

I 部

目 次

1	巻頭言 「センターに望むこと」 京都大学福井謙一記念研究センター 諸熊奎治	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	10
3.3	キュー構成	10
3.4	利用課金	14
3.5	利用点数	14
3.6	センター開発コマンド	18
4	一般報告	20
4.1	ライブラリプログラムの開発・公開	20
4.2	データベース開発状況	22
5	平成 18 年度計算機稼働状況および利用者数	23
5.1	利用申請プロジェクトおよび利用者数	23
5.2	電力使用および計算機稼働状況	23
5.3	計算機利用状況	24
5.4	クラス別 CPU 使用時間	26
5.5	クラス別 VPU 使用時間	28
5.6	ジョブ処理件数	29
6	資料	31
6.1	計算科学研究センター運営委員	31
6.2	計算科学研究センター職員	32
6.3	利用者数と CPU 時間の推移	33
6.4	建物図	35
6.5	マニュアル一覧	38
7	将来計画及び運営方針 (分子研リポート 2006 より転載)	44

京都大学福井謙一記念研究センター

諸熊奎治

14年ぶりにまた日本で研究をすることになり、自然科学研究機構岡崎共通研究施設計算科学研究センターと名前を変えた”センター”に今回はユーザーの1人としてお世話になることになりました。15年前に比べるとレンタル予算もセンタースタッフの数も遥かに充実しており、期待するところが大変大きいです。

30年前の創設時に比べて分子科学の中での計算化学の立場も大いに変わりました。当時は役に立つ理論計算がやっと出来始めた頃でしたが、大型計算が出来るところは国内では分子研だけしか無かったので多くの研究者が計算機を使い集まり、センターには熱気が漂っていました。計算化学の立場が確立されたといえる15年ほど前からは、ユーザーの層も広くなると同時に、ワークステーション、パソコンクラスターが普及し始め、またネットワークを通じたアクセスが可能になり、センターの役割にも変化が起りました。

現在、多くの研究者はCPUが10-200台程度のパソコンクラスターを個人あるいはグループで持ち日常の計算機の必要性を満たしています。我々計算化学研究者がセンターに期待するのは、例えば大容量記憶、大容量ディスク、高並列化長時間計算など、自前のクラスターでは出来ないような大型計算です。このような能力を提供できるのはセンター以外にはありません。さらにこのようなハードウェアサービスと同時に大切なことは、多彩なソフトウェアの提供とそれらに関する高度な知識と適切な指導のサービスだと言えます。このようなサービスは、大規模利用者だけでなく、自前の計算機を持たない極めて広範囲な多彩な利用者が計算化学の恩恵を有効に得るためにも不可欠であり、今後一層の充実が望まれるところです。

現在次世代計算科学研究開発プログラムが国家プロジェクトとして理研が中心となって進行中です。10ペタフロップスーパーコンピュータの基本設計も最近完成、設置場所も神戸に決定し、2011年には稼働を開始することになっています。神戸にはこの管理と利用のためのCOEセンターの設置が検討されています。また、このプログラムのランドチャレンジアプリケーションの2本の柱:ナノ統合シミュレーションと生命体統合シミュレーションのうち前者については、分子研が拠点となって既に分子科学、物性科学などの研究分野が協力してソフトウェア開発のプロジェクトが進行しています。

このような状況の下に今後分子研センターが果たして行くべき役割は大変大きいと思われれます。ハードウェアに関しては、個人PCクラスター<分子研センター<次世代スパコンという段階的構造が出来、次世代スパコンでは今迄は不可能だった超大型計算プロジェクトが初めて可能になります。分子計算化学の分野でも、複雑な分子系の長時間高精度シミュレーションが実現すると大いに期待されます。しかし、このような超大型計算プロジェクトはスパコンだけでは実現しません。これを有効に利用するためには、効率的なソフトウェアの開発、充実及びサポートが欠かせません。ナノ統合シミュレーションを含めた広い意味での分子科学の分野においてこの役割が果たせるのは専門的知識(expertise)が集結している分子研センター(及び分子研理論・計算分子科学研究領域)以外にはありません。進行中のソフトウェア開発プロジェクトをさらに発展させ、関連分野の力を結集して、スパコンのCOEにも積極的に参加して頂きたいと思ひます。

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「計算分子科学の30年と将来」というタイトルのもとで行われ、所外をあわせて147名の参加者があった。

自然科学研究機構計算科学研究センターは、前身である分子科学研究所電子計算機センターの設立から2007年で設立30周年を迎えた。そこで本ワークショップでは設立30周年を記念して、初代センター長を務められた諸熊奎治名誉教授をはじめとする日本の分子科学の理論および計算科学分野で活躍されている方々を招聘し、最新の研究成果について講演していただいた。また「計算科学研究センターの将来像を考える」をテーマにパネルディスカッションを開催し、本センターの将来に対して提言をいただく機会を設けた。

平成18年度スーパーコンピュータワークショップ

日時：2007年2月27日（火）～28日（水）

場所：岡崎コンファレンスセンター

参加者：147名（所外115名、所内32名）

テーマ：「計算分子科学の30年と将来」

2月27日（大会議室）

13:20-13:30 はじめに 岡崎進（計算科学研究センター長）

13:30-14:20 基調講演 諸熊奎治（京大福井謙一センター）

複雑分子系の複合分子理論によるシミュレーションを目指して

14:20-15:00 藪下聡（慶大理工）

スピン軌道CI法による分子の解離過程の理論計算

15:00-15:40 加藤重樹（京大理）

溶液内、タンパク質場における化学反応の理論的研究

15:40-16:00 休憩

16:00-17:40 パネルディスカッション

「計算科学研究センターの将来像を考える」

パネラー：加藤重樹（京大理）

中井浩巳（早大理工）

平田文男（分子研）

樋渡保秋（金沢大名誉教授）

諸熊奎治（京大福井謙一センター）

藪下聡（慶大理工）（50音順）

司会：岡崎進（計算科学研究センター長）

18:00-20:00 懇親会（中会議室）

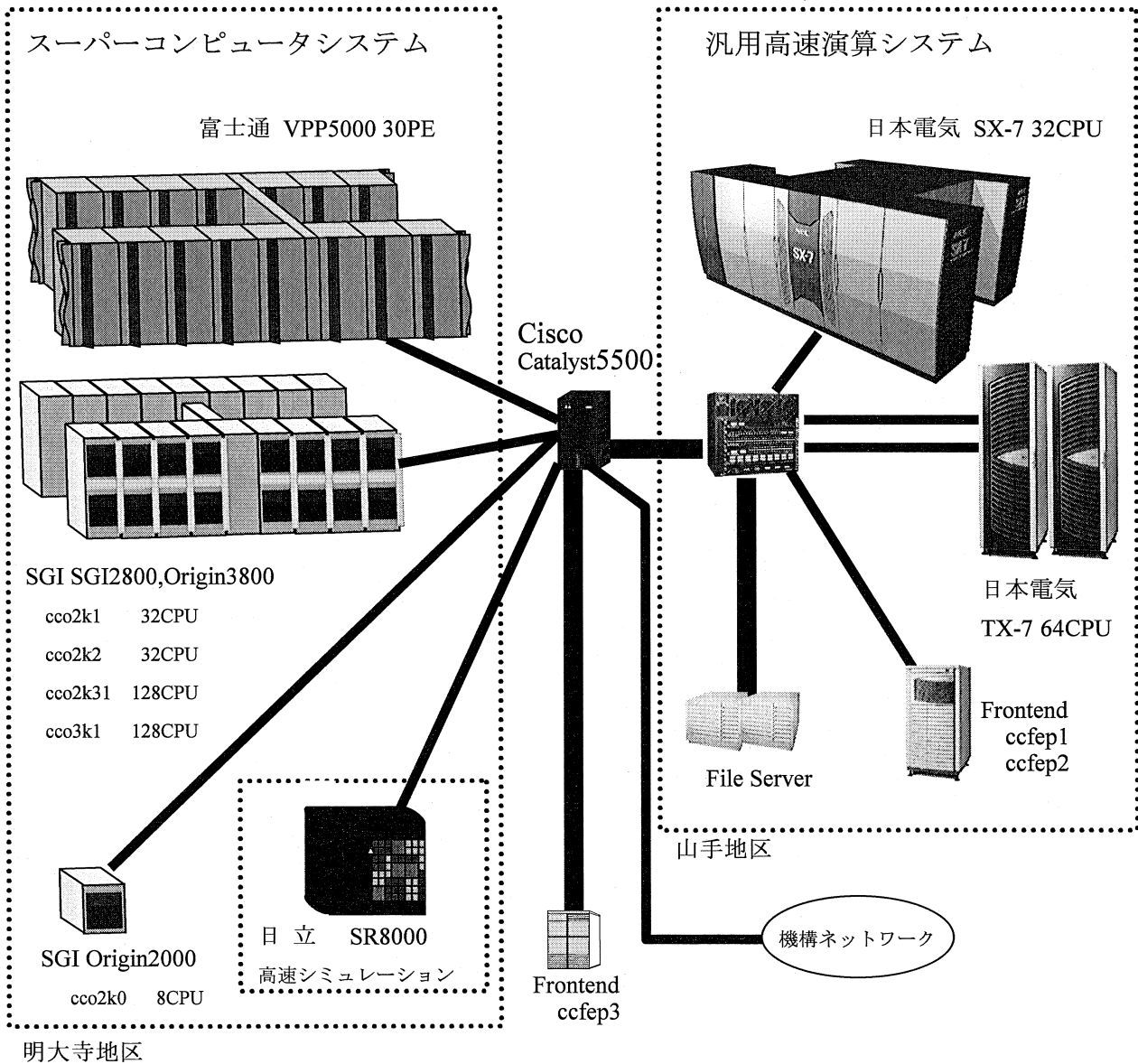
2月28日(中会議室)

- 9:00-9:50 基調講演 中村宏樹(分子研)
化学動力学理論の将来(?) --量子効果の重要性と分子機能の開発・制御
- 9:50-10:30 田中秀樹(岡山大自然科学)
水、氷、包接水和物の構造とダイナミクスに関する理論的研究
- 10:30-10:50 休憩
- 10:50-11:30 榊茂好(京大工)
遷移金属元素を含む複合電子系の理論的研究
- 11:30-12:10 押山淳(筑波大数理物質)
密度汎関数理論によるナノ・バイオ計算
- 12:10-13:30 昼食
- 13:30-14:10 平尾公彦(東大工)
大規模分子系の理論計算に向けて
- 14:10-14:50 岡本祐幸(名大理)
生体分子系の拡張アンサンブルシミュレーション
- 14:50-15:30 中辻博(京大工)
正確な予言学としての量子化学の確立
- 15:30-15:40 おわりに 齊藤真司(分子研)

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

3.1.1 2006年6月末（VPP5000、SGI2800、Origin3800は5月末で運用停止）までのシステム構成と特徴
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)。



- ・ 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。

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

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

◆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	4.5TB
(内訳)	
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。	

◆高速演算サーバ副システム(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。

◆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)>

総容量	6TB
(内訳)	
ユーザホームディレクトリ	6TB

◆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)

3.1.2 2006 年 7 月以降のシステム構成と特徴

高速 I/O サーバサブシステム(SGI 製 Altix4700)、密結合サーバサブシステム(富士通製 PRIMEQUEST)、高速演算サーバシステム(日本電気製 SX-7)、高速演算サーバ副システム(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)。

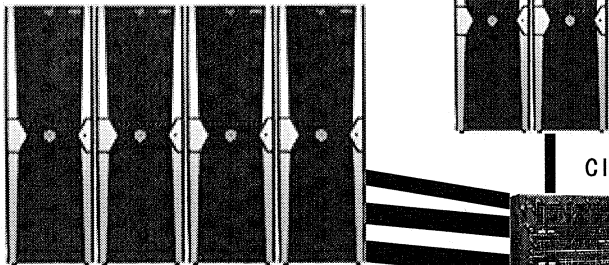
超高速分子シミュレーターシステム

会話処理ノード

SGI Altix4700 8CPU Core

高速 I/O サーバサブシステム

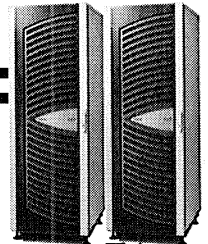
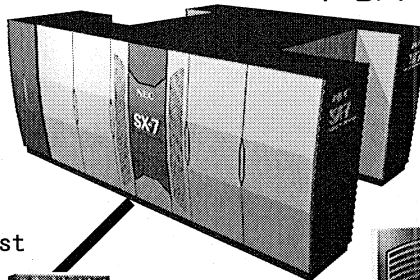
SGI Altix4700 640CPU core



CISCO Catalyst

汎用高速演算システム

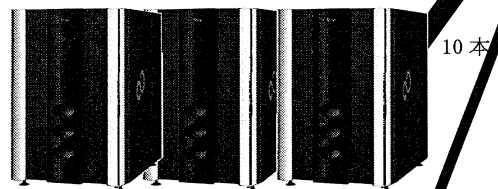
日本電気 SX-7 32CPU



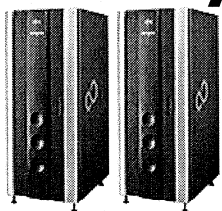
日本電気 TX-7 64CPU

密結合サーバサブシステム

富士通 PRIMEQUEST 640CPU core

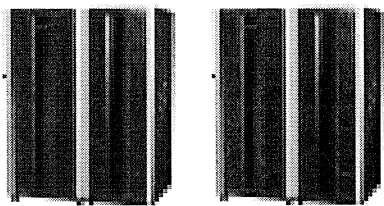
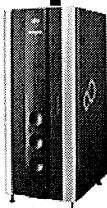


10本



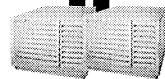
会話処理ノード

富士通 PRIMEQUEST 8CPU core

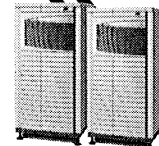


データ保管用磁気ディスク装置

富士通 ETERNUS3000 24TB



File Server



Frontend
ccfep1
ccfep2

山手地区

明大寺地区

機構ネットワーク

- ・ センター内は2台のスイッチングシステム(Cisco Catalyst6506E)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。

◆高速 I/O サーバサブシステム(SGI 製 Altix4700)

Altix ではジョブ管理(PBS Professional)、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	8.0TB(6.0TB + 2.0TB)
総理論演算性能	3276.9GFLOPS+819.2GFLOPS(6.4GFLOPS/CPUCore)
CPU 台数	640 台(512 台 + 128 台)

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量	114TB
(内訳)	
一時作業ファイル領域(/work)	114TB

◆密結合サーバサブシステム(富士通製 PRIMEQUEST)

PRIMEQUEST ではジョブ管理(Parallelnavi for Linux Advanced Edition)、バッチ処理と TSS 処理を行います。

<演算処理装置>

主記憶容量	2.56TB(256GB × 10node)
総理論演算性能	409.6GFLOPS × 10node(6.4GFLOPS/CPUCore)
CPU 台数	640 台(64 台 × 10node)

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量	35TB
(内訳)	
一時作業領域(/work)	8TB
短期保存ファイル領域(/week)	24TB

◆高速演算サーバシステム(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	4.5TB
(内訳)	
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。	

◆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。	

◆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)>

総容量	6TB
(内訳)	
ユーザホームディレクトリ	6TB

◆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、施設利用専用キュー（2006年7月以降）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

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

◆2006年6月末までの構成（VPP5000とSGI2800、Origin3800は5月末で運用停止）

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）。

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。

◆2006年7月以降のキュー構成

施設利用S用キュー(Special queue) 最優先ジョブ

キュー名	CPU時間	メモリ	多重度	同時 実行数	CPU数	ユーザ 制限	グループ 制限	備考
PAS	240時間	12.8GB/C	1	2から40	128から1	128C	128C	Altix4700
PBS	240時間	4.0GB/C	1	5から40	64から1	128C	128C	PRIMEQUEST

特別利用キュー (Extended Queue: 特別利用申請者のみ利用可, 施設利用 S 実行時は運用枠が減少する)

キュー名	CPU 時間	メモリ	多重度	同時 実行数	CPU 数	ユーザ 制限	グループ 制限	備考
PAE	240 時間	12.8GB/C	1	3 から 40	128 から 1	128C	128C	Altix4700
PBE	240 時間	4.0GB/C	1	7 から 40	64 から 1	128C	128C	PRIMEQUEST
SNE	360 時間	8.0GB	1	16	1	4	4	SX-7

利用者が無い場合は、資源は以下のパラレル利用キューとシリアル利用キューに割り当てる

パラレル利用キュー (施設利用 S、特別利用キュー実行時は運用枠が減少する)

キュー名	CPU 時間	メモリ	多重度	同時 実行数	CPU 数	ユーザ 制限	グループ 制限	備考
PA	72 時間	12.8GB/C	1	8 から 80	64 から 1	64C	64C	Altix4700
PB	72 時間	4.0GB/C	1	20 から 80	32 から 1	64C	64C	PRIMEQUEST
PI	24 時間	32GB	1	8	8	4	4	TX7

シリアル利用キュー 運用枠 62~30 (特別利用キュー実行時は運用枠が減少する)

キュー名	CPU 時間	メモリ	多重度	同時 実行数	CPU 数	ユーザ 制限	グループ 制限	備考
SN	96 時間	4GB	2	62 から 30	1	8	8	SX-7

会話処理

CPU 名	CPU 時 間	メモリ	多重度	同時 実行数	CPU 数	ユーザ 制限	グループ 制限	備考
Altix	1 時間	1GB	-	-	4	-	-	4Core 16GB x2node
PRIMEQUEST	1 時間	1GB	-	-	4	-	-	4Core 16GB x2node
SX7	1 時間	1GB	-	-	1	-	-	

3.4 利用課金

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。

3.5 利用点数

計算機利用の配分のためにプロジェクト課題ごとに許可点数が割り当てられます。各グループは割り当てられた許可点数を越えて計算機を利用することはできません。

3.5.1 利用点数算出法

Serial	<p>利用点数 = CPU使用時間 × 点数換算係数</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>利用点数 = (SPU使用時間 × 点数換算係数) + (VPU使用時間 × 点数換算係数)</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>利用点数 = ジョブ経過時間 × CPU数 × 点数換算係数</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 (要求) CPU数 (例 : PN008なら8CPU)</p>

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。

◆2006年6月末まで

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

P_{vpps} : VPP5000 のシリアルジョブキューで利用した点数

P_{vppp} : VPP5000 のパラレルジョブキューで利用した点数

P_{sgip} : SGI2800 のパラレルジョブキューで利用した点数

$P_{originp}$: Origin3800 のパラレルジョブキューで利用した点数

P_{sx7s} : SX-7 のシリアルジョブキューで利用した点数

P_{sx7p} : SX-7 のパラレルジョブキューで利用した点数

P_{tx7p} : TX-7 のパラレルジョブキューで利用した点数

◆2006年7月以降

$$P = \text{Patxp} + \text{Pprqp} + \text{Psx7s} + \text{Ptx7p}$$

Patxp : Altix4700 のシリアルジョブキューで利用した点数

Pprqp : PRIMEQUEST 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

Ptx7p : TX-7 のパラレルジョブキューで利用した点数

3.5.2 点数換算係数一覧

◆2006年6月末まで (VPP5000、SGI2800、Origin3800 は5月末で運用停止)

	点数換算係数		CPU1 時間当たりの消費点数 (3600×点数換算係数)	
	Scalar	Vector	Scalar	Vector
VPP5000(S)	0.04500	0.04500	162.00	162.00
VPP5000(P)	0.03150	0.03150	113.40	113.40
SGI2800(P)	0.00245	-	8.82	-
Origin3800(P)	0.00315	-	11.34	-
SX-7(S)	0.06000	0.06000	216.00	216.00
SX-7(P)	0.04200	0.04200	151.20	151.20
TX-7(P)	0.01750	-	63.00	-

◆2006年7月以降

	点数換算係数		CPU1 時間当たりの消費点数 (3600×点数換算係数)	
	Scalar	Vector	Scalar	Vector
Altix4700(P)	0.0090	-	32.40	-
PRIMEQUEST(P)	0.0060	-	21.60	-
SX-7(S)	0.0600	0.0600	216.00	216.00
TX-7(P)	0.0040	-	14.40	-

(S):Serial

(P): Parallel

3.5.3 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。

◆2006年6月末まで

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	演算性能	マシン名	備考
SF	16.875	162.0 点	0.405 時間	0.0450	9.6	VPP5000	
SN	24.462	216.0 点	0.540 時間	0.0600	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	演算性能	マシン名	備考
PF	11.813	907.2 点	2.268 時間	0.0315	76.8	VPP5000	8CPU
PS	14.698	141.1 点	0.353 時間	0.00245	9.6	SGI2800	16CPU
PO	14.172	181.4 点	0.454 時間	0.00315	12.8	Origin3800	16CPU
PN	17.123	1209.6 点	3.024 時間	0.0420	70.64	SX-7	8CPU
PI	12.115	1008.0 点	2.520 時間	0.0175	83.2	TX-7	16CPU

◆2006年7月以降

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	演算性能	マシン名	備考
SN, SNE	24.5	216.0 点	0.540 時間	0.0600	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	演算性能	マシン名	備考
PA, PAE, PAS	5.06	259.2 点	0.648 時間	0.0090	51.2	Altix4700	8CPU
PB, PBE, PBS	3.38	172.8 点	0.432 時間	0.0060	51.2	PRIMEQUEST	8CPU
PI	2.77	115.2 点	0.288 時間	0.0040	41.6	TX-7	8CPU

3.6 センター開発コマンド（新規・更新分）

3.6.1 jobinfo（新規）

これまでのセンター開発コマンド `jstatr`, `jstatq`, `jstat` を置き換える高機能なコマンドです。旧コマンドでは CPU 数等の表示ができませんので、今後、`jobinfo` を使用してください。

```
ccfep1% jobinfo -h host [-s]
```

もしくは

```
ccfep1% jobinfo -q queue [-s]
```

キューの状態の概略を表示します。

- ユーザー、グループに許されている CPU の数
- ユーザー、グループの実行中や待ちジョブの CPU 数、本数
- システム全体の実行中や待ちジョブの CPU 数、本数
- その時点ですぐに実行可能かどうかの表示と可能ならその CPU 数。
- システム全体の最大断片空き CPU 数、総空き CPU 数

```
ccinfo1% jobinfo -h host -l [-a|-g]
```

もしくは

```
ccfep1% jobinfo -q queue -l [-a|-g]
```

各リクエストの状態を表示します。

ジョブ ID、バッチスクリプトファイル名、ユーザー名、グループ名、ジョブの状態、経過時間（`sx7` の場合は CPU 時間）、実行ノードが表示されます。ただし、バッチスクリプトファイル名は、自分自身のジョブの場合のみ表示されます。また、自分自身のユーザー名や所属グループ外のグループ名は、暗号化されて 4 文字で表示されます。

コマンドラインオプションをつけないと自分自身のみ、`-g` オプションをつけると自分の所属グループのみ、`-a` オプションをつけると全ユーザーのリクエストが表示されます。

```
ccinfo1% jobinfo -h host -n
```

もしくは

```
ccfep1% jobinfo -q queue -n
```

各ノードでの空き CPU 数や全 CPU 数を表示します。

host は、計算サーバ名（`ccatx`, `ccprq`, `ccsx7`, `cctx7`）のいずれかを指定してください。

queue は、キュー名（`PAS`, `PAE`, `PA`, `PBS`, `PBE`, `PB`, `SNE`, `SN`, `PI`）のいずれかを指定してください。

3.6.2 catw、findw、headw、lsw、tailw (新規)

バッチスクリプトで投入されたジョブは各演算ノードで実行されます。/work 以下にある計算途中経過にアクセスする方法として、cat、find、head、ls、tail に対応するコマンド catw、findw、headw、lsw、tailw を用意してあります。

使用法は以下のとおりです。

```
ccfef1% xxxw [-h host -i RequestID|-n node] [-- xxx のオプション] [xxx に渡す引数]
```

xxxは先の5つのコマンドを表しています。オリジナルのオプション開始前にはハイフンが2つ必要です。

3.6.3 g03sub (更新)

SGI Altix4700 および Fujitsu PrimeQuest の導入に伴い、ジョブの投入の際に CPU 数の指定ができるようになりました。これに対応して、g03sub では、-np nproc オプションで CPU 数の指定ができるように変更しました。

これまでデフォルトで PI キューに入ったジョブは PA キューに入るように変更しました。

より詳細なメモリ指定ができるように、-mem size オプションを新設し、この値が%mem 行に反映するようにしました。

現在の g03sub の使い方は、下記のようになります。

```
Usage :
  g03sub [-q "QUE "] [-noedit] [-rev "g03xxx"] [-np "ncpus"] [-mem "size"] input_files
Options :
  -q "QUE"    Specify que.
  -noedit     Prohibit editing your input files. (%mem, %nproc)
  -rev "g03xxx" Specify g03 revision.
  -np "ncpus" Specify number of processors.
  -mem "size" Specify memory size used in %mem.
Examples :
  % g03sub *.dat
  % g03sub -q PI *.inp
  % g03sub -noedit input1.com input2.com
  % g03sub -q PA -rev g03d01 -np 16 -mem 8000MB sample.inp
Available revisions :
atx:          g03d01
prq:          g03d01
sx7: g03b05 g03c01 g03c02 g03d02
tx7: g03b05 g03c01 g03c02 g03d01
```

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 18 年度のライブラリプログラム開発の申請件数は 1 件でした。

また、平成 18 年度に新規登録または更新したライブラリプログラムは以下の 21 件です。

Altix4700 用 (8 件)

<u>プログラム名</u>	<u>タイトル名</u>
Amber 8	Amber 8 (bugfix61) : Assisted model building with energy refinement
Amber 9	Amber 9 (bugfix 20) : Assisted model building with energy refinement
Gaussian03	Gaussian03 Rev d.01 : <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	GAMESS2006Feb22 : General atomic and molecular electronic structure system
MOLCAS	MOLCAS 6.4 sp1 : A quantum chemistry software
MOLPRO	MOLPRO 2002.6 : A complete system of <i>ab initio</i> programs
MOLPRO	Molpro 2006.1 : A complete system of <i>ab initio</i> programs
TURBOMOLE	TURBOMOLE 5.9: One of the fastest programs for standard quantum chemical applications

PRIMEQUEST 用 (6 件)

<u>プログラム名</u>	<u>タイトル名</u>
Amber 8	Amber 8 (bugfix61) : Assisted model building with energy refinement
Amber 9	Amber 9 (bugfix 31) : Assisted model building with energy refinement
Gaussian03	Gaussian03 Rev d.01 : <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	GAMESS2006Feb22 : General atomic and molecular electronic structure system
MOLPRO	MOLPRO 2002.6 : A complete system of <i>ab initio</i> programs
MOLPRO	Molpro 2006.1 : A complete system of <i>ab initio</i> programs

SX-7 用 (1 件)

<u>プログラム名</u>	<u>タイトル名</u>
Gaussian03	Gaussian03 Rev d.02 : <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations

TX-7 用 (5 件)

<u>プログラム名</u>	<u>タイトル名</u>
Gaussian03	Gaussian03 Rev d.01 : <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations
Amber 9	Amber 9 (bugfix 06) : Assisted model building with energy refinement
Amber 8	Amber 8 (bugfix 61) : Assisted model building with energy refinement
MOLCAS	MOLCAS 6.4 sp1 : A quantum chemistry software
MOLPRO	Molpro 2006.1 : A complete system of <i>ab initio</i> programs

ccfep1/2 用 (1 件)

<u>プログラム名</u>	<u>タイトル名</u>
GaussiView	GaussView 3.0.9 : Graphical frontend for the Gaussian program

よって、平成 18 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

**** SGI Altix4700 版 ****

プログラム名	タイトル名
Amber 9	Amber 9 (bugfix20): Assisted model building with energy refinement
Amber 8	Amber 8 (bugfix61): Assisted model building with energy refinement
Gaussian 03	Gaussian 03(D.01): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	GAMESS(2006Feb22): General atomic and molecular electronic structure system
Molcas	Molcas(6.4sp1): Quantum chemistry software
Molpro	Molpro(2002.6): A complete system of <i>ab initio</i> programs
Molpro	Molpro(2006.1): A complete system of <i>ab initio</i> programs
TURBOMOLE	TURBOMOLE 5.9: One of the fastest programs for standard quantum chemical applications

**** Fujitsu PrimeQuest 版 ****

プログラム名	タイトル名
Amber 9	Amber 9 (bugfix31): Assisted model building with energy refinement
Amber 8	Amber 8 (bugfix61): Assisted model building with energy refinement
Gaussian 03	Gaussian 03(D.01): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	GAMESS(2006Feb22): General atomic and molecular electronic structure system
Molpro	Molpro(2002.6): A complete system of <i>ab initio</i> programs
Molpro	Molpro(2006.1): 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 (bugfix25): Assisted model building with energy refinement
Gaussian 03	Gaussian 03(D.02): <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

**** 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 9	Amber 9 (bugfix06): Assisted model building with energy refinement
Amber 8	Amber 8 (bugfix61): Assisted model building with energy refinement
Gaussian 03	Gaussian 03(D.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(6.4sp1): Quantum chemistry software
Molpro	Molpro(2006.1): A complete system of <i>ab initio</i> programs
Molpro	Molpro(2002.3): A complete system of <i>ab initio</i> programs
BLAST	BLAST: Basic local alignment search tool

**** その他 ****

プログラム名	タイトル名
GaussView	Graphical frontend for the Gaussian program

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： 89,624 件

主要学術雑誌に掲載された *ab initio* 分子軌道計算を扱った文献のデータベースで、日本化学情報協会（JAICI）より世界中に配布されています。また、毎年一年分のデータを、論文形式で2004年度まではELSEVIER社の「THEOCHEM」に、またそれ以降は日本コンピュータ化学会の J. Comp. Chem. Jpn. に1号分全部を使って刊行しています。WWW版QCLDBの利用については、平成15年秋からは、モニター制度の制限つきではありませんが、本機構の計算科学研究センターから、WWW版QCLDBの無料公開が文部科学省から認められ、新しいQCLDBデータフォーマットに対応したQCLDB IIを、SQLを用いてWWW化したものをURL:<http://qcldb2.ims.ac.jp/>で公開しています。

平成18年度に新規登録されたデータは、7,607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://fcd.ims.ac.jp/>）を原則利用制限なしで公開サービスしています。新規開発は平成13年度で中止になっています。

5 平成18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	ユーザー数	時間			点数	
				申請	許可	実績	許可	実績
分子科学	施設利用	117	519	576,470	527,668	329,920	211,067,200	131,967,920
	協力研究	6	14	6,000	6,000	25	2,400,000	10,155
	所内	17	39	118,800	118,800	78,075	47,520,000	31,229,885
基礎生物学	所内	1	1	1,000	1,000	0	40,000	0
合計		141	573	702,270	653,468	408,020	261,027,200	163,207,960

※ 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	*	cco2k31	*
平成18年4月	239,345	460,740	700,085	666	100	665	100	665	100	665	100	663	100
5月	252,416	472,850	725,266	736	100	736	100	736	100	736	100	736	100
6月	232,435	451,000	683,435	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
7月	367,399	487,880	855,279	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
8月	386,323	517,050	903,373	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
9月	347,776	464,310	812,086	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
10月	352,226	447,740	799,966	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
11月	327,465	432,680	760,145	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
12月	332,934	435,200	768,134	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
平成19年1月	330,641	426,780	757,421	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
2月	302,715	384,170	686,885	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
3月	338,412	425,560	763,972	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
合計	3,810,087	5,405,960	9,216,047	1,402	100	1,401	100	1,401	100	1,401	100	1,399	100

年月	システム稼働時間												合計	KW/ 稼働時間
	cco3k1	*	Altix	*	PQ	*	SX-7	*	TX-7	*	平均	*		
平成18年4月	665	100	-	-	-	-	661	100	661	100	664	100	5,309	361
5月	733	99	-	-	-	-	728	99	731	100	734	100	5,872	344
6月	-	-	-	-	-	-	566	100	566	100	566	100	1,132	411
7月	-	-	728	97	742	100	733	100	733	100	734	99	2,936	501
8月	-	-	711	94	732	100	728	99	728	99	725	98	2,899	533
9月	-	-	588	90	620	97	709	109	709	109	656	100	2,626	530
10月	-	-	683	91	698	95	733	100	733	100	712	96	2,847	495
11月	-	-	666	96	683	100	681	100	681	100	678	99	2,711	483
12月	-	-	722	97	732	100	734	100	734	100	730	99	2,922	456
平成19年1月	-	-	719	97	734	100	730	99	730	99	728	99	2,912	454
2月	-	-	651	98	662	100	662	100	660	100	659	99	2,635	460
3月	-	-	729	99	733	100	734	100	732	100	732	100	2,929	462
合計	1,398	100	6,196	74	6,336	77	8,399	100	8,398	100	693	99	37,728	5,497

※ *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	*	cco3k1	*
平成18年4月		8,898	45	223	4	11,706	55	11,970	56	52,525	62	57,038	67
5月		10,342	47	32	1	10,343	44	11,434	49	52,633	56	16,521	18
6月		-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
7月		-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
8月		-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
9月		-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
10月		-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
11月		-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
12月		-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
平成19年1月		-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
2月		-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
3月		-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
合計		19,240	46	254	2	22,049	49	23,404	52	105,158	59	73,560	41

年月	CPU使用時間										
	マシン名	Altix	*	PQ	*	SX-7	*	TX-7	*	合計	@
平成18年4月		-	-	-	-	13,468	64	19,844	47	175,672	50
5月		-	-	-	-	18,239	78	25,390	54	144,934	43
6月		-	-	-	-	9,868	54	14,209	39	24,077	47
7月		26,589	6	181,409	38	15,663	67	28,130	60	251,791	43
8月		69,648	15	191,943	41	18,053	77	21,213	46	300,857	45
9月		77,939	21	214,282	54	16,076	71	19,180	42	327,477	47
10月		163,581	37	266,986	60	15,419	66	9,801	21	455,787	46
11月		117,827	28	247,477	57	12,298	56	21,959	50	399,561	48
12月		175,194	38	326,297	70	12,259	52	13,021	28	526,771	47
平成19年1月		306,034	67	269,494	57	12,509	54	13,709	29	601,746	52
2月		312,458	75	291,330	69	14,115	67	12,089	29	629,992	60
3月		309,712	66	215,307	46	19,795	84	985	2	545,799	50
合計		1,558,982	39	2,204,525	54	177,762	66	199,530	37	4,384,464	48

※ 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	VPU使用時間						
	マシン名	VPP	*	SX-7	*	合計	@
平成18年4月		6,037	30	8,663	41	14,700	36
5月		6,984	32	13,066	56	20,050	44
6月		-	-	5,802	32	5,802	32
7月		-	-	13,559	58	13,559	58
8月		-	-	16,064	69	16,064	69
9月		-	-	14,984	66	14,984	66
10月		-	-	13,448	57	13,448	57
11月		-	-	9,835	45	9,835	45
12月		-	-	10,578	45	10,578	45
平成19年1月		-	-	10,863	47	10,863	47
2月		-	-	13,065	62	13,065	62
3月		-	-	18,240	78	18,240	78
合計		13,021	31	148,167	55	161,188	53

※ 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	バッチジョブ処理件数										
	マシン名	VPP	cco2k1	cco2k2	cco2k31	cco3k1	Altix	PQ	SX-7	TX-7	合計
平成18年4月		209	442	0	442	18	-	-	266	225	1,602
5月		512	675	0	675	79	-	-	240	240	2,421
6月		-	-	-	-	-	-	-	374	335	709
7月		-	-	-	-	-	1,717	2,782	1,298	810	6,607
8月		-	-	-	-	-	1,636	2,465	667	928	5,696
9月		-	-	-	-	-	2,119	3,000	734	807	6,660
10月		-	-	-	-	-	4,740	2,233	874	798	8,645
11月		-	-	-	-	-	3,860	3,215	929	612	8,616
12月		-	-	-	-	-	4,341	2,076	919	715	8,051
平成19年1月		-	-	-	-	-	4,506	3,547	874	904	9,831
2月		-	-	-	-	-	3,211	4,384	1,001	457	9,053
3月		-	-	-	-	-	3,316	6,067	825	31	10,239
合計		721	1,117	0	1,117	97	29,446	29,769	9,001	6,862	78,130

5.4 クラス別 CPU 使用時間

5.4.1 Altix4700

Altix4700	PA	PAE	PAS	会話処理	合計	ETC	総合計
平成18年4月	-	-	-	-	-	-	-
5月	-	-	-	-	-	-	-
6月	-	-	-	-	-	-	-
7月	25723:34:58	865:33:40	0:00:00	0:00:00	26589:08:38	0:00:00	26589:08:38
8月	53206:42:19	566:57:02	15874:09:31	0:00:00	69647:48:52	0:00:00	69647:48:52
9月	52901:52:14	1390:04:22	23646:36:18	0:00:00	77938:32:54	0:00:00	77938:32:54
10月	64502:46:05	31497:17:01	67581:21:38	0:00:00	163581:24:44	0:00:00	163581:24:44
11月	42818:15:39	7998:30:16	67010:10:17	0:00:00	117826:56:12	0:00:00	117826:56:12
12月	75311:55:45	3899:03:12	95982:55:26	0:00:00	175193:54:23	0:00:00	175193:54:23
平成19年1月	102170:34:41	64409:18:05	139454:26:05	0:00:00	306034:18:51	0:00:00	306034:18:51
2月	93206:27:41	97422:02:52	121829:13:07	0:00:00	312457:43:40	0:00:00	312457:43:40
3月	105356:24:59	76540:15:44	127815:11:24	0:00:00	309711:52:07	0:00:00	309711:52:07
合計	615198:34:21	284589:02:14	659194:03:46	0:00:00	1558981:40:21	0:00:00	1558981:40:21

5.4.2 PRIMEQUEST

PRIMEQUEST	PB	PBE	PBS	会話処理	合計	ETC	総合計
平成18年4月	-	-	-	-	-	-	-
5月	-	-	-	-	-	-	-
6月	-	-	-	-	-	-	-
7月	120914:28:17	12884:22:35	47609:51:17	0:00:00	181408:42:09	0:00:00	181408:42:09
8月	147826:11:31	23997:07:50	19499:30:47	0:00:00	191322:50:08	620:14:29	191943:04:37
9月	135977:08:01	50005:50:08	22840:32:06	0:00:00	208823:30:15	5458:08:53	214281:39:08
10月	181221:36:59	66570:47:59	19191:27:48	0:00:00	266983:52:46	2:36:57	266986:29:43
11月	156092:06:59	64922:14:16	26462:53:06	0:00:00	247477:14:21	0:00:00	247477:14:21
12月	208434:18:53	80312:29:19	37549:59:08	0:00:00	326296:47:20	0:00:00	326296:47:20
平成19年1月	173459:33:17	27535:47:53	68498:38:01	0:00:00	269493:59:11	0:00:00	269493:59:11
2月	148752:39:51	77410:02:02	65167:06:36	0:00:00	291329:48:29	0:00:00	291329:48:29
3月	86951:05:12	57853:12:37	70502:49:41	0:00:00	215307:07:30	0:00:00	215307:07:30
合計	1359629:09:00	461491:54:39	377322:48:30	0:00:00	2198443:52:09	6081:00:19	2204524:52:28

5.4.3 VPP5000

VPP	SF	PF	SF001	PF016	PF008	vp23	合計	ETC	総合計
平成18年4月	2858:22:53	6022:45:39	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	8881:08:32	16:31:32	8897:40:04
5月	3628:19:57	6677:22:22	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	10305:42:19	36:34:32	10342:16:51
合計	6486:42:50	12700:08:01	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	19186:50:51	53:06:04	19239:56:55

5.4.4 SGI2800,Origin3800

02K	PO	PO128	PS	合計	ETC	総合計
平成18年4月	0:00:00	4583:01:49	43503:28:31	48086:30:20	85375:54:27	133462:24:47
5月	1129:33:40	14:06:12	55030:41:03	56174:20:55	34788:30:28	90962:51:23
合計	1129:33:40	4597:08:01	98534:09:34	104260:51:15	120164:24:55	224425:16:10

5.4.5 SX-7

SX-7	SN	PN	SN001	PN008	PN016	合計	ETC	総合計
平成18年4月	4179:11:03	5566:36:24	421:46:02	1335:17:25	1385:18:25	12888:09:19	580:20:06	13468:29:25
5月	4351:42:33	6784:53:29	502:37:24	5721:18:04	0:00:22	17360:31:52	877:59:34	18238:31:26
6月	3777:57:59	3751:42:39	360:05:27	1790:04:52	0:00:00	9679:50:57	188:07:58	9867:58:55
7月	14847:35:41	554:44:28	0:00:00	215:28:06	0:00:00	15617:48:15	45:26:40	15663:14:55
8月	16249:39:39	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	17874:17:22	179:07:52	18053:25:14
9月	12676:52:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	15355:52:01	720:08:09	16076:00:10
10月	13873:35:28	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	15117:57:47	300:42:33	15418:40:20
11月	12072:22:58	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	12258:39:17	39:45:05	12298:24:22
12月	12226:21:05	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	12226:21:05	32:26:39	12258:47:44
平成19年1月	12235:38:50	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	12315:10:25	193:42:53	12508:53:18
2月	12718:10:31	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	13978:57:13	135:50:51	14114:48:04
3月	16056:51:52	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	19630:36:46	164:07:40	19794:44:26
合計	135265:59:39	16103:12:32	1284:28:53	8846:40:21	1385:18:47	174304:12:19	3457:46:00	177761:58:19

5.4.6 TX-7

TX-7	PI	PI016	PI032	合計	ETC	総合計
平成18年4月	18119:05:27	116:07:06	1609:13:42	19844:26:15	0:00:00	19844:26:15
5月	22355:42:19	3034:04:58	0:18:18	25390:05:35	0:00:00	25390:05:35
6月	10100:11:49	4093:45:36	14:50:18	14208:47:43	0:00:00	14208:47:43
7月	28130:27:37	0:00:00	0:00:00	28130:27:37	0:00:00	28130:27:37
8月	21212:31:45	0:00:00	0:00:00	21212:31:45	0:00:00	21212:31:45
9月	19180:04:57	0:00:00	0:00:00	19180:04:57	0:00:00	19180:04:57
10月	9800:40:52	0:00:00	0:00:00	9800:40:52	0:00:00	9800:40:52
11月	21959:16:39	0:00:00	0:00:00	21959:16:39	0:00:00	21959:16:39
12月	13020:58:51	0:00:00	0:00:00	13020:58:51	0:00:00	13020:58:51
平成19年1月	13709:02:15	0:00:00	0:00:00	13709:02:15	0:00:00	13709:02:15
2月	12088:51:41	0:00:00	0:00:00	12088:51:41	0:00:00	12088:51:41
3月	985:26:12	0:00:00	0:00:00	985:26:12	0:00:00	985:26:12
合計	190662:20:24	7243:57:40	1624:22:18	199530:40:22	0:00:00	199530:40:22

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18年4月	1950:57:18	4084:46:07	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	6035:43:25	0:55:13	6036:38:38
5月	2433:11:20	4543:46:35	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	6976:57:55	7:17:07	6984:15:02
合計	4384:08:38	8628:32:42	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	13012:41:20	8:12:20	13020:53:40

5.5.2 SX-7

SX-7	SN	PN	SN001	PN008	PN016	合計	ETC	総合計
平成18年4月	3069:34:25	3637:30:35	419:07:23	934:58:55	226:06:27	8287:17:45	375:31:38	8662:49:23
5月	3333:11:21	4529:29:23	491:01:18	4010:42:35	0:00:00	12364:24:37	701:17:51	13065:42:28
6月	3100:26:45	1862:57:53	357:29:21	352:20:38	0:00:00	5673:14:37	128:36:06	5801:50:43
7月	13055:06:33	359:36:55	0:00:00	143:54:48	0:00:00	13055:06:33	503:48:25	13558:54:58
8月	14411:42:07	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	14411:42:07	1652:02:48	16063:44:55
9月	11812:08:21	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	11812:08:21	3172:13:05	14984:21:26
10月	12224:29:45	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	12224:29:45	1223:48:34	13448:18:19
11月	9727:33:19	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	9727:33:19	107:35:10	9835:08:29
12月	10578:16:24	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	10578:16:24	0:01:36	10578:18:00
平成19年1月	10685:09:50	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	10685:09:50	177:44:43	10862:54:33
2月	11780:03:44	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	11780:03:44	1285:19:46	13065:23:30
3月	14660:12:14	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	14660:12:14	3579:45:12	18239:57:26
合計	118437:54:48	10389:34:46	1267:38:02	5441:56:56	226:06:27	135259:39:16	12907:44:54	148167:24:10

5.6 ジョブ処理件数

5.6.1 Altix4700

Altix4700	PA	PAE	PAS	合計	ETC	総合計
平成18年4月	-	-	-	-	-	-
5月	-	-	-	-	-	-
6月	-	-	-	-	-	-
7月	1,689	18	10	1,717	0	1,717
8月	1,572	36	28	1,636	0	1,636
9月	1,763	54	302	2,119	0	2,119
10月	3,796	321	623	4,740	0	4,740
11月	2,368	177	1,315	3,860	0	3,860
12月	2,993	66	1,282	4,341	0	4,341
平成19年1月	2,905	310	1,291	4,506	0	4,506
2月	2,424	307	480	3,211	0	3,211
3月	2,463	223	630	3,316	0	3,316
合計	21,973	1,512	5,961	29,446	0	29,446

5.6.2 PRIMEQUEST

PRIMEQUEST	PB	PBE	PBS	合計	ETC	総合計
平成18年4月	-	-	-	-	-	-
5月	-	-	-	-	-	-
6月	-	-	-	-	-	-
7月	1,415	108	1,259	2,782	0	2,782
8月	1,790	136	539	2,465	0	2,465
9月	1,880	401	719	3,000	0	3,000
10月	1,248	421	564	2,233	0	2,233
11月	2,587	150	478	3,215	0	3,215
12月	1,518	104	454	2,076	0	2,076
平成19年1月	2,817	222	508	3,547	0	3,547
2月	3,352	553	479	4,384	0	4,384
3月	4,902	686	479	6,067	0	6,067
合計	21,509	2,781	5,479	29,769	0	29,769

5.6.3 VPP5000

VPP	SF	PF	SF001	PF016	PF008	vp23	合計	ETC	総合計
平成18年4月	160	49	0	0	0	0	209	0	209
5月	419	93	0	0	0	0	512	0	512
合計	579	142	0	0	0	0	721	0	721

5.6.4 SGI2800,Origin3800

O2K	PO	PO128	PS	合計	ETC	総合計
平成18年4月	0	18	424	442	0	442
5月	43	36	596	675	0	675
合計	43	54	1,020	1,117	0	1,117

5.6.5 SX-7

SX-7	SN	SNE	PN	SN001	PN008	PN016	合計	ETC	総合計
平成18年4月	202	0	50	2	11	1	266	0	266
5月	178	0	42	4	15	1	240	0	240
6月	252	0	101	2	19	0	374	0	374
7月	1,295	0	2	0	1	0	1,298	0	1,298
8月	632	35	0	0	0	0	667	0	667
9月	709	25	0	0	0	0	734	0	734
10月	862	12	0	0	0	0	874	0	874
11月	924	5	0	0	0	0	929	0	929
12月	919	0	0	0	0	0	919	0	919
平成19年1月	856	18	0	0	0	0	874	0	874
2月	989	12	0	0	0	0	1,001	0	1,001
3月	785	40	0	0	0	0	825	0	825
合計	8,603	147	195	8	46	2	9,001	0	9,001

5.6.6 TX-7

TX-7	PI	PI016	PI032	合計	ETC	総合計
平成18年4月	215	3	7	225	0	225
5月	210	28	2	240	0	240
6月	275	52	8	335	0	335
7月	810	0	0	810	0	810
8月	928	0	0	928	0	928
9月	807	0	0	807	0	807
10月	798	0	0	798	0	798
11月	612	0	0	612	0	612
12月	715	0	0	715	0	715
平成19年1月	904	0	0	904	0	904
2月	457	0	0	457	0	457
3月	31	0	0	31	0	31
合計	6,762	83	17	6,862	0	6,862

6 資料

6.1 計算科学研究センター運営委員

岡崎 進	計算科学研究センター長 計算分子科学研究系 計算分子科学第一研究部門	教授
斎藤 真司	計算科学研究センター 計算分子科学研究系 計算分子科学第二研究部門	教授
森田 明弘	計算科学研究センター 計算分子科学研究系 計算分子科学第一研究部門	助教授
永瀬 茂	分子科学研究所理論研究系 分子基礎理論第一研究部門	教授
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
長谷部 光泰	進化多様性生物学領域 生物進化研究部門	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
中井 浩巳	早稲田大学 理工学部	教授
押山 淳	筑波大学大学院 数理物質科学研究科	教授
松本 充弘	京都大学大学院 工学研究科	助教授
中井 謙太	東京大学 医科学研究所附属ヒトゲノム解析センター	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

岡崎 進	センター長
斎藤 真司	教授
森田 明弘	助教授
三浦 伸一	助手
石田 千城	助手
金 鋼	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 (主任)
手島 史綱	技術職員 (主任)
岩橋 健輔	技術職員
澤 昌孝	技術職員
松尾 純一	技術職員
加納 聖子	事務支援員
禿子 瞳	事務支援員
矢崎 稔子	技術支援員

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 8,425 HSP 8,431 SP2 8,336 HPC(9月～) 4,872	SX-3/34R 8,494 HSP 8,513 SP2 8,515 HPC 8,501 SR2201(11月～) 3,561	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	平成18年度
	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-5 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	VPP5000(5月まで) SGI2800,Origin3800 (5月まで) Altix(7月～) PRIMEQUEST(7月～) SX-7 TX-7
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	156	148	144	119	154	132	141
利 用 者 数							
機 構 内a	101	100	104	89	83	30	40
機 構 外	534	504	479	449	516	480	533
合 計	635	604	583	538	599	510	573
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	VPP5000 1,402 SGI系 1,400 Altix 6,196 PRIMEQUEST 6,336 SX-7 8,399 TX-7 8,398
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	(TX-7 基準)b
申 請	249,405	251,785	237,872	278,177	341,788	414,643	702,270
許 可	209,393	234,866	229,401	277,697	321,796	368,136	653,468
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	4,384,464
ジョブ処理件数c	58,685	70,680	55,522	58,784	28,968	19,896	78,130
ライブラリプログラム 新規登録数	18	4	15	5	4	4	21
データベース 新規登録数	0	0	0	0	0	0	0
センター使用論文数d	391	302	302	281	284	205	214

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。

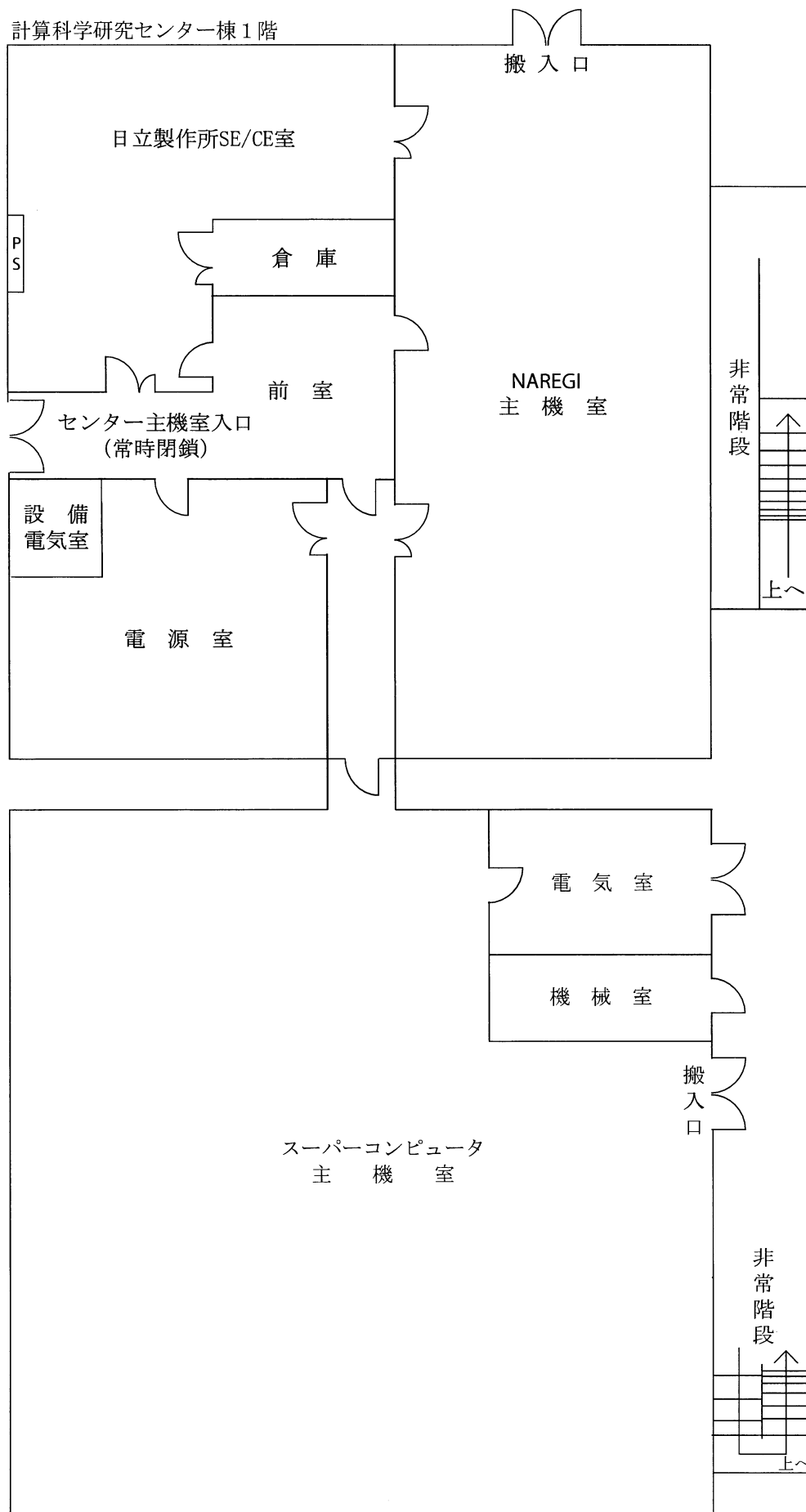
d:センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたものです。

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。

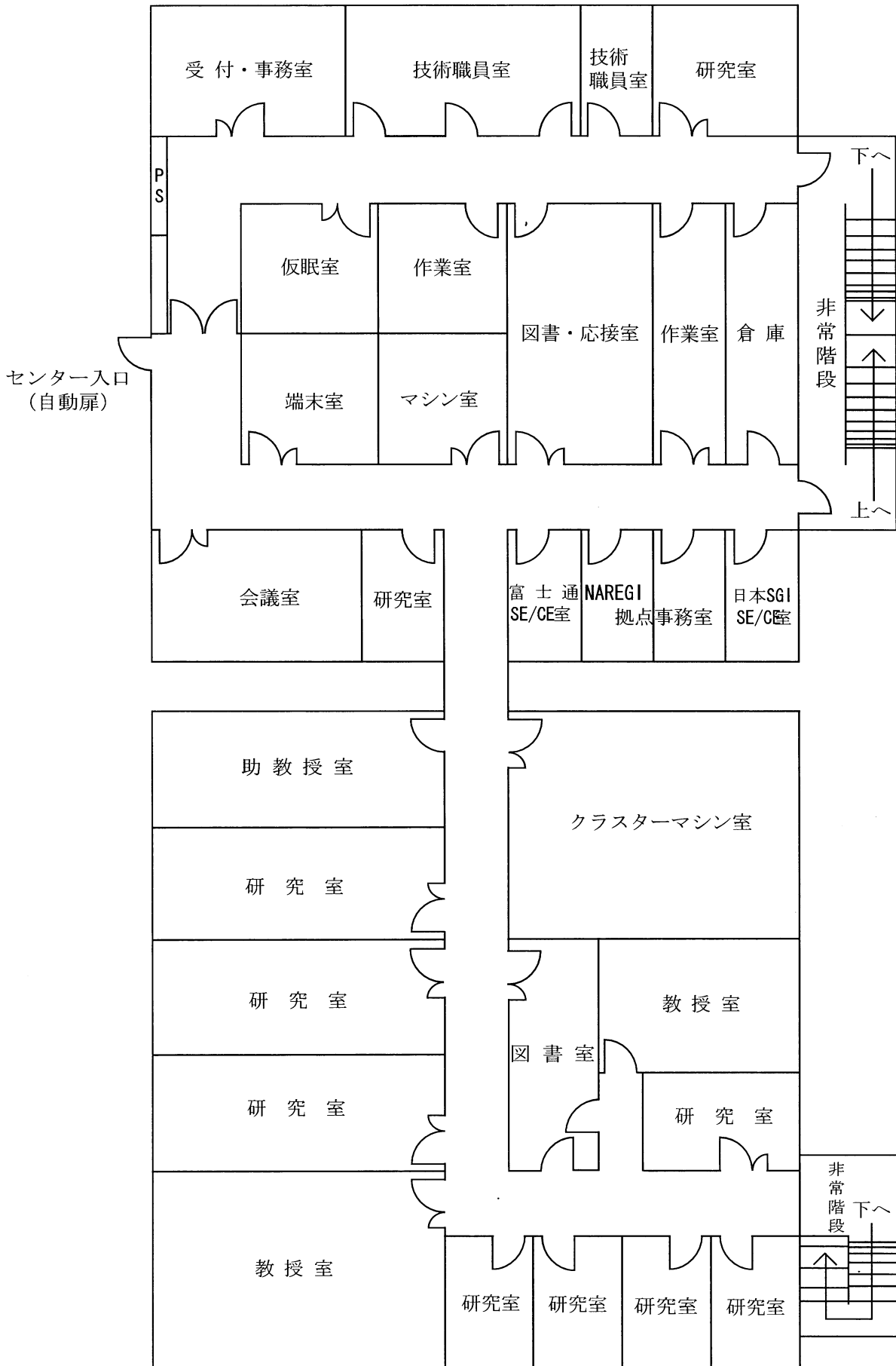
*:下段はM-680H基準

6.4 建物図

明大寺地区 計算科学研究センター棟1階

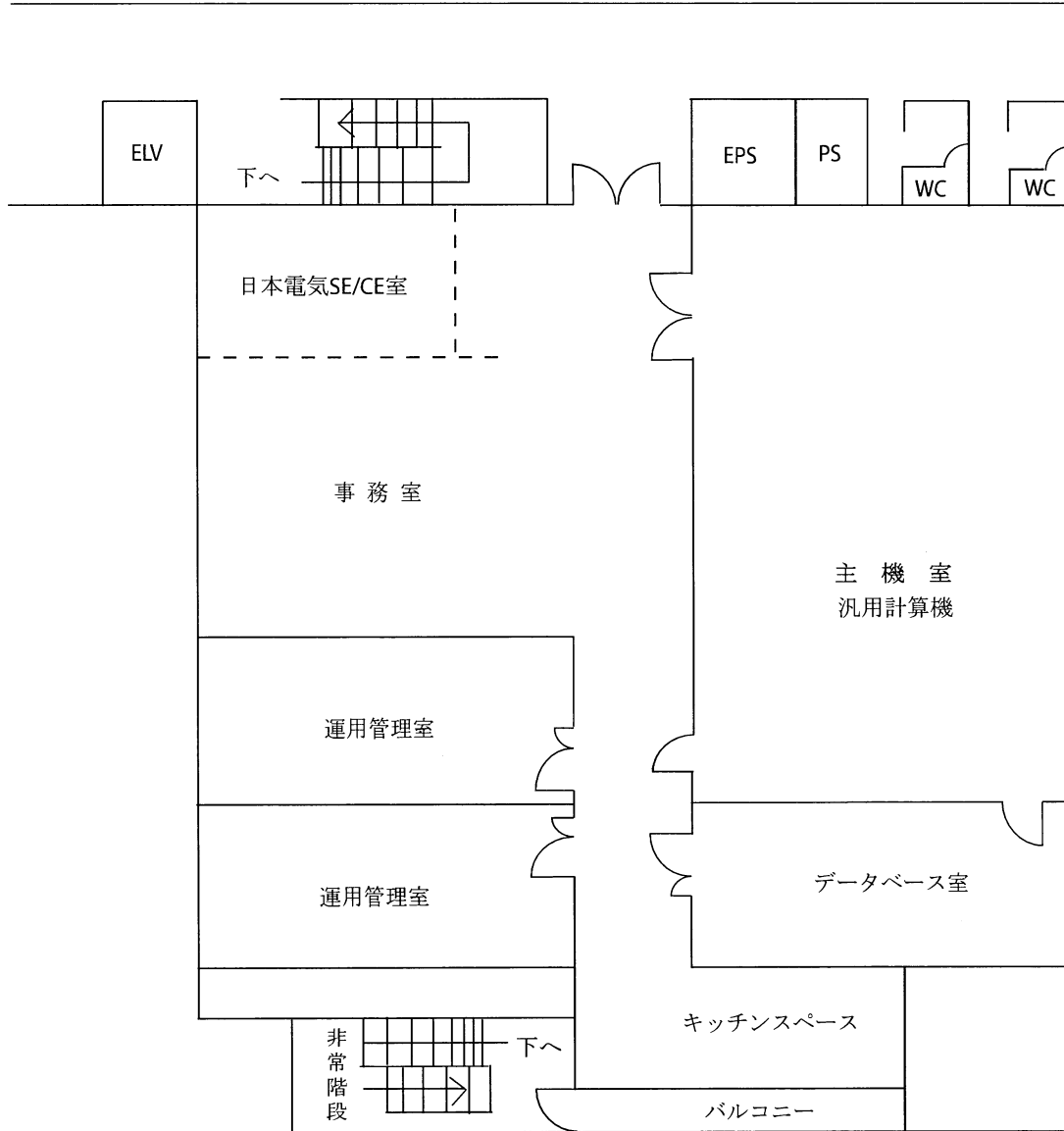


2階



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/V Fortran 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 Altix4700用マニュアル (日本語版、英語版)

Altix4700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「SGI Altix4700 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、Linux Kernel2.6(IA64 版) (平成 19 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) SGI Altix4700 User's Guide
- (2) Altix4700 プログラミングガイド
- (3) MPI マニュアル
- (4) Linux Application Tuning Guide
- (5) Intel Fortran Compiler for Linux Systems User's Guide
- (6) Intel C++ Compiler for Linux Systems User's Guide
- (7) SCSL User's Guide
- (8) PBS User Guide

6.5.9 PRIMEQUEST用マニュアル (日本語版)

PRIMEQUEST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「富士通 PRIMEQUEST 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、Linux Kernel2.6(IA64 版) (平成 19 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) Fortran 使用手引書
- (2) Fortran 文法書
- (3) Fortran コンパイラメッセージ
- (4) Fortran 実行時メッセージ
- (5) C 使用手引書
- (6) C-SSL II オンラインマニュアル
- (7) C-SSL II スレッド並列機能オンラインマニュアル
- (8) MPI 使用手引書
- (9) BLAS LAPACK ScaLAPACK オンラインマニュアル
- (10) SSLII オンラインマニュアル
- (11) SSL II スレッド並列機能オンラインマニュアル
- (12) デバッガ使用手引書
- (13) プロファイラ使用手引書

6.5.10 PRIMEQUEST 用マニュアル（英語版）

英語版マニュアルに関しては、6.5.9 PRIMEQUEST 用マニュアル（日本語版）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) Fortran User's Guide
- (2) Fortran Language Reference
- (3) Fortran Compiler Message
- (4) Fortran Runtime Message
- (5) C User's Guide
- (6) C-SSL II Online Documents
- (7) C-SSL II Thread-Parallel Capabilities Online Documents
- (8) MPI User's Guide
- (9) BLAS LAPACK ScaLAPACK Online Documents
- (10) SSL II Online Documents
- (11) SSL II Thread-Parallel Capabilities Online Documents
- (12) Debugger User's Guide
- (13) Profiler User's Guide

6.5.11 マニュアルの購入と問い合わせ先

VPP5000 用、PRIMEQUEST 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、Altix4700 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

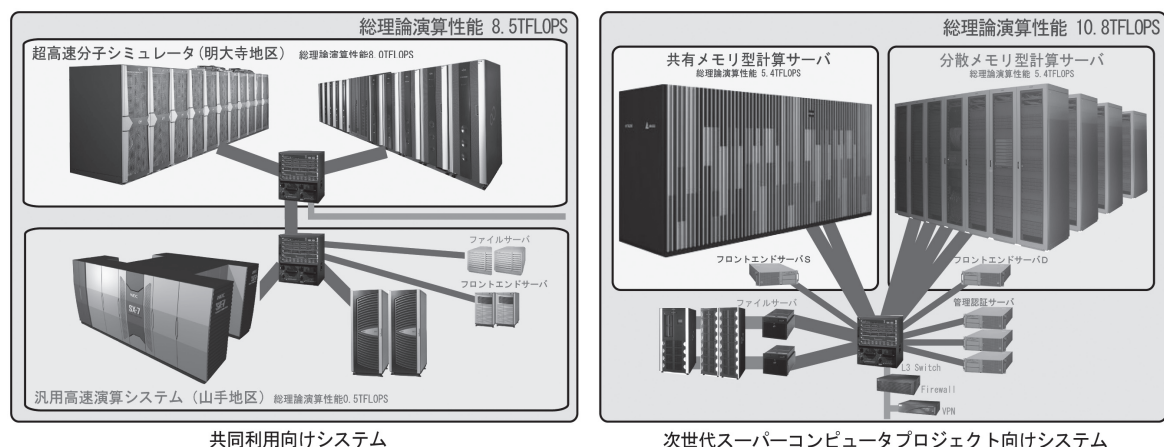
〒460-8525 名古屋市中区錦一丁目 17-1 NEC 中部ビル
日本電気株式会社 中部支社 公共第二営業部
担 当 : 中村
電 話 : 052-222-2121
F A X : 052-222-2129

7 将来計画及び運営方針（分子研リポート 2006 より転載）

5-5 計算科学研究センター

計算科学研究センターにおいては、2000年度における計算科学研究センター化にともない、従来の共同利用に加えて、理論、方法論の開発等の研究以外にも、研究の場の提供、ネットワーク業務の支援、人材育成等の新たな業務に取り組んできているところであるが、2006年度においても、次世代スーパーコンピュータプロジェクト支援、分子・物質シミュレーション中核拠点形成、ネットワーク管理室支援等をはじめとした様々な活動を展開してきている。上記プロジェクトについてはそれぞれの項に詳しく、ここでは共同利用に関する活動を中心に、特に設備の運用について述べる。

2007年1月現在の計算機システムの概要を下図に示す。システムは大きく分けて2系統からなる。最初のものは共同利用に供している超高速分子シミュレータと汎用高速演算システムからなり、前者は今年度、2006年7月に新たに導入され、後者は2003年3月に更新されて山手地区に設置されている。もうひとつは、次世代スーパーコンピュータプロジェクトにおけるアプリケーションの開発環境であるが、これらはいずれも分子科学やナノサイエンスの計算科学分野における高性能システムである。



システム構成図

まず、2006年7月より運用を開始した新システム「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クラスター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Altix4700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 (Linux2.6) をもとに、バイナリ互換性を保って一体的に運用される。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、64 CPU 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。Altix4700 サブシステムは 2 ノード構成からなり、それぞれ 512 CPU コア / 6 TB および 128 CPU コア / 2 TB 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 6 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。

共同利用における新システムの導入にあたり、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、大規模ユーザのために新たに施設利用 S を設定した。これに従い、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している。

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。

共同利用に関しては、2006 年度も 141 の研究グループの総数 555 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。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さらに充実するために、汎用高速演算システムを 2008 年 2 月に更新する。

一方、次世代スーパーコンピュータプロジェクト・ナノ分野グランドチャレンジ研究におけるアプリケーション開発環境として、Hitachi SR11000 と HA8000 を運用している。このうち、SR11000 は、総合理論演算性能 5.44 Tflops、総メモリ容量 3.072 TB の共有メモリ型スカラ並列コンピュータであり、システムは 16way (CPU) を持つ演算ノード 50 台で構成され、ノード間は 8 GByte/s のクロスバーで相互接続されており、周辺装置として 6.8 TB の RAID ディスク装置を備えている。HA8000 は、総合理論演算性能 5.495 GFlops、総メモリ容量 1.796 TB の分散型スカラ並列コンピュータで、演算ノードとして 2 CPU を持つ PC サーバ 449 台から構成され、128 ノードごとに 2 Gbps で相互接続してクラスタを形成している。各クラスタは、周辺装置として 1.1 TB の RAID ディスク装置を備えている。

計算科学研究センターは、国家基幹技術の一つとして位置づけられている次世代スーパーコンピュータプロジェクトの中で、ナノサイエンスに関わるアプリケーション開発という重要な役割の一端を担っており、分子科学に関わる計算科学研究のナショナルセンターとでもいふべき分野拠点として、多様な活動の展開がさらに求められている。