

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。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）