

I 部

目 次

寄語	熊本大教授 榊 茂 好	1
1.	電子計算機センターでの1年 青 柳 睦	4
2.	スーパーコンピュータワークショップの活動	6
3.	計算機システムの運用および使い方	8
3. 1	システムの構成と特徴	8
3. 2	ジョブクラスの構成	13
3. 3	利用課金点数	16
3. 4	通信・ネットワーク	18
4.	一般報告	21
4. 1	分子研ライブラリプログラムの収集と開発	21
4. 2	データベース開発状況	24
5.	平成6年度稼働状況および利用者数	25
5. 1	利用申請プロジェクトおよび利用者数	25
5. 2	システム稼働状況	26
5. 3	CPU使用時間	27
5. 4	VPU使用時間	28
5. 5	ジョブ処理件数	29
5. 6	所外ネットワーク・通信回線の利用状況	30
5. 7	所内ネットワーク・通信回線の利用状況	31
6.	資料	32
6. 1	センター関連組織	32
6. 2	岡崎国立共同研究機構分子科学研究所 電子計算機センター規則	33
6. 3	岡崎国立共同研究機構分子科学研究所 電子計算機センター運営委員会規則	34
6. 4	電子計算機センター運営委員会委員	35
6. 5	電子計算機センター職員	36
6. 6	応用プログラム相談員	36
6. 7	建物図	37
6. 8	マニュアルの紹介と購入方法	39
6. 9	利用者数とCPU時間の推移	49
7.	電子計算機センター将来計画(中間報告)	50
8.	UNIX分散処理環境におけるユーザ資源管理システム	57
9.	分散処理環境における障害監視システム	68

寄 語

熊本大教授 榊 茂好

1 ヶ月前位でしょうか、センター長の岩田先生から、「センターレポートの巻頭言を書いて下さい」との電話がありました。その際、「榊さんも、もうそろそろ、そう言う年令になったのですから」と言われましたが、振り返ってみると、分子研の計算センターを利用し始めて、かれこれ15年以上にもなり、又、私自身も50才間近になってしまっていることに気がつき、愕然としてしまいました。50才位になれば過去を振り返りたくなる時もあるのは当然のことなので、この機会に分子研計算センターの過去を、ユーザーの立場から振り返ってみようと思います。

1978年、M180で運用が開始された頃、私が個人的にもっとも嬉しかった事は、「CPU時間は申請し、許可された範囲内で無料」と言う点でした。当時、大学の計算センターの使用料はたいした計算をしなくても相当額になり、どこの研究室でも多かれ少なかれ、びくびくしながら計算をしていた状況の中で、「無料で ab initio M0 計算ができる」事は、少し大げさに言えば、culture shock 的な出来事でもあったわけです。しかし、「無料で計算できる」のは良いのですが、当時（1978年から10年位）は、ネットワークもなく電話回線で細々と遅い端末を通してしか分子研の計算機が使えない状況であったため、乏しい旅費をひねり出し、岡崎まで出かける必要もありました。数年前のセンターレポートの巻頭言に細矢先生が「以前はユーザーが悲愴感をもって計算していた」と述べておられますが、この時代は”タダで計算できる”嬉しさと”旅費の分は計算して帰ろう”と言う義務感で徹夜も辞せず計算機を使ったユーザーも数多く、傍目には悲愴感が漂っていたのでしょうか。しかし、この時代は別の見方をすれば、「分子研計算センターの黄金時代であった」と言って良いかも知れません。とにかく「それまで日本では不可能であった大規模理論計算が可能になり」、「全国からユーザーが分子研計算センターに出かけた」のですから、研究成果があがり研究者の交流も盛んで、しかもこれらのことが何一つ工夫しなくても可能であった訳です。しかし、御存知の通りこの5年間位で、状況は大きく変化しました。各研究室にワークステーションが導入されたこと、しかもその能力はかつて計算センターの主力であったM680Hの能力に匹敵する程です。又、ネットワークの整備が我が国でもようやく進展し、不十分とは言え、ネットワークを介して分子研の計算機の利用が可能となったこともその原因であり、センターの端末室がガランとして人気

のないのもその一つの可視的な現われであろう。

分子研とその計算センターは、国内においては全国の理論化学、分子科学研究者の交流の中心となり、海外に向けては、日本の分子科学研究の一つの中心としての地位を示し続けて来たこと、そしてその役割を今後も担って行かなくてはならないこと、その役割を担えなくなった時は分子研と計算センターの存在価値が半減することを考えると、「何もしなくても人が集まり、分子研での研究成果がでる」時代でなくなった現在は、分子研と計算センターが「何かの工夫」をする必要が出てきたと言える。この点は、多くの方々の共通認識となっていると思います。では、一体何をしたら良いのでしょうか。この点について様々な考え方があるでしょうが、一つには、分子研の計算センターにはやはり、その時代の計算環境を一步リードするハードの整備とそれに基づく質の高い大規模計算の実行が必要であろうと思われます。ワークステーションがいくら普及したと言っても、そして、ベクトル化率が低くスーパーコン向きでない電子状態計算でさえも、やはり現在のSX-3の威力は大きく、ワークステーションで2~3日かかる計算が数時間で終了する。この差は研究の進展の時間的側面を考えると大きい。もっと基本的なところではワークステーションではできない計算がSX-3で可能なこともあるはずで、そのようなプロジェクトの奨励と推進も必要であろう。二つ目は、研究室単位で出来ない事の実行であろう。データベースの整備を細矢先生が指摘しておられますが、QC LDBの充実、それ以外のデータベースの整備も必要であり、国内の研究者のみならず海外からもアクセスされるようにすることも分子研の果たす役割の一つであろう。オリジナルなプログラムシステムの開発も、計算センターが中心となって実行できれば素晴らしい事と思われる。三つ目は、研究者の交流ではないだろうか。ネットワークの整備、インターネットでの情報交換は便利なものだが、お互い顔を見ながら discussion すると良い知恵も出てくることが多い。大規模なものでも小規模なものでも、とにかく研究会を、計算センター、分子研の理論研究部門、あるいは周囲が協力して行うことがもっとあっても良いように思える。

このように、ユーザーサイドからはやって欲しい事を列挙してみました。計算センターの乏しいスタッフはスーパーマンではないし、上で述べたようなことは研究業績にカウントされない事を考えると、ユーザーが計算センターの助けを借りて、あるいは計算センターを媒介にして何かをするという行動形態が最も実現性が高いだろうと思われる。幸い計算センターの歴代のスタッフは分子科学の分野の優秀な研究者であり、大学の計算センターのスタッフと我々

の関係とは異なり、我々と共通の認識を持ち密接な関係を保っています。この関係に基づき、分子研の計算センターの存在意義が失われてしまったり、小さくなった場合のデメリットは測りきれない程大きいことを忘れず、分子研の計算センターを自分の研究に貪欲に利用し、又、その為の要望を日常的に提案することも必要だろう。

最後に、分子研のスタッフに感謝すると共に、スタッフ増とその待遇改善（一朝一夕には出来ないにしても）の声を常に出し続ける努力も必要なことに触れておきたい。

平成7年は、前年のスーパーコンに続き高速演算システム（従来の大型汎用機）の更新作業が終わり、これでセンターのすべてのOSがUNIXとなった最初の1年でした。SP2の稼働当初は、OSやLoadlevelerの不具合に加え、新機種に対するセンタースタッフ、SEさんの不慣れが重なり何度かの運用一時停止に見舞われ利用者に迷惑を掛けました。また6月ごろには、分散システムにおけるネットワーク負荷の増加に伴い利用者の保存ファイル（/home/users）を提供するファイルサーバーのNFS機能が不安定となり、この問題を解決するまでの数週間は、対応に苦勞しました。幸い7年度の後半からはシステムはかなり安定に稼働しており現時点では一安心といったところです。

計算機運用の上での環境作りとして平成7年度は、UNIX分散システムにおける利用環境、システム管理機構の充実に力を入れました。利用面では、3種類の計算サーバー（super, HSP, SP2）へのバッチジョブの処理機構をJQSにより統合化しました。また利用ハード環境の面では、SP2の一時作業領域（/work/users）の拡大や、FDDIカードの増設によるネットワーク負荷の分散を実現しました。システム管理機構としては、後の章に説明がある通りJupiter, Watchmanという2種類のプログラムを開発しました。JupiterはログインIDやグループなどの利用者情報の管理、そしてCPU課金点数やファイル使用量の上限管理などをシステム全体にわたり統一的に操作するためのソフトウェアです。Watchmanは、CPUサーバー、ファイルサーバーそしてccfep1などのフロントエンドからなる複数の計算機システムが正常に動作しているかを定期的に監視し、障害があればポケットベルによるセンター職員への連絡や自動復旧を行うプログラムシステムです。

前年に続き平成7年度も職員の移動がありましたので報告します。田中技官の後任として生理学研究所生理機能研究施設から水谷文保技官がセンタースタッフとして来てくれました。また、分子研ネットワーク専任技官として内藤茂樹技官が着任しました。

また7年度は、分子研の将来計画の中で特にUVSORと電子計算機センターの将来計画を検討するための委員会がそれぞれ設けられました。センターでは所内委員4名、所外委員4名からなる将来構想委員会が開かれました。7章の「電子計算機センター将来計画」に審議結果を掲載しましたので目を通してください。ここでの指針に基づき将来の機種更新やセンター運営の変更を行ってゆくこととなりますが、まだ中間報告の段階ですので委員以外の利用者からのご意見や提案を是非ともお聞かせください。将来計画に関連する現時点での大まかなスケジュールを以下に示しますので参考にしてください。

1996年	3～4月ごろ	SP2 の一時作業領域の拡張（第二期）計画実施
	4月以降	次期スーパーコン検討小委員会設置
	6～8月ごろ	レンタル契約以外の演算能力拡充（第一期）計画実施
1997年	7月	次期スーパーコン導入説明会
	6～8月ごろ	レンタル契約以外の演算能力拡充（第二期）計画
1998年	1月	次期スーパーコン仕様策定委員会発足
	7月	次期スーパーコン機種決定
1999年	1月	次期スーパーコン運用開始（以上、予定）

近頃は、多くの大学大型計算機センターの目的が、従来の大型計算処理から情報処理、ネットワーク運用にシフトしてきています。一方、分子研の電子計算機センターは設立当初からの基本理念に基づき、大学等の機関では実行が困難な大規模計算処理を行える国内随一のセンターとして、今後も処理能力及び処理データ容量の拡大を主眼に発展してゆくことが肝要と考えます。昨年の分子研に続き、来年（平成9年）の5月には電子計算機センターも20周年を迎えます。過去を振り返ると同時に未来に向け熱い思いをさせるよい機会だと思います。

2. スーパーコンピュータワークショップの活動

平成7年1月に新汎用コンピュータであるHSP（NEC製）及びSP2（IBM製）が電子計算機センターに導入されたことから、計算機センターでは「並列計算等次期汎用計算システムの活用について」という主題で、SP2の並列環境を用いることによって一体どのような活用が可能なのかを探求することを目的としたネットワークコンピューティングワークショップを開催した。このワークショップでは、並列環境がどのように研究に取り入れられているかを国内外の研究者の方々にご講演いただいた上で、次期並列計算機の未知の可能性を追求するため、活発な議論が行われた。

～ スーパーコンピューティングワークショップ ～

主題 : 並列計算等次期汎用計算システムの活用について

会場 : 分子科学研究所電子計算機センター2階会議室

平成6年11月24日（木）

- 13:30～13:40 開 会 (分子研センター長)
- 13:40～14:40 「C++による巨大分子の密度汎関数計算プログラムとそのパラレル化の試み」
佐藤文俊（九工大・情報工）
- 14:40～15:40 「メッセージ通信による密度汎関数法プログラムの並列化」
林 秀光（豊田中研・数理情報）
- 16:00～17:00 「Super Direct CI」
W. Duch（Nicholas Copernicus Univ., Poland）
- 17:00～18:00 「Parallel Computing In Chemistry Made Easier」
R. J. Harrison(Battelle Pacific Northwest Lab.)
- 18:00～18:30 「新計算機システムの紹介」
青柳 睦（分子研電算センター）

平成6年11月25日(金)

9:30～10:30 「並列版 HONDO の紹介」

M. Dupuis (IBM Corporation, Kingston)

10:30～11:30 「並列計算機IBM SP1の使用経験」～HONDO, 3次元格子上的MO作成～

村上明德 (三菱化学・横浜総研)

13:00～14:00 「ハイパフォーマンスコンピューティングのためのシステム技術動向」

関口智嗣 (電総研)

14:00～15:00 「非経験的分子軌道計算の平行処理」

望月祐志 (NEC基礎研)

平原幸男 (NEC情報システムズ)

15:00～16:00 「サーバ・クライアント方式による行列対角化パッケージ REISPACKの開発」

足立 聡 (東工大・理)

16:00～16:10 閉 会

(分子研センター長)

3 計算機システムの運用および使い方

3.1 システムの構成と特徴

当センターのシステム平成6年12月までは図3.1.1に示すように汎用計算機(日立製作所製 M-680H)とスーパーコンピュータ(日本電気製 SX-3/34R)との、全く独立したシステムでした。平成7年1月以降は、図3.1.2に示す高速演算サーバ(日本電気製 HSP)、スーパーコンピュータ(日本電気製 SX-3/34R)、演算クラスシステム(IBM製 SP2)による全く独立したUNIX分散処理システムである。

- ・機構内にFDDI準拠の600Mbps光ループLANを張り巡らせており、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)のサブネットワーク(TCP/IP、DEC netなど)間を統合的に接続・利用できる。
- ・TISN(東大理学部国際理学ネットワーク)、SINET(学術情報センター インターネットバックボーン)を経由してインターネットにアクセスできる。

3.1.1 平成6年1月4日から平成6年12月31日までのシステムの構成と特徴

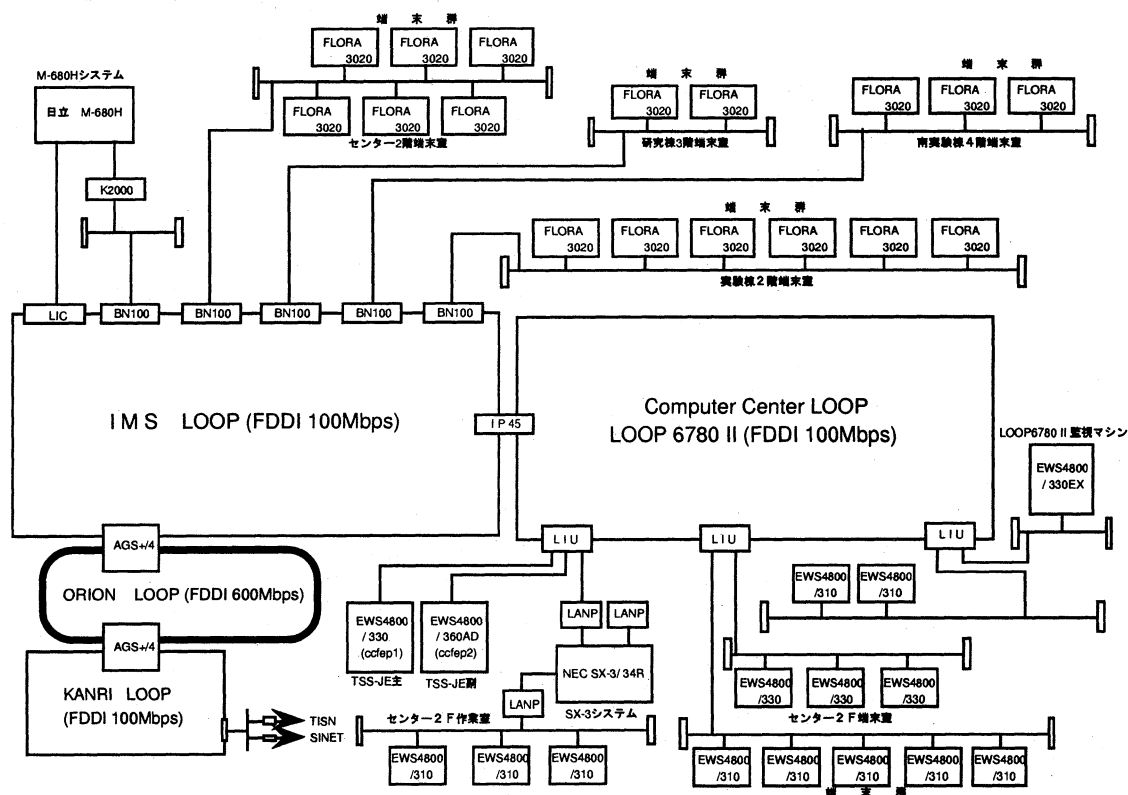


図3.1.1 システム全体構成概略図

◆大型汎用計算機システム(日立製作所製 M-680H)

- ・M-680HではTSS処理、ジョブ管理、バッチ処理を行っている。
- ・自動ジョブスケジュール機能(日立製作所と共同開発)により各ジョブの要求する各種資源を柔軟かつ最適に割り当ててスケジュールしている。また、各種資源を最大限に必要とする大規模ジョブも、他のジョブと混在させてシステム全体を有効に使うことができる。
- ・総計140GBの磁気ディスク容量を擁し、CPUの高速化とあわせて大規模科学計算を可能とする。
- ・大容量の光ディスク装置(83GB)を用意し、所外の遠隔地ユーザの便に共している。

- ・ISDN経由でのホスト接続を可能としている。
- ・M-680HではBITNETのサービスを行っている。
- ・総計約115GBの光磁気ディスク(書換可能)を用意し、磁気ディスクの有効利用を計っている。

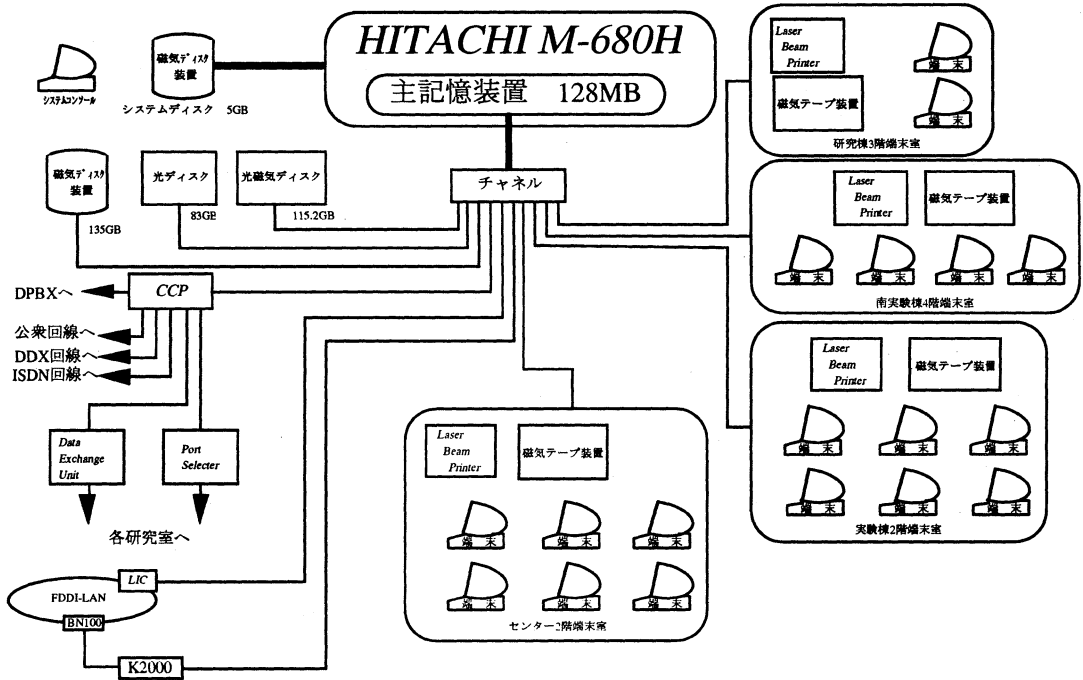


図3.1.1a 大型汎用計算機システム

◆スーパーコンピュータシステム(日本電気製 SX-3/34R)

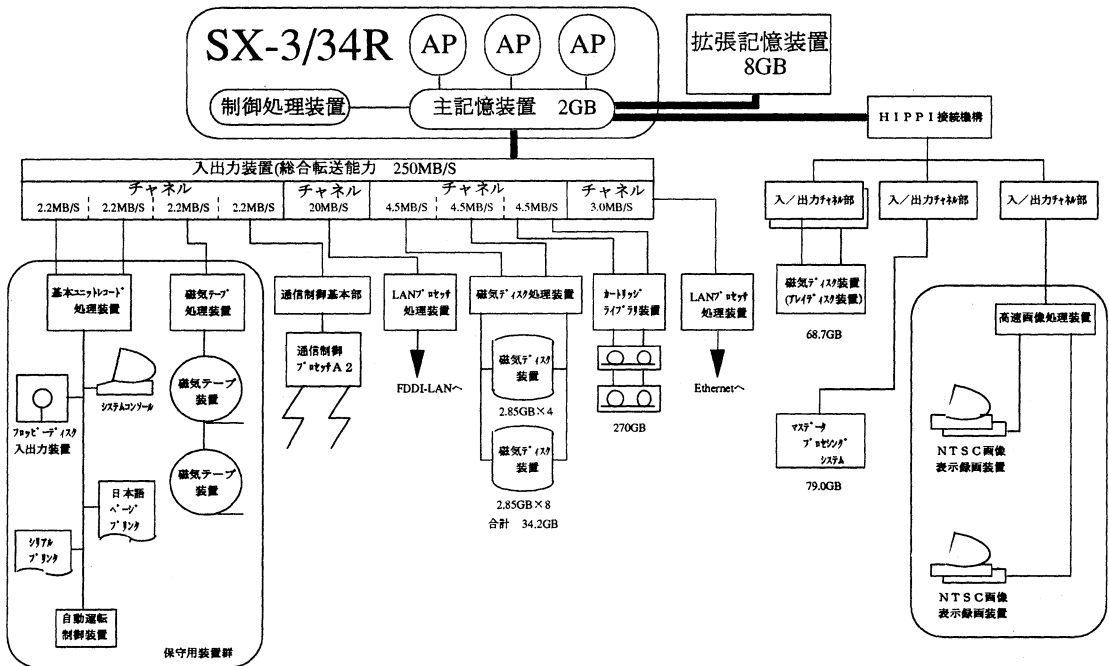


図3.1.1b スーパーコンピュータシステム

- ・SX-3/34RではTSS処理、ジョブ管理(NQS)、バッチ処理を行っている。
- ・大容量のCGMT装置(270GB)を用意し、所外の遠隔地ユーザの便に共している。
- ・約34.2GBの磁気ディスクと約68.7GBの磁気アレイディスクの総容量約103GBを有している。
- ・約790GBの光磁気ディスク(書換可能)を用意し、磁気ディスクの有効利用を計っている。この光磁気ディスクは、通常の磁気ファイルシステムとして使用している。
- ・動画出力システムによって、スーパーコンピュータの計算結果の視覚化を可能としている。

3.1.2 平成7年1月4日以降の構成と特徴

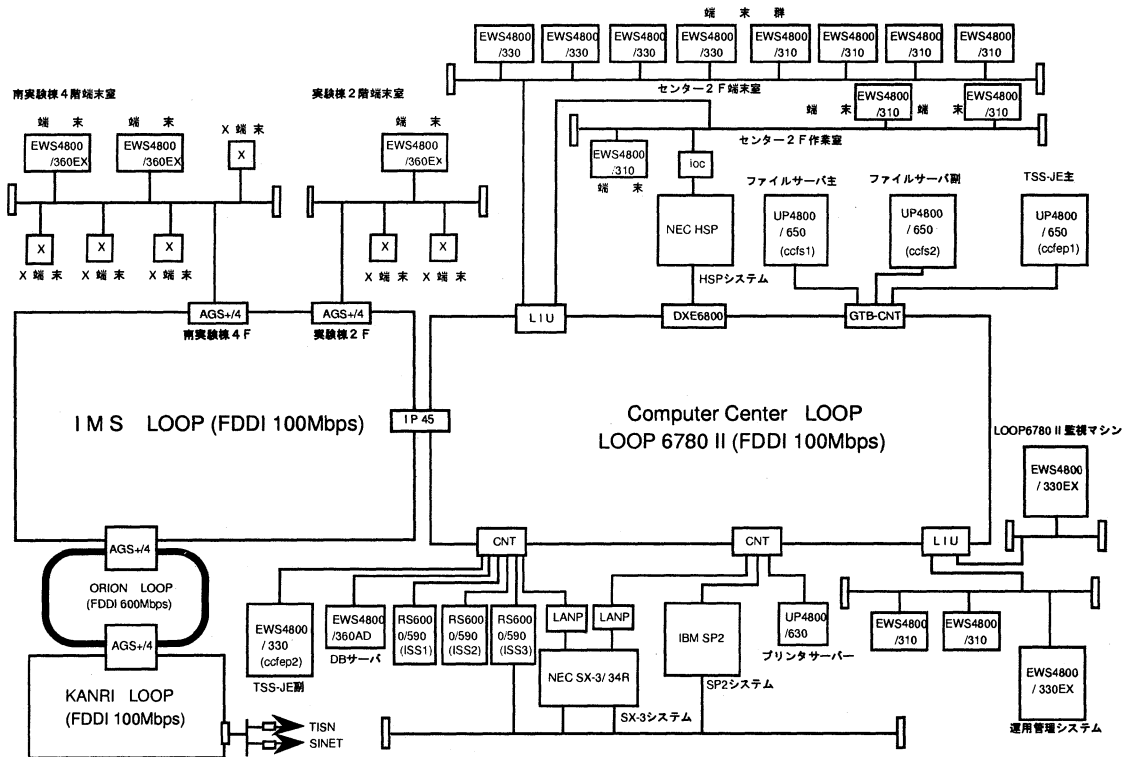


図3.1.2 システム全体構成概略図

◆高速演算サーバシステム(日本電気製 HSP)

- ・HSPではTSS処理、ジョブ管理(NQS)、バッチ処理を行っている。
- ・約68.7GBの磁気アレイディスクを有している。

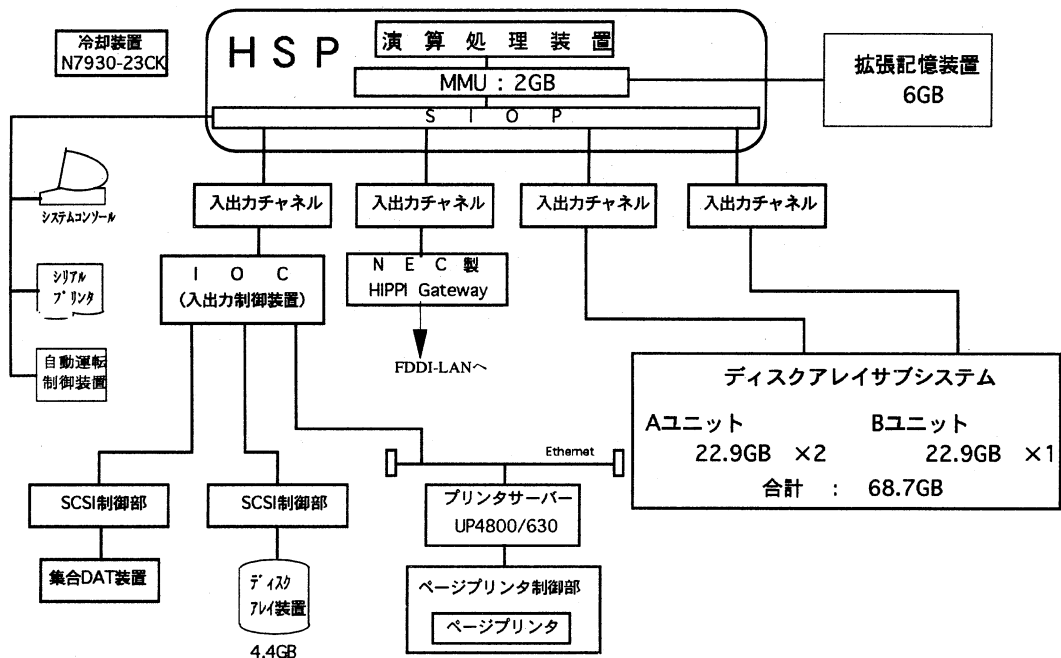


図3.1.2a 高速演算サーバシステム

◆演算クラスタシステム(IBM製 SP2)

- SP2では、ジョブ管理(ロードレバラー)、バッチ処理を行っている。
- 48のノードからなるシステムで、各ノードには2GB(総計96GB)の磁気ディスクを有している。

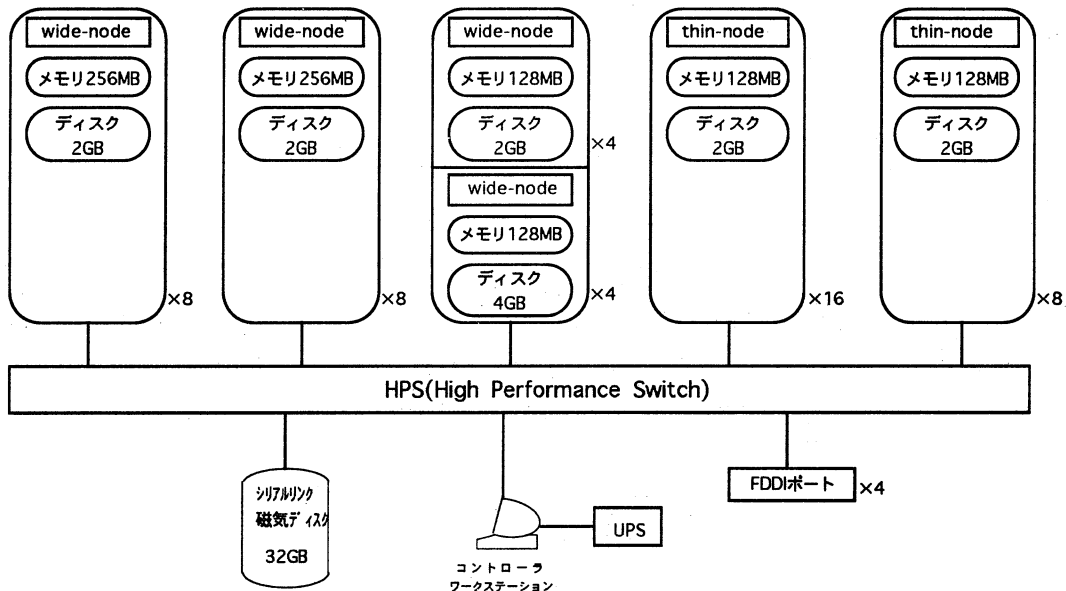


図3.1.2b 演算クラスタシステム

◆スーパーコンピュータシステム(日本電気製 SX-3/34R)

- ・SX-3/34Rではジョブ管理(NQS)、バッチ処理を行っている。
- ・大容量のCGMT装置(270GB)を用意し、所外の遠隔地ユーザの便に共している。
- ・約34.2GBの磁気ディスクと約91.6GBの磁気アレイディスクの総容量約126GBを有している。
- ・約790GBの光磁気ディスク(書換可能)を用意し、磁気ディスクの有効利用を計っている。この光磁気ディスクは、通常の磁気ファイルシステムとして使用している。
- ・動画出力システムによって、スーパーコンピュータの計算結果の視覚化を可能としている。

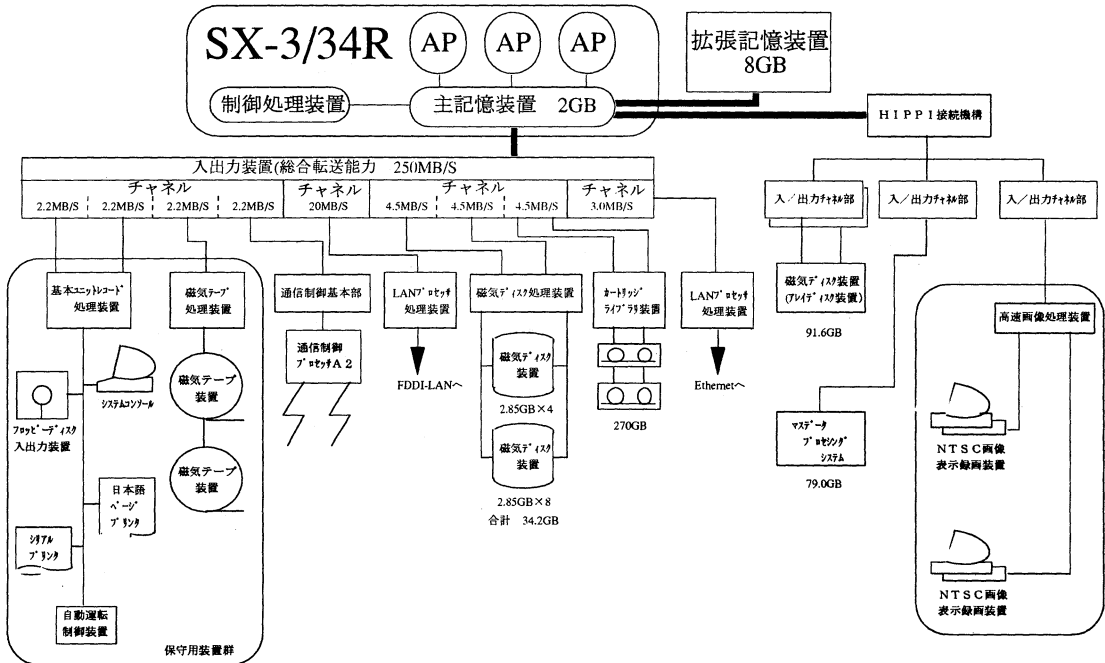


図3.1.2c スーパーコンピュータシステム

3.2 ジョブクラスの構成

3.2.1 平成6年1月4日から平成6年12月31日までのジョブクラス構成

◆M-680H

クラス名	CPU時間 (分)		基本リージョン (MB)		拡張リージョン (MB)		拡張記憶(ES) (MB)	
	最大	標準	最大	標準	最大	標準	最大	標準
A	1	1	7	2	64	4	-	-
B	5	5	7	2	64	4	-	-
C	30	30	7	2	64	4	-	-
D	120	120	7	2	64	4	-	-
E	300	300	7	2	64	4	-	-
F	30	30	7	2	64	4	-	-
G	600	30	7	2	96	4	-	-
TSS	3	3	7	4	32	4	-	-

ただし、Sジョブは許可制である。

◆SX-3/34R

キュー名	CPU時間 (分)	主記憶 (MB)	runlimit	complex	備 考
A	1	256	3	4	A、B併せて多重度が4
B	30	256	3		
C	60	512	2	3	C、D、E併せて多重度が3
D	180	512	2		
E	720	1024	1		
S	4320	2048	1	1	特別申請ジョブ
TSS10	32	32	-	-	

3.2.2 平成7年1月4日から平成7年3月31日までのジョブクラス構成

◆SX-3/34R

(ベクトルジョブ処理)

キュー名	CPU時間 (分)	主記憶 (MB)	多重度	complex	備 考
V	—	—	—	—	V1～V5へのパイプキュー
V1	60	256	3	4	V1、V2併せて多重度が4
V2	180	256	3		
V3	180	512	2	3	V3、V4、V5併せて多重度が3
V4	360	512	2		
V5	720	1	1		
VX	1440	2	1	1	特別申請ジョブ
MDPS	—	—	1	1	
会話処理	5	32	—	—	rshのみ

◆HSP(cchsp)

(高速シリアルジョブ処理)

キュー名	CPU時間 (分)	主記憶 (MB)	多重度	備 考
H	-	-	-	H1～H3へのパイプキュー
H1	180	256	2	
H2	360	256	2	
H3	360	512	2	
会話処理	180	128	2	

◆ISS(ccibm)

(会話処理専用)

キュー名	CPU時間 (分)	主記憶 (MB)	多重度	ノード数	備 考
-	180	64	-	3	(IBM Power Station 590)

◆SP2(ccsp2)

(シリアルジョブ処理)

キュー名	CPU時間 (分)	主記憶 (MB)	多重度	ノード数	備 考
S1	720	128	6	6	THIN
S2	720	256	8	8	WIDE
S3	2880	128	6	6	THIN
S4	2880	256	8	8	WIDE

(並列ジョブ処理)

キュー名	CPU時間 (分)	主記憶 (MB)	多重度	ノード数	備 考
P1	1440	128	1	12	THIN
P2	1440	128	1	7	WIDE

3.2.3 平成7年4月3日以降のジョブクラス構成

◆SX3(super)

(ベクトルジョブ処理)

キュー名	CPU時間 (分)	主記憶 (MB)	多重度	complex	処理開始時間	処理終了時間
V	—	—	—	—	V1～V5へのパイプキュー	
V1	60	256	3	4	午前 8 時	午前 1 時
V2	180	256	3			
V3	180	512	2			
V4	360	512	2	3	終日	
V5	720	1024	1			
VX	720	2048	1	1		
V P	420	1024	1	1	午前 1 時	午前 8 時
MDPS	—	—	1	1	—	
会話処理	5	32	—	—		

3.3 利用課金点数

計算機利用の配分のためにプロジェクト課題ごとに利用点数が割り当てられる。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ない。利用点数 P は、次の式に従ってジョブごとに算出される。

3.3.1 平成6年1月4日から平成6年12月31日までの利用課金点数

平成6年1月4日から平成6年12月31日までのユーザ利用課金点数は、下記のP1である。

$$P1 = \text{CPU}_m \times a + (\text{CPU}_{sx} - \text{VPU}_{sx}) \times b + \text{VPU}_{sx} \times c$$

CPU_m : M-680Hの全CPU時間

CPU_{sx} : SX-3/34Rの全CPU時間

VPU_{sx} : SX-3/34Rのベクトル演算器の全CPU時間

パラメータの値は、以下のとおりである。

a: 0.06/sec

b: 0.12/sec

c: 0.12/sec

◆各々の計算機におけるCPU1時間当たりの利用点数は、以下のようになる。

M-680H : 216点

SX-3/34R : 432点

ただし、許可時間はCPU1時間に対し400点が割り当てられる。

3.3.2 平成7年1月4日以降の利用課金点数

平成7年1月4日以降のユーザ利用課金点数は、下記のP2である。

$$P2 = P3 + P4 + P5 + P6$$

P3: SX-3/34Rの利用課金点数

P4: HSPの利用課金点数

P5: SP2(Thin)の利用課金点数

P6: SP2(Wide)の利用課金点数

◆スーパーコンピュータ(SX-3/34R)の利用点数算出法

$$P3 = \text{CPU} \times a' + \text{VPU} \times b'$$

CPU : 全CPU時間

VPU : ベクトル演算器の全CPU時間

パラメータの値は、以下のとおりである。

a' : 0.12/sec

b' : 0.12/sec

◆高速演算サーバシステム(HSP)の利用点数算出法

$$P4 = \text{CPU} \times a''$$

CPU : 全CPU時間

パラメータの値は、以下のとおりである。

a'' : 0.03/sec

◆演算クラスタシステム(SP2 Thin)の利用点数算出法

$$P5 = \text{CPU} \times a'''$$

CPU : 全CPU時間

パラメータの値は、以下のとおりである。

a''' : 0.02/sec (平成7年4月3日以降 0.01/secに変更)

◆演算クラスタシステム(Wide)の利用点数算出法

$$P6 = \text{CPU} \times a''''$$

CPU : 全CPU時間

パラメータの値は、以下のとおりである。

a'''' : 0.03/sec (平成7年4月3日以降 0.02/secに変更)

◆各々の計算機システムにおける CPU1時間当たりの利用点数は、次のようになる。

SX-3/34R 432点(ベクトル演算装置も同じ点数)

HSP 108点

SP2(Thin) 72点 (平成7年4月3日以降 36点)

SP2(Wide) 108点 (平成7年4月3日以降 72点)

ただし、許可時間はCPU1時間に対し400点が割り当てられる。

3.4 通信回線・ネットワーク

(1) N-1ネットワーク

計算機センターでは平成元年7月3日より平成6年11月24日まで、N-1TSSのサーバ/ユーザ機能を公開していた。N-1RJE機能の公開は行っていない。当センターは、岡崎国立共同研究機構内に設置されている岡崎ノードとつながっている。

利用できる機関とホスト名称一覧(平成6年10月末現在)

当センターはサーバ/ユーザとして登録している。

当センターのサーバホスト名称 : IMS

機 関 名	ホ ス ト 名	利用形態 (TSS)	使 用 計 算 機 名
北海道大学	HOKKAIDO	ユーザ/サーバ	HITAC M-682H
東北大学	TOHOKU	ユーザ/サーバ	ACOS S-2000
東京大学	TOKYO	ユーザ/サーバ	HITAC M-682H
東京大学	TOKYO1	ユーザ/サーバ	HITAC M-682H
名古屋大学	NAGOYA	ユーザ/サーバ	FACOM M-780/20
京都大学	KYOTO	ユーザ/サーバ	FACOM M-780/30
大阪大学	OSAKA	ユーザ/サーバ	ACOS S-2000
九州大学	KYUSHU	ユーザ/サーバ	FACOM M-780/20
学術情報センター	NACISIS	サーバ	HITAC M-680H
学術情報センター	SIMAIL	サーバ	ACOS S-1000/10
埼玉大学	SAITAMA	ユーザ/サーバ	HITAC M-260K
奈良女子大学	NARAJYO	ユーザ/サーバ	FACOM M-760/6
広島大学	HIRODAI	ユーザ/サーバ	HITAC M-680H
お茶の水女子大学	OCHA	ユーザ	IBM 4381-R24
京都大学化学研究所	KAKEN	ユーザ	FACOM M-380Q
弘前大学	HIROSAKI	ユーザ	ACOS 850/10
大阪府立大学	OFUDAI	ユーザ/サーバ	ACOS 930/10
千葉大学	CHIBA	ユーザ/サーバ	HITAC M-680D
東京大学物性研究所	ISSP	ユーザ/サーバ	FACOM M-380R
熊本大学	KUMAMOTO	ユーザ	FACOM M-780/10Q
愛媛大学	EHIME	ユーザ/サーバ	FACOM M-360AP
静岡大学	SUIPC	ユーザ/サーバ	平成6年1月1日付けで接続解除
豊橋技術科学大学	TOYOGI	ユーザ/サーバ	ECLIPSE MV/20000 MODEL1

機 関 名	ホ ス ト 名	利用形態 (TSS)	使 用 計 算 機 名
金城学院大学	KINJO	ユーザ [*] /サ [*] ハ [*]	FACOM M760/4
信州大学	SHIN1	ユーザ [*]	HITAC M-260D
横浜国立大学	YOKO1	ユーザ [*] /サ [*] ハ [*]	HITAC M-280D
電気通信大学	UEC	ユーザ [*]	IBM 3090/180S
東洋大学(川越校舎)	TOYOK	ユーザ [*]	ECLIPSE MV/2500D
岡山理科大学	OKARIDAI	ユーザ [*] /サ [*] ハ [*]	FACOM M-380
東京工業大学	KODAI	ユーザ [*] /サ [*] ハ [*]	HITAC M-640/20E
奈良教育大学	NARAKYO	ユーザ [*]	ECLIPSE MV/9500
金沢大学	KANAZAWA	ユーザ [*] /サ [*] ハ [*]	FACOM M-760/20
岐阜大学	GIFUDAI	ユーザ [*] /サ [*] ハ [*]	FACOM M-760/6
岡山大学	OKAYAMA	ユーザ [*] /サ [*] ハ [*]	ACOS 2010
宮崎大学	MIYAZAKI	ユーザ [*] /サ [*] ハ [*]	FACOM M-760/6
大阪工業大学	DAIKODAI	ユーザ [*] /サ [*] ハ [*]	FACOM VP-50E
東京都立大学	TORITU	ユーザ [*]	IBM 3090-30J
富山大学	TOYAMA	ユーザ [*]	IBM 3081-KX4
関西学院大学	KWANSEI	ユーザ [*]	HITAC M-680H

(2) 東京大学理学部国際理学ネットワーク(TISN)

平成3年度よりTISNに加入し、国内外のインターネットへの接続を可能にしている。サービス内容はIPプロトコルによる通信で、リモートログイン(TELNET)、ファイル転送(FTP)、電子メール(SMTP)などである。計算機センターにおいても東京大学理学部と64Kbpsで接続され、そこを經由してアメリカ、ヨーロッパ、オーストラリアなどに接続されている。これにより計算機センター内の大型計算機(M-680H、SX-3/34R、HSP、SP2)にもK2000/KNET、LIC装置を經由して接続出来るようになった。TSSのフルスクリーン利用も容易である。

(3) BITNET

平成3年6月より行われてきたM-680HによるBITNETのサービスを、平成6年11月24日をもって終了した。

公衆網、DDX、ISDNサービス

	通信速度	回線数	手順	電話番号
電話回線	1200bos(V.22)	2	TTY	0564-53-6113(代)
DDX回線	9600bps	2	TTY	63-060-5722107
ISDN回線	9600bps(Bch)	2	TTY	0564-57-1170,1171

DDX回線は物理的には1回線しかないが、論理的に多重化しているために15端末まで同時に接続可能になっている。

(4) 構内通信回線、ローカルエリアネットワーク

構内データ交換機

ポートセクタの老朽化に伴い、ISDN対応のデータ交換機を設置し、順次移行を行っている。また、岡崎国立共同研究機構においてもデジタルPBXが設置され、機構内のデジタル電話からのアクセスも可能である。

	通信速度	回線数	手順	電話番号
ISDN回線	9600bps	2	TTY	7164,7172,7176
機構DPBX	9600bps	10	TTY	内線 7270 (代)

4 一般報告

4.1 分子研ライブラリプログラムの収集と開発

平成6年度のライブラリ開発計画を表4.1.1に示す。開発されたライブラリは新規プログラムの登録あるいは既存プログラムの改良・発展というかたちでユーザに公開される。

表4. 1. 1 平成6年度分子研ライブラリプログラム開発作業一覧

名前	所属	職名	内 容
秦野 雷世	中京大	教授	分子軌道、電子密度の図形表示システム JAPIC3
今村 詮 青木小百合	広島大	教授 助手	BAND1 プログラムの次期汎用機へのコンバージョン
山本茂義	中京大	助教授	ab initio 分子軌道法による RHF プログラム JAMOL4 の IBM RS6000 への移植
山本茂義	中京大	助教授	CASSCF プログラム JASON2 の IBM RS6000 への移植
遠藤勝義	大阪大	助教授	第一原理分子動力学シミュレーションプログラムの開発
関谷雅弘	北大	助手	プログラム ATOMCI の開発
児玉 健	総研大	大学院生	新電算塔端末室における Sony News と Macintosh の協調分散環境のためのツールの開発と整備
中田恭子	お茶大	大学院生	新汎用機システムのための Mosaic 用 QCLDB のインターフェイス開発
渡辺秀和	総研大	大学院生	95年版 Columbus プログラムの SP2 への移植

平成6年1月より新しいスーパーコンピュータ SX-3 (NEC製) が稼働し始めたのに伴い、平成5年度に S-820 のプログラムライブラリの一部を、SX-3 で実行できるようにコンバート作業を行った。また、平成7年1月より汎用計算機の HSP (NEC製) 及び、SP2 (IBM製) が稼働を始めたので、ユーザーの希望に従い、一部を HSP、もしくは SP2 で実行できるようにした。

M680 からコンバートした分子科学プログラムパッケージは以下の15件である。

<HSP版> : 4件

colmbs2 COLUMBUS: a program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc.
 gamess general atomic and molecular electronic structure system
 meld program for many electron description
 mm2 molecular mechanics calculation by MM2 force field model

<SP2版> : 11件

assign assign diagram for the assignment of vib-rot spectra
 band1 extended HUCKEL calculations of one-dimensional polymers
 bc3 Vibrational and rotational spectroscopy
 bgstr3 BIGSTRN3: a general purpose empirical force field program
 cndos CNDO/S-CI: modified CNDO and CI method
 jamol4 ab initio LCAO MO SCF calculation
 jason2 CASSCF calculation with large basis set

mm2	molecular mechanics calculation by MM2 force field model
series	LOOMIS-WOOD diagram for finding line series
unics3	universal crystallographic computation program system
wigner	magnitudes of 3-J and 6-J symbols

また、平成6年度に新規登録した分子科学プログラムパッケージは以下の8件である。

< S X 3 版 >

meld	program for many electron description
jamol4	ab initio LCAO MO SCF calculation
jason2	CASSCF calculation with large basis set

< H S P 版 >

g92	GAUSSIAN92: ab initio molecular orbital calculations.
hondo8	HONDO version 8.5: ab initio MO calculation
mopac7	MOPAC version 7: a general molecular orbital package

< S P 2 版 >

g92	GAUSSIAN92: ab initio molecular orbital calculations
hondo8	HONDO version 8.5: ab initio MO calculation

よって、現在登録されているライブラリプログラムは総件数36である。

表4.1.2 プログラムライブラリ一覧

==== IMS PROGRAM LIBRARY ====

**** SX-3 VERSION ****

PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
amos	AMOSS
colmb1	COLUMBUS: a program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc.
colmb2	COLUMBUS: a program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc.
crys88	CRYSTAL88: ab initio LCAO-HF program for crystal systems
g92	GAUSSIAN92: ab initio molecular orbital calculations
gamess	general atomic and molecular electronic structure system
hondo7	HONDO version 7: ab initio MO calculation
hondo8	HONDO version 8.5: ab initio MO calculation
jamol4	ab initio LCAO MO SCF calculation
jason2	CASSCF calculation with large basis set
koto	KOTO: ab initio molecular orbital calculations
masphyc	material design system by means of comp. phys. and chem./MD
meld	program for many electron description
mm2	molecular mechanics calculation by MM2 force field model
mopac7	MOPAC version 7: a general molecular orbital package

**** HSP VERSION ****

PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
colmbs2	COLUMBUS: a program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc.
g92	GAUSSIAN92: ab initio molecular orbital calculations
gamess	general atomic and molecular electronic structure system
hondo8	HONDO version 8.5: ab initio MO calculation
meld	program for many electron description
mm2	molecular mechanics calculation by MM2 force field model
mopac7	MOPAC version 7:a general molecular orbital package
colmbs2	COLUMBUS: a program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc.
g92	GAUSSIAN92: ab initio molecular orbital calculations
gamess	general atomic and molecular electronic structure system
hondo8	HONDO version 8.5: ab initio MO calculation
meld	program for many electron description
mm2	molecular mechanics calculation by MM2 force field model
mopac7	MOPAC version 7:a general molecular orbital package

**** SP2 VERSION ****

PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
assign	assign diagram for the assignment of vib-rot spectra
band1	extended HUCKEL calculations of one-dimensional polymers
bc3	Vibrational and rotational spectroscopy
bgstr3	BIGSTRN3: a general purpose empirical force field program
cnDOS	CNDO/S-CI: modified CNDO and CI method
g92	GAUSSIAN92: ab initio molecular orbital calculations
hondo8	HONDO version 8.5: ab initio MO calculation
jamol4	ab initio LCAO MO SCF calculation
jason2	CASSCF calculation with large basis set
mm2	molecular mechanics calculation by MM2 force field model
series	LOOMIS-WOOD diagram for finding line series
unics3	universal crystallographic computation program system
wigner	magnitudes of 3-J and 6-J symbols

**** MISC ****

PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
crystruct	crystruct3/SD
masphyc	material design system by means of comp. phys. and chem./WB

**** SORTED UNIQUE PROGRAMS(SX-3) ****

amos	colmbs1	colmbs2	crys88	g92	gamess
hondo7	hondo8	jamol4	jason2	koto	meld
mm2	mopac7				

**** SORTED UNIQUE PROGRAMS(HSP) ****

colmbs2 g92 gamess hondo8 meld mm2
mopac7

**** SORTED UNIQUE PROGRAMS(SP2) ****

assign band1 bc3 bgstr3 cndos g92
hondo8 jamol4 jason2 mm2 series unics3
wigner

**** SORTED UNIQUE PROGRAMS(MISC) ****

crystruct masphyc

4.2 データベース開発状況

分子研データベースとして現在8件のデータベースが登録されており、汎用計算機であるM680上で公開していたが、平成6年12月の汎用計算機M680の停止に伴い、データベースの新システムへのコンバート作業を行った。

現在公開中のデータベースは以下の1件である。

- ・ QCLDB (量子化学文献データベース)

また、現在公開準備中のデータベースは以下の7件である。

- ・ FCDB (力の定数のデータベース)
- ・ QCBDB (量子化学基底関数データベース)
- ・ MPBDB (モデルポテンシャル関数データベース)
- ・ CMQCA (Carnegie-Mellon 量子化学アーカイブ)
- ・ CHEMICS (有機化合物自動構造解析システム)
- ・ IR2 (赤外線スペクトルデータベース)
- ・ STERIC (立体化学計算プログラム基礎団データベース)

5 平成6年度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	166	572	15951	14156	9958	5662400	3983077
	協力研究	15	23	240	235	54	94000	21559
	所内	36	138	5400	4862	3540	1944800	1415833
生理学	施設利用	4	6	180	131	94	52400	37550
基礎生物学	所内	1	1	10	9	0	3600	0
合計		222	740	21781	19393	13646	7757200	5458019

注)ここでのCPU時間実績は、点数管理の方から(点数/400)を行って逆算したものである。

5.2 システム稼働状況

年月 マシン名	電力量 (KWh)	システム稼働時間 (時)					KW /稼働時間	システム保守時間 (時)					CPU使用時間 (時)				VPU時間 (時)	ジョブ処理件数 (件)			
		M-680	SX-3	HSP	SP2	平均		M-680	SX-3	HSP	SP2	平均	M-680	SX-3	HSP	SP2	SX-3	M-680	SX-3	HSP	SP2
平成6年4月	331,540	715	711	0	0	713	465	4	10	0	0	4	475	1,643	0	0	525	6,095	4,748	0	0
5月	395,060	711	737	0	0	724	546	3	8	0	0	3	339	1,432	0	0	522	5,536	5,519	0	0
6月	358,720	714	708	0	0	711	505	4	11	0	0	4	230	1,493	0	0	642	5,421	8,776	0	0
7月	367,070	708	726	0	0	717	512	4	18	0	0	6	221	960	0	0	248	4,391	3,776	0	0
8月	423,470	737	732	0	0	735	733	4	14	0	0	5	195	1,498	0	0	549	6,216	6,335	0	0
9月	382,610	706	703	0	0	705	704	4	10	0	0	4	469	1,376	0	0	443	4,601	5,886	0	0
10月	325,410	630	620	0	0	625	623	4	10	0	0	4	407	960	0	0	334	2,995	4,295	0	0
11月	341,410	561	710	0	0	636	673	39	10	0	0	12	122	1,234	0	0	430	4,152	5,292	0	0
12月	289,520	240	723	0	0	482	602	0	0	0	0	0	0	1,043	14	0	391	0	3,643	98	0
平成7月1月	386,180	0	742	744	683	371	557	0	2	0	1	1	0	746	596	0	171	0	4,484	925	0
2月	323,780	0	661	658	605	331	496	0	11	14	69	24	0	1,310	491	2934	385	0	4,918	751	2,114
3月	356,900	0	733	731	734	367	550	0	10	13	11	9	0	1,006	531	3056	380	0	3,893	984	1,350
合計	4,281,670	5,722	8,506	2,133	2022	7,114	602	66	114	27	81	72	2,458	14,701	1,632	5,990	5,020	39,407	61,565	2,758	3,464

5.3 CPU使用時間

◆M-680H (平成6年11月24日にて稼働停止)

	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(G)	(O)	(P)	(Q)	(R)	(S)	(X)	(Y)	(Z)	TSS	合計
平成 6年 4月	0:46:50	7:34:18	28:58:46	242:36:04	187:33:16	0:00:00	0:07:59	0:00:00	0:00:00	0:00:26	0:00:00	0:00:00	0:19:24	0:14:45	6:25:20	474:37:08
5月	1:12:41	18:10:54	24:30:25	136:58:18	150:07:38	0:00:00	0:00:59	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:01:13	2:54:53	0:10:10	4:23:23	338:30:34
6月	1:09:52	10:23:16	18:51:52	81:36:22	95:05:10	0:00:00	0:00:04	0:00:00	0:00:00	0:00:09	0:00:00	6:35:52	10:39:26	0:46:02	4:58:55	230:07:00
7月	0:33:09	9:06:44	32:03:13	55:38:52	117:14:28	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:30	0:00:00	0:00:07	1:14:05	0:11:41	4:45:29	220:48:18
8月	1:27:11	42:14:33	39:35:16	38:26:00	58:47:45	0:00:00	0:00:01	0:00:00	0:00:00	0:00:06	0:00:00	3:25:37	4:33:12	0:55:56	5:25:09	194:50:46
9月	0:59:38	16:26:09	54:44:40	53:20:33	337:43:53	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:08	0:00:00	0:02:20	0:14:11	0:10:30	4:51:01	468:33:03
10月	0:20:25	5:42:17	49:04:49	89:58:45	258:20:58	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:04	0:00:00	0:02:24	1:12:29	0:20:19	2:01:42	407:04:12
11月	0:23:34	28:39:30	29:15:21	50:22:52	5:28:22	0:00:00	0:00:01	0:00:00	0:00:00	0:01:00	0:00:00	0:17:35	1:28:54	0:13:40	6:10:35	122:21:24
12月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
平成 7年 1月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
2月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
3月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
合計	6:53:20	138:17:41	277:04:22	748:57:46	1210:21:30	0:00:00	0:09:04	0:00:00	0:00:00	0:02:23	0:00:00	10:25:08	22:36:34	3:03:03	39:01:34	2456:52:25

◆SX-3/34R

	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(S)	(MDPS)	合計
平成 6年 4月	4:22:08	253:33:25	171:50:30	638:24:02	460:00:43	0:00:00	0:00:00	1528:10:48
5月	4:28:52	168:57:05	183:18:01	501:01:40	509:34:20	0:00:00	0:01:07	1367:21:05
6月	8:02:23	289:01:00	197:25:22	464:01:20	469:01:20	0:00:00	0:00:40	1427:32:05
7月	2:20:01	85:12:19	158:46:16	354:20:20	298:36:10	0:00:00	0:00:02	899:15:08
8月	3:34:59	137:11:40	203:33:13	594:48:50	477:13:40	0:00:00	0:00:00	1416:22:22
9月	2:10:38	183:18:37	190:58:32	474:22:50	475:36:40	0:00:00	0:00:00	1326:27:17
10月	2:55:39	90:10:34	134:29:49	303:45:00	380:44:00	0:00:00	0:26:46	912:31:48
11月	1:23:41	108:55:31	136:49:14	423:57:00	507:39:50	0:00:00	2:19:38	1181:04:54
12月	3:05:15	119:10:03	142:42:12	351:29:24	314:11:55	0:00:00	2:40:54	933:19:42
	(V1)	(V2)	(V3)	(V4)	(V5)	(VX)		
平成 7年 1月	62:42:13	120:18:53	74:33:00	165:17:22	257:17:17	0:00:00	0:00:00	680:08:45
2月	119:45:48	208:35:53	84:48:00	350:07:54	453:19:14	48:17:55	0:00:00	1264:54:44
3月	104:01:47	162:12:56	132:01:43	240:53:09	344:24:47	0:00:00	0:00:00	983:34:22
合計	318:53:24	1926:37:56	1811:15:52	4862:28:51	4947:39:56	48:17:55	5:29:05	13920:42:59

◆HSP (平成7年1月4日より稼働開始)

	(H1)	(H2)	(H3)	合計
平成 6年 4月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
5月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
6月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
7月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
8月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
9月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
10月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
11月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
12月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
平成 7年 1月	115:16:46	179:31:41	181:38:20	476:26:47
2月	99:25:32	165:49:30	194:51:32	460:06:34
3月	68:33:38	230:18:38	193:12:28	492:04:44
合計	283:15:56	575:39:49	569:42:20	1428:38:05

◆SP2 (平成7年1月4日より稼働開始。ただし平成7年1月分データ未採取)

	(S1)	(S2)	(S3)	(S4)	(P1)	(P2)	合計
平成 6年 4月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
5月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
6月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
7月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
8月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
9月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
10月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
11月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
12月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
平成 7年 1月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
2月	367:42:19	347:37:00	673:03:56	657:52:58	335:47:30	89:32:03	2471:25:46
3月	143:19:29	367:45:57	627:37:48	1499:04:26	198:59:30	219:05:22	3055:34:52
合計	511:01:48	715:22:57	1300:41:44	2156:40:44	534:36:00	308:37:25	5527:00:38

5.4 VPU使用時間

◆SX-3/34R

	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(S)	(MDPS)	合計
平成 6年 4月	1:06:35	103:48:10	47:42:20	206:58:14	138:37:30	0:00:00	0:00:00	498:12:49
5月	0:30:18	51:24:57	44:03:45	219:22:38	186:24:06	0:00:00	0:00:00	501:45:44
6月	1:12:11	102:50:10	81:46:09	163:35:33	241:59:39	0:00:00	0:00:00	591:23:42
7月	0:29:05	26:47:33	54:34:09	111:18:56	53:27:37	0:00:00	0:00:00	246:37:20
8月	1:11:33	27:18:11	66:13:34	203:18:36	241:13:28	0:00:00	0:00:00	539:15:22
9月	0:32:48	35:18:52	57:15:36	180:20:43	166:16:26	0:00:00	0:00:00	439:44:25
10月	0:32:46	21:16:27	50:35:54	114:34:34	141:29:24	0:00:00	0:18:12	328:47:17
11月	0:07:49	25:03:03	59:27:59	138:24:15	184:25:30	0:00:00	1:14:33	408:43:09
12月	0:10:15	67:13:25	86:35:19	150:26:48	67:33:03	0:00:00	1:44:36	373:43:26
	(V1)	(V2)	(V3)	(V4)	(V5)	(VX)		
平成 7年 1月	16:30:16	35:14:28	25:23:00	34:29:05	56:46:08	0:00:00	0:00:00	168:22:57
2月	22:45:04	83:39:46	26:57:13	121:43:47	123:58:45	0:30:16	0:00:00	379:34:51
3月	23:20:49	87:39:48	70:39:30	91:38:52	107:00:16	0:00:00	0:00:00	380:19:15
合計	68:29:29	667:34:50	671:14:28	1736:12:01	1709:11:52	0:30:16	3:17:22	4856:30:17

5.5 ジョブ処理件数

◆M-680H (平成6年11月24日にて稼働停止)

	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(G)	(O)	(P)	(Q)	(R)	(S)	(X)	(Y)	(Z)	TSS	合 計
平成 6年 4月	816	419	281	471	79	0	13	0	0	9	0	2	57	34	3914	6095
5月	790	710	414	280	87	0	7	1	0	3	0	7	54	23	3143	5519
6月	726	547	297	236	59	0	2	0	0	6	0	16	82	55	3395	5421
7月	447	446	390	188	48	0	0	0	0	10	0	19	78	21	2744	4391
8月	1042	1191	446	179	58	0	4	5	0	2	0	41	102	29	3117	6216
9月	665	606	548	113	78	0	0	2	0	7	0	13	40	20	2509	4601
10月	453	241	362	131	54	0	1	1	0	9	0	5	43	21	1674	2995
11月	195	646	308	112	1	0	8	0	0	16	0	8	46	20	2792	4152
12月	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
平成 7年 1月	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2月	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3月	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
合 計	5134	4806	3046	1710	464	0	35	9	0	62	0	111	502	223	23288	39390

◆SX-3/34R

	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(S)	(MDPS)	合 計
平成 6年 4月	996	2467	584	542	159	0	0	4748
5月	1805	2363	651	498	142	0	77	5536
6月	1941	4883	1241	538	124	0	49	8776
7月	585	1383	1020	655	131	0	2	3776
8月	1651	2756	1016	755	157	0	0	6335
9月	828	3004	1442	473	139	0	0	5886
10月	735	1969	987	424	140	0	40	4295
11月	421	2983	1017	626	190	0	55	5292
12月	755	1434	646	614	108	0	86	3643
	(V1)	(V2)	(V3)	(V4)	(V5)	(VX)		
平成 7年 1月	2375	1341	451	219	98	0	0	4484
2月	2848	1332	370	207	153	8	0	4918
3月	2296	696	547	167	187	0	0	3893
合 計	17236	26611	9972	5718	1728	8	309	61582

◆HSP (平成7年1月4日より稼働開始)

	(H1)	(H2)	(H3)	合 計
平成 6年 4月	0	0	0	0
5月	0	0	0	0
6月	0	0	0	0
7月	0	0	0	0
8月	0	0	0	0
9月	0	0	0	0
10月	0	0	0	0
11月	0	0	0	0
12月	84	1	13	98
平成 7年 1月	659	154	112	925
2月	418	193	140	751
3月	655	174	155	984
合 計	1,816	522	420	2,758

◆SP2 (平成7年1月4日より稼働開始。ただし平成7年1月分データ未採取)

	SP2	(S1)	(S2)	(S3)	(S4)	(P1)	(P2)	(P3)	合 計
平成 6年 4月	0	0	0	0	0	0	0	0	0
5月	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6月	0	0	0	0	0	0	0	0	0
7月	0	0	0	0	0	0	0	0	0
8月	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9月	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10月	0	0	0	0	0	0	0	0	0
11月	0	0	0	0	0	0	0	0	0
12月	0	0	0	0	0	0	0	0	0
平成 7年 1月	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2月	890	435	116	336	111	226	0	0	2,114
3月	422	386	59	190	85	208	0	0	1,350
合 計	1,312	821	175	526	196	434	0	0	3,464

5.6 通信回線・ネットワークの利用状況(セッション数)

5.6.1 N1ネットワークの利用状況

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	合 計
北海道大学	47	11	2	4	14	33	10	9	130
東北大学	0	0	0	0	0	0	0	4	4
東京大学	92	2	14	23	78	96	60	32	397
東京大学1	0	0	0	1	0	0	1	0	2
名古屋大学	9	21	16	9	6	7	3	15	86
京都大学	88	45	30	28	2	37	5	4	239
大阪大学	90	68	87	123	67	19	2	9	465
九州大学	3	5	5	2	0	7	4	0	26
奈良女子大学	10	0	2	0	0	1	0	0	13
広島大学	0	0	0	0	0	9	0	0	9
大阪府立大学	51	4	3	2	0	0	1	0	61
千葉大学	1	0	0	1	0	0	3	0	5
京都大学化学研究所	0	0	0	0	0	0	0	0	0
弘前大学	1	0	0	1	0	0	0	0	2
お茶の水女子大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0
東京大学物性研究所	5	9	5	7	5	3	0	0	34
熊本大学	0	26	0	0	1	0	0	0	27
愛媛大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0
金城学院大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0
豊橋技術科学大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0
信州大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0
横浜国立大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0
電気通信大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0
東洋大学(川越校舎)	0	0	0	0	0	0	0	0	0
岡山理科大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0
東京工業大学	18	6	8	0	0	0	0	0	32
奈良教育大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0
金沢大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0
岐阜大学	0	0	0	1	0	0	0	0	1
岡山大学	5	0	0	0	0	0	0	0	5
宮崎大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0
大阪工業大学	1	0	7	0	0	0	7	0	15
東京都立大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0
富山大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0
関西学院大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0
合 計	421	197	179	202	173	212	96	73	1553

5.6.2 公衆回線(1200bps, V22)の利用状況

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	合 計
回 線 1	74	157	87	30	38	34	41	4	465
回 線 2	0	5	4	0	0	0	0	0	9
合 計	74	162	91	30	38	34	41	4	474

5.6.3 DDXパケット網(9600bps)の利用状況

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	合 計
回 線 1	17	0	22	1	8	0	0	0	48
合 計	17	0	22	1	8	0	0	0	48

5.7 所内ネットワーク・通信回線の利用状況(セッション数)

5.7.1 デジタルPBX(9600bps)の利用状況

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	合 計
回 線 1	5	4	6	5	5	9	5	3	42
回 線 2	22	0	1	0	0	0	0	0	23
回 線 3	99	161	77	61	6	4	1	0	409
回 線 4	8	11	11	11	8	0	0	0	49
合 計	134	176	95	77	19	13	6	3	523

5.7.2 構内ポートセクタ(9600bps)の利用状況

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	合 計
回 線 1	101	13	154	2	0	20	0	0	290
回 線 2	11	0	8	0	0	4	0	0	23
合 計	112	13	162	2	0	24	0	0	313

5.7.3 構内ポートセクタ(1200bps)の利用状況

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	合 計
回 線 1	7	0	6	0	0	0	0	0	13
合 計	7	0	6	0	0	0	0	0	13

5.7.4 telnet、ftpの利用状況

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	合 計
フルスクリーン・モード	856	688	687	706	732	465	507	575	5216
ライン・モード	1565	1433	1617	1140	1318	1202	699	1564	10538
合 計	2421	2121	2304	1846	2050	1667	1206	2139	15754

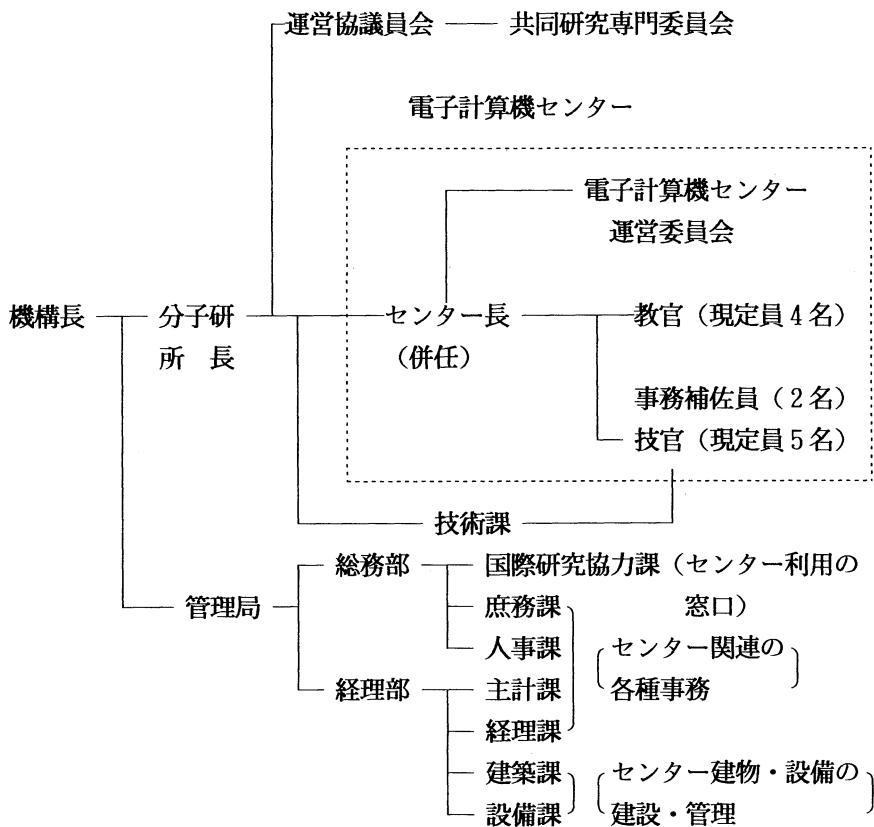
6. 資料

6. 1 センター関連組織

センター関連組織は下図に示す通りである。

課題・協力研究の運営は運営協議員会及びその共同研究専門委員会で
行われている。

電子計算機センター運営委員会の規則と委員については資料6. 2、6. 3、
6. 4を参照されたい。



6. 2 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター規則

〔昭和56年4月14日〕
分子研規則第4号

最終改正 昭和62年3月30日

岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター規則

(目的)

第1条 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター（以下「センター」という）は、センターの大型計算機システムを分子科学の大型計算等のために分子科学 研究所内外の研究者の利用に供するとともに、これに必要な研究開発を行い、かつ、岡 崎国立共同研究機構に置かれる研究所の研究に関する計算を処理することを目的とする（職員）

第2条 センターに、次の職員を置く。

- 一 センター長
- 二 助教授
- 三 助手
- 四 その他必要な職員

(センター長)

第3条 センター長は、分子科学研究所の教授又は助教授をもって充てる。

2 センター長は、センターの業務を掌理する。

(運営委員会)

第4条 分子科学研究所に、センターの管理運営に関する重要事項を審議し、分子科学研 究所長の諮問に応じるため、分子科学研究所電子計算機センター運営委員会（以下「運 営委員会」という）を置く。

2 運営委員会の組織及び運営に関し必要な事項は、分子科学研究所長が定める。

附 則

この規則は、昭和56年4月14日から施行する。

附 則（昭和62年分子研規則第1号）

この規則は、昭和62年4月1日から施行する。

6. 3 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター運営委員会
規則

〔昭和56年4月14日〕
分子研規則第9号

最終改正 昭和62年3月30日

岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター運営委員会規則

(目的)

第1条 この規則は、岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター規則(昭和56年分子研規則第4号)第4条第2項の規定に基づき、分子科学研究所電子計算機センター(以下「センター」という)の運営委員会の組織及び運営に関し必要な事項を定めることを目的とする。

(組織)

第2条 運営委員会は、次の各号に掲げる委員をもって組織する。

- 一 センター長
 - 二 センターの助教授
 - 三 分子科学研究所の教授又は助教授2名
 - 四 基礎生物学研究所及び生理学研究所の教授又は助教授各1名
 - 五 岡崎国立共同研究機構の職員以外の分子科学に関する学識経験者4名
- 2 前号第3号から第5号に掲げる委員は、分子科学研究所長が委嘱する。

(任期)

第3条 前項第3条から第5条に掲げる委員の任期は、2年とし、再任を妨げない。

ただし、補欠の委員の任期は、前任者の残任期間とする。

(委員長)

第4条 運営委員会に委員長を置き、センター長をもって充てる。

- 2 委員長は、運営委員会を招集し、その議長となる。
- 3 委員長に事故あるときは、あらかじめ委員長が指名する委員がその職務を代行する。

(議事)

第5条 運営委員会は、委員の3分の2以上の出席がなければ、議事を開き、

議決することができない。

(委員以外の者の出席)

第6条 運営委員会は、必要に応じて委員以外のものに出席を求め、意見を聴取することができる。

(庶務)

第7条 運営委員会の庶務は、総務部国際研究協力課において処理する。

付 則

- 1 この規則は、昭和56年4月14日から施行する。
- 2 昭和60年6月1日任命に係る委員の任期は、第3条の規定にかかわらず、昭和62年3月31日までとする。

付 則(昭和60年分子研規則第3号)

この規則は、昭和60年4月1日から施行する。

付 則(昭和62年分子研規則第2号)

この規則は、昭和62年4月1日から施行する。

6. 4 電子計算機センター運営委員会委員

(平成6年度)

岩 田 末 廣	分子研理論研究系教授、センター長	センター委員
青 柳 睦	分子研電子計算機センター助教授	〃
中 村 宏 樹	分子研理論研究系教授	分子研所内委員
小 杉 信 博	分子研極端紫外光科学研究系教授	〃
岡 田 勲	東工大教授	分子研所外委員
中 辻 博	京大教授	〃
山 口 兆	阪大教授	〃
里 子 允 敏	日大助教授	〃
上 野 孝 治	基生研産生生物学研究系助教授	基生研委員
巨 弘	生理研分子生理研究系教授	生理研委員

(平成7年度)

岩田末廣	分子研理論研究系教授、センター長	センター委員
青柳睦	分子研電子計算機センター助教授	”
中村宏樹	分子研理論研究系教授	分子研所内委員
小杉信博	分子研極端紫外光科学研究系教授	”
片岡洋右	法大教授	分子研所外委員
永瀬茂	都立大教授	”
山口兆	阪大教授	”
里子允敏	日大助教授	”
上野孝治	基生研産生生物学研究系助教授	基生研委員
小松英彦	生理研生体調節系教授	生理研委員

6. 5 電子計算機センター職員 (平成8年1月現在)

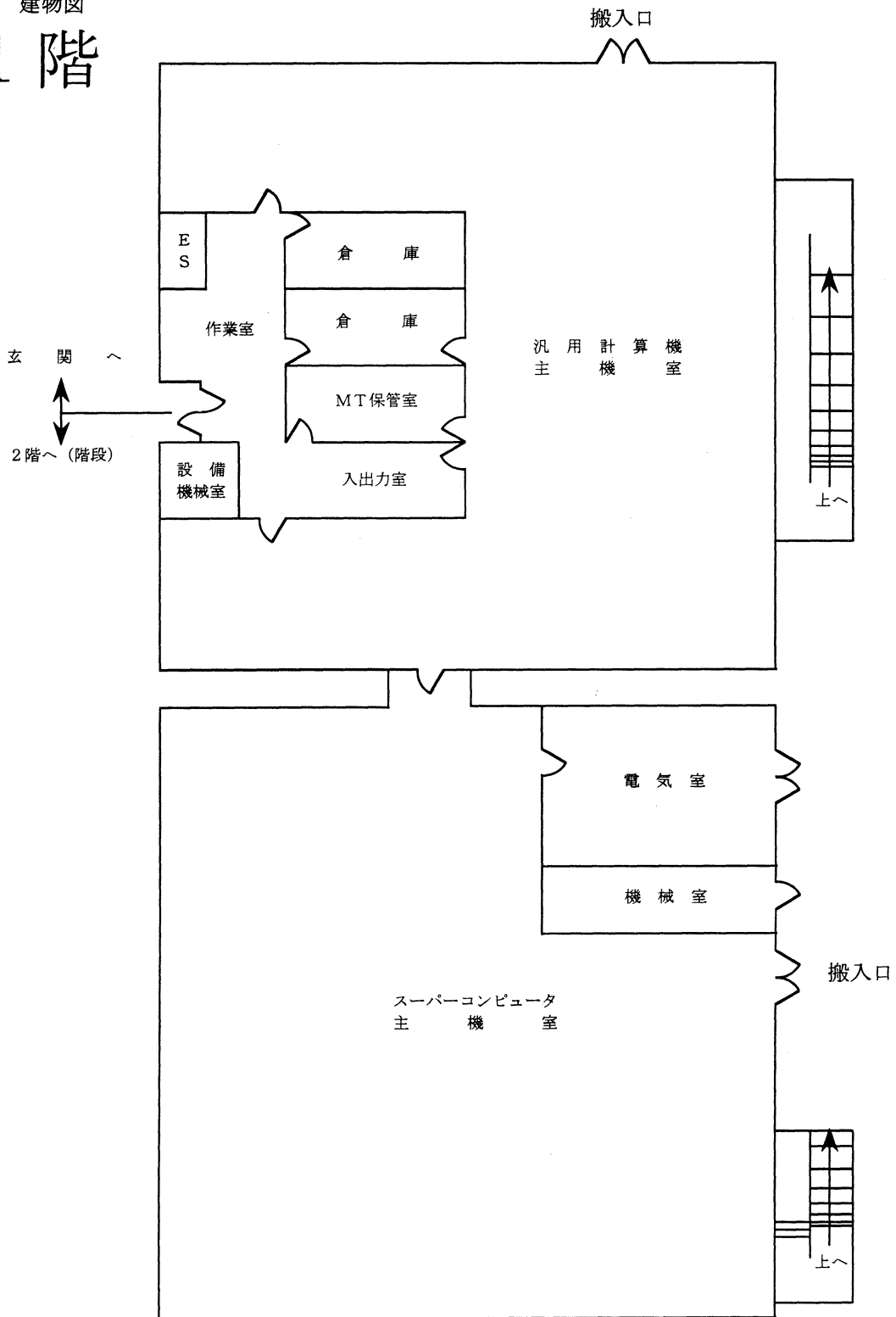
岩田末廣	センター長 (併任、平成6年4月1日より)
青柳睦	助教授
南部伸孝	助手
高見利也	助手
茂木孝一	非常勤研究員 (平成7年5月15日より)
南野智	技官
西本史雄	技官 (班長)
水谷文保	技官 (平成7年4月1日より)
手島史綱	技官
内藤茂樹	技官 (平成7年4月1日より)
加納聖子	事務補佐員
齊藤敦子	事務補佐員

6. 6 応用プログラム相談員一覧

小江誠司 総研大大学院生 平成6年 6月～平成7年1月

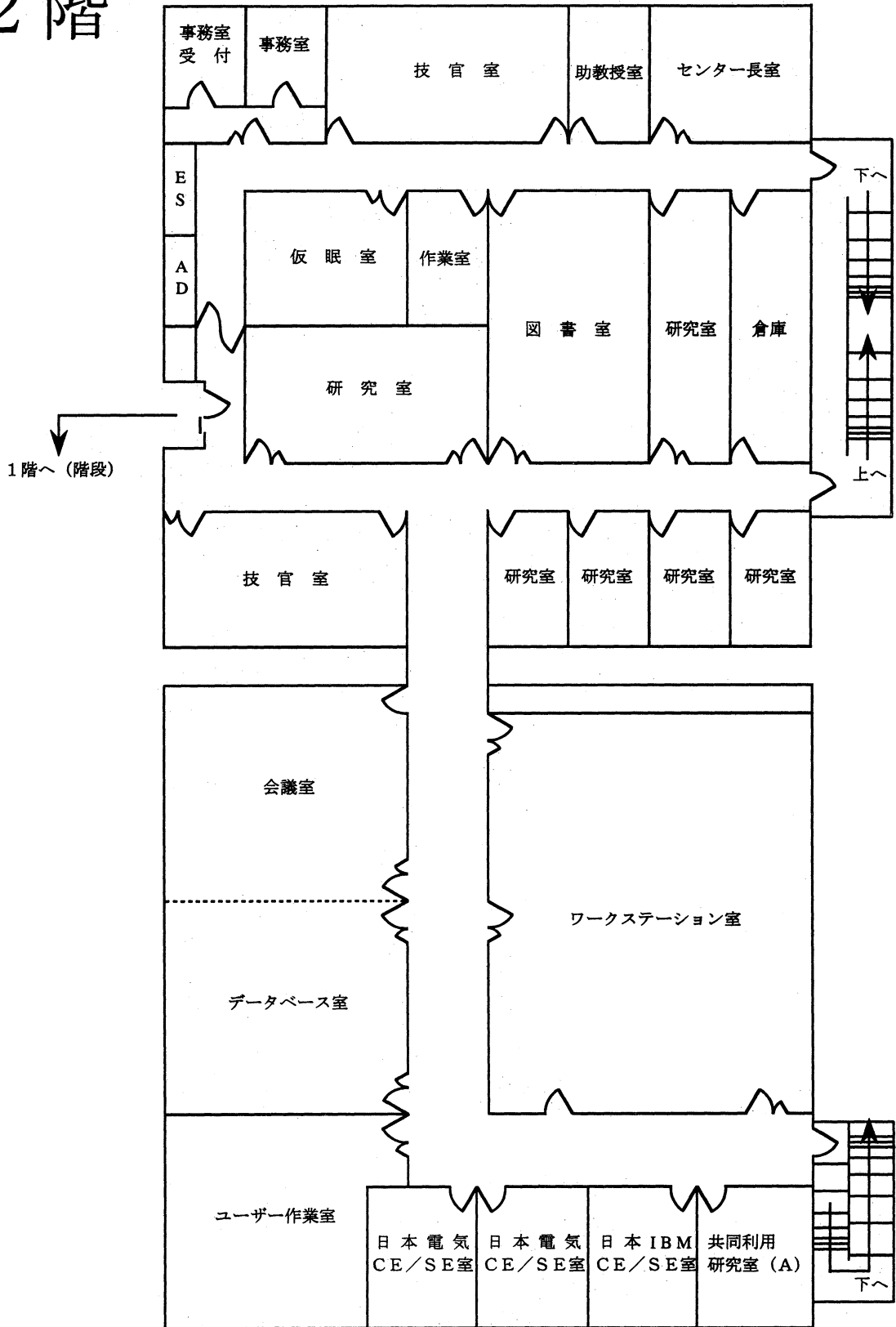
6.7 建物図

1階



1階はセンターの業務に関わる作業室と計算機システムの主機室のみ

2階



6.8 マニュアルの紹介と購入方法

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、実験棟と南実験棟の端末室においてありますが、個人での購入を希望される時の申し込み先は次のとおりです。

<SX-3/34RおよびHSP用マニュアルの購入申込先>

〒460 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第二販売部
担当 城(たち)、伊佐治
電話 052-222-2121

(注)SX-3/34R用の最新版マニュアルはHSPと共通化されています。

<SP2用マニュアルの購入申込先>

〒460 名古屋市中区錦3丁目1番1号 十六銀行名古屋ビル
日本アイ・ピーエム株式会社 中部システム事業部第二営業部
担当 山岡
電話 052-954-3127

SX-3/34R用(日本語)マニュアル

- (1) 利用者の手引
オペレーティングシステム SUPER-UX (以下 SUPER-UX とする)の一般利用者が使用できる機能について説明したものです。
- (2) コマンド操作ハンドブック
SUPER-UX が一般利用者に対して提供している UNIX の基本コマンドについて説明したものです。
- (3) 日本語機能利用の手引
SUPER-UX における日本語の取り扱いについて説明したものです。
- (4) プログラミングの手引
SUPER-UX におけるプログラムの作成方法および作成環境について説明したものです。
- (5) プログラミングハンドブック
SUPER-UX がプログラマに対して提供している UNIX の基本機能について説明したものです。
- (6) バッチ処理利用の手引
SUPER-UX でのバッチ処理の方法について説明したものです。SUPER-UX のバッチ処理は NQS(Network Queuing System)により実現されます。
- (7) 言語支援機能利用の手引
SUPER-UX の C ライブラリ、各種プログラム開発支援ツール、および systemV の共通オブジェクトファイル形式である COFF について説明したものです。
- (8) C プログラミングの手引
SUPER-UX の C 言語について説明したものです。
- (9) FORTRAN77/SX 言語説明書
SUPER-UX の FORTRAN77/SX 言語の文法について説明したものです。
- (10) FORTRAN77/SX プログラミングの手引
SUPER-UX の FORTRAN77/SX の使用方法について説明したものです。

- (11) FORTRAN77/SX 並列処理機能利用の手引
SUPER-UX の FORTRAN77/SX で処理できる、並列処理機能のプログラミングについて説明したものです。
- (12) PHIGS PLUS プログラミングの手引
PHIGS(Programmer's Hierarchical Interactive Graphics System : 階層的グラフィックシステム)について説明したものです。本ライブラリは ISO と IEC の PHIGS 規格(ISO/IEC9592-1 および 9592-4)の仕様に準拠したもので、図形の表示と図形データの管理を明確に分離し、図形データの基本要素単位での追加、削除、置換などの編集を可能にしています。また、図形データは階層構造をしており、複雑な形状でも容易に構築することを可能としています。さらに、高度なライティング機能やシェーディング機能を強化しています。
- (13) ANALYZER-P/SX 利用の手引
SUPER-UX の ANALYZER-P/SX の使用方法について説明したものです。
- (14) PARALLELIZER/SX 利用の手引
SUPER-UX のもとで動作する PARALLELIZER/SX について説明したものです。
PARALLELIZER/SX は FORTRAN 言語で記述された原始プログラムの静的解析情報や動的解析情報から利用者の要求に従った情報を対話的に提供する X ウィンドウシステム (X.V11R4)対応のプログラム開発ツールです。
- (15) PDBX 利用の手引
SUPER-UX の pdbx の使用方法について説明したものです。pdbx を使用すれば、SUPER-UX 上で動作する利用者プログラムをソースプログラムに記述した変数名や行番号を指定してデバッグすることができます。
- (16) GKS プログラミングの手引
GKS(Graphical Kernel System : 図形処理プログラム)について説明したものです。ISO 規格の GKS(ISO7942)の仕様に準拠したもので、X ウィンドウシステム (X Window System)をサポートしています。また、図形処理の保存やシステム間での持ち運びのためにメタファイル機能を提供しています。
- (17) 数値計算ライブラリ MATHLIB/SX V2 利用の手引(概念/機能編)
SUPER-UX のもとで提供される業種共通アプリケーションの一つとして開発された数値計算ライブラリ MATHLIB/SX V2(MATHematical LIBrary/SX Version2)の概念、機能について説明したものです。
- (18) 数値計算ライブラリ MATHLIB/SX V2 利用の手引(アルゴリズム編)
SUPER-UX のもとで提供される業種共通アプリケーションの一つとして開発された数値計算ライブラリ MATHLIB/SX V2(MATHematical LIBrary/SX Version2)の各サブルーチンの計算方法について説明したものです。
- (19) 数値計算ライブラリ MATHLIB/SX V2 例題集
SUPER-UX のもとで提供される業種共通アプリケーションの一つとして開発された数値計算ライブラリ MATHLIB/SX V2 (MATHematical LIBrary/SX Version2) の基本的な使用例を集めたものです。
- (20) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(基本機能編 第 1 分冊)
SUPER-UX のもとで提供される、業種共通アプリケーションの一つとして開発された科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2(Advanced Scientific Library/SX Version2)の概念、機能、利用方法などについて説明したものです。第 1 分冊は、基本行列演算、連立一次方程式(直接法)、連立一次方程式(反復法)について説明したものです。
- (21) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(基本機能編 第 2 分冊)
SUPER-UX のもとで提供される、業種共通アプリケーションの一つとして開発された科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2(Advanced Scientific Library/SX Version2)の概念、機能、利用方法などについて説明したものです。第 2 分冊では、固有値・固有ベクトル、最小二乗法、

高速フーリエ変換(FET)について説明したものです。

- (22) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(基本機能編 第3分冊)
SUPER-UXのもとで提供される、業種共通アプリケーションの一つとして開発された科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2(Advanced Scientific Library/SX Version2)の概念、機能、利用方法などについて説明したものです。第3分冊は、スプライン関数、数値積分、常微分方程式、方程式の根、極値問題・最適化、近似・補間、数値微分について説明したものです。
- (23) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(基本機能編 第4分冊)
SUPER-UXのもとで提供される、業種共通アプリケーションの一つとして開発された科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2(Advanced Scientific Library/SX Version2)の概念、機能、利用方法などについて説明したものです。第4分冊は、特殊関数、乱数について説明したものです。
- (24) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(高速機能編)
SUPER-UXのもとで提供される、業種共通アプリケーションの一つとして開発された科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2(Advanced Scientific Library/SX Version2)の概念、機能、利用方法などについて説明したものです。高速機能編は、行列のデータ格納変換、連立一次方程式(直接法)、対称連立一次方程式(直接法)、対称一次方程式(反復法)、非対称連立一次方程式(反復法)、固有値・固有ベクトル、最小二乗法、高速フーリエ変換(FET)、スプライン関数、3次元境界要素法用の数値積分について説明したものです。
- (25) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(並列処理機能編)
SUPER-UXのもとで提供される、業種共通アプリケーションの一つとして開発された科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2(Advanced Scientific Library/SX Version2)の概念、機能、利用方法などについて説明したものです。基本行列演算、連立一次方程式(直接法)、高速フーリエ変換(FET)について説明したものです。

SX-3/34R用(English)マニュアル

- (1) User's Guide
This book explains the components that make up SUPER-UX Operating System environment.
- (2) User's Reference Manual
This book describes commands and application programs available to users of the SUPER-UX operating system. If users are not already familiar with the SUPER-UX operating system, they can refer to the SUPER-UX User's guide for details.
- (3) Programmer's Guide
This book describes programming methods for the SUPER-UX environment.
- (4) Programmer's Reference Manual
This book describes commands and application programs available to users of the SUPER-UX operating system. If users are not already familiar with the SUPER-UX operating system, they can refer to the SUPER-UX User's Guide for details.
- (5) NQS User's Guide
This book explains how to create batch transactions using the Network Queueing System(NQS) on the SUPER-UX operating system.
- (6) Programming Language Support Reference Manual
This book describes the SUPER-UX C library and various programming tools.
- (7) C Programmer's Guide
This book describes the C language compilers available for the SUPER-UX operating system.
- (8) FORTRAN77/SX Language Reference Manual
This book explains FORTRAN77/SX, the FORTRAN77 language used under the SUPER-UX

software. FORTRAN77/SX conforms to the International Standard ISO 1539-1980 and American National Standard ANSI X3.9-1978 full language FORTRAN (also called FORTRAN77). A variety of extended functions is included with FORTRAN77/SX

(9) FORTRAN77/SX Programmer's Guide

This book describes the FORTRAN77/SX compiler for the SUPER-UX operating system. This manual focuses on the FORTRAN77/SX features that improve program performance.

(10) FORTRAN77/SX Multitasking User's Guide

This book is a multitasking programmer's guide for the FORTRAN77/SX running on the SUPER-UX Operating System. This guide provides information ranging from the basic knowledge required for multitasking to high-level multitasking applications.

(11) PHIGS PLUS Programmer's Guide

This book explains the Programmer's Hierarchical Interactive Graphics System (PHIGS). The PHIGS library is based on the PHIGS specifications of the International Organization for Standardization (ISO) and International Electrotechnical Commission (IEC). It divides graphics display from the management of graphics data. Graphical primitives can be edited using addition, deletion, and rearrangement functions. Graphical data in the library is structured hierarchically, allowing complicated shapes to be constructed simply.

(12) ANALYZER-P/SX Reference Manual

This book explains the ANALYZER-P/SX, a FORTRAN program analysis tool for performance improvement.

(13) PARALLELIZER/SX Reference Manual

This book explains the PARALLELIZER/SX, a programming support tool to enable high-speed processing using vectorization and parallelization in the X window environment.

(14) DBX User's Guide

This book explains how to use DBX on the SUPER-UX operating system. dbx allows user programs operating on SUPER-UX to be debugged by specifying variable names and line numbers described in the debug source program. dbx supports the following program languages.

(15) PDBX User's Guide

This book explains how to use pdbx on the SUPER-UX operating system. pdbx allows user programs operating on SUPER-UX to be debugged specifying variable names and line numbers described in the debug source program. pdbx supports the following program languages:

(16) GKS Programmer's Guide

This book describes the NEC SX Series supercomputer implementation of the Graphical Kernel System (GKS). GKS is a standard set of FORTRAN77 subroutines and C functions, adopted by the International Organization for Standardization (ISO), that can be invoked by an application program to perform computer graphics tasks. GKS subroutines and functions enable an application program to

(17) Mathematical Library/SX V2 User's Guide (Functional Description)

This book describes the general concepts and functions of the Mathematical Library/SX Version 2 (MATHLIB/SX V2), which was developed as one of the interdisciplinary applications offered under the SUPER-UX operating system.

(18) Mathematical Library/SX V2 User's Guide (Algorithms)

This book describes the algorithms of subroutines of the Mathematical Library/SX Version 2 (MATHLIB/SX V2), which was developed as one of the interdisciplinary common applications serviced under the SUPER-UX operating system.

(19) Mathematical Library/SX V2 User's Guide (Examples)

This book describes the general concepts and functions of the Mathematical Library/SX Version 2 (MATHLIB/SX V2), which was developed as one of the interdisciplinary common applications

offered under the SUPER-UX operating system.

(20) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Basic Functions Vol.1)

This book describes general concepts, functions, and methods of using the Advanced Scientific Library/SX Version 2(ASL/SX V2), which was developed as one of the interdisciplinary common applications offered under the SUPER-UX operating system.

This manuals corresponding to this product consist of six volumes, which are divided into the chapters shown below. This book describes the basic functions of volume 1.

(21) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Basic Functions Vol.2)

This book describes general concepts, functions, and methods of using the Advanced Scientific Library/SX Version 2(ASL/SX V2), which was developed as one of the interdisciplinary common applications offered under the SUPER-UX operating system.

This manuals corresponding to this product consist of six volumes, which are divided into the chapters shown below. This book describes the basic functions of volume 2.

(22) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Basic Functions Vol.3)

This book describes general concepts, functions, and methods of using the Advanced Scientific Library/SX Version 2(ASL/SX V2), which was developed as one of the interdisciplinary common applications offered under the SUPER-UX operating system.

This manuals corresponding to this product consist of six volumes, which are divided into the chapters shown below. This book describes the basic functions of volume 3.

(23) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Basic Functions Vol.4)

This book describes general concepts, functions, and methods of using the Advanced Scientific Library/SX Version 2(ASL/SX V2), which was developed as one of the interdisciplinary common applications offered under the SUPER-UX operating system.

This manuals corresponding to this product consist of six volumes, which are divided into the chapters shown below. This book describes the basic functions of volume 4.

(24) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Extended Function)

This book describes general concepts, functions, and methods of using the Advanced Scientific Library/SX Version 2(ASL/SX V2), which was developed as one of the interdisciplinary common applications offered under the SUPER-UX operating system.

This manuals corresponding to this product consist of six volumes, which are divided into the chapters shown below. This book describes the extended functions.

(25) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Parallel Processing Functions)

This book describes general concepts, functions, and methods of using the Advanced Scientific Library/SX Version 2(ASL/SX V2), which was developed as one of the interdisciplinary common applications offered under the SUPER-UX operating system.

This manuals corresponding to this product consist of six volumes, which are divided into the chapters shown below. This book describes the parallel processing functions.

HSP用(日本語)マニュアル

- (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) バッチ処理利用の手引
- (7) 言語支援機能利用の手引

- (8) C プログラミングの手引
- (9) C++ 言語説明書
 - SUPER-UX のもとで動作する C++ 言語の言語仕様を説明したものです。
- (10) FORTRAN77/SX 言語説明書
- (11) FORTRAN77/SX プログラミングの手引
- (12) FORTRAN77/SX 並列処理機能利用の手引
- (13) PHIGS PLUS プログラミングの手引
- (14) ANALYZER-P/SX 利用の手引
- (15) PDBX利用 の手引
- (16) GKS プログラミングの手引
- (17) 数値計算ライブラリ MATHLIB/SX V2 利用の手引(概念 / 機能編)
- (18) 数値計算ライブラリ MATHLIB/SX V2 利用の手引(アルゴリズム編)
- (19) 数値計算ライブラリ MATHLIB/SX V2 例題集
- (20) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(基本機能編 第 1 分冊)
- (21) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(基本機能編 第 2 分冊)
- (22) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(基本機能編 第 3 分冊)
- (23) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(基本機能編 第 4 分冊)
- (24) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(高速機能編)
- (25) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引(並列処理機能編)

HSP用(English)マニュアル

- (1) User's Guide
- (2) User's Reference Manual
- (3) Programmer's Guide
- (4) Programmer's Reference Manual
- (5) NQS User's Guide
- (6) Programming Language Support Reference Manual
- (7) C Programmer's Guide
- (8) C++ Language Reference Manual
 - This book describes the C++ language compilers available for the SUPER-UX operating system.
- (9) FORTRAN77/SX Language Reference Manual
- (10) FORTRAN77/SX Programmer's Guide
- (11) FORTRAN77/SX Multitasking User's Guide
- (12) PHIGS PLUS Programmer's Guide
- (13) ANALYZER-P/SX Reference Manual
- (14) DBX User's Guide
- (15) GKS Programmer's Guide
- (16) Mathematical Library/SX V2 User's Guide(Functional Description)
- (17) Mathematical Library/SX V2 User's Guide(Algorithms)
- (18) Mathematical Library/SX V2 User's Guide(Examples)
- (19) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Basic Functions Vol.1)
- (20) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Basic Functions Vol.2)
- (21) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Basic Functions Vol.3)
- (22) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Basic Functions Vol.4)
- (23) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Extended Function)
- (24) Advanced Scientific Library/SX V2 User's Guide(Parallel Processing Functions)

- (1) GC88-6756 (日) AIX V3 コマンド解説書 Vol.1
オペレーティングシステム Advanced Interactive Executive (以下 AIX とする)のコマンドに関する解説情報を収録したものです。各コマンドが実行するタスク、コマンドの変更方法、コマンドによる入出力の処理方法、およびコマンドを実行できるユーザについて説明したものです。(ac~dumpfs)
- (2) GC88-6757 (日) AIX V3 コマンド解説書 Vol.2
オペレーティングシステム Advanced Interactive Executive (以下 AIX とする)のコマンドに関する解説情報を収録したものです。各コマンドが実行するタスク、コマンドの変更方法、コマンドによる入出力の処理方法、およびコマンドを実行できるユーザについて説明したものです。(e~lvlstmajor)
- (3) GC88-6758 (日) AIX V3 コマンド解説書 Vol.3
オペレーティングシステム Advanced Interactive Executive (以下 AIX とする)のコマンドに関する解説情報を収録したものです。各コマンドが実行するタスク、コマンドの変更方法、コマンドによる入出力の処理方法、およびコマンドを実行できるユーザについて説明したものです。(m4~rwhod)
- (4) GC88-6759(日) AIX V3 コマンド解説書Vol.4
オペレーティングシステムAdvanced Interactive Executive (以下AIXとする) のコマンドに関する解説情報を収録したものです。各コマンドが実行するタスク、コマンドの変更方法、コマンドによる入出力の処理方法、およびコマンドを実行できるユーザについて説明したものです。(sa~ypxfr)
- (5) N:GR18-3550 (日) RISC/6000 よく使われるコマンド
AIX で一般利用者がよく使用するコマンドについて説明したものです。
- (6) N:GC23-2200 (日) RISCシステム/6000 V3 ファイル解説書
AIX で使用されるファイルについて説明したものです。このファイル解説書には、AIX、そのサブシステム、および特定のオプションのプログラム製品で使用される様々なシステム・ファイル、ファイル形式、スペシャル・ファイル、ヘッダー・ファイル、およびディレクトリが説明されています。
- (7) N:GC23-2212 (日) RISC/6000 V3.2 編集機能の概念および手順
AIX で使用可能ないくつかのエディタについて説明したもので、その効果的な使用法も説明されています。また、エディタで提供される機能の使用手順についても説明されています。
- (8) SC88-7266 (日) C Set ++ コンパイラ/6000 使用者の手引き V2
AIX のライセンス・プログラムに関する説明と、C Set++ コンパイラまたは C++ コンパイラ・プログラム構成要素を使用して、C または C++ 言語でコーディングされたプログラムをコンパイル、リンク、および実行する方法について説明したものです。
- (9) SC88-7267 (日) C Set ++ コンパイラ/6000 C++言語解説書 V2R1
AIX の C++ 言語について説明したものです。また、本書を言語解説書として、IBM C Set コンパイラ/6000 : 使用者の手引きと併用することもできます。本書では、C++ 言語の構成要素、特に C 言語にはない C++ 言語独自の要素を詳しく解説することに重点をおいています。C Set++ コンパイラ/6000 によって実施されるC言語については、IBM C Set ++ コンパイラ/6000 : C 言語解説書に説明があります。
- (10) SC88-7265 (日) C Set ++ コンパイラ/6000 スタンダード・ライブラリー・リファレンス
IBM C Set++ コンパイラ/6000 に含まれるスタンダード・クラス・ライブラリについて説明したものです。これらのクラス・ライブラリは、定義済みクラスの集合を提供しており、入出力、複素数などの共通機能の実行に使用することができます。3つのクラス・ライブラリ

とは、次のものです。

複素数ライブラリ

入出力ストリーム・ライブラリ

タスク・ライブラリ

- (11) SC88-7264 (日) C Set ++ コンパイラ/6000 ソース・コード・ブラウザー-使用者の手引き
IBM C Set++ コンパイラ/6000 ソース・コード・ブラウザーの使用方法和カスタマイズ方法を紹介するものです。本書はブラウザーを使い始めるときのチュートリアルとしてもお使いいただけます。
- (12) SC88-7269 (日) C Set ++ コンパイラ/6000 C言語解説書 V2R1
IBM C Set++ コンパイラ/6000 に組み込まれている C プログラム言語について説明したものです。
- (13) SC88-7263 (日) C Set ++ コンパイラ/6000 コレクション・ライブラリー・リファレンス
IBM C Set コンパイラ/6000 に含まれるC++クラスのセットについて説明したものです。
- (14) N:GC18-0898 (日) RISC/6000 日本語 EUC コード一覧表
AIX で使用する日本語コード(EUC)の一覧表です。

SP2(English)マニュアル

- (1) GC23-2376 (英) Commands Reference Volume 1
This Book contains reference information on Advanced Interactive Executive(AIX)Operating System commands. It describes tasks each commands can be modified,how they handle input and output, and who can run them. (ac through dumpfs)
- (2) GC23-2376 (英) Commands Reference Volume 2
This Book contains reference information on Advanced Interactive Executive(AIX)Operating System commands. It describes tasks each commands can be modified,how they handle input and output, and who can run them. (e through lvlstmajor)
- (3) GC23-2376 (英) Commands Reference Volume 3
This Book contains reference information on Advanced Interactive Executive(AIX)Operating System commands. It describes tasks each commands can be modified,how they handle input and output, and who can run them. (m4 through rwhod)
- (4) GC23-2376 (英) Commands Reference Volume 4
This Book contains reference information on Advanced Interactive Executive(AIX)Operating System commands. It describes tasks each commands can be modified,how they handle input and output, and who can run them. (sa through ypxfr)
- (5) SC09-1610 (英) XL Fortran Compiler/6000 V3 User's Guide
This book describes Version 3.1 of AIX XL Fortran Compiler/6000, and explains how to compile, link, and run programs written in the XL Fortran language.
- (6) SC09-1611 (英) XL Fortran Compiler/6000 V3 Language Reference
This Book describes Version 3.1 of AIX XL Fortran Compiler/6000,and explains how to compile,link,and run programs written in the XL Fortran language.
- (7) SC23-0526 (英) Engineering and Scientific Subroutine Library Version 2 Release 2 Guide and Reference Volume 1
The Engineering and Scientific Subroutine Library(ESSL) is set of high-performance mathematical subroutines. (Pages 1 - 266)
- (8) SC23-0526 (英) Engineering and Scientific Subroutine Library Version 2 Release 2 Guide and Reference Volume 2
The Engineering and Scientific Subroutine Library(ESSL) is set of high-performance mathematical

subroutines. (Pages 266 - 792)

- (9) SC23-0526 (英) Engineering and Scientific Subroutine Library Version 2 Release 2 Guide and Reference Volume 3
The Engineering and Scientific Subroutine Library(ESSL) is set of high-performance mathematical subroutines. (PAges 793 - 1080)
- (10) SX23-1048 (英) IBM Load Leveler : Quick Reference
This quick reference summary provides you with a list of the most common tasks you can perform using LoadLeveler. In addition, it teaches you how to accomplish the task using the Graphical User Interface(GUI) and the commands. For detailed information on these subjects, refer to the IBM LoadLeveler : User's Guide, SH26-7226
- (11) SH26-7226 (英) IBM LOad leveler : User's Guide
This book is intended to help you use the LoadLeveler program product to build and submit jobs and perform other job management related tasks. It promarily contains instructions to use the graphical user inteface and LoadLeveler commands to accomplish these tasks.
- (12) SH26-7230 (英) IBM AIX Parallel Environment : Operation and Use
This book describes the IBM AIX Parallel Environment program product(PE) and how to use its facilities and tools to execute, analyze, debug,and tune parallel programs. It describes the operating environment which enables you to run parallel programs and also describes the varios PE tools for visualizing a program's peformance, debugging parallel programs, and parallel programs for their most efficient performance.
- (13) SH23-0019 (英) IBM AIX PVMe Users Guide and Reference
This book describes the features and programming tasks for the IBM AIX PVMe program product. It also provides some general information for creating and porting applications.
- (14) GH23-2485 (英) IBM9076 Scalable POWER parallel Systems Technical Solutions
- (15) SC23-2204 (英) Problem Solving Guide and Reference
The AIX Version 3.2 Problem Solving Guide and Reference provides information to help you investigate, define, and fix problems with the operating system, software or hardware, or other programs installed on the system.
- (16) SH26-7223 (英) IBM AIX Parallel Environment : Applcation Development
This promer provides guidelines and hints for developing parallel C, C++, and FORTRAN applications with the IBM AIX Parallel Environment rprogram product(PE). In particular, it covers the fundamentals of using PE's message passing library(MPL) subroutines to parallelize applications.
- (17) SH26-7228 (英) IBM AIX Parallel Environment : Functions Reference
- (18) C Set ++ for AIX/6000 Standard Class Library Reference Version 2 Release 1
This book describes the standard class libraries included with IBM C Set ++ for AIX/6000. They provide sets of predefined classes that you can use to perform common functions such as input and output or complex arithmetic. The three class libraries are:
 - The Complex Mathematics Library
 - The I/O Stream Library
 - The Task Library
- (19) SC09-1605 (英) C Set ++ for AIX/6000 User's Guide Version 2 Release 1
This book describes the IBM C Set ++ for AIX/6000 licensed program and explains how to compile, link, and run programs coded in the C or C++ Languages using the C Set ++ for AIX C compiler or C++ compiler componen.
- (20) SC09-1606 (英) C Set ++ for AIX/6000 C++ Language Reference Version 2 Release 1
This book describes C++ language implemented by the C Set ++ for AIX/6000 product and contains

language reference material to accompany the IBM C Set ++ for AIX/6000 : User's Guide. It describes in detail the constructs that make up the C++ language, emphasizing the elements of C++ that are not part of the C language. The C language implemented by C Set ++ for AIX is described in the IBM C Set ++ for AIX/6000 : C Language Reference.

- (21) SC09-1705 (英) Optimization and Tuning Guide for Fortran and C and C++

This book describes techniques you can use to improve the performance of programs you compile with the IBM AIX XL Fortran Copiler/6000(Version 3.1 or later), and with IBM C Set ++ for AIX/6000(Version 2.1 or later). It deals primarily with improving the performance of numerically intensive applications. Performance considerations relating to input/output, code size, or string manipulation are discussed in separate chapters or sections. This book does not discuss tuning of the operating system environment.

- (22) SC09-1729 (英) IBM C Set ++ for AIX/6000 Appl'n Support Class Library Reference

This book describes the Application Support Class Library, a set of predefined C++ classes for use with the IBM C Set ++ For AIX/6000 compiler, These classes can be used to handle the following information:

- Strings
- Exceptions
- Date
- Time

6.9 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
計算機システム	M-180 2台	M-180 2台	M-200H M-180	M-200H M-180	M-200H 2台	同57年度
運転方式	3カ月 有人	9月から無人	200H 無人 180 有人	疎結合 無 人	疎結合 無 人	無 人
プロジェクト数	63	176	192	183	198	199
利用者数						
機構内 ^a	48	70	69	91	94	102
機構外	107	254	325	330	375	426
合計	155	334	394	421	469	528
稼働時間(時間)	1,087	6,071	6,553	6,721	6,305	6,170
CPU時間利用申請(時間)	(200H基準)					(200H基準)
申請	929	4,666	11,033	10,230	11,938	13,053
許可	816	3,171	7,427	8,306	10,141	10,091
総使用CPU時間 ^c (時間)	509	2,405	5,405	6,320	8,205	8,489
ジョブ処理件数 ^c	41,521	155,980	183,840	214,847	239,771	236,519
ライブラリプログラム新規登録数	0	20	43	20	699	10
データベース新規登録数	0	2	0	0	3	3
センター使用論文数 ^d	0	24	93	118	190	185

	59年度	60年度	61年度	62年度	63年度	平成元年度
計算機システム	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	M-680H (~1月) S-810/10 (2月~) S-820/80 疎結合	M-680H S-820/80	同63年度
運転方式	無 人	無 人	無 人	無 人	疎結合 無 人	無 人
プロジェクト数	207	226	234	213	231	239
利用者数						
機構内 ^a	110	130	141	143	137	146
機構外	446	464	496	520	515	544
合計	556	594	637	663	652	690
稼働時間(時間)	6,316	6,016	6,368	6,444	6,091	5,694
CPU時間利用申請(時間)				(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b
申請	14,799	15,536	33,832/8,458*	9,880	12,439	14,694
許可	10,768	12,080	28,184/7,046*	7,978	10,418	12,347
総使用CPU時間 ^c (時間)	8,508	12,770	20,092/5,023e*	6624*	7,872	8,300
ジョブ処理件数 ^c	226,727	274,431	289,915	278,956	278,104	253,418
ライブラリプログラム新規登録数	118	160	39	4	7	3
データベース新規登録数	0	1	0	1	0	0
センター使用論文数 ^d	202	206	237	223	211	218

	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
計算機システム	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~)
運転方式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	256	272	271	225	222
利用者数					
機構内 ^a	140	158	143	127	139
機構外	593	623	661	589	601
合計	733	781	804	716	740
稼働時間(時間)	6,768	6,749	7,156	(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
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
申請	16,622	20,606	21,153	18,311	18,311
許可	14,626	17,846	19,110	16,027	16,027
総使用CPU時間 ^c (時間)	11,975	11,874	12,491	16,306	16,306
ジョブ処理件数 ^c	295,503	346,987	297,638	227,650	227,650
ライブラリプログラム新規登録数	0	0	0	10	10
データベース新規登録数	0	0	0	1	1
センター使用論文数 ^d	248	229	282	267	306

a: 機構内利用者にはアイドル課題のための重複をふくめない。

b: 申請および使用の詳細については4.1項を参照。

c: ここでの値は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のすべてを含む。

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。

e: S-810、S-820についてはSPUとVPUのCPU時間の単純な和である。s

*: 下段はM-680H基準。

電子計算機センター将来計画（中間報告）

分子科学研究所電子計算機センター将来構想委員会（以下、将来構想委員会と呼ぶ）では、前年度の点検評価結果を基に将来のセンターのあり方、計算機システム更新、運用方針等に係わる事項について議論した。委員会は、所外委員に榊茂好（熊本大）教授、岡崎進（東工大）助教授、山下晃一（東大）助教授、藪下聡（慶応大）助教授、所内委員に岩田末廣教授、青柳睦助教授、谷村吉隆助教授、岡本祐幸助教授によって構成された。

1966年にマリケン教授はノーベル賞受賞講演を「もう既に計算する化学者の時代になっているという私の信念を強調したいと思います。数千人とは言わないまでも数百人の化学者が、ますます多彩な分野の化学情報を得るために、実験室ではなく計算機室に通う時代です」と述べて締めくくっている。1995年の現在では、1966年のマリケン教授の認識を遥かに越える規模で、計算機を利用した研究は、化学研究の中で重要な役割を果たしている。21世紀に向けて、分子科学研究における電子計算機の重要度は一層増大し、実験科学と、計算機を活用した理論科学の競演は科学研究の場に不可欠となる。分子科学研究所計算機センターは、研究所内外の計算機需要の増大に応える体制を常に用意していく必要がある。

1. 現有計算機の構成と利用状況

平成7年度の利用者の総計は約712名、研究課題は205件である。平成7年1月より電子計算機センターの計算機システムは、スーパーコンピュータNEC SX-3、並列計算機IBM SP2、そして高速汎用計算機NEC HSPから構成されている。この時から、オペレーティングシステム（OS）もUNIXに統一された。

SX-3は3個のベクトル演算器を持ち最高性能は19.2 GFLOPSである。また、2GBの主記憶容量とジョブの一時作業領域として高速に読み書きが可能なRAIDディスクを約60GB持つ。汎用高速計算システム（SP2、HSP）が導入される以前の一年間は、大型汎用機の性能が不十分であったため、スーパーコンピュータ上でベクトル化率の低い小規模なジョブを実行せざるを得ない環境であった。現在ではベクトル化率が高くしかも大容量の主記憶と一時記憶装置を必要とするジョブを中心に利用されている。

並列計算機SP2は、平均100 MFLOPSの性能をもつ48個の演算装置（CPUノード）から構成されており、各CPUノードは40MB/秒以上の高速度で互いに通信を行うことが出来るネットワークスイッチにより結合されており、メッセージパッシング型の並列計算プログラムの実行を効率よく行うことが出来る。また全CPUノードには2GB以上の一時作業用のディスクをもち、平成7年度末にはそれぞれのノードのディスクが4GBに増強される。SP2では現在約3分の2のCPUノードは主に逐次実行型のジョブによって利用され、残りの3分の1は並列計算ジョブ用に利用されている。SP2の導入後約1年

が経過し、現在では並列ジョブ処理環境を利用するユーザの数が徐々に増え、また利用法が高度化する傾向が見られる。

HSPは、高性能の汎用高速計算機であり、2GBの主記憶装置と約20GBのRAIDディスクをもつ。HSPではベクトル化率はあまり高くないが、SP2の逐次専用ノードでは実行が困難な大容量メモリと一時作業ディスクを必要とするジョブの実行に利用され、その意味でスーパーコンピュータと並列コンピュータそれぞれの役割を補間する重要な役目を果たしている。

この新しいシステムが運用されて、約1年が経過した。分子研計算機センターのCPUサーバーとしての能力は平成6年1月にはそれまでのおよそ9倍、平成7年1月には平成6年1月以前のおよそ14倍になったが、学会シーズンが一段落した平成7年11月の平均でもその全CPU能力の約62%を、年明けの1月には常時数十件の待ちジョブが待機している状況になっている。当センターの計算機は、365日24時間運転を行っているため、実稼働率が6割を超えた場合には、平日の日中には常に待ちジョブがある状況で、特に学会前の混雑時には投入したジョブが実行されるまでの待ち時間が数日に及ぶ状況も発生している。各計算機のCPU能力の増強により、このような事態を早急に改善しなければならない。

2. 将来の計算機システム

分子科学研究の計算環境を常に時代の先端に保つためには、短期的展望と長期的（具体的には機種更新）展望に立って、その指針となる事項を検討しなければならない。

2.1 計算機をめぐる状況

計算機の性能向上は著しく早い。それは単に計算速度が速くなるだけでなく、アーキテクチャーの進歩、OSの変革、情報処理価格の低下など多面にわたっている。現在（および近未来）の計算機は様々な観点から分類することができる。たとえば、CPUの速度の観点（現時点の）からは、1CPUのベクトル性能が6GFLOPS以上の（高価な）計算機、2GFLOPS以下のもの、そしてベクトル演算器を持たない（安価な）ものという分け方ができる。また、並列度の観点から見ると、並列度の高い（3桁以上の）もの、少ないが並列計算が可能なもの、並列計算ができないものという分け方ができる。またCPUとメモリの構成の違いからは、全てのCPUがシステム全体のメモリを共有する「共有メモリ型」と各CPUがそれぞれ局所メモリを持つ「分散メモリ型」に分けることができる。

この十年余の計算機をめぐる一つの特徴は、UNIXをOSとしたRISC CPUをもつワークステーションが高性能かつ安価になったことである。また、この数年では、パーソナルコンピュータ（PC）のハード・ソフト両面の高性能化も顕著である。一方、1980年代に発展したベクトル演算機を持つ高性能（スーパー）コンピュータも並列化され、いつそ

う強力な研究手段となっている。また、ワークステーションクラスターという形の並列計算技術も重要である。

ワークステーションが安価になり、また国内のいくつかの研究室では研究費も比較的潤沢になったので、所外研究者の分子研計算機センターへの依存度は、数年前と比べて下がっている。かつての大利用者の何人かは課題申請もしていない。国内（学内）情報交換網が遅いのもこの傾向を促進している。研究室の使い勝手の良いワークステーションに慣れた研究者・学生が分子研センターへの接続を避けることになり、結果的に計算規模を小さくする場合も散見される。一方では、計算機センターのCPUへの期待も大きく、実際上記のように予想を上回る勢いで平成7年1月からのシステムは利用し尽くされている。計算機の性能向上に伴い、研究に必要な計算量が著しく増大しており、特に大メモリー・大容量ディスク・長時間ジョブへの要求は強い。東大物性研究所の計算機センターは今年度から、分子研計算機センターがこれまで行ってきた方式に似た形で、所外からの計算機利用を受け付けるようになり、非常に多くの申請があったという。センター設立時のように、分子研センターでしか計算化学ができなかったのが異常時であったと言えよう。とはいえ、計算機をめぐる環境の変化は著しく速く、正しい展望をもつ努力を絶え間なくしていなければならない。

2.2 機種更新以前の対策

ベクトル、並列、高速スカラから成る3種の計算機システムそれぞれに対して、その特徴を生かした利用形態がユーザに浸透してくるにつれて、各システム固有に増強を必要とする事項と3種のシステム間のバランスを考慮しなければならない事項が次第に明らかとなってきた。

並列計算機のCPUノードの拡充やメモリー、ディスク資源の増強は、5年ごとのレンタル契約更新に制約されず適時に行える体制を整え、予算的措置の検討が必要である。

現有スーパーコンピュータでは、平成7年度より深夜から早朝にかけて3個のベクトルCPUを並列に利用できるジョブクラスを設置し、利用者にベクトル並列プログラムの実行を推進してきたが、更に大規模な計算を行うためにはベクトル演算器の台数を大幅に増やす必要がある。また、配置間相互作用計算や量子動力学計算等の大規模計算を可能とするためには、1つのジョブが4GB以上のメモリーと50GB以上の一時作業ディスクを利用できるシステム構成に拡張する必要がある（現行はそれぞれ2GBと20GB）。

CPUの構成としては、ベクトル並列プログラミングの容易さからみて、現時点では、共有メモリー型の構成が有利であるが、その際、主記憶装置と演算器間には高性能のバスとメモリー競合を回避する高度なソフトウェア機構が要求される。拡張記憶装置は、ディスクよりも高速な一時作業ファイルの格納領域として今後もその重要性は変わらないが、近い将来は今以上に高速なRAID型ディスクが開発される見通しもあり再検討の余地がある。

現段階では並列計算機SP2は、逐次実行ジョブと並列ジョブのCPU資源の分配が2：1

程度となるよう運用されている。 今後は並列プログラムの開発環境と利用者のプログラミング技術の向上に伴い、大規模で長時間の並列ジョブへの需要が高まってくることが予想される。 その場合においても現在の汎用高速計算機 HSPとSP2の逐次計算ノードにおいて処理しているような逐次処理型の中規模ジョブを効率よく処理できる環境を用意しておくことが重要であり、特に研究室のワークステーションでは計算しにくい程度の中・大規模分子軌道計算を多量に処理する環境を常に用意しておかなければならない。

逐次実行型のジョブと大規模並列ジョブの実行環境を分割した構成をとることも検討する必要がある。 現在の運用ではCPU資源を分配するために、CPUの構成として分散メモリ型をとっているが、並列ジョブの実行のみを行う場合には高速なノード間通信機能をもった共有メモリ型の並列計算機の導入も検討する余地がある。 逐次実行ジョブに対しても時間制限（現状は最長48時間）が短いと言う声も強く、限られたCPU資源をよりいっそう有効利用できるよう運用面でもさらに工夫が必要である。

プログラムの巨大化に伴い、利用者の保存ファイルを格納するファイルサーバに要求される容量の増加と入出力性能の向上は、すでに重要な課題となっている。 センター内のCPUサーバと各種周辺機器を結ぶネットワークは、ファイル共有等の負荷の増大に十分対応できるように現在のバス型からATM等のスイッチ型に移行してゆく必要がある。 また利用者からは、センターと所外利用者端末を結ぶネットワークを高速化する強い要望があり、今後も機構ネットワーク組織及び学術情報センターなどのネットワーク組織と協力し、名古屋-岡崎間に主要大学間ネットワークと同等の高速なネットワークを導入するための努力を続けてゆくことが重要である。

以上の様に電子計算機センターの3種の計算機はそれぞれの計算機の特徴を生かした利用がなされてきているが、さらに大容量のメモリーとディスク資源を必要とするベクトル及び並列計算の需要も年々増大している。 一方、計算機のダウンサイズに伴い所内外の各研究室のCPU能力は数年前に比べて飛躍的に向上しており、分子科学研究者に対し常に最高性能の計算環境を提供することが当センターの重要な使命の一つであることから、ベクトル並列型スーパーコンピュータ、超並列型計算機等の導入により演算能力の早急な増強が望まれている。

2.3 平成10年度のスーパーコンピュータ機種更新に向けて

どのようなタイプの計算機を選択するかは、単に演算性能やメモリ容量を考慮するだけでなく、今後の利用分野、利用形態の正確な予測に基づいた判断が重要となる。 平成11年度の汎用システム更新を展望に入れて、全システムとして分子科学研究の中の計算需要の拡大に応えるシステムを構築しなければならない。

現有の計算機システムは、ベクトル計算（SX-3）、大規模スカラ計算（HSP）、並列及び中小規模計算（SP2）の様にそれぞれの計算機の性能を引き出すように運用されている。 現在これらの3システムの中では、並列計算と中小規模計算を独立したシステムで運用できることが望まれており、将来は超並列計算機を加えた4システムをバランス良く使い分けることが機能分散の観点から重要となる。 次期のスーパーコンピュー

タ機種更新においては、1 CPU当たりのベクトル性能ができるだけ高いベクトル並列計算機と中小規模計算を処理するための計算機を導入し、平成11年度の汎用機更新において、大規模スカラ計算及び超並列計算を処理できるシステムを導入するなど、全システムの性能バランスを考慮し、平成10～11年の間で計算機システム全体の飛躍的な能力拡大を図る必要がある。1 CPU当たりのベクトル性能の良い計算機は、使用している半導体技術と関連して高価であり、一見価格性能比が低い、プログラムが一度完成すると、WSでは実行できない質的に違う計算科学が可能になる。計算需要の伸びと十年度に販売が予想される計算機の性能・価格を調査し、レンタル料の増額も含め検討しなければならない。そのために機種選定委員会を平成八年度の早い時期に発足させなければならない。

また、今後もWSの高性能・低価格化が続くことが予想されることから、更新機種のレンタル契約期間（通常5年間）中におけるアップグレード可能性の有無も重要な選定要素となる。さらに、現在の計算機システムのように、OSの異なる複数の計算機システムを高速ネットワークで結び、いわゆる分散システムを構成する際には、次期システムと他のシステムとの親和性も重要な要件となる。

3. 分子研における計算分子科学分野の重要性とセンターの役割

理論化学は、多様な化学事象からその基本となる概念を抽出し体系化を図ることを目的としている。体系化を図る過程においては、個々の物質の構造や物性、化学反応に関与する化合物や溶媒といった具体物の物質の個性が重要となり、興味の対象になる。そこでは出来る限り実験で取り扱っている系の特徴を損なわずに、理論的な考察を行うことが重要となる。今日、理論化学的手法の発展と計算機の進歩によって、従来では不可能と考えられていたような複雑な系を不必要なモデル化を行わずそのまま研究対象として扱うことができるようになってきている。また、多くの簡単な系の厳密解も計算機上で得ることができるようになってきている。分子科学における計算科学は、実験の解析をするにとどまらず実験の先導的な役割を果たしており、その重要性は今後さらに増大する。

一方、分子研の理論部門は平成七年度から1部門が増設され、計算機センターのグループを加えると専任の研究グループは7になった。各研究グループは独自にワークステーションを持ちプログラム開発や応用計算を進めているが、同時に計算機センターの計算機利用の中で大利用者でもある。従来、センターのCPU利用の約4割が所内（ほとんど理論系）利用の目安とされていた。分子科学の理論研究においてこれまで以上に計算科学の手法が重要になることが予想され、計算機センターと理論系のいっそうの緊密な連携が必要となる。

上記のように、所外の研究グループも研究室単位で強力な計算環境を持つことも一部では可能になってきている。分子研の理論グループにいっそう卓越した計算環境を提供するためには、所外には公開しない特殊計算機の導入も検討していく必要がある。その一環として、平成8年度研究基盤重点設備費に「計算分子科学の展開」を要求する予定である。

計算機のハード・ソフトの両面の進歩は早く、またその最新の成果を研究に取り入れることによって、質的な変化をもたらす研究を進めることが可能になる。ベクトル並列型、超並列型などの新しいアーキテクチャの計算機的能力をフルに活用するための分子科学計算アルゴリズムの開拓や、計算機アーキテクチャの特徴を生かした分子シミュレーションプログラムの開発研究を行うことのできる研究グループが、計算機センター内に新たに1グループ（助教授1，助手1，技官1）は必要である。

4. 国際分子科学計算センターとして

平成6年度の点検評価結果に指摘されているように、センターは設立の当初より日本全体の分子科学研究のための大型計算を実行するためのセンターとして出発し、この目標もかなり高い水準で達成されている。実際、過去10数年にわたりコストの面でも、また使えるメモリーやディスク容量の面でも、国立大学共同利用計算機センターでは実行が困難な大規模な分子科学計算分野において成果をあげることができた。また、設立当初より運営委員会を中心とした独自の審査制度を確立し、少なくとも所外に対しては、課金制度なしに研究プロジェクトに対する申請許可制度を導入・運用してきた。

このようなユニークなセンター運営の特徴と優れた計算機環境を生かし、また高速な国際的な情報ネットワークの整備に伴い、将来的には、アジア諸国を中心に、計算環境が十分備わっていないが潜在的に優秀な分子科学研究者を持つ国々の研究者に対し、プロジェクト申請の道を開き、国際的な計算機センターへ飛躍させる事は今後の検討課題である。この制度の実現のためには、国内利用者に負の影響を与えない様にするために計算環境の一層の充実が何より前提であり、さらに課題審査制度の確立、専任の助手（出来る限り外国人の）の採用、高速ネットワークの整備など多くの課題を解決しなければならない。

海外の研究者は、現在でも、国内の研究グループの一員に加わっていれば、インターネットを通じて分子研計算機センターを利用する事ができる。このような形の国際協力研究も推進していく必要がある。また、プロジェクト方式で国際協力研究課題を新たに設定することが可能である。この場合には、1、2度の訪問を可能にする予算的措置が必要である。

5. センターライブラリ開発の研究プロジェクト化

計算機センターの目的の中の一つの大切な業務は、分子科学計算のためのプログラムライブラリの構築とプログラム開発への支援、データベース開発である。過去に、センターは継続的にこれらの事業を進めてきたが、分子研センター発で世界に広まったソフトウェアの開発はあまり多くはない。センターライブラリ開発制度を見直し、件数を絞って集中的に開発支援できる形にしなければならない。外部研究者に研究プロジェクトを公募すると同時に、センターや理論系のスタッフが協力することが望ましい。例えば、大規模な分子軌道計算プログラムの並列化や、量子分子動力学プログラムの開発などは、現在の研究者構成においてもその成果が十分に期待できる。

昨年度の「点検評価」で指摘されているように、1986年のベクトル型スーパーコンピュータのセンターへの導入は、分子動力学計算と反応動力学計算分野の研究者に大きな刺激を与えた。この様に将来の超並列スーパーコンピュータの導入が、新たな分子科学計算分野の進展を促す可能性も十分にあり、超並列時代を見据えた方法論の開拓が重要である。

6. 世界に情報を発信する

センターのスタッフが過去に積極的に参加し、量子化学者のみならず広く化学・物理学研究者から高い評価を受けているQCLDB(Quantum Chemistry Literature Data Base)の開発に対し今後も予算的にはもちろんのこと、センターの開発業務として支援する体制をとり続ける必要がある。現在、U.S.A.のいくつかの国立研究機関では、WWW(World Wide Web)を通じてその機関が作成したデータベースを全世界に公開している。このような形の全世界の学会に対する寄与は、特に生物学や素粒子・原子核の分野などではその研究機関の一つの「業績」として高く評価されている。我が国ではデータベース作成による世界の学会への寄与は、QCLDBを除いて皆無であると言われているが、このQCLDBも、現在は、情報ネットワークを通じての利用は分子研計算機センターの利用権を持っている者に限られており、事実上、国内にのみ閉じている。QCLDBをWWW等を通じて世界中から無料で利用できるようにする環境の整備とそのための予算的処置（データベース作成とそのための環境整備・事務費）および著作権（特に、国が主張している）に関する対策が緊急に必要である。

7. 情報ネットワークと計算機センター

平成5年度末に完成した岡崎国立共同研究機構の情報ネットワーク新ORIONによって、分子研のスタッフ・学生の電子メール・インターネットの利用は著しく向上し、ほとんどの研究者にとって情報収集と発信のための不可欠な手段になっている。計算機センターは新ORIONの構築と運用には当初はたずさわらなかったが、平成7年度に情報ネットワークの担当技官が採用され、センターに配属されたのを契機に、センターは分子研内のネットワーク業務に関与するようになった。計算機センターの主要目的は、分子科学における計算科学の支援であり、情報ネットワーク特に電子メールなど情報交換を支援する業務はこれまで軽視されてきた。これからも、このような業務は主要業務とはならないが、上述のように、研究所内はもとより国内外との高速情報交換網は、計算科学を推進する上に非常に重要な基盤設備であり、また、情報ネットワークを企画・管理・維持するのに必要な知識や技術は計算機センターのスタッフに要求されている知識や技術と多くの共通部分があるので、センターは分子研内はもとより、岡崎国立共同研究機構内のネットワークの企画・運用に関与する必要がある。

センターの計算機を国内外の研究機関から高速に利用するために、名古屋-岡崎間の情報交換速度を主要大学間と同じ速度に常に維持していく必要がある。スーパーコンピュータをネットワークコンピュータの一つのノードとして活用するためには高速な学術情報ネットワークが不可欠な基盤設備であるので関連機関と連携して実現していかなければならない。

8 UNIX分散処理環境におけるユーザ資源管理システム

はじめに

現在のNEC SX-3/34Rを中心とするUNIX分散処理システム以前は、大型汎用システムによるクローズドなOSの下、毎年約800人からなるユーザ(プロジェクト数約250)が利用していた。そこでは、継続利用、未継続、新規登録、所属プロジェクト変更、複数プロジェクトへの登録などの要望に対するユーザ管理、CPU使用量課金およびファイル使用量課金など複雑な管理が一元的に行っていた。しかし、現システムには簡単な管理機能しか用意されてなく、また、ジョブを実行するマシンが分散しているので、ユーザ管理、CPU使用量課金およびファイル使用量課金などを1つのマシンで一元的に管理することが望ましいと考え、ユーザ資源管理システムを構築することにした。

1. ユーザ資源管理システムの概要

当計算機センターのシステムは、NEC製スーパーコンピュータSX-3/34R(以下SX-3と記す)を中心にNEC製高速演算サーバーHSP(以下HSPと記す)、IBM製演算クラスタSP2(以下SP2と記す)、NEC製ファイルサーバー等から構成されているUNIX分散処理システムである。ユーザは、フロントエンドマシン(以下fepマシンとする)、HSP、SP2のfepマシンのみにログインすることができ、そこから各演算処理マシンにバッチジョブを投入する。SX-3、HSPはNQS(Network Queuing System)によってバッチジョブを管理するが、SP2はロードレベラーによって管理されている。また、SX-3、HSPにはグループクォータの管理概念がないがSP2にはある。ユーザが使用するCPUの課金は使用時間で管理するのではなく点数制で行っている。点数制の方法としては、各演算マシンで使用したCPU時間に係数(各演算マシンの性能比)を乗算した値で管理している。ファイルシステムにおいては、ファイルサーバー上にユーザホームディレクトリ(/home)を作成(1ユーザ当たり200MB)し、各マシンがNFSマウントしている。また、SX-3、SP2には/weekファイルシステム(ファイル作成から2週間を越えたファイルを削除するファイルシステムで標準で400MB割り当てている)、SX-3には/save(大容量の恒久的ファイルシステムで標準で1GB割り当てている)がある。このようなマルチベンダー環境の下、OSの違い、管理機能の違い、各演算マシンシステムのファイルシステム構成の違いなどによる複雑な運用管理を余

儀なくされている。これを改善するために、分散処理システムを1台の管理マシンを用いて、ネットワーク接続されている複数の管理対象マシン(以下エージェントと記す)を一元集中的に運用管理するシステムを開発することにした。本システムは、簡便性を要求(技術的知識がない人でも操作できるように)するため、比較的簡単にGUI環境を構築することができるWWWシステムを利用し、HTMLによるページ作成のほか処理系にC言語、Perl、シェルスクリプトを用いて開発した。また、ブラウザには、操作性の良いMosaicを使用した。さらに、ヘルプの充実にも努め、途中で操作の仕方が分からなくなっても困らないようにしている。機能としては、エージェント管理、自動運転管理、ユーザ/グループ管理、資源管理、バッチ管理がある。次に順をおって各機能の詳細を説明する。

2. エージェント管理

エージェント管理は、エージェントの新規登録、登録削除、設定内容変更、設定内容表示から成る(図1参照)。現在登録されているエージェントは、エージェントリストに表示され、設定内容の有効性をON/OFFで表示する。この中で、エージェントグループ名と言うのは、グループ化されたエージェントの名前であるが必須項目ではない。新規登録の場合は、エージェント名と各管理機能の有効設定が必須である。キャンセルボタンを押下した場合は、設定内容の表示が変更前に戻り、設定ファイルの更新は行われない。一度に複数の新規登録、登録削除や設定内容変更をしたい場合は、エージェント名欄でカンマで区切って記述する方法以外にエージェントリストでコントロールキーを押しながらクリックして選ぶか、エージェントグループ名を指定して実行ボタンを押下する方法もある。一度に複数のエージェントの設定内容を表示することはできない。

3. 自動運転管理

自動運転管理は、エージェント管理で登録された各エージェントの自動運転スケジュールを管理する機能である(図2参照)。エージェントリストには現在の運転状況、運転計画が各エージェントごとに表示される。運転状況は、自動運転管理が選択された時点で、各エージェントにpingコマンドを発行して、現在稼働中かどうかを確認している。運転計画で連続運転を指定した場合は、24時間フル稼働であり、特に障害や計画的に停止作業を行わない限り動き続けるこ

とを意味している。計画運転を指定した場合は、運転終了時間、運転再開時間を指定しなければならない。本システムは、指定された時間にそのエージェントのシャットダウン動作にはいり、運転再開時間でシステム起動が始まる。

4. グループ管理

グループ管理は、グループの新規登録、登録削除、設定内容変更を行う機能である(図3参照)。新規登録時には、グループ名に登録したいグループ名を入力し、新規登録ボタンを選択した後に、実行を押下することにより登録が実行される(groupaddコマンドを実行する)。グループIDは本システムが自動的に算出する。算出方法は当センターのグループ名規則(左からアルファベット2文字+数字1文字)から、一定式(グループ名のアルファベットのaを0(ゼロ)、zを25として数字に変換して、グループ名を $lmn(l=0,1,\dots,25,m=0,1,\dots,25,n=0,1,\dots,9)$ とし、次の式に当てはめて算出する。 $26 \times 10 \times l + 10 \times m + n + 10000$)から算出される。この値は、一意的に決定されるため、本システムからの変更は不可能である。

4.1 ログイン属性

当センターでは、4月から翌年3月までを1年度としており、ユーザは毎年度利用申請をしなければ利用ができない規則になっている。ただし、ユーザ名は一度発行されるとその利用者固有のコードとなり半永久的に保持している。また、グループ名も研究室もしくは、研究プロジェクトごとに固有のものである。このことから、グループが利用申請を一定期間しなかった場合、該当グループの設定内容を毎年削除・登録を繰り返すよりも、利用のみを抑止した方が都合がよい。このようなグループに対しては、各エージェントのログイン属性をREJECTとして、各エージェントへのログイン、バッチジョブのサブミット抑制を行う。また、グループのCPU使用許可点数(当センターではCPU1時間あたり400点を配分している)をCPU使用点数が超過した場合、もしくは使用許可ファイル容量を使用ファイル容量が超過した時は、それ以上の利用を自動的に抑止するようになっている。しかし、REJECTとは条件が異なるため属性をNOLOGINとして管理する。これらの抑止属性になった場合でも、分散処理システムのfepマシンにはログインでき、センター運用のローカルニュースや資源許可、使用状況コマンドなどが利用できるようになっている。しかしそれ以外のエージェントにログインをしようとしたり、バッチジョ

ブをサブミットしようとしたりすると警告メッセージを表示して使用を抑止するようになっている。ファイルシステムの超過の場合は、ユーザ各々で不用ファイルを削除したり、他のファイルシステムに移動したりすれば、超過しているファイルシステムの使用容量を許可容量内に押さえることができる。許可容量内に押さえられれば、計算機システム利用可能属性のACCEPTに戻り、すべての利用ができるようになる。しかし、センター管理者が本システムを使用して、NOLOGIN属性にした場合は、資源が超過していなくとも利用が抑止され(本システムでの手動設定が優先)、センター管理者がACCEPT属性に変更しない限り、ユーザは利用抑止されたままとなる。なぜこのような設定になっているかというと、たとえば、あるグループがセンターの運用に反した利用をし、再三の警告にも従わなかった場合などに、ある一定期間の利用停止などを行うためである。

4.2 資源使用実績表示

資源使用実績表示は、グループのエージェントごとの資源使用実績(CPU使用実績、ファイル使用実績)、資源使用許可値の表示、もしくはグループ実績とグループ内ユーザの実績クリアを行う時に使用する。CPU使用実績のクリアは、クリア対象選択ポップアップメニューでエージェント単位、エージェントグループ単位またはすべてのエージェントの内から1つを選択する。選択、入力が終了したら実績クリアボタンをクリックする。指定が正しいと確認されれば、実績クリア画面が表示され、最終確認が行われる(ここで、グループ名、クリア対象を入力し直しても無効となる)。ここで、「はい」をクリックするとそのグループとグループ内ユーザ(以下メンバーと記す)のCPU実績がすべてゼロクリアされる。最終確認を行うのは、CPU使用実績のデータが、センター運用上もっとも大切なデータであるからである。

4.3 ファイル一括処理

今までの機能では、多数のグループを一括して新規登録する場合には大変不便であるため、指定フォーマットに書かれたファイルを指定すれば新規登録、削除、変更が行える機能が別ページに用意してある。これは、年度切り替え(毎年4月)の時期には、新規登録が殺到するので非常に有用な機能である

5. ユーザ管理

ユーザ管理は、ユーザの新規登録、登録削除、設定内容変更を行う機能である(図4参照)。新規登録時には、ユーザ名等の各入力項目に必要な事項を入力し、新規登録ボタンをクリックし、実行を押下することにより登録が実行される(useraddコマンドを実行する)。ユーザIDも本システムが自動的に算出する。算出方法は当センターのユーザ名規則(左からアルファベット2文字+数字1文字)から一定式(ユーザ名のアルファベットのaを0(ゼロ)、zを25として数字に変換する、ユーザ名をlmn($l=0,1,\dots,25,m=0,1,\dots,25,n=0,1,\dots,9$)とし次の式に当てはめて算出する。 $26 \times 10 \times l + 10 \times m + n + 20000$)から算出される。この値一意的に決定されるため本システムからの変更は不可能である。ここで、当センターの運用として、各グループにはグループ長を一名設置することにしており、そのグループ長は、グループに割り当てられたCPU許可点数、ファイル使用許可容量をメンバー各位に自由に割り振ることができることになっている。このグループ長は登録ランクの項目で決定する。氏名、所属、電話番号、電子メールアドレスの内容は/etc/passwdファイルのコメントカラムに登録される。

5.1 ログイン属性

4.1ログイン属性のユーザ版である。5.ユーザ管理で述べたように、グループ長によって利用を制限されているメンバーが、資源を超過した場合にNOLOGIN属性となり、このメンバーだけが計算機システムの利用を抑止される。

5.2 資源使用実績表示

4.2資源使用実績表示のユーザ版であるが、アカウント実績クリアの機能はない。これは今までの運用の中で一人のユーザの使用実績をクリアするようなことがなかったので、特に作成していない。

5.3 ファイル一括処理

4.3ファイル一括処理と同様な機能が実現されている。

6. 資源管理

資源管理は、2.エージェント管理で設定したアカウント管理やクォータ管理の詳細を設定する機能である(図5参照)。ここでのアカウント管理、クォータ管理の選択ボタンは2.エージェント管理のものと連動している。設定ディレクトリには、管理を行いたい各エージェントのローカルディレクトリパス名を入力する。

7. バッチ管理

各エージェントのバッチキューの管理を行う機能である(図6参照)。バッチキューにおけるキュープライオリティ、ベースプライオリティ、タイムスライス等の各種設定は運用者の推測によって決定しているため、必ずしも円滑なユーザジョブの実行が実現できるとは言えないのが実際である。このため、ある一定期間のジョブ実行状況、待ち状況等の各種データを解析し、各種設定の最適値を決定していくのがベストであるため、バッチキューの各種設定、一覧表示やジョブフリーズ、デフリーズが簡便にできるようにしてある。

8. 現状での問題点

現在(これから)の計算機システムは多種なマシンが混在するマルチベンダーシステムであり、OSやマシン環境が異なるのは必然的である。このようなシステムでは、各管理機能に必要なエージェント用プログラムのインストールやエージェントでの環境ファイルの設定などが自動的に行うことができないので、結局のところ、人の手で行わなければならない。これを解決する手だては現時点では見当がついておらず今後の課題である。

9. 今後の改善点・計画

9.1 資源(CPU許可点数、ファイル許可容量)の上限値設定

グループ登録時においては、各資源の上限値設定も行っている。しかし、本システム導入当初

は基本的な機能のみを、とりあえず構築することを目指していたため、初期バージョンから外されていた(関連設定ファイルが多岐に渡っているため)が、今年度末までに機能を追加する計画である。処理課程的には、グループ管理機能で新規設定、変更を行えるようにし、ユーザ管理機能で、所属するグループの関連設定ファイルへのユーザ追加などを行えるようにする予定である。

9.2 処理速度の向上

各管理の実行プログラムは、awk、sed、perlなどのインタプリタ言語で書かれているものも少なからずあるので、これらをC言語で書き換え、処理速度を向上させる。ブラウザはNetscapeの方が応答が良いようなので移行を検討している。

9.3 エージェントグループ機能の活用

エージェントグループ機能は、エージェントをグループ化して、グループ単位で自動運転管理、グループログイン属性設定、ユーザログイン属性設定を行う機能である。現システムでは、エージェント管理でエージェントグループを指定できる様になっているが、まだエージェントグループ単位での制御が行えるように至っていない。この機能は単発するマシンメンテナンス時等には非常に有用であるため、早期に開発したいと考えている。

9.4 削除ボタン実行後の再確認

現システムでは、各管理機能の削除ボタンを選択し、実行ボタンを押下するとすぐに削除処理を行ってしまう。これは、誰でも操作できるシステムを構築する上では好ましくない処理である。したがって、実績クリア同様に再度確認メッセージを出力して確認後、削除処理を行うように改善する。

9.5 複数グループに属するユーザのランク

図4にある登録ランクは、一般ユーザかグループ長を決定するものであるが、1ユーザが2グルー

プ以上所属できるのにもかかわらず、登録ランクの設定が1つしかないため、あるグループのグループ長である場合、他のグループにおいてもグループ長であるかのように表示上見えてしまう。当初は複数グループにまたがるユーザは極々少数であるため後回しにしてしまった経緯があるので、これを改善する。

9.6 実績ゼロクリアのファイル一括化

年度の変わり目では、多数のグループの実績ゼロクリアを行わないといけない。そこで、グループ管理に実績ゼロクリアのファイル一括機能を追加する。しかし、実行に際しては、会話処理同様に最終確認をするようにする。また、ファイルのフォーマットチェックも行うようにする。

9.7 新規グループ名、ユーザ名の自動割当

現在は、新規登録でも人の手によって、グループ/ユーザ名を指定しないと登録が行えない。そこで、グループ名/ユーザ名が空白で、新規登録を実行した場合は、本システムが空いている名前から自動的に割り振る機能を追加する。

9.8 統計情報の採取・表示

各エージョンのCPU使用統計、ジョブ処理件数統計、ログイン件数統計等を月単位、グループ単位、ユーザ単位で表示できるよう来年度以降機能追加する。

おわりに

今後、多くの計算機システムにおいても、UNIXによるマルチベンダー化分散処理システムは広がりを見せると思われるので、このような、各サイトでカスタマイズ、拡張性がしやすく、操作が簡便な管理システムが事実上求められてくる。また、当センターにおいてもHTMLにこだわることなく、他の有用な処理言語があるかなどの模索は絶えず行い、いいものがあれば移行していく考えである。

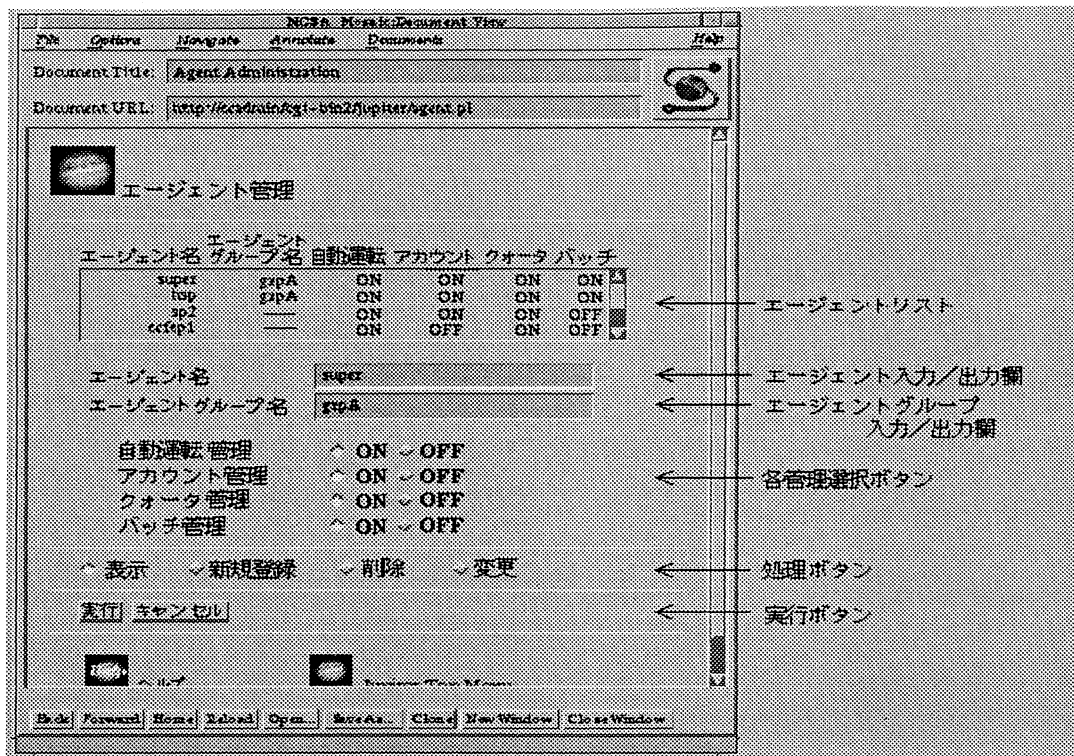


図1 エージェント管理

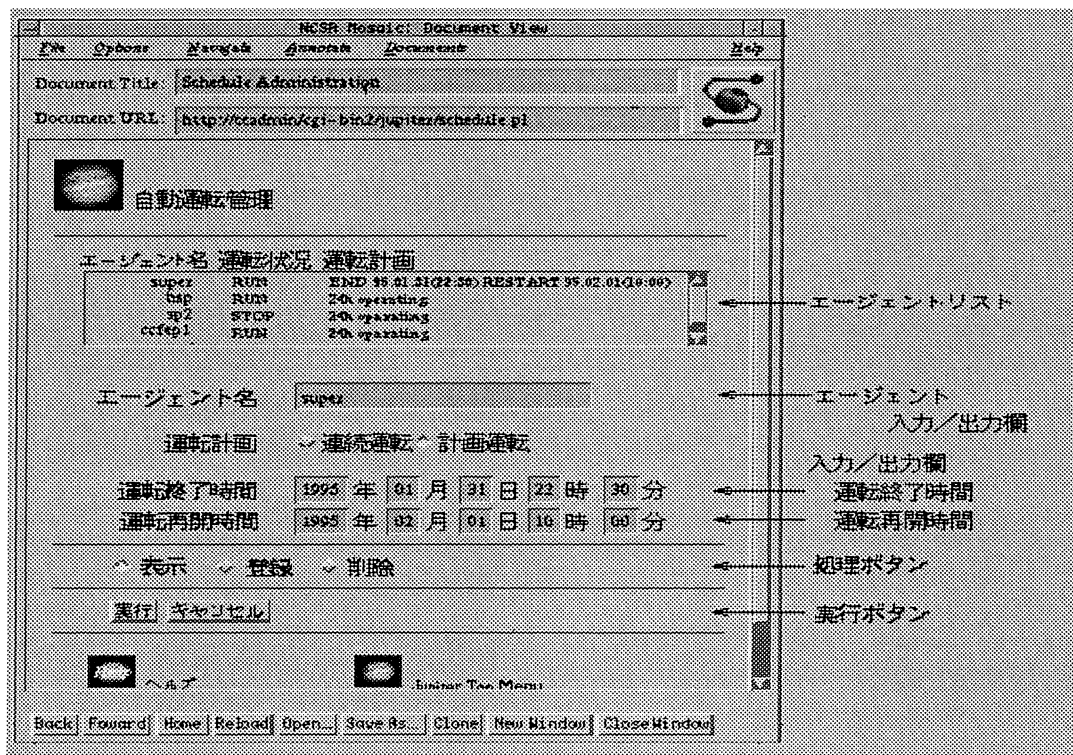


図2 自動運転管理

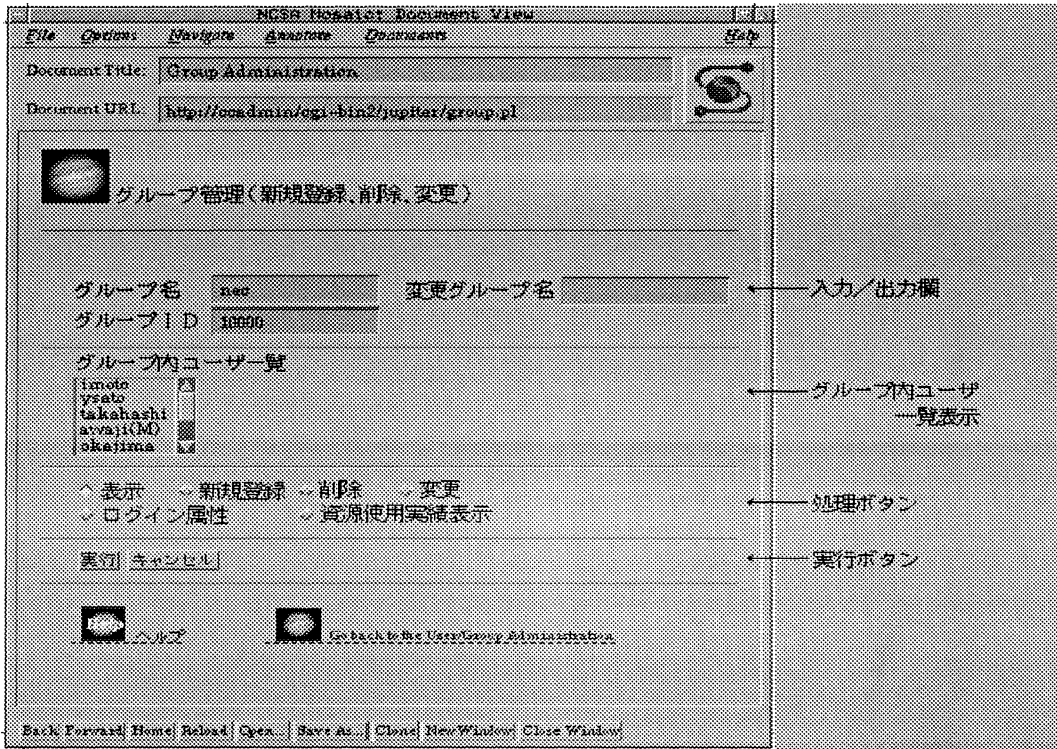


図3 グループ管理

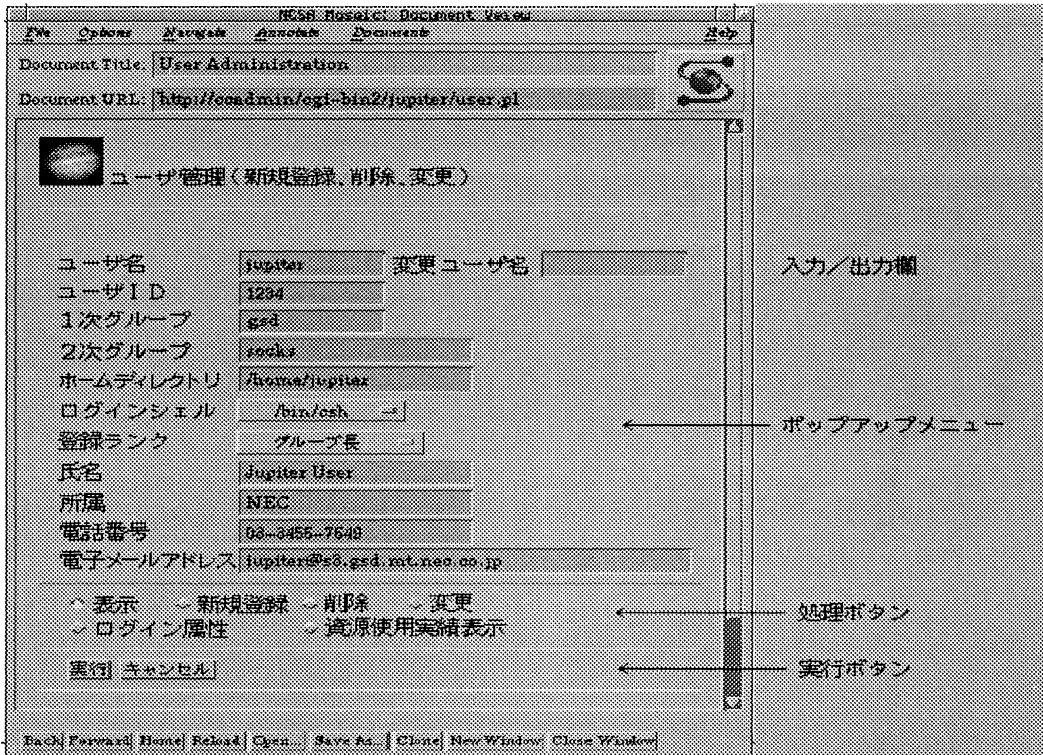


図4 ユーザ管理

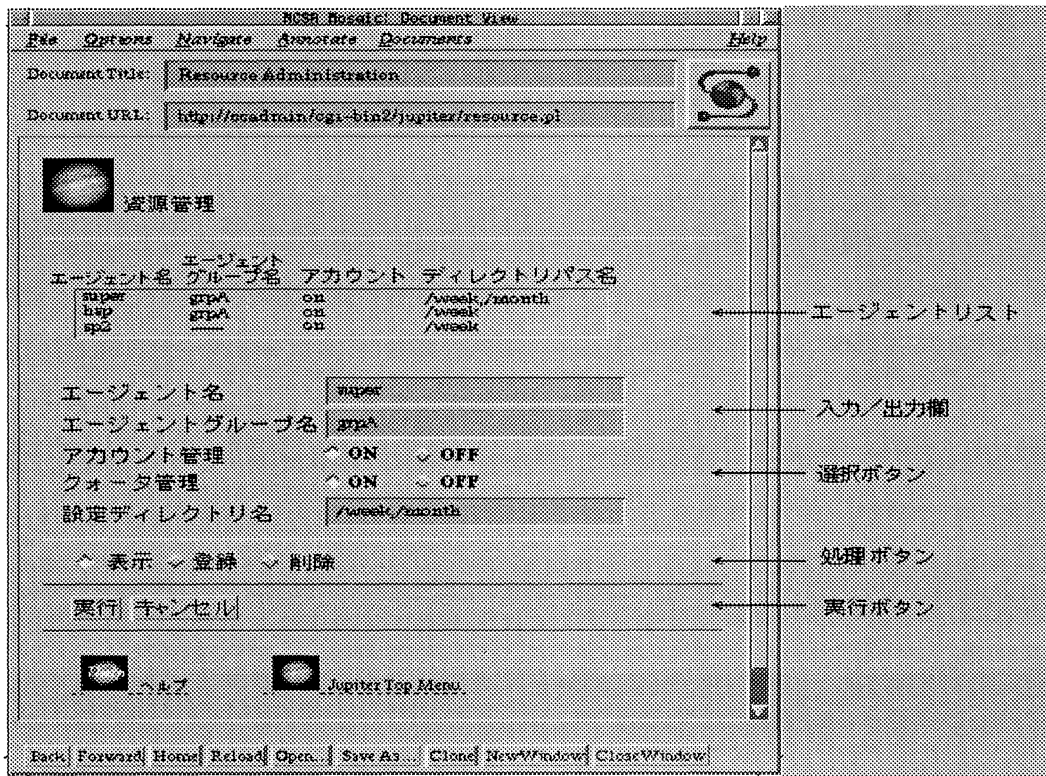


図5 資源管理

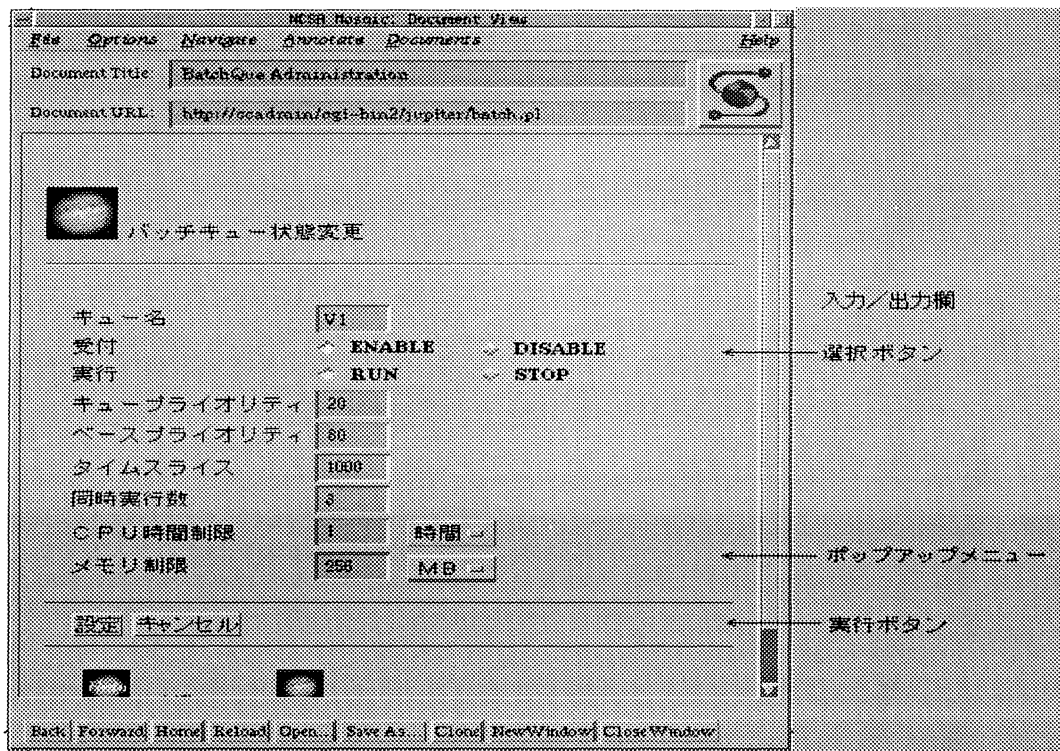


図6 バッチキュー状態表示

9 分散処理環境における障害監視システム

はじめに

分子科学研究所電子計算機センターは、大学の大型計算機センターでは実行が困難な高メモリ・ディスク資源を利用する分子科学分野の大規模理論計算利用を重点とした計算機環境を24時間全国の研究者に提供している。現在3種類の演算環境（高速ベクトル演算・日本電気製SX-3/34R、高速スカラー演算・日本電気製HSP、高速スカラー並列演算・IBM製SP2 48ノード）を目的に応じジョブ投入形式で利用できる。これらCPUサーバ以外には、利用者がプログラミングをはじめとしたインタラクティブなオペレーションを行うフロントエンドサーバとして日本電気製UP4800/650、EWS4800/330およびIBM製PowerStation590 3ノードを、ファイルサーバとして日本電気製UP4800/690、UP4800/650を、さらにデータベースサーバ、プリンタサーバ、アカウント管理端末用、利用者端末用などそれぞれの目的にワークステーションを配しており、全計算機がUNIXで統一した環境下にある。

上記の様な、サービスに応じて計算機を多数配置して1つのシステムを構成している分散処理環境を運用するにあたり、表面化してきた問題点は、障害発生を事前に予測したり発生障害の根本原因を直ちに追求することが、その機器数の多さから、困難な状況であり、利用者からの障害報告を受けて運用管理者が認知する状況が多発している。そこでシステム全機器を常時監視し、異常状況を報告するシステム（仮称：watchman）を開発することにした。

本 論

1. 経 緯

スーパーコンピュータや汎用機では、障害発生はランプやブザーなどでアラーム通報する機構になっている。従来のスタンドアロン運用ならばこの機構で十分であったが、現在の様なコンピュータネットワーク環境を前提としたシステムに対応できている訳ではない。実際当電子計算機センターでは、ネットワーク経由で外部サーバのディスクを共有してユーザの利便をはかっており、そのため外部機器に起因する障害把握が遅れる状況が発生した。これはユーザからジョブが投入できない旨の連絡を受けたことによって発覚した。調査を行うとファイルサーバがネットワーク障害を起こしていたためユーザファイルが認識できないことが原因であった。ネットワーク障害やシステムダウンならば ping 応答性を

監視すれば容易に検出できるので、最初は ping の応答がなければ運用管理者に対しメールで通知する機構を開発した。ある日ユーザからフロントエンドサーバにログインできない旨の報告を受けて調査をすると、ping 応答はあるがシステムがロックしていることが判明した。これは一筋縄にはいかないということで、システム障害の可能性を検討したところ多面的なシステム監視が必要であると判断し、本システム開発に着手することになった。

2. 目的

分散処理環境を安定運用するために運用障害・資源利用・セキュリティの観点から24時間監視を行い、異常検出および障害発生をすみやかに通知し、対応可能なものは自動復旧を試みる。現時点での監視項目は以下のとおりである。

(1) 運用障害

- | | |
|-------------------|--------------------|
| (a) ネットワーク接続性監視 | ping の応答があるか |
| (b) リモート操作の応答性監視 | rsh が実行できるか |
| (c) ネットワーク情報の参照監視 | NIS 情報が引用できているか |
| (d) ローカルディスク状況監視 | ローカルディスクをマウントしているか |
| (e) リモートディスク状況監視 | リモートディスクをマウントしているか |
| (f) プロセス継続性監視 | 必須デーモンが存在しているか |
| (g) ジョブキュー監視 | ジョブ投入、キャンセル、実行が可能か |

(2) 資源利用

- | | |
|--------------|-----------------------|
| (a) ディスク容量監視 | 利用可能サイズおよび i ノード数は十分か |
| (b) ディスク負荷監視 | ディスクのbusy率が高くないか |
| (c) スワップ領域監視 | スワップ領域の残りは十分か |

(3) セキュリティ

- | | |
|-------------|---|
| (a) ログイン監視 | CPUサーバへログインしていないか
HSP以外のCPUサーバではインタラクティブな処理を許可していない |
| (b) コマンド監視 | CPUサーバ上で特定コマンドを実行していないか
rshによるエディタ起動などのインタラクティブ処理することを防止する |
| (c) CPU負荷監視 | CPUサーバ以外での高負荷プロセスが無いか
フロントエンドサーバ上でユーザアプリケーションの長時間実行防止 |
| (d) 不正su監視 | rootへのsu形跡があるか |

3. 前提条件

分散処理環境の安定運用のためとは言え、CPUなどの資源を無駄に消費することは本来の運用目的に反するので、資源の利用は最小限にすることを前提として開発を行った。

4. システム構成

当初ネットワーク管理に用いられるSNMPによる方法も検討したが、この方法だと監視システムが中央集権的になりネットワーク透過性が確保できなければ自動復旧などの障害対応がとれない点、また独自MIBを作り込む煩雑さが懸念されたため見送った。監視機器上で単独動作している方が自動復旧へのアプローチが容易であるため、以下に示すクライアント・サーバ方式による分散処理型のシステムが有効的だと判断した。本システムは、C言語およびシェルスクリプトで作成されており、開発は日本電気株式会社に依頼して行われた。現在本システムによって監視している計算機は60台である。

本システムでは以下の5種類のプロセスにより運用される。監視対象機器全部にwmanアカウントを作成し、すべてのプロセスはwmanの権限で実行される。

(1) サーバデーモン

監視システムのメインプロセス。監視対象計算機（クライアント）で動作させるクライアントデーモンと通信を行い、監視結果より通知処理を行う。クライアント・サーバ構成を分散して実行効率をあげるために、複数台上でサーバデーモンを起動することができ、そのうちの1つをマスタサーバデーモン、残りをスレーブサーバデーモンとしてサーバデーモン間でも通信を行うことで3階層のクライアント・サーバ構成とすることが可能である。なおクライアントからの通信はネットワーク負荷軽減のため異常報告のみとしているが、クライアント自身の生存有無の確認も重要なので、定期的な生存証明の通信を行っている。サーバデーモンは以下の機能を持つ。

- (a) 各種設定ファイルをスレーブサーバ（マスタのみ）およびクライアントにコピー
- (b) スレーブサーバデーモンの起動・停止（マスタのみ）
- (c) クライアントデーモンの起動・停止
- (d) 異常・復旧処理発生時に対応アクションコマンドの起動
- (e) ロギング
- (f) スレーブサーバの場合はマスタサーバに定期通信

(2) クライアントデーモン

監視処理を行う。cronと同等の機構を実現し、チェックコマンド毎に設定した時間
に実行する。ただし複数のチェックコマンド実行が同時刻に発生した場合は、同時起動
による負荷増加を回避するために、逐次的に処理を行う様にしてある。クライアントデー
モンは以下の機能を持つ。

- (a) 情報収集および状況判定（チェックコマンドの起動）
- (b) 異常検出時および自動復旧時にサーバデーモンへ報告
- (c) サーバデーモンに定期通信

(3) コントロールコマンド

マスタサーバデーモンにメッセージを送り、監視システム全体の停止や再起動を行う。

(4) アクションコマンド群

マスタサーバデーモンにより起動され、障害レベルに応じた通知処理を行う。現在の
ところ、このコマンドはサーバデーモンに作り込まれている。なお通知方法は現時点で
は以下の3点である。

- (a) 電子メールによる運用者への通知（警告レベル）
- (b) ポケットベルによる運用者への通知（致命的レベル）
- (c) ログインメッセージによる利用者への通知（システムダウンなど）

(5) チェックコマンド群

情報収集・状況判定処理を行い、必要に応じて復旧処理も実行する。クライアントデー
モンより起動される。2. で示した監視項目数分のコマンドが存在する。以下に自動
復旧の例を示す。

- (a) 設定全ホストに対してping応答が無い場合、ネットワークインターフェイスの再
起動を行う。
- (b) プロセス継続性異常（特定デーモンが存在しない）時、プロセスの再起動を行う。

5. 設定方法

設定は以下の3つのファイルを行う。それぞれはテキストファイルである。

(1) システム設定ファイル

システム設定ファイルでは、監視ターゲットマシンと通信経路および通信条件、また
クライアント別のチェックコマンドの種類とその起動タイミングおよび対応アクション

名を設定する。表 1 に設定例を示す。

設定項目	設定内容解説
MASTER=ccadmin	マスターサーバ名
SLAVE=ccsp201e, ccsp217e	スレーブサーバ名
CLIENT=super, ccadmin:ccadmin	どのサーバから監視するか
CLIENT=ccsp201e, ccsp202e:ccsp201e	書式 クライアント名:サーバ名
CLIENT=ccsp217e, ccsp218e:ccsp217e	サーバ分繰り返す
ACT=mail2	定期通信エラー時のアクション名
DEBUG=ON	デバッグモード (運用状況の表示)
INTERVAL=300	生存確認間隔 (秒)
TIMEOUT=180	生存確認応答待ち時間 (秒)
TARGET=super	クライアント名
0, 10, 20, 30, 40, 50 * chk_ping mail2	チェックコマンド名の宣言
5, 15, 25, 35, 45, 55 * chk_nis mail2	書式 分 時 チェック名 アクション名
30 23 chk_su mail2	チェックコマンド分繰り返す
TARGET=ccsp201e, ccsp202e	クライアント分繰り返す
0, 30 * chk_mnt2 mail2	

表 1

上記設定の場合、サーバデーモンおよびクライアントデーモンの実行関係は図 1 の通りとなる。

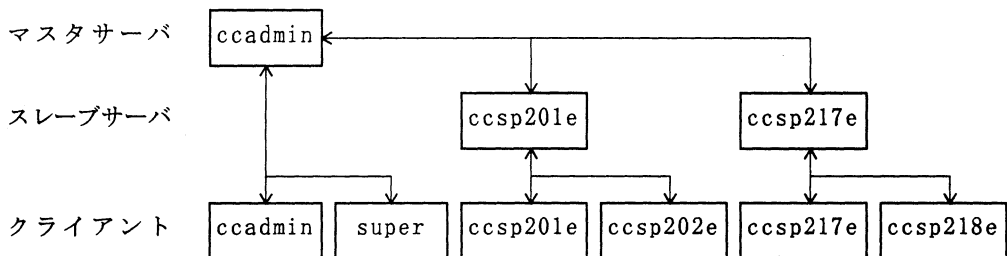


図 1

(2) アクションコマンド設定ファイル

アクションコマンド名に対応したパラメータを指定する。表 2 に例を示す。

設定項目	設定内容解説
mail2:wman	メールの送信先アドレス名
bells	ポケットベル送信にはパラメータは無し

表 2

(3) チェックコマンド設定ファイル

チェックコマンドに対して、起動機器毎の各種設定項目を既定する。チェック項目毎に設定方法が若干変わる。表 3 にネットワーク接続性監視チェックコマンドの設定例を示す。

設定項目	設定内容解説
MAC=super	実行マシン名
TARGET=ccfs1, ccfs2	ping対象マシン名
INTF=lo0	利用インターフェイス名
PSIZE=10	転送パケットサイズ
LOSS=75	異常判定基準：パケットロス基準値
CPUS=ON	CPUサーバかどうか
DUMMY=ON	自動復旧しないか
MAC=ccsp201e	マシン分繰り返す
TARGET=ccfs1	

表 3

6. 実行結果

実行結果は、システムログにシステム全体の状況概要が記録され、個々のチェックコマンド用ログには詳細が記録される。以下に両ログの内容と送信したメールの内容を示す。

(1) システムログ

システムログは、1行1メッセージの概要を記録している。内容は日付、時間、状態、状況である。状態は、正常処理のINFO、異常検出時のABNORMAL、復旧作業時のRECOVER、チェックコマンド実行不能時のERRORの4種類があり、ひとめで状態把握が可能である。さらに状況の部分を見ることにより、該当クライアント名とチェックコマンド名が分かる。各項目の位置が統一してあることで、後日集計が容易になっている。表 4 にシステムログの例を示す。

スレーブサーバデーモン、クライアントデーモンの生存証明通信は量が膨大になるため記録しないが、マスタサーバデーモン自身の生存証明としてコメント (a) を記録している。監視システムの運用状況は、このログを常時確認すれば把握が可能である。

(b) (c) については、チェックコマンドログおよびメール内容に対応したものを掲

載する。なおシステムログは実際のものであるが、内容は大幅に削除してある。

```
09/14/95 10:56:46 INFO System start.
09/14/95 10:57:00 INFO ccsp201e Start slave server.
09/14/95 10:57:12 INFO ccsp217e Start slave server.
09/14/95 10:57:49 INFO ccadmin Start client.
09/14/95 10:58:01 INFO super Start client.
09/14/95 10:58:50 INFO ccfs1 Start client.
09/14/95 11:05:04 INFO ccsp201e Start client.
09/14/95 11:05:04 INFO ccsp217e Start client.
09/14/95 11:10:01 INFO A regular communication. (a)
09/14/95 11:13:02 ABNORMAL ccsp217e Slave server is not responding.
09/14/95 11:25:03 ABNORMAL ccsp231e chk_swap
09/14/95 12:00:49 ABNORMAL ccfepl chk_ping (b)
09/14/95 12:10:36 RECOVER ccfepl chk_ping (c)
09/14/95 12:47:04 ABNORMAL ccsp263e Client is not responding.
09/17/95 02:43:40 ERROR cchsp chk_ping
09/19/95 10:00:00 INFO System restart.
09/20/95 16:50:21 INFO System exit.
```

表 4

(2) チェックコマンドログ

チェックコマンドログは、チェックコマンド名＋クライアント名単位で障害の詳細記録を残しており、ファイル名もチェックコマンド名_クライアント名としてある（表 5 は chk_ping_ccfepl の内容）。

```
09/14/95 12:00:49 ABNORMAL (b)
===== PING NOT RESPONDING LIST =====
System PSIZE LOSS(%) PERMIT_LOSS(%)
cciss1 10 100 75

09/14/95 12:10:36 RECOVER (c)
```

表 5

(3) メール内容

メールは、チェックコマンドログに記録された詳細情報も含め通知される。表 6 にメールの例を示す。

```
(b) に対するメール
Date: Thu, 14 Sep 1995 12:00:49 +0900
From: Watchman admin user <wman@ccadmin.center.ims.ac.jp>
Message-Id: <199509140300.MAA08839@ccadmin.center.ims.ac.jp>
```

To: wman@ccadmin.center.ims.ac.jp
Content-Length: 306

***** Watchman information *****

Host : ccfep1
Check com : chk_ping
Status : ABNORMAL
Data :
===== PING NOT RESPONDING LIST =====
System PSIZE LOSS(%) PERMIT_LOSS(%)
cciss1 10 100 75

(c) に対するメール

Date: Thu, 14 Sep 1995 12:10:36 +0900
From: Watchman admin user <wman@ccadmin.center.ims.ac.jp>
Message-Id: <199509140310.MAA09166@ccadmin.center.ims.ac.jp>
To: wman@ccadmin.center.ims.ac.jp
Content-Length: 200

***** Watchman information *****

Host : ccfep1
Check com : chk_ping
Status : RECVOER
Data :

表 6

7. 考 察

適切な異常判定基準値の設定は予想外に難解で、計算機毎の運用状況を熟知した上で決定しなければ有効な監視が行えないことを思い知らされた。特にCPUサーバにいたっては想像以上に負荷が高く、ディスクのbusy率が常時90%を越えているものがあつたり、スワップ領域を50%以上消費している状況などが観察できた。したがって現在の時点では現状把握するのに役立てている状態で、当初想定していた異常状態レベルでは、頻繁に報告が発生しているため異常通知や自動復旧は行っておらず本格運用に至っていない。パースト的な高負荷と継続的な高負荷を区別して判断する必要があると考えており、これに対応するコマンドの開発を行いながら徐々に最適判断値を決定していきたい。

別な問題点としてCPU負荷が高すぎる場合に、クライアントデーモンの応答がタイムアウトとして設定した3分を超過するという状況が観察された。タイムアウト値の延長は、監視時間間隔と監視計算機数に関係してくるので別な方法による対応、例えばシステムクライアントデーモンのnice値操作、を検討している。

監視結果を運用者だけに通知するだけでなく、いかにユーザに伝えるのかも現在検討している事項である。ユーザにとって障害発生によるサービスの停止状況よりも、いつサービスが開始されるか（復旧の見込み）が一番興味がある点だと思われるので、障害処置方法と平行して検討する必要がある。

8. 展 望

システム状況を把握するために、システムログを常時画面に表示し、更新される度に書き換えるツールを作成して監視を行っているが、将来的にはグラフィカルな表示をするツールを開発して、状況把握および詳細情報が簡単に引き出せる様に発展させていきたい。

むすび

現在並列計算が注目を集めているが、並列演算手法の確立と計算機資源の低価格化によって、今後多数計算機による粗結合の並列計算環境が増加してくることは想像に難くない。単体のコンピュータを考えた場合、安定利用のためにはメモリチップやハードディスクなどのデバイスの信頼性の向上は必須条件であるが、並列計算環境においては1台のコンピュータがマクロ的に1つの素子となるため、素子を連結するソフトウェアの信頼性の向上が必須条件となってくるであろう。この場合、素子を構成しているUNIXが永遠と利用されるかという問題には論を持たないが、当面UNIXを利用していく中でソフトウェアの信頼性がハードウェアの信頼性ほど高められないと思われるため、トラブルを直ちに検出し素子の回復や通知を行うシステムの必要性が増加してくる予感が本システムを構築していくなかで感じた。当システムは、大規模システムの運用管理者レベルから切望されるものであり、計算機利用者に直接縁があるものではないが、今後並列演算環境が一般的に普及した段階では、標準的な機能として重要な意味を持つと思われる。