

# I 部

## 目 次

1	巻頭言 計算科学研究センター 江原正博	1
2	スーパーコンピュータワークショップ 2023	2
3	計算機システム	
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	
4.1	ライブラリプログラムの開発・公開	8
4.2	ライブラリプログラム一覧	8
5	2023 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 2023 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います。利用者数はここ数年増加しており、2023年度のグループ数は302グループ、利用者数は1329名に達しました。研究分野も広がり、分子科学分野だけでなく、エネルギーやマテリアルなど幅広い研究に利用されています。これらの研究分野のニーズに対応するために、アプリケーションソフトの充実を心掛けており、各分野の代表的なソフトの最新バージョンを実装・登録するようにしています。ユーザーサポート(ヘルプデスク)にも力を入れていますので、ご活用いただければ幸いです。

クラスター演算サーバーは、2023年2月にIntelからAMDの計算機に更新し、計算機の総演算性能は6.68 PFlopsとなりました。2023年度はこの更新に伴い、新システムの安定な運用とソフトの実装に注力しました。計算機の利用状況は、新システムを導入して間もないため、比較的余裕があるものでしたが、この巻頭言を執筆している2024年9月には、非常に混んできています。導入当初はウクライナ問題や円安などの社会情勢を反映して電気代が高騰したため、計算機性能を抑える等の対策をしました。2023年度は、電気代が落ち着き、計算機の性能をフルに発揮した運用を行うことができました。

当センターでは、若手研究者の育成や研究者間の研究交流にも力を入れています。2023年度も例年通り2つのスクールをハイブリッドで開催しました。2023年9月27-29日に第17回分子シミュレーションスクール、2023年12月5-7日に第13回量子化学スクールを開催し、各々380名、329名の参加がございました。また、当センターの設立当初から実施しているスーパーコンピュータワークショップは、2023年度は「シミュレーション、インフォマティクス、AIによる生体分子科学の最前線」をテーマとして開催しました。このワークショップにも124名の参加をいただきました。

さて、運営面では大きな変革があり、基礎生物学研究所のスパコンが統合されることが計画されました。このスパコンの統合を実施するために、基生研・超階層生物学センターの藤森センター長や、データ統合解析室の内山郁夫准教授をはじめとする基生研のチームの方々と、統合のための相談や準備を進めました。2024年度には、基礎生物学分野のユーザーの方々に登録していただき、ご利用いただいています。

当センターでは、今後も大規模高速計算環境やソフトを提供するとともに、人材育成や研究交流を通じて様々な研究分野の発展の一翼を担うことができると考えています。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. スーパーコンピュータワークショップ 2023

テーマ：「シミュレーション、インフォマティクス、AIによる生体分子科学の最前線」

日時：2024年1月15日（月）～16日（火）

会場：ハイブリッド形式（現地+Zoom 配信）

参加者：124名

ポスター発表：10件

2023年度のスーパーコンピュータワークショップは、「シミュレーション、インフォマティクス、AIによる生体分子科学の最前線」をテーマとして、四年ぶりの現地開催（Zoomでの同時配信あり）でのワークショップを開催した。生体分子の計算科学分野で先進的な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についてご講演、ご討論いただいた。さらに、実験研究者の方々や大学院生の皆さんにも幅広く参加していただけるようポスター発表（現地のみ）を実施した。ポスターセッションにおいては10件のポスター発表があり、参加者は合計124名であった。

### 講演者

・長岡 正隆（名古屋大学）

「溶液や生体分子における pH 依存現象の理論的予測に向けて：Red Moon アプローチ」

・小野 純一（早稲田大学）

「量子分子動力学法による生体化学反応機構の解明」

・吉田 紀生（名古屋大学）

「3D-RISM 理論と分子シミュレーションによる生体分子の構造と機能の解析手法の開発と応用」

・原田 隆平（筑波大学）

「生体機能を紐解く分子シミュレーション手法の開発と応用」

・千見寺 浄慈（名古屋大学）

「デザインしやすいタンパク質フォールドの条件探索と新規フォールドタンパク質デザイン」

・山本 詠士（慶應義塾大学）

「マルチスケール分子シミュレーションで迫る生体分子の不均一拡散現象」

・森次 圭（大阪公立大学）

「生体分子に向けたシミュレーション法の開発とその応用研究」

・西 羽美（東北大学）

「AI とゲノム科学で探る SLC トランスポーターファミリー」

・太田 元規（名古屋大学）

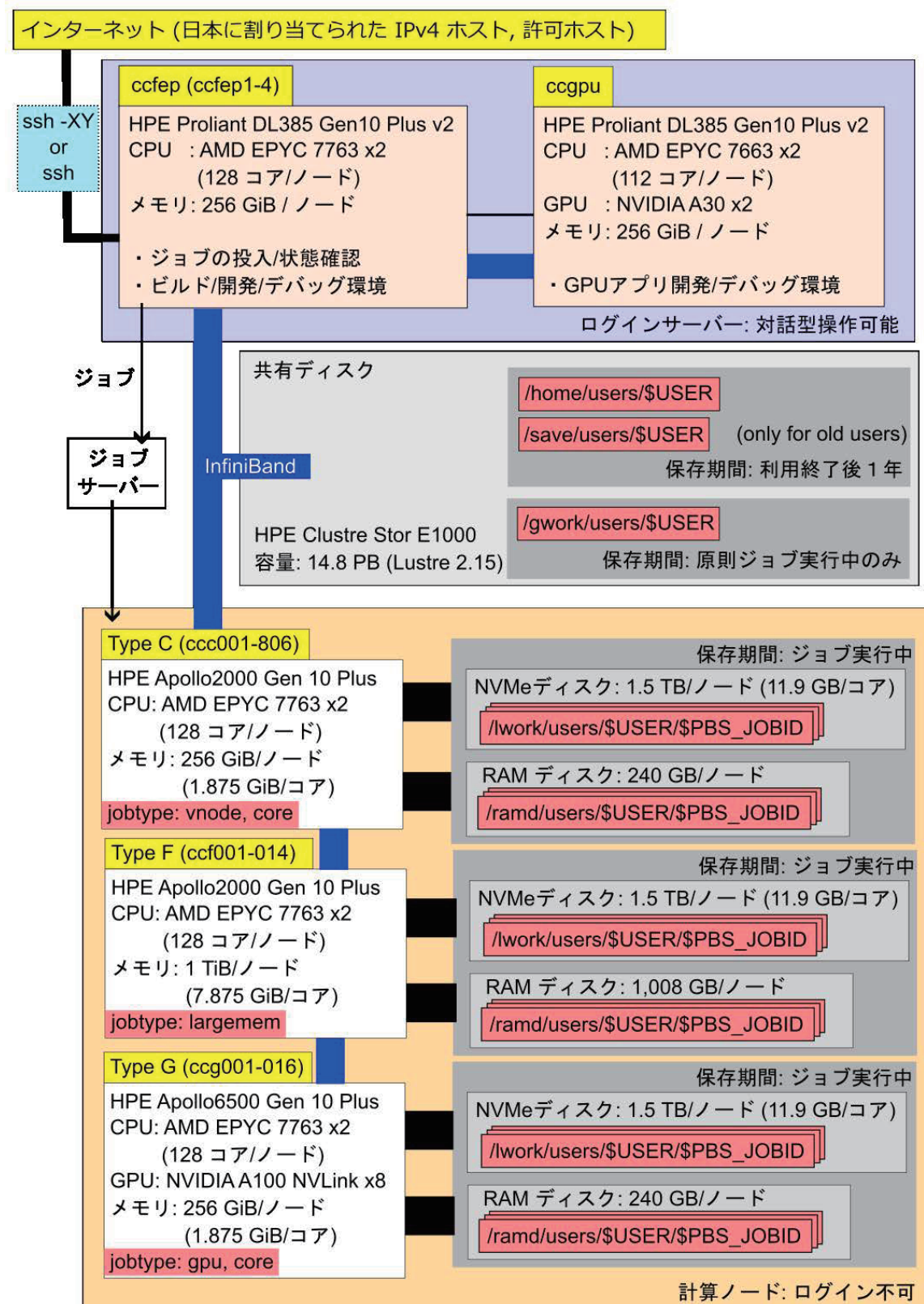
「大きな生体高分子複合体のバイオインフォマティクス」

## ポスター発表

- P-1 化合物空間の物質的非対称性の理論構築  
(分子科学研究所) ○白男川貴史, サイモン・レオン・クリュッグ, 江原正博,  
アナトール・ヴァン・リーレンフェルト
- P-2 天然変性タンパク質の分子動力学シミュレーションによるタンパク質進化解析  
(早稲田大学大学院) ○青木志穂, 森 渉, 朝日 透, 小野寺 航
- P-3 ピロールの位置選択的トリシアノビニル化における反応機構解析  
(高知大学大学院) ○飛鷹絢子, 佐々木義章, 高橋大空, 有澤佐織, 谷 涼太,  
金野大助
- P-4 有機試薬を用いた 1,5-ジエン化合物の分子内環化反応についての理論研究  
(高知大学大学院) ○小川渉太郎, 金野大助
- P-5 チオアミド誘導体を用いたスルフィド合成の反応機構解析  
(高知大学大学院) ○昌本 麗, 吉永有佑, 金野大助
- P-6 分子内求電子置換反応によるテトラヒドロフルオレン合成の反応機構解析  
(高知大学大学院) ○浅野真守, 金野大助
- P-7 ミトコンドリア型 ATP 合成酵素の阻害因子 IF1 が示す回転方向依存的な制御機構  
:1 分子操作実験と分子動力学シミュレーション  
(分子科学研究所) ○小林稜平, 岡崎圭一
- P-8 高成功率・高精度・高効率の QM 用両端固定型遷移状態探索  
(分子科学研究所) ○甲田信一, 斉藤真司
- P-9 Accelerated 分子動力学法と AlphaFold によるトランスポーター蛋白質の  
未解明構造探索  
(分子科学研究所 計算科学研究センター) ○大貫 隼, 岡崎圭一
- P-10 金属ナノクラスターの光物性に関する理論研究  
(分子科学研究所) ○江原正博, 白男川貴史, Pei Zhao

### 3. 計算機システム

#### 3.1. 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)、インターコネクトには 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。

2024 年 1 月に GPU を搭載した対話型操作が可能なサーバー、`ccgpu` を導入しました。GPU を使うプログラムの開発、テスト、デバッグ用の環境として利用できるようになっています。



図 ラックの外観

### 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。

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	-
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			

- 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。



### 3.3. 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	$60 / (\text{点}/(\text{ノード} \cdot \text{時間}))$	-
vnode	$45 / (\text{点}/(\text{ノード} \cdot \text{時間}))$	-
core	$1.0 / (\text{点}/(\text{コア} \cdot \text{時間}))$	
gpu	$1.0 / (\text{点}/(\text{コア} \cdot \text{時間}))$	$60 / (\text{点}/(\text{GPU} \cdot \text{時間}))$

- 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。`ccgpu` では CPU 点数は消費されません。

## 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。

### 4.2. 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.
DFTB+	Fast and efficient versatile quantum mechanical simulation package.
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	2.3.2		2024/2/8
	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 4	2023/8/25
	22	update 1	2023/1/-
	20	update 13	2023/1/-
AutoDock	4.2.6		2023/11/24
AutoDock-GPU	1.5.3		2023/11/24
AutoDock Vina	1.2.5		2023/11/24
ColabFold	1.5.5		2024/2/16
CP2K	2023.1		2023/4/6
	9.1		2023/1/-
CRYSTAL	17	1.0.2	2023/1/-
DFTB+	23.1		2023/7/19
DIRAC	23.0		2023/5/8
	19.0		2023/1/27
GAMESS	2023	R2	2023/12/7
	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	2.1.2		2024/1/16
	2.0.3		2023/1/-
GROMACS	2023.4		2024/1/26
	2023.2		2023/8/9
	2022.6		2023/7/12
	2022.4		2023/1/-
	2021.7		2023/4/14
	2021.6		2023/1/-
GRRM	23		2024/1/11
	17		2021/1/27
	14		2015/7/29
LAMMPS	2Aug23		2023/10/16
	23Jun22	Update 2	2023/1/-
	29Sep21	Update 3	2023/4/18
	29Sep21		2023/1/-
LigandMPNN		(2024/3/27)	2024/3/27
Molpro	2024.1.0		2024/3/11
	2023.2.0		2023/10/11
	2023.1.0		2023/9/19
	2022.3.0		2023/1/-
	2022.2.2		2023/1/-
	2021.3.1		2023/5/10
NAMD	2015.1-44		2023/1/-
NAMD	3.0b6		2024/3/6
	3.0b2		2023/4/10
	2.14		2023/1/-
NBO	7.0	10	2023/2/14
	7.0	7	2023/1/-
NWChem	7.2.2		2024/3/5
	7.0.2		2023/3/6
	6.8		2023/1/-
OpenMM	8.1.0		2023/12/5

OpenMolcas	23.06		2023/7/25
	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	1.9.1		2024/3/5
	1.7		2023/1/30
Quantum ESPRESSO	7.3		2024/2/6
	7.2		2023/4/11
	6.8		2023/1/26
ReactionPlus	1.0		2018/1/22
RFdiffusion		(2023/10/25)	2023/10/26
RFDiffusion AA		(2024/3/27)	2024/3/27
SIESTA	4.1.5		2023/1/-
SMASH	2.2.0		2017/5/16
TURBOMOLE	7.8		2023/12/18
	7.7		2023/7/18
	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
iMolpro	1.0.1		2024/3/8
Luscus	0.8.6		2023/10/4
VMD	1.9.4	alpha	2023/1/-

## 5. 2023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	278	1,230	552,566,826	519,824,685	441,216,935
	所内	11	43	83,010,000	83,010,000	48,093,968
生理学	施設利用	1	1	3,000,000	3,000,000	1,850,535
	所内	3	5	4,543,200	4,543,200	1,857,000
基礎生物学	施設利用	3	7	240,000	240,000	1,561
	所内	2	5	160,000	160,000	41,342
計算物質科学スパコン共用事業利用枠		4	38	36,860,000	36,860,000	36,931,304
合計		302	1,329	680,380,026	647,637,885	529,992,645

### 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-F	*	Type-C	*	Type-G	*
2023年4月	367,806	664	100	664	100	664	100
5月	379,404	734	100	734	100	734	100
6月	386,332	710	100	710	100	710	100
7月	407,424	734	99	734	100	734	100
8月	410,012	734	100	734	100	734	100
9月	394,835	710	100	710	100	710	100
10月	418,767	736	100	736	100	736	100
11月	388,636	686	100	686	100	686	93
12月	471,926	736	100	734	100	736	100
2024年1月	461,431	736	100	736	100	736	100
2月	442,502	688	100	688	100	688	100
3月	461,927	736	100	736	100	736	100
合計	4,991,002	8,604	100	8,602	100	8,604	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-F	*	Type-C	*	Type-G	*	Type-G	*
2023年4月		862,767	73	39,453,223	58	229,050	17	50,249	59
5月		990,777	75	52,579,596	70	225,145	15	60,597	64
6月		934,602	73	55,796,886	76	418,889	29	58,770	65
7月		1,109,299	84	49,847,540	66	349,932	23	73,727	78
8月		1,012,955	77	50,943,192	67	266,855	18	59,603	63
9月		648,970	51	47,995,846	66	152,434	10	50,697	56
10月		972,057	74	59,162,465	78	384,676	26	86,782	92
11月		908,848	74	53,393,610	76	305,653	22	70,372	80
12月		1,085,499	82	63,148,760	84	340,525	23	69,017	73
2024年1月		1,041,801	79	60,038,436	79	808,108	54	75,652	80
2月		1,015,720	82	52,842,307	75	471,048	33	61,680	70
3月		565,355	43	54,163,559	72	392,705	26	67,215	71
合計		11,148,651	72	639,365,420	72	4,345,020	25	784,361	71

※ 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-F	Type-C	Type-G	合計
2023年4月		614	112,099	5,520	118,233
5月		454	104,238	1,801	106,493
6月		2,583	78,096	23,872	104,551
7月		1,182	116,158	28,441	145,781
8月		476	124,673	21,089	146,238
9月		1,202	131,150	27,383	159,735
10月		1,290	158,006	21,251	180,547
11月		970	174,374	3,441	178,785
12月		1,735	176,593	3,333	181,661
2024年1月		1,237	151,638	12,580	165,455
2月		497	119,536	9,049	129,082
3月		607	94,457	20,880	115,944
合計		12,847	1,541,018	178,640	1,732,505

#### 5.4 クラス別CPU使用時間

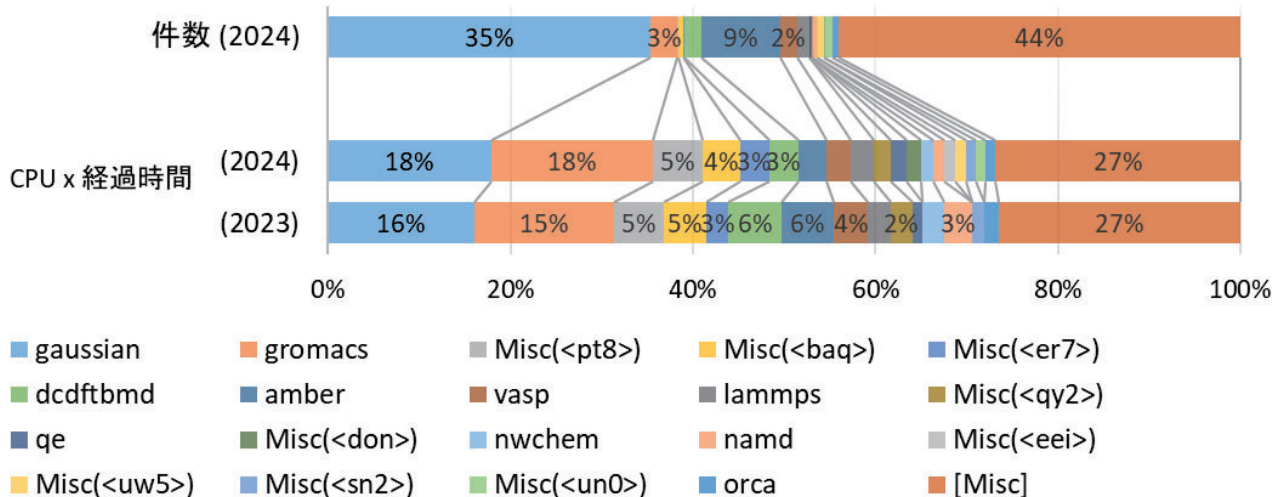
	H largemem	H vnode	H core	H gpu	Queue 合計	ETC	総合計
2023年4月	862767:19:28	33933441:01:52	5519781:57:43	229049:34:44	40545039:53:47	0:00:00	40545039:53:47
5月	990776:48:00	46100928:40:32	6478667:37:48	225145:02:23	53795518:08:43	0:00:00	53795518:08:43
6月	863669:02:56	49434520:50:08	6559084:12:17	293103:03:51	57150377:09:12	0:00:00	57150377:09:12
7月	1069212:04:16	45407953:15:44	4514225:49:37	315379:25:19	51306770:34:56	0:00:00	51306770:34:56
8月	1007710:57:04	46587226:48:32	4412344:58:42	215719:04:55	52223001:49:13	0:00:00	52223001:49:13
9月	643644:44:48	43714210:44:16	4289043:22:14	150351:10:49	48797250:02:07	0:00:00	48797250:02:07
10月	914963:50:24	52501146:52:48	6753941:26:46	349145:53:38	60519198:03:36	0:00:00	60519198:03:36
11月	872218:26:08	46358789:07:12	7071580:46:22	305523:02:43	54608111:22:25	0:00:00	54608111:22:25
12月	1030119:10:56	57266910:58:08	5944479:40:12	333274:07:46	64574783:57:02	0:00:00	64574783:57:02
2024年1月	911664:05:20	53309183:13:04	7101809:52:19	565687:45:09	61888344:55:52	0:00:00	61888344:55:52
2月	983727:15:12	45589711:42:35	7383562:06:24	372074:20:51	54329075:25:02	0:00:00	54329075:25:02
3月	560808:53:20	49921374:58:08	4246730:20:48	392704:55:25	55121619:07:41	0:00:00	55121619:07:41
合計	10711282:37:52	570125398:12:59	70275252:11:12	3747157:27:33	654859090:29:36	0:00:00	654859090:29:36

#### 5.5 クラス別ジョブ処理件数

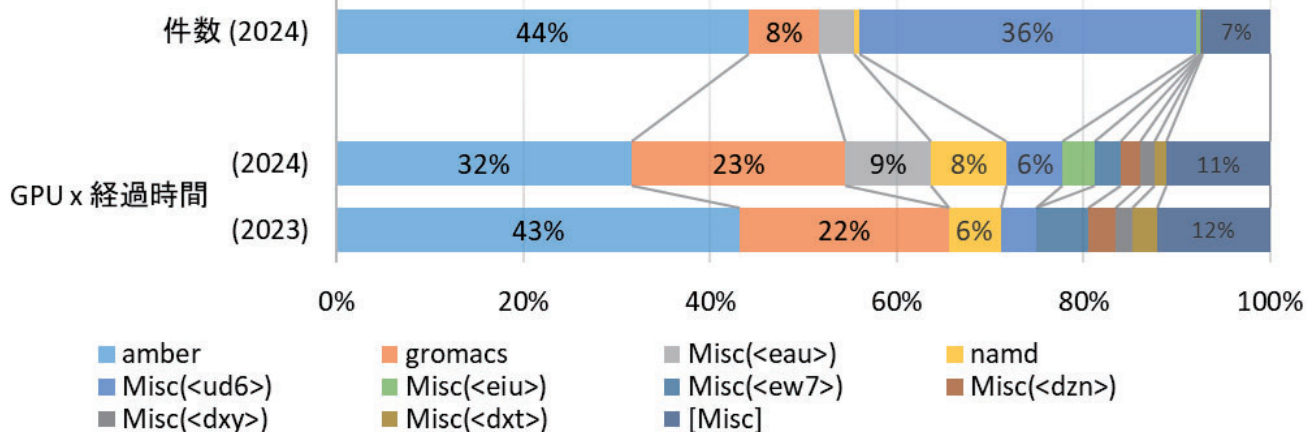
	H largemem	H vnode	H core	H gpu	合計
2023年4月	614	13,103	98,998	5,518	118,233
5月	454	21,430	82,808	1,801	106,493
6月	641	33,921	48,378	21,611	104,551
7月	489	52,905	64,937	27,450	145,781
8月	456	40,547	84,419	20,816	146,238
9月	1,082	34,801	96,473	27,379	159,735
10月	667	45,076	115,601	19,203	180,547
11月	913	37,825	136,728	3,319	178,785
12月	1,382	53,092	124,035	3,152	181,661
2024年1月	791	62,611	99,883	2,170	165,455
2月	421	38,808	83,055	6,798	129,082
3月	585	31,016	63,463	20,880	115,944
合計	8,495	465,135	1,098,778	160,097	1,732,505

5.6. ジョブの実行状況

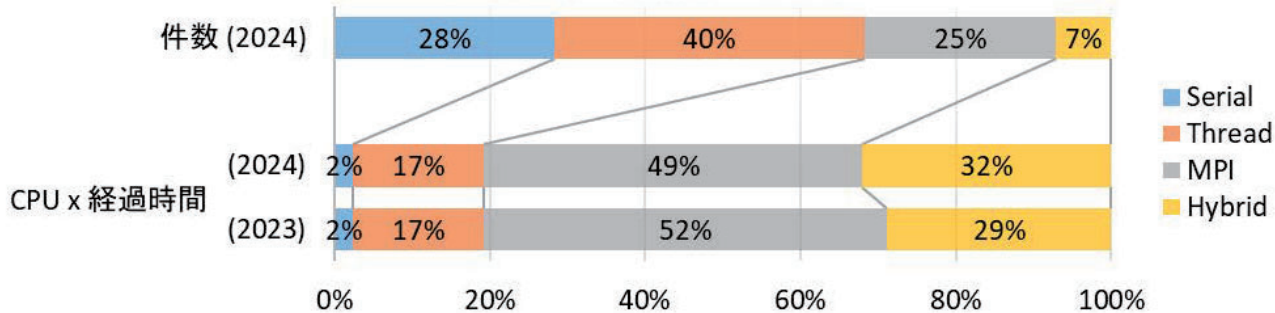
### アプリケーション利用比率(CPUベース)



### アプリケーション利用比率(GPUベース)

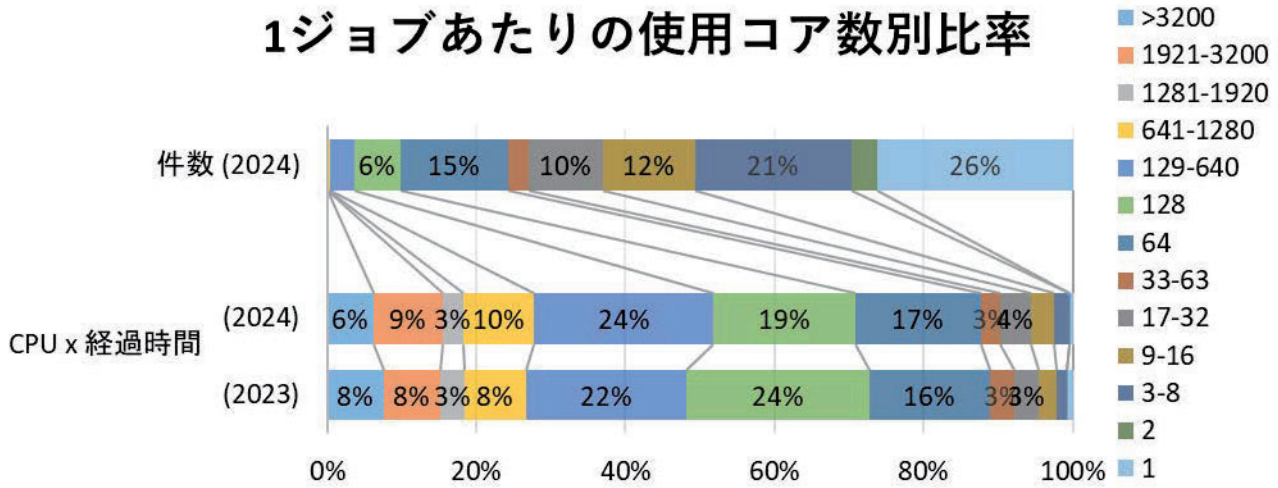


### 並列化種別の比率

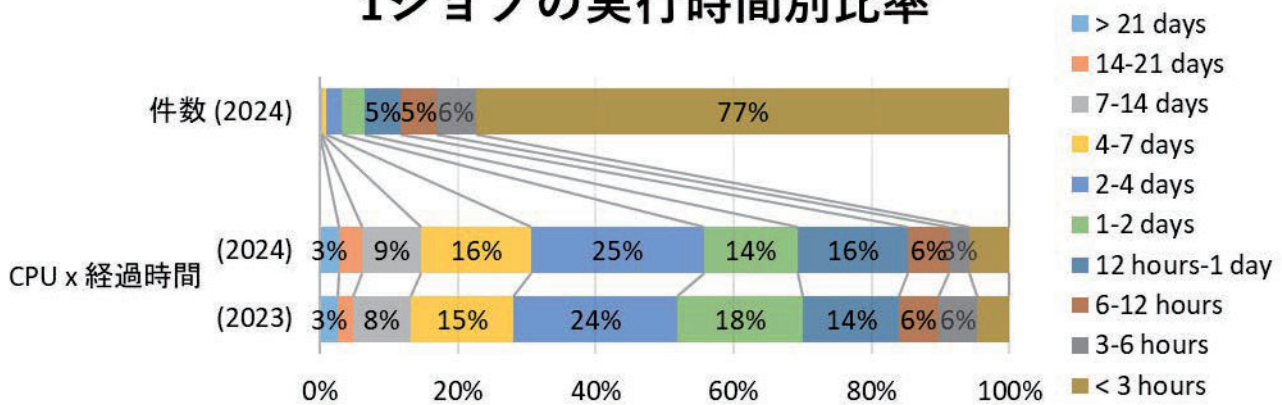




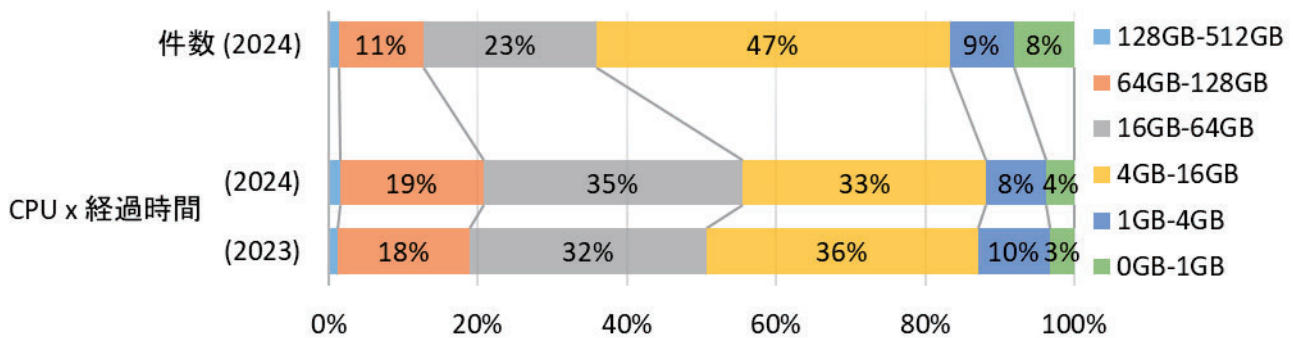
## 1ジョブあたりの使用コア数別比率



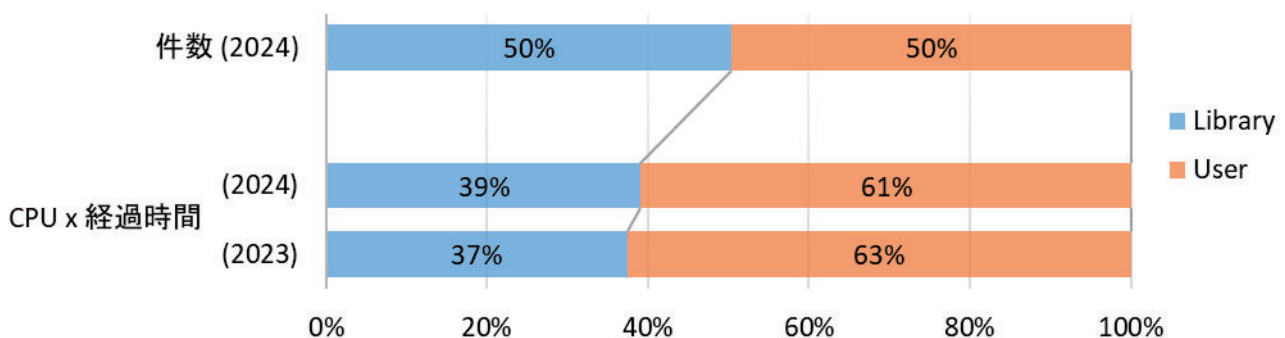
## 1ジョブの実行時間別比率



## VNODE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
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 計算分子科学研究部門)	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 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
内山 郁夫	基礎生物学研究所 ゲノム情報研究室	准教授
福永 雅喜	生理学研究所 脳機能計測・支援センター 生体機能情報解析室	特任教授

## 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）
白男川 貴史	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）
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）
鈴木 和磨	技術職員（技術員）
金城 行真	技術職員（技術員）
水谷 文保	再雇用職員
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 (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～)	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 <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	2023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)	HPE Apollo
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	248	268	271	278	298	302
利 用 者 数						
機 構 内a	52	51	57	49	62	53
機 構 外	933	997	1086	1143	1190	1276
合 計	985	1048	1143	1192	1252	1329
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	HPE Apollo 8,602
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	680,380,026
許 可	292,639,800	331,660,029	356,884,313	322,133,773	297,511,314	647,637,885
総使用CPU時間b(時間)	272,486,299	301,854,255	304,254,227	288,761,279	236,202,463	654,859,090
ジョブ処理件数b	2,520,856	5,494,831	1,841,463	6,389,960	2,818,463	1,732,505
ライブラリプログラム新規登録数	24	23	15	29	23	38
データベース新規登録数	0	0	0	0	0	0
センター使用論文数d	368	314	252	234	313	299

- 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2023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。2023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。

2024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、生物物理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、2023年度は297研究グループにより、総数1,302名（2024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、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、2023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「シミュレーション、インフォマティクス、AIによる

る生体分子科学の最前線」と2つのスクール「第13回量子化学スクール」と「第17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、大阪大学エマージングサイエンスデザインR3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。

## 2023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）