

I 部

目 次

1.	巻頭言	計算科学研究センター	岡崎 進	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			9
3.3	利用課金点数			11
4.	一般報告			13
4.1	ライブラリプログラムの収集と開発			13
4.2	データベース開発状況			18
5.	平成12年度計算機稼働状況および利用者数			19
5.1	利用申請プロジェクトおよび利用者数			19
5.2	電力使用および計算機稼働状況システム稼働状況			20
5.3	計算機利用状況			20
5.4	クラス別CPU使用時間			22
5.5	クラス別VPU使用時間			24
5.6	ジョブ処理件数			25
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			26
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			27
6.3	計算科学研究センター運営委員			28
6.4	計算科学研究センター職員			29
6.5	応用プログラム相談員一覧			29
6.6	利用者数とCPU時間の推移			30
6.7	建物図			32
6.8	マニュアル一覧			34
7.	現状と将来構想(分子研リポート'00より転載)			42

巻頭言

計算科学研究センター 岡崎 進

今年は、当計算機センターが岡崎機構直轄の計算科学研究センターとして改組され、新たな使命を持って改めて活動を開始した最初の年にあたります。よく言えば、21世紀の幕開けにふさわしく、世紀とともに新しい道を歩み始めたわけですが。もう皆さんもすでにご存じのように、大きな変更点は、これまでの分子科学に加えて広くバイオサイエンス分野をも含め、国立共同利用研究機関の一組織として全国の計算科学の研究遂行のための拠点作りをしようというものであります。また、これまでの単なるCPU時間の提供というサービス業務だけでなく、計算科学という学問分野をさらに発展させるべく、センター自身が研究組織として学問的に新たな展開をはかるという使命も付加されたわけであり、この意味で、ここ数年の間にセンターに求められていることは、センターの前身である分子研計算機センター時代における電子状態理論や分子動力学計算分野での高い研究レベルと、それに裏打ちされた輝かしい研究実績とを継承しこれをさらに発展させることであり、一方でバイオインフォマティクスすら視野に入れながら、バイオサイエンスにおける計算科学という新しい分野に対する基盤作りを行いこれを確立していくことである、と行うことができるでしょう。

景気よく響きのいい話ではありますが、これを具体化していくには数々のハードルを越えていかなければならないことは言うまでもありません。このため、センターも新しい体制で事にあたろうということで、生理学研究所や基礎生物学研究所から新たに職員を迎え、また外部からも私などがお仲間入りさせていただいた次第であります。バイオサイエンス分野における計算科学の方向性は固定されたものではなく、今まさに現在進行形で展開が模索され、新しい分野が形成されつつあるということは研究者にとっても大きなチャンスであると言えます。このような中で、当センターはそのお手伝いとしてバイオサイエンス分野を担うべき上記の2研究所との連携、協力をひとつひとつ進めていかなければなりません。

所掌分野が拡大したことは、導入すべきコンピュータの性格にも多少の影響を及ぼすこととなるでしょう。これまでも、MO計算に適した計算機とMD、MC法に適した計算機というかなり性格の異なる2通りの計算機を考えていかなければなかったわけですが、これらに加えてバイオサイエンス用の全く性格の異なった計算機が新たに加わるとなると話は大変です。悪化の一途をたどる国家財政の下、予算の大幅増加には困難なものがあります。仮に同額の予算でこれをまかなうとすると、小さな計算機の博物館となってしまいう危険性すら生じてしまいます。従いまして、一層効率的な運用が求められるわけではありますが、目的が分散される以上具体策はなかなか難しいところでもあります。特に米国において、MOの分野においてもまたMD、MCの分野においてもこれまでの常識を超えた巨大な計算が行われつつあるという現状をまの

あたりにするとき、私達がこれからどのような道を進むべきかよくよく考えて実行に移していかなければなりません。

計算科学研究センターとしての方向性に関する最初の具体的な検討は、来年度予定されている“汎用高速演算用スーパーコンピュータシステム”の更新を通して行われることになるでしょう。これは、現有のシステムのうち、NEC SX-5とIBM SP-2で構成されている部分の更新に相当しますが、すでに11月には外部委員も迎えて仕様策定委員会が発足し、議論を開始したところであり、単に現有システムの性能アップを目指した更新にとどまらず、上述のように当センターの方向性をも含めた議論の深まりが求められるところでもあります。

さらに何年か先には、岡崎機構にも独立行政法人化の波が押し寄せて来るものと思われ、この大きな変革の時代に、計算科学研究センターがより発展し、我国の先進的な研究への大きな貢献を目標にしていい方向に向かうことができるよう、皆さんの一層のご理解、ご支援を心からお願い申し上げます。

2. スーパーコンピュータワークショップの活動

平成13年3月22日(木)、23日(金)の両日、計算科学研究センターで、スーパーコンピュータワークショップを開催した。約70名の参加者があり、スーパーコンピュータの活用方法についての講習や、センターのマシンを使って得られた研究成果などの講演を行った。

また、講演で用いた資料や OHP を集めた計算科学研究センターワークショップレポート(1号)を発刊した。

さらに、センターホームページ (<http://www.rccs.orion.ac.jp/workshop/>) で、講演の動画や講演に使用した資料(PDF形式)を公開している。

◎ スーパーコンピュータワークショッププログラム

タイトル： 「分子科学と大規模計算」

日時： 平成13年3月22日(木)、23日(金)

場所： 計算科学研究センター2階会議室

3月22日(木)

13:25-13:30	Open remark	平田文男(計算科学センター)
座長：南部伸孝		
13:30-14:00	「有機金属会合種の反応における協同効果に関する理論的研究」	山中正浩(東大理)
14:00-14:30	「C ₆₀ 超伝導体の電子構造」	梅本幸一郎(東工大理工)
14:30-15:00	「分子磁性体の <i>ab initio</i> 計算」	鷹野 優(大阪大理)
15:00-15:30	「4成分相対論的電子状態理論の開発」	柳井 毅(東大工)
15:30-15:45	(coffee break)	
座長：高見利也		
15:45-16:45	「HPF 言語と今後のプログラミングインタフェース」	妹尾義樹(日本電気)
16:45-17:45	「OpenMP プログラミング・ワークショップ」	芦澤芳夫(日本 SGI)
17:45-18:00	「新年度の申請について」	青柳 睦(計算科学センター)
18:30-20:30	懇親会	

3月23日(金)

座長：片岡洋右

9:30-10:00 「蛋白質ナノチューブの第一原理電子論」	武田京三郎(早大理工)
10:00-10:30 「密度汎関数法プログラム ProteinDF を用いた並列処理によるシトクロム c の全電子計算」	佐藤文俊(九工大情報工)
10:30-11:00 「機能を生み出す蛋白質のダイナミクス」	北尾彰朗(京大理)
11:00-11:15 (coffee break)	

座長：森田明弘

11:15-11:45 「星間空間における分子生成反応の理論的研究」	長村吉洋(立教大理)
11:45-12:15 「シルセスキオキサンの分子軌道法計算による研究」	工藤貴子(群馬大工)
12:15-13:30 (昼食)	

座長：青柳 睦

13:30-14:15 「VPP Fortran の設計思想と特徴」	山中栄次(富士通)
14:15-15:00 「プログラミングに関する VPP 利用技術について」	村瀬丈夫(富士通)
15:00-15:10 (休憩)	

座長：北尾彰朗

15:10-15:40 「過飽和蒸気相における均質核形成の自由エネルギー」	片岡洋右(法政大工)
15:40-16:10 「気液界面の構造に対する sum frequency generation スペクトルの非経験的理論解析」	森田明弘(京大院理)
16:10-16:40 「定圧第一原理分子動力学法での Si 結晶構造の安定性と k 点サンプリング数との関係」	田代順一(慶応大理工)
16:40-17:10 「バクテリア Proteus mirabilis のパターン形成シミュレーション」	橋本昌人(分子研)
17:10-17:15 End remark	平田文男(計算科学センター)

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、ベクトルスーパーコンピュータ(富士通製 VPP5000)、超並列スーパーコンピュータ(SGI 製 SGI2800, Origin3800)、高速演算サーバーシステム(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)、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す(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ます)。

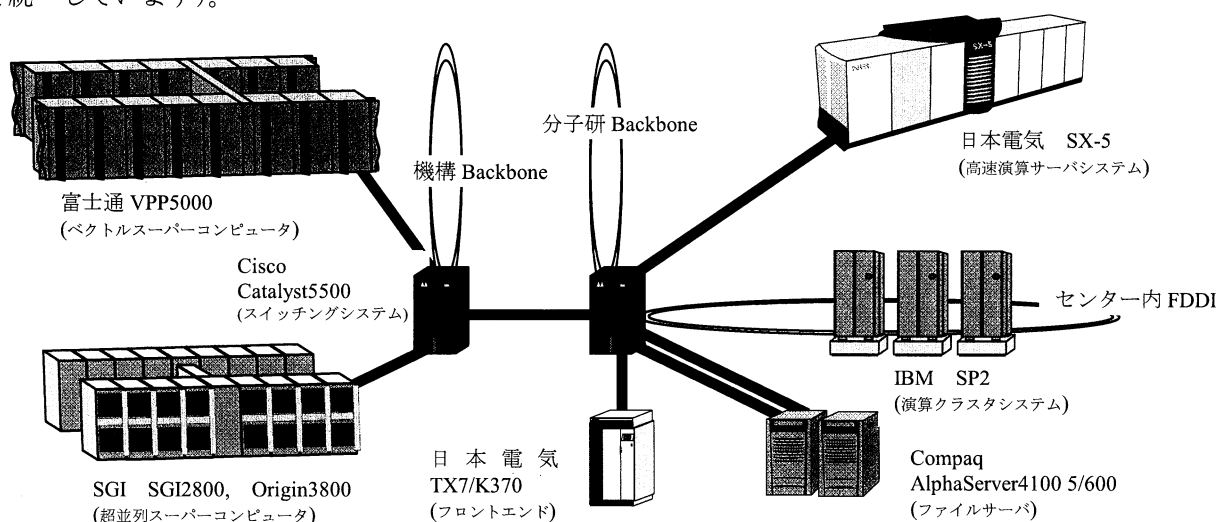


図 3.1 計算機システム概略図

- ・ センター内は 2 台のスイッチングシステム(Cisco Catalyst5500)を中心に各マシンと各バックボーンが相互に接続されています。
- ・ 機構内に FDDI 準拠の 600Mbps 光ループ LAN(機構内 Backbone)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・利用できます。
- ・ SINET を経由してインターネットにアクセスできます。
- ・ センター内の端末は、センター内 FDDI に接続されています。

3.1.1 ベクトルスーパーコンピュータ(富士通製 VPP5000)

- ・ VPP5000 ではジョブ管理(NQS)、バッチ処理と TSS 処理を行っています。

〈演算処理装置〉

主記憶容量	256GB
総理論演算性能	288GFLOPS(9.6GFLOPS/PE)
プロセッサ台数	30 台

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量 (内訳)	3.5TB(18GB×9 ドライブ/RAID、24RAID)
一時作業ファイル領域(/work)	2TB
短期保存ファイル領域(/week)	1TB
長期保存ファイル領域(/save)	0.3TB

3.1.2 並列スーパーコンピュータ(SGI 製 SGI2800、Origin3800)

- ・SGI2800 ではジョブ管理(NQE)、バッチ処理と TSS 処理を行っています。
- ・SGI3800 ではジョブ管理(NQE)、バッチ処理を行っています。

<SGI2800 演算処理装置>

プロセッサ	MIPS RISC R12000 300MHz
主記憶容量	192GB
総理論演算性能	115GFLOPS(0.6GFLOPS/CPU)
CPU 台数	192 台

<Origin3800 演算処理装置>

プロセッサ	MIPS RISC R12000 400MHz
主記憶容量	128GB
総理論演算性能	102GFLOPS(0.8GFLOPS/CPU)
CPU 台数	128 台

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量 (内訳)	4.6TB(36GB×8 ドライブ/RAID、16RAID)
一時作業領域(/work)	3.5TB
短期保存ファイル領域(/week)	1.1TB

3.1.3 高速演算サーバーシステム(日本電気製 SX-5)

- ・SX-5 ではジョブ管理(NQS)、バッチ処理と TSS 処理を行っています。

<演算処理装置>

主記憶装置	32GB
総理論演算性能	32GFLOPS(8GFLOPS/CPU)
ベクトルプロセッサ台数	4 台

<磁気ディスク装置>

総容量 (内訳)	70.4GB
OS	11GB
アプリケーションなど(/local)	21GB

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量 (内訳)	563.2GB
一時作業ファイル領域(/work)	279GB
短期保存ファイル領域(/week)	191GB
他はシステムで使用します。	

3.1.4 高速演算サーバー副システム(日本電気製 HPC)

- ・ HPC ではジョブ管理(NQS)、バッチ処理と TSS 処理を行っています

<演算処理装置>

主記憶装置	1GB
総理論演算性能	4GFLOPS(2GFLOPS/CPU)
ベクトルプロセッサ台数	2 台

<磁気ディスク装置>

総容量	2GB
(内訳)	
キャッシュ	256MB
テンポラリ(/tmp)	256MB
スワップ	512MB

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量	33.6GB
(内訳)	
一時作業ファイル領域(/work)	26GB

3.1.5 演算クラスタシステム(IBM 製 SP2)

- ・ SP2 では、ジョブ管理(LoadLeveler)、バッチ処理と TSS 処理を行っています。

<演算処理装置>

主記憶装置	256MB/node(16nodes) 128MB/node(32nodes)
演算性能	52.9MFLOPS(Thin タイプ、24nodes) 131.8MFLOPS(Wide タイプ、24nodes)
CPU 台数	48 台
(注)このうち 1 台はコントロール用に、もう 1 台を会話処理に使用しています	

<磁気ディスク装置>

総容量	320GB
(内訳)	
一時作業ファイル領域(/work)	4GB/node(総計 288GB)
短期保存ファイル領域(/week)	32GB

3.1.6 ファイルサーバシステム

◆主システム(COMPAQ AlphaServer4100 5/600)

<演算処理装置>

主記憶装置	2GB(1GB×2)
CPU 台数	2台(クラスタ構成)

<磁気ディスク装置>

総容量	414GB
(内訳)	
ユーザホームディレクトリ	414GB

◆副システム(日本電気 UP4800/650)

<演算処理装置>

主記憶装置	512MB
CPU 台数	1台

<磁気ディスク装置>

総容量	76GB
(内訳)	
ライブラリ、データベース、 バックアップなど	76GB

3.1.7 フロントエンド

◆ccfep1.center.ims.ac.jp(日本電気 TX7/K370)

主記憶装置	1GB
演算性能	14.6SPECint95×2
CPU 台数	2台

◆ccfep2.center.ims.ac.jp(日本電気 EWS4800/360AD)

主記憶装置	256MB
演算性能	149MIPS
CPU 台数	2台

3.2 キューの構成

それぞれのホストにおけるキュー構成は以下のとおりです。

表中の言葉の意味は下記の通りです。

キュー名	: 各ホストのバッチ投入機構(NQS, NQE, Load Leveler)に用意されているキューの名前
CPU 時間	: 各キューにおいて、実行可能な最大 CPU 時間
主記憶	: 各キューにおいて、利用可能な最大主記憶容量
多重度	: 各キューにおいて、同時に実行出来るジョブの最大件数
多重度	: 各キューにおいて、利用可能な最大ノード数
1 ユーザ制限	: 各キューにおいて、あるユーザが同時に実行できる最大ジョブ件数
1 グループ制限	: 各キューにおいて、あるグループが同時に実行できる最大のジョブ件数

富士通 VPP5000 (ccvpp) <大規模ベクトルジョブ処理/ベクトル並列ジョブ処理>

キュー名	CPU 時間	主記憶 (標準値)	多重度	ノード数	1 ユーザ 制限	1 グループ 制限	備 考
jobexec	1 時間	7GB×2	-	2	-	-	Jobexec, V1, V2 でノード共用
V1	6 時間	512MB	3	3	1	2	
V2	12 時間	12GB (1.5GB)	12	3	1	1	
V3	24 時間	15GB(7GB)	4	2	1	1	VP6 が空の時 24 ノード利用可能
V4	24 時間	7GB(3GB)	15	14(24)	1	2	
V5	48 時間	7GB(3GB)	15	14(24)	1	2	
VP6	12 時間	7GB×10	1	10	1	1	ベクトル並列ジョブキュー
会話処理	30 分	256MB	-	1	-	-	コンパイル・リンク他

S G I Origin2000,SGI2800,Origin3800 (cco2k,cco3k) <小規模から大規模並列ジョブ処理>

キュー名	CPU 時間	主記憶 (標準値)	多重度	ノード数	1 ユーザ 制限	1 グループ 制限	備 考
G1	12 時間	8GB	4	4-8	1	1	並列ジョブ(SGI2800)
G2	24 時間	16GB	2	9-16	1	1	並列ジョブ(SGI2800)
G3	48 時間	32GB	3	32	1	1	並列ジョブ(SGI2800)
G4	24 時間	64GB	1	64	1	1	並列ジョブ(SGI2800)
G2S	24 時間	16GB	8	9-16	1	4	並列ジョブ(Origin3800)
G5S	24 時間	128GB	無制限	128	-	-	特別申請(Origin3800)
会話処理	2 時間	4GB	4(b)	1-4	-	-	32CPU

(注1)ノード数の上限値は、それぞれのジョブキューにおいて、並列ジョブが最大限利用できる物理的な CPU 台数です。マルチスレッド型の並列ジョブやマスター・スレーブ型のジョブは1ジョブから生まれるスレッドの個数やプロセス数はCPU台数を超える場合があります。

(注2)G3,G4の2クラスでの最大同時実行数は3です。ただし、G4クラスの方が優先度を高くしてあります。

(注3)Origin3800で特別申請利用者が利用中は、G2Sキューを閉鎖します。閉鎖スケジュールは1ヶ月前に確定します。

日本電気 SX-5 (ccsx5) <中規模から大規模ベクトルジョブ処理>

キュー名	CPU 時間	主記憶 (標準値)	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	
会話処理	10 分	256MB	-	-	-	コンパイルリンク用

日本電気 HPC (cchpc) <小規模から中規模ベクトルジョブ逐次処理>

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	24 時間	128MB	2	1	1	
W2	48 時間	512MB	2	1	1	
会話処理	10 分	32MB	-	-	-	rsh のみ

IBM SP2 (ccsp2) <分散メモリ型並列ジョブ処理>

キュー名	CPU 時間	主記憶	多重度	ノード数	1 ユーザ 制限	1 グループ 制限	備 考
P1	72 時間	128MB	1	8-23	2	6	Thin ノード名は以下の通り ccsp201, ccsp202, ccsp203, ccsp204, ccsp205, ccsp206, ccsp207, ccsp208, ccsp209, ccsp210, ccsp211, ccsp212, ccsp213, ccsp214, ccsp215, ccsp216, ccsp263, ccsp266, ccsp267, ccsp268, ccsp269, ccsp270, ccsp277
P2	96 時間	128MB	1	7	2	6	Wide ノード名は以下の通り ccsp251, ccsp253, ccsp255, ccsp257, ccsp259, ccsp261, ccsp263
P3	48 時間	256MB	1	16	2	6	Wide ノード名は以下の通り ccsp217, ccsp219, ccsp221, ccsp223, ccsp225, ccsp227, ccsp229, ccsp231, ccsp233, ccsp235, ccsp237, ccsp239, ccsp241, ccsp243, ccsp245, ccsp247
会話処理	10 分	32MB	-	1	-	-	コンパイルリンク用(ccibm) ccsp265

日立製作所 SR-2201 (ccsr) <分散メモリ型並列ジョブ処理>

キュー名	CPU 時間	主記憶	多重度	PU 数	備 考
R	24 時間	224MB/PU	16	16	並列ジョブ投入可能
会話処理	10 分	224MB/PU	-	2	コンパイルリンク用

3.3 利用課金点数

利用課金は差し当たり徴収していませんが、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。

◆ 利用点数算出法

$$P = P1 + P2 + P3 + P4 + P5 + P6$$

P1~P6 は各マシンにおける利用点数であり、それぞれの算出法は次の通りです。

□ベクトルスーパーコンピュータ (VPP5000) の利用点数算出法

$$P1 = SPU \times Fvpp \times a + VPU \times Fvpp \times b$$

S P U : スカラ演算器使用時間(秒)

V P U : ベクトル演算器使用時間(秒)

a : スカラ課金係数 0.08/sec

b : ベクトル課金係数 0.04/sec

F v p p : $1/3 \times (Pe+5)$ [VP6 利用の場合、Pe は使用した PE 数]

: 1.00 [V1-V5 および会話処理利用の場合]

(注) VPP5000 における並列ジョブに対する課金は、並列実行において最長時間実行した PE の演算時間に対して課金を行うが、その演算時間に対し、並列度合いによって変わる比率 Fvpp をかけて調整を行っています。

□超並列スーパーコンピュータ (SGI2800、Origin3800) の利用点数算出法

$$P2 = CPU \times Fsg i \times c$$

C P U : CPU 使用時間(秒)の総和

c : CPU 課金係数 0.008/sec

F s g i : 0.75 [G1~G5、G2S、G5S に一律に適用]

: 1.00 [会話処理に場合]

(注) SGI2800、Origin3800 における並列ジョブに対する課金は、逐次および並列実行を問わず、演算時間の総和に対して課金を行いますが、キュークラスによって変わる比率 (Fsg i) をかけて統制を行います。

□ 高速演算サーバシステム（SX-5）の利用点数算出法

$$P3 = \text{SPU} \times d + \text{VPU} \times e$$

S P U : スカラ演算器使用時間(秒)

V P U : ベクトル演算器使用時間(秒)

d : スカラ課金係数 0.10/sec

e : ベクトル課金係数 0.08/sec

□ 高速演算サーバ副システム(HPC)の利用点数算出法

$$P4 = \text{SPU} \times f + \text{VPU} \times g$$

S P U : スカラ演算器使用時間(秒)

V P U : ベクトル演算器使用時間(秒)

f : スカラ課金係数 0.03/sec

g : ベクトル課金係数 0.02/sec

□ 演算クラスタシステム（SP2 Wide）の利用点数算出法

$$P5 = \text{CPU} \times 2 \times h$$

C P U : CPU使用時間(秒)

h : CPU 課金係数 0.01/sec

□ 演算クラスタシステム（SP2 Thin）の利用点数算出法

$$P6 = \text{CPU} \times 2 \times i$$

C P U : CPU使用時間(秒)

i : CPU 課金係数 0.005/sec

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)
VPP5000	1.38	2.78
SGI2800,Origin3800	13.89	-
SX-5	1.11	1.39
HPC	3.7	5.56
SP2(Wide)	11.11	-
SP2(Thin)	22.22	-

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ます。

4. 一般報告

4.1 分子科学ライブラリプログラムの開発

平成 12 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 12 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 dirac

平成 12 年度に新規登録したライブラリプログラムは以下の 18 件である。

Fujitsu VPP5000 版

COLUMBUS	A program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc.
DALTON	An <i>ab initio</i> molecular toolbox for a manifold of properties
G98	GAUSSIAN98 (A. 9): <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	General atomic and molecular electronic structure system
HONDO8	HONDO8.4: <i>ab initio</i> MO calculation
MM2	Molecular mechanics calculation by MM2 force field model
MOLCAS	MOLCAS4.1: quantum chemistry program package for scientists
MOLPRO	MOLPRO2000.1: complete system of <i>ab initio</i> programs

SGI SGI2800 版

COLUMBUS	A program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc.
DALTON	An <i>ab initio</i> molecular toolbox for a manifold of properties
G98	GAUSSIAN98 (A. 9): <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	General atomic and molecular electronic structure system
HONDO95	HONDO95: <i>ab initio</i> MO calculation
MM2	Molecular mechanics calculation by MM2 force field model
MOLCAS	MOLCAS4.1: quantum chemistry program package for scientists
MOLPRO	MOLPRO2000.1: complete system of <i>ab initio</i> programs

NEC SX-5 版

G98 GAUSSIAN98 (A. 9): *ab initio* molecular orbital calculations

NEC HPC 版

G98 GAUSSIAN98 (A. 9): *ab initio* molecular orbital calculations

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

**** Fujitsu VPP5000 VERSION ****

<u>PROGRAM</u>	<u>PROGRAM TITLE</u>
BLAS/VP	Basic linear algebra subprograms
C-SSL II/VP	Scientific subroutine library II (for C)
COLUMBUS	A program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc.
DALTON	An <i>ab initio</i> molecular toolbox for a manifold of properties
G98	GAUSSIAN98 (A. 9): <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	General atomic and molecular electronic structure system
HONDO8	HONDO8.4: <i>ab initio</i> MO calculation
LAPACK/VP	LAPACK
MM2	Molecular mechanics calculation by MM2 force field model
MOLCAS	MOLCAS4.1: quantum chemistry program package for scientists
MOLPRO	MOLPRO2000.1: complete system of <i>ab initio</i> programs
ScaLAPACK	LAPACK (MPL parallel version)
SSL II/VP	Scientific subroutine library II
SSL II/VPP	Scientific subroutine library II (data parallel version)

**** SGI SGI2800 VERSION ****

<u>PROGRAM</u>	<u>PROGRAM TITLE</u>
BLAS	Basic linear algebra subprograms
COLUMBUS	A program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc.
DALTON	An <i>ab initio</i> molecular toolbox for a manifold of properties
G98	GAUSSIAN98 (A. 9): <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	General atomic and molecular electronic structure system

HOND08 HOND08.4: *ab initio* MO calculation
 LAPACK LAPACK
 MOLPRO MOLPRO2000.1: a complete system of *ab initio* programs

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

<u>PROGRAM</u>	<u>PROGRAM TITLE</u>
ASL	(SUBROUTINES) ASL/SX: Advanced Scientific Library/SX
BLAS	(SUBROUTINES) BLAS: Basic Linear Algebra Subprograms Rev. 4.0
COLMBS2	COLUMBUS: modified program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc
CRYSS88	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(A.9): <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	General atomic and molecular electronic structure system
HOND08	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
KOTO	KOTO: <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
LAPACK	LAPACK
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 ****

<u>PROGRAM</u>	<u>PROGRAM TITLE</u>
ASL	(SUBROUTINES) ASL/SX: Advanced Scientific Library/SX
BLAS	(SUBROUTINES) BLAS: Basic Linear Algebra Subprograms Rev. 4.0
COLMBUS2	COLUMBUS: modified program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc
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
IMLS	(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 ****

<u>PROGRAM</u>	<u>PROGRAM TITLE</u>
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
G94I	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.
UNICS3	Universal crystallographic computation program system
WIGNER	Magnitudes of 3-J and 6-J symbols

**** MISC ****

<u>PROGRAM</u>	<u>PROGRAM TITLE</u>
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： 51,432 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 (46,262 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12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	5,170 件
(2) FCDB	163 件

5 平成12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	130	523	188,683	154,592	98,154	61,836,800	39,261,591
	協力研究	6	11	3,220	3,049	88	1,219,600	35,084
	所 内	19	92	53,091	47,782	18,719	19,112,800	7,487,781
生理学	所 内	1	9	4,411	3,970	3,740	1,588,000	1,496,069
合 計		156	635	249,405	209,393	120,701	83,757,200	48,280,525

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/
マシン名	Kwh	VPP	O2K	SX-5	HPC	SP2	平均	合計	稼働時間
平成12年4月	223,410	639	609	644	644	644	636	3,180	351
5月	265,370	693	708	735	735	735	721	3,606	368
6月	248,660	706	704	735	735	735	723	3,615	344
7月	268,420	713	722	734	734	732	727	3,635	369
8月	275,990	736	735	735	735	735	735	3,676	375
9月	249,480	679	678	735	735	735	712	3,562	350
10月	256,600	636	716	702	702	699	691	3,455	371
11月	228,030	644	648	651	651	651	649	3,245	351
12月	247,720	733	733	744	744	744	740	3,698	335
平成13年1月	307,320	680	678	686	686	686	683	3,416	450
2月	260,910	664	660	662	655	662	661	3,303	395
3月	272,870	711	728	733	734	734	728	3,640	375
合計	3,104,780	8,234	8,319	8,496	8,490	8,492	8,406	42,031	369

5.3 計算機利用状況

5.3.1 CPU 使用時間

年月	CPU 使用時間											
	VPP	*	O2K	*	SX-5	*	HPC	*	SP2	*	合計	@
平成12年4月	8,963	47	60,558	39	4,041	78	714	55	7,297	25	81,574	49
5月	8,846	43	83,794	46	2,669	45	995	68	22,554	67	118,858	54
6月	8,544	40	51,424	29	3,775	64	1,349	92	21,702	64	86,794	58
7月	9,709	45	44,126	24	4,228	72	1,314	89	17,620	52	76,996	56
8月	11,172	51	46,620	25	3,076	52	1,300	88	14,292	42	76,461	52
9月	9,505	47	46,483	27	3,514	60	1,295	88	15,460	46	76,258	54
10月	12,010	63	24,608	13	4,403	78	707	50	12,670	39	54,397	49
11月	13,460	70	39,912	24	3,569	69	1,257	97	10,019	33	68,218	59
12月	16,236	74	37,633	20	4,856	82	899	60	13,547	40	73,171	55
平成13年1月	15,905	78	70,536	33	4,779	87	996	73	15,035	48	107,252	64
2月	17,717	89	68,944	33	4,856	92	1,026	78	16,867	55	109,410	69
3月	14,072	66	78,466	34	4,483	76	895	61	19,384	57	117,299	59
合計	146,139	59	653,105	25	48,249	71	12,746	75	186,448	48	1,046,687	56

※ CPU 時間の単位は時です。

※ CPU はスカルプロセッサ(SPU)とベクトルプロセッサ(VPU)それぞれの消費時間の和です。

※ *は、マルチ CPU の計算機における 1CPU 当たりの CPU 稼働率(%)です。

※ @は、各マシンの CPU 稼働率の平均値です。

5.3.2 VPU 使用時間

年月	VPU 時間							
マシン名	VPP	*	SX-5	*	HPC	*	合計	@
平成 12 年 4 月	6,250	33	2,754	53	348	27	9,352	38
5 月	6,045	29	1,501	26	556	38	8,102	31
6 月	6,202	29	2,461	42	610	41	9,273	37
7 月	7,437	35	2,877	49	845	58	11,160	47
8 月	8,825	40	2,313	39	807	55	11,946	45
9 月	7,384	36	2,338	40	722	49	10,443	42
10 月	9,474	50	3,418	61	432	31	13,324	47
11 月	10,468	54	2,547	49	817	63	13,832	55
12 月	12,152	55	3,335	56	415	28	15,902	46
平成 13 年 1 月	11,730	58	3,021	55	592	43	15,343	52
2 月	13,345	67	3,315	63	707	54	17,367	61
3 月	10,629	50	2,414	41	496	34	13,539	42
合 計	109,942	45	32,295	48	7,348	43	149,584	45

※ VPU 時間の単位は時です。

※ *は、マルチ CPU の計算機における 1VPU 当たりの CPU 稼働率(%)です。

※ @は、各マシンの VPU 稼働率の平均値です。

5.3.3 バッチジョブ処理件数

年月	バッチジョブ処理件数					
マシン名	VPP	O2K	SX-5	HPC	SP2	合計
平成 12 年 4 月	2,834	82	992	262	291	4,461
5 月	2,574	830	838	419	429	5,090
6 月	2,908	731	955	178	273	5,045
7 月	2,049	647	1,546	252	430	4,924
8 月	2,178	738	1,257	161	199	4,533
9 月	2,270	764	770	247	150	4,201
10 月	2,170	641	1,378	712	124	5,025
11 月	2,489	687	1,671	169	218	5,234
12 月	2,812	934	1,051	408	185	5,390
平成 13 年 1 月	2,356	717	1,499	205	163	4,940
2 月	2,864	1,019	1,407	231	228	5,749
3 月	2,395	630	773	197	98	4,093
合 計	29,899	8,420	14,137	3,441	2,788	58,685

5.4 クラス別 CPU 使用時間

5.4.1 VPP5000

VPP	(V1)	(V2)	(V3)	(V4)	(V5)	(VP6)	(VC)	(vp23)	合 計	(TSS)	総合計(時)
平成 12 年 4 月	183:07:51	1018:29:15	480:42:35	2754:58:36	2928:56:18	1554:52:34	0:00:00	21:17:58	8942:25:07	21:01:23	8963:26:30
5 月	85:46:58	723:48:46	816:14:51	2773:45:36	3982:57:03	453:58:40	0:00:00	1:10:22	8837:42:16	8:02:27	8845:44:43
6 月	173:42:39	663:00:42	985:39:12	2227:13:42	3370:23:00	1015:20:30	96:27:57	1:10:26	8532:58:08	10:51:14	8543:49:22
7 月	107:58:13	709:04:37	1022:18:25	2495:52:26	3133:29:43	1790:03:54	442:21:38	0:00:17	9701:09:13	7:24:26	9708:33:39
8 月	192:26:37	638:32:09	1027:07:04	2556:40:13	4535:46:23	1817:18:00	392:28:12	2:44:13	11163:02:51	9:20:08	11172:22:59
9 月	173:07:15	394:04:58	957:31:01	2357:01:17	4180:40:39	1408:50:01	0:00:00	22:22:14	9493:37:25	11:14:05	9504:51:30
10 月	461:28:33	886:33:10	1173:53:05	4304:40:51	4485:55:39	678:29:32	0:00:00	9:59:57	12001:00:47	8:51:45	12009:52:32
11 月	383:04:30	1049:04:08	1158:49:15	4335:50:05	5030:19:44	1492:29:54	0:00:00	0:38:49	13450:16:25	9:45:07	13460:01:32
12 月	169:49:55	1626:53:06	1226:18:38	4694:06:12	6275:53:19	2231:03:00	0:00:00	0:06:32	16224:10:42	12:15:51	16236:26:33
平成 13 年 1 月	261:56:07	1554:59:15	1225:59:48	4478:52:21	5363:10:42	3004:31:50	0:00:00	1:37:02	15891:07:05	14:08:16	15905:15:21
2 月	296:35:32	1453:00:36	1310:02:00	4388:20:13	4926:18:09	5323:56:26	0:00:00	0:00:00	17698:12:56	18:53:45	17717:06:41
3 月	79:55:42	1524:25:16	1238:47:21	3666:33:17	4766:12:46	2778:39:54	0:00:00	1:34:15	14056:08:31	15:21:48	14071:30:19
合 計	2568:59:52	12241:55:58	12623:23:15	41033:54:49	52980:03:25	23549:34:15	931:17:47	62:42:05	145991:51:26	147:10:15	146139:01:41

5.4.2 SGI2800,Origin3800

O2K	(G1)	(G2)	(G3)	(G4)	(G5)	合 計	(O2K)	総合計(時)
平成 12 年 4 月	3029:52:10	0:00:01	10482:39:27	6278:43:13	0:00:00	19791:14:51	40766:24:09	60557:39:00
5 月	3418:27:35	6201:34:20	13885:57:25	4220:06:05	0:00:00	27726:05:25	56068:13:35	83794:19:00
6 月	1336:29:16	7760:20:18	7066:28:16	8001:15:35	0:00:00	24164:33:25	27259:02:35	51423:36:00
7 月	4598:20:27	4405:01:02	4201:12:29	8361:28:10	0:00:00	21566:02:08	22560:25:52	44126:28:00
8 月	4167:20:56	5468:36:23	800:01:16	12104:34:06	0:00:00	22540:32:41	24079:45:19	46620:18:00
9 月	7174:49:30	4958:57:45	8528:18:10	1270:29:01	0:00:00	21932:34:26	24550:54:34	46483:29:00
10 月	6977:39:20	4412:28:31	5933:35:44	1194:22:03	0:00:00	18518:05:38	6089:30:22	24607:36:00
11 月	6801:00:43	4169:19:47	10630:31:10	2881:12:59	0:00:00	24482:04:39	15430:24:21	39912:29:00
12 月	6502:28:24	3349:34:28	17951:14:06	14:09:52	0:00:00	27817:26:50	9815:11:10	37632:38:00
平成 13 年 1 月	5466:17:23	2762:08:52	10481:50:38	66:21:35	0:00:00	18776:38:28	51759:21:32	70536:00:00
2 月	6994:44:43	1991:14:38	12037:53:09	0:01:57	0:00:00	21023:54:27	47920:17:33	68944:12:00
3 月	4969:52:33	3298:47:39	5289:23:14	4189:42:32	0:00:00	17747:45:58	60718:13:02	78465:59:00
合 計	61437:23:00	48778:03:44	107289:05:04	48582:27:08	0:00:00	266086:58:56	387017:44:04	653104:43:00

5.4.3 SX-5

SX-5	H05S	H05M	H05L	H1S	H1L	H2S	H2L	H4S	H8	合 計	(ETC)	総合計(時)
平成 12 年 4 月	125:12:51	265:59:54	116:59:03	417:19:31	276:55:08	369:01:44	169:53:39	0:00:00	0:00:00	1741:21:50	2299:48:54	4041:10:44
5 月	108:32:33	251:07:38	205:16:42	186:48:17	177:48:36	92:35:52	232:42:54	0:00:00	0:00:00	1254:52:32	1413:43:53	2668:36:25
6 月	65:58:25	370:49:02	127:17:29	234:59:12	180:38:42	163:52:37	216:44:27	0:00:00	0:00:00	1360:19:54	2415:04:23	3775:24:17
7 月	83:09:00	461:13:54	187:51:33	100:31:43	200:16:01	414:55:30	396:51:37	0:00:00	0:00:00	1844:49:18	2382:46:04	4227:35:22
8 月	75:44:19	321:22:37	115:00:17	17:50:24	177:10:19	180:09:24	79:09:58	0:00:00	0:00:00	966:27:18	2109:35:02	3076:02:20
9 月	20:01:24	71:28:59	119:00:08	198:04:28	185:15:21	170:40:12	216:25:21	0:00:00	0:00:00	980:55:53	2533:08:48	3514:04:41
10 月	47:10:00	208:07:39	63:43:29	412:01:10	230:16:38	233:23:04	193:00:48	0:00:00	0:00:00	1387:42:48	3015:00:16	4402:43:04
11 月	67:04:37	139:06:16	137:11:54	367:45:30	302:09:46	250:13:57	206:19:27	0:00:00	0:00:00	1469:51:27	2099:36:30	3569:27:57
12 月	61:38:03	176:52:39	121:04:18	132:15:45	345:12:39	338:03:43	363:14:08	0:00:00	0:00:00	1538:21:15	3317:44:54	4856:06:09
平成 13 年 1 月	246:35:37	405:30:45	113:09:25	228:51:02	328:29:01	243:09:14	216:44:19	0:00:00	0:00:00	1782:29:23	2996:50:05	4779:19:28
2 月	196:40:03	500:17:52	157:21:30	273:37:42	159:26:34	296:16:24	27:03:28	0:00:00	0:00:00	1610:43:33	3244:59:54	4855:43:27
3 月	54:58:31	250:07:07	165:54:21	278:04:50	411:16:15	194:44:34	190:56:14	0:00:00	0:00:00	1546:01:52	2936:55:31	4482:57:23
合 計	1152:45:23	3422:04:22	1629:50:09	2848:09:34	2974:55:00	2947:06:15	2509:06:20	0:00:00	0:00:00	17483:57:03	30765:14:14	48249:11:17

5.4.4 HPC

HPC	(W1)	(W2)	合 計	(etc)	総合計(時)
平成 12 年 4 月	131:46:07	349:33:09	481:19:16	233:08:41	714:27:57
5 月	115:25:51	175:00:08	290:25:59	704:30:26	994:56:25
6 月	91:03:57	104:33:51	195:37:48	1153:25:50	1349:03:38
7 月	221:43:37	72:20:00	294:03:37	1019:35:18	1313:38:55
8 月	108:17:53	84:30:49	192:48:42	1107:20:41	1300:09:23
9 月	153:59:41	212:47:58	366:47:39	927:57:05	1294:44:44
10 月	150:01:31	146:37:50	296:39:21	410:06:28	706:45:49
11 月	149:13:04	57:20:27	206:33:31	1050:12:40	1256:46:11
12 月	129:22:41	103:56:10	233:18:51	665:33:03	898:51:54
平成 13 年 1 月	122:41:32	90:27:46	213:09:18	782:36:17	995:45:35
2 月	167:25:30	111:56:24	279:21:54	746:18:49	1025:40:43
3 月	115:49:59	116:46:46	232:36:45	662:39:34	895:16:19
合 計	1656:51:23	1625:51:18	3282:42:41	9463:24:52	12746:07:33

5.4.5 SP2

SP2	(S2)	(S2)	(S3)	(S4)	(P1)	(P2)	(P3)	合 計
平成 12 年 4 月	24:28:00	32:23:15	234:16:14	1268:14:23	0:00:00	3984:25:40	1753:01:46	7296:49:18
5 月	14:54:45	0:28:57	74:06:56	481:56:01	9527:25:48	4643:32:58	7811:34:16	22553:59:41
6 月	-	-	-	-	11641:14:41	2357:42:48	7703:23:28	21702:20:57
7 月	-	-	-	-	11670:20:58	933:54:04	5015:25:32	17619:40:34
8 月	-	-	-	-	7417:59:54	873:11:32	6000:59:51	14292:11:17
9 月	-	-	-	-	7259:46:59	1846:51:30	6353:47:29	15460:25:58
10 月	-	-	-	-	5365:04:36	679:06:20	6626:04:43	12670:15:39
11 月	-	-	-	-	4848:39:35	780:31:36	4389:36:28	10018:47:39
12 月	-	-	-	-	6059:11:56	1014:36:00	6473:39:13	13547:27:09
平成 13 年 1 月	-	-	-	-	8134:32:22	1418:26:23	5482:14:05	15035:12:50
2 月	-	-	-	-	8313:12:47	1226:10:19	7327:44:59	16867:08:05
3 月	-	-	-	-	10474:53:02	2620:55:33	6287:41:26	19383:30:01
合 計	39:22:45	32:52:12	308:23:10	1750:10:24	90712:22:38	22379:24:43	71225:13:16	186447:49:08

5.5 クラス別 VPU 使用時間

5.5.1 VPP5000

VPP	(V1)	(V2)	(V3)	(V4)	(V5)	(VP6)	(VC)	(vp23)	合 計	(TSS)	総合計(時)
平成 12 年 4 月	101:22:50	631:29:20	325:05:58	1773:51:41	2147:05:48	1261:08:57	0:00:00	8:20:16	6248:24:50	1:16:34	6249:41:24
5 月	59:46:49	505:17:02	438:49:09	2091:17:34	2558:10:28	389:32:54	0:00:00	1:08:06	6044:02:02	0:31:57	6044:33:59
6 月	101:06:50	401:54:07	497:40:55	1681:34:07	2688:59:06	757:16:55	71:57:47	1:08:10	6201:37:57	0:34:04	6202:12:01
7 月	50:02:30	534:15:23	764:49:02	1972:26:35	2541:15:29	1263:13:06	311:05:18	0:00:17	7437:07:40	0:10:23	7437:18:03
8 月	134:57:21	527:01:58	924:45:30	2100:55:50	3779:29:39	1094:32:59	261:36:55	1:50:28	8825:10:40	0:06:20	8825:17:00
9 月	127:55:03	263:02:21	779:31:07	1833:01:57	3173:45:31	1184:37:31	0:00:00	20:48:31	7382:42:01	1:04:29	7383:46:30
10 月	412:23:30	726:28:12	971:36:58	3339:57:24	3422:15:32	590:19:27	0:00:00	9:34:54	9472:35:57	1:17:03	9473:53:00
11 月	277:46:33	735:01:20	929:06:25	3433:32:07	3732:30:39	1359:25:20	0:00:00	0:18:11	10467:40:35	0:24:41	10468:05:16
12 月	77:10:39	1251:35:33	1036:49:38	3421:00:30	4491:31:52	1873:14:22	0:00:00	0:02:53	12151:25:27	0:29:43	12151:55:10
平成 13 年 1 月	163:55:12	1254:50:15	1111:26:36	3076:11:01	3605:34:53	2517:22:10	0:00:00	0:46:15	11730:06:22	0:04:34	11730:10:56
2 月	214:50:23	1116:11:54	1057:20:22	3097:39:25	3254:25:04	4593:16:24	0:00:00	0:00:00	13333:43:32	11:27:23	13345:10:55
3 月	48:19:02	1241:07:10	1085:07:20	2638:40:15	3084:34:06	2514:37:51	0:00:00	0:44:30	10613:10:14	16:15:39	10629:25:53
合 計	1769:36:42	9188:14:35	9922:09:00	30460:08:26	38479:38:07	19398:37:56	644:40:00	44:42:31	109907:47:17	33:42:50	109941:30:07

5.5.2 SX-5

SX-5	H05S	H05M	H05L	H1S	H1L	H2S	H2L	H4S	(H8)	合 計	(ETC)	総合計(時)
平成 12 年 4 月	23:13:02	116:07:10	192:22:53	287:33:16	336:44:31	173:20:34	119:34:24	0:00:00	0:00:00	1248:55:50	1505:02:38	2753:58:28
5 月	21:18:14	77:21:28	198:59:22	69:21:24	87:47:03	19:30:07	88:49:11	0:00:00	0:00:00	563:06:49	938:04:47	1501:11:36
6 月	25:38:08	209:46:27	342:07:32	53:33:00	436:32:27	45:34:09	105:01:50	0:00:00	0:00:00	1218:13:33	1242:35:27	2460:49:00
7 月	19:42:19	143:07:38	390:31:23	54:59:18	252:05:50	124:26:54	149:45:08	0:00:00	0:00:00	1134:38:30	1742:39:20	2877:17:50
8 月	16:45:39	95:26:55	443:44:20	1:22:55	354:08:26	53:12:52	20:33:38	0:00:00	0:00:00	985:14:45	1328:10:12	2313:24:57
9 月	7:50:21	29:54:12	240:06:17	139:23:45	383:17:54	97:47:39	139:10:38	0:00:00	0:00:00	1037:30:46	1300:11:38	2337:42:24
10 月	1:22:59	94:27:23	392:21:59	297:25:58	447:09:09	157:13:47	288:05:51	0:00:00	0:00:00	1678:07:06	1739:57:54	3418:05:00
11 月	12:03:52	29:37:02	232:38:48	296:09:01	329:42:18	100:31:23	174:58:00	0:00:00	0:00:00	1175:40:24	1371:21:21	2547:01:45
12 月	18:53:19	93:00:36	264:42:38	109:01:34	298:15:27	163:02:01	383:12:14	0:00:00	0:00:00	1330:07:49	2004:46:19	3334:54:08
平成 13 年 1 月	50:19:55	142:37:37	141:41:16	105:42:55	342:28:20	92:43:32	316:10:15	0:00:00	0:00:00	1191:43:50	1829:23:08	3021:06:58
2 月	48:59:23	172:28:29	190:57:42	183:25:52	448:50:50	15:58:53	224:49:24	0:00:00	0:00:00	1285:30:33	2029:31:33	3315:02:06
3 月	1:11:42	68:00:45	59:10:56	180:04:03	391:28:37	88:44:56	227:07:38	0:00:00	0:00:00	1015:48:37	1398:14:03	2414:02:40
合 計	247:18:53	1271:55:42	3089:25:06	1778:03:01	4108:30:52	1132:06:47	2237:18:11	0:00:00	0:00:00	13864:38:32	18429:58:20	32294:36:52

5.5.3 HPC

HPC	(W1)	(W2)	合 計	(etc)	総合計(時)
平成 12 年 4 月	43:19:45	189:54:03	233:13:48	115:03:33	348:17:21
5 月	49:22:53	409:41:43	459:04:36	97:05:28	556:10:04
6 月	136:59:35	358:36:02	495:35:37	114:11:03	609:46:40
7 月	236:44:40	592:15:40	829:00:20	16:29:11	845:29:31
8 月	126:09:58	664:27:00	790:36:58	16:11:11	806:48:09
9 月	259:59:41	461:40:10	721:39:51	0:14:37	721:54:28
10 月	95:42:51	189:07:47	284:50:38	147:32:53	432:23:31
11 月	323:24:32	363:37:41	687:02:13	130:11:08	817:13:21
12 月	63:36:37	236:31:34	300:08:11	115:12:29	415:20:40
平成 13 年 1 月	238:29:56	311:25:24	549:55:20	41:52:06	591:47:26
2 月	184:50:57	516:11:35	701:02:32	5:49:15	706:51:47
3 月	134:16:02	361:18:41	495:34:43	-22	495:34:21
合 計	1892:57:27	4654:47:20	6547:44:47	799:52:32	7347:37:19

5.6 ジョブ処理件数

5.6.1 VPP5000

VPP	(V1)	(V2)	(V3)	(V4)	(V5)	(VP6)	(VC)	(vp23)	合 計	TSS	総 合 計
平成 12 年 4 月	843	644	143	560	506	118	0	20	2,834	2,119	4,953
5 月	455	521	163	602	708	122	0	3	2,574	1,437	4,011
6 月	565	681	265	738	589	52	14	4	2,908	1,691	4,599
7 月	335	451	158	509	397	187	6	6	2,049	1,147	3,196
8 月	468	387	152	473	583	103	1	11	2,178	1,365	3,543
9 月	236	405	371	678	514	56	0	10	2,270	1,168	3,438
10 月	369	581	169	602	423	23	0	3	2,170	1,450	3,620
11 月	407	581	181	613	621	83	0	3	2,489	1,466	3,955
12 月	517	693	163	842	526	70	0	1	2,812	1,454	4,266
平成 13 年 1 月	427	532	124	615	501	56	0	101	2,356	949	3,305
2 月	604	448	132	914	712	54	0	0	2,864	832	3,696
3 月	349	578	157	662	545	98	0	6	2,395	1,414	3,809
合 計	5,575	6,502	2,178	7,808	6,625	1,022	21	168	29,899	16,492	46,391

5.6.2 SG12800,Origin3800

O2K	(G1)	(G2)	(G3)	(G4)	(G5)	合 計
平成 12 年 4 月	30	5	30	17	0	82
5 月	433	223	139	35	0	830
6 月	427	170	77	57	0	731
7 月	345	140	77	85	0	647
8 月	427	150	102	59	0	738
9 月	489	187	62	26	0	764
10 月	423	126	46	46	0	641
11 月	459	119	66	43	0	687
12 月	576	181	141	36	0	934
平成 13 年 1 月	380	109	205	23	0	717
2 月	571	219	216	13	0	1,019
3 月	297	129	170	34	0	630
合 計	4,857	1,758	1,331	474	0	8,420

5.6.3 SX-5

SX-5	H05S	H05M	H05L	H1S	H1L	H2S	H2L	H4S	H8	合 計
平成 12 年 4 月	245	141	43	139	144	147	60	73	0	992
5 月	285	154	41	102	99	32	80	45	0	838
6 月	189	173	30	201	56	113	156	37	0	955
7 月	115	150	22	140	83	723	247	66	0	1,546
8 月	90	145	20	67	135	470	295	35	0	1,257
9 月	49	96	19	248	68	71	164	55	0	770
10 月	325	132	44	276	192	146	107	156	0	1,378
11 月	356	247	38	230	396	332	54	18	0	1,671
12 月	196	198	57	118	126	215	96	45	0	1,051
平成 13 年 1 月	381	298	159	151	132	198	108	72	0	1,499
2 月	243	501	77	148	66	174	131	67	0	1,407
3 月	83	114	32	175	143	88	70	68	0	773
合 計	2,557	2,349	582	1,995	1,640	2,709	1,568	737	0	14,137

5.6.4 HPC

HPC	(W1)	(W2)	合 計
平成 12 年 4 月	149	113	262
5 月	369	50	419
6 月	143	35	178
7 月	230	22	252
8 月	125	36	161
9 月	157	90	247
10 月	322	390	712
11 月	130	39	169
12 月	314	94	408
平成 13 年 1 月	153	52	205
2 月	177	54	231
3 月	129	68	197
合 計	2,398	1,043	3,441

5.6.5 SP2

SP2	(S1)	(S2)	(S3)	(S4)	(P1)	(P2)	(P3)	合 計
平成 12 年 4 月	39	47	16	151	0	23	15	291
5 月	52	4	3	93	43	171	63	429
6 月	-	-	-	-	20	205	48	273
7 月	-	-	-	-	17	232	181	430
8 月	-	-	-	-	36	88	75	199
9 月	-	-	-	-	20	77	53	150
10 月	-	-	-	-	16	58	50	124
11 月	-	-	-	-	37	103	78	218
12 月	-	-	-	-	67	65	53	185
平成 13 年 1 月	-	-	-	-	34	77	52	163
2 月	-	-	-	-	54	114	60	228
3 月	-	-	-	-	29	37	32	98
合 計	91	51	19	244	373	1,250	760	2,788

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13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)
- 岡崎 進 計算科学研究センター教授
- 青柳 睦 計算科学研究センター助教授
- 永瀬 茂 分子科学研究所理論研究系分子基礎理論第一研究部門教授
- 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
- 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
- 堀内 嵩 基礎生物学研究所形質統御実験施設遺伝子発現統御第二研究部門
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
- 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13年11月現在)

平田 文男 センター長(併任)
岡崎 進 教授
青柳 睦 助教授
南部 伸孝 助手
高見 利也 助手
大野 人侍 助手
南野 智 技官
内山 郁夫 助手
高橋 卓也 助手
真木 淳 非常勤研究員
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
岡田 智子 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一覧

木下 朋子 総研大大学院生 平成13年8月～平成14年3月(平成13年度)
日野 理 総研大大学院生 平成13年8月～平成14年3月(平成13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 疎結合	M-200H 2台 疎結合	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*	9,880	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	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	平成12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	VPP5000 SGI2800, Origin3800 SX-5 SP2 HPC
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	201	188	174	166	156
利用 者 数					
機 構 内 ^a	139	126	138	125	101
機 構 外	574	609	566	539	534
合 計	713	735	704	664	635
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	(VPP5000) 8,234 (SGI2800系) 8,319 (SX5) 8,496 (SP2) 8,492 (HPC) 8,490
CPU時間利用申請(時間)	(HSP基準) ^b	(HSP基準) ^b	(HSP基準) ^b	(SP2 Thin基準) ^b	(SP2 Thin基準) ^b
申 請	58,425	73,910	76,804	97,788	249,405
許 可	51,499	58,650	67,159	79,964	209,393
総使用CPU時間 ^c (時間)	207,790	262,365	273,575	239,671	619,294
ジョブ処理件数 ^c	70,308	51,738	45,173	40,697	58,685
ライブラリプログラム 新規登録数	15	3	13	14	18
データベース新規登録数	0	0	0	0	0
センター使用論文数 ^d	279	331	347	391	302

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。

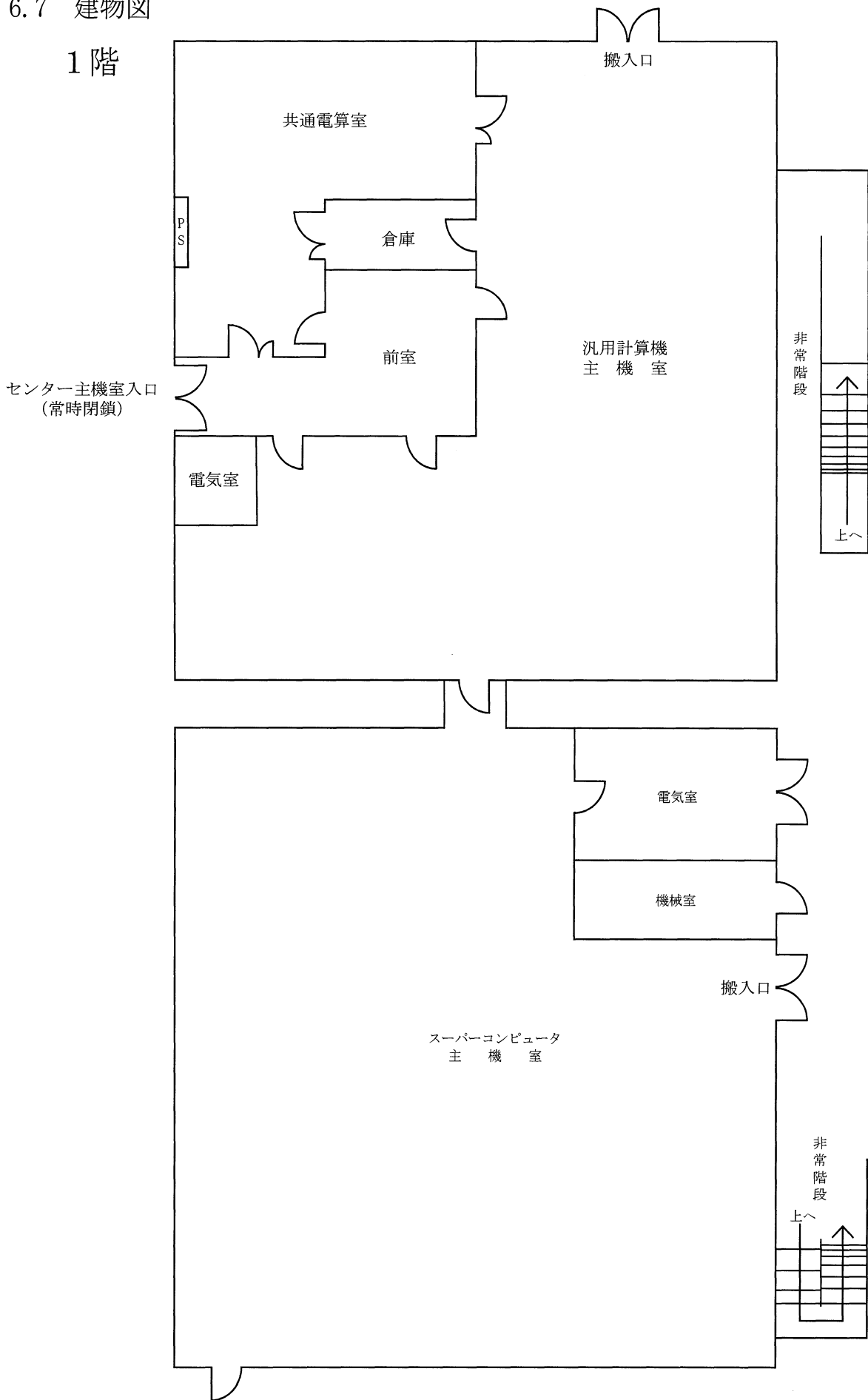
d:センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたもの。

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

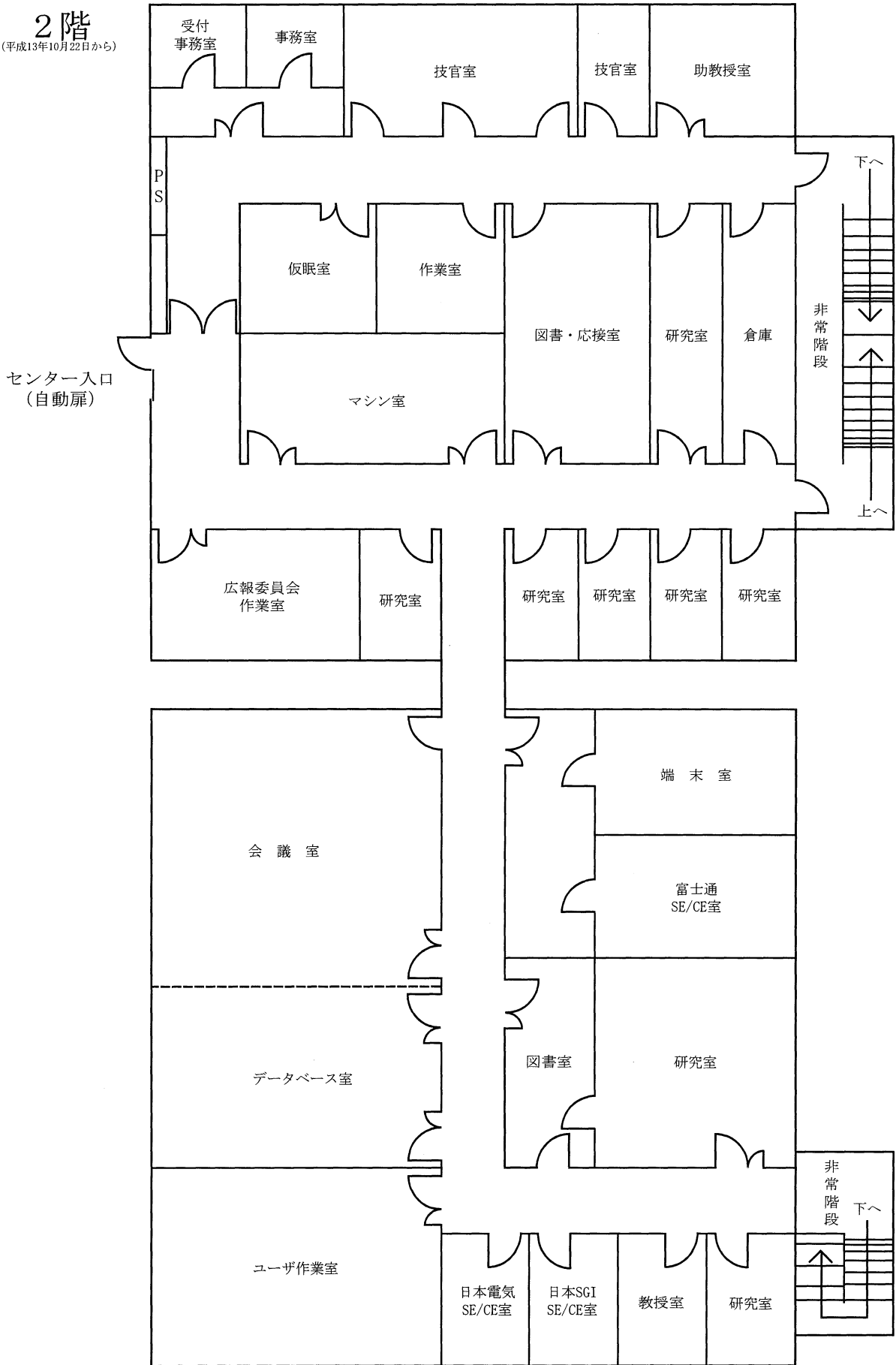
6.7 建物図

1 階



2階

(平成13年10月22日から)



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

F A X : 052-239-1154

<SGI2800,Origin3800 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

F A X : 06-6343-6713

<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

<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

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-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 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 の仕様に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/慈悲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。

6.8.6 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-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。

6.8.7 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)

6.8.8 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-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 SP2 用マニュアル

6.8.9.1 AIX 4.1.4 関連

- (1) SC23-2550-03AIX Version 4.1 Installation Guide
- (2) SC23-2527-03AIX 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

6.8.9.2 IBM C Set++ for AIX Version 3 Release 1 関連

- (4) SX09-1300-01IBM C Set++ for AIX Reference Summary
- (5) SX88-7017-00C Set++ for AIX バージョン 3 リファレンス・サマリー
- (6) SC09-1968-01IBM 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

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

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

6.8.9.4 Parallel Environment (PE) Version 2 Release 1 関連

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

6.8.9.5 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

6.8.9.6 Performance Toolbox for AIX Version 2 Release 1

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

6.8.9.7 AIX ESSL/6000 V2.2.2 関連

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

7. 現状と将来構想 (分子研リポート'00より転載)

5-2 計算科学研究センターの現状と将来

分子科学研究所・電子計算機センターは1978年に設立され、2000年4月より、岡崎国立共同研究機構（岡崎機構）・計算科学研究センターに改組された。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。

5-2-1 現在の計算機システム

2000年3月から導入されたスーパーコンピュータシステムを図1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。

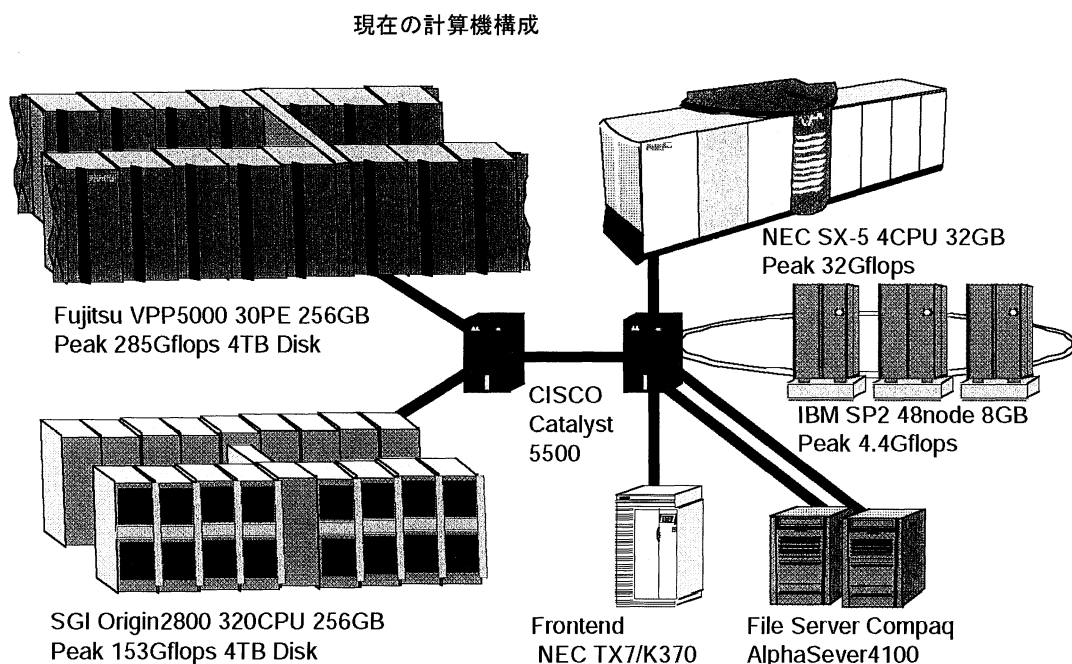


図1. 2000年11月以降の計算機構成

VPP5000 は1 CPU 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8~16 GB 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1 CPU 当たりの最高演算性能が0.59 Gflops のスカラ演算装置256 CPU から構成され、CPU 当たり1 GB 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。2000年11月にはSGI側システムは320 CPU に増強され現在に至っている。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。1 昨年度、導入された SX-5 は1 CPU 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。更に、2001年3月中旬より、分子科学およびバイオサイエンス関連の計算処理を目的とした高速シミュレーションシステムが稼動を始める。高速シミュレーションシステムは、日立製作所SR8000とSGI 3200から構成される中規模なシステムであり、当面の間は主に機構内における利用を目的として運用を行う。今後は、個々の計算機の特徴を活かしつつ、大規模な分子科学計算が実行できる基盤施設としての機構外施設利用として、および機構内の多様な計算処理に適應できるセンターとして、分散処理環境をさらに充実させ、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。

2002年（平成14年度）には、機構から約1 km離れた場所（E地区と呼ぶ）に、新たに統合バイオサイエンス棟と2つの付属施設棟が完工する。統合バイオサイエンス棟内には、E地区の計算科学の研究基盤施設およびネットワークのノード室として計算科学研究センターの分室が設置される予定であり、上述の高速シミュレーションシステムと関連周辺装置を移設する。更に平成14年度末には、計算科学研究センターの汎用高速演算システム（図1、右側）の拘束レンタル期間が終了するためシステムの更新が可能となるが、その更新時期については、施設利用を目的とした汎用システムとしての役割、近い将来予想される機構内の計算処理需要の増大等を熟慮して、現在（本稿原稿執筆時点）、基礎生物学研究所、生理学研究所の関係者および外部運営委員と協議中である。

5-2-2 計算機施設利用枠の新設「特別申請」

本計算科学研究センターの前身である「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」としてサービスを提供してきた実績をもっている。これは、他の研究機関の「スパコンセンター」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る。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る。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る。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る。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。このような要請に応えるため、2000年春の運営委員会において計算資源の利用枠を「一般利用」と「特別利用」に2本化することが提案され了承された。「一般利用」はこれまでとはほぼ同様であり、同様の手続きで申請を行う。他方、「特別利用」は毎年小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ある。「特別利用」は他の多くの利用者の「犠牲」の上に行うわけであるから、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る。

平成13年度春から試行予定の「特別利用」の概要を以下に示す。

毎年、少数（10件程度）の特別利用申請を公募する。このカテゴリーは他のユーザーの利用をある程度制限することを前提に行うもので、それを正当化する唯一の根拠は、その利用の結果、一般の利用ではできない、際立った研究成果を挙げる事以外にない。そのような成果を期待するには申請に関する審査と研究結果報告に対する評価をできるだけ厳しく行う必要がある。まず、申請書に基づいて審査を行い、点数に基づいて順位をきめる。その上位順位から、「特別利用」の枠内で採用を決定する。審査は通常の論文審査の場合と同様に複数の審査委員に依頼する。審査委員は

あらかじめ定められた審査基準に基づいて審査を行い採点すると同時に審査意見を述べる。最終的な可否は審査結果に基づき運営委員会において行う。また、研究結果の評価に関しては論文の発表を原則とし、その論文は計算科学研究センター特別利用申請と明記する。

2001年度中に特別利用に供する計算機資源は以下の2機種である。

■超並列計算機 SGI3800 128 CPU (128 GB)……特別枠専用利用

(ただし2001年6月までは主記憶は64GBに制限される)

■ベクトル計算機 VPP3000 最大16 CPU (128 GB)……一般施設利用ジョブと共存利用

VPP3000については特別枠の利用期間を限定する。

5-2-3 機構化の現状と将来展望

岡崎機構の計算科学研究センター(旧分子科学研究所電子計算機センター)はこの1年の間にいくつかの点で大きな変貌を遂げた。その第一はスーパーコンピュータの更新であり、この更新によって、演算処理能力は従来の約10倍に向上し、これまで滞りがちだった計算処理速度を大幅に改善することができた。

第二は従来の分子科学研究所のセンターから機構のセンターへの組織的変更である。この変更は、一方では、将来、岡崎機構内で分子科学と生物科学を融合した計算科学の新しい展開に大きな展望を与えるものであると同時に、他方では、もしそのような展開が十分な裏付けもなく性急に行われた場合、分子科学分野において国際的に高い評価を確立している計算センターの存立基盤そのものを危うくする契機を孕んでいる。ここでは「計算科学研究センター」の運営に主として責任を負っている分子科学研究所電算機室の立場から、特に、「機構化」に伴って生じる諸問題について言及し、「センター」の将来を展望する。

「計算科学研究センター」の将来を展望する上で二つの「座標軸」が必要である。ひとつは旧「分子研電算センター」が共同利用施設として分子科学の発展に果たしてきた役割であり、他のひとつは計算科学の発展において生物関係の問題が占める比重の増大である。「分子研電算センター」は約22年前に設立以来、国内における分子科学者の共同利用施設として、一方では国際的にもピークをなす計算を行い、他方では国内の計算化学全体の底上げを行うという二重の役割を果たしてきた。まだ、ワークステーションが普及していなかった時期に地方の大学などで計算機にアクセスできなかった研究者に計算資源を提供し、その中から国際的にも高い評価を受けている分子科学のリーダーを数多く輩出してきたことは周知の事実である。このことは、現在、世界で発表されている量子化学関連論文全体の2、3パーセントが旧「分子研電算センター」を使って行われたものであることから伺われる。さらに、最近、センター利用者の分布に見られる特徴は、有機化学や固体物性分野を中心として実験研究グループの利用の比重が増大していることである。その理由のひとつは量子化学、分子シミュレーションを始めとする理論化学における(計算プログラムを含む)各種方法論が成熟期を迎え、実験家自身ないしは実験家と理論家との協力によって、実験条件に近い系の理論計算が可能になったことが上げられる。このような傾向はナノサイエンスを始めとする物質科学の最近の展開によって今後さらに拍車がかげられることが予想される。最近のセンター利用状況に見られるこれらの特徴は実験研究において理論計算が有効であり得ることを実証する有力な根拠であり、まさに、旧「分子研電算センター」がその創設において企図した目的のひとつであった。したがって、分子科学分野における「計算科学研究センター」の役割が今後益々増大することは必至であり、この分野でのサービスを引き続き強化していくことが必要である。

もう一方の「座標軸」である生物関連分野の位置付けであるが、これまでもこの分野ではprotein data bankなどに象徴されるような国際的に公開された生物情報データを利用して、一方ではいわゆるバイオインフォマティクスに代

表されるようなデータベース処理において、他方では分子動力学 (MD) やモンテカルロ法 (MC) といった分子シミュレーションにおいて、計算科学が重要な役割を演じてきた。もちろん、分子科学自身、その発展に少なからぬ貢献をしてきたことは、MDやMCといった計算科学の手法が分子科学の分野で開発され、発展してきたことから見ても明らかである。このような生物分野における計算科学の位置付けは「人ゲノム計画」の進展とともに以前にも増した高まりを見せている。ゲノムの全解析によってもたらされる膨大な情報を巡って、医学から基礎科学に至る様々な学問分野だけでなく薬品工学や生命工学を含む広大な工業分野が創出されるであろうことは火を見るより明らかである。今後、ゲノムの情報解析において計算科学が有用な学問的知見を引き出し、また、新たな社会的資産を生み出すために重要な役割を果たすことは疑いないであろう。生物科学系の2研究所を有する機構内の「計算センター」がこのような学問の進展に手をこまねていることは許されないし、まさに、このことが「計算センター」機構化の重要な契機ともなった。したがって、「計算科学研究センター」が将来展望として生物関連分野の利用を視野に入れた展開を図るべきであることはいままでもない、その方向については今後十分な検討が必要である。その検討の材料として以下の要素が考慮されるべきであろう。そのひとつは生物関連の計算科学分野の国内における現在の状況である。この分野は、現在、大きくふたつの流れで進みつつある。その流れのひとつはゲノム情報など生物「データベース」から情報処理の手法により生物進化や医学における有用な情報を得ることを目的にしたいわゆるバイオイオンフォーマティクス分野である。この分野はこれまで京大(化研)、東大、名大(生物)、阪大(蛋白研)を中心にいくつかの研究拠点が形成されており、これらに岡崎の基生研の「情報生物学研究センター」が新たに加わろうとしている。また、この分野の共同利用計算センターとしては遺伝研が機能している。生物関連計算科学のもうひとつの重要な流れは分子レベルから蛋白質の構造の成り立ちや揺らぎ、あるいはその機能を解明しようとする分野であり、いわば「生物分子科学」とも呼ぶべき研究領域である。

以上述べたきた諸点から「計算科学研究センター」における生物関連分野への展開は、分子科学分野における共同利用研究者へのサービスを低下させないことを前提に、次のように、短期、長期に分けて展望するのが最善であると思われる。

まず、短期的な展望としては、特に、生物科学と分子科学の境界に位置する分野、すなわち、「生物分子科学」分野における計算科学を発展させる。その理由のひとつは岡崎機構が分子科学研究所と生物関連の2研究所を有する国際的にもまれな地理的条件にある点である。このような条件を最大限に活かして、生物学と分子科学との「境界領域」に新しい計算科学の分野を構築していくことは「センター」に課せられた責務であるとさえ言える。もうひとつの理由は歴史的に見て「計算科学研究センター」の前身である「分子研電算センター」がもともと分子科学研究者の共同利用施設であり、計算科学におけるノウハウの蓄積の面でも、人的資源においても分子科学研究所にその大部分の基盤をおいている点である。そもそもスーパーコンピュータのような大型施設を使って行うような計算の多くは非常に大きく、かつ、高度に組織化されたソフトウェアを要求する。量子化学計算で使われる Gaussian や分子シミュレーションで使われる CHARMM などはその代表例である。そのようなソフトウェアはその製作だけでなくその維持、管理においても高度のノウハウと莫大な人的資源を要求し、一朝一夕にして出来上がるものでない。将来、生物独自の情報処理への展開を展望する場合には、まず、生物関連2研究所にその基盤となる研究グループを創出し、同時に、計算科学研究センターにおける財政面、人材、ハードウェア、ソフトウェアなどにおいてその分野の拡充を図ることが前提となる。すべての面においてその基盤を分子研電算センター時代の「資源」に依存している現状では、それらの「資源」を最大限に活用できる生物の分野に限定した展開を行うことは極めて自然であり、分子科学と生物の「境界領域」にその可能性を求める所以である。以下に、例として、生物・分子科学境界領域で未解決になっているいくつかの重

要問題について挙げておく。

(1)ゲノム情報から得られるアミノ酸配列に基づく未知蛋白質の立体構造予測。

ゲノム情報は生体系内で活躍するすべての蛋白質の配列情報を含むはずであるが、それらの中には、未だ、構造どころか機能も明らかになっていないものが数多く存在する。このような蛋白質の構造を一次配列から予測することはその生体内での役割や生物進化における位置付けなどを明らかにする上で基本的な課題である。このような問題は蛋白質の熱力学的安定性と密接に関係しているが、それを溶媒をも含めて分子レベルで解明することは生物学と分子科学の境界に位置する重要課題である。

(2)生体系における光化学反応過程。

光化学反応はいまでもなく生物が光エネルギーを物質に固定するもっとも重要な機能であり、すぐれて生物学上の問題である。一方、光の収集や電子移動（酸化・還元）といった機能を担うのは蛋白質という「分子」であり、その全プロセスに「水」というこれまた「分子」が極めて重要な役割を演じている。方法論的には量子化学、統計力学、分子シミュレーションなど分子科学において発展してきた方法が主役を演じる格好の生物学上の舞台だといえる。

(3)神経伝達系におけるイオンチャンネル。

細胞膜内外のイオンの移動は脳を含む神経伝達系におけるもっとも重要なプロセスのひとつであり、その解明は生理学における重要課題である。このプロセスには細胞膜や膜蛋白質の構造と揺らぎ、イオンの個性とその溶媒和などが複雑に関係しており、まさに分子レベルでの解析が本質的な意味をもっている。

この例の他にも、「DNAとペプチドの分子認識」、「受容体とリガンドの結合」、「各種酵素反応」、「人工酵素」などなど、分子科学と生物の「境界領域」に位置する計算科学の重要問題は数え上げればきりがなく、この分野において「計算科学研究センター」が果たすべき役割は極めて重要である。

長期的な展望としては上記の「生物分子科学」および「生物情報」を含む総合的な計算・情報処理拠点の創出を行うため基生研および「情報生物学研究センター」の協力のもとに特に物情報関連の計算・情報処理パワーの大幅な拡充をハード、ソフト、スタッフの面で行う。