

# I 部

## 目 次

1. 巻頭言 九州大学 情報基盤センター 青柳 睦	1
2. スーパーコンピュータワークショップの活動	2
3. 計算機システムの運用および使い方	6
3. 1 システムの構成と特徴	6
3. 2 キューの構成	10
3. 3 利用課金点数	12
4. 一般報告	15
4. 1 分子研ライブラリプログラムの開発	15
4. 2 データベース開発状況	19
5. 平成 13 年度計算機稼働状況および利用者数	20
5. 1 利用申請プロジェクトおよび利用者数	20
5. 2 電力使用および計算機稼働状況	20
5. 3 計算機利用状況	21
5. 4 クラス別 CPU 使用時間	23
5. 5 クラス別 VPU 使用時間	25
5. 6 ジョブ処理件数	26
6. 資料	
6. 1 計算科学研究センター運営委員	27
6. 2 計算科学研究センター職員	28
6. 3 応用プログラム相談員一覧	28
6. 4 利用者数と CPU 時間の推移	29
6. 5 建物図	31
6. 6 マニュアル一覧	34
7. 現状と将来構想 (分子研レポート'01 より転載)	42



## 巻頭言

### グリッドに思うこと

九州大学 情報基盤センター  
九州大学 システム情報科学 青柳 睦

今年の5月より岡崎機構から情報系の研究者が周りに大勢いる職場に移ったため、最近、グリッドコンピューティングという言葉をよく耳にします。グリッド環境が実現すれば電力網 (Power supply grid) のように、世界中どこからでも簡単にネットワーク上の共有リソースが使えるようになるようです。広域ネットワークに接続されたスーパーコンピュータはもちろん、大規模なデータベースサーバーや可視化装置、さらには大型加速器等の観測装置までもがグリッドのネットワーク資源となる日が近いと言われています。計算機科学 (計算科学ではない) を専門にされている方々や、所謂情報系の研究者は、グリッドの基盤となるソフトウェア (通信ミドルウェアやセキュリティー、認証システム) の世界標準化へ向けて活発な研究開発を行っています。一方、計算科学者の多くは研究室に自前の高性能 PC やワークステーションを持ち、大規模な計算をセンターで行う従来からの研究の仕方あまり不便を感じていないと思います。私は片足を情報系、もう一方を計算化学に置いているので、両者の間に価値観や意識の差のようなものを感じていました。前者は盛んに「計算機をいかに便利に効率的に使うか」を議論し、後者はもちろん「計算機を使っていかによい研究をするか」に力点があります。計算機科学者と計算科学者の唯一の接点は、広域ではなく LAN 内 (一つの研究機関の中に分散された) の複数計算機における並列処理の話題くらいでした。これからは将来に向けてグリッド計算の環境が整備されてゆく中で、これまでになく計算科学者と計算機科学者との密接な連携が必要になると思います。さもないと、折角グリッド技術によって、便利で効率的に計算機を利用できる環境が整備されても、計算科学 (計算物理、計算化学など) の研究実態にそぐわない環境になってしまう恐れがあるからです。

また、グリッド技術によって計算機がどこにあってもよい環境が実現すると、「どこの計算機で研究したか」ではなく「どこの研究者と共同研究したか」とか「どこの誰の Know-How が役にたったか」に重心が移っていく気がします。高速ネットワークであらゆるハードが結ばれる時代だからこそ、より一層、組織や人の重要性が再認識されるのではないのでしょうか。その意味で、これまでの様に分子科学研究所の優秀な人材を活かした共同研究や課題研究のより一層の充実はもちろん、計算科学研究センターの研究支援の発展に期待いたします。最後に私事ですが、九大着任以来旧帝大7大型計算機センターの将来構想委員をしています。これまで全国共同利用という傘の下で百貨店的な施設利用に焦点を当ててきた大型計算機センターは、法人化を踏まえたセンターの生き残り策に苦慮しています。「スパコンを所有する」だけではだめなのです。

## 2. スーパーコンピュータワークショップの活動

平成14年3月5日(火)、6日(水)の両日、計算科学研究センターで、スーパーコンピュータワークショップを開催した。約68名の参加者があり、スーパーコンピュータの活用方法についての講習や、センターのマシンを使って得られた研究成果などの講演を行った。

また、講演で用いた資料やOHPを集めた『計算科学研究センターワークショップレポート(2号)』を発刊しセンターホームページ(<http://www.rccs.orion.ac.jp/workshop/>)で、講演の動画や講演に使用した資料(PDF形式)も公開している。

### ◎ スーパーコンピュータワークショッププログラム

タイトル : 「分子科学とバイオサイエンスの接点」  
日時 : 平成14年3月5日(火)～3月6日(水)  
場所 : 計算科学研究センター2階大会議室

#### 3月5日(火)

13:30-13:40	Open remark 平田 文男 (計算科学セ)
13:40-14:10	「フェリチン分子への多イオン透過過程におけるエネルギー障壁の計算」 高橋 卓也 (計算科学セ)
14:10-14:40	「serin protease における酵素触媒反応」 石田 豊和 (京大院理)
14:40-15:10	「タンパク質の励起移動・電子移動・励起状態ダイナミクス」 倭 剛久 (名大院理)
15:10-15:40	「分子動力学シミュレーション専用計算機MDMによるバイオサイエンス」 戎崎 俊一 (理研)
15:55-16:55	「富士通のBioInformatics への取り組み」 奥田 基 (富士通)
17:00-18:00	「NECのHPCへの取り組み」 花村 光泰 (日本電気)
18:30-20:30	懇親会 職員会館2階大会議室

### 3月6日(水)

9:30-10:00	「分極モデルポテンシャル関数を用いた生体分子の理論研究」 中川 節子 (金城学院大)
10:00-10:30	「CUFF(Consistent Charge Equilibration with Universal Force Filed)の開発と 色素増感型太陽電池への応用」 北尾 修 (産総研)
10:30-11:00	「ヒトゲノム解析センターのスーパーコンピュータシステム」 中井 謙太 (東大医科研)
11:00-11:30	「蛋白質計算科学とグリッド技術」 中村 春木 (阪大蛋白研)
11:30-12:00	「熱力学的積分法による自由エネルギープロファイルの計算 —生体膜を横切る物質透過とタンパク質のコンフォメーション変化—」 岡崎 進 (計算科学セ)
13:15-13:45	「計算分子科学で解明する蛋白質の熱安定性と基質認識」 斎藤 稔 (弘前大理工)
13:45-14:15	「溶媒中における蛋白質の立体構造予測：拡張アンサンブル法と RISM 理論の複合 アプローチ」 木下 正弘 (京大エネルギー理工研)
14:15-14:45	「タンパク質立体構造予測：粗視化モデルによる物理化学的アプローチ」 藤埴 佳見 (神戸大院自然科学)
14:50-15:50	「グリッドコンピューティング —SGI の取り組みとそのテクノロジー—」 戸室 隆彦 (日本 SGI)
15:50-15:55	End remark 平田 文男 (計算科学セ)

### 分子研シンポジウム「計算ナノサイエンス研究会」の開催について

平成 14 年 3 月 26 日、27 日の両日、計算科学研究センター主催で、「計算ナノサイエンス研究会」を開催した。口頭発表 21 件、ポスター発表 15 件の発表があり、研究所内外から理論研究者を中心として、94 名の参加者があった。また研究会の報告書を作成し、関係者への配布を行った。

#### ◎ 計算ナノサイエンス研究会プログラム

日時：平成 14 年 3 月 26 日(火)、27 日(水)  
場所：岡崎ニューグランドホテル 2 階

3月26日(火)

10:30-11:00	開会のあいさつ「分子研におけるナノサイエンス研究と計算科学」 茅 幸二 (分子研)
11:00-11:30	「分子設計とナノ構造」 永瀬 茂 (分子研)
11:30-12:00	「大規模系への応用を目指した量子化学および動力学並列計算」 青柳 睦 (計算科学セ)
13:00-13:30	「次世代分子理論と UTChem」 平尾 公彦 (東大院工)
13:30-14:00	「光合成細菌の量子化学」 中辻 博 (京大院工)
14:00-14:30	「複合電子系の反応の理論研究—計算ナノサイエンスへの期待」 榊 茂好 (九大有機セ)
15:00-15:30	「分子シミュレーション研究における大規模計算」 樋渡 保秋 (金沢大理)
15:30-16:00	「揺らぎから機能へ：水を通して見た化学反応」 大峰 巖 (名大理)
16:00-16:30	「ソフトナノ自己組織化構造体の自由エネルギー解析」 松林 伸幸 (京大化研)
16:30-17:00	「古典系と結合した多電子系の非線形励起と相転移ダイナミクス」 米満 賢治 (分子研)
17:00-18:30	ポスター発表
18:30-20:00	懇親会

3月27日(水)

9:00-9:30	「生体高分子系の拡張アンサンブルシミュレーション」 岡本 祐幸 (分子研)
9:30-10:00	「柔かいナノ物質の計算機シミュレーションに向けて—形態と機能—」 岡崎 進 (計算科学セ)
10:00-10:30	「ナノサイズ系への対応：大規模電子状態計算手法開発」 寺倉 清之 (産総研)
11:00-11:30	「ナノ科学—統計力学の視点からの2、3の問題」 宗像 豊哲 (京大院工)
11:30-12:00	「ナノ科学における液体論の諸問題」 平田 文男 (計算科学セ)
13:00-13:30	「自己組織化のための分子シミュレーション技術—ナノシミュレーション技術の構築に向けて—」 三上 益弘 (産総研)
13:30-14:00	「光誘起相転移の初期過程におけるナノ構造形成シミュレーション」 那須 奎一郎 (物構研)
14:00-14:30	「水素—境界領域の物質科学」 常行 真司 (東大物性研)
15:00-15:30	「超大規模材料設計シミュレーション計算とナノテク GRID 構想」 川添 良幸 (東北大金研)
15:30-16:00	「中性子で観るナノ構造」 池田 進 (物構研)
16:00-16:30	「sum frequency generation スペクトルの理論とシミュレーション」 森田 明弘 (京大院理)
16:30-16:35	閉会のあいさつ

ポスターセッション (3月26日 17:00-18:30)

P-1	「トリチアペンタレン類の構造変化に関する理論的研究」 酒井 章吾 (大阪産大工)
P-2	「分子動力学法・演習カリキュラム」 片岡 洋右 (法政大工)
P-3	「化学反応動力学シミュレーションによる液体 N2O4 の化学平衡と解離モードラマンバンドの帯形」 加藤 聡子 (聖母女学院)
P-4	「分子動力学シミュレーションを用いた自由エネルギー計算による融点融解潜熱の予測」 吉井 範行・土屋 陽子・長谷川 浩巳・岩坪 哲四郎 (電中研)
P-5	「ナノチューブ中などにおける水の相転移」 田中 秀樹 (岡山大理)・甲賀 研一郎 (福岡教育大) G. T. Gao (Univ. Nebraska)・X. C. Zeng (Univ. Nebraska)
P-6	「Ir (ppy) 3 およびその類似化合物の発光スペクトルに関する理論的研究」 杉本 学・綿末 拓未・榊 茂好 (熊本大院)
P-7	「様々な MD シミュレーションを高速化する MD 法専用計算機」 豊田 新次郎・岡田 興昌・佐々木 茂彦 (富士ゼロックス) 宮川 博夫・北村 一秦 (大正製薬)・網崎孝志 (鳥取大医)
P-8	「金属ナノクラスターの合成と構造・機能評価」 根岸 雄一 (分子研)
P-9	「高圧下熔融ケイ酸塩におけるモード伝搬」 竹内 靖 (東大院理)
P-10	「大きな系の振動エコーを計算する時の問題：量子効果の評価」 秋山 良 (Cornell Univ.)
P-11	「シンジオタクチックポリスチレン結晶多形体における分子キャビティの構造と結合性」 玉井 良則 (福井大工)・福田 光完 (兵庫教育大)
P-12	「フラーレン内部での金属クラスターの回転制御」 小林 郁・永瀬 茂 (分子研)
P-13	「結び目のある環状高分子におけるトポロジー効果」 島村 美裕紀 (東大院工)
P-14	「マイセルのサイズ分布」 田中 美栄子 (宮崎大工)
P-15	「serine protease の酵素触媒反応」 石田 豊和・加藤 重樹 (京大院理)

### 3 計算機システムの運用および使い方

#### 3.1 システムの構成と特徴

当センターのシステムは、ベクトルスーパーコンピュータ(富士通製 VPP5000)、超並列スーパーコンピュータ(SGI 製 SGI2800, Origin3800)、高速演算サーバシステム(日本電気製 SX-5)、高速演算サーバ副システム(日本電気製 HPC)、演算クラスタシステム(IBM 製 SP2)による独立性を重視した UNIX 分散処理システムである。(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る)

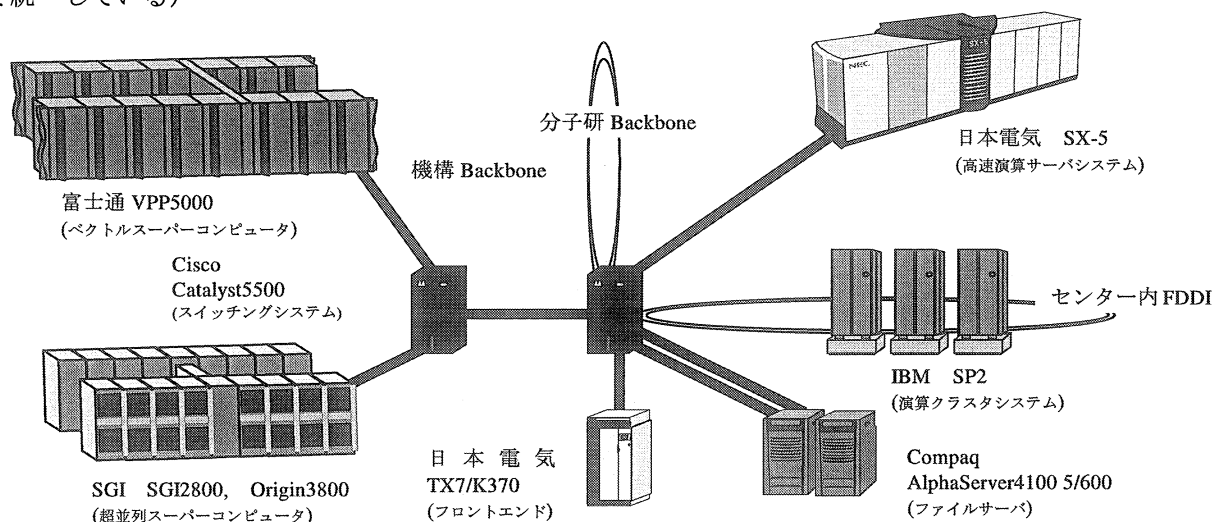


図 3.1 計算機システム概略

- ・ センター内は 2 台のスイッチングシステム(Cisco Catalyst5500)を中心に各マシンと各バックボーンが相互に接続されている。
- ・ 機構内に FDDI 準拠の 600Mbps 光ループ LAN(機構内 Backbone)を張り巡らせており、所内はもちろんのこと三研究所(分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所)の支線ネットワーク間を統合的に接続・利用できる。
- ・ SINET を経由してインターネットにアクセスできる。
- ・ センター内の端末は、センター内 FDDI に接続されている。

##### 3.1.1 ベクトルスーパーコンピュータ(富士通製 VPP5000)

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

〈演算処理装置〉

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



<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

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

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

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

<SGI2800 演算処理装置>

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

<Origin3800 演算処理装置>

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

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

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

3.1.3 高速演算サーバシステム(日本電気製 SX-5)

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

<演算処理装置>

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

<磁気ディスク装置>

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

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

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

### 3.1.4 高速演算サーバ副システム(日本電気製 HPC)

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

#### <演算処理装置>

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

#### <磁気ディスク装置>

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

#### <磁気ディスク装置(アレイディスク)>

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

### 3.1.5 演算クラスタシステム(IBM 製 SP2)

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

#### <演算処理装置>

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

#### <磁気ディスク装置>

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

### 3.1.6 ファイルサーバシステム

#### ◆主システム(COMPAQ AlphaServer4100 5/600)

#### <演算処理装置>

主記憶装置	2GB (1GB×2)
CPU 台数	2 台(クラスタ構成)

#### <磁気ディスク装置>

総容量 (内訳)	414GB
ユーザホームディレクトリ	414GB

◆副システム(日本電気 UP4800/650)

〈演算処理装置〉

主記憶装置	512MB
CPU 台数	1 台

〈磁気ディスク装置〉

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

### 3.1.7 フロントエンド

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

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

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

主記憶装置	256MB
演算性能	149MIPS
CPU 台数	2 台

### 3.2 キューの構成

それぞれのホストにおけるキュー構成は以下のとおり。  
 表中の言葉の意味は下記の通りである。

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

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

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

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

キュー名	CPU 時間	主記憶 (標準値)	多重度	ノード数	1 ユーザ 制限	1 グループ 制限	備 考
G1	12 時間	8GB	8	4-8	2	2	並列ジョブ(SGI2800)
G2	24 時間	16GB	4	9-16	2	2	並列ジョブ(SGI2800)
G3	48 時間	32GB	6	32	1	1	並列ジョブ(SGI2800)
G4	24 時間	64GB	1	64	1	1	並列ジョブ(SGI2800)
G2S	24 時間	16GB	8	9-16	2	4	並列ジョブ(Origin3800)
G5S	24 時間	128GB	無制限	128	-	-	特別申請(Origin3800)
会話処理	2 時間	4GB	4(b)	1-4	-	-	8CPU(Origin2000)

- (注 1) ノード数の上限値は、それぞれのジョブキューにおいて、並列ジョブが最大限利用できる物理的な CPU 台数である。マルチスレッド型の並列ジョブやマスター・スレーブ型のジョブは 1 ジョブから生まれるスレッドの個数やプロセス数は CPU 台数を超える場合がある。
- (注 2) G3, G4 の 2 クラスでの最大同時実行数は 6 である。ただし、G4 クラスの方が優先度を高くしてある。
- (注 3) Origin3800 で特別申請利用者が利用中は、G2S キューを閉鎖する。閉鎖スケジュールは 1 ヶ月前に確定する。

日本電気 SX-5 (ccsx5) <中規模から大規模ベクトルジョブ処理>

キュー名	CPU 時間	主記憶 (標準値)	多重度	1 ユーザ 制限	1 グループ 制限	備 考
H05S	6 時間	512MB	2	1	1	
H05M	12 時間	512MB	4	1	2	
H05L	48 時間	512MB	2	1	1	
H1S	24 時間	1GB	4	1	2	
H1L	48 時間	1GB	4	1	2	
H2S	12 時間	2GB	3	1	2	
H2L	24 時間	2GB	3	1	2	
H4S	12 時間	4GB	2	1	1	
会話処理	10 分	256MB	-	-	-	コンパイルリンク用

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

キュー名	CPU 時間	主記憶	多重度	1 ユーザ 制限	1 グループ 制限	備 考
W1	24 時間	128MB	2	1	1	
W2	48 時間	512MB	2	1	1	
会話処理	10 分	32MB	-	-	-	rsh のみ

IBM SP2 (ccsp2) <分散メモリ型並列ジョブ処理>

キュー名	CPU 時間	主記憶	多重度	ノード数	1 ユーザ 制限	1 グループ 制限	備 考
P1	72 時間	128MB	1	8-23	2	6	Thin ノード名は以下の通り ccsp201, ccsp202, ccsp203, ccsp204, ccsp205, ccsp206, ccsp207, ccsp208, ccsp209, ccsp210, ccsp2011, ccsp212, ccsp213, ccsp214, ccsp215, ccsp216, ccsp266, ccsp267, ccsp268, ccsp269, ccsp270, ccsp272, ccsp277
P2	96 時間	128MB	1	7	2	6	Wide ノード名は以下の通り ccsp251, ccsp253, ccsp255, ccsp257, ccsp259, ccsp261, ccsp263
P3	48 時間	256MB	1	16	2	6	Wide ノード名は以下の通り ccsp217, ccsp219, ccsp221, ccsp223, ccsp225, ccsp227, ccsp229, ccsp231, ccsp233, ccsp235, ccsp237, ccsp239, ccsp241, ccsp243, ccsp245, ccsp247
会話処理	10 分	32MB	-	1	-	-	コンパイルリンク用(ccibm) ccsp265

### 3.3 利用課金点数

利用課金は差し当たり徴収していませんが、予算の関係上、場合によっては消耗品等を何らかの方法で利用者に負担して頂くことがあるかもしれない。

計算機利用の配分のためにプロジェクト課題ごとに利用点数が割り当てられる。各グループは割り当てられた点数を越えて計算機を利用することはできない。利用点数 P は次の式に従ってジョブごとに算出される。

#### ◆ 利用点数算出法

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

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

#### □ ベクトルスーパーコンピュータ (VPP5000) の利用点数算出法

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

S P U : スカラ演算器使用時間(秒)

V P U : ベクトル演算器使用時間(秒)

a : スカラ課金係数 0.08/sec

b : ベクトル課金係数 0.04/sec

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

: 1.00 [V1-V5 および会話処理利用の場合]

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

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

$$P2 = CPU \times Fsg_i \times c$$

C P U : CPU 使用時間(秒)の総和

c : CPU 課金係数 0.008/sec

F s g i : 0.75 [G1~G5、G2S、G5S に一律に適用]

: 1.00 [会話処理に場合]

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

□ 高速演算サーバシステム（SX-5）の利用点数算出法

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

S P U : スカラ演算器使用時間(秒)

V P U : ベクトル演算器使用時間(秒)

d : スカラ課金係数 0.10/sec

e : ベクトル課金係数 0.08/sec

□ 高速演算サーバ副システム(HPC)の利用点数算出法

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

S P U : スカラ演算器使用時間(秒)

V P U : ベクトル演算器使用時間(秒)

f : スカラ課金係数 0.03/sec

g : ベクトル課金係数 0.02/sec

□ 演算クラスタシステム（SP2 Wide）の利用点数算出法

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

C P U : CPU 使用時間(秒)

h : CPU 課金係数 0.01/sec

□ 演算クラスタシステム（SP2 Thin）の利用点数算出法

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

C P U : CPU 使用時間(秒)

i : CPU 課金係数 0.005/sec

(注) SP2における並列ジョブに対する課金は、ジョブが利用した全ノードに関して処理開始時刻と処理終了時刻をシステムが調べ、一番速い処理開始時刻と一番遅い処理開始時刻の差をとり、当該ジョブが並列処理用のキューを占有していた経過時間(秒)を算出し、この値をCPUとする。変数名としてCPUを用いているが、並列ジョブにたいしては経過時間を基に課金計算を行う。このことにより、効率の良い並列プログラムでは、1CPUに対するか課金点数に近いt年数を消費するだけである。実際の計算処理量としては7~23倍の計算が実行できることになる。

## 課金係数一覧表

各々のキュークラスにおける1時間あたりの利用点数(消費点数/時)は、以下の表のようになる。

マシン名	キュー名	演算性能 (GFLOPS) ※1	課金係数	1時間あたりの 消費点数(点)※3	標準時間 (時)※4	備 考	CP※5
VPP5000	V1? V5 会話処理	9.6	0.05(s) 0.06(v)	216.0	0.540	会話処理は最大30分まで	22.50
	VP6	96.0		1,080.0	2.700	同時に10PE使用した場合	11.25
SGI2800 Origin3800	G1	4.8	0.008	172.8	0.432	同時に8CPUを利用した場合	36.00
	G2	9.6		345.6	0.864	同時に16CPUを利用した場合	
	G3	19.2		691.2	1.728	同時に32CPUを利用した場合	
	G4	38.4		1382.4	3.456	同時に64CPUを利用した場合	
	G5	76.8		2764.8	6.912	同時に128CPUを利用した場合	27.00
	G2S	12.8		345.6	0.864	同時に16CPUを利用した場合	
	G5S	102.4		2764.8	6.912	同時に128CPUを利用した場合	
	会話処理	0.7		28.8	0.072	同時に利用したCPU数倍に増加	
SX-5	全クラス 会話処理	8.0	0.08(s) 0.10(v)	360.0	0.900	会話処理は最大10分まで	45.00
HPC	全クラス 会話処理	2.0	0.02(s) 0.03(v)	108.0	0.270	会話処理は最大10分まで	54.00
SP2	P1	1.2	0.005	36.0	0.090	利用ノード数に依存しない	29.59
	P2	0.9	0.01	72.0	0.180		78.04
	P3	2.1					34.14
	会話処理	0.05	0.005	18.0	0.045	最大10分まで	340.26

(注意)

※1 演算性能は理論ピーク性能の総和である。

※2 (s)はスカラプロセッサ使用時間(秒)に対する課金係数、(v)はベクトルプロセッサ使用時間(秒)に対する課金係数である。

※3 CPU1時間あたりに消費されるCPU点数である。表の計算においては、3,600(秒)×ベクトル課金係数で行っている。

※4 CPU1時間あたりに消費されるCPU点数を時間に換算し直した場合の消費時間である。

※5 CPはコストパフォーマンスの略であり、1GFLOPSを得るのに必要な点数を表している。値が小さい方がお得なことを示している。



## 4. 一般報告

### 4.1 分子研ライブラリプログラムの開発

平成 13 年度のライブラリ開発計画を表 4.1.1 に示す。新規プログラムの開発もしくは既存プログラムの改良・発展というかたちでプログラム開発を依頼し、CPU 時間、ファイル容量などの計算資源を提供する代わりに、ライブラリプログラムとして登録してもらい、一般ユーザーに向けて公開している。

表 4.1.1 平成 13 年度ライブラリプログラム開発作業一覧

名 前	所 属	職 名	内 容
梅本公子	国際基督大	教授	レクチン糖の相互作用系に対する AMBER6 による分子動力学計算

平成 13 年度に新規登録または更新したライブラリプログラムは以下の 7 件である。

#### VPP5000 (Fujitsu)

g98 Gaussian98(A.11): *ab initio* molecular orbital calculations

#### SGI 2800/3800 (SGI)

Dirac 4-th component relativistic MO calculation program

g98 Gaussian98(A.11): *ab initio* molecular orbital calculations

#### SX-5 (NEC)

dirac 4-th component relativistic MO calculation program

g98 Gaussian98(A.11): *ab initio* molecular orbital calculations

#### SR8000 (HITACHI)

amber5 AMBER5: assisted model building with energy refinement

g98 Gaussian98(A.11): *ab initio* molecular orbital calculations

よって、平成 14 年 3 月現在で登録されているライブラリプログラムは以下の通りである。

表 4.1.2 プログラムライブラリー一覧

\*\*\*\* Fujitsu VPP5000 VERSION \*\*\*\*

<u>PROGRAM</u>	<u>PROGRAM TITLE</u>
BLAS/VP	Basic linear algebra subprograms
C-SSL II/VP	Scientific subroutine library II (for C)
COLUMBUS	A program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc.
DALTON	An <i>ab initio</i> molecular toolbox for a manifold of properties
G98	GAUSSIAN98(A.11): <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	General atomic and molecular electronic structure system
HONDO8	HONDO8.4: <i>ab initio</i> MO calculation
LAPACK/VP	LAPACK
MM2	Molecular mechanics calculation by MM2 force field model
MOLCAS	MOLCAS4.1: quantum chemistry program package for Scientists
MOLPRO	MOLPRO2000.1: complete system of <i>ab initio</i> programs
ScaLAPACK	LAPACK (MPL parallel version)
SSL II/VP	Scientific subroutine library II
SSL II/VPP	Scientific subroutine library II (data parallel cersion)

\*\*\*\* SGI SGI2800/3800 VERSION \*\*\*\*

<u>PROGRAM</u>	<u>PROGRAM TITLE</u>
BLAS	Basis linear algebra subprograms
COLUMBUS	A program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc.
DALTON	An <i>ab initio</i> molecular toolbox for a manifold of properties
DIRAC	4-th component relativistic MO calculation program
G98	GAUSSIAN98(A.11): <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	General atomic and molecular electronic structure system
HONDO8	HONDO8.4: <i>ab initio</i> MO calculation
LAPACK	LAPACK
MOLPRO	MOLPRO2000.1: a complete system of <i>ab initio</i> programs

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

<u>PROGRAM</u>	<u>PROGRAM</u> <u>TITLE</u>
ASL	(SUBROUTINES) ASL/SX: Advanced Scientific Library/SX
BLAS	(SUBROUTINES) BLAS: Basic Linear Algebra Subprograms Rev.4.0
COLMBS2	COLUMBUS: modified prog. system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc
CRYSS88	CRYSTAL88: <i>Ab initio</i> LCAO-HF program for crystal systems
DALTON	An <i>ab initio</i> molecular toolbox for a manifold of properties
DIRAC	4-th component relativistic MO calculation program
G94	GAUSSIAN94: <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
G98	GAUSSIAN98(A.11): <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	General atomic and molecular electronic structure system
HONDO8	HONDO version 8.5: <i>ab initio</i> MO calculation
JAMOL4	<i>Ab initio</i> LCAO MO SCF calculation
JASON2	CASSCF calculation with large basis set
KOTO	KOTO: <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
LAPACK	LAPACK
MELD	Program for many electron description
MM2	Molecular mechanics calculation by MM2 force field model
MOPAC7	MOPAC version 7: a general molecular orbital package

\*\*\*\* HPC VERSION \*\*\*\*

<u>PROGRAM</u>	<u>PROGRAM</u> <u>TITLE</u>
ASL	(SUBROUTINES) ASL/SX: Advanced Scientific Library/SX
BLAS	(SUBROUTINES) BLAS: Basic Linear Algebra Subprograms Rev.4.0
COLMBUS2	COLUMBUS: modified program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc
CRYS88	CRYSTAL88: <i>ab initio</i> LCAO-HF program for crystal systems
DALTON	An <i>ab initio</i> molecular toolbox for a manifold of properties
G94	GAUSSIAN94: <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
G98	GAUSSIAN98: <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	General atomic and molecular electronic structure system
HONDO8	HONDO version 8.5: <i>ab initio</i> MO calculation
IMLS	(SUBROUTINES) International math. and stat. libraries
JAMOL4	<i>ab initio</i> LCAO MO SCF calculation
JASON2	CASSCF calculation with large basis set
KOTO	KOTO: <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
MELD	Program for many electron description
MM2	Molecular mechanics calculation by MM2 force field model

MOLPRO96	MOLPRO96.4: complete system of <i>ab initio</i> programs
MOLPRO98	MOLPRO98.1: complete system of <i>ab initio</i> programs
MOPAC7	MOPAC version 7:a general molecular orbital package

\*\*\*\* IBM SP2 VERSION \*\*\*\*

<u>PROGRAM</u>	<u>PROGRAM TITLE</u>
ASSIGN	Assign diagram for the assignment of vib-rot spectra
ATOMCI	Calculation of electronic states of atomic system
BAND1	Extended HUCKEL calculations of one-dimensional polymers
BC3	Vibrational and rotational spectroscopy
BGSTR3	BIGSTRN3: a general purpose empirical force field program
CNDOS	CNDO/S-CI: modified CNDO and CI method
COLUMBUS	COLUMBUS: A program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calculation
DALTON	An <i>ab initio</i> molecular toolbox for a manifold of properties
G92	GAUSSIAN92: <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
G94	GAUSSIAN94: <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
G94I	GAUSSIAN94: <i>ab initio</i> molecular orbital calculations (for LINDA)
G98	GAUSSIAN98: <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	General atomic and molecular electronic structure system(POE)
HONDO8	HONDO version 8.5: <i>ab initio</i> MO calculation
JAMOL4	<i>ab initio</i> LCAO MO SCF calculation
JASON2	CASSCF calculation with large basis set
MM2	Molecular mechanics calculation by MM2 force field model
MOLCAS	MOLCAS4.1: quantum chemistry program package for scientists
MOLPRO96	MOLPRO96.4: complete system of <i>ab initio</i> programs
MOPAC7	MOPAC version 7: A general molecular orbital package
MULLIKEN	Mulliken version 2.48
NUMPAC	(SUBROUTINES) NAGOYA university mathematical program package
PICMO	PICMO: The 2-D drawing system of molecular orbital and electron
SAC-CI96	SAC/SAC-CI program system for calculating ground and excited
SERIES	LOOMIS-WOOD diagram for finding line series
TCG4MPL	(SUBROUTINES) tcg4mpl:interface from TCGMSG4.0 to IBM POE MPL
TCGMSG	(SUBROUTINES) TCGMSG:message passing library for theo. chem.
UNICS3	Universal crystallographic computation program system
WIGNER	Magnitudes of 3-J and 6-J symbols

\*\*\*\* HITACHI SR8000 \*\*\*\*

<u>PROGRAM</u>	<u>PROGRAM TITLE</u>
AMBER5	AMBER5: Assisted Model Building with Energy Refinement
G98	GAUSSIAN98(A.11): <i>ab initio</i> molecular orbital calculations

\*\*\*\* MISC \*\*\*\*

<u>PROGRAM</u>	<u>PROGRAM TITLE</u>
CRYSTRUCT	Crystruct3/SD
MASPHYC	Material design system by means of comp.phys. and chem./Workbench

## 4.2 データベース開発状況

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、現在公開中である。また、1件のデータベース（QCLDB）については、開発の援助を行っている。

### (1) QCLDB（量子化学文献データベース）

（開発代表者）細矢治夫

総件数： 57,037 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、JAICI（日本化学情報協会）より世界中に販売されているとともに、一年ごとのデータが、Journal of Molecular Structure:THEOCHEM(ELSEVIER 社)より出版されている。計算科学研究センターでは、オンライン版と WWW 版の2種類の公開サービスを行っている。オンライン版の利用にはセンターの課題取得が必要である。WWW 版の利用は、原則利用制限なしで公開している (<http://qcldb.ims.ac.jp/>)。ただし、WWW 版 QCLDB では、著作権等の事情により、前年度版（51,432 件）までのデータで公開を行っている。

平成 13 年度に新規登録されたデータは、5,605 件である。

### (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、オンライン版と WWW 版を公開サービスしている。オンライン版の利用にはセンターの課題取得が必要であるが、WWW 版は原則利用制限なしで公開している (<http://qcldb.ims.ac.jp/fcdb/>)。

## 5. 平成 13 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	124	498	180,460	170,380	129,648	68,152,000	51,859,094
	協力研究	4	6	730	950	127	380,000	50,720
	所 内	19	91	66,625	59,963	25,685	23,985,200	10,273,949
生 理 学	所 内	1	9	3,970	3,573	2,844	1,429,200	1,137,523
合 計		148	604	251,785	234,866	158,308	93,946,400	63,321,286

(注) ここでの CPU 時間実績は、点数実績より逆算(点数/400=時間実績)を行って算出したものである。

### 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											kw/ 稼働時間
		VPP	cco2k0	cco2k1	cco2k2	cco2k31	cco3k1	SX-5	HPC	SP2	平均	合計	
平成 13 年 4 月	257,240	661.0	-	710.6	707.2	697.1	684.6	662.0	662.0	658.0	666.0	5,442.5	386.0
5 月	318,490	728.0	734.8	734.8	734.8	732.4	734.8	734.0	734.0	734.0	733.0	6,601.6	435.0
6 月	282,620	696.0	709.8	696.5	707.0	709.8	704.8	708.0	706.0	708.0	705.0	6,345.8	401.0
7 月	332,260	736.0	735.8	721.0	727.3	730.8	735.8	734.0	732.0	734.0	734.0	6,586.5	453.0
8 月	307,840	726.0	733.0	733.0	733.0	727.3	733.0	734.0	734.0	734.0	732.0	6,587.3	421.0
9 月	272,270	683.0	684.0	676.8	662.0	680.3	679.8	687.0	688.0	688.0	685.0	6,128.8	397.0
10 月	296,180	734.0	732.8	732.8	732.8	718.0	732.8	734.0	734.0	734.0	734.0	6,585.0	404.0
11 月	271,410	683.0	699.0	699.0	699.0	699.0	699.0	701.0	701.0	701.0	697.0	6,281.0	389.0
12 月	257,240	725.8	734.5	734.5	734.5	734.5	734.5	734.0	734.0	734.0	732.0	6,600.3	351.0
平成 14 年 1 月	312,950	733.2	734.5	734.5	717.7	715.0	734.5	734.0	734.0	734.0	734.0	6,571.4	426.0
2 月	260,140	651.9	663.5	663.5	663.5	663.5	656.0	662.0	662.0	662.0	659.0	5,947.9	395.0
3 月	289,510	734.3	731.7	731.7	731.7	731.7	730.2	734.0	734.0	734.0	733.0	6,593.3	395.0
合 計	3,458,150	8,492.2	7,893.3	8,568.6	8,550.4	8,539.2	8,559.6	8,558.0	8,555.0	8,555.0	8,544.0	76,271.3	405.0

## 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	VPP	*	cco2k0	*	cco2k1	*	cco2k2	*	cco2k31	*	cco3k1	*	SX-5	*	HPC	*	SP2	*	合計
平成 12 年 4 月	11,483	58	—	—	727	3	10,105	45	39,208	44	9,796	11	2,805	53	949	72	12,186	40	37,219	47
5 月	15,033	69	297	5	202	1	16,211	69	46,974	50	17,422	19	4,487	76	652	44	15,775	47	53,369	51
6 月	14,300	68	27	0	12,038	54	7,935	35	45,824	50	17,976	20	3,422	60	975	69	12,679	39	49,352	51
7 月	16,843	76	232	4	12,949	56	11,094	48	31,657	34	9,610	10	4,865	83	1,257	86	15,945	47	48,520	60
8 月	12,811	59	711	12	4,377	18	6,045	26	22,211	24	5,654	6	1,759	30	715	49	16,647	49	37,586	39
9 月	9,905	48	235	4	7,977	37	14,427	68	23,896	27	14,502	17	2,112	38	967	70	9,102	29	36,588	40
10 月	13,603	62	367	6	11,629	50	14,115	60	45,258	49	36,238	39	3,368	57	1,357	92	19,692	58	74,258	62
11 月	13,263	65	57	1	11,447	51	10,856	49	20,263	23	30,641	34	3,295	59	826	59	26,239	81	74,264	60
12 月	13,647	63	1,725	29	13,708	58	16,919	72	51,733	55	27,414	29	4,516	77	554	38	19,397	57	65,528	53
平成 13 年 1 月	16,247	74	1,742	30	16,884	72	19,352	84	77,369	85	50,874	54	4,787	82	628	43	20,523	61	93,059	63
2 月	14,427	74	13	0	10,432	49	15,335	72	35,121	41	29,130	35	4,732	89	603	46	18,186	60	67,078	61
3 月	15,414	70	6	0	10,978	47	10,956	47	19,500	21	8,293	9	3,950	67	208	14	13,443	40	41,308	40
合 計	166,976	66	5,492	8	113,308	41	153,350	56	459,013	42	257,549	24	44,098	64	9,691	57	199,814	51	678,128	52

※ CPU 時間の単位は時である。

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

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

※ @は、各マシンの CPU 稼働率の平均値である。

### 5.3.2 VPU 使用時間

年 月	VPU 時間							
	マシン名	VPP	*	SX-5	*	HPC	*	合計
平成 12 年 4 月	9,200	46	1,700	32	487	37	11,387	38
5 月	11,937	55	3,460	59	362	25	15,759	46
6 月	11,945	57	2,483	44	604	43	15,032	48
7 月	13,511	61	3,457	59	864	59	17,832	60
8 月	9,675	44	1,186	20	442	30	11,303	31
9 月	7,428	36	1,291	23	589	43	9,308	34
10 月	10,468	48	2,086	36	875	60	13,429	48
11 月	9,310	45	2,070	37	565	40	11,945	41
12 月	10,333	47	2,743	47	381	26	13,457	40
平成 13 年 1 月	11,605	53	1,944	33	393	27	13,942	38
2 月	10,205	52	1,895	36	169	13	12,269	34
3 月	8,878	40	1,367	23	62	4	10,307	22
合 計	234,495	49	25,682	37	5,793	34	155,970	40

VPU 時間の単位は時である。

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

※ @は、各マシンの VPU 稼働率の平均値である。

### 5.3.3 バッチジョブ処理件数

年 月	バッチジョブ処理件数									
	マシン名	VPP	cco2k1	cco2k2	cco2k31	cco3k1	SX-5	HPC	SP2	合計
平成12年4月		2,707	235	98	138	44	637	120	220	4,199
5月		3,514	483	155	168	279	1,059	274	293	6,225
6月		3,501	719	296	374	297	727	360	181	6,455
7月		4,410	673	317	233	273	753	301	169	7,129
8月		3,134	286	111	119	130	570	172	410	4,932
9月		2,711	509	417	405	525	722	138	751	6,178
10月		4,992	602	270	277	657	443	100	593	7,934
11月		3,459	594	497	183	576	472	84	312	6,177
12月		3,185	492	280	295	276	586	104	235	5,453
平成13年1月		3,827	480	171	281	90	867	185	209	6,110
2月		2,337	524	469	347	526	892	106	166	5,367
3月		2,764	324	340	183	225	463	92	130	4,521
合 計		40,541	5,921	3,421	3,003	3,898	8,191	2,036	3,669	70,680



## 5.4 クラス別 CPU 使用時間

### 5.4.1 VPP5000

VPP	V1	V2	V3	V4	V5	VP6	VC	VP23	合 計	ETC	総合計
平成 12 年 4 月	32:51:31	1066:50:26	1110:50:15	3040:46:23	4033:38:21	2187:31:42	0:00:00	1:04:08	11473:32:46	9:35:51	11483:08:37
5 月	86:39:30	1326:26:00	1230:12:04	3174:55:24	6197:48:43	3008:04:42	0:00:00	0:00:33	15024:06:56	9:03:03	15033:09:59
6 月	129:08:32	1457:05:48	1240:04:11	3304:08:23	5025:49:13	3133:45:18	0:00:00	0:18:07	14290:19:32	10:01:57	14300:21:29
7 月	92:05:09	1558:59:57	1339:43:58	4493:38:50	6630:28:03	2718:04:25	0:00:00	0:02:10	16833:02:32	9:38:46	16842:41:18
8 月	202:13:09	1070:33:49	1193:15:31	3248:13:54	5679:55:59	1396:12:11	0:00:00	10:14:00	12800:38:33	9:54:05	12810:32:38
9 月	120:33:22	1151:30:18	1281:41:31	2411:17:29	4162:03:28	769:04:05	0:00:00	0:02:55	9896:13:08	8:48:37	9905:01:45
10 月	228:52:23	1408:35:08	1395:13:46	4091:15:17	5546:53:07	923:19:20	0:00:00	0:00:00	13594:9:1	8:47:27	13602:56:28
11 月	173:47:21	1378:03:39	1227:00:57	3749:17:38	5545:09:31	1178:57:43	0:00:00	0:05:15	13252:22:4	10:26:10	13262:48:14
12 月	205:01:05	1457:27:02	1222:28:42	3988:38:19	5583:58:46	1178:02:04	0:00:00	1:34:18	13637:10:16	9:42:30	13646:52:46
平成 13 年 1 月	173:26:06	1560:22:21	1386:45:08	4976:45:27	6778:50:32	1362:02:05	0:00:00	0:00:00	16238:11:39	8:48:54	16247:00:33
2 月	276:41:38	1398:04:39	1079:06:10	4459:27:32	6108:54:20	1068:00:25	0:00:00	28:02:52	14418:17:36	8:44:23	14427:01:59
3 月	118:58:00	1185:20:02	1215:39:10	3064:38:15	5824:29:44	3995:38:54	0:00:00	0:00:00	15404:54:5	8:53:52	15413:47:57
合 計	1840:17:46	16019:29:9	14922:1:23	44003:2:51	67117:59:47	22918:42:54	0:00:00	41:24:18	166862:58:8	112:25:35	166975:23:43

### 5.4.2 SGI2800, Origin3800

O2K	G1	G2	G3	G4	G2S	G5S	合 計	ETC	総合計
平成 12 年 4 月	3311:45:10	1657:31:11	10565:15:18	3581:08:20	987:26:03	0:00:00	20103:06:02	39813:19:58	59916:26:00
5 月	7030:58:06	4528:04:00	26026:00:46	0:12:20	20443:55:11	0:00:00	58029:10:23	23076:14:37	81105:25:00
6 月	10013:2:39	5145:36:11	25789:35:45	4384:47:35	17326:49:15	0:00:00	62659:51:25	21139:46:35	83799:38:00
7 月	11462:59:36	8758:50:07	22028:02:35	2679:20:34	10347:42:20	0:00:00	55276:55:12	10265:10:48	65542:6:00
8 月	3645:37:00	4517:36:00	9067:04:25	0:00:04	5240:51:14	0:00:00	22471:08:43	16487:26:17	38958:45:00
9 月	7117:45:13	9393:29:25	15426:45:26	1107:56:33	11113:59:24	0:00:00	44159:56:1	16876:39:59	61036:36:00
10 月	11097:48:23	10336:28:56	31579:52:56	111:11:57	39265:34:37	0:00:00	92390:56:49	15216:59:11	107607:56:00
11 月	10824:28:49	9397:52:15	17722:31:53	175:13:35	34626: 9:45	0:00:00	72746:16:17	518:52:43	73265:9:00
12 月	8532:40:15	11282:39:48	20833:37:04	16704:35:50	17471:32:14	0:00:00	74825:5:11	36673:37:49	111498:43:00
平成 13 年 1 月	15891:11:35	15891:11:35	37063:04:38	28119:08:14	1811:12:13	0:00:00	92487:45:55	73732:0:5	166219:46:00
2 月	8347:48:55	7886:32:49	21967:48:21	251:09:53	26693:21:11	0:00:00	65146:41:9	24882:10:51	90028:52:00
3 月	10407:23:41	7878:17:30	13212:12:54	0:00:14	7275:30:25	0:00:00	38773:24:44	10960:15:16	49733:40:00
合 計	107683:29:22	90386:7:27	251281:52:1	57114:45:9	192604:3:52	0:00:00	699070:17:51	289642:34:9	988712:52:00

### 5.4.3 SX-5

SX-5	H05S	H05M	H05L	H1S	H1L	H2S	H2L	H4S	H8	合 計	ETC	総合計
平成 12 年 4 月	0:03:52	12:00:20	44:16:02	70:59:10	130:42:55	99:55:00	243:02:46	0:00:00	0:00:00	601:00:05	1099:07:02	1700:07:07
5 月	5:36:23	27:23:27	96:20:34	81:04:05	179:41:35	228:00:29	453:16:37	0:00:00	0:00:00	1071:23:10	2388:13:56	3459:37:06
6 月	4:20:00	79:32:05	425:21:12	65:07:51	243:00:26	119:53:02	256:23:18	0:00:00	0:00:00	1193:37:54	1288:55:20	2482:33:14
7 月	5:23:34	109:00:34	286:34:49	134:06:14	583:11:19	40:13:13	438:17:36	0:00:00	0:00:00	1596:47:19	1860:08:47	3456:56:06
8 月	1:28:14	62:51:41	102:16:19	50:25:24	211:16:39	19:43:01	90:09:43	0:00:00	0:00:00	538:11:01	648:03:50	1186:14:51
9 月	5:00:24	17:07:21	100:47:43	183:50:27	149:40:03	21:04:50	39:35:59	0:00:00	0:00:00	517:06:47	773:28:48	1290:35:35
10 月	29:56:20	70:03:44	220:51:47	73:00:09	329:08:03	127:25:28	127:25:28	0:00:00	0:00:00	977:50:59	1107:41:20	2085:32:19
11 月	3:29:01	10:47:49	203:07:07	70:50:39	388:16:18	118:08:38	123:14:46	0:00:00	0:00:00	917:54:18	1152:04:39	2069:58:57
12 月	15:44:26	50:43:43	262:08:08	80:02:52	419:58:56	62:00:18	229:49:22	0:00:00	0:00:00	1120:27:45	1622:47:27	2743:15:12
平成 13 年 1 月	10:28:45	32:38:32	190:23:25	61:07:29	285:01:34	57:03:56	189:36:54	76:01:23	0:00:00	902:21:58	1041:12:16	1943:34:14
2 月	72:42:18	182:00:02	366:20:16	156:11:59	744:41:19	105:51:56	225:51:56	34:37:03	0:00:00	1888:16:49	6:47:22	1895:04:11
3 月	9:46:46	94:33:40	237:11:41	58:21:09	478:56:59	69:09:50	375:34:10	42:56:21	0:00:00	1366:30:36	0:01:13	1366:31:49
合 計	164:00:03	748:42:58	2535:39:03	1085:07:28	4143:36:06	1058:29:41	2792:18:35	153:34:47	0:00:00	12691:28:41	12988:32:00	25680:0:41

#### 5.4.4 HPC

HPC	W1	W2	合 計	ETC	総合計
平成 12 年 4 月	91:48:32	25:14:13	117:02:45	832:03:29	949:06:14
5 月	103:12:05	167:51:49	271:03:54	381:24:15	652:28:09
6 月	142:43:19	180:05:20	322:48:39	652:30:11	975:18:50
7 月	111:04:45	189:49:11	300:53:56	955:50:35	1256:44:31
8 月	80:26:00	110:16:35	190:42:35	524:28:21	715:10:56
9 月	138:03:06	172:38:32	310:41:38	656:47:40	967:29:18
10 月	89:41:13	118:25:20	208:06:33	1149:20:26	1357:26:59
11 月	41:44:07	55:02:07	96:46:14	729:06:03	825:52:17
12 月	34:02:29	71:20:49	105:23:18	448:50:31	554:13:49
平成 13 年 1 月	259:31:59	348:25:15	607:57:14	19:45:05	627:42:19
2 月	57:19:31	536:44:35	594:04:06	8:50:29	602:54:35
3 月	15:07:15	183:01:43	198:08:58	10:03:01	208:11:59
合 計	1164:44:21	2158:55:29	3323:39:50	6369:00:06	9692:39:56

#### 5.4.5 SP2

SP2	P1	P2	P3	総合計
平成 12 年 4 月	5836:21:55	819:34:32	5530:21:12	12186:17:39
5 月	6688:40:37	1538:41:28	7547:16:03	15774:38:08
6 月	3465:09:02	1860:48:35	7352:32:47	12678:30:24
7 月	5532:25:14	3182:32:06	7230:08:04	15945:05:24
8 月	9596:15:38	1803:24:00	5247:07:19	16646:46:57
9 月	2757:33:35	117:40:21	1142:49:36	9101:44:18
10 月	9093:55:46	1075:49:57	8743:38:14	19692:8:17
11 月	15590:28:58	2839:01:47	7809:13:01	26238:43:46
12 月	9039:19:40	2123:45:57	8234:03:59	19397:9:36
平成 13 年 1 月	9962:52:02	2406:22:17	8153:48:52	20523:3:11
2 月	7902:51:26	3137:43:08	7145:51:52	18186:26:26
3 月	3433:10:29	3271:00:04	6738:51:19	13443:1:52
合 計	88899:4:22	25913:18:8	85001:13:28	199813:35:58

## 5.5 クラス別 VPU 使用時間

### 5.5.1 VPP5000

VPP	V1	V2	V3	V4	V5	VP6	VC	VP23	合 計	ETC	総合計
平成 12 年 4 月	25:51:13	937:12:22	1027:10:19	2253:56:44	3001:18:05	1953:46:12	0:00:00	0:30:24	9199:45:19	0:37:38	9200:22:57
5 月	50:51:49	1116:00:53	1083:47:24	2470:13:26	4489:08:35	2721:14:42	0:00:00	0:00:13	11931:17:02	5:58:12	11937:15:14
6 月	92:40:10	1189:40:56	1021:57:22	2670:40:37	4134:24:43	2825:08:37	0:00:00	0:08:25	11934:40:50	10:08:17	11944:49:07
7 月	48:41:46	1281:11:25	1096:38:55	3396:53:40	5072:47:46	2607:53:37	0:00:00	0:00:55	13504:08:04	6:57:25	13511:05:29
8 月	120:14:19	799:29:37	939:44:45	2322:07:08	4192:39:11	1292:21:15	0:00:00	7:04:09	9673:40:24	1:03:30	9674:43:54
9 月	65:34:09	839:46:31	969:43:50	1769:34:49	3174:04:13	608:36:06	0:00:00	0:01:05	7427:20:43	0:53:18	7428:14:01
10 月	145:24:48	1067:05:55	1140:19:00	3197:56:12	4268:15:12	636:47:32	0:00:00	0:00:00	10455:48:39	12:09:33	10467:58:12
11 月	115:47:59	1015:39:59	953:02:58	2632:06:09	3664:59:04	922:59:02	0:00:00	0:02:22	9304:37:33	5:37:25	9310:14:58
12 月	144:10:19	1109:25:37	1050:26:20	2873:52:48	4092:01:37	1062:32:11	0:00:00	0:44:30	10333:13:22	0:04:38	10333:18:0
平成 13 年 1 月	96:50:45	1097:35:23	1080:03:01	3320:49:54	4685:54:41	1323:13:43	0:00:00	0:00:00	11604:27:27	0:20:52	11604:48:19
2 月	207:25:51	913:08:07	857:40:12	3131:00:13	4317:02:46	755:20:14	0:00:00	22:44:03	10204:21:26	0:11:18	10204:32:44
3 月	83:23:50	706:07:44	874:26:54	2461:12:27	4403:11:27	349:57:13	0:00:00	0:00:00	8878:19:35	0:00:00	8878:19:35
合 計	1196:56:58	12072:24:29	12095:01:00	32500:24:7	49495:47:20	17059:50:24	0:00:00	31:16:06	124451:40:24	44:02:06	124495:42:30

### 5.5.2 SX-5

SX-5	H05S	H05M	H05L	H1S	H1L	H2S	H2L	H4	H8	合 計	ETC	総合計
平成 12 年 4 月	0:03:52	12:00:20	44:16:02	70:59:10	130:42:55	99:55:00	243:02:46	0:00:00	0:00:00	601:00:05	1099:07:02	1700:07:07
5 月	5:36:23	27:23:27	96:20:34	81:04:05	179:41:35	228:00:29	453:16:37	0:00:00	0:00:00	1071:23:10	2388:13:56	3459:37:06
6 月	4:20:00	79:32:05	425:21:12	65:07:51	243:00:26	119:53:02	256:23:18	0:00:00	0:00:00	1193:37:54	1288:55:20	2482:33:14
7 月	5:23:34	109:00:34	286:34:49	134:06:14	583:11:19	40:13:13	438:17:36	0:00:00	0:00:00	1596:47:19	1860:08:47	3456:56:06
8 月	1:28:14	62:51:41	102:16:19	50:25:24	211:16:39	19:43:01	90:09:43	0:00:00	0:00:00	538:11:01	648:03:50	1186:14:51
9 月	5:00:24	17:07:21	100:47:43	183:50:27	149:40:03	21:04:50	39:35:59	0:00:00	0:00:00	517:06:47	773:28:48	1290:35:35
10 月	29:56:20	70:03:44	220:51:47	73:00:09	329:08:03	127:25:28	127:25:28	0:00:00	0:00:00	977:50:59	1107:41:20	2085:32:19
11 月	3:29:01	10:47:49	203:07:07	70:50:39	388:16:18	118:08:38	123:14:46	0:00:00	0:00:00	917:54:18	1152:04:39	2069:58:57
12 月	15:44:26	50:43:43	262:08:08	80:02:52	419:58:56	62:00:18	229:49:22	0:00:00	0:00:00	1120:27:45	1622:47:27	2743:15:12
平成 13 年 1 月	10:28:45	32:38:32	190:23:25	61:07:29	285:01:34	57:03:56	189:36:54	76:01:23	0:00:00	902:21:58	1041:12:16	1943:34:14
2 月	72:42:18	182:00:02	366:20:16	156:11:59	744:41:19	105:51:56	225:51:56	34:37:03	0:00:00	1888:16:49	6:47:22	1895:04:11
3 月	9:46:46	94:33:40	237:11:41	58:21:09	478:56:59	69:09:50	375:34:10	42:56:21	0:00:00	1366:30:36	0:01:13	1366:31:49
合 計	164:00:03	748:42:58	2535:39:03	1085:07:28	4143:36:06	1058:29:41	2792:18:35	153:34:47	0:00:00	12691:28:41	12988:32:00	25680:0:41

### 5.5.3 HPC

HPC	W1	W2	合 計	ETC	総合計
平成 12 年 4 月	207:41:00	279:20:48	487:01:48	(-) 0:00:26	487:01:22
5 月	135:50:17	225:39:48	361:30:05	(-) 0:00:04	361:30:01
6 月	114:24:24	472:11:20	586:35:44	17:39:56	604:15:40
7 月	128:50:11	676:47:44	805:37:55	58:14:48	863:52:43
8 月	107:00:28	334:49:44	441:50:12	0:13:39	442:03:51
9 月	148:13:26	427:05:53	575:19:19	14:08:44	589:28:03
10 月	294:05:27	535:26:35	829:32:02	45:57:44	875:29:46
11 月	128:25:35	417:08:42	545:34:17	19:33:07	565:07:24
12 月	58:20:59	322:27:56	380:48:55	0:02:12	380:51:07
平成 13 年 1 月	166:08:50	219:10:39	385:19:29	7:11:24	392:30:53
2 月	35:08:14	134:08:57	169:17:11	0:00:00	169:17:11
3 月	9:21:42	52:39:28	62:01:10	0:00:01	62:01:11
合 計	1533:30:33	4096:57:34	5630:28:07	163:01:05	5793:29:12

## 5.6 ジョブ処理件数

### 5.6.1 VPP5000

VPP	V1	V2	V3	V4	V5	VP6	VC	VP23	合計	ETC	総合計
平成 12年 4月	330	432	117	475	315	84	0	5	1,758	949	2,707
5月	416	574	174	722	547	91	0	1	2,525	989	3,514
6月	355	612	205	811	607	82	0	1	2,673	828	3,501
7月	374	822	167	924	660	87	0	11	3,045	1,365	4,410
8月	435	454	175	604	580	53	0	19	2,320	814	3,134
9月	371	410	141	545	429	74	0	0	1,970	741	2,711
10月	404	777	121	1,259	1,030	71	0	0	3,662	1,330	4,992
11月	330	435	127	698	532	112	0	2	2,236	1,223	3,459
12月	343	448	134	711	569	80	0	1	2,286	899	3,185
平成 13年 1月	516	591	166	862	651	53	0	0	2,839	988	3,827
2月	403	556	164	688	458	36	0	32	2,337	0	2,337
3月	409	751	216	922	374	92	0	0	2,764	0	2,764
合計	4,686	6,862	1,907	9,221	6,752	915	0	72	30,415	10,126	40,541

### 5.6.2 SGI2800, Origin3800

O2K	G1	G2	G3	G4	G2S	G5S	合計	ETC	総合計
平成 12年 4月	235	98	90	48	44	0	515	0	515
5月	483	155	129	39	279	0	1,085	0	1,085
6月	719	296	261	113	297	0	1,686	0	1,686
7月	673	317	206	27	273	0	1,496	0	1,496
8月	286	111	115	4	130	0	646	0	646
9月	509	417	319	86	525	0	1,856	0	1,856
10月	602	270	255	22	657	0	1,806	0	1,806
11月	594	497	163	20	576	0	1,850	0	1,850
12月	492	280	239	56	276	0	1,343	0	1,343
平成 13年 1月	480	171	209	72	90	0	1,022	0	1,022
2月	524	469	289	58	526	0	1,866	0	1,866
3月	324	340	161	22	225	0	1,072	0	1,072
合計	5,921	3,421	2,436	567	3,898	0	16,243	0	16,243

### 5.6.3 SX-5

SX-5	H05S	H05M	H05L	H1S	H1L	H2S	H2L	H4S	H8	合計	ETC	総合計
平成 12年 4月	121	40	51	32	90	154	107	42	0	637	0	637
5月	232	65	82	109	139	276	123	33	0	1,059	0	1,059
6月	56	113	30	72	92	173	138	53	0	727	0	727
7月	94	233	33	77	71	96	101	48	0	753	0	753
8月	56	234	46	31	57	70	35	41	0	570	0	570
9月	92	80	74	134	108	105	31	98	0	722	0	722
10月	60	26	21	48	49	69	28	142	0	443	0	443
11月	70	56	21	57	51	74	74	69	0	472	0	472
12月	60	139	28	73	75	65	80	66	0	586	0	586
平成 13年 1月	87	112	63	117	153	82	152	101	0	867	0	867
2月	190	128	66	137	94	149	92	36	0	892	0	892
3月	16	46	52	91	76	38	110	34	0	463	0	463
合計	1,134	1,272	567	978	1,055	1,351	1,071	763	0	8,191	0	8,191

### 5.6.4 HPC

HPC	W1	W2	合計	ETC	総合計
平成 12年 4月	102	18	120	0	120
5月	171	103	274	0	274
6月	267	93	360	0	360
7月	224	77	301	0	301
8月	87	85	172	0	172
9月	74	64	138	0	138
10月	55	45	100	0	100
11月	48	36	84	0	84
12月	81	23	104	0	104
平成 13年 1月	115	70	185	0	185
2月	54	52	106	0	106
3月	59	33	92	0	92
合計	1,337	699	2,036	0	2,036

### 5.6.5 SP2

SP2	P1	P2	P3	合計	ETC	総合計
平成 12年 4月	55	104	61	220	0	220
5月	99	122	72	293	0	293
6月	109	32	40	181	0	181
7月	66	52	51	169	0	169
8月	41	262	107	410	0	410
9月	116	544	91	751	0	751
10月	120	406	67	593	0	593
11月	54	168	90	312	0	312
12月	88	91	56	235	0	235
平成 13年 1月	63	81	65	209	0	209
2月	79	41	46	166	0	166
3月	81	20	29	130	0	130
合計	971	1,923	775	3,669	0	3,669

## 6. 資料

### 6.1 計算科学研究センター運営委員

平田 文男	計算科学研究センター長 分子科学研究所理論研究系 分子基礎理論第四研究部門	教授
岡崎 進	計算科学研究センター	教授
青柳 睦	計算科学研究センター	助教授
永瀬 茂	分子科学研究所理論研究系 分子基礎理論第一研究部門	教授
岡本 祐幸	分子科学研究所理論研究系 分子基礎理論第一研究部門	助教授
大隅 良典	基礎生物学研究所細胞生物学研究系 細胞内エネルギー変換機構研究部門	教授
堀内 嵩	基礎生物学研究所形質統御実験施設 遺伝子発現統御第二研究部門	教授
永山 國昭	生理学研究所分子生理研究系 超微小形態生理研究部門	教授
定藤 規弘	生理学研究所大脳皮質機能研究系 心理生理学研究部門	教授
齋藤 晋	東京工業大学 大学院理工学研究科	教授
相田 美砂子	広島大学 理学部	教授
金久 實	京都大学化学研究所 機構共通研究施設 統合バイオサイエンスセンター客員	教授
中村 春木	大阪大学 蛋白研究所附属生体分子解析センター	教授

## 6.2 計算科学研究センター職員

平田 文男	センター長(併任)
岡崎 進	教授
青柳 睦	助教授 (2002年4月1日より併任教授)
南部 伸孝	助手
高見 利也	助手
大野 人侍	助手
内山 郁夫	助手
高橋 卓也	助手
真木 淳	非常勤研究員
西本 史雄	技官 (班長) (2002年6月30日付退職)
水谷 文保	技官(係長)
南野 智	技官
手島 史綱	技官
内藤 茂樹	技官
加納 聖子	事務補佐員
明石 志保子	事務補佐員
禿子 瞳	研究支援推進員

## 6.3 応用プログラム相談員一覧

平成13年度の応用プログラム相談員は以下の2名である。

日野 朋子	総研大大学院生	平成13年	8月	—	平成14年	3月
日野 理	総研大大学院生	平成13年	8月	—	平成14年	3月

## 6.4 利用者数とCPU時間の推移

	53年度	54年度	55年度	56年度	57年度	58年度
計算機システム	M-180 2台	M-180 2台	M-200H M-180	M-200H M-180  疎結合	M-200H 2台  疎結合	同57年度
運 転 方 式	3カ月 有人	9月から無人	200H 無人 180 有人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	63	176	192	183	198	199
利 用 者 数						
機 構 内 <sup>a</sup>	48	70	69	91	94	102
機 構 外	107	254	325	330	375	426
合 計	155	334	394	421	469	528
稼働時間(時間)	1,087	6,071	6,553	6,721	6,305	6,170
CPU時間利用申請(時間)	(200H基準)					(200H基準)
申 請	929	4,666	11,033	10,230	11,938	13,053
許 可	816	3,171	7,427	8,306	10,141	10,091
総使用CPU時間 <sup>c</sup> (時間)	509	2,405	5,405	6,320	8,205	8,489
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>	41,521	155,980	183,840	214,847	239,771	236,519
ライブラリプログラム 新規登録数	0	20	43	20	699	10
データベース新規登録数	0	2	0	0	3	3
センター使用論文数 <sup>d</sup>	0	24	93	118	190	185

	59年度	60年度	61年度	62年度	63年度	平成元年度
計算機システム	同57年度	(~11月) 同57年度 (1月~) M-680H S-810/10	M-680H S-8210/10 疎結合	M-680H (~1月) S-810/10 (2月~) S-820/80 疎結合	M-680H S-820/80  疎結合	同63年度
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	207	226	234	213	231	239
利 用 者 数						
機 構 内 <sup>a</sup>	110	130	141	143	137	146
機 構 外	446	464	496	520	515	544
合 計	556	594	637	663	652	690
稼働時間(時間)	6,316	6,016	6,368	6,444	6,091	5,694
CPU時間利用申請(時間)				(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>
申 請	14,799	15,536	33,832/8,458*	9,880	12,439	14,694
許 可	10,768	12,080	28,184/7,046*	7,978	10,418	12,347
総使用CPU時間 <sup>c</sup> (時間)	8,508	12,770	20,092/5,023e*	6,624	7,872	8,300
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>	226,727	274,431	289,915	278,956	278,104	253,418
ライブラリプログラム 新規登録数	118	160	39	4	7	3
データベース新規登録数	0	1	0	1	0	0
センター使用論文数 <sup>d</sup>	202	206	237	223	211	218

	平成2年度	平成3年度	平成4年度	平成5年度	平成6年度	平成7年度
計算機システム	同63年度	同63年度	同63年度	M-680H S-820/80(～12月) SX-3/34R(1月～)	M-680H(～11月) SX-3/34R HSP(1月～) SP2(1月～)	SX-3/34R HSP(1月～) SP2(1月～)
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	256	272	271	225	222	210
利 用 者 数						
機 構 内 <sup>a</sup>	140	158	143	127	139	129
機 構 外	593	623	661	589	601	597
合 計	733	781	804	716	740	726
稼 働 時 間(時間)	6,768	6,749	7,156	(M-680H系) 6,689 (SX-3/34R) 2,101	(M-680H系) 5,722 (SX-3/34R) 8,506 (HSP) 2,133 (SP2) 2,022	(SX-3/34R) 8,352 (HSP) 8,293 (SP2) 8,333
CPU時間利用申請(時間)	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(HSP基準) <sup>b</sup>
申 請	16,622	20,606	21,153	18,311	21,781	40,358
許 可	14,626	17,846	19,110	16,027	19,393	37,446
総使用CPU時間 <sup>c</sup> (時間)	11,975	11,874	12,491	16,306	24,781	156,076
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>	295,503	346,987	297,638	227,650	107,194	84,102
ライブラリプログラム 新規登録数	0	0	0	10	10	7
データベース新規登録数	0	0	0	1	1	1
センター使用論文数 <sup>d</sup>	248	229	282	267	306	275

	平成8年度	平成9年度	平成10年度	平成11年度	平成12年度	平成13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
運 転 方 式	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
利 用 者 数						
機 構 内 <sup>a</sup>	139	126	138	125	101	100
機 構 外	574	609	566	539	534	504
合 計	713	735	704	664	635	604
稼 働 時 間(時間)	(SX-3/34R) 8,425 (HSP) 8,431 (SP2) 8,336 (HPC) 4,872	(SX-3/34R) 8,494 (HSP) 8,513 (SP2) 8,515 (HPC) 8,501 (SR2201) 3,561	(SX-3/34R) 8,579 (HSP) 8,587 (SP2) 8,574 (HPC) 8,590 (SR2201) 8,694 (Origin2000) 3,570	(SX-3/34R) 6,365 (SX5) 8,301 (SP2) 8,375 (HPC) 8,363 (SR2201) 8,381 (Origin2000) 8,380	(VPP5000) 8,234 (SGI2800系) 8,319 (SX5) 8,496 (SP2) 8,492 (HPC) 8,490 (VPP5000) 8,234	(VPP5000) 8,492 (SGI2800系) 8,422 (SX5) 8,558 (SP2) 8,555 (HPC) 8,555 (VPP5000) 8,492
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>
申 請	58,425	73,910	76,804	97,788	249,405	251,785
許 可	51,499	58,650	67,159	79,964	209,393	234,866
総使用CPU時間 <sup>c</sup> (時間)	207,790	262,365	273,575	239,671	619,294	678,128
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>	70,308	51,738	45,173	40,697	58,685	70,680
ライブラリプログラム 新規登録数	15	3	13	14	18	4
データベース新規登録数	0	0	0	0	0	0
センター使用論文数 <sup>d</sup>	279	331	347	391	302	302

a: 機構内利用者にはアイドル課題のための重複を含めない。

b: 申請および使用の詳細については、5.1を参照。

c: ここでの値はCPU時間、件数ともライブラリ開発、センター業務使用分などすべてを含む。

d: センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたもの。

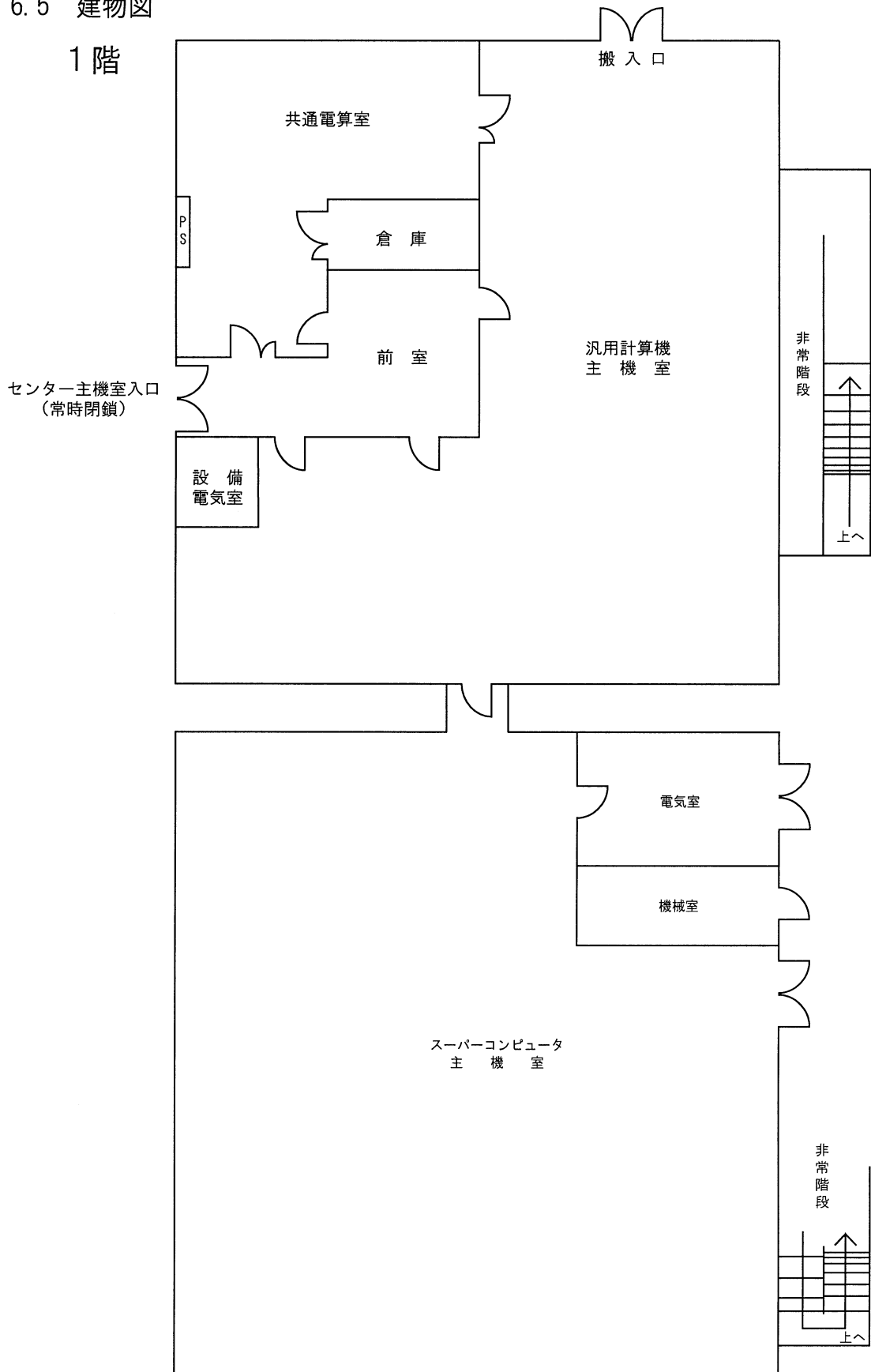
e: S-810、S-820、SX-3、SX-5、VPPのCPU時間については、スカラー時間とベクトル時間の単純な和である。

\*: 下段はM-680H基準

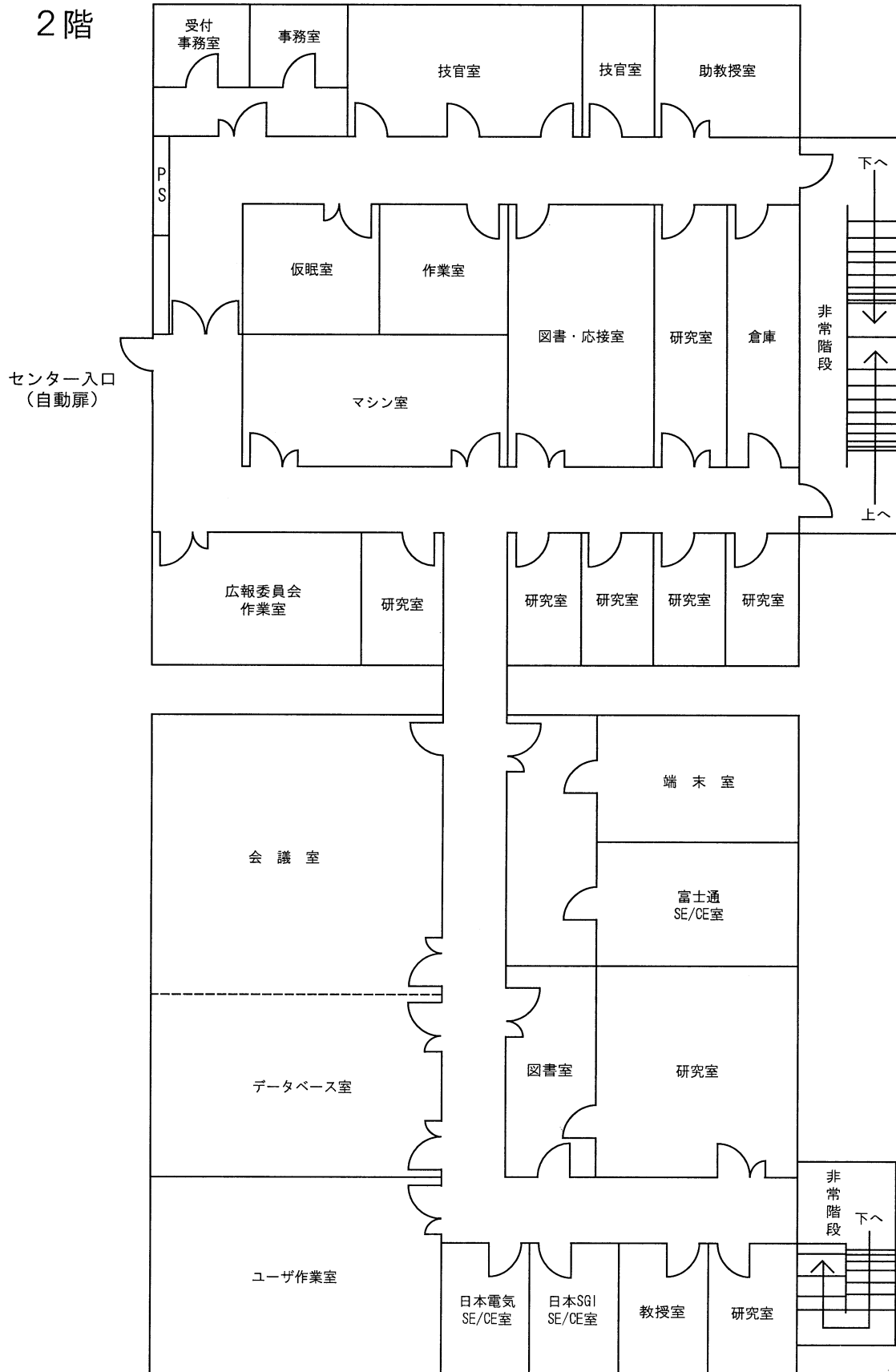


6.5 建物図

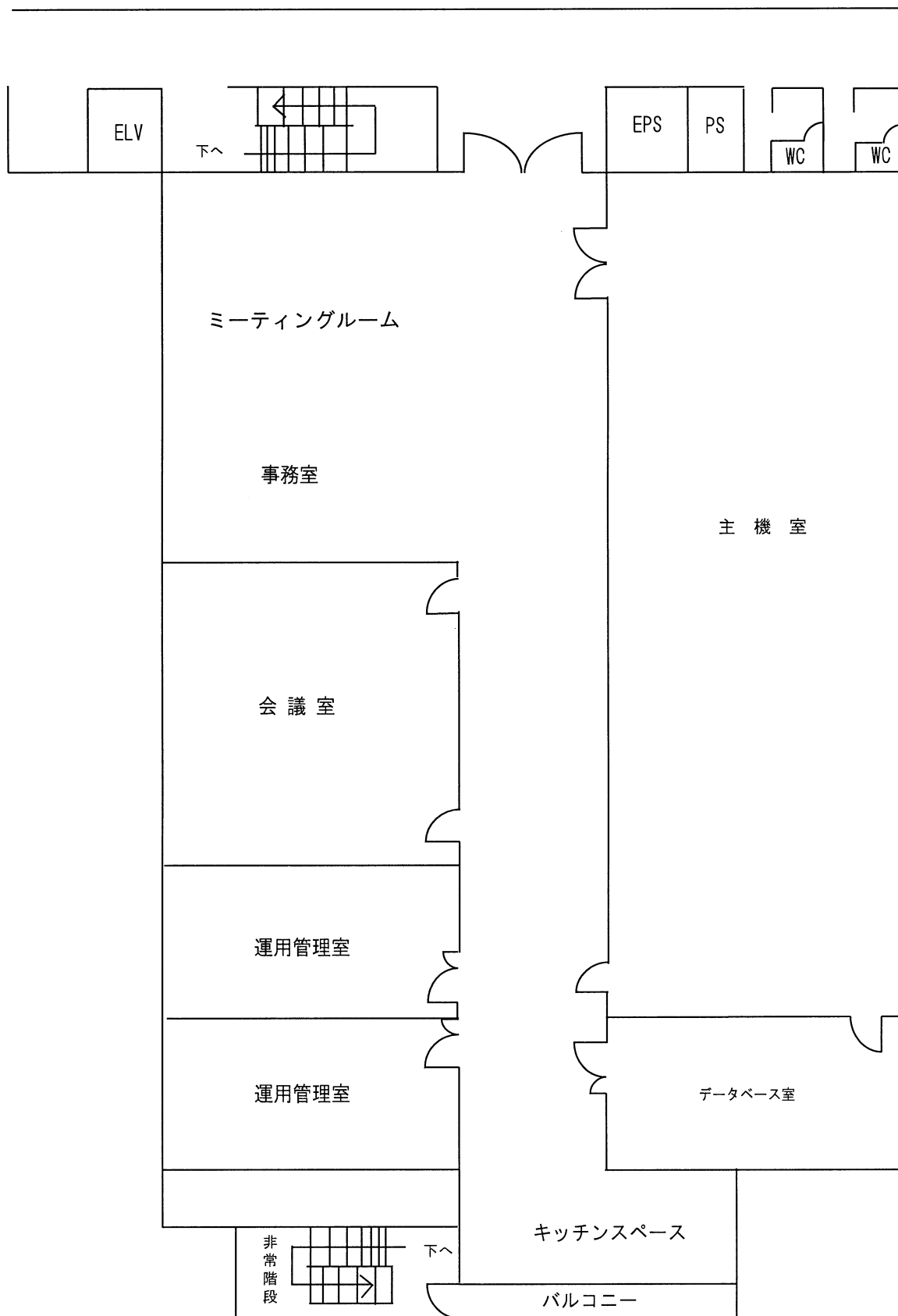
1階



2階



E地区 山手1号館  
2階



## 6.6 マニュアル一覧

### 6.6.1 マニュアル一覧と購入方法

よく利用されるマニュアルには以下のようなものがある。

センターではセンター内端末室においてあるが、個人での購入を希望される時のお問い合わせ先は次のとおりである。

#### <VPP5000 用マニュアルの購入にあたってのお問い合わせ先>

〒460-8585 名古屋市中区錦 1 丁目 10 番 1 号

富士通株式会社 東海支社第一公共営業部

担 当 : 岡本、町田

E-mail : fj0657fz@tm.fujitsu.co.jp, fj3707fm@tm.fujitsu.co.jp

電 話 : 052-239-1110

F A X : 052-239-1154

#### <SGI2800, Origin3800 用マニュアルの購入にあたってのお問い合わせ先>

〒530-0001 大阪市北区梅田 2-5-25 ハービス OSAKA11 階

日本 S G I 株式会社

担 当 : 山下晶

E-mail : ak\_Yamashita@sgi.co.jp

電 話 : 06-6343-6702

F A X : 06-6343-6713

#### <SX-5 および HPC 用マニュアルの購入にあたってのお問い合わせ先>

〒460-8525 名古屋市中区錦一丁目 17-1 NEC 中部ビル

日本電気株式会社中部支社官公営業部

担 当 : 村田

電 話 : 052-222-2121

F A X : 052-222-2129

#### <SP2 用マニュアルの購入にあたってのお問い合わせ先>

〒460 名古屋市中区錦 3 丁目 1 番 1 号 十六銀行名古屋ビル

日本アイ・ビーエム株式会社 中部システム事業本部第二営業部

担 当 : 後藤

電 話 : 052-954-3127

### 6.6.2 VPP5000 用 (日本語) マニュアル

- (1) UXP/V V20 Online Manual (日本語版)
- (2) UXP/V Fortran 使用手引書 V20 用
- (3) UXP/VFortran メッセージ説明書 V20 用
- (4) UXP/V Fortran プログラミング ハンドブック V20 用
- (5) UXP/V Fortran/VPP 使用手引書 V20 用
- (6) UXP/V VPP Fortran プログラミング ハンドブック V20 用
- (7) UXP/V HPF 使用手引書 V20L20 用
- (8) UXP/V アナライザ使用手引書 V20 用
- (9) UXP/V C 言語使用手引書 V20 用
- (10) UXP/V C++ 使用手引書 V20 用
- (11) C-SSL II/VP オンラインマニュアル
- (12) UXP/V DPCE 使用手引書 V20 用
- (13) UXP/V MPI 使用手引書 V20 用
- (14) FUJITSU MPTools 使用手引書
- (15) UXP/V PVM 使用手引書 V20 用
- (16) BLAS/VP LAPACK/VP ScaLAPACK オンラインマニュアル
- (17) SSL II/VP オンラインマニュアル
- (18) SSL II/VPP オンラインマニュアル
- (19) UXP/V TotalView 使用手引書 V20 用
- (20) UXP/V ネットワークキューイングシステム V20 用
- (21) UXP/V ネットワークキューイングシステム-JM V20 用
- (22) UXP/V ネットワークキューイングシステム-JS V20 用

### 6.6.3 VPP5000 用 (English) マニュアル

- (1) UXP/V V20 Online Manual (English Version)
- (2) UXP/V Fortran User's Guide V20
- (3) UXP/V Fortran Messages V20
- (4) UXP/V Fortran Programming Handbook V20
- (5) UXP/V Fortran/VPP User's Guide V20

- (6) UXP/V VPP Fortran Programming Handbook V20
- (7) UXP/V HPF User's Guide V20
- (8) UXP/V ANALYZER User's Guide V20
- (9) UXP/V C Language User's Guide V20
- (10) UXP/V C++ User's Guide V20
- (11) C-SSL II/VP Online Documents
- (12) UXP/V DPCE User's Guide V20
- (13) UXP/V MPI User's Guide V20
- (14) FUJITSU MPTools User's Guide
- (15) UXP/V PVM User's Guide V20
- (16) BLAS/VP LAPACK/VP ScaLAPACK Online Documents
- (17) SSL II/VP Online Documents
- (18) SSL II/VPP Online Documents
- (19) UXP/V TotalView User's Guide V20
- (20) UXP/V Network Queuing System Handbook V20
- (21) UXP/V Network Queuing System-JM Handbook V20
- (22) UXP/V Network Queuing System-JS Handbook V20

#### 6.6.4 SGI2800 用 (English) マニュアル

- (1) C Programmer's Guide (IRIX6.5)
- (2) C++ Programmer's Guide (IRIX6.5)
- (3) MIPSpro F90 Manuals (IRIX6.5)
- (4) MIPSpro F77 Manuals (IRIX6.5)

#### 6.6.5 SX-5 用 (日本語) マニュアル

- (1) 利用者の手引
- (2) コマンド操作ハンドブック
- (3) 日本語機能利用の手引
- (4) プログラミングの手引
- (5) プログラミングハンドブック
- (6) ネットワークプログラミングの手引

(7) ストリームプログラミングの手引

(8) NQS 利用の手引

本書は、SUPER-UX でのバッチ処理の方法について説明したものである。SUPER-UX のバッチ処理は NQS (Network Queuing System) により実現される。

(9) 言語支援機能利用の手引

(10) C プログラミングの手引

(11) C++言語説明書

本書は、SUPER-UX システムのもとで使用される C++コンパイラ (USL C++ Language System Release3.0 対応) の言語仕様を定めるものである。

(12) C++ライブラリ利用の手引

本書は、SUPER-UX システムのもとで使用される C++コンパイラ (USL C++ Language System Release3.0 対応) で提供される C++クラスライブラリについて説明したものである。

(13) C++利用の手引

本書は、SUPER-UX システムのもとで使用される C++コンパイラ (USL C++ Language System Release3.0 対応) の作成方法やデバック方法を紹介している。

(14) FORTRAN90/SX 言語説明

本書は、SUPER-UX の Fortran90 言語の文法を説明したものである。

SUPER-UX の Fortran90 言語は、日本工業規格 (JIS) Fortran (X3001-1994)。内容は国際規格 ISO/IEC 1539:1991 および米国規格 ANSI X3.198-1992 と同一であり、通称 Fortran90 と呼ばれる) に準拠するとともに、さらに多くの拡張機能を備えている。

(15) FORTRAN90/SX プログラミングの手引

本書は、SUPER-UX の FORTRAN90/SX の使用方法について説明したものである。

(16) FORTRAN90/SX 並列処理機能利用の手引

(17) MPI/SX 利用の手引

本書は、SUPER-UX 上で分散並列処理プログラミングを行うためのメッセージ通信ライブラリ MPI/SX について説明したものである。MPI/SX は 1994 年に MPI フォーラムにおいて策定された MPI 標準仕様に準拠した機能を提供しており、さらに SX アーキテクチャの特長の一つである共有メモリを活かした高速通信を実現している。

(18) DBX 利用の手引

(19) PDBX 利用の手引

(20) OpenGL プログラミングの手引

本書は、OpenGL の説明書である。OpenGL はシリコングラフィックス社 (SGI) が 3 次元グラフィック API の実質的な業界標準であった自社 IRIS GL を SGI 以外のコンピュータでも利用できるように、そのレンダリング機能のみを取り出してオープン化したものである。本製品は、SUPER-UX シリーズ用にインポートしたものであり、OpenGL Version1.0 の仕様に準拠したものとなっている。

(21) PSUITE 利用の手引

本書は、SUPER-UX のプログラミング開発環境 PSUITE の使用方法について説明したものである。

PSUITE は、ソースブラウザ、エディタ、デバッガ、性能解析ツールを備えたワークステーション上で動作するプログラミング開発環境である。PSUITE を使用することにより、利用者プログラムの作成、コンパイル、デバッグ、チューニングなどの一連の開発作業をワークステーション上において GUI ベースで容易に実施することができる。

- (22) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(基本機能編 第1分冊)
- (23) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(基本機能編 第2分冊)
- (24) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(基本機能編 第3分冊)
- (25) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(基本機能編 第4分冊)
- (26) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(高速機能編)
- (27) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(並列処理機能編)
- (28) 科学技術計算ライブラリ統計機能 ASLSTAT/SX 利用の手引

本書は、SUPER-UX のもとで提供される、業種共通アプリケーションの一つとして開発された科学技術計算ライブラリ ASLSTAT/SX(Advanced Scientific Library STATistical function/SX)の概念、機能、利用方法などについて説明したものである。本書は、確率分布、基礎統計量、推定と検定、分散解析・実験計画、ノンパラメトリック検定、多変量解析、フーリエ変換とその応用/時系列分析、近時・回帰分析、ソート・順位付けなどについて説明したものである。

- (29) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第1分冊)

本書は、SUPER-UX のもとで提供される、業種共通アプリケーションの一つとして開発された科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX (Advanced Scientific Library C INTerface/SX)の概念、機能、利用方法などについて説明したものである。このうち本書は、基本行列演算、連立一次方程式(直接法)、連立一次方程式(反復法)、複素演算関数について説明したものである。

- (30) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第2分冊)

本書は、SUPER-UX のもとで提供される、業種共通アプリケーションの一つとして開発された科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASL/SX(Advanced Scientific Library C INTerface/SX)の概念、機能、利用方法などについて説明したものである。このうち本書は、固有値・固有ベクトル、最小二乗法、フーリエ変換とその応用/慈恵列分析について説明したものである。

- (31) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第3分冊)

本書は、SUPER-UX のもとで提供される、業種共通アプリケーションの一つとして開発された科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX(Advanced Scientific Library C INTerface/SX)の概念、機能、利用方法などについて説明したものです。このうち本書は、スプレイン関数、数値積分、方程式の根、極値問題・最適化、近似・補間、数値微分について説明したものである。

- (32) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第4分冊)

本書は、SUPER-UX のもとで提供される、業種共通アプリケーションの一つとして開発された科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX(Advanced Scientific Library C



INTerface/SX)の概念、機能、利用方法などについて説明したものである。このうち本書は、特殊関数、乱数について説明したものである。

(33) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(高速機能編)

本書は、SUPER-UX のもとで提供される、業種共通アプリケーションの一つとして開発された科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX(Advanced Scientific Library C INTerface/SX)の概念、機能、利用方法などについて説明したものである。このうち本書は、高速機能編(行列のデータ格納変換、連立一次方程式(直接法)、対称一次方程式(反復法)、非対称連立一次方程式(反復法)、固有値・固有ベクトル、最小二乗法、フーリエ変換とその応用/時系列分析、スプライン関数、数値積分)について説明したものである。

(34) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(並列処理機能編)

本書は、SUPER-UX のもとで提供される、業種共通アプリケーションの一つとして開発された科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX(Advanced Scientific Library C INTerface/SX)の概念、機能、利用方法などについて説明したものである。このうち本書は、並列機能編(基本行列演算、連立一次方程式(直接法)、固有値・固有ベクトル、フーリエ変換とその応用/時系列分析)について説明したものである。

(35) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(統計機能編)

本書は、SUPER-UX のもとで提供される、業種共通アプリケーションの一つとして開発された科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX(Advanced Scientific Library C INTerface/SX)の概念、機能、利用方法などについて説明したものである。このうち本書は、統計機能編(確率分布、基礎統計量、推定と検定、分散分析・実験計画、ノンパラメトリック検定、多変量解析、フーリエ変換とその応用/時系列分析、感じ・回帰分析、乱数、ソート・順位付けなど)について説明したものである。

### 6.6.6 SX-5 用 (English) マニュアル

英語版マニュアルに関しては、日本電気株式会社 中部支社官公営業部 (6.6.1 マニュアル一覧と購入方法の「<SX-5 および HPC 用マニュアルの購入にあたってのお問い合わせ先>」を参照)にお問い合わせください。

### 6.6.7 HPC 用 (日本語) マニュアル

- (1) 利用者の手引
- (2) コマンド操作ハンドブック
- (3) 日本語機能利用の手引
- (4) プログラミングの手引
- (5) プログラミングハンドブック
- (6) バッチ処理利用の手引
- (7) 言語支援機能利用の手引
- (8) C プログラミングの手引

- (9) FORTRAN90/SX 言語説明書
- (10) FORTRAN90/SX プログラミングの手引
- (11) FORTRAN90/SX 並列処理機能利用の手引
- (12) ANALYZER90/SX 利用の手引
- (13) C-ANALYZER-P/SX 利用の手引
- (14) DBX 利用 の手引
- (15) PDBX 利用 の手引
- (16) XDBX 利用 の手引
- (17) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(基本機能編 1/4)
- (18) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(基本機能編 2/4)
- (19) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(基本機能編 3/4)
- (20) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(基本機能編 4/4)
- (21) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(高速機能編)
- (22) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(並列処理機能編)
- (23) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第1分冊)
- (24) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第2分冊)
- (25) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第3分冊)
- (26) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第4分冊)
- (27) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(高速機能編)
- (28) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(並列処理機能編)

#### 6.6.8 HPC 用 (English) マニュアル

英語版マニュアルに関しては、日本電気株式会社 中部支社官公営業部 (6.6.1 マニュアル一覧と購入方法の「<SX-5 および HPC 用マニュアルの購入にあたってのお問い合わせ先>」を参照) にお問い合わせください。

#### 6.6.9 SP2 用マニュアル

##### 6.6.9.1 AIX 4.1.4 関連

- (1) SC23-2550-03AIX Version 4.1 Installation Guide
- (2) SC23-2527-03AIX Version 4 Getting Started
- (3) SC88-6853-03バージョン 4.1 ネットワーク・インストール・マネージメント・ガイドおよびリファレンス

##### 6.6.9.2 IBM C Set++ for AIX Version 3 Release 1 関連

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

- (6) SC09-1968-01 IBM C Set++ for AIX User's Guide
- (7) SC88-7359-00 C Set++ for AIX バージョン 3 ユーザーズ・ガイド
- (8) SC88-7396-00 C Set++ for AIX バージョン 3 ランゲージ・リファレンス
- (9) SC88-7361-00 C Set++ for AIX バージョン 3 クラス・ライブラリー・ユーザーズ・ガイド
- (10) SC09-2202-01 LPEX User's Guide and Reference
- (11) SC09-2201-01 Program Builder User's Guide
- (12) SC23-2666-00 AIX Version 4.1 iFOR/LS Tips and Techniques
- (13) SC88-6858-00 AIX バージョン 4.1 iFOR/LS システム・マネージメント・ガイド

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

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

#### 6.6.9.4 Parallel Environment (PE) Version 2 Release 1 関連

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

#### 6.6.9.5 IBM PVM for AIX Version 2 Release 1 関連

- (24) GC23-3884-00 IBM PVM for AIX User's Guide and Subroutine Reference Version 2, Release 1

#### 6.6.9.6 Performance Toolbox for AIX Version 2 Release 1

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

#### 6.6.9.7 AIX ESSL/6000 V2.2.2 関連

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

## 7. 現状と将来構想 (分子研レポート'01より転載)

### 5-3 計算科学研究センターの将来構想

#### 5-3-1 現在の計算機システムと運用

2002年2月現在の計算機システムの概要を下図に示す。図の左側は2000年3月に導入されたスーパーコンピュータシステムであり、来年度に更新が予定されている汎用高速演算システムが右側に示されている。

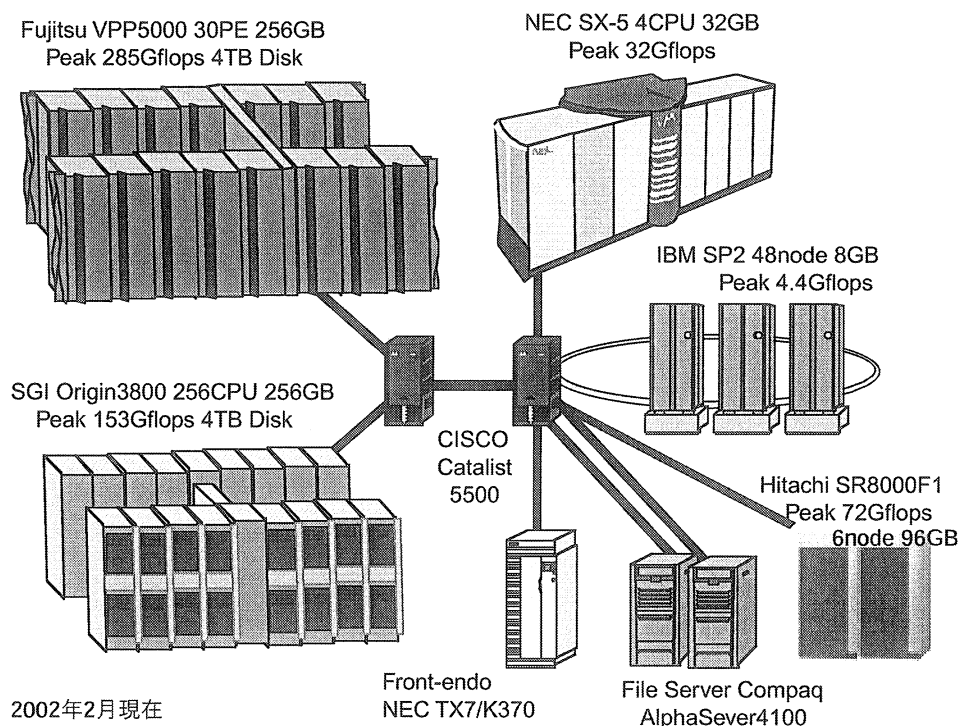


図1 計算機システムの概要

スーパーコンピュータシステムは、富士通製 VPP5000 と SGI 製 Origin から構成される。VPP5000 は 1 CPU 当たりの最高演算性能が 9.6 Gflops のベクトル演算装置 30 台から構成され、各 CPU に 8 ~ 16 GB の主記憶装置を持つベクトル並列計算機である。一方、SGI Origin は 1 CPU 当たりの最高演算性能が 0.6 ~ 0.8 Gflops のスカラ演算装置 320 CPU から構成され、CPU 当たり 1 GB の主記憶をそれぞれの CPU から共有メモリとしてアクセス可能な分散共有方式の超並列計算機である。VPP5000 では高速なベクトル演算能力を活かした大型ジョブの逐次演算処理はもちろん、例えば 8 台以上のベクトル演算装置を使った大規模なベクトル並列演算が可能となる。Origin2800/3800 は Non Uniform Memory Access (NUMA) 方式と呼ばれる論理的な共有メモリ機構を有する。NUMA は主記憶装置が各 CPU に分散して配置されているため CPU から主記憶へのアクセス速度が非等価ではあるが、利用者プログラムから大容量のメモリを容易に利用することが出来、大規模な並列ジョブの実行が可能となる。1998 年度に導入された NEC SX-5 は 1 CPU 当たり 8 Gflops の最高演算能力を持つ共有メモリ型ベクトル計算機であり、SP2 は 48 CPU から成る分散メモリ型スカラ並列計算機である。現在、更新予定の汎用高速演算システムは、ベクトル演算に適したプログラムを高速に処理することが出来る“主システム”と、中大規模なスカラ並列演算処理が可能な“副システム”から構成される点は、既存の汎用システムと同様であるが、大幅な性能向上が期待されている。今後もこれらの計算機の特徴を活かしつつ、利用者ジョブの効率的な実行環境を構築することがこれからのセンターの課題である。

本計算科学研究センターの前身である「分子研電算センター」はこれまで全国700人におよぶ分子科学者に対して文字どおり「共同利用施設」としてサービスを提供してきた実績をもっている。これは、他の研究機関の「電算センター」がその利用者の大部分を事実上その機関内に閉じていることを思うとき、「分子研電算センター」が誇るべき偉大な実績であり、今後も「計算科学研究センター」が継承すべき特色である。しかし、一方、ワークステーションや高性能のパーソナルコンピュータの普及に伴って、これまで「計算機センター」が果たしてきた役割の一部が変更を迫られていることも確かである。これまで計算機センターを利用して行われていた計算のかなりの部分がワークステーションやパソコンで簡便に行えるようになり、「煩わしい手続きをして大型センターを利用するまでもない」と考えるユーザーも増えている。他方、国際的には米国を中心に超並列マシンの性能を極限まで使って初めて可能になるような計算が報告されつつあり、このままでは我が国の理論化学が国際的に遅れをとってしまうという危機感も生まれている。すなわち、一方では「できるだけ多くの研究者へのサービスの提供を維持」しながら、他方では「世界のピークを目指すような大規模計算を可能にする」という「二兎を追う」ことを要求されている。このような要請に応えるため一昨年、計算科学研究センター運営委員会では計算資源の利用枠を「一般利用」と「特別利用」に2本化することが提案され、昨年度から実運用と審査基準の準備を進めてきた。「一般利用」はこれまでとほぼ同様の計算機利用形態であり、同様の手続きで申請を行う。他方、「特別利用」は毎年少数の大規模計算プロジェクトに計算資源の一部を供するものであり、特別の申請手続きと審査を経て許可されるものである。平成14年度の例としては、SGI Origin 計算資源の約1/4に相当するリソースを1つの研究プロジェクトに割り当てられる特別申請が許可された。現在 VPP5000 の一部のCPU資源も特別申請の対象と出来る運用準備を進めており、今後ますますこの様な質の高い大規模計算プロジェクトに利用され研究成果を上げることが期待される。

### 5-3-2 計算科学研究センターを巡る状況

「計算科学研究センター」（以下、「センター」と略）が発足（機構化）して2年が経過しようとしている。昨年度の「分子研レポート」において、我々は「センター」の将来構想に関して二つの点を明確にした。ひとつは700名近い分子科学研究者の共同利用施設として旧「分子研電算センター」が果たしてきた役割は全く変わっていないこと。他のひとつは計算科学分野における生物関連の計算や情報処理の重要性が増大しており、今後、この傾向は益々強くなることが予想されることである。（このことが「電算センター機構化」の主な動機であったことは言うまでも無い。）そして、これら二つのファクターを満たすために、今後の「センター」の構想を「長期」と「短期」の二つに区別し、長期的には生物系2研究所との協力でいわゆる「生物情報」を含む生物関連の情報処理分野の充実を視野に入れながら、短期的には「分子科学」と「生物科学」の「境界領域」の計算科学を発展させることを提案した。この長期的構想に関しては、昨年度、基生研に「情報生物学研究センター」が発足し、そこに「生物情報」の専門家が招聘されることが予想されるため、その第一歩を踏み出したと言えよう。今後、「情報生物学研究センター」との連繋により、この分野のマシンやスタッフの充実を図る必要がある。一方、短期的構想については、その第一歩として「分子科学と生物科学の接点」と題するワークショップを開催し、分子、生物両科学の境界領域で働く研究者の交流を進めた。

「計算科学研究センター」を巡る内外の状況に、昨年度、いくつかの新たなファクターが加わった。そのひとつは分子研を含む物質科学系5研究所（分子研、東北大金研、東大物性研、京大化研、高エネ機構・物構研）が共同提案していた学術創成研究が認められ、この秋にはスーパー SINET を介して分子研・金研・物性研計算センター間のグリッド計算が可能となることである。もうひとつのファクターはナノテクノロジーに関わる国の施策が大きく進展し、分子研にもこの4月から「分子スケールナノサイエンスセンター」が発足することである。

「センター」ではこれらの発展をふまえて、上記5研究所が連携した「ナノサイエンス」を主題とする新しい「計算科学」プロジェクトを国に提案する方向で検討を開始した。現在、いわゆる「ナノテクノロジー」という言葉から想像されるのは、LSI加工技術や記憶媒体の高密度化など計算機製造にまつわる工学研究である。また、化学における「ナノテクノロジー」も「ナノチューブ」や「ナノワイヤー」など主としてその固体電子物性に着目した分野であり、実際、これらのナノ物質が示す新しい物性や機能は電子工学などの応用面で大きな期待がもたれている。これらのいわば「剛いナノ物質」の物性や機能を理論的に解明する計算科学も本提案のひとつの主題であり、主として、東大物性研と東北大金属研が分担することになる。一方、分子やその集合体の中には蛋白質や超分子あるいはミセルなどナノスケールである決まった形態をとったときに初めて機能を発揮する一連の物質が知られており、これらに関しては主として「センター」と分子研理論グループがこの問題を担当する。これらの物質は、通常、溶液中に存在し、ある平均的な構造（形態）のまわりで統計的に「揺らぐ」ことを特徴としており、この「構造・形態の揺らぎ」が機能と密接に関係している。われわれはこの意味でこれらの物質を「柔らかいナノ物質」と名づける。「柔らかいナノ物質」の代表格は蛋白質と細胞膜（リン脂質2重膜）であり、その意味で、本プロジェクトは昨年度「将来構想」で提案した短期構想である「分子科学と生物科学の境界領域」の具体化という側面ももっている。

以下、「センター」を中心にした「計算ナノサイエンス」プロジェクトの主旨を述べる。

### 5-3-3 計算ナノサイエンスの提案

生体内における化学反応は「酵素」というナノサイズの分子を触媒として起きており、酵素機能が発現するためには蛋白質が「自己組織化（フォールディング）」して特異な構造をとらなければならない。金属が「触媒」としての機能（電子物性）を示すためには金属原子が溶液中で集合してあるサイズになる必要がある。また、界面活性剤などの両親媒性分子が化学反応の反応場として有効であるためにはそれらが集まってミセルやベシクルなどのナノスケールの分子集合体を形成しなければならない。これらの例に見られるように、自然界にはナノスケールで初めて機能が発現する現象が数多くあり、これらの集合体ができるためには、まず、バラバラの分子や原子がエントロピーの障壁を越えて集まる必要がある。しかも、原子や分子がただ集まれば良いのではなく、例えば、「化学反応」という「機能」が発現するためには、「ナノ集合体」の化学的性質が原子レベルで制御されていなければならない。ナノ集合体を特徴づけるさらに重要な性質はそれら全部が同じサイズではなく、ある平均値の周りに分布していることである。自然界の化学過程はこのナノ集合体の「形態安定性」と「揺らぎ」を巧みに使ってコントロールされているのである。そして、ナノ粒子の形態安定性、揺らぎ、および機能は、ナノ粒子が置かれている溶媒環境によって支配されている。したがって、もし、われわれがこの自然界の化学過程に学びその法則を理解すれば、それが医療や生産など人間社会に有用な科学・技術の基礎と成り得ることは理解に難く無い。

本プロジェクトの第一目的は計算化学・物理と情報技術（Information Technology）の手法を駆使して、溶液中に起きるナノ集合体の自己組織化、形態変化、揺らぎ、機能発現の仕組みを支配している自然原理を明らかにし、その上でこれに基づいて形態、機能を予測するなど、ナノスケールの「柔構造」を特徴とする新規物質創製に有用な理論的方法論を構築することにある。本プロジェクトの意義は単に上に述べた「実用的」な目的の達成に止まらず、新しい基礎学問分野の確立という大問題への挑戦という側面ももっている。それはこの問題がこれまでの伝統的な物理・化学の理論的方法論の枠組みを大きくはみ出した研究対象だからである。

これまでの伝統的な方法論は、例えば、形の決まった1個の分子の電子状態や原子や分子が格子状に綺麗にならんだ結晶などいわば「硬い物質」に対しては極めて有効であった。また、多体系でも通常の水のように均一な液体系で

は分子シミュレーションや統計力学が定量的あるいは半定量的なレベルで現象を記述できる程度に確立していると言ってよい。また、いわゆる「自己組織化」という問題についてもこれまで理論的研究が行われなかったわけではない。例えば、ミセル形成のシミュレーションは界面活性剤分子の疎水基同士がお互いに「引き合う」ということを考慮した直感的（経験的）なモデルのレベルでは多数のシミュレーションが行われている。しかしながら、これらの方法は上に述べた実際の化学・物理プロセス（溶液中ナノ集合体の自己組織化、形態変化、揺らぎ、機能発現）のある側面を全体から機械的に切り出しすることを前提に構築されたものであり、その有機的連関を無視したことに起因する様々な問題を内包している。すなわち、「群盲、象をなでる」ことによる自然描像の誤った記述や実験の「後追い説明」に墮する危険性を免れ得ないのである。例えば、最後に述べたミセル形成のシミュレーションの例では、ミセル分子の「疎水基同士が、何故、引き合うのか」という基本的な疑問が説明されていない。これは界面活性剤分子が存在する「水」という溶媒環境を極端に単純化したためである。このようなモデル化では相互作用の本質が正しく捉えられていないため、溶液の組成や温度など環境の変化に対応できず、それらが変わる度に経験的な相互作用パラメータを準備しなければならない。すなわち、実験結果に「理屈」をつける理論ではあり得ても、実験を「予測」する理論とは成り得ないのである。ナノスケールの理論科学で、何故、このような問題が生じるのか？ それは「ナノ」がまさにマイクロとマクロの中間にあり、量子力学や力学で全部を解くには大きすぎ、一方、統計力学や流体力学などの巨視系に対する方法論の対象としては小さすぎて「揺らぎ」や「不均一性」が本質的な位置を占めるからである。

このような問題を解決するためにはこれまでの伝統的な方法論だけに固執するのではなく、それらを融合した新しい「方法論」の確立が必要であろう。本プロジェクトは理論化学・物理における3つの流れ（統計力学、分子シミュレーション、量子化学）を「計算科学」というプラットフォームに統一して、溶液内ナノ現象を解明する新しい理論化学の構築を目指すものである。