

# 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	4
3.1	計算機システムの全体像	4
3.2	キュー構成	7
3.3	課金	8
4	一般報告	9
4.1	ライブラリプログラムの開発・公開	9
4.2	データベース開発状況	11
5	2012年度計算機稼働状況および利用者数	12
5.1	利用申請プロジェクトおよび利用者数	12
5.2	電力使用および計算機稼働状況	12
5.3	計算機利用状況	13
5.4	クラス別 CPU 使用時間	14
5.5	ジョブ処理件数	15
5.6	ジョブの実行状況	17
6	資料	19
6.1	計算科学研究センター運営委員	19
6.2	計算科学研究センター職員	20
6.3	利用者数と CPU 時間の推移	21
6.4	マニュアル	23
7	研究施設の現状と将来計画 (分子研リポート 2012 より転載)	26

## 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 210、利用者数は約 800 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。

今年は新しいコンピューターが導入されました。総演算性能 136.6TFlops の「高性能分子シミュレータシステム」が 2013 年 3 月から稼働開始しています。また 2013 年 4 月に「超高速分子シミュレータシステム」のうち高速 I/O 演算サーバシステムを SGI の UV1000 から UV2000 に更新しました。その結果、合計 326.2TFlops になりました。

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。2012 年 12 月 11～14 日に「第 6 回分子シミュレーションスクール—基礎から応用まで—」を、2012 年 12 月 17～18 日に「第 2 回量子化学ウインタースクール～基礎理論と生体系の理論～」を開催し、分子シミュレーション分野と量子化学分野それぞれにおいて先導的な立場で活躍されている先生方に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大学院生や若手研究者の育成の場として好評を博しています。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 2013 年 1 月 22～23 日に「理論と計算科学による新たな展開と可能性を探る」をテーマとして開催いたしました。分子科学とその周辺、物性物理学や材料科学など広い分野から精力的に取り組んでおられる研究者の方々に講師にお招きし、理論および計算科学の視点から今後取り組むべき問題と必要とされる方法論、そしてそれらを念頭においたこれからの可能性について広く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

テーマ：「理論と計算科学による新たな展開と可能性を探る」

日時：2013年1月22日（火）～23日（水）

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：59名

ポスター発表：25件

今年度のワークショップは「理論と計算科学による新たな展開と可能性を探る」と題して、近年の計算機性能の進歩とそれに伴う理論及び計算方法論の洗練・発展を受けて、これからの目指すべき方向性と可能性を検証・展望するべき時期にきている状況を念頭におき、様々な問題に精力的に取り組んでおられる研究者の方々を講師にお招きして開催した。ワークショップでは講師の先生方の研究成果の紹介と合わせ、理論および計算科学の視点から今後取り組むべき問題と必要とされる方法論、そしてそれらを念頭においたこれからの可能性について広く展望し、ご討論いただいた。また若手・実験研究者の方々にも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を設け、合計25件のポスター発表があり、質の高い研究交流がなされた。ワークショップには幅広い分野からの参加があり、参加者は合計59名であった。

1月22日（火）	
14:00 - 14:10	はじめに
14:10 - 14:50	常田 貴夫（山梨大学） 「軌道エネルギーに関する最新の研究」
14:50 - 15:30	山下 雄史（東京大学） 「分子動力学シミュレーションの創薬応用」
15:30 - 15:50	休憩
15:50 - 16:30	高野 宏（慶応義塾大学） 「生体高分子系の緩和モード解析」
16:30 - 17:10	尾形 修司（名古屋工業大学） 「オーダーN実空間DFT法を用いたハイブリッド量子古典シミュレーション」
17:10 - 18:20	ポスター発表
18:30 - 20:30	懇親会：職員会館

1月23日(水)	
9:30 - 10:10	上羽 牧夫 (名古屋大学) 「結晶表面における原子ステップのパターン形成」
10:10 - 10:50	藤堂 眞治 (東京大学) 「大規模並列量子モンテカルロ法 ALPS/looper と量子磁性体への応用」
10:50 - 11:10	休憩
11:10 - 11:50	大谷 実 (産業技術総合研究所) 「電極/溶液界面における電気化学反応シミュレーション： 理論の発展と最近の展開」
11:50 - 12:30	佐藤 健 (東京大学) 「強レーザー場中の多電子ダイナミクス：多配置波動関数理論の開発と 応用」
12:30 - 12:40	おわりに

計算科学研究センター・ワークショップ

理論と計算科学による  
新たな展開と可能性を探る

2013年  
1月22日(火)～23日(水)

会場：岡山大学情報科学センター  
岡山県岡山市北区大町1番1号10F

■招待講演

■ポスター発表

参加申込  
■参加費：無料  
■参加方法：下記ホームページをご覧ください。  
<https://ccportal.ims.ac.jp/workshop2013/>

お問い合わせ  
大学共同利用機関法人 自然科学研究所  
岡山共通研究施設 計算科学研究センター  
TEL: 0864-55-7462 FAX: 0864-55-7029

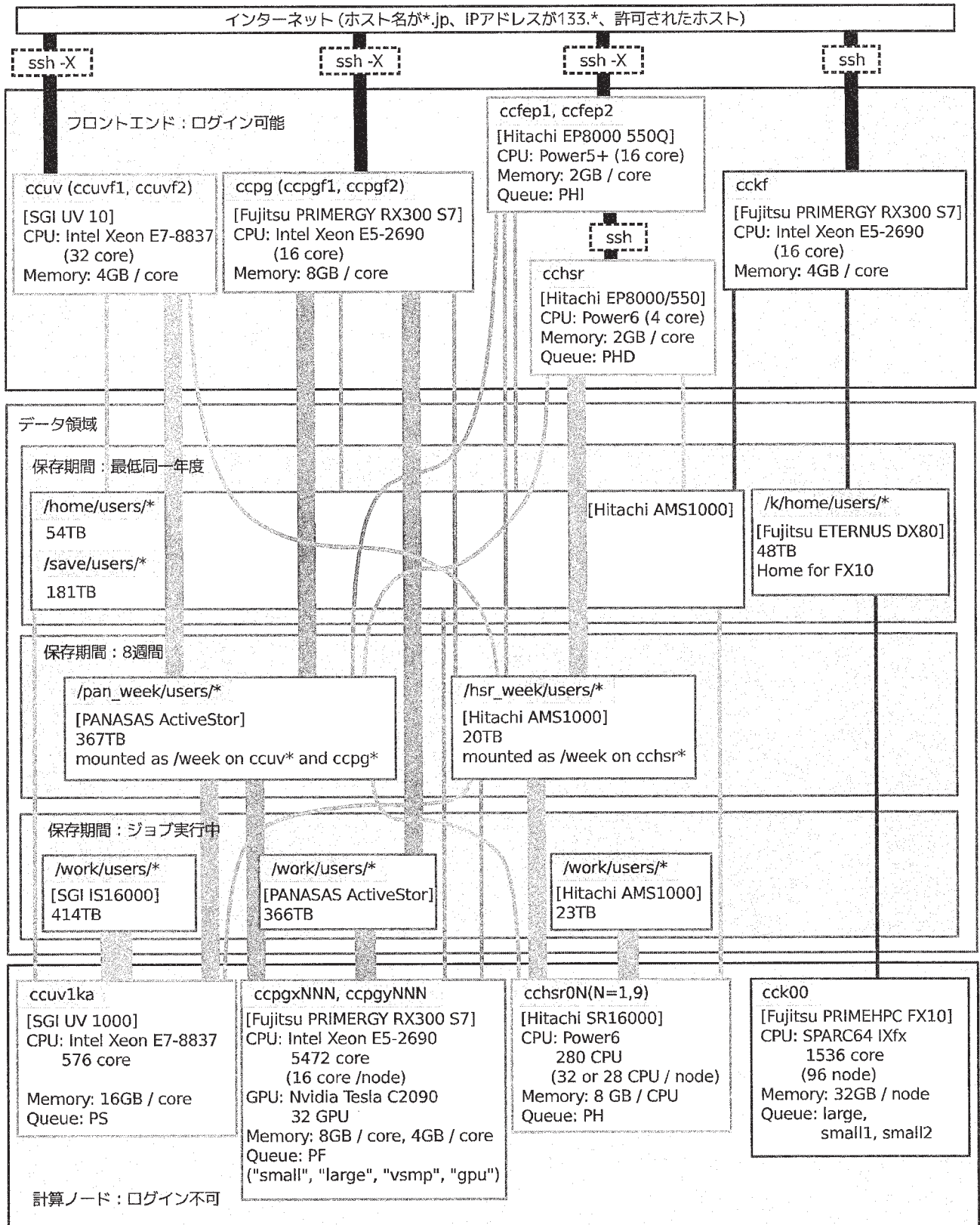


### 3 計算機システム

#### 3.1 計算機システムの全体像

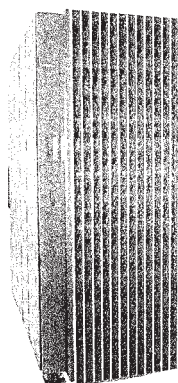
##### 3.1.1 2013年2月までの構成

構成は下記のようになっています。

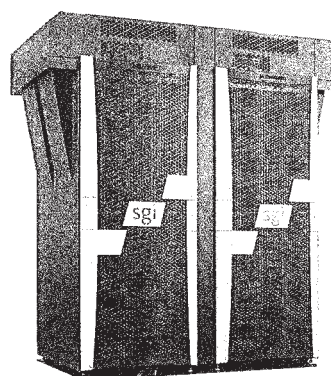


高性能分子シミュレータシステムは2007年3月から2013年2月の間運用されたシステムで、3つのサブシステムから構成されています。演算サーバとして日立製作所製 SR16000、磁気ディスク装置として日立製作所製 AMS1000、フロントエンドサーバとファイルサーバとして日立製作所製 EP8000/550Q、ネットワーク装置としてAlaxala製 AX6708Sが導入されました。2012年度の運用では、SMT機能をOFFにして、1つの物理coreを1つの論理coreとなるようにしました。

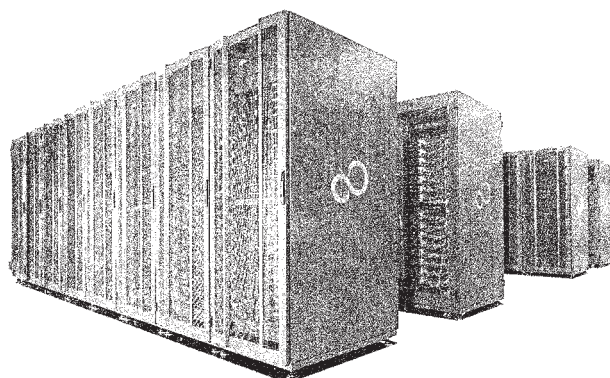
超高速分子シミュレータシステムは2012年2月運用開始のシステムで、7つのサブシステムから構成されています。高速I/O演算サーバとしてSGI製UV1000とIS16000ストレージシステム、その開発用サーバとしてSGI製UV10、クラスタ演算サーバとその開発用サーバとして富士通製PRIMERGY RX300 S7、「京」用開発サーバとして富士通製PRIMEHPC FX10、外部磁気ディスク装置としてPANASAS製ActiveStor、高速ネットワーク装置としてフォーステン・ネットワーク製ZettaScale Z9000とS4810が導入されています。2012年5月より増強したクラスタ演算サーバの運用を開始しました。また、クラスタ演算サーバのうち32ノードにNVIDIA製のTesla C2090を搭載し、GPUを使った計算ができるようになりました。



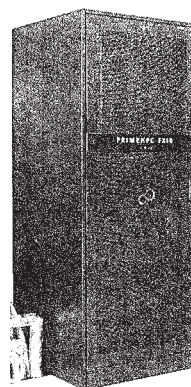
日立製作所 SR16000



SGI UV1000



富士通 PRIMERGY RX300 S7



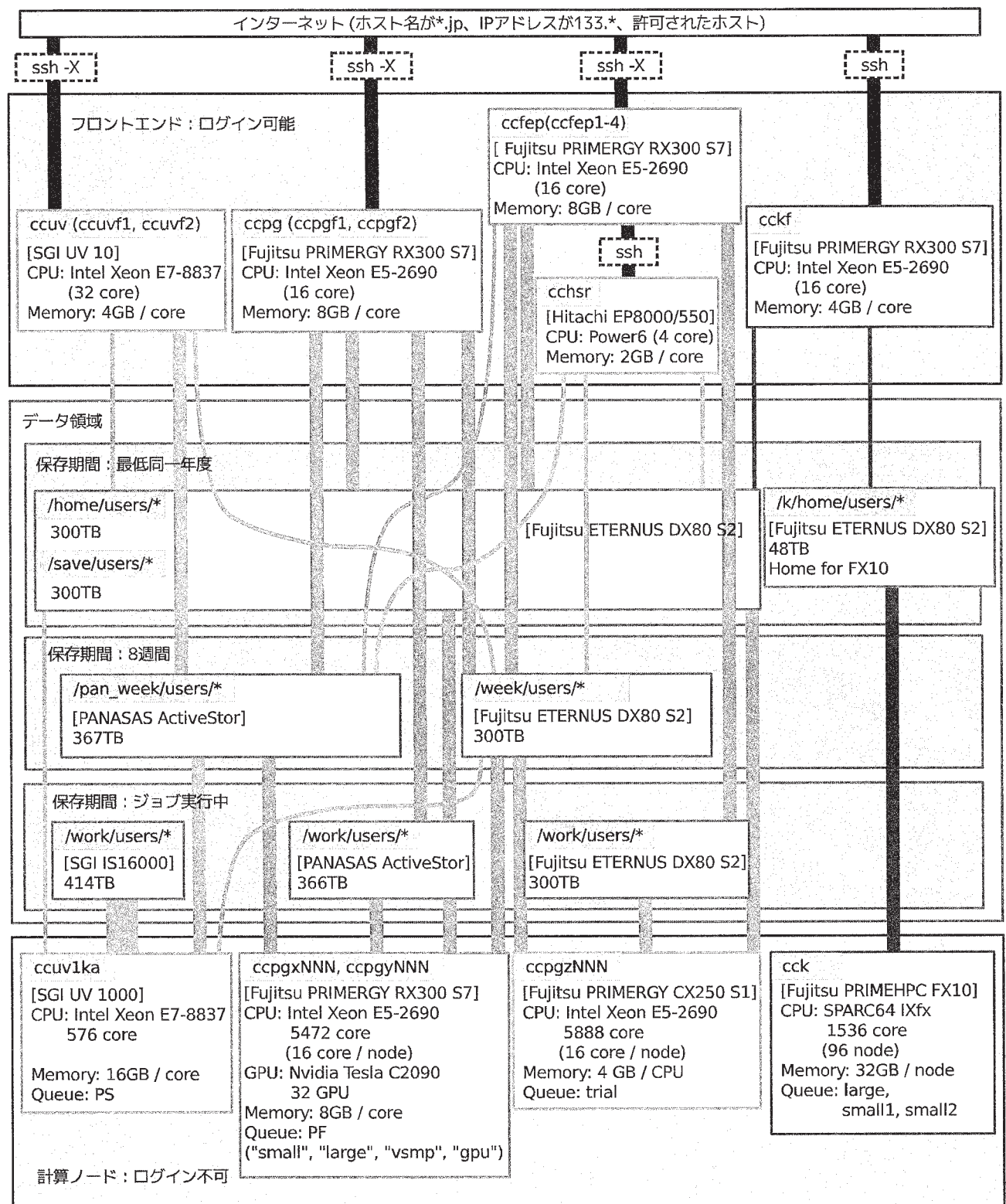
富士通 PRIMEHPC FX10

### 3.1.2 2013年3月の構成

高性能分子シミュレータシステムが更新され2013年3月から運用が開始されました。新しい高性能分子シミュレータシステムは、演算サーバとして富士通製PRIMERGY CX250/400 S1、フロントエンドサーバとしてPRIMERGY RX300 S7、外部磁気ディスク装置として富士通製ETERNUS DX80 S2、高速ネットワーク装置としてDELL製Force10 S4810が導入されています。

超高速分子シミュレータシステムは2月までとほぼ同じ構成ですが、クラスタ演算サーバにメモリーを増強し、すべてのノードで1ノードあたり128GBとなりました。

2013年3月の構成は下記のようになっています。





### 3.2 キュー構成

制限時間は経過時間で制限されます。閑散期ではグループ制限を緩和することがあります。

#### 3.2.1 2013年2月までの構成

##### • 全利用者が利用可能なキュー

システム	キュー名	制限時間	メモリー	1ジョブあたりの core 数	グループ制限
ccpg	PF	定期保守 まで	3.875GB/core 7.75GB/core	最大 512	許可時間が 10 万時間以上 : 640 core 許可時間が 1 万時間以上 : 384 core 許可時間が 1 万時間未満 : 128 core
cchsr	PH	360 時間	6.0GB/core	最大 32	64 core
ccfep	PHI	5 分	1.0GB/core	最大 4	1 ジョブ
phd	PHD	5 分	1.0GB/core	最大 4	1 ジョブ

PF キューは、16 core 以下の並列数は任意の数を指定できますが他のジョブとノードを共有します。それ以上の場合は 16 core の倍数に切り上げられ、ノードを占有します。17 core 以上のスレッド並列を行うには、jobtype=vsmpp を指定する必要がありますが、計算が動き出すまで 20 分くらいかかります。

##### • 利用申請や追加申請時に希望理由の記述が必要なキュー

システム	キュー名	制限時間	メモリー	1ジョブあたりの core 数	グループ制限
ccuv	PS	定期保守 まで	15.5GB/core	最大 256	許可時間が 10 万時間以上 : 512 core 許可時間が 1 万時間以上 : 256 core 許可時間が 1 万時間未満 : 128 core
cck	large small1 small2	24 時間	1.8GB/core	72x16 (固定) 12x16 (固定) 12x16 (固定)	システム全体で 1 ジョブ

#### 3.2.2 2013年3月の構成

##### • 全利用者が利用可能なキュー

システム	キュー名	制限時間	メモリー	1ジョブあたりの core 数	グループ制限
ccpg	PF	定期保守 まで	7.75GB/core	最大 512	許可時間が 10 万時間以上 : 640 core 許可時間が 1 万時間以上 : 384 core 許可時間が 1 万時間未満 : 128 core
cccx	trial	定期保守 まで	3.875GB/core	最大 512	許可時間が 10 万時間以上 : 640 core 許可時間が 1 万時間以上 : 384 core 許可時間が 1 万時間未満 : 128 core

16 core 以下の並列数は任意の数を指定できますが他のジョブとノードを共有します。それ以上の場合は 16 core の倍数に切り上げられ、ノードを占有します。17 core 以上のスレッド並列を行うには、PF キューで jobtype=vsmpp を指定する必要がありますが、計算が動き出すまで 20 分くらいかかります。

##### • 利用申請や追加申請時に希望理由の記述が必要なキュー

システム	キュー名	制限時間	メモリー	1ジョブあたりの core 数	グループ制限
ccuv	PS	定期保守 まで	15.5GB/core	最大 256	許可時間が 10 万時間以上 : 512 core 許可時間が 1 万時間以上 : 256 core 許可時間が 1 万時間未満 : 128 core
cck	large small1 small2	24 時間	1.8GB/core	72x16 (固定) 12x16 (固定) 12x16 (固定)	システム全体で 1 ジョブ

### 3.3 課金

実際の利用料金は無料です。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。CPU を使うことによって CPU 利用可能時間が減ります。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。

CPU 利用時間は、課金係数に利用 core 数と実行時間をかけたものです。課金係数はシステムごとに異なっており、課金係数の一覧は下記の通りです。

システム	課金係数 / (CPU 利用時間/(core*秒))
ccuv	0.000055
ccpg	0.000028
cck	0.000018

会話処理の ccfev, ccuv, ccpg は CPU 時間で課金しますが、cckf と cchsr は課金しません。2013 年 3 月運用開始の PRIMERGY の演算ノードは試用期間のため課金しません。他の演算ノードは経過時間で課金します。



## 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。

2012 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。2012 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				
GRRM	Automated Exploration of Reaction Pathways.				
Molcas	A quantum chemistry software.				
Molpro	A complete system of ab initio programs.				
NAMD	A scalable molecular dynamics program.				
Quantum ESPRESSO	An integrated suite of Open-Source computer codes for electronic-structure calculations and materials modeling at the nanoscale.				
SIESTA	Efficient electronic structure calculations and ab initio molecular dynamics simulations of molecules and solids				
TURBOMOLE	One of the fastest programs for standard quantum chemical applications.				
GaussView	A viewer for Gaussian 03 / 09.				
Molden	A visualization program of molecular and structure.				
VMD	Molecular graphics viewer				
パッケージプログラム名	バージョン	リビジョン	ccpg	ccuv	cchr
Amber	12	bugfix 7	○ (2012/5/17)*	○ (2012/5/18)	—
	11	bugfix 26	—	◎ (2012/2/1)	—
	11	bugfix 19	◎ (2012/2/1)	—	—
	9	bugfix 41	—	—	◎ (2008/3/14)
GAMESS	2012	May01	○ (2012/8/14)	○ (2012/8/15)	—
	2011	Aug11	—	◎ (2012/2/1)	—
	2010	Oct01	◎ (2012/2/1)	—	◎ (2011/6/20)
	2009	Jan12	—	—	○ (2009/3/30)
	2008	Apr11	—	—	○ (2008/7/28)
	2007	Mar24	—	—	○ (2008/3/12)
Gaussian	09	C.01	◎ (2012/2/1)	◎ (2012/2/1)	◎ (2011/11/2)
	09	B.01	○ (2012/2/7)	○ (2012/2/6)	○ (2011/5/19)
	09	A.02	—	—	○ (2009/10/28)
	09	A.01	—	—	○ (2009/6/16)
	03	E.01	○ (2012/5/22)	—	◎ (2008/3/12)
	03	D.01	—	—	○ (2008/3/12)
GROMACS	4.5.5		○ (2012/6/12)*	○ (2012/6/29)	—
	3.3.3		—	—	◎ (2008/8/4)
GRRM	11		◎ (2012/9/26)	◎ (2012/9/26)	—
Molcas	7.8		—	○ (2012/11/8)	○ (2012/12/7)
	7.6		◎ (2012/2/1)	◎ (2012/2/1)	—
	7.4		○ (2012/2/1)	—	—
	6.4	sp1		—	◎ (2008/3/3)

パッケージプログラム名	バージョン	リビジョン	ccpg	ccuv	cchsr
Molpro	2010.1	24	◎ (2012/2/1)	◎ (2012/2/1)	—
	2006.1	158	—	—	◎ (2008/5/22)
NAMD	2.9		○ (2012/5/15)*	○ (2012/5/15)	—
	2.8		◎ (2012/4/10)	◎ (2012/4/10)	—
	2.7		—	—	◎ (2011/6/23)
	2.6		—	—	○ (2008/5/13)
Quantum ESPRESSO	5.0.1		○ (2012/10/05)*	○ (2012/10/05)	—
SIESTA	3.1		◎ (2012/8/16)	—	—
TURBOMOLE	6.4		○ (2012/8/15)	◎ (2012/8/15)	—
	6.3.1		◎ (2012/2/2)	—	—

名前	バージョン	リビジョン	起動コマンド	ccfep	ccpg	ccuv
GaussView	5.0.9		gview5	—	◎ (2013/2/19)	◎ (2013/2/19)
	5.0.8		gview5	○ (2009/10/22)	—	—
	4.1		gview	◎ (2008/2/18)	—	—
Molden	5.0		molden	—	◎ (2013/2/19)	◎ (2013/2/19)
	4.6		molden	◎ (2008/2/20)	—	—
VMD	1.9.1		vmd	—	◎ (2013/2/14)	◎ (2013/2/14)

◎: 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。

☆: GPU 版が用意されている。

## 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: 125,646 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。

2012 年度に新規登録されたデータは、6,657 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 2001 年度で中止になっています。

### (3) SGBS (Segmented Gaussian Basis Set; Sapporo 基底関数のデータベース)

(開発代表者) 野呂武司

総件数: 1,264 件

基底関数の種類は全部で 19 種類あり、延べ 1,264 個の元素の基底関数が登録されています。基底関数の出力時に、diffuse 関数を加えることができ、ユーザーの選択した 9 種類のデータ書式のいずれかで出力することができます。北海道大学の研究室で公開されていたものを、2013 年 3 月から計算科学研究センターでも公開しています。(<http://sapporo.ims.ac.jp/sapporo/>)

## 5 2012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		
				申 請	許 可	実 績
分子科学	施設利用	182 (22)	734 (110)	6,511,210 (1,018,000)	6,387,740 (1,018,000)	3,479,589
	協力研究	2	7	9,000	9,000	6,634
	所内	22 (1)	49 (5)	1,319,500 (100,000)	1,319,500 (100,000)	735,133
基礎生物学	施設利用	7	17	168,200	116,390	69,693
	所内	0	0	0	0	0
合 計		213	807	8,007,910	7,832,630	4,291,049

※ ( )内は、計算物質科学イニシアティブ利用枠の内数

### 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							
		PRIMERGY	*	PRIMEHPC FX10	*	UV1000	*	SR16000	*
2012年4月	493,790	654	91	662	100	662	100	666	100
5月	527,859	690	93	734	100	731	100	744	100
6月	543,623	708	98	710	100	711	100	720	100
7月	574,403	730	98	734	100	704	97	734	100
8月	576,232	727	98	732	100	732	100	734	100
9月	508,034	643	89	683	100	684	100	712	99
10月	551,838	741	100	744	100	744	100	744	100
11月	505,537	686	95	688	100	670	98	711	100
12月	563,976	744	100	744	100	744	100	744	100
2013年1月	594,483	731	98	733	100	732	100	723	98
2月	559,881	661	98	662	100	655	99	672	100
3月	630,334	732	98	733	100	569	99	-	-
合 計	6,629,990	8,446	96	8,558	100	8,338	99	7,904	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	PRIMERGY	*	PRIMEHPC FX10	*	UV1000	*	SR16000	*
2012年4月		2,133,211	60	310,886	31	144,143	38	97,522	52
5月		2,732,990	72	557,156	49	253,390	60	154,159	74
6月		3,253,810	84	683,329	63	223,389	55	126,329	63
7月		3,334,930	84	616,586	55	160,935	40	112,963	55
8月		3,222,707	81	513,448	46	187,926	45	115,647	56
9月		2,568,943	73	221,758	21	197,668	50	101,097	51
10月		3,421,886	84	203,666	18	220,644	52	169,509	81
11月		3,085,188	82	454,163	43	200,322	52	134,988	68
12月		3,721,553	92	393,485	34	359,379	84	185,365	89
2013年1月		3,722,017	93	425,454	38	290,476	69	136,081	67
2月		3,527,792	98	423,695	42	272,000	72	152,462	81
3月		6,558,898	79	487,961	43	113,459	35	-	-
合計		41,283,925	82	5,291,587	40	2,623,730	55	1,486,122	67

※ CPU時間の単位は時間です。

※ \*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	PRIMERGY	PRIMEHPC FX10	UV1000	SR16000	合計
2012年4月		66,953	396	1,318	1,143	69,810
5月		54,271	672	933	1,236	57,112
6月		44,840	542	985	1,599	47,966
7月		30,320	792	3,475	1,500	36,087
8月		30,813	870	1,413	784	33,880
9月		26,056	362	1,163	862	28,443
10月		34,750	475	760	1,535	37,520
11月		53,170	350	719	1,505	55,744
12月		22,055	1,005	999	866	24,925
2013年1月		22,542	1,133	997	1,184	25,856
2月		25,689	2,165	989	1,330	30,173
3月		47,764	725	714	-	49,203
合計		459,223	9,487	14,465	13,544	496,719



## 5.4 クラス別CPU使用時間

PRIMERGY	PF small	PF large	PF vsmp	PF gpu	trial small	Queue合計	ETC	総合計
2012年4月	1532307:27:20	421341:00:15	179562:33:20	-	-	2133211:00:55	0:00:00	2133211:00:55
5月	1915913:41:35	574683:39:09	242193:49:36	198:55:42	-	2732990:06:02	0:00:00	2732990:06:02
6月	2597975:33:07	527475:09:13	128344:03:28	15:34:20	-	3253810:20:08	0:00:00	3253810:20:08
7月	2362206:26:50	850848:57:05	119619:17:04	2255:26:59	-	3334930:07:58	0:00:00	3334930:07:58
8月	2245074:02:57	706554:13:43	271002:46:40	75:29:23	-	3222706:32:43	0:00:00	3222706:32:43
9月	1528254:12:24	698634:24:16	341984:01:20	70:28:26	-	2568943:06:26	0:00:00	2568943:06:26
10月	2187396:26:56	927046:08:27	296440:25:52	11003:16:10	-	3421886:17:25	0:00:00	3421886:17:25
11月	1769815:47:06	1101830:43:00	198688:09:20	14853:09:01	-	3085187:48:27	0:00:00	3085187:48:27
12月	1999116:41:12	1686855:20:26	24761:35:28	10819:09:34	-	3721552:46:40	0:00:00	3721552:46:40
2013年1月	2435753:13:31	1115371:05:11	110435:10:56	60457:48:16	-	3722017:17:54	0:00:00	3722017:17:54
2月	2110390:42:51	1255183:32:05	100559:12:32	61658:10:29	-	3527791:37:57	0:00:00	3527791:37:57
3月	2145078:58:23	1085652:46:54	122860:28:16	34779:25:58	3170526:31:26	6558898:10:57	0:00:00	6558898:10:57
合計	24829283:14:12	10951476:59:44	2136451:33:52	196186:54:18	3170526:31:26	41283925:13:32	0:00:00	41283925:13:32

PRIMEHPC FX10	cck small	cck large	Queue合計	ETC	総合計
2012年4月	9254:42:40	301631:29:36	310886:12:16	0:00:00	310886:12:16
5月	17089:30:08	540066:40:00	557156:10:08	0:00:00	557156:10:08
6月	41473:48:00	641854:46:56	683328:34:56	0:00:00	683328:34:56
7月	55240:05:36	561346:12:16	616586:17:52	0:00:00	616586:17:52
8月	30554:29:36	482893:30:08	513447:59:44	0:00:00	513447:59:44
9月	9781:28:16	211976:45:52	221758:14:08	0:00:00	221758:14:08
10月	700:32:16	202965:44:00	203666:16:16	0:00:00	203666:16:16
11月	16430:01:52	437732:36:48	454162:38:40	0:00:00	454162:38:40
12月	24757:14:40	368727:51:12	393485:05:52	0:00:00	393485:05:52
2013年1月	41756:34:08	383697:40:32	425454:14:40	0:00:00	425454:14:40
2月	48431:13:52	375263:41:36	423694:55:28	0:00:00	423694:55:28
3月	26507:45:04	461452:55:12	487960:40:16	0:00:00	487960:40:16
合計	321977:26:08	4969609:54:08	5291587:20:16	0:00:00	5291587:20:16

UV1000	PS	Queue合計	ETC	総合計
2012年4月	144142:41:18	144142:41:18	0:00:00	144142:41:18
5月	253390:11:32	253390:11:32	0:00:00	253390:11:32
6月	223389:00:13	223389:00:13	0:00:00	223389:00:13
7月	160934:33:00	160934:33:00	0:00:00	160934:33:00
8月	187925:53:19	187925:53:19	0:00:00	187925:53:19
9月	197668:26:09	197668:26:09	0:00:00	197668:26:09
10月	220643:51:37	220643:51:37	0:00:00	220643:51:37
11月	200322:10:31	200322:10:31	0:00:00	200322:10:31
12月	359378:35:08	359378:35:08	0:00:00	359378:35:08
2013年1月	290476:10:14	290476:10:14	0:00:00	290476:10:14
2月	271999:49:28	271999:49:28	0:00:00	271999:49:28
3月	113458:58:00	113458:58:00	0:00:00	113458:58:00
合計	2623730:20:29	2623730:20:29	0:00:00	2623730:20:29

SR16000	PH	PHI	PHD	Queue合計	ETC	総合計
2012年4月	97522:11:57	0:00:00	0:00:00	97522:11:57	0:00:00	97522:11:57
5月	154159:26:55	0:00:00	0:00:00	154159:26:55	0:00:00	154159:26:55
6月	126328:39:14	0:00:00	0:00:00	126328:39:14	0:00:00	126328:39:14
7月	112963:24:40	0:00:00	0:00:00	112963:24:40	0:00:00	112963:24:40
8月	115647:15:13	0:00:00	0:00:00	115647:15:13	0:00:00	115647:15:13
9月	101097:24:37	0:00:00	0:00:00	101097:24:37	0:00:00	101097:24:37
10月	169508:49:48	0:00:00	0:00:00	169508:49:48	0:00:00	169508:49:48
11月	134988:14:37	0:00:00	0:00:00	134988:14:37	0:00:00	134988:14:37
12月	185364:43:16	0:00:00	0:00:00	185364:43:16	0:00:00	185364:43:16
2013年1月	136081:20:49	0:00:00	0:00:00	136081:20:49	0:00:00	136081:20:49
2月	152462:09:44	0:00:00	0:00:00	152462:09:44	0:00:00	152462:09:44
3月	-	-	-	-	-	-
合計	1486123:40:50	0:00:00	0:00:00	1486123:40:50	0:00:00	1486123:40:50

## 5.5 ジョブ処理件数

PRIMERGY	PF small	PF large	PF vsmp	PF gpu	trial small	Queue合計	ETC	総合計
2012年4月	59,888	6,006	1,059	0	-	66,953	0	66,953
5月	43,527	9,898	809	37	-	54,271	0	54,271
6月	34,194	9,943	618	85	-	44,840	0	44,840
7月	15,757	13,800	705	58	-	30,320	0	30,320
8月	21,020	8,210	1,533	50	-	30,813	0	30,813
9月	17,888	6,226	1,933	9	-	26,056	0	26,056
10月	20,246	12,783	1,659	62	-	34,750	0	34,750
11月	20,688	31,336	1,018	128	-	53,170	0	53,170
12月	9,631	12,245	99	80	-	22,055	0	22,055
2013年1月	9,430	12,560	429	123	-	22,542	0	22,542
2月	10,391	14,778	393	127	-	25,689	0	25,689
3月	17,806	9,748	648	47	19,515	47,764	0	47,764
合計	280,466	147,533	10,903	806	19,515	439,708	0	459,223

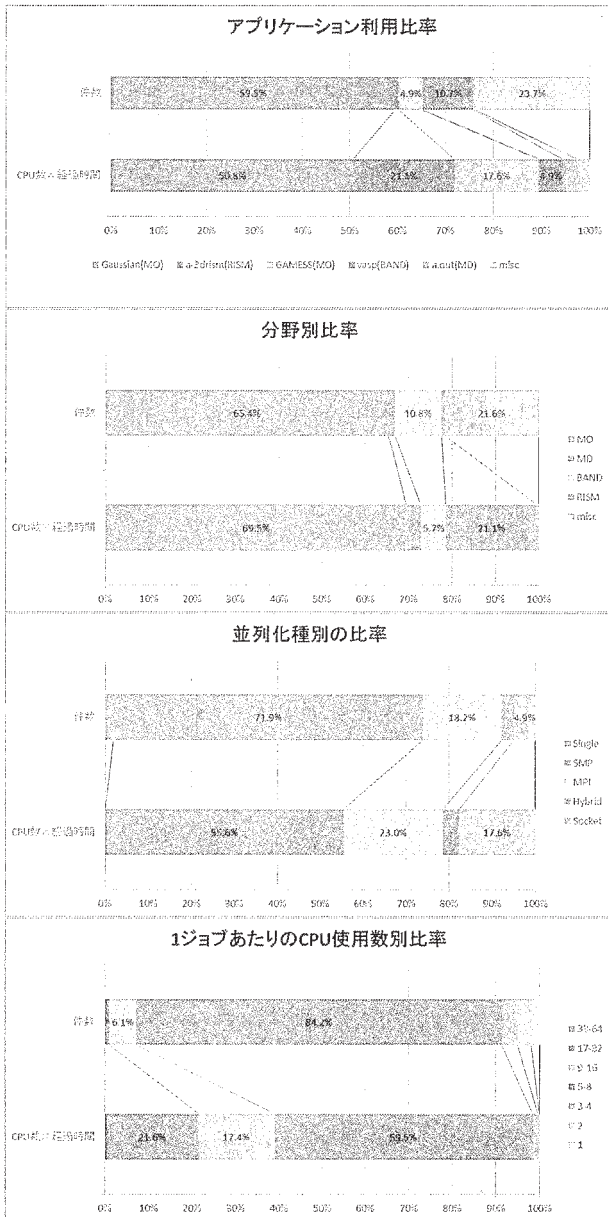
PRIMEHPC FX10	cck small	cck large	Queue合計	ETC	総合計
2012年4月	219	177	396	0	396
5月	489	183	672	0	672
6月	313	229	542	0	542
7月	556	236	792	0	792
8月	609	261	870	0	870
9月	164	198	362	0	362
10月	258	217	475	0	475
11月	260	90	350	0	350
12月	671	334	1,005	0	1,005
2013年1月	1,049	84	1,133	0	1,133
2月	1,156	1,009	2,165	0	2,165
3月	497	228	725	0	725
合計	6,241	3,246	9,487	0	9,487

UV1000	PS	Queue合計	ETC	総合計
2012年4月	1,318	1,318	0	1,318
5月	933	933	0	933
6月	985	985	0	985
7月	3,475	3,475	0	3,475
8月	1,413	1,413	0	1,413
9月	1,163	1,163	0	1,163
10月	760	760	0	760
11月	719	719	0	719
12月	999	999	0	999
2013年1月	997	997	0	997
2月	989	989	0	989
3月	714	714	0	714
合計	14,465	14,465	0	14,465

SR16000	PH	PHI	PHD	Queue合計	ETC	総合計
2012年4月	1,143	0	0	1,143	0	1,143
5月	1,236	0	0	1,236	0	1,236
6月	1,599	0	0	1,599	0	1,599
7月	1,500	0	0	1,500	0	1,500
8月	784	0	0	784	0	784
9月	862	0	0	862	0	862
10月	1,535	0	0	1,535	0	1,535
11月	1,505	0	0	1,505	0	1,505
12月	866	0	0	866	0	866
2013年1月	1,184	0	0	1,184	0	1,184
2月	1,330	0	0	1,330	0	1,330
3月	-	-	-	-	-	-
合 計	13,544	0	0	13,544	0	13,544

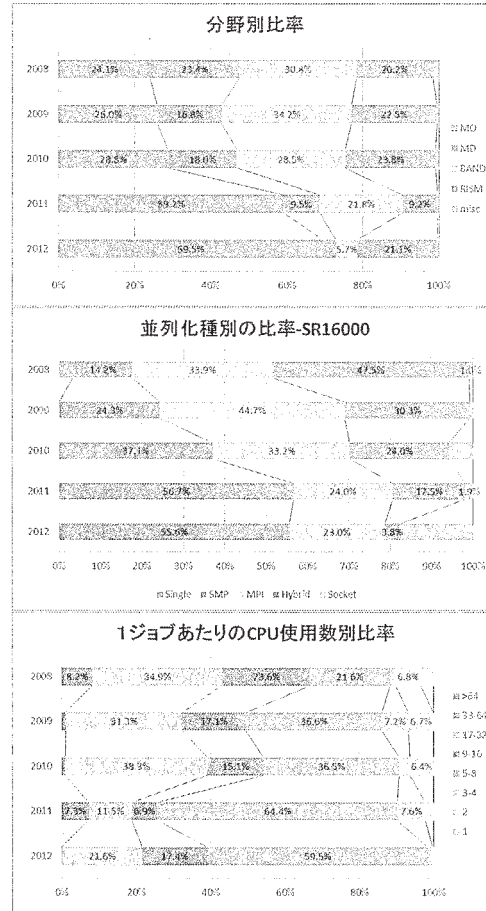
## 5.6 ジョブの実行状況

[Hitachi SR16000] (2013年2月まで)

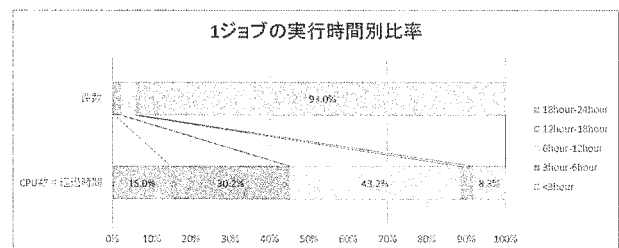
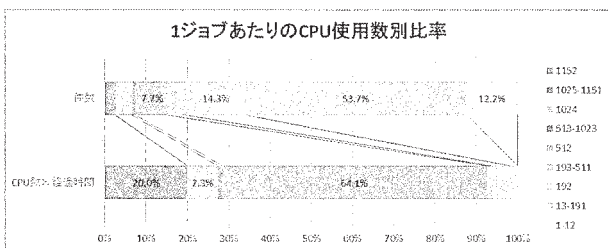


センターライブラリーの使用割合：

70%(ジョブ件数), 51%(CPU数×経過時間)

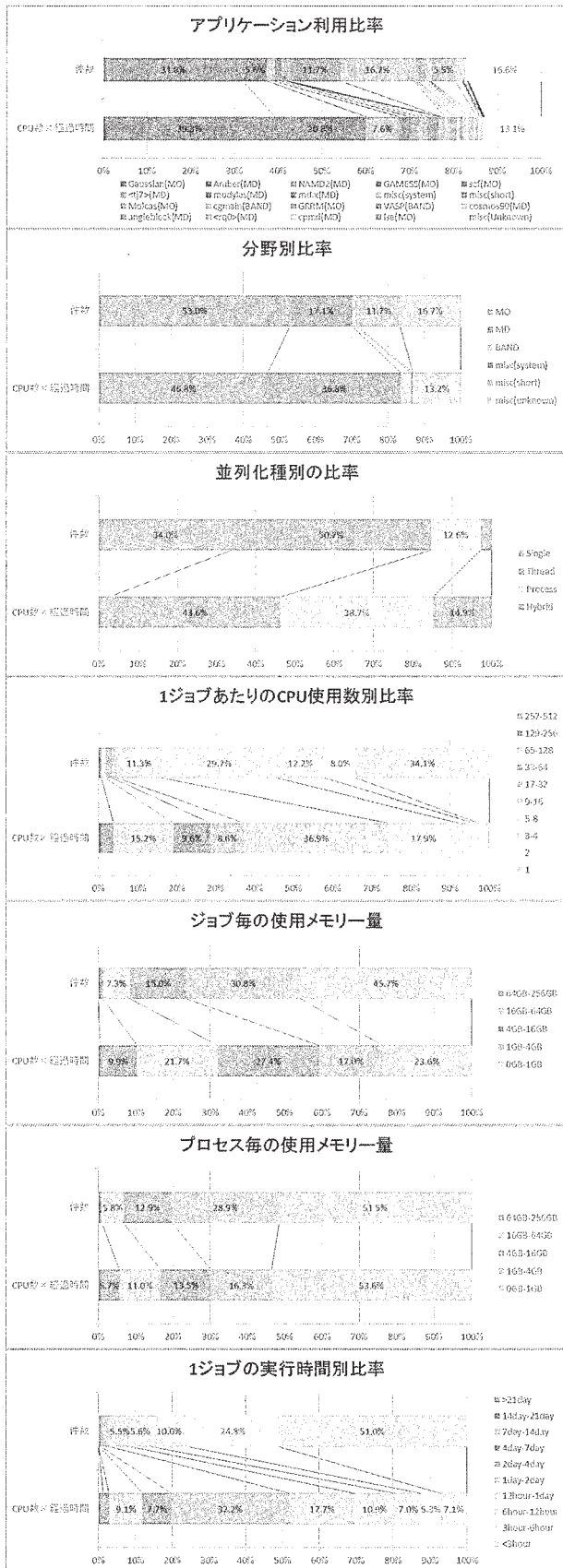


[富士通 PRIMEHPC FX10] (2013年2月まで)



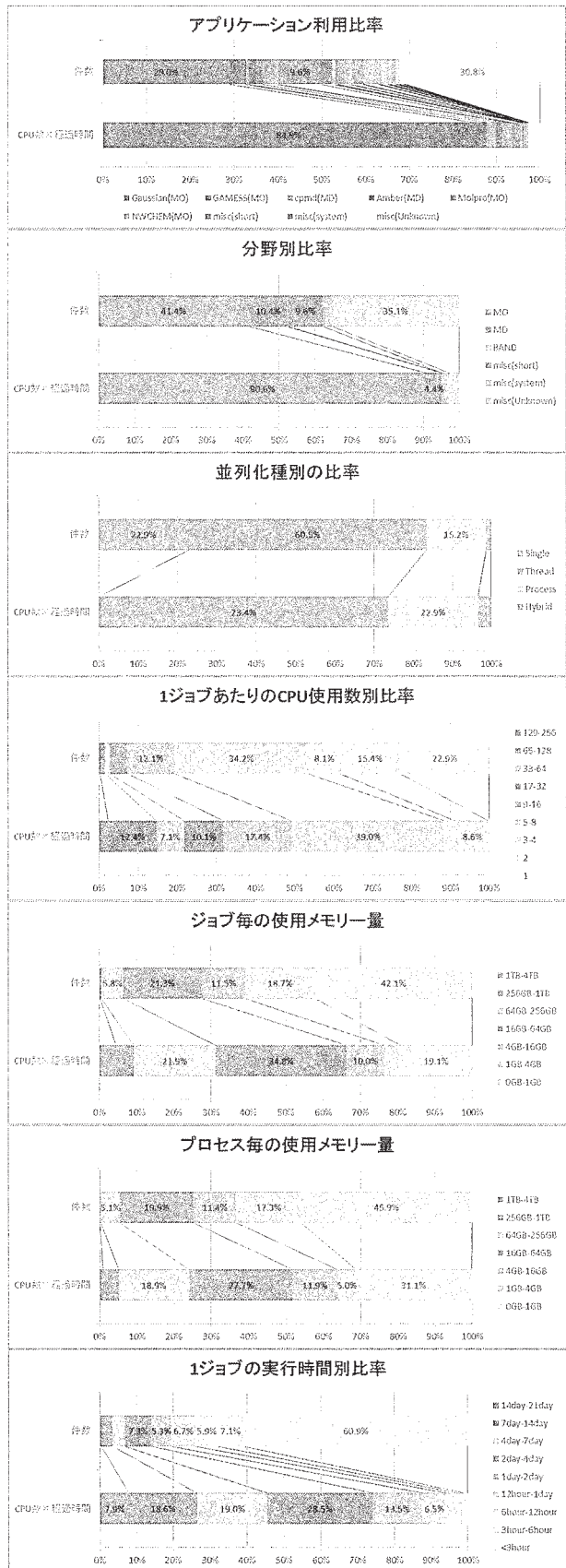
センターライブラリーは用意されていないので、すべてのジョブはユーザーが開発したものか移植したものです。

[富士通 PRIMERGY RX300] (2013年2月まで)



センターライブラリーの使用割合：  
61%(ジョブ件数), 37%(CPU数×経過時間)

[SGI UV 1000] (2013年2月まで)



センターライブラリーの使用割合：  
43%(ジョブ件数), 58%(CPU数×経過時間)



## 6 資料

### 6.1 計算科学研究センター運営委員

木下 賢吾	東北大学 大学院情報科学研究科	教授
老木 成稔	福井大学 医学部分子生理学	教授
常次 宏一	東京大学 物性研究所	教授
佐藤 啓文	京都大学 大学院工学研究科	教授
波田 雅彦	首都大学東京 大学院理工学研究科	教授
斉藤 真司	分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門 (計算科学研究センター)	教授
江原 正博	分子科学研究所 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	分子科学研究所 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
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
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
小林 悟	基礎生物学研究所 発生遺伝学研究部門	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
井本 敬二	生理学研究所 神経シグナル研究部門	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	教授・センター長
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
伊藤 暁	助教
大野 人侍	助教
内山 郁夫	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

	1978年度	1979年度	1980年度	1981年度	1982年度	1983年度	1984年度	1985年度	1986年度	1987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1982年度	同1982年度	(~11月) 同1982年度 (1月~) M-680H S-810/10	M-680H S-810/10  疎結合	M-680H (~1月) S-810/10 (2月~) S-820/80 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	無 人
プロジェクト数	63	176	192	183	198	199	207	226	234	213
利 用 者 数										
機 構 内 <sup>a</sup>	48	70	69	91	94	102	110	130	141	143
機 構 外	107	254	325	330	375	426	446	464	496	520
合 計	155	334	394	421	469	528	556	594	637	663
稼働時間(時間)	1,087	6,071	6,553	6,721	6,305	6,170	6,316	6,016	6,368	6,444
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)	(M-680H基準)	(M-680H基準)
申 請	929	4,666	11,033	10,230	11,938	13,053	14,799	15,536	33,832/8,458*	9,880
許 可	816	3,171	7,427	8,306	10,141	10,091	10,768	12,080	28,184/7,046*	7,978
総使用CPU時間 <sup>b,c</sup> (時間)	509	2,405	5,405	6,320	8,205	8,489	8,508	12,770	20,092/5,023*	6,624
ジョブ処理件数 <sup>b</sup>	41,521	155,980	183,840	214,847	239,771	236,519	226,727	274,431	289,915	278,956
ライブラリプログラム 新規登録数	0	20	43	20	699	10	118	160	39	4
データベース新規登録数	0	2	0	0	3	3	0	1	0	1
センター使用論文数 <sup>d</sup>	0	24	93	118	190	185	202	206	237	223

	1988年度	1989年度	1990年度	1991年度	1992年度	1993年度	1994年度	1995年度	1996年度	1997年度
計算機システム	M-680H S-820/80  疎結合	同1988年度	同1988年度	同1988年度	同1988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~)	SX-3/34R HSP SP2 HPC(9月~)	SX-3/34R HSP SP2 HPC SR2201(11月~)
運 転 方 式	無 人	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	231	239	256	272	271	225	222	210	201	188
利 用 者 数										
機 構 内 <sup>a</sup>	137	146	140	158	143	127	139	129	139	126
機 構 外	515	544	593	623	661	589	601	597	574	609
合 計	652	690	733	781	804	716	740	726	713	735
稼働時間(時間)	6,091	5,694	6,768	6,749	7,156	M-680H系 6,689 SX-3/34R 2,101	M-680H系 5,722 SX-3/34R 8,506 HSP 8,293 HSP 2,133 SP2 2,022	SX-3/34R 8,352 HSP 8,293 SP2 8,333	SX-3/34R 8,425 HSP 8,431 SP2 8,336 HPC 4,872 (9月~)	SX-3/34R 8,494 HSP 8,513 SP2 8,515 HPC 8,501 SR2201 3,561 (11月~)
CPU時間利用申請(時間)	(M-680H基準)	(M-680H基準)	(M-680H基準)	(M-680H基準)	(M-680H基準)	(M-680H基準)	(M-680H基準)	(HSP基準)	(HSP基準)	(HSP基準)
申 請	12,439	14,694	16,622	20,606	21,153	18,311	21,781	40,358	58,425	73,910
許 可	10,418	12,347	14,626	17,846	19,110	16,027	19,393	37,446	51,499	58,650
総使用CPU時間 <sup>b,c</sup> (時間)	7,872	8,300	11,975	11,874	12,491	16,306	24,781	156,076	207,790	262,365
ジョブ処理件数 <sup>b</sup>	278,104	253,418	2,955,038	346,987	297,638	227,650	107,194	84,102	70,308	51,738
ライブラリプログラム 新規登録数	7	3	0	0	0	10	10	7	15	3
データベース新規登録数	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0
センター使用論文数 <sup>d</sup>	211	218	248	229	282	267	306	275	279	331

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: 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。

c: S-810、S-820、SX-3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。

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。

\*: 下段はM-680H基準

	1998年度	1999年度	2000年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度	2005年度
計算機システム	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	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-7 TX-7	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	174	166	156	148	144	119	154	132
利 用 者 数								
機 構 内 <sup>a</sup>	138	125	101	100	104	89	83	30
機 構 外	566	539	534	504	479	449	516	480
合 計	704	664	635	604	583	538	599	510
稼働時間(時間)	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	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
CPU時間利用申請(時間)	(HSP基準)	(SP2 Thin基準)	(SP2 Thin基準)	(SP2 Thin基準)	(SP2 Thin基準)	(TX-7基準)	(TX-7基準)	(TX-7基準)
申 請	76,804	97,788	249,405	251,785	237,872	278,177	341,788	414,643
許 可	67,159	79,964	209,393	234,866	229,401	277,697	321,796	368,136
総使用CPU時間 <sup>b,c</sup> (時間)	273,575	239,671	619,294	678,128	2,030,643	1,785,877	1,762,818	1,992,205
ジョブ処理件数 <sup>b</sup>	45,173	40,697	58,685	70,680	55,522	58,784	28,968	19,896
ライブラリプログラム新規登録数	13	14	18	4	15	5	4	4
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>	347	347	391	302	302	281	284	205

	2006年度	2007年度	2008年度	2009年度	2010年度	2011年度	2012年度	
計算機システム	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 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)	SR16000(2月まで) PRIMERGY UV1000 PRIMEHPC FX10
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	141	145	152	171	170	190	213	
利 用 者 数								
機 構 内 <sup>a</sup>	40	44	59	49	49	43	49	
機 構 外	533	551	589	635	617	645	758	
合 計	573	595	648	684	666	688	807	
稼働時間(時間)	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	SR16000 7,904 PRIMERGY 8,444 UV1000 8,338 PRIMEHPC FX10 8,558	
CPU時間利用申請(時間)	(TX-7基準)	(TX-7基準)	(SR16000基準)	(SR16000基準)	(SR16000基準)	-	-	
申 請	702,270	1,005,486	1,224,945	1,433,895	1,712,430	1,738,115	8,007,910	
許 可	653,468	918,737	1,199,620	1,412,981	1,581,450	1,675,950	7,832,630	
総使用CPU時間 <sup>b,c</sup> (時間)	4,384,464	6,307,008	12,579,635	11,954,215	12,232,544	14,958,012	50,685,364	
ジョブ処理件数 <sup>b</sup>	78,130	140,250	149,342	149,177	143,132	204,864	496,719	
ライブラリプログラム新規登録数	21	18	22	20	15	22	21	
データベース新規登録数	0	0	0	0	0	0	1	
センター使用論文数 <sup>d</sup>	214	188	186	196	193	231	257	

- 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: 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。  
c: SX-3、SX-5、SX-7、VPP5000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。  
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。

## 6.4 マニュアル

全てのマニュアルは電子媒体で提供されています。計算科学研究センターのウェブページ (<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。

### 6.4.1 SR16000 用マニュアル（日本語版）

1. XL C/C++ Enterprise Edition for AIX スタートアップ・ガイド
2. XL C/C++ Enterprise Edition for AIX プログラミングガイド
3. XL C/C++ Enterprise Edition for AIX コンパイラ・リファレンス
4. XL C/C++ Enterprise Edition for AIX XL C/C++ 言語解説書
5. XL Fortran Enterprise Edition for AIX 言語解説書
6. XL Fortran Enterprise Edition for AIX ユーザーズガイド
7. 最適化 FORTRAN90 言語文法書
8. 最適化 FORTRAN90 使用の手引き
9. 数値計算副プログラム MSL2 行列計算
10. 数値計算副プログラム MSL2 関数計算
11. 数値計算副プログラム MSL2 統計計算
12. 数値計算副プログラム MSL2 操作
13. 行列計算副プログラムライブラリ MATRIX/MPP 文法・操作書

### 6.4.2 SR16000 用マニュアル（英語版）

1. IBM XL C/C++ Enterprise Edition for AIX Getting Started with C/C++
2. IBM XL C/C++ Enterprise Edition for AIX Programming Guide
3. IBM XL C/C++ Enterprise Edition for AIX Compiler Reference
4. IBM XL C/C++ Enterprise Edition for AIX XL C/C++ Language Reference
5. XL Fortran Enterprise Edition for AIX Language Reference
6. XL Fortran Enterprise Edition for AIX User's Guide
7. For SR11000 Optimizing FORTRAN90 Reference
8. For SR11000 Optimizing FORTRAN90 User's Guide
9. For SR11000 SR11000 MSL2 User's Guide
10. For SR11000 MSL2 Function Calculation User's Guide and Reference
11. For SR11000 MSL2 Matrix Calculation User's Guide and Reference
12. For SR11000 MSL2 Statistical Calculation User's Guide and Reference
13. For SR11000 MATRIX/MPP User's Guide and Reference
14. ESSL Guide and Reference
15. Parallel ESSL Guide and Reference

### 6.4.3 UV1000 用マニュアル（日本語版）

プログラミングガイド

### 6.4.4 UV1000、PRIMERGY 共通インテル製品マニュアル（日本語版）

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 デバッガー・ドキュメント

### 6.4.5 UV1000、PRIMERGY 共通インテル製品マニュアル（英語版）

#### 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

### 6.4.6 UV1000、PRIMERGY 共通 Portland Group 製品マニュアル（英語版）

#### PGI Compilers and Tools Documentation

### 6.4.7 UV1000 用 ログウェア ソフトウェア 製品マニュアル（英語版）

1. TotalView
2. MemoryScape
3. ThreadSpotter

### 6.4.8 PRIMEHPC FX10 用マニュアル（日本語版）

1. エンドユーザー向けガイド
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
- 6.4.9 PRIMEHPC FX10 用マニュアル (英語版)
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

## 7 研究施設の現状と将来計画 (分子研レポート 2012 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、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。2012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。

2013年3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月に更新され、後者は2013年3月に更新された。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。

超高速分子シミュレータは富士通社製のPRIMERGY RX300S7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188.7 Tflopsで総メモリ容量55 TByte超である。PRIMERGY RX300S7は、16 CPU コア /128 GB 構成のノード342台からなるPCクラスタである。インターコネクトはInfiniBand QDRを採用し、全台数を40 GB/sで、一部は2系統の80 GB/sで演算ノード間を相互接続しており、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。特徴は、vSMPの導入により複数ノードを仮想的に1ノードの巨大共有メモリシステムとして運用できることである。しかも、ジョブ毎にこの制御が可能である。また32ノードには、NVIDIA社製のGPGPU TeslaM2090を搭載している。UV2000は1024 CPU コア /8 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インターコネクト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。

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、運用管理クラスタおよびネットワーク装置から構成される。演算サーバは、富士通製のPRIMERGY CX250S1で、16 CPU コア /64 GByte 構成のノード368台からなる共有メモリ型スカラ計算機のPCクラスタである。理論総演算性能は136.6 Tflops、総メモリ容量は23 TByteである。インターコネクトはInfiniBand FDRを採用し、全台数を56 GB/sで相互接続しており、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。ファイルサーバは、1800 TByteのディスクを装備しており、演算サーバのインターコネクトに直結している。本ディスクは演算サーバのワークディレクトリとしてだけでなく、共同利用システム全体のホームディレクトリやバックアップ領域として運用している。本演算サーバは、2014年9月に次世代CPUを有するPCクラスタに入れ換えることになっており、その時点では220 Tflops以上に増強される。

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

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 118,989 件のデータが収録され、世界 91 カ国から利用されている。

共同利用に関しては、2012 年度は 190 研究グループにより、総数 697 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。近年、共同利用における利用者数が増加傾向にあり、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。

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、一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 (9 課題, 75 名)。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「理論と計算科学による新たな展開と可能性を探る」と 2 つのウィンタースクール「第 2 回量子化学ウィンタースクール～基礎理論と生体系の理論～」と「第 6 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 24 年度 システム構成 (2013 年 3 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 RX300S7
	OS：Linux
	CPUCore 数：5472 (16CPUCore×342 ノード)
	総理論性能：126.9 Tflops (371.2 Gflops×342 ノード) +21.2 Tflops (TeslaM2090 x32)
	総メモリ容量：43.7 TB (128 GB×342 ノード)
高速 I/O 演算サーバ	
	型番：SGI UV2000
	OS：Linux
	CPUCore 数：1024
	総理論性能：20.4 Tflops (20.0 Gflops/CPUCore)
	総メモリ容量：8.0 TB
	ディスク容量：400 TB (/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)
	総理論性能：20.2 Tflops (13.2 Gflops/CPUCore)
	総メモリ容量：3.0 TB (32 GB×96 ノード)
	ディスク容量：48 TB (/k/home)

外部磁気ディスク装置	
	型番：PANASAS PAS12, PAS11
	総ディスク容量：1000 TB
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	
	型番：富士通 PRIMERGY CX250S1
	OS：Linux
	CPUCore 数：5888 (16CPUCore×368 ノード)
	総理論性能：136.6 Tflops (371.2 Gflops×368 ノード)
	総メモリ容量：23.5 TB (64 GB×368 ノード)
ファイルサーバ	
	型番：富士通 PRIMERGY RX300S7 (8 ノード)
	OS：Linux
	総メモリ容量：320 GB (64 GB×2 ノード+ 32 GB×6 ノード)
	ディスク容量：1800 TB (/home (300 TB), /save (600 TB), /week (300 TB), バックアップ領域 (600 TB))
フロントエンドサーバ	
	型番：富士通 PRIMERGY RX300S7 (4 ノード)
	OS：Linux
	総メモリ容量：256 GB (64 GB×4 ノード)
運用管理クラスタ	
	型番：富士通 PRIMERGY RX200S7 (16 ノード)
	OS：Linux
	総メモリ容量：512 GB (32 GB×16 ノード)
高速ネットワーク装置	
	型番：Force10 S4810