

I 部

目 次

1	巻頭言 計算科学研究センター 奥村 久士	1
2	スーパーコンピュータワークショップについて	2
3	計算機システムの運用および使い方	4
3.1	システムの構成と特徴	4
3.2	キュー構成方針	7
3.3	キュー構成	7
3.4	利用課金	9
3.5	利用点数	9
4	一般報告	11
4.1	ライブラリプログラムの開発・公開	11
4.2	データベース開発状況	13
5	平成 21 年度計算機稼働状況および利用者数	14
5.1	利用申請プロジェクトおよび利用者数	14
5.2	電力使用および計算機稼働状況	14
5.3	計算機利用状況	15
5.4	クラス別 CPU 使用時間	16
5.5	ジョブ処理件数	17
6	資料	18
6.1	計算科学研究センター運営委員	18
6.2	計算科学研究センター職員	19
6.3	利用者数と CPU 時間の推移	20
6.4	建物図	22
6.5	マニュアル一覧	25
7	研究施設の現状と将来計画 (分子研リポート 2009 より転載)	28

1. 巻頭言

計算科学研究センター
奥村久士

自然科学研究機構計算科学研究センターでは、スーパーコンピューターシステムを全国の研究者の方々に共同利用を通じてご利用いただいております。利用者数はここ数年増えており、今年度のグループ数は約 170、利用者数は約 680 名に上りました。我々の超高速かつ大規模な計算環境は分子科学、物性科学、生物科学の研究に活用されており、分子理論・物性理論・生体シミュレーションに基づく多彩な研究が行われています。近年では、実験においても反応解析や反応設計、物性の研究に理論計算は広く利用されるようになりました。この計算科学研究センターレポートには利用者の方々の研究成果が収録されています。

計算科学研究センターでは単に計算環境を提供するだけでなく、若手研究者の育成、研究者間の情報交換や交流にも力を入れています。2009 年 12 月 15～18 日に「第 3 回分子シミュレーションスクールー基礎から応用までー」を開催し、分子シミュレーション分野を先導されている先生方に分子シミュレーションの基礎から応用まで講義していただきました。このシミュレーションスクールは毎年参加申し込み受け付け開始後、数日で定員の 100 名を超えてしまうほど好評です。また毎年、計算科学研究センターワークショップを開催しています。今年度は 2010 年 1 月 13～14 日に「大規模並列分子シミュレーションの最前線」をテーマとして開催いたしました。分子シミュレーションおよびその関連領域の最前線でご活躍されておられます先生方をお招きして、理論の新しい展開についてご紹介いただき、将来について展望していただきました。

計算科学研究センターでは、今後も大規模高速計算環境を提供するとともに、理論・計算科学分野の人材育成や研究交流を通じて理論分子科学の発展の一翼を担うことができると考えております。今後とも皆様のあたたかいご指導、ご支援を賜りますようよろしくお願いいたします。

2 スーパーコンピュータワークショップについて

今年度のワークショップでは、「大規模並列分子シミュレーションの最前線」というテーマについて議論することを目的とした。理論分子科学の最前線で活躍されておられる先生方に、理論の新しい展開についてご紹介いただき、将来について展望していただいた。これらの中には、一昨年から設置した超大規模計算のための施設利用S課題による研究も紹介していただいた。また、高度な並列計算を目指した計算手法を開発されておられる先生方に、その取り組みについてご紹介いただいた。さらに、若手の方々に積極的に参加し、研究交流していただけるようにポスター発表を行った。ポスター発表は36件あり、質の高い研究交流がなされた。ワークショップは幅広い分野からの参加があり、参加者は合計108名であった。

スーパーコンピュータワークショップ 10

日 時：2010年1月13日（水）13:30～14日（木）17:00

会 場：自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター

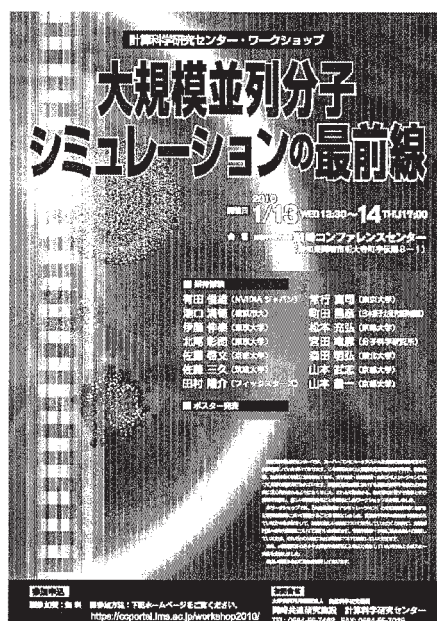
参加者：108名

ポスター発表：36件

テーマ：「大規模並列分子シミュレーションの最前線」

1月13日（水）	
13:30 - 13:40	はじめに 平田文男（計算科学研究センター長）
13:40 - 14:20	池口満徳（横浜市立大学） 「DNA結合タンパク質の機能ダイナミクス」
14:20 - 15:00	北尾彰朗（東京大学） 「大規模分子動力学によるバイオナノマシンの機能シミュレーション」
15:00 - 15:20	休憩
15:20 - 16:00	佐藤啓文（京都大学） 「溶液の理論化学：水溶液、イオン液体、蛋白質」
16:00 - 16:40	宮田竜彦（分子科学研究所） 「MD/3D-RISM 連成計算法の開発と応用」
16:40 - 17:20	山本武志（京都大学） 「QM/MM法を用いた化学反応の自由エネルギー計算と反応経路の探索」
17:20 - 18:30	ポスター発表
18:30 - 20:30	懇親会 挨拶 中村宏樹（分子科学研究所長）

1月14日(木)	
9:00 – 9:40	佐藤三久 (筑波大学) 「次世代スパコンに向けた計算機科学と計算科学の連携にむけて - e-サイエンスプロジェクトとナノ拠点での連携から -」
9:40 – 10:20	町田昌彦 (日本原子力研究開発機構) 「行列対角化と密度行列繰りこみ群の超並列化：強相関非平衡量子多体系の 理解へ向けて」
10:20 – 10:40	休憩
10:40 – 11:20	伊藤伸泰 (東京大学) 「計算機シミュレーションによる非平衡状態の研究」
11:20 – 12:00	松本充弘 (京都大学) 「固体熱伝導解析 –フォノン工学のためのDSMC法コードの開発–」
12:00 – 13:30	昼食
13:30 – 14:10	森田明弘 (東北大学) 「界面非線形分光の分子シミュレーション計算手法の開発」
14:10 – 14:50	常行真司 (東京大学) 「波動関数理論にもとづく凝縮系の電子状態計算」
14:50 – 15:30	山本量一 (京都大学) 「ソフトマターのマルチスケールシミュレーション」
15:30 – 15:50	休憩
15:50 – 16:10	有田俊雄 (NVIDIA ジャパン) 「GPU コンピューティングの現在と未来」
16:10 – 16:50	田村陽介 (フィックスターズ) 「CUDA によるプログラム手法と応用事例」
16:50 – 17:00	おわりに 奥村久士 (計算科学研究センター)

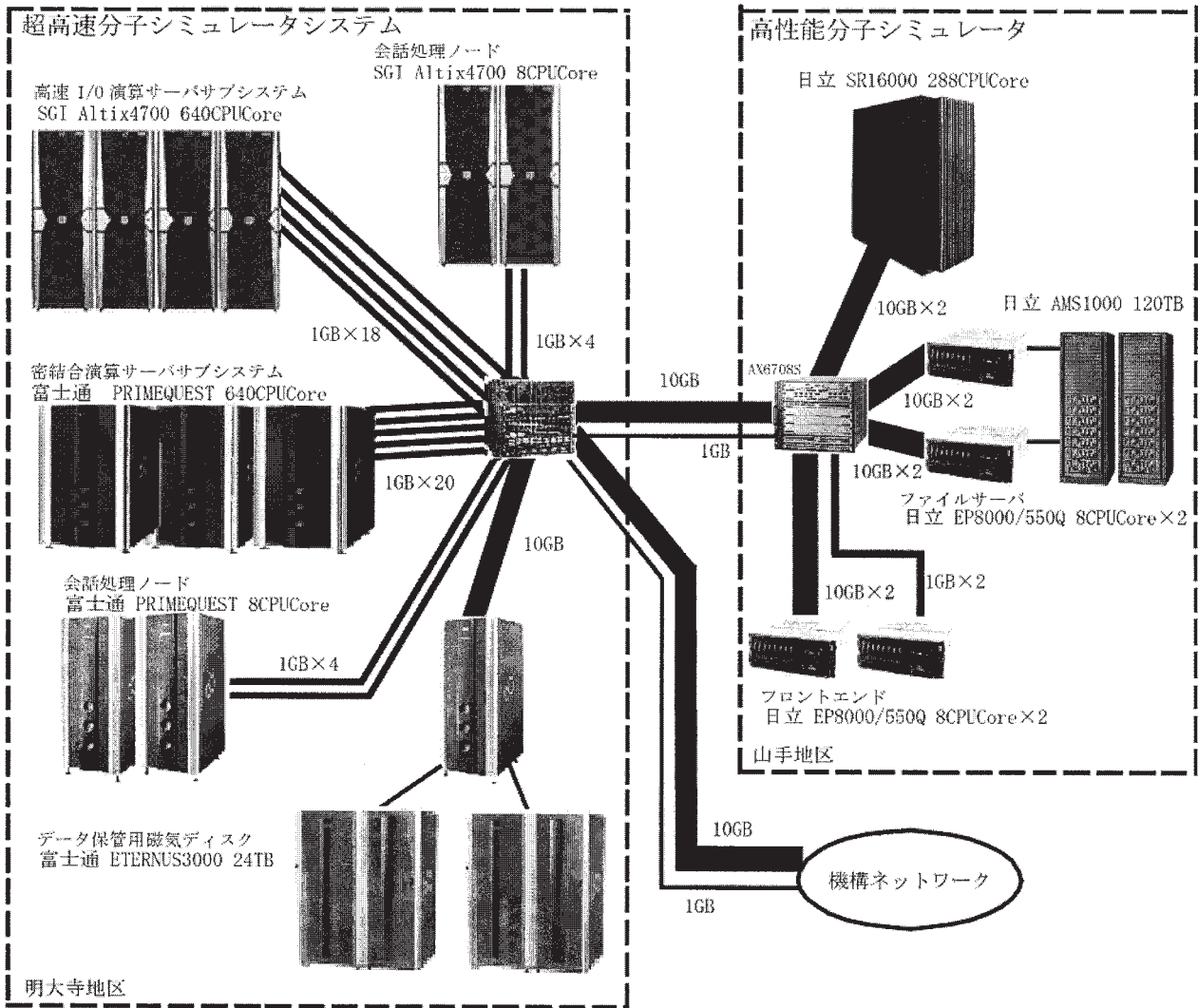


3 計算機システムの運用および使い方

3.1 システムの構成と特徴

超高速分子シミュレータシステム（高速 I/O サーバサブシステム(SGI 製 Altix4700)、密結合サーバサブシステム(富士通製 PRIMEQUEST)、高性能分子シミュレータシステム（日立製 SR16000）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)。

システム構成図



センター内は2台のスイッチングシステム(CISCO Catalyst 6504 と Alaxala AX6708S)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 GigaBitEther (8Gbps) の LAN が張り巡らせており、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。

◆超高速分子シミュレータシステム

- ・高速 I/O サーバサブシステム(SGI 製 Altix4700)

Altix ではジョブ管理(PBS Professional)、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	8.0TB (6.0TB + 2.0TB)
総理論演算性能	3276.9GFLOPS + 819.2GFLOPS (6.4GFLOPS/CPUCore)
CPU 個数	640 個 (512 個 + 128 台)

OS は、1CPUCore を 1CPU と認識しています。

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量 (内訳)	114TB
一時作業ファイル領域(/work)	114TB

- ・密結合サーバサブシステム(富士通製 PRIMEQUEST)

PRIMEQUEST ではジョブ管理(Parallelnavi for Linux Advanced Edition)、バッチ処理と TSS 処理を行います。

<演算処理装置>

主記憶容量	2.56TB (256GB × 10node)
総理論演算性能	409.6GFLOPS × 10node (6.4GFLOPS/CPUCore)
CPU 個数	640 個 (64 個 × 10node)

OS は、1CPUCore を 1CPU と認識しています。

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量 (内訳)	35TB
一時作業領域(/work)	8TB
短期保存ファイル領域(/week)	24TB

◆高性能分子シミュレータシステム

- ・演算サーバシステム(日立製作所製 SR16000)

SR16000 ではジョブ管理(LoadLeveler)によるバッチ処理を行っています

<演算処理装置>

主記憶装置	2,304GB (256GB × 9node)
総理論演算性能	601.6GFLOPS × 9node (18.8GFLOPS/CPUCore)
CPU 個数	288 個 (32 個 × 9node)

SMT 機能を使うことにより OS は、1CPUCore を 2CPU (総合計 576 個) と認識しています

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量 (内訳)	23TB
一時作業ファイル領域(/work)	23TB

- ・ファイルサーバシステム(日立製作所製 EP8000/550Q)

2台構成です。

<演算処理装置>

主記憶装置	64GB (32GB × 2台)
CPU 個数	32個 (16個 × 2台)

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量	120TB
(内訳)	
ホームディレクトリ領域 (/home)	60TB
短期保存ファイル領域 (/week)	20TB
長期保存ファイル領域 (/save)	40TB

- ・フロントエンド(日立製作所製 EP8000/550Q)

ccfep1 と ccfep2 の2台構成です。

<演算処理装置>

主記憶装置	64GB (32GB × 2台)
CPU 個数	32個 (16個 × 2台)

OS は、1CPUCoreを2CPUと認識しています。

3.2 キュー構成方針

1	パラレル利用キューには、現在のパソコンの10倍程度を単位としたコンピュータ資源を提供する。課金は経過時間とする（キュー占有時間）。CPU数の可変提供をする。
2	パラレル利用キューのみとする。
3	ライブラリ環境整備の一環として、比較的利用の多いアプリケーションについては、初級者利用の便宜を図る。特に機器更新に伴う環境の変化を隠蔽する様にウェブからの利用環境を整備する。
4	申請に特別利用枠を設け、許可されたユーザは特別利用キューを使用できる様にする。長時間利用、大規模CPU利用が可能な環境を提供する。
5	キュー構成をシンプルにする

3.3 キュー構成

キュー構成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(NQE、LSF、LoadLevelor)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
メモリ	: 各キューにおいて、利用可能な最大主記憶容量
多重度	: 1CPU で同時実行できるジョブ本数
PE/CPU 数	: 各キューにおいて、利用可能な最大 CPU 数
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
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

Altix4700	640CPUを次のように割り当てます。 640CPUは、PA、PAE、PASがお互いに共有して使用します。内384CPUは、PAEとPASが優先的に使用し、256CPUはPAが占有します。
PRIMEQUEST	640CPUを次のように割り当てます。 640CPUは、PB、PBE、PBSがお互いに共有して使用します。内448CPUは、PBEとPBSが優先的に使用し、192CPUはPBが占有します
SR16000	560CPUを次のように割り当てます。 560CPUは、PH、PHE、PHSがお互いに共有して使用します。内256CPUは、PHEとPHSが優先的に使用し、304CPUはPHが占有します。

(注意)

- (1) 施設利用 S キュー、特別利用キューのジョブが投入された場合、既に実行されているジョブの終了を待ってから実行されます（先入先出）。

デバッグキュー

キュー名	CPU時間	メモリ	PE/CPU数	ユーザ制限	グループ制限	備考
PHI	5分	1GB/CPU	4から1	1JOB	なし	ccfep2
PHD	5分	1GB/CPU	4から1	1JOB	なし	cchsr

PHI: SR16000 用のプログラム動作確認用キュー (クロスコンパイラ) です。ccfep2 の 6 CPU を割り当てています。同一 CPU に最大 3 本のジョブが割り当てられますので、速度測定のデバッグには向いていません。jobinfo や jstat 系コマンドでは、cchsr ではなく、サーバーに ccfep を指定します。

PHD: SR16000 用のプログラム動作確認用キューです。PHI との違いは、Power6 プロセッサによるネイティブコンパイラを使用して動作確認が行えます (PHI は、Power5 によるクロスコンパイラです)。Power6 のネイティブコンパイラは cchsr にログインして利用することが可能です。cchsr は ccfep1 もしくは ccfep2 よりログイン可能です。

PHD キューを利用する場合、jobinfo や jstat 系コマンドではサーバ名として cchsr を指定するのではなく、phd を指定して下さい。

Altix4700 や PrimeQuest のデバッグは、直接 ccatx や ccprq で行います。

会話処理

キュー名	CPU時間	メモリ	PE/CPU数	ユーザ制限	グループ制限	備考
ccatx	1時間	1GB	4	-	-	Altix4700
ccprq	1時間	1GB	4	-	-	PRIMEQUEST
cchsr	1時間	1GB	2			EP8000/550
ccfep1/2	1時間	1GB	6			EP8000/550Q

パラレル利用キュー (施設利用 S、特別利用キュー実行時は運用枠が減少する)

キュー名	CPU時間	メモリ	PE/CPU数	ユーザ制限	グループ制限	備考
PA	72時間	11.5GB/CPU	64から1	64CPU	64CPU	Altix4700 409.6GFLOPS
PB	72時間	3.9GB/CPU	32から1	64CPU	64CPU	PRIMEQUEST 204.8GFLOPS
PH	72時間	3.2GB/CPU	32から1	64CPU	64CPU	SR16000 601.6GFLOPS

特別利用キュー (Extended Queue: 特別利用申請者のみ利用可、施設利用 S 実行時は運用枠が減少する)

キュー名	CPU時間	メモリ	PE/CPU数	ユーザ制限	グループ制限	備考
PAE	240時間	11.5GB/CPU	128から1	128CPU	128CPU	Altix4700 819.2GFLOPS
PBE	240時間	3.9GB/CPU	64から1	128CPU	128CPU	PRIMEQUEST 409.6GFLOPS
PHE	240時間	3.2GB/CPU	64から1	128CPU	128CPU	SR16000 1,203.2GFLOPS

施設利用 S 用キュー (Special queue) 最優先ジョブ

キュー名	CPU時間	メモリ	PE/CPU数	ユーザ制限	グループ制限	備考
PAS	240時間	11.5GB/CPU	128から1	128CPU	128CPU	Altix4700 819.2GFLOPS
PBS	240時間	3.9GB/CPU	64から1	128CPU	128CPU	PRIMEQUEST 409.6GFLOPS
PHS	240時間	3.2GB/CPU	64から1	128CPU	128CPU	SR16000 1,203.2GFLOPS

3.4 利用課金

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。

3.5 利用点数

計算機利用の配分のためにプロジェクト課題ごとに許可点数が割り当てられます。各グループは割り当てられた許可点数を越えて計算機を利用することはできません。

3.5.1 利用点数算出法

Parallel	利用点数 = ジョブ経過時間 × 要求CPU数 × 点数換算係数 ジョブ経過時間：ジョブの終了時間から開始時間を引いた時間 要求CPU数：ジョブが要求したCPU数
----------	---

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。

$$P = Patxp + Pprqp + Phsrp$$

Patxp：Altix4700 のシリアルジョブキューで利用した点数

Pprqp：PRIMEQUEST のパラレルジョブキューで利用した点数

Phsrp：SR16000 のパラレルジョブキューで利用した点数

3.5.2 点数換算係数一覧

	点数換算係数	CPU1 時間当たりの消費点数 (3600×点数換算係数)
Altix4700(P)	0.0120	43.20
PRIMEQUEST(P)	0.0060	21.60
SR16000(P)	0.0120	43.20

(P): Parallel

3.5.3 キュー別コストパフォーマンス一覧

各キュークラスにおける1時間当たりの利用点数(消費点数/時)は、以下の表のようになります。

(注意)

- (1) 演算性能は、理論ピーク性能の総和です。単位は、GFLOPS です。
- (2) CP (コストパフォーマンス) は、1GFLOPS を得るのに必要な点数で、小さい方がお得です。
- (3) CP 算出式は、(消費点数÷演算性能) です。
- (4) 消費点数は、利用点数算出式を使用して利用 CPU1 時間当たりの点数です。
パラレルジョブキューにおいては、経過時間1時間当たりの点数です。
ベクトル演算器搭載マシンにおいては、スカラのみで計算しています。
- (5) 標準時間算出式は、(消費点数÷400) です。該当消費点数を消化する CPU 時間です。

パラレルジョブキュー

キュー名	CP	消費点数	標準時間	課金係数	演算性能	マシン名	備考
PA, PAE, PAS	6.75	345.6 点	0.864 時間	0.0120	51.2	Altix4700	8CPU
PB, PBE, PBS	3.38	172.8 点	0.432 時間	0.0060	51.2	PRIMEQUEST	8CPU
PH, PHE, PHS	4.60	345.6 点	0.864 時間	0.0120	75.2	SR16000	8CPU

4 一般報告

4.1 ライブラリプログラムの開発・公開

ライブラリプログラム開発は、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行われたプログラム開発申請に基づいて、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のひとつとしてソフトウェアをセンターで実行可能な形式で登録し、一般ユーザーに向けて公開するものです。その他に、メーカー・ベンダーにソフトウェアのインストール作業を依頼したり、センター職員がインストール作業を実施したりしたものも、ライブラリプログラムとして公開しています。

平成 20 年度のライブラリプログラム開発の申請件数は 2 件でした。

平成 20 年度末のライブラリプログラム一覧は下記の通りです。

名前	内容				
AMBER	A package of molecular simulation programs.				
GAMESS	General atomic and molecular electronic structure system.				
Gaussian	Ab initio molecular orbital calculations.				
GROMACS	Fast, Free and Flexible MD				
Molcas	A quantum chemistry software.				
Molpro	A complete system of ab initio programs.				
NAMD	A scalable molecular dynamics program.				
TURBOMOLE	One of the fastest programs for standard quantum chemical applications.				
GaussView	A viewer for Gaussin 09/03.				
Molden	A visualization program of molecular and structure.				
パッケージプログラム名	バージョン	リビジョン	ccatx	ccprq	cchsr
Amber	10	bugfix 24	—	○ (2009/8/24)	—
Amber	10	bugfix 11	◎ (2008/12/4)	◎ (2008/12/3)	—
Amber	9	bugfix 41	—	—	◎ (2008/3/14)
Amber	9	bugfix 31	—	◎ (2007/2/16)	—
Amber	9	bugfix 20	◎ (2006/10/26)	—	—
Amber	8	bugfix 61	◎ (2006/7/1)	◎ (2006/7/1)	—
GAMESS	2009	Jan12	◎ (2009/2/5)	◎ (2009/4/8)	◎ (2009/3/30)
GAMESS	2008	Apr11	○ (2008/7/8)	◎ (2008/7/8)	○ (2008/7/28)
GAMESS	2007	Mar24	○ (2008/2/27)	◎ (2008/3/12)	○ (2008/3/12)
GAMESS	2006	Feb22	◎ (2006/7/24)	—	—
GAMESS	2005	Jun27	—	○ (2006/6/30)	—
Gaussian	09	A.02	○ (2009/10/28)	○ (2009/10/30)	○ (2009/10/28)
Gaussian	09	A.01	◎ (2009/6/15)	◎ (2009/6/15)	◎ (2009/6/16)
Gaussian	03	E.01	◎ (2008/2/5)	◎ (2008/3/12)	◎ (2008/3/12)
Gaussian	03	D.01	○ (2006/7/1)	○ (2006/7/1)	○ (2008/3/12)
GROMACS	4.0.5		○ (2009/8/27)	○ (2009/11/17)	—
GROMACS	3.3.3		◎ (2008/7/30)	◎ (2008/11/11)	◎ (2008/8/4)
Molcas	7.4		○ (2009/10/29)	○ (2009/11/25)	—
Molcas	7.2		◎ (2008/12/5)	◎ (2009/1/15)	—
Molcas	7.0	sp1	○ (2008/2/25)	—	—
Molcas	6.4	sp1	○ (2006/10/16)	—	◎ (2008/3/3)
Molpro	2009.1	19	—	○ (2009/11/16)	—
Molpro	2009.1	14	◎ (2009/10/26)	—	—

パッケージプログラム名	バージョン	リビジョン	ccatx	ccprq	cchsr
Molpro	2008.1	35	◎ (2009/4/7)	—	—
Molpro	2008.1	23	○ (2009/2/3)	—	—
Molpro	2008.1	13	—	◎ (2008/11/18)	—
Molpro	2006.1	158	—	—	◎ (2008/5/22)
Molpro	2006.1	149	○ (2008/4/25)	—	—
Molpro	2006.1	137	—	○ (2008/1/15)	—
Molpro	2006.1		—	○ (2007/2/16)	—
NAMD	2.6		◎ (2008/4/30)	◎ (2010/1/12)	◎ (2008/5/13)
TURBOMOLE	6.1		○ (2009/11/30)	○ (2009/11/30)	—
TURBOMOLE	6.0.2		○ (2009/6/24)	—	—
TURBOMOLE	5.10		◎ (2008/2/18)	◎ (2008/4/8)	—
TURBOMOLE	5.9.1		○ (2007/6/1)	—	—
TURBOMOLE	5.9		○ (2007/1/25)	—	—
VASP			▼	▼	▼

パッケージプログラム名	バージョン	リビジョン	ccfep1
GaussView	5.0.8		○ (2009/10/22)
GaussView	4.1		◎ (2008/2/18)
Molden	4.6		◎ (2008/2/20)

◎: インストール済み。g03 のような別名が設定されている。

○: インストール済み。g03e01 のように指定する必要がある。

▼: 入手不可

4.2 データベース開発状況

計算科学研究センターのデータベースサービスとして、以下の2件のデータベースが登録されており、現在公開中です。このうち、1件のデータベース（QCLDB）については、開発の援助を行っており、毎年データの更新を行っています。

(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： 105,170 件

主要学術雑誌に掲載された *ab initio* 分子軌道計算を扱った文献のデータベースで、日本化学情報協会（JAICI）より世界中に配布されています。また、毎年一年分のデータを、論文形式で2004年度まではELSEVIER社の「THEOCHEM」に、またそれ以降は日本コンピュータ化学会の J. Comp. Chem. Jpn. に1号分全部を使って刊行しています。WWW版 QCLDB の利用については、平成15年秋からは、モニター制度の制限つきではありませんが、本機構の計算科学研究センターから、WWW版 QCLDB の無料公開が文部科学省から認められ、新しい QCLDB データフォーマットに対応した QCLDB II を、SQL を用いて WWW 化したものを URL: <http://qcldb2.ims.ac.jp/> で公開しています。

平成21年度に新規登録されたデータは、2,930件です。

(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（Force Constant）に関する文献のデータベースで、WWW版 FCDB（<http://fdb.ims.ac.jp/>）を原則利用制限なしで公開サービスしています。新規開発は平成13年度で中止になっています。

5 平成21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	147	620	1,158,895	1,150,991	804,473	460,396,400	321,789,225
	協力研究	4	9	4,000	4,000	835	1,600,000	334,000
	所内	16	47	266,000	253,000	207,579	101,200,000	83,031,507
基礎生物学	施設利用	3	6	4,000	3,990	2,140	1,596,000	855,915
	所内	1	2	1,000	1,000	0	400,000	0
合 計		171	684	1,433,895	1,412,981	1,015,027	565,192,400	406,010,647

※ 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 (Kwh) B,E地区合計	システム稼働時間					
		Altix4700	*	PRIMQUEST	*	SR16000	*
平成21年4月	352,230	556	85	662	100	527	81
5月	381,610	742	100	733	100	743	100
6月	382,630	702	99	709	100	708	100
7月	408,814	723	98	732	100	721	98
8月	417,478	725	99	727	99	744	100
9月	388,453	645	95	711	100	710	100
10月	365,003	702	96	708	97	724	100
11月	348,121	682	100	685	100	686	100
12月	362,229	731	100	735	100	739	100
平成22年1月	362,542	727	99	735	100	744	100
2月	332,579	659	99	664	100	664	100
3月	371,318	726	99	736	100	744	100
合 計	4,473,007	8,319	97	8,536	100	8,454	98

※ *は、マシン稼働率（マシン稼働時間÷計画停止時間）÷通電時間（暦月度）です。

5.3 計算機利用状況

5.3.1 CPU使用時間

年月	CPU使用時間						
	マシン名	Altix4700	*	PRIMQUEST	*	SR16000	*
平成21年4月		264,325	74	410,730	97	239,191	81
5月		400,398	84	393,546	84	315,745	76
6月		283,497	63	378,636	83	345,878	87
7月		346,552	75	379,845	81	240,717	60
8月		363,873	78	355,335	76	378,889	91
9月		264,776	64	314,156	69	288,639	73
10月		348,868	78	342,139	75	271,259	67
11月		317,116	73	371,831	85	255,034	66
12月		356,529	76	375,263	80	331,571	80
平成22年1月		322,464	69	385,656	82	318,128	76
2月		323,440	77	360,932	85	332,001	89
3月		326,064	70	323,992	69	327,202	79
合計		3,917,902	74	4,392,061	80	3,644,254	77

※ CPU時間の単位は時です。

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

5.3.2 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	Altix4700	PRIMQUEST	SR16000	合計
平成21年4月		3,638	7,814	2,818	14,270
5月		3,762	4,800	3,174	11,736
6月		3,740	2,992	2,195	8,927
7月		5,509	4,925	1,634	12,068
8月		3,752	6,873	1,437	12,062
9月		2,143	5,555	1,444	9,142
10月		2,796	12,856	2,393	18,045
11月		2,716	4,550	2,182	9,448
12月		4,647	7,197	1,956	13,800
平成22年1月		4,612	4,124	1,652	10,388
2月		5,906	9,899	2,195	18,000
3月		4,306	4,717	2,268	11,291
合計		47,527	76,302	25,348	149,177

5.4 クラス別CPU使用時間

Altix4700	PA	PAE	PAS	Queue合計	ETC	総合計
平成21年4月	117974:29:08	57967:40:58	88383:01:33	264325:11:39	0:00:00	264325:11:39
5月	139648:27:41	141289:38:47	119459:31:50	400397:38:18	0:00:00	400397:38:18
6月	87868:15:05	111927:37:51	83701:08:40	283497:01:36	0:00:00	283497:01:36
7月	108010:40:45	115935:54:40	122605:13:27	346551:48:52	0:00:00	346551:48:52
8月	158492:06:32	74455:03:51	130925:28:49	363872:39:12	0:00:00	363872:39:12
9月	121151:48:00	61867:39:54	81756:41:04	264776:08:58	0:00:00	264776:08:58
10月	129719:10:26	147053:54:44	72095:07:41	348868:12:51	0:00:00	348868:12:51
11月	144717:49:09	81648:48:44	90749:19:24	317115:57:17	0:00:00	317115:57:17
12月	218680:09:36	69317:16:34	68531:08:33	356528:34:43	0:00:00	356528:34:43
平成22年1月	158014:59:48	124118:15:22	40330:44:06	322463:59:16	0:00:00	322463:59:16
2月	114356:43:43	127336:04:03	81746:46:13	323439:33:59	0:00:00	323439:33:59
3月	127542:59:58	119100:55:34	79420:28:02	326064:23:34	0:00:00	326064:23:34
合計	1626177:39:51	1232018:51:02	1059704:39:22	3917901:10:15	0:00:00	3917901:10:15

PRIMQUEST	PB	PBE	PBS	Queue合計	ETC	総合計
平成21年4月	172845:25:23	61564:44:57	176319:20:21	410729:30:41	0:00:00	410729:30:41
5月	102312:00:53	192180:33:36	99053:04:09	393545:38:38	0:00:00	393545:38:38
6月	102326:53:12	213860:06:59	62449:19:10	378636:19:21	0:00:00	378636:19:21
7月	142698:49:15	175936:36:44	61209:28:01	379844:54:00	0:00:00	379844:54:00
8月	141784:34:22	129644:42:15	83905:15:46	355334:32:23	0:00:00	355334:32:23
9月	114708:30:22	142822:24:58	56625:18:06	314156:13:26	0:00:00	314156:13:26
10月	131405:43:43	149247:12:04	61486:20:30	342139:16:17	0:00:00	342139:16:17
11月	148018:47:17	112973:30:41	110838:39:06	371830:57:04	0:00:00	371830:57:04
12月	133885:53:07	128577:53:38	112799:31:38	375263:18:23	0:00:00	375263:18:23
平成22年1月	96736:08:51	185462:52:57	103456:29:49	385655:31:37	0:00:00	385655:31:37
2月	124612:42:13	185298:28:40	51020:23:25	360931:34:18	0:00:00	360931:34:18
3月	113206:08:03	194988:49:24	15797:26:53	323992:24:20	0:00:00	323992:24:20
合計	1524541:36:41	1872557:56:53	994960:36:54	4392060:10:28	0:00:00	4392060:10:28

SR16000	PH	PHE	PHS	Queue合計	ETC	総合計
平成21年4月	128636:31:54	68732:15:32	41820:14:16	239190:50:33	0:00:00	239190:50:33
5月	163622:32:58	77564:30:40	74557:45:32	315744:51:22	0:00:00	315744:51:22
6月	196063:45:40	66324:08:32	83489:53:42	345878:02:01	0:00:00	345878:02:01
7月	168270:11:02	27839:18:00	44607:16:14	240716:49:27	0:00:00	240716:49:27
8月	235743:53:34	50944:32:12	92200:03:20	378888:33:50	0:00:00	378888:33:50
9月	163049:52:34	45312:49:40	80276:00:16	288638:42:30	0:00:00	288638:42:30
10月	194453:40:12	71871:10:24	4934:21:52	271259:12:28	0:00:00	271259:12:28
11月	175940:16:32	79084:57:40	8:35:28	255033:49:40	0:00:00	255033:49:40
12月	213703:36:26	43060:40:56	74806:21:36	331570:38:58	0:00:00	331570:38:58
平成22年1月	163554:56:36	61163:32:08	93409:45:52	318128:14:36	0:00:00	318128:14:36
2月	173722:26:08	82206:57:36	76071:36:00	332000:59:44	0:00:00	332000:59:44
3月	190824:55:34	123499:02:20	12878:15:46	327202:19:54	0:00:00	327202:19:54
合計	2167586:39:10	797603:55:40	679060:09:54	3644253:05:03	0:00:00	3644253:05:03

5.5 ジョブ処理件数

Altix4700	PA	PAE	PAS	PAX1	Queue合計	ETC	総合計
平成21年4月	2,465	606	567	0	3,638	0	3,638
5月	1,560	761	1,441	0	3,762	0	3,762
6月	1,833	982	925	0	3,740	0	3,740
7月	2,995	1,191	1,323	0	5,509	0	5,509
8月	2,025	767	960	0	3,752	0	3,752
9月	1,275	252	616	0	2,143	0	2,143
10月	1,828	639	329	0	2,796	0	2,796
11月	1,916	494	306	0	2,716	0	2,716
12月	3,563	768	316	0	4,647	0	4,647
平成22年1月	2,908	598	1,106	0	4,612	0	4,612
2月	3,250	936	1,720	0	5,906	0	5,906
3月	2,254	930	1,122	0	4,306	0	4,306
合計	27,872	8,924	10,731	0	47,527	0	47,527

PRIMQUEST	PB	PBE	PBS	Queue合計	ETC	総合計
平成21年4月	4,635	2,863	316	7,814	0	7,814
5月	1,912	557	2,331	4,800	0	4,800
6月	1,115	895	982	2,992	0	2,992
7月	1,929	1,215	1,781	4,925	0	4,925
8月	4,270	817	1,786	6,873	0	6,873
9月	1,906	625	3,024	5,555	0	5,555
10月	9,526	2,193	1,137	12,856	0	12,856
11月	3,366	444	740	4,550	0	4,550
12月	4,817	788	1,592	7,197	0	7,197
平成22年1月	3,116	584	424	4,124	0	4,124
2月	9,331	277	291	9,899	0	9,899
3月	4,019	638	60	4,717	0	4,717
合計	49,942	11,896	14,464	76,302	0	76,302

SR16000	PH	PHE	PHS	PHI	Queue合計	ETC	総合計
平成21年4月	2,422	257	111	28	2,818	0	2,818
5月	2,874	277	20	3	3,174	0	3,174
6月	2,009	147	22	17	2,195	0	2,195
7月	1,505	104	21	4	1,634	0	1,634
8月	1,243	174	19	1	1,437	0	1,437
9月	1,356	32	56	0	1,444	0	1,444
10月	2,094	294	4	1	2,393	0	2,393
11月	1,914	264	4	0	2,182	0	2,182
12月	1,795	130	28	3	1,956	0	1,956
平成22年1月	1,575	48	29	0	1,652	0	1,652
2月	1,996	90	109	0	2,195	0	2,195
3月	1,927	258	76	0	2,268	0	2,268
合計	22,710	2,075	499	57	25,348	0	25,348

6 資料

6.1 計算科学研究センター運営委員

武次 徹也	北海道大学 理学研究院科学部門	教授
木寺 詔紀	横浜市立大学 大学院国際総合研究科	教授
押山 淳	東京大学 大学院工学系研究科	教授
松本 充弘	京都大学 大学院工学研究科	准教授
中井 謙太	東京大学 医科学研究所附属ヒトゲノム解析センター	教授
平田 文男	計算科学研究センター長 理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門	教授
斉藤 真司	計算科学研究センター 理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門	教授
江原 正博	計算科学研究センター 理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門	教授
奥村 久士	計算科学研究センター 理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門	准教授
永瀬 茂	分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 分子基礎理論第一研究部門	教授
信定 克幸	分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 分子基礎理論第一研究部門	准教授
長谷部 光泰	基礎生物学研究所 進化多様性生物学領域 生物進化研究部門	教授
望月 敦史	基礎生物学研究所 理論生物学領域 理論生物学研究部門	教授
永山 國昭	統合バイオサイエンスセンター 戦略的方法論研究領域 ナノ形態生理研究部門	教授
久保 義弘	生理学研究所 分子生理研究系 神経機能素子研究部門	教授

6.2 計算科学研究センター職員

平田 文男	センター長
斉藤 真司	教授
江原 正博	教授
奥村 久士	准教授
石田 干城	助教
金 鋼	助教
福田 良一	助教
大野 人侍	助教
内山 郁夫	助教
片岡 正典	助教
水谷 文保	技術職員 (班長)
内藤 茂樹	技術職員 (主任)
手島 史綱	技術職員 (主任)
岩橋 健輔	技術職員
澤 昌孝	技術職員
松尾 純一	技術職員
長屋 貴量	技術職員
石原 麻由美	事務支援員
戸谷 明子	事務支援員

6.3 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	59年度	60年度	61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	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
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	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	63	176	192	183	198	199	207	226	234
利用者数									
機構内a	48	70	69	91	94	102	110	130	141
機構外	107	254	325	330	375	426	446	464	496
合計	155	334	394	421	469	528	556	594	637
稼働時間 (時間)	1,087	6,071	6,553	6,721	6,305	6,170	6316	6016	6368
CPU時間利用申請 (時間)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(M-680H基準)b	(M-680H基準)b
申請	929	4,666	11,033	10,230	11,938	13,053	14799	15536	33,832/8,458*
許可	816	3,171	7,427	8,306	10,141	10,091	10768	12080	28,184/7,046*
総使用CPU時間c (時間)	509	2,405	5,405	6,320	8,205	8,489	8508	12770	20,092/5,023e*
ジョブ処理件数c	41,521	155,980	183,840	214,847	239,771	236,519	226727	274431	289915
ライブラリプログラム 新規登録数	0	20	43	20	699	10	118	160	39
データベース新規登録数	0	2	0	0	3	3	0	1	0
センター使用論文数d	0	24	93	118	190	185	202	206	237

	62年度	63年度	平成元年度	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	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	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	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	213	231	239	256	272	271	225	222	210
利用者数									
機構内a	143	137	146	140	158	143	127	139	129
機構外	520	515	544	593	623	661	589	601	597
合計	663	652	690	733	781	804	716	740	726
稼働時間 (時間)	6,444	6,091	5,694	6,768	6,749	7,156	M-680H 6,689 SX- 2,101	M-680H系 5,722 SX-3/34R 8,506 HSP 2,133 SP2 2,022	SX- 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	(M-680H基準)b	(M-680H基準)b	(M-680H基準)b	(HSP基準)b
申請	9,880	12,439	14,694	16,622	20,606	21,153	18,311	21,781	40,358
許可	7,978	10,418	12,347	14,626	17,846	19,110	16027	19,393	37,446
総使用CPU時間c (時間)	6,624	7,872	8,300	11,975	11,874	12,491	16,306	24,781	156,076
ジョブ処理件数c	278,956	278,104	253,418	2,955,038	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	4	7	3	0	0	0	10	10	7
データベース新規登録数	1	0	0	0	0	0	1	1	1
センター使用論文数d	223	211	218	248	229	282	267	306	275

a: 機構内利用者にはアイドル課題のための重複を含めません。

b: 申請および使用の詳細については、5.1を参照してください。

c: 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みます。

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です。

e: S-810、S-820、SX-3、SX-5、SX-7、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す。

*: 下段はM-680H基準

	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	平成13年度	平成14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	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	201	188	174	166	156	148	144
利 用 者 数							
機 構 内 ^a	139	126	138	125	101	100	104
機 構 外	574	609	566	539	534	504	479
合 計	713	735	704	664	635	604	583
稼働時間(時間)	SX-3/34R 8,425 HSP 8,431 SP2 8,336 HPC(9月～) 4,872	SX-3/34R 8,494 HSP 8,513 SP2 8,515 HPC 8,501 SR2201(11月～) 3,561	SX3-3/34R 8,579 SX5 8,587 SP2 8,574 HPC 8,590 SR2201 8,694 Origin2000 3,570	SX3-3/34R 6,365 SX5 8,301 SP2 8,375 HPC 8,363 SR2201 8,381 Origin2000 8,380	VPP5000 8,234 SGI系 8,319 SX5 8,496 SP2 8,492 HPC 8,490	VPP5000 8,492 SGI系 8,422 SX5 8,558 SP2 8,555 HPC 8,555	VPP5000 8,506 SGI系 8,324 SX5 8,391 SP2 7,118 HPC 8,386
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	(SP2 Thin基準) ^b	(SP2 Thin基準) ^b
申 請	58,425	73,910	76,804	97,788	249,405	251,785	237,872
許 可	51,499	58,650	67,159	79,964	209,393	234,866	229,401
総使用CPU時間 ^c (時間)	207,790	262,365	273,575	239,671	619,294	678,128	2,030,643
ジョブ処理件数 ^c	70,308	51,738	45,173	40,697	58,685	70,680	55,522
ライブラリプログラム新規登録数	15	3	13	14	18	4	15
データベース新規登録数	0	0	0	0	0	0	0
センター使用論文数 ^d	279	331	347	347	391	302	302

	平成15年度	平成16年度	平成17年度	平成18年度	平成19年度	平成20年度	平成21年度
計算機システム	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-7 TX-7	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-7 TX-7	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-7 TX-7	VPP5000(5月まで) SGI2800,Origin3800 (5月まで) Altix4700(7月から) PRIMEQUEST(7月から) SX-7 TX-7	Altix4700 PRIMEQUEST SX-7(1月まで) TX-7(1月まで) SR16000(3月から)	Altix4700 PRIMEQUEST SR16000	Altix4700 PRIMEQUEST SR16000
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	119	154	132	141	145	152	171
利 用 者 数							
機 構 内 ^a	89	83	30	40	44	59	49
機 構 外	449	516	480	533	551	589	635
合 計	538	599	510	573	595	648	684
稼働時間(時間)	VPP5000 8,553 SGI系 8,545 SX-7 8,524 TX-7 8,525	VPP5000 8,502 SGI系 8,496 SX-7 8,451 TX-7 8,489	VPP5000 8,462 SGI系 8,492 SX-7 8,492 TX-7 8,501	VPP5000 1,402 SGI系 1,400 Altix4700 6,196 PRIMEQUEST 6,336 SX-7 8,399 TX-7 8,398	Altix4700 8,245 PRIMEQUEST 8,304 SX-7 7,098 TX-7 7,088	Altix4700 8,087 PRIMEQUEST 8,486 SR16000 8,261	Altix4700 8,319 PRIMEQUEST 8,536 SR16000 8,454
CPU時間利用申請(時間)	(TX-7基準) ^b	(TX-7基準) ^b	(TX-7基準) ^b	(TX-7基準) ^b	(TX-7基準) ^b	(SR16000基準) ^b	(SR16000基準) ^b
申 請	278,177	341,788	414,643	702,270	1,005,486	1,224,945	1,433,895
許 可	277,697	321,796	368,136	653,468	918,737	1,199,620	1,412,981
総使用CPU時間 ^c (時間)	1,785,877	1,762,818	1,992,205	4,384,464	6,307,008	12,579,635	11,954,215
ジョブ処理件数 ^c	58,784	28,968	19,896	78,130	140,250	149,342	149,177
ライブラリプログラム新規登録数	5	4	4	21	18	22	20
データベース新規登録数	0	0	0	0	0	0	0
センター使用論文数 ^d	281	284	205	214	188	186	196

a:機構内利用者にはアイドル課題のための重複を含めません。

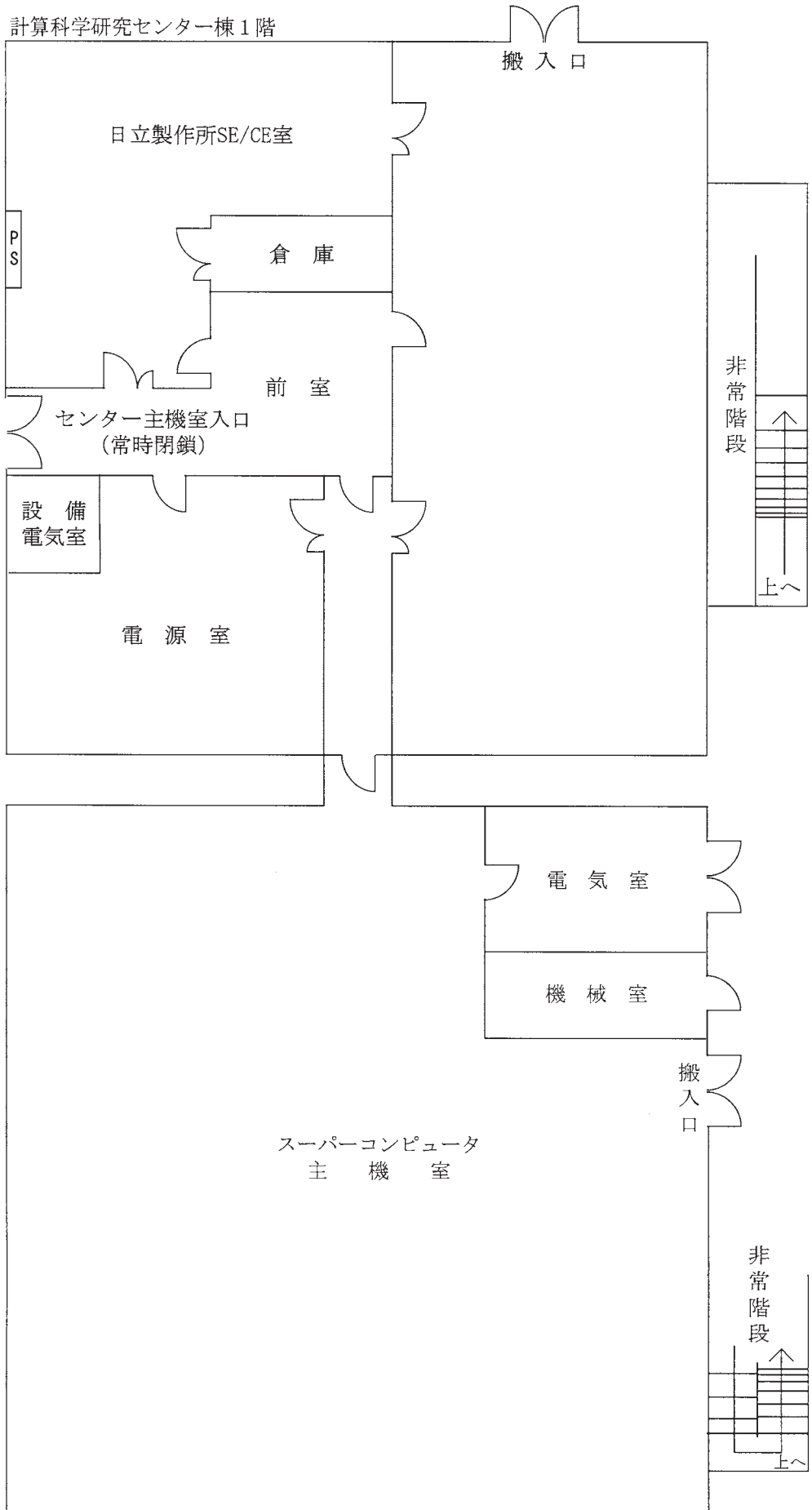
b:申請および使用の詳細については、5.1を参照してください。

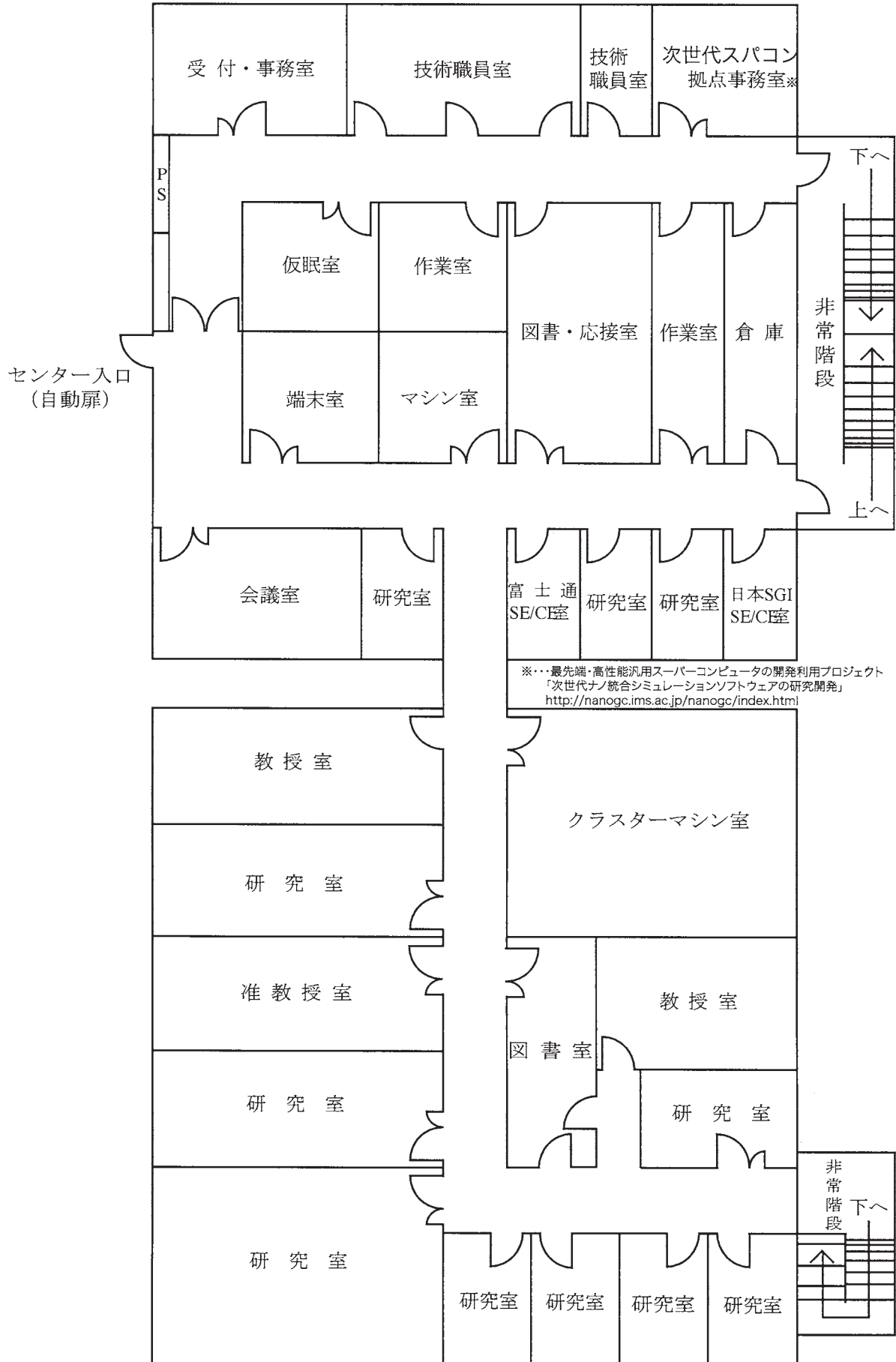
c:CPU時間、件数ともライブラリ開発、センター業務使用分などすべてを含みます。

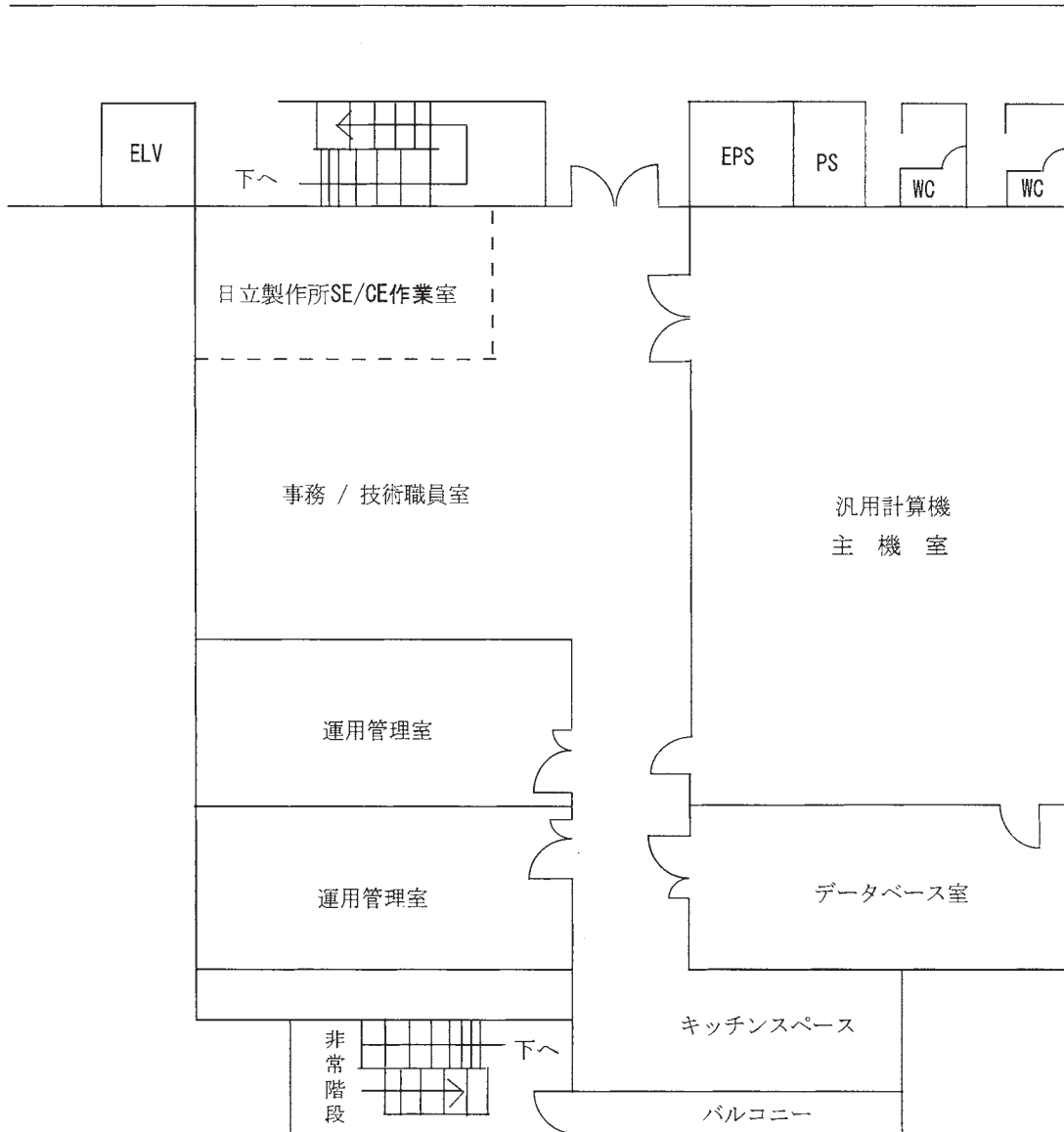
d:センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたものです。

e:S-810、S-820、SX-3、SX-5、SX-7、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す。

6.4 建物図
明大寺地区







6.5 マニュアル一覧

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場合は 6.6.8 「マニュアルの購入と問い合わせ先」の問い合わせ先に直接連絡して下さい。

6.5.1 SR16000 用マニュアル（日本語版）

下記のマニュアルは、電子マニュアル（PDF）と冊子の両方提供されています。

- (1) IBM XL C/C++ Enterprise Edition for AIX プログラミングガイド
- (2) IBM XL C/C++ Enterprise Edition for AIX コンパイラ・リファレンス
- (3) IBM XL C/C++ Enterprise Edition for AIX XL C/C++ 言語解説書
- (4) XL Fortran Enterprise Edition for AIX 言語解説書
- (5) 最適化 FORTRAN90 言語
- (6) 最適化 FORTRAN90 使用の手引き
- (7) 数値計算副プログラム MSL2 行列計算
- (8) 数値計算副プログラム MSL2 関数計算
- (9) 数値計算副プログラム MSL2 統計計算
- (10) 数値計算副プログラム MSL2 操作
- (11) 数値計算副プログラム MSL2 MATRIX/MPP
- (12) AIX 5L コマンド・リファレンス第一巻(a から c)
- (13) AIX 5L コマンド・リファレンス第一巻(d から h)
- (14) AIX 5L コマンド・リファレンス第一巻(i から m)
- (15) AIX 5L コマンド・リファレンス第一巻(n から r)
- (16) AIX 5L コマンド・リファレンス第一巻(s から u)
- (17) AIX 5L コマンド・リファレンス第一巻(v から z)
- (18) AIX 5L プログラミングの一般概念：プログラムの作成およびデバッグ
- (19) AIX 5L メッセージ・センター・リファレンス

6.5.2 SR16000 用マニュアル（英語版）

下記のマニュアルは、電子マニュアル（PDF）と冊子の両方提供されています。

- (1) IBM XL C/C++ Enterprise Edition for AIX プログラミングガイド
- (2) IBM XL C/C++ Enterprise Edition for AIX コンパイラ・リファレンス
- (3) IBM XL C/C++ Enterprise Edition for AIX XL C/C++ 言語解説書
- (4) XL Fortran Enterprise Edition for AIX 言語解説書
- (5) 最適化 FORTRAN90 言語
- (6) 最適化 FORTRAN90 使用の手引き
- (7) 数値計算副プログラム MSL2 行列計算
- (8) 数値計算副プログラム MSL2 関数計算
- (9) 数値計算副プログラム MSL2 統計計算

(10)数値計算副プログラム MSL2 操作

(11)数値計算副プログラム MSL2 MATRIX/MPP

6.5.3 Altix4700 用マニュアル（日本語版、英語版）

Altix4700 に関するマニュアルは、すべてオンライン版のみの提供となっています。センターホームページ <http://www.rccs.orion.ac.jp/> から、「センター利用者限定ページ」の「SGI Altix4700 オンラインマニュアル」から閲覧・取得できます。ただし、OS 関連については、Linux Kernel2.6(IA64 版)（平成 19 年現在）を使用していますので、一般的な「RedHat Linux に関する情報」を利用して下さい。

- (1) SGI Altix4700 User's Guide
- (2) Altix4700 プログラミングガイド
- (3) MPI マニュアル
- (4) Linux Application Tuning Guide
- (5) Intel Fortran Compiler for Linux Systems User's Guide
- (6) Intel C++ Compiler for Linux Systems User's Guide
- (7) SCSL User's Guide
- (8) PBS User Guide

6.5.4 PRIMEQUEST 用マニュアル（日本語版）

PRIMEQUEST に関するマニュアルは、すべてオンライン版のみの提供となっています。センターホームページ <http://www.rccs.orion.ac.jp/> から、「センター利用者限定ページ」の「富士通 PRIMEQUEST オンラインマニュアル」から閲覧・取得できます。ただし、OS 関連については、Linux Kernel2.6(IA64 版)（平成 19 年現在）を使用していますので、一般的な「RedHat Linux に関する情報」を利用して下さい。

- (1) Fortran 使用手引書
- (2) Fortran 文法書
- (3) Fortran コンパイラメッセージ
- (4) Fortran 実行時メッセージ
- (5) C 使用手引書
- (6) C-SSL II オンラインマニュアル
- (7) C-SSL II スレッド並列機能オンラインマニュアル
- (8) MPI 使用手引書
- (9) BLAS LAPACK ScaLAPACK オンラインマニュアル
- (10) SSLII オンラインマニュアル
- (11) SSL II スレッド並列機能オンラインマニュアル
- (12) デバッガ使用手引書
- (13) プロファイラ使用手引書

6.5.5 PRIMEQUEST 用マニュアル（英語版）

英語版マニュアルに関しては、6.5.9 PRIMEQUEST 用マニュアル（日本語版）が英語版で提供されています。これらについても日本語版と同様に、オンライン版のみの提供となっています。

- (1) Fortran User's Guide
- (2) Fortran Language Reference
- (3) Fortran Compiler Message
- (4) Fortran Runtime Message
- (5) C User's Guide
- (6) C-SSL II Online Documents
- (7) C-SSL II Thread-Parallel Capabilities Online Documents
- (8) MPI User's Guide
- (9) BLAS LAPACK ScaLAPACK Online Documents
- (10) SSL II Online Documents
- (11) SSL II Thread-Parallel Capabilities Online Documents
- (12) Debugger User's Guide
- (13) Profiler User's Guide

6.5.6 マニュアルの購入と問い合わせ先 SR16000 用マニュアルの購入にあたっての問い合わせ先

〒450-6021 名古屋市中村区名駅一丁目1番4号
JR セントラルタワーズビル オフィース棟 21 階
株式会社 日立製作所 中部支社
担 当 : 村松
電 話 : 052-388-3713
F A X : 052-388-3722

PRIMEQUEST 用マニュアルの購入にあたっての問い合わせ先

〒460-8585 名古屋市中区錦一丁目10番1号
富士通株式会社 東海営業本部 公共営業部
担 当 : 岡本、赤木
電 話 : 052-239-1110
F A X : 052-239-1154

Altix4700 用マニュアルの購入にあたっての問い合わせ先

〒530-6127 大阪府大阪市北区中之島3-3-23 中之島ダイビル 27 階
日本 SGI 株式会社 西日本支社
担 当 : 近藤
電 話 : 06-6479-3918
F A X : 06-6479-3919

7 研究施設の現状と将来計画 (分子研リポート 2009 より転載)

8-6 計算科学研究センター

計算科学研究センターにおいては、2000年度における計算科学研究センター化にともない、従来の共同利用に加えて、理論、方法論の開発等の研究以外にも、研究の場の提供、ネットワーク業務の支援、人材育成等の新たな業務に取り組んできているところであるが、2009年度においても、次世代スーパーコンピュータプロジェクト支援、分子・物質シミュレーション中核拠点形成、ネットワーク管理室支援等をはじめとした様々な活動を展開してきている。上記プロジェクトについてはそれぞれの項に詳しく、ここでは共同利用に関する活動を中心に、特に設備の運用とセンターの将来構想の検討の必要性について述べる。

2010年2月現在の共同利用サービスを行っている計算機システムの概要を図と表に示す。本システムは、超高速分子シミュレータと高性能分子シミュレータから構成されている。前者は2006年7月に導入し明大寺地区に設置され、後者は2008年2月に更新されて山手地区に設置されている。「超高速分子シミュレータ」、「高性能分子シミュレータ」は、いずれも量子化学、分子シミュレーション、固体電子論、反応動力学などの共同利用の多様な計算要求に応えるための汎用性があるばかりでなく、ユーザーサイドのPCクラスタでは不可能な大規模計算を実行できる性能を有する。

まず、「超高速分子シミュレータ」は富士通のPrimeQuestとSGIのAltix4700から構成される共有メモリ型スカラ計算機で、両サブシステムは同一体系のCPU (Intel Itanium2) およびOS (Linux2.6) をもとに、バイナリ互換性を保って一体的に運用される。システム全体として総演算性能8 Tflopsで総メモリ容量10 TByte超である。

PrimeQuestサブシステムは、64 CPU コア /256 GB からなるSMP ノード10台で構成される。演算ノード間は16 GB/s のバンド幅で相互接続され、大規模な分子動力学計算などノード間をまたがる並列ジョブを高速で実行することができる。Altix4700サブシステムは2ノード構成からなり、それぞれ512 CPU コア /6 TB および128 CPU コア /2 TB を有するNUMA型の共有メモリシステムである。さらに本サブシステムには、磁気ディスク装置SGI TP9700がジョブ作業領域として提供され、実効容量104 TB および総理論読み出し性能12 GB/sを有するディスクI/Oを実現する。本サブシステムは大容量(最大6 TB)の共有メモリおよび超高速ディスクI/Oに特徴をもち、大規模で高精度な量子化学計算を可能とする。

一方、2008年3月に導入された「高性能分子シミュレータ」は、演算サーバ、ファイルサーバ、フロントエンドサーバおよびネットワーク装置から構成される。演算サーバは、日立製作所製のSR16000であり、1 CPU コアあたり18.8 Gflopsの演算性能を持ち、1ノードが32 CPU コアと256 GByteメモリを有する共有メモリ型スカラ計算機である。理論総演算性能は5.4 Tflops、総メモリ容量は2.3 TByteであり、一時作業領域として23 TByteのディスクを装備している。本演算サーバは、浮動小数演算量が多い分子科学計算はもちろんのこと、高クロック周波数CPUの強みを生かし、従来性能が出しにくかった整数演算や論理演算を多用するプログラムも性能を発揮することが期待される。ファイルサーバは、共同利用システム全体のホームディレクトリ等のサービスを行い、128 TByteのディスクを装備している。またバックアップ領域として60 TByteのディスクも装備している。

さらに、2011年7月以降に「超高速分子シミュレータ」を更新するために、2010年1月に仕様策定委員会を設置し、導入に向けた手続きを開始した。

共同利用に関しては、2009年度も171の研究グループにより、総数683名にもおよぶ利用者がこれらのシステムを日常的に利用しているが、システムの運用にあたり、世界をリードする計算科学研究を本センターから発信していくことができるよう、特に大規模ユーザのために施設利用Sを設定している。これに従い、審査により、2009年度は5件の利用グループに本システムを優先的に使用していただき、従来の共同利用の枠を超えた超大規模計算の環境

を提供している。また、近年、共同利用における利用者の数が増加傾向にある。このことは、計算科学研究センターが分子科学分野や物性科学分野において、極めて重要な役割を担っており、特色のある計算機資源とソフトウェアを提供していることを示している。

計算科学研究センターは、国家基幹技術の一つとして位置づけられている次世代スーパーコンピュータプロジェクトの中で、ナノサイエンスに関わるアプリケーション開発という重要な役割の一端を担っており、分子科学に関わる計算科学研究のナショナルセンターとでもいふべき分野拠点として、活動を展開している。

この中で、昨年度は計算科学研究センターワークショップとして、分子科学、物性科学、計算機科学の分野の研究者が集まり、「大規模並列分子シミュレーションの最前線」をテーマとしたワークショップを開催した。また、次世代スーパーコンピュータについては、センターユーザーをはじめとした理論・計算分子科学研究コミュニティの主だった先生方により委員会が組織され、計算科学研究センターの位置づけ、果たすべき役割等について検討がなされた。その中で計算科学研究センターに期待されている重要なアクティビティの大筋は以下の通りである。

- (1) 神戸に設置される次世代スーパーコンピュータの共用に際して、理論・計算分子科学研究領域を含め、計算科学研究センターがナノサイエンス分野、分子科学分野の分野拠点として機能していくこと、つまり神戸センターが計算機の運用に対して責任を持つ一方で、分子研は分野の研究に対して責任を持ち、研究をリードし、取りまとめを行っていくこと。
- (2) このため、分子科学研究所に理論・計算ナノサイエンス特別研究センターを設置し、計算科学研究に加えてソフト開発を含めたライブラリの整備や研究支援活動を行っていくこと。

平成 21 年度 システム構成

高性能分子シミュレータシステム

演算サーバシステム	
	型番：HITACHI SR16000 モデル
	OS：AIX
	CPUCore 数：288 (32CPUCore × 9 ノード)
	総理論性能：5.4TFLOPS
	総メモリ容量：2.3TB (256GB × 9 ノード)
	ディスク容量：23TB (/work)
ファイルサーバシステム	
	型番：HITACHI EP8000/550Q (2 ノード)
	OS：AIX
	総メモリ容量：64GB (32GB × 2 ノード)
	ディスク容量：120TB (/home (37.4TB), /week (20.0TB), /save (37.4TB))
	60TB (バックアップ用)
フロントエンドサーバ	
	型番：HITACHI EP8000/550Q (2 ノード)
	OS：AIX
	総メモリ容量：64GB (32GB × 2 ノード)
高速ネットワーク装置	
	型番：Alaxala AX6708S

超高速分子シミュレータシステム

蜜結合演算サーバサブシステム	
型番	富士通 PRIMEQUEST
OS	Linux
CPUCore数	640 (64CPUCore × 10 ノード)
総理論性能	4.096TFLOPS (409.6GFLOPS × 10 ノード)
総メモリ容量	2.56TB (256GB × 10 ノード)
ディスク容量	800GB × 10 ノード (/work)
	: 8TB (/week)
高速 I/O サーバサブシステム	
型番	SGI Altix4700
OS	Linux
CPUCore数	640 (128CPUCore + 512CPUCore)
総理論性能	4.096TFLOPS (819.2GFLOPS + 3276.9GFLOPS) (6.4GFLOPS/CPUCore)
総メモリ容量	8TB (2TB + 6TB)
ディスク容量	114TB (/work)
高速ネットワーク装置	
型番	Catalyst 6504

システム構成図

