

## 1 巻頭言

計算分子科学研究系

斉藤真司

私がこのセンターを利用し始めたのは約 15 年前で、ワークステーションが研究室に広まり始めた時期でした。計算機を気軽に使える環境になったものの、その性能はまだ不十分で、さらにインターネットも十分には普及していなかったために、大規模計算の実施のために分子研に足を運んでいました。使っていたのは、メモリーが 128MB の“大型”計算機でした。4000 次元の行列の対角化がオンコアでできると当時は喜んだものですが、安いノートパソコンですら数百 MB のメモリーが載っている今日です。しかも、その大型計算機を日本全国からの多くのユーザーで使っていたわけですから、計算機環境の長足の進歩に驚かされるとともに、当時を知らない人たちからすると失笑といったところでしょうか。

インターネットの普及、安価で高性能のパソコンの普及により、実験研究者が X 線や NMR の装置を研究室にもつように、研究室で多数のパソコン、PC クラスタを所有するようになってきました。このような流れのなか、このセンターだけでなく全国のいわゆる大型計算機センターも、その新しい姿を求めて様々な模索をしていることと思います。計算科学センターは、前身の分子研の電子計算機センターから数えると 28 年が経ちました。この間の量子化学計算、固体電子論、液体や生体系の分子シミュレーションなどの分野への分子・物質科学研究の全国共同利用センターとしての寄与は計り知れません。しかし、センターを取り巻くさまざまな最近の状況、幅広いユーザースペクトルを鑑み、永瀬、岡崎、森田先生をはじめとして、センターのこれからの方向性をいろいろと検討してこられました。

そして、現在その新たな展開が進んでいます。その 1 つとして、施設利用 S の新設があります。スパコンの更新による大幅な CPU 増強にともない、これまで不可能であった超大規模計算への道を開くものです。また、2 つめの展開として、昨年末に密度汎関数法に関する勉強会が企画されました。3 名の先生をお招きし、大学院生をはじめとする 100 名を超える参加者が集まり成功裏に終わりました。以上のような、従来の枠を超えた超大規模計算環境の提供、勉強会などを通してのこれからの世代を担う人たちへの支援は、分子・物質科学の計算拠点センターとして重要な方向であり、1 ユーザーとしても非常に期待しています。

上記の展開以外にも、このセンターらしさを発揮できる良いアイデアをお持ちのユーザーの方もおられることと思います。センターの一員として、今後とも皆様からのご意見やご支援をお聞かせいただければ幸いです。

## 2 スーパーコンピュータワークショップについて

本年度のスーパーコンピュータワークショップは「次期スパコン構想と今後の大規模分子計算」というタイトルのもとで行われ、所内外をあわせて90名の参加者があった。

今回は計算科学分野の最先端で活躍中の先生方の招待講演を行い、分子科学分野のユーザにわかりやすく現在の High-End Computing の動向を解説していただいた。また、本センターで分子科学分野の大型計算を推進、計画されている先生方を招待し、現在の研究と新システムでの利用について講演していただいた。さらに、次年度のスーパーコンピュータシステムの導入に向けて、新システムへの要望、利用などについても、センタースタッフおよびユーザの間で議論を深めた。

### 平成 16 年度スーパーコンピュータワークショップ

日時：2005 年 3 月 7 日（月）－8 日（火）

場所： セミナー ― 岡崎コンファレンスセンター小会議室  
懇親会 ― 同 中会議室

テーマ： 「次期スパコン構想と今後の大規模分子計算」

参加者： 90 名（所外 67 名、所内 23 名）

#### 3 月 7 日（月）

1：00－1：10 はじめに 中村宏樹（分子研所長）

座長 岡崎進（計算センター）

1：10－2：10 HPC とグリッド・コンピューティングの将来 松岡聡（東工大）

2：10－3：10 次期地球シミュレータと最先端 HPC の動向 佐藤哲也（JAMSTEC）

3：10－3：30 休憩

座長 南部伸孝（計算センター）

3：30－4：00 グリッド環境を使ったナノ分野におけるリアルタイム・コラボレーション 岡崎進  
（計算センター）

4：00－4：30 量子化学計算の高速化及び並列化 石村和也（分子研）

4：30－5：00 超大規模 MD シミュレーション 吉井範行（計算センター）

5：00－5：30 新炭素材料と大規模物性計算 岡田晋（筑波大）

6：00－8：00 懇親会

#### 3 月 8 日（火）

9：00－9：20 新システムでの大型計算プロジェクト 森田明弘（計算センター）

座長 三浦伸一（計算センター）

9：20－9：50 遷移金属元素を含む複合電子系の構造と反応の理論的研究 榊茂好（京大）

9：50－10：20 金属－芳香族有機分子からなるサンドイッチクラスターの理論研究 藪下聡  
（慶大）

10：20－10：50 第一原理分子動力学計算によるポリアモルフィズムの研究 森下徹也（産総研）

10：50－11：10 休憩

座長 石田干城（計算センター）

11：10－11：40 ロドプシン光受容タンパク質の光化学反応動力学 林重彦（京大）

11：40－12：10 液体の運動と多次元振動分光法 斎藤真司（名大）

12：10－12：40 スーパーコンピュータによる生体超分子系のシミュレーション 北尾彰朗（東大）

12：40－12：50 おわりに 永瀬茂（センター長）

### 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)、高速演算サーバーシステム(日本電気製 SX-7)、高速演算サーバー副システム(日本電気製 TX-7)による独立性を重視した UNIX 分散処理システムです(ユーザのホームディレクトリはファイルサーバー上にあり、各システムは NFS マウントすることによって統一しています)。

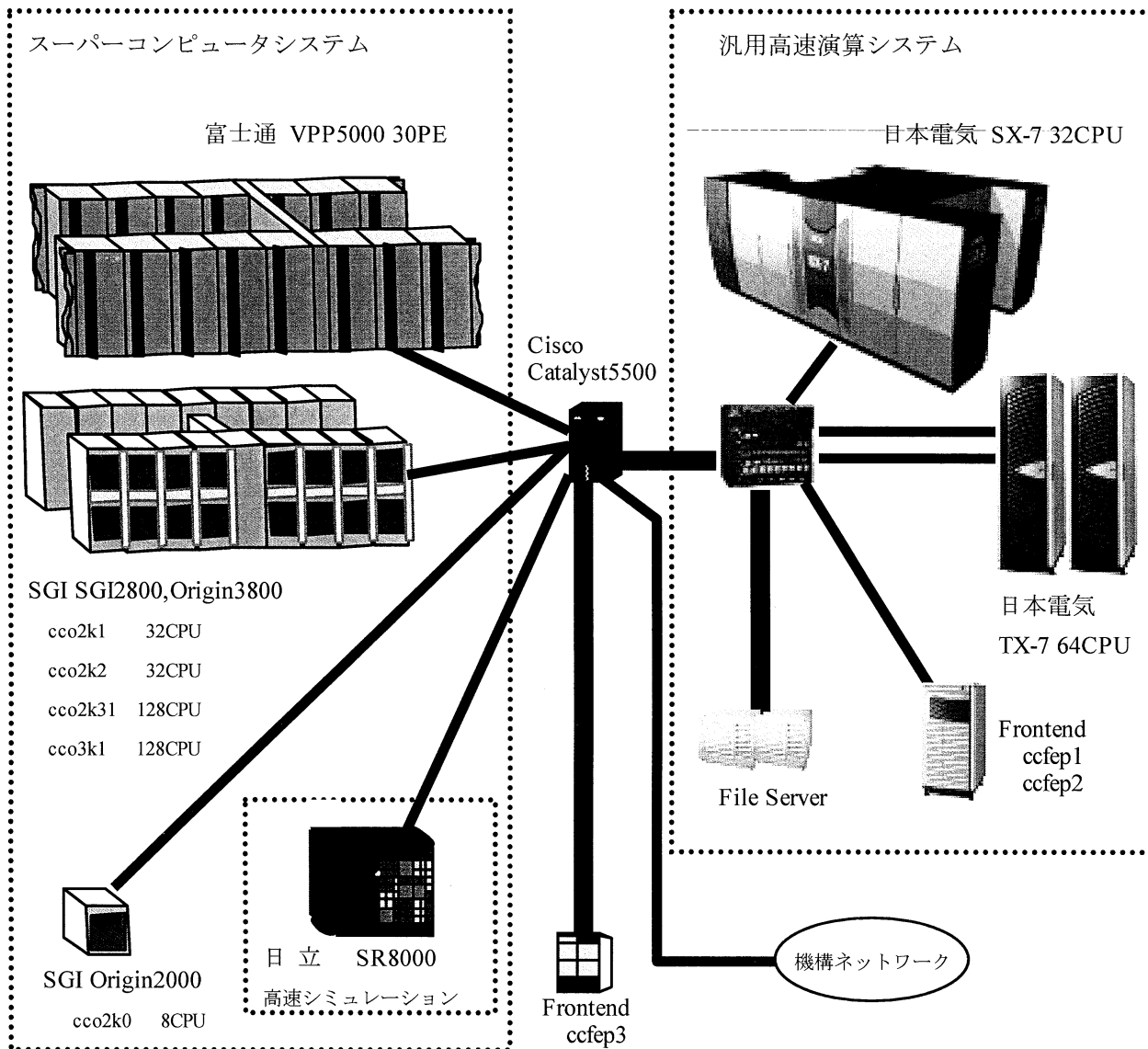


図 3.1 計算機システム概略図

- ・ 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ます。
- ・ 機構内に GigaBitEther (8Gbps) の LAN が張り巡らせており、所内はもちろんのこと三研究所(分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所)の支線ネットワーク間を統合的に接続・利用できます。
- ・ SINET を経由してインターネットにアクセスできます。

### 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 処理を行っています。

#### <演算処理装置>

|         |                         |
|---------|-------------------------|
| 主記憶容量   | 256GB                   |
| 総理論演算性能 | 288GFLOPS(9.6GFLOPS/PE) |
| CPU 台数  | 30 台                    |

#### <磁気ディスク装置(アレイディスク)>

|                   |                                |
|-------------------|--------------------------------|
| 総容量<br>(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 処理を行っています。

#### <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 ではジョブ管理(NQE)、バッチ処理を行っています。

#### <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<br>(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 高速演算サーバーシステム(日本電気製 SX-7)

SX-7 ではジョブ管理(NQSII)、バッチ処理と TSS 処理を行っています。

#### <演算処理装置>

|         |                             |
|---------|-----------------------------|
| 主記憶装置   | 256GB (共有メモリ)               |
| 総理論演算性能 | 282.5GFLOPS(8.83GFLOPS/CPU) |
| CPU 台数  | 32 台                        |

#### <磁気ディスク装置(アレイディスク)>

|                   |       |
|-------------------|-------|
| 総容量<br>(内訳)       | 4.5TB |
| 一時作業ファイル領域(/work) | 3TB   |
| 短期保存ファイル領域(/week) | 1TB   |

他はシステムで使用しています。

### 3.1.4 高速演算サーバー副システム(日本電気製 TX-7)

TX-7 ではジョブ管理(LSF)、バッチ処理と TSS 処理を行っています。

#### <演算処理装置>

|         |                            |
|---------|----------------------------|
| 主記憶装置   | 128GB (1 ノードあたり)           |
| 総理論演算性能 | 256GFLOPS(4GFLOPS/CPU)     |
| CPU 台数  | 64 台 (2 ノード 1 ノードあたり 32 台) |

#### <磁気ディスク装置(アレイディスク)>

|                   |       |
|-------------------|-------|
| 総容量               | 3TB   |
| (内訳)              |       |
| 一時作業ファイル領域(/work) | 1TB   |
| 短期保存ファイル領域(/week) | 1.5TB |
| 他はシステムで使用しています。   |       |

### 3.1.5 ファイルサーバ(主・副)システム(日本電気製 TX-7/tp5430)

2 台によるクラスター構成です。

#### <演算処理装置>

|        |              |
|--------|--------------|
| 主記憶装置  | 2GB(1GB×2 台) |
| CPU 台数 | 2 台(クラスター構成) |

#### <磁気ディスク装置(アレイディスク)>

|              |     |
|--------------|-----|
| 総容量          | 6TB |
| (内訳)         |     |
| ユーザホームディレクトリ | 6TB |

### 3.1.6 フロントエンド(日本電気製 TX-7/i6010)

ccfep1 と ccfep2 の 2 台を使用しています。

#### <演算処理装置>

|        |                    |
|--------|--------------------|
| 主記憶装置  | 4GB (それぞれ 2GB×2 台) |
| CPU 台数 | 4 台 (それぞれ 2 台×2 台) |

### 3.2 キュー構成方針

|   |                                                                                                                                                |
|---|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1 | パラレル利用キューには、現在のパソコン(Pentium4 3GHz, Itanium2 1.5GHz相当 6GFLOPS, Memory 2GB)の10倍程度を単位としたコンピュータ資源を提供する。多重度は1とする。課金は経過時間とする(キュー占有時間)。CPU数の可変提供はしない。 |
| 2 | シリアル利用キューは、最高性能のCPUを提供する。長時間解放を実現する。課金はCPU時間とする。スループットをあげるため、多重度を2とする。                                                                         |
| 3 | パラレル利用キューとシリアル利用キューの実行ジョブ数比は1:1程度にする                                                                                                           |
| 4 | ライブラリ環境整備の一環として、比較的使用の多いアプリケーションについては、初級者利用の便宜を図る。特に機器更新に伴う環境の変化を隠蔽する様にウェブからの利用環境を整備する。                                                        |
| 5 | 申請に特別利用枠を設け、許可されたユーザは特別利用キューを使用できる様にする。長時間利用、大規模CPU利用が可能な環境を提供する。                                                                              |
| 6 | キュー構成をシンプルにする。                                                                                                                                 |

### 3.3 キュー構成

|            |                                                                                                                                                                                                                            |
|------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| VPP5000    | <p>30CPUを次のように割り当てます。</p> <p>24CPUは、PF、PF016、PF008がお互いに共有して使用します。<br/>内16CPUは、PF016とPF008が優先的に使用し、8CPUはPFが占有します。</p> <p>5CPUは、SF、SF001がお互いに共有して使用します。<br/>内2CPUは、SF001が優先的に使用し、3CPUはSFが占有します。</p> <p>1CPUは、会話処理が占有します。</p> |
| SGI2800    | 192CPUはPSが占有します。                                                                                                                                                                                                           |
| Origin3800 | <p>128CPUを次のように割り当てます。</p> <p>128CPUはPS、PS128がお互いに共有して使用します。<br/>内128CPUはPS128が優先的に使用します。</p>                                                                                                                              |
| SX-7       | <p>32CPUを次のように割り当てます。</p> <p>24CPUは、PN、PN016、PN008がお互いに共有して使用します。<br/>内16CPUは、PN016とPN008が優先的に使用し、8CPUはPNが占有します。</p> <p>7CPUは、SN、SN001がお互いに共有して使用します。<br/>内2CPUは、SN001が優先的に使用し、5CPUはSNが占有します。</p> <p>1CPUは、会話処理が占有します。</p> |
| TX-7       | <p>64CPUを次のように割り当てます。</p> <p>64CPUは、PI、PI016、PI032がお互いに共有して使用します。<br/>内32CPUは、PI032とPI016が優先的に使用し、32CPUはPIが占有します。</p>                                                                                                      |

(注意)

- (1) 特別利用キューのジョブが投入された場合、既に実行されているジョブの終了を待ってから実行されます(先入先出)。

キュー構成表中の言葉の意味は下記の通りです。

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

◆パラレル利用キュー

| キュー名 | CPU時間 | メモリ     | 多重度 | PE/CPU数  | ユーザ制限 | グループ制限 | 備考                    |
|------|-------|---------|-----|----------|-------|--------|-----------------------|
| PF   | 48時間  | 56(7)GB | 3-1 | 8×(3-1)  | 1     | 1      | VPP5000 76.8GFLOPS    |
| PN   | 48時間  | 64GB    | 3-1 | 8×(3-1)  | 1     | 1      | SX-7 70.64GFLOPS      |
| PI   | 48時間  | 64GB    | 4-2 | 16×(4-2) | 2     | 2      | TX-7 83.2GFLOPS       |
| PO   | 96時間  | 16GB    | 8-0 | 16×8     | 4     | 4      | Origin3800 12.8GFLOPS |
| PS   | 96時間  | 16GB    | 12  | 16×12    | 6     | 6      | SGI2800 9.6GFLOPS     |

(注意)

- (1) PSキューは、SGI2800の3つのマシン（マシン名：cco2k1、cco2k2、cco2k31）を使用していますが、キュー管理システムの仕様上、各マシンにおいて、ユーザ制限とグループ上限を設定することしか出来ない為、必ずしも6本のジョブが実行されることを保証していません。各マシンにおけるユーザ制限、グループ制限は下記のとおりです。

| マシン名    | ユーザ制限 | グループ制限 |
|---------|-------|--------|
| cco2k1  | 1     | 1      |
| cco2k2  | 1     | 1      |
| cco2k31 | 4     | 4      |
| 合計      | 6     | 6      |

(注意)

- (1) PSキューへ投入されたジョブは、ロードバランシング機能により、負荷の低いマシンに自動的に振り分けられます。
- (2) ここで言う多重度は、同時に実行できる最大ジョブ数を指します。運用枠内の実質的な多重度は1です。

◆シリアル利用キュー

| キュー名 | CPU時間 | メモリ | 多重度   | PE/CPU数 | ユーザ制限 | グループ制限 | 備考                |
|------|-------|-----|-------|---------|-------|--------|-------------------|
| SF   | 96時間  | 6GB | 10-6  | 5-3     | 5     | 5      | VPP5000 9.6GFLOPS |
| SN   | 96時間  | 4GB | 14-10 | 7-5     | 7     | 7      | SX-7 8.83GFLOPS   |

(注意)

- (1) ここで言う多重度は、同時に実行できる最大ジョブ数を指します。運用枠内の実質的な多重度は2です。

◆会話処理

| キュー名    | CPU時間 | メモリ | 多重度 | PE/CPU数 | ユーザ制限 | グループ制限 | 備考 |
|---------|-------|-----|-----|---------|-------|--------|----|
| VPP5000 | 1時間   | 1GB | -   | 1       | -     | -      |    |
| SX-7    | 96時間  | 1GB | -   | 1       | -     | -      |    |
| SGI2800 | 4時間   | 1GB | -   | 1       | -     | -      |    |

◆特別利用キュー

| キュー名  | CPU時間 | メモリ      | 多重度 | PE/CPU数 | ユーザ制限 | グループ制限 | 備考                     |
|-------|-------|----------|-----|---------|-------|--------|------------------------|
| PF016 | 360時間 | 112(7)GB | 1   | 16      | 1     | 1      | VPP5000 153.6GFLOPS    |
| PF008 | 360時間 | 56(7)GB  | 2   | 8×2     | 1     | 1      | VPP5000 76.8GFLOPS     |
| PN016 | 360時間 | 128GB    | 1   | 16      | 1     | 1      | SX-7 141.28GFLOPS      |
| PN008 | 360時間 | 64GB     | 2   | 8×2     | 1     | 1      | SX-7 70.64GFLOPS       |
| PI032 | 360時間 | 128GB    | 1   | 32      | 1     | 1      | TX-7 166.4GFLOPS       |
| PI016 | 360時間 | 64GB     | 2   | 16×2    | 1     | 1      | TX-7 83.2GFLOPS        |
| PO128 | 360時間 | 128GB    | 1   | 128     | 1     | 1      | Origin3800 102.4GFLOPS |
| SF001 | 360時間 | 12GB     | 2   | 2       | 1     | 1      | VPP5000 9.6GFLOPS      |
| SN001 | 360時間 | 8GB      | 2   | 2       | 1     | 1      | SX-7 8.83GFLOPS        |

(注意)

- (1) 利用者が無い場合、資源はパラレル利用キューとシリアル利用キューに割り当てられます。  
PF016とPF008は、同じCPU資源を共有します。  
PN016とPN008は、同じCPU資源を共有します。  
PI032とPI016は、同じCPU資源を共有します。
- (2) ここで言う多重度は、同時に実行できる最大ジョブ数を指します。運用枠内の実質的な多重度は1です。



### 3.4 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ません。

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ます。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ません。利用点数 P は次の式に従ってジョブごとに算出されます。

#### ◆課金係数一覧

|               | 点数換算係数 |        | 並列係数   |        | CPU1時間当たりの消費点数<br>(3600×点数換算係数) |        |
|---------------|--------|--------|--------|--------|---------------------------------|--------|
|               | Scalar | Vector | Scalar | Vector | Scalar                          | Vector |
| VPP5000(S)    | 0.0450 | 0.0450 | 1.0    | 1.0    | 162.00                          | 162.00 |
| VPP5000(P)    | 0.0450 | 0.0450 | 0.7    | 0.7    | 113.40                          | 113.40 |
| SGI2800(P)    | 0.0035 | -      | 0.7    | -      | 8.82                            | -      |
| Origin3800(P) | 0.0045 | -      | 0.7    | -      | 11.34                           | -      |
| SX-7(S)       | 0.0600 | 0.0600 | 1.0    | 1.0    | 216.00                          | 216.00 |
| SX-7(P)       | 0.0600 | 0.0600 | 0.7    | 0.7    | 151.20                          | 151.20 |
| TX-7(P)       | 0.0250 | -      | 0.7    | -      | 63.00                           | -      |

(S):Serial  
(P): Parallel

#### ◆利用課金点数算出法

|          |                                                                                                                                                                                                                               |
|----------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Serial   | <p>課金点数 = CPU使用時間 × 点数換算係数 × 並列係数</p> <p>ベクトルプロセッサを持つマシンは、次のようになります。</p> <p>課金点数 = ( スカラ演算器使用時間 × 点数換算係数 × 並列係数 )<br/>+ ( ベクトル演算器使用時間 × 点数換算係数 × 並列係数 )</p> <p>SPU使用時間 : スカラプロセッサを使用した実時間<br/>VPU使用時間 : ベクトルプロセッサを使用した実時間</p> |
| Parallel | <p>課金点数 = ジョブ経過時間 × CPU数 × 点数換算係数 × 並列係数</p> <p>ジョブ経過時間 : ジョブの終了時間から開始時間を引いた時間<br/>CPU数 : ジョブが実行されたキューに割り当てられているCPU数 (例 : PN008なら8CPU)</p>                                                                                    |

#### ◆各ジョブにおける利用課金点数算出基本法

$$\text{PointSerial} = (\text{Scalar} \times \text{Scoe} \times \text{SPcoe}) + (\text{Vector} \times \text{Vcoe} \times \text{VPcoe})$$

Scalar : スカラ演算器使用時間 (秒)  
Vector : ベクトル演算器使用時間 (秒)  
Scoe : シリアルスカラ点数演算係数  
SPcoe : シリアルスカラ並列係数  
Vcoe : シリアルベクトル点数演算係数  
CPcoe : シリアルベクトル並列係数

$$\text{PointParallel} = \text{Elapsed-time} \times \text{CPUnum} \times \text{coe} \times \text{Pcoe}$$

Elapsed-time : ジョブ経過時間 (秒)

CPUnum : ジョブが実行されたキューに割り当てられている CPU 数

coe : パラレル点数演算係数

Pcoe : パラレル並列係数

(注意)

(1) CPUnum は、ユーザがジョブスクリプトにおいて指定した CPU 数ではなく、実行されたキューに設定されている CPU 数です。CPU 数は「3.2 キューの構成」にて確認してください。

#### ◆ユーザもしくはグループにおける利用課金点数算出基本法

$$P = P\text{vpps} + P\text{vppp} + P\text{sigp} + P\text{originp} + P\text{sx7s} + P\text{sx7p} + P\text{tx7p}$$

Pvpps : VPP5000 のシリアルジョブキューで利用した点数

Pvppp : VPP5000 のパラレルジョブキューで利用した点数

Psigp : SGI2800 のパラレルジョブキューで利用した点数

Poriginp : Origin3800 のパラレルジョブキューで利用した点数

Psx7s : SX-7 のシリアルジョブキューで利用した点数

Psx7p : SX-7 のパラレルジョブキューで利用した点数

Ptx7p : TX-7 のパラレルジョブキューで利用した点数

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

##### VPP5000 (S) の利用課金点数算出法

$$P\text{vpps} = (\text{Scalar} \times \text{Scoe} \times \text{SPcoe}) + (\text{Vector} \times \text{Vcoe} \times \text{VPcoe})$$

Scalar : VPP5000 のスカラ演算器使用時間 (秒)

Scoe : VPP5000 のシリアルスカラ点数演算係数 (0.0450)

SPcoe : VPP5000 のシリアルスカラ並列係数 (1.0)

Vector : VPP5000 のベクトル演算器使用時間 (秒)

Vcoe : VPP5000 のシリアルベクトル点数演算係数 (0.0450)

VPcoe : VPP5000 のシリアルベクトル並列係数 (1.0)

##### VPP5000 (P) の利用課金点数算出法

$$P\text{vppp} = \text{Elapsed-time} \times \text{CPUnum} \times \text{Coe} \times \text{Pcoe}$$

Elapsed-time : VPP5000 のジョブ経過時間 (秒)

CPUnum : ジョブが実行された VPP5000 キューに割り当てられている CPU 数

Coe : VPP5000 のパラレル点数演算係数 (0.0450)

Pcoe : VPP5000 のパラレル並列係数 (0.7)

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

##### SGI2800 (P) の利用点数算出法

$$P\text{sigp} = \text{Elapsed-time} \times \text{CPUnum} \times \text{Coe} \times \text{Pcoe}$$

Elapsed-time : SGI2800 のジョブ経過時間 (秒)

CPUnum : ジョブが実行された SGI2800 キューに割り当てられている CPU 数

coe : SGI2800 のパラレル点数演算係数 (0.0035)

Pcoe : SGI2800 のパラレル並列係数 (0.7)

## Origin3800(P) の利用点数算出法

$$Porigin = Elapsed-time \times CPUnum \times Coe \times Pcoe$$

|              |                                            |
|--------------|--------------------------------------------|
| Elapsed-time | : Origin3800 のジョブ経過時間 (秒)                  |
| CPUnum       | : ジョブが実行された Origin3800 キューに割り当てられている CPU 数 |
| coe          | : Origin3800 のパラレル点数演算係数 (0.0045)          |
| Pcoe         | : Origin3800 のパラレル並列係数 (0.7)               |

## ◆高速演算サーバシステム (SX-7) の利用課金点数算出法

### SX-7 (S) の利用点数算出法

$$P_{sx7s} = (Scalar \times Scoe \times SPcoe) + (Vector \times Vcoe \times VPcoe)$$

|        |                                 |
|--------|---------------------------------|
| Scalar | : SX-7 のスカラー演算器使用時間 (秒)         |
| Scoe   | : SX-7 のシリアルスカラー点数演算係数 (0.0600) |
| SPcoe  | : SX-7 のシリアルスカラー並列係数 (1.0)      |
| Vector | : SX-7 のベクトル演算器使用時間 (秒)         |
| Vcoe   | : SX-7 のシリアルベクトル点数演算係数 (0.0600) |
| VPcoe  | : SX-7 のシリアルベクトル並列係数 (1.0)      |

### SX-7 (P) の利用点数算出法

$$P_{sx7p} = Elapsed-time \times CPUnum \times Coe \times Pcoe$$

|              |                                      |
|--------------|--------------------------------------|
| Elapsed-time | : SX-7 のジョブ経過時間 (秒)                  |
| CPUnum       | : ジョブが実行された SX-7 キューに割り当てられている CPU 数 |
| coe          | : SX-7 のパラレル点数演算係数 (0.0600)          |
| Pcoe         | : SX-7 のパラレル並列係数 (0.7)               |

## ◆高速演算サーバ副システム(TX-7) の利用課金点数算出法

### TX-7 (P) の利用点数算出法

$$P_{tx7p} = Elapsed-time \times CPUnum \times Coe \times Pcoe$$

|              |                                      |
|--------------|--------------------------------------|
| Elapsed-time | : TX-7 のジョブ経過時間 (秒)                  |
| CPUnum       | : ジョブが実行された TX-7 キューに割り当てられている CPU 数 |
| coe          | : TX-7 のパラレル点数演算係数 (0.0250)          |
| Pcoe         | : TX-7 のパラレル並列係数 (0.7)               |

### キュー別コストパフォーマンス一覧

各キュークラスにおける1時間当たりの利用点数(消費点数/時)は、以下の表のようになります。

(注意)

- (1) 演算性能は、理論ピーク性能の総和です。単位は、GFLOPSです。
- (2) CP (コストパフォーマンス) は、1GFLOPSを得るのに必要な点数で、小さい方がお得です。
- (3) CP算出式は、(消費点数÷演算性能) です。
- (4) 消費点数は、利用点数算出式を使用して利用CPU1時間当たりの点数です。  
 パラレルジョブキューにおいては、経過時間1時間当たりの点数です。  
 ベクトル演算器搭載マシンにおいては、スカラのみで計算しています。
- (5) 標準時間算出式は、(消費点数÷400) です。該当消費点数を消化するCPU時間です。

#### シリアルジョブキュー

| キュー名 | CP     | 消費点数   | 標準時間    | 課金係数   | 並列係数 | 演算性能 | マシン名    | 備考 |
|------|--------|--------|---------|--------|------|------|---------|----|
| SF   | 16.875 | 162.0点 | 0.405時間 | 0.0450 | 1.0  | 9.6  | VPP5000 |    |
| SN   | 24.462 | 216.0点 | 0.540時間 | 0.0600 | 1.0  | 8.83 | SX-7    |    |

#### パラレルジョブキュー

| キュー名 | CP     | 消費点数    | 標準時間    | 課金係数   | 並列係数 | 演算性能  | マシン名       | 備考    |
|------|--------|---------|---------|--------|------|-------|------------|-------|
| PF   | 11.813 | 907.2点  | 2.268時間 | 0.0450 | 0.7  | 76.8  | VPP5000    | 8CPU  |
| PS   | 14.698 | 141.1点  | 0.353時間 | 0.0035 | 0.7  | 9.6   | SGI2800    | 16CPU |
| PO   | 14.172 | 181.4点  | 0.454時間 | 0.0045 | 0.7  | 12.8  | Origin3800 | 16CPU |
| PN   | 17.123 | 1209.6点 | 3.024時間 | 0.0600 | 0.7  | 70.64 | SX-7       | 8CPU  |
| PI   | 12.115 | 1008.0点 | 2.520時間 | 0.0250 | 0.7  | 83.2  | TX-7       | 16CPU |

## 4 一般報告

### 4.1 ライブラリプログラムの開発・公開

ライブラリプログラム開発は、新規プログラムの開発もしくは既存プログラムの改良・発展というかたちで行われたプログラム開発申請に基づいて、CPU 時間、ファイル容量などの計算資源を提供する代わりに、ライブラリプログラムのひとつとしてソフトウェアをセンターで実行可能な形式で登録し、一般ユーザーに向けて公開するものです。その他に、メーカー・ベンダーにソフトウェアのインストール作業を依頼したり、センター職員がインストール作業を実施したりしたものも、ライブラリプログラムとして公開しています。

平成 16 年度のライブラリプログラム開発の申請件数は 0 件でした。

また、平成 16 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 8 件です。

#### Fujitsu VPP5000 版

| プログラム名      | タイトル名                                                              |
|-------------|--------------------------------------------------------------------|
| Amber 8     | Amber 8: Assisted model building with energy refinement            |
| Gaussian 03 | Gaussian 03(C.01): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations |

#### SGI SGI2800/Origin3800 版

| プログラム名      | タイトル名                                                              |
|-------------|--------------------------------------------------------------------|
| Gaussian 03 | Gaussian 03(C.02): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations |

#### NEC SX-7 版

| プログラム名      | タイトル名                                                              |
|-------------|--------------------------------------------------------------------|
| Amber 8     | Amber 8: Assisted model building with energy refinement            |
| Gaussian 03 | Gaussian 03(C.01): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations |

#### NEC TX-7 版

| プログラム名      | タイトル名                                                              |
|-------------|--------------------------------------------------------------------|
| Amber 8     | Amber 8: Assisted model building with energy refinement            |
| Gaussian 03 | Gaussian 03(C.01): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations |

#### HITACHI SR8000 版

| プログラム名      | タイトル名                                                              |
|-------------|--------------------------------------------------------------------|
| Gaussian 03 | Gaussian 03(C.02): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations |

よって、平成 17 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す。

表 4.1 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 8     | Amber 8: 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          |
| Gaussian 03 | Gaussian 03(C.01): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations          |
| Gaussian 98 | Gaussian 98(A.11): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations          |
| GAMESS      | GAMESS(2003Jan14): General atomic and molecular electronic structure system |
| HONDO8      | HONDO(8.4): <i>Ab initio</i> MO calculation                                 |
| LAPACK/VP   | LAPACK:Linear algebra package                                               |
| Meld        | Program for many electron description                                       |
| MM2         | Molecular mechanics calculation by MM2 force field model                    |
| Molcas      | Molcas(4.1):Quantum chemistry program package for scientists                |
| Molpro      | Molpro (2002.3): A complete system of <i>ab initio</i> programs             |
| ScaLAPACK   | LAPACK (MPL parallel version) :Scalable linear algebra package              |
| SSL II/VP   | Scientific subroutine library II                                            |
| SSL II/VPP  | Scientific subroutine library II (data parallel cersion)                    |
| VASP        | VASP(4.6):Vienna <i>ab initio</i> simulation package                        |

\*\*\*\* SGI SGI2800/Origin3800 版 \*\*\*\*

| プログラム名      | タイトル名                                                                          |
|-------------|--------------------------------------------------------------------------------|
| ABINIT      | ABINIT(4.1.3): Periodic solids using DFT, pseudopotential and plane wave basis |
| Amber 8     | Amber 8: 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                             |
| Gaussian 03 | Gaussian 03(C.02): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations             |
| Gaussian 98 | Gaussian 98(A.11): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations             |
| GAMESS      | GAMESS(2003Jan14): General atomic and molecular electronic structure system    |
| HONDO 8     | HONDO(2002): <i>Ab initio</i> MO calculation package                           |
| LAPACK      | LAPACK:Linear algebra package                                                  |
| Meld        | Program for many electron description.                                         |
| MM2         | Molecular mechanics calculation by MM2 force field model                       |
| Molcas      | Molcas(5.4):Quantum chemistry program package for scientists                   |
| Molpro      | Molpro(2002.3): 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 8     | Amber 8: Assisted model building with energy refinement                       |
| Gaussian 03 | Gaussian 03(C.01): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations            |
| Gaussian 98 | Gaussian 8(A.11.3): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations           |
| GAMESS      | GAMESS(2002June20): General atomic and molecular electronic structure system  |
| Molcas      | Molcas(5.4):Quantum chemistry program package for scientists                  |
| Molpro      | MOLPRO(2002.3): A complete system of <i>ab initio</i> programs                |
| PRESTO      | PRESTO (ver.3): A program for handling series of peptide and protein sequence |
| VASP        | VASP(4.6):Vienna <i>ab initio</i> simulation package                          |

\*\*\*\* NEC TX-7 版 \*\*\*\*

| プログラム名  | タイトル名                                                                           |
|---------|---------------------------------------------------------------------------------|
| ABINIT  | ABINIT(v4.2.3): Periodic solids using DFT, pseudopotential and plane wave basis |
| Amber 8 | Amber 8: Assisted model building with energy refinement                         |

|             |                                                                              |
|-------------|------------------------------------------------------------------------------|
| Gaussian 03 | Gaussian 03(C.01): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations           |
| Gaussian 98 | Gaussian 98(A.11.3): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations         |
| GAMESS      | GAMESS(2002June20): General atomic and molecular electronic structure system |
| Molcas      | Molcas(5.4): Quantum chemistry program package for scientists                |
| Molpro      | Molpro(2002.3): 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                                                                |
|-------------|----------------------------------------------------------------------|
| Amber 5     | Amber 5: Assisted model building with energy refinement              |
| Gaussian 03 | Gaussian 03(C.02): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations   |
| Gaussian 98 | Gaussian 98(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: Crystal structure design support system            |
| MASPHYC   | Material design system by means of computer physics and chemistry |

## 4.2 データベース開発状況

計算科学研究センターのデータベースサービスとして、以下の2件のデータベースが登録されており、現在公開中です。このうち、1件のデータベース（QCLDB）については、開発の援助を行っており、毎年データの更新を行っています。

### (1) QCLDB（量子化学文献データベース）

（開発代表者）細矢治夫

総件数： 74,890 件

主要学術雑誌に掲載された *ab initio* 分子軌道計算を扱った文献のデータベースで、日本化学情報協会（JAICI）より世界中に配布されています。大学評価学位授与機構の行っている平成 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」の評価を得ました。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ます（J. Mol. Struct.(THEOCHEM), 669-670 (2004) 1-771）。WWW 版 QCLDB の利用については、平成 15 年秋からは、モニター制度の制限つきではありますが、本機構の計算科学研究センターから、WWW 版 QCLDB の無料公開が文部科学省から認められました。また、新しい QCLDB データフォーマットに対応した QCLDB II を、SQL を用いて WWW 化したものを URL:<http://qcldb2.ims.ac.jp/> で公開しています。

平成 16 年度に新規登録されたデータは、6,426 件です。

### (2) FCDB（力の定数に関するデータベース）

（開発代表者）田隅三生

総件数： 2,394 件

力の定数（Force Constant）に関する文献のデータベースで、WWW 版 FCDB（<http://ginger.ims.ac.jp/fcdb/>）を原則利用制限なしで公開サービスしています。新規開発は平成 13 年度で中止になっています。



## 5 平成16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 | 126     | 501  | 279,518 | 259,843 | 189,134 | 103,937,200 | 75,653,556 |
|       | 課題研究 | 1       | 3    | 3,000   | 2,812   | 2,023   | 1,124,800   | 809,211    |
|       | 協力研究 | 6       | 12   | 1,660   | 1,531   | 0       | 612,400     | 0          |
|       | 所内   | 17      | 75   | 53,410  | 53,410  | 34,487  | 21,364,000  | 13,794,747 |
| 生理学   | 所内   | 2       | 6    | 4,200   | 4,200   | 0       | 1,680,000   | 0          |
| 基礎生物学 | 所内   | 2       | 2    | 400     | 400     | 0       | 160,000     | 0          |
| 合計    |      | 154     | 599  | 342,188 | 322,196 | 225,644 | 128,734,400 | 90,257,514 |

※ CPU時間実績は、点数実績より逆算(点数/400=時間実績)を行って算出したものです。

### 5.2 電力使用および計算機稼働状況

| 年月      | 電力量 (Kwh) |           |           | システム稼働時間 |     |        |     |        |     |        |     |
|---------|-----------|-----------|-----------|----------|-----|--------|-----|--------|-----|--------|-----|
|         | B,E地区合計   | グリッド      | 総合計       | VPP      | *   | cco2k0 | *   | cco2k1 | *   | cco2k2 | *   |
| 平成16年4月 | 265,712   | 431,780   | 697,492   | 662      | 100 | 662    | 100 | 662    | 100 | 662    | 100 |
| 5月      | 265,769   | 465,760   | 731,529   | 734      | 100 | 734    | 100 | 734    | 100 | 734    | 100 |
| 6月      | 276,300   | 475,860   | 752,160   | 710      | 100 | 710    | 100 | 708    | 99  | 710    | 100 |
| 7月      | 299,288   | 496,640   | 795,928   | 735      | 100 | 732    | 100 | 732    | 100 | 729    | 99  |
| 8月      | 305,654   | 494,680   | 800,334   | 735      | 100 | 737    | 100 | 737    | 100 | 737    | 100 |
| 9月      | 281,990   | 473,780   | 755,770   | 700      | 97  | 709    | 100 | 709    | 100 | 709    | 100 |
| 10月     | 252,694   | 444,960   | 697,654   | 671      | 100 | 670    | 100 | 669    | 100 | 670    | 100 |
| 11月     | 250,167   | 455,320   | 705,487   | 685      | 100 | 684    | 100 | 684    | 100 | 683    | 100 |
| 12月     | 265,395   | 465,830   | 731,225   | 735      | 100 | 734    | 100 | 734    | 100 | 734    | 100 |
| 平成17年1月 | 264,358   | 446,030   | 710,388   | 736      | 100 | 736    | 100 | 735    | 100 | 736    | 100 |
| 2月      | 245,336   | 407,650   | 652,986   | 664      | 100 | 660    | 100 | 659    | 99  | 660    | 100 |
| 3月      | 277,379   | 447,800   | 725,179   | 736      | 100 | 735    | 100 | 735    | 100 | 735    | 100 |
| 合計      | 3,250,042 | 5,506,090 | 8,756,132 | 8,502    | 100 | 8,500  | 100 | 8,494  | 100 | 8,496  | 100 |

| 年月      | システム稼働時間 |     |        |     |       |     |       |     |        |     | KW/<br>稼働時間 |     |
|---------|----------|-----|--------|-----|-------|-----|-------|-----|--------|-----|-------------|-----|
|         | cco2k31  | *   | cco3k1 | *   | SX-7  | *   | TX-7  | *   | 平均     | *   |             | 合計  |
| 平成15年4月 | 662      | 100 | 658    | 99  | 613   | 93  | 655   | 99  | 5,942  | 405 | 5,942       | 405 |
| 5月      | 734      | 100 | 730    | 99  | 733   | 100 | 733   | 100 | 6,566  | 362 | 6,566       | 362 |
| 6月      | 710      | 100 | 710    | 100 | 710   | 100 | 710   | 100 | 6,377  | 389 | 6,377       | 389 |
| 7月      | 732      | 100 | 735    | 100 | 735   | 100 | 731   | 99  | 6,547  | 409 | 6,547       | 409 |
| 8月      | 737      | 100 | 734    | 100 | 734   | 100 | 736   | 100 | 6,587  | 415 | 6,587       | 415 |
| 9月      | 709      | 100 | 708    | 100 | 708   | 100 | 707   | 99  | 6,355  | 399 | 6,355       | 399 |
| 10月     | 670      | 100 | 670    | 100 | 670   | 100 | 670   | 100 | 6,058  | 377 | 6,058       | 377 |
| 11月     | 684      | 100 | 682    | 100 | 682   | 100 | 683   | 100 | 6,165  | 366 | 6,165       | 366 |
| 12月     | 734      | 100 | 735    | 100 | 735   | 100 | 734   | 100 | 6,572  | 362 | 6,572       | 362 |
| 平成16年1月 | 736      | 100 | 731    | 100 | 735   | 100 | 734   | 100 | 6,573  | 360 | 6,573       | 360 |
| 2月      | 660      | 100 | 662    | 100 | 662   | 100 | 661   | 100 | 5,984  | 371 | 5,984       | 371 |
| 3月      | 735      | 100 | 734    | 100 | 734   | 100 | 735   | 100 | 6,577  | 378 | 6,577       | 378 |
| 合計      | 8,500    | 100 | 8,489  | 100 | 8,451 | 99  | 8,489 | 100 | 68,614 | 383 | 68,614      | 383 |

※ \*は、マシン稼働率（マシン稼働時間+計画停止時間）÷通電時間（暦月度）です。

### 5.3 計算機利用状況

#### 5.3.1 CPU 使用時間

| 年月      | CPU使用時間 |    |        |   |         |    |         |    |         |    |
|---------|---------|----|--------|---|---------|----|---------|----|---------|----|
| マシン名    | VPP     | *  | cco2k0 | * | cco2k1  | *  | cco2k2  | *  | cco2k31 | *  |
| 平成16年4月 | 3,044   | 15 | 46     | 1 | 6,465   | 31 | 4,598   | 22 | 16,684  | 20 |
| 5月      | 4,670   | 21 | 133    | 2 | 9,892   | 42 | 11,060  | 47 | 45,374  | 48 |
| 6月      | 5,113   | 24 | 131    | 2 | 11,845  | 52 | 14,223  | 63 | 51,831  | 57 |
| 7月      | 6,763   | 31 | 462    | 8 | 19,725  | 84 | 16,126  | 69 | 66,428  | 71 |
| 8月      | 12,552  | 57 | 101    | 2 | 15,530  | 66 | 16,603  | 70 | 64,754  | 69 |
| 9月      | 11,090  | 53 | 37     | 1 | 10,391  | 46 | 10,319  | 46 | 52,407  | 58 |
| 10月     | 10,611  | 53 | 28     | 1 | 13,268  | 62 | 11,281  | 53 | 70,743  | 83 |
| 11月     | 6,490   | 32 | 36     | 1 | 13,393  | 61 | 13,823  | 63 | 59,440  | 68 |
| 12月     | 8,944   | 41 | 27     | 0 | 15,726  | 67 | 17,243  | 73 | 55,801  | 59 |
| 平成17年1月 | 10,471  | 47 | 38     | 1 | 17,041  | 72 | 18,116  | 77 | 62,491  | 66 |
| 2月      | 10,585  | 53 | 21     | 0 | 14,129  | 67 | 13,589  | 64 | 63,629  | 75 |
| 3月      | 13,539  | 61 | 31     | 1 | 15,527  | 66 | 15,763  | 67 | 57,115  | 61 |
| 合 計     | 103,872 | 41 | 1,090  | 2 | 162,931 | 60 | 162,744 | 60 | 666,698 | 61 |

| 年月      | CPU使用時間 |    |         |    |         |    |           |    |
|---------|---------|----|---------|----|---------|----|-----------|----|
| マシン名    | cco3k1  | *  | SX-7    | *  | TX-7    | *  | 合計        | @  |
| 平成16年4月 | 4,034   | 5  | 3,797   | 19 | 1,602   | 4  | 40,270    | 15 |
| 5月      | 15,855  | 17 | 5,023   | 21 | 6,876   | 15 | 98,883    | 27 |
| 6月      | 28,525  | 31 | 12,791  | 56 | 7,833   | 17 | 132,292   | 38 |
| 7月      | 37,556  | 40 | 13,506  | 57 | 14,161  | 30 | 174,727   | 49 |
| 8月      | 6,337   | 7  | 13,560  | 58 | 24,305  | 52 | 153,742   | 48 |
| 9月      | 23,955  | 26 | 7,432   | 33 | 21,573  | 48 | 137,204   | 39 |
| 10月     | 27,824  | 32 | 6,607   | 31 | 21,744  | 51 | 162,106   | 46 |
| 11月     | 44,321  | 51 | 9,200   | 42 | 11,115  | 25 | 157,818   | 43 |
| 12月     | 47,998  | 51 | 15,216  | 65 | 9,308   | 20 | 170,263   | 47 |
| 平成17年1月 | 66,450  | 71 | 15,805  | 67 | 20,928  | 45 | 211,340   | 56 |
| 2月      | 34,023  | 40 | 11,153  | 53 | 13,319  | 31 | 160,448   | 48 |
| 3月      | 28,674  | 31 | 15,930  | 68 | 17,146  | 36 | 163,725   | 49 |
| 合 計     | 365,553 | 34 | 130,020 | 48 | 169,910 | 31 | 1,762,818 | 42 |

※ CPU 時間の単位は時です。

※ 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す。

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

※ @は、各マシンの CPU 稼働率の平均値です

### 5.3.2 VPU 使用時間

| 年月<br>マシン名 | VPU使用時間 |    |        |    |         |    |
|------------|---------|----|--------|----|---------|----|
|            | VPP     | *  | SX-7   | *  | 合計      | @  |
| 平成16年4月    | 1,984   | 10 | 3,029  | 14 | 5,013   | 12 |
| 5月         | 3,296   | 15 | 3,854  | 16 | 7,150   | 16 |
| 6月         | 3,475   | 16 | 7,939  | 35 | 11,414  | 26 |
| 7月         | 4,341   | 20 | 8,464  | 36 | 12,805  | 28 |
| 8月         | 10,900  | 49 | 8,678  | 37 | 19,578  | 43 |
| 9月         | 8,964   | 43 | 5,270  | 23 | 14,234  | 33 |
| 10月        | 8,986   | 45 | 5,341  | 25 | 14,327  | 35 |
| 11月        | 5,442   | 27 | 7,323  | 34 | 12,765  | 31 |
| 12月        | 6,321   | 29 | 9,038  | 38 | 15,359  | 34 |
| 平成17年1月    | 7,914   | 36 | 9,704  | 41 | 17,618  | 39 |
| 2月         | 8,060   | 40 | 8,076  | 38 | 16,136  | 39 |
| 3月         | 8,823   | 40 | 11,885 | 51 | 20,708  | 46 |
| 合 計        | 78,506  | 31 | 88,601 | 33 | 167,107 | 32 |

※ VPU 時間の単位は時です。

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

※ @は、各マシンの VPU 稼働率の平均値です。

### 5.3.3 バッチジョブ処理件数

| 年月<br>マシン名 | バッチジョブ処理件数 |        |        |         |        |       |       |        |
|------------|------------|--------|--------|---------|--------|-------|-------|--------|
|            | VPP        | cco2k1 | cco2k2 | cco2k31 | cco3k1 | SX-7  | TX-7  | 合計     |
| 平成16年4月    | 682        | 217    | 203    | 588     | 53     | 541   | 355   | 2,639  |
| 5月         | 963        | 217    | 212    | 848     | 83     | 702   | 364   | 3,389  |
| 6月         | 795        | 175    | 250    | 632     | 77     | 830   | 182   | 2,941  |
| 7月         | 427        | 167    | 192    | 620     | 60     | 561   | 117   | 2,144  |
| 8月         | 382        | 154    | 111    | 334     | 123    | 682   | 116   | 1,902  |
| 9月         | 462        | 79     | 77     | 432     | 296    | 472   | 150   | 1,968  |
| 10月        | 247        | 99     | 116    | 511     | 547    | 436   | 209   | 2,165  |
| 11月        | 301        | 180    | 128    | 477     | 142    | 638   | 135   | 2,001  |
| 12月        | 618        | 122    | 164    | 471     | 422    | 488   | 191   | 2,476  |
| 平成17年1月    | 427        | 94     | 128    | 496     | 34     | 581   | 600   | 2,360  |
| 2月         | 285        | 152    | 171    | 496     | 564    | 428   | 563   | 2,659  |
| 3月         | 378        | 129    | 170    | 574     | 214    | 522   | 337   | 2,324  |
| 合 計        | 5,967      | 1,785  | 1,922  | 6,479   | 2,615  | 6,881 | 3,319 | 28,968 |

## 5.4 クラス別 CPU 使用時間

### 5.4.1 VPP5000

| VPP     | SF          | PF          | SF001      | PF016     | PF008     | vp23      | 合計           | ETC       | 総合計          |
|---------|-------------|-------------|------------|-----------|-----------|-----------|--------------|-----------|--------------|
| 平成16年4月 | 2654:04:10  | 386:13:20   | 0:00:00    | 0:04:59   | 0:00:00   | 0:00:00   | 3040:22:29   | 3:55:06   | 3044:17:35   |
| 5月      | 3216:17:11  | 1114:11:24  | 63:01:56   | 77:08:02  | 0:00:00   | 0:00:00   | 4640:46:00   | 29:10:47  | 4669:56:47   |
| 6月      | 3589:41:53  | 1303:09:56  | 0:00:00    | 68:07:22  | 114:47:32 | 114:47:32 | 5075:46:43   | 37:42:01  | 5113:28:44   |
| 7月      | 3412:58:47  | 3324:08:24  | 0:00:00    | 0:04:16   | 0:09:28   | 0:09:28   | 6737:34:29   | 25:05:31  | 6762:40:00   |
| 8月      | 3629:16:47  | 8894:23:30  | 0:00:00    | 0:00:00   | 0:00:00   | 0:00:00   | 12523:40:17  | 28:47:51  | 12552:28:08  |
| 9月      | 3369:40:14  | 7679:14:03  | 0:00:00    | 0:00:00   | 0:00:00   | 0:00:00   | 11048:54:17  | 41:20:11  | 11090:14:28  |
| 10月     | 3140:58:09  | 7444:09:20  | 0:00:00    | 0:00:00   | 0:00:00   | 0:00:00   | 10585:07:29  | 25:32:59  | 10610:40:28  |
| 11月     | 3407:24:08  | 3061:53:34  | 0:00:00    | 0:00:00   | 0:00:00   | 0:00:00   | 6469:17:42   | 20:53:45  | 6490:11:27   |
| 12月     | 3393:29:31  | 5365:56:11  | 158:03:14  | 0:00:00   | 0:00:00   | 0:00:00   | 8917:28:56   | 26:52:16  | 8944:21:12   |
| 平成17年1月 | 3515:24:16  | 6927:45:10  | 0:00:00    | 0:00:00   | 0:00:53   | 0:00:53   | 10443:10:19  | 27:30:48  | 10470:41:07  |
| 2月      | 2808:41:14  | 7245:32:41  | 447:32:30  | 0:00:00   | 49:35:48  | 49:35:48  | 10551:22:13  | 33:45:20  | 10585:07:33  |
| 3月      | 3182:01:21  | 9809:00:25  | 395:50:07  | 0:00:00   | 121:27:24 | 121:27:24 | 13508:19:17  | 31:03:26  | 13539:22:43  |
| 合計      | 39319:57:41 | 62555:37:58 | 1064:27:47 | 145:24:39 | 286:01:05 | 286:01:05 | 103541:50:11 | 331:40:01 | 103873:30:12 |

### 5.4.2 SGI2800,Origin3800

| 02K     | G1       | G2       | G3        | G4      | G2S     | PO           | PO128       |
|---------|----------|----------|-----------|---------|---------|--------------|-------------|
| 平成16年4月 | 13:37:54 | 21:16:09 | 244:44:30 | 0:00:01 | 0:00:00 | 147:50:33    | 2066:04:56  |
| 5月      | 0:00:00  | 0:00:00  | 0:00:00   | 0:00:00 | 0:00:00 | 592:17:06    | 12167:38:32 |
| 6月      | 0:00:00  | 0:00:00  | 0:00:00   | 0:00:00 | 0:00:00 | 1979:41:19   | 21219:49:13 |
| 7月      | 0:00:00  | 0:00:00  | 0:00:00   | 0:00:00 | 0:00:00 | 2109:36:49   | 8758:38:36  |
| 8月      | 0:00:00  | 0:00:00  | 0:00:00   | 0:00:00 | 0:00:00 | 3290:06:54   | 568:33:36   |
| 9月      | 0:00:00  | 0:00:00  | 0:00:00   | 0:00:00 | 0:00:00 | 11260:29:31  | 0:00:00     |
| 10月     | 0:00:00  | 0:00:00  | 0:00:00   | 0:00:00 | 0:00:00 | 16804:09:55  | 0:00:00     |
| 11月     | 0:00:00  | 0:00:00  | 0:00:00   | 0:00:00 | 0:00:00 | 4616:56:19   | 1427:19:27  |
| 12月     | 0:00:00  | 0:00:00  | 0:00:00   | 0:00:00 | 0:00:00 | 26150:38:16  | 0:06:14     |
| 平成17年1月 | 0:00:00  | 0:00:00  | 0:00:00   | 0:00:00 | 0:00:00 | 2616:53:44   | 5629:44:57  |
| 2月      | 0:00:00  | 0:00:00  | 0:00:00   | 0:00:00 | 0:00:00 | 26649:26:17  | 14:52:11    |
| 3月      | 0:00:00  | 0:00:00  | 0:00:00   | 0:00:00 | 0:00:00 | 18169:41:13  | 4:23:49     |
| 合計      | 13:37:54 | 21:16:09 | 244:44:30 | 0:00:01 | 0:00:00 | 114387:47:56 | 51857:11:31 |

| 02K     | PS           | 合計           | ETC          | 総合計           |
|---------|--------------|--------------|--------------|---------------|
| 平成16年4月 | 9161:26:26   | 11655:00:29  | 20172:05:02  | 31827:05:31   |
| 5月      | 41210:11:35  | 53970:07:13  | 28344:41:26  | 82314:48:39   |
| 6月      | 54036:59:47  | 77236:30:19  | 29318:29:12  | 106554:59:31  |
| 7月      | 60817:11:04  | 71685:26:29  | 68611:49:43  | 140297:16:12  |
| 8月      | 57875:36:23  | 61734:16:53  | 41590:56:31  | 103325:13:24  |
| 9月      | 47648:15:44  | 58908:45:15  | 38198:44:41  | 97107:29:56   |
| 10月     | 52066:09:06  | 68870:19:01  | 54274:28:45  | 123144:47:46  |
| 11月     | 56519:47:27  | 62564:03:13  | 68448:57:46  | 131013:00:59  |
| 12月     | 66278:53:58  | 92429:38:28  | 44365:51:39  | 136795:30:07  |
| 平成17年1月 | 61080:37:17  | 69327:15:58  | 94809:11:43  | 164136:27:41  |
| 2月      | 66023:00:57  | 92687:19:25  | 32703:15:45  | 125390:35:10  |
| 3月      | 58795:12:33  | 76969:17:35  | 40140:30:14  | 117109:47:49  |
| 合計      | 631513:22:17 | 798038:00:18 | 560979:02:27 | 1359017:02:45 |

## 5.4.3 SX-7

| SX-7    | SN          | PN          | SN001      | PN008     | PN016      | 合計           | ETC        | 総合計          |
|---------|-------------|-------------|------------|-----------|------------|--------------|------------|--------------|
| 平成16年4月 | 2704:53:15  | 442:25:51   | 0:02:09    | 6:30:49   | 0:34:24    | 3154:26:28   | 642:13:49  | 3796:40:17   |
| 5月      | 3826:06:32  | 1164:11:28  | 0:00:00    | 2:00:45   | 0:00:00    | 4992:18:45   | 30:33:58   | 5022:52:43   |
| 6月      | 4911:45:30  | 7456:09:18  | 341:48:07  | 0:00:44   | 3:45:13    | 12713:28:52  | 77:03:16   | 12790:32:08  |
| 7月      | 4791:12:25  | 8310:41:52  | 323:12:05  | 0:00:00   | 0:00:00    | 13425:06:22  | 80:44:09   | 13505:50:31  |
| 8月      | 4652:50:02  | 7931:27:34  | 930:09:14  | 0:00:00   | 13:21:51   | 13527:48:41  | 31:59:30   | 13559:48:11  |
| 9月      | 5075:19:24  | 1533:02:07  | 779:04:01  | 0:00:00   | 0:00:00    | 7387:25:32   | 44:36:17   | 7432:01:49   |
| 10月     | 4535:47:50  | 1834:56:10  | 145:59:03  | 0:00:00   | 0:00:00    | 6516:43:03   | 90:28:30   | 6607:11:33   |
| 11月     | 5021:41:38  | 4100:50:43  | 0:00:00    | 0:00:00   | 0:33:24    | 9123:05:45   | 76:58:11   | 9200:03:56   |
| 12月     | 4820:34:12  | 10192:08:39 | 54:30:58   | 0:12:33   | 103:28:45  | 15170:55:07  | 45:23:06   | 15216:18:13  |
| 平成17年1月 | 4510:43:43  | 10080:45:38 | 57:24:45   | 347:52:59 | 189:58:48  | 15186:45:53  | 617:55:43  | 15804:41:36  |
| 2月      | 3960:09:44  | 5503:52:01  | 0:03:01    | 122:51:52 | 1413:47:56 | 11000:44:34  | 151:58:12  | 11152:42:46  |
| 3月      | 5187:07:00  | 10613:28:41 | 0:00:00    | 2:11:08   | 5:51:13    | 15808:38:02  | 121:42:22  | 15930:20:24  |
| 合計      | 53998:11:15 | 69164:00:02 | 2632:13:23 | 481:40:50 | 1731:21:34 | 128007:27:04 | 2011:37:03 | 130019:04:07 |

| SX-7    | SN          | PN(ELAPS)   | SN001      | PN008(ELAPS) | PN016(ELAPS) | 合計           |
|---------|-------------|-------------|------------|--------------|--------------|--------------|
| 平成16年4月 | 2704:53:15  | 264:50:11   | 0:02:09    | 0:49:41      | 0:21:48      | 4836:03:08   |
| 5月      | 3826:06:32  | 312:41:38   | 0:00:00    | 0:25:02      | 0:00:00      | 6644:06:32   |
| 6月      | 4911:45:30  | 1390:36:36  | 341:48:07  | 0:00:21      | 0:15:12      | 16382:32:25  |
| 7月      | 4791:12:25  | 1981:53:35  | 323:12:05  | 0:00:00      | 0:00:00      | 20969:33:10  |
| 8月      | 4652:50:02  | 2056:50:11  | 930:09:14  | 0:00:00      | 18:23:10     | 22331:51:24  |
| 9月      | 5075:19:24  | 1247:39:34  | 779:04:01  | 0:00:00      | 0:00:00      | 15835:39:57  |
| 10月     | 4535:47:50  | 805:25:21   | 145:59:03  | 0:00:00      | 0:00:00      | 11125:09:41  |
| 11月     | 5021:41:38  | 783:21:01   | 0:00:00    | 0:00:00      | 0:36:44      | 11298:17:30  |
| 12月     | 4820:34:12  | 1591:22:09  | 54:30:58   | 0:03:31      | 14:04:48     | 17831:47:18  |
| 平成17年1月 | 4510:43:43  | 1419:46:26  | 57:24:45   | 50:39:23     | 16:09:26     | 16590:05:56  |
| 2月      | 3960:09:44  | 1040:10:54  | 0:03:01    | 17:11:09     | 193:28:07    | 15514:39:01  |
| 3月      | 5187:07:00  | 1771:28:51  | 0:00:00    | 0:18:52      | 1:36:51      | 19387:18:20  |
| 合計      | 53998:11:15 | 14666:06:27 | 2632:13:23 | 69:27:59     | 244:56:06    | 178433:57:42 |

## 5.4.4 TX-7

| TX-7    | PI           | PI016       | PI032    | 合計           | ETC     | 総合計          |
|---------|--------------|-------------|----------|--------------|---------|--------------|
| 平成16年4月 | 1594:03:48   | 3:49:51     | 4:06:40  | 1602:00:19   | 0:00:00 | 1602:00:19   |
| 5月      | 6868:25:56   | 3:47:59     | 3:43:30  | 6875:57:25   | 0:00:00 | 6875:57:25   |
| 6月      | 7833:11:38   | 0:00:00     | 0:00:00  | 7833:11:38   | 0:00:00 | 7833:11:38   |
| 7月      | 9640:24:53   | 4520:21:02  | 0:00:00  | 14160:45:55  | 0:00:00 | 14160:45:55  |
| 8月      | 18943:30:12  | 5361:37:18  | 0:00:00  | 24305:07:30  | 0:00:00 | 24305:07:30  |
| 9月      | 18943:19:00  | 2626:50:56  | 3:07:14  | 21573:17:10  | 0:00:00 | 21573:17:10  |
| 10月     | 21734:28:39  | 2:10:56     | 7:24:53  | 21744:04:28  | 0:00:00 | 21744:04:28  |
| 11月     | 10457:26:07  | 657:38:11   | 0:09:38  | 11115:13:56  | 0:00:00 | 11115:13:56  |
| 12月     | 7709:09:32   | 1598:06:46  | 0:18:22  | 9307:34:40   | 0:00:00 | 9307:34:40   |
| 平成17年1月 | 20916:31:51  | 11:56:55    | 0:00:00  | 20928:28:46  | 0:00:00 | 20928:28:46  |
| 2月      | 13319:26:52  | 0:01:32     | 0:00:00  | 13319:28:24  | 0:00:00 | 13319:28:24  |
| 3月      | 17125:38:30  | 20:35:42    | 0:09:49  | 17146:24:01  | 0:00:00 | 17146:24:01  |
| 合計      | 155085:36:58 | 14806:57:08 | 19:00:06 | 169911:34:12 | 0:00:00 | 169911:34:12 |

## 5.5 クラス別 VPU 使用時間

### 5.5.1 VPP5000

| VPP     | SF          | PF          | SF001     | PF016     | PF008     | vp23     | 合計          | ETC      | 総合計         |
|---------|-------------|-------------|-----------|-----------|-----------|----------|-------------|----------|-------------|
| 平成16年4月 | 1713:31:25  | 270:47:24   | 0:00:00   | 0:04:59   | 0:00:00   | 0:00:00  | 1984:23:48  | 0:01:50  | 1984:25:38  |
| 5月      | 2266:26:27  | 827:42:07   | 36:35:58  | 54:46:27  | 102:30:37 | 0:00:00  | 3288:01:36  | 8:02:28  | 3296:04:04  |
| 6月      | 2506:51:56  | 854:52:40   | 0:00:00   | 68:01:10  | 0:00:00   | 32:47:57 | 3462:33:43  | 12:48:43 | 3475:22:26  |
| 7月      | 2663:36:00  | 1671:56:04  | 0:00:00   | 0:00:50   | 0:02:30   | 0:02:17  | 4335:37:41  | 4:56:42  | 4340:34:23  |
| 8月      | 2728:39:26  | 8169:47:44  | 0:00:00   | 0:00:00   | 0:00:00   | 0:00:00  | 10898:27:10 | 1:09:45  | 10899:36:55 |
| 9月      | 2548:19:55  | 6412:51:44  | 0:00:00   | 0:00:00   | 0:00:00   | 0:00:00  | 8961:11:39  | 3:01:18  | 8964:12:57  |
| 10月     | 2567:41:46  | 6417:18:12  | 0:00:00   | 0:00:00   | 0:00:00   | 0:00:00  | 8984:59:58  | 0:48:23  | 8985:48:21  |
| 11月     | 2682:16:51  | 2758:03:48  | 0:00:00   | 0:00:00   | 0:00:00   | 0:00:00  | 5440:20:39  | 1:13:42  | 5441:34:21  |
| 12月     | 2872:03:44  | 3347:26:00  | 100:16:55 | 0:00:00   | 0:00:00   | 0:00:00  | 6319:46:39  | 1:39:35  | 6321:26:14  |
| 平成17年1月 | 2952:18:49  | 4961:06:22  | 0:00:00   | 0:00:00   | 0:00:00   | 0:00:00  | 7913:25:11  | 0:52:15  | 7914:17:26  |
| 2月      | 2407:47:05  | 5546:57:22  | 78:19:50  | 0:00:00   | 0:00:00   | 16:48:54 | 8049:53:11  | 9:57:36  | 8059:50:47  |
| 3月      | 2770:57:00  | 5953:29:58  | 55:24:10  | 0:00:00   | 0:00:00   | 42:18:58 | 8822:10:06  | 0:51:20  | 8823:01:26  |
| 合計      | 30680:30:24 | 47192:19:25 | 270:36:53 | 122:53:26 | 102:33:07 | 91:58:06 | 78460:51:21 | 45:23:37 | 78506:14:58 |

### 5.5.2 SX-7

| SX-7    | SN          | PN          | SN001      | PN008     | PN016     | 合計          | ETC        | 総合計         |
|---------|-------------|-------------|------------|-----------|-----------|-------------|------------|-------------|
| 平成16年4月 | 2205:16:57  | 335:49:58   | 0:00:00    | 0:15:17   | 0:02:26   | 2541:24:38  | 487:16:23  | 3028:41:01  |
| 5月      | 3002:17:28  | 850:07:21   | 0:00:00    | 0:42:50   | 0:00:00   | 3852:24:49  | 1:47:24    | 3854:12:13  |
| 6月      | 3626:48:06  | 4101:11:17  | 192:13:07  | 0:00:01   | 2:48:06   | 7727:59:23  | 211:03:46  | 7939:03:09  |
| 7月      | 3665:24:05  | 4515:59:57  | 264:31:16  | 0:00:00   | 0:00:00   | 8181:24:02  | 282:31:59  | 8463:56:01  |
| 8月      | 3267:33:43  | 4665:22:31  | 735:13:31  | 0:00:00   | 9:39:33   | 7932:56:14  | 745:22:16  | 8678:18:30  |
| 9月      | 3703:18:29  | 984:22:05   | 582:35:08  | 0:00:00   | 0:00:00   | 4687:40:34  | 582:35:08  | 5270:15:42  |
| 10月     | 3906:07:45  | 1310:20:42  | 113:40:03  | 0:00:00   | 0:00:00   | 5216:28:27  | 124:29:12  | 5340:57:39  |
| 11月     | 4341:24:14  | 2947:52:44  | 0:00:00    | 0:00:00   | 0:23:34   | 7289:16:58  | 33:30:24   | 7322:47:22  |
| 12月     | 4041:19:03  | 4865:36:56  | 47:11:38   | 0:05:07   | 76:00:56  | 8906:55:59  | 131:33:41  | 9038:29:40  |
| 平成17年1月 | 4039:22:26  | 4994:19:52  | 52:47:46   | 283:40:06 | 137:14:41 | 9033:42:18  | 670:05:00  | 9703:47:18  |
| 2月      | 3376:27:08  | 3771:50:52  | 0:00:00    | 77:45:17  | 764:47:04 | 7148:18:00  | 927:27:43  | 8075:45:43  |
| 3月      | 4536:26:16  | 7306:54:38  | 0:00:00    | 1:23:22   | 3:19:10   | 11843:20:54 | 41:57:37   | 11885:18:31 |
| 合計      | 43711:45:40 | 40649:48:53 | 1988:12:29 | 363:52:00 | 994:15:30 | 84361:52:16 | 4239:40:33 | 88601:32:49 |

## 5.6 ジョブ処理件数

### 5.6.1 VPP5000

| VPP     | SF    | PF    | SF001 | PF016 | PF008 | vp23 | 合計    | ETC | 総合計   |
|---------|-------|-------|-------|-------|-------|------|-------|-----|-------|
| 平成16年4月 | 530   | 151   | 0     | 1     | 0     | 0    | 682   | 0   | 682   |
| 5月      | 463   | 485   | 2     | 5     | 8     | 0    | 963   | 0   | 963   |
| 6月      | 306   | 439   | 0     | 31    | 0     | 19   | 795   | 0   | 795   |
| 7月      | 267   | 136   | 2     | 2     | 13    | 7    | 427   | 0   | 427   |
| 8月      | 260   | 121   | 0     | 0     | 0     | 1    | 382   | 0   | 382   |
| 9月      | 230   | 231   | 0     | 0     | 0     | 1    | 462   | 0   | 462   |
| 10月     | 158   | 88    | 0     | 0     | 0     | 1    | 247   | 0   | 247   |
| 11月     | 205   | 96    | 0     | 0     | 0     | 0    | 301   | 0   | 301   |
| 12月     | 322   | 295   | 1     | 0     | 0     | 0    | 618   | 0   | 618   |
| 平成17年1月 | 238   | 178   | 0     | 0     | 0     | 11   | 427   | 0   | 427   |
| 2月      | 141   | 114   | 17    | 2     | 0     | 11   | 285   | 0   | 285   |
| 3月      | 165   | 186   | 17    | 0     | 0     | 10   | 378   | 0   | 378   |
| 合計      | 3,285 | 2,520 | 39    | 41    | 21    |      | 5,967 | 0   | 5,967 |

### 5.6.2 SGI2800,Origin3800

| O2K     | G1 | G2 | G3 | G4 | G2S | PO    | PO128 | PS | 合計    | ETC | 総合計   |
|---------|----|----|----|----|-----|-------|-------|----|-------|-----|-------|
| 平成16年4月 | 4  | 4  | 22 | 4  | 0   | 29    | 24    | 0  | 87    | 0   | 87    |
| 5月      | 0  | 0  | 0  | 0  | 0   | 55    | 28    | 0  | 83    | 0   | 83    |
| 6月      | 0  | 0  | 0  | 0  | 0   | 29    | 48    | 0  | 77    | 0   | 77    |
| 7月      | 0  | 0  | 0  | 0  | 0   | 37    | 23    | 0  | 60    | 0   | 60    |
| 8月      | 0  | 0  | 0  | 0  | 0   | 122   | 1     | 0  | 123   | 0   | 123   |
| 9月      | 0  | 0  | 0  | 0  | 0   | 296   | 0     | 0  | 296   | 0   | 296   |
| 10月     | 0  | 0  | 0  | 0  | 0   | 547   | 0     | 0  | 547   | 0   | 547   |
| 11月     | 0  | 0  | 0  | 0  | 0   | 126   | 16    | 0  | 142   | 0   | 142   |
| 12月     | 0  | 0  | 0  | 0  | 0   | 410   | 12    | 0  | 422   | 0   | 422   |
| 平成17年1月 | 0  | 0  | 0  | 0  | 0   | 25    | 9     | 0  | 34    | 0   | 34    |
| 2月      | 0  | 0  | 0  | 0  | 0   | 555   | 9     | 0  | 564   | 0   | 564   |
| 3月      | 0  | 0  | 0  | 0  | 0   | 206   | 8     | 0  | 214   | 0   | 214   |
| 合計      | 4  | 4  | 22 | 4  | 0   | 2,437 | 178   | 0  | 2,649 | 0   | 2,649 |

### 5.6.3 SX-7

| SX-7    | SN    | PN    | SN001 | PN008 | PN016 | 合計    | ETC | 総合計   |
|---------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-----|-------|
| 平成16年4月 | 333   | 174   | 1     | 8     | 25    | 541   | 0   | 541   |
| 5月      | 479   | 218   | 0     | 4     | 1     | 702   | 0   | 702   |
| 6月      | 390   | 408   | 27    | 1     | 4     | 830   | 0   | 830   |
| 7月      | 244   | 283   | 34    | 0     | 0     | 561   | 0   | 561   |
| 8月      | 371   | 249   | 60    | 0     | 2     | 682   | 0   | 682   |
| 9月      | 271   | 149   | 52    | 0     | 0     | 472   | 0   | 472   |
| 10月     | 170   | 220   | 46    | 0     | 0     | 436   | 0   | 436   |
| 11月     | 316   | 321   | 0     | 0     | 1     | 638   | 0   | 638   |
| 12月     | 281   | 191   | 8     | 7     | 1     | 488   | 0   | 488   |
| 平成17年1月 | 410   | 156   | 5     | 9     | 1     | 581   | 0   | 581   |
| 2月      | 296   | 117   | 2     | 10    | 3     | 428   | 0   | 428   |
| 3月      | 284   | 235   | 0     | 2     | 1     | 522   | 0   | 522   |
| 合計      | 3,845 | 2,721 | 235   | 41    | 39    | 6,881 | 0   | 6,881 |

### 5.6.3 TX-7

## 5.6.3 TX-7

| TX-7    | PI    | PI016 | PI032 | 合計    | ETC | 総合計   |
|---------|-------|-------|-------|-------|-----|-------|
| 平成16年4月 | 301   | 37    | 17    | 355   | 0   | 355   |
| 5月      | 359   | 3     | 2     | 364   | 0   | 364   |
| 6月      | 181   | 1     | 0     | 182   | 0   | 182   |
| 7月      | 111   | 6     | 0     | 117   | 0   | 117   |
| 8月      | 101   | 15    | 0     | 116   | 0   | 116   |
| 9月      | 101   | 8     | 41    | 150   | 0   | 150   |
| 10月     | 182   | 4     | 23    | 209   | 0   | 209   |
| 11月     | 127   | 7     | 1     | 135   | 0   | 135   |
| 12月     | 179   | 9     | 3     | 191   | 0   | 191   |
| 平成17年1月 | 593   | 7     | 0     | 600   | 0   | 600   |
| 2月      | 562   | 1     | 0     | 563   | 0   | 563   |
| 3月      | 333   | 3     | 1     | 337   | 0   | 337   |
| 合計      | 3,130 | 101   | 88    | 3,319 | 0   | 3,319 |



## 6 資料

### 6.1 計算科学研究センター運営委員

|       |                                             |     |
|-------|---------------------------------------------|-----|
| 永瀬 茂  | 計算科学研究センター長<br>分子科学研究所理論研究系<br>分子基礎理論第一研究部門 | 教授  |
| 岡崎 進  | 計算科学研究センター                                  | 教授  |
| 森田 明弘 | 計算科学研究センター                                  | 助教授 |
| 岡本 祐幸 | 分子科学研究所理論研究系<br>分子基礎理論第一研究部門                | 助教授 |
| 波田 雅彦 | 分子科学研究所理論研究系<br>分子基礎理論第四研究部門                | 教授  |
| 高田 慎治 | 統合バイオサイエンスセンター時系列生命現象研究領域<br>分子発生学研究部門      | 教授  |
| 望月 敦史 | 基礎生物学研究所理論生物学領域<br>理論生物学研究部門                | 助教授 |
| 永山 國昭 | 統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域<br>ナノ形態生理学研究部門     | 教授  |
| 鍋倉 淳一 | 生理学研究所発達生理学系<br>生体恒常機能発達機構研究部門              | 教授  |
| 田中 秀樹 | 岡山大学<br>理学部                                 | 教授  |
| 常行 真司 | 東京大学大学院<br>理学系研究科                           | 助教授 |
| 中井 浩巳 | 早稲田大学<br>理工学部                               | 教授  |
| 中井 謙太 | 東京大学<br>医科学研究所附属ヒトゲノム解析センター                 | 教授  |
| 中村 春木 | 大阪大学<br>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

|        |         |
|--------|---------|
| 永瀬 茂   | センター長   |
| 岡崎 進   | 教授      |
| 森田 明弘  | 助教授     |
| 南部 伸孝  | 助手      |
| 三浦 伸一  | 助手      |
| 石田 干城  | 助手      |
| 大野 人侍  | 助手      |
| 内山 郁夫  | 助手      |
| 片岡 正典  | 助手      |
| 水谷 文保  | 技官 (班長) |
| 南野 智   | 技官      |
| 手島 史綱  | 技官      |
| 内藤 茂樹  | 技官      |
| 澤 昌孝   | 技官      |
| 加納 聖子  | 事務補佐員   |
| 禿子 瞳   | 事務補佐員   |
| 明石 志保子 | 事務補佐員   |
| 川口 律子  | 事務補佐員   |
| 矢崎 稔子  | 事務補佐員   |

### 6.3 利用者数とCPU時間の推移

|                            | 53年度        | 54年度        | 55年度              | 56年度                   | 57年度                | 58年度     | 59年度     |
|----------------------------|-------------|-------------|-------------------|------------------------|---------------------|----------|----------|
| 計算機システム                    | M-180<br>2台 | M-180<br>2台 | M-200H<br>M-180   | M-200H<br>M-180<br>疎結合 | M-200H<br>2台<br>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<br>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 <sup>a</sup>         | 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)          | (200H基準)               | (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 <sup>c</sup> (時間) | 509         | 2,405       | 5,405             | 6,320                  | 8,205               | 8,489    | 8,508    |
| ジョブ処理件数 <sup>c</sup>       | 41,521      | 155,980     | 183,840           | 214,847                | 239,771             | 236,519  | 226,727  |
| ライブラリプログラム<br>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 <sup>d</sup>     | 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3年度                   |
|----------------------------|------------------------------------------------|--------------------------------|---------------------------------------------------------|-------------------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|
| 計算機システム                    | (~11月)<br>同57年度<br>(1月~)<br>M-680H<br>S-810/10 | M-680H<br>S-8210/10<br><br>疎結合 | M-680H<br>(~1月)<br>S-810/10<br>(2月~)<br>S-820/80<br>疎結合 | M-680H<br>S-820/80<br><br>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 <sup>a</sup>         | 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) <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> | (M-680H基準) <sup>b</sup> | (M-680H基準) <sup>b</sup> |
| 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 <sup>c</sup> (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 <sup>c</sup>       | 274,431                                        | 289,915                        | 278,956                                                 | 278,104                       | 253,418                 | 295,5038                | 346,987                 |
| ライブラリプログラム<br>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 <sup>d</sup>     | 206                                            | 237                            | 223                                                     | 211                           | 218                     | 248                     | 229                     |

a:機構内利用者にはアイドル課題のための重複を含めません。

b:申請および使用の詳細については、5.1を参照してください。

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

d:センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたものです。

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

\*:下段はM-680H基準

|                 | 平成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                                         | 平成10年度                                                                                                 |
|-----------------|-------------|-------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------|------------------------------------|-----------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 計算機システム         | 同63年度       | M-680H<br>S-820/80(～12月)<br>SX-3/34R(1月～) | M-680H(～11月)<br>SX-3/34R<br>HSP(1月～)<br>SP2(1月～)                  | SX-3/34R<br>HSP(1月～)<br>SP2(1月～)               | SX-3/34R<br>HSP<br>SP2<br>HPC(9月～) | SX-3/34R<br>HSP<br>SP2<br>HPC<br>SR2201(11月～) | SX-3/34R<br>HSP<br>SP2<br>HPC<br>SR2201<br>Origin2000<br>(10月～)<br>SX-5<br>(3月～)                       |
| 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         | 271         | 225                                       | 222                                                               | 210                                            | 201                                | 188                                           | 174                                                                                                    |
| 利用者数            |             |                                           |                                                                   |                                                |                                    |                                               |                                                                                                        |
| 機構内a            | 143         | 127                                       | 139                                                               | 129                                            | 139                                | 126                                           | 138                                                                                                    |
| 機構外             | 661         | 589                                       | 601                                                               | 597                                            | 574                                | 609                                           | 566                                                                                                    |
| 合計              | 804         | 716                                       | 740                                                               | 726                                            | 713                                | 735                                           | 704                                                                                                    |
| 稼働時間(時間)        | 7,156       | (M-680H系) 6,689<br>(SX-3/34R) 2,101       | (M-680H系) 5,722<br>(SX-3/34R) 8,506<br>(HSP) 2,133<br>(SP2) 2,022 | (SX-3/34R) 8,352<br>(HSP) 8,293<br>(SP2) 8,333 | SX-3/34R<br>HSP<br>SP2<br>HPC(9月～) | SX-3/34R<br>HSP<br>SP2<br>HPC<br>SR2201(11月～) | (SX3-3/34R) 8,579<br>(HSP) 8,587<br>(SP2) 8,574<br>(HPC) 8,590<br>(SR2201) 8,694<br>(Origin2000) 3,570 |
| 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                                      | (HSP基準)b                                                                                               |
| 申請              | 21,153      | 18,311                                    | 21,781                                                            | 40,358                                         | 58,425                             | 73,910                                        | 76,804                                                                                                 |
| 許可              | 19,110      | 16,027                                    | 19,393                                                            | 37,446                                         | 51,499                             | 58,650                                        | 67,159                                                                                                 |
| 総使用CPU時間c(時間)   | 12,491      | 16,306                                    | 24,781                                                            | 156,076                                        | 207,790                            | 262,365                                       | 273,575                                                                                                |
| ジョブ処理件数c        | 297,638     | 227,650                                   | 107,194                                                           | 84,102                                         | 70,308                             | 51,738                                        | 45,173                                                                                                 |
| ライブラリプログラム新規登録数 | 0           | 10                                        | 10                                                                | 7                                              | 15                                 | 3                                             | 13                                                                                                     |
| データベース新規登録数     | 0           | 1                                         | 1                                                                 | 1                                              | 0                                  | 0                                             | 0                                                                                                      |
| センター使用論文数d      | 282         | 267                                       | 306                                                               | 275                                            | 279                                | 331                                           | 347                                                                                                    |

|                 | 平成11年度                                                                                                | 平成12年度                                                                       | 平成13年度                                                                       | 平成14年度                                                                       | 平成15年度                                                          | 平成16年度                                                          |
|-----------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------|
|                 | SX-3/34R<br>(12月まで)<br>SX-5<br>SP2<br>HPC<br>SR2201<br>Origin2000                                     | VPP5000<br>SGI2800,Origin3800<br>SX-5<br>SP2<br>HPC                          | VPP5000<br>SGI2800,Origin3800<br>SX-5<br>SP2<br>HPC                          | VPP5000<br>SGI2800,Origin3800<br>SX-5<br>SP2<br>HPC                          | VPP5000<br>SGI2800,Origin3800<br>SX-7<br>TX-7                   | VPP5000<br>SGI2800,Origin3800<br>SX-7<br>TX-7                   |
| 運転方式            | 無人                                                                                                    | 無人                                                                           | 無人                                                                           | 無人                                                                           | 無人                                                              | 無人                                                              |
| プロジェクト数         | 166                                                                                                   | 156                                                                          | 148                                                                          | 144                                                                          | 119                                                             | 154                                                             |
| 利用者数            |                                                                                                       |                                                                              |                                                                              |                                                                              |                                                                 |                                                                 |
| 機構内a            | 125                                                                                                   | 101                                                                          | 100                                                                          | 104                                                                          | 89                                                              | 83                                                              |
| 機構外             | 539                                                                                                   | 534                                                                          | 504                                                                          | 479                                                                          | 449                                                             | 516                                                             |
| 合計              | 664                                                                                                   | 635                                                                          | 604                                                                          | 583                                                                          | 538                                                             | 599                                                             |
|                 | (SX-3/34R) 6,365<br>(SX5) 8,301<br>(SP2) 8,375<br>(HPC) 8,363<br>(SR2201) 8,381<br>(Origin2000) 8,380 | (VPP5000) 8,234<br>(SGI系) 8,319<br>(SX5) 8,496<br>(SP2) 8,492<br>(HPC) 8,490 | (VPP5000) 8,492<br>(SGI系) 8,422<br>(SX5) 8,558<br>(SP2) 8,555<br>(HPC) 8,555 | (VPP5000) 8,506<br>(SGI系) 8,324<br>(SX5) 8,391<br>(SP2) 7,118<br>(HPC) 8,386 | (VPP5000) 8,553<br>(SGI系) 8,545<br>(SX-7) 8,524<br>(TX-7) 8,525 | (VPP5000) 8,502<br>(SGI系) 8,496<br>(SX-7) 8,451<br>(TX-7) 8,489 |
| CPU時間利用申請(時間)   | (SP2 Thin 基準)b                                                                                        | (SP2 Thin 基準)b                                                               | (SP2 Thin 基準)b                                                               | (SP2 Thin 基準)b                                                               | (TX-7 基準)b                                                      | (TX-7 基準)b                                                      |
| 申請              | 97,788                                                                                                | 249,405                                                                      | 251,785                                                                      | 237,872                                                                      | 278,177                                                         | 341,788                                                         |
| 許可              | 79,964                                                                                                | 209,393                                                                      | 234,866                                                                      | 229,401                                                                      | 277,697                                                         | 321,796                                                         |
| 総使用CPU時間c(時間)   | 239,671                                                                                               | 619,294                                                                      | 678,128                                                                      | 2,030,643                                                                    | 1,785,877                                                       | 1,762,818                                                       |
| ジョブ処理件数c        | 40,697                                                                                                | 58,685                                                                       | 70,680                                                                       | 55,522                                                                       | 58,784                                                          | 28,968                                                          |
| ライブラリプログラム新規登録数 | 14                                                                                                    | 18                                                                           | 4                                                                            | 15                                                                           | 5                                                               | 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d      | 347                                                                                                   | 391                                                                          | 302                                                                          | 302                                                                          | 281                                                             | 284                                                             |

a:機構内利用者にはアイドル課題のための重複を含めません。

b:申請および使用の詳細については、5.1を参照してください。

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

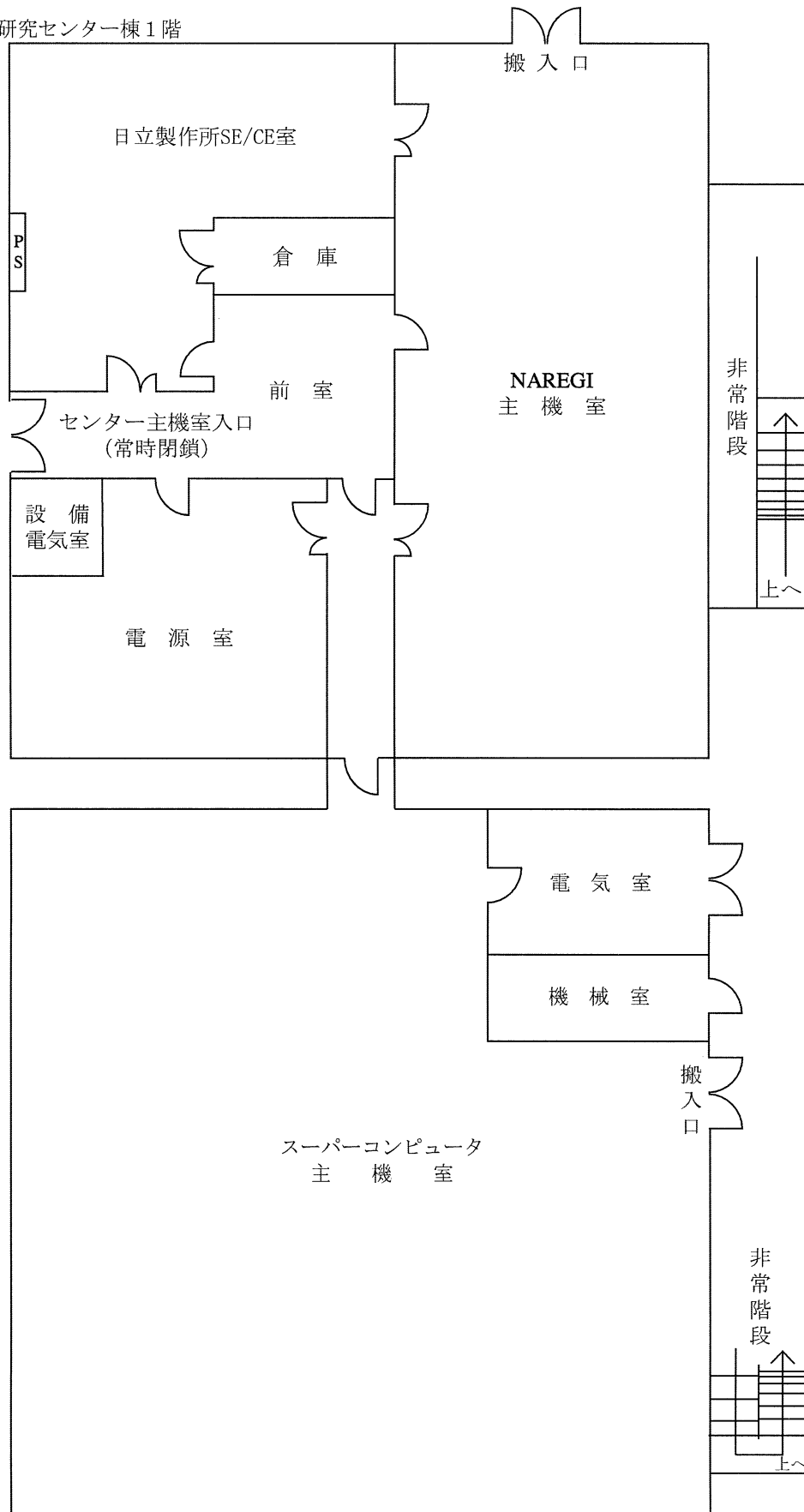
d:センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたものです。

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

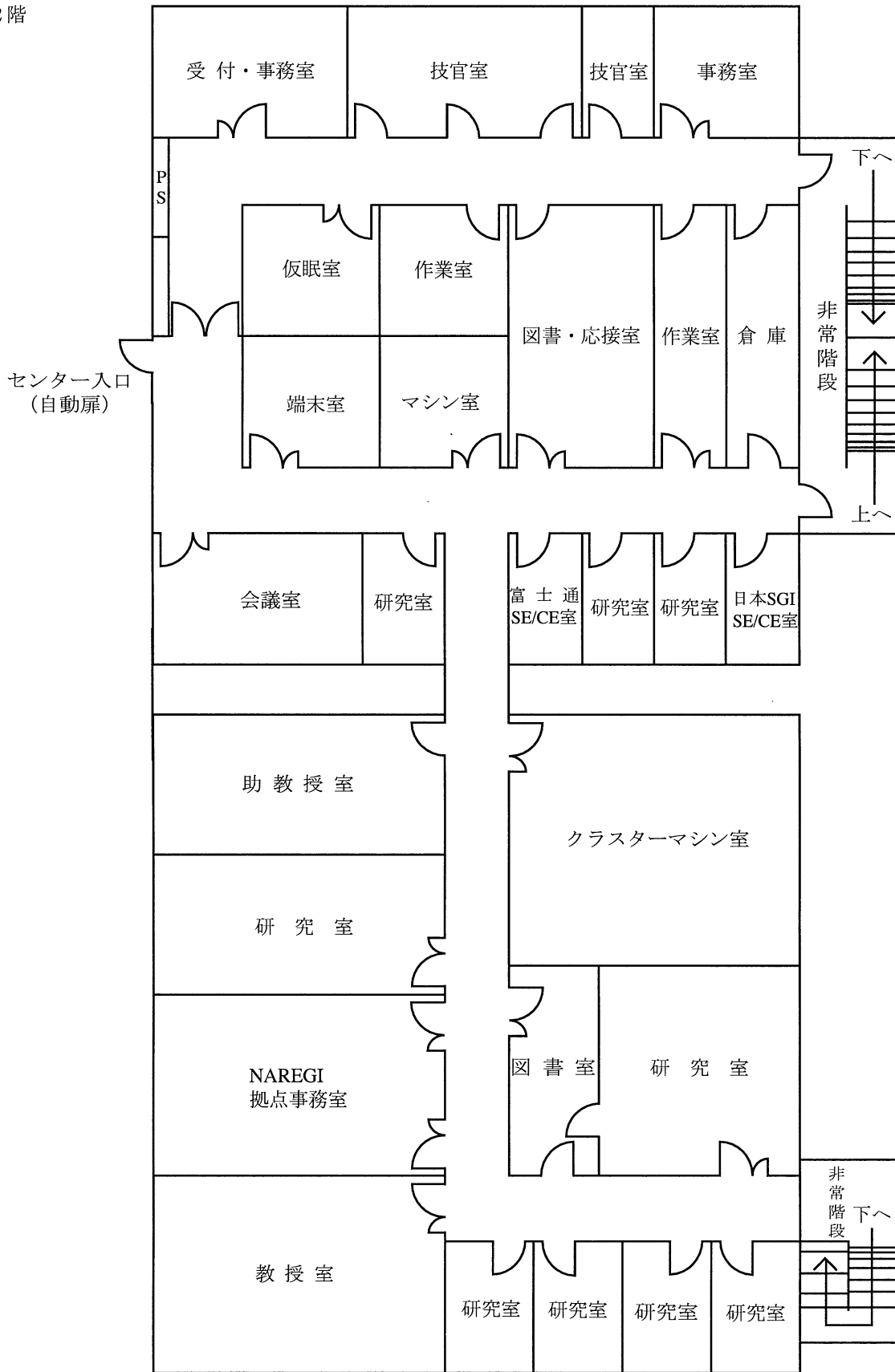
\*:下段はM-680H基準

6.4 建物図

B地区 計算科学研究センター棟1階

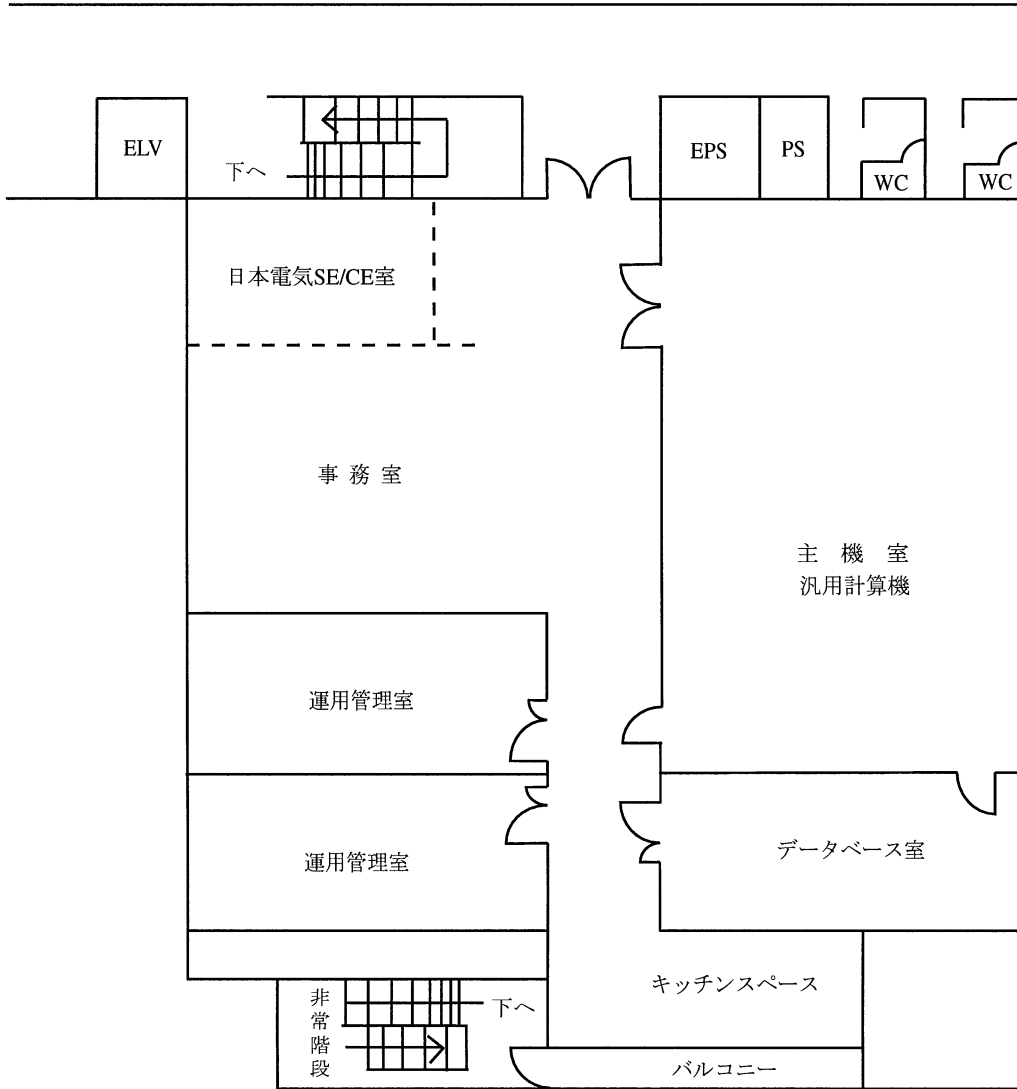


2階



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



## 6.5 マニュアル一覧

よく利用されるマニュアルには以下のようなものがあります。センターではセンター内端末室においてありますが、個人での購入を希望される場合は 6.6.8 「マニュアルの購入と問い合わせ先」の問い合わせ先に直接連絡して下さい。

### 6.5.1 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

### 6.5.2 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

#### 6.5.3 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)

#### 6.5.4 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)

#### 6.5.5 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 中部支社公共第二営業部（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。

#### 6.5.6 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ます。センターホームページ <http://www.rccs.orion.ac.jp/> から、「センター利用者限定ページ」の「日本電気 TX7 オンラインマニュアル」から閲覧・取得できます。ただし、OS 関連については、RedHat Linux 7.2（平成 15 年現在）を使用しますので、一般的な「RedHat Linux に関する情報」を利用して下さい。

- (1) 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

6.5.7 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ます。これらについても日本語版と同様に、オンライン版のみの提供となっています。

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

6.5.8 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 名古屋市中区錦一丁目 10 番 1 号  
富士通株式会社 東海営業本部 公共営業部  
担 当 : 岡本、赤木  
電 話 : 052-239-1110  
F A X : 052-239-1154

SGI2800,Origin3800 用マニュアルの購入にあたっての問い合わせ先

〒471-0034 豊田市小坂本町 1-13-11 富士火災豊田ビル 5 階  
日本 SGI 株式会社 中部支社  
担 当 : 和田、平島  
電 話 : 0565-35-2908  
F A X : 0565-35-2189

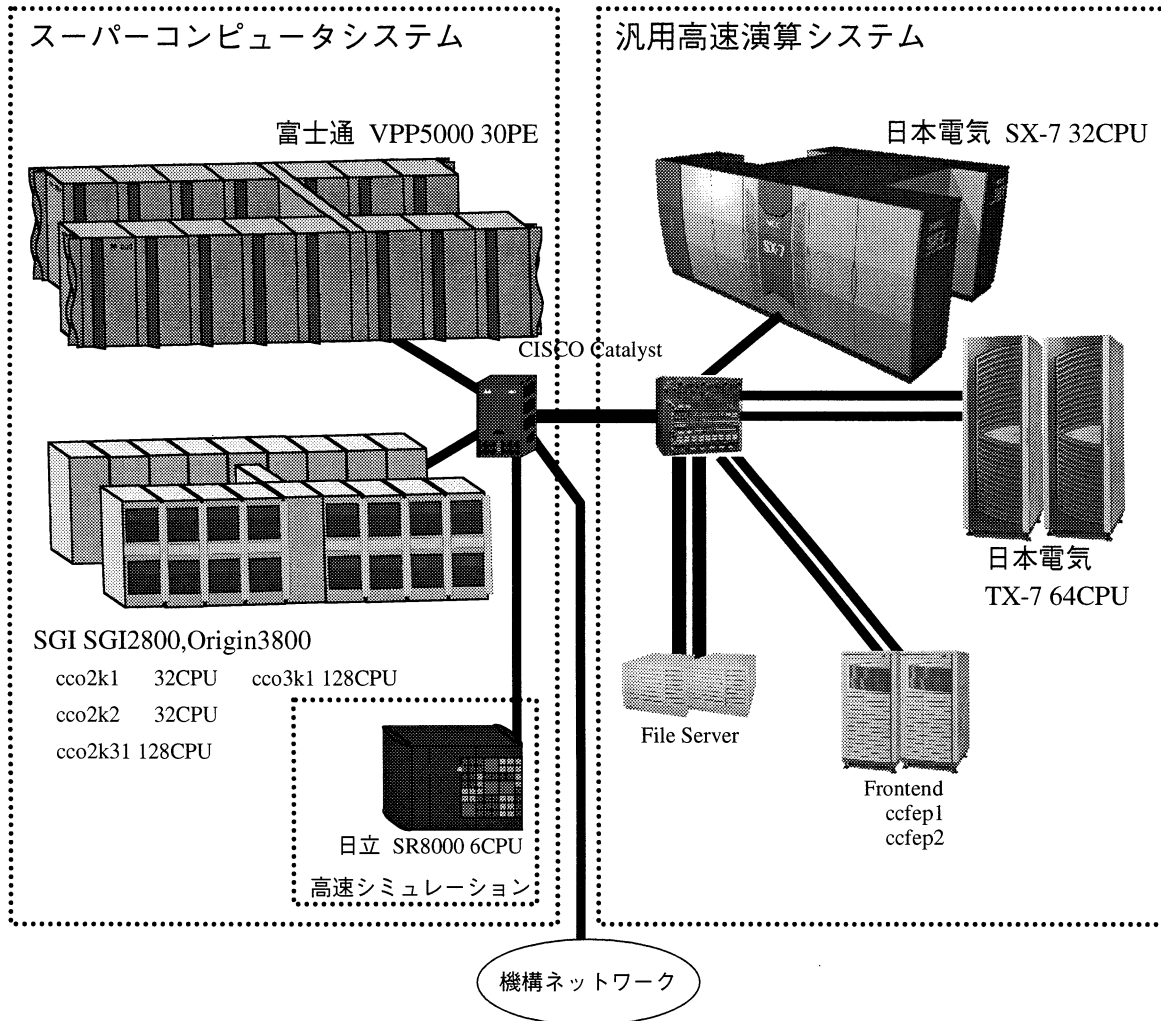
SX-7 用マニュアルの購入にあたっての問い合わせ先

〒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 公共第二営業部  
担 当 : 村田、中村  
電 話 : 052-222-2121  
F A X : 052-222-2129

7 現状と今後 (分子研リポート 2003 より転載)

5-4 計算科学研究センター

2005年1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、図の右側は2003年3月に更新されて山手地区に設置された汎用高速演算システムである。



システム構成図

スーパーコンピュータシステムは、富士通製 VPP5000 と SGI 製 Origin から構成されている。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 の主記憶装置をも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 のスカラー演算装置 320 CPU から構成され、1 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や 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である。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できるので、大規模な並列ジョブの実行が可能となる。高速シミュレーションシステムの日立製SR8000は、主に機構内における利用を目的として運用されている。

一方、2003年3月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ている。

2004年度も144の研究グループの550名にもおよぶ全国の利用者に共同利用施設として広くサービスを提供し、計算科学分野の中核的拠点センターとしての役割を果たしている。最近の大規模計算への要求に答えるために、2004年4月から運用の抜本的な変更を行い、これまでと比較してはるかに高度で便利な計算環境の整備を行った。変更の主なポイントは、

- (a)CPU時間とメモリーの上限を大幅に緩和して、大きな分子の電子状態計算を可能にした。また、デスク容量の上限を大幅に緩和して、分子動力学計算等の巨大データの保存を可能にした。
- (b)大規模計算を高速処理するための並列計算キューを大幅に拡充した。
- (c)これまでの特別申請を簡素化した特別利用キューを新設し、申請時に簡単な説明を追記するだけで、360時間（16-32 cpu、128 GBメモリー）もの長時間ジョブを可能にした。
- (d)アプリケーション利用キューを新設し、機種に依存しないWebからの標準入力で、量子化学計算で最も利用頻度が高いGaussianプログラムの効率的実行を初心者にも簡便に実行可能にした。

これらの変更により、これまでと比較して格段に大規模な計算が実行できるようになった。たとえば、HF/6-31G(d)法で、原子数338、基底関数4,238の分子系のSCF(21回)+forceの計算がTX-7(16cpu)を利用して9時間足らずで終了するので、巨大な分子の理論研究も可能になった。今回の変更によって大規模な計算ばかりでなく、小規模な計算も効率的に実行できるのも特徴である。次年度にスーパーコンピュータを更新することにより、2006年4月からはさらに巨大な分子系の大規模計算を可能にする計算環境を提供する予定である。

計算科学研究センターには、超高速コンピュータ網形成プロジェクト(NAREGI)のナノサイエンス実証研究のために、2004年3月から総理論演算能力が10 Tflopsの大型計算機システムが導入されている。アプリケーション開発拠点としての研究推進はもとより、事務局と計算機システムの運用という重要な役割を果たしている。

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の唯一の全国共同利用センターとして、計算環境の提供ばかりでなく、分子科学を基盤とする計算科学の裾野を大きく広げて、国際的に先導的な計算科学研究発進の中心拠点としての進展を目指して運営を進めていく。このために、以下のことを現在計画している。

- (1) 高速パソコンクラスターの最近の普及によりセンターへの期待と役割がこれまでとは大きく変化してきている。これに答えるために、通常の研究室レベルでは不可能な大規模計算を実行できる計算環境の整備と強化を引き続き進めて、来年の3月にスーパーコンピュータを更新することにより、これまでと比較して格段に巨大な分子系の理論研究も効率よくできるようにする。このために有用な計算プログラム、分子モデリングプログラム、動画像処理プログラム等を強化していく。また、超大規模計算によって計算科学のブレイクスルーや新展開が期待できる特徴ある研究

計画には、計算資源を優先的に大きく解放する方法を検討していく。

(2) 物質科学はもとより生命科学分野でも、分子科学を基盤とする計算科学とコンピュータシミュレーションは、実験に並ぶあるいはそれ以上に有力で強力な研究方法として今後ますます重要になる。計算科学研究分野での新機軸を先導的に展開するために、これまでのスーパーコンピューティングやグリッドコンピューティングの豊富な経験を活かして、国内の代表的な「理論化学研究会」と「分子シミュレーション研究会」の協力のもとに、分子科学研究所に本年度新設された計算分子科学研究系を中心にして「巨大計算に基づいた分子・物質シミュレーションナショナルセンター形成」の実現を目指す。このためのシンポジウムや研究会を開催して人的交流を促進すると同時に、内外の研究者の支援のもとに若手研究者や大学院生の育成のための教育プログラムを進めて、計算科学の裾野を拡げる。また、ナショナルセンターとして大きく機能していくために、NAREGI プロジェクト「ナノサイエンス実証研究」に代表される大型プロジェクトの推進ばかりでなく、国内に加えて多国間共同研究など国外の研究グループ（特にアジア地域の研究者）との国際共同研究支援のあり方を検討していく。

本年度の外部評価でも指摘されているように、これらの実行にはセンターの人的パワーの補強が強く求められている。