

# I 部

## 目 次

巻頭言	コンピューター・ネットワークの効用 埼玉大学理学部長、 分子科学研究所評議員会会長 田 隅 三 生	1
1.	センターでの1年 青 柳 睦	2
2.	スーパーコンピュータワークショップの活動-----	4
3.	計算機システムの運用および使い方-----	6
3. 1	システムの構成と特徴-----	6
3. 2	キューの構成-----	12
3. 3	利用課金点数-----	14
4.	一般報告-----	16
4. 1	分子研ライブラリプログラムの収集と開発-----	16
4. 2	データベース開発状況-----	20
5.	平成9年度計算機稼働状況および利用者数-----	21
5. 1	利用申請プロジェクトおよび利用者数-----	21
5. 2	電力使用および計算機稼働状況システム稼働状況-----	21
5. 3	計算機利用状況-----	21
5. 4	クラス別CPU使用時間-----	22
5. 5	VPU使用時間-----	23
5. 6	ジョブ処理件数-----	24
6.	資料-----	25
6. 1	センター関連組織-----	25
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-----	26
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-----	27
6. 4	電子計算機センター運営委員会委員-----	29
6. 5	電子計算機センター職員-----	30
6. 6	応用プログラム相談員-----	30
6. 7	建物図-----	31
6. 8	マニュアル一覧-----	33
6. 9	利用者数とCPU時間の推移-----	45
7.	電子計算機センター将来計画-----	47



私がコンピューターというものを初めて使ったのは1959年のことで、既に40年近く前になる。それは、東大理学部物理教室の故高橋秀俊先生の研究室で後藤英一先生（当時若手の助教授、現在は神奈川大学教授）らが自作されたパラメロン計算機PC-1であった。図体は大きかったが、能力の点では現在のコンピューターとは比較にならないものであった。しかし、折にふれ懐しく思い出される。

当時、コンピューターが急速に進歩するであろうという確信は誰もがもっており、将来どのような計算ができるかについての予測も行われていた。現在、それらの多くは既に達成されている。しかし、私の記憶する限りでは、それらの予測は単一のコンピューターの能力に関するもので、多数のコンピューターをつないでネットワークを構成するという発想はなかったと思う。

分子研のコンピューターは所外の利用者にも多大の便宜を与えていて、日本の分子科学を支える大きな柱の一つとなっている。その原因の一つは、所外利用者については使用料が無料という分子研計算機センター発足以来のポリシーにあるが、もう一つはネットワークとデータ転送技術の進歩にあると思う。分子研コンピューターの能力がどれほど向上しても、自分の研究室に居ながら計算を進め、結果を取り出せないならば、利用価値はさほど大きくはならない。それが1980年代の終りごろまでの状況であったと思う。

ネットワークの効用は絶大なもので、電子メールの普及は手紙を書く（打つ）回数を激減させてしまった。そのお蔭で郵送費は近頃かなり減ったと思う。筆者が世話役を務めている赤外ラマン研究会では、今年の初めから約200名の会員（電子メールでアクセスできる会員）に電子メールでのニュースの配信をメーリングリストで行っている。配信頻度は平均して月に2回であるが、これを従来どおりの方式、つまり原稿を作成し、オリジナルを印刷し、コピーを200部とり、それぞれ封筒に入れ、宛名ラベルを貼り、郵便局に持って行くという手順で行うと、それだけで月に2日を費やしかねない。電子メールを使うと、原稿の作成と打込みだけで済んでしまうので、便利さをつくづく実感している。

そこで、ネットワークをもっと有効に利用できないものかと考えている。通常の形式の討論会を開く代わりに、例えば分子研のコンピューターをホストにして、「ネットワーク会議」を行うことはできないだろうか。技術面はよく分からないが、口頭発表とポスター発表の中間の形での討論会に各研究室の端末コンピューターを通じて参加することはできそうに思えるが、如何であろうか。参加者が一堂に会する学会・討論会はそれなりに有意義であるが、無駄も多いことは否めない。まず試験的に小規模な討論会をネットワーク会議で行ってみたいと思う。

## 1. センターでの1年

電子計算機センター 青柳 睦

### 汎用高速演算システムの更新

汎用高速演算システムの調達手続きを行ってきた。1999年3月、HSP、SP2、ファイルサーバー等から構成されている現有システムはNEC SX-5を中心とする新システムに更新される。新システムは、以下のような構成である。

- ・主演算システム
  - ・ NEC SX-5 … 32GFLOPS 以上, 主記憶 32GB, 一次作業用ディスク 500GB
- ・副演算システム
  - ・ IBM SP2 … 20GFLOPS 以上, 主記憶 4GB, 一次作業用ディスク 4GB/node
- ・ファイルサーバー
  - ・ DEC AlphaServer … 2CPU クラスタ, 保存ファイル用ディスク 約 400GB
- ・その他、フロントエンドサーバ、運用管理サーバ、ネットワーク機器

主演算システムの NEC SX-5 は共有メモリ型スーパーコンピュータで、現有スーパーコンピュータ SX-3/34R と同一アーキテクチャを持つベクトル並列計算機である。

3月から試験運用、4月から本稼働予定の SX-5 のジョブクラス（キュー構成）と課金係数（他の演算サーバとの比較）は以下のように設定される見込みである。

キュー名	メモリー (GB)	CPU時間 (時間)
H05S	0.5	6
H05M	0.5	12
H05L	0.5	48
H1S	1	24
H1L	1	48
H2S	2	12
H2L	2	24
H4S	4	12
H8(特別申請)	8	24
会話処理	0.25	10min

課金係数

計算機	現	新
SX-5(scalar)		0.10
SX-5(vector)		0.10
SX-3 (scalar)	0.12	0.08
SX-3 (vector)	0.12	0.04
HPC(scalar)	0.06	0.06
HPC(vector)	0.06	0.03
origin	0.03	0.03
SP2Wide	0.02	0.02
SP2Thin	0.01	0.01

## 次期スーパーコン調達

一昨年からセンター将来計画小委員会、スーパーコン仕様策定委員会を開催し、次期スーパーコンの更新に向けて準備を進めてきた。1998年末の文部省予算内示結果によれば、我々のスーパーコン予算は月額で当初の6分の5に削られ、レンタル期間は6年となることが決まっている。また1998年夏から秋にかけて、米国商務省と日本政府の間で、スーパーコンピュータ調達規則に関する協議が行われた。これを受けて、文部省においても調達手続きの見直しが行われ、調達に係わっている本センターも再三、本省に呼び出され説明を受けた。規則の中で、特に我々の次期スパコン仕様に直接関係する部分としては…

- (1)スーパーコンの単体CPUの性能及び総合（全体）演算性能は、仕様書から除く。
- (2)共有、又は分散等、スーパーコンのメモリアーキテクチャ等のハードウェア仕様は指定できない。

代わりに、これら性能に係わる仕様は、全てベンチマークによって評価することとなった。「仕様書は、調達機関が必要とするスパコンの性能および機能を実現できる機種を導入するために策定されるべきであって、計算機の理論性能やハードウェア形式を指定することは、潜在的供給可能業者（メーカ）を排除する危険がある」、と言うのが米国側の主張であった。

この背景には、1GFLOPS以下のCPUを多数搭載した分散共有メモリ計算機（例えば、cc-NUMA）や、分散メモリ超並列型の計算機分野において、米国メーカーが高性能機種を持っており、一方、国内のスパコンメーカーは、ベクトル機構を有する単体CPU性能の高い機種を製品化している事情がある。

次期スーパーコン調達では、ベンチマークテストで導入機種が決定されることは明かである。我々計算機センターの立場としては、自動並列コンパイラやプログラム開発支援ツールのみによって実現できる性能が一番高い機種に選定されるよう、ベンチマークプログラムを作成する予定である。すなわち、本センターのような共同利用施設に導入する機種としては、高度の並列化技術を要する（例えば、計算機メーカーの並列プログラミングの専門家がチューニングを行う）計算機は適さないからである。

現在、以下のようなベンチマークプログラムを用いて、次期スーパーコンピュータの性能評価試験書（仕様書の一部）を作成中である。分子軌道計算、分子動力学計算、モンテカルロ計算、波束動力学計算、線形代数演算（大次元行列対角化、連立一次方程式等）、RAIDディスクとCPU間データ転送試験プログラム、CPUノード間データ転送試験プログラム。1999年4月末までに仕様書を確定するので、利用者の皆様からの、提案、ご要望があればお聞かせ下さい。

## 2. スーパーコンピュータワークショップの活動

計算機センターでは、平成9年10月30日(木)、31日(金)の両日、スーパーコンピュータワークショップを開催した。59名の参加者があり、センターのマシンを使って得られた成果や、マシンの評価についてなど、さらに計算化学、理論化学と大規模計算の将来についてや、電子計算機センターに対する期待・要望などについても活発な議論が展開された。

### ～ スーパーコンピュータワークショッププログラム ～

日時 : 平成9年10月30日(木)～31日(金)  
場所 : 分子科学研究所電子計算機センター新棟2階大会議室

#### 10月30日(木)

- |             |                              |               |
|-------------|------------------------------|---------------|
| 13:30-14:15 | 「炭素新固体結晶相の構造と電子状態」           | 斎藤 晋 (東工大理)   |
| 14:15-14:45 | 「無限鎖高分子の振動解析用密度汎関数法プログラムの開発」 | 平田 聡 (分子研理論)  |
| 14:45-15:15 | 「励起分子と触媒系の電子状態と化学反応」         | 波田雅彦 (京大工)    |
| 15:15-15:45 | 「新しい電子状態・化学反応理論とソフトウェアの開発」   | 中野晴之 (東大工)    |
| 15:45-16:00 | coffee break                 |               |
| 16:00-16:45 | 「21世紀の分子計算」                  | 柏木 浩 (九工大情報工) |
| 16:45-17:30 | 「有機金属反応の理論的研究」               | 古賀申明 (名大情報文化) |
| 17:30-18:15 | 「スピン軌道CI法による重原子系の電子状態計算」     | 藪下 聡 (慶応理工)   |
| 18:30-20:30 | 懇親会                          |               |

10月31日(金)

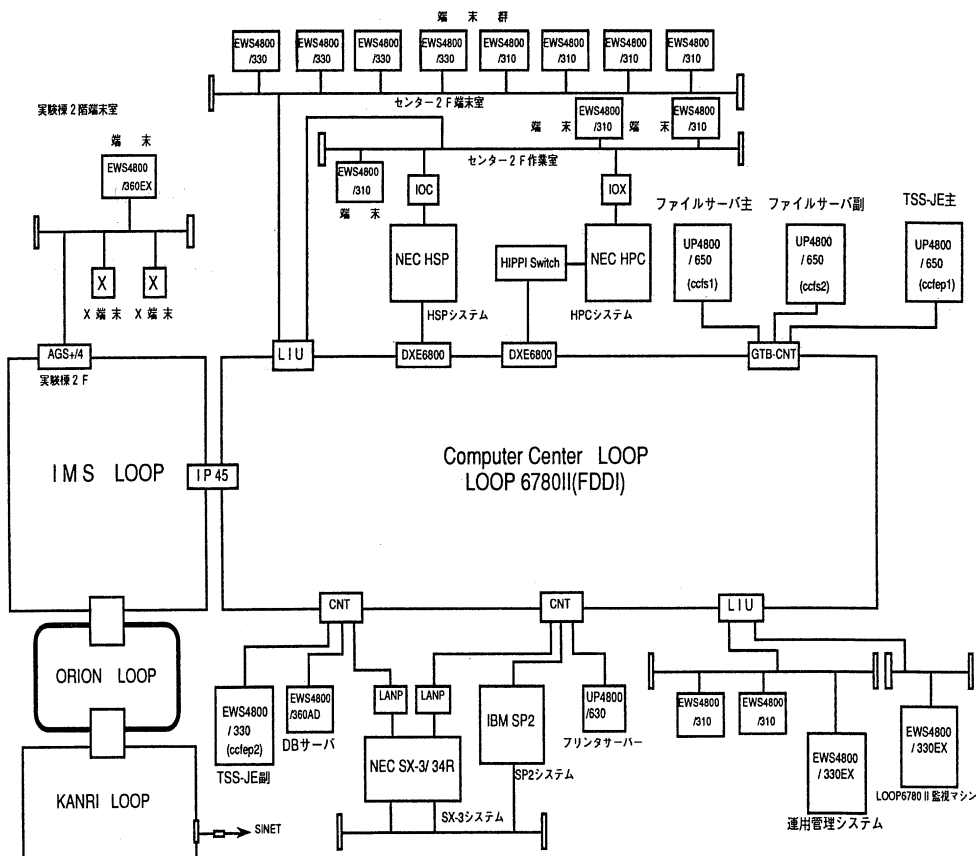
- 9:30-10:15 「並列コンピュータの現状」  
～ HP Exemplar S/Xクラスの観点から ～  
志村和紀、守屋暁 (NKK 株式会社)
- 10:15-11:00 「凝集系における古典・量子系動力学の計算機シミュレーション」  
岡崎 進 (東工大総合理工)
- 11:00-11:30 「並列環境におけるMO&MD計算」  
相田美砂子 (国立がん研)
- 11:30-12:00 「大規模計算による有機金属会合体の反応性の解明」  
森 聖治 (東大理)
- 12:00-13:00 昼 食
- 13:00-13:45 「MDによるProtein G の Unfolding Pathway の研究」  
高橋卓也 (東大総合文化)
- 「分子動力学の大規模計算に望ましい資源と実際」  
杉浦淳之介 (東大総合文化)
- 13:45-14:15 「分子および分子集合体の非摂動論的非線型感受率の計算法の開発」  
中野雅由 (大阪大理)
- 14:15-14:45 「MRCPA の開発と計算例」  
田中 皓 (電通大)
- 14:45-15:15 「Simulation of Peptides and Proteins in Generalized Ensembles」  
Ulrich Hansmann (分子研理論)
- 15:15-15:45 「液体の高次非線型分光」  
～基準振動に基づく2次元ラマンスペクトルの理論的解析～  
斉藤真司 (名大理)

### 3 計算機システムの運用および使い方

#### 3.1 システムの構成と特徴

当センターのシステムは、高速演算サーバー(日本電気製 HSP)、高速演算サーバー副システム(日本電気製 HPC)、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)による独立性を重視した UNIX 分散処理システムである(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)の支線ネットワーク間を統合的に接続・利用できる。
- ・ SINET(学術情報センター)を経由してインターネットにアクセスできる。



(注) 会話処理専用AIJサーバは、図に記載されていない。

図 3.1 システム全体構成概略図



### 3.1.1 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(平成8年10月よりユーザ公開運用停止。現在は、システムバックアップ用として運用)。
- ・ 約34.2GBの磁気ディスクと約91.6GBの高速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。
- ・ 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。

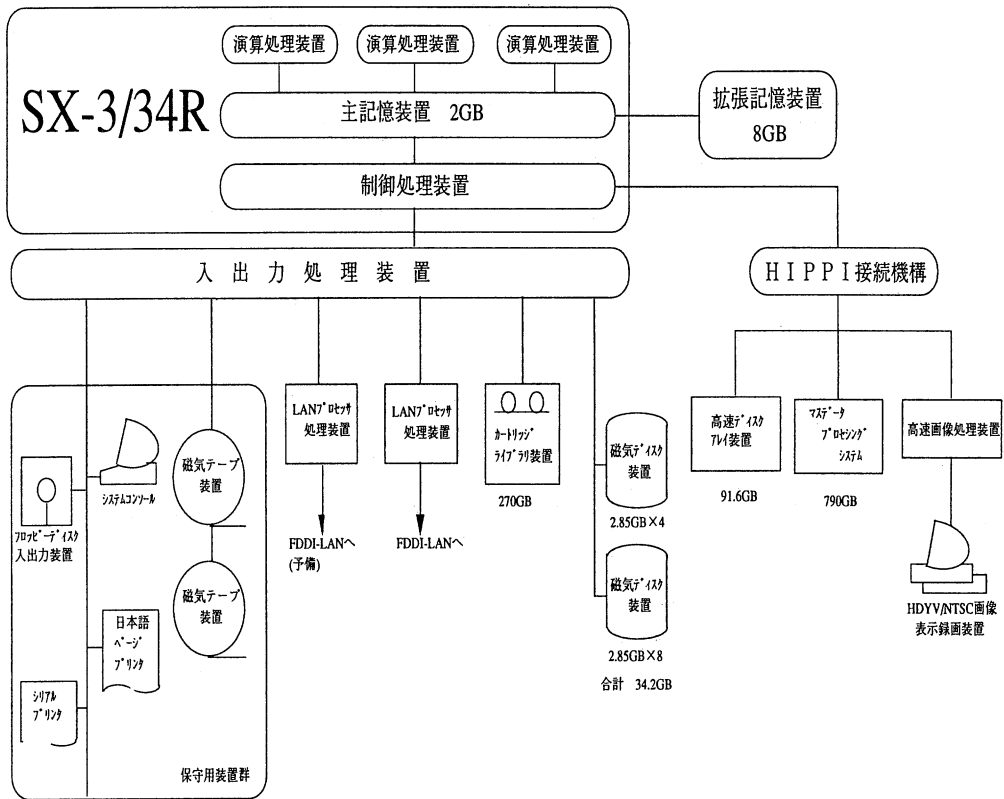


図 3.1.1 スーパーコンピュータシステム

### 3.1.2 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(NOS)、バッチ処理を行っている。
- ・ 約 68.7GB の高速アレイディスクを有している。

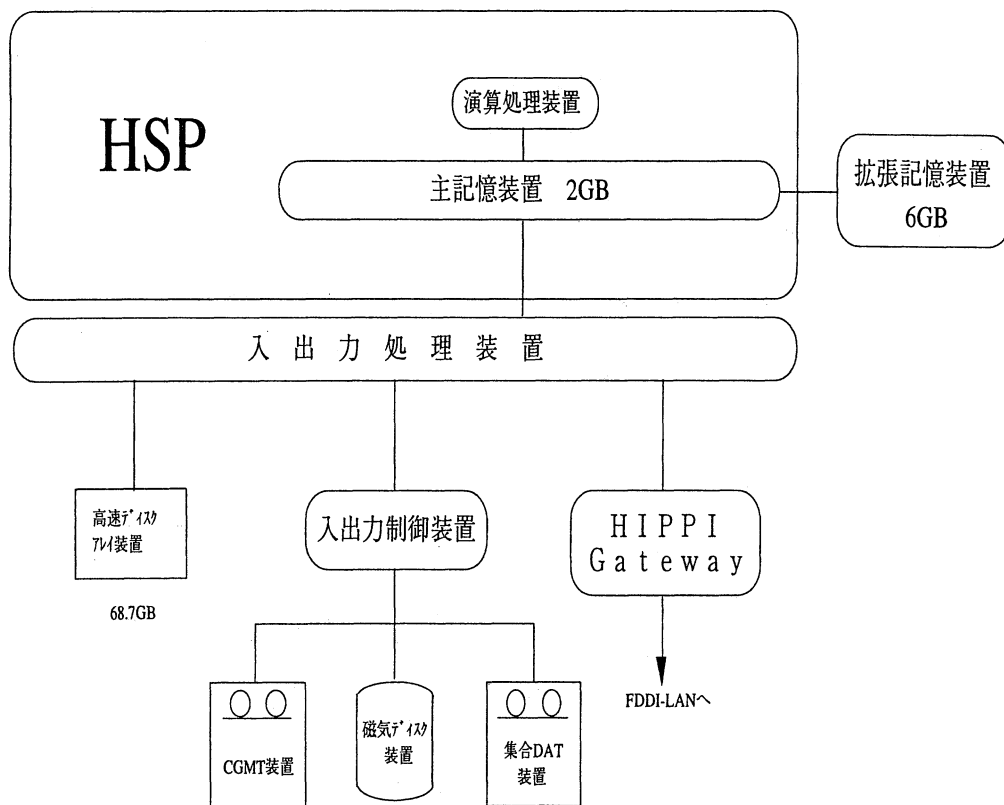


図 3.1.2 高速演算サーバシステム

### 3.1.3 高速演算サーバ副システム(日本電気製 HPC)

- ・ HPC では、ジョブ管理(NQS)、バッチ処理を行っている。
- ・ 約 33.6GB の高速アレイディスクを有している。

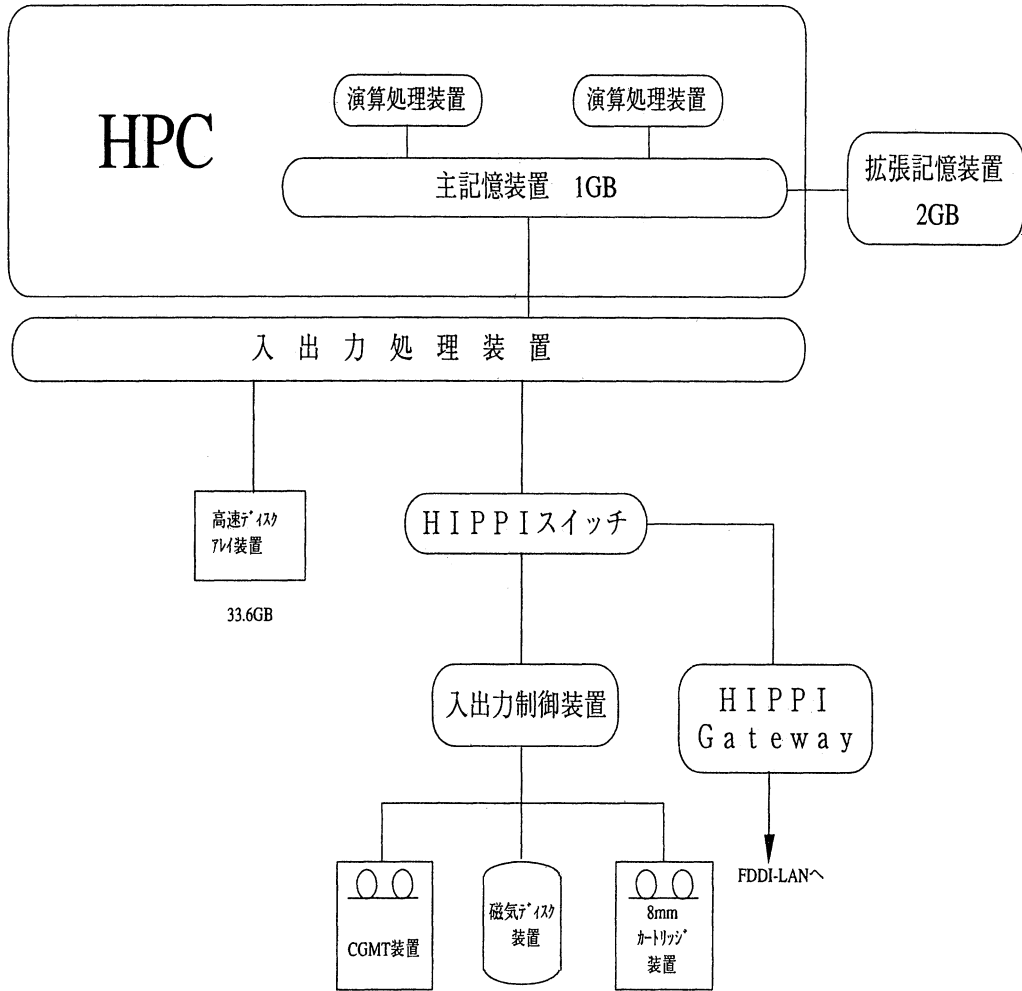


図 3.1.3 高速演算サーバ副システム

### 3.1.4 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。
- ・ 1つのノードを TSS 処理用に解放している。
- ・ 47 のノードからなるシステムで、各ノードには 4GB(総計 192GB)の磁気ディスクを有している。

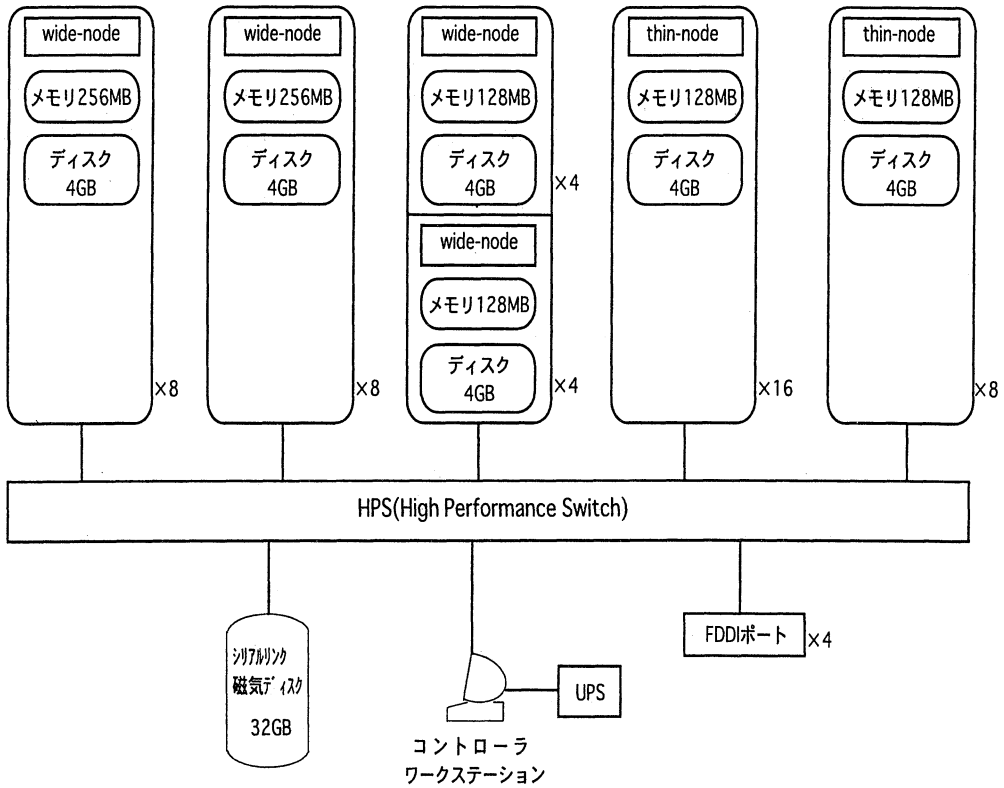


図 3.1.4 演算クラスタシステム

### 3.1.5 分散メモリ並列計算機システム(日立製 SR2201)

- ・ SR2201 では、ジョブ管理(NQS)、バッチ処理を行っている。
- ・ 2 ノードは TSS 処理用に解放している。
- ・ 12 ノードを並列ジョブ用として解放している。
- ・ 全部で 16 ノードからなるシステム (内 2 ノードは 1/0 等の基本システム専用) で、各ノードは 256MB のメモリを有している。
- ・ 総計 32GB (4GB を 8 台) のハードディスクを有している。

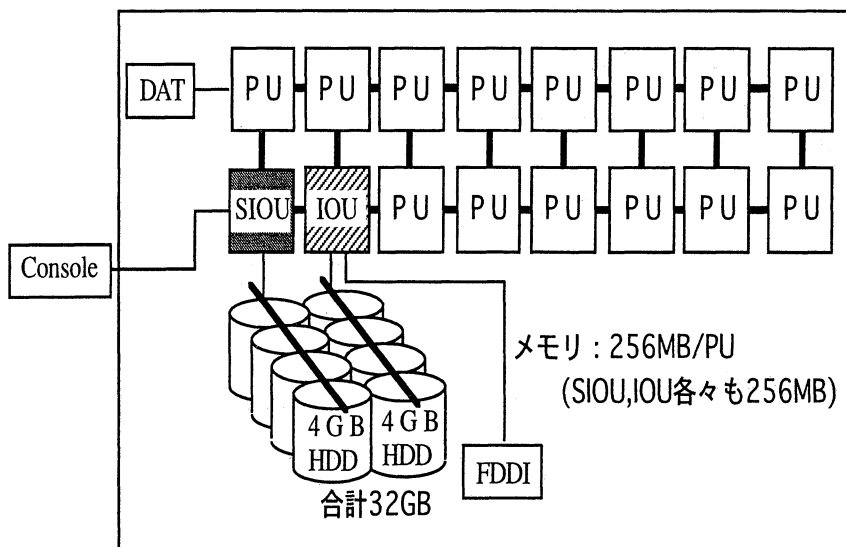


図 3.1.5 分散メモリ並列計算機システム

## 3.2 キューの構成

それぞれのホストにおけるキュー構成は以下のとおりである。表中の「多重度」は、各キューにおいて同時に実行出来るジョブの最大件数を指す。また「Complex」は、2つ以上のキューを併せて同時に実行出来るジョブの最大件数を指す。

### SX-3/34R (super) <ベクトルジョブ処理>

キュー名	CPU時間	主記憶	多重度	Complex	備考
V	—	—	—	—	V1~V3 へのパイプキュー
V1	3 時間	256MB	4	5	
V2	12 時間	256MB	3		
V3	12 時間	1GB	2	—	
VX	24 時間	2GB	1	—	特別申請ジョブ
MDPS	—	—	1	—	
会話処理	10 分	32MB	—	—	rshのみ

### HSP (cchsp) <高速シリアルジョブ処理>

キュー名	CPU時間	主記憶	多重度	Complex	備考
H	—	—	—	—	H1~H3 へのパイプキュー
H1	3 時間	256MB	2	—	
H2	6 時間	256MB	2		
H3	6 時間	512MB	1	3	
H4	12 時間	1GB	1		特別申請ジョブ
会話処理	3 時間	128MB	—	—	

### HPC (cchpc) <高速シリアルジョブ処理>

キュー名	CPU時間	主記憶	多重度	Complex	備考
W1	12 時間	128MB	2	—	
W2	12 時間	512MB	2	—	
会話処理	10 分	32MB	—	—	rshのみ

SP2 (sp2) <シリアルジョブ処理>

キュー名	CPU時間	主記憶	多重度	Complex	ノード数	備考
S1	12時間	128MB	6	8	8	Thin
S3	48時間	128MB	6			
S2	12時間	256MB	12	16	16	Wide
S4	48時間	256MB	12			

SP2 (sp2) <並列ジョブ処理>

キュー名	CPU時間	主記憶	多重度	Complex	ノード数	備考
P1	20分	128MB	1	1	3	Thin
P2	24時間	128MB	1	1	12	
P3	24時間	128MB	1	1	7	Wide

ISS (ccibm) <会話処理専用>

キュー名	CPU時間	主記憶	多重度	ノード数	備考
-	3時間	64MB	-	1	Thin ccsp265

SR-2201

キュー名	最大利用CPU数	CPU時間	備考
R	-	-	パイプキュー
R1	2	6時間	並列テストジョブ
R2	10	24時間	並列ジョブ

### 3.3 利用課金点数

利用課金は差し当たり徴収しませんが、予算の関係上、場合によっては消耗品等を何らかの方法で利用者に負担して頂くことがあるかもしれません。

計算機利用の配分のためにプロジェクト課題ごとに利用点数が割り当てられます。各グループは割り当てられた点数を越えて計算機を利用することはできません。利用点数  $P$  は次の式に従ってジョブごとに算出されます。

#### ◆スーパーコンピュータ（SX-3/34R）の利用点数算出法

$$P1 = \text{CPU} \times a + \text{VPU} \times b$$

CPU：全 cpu time

VPU：ベクトル演算器の cpu time

パラメータの値は、以下のとおりです。

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

$$P2 = \text{CPU} \times c$$

CPU：全 cpu time

パラメータの値は、以下のとおりです。

c：0.03/sec

#### ◆演算クラスシステム（SP2 Wide）の利用点数算出法

$$P3 = \text{CPU} \times d$$

CPU：全 cpu time

パラメータの値は、以下のとおりです。

d：0.02/sec

#### ◆演算クラスシステム（SP2 Thin）の利用点数算出法

$$P4 = \text{CPU} \times e$$

CPU：全 cpu time

パラメータの値は、以下のとおりです。

e：0.01/sec



◆高速演算サーバ副システム(HPC)の利用点数算出法

$$P5 = \text{CPU} \times f + \text{VPU} \times g$$

CPU : 全 cpu time

VPU : ベクトル演算器の cpu time

パラメータの値は、以下のとおりです。

f : 0.06/sec

g : 0.06/sec

◆分散メモリ並列計算機システム(SR2201)の利用点数算出方法

$$P6 = \text{CPU} \times h$$

CPU : 全 cpu time

パラメータの値は、以下のとおりです。

h: 0.002/sec

◆利用点数

$$\text{利用点数 } P = P1 + P2 + P3 + P4 + P5 + P6$$

◆各々の計算機システムにおける CPU 1 時間当たりの利用点数は、次のようになります。

SX-3/34R	432 点 (ベクトル演算装置も同じ点数)
HSP	108 点
SP2(Wide)	72 点
SP2(Thin)	36 点
HPC	216 点 (ベクトル演算装置も同じ点数)
SR2201	7.2 点

ただし、許可時間は CPU1 時間に対し 400 点が割り当てられている。

#### 4. 一般報告

##### 4.1 分子研ライブラリプログラムの開発

平成9年度のライブラリ開発計画を表 4.1.1 に示す。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プログラム開発を依頼し、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として登録してもらい、一般ユーザーに向けて公開している。

表 4.1.1 平成9年度ライブラリプログラム開発作業一覧

名 前	所属	職 名	内 容
西川武志	分子研	大学院生	Global Array Toolkit の SR2201 への移植
秦野 世	中京大	教授	分子軌道、電子密度の図形表示システム
木下朋子	お茶大	大学院生	QCLDB のリレーショナルデータベース版プロトタイプ の開発
望月祐志	科技団	特別研究員	分子物性評価向け分子軌道プログラムの整備

平成9年度に新規登録したライブラリプログラムは以下の6件である。

##### HSP 版

molpro96 MOLPRO96.4: complete system of ab initio programs

##### HPC 版

asl (SUBROUTINES) ASL/SX: Advanced Scientific Library/SX  
blas (SUBROUTINES) BLAS: Basic Linear Algebra Subprograms Rev.4.0  
imsl (SUBROUTINES) IMSL Fortran Numerical Libraries ver.3.0  
molpro96 MOLPRO96.4: complete system of ab initio programs

##### SP2 版

mulliken Mulliken version 2.48

表 4.1.2 プログラムライブラリー一覧

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

PROGRAM	PROGRAM TITLE
amos	AMOSS
asl	(SUBROUTINES) ASL/SX: Advanced Scientific Library/SX
blas	(SUBROUTINES) BLAS: Basic Linear Algebra Subprograms Rev.4.0
colmbs1	COLUMBUS: a program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc.
colmbs2	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
g94	GAUSSIAN94: ab initio molecular orbital calculations
gamess	general atomic and molecular electronic structure system
hitac	(SUBROUTINES) M680 or S820 -> SX-3 convert library
hondo7	HONDO version 7: ab initio MO calculation
hondo8	HONDO version 8.5: ab initio MO calculation
imsl	(SUBROUTINES) IMSL Fortran Numerical Libraries ver.3.0
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 engine
math	(SUBROUTINES) mathematical Library
meld	program for many electron description
mm2	molecular mechanics calculation by MM2 force field model
mopac7	MOPAC version 7: a general molecular orbital package
numpac	(SUBROUTINES) NAGOYA university mathematical program package
sxview	SXVIEW

\*\*\*\* HSP VERSION \*\*\*\*

PROGRAM	PROGRAM TITLE
asl	(SUBROUTINES) ASL/SX: Advanced Scientific Library/SX
blas	(SUBROUTINES) BLAS: Basic Linear Algebra Subprograms Rev.4.0
colmbs2	COLUMBUS: a program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc.

g92 GAUSSIAN92: ab initio molecular orbital calculations  
 g94 GAUSSIAN94: ab initio molecular orbital calculations  
 gamess general atomic and molecular electronic structure system  
 hitac (SUBROUTINES) M680 or S820 -> HSP convert library  
 hondo8 HONDO version 8.5: ab initio MO calculation  
 math (SUBROUTINES) mathematical Library  
 meld program for many electron description  
 mm2 molecular mechanics calculation by MM2 force field model  
 molpro96 MOLPRO96.4: complete system of ab initio programs  
 mopac7 MOPAC version 7:a general molecular orbital package  
 numpac (SUBROUTINES) NAGOYA university mathematical program package

\*\*\*\* HPC VERSION \*\*\*\*

PROGRAM	PROGRAM TITLE
asl	(SUBROUTINES) ASL/SX: Advanced Scientific Library/SX
blas	(SUBROUTINES) BLAS: Basic Linear Algebra Subprograms Rev.4.0
colmbs1	COLUMBUS: a program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc.
colmbs2	COLUMBUS: a program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc.
crys88	CRYSTAL88: ab initio LCAO-HF program for crystal systems
g94	GAUSSIAN94: ab initio molecular orbital calculations
gamess	general atomic and molecular electronic structure system
hondo8	HONDO version 8.5: ab initio MO calculation
imsl	(SUBROUTINES) IMSL Fortran Numerical Libraries ver.3.0
jamol4	ab initio LCAO MO SCF calculation
jason2	CASSCF calculation with large basis set
koto	KOTO: ab initio molecular orbital calculations
meld	program for many electron description
mm2	molecular mechanics calculation by MM2 force field model
molpro96	MOLPRO96.4: complete system of ab initio programs
mopac7	MOPAC version 7:a general molecular orbital package

\*\*\*\* SP2 VERSION \*\*\*\*

PROGRAM	PROGRAM TITLE
assign	assign diagram for the assignment of vib-rot spectra
atomci	Calculation of electronic states of atomic system
band1	extended HUCKEL calculations of one-dimensional polymers
bc3	Vibrational and rotasional 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
g94	GAUSSIAN94: ab initio molecular orbital calculations
g941	GAUSSIAN94: ab initio molecular orbital calculations (for LINDA)
gamess	GAMESS: ab initio molecular orbital calculation (for POE)
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
molpro96	MOLPRO96.4: complete system of ab initio programs
mulliken	Mulliken version 2.48
numpac	(SUBROUTINES) NAGOYA university mathematical program package
picmo	PICMO: The 2-D drawing system of MO and Electric density
series	LOOMIS-WOOD diagram for finding line series
tcg4mpl	(SUBROUTINES) tcg4mpl:interface from TCGMSG4.0 to IBM POE MPL
tcgmsg	(SUBROUTINES) TCGMSG:message passing library for theo. chem.
unics3	universal crystallographic computation program system
wigner	magnitudes of 3-J and 6-J symbols

\*\*\*\* MISC \*\*\*\*

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

## 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、現在公開中である。

### (1) QCLDB (量子化学文献データベース)

(開発代表者) 細谷治夫

*ab initio* MO 計算を扱った文献のデータベース。JAICI (日本化学情報協会) より世界中に販売されているとともに、毎年 Journal of Molecular Structure (ELSEVIER) より出版されている。(総件数 36,856)

### (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

力の定数に関する文献のデータベース。平成8年4月より公開している。

(総件数 1,681)

平成9年度に新規登録されたデータの件数は以下の通りである。

(1) QCLDB	4003 件
(2) FCDB	157 件

## 5 平成9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	153	596	51,619	38,574	29,954	15,429,600	11,981,456
	協力研究	9	13	1,240	1,130	322	452,000	128,900
	所内	23	118	16,651	14,986	12,069	5,994,400	4,827,634
生理学	施設利用	0	0	0	0	0	0	0
	所内	3	8	4,400	3,960	2,905	1,584,000	1,162,067
合計		188	735	73,910	58,650	45,250	23,460,000	18,100,057

注) ここでのCPU時間実績は、点数実績より逆算(点数/400=時間実績)を行って算出したものです。

### 5.2 電力使用および計算機稼働状況

年月	電力量 kWh	システム稼働時間						KW/ 稼働時間
		SX-3	HSP	HPC	SP2	SR	平均	
平成9年4月	372,970	708	710	710	710	0	710	525
5月	380,550	733	734	734	734	0	734	518
6月	407,430	702	708	708	708	0	707	576
7月	428,250	734	732	734	734	0	734	583
8月	408,130	732	734	734	734	0	734	556
9月	426,460	706	711	711	711	0	710	601
10月	352,460	674	674	671	674	0	673	524
11月	314,140	650	650	650	650	657	651	483
12月	339,090	733	734	734	734	744	736	461
平成10年1月	418,140	731	734	734	734	744	735	569
2月	339,100	662	662	651	662	672	662	512
3月	391,380	729	730	730	730	744	733	534
合計	4,578,100	8,494	8,513	8,501	8,515	3561	8,519	537

### 5.3 計算機利用状況

年月	CPU使用時間										VPU時間		ジョブ処理件数					
	SX-3	*3	HSP	*1	HPC	*2	SP2	*46	SR2201	*14	SX-3	*3	SX-3	HSP	HPC	SP2	SR2201	
平成9年4月	1,682	79	617	87	888	63	19,121	59	-	-	792	37	1,568	649	405	1,876	-	
5月	1,932	88	537	73	716	49	22,208	66	-	-	941	43	1,397	628	346	2,357	-	
6月	1,756	83	595	84	880	62	19,559	60	-	-	798	38	1,161	799	499	2,227	-	
7月	2,069	94	608	83	1,233	84	16,901	50	-	-	1,166	53	1,775	938	454	1,994	-	
8月	1,934	88	435	59	824	56	13,572	40	-	-	792	36	1,515	895	384	1,637	-	
9月	1,553	73	662	93	1,191	84	18,717	57	-	-	705	33	903	717	362	2,091	-	
10月	1,750	87	637	95	1,072	80	15,110	49	-	-	892	44	694	477	431	2,500	-	
11月	1,795	92	575	88	1,065	82	16,652	56	1,570	17	980	50	725	694	247	2,033	182	
12月	1,504	68	711	97	1,367	93	16,842	50	3,290	32	837	38	571	555	382	1,917	227	
平成10年1月	1,949	89	693	94	1,290	88	17,176	51	5,155	49	1,060	48	906	492	301	2,167	142	
2月	1,862	94	624	94	1,173	90	11,694	38	3,921	42	1,149	58	978	665	245	1,844	123	
3月	1,944	89	390	53	960	66	11,764	35	7,640	73	1,079	49	2,192	382	247	1,666	176	
合計	21,730	85	7,084	83	12,659	74	199,316	51	21,576	43	11,191	44	14,385	7,891	4,303	24,309	850	

## 5.4 クラス別 CPU 使用時間

### 5.4.1 SX-3/34R

	(V1)	(V2)	(V3)	(V4)	(V5)	(VX)	(VP)	(MDPS)	合計	(ETC)	総合計
平成9年4月	133:08:38	447:42:52	976:05:17	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1556:56:47	124:47:46	1681:44:33
5月	142:17:28	543:56:43	1210:10:22	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1896:24:33	36:00:09	1932:24:42
6月	87:39:47	617:39:29	954:50:16	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1660:09:32	95:39:16	1755:48:48
7月	111:43:17	501:49:47	1210:21:52	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1823:54:56	244:43:45	2068:38:41
8月	84:30:43	345:39:08	919:32:48	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1349:42:39	583:51:24	1933:34:03
9月	101:34:50	306:15:06	864:16:53	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1272:06:49	280:59:55	1553:06:44
10月	140:41:25	312:30:35	1047:15:20	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1500:27:20	249:19:24	1749:46:54
11月	79:42:14	343:21:34	955:10:05	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1378:13:53	416:34:51	1794:48:44
12月	104:05:40	168:36:11	1033:48:27	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1306:30:18	197:01:24	1503:31:42
平成10年1月	175:51:31	310:18:25	1167:57:30	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1654:07:26	295:05:23	1949:12:49
2月	218:53:13	321:09:04	1254:41:03	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1794:43:20	66:51:23	1861:34:43
3月	141:30:46	627:28:00	1110:44:30	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1879:43:16	64:43:30	1944:26:46
合計	1521:39:32	4846:26:54	12704:54:23	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	19073:00:49	2655:38:20	21728:39:09

### 5.4.2 HSP

HSP	(H1)	(H2)	(H3)	(H4)	合計	(ETC)	総合計
平成9年4月	149:25:38	206:09:35	189:09:49	0:00:00	544:45:02	72:28:06	617:13:08
5月	92:24:04	239:48:01	170:42:41	0:00:00	502:54:46	33:54:28	536:49:14
6月	171:24:38	232:12:47	158:38:19	0:00:00	562:15:44	33:09:06	595:24:50
7月	137:14:10	242:13:17	145:21:02	0:00:00	524:48:29	83:08:09	607:56:38
8月	80:25:41	199:38:42	128:14:56	0:00:00	408:19:19	26:39:36	434:58:55
9月	152:33:35	219:31:49	133:41:34	0:00:00	505:46:58	156:20:46	662:07:44
10月	155:57:55	171:49:27	100:36:34	0:00:00	428:23:56	208:06:48	636:30:44
11月	149:08:21	204:12:52	151:52:53	0:00:00	505:14:06	69:45:36	574:59:42
12月	136:49:38	196:49:15	121:54:43	0:00:00	455:33:36	255:54:34	711:28:10
平成10年1月	76:51:04	143:13:01	87:46:37	0:00:00	307:50:42	385:12:49	693:03:31
2月	112:59:25	207:49:20	119:53:31	0:00:00	440:42:16	183:15:40	623:57:56
3月	66:37:56	140:45:58	143:25:34	0:00:00	350:49:28	39:03:05	389:52:33
合計	1481:52:05	2404:14:04	1651:18:13	0:00:00	5537:24:22	1546:58:43	7084:23:05

### 5.4.3 HPC

	(W1)	(W2)	合計	(ETC)	総合計
平成9年4月	90:43:19	377:07:58	467:51:17	419:52:21	887:43:38
5月	125:20:55	244:35:31	369:56:26	345:46:58	715:43:24
6月	212:37:34	342:13:43	554:51:17	325:26:09	880:17:26
7月	222:49:07	460:29:05	683:18:12	549:41:03	1232:59:15
8月	223:28:21	267:19:03	490:47:24	333:00:22	823:47:46
9月	140:38:57	482:44:34	623:23:31	567:50:56	1191:14:27
10月	167:20:29	451:16:32	618:37:01	453:43:05	1072:20:06
11月	127:52:10	398:13:40	486:03:51	578:26:17	1064:30:08
12月	148:49:51	515:38:32	664:28:23	702:29:03	1366:57:26
平成10年1月	118:52:00	379:37:45	498:29:45	791:02:27	1289:32:12
2月	145:06:05	478:43:00	623:49:05	548:41:47	1172:30:52
3月	143:23:55	349:59:41	493:23:36	466:51:17	960:14:53
合計	1827:00:44	4747:59:04	6574:59:48	6082:51:45	12657:51:33



#### 5.4.4 SP2

	(S1)	(S2)	(S3)	(S4)	(P1)	(P2)	(P3)	合計
平成9年4月	610:08:43	1583:40:28	717:59:31	5167:56:41	4:14:09	7020:14:37	4016:54:37	19121:08:46
5月	883:56:44	1799:02:38	1494:19:33	5838:37:00	23:58:41	7597:04:19	4571:27:34	2220:26:29
6月	645:23:35	1683:48:50	1716:40:18	4608:32:23	18:23:12	7420:43:13	3465:12:46	19558:44:17
7月	664:36:31	2131:49:46	1031:18:16	4445:56:59	15:28:13	5926:44:33	2684:48:01	16900:42:19
8月	257:13:18	1369:06:09	543:37:53	3006:38:30	48:48:00	5659:18:37	2687:36:04	13572:18:31
9月	610:49:17	1660:35:01	1577:03:03	4994:11:55	11:29:18	7143:46:54	2718:53:03	18716:48:31
10月	823:13:09	1508:10:11	1173:54:28	4978:26:09	7:34:16	5114:17:59	1504:22:52	15109:59:04
11月	949:21:47	1563:48:48	1566:14:42	5726:33:13	1:24:57	5362:58:03	1481:43:55	16652:05:25
12月	674:25:38	1146:17:46	2223:15:10	4638:05:44	0:49:39	6312:32:54	1846:40:22	16842:07:13
平成10年1月	979:03:50	1848:57:20	1897:17:48	5199:58:23	1:44:41	5097:27:20	2151:37:03	17176:16:25
2月	391:13:22	1594:35:13	1379:36:24	5588:29:25	5:41:21	1443:45:47	1290:22:45	11693:44:17
3月	604:40:47	1308:22:45	1434:02:50	3288:10:58	1:28:56	3167:36:52	1960:02:19	11764:25:27
合計	8094:06:41	19198:14:55	16755:29:56	57481:37:20	141:05:23	67266:31:08	30379:41:21	199316:46:44

#### 5.4.5 SR2201

SR2201	(R1)	(R2)	合計
平成9年11月	66:23:44	1503:58:23	1570:22:07
12月	77:11:00	3213:16:47	3290:27:47
平成10年1月	172:54:53	4982:16:54	5155:11:47
2月	121:42:04	3798:56:32	3920:38:36
3月	1091:56:04	6547:45:45	7639:41:49
合計	1530:07:45	20046:14:20	21576:22:05

### 5.5 VPU 使用時間

#### 5.5.1 SX-3/34R

	(V1)	(V2)	(V3)	(V4)	(V5)	(VX)	(VP)	(MDPS)	合計	(ETC)	総合計
平成9年4月	37:53:50	114:40:46	447:43:21	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	600:17:57	191:36:59	791:54:56
5月	58:42:56	148:14:57	668:45:14	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	875:43:07	65:11:01	940:54:08
6月	27:42:41	173:26:00	327:24:44	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	528:33:25	268:25:21	797:58:46
7月	26:01:25	152:39:52	536:11:34	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	714:52:51	450:47:47	1165:50:38
8月	14:42:45	82:40:04	299:08:15	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	396:31:04	395:40:44	792:11:48
9月	18:13:15	97:43:00	273:12:43	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	389:08:58	315:52:43	705:01:41
10月	45:18:50	124:45:39	335:46:04	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	505:50:33	386:00:12	891:50:45
11月	23:58:37	174:23:51	376:39:28	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	575:01:56	405:12:53	980:14:49
12月	10:19:29	26:24:10	243:10:25	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	279:54:04	557:30:04	837:24:08
平成10年1月	55:04:04	115:34:31	405:57:03	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	576:35:38	483:35:00	1060:10:38
2月	65:47:05	116:58:36	552:23:18	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	735:08:59	413:57:00	1149:05:59
3月	28:28:47	188:31:41	417:08:29	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	634:08:57	445:08:35	1079:17:32
合計	412:13:44	1516:03:07	4883:30:38	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	6811:47:29	4380:08:19	11191:55:48

## 5.6 ジョブ処理件数

### 5.6.1 SX-3/34R

	(V1)	(V2)	(V3)	(V4)	(V5)	(VX)	(VP)	(MDPS)	合 計
平成9年4月	749	146	673	0	0	0	0	0	1,568
5月	751	184	462	0	0	0	0	0	1,397
6月	603	200	358	0	0	0	0	0	1,161
7月	981	192	602	0	0	0	0	0	1,775
8月	595	481	439	0	0	0	0	0	1,515
9月	513	96	294	0	0	0	0	0	903
10月	311	99	284	0	0	0	0	0	694
11月	317	123	285	0	0	0	0	0	725
12月	219	81	271	0	0	0	0	0	571
平成10年1月	325	141	440	0	0	0	0	0	906
2月	555	132	291	0	0	0	0	0	978
3月	863	401	928	0	0	0	0	0	2,192
合 計	6,782	2,276	5,327	0	0	0	0	0	14,385

### 5.6.2 HPC

	(W1)	(W2)	合 計
平成9年4月	185	220	405
5月	184	162	346
6月	292	207	499
7月	253	201	454
8月	266	118	384
9月	132	230	362
10月	254	177	431
11月	98	149	247
12月	137	245	382
平成10年1月	126	175	301
2月	95	150	245
3月	94	153	247
合 計	2,116	2,187	4303

### 5.6.3 HSP

	(H1)	(H2)	(H3)	(H4)	合 計
平成9年4月	328	213	108	0	649
5月	265	234	129	0	628
6月	478	193	128	0	799
7月	497	226	215	0	938
8月	574	220	101	0	895
9月	411	193	113	0	717
10月	256	154	67	0	477
11月	370	239	85	0	694
12月	266	205	84	0	555
平成10年1月	284	151	57	0	492
2月	336	193	136	0	665
3月	247	123	135	0	505
合 計	4,312	2,344	1,358	0	8,014

### 5.6.4 SR2201

	(R1)	(R2)	合 計
平成9年11月	128	54	182
12月	153	74	227
平成10年1月	67	75	142
2月	58	65	123
3月	126	50	176
合 計	532	318	850

### 5.6.5 SP2

	(S1)	(S2)	(S3)	(S4)	(P1)	(P2)	(P3)	合 計
平成9年4月	503	548	179	461	81	51	53	1,876
5月	625	687	220	516	178	52	79	2,357
6月	511	835	231	493	48	48	61	2,227
7月	388	732	178	428	93	82	93	1,994
8月	283	695	74	349	108	75	53	1,637
9月	519	625	256	421	41	86	143	2,091
10月	826	743	300	421	35	59	116	2,500
11月	558	691	221	417	12	62	72	2,033
12月	466	655	198	487	31	54	26	1,917
平成10年1月	537	757	290	496	17	39	31	2,167
2月	469	611	101	399	43	91	130	1,844
3月	393	507	218	299	29	86	134	1,666
合 計	6,078	8,086	2,466	5,187	716	785	991	24,309

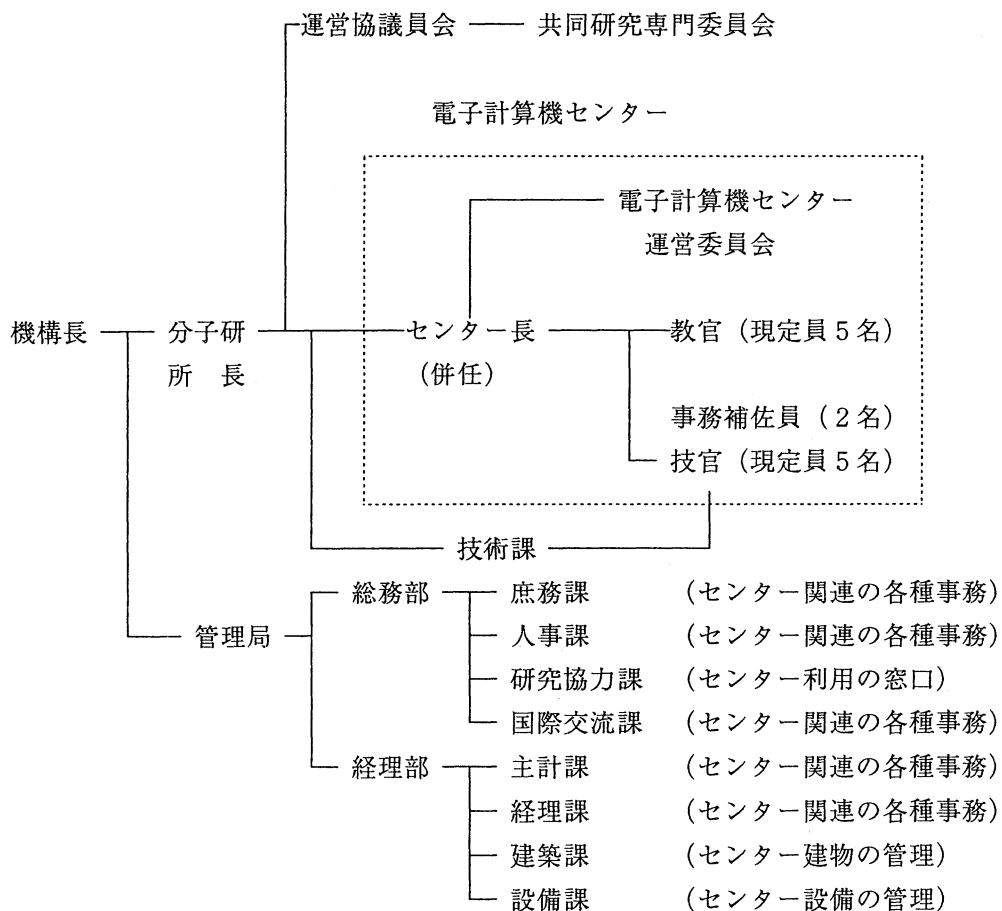
## 6. 資料

### 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委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9年度、平成10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	〃
平田文男	分子研理論研究系教授	分子研所内委員
岡本祐幸	分子研理論研究系助教授	〃
片岡洋右	法大教授	分子研所外委員
永瀬茂	都立大教授	〃
古賀伸明	名大助教授	〃
齋藤晋	東工大助教授	〃
上野孝治	基生研発生生物学研究系助教授	基生研委員
永山国昭	生理研分子生理研究系教授	生理研委員

#### 6. 5 電子計算機センター職員（平成10年11月現在）

岩田末廣	センター長（併任）
青柳睦	助教授
南部伸孝	助手
高見利也	助手
大野人侍	助手
伊藤正勝	非常勤研究員
南野智	技官
西本史雄	技官（班長）
水谷文保	技官（主任）
手島史綱	技官
内藤茂樹	技官
加納聖子	事務補佐員
禿子瞳	事務補佐員

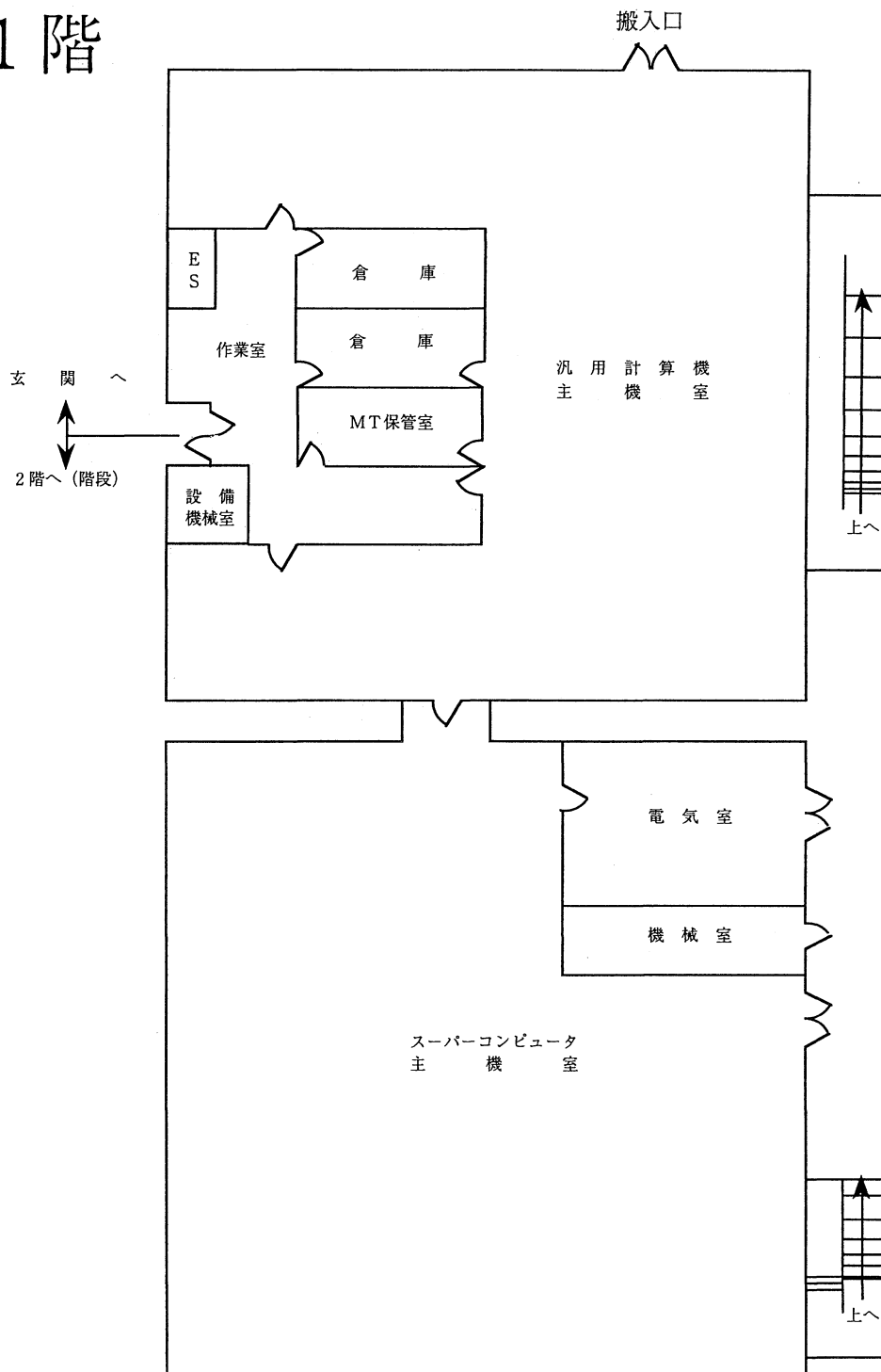
#### 6. 6 応用プログラム相談員一覧

西川武志	特別研究学生	平成9年6月～平成10年3月（平成9年度）
岡田一俊	総研大大学院生	平成9年6月～平成10年3月（平成9年度）
武藤明子	特別研究学生	平成9年6月～平成10年3月（平成9年度）
廣津昌和	特別研究学生	平成10年6月～平成10年11月（平成10年度）
木下朋子	総研大大学院生	平成10年6月～平成11年3月（平成10年度）



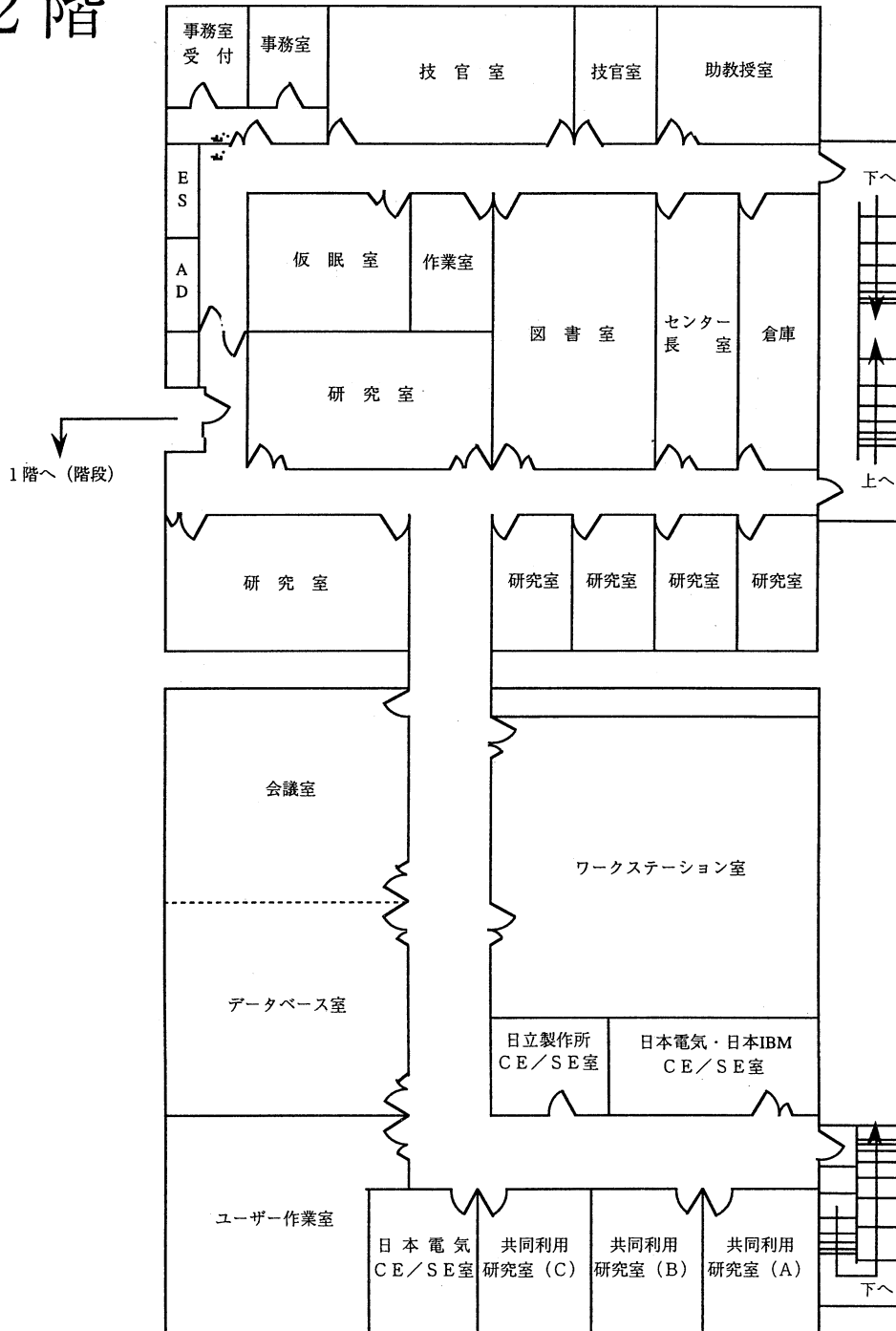
6.7 建物図

# 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 マニュアル一覧

### 6.8.1 マニュアル一覧と購入方法

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、HSP および HPC 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 村田

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・ビー・エム株式会社 中部システム事業本部第二営業部

担当 後藤

電話 052-954-3127

#### <SR2201 用マニュアルの購入申込先>

〒101-0054 東京都千代田区神田錦町 2-1-5(日立印刷ビル)

(株)日和 出版センタ

電話 03-5281-5054 FAX. 0120-210-454

受付時間 9:00 A.M.～5:30 P.M. 土曜、日曜、祝祭日は休

### 6.8.2 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/IEC 9592-1 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ュ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) C-ANALYZER/SX 利用の手引き

SUPER-UX の C-ANALYZER/SX の使用方法について説明したものです。

C-ANALYZER/SX はスーパーコンピュータ SX-3 システムの能力を最大限に引き出すための性能向上支援ツールであり、C/SX 言語に対応しています。

(15) 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。

(16) DBX 利用の手引

SUPER-UX の dbx の使用方法について説明したものです。dbx 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。

(17) 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。

(18) 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。

(19) 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。

(20) 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。

(21) 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)の各サブルーチンの計算方法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 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(Advanced Scientific Library/SX)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。

(23) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 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(Advanced Scientific Library/SX)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(FFT)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 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(Advanced Scientific Library/SX)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。

(25) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 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(Advanced Scientific Library/SX)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。

(26) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 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(Advanced Scientific Library/SX)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(FFT)、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。

(27) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(並列処理機能編)

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(Advanced Scientific Library/SX)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(FFT)について説明したものです。

(28) 科学技術計算ライブラリ C言語インターフェース ASLCINT/SX 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 C言語インターフェース

ASLCINT/SX (Advanced Scientific Library C INterface/SX)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。

- (29) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 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 C 言語インターフェース ASL/SX(Advanced Scientific Library C INterface/SX)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(FFT)について説明したものです。

- (30) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 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 C 言語インターフェース ASLCINT/SX(Advanced Scientific Library C INterface/SX)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。

- (31) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 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 C 言語インターフェース ASLCINT/SX(Advanced Scientific Library C INterface/SX)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。

- (32) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 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 C 言語インターフェース ASLCINT/SX(Advanced Scientific Library C INterface/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(FFT)、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。

- (33) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 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 C 言語インターフェース ASLCINT/SX(Advanced Scientific Library/SX)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(FFT)について説明したものです。

### 6.8.3 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 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 use 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 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 User's Guide(Algorithms)

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

(19) Mathematical Library/SX 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/S2 User's Guide(Basic Functions Vol.1)

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

This manual's 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 User's Guide(Basic Functions Vol.2)

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

This manual's 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 User's Guide(Basic Functions Vol.3)

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

This manual's 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 User's Guide(Basic Functions Vol.4)

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

This manual's 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 User's Guide(Extended Function)

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

This manual's 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 User's Guide(Parallel Processing Functions)

This book describes general concepts, functions, and methods of using the Advanced Scientific Library/SX(ASL/SX), 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.

#### 6.8.4 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)

(26) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第1分冊)

(27) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第2分冊)

- (28) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第 3 分冊)
- (29) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第 4 分冊)
- (30) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(高速機能編)
- (31) 科学技術計算ライブラリ C 言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(並列処理機能編)

### 6.8.5 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)

### 6.8.6 HPC 用マニュアル

- (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) FORTRAN90/SX 言語説明書
- (10) FORTRAN90/SX: プログラミングの手引
- (11) FORTRAN90/SX 並列処理機能利用の手引
- (12) ANALYZER90/SX 利用の手引
- (13) C-ANALYZER-P/SX 利用の手引
- (14) DBX 利用 の手引
- (15) PDBX 利用 の手引
- (16) XDBX 利用 の手引
- (17) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(基本機能編 1/4)
- (18) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(基本機能編 2/4)
- (19) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(基本機能編 3/4)
- (20) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(基本機能編 4/4)
- (21) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(高速機能編)
- (22) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(並列処理機能編)
- (23) 科学技術計算ライブラリ C言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第1分冊)
- (24) 科学技術計算ライブラリ C言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第2分冊)
- (25) 科学技術計算ライブラリ C言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第3分冊)
- (26) 科学技術計算ライブラリ C言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第4分冊)
- (27) 科学技術計算ライブラリ C言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(高速機能編)
- (28) 科学技術計算ライブラリ C言語インターフェース ASLCINT/SX 利用の手引(並列処理機能編)

## 6.8.7 SP2 用マニュアル

### 6.8.7.1 AIX 4.1.4 関連

- (1) SC23-2550-03 AIX Version 4.1 Installation Guide
- (2) SC23-2527-03 AIX Version 4 Getting Started
- (3) SC88-6853-03 バージョン 4.1 ネットワーク・インストール・マネージメント・ガイドおよびリファレンス

### 6.8.7.2 IBM C Set++ for AIX Version 3 Release 1 関連

- (4) SX09-1300-01 IBM CSet++ for AIX Reference Summary
- (5) SX88-7017-00 CSet++ for AIX バージョン 3 リファレンス・サマリー
- (6) SC09-1968-01 IBM CSet++ for AIX User's Guide
- (7) SC88-7359-00 CSet++ for AIX バージョン 3 ユーザーズ・ガイド
- (8) SC88-7396-00 CSet++ for AIX バージョン 3 ランゲージ・リファレンス
- (9) SC88-7361-00 CSet++ for AIX バージョン 3 クラス・ライブラリー・ユーザーズ・ガイド
- (10) SC09-2202-01 LPEX User's Guide and Reference
- (11) SC09-2201-01 Program Builder User's Guide
- (12) SC23-2666-00 AIX Version 4.1 iFOR/LS Tips and Techniques
- (13) SC88-6858-00 AIX バージョン 4.1 iFOR/LS システム・マネージメント・ガイド

#### 6.8.7.3 Parallel System Support Program (PSSP) Version 2 Release 1 関連

- (14) GC23-3902-01 IBM RISC System/6000 Scalable POWERparallel Systems System Planning
- (15) GC88-6514-00 RISC システム/6000 スケーラブル・パワー並列システム SP インストール・ガイド
- (16) GC23-3897-01 IBM RISC System/6000 Scalable POWERparallel Systems Administration Guide
- (17) GC23-3900-01 IBM RISC System/6000 Scalable POWERparallel Systems command and Technical Reference
- (18) GC23-3899-01 IBM RISC System/6000 Scalable POWERparallel Systems Diagnosis and Messages Guide

#### 6.8.7.4 Parallel Environment (PE) Version 2 Release 1 関連

- (19) GC88-6450-00 AIX 並列処理環境バージョン 2.1 入門
- (20) GC88-6447-00 AIX 並列処理環境バージョン 2.1 インストール、管理および診断ガイド
- (21) GC88-6446-00 AIX 並列処理環境バージョン 2.1 オペレーションおよびユーザーズ・ガイド
- (22) GC88-6448-00 AIX 並列処理環境バージョン 2.1 MPL プログラミングおよびサブルーチンリファレンス
- (23) GC88-6449-00 AIX 並列処理環境バージョン 2.1 MPI プログラミングおよびサブルーチンリファレンス

#### 6.8.7.5 IBM PVMe for AIX Version 2 Release 1 関連

- (24) GC23-3884-00 IBM PVMe for AIX User's Guide and Subroutine Reference Version 2, Release 1

#### 6.8.7.6 Performance Toolbox for AIX Version 2 Release 1

- (25) SC23-2625-03 Performance Toolbox for AIX Guide and Reference Version 1.2 and 2

#### 6.8.7.7 AIX ESSL/6000 V2.2.2 関連

## 6.8.8 SR2201 用マニュアル

資料番号	マニュアル名
6A20-3-001	HI-UX/MPP 概説
6A20-3-010	HI-UX/MPP ユーザーズガイド
6A20-3-011(E)	HI-UX/MPP Command Reference
6A20-3-020	HI-UX/MPP アプリケーションプログラマーズガイド
6A20-3-021	HI-UX/MPP リモート DMA 転送使用の手引-C
6A20-3-022	HI-UX/MPP 並列アプリケーションプログラマーズガイド-C
6A20-3-023(E)	HI-UX/MPP Network Applications Programmer's Guide
6A20-3-024(E)	HI-UX/MPP Programmer's Reference
6A20-3-025	HI-UX/MPP 並列アプリケーションプログラマーズガイド-F
6A20-3-030	HI-UX/MPP システム管理者ガイド
6A20-3-031	HI-UX/MPP 日本語使用ガイド
6A20-3-032(E)	HI-UX/MPP System and Network Administrator's Reference
6A20-3-026	HI-UX/MPP MPI PVM 使用の手引
8X20-3-235	プログラムプロダクト OSCNQS NQS システム管理者ガイド
8X20-3-230	プログラムプロダクト OSCNQS NQS ユーザーズガイド
8X20-3-506	プログラムプロダクト NFS/MPP ガイド
6A20-3-100	FDDI ドライバ
8X20-3-215	HI-UX/MPP OSCXWN X Window System ユーザーズガイド(X11R5)
8X20-3-216	HI-UX/MPP OSCXWN Xlib プログラマーズガイド(X11R5)
8X20-3-217	HI-UX/MPP OSCXWN X ツールキットインテリジンスプログラミングマーズガイド(X11R5)
8X20-3-218	HI-UX/MPP OSCXWN Xlib リファレンス(X11R5)
8X20-3-219	HI-UX/MPP OSCXWN X ツールキットインテリジンスリファレンス(X11R5)
8X20-3-206	HI-UX/MPP OSCMTF 日立 Motif ユーザーズガイド(R1.2)
8X20-3-207	HI-UX/MPP OSCMTF 日立 Motif プログラマーズガイド(R1.2)
8X20-3-208	HI-UX/MPP OSCMTF 日立 Motif スタイルガイド(R1.2)
8X20-3-209	HI-UX/MPP OSCMTF 日立 Motif プログラマーズリファレンス(R1.2)
6A20-3-200	プログラムプロダクト OSCBGT 運用ガイド
3000-3-150	パフォーマンスモニタ for SR2201
6A20-3-301	最適化 C 言語
6A20-3-302	最適化 C 使用の手引
6A20-3-303	最適化 C++ 使用の手引
6A20-3-313	HI-UX/MPP 最適化 FORTRAN77 言語

6A20-3-314	HI-UX/MPP 最適化 FORTRAN77 使用の手引
6A20-3-315	HI-UX/MPP リモート DMA 転送 使用の手引 -FORTRAN77-
6A20-3-310	HI-UX/MPP 最適化 FORTRAN90 言語
6A20-3-311	HI-UX/MPP 最適化 FORTRAN90 使用の手引
6A20-3-312	HI-UX/MPP リモート DMA 転送 使用の手引 -FORTRAN-
6A20-3-320	HI-UX/MPP Parallel FORTRAN 言語
6A20-3-321	HI-UX/MPP Parallel FORTRAN 使用の手引
6A20-3-400	PARALLELWARE ユーザーズガイド -FORTRAN-
6A20-3-401	PARALLELWARE リファレンス -FORTRAN-
6A20-3-402	PARALLELWARE ユーザーズガイド -C-
6A20-3-403	PARALLELWARE リファレンス -C-
6A20-3-404	並列デバッガ ndb 使用の手引き
8X20-7-550	HI-UX/MPP 統合構造解析システム ISAS 機能編 -第一分冊- 機能
8X20-7-551	HI-UX/MPP 統合構造解析システム ISAS 機能編 -第二分冊- 入力データ
8X20-7-552	HI-UX/MPP 統合構造解析システム ISAS 操作編
8X20-7-553	HI-UX/MPP 統合構造解析システム ISAS 例題編
6A20-7-610	HI-UX/MPP 数値計算副プログラムライブラリ MSL2 機能編 -第一分冊- 行列計算
6A20-7-611	HI-UX/MPP 数値計算副プログラムライブラリ MSL2 機能編 -第二分冊- 関数計算
6A20-7-612	HI-UX/MPP 数値計算副プログラムライブラリ MSL2 機能編 -第三分冊- 統計計算
6A20-7-613	HI-UX/MPP 数値計算副プログラムライブラリ MSL2 操作編
6A20-7-600	HI-UX/MPP 行列計算副プログラムライブラリ MATRIX/MPP
6A20-7-601	HI-UX/MPP 行列計算副プログラムライブラリ スカイライン法 MATRIX/MPP/SSS

## 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	M-180	M-200H	M-200H	M-200H	同57年度
	2台	2台	M-180	M-180	2台	
				疎結合	疎結合	
運転方式			200H 無人			
	3カ月 有人	9月から無人	180 有人	無 人	無 人	無 人
プロシエ外数	63	176	192	183	198	199
利用者数						
機 構 内 <sup>a</sup>	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 <sup>c</sup> (時間)	509	2,405	5,405	6,320	8,205	8,489
シヨア処理件数 <sup>c</sup>	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 <sup>d</sup>	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)	M-680H	M-680H	M-680H	同63年度
		同57年度	S-8210/10	(~1月)	S-820/80	
		(1月~)	疎結合	S-810/10		
		M-680H		(2月~)		
		S-810/10		S-820/80		
				疎結合	疎結合	
運転方式						
	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロシエ外数	207	226	234	213	231	239
利用者数						
機 構 内 <sup>a</sup>	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) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>
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 <sup>c</sup> (時間)	8,508	12,770	20,092/5,023e*	6,624	7,872	8,300
シヨア処理件数 <sup>c</sup>	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 <sup>d</sup>	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	平成7年度
計算機システム	同63年度	同63年度	同63年度	M-680H	M-680H(～11月)	SX-3/34R
				S-820/80(～12月)	SX-3/34R	HSP(1月～)
				SX-3/34R(1月～)	HSP(1月～)	SP2(1月～)
					SP2(1月～)	
運 転 方 式						
	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プ ロ グ ラ ム 外 数	256	272	271	225	222	210
利 用 者 数						
機 構 内 <sup>a</sup>	140	158	143	127	139	129
機 構 外	593	623	661	589	601	597
合 計	733	781	804	716	740	726
稼 働 時 間(時間)	6,768	6,749	7,156	(M-680H系) 6,689	(M-680H系) 5,722	(SX-3/34R) 8,352
				(SX-3/34R) 2,101	(SX-3/34R) 8,506	(HSP) 8,293
					(HSP) 2,133	(SP2) 8,333
					(SP2) 2,022	
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>	(HSP基準) <sup>b</sup>
申 請	16,622	20,606	21,153	18,311	18,311	40,358
許 可	14,626	17,846	19,110	16,027	16,027	37,446
総使用CPU時間 <sup>c</sup> (時間)	11,975	11,874	12,491	16,306	24,781	156,076
シ ョ ッ プ 処 理 件 数 <sup>c</sup>	295,503	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	0	0	0	10	10	7
データベース新規登録数	0	0	0	1	1	1
センター使用論文数 <sup>d</sup>	248	229	282	267	306	275

	平成8年度	平成9年度
計算機システム	SX-3/34R	SX-3/34R
	HSP	HSP
	SP2	SP2
	HPC(9月～)	HPC
		SR2201(11月～)
運 転 方 式		
	無 人	無 人
プ ロ グ ラ ム 外 数	201	188
利 用 者 数		
機 構 内 <sup>a</sup>	139	126
機 構 外	574	609
合 計	713	735
稼 働 時 間(時間)	(SX-3/34R) 8,425	(SX-3/34R) 8,494
	(HSP) 8,431	(HSP) 8,513
	(SP2) 8,336	(SP2) 8,515
	(HPC) 4,872	(HPC) 8,501
		(SR2201) 3,561
CPU時間利用申請(時間)	(HSP基準) <sup>b</sup>	(HSP基準) <sup>b</sup>
申 請	58,425	73,910
許 可	51,499	58,650
総使用CPU時間 <sup>c</sup> (時間)	207,790	262,365
シ ョ ッ プ 処 理 件 数 <sup>c</sup>	70,308	51,738
ライブラリプログラム新規登録数	15	
データベース新規登録数	0	
センター使用論文数 <sup>d</sup>	279	331

- a: 機構内利用者にはアイドル課題のための重複を含めない。  
b: 申請および使用の詳細については5.1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。  
\*: 下段はM-680H基準。



## 5-2 電子計算機センター将来計画 — 1999年と2000年の計算機更新に向けて—

### 5-2-1 現有計算機の構成と利用状況

平成10年1月現在の利用者の総計は約716名、研究課題は187件である。電子計算機センターの計算機システムは、平成6年1月からスーパーコンピュータNEC SX-3が、平成7年1月より並列計算機IBM SPと高速汎用計算機NEC HSPがそれぞれ導入された。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。また汎用演算性能および並列演算性能を増強する目的で、平成8年9月よりNEC HPC計算機、平成9年10月より日立製作所SR2201を導入し公開運用を行っている。

SX-3は3個のベクトル演算器を持ち最高性能は19.2ギガフロップスである。また、2ギガバイト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60ギガバイト持つ。現在では大規模な配置間相互作用(CI)計算や分子動力学計算など、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大型ジョブを中心に利用されている。

分散メモリ型並列計算機SP2は、平均100メガフロップスの性能をもつ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40メガバイト/秒以上の高速度で互いに通信を行うことが出来る高速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。SP2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3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、2ギガバイトの主記憶装置と約20ギガバイトのRAIDディスクをもつ。HSP計算機は、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。さらに平成8年9月より高速汎用システムの演算能力を増強する目的でNEC HPCを導入した。1ギガバイトの主記憶と2ギガバイトの拡張記憶装置を有し、HSPと同様に中規模なベクトルジョブの処理に利用されている。また、平成9年11月から日立製並列計算機SR2201(16CPU)を比較的低い課金係数で公開運用しているが、並列ジョブの利用率はまだまだ高くない。

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、年間平均でもその全CPU能力の約70%が利用されており、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7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となる。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。

### 5-2-2 1999年と2000年の計算機システム更新

平成9年度、文部省に概算要求をしていたスーパーコンピュータ借料の増額によるCPU能力の増強は認められなかった。また導入一時経費もつかないという厳しい結果となったため、外部委員を含む「スーパーコンピュータ検討小委員会」の結論に従い、来年度(平成11年1月)に機種を更新することを断念し、更新を1年延期することとした。平成10年の春より再度、文部省への増額による更新要求を行う。

スーパーコンピュータ検討小委員会では、スーパーコンピュータの更新を1年延期したことから、汎用システムの機種更新を1年早めて、平成11(1999)年1月に行うことが望まれるとの結論を得た。これを受けて、文部省と協議の結果、現有の汎用高速演算システムであるIBM SP2とNEC HSPを平成11年1月に新たな機種に更新するための準備を進めている。現在、計算機メーカ各社からの資料提供の招請と仕様書原案の提示を行い、各社からの提案を求めている段階である。最高演算性能が5ギガフロップスを上回る機種の導入を予定していることから、スーパーコンピュータに準ずる調達手続きを採用することとなった。今後、平成10年5月1日に最終仕様書が完成し、6月22日入札、7月7日開札(機種決定)、8月から新機種への移行作業を開始し平成11年

1月から2月に公開運用開始の予定で調達手続きを進めている。

#### (1) 汎用高速演算システムに要求される演算性能

大学の研究室では実行が困難な大容量の主記憶及び一時作業ディスク容量を要求するジョブや、多数のCPUを利用する並列ジョブを実行できる計算環境を提供するため、現有的中規模ベクトル計算機(HSP)と並列計算機(SP2)といった2つの異なるタイプの計算機を汎用システムとして更新する。ベクトル計算機としては、従来の半分程度のマシクロックと2倍程度の数のベクトルパイプラインを備えた新型機が来春、スーパーコンピュータメーカー各社から出荷されるため、並列度は5～6程度と低い。単体演算性能が6ギガフロップス程度のベクトル並列計算機を導入できる予定である。また今後、分子科学分野において並列プログラムを積極的に開発してゆくための環境として、各演算器の性能が100メガフロップス程度でできるだけ多くのCPUを有する並列計算機を導入する必要がある。汎用高速演算システム全体の性能としては、更新前の10倍以上の演算能力が必要である。

また計算機開発の技術進歩が非常に速いことから、今回のシステム更新を機会に、汎用高速演算システムのレンタル期間が4年に定着化されることが望まれる。

#### (2) スーパーコンピュータシステムに要求される性能

スーパーコンピュータの更新目的の第一は、分子科学分野において大学等では実行が困難である大規模なベクトル並列計算を行う計算環境を整備することにある。一方、現状のように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を早急に改善しなければならないため、中小規模のシリアルジョブの実行スループットを向上させる配慮も重要である。このように、ある意味では相反する更新要求を、レンタル期間中の運用変更によって適応可能とする計算機構成を選択することが重要である。すなわち、高い単体ベクトル演算性能を持つ計算ノードをできる限り多数導入し、CPUリソースの分割運用によって、大規模ベクトル並列計算の実行と中小規模ベクトル計算の両方が干渉することなく実行できることが重要である。これを実現するためには、システム全体として大容量の主記憶と一時作業ディスクが必要である。

具体的には、現有スーパーコンピュータの単体CPU能力を上回る8ギガフロップス程度のベクトル計算ノード64以上が必要であり、16ノードと48ノードのようにリソースを分割運用する。主記憶は128ギガバイト以上、作業ディスクは1000ギガバイト以上必要である。平成8年に発足した次期スーパーコンピュータ検討委員会では単体CPU性能を重視するかCPU台数(並列計算の規模)を重視するかで活発な討論がおこなわれた。並列度の高いプログラムへ比較的容易に移行が可能な分子動力学(MD)分野の研究者からはCPU台数を重視すべきとの意見がだされ、一方、大規模な分子軌道(MO)計算や配置間相互作用計算などに代表される並列化が困難な電子状態分野の研究者からは単体のベクトル演算性能と大容量の主記憶および拡張記憶装置の重要性が示された。上記のCPUリソースの分割運用は、大規模ジョブの実行と中小規模ジョブのスループットを運用によりバランスをとってゆく観点としてだけでなく、MD計算とMO計算分野の要求に柔軟に答えて行くための方策としても重要である。

又、CPUリソースの利用状況によっては、超大型計算を奨励する新しい運用方法の導入も検討する必要がある。従来の課金制度とは違う形で、研究課題を募集し、従来のCPU時間やメモリー利用制限の枠を大幅に越えた計算機利用を可能にして、優れた研究成果を引き出すような施策の検討である。

#### (3) センターの運用方針

前回の報告にもあるように、計算機センターの利用者は大別すると4つに分類される。

グループA: 分子研理論部門(計算センター含む)。

グループB: 所外の大きな理論グループ。

グループC: 所外の小さな(一人ないし三人程度の若い)理論グループ。

グループD: 実験を主体とする研究グループ。

それぞれのグループで計算機を利用する分野・形態や、必要なCPU時間に相違があり、どのグループを重点的にサポートして

行くかの議論には慎重を要す。最近では、研究所内外のいくつかの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。そのような研究グループがさらに強力な演算性能を必要とする研究プロジェクトで成果を上げるためには、グループAとBに一層力点を置いた運営方針を取ることが望ましい。一方、グループCとDの研究者にとって、本センターは研究遂行上不可欠なものであることも事実であり、今後とも適切な配慮が必要である。

#### (4) 世界のスーパーコンピュータの動向とセンターの立場

現在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、単体CPU性能の観点からは、1CPUのベクトル性能が5ギガフロップス以上の高価な計算機、4ギガフロップス以下のもの、そしてワークステーションに代表される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)超並列計算機、並列度の少ないもの、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」、そして分散メモリのハードウェア構成を持ちながら基本ソフトウェアにより論理的に共有メモリ計算機として利用できる「分散共有メモリ型」に分類することができる。さらに、並列計算機ではCPU間を結ぶ通信経路のトポロジーと通信性能の違いによって幾つかの形態がある。

欧米では、計算機アーキテクチャの研究を専門とする分野はもちろんのこと、科学計算分野においても単体CPU性能の向上に頼る時代は終わり、基本ソフトウェアと高速通信技術における並列計算技術の発展に将来の大規模計算環境を委ねる機運が高まっている。ここで並列化の基本ソフトウェア技術として分散共有メモリ計算機におけるマルチスレッドや分散メモリ計算機のメッセージパッシングが挙げられる。たとえば米国では1996年よりAccelerated Strategic Computing Initiative (ASCI)を国家プロジェクトとして提案し、コンピュータメーカーと国立研究所が共同で大規模な超並列計算機の開発を推進している。我が国でも欧米の計算機動向に追従し、かつて単体CPU性能で世界1,2位を争っていたスーパーコンピュータメーカーも、超並列計算機のみ開発に方針転換している。このような状況の中、電子計算機センターは将来にわたり最先端の大規模計算環境を分子科学者に提供することを最重要と考え、計算機アーキテクチャの動向に注視する努力を怠ってはならない。一方、現状では並列コンパイラや並列プログラム開発のための支援ツールが未成熟な状況であることもまた事実であり、分子科学計算分野はあくまで高速計算機を研究道具として利用し続ける1研究分野であり、安易に並列計算機一辺倒の運営に踏み切ることも慎重にしなければならない。

### 5-2-3 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

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。分子科学における計算科学は、単に実験の解析にとどまらず実験の先導的な役割を果たしており、90年代の後半に至り計算的手法の重要性は質的転換を遂げたと言える。21世紀において計算分子科学は一層の発展が期待されている。特に、分子研の理論部門は平成7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口利用者でもある。計算機センターは、研究所内の理論グループに卓越した計算環境を提供していく必要がある。そのためには、所外には公開しない特別な運用を行う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、理論研究系と計算機センターのスタッフが中心となって、たとえば文部省研究基盤重点設備費に「計算分子科学の展開」を要求していくなどの努力も必要である。

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、前述のように超並列時代を見据えた方法論の開拓が重要である。計算機のハード・ソフトの両面の進歩は速く、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。計算機センターの現スタッフは

あくまで計算機利用者の一員として、計算機アーキテクチャの動向や並列ソフトウェアの進展状況を冷静に判断し、プログラム開発やアルゴリズム理論の非専門家である分子科学者に適切な計算環境をバランスよく提供するための人員構成をとっている。一方、計算機の発展に密着しベクトル並列型、超並列及び分散共有メモリの並列計算機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スタッフも重要であり、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。また研究要素として大規模なソフトウェアの構築を含む研究開発テーマなど、多くの若手研究者を必要とする分野(この分野は欧米に依然立ち後れていると言わざるを得ない)では、研究系教官と共同でプロジェクト研究課題を提案し、大学等では困難な課題にも挑戦してゆく必要がある。

#### 5-2-4 国際分子科学計算センターとして

分子研理論部門における外国人長期滞在研究者の割合は高い。インターネットを通じての計算機利用が可能になった今日、これら長期滞在者は帰国後も共同研究が継続されるようになっていく。このようなインターネットを通じた国際共同研究も進めていく必要がある。また、現在分子研が概算要求している「多国間国際協力事業」の一つとしてプロジェクト方式の研究課題を新たに設定することが可能であろう。

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、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)の採用など多くの課題を解決しなければならない。

#### 5-2-5 センターライブラリ開発の研究プロジェクト化

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。外部研究者に開発プロジェクトを公募すると同時に、予算的措置を伴ったプロジェクト開発制度を発足させることも検討する必要がある。

#### 5-2-6 QCLDBの事業化

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、センターの業務として支援する体制をとり続ける必要がある。現在、米国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、平成9年夏からはQCLDBも、WWWを通じて登録制の公開を試験的に開始した。この公開をハード・ソフトの両面で長期的に安定運用をするためには、正式に分子科学研究所の事業の一つとする必要がある。1)データベース作成・管理・運用のためのハードウェア整備、2)データベース作成のための謝金と事務費の確保のために予算的措置をとる必要がある。もちろんQCLDBを開発・作成しているQCDB (Quantum Chemistry Data Base)研究会と緊密に連携をとってこの事業は進めなければならない。

## 5-2-7 情報ネットワークと計算機センター

平成7年度末に完成した岡崎国立共同研究機構の超高速ATMネットワークシステム(新ORIONと呼ぶ)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。計算機センターは機構情報ネットワークの構築と運用に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かつ安定に利用するために、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。そのための一つの手段として計算機センターの予算の中で学術情報センターへの専用回線を契約する可能性も追求する必要がある。