

I 部

目 次

1	巻頭言 計算科学研究センター 江原 正博	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	10
3.3	キュー構成	10
3.4	利用課金	14
3.5	CPU 利用時間	14
4	一般報告	16
4.1	ライブラリプログラムの開発・公開	16
4.2	データベース開発状況	18
5	平成 23 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	19
5.3	計算機利用状況	20
5.4	クラス別 CPU 使用時間	21
5.5	ジョブ処理件数	23
5.6	ジョブ処理内訳	25
5.7	各マシンでのアプリケーション利用比率	27
6	資料	28
6.1	計算科学研究センター運営委員	28
6.2	計算科学研究センター職員	29
6.3	利用者数と CPU 時間の推移	30
6.4	建物図	32
6.5	マニュアル一覧	35
7	研究施設の現状と将来計画 (分子研リポート 2011 より転載)	41

1. 巻頭言

計算科学研究センター
江原正博

いつも計算科学研究センターをご利用いただきまして有難うございます。また、ワークショップやスクールにもご協力をいただき、この場をお借りしまして御礼申し上げます。本年度も皆様の研究成果やセンターの運営・活動をまとめたセンターレポートを発刊いたしました。本レポートから、分子科学や物性科学など広い分野において多彩な研究がなされていることが分かります。今後、本センターが皆様のご研究に益々活用されることを願っております。

本センターでは、本年度2月にこれまでの約1.5倍に相当する演算性能をもつ超高速分子シミュレーターシステムが導入しました。また、利用しやすいようにキュー構成も新しくしました。詳細はシステム構成に記載されていますが、新システムは高速 I/O サーバー、クラスター演算サーバー、京開発サーバから構成されます。現在、京コンピュータや HPCI コンソーシアムなど大型計算機を取り巻く環境は大きな変革が進んでいます。本計算センターにおいても、高並列計算など様々なリクエストに柔軟に対応できるように新システムを構成しています。本システムが共同利用を通じて、皆様の研究に有効に活用され、新しい理論や方法の開発、新しい現象の発見や解明に繋がればと願っています。

毎年開催しておりますワークショップは、本年度は「バイオサイエンスに対する計算分子科学からのアプローチ」に焦点をあて開催しました。様々なアプローチによってバイオサイエンスに取り組む最先端の研究のご講演をいただき、ポスター発表による研究交流も行っていました。本年度は、特に新システムを導入したこともあり、スーパーコンピュータ利用講習会をプログラムの一部に加えました。また、計算分子科学研究拠点や計算科学研究機構と連携して、量子化学ウィンタースクールや分子シミュレーションスクールを開催しました。これらのワークショップやスクールを通じて、若い研究者の方々が基礎理論や応用研究に触れ、理解を深め、今後の研究に活用されることを願っています。

皆様には、これまで以上に計算センターのシステムや研究会などを活用していただき、最先端の研究を切り拓いていただきたいと思います。皆様のご意見やご要望をお寄せいただき、今後とも計算センターのご利用とご協力をよろしくお願い致します。

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は「バイオサイエンスに対する計算分子科学からのアプローチ」と題して、計算分子科学の観点からバイオサイエンス分野に対してどのようなアプローチがなされているのか、そしてその結果これまでどのような知見が得られているのかということ講義者の先生方にその研究成果を通して紹介していただいた。大規模計算のための施設利用 S 課題による研究もこの中で紹介していただいた。若手・実験研究者の方々に積極的に参加していただけるようにポスターセッションも設けた。ポスター発表は20件あり、質の高い研究交流がなされた。さらに、今年度は新たに導入された超高速分子シミュレータシステムの紹介も兼ねたスーパーコンピュータ利用講習会を開催した。プログラムの高速化及び並列化に関する講習を実例を交えながら専門家に行っていただいた。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77名であった。

スーパーコンピュータワークショップ 2012

テーマ：「バイオサイエンスに対する計算分子科学からのアプローチ」

日時：2012年1月24日（火）13:30～25日（水）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：77名

ポスター発表：20件

1月24日（火）	
13:30 - 13:40	はじめに 齊藤真司（計算科学研究センター長）
13:40 - 14:20	木寺詔紀（横浜市立大学） 「タンパク質の機能的運動のマルチスケールシミュレーション」
14:20 - 15:00	野口博司（東京大学） 「生体膜の粗視化シミュレーション」
15:00 - 15:20	休憩
15:20 - 16:00	長谷川淳也（京都大学） 「光機能性蛋白質における励起状態と分子間相互作用」
16:00 - 16:40	李秀榮（理化学研究所） 「レプリカ交換分子動力学計算による水中糖鎖の立体構造予測」
16:40 - 17:20	山口 兆（大阪大学） 「光合成酸素発生中心 CaMn405 クラスターの構造、 電子状態および反応性に関する理論的研究」
17:20 - 18:30	ポスター発表
18:30 - 20:30	懇親会 挨拶 大峯 巖（分子科学研究所長）

1月25日(水)	
9:00 – 9:40	中村春木 (大阪大学) 「蛋白質の自由エネルギー地形」
9:40 – 10:20	吉田紀生 (分子科学研究所) 「RISM理論による生体分子の分子認識と化学反応へ向けた研究」
10:20 – 10:40	休憩
10:40 – 11:20	吉澤一成 (九州大学) 「分子伝導の軌道理論：実験的検証」
11:20 – 12:00	諸熊奎治 (京都大学) 「複合および非複合理論による複雑分子系の化学反応の シミュレーション：バイオサイエンスへの応用」
12:00 – 13:30	昼食
13:30 – 15:00	スーパーコンピュータ利用講習会 1) 新システムのご紹介 木村敏幸 (富士通株式会社)・岩室好修 (日本 SGI 株式会社) 2) 「マルチコアの優位性を活用：インテル Fortran コンパイラーによる 並列処理」 菅原清文 (インテル株式会社) 3) 「インテル・コンパイラーを利用したインテル AVX の最適化」 菅原清文 (インテル株式会社) 4) 「インテルツールによる性能解析とデバッグ」 黒澤一平 (エクセルソフト株式会社)
15:00 – 15:20	休憩
15:20 – 16:50	スーパーコンピュータ利用講習会 (上記より引き続き)
16:50 – 17:00	おわりに 江原正博 (計算科学研究センター)



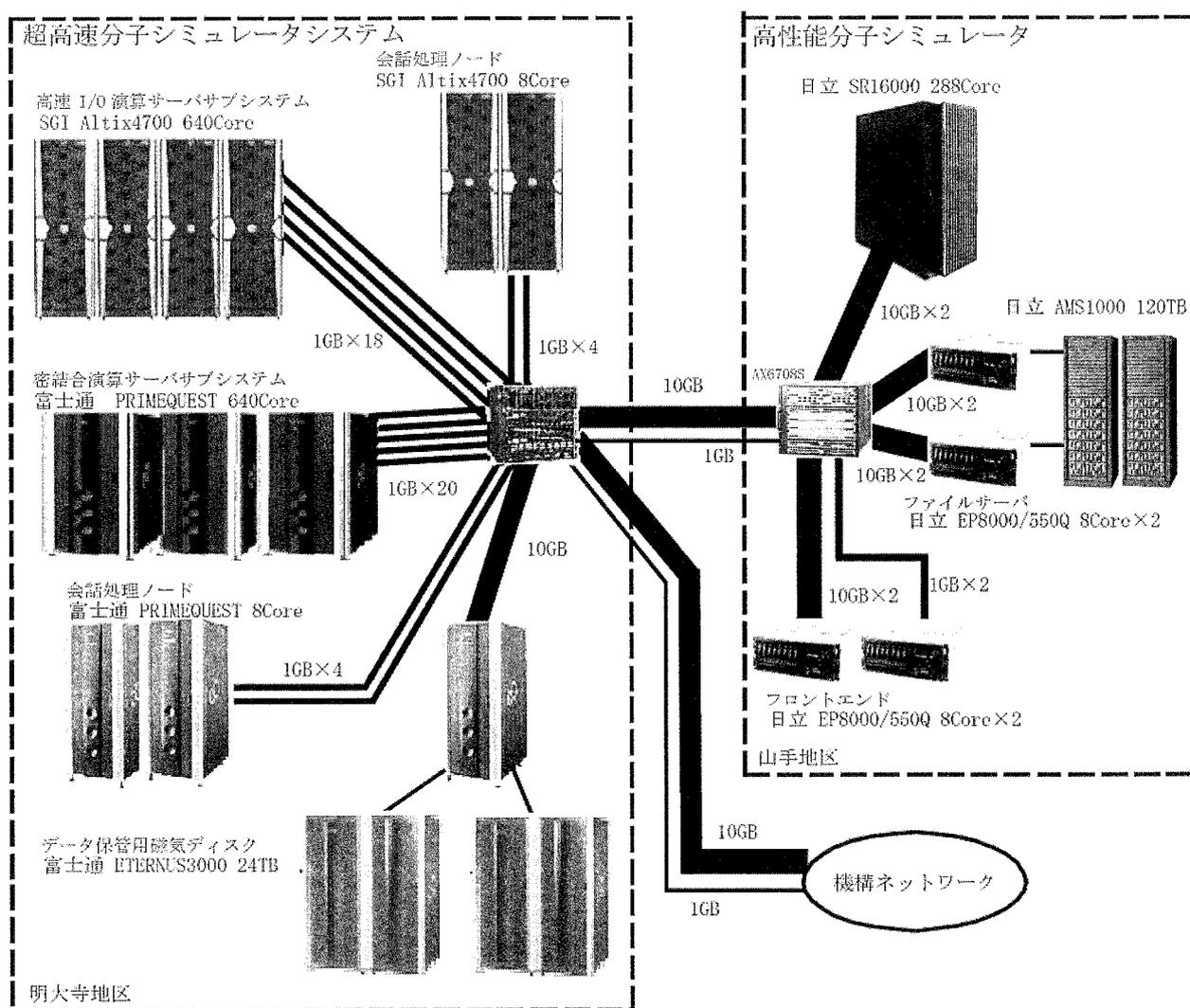
3 計算機システムの運用および使い方

3.1 システムの構成と特徴

平成 24 年 1 月末までの構成と特徴

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/Core)
Core 数	640 個 (512 個 + 128 台)

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量	114TB
(内訳)	
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/Core)
Core 数	640 個 (64 個 × 10node)

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量	35TB
(内訳)	
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

- ・演算サーバーシステム(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/Core)
Core 数	288 個 (32 個 × 9node)
	SMT 機能を使うことにより OS は、1Core を 2Core (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	23TB
(内訳)	
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)
Core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)
Core数	32個 (16個 × 2台)

平成24年2月1日から年度末までの構成と特徴

超高速分子シミュレータシステム (高速 I/O 演算サーバシステム(SGI 製 UV1000)、クラスタ演算サーバシステム(富士通製 PRIMERGY)、京用開発サーバシステム(富士通 PRIMEHPC FX10))、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)。センター内は2台のスイッチングシステム(Force10 ZettaScale Z9000 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 (10Gbps) 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。

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>	
総容量	400TB
(内訳)	
一時作業ファイル領域(/work)	400TB

- ・ クラスタ演算サーバシステム(富士通製 PRIMERGY RX300)

PRIMERGY ではジョブ管理(PBS Professional)、バッチ処理を行っています。

クラスタ演算サーバは、TypeX と TypeY より構成されています。

<演算処理装置>

主記憶容量	32.2TB
	(TypeX:4GB/Core×2,880Core、TypeY:8GB/Core×2,592Core)
総理論演算性能	127TFLOPS (TypeX:66.8TFLOPS、TypeY:60.2TFLOPS)
Core 数	5,472 個 (TypeX:2,280Core、TypeY:2,592Core)

- ・ 京用開発サーバシステム(富士通製 PRIMEHPC FX10)

PRIMEHPC FX10 ではジョブ管理(リソースグループ管理)、バッチ処理を行っています。

<演算処理装置>

主記憶容量	2TB
総理論演算性能	20.2TFLOPS
Core 数	1,536 個

◆ 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/Core)
Core 数	288 個 (32 個 × 9node)
	SMT 機能を使うことにより OS は、1Core を 2Core (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	23TB
(内訳)	
一時作業ファイル領域(/work)	23TB

- ・ ファイルサーバシステム(PANASAS 製 ActiveStor)

<演算処理装置>

主記憶装置	64GB
-------	------

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量	1PB
(内訳)	
ホームディレクトリ領域 (/save)	193TB
短期保存ファイル領域 (/week)	390TB
長期保存ファイル領域 (/work)	390TB
	(クラスタ演算サーバ、クラスタ演算サーバ用開発サーバ)

- ・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)
Core 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

- ・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)
Core 数	32 個 (16 個 × 2 台)

- ・高速 I/O 演算サーバ用開発サーバ(SGI 製 UV10)

ccuvf1 と ccuvf2 の 2 台構成です。

<演算処理装置>

主記憶装置	256GB (128GB × 2 台)
Core 数	64 個 (32 個 × 2 台)

- ・クラスタ演算サーバ用開発サーバ(富士通製 PRIMERGY RX300)

ccpgf1 と ccpgf2 の 2 台構成です。

<演算処理装置>

主記憶装置	256GB (128GB × 2 台)
Core 数	32 個 (16 個 × 2 台)

- ・京用開発サーバ(富士通製 PRIMERGY RX300)

<演算処理装置>

主記憶装置	64GB
Core 数	16 個

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。

平成 24 年 1 月末までの構成

SR16000 は、SMT(Simultaneous Multi Threading)機能を用いることにより、仮想 CPU 数が増えます。

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 of 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 409.6GLOPS
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。

平成 24 年 2 月 1 日から年度末の構成

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
ccfep1/2	1時間	1GB	6			EP8000/550Q

パラレル利用キュー

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
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。
 SR16000 は、SMT(Simultaneous Multi Threading)機能を使用しません。

キュー名	CPU時間	メモリ	1ジョブ当たりのCore数	グループ制限	備考
PF	定期保守 まで	3.875GB/Core 7.75GB/Core	512	許可時間が8万時間以上:1,024Core 許可時間が1万時間以上:640Cor 許可時間が1万時間未満:128Core	PRIMERGY
PS	定期保守 まで	15.5GB/Core	最大グループ制限数 まで	許可時間が8万時間以上:576Core 許可時間が1万時間以上:384Cor 許可時間が1万時間未満:128Core	UV1000
large small1 small2	24時間	1.8GB/Core	72×16 (固定) 12×16 (固定) 12×16 (固定)	システム全体で1ジョブ	PRIMEHPC FX10

PF キューは、16Core 以下の並列数は任意の数を指定できるが、他のジョブとノードを共有する。それ以上の場合は、16Core の倍数に切り上げられ、ノードを共有する。
 今年度内は全利用者が利用可能。
 制限時間は、経過時間で制限される。

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 CPU 利用時間

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

3.5.1 CPU 利用時間算出法

Parallel	<p>CPU利用時間 = ジョブ経過時間 × 要求CPU数 × 1秒当たりの課金係数</p> <p>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</p> <p>要求CPU数：ジョブが要求したCPU数</p>
----------	---

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消費された CPU 利用時間

Pprqp：PRIMEQUEST のパラレルジョブキューで消費された CPU 利用時間

Phsrp：SR16000 のパラレルジョブキューで消費された CPU 利用時間

3.5.2 課金係数一覧

平成 24 年 1 月末まで課金係数

	1 秒当たりの課金係数	マシン 1CPU、1 経過時間当たりの CPU 利用時間 (3600×1 秒当たりの課金数) 単位：時間
Altix4700(P)	0.000030	0.108
PRIMEQUEST(P)	0.000015	0.054
SR16000(P)	0.000030	0.108

(P): Parallel

平成 24 年 2 月 1 日から年度末まで課金係数

	1 秒当たりの課金係数	マシン 1CPU、1 経過時間当たりの CPU 利用時間 (3600×1 秒当たりの課金数)単位：時間
PRIMERGY	0.000020	0.0720
PRIMEHPC FX10	0.000018	0.0648
UV1000	0.000040	0.1440
SR16000(P)	0.0000325	0.1170

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標準時間（1時間当たりのCPU利用時間）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、TFLOPS 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、（標準時間÷演算性能）です。
- (5) 標準時間算出式は、（3600秒×課金係数）です。

平成24年1月末までコストパフォーマンス

パラレルジョブキュー

キュー名	CP	標準時間 (時間)	課金係数	演算性能 (TFLOPS)	マシン名	備考
PA, PAE, PAS	0.211	0.864	0.000030	4.1	Altix4700	8CPU
PB, PBE, PBS	0.105	0.432	0.000015	4.1	PRIMEQUEST	8CPU
PH, PHE, PHS	0.160	0.864	0.000030	5.4	SR16000	8CPU

平成24年2月1日から年度末までコストパフォーマンス

キュー名	CP	標準時間 (時間)	課金係数	演算性能 (TFLOPS)	マシン名	備考
PF	0.012	1.584	0.000055	127.0	Altix4700	8CPU
PS	0.132	0.806	0.000028	6.1	PRIMEQUEST	8CPU
large,small1,small2	0.058	1.181	0.000041	20.2	PRIMEHPC FX10	8CPU
PH	0.096	0.518	0.000018	5.4	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。

2011 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。

2011 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)	—	◎ (2011/6/20)
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	C.01	◎ (2011/11/2)	◎ (2011/11/2)	◎ (2011/11/2)
Gaussian	09	B.01	◎ (2010/11/10)	◎ (2010/11/10)	◎ (2011/5/19)
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		◎ (2011/2/10)	—	—
NAMD	2.6		○ (2008/4/30)	◎ (2010/1/12)	◎ (2008/5/13)
TURBOMOLE	6.3.1		○ (2011/7/21)	○ (2011/7/21)	—
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	ccpg	ccuv
Amber	11	Bugfix26	—	◎ (2012/2/21)
Amber	11	bugfix19	◎ (2012/2/1)	—
GAMESS	2011	Aug11	—	◎ (2012/2/1)
GAMESS	2010	Oct01	◎ (2011/3/30)	—
Gaussian	09	C.01	◎ (2012/2/1)	◎ (2012/2/1)
Gaussian	09	B.01	○ (2012/2/7)	○ (2012/2/6)
Molcas	7.6		◎ (2012/2/1)	◎ (2012/2/1)
Molcas	7.4		○ (2012/2/1)	—
Molpro	2010.1	24	◎ (2012/2/1)	◎ (2012/2/1)
TURBOMOLE	6.3.1		◎ (2012/2/1)	—
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： 115,996 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、2003年秋からは、モニター制度の制限つきではありますが、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。

2011年度に新規登録されたデータは、2,989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://fcdb.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2001年度で中止になっています。

5 平成23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	154	592	1,408,915	1,350,370	875,609	540,148,000	350,243,622
	協力研究	1	4	10,000	10,000	3,341	4,000,000	1,336,244
	所内	15	36	162,200	162,200	115,033	64,880,000	46,013,007
基礎生物学	施設利用	3	7	63,000	59,380	9,257	23,752,000	3,702,677
	所内	0	0	0	0	0	0	0
CMSI利用枠	施設利用	15	42	84,000	84,000	48,229	33,600,000	19,291,600
	所内	2	7	10,000	10,000	4,536	4,000,000	1,814,400
合計		190	688	1,738,115	1,675,950	1,056,004	670,380,000	422,401,550

※ 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	*	PRIMERGY	*	UV1000	*	PRIMEHPC FX10
平成23年4月	385,232	664	100	664	100	720	100	-	-	-	-	-	-
5月	418,951	734	100	736	100	744	100	-	-	-	-	-	-
6月	415,460	708	100	712	100	720	100	-	-	-	-	-	-
7月	438,801	729	100	736	100	744	100	-	-	-	-	-	-
8月	437,741	730	100	736	100	732	99	-	-	-	-	-	-
9月	394,302	682	100	685	100	720	100	-	-	-	-	-	-
10月	408,214	744	100	744	100	744	100	-	-	-	-	-	-
11月	390,432	684	100	688	100	710	100	-	-	-	-	-	-
12月	512,285	744	100	744	100	744	100	-	-	-	-	-	-
平成24年1月	591,051	730	100	736	100	744	100	-	-	-	-	-	-
2月	486,548	-	-	-	-	696	100	691	99	684	98	696	100
3月	492,343	-	-	-	-	734	100	721	97	728	98	732	98
合計	5,371,360	7,148	100	7,180	100	8,752	100	1,412	98	1,412	98	1,428	99

※ *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	*	PRIMERGY	*	UV1000	*	PRIMEHPC FX10	*
平成23年4月		332,064	78	339,270	80	90,180	22	-	-	-	-	-	-
5月		415,078	88	367,756	78	221,513	53	-	-	-	-	-	-
6月		385,953	85	362,395	80	262,183	65	-	-	-	-	-	-
7月		371,994	80	405,915	86	256,832	62	-	-	-	-	-	-
8月		380,095	81	412,836	88	248,892	61	-	-	-	-	-	-
9月		353,291	81	381,763	87	149,055	37	-	-	-	-	-	-
10月		430,374	90	424,378	89	207,605	50	-	-	-	-	-	-
11月		381,352	87	397,418	90	185,976	47	-	-	-	-	-	-
12月		447,483	94	393,981	83	168,998	41	-	-	-	-	-	-
平成24年1月		406,266	87	399,821	85	205,408	49	-	-	-	-	-	-
2月		-	-	-	-	252,228	65	1,744,545	49	275,592	70	65,056	6
3月		-	-	-	-	263,708	64	2,088,472	55	262,424	63	219,862	20
合計		3,903,949	85	3,885,535	85	2,512,578	51	3,833,017	52	538,016	66	284,918	13

※ 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	PRIMERGY	UV1000	PRIMEHPC FX10	合計
平成23年4月		2,821	4,118	1,273	-	-	-	8,212
5月		2,735	8,445	1,156	-	-	-	12,336
6月		2,159	6,236	1,461	-	-	-	9,856
7月		18,755	5,012	2,166	-	-	-	25,933
8月		4,094	3,679	2,413	-	-	-	10,186
9月		4,119	9,133	1,258	-	-	-	14,510
10月		5,418	3,883	1,729	-	-	-	11,030
11月		7,479	4,156	1,905	-	-	-	13,540
12月		4,922	4,006	3,219	-	-	-	12,147
平成24年1月		5,861	2,819	5,061	-	-	-	13,741
2月		-	-	1,865	28,966	1,876	481	33,188
3月		-	-	10,607	27,787	1,181	610	40,185
合計		58,363	51,487	34,113	56,753	3,057	1,091	204,864

5.4 クラス別CPU使用時間

Altix4700	PA	PAE	PAS	Queue合計	ETC	総合計
平成23年4月	125542:52:50	143979:44:15	57224:33:34	332064:13:35	0:00:00	332064:13:35
5月	119859:22:24	227515:35:13	67703:08:50	415078:06:27	0:00:00	415078:06:27
6月	117037:16:39	206691:09:53	62224:03:30	385952:30:02	0:00:00	385952:30:02
7月	120731:08:15	120324:36:22	130937:48:17	371993:32:54	0:00:00	371993:32:54
8月	117784:20:39	115306:34:54	147004:05:02	380095:00:35	0:00:00	380095:00:35
9月	115713:49:22	89400:26:37	148176:16:12	353290:32:11	0:00:00	353290:32:11
10月	116422:47:41	165608:15:59	148343:06:22	430374:10:02	0:00:00	430374:10:02
11月	108150:37:38	162609:38:29	109591:25:54	381352:09:45	0:00:00	381352:09:45
12月	135980:55:17	188765:49:46	122735:57:55	447482:42:58	0:00:00	447482:42:58
平成24年1月	134673:24:10	150511:25:46	121081:32:18	406266:22:14	0:00:00	406266:22:14
2月	-	-	-	-	-	-
3月	-	-	-	-	-	-
合計	1211896:34:55	1570713:17:14	1115021:57:54	3903949:20:43	0:00:00	3903949:20:43

PRIMQUEST	PB	PBE	PBS	Queue合計	ETC	総合計
平成23年4月	159391:59:37	123841:00:24	56037:09:20	339270:09:21	0:00:00	339270:09:21
5月	225143:12:48	60032:04:38	82580:51:41	367756:09:07	0:00:00	367756:09:07
6月	122437:23:34	175657:25:36	64300:27:22	362395:16:32	0:00:00	362395:16:32
7月	160624:12:36	178685:11:21	66606:05:39	405915:29:36	0:00:00	405915:29:36
8月	132117:42:42	220495:03:42	60223:42:51	412836:29:15	0:00:00	412836:29:15
9月	160668:01:06	118241:44:25	102853:35:32	381763:21:03	0:00:00	381763:21:03
10月	162770:29:38	91602:43:36	170005:13:36	424378:26:50	0:00:00	424378:26:50
11月	181917:04:29	129778:54:58	85722:26:28	397418:25:55	0:00:00	397418:25:55
12月	178304:33:37	127451:21:38	88225:10:34	393981:05:49	0:00:00	393981:05:49
平成24年1月	172459:48:15	133654:08:38	93706:39:12	399820:36:05	0:00:00	399820:36:05
2月	-	-	-	-	-	-
3月	-	-	-	-	-	-
合計	1655834:28:22	1359439:38:56	870261:22:15	3885535:29:33	0:00:00	3885535:29:33

SR16000	PH	PHE	PHS	Queue合計	ETC	総合計
平成23年4月	76236:47:26	13942:44:32	0:00:00	90179:31:58	0:00:00	90179:31:58
5月	92849:47:28	128663:34:36	0:00:00	221513:26:43	0:00:00	221513:26:43
6月	104625:50:38	157526:20:06	30:22:24	262182:34:50	0:00:00	262182:34:50
7月	142652:00:08	114178:30:44	0:00:00	256831:32:50	0:00:00	256831:32:50
8月	173091:08:48	75801:04:26	0:12:58	248892:26:12	0:00:00	248892:26:12
9月	105773:19:30	43282:05:16	0:00:00	149055:24:46	0:00:00	149055:24:46
10月	162289:56:48	45314:36:18	0:00:00	207604:33:06	0:00:00	207604:33:06
11月	154725:08:32	31250:31:48	0:00:00	185975:40:20	0:00:00	185975:40:20
12月	120428:34:30	31250:31:48	17318:26:20	168997:32:38	0:00:00	168997:32:38
平成24年1月	153933:38:32	31250:31:48	20224:14:26	205408:24:46	0:00:00	205408:24:46
2月	144999:41:54	88790:20:22	18437:54:34	252227:56:50	0:00:00	252227:56:50
3月	224447:48:44	39259:47:36	0:34:48	263708:11:08	0:00:00	263708:11:08
合計	1656053:42:58	800510:39:20	56011:45:30	2512577:16:07	0:00:00	2512577:16:07

PRIMERGY	PF small	PF large	PF vsmp	Queue合計	ETC	総合計
平成23年4月	-	-	-	-	-	-
5月	-	-	-	-	-	-
6月	-	-	-	-	-	-
7月	-	-	-	-	-	-
8月	-	-	-	-	-	-
9月	-	-	-	-	-	-
10月	-	-	-	-	-	-
11月	-	-	-	-	-	-
12月	-	-	-	-	-	-
平成24年1月	-	-	-	-	-	-
2月	1238225:52:55	503662:10:18	2656:54:30	1744544:57:43	0:00:00	1744544:57:43
3月	1552770:49:23	455413:30:50	80287:51:44	2088472:11:57	0:00:00	2088472:11:57
合計	2790996:42:18	959075:41:08	82944:46:14	3833017:09:40	0:00:00	3833017:09:40

UV1000	PS	Queue合計	ETC	総合計
平成23年4月	-	-	-	-
5月	-	-	-	-
6月	-	-	-	-
7月	-	-	-	-
8月	-	-	-	-
9月	-	-	-	-
10月	-	-	-	-
11月	-	-	-	-
12月	-	-	-	-
平成24年1月	-	-	-	-
2月	275591:42:25	275591:42:25	0:00:00	275591:42:25
3月	262424:06:07	262424:06:07	0:00:00	262424:06:07
合計	538015:48:32	538015:48:32	0:00:00	538015:48:32

PRIMEHPC FX10	cck small	cck large	Queue合計	ETC	総合計
平成23年4月	-	-	-	-	-
5月	-	-	-	-	-
6月	-	-	-	-	-
7月	-	-	-	-	-
8月	-	-	-	-	-
9月	-	-	-	-	-
10月	-	-	-	-	-
11月	-	-	-	-	-
12月	-	-	-	-	-
平成24年1月	-	-	-	-	-
2月	5771:16:00	59284:17:20	65055:33:20	0:00:00	65055:33:20
3月	5462:45:04	214399:37:52	219862:22:56	0:00:00	219862:22:56
合計	11234:01:04	273683:55:12	284917:56:16	0:00:00	284917:56:16

5.5 ジョブ処理件数

Altix4700	PA	PAE	PAS	PAR	PAX	Queue合計	ETC	総合計
平成23年4月	1,425	549	831	16	0	2,821	0	2,821
5月	1,496	658	581	0	0	2,735	0	2,735
6月	1,443	403	313	0	0	2,159	0	2,159
7月	3,928	6,575	8,252	0	0	18,755	0	18,755
8月	1,056	1,259	1,779	0	0	4,094	0	4,094
9月	1,628	950	1,541	0	0	4,119	0	4,119
10月	1,440	1,204	2,774	0	0	5,418	0	5,418
11月	958	1,998	4,513	0	10	7,479	0	7,479
12月	1,029	943	2,950	0	0	4,922	0	4,922
平成24年1月	1,000	1,329	3,532	0	0	5,861	0	5,861
2月	-	-	-	-	-	-	-	-
3月	-	-	-	-	-	-	-	-
合計	15,403	15,868	27,066	16	10	58,363	0	58,363

PRIMQUEST	PB	PBE	PBS	PBX	PBR	Queue合計	ETC	総合計
平成23年4月	2,601	381	1,136	0	0	4,118	0	4,118
5月	2,402	754	5,289	0	0	8,445	0	8,445
6月	1,855	1,310	3,071	0	0	6,236	0	6,236
7月	1,882	1,732	1,398	0	0	5,012	0	5,012
8月	1,508	1,129	1,042	0	0	3,679	0	3,679
9月	2,415	853	5,865	0	0	9,133	0	9,133
10月	2,594	216	1,073	0	0	3,883	0	3,883
11月	2,673	349	1,134	0	0	4,156	0	4,156
12月	2,115	728	1,163	0	0	4,006	0	4,006
平成24年1月	1,562	667	590	0	0	2,819	0	2,819
2月	-	-	-	-	-	-	-	-
3月	-	-	-	-	-	-	-	-
合計	21,607	8,119	21,761	0	0	51,487	0	51,487

SR16000	PH	PHE	PHS	PHI	PHR	PHD	Queue合計	ETC	総合計
平成23年4月	1,086	187	0	0	0	0	1,273	0	1,273
5月	993	158	0	5	0	0	1,156	0	1,156
6月	1,056	387	11	7	0	0	1,461	0	1,461
7月	1,552	603	0	11	0	0	2,166	0	2,166
8月	2,183	228	2	0	0	0	2,413	0	2,413
9月	1,145	113	0	0	0	0	1,258	0	1,258
10月	1,456	273	0	0	0	0	1,729	0	1,729
11月	1,628	277	0	0	0	0	1,905	0	1,905
12月	1,731	441	1,047	0	0	0	3,219	0	3,219
平成24年1月	2,543	1,077	1,441	0	0	0	5,061	0	5,061
2月	1,486	261	118	0	0	0	1,865	0	1,865
3月	10,474	127	6	0	0	0	10,607	0	10,607
合計	27,333	4,132	2,625	23	0	0	34,113	0	34,113

PRIMERGY	PF small	PF large	PF vsmp	Queue合計	ETC	総合計
平成23年4月	-	-	-	-	-	-
5月	-	-	-	-	-	-
6月	-	-	-	-	-	-
7月	-	-	-	-	-	-
8月	-	-	-	-	-	-
9月	-	-	-	-	-	-
10月	-	-	-	-	-	-
11月	-	-	-	-	-	-
12月	-	-	-	-	-	-
平成24年1月	-	-	-	-	-	-
2月	20,906	8,019	41	28,966	0	28,966
3月	23,954	3,483	350	27,787	0	27,787
合計	44,860	11,502	391	56,753	0	56,753

UV1000	PS	Queue合計	ETC	総合計
平成23年4月	-	-	-	-
5月	-	-	-	-
6月	-	-	-	-
7月	-	-	-	-
8月	-	-	-	-
9月	-	-	-	-
10月	-	-	-	-
11月	-	-	-	-
12月	-	-	-	-
平成24年1月	-	-	-	-
2月	1,876	1,876	0	1,876
3月	1,181	1,181	0	1,181
合計	3,057	3,057	0	3,057

PRIMEHPC FX10	cck small1	cck large	Queue合計	ETC	総合計
平成23年4月	-	-	-	-	-
5月	-	-	-	-	-
6月	-	-	-	-	-
7月	-	-	-	-	-
8月	-	-	-	-	-
9月	-	-	-	-	-
10月	-	-	-	-	-
11月	-	-	-	-	-
12月	-	-	-	-	-
平成24年1月	-	-	-	-	-
2月	185	296	481	0	481
3月	97	513	610	0	610
合計	809	282	1,091	0	1,091

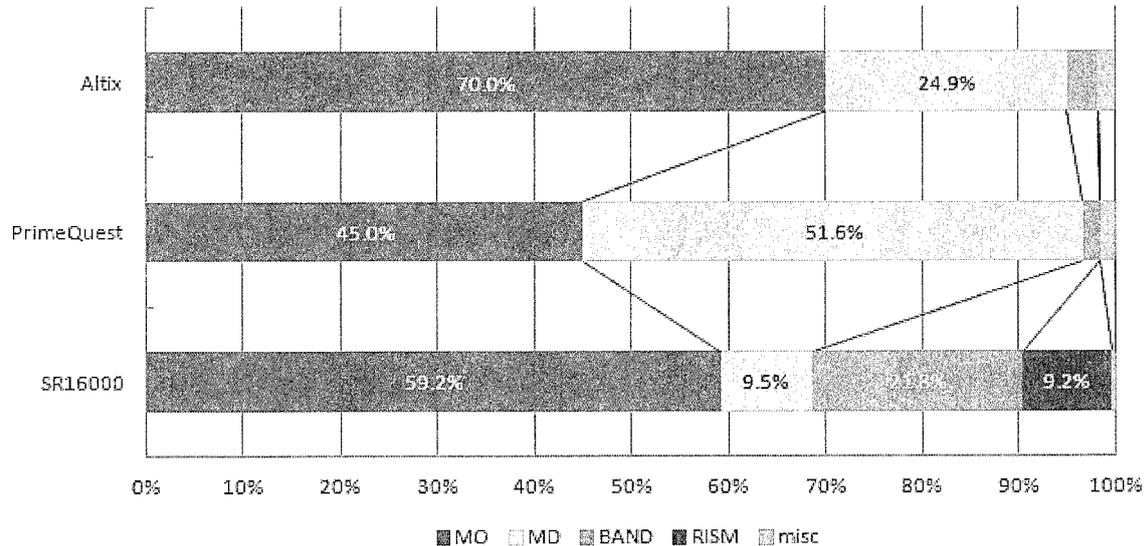
5.6 ジョブ処理内訳

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

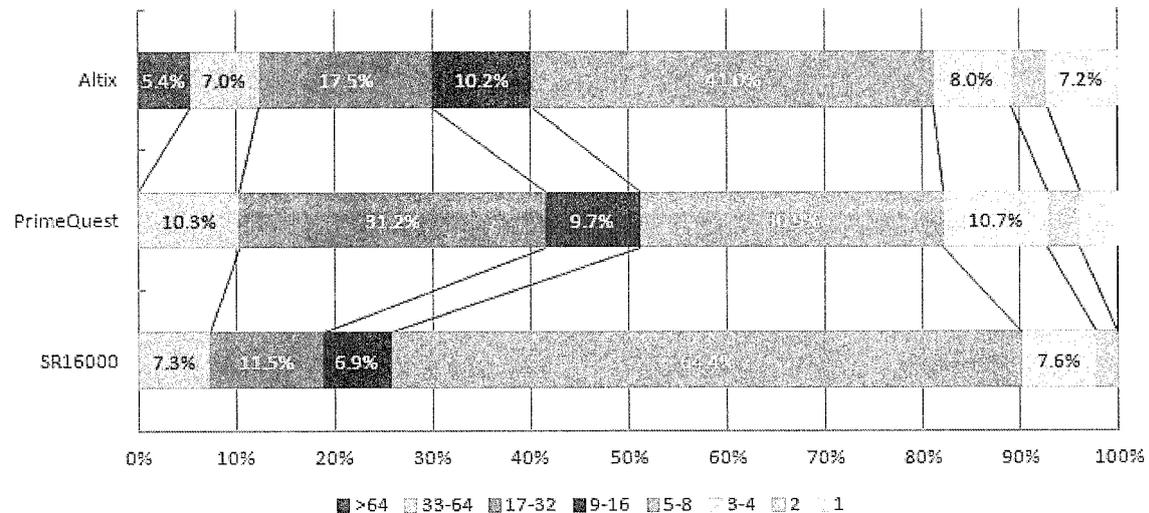
分野別比率



PrimeQuest と SR16000 で Gaussian ジョブの利用が増加したため、MO 計算の比率が大幅に増加した。また SR16000 の RISM 計算の割合は 1/3 に減少しており、大型 RISM ユーザの利用がなくなったためと考えられる。

- CPU 使用数

1ジョブあたりのCPU使用数別比率

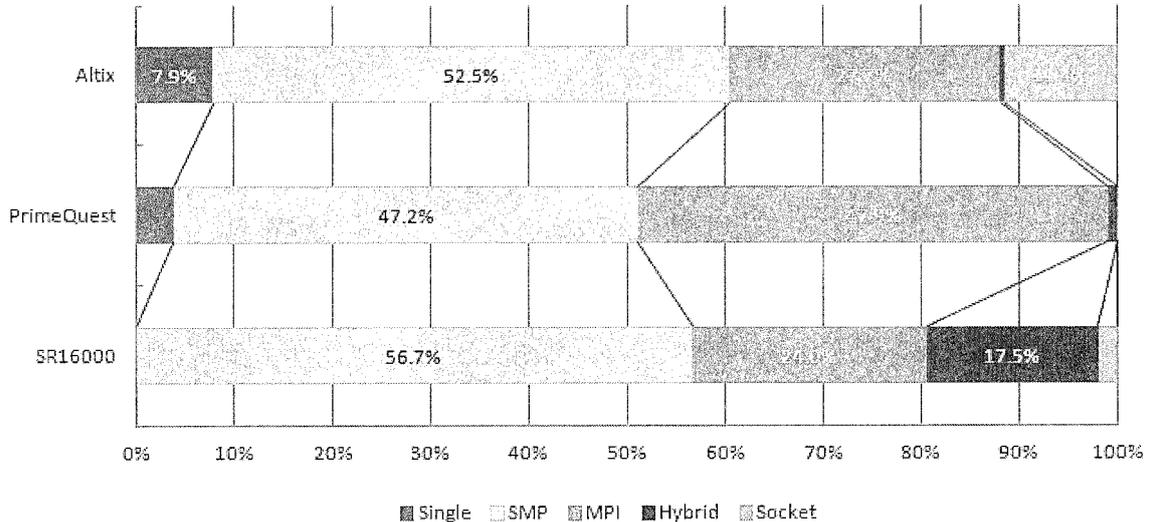


どのマシンでも 8 並列の割合が増加しており、特に PrimeQuest と SR16000 では倍近く増加していた。これも Gaussian ジョブの増加によるものである。また SR16000 は 32 並列ジョブが大幅に減少しており、SR16000 の大口ユーザ撤退の影響を反映していると考えられる。

- 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

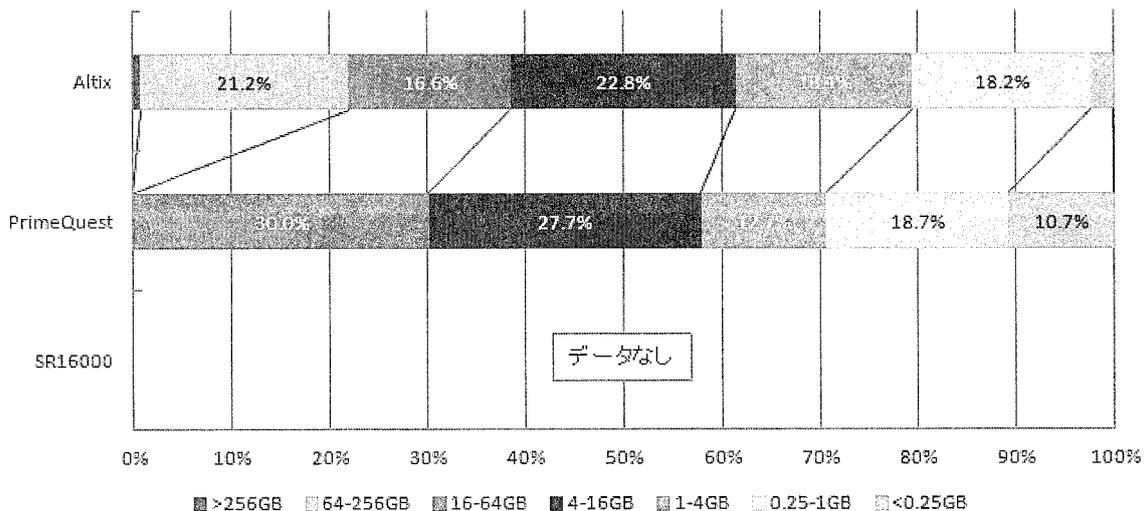


Altix と SR16000 では SMP 利用率が半分を超え、全マシンの SMP が使われるようになってきている事を示している。これも Gaussian 利用の激化を示すものである。Hybrid 及び Socket の比率はいずれも 6 割程度に減少した。

- 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

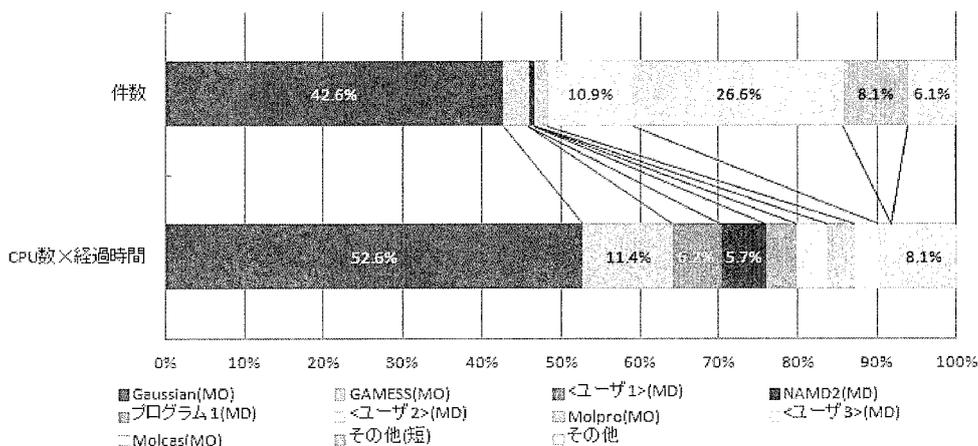


PrimeQuest で、4GB 以上のメモリーを使うジョブが全体の半分を超えた。より大きなメモリーを使う傾向がうかがえる。

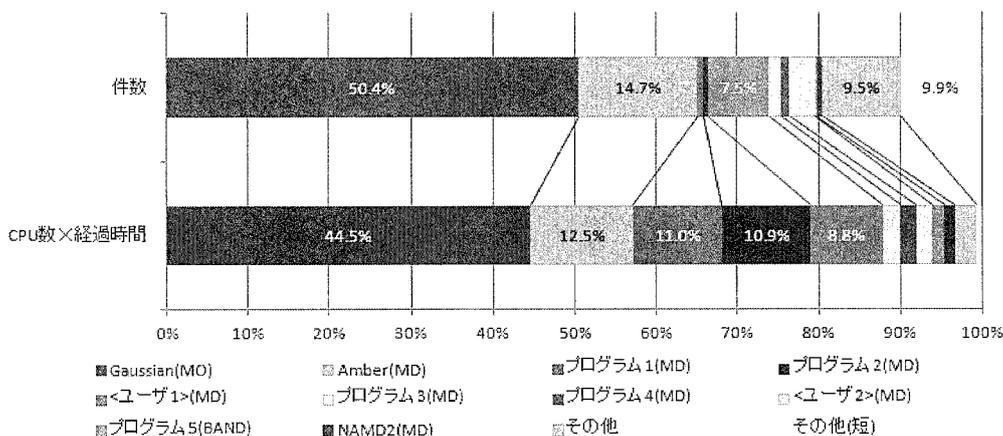
5.7 各マシンでのアプリケーション利用比率

各マシンで実行されたジョブを、投入件数及び CPU 数×経過時間で取った内訳を示す。

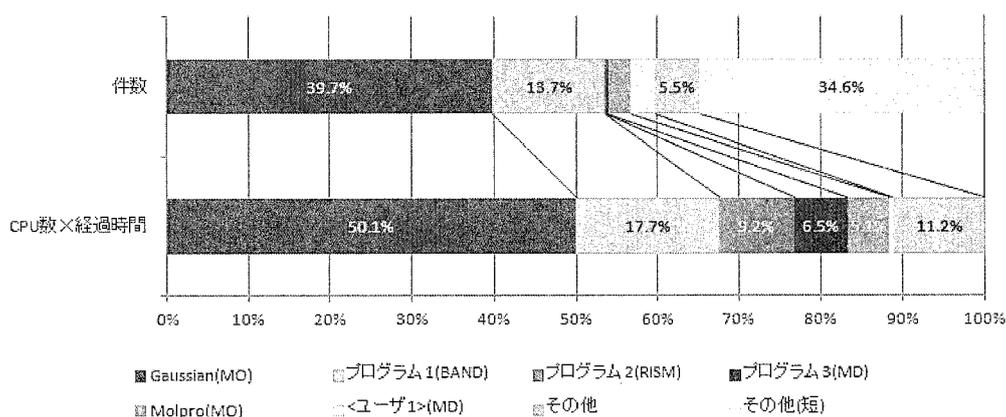
アプリケーション利用比率-Altix



アプリケーション利用比率-PrimeQuest



アプリケーション利用比率-SR16000



いずれも Gaussian が半分近く占めていた。各マシンでよく使われるアプリケーションのうち、トップ 5 がリソースの 8~9 割を占めていた。SR16000 は他とは違い、BAND 計算や RISM 計算のプログラムが上位に現れており、多様なプログラムが実行されていることを示している。

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 分子細胞生物学研究所	准教授
佐藤 啓文	京都大学 大学院工学研究科	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
松林嘉克	基礎生物学研究所 細胞間シグナル研究部門	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

斉藤 真司	センター長
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
伊藤 暁	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 建輔	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	6,316	6,016	6,368
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	14,799	15,536	33,832/8,458*
許 可	816	3,171	7,427	8,306	10,141	10,091	10,768	12,080	28,184/7,046*
総使用CPU時間 ^c (時間)	509	2,405	5,405	6,320	8,205	8,489	8,508	12,770	20,092/5,023e*
ジョブ処理件数 ^c	41,521	155,980	183,840	214,847	239,771	236,519	226,727	274,431	289,915
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	16,027	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 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a	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)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	(TX-7基準)b
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c(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c	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d	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	平成23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	Altix4700(1月まで) PRIMEQUEST(1月まで) SR16000 PRIMERGY(2月から) UV1000(2月から) PRIMEHPC FX10 (2月から)
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	154	132	141	145	152	171	170	190
利用者数								
機構内a	83	30	40	44	59	49	49	43
機構外	516	480	533	551	589	635	617	645
合計	599	510	573	595	648	684	666	688
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	Altix4700 7,148 PRIMEQUEST 7,180 SR16000 8,752 PRIMERGY 1,412 UV1000 1,412 PRIMEHPC FX10 1,428
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	(SR16000基準)b	(SR16000基準)b	(SR16000基準)b	-
申請	341,788	414,643	702,270	1,005,486	1,224,945	1,433,895	1,712,430	1,738,115
許可	321,796	368,136	653,468	918,737	1,199,620	1,412,981	1,581,450	1,675,950
総使用CPU時間c(時間)	1,762,818	1,992,205	4,384,464	6,307,008	12,579,635	11,954,215	12,232,544	14,958,012
ジョブ処理件数c	28,968	19,896	78,130	140,250	149,342	149,177	143,132	204,864
ライブラリプログラム新規登録数	4	4	21	18	22	20	15	22
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d	284	205	214	188	186	196	193	231

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。

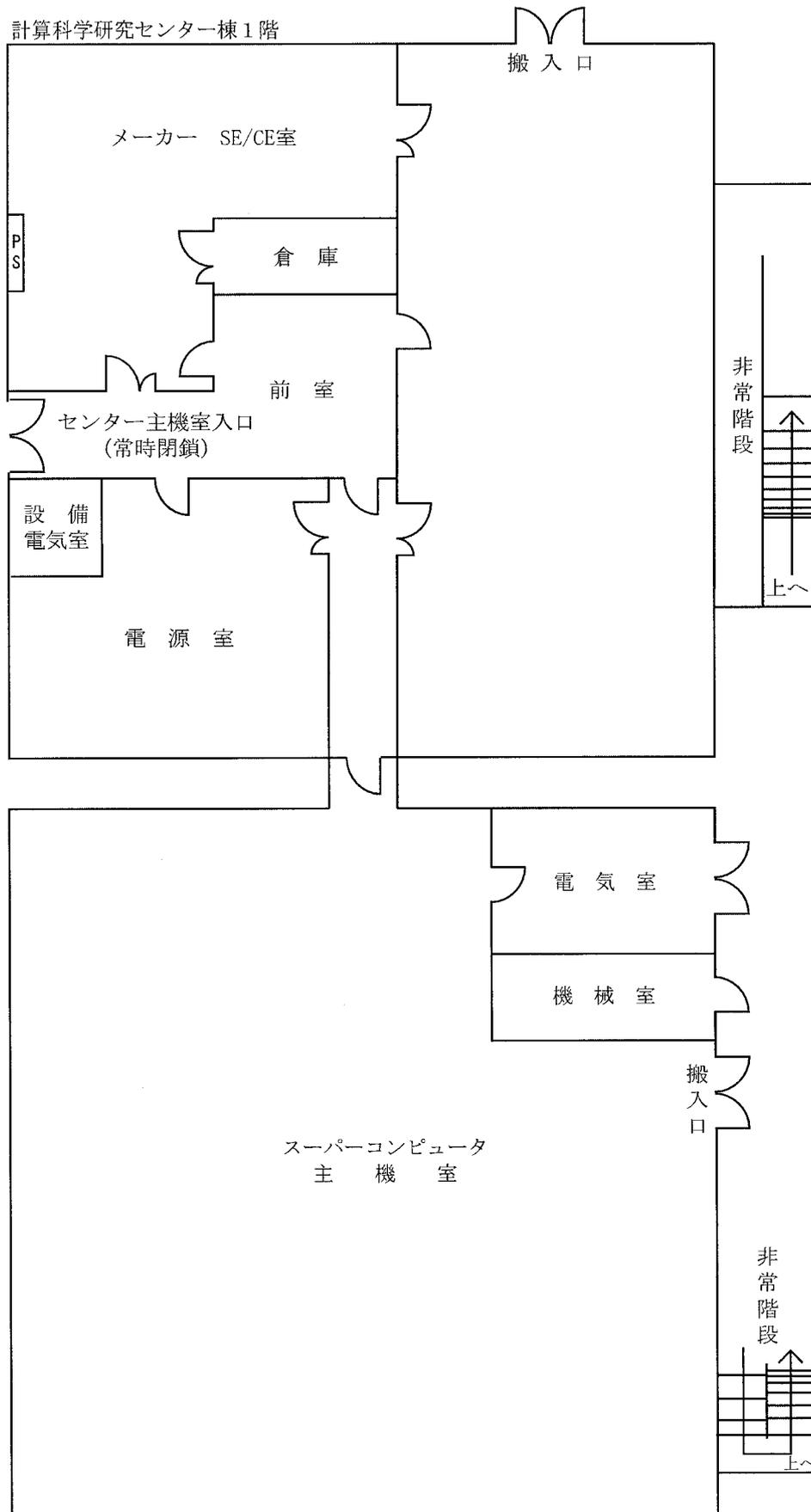
c: CPU時間、件数ともライブラリ開発、センター業務使用分などすべてを含みます。

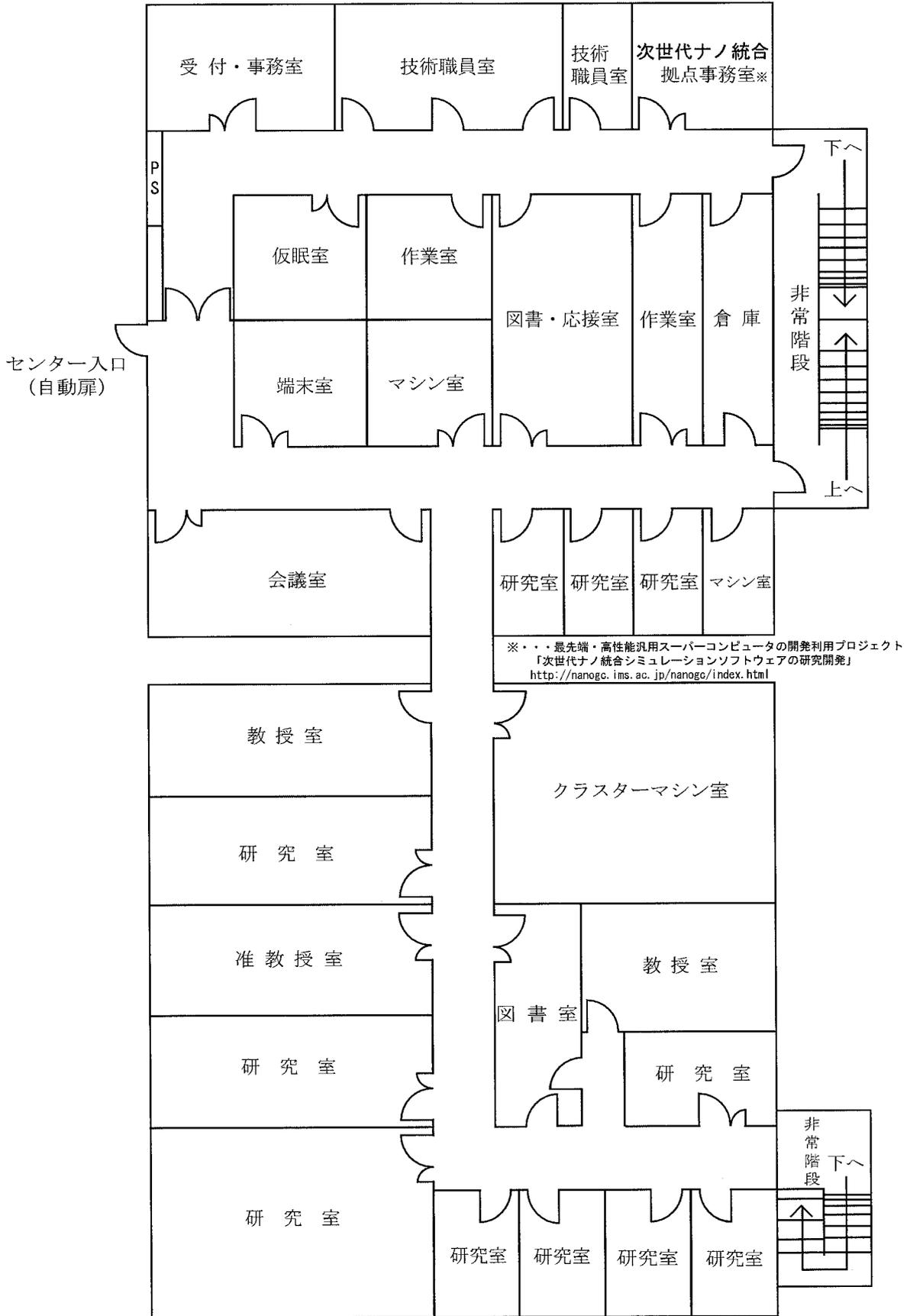
d: センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたものです。

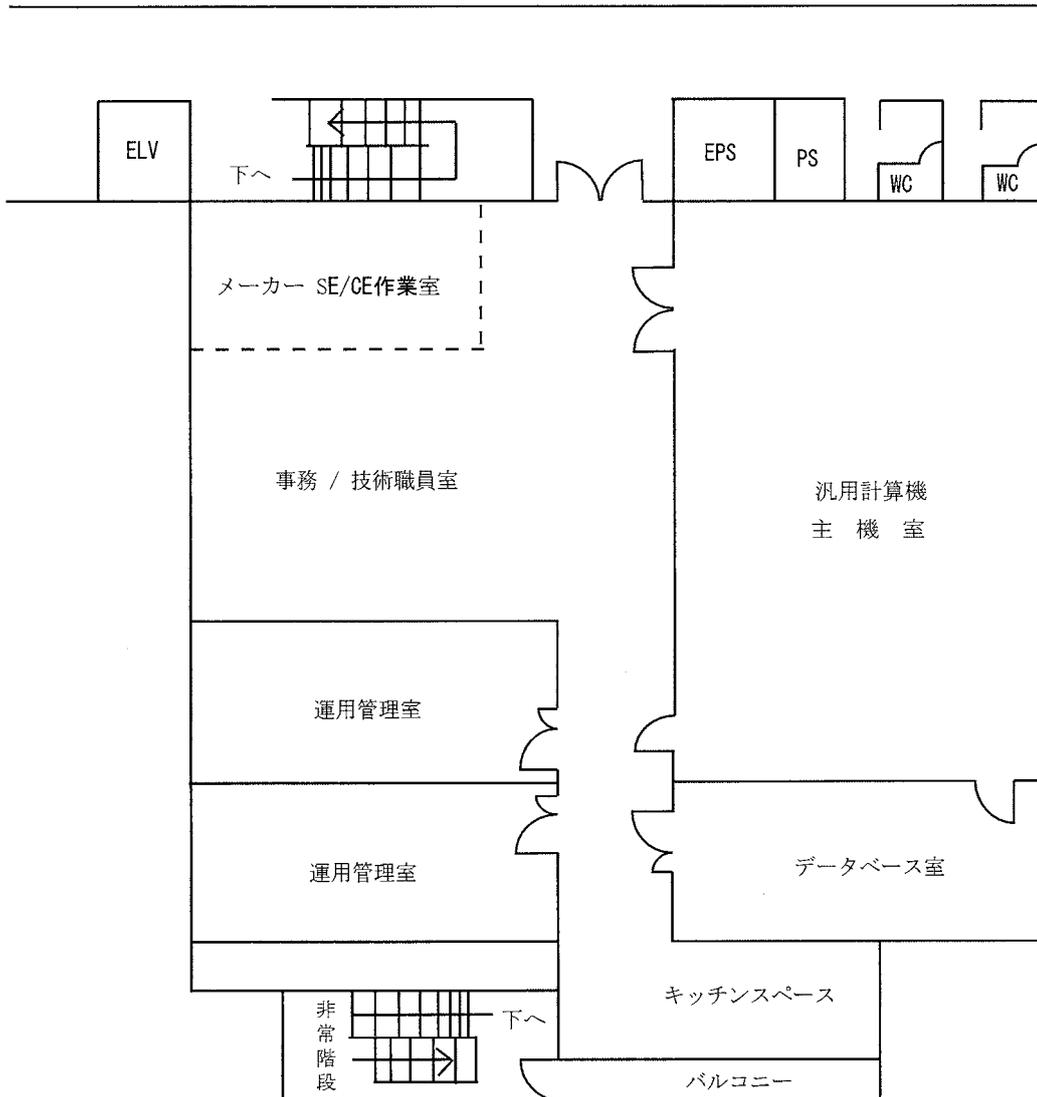
e: S-810、S-820、SX-3、SX-5、SX-7、VPPのCPU時間については、スカラー時間とベクトル時間の単純な和です。

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 6.5.11「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）2012 年 1 月末まで

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。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）2012 年 1 月末まで

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。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 コンパイルメッセージ
- (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）2012 年 1 月末まで

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 UV1000 用マニュアル（日本語版）2012 年 2 月 1 日から年度末まで

uv1000 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 <https://ccportal.ims.ac.jp/> にログインし、「利用中の方への情報」の「オンラインマニュアル」から閲覧・取得できます。

- (1) プログラミングガイド

6.5.7 UV1000、PRIMERGY 共通インテル製品マニュアル（日本語版）2012 年 2 月 1 日から年度末まで

インテル製品マニュアルは、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 <https://ccportal.ims.ac.jp/> にログインし、「利用中の方への情報」の「オンラインマニュアル」から閲覧・取得できます。

(1) インテル Fortran Composer XE

- ・インテル Fortran Composer XE 2011 入門チュートリアル
- ・インテル Fortran コンパイラー ドキュメント
- ・インテル マス・カーネル・ライブラリー・ドキュメント
- ・インテル デバッガー・ドキュメント

(2) インテル C++ Composer XE

- ・インテル C++ Composer XE 2011 入門チュートリアル
- ・インテル C++ コンパイラ・ユーザー・リファレンス・ガイド
- ・インテル インテグレートッド・パフォーマンス・プリミティブ・ドキュメント
- ・インテル スレッディング・ビルディング・ブロック・ドキュメント
- ・インテル マス・カーネル・ライブラリー・ドキュメント
- ・インテル デバッガ・ドキュメント

(3) Intel VTune Amplifier XE2011 Documentation

(4) Intel Inspector XE 2011 Documentation

(5) インテル MPI ライブラリ

6.5.8 UV1000、PRIMERGY 共通インテル製品マニュアル（英語版）2012年2月1日から年度末まで

インテル製品マニュアルは、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 <https://ccportal.ims.ac.jp/> にログインし、「利用中の方への情報」の「オンラインマニュアル」から閲覧・取得できます。

(1) Intel Fortran Composer XE

- Intel Fortran Composer XE 2011 Getting Started Tutorials
- Intel Fortran Compiler Documentation
- Intel Math Kernel Library Documentation
- Intel Debugger Documentation

(2) Intel C++ Composer XE

- Intel C++ Composer XE 2011 Getting Started Tutorials
- Intel C++ Compiler User and Reference Guide
- Intel Integrated Performance Primitives Documentation
- Intel Threading Building Blocks Documentation
- Intel Math Kernel Library Documentation
- Intel Debugger Documentation

(3) Intel VTune Amplifier XE2011 Documentation

(4) Intel Inspector XE 2011 Documentation

(5) Intel MPI Library

6.5.9 PRIMEHPC FX10 用マニュアル（日本語版）2012年2月1日から年度末まで

PRIMEHPC FX10 用マニュアルは、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 <https://ccportal.ims.ac.jp/> にログインし、「利用中の方への情報」の「オンラインマニュアル」から閲覧・取得できます。

(1) エンドユーザ向けガイド

(2) Fortran 使用手引書

(3) Fortran 文法書

(4) Fortran コンパイラメッセージ

(5) Fortran/C/C++実行時メッセージ

(6) 実行時情報出力機能使用手引書

(7) XP Fortran 使用手引書

(8) C 言語使用手引書

(9) C++使用手引書

(10) C/C++最適化メッセージ説明書

(11) MPI 使用手引書

(12) デバッガ使用手引書

(13) プロファイラ使用手引書

(14) プログラミング支援ツール使用手引書

(15) ランク配置最適化ツール使用手引書

- (16)BLAS LAPACK ScaLAPACK オンラインマニュアル
- (17)SSL II オンラインマニュアル
- (18)SSL II スレッド並列機能オンラインマニュアル
- (19)SSL II/MPI オンラインマニュアル
- (20)C-SSL II オンラインマニュアル
- (21)C-SSL II スレッド並列機能オンラインマニュアル
- (22)高速 4 倍精度基本演算ライブラリ使用手引書

6.5.10 PRIMEHPC FX10 用マニュアル（英語版）2012 年 2 月 1 日から年度末まで

PRIMEHPC FX10 用マニュアルは、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 <https://ccportal.ims.ac.jp/> にログインし、「利用中の方への情報」の「オンラインマニュアル」から閲覧・取得できます。

- (1) End Users Guide
- (2) Fortran User's Guide
- (3) Fortran Language Reference
- (4) Fortran Compiler Messages
- (5) Fortran/C/C++ Runtime Messages
- (6) Runtime Information Output Function
- (7) Technical Computing Language XP Fortran User's Guide
- (8) C User's Guide
- (9) C++ User's Guide
- (10)C/C++ Compiler Optimization Messages
- (11)MPI User's Guide
- (12)Debugger User's Guide
- (13)Profiler User's Guide
- (14)Programming Workbench User's Guide
- (15)Rank Map Automatic Tuning Tool User's Guide
- (16)BLAS LAPACK ScaLAPACK Online Documents
- (17)SSL II Online Documents
- (18)SSL II Thread-Parallel Capabilities Online Documents
- (19)SSL II/MPI Online Documents
- (20)C-SSL II Online Documents
- (21)C-SSL II Thread-Parallel Capabilities Online Documents
- (22)Fast Basic Operation Library for Quadruple Precision User's Guide

6.5.11 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、PRIMERGY 用、PRIMEHPC FX10 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、UV1000 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 2011 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年度の電子計算機センターから計算科学研究センターへの組織改組にともない、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いる。2011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、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、特に設備の運用等について記す。

2012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2012年2月明大寺地区に設置され、後者は2008年3月に更新されて山手地区に設置されている。両シミュレータは、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社製のPRIMERGYとSGI社製のUV1000から構成される共有メモリ型スカラ計算機で、両サーバは同一体系のCPU (Intel Xeon) 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。これらに加え、京コンピュータと同じアーキテクチャの富士通社製PRIMEHPC FX10があり、システム全体として総演算性能149 Tflopsで総メモリ容量43 TByte超である。PRIMERGYは、16 CPUコア/64 GB構成のノード162台と16CPUコア/128GB構成のノード162台からなるPCクラスタである。前者が40 GB/sで後者は80 GB/sのバンド幅で演算ノード間が相互接続され、大規模な分子動力学計算などノードをまたがる並列ジョブを高速で実行することができる。特に後者においては、vSMPを導入することで複数ノードを仮想的に1ノードの共有メモリシステムとして運用できる機構を有する。UV1000は576 CPUコア/9 TBを有するNUMA型の共有メモリシステムであり、ジョブ作業領域用に実効容量400 TBおよび総理論読み出し性能12 GB/sを有する高速磁気ディスク装置が装備され、大規模で高精度な量子化学計算を可能とする。この2サーバで1000 TBの容量の外部磁気ディスクを共有し、NFSより高速なパラレルNFSが使用できる。PRIMEHPC FX10は、16CPUコア/32GBの96ノードが富士通独自のTofuインターコネクで連結されたシステムである。京コンピュータと互換性があり、京コンピュータのプログラム開発やデータ解析等への活用が期待される。

一方、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にも性能を発揮する。ファイルサーバは、128 TByteのディスクを装備し、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っている。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。2013年2月以降に「高性能分子シミュレータ」を更新するために、2011年9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。

ハードウェアに加え、利用者が分子科学の計算をすぐに始められるようにソフトウェアについても整備を行っている。量子化学分野においては、Gaussian 09, Gamess, Molpro, Molcas, Turbomole, 分子動力学分野では、Amber, NAMD, Gromacsがインストールされている。これらを使った計算は全体の約半数を占めている。さらに、量子化学データベース研究会の活動を支援し、同会から提供された量子化学文献データベースをホームページから検索できるよう

にしている。これまでに合計 113,007 件のデータが収録され、世界 84 カ国から利用されている。

共同利用に関しては、2011 年度は 170 の研究グループにより、総数 666 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。また、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、大規模ユーザのために施設利用 S を設定し、2011 年度は 5 件の利用グループに従来の共同利用の枠を超えた超大規模計算環境を提供してきた。近年、共同利用における利用者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において、とくにナノサイエンスに関わるアプリケーション開発「ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」において重要な役割の一端を担っている。また、昨年度より、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された。この中で、HPCI 戦略分野 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) が物性科学分野、分子科学分野、材料科学分野により構成され、CMSI の戦略機関の一つとして分子科学研究所が参加し戦略プログラムを推進している。HPCI 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し、昨年度よりコンピュータ資源の一部 (20% 未満) を提供・協力している。さらに、ハード・ソフトでの協力以外にも、分野振興および人材育成に関して、スーパーコンピュータワークショップ「バイオサイエンスに対する計算分子科学からのアプローチ」と 2 つのウィンタースクール「第 1 回量子化学ウィンタースクール～基礎理論を中心として～」と「第 5 回分子シミュレーションスクール～基礎から応用まで～」を開催した。

平成 23 年度 システム構成 (2012 年 2 月以降)

超高速分子シミュレータシステム

クラスタ演算サーバ	
	型番：富士通 PRIMERGY
	OS：Linux
	CPUCore 数：5184 (16CPUCore×162 ノード×2 システム)
	総理論性能：120.2TFLOPS (371.2GFLOPS×162 ノード×2 システム)
	総メモリ容量：31.1TB (64GB×162 ノード+ 128GB×162 ノード)
高速 I/O 演算サーバ	
	型番：SGI UV1000
	OS：Linux
	CPUCore 数：576
	総理論性能：6.1TFLOPS (6.4GFLOPS/CPUCore)
	総メモリ容量：9.2TB
	ディスク容量：400TB (/work)
「京」用開発サーバ	
	型番：富士通 PRIMEHPC FX10
	OS：Linux
	CPUCore 数：1536 (16CPUCore×96 ノード)
	総メモリ容量：3.0TB (32GB×96 ノード)
	ディスク容量：48TB (/k/home)

外部磁気ディスク装置	
	型番：PANASAS PAS12, PAS11
	総ディスク容量：1000TB
高速ネットワーク装置	
	型番：Force10 Z9000

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