

I 部

目 次

1.	巻頭言	計算科学研究センター長 平田文男	1
2.	スーパーコンピュータワークショップの活動		3
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		12
3.3	利用課金点数		14
4.	一般報告		16
4.1	ライブラリプログラムの収集と開発		16
4.2	データベース開発状況		21
5.	平成11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	岡崎国立共同研究機構 計算科学研究センター規則		28
6.2	岡崎国立共同研究機構 計算科学研究センター運営委員会規則		29
6.3	計算科学研究センター運営委員会委員		30
6.4	計算科学研究センター職員		31
6.5	応用プログラム相談員		31
6.6	利用者数とCPU時間の推移		32
6.7	建物図		34
6.8	マニュアル一覧		36
7.	現状と将来構想(分子研リポート'99より転載)		51

巻頭言

計算科学研究センター長 平田文男

分子科学研究所理論研究系の平田です。この4月から岩田前センター長の後を受けて計算科学研究センター長を仰せつかりました。したがって、この報告は「報告」というより、むしろ新センター長としての「所信表明」のつもりで書いています。

まず初めに、岩田前センター長に「長い間ご苦勞様でした」と申し上げたいと思います。岩田先生はすでに慶應大学に確固とした研究室を確立されていたにも関わらず、日本における理論化学の指導者としての責任から分子研に赴任され、理論化学をリードする数々の業績を挙げられたのみならず、特に、分子科学者の共同利用施設としての電子計算機センターの運営・発展に心血を注がれました。この4月から稼動を始めたセンターの強力なマシンは岩田先生のような努力の結晶であり、分子科学の発展にとって極めて大きな武器になるだけでなく、岡崎機構「計算科学研究センター」として生物関連の分野を含む新たな飛躍にとっても、その重要なステップとなるものであります。ここに改めて、岩田先生に対する感謝を意を表したいと思います。

さて、本報告でまず最初にお知らせしなければならないことは分子科学研究所「電子計算機センター」がこの四月から岡崎国立共同研究機構の「計算科学研究センター」に組織が変わったことです。現在、量子化学や分子シミュレーションなど分子科学における理論的手法は非常に高度に発展し、そのターゲットをより複雑な化学現象に向けつつあります。特に、生命現象に関わりをもつ蛋白質やDNAなどの生体分子の構造や機能を分子レベルで解明する手段として、これまで分子科学において開発されてきた諸々の理論的手法が威力を発揮する現実的な可能性が出てきています。また、一方、生物関連分野においては「人ゲノム計画」に象徴されるような巨大プロジェクトを中心に分子レベルの膨大なデータが蓄積されてきており、それを解析して如何に有効な知見を引き出すかという問題は焦眉の課題になりつつあります。岡崎は同じ機構内にこのような二つの流れを代表する三つの研究所（分子研、基生研、生理研）を合わせもつ国際的にも極めてまれな研究所群であり、これらの研究所間の共同は文字どおり計り知れない成果をもたらす可能性があります。このような認識から、岡崎機構においてこの四月から新たに「統合バイオサイエンスセンター」が発足しました。計算機センターの「機構化」もこのような動きと連動して行われたものであり、生理研からは「動物実験センター」が、また、基生研からは「アイソトープ実験センター」が機構化されました。「計算科学研究センター」の運営に関わる詳細については、今後、運営委員会を中心に煮詰めていくこととなりますが、いずれにしても、センターが岡崎機構の特色を活かして分子科学と生物関連分野の「境界領域」に新たな展開を開始したことをご報告します。

現在、検討を進めているもうひとつの大事な問題について述べさせていただきます。それは計算機の運用の問題です。実は、本年1月25日に「分子科学研究所電子計算機センター将来構想検討委員会」なるワークショップが岩田前

センター長、茅分子研所長、センター運営委員、全国大学の大口利用者、青柳助教授を始めとするセンタースタッフなどの参加のもとに開催され、計算機センターの将来構想に関して活発な議論が行われました。（この会議の詳しい内容については「分子研りポート’99」に掲載されています。）

「分子研電算センター」はこれまで全国700人におよぶ分子科学者に対して文字どおり「共同利用施設」してサービスを提供してきた実績をもっています。これは、他の研究機関の「大型電算機センター」がその利用者の大部分を事実上その機関内に閉じていることを思うとき、「分子研電算機センター」が誇るべき偉大な実績であり、今後も「計算科学研究センター」が継承すべき特色であります。しかし、一方、ワークステーションや高性能のパーソナルコンピュータの普及に伴って、これまで「計算機センター」が果たしてきた役割の一部が変更を迫られていることも確かであります。これまで計算機センターを利用して行われていた計算のかなりの部分がワークステーションやパソコンで簡便に行なえるようになり、「煩わしい手続きをして大型センターを利用するまでもない」と考えるユーザーも増えています。他方、国際的には米国を中心に超並列マシンの性能を極限まで使って初めて可能になるような計算が報告されつつあり、このままでは我が国の理論化学が国際的に遅れをとってしまうという危機感も生まれています。すなわち、一方では「できるだけ多くの研究者へのサービスの提供を維持」しながら、他方では「世界のピークを目指すような大規模計算を可能にする」という「二兎を追う」ことを要求されているのであります。このような要請に応えるため現在検討を進めている運用形態は、計算資源の利用枠を「一般利用」と「特別利用」に2本化することです。

「一般利用」はこれまでとほぼ同様であり、同様の手続きで申請を行います。他方、「特別利用」は毎年少数の大規模計算プロジェクトに供するものであり、特別の申請手続きと審査を経て許可されるものです。全計算機資源中の特別利用の割合、審査の基準、審査の方法、など詳細については、センターニュースやセンターホームページを通じてお知らせしますが、いずれにしても、「特別利用」は他の多くの利用者の「犠牲」の上に行うわけですから、その申請者の責任の自覚が不可欠であり、審査もそのような高い基準で行われる必要があります。この件について、できるだけ多くの利用者のご意見を伺えれば幸いです。

2. スーパーコンピュータワークショップの活動

平成12年3月14日(火)、15日(水)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。新スーパーコンピュータについての講演の他、センターのマシンを使って得られた成果などの講演を行った。103名の参加者があり、活発な議論が展開された。

○ 第15回公開講演プログラム

タイトル：「次期スーパーコンピュータの活用」
場 所： 分子科学研究所電子計算機センター2階大会議室
日 時： 平成12年3月14日(火)、15日(水)

3月14日

13:00-15:00	「スーパーコンピュータ講習会Ⅰ ～VPP5000について～」 (富士通)
15:00-15:15	coffee break
15:15-16:45	「スーパーコンピュータ講習会Ⅱ ～SGI2800について～」 (日本SGI)
16:45-17:00	coffee break
17:00-17:30	「新スーパーコンピュータの運用について」 青柳 睦(分子研)
17:30-18:00	「次期スーパーコンピュータに望むこと:運用面の改革を！」 西川武志(分子研)
18:00-18:30	「センター長報告最終版」 岩田末廣(分子研)
18:45-20:30	懇 親 会 (職員会館2階会議室)

3月15日

- 9:00- 9:30 「異機種並列計算機間通信ライブラリ Stampi と応用事例」
小出洋、望月祐志(原研、科技団)
- 9:30-10:00 「遷移状態波束計算による量子論的反應確率の決定」
南部伸孝(分子研)
- 10:00-10:30 「量子力学計算のための基底系及び方法論の開発」
菅原道彦(慶応大)
- 10:30-11:00 「スピン禁制前解離の量子ダイナミクスと統計論」
中村恒夫(京大)
- 11:00-11:30 「クラスター内のプロトン移動反応」
麻田俊雄(大阪府大)
- 11:30-13:00 昼 食
- 13:00-13:30 「基底・励起状態における重原子分子の相対論的効果」
中嶋隆人(東大院)
- 13:30-14:00 「分子シミュレーションによる蛋白質折れ畳み機構」
杉田有治(分子研)
- 14:00-14:30 「Si(100)表面上の Ga 細線による磁性」
岡田 晋(筑波大)

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 SX-5)、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。

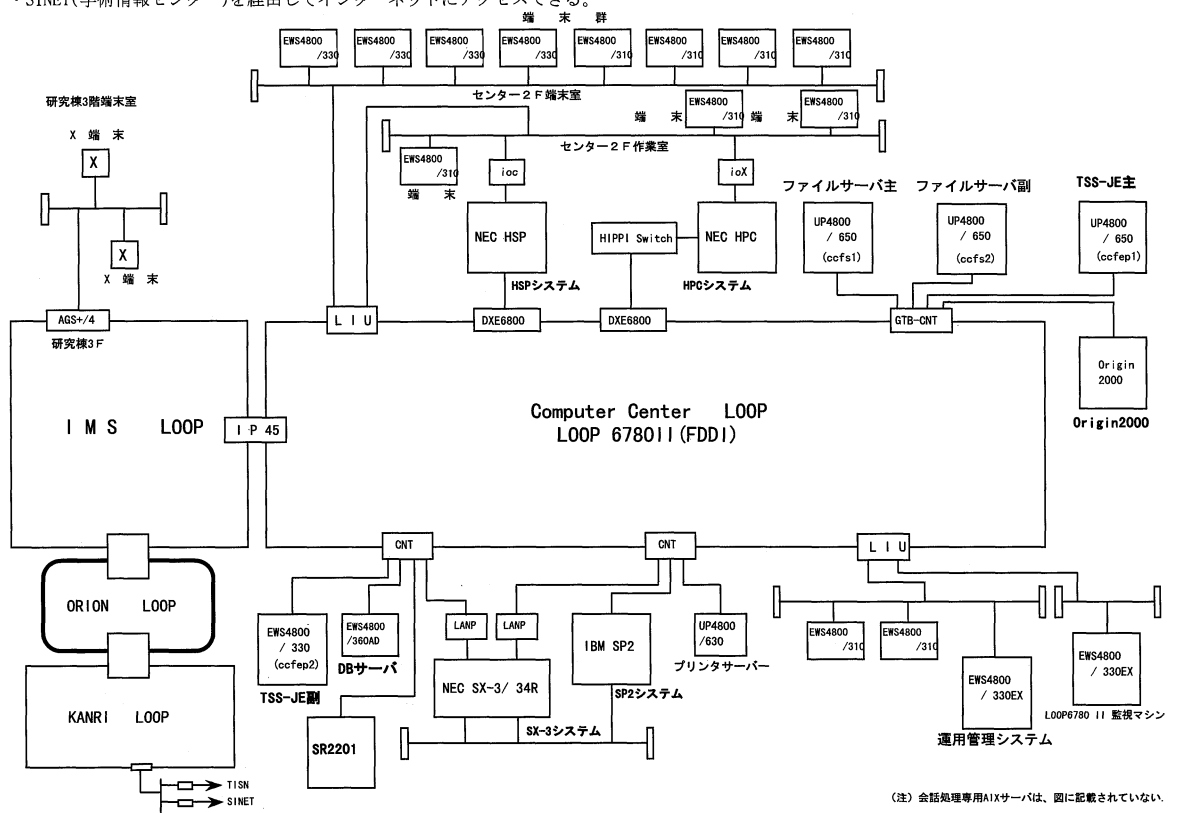


図 3.1 システム全体構成概略図

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。
- ・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。

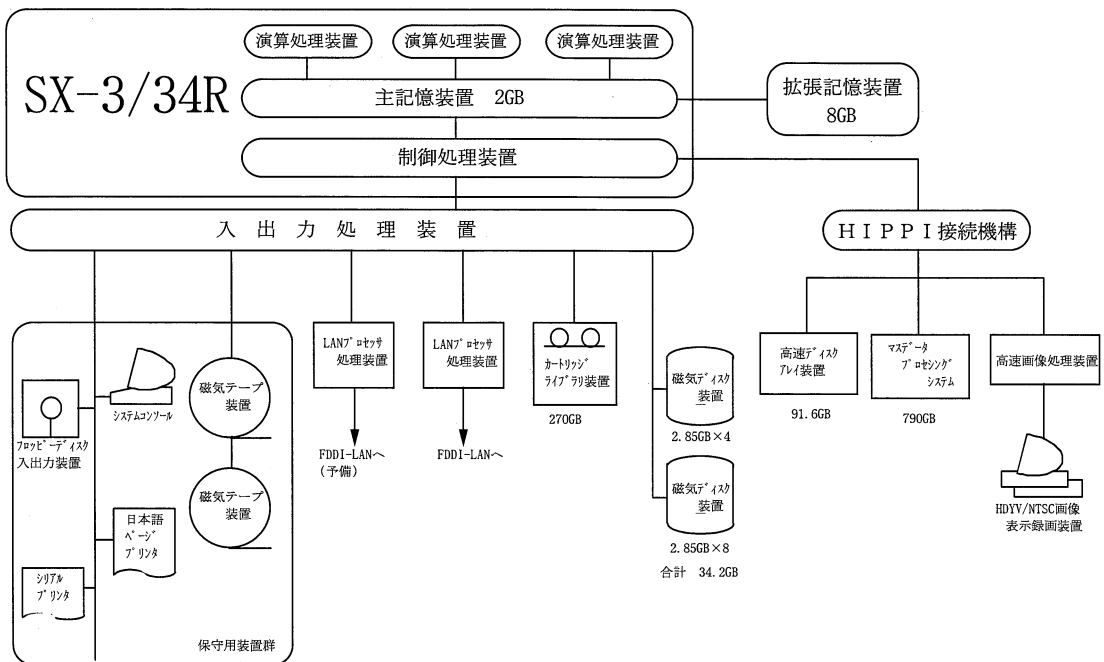


図 3.1.1 スーパーコンピュータシステム

3.1.2 高速演算サーバシステム(日本電気製 SX-5)

- ・SX-5 では TSS 処理、ジョブ管理(NQS)、バッチ処理を行っている。
- ・約 563.2GB の高速アレイディスクを有している。

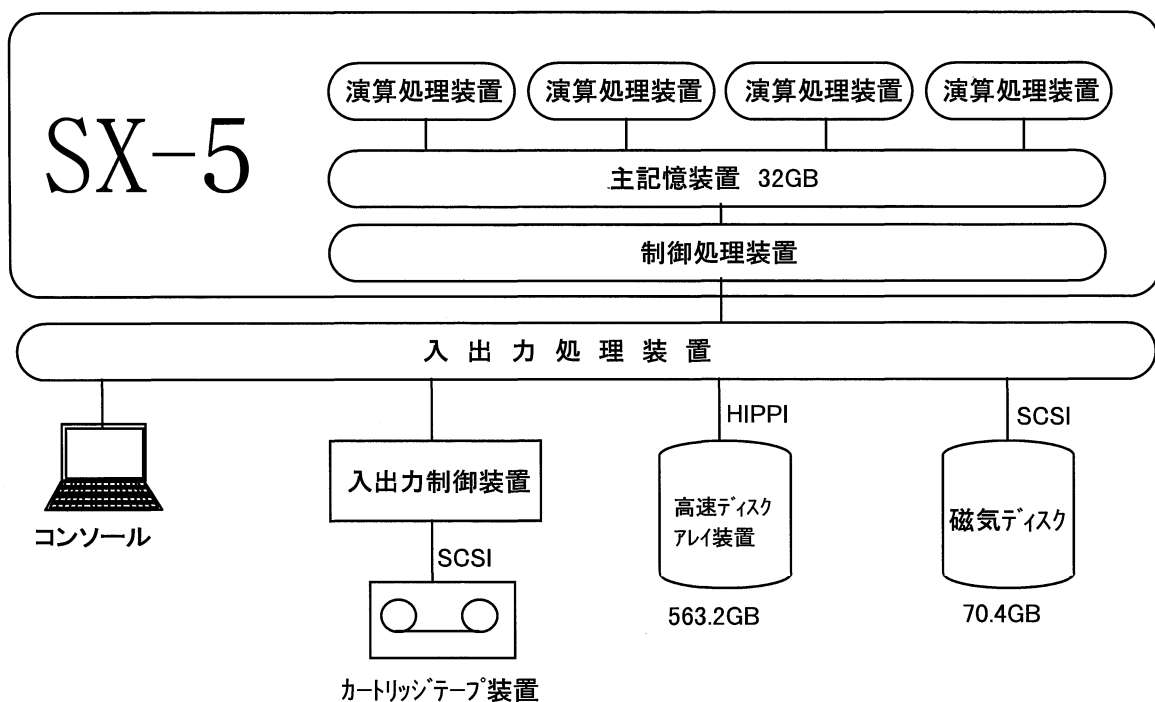


図 3.1.2 高速演算サーバシステム

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。

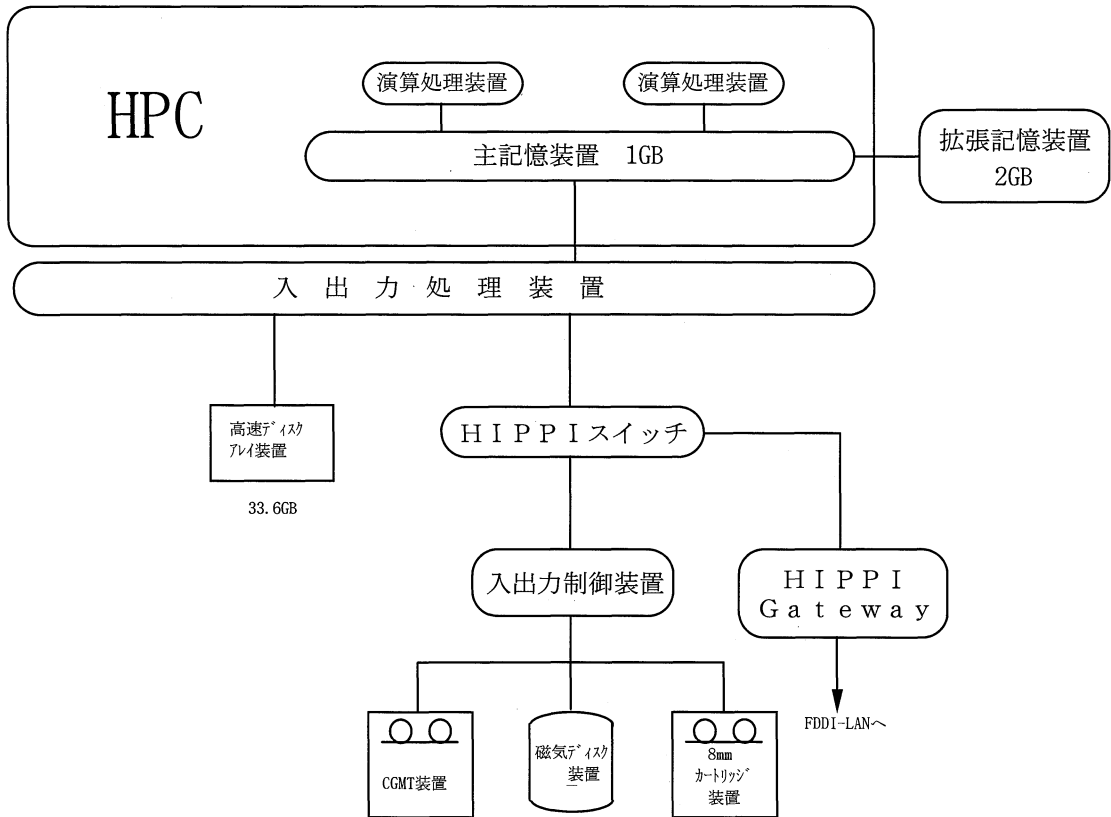


図 3.1.3 高速演算サーバ副システム

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。

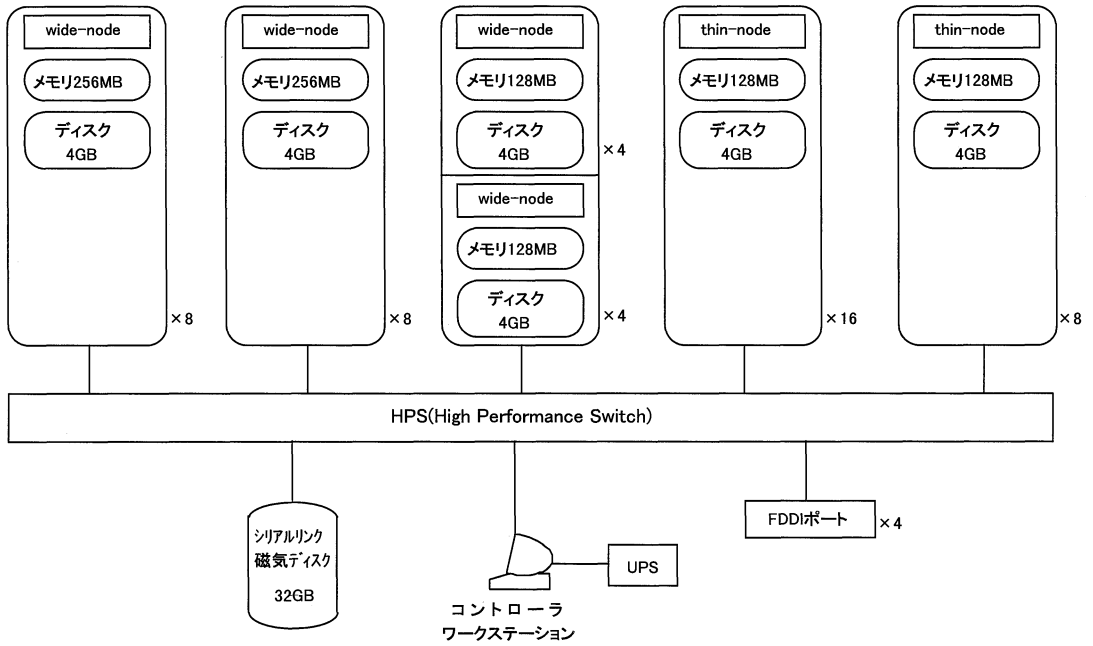


図 3.1.4 演算クラスタシステム

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。

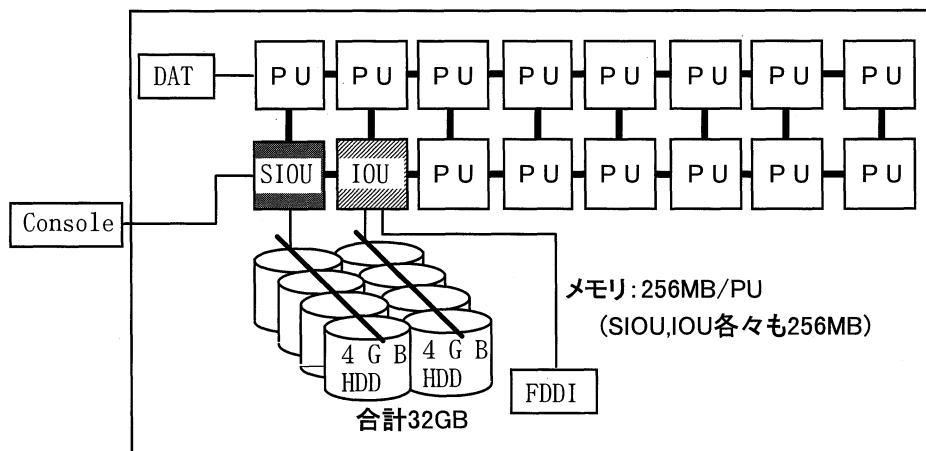


図 3.1.5 分散メモリ並列計算機システム

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。

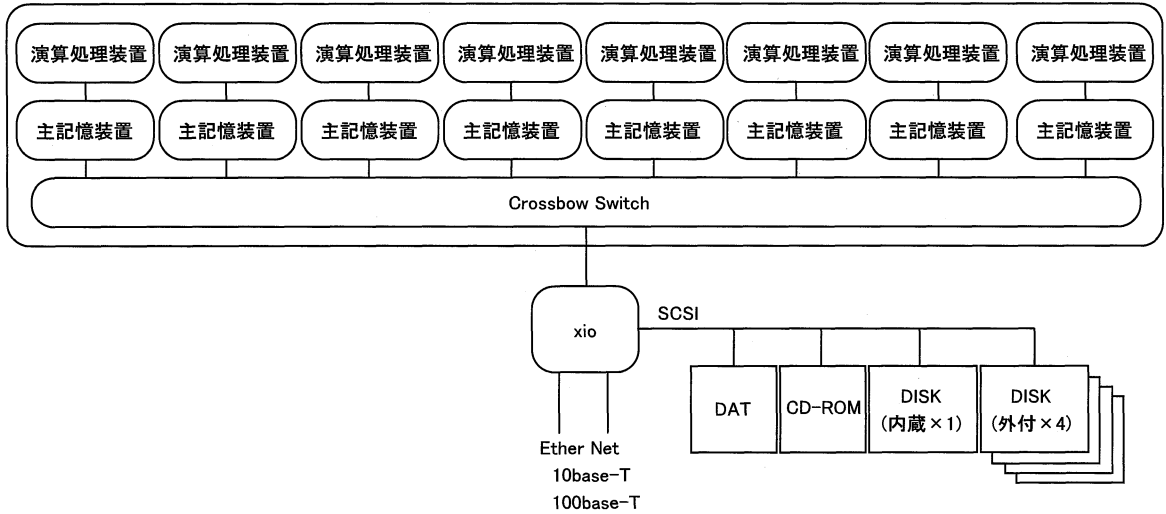


図 3.1.6 NUMA(Non-Uniform Memory Access)型計算機システム

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

SX-5 (ccsx5) <高速シリアルジョブ処理>

キュー名	CPU時間	主記憶	多重度	1ユーザ制限	1グループ制限	備 考
H05S	6時間	512MB	2	1	1	
H05M	12時間	512MB	4	1	2	
H05L	48時間	512MB	2	1	1	
H1S	24時間	1GB	4	1	2	
H1L	48時間	1GB	4	1	2	
H2S	12時間	2GB	3	1	2	
H2L	24時間	2GB	3	1	2	
H4S	12時間	4GB	2	1	1	
H8	24時間	8GB	1	1	1	特別申請ジョブ
会話処理	10分	256MB	-	-	-	コンパイル・リンク用

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	1ユーザ制限	1グループ制限	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>(1999年4月1日～5月9日)

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) <シリアルジョブ処理>(1999年5月10日～)

キュー名	CPU時間	主記憶	多重度	Complex	ノード数	備 考
S1	24時間	128MB	4	7	7	Wide
S3	48時間	128MB	4			
S2	24時間	256MB	12	16	16	Wide
S4	48時間	256MB	12			

SP2 (sp2) <並列ジョブ処理>(1999年4月1日~5月9日)

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

SP2 (sp2) <並列ジョブ処理>(1999年5月10日~)

キュー名	CPU時間	主記憶	多重度	Complex	ノード数	備考
P2	24時間	128MB	1	1	15	Thin ノード名は以下の通り ccsp205,ccsp206,ccsp207,ccsp208, ccsp209,ccsp210,ccsp211,ccsp212, ccsp213,ccsp214,ccsp215,ccsp216 ccsp266,ccsp267,ccsp268
P3	48時間	128MB	1	1	8	Thin ノード名は以下の通り ccsp201,ccsp202,ccsp203,ccsp204, ccsp269,ccsp270,ccsp271,ccsp272

ISS (ccibm) <会話処理専用>(1999年4月1日~5月9日)

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

ISS (ccibm) <会話処理専用>(1999年5月10日~)

キュー名	CPU時間	主記憶	多重度	ノード数	備考
-	10分	32MB	-	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

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

SPU：スカラ演算器の使用時間

VPU：ベクトル演算器の使用時間

パラメータの値は、以下のとおりです。

a：0.08/sec

b：0.04/sec

◆高速演算サーバシステム（SX-5）の利用点数算出法

$$P2 = \text{SPU} \times a + \text{VPU} \times b$$

SPU：スカラ演算器の使用時間

VPU：ベクトル演算器の使用時間

パラメータの値は、以下のとおりです。

c：0.10/sec

d：0.10/sec

◆演算クラスシステム（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。

e：0.02/sec

◆演算クラスシステム（SP2 Thin）の利用点数算出法

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

CPU：全 cpu time

パラメータの値は、以下のとおりです。

f：0.01/sec

◆高速演算サーバ副システム(HPC)の利用点数算出法

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

SPU : スカラー演算器の使用時間

VPU : ベクトル演算器の使用時間

パラメータの値は、以下のとおりです。

g : 0.06/sec

h : 0.03/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。

i : 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。

j : 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。

マシン名	スカラー(点)	ベクトル(点)
SX-3/34R	288	144
SX-5	360	360
SP2(Wide)	72	-
SPw(Thin)	36	-
HPC	216	108
SR2201	7.2	-

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 11 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 11 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	4 成分相対論的分子軌道計算プログラムの整備
			分子物性評価向け分子軌道プログラムの整備
平山俊雄	原研	グループリーダー	異機種並列計算期間通信用 MPI ライブラリの整備
			Java Applet - C program 間通信ライブラリの整備
西川武志	分子研	リサーチアソシエイト	IMS Benchmark program の開発
渡辺 弘	原研	研究員	並列/非並列共用 FORTRAN プログラム性能解析ツールの開発
秦野甯世	中京大	教授	線形計算プログラムベクトル版

平成 11 年度に新規登録したライブラリプログラムは以下の 5 件である。

NEC SX-5 版

crys88 CRYSTAL88: *Ab initio* LCAO-HF program for crystal systems
jamol4 *Ab initio* LCAO MO SCF calculation
jason2 CASSCF calculation with large basis set
koto KOTO: *ab initio* molecular orbital calculations

IBM SP2 版

sac-ci96 SAC/SAC-CI program system for calculating ground and excited

よって、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	AMOSS/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: <i>ab initio</i> MO calculation
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
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
 colms2 COLUMBUS: a program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calculation
 crys88 CRYSTAL88: *Ab initio* LCAO-HF program for crystal systems
 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
 jamol4 *Ab initio* LCAO MO SCF calculation
 jason2 CASSCF calculation with large basis set
 koto KOTO: *ab initio* molecular orbital calculations
 meld Program for many electron description
 mm2 Molecular mechanics calculation by MM2 force field model
 mopac7 MOPAC version 7: a general molecular orbital package

**** HPC VERSION ****

PROGRAM	PROGRAM TITLE
asl	(SUBROUTINES) ASL/SX: Advanced Scientific Library/SX
blas	(SUBROUTINES) BLAS: Basic Linear Algebra Subprograms Rev. 4. 0
colms2	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 rotational 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
sac-ci96	SAC/SAC-CI program system for calculating ground and excited
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: 46,094 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 (41,262 件) 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: 2,394 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11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	4,832 件
(2) FCDB	163 件

5 平成 11 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	134	529	63,030	48,674	36,105	19,469,600	14,441,932
	協力研究	5	7	3,200	2,888	1,774	1,155,200	709,444
	所 内	25	116	26,647	23,982	17,659	9,592,800	7,063,473
生理学	所 内	1	9	4,901	4,411	3,155	1,764,400	1,262,127
基礎生物学	施設利用	1	3	10	9	1	3,600	318
合 計		166	664	97,788	79,964	58,694	31,985,600	23,477,294

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 マシン名	電力量 kWh	システム稼働時間								平均	合計	kW/ 稼働時間
		SX-3	SX-5	HPC	SP2	SR2201	Origin					
平成11年4月	417,370	708	700	703	708	708	708	708	708	706	5,649	591
5月	437,630	734	681	731	734	734	734	734	734	726	5,808	603
6月	431,780	706	707	706	707	707	707	707	707	707	5,654	611
7月	376,080	732	730	733	733	734	733	733	733	733	5,128	513
8月	390,850	731	729	731	731	731	731	731	731	731	5,115	535
9月	360,820	700	705	707	710	710	710	710	710	707	4,949	510
10月	310,790	673	673	668	668	673	673	673	673	671	4,699	463
11月	333,960	650	647	650	650	650	650	650	650	650	4,547	514
12月	318,310	731	659	662	662	662	662	662	662	673	4,711	473
平成12月1月	156,500	-	652	652	652	652	652	652	652	652	3,912	240
2月	146,510	-	686	686	686	686	686	686	686	686	4,116	214
3月	198,200	-	732	734	734	734	734	734	734	734	4,402	270
合計	3,878,800	6,365	8,301	8,363	8,375	8,381	8,380	8,380	8,380	8,376	58,690	463

5.3 計算機利用状況

年月 マシン名	CPU 使用時間													VPU 時間								
	SX-3	*	SX-5	*	HPC	*	SP2	*	SR2201	*	Origin	*	合計	*	SX-3	*	SX-5	*	HPC	*	合計	*
平成11年4月	1,017	48	4,893	87	1,058	75	11,583	36	8,180	83	219	4	27,024	47	388	18	1,769	32	444	32	2,601	28
5月	1,063	48	4,455	82	620	42	14,682	43	7,390	72	8	0	28280	48	569	26	2,418	44	424	29	3,411	36
6月	1,358	64	2,353	42	808	57	12,187	37	6,132	62	267	5	23252	40	842	40	1,606	28	481	34	2,929	32
7月	2,132	97	3,255	56	1,171	80	8,399	25	7,386	72	482	8	22,825	38	1,460	66	1,985	34	720	49	4,165	44
8月	2,120	97	4,495	77	907	62	5,208	15	520	5	524	9	13774	23	1,571	72	3,190	55	631	43	5,392	57
9月	2,002	95	5,158	91	1,157	82	10,244	31	340	3	1,550	27	20451	36	1,510	72	3,855	68	738	52	6,103	66
10月	1,317	65	4,283	80	1,143	86	10,329	34	76	1	1,810	34	18958	35	960	48	3,172	59	613	46	4,745	54
11月	718	37	4,148	80	631	49	9,650	32	1,438	16	2,101	40	18686	35	483	25	2,823	55	266	20	3,572	42
12月	1,234	56	4,616	88	756	57	9,732	32	2,718	29	794	15	19850	36	797	36	3,040	58	382	29	4,219	48
平成12月1月	-	-	4,190	80	826	63	12,055	40	434	5	1,752	34	19,257	38	-	-	2,910	56	420	32	3,330	51
2月	-	-	4,547	83	745	54	7,016	22	198	2	487	9	12993	24	-	-	2,912	53	427	31	3,339	49
3月	-	-	3,956	68	895	61	8,750	26	0	0	720	12	14321	25	-	-	0	0	391	27	391	5
合計	12,961	68	50,349	76	10,717	64	119,835	31	34,812	30	10,714	16	239,671	35	8,580	45	29,680	45	5,937	35	44,197	43

*: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 マシン名	ジョブ処理件数						
	SX-3	SX-5	HPC	SP2	SR2201	Origin	合計
平成11年4月	1,316	1,239	288	676	58	42	3,710
5月	735	1,132	145	736	30	20	2,909
6月	722	1,405	282	769	40	123	3,503
7月	797	1,565	487	1,494	29	286	4,658
8月	466	1,311	357	1,241	49	138	3,562
9月	575	1,074	951	516	105	117	3,338
10月	355	1,331	386	854	29	119	3,074
11月	789	1,077	280	1,382	33	361	3,922
12月	433	1,043	427	1,030	51	278	3,262
平成12月1月	-	1,333	431	1,372	18	52	3,206
2月	-	1,308	568	1,336	1	112	3,325
3月	-	1,316	477	435	0	0	2,228
合計	6,188	15,134	5,079	11,841	443	1,648	40,697

5.4 クラス別 CPU 使用時間

5.4.1 SX-3/34R

SX-3	(V1)	(V2)	(V3)	(VX)	(VP)	(MDPS)	合計	(ETC)	総合計
平成 11 年 4 月	82:15:37	134:33:2	567:26:6	0:00:00	0:00:00	0:00:00	784:14:45	233:10:20	1017:25:05
5 月	76:25:16	234:20:58	706:3:32	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1016:49:46	46:00:01	1062:49:47
6 月	88:42:47	258:44:47	959:29:16	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1306:56:50	50:38:43	1357:35:33
7 月	152:8:35	641:21:54	1320:59:26	0:00:00	0:00:00	0:00:00	2114:29:55	17:11:46	2131:41:41
8 月	4:3:13	944:16:24	1142:43:56	0:00:00	0:00:00	0:00:00	2091:03:33	28:48:26	2119:51:59
9 月	22:36:40	871:26:16	1107:51:45	0:00:00	0:00:00	0:00:00	2001:54:41	0:24:21	2002:19:02
10 月	31:12:15	782:14:4	481:6:34	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1294:32:53	22:19:50	1316:52:43
11 月	18:26:39	311:50:1	322:24:46	0:00:00	0:00:00	0:00:00	652:41:26	63:03:57	715:45:23
12 月	9:32:42	613:16:40	573:28:7	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1196:17:29	37:25:26	1233:42:55
平成 12 年 1 月	-	-	-	-	-	-	-	-	-
2 月	-	-	-	-	-	-	-	-	-
3 月	-	-	-	-	-	-	-	-	-
合計	485:23:44	4792:04:06	7181:33:28	0:00:00	0:00:00	0:00:00	12459:01:18	499:02:50	5569:32:06

5.4.2 SX-5

SX-5	H05S	H05M	H05L	H1S	H1L	H2S	H2L	H4S	H8	合計	(ETC)	総合計
平成 11 年 4 月	190:36:50	491:00:21	40:57:33	215:24:57	171:37:46	59:45:59	299:41:27	0:00:00	0:00:00	1469:04:53	3424:13:03	4893:17:56
5 月	108:20:08	458:46:05	61:29:18	177:25:44	224:12:25	52:27:30	415:55:23	0:00:00	0:00:00	1498:36:33	2956:04:24	4454:40:57
6 月	88:53:9	308:4:27	312:41:15	139:12:42	192:5:31	58:24:14	240:27:9	0:00:00	0:00:00	1339:48:27	1013:01:58	2352:50:25
7 月	93:54:0	329:53:20	297:42:55	166:28:36	241:59:57	69:17:53	242:55:33	0:00:00	0:00:00	1442:12:14	1813:08:38	3255:20:52
8 月	36:25:28	389:38:22	222:12:1	212:9:27	123:16:47	229:27:17	243:36:41	0:00:00	0:00:00	1456:46:03	3038:35:34	4495:21:37
9 月	161:7:24	402:45:58	107:34:28	254:14:30	55:38:51	143:33:48	199:9:16	0:00:00	0:00:00	1324:04:15	3834:23:51	5158:28:06
10 月	164:37:33	288:28:15	179:14:39	252:0:25	126:4:42	215:19:25	261:36:24	0:00:00	0:00:00	1487:21:23	2795:56:55	4283:18:18
11 月	183:45:58	269:15:33	217:5:43	339:40:47	78:21:38	191:49:59	221:28:27	0:00:00	0:00:00	1501:28:05	2646:40:16	4148:08:21
12 月	112:42:43	325:35:24	128:26:49	290:38:34	173:46:0	158:30:20	275:42:6	0:00:00	0:00:00	1465:21:56	3150:59:09	4616:21:05
平成 12 年 1 月	95:0:57	236:0:1	142:39:9	269:36:19	147:35:38	166:20:19	155:32:51	0:00:00	0:00:00	1212:45:14	2976:45:03	4189:30:17
2 月	116:28:55	324:51:16	177:19:6	186:31:34	101:49:40	173:11:1	161:50:46	0:00:00	0:00:00	1242:02:18	3304:57:34	4546:59:52
3 月	223:20:3	476:24:56	144:1:31	220:13:40	202:42:39	117:42:31	250:30:33	0:00:00	0:00:00	1634:55:53	2320:41:03	3955:36:56
合計	1575:13:08	4300:43:58	2031:24:27	2723:37:15	1839:11:34	1635:50:16	2968:26:36	0:00:00	0:00:00	17074:27:14	33275:27:28	50349:54:42

5.4.3 SP2

SP2	(S1)	(S2)	(S3)	(S4)	(P1)	(P2)	(P3)	合計
平成 11 年 4 月	25:36:03	296:02:23	1401:55:43	3163:57:12	0:00:00	6236:45:52	459:00:06	11583:17:19
5 月	41:59:01	195:51:11	1403:25:02	4725:56:35	0:00:00	8100:18:35	214:22:50	14681:53:14
6 月	160:46:23	216:15:24	1728:24:11	4390:30:17	0:00:00	5669:04:55	21:49:35	12186:50:45
7 月	292:03:41	382:47:43	2315:41:22	2952:01:23	0:00:00	2012:49:19	443:53:40	8399:17:08
8 月	160:54:54	189:52:28	2464:54:47	2392:43:04	0:00:00	0:00:18	0:00:00	5208:25:31
9 月	305:34:14	298:01:17	2134:28:16	4303:42:16	0:00:00	2220:36:41	982:01:26	10244:24:10
10 月	498:12:50	846:57:20	1001:18:08	5227:54:06	0:00:00	2028:17:50	0:00:00	10328:58:30
11 月	56:34:32	485:21:14	1205:40:02	3652:51:42	0:00:00	3139:36:46	0:00:00	9650:00:54
12 月	49:49:29	267:50:40	1684:37:57	2847:09:51	0:00:00	3846:44:51	0:00:00	9732:03:50
平成 12 年 1 月	164:29:40	125:46:11	896:13:32	2795:52:53	0:00:00	5582:11:47	0:00:00	12054:32:06
2 月	225:41:36	170:50:19	841:44:02	1416:00:57	0:00:00	3068:07:02	0:00:00	7015:38:38
3 月	53:15:26	104:39:05	381:23:03	1986:33:56	0:00:00	3868:02:39	0:00:00	8750:22:58
合計	2034:09:49	3580:15:15	17459:46:05	39855:14:12	0:00:00	45772:36:35	0:00:00	119836:09:07

5.4.4 HPC

HPC	(W1)	(W2)	合 計	(etc)	總 合 計
平成 11 年 4 月	192:47:18	347:11:43	539:59:01	517:53:42	1057:52:43
5 月	65:48:31	180:10:52	245:59:23	374:00:13	619:59:36
6 月	166:17:34	267:48:21	434:05:55	373:30:00	807:35:55
7 月	282:59:43	349:35:41	632:35:24	538:32:08	1171:07:32
8 月	210:39:13	259:21:31	470:00:44	437:17:02	907:17:46
9 月	259:27:8	279:55:23	539:22:31	617:16:30	1156:39:01
10 月	386:49:35	269:48:38	656:38:13	486:05:36	1142:43:49
11 月	158:20:16	247:56:36	406:16:52	225:00:58	631:17:50
12 月	156:35:37	293:15:17	449:50:54	306:32:39	756:23:33
平成 12 年 1 月	136:18:20	233:46:31	370:04:51	456:07:53	826:12:44
2 月	128:45:15	355:22:37	484:07:52	261:19:38	745:27:30
3 月	230:59:45	248:47:8	479:46:53	415:36:05	895:22:58
合 計	2375:48:15	3333:00:18	5708:48:33	5009:12:24	10718:00:57

5.4.5 Origin2000

coorg	(O1)	(O2)	合 計	(etc)	總 合 計
平成 11 年 4 月	47:31:5	11:32:59	59:04:04	159:50:56	218:55:00
5 月	0:8:8	5:41:25	5:49:33	2:17:27	8:07:00
6 月	0:7:18	222:56:15	0:00:00	43:26:28	266:30:00
	(O)				
7 月	66:2:7	0:00:00	66:2:7	415:46:50	481:48:57
8 月	350:30:3	0:00:00	350:30:04	173:43:56	524:14:00
9 月	302:35:2	0:00:00	302:35:02	1247:15:58	1549:51:00
10 月	512:48:32	0:00:00	512:48:32	1297:11:28	1810:00:00
11 月	657:48:40	0:00:00	657:48:41	1443:20:19	2101:09:00
12 月	550:36:2	0:00:00	550:36:03	243:52:57	794:29:00
平成 12 年 1 月	499:42:49	0:00:00	499:42:50	1252:11:10	1751:54:00
2 月	433:52:8	0:00:00	433:52:08	52:55:52	486:48:00
3 月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	719:39:00
合 計	3421:41:57	240:10:39	3661:52:36	7051:32:21	10713:24:57

※ 7/17 文の元データ不正。反映していない。

※ 平成 12 年 3 月分の O クラスデータ取得忘れ

5.4.6 SR2201

SR2201	(R)	合 計
平成 11 年 4 月	8179:37:01	8179:37:01
5 月	7389:58:54	7389:58:54
6 月	6132:20:27	6132:20:27
7 月	7385:43:18	7385:43:18
8 月	519:41:51	519:41:51
9 月	339:43:02	339:43:02
10 月	76:28:42	76:28:42
11 月	1438:07:37	1438:07:37
12 月	2718:12:47	2718:12:47
平成 12 年 1 月	433:43:16	433:43:16
2 月	198:25:15	198:25:15
3 月	0:00:00	0:00:00
合 計	34812:02:10	34812:02:10

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	39:44:34	77:36:6	256:3:7	0:00:00	0:00:00	0:00:00	373:23:47	14:15:04	387:38:51
5 月	25:7:43	90:58:50	300:55:3	0:00:00	0:00:00	0:00:00	417:01:36	152:19:04	569:20:40
6 月	22:55:28	119:8:5	394:46:0	0:00:00	0:00:00	0:00:00	536:49:33	305:20:56	842:10:29
7 月	43:17:48	435:6:55	737:50:24	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1216:15:07	243:37:50	1459:52:57
8 月	1:13:1	482:12:13	540:2:24	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1023:27:38	547:07:08	1570:34:46
9 月	7:21:25	598:50:38	766:58:11	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1373:10:14	137:12:31	1510:22:45
10 月	4:57:49	369:31:17	222:43:59	0:00:00	0:00:00	0:00:00	597:13:05	362:19:42	959:32:47
11 月	2:24:44	131:35:1	139:30:10	0:00:00	0:00:00	0:00:00	273:29:55	209:41:40	483:11:35
12 月	1:56:59	198:47:42	219:22:6	0:00:00	0:00:00	0:00:00	420:06:47	376:34:23	796:41:10
平成 11 年 1 月	-	-	-	-	-	-	-	-	-
2 月	-	-	-	-	-	-	-	-	-
3 月	-	-	-	-	-	-	-	-	-
合計	148:59:31	2503:46:47	3578:11:24	0:00:00	0:00:00	0:00:00	6230:57:42	2348:28:18	8579:26:00

5.5.2 SX-5

SX-5	H05S	H05M	H05L	H1S	H1L	H2S	H2L	H4S	H8	合計	(ETC)	総合計
平成 11 年 4 月	6:00:32	46:40:39	150:30:45	35:12:33	64:17:11	2:17:51	14:00:56	0:00:00	0:00:00	319:00:27	1449:58:22	1768:58:49
5 月	0:18:47	97:42:48	110:15:58	79:36:28	209:30:36	12:41:27	115:54:47	0:00:00	0:00:00	626:00:51	1791:49:56	2417:50:47
6 月	9:51:57	66:38:20	234:50:3	21:17:4	71:36:4	10:40:8	73:46:39	0:00:00	0:00:00	488:40:15	1116:54:51	1605:35:06
7 月	13:26:57	77:53:29	380:16:41	37:12:8	222:35:38	3:12:0	154:33:38	0:00:00	0:00:00	889:10:31	1095:48:27	1984:58:58
8 月	6:12:46	173:36:54	234:30:1	120:4:20	365:8:3	79:42:52	270:23:58	0:00:00	0:00:00	1249:38:54	1940:47:57	3190:26:51
9 月	58:42:44	200:47:41	217:57:42	345:52:47	264:0:2	76:18:37	234:32:22	0:00:00	0:00:00	1398:11:55	2456:55:46	3855:07:41
10 月	46:25:56	93:8:29	204:15:14	121:23:9	227:23:42	93:34:8	99:11:24	0:00:00	0:00:00	885:22:02	2286:08:12	3171:30:14
11 月	30:7:42	152:18:9	312:59:42	150:8:0	170:36:59	86:36:46	125:43:37	0:00:00	0:00:00	1028:30:55	1794:51:16	2823:22:11
12 月	0:00:00	0:15:54	446:43:14	2:34:27	32:31:47	12:46:58	31:50:33	0:00:00	0:00:00	526:42:53	2513:32:01	3040:14:54
平成 12 年 1 月	12:59:38	127:18:58	210:12:33	156:34:34	241:39:37	96:33:19	260:11:8	0:00:00	0:00:00	1105:29:47	1804:22:59	2909:52:46
2 月	31:10:22	174:18:52	151:24:11	202:24:3	261:35:16	86:1:4	191:52:10	0:00:00	0:00:00	1098:45:58	1813:30:10	2912:16:8
3 月	23:20:42	235:28:47	72:30:21	124:16:36	287:12:10	48:33:46	192:5:51	0:00:00	0:00:00	983:28:13	1270:36:04	2254:5:17
合計	238:38:03	1446:09:00	2726:26:25	1396:36:09	2418:07:05	608:58:56	1764:07:03	0:00:00	0:00:00	10599:02:41	21335:16:01	31934:18:42

5.5.3 HPC

HPC	(W1)	(W2)	合計	(etc)	総合計
平成 10 年 4 月	83:52:12	261:9:49	345:02:01	99:27:09	444:29:10
5 月	142:56:42	211:7:4	354:03:46	70:19:59	424:23:45
6 月	110:15:26	190:19:16	300:34:42	180:31:21	481:06:03
7 月	204:25:55	175:17:31	379:43:36	340:36:19	720:19:45
8 月	208:18:55	226:42:4	435:00:59	195:38:31	630:39:30
9 月	362:34:19	246:59:32	609:33:51	128:21:43	737:55:34
10 月	168:26:12	171:47:49	340:14:01	273:12:30	613:26:31
11 月	68:17:11	114:30:28	182:47:39	83:16:19	266:03:58
12 月	5:34:27	8:36:51	14:11:18	367:19:31	381:30:49
平成 11 年 1 月	8:34:8	17:35:23	26:09:31	393:55:55	420:05:26
2 月	102:14:36	302:14:48	404:29:24	22:29:52	426:59:16
3 月	165:30:41	222:20:13	387:50:54	2:41:05	390:31:59
合計	1631:00:44	214840:48	3779:41:32	2157:50:14	593731:46

5.6 ジョブ処理件数

5.6.1 SX-3/34

SX-3	(V1)	(V2)	(V3)	(V4)	(V5)	(VX)	(VP)	(MDPS)	合 計
平成 11 年 4 月	748	120	448	0	0	0	0	0	1,316
5 月	263	138	334	0	0	0	0	0	735
6 月	339	75	308	0	0	0	0	0	722
7 月	258	225	314	0	0	0	0	0	797
8 月	65	182	219	0	0	0	0	0	466
9 月	188	171	217	0	0	0	0	0	576
10 月	170	104	81	0	0	0	0	0	355
11 月	600	68	121	0	0	0	0	0	789
12 月	105	133	195	0	0	0	0	0	433
平成 12 年 1 月	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2 月	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3 月	0	0	0	0	0	0	0	0	0
合 計	2,736	1,216	2,237	0	0	0	0	0	6,189

5.6.4 HPC

HPC	(W1)	(W2)	合 計
平成 11 年 4 月	152	136	288
5 月	71	74	145
6 月	122	160	282
7 月	283	204	487
8 月	190	167	357
9 月	166	350	516
10 月	266	120	386
11 月	184	96	280
12 月	262	165	427
平成 12 年 1 月	327	104	431
2 月	382	186	568
3 月	351	126	477
合 計	2,756	1,888	4644

5.6.2 SX-5

SX-5	H05S	H05M	H05L	H1S	H1L	H2S	H2L	H4S	H8	合 計
平成 11 年 4 月	360	416	21	121	50	64	142	65	0	1,239
5 月	262	474	27	111	64	24	148	22	0	1,132
6 月	270	622	79	135	83	39	102	75	0	1,405
7 月	354	582	47	201	140	62	112	67	0	1,565
8 月	175	414	89	155	99	135	118	126	0	1,311
9 月	273	317	47	97	75	119	71	75	0	1,074
10 月	198	404	49	170	122	170	127	91	0	1,331
11 月	245	204	53	231	45	156	79	64	0	1,077
12 月	235	144	40	196	96	129	74	129	0	1,043
平成 12 年 1 月	415	209	45	230	83	164	75	112	0	1,333
2 月	312	290	27	188	95	199	83	114	0	1,308
3 月	472	239	83	215	55	164	58	30	0	1,316
合 計	3,571	4,315	607	2,050	1,007	1,425	1,189	970	0	15,134

5.6.5 SR2201

SR2201	(R)	合 計
平成 11 年 4 月	58	58
5 月	30	30
6 月	40	40
7 月	29	29
8 月	49	49
9 月	105	105
10 月	29	29
11 月	33	33
12 月	51	51
平成 12 年 1 月	18	18
2 月	1	1
3 月	0	0
合 計	443	443

5.6.3 SP2

SP2	(S1)	(S2)	(S3)	(S4)	(P1)	(P2)	(P3)	合 計
平成 11 年 4 月	207	127	51	247	1	34	9	676
5 月	320	60	70	217	0	50	19	736
6 月	274	114	128	204	0	33	16	769
7 月	393	303	96	663	0	28	11	1,494
8 月	528	225	82	405	0	1	0	1,241
9 月	224	190	71	420	0	32	14	951
10 月	177	223	57	337	0	31	29	854
11 月	564	215	49	354	0	136	64	1,382
12 月	408	186	56	237	0	96	47	1,030
平成 12 年 1 月	440	336	86	221	0	135	154	1,372
2 月	734	143	58	282	0	68	51	1,336
3 月	124	117	49	101	0	29	15	435
合 計	4,393	2,239	853	3,688	1	673	429	12,276

5.6.6 Origin2000

ccorg	(O1)	(O2)	合 計
平成 11 年 4 月	16	26	42
5 月	1	19	20
6 月	13	110	123
	(O)		
7 月	286	0	286
8 月	144	0	144
9 月	127	0	127
10 月	119	0	119
11 月	361	0	361
12 月	278	0	278
平成 12 年 1 月	52	0	52
2 月	112	0	112
3 月	0	0	0
合 計	922	0	922

6. 資料

6.1 岡崎国立共同研究機構計算科学研究センター規則

平成12年3月30日
岡機構規則 第3号

岡崎国立共同研究機構計算科学研究センター規則

(目的)

第1条 岡崎国立共同研究機構計算科学研究センター（以下「センター」という。）は、センターの大型電子計算機システムを分子科学及びバイオサイエンスにおける大型計算等のために、岡崎国立共同研究機構（以下「機構」という。）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、機構に置かれる研究所及び共通研究施設の研究に必要な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 教授
- 三 助教授
- 四 助手
- 五 その他必要な職員

(センター長)

第3条 センター長は、機構の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 機構に、センターの管理運営に関する重要事項を審議するため、岡崎国立共同研究機構計算科学研究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、機構長が別に定める。

附 則

この規則は、平成12年4月1日から施行する。

6.2 岡崎国立共同研究機構計算科学研究センター運営委員会規則

平成12年3月30日
岡機構規則 第4号

岡崎国立共同研究機構計算科学研究センター運営委員会規則

(趣旨)

第1条 この規則は、岡崎国立共同研究機構計算科学研究センター規則（平成12年岡機構規則第3号）第4条第2項の規定に基づき、岡崎国立共同研究機構計算科学研究センター（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。

(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 センターの教授及び助教授
 - 三 分子科学研究所，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2名
 - 四 岡崎国立共同研究機構の職員以外の計算科学に関する学識経験者5名
- 2 前項第3号及び第4号に掲げる委員は、岡崎国立共同研究機構長が委嘱する。

(任期)

第3条 前条第1項第3号及び第4号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、委員の過半数の出席がなければ、議事を開き、議決することができない。

2 運営委員会の議事は、出席した委員の過半数をもって決し、可否同数のときは、委員長の決するところによる。

(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者に出席を求め、意見を聴くことができる。

(庶務)

第7条 運営委員会の庶務は、総務部庶務課において処理する。

附 則

この規則は、平成12年4月1日から施行する。

6.3 平成12年度計算科学研究センター運営委員

平田 文男	計算科学研究センター長 (分子科学研究所理論研究系分子基礎理論第四研究部門教授)
青柳 睦	計算科学研究センター助教授
岡本 祐幸	分子科学研究所理論研究系分子基礎理論第一研究部門助教授
鈴木 俊法	分子科学研究所電子構造研究系電子状態動力学研究部門助教授
村田 紀夫	基礎生物学研究所制御機構研究系計時機構研究部門教授
大隅 良典	基礎生物学研究所細胞生物学研究系細胞内エネルギー変換機構研究部門教授
永山 國昭	生理学研究所分子生理研究系超微小形態生理研究部門教授
定藤 規弘	生理学研究所大脳皮質機能研究系心理生理学研究部門教授
齋藤 晋	東京工業大学大学院理工学研究科教授
相田 美砂子	広島大学理学部教授
岡崎 進	東京工業大学大学院総合理工学研究科助教授
金久 實	京都大学化学研究所教授 /機構共通研究施設統合バイオサイエンスセンター客員教授
中村 春木	大阪大学蛋白研究所附属生体分子解析センター教授

6.4 計算科学研究センター職員(平成12年11月現在)

平田 文男 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
内山 郁夫 助手
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 研究支援推進員

6.5 応用プログラム相談員

木下 朋子 総研大大学院生 平成12年11月～平成13年3月(平成12年度)

6.6 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	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) 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 疎結合	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 ^a	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) ^b	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b
申 請	14,799	15,536	33,832/8,458*	9,680	12,439	14,694
許 可	10,768	12,060	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	21,781	40,358
許 可	14,626	17,846	19,110	16,027	19,393	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	平成11年度
計算機システム	SX-3/34R HSP SP2 HPC(9月～)	SX-3/34R HSP SP2 HPC SR2201(11月～)	SX-3/34R HSP SP2 HPC SR2201 Origin2000 (10月～) SX-5 (3月～)	SX-3/34R (12月まで) SX-5 SP2 HPC SR2201 Origin2000
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	201	188	174	166
利用 者 数				
機 構 内 ^a	139	126	138	125
機 構 外	574	609	566	539
合 計	713	735	704	664
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 (SR2201) 3,561	(SX-3/34R) 8,579 (HSP) 8,587 (SP2) 8,574 (HPC) 8,590 (SR2201) 8,694 (Origin2000) 3,570	(SX-3/34R) 6,365 (SX5) 8,301 (SP2) 8,375 (HPC) 8,363 (SR2201) 8,381 (Origin2000) 8,380
CPU時間利用申請(時間)	(HSP基準) ^b	(HSP基準) ^b	(HSP基準) ^b	(HSP基準) ^b
申 請	58,425	73,910	76,804	97,788
許 可	51,499	58,650	67,159	79,964
総使用CPU時間 ^c (時間)	207,790	262,365	273,575	239,671
ジョブ処理件数 ^c	70,308	51,738	45,173	40,697
ライブラリプログラム 新規登録数	15	3	13	14
データベース新規登録数	0	0	0	0
センター使用論文数 ^d	279	331	347	391

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。

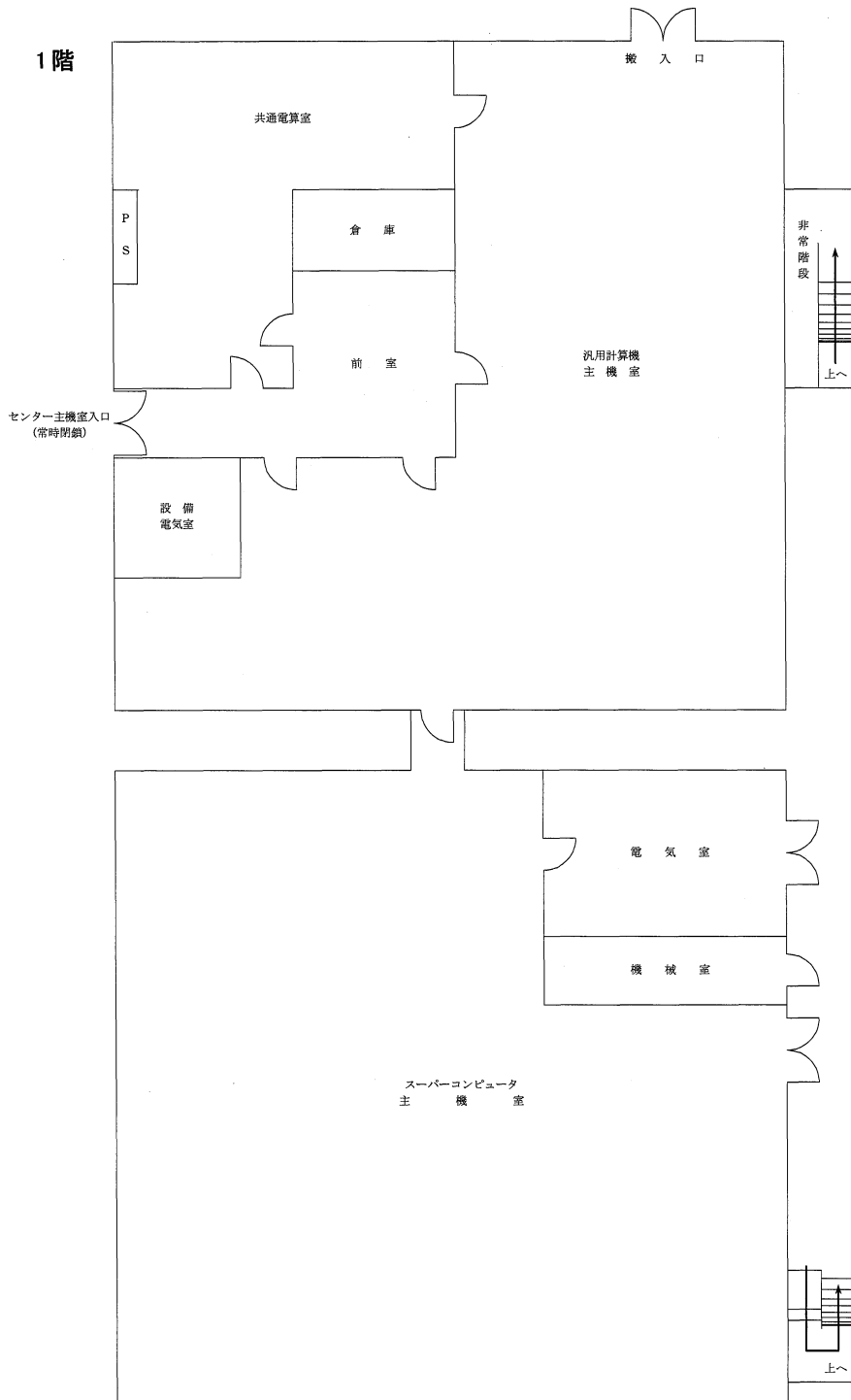
c:ここでの値はCPU時間、件数ともライブラリ開発、センター業務使用分などすべてを含む。

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。

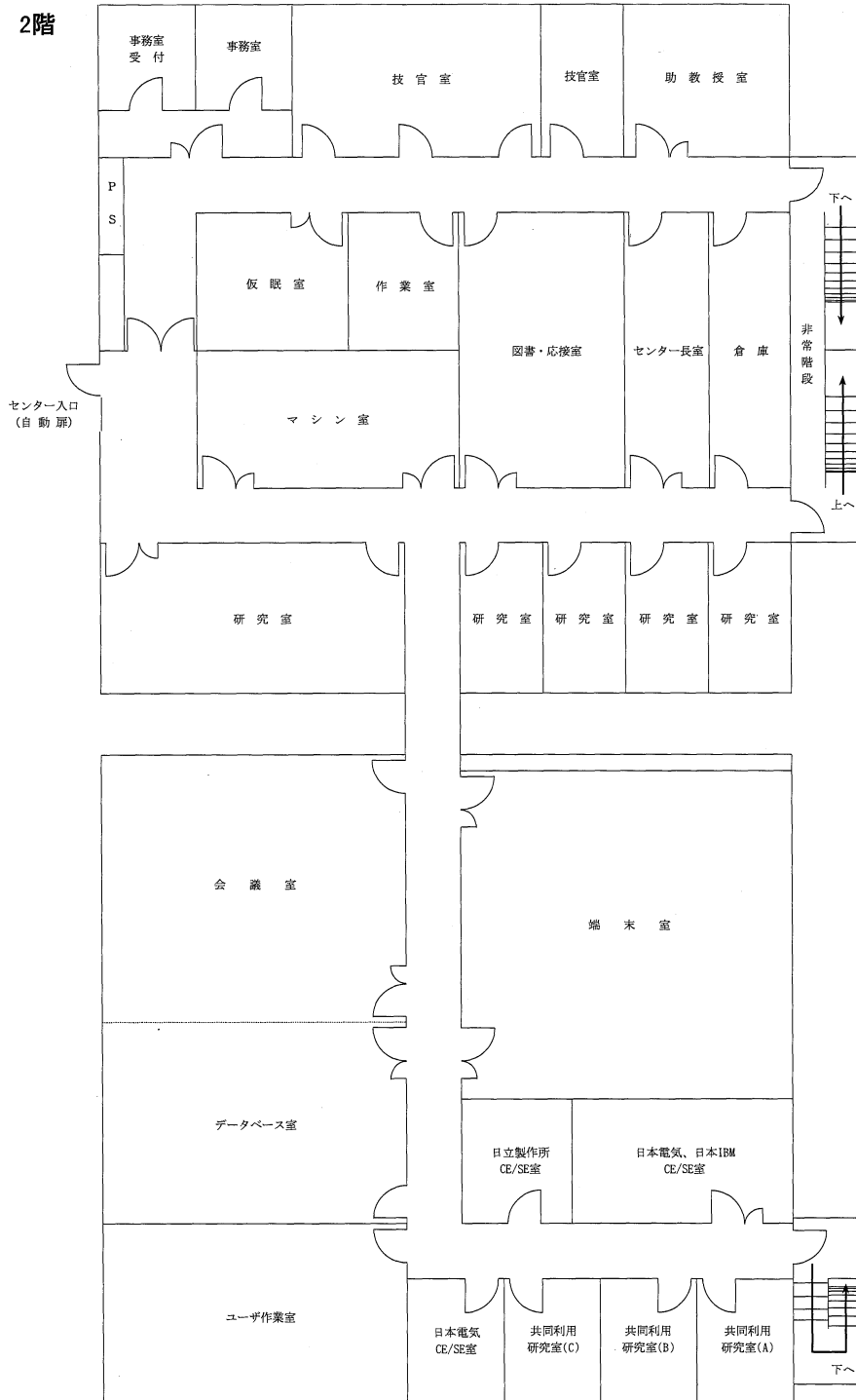
e:S-810、S-820、SX-3、SX-5、VPPのCPU時間については、スカラー時間とベクトル時間の単純な和である。

*:下段はM-680H基準

6.7 建物図



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においてありますが、個人での購入を希望される時のお問い合わせ先は次のとおりです。

<VPP5000 用マニュアルの購入にあたってのお問い合わせ先>

〒460-8585 名古屋市中区錦1丁目10番1号

富士通株式会社 東海支社第一公共営業部

担当 岡本、町田

E-mail : fj0657fz@tm.fujitsu.co.jp, fj3707fm@tm.fujitsu.co.jp

電話 : 052-239-1110

FAX : 052-239-1154

<SGI2800 用マニュアルの購入にあたってのお問い合わせ先>

〒530-0001 大阪市北区梅田2-5-25 ハービス OSAKA11 階

日本 S G I 株式会社

担当 森田桂治, 新谷ひろみ

E-mail : shintani@sgi.co.jp

電話 : 06-6343-6702

FAX : 06-6343-6713

<SX-3/34R、SX-5 および HPC 用マニュアルの購入にあたってのお問い合わせ先>

〒460-8525 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にあたってのお問い合わせ先>

〒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にあたってのお問い合わせ先>

〒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

6.8.2 VPP5000 用 (日本語) マニュアル

- (1) UXP/V V20 Online Manual (日本語版)
- (2) UXP/V Fortran 使用手引書 V20 用
- (3) UXP/VFortran メッセージ説明書 V20 用
- (4) UXP/V Fortran プログラミング ハンドブック V20 用
- (5) UXP/V Fortran/VPP 使用手引書 V20 用
- (6) UXP/V VPP Fortran プログラミング ハンドブック V20 用
- (7) UXP/V HPF 使用手引書 V20L20 用
- (8) UXP/V アナライザ使用手引書 V20 用
- (9) UXP/V C 言語使用手引書 V20 用
- (10) UXP/V C++ 使用手引書 V20 用
- (11) C-SSL II/VP オンラインマニュアル
- (12) UXP/V DPCE 使用手引書 V20 用
- (13) UXP/V MPI 使用手引書 V20 用
- (14) FUJITSU MPTools 使用手引書
- (15) UXP/V PVM 使用手引書 V20 用
- (16) BLAS/VP LAPACK/VP ScaLAPACK オンラインマニュアル
- (17) SSL II/VP オンラインマニュアル
- (18) SSL II/VPP オンラインマニュアル
- (19) UXP/V TotalView 使用手引書 V20 用
- (20) UXP/V ネットワークキューイングシステム V20 用
- (21) UXP/V ネットワークキューイングシステム-JM V20 用
- (22) UXP/V ネットワークキューイングシステム-JS V20 用

6.8.3 VPP5000 用 (English) マニュアル

- (1) UXP/V V20 Online Manual (English Version)
- (2) UXP/V Fortran User's Guide V20
- (3) UXP/V Fortran Messages V20
- (4) UXP/V Fortran Programming Handbook V20
- (5) UXP/V Fortran/VPP User's Guide V20
- (6) UXP/V VPP Fortran Programming Handbook V20

- (7) UXP/V HPF User's Guide V20
- (8) UXP/V ANALYZER User's Guide V20
- (9) UXP/V C Language User's Guide V20
- (10) UXP/V C++ User's Guide V20
- (11) C-SSL II/VP Online Documents
- (12) UXP/V DPCE User's Guide V20
- (13) UXP/V MPI User's Guide V20
- (14) FUJITSU MPTools User's Guide
- (15) UXP/V PVM User's Guide V20
- (16) BLAS/VP LAPACK/VP ScaLAPACK Online Documents
- (17) SSL II/VP Online Documents
- (18) SSL II/VPP Online Documents
- (19) UXP/V TotalView User's Guide V20
- (20) UXP/V Network Queuing System Handbook V20
- (21) UXP/V Network Queuing System-JM Handbook V20
- (22) UXP/V Network Queuing System-JS Handbook V20

6.8.4 SGI2800 用 (English) マニュアル

- (1) C Programmer's Guide (IRIX6.5)
- (2) C++ Programmer's Guide (IRIX6.5)
- (3) MIPSpro F90 Manuals (IRIX6.5)
- (4) MIPSpro F77 Manuals (IRIX6.5)

6.8.5 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) 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

インドウシステム (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。

6.8.6 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 Queueing 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 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 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.

(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.

6.8.7 SX-5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) ネットワークプログラミングの手引
- (7) ストリームプログラミングの手引
- (8) NQS 利用の手引

本書は、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。

- (9) 言語支援機能利用の手引
- (10) C プログラミングの手引
- (11) C++言語説明書

本書は、SUPER-UX システムのもとで使用される C++コンパイラ (USL C++ Language System Release3.0 対応) の言語仕様を定めるものです。

- (12) C++ライブラリ利用の手引

本書は、SUPER-UX システムのもとで使用される C++コンパイラ (USL C++ Language System Release3.0 対応) で提供される C++クラスライブラリについて説明したものです。

- (13) C++利用の手引

本書は、SUPER-UX システムのもとで使用される C++コンパイラ (USL C++ Language System Release3.0 対応) の作成方法やデバック方法を紹介しています。

- (14) FORTRAN90/SX 言語説明

本書は、SUPER-UX の Fortran90 言語の文法を説明したものです。

SUPER-UX の Fortran90 言語は、日本工業規格 (JIS) Fortran (X3001-1994)。内容は国際規格 ISO/IEC 1539:1991 および米国規格 ANSI X3.198-1992 と同一であり、通称 Fortran90 と呼ばれる) に準拠するとともに、さらに多くの拡張機能を備えています。

- (15) FORTRAN90/SX プログラミングの手引

本書は、SUPER-UX の FORTRAN90/SX の使用方法について説明したものです。

- (16) FORTRAN90/SX 並列処理機能利用の手引

- (17) MPI/SX 利用の手引

本書は、SUPER-UX 上で分散並列処理プログラミングを行うためのメッセージ通信ライブラリ MPI/SX について説明したものです。MPI/SX は 1994 年に MPI フォーラムにおいて策定された MPI 標準仕様に準拠した機能を提供しており、さらに SX アーキテクチャの特長の一つであ

る共有メモリを活かした高速通信を実現しています。

(18) DBX 利用の手引

(19) PDBX 利用の手引

(20) OpenGL プログラミングの手引

本書は、OpenGL の説明書です。OpenGL はシリコングラフィックス社 (SGI) が 3 次元グラフィックス API の実質的な業界標準であった自社 IRIS GL を SGI 以外のコンピュータでも利用できるように、そのレンダリング機能のみを取り出してオープン化したものです。本製品は、SUPER-UX シリーズ用にインポートしたものであり、OpenGL Version1.0 の仕様準拠したものとなっています。

(21) PSUITE 利用の手引

本書は、SUPER-UX のプログラミング開発環境 PSUITE の使用方法について説明したものです。PSUITE は、ソースブラウザ、エディタ、デバッガ、性能解析ツールを備えたワークステーション上で動作するプログラミング開発環境です。PSUITE を使用することにより、利用者プログラムの作成、コンパイル、デバッグ、チューニングなどの一連の開発作業をワークステーション上において GUI ベースで容易に実施することができます。

(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)

(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)

(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)

(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)

(26) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(高速機能編)

(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)

(28) 科学技術計算ライブラリ統計機能 ASLSTAT/SX 利用の手引

本書は、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 ASLSTAT/SX(Advanced Scientific Library STATistical function/SX)の概念、機能、利用方法などについて説明したものです。本書は、確率分布、基礎統計量、推定と検定、分散解析・実験計画、ノンパラメトリック検定、多変量解析、フーリエ変換とその応用/時系列分析、近時・回帰分析、ソート・順位付けなど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 1 分冊)

本書は、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。このうち本書は、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)、複素演算関数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 2 分冊)

本書は、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。このうち本書は、固有値・固有ベクトル、最小二乗法、フーリエ変換とその応用/慈恵列分析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 3 分冊)

本書は、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。このうち本書は、スプライン関数、数値積分、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。

(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(基本機能編 第 4 分冊)

本書は、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。このうち本書は、特殊関数、乱数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(高速機能編)

本書は、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。このうち本書は、高速機能編(行列のデータ格納変換、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、フーリエ変換とその応用/時系列分析、スプライン関数、数値積分)について説明したものです。

(34) 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)

本書は、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。このうち本書は、並列機能編(基本行列演算、連立一次方程式(直接法)、固有値・固有ベクトル、フーリエ変換とその応用/時系列分析)について説明したものです。

(35) 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(統計機能編)

本書は、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。このうち本書は、統計機能編(確率分布、基礎統計量、推定と検定、分散分析・実験計画、ノンパラメトリック検定、多変量解析、フーリエ変換とその応用/時系列分析、感じ・回帰分析、乱数、ソート・順位付けなど)について説明したものです。

6.8.8 SX-5 用 (English) マニュアル

英語版マニュアルに関しては、日本電気株式会社 中部支社第二販売部 (6.8.1 マニュアル一覧と購入方法の「<SX-3/34R、SX-5 および HPC 用マニュアルの購入にあたってのお問い合わせ先>」を参照)にお問い合わせください。

6.8.9 HPC 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) 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)

6.8.10 HPC 用 (English) マニュアル

英語版マニュアルに関しては、日本電気株式会社 中部支社第二販売部 (6.8.1 マニュアル一覧と購入方法の「<SX-3/34R、SX-5 および HPC 用マニュアルの購入にあたってのお問い合わせ先>」を参照) にお問い合わせください。

6.8.11 SP2 用マニュアル

6.8.11.1 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

6.8.11.2 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

6.8.11.3 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 command and Technical Reference
- (18) GC23-3899-01 IBM RISC System/6000 Scalable POWERparallel Systems Diagnosis and Messages Guide

6.8.11.4 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

6.8.11.5 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

6.8.11.6 Performance Toolbox for AIX Version 2 Release 1

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

6.8.11.7 AIX ESSL/6000 V2.2.2 関連

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

6.8.12 SR2201 用 (日本語) マニュアル

- (1) HI-UX/MPP 概説
- (2) HI-UX/MPP ユーザーズガイド
- (3) HI-UX/MPP Command Reference
- (4) HI-UX/MPP アプリケーションプログラマーズガイド
- (5) HI-UX/MPP リモート DMA 転送使用の手引-C-
- (6) HI-UX/MPP 並列アプリケーションプログラマーズガイド-C-
- (7) HI-UX/MPP Network Applications Programmer's Guide
- (8) HI-UX/MPP Programmer's Reference
- (9) HI-UX/MPP 並列アプリケーションプログラマーズガイド-F-
- (10) HI-UX/MPP システム管理者ガイド
- (11) HI-UX/MPP 日本語使用ガイド
- (12) HI-UX/MPP System and Network Administrator's Reference

- (13) HI-UX/MPP MPI PVM 使用の手引
- (14) プログラムプロダクト OSCNQS NQS システム管理者ガイド
- (15) プログラムプロダクト OSCNQS NQS ユーザーズガイド
- (16) プログラムプロダクト NFS/MPP ガイド
- (17) FDDI ドライバ
- (18) HI-UX/MPP OSCXWN X Window System ユーザーズガイド(X11R5)
- (19) HI-UX/MPP OSCXWN Xlib プログラマーズガイド(X11R5)
- (20) 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)
- (21) HI-UX/MPP OSCXWN Xlib リファレンス(X11R5)
- (22) 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)
- (23) HI-UX/MPP OSCMTF 日立 Motif ユーザーズガイド(R1.2)
- (24) HI-UX/MPP OSCMTF 日立 Motif プログラマーズガイド(R1.2)
- (25) HI-UX/MPP OSCMTF 日立 Motif スタイルガイド(R1.2)
- (26) HI-UX/MPP OSCMTF 日立 Motif プログラマーズリファレンス(R1.2)
- (27) プログラムプロダクト OSCBGT 運用ガイド
- (28) パフォーマンスモニタ for SR2201
- (29) 最適化 C 言語
- (30) 最適化 C 使用の手引
- (31) 最適化 C++ 使用の手引
- (32) HI-UX/MPP 最適化 FORTRAN77 言語
- (33) HI-UX/MPP 最適化 FORTRAN77 使用の手引
- (34) HI-UX/MPP リモート DMA 転送 使用の手引 -FORTRAN77-
- (35) HI-UX/MPP 最適化 FORTRAN90 言語
- (36) HI-UX/MPP 最適化 FORTRAN90 使用の手引
- (37) HI-UX/MPP リモート DMA 転送 使用の手引 -FORTRAN-
- (38) HI-UX/MPP Parallel FORTRAN 言語
- (39) HI-UX/MPP Parallel FORTRAN 使用の手引
- (40) PARALLELWARE ユーザーズガイド -FORTRAN-
- (41) PARALLELWARE リファレンス -FORTRAN-
- (42) PARALLELWARE ユーザーズガイド -C-
- (43) PARALLELWARE リファレンス -C-
- (44) 並列デバッガ ndb 使用の手引き
- (45) HI-UX/MPP 統合構造解析システム ISAS 機能編 -第一分冊- 機能
- (46) 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
- (47) HI-UX/MPP 統合構造解析システム ISAS 操作編
- (48) HI-UX/MPP 統合構造解析システム ISAS 例題編
- (49) 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

- (50) 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
- (51) 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
- (52) HI-UX/MPP 数値計算副プログラムライブラリ MSL2 操作編
- (53) HI-UX/MPP 行列計算副プログラムライブラリ MATRIX/MPP
- (54) 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

6.8.13 SR2201 用 (English) マニュアル

- (1) HI-UX/MPP Command Reference
- (2) HI-UX/MPP Network Applications Programmer' s Guide
- (3) HI-UX/MPP Programmer' s Reference
- (4) HI-UX/MPP System and Network Administrator' s Reference

5-1 電子計算機センター 現状と将来構想

5-1-1 過去と現在

分子科学研究所・電子計算機センターは1978年に設立され、今日に至っている。2000年4月より、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る。電子計算機センターは日本全国の分子科学研究者に大規模計算を実行する環境を提供する計算機センターとして設立され、22年を経た今日においても所内外の分子科学研究の基盤施設としての重要性は変わらない。実際、「分子研リポート'94」に報告されている通り、外部評価委員、運営委員、所内外の利用者の多くは、本センターが分子科学理論計算分野へ貢献してきた歴史的経緯を高く評価しており、当初の目標を高い水準で達成できていることを認めている。

この22年間にセンターの計算機の性能・記憶容量は大幅に増強され、インターネットの普及により利用形態も大きく様変わりしている。図1はセンターに導入された計算機のCPU能力(理論ピーク性能)を年度別に示したグラフである。分子科学計算に必要な計算

処理の需要は年々増加の一途をたどっている。1995年以降、従来からの計算機借料を汎用計算機借料とスーパーコンピュータ借料に分割した。この分割によって、より性能の高い新型機種を導入できるチャンスと、計算機アーキテクチャの多様化に迅速に適応できる計算機構成となった。2000年3月末から稼働を開始するスーパーコンピュータ(富士通VPP5000とSGI Origin2800)、そして汎用高速演算システム(日本電気製SX-5とIBM製SP2)の総合性能は、1979年1月に初めて導入された日立製作所製M-180(2台)の実に13500倍に至っている。また図2に示すように、性能の大幅な増強に加えて、記憶容量は主記憶メモリで約70000倍、ディスク容量で約1300倍に増加している。この間、計算機アーキテクチャも、単一CPUのスカラ型からベクトル型へ、その後、複数CPUを有するスカラ及びベクトル

並列型の混成システムとなった。また複数CPUにおける主記憶メモリへのアクセス機構も分散型、共有型、分散共有

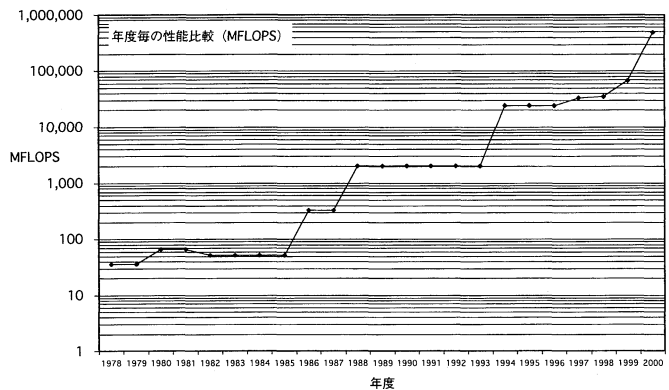


図1 電子計算機センターにおけるCPU能力の増強

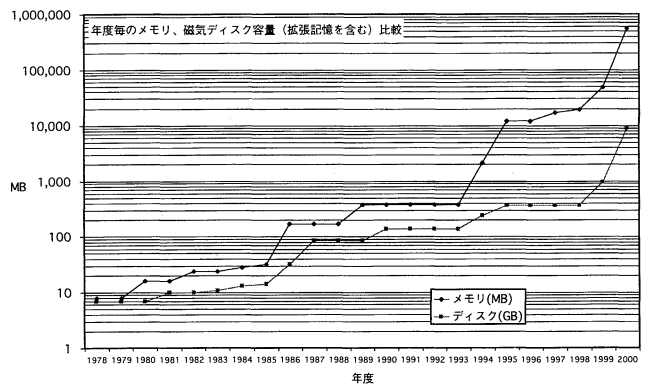


図2 電子計算機センターにおける記憶容量の増強

型等へと高度化及び複雑化している。

分子科学計算の計算機利用分野においても多様化が進んだ。設立以来、初めてベクトル型スーパーコンピュータが導入された1986年以前までは、全CPU資源の60～70%程度が電子状態計算分野に利用されてきた。1986年、日立製作所製 S-810 ベクトル型計算機の導入に伴い、分子動力学、量子反応動力学などの動力学分野での計算機利用が増え、その後ベクトル型計算機としては、同 S-820、日本電気製 SX-3、SX-5 へと更新され、今日においてもこの傾向は続いている。今後の計算機利用においては、ベクトル並列計算方式や分散共有メモリ機能を最大限に活用できるような、新たなソフトウェアが開発され、例えば電子状態計算と動力学計算を融合したアルゴリズム等、媒質との相互作用をも精密に取りこんだ電子構造計算や生体高分子などへの新分野での応用が期待される。

現在の計算機システムは、スーパーコンピュータ NEC SX-3 (3CPU)、並列計算機 IBM 製 SP2 (48CPU) が稼動しており、昨年度の汎用高速演算システムの更新により日本電気製 HSP (2CPU) が同 SX-5 (4CPU, 32GB) に更新された。また CPU 能力を增強するために施設運営費によって日本電気製 HPC (2CPU)、日立製作所製 SR2201 (16CPU) が導入されている。前述の通り、まもなく SX-3 は富士通 VPP5000 (30CPU) と SGI Origin2800 (256CPU) から成るシステムに更新される。過去 6 年間に導入され利用されてきた計算機が、実際にジョブ処理のために稼動してきた時間を年度毎の1CPU当たりの月平均ジョブ処理時間として図 3 に示した。本センターでは、年間を通じて定期保守

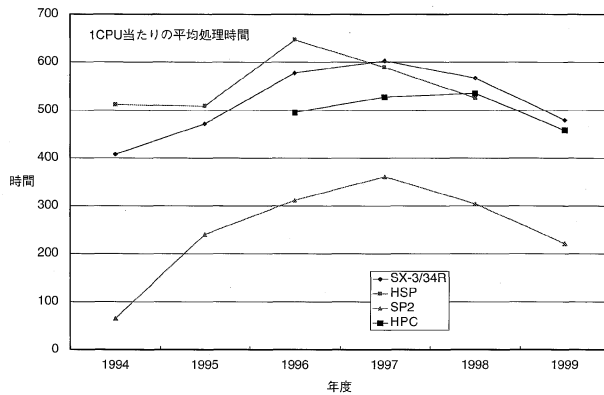


図 3 過去 6 年間の CPU 利用状況

及び障害対応時間以外 1 日 24 時間体制の運用を行っており、1 ヶ月の通電時間は約 700 時間であることから 500 時間 (稼働率 70%) を越える運用は、利用者から見た場合には、待ちジョブが並ぶ高負荷状態である。48CPU から構成される SP2 は約半数の CPU が並列ジョブクラスに割り当てられているため 1CPU 当たりで平均すると、他の逐次処理を主体としたベクトル計算機に比べ、ジョブ処理時間は高くない。

それぞれの計算機は導入以降、徐々に利用率が増加し 2・3 年後にピークを迎えている。SX-3、HSP については利用率が 80% 以上にも達し飽和状態を経験している。導入当初は個々の計算機に適したソフトウェアへの移植作業を行うなどジョブ処理以外での利用も含まれ、ソフトウェアの完成度が高まり、利用者が新しい計算機に慣れるに従い、より大規模な計算処理を要求することがグラフから見える。逐次処理コードからの並列化が比較的困難な分散メモリ型計算機 (SP2) では、ソフトウェアの移植 (並列化) が行われたとみられる時期 (1997 年度) での利用率の上昇は著しい。導入から 2・3 年後に利用のピークに達した計算機は、さらに大規模な計算処理を多数要求されるが、計算機資源に限りがあるため常時待ちジョブが並ぶ状態が長期にわたると利用率は徐々に低下してゆく。スーパーコンピュータに比べてワークステーション等の小型計算機の開発期間が著しく短いため、最新鋭の計算機が利用者の研究室に導入されることも、グラフが右肩下がりとなる要因の一つと考えられる。従ってセンターでは、利用のピークを迎えた時期から 2・3 年以内に次期の更新による CPU 能力の增強を行い、研究室では実行が困難な (または不可能な) 計算処理の要求に迅速に対応してゆくことが必要である。

1997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、1999年1月に機種を更新することを断念し、スーパーコンピュータの更新を1年延期することとした。これを補うべく汎用システムの機種更新を1年早め、1999年3月には最新鋭のベクトル並列計算機SX-5が導入された。このように、汎用高速演算システムとスーパーコンピュータシステムは、それぞれ中規模ベクトル演算と大規模スカラ並列演算及びベクトル並列演算のように相補的なシステム構成としての位置付だけでなく、計算機の更新時期を柔軟に調整する観点からも2システムから成る計算機構成は重要である。

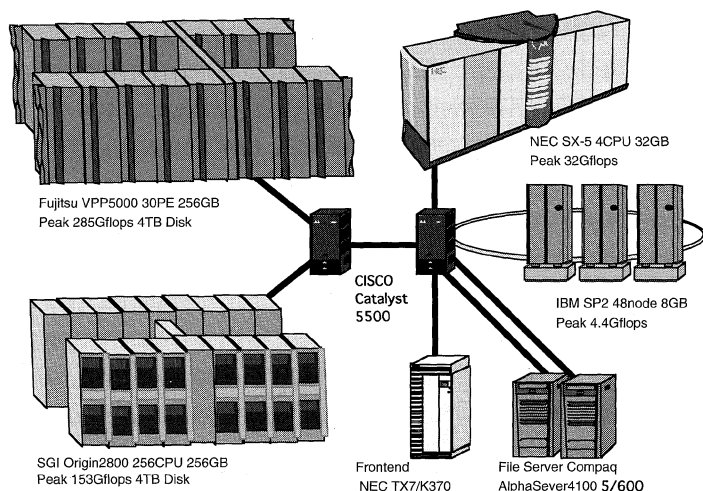


図4 2000年4月以降の計算機構成

2000年4月以降の計算機構成を図4に示す。今回導入が決まったスーパーコンピュータシステムを図の左側に、昨年度に更新を終えた汎用高速演算システムを右側に示す。新スーパーコンピュータシステムは、富士通製 VPP5000 と SGI 製 Origin2800 から構成される。VPP5000 は1CPU当たりの最高演算性能が9.5 Gflops のベクトル演算装置 30 台から構成され、各CPUに8~16GBの主記憶装置を持つベクトル並列計算機である。一方、SGI Origin2800 は1CPU当たりの最高演算性能が0.59 Gflops のスカラ演算装置256CPUから構成され、CPU当たり1GBの主記憶をそれぞれのCPUから共有メモリとしてアクセスが可能な分散共有方式の超並列計算機である。VPP5000では高速なベクトル演算能力を活かした大型ジョブの逐次演算処理はもちろん、例えば8台以上のベクトル演算装置を使った大規模なベクトル並列演算が可能となる。Origin2800 は Non Uniform Memory Access (NUMA) 方式と呼ばれる論理的な共有メモリ機構を有する。NUMAは主記憶装置が各CPUに分散して配置されているためCPUから主記憶へのアクセス速度が非等価ではあるが、利用者プログラムから大容量のメモリを容易に利用することが出来るため、大規模な並列ジョブの実行が可能となる。昨年度、導入された SX-5 は1CPU当たり 8Gflops の最高演算能力を持つ共有メモリ型ベクトル計算機であり、SP2は分散メモリ型スカラ並列計算機である。これらの計算機の特徴を活かしつつ、利用者ジョブの効率的な実行環境を構築することがこれからの課題である。

5-1-2 岡崎共同研究機構・計算科学研究センターと分子科学研究所・計算機室

2000年4月には、分子科学研究所電子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転換される予定である。スタッフは、教授1、助教授1、助手2から構成されることになっている。しかし、定員増があったわけではなく、分子研から助教授1と助手1が、基礎生物学研究所（基生研）と生理学研究所（生理研）から各助手1の定員が計算科学研究センターに振り替えられることになっている。

改組以前（現在）の岡崎機構内で電子計算機・情報ネットワーク関連のスタッフとしては、分子科学研究所電子計算機センターには、理論系教授が兼任しているセンター長、助教授1、助手2、技官5（うち一人は所内情報ネットワーク専任）がおり、また基生研には、培養育成研究施設・電子計算機室に助手1、生理研には、脳機能計測センター・生体情報処理室に助手1がいる。さらに基生研と生理研には計算機・ネットワーク関連の仕事をしている技官がそれぞれ若干名いる。これに加えて数年前より岡崎機構全体の情報ネットワークの企画・管理・運営などを総括する助手が1名採用されて、岡崎機構「情報ネットワーク管理室」に配属されている（組織上はこの助手の所属は分子研計算機センターに属している）。

4月の改組転換以降も、これまで分子科学研究所電子計算機センターが共同利用研究機関の業務としてきた利用者サービスには変更はない。現行の分子科学研究所電子計算機センター規則には、「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、センターの大型電子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。」となっている。すなわち、これまでも基生研・生理研の研究に関連する計算を処理することにはなっている。そのために、運営委員には各研究所から教授あるいは助教授が参加している。2000年度の計算機利用申請は、従来通りこの3月に開かれる「運営委員会」で審議されるが、今後、改組転換に伴い新たな申請を募集する場合は、計算科学研究センター運営委員会で新たに議論する必要がある。

分子研の電子計算機センターでは、助手1と技官5が「岡機構化」されないが、彼らの働きなしには新計算科学研究センターは全く動きが取れない。したがって、分子研内の措置として「計算機室」をあらたに設置して、この計算機室と計算科学研究センターとの密接な共同作業で、新研究センターを運営していく必要がある。しかしながら、運営諸経費等、日常業務の上ですぐさま問題になることが生じよう。また、従来、分子研所内利用者が負担していた使用料の取り扱いも問題になろう。

計算科学研究センターへの改組は、統合バイオセンターが3研究所の共同事業として岡崎機構に作られることに伴って進められることになった。他に生理学研究所・動物実験施設が動物実験研究センターに、基礎生物学研究所・アイソトープ実験施設がアイソトープ実験センターに「岡機構化」される。MIT press は、新しく「*Computational Molecular Biology Series*」を発刊するにあたり“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.”と述べている。「分子生物学を情報科学から計算科学へ転換する」というのは少々言い過ぎとしても、生物学における計算機利用が情報科学的側面からより広い計算科学的利用へと発展しつつあることは事実である。

岡崎国立共同研究機構・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し、世界的に特異な展開を実現しなければならない。そのためには、もちろん優れた研究者の結集が第一の条件であり、同時に、さら

にいつそう高性能な計算機システムの導入も不可欠である。また、国際協力の推進が新センターの発展のために特に重要である。

ネットワーク管理室との関係

岡崎機構・「情報ネットワーク管理室」は引き続き、岡崎機構内の情報ネットワークの維持・管理・企画に責任を持たなければならない。この「管理室」を通じて、数年間3研究所と管理局のネットワーク関係スタッフは共同作業を積み重ねてきた。この作業の中で、各研究所・管理局で責任を持つ部分と、岡崎機構「管理室」が責任を持つ部分とが整理されてきた。各研究所・管理局内の情報ネットワークがそれぞれの責任で運営されている現状の体制を維持し続けなければならない。もちろん、計算科学研究センターは情報ネットワーク管理室と緊密な連携を持ち続けなければならない。

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。

5-1-3 将来構想検討会議

2000年1月25日に「分子科学研究所電子計算機センター将来構想検討会議」を開催した。所外からは、相田美砂子(広島大)教授、大峰巖(名古屋大)教授、片岡洋右(法政大)教授、柏木浩(九州工大)教授、斎藤晋(東工大)教授、斎藤稔(弘前大)教授、榊茂好(熊本大)教授、橋本健朗(都立大)助教授、中島徹(東大)助手、中野雅由(大阪大)助手、中村恒夫(京大)大学院生、三浦伸一(東工大)助手、山西正人(東大)大学院生の13名が参加した。研究所内からは茅所長を始め、平田文男教授、中村宏樹教授、小杉信博教授、岡本祐幸助教授、谷村吉隆助教授、神坂英幸(総研大)大学院生、西川武志博士研究員および、電子計算機センターの岩田末廣センター長、青柳睦助教授、南部伸孝助手、高見利也助手と技術スタッフ(西本、水谷、南野、手島)が討論に参加した。4時間以上に涉って様々な問題が議論された。その中で主に議論された問題点を以下に整理する。

a) 電子計算機センターはどの様な利用者への計算機サービスに力点をおくべきか

センターの設立当初から原子分子の電子構造の理論計算分野を中心に、センターでなければ実行が困難な計算機の利用が盛んに行われ、国内で唯一の分子科学計算センターとしての位置付を確立した。近年では、計算分野も拡大さ

れ、また研究室に比較的安価で高性能のワークステーションが導入され、センターの利用のされ方及びジョブの内容にも変化がみられる。そこで、今後電子計算機センターはどのような利用者への計算機サービスに力点を置いて運用を行うべきか、について委員の方々に議論して頂いた。

- ・ 設立当初、運用が上手くいっていたのは、利用目的がかなり限定されており、ユーザもその利用分野の方が大多数であったからであろう。現在は利用形態、利用分野ともに非常に複雑に、広範になっている。全部をサポートしようとするのは無理ではないか。このような討論会を数回開いて、方向性を明確に決定して行くのはどうか。
- ・ 大学の大型計算機センターでは、以前は課金係数が高いこと、計算機資源の制限（ディスク、メモリ制限）もあり、大規模ジョブの実行が困難であった。現在では課金も安くなってきたので大型ユーザが研究費を出して大型計算機センターを使う傾向が見られる。
- ・ ユーザがどういう計算機の使い方をしているのかを把握しないと、環境整備はできない。外部ユーザがどの程度の環境を持っているかも把握する必要がある。それをふまえて、棲み分け等を考える必要がある。
- ・ 安いマシンの性能が急速に上がっている。コストパフォーマンスで研究室の計算機環境と比較したらセンターの存在意義は低下してしまうのではないか。最初の頃のセンターでは新しい方法論を開発していた。現在は計算機アーキテクチャや、ソフトウェアが複雑化し、また応用プログラムも肥大化しているので、本格的な開発は難しいが、センターは新しい方法論の確立をめざす場所でもあって欲しい。
- ・ センターは利用目的と規模において3種類のユーザを持っている。1つは理論研究分野のトップレベルの研究を行っている（大規模計算も行う）研究グループ。1つはある程度のワークステーションを持っている理論研究グループ。もう1つは大規模な計算を行う実験のグループ。それぞれ無視できないのではないか。
- ・ 所内（理論研究系）が使いやすい計算環境をめざすのも1つの方向。
- ・ 計算機が1台あれば研究が遂行できるグループは、各大学の大型計算機センターで吸収できるのではないだろうか。昔ほど計算環境が無いという緊迫感はない。
- ・ 計算機運用の面で特徴がなければ、大規模計算ユーザはセンターから離れていく。独自性、方向性を明確に出さないとユーザがついてこなくなるので、計算機更新時の借料の増額等、施設設備の拡充も困難となる。
- ・ 議論の観点が、古い分子科学ユーザに特化しすぎているようだ。常に新しいユーザ、新しい分野のことも考えることが必要である。特定分野のために計算機資源を用意するだけでなく分野の拡大も検討する必要があるのではないか。
- ・ 新規利用者や比較的小規模な研究グループと大規模計算グループのどちらかに決めずに、両方の計算機利用環境を考慮した運用が必要。リプレース直後のリソースが余っている時期だからこそ、大規模計算向けの大型プロジェクトに計算資源を利用する、という試みをして良い。ただしスケジュールが難しい。

b) 新システムをどのように運用するか

4月より新スーパーコンピュータが運用を開始するに先立ち、VPP5000(VPP)30ノードとSGI Origin2800 256 CPUを

どのように運用するか、並列ジョブのジョブクラス等について議論した。

- ・ 並列計算ジョブに利用できるプロセッサ数は多い方が良い。VPPなら8プロセッサ以上。将来はもっと多数の並列が必要であろう。多数プロセッサによる効率的な応用ソフトウェアの開発には、それだけの環境が必要。センターとしては多数の環境を用意していただけるとありがたい。
- ・ VPPならば16以上、SGIならば64以上のクラスを作っていたいただきたい。
- ・ 名古屋大学大型計算機センターでは32CPU及び16CPUの並列ジョブが常に走っている。大規模計算利用者にはメモリ、ディスクが足りない。ユーザ持ち込みのディスクを設置できるようなフレキシブルな運営が必要。
- ・ 計算資源を細切れにするのは、大規模計算を行う環境として適さない。VPPを8プロセッサ程度で分割運用するのでは意味がない。
- ・ 京大では40PEまで普通に使える。SGIも多数を一度に使えて初めて意味がある。

またセンター側から、「少数の研究グループに最大リソースを提供する様な運用をしてもよいかどうかを判断しかねている。思い切った運用についてどう思うか？」との問いかけに対し以下の意見を頂いた。

- ・ 4月以降の計算機リソースは確実に増加する。3月の運営委員会時点での割り振りでリソースが多少余るのではないだろうか。その余剰分で思い切った運用するのは可能。運用当初、テスト的にやるには好機である。
- ・ 京大でVPPを使っているが、ベクトルの効かないものはワークステーションかまたはパソコン並の性能である。大きなメモリを使いたいだけならば、VPPを使わせるよりもパソコンクラスタを用意すべき。
- ・ 土日が大規模計算のみに占有されるようなのはきつい。月に1度くらい試行されるのならば問題ないのでは。年に4、5回が限度ではないか。
- ・ できるだけ大きく使いたい。SGIならば128までは並列で使えるようにしてもらいたい。VPPも並列で大きくとれるとうれしい。常に監視して適切なルールを適応して運用してほしい。
- ・ 少数の研究グループに最大リソースを提供する様な運用を行う場合は、審査の仕方、審査委員の選定も2重化していく必要がある。従来の審査方法とは違った方法が必要である。

c) バイオサイエンス分野の研究課題について

2000年4月には、分子科学研究所・電子計算機センターは岡崎共同研究機構・計算科学研究センターに改組される予定である。また機構の共通センターとして統合バイオサイエンスセンターが設置される予定であり、バイオサイエンス分野の計算機利用について議論した。

- ・ 分子研がバイオサイエンス含め生体系などの複雑系に進出していくのは基本的に良いことだと思う。機構化によって、分子研が主導を担う形でバイオ分野での計算機利用が促進されることが理想だと思っている。当面の移行にあたっては、センターのリソース不足等、危惧すべき点は少ないと思う。
- ・ バイオロジの分野でもゲノムという情報处理的な用途だけでなく、次のレベルに発展しようとしてきている様だ。現時点のリソースでは、そこまでは難しいので、当面は分子科学分野に限った利用に限定せざるを得ない。近い将来、次のステップではバイオ関連の計算機利用を念頭においたシステムに変わっていくことになるだろう。

- ・分子科学はこのままではいけない。分子科学がどういう分野に成長していくかが重要で、バイオ分野に成長していくことは重要である。それに連れて、計算機利用分野も変わってゆく。
- ・生物系であれ、生体系であれ、生命系であれ蛋白質1つを扱っている限りは生命を扱っているとは思えない、と言うのは言い過ぎであろうか。
- ・「生体分野の信頼のおける計算方法を開発する」ことを目標にしてはいかがか？今のバイオロジーの研究者の利用しているソフトウェアをセンターに準備してサービスを行うだけでは研究開発とは言えない。
- ・ゲノム解析ではマルチプルアライメントをする人、構造予測する人、NMRの予測をする人などがいて、情報処理を含め色々な計算機利用を行っているようだ。このような情報处理的な利用として、バイオ関係のサービスを始めると、単にサービスをするだけのセンターになるのではないか？

d) 新しい組織及び、国際化について議論した。

- ・電子計算機センターにソフトウェア開発部門を作ったらどうだろうか。アメリカだと、センターには10人くらいのドクターがいてソフトウェア開発をやっている。そういう環境でなければ応用ソフトウェアが生まれてこない。オブジェクト指向のプログラミングは並列化に適している。そういうものが普及しないのはセンター内に開発部門が無いからでは。
- ・大学のセンターには人は結構いるけど目標が定まらない。センターが目標を掲げることが必要。

現在のセンターの運用方針では、外国人でも国内の研究グループに所属していれば利用できるが、国際研究集会などで、外国人主導の利用の要請がある。すなわち、国内に研究グループを持たないが、インターネットを通じて国外からセンターの計算機資源を利用するといった要請である。この点について委員から以下の意見を頂いた。

- ・現在の計算リソースでは無理だが、将来的には外国人の客員部門なども作ってはどうか。計算機センターは計算機のおもり役ではなく、サイエンスの牽引役として進展すべきである。
- ・方法論の国際シンポジウムを開く、というのも国際化の選択肢にあげられると思う。

今回の議論を参考にして、3月の電子計算機センター運営委員会でも議論を重ね、4月からの運用を考えていく必要がある。今後もこのような会議を開いて、広い世代の研究者の意見を採り入れ、センターの方向性を考える機会を増やし運用に反映させていかなければならない。