

I 部

目 次

1.	巻頭言 計算科学研究センター長 永瀬 茂	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	5
3. 1	システムの構成と特徴	5
3. 2	キューの構成	9
3. 3	利用課金点数	11
4.	一般報告	14
4. 1	分子研ライブラリプログラムの開発	14
4. 2	データベース開発状況	17
5.	平成 14 年度計算機稼働状況および利用者数	18
5. 1	利用申請プロジェクトおよび利用者数	18
5. 2	電力使用および計算機稼働状況	18
5. 3	計算機利用状況	19
5. 4	クラス別 CPU 使用時間	21
5. 5	クラス別 VPU 使用時間	24
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	28
6. 2	計算科学研究センター職員	29
6. 3	応用プログラム相談員一覧	29
6. 4	利用者数と CPU 時間の推移	30
6. 5	建物図	32
6. 6	マニュアル一覧	35
7.	現状と将来構想 (分子研リポート'02 より転載)	40

巻頭言

計算科学研究センター長
永瀬 茂

1977年に設置された分子科学研究所・電子計算機センターは、2000年4月より分子科学ばかりでなくバイオサイエンス分野の計算科学をも視野にいた岡崎国立共同研究機構・計算科学研究センターに改組されて今日に至っています。この間、一貫して計算科学分野の学術研究発展の先導的な役割はもとより、全国共同利用センターの中心拠点として大きな貢献をなしているのは周知のとおりです。これは、これまでのセンターのスタッフの並々ならぬ努力と、毎年約150の研究グループの600人にも及ぶ利用者に支えられてきたお陰です。懐古すると、設立当初から10-15年の間は、当時の分子研の計算機センターを利用しなければ、今ではごく簡単な *ab initio* 分子軌道計算でさえ可能でない時代でした。このために、全国からたくさんの人が入れ替り立ち替わりして計算機センターに集まりましたが、これは研究交流と人的交流を推進して、我が国の計算科学の裾野を大きく広げました。その後、高速ネットワークが普及するにつれて、各研究室からのアクセスが一般になりましたが、小規模な計算から大規模な計算までと利用方法も研究分野も多彩になりました。また、計算プログラムの汎用化とライブラリーの充実に伴い、実験を専門にする研究者の利用も年々増加して、計算は実験の良きパートナーとなっています。

一方、最近の高性能パソコンクラスターの普及などに伴って、センターへの期待と役割が変化してきていることも事実です。しかし確実に言えることは、物質科学はもとより生命科学分野でも、「計算科学とコンピュータシミュレーション」は実験に並ぶ、時にはそれ以上に有力で強力な研究法としてますます重要で不可欠になり、実験とのインタープレイもこれまでになく大きくなることです。このためにも、ナノサイズの大規模分子系も高精度に高速に取り扱える新しい方法論の開発と計算環境の整備と充実が必要です。魅力ある計算科学のセンターとして大きく発展するために、アンケート調査や意見交換会を開催するなど様々な模索を現在行っています。将来展望も含めて、できることから確実に実行していきたく思っています。計算科学の基礎となる理論と方法の発展は勿論のこと、新しい挑戦的な計算科学を国際的に発信できる重要な中心拠点になることを願っています。皆様の一層の叱咤激励とご支援を今後ともお願いする次第です。

2. スーパーコンピュータワークショップの活動

平成 15 年 3 月 11 日 (火)、12 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。本年度は約 68 名の参加者があり、実験研究の最前線で活躍されている研究者を招き、その研究紹介とともに「このような計算がやれたら自分の研究を飛躍的に発展させることができる」という期待と提案について話していただいた。また、本年 2 月より稼動している新汎用コンピュータシステム (NEC 製 SX-7、TX-7) についての実践的な活用方法等の講習も行った。

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 (3 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 : 「実験家は計算科学に何を期待するか」
日時 : 平成 15 年 3 月 11 日 (火) ~ 3 月 12 日 (水)
場所 : 計算科学研究センター 2 階大会議室

3 月 11 日 (火)

13:00-13:10	Open remark 平田 文男 (計算科学セ)
13:10-13:40	「遷移金属および希土類を含む有機金属クラスターの電子構造」 茅 幸二 (分子研)
13:40-14:20	「電子回折法による強光子場中の分子追跡」 星名 賢之助 (東大院理)
14:20-15:00	「ナノ空間制約分子系に見る新展開」 金子 克美 (千葉大理)
15:00-15:40	「有機単分子膜で保護されたサブナノ金属クラスターの構造と安定性」 佃 達哉 (分子研)
16:00-16:40	「固液界面に形成される吸着層の構造」 板谷 謹吾 (東北大院工)
16:40-17:20	「金属錯体による水分子の活性化」 田中 晃二 (分子研)
17:20-18:00	「RLi 化学種の溶液中の構造と速度論」 山高 博 (阪大産研)
18:30-20:00	懇 親 会 職員会館 2 階大会議室

3月12日(水)

9:30-12:30	<p>【講習会】新汎用高速演算機システムについて</p> <p>「SX-7 ハードウェアの紹介」 「TX7/i9501 ハードウェアの紹介」 「SX-7 プログラムチューニング」 「TX7/i9501 プログラムチューニング」</p>	<p>萩原 孝 (日本電気) 渋谷 俊輝 (日本電気) 横谷 雄司 (日本電気) 左近 彰一 (日本電気)</p>
13:30-14:10	<p>「表面赤外振動分光データやナノバイオロジーの解析に必須な計算機シミュレーション」</p>	<p>宇理須 恒雄 (分子研)</p>
14:10-14:50	<p>「アルケン類を活用する精密合成反応の設計と開発」</p>	<p>中村 正治 (東大院理)</p>
14:50-15:30	<p>「実験と計算による時間分解蛋白質ダイナミクスの解明」</p>	<p>寺嶋 正秀 (京大院理)</p>
15:40-16:20	<p>「副作用のないハイブリッドリポソームのがん治療」</p>	<p>松本 陽子 (崇城大院工)</p>
16:20-17:00	<p>「液液界面における特異的錯形成反応」</p>	<p>渡會 仁 (阪大院理)</p>
17:00-17:10	<p>End remark</p>	<p>岡崎 進 (計算科学セ)</p>

NAREGI
ナノサイエンス実証研究
第1回公開シンポジウム
 の開催について

会期：平成15年5月26日（月）14:00～
 会場：岡崎コンファレンスセンター・中会議室

14:00～14:15	Open remark	茅 幸二 (分子研)
14:15～14:30	remark	古西 真 (文科省)
14:30～15:00	「NAREGI プロジェクトの概要とナノグリッドへの期待」	三浦 謙一 (国情研)
15:00～15:30	「ソフトナノ計算科学とグリッド環境」	平田 文男 (分子研)
15:30～16:00	「強相関電子超構造物質と計算科学」	十倉 好紀 (東工大)
16:00～16:30	「ナノサイエンスとがん治療」	上岡 龍一 (崇城大)
16:30～17:00	「ケイ素を含むシグマ及びパイ共役電子系の構築と計算科学」	玉尾 皓平 (京大化研)
17:00～17:30	「企業がナノグリッドに期待する理由」	中尾 俊夫 (住友ベークライト)
17:30～18:00	「高度シミュレーション技術への期待」	中村 道治 (日 立)
18:00～18:05	End remark	北原 和夫 (国際基督大)
18:15～20:00	懇親会	

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)

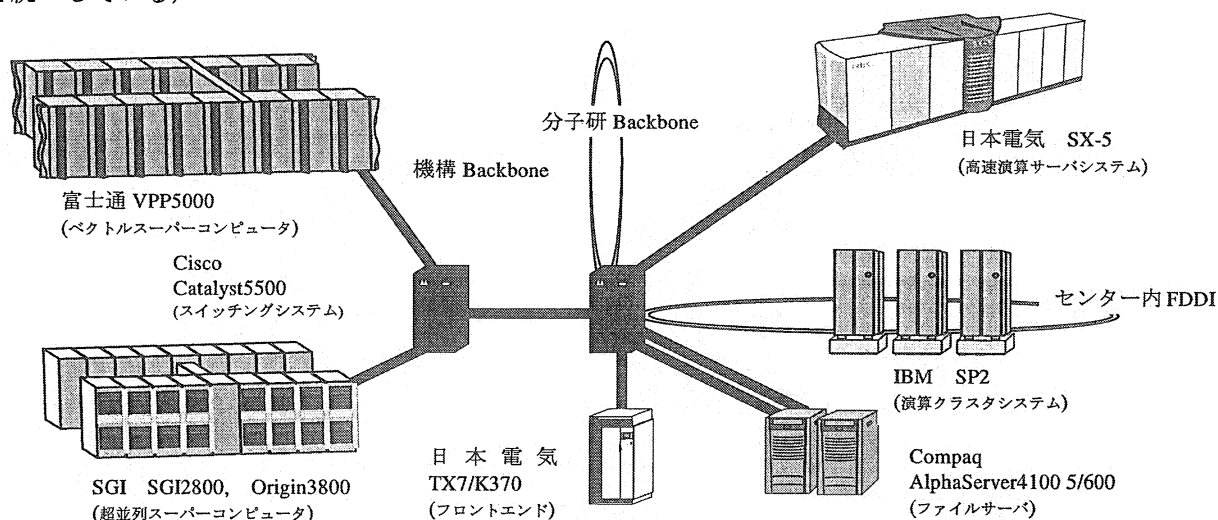


図 3.1 計算機システム概略

- ・ 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	3.5TB(18GB×9 ドライブ/RAID、24RAID)
(内訳)	
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	4.6TB(36GB×8 ドライブ/RAID、16RAID)
(内訳)	
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	70.4GB
(内訳)	
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	563.2GB
(内訳)	
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	2GB
(内訳)	
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	33.6GB
(内訳)	
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	320GB
(内訳)	
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	414GB
(内訳)	
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	24 時間	8GB	8	4-8	2	2	並列ジョブ(SGI2800)
G2	24 時間	16GB	3	9-16	2	2	並列ジョブ(SGI2800)
G3	48 時間	32GB	6	17-32	1	1	並列ジョブ(SGI2800)
G4	24 時間	64GB	1	33-64	1	1	並列ジョブ(SGI2800)
G2S	48 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	3 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
H1S	48 時間	1GB	5	2	3	
H1L	72 時間	1GB	5	2	3	
H2S	48 時間	2GB	3	1	2	
H2L	72 時間	2GB	4	1	2	
H4S	24 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, ccsp211, 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 0.05/sec

b : ベクトル課金係数 0.06/sec

Fvpp : $1/3 \times (Pe+5)$ [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

$$P2 = CPU \times Fsgl \times c$$

C P U : CPU 使用時間(秒)の総和

c : CPU 課金係数 0.008/sec

Fsgl : 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 (Fsgl) 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 0.08/sec

e : ベクトル課金係数 0.10/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 0.02/sec

g : ベクトル課金係数 0.03/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 0.005/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 0.0025/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を使用した場合	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	0.0025	9.0	0.0225	利用ノード数に依存しない	7.40
	P2	0.9	0.005	18.0	0.045		19.51
	P3	2.1					8.54
	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14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。その他に、メーカ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る。

本年度のライブラリプログラム開発の申請件数は0件だった。

平成14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21件である。

Fujitsu VPP5000 版

プログラム名	タイトル名
amber	AMBER7: Assisted model building with energy refinement
gamess	GAMESS(2003Jan14): General atomic and molecular electronic structure system
molpro	MOLPRO2002.3: A complete system of <i>ab initio</i> programs

SGI SGI2800/Origin3800 版

プログラム名	タイトル名
amber	AMBER7: Assisted model building with energy refinement
gamess	GAMESS(2003Jan14): General atomic and molecular electronic structure system
Hondo	HONDO2002: <i>ab initio</i> MO calculation package
molcas	MOLCAS5.4: Quantum chemistry software
molpro	MOLPRO2002.3: A complete system of <i>ab initio</i> programs

NEC SX-7 版

プログラム名	タイトル名
amber	AMBER7: Assisted model building with energy refinement
g98	Gaussian98(A.11.3): <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
gamess	GAMESS(2002June20): General atomic and molecular electronic structure system
molcas	MOLCAS5.4: Quantum chemistry software
molpro	MOLPRO2002.3: A complete system of <i>ab initio</i> programs
presto	PRESTO (ver.3)

NEC TX-7 版

プログラム名	タイトル名
amber	AMBER7: Assisted model building with energy refinement
g98	Gaussian98(A.11.3): <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
gamess	GAMESS(2002June20): General atomic and molecular electronic structure system
molcas	MOLCAS5.4: Quantum chemistry software
molpro	MOLPRO2002.3: A complete system of <i>ab initio</i> programs
blast	BLAST: Basic local alignment search tool

HITACHI SR8000 版

プログラム名	タイトル名
G98	Gaussian98(A.11.3): <i>ab initio</i> molecular orbital calculations

よって、平成 15 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 版 ****

プログラム名	タイトル名
AMBER	AMBER7: Assisted model building with energy refinement
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	GAMESS(2003Jan14): 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	MOLPRO2002.3: A 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/Origin3800 版 ****

プログラム名	タイトル名
AMBER	AMBER7: Assisted model building with energy refinement
BLAS	Basis linear algebra subprograms
COLUMBUS	A program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calculation
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	GAMESS(2003Jan14): General atomic and molecular electronic structure system
HONDO8	HONDO2002: <i>ab initio</i> MO calculation package
LAPACK	LAPACK
MOLCAS	MOLCAS5.4: Quantum chemistry software
MOLPRO	MOLPRO2002.3: A complete system of <i>ab initio</i> programs

**** NEC SX-5 版 ****

プログラム名	タイトル名
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

**** NEC SX-7 版 ****

プログラム名	タイトル名
AMBER	AMBER7: Assisted model building with energy refinement
G98	Gaussian98(A.11.3): <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	GAMESS(2002June20): General atomic and molecular electronic structure system
MOLCAS	MOLCAS5.4: Quantum chemistry software
MOLPRO	MOLPRO2002.3: A complete system of <i>ab initio</i> programs
PRESTO	PRESTO (ver.3)

**** NEC TX-7 版 ****

プログラム名	タイトル名
AMBER	AMBER7: Assisted model building with energy refinement
G98	Gaussian98(A.11.3): <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	GAMESS(2002June20): General atomic and molecular electronic structure system
MOLCAS	MOLCAS5.4: Quantum chemistry software
MOLPRO	MOLPRO2002.3: A complete system of <i>ab initio</i> programs
BLAST	BLAST: Basic local alignment search tool

**** HITACHI SR8000 版 ****

プログラム名	タイトル名
AMBER5	AMBER5: Assisted Model Building with Energy Refinement
G98	GAUSSIAN98(A.11.3): <i>ab initio</i> molecular orbital calculations

**** その他 ****

プログラム名	タイトル名
CRYSTRUCT	Crystruct3/SD
MASPHYC	Material design system by means of computer physics and chemistry/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おり、毎年データの更新を行っている。

(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： 62,696 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る。大学評価学位授与機構が行っている平成13年度着手全学テーマ別評価「研究活動面における社会との連携及び協力」評価報告書では、本事業は「優れている」の評価を得た。また、毎年一年分のデータを、論文形式で ELSEVIER 社の国際学術雑誌「THEOCHEM」の1号分全部を使って刊行している。センターのフロントエンドマシン（ccfep1）から利用できるオンライン版 QCLDB は、開発者の意向により廃止した。WWW 版 QCLDB 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（57,037 件）までのデータで公開を行っている。しかし平成15年度秋からは、モニター制度という制限つきながら、新しいデータベース QCLDB II（<http://qcldb2.ims.ac.jp/>）として、データの内容、検索システム等が一新されるため、著作権の問題も解決され、最新のデータ（62,696 件）での検索が可能となる予定である。

平成14年度に新規登録されたデータは、5,659 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、WWW 版 FCDB（<http://ginger.ims.ac.jp/fcdb/>）のみを公開サービスしている。WWW 版 FCDB は原則利用制限なしで公開している。センターのフロントエンドマシン（ccfep1）から利用できるオンライン版については、利用がほとんどないことから、現在は公開を行っていない。開発グループの解散により、平成13年度で開発が中止になった。

5. 平成 14 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	112	461	169,981	167,974	125,256	67,189,600	50,102,478
	協力研究	10	18	3,399	3,384	1,428	1,353,600	801,236
	所 内	21	96	60,919	54,827	30,308	21,930,800	12,123,465
生 理 学	所 内	1	8	3,573	3,216	3,060	1,286,400	1,223,863
合 計		144	583	237,872	229,401	160,052	91,760,400	64,251,042

(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 14 年 4 月	279,600	664	662	662	660	660	662	664	664	664	662	5,961	422
5 月	285,140	726	732	732	732	730	727	733	734	734	731	6,578	390
6 月	282,310	691	686	686	686	686	686	695	695	695	690	6,206	409
7 月	313,560	733	732	732	732	732	732	730	731	731	732	6,585	428
8 月	323,720	734	736	736	736	733	736	732	734	734	735	6,611	440
9 月	294,080	687	683	683	681	679	683	683	683	683	683	6,143	431
10 月	309,040	734	733	733	733	732	733	734	734	734	733	6,600	422
11 月	288,630	703	700	700	700	693	700	696	699	699	699	6,288	413
12 月	305,760	735	735	735	735	689	735	734	734	734	730	6,566	419
平成 15 年 1 月	350,945	734	735	735	735	602	735	734	734	710	717	6,452	489
2 月	328,681	637	634	634	634	634	634	524	512	-	588	5,582	559
3 月	351,862	731	731	731	731	731	731	732	732	-	812	7,306	433
合 計	3,713,328	8,506	8,498	8,498	8,494	8,300	8,493	8,391	8,386	7,118	7,718	77,177	481

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14年4月	13,527	68	4	0	11,170	53	7,634	36	27,635	33	42,994	51	2,265	43	145	11	13,096	43	118,470	38
5月	13,617	63	105	2	20,541	88	20,910	89	47,496	51	76,364	82	1,976	34	494	34	13,989	41	195,492	54
6月	14,688	71	96	2	13,586	62	11,296	51	17,286	20	29,410	33	1,874	34	216	16	10,339	32	98,791	36
7月	15,475	70	63	1	11,777	50	9,774	42	22,044	24	25,330	27	1,711	29	208	14	11,204	33	97,586	32
8月	14,916	68	11	0	11,918	51	6,456	27	25,236	27	32,929	35	2,784	48	36	2	7,492	22	101,778	31
9月	12,818	62	18	0	22,339	102	13,633	63	51,704	59	55,883	64	3,516	64	338	25	6,500	21	166,749	51
10月	16,875	77	46	1	16,767	71	13,745	59	76,612	82	28,537	30	4,980	85	445	30	16,325	48	174,332	54
11月	17,357	82	10	0	19,254	86	17,452	78	64,528	73	53,880	60	4,739	85	384	27	16,294	51	193,898	60
12月	19,122	87	124	2	22,885	97	19,310	82	60,834	69	74,502	79	5,720	97	649	44	10,693	32	213,839	65
平成15年1月	19,561	89	434	7	23,595	100	17,446	74	62,990	82	92,983	99	5,652	96	595	41	11,218	34	234,474	69
2月	15,563	81	582	11	26,402	130	22,549	111	68,939	85	103,657	128	4,145	99	176	17	-	-	242,013	83
3月	15,867	72	122	2	25,622	110	22,227	95	51,790	55	73,272	78	4,145	71	176	12	-	-	193,221	62
合 計	189,867	74	1,615	2	225,856	83	182,432	67	577,094	55	689,741	64	43,507	65	3,862	23	117,150	36	2,030,643	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14年4月	9,360	47	969	18	64	5	10,393	23
5月	10,410	48	1,108	19	124	8	11,642	25
6月	11,133	54	1,247	22	118	8	12,498	28
7月	11,537	53	784	13	79	5	12,400	24
8月	11,181	51	1,417	24	8	1	12,606	25
9月	9,313	45	1,843	34	201	15	11,357	31
10月	12,138	55	2,053	35	303	21	14,494	37
11月	12,424	59	2,980	54	246	18	15,650	44
12月	14,063	64	3,413	58	387	26	17,863	49
平成15年1月	13,460	61	2,246	38	393	27	16,099	42
2月	10,130	53	1,183	28	271	26	11,584	36
3月	9,231	42	1,122	19	102	7	10,455	23
合 計	134,380	53	20,365	30	2,296	14	157,041	32

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 14 年 4 月		1,890	405	248	259	499	541	155	114	4,111
5 月		2,926	465	174	228	447	469	126	79	4,914
6 月		2,773	424	175	258	269	563	50	47	4,559
7 月		2,528	332	273	428	288	369	26	102	4,346
8 月		2,498	249	112	212	210	522	10	47	3,860
9 月		2,876	356	221	356	404	779	68	118	5,178
10 月		3,123	436	140	338	217	1,196	172	124	5,746
11 月		3,329	487	230	302	0	1,199	71	126	5,744
12 月		2,660	296	221	368	0	586	95	54	4,280
平成 15 年 1 月		2,204	204	243	484	0	496	83	42	3,756
2 月		2,093	162	310	471	0	314	69	-	3,419
3 月		2,189	134	230	529	0	344	84	-	3,510
合 計		31,089	3,950	2,577	4,233	2,334	7,378	1,009	853	53,423

5.4 クラス別 CPU 使用時間

5.4.1 VPP5000

VPP	V1	V2	V3	V4	V5	VP6
平成 14 年 4 月	54:31:07	1266:11:44	1217:06:40	2746:47:34	4831:32:30	3401:32:08
5 月	163:29:53	1164:27:10	1132:43:10	2905:54:59	5160:09:57	3081:53:25
6 月	346:51:03	1133:37:26	1227:12:27	3832:37:00	5615:09:36	2461:50:51
7 月	322:45:29	1076:27:05	1042:27:50	3750:43:54	6176:17:44	3034:46:56
8 月	360:00:14	1024:21:00	1014:02:53	3841:58:49	5341:50:04	2635:11:02
9 月	479:47:11	1023:55:15	850:21:15	2856:49:23	4564:31:28	2465:43:12
10 月	270:08:39	1322:25:05	1280:27:35	3388:58:12	6324:50:04	3064:06:45
11 月	415:49:25	1425:27:34	1272:02:45	4298:29:36	6429:54:05	2793:03:11
12 月	194:32:15	1574:32:44	1416:14:35	4505:41:17	7161:39:32	3607:52:37
平成 15 年 1 月	280:53:17	1742:36:55	1434:42:22	4100:44:05	6903:46:02	4462:59:47
2 月	225:58:39	1339:41:13	1129:07:58	4755:21:32	4872:37:36	2613:08:15
3 月	44:33:36	1397:16:31	924:01:08	4135:59:13	4979:22:57	3842:07:15
合 計	3159:20:48	15490:59:42	13940:30:38	45120:05:34	68361:41:35	37464:15:24

VPP	VC	VP23	ZZ1	ZZ2	合計	ETC	総合計
平成 14 年 4 月	0:00:00	0:00:04	-	-	13517:41:47	8:57:49	13526:39:36
5 月	0:00:00	0:00:03	-	-	13608:38:37	8:46:43	13617:25:20
6 月	0:00:00	0:00:01	-	-	14617:18:24	70:57:41	14688:16:05
7 月	0:00:00	0:00:03	-	-	15403:29:01	71:54:43	15475:23:44
8 月	0:00:00	1:04:23	403:24:25	213:39:40	14835:32:30	80:35:34	14916:08:04
9 月	0:00:00	0:00:03	216:46:32	269:01:28	12726:55:47	91:11:26	12818:07:13
10 月	0:00:00	0:00:03	566:11:39	553:34:04	16770:42:06	104:13:23	16874:55:29
11 月	0:00:00	0:00:06	146:31:16	459:23:43	17240:41:41	116:09:14	17356:50:55
12 月	0:00:00	0:00:04	305:03:07	215:21:41	18980:57:52	141:16:02	19122:13:54
平成 15 年 1 月	0:00:00	0:01:50	0:41:24	460:07:38	19386:33:20	174:05:52	19560:39:12
2 月	0:00:00	0:00:00	96:33:28	299:11:57	15331:40:38	231:39:51	15563:20:29
3 月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	357:53:20	15681:14:00	185:18:52	15866:32:52
合 計	0:00:00	1:06:40	1735:11:51	2828:13:31	188101:25:43	1285:07:10	189386:32:53

5.4.2 SGI2800, Origin3800

02K	G1	G2	G3	G4	G2S	G5S
平成14年 4月	9791:08:51	3944:17:01	20445:05:10	231:17:44	29291:55:38	0:00:00
5月	11366:41:00	8322:38:23	23306:53:20	48:05:02	29389:35:57	0:00:00
6月	11444:44:16	8614:47:33	9759:46:30	934:58:50	20271:39:38	0:00:00
7月	10354:34:09	8028:24:25	13932:07:51	283:06:46	15447:18:28	0:00:00
8月	7744:20:21	5621:16:19	11328:19:36	7:03:20	22906:11:57	0:00:00
9月	13896:43:34	10485:21:12	34070:50:56	676:45:16	40013:07:28	0:00:00
10月	11816:40:39	4320:39:56	30947:30:11	2057:44:36	9572:24:55	0:00:00
11月	11854:04:25	8887:22:15	29275:14:11	1541:07:22	0:00:00	0:00:00
12月	17902:34:53	10734:13:20	22022:42:46	6906:10:33	0:00:00	0:00:00
平成15年 1月	17062:38:27	6663:05:22	13483:44:38	3768:27:37	0:00:00	0:00:00
2月	18338:49:08	7092:18:34	20755:40:18	1995:16:04	0:00:00	0:00:00
3月	16452:32:17	12487:23:36	24723:04:47	144:09:17	0:00:00	0:00:00
合 計	158025:32:00	95201:47:56	254051:00:14	18594:12:27	166892:14:01	0:00:00

02K	G5S1	G5S2	G5S3	G5S4	合計	ETC	総合計
平成14年 4月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	63703:44:24	25733:11:47	89436:56:11
5月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	72433:53:42	92982:43:07	165416:36:49
6月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	51025:56:47	20648:40:13	71674:37:00
7月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	48045:31:39	20943:06:11	68988:37:50
8月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	76549:15:59	76549:15:59
9月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	99142:48:26	44433:24:32	143576:12:58
10月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	58715:00:17	76992:31:40	135707:31:57
11月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	51557:48:13	103565:40:00	155123:28:13
12月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	57565:41:32	120088:12:51	177653:54:23
平成15年 1月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	40977:56:04	156470:30:44	197448:26:48
2月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	48182:04:04	173947:56:46	222130:00:50
3月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	53807:09:57	119226:22:47	173033:32:44
合 計	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	692764:46:38	983974:25:04	1676739:11:42

5.4.3 SX-5

SX-5	H1S	H1L	H2S	H2L	H4	H8	合計	ETC	総合計
平成14年 4月	594:25:10	623:28:15	245:35:41	531:42:31	245:30:04	0:00:00	2240:41:41	23:52:48	2264:34:29
5月	432:56:43	477:47:17	418:44:25	467:54:48	142:13:05	0:00:00	1939:36:18	36:41:37	1976:17:55
6月	528:52:36	493:28:40	379:25:35	260:49:01	194:45:06	0:00:00	1857:20:58	17:08:31	1874:29:29
7月	215:31:46	546:17:29	136:54:22	596:20:01	196:53:37	0:00:00	1691:57:15	18:53:25	1710:50:40
8月	336:08:07	696:37:11	380:56:51	847:28:55	365:40:22	0:00:00	2626:51:26	157:17:33	2784:08:59
9月	854:37:14	1259:30:34	441:37:15	521:11:32	356:15:58	0:00:00	3433:12:33	82:45:14	3515:57:47
10月	1331:57:21	1859:15:55	545:29:53	648:38:43	459:10:21	0:00:00	4844:32:13	135:00:27	4979:32:40
11月	922:01:34	1515:08:56	821:54:51	946:38:36	465:44:09	0:00:00	4671:28:06	67:31:53	4738:59:59
12月	1431:10:03	1510:47:35	877:52:55	1184:02:53	440:49:38	0:00:00	5444:43:04	275:30:28	5720:13:32
平成15年 1月	1418:14:55	1581:36:02	831:46:24	1221:00:46	354:02:04	0:00:00	5406:40:11	245:26:08	5652:06:19
2月	961:32:58	1017:35:18	853:10:17	1246:45:03	47:52:32	0:00:00	4126:56:08	18:03:20	4144:59:28
3月	961:32:58	1017:35:18	853:10:17	1246:45:03	47:52:32	0:00:00	4126:56:08	18:03:20	4144:59:28
合 計	9989:01:25	12599:08:30	6786:38:46	9719:17:52	3316:49:28	0:00:00	42410:56:01	1096:14:44	43507:10:45

5.4.4 HPC

HPC	W1	W2	合計	ETC	総合計
平成14年 4月	6:31:09	132:53:53	139:25:02	5:36:53	145:01:55
5月	152:49:37	335:36:42	488:26:19	5:24:19	493:50:38
6月	5:46:47	204:37:00	210:23:47	5:32:41	215:56:28
7月	37:26:26	165:24:03	202:50:29	5:07:42	207:58:11
8月	12:03:25	17:53:14	29:56:39	5:44:08	35:40:47
9月	54:10:27	271:05:06	325:15:33	13:01:40	338:17:13
10月	80:53:57	358:31:33	439:25:30	5:19:29	444:44:59
11月	145:43:12	212:57:32	358:40:44	25:25:30	384:06:14
12月	186:52:58	453:39:57	640:32:55	8:17:20	648:50:15
平成15年 1月	49:31:03	456:20:22	505:51:25	88:43:58	594:35:23
2月	69:34:32	98:10:02	167:44:34	8:04:29	175:49:03
3月	69:34:32	98:10:02	167:44:34	8:04:29	175:49:03
合計	870:58:05	2805:19:26	3676:17:31	184:22:38	3860:40:09

5.4.5 SP2

SP2	P1	P2	P3	合計
平成14年 4月	6331:19:46	1054:06:02	5711:02:35	13096:28:23
5月	6426:08:03	2016:45:01	5546:02:03	13988:55:07
6月	5441:22:05	2462:53:44	2434:14:57	10338:30:46
7月	5439:07:47	3058:02:26	2706:35:34	11203:45:47
8月	2941:22:38	3068:31:33	1482:21:21	7492:15:32
9月	1747:09:53	2195:02:20	2557:42:09	6499:54:22
10月	5120:54:44	2779:23:41	8424:31:24	16324:49:49
11月	4283:27:41	3615:43:12	8394:57:58	16294:08:51
12月	3:59:57	3356:23:30	7332:08:34	10692:32:01
平成15年 1月	0:04:22	3272:17:43	7945:59:07	11218:21:12
2月	-	-	-	-
3月	-	-	-	-
合計	37734:56:56	26879:09:12	52535:35:42	117149:41:50

5.5 クラス別 VPU 使用時間

5.5.1 VPP5000

VPP	V1	V2	V3	V4	V5	VP6	VC
平成14年 4月	40:49:56	887:18:41	945:48:38	1910:56:46	3651:55:07	1923:31:17	0:00:00
5月	108:16:26	770:51:54	830:37:34	2106:21:24	3560:30:05	3033:18:38	0:00:00
6月	235:56:24	788:13:33	868:17:33	2845:54:44	3999:30:04	2385:28:36	0:00:00
7月	160:33:18	593:02:05	706:51:18	2657:50:35	4456:48:40	2962:04:00	0:00:00
8月	178:52:46	691:28:23	718:20:19	2851:02:26	3876:24:16	2462:00:42	0:00:00
9月	300:27:58	681:32:48	556:27:16	1965:02:26	3171:31:21	2300:16:23	0:00:00
10月	129:15:23	916:16:53	993:00:39	2430:13:01	4306:20:08	2731:58:12	0:00:00
11月	297:43:13	1056:57:39	907:01:12	3205:25:12	4393:10:52	2159:32:45	0:00:00
12月	128:45:22	1060:19:23	1147:00:20	3245:08:35	5492:11:43	2686:40:34	0:00:00
平成15年 1月	178:54:02	1020:42:28	1099:35:17	2374:43:51	4760:38:16	3780:28:56	0:00:00
2月	169:47:28	846:56:33	664:02:52	2490:28:15	3539:28:39	2148:42:57	0:00:00
3月	23:24:51	718:29:54	390:41:55	2092:40:23	2693:36:57	3110:23:07	0:00:00
合 計	1952:47:07	10032:10:14	9827:44:53	30175:47:38	47902:06:08	31684:26:07	0:00:00

VPP	VP23	ZZ1	ZZ2	合計	ETC	総合計
平成14年 4月	0:00:00	-	-	9360:20:25	0:03:14	9360:23:39
5月	0:00:00	-	-	10409:56:01	0:28:53	10410:24:54
6月	0:00:00	-	-	11123:20:54	9:29:22	11132:50:16
7月	0:00:00	-	-	11537:09:56	0:02:36	11537:12:32
8月	0:29:03	259:21:14	142:56:37	11180:55:46	0:17:40	11181:13:26
9月	0:00:00	149:42:54	187:56:49	9312:57:55	0:24:06	9313:22:01
10月	0:00:00	319:45:48	309:36:14	12136:26:18	1:36:29	12138:02:47
11月	0:00:00	97:59:40	306:09:09	12423:59:42	0:00:19	12424:00:01
12月	0:00:00	174:36:30	127:42:04	14062:24:31	0:11:45	14062:36:16
平成15年 1月	0:00:00	0:17:48	229:41:04	13445:01:42	14:53:18	13459:55:00
2月	0:00:00	58:54:45	142:33:55	10060:55:24	68:52:11	10129:47:35
3月	0:00:00	0:00:00	200:05:24	9229:22:31	2:02:06	9231:24:37
合 計	0:29:03	1060:38:39	1646:41:16	134282:51:05	98:21:59	134381:13:04

5.5.2 SX-5

SX-5	H1S	H1L	H2S	H2L	H4	H8	合計	ETC	総合計
平成14年 4月	331:46:06	261:43:45	139:39:57	128:47:16	106:31:45	0:00:00	968:28:49	0:11:19	968:40:08
5月	371:53:58	181:35:09	323:40:05	167:41:29	62:46:23	0:00:00	1107:37:04	0:22:51	1107:59:55
6月	445:53:09	329:47:20	288:06:46	131:23:08	51:23:34	0:00:00	1246:33:57	0:01:23	1246:35:20
7月	92:49:52	325:44:02	81:37:15	228:45:07	54:30:10	0:00:00	783:26:26	0:04:24	783:30:50
8月	300:27:47	411:05:56	183:36:25	356:35:52	124:33:25	0:00:00	1376:19:25	40:11:09	1416:30:34
9月	725:35:00	582:10:07	202:33:27	162:33:39	127:55:33	0:00:00	1800:47:46	42:06:31	1842:54:17
10月	564:05:46	611:04:29	392:44:47	301:26:33	140:35:23	0:00:00	2009:56:58	42:42:49	2052:39:47
11月	575:13:34	1042:06:57	549:14:39	614:54:31	170:00:24	0:00:00	2951:30:05	28:25:04	2979:55:09
12月	844:40:44	1027:23:15	557:20:47	679:06:25	124:50:37	0:00:00	3233:21:48	179:35:39	3412:57:27
平成15年 1月	557:53:40	524:51:33	452:27:02	502:06:47	165:12:27	0:00:00	2202:31:29	43:36:35	2246:08:04
2月	201:25:00	287:10:00	222:45:16	351:44:09	119:21:53	0:00:00	1182:26:18	0:18:48	1182:45:06
3月	196:36:12	312:08:28	313:54:06	283:33:24	15:19:37	0:00:00	1121:31:47	0:00:54	1121:32:41
合 計	5208:20:48	5896:51:01	3707:40:32	3908:38:20	1263:01:11	0:00:00	19984:31:52	377:37:26	20362:09:18

5.5.3 HPC

HPC	W1	W2	合計	ETC	総合計
平成14年 4月	3:31:02	60:46:55	64:17:57	0:00:01	64:17:58
5月	50:41:28	72:53:21	123:34:49	0:00:01	123:34:50
6月	3:29:34	114:12:49	117:42:23	0:00:03	117:42:26
7月	0:57:25	78:20:52	79:18:17	0:00:01	79:18:18
8月	0:02:44	7:47:41	7:50:25	0:00:01	7:50:26
9月	32:49:50	168:32:03	201:21:53	0:00:00	201:21:53
10月	48:41:10	253:55:20	302:36:30	0:00:00	302:36:30
11月	94:49:35	140:53:23	235:42:58	10:31:57	246:14:55
12月	106:26:55	280:47:59	387:14:54	0:00:56	387:15:50
平成15年 1月	29:18:23	304:05:40	333:24:03	60:02:33	393:26:36
2月	28:56:50	224:23:56	253:20:46	17:55:29	271:16:15
3月	45:30:18	56:11:07	101:41:25	0:00:14	101:41:39
合計	445:15:14	1762:51:06	2208:06:20	88:31:16	2296:37:36

5.6 ジョブ処理件数

5.6.1 VPP5000

VPP	V1	V2	V3	V4	V5	VP6	VC	VP23	ZZ1	ZZ2	合計	ETC	総合計
平成14年 4月	205	645	95	559	299	87	0	0	0	0	1,890	0	1,890
5月	464	631	181	1,027	535	88	0	0	0	0	2,926	0	2,926
6月	455	649	200	857	542	70	0	0	0	0	2,773	0	2,773
7月	439	549	120	740	601	79	0	0	0	0	2,528	0	2,528
8月	589	457	86	809	467	80	0	1	4	5	2,498	0	2,498
9月	386	749	196	897	559	85	0	0	3	1	2,876	0	2,876
10月	511	812	225	791	690	83	0	0	7	4	3,123	0	3,123
11月	454	694	305	1,038	733	101	0	0	1	3	3,329	0	3,329
12月	362	828	175	636	531	85	0	0	5	38	2,660	0	2,660
平成15年 1月	273	659	154	636	383	84	0	0	4	11	2,204	0	2,204
2月	274	581	95	600	417	98	0	0	6	22	2,093	0	2,093
3月	151	715	167	590	446	102	0	0	0	18	2,189	0	2,189
合計	4,563	7,969	1,999	9,180	6,203	1,042	0	1	30	102	31,089	0	31,089

5.6.2 SGI2800,Origin3800

O2K	G1	G2	G3	G4	G2S	G5S	G5S1	G5S2	G5S3	G5S4	合計	ETC	総合計
平成14年 4月	405	248	214	45	499	0	0	0	0	0	1,411	0	1,411
5月	465	174	197	31	447	0	0	0	0	0	1,314	0	1,314
6月	424	175	182	76	269	0	0	0	0	0	1,126	0	1,126
7月	332	273	410	18	288	0	0	0	0	0	1,321	0	1,321
8月	249	112	169	43	210	0	0	0	0	0	783	0	783
9月	356	221	309	47	404	0	0	0	0	0	1,337	0	1,337
10月	436	140	282	56	217	0	0	0	0	0	1,131	0	1,131
11月	487	230	252	50	0	0	0	0	0	0	1,019	0	1,019
12月	296	221	308	60	0	0	0	0	0	0	885	0	885
平成15年 1月	204	243	421	63	0	0	0	0	0	0	931	0	931
2月	162	310	389	82	0	0	0	0	0	0	943	0	943
3月	134	230	383	146	0	0	0	0	0	0	893	0	893
合計	3,950	2,577	3,516	717	2,334	0	0	0	0	0	13,094	0	13,094

5.6.3 SX-5

SX-5	H1S	H1L	H2S	H2L	H4S	H8	合計	ETC	総合計
平成14年 4月	59	66	190	64	162	0	541	0	541
5月	148	106	108	42	65	0	469	0	469
6月	143	143	94	98	85	0	563	0	563
7月	109	46	80	66	68	0	369	0	369
8月	215	89	136	51	31	0	522	0	522
9月	527	74	93	55	30	0	779	0	779
10月	611	117	119	154	195	0	1,196	0	1,196
11月	597	114	126	90	272	0	1,199	0	1,199
12月	105	63	85	51	282	0	586	0	586
平成15年 1月	160	52	122	65	97	0	496	0	496
2月	76	51	88	34	65	0	314	0	314
3月	122	55	58	36	73	0	344	0	344
合計	2,872	976	1,299	806	1,425	0	7,378	0	7,378

5.6.4 HPC

HPC	W1	W2	合計	ETC	総合計
平成14年 4月	42	113	155	0	155
5月	44	82	126	0	126
6月	13	37	50	0	50
7月	9	17	26	0	26
8月	7	3	10	0	10
9月	37	31	68	0	68
10月	124	48	172	0	172
11月	42	29	71	0	71
12月	37	58	95	0	95
平成15年 1月	49	34	83	0	83
2月	29	40	69	0	69
3月	48	36	84	0	84
合計	481	528	1,009	0	1,009

5.6.5 SP2

SP2	P1	P2	P3	合計	ETC	総合計
平成14年 4月	45	34	35	114	0	114
5月	21	22	36	79	0	79
6月	21	16	10	47	0	47
7月	37	27	38	102	0	102
8月	15	19	13	47	0	47
9月	15	55	48	118	0	118
10月	75	23	26	124	0	124
11月	91	13	22	126	0	126
12月	14	14	26	54	0	54
平成15年 1月	3	16	23	42	0	42
2月	-	-	-	-	-	-
3月	-	-	-	-	-	-
合計	337	239	277	853	0	853

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(2003年3月31日併任終了) 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 (2002年4月1日より併任) 九州大学情報基盤センター	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 (計算科学研究センター長 2003年4月1日併任)	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
西村 幹夫	基礎生物学研究所細胞生物学研究系 細胞機構研究部門	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
田中 秀樹	岡山大学 理学部	教授
波田 雅彦	東京都立大学 大学院理学研究科	教授
常行 真司	東京大学 大学院理学系研究科	助教授
中井 謙太	東京大学 医科学研究所附属ヒトゲノム解析センター	助教授
中村 春木	大阪大学 蛋白質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(2003年3月31日まで併任)
岡崎 進	教授
青柳 睦	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(2003年4月1日より立命館大学理工学部助教授)
真木 淳	非常勤研究員(2003年4月1日より九州大学勤務)
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(2002年12月1日より事務補佐員)

6.3 応用プログラム相談員一覧

田中 純志	特別研究員	平成14年	8月	—	平成15年	3月
三上 泰治	特別研究員	平成14年	8月	—	平成15年	3月
永田 武志	特別研究員	平成14年	9月	—	平成15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	59年度
計算機システム	M-180 2台	M-180 2台	M-200H M-180	M-200H M-180 疎結合	M-200H 2台 疎結合	同57年度	同57年度
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
プロジェクト数	63	176	192	183	198	199	207
利用者数							
機構内 ^a	48	70	69	91	94	102	110
機構外	107	254	325	330	375	426	446
合計	155	334	394	421	469	528	556
稼働時間(時間)	1,087	6,071	6,553	6,721	6,305	6,170	6,316
CPU時間利用申請(時間)	(200H基準)					(200H基準)	(200H基準)
申請	929	4,666	11,033	10,230	11,938	13,053	14,799
許可	816	3,171	7,427	8,306	10,141	10,091	10,768
総使用CPU時間 ^c (時間)	509	2,405	5,405	6,320	8,205	8,489	8,508
ジョブ処理件数 ^c	41,521	155,980	183,840	214,847	239,771	236,519	226,727
ライブラリプログラム 新規登録数	0	20	43	20	699	10	118
データベース新規登録数	0	2	0	0	3	3	0
センター使用論文数 ^d	0	24	93	118	190	185	202

	60年度	61年度	62年度	63年度	平成元年度	平成2年度	平成2年度
計算機システム	(~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	同63年度	同63年度
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	226	234	213	231	239	256	272
利用者数							
機構内 ^a	130	141	143	137	146	140	158
機構外	464	496	520	515	544	593	623
合計	594	637	663	652	690	733	781
稼働時間(時間)	6,016	6,368	6,444	6,091	5,694	6,768	6,749
CPU時間利用申請(時間)			(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b
申請	15,536	33,832/8,458*	9,880	12,439	14,694	16,622	20,606
許可	12,080	28,184/7,046*	7,978	10,418	12,347	14,626	17,846
総使用CPU時間 ^c (時間)	12,770	20,092/5,023e*	6,624	7,872	8,300	11,975	11,874
ジョブ処理件数 ^c	274,431	289,915	278,956	278,104	253,418	295,5038	346,987
ライブラリプログラム 新規登録数	160	39	4	7	3	0	0
データベース新規登録数	1	0	1	0	0	0	0
センター使用論文数 ^d	206	237	223	211	218	248	229

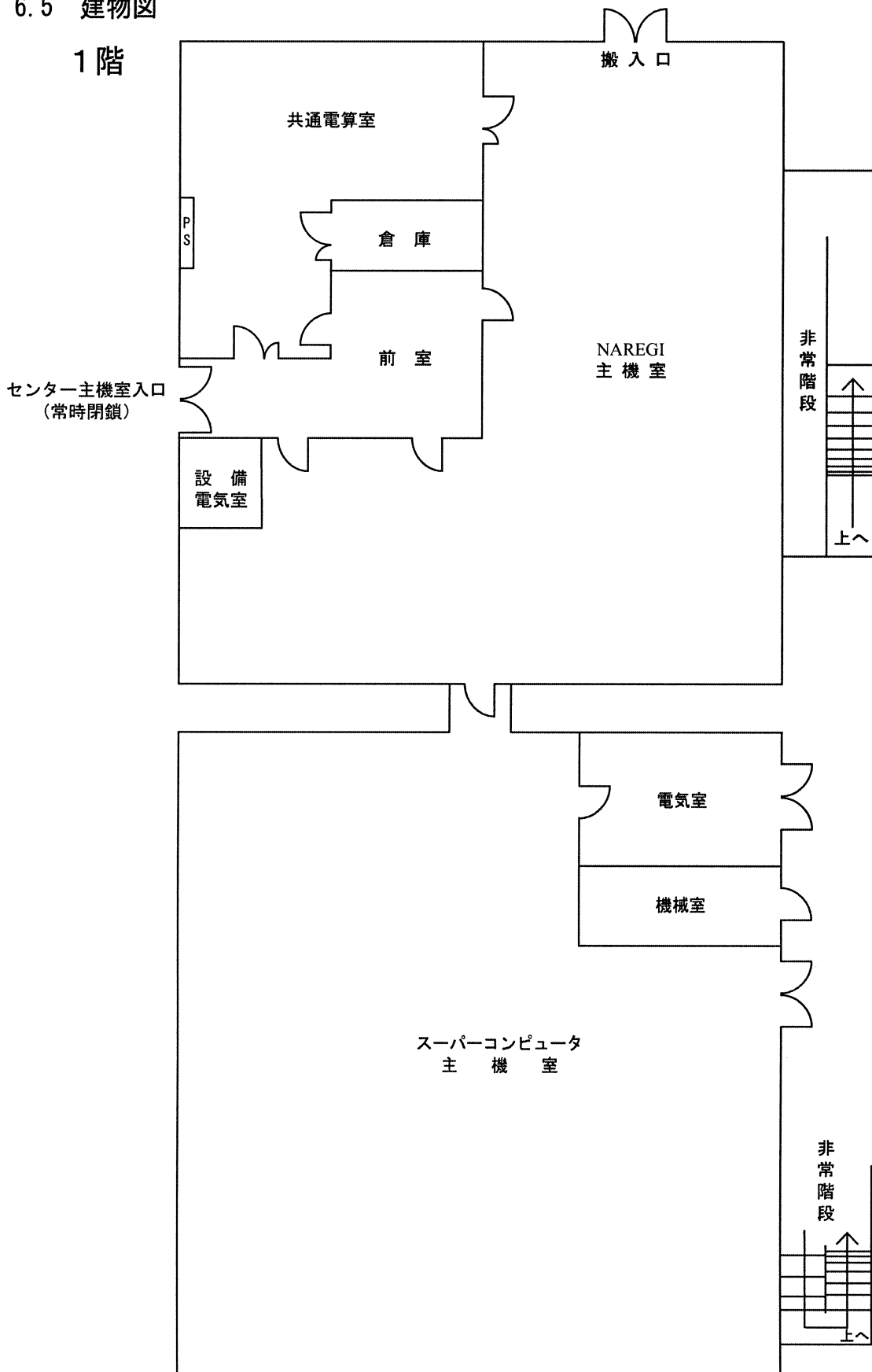
	平成4年度	平成5年度	平成6年度	平成7年度	平成8年度	平成9年度
計算機システム	同63年度	M-680H S-820/80(～12月) SX-3/34R(1月～)	M-680H(～11月) SX-3/34R HSP(1月～) SP2(1月～)	SX-3/34R HSP(1月～) SP2(1月～)	SX-3/34R HSP SP2 HPC(9月～)	SX-3/34R HSP SP2 HPC SR2201(11月～)
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	271	225	222	210	201	188
利 用 者 数						
機 構 内 ^a	143	127	139	129	139	126
機 構 外	661	589	601	597	574	609
合 計	804	716	740	726	713	735
稼働時間(時間)	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	SX-3/34R HSP SP2 HPC(9月～)	SX-3/34R HSP SP2 HPC SR2201(11月～)
CPU時間利用申請(時間)	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b	(HSP基準) ^b	(HSP基準) ^b	(HSP基準) ^b
申 請	21,153	18,311	21,781	40,358	58,425	73,910
許 可	19,110	16,027	19,393	37,446	51,499	58,650
総使用CPU時間 ^c (時間)	12,491	16,306	24,781	156,076	207,790	262,365
ジョブ処理件数 ^c	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	0	10	10	7	15	3
データベース新規登録数	0	1	1	1	0	0
センター使用論文数 ^d	282	267	306	275	279	331

	平成10年度	平成11年度	平成12年度	平成13年度	平成14年度
計算機システム	SX-3/34R HSP SP2 HPC SR2201 Origin2000 (10月～) SX-5 (3月～)	SX-3/34R (12月まで) SX-5 SP2 HPC SR2201 Origin2000	VPP5000 SGI2800, Origin3800 SX-5 SP2 HPC	VPP5000 SGI2800, Origin3800 SX-5 SP2 HPC	VPP5000 SGI2800, Origin3800 SX-5 SP2 HPC
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	174	166	156	148	144
利 用 者 数					
機 構 内 ^a	138	125	101	100	104
機 構 外	566	539	534	504	479
合 計	704	664	635	604	583
稼働時間(時間)	(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 (SGI系) 8,319 (SX5) 8,496 (SP2) 8,492 (HPC) 8,490	(VPP5000) 8,492 (SGI系) 8,422 (SX5) 8,558 (SP2) 8,555 (HPC) 8,555	(VPP5000) 8,506 (SGI系) 8,324 (SX5) 8,391 (SP2) 7,118 (HPC) 8,386
CPU時間利用申請(時間)	(HSP基準) ^b	(SP2 Thin基準) ^b	(SP2 Thin基準) ^b	(SP2 Thin基準) ^b	(SP2 Thin基準) ^b
申 請	76,804	97,788	249,405	251,785	237,872
許 可	67,159	79,964	209,393	234,866	229,401
総使用CPU時間 ^c (時間)	273,575	239,671	619,294	678,128	2,030,643
ジョブ処理件数 ^c	45,173	40,697	58,685	70,680	55,522
ライブラリプログラム 新規登録数	13	14	18	4	15
データベース新規登録数	0	0	0	0	0
センター使用論文数 ^d	347	391	302	302	281

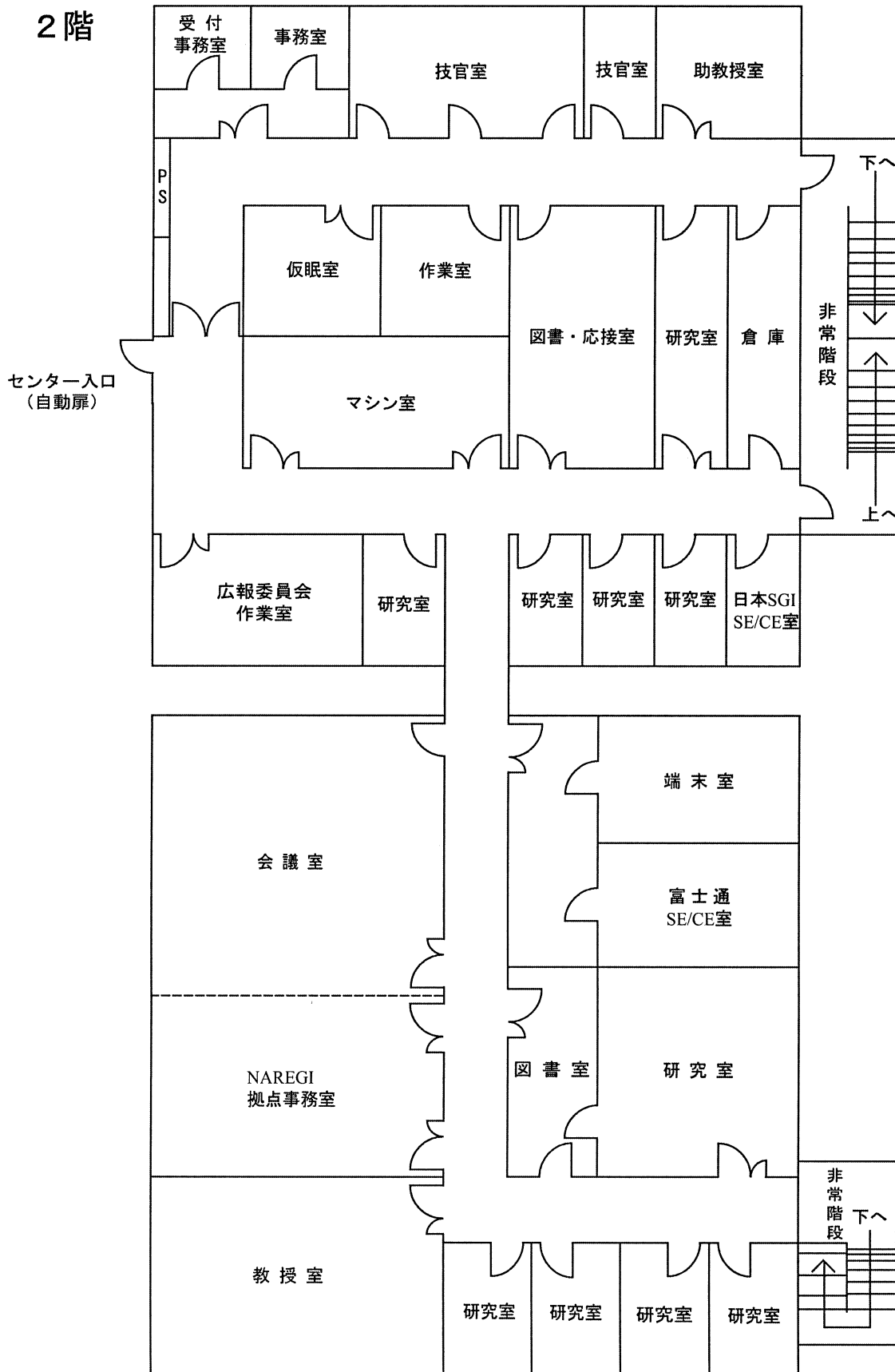
a: 機構内利用者にはアイドル課題のための重複を含めない。
b: 申請および使用の詳細については、5.1を参照。
c: ここでの値はCPU時間、件数ともライブラリ開発、センター業務使用分などすべてを含む。
d: センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたもの。
e: S-810、S-820、SX-3、SX-5、VPPのCPU時間については、スカラー時間とベクトル時間の単純な和である。
*: 下段はM-680H基準

6.5 建物図

1階



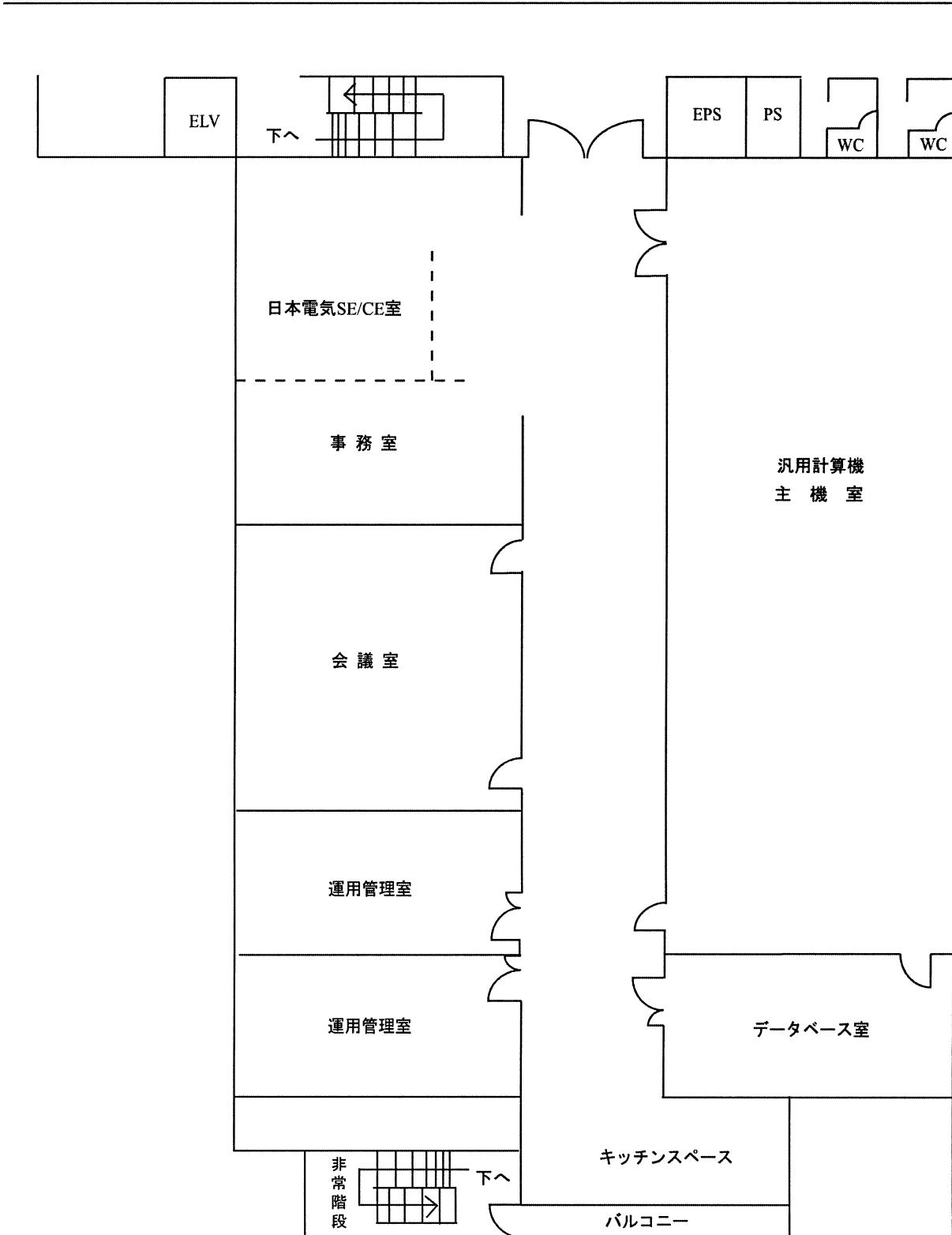
2階



NAREGI . 超高速コンピュータ網形成プロジェクト

E地区 山手2号館

2階



6.6 マニュアル一覧

よく利用されるマニュアルには以下のようなものがある。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場合は 6.6.8「マニュアルの購入と問い合わせ先」の問い合わせ先に直接連絡してください。

6.6.1 VPP5000 用マニュアル（日本語版）

- (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

6.6.2 VPP5000 用マニュアル (英語版)

- (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

6.6.3 SGI2800/Origin3800 用マニュアル (英語版)

- (1) C++ Programm 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)

6.6.4 SX-7 用マニュアル（日本語版）

- (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き
- (7) ストリームプログラミングの手引き
- (8) 言語支援機能利用の手引
- (9) C++言語説明書
- (10) Fortran90/SX 言語説明書
- (11) Fortran90/SX プログラミングの手引き
- (12) Fortran90/SX 並列処理機能利用の手引き
- (13) MPI/SX ユーザーズガイド
- (14) DBX 利用の手引き
- (15) PDBX 利用の手引き
- (16) PSUITE 利用の手引き
- (17) C++/SX プログラミングの手引き
- (18) 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)
- (19) 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)
- (20) 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)
- (21) 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)
- (22) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(高速機能編)
- (23) 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)
- (24) 科学技術計算ライブラリ ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第1分冊)
- (25) 科学技術計算ライブラリ ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第2分冊)
- (26) 科学技術計算ライブラリ ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第3分冊)
- (27) 科学技術計算ライブラリ ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第4分冊)
- (28) 科学技術計算ライブラリ ASLCINT/SX 利用の手引(高速機能編)
- (29) 科学技術計算ライブラリ ASLCINT/SX 利用の手引(並列処理機能編)

6.6.5 SX-7 用マニュアル（英語版）

英語版マニュアルについては、日本電気株式会社 中部支社公共第2営業部（6.6.8 マニュアルの購入と問い合わせ先の「SX-7 用マニュアルの購入に関する問い合わせ先」を参照）に直接問い合わせして下さい。

6.6.6 TX-7 用マニュアル（日本語版）

TX-7 に関するマニュアルは、すべてオンライン版のみの提供となっている。センターホームページ <http://www.rccs.orion.ac.jp/> から、「センター利用者限定ページ」の「日本電気 TX7 オンラインマニュアル」から閲覧・取得できる。ただし、OS 関連については、RedHat Linux 7.2（平成 15 年現在）を使用しているため、一般的な「RedHat Linux に関する情報」を利用して下さい。

- (1) 科学技術計算ライブラリ ASL 利用の手引き（基本機能編第 1 分冊）
- (2) 科学技術計算ライブラリ ASL 利用の手引き（基本機能編第 2 分冊）
- (3) 科学技術計算ライブラリ ASL 利用の手引き（基本機能編第 3 分冊）
- (4) 科学技術計算ライブラリ ASL 利用の手引き（基本機能編第 4 分冊）
- (5) 科学技術計算ライブラリ ASL 利用の手引き（スーパーコンピュータ対応機能編）
- (6) 科学技術計算ライブラリ ASLINT/ASLCLIB 利用の手引き（基本機能編第 1 分冊）
- (7) 科学技術計算ライブラリ ASLINT/ASLCLIB 利用の手引き（基本機能編第 2 分冊）
- (8) 科学技術計算ライブラリ ASLINT/ASLCLIB 利用の手引き（基本機能編第 3 分冊）
- (9) 科学技術計算ライブラリ ASLINT/ASLCLIB 利用の手引き（基本機能編第 4 分冊）
- (10) 科学技術計算ライブラリ ASLINT/ASLCLIB 利用の手引き
(スーパーコンピュータ対応機能編)
- (11) 科学技術計算ライブラリ ASLINT/ASLCLIB 利用の手引き（統計機能編）
- (12) 科学技術計算ライブラリ統計機能 ASLSTAT 利用の手引き
- (13) 科学技術計算ライブラリ外部記憶拡張機能 ASLEME 利用の手引き
- (14) NEC Fortran コンパイラ リリースノート
- (15) NEC Fortran コンパイラ ユーザーズ・ガイド
- (16) NEC Fortran プログラマーズ・リファレンスマニュアル
- (17) NEC Fortran ライブラリ・リファレンスマニュアル

6.6.7 TX-7 用マニュアル（英語版）

英語版マニュアルに関しては、6.6.6 TX-7 用マニュアル（日本語版）の(1)～(17)に対する英語版と、さらに以下の(1)～(2)が英語版で提供されている。これらについても日本語版と同様に、オンライン版のみの提供となっている。

- (1) MPI/EX ユーザーズガイド
- (2) MathKeisan ユーザーズガイド

6.6.8 マニュアルの購入と問い合わせ先

VPP5000 用マニュアルの購入にあたっての問い合わせ先

〒460-8585 名古屋市中区錦1丁目10番1号
富士通株式会社 東海支社 公共営業部
担 当 : 岡本、浅野
E-mail : okamoto.yukio@jp.fujitsu.com, a-asano@jp.fujitsu.com
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 : 近藤宏昭
E-mail : ha-kondo@sgi.co.jp
電 話 : 06-6343-6702
F A X : 06-6343-6713

SX-7 用マニュアルの購入にあたっての問い合わせ先

〒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公共第2営業部
担 当 : 中村正基
電 話 : 052-222-2121
F A X : 052-222-2129

7. 現状と将来構想 (分子研レポート'02より転載)

5-3 計算科学研究センターの現状と将来構想

5-3-1 現在の計算機システムと運用

2003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、本年度に更新されE地区に設置された汎用高速演算システムは右側に示している。

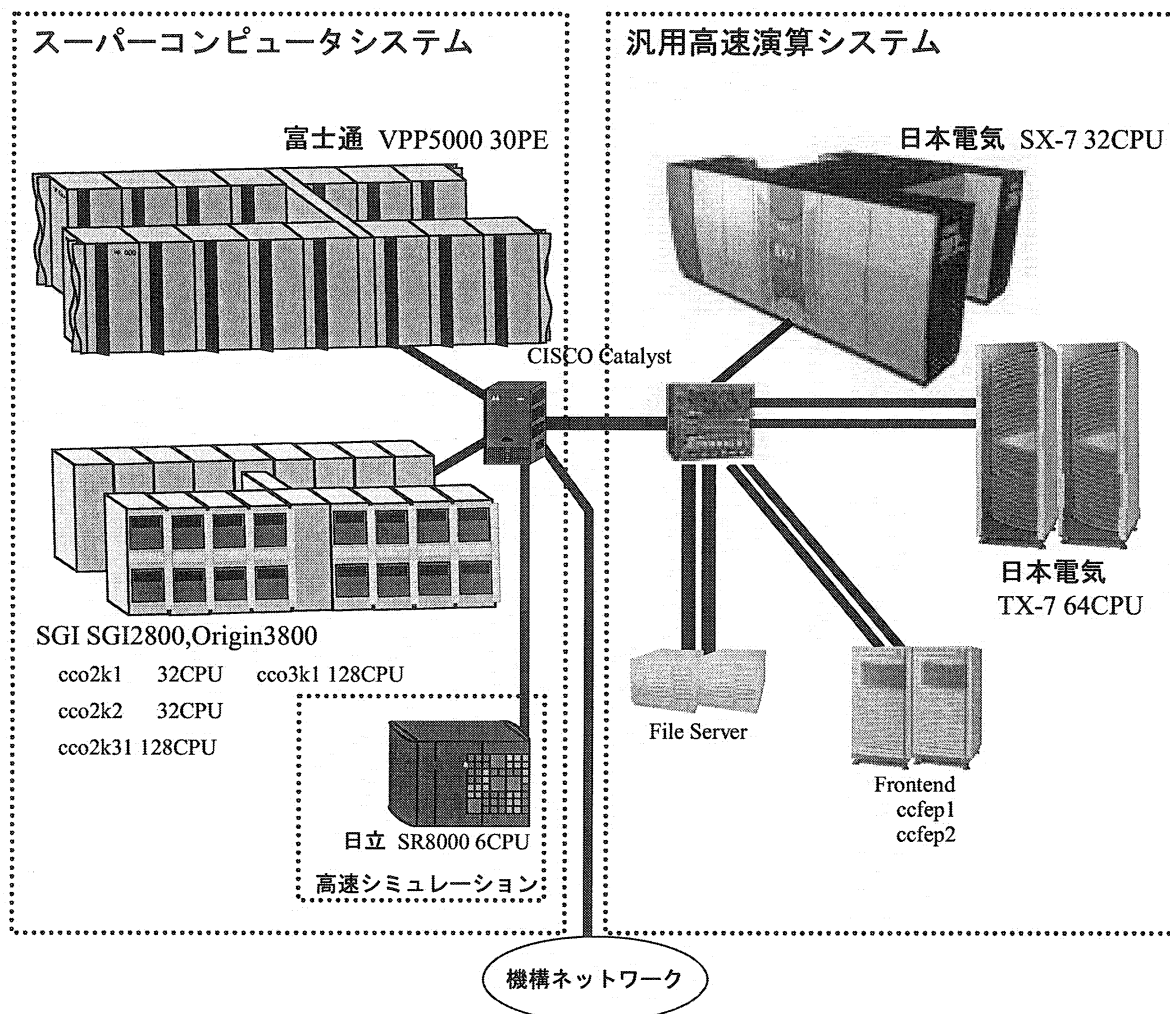


図1 システム構成図 (平成15年2月1日現在)

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が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。

一方、今年度に導入された汎用高速演算システムは、NEC製SX-7で構成される主システムとTX-7で構成される副システムとから成る。NEC SX-7は1 CPUあたり8.8 Gflopsの最高演算能力を持ち、256 GBの共有メモリに結合された32 CPUの演算装置から構成され、総合演算性能282.5 Gflopsの共有メモリ型ベクトル計算機である。また、TX-7は4 GBのメモリを持ち最大4 Gflopsの演算性能を有するCPUを32台搭載したノードを基本単位として構成されている。本システムは2ノードから成り、合わせて64 CPU、256 GB、256 Gflopsの総合性能を有する分散メモリ型スカラー計算機である。このうち主システムは高速演算、大容量メモリを活用した大規模分子科学計算に用いられ、また副システムは分子科学計算に加え、ホモロジー検索を主としたバイオサイエンス分野での利用に供される。

本計算科学研究センターは、今年度も国内約150グループ、600名にも及ぶ分子科学者に対して共同利用施設として広くサービスを提供し、分子科学分野における計算科学の中核的拠点センターとしての役割を果たしてきている。一方で、世界の最先端研究をリードしこれを推進していくために、各研究室における小規模のワークステーションクラスはもちろんのこと、他の計算機センターでも不可能なような大規模計算を実行可能とするために、今年度からは従来の「一般利用」枠に加えて試験的に「特別利用」枠を設け、巨大計算のための環境整備を行ってきた。ここでの成果を踏まえて次年度からは「特別利用」枠を本格的に運用し、センターの全CPU性能の約半分を上限として、計算分子科学分野において世界のピークとなる巨大計算の場を提供していく予定である。

5-3-2 計算科学研究センター将来構想

「計算科学研究センター」を廻る環境は大きく変化しようとしている。そのひとつは2004年度に始まる法人化およびそれともなう分子科学研究所、基礎生物学研究所および生理学研究所の「自然科学研究機構」への再編成である。他のひとつは本年度の補正予算で認められた「ナノグリッド計算」研究プロジェクトの発足である。これらのふたつの変化はこれまでの計算科学研究センターの位置付けや運営そのものに甚大な影響を及ぼすため、この点について述べておきたい。

(A) 「自然科学研究機構」の発足と計算科学研究センター

本岡崎国立共同研究機構の3研究所は2004年度を期して国立天文台および核融合科学研究所とともに新たに「自然科学研究機構」として再出発する。この再出発に際して岡崎機構の4つの共通施設（統合バイオサイエンスセンター、計算科学研究センター、動物実験センター、アイソトープ実験センター）をどのように位置付けるかということが大きな課題となっている。未だ、最終的な結論にいたってはいないが、現段階では、「これらの4つのセンターを『岡崎共通施設』として位置付け、それぞれのセンターの管理、運営（予算、人事を含む）についてはそれらのセンターがもともと所属していた研究所が全面的な責任を負う」という線でもとまりつつある。法人化後の計算科学研究センターの将来計画についても分子科学研究所の責任において作成することになっており、下記のような基本的な精神でもとめつつある。

[将来計画]

計算科学研究センターは、分子科学分野における計算科学の拠点として分野に先導的な研究を実施するとともに、計算機資源を分子科学に関わる全国の共同利用研究に供し、計算分子科学の飛躍的な進展を目指す。同時に、分子科学のひとつの応用として、生物科学やナノ科学分野への新たな展開を図る。

これらの目標を実現するため、理論研究系との連携の下に、量子化学や分子シミュレーションなどに関わる計算分

子科学の新しい方法論を構築し、また大規模計算を実行することにより、これまでは不可能であった分子や分子集団系の複雑なふるまいの解明を目指す。一方で、分子科学、および分子科学と他分野との境界領域における計算ニーズに応えるために、ハードウェア、ソフトウェア、スタッフの充実を図る。

[共同利用研究の内容]

主として電子状態理論、化学反応動力学理論、分子シミュレーション、統計力学理論等に基づいた計算科学的手法を用いて、分子の電子状態と構造、化学反応経路や反応メカニズムの解明、そして凝集系における分子集合体の構造や動力学など、分子科学に関わる世界トップレベルでの理論的研究を行う。一方で、これら分子科学研究を基盤に持ちながら、生物分子科学、ナノ分子科学をはじめとして、分子科学と他分野との境界領域における計算科学研究を展開する。

[共同利用研究を進める場合の改善内容]

従来は、広く分子科学者の研究需要に応えるために中規模程度までの計算を主な研究対象としていたが、これに加えて世界をリードする先端的な研究を実施するために、全CPU能力の半分程度の資源を集約して、厳選された少数の研究者が一般の計算機センターでは不可能な大規模計算を実行できる環境を整える。一方で、計算分子科学の共同利用研究が円滑に推進できるよう、これまで不十分であった当該分野の計算科学的手法に関するライブラリーソフトの整備を進める。

(B) 「ナノグリッド計算」研究プロジェクト

2003年度より「ナノグリッド」と名付けた研究プロジェクトが計算科学研究センターを中心に発足する運びとなった。このプロジェクトは我が国にグリッド計算環境を整備することを主眼として進行している国家プロジェクト「超高速コンピュータ網形成プロジェクト (NAREGI)」の分野別研究開発拠点として「グリッド計算環境の有効性を実証する研究」の推進を目的に5年間の予定で行われる。

昨年、計算科学研究センターは我が国における物質系5研究所の共同提案として「ナノ計算科学」プロジェクトに関する概算要求を提出していた。(提案の主旨等については2001年度「分子研レポート」を参照のこと。)このプロジェクト自身は採択されなかったが、これと同様の主旨をもつ上記のプロジェクトが、今回、NAREGIプロジェクトの一環として補正予算の形で採択されたものである。

本プロジェクトはグリッド計算環境下で以下に示された6つの課題に関する研究を遂行し、それらの研究成果を通じてグリッド計算環境の有効性を実証すると同時に、ナノサイエンス分野における統合シミュレーションシステムを構築し、大学や産業界の研究者に広く公開することを目指している。6つのグループの研究課題と担当研究機関は以下のとおりである。(これらの研究機関の他に、高エネ機構および京大・化研がグループメンバーとして共同研究を行うことになっている。)

- 1) 機能性ナノ分子 (分子研)
- 2) ナノ分子集合体 (分子研)
- 3) ナノ電子系 (東北大・金研)
- 4) ナノ磁性 (東大・物性研)
- 5) ナノ複合設計 (産総研)
- 6) ナノ設計実証 (産業界から公募)