

# I 部

## 目 次

1	巻頭言 計算科学研究センター 江原 正博	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	5
3.1	システムの構成と特徴	5
3.2	キュー構成方針	8
3.3	キュー構成	8
3.4	利用課金	10
3.5	利用点数	10
3.6	センター開発コマンド	12
4	一般報告	13
4.1	ライブラリプログラムの開発・公開	13
4.2	データベース開発状況	15
5	平成 20 年度計算機稼働状況および利用者数	16
5.1	利用申請プロジェクトおよび利用者数	16
5.2	電力使用および計算機稼働状況	16
5.3	計算機利用状況	17
5.4	クラス別 CPU 使用時間	18
5.5	ジョブ処理件数	19
6	資料	20
6.1	計算科学研究センター運営委員	20
6.2	計算科学研究センター職員	21
6.3	利用者数と CPU 時間の推移	22
6.4	建物図	24
6.5	マニュアル一覧	27
7	研究施設の現状と将来計画 (分子研リポート 2008 より転載)	30

## 1 巻頭言

計算科学研究センター  
江原正博

計算科学研究センターでは、共同利用を通じて、超高速計算機を全国の研究者の方々にご利用いただいております。昨年は全国の約 140 グループ、約 600 名の方々に申請をいただき、ご利用いただきました。また、ワークショップや研究会の開催も重要な活動として位置づけており、研究交流や情報発信にも力を入れています。このセンターレポートは皆様の共同利用の成果やセンターの運営や活動をまとめたものですが、センターがとても広い分野の方々にご活用いただいていることが分かります。

計算機の共同利用では、分子科学、物性科学、生物物理などの分野の多彩な研究が実施されています。その内容は、オリジナルな理論を開発し、新しい理論化学に挑戦する研究、理論計算を活用して化学現象を解明し、新しい実験を設計する研究など様々なタイプの研究があります。これら様々な研究に有用な研究環境を公開することがセンターの重要な役割になります。計算センターでは、ハードウェアの向上とともに、特色あるソフトウェア・ライブラリーを充実していくことが重要であると考えております。そして、本センターが共同利用を通じて「理論計算によって科学を切り拓く研究」に少しでも貢献できることを願っています。

昨年は、計算科学研究センター・ワークショップを「次世代理論化学の新展開と超並列計算への挑戦」というタイトルで開催しました。広い分野の方々にご参加いただき、講演とポスター発表を通じて研究交流を深めていただきました。また、分子シミュレーションスクールを企画し、多くの若手の方に参加していただきました。これらの活動も全国の研究者の皆様のご協力によって充実したものにすることができました。このように研究交流や情報発信の場としても本センターをご活用いただけることを願っています。

当センターを最先端の研究に有効に活用していただくために、これまで以上の共同研究施設に高めていきたいと存じます。皆さまのご意見やご要望をお寄せいただき、今後とも計算センターへのご理解とご協力をよろしくお願い致します。

## 2 スーパーコンピュータワークショップについて

今年度のワークショップでは、「次世代理論化学の新展開」と「超並列計算への挑戦」という2つの重要なテーマについて議論することを目的とした。理論化学の最前線で活躍されておられる先生方に、理論の新しい展開についてご紹介いただき、将来について展望していただいた。これらの中には、一昨年から設置した超大規模計算のための施設利用 S 課題による研究も紹介していただいた。また、超並列計算を目指した計算手法を開発されておられる先生方に、超並列計算への取り組みについてご紹介いただいた。さらに、若手の方々に積極的に参加し、研究交流していただけるようにポスター発表を行った。ポスター発表は54件あり、質の高い研究交流がなされた。ワークショップは幅広い分野からの参加があり、参加者は合計129名であった。

スーパーコンピュータ ワークショップ 2009

日 時：平成 21 年 1 月 19 日(月) 13:30 ~ 21 日(水) 15:00

会 場：自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター

参加者：129 名

ポスター発表：54 件

テーマ：「次世代理論化学の新展開と超並列計算への挑戦」

### 1月19日(月)

13:30-13:40	はじめに 平田文男 (センター長)
13:40-14:20	柳井 毅 (分子科学研究所) 「大規模多参照電子状態計算のためのアルゴリズムとプログラム開発」
14:20-15:00	北浦和夫 (京都大学) 「フラグメント分子軌道法の最近の発展」
15:00-15:30	Break
15:30-16:10	宮原友夫 (量子化学研究協会) 「計算科学の巨大化:DNA や分子性結晶への応用」
16:10-16:50	諸熊奎治 (京都大学) 「化学反応の理解と設計への挑戦」
16:50-17:00	Break
17:00-18:30	ポスター発表

## 1月20日(火)

- 9:00-9:40 **中野晴之** (九州大学)  
「多参照摂動法とその効率的計算手法の開発とオリゴアセンの電子状態への応用」
- 9:40-10:20 **藪下 聡** (慶應義塾大学)  
「共鳴状態、光イオン化過程の理論研究のための複素座標法の開発」
- 10:20-10:50 Break
- 10:50-11:30 **天能精一郎** (名古屋大学)  
「高精度電子相関理論と高品位 QM/MM 法の開発」
- 11:30-12:10 **中井浩巳** (早稲田大学)  
「分割統治法に基づく次世代理論化学計算手法の開発」
- 12:10-13:30 昼食
- 13:30-14:10 **高橋大介** (筑波大学)  
「高速フーリエ変換の超並列計算に向けて」
- 14:10-14:50 **町田昌彦** (日本原子力研究開発機構)  
「大規模行列対角化の並列アルゴリズム開発と量子力学の根本問題」
- 14:50-15:20 Break
- 15:20-16:00 **吉田紀生** (分子科学研究所)  
「タンパク質の分子認識:3D-RISM 理論によるアプローチ」
- 16:00-16:40 **岡崎 進** (名古屋大学)  
「汎用大規模分子動力学計算ソフトの高並列化」
- 16:40-17:20 **遠山貴巳** (京都大学)  
「動的密度行列繰り込み群法の開発と電子・格子結合系への適用」
- 17:20-17:40 Break
- 17:40 分子科学研究所長挨拶 **中村宏樹**
- 19:00 懇親会

## 1月21日(水)

- 9:00-9:40 **森川良忠** (大阪大学)  
「界面におけるナノスケールプロセスの第一原理シミュレーション」
- 9:40-10:20 **片桐孝洋** (東京大学)  
「次世代計算機環境における固有値解法と自動チューニング機能の開発」
- 10:20-10:50 Break
- 10:50-11:30 **加藤 毅** (東京大学)  
「強光子場中における分子の電子状態の記述と核軌跡の効率的計算手法」

- 11:30-12:10 **武次徹也** (北海道大学)  
「励起状態反応ダイナミクスと光化学への応用」
- 12:10-13:30 昼食
- 13:30-14:10 **杉田有治** (理化学研究所)  
「膜タンパク質の分子動力学計算」
- 14:10-14:50 **高田彰二** (京都大学)  
「巨大生体分子複合系のマルチスケールシミュレーションに向けて」
- 14:50-15:00 おわりに

計算科学研究センター・ワークショップ

## 次世代理論化学の新展開と 超並列計算への挑戦

2000年1月19日(月) 13:30 ~  
21日(水) 15:00

★会場★ 阿倍コンファレンスセンター

■ 特別講師			
岡崎 薫 (名古屋大学)	中井 浩巳 (早稲田大学)	片桐 孝治 (東京大学)	中野 隆之 (九州大学)
加藤 毅 (東京大学)	町田 昌彦 (理化学研究所)	北浦 和夫 (理研大学)	宮原 友夫 (量子化学研究会)
杉田 有治 (理研大学)	袴川 良忠 (大阪大学)	高田 彰二 (京都大学)	西嶋 康治 (京都大学)
高橋 大介 (京都大学)	藤下 隆 (筑波大学)	武次 徹也 (北海道大学)	柳井 龍 (量子化学研究所)
天藤 新一 (名古屋大学)	吉田 紀生 (量子化学研究所)	遠山 貴巳 (京都大学)	
■ ホスター先生			

**会場申込**

申込料：無料

申込方法：下記ホームページをご覧ください。  
<http://ocinfo.lme.ac.jp/workshop/2008/>

**お問い合わせ**

大会世話役 大塚 隆夫 (理研大学) 事務局

阿倍コンファレンスセンター 計算科学研究センター

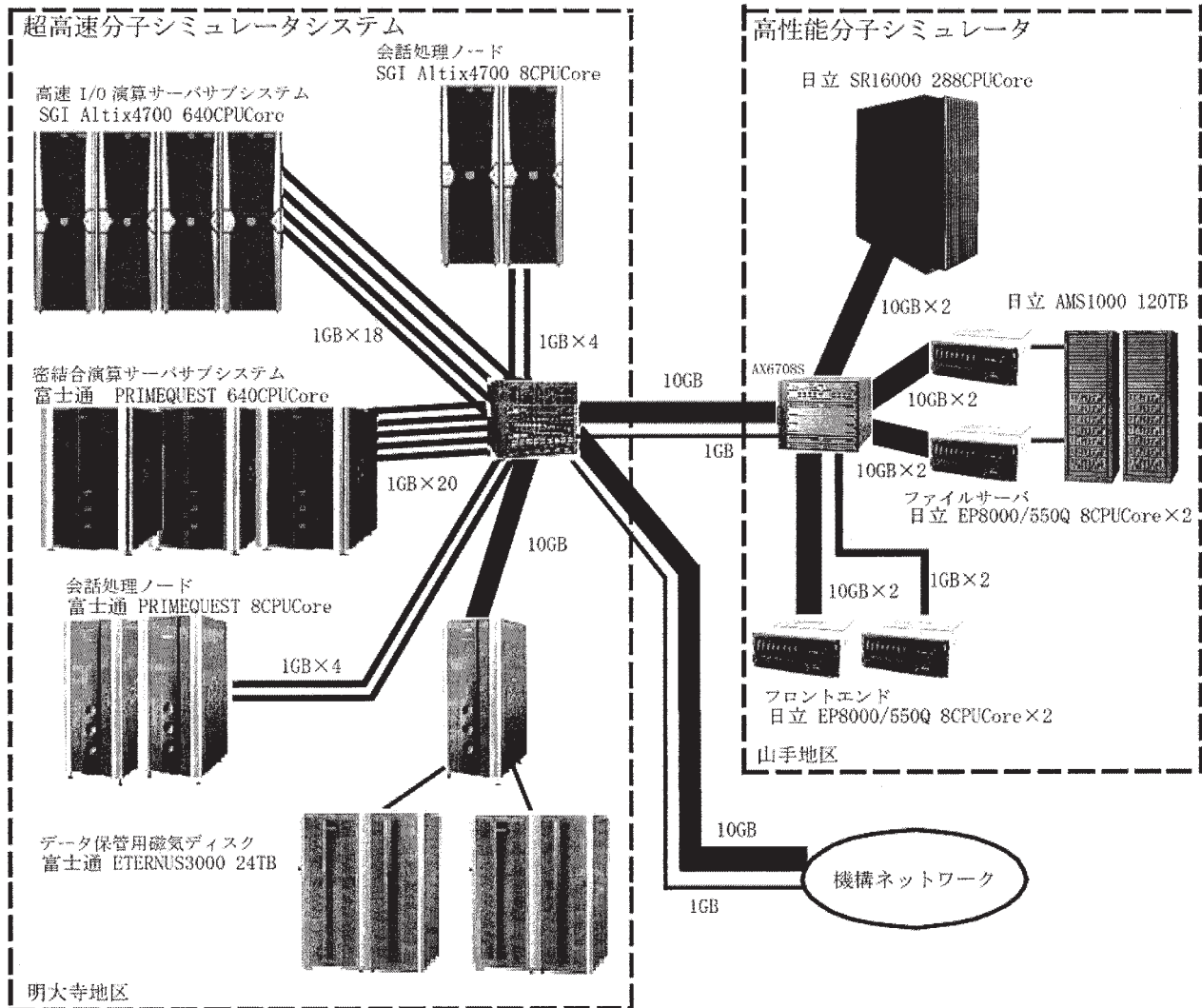
TEL: 0864-88-7482 FAX: 0864-88-7634

### 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

超高速分子シミュレータシステム（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)、高性能分子シミュレータシステム（日立製 SR16000）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)。

#### システム構成図



センター内は2台のスイッチングシステム(CISCO Catalyst 6504 と Alaxala AX6708S)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。

## ◆超高速分子シミュレータシステム

- ・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 個数	640 個 (512 個 + 128 台)

OS は、1CPUCore を 1CPU と認識しています。

### <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 処理を行っています。

### <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 個数	640 個 (64 個 × 10node)

OS は、1CPUCore を 1CPU と認識しています。

### <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

## ◆高性能分子シミュレータシステム

- ・演算サーバシステム(日立製作所製 SR16000)

SR16000 ではジョブ管理(LoadLeveler)によるバッチ処理を行っています

### <演算処理装置>

主記憶装置	2,304GB (256GB × 9node)
総理論演算性能	601.6GFLOPS × 9node (18.8GFLOPS/CPUCore)
CPU 個数	288 個 (32 個 × 9node)

SMT 機能を使うことにより OS は、1CPUCore を 2CPU (総合計 576 個) と認識しています

### <磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量	23TB
(内訳)	
一時作業ファイル領域(/work)	23TB



- ・ファイルサーバシステム(日立製作所製 EP8000/550Q)

2台構成です。

<演算処理装置>

主記憶装置	64GB (32GB × 2台)
CPU 個数	32個 (16個 × 2台)

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量	120TB
(内訳)	
ホームディレクトリ領域 (/home)	60TB
短期保存ファイル領域 (/week)	20TB
長期保存ファイル領域 (/save)	40TB

- ・フロントエンド(日立製作所製 EP8000/550Q)

ccfep1 と ccfep2 の2台構成です。

<演算処理装置>

主記憶装置	64GB (32GB × 2台)
CPU 個数	32個 (16個 × 2台)

OSは、1CPUCoreを2CPUと認識しています。



### 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。課金は経過時間とする（キュー占有時間）。CPU数の可変提供をする。
2	パラレル利用キューのみとする。
3	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。
4	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。
5	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(NQE、LSF、LoadLevelor)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	: 1CPU で同時実行できるジョブ本数
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

Altix4700	640CPUを次のように割り当てます。 640CPUは、PA、PAE、PASがお互いに共有して使用します。内384CPUは、PAEとPASが優先的に使用し、256CPUはPAが占有します。
PRIMEQUEST	640CPUを次のように割り当てます。 640CPUは、PB、PBE、PBSがお互いに共有して使用します。内448CPUは、PBEとPBSが優先的に使用し、192CPUはPBが占有します
SR16000	560CPUを次のように割り当てます。 560CPUは、PH、PHE、PHSがお互いに共有して使用します。内256CPUは、PHEとPHSが優先的に使用し、304CPUはPHが占有します。

(注意)

- (1) 施設利用 S キュー、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）。

#### デバッグキュー

キュー名	CPU時間	メモリ	PE/CPU数	ユーザ制限	グループ制限	備考
PHI	5分	1GB/CPU	4から1	1JOB	なし	ccfep2

SR16000用のプログラムの動作確認用キューです。ccfep2の6CPUを割り当てています。同一CPUに最大3本のジョブが割り当てられますので、速度測定のデバッグには向いていません。jobinfoやjstat系コマンドでは、cchsrではなく、サーバーにccfepを指定します。

Altix4700やPrimeQuestのデバッグは、直接ccatxやccprqで行います。

#### 会話処理

キュー名	CPU時間	メモリ	PE/CPU数	ユーザ制限	グループ制限	備考
ccatx	1時間	1GB	4	-	-	Altix4700
ccprq	1時間	1GB	4	-	-	PRIMEQUEST
ccfep1/2	1時間	1GB	6			EP8000/550Q

#### 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	PE/CPU数	ユーザ制限	グループ制限	備考
PA	72時間	11.5GB/CPU	64から1	64CPU	64CPU	Altix4700 409.6GFLOPS
PB	72時間	3.9GB/CPU	32から1	64CPU	64CPU	PRIMEQUEST 204.8GFLOPS
PH	72時間	3.2GB/CPU	32から1	64CPU	64CPU	SR16000 601.6GFLOPS

#### 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	PE/CPU数	ユーザ制限	グループ制限	備考
PAE	240時間	11.5GB/CPU	128から1	128CPU	128CPU	Altix4700 819.2GFLOPS
PBE	240時間	3.9GB/CPU	64から1	128CPU	128CPU	PRIMEQUEST 409.6GFLOPS
PHE	240時間	3.2GB/CPU	64から1	128CPU	128CPU	SR16000 1,203.2GFLOPS

#### 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	PE/CPU数	ユーザ制限	グループ制限	備考
PAS	240時間	11.5GB/CPU	128から1	128CPU	128CPU	Altix4700 819.2GFLOPS
PBS	240時間	3.9GB/CPU	64から1	128CPU	128CPU	PRIMEQUEST 409.6GFLOPS
PHS	240時間	3.2GB/CPU	64から1	128CPU	128CPU	SR16000 1,203.2GFLOPS

### 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

Parallel	利用点数 = ジョブ経過時間 × 要求CPU数 × 点数換算係数  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 要求CPU数：ジョブが要求したCPU数
----------	---

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。

$$P = Patxp + Pprqp + Phsrp$$

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

Phsrp：SR16000 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

	点数換算係数	CPU1 時間当たりの消費点数 (3600×点数換算係数)
Altix4700(P)	0.0090	32.40
PRIMEQUEST(P)	0.0060	21.60
SR16000(P)	0.0090	32.40

(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。

#### 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
PH, PHE, PHS	3.45	259.2 点	0.648 時間	0.0090	75.2	SR16000	8CPU

### 3.6 センター開発プログラム

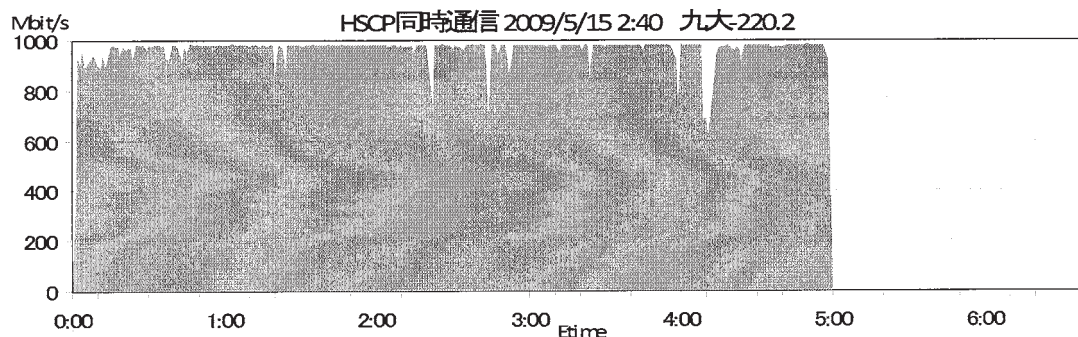
#### 3.6.1 高速ファイル転送プログラム hscp (新規)

MD のトラジェクトリファイルなど、大容量のファイルをインターネットで長時間かけて転送しているユーザーに朗報です。当センターで開発した hscp コマンド を使ってファイル転送すると、劇的に転送時間が短縮できる場合があります。

通常インターネットでファイルを転送する場合には、パスワード漏洩の心配が無いセキュアな scp や sftp コマンドを使っていると思いますが、実際にファイルを転送すると、2, 3 割程度の速度しか出せず、ネットワークの規格速度 (100Mbps または 1Gbps) を出し切れません。この原因は、通常のプログラムが TCP (Transmission Control Protocol) を使った通信であることに起因している場合があります。TCP による通信は、情報損失が無い確実な通信が行える一方、通信距離が伸びると情報伝達確認で時間がとられ、ネットワークがどんなに空いていても転送速度が低下します。

そこで当センターでは、通信距離による速度低下が比較的少ない UDT (UDP-based data transfer, UDP は User Datagram Protocol の略で TCP と異なる通信方式) 通信ライブラリを scp のデータ通信部に組み込んだプログラム hscp を開発しました。当センターの ccfe1 と名古屋大学・東北大学・九州大学内のマシン間で、hscp と scp を使って通信速度を比べたところ、hscp の方が数倍から十数倍速く転送できています。

また、hscp はネットワークが混んでいない理想に近い環境では下記のグラフのように、当センターLinux 機 (愛知県) と九州大学内の Linux 機 (福岡県) との遠距離間で、16GByte のファイルを約 5 分 (平均速度 963Mbps) で転送できた実績を持ちます。



センターから大容量ファイルの転送をする際には、ぜひ hscp を一度ご評価ください。ソースコードは BSD ライセンスの下で公開されており、どなたでも無料で使うことができます。センターとの通信以外でも、ご利用頂くことに制限はありません。対応プラットフォームは、Linux をはじめ順次拡大中です。簡単に試せる様に、バイナリファイルも用意してあります。

詳しくは以下のページをご覧ください。

<https://ccportal.ims.ac.jp/software/hscp>



## 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 20 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。

平成 20 年度末のライブラリプログラム一覧は下記の通りです。

名前	内容				
AMBER	A package of molecular simulation programs.				
GAMESS	General atomic and molecular electronic structure system.				
Gaussian	Ab initio molecular orbital calculations.				
GROMACS	Fast, Free and Flexible MD				
Molcas	A quantum chemistry software.				
Molpro	A complete system of ab initio programs.				
NAMD	A scalable molecular dynamics program.				
TURBOMOLE	One of the fastest programs for standard quantum chemical applications.				
GaussView	A viewer for Gaussin 03.				
Molden	A visualization program of molecular and structure.				
パッケージプログラム名	バージョン	リビジョン	ccatx	ccprq	cchsr
Amber	10	bugfix 11	◎ (2008/12/4)	◎ (2008/12/3)	—
Amber	9	bugfix 41	—	—	◎ (2008/3/14)
Amber	9	bugfix 31	—	◎ (2007/2/16)	—
Amber	9	bugfix 20	◎ (2006/10/26)	—	—
Amber	8	bugfix 61	◎ (2006/7/1)	◎ (2006/7/1)	—
GAMESS	2009	Jan12	◎ (2009/2/5)	—	◎ (2009/3/30)
GAMESS	2008	Apr11	◎ (2008/7/8)	◎ (2008/7/8)	◎ (2008/7/28)
GAMESS	2007	Mar24	◎ (2008/2/27)	◎ (2008/3/12)	◎ (2008/3/12)
GAMESS	2006	Feb22	◎ (2006/7/24)	—	—
GAMESS	2005	Jun27	—	◎ (2006/6/30)	—
Gaussian	03	E.01	◎ (2008/2/5)	◎ (2008/3/12)	◎ (2008/3/12)
Gaussian	03	D.01	◎ (2006/7/1)	◎ (2006/7/1)	◎ (2008/3/12)
GROMACS	3.3.3		◎ (2008/7/30)	◎ (2008/11/11)	◎ (2008/8/4)
Molcas	7.2		◎ (2008/12/5)	◎ (2009/1/15)	—
Molcas	7.0	sp1	◎ (2008/2/25)	× (2008/10/10)	—
Molcas	6.4	sp1	◎ (2006/10/16)	× (2008/2/28)	◎ (2008/3/3)
Molpro	2008.1	23	◎ (2009/2/3)	—	※ (2008/12/1)
Molpro	2008.1	13	—	◎ (2008/11/18)	× (2008/11/18)
Molpro	2006.1	158	—	—	◎ (2008/5/22)
Molpro	2006.1	149	◎ (2008/4/25)	—	—
Molpro	2006.1	137	—	◎ (2008/1/15)	—
Molpro	2006.1		◆ (2008/4/25)	◎ (2007/2/16)	◆ (2008/3/3)
NAMD	2.6		◎ (2008/4/30)	※ (2008/4/1)	◎ (2008/5/13)

パッケージプログラム名	バージョン	リビジョン	ccatx	ccprq	cchsr
TURBOMOLE	5.10		◎ (2008/2/18)	◎ (2008/4/8)	—
TURBOMOLE	5.9.1		○ (2007/6/1)	—	—
TURBOMOLE	5.9		○ (2007/1/25)	—	—
VASP			▼	▼	▼

パッケージプログラム名	バージョン	リビジョン	ccfep1
GaussView	4.1		◎ (2008/2/18)
Molden	4.6		◎ (2008/2/20)

◎: インストール済み。g03 のような別名が設定されている。

○: インストール済み。g03e01 のように指定する必要がある。

×: 移植不可能

※: 移植作業中一: (現段階において)移植計画無し

◆: 公開停止

▼: 入手不可



## 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： 102,240 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、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20年度に新規登録されたデータは、4,552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://fcdb.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20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	128	577	944,945	920,220	658,034	368,088,000	263,213,550
	協力研究	5	8	5,000	5,000	0	2,000,000	0
	所内	17	57	254,000	254,000	171,120	101,600,000	68,448,168
基礎生物学	施設利用	1	4	20,000	19,400	1,888	7,760,000	755,247
	所内	1	2	1,000	1,000	0	400,000	0
合計		152	648	1,224,945	1,199,620	831,042	479,848,000	332,416,965

※ 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)			
	マシン名	B,E地区合計	グリッド	総合計
平成20年4月		345,373	362,420	707,793
5月		372,339	383,720	756,059
6月		378,560	385,780	764,340
7月		428,670	412,450	841,120
8月		424,487	423,290	847,777
9月		374,831	353,700	728,531
10月		380,745	385,960	766,705
11月		350,539	345,000	695,539
12月		350,053	288,190	638,243
平成21年1月		350,080	252,760	602,840
2月		327,401	189,820	517,221
3月		364,909	116,330	481,239
合計		4,447,987	3,899,420	8,347,407

年月	システム稼働時間						
	マシン名	Altix4700	*	PRIMQUEST	*	SR16000	*
平成20年4月		255	43	614	93	614	93
5月		717	97	735	100	718	98
6月		700	98	711	100	710	100
7月		725	98	735	100	722	97
8月		724	99	734	100	725	99
9月		692	100	697	102	645	88
10月		742	101	714	93	744	101
11月		682	99	686	100	495	73
12月		727	99	734	100	739	100
平成21年1月		733	100	730	99	743	101
2月		661	100	663	100	672	101
3月		731	100	734	100	734	100
合計		8,087	95	8,486	99	8,261	96

※ \*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 マシン名	CPU使用時間					
	Altix4700	*	PRIMQUEST	*	SR16000	*
平成20年4月	140,523	86	314,236	80	297,657	87
5月	341,472	74	405,808	86	347,366	86
6月	337,369	75	338,620	74	353,671	89
7月	342,727	74	366,315	78	332,021	82
8月	335,938	73	380,034	81	328,668	81
9月	312,146	71	373,950	84	305,924	85
10月	369,344	78	387,403	85	344,538	83
11月	389,931	89	401,663	92	220,351	79
12月	402,647	87	401,168	85	361,821	87
平成21年1月	390,149	83	421,190	90	347,832	84
2月	338,229	80	358,243	84	353,550	94
3月	363,610	78	410,730	87	362,793	88
合 計	4,064,083	79	4,559,360	84	3,956,192	86

※ CPU時間の単位は時です。

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

#### 5.3.2 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			
	Altix4700	PRIMQUEST	SR16000	合 計
平成20年4月	1,981	6,919	3,078	11,978
5月	4,697	7,962	2,100	14,759
6月	2,760	4,953	1,897	9,610
7月	4,743	5,306	4,477	14,526
8月	4,369	5,912	1,754	12,035
9月	6,460	6,278	1,845	14,583
10月	4,021	7,460	2,573	14,054
11月	3,691	5,104	2,432	11,227
12月	3,498	4,187	2,427	10,112
平成21年1月	3,046	3,409	2,036	8,491
2月	4,601	7,011	2,576	14,188
3月	3,582	7,814	2,383	13,779
合 計	47,449	72,315	29,578	149,342

5.4 クラス別CPU使用時間

Altix4700	PA	PAE	PAS	会話処理	Queue合計	ETC	総合計
平成20年4月	78774:09:46	17799:37:15	43948:50:23	0:00:00	140522:37:24	0:00:00	140522:37:24
5月	189726:06:46	98876:00:06	49706:19:20	0:00:00	341471:38:10	0:00:00	341471:38:10
6月	155241:15:26	109688:53:29	67476:30:15	0:00:00	337369:18:37	0:00:00	337369:18:37
7月	194632:51:52	80736:53:41	63230:32:30	0:00:00	342726:33:33	0:00:00	342726:33:33
8月	200033:31:53	80227:10:21	55677:11:56	0:00:00	335937:54:10	0:00:00	335937:54:10
9月	163119:59:57	68064:35:39	80961:10:10	0:00:00	312145:45:46	0:00:00	312145:45:46
10月	194285:57:37	87061:22:32	87996:14:02	0:00:00	369343:34:11	0:00:00	369343:34:11
11月	194892:46:24	102765:28:32	92272:23:06	0:00:00	389930:38:02	0:00:00	389930:38:02
12月	167624:08:38	102703:09:40	132319:42:16	0:00:00	402647:00:34	0:00:00	402647:00:34
平成21年1月	133372:35:17	124374:43:18	132401:38:11	0:00:00	390148:56:46	0:00:00	390148:56:46
2月	99336:00:54	89015:26:41	149877:42:58	0:00:00	338229:10:33	0:00:00	338229:10:33
3月	154364:30:38	87743:07:46	121502:43:26	0:00:00	363610:21:50	0:00:00	363610:21:50
合計	1925403:55:08	1049056:29:00	1077370:58:33	0:00:00	4064083:29:36	0:00:00	4064083:29:36

PRIMQUEST	PB	PBE	PBS	会話処理	Queue合計	ETC	総合計
平成20年4月	101823:21:47	156571:37:49	54240:00:17	0:00:00	314235:59:05	0:00:00	314235:59:05
5月	128950:57:13	193415:27:15	83441:07:28	0:00:00	405807:31:56	0:00:00	405807:31:56
6月	164915:11:09	100238:49:29	73465:45:56	0:00:00	338619:46:34	0:00:00	338619:46:34
7月	205042:24:44	125910:45:22	35362:19:41	0:00:00	366315:29:47	0:00:00	366315:29:47
8月	150370:24:25	185312:01:59	44351:16:27	0:00:00	380033:42:51	0:00:00	380033:42:51
9月	148495:46:23	163380:20:16	62074:09:28	0:00:00	373950:16:07	0:00:00	373950:16:07
10月	153889:19:17	147865:32:41	85648:17:59	0:00:00	387403:09:57	0:00:00	387403:09:57
11月	156097:54:20	169944:02:46	75621:30:52	0:00:00	401663:27:58	0:00:00	401663:27:58
12月	159117:18:03	165117:07:01	76934:04:10	0:00:00	401168:29:14	0:00:00	401168:29:14
平成21年1月	112721:11:23	195821:43:51	112646:55:08	0:00:00	421189:50:22	0:00:00	421189:50:22
2月	106240:05:21	126581:59:14	125420:33:05	0:00:00	358242:37:40	0:00:00	358242:37:40
3月	172845:25:23	61564:44:57	176319:20:21	0:00:00	410729:30:41	0:00:00	410729:30:41
合計	1760509:19:28	1791724:12:40	1005525:20:52	0:00:00	4559359:52:12	0:00:00	4559359:52:12

SR16000	PH	PHE	PHS	会話処理	Queue合計	ETC	総合計
平成20年4月	162383:06:57	60961:22:53	74312:16:34	0:00:00	223344:29:50	74312:16:34	297656:46:24
5月	189953:19:55	91276:49:00	66136:12:50	0:00:00	281230:08:55	66136:12:50	347366:21:45
6月	197566:14:50	76659:48:16	79444:29:02	0:00:00	274226:03:06	79444:29:02	353670:32:08
7月	181916:51:29	100031:47:00	50072:12:16	0:00:00	281948:38:29	50072:12:16	332020:50:45
8月	180374:52:19	84362:58:29	63930:32:40	0:00:00	264737:50:48	63930:32:40	328668:23:28
9月	166400:49:22	62742:31:59	76780:31:28	0:00:00	229143:21:21	76780:31:28	305923:52:49
10月	172514:49:13	93468:34:10	78554:32:00	0:00:00	265983:23:23	78554:32:00	344537:55:23
11月	116022:02:31	38691:33:04	65637:01:32	0:00:00	154713:35:35	65637:01:32	220350:37:07
12月	225131:34:14	50862:53:58	85826:16:16	0:00:00	275994:28:12	85826:16:16	361820:44:28
平成21年1月	198093:29:32	64270:57:32	85467:08:16	0:00:00	262364:27:04	85467:08:16	347831:35:20
2月	205871:02:32	62996:49:10	84682:24:00	0:00:00	268867:51:42	84682:24:00	353550:15:42
3月	219692:25:02	57040:17:48	86060:40:16	0:00:00	276732:42:50	86060:40:16	362793:23:06
合計	2215920:37:56	843366:23:19	896904:17:10	0:00:00	3059287:01:15	896904:17:10	3956191:18:25

5.5 ジョブ処理件数

Altix4700	PA	PAE	PAS	PAX1	Queue合計	ETC	総合計
平成20年4月	1,575	163	243	0	1,981	0	1,981
5月	3,639	630	428	0	4,697	0	4,697
6月	2,089	325	346	0	2,760	0	2,760
7月	3,931	325	471	16	4,743	0	4,743
8月	3,690	300	379	0	4,369	0	4,369
9月	5,179	747	534	0	6,460	0	6,460
10月	2,551	773	697	0	4,021	0	4,021
11月	1,857	1,255	579	0	3,691	0	3,691
12月	1,845	752	901	0	3,498	0	3,498
平成21年1月	1,439	867	740	0	3,046	0	3,046
2月	2,449	1,123	1,029	0	4,601	0	4,601
3月	1,658	1,102	822	0	3,582	0	3,582
合計	31,902	8,362	7,169	16	47,449	0	47,449

PRIMQUEST	PB	PBE	PBS	Queue合計	ETC	総合計
平成20年4月	5,543	989	387	6,919	0	6,919
5月	2,659	4,326	977	7,962	0	7,962
6月	2,708	1,767	478	4,953	0	4,953
7月	2,662	2,461	183	5,306	0	5,306
8月	2,051	3,723	138	5,912	0	5,912
9月	3,664	2,416	198	6,278	0	6,278
10月	5,382	1,853	225	7,460	0	7,460
11月	2,564	2,261	279	5,104	0	5,104
12月	2,208	1,806	173	4,187	0	4,187
平成21年1月	1,850	1,124	435	3,409	0	3,409
2月	3,280	3,268	463	7,011	0	7,011
3月	4,635	2,863	316	7,814	0	7,814
合計	39,206	28,857	4,252	72,315	0	72,315

SR16000	PH	PHE	PHS	Queue合計	ETC	総合計
平成20年4月	2,552	184	342	3,078	0	3,078
5月	1,639	307	154	2,100	0	2,100
6月	1,458	364	75	1,897	0	1,897
7月	2,336	2,111	30	4,477	0	4,477
8月	1,252	484	18	1,754	0	1,754
9月	1,756	78	11	1,845	0	1,845
10月	2,405	152	16	2,573	0	2,573
11月	2,358	51	23	2,432	0	2,432
12月	2,357	39	31	2,427	0	2,427
平成21年1月	1,942	71	23	2,036	0	2,036
2月	2,442	117	17	2,576	0	2,576
3月	1,863	469	51	2,383	0	2,383
合計	24,360	4,427	791	29,578	0	29,578

## 6 資料

### 6.1 計算科学研究センター運営委員

武次 徹也	北海道大学 理学研究院科学部門	教授
木寺 詔紀	横浜市立大学大学院 国際総合研究科	教授
押山 淳	東京大学大学院 工学系研究科	教授
松本 充弘	京都大学大学院 工学研究科	准教授
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
平田 文男	計算科学研究センター長 理論・計算分子科学研究領域 理論分子科学第二研究部門	教授
斉藤 真司	計算科学研究センター 理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門	教授
江原 正博	計算科学研究センター 理論・計算分子科学研究領域 計算分子科学研究部門	教授
永瀬 茂	分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 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・計算分子科学研究領域 分子基礎理論第一研究部門	准教授
長谷部 光泰	基礎生物学研究所 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	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
久保 義弘	生理学研究所 分子生理学研究系 神経機能素子研究部門	教授

## 6.2 計算科学研究センター職員

平田 文男	センター長
斉藤 真司	教授
江原 正博	教授
石田 千城	助教
金 鋼	助教
大野 人侍	助教
内山 郁夫	助教
片岡 正典	助教
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
長屋 貴量	技術職員
石原 麻由美	事務支援員
戸谷 明子	事務支援員



### 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	61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	M-680H S-8210/10  疎結合
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	無 人
プロジェクト数	63	176	192	183	198	199	207	226	234
利用者数									
機構内 <sup>a</sup>	48	70	69	91	94	102	110	130	141
機構外	107	254	325	330	375	426	446	464	496
合 計	155	334	394	421	469	528	556	594	637
稼働時間 (時間)	1,087	6,071	6,553	6,721	6,305	6,170	6316	6016	6368
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) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>
申 請	929	4,666	11,033	10,230	11,938	13,053	14799	15536	33,832/8,458 <sup>e</sup>
計 可	816	3,171	7,427	8,306	10,141	10,091	10768	12080	28,184/7,046 <sup>e</sup>
総使用CPU時間 <sup>c</sup> (時間)	509	2,405	5,405	6,320	8,205	8,489	8508	12770	20,092/5,023 <sup>e</sup>
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>	41,521	155,980	183,840	214,847	239,771	236,519	226727	274431	289915
ライブラリプログラム 新規登録数	0	20	43	20	699	10	118	160	39
データベース新規登録数	0	2	0	0	3	3	0	1	0
センター使用論文数	0	24	93	118	190	185	202	206	237

	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	平成5年度	平成6年度	平成7年度
計算機システム	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	M-680H S-820/80(~12月) SX-3/34R(1月~)	M-680H(~11月) SX-3/34R HSP(1月~) SP2(1月~)	SX-3/34R HSP(1月~) SP2(1月~)
運転方式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	213	231	239	256	272	271	225	222	210
利用者数									
機構内 <sup>a</sup>	143	137	146	140	158	143	127	139	129
機構外	520	515	544	593	623	661	589	601	597
合 計	663	652	690	733	781	804	716	740	726
稼働時間 (時間)	6,444	6,091	5,694	6,768	6,749	7,156	M-680H 6,689 SX- 2,101	M-680H系 5,722 SX-3/34R 8,506 HSP 2,133 SP2 2,022	SX- 8,352 HSP 8,293 SP2 8,333
CPU時間利用申請 (時間)	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(HSP基準) <sup>b</sup>
申 請	9,880	12,439	14,694	16,622	20,606	21,153	18,311	21,781	40,358
計 可	7,978	10,418	12,347	14,626	17,846	19,110	16027	19,393	37,446
総使用CPU時間 <sup>c</sup> (時間)	6,624	7,872	8,300	11,975	11,874	12,491	16,306	24,781	156,076
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>	278,956	278,104	253,418	2,955,038	346,987	297,638	227,650	107,194	84,102
ライブラリプログラム 新規登録数	4	7	3	0	0	0	10	10	7
データベース新規登録数	1	0	0	0	0	0	1	1	1
センター使用論文数	223	211	218	248	229	282	267	306	275

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

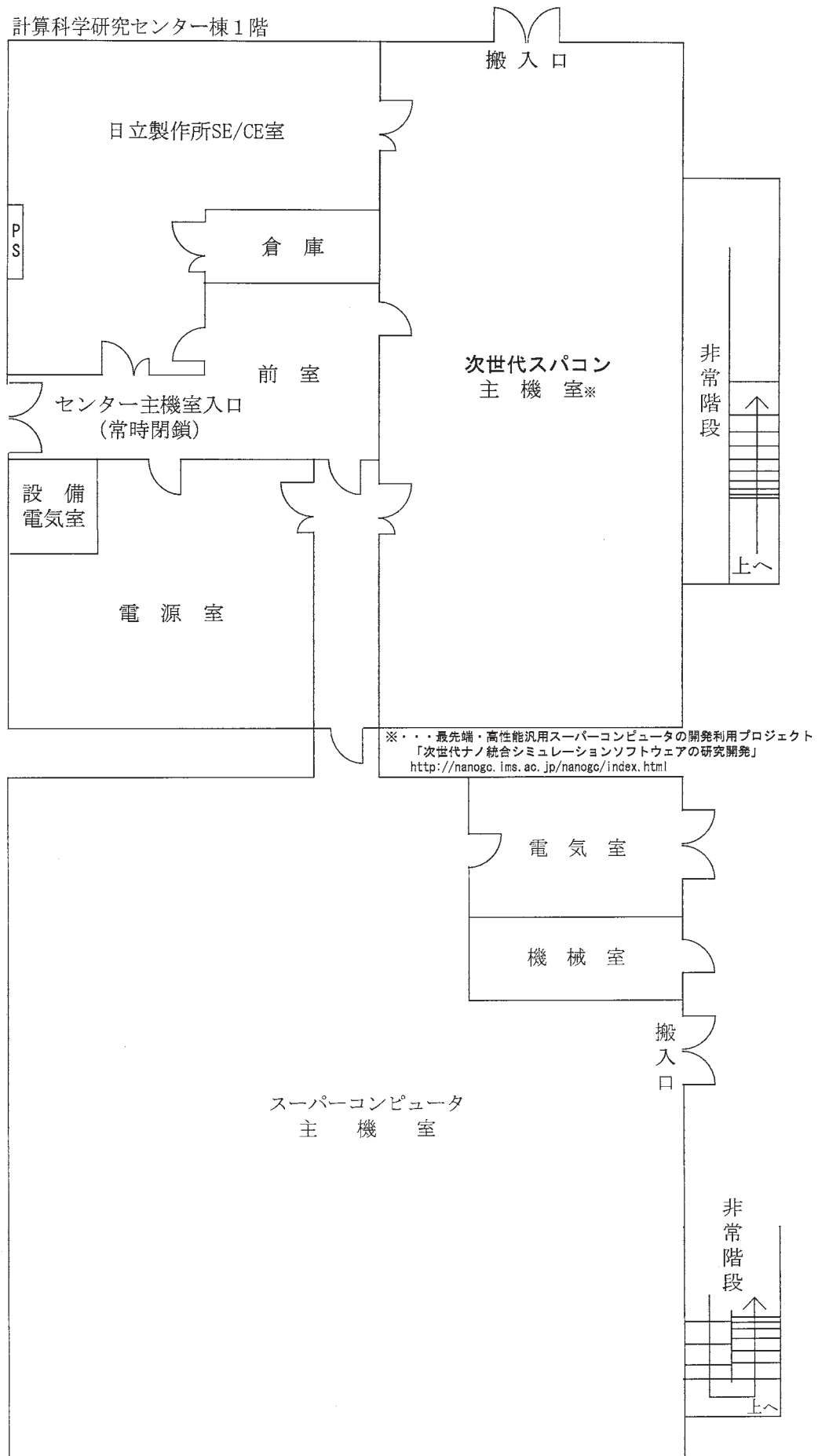
	平成8年度	平成9年度	平成10年度	平成11年度	平成12年度	平成13年度	平成14年度
計算機システム	SX-3/34R HSP SP2 HPC(9月～)	SX-3/34R HSP SP2 HPC SR2201(11月～)	SX-3/34R HSP SP2 HPC SR2201 Origin2000(10月～) SX-5(3月～)	SX-3/34R (12月まで) SX-5 SP2 HPC SR2201 Origin2000	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC
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	201	188	174	166	156	148	144
利 用 者 数							
機 構 内 <sup>a</sup>	139	126	138	125	101	100	104
機 構 外	574	609	566	539	534	504	479
合 計	713	735	704	664	635	604	583
稼働時間(時間)	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	VPP5000 8,234 SGI系 8,319 SX5 8,496 SP2 8,492 HPC 8,490	VPP5000 8,492 SGI系 8,422 SX5 8,558 SP2 8,555 HPC 8,555	VPP5000 8,506 SGI系 8,324 SX5 8,391 SP2 7,118 HPC 8,386
CPU時間利用申請(時間)	(HSP基準) <sup>b</sup>	(HSP基準) <sup>b</sup>	(HSP基準) <sup>b</sup>	(SP2 Thin基準) <sup>b</sup>	(SP2 Thin基準) <sup>b</sup>	(SP2 Thin基準) <sup>b</sup>	(SP2 Thin基準) <sup>b</sup>
申 請	58,425	73,910	76,804	97,788	249,405	251,785	237,872
許 可	51,499	58,650	67,159	79,964	209,393	234,866	229,401
総使用CPU時間 <sup>c</sup> (時間)	207,790	262,365	273,575	239,671	619,294	678,128	2,030,643
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>	70,308	51,738	45,173	40,697	58,685	70,680	55,522
ライブラリプログラム新規登録数	15	3	13	14	18	4	15
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	279	331	347	347	391	302	302

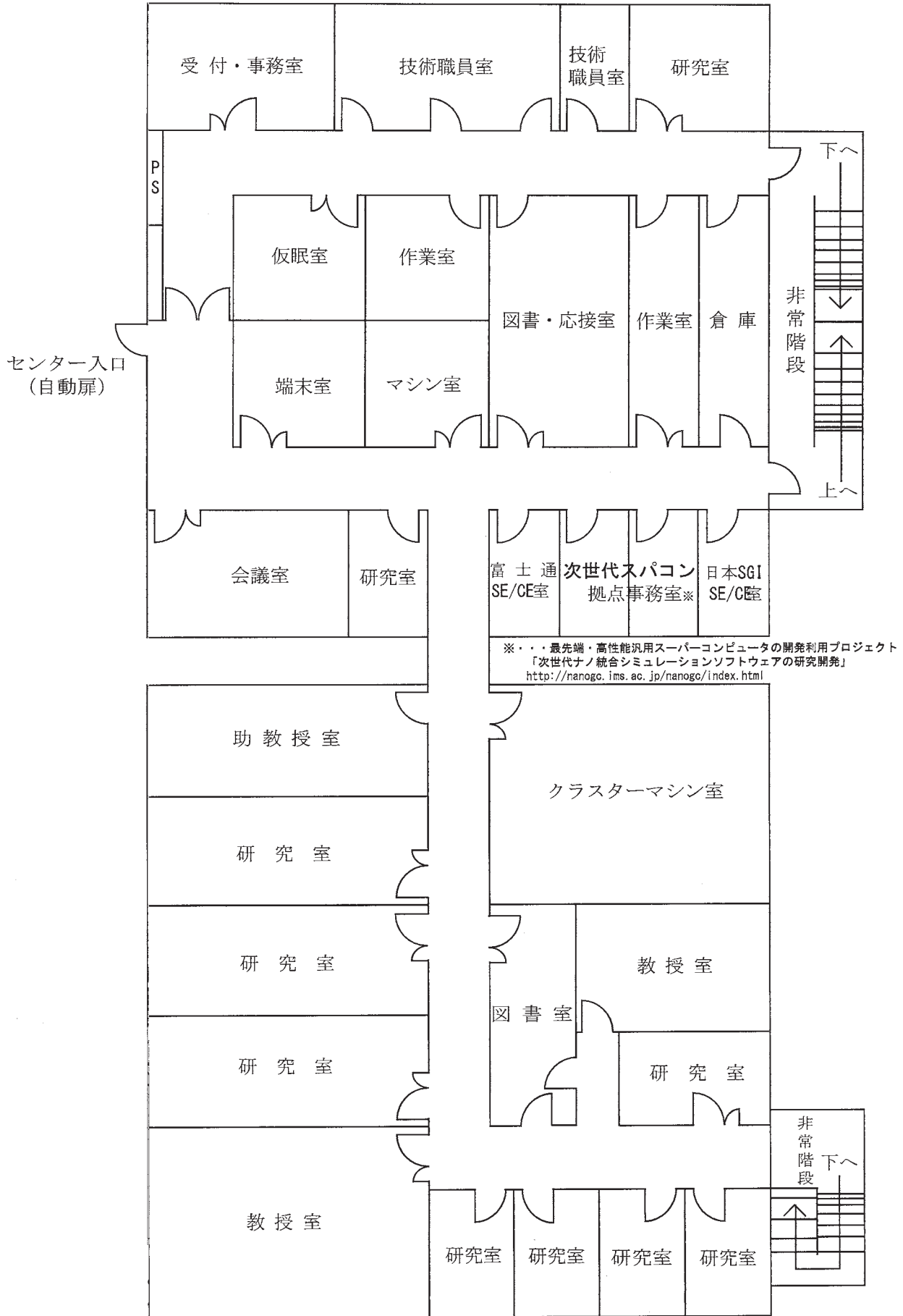
	平成15年度	平成16年度	平成17年度	平成18年度	平成19年度	平成20年度
計算機システム	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-7 TX-7	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-7 TX-7	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-7 TX-7	VPP5000(5月まで) SGI2800,Origin3800 (5月まで) Altix4700(7月から) PRIMEQUEST(7月か) SX-7 TX-7	Altix4700 PRIMEQUEST SX-7(1月まで) TX-7(1月まで) SR16000(3月から)	Altix4700 PRIMEQUEST SR16000
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	119	154	132	141	145	152
利 用 者 数						
機 構 内 <sup>a</sup>	89	83	30	40	44	59
機 構 外	449	516	480	533	551	589
合 計	538	599	510	573	595	648
稼働時間(時間)	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 Altix4700 6,196 PRIMEQUEST 6,336 SX-7 8,399 TX-7 8,398	Altix4700 8,245 PRIMEQUEST 8,304 SX-7 7,098 TX-7 7,088	Altix4700 8,087 PRIMEQUEST 8,486 SR16000 8,261
CPU時間利用申請(時間)	(TX-7基準) <sup>b</sup>	(TX-7基準) <sup>b</sup>	(TX-7基準) <sup>b</sup>	(TX-7基準) <sup>b</sup>	(TX-7基準) <sup>b</sup>	(SR16000基準) <sup>b</sup>
申 請	278,177	341,788	414,643	702,270	1,005,486	1,224,945
許 可	277,697	321,796	368,136	653,468	918,737	1,199,620
総使用CPU時間 <sup>c</sup> (時間)	1,785,877	1,762,818	1,992,205	4,384,464	6,307,008	12,579,635
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>	58,784	28,968	19,896	78,130	140,250	149,342
ライブラリプログラム新規登録数	5	4	4	21	18	22
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	281	284	205	214	188	186

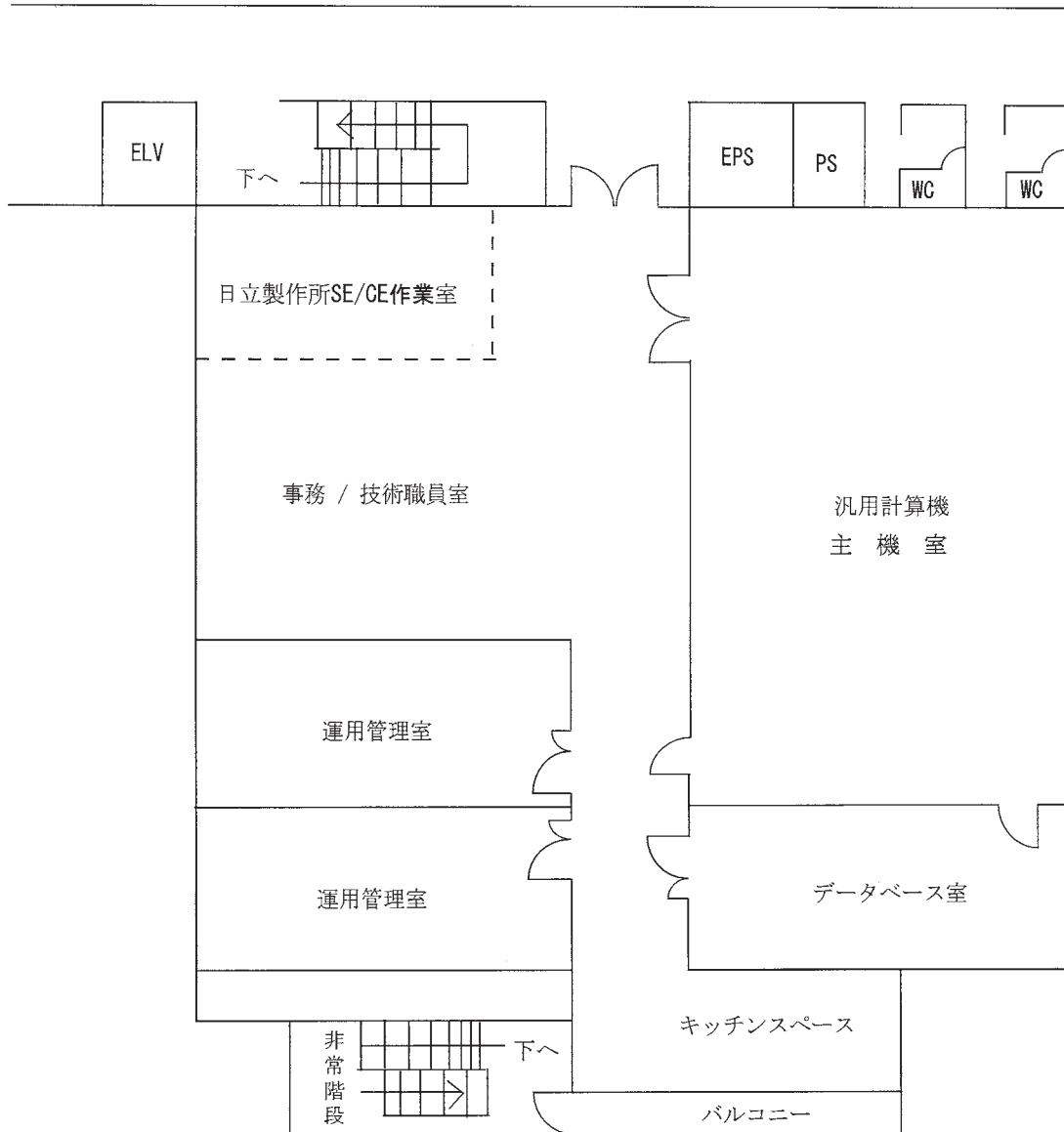
- a: 機構内利用者にはアイドル課題のための重複を含めません。  
b: 申請および使用の詳細については、5.1を参照してください。  
c: CPU時間、件数ともライブラリ開発、センター業務使用分などすべてを含みます。  
d: センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたものです。  
e: S-810、S-820、SX-3、SX-5、SX-7、VPPのCPU時間については、スカラー時間とベクトル時間の単純な和です。  
\*: 下段はM-680H基準

6.4 建物図

明大寺地区 計算科学研究センター棟1階







## 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 SR16000 用マニュアル（日本語版）

下記のマニュアルは、電子マニュアル（PDF）と冊子の両方提供されています。

- (1) IBM XL C/C++ Enterprise Edition for AIX プログラミングガイド
- (2) IBM XL C/C++ Enterprise Edition for AIX コンパイラ・リファレンス
- (3) IBM XL C/C++ Enterprise Edition for AIX XL C/C++ 言語解説書
- (4) XL Fortran Enterprise Edition for AIX 言語解説書
- (5) 最適化 FORTRAN90 言語
- (6) 最適化 FORTRAN90 使用の手引き
- (7) 数値計算副プログラム MSL2 行列計算
- (8) 数値計算副プログラム MSL2 関数計算
- (9) 数値計算副プログラム MSL2 統計計算
- (10) 数値計算副プログラム MSL2 操作
- (11) 数値計算副プログラム MSL2 MATRIX/MPP
- (12) AIX 5L コマンド・リファレンス第一巻(a から c).
- (13) AIX 5L コマンド・リファレンス第一巻(d から h)
- (14) AIX 5L コマンド・リファレンス第一巻(i から m)
- (15) AIX 5L コマンド・リファレンス第一巻(n から r)
- (16) AIX 5L コマンド・リファレンス第一巻(s から u)
- (17) AIX 5L コマンド・リファレンス第一巻(v から z)
- (18) AIX 5L プログラミングの一般概念：プログラムの作成およびデバッグ
- (19) AIX 5L メッセージ・センター・リファレンス

### 6.5.2 SR16000 用マニュアル（英語版）

下記のマニュアルは、電子マニュアル（PDF）と冊子の両方提供されています。

- (1) IBM XL C/C++ Enterprise Edition for AIX プログラミングガイド
- (2) IBM XL C/C++ Enterprise Edition for AIX コンパイラ・リファレンス
- (3) IBM XL C/C++ Enterprise Edition for AIX XL C/C++ 言語解説書
- (4) XL Fortran Enterprise Edition for AIX 言語解説書
- (5) 最適化 FORTRAN90 言語
- (6) 最適化 FORTRAN90 使用の手引き
- (7) 数値計算副プログラム MSL2 行列計算
- (8) 数値計算副プログラム MSL2 関数計算
- (9) 数値計算副プログラム MSL2 統計計算

(10) 数値計算副プログラム MSL2 操作

(11) 数値計算副プログラム MSL2 MATRIX/MPP

### 6.5.3 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

### 6.5.4 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 コンパイルメッセージ
- (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

### 6.5.5 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

6.5.6 マニュアルの購入と問い合わせ先  
SR16000 用マニュアルの購入にあたっての問い合わせ先

〒450-6021 名古屋市中村区名駅一丁目1番4号  
JR セントラルタワーズビル オフィース棟 21 階  
株式会社 日立製作所 中部支社  
担 当 : 水森 隆太  
電 話 : 052-388-3713  
F A X : 052-388-3722  
E-mail : ryuta.mizumori.my@hitachi.com

PRIMEQUEST 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

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

## 7 研究施設の現状と将来計画 (分子研リポート 2008 より転載)

### 8-6 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、2008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、特に設備の運用とセンターの将来構想の検討の必要性について述べる。

2009年2月現在の共同利用サービスを行っている計算機システムの概要を図と表に示す。本システムは、超高速分子シミュレータと高性能分子シミュレータから構成されている。前者は2006年7月に導入し明大寺地区に設置され、後者は2008年2月に更新されて山手地区に設置されている。「超高速分子シミュレータ」、「高性能分子シミュレータ」は、いずれも量子化学、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クラスタでは不可能な大規模計算を実行できる性能を有する。

まず、「超高速分子シミュレータ」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。

一方、2008年3月に導入された「高性能分子シミュレータ」は、演算サーバ、ファイルサーバ、フロントエンドサーバおよびネットワーク装置から構成される。演算サーバは、日立製作所製のSR11000後継機であり、1 CPUコアあたり18.8 Gflopsの演算性能を持ち、1ノードが32 CPUコアと256 GByteメモリを有する共有メモリ型スカラ計算機である。理論総演算性能は5.4 Tflops、総メモリ容量は2.3 TByteであり、一時作業領域として23 TByteのディスクを装備している。本演算サーバは、浮動点少数演算量が多い分子科学計算はもちろんのこと、高クロック周波数CPUの強みを生かし、従来性能が出しにくかった整数演算や論理演算を多用するプログラムも性能を発揮することが期待される。ファイルサーバは、共同利用システム全体のホームディレクトリ等のサービスを行い、128 TByteのディスクを装備している。またバックアップ領域として60 TByteのディスクも装備している。

共同利用に関しては、2008年度も151の研究グループにより、総数646名にもおよぶ利用者がこれらのシステムを日常的に利用しているが、システムの運用にあたり、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、特に大規模ユーザのために施設利用Sを設定している。これに従い、審査により、平成20年度は5件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。

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うべき分野拠点として、活動を展開している。

この中で、昨年度は計算科学研究センターワークショップとして、分子科学、物性科学、計算機科学の分野の研究者が集まり、「次世代理論化学の新展開と超並列計算への挑戦」をテーマとしたワークショップを開催した。また、次世代スーパーコンピュータについては、センターユーザーをはじめとした理論・計算分子科学研究コミュニティの主だった先生方により設立準備委員会が組織され、計算科学研究センターの位置づけ、果たすべき役割等について検討がなされた。その中の計算科学研究センターに期待されている重要なアクティビティの大筋は以下の通りである。

(1) 神戸に設置される次世代スーパーコンピュータの共用に際して、理論・計算分子科学領域を含め、計算科学研究センターがナノサイエンス分野、分子科学分野の分野拠点として機能していくこと、つまり神戸センターが計算機の運用に対して責任を持つ一方で、分子研は分野の研究に対して責任を持ち、研究をリードし、取りまとめを行っていくこと。

(2) このため、分子科学研究所に理論・計算ナノサイエンス特別研究センター（仮称）を設置し、計算科学研究に加えてソフト開発を含めたライブラリの整備や研究支援活動を行っていくこと。

#### 平成 20 年度 システム構成

##### 高性能分子シミュレータシステム

演算サーバシステム	
	型番：HITACHI SR11000 次世代モデル
	OS：AIX
	CPUCore 数：288 (32CPUCore × 9 ノード)
	総理論性能：5.4TFLOPS
	総メモリ容量：2.3TB (256GB × 9 ノード)
	ディスク容量：23TB (/work)
ファイルサーバシステム	
	型番：HITACHI EP8000/550Q (2 ノード)
	OS：AIX
	総メモリ容量：64GB (32GB × 2 ノード)
	ディスク容量：120TB (/home (37.4TB), /week (20.0TB), /save (37.4TB))
	60TB (バックアップ用)
フロントエンドサーバ	
	型番：HITACHI EP8000/550Q (2 ノード)
	OS：AIX
	総メモリ容量：64GB (32GB × 2 ノード)
高速ネットワーク装置	
	型番：Alaxala AX6708S

超高速分子シミュレータシステム

蜜結合演算サーバサブシステム	
型番	富士通 PRIMEQUEST
OS	Linux
CPUCore 数	640 (64CPUCore × 10 ノード)
総理論性能	4.096TFLOPS (409.6GFLOPS × 10 ノード)
総メモリ容量	2.56TB (256GB × 10 ノード)
ディスク容量	800GB × 10 ノード (/work)
	: 8TB (/week)
高速 I/O サーバサブシステム	
型番	SGI Altix4700
OS	Linux
CPUCore 数	640 (128CPUCore + 512CPUCore)
総理論性能	4.096TFLOPS (819.2GFLOPS + 3276.9GFLOPS) (6.4GFLOPS/CPUCore)
総メモリ容量	8TB (2TB + 6TB)
ディスク容量	114TB (/work)
高速ネットワーク装置	
型番	Catalyst 6504

システム構成図

