

I 部

目 次

1.	巻頭言	分子科学研究所電算機センター長 岩田末廣	1
2.	スーパーコンピュータワークショップの活動		2
3.	計算機システムの運用および使い方		4
3. 1	システムの構成と特徴		4
3. 2	キューの構成		11
3. 3	利用課金点数		13
4.	一般報告		15
4. 1	分子研ライブラリプログラムの収集と開発		15
4. 2	データベース開発状況		21
5.	平成10年度計算機稼働状況および利用者数		22
5. 1	利用申請プロジェクトおよび利用者数		22
5. 2	電力使用および計算機稼働状況システム稼働状況		23
5. 3	計算機利用状況		23
5. 4	クラス別CPU使用時間		24
5. 5	VPU使用時間		26
5. 6	ジョブ処理件数		27
6.	資料		28
6. 1	センター関連組織		28
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		29
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		30
6. 4	電子計算機センター運営委員会委員		32
6. 5	電子計算機センター職員		33
6. 6	応用プログラム相談員		33
6. 7	建物図		34
6. 8	マニュアル一覧		36
6. 9	利用者数とCPU時間の推移		48
7.	電子計算機センター将来計画		50

巻頭言

分子科学研究所電算機センター長 岩田末廣

この一年は、スーパーコンピュータの調達で終始してしまいました。詳細は省きますが、今回のスーパーコンピュータの調達は、第1話、2話、3話と続き、現在が第4話になっています。そういえば序話もありました。それは、アメリカ大使館の役人から以下の手紙が届いたことです。“I would like to convey the strong interest of the U.S. Embassy in supporting the efforts of U.S. supercomputer suppliers to gain market access in Japan, , ,” (Signed by Minister-Counselor for Commercial Affairs) このような手紙を頂く名誉に浴した計算機センターは私どもだけであったようです。

巻頭言の書き手が私に回ってきたのは、このような愚痴を書かせるためではなかったはずですが。私からすれば、6年間勤めたセンター長をこの3月にやめることができるので、その最後のご挨拶をするための巻頭言のはずでした。そして、未来を夢見る巻頭言になるはずでした。計算機センター報告に記しましたように、4月からは、分子科学研究所計算機センターは、岡崎国立共同研究機構・計算科学研究センターに改組されます。ですから、私が最後の計算機センター長ということになります。以前にも記しましたが、分子研計算機センターの利用者は三つのグループに大別されます。第一のグループは、分子科学計算を専門とし、世界的大研究グループです。第二は、分子科学計算を専門としてはいますが、ほとんど個人規模で研究しているグループです。最近では、実験グループも大きな分子科学計算をするようになりました。このグループが第三のグループです。これら三つのグループに、今後もサービスを続けなければなりません、運用の重点は、第一と第二のグループから独創的研究が生まれるようにしなければなりません。第三のグループにとっては、分子研の計算機センターは研究推進上重要な役割を演じています。ごく最近、私は、友田東大教授(総合文化研究科)かから次のような電子メールを頂きました。「実験を専門とする有機化学者として、分子科学研究所の計算機を無料で利用できることは、複雑な有機分子や反応遷移状態の分子軌道計算が必要であるだけに、大変ありがたく思っております。現在、私のような計算好きの有機合成化学者の数は増大傾向にあります。、、、実験で間接的にしか確認出来ないデータが計算で再現可能となり、有機分子の新しい性質のベールが剥がれつつあります」

組織変更後どのように発展していくか、発展させていくか分からないことだらけです。生物学の中での計算科学の役割も変化しさらに重要になってきています。今私の手元に、MIT press が新しく発刊を始める「Computational Molecular Biology Series」の宣伝文があります。“Recent developments in Molecular Biology are not evolutionary but revolutionary. Computer Science, Statistics and Mathematics are the driving forces transforming molecular biology from an informational science to a computational science. Computational Molecular Biology is a new discipline, bringing together computational, experimental, and technological methods, that is energizing and dramatically accelerating the discovery of new technologies and tools for molecular biology.” 岡崎共同研究機構・計算科学研究センターは、計算分子科学を中心に据えて、計算生物学をも包含する方向に発展していくよう期待したいと思います。その中で、世界的に特異な発展が実現されることでしょう。そのためには優れた研究者の結集が第一の条件ですが、同時に、いっそう高性能な計算機システムの導入も不可欠です。

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11年3月11日(木)、12日(金)の両日、スーパーコンピュータワークショップを開催した。63名の参加者があり、導入が決定している次期汎用コンピュータであるSX-5/4Bについてや、センターのマシンを使って得られた成果、マシンの評価についてなど、活発な議論が展開された。

○ 第15回公開講演プログラム

場所 : 分子科学研究所電子計算機センター新棟2階大会議室
日時 : 平成11年3月11日(木)、12日(金)

3月11日(木)

- 13:30 - 14:00 「MCSCF+MP2法を用いたラジカル反応系の理論研究」
小関 史朗 (三重大工)
- 14:00 - 14:30 「分子シミュレーション ~パソコン、MPI クラスタ、専用計算機~」
河村 雄行 (東工大院理工)
- 14:30 - 15:00 「並列版プログラムをどう開発するか」
西川 武志 (分子研理論)
- 15:00 - 15:15 coffee break
- 15:15 - 16:00 「シリコングラフィックス社製Origin2000を利用したスケラブルプログラミング」
戸室 隆彦 (日本SGI)
- 16:00 - 16:25 「スーパーコンピュータSX-5/4Bの概要と高速化技術」
木下 耕二 (NEC)
- 16:25 - 16:45 「SUPER-UXの機能強化の概要」
堀 健一 (NEC)
- 16:45 - 17:30 「SX-5のプログラミング言語とツールの概要」
藤井 等 (NEC)
- 18:00 - 20:00 懇親会

3月12日(木)

- 9:30 - 10:00 「北欧のフリーソフト DALTON の紹介と応用事例」
望月 祐志 (科技団・原研)
- 10:00 - 10:30 「振動スペクトルの理論的解析における諸問題と今後の展望」
鳥居 肇 (東大院理)
- 10:30 - 11:00 「分子軌道計算による化学反応の経路と相互作用」
笛野 博之 (京大院工)
- 11:00 - 11:15 coffee break
- 11:15 - 11:45 「遷移金属化学種の構造・電子状態・反応挙動に関する理論的研究」
杉本 学 (熊本大工)
- 11:45 - 12:15 「密度汎関数法による半無限結晶表面の電子状態計算」
石田 浩 (日大文理)
- 12:15 - 13:30 昼 食
- 13:30 - 14:00 Multicanonical algorithm in *Ab initio* simulation.
~ Investigation of structure and spectroscopy of clusters ~
Pradipta Bandyopadhyay (分子研理論)
- 14:00 - 14:30 「タンパク質全電子計算とスーパーコンピュータ」
佐藤 文俊 (九工大情報工)
- 14:30 - 15:00 「蛋白質の分子動力学シミュレーション：その精度と計算効率の改善」
木寺 詔紀 (京大院理)

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は、高速演算サーバー(日本電気製 HSP)、高速演算サーバー副システム(日本電気製 HPC)、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)による独立性を重視したUNIX分散処理システムである(ユーザのホームディレクトリはファイルサーバー上にあり、各システムはNFSマウントすることによって統一している)。

- ・ 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)の支線ネットワーク間を統合的に接続・利用できる。
- ・ SINET(学術情報センター)を経由してインターネットにアクセスできる。

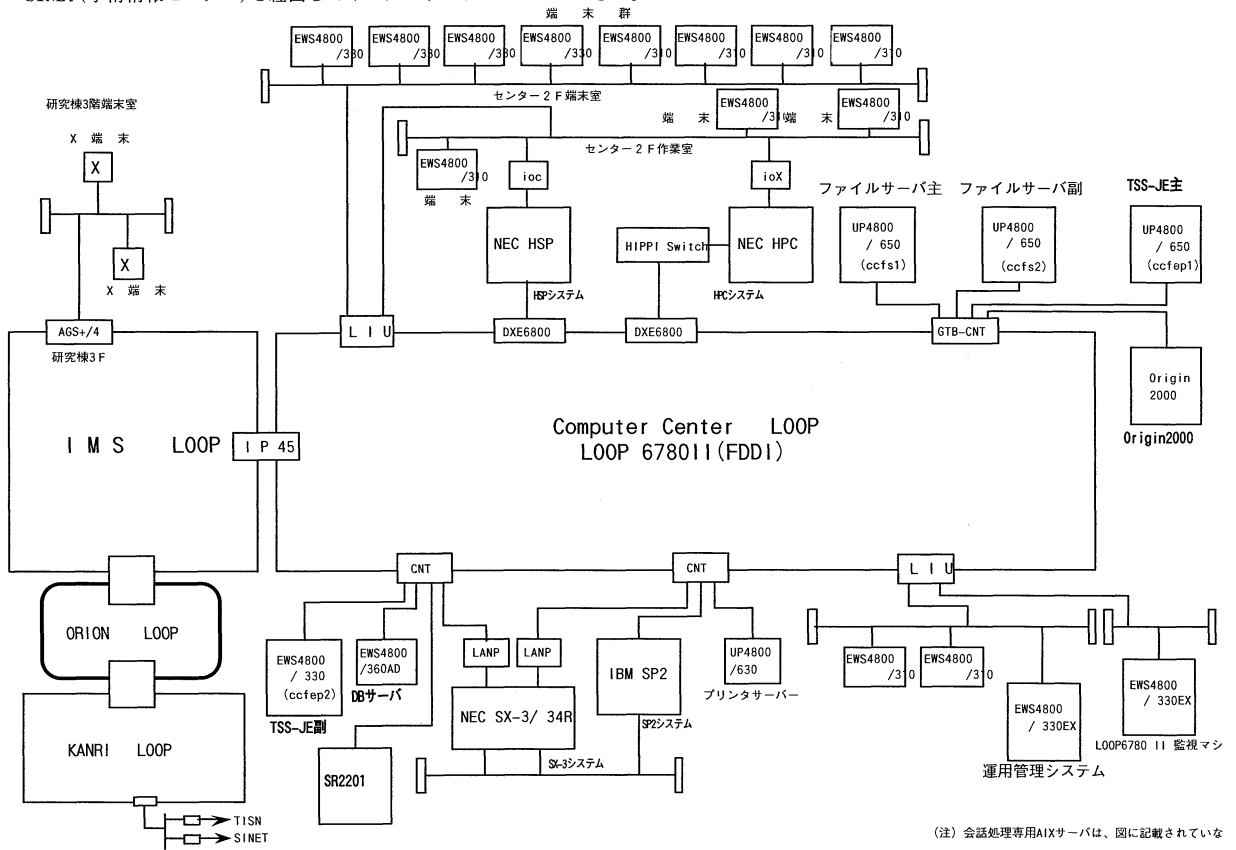


図3.1 システム全体構成概略図

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(平成8年10月よりユーザ公開運用停止。現在は、システムバックアップ用として運用)。
- ・約34.2GBの磁気ディスクと約91.6GBの高速アレイドスクの総容量約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。
- ・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。

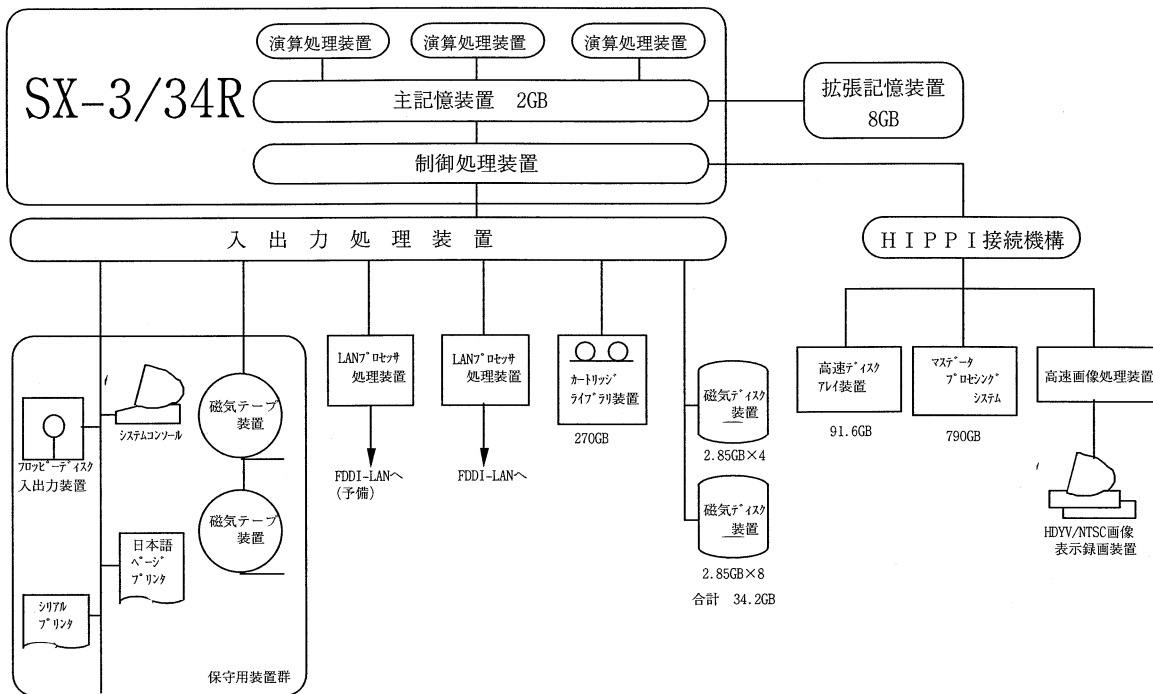


図 3.1.1 スーパーコンピュータシステム

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 の高速アレイディスクを有している。

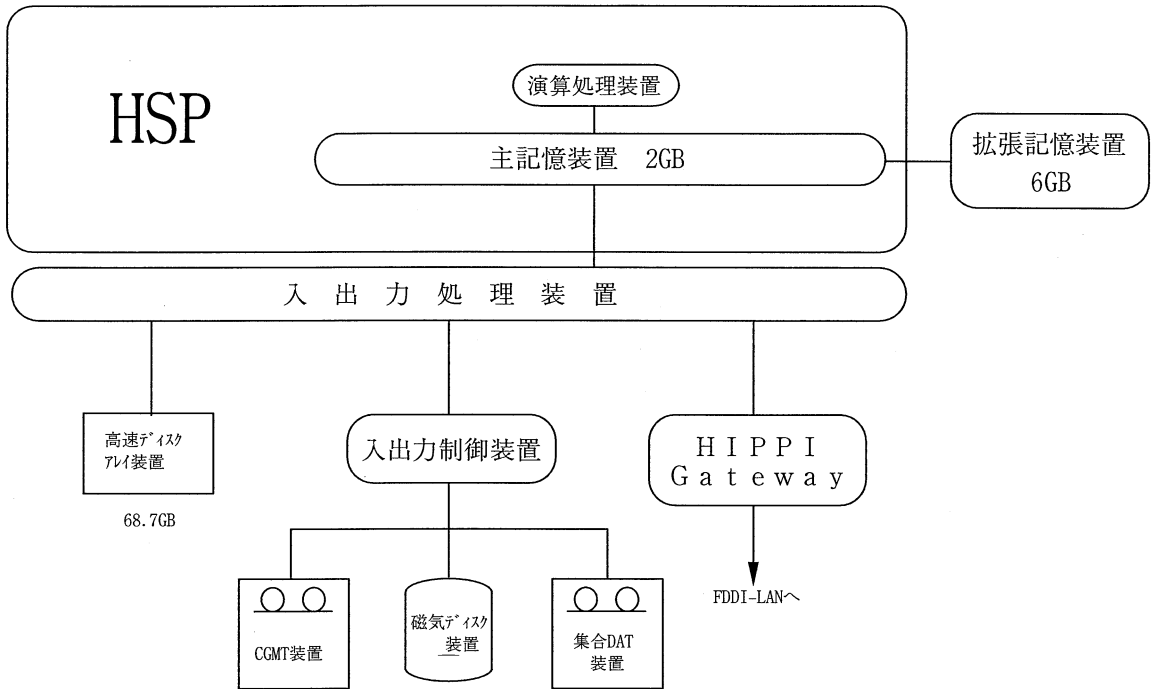


図 3.1.2 高速演算サーバシステム

3.1.3 高速演算サーバ副システム(日本電気製 HPC)

- ・HPCでは、ジョブ管理(NQS)、バッチ処理を行っている。
- ・約33.6GBの高速アレイドディスクを有している。

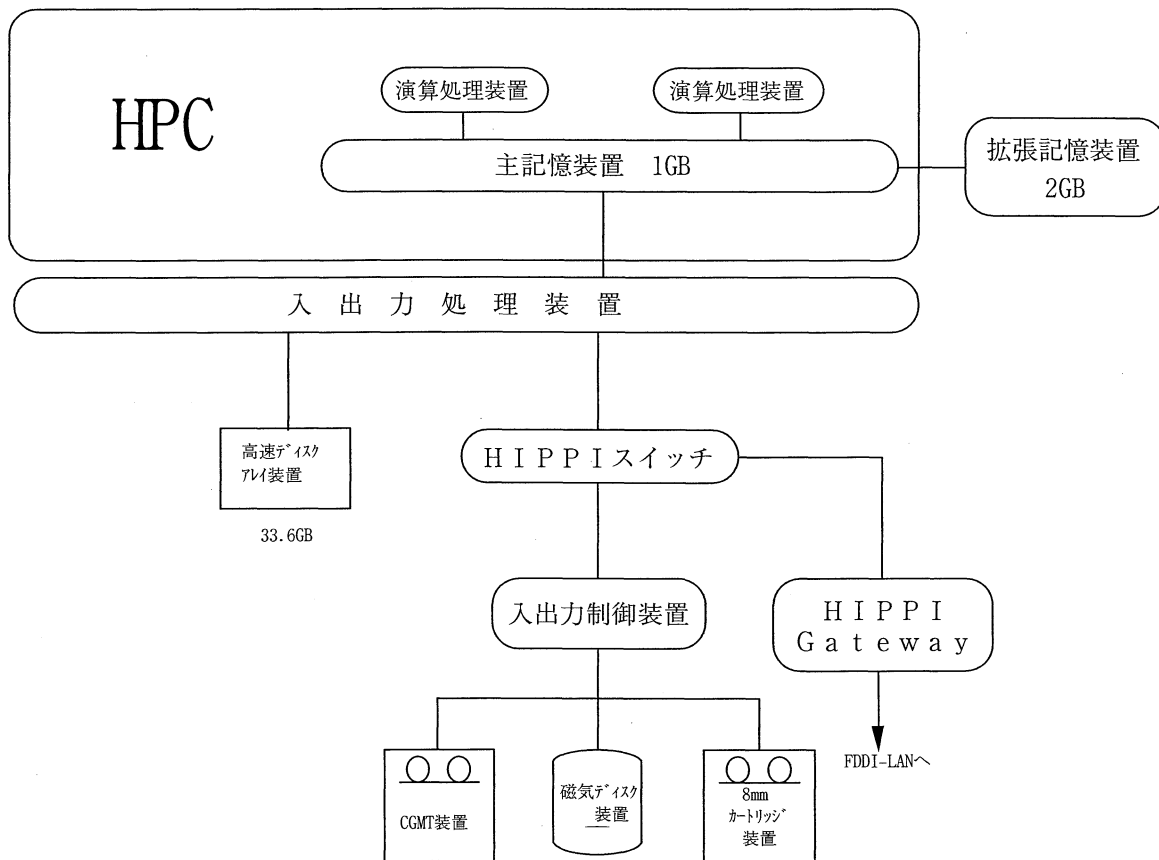


図 3.1.3 高速演算サーバ副システム

3.1.4 演算クラスタシステム(IBM 製 SP2)

- ・SP2では、ジョブ管理(ロードレベラー)、バッチ処理を行っている。
- ・1つのノードをTSS処理用に解放している。
- ・47のノードからなるシステムで、各ノードには4GB(総計192GB)の磁気ディスクを有している。

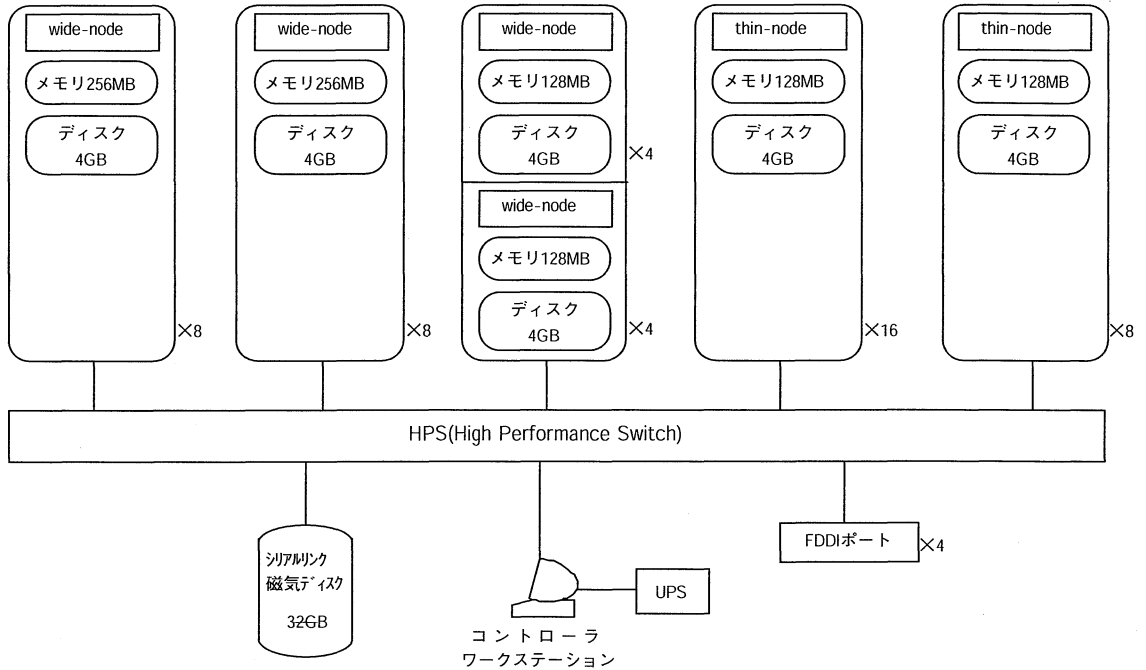


図3.1.4 演算クラスタシステム

3.1.5 分散メモリ並列計算機システム(日立製 SR2201)

- ・SR2201では、ジョブ管理(NQS)、バッチ処理を行っている。
- ・2ノードはTSS処理用に解放している。
- ・12ノードを並列ジョブ用として解放している。
- ・全部で16ノードからなるシステム(内2ノードはI/O等の基本システム専用)で、各ノードは256MBのメモリを有している。
- ・総計32GB(4GBを8台)のハードディスクを有している。

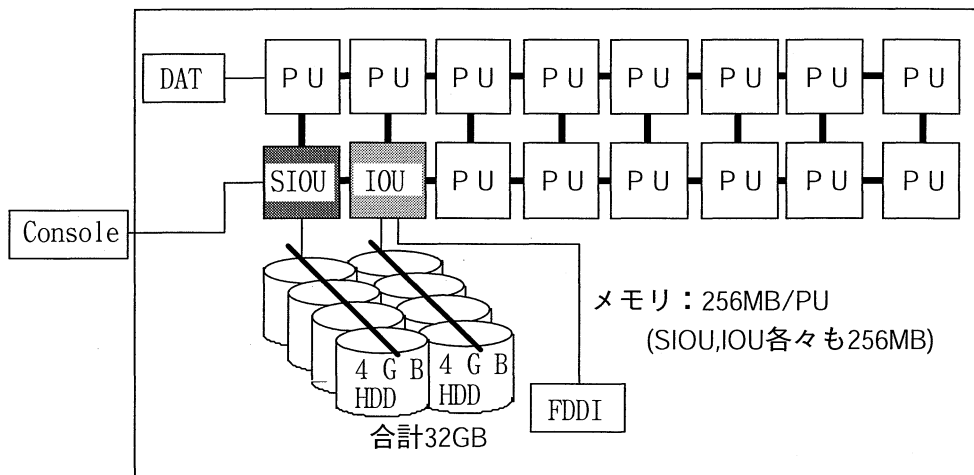


図3.1.5 分散メモリ並列計算機システム

3.1.6 NUMA(Non-Uniform Memory Access)型計算機システム(SGI 製 Origin2000)

- ・Origin2000では、ジョブ管理(NQS)、バッチ処理を行っている。
- ・TSS 処理用にも解放している。
- ・8ノードを並列ジョブ用として解放している。
- ・全部で8ノードからなるシステムで、総計2GMBのメモリを有している。
- ・総計63.7(9.1GBを7台)のハードディスクを有している。

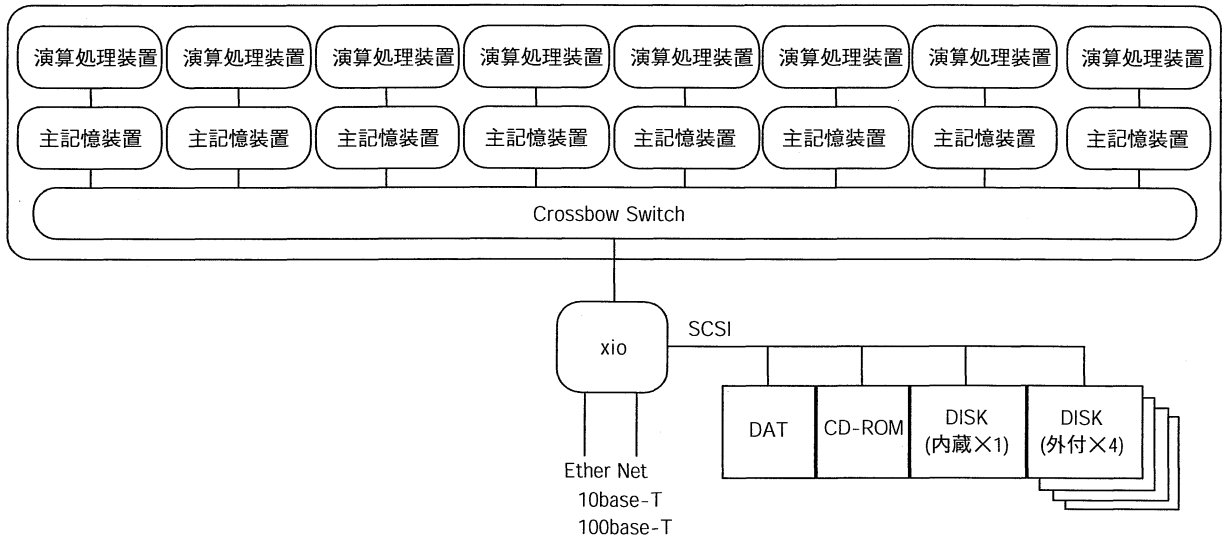


図 3.1.6 NUMA(Non-Uniform Memory Access)型計算機システム

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ある。表中の「多重度」は、各キューにおいて同時に実行出来るジョブの最大件数を指す。

また「Complex」は、2つ以上のキューを併せて同時に実行出来るジョブの最大件数を指す。

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	備 考
V					V1 V3へのパイプキュー
V1	3時間	256MB	4	5	
V2	12時間	256MB	3		
V3	12時間	1GB	2		
VX	24時間	2GB	1		特別申請ジョブ
MDPS			1		
会話処理	10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	Complex	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	1	3	
H4	12時間	1GB	1		特別申請ジョブ
会話処理	3時間	128MB			

HPC (cchpc) <高速シリアルジョブ処理>

キュー名	CPU時間	主記憶	多重度	Complex	備 考
W1	12時間	128MB	2		
W2	12時間	512MB	2		
会話処理	10分	32MB			rshのみ

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			

SP2 (sp2) <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	3	Thin ノード名は以下の通り ccsp266,ccsp267,ccsp268
P2	24時間	128MB	1	1	12	Thin ノード名は以下の通り ccsp205,ccsp206,ccsp207,ccsp208, ccsp209,ccsp210,ccsp211,ccsp212, ccsp213,ccsp214,ccsp215,ccsp216
P3	24時間	128MB	1	1	7	Wide ノード名は以下の通り ccsp251,ccsp253,ccsp255,ccsp257, ccsp259,ccsp261,ccsp263

ISS (ccbm) <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		1	Thin ccsp265

SR-2201

キュー名	最大利用CPU数	CPU時間	備 考
R	-	-	パイプキュー
R1	2	6時間	並列テストジョブ
R2	10	24時間	並列ジョブ

Origin2000

キュー名	CPU時間	主記憶	多重度	ノード数	備 考
01	12時間	123GB	4	4	
02	12時間	384MB	4	4	
会話処理	10分	256MG	-	-	会話処理

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

◆演算クラスタシステム (SP2 Wide) の利用点数算出法

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

CPU : 全 cpu time

パラメータの値は、以下のとおりです。

d : 0.02/sec

◆演算クラスタシステム (SP2 Thin) の利用点数算出法

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

CPU : 全 cpu time

パラメータの値は、以下のとおりです。

e: 0.01/sec

◆高速演算サーバ副システム(HPC)の利用点数算出法

$$P5 = \text{CPU} \times f + \text{VPU} \times g$$

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。

f : 0.06/sec

g : 0.06/sec

◆分散メモリ並列計算機システム(SR2201)の利用点数算出方法

$$P6 = \text{CPU} \times h$$

CPU : 全 cpu time

パラメータの値は、以下のとおりです。

h: 0.002/sec

◆NUMA(Non-Uniform Memory Access)型計算機システム(Origin2000)の利用点数算出方法

$$P7 = \text{CPU} \times I$$

CPU : 全 cpu time

パラメータの値は、以下のとおりです。

I: 0.03/sec

◆利用点数

$$\text{利用点数 } P = P1 + P2 + P3 + P4 + P5 + P6 + P7$$

◆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	
HPC	216 点	(ベクトル演算装置も同じ点数)
SR2201	7.2 点	
Origin2000	108 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開発

平成10年度のライブラリ開発計画を表4.1.1に示す。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プログラム開発を依頼し、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として登録してもらい、一般ユーザーに向けて公開している。

表 4.1.1 平成10年度ライブラリプログラム開発作業一覧

名前	所属	職名	内容
望月 祐志	科技団	特別研究員	分子物性評価向け分子軌道プログラムの整備
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
中辻 博	京大院	教授	SAC-CI96プログラムの登録
波田 雅彦	京大院	助教授	
江原 正博	京大院	助手	
長谷川 淳也	東大	特別研究員	
中嶋 隆人	東大	特別研究員	
中井 浩巳	早大	講師	
北尾 修	物質研	主任研究官	
豊田 和男	京大院	大学院生	

平成10年度に新規登録したライブラリプログラムは以下の21件である。

NEC SX-5版

asl (SUBROUTINES) ASL/SX: Advanced Scientific Library/SX
 blas (SUBROUTINES) BLAS: Basic Linear Algebra Subprograms Rev.4.0
 colmbs2 COLUMBUS: a program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calculation
 dalton An *ab initio* molecular toolbox for a manifold of properties
 g98 GAUSSIAN98: *ab initio* molecular orbital calculations
 gamess General atomic and molecular electronic structure system
 hondo8 HONDO version 8.5: *ab initio* MO calculation
 meld Program for many electron description
 mm2 Molecular mechanics calculation by MM2 force field model
 mopac7 MOPAC version 7: a general molecular orbital package

NEC HPC版

dalton An *ab initio* molecular toolbox for a manifold of properties

g98 GAUSSIAN98: *ab initio* molecular orbital calculations
 molpro98 MOLPRO98.1: complete system of *ab initio* programs

IBM SP2 版

picmo PICMO: The 2-D drawing system of molecular orbital and electron

SGI Origin2000 版

dalton An *ab initio* molecular toolbox for a manifold of properties
 g94 GAUSSIAN94: *ab initio* molecular orbital calculations
 g98 GAUSSIAN98: *ab initio* molecular orbital calculations
 gamess General atomic and molecular electronic structure system
 molpro96 MOLPRO96.4: complete system of *ab initio* programs

HITACHI SR2201 版

g94 GAUSSIAN94: *ab initio* molecular orbital calculations
 gamess General atomic and molecular electronic structure system

よって、現在登録されているライブラリプログラムは以下の通りである。

表 4.1.2 プログラムライブラリー一覧

**** NEC SX-3 VERSION ****

PROGRAM	PROGRAM TITLE
amos	AMOS/SX R2.0
asl	(SUBROUTINES) ASL/SX: Advanced Scientific Library/SX
blas	(SUBROUTINES) BLAS: Basic Linear Algebra Subprograms
colmbs1	COLUMBUS: a program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calculation
colmbs2	COLUMBUS: a program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calculation
crys88	CRYSTAL88: <i>ab initio</i> LCAO-HF program for crystal systems
g92	GAUSSIAN92: <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
g94	GAUSSIAN94: <i>ab initio</i> 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) International math. and stat. libraries
 jamol4 *Ab initio* LCAO MO 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 engine
 math (SUBROUTINES) mathematical 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
 sxview SXVIEW: Visual simulation system for SX

**** NEC SX-5 VERSION ****

PROGRAM	PROGRAM TITLE
asl	(SUBROUTINES) ASL/SX: Advanced Scientific Library/SX
blas	(SUBROUTINES) BLAS: Basic Linear Algebra Subprograms Rev.4.0
colmbs2	COLUMBUS: a program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calculation
dalton	An <i>ab initio</i> molecular toolbox for a manifold of properties
g98	GAUSSIAN98: <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
gamess	General atomic and molecular electronic structure system
hondo8	HONDO version 8.5: <i>ab initio</i> MO calculation
meld	Program for many electron description
mm2	Molecular mechanics calculation by MM2 force field model
mopac7	MOPAC version 7: a general molecular orbital package

**** HSP VERSION ****

PROGRAM	PROGRAM TITLE
asl	(SUBROUTINES) ASL/SX: Advanced Scientific Library/SX
blas	(SUBROUTINES) BLAS: Basic Linear Algebra Subprograms Rev.4.0

colmbs2 COLUMBUS: a program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calculation
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) mathematical Library
meld Program for many electron description
mm2 Molecular mechanics calculation by MM2 force field model
molpro96 MOLPRO96.4: complete system of *ab initio* programs
mopac7 MOPAC version 7:a general molecular orbital package
numpac (SUBROUTINES) NAGOYA university mathematical program package

**** HPC VERSION ****

PROGRAM	PROGRAM TITLE
asl	(SUBROUTINES) ASL/SX: Advanced Scientific Library/SX
blas	(SUBROUTINES) BLAS: Basic Linear Algebra Subprograms Rev.4.0
colmbs2	COLUMBUS: a program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calculation
crys88	CRYSTAL88: <i>ab initio</i> LCAO-HF program for crystal systems
dalton	An <i>ab initio</i> molecular toolbox for a manifold of properties
g94	GAUSSIAN94: <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
g98	GAUSSIAN98: <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
gamess	General atomic and molecular electronic structure system
hondo8	HONDO version 8.5: <i>ab initio</i> MO calculation
imsl	(SUBROUTINES)International math. and stat. libraries
jamol4	<i>ab initio</i> LCAO MO SCF calculation
jason2	CASSCF calculation with large basis set
koto	KOTO: <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
meld	Program for many electron description
mm2	Molecular mechanics calculation by MM2 force field model
molpro96	MOLPRO96.4: complete system of <i>ab initio</i> programs
molpro98	MOLPRO98.1: complete system of <i>ab initio</i> programs
mopac7	MOPAC version 7:a general molecular orbital package

**** IBM SP2 VERSION ****

PROGRAM	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 rotasional spectroscopy
bgstr3	BIGSTRN3: a general purpose empirical force field program
cndos	CNDO/S-CI: modified CNDO and CI method
columbus	COLUMBUS: A program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calculation
dalton	An <i>ab initio</i> molecular toolbox for a manifold of properties
g92	GAUSSIAN92: <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
g94	GAUSSIAN94: <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
g98	GAUSSIAN98: <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
g941	GAUSSIAN94: <i>ab initio</i> molecular orbital calculations (for LINDA)
gamess	General atomic and molecular electronic structure system (POE)
hondo8	HONDO version 8.5: <i>ab initio</i> MO calculation
jamol4	<i>ab initio</i> LCAO MO SCF calculation
jason2	CASSCF calculation with large basis set
mm2	Molecular mechanics calculation by MM2 force field model
molcas	MOLCAS4.1: quantum chemistry program package for scientists
molpro96	MOLPRO96.4: complete system of <i>ab initio</i> programs
mopac7	MOPAC version 7: A general molecular orbital package
mulliken	Mulliken version 2.48
numpac	(SUBROUTINES) NAGOYA university mathematical program package
picmo	PICMO: The 2-D drawing system of molecular orbital and electron
series	LOOMIS-WOOD diagram for finding line series
tcg4mpl	(SUBROUTINES) tcg4mpl: interface from TCGMSG4.0 to IBM POE MPL
tcgmsg	(SUBROUTINES) TCGMSG: message passing library for theo. chem.
unic3	Universal crystallographic computation program system
wigner	Magnitudes of 3-J and 6-J symbols

**** SGI Origin2000 VERSION ****

PROGRAM	PROGRAM TITLE
dalton	An <i>ab initio</i> molecular toolbox for a manifold of properties
g94	GAUSSIAN94: <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
g98	GAUSSIAN98: <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
gamess	General atomic and molecular electronic structure system
molpro96	MOLPRO96.4: complete system of <i>ab initio</i> programs

**** HITACHI SR2201 ****

PROGRAM	PROGRAM TITLE
g94	GAUSSIAN94: <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
gamess	General atomic and molecular electronic structure system

**** MISC ****

PROGRAM	PROGRAM TITLE
crystruct	crystruct3/SD
masphyc	Material design system by means of comp. phys. and chem./Workbench

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以下の2件のデータベースが登録されており、現在公開中である。

(1) QCLDB (量子化学文献データベース)

(開発代表者) 細矢治夫

総件数: 41,262 件

ab initio MO 計算を扱った文献のデータベース。JAICI (日本化学情報協会) より世界中に販売されているとともに、毎年 Journal of Molecular Structure (ELSEVIER) より出版されている。利用にはセンターの課題取得が必要である。

(1-2) WWW 版 QCLDB

既存の QCLDB プログラムに、WWW インターフェースを導入した WWW 版 QCLDB を公開している。ただしデータについては、前年度版を利用している。利用制限は特にない。

(2) FCDB (力の定数に関するデータベース)

(開発代表者) 田隅三生

総件数: 2,231 件

力の定数に関する文献のデータベース。平成8年4月より公開している。利用にはセンターの課題取得が必要である。

平成10年度に新規登録されたデータの件数は以下の通りである。

(1) QCLDB	4,406 件
(2) FCDB	217 件

5 平成 10 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	時 間			点 数	
				申 請	許 可	実 績	許 可	実 績
分子科学	施設利用	138	554	45,908	39,118	28,022	15,647,200	11,208,943
	協力研究	10	12	3,720	3,582	1,518	1,432,800	607,009
	所 内	24	128	21,731	19,558	15,571	7,823,200	6,228,326
生理学	所 内	2	10	5,445	4,901	1,075	1,960,400	429,961
合 計		174	704	76,804	67,159	46,186	15,904,629	18,474,239

注) ここでの CPU 時間実績は、点数実績より逆算(点数/400=時間実績)を行って算出したものです。

5.2 電力使用および計算機稼働状況

年月	電力量	システム稼働時間								KW/ 稼働時間
		マシン名	Kwh	SX-3	HSP	HPC	SP2	SR	Origin	
平成10年4月	375,680	709	710	710	710	720	-	710	529	
5月	367,350	733	734	734	734	744	-	734	500	
6月	407,040	733	734	734	734	744	-	734	555	
7月	418,660	734	734	734	719	744	-	730	574	
8月	425,010	734	734	734	734	744	-	734	579	
9月	394,490	710	710	710	710	720	-	710	556	
10月	349,430	674	674	674	673	684	-	674	518	
11月	378,220	700	697	700	700	710	710	703	538	
12月	339,080	731	732	732	732	744	732	734	462	
平成11年1月	395,590	731	732	732	732	744	732	734	539	
2月	373,410	662	662	662	662	662	662	662	564	
3月	435,520	728	734	734	734	734	734	733	594	
合計	4,659,480	8,579	8,587	8,590	8,574	8,694	3,570	8,592	542	

5.3 計算機利用状況

年月	CPU使用時間												VPU時間			
	マシン名	SX-3	*	HSP	*	HPC	*	SP2	*	SR2201	*	Origin	*	SX-3	*	HPC
平成10年4月	1,866	88	454	64	939	66	15,019	46	7,250	72	-	-	1,091	51	417	59
5月	1,696	77	461	63	958	65	13,054	39	5,305	51	-	-	983	45	488	66
6月	1,676	76	541	74	1,116	76	18,375	54	1,972	19	-	-	1,068	49	500	68
7月	2,121	96	530	72	1,319	90	19,098	58	4,674	45	-	-	1,365	62	634	86
8月	1,592	72	563	77	1,126	77	13,630	40	1,624	16	-	-	922	42	503	69
9月	1,917	90	690	97	996	70	15,281	47	1,069	11	-	-	1,104	52	476	67
10月	1,400	69	521	77	865	64	13,408	43	2,478	26	-	-	960	47	337	50
11月	1,859	89	549	79	997	71	19,784	61	3,843	39	1,815	32	1,146	55	544	78
12月	1,968	90	635	87	1,273	87	12,807	38	6,456	62	3,530	60	970	44	652	89
平成11年1月	1,331	61	446	61	1,101	75	4,549	14	5,994	58	4,195	72	498	23	631	86
2月	1,157	58	476	72	1,075	81	15,691	52	5,308	57	3,580	68	530	27	578	87
3月	1,833	84	450	61	1,087	74	6,951	21	6,293	61	958	16	1,060	49	354	48
合計	20,416	79	6,316	74	12,852	75	167,647	43	52,266	43	14,078	49	11,697	45	6,114	71

*:各システムの稼働時間/月における1CPU当たりの稼働率

年月	ジョブ処理件数						
	マシン名	SX-3	HSP	HPC	SP2	SR2201	Origin
平成10年4月	736	520	191	1,925	164	-	-
5月	1,657	464	312	1,839	216	-	-
6月	1,300	524	235	2,194	59	-	-
7月	1,032	446	280	1,774	285	-	-
8月	568	394	211	1,629	113	-	-
9月	1,249	409	336	1,658	321	-	-
10月	1,224	584	305	1,668	285	-	-
11月	1,064	616	304	2,170	383	798	-
12月	1,126	622	337	1,290	297	304	-
平成11年1月	699	487	376	385	433	243	-
2月	503	487	263	1,711	230	157	-
3月	936	455	247	857	175	111	-
合計	12,094	6,008	3,397	19,100	2,961	1,613	-

5.4 クラス別 CPU 使用時間

5.4.1 SX-3/34R

	(V1)	(V2)	(V3)	(VX)	(VP)	(MDPS)	合 計	(ETC)	総 合 計
平成 10年 4月	49:30:46	583:05:57	971:22:11	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1603:58:54	261:43:06	1865:42:00
5月	93:38:07	550:02:55	984:48:09	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1628:29:11	67:29:58	1695:59:09
6月	48:46:00	679:49:49	885:32:18	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1614:08:07	61:29:51	1675:37:58
7月	117:49:26	748:00:56	1210:21:52	0:00:00	0:00:00	0:00:00	2076:12:14	44:50:51	2121:03:05
8月	6:37:10	703:33:50	875:37:37	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1585:48:37	6:24:26	1592:13:03
9月	132:11:25	509:04:43	1232:31:18	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1873:47:26	43:03:35	1916:51:01
10月	64:22:11	276:09:00	1028:27:02	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1368:58:13	31:24:37	1400:22:50
11月	135:14:06	477:53:18	1195:30:37	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1808:38:01	50:16:48	1858:54:49
12月	163:03:12	547:25:12	1243:36:26	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1954:04:50	14:01:32	1968:06:22
平成 11年 1月	78:35:33	350:30:00	858:47:22	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1287:52:55	42:43:32	1330:36:27
2月	19:14:10	424:28:37	683:10:02	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1126:52:49	29:53:09	1156:45:58
3月	247:10:55	362:38:34	1155:27:03	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1765:16:32	68:04:45	1833:21:17
合 計	1156:13:01	6212:42:51	12325:11:57	0:00:00	0:00:00	0:00:00	19694:07:49	721:26:10	21415:33:59

5.4.2 HSP

	(H1)	(H2)	(H3)	(H4)	合 計	(ETC)	総 合 計
平成 10年 4月	117:30:24	199:53:15	110:08:51	0:00:00	427:32:30	26:55:01	454:27:31
5月	100:07:22	209:41:43	124:38:22	0:00:00	434:27:27	26:13:07	460:40:34
6月	121:07:36	232:03:29	170:31:53	0:00:00	523:42:58	17:26:13	541:09:11
7月	80:32:17	215:48:02	153:48:52	0:00:00	450:09:11	80:19:22	530:28:33
8月	30:46:47	167:08:31	98:57:50	0:00:00	296:53:08	266:28:20	563:21:28
9月	76:28:11	126:43:58	78:51:13	0:00:00	282:03:22	407:44:53	689:48:15
10月	144:43:30	229:23:40	110:35:31	0:00:00	484:42:41	35:59:32	520:42:13
11月	136:59:34	229:13:04	162:58:32	0:00:00	529:11:10	19:38:18	548:49:28
12月	133:18:51	321:53:48	156:42:28	0:00:00	611:55:07	22:47:49	634:42:56
平成 11年 1月	124:19:05	172:29:34	122:39:12	0:00:00	419:27:51	26:15:10	445:43:01
2月	116:24:58	191:45:20	150:38:52	0:00:00	458:49:10	16:54:37	475:43:47
3月	54:35:40	171:57:51	191:59:47	0:00:00	418:33:18	31:52:46	450:26:04
合 計	1236:54:15	2468:02:15	1632:31:23	0:00:00	5337:27:53	978:35:08	6316:03:01

5.4.3 HPC

	(W1)	(W2)	合 計	(ETC)	総 合 計
平成 10年 4月	147:21:22	259:28:26	406:49:48	532:07:52	938:57:40
5月	172:11:04	257:53:28	430:04:32	527:48:33	957:53:05
6月	136:41:16	246:28:02	383:09:18	733:01:20	1116:10:38
7月	113:45:55	396:09:50	509:55:45	809:11:26	1319:07:11
8月	158:11:30	310:27:08	468:38:38	657:06:36	1125:45:14
9月	179:28:39	352:40:32	532:09:11	463:30:10	995:39:21
10月	133:09:55	284:50:28	418:00:23	446:31:04	864:31:27
11月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	997:23:07	997:23:07
12月	238:57:05	459:36:34	698:33:39	574:29:07	1273:02:46
平成 11年 1月	253:02:21	328:34:45	581:37:06	518:56:26	1100:33:32
2月	226:15:00	291:00:16	517:15:16	558:09:58	1075:25:14
3月	190:31:41	222:31:12	413:02:53	674:04:29	1087:07:22
合 計	2183:30:02	3710:56:41	5894:26:43	6962:50:46	12857:17:29

5.4.4 SP2

	(S1)	(S2)	(S3)	(S4)	(P1)	(P2)	(P3)	合 計
平成 10年 4月	1833:35:23	1164:37:58	1572:29:05	3347:51:26	7:25:14	5746:11:41	1357:02:57	15019:13:44
5月	1085:36:15	896:14:42	1537:52:39	2945:45:48	5:47:51	4860:40:35	1722:19:14	13054:17:04
6月	897:01:36	1372:13:49	2680:50:35	4817:29:18	5:46:40	5682:45:35	2888:44:14	18374:51:47
7月	1201:53:41	1529:00:23	2734:02:26	5568:47:52	0:57:31	6275:54:13	1787:17:54	19097:54:00
8月	1045:12:23	1196:07:41	2931:50:10	230436:19	2:32:19	4297:39:09	1851:58:43	13629:56:44
9月	1203:32:46	1099:41:17	3306:47:27	3508:19:23	0:08:18	5240:12:41	922:33:11	15281:15:03
10月	1202:43:16	1272:25:40	2199:12:52	4693:53:22	0:17:16	2911:54:39	1127:11:22	13407:38:27
11月	594:35:07	1084:09:52	4815:55:17	4640:49:02	1:41:49	8055:01:56	591:21:34	19783:34:37
12月	394:26:53	727:32:44	3483:54:02	3874:04:02	0:47:43	3796:52:21	529:02:50	12806:40:35
平成 11年 1月	601:14:03	1272:04:38	2619:14:34	2960:09:15	1:34:19	5524:54:05	1646:53:41	14626:04:35
2月	460:32:44	1489:29:52	1818:33:29	3799:23:52	0:03:10	5406:25:35	2716:12:04	15690:40:46
3月	151:07:49	481:58:10	1022:33:03	1675:14:46	0:11:12	3592:30:47	28:30:20	6954:10:32
合 計	10673:26:11	13585:46:56	30723:15:39	44166:24:25	27:13:22	61381:03:17	17169:08:04	177726:17:54

5.4.5 SR2201

	(R1)	(R2)	合 計
平成 10年 4月	433:09:42	6807:20:31	7240:30:14
5月	688:23:15	4600:00:57	5288:24:12
6月	130:42:42	1828:52:25	1959:35:06
7月	514:00:51	4150:01:25	4664:02:16
8月	453:16:09	1170:25:30	1623:41:39
	(R)	(1998.9.7より)	
9月	1069:06:16	0:00:00	1069:06:16
10月	2478:29:17	0:00:00	2478:29:17
11月	3843:00:05	0:00:00	3843:00:05
12月	6456:18:43	0:00:00	6456:18:43
平成 11年 1月	5994:27:00	0:00:00	5994:27:00
2月	5307:48:50	0:00:00	5307:48:50
3月	6293:23:00	0:00:00	6293:23:00
合 計	33662:05:51	18556:40:48	52218:46:38

5.4.6 Origin2000

	(01)	(02)	合 計
平成 10年10月	356:34:53	179:27:19	536:02:13
11月	979:02:09	215:29:29	1194:31:39
12月	64:49:01	195:11:54	260:00:56
平成 11年 1月	2:48:25	115:06:46	117:55:12
2月	66:45:50	107:35:34	174:21:25
3月	3:05:36	15:18:16	18:23:51
合 計	1473:05:57	828:09:20	2301:15:17

5.5 クラス別 VPU 使用時間

5.5.1 SX-3/34R

SX-3	(V1)	(V2)	(V3)	(VX)	(VP)	(MDPS)	合計	(ETC)	総合計
平成 10年 4月	19:41:29	270:22:49	497:49:14	0:00:00	0:00:00	0:00:00	787:53:32	302:58:10	1090:51:42
5月	20:17:23	216:15:50	448:28:40	0:00:00	0:00:00	0:00:00	685:01:53	297:43:13	982:45:06
6月	9:36:01	299:53:23	408:17:58	0:00:00	0:00:00	0:00:00	717:47:22	349:55:05	1067:42:27
7月	34:41:49	369:38:17	546:03:34	0:00:00	0:00:00	0:00:00	950:23:40	414:36:00	1364:59:40
8月	2:35:05	313:29:22	355:10:14	0:00:00	0:00:00	0:00:00	671:14:41	250:24:33	921:39:14
9月	42:35:23	143:48:42	539:48:53	0:00:00	0:00:00	0:00:00	726:12:58	377:33:31	1103:46:29
10月	21:01:48	122:28:33	561:31:21	0:00:00	0:00:00	0:00:00	405:01:42	254:47:06	959:48:48
11月	61:33:27	217:02:20	494:25:34	0:00:00	0:00:00	0:00:00	773:01:21	373:34:43	1146:36:04
12月	53:35:43	177:59:51	399:53:16	0:00:00	0:00:00	0:00:00	631:28:50	338:37:55	970:06:45
平成 11年 1月	21:40:02	111:49:02	211:54:34	0:00:00	0:00:00	0:00:00	345:23:38	152:49:43	498:13:21
2月	5:00:39	188:06:13	230:23:27	0:00:00	0:00:00	0:00:00	423:30:19	106:31:01	530:01:20
3月	61:44:26	79:42:13	355:00:56	0:00:00	0:00:00	0:00:00	496:27:35	563:11:37	1059:39:12
合計	354:03:15	2510:36:35	5048:47:41	0:00:00	0:00:00	0:00:00	7913:27:31	3782:42:37	11696:10:08

5.5.2 HPC

HPC	(W1)	(W2)	合計	(ETC)	総合計
平成 10年 4月	68:44:16	139:27:02	208:11:18	209:09:35	417:20:53
5月	47:03:14	95:30:06	142:33:20	345:39:20	488:12:40
6月	51:49:58	185:15:40	237:05:38	262:50:48	499:56:26
7月	48:29:12	140:15:44	188:44:56	444:50:22	633:35:18
8月	64:16:36	130:40:20	194:56:56	307:33:43	502:30:39
9月	83:04:45	146:33:09	229:37:54	243:46:51	473:24:45
10月	46:32:43	86:19:10	132:51:53	204:03:54	336:55:47
11月	80:15:58	111:52:11	192:08:09	352:17:48	544:25:57
12月	84:10:19	184:55:54	269:06:13	382:53:06	651:59:19
平成 11年 1月	92:43:36	172:11:05	264:54:41	365:36:51	630:31:32
2月	123:32:39	259:29:45	383:02:24	194:54:14	577:56:38
3月	21:02:05	1:09:54	22:11:59	331:27:35	353:39:34
合計	811:45:21	1653:40:00	2465:25:21	3645:04:07	6110:29:28

5.6 ジョブ処理件数

5.6.1 SX-3/34R

SX-3	(V1)	(V2)	(V3)	(V4)	(V5)	(VX)	(VP)	(MDPS)	合 計
平成10年 4月	215	181	340	0	0	0	0	0	736
5	538	276	843	0	0	0	0	0	1,657
6	444	262	594	0	0	0	0	0	1,300
7	343	255	434	0	0	0	0	0	1,032
8	69	216	283	0	0	0	0	0	568
9	532	304	413	0	0	0	0	0	1,249
10月	624	294	306	0	0	0	0	0	1,224
11月	517	213	334	0	0	0	0	0	1,064
12月	463	260	403	0	0	0	0	0	1,126
平成11年 1月	251	166	282	0	0	0	0	0	699
2	182	125	196	0	0	0	0	0	503
3	396	161	379	0	0	0	0	0	936
合 計	4,574	2,713	4,807	0	0	0	0	0	12,094

5.6.2 HPC

HPC	(W1)	(W2)	合 計
平成10年 4月	95	96	191
5	130	182	312
6	117	118	235
7	85	195	280
8	91	120	211
9	203	133	336
10月	149	156	305
11月	125	179	304
12月	152	185	337
平成11年 1月	211	165	376
2	127	136	263
3	127	120	247
合 計	1,612	1,785	3,397

5.6.3 HSP

	(H1)	(H2)	(H3)	(H4)	合 計
平成10年 4月	279	147	94	0	520
5	195	200	69	0	464
6	288	163	73	0	524
7	233	138	75	0	446
8	147	125	122	0	394
9	190	132	87	0	409
10月	279	200	105	0	584
11月	313	183	120	0	616
12月	349	174	99	0	622
平成11年 1月	265	131	91	0	487
2	284	133	66	0	483
3	251	133	71	0	455
合 計	3,073	1,859	1,072	0	6,004

5.6.4 Origin2000

	(O1)	(O2)	合 計
平成10年10月	102	113	215
11月	515	283	798
12月	102	202	304
平成11年 1月	85	158	243
2	66	91	157
3	58	53	111
合 計	928	900	1,828

5.6.5 SP2

	(S1)	(S2)	(S3)	(S4)	(P1)	(P2)	(P3)	合 計
平成10年 4月	501	614	199	450	33	72	56	1,925
5	383	852	146	286	20	67	85	1,839
6	393	963	258	403	46	69	62	2,194
7	309	651	195	400	16	92	111	1,774
8	287	596	164	363	31	65	123	1,629
9	229	684	150	406	9	132	48	1,658
10月	236	723	147	450	15	46	51	1,668
11月	341	856	233	546	8	44	142	2,170
12月	214	477	181	299	6	64	49	1,290
平成11年 1月	276	609	167	405	45	121	155	1,778
2	323	598	108	516	9	59	98	1,711
3	218	251	95	262	12	30	12	880
合 計	3,710	7,874	2,043	4,786	250	861	992	20,516

5.6.6 SR2201

	(R1)	(R2)	合 計
平成10年 4月	112	52	164
5	153	63	216
6	35	24	59
7	215	70	285
8	93	20	113
	R	(1998.9.7より)	
9	321	-	321
10月	285	-	285
11月	383	-	383
12月	297	-	297
平成11年 1月	433	-	433
2	230	-	230
3	175	-	175
合 計	2,732	229	2,961

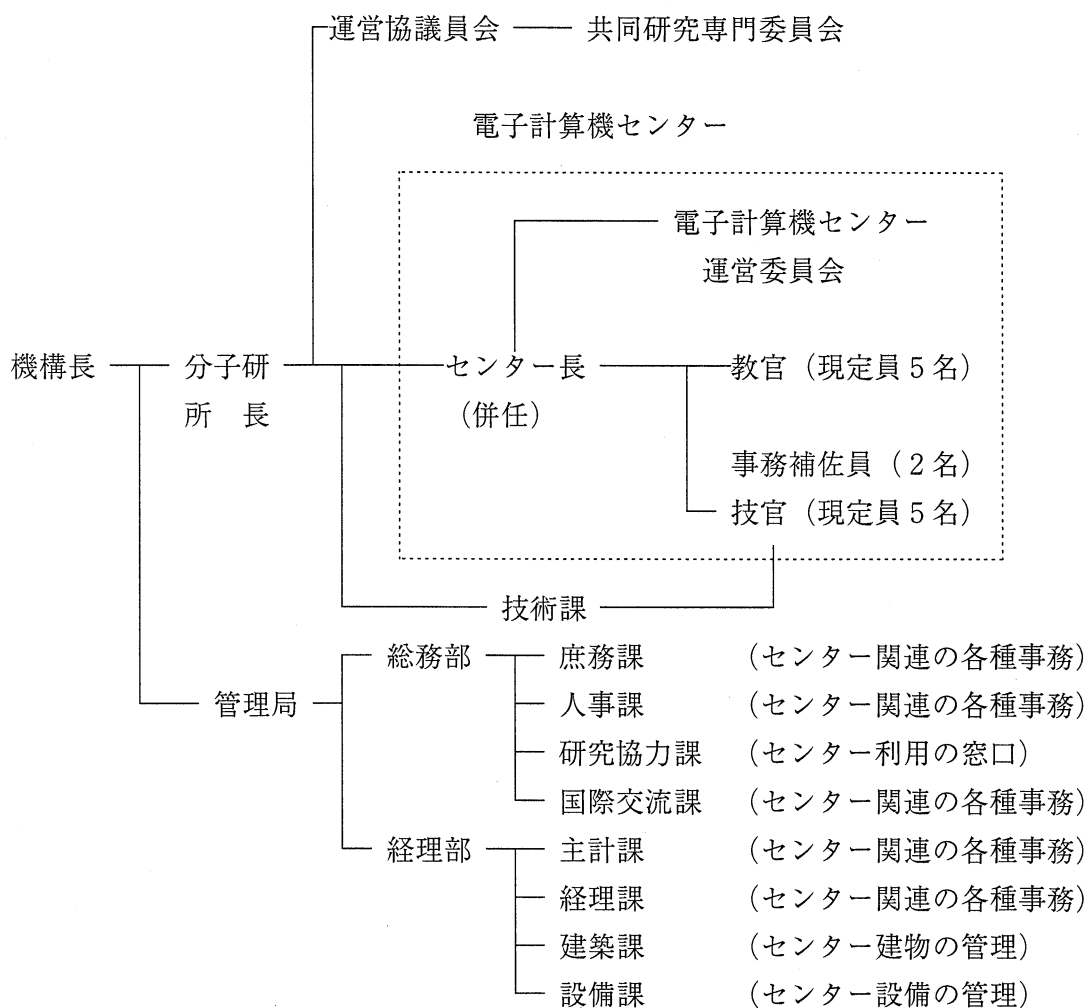
6. 資料

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員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10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	〃
平田文男	分子研理論研究系教授	分子研所内委員
岡本祐幸	分子研理論研究系助教授	〃
片岡洋右	法大教授	分子研所外委員
永瀬茂	都立大教授	〃
古賀伸明	名大教授	〃
齋藤晋	東工大教授	〃
上野孝治	基生研発生生物学研究系助教授	基生研委員
永山国昭	生理研分子生理研究系教授	生理研委員

(平成11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	〃
平田文男	分子研理論研究系教授	分子研所内委員
鈴木俊法	分子研理論研究系助教授	〃
岡崎進	東工大助教授	分子研所外委員
相田美砂子	広島大学教授	〃
古賀伸明	名大教授	〃
齋藤晋	東工大教授	〃
上野孝治	基生研発生生物学研究系助教授	基生研委員
永山國昭	生理研分子生理研究系教授	生理研委員

6. 5 電子計算機センター職員（平成11年11月現在）

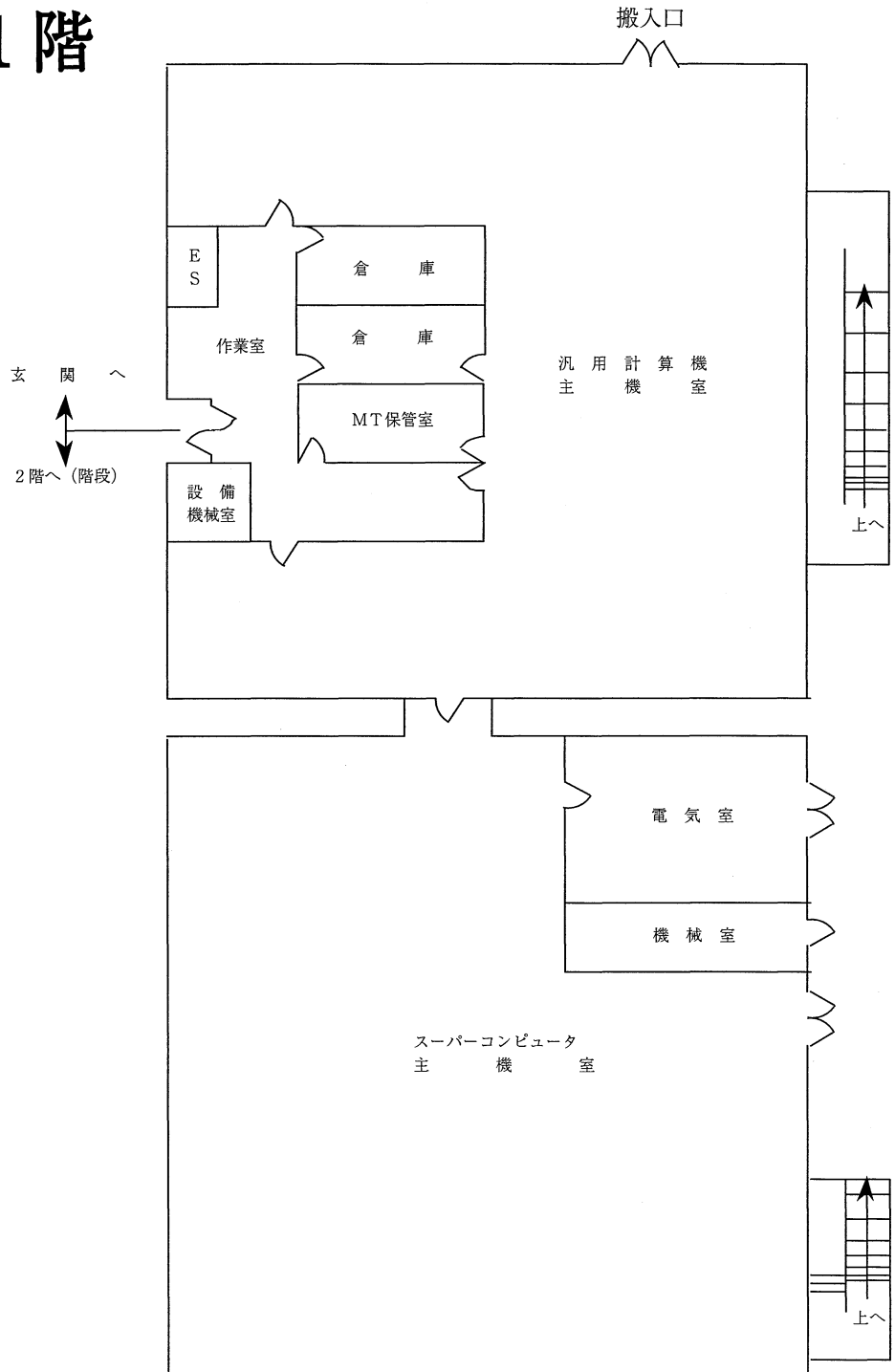
岩田末廣	センター長（併任）
青柳睦	助教授
南部伸孝	助手
高見利也	助手
大野人侍	助手
伊藤正勝	リサーチアソシエート
南野智	技官
西本史雄	技官（班長）
水谷文保	技官（係長）
手島史綱	技官
内藤茂樹	技官
加納聖子	事務補佐員
禿子瞳	事務補佐員

6. 6 応用プログラム相談員一覧

廣津昌和	特別研究学生	平成10年6月～平成10年11月（平成10年度）
木下朋子	総研大大学院生	平成10年6月～平成11年3月（平成10年度）
木下朋子	総研大大学院生	平成11年9月～平成12年3月（平成11年度）
岡田一俊	総研大大学院生	平成11年9月～平成12年3月（平成11年度）
大塚博史	総研大大学院生	平成11年9月～平成11年9月（平成11年度）

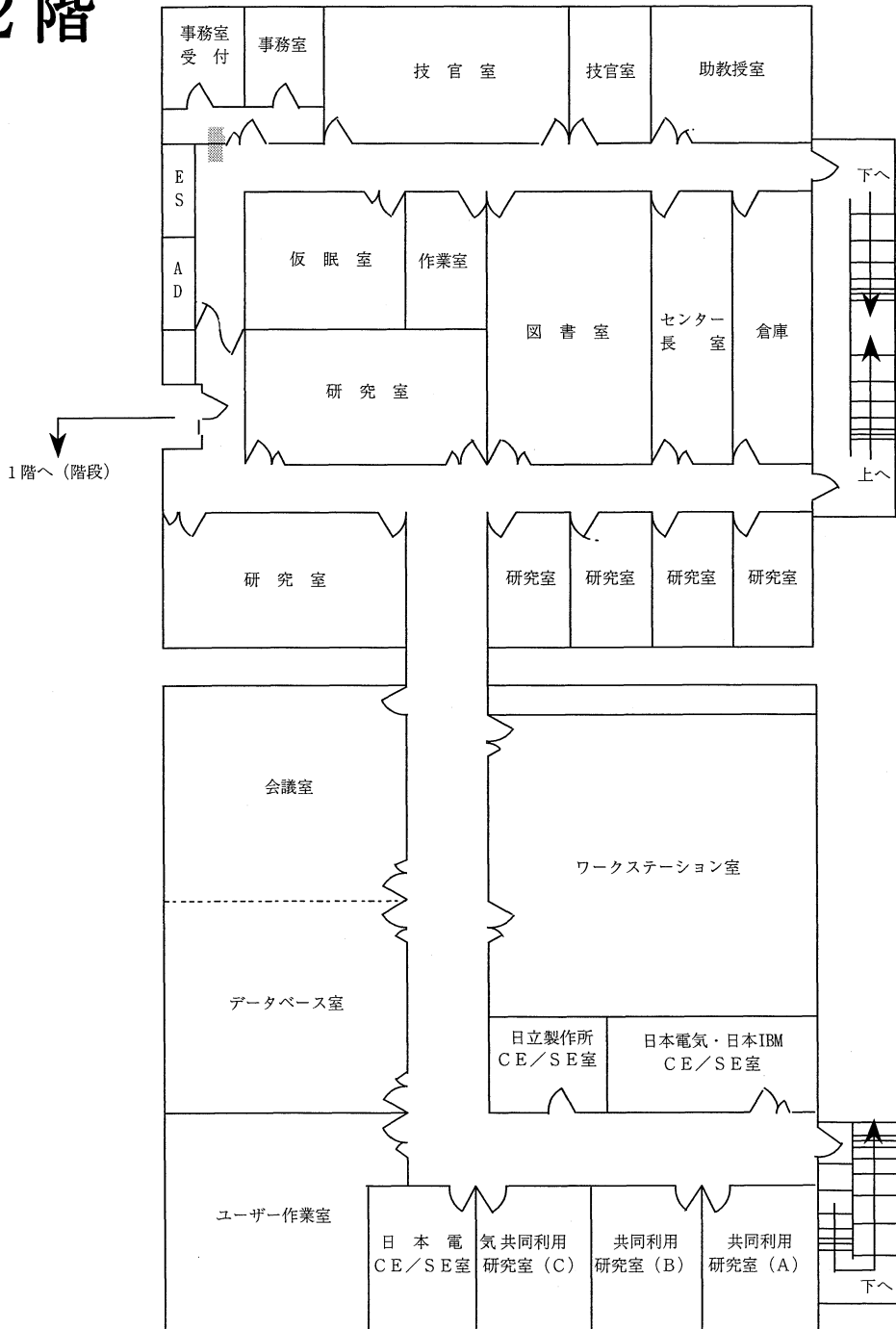
6.7 建物図

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 後藤

電話 052-954-3127

<SR2201 用マニュアルの購入申込先>

〒101-0054 東京都千代田区神田錦町 2-1-5(日立印刷ビル)

(株)日和 出版センタ

電話 03-5281-5054 FAX. 0120-210-454

受付時間 9:00 A.M.・5:30 P.M. 土曜、日曜、祝祭日は休

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 NOS(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) C-ANALYZER/SX 利用の手引き

SUPER-UX の C-ANALYZER/SX の使用方法について説明したものです。C-ANALYZER/SX はスーパーコンピュータ SX-3 システムの能力を最大限に引き出すための性能向上支援ツールであり、C/SX 言語に対応しています。

(15) 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。

(16) DBX 利用の手引

SUPER-UX の dbx の使用方法について説明したものです。dbx 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。

(17) 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。

(18) 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。

- (19) 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。
- (20) 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。
- (21) 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)の各サブルーチンの計算方法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 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(Advanced Scientific Library/SX)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。
- (23) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 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(Advanced Scientific Library/SX)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。
- (24) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 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(Advanced Scientific Library/SX)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。
- (25) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 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(Advanced Scientific Library/SX)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。
- (26) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 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(Advanced Scientific Library/SX)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。
- (27) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 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(Advanced Scientific Library/SX)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。
- (28) 科学技術計算ライブラリ C言語インターフェース ASLCINT/SX 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 C言語インターフェース ASLCINT/SX (Advanced Scientific Library C INTerface/SX)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。

- (29) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 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 C 言語インターフェース ASL/SX(Advanced Scientific Library C INterface/SX)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。
- (30) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 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 C 言語インターフェース ASLCINT/SX(Advanced Scientific Library C INterface/SX)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。
- (31) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 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 C 言語インターフェース ASLCINT/SX(Advanced Scientific Library C INterface/SX)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。
- (32) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 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 C 言語インターフェース ASLCINT/SX(Advanced Scientific Library C INterface/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。
- (33) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 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 C 言語インターフェース ASLCINT/SX(Advanced Scientific Library/SX)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.

(1) User's Guide

This book explains the components that make up SUPER-UX Operating System environment.

(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 ANSI X3.9-1978 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 features 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 in 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 user programs operating on SUPER-UX to be debugged by 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 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 User's Guide(Algorithms)

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

(19) Mathematical Library/SX 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/S2 User's Guide(Basic Functions Vol.1)

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

This manuals corresponding to this product consist 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 User's Guide(Basic Functions Vol.2)

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

This manuals corresponding to this product consist 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 User's Guide(Basic Functions Vol.3)

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

This manuals corresponding to this product consist 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 User's Guide(Basic Functions Vol.4)

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

This manuals corresponding to this product consist 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 User's Guide(Extended Function)

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

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

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

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

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

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

This manuals corresponding to this product consist 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)
- (26) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第 1 分冊)
- (27) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第 2 分冊)
- (28) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第 3 分冊)

- (29) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第4分冊)
- (30) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(高速機能編)
- (31) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 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) 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) FORTRAN90/SX 言語説明書
- (10) FORTRAN90/SX プログラミングの手引
- (11) FORTRAN90/SX 並列処理機能利用の手引
- (12) ANALYZER90/SX 利用の手引
- (13) C-ANALYZER-P/SX 利用の手引
- (14) DBX 利用 の手引
- (15) PDBX 利用 の手引
- (16) XDBX 利用 の手引
- (17) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(基本機能編 1/4)
- (18) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(基本機能編 2/4)
- (19) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(基本機能編 3/4)
- (20) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(基本機能編 4/4)
- (21) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(高速機能編)
- (22) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(並列処理機能編)
- (23) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第 1 分冊)
- (24) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第 2 分冊)
- (25) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第 3 分冊)
- (26) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第 4 分冊)
- (27) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(高速機能編)
- (28) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/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・インストレーション・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 インストレーション・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 インストレーション、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)

6.8.8 SR2201 用マニュアル

資料番号	マニュアル名
6A20-3-001	HI-UX/MPP 概説
6A20-3-010	HI-UX/MPP ユーザーズガイド
6A20-3-011(E)	HI-UX/MPP Command Reference
6A20-3-020	HI-UX/MPP アプリケーションプログラマーズガイド
6A20-3-021	HI-UX/MPP リモート DMA 転送使用の手引-C-
6A20-3-022	HI-UX/MPP 並列アプリケーションプログラマーズガイド-C-
6A20-3-023(E)	HI-UX/MPP Network Applications Programmer's Guide
6A20-3-024(E)	HI-UX/MPP Programmer's Reference
6A20-3-025	HI-UX/MPP 並列アプリケーションプログラマーズガイド-F-
6A20-3-030	HI-UX/MPP システム管理者ガイド
6A20-3-031	HI-UX/MPP 日本語使用ガイド
6A20-3-032(E)	HI-UX/MPP System and Network Administrator's Reference
6A20-3-026	HI-UX/MPP MPI PVM 使用の手引
8X20-3-235	プログラムプロダクト OSCNQS NQS システム管理者ガイド
8X20-3-230	プログラムプロダクト OSCNQS NQS ユーザーズガイド
8X20-3-506	プログラムプロダクト NFS/MPP ガイド
6A20-3-100	FDDI ドライバ
8X20-3-215	HI-UX/MPP OSCXWN X Window System ユーザーズガイド(X11R5)
8X20-3-216	HI-UX/MPP OSCXWN Xlib プログラマーズガイド(X11R5)
8X20-3-217	HI-UX/MPP OSCXWN X ツールキットイントリンシックスプログラマーズガイド(X11R5)
8X20-3-218	HI-UX/MPP OSCXWN Xlib リファレンス(X11R5)
8X20-3-219	HI-UX/MPP OSCXWN X ツールキットイントリンシックスリファレンス(X11R5)
8X20-3-206	HI-UX/MPP OSCMTF 日立 Motif ユーザーズガイド(R1.2)
8X20-3-207	HI-UX/MPP OSCMTF 日立 Motif プログラマーズガイド(R1.2)
8X20-3-208	HI-UX/MPP OSCMTF 日立 Motif スタイルガイド(R1.2)
8X20-3-209	HI-UX/MPP OSCMTF 日立 Motif プログラマーズリファレンス(R1.2)
6A20-3-200	プログラムプロダクト OSCBGT 運用ガイド
3000-3-150	パフォーマンスモニタ for SR2201
6A20-3-301	最適化 C 言語
6A20-3-302	最適化 C 使用の手引
6A20-3-303	最適化 C++ 使用の手引
6A20-3-313	HI-UX/MPP 最適化 FORTRAN77 言語
6A20-3-314	HI-UX/MPP 最適化 FORTRAN77 使用の手引
6A20-3-315	HI-UX/MPP リモート DMA 転送 使用の手引 -FORTRAN77-

6A20-3-310	HI-UX/MPP 最適化 FORTRAN90 言語
6A20-3-311	HI-UX/MPP 最適化 FORTRAN90 使用の手引
6A20-3-312	HI-UX/MPP リモート DMA 転送 使用の手引 -FORTRAN-
6A20-3-320	HI-UX/MPP Parallel FORTRAN 言語
6A20-3-321	HI-UX/MPP Parallel FORTRAN 使用の手引
6A20-3-400	PARALLELWARE ユーザーズガイド -FORTRAN-
6A20-3-401	PARALLELWARE リファレンス -FORTRAN-
6A20-3-402	PARALLELWARE ユーザーズガイド -C-
6A20-3-403	PARALLELWARE リファレンス -C-
6A20-3-404	並列デバッグ ndb 使用の手引き
8X20-7-550	HI-UX/MPP 統合構造解析システム ISAS 機能編 -第一分冊- 機能
8X20-7-551	HI-UX/MPP 統合構造解析システム ISAS 機能編 -第二分冊- 入力データ
8X20-7-552	HI-UX/MPP 統合構造解析システム ISAS 操作編
8X20-7-553	HI-UX/MPP 統合構造解析システム ISAS 例題編
6A20-7-610	HI-UX/MPP 数値計算副プログラムライブラリ MSL2 機能編 -第一分冊- 行列計算
6A20-7-611	HI-UX/MPP 数値計算副プログラムライブラリ MSL2 機能編 -第二分冊- 関数計算
6A20-7-612	HI-UX/MPP 数値計算副プログラムライブラリ MSL2 機能編 -第三分冊- 統計計算
6A20-7-613	HI-UX/MPP 数値計算副プログラムライブラリ MSL2 操作編
6A20-7-600	HI-UX/MPP 行列計算副プログラムライブラリ MATRIX/MPP
6A20-7-601	HI-UX/MPP 行列計算副プログラムライブラリ スカイライン法 MATRIX/MPP/SSS

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	M-180	M-200H	M-200H	M-200H	同57年度
	2台	2台	M-180	M-180	2台	
運 転 方 式			200H 無人	疎結合	疎結合	
	3カ月 有人	9月から無人	180 有人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	63	176	192	183	198	199
利 用 者 数						
機 構 内 ^a	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	929	4,666	11,033	10,230	11,938	13,053
許 可	816	3,171	7,427	8,306	10,141	10,091
総使用CPU時間 ^c (時間)	509	2,405	5,405	6,320	8,205	8,489
ジョブ処理件数 ^c	41,521	155,980	183,840	214,847	239,771	236,519
ライブラリプログラム 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 ^d	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)	M-680H	M-680H	M-680H	同63年度
		同57年度	S-8210/10	(~1月)	S-820/80	
		(1月~)	疎結合	S-810/10		
		M-680H		(2月~)		
		S-810/10		S-820/80		
運 転 方 式				疎結合	疎結合	
プロジェクト数	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
利 用 者 数						
機 構 内 ^a	207	226	234	213	231	239
機 構 外	110	130	141	143	137	146
合 計	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) ^b	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b
申 請	14,799	15,536	33,832/8,458*	9,880	12,439	14,694
許 可	10,768	12,080	28,184/7,046*	7,978	10,418	12,347
総使用CPU時間 ^c (時間)	8,508	12,770	20,092/5,023e*	6,624	7,872	8,300
ジョブ処理件数 ^c	226,727	274,431	289,915	278,956	278,104	253,418
ライブラリプログラム 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 ^d	202	206	237	223	211	218

	平成2年度	平成3年度	平成4年度	平成5年度	平成6年度	平成7年度
計算機システム	同63年度	同63年度	同63年度	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
プロジェクト数	256	272	271	225	222	210
利 用 者 数						
機 構 内 ^a	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) ^b	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b	(HSP基準) ^b
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 ^c (時間)	11,975	11,874	12,491	16,306	24,781	156,076
ジョブ処理件数 ^c	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 ^d	248	229	282	267	306	275

	平成8年度	平成9年度	平成10年度
計算機システム	SX-3/34R HSP SP2 HPC(9月～)	SX-3/34R HSP SP2 HPC	SX-3/34R HSP SP2 HPC SR2201(11月～) Origin2000 (10月～)
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	201	188	174
利 用 者 数			
機 構 内 ^a	139	126	138
機 構 外	574	609	566
合 計	713	735	704
稼働時間(時間)	(SX-3/34R) 8,425 (HSP) 8,431 (SP2) 8,336 (HPC) 4,872	(SX-3/34R) 8,494 (HSP) 8,513 (SP2) 8,515 (HPC) 8,501	(SX-3/34R) 8,579 (HSP) 8,587 (SP2) 8,574 (HPC) 8,590 (SR2201) 3,561 (Origin) 3,570
CPU時間利用申請(時間)	(HSP基準) ^b	(HSP基準) ^b	(HSP基準) ^b
申 請	58,425	73,910	76,804
許 可	51,499	58,650	67,159
総使用CPU時間 ^c (時間)	207,790	262,365	273,575
ジョブ処理件数 ^c	70,308	51,738	45,173
ライブラリプログラム 新規登録数	15	3	13
データベース新規登録数	0	0	0
センター使用論文数 ^d	279	331	347

- a: 機構内利用者にはアイドル課題のための重複を含めない。
b: 申請および使用の詳細については5.1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。

5. 将来計画及び運営方針

5-1 電子計算機センター将来計画

5-1-1 現有計算機の構成と利用状況

平成11年1月現在の利用者の総計は約700名、研究課題は174件である。電子計算機センターの計算機システムは、平成6年1月からスーパーコンピュータ NEC SX-3 が、平成7年1月より並列計算機 IBM SP と汎用高速計算機 NEC HSP がそれぞれ導入された。この時から、オペレーティングシステム (OS) も UNIX に統一された。また汎用演算性能および並列演算性能を増強する目的で、平成8年9月より NEC HPC 計算機、平成9年10月より日立製作所 SR2201、平成10年9月よりシリコングラフィックス社 Origin2000 を導入し公開運用を行っている。平成11年2月より、高速汎用計算機の HSP は NEC SX-5 に更新され、3月から試験運用を開始、4月より本格的な課金運用を行う予定である。

SX-3 は3個のベクトル演算器を持ち最高性能は19.2ギガフロップスである。また、2ギガバイトの主記憶容量とジョブの一時作業領域として高速に読み書きが可能な RAID ディスクを約60ギガバイト持つ。現在では大規模な配置間相互作用(CI)計算や分子動力学計算など、ベクトル化率が高くしかも大容量の主記憶と一時記憶装置を必要とする大型ジョブを中心に利用されている。

分散メモリ型並列計算機 SP2 は、平均100メガフロップスの性能をもつ48個の演算装置 (CPU ノード) から構成されており、各CPUノードは40メガバイト/秒以上の高速度で互いに通信を行うことが出来る高速ネットワークスイッチにより結合されており、メッセージパッシング型の並列計算プログラムの実行を効率よく行うことが出来る。SP2 は現在約3分の2のCPUノードは主に逐次実行型のジョブによって利用され、残りの3分の1は並列計算ジョブ用に利用されている。SP2 の導入後約4年が経過し現在では並列ジョブ処理環境を利用するユーザの数が徐々に増え、また利用法がよりいっそう高度化する傾向が見られる。新汎用システム SX5 の利用度の向上に伴い、並列ジョブの割合を増し、利用者の並列プログラムの開発・利用を促進する。

新汎用高速演算システム SX-5 は、ピーク性能が32ギガフロップス以上の高性能ベクトル計算機であり、8ギガバイトの主記憶装置と約150ギガバイトの RAID ディスクをもつ。この計算機は、SP2 の逐次専用ノードでは実行が困難な大容量メモリと一時作業ディスクを必要とするジョブの実行に利用され、その意味でスーパーコンピュータと並列コンピュータそれぞれの役割を補間する重要な役目を果たすことが期待されている。NEC HPC は1ギガバイトの主記憶と2ギガバイトの拡張記憶装置を有し、中規模なベクトルジョブの処理に利用されている。

分子研計算機センターのCPUサーバーとしての能力は平成6年1月にはそれまでのおよそ9倍、平成7年1月には平成6年1月以前のおよそ14倍になったが、年間平均でもその全CPU能力の約70%が利用されており、常時数十件の待ちジョブが待機している状況になっている。当センターの計算機は、365日24時間運転を行っているため、実稼働率が7割を超えた場合には、平日の日中には常に待ちジョブがある状況となる。特に学会前の混雑時には投入したジョブが実行されるまでの待ち時間が数日に及ぶ状況も発生している。平成11年4月から本格稼働を予定している汎用高速演算システム SX-5 のCPU能力により、一時的とはいえ、このような事態が緩和されることが期待される。

5-1-2 平成11年度の計算機システム更新

平成9年度、文部省に概算要求をしていたスーパーコンピュータ借料の増額によるCPU能力の増強は認められなかった。また導入一時経費もつかないという厳しい結果となったため、外部委員を含む「スーパーコンピュータ検討小委員会」の結論に従い、平成11年1月に機種を更新することを断念し、更新を1年延期することとした。

スーパーコンピュータ検討小委員会では、スーパーコンピュータの更新を1年延期したことから、汎用システムの機種更新を1年早めて、平成11（1999）年2月に行うことが望まれるとの結論を得た。これを受けて、岡崎機構管理局及び文部省と協議の結果、現有の汎用高速演算システムである IBM SP2 と NEC HSP を平成11年2月に新たな機種に更新するための準備を進め、最高演算性能が5 ギガフロップスを上回る機種の導入を検討し、スーパーコンピュータに準ずる調達手続きを採用することとなった。平成10年5月1日に最終仕様書が完成し、6月22日入札、7月7日開札が行われ上記の SX-5 に決定した。現在は、公開に向けて汎用高速演算システムの最終調整作業を行うと同時に、更新を1年延期したスーパーコンピュータシステムの調達手続きが進行中である。

(1)スーパーコンピュータシステムに要求される性能

スーパーコンピュータの更新目的の第一は、分子科学分野において大学等では実行が困難である大規模なベクトル並列計算を行う計算環境を整備することにある。一方、現状のように投入したジョブが実行されるまでの待ち時間が数日に及ぶ状況を早急に改善しなければならないため、中小規模のシリアルジョブの実行スループットを向上させる配慮も重要である。このように、ある意味では相反する更新要求を、レンタル期間中の運用変更によって適応可能とする計算機構成を選択することが重要である。すなわち、高い単体演算性能を持つ計算ノードをできる限り多数導入し、CPU リソースの分割運用によって、大規模ベクトル並列計算の実行と中小規模ベクトル計算の両方が干渉することなく実行できることが重要である。これを実現するためには、システム全体として大容量の主記憶と一時作業ディスクが必要である。

具体的には、現有スーパーコンピュータの(SX3/34R)単体 CPU 能力を上回る 8 ギガフロップス程度の計算ノード 48 以上が必要であり、16 ノードと 32 ノードのようにリソースを分割運用する。主記憶は 128 ギガバイト以上、作業ディスクは 1500 ギガバイト以上必要である。平成 8 年に発足した次期スーパーコンピュータ検討委員会では単体 CPU 性能を重視するか CPU 台数（並列計算の規模）を重視するかで活発な討論がおこなわれた。並列度の高いプログラムへ比較的容易に移行が可能な分子動力学（MD）分野の研究者からは CPU 台数を重視すべきとの意見がだされ、一方、大規模な分子軌道（MO）計算や配置間相互作用計算などに代表される並列化が困難な電子状態分野の研究者からは単体のベクトル演算性能と大容量の主記憶および拡張記憶装置の重要性が示された。上記の CPU リソースの分割運用は、大規模ジョブの実行と中小規模ジョブのスループットを運用によりバランスをとってゆく観点としてだけでなく、MD 計算と MO 計算分野の要求に柔軟に答えて行くための方策としても重要である。

又、CPU リソースの利用状況によっては、超大型計算を奨励する新しい運用方法の導入も検討する必要がある。従来の課金制度とは違う形で、研究課題を募集し、従来の CPU 時間やメモリー利用制限の枠を大幅に越えた計算機利用を可能にして、優れた研究成果を引き出すような施策の検討である。このように次期スーパーコンピュータシステムは、その利用目的が汎用高速演算システムと明確にことなり、超大規模計算を実行できる環境を常に意識した運用体制が必要である。

(2)センターの運用方針

前年度の報告にもあるように、計算機センターの利用者は大別すると 4 つに分類される。

グループ A: 分子研理論部門（計算センター含む）。

グループ B: 所外の大きな理論グループ。

グループ C: 所外の小さな（一人ないし三人程度の若い）理論グループ。

グループ D: 実験を主体とする研究グループ。

それぞれのグループで計算機を利用する分野・形態や、必要な CPU 時間に相違があり、どのグループを重点的にサポートして行くかの議論には慎重を要す。最近では、高速ワークステーションの普及によって、研究所内外のいくつかの研究室単位で強力な計算環境を持つことも一部では可能になってきている。そのような研究グループがさらに強力な演算性能を必要とする研究プロジェクトで成果を上げるためには、グループ A と B に一層力点をおいた運営方針を取ることが望ましい。一方、グループ C と D の研究者にとって、本センターは研究遂行上不可欠なものであることも事実であり、今後とも適切な配慮が必要である。特にここ 1～2 年は、グループ D の実験を主体とする研究グループの利用が急増しており、このような研究室において高性能のワークステーションを自前で運用管理してゆくための人的・技術的負担を回避する上でも、本センターの計算機資源は重要である。

(3)世界のスーパーコンピュータの動向とセンターの立場

現在の計算機は様々な観点から分類することができる。たとえば、単体 CPU 性能の観点からは、1 CPU のベクトル性能が 5 ギガフロップス以上の高価な計算機、4 ギガフロップス以下のもの、そしてワークステーションに代表されるベクトル演算器を持たない安価なものという分け方ができる。また、並列度の観点から見ると、並列度の高い（3 桁以上の）超並列計算機、並列度の少ないもの、並列計算ができないものという分け方ができる。また CPU とメモリの構成の違いからは、全ての CPU がシステム全体のメモリを共有する「共有メモリ型」と各 CPU がそれぞれ局所メモリを持つ「分散メモリ型」、そして分散メモリのハードウェア構成を持ちながら基本ソフトウェアにより論理的に共有メモリ計算機として利用できる「分散共有メモリ型」に分類することができる。さらに、並列計算機では CPU 間を結ぶ通信経路のトポロジーと通信性能の違いによって幾つかの形態がある。

欧米では、計算機アーキテクチャの研究を専門とする分野はもちろんのこと、科学計算分野においても単体 CPU 性能の向上に頼る時代は終わり、基本ソフトウェアと高速通信技術における並列計算技術の発展に将来の大規模計算環境を委ねる機運が高まっている。ここで並列化の基本ソフトウェア技術として分散共有メモリ計算機におけるマルチスレッドや分散メモリ計算機のメッセージパッシングが挙げられる。たとえば米国では 1996 年より Accelerated Strategic Computing Initiative (ASCI) を国家プロジェクトとして提案し、コンピュータメーカーと国立研究所が共同で大規模な超並列計算機の開発を推進している。我が国でも欧米の計算機動向に追従し、かつて単体 CPU 性能で世界 1、2 位を争っていたスーパーコンピュータメーカーも、超並列計算機のための開発に方針転換している。このような状況の中、電子計算機センターは将来にわたり最先端の大規模計算環境を分子科学者に提供することを最重要と考え、計算機アーキテクチャの動向に注視する努力を怠ってはならない。一方、現状では並列コンパイラや並列プログラム開発のための支援ツールが未成熟な状況であることもまた事実であり、分子科学計算分野はあくまで高速計算機を研究道具として利用し続ける 1 研究分野であり、安易に並列計算機一辺倒の運営に踏み切ることも慎重にしなければならない。

5-1-3 分子研所内及び岡崎国立共同研究機構におけるセンターの役割

(1)分子研における計算分子科学分野の重要性とセンターの役割

今日、理論化学的手法の発展と計算機の進歩によって、従来では不可能と考えられていたような複雑な系を不必要なモデル化を行わずそのまま研究対象として扱うことができるようになってきている。分子科学における計算科学は、単に実験の解析にとどまらず実験の先導的な役割を果たしており、90 年代の後半に至り計算的手法の重要性は質的転換を遂げたと言える。21 世紀において計算分子科学は一層の発展が期待されている。特に、分子研の理論部門は平成

7年度から1部門が増設され、計算機センターのグループを加えると専任の研究グループは7になった。各研究グループは独自にワークステーションを持ちプログラム開発や応用計算を進めているが、同時に計算機センターの計算機利用の中で大口利用者でもある。計算機センターは、研究所内の理論グループに卓越した計算環境を提供していく必要がある。そのためには、所外には公開しない特別な運用を行う計算機の導入も検討していく必要がある。その一環として、理論研究系と計算機センターのスタッフが中心となって、たとえば文部省研究基盤重点設備費に「計算分子科学の展開」を要求していくなどの努力も必要である。また平成10年度より、学術振興会および科学技術振興事業団の外部資金によって所内理論グループが導入する計算機の維持管理業務を、電子計算機センターで行うことも試行されている。これは、計算機センターの計算機管理技術と電源・冷却設備等の設置環境を考慮した方策の一つであり、今後このような所内グループ専用計算機の導入がますます増えることが予想されることから、業務分担及び維持費等についての制度化が必要である。

1986年のベクトル型スーパーコンピュータのセンターへの導入は、分子動力学計算と反応動力学計算分野の研究者に大きな刺激を与えた。この様に将来の超並列スーパーコンピュータの導入が、新たな分子科学計算分野の進展を促す可能性も十分にあり、前述のように超並列時代を見据えた方法論の開拓が重要である。計算機のハード・ソフトの両面の進歩は速く、またその最新の成果を研究に取り入れることによって、質的な変化をもたらす研究を進めることが可能になる。計算機センターの現スタッフはあくまで計算機利用者の一員として、計算機アーキテクチャの動向や並列ソフトウェアの進展状況を冷静に判断し、プログラム開発やアルゴリズム理論の非専門家である分子科学者に適切な計算環境をバランスよく提供するための人員構成をとっている。一方、計算機の発展に密着しベクトル並列型、超並列及び分散共有メモリの並列計算機などの新しいアーキテクチャの計算機の能力をフルに活用するためのスタッフも重要であり、分子科学計算アルゴリズムの開拓や、計算機アーキテクチャの特徴を生かした分子シミュレーションプログラムの開発研究を行うことのできる研究グループが、計算機センター内に新たに1グループ(助教授1、助手1、技官1)は必要である。また研究要素として大規模なソフトウェアの構築を含む研究開発テーマなど、多くの若手研究者を必要とする分野(この分野は欧米に依然立ち後れていると言わざるを得ない)では、研究系教官と共同でプロジェクト研究課題を提案し、大学等では困難な課題にも挑戦してゆく必要がある。

(2)岡崎機構における分子科学境界分野の重要性とセンターの役割

スーパーコンピュータを中心とする本センターの計算機システムは世界的な観点から見ても、分子の電子構造と反応性・機能、クラスター・液体・固体表面など多くの分子科学分野で多大な研究成果を生み出してきた。計算機の演算速度と記憶容量の向上は、研究対象となる物質範囲を広げることが出来、さらに新分野の開拓に向かうことが出来る。例えば、分子科学研究所理論研究系の二つの研究グループと生理学研究所分子生理研究系のグループが中心となり、大規模分子動力学計算及びモンテカルロ計算によるタンパク質の3次元構造解析が平成10年度学術振興会未来開拓事業の新規テーマとして開始され、研究業績を上げ始めている。このように分子科学と生理学の境界領域における計算シミュレーション分野では、近年目覚ましい発展があり、今後、環境ホルモン、生理活性物質の構造・機能の解析などへの応用が切望されており、分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所の学際研究領域である生命環境科学研究では、分子レベルでの生体物質のシミュレーションはもちろん、神経系、脳研究といった生理科学の領域までも計算対象とした高性能計算機システムの共同利用が始まりつつある。この様に計算分野自身が今までの少数多体系としての分子科学から分子科学と生命および環境科学の境界領域に拡大するなかで、今後、本センターの計算機システムの役割は今まで以上に重要となるため、近い将来において他2研究所の計算機室と協力し、岡崎機構の計算機センターとしての位置づけを真剣に議論する必要がある。

5-1-4 国際分子科学計算センターとして

分子研理論部門における外国人長期滞在研究者の割合は高い。インターネットを通じての計算機利用が可能になった今日、これら長期滞在者は帰国後も共同研究が継続されるようになってきている。このようなインターネットを通じた国際共同研究も進めていく必要がある。また、現在分子研が概算要求している「多国間国際協力事業」の一つとしてプロジェクト方式の研究課題を新たに設定することが可能であろう。

アジア諸国を中心に、計算環境が十分備わっていないが潜在的に優秀な分子科学研究者を持つ国々の研究者に対し、プロジェクト申請の道を開き、国際的な計算機センターへ飛躍させる事は今後の検討課題である。この制度の実現のためには、計算環境の一層の充実が何より前提であり、さらに課題審査制度の確立、専任の助手（出来る限り外国人の）の採用など多くの課題を解決しなければならない。

5-1-5 センターライブラリ開発の研究プロジェクト化

センターライブラリ開発制度を見直し、件数を絞って集中的に開発支援できる形にしなければならない。外部研究者に開発プロジェクトを公募すると同時に、予算的措置を伴ったプロジェクト開発制度を発足させることも検討する必要がある。

5-1-6 QCLDBの事業化

センターのスタッフが過去に積極的に参加し、量子化学者のみならず広く化学・物理学研究者から高い評価を受けているQCLDB（Quantum Chemistry Literature Data Base）の開発に対し今後も予算的にはもちろんのこと、センターの業務として支援する体制をとり続ける必要がある。現在、米国のいくつかの国立研究機関では、WWW（World Wide Web）を通じてその機関が作成したデータベースを全世界に公開している。このような形の全世界の学会に対する寄与は、特に生物学や素粒子・原子核の分野などではその研究機関の一つの「業績」として高く評価されている。

我が国ではデータベース作成による世界の学会への寄与は、QCLDBを除いて皆無であると言われているが、平成9年夏からはQCLDBも、WWWを通じて登録制の公開を試験的に開始した。この公開に対する世界中の研究者からの反響は著しく高い。この公開をハード・ソフトの両面で長期的に安定運用をするためには、正式に分子科学研究所の事業の一つとする必要がある。1)データベース作成・管理・運用のためのハードウェア整備、2)データベース作成のための謝金と事務費の確保のために早急に予算的措置をとる必要があり、平成12年度概算要求を行う予定である。もちろんQCLDBを開発・作成しているQCDB（Quantum Chemistry Data Base）研究会と緊密に連携をとってこの事業は進めなければならない。

5-1-7 情報ネットワークと計算機センター

平成7年度末に完成した岡崎国立共同研究機構の超高速ATMネットワークシステム（新ORIONと呼ぶ）によって、分子研のスタッフ・学生の電子メール・インターネットの利用は著しく向上し、ほとんどの研究者にとって情報収集と発信のための不可欠な手段になっている。計算機センターは機構情報ネットワークの構築と運用に当初はたずさわらなかったが、平成7年度に情報ネットワークの担当技官が採用され、センターに配属されたのを契機に、センターは分子研内のネットワーク業務に関与するようになった。計算機センターの主要目的は、分子科学における計算科学の支援であり、情報ネットワーク、特に電子メールなど情報交換を支援する業務はこれまで軽視されてきた。これからも、このような業務は主要業務とはならないが、上述のように、研究所内はもとより国内外との高速情報交換網は、

計算科学を推進する上に非常に重要な基盤設備であり、また、情報ネットワークを企画・管理・維持するのに必要な知識や技術は計算機センターのスタッフに要求されている知識や技術と多くの共通部分があるので、センターは、分子研内はもとより、岡崎国立共同研究機構内のネットワークの企画・運用に関与する必要がある。

センターの計算機を国内外の研究機関から高速かつ安定に利用するために、情報交換速度を主要大学間と同じ速度に常に維持していく必要がある。そのための一つ的手段として計算機センターの予算の中で学術情報センターへの専用回線を契約する可能性も追求する必要がある。