

# I 部

## 目 次

1	巻頭言 計算科学研究センター 齊藤 真司	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	10
3.5	利用点数	10
4	一般報告	12
4.1	ライブラリプログラムの開発・公開	12
4.2	データベース開発状況	14
5	平成 22 年度計算機稼働状況および利用者数	15
5.1	利用申請プロジェクトおよび利用者数	15
5.2	電力使用および計算機稼働状況	15
5.3	計算機利用状況	16
5.4	クラス別 CPU 使用時間	17
5.5	ジョブ処理件数	18
5.6	ジョブ処理内訳	19
6	資料	21
6.1	計算科学研究センター運営委員	21
6.2	計算科学研究センター職員	22
6.3	利用者数と CPU 時間の推移	23
6.4	建物図	25
6.5	マニュアル一覧	28
7	研究施設の現状と将来計画 (分子研リポート 2010 より転載)	31

## 2010年度センターレポート発行にあてて

2010年度のセンターレポートをお送りします。皆さまのご協力にお礼申し上げます。

テレビや新聞などで報道されているように、神戸のポートアイランドに建設中の京コンピュータは建設途中にも関わらず世界一となりました。そのマシンに加え、大学基盤センターや分野拠点のスーパーコンピュータなどの計算機資源、さらにユーザーコミュニティをも巻き込んで HPCI コンソーシアムが形成され、我が国の計算機を取り巻く状況はこれまでにない新しい局面を迎えています。

さて、計算科学研究センターの第一の使命は、国内の大学等の分子科学分野の研究に計算機資源を提供するというものです。とくに、できる限り利用に関して制限を設けることなく、研究室レベルでは困難な大規模な計算機資源を要するような研究、研究者の自由な発想により新しい展開に繋がる研究に対して計算機資源を提供することが、このセンターの重要な使命です。現在、センターのスパコンとして、富士通と SGI のマシンからなるシステムがあります。当初の更新スケジュールでは、この7月には新システムが導入される予定でした。しかし、消費電力を抑えつつ計算能力の高いマシンの導入を検討し、来年の2月に導入を遅らすことにしました。また、新しい CPU 開発に期待して導入を遅らせてだけでなく、これまでとは異なる保守体制などについても新しい試みを進める予定です。限られた予算の中で、このような工夫の結果、現システムの20倍程度の計算能力をもつ新システムの導入される予定です。これまで同様に、施設利用 S も継続します。「京」コンピュータ全体を1年間占有するには及びませんが、自由な発想のもとでの新たな分子科学・科学の展開に挑戦する研究にご活用ください。

ところで、ソフトをも含めたこのような計算機環境の提供だけがこのセンターの使命・役割ではないと思っています。実は最も重要なのはヒトではないでしょうか。このヒトというのは、計算センターに籍を人だけではなく、計算センターのマシン等を利用する人、センターの活動に参加する人など、センターに関わる全ての人を指しています。センター・分子研では、約5年前から学生やポスドクなどを中心とする勉強会を開催してきました。今年度は戦略拠点の活動もかねて、分子シミュレーションと電子状態の2つの勉強会を行う予定です。また、センターのワークショップにおいても、数年前から招待講演だけでなく、ポスター発表も設けています。また、他の活動もできらるうと議論を行っています。センターにヒトが集うことにより研究交流が生まれ、さらに新しい研究を生み出す場として貢献できればと考えています。

冒頭に記しましたように、現在、我々を取り巻く計算機環境が大きく変わりつつあります。計算センターが理論および計算分子科学分野のさらなる発展の場を供することができるよう、皆さまからもいろいろなアイデアや御意見を頂ければ幸いです。分野およびセンターのサイズが大きすぎないだけに、フットワーク軽く動ける部分も多いと思います。お待ちしております。

分子研計算センターから、新しい研究を発信していきましょう！

計算科学研究センター  
センター長 齊藤真司

## 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、「分子科学プログラムライブラリの充実にむけて」というテーマについて議論することを目的とした。まず、計算科学研究センターとして、このテーマに関する現状と、今後計画されている取り組みについて説明し、参加者からの貴重な意見や要望等をいただいた。また、オリジナルの理論・プログラムを用いて、分子科学や材料化学の最前線で研究をなされている先生方に、その研究成果や、理論・プログラム開発の取り組みについて紹介していただいた。これらの中では、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。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 22 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 89 名であった。

### スーパーコンピュータワークショップ 11

日 時：2011 年 1 月 24 日（月）13:30 ～ 25 日（火）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：89 名

ポスター発表：22 件

テーマ：「分子科学プログラムライブラリの充実にむけて」

1 月 24 日（月）	
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	奥村久士（計算科学研究センター）、水谷文保（計算科学研究センター） 「IMS ライブラリ構想」
14:20 – 15:00	中井浩巳（早稲田大） 「電子状態理論の理論開発とプログラム公開 ：分割統治(DC)法の GAMESS 実装を例に」
15:00 – 15:20	休憩
15:20 – 16:00	塚田 捷（東北大） 「表面・界面・ナノ構造の理論と計算科学のアプローチ」
16:00 – 16:40	信定克幸（分子研） 「ナノ構造体における電子・電磁場ダイナミクスの大規模並列化計算」
16:40 – 17:20	南部伸孝（上智大） 「インドリルマレイミド誘導体による蛍光標識タグ分子の理論的解析」
17:20 – 18:30	ポスター発表
18:30 – 20:30	懇親会 挨拶 平田文男（計算科学研究センター長）

1月25日(火)	
9:00 - 9:40	齊藤真司 (分子研) 「多時間相関関数を用いた凝縮系反応ダイナミクスの理論研究」
9:40 - 10:20	Arend G. Dijkstra (京都大) "Excitation dynamics in a complex environment : hierarchy of equations of motion"
10:20 - 10:40	休憩
10:40 - 11:20	奥村光隆 (大阪大) 「凝縮重多電子系の電子状態の量子化学計算」
11:20 - 12:00	武次徹也 (北海道大) 「非断熱効果とトンネル効果を実装した ab initio ダイナミクスの展開」
12:00 - 13:30	昼食
13:30 - 14:10	岡本祐幸 (名古屋大) 「レプリカ交換法プログラム: REM」
14:10 - 14:50	岡崎 進 (名古屋大) 「全原子分子動力学計算によるミセル、脂質膜系の構造と動力学」
14:50 - 15:10	休憩
15:10 - 15:50	横川大輔 (大阪大) 「溶液の理論化学: 積分方程式理論に基づいた手法の開発と応用」
15:50 - 16:30	中辻 博 (量子化学研究協会) 「予言的量子化学の基礎と SAC-CI 科学の展開」
16:30 - 16:40	おわりに 江原正博 (計算科学研究センター)

計算科学研究センター・ワークショップ

# 分子科学プログラム ライブラリの 充実にむけて

2011年1月24日(月)13:30~  
25日(火)17:00

会場: 計算科学研究センター  
〒565-0871 大阪府吹田市吹田1-1-1

講演者:

- 齊藤 真 (分子研)
- 岡本 祐幸 (名古屋大)
- 奥村 光隆 (大阪大)
- 武次 徹也 (北海道大)
- 岡崎 進 (名古屋大)
- 横川 大輔 (大阪大)
- 中辻 博 (量子化学研究協会)
- 高野 伸也 (理研)
- 藤原 幸雄 (理研)
- 横川 大輔 (大阪大)
- Arend G. Dijkstra (京都大)

主催: 計算科学研究センター

お問い合わせ: 計算科学研究センター  
TEL: 06-6456-4121 E-MAIL: ccsc@ipc.ac.jp

申込締切: 1月20日(金)17:00

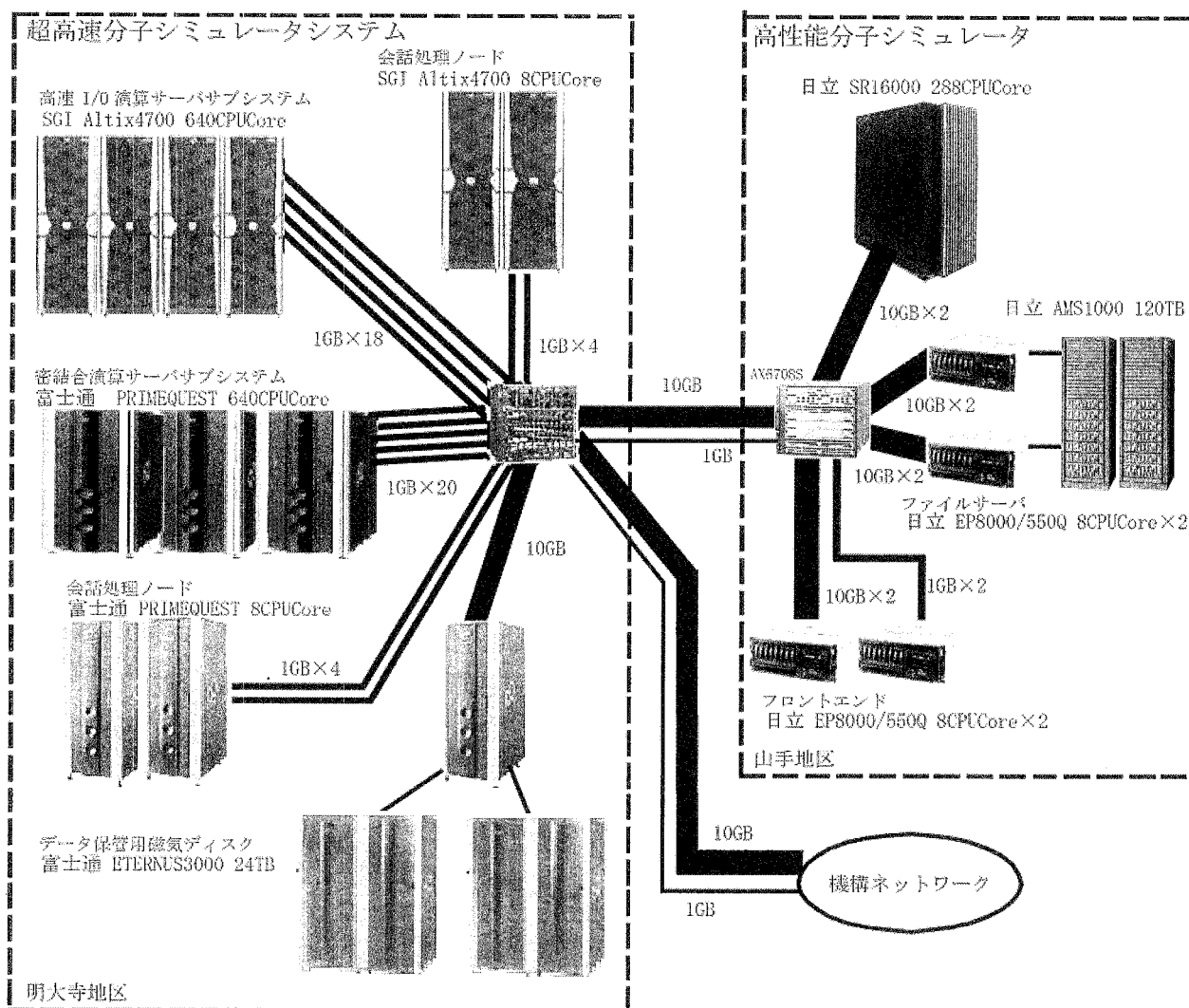
申込方法: 申し込み用紙をダウンロードし、お申し込みください。  
https://ccportal.lms.ac.jp/workshop2011/

### 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）。
- (2) 計算機システム利用閑散期では、各ユーザ理制限、グループ制限を緩和することがあります。

#### 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

\*: SR16000 システムは、ジョブを効率的に処理するため、スレッド並列数 16(16CPU)を1つの固まりとしております。64CPUを使用する場合は、MPIを使用して、プロセス並列数を4としてください。

## 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

\*: SR16000 システムは、ジョブを効率的に処理するため、スレッド並列数 16(16CPU)を1つの固まりとしております。64CPUを使用する場合は、MPIを使用して、プロセス並列数を4としてください。

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 409.6GLOPS
PHS	240時間	3.2GB/CPU	64から1*	128CPU	128CPU	SR16000 1,203.2GFLOPS

\*: SR16000 システムは、ジョブを効率的に処理するため、スレッド並列数 16(16CPU)を1つの固まりとしております。64CPU を使用する場合は、MPI を使用して、プロセス並列数を 4 としてください。

### 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のも、ライブラリプログラムとして公開しています。

平成 22 年度のライブラリプログラム開発の申請件数は 1 件でした。

平成 22 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	11	bugfix12	—	◎ (2011/3/30)	—
Amber	11	bugfix11	◎ (2011/2/4)	—	—
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	2010	Oct01	◎ (2011/3/30)	—	—
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	B.01	◎ (2010/11/10)	◎ (2010/11/10)	—
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	7.6		◎ (2011/3/2)	—	—
Molcas	7.4		◎ (2009/10/29)	◎ (2009/11/25)	—

パッケージプログラム名	バージョン	リビジョン	ccatx	ccprq	cchsr
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	2010.1	14	◎ (2011/3/30)	—	—
Molpro	2009.1	19	—	◎ (2009/11/16)	—
Molpro	2009.1	14	○ (2009/10/26)	—	—
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	2.7		◎ (2008/4/30)	—	—
NAMD	2.6		○ (2008/4/30)	◎ (2010/1/12)	◎ (2008/5/13)
TURBOMOLE	6.3		◎ (2011/3/30)	◎ (2011/3/30)	—
TURBOMOLE	6.2		○ (2009/7/16)	○ (2010/7/16)	—
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： 113,007 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22年度に新規登録されたデータは、5,285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://fcd.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22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	142	590	1,337,430	1,214,850	837,901	485,940,000	335,160,474
	協力研究	8	21	39,000	35,400	3,671	14,160,000	1,468,542
	所内	17	49	245,000	245,000	216,500	98,000,000	86,599,946
基礎生物学	施設利用	3	6	91,000	86,200	10,452	34,480,000	4,180,957
	所内	0	0	0	0	0	0	0
合計		170	666	1,712,430	1,581,450	1,068,525	632,580,000	427,409,919

※ 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)	システム稼働時間					
	B,E地区合計	Altix4700	*	PRIMQUEST	*	SR16000	*
平成22年4月	371,054	664	100	664	100	552	85
5月	393,036	731	100	735	100	744	100
6月	402,850	703	99	711	100	720	101
7月	427,555	734	100	735	100	743	100
8月	431,198	733	100	736	100	744	100
9月	392,726	683	100	686	100	720	100
10月	388,287	741	100	744	100	744	100
11月	367,423	682	100	685	100	720	100
12月	387,298	731	100	736	100	740	99
平成23年1月	383,510	730	100	736	100	744	100
2月	354,197	660	100	664	100	672	100
3月	394,051	722	99	736	100	734	100
合計	4,693,185	8,513	100	8,567	100	8,576	100

※ \*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22年4月		343,757	81	322,431	76	151,377	49
5月		326,965	70	406,053	86	220,122	53
6月		387,482	86	407,813	90	322,931	80
7月		405,231	86	407,366	87	357,141	86
8月		403,441	86	396,116	84	317,342	76
9月		354,824	81	386,999	88	299,214	74
10月		379,975	80	377,157	79	172,548	41
11月		349,060	80	378,571	86	219,300	54
12月		389,819	83	415,196	88	364,840	88
平成23年1月		322,255	69	344,291	73	273,237	66
2月		385,987	91	358,090	84	337,498	90
3月		375,785	81	393,673	84	178,657	43
合計		4,424,581	81	4,593,756	84	3,214,207	67

※ 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22年4月		4,472	3,316	929	8,717
5月		3,221	9,222	1,513	13,956
6月		2,906	5,345	2,011	10,262
7月		3,070	7,073	2,276	12,419
8月		2,299	7,009	1,655	10,963
9月		1,984	7,608	3,841	13,433
10月		2,860	6,074	4,676	13,610
11月		3,027	6,119	2,296	11,442
12月		2,952	6,263	2,584	11,799
平成23年1月		1,918	5,493	1,929	9,340
2月		2,183	6,805	1,986	10,974
3月		3,138	9,044	4,035	16,217
合計		34,030	79,371	29,731	143,132

5.4 クラス別CPU使用時間

Altix4700	PA	PAE	PAS	Queue合計	ETC	総合計
平成22年4月	159695:49:37	111136:08:21	72924:48:08	343756:46:06	0:00:00	343756:46:06
5月	200894:46:02	93028:17:53	33042:01:44	326965:05:39	0:00:00	326965:05:39
6月	199983:34:08	160582:43:17	26915:47:33	387482:04:58	0:00:00	387482:04:58
7月	199659:17:11	116358:21:06	89213:16:36	405230:54:53	0:00:00	405230:54:53
8月	183090:09:12	107548:57:57	112802:10:51	403441:18:00	0:00:00	403441:18:00
9月	124688:09:21	108781:55:05	121353:55:41	354824:00:07	0:00:00	354824:00:07
10月	144482:04:44	113655:23:21	121837:32:09	379975:00:14	0:00:00	379975:00:14
11月	126134:42:11	115191:01:12	107734:31:02	349060:14:25	0:00:00	349060:14:25
12月	124890:29:47	156013:20:11	108915:04:12	389818:54:10	0:00:00	389818:54:10
平成23年1月	104869:59:56	119958:33:16	97426:06:17	322254:39:29	0:00:00	322254:39:29
2月	112915:06:28	145947:06:15	127124:36:16	385986:48:59	0:00:00	385986:48:59
3月	138424:42:03	108874:50:38	128485:24:46	375784:57:27	0:00:00	375784:57:27
合計	1819728:50:40	1457076:38:32	1147775:15:15	4424580:44:27	0:00:00	4424580:44:27

PRIMQUEST	PB	PBE	PBS	Queue合計	ETC	総合計
平成22年4月	177878:15:22	132009:05:42	12543:27:56	322430:49:00	0:00:00	322430:49:00
5月	244345:41:10	115101:51:40	46605:13:43	406052:46:33	0:00:00	406052:46:33
6月	181503:50:32	152926:44:50	73382:24:28	407812:59:50	0:00:00	407812:59:50
7月	197682:07:09	138504:38:59	71179:04:47	407365:50:55	0:00:00	407365:50:55
8月	210945:53:03	140370:28:46	44799:57:45	396116:19:34	0:00:00	396116:19:34
9月	229480:47:43	96978:12:53	60540:19:11	386999:19:47	0:00:00	386999:19:47
10月	195417:19:13	105597:48:55	76142:17:44	377157:25:52	0:00:00	377157:25:52
11月	174713:03:25	124138:08:47	79719:47:01	378570:59:13	0:00:00	378570:59:13
12月	185011:13:07	129259:33:35	100925:01:55	415195:48:37	0:00:00	415195:48:37
平成23年1月	184381:53:45	41510:53:09	110443:34:38	344290:56:44	0:00:00	344290:56:44
2月	149673:28:02	105142:08:54	98494:37:32	358089:41:56	0:00:00	358089:41:56
3月	135099:16:11	117657:07:55	138582:57:49	393672:33:55	0:00:00	393672:33:55
合計	2266132:48:42	1399196:44:05	913358:44:29	4593755:31:56	0:00:00	4593755:31:56

SR16000	PH	PHE	PHS	Queue合計	ETC	総合計
平成22年4月	91936:54:20	872:05:18	58567:52:22	151376:52:00	0:00:00	151376:52:00
5月	135654:14:30	23734:51:30	60732:43:14	220121:49:14	0:00:00	220121:49:14
6月	181544:33:46	20894:04:48	120492:16:00	322930:58:15	0:00:00	322930:58:15
7月	273518:57:08	6039:03:38	77583:09:52	357141:10:38	0:00:00	357141:10:38
8月	243558:22:54	41039:21:18	32744:18:26	317342:03:31	0:00:00	317342:03:31
9月	171091:56:46	83275:07:42	44846:57:20	299214:01:48	0:00:00	299214:01:48
10月	126759:26:54	36981:33:42	8806:29:52	172547:30:28	0:00:00	172547:30:28
11月	117098:25:14	24337:40:36	77863:15:48	219299:40:54	0:00:00	219299:40:54
12月	118446:11:58	96596:20:52	149797:09:06	364839:41:56	0:00:00	364839:41:56
平成23年1月	112855:10:06	14400:19:08	145981:10:56	273236:40:10	0:00:00	273236:40:10
2月	150235:31:16	23347:25:24	163915:02:56	337498:21:14	0:00:00	337498:21:14
3月	102711:10:56	60121:20:14	15824:58:24	178657:29:34	0:00:00	178657:29:34
合計	1825410:55:48	431639:14:10	957155:24:16	3214206:19:42	0:00:00	3214206:19:42

5.5 ジョブ処理件数

Altix4700	PA	PAE	PAS	PAR	Queue合計	ETC	総合計
平成22年4月	1,780	824	1,868	0	4,472	0	4,472
5月	1,987	653	581	0	3,221	0	3,221
6月	1,235	1,192	479	0	2,906	0	2,906
7月	1,220	878	972	0	3,070	0	3,070
8月	920	383	996	0	2,299	0	2,299
9月	1,073	531	380	0	1,984	0	1,984
10月	1,969	470	421	0	2,860	0	2,860
11月	1,586	607	834	0	3,027	0	3,027
12月	2,134	326	492	0	2,952	0	2,952
平成23年1月	1,317	317	284	0	1,918	0	1,918
2月	1,513	279	391	0	2,183	0	2,183
3月	1,197	1,427	514	0	3,138	0	3,138
合計	17,931	7,887	8,212	0	34,030	0	34,030

PRIMQUEST	PB	PBE	PBS	PBX	PBR	Queue合計	ETC	総合計
平成22年4月	2,922	271	123	0	0	3,316	0	3,316
5月	7,149	244	1,829	0	0	9,222	0	9,222
6月	3,015	256	2,074	0	0	5,345	0	5,345
7月	3,775	491	2,807	0	0	7,073	0	7,073
8月	4,490	297	2,222	0	0	7,009	0	7,009
9月	4,421	496	2,691	0	0	7,608	0	7,608
10月	2,389	1,131	2,554	0	0	6,074	0	6,074
11月	2,653	706	2,760	0	0	6,119	0	6,119
12月	3,907	196	2,160	0	0	6,263	0	6,263
平成23年1月	3,407	328	1,742	0	16	5,493	0	5,493
2月	2,047	1,069	3,663	0	26	6,805	0	6,805
3月	3,397	1,458	4,146	0	43	9,044	0	9,044
合計	43,572	6,943	28,771	0	85	79,371	0	79,371

SR16000	PH	PHE	PHS	PHI	PHR	PHD	Queue合計	ETC	総合計
平成22年4月	889	25	15	0	0	0	929	0	929
5月	1,121	376	16	0	0	0	1,513	0	1,513
6月	1,804	178	27	2	0	0	2,011	0	2,011
7月	2,161	98	17	0	0	0	2,276	0	2,276
8月	1,452	179	21	3	0	0	1,655	0	1,655
9月	3,550	239	52	0	0	0	3,841	0	3,841
10月	4,163	502	11	0	0	0	4,676	0	4,676
11月	2,054	212	29	1	0	0	2,296	0	2,296
12月	2,054	413	117	0	0	0	2,584	0	2,584
平成23年1月	1,786	110	33	0	0	0	1,929	0	1,929
2月	1,652	287	32	11	0	4	1,986	0	1,986
3月	3,756	273	6	0	0	0	4,035	0	4,035
合計	26,442	2,892	376	17	0	0	29,731	0	29,731

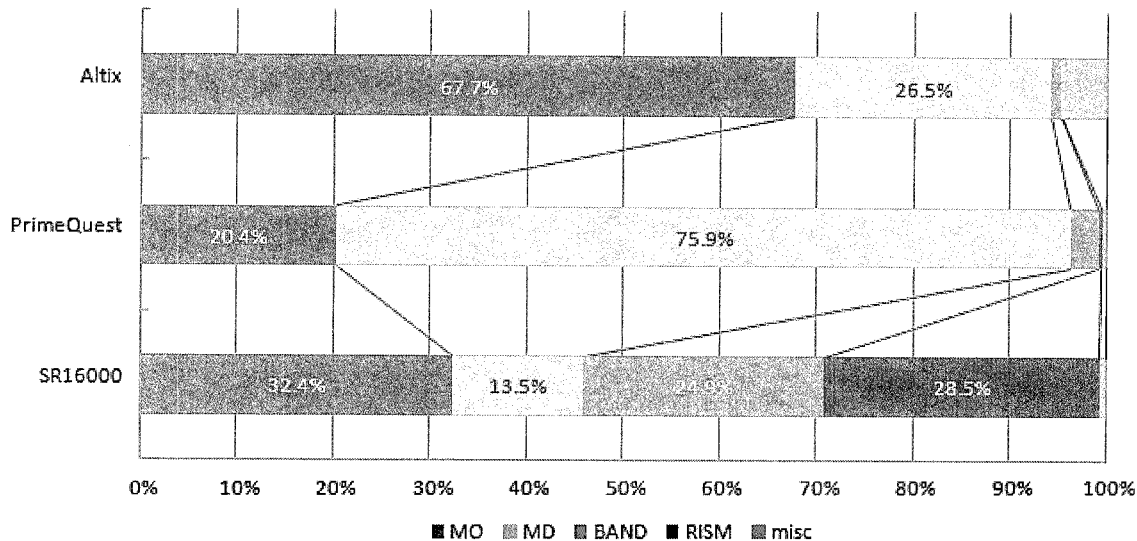
## 5.6 ジョブ処理内訳

各システムで実行されたジョブを「分野別」、「CPU 使用数」、「並列化の手法別」、「ジョブ毎のメモリー実使用量」に観点から内訳を示している。

集計はジョブの使用 CPU 数と経過時間で重み付けしている。

### ● 分野別

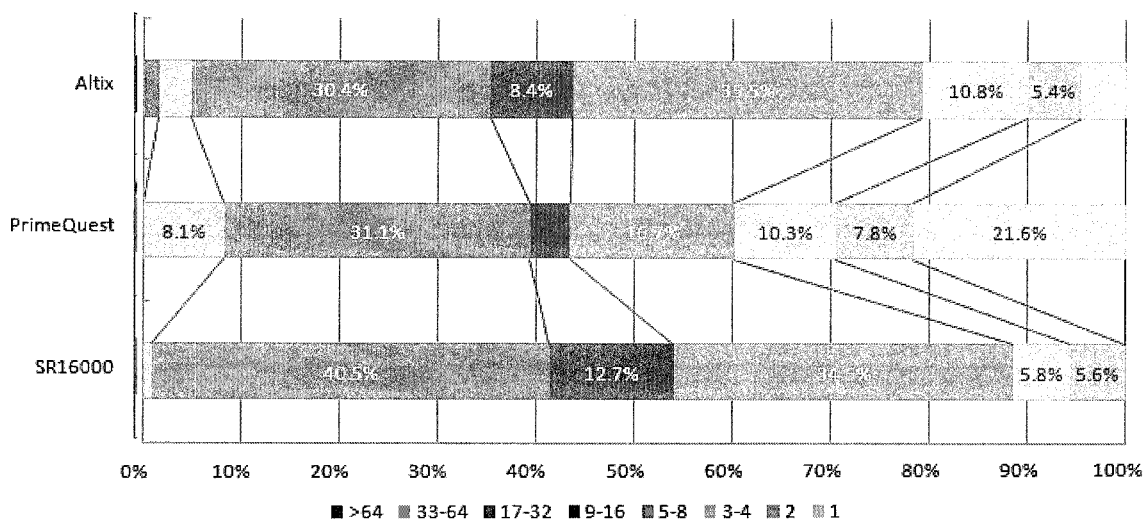
#### 分野別比率



Altix では MO 計算、PrimeQuest では MD 計算が多く、SR16000 では MO 計算や MD 計算だけではなく BAND 計算や RISM 計算が多く実行されていた。

### ● CPU 使用数

#### 1ジョブあたりのCPU使用数別比率



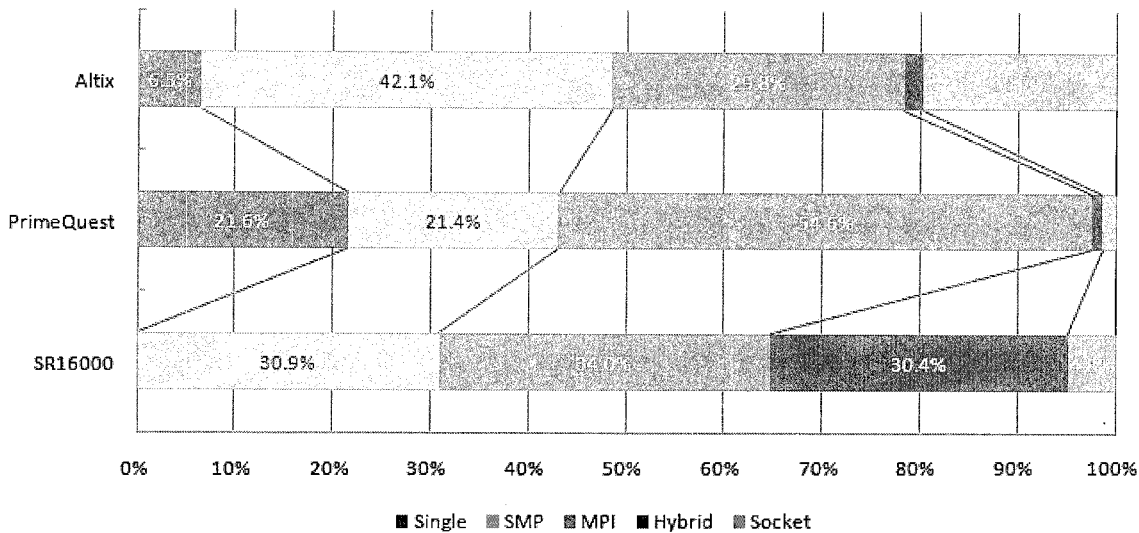
どのシステムでも 32 並列か 8 並列が多かった。8 並列が多い理由は、Gaussian ジョブ投入専用コマンド g03sub/g09sub のデフォルト並列数 8CPU をそのまま使うユーザーが多いからであっ

た。SR16000 では、Single CPU ジョブは実行できないキュー構成であるため、Single CPU ジョブは存在していない。

● 並列化の手法別

CPU を複数個使う際に用いられた手法について集計した。グラフ中の Hybrid とは、SMP と MPI の併用のことである。また Socket とは、GAMESS で使われているソケット通信を用いる手法である。

**並列化種別の比率**

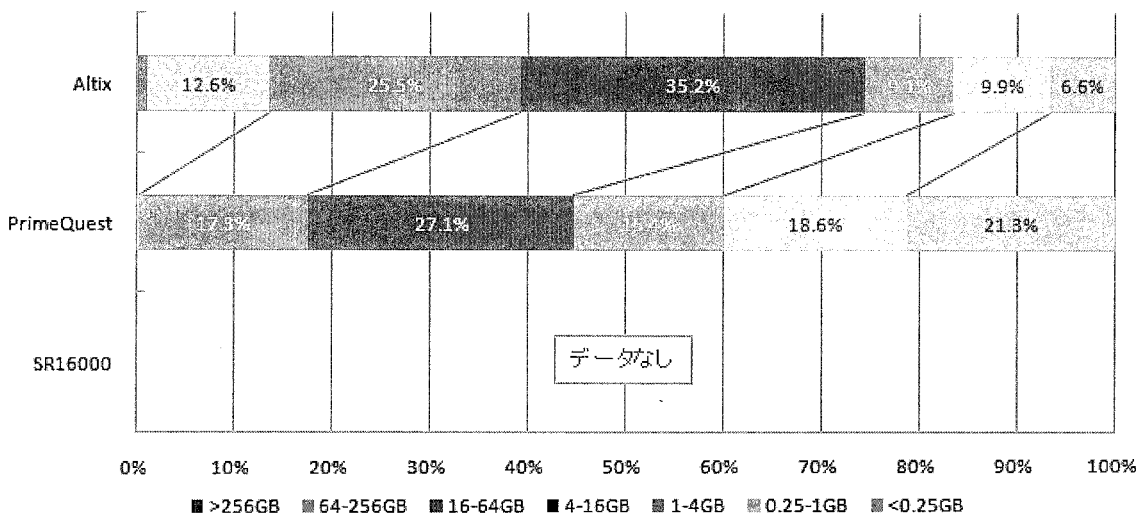


Altix では SMP、PrimeQuest では MPI、SR16000 では Hybrid の割合が多いのが特徴的である。

● ジョブ毎のメモリー実使用量

SR16000 の使用メモリー量についてのデータは存在しないため、空欄になっている。

**ジョブ毎の使用メモリー量**



Altix は、PrimeQuest に比べより大量のメモリーを使用するジョブが多かった。

## 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 理学研究院化学部門	教授
木下 賢吾	東北大学 大学院情報科学研究科	教授
常次 宏一	東京大学 物性研究所	教授
北尾 彰朗	東京大学 分子細胞生物学的研究所	准教授
佐藤 啓文	京都大学 大学院工学研究科	教授
平田 文男	計算科学研究センター長 (2011年3月31日退任) 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
柳井 毅	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
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
村田和義	生理学研究所 脳機能計測・支援センター 形態情報解析室	准教授

## 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 千城	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 SX- 6,689 2,101	M-680H系 SX-3/34R 5,722 HSP 8,506 SP2 2,133 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



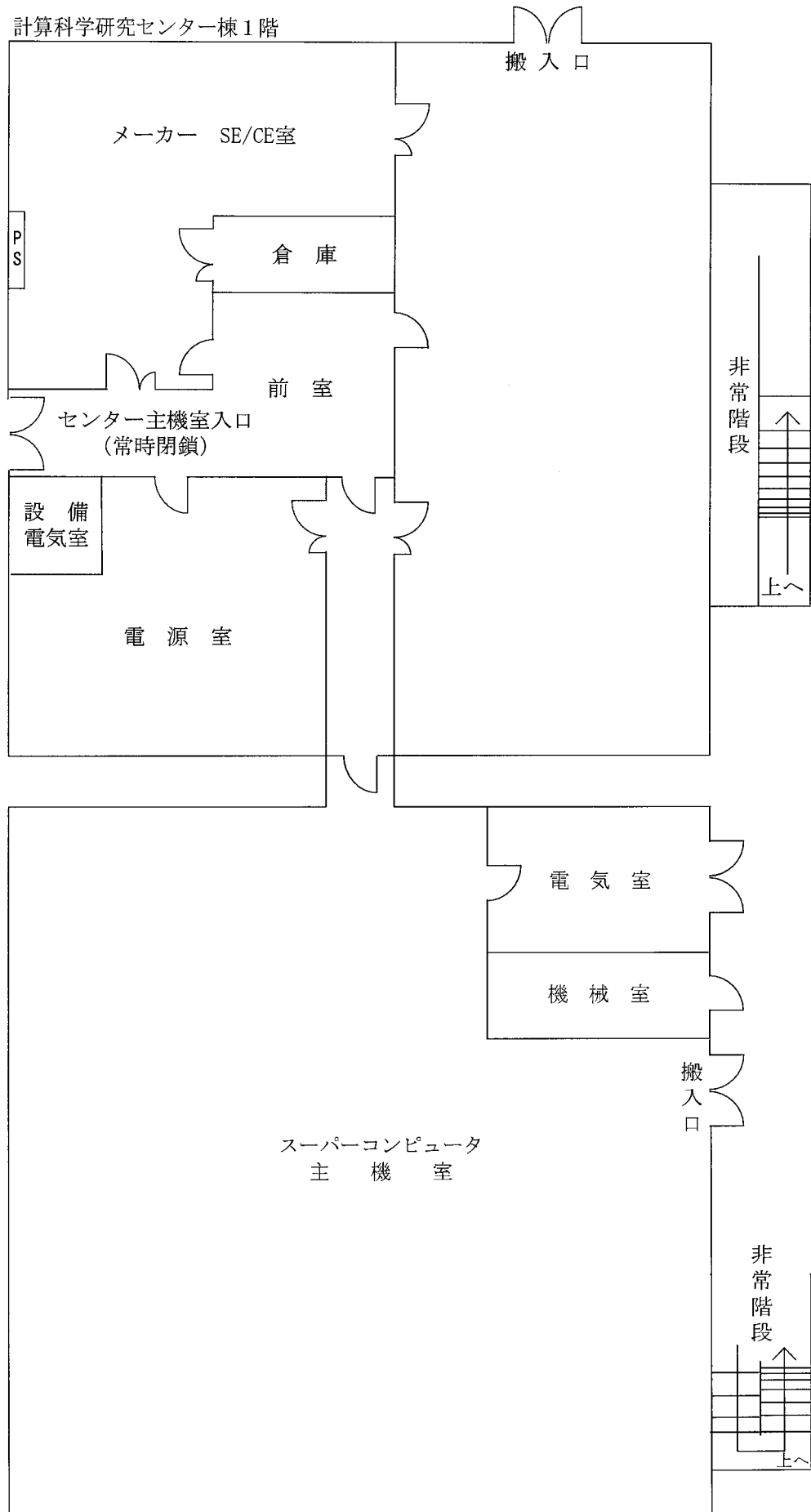
	平成8年度	平成9年度	平成10年度	平成11年度	平成12年度	平成13年度	平成14年度	平成15年度
計算機システム	SX-3/34R HSP SP2 HPC(9月～)	SX-3/34R HSP SP2 HPC SR2201(11月～)	SX-3/34R HSP SP2 HPC SR2201 Origin2000(10月～) SX-5(3月～)	SX-3/34R (12月まで) SX-5 SP2 HPC SR2201 Origin2000	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-7 TX-7
運 転 方 式	無 人	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	119
利 用 者 数								
機 構 内 <sup>a</sup>	139	126	138	125	101	100	104	89
機 構 外	574	609	566	539	534	504	479	449
合 計	713	735	704	664	635	604	583	538
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	VPP5000 8,553 SGI系 8,545 SX-7 8,524 TX-7 8,525
CPU時間利用申請(時間)	(HSP基準) <sup>b</sup>	(HSP基準) <sup>b</sup>	(HSP基準) <sup>b</sup>	(SP2 Thin基準) <sup>b</sup>	(SP2 Thin基準) <sup>b</sup>	(SP2 Thin基準) <sup>b</sup>	(SP2 Thin基準) <sup>b</sup>	(TX-7基準) <sup>b</sup>
申 請	58,425	73,910	76,804	97,788	249,405	251,785	237,872	278,177
許 可	51,499	58,650	67,159	79,964	209,393	234,866	229,401	277,697
総使用CPU時間 <sup>c</sup> (時間)	207,790	262,365	273,575	239,671	619,294	678,128	2,030,643	1,785,877
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>	70,308	51,738	45,173	40,697	58,685	70,680	55,522	58,784
ライブラリプログラム新規登録数	15	3	13	14	18	4	15	5
データベース新規登録数	0	0	0	0	0	0	0	0
センター使用論文数 <sup>d</sup>	279	331	347	347	391	302	302	281

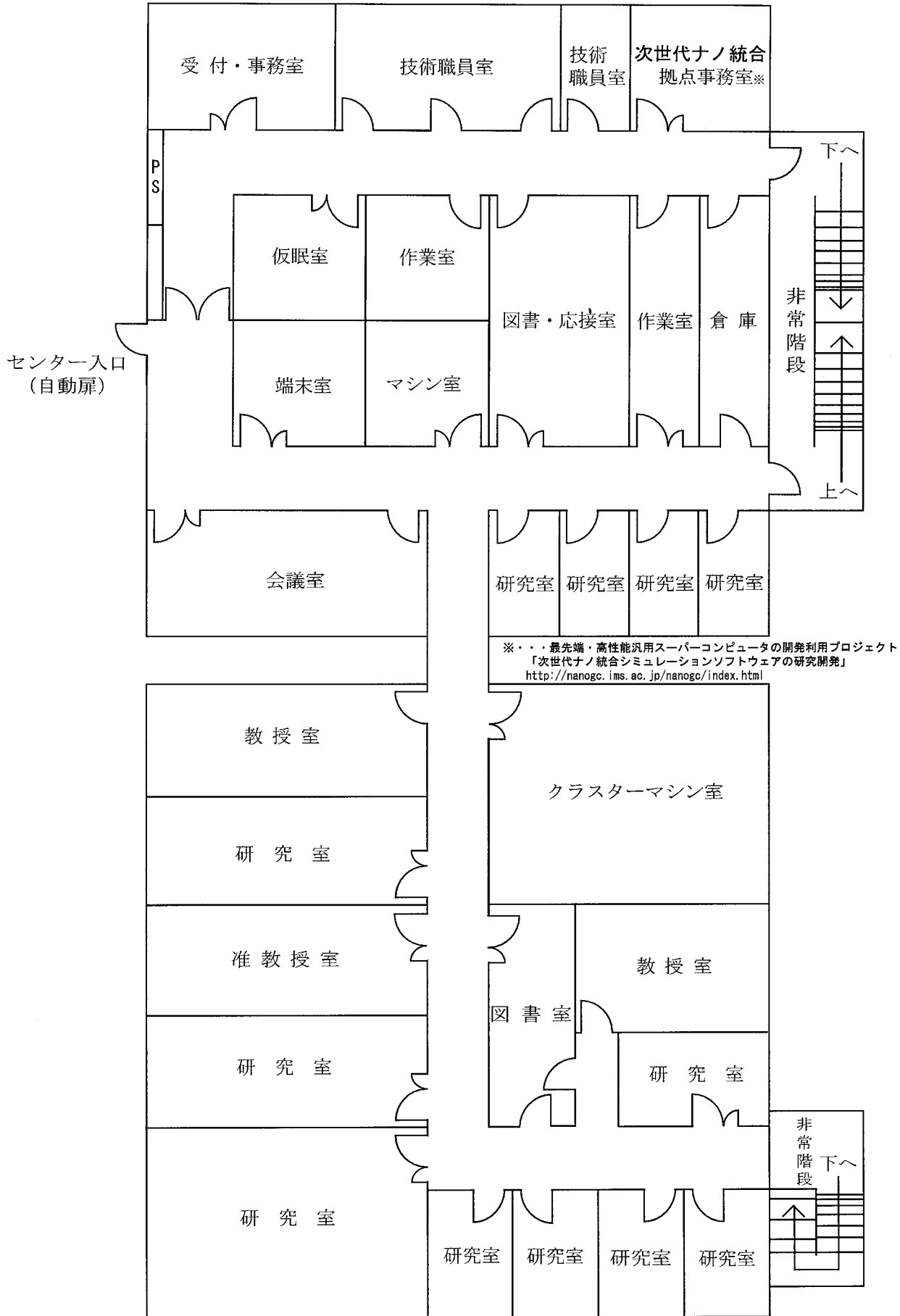
	平成16年度	平成17年度	平成18年度	平成19年度	平成20年度	平成21年度	平成22年度
計算機システム	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-7 TX-7	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-7 TX-7	VPP5000(5月まで) SGI2800,Origin3800 (5月まで) Altix4700(7月から) PRIMEQUEST(7月から) SX-7 TX-7	Altix4700 PRIMEQUEST SX-7(1月まで) TX-7(1月まで) SR16000(3月から)	Altix4700 PRIMEQUEST SR16000	Altix4700 PRIMEQUEST SR16000	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	154	132	141	145	152	171	170
利 用 者 数							
機 構 内 <sup>a</sup>	83	30	40	44	59	49	49
機 構 外	516	480	533	551	589	635	617
合 計	599	510	573	595	648	684	666
稼働時間(時間)	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	Altix4700 8,513 PRIMEQUEST 8,567 SR16000 8,576
CPU時間利用申請(時間)	(TX-7基準) <sup>b</sup>	(TX-7基準) <sup>b</sup>	(TX-7基準) <sup>b</sup>	(TX-7基準) <sup>b</sup>	(SR16000基準) <sup>b</sup>	(SR16000基準) <sup>b</sup>	(SR16000基準) <sup>b</sup>
申 請	341,788	414,643	702,270	1,005,486	1,224,945	1,433,895	1,712,430
許 可	321,796	368,136	653,468	918,737	1,199,620	1,412,981	1,581,450
総使用CPU時間 <sup>c</sup> (時間)	1,762,818	1,992,205	4,384,464	6,307,008	12,579,635	11,954,215	12,232,544
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>	28,968	19,896	78,130	140,250	149,342	149,177	143,132
ライブラリプログラム新規登録数	4	4	21	18	22	20	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 <sup>d</sup>	284	205	214	188	186	196	193

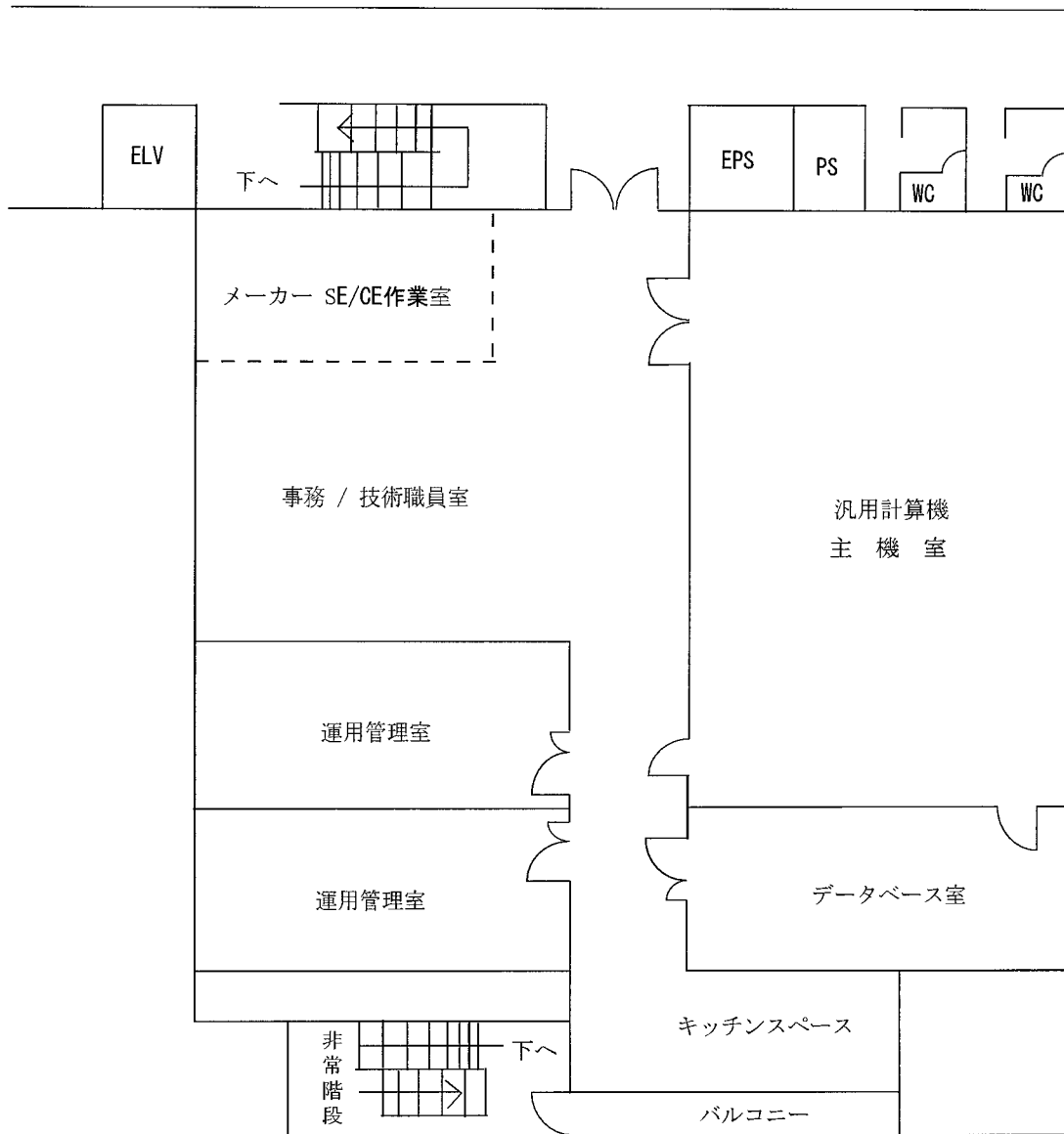
- a: 機構内利用者にはアイドル課題のための重複を含めません。  
b: 申請および使用の詳細については、5.1を参照してください。  
c: CPU時間、件数ともライブラリ開発、センター業務使用分などすべてを含みます。  
d: センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたものです。  
e: S-810、S-820、SX-3、SX-5、SX-7、VPPのCPU時間については、スカラー時間とベクトル時間の単純な和です。

6.4 建物図

明大寺地区 計算科学研究センター棟1階







## 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 2010 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は、2000年度の組織改組(電子計算機センターから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、2010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。

2011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う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、2012年2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ている。

共同利用に関しては、2010年度も169の研究グループにより、総数662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、2010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、本年度は計算科学研究センターワークショップとして、「分子科学プログラムライブラリの充実にむけて」をテーマとしたワークショップを開催した。

また、本年度より、次世代スーパーコンピュータプロジェクトである「ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」と平行して、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI) 戦略プログラムが開始した。その中で、物性科学分野、分子科学分野、材料科学分野が、HPCI 戦略プログラム分野2「新物質・エネルギー創成」計算物質科学イニシアティブ (CMSI: Computational Materials Science Initiative) を構成し、HPCI 戦略プログラムを推進している。今後、分子科学研究所は、CMSI の戦略機関の一つとして参加し、分子科学分野の中核として戦略プログラムを推進する。その事業の中で、計算科学研究センターは、HPCI の資源提供機関の一つとして HPCI 戦略プログラムに参加する。具体的には、本年度後期より、コンピューター資源の一部 (20% 未満) を提供することで協力を開始した。

#### 平成 22 年度 システム構成

##### 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

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

システム構成図

