

# I 部

## 目 次

寄語	名大教授 大 峰 巖	1
1.	センターでの1年 青 柳 睦	2
2.	スーパーコンピュータワークショップの活動	4
3.	計算機システムの運用および使い方	5
3. 1	システムの構成と特徴	5
3. 2	キューの構成	8
3. 3	利用課金点数	10
4.	一般報告	11
4. 1	分子研ライブラリプログラムの収集と開発	11
4. 2	データベース開発状況	13
5.	平成7年度稼働状況および利用者数	14
5. 1	利用申請プロジェクトおよび利用者数	14
5. 2	システム稼働状況	15
5. 3	C P U使用時間	16
5. 4	V P U使用時間	17
5. 5	ジョブ処理件数	18
6.	資料	19
6. 1	センター関連組織	19
6. 2	岡崎国立共同研究機構分子科学研究所 電子計算機センター規則	20
6. 3	岡崎国立共同研究機構分子科学研究所 電子計算機センター運営委員会規則	21
6. 4	電子計算機センター運営委員会委員	22
6. 5	電子計算機センター職員	23
6. 6	応用プログラム相談員	23
6. 7	建物図	24
6. 8	マニュアル一覧	26
6. 9	利用者数とC P U時間の推移	34



## ガルガンチョワの水

クリーンウォーター、美しいウォーターフロント、おいしいヘルシーな水、などなど、水はとても良いことらしい。その水に魅せられて、早くも十数年、相当頭もやられてしまった水馬鹿三太郎、どうも自分でやっていることがはっきりとは分からない。馬鹿もここまで来れば専門馬鹿を通り越し、本当の馬鹿。この水商売、一回やったら辞められない。魑魅魍魎の魅力とはこんなものか。

電子状態理論の美しい大伽藍はさしづめダンテの神曲、それに比し液体や生体高分子の運動はラブレーのガルガンチョワの世界、または、パンドラの箱の中。何かありそうな、しかし多様性とかいうことでカオスの中に埋没してしまう、我々の認識の限界。自然がなんなく解いてしまう問題が我々には分からない、人間は本当の多次元の解析がどうも不得意らしい。

自然、生命---我々を豊かにしているのは、中間的な長さの相関、本質的に多次元的、精密科学を目指す者には正に魑魅魍魎。しかしこれを解かねば自然の豊かさ美しさの源をつかみだせない。何年も何年も、ひょっとしたら一生を無駄にする覚悟で、大愚に徹しなければ解けそうにない問題、誰かやってみませんか？

幸い、コンピュータは本当の馬鹿正直に計算しこの魑魅魍魎の世界で道を示してくれる強い味方、君の力になります。冒険のない研究なんてしょうがない。あくまで自然には謙虚だけがお守り。心から好きなことしてみませんか？

ところで計算センターさま、彼に計算時間を充分下さいネ。すいませんが、ついでに私にも。

水ほけ老人より

追伸、 計算センターの皆様、御礼を言うのを忘れていました。研究者--言いたいことを言い、自分の要求だけを突き付ける勝手気ままな人間集団--相手するのはさぞ大変。気にしてます、時々は。

この無駄の大集団のなか、自然の内に神の声を聞く一人や二人はいるかも知れません。そうでなければ全くの無駄。お世話をかけます、申し訳ない。

今年の8月から日本電気の新しいコンピュータHPCが稼働し始めました。HPCの導入に伴いセンターのCPUサーバ全般のキュー構成を変更しました。利用の手引き（平成8年9月発行）にあるように、このマシンは2台のベクトルCPUをもち、1CPU当たりのピーク性能は2 GFLOPSです。ところで最近、平成10年度のスーパーコン更新の準備のために各社の新型スーパーコンの仕様を調査しているのですが、気付いたことがあるので報告します。次期スーパーコンの1CPU当たりの演算性能は、富士通、日電、日立、Crayどのメーカーのものが導入されても現有機（SX-3/34R）の6.3G FLOPS以下になってしまいます。各社とも1CPUの性能は2 GFLOPSまでしか出ません。あと1年半以内に新製品が出たとしても3 G FLOPS以下でしょう。各社の新製品は、1CPU当たりの価格を抑えた高（超）並列スーパーコンで、並列演算ピーク性能（カタログ値）は、CPU台数x 2 GFLOPSで、各社とも最大構成で1024 G FLOPS程度です。ここで気をつけなければいけないことは、並列演算ピーク性能の意味するところです。この性能を引き出す最低条件は、(1)メーカーが並列演算用の環境として、優れた並列コンパイラ、並列デバッグ、並列ライブラリと分かり易いマニュアルを提供していること、(2)利用者がその環境を使いこなせることです。心配なのは、(1)各社の並列ソフトウェアは決して初心者向きとは言えない状況ですし、また(2)現有機SP2の並列環境を利用している人が少ないように、新たな並列処理技術を習得しようとする利用者があまりいなかったら、次期システムは「CPUが沢山あるので大人数で使ってもスループットはよいが、性能は現有機の3分の1」となることです。各社とも並列コンパイルをある程度は自動化する機能を強化してきていますが、10年前に自動ベクトルコンパイラとベクトル演算ライブラリをもつスーパーコン（日立S810）が導入された状況とは少し違います。単一処理を前提に書かれたプログラムから並列プログラムを自動的に生成するための技術はまだ発展途上です。自動並列化は自動ベクトル化とは比較にならないほどプリコンパイラの処理が複雑なので、必ずしも効率のよい並列プログラムに変換できない場合が多いようです。利用者は並列化する部分を指定するディレクティブを挿入したり、MPIなどのメッセージ交換ライブラリ（SP2のPOEに相当）の使い方を習得する必要があります。11月5～6日に行われるワークショップの中でも、このような並列化の話題を中心に利用者からの要望を聞く機会がありますので是非参加してください。

今年度センターで開発したものは以下の2つです。来年度の利用申請から申請書の一部を電子化するため、電子メールによる申請ができるようになります。詳細はセンター速報とWeb版利用の手引き（<http://ccinfo.ims.ac.jp>）に

て11月中旬までにお伝えする予定です。次に、センターの計算サービスがどのような状態かを知りたい場合、ccfep1にログインできればservinfoコマンドにより各CPUの稼働状況を知ることができますが、所内の計画停電やSINETの障害時には、今まで外部の利用者がセンターの状況を把握する手段がありませんでした。このような時でもFAXにてセンターの情報を提供するシステムをセンター職員の手島さんが中心となり開発してくれました。11月初旬から運用しますので利用方法等をセンター速報でお知らせします。

## 2. スーパーコンピュータワークショップの活動

計算機センターでは、平成7年8月19日に、SP2 (IBM) およびSX-3 (NEC) の並列環境の利用促進を目的として、「並列計算入門および実用例と解説」という主題でスーパーコンピュータワークショップを開催した。合計46名の参加者があり、並列計算について活発な議論が展開された。

### ～ スーパーコンピュータワークショップ ～

日時 : 平成7年8月19日 (土)  
主題 : 並列計算入門および実用例と解説  
会場 : 分子科学研究所電子計算機センター 2階会議室

#### 平成7年8月19日 (土)

9:00～10:00	「SP2 での並列プログラム入門 part 1」	青山幸也 (IBM)
10:00～10:20	休 憩	
10:20～11:20	「SP2 での並列プログラム入門 part 1」	青山幸也 (IBM)
11:20～12:00	「並列版 HONDO の使い方」	相田美砂子 (国立癌研)
12:00～13:30	昼 食	
13:30～15:30	「SX3 並列処理講習会 (マクロタスク)」	堀内紳年 (NEC)
15:30～15:50	休 憩	
15:50～16:30	「GAMESS による並列計算～SP2 での使用経験～」	鷹野景子 (お茶大理)
16:30～16:50	「並列化 Gaussian 94 の性能と計算例」	南野 智 (分子研) 渡辺秀和 (分子研)

### 3 計算機システムの運用および使い方

#### 3.1 システムの構成と特徴

当センターのシステム平成6年12月までは図3.1に示すように高速演算サーバ(日本電気製 HSP)、スーパーコンピュータ(日本電気製 SX-3/34R)、演算クラスタシステム(IBM製 SP2)による全く独立したUNIX分散処理システムである。

- ・ 機構内にFDDI準拠の600Mbps光ループLANを張り巡らせており、所内はもちろんのこと三研究所(分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所)のサブネットワーク(TCP/IP、DEC netなど)間を統合的に接続・利用できる。
- ・ TISN(東大理学部国際理学ネットワーク)、SINET(学術情報センター インターネットバックボーン)を経由してインターネットにアクセスできる。

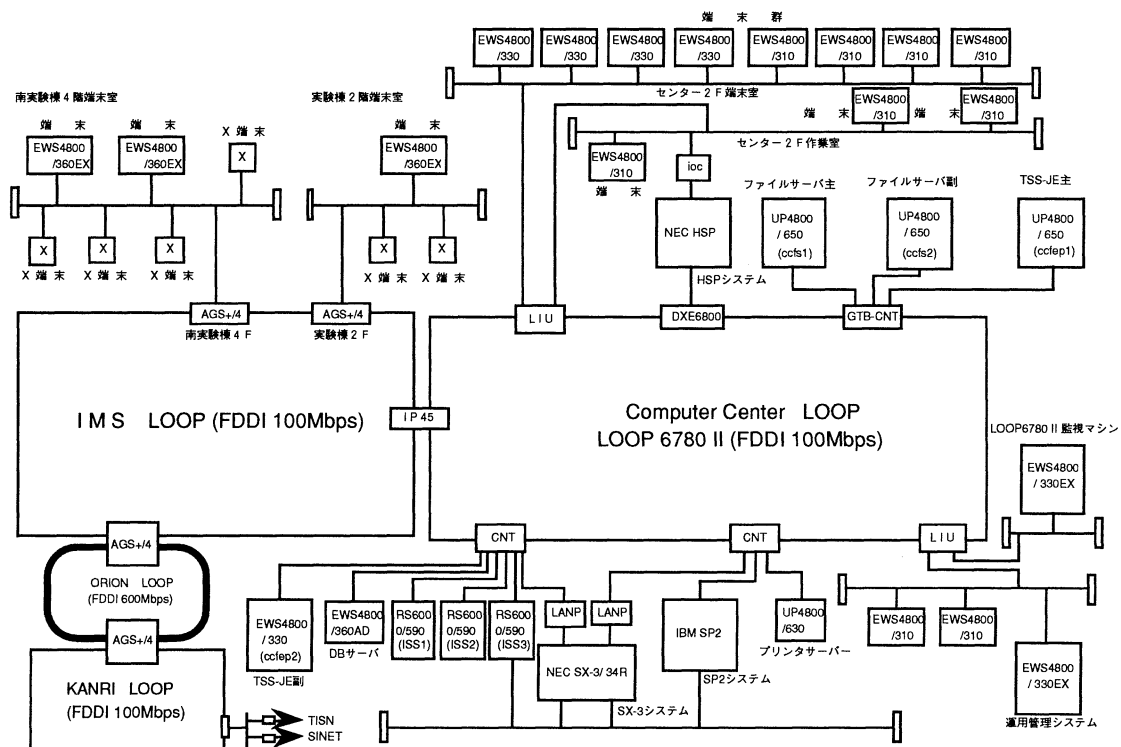


図3.1 システム全体構成概略図

##### 3.1.1 スーパーコンピュータシステム(日本電気製 SX-3/34R)

- ・ SX-3/34Rではジョブ管理(NQS)、バッチ処理を行っている。
- ・ 大容量のCGMT装置(270GB)を用意し、所外の遠隔地ユーザの便に共している。
- ・ 約34.2GBの磁気ディスクと約91.6GBの磁気アレイディスクの総容量約126GBを有している。
- ・ 約790GBの光磁気ディスク(書換可能)を用意し、磁気ディスクの有効利用を計っている。この光磁気ディスクは、通常の磁気ファイルシステムとして使用している。
- ・ 動画出力システムによって、スーパーコンピュータの計算結果の視覚化を可能としている。

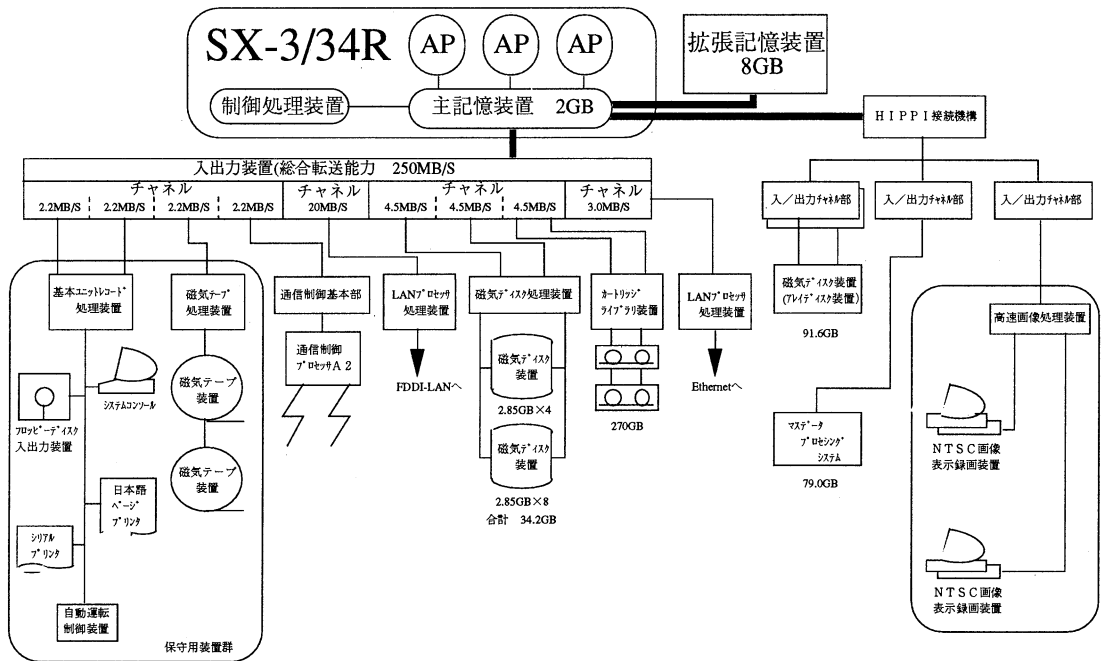


図3.1.1 スーパーコンピュータシステム

3.1.2 高速演算サーバシステム(日本電気製 HSP)

- ・ HSPではTSS処理、ジョブ管理(NQS)、バッチ処理を行っている。
- ・ 約68.7GBの磁気アレディスクを有している。

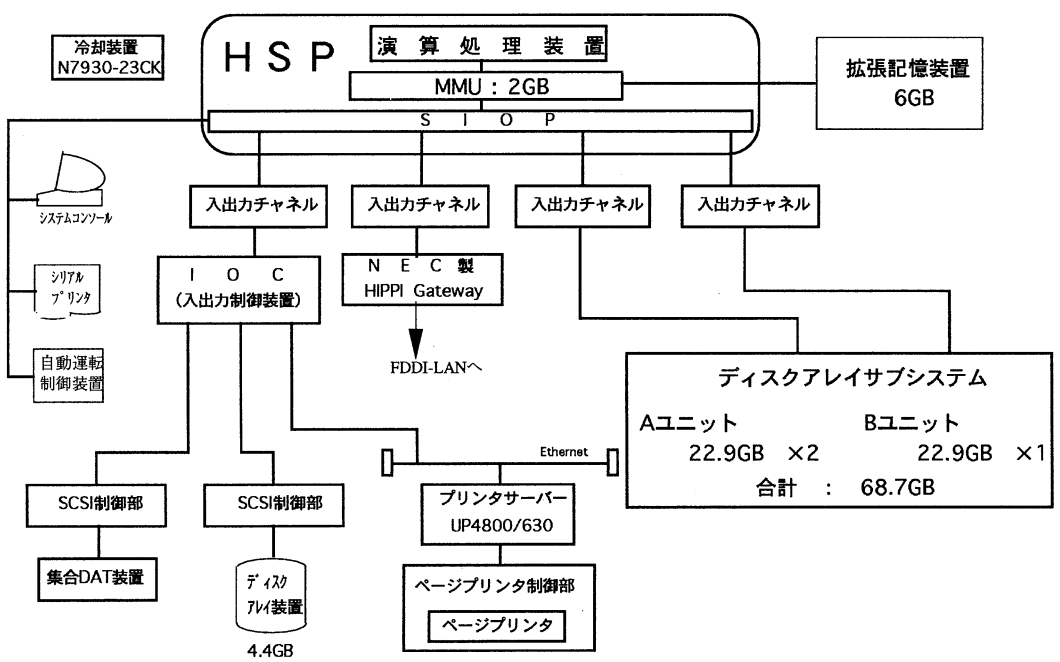


図3.1.2 高速演算サーバシステム



### 3.1.3 演算クラスタシステム(IBM製 SP2)

- ・ SP2では、ジョブ管理(ロードレバラー)、バッチ処理を行っている。
- ・ 48のノードからなるシステムで、各ノードには2GB(総計96GB)の磁気ディスクを有している。

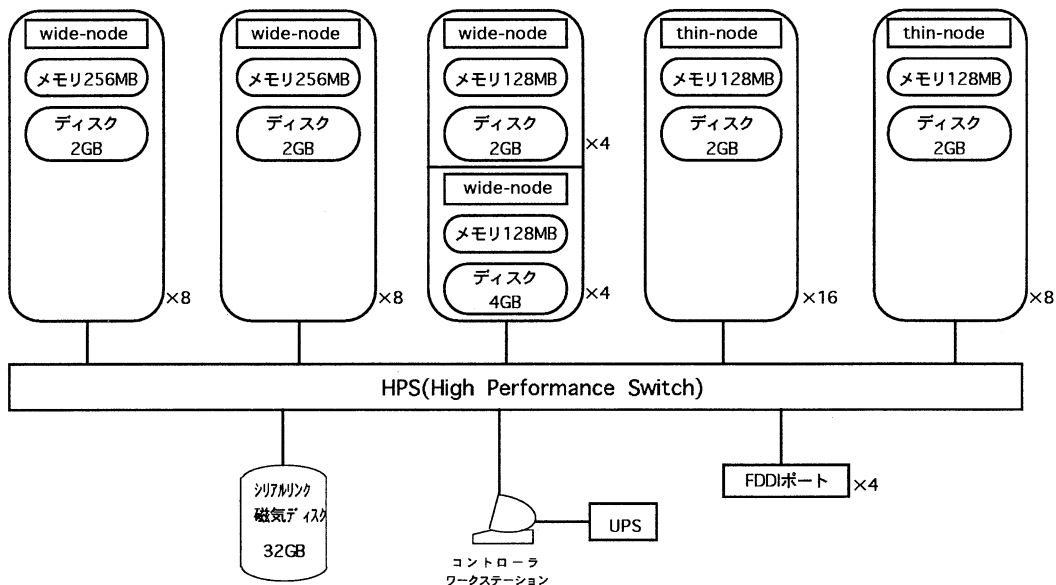


図3.1.3 演算クラスタシステム

### 3.2 キューの構成

それぞれのホストにおけるキュー構成は以下のとおりです。表中の「多重度」は、各キューにおいて同時に実行するジョブの最大件数を指します。また「Complex」は、2つ以上のキューを併せて同時に実行するジョブの最大件数を指します。

#### SX-3/34R (super)

(ベクトルジョブ処理)

キュー名	CPU時間	主記憶	多重度	Complex	処理時間	備 考
V	—	—	—	—	—	V1～V5へのパイプキュー
V1	1時間	256MB	3	4	AM8:00～ AM1:00	
V2	3時間	256MB	3			
V3	3時間	512MB	2	3	終日	
V4	6時間	512MB	2			
V5	12時間	1GB	1			
VX	24時間	2GB	1	1	—	特別申請ジョブ
VP	7時間	1GB	1	1	AM1:00～AM8:00	
MDPS	—	—	1	1	—	
会話処理	5分	32MB	—	—	—	rshのみ

#### HSP (cchsp)

(高速シリアルジョブ処理)

キュー名	CPU時間	主記憶	多重度	備 考
H	—	—	—	H1～H3へのパイプキュー
H1	3時間	256MB	2	
H2	6時間	256MB	2	
H3	6時間	512MB	2	
会話処理	3時間	128MB	2	

#### SP2 (sp2)

(シリアルジョブ処理)

キュー名	CPU時間	主記憶	多重度	Complex	ノード数	備 考
S1	12時間	128MB	6	8	8	Thin
S3	48時間	128MB	6			
S2	12時間	256MB	12	16	16	Wide
S4	48時間	256MB	12			

(並列ジョブ処理)

キュー名	CPU時間	主記憶	多重度	Complex	ノード数	備考
P1	20分	128MB	1	1	4	Thin
P2	24時間	128MB	1	1	12	
P3	24時間	128MB	1	1	7	Wide

ISS (ccibm)

(会話処理専用)

キュー名	CPU時間	主記憶	多重度	ノード数	備考
—	3時間	64MB	—	3	(IBM Power Station590)

### 3.3 利用課金点数

利用課金は差し当たり徴収しませんが、予算の関係上、場合によっては消耗品等を何らかの方法で利用者に負担して頂くことがあるかもしれません。

計算機利用の配分のためにプロジェクト課題ごとに利用点数が割り当てられます。各グループは割り当てられた点数を越えて計算機を利用することはできません。利用点数Pは次の式に従ってジョブごとに算出されます。

#### ◆スーパーコンピュータ (SX-3/34R) の利用点数算出法

$$P1 = \text{CPU} \times a + \text{VPU} \times b$$

CPU : 全 cpu time

VPU : ベクトル演算器の cpu time

パラメータの値は、以下のとおりです。

a : 0.12/sec

b : 0.12/sec

#### ◆高速演算サーバシステム (HSP) の利用点数算出法

$$P2 = \text{CPU} \times c$$

CPU : 全 cpu time

パラメータの値は、以下のとおりです。

c : 0.03/sec

#### ◆演算クラスシステム (SP2 Wide) の利用点数算出法

$$P3 = \text{CPU} \times f$$

CPU : 全 cpu time

パラメータの値は、以下のとおりです。

f : 0.02/sec

#### ◆演算クラスシステム (SP2 Thin) の利用点数算出法

$$P4 = \text{CPU} \times g$$

CPU : 全 cpu time

パラメータの値は、以下のとおりです。

g : 0.01/sec

利用点数  $P = P1 + P2 + P3 + P4$

各々の計算機システムにおける CPU 1 時間当たりの利用点数は、次のようになります。

SX-3/34R      432 点 (ベクトル演算装置も同じ点数)

HSP            108 点

SP2(Wide)    72 点

SP2(Thin)    36 点

ただし、許可時間はCPU1時間に対し400点が割り当てられている。

#### 4 一般報告

##### 4.1 分子研ライブラリプログラムの収集と開発

平成7年度のライブラリ開発計画を表4.1.1に示す。開発されたライブラリは新規プログラムの登録あるいは既存プログラムの改良・発展というかたちでユーザーに公開される。

表4. 1. 1 平成7年度分子研ライブラリプログラム開発作業一覧

名前	所属	職名	内 容
遠藤勝義 垣内弘章 山村和也 稲垣耕司 別所勇爾	大阪大	助教授 助手 助手 助手 大学院生	第一原理分子動力学シミュレーションプログラムの開発
鷹野景子 蔵方美佐子 長瀬明子 片岡昌子	お茶大	助教授 大学院生 大学院生 大学院生	非経験的分子軌道法プログラムパッケージ「GAMESS」の移植
秦野 世	中京大	教授	分子軌道電子密度の図形表示システム「JAPIC3」
関谷雅弘	北大理	助手	ATOMCI の開発
小松崎民樹	基礎化研	学振研究員	SALS の SP2 への移植
長嶋雲兵 加藤澄恵 小原 繁 高野彩子 坂田聡子 橋本美奈子	お茶大	助教授 大学院生 助教授 大学院生 大学院生 大学院生	QCLDB 収集・査読データの check プログラム proof の開発
西川 武志	慶応大	大学院生	TCGMSG インターフェースの SP2 への移植
丸山 豊	総研大	大学院生	線形演算ライブラリの並列化 (SP2 への移植)

平成7年度に新規登録した分子科学プログラムパッケージは以下の8件である。

##### < S X 3 版 >

g94 GAUSSIAN94: ab initio molecular orbital calculations  
 imsl (SUBROUTINES) ims library

##### < H S P 版 >

g94 GAUSSIAN94: ab initio molecular orbital calculations

##### < S P 2 版 >

atomci Calculation of electronic states of atomic system  
 g94 GAUSSIAN94: ab initio molecular orbital calculations  
 gamess GAMESS: ab initio molecular orbital calculation (for POE)  
 tcg4mpl (SUBROUTINES) tcg4mpl: interface from TCGMSG4.0 to IBM POE MPL

表4.1.2 プログラムライブラリー一覧

==== IMS PROGRAM LIBRARY ====

\*\*\*\* SX-3 VERSION \*\*\*\*

PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
amoss	AMOSS
asl	(SUBROUTINES) ASL/SX: Advanced Scientific Library/SX
blas	(SUBROUTINES) BLAS Library
colmbs1	COLUMBUS: a program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc.
colmbs2	COLUMBUS: a program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc.
crys88	CRYSTAL88: ab initio LCAO-HF program for crystal systems
g92	GAUSSIAN92: ab initio molecular orbital calculations
g94	GAUSSIAN94: ab initio molecular orbital calculations
gamess	general atomic and molecular electronic structure system
hitac	(SUBROUTINES) M680 or S820 -> SX-3 convert library
hondo7	HONDO version 7: ab initio MO calculation
hondo8	HONDO version 8.5: ab initio MO calculation
imsl	(SUBROUTINES) ims library
jamol4	ab initio LCAOMO SCF calculation
jason2	CASSCF calculation with large basis set
koto	KOTO: ab initio molecular orbital calculations
masphyc	material design system by means of comp. phys. and chem./MD
math	(SUBROUTINES) math Library
meld	program for many electron description
mm2	molecular mechanics calculation by MM2 force field model
mopac7	MOPAC version 7: a general molecular orbital package
numpac	(SUBROUTINES) NAGOYA university mathematical program packag
sxview	SXVIEW

\*\*\*\* HSP VERSION \*\*\*\*

PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
asl	(SUBROUTINES) ASL/SX: Advanced Scientific Library/SX
blas	(SUBROUTINES) BLAS Library
colmbs2	COLUMBUS: a program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc.
g92	GAUSSIAN92: ab initio molecular orbital calculations
g94	GAUSSIAN94: ab initio molecular orbital calculations
gamess	general atomic and molecular electronic structure system
hitac	(SUBROUTINES) M680 or S820 -> HSP convert library
hondo8	HONDO version 8.5: ab initio MO calculation
math	(SUBROUTINES) math Library
meld	program for many electron description
mm2	molecular mechanics calculation by MM2 force field model

mopac7 MOPAC version 7: a general molecular orbital package  
 numpac (SUBROUTINES) NAGOYA university mathematical program package

\*\*\*\* SP2 VERSION \*\*\*\*

PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
assign	assign diagram for the assignment of vib-rot spectra
atomci	Calculation of electronic states of atomic system
band1	extended HUCKEL calculations of one-dimensional polymers
bc3	Vibrational and rotational spectroscopy
bgstr3	BIGSTRN3: a general purpose empirical force field program
cnDOS	CNDO/S-CI: modified CNDO and CI method
g92	GAUSSIAN92: ab initio molecular orbital calculations
g94	GAUSSIAN94: ab initio molecular orbital calculations
gamess	GAMESS: ab initio molecular orbital calculation (for POE)
hondo8	HONDO version 8.5: ab initio MO calculation
jamol4	ab initio LCAOMO SCF calculation
jason2	CASSCF calculation with large basis set
mm2	molecular mechanics calculation by MM2 force field model
numpac	(SUBROUTINES) NAGOYA university mathematical program package
series	LOOMIS-WOOD diagram for finding line series
tcg4mpl	(SUBROUTINES) tcg4mpl: interface from TCGMSG4.0 to IBM POE MPL
unics3	universal crystallographic computation program system
wigner	magnitudes of 3-J and 6-J symbols

\*\*\*\* MISC \*\*\*\*

PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
crystruct	crystruct3/SD
masphyc	material design system by means of comp. phys. and chem./WB

#### 4.2 データベース開発状況

分子研データベースとして現在2件のデータベースが登録されている。  
 現在公開中のデータベースは以下の通りである。

- ・ QCLDB (量子化学文献データベース)
- ・ FCDB (力の定数のデータベース)

## 5 平成7年度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	時 間			点 数	
				申 請	許 可	実 績	許 可	実 績
分子科学	施設利用	165	580	26,076	24,481	17,753	9,792,400	7,101,018
	協力研究	11	11	1,470	1,428	419	571,200	167,431
	所 内	29	128	12,662	11,397	9,538	4,558,800	3,815,209
生理学	施設利用	4	6	140	131	119	52,400	47,575
基礎生物学	所 内	1	1	10	9	0	3,600	0
合 計		210	726	40,358	37,446	27,829	14,978,400	11,131,233

注)ここでのCPU時間実績は、点数管理の方から(点数/400)を行って逆算したものである。



5.2 システム稼働状況

年月	電力量	システム稼働時間				KW/ 稼働時間	CPU使用時間						VPU時間		ジョブ処理件数			
		SX-3	HSP	SP2	平均		SX-3	*3	HSP	*1	SP2	*48	SX-3	*3	SX-3	HSP	SP2	
マシン名	kWh					-												
平成7年4月	323,330	698	695	708	700	462	725	35	365	53	3,929	12	260	12	4,123	1,120	2,019	
5月	384,100	733	733	734	733	524	1,079	49	411	56	4,757	14	554	25	3,253	847	2,609	
6月	358,590	700	707	708	705	509	1,318	63	594	84	6,162	18	411	20	3,934	830	3,056	
7月	395,820	725	726	724	725	725	1,568	72	672	93	8,912	26	594	27	3,377	761	2,999	
8月	413,360	734	707	722	721	717	1,535	0	547	0	15,995	0	762	0	2,806	928	8,062	
9月	352,810	693	693	677	688	686	1,417	0	601	0	8,919	0	725	0	2,935	858	2,645	
10月	374,970	698	693	701	697	697	1,233	0	455	0	10,644	0	649	0	3,525	992	3,291	
11月	328,890	664	632	664	653	650	1,428	0	476	0	13,105	0	628	0	3,437	593	2,182	
12月	327,430	623	623	622	623	623	1,434	0	559	0	15,308	0	576	0	2,457	593	1,805	
平成8月1月	394,740	663	663	663	663	663	1,665	0	511	0	15,130	0	739	0	3,936	756	2,700	
2月	344,340	686	686	686	686	686	1,678	0	288	0	14,234	0	759	0	2,897	1,076	2,475	
3月	346,300	735	735	724	731	730	1,917	0	627	0	15,878	0	872	0	1,482	790	1,953	
合計	4,344,680	8,352	8,293	8333	8,326	522	16,997	68	6,106	74	132,973	33	7,529	30	38,162	10,144	35,796	

CPU、VPU時間の単位は時間である。

### 5.3 CPU使用時間

#### 5.3.1 SX-3/34R

	(V1)	(V2)	(V3)	(V4)	(V5)	(VX)	(VP)	(MDPS)	合計
平成 6年 4月	106:28:39	143:55:16	70:06:50	171:12:38	205:09:45	0:00:00	7:00:05	0:00:02	703:53:15
5月	113:28:35	152:02:15	61:41:21	406:02:16	301:46:47	0:00:00	10:35:40	0:00:00	1045:36:54
6月	178:21:52	176:56:27	80:53:55	321:12:47	505:27:16	0:00:00	0:00:13	0:00:00	1262:52:30
7月	84:27:56	255:22:38	90:00:44	446:58:52	607:33:54	0:00:00	47:22:45	0:00:01	1531:46:50
8月	99:34:23	219:57:37	61:59:41	493:58:50	582:01:13	0:00:00	57:17:14	0:00:00	1514:48:58
9月	80:10:17	128:40:20	61:16:42	552:03:40	580:29:01	0:00:00	12:32:08	0:01:22	1415:13:30
10月	169:14:47	153:49:36	58:07:38	232:13:21	541:57:59	0:00:00	24:05:16	0:00:25	1179:29:02
11月	89:11:02	157:16:15	113:20:25	371:46:01	559:08:21	0:00:00	27:06:37	0:00:00	1317:48:41
12月	63:32:48	152:40:43	131:10:47	301:38:38	488:55:26	0:00:00	30:13:10	0:00:00	1168:12:02
平成 7年 1月	98:05:50	142:08:45	98:30:37	285:05:01	575:41:32	0:00:00	30:00:31	0:00:00	1229:32:16
2月	99:28:00	210:35:27	115:14:22	416:22:37	561:02:43	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1402:43:09
3月	63:28:07	188:45:07	85:01:30	344:37:05	545:35:37	0:00:00	0:00:00	0:00:01	1227:27:27
合計	1245:32:16	2082:10:26	1027:24:32	4343:11:46	6054:49:34	0:00:00	246:13:39	0:02:21	14999:24:34

#### 5.3.2 HSP

	(H1)	(H2)	(H3)	(H4)	合計
平成 6年 4月	87:44:09	151:38:04	78:43:49	0:08:11	318:14:13
5月	111:28:58	170:28:25	114:38:47	0:00:00	396:36:10
6月	121:53:02	239:02:11	199:07:38	0:00:00	560:02:51
7月	168:35:38	288:49:55	205:31:36	0:00:00	662:57:09
8月	94:29:01	255:06:36	158:17:42	0:00:00	507:53:19
9月	148:21:45	259:15:30	186:27:54	0:00:00	594:05:09
10月	134:12:15	197:43:05	108:08:55	0:00:00	440:04:15
11月	99:42:37	224:48:40	136:27:41	0:00:01	460:58:59
12月	108:23:11	267:10:52	170:26:52	0:00:00	546:00:55
平成 7年 1月	134:38:58	185:44:36	141:57:38	0:00:00	462:21:12
2月	124:17:46	142:52:05	178:59:15	0:00:38	446:09:44
3月	150:47:03	221:17:15	149:17:03	0:00:00	521:21:21
合計	1484:34:23	2603:57:14	1828:04:50	0:08:50	5916:45:17

### 5.3.3 SP2

	(S1)	(S2)	(S3)	(S4)	(P1)	(P2)	(P3)	合計
平成 6年 4月	88:10:10	803:40:00	294:25:09	1315:33:07	86:35:56	1134:27:36	205:51:58	3928:43:56
5月	299:40:06	708:19:10	189:43:11	1526:07:14	0:01:44	1958:31:56	74:34:16	4756:57:37
6月	572:30:50	745:59:22	1464:32:04	1802:18:13	4:04:58	1296:11:28	276:36:25	6162:13:20
7月	851:31:50	1502:36:38	2294:45:44	3333:10:38	1:46:48	656:36:54	271:10:43	8911:39:15
8月	1717:17:12	2709:45:17	4194:48:47	6761:34:24	13:20:26	376:16:20	221:58:42	15995:01:08
9月	887:01:55	1054:03:41	1611:52:49	2489:57:05	1:22:17	1635:59:41	1238:55:04	8919:12:32
10月	967:03:43	1752:43:09	1688:18:10	3005:18:02	31:34:01	2733:12:47	466:12:35	10644:22:27
11月	998:40:12	1518:58:42	1915:24:34	3530:08:28	8:06:44	4091:40:09	1041:33:50	13104:32:39
12月	808:49:23	1298:25:33	1865:56:05	3170:02:39	37:29:46	5756:53:37	2370:09:21	15307:46:24
平成 7年 1月	1109:26:13	1764:26:30	2273:13:33	3624:24:49	3:22:04	4648:47:06	1706:10:26	15129:50:41
2月	942:50:36	1343:02:12	1936:15:19	3919:12:44	8:00:56	2432:39:32	1829:19:26	12411:20:45
3月	1036:16:46	1326:39:19	2863:46:49	4713:33:41	96:01:53	3950:55:25	1890:35:09	15877:49:02
合計	10279:18:56	16528:39:33	22593:02:14	39191:21:04	291:47:33	30672:12:31	11593:07:55	131149:29:46

## 5.4 VPU使用時間

### 5.4.1 SX-3/34R

	(V1)	(V2)	(V3)	(V4)	(V5)	(VX)	(VP)	(MDPS)	合計
平成 6年 4月	19:08:59	66:34:39	23:59:15	68:42:17	81:30:28	0:00:00	0:00:02	0:00:00	264:55:40
5月	24:09:08	57:58:05	20:20:38	205:03:27	235:07:11	0:00:00	5:52:31	0:00:00	548:31:00
6月	69:05:24	60:52:16	20:54:32	116:04:52	129:47:23	0:00:00	0:00:00	0:00:00	396:44:27
7月	27:16:21	106:26:46	20:19:11	191:38:47	199:18:01	0:00:00	27:16:37	0:00:00	572:15:43
8月	16:11:45	97:32:48	26:10:03	243:40:58	342:42:45	0:00:00	33:20:39	0:00:00	759:38:58
9月	12:07:10	51:12:28	27:05:27	184:47:33	397:19:56	0:00:00	12:32:08	0:00:00	685:04:42
10月	10:51:46	27:01:32	9:02:31	62:26:33	249:45:11	0:00:00	5:18:43	0:00:00	364:26:16
11月	4:15:43	12:30:00	7:36:40	20:41:59	66:13:19	0:00:00	0:00:00	0:00:00	111:17:41
12月	15:12:26	58:17:36	51:22:23	107:31:17	206:37:50	0:00:00	18:58:52	0:00:00	460:47:04
平成 7年 1月	15:40:43	41:32:38	35:36:59	104:03:15	268:58:40	0:00:00	14:04:05	0:00:00	479:56:20
2月	22:34:19	61:57:53	23:10:51	154:43:08	188:20:30	0:00:00	0:00:00	0:00:00	450:46:41
3月	11:21:22	32:12:43	20:05:33	65:38:32	119:40:59	0:00:00	0:00:00	0:00:00	248:59:09
合計	250:41:46	674:09:24	285:44:03	1525:02:38	2485:22:13	0:00:00	117:23:37	0:00:00	5338:23:41

5.5 ジョブ処理件数

SX-3	(V1)	(V2)	(V3)	(V4)	(V5)	(VX)	(VP)	(MDPS)	合 計
平成 7年 4月	2940	446	319	179	236	0	1	2	4123
5月	2351	291	202	251	147	0	11	0	3253
6月	2624	695	300	209	105	0	1	0	3934
7月	2450	439	171	182	120	0	14	1	3377
8月	1688	374	183	320	191	0	50	0	2806
9月	1418	420	170	559	129	0	187	52	2935
10月	2408	455	200	209	161	0	77	15	3525
11月	2098	505	297	315	163	0	59	0	3437
12月	1340	415	259	197	126	0	101	19	2457
平成 8年 1月	2517	433	275	383	119	0	209	0	3936
2月	1388	397	255	255	111	0	491	0	2897
3月	608	268	133	198	121	0	147	1	1476
合 計	23830	5138	2764	3257	1729	0	1348	90	38156

HSP	(H1)	(H2)	(H3)	(H4)	合 計
平成 7年 4月	871	165	79	5	1,120
5月	556	208	83	0	847
6月	522	190	118	0	830
7月	379	243	139	0	761
8月	651	163	114	0	928
9月	564	179	115	0	858
10月	558	341	93	0	992
11月	328	148	116	1	593
12月	316	154	123	0	593
平成 8年 1月	470	188	98	0	756
2月	557	348	162	9	1,076
3月	433	237	120	0	790
合 計	6,205	2,564	1,360	15	10,144

SP2	(S1)	(S2)	(S3)	(S4)	(P1)	(P2)	(P3)	合 計
平成 7年 4月	877	719	79	283	19	27	15	2,019
5月	1,568	746	78	189	8	13	7	2,609
6月	1,216	1,037	261	445	28	36	33	3,056
7月	617	1,470	246	433	31	102	100	2,999
8月	1,805	3,393	565	1,117	354	481	347	8,062
9月	1,056	901	197	207	124	77	83	2,645
10月	1,047	1,175	328	350	280	61	50	3,291
11月	630	733	281	322	92	66	58	2,182
12月	582	508	188	250	111	101	65	1,805
平成 8年 1月	619	1169	243	444	143	51	31	2,700
2月	518	757	216	307	100	33	48	1,979
3月	555	638	203	325	153	45	34	1,953
合 計	11,090	13,246	2,885	4,672	1,443	1,093	871	35,300

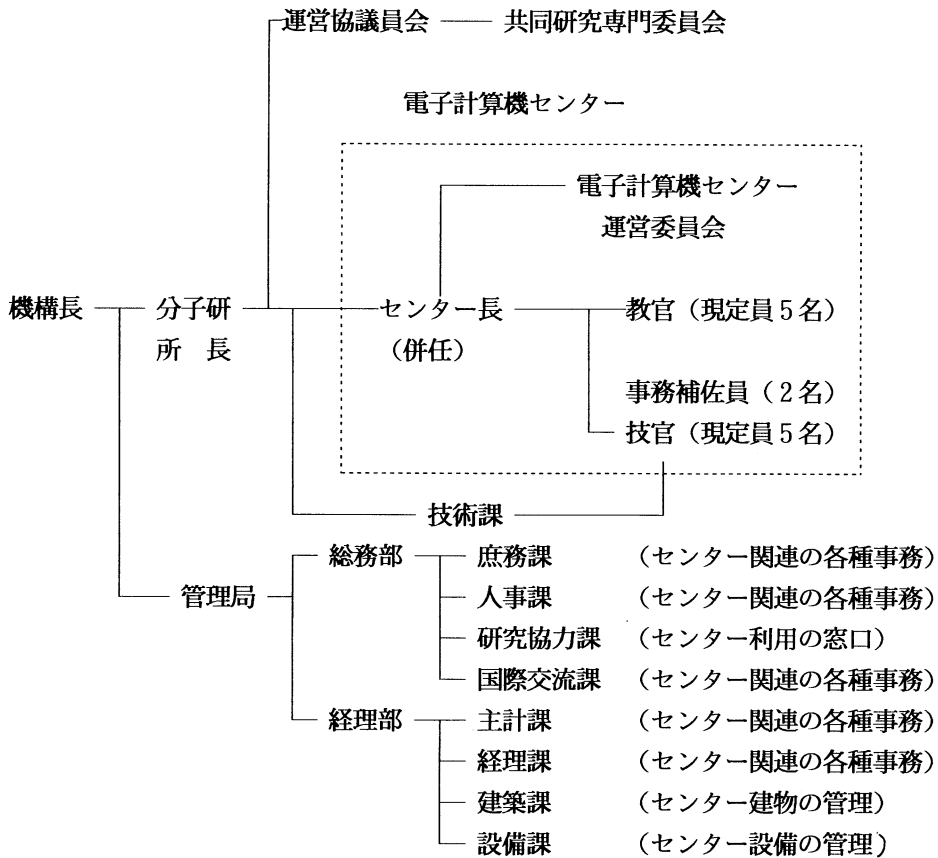
## 6. 資料

### 6. 1 センター関連組織

センター関連組織は下図に示す通りである。

課題・協力研究の運営は運営協議会及びその共同研究専門委員会で行われている。

電子計算機センター運営委員会の規則と委員については資料6. 2、6. 3、6. 4を参照されたい。



6. 2 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター規則

〔昭和56年4月14日〕  
分子研規則第4号

最終改正 昭和62年3月30日

岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター規則

(目的)

第1条 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター（以下「センター」という）は、センターの大型計算機システムを分子科学の大型計算等のために分子科学研究所内外の研究者の利用に供するとともに、これに必要な研究開発を行い、かつ、岡崎国立共同研究機構に置かれる研究所の研究に関する計算を処理することを目的とする（職員）

第2条 センターに、次の職員を置く。

- 一 センター長
- 二 助教授
- 三 助手
- 四 その他必要な職員

(センター長)

第3条 センター長は、分子科学研究所の教授又は助教授をもって充てる。

2 センター長は、センターの業務を掌理する。

(運営委員会)

第4条 分子科学研究所に、センターの管理運営に関する重要事項を審議し、分子科学研究所長の諮問に応じるため、分子科学研究所電子計算機センター運営委員会（以下「運営委員会」という）を置く。

2 運営委員会の組織及び運営に関し必要な事項は、分子科学研究所長が定める。

附 則

この規則は、昭和56年4月14日から施行する。

附 則（昭和62年分子研規則第1号）

この規則は、昭和62年4月1日から施行する。

6. 3 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター運営委員会  
規則

〔昭和56年4月14日〕  
〔分子研規則第9号〕

最終改正 昭和62年3月30日

岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター運営委員会規則

(目的)

第1条 この規則は、岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター規則（昭和56年分子研規則第4号）第4条第2項の規定に基づき、分子科学研究所電子計算機センター（以下「センター」という）の運営委員会の組織及び運営に関し必要な事項を定めることを目的とする。

(組織)

第2条 運営委員会は、次の各号に掲げる委員をもって組織する。

- 一 センター長
- 二 センターの助教授
- 三 分子科学研究所の教授又は助教授2名
- 四 基礎生物学研究所及び生理学研究所の教授又は助教授各1名
- 五 岡崎国立共同研究機構の職員以外の分子科学に関する学識経験者4名

2 前号第3号から第5号に掲げる委員は、分子科学研究所長が委嘱する。

(任期)

第3条 前項第3条から第5条に掲げる委員の任期は、2年とし、再任を妨げない。

ただし、補欠の委員の任期は、前任者の残任期間とする。

(委員長)

第4条 運営委員会に委員長を置き、センター長をもって充てる。

- 2 委員長は、運営委員会を招集し、その議長となる。
- 3 委員長に事故あるときは、あらかじめ委員長が指名する委員がその職務を代行する。

(議事)

第5条 運営委員会は、委員の3分の2以上の出席がなければ、議事を開き、

議決することができない。

(委員以外の者の出席)

第6条 運営委員会は、必要に応じて委員以外のものに出席を求め、意見を聴取することができる。

(庶務)

第7条 運営委員会の庶務は、総務部国際研究協力課において処理する。

付 則

- 1 この規則は、昭和56年4月14日から施行する。
- 2 昭和60年6月1日任命に係る委員の任期は、第3条の規定にかかわらず、昭和62年3月31日までとする。

付 則 (昭和60年分子研規則第3号)

この規則は、昭和60年4月1日から施行する。

付 則 (昭和62年分子研規則第2号)

この規則は、昭和62年4月1日から施行する。

#### 6. 4 電子計算機センター運営委員会委員

(平成7年度、平成8年度)

岩 田 末 廣	分子研理論研究系教授、センター長	センター委員
青 柳 睦	分子研電子計算機センター助教授	”
中 村 宏 樹	分子研理論研究系教授	分子研所内委員
小 杉 信 博	分子研極端紫外光科学研究系教授	”
片 岡 洋 右	法大教授	分子研所外委員
永 瀬 茂	都立大教授	”
山 口 兆	阪大教授	”
里 子 允 敏	日大助教授	”
上 野 孝 治	基生研産学生物学研究系助教授	基生研委員
小 松 英 彦	生理研生体調節系教授	生理研委員



#### 6. 5 電子計算機センター職員（平成8年11月現在）

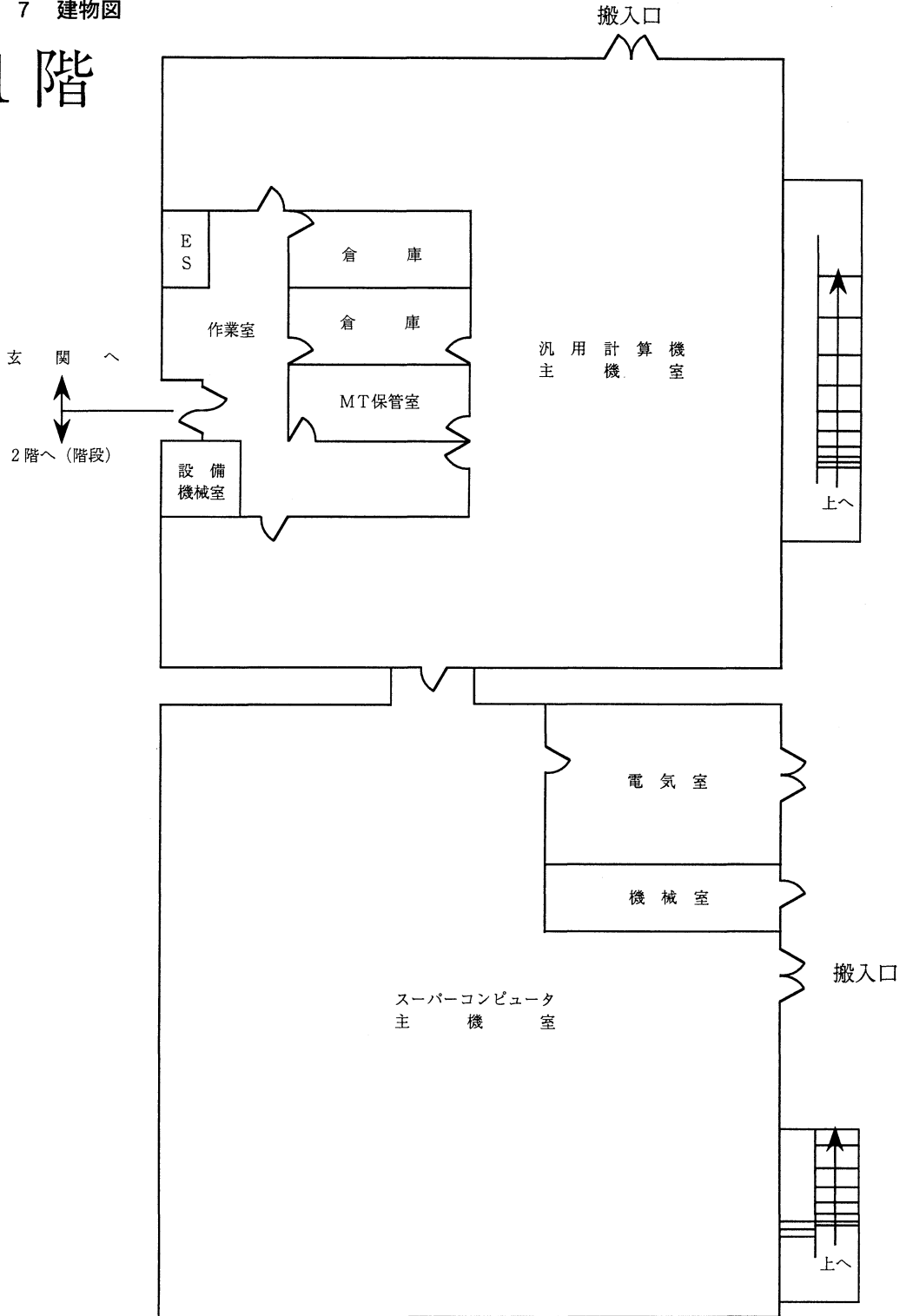
岩田末廣	センター長（併任）
青柳睦	助教授
南部伸孝	助手
高見利也	助手
大野人侍	助手（平成8年4月1日より）
茂木孝一	非常勤研究員
南野智	技官
西本史雄	技官（班長）
水谷文保	技官
手島史綱	技官
内藤茂樹	技官
加納聖子	事務補佐員
禿子瞳	事務補佐員

#### 6. 6 応用プログラム相談員一覧

渡辺秀和	総研大学院生	平成7年5月～平成8年3月（平成7年度）
鈴木賢剛	特別研究学生	平成8年9月～平成9年3月（平成8年度）
武藤明子	特別研究学生	平成8年10月～平成9年3月（平成8年度）

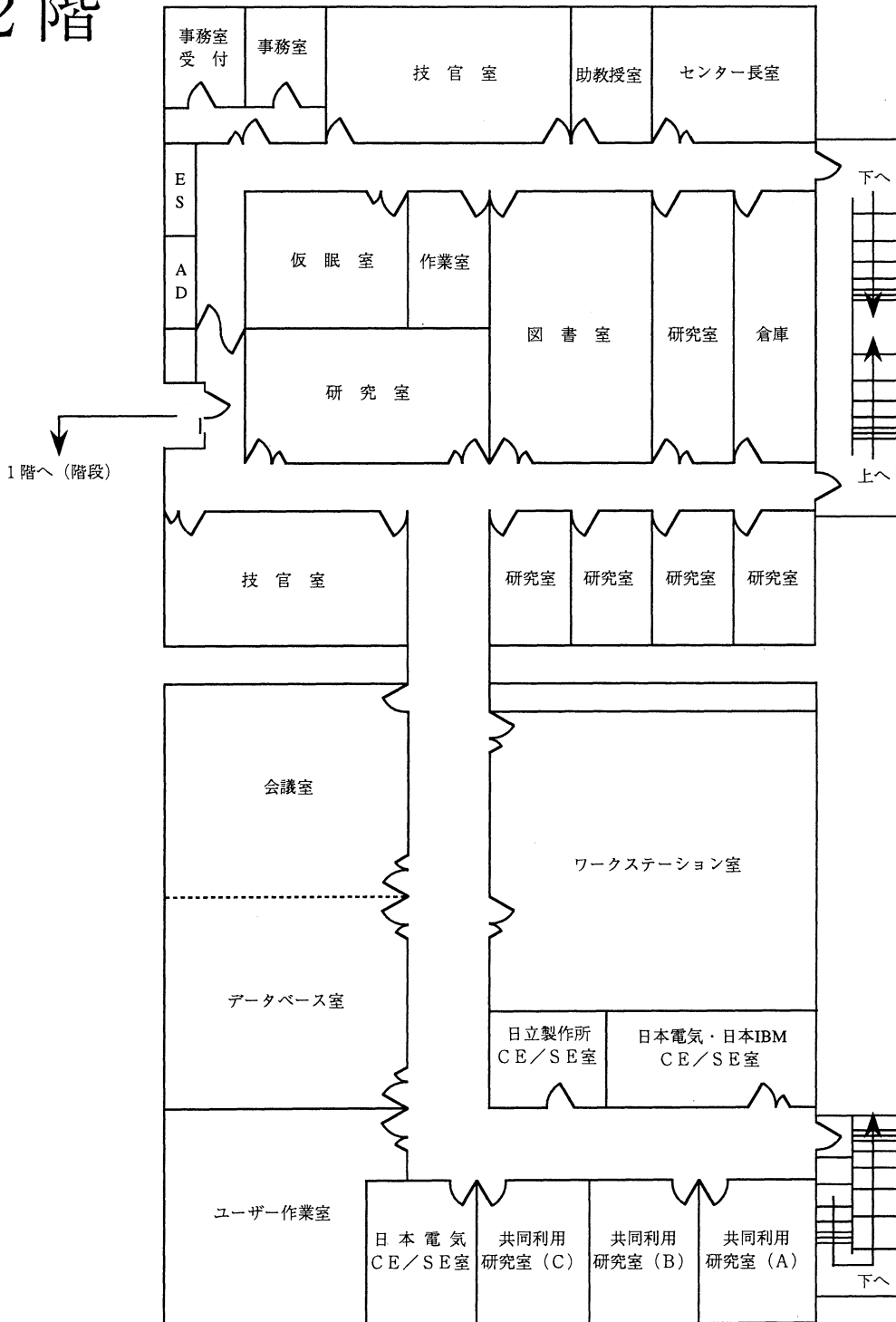
6. 7 建物図

# 1 階



1 階はセンターの業務に関わる作業室と計算機システムの主機室のみ

# 2階



## 6.8 マニュアル一覧

### 6.8.1 マニュアル一覧と購入方法

よく利用されるマニュアルには以下のようなものがあります。

センターではセンター内端末室、実験棟と南実験棟の端末室においてありますが、個人での購入を希望される時の申し込み先は次のとおりです。

<SX-3/34R、HSPおよびHPC用マニュアルの購入申込先>

〒460 名古屋市中区錦一丁目17-1 NEC中部ビル  
日本電気株式会社中部支社第二販売部  
担当 村田  
電話 052-222-2121

(注) SX-3/34R用の最新版マニュアルはHSPと共通化されています。

<SP2用マニュアルの購入申込先>

〒460 名古屋市中区錦3丁目1番1号 十六銀行名古屋ビル  
日本アイ・ビーエム株式会社 中部システム事業本部第二営業部  
担当 山岡  
電話 052-954-3127

### 6.8.2 SX-3/34R 用(日本語)マニュアル

- (1) 利用者の手引  
オペレーティングシステム SUPER-UX (以下 SUPER-UX とする)の一般利用者が使用できる機能について説明したものです。
- (2) コマンド操作ハンドブック  
SUPER-UX が一般利用者に対して提供している UNIX の基本コマンドについて説明したものです。
- (3) 日本語機能利用の手引  
SUPER-UX における日本語の取り扱いについて説明したものです。
- (4) プログラミングの手引  
SUPER-UX におけるプログラムの作成方法および作成環境について説明したものです。
- (5) プログラミングハンドブック  
SUPER-UX がプログラマに対して提供している UNIX の基本機能について説明したものです。
- (6) バッチ処理利用の手引  
SUPER-UX でのバッチ処理の方法について説明したものです。SUPER-UX のバッチ処理はNQS(Network Queuing System)により実現されます。
- (7) 言語支援機能利用の手引  
SUPER-UX の C ライブラリ、各種プログラム開発支援ツール、および systemV の共通オブジェクトファイル形式である COFF について説明したものです。
- (8) C プログラミングの手引  
SUPER-UX の C 言語について説明したものです。
- (9) FORTRAN77/SX 言語説明書

- SUPER-UX の FORTRAN77/SX 言語の文法について説明したものです。
- (10) FORTRAN77/SX プログラミングの手引  
SUPER-UX の FORTRAN77/SX の使用方法について説明したものです。
- (11) FORTRAN77/SX 並列処理機能利用の手引  
SUPER-UX の FORTRAN77/SX で処理できる、並列処理機能のプログラミングについて説明したものです。
- (12) PHIGS PLUS プログラミングの手引  
PHIGS(Programmer's Hierarchical Interactive Graphics System : 階層的グラフィックシステム)について説明したものです。本ライブラリは ISO と IEC の PHIGS 規格(ISO/IEC 9592-1 および9592-4)の仕様に準拠したもので、図形の表示と図形データの管理を明確に分離し、図形データの基本要素単位での追加、削除、置換などの編集を可能にしています。また図形データは階層構造をしており、複雑な形状でも容易に構築することを可能としています。さらに高度なライティング機能やシェーディング機能を強化しています。
- (13) ANALYZER-P/SX 利用の手引  
SUPER-UX の ANALYZER-P/SX の使用方法について説明したものです。
- (14) PARALLELIZER/SX 利用の手引  
SUPER-UX のもとで動作する PARALLELIZER/SX について説明したものです。  
PARALLELIZER/SX は FORTRAN 言語で記述された原始プログラムの静的解析情報や動的解析情報から利用者の要求に従った情報を対話的に提供する X ウィンドウシステム (X.V11R4)対応のプログラム開発ツールです。
- (15) PDBX 利用の手引  
SUPER-UX の pdbx の使用方法について説明したものです。pdbx を使用すれば、SUPER-UX 上で動作する利用者プログラムをソースプログラムに記述した変数名や行番号を指定してデバッグすることができます。
- (16) GKS プログラミングの手引  
GKS(Graphical Kernel System : 図形処理プログラム)について説明したものです。ISO 規格のGKS(ISO7942)の仕様に準拠したもので、X ウィンドウシステム (X Window System) をサポートしています。また、図形処理の保存やシステム間での持ち運びのためにメタファイル機能を提供しています。
- (17) 数値計算ライブラリ MATHLIB/SX V2 利用の手引(概念/機能編)  
SUPER-UX のもとで提供される業種共通アプリケーションの一つとして開発された数値計算ライブラリ MATHLIB/SX V2(MATHematical LIBrary/SX Version2)の概念、機能について説明したものです。
- (18) 数値計算ライブラリ MATHLIB/SX V2 利用の手引(アルゴリズム編)  
SUPER-UX のもとで提供される業種共通アプリケーションの一つとして開発された数値計算ライブラリ MATHLIB/SX V2(MATHematical LIBrary/SX Version2)の各サブルーチンの計算方法について説明したものです。
- (19) 数値計算ライブラリ MATHLIB/SX V2 例題集  
SUPER-UX のもとで提供される業種共通アプリケーションの一つとして開発された数値計算ライブラリ MATHLIB/SX V2 ( MATHematical LIBrary/SX Version2 ) の基本的な使用例を集めたものです。
- (20) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(基本機能編 第1分冊)  
SUPER-UX のもとで提供される、業種共通アプリケーションの一つとして開発された科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2(Advanced Scientific Library/SX Version2)の概念、機能、利用方法などについて説明したものです。第1分冊は、基本行列演算、連立一次方程式(直接法)、連立一次方程式(反復法)について説明したものです。

- (21) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(基本機能編 第2分冊)  
 SUPER-UX のもとで提供される、業種共通アプリケーションの一つとして開発された科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2(Advanced Scientific Library/SX Version2)の概念、機能、利用方法などについて説明したものです。第2分冊では、固有値・固有ベクトル、最小二乗法、高速フーリエ変換(FFT)について説明したものです。
- (22) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(基本機能編 第3分冊)  
 SUPER-UX のもとで提供される、業種共通アプリケーションの一つとして開発された科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2(Advanced Scientific Library/SX Version2)の概念、機能、利用方法などについて説明したものです。第3分冊は、スプライン関数、数値積分、常微分方程式、方程式の根、極値問題・最適化、近似・補間、数値微分について説明したものです。
- (23) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(基本機能編 第4分冊)  
 SUPER-UX のもとで提供される、業種共通アプリケーションの一つとして開発された科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2(Advanced Scientific Library/SX Version2)の概念、機能、利用方法などについて説明したものです。第4分冊は、特殊関数、乱数について説明したものです。
- (24) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(高速機能編)  
 SUPER-UX のもとで提供される、業種共通アプリケーションの一つとして開発された科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2(Advanced Scientific Library/SX Version2)の概念、機能、利用方法などについて説明したものです。高速機能編は、行列のデータ格納変換、連立一次方程式(直接法)、対称連立一次方程式(直接法)、対称一次方程式(反復法)、非対称連立一次方程式(反復法)、固有値・固有ベクトル、最小二乗法、高速フーリエ変換(FFT)、スプライン関数、3次元境界要素法用の数値積分について説明したものです。
- (25) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(並列処理機能編)  
 SUPER-UX のもとで提供される、業種共通アプリケーションの一つとして開発された科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2(Advanced Scientific Library/SX Version2)の概念、機能、利用方法などについて説明したものです。基本行列演算、連立一次方程式(直接法)、高速フーリエ変換(FFT)について説明したものです。

### 6.8.3 SX-3/34R用(English)マニュアル

- (1) User's Guide  
 This book explains the components that make up SUPER-UX Operating System environment.
- (2) User's Reference Manual  
 This book describes commands and application programs available to users of the SUPER-UX operating system. If users are not already familiar with the SUPER-UX operating system, they can refer to the SUPER-UX User's guide for details.
- (3) Programmer's Guide  
 This book describes programming methods for the SUPER-UX environment.
- (4) Programmer's Reference Manual  
 This book describes commands and application programs available to users of the SUPER-UX operating system. If users are not already familiar with the SUPER-UX operating system, they can refer to the SUPER-UX User's Guide for details.
- (5) NQS User's Guide  
 This book explains how to create batch transactions using the Network Queuing System(NQS) on the SUPER-UX operating system.

- (6) Programming Language Support Reference Manual  
This book describes the SUPER-UX C library and various programming tools.
- (7) C Programmer's Guide  
This book describes the C language compilers available for the SUPER-UX operating system.
- (8) FORTRAN77/SX Language Reference Manual  
This book explains FORTRAN77/SX, the FORTRAN77 language used under the SUPER-UX software. FORTRAN77/SX conforms to the International Standard ISO 1539-1980 and American National Standard ANSIX3.9-1978 full language FORTRAN (also called FORTRAN77). A variety of extended functions is included with FORTRAN77/SX
- (9) FORTRAN77/SX Programmer's Guide  
This book describes the FORTRAN77/SX compiler for the SUPER-UX operating system. This manual focuses on the FORTRAN77/SX featur that improve program performance.
- (10) FORTRAN77/SX Multitasking User's Guide  
This book is a multitasking programmer's guide for the FORTRAN77/SX running on the SUPER-UX Operating System. This guide provides information ranging from the basic knowledge required for multitasking to high-level multitasking applications.
- (11) PHIGS PLUS Programmer's Guide  
This book explains the Programmer's Hierarchical Interactive Graphics System(PHIGS).  
The PHIGS library is based on the PHIGS specifications of the International Organization for Standardization(ISO) and International Electrotechnical Commission(IEC). It divides graphics display from the management of graphics data. Graphical primitives can be edited using addition, deletion, and rearrangement functions. Graphical data in the library is structured hierarchically, allowing complicated shapes to be constructed simply.
- (12) ANALYZER-P/SX Reference Manual  
This book explains the ANALYZER-P/SX, a FORTRAN program analysis tool for performance improvement.
- (13) PARALLELIZER/SX Reference Manual  
This book explains the PARALLELIZER/SX, a programming support tool to enable high-speed processing using vectorization and parallelization in the X window environment.
- (14) DBX User's Guide  
This book explains how to use DBX on the SUPER-UX operating system. dbx allows user programs operating on SUPER-UX to be debugged by specifying variable names and line numbers described the debug source program. dbx supports the following program languages.
- (15) PDBX User's Guide  
This book explains how to use pdbx on the SUPER-UX operating system. pdbx allows use programs operating on SUPER-UX to be debugged specifying variable names and line numbers described in the debug source program. pdbx supports the following program languages:
- (16) GKS Programmer's Guide  
This book describes the NEC SX Series supercomputer implementation of the Graphical Kernel System(GKS). GKS is a standard set of FORTRAN77 subroutines and C functions, adopted by the International Organization for Standardization(ISO), that can be invoked by an application program to perform computer graphics tasks. GKS subroutines and functions enable an application program to
- (17) Mathematical Library/SX V2 User's Guide(Functional Description)  
This book describes the general concepts and functions of the Mathematical Library/SX Version 2 (MATHLIB/SX V2), which was developed as one of the interdisciplinary applications offered

under the SUPER-UX operating system.

(18) Mathematical Library/SX V2 User's Guide(Algorithms)

This book describes the algorithms of subroutines of the Mathematical Library/SX Version 2 (MATHLIB/SX V2), which was developed as one of the interdisciplinary common applications serviced under the SUPER-UX operating system.

(19) Mathematical Library/SX V2 User's Guide(Examples)

This book describes the general concepts and functions of the Mathematical Library/SX Version 2 (MATHLIB/SX V2), which was developed as one of the interdisciplinary common applications offered under the SUPER-UX operating system.

(20) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Basic Functions Vol.1)

This book describes general concepts, functions, and methods of using the Advanced Scientific Library/SX Version 2(ASL/SX V2), which was developed as one of the interdisciplinary common applications offered under the SUPER-UX operating system.

This manual corresponding to this product consists of six volumes, which are divided into the chapters shown below. This book describes the basic functions of volume 1.

(21) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Basic Functions Vol.2)

This book describes general concepts, functions, and methods of using the Advanced Scientific Library/SX Version 2(ASL/SX V2), which was developed as one of the interdisciplinary common applications offered under the SUPER-UX operating system.

This manual corresponding to this product consists of six volumes, which are divided into the chapters shown below. This book describes the basic functions of volume 2.

(22) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Basic Functions Vol.3)

This book describes general concepts, functions, and methods of using the Advanced Scientific Library/SX Version 2(ASL/SX V2), which was developed as one of the interdisciplinary common applications offered under the SUPER-UX operating system.

This manual corresponding to this product consists of six volumes, which are divided into the chapters shown below. This book describes the basic functions of volume 3.

(23) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Basic Functions Vol.4)

This book describes general concepts, functions, and methods of using the Advanced Scientific Library/SX Version 2(ASL/SX V2), which was developed as one of the interdisciplinary common applications offered under the SUPER-UX operating system.

This manual corresponding to this product consists of six volumes, which are divided into the chapters shown below. This book describes the basic functions of volume 4.

(24) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Extended Function)

This book describes general concepts, functions, and methods of using the Advanced Scientific Library/SX Version 2(ASL/SX V2), which was developed as one of the interdisciplinary common applications offered under the SUPER-UX operating system.

This manual corresponding to this product consists of six volumes, which are divided into the chapters shown below. This book describes the extended functions.

(25) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Parallel Processing Functions)

This book describes general concepts, functions, and methods of using the Advanced Scientific Library/SX Version 2(ASL/SX V2), which was developed as one of the interdisciplinary common applications offered under the SUPER-UX operating system.

This manual corresponding to this product consists of six volumes, which are divided into the chapters shown below. This book describes the parallel processing functions.



## 6.8.4 HSP用(日本語)マニュアル

- (1) 利用者の手引
- (2) コマンド操作ハンドブック
- (3) 日本語機能利用の手引
- (4) プログラミングの手引
- (5) プログラミングハンドブック
- (6) バッチ処理利用の手引
- (7) 言語支援機能利用の手引
- (8) C プログラミングの手引
- (9) C++ 言語説明書

SUPER-UX のもとで動作する C++ 言語の言語仕様を説明したものです。

- (10) FORTRAN77/SX 言語説明書
- (11) FORTRAN77/SX プログラミングの手引
- (12) FORTRAN77/SX 並列処理機能利用の手引
- (13) PHIGS PLUS プログラミングの手引
- (14) ANALYZER-P/SX 利用の手引
- (15) PDBX利用 の手引
- (16) GKS プログラミングの手引
- (17) 数値計算ライブラリ MATHLIB/SX V2 利用の手引(概念 / 機能編)
- (18) 数値計算ライブラリ MATHLIB/SX V2 利用の手引(アルゴリズム編)
- (19) 数値計算ライブラリ MATHLIB/SX V2 例題集
- (20) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(基本機能編 第1分冊)
- (21) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(基本機能編 第2分冊)
- (22) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(基本機能編 第3分冊)
- (23) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(基本機能編 第4分冊)
- (24) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(高速機能編)
- (25) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(並列処理機能編)

## 6.8.5 HSP用(English)マニュアル

- (1) User's Guide
- (2) User's Reference Manual
- (3) Programmer's Guide
- (4) Programmer's Reference Manual
- (5) NQS User's Guide
- (6) Programming Language Support Reference Manual
- (7) C Programmer's Guide
- (8) C++ Language Reference Manual

This book describes the C++ language compilers available for the SUPER-UX operating system.

- (9) FORTRAN77/SX Language Reference Manual
- (10) FORTRAN77/SX Programmer's Guide
- (11) FORTRAN77/SX Multitasking User's Guide
- (12) PHIGS PLUS Programmer's Guide
- (13) ANALYZER-P/SX Reference Manual

- (14) DBX User's Guide
- (15) GKS Programmer's Guide
- (16) Mathematical Library/SX V2 User's Guide(Functional Description)
- (17) Mathematical Library/SX V2 User's Guide(Algorithms)
- (18) Mathematical Library/SX V2 User's Guide(Examples)
- (19) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Basic Functions Vol.1)
- (20) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Basic Functions Vol.2)
- (21) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Basic Functions Vol.3)
- (22) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Basic Functions Vol.4)
- (23) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Extended Function)
- (24) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Parallel Processing Functions)

## 6.8.6 HPC用マニュアル

- (1) G1AA01-1 利用者の手引
- (2) G1AA02-2 コマンド操作ハンドブック
- (3) G1AA05-1 日本語機能利用の手引
- (4) G1AB01-1 プログラミングの手引
- (5) G1AB02-2 プログラミングハンドブック
- (6) G1AD01-2 バッチ処理利用の手引
- (7) G1AF01-1 言語支援機能利用の手引
- (8) G1AF02-1 Cプログラミングの手引
- (9) G1AF06-2 FORTRAN90/SX 言語説明書
- (10) G1AF07-2 FORTRAN90/SX プログラミングの手引
- (11) G1AF08-1 FORTRAN90/SX 並列処理機能利用の手引
- (12) G1AF14-1 ANALYZER90/SX 利用の手引
- (13) G1AF16-2 C-ANALYZER-P/SX 利用の手引
- (14) G1AF19-2 DBX利用 の手引
- (15) G1AF20-2 PDBX利用 の手引
- (16) G1AF21-1 XDBX利用 の手引
- (17) GUY21-5 ASL/SX 利用の手引(基本機能編 1/4)
- (18) GUY22-5 ASL/SX 利用の手引(基本機能編 2/4)
- (19) GUY23-5 ASL/SX 利用の手引(基本機能編 3/4)
- (20) GUY24-5 ASL/SX 利用の手引(基本機能編 4/4)
- (21) GUY28-5 ASL/SX 利用の手引(高速機能編)
- (22) GUY29-3 ASL/SX 利用の手引(並列処理機能編)

## 6.8.7 SP2用マニュアル

### 6.8.7.1 AIX 4.1.4 関連

- (1) SC23-2550-03 AIX Version 4.1 Installation Guide
- (2) SC23-2527-03 AIX Version 4 Getting Started
- (3) SC88-6853-03 バージョン 4.1 ネットワーク・インストール・マネージメント・ガイドおよびリファレンス

#### 6.8.7.2 IBM C Set++ for AIX Version 3 Release 1 関連

- (4) SX09-1300-01 IBM C Set++ for AIX Reference Summary
- (5) SX88-7017-00 C Set++ for AIX バージョン 3 リファレンス・サマリー
- (6) SC09-1968-01 IBM C Set++ for AIX User's Guide
- (7) SC88-7359-00 C Set++ for AIX バージョン 3 ユーザーズ・ガイド
- (8) SC88-7396-00 C Set++ for AIX バージョン 3 ランゲージ・リファレンス
- (9) SC88-7361-00 C Set++ for AIX バージョン 3 クラス・ライブラリー・ユーザーズ・ガイド
- (10) SC09-2202-01 LPEX User's Guide and Reference
- (11) SC09-2201-01 Program Builder User's Guide
- (12) SC23-2666-00 AIX Version 4.1 iFOR/LS Tips and Techniques
- (13) SC88-6858-00 AIX バージョン 4.1 iFOR/LS システム・マネージメント・ガイド

#### 6.8.7.3 Parallel System Support Program (PSSP) Version 2 Release 1 関連

- (14) GC23-3902-01 IBM RISC System/6000 Scalable POWERparallel Systems System Planning
- (15) GC88-6514-00 RISC システム/6000 スケーラブル・パワー並列システム SP インストラクション・ガイド
- (16) GC23-3897-01 IBM RISC System/6000 Scalable POWERparallel Systems Administration Guide
- (17) GC23-3900-01 IBM RISC System/6000 Scalable POWERparallel Systems ommand and Technical Reference
- (18) GC23-3899-01 IBM RISC System/6000 Scalable POWERparallel Systems Diagnosis and Messages Guide

#### 6.8.7.4 Parallel Environment (PE) Version 2 Release 1 関連

- (19) GC88-6450-00 AIX 並列処理環境バージョン 2.1 入門
- (20) GC88-6447-00 AIX 並列処理環境バージョン 2.1 インストラクション、管理および診断ガイド
- (21) GC88-6446-00 AIX 並列処理環境バージョン 2.1 オペレーションおよびユーザーズ・ガイド
- (22) GC88-6448-00 AIX 並列処理環境バージョン 2.1 MPL プログラミングおよびサブルーチンリファレンス
- (23) GC88-6449-00 AIX 並列処理環境バージョン 2.1 MPI プログラミングおよびサブルーチンリファレンス

#### 6.8.7.5 IBM PVMe for AIX Version 2 Release 1 関連

- (24) GC23-3884-00 IBM PVMe for AIX Uses's Guide and Subroutine Reference Version 2, Release 1

#### 6.8.7.6 Performance Toolbox for AIX Version 2 Release 1

- (25) SC23-2625-03 Performance Toolbox for AIX Guide and Reference Version 1.2 and 2

#### 6.8.7.7 AIX ESSL/6000 V2.2.2 関連

- (26) SC23-0526-01 ESSL V2.2 Guide and Reference (3分冊)

6.9 利用者数とCPU時間の推移

	53年度	54年度	55年度	56年度	57年度	58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	M-200H 2台	同57年度
運 転 方 式	3カ月 有人	9月から無人	200H 無人 180 有人	疎結合 無 人	疎結合 無 人	無 人
プロジェクト数	63	176	192	183	198	199
利 用 者 数						
機 構 内 <sup>a</sup>	48	70	69	91	94	102
機 構 外	107	254	325	330	375	426
合 計	155	334	394	421	469	528
稼働時間(時間)	1,087	6,071	6,553	6,721	6,305	6,170
CPU時間利用申請(時間)	(200H基準)					(200H基準)
申 請 可	929	4,666	11,033	10,230	11,938	13,053
	816	3,171	7,427	8,306	10,141	10,091
総使用CPU時間 <sup>c</sup> (時間)	509	2,405	5,405	6,320	8,205	8,489
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>	41,521	155,980	183,840	214,847	239,771	236,519
タイププログラム新規登録数	0	20	43	20	699	10
データベース新規登録数	0	2	0	0	3	3
センター使用論文数 <sup>d</sup>	0	24	93	118	190	185

	59年度	60年度	61年度	62年度	63年度	平成元年度
計算機システム	同57年度	(~11月) 同57年度 (1月~) M-680H S-810/10	M-680H S-8210/10 疎結合	M-680H (~1月) S-810/10 (2月~) S-820/80 疎結合	M-680H S-820/80	同63年度
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	207	226	234	213	231	239
利 用 者 数						
機 構 内 <sup>a</sup>	110	130	141	143	137	146
機 構 外	446	464	496	520	515	544
合 計	556	594	637	663	652	690
稼働時間(時間)	6,316	6,016	6,368	6,444	6,091	5,694
CPU時間利用申請(時間)				(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>
申 請 可	14,799	15,536	33,832/8,458*	9,880	12,439	14,694
	10,768	12,080	28,184/7,046*	7,978	10,418	12,347
総使用CPU時間 <sup>c</sup> (時間)	8,508	12,770	20,092/5,023e*	6,624	7,872	8,300
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>	226,727	274,431	289,915	278,956	278,104	253,418
タイププログラム新規登録数	118	160	39	4	7	3
データベース新規登録数	0	1	0	1	0	0
センター使用論文数 <sup>d</sup>	202	206	237	223	211	218

	平成2年度 同63年度	平成3年度 同63年度	平成4年度 同63年度	平成5年度	平成6年度	平成7年度
計算機システム				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～)
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロセッサ数	256	272	271	225	222	210
利用者数						
機 構 内 <sup>a</sup>	140	158	143	127	139	129
機 構 外	593	623	661	589	601	597
合 計	733	781	804	716	740	726
稼働時間(時間)	6,768	6,749	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
CPU時間利用申請(時間)	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(HSP基準) <sup>b</sup>
申 請	16,622	20,606	21,153	18,311	18,311	40,358
許 可	14,626	17,846	19,110	16,027	16,027	37,446
総使用CPU時間 <sup>c</sup> (時間)	11,975	11,874	12,491	16,306	24,781	156,076
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>	295,503	346,987	297,638	227,650	107,194	84,102
ライブラリプログラム新規登録数	0	0	0	10	10	7
データベース新規登録数	0	0	0	1	1	1
センター使用論文数 <sup>d</sup>	248	229	282	267	306	275

a: 機構内利用者にはアイドル課題のための重複をふくめない。

b: 申請および使用の詳細については3項を参照。

c: ここでの値は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のすべてを含む。

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。

e: S-810、S-820についてはSPUとVPUのCPU時間の単純な和である。

\*: 下段はM-680H基準。