

センター設立の目的と経緯

岡崎国立共同研究機構計算科学研究センターの前身である分子科学研究所電子計算機センターは、実験データの収集解析、分子科学計算の発展に貢献するため、1977年5月に分子科学研究所の研究施設として設立された。

1978年6月には日立製作所製 HITAC M-180 2台の導入が決まり、翌年1月より利用者へのサービスを開始した。

1979年9月には全国にさがけて無人運転システムが稼働を始め、長期にわたる連続無人運転を可能にした。

1980年4月にはM-200HとM-180それぞれ1台の構成となり、さらに1982年4月にはM-200H 2台のシステムに更新された。

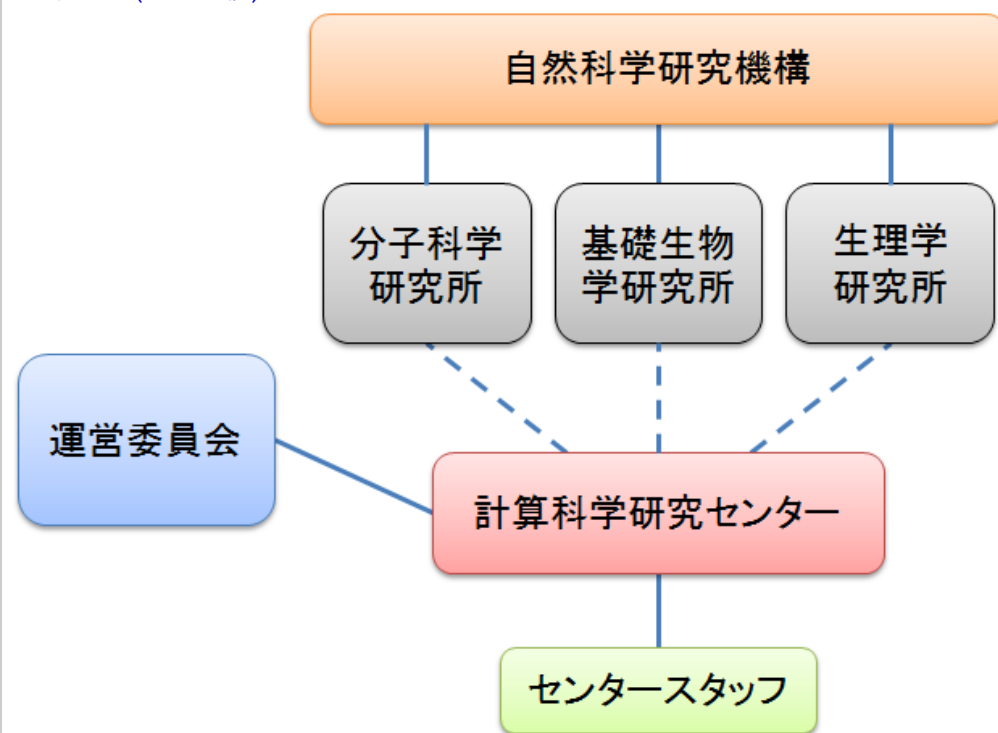
1986年1月には、かねてから分子科学研究者の夢であったスーパーコンピュータ（HITAC S-810/10）が導入され、同時に汎用機として当時、最高性能を誇ったM-680Hへの更新が実現した。その後も分子科学計算の計算規模は拡大の一途をたどり、1988年にはスーパーコンピュータの性能向上を図るため、HITAC S-820/80）が行われ、1991年には汎用計算機（M-680H）の主記憶増強がなされた。

1994年には、スーパーコンピュータが日本電気製SX-3/34Rに更新され、1995年には、汎用計算機が日本電気製HSP及びIBM製並列計算機SP2を主計算サーバとして含む分散型的高速演算システムへと更新された。これによりセンターの全ての計算業務が高速化された。

1999年には、汎用計算機が日本電気製 SX-5 及び IBM製並列計算機 SP2 に更新され、2000年には、スーパーコンピュータが富士通製 VPP5000 及び SGI製 SGI2800 に更新された。

2000年4月1日付けで、分子科学研究所電子計算機センターは、我が国唯一の分子科学計算のための共同利用基盤センターと分子科学研究所電子計算機センターを岡崎国立共同研究機構 共通施設計算科学研究センターに転換した。

図: 組織図(法人化後)



2004年には、汎用計算機が日本電気製 SX-7 及び TX-7 に更新された。

また、国立大学法人化に伴い、2004年4月1日付けで、岡崎国立共同研究機構 共通施設計算科学研究センター を自然科学研究機構 岡崎共通研究施設 計算科学研究センター に転換した。

2006年には、スーパーコンピューターがSGI製 Altix4700 及び富士通製

PrimeQuestに更新され、2008年には汎用コンピュータが日立製作所製 SR16000に更新された。

2012年には、スーパーコンピューターは富士通製 PRIMERGY RX300、PRIMEHPC FX10 及び SGI製 UV 1000 に更新された。

2013年には、汎用コンピュータは富士通製 PRIMERGY CX250に更新された。

2013年現在におけるセンター職員は、センター長（併任）、教授 1名、准教授 1名、助教 5名、技術職員 6名 から構成されている。

今後、共通研究施設の計算基盤研究センターとしてはもちろん、国内外の分子科学研究者、バイオサイエンス研究者に大学等

2015年には、汎用コンピュータが富士通製 PRIMERGY CX2550M1に更新された。