

I 部

目 次

1	巻頭言 計算科学研究センター 岡崎 進	1
2	スーパーコンピュータワークショップについて	2
3	計算機システムの運用および使い方	4
3.1	システムの構成と特徴	4
3.2	キュー構成方針	7
3.3	キュー構成	7
3.4	利用課金点数	9
4	一般報告	12
4.1	ライブラリプログラムの開発・公開	12
4.2	データベース開発状況	14
5	平成 17 年度計算機稼働状況および利用者数	15
5.1	利用申請プロジェクトおよび利用者数	15
5.2	電力使用および計算機稼働状況	15
5.3	計算機利用状況	16
5.4	クラス別 CPU 使用時間	18
5.5	クラス別 VPU 使用時間	20
5.6	ジョブ処理件数	21
6	資料	23
6.1	計算科学研究センター運営委員	23
6.2	計算科学研究センター職員	24
6.3	利用者数と CPU 時間の推移	25
6.4	建物図	27
6.5	マニュアル一覧	30
7	将来計画及び運営方針 (分子研リポート 2005 より転載)	34

1 巻頭言

計算科学研究センター

岡崎 進

ここ2～3年の間、計算科学研究センターの施設利用も大規模系に対する計算に対応すべく、それに適した特別利用という新たなキュー構成での運用の試みを開始し、またその普及を図って参りましたが、平成17年度には特別キューの利用もかなり定着してきたものと思われまます。本成果報告書も、このような大規模計算の成果が反映されているものと信じておりますが、センター一同、世界に発信できる新しい計算を目指して皆様に優れた環境を提供できるよう、今後ともより一層の努力を続けていく所存でございます。

この方向で、平成18年度もすでにスーパーコンピュータの更新という大きな変化があり、これまでの「スーパーコンピュータシステム」に替わり、7月初頭より約10倍の総演算性能を持つ「超高速分子シミュレータ」が稼働致しております。このシステムは大きく分けて2つのサブシステムで構成されていますが、最初のもは、160CPU/2,064GBの大容量のNUMA型の共有メモリを有する4台のノードと超高速I/Oシステムを装備したSGIのAltix 4700であり、これにより大規模で高精度な量子化学計算が可能となります。もう一つのもは、富士通のPrime Questであり、64CPU/256GBの中規模の実共有メモリを有するSMPノード10台で構成され、こちらの方は分子動力学計算等で威力を発揮するものと期待されています。

これらのシステムを用いて、研究室のPCクラスタでは不可能な大規模計算環境をより多くの方々に提供していくとともに、平成18年度からは課題を募って、その中でも特に世界最大規模の計算が可能となるような破格の計算環境をごく少数の研究者に提供し、優れた研究成果を発信して頂く試みも出発致しました。後者はS申請と命名いたしました。すでに3課題が出発しています。

このほか、自然科学研究機構の連携研究プロジェクトのひとつとして、「巨大計算新手法の開発と分子・物質シミュレーション中核拠点の形成」事業を、分子科学研究所理論研究系、計算分子科学研究系とも協力しながら、平成17年度から実施してきております。

計算科学研究センターにおきましては、皆様とともにわが国における分子および分子集合体の計算科学の新たな局面を切り開くべく今後とも最大限の努力を積み重ねていきたいと存じておりますので、量子化学、分子シミュレーションをはじめとした分子科学の計算科学コミュニティの皆様の一層のご支援を賜れば幸いに存じます。

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「超高速シミュレータが切り開く分子科学の諸相：若手研究者による理論・方法論展開とその展望」というタイトルのもとで行われ、所外をあわせて69名の参加者があった。

今回は理論・計算方法論の分野で精力的に取り組んでおられる若い研究者の方々を講師にお招きし、理論・計算方法論の新たな展開を議論し、今後の分子科学を広く展望した。また、次期導入予定のスーパーコンピュータに関する説明も行った。

平成17年度スーパーコンピュータワークショップ

日時： 2006年3月6日（月）～7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

参加者： 69名（所外56名、所内13名）

テーマ： 「超高速シミュレータが切り開く分子科学の諸相：

若手研究者による理論・方法論展開とその展望」

3月6日（月）

13:30 - 13:40 はじめに 永瀬 茂（センター長）

13:40 - 14:00 次期導入超高速分子シミュレータの概要
森田 明弘（計算センター）

座長 森田 明弘

14:00 - 14:50 超高速分子シミュレータシステムの解説

青木 正樹（富士通 ソフトウェア事業本部 ミドルウェアコン
ポーネント事業部 第二開発部 部長）

田坂 隆明（SGI HPC コンサルティングセンター チーフ HPC コンサ
ルタント）

14:50 - 15:30 MO・MD 計算用入力生成ライブラリ “IGNITION” の開発

岡崎 進・山田 篤志（計算センター）

生田 靖弘・石村和也（分子研）

座長 石田 干城

16:00 - 16:30 第一原理量子拡散モンテカルロ法、分子科学計算を中心とした最近の進展

前園 涼 (物質材料研究機構)

16:30 - 17:00 非相対論的および相対論的多配置摂動法の開発とその高速計算アルゴリズム
中野 晴之 (九州大学)

17:30 - 19:30 懇親会

3月7日 (火)

9:00 - 9:10 挨拶 中村 宏樹 (分子研所長)

座長 三浦 伸一

9:10 - 9:40 細孔内の水とアルゴンの相転移と相図
甲賀 研一郎 (岡山大学)

9:40 - 10:10 Dynamics in supercooled molecular liquids
鄭 誠虎 (分子研)

10:10 - 10:40 分子シミュレーションと溶液理論の結合による溶媒和の自由エネルギー解析
松林 伸幸 (京大化研)

座長 斉藤 真司

11:00 - 11:30 タンパク質の機能の分子動力学シミュレーション
池口 満徳 (横浜市立大学)

11:30 - 12:00 SAC-CI 法による光生物学へのアプローチ
長谷川 淳也 (京大工)

12:00 - 12:30 カルシウムポンプとその阻害剤の分子動力学計算
杉田 有治 (東大・分子細胞生物学研究所)

12:30 - 12:40 おわりに 岡崎 進 (計算センター)

3 計算機システムの運用および使い方

3.1 システムの構成と特徴

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)。

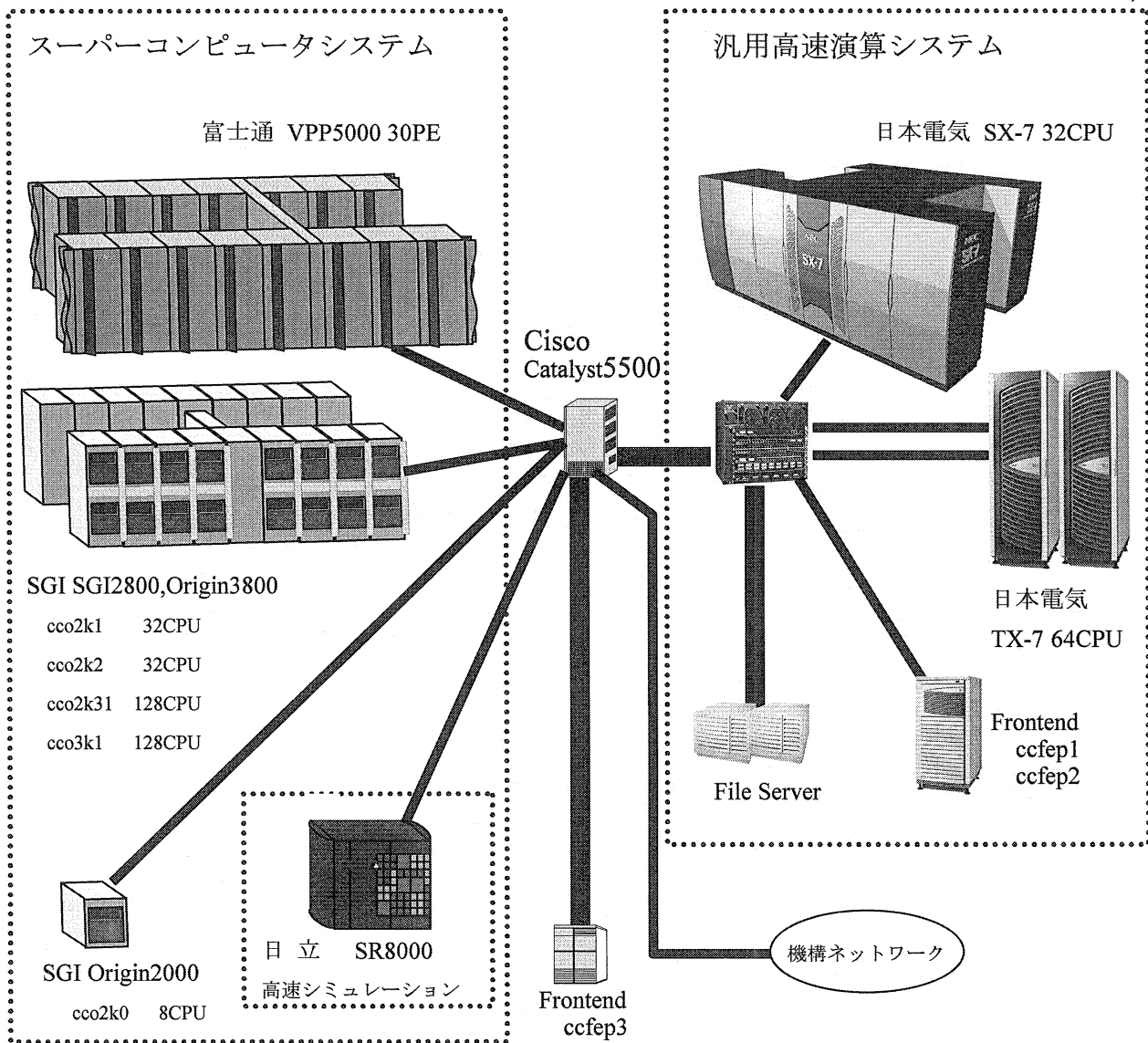


図 3.1 計算機システム概略図

- ・ 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 (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

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 (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 (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/rp5430)

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)>

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>	8.5TB
総容量	
(内訳)	
ユーザホームディレクトリ(/home)	6TB
長期保存ファイル領域(/save)	2.5TB

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、比較的利用の多いアプリケーションについては、初級者利用の便宜を図る。特に機器更新に伴う環境の変化を隠蔽する様にウェブからの利用環境を整備する。
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	30CPUを次のように割り当てます。 24CPUは、PF、PF016、PF008がお互いに共有して使用します。 内16CPUは、PF016とPF008が優先的に使用し、8CPUはPFが占有します。 5CPUは、SF、SF001がお互いに共有して使用します。 内2CPUは、SF001が優先的に使用し、3CPUはSFが占有します。 1CPUは、会話処理が占有します。
SGI2800	192CPUはPSが占有します。
Origin3800	128CPUを次のように割り当てます。 128CPUはPS、PS128がお互いに共有して使用します。 内128CPUはPS128が優先的に使用します。
SX-7	32CPUを次のように割り当てます。 24CPUは、PN、PN016、PN008がお互いに共有して使用します。 内16CPUは、PN016とPN008が優先的に使用し、8CPUはPNが占有します。 7CPUは、SN、SN001がお互いに共有して使用します。 内2CPUは、SN001が優先的に使用し、5CPUはSNが占有します。 1CPUは、会話処理が占有します。
TX-7	64CPUを次のように割り当てます。 64CPUは、PI、PI016、PI032がお互いに共有して使用します。 内32CPUは、PI032とPI016が優先的に使用し、32CPUはPIが占有します。

(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 (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) + (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 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 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

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

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 17 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 17 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 4 件です。

Fujitsu VPP5000 版

プログラム名	タイトル名
Molcas	Molcas (6.2): Quantum chemistry program package for scientists

SGI SGI2800/Origin3800 版

プログラム名	タイトル名
Molcas	Molcas (6.2): Quantum chemistry program package for scientists

NEC TX-7 版

プログラム名	タイトル名
Molcas	Molcas (6.2): Quantum chemistry program package for scientists

Web 用

プログラム名	タイトル名
Web MO	World Wide Web-based interface to computational chemistry packages

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 98	Gaussian 98(A.11): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations
Gaussian 03	Gaussian 03(C.01): <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
Meld	Program for many electron description.
MM2	Molecular mechanics calculation by MM2 force field model
Molcas	Molcas (6.2): Quantum chemistry program package for scientists
Molpro	Molpro (2002.3): 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)
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
Meld	Program for many electron description.
MM2	Molecular mechanics calculation by MM2 force field model
Molcas	Molcas(6.2): Quantum chemistry software
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 software
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(6.2): Quantum chemistry software
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 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
MASPHYC	Material design system by means of computer physics and chemistry
Web MO	World Wide Web-Based interface to computational chemistry packages

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： 82,017 件

主要学術雑誌に掲載された *ab initio* 分子軌道計算を扱った文献のデータベースで、日本化学情報協会（JAICI）より世界中に配布されています。また、毎年一年分のデータを、論文形式で 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), 720-721 (2005) 1-665)。さらに、2004年に出版された論文を本年度収集したデータより、日本コンピューター化学会を通じて出版されています（J. Comp. Chem. Jpn. Vol. 4., 203-569(2005)）。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17年度に新規登録されたデータは、7,127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17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	113	467	365,363	318,856	231,125	127,542,400	92,450,016
	課題研究	1	3	3,000	3,000	1,443	1,200,000	577,297
	協力研究	4	7	1,420	1,420	0	568,000	0
	所内	14	30	44,860	44,860	4,480	17,944,000	1,791,918
合計		132	507	414,643	368,136	237,048	147,254,400	94,819,231

※ 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								
	マシン名	B,E地区合計	グリッド	総合計	VPP	*	cco2k0	*	cco2k1	*	cco2k2	*
平成17年4月		273,467	451,370	724,837	663	100	662	100	662	100	662	100
5月		286,611	470,370	756,981	735	100	736	100	736	100	734	100
6月		284,874	439,340	724,214	711	100	711	100	711	100	711	100
7月		297,144	489,460	786,604	735	100	736	100	736	100	736	100
8月		305,031	519,080	824,111	736	100	734	100	736	100	736	100
9月		282,858	484,410	767,268	704	99	701	99	701	99	701	99
10月		260,827	450,400	711,227	674	100	680	102	680	102	680	102
11月		261,911	468,940	730,851	642	88	684	100	684	100	684	100
12月		273,002	482,030	755,032	728	98	735	100	703	92	735	100
平成18年1月		270,432	485,340	755,772	736	100	735	100	678	85	735	100
2月		247,483	424,080	671,563	663	100	664	100	664	100	664	100
3月		265,929	478,620	744,549	735	100	736	100	736	100	736	100
合計		3,309,569	5,643,440	8,953,009	8,462	99	8,512	100	8,425	98	8,513	100

年月	システム稼働時間										合計	KW/ 稼働時間	
	マシン名	cco2k31	*	cco3k1	*	SX-7	*	TX-7	*	平均			*
平成17年4月		657	99	662	100	662	100	662	100	662	100	5,993	413
5月		732	99	736	100	734	100	734	100	735	100	6,576	390
6月		711	100	708	99	710	100	710	100	710	100	6,382	401
7月		736	100	736	100	734	100	734	100	736	100	6,586	404
8月		736	100	736	100	725	98	734	100	734	100	6,568	416
9月		701	99	700	99	701	99	701	99	701	99	6,298	404
10月		678	101	680	102	679	101	679	101	678	101	6,137	384
11月		684	100	684	100	682	100	682	100	678	99	6,114	366
12月		733	100	735	100	734	100	734	100	730	99	6,527	374
平成18年1月		735	100	735	100	735	100	735	100	728	98	6,507	372
2月		664	100	664	100	662	100	662	100	664	100	6,011	373
3月		734	100	736	100	734	100	734	100	735	100	6,581	362
合計		8,501	100	8,510	100	8,492	100	8,501	100	8,489	100	68,612	390

※ *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	*	cco2k1	*	cco2k2	*	cco2k31	*
平成17年4月		8,229	41	13,174	62	15,797	75	58,841	20
5月		13,484	61	17,422	74	15,043	64	71,608	48
6月		13,657	64	15,643	69	12,944	57	56,929	57
7月		10,045	46	14,588	62	13,479	57	60,831	71
8月		8,492	38	10,847	46	12,331	52	46,401	69
9月		7,823	37	10,205	46	10,830	48	45,220	58
10月		8,025	40	14,325	66	11,846	54	55,258	83
11月		7,604	40	15,307	70	14,387	66	57,384	68
12月		9,144	42	15,413	69	14,022	60	64,009	59
平成18年1月		3,938	18	6,085	28	12,494	53	47,902	66
2月		9,869	50	11,740	55	13,877	65	57,292	75
3月		5,547	25	11,839	50	15,329	65	58,071	61
合計		105,857	42	156,588	58	162,379	60	679,746	61

年月	CPU使用時間								
	マシン名	cco3k1	*	SX-7	*	TX-7	*	合計	@
平成17年4月		29,158	34	11,056	52	17,640	42	153,895	54
5月		37,104	39	15,388	66	32,592	69	202,641	64
6月		39,741	44	11,919	52	26,857	59	177,690	58
7月		48,875	52	11,021	47	24,713	53	183,552	55
8月		33,550	36	8,753	38	22,087	47	142,461	44
9月		8,818	10	13,378	60	29,348	65	125,622	45
10月		8,051	9	8,414	39	24,608	57	130,527	47
11月		55,338	63	9,015	41	23,163	53	182,198	57
12月		43,589	46	13,083	56	24,185	51	183,445	56
平成18年1月		61,522	65	15,785	67	22,865	49	170,591	47
2月		43,160	51	17,035	80	13,487	32	166,460	57
3月		47,017	50	16,847	72	18,472	39	173,122	52
合計		455,923	42	151,694	56	280,017	51	1,992,205	53

※ 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 マシン名	VPU使用時間					
	VPP	*	SX-7	*	合計	@
平成17年4月	8,494	43	5,855	28	14,349	36
5月	12,248	56	10,499	45	22,747	51
6月	10,154	48	9,868	43	20,022	46
7月	7,975	36	6,977	30	14,952	33
8月	7,010	32	6,540	28	13,550	30
9月	8,448	40	5,597	25	14,045	33
10月	6,300	31	5,676	26	11,976	29
11月	6,648	35	5,226	24	11,874	30
12月	10,140	46	6,288	27	16,428	37
平成18年1月	11,992	54	2,719	12	14,711	33
2月	12,232	61	6,259	30	18,491	46
3月	11,796	53	4,473	19	16,269	36
合計	113,437	45	75,977	28	189,414	37

※ 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 VPU 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 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17年4月	294	101	177	406	181	226	479	1,864
5月	259	148	71	409	412	404	505	2,208
6月	365	165	146	568	390	301	162	2,097
7月	290	69	69	286	683	547	113	2,057
8月	226	88	53	354	326	439	162	1,648
9月	191	58	189	304	150	303	149	1,344
10月	221	82	124	360	48	352	312	1,499
11月	349	119	86	252	8	255	430	1,499
12月	312	90	102	295	33	362	347	1,541
平成18年1月	252	60	86	440	7	592	317	1,754
2月	177	79	63	267	7	209	397	1,199
3月	193	51	73	249	17	321	282	1,186
合計	3,129	1,110	1,239	4,190	2,262	4,311	3,655	19,896

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17年4月	2560:56:27	5418:12:08	0:23:26	0:00:00	223:20:28	223:20:28	8202:52:29	26:23:50	8229:16:19
5月	3777:57:07	9686:50:43	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	13464:47:50	19:35:34	13484:23:24
6月	3244:49:01	8074:18:49	296:19:12	0:00:00	0:00:00	0:00:00	13628:21:52	28:36:47	13656:58:39
7月	3176:30:41	4576:44:14	464:57:11	0:00:00	0:00:00	0:00:00	10017:28:13	27:51:45	10045:19:58
8月	3103:04:12	5053:53:17	318:41:23	0:00:00	0:00:00	0:00:00	8475:38:52	16:22:52	8492:01:44
9月	2963:47:02	4448:19:18	376:10:15	0:00:00	0:00:00	0:00:00	7788:16:35	34:43:03	7822:59:38
10月	2956:03:56	4531:09:41	518:53:53	0:00:00	0:00:00	0:00:00	8006:07:30	19:10:26	8025:17:56
11月	3437:20:47	4051:32:45	86:58:13	0:00:00	0:00:00	0:00:00	7575:51:45	27:48:19	7603:40:04
12月	3141:04:43	5989:41:38	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	9130:46:21	13:10:25	9143:56:46
平成18年1月	3253:37:36	610:10:23	60:07:42	0:00:00	0:00:00	0:00:00	3923:55:41	14:09:50	3938:05:31
2月	3189:02:44	3331:03:33	129:02:31	0:00:00	0:00:00	0:00:00	9864:46:10	3:57:00	9868:43:10
3月	3597:44:43	1915:33:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	5513:17:43	33:20:08	5546:37:51
合計	38401:58:59	57687:29:29	2251:33:46	0:00:00	223:20:28	223:20:28	105592:11:01	265:09:59	105857:21:00

5.4.2 SGI2800,Origin3800

02K	PO	PO128	PS	合計	ETC	総合計
平成17年4月	12271:29:44	119:28:56	58238:43:36	70629:42:16	46367:14:36	116996:56:52
5月	20335:44:51	3:48:39	66545:43:36	86885:17:06	54320:07:28	141205:24:34
6月	15437:16:21	0:00:00	60248:53:44	75686:10:05	49602:14:36	125288:24:41
7月	28337:33:11	0:00:00	54213:31:50	82551:05:01	55285:51:12	137836:56:13
8月	18460:33:48	0:00:00	52072:48:32	70533:22:20	32698:10:42	103231:33:02
9月	5673:19:48	0:00:00	36844:04:45	42517:24:33	32620:20:57	75137:45:30
10月	2761:58:25	0:00:07	43931:55:58	46693:54:30	42801:17:07	89495:11:37
11月	83:45:10	11939:37:22	48167:06:07	60190:28:39	82248:47:26	142439:16:05
12月	1643:43:58	121:22:09	57382:33:45	59147:39:52	77906:53:21	137054:33:13
平成18年1月	0:00:00	5970:36:14	23501:21:12	29471:57:26	98558:50:35	128030:48:01
2月	426:51:28	42918:19:34	49315:54:02	92661:05:04	33633:06:34	126294:11:38
3月	35:43:41	246:11:19	41703:44:06	41985:39:06	90453:23:48	132439:02:54
合計	105468:00:25	61319:24:20	592166:21:13	758953:45:58	696496:18:22	1455450:04:20

5.4.3 SX-7

SX-7	SN	PN	SN001	PN008	PN016	合計	ETC	総合計
平成17年4月	4179:11:03	5702:36:08	738:27:12	0:02:17	341:00:32	10961:17:12	94:18:40	11055:35:52
5月	5340:31:53	9456:10:21	551:39:22	0:00:00	0:00:00	15348:21:36	39:45:10	15388:06:46
6月	4694:39:23	5727:50:59	864:24:46	595:02:28	0:00:00	11881:57:36	37:26:51	11919:24:27
7月	4964:25:51	5142:41:18	743:25:36	80:09:42	0:00:00	10930:42:27	89:48:24	11020:30:51
8月	4808:46:39	2706:07:19	538:37:36	357:45:55	0:03:58	8411:21:27	342:04:39	8753:26:06
9月	4854:13:11	7269:21:45	670:39:49	359:53:41	0:00:00	13154:08:26	223:45:40	13377:54:06
10月	4491:08:13	2771:17:05	645:23:41	446:28:57	1:15:46	8355:33:42	58:47:52	8414:21:34
11月	4301:17:35	3099:47:49	641:38:06	921:04:19	0:00:00	8963:47:49	50:44:27	9014:32:16
12月	4881:10:56	5651:45:28	1191:12:00	1326:01:15	0:00:00	13050:09:39	32:45:27	13082:55:06
平成18年1月	5296:59:42	9477:20:58	152:30:12	294:18:41	1:15:50	15222:25:23	562:53:41	15785:19:04
2月	4247:55:36	7096:39:39	568:22:17	4719:00:18	0:00:00	16631:57:50	402:52:13	17034:50:03
3月	5050:56:14	8675:58:16	201:54:16	2747:12:44	0:00:00	16676:01:30	171:04:51	16847:06:21
合計	57111:16:16	72777:37:05	7508:14:53	11847:00:17	343:36:06	149587:44:37	2106:17:55	151694:02:32

5.4.4 TX-7

TX-7	PI	PI016	PI032	合計	ETC	総合計
平成17年4月	17639:49:19	0:01:31	0:20:18	17640:11:08	0:00:00	17640:11:08
5月	32591:37:03	0:01:33	0:09:20	32591:47:56	0:00:00	32591:47:56
6月	25515:03:06	1341:26:11	0:09:34	26856:38:51	0:00:00	26856:38:51
7月	23218:39:54	1494:34:02	0:09:37	24713:23:33	0:00:00	24713:23:33
8月	21704:36:46	102:14:37	280:17:30	22087:08:53	0:00:00	22087:08:53
9月	28901:59:04	0:01:33	446:00:47	29348:01:24	0:00:00	29348:01:24
10月	21462:12:49	0:02:54	3145:53:29	24608:09:12	0:00:00	24608:09:12
11月	23157:51:41	5:17:51	0:08:41	23163:18:13	0:00:00	23163:18:13
12月	23667:12:41	156:16:12	361:27:54	24184:56:47	0:00:00	24184:56:47
平成18年1月	22864:13:45	0:01:31	0:17:50	22864:33:06	0:00:00	22864:33:06
2月	13486:32:20	0:01:33	0:09:01	13486:42:54	0:00:00	13486:42:54
3月	18377:50:43	73:23:38	20:46:34	18472:00:55	0:00:00	18472:00:55
合計	272587:39:11	3173:23:06	4255:50:35	280016:52:52	0:00:00	280016:52:52

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17年4月	2305:33:49	3482:57:09	0:14:02	0:00:00	0:00:00	61:26:52	5850:11:52	4:50:34	5855:02:26
5月	3416:10:06	7078:56:58	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	10495:07:04	4:05:43	10499:12:47
6月	2870:04:16	5728:43:13	261:57:59	0:00:00	998:22:08	0:00:00	9859:07:36	9:05:16	9868:12:52
7月	2598:06:29	2978:16:18	455:04:59	0:00:00	937:47:35	0:00:00	6969:15:21	7:38:21	6976:53:42
8月	2372:58:29	3854:54:20	310:58:03	0:00:00	0:00:00	0:00:00	6538:50:52	0:59:51	6539:50:43
9月	2543:58:33	2682:58:24	365:07:37	0:00:00	0:00:00	0:00:00	5592:04:34	5:13:59	5597:18:33
10月	2518:21:57	2657:01:53	499:17:03	0:00:00	0:00:00	0:00:00	5674:40:53	1:22:48	5676:03:41
11月	2752:29:10	2386:28:03	84:18:48	0:00:00	0:00:00	0:00:00	5223:16:01	2:48:40	5226:04:41
12月	2376:59:12	3911:11:50	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	6288:11:02	0:00:01	6288:11:03
平成18年1月	2209:43:21	453:05:10	56:16:45	0:00:00	0:00:00	0:00:00	2719:05:16	0:00:01	2719:05:17
2月	2583:11:59	1877:21:30	122:53:09	0:00:00	1675:36:00	0:00:00	6259:02:38	0:00:01	6259:02:39
3月	2651:42:58	1817:46:17	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	4469:29:15	3:57:56	4473:27:11
合計	31199:20:19	38909:41:05	2156:08:25	0:00:00	3611:45:43	61:26:52	75938:22:24	40:03:11	75978:25:35

5.5.2 SX-7

SX-7	SN	PN	SN001	PN008	PN016	合計	ETC	総合計
平成17年4月	3838:39:33	3753:31:29	633:47:39	0:00:37	207:41:14	8433:40:32	60:10:05	8493:50:37
5月	5135:51:32	6573:44:15	533:41:39	0:00:00	0:00:00	12243:17:26	4:45:58	12248:03:24
6月	4396:58:44	4685:28:22	800:56:53	270:43:17	0:00:00	10154:07:16	0:20:37	10154:27:53
7月	3913:53:04	3255:23:38	715:52:35	69:03:52	0:00:00	7954:13:09	20:20:49	7974:33:58
8月	3846:19:22	2129:30:03	517:07:18	355:36:44	0:00:05	6848:33:32	161:46:20	7010:19:52
9月	4547:55:16	2741:35:03	652:06:52	358:27:57	0:00:00	8300:05:08	148:02:23	8448:07:31
10月	3818:23:48	1394:40:31	623:50:27	444:32:22	0:18:20	6281:45:28	18:17:40	6300:03:08
11月	3375:40:41	1729:42:47	620:11:34	912:51:51	0:00:00	6638:26:53	9:55:31	6648:22:24
12月	4171:57:01	3673:32:01	1168:49:42	1125:21:10	0:00:00	10139:39:54	0:02:36	10139:42:30
平成18年1月	4337:59:06	7047:09:11	151:32:00	102:57:38	0:19:35	11639:57:30	352:07:40	11992:05:10
2月	3650:17:44	4907:40:37	560:27:19	2840:03:53	0:00:00	11958:29:33	273:00:30	12231:30:03
3月	4108:13:06	5809:48:12	199:32:47	1596:47:59	0:00:00	11714:22:04	81:53:33	11796:15:37
合計	49142:08:57	47701:46:09	7177:56:45	8076:27:20	208:19:14	112306:38:25	1130:43:42	113437:22:07

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17年4月	155	128	2	0	0	9	294	0	294
5月	117	142	0	0	0	0	259	0	259
6月	223	112	7	0	23	0	365	0	365
7月	145	107	22	0	16	0	290	0	290
8月	134	74	17	0	1	0	226	0	226
9月	117	65	9	0	0	0	191	0	191
10月	69	141	11	0	0	0	221	0	221
11月	169	178	2	0	0	0	349	0	349
12月	238	74	0	0	0	0	312	0	312
平成18年1月	208	42	2	0	0	0	252	0	252
2月	118	47	3	0	9	0	177	0	177
3月	115	78	0	0	0	0	193	0	193
合計	1,808	1,188	75	0	49	9	3,129	0	3,129

5.6.2 SGI2800,Origin3800

O2K	PO	PO128	PS	合計	ETC	総合計
平成17年4月	174	7	0	181	0	181
5月	410	2	0	412	0	412
6月	385	5	0	390	0	390
7月	683	0	0	683	0	683
8月	326	0	0	326	0	326
9月	150	0	0	150	0	150
10月	44	4	0	48	0	48
11月	1	7	0	8	0	8
12月	18	15	0	33	0	33
平成18年1月	0	7	0	7	0	7
2月	3	4	0	7	0	7
3月	10	7	0	17	0	17
合計	2,204	58	0	2,262	0	2,262

5.6.3 SX-7

SX-7	SN	PN	SN001	PN008	PN016	合計	ETC	総合計
平成17年4月	142	75	6	1	2	226	0	226
5月	281	117	6	0	0	404	0	404
6月	166	120	9	6	0	301	0	301
7月	380	154	7	6	0	547	0	547
8月	180	244	6	5	4	439	0	439
9月	221	63	18	1	0	303	0	303
10月	210	133	6	2	1	352	0	352
11月	150	95	5	5	0	255	0	255
12月	212	135	10	5	0	362	0	362
平成18年1月	443	136	1	11	1	592	0	592
2月	140	35	16	18	0	209	0	209
3月	262	44	6	9	0	321	0	321
合計	2,787	1,351	96	69	8	4,311	0	4,311

5.6.3 TX-7

TX-7	PI	PI016	PI032	合計	ETC	総合計
平成17年4月	475	1	3	479	0	479
5月	503	1	1	505	0	505
6月	159	2	1	162	0	162
7月	104	7	2	113	0	113
8月	150	4	8	162	0	162
9月	140	1	8	149	0	149
10月	297	2	13	312	0	312
11月	423	6	1	430	0	430
12月	332	13	2	347	0	347
平成18年1月	314	1	2	317	0	317
2月	395	1	1	397	0	397
3月	273	6	3	282	0	282
合計	3,565	45	45	3,655	0	3,655

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 分子科学研究所理論研究系 分子基礎理論第一研究部門	教授
岡崎 進	計算科学研究センター	教授
斎藤 真司	計算分子科学研究系	教授
森田 明弘	計算科学研究センター	助教授
信定 克幸	分子科学研究所理論研究系 分子基礎理論第二研究部門	助教授
米満 賢治	分子科学研究所理論研究系 分子基礎理論第三研究部門	助教授
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 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 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 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研究系 生体恒常機能発達機構研究部門	教授
田中 秀樹	岡山大学 理学部	教授
常行 真司	東京大学大学院 理学系研究科	助教授
中井 浩巳	早稲田大学 理工学部	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	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

永瀬 茂	センター長
岡崎 進	教授
森田 明弘	助教授
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	技術職員 (班長)
内藤 茂樹	技術職員
手島 史綱	技術職員
岩橋 健輔	技術職員
澤 昌孝	技術職員
加納 聖子	事務補佐員
禿子 瞳	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	60年度
計算機システム	M-180 2台	M-180 2台	M-200H M-180	M-200H M-180 疎結合	M-200H 2台 疎結合	同57年度	同57年度	(~11月) 同57年度 (1月~) M-680H S-810/10
運 転 方 式	3カ月 有人	9月から無人	200H 無人 180 有人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	63	176	192	183	198	199	207	226
利 用 者 数								
機 構 内 ^a	48	70	69	91	94	102	110	130
機 構 外	107	254	325	330	375	426	446	464
合 計	155	334	394	421	469	528	556	594
稼働時間(時間)	1,087	6,071	6,553	6,721	6,305	6,170	6,316	6,016
CPU時間利用申請(時間)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(M-680H基準) ^b
申 請	929	4,666	11,033	10,230	11,938	13,053	14,799	15,536
許 可	816	3,171	7,427	8,306	10,141	10,091	10,768	12,080
総使用CPU時間 ^c (時間)	509	2,405	5,405	6,320	8,205	8,489	8,508	12,770
ジョブ処理件数 ^c	41,521	155,980	183,840	214,847	239,771	236,519	226,727	274,431
ライブラリプログラム 新規登録数	0	20	43	20	699	10	118	160
データベース新規登録数	0	2	0	0	3	3	0	1
センター使用論文数 ^d	0	24	93	118	190	185	202	206

	61年度	62年度	63年度	平成元年度	平成2年度	平成3年度	平成4年度
計算機システム	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	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	234	213	231	239	256	272	271
利 用 者 数							
機 構 内 ^a	141	143	137	146	140	158	143
機 構 外	496	520	515	544	593	623	661
合 計	637	663	652	690	733	781	804
稼働時間(時間)	6,368	6,444	6,091	5,694	6,768	6,749	7,156
CPU時間利用申請(時間)	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b
申 請	33,832/8,458*	9,880	12,439	14,694	16,622	20,606	21,153
許 可	28,184/7,046*	7,978	10,418	12,347	14,626	17,846	19,110
総使用CPU時間 ^c (時間)	20,092/5,023e*	6,624	7,872	8,300	11,975	11,874	12,491
ジョブ処理件数 ^c	289,915	278,956	278,104	253,418	295,5038	346,987	297,638
ライブラリプログラム 新規登録数	39	4	7	3	0	0	0
データベース新規登録数	0	1	0	0	0	0	0
センター使用論文数 ^d	237	223	211	218	248	229	282

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	平成11年度
計算機システム	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～)	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
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	225	222	210	201	188	174	166
利 用 者 数							
機 構 内 ^a	127	139	129	139	126	138	125
機 構 外	589	601	597	574	609	566	539
合 計	716	740	726	713	735	704	664
稼 働 時 間(時間)	(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～)	(SX3-3/34R) 8,579 (SX5) 8,587 (SP2) 8,574 (HPC) 8,590 (SR2201) 8,694 (Origin2000) 3,570	(SX3-3/34R) 6,365 (SX5) 8,301 (SP2) 8,375 (HPC) 8,363 (SR2201) 8,381 (Origin2000) 8,380
CPU時間利用申請(時間)	(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	(SP2 Thin 基準) ^b
申 請	18,311	21,781	40,358	58,425	73,910	76,804	97,788
許 可	16,027	19,393	37,446	51,499	58,650	67,159	79,964
総使用CPU時間 ^c (時間)	16,306	24,781	156,076	207,790	262,365	273,575	239,671
ジョブ処理件数 ^c	227,650	107,194	84,102	70,308	51,738	45,173	40,697
ライブラリプログラム 新規登録数	10	10	7	15	3	13	14
データベース新規登録数	1	1	1	0	0	0	0
センター使用論文数 ^d	267	306	275	279	331	347	347

	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	平成17年度
	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-7 TX-7	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-7 TX-7	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-7 TX-7
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	156	148	144	119	154	132
利 用 者 数						
機 構 内 ^a	101	100	104	89	83	30
機 構 外	534	504	479	449	516	477
合 計	635	604	583	538	599	507
稼 働 時 間(時間)	(VPP5000) 8,234 (SGI系) 8,319 (SX5) 8,496 (SP2) 8,492 (HPC) 8,490	(VPP5000) 8,492 (SGI系) 8,422 (SX5) 8,558 (SP2) 8,555 (HPC) 8,555	(VPP5000) 8,506 (SGI系) 8,324 (SX5) 8,391 (SP2) 7,118 (HPC) 8,386	(VPP5000) 8,553 (SGI系) 8,545 (SX-7) 8,524 (TX-7) 8,525	(VPP5000) 8,502 (SGI系) 8,496 (SX-7) 8,451 (TX-7) 8,489	(VPP5000) 8,462 (SGI系) 8,492 (SX-7) 8,492 (TX-7) 8,501
CPU時間利用申請 (時間)	(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	(TX-7 基準) ^b
申 請	249,405	251,785	237,872	278,177	341,788	414,643
許 可	209,393	234,866	229,401	277,697	321,796	368,136
総使用CPU時間 ^c (時間)	619,294	678,128	2,030,643	1,785,877	1,762,818	1,992,205
ジョブ処理件数 ^c	58,685	70,680	55,522	58,784	28,968	19,896
ライブラリプログラ ム新規登録数	18	4	15	5	4	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	391	302	302	281	284	205

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。

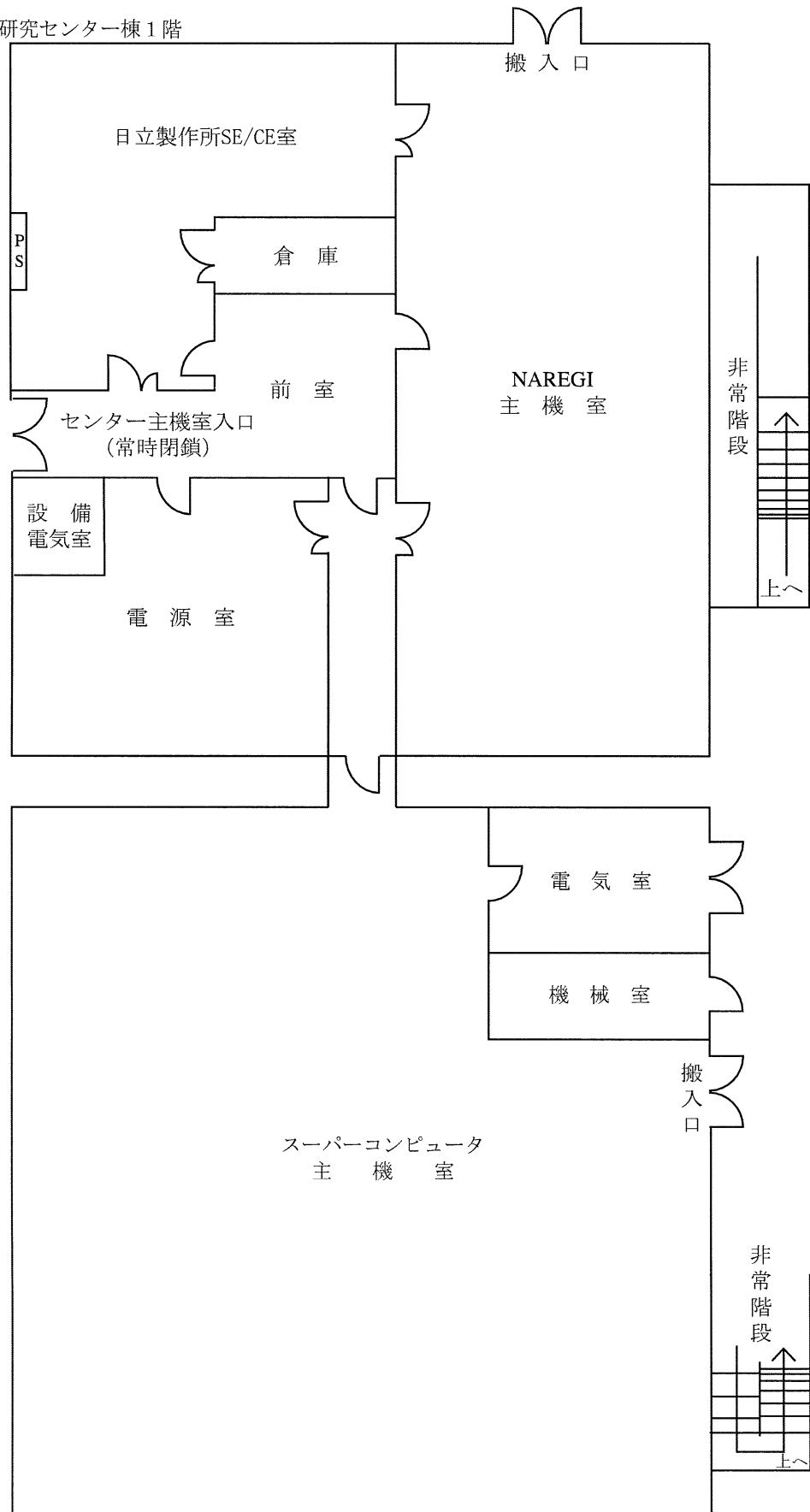
d:センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたものです。

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。

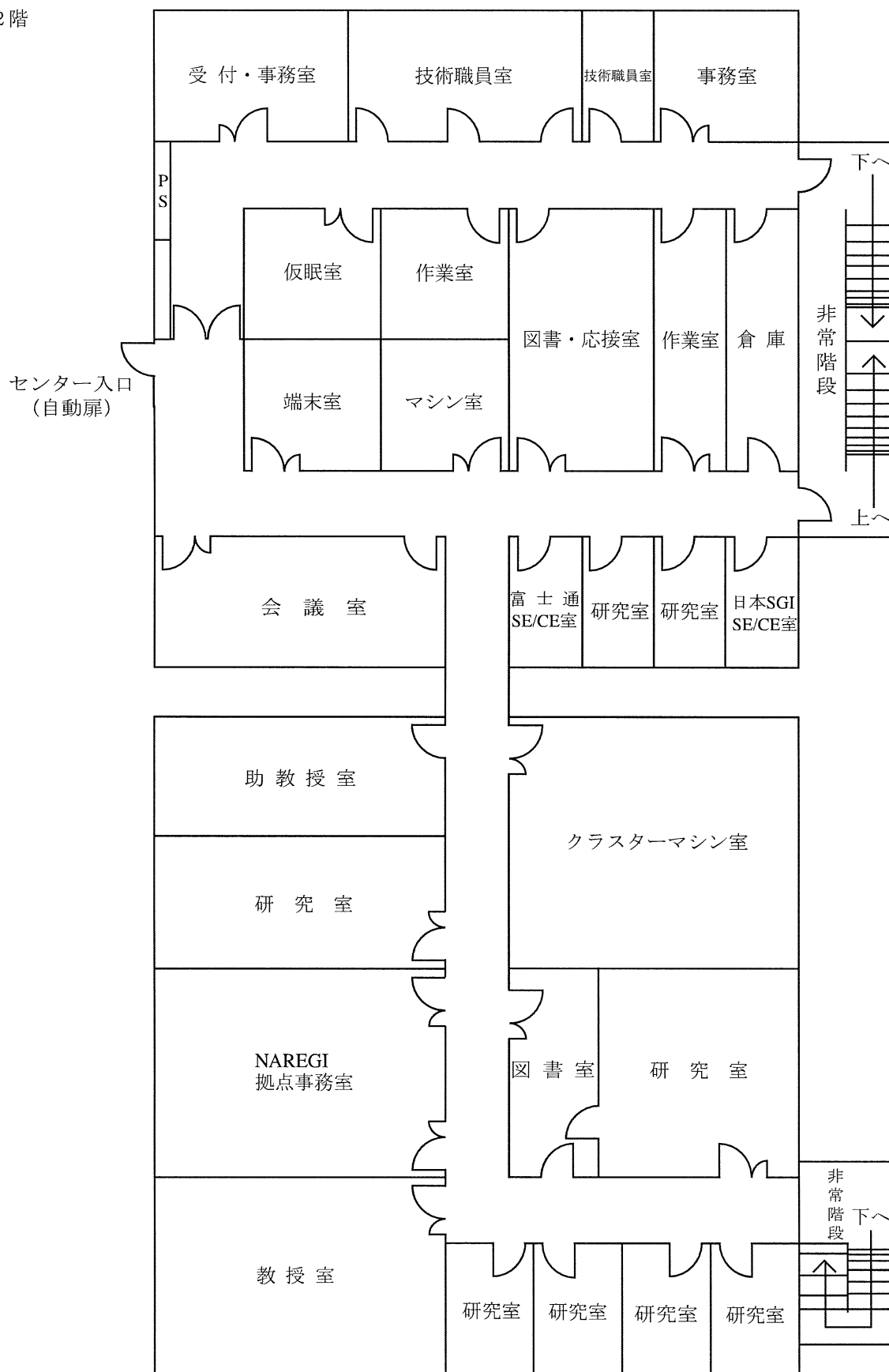
*:下段はM-680H基準

6.4 建物図

B地区 計算科学研究センター棟1階

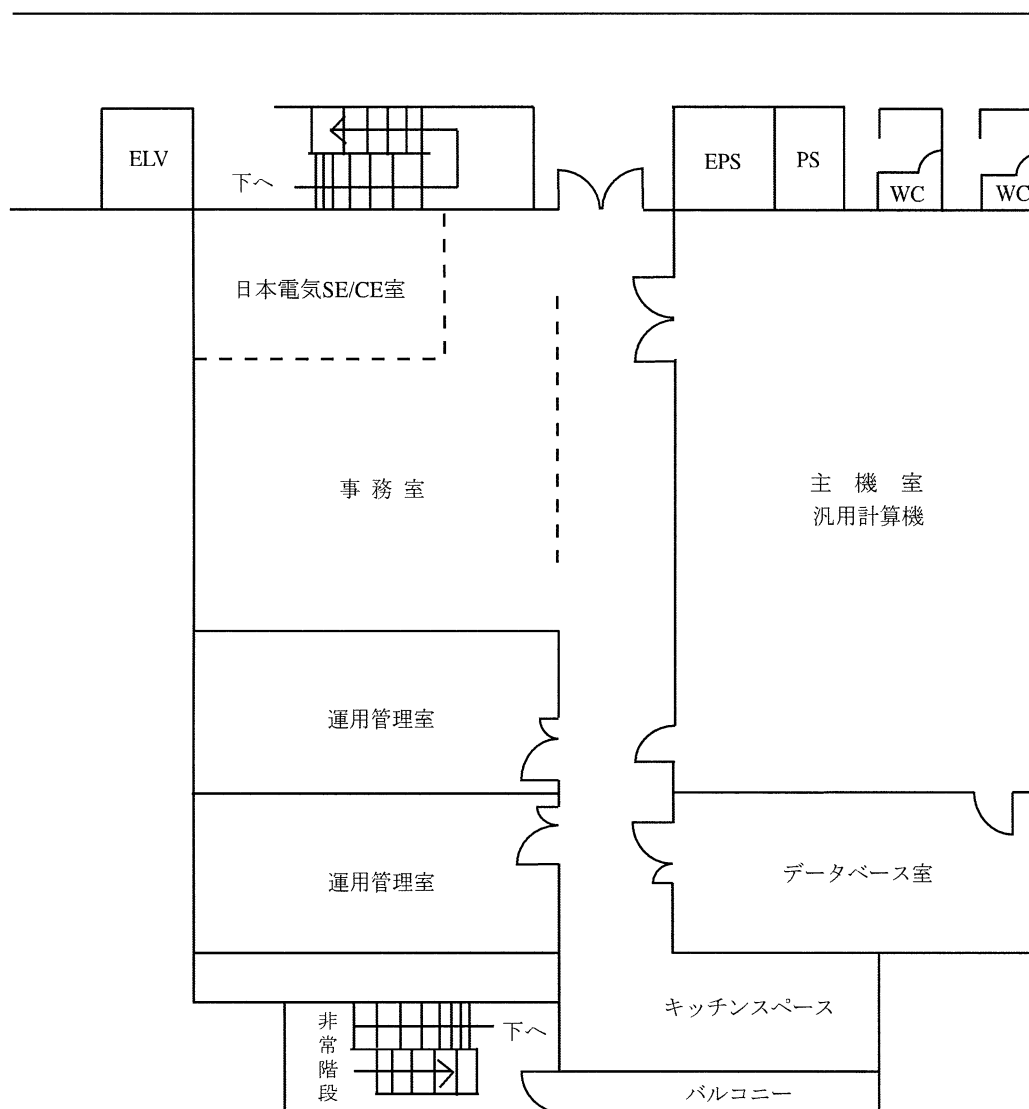


2階



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）を使用していますので、一般的な「RedHat Linux に関する情報」を利用して下さい。

- (1) 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

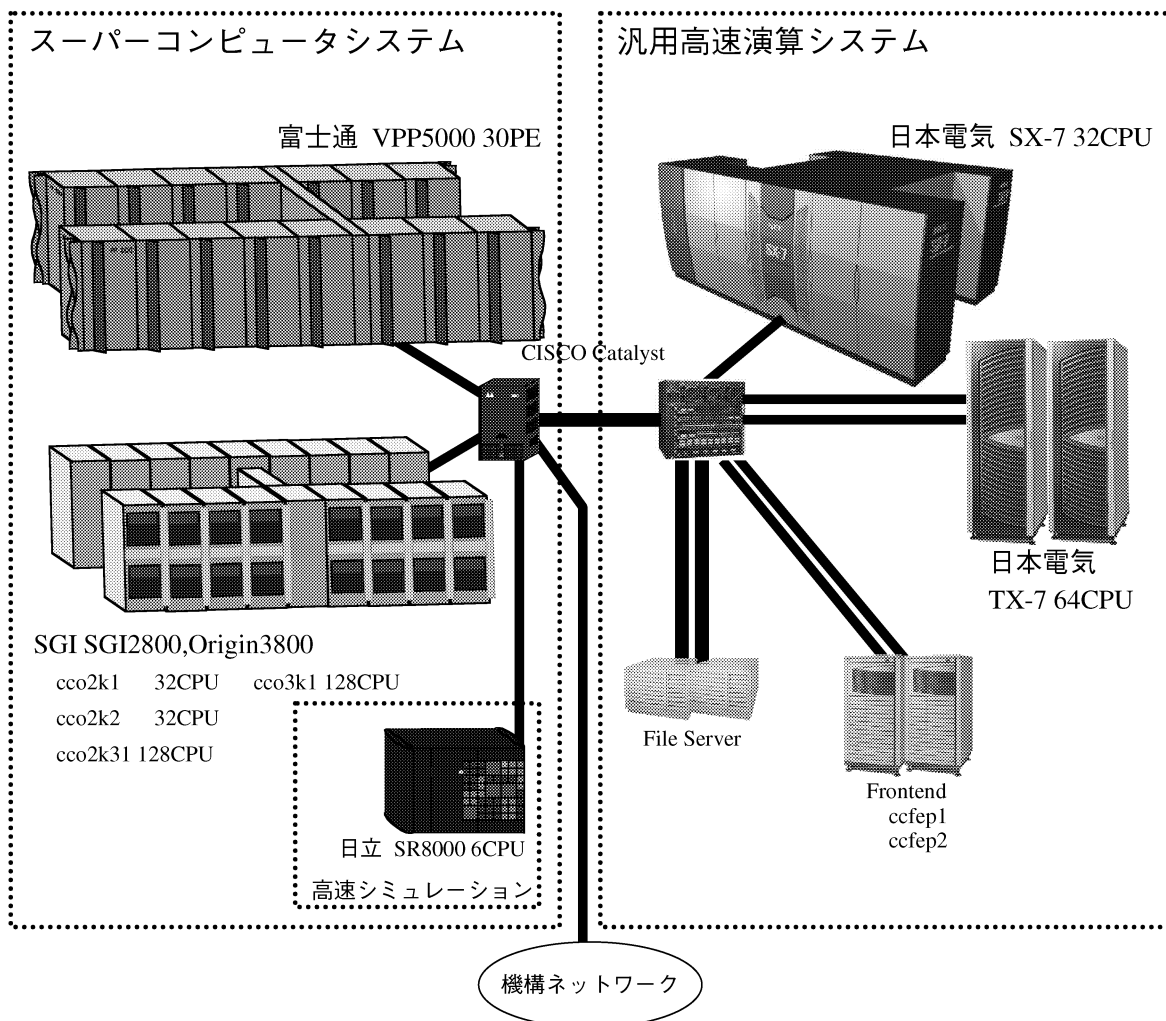
SX-7用マニュアルの購入にあたっての問い合わせ先

〒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 : 中村
電 話 : 052-222-2121
F A X : 052-222-2129

7 将来計画及び運営方針（分子研レポート2005より転載）

5-5 計算科学研究センター

2006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 1CPU 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 1CPU 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 320CPU から構成され、1CPU 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 1CPU 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 32CPU 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 64CPU、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。

2005年度も132の研究グループの総数514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。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。

高速パソコンクラスタ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を提供するために、2006年6月にスーパーコンピュータを更新する。

2006年7月より運用を開始する新システム「超高速分子シミュレータ」は、これまでの共同利用のスーパーコンピュータシステム (富士通 VPP5000, SGI2800/Origin3800) の後継機である。新システムは、量子化学、分子シミュレーション、固体電子論、反応動力学などの共同利用の多様な計算要求に応えうるための汎用性があるばかりでなく、ユーザーサイドの PC クラスタで実行が不可能な大規模計算を実行できる性能がある。新システムは富士通の PrimeQuest と SGI の Altix 4700 から構成される共有メモリ型スカラー計算機で、両サブシステムは同一体系の CPU (Intel Itanium2) および OS (Linux 2.6) をもとに、バイナリ互換性を保って一体的に運用される。システム全体として総演算性能 8 Tflops で総メモリ容量 10 TByte 超である。

PrimeQuest サブシステムは、64CPU コア / 256 GB からなる SMP ノード 10 台で構成される。演算ノード間は 16 GB/s のバンド幅で相互接続され、大規模な分子動力学計算などノード間をまたがる並列ジョブを高速で実行することができる。Altix 4700 サブシステムは 4 ノード構成からなり、各ノードは 160CPU コア / 2,064 GB を有する NUMA 型の共有メモリシステムである。さらに本サブシステムには、磁気ディスク装置 SGI TP9700 がジョブ作業領域として提供され、実効容量 104 TB および総理論読み出し性能 12 GB/s を有するディスク I/O を実現する。本サブシステムは大容量 (最大 2 TB) の共有メモリおよび超高速ディスク I/O に特徴をもち、大規模で高精度な量子化学計算を可能とする。

新システムの導入にあたって運用面でも、世界をリードする計算科学研究を本センターから発信していくことができるよう、大規模ユーザーのために新たに施設利用 S を設定する。審査により、年間 3 - 4 件程度の利用グループに本システムを優先的に使用していただき、従来の共同利用の枠を超えた超大規模計算の環境を提供する。また、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ていく。ナショナルセンターとして大きく機能していくために、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。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。