

# 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 2018	2
3	計算機システム	4
3.1	計算機システムの全体像	4
3.2	キュー構成	6
3.3	キュー係数	7
4	一般報告	8
4.1	ライブラリプログラムの開発・公開	8
4.2	データベース開発状況	11
5	2018 年度計算機稼働状況および利用者数	12
5.1	利用申請プロジェクトおよび利用者数	12
5.2	電力使用および計算機稼働状況	12
5.3	計算機利用状況	13
5.4	クラス別 CPU 使用時間	14
5.5	ジョブ処理件数	15
5.6	ジョブの実行状況	16
6	資料	18
6.1	計算科学研究センター運営委員	18
6.2	計算科学研究センター職員	19
6.3	利用者数と CPU 時間の推移	20
7	研究施設の現状と将来計画 (分子研レポート 2018 より転載)	23



## 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、今年度のグループ数は248、利用者数は939名に上りました。これは当センター約40年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、分子科学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科学、物性科学、生物科学の研究に活用されており、分子理論・物性理論・生体シミュレーションに基づく多彩な研究が行われています。近年では、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。

現在の稼働中のスーパーコンピュータは2017年10月に導入されたNEC製のスパコンです。このスパコンはノード単位で貸し出すタイプNとコア単位で貸し出すタイプCから構成されています。これら全ノードの総演算性能は4.076PFlopsです。更新当初は空いているノード、CPUも散見されましたが、2年近くがたちどのマシンもCPUの空きを待つジョブが見られるようになってきました。仕様を策定した立場としては、それだけユーザーにとって使いやすい環境を用意できたと嬉しく思う反面、残り約3年ある運用期間を考えると頭が痛くもなります。

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。2018年9月3～6日に「第12回分子シミュレーションスクール—基礎から応用まで—」を、2018年12月17～19日に「第8回量子化学スクール」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きました。これらのスクールでは基礎から最先端まで平易に解説していただく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、計算科学研究センターワークショップを開催しています。今年度は2019年1月16～17日に「理論・計算科学の挑戦：量子化学とシミュレーションからの展望」をテーマとして開催いたしました。分子科学とその周辺の広い分野から精力的に取り組んでおられる研究者の方々を講師にお招きし、理論および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。

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申し上げます。

## 2 スーパーコンピュータワークショップ 2018

テーマ：「理論・計算科学の挑戦：量子化学とシミュレーションからの展望」

日時：2019年1月16日（水）～17日（木）

会場：自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター

参加者：46名

ポスター発表：25件

2018年度のスーパーコンピュータワークショップでは、「理論・計算科学の挑戦：量子化学とシミュレーションからの展望」というテーマでワークショップを開催した。昨今、発展を遂げてきている分子・物性科学や生物科学などの広範な分野における様々な研究対象に精力的に取り組んでおられる研究者の方々に講師にお招きし、今後取り組むべき問題と必要とされる方法論やこれからの可能性について理論および計算科学の視点からご講演いただいた。また質疑応答にてご討論いただいた。若手・実験研究者の方々にも積極的に参加していただけるようにポスターセッションも設け、合計25件のポスター発表があり、質の高い研究交流がなされた。ワークショップには幅広い分野からの参加があり、参加者は合計46名であった。

1月16日(水)	
13:30 - 13:40	はじめに 川合真紀（分子科学研究所長）
13:40 - 14:20	岡崎圭一（分子科学研究所） 「遷移パスサンプリングによる膜輸送タンパク質の基質輸送メカニズムの解明」
14:20 - 15:00	森下徹也（産業技術総合研究所） 「非平衡バスアンサンブルを用いた対数平均力ダイナミクス」
15:00 - 15:20	休憩
15:20 - 16:00	鷹野 優（広島市立大学） 「計算科学による金属蛋白質活性中心の電子構造制御に関する研究－ヘムの構造歪みに関する構造機能相関－」
16:00 - 16:40	奥村久士（生命創成探究センター） 「アミロイドβペプチドのオリゴマーとアミロイド線維の分子動力学シミュレーション」
16:40 - 17:50	ポスター発表
18:00 - 19:30	懇親会（会場：岡崎コンファレンスセンター 中会議室）

1月17日(木)	
9:30 - 10:10	中井浩巳 (早稲田大学) 「大規模化学反応シミュレーションプログラム DCDFBMD の開発と応用」
10:10 - 10:50	森川良忠 (大阪大学) 「電子状態計算による酸化物中の酸素拡散機構と金属表面上での NO 解離反応機構に関する研究」
10:50 - 11:10	休憩
11:10 - 11:50	尾形修司 (名古屋工業大学) 「大規模なハイブリッド量子古典シミュレーションによるエポキシ系接着剤の性能低下機構の解明」
11:50 - 12:30	長岡正隆 (名古屋大学) 「計算分子技術 Red Moon 法によるコンピュータ科学」
12:30 - 12:40	おわりに 江原正博 (計算科学研究センター)

**スーパーコンピュータワークショップ 2018**

## 理論・計算科学の挑戦

-量子化学とシミュレーションからの展望-



**開催日**  
2019年  
1月16日(水)～17日(木)

**会場**  
自然科学研究機構  
岡崎コンファレンスセンター  
(愛知県岡崎市明大寺町字伝馬8-1)

**■招待講演 (50音順)**

岡崎圭一 (分子科学研究所)  
尾形修司 (名古屋工業大学)  
奥村久士 (生命創成探究センター)  
鷹野 優 (広島市立大学)  
中井浩巳 (早稲田大学)  
長岡正隆 (名古屋大学)  
森川良忠 (大阪大学)  
森下徹也 (産業技術総合研究所)

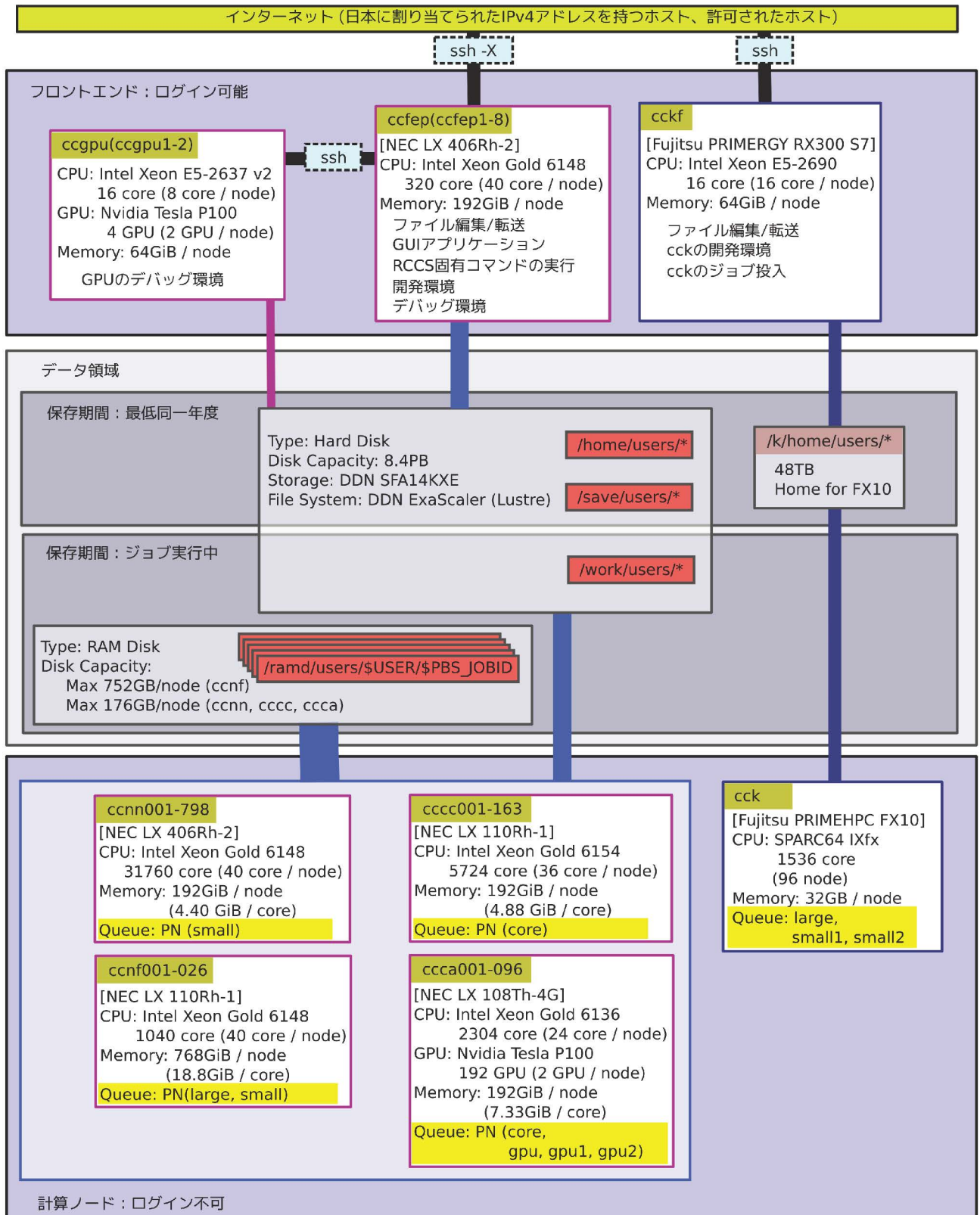
**■ポスター発表**

**参加申込**  
■参加費：無料 ■参加方法：下記ホームページをご覧ください  
<https://ccportal.ims.ac.jp/workshop2018>

**お問い合わせ**  
大学共同利用機関法人 自然科学研究機構  
岡崎共通研究施設 計算科学研究センター  
TEL: 0564-55-7462 FAX: 0564-55-7025

### 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。

前システムの「京」用開発サーバの富士通製PRIMEHPC FX10は2017年12月に運用再開し、2018年9月末で運用を停止しました。

GPUアプリケーション開発用のフロントエンドサーバーは、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。閑散期ではグループ制限を緩和することがあります。

#### • 全利用者が利用可能なキュー

システム	キュー名 (jobtype 名)	演算 ノード	メモリー	1 ジョブの制限	グループ実行制限		グループサブミット制限	
					割当点数	コア数/ GPU 数	割当点数	ジョブ数
cclx	PN (large)	ccnf	18.8GB/コア	1~10 ノード (40~400 コア)	300 万点以上 100 万点以上 30 万点以上 10 万点以上 10 万点未満	4000/48 2560/32 1600/20 960/12 320/8	300 万点以上 100 万点以上 30 万点以上 10 万点以上 10 万点未満	4000 2560 1600 960 320
cclx	PN (small)	ccnn ccnf	4.4GB/コア	1~32 ノード (40~1280 コア)				
cclx	PN (core)	cccc ccca	4.8GB/コア	1~18 コア				
cclx	PN (gpu,gpu1, gpu2)	ccca	7.3GB/コア	1~48GPU 2~24 コア/ノード(2GPU/ノード) 1~12 コア/ノード(1GPU/ノード)				

- 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。
- 8 ノード並列までのジョブは、同一 OmniPath スイッチに接続された演算ノードで実行されます。
- 演算ノード ccnn のうち 526 ノードは 3 ノード以上のジョブ専用です。
- ジョブの最大時間が 1 日以下のジョブタイプ small のジョブは、演算ノード ccnf で実行される場合があります。
- ジョブの最大時間が 3 日以下で要求コア数が 6-12 のジョブタイプ core のジョブは、演算ノード ccca で実行される場合があります。
- ジョブタイプ core, gpu, gpu1, gpu2 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 2 GPU が搭載されていますが構成が 2 種類あります。1 つの CPU 配下に 2 GPU がある演算ノードを明示的に指定する場合は、jobtype=gpu2 を指定してください。2 つの CPU 配下にそれぞれ 1GPU がある演算ノードを明示的に指定する場合は、jobtype=gpu1 を指定して下さい。どちらの演算ノードでもよい場合は、jobtype=gpu を指定して下さい。GPU 間通信が主の場合は jobtype=gpu2 が適しています。CPU-GPU 間通信が主の場合は jobtype=gpu1 が適しています。
- 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, gpu1, gpu2)	1.0 / (点/(コア*時間))	10 / (点/(GPU*時間))
cck	0.1 / (点/(コア*時間))	

- 会話処理の ccfep は CPU 時間で CPU 点数が消費されます。
- 会話処理の cckf, ccgpu1, ccgpu2 では CPU 点数が消費されません。
- 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.
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.
Molcas	A quantum chemistry software.
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
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
Molden	A visualization program of molecular and structure.
VMD	Molecular graphics viewer

パッケージプログラム名	バージョン	リビジョン	導入日
ABINIT	8.8.3		○ (2018/7/10)
Amber	18	bugfix 12	○ (2019/2/14)*
	18	bugfix 11	○ (2019/2/14)*
	18	bugfix 1	○ (2018/6/4)*
	16	bugfix 15	○ (2018/7/25)*
	16	bugfix 10	◎ (2017/10/01)*
	14	bugfix 11	○ (2015/7/21)
	12	bugfix 21	○ (2013/12/10)
CP2K	6.1.0		○ (2018/11/22)*
CRYSTAL	14	1.0.4	◎ (2016/5/11)
GAMESS	2018	Sep30	○ (2018/11/9)
	2018	Feb14	○ (2018/3/19)
	2017	Nov11	○ (2017/12/15)
	2017	Apr20	◎ (2017/10/1)
Gaussian	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	1.3.0		○ (2018/9/4)*
	1.1.6		◎ (2017/12/13)*
	1.1.5		○ (2017/8/4)
GROMACS	2018.6		○ (2019/3/27)*
	2018.3		○ (2018/9/4)*
	2018.1		○ (2018/4/17)
	2016.6		○ (2019/2/22)*
	2016.5		○ (2018/4/17)*
	2016.4		◎ (2017/10/01)*
	2016.3		○ (2017/3/16)*
	2016.1		○ (2017/2/2)*
	5.1.5		○ (2018/4/17)*
	5.1.4		○ (2018/1/19)*
4.5.5		○ (2012/6/12)*	
GRRM	14		◎ (2015/7/29)
	11		○ (2012/9/26)
LAMMPS	22Aug18		○ (2018/11/6)*
	16Mar18		○ (2018/5/10)*
Molcas	8.2		◎ (2017/10/1)
Molpro	2018.2		○ (2018/12/20)
	2015.1	33	○ (2018/6/12)
	2015.1	27	○ (2017/12/14)
	2015.1	19	◎ (2017/10/1)
	2012.1	37	○ (2016/4/19)
NAMD	2.13		○ (2018/12/7)*
	2.11		◎ (2017/10/1)*
NBO	7.0	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)
PSI4	1.1		◎ (2018/1/12)

Quantum ESPRESSO	6.3		○ (2018/12/17)
	6.1		○ (2017/9/14)
	5.4		○ (2018/12/17)
	5.1.2		◎ (2015/4/8)
ReactionPlus	1.0		◎ (2018/1/22)
SIESTA	3.1		◎ (2012/8/16)
SMASH	2.2.0		○ (2017/5/16)
TURBOMOLE	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	6.0.16		◎ (2017/2/2)
	5.0.9		◎ (2013/3/13)
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。

## 4.2. データベース開発状況

計算科学研究センターのデータベースサービスとして、以下の3件のデータベースが登録されており、現在公開中です。QCLDBについては、2016年度まで開発の援助を行っていましたが、2016年度をもって開発は終了しました。

### (1) QCLDB (量子化学文献データベース)

(公開先) <http://qcldb2.ims.ac.jp/>

(開発代表者) 細矢治夫

(総件数) 139,657 件

主要学術雑誌に掲載された *ab initio* 分子軌道計算を扱った文献のデータベースです。新規開発は2016年度で中止になりました。

### (2) FCDB (力の定数に関するデータベース)

(公開先) <http://fcd.ims.ac.jp/>

(開発代表者) 田隅三生

(総件数) 2,394 件

力の定数 (Force Constant) に関する文献のデータベースで、WWW版FCDBを原則利用制限なしで公開サービスしています。新規開発は2001年度で中止になっています。

### (3) SGBS (Segmented Gaussian Basis Set; Sapporo 基底関数のデータベース)

(公開先) <http://sapporo.ims.ac.jp/sapporo/>

(開発代表者) 野呂武司

(総件数) 1,315 件

基底関数の種類は全部で29種類あり、延べ1,315個の元素の基底関数が登録されています。基底関数の出力時に、diffuse関数を加えることができ、ユーザーの選択した9種類のデータ書式のいずれかで出力することができます。北海道大学の研究室で公開されていたものを、2013年3月から計算科学研究センターでも公開しています。2014年10月にデータが更新されました。

## 5 2018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	216	857	230,432,944	215,653,890	147,739,797
	所内	15	46	46,813,910	46,813,910	32,630,602
生理学	施設利用	2	3	1,100,000	1,092,000	900,804
	所内	3	6	450,000	450,000	105,407
基礎生物学	施設利用	1	1	30,000	30,000	0
計算物質科学スパコン共用事業利用枠		11	72	28,600,000	28,600,000	21,673,245
合計		248	985	307,426,854	292,639,800	203,049,855

### 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									
		FX10	*	Type-NF	*	Type-NN	*	Type-CC	*	Type-CA	*
2018年4月	400,410	720	100	664	100	641	100	664	100	657	100
5月	442,281	744	100	734	100	708	100	734	100	731	99
6月	484,932	720	100	710	100	698	100	710	100	710	99
7月	551,532	744	100	734	100	734	99	734	100	734	100
8月	534,536	744	100	734	100	734	97	734	97	734	97
9月	443,146	720	100	710	100	710	100	710	100	710	100
10月	472,355	-	-	699	100	699	100	699	100	699	100
11月	461,659	-	-	720	100	720	100	720	100	720	100
12月	457,137	-	-	734	100	734	94	734	94	732	94
2019年1月	441,291	-	-	734	100	734	100	734	100	722	100
2月	375,198	-	-	657	100	657	56	657	69	644	69
3月	471,846	-	-	744	100	744	100	744	100	744	100
合計	5,536,323	4,392	100	8,574	100	8,513	95	8,574	97	8,536	96

※ \*は、マシン稼働率（マシン稼働時間＋計画停止時間）÷通電時間（暦月度）です。

### 5.3 計算機利用状況

#### 5.3.1 CPU使用時間

年月 マシン名	CPU使用時間										GPU使用時間	
	FX10	*	Type-NF	*	Type-NN	*	Type-CC	*	Type-CA	*	Type-CA	*
2018年4月	44,428	4	613,317	89	14,529,878	71	1,458,412	38	276,460	18	61,421	49
5月	260,694	23	700,570	92	16,446,594	73	1,624,509	39	767,366	46	90,752	65
6月	109,349	10	700,983	95	18,871,366	85	2,276,158	56	656,985	40	107,529	79
7月	49,105	4	732,377	96	20,267,776	87	2,956,855	70	894,991	53	120,134	85
8月	112,273	10	717,829	94	19,780,005	85	2,854,223	68	797,926	47	125,647	89
9月	44,712	4	664,394	90	15,628,520	69	1,716,395	42	851,477	52	93,979	69
10月	-	-	450,527	62	19,505,038	88	2,966,145	74	414,603	26	81,920	61
11月	-	-	621,498	83	20,232,616	88	3,269,920	79	982,687	59	95,652	69
12月	-	-	666,356	87	20,022,314	86	3,357,997	80	807,249	48	62,807	45
2019年1月	-	-	615,891	81	19,641,794	84	2,708,524	64	602,179	36	76,986	56
2月	-	-	573,022	84	17,739,215	85	2,416,624	64	513,506	35	98,155	79
3月	-	-	662,868	86	22,424,434	95	3,599,123	85	853,563	50	38,829	27
合計	620,561	9	7,719,633	86	225,089,550	83	31,204,884	63	8,418,989	42	1,053,811	64

※ 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 マシン名	バッチジョブ処理件数					
	FX10	Type-NF	Type-NN	Type-CC	Type-CA	合計
2018年4月	804	1,199	17,533	31,346	8,655	59,537
5月	1,954	902	25,152	47,232	121,761	197,001
6月	305	1,062	13,849	185,767	76,724	277,707
7月	468	651	14,860	202,304	80,132	298,415
8月	11,258	1,694	11,316	110,524	42,872	177,664
9月	6,316	1,777	16,471	40,381	39,641	104,586
10月	-	1,062	21,135	101,639	37,027	160,863
11月	-	1,115	25,774	168,855	33,451	229,195
12月	-	1,174	36,334	81,406	41,109	160,023
2019年1月	-	4,131	27,880	50,534	28,977	111,522
2月	-	515	13,239	608,837	22,734	645,325
3月	-	1,882	13,298	76,227	7,611	99,018
合計	21,105	17,164	236,841	1,705,052	540,694	2,520,856

#### 5.4 クラス別CPU使用時間

PRIMEHPC FX10	cck small1	cck large	Queue合計	ETC	総合計
2018年4月	42001:15:12	2426:56:16	44428:11:28	0:00:00	44428:11:28
5月	243836:48:00	16857:07:44	260693:55:44	0:00:00	260693:55:44
6月	108707:15:12	641:34:40	109348:49:52	0:00:00	109348:49:52
7月	48001:10:24	1103:37:52	49104:48:16	0:00:00	49104:48:16
8月	105776:29:52	6496:39:44	112273:09:36	0:00:00	112273:09:36
9月	43156:13:52	1555:44:48	44711:58:40	0:00:00	44711:58:40
10月	-	-	-	-	-
11月	-	-	-	-	-
12月	-	-	-	-	-
2019年1月	-	-	-	-	-
2月	-	-	-	-	-
3月	-	-	-	-	-
合計	591479:12:32	29081:41:04	620560:53:36	0:00:00	620560:53:36

NEC LX Series	PN large	PN small	PN core	PN gpu	Queue合計	ETC	総合計
2018年4月	550845:26:00	14592349:17:56	1638358:46:29	96512:59:10	16878066:29:35	0:00:00	16878066:29:35
5月	538086:24:00	16609078:02:00	2189942:43:16	201931:34:27	19539038:43:43	0:00:00	19539038:43:43
6月	629444:48:00	18942904:18:40	2623267:34:12	309875:33:22	22505492:14:14	0:00:00	22505492:14:14
7月	711026:47:20	20289125:54:40	3532093:31:51	319751:40:43	24851997:54:34	0:00:00	24851997:54:34
8月	457382:52:40	20040452:02:40	3320607:57:05	331540:49:13	24149983:41:38	0:00:00	24149983:41:38
9月	394258:28:40	15898654:58:40	2372995:06:51	194876:21:11	18860784:55:22	0:00:00	18860784:55:22
10月	403315:46:00	19552250:01:20	3195733:26:28	185014:33:32	23336313:47:20	0:00:00	23336313:47:20
11月	587627:36:40	20266487:01:22	3882815:00:47	369791:30:45	25106721:09:34	0:00:00	25106721:09:34
12月	631160:26:00	20057509:07:20	3941428:50:04	223817:07:18	24853915:30:42	0:00:00	24853915:30:42
2019年1月	578985:49:20	19678698:54:40	2924594:34:11	386108:24:11	23568387:42:22	0:00:00	23568387:42:22
2月	540012:25:20	17772224:11:20	2598684:16:24	331445:43:49	21242366:36:53	0:00:00	20992546:35:33
3月	403141:16:00	22684160:35:20	4310331:49:14	142354:01:02	27539987:41:36	0:00:00	27539987:41:36
合計	6425288:06:00	225826896:34:38	36526169:32:08	3093020:18:43	272433056:27:33	0:00:00	272433056:27:33

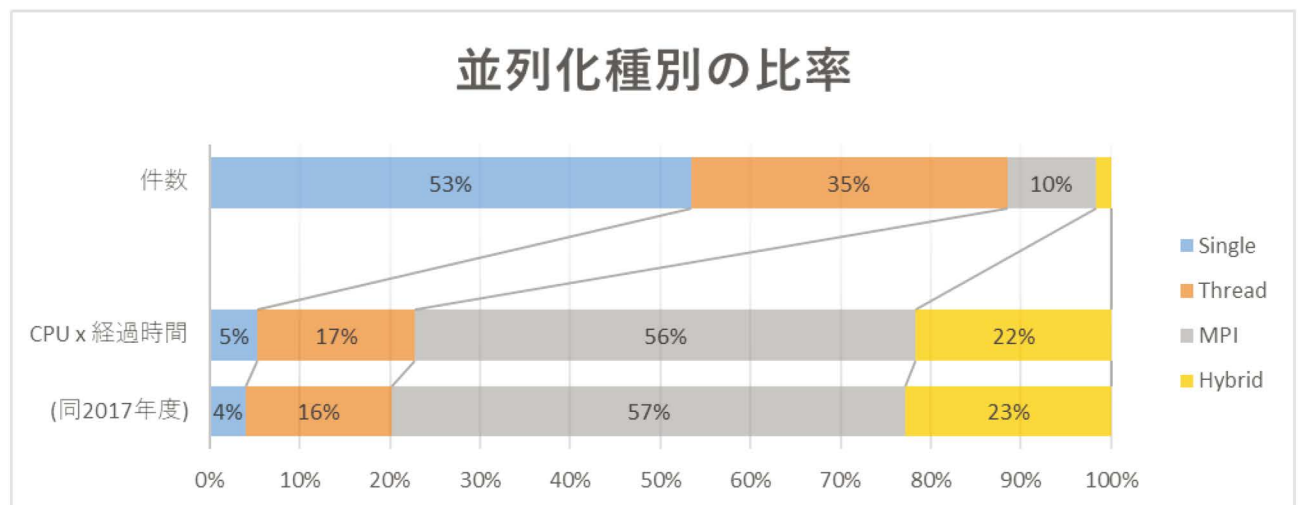
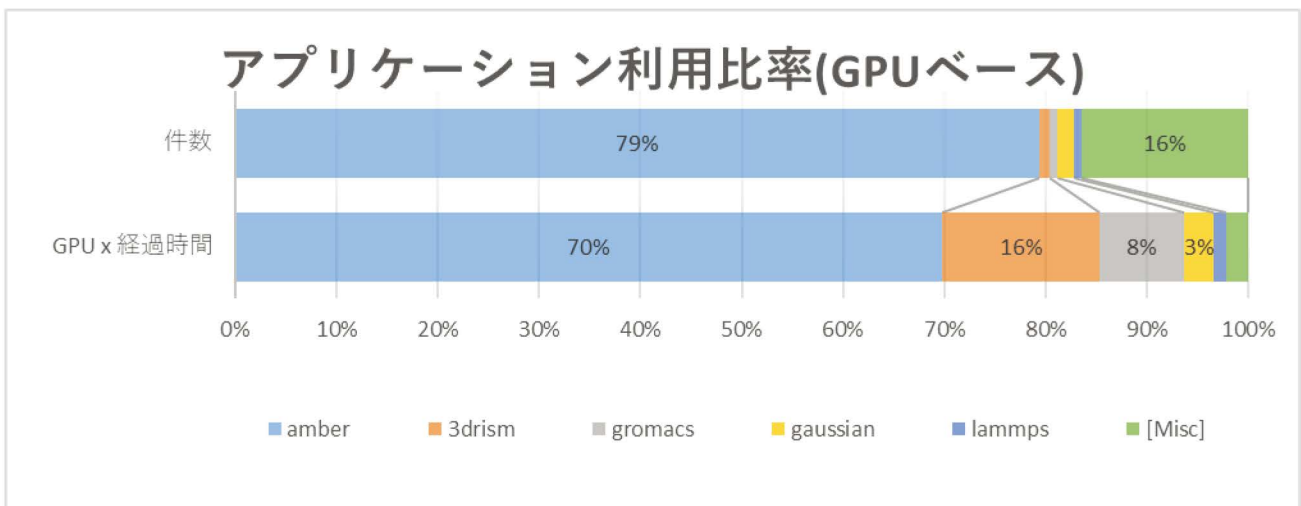
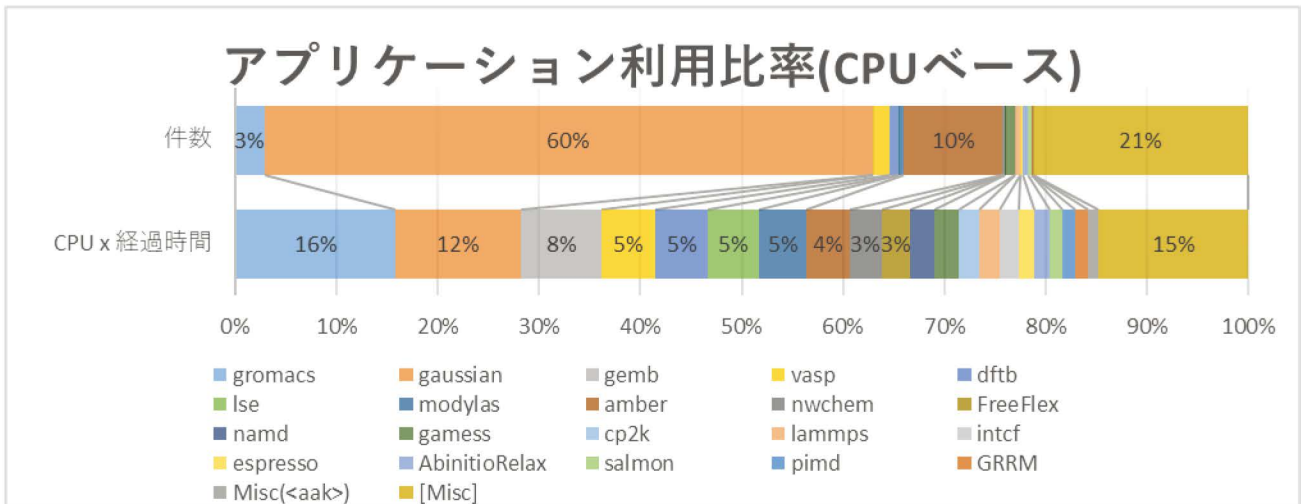


## 5.5 ジョブ処理件数

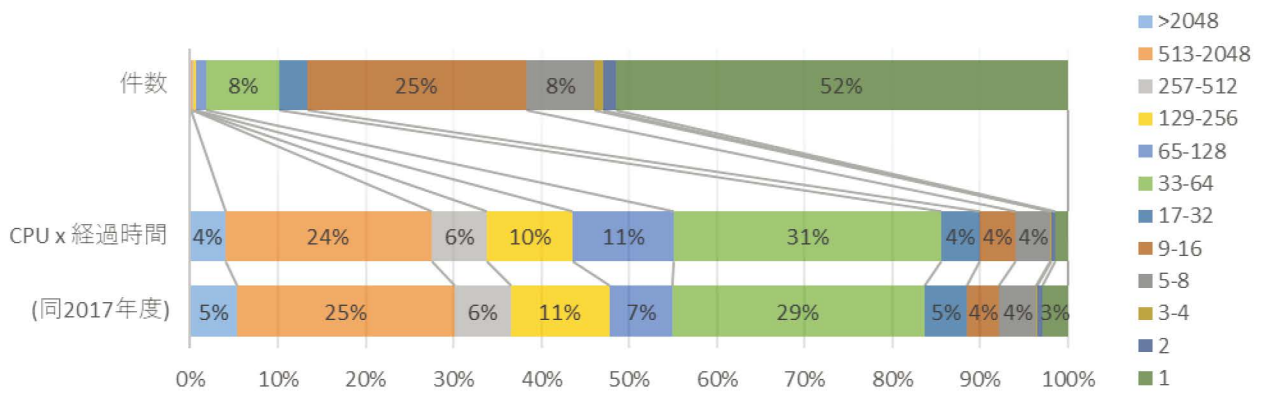
PRIMEHPC FX10	cck small	cck large	Queue合計	ETC	総合計
2018年4月	763	41	804	0	804
5月	1,830	124	1,954	0	1,954
6月	189	116	305	0	305
7月	415	53	468	0	468
8月	9,755	1,503	11,258	0	11,258
9月	1,854	4,462	6,316	0	6,316
10月	-	-	0	-	-
11月	-	-	0	-	-
12月	-	-	0	-	-
2019年1月	-	-	0	-	-
2月	-	-	0	-	-
3月	-	-	0	-	-
合計	14,806	6,299	21,105	0	21,105

NEC LX Series	Type-NF	Type-NN	Type-CC	Type-CA	Queue合計	ETC	総合計
2018年4月	1,199	17,533	31,346	8,655	58,733	0	58,733
5月	902	25,152	47,232	121,761	195,047	0	195,047
6月	1,062	13,849	185,767	76,724	277,402	0	277,402
7月	651	14,860	202,304	80,132	297,947	0	297,947
8月	1,694	11,316	110,524	42,872	166,406	0	166,406
9月	1,777	16,471	40,381	39,641	98,270	0	98,270
10月	1,062	21,135	101,639	37,027	160,863	0	160,863
11月	1,115	25,774	168,855	33,451	229,195	0	229,195
12月	1,174	36,334	81,406	41,109	160,023	0	160,023
2019年1月	4,131	27,880	50,534	28,977	111,522	0	111,522
2月	515	13,239	608,837	22,734	645,325	0	645,325
3月	1,882	13,298	76,227	7,611	99,018	0	99,018
合計	17,164	236,841	1,705,052	540,694	2,499,751	0	2,499,751

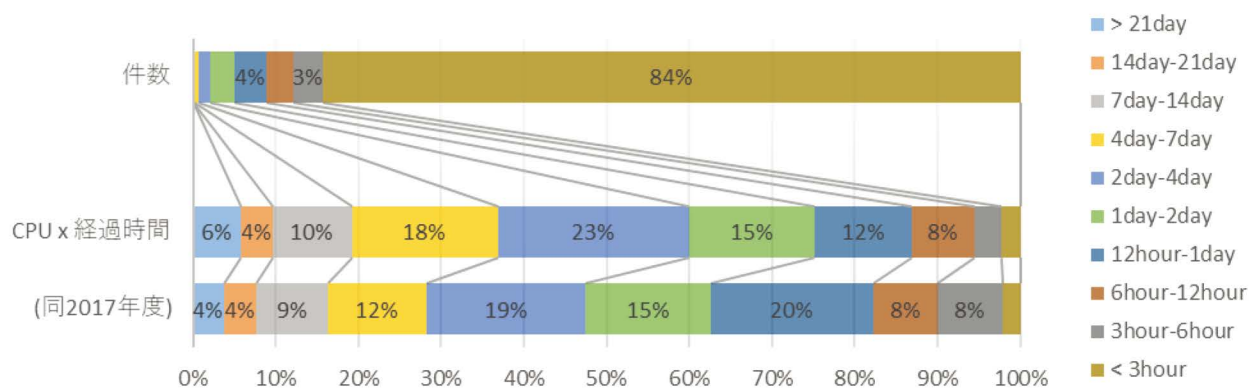
## 5.6. ジョブの実行状況



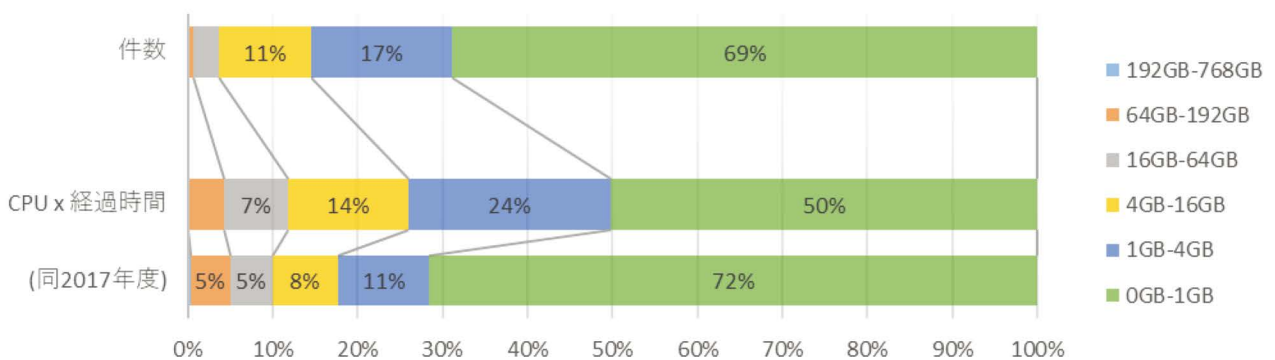
## 1ジョブあたりの使用コア数別比率



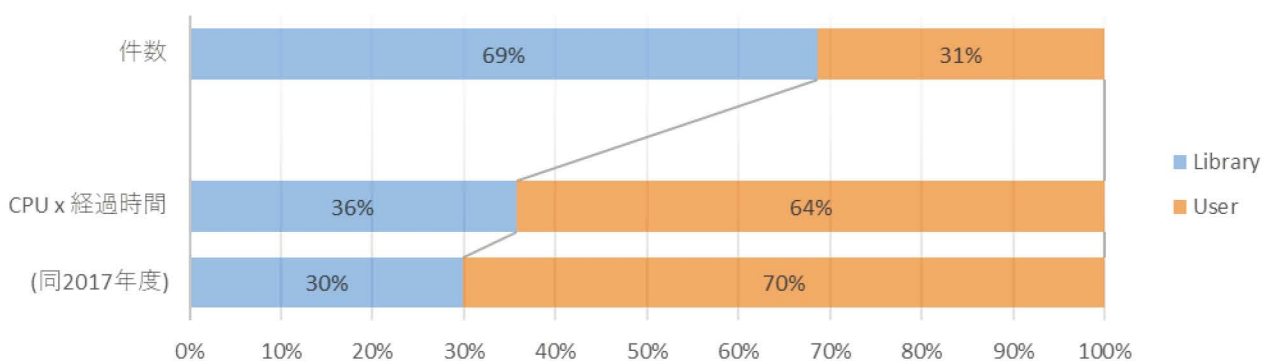
## 1ジョブの実行時間別比率



## プロセスごとの使用メモリー量



## ライブラリーアプリケーションの使用割合



## 6 資料

### 6.1 計算科学研究センター運営委員

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

齊藤 真司	教授・センター長
江原 正博	教授
奥村 久士	准教授
石田 千城	助教
大野 人侍	助教
内山 郁夫	助教
水谷 文保	技術職員（班長）
岩橋 建輔	技術職員（係長）
内藤 茂樹	技術職員（係長）
澤 昌孝	技術職員（主任）
松尾 純一	技術職員（主任）
長屋 貴量	技術職員
神谷 基司	技術職員
宇野 明子	技術支援員
石原 麻由美	事務支援員
近藤 直子	事務支援員

### 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 <sup>a</sup>	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 <sup>b,c</sup> (時間)	509	2,405	5,405	6,320	8,205	8,489	8,508
ジョブ処理件数 <sup>b</sup>	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 <sup>d</sup>	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 <sup>a</sup>	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 <sup>b,c</sup> (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 <sup>b</sup>	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 <sup>d</sup>	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 (11月~)	SX-3/34R 8,579 SX-5 8,587 SP2 8,574 HPC 8,590 SR2201 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 SR16000 8,261 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
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
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	170	190	213	204	214	235	234
利 用 者 数							
機 構 内 <sup>a</sup>	49	43	49	39	63	46	50
機 構 外	617	645	758	747	773	798	816
合 計	666	688	807	786	836	844	866
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
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
許 可	1,581,450	1,675,950	7,832,630	12,841,960	14,147,404	171,317,964	213,838,230
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
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
ライブラリプログラム 新規登録数	15	22	21	9	24	36	29
データベース新規登録数	0	0	1	0	0	0	0
センター使用論文数 <sup>d</sup>	193	231	257	260	253	210	253

	2017年度	2018年度
計算機システム	PRIMERGY(9月まで) UV2000(9月まで) PRIMEHPC FX10 NEC LX(10月から)	PRIMEHPC FX10 (9月まで) NEC LX
運 転 方 式	無人	無人
プロジェクト数	236	248
利 用 者 数		
機 構 内 <sup>a</sup>	45	52
機 構 外	869	933
合 計	914	985
稼働時間 (時間)	PRIMERGY 4,251 UV2000 4,262 PRIMEHPC FX10 8,519 NEC LX 4,209	PRIMEHPC FX10 4,392 NEC LX 8,525
CPU時間利用申請 (時間)	-	-
申 請	264,312,932	307,426,854
許 可	253,788,270	292,639,800
総使用CPU時間 <sup>b</sup> (時間)	186,692,673	272,486,299
ジョブ処理件数 <sup>b</sup>	1,140,631	2,520,856
ライブラリプログラム 新規登録数	32	24
データベース新規登録数	0	0
センター使用論文数 <sup>d</sup>	322	368

- 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2018より転載)

### 8-6 計算科学研究センター

計算科学研究センターは、2000年度の電子計算機センターから計算科学研究センターへの組織改組にともない、従来の共同利用に加えて、理論、方法論の開発等の研究、さらに、研究の場の提供、ネットワーク業務の支援、人材育成等に取り組んでいる。2018年度においても、次世代スーパーコンピュータプロジェクト支援、ネットワーク管理室支援等をはじめとした様々な活動を展開している。上記プロジェクトについてはそれぞれの項に詳しく、ここでは共同利用に関する活動を中心に、特に設備の運用等について記す。

2018年12月現在の共同利用サービスを行っている計算機システムの概要を示す。本システムは、旧来「超高速分子シミュレータ」と「高性能分子シミュレータ」の2システムから構成されてきたが、2017年10月の更新以降「高性能分子シミュレータ」の1システムに統合した。本シミュレータでは、いずれも量子化学、分子シミュレーション、固体電子論などの共同利用の多様な計算要求に応え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、主として日本電気製のLXシリーズで構成される1075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4.096 PFlopsで総メモリ容量221 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96台からなるPCクラスタである。インターコネクタは、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 09, 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、2018年度は248研究グループにより、総数923名(2019年2月現在)におよぶ利用者がこれらのシステムを日常的に利用している。近年、共同利用における利用者数が増加傾向にあり、このことは計算科学研究センターが分子科学分野や物性科学分野において極めて重要な役割を担っており、特色のある計算機資源とソフトウェアを提供していることを示している。

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

「計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業 (SCCMS)」を運営しており、2018年度はこれらプロジェクトにコンピュータ資源の一部 (20% 未満) を提供・協力している。さらに、ハード・ソフトでの協力以外にも、分野振興および人材育成に関して、スーパーコンピュータワークショップ「理論・計算科学の挑戦：量子化学とシミュレーションからの展望」と2つのウィンタースクール「第8回量子化学スクール」と「第12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。

#### 平成30年度 システム構成

##### 高性能分子シミュレータシステム 4.096 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	2,304 コア (24 コア × 96 ノード) 3.0 GHz
総理論性能	221 TFlops (2,304 GFlops × 96 ノード) + 806 TFlops (NVIDIA Tesla P100 × 192)
総メモリ容量	18 TB (192 GB × 96 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)