

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 2024	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	2024 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	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	クラス別ジョブ処理件数	14
5.6	ジョブの実行状況	15
6	資料	
6.1	計算科学研究センター運営委員	17
6.2	計算科学研究センター職員	18
6.3	利用者数と CPU 時間の推移	19
7	研究施設の現状と将来計画 (分子研レポート 2024 より転載)	22

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。2024 年度は、基礎生物学研究所のスパコンが統合され基礎生物学分野の利用者が増加したこともあり、共用事業枠を含めてグループ数は 429、利用者数は 1737 名となり前年と比べて急伸びしました。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、分子科学と基礎生物学それぞれの分野の代表的なソフトを登録しております。さらに、Open OnDemand という Web ブラウザを通じてスパコンに簡単にアクセスできるプラットフォームも用意しております。これらのライブラリやプラットフォームをご活用いただき皆様の研究を進め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ます。

2023 年 2 月に現在のスパコンに更新されてから二年以上経過しました。計算機の総演算性能は 6.68 PFlops になり更新当初の利用状況には比較的余裕がありましたが、2024 年度の利用率は CPU・GPU とともに高い値で推移しました。時期によっては、ジョブ投入から計算開始まで多少の待ち時間が生じてしまうこともあります。そのような状況を緩和するため、グループ毎の CPU・GPU 制限値を割り当て点数に応じて設けております。これらの制限値を適切な値に設定することで、皆様が公平に計算資源を利用できるように心がけております。利用者の皆様が存分にスパコンをご活用いただき研究成果を上げられることを願っております。

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。2024 年度も例年通り 2 つのスクールをオンラインとハイブリッドで開催しました。2024 年 8 月 28～30 日に「分子シミュレーションスクール」を、2024 年 12 月 10 日～12 月 12 日に「量子化学スクール」を開催し、それぞれ 381 名、348 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、計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業（SCCMS）と合同で、2025 年 1 月 15～16 日に「AI/ML に基づく材料設計と開発：理論と実験の接点」をテーマとして開催しました。当該テーマを専門とされる先生 9 名による講演と、10 件のポスター発表を実施しました。このワークショップにも 197 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アプリケーションライブラリを提供するとともに、人材育成や研究交流を通じて分子科学・物性科学・基礎生物学の発展の一翼を担うことができると考えております。今後とも皆様の温かいご指導、ご支援を賜りますようお願いいたします。

2. スーパーコンピュータワークショップ 2024

テーマ：「AI/MLに基づく材料設計と開発：理論と実験の接点」

日時：2025年1月15日（水）～16日（木）

会場：ハイブリッド形式（現地+Zoom 配信）

参加者：197名

ポスター発表：10件

2024年度のスーパーコンピュータワークショップは、計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業と合同で、「AI/MLに基づく材料設計と開発：理論と実験の接点」をテーマとしたワークショップを開催した。分子・物質科学分野でAI/MLを用いた先進的な研究に取り組んでおられる気鋭の研究者を講師にお招きし、研究成果や展望をについてご講演、ご討論いただいた。さらに、実験で計算科学を研究に導入して、顕著な成果を挙げておられる先生方にもご講演いただいた。また、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197名であった。

講演者

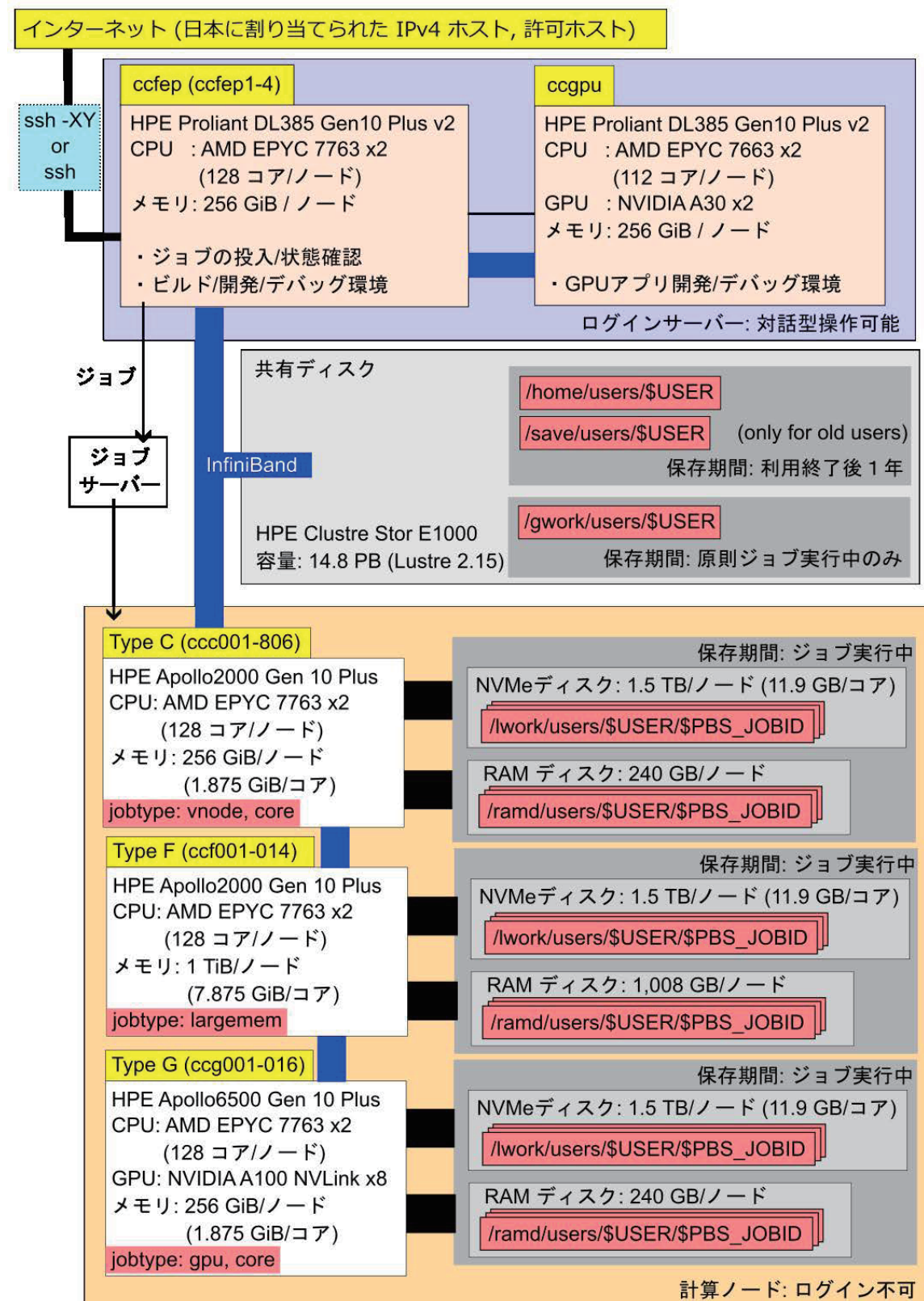
- ・ 中山 哲（東京大学）
「ニューラルネットワークポテンシャルを用いた表面・界面の分子シミュレーション」
- ・ 原 祐（北海道大学）
「量子化学計算に基づく化学反応解析：実験・情報との連携研究への展開」
- ・ 古川 森也（大阪大学）
「多元素合金触媒における反応場および速度論のモデリング」
- ・ 辻 雄太（九州大学）
「触媒材料探索における計算科学と情報科学の応用」
- ・ 藤本 和士（関西大学）【SCCMS 講演】
「燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けた、マルチスケール計算技術構築とその活用」
- ・ 熊谷 悠（東北大学）
「第一原理計算とMIによる欠陥を考慮した新材料探索」
- ・ 福島 知宏（北海道大学）
「水電解反応の機械学習解析」
- ・ 尾方 成信（大阪大学）【SCCMS 講演】
「機械学習ポテンシャルを用いた水素が構造材料に与える影響の原子シミュレーション」
- ・ 只野 央将（物質・材料研究機構）【SCCMS 講演】
「第一原理計算とデータ駆動手法による機能性ホイスラー合金の探索」

ポスター発表

- P-1 生体分子の溶媒和理論の開発と応用
(名古屋大学) ○吉田紀生, 山口毅, 金丸恒大
- P-2 アゾ含有のアミノ酸シッフ塩基銅(II)錯体の DFT 計算と蛋白質ラッカーゼとの相互作用
(東京理科大学) 成田真央, ○伊藤匠汰, 中根大輔, 秋津貴城
- P-3 反応物を表現とした活性予測モデル構築と分子構造生成への適用
(奈良先端科学技術大学院大学) ○岩崎悠人, 宮尾知幸
- P-4 機械学習とハイパーパラメータチューニングを用いた酵素反応の反応座標探索
(九州大学) ○川島恭平, 佐藤拓海, 森俊文
- P-5 汎用機械学習ポテンシャルを用いた有限温度における SrTiO₃ 元素置換系の相図シミュレーション
(ENEOS 株式会社) ○小鷹浩毅, 原嶋庸介, 入口広紀, 高山大鑑, 高須賀聖五, 藤井幹也
- P-6 立体配置を考慮した反応経路ネットワーク解析手法の開発: NNP-AFIR 法を用いたプロリン触媒不斉アルドール反応の機構解析
(北海道大学大学院総合化学院¹, WPI-ICReDD², JST-ERATO³, 北海道大学大学院理学院⁴, NIMS⁵) ○砂崎慎之介¹, 原渕祐^{2,3}, Staub Ruben², Varnek Alexandre², 前田理^{2,3,4,5}
- P-7 データ駆動型分子特性予測モデルにおける立体配座の重要性の理解
(奈良先端科学技術大学院大学) ○濱川祐羽, 宮尾知幸
- P-8 高濃度 ATP 溶液における水モデルの重要性の理論的解析
(九州大学) ○森俊文, 吉田紀生
- P-9 AiiDA によるハイスループット第一原理計算システム
(日本電気株式会社) ○矢作裕太
- P-10 化合物空間の構造の理論研究: 物質的反对称性の開拓
(分子科学研究所) ○白男川貴史, Simon León Krug, 江原正博,
O. Anatole von Lilienfeld

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。

2024 年 8 月に基礎生物学分野専用の大容量メモリー搭載サーバー、ccb001 を導入しました。1 つのノードに 3TB のメモリーを搭載しているため、巨大なメモリーを要する計算が可能です。



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	7.875 GiB/ 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	9,600/32 6,400/24 4,096/20 3,200/12 768/8	-
H (vnode)	ccc ccf	1.875 GiB/ コア	1~50 vnode(s) (64~3,200 コア)			
H (core)	ccc ccg	1.875 GiB/ コア	1~63 コア			
H (gpu)	ccg	1.875 GiB/ コア	1~32 GPU 1~16 コア/GPU			
HB (nibb)	ccb	30.667 GiB/ コア	1~2 vnode(s) (48~96 コア)			
(専有利用)	ccc	1.875 GiB/ コア	応相談		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。
- HB キューは基礎生物学分野専用のキューです。

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 ccfe_p 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	
	バージョン	導入日
ABCluster	クラスター構造の最適化や配座探索を行うソフト	
	3.0	2023/11/28
ABINIT-MP	高速なフラグメント分子起動法(FMO)ソフトウェア	
	v2r8	2025/1/7
	v2r4	2023/2/21
	v1r22	2023/2/21
AlphaFold	配列情報からタンパク質立体構造予測を行うソフトウェア	
	3.0.0 (2025/1/16)	2025/1/16
	3.0.0 (2024/11/26)	2024/11/26
	2.3.2	2024/2/8
	2.3.1	2023/2/6
	2.2.0	2022/3/14
	2.1.1	2021/11/8
	2.1.0	-
	2.0.0 (2021/8/19)	2021/8/23
	2.0.0 (2021/7/20)	2021/7/26
AMBER	生体系を主ターゲットとした分子動力学計算ソフト	
	24-update3	2025/3/6
	24-update1	2024/6/11
	22-update4	2023/8/25
	22-update1	2023/1/-
	20-update13	2023/1/-
AutoDock	自動ドッキングツール	
	4.2.6	2023/11/24
AutoDock-GPU	AutoDock のアクセラレータ有効版	
	1.5.3	2023/11/24
AutoDock Vina	AutoDock の発展版	
	1.2.5	2023/11/24
CENSO	DFT レベルで構造アンサンブルを評価するプログラム	
	1.2.0	2024/5/22
ColabFold	配列情報からタンパク質立体構造予測を行うソフト	
	1.5.5	2024/2/16
CP2K	第一原理分子動力学計算可能な量子化学計算ソフト	
	2024.3	2024/10/24
	2024.2	2024/8/22
	2023.1	2023/4/6
CREST	DFT レベルでの配座探索等を行うプログラム	
	3.0.1	2024/5/21
CRYSTAL	周期系向けの量子化学計算ソフト	
	23-1.0.1	2024/7/19
	17-1.0.2	2023/1/-

Dalton	様々な分子特性を計算可能な量子化学ソフトウェア	
	2020.1	2024/11/8
DFTB+	DFTB 法を用いた高速高効率な汎用量子化学計算ソフト	
	23.1	2023/7/19
DIRAC	相対論効果の直接的な取り扱い可能な量子化学計算ソフト	
	23.0	2023/5/8
	19.0	2023/1/27
GAMESS	分子系向けの汎用量子化学計算ソフト	
	2024-R2	2024/10/21
	2023-R2	2023/12/7
	2022-R2	2023/1/-
	2021-R1	2023/1/-
Gaussian	様々な系で利用可能な量子化学計算ソフト	
	16.C.02	2022/3/14
	16.C.01	2019/8/2
	16.B.01	2018/3/2
	09.E.01	2015/12/24
GENESIS	生体系向けの分子動力学計算ソフト	
	2.1.4	2025/1/10
	2.1.2	2024/1/16
	2.0.3	2023/1/-
GROMACS	高速計算向け分子動力学計算ソフト	
	2024.5	2025/1/27
	2024.4	2024/11/5
	2024.2	2024/5/16
	2023.5	2024/5/7
	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/-
	2021.4	2023/1/-
GRRM	化学反応自動探索ソフト	
	23	2024/1/11
	17	2021/1/27
	14	2015/7/29
LAMMPS	柔軟で拡張性の高い分子動力学計算ソフト	
	29Aug2024 Update 1	2025/2/21
	29Aug2024	2024/9/6
	2Aug23	2023/10/16
	23Jun22 Update 2	2023/1/-
	29Sep21 Update 3	2023/4/18
	29Sep21	2023/1/-
LigandMPNN	低分子リガンドに結合する配列設計のためのソフト	
	(2024/3/27 最新のコード)	2024/3/27
Molpro	電子相関や多参照計算向けの量子化学計算ソフト	
	2025.1.0	2025/3/14
	2024.3.0	2024/11/15
	2024.2.0	2024/9/9
	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
	2015.1-44	2023/1/-
NAMD	超並列計算向け分子動力学ソフト	
	3.0.1	2024/10/31
	3.0	2024/7/5
	3.0b7	2024/5/23
	3.0b6	2024/3/6
	3.0b2	2023/4/10
	2.14	2023/1/-
NBO	Natural Bond Orbital (NBO)プログラム	
	7.0.10	2023/2/14
	7.0.7	2023/1/-
NTChem	大規模複雑系のための量子化学計算ソフト	
	2013.13.0.0	2023/4/28
NWChem	超並列計算対応の汎用量子化学計算ソフト	
	7.2.3	2025/2/27
	7.2.2	2024/3/5
	7.0.2	2023/3/6
	6.8	2023/1/-
OmegaFold	タンパク質立体構造予測ソフトウェア	
	1.1.0	2024/6/12
OpenBabel	化学データの様々な表現の変換に対応可能なツールボックス	
	3.1.1	2025/3/10
OpenMM	分子シミュレーション用のツールキット	
	8.2.0	2025/3/6
	8.1.0	2023/12/5
OpenMolcas	電子状態計算ソフト Molcas のオープンソース版	
	24.10	2024/11/18
	23.06	2023/7/25
	22.10	2023/3/6
	21.10	2023/3/6
ORCA	多様な計算方法に対応した量子化学計算ソフト	
	6.0.1	2024/11/6
	5.0.4	2023/3/20
	5.0.3	2022/2/22
	4.2.1	2020/1/8
ProteinMPNN	与えられた主鎖構造からアミノ酸配列予測を行うソフト	
	(2023/10/25 最新のコード)	2023/10/26
PSI4	柔軟な設定可能な量子化学計算ソフト	
	1.9.1	2024/3/5
	1.7	2023/1/30
Quantum ESPRESSO	固体物性解析向けの量子化学計算ソフト	
	7.4.1	2025/2/12
	7.4	2025/1/24
	7.3	2024/2/6
	7.2	2023/4/11
	6.8	2023/1/26
Reaction Plus	反応経路探索ソフト	
	1.0	2018/1/22
RFdiffusion	AI を用いた主鎖構造生成ソフトウェア	
	(2023/10/25 最新コード)	2023/10/26
RFDiffusion AA	生体分子全般のモデリングと設計を行うソフト	
	(2024/3/27 最新コード)	2024/3/27
SIESTA	大規模固体表面系を得意とする量子化学計算ソフト	
	5.2.2	2025/2/19

	5.0.1	2024/7/4
	5.0.0	2024/5/29
	4.1.5	2023/1/-
TURBOMOLE	汎用高速量子化学計算ソフト	
	7.9	2024/12/12
	7.8.1	2024/11/12
	7.8	2023/12/18
	7.7	2023/7/18
	7.6	2021/12/23
xTB	Extended tight binding 計算のためのソフト	
	6.7.1	2025/3/5
	6.7.0	2024/5/7
	6.5.1	2024/5/22
GaussView	Gaussian 用ビューア	
	6.1.1	2019/10/29
	6.0.16	2017/2/2
	5.0.9	2013/3/13
iMolpro	Molpro の GUI 環境	
	1.0.1	2024/3/8
Luscus	Molcas の GUI 環境	
	0.8.6	2023/10/4
Molden	種々の量子化学計算ソフト対応のビューア	
	7.2.1	2023/2/6
VMD	汎用分子ビューア	
	1.9.4 alpha (2022/4/27)	2023/1/-
XCrySDen	結晶や分子構造の可視化ソフト	
	1.6.2	2024/8/23

5. 2024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	334	1,459	648,880,109	627,148,213	495,561,909
	所内	12	41	106,247,460	106,247,460	90,505,723
生理学	施設利用	3	7	3,160,000	3,160,000	64,631
	所内	2	2	8,940,000	8,940,000	4,511,618
基礎生物学	施設利用	63	160	5,520,000	5,520,000	1,202,988
	所内	11	44	1,240,000	1,240,000	366,829
計算物質科学スパコン共用事業利用枠		4	44	36,700,000	36,700,000	36,814,851
合 計		429	1,757	810,687,569	788,955,673	629,028,549

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	*
2024年4月	442,502	640	99	640	100	640	100
5月	497,172	744	100	744	100	744	100
6月	518,641	712	100	712	100	712	100
7月	550,451	744	99	744	100	744	100
8月	571,580	736	100	736	100	736	99
9月	548,189	712	100	712	100	712	100
10月	496,577	710	99	710	99	710	99
11月	435,093	720	100	720	100	720	100
12月	474,052	736	100	736	100	736	100
2025年1月	480,723	744	100	744	100	744	100
2月	432,682	664	100	664	100	664	100
3月	470,485	744	100	744	100	744	100
合 計	5,918,147	8,606	100	8,606	100	8,606	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-F	*	Type-C	*	Type-G	*	Type-G	*
2024年4月	1,031,760	90	52,283,528	79	358,682	27	71,670	87
5月	1,165,552	87	62,053,404	81	595,605	39	91,495	96
6月	1,145,868	90	62,347,335	85	679,298	47	80,212	88
7月	1,038,417	78	61,869,995	81	510,367	33	88,291	93
8月	1,155,738	88	63,484,577	84	511,471	34	80,676	86
9月	841,884	66	66,246,864	90	405,649	28	74,481	82
10月	1,094,536	86	64,605,012	88	616,503	42	78,296	86
11月	1,071,017	83	69,502,453	94	635,248	43	80,374	87
12月	872,859	66	61,403,510	81	528,133	35	75,514	80
2025年1月	1,115,176	84	65,250,250	85	431,900	28	69,224	73
2月	931,686	78	56,754,964	83	463,455	34	67,331	79
3月	1,121,667	84	58,058,519	76	483,187	32	87,366	92
合 計	12,586,162	82	743,860,410	84	6,219,498	35	944,930	86

※ 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
2024年4月	568	74,478	27,202	102,248
5月	2,138	139,651	6,676	148,465
6月	1,220	144,062	17,483	162,765
7月	2,494	189,217	17,653	209,364
8月	789	193,805	21,000	215,594
9月	2,103	218,590	18,045	238,738
10月	1,707	145,745	25,551	173,003
11月	2,100	157,954	15,110	175,164
12月	1,630	246,021	19,309	266,960
2025年1月	1,008	197,949	11,636	210,593
2月	1,882	149,182	7,027	158,091
3月	952	167,142	7,378	175,472
合 計	18,591	2,023,796	194,070	2,236,457

5.4 クラス別CPU使用時間

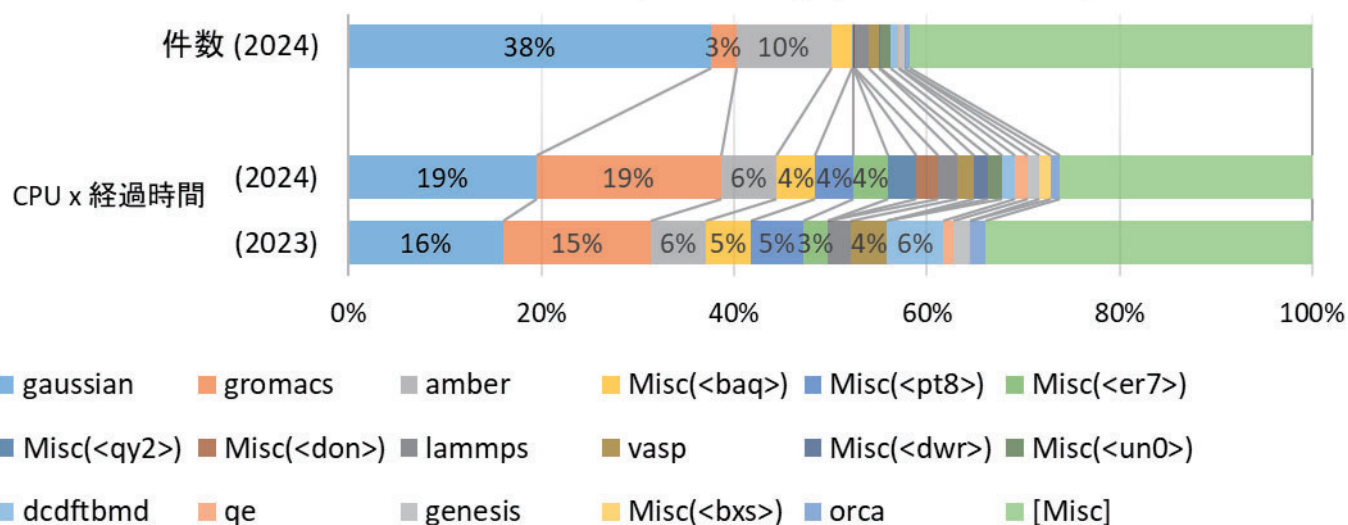
	H largemem	H vnode	H core	H gpu	Queue 合計	ETC	総合計
2024年4月	1028415:24:48	48244209:21:04	4042942:25:16	358402:40:35	53673969:51:43	0:00:00	53673969:51:43
5月	1133336:29:52	54793370:00:32	7316444:38:02	571410:33:07	63814561:41:33	0:00:00	63814561:41:33
6月	1111292:41:36	54705855:06:40	7741880:47:58	613472:15:51	64172500:52:05	0:00:00	64172500:52:05
7月	990723:26:56	52988869:04:00	8957944:45:39	481240:56:45	63418778:13:20	0:00:00	63418778:13:20
8月	1145781:00:48	56070660:16:00	7463862:00:42	471483:25:20	65151786:42:50	0:00:00	65151786:42:50
9月	786483:01:20	58141673:46:40	8223089:36:12	343150:07:25	67494396:31:37	0:00:00	67494396:31:37
10月	945036:01:04	56806814:56:00	8132069:01:55	432130:28:14	66316050:27:13	0:00:00	66316050:27:13
11月	833040:06:24	60300242:19:44	9656155:08:26	419281:04:32	71208718:39:06	0:00:00	71208718:39:06
12月	804331:56:48	52805292:22:24	8756448:57:51	438428:53:54	62804502:10:57	0:00:00	62804502:10:57
2025年1月	1101784:54:24	56895334:56:00	8423687:52:29	376518:15:20	66797325:58:13	0:00:00	66797325:58:13
2月	888584:53:20	49383456:28:48	7444832:26:38	433231:20:22	58150105:09:08	0:00:00	58150105:09:08
3月	1121667:24:48	50946320:34:08	7113275:29:23	482110:12:25	59663373:40:44	0:00:00	59663373:40:44
合 計	11890477:22:08	652082099:12:00	93272633:10:31	5420860:13:50	762666069:58:29	0:00:00	762666069:58:29

5.5 クラス別ジョブ処理件数

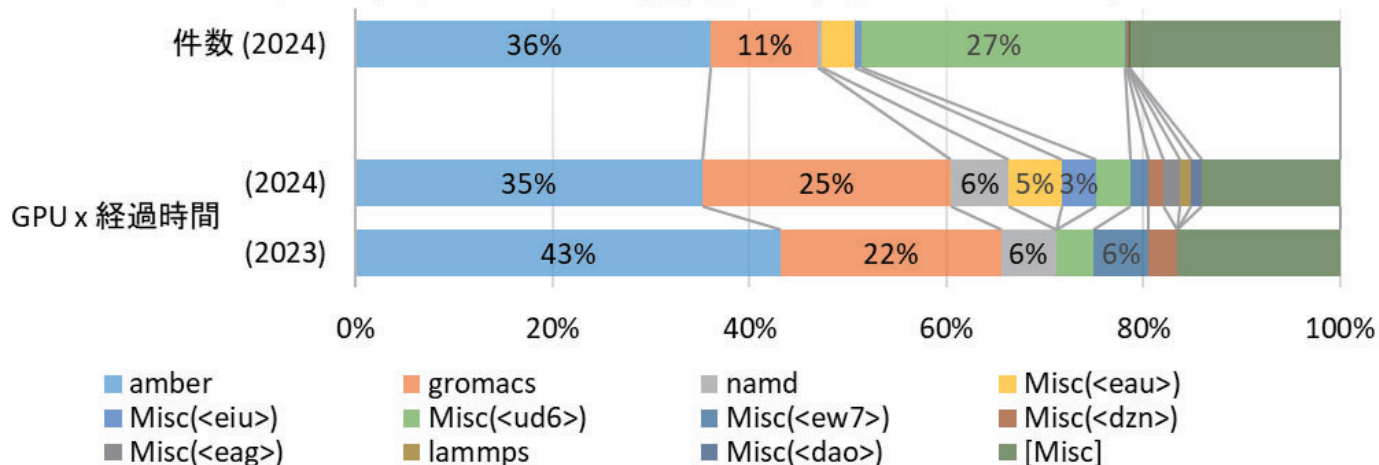
	H largemem	H vnode	H core	H gpu	合 計
2024年4月	540	24,469	50,071	27,168	102,248
5月	1,765	46,238	94,054	6,408	148,465
6月	1,013	49,632	98,503	13,617	162,765
7月	2,333	39,835	150,516	16,680	209,364
8月	671	35,955	160,420	18,548	215,594
9月	1,330	51,208	170,743	15,457	238,738
10月	833	37,987	117,975	16,208	173,003
11月	931	30,001	139,625	4,607	175,164
12月	1,053	48,473	205,580	11,854	266,960
2025年1月	884	70,519	131,238	7,952	210,593
2月	1,465	56,522	95,555	4,549	158,091
3月	952	90,932	76,212	7,376	175,472
合 計	13,770	581,771	1,490,492	150,424	2,236,457

5.6. ジョブの実行状況

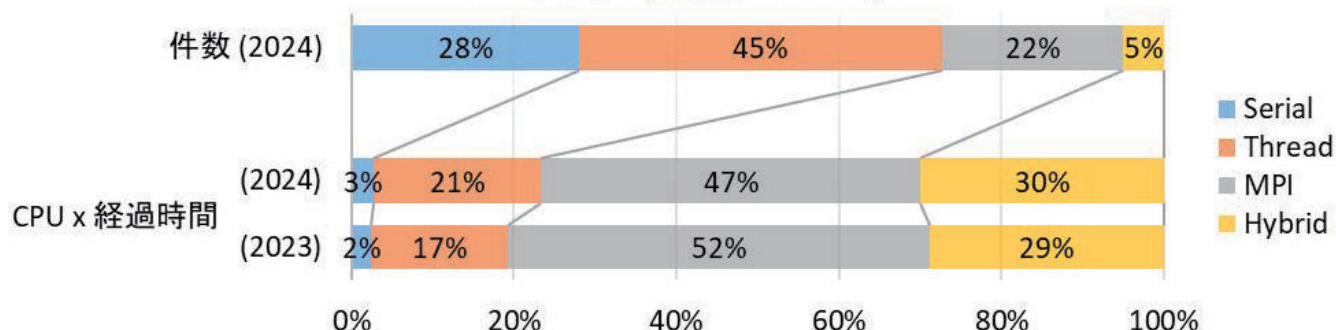
アプリケーション利用比率(CPUベース)



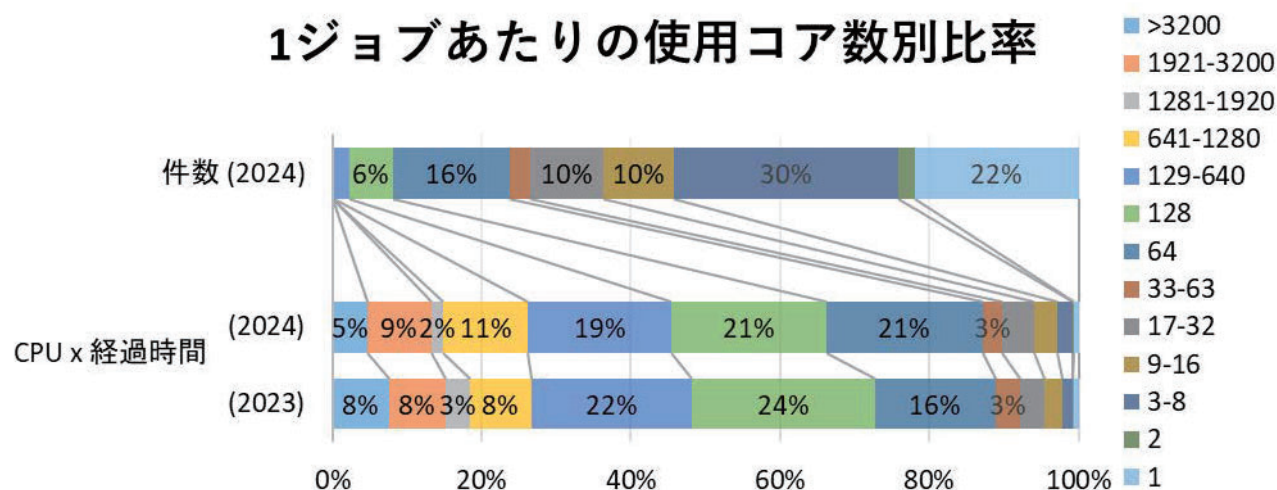
アプリケーション利用比率(GPUベース)



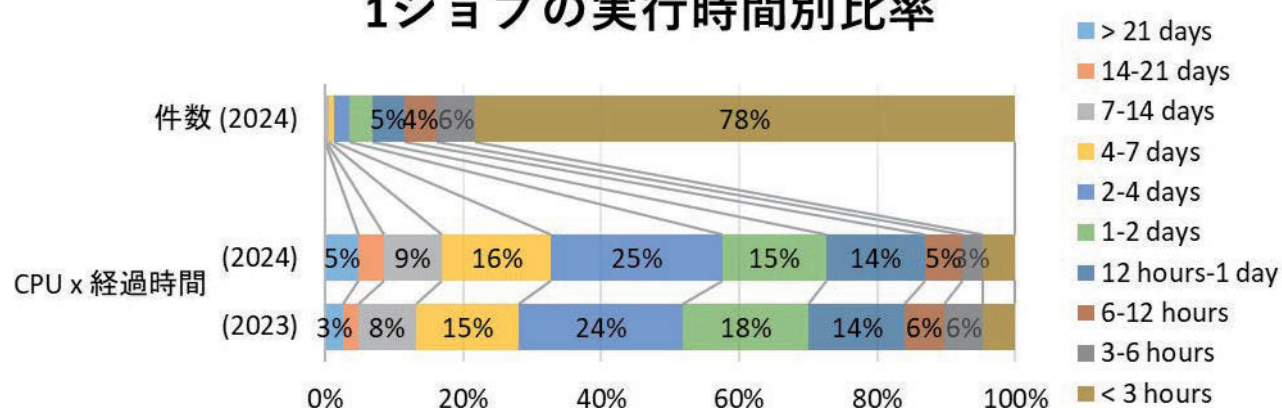
並列化種別の比率



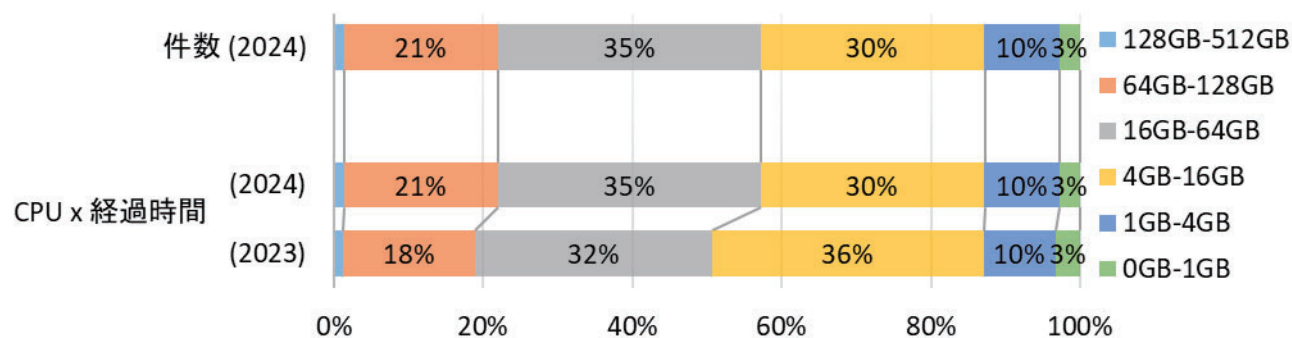
1ジョブあたりの使用コア数別比率



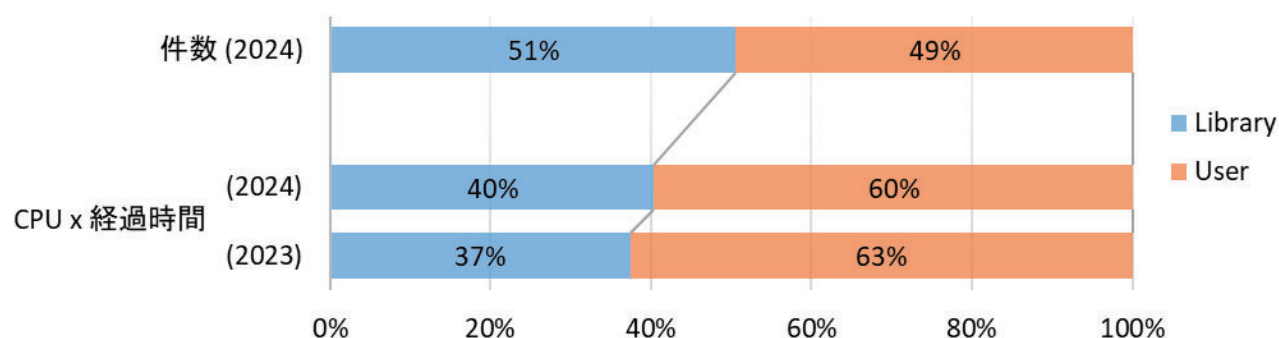
1ジョブの実行時間別比率



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 】

尾崎 泰助	東京大学 物性研究所	教授
森 聖治	茨城大学 大学院理工学研究科	教授
阿部 穰里	広島大学 大学院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
原渕 祐	北海道大学 大学院理学研究院	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
重信 秀治	基礎生物学研究所 超階層生物学センター	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	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（主任技術員）
長屋 貴量	技術職員（主任技術員）
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	再雇用フルタイム職員
矢崎 稔子	特定技術職員
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	2018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)	PRIMEHPC FX10 (9月まで) NEC LX
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	170	190	213	204	214	235	234	236	248
利 用 者 数									
機 構 内a	49	43	49	39	63	46	50	45	52
機 構 外	617	645	758	747	773	798	816	869	933
合 計	666	688	807	786	836	844	866	914	985
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	PRIMEHPC FX10 4,392 NEC LX 8,525
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	307,426,854
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	292,639,800
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	272,486,299
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	2,520,856
ライブラリプログラム 新規登録数	15	22	21	9	24	36	29	32	24
データベース新規登録数	0	0	1	0	0	0	0	0	0
センター使用論文数d	193	231	257	260	253	210	253	328	368

	2019年度	2020年度	2021年度	2022年度	2023年度	2024年度
計算機システム	NEC LX	NEC LX	NEC LX	NEC LX (9月まで) HPE Apollo (2月から)	HPE Apollo	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	268	271	278	298	302	429
利 用 者 数						
機 構 内a	51	57	49	62	53	87
機 構 外	997	1086	1143	1190	1276	1670
合 計	1048	1143	1192	1252	1329	1757
稼 働 時 間 (時間)	NEC LX 8,402	NEC LX 8,568	NEC LX 8,569	NEC LX 4,280 HPE Apollo 1,405	HPE Apollo 8,602	HPE Apollo 8,606
CPU時間利用申請 (時間)	-	-	-	-	-	-
申 請	362,766,273	394,146,128	411,356,806	352,148,319	680,380,026	810,687,569
許 可	331,660,029	356,884,313	322,133,773	297,511,314	647,637,885	788,955,673
総使用CPU時間b (時間)	301,854,255	304,254,227	288,761,279	236,202,463	654,859,090	762,666,070
ジョブ処理件数b	5,494,831	1,841,463	6,389,960	2,818,463	1,732,505	2,236,457
ライブラリプログラム 新規登録数	23	15	29	23	38	42
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	314	252	234	313	299	289

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2024より転載）

6-4 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。2024 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 年度には、基礎生物学研究所のスーパーコンピュータとの統合がなされた。

2025 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う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。インターコネクトは 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、2024 年度は 429 研究グループにより、総数 1,737 名（2025 年3 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。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。また、基礎生物学研究所のスーパーコンピュータとの統合の結果、利用者数が格段に増加した。

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、2024 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「AI/ML に基づく材料設計と開発：理論と実験の接

点」と2つのスクール「第14回量子化学スクール」と「第18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。

2024 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）