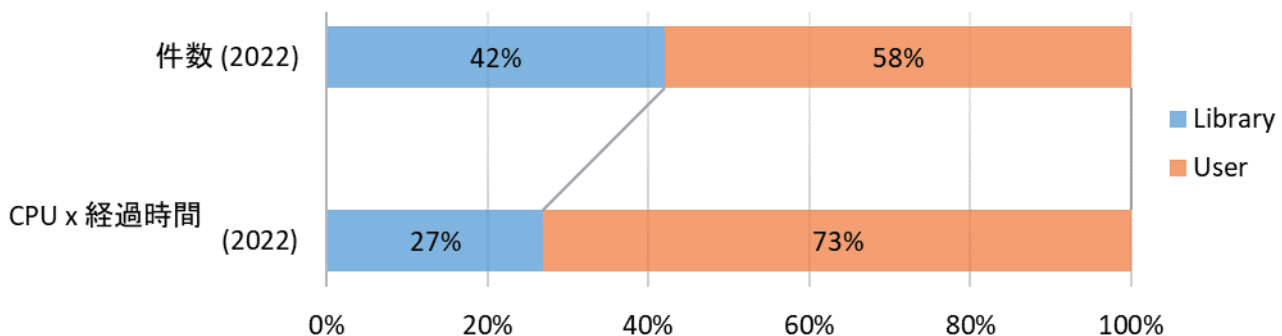
1ジョブの実行時間別比率



VNODEジョブのVNODEあたり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
阿部 穰里	広島大学 先進理工系科学研究科	准教授
松本 正和	岡山大学 異分野基礎科学研究所	准教授

【 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
大貫 隼	助教（併任）
石田 干城	助手
岩橋 建輔	技術職員（ユニット長、主任技師）
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	再雇用職員
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 HSP 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(3月から) 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	2022年度
計算機システム	PRIMEHPC FX10 (9月まで) NEC LX	NEC LX	NEC LX	NEC LX	NEC LX (9月まで) HPE Apollo (2月から)
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	248	268	271	278	298
利 用 者 数					
機 構 内a	52	51	57	49	62
機 構 外	933	997	1086	1143	1190
合 計	985	1048	1143	1192	1252
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	NEC LX 4,280 HPE Apollo 1,405
CPU時間利用申請(時間)	-	-	-	-	-
申 請	307,426,854	362,766,273	394,146,128	411,356,806	352,148,319
許 可	292,639,800	331,660,029	356,884,313	322,133,773	297,511,314
総使用CPU時間b(時間)	272,486,299	301,854,255	304,254,227	288,761,279	236,202,463
ジョブ処理件数b	2,520,856	5,494,831	1,841,463	6,389,960	2,818,463
ライブラリプログラム新規登録数	24	23	15	29	23
データベース新規登録数	0	0	0	0	0
センター使用論文数d	368	314	252	234	313

- 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2022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。2022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。

2023年2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、2017年10月から稼働していた旧「高性能分子シミュレータ」を2023年2月に更新した「高性能分子シミュレータ」である。本シミュレータでは、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。

高性能分子シミュレータは、主としてHPE製のApolloシリーズで構成される834ノードの共有メモリ型スカラ計算機クラスタであり、全サーバは全て同一CPU（AMD E7763）、同一OS（Rocky Linux 8.7）を有し、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6.68 Pflopsで総メモリ容量224 TBである。主力の演算サーバはType Cと呼ぶもので、2.45 GHzのクロック周波数をもつ128コア、256 GBメモリ構成の804台である。仮想ノード単位とコア単位の利用形態のジョブの大半はType Cで実行される。Type Fはメモリを1 TBに強化した14台であり、他はType Cと同一である。多くのメモリを必要とするジョブが仮想ノード単位で実行される。Type Gは1ノードあたり8 GPUを有する16台であり、筐体が違うものの他はType Cと同一である。インターコネクタはInfiniBandアーキテクチャを採用し、全台数を100 Gb/sで接続しており、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。これらクラスタ演算サーバは14.8 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, GAMESS, Molpro, TURBOMOLE、分子動力学分野では、Lammps, GROMACS, Amber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、2022年度は296研究グループにより、総数1,238名（2023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、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、データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクトとも連携を行っている。これら2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、2022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研究施設のワークショップ「複雑電子状態の理論・計算科学」と2つのスクール「第12回量子化学スクール」と「第16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。

2022年度 システム構成

高性能分子シミュレータシステム 6.68 PFlops

クラスタ演算サーバ Type C	
	型番：HPE Apollo2000 Gen 10 Plus
	OS：Linux
	コア数：102,912 コア（128 コア× 804 ノード） 2.45 GHz
	総理論性能：4,034 TFlops（5,017.6 GFlops × 804 ノード）
	総メモリ容量：206 TB（256 GB × 804 ノード）
クラスタ演算サーバ Type F（メモリ強化）	
	型番：HPE Apollo2000 Gen 10 Plus
	OS：Linux
	コア数：1,792 コア（128 コア× 14 ノード） 2.45 GHz
	総理論性能：70 TFlops（5,017.6 GFlops × 14 ノード）
	総メモリ容量：14 TB（1024 GB × 14 ノード）
クラスタ演算サーバ Type G（演算性能強化）	
	型番：HPE Apollo6500 Gen10 Plus
	OS：Linux
	コア数：2,048 コア（128 コア× 16 ノード） 2.45 GHz
	GPU：NVIDIA A100 NVLink
	総理論性能：80 TFlops（5,017.6 GFlops × 16 ノード） + 2,496 TFlops（19.5 TFlops × 128 ノード）
	総メモリ容量：14 TB（1024 GB × 14 ノード）
外部磁気ディスク装置	
	型番：HPE ClusterStor E1000
	総ディスク容量：14.8 PB
インターコネクト装置	
	型番：NVIDIA Mellanox InfiniBand Switch
フロントエンドサーバ	
	型番：HPE ProLiant DL385 Gen10 Plus v2
	OS：Linux
	総メモリ容量：1 TB（256 GB × 4 ノード）
運用管理クラスタ	
	型番：HPE ProLiant DL360 Gen10 Plus
	OS：Linux
	総メモリ容量：1.1 TB（192 GB × 6 ノード）