

I 部

目 次

1	巻頭言 計算科学研究センター 森田 明弘	1
2	スーパーコンピュータワークショップについて	2
3	計算機システムの運用および使い方	3
3.1	システムの構成と特徴	3
3.2	キューの構成	5
3.3	利用課金点数	7
4	一般報告	9
4.1	ライブラリプログラムの開発・公開	9
4.2	データベース開発状況	11
5	平成 15 年度計算機稼働状況および利用者数	12
5.1	利用申請プロジェクトおよび利用者数	12
5.2	電力使用および計算機稼働状況	12
5.3	計算機利用状況	13
5.4	クラス別 CPU 使用時間	15
5.5	クラス別 VPU 使用時間	18
5.6	ジョブ処理件数	19
6	資料	20
6.1	計算科学研究センター運営委員	20
6.2	計算科学研究センター職員	21
6.3	応用プログラム相談員一覧	21
6.4	利用者数と CPU 時間の推移	22
6.5	建物図	24
6.6	マニュアル一覧	27
7	現状と今後 (分子研リポート 2003 より転載)	31

1 巻頭言

計算科学研究センター 森田明弘

本年より京都大学から計算科学研究センターに赴任いたしました森田です。どうぞよろしくお願いたします。

本研究センターは前身の分子研電子計算機センターの時代から日本の理論化学の計算を支えてきた施設ですが、近年では利用者が多様化し、実験家による Gaussian の利用から NAREGI に代表される先端的な大規模グリッド計算までカバーするようになってきています。研究内容も本レポートにあるように量子化学はもとより、分子シミュレーション、反応動力学、固体電子論、統計力学、計算生物学といった広がりを見せています。一人の理論化学者として外部から見ているときには、センター利用の役割は減りつつあるような印象をもっておりましたが、それはセンターの変革と多様化に気づいていなかったためといえそうです。計算科学の推進は社会的な要請でもあり、昨年は NAREGI プロジェクトがスタートし、グリッド環境のナノサイエンスでの実証と応用を目指してセンターにも日立のスパコン SR11000, HA8000 が導入されました。また本年は分子研に計算分子科学研究系が新設されて、センターのスタッフも拡充される予定です。

利用形態の多様化にともなって、センターを計算のプロでない人にも使いやすい環境にしていくことは一つの重要な使命ですが、近年の分子科学分野の利用状況をみると、その面はある程度評価されつつあるように思います。もう一つの重要な役目としては、研究室レベルの計算環境では実行できない大規模計算の研究を実現することで、今後センターの魅力を高める重点課題として、それにも力を入れるつもりでおります。共同利用の枠内でも、今までにも大型ユーザーのために特別申請、特別利用キューといった試みが行われていますが、率直に言って利用者からみた使い勝手としてまだ改善の余地が大きいことは事実だと思います。限られた計算資源の分配には当然難しい問題を伴いますが、幸い来年度に共同利用のためのスーパーコンピュータシステム Fujitsu VPP5000, SGI Origin の更新が予定されており、平成 18 年度には計算性能の飛躍的向上が期待されます。従来の枠を超えたチャレンジングな計算の研究を公開して取り上げ、新システムで実現できるようなプロジェクトを現在検討しております。NAREGI の運営でセンターのスタッフが培いつつある並列環境やグリッド環境の経験も、今後共同利用の方にも直接・間接に還元していくことができると思います。今後のセンターのあり方について、どうぞ利用者の方々の忌憚ないご意見をお聞かせくだされば幸いです。

2 スーパーコンピュータワークショップについて

平成16年3月4日(木)、5日(金)の両日、「大規模・高精度電子状態計算に向けて」というタイトルで、スーパーコンピュータワークショップを開催しました。今回は、電子状態計算の分野で活躍されている方々をお招きして講演していただきました。また、Intel、NECといったベンダーから、プログラムのチューニング方法等についての講習会を行いました。さらにセンターから、新しい運用についての説明を行いました。全国から99名の参加者があり、活発な議論が行われました。

講演要旨やOHP等を掲載したワークショップレポート(第4号)を発刊した。講演に使用した資料(PDF形式)等をホームページ(<http://www.rccs.orion.ac.jp/workshop/>)で公開しています。

タイトル： 「大規模・高精度電子状態計算に向けて」

日時： 平成16年3月4日(木)、5日(金)

場所： 岡崎コンファレンスセンター

◎ スーパーコンピュータワークショッププログラム

3月4日(木)

13:00-13:10	Opening remarks	永瀬 茂 (計算センター)
座長： 森田明弘		
13:10-14:10	「Second Order Møller-Plesset Energies for Large Molecules」 Peter Pulay (Arkansas Univ.)	
14:10-15:10	「タンパク質の電子状態計算」	北浦和夫(産総研)
15:10-15:30	Coffee break	
座長： 南部伸孝		
15:30-17:30	Intel 講習会 「インテル・アーキテクチャとHPCへの取り組み」 「インテル・コンパイラを用いた最適化の手法」	
		池井 満 (インテル(株))
17:30-17:50	「新しい運用について」	水谷文保 (計算センター)
17:50-18:20	「Gaussian の効率的な利用について」	南野 智 (計算センター)
18:30-20:00	懇親会	

3月5日(金)

座長： 高見利也		
9:00-11:00	NEC 講習会 「IPFの高度なチューニングに関して ～AMBER, GAMESS, MOLPRO, MOLCASのチューニング方法及び内容～」 増田典雄, A. Amin, J. Fredin (NEC(株))	
11:00-12:00	「相対論的分子理論の最近の展開」	中嶋隆人(東大院工)
12:00-13:30	昼食	
座長： 三浦伸一		
13:30-14:30	「大規模・高精度電子状態計算から何がわかるか —EDAによるアプローチ」	
		中井浩巳(早大理工)
14:30-15:30	「密度汎関数法によるナノ・バイオ物質での新現象」	押山 淳(筑波大物理)
15:30-16:30	「金属錯体を含む複合分子の電子状態計算」	杉本 学(熊大院自然)
16:30-16:35	Closing remarks	
		岡崎 進 (計算センター)

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、ベクトルスーパーコンピュータ(富士通製 VPP5000)、超並列スーパーコンピュータ(SGI製 SGI2800、Origin3800)、高速演算サーバーシステム(日本電気製 SX-7)、高速演算サーバー副システム(日本電気製 TX-7)による独立性を重視した UNIX 分散処理システムです(ユーザのホームディレクトリはファイルサーバー上にあり、各システムは NFS マウントすることによって統一しています)。

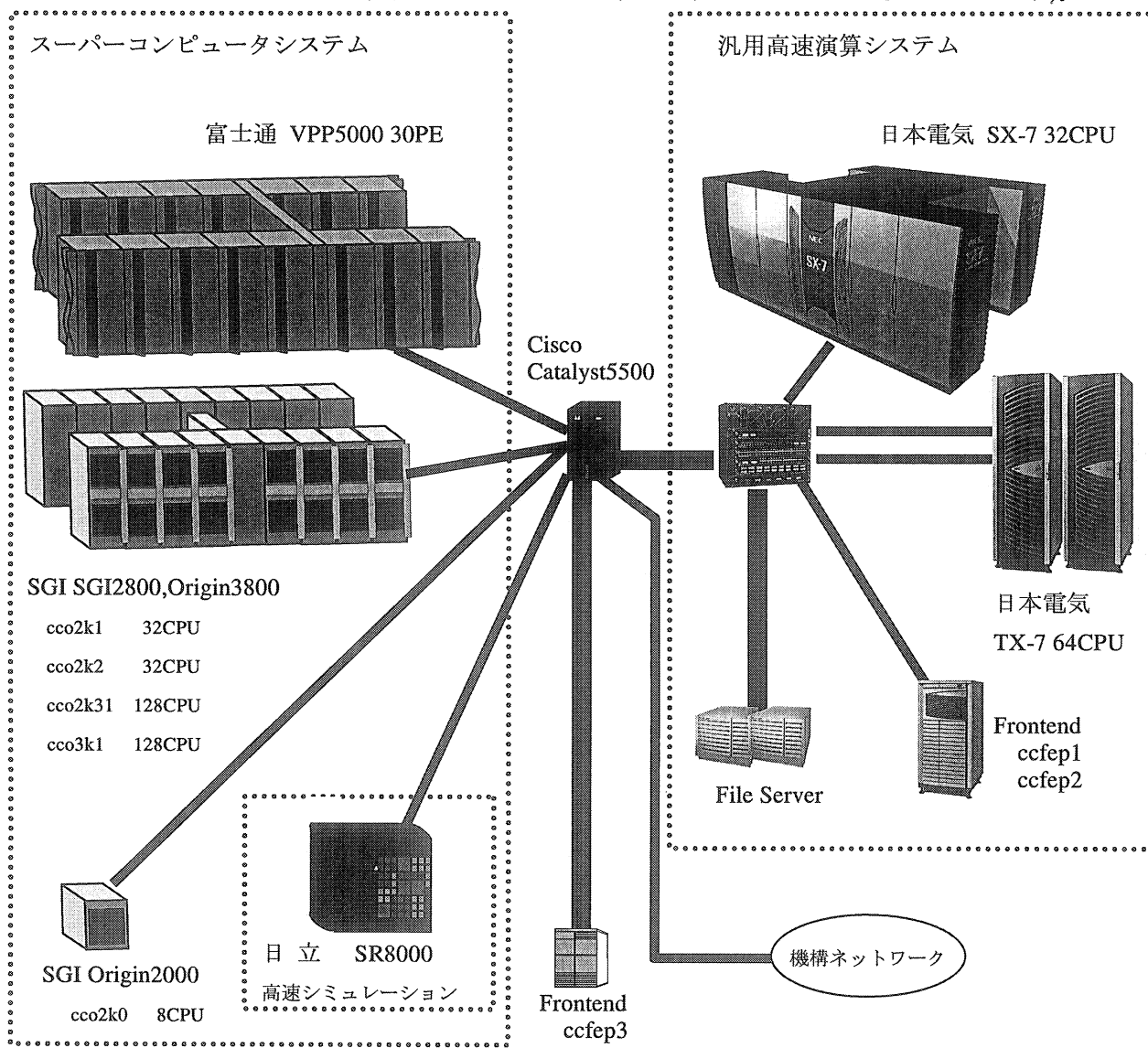


図 3.1 計算機システム概略図

- ・ センター内は 2 台のスイッチングシステム(Cisco Catalyst5500)を中心に各マシンと各バックボーンが相互に接続されています。
- ・ 機構内に GigaBitEther (8Gbps) の LAN が張り巡らせており、所内はもちろんのこと三研究所(分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所)の支線ネットワーク間を統合的に接続・利用できます。
- ・ SINET を経由してインターネットにアクセスできます。

3.1.1 ベクトルスーパーコンピュータ(富士通製 VPP5000)

VPP5000 ではジョブ管理(NQS)、バッチ処理と TSS 処理を行っています。

<演算処理装置>

主記憶容量	256GB
総理論演算性能	288GFLOPS(9.6GFLOPS/PE)
CPU 台数	30 台

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

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

3.1.2 超並列スーパーコンピュータ(SGI 製 SGI2800、Origin3800)

SGI2800 ではジョブ管理(NQE)、バッチ処理と TSS 処理を行っています。

<SGI2800 演算処理装置>

プロセッサ	MIPS RISC R12000 300MHz
主記憶容量	192GB
総理論演算性能	115GFLOPS(0.6GFLOPS/CPU)
CPU 台数	192 台

Origin3800 ではジョブ管理(NQE)、バッチ処理を行っています。

<Origin3800 演算処理装置>

プロセッサ	MIPS RISC R12000 400MHz
主記憶容量	128GB
総理論演算性能	102GFLOPS(0.8GFLOPS/CPU)
CPU 台数	128 台

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

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

3.1.3 高速演算サーバーシステム(日本電気製 SX-7)

SX-7 ではジョブ管理(NQSII)、バッチ処理と TSS 処理を行っています。

<演算処理装置>

主記憶装置	256GB (共有メモリ)
総理論演算性能	282.5GFLOPS(8.83GFLOPS/CPU)
CPU 台数	32 台

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量 (内訳)	4.5TB
一時作業ファイル領域(/work)	3TB
短期保存ファイル領域(/week)	1TB

他はシステムで使用しています。

3.1.4 高速演算サーバー副システム(日本電気製 TX-7)

TX-7ではジョブ管理(LSF)、バッチ処理とTSS処理を行っています。

<演算処理装置>

主記憶装置	128GB (1ノードあたり)
総理論演算性能	256GFLOPS(4GFLOPS/CPU)
CPU台数	64台 (2ノード 1ノードあたり32台)

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量 (内訳)	3TB
一時作業ファイル領域(/work)	1TB
短期保存ファイル領域(/week)	1.5TB

他はシステムで使用しています。

3.1.5 ファイルサーバ(主・副)システム(日本電気製 TX-7/rp5430)

2台によるクラスター構成です。

<演算処理装置>

主記憶装置	2GB(1GB×2台)
CPU台数	2台(クラスター構成)

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量 (内訳)	6TB
ユーザホームディレクトリ	6TB

3.1.6 フロントエンド(日本電気製 TX-7/i6010)

ccfep1とccfep2の2台を使用しています。

<演算処理装置>

主記憶装置	4GB (それぞれ2GB×2台)
CPU台数	4台 (それぞれ2台×2台)

3.2 キューの構成

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す。

表中の言葉の意味は下記の通りです。

キュー名	: 各ホストのバッチ投入機構(NQS、NQSII、NQE、LSF)に用意されているキューの名前
CPU時間	: 各キューにおいて、実行可能な最大CPU時間
主記憶	: 各キューにおいて、利用可能な最大主記憶容量
多重度	: 各キューにおいて、同時に実行出来るジョブの最大件数
CPU数	: 各キューにおいて、利用可能な最大CPU数
1 ユーザ制限	: 各キューにおいて、あるユーザが同時に実行できる最大ジョブ件数
1 グループ制限	: 各キューにおいて、あるグループが同時に実行できる最大のジョブ件数

富士通 VPP5000 (ccvpp) <大規模ベクトルジョブ処理/ベクトル並列ジョブ処理>

キュー名	CPU 時間	主記憶 (標準値)	多重度	CPU 数	1 ユーザ制限	1 グループ制限	備 考
jobexec	1 時間	7GB×2	-	2	-	-	Jobexec,V1,V2 でノード共用
V1	6 時間	512MB	3	3	1	2	
V2	12 時間	12GB (1.5GB)	12	3	1	1	
V3	24 時間	15GB(7GB)	4	2	1	1	VP6 が空の時 24 ノード利用可能
V4	24 時間	7GB(3GB)	15	14(24)	1	2	
V5	48 時間	7GB(3GB)	15	14(24)	1	2	
VP6	12 時間	7GB×10	1	10	1	1	ベクトル並列ジョブキュー
会話処理	30 分	256MB	-	1	-	-	コンパイル・リンク他

SGI Origin2000,SGI2800,Origin3800 (cco2k,cco3k) <小規模から大規模並列ジョブ処理>

キュー名	CPU 時間	主記憶 (標準値)	多重度	CPU 数	1 ユーザ制限	1 グループ制限	備 考
G1	12 時間	8GB	4	4-8	1	1	並列ジョブ(SGI2800)
G2	24 時間	16GB	2	9-16	1	1	並列ジョブ(SGI2800)
G3	48 時間	32GB	3	32	1	1	並列ジョブ(SGI2800)
G4	24 時間	64GB	1	64	1	1	並列ジョブ(SGI2800)
G2S	24 時間	16GB	8	9-16	1	4	並列ジョブ(Origin3800)
G5S	24 時間	128GB	無制限	128	-	-	特別申請(Origin3800)
会話処理	2 時間	4GB	4	1-4	-	-	32CPU

(注 1)CPU 数の上限値は、それぞれのジョブキューにおいて、並列ジョブが最大限利用できる物理的な CPU 台数です。マルチスレッド型の並列ジョブやマスター・スレーブ型のジョブは 1 ジョブから生まれるスレッドの個数やプロセス数は CPU 台数を超える場合があります。

(注 2)G3,G4 の 2 クラスでの最大同時実行数は 3 です。ただし、G4 クラスの方が優先度を高くしてあります。

(注 3)Origin3800 で特別申請利用者が利用中は、G2S キューを閉鎖します。閉鎖スケジュールは 1 ヶ月前に確定します。

日本電気 SX-7 (ccsx7) <中規模から大規模ベクトルジョブ処理>

キュー名	CPU 時間	主記憶 (標準値)	多重度	1 ユーザ制限	1 グループ制限	備 考
S	48 時間	8GB	32	4	8	シリアルジョブ
P	48 時間	32GB	6	1	3	パラレルジョブ 16CPU 並列まで
会話処理	10 分	256MB	-	-	-	デバック用 コンパイルは、ccfep1 もしくは ccfep2 にて行って下さい。

日本電気 TX-7 (cctx7) <小規模から中規模ベクトルジョブ逐次処理>

キュー名	CPU 時間	主記憶 (標準値)	多重度	1 ユーザ制限	1 グループ制限	備 考
T2	24 時間	16GB	8	2	4	パラレルジョブ 8CPU 並列まで
B	2 時間	8GB	16	8	16	BLAST ジョブ 8CPU 並列
会話処理	3 時間	-	-	-	-	コンパイル、デバック用

3.3 利用課金点数

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

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。

◆ 利用点数算出法

$$P = P1 + P2 + P3 + P4$$

P1 から P6 は各マシンにおける利用点数であり、それぞれの算出法は次の通りです。

□ ベクトルスーパーコンピュータ (VPP5000) の利用点数算出法

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

SPU : スカラ演算器使用時間(秒)

VPU : ベクトル演算器使用時間(秒)

a : スカラ課金係数 0.05/sec

b : ベクトル課金係数 0.05/sec

Fvpp : 1/3 × (Pe+5) [VP6 利用の場合、Pe は使用した PE 数]

: 1.00 [V1 から V5 および会話処理利用の場合]

(注) VPP5000 における並列ジョブに対する課金は、並列実行において最長時間実行した PE の演算時間に対して課金を行いますが、その演算時間に対し、並列度合いによって変わる比率 Fvpp をかけて調整を行っています。

□ 超並列スーパーコンピュータ (SGI2800、Origin3800) の利用点数算出法

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

CPU : CPU 使用時間(秒)の総和

c : CPU 課金係数 0.005/sec

Fsgi : 0.75 [G1 から G5、G2S、G5S に一律に適用]

: 1.00 [会話処理に場合]

(注) SGI2800、Origin3800 における並列ジョブに対する課金は、逐次および並列実行を問わず、演算時間の総和に対して課金を行いますが、キュークラスによって変わる比率 (Fsgi) をかけて統制を行います。

□ 高速演算サーバシステム (SX-7) の利用点数算出法

$$P3 = \text{SPU} \times d + \text{VPU} \times e$$

SPU : スカラ演算器使用時間(秒)

VPU : ベクトル演算器使用時間(秒)

d : スカラ課金係数 0.10/sec

e : ベクトル課金係数 0.10/sec

□ 高速演算サーバ副システム (TX-7) の利用点数算出法

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

CPU : CPU 使用時間(秒)

h : CPU 課金係数 0.02/sec

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

マシン名	スカラー (点)	ベクトル (点)
VPP5000	180	180
SGI2800, Origin3800	13.5	-
SX-7	360	360
TX-7	72	-

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ます。

課金係数一覧表

各々のキュークラスにおける1時間あたりの消費点数などは、以下の表のようになります。

マシン名	キュー名	演算性能 (GFLOPS) ※1	課金係数	1時間あたり の 消費点数(点) ※3	標準時間 (時)※4	備 考	CP ※5
VPP5000	V1 から V5 会話処理	9.6	0.05(s) 0.05(v)	180.0	0.450	会話処理は最大 30 分まで	18.75
	VP6	96.0		900.0	2.250	同時に 10PE 使用した場合	9.38
SGI2800 Origin380 0	G1	4.8	0.005	108.0	0.270	同時に 8CPU を利用した場合	22.50
	G2	9.6		216.0	0.540	同時に 16CPU を利用した場合	
	G3	19.2		432.0	1.080	同時に 32CPU を利用した場合	
	G4	38.4		864.0	2.160	同時に 64CPU を利用した場合	
	G5	76.8		1728.0	4.320	同時に 128CPU を利用した場合	16.88
	G2S	12.8		216.0	0.540	同時に 16CPU を利用した場合	
	G5S	102.4		1728.0	4.320	同時に 128CPU を利用した場合	
	会話処理	0.7		18.0	0.045	同時に利用した CPU 数倍に増加	
SX-7	S 会話処理	8.8	0.10(s) 0.10(v)	360.0	0.900	会話処理は最大 10 分まで	40.90
	P	140.8	0.10(s) 0.10(v)	5760.0	14.400	同時に 16CPU を利用した場合	
TX-7	全クラス 会話処理	32.0	0.02	72.0	0.180	同時に 8CPU を利用した場合 会話処理は最大 10 分まで	2.25

(注意)

- ※1 演算性能は理論ピーク性能の総和です。
- ※2 (s)はスカラプロセッサ使用時間(秒)に対する課金係数、(v)はベクトルプロセッサ使用時間(秒)に対する課金係数です。
- ※3 CPU1 時間あたりに消費される CPU 点数です。表の計算においては、3,600(秒)×ベクトル課金係数で行っています。
- ※4 CPU1 時間あたりに消費される CPU 点数を時間に換算し直した場合の消費時間です。表においては、1 時間あたりの消費点数(点)÷400 点で行っています。
- ※5 CP はコストパフォーマンスの略であり、1GFLOPS を得るのに必要な点数を表しています。値が小さい方がお得なことを示しています。表においては、1 時間あたりの消費点数(点)÷演算性能(GFLOPS)で行っています。

4 一般報告

4.1 ライブラリプログラムの開発・公開

ライブラリプログラム開発は、新規プログラムの開発もしくは既存プログラムの改良・発展というかたちでプログラム開発を申請してもらい、CPU 時間、ファイル容量などの計算資源を提供する代わりに、ライブラリプログラムのひとつとしてソフトウェアをセンターで実行可能な形式で登録してもらって、一般ユーザーに向けて公開するものです。その他に、メーカー・ベンダーにソフトウェアのインストール作業を依頼したり、センター職員がインストール作業を実施したりしたものも、ライブラリプログラムとして公開しています。

平成 15 年度のライブラリプログラム開発の申請件数は 0 件でした。

また、平成 15 年度に新規登録または更新したライブラリプログラムは以下の 5 件です。

SGI SGI2800/Origin3800 版

プログラム名	タイトル名
abinit	ABINIT(v4.1.3): periodic solids using DFT, pseudopotential and plane wave basis
g03	Gaussian03(Rev.B05): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations

NEC SX-7 版

プログラム名	タイトル名
g03	Gaussian03(Rev.B05): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations

NEC TX-7 版

プログラム名	タイトル名
abinit	ABINIT(v4.1.3): periodic solids using DFT, pseudopotential and plane wave basis
g03	Gaussian03(Rev.B05): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations

よって、平成 16 年 3 月現在で登録されているライブラリプログラムは以下の通りです。

表 4.1 プログラムライブラリー一覧

**** Fujitsu VPP5000 版 ****

プログラム名	タイトル名
AMBER	AMBER7: Assisted model building with energy refinement
BLAS/VP	Basic linear algebra subprograms
C-SSL II/VP	Scientific subroutine library II (for C)
COLUMBUS	A program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calc.
DALTON	An <i>ab initio</i> molecular toolbox for a manifold of properties
G98	GAUSSIAN98(A.11): <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	GAMESS(2003Jan14): General atomic and molecular electronic structure system
HONDO8	HONDO8.4: <i>ab initio</i> MO calculation
LAPACK/VP	LAPACK
MM2	Molecular mechanics calculation by MM2 force field model
MOLCAS	MOLCAS4.1: quantum chemistry program package for scientists
MOLPRO	MOLPRO2002.3: A complete system of <i>ab initio</i> programs
ScaLAPACK	LAPACK (MPL parallel version)
SSL II/VP	Scientific subroutine library II
SSL II/VPP	Scientific subroutine library II (data parallel version)

**** SGI SGI2800/Origin3800 版 ****

プログラム名	タイトル名
ABINIT	ABINIT(v4.1.3): periodic solids using DFT, pseudopotential and plane wave basis
AMBER	AMBER7: Assisted model building with energy refinement
BLAS	Basis linear algebra subprograms
COLUMBUS	A program system for SCF, MCSCF and MR-SDCI calculation
DALTON	An <i>ab initio</i> molecular toolbox for a manifold of properties
DIRAC	4-th component relativistic MO calculation program
G03	Gaussian03(Rev.B05): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations
G98	GAUSSIAN98(A.11): <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	GAMESS(2003Jan14): General atomic and molecular electronic structure system
HONDO8	HONDO2002: <i>ab initio</i> MO calculation package
LAPACK	LAPACK
MOLCAS	MOLCAS5.4: Quantum chemistry software
MOLPRO	MOLPRO2002.3: A complete system of <i>ab initio</i> programs

**** NEC SX-7 版 ****

プログラム名	タイトル名
AMBER	AMBER7: Assisted model building with energy refinement
G03	Gaussian03(Rev.B05): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations
G98	Gaussian98(A.11.3): <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	GAMESS(2002June20): General atomic and molecular electronic structure system
MOLCAS	MOLCAS5.4: Quantum chemistry software
MOLPRO	MOLPRO2002.3: A complete system of <i>ab initio</i> programs
PRESTO	PRESTO (ver.3)

**** NEC TX-7 版 ****

プログラム名	タイトル名
ABINIT	ABINIT(v4.2.3): periodic solids using DFT, pseudopotential and plane wave basis
AMBER	AMBER7: Assisted model building with energy refinement
G03	Gaussian03(Rev.B05): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations
G98	Gaussian98(A.11.3): <i>ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	GAMESS(2002June20): General atomic and molecular electronic structure system
MOLCAS	MOLCAS5.4: Quantum chemistry software
MOLPRO	MOLPRO2002.3: A complete system of <i>ab initio</i> programs
BLAST	BLAST: Basic local alignment search tool

**** HITACHI SR8000 版 ****

プログラム名	タイトル名
AMBER5	AMBER5: Assisted Model Building with Energy Refinement
G98	GAUSSIAN98(A.11.3): <i>ab initio</i> molecular orbital calculations

**** その他 ****

プログラム名	タイトル名
CRYSTRUCT	Crystruct3/SD
MASPHYC	Material design system by means of computer physics and chemistry/Workbench

4.2 データベース開発状況

計算科学研究センターのデータベースサービスとして、以下の2件のデータベースが登録されており、現在公開中です。また、1件のデータベース（QCLDB）については、開発の援助を行っており、毎年データの更新を行っています。

(1) QCLDB（量子化学文献データベース）

（開発代表者）細矢治夫

総件数： 68,468 件

主要学術雑誌に掲載された *ab initio* 分子軌道計算を扱った文献のデータベースで、日本化学情報協会（JAICI）より世界中に配布されています。大学評価学位授与機構の行っている平成13年度着手全学テーマ別評価「研究活動面における社会との連携及び協力」評価報告書では、本事業は「優れている」の評価を得ました。また、毎年一年分のデータを、論文形式で ELSEVIER 社の国際学術雑誌「THEOCHEM」の1号分全部を使って刊行しています（J. Mol. Struct.(THEOCHEM), 627-628 (2003) 1-946）。センターのフロントエンドマシン（ccfep1.ims.ac.jp）から利用できるオンライン版 QCLDB は、開発者の意向により廃止しました。WWW 版 QCLDB の利用については、平成15年秋からは、モニター制度の制限つきではありますが、本機構の計算科学研究センターから、WWW 版 QCLDB の無料公開が文部科学省から認められました。また、新しい QCLDB データフォーマットに対応した QCLDB II を、SQL を用いて WWW 化したものを昨年度秋より URL:<http://qcldb2.ims.ac.jp/> で公開しています。

平成15年度に新規登録されたデータは、5,612 件です。

(2) FCDB（力の定数に関するデータベース）

（開発代表者）田隅三生

総件数： 2,394 件

力の定数（Force Constant）に関する文献のデータベースで、WWW 版 FCDB（<http://ginger.ims.ac.jp/fcdb/>）のみを公開サービスしています。WWW 版 FCDB は原則利用制限なしで公開しています。センターのフロントエンドマシン（ccfep1.ims.ac.jp）から利用できるオンライン版については、利用がほとんどないことから、現在は公開を行っていません。開発グループの解散により、平成13年度で開発が中止になっています。

5 平成15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	92	436	195,208	194,729	115,090	77,891,600	46,035,998
	協力研究	8	13	2,459	2,458	713	983,200	285,383
	所内	18	81	76,510	76,510	54,816	30,604,000	21,926,258
生理学	所内	1	8	4,000	4,000	3,832	1,600,000	1,532,728
合計		119	538	278,177	277,697	174,451	111,078,800	69,780,367

※ 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								
	マシン名	B,E地区合計	グリッド	総合計	VPP	*	cco2k0	*	cco2k1	*	cco2k2	*
平成15年4月		334522	0	334,522	636	100	634	100	634	100	634	100
5月		353030	0	353,030	734	100	734	100	734	100	728	99
6月		346581	0	346,581	711	100	713	100	713	100	713	100
7月		308039	0	308,039	734	100	735	100	734	100	735	100
8月		302193	0	302,193	734	100	736	100	736	100	736	100
9月		273796	0	273,796	667	101	657	100	657	100	657	100
10月		278715	0	278,715	734	100	733	100	733	100	733	100
11月		255002	0	255,002	711	100	713	100	713	100	713	100
12月		258325	0	258,325	735	100	735	100	735	100	735	100
平成16年1月		267531	0	267,531	736	100	736	100	736	100	736	100
2月		254104	247300	501,404	688	100	687	100	687	100	687	100
3月		273014	431080	704,094	735	100	734	100	734	100	734	100
合計		3504852	678380	4,183,232	8,553	100	8,548	100	8,547	100	8,541	100

年月	システム稼働時間										合計	KW/ 稼働時間	
	マシン名	cco2k31	*	cco3k1	*	SX-7	*	TX-7	*	平均			*
平成15年4月		634	100	634	100	635	100	636	100	635	100	5,077	527
5月		734	100	734	100	734	100	734	100	733	100	5,866	481
6月		707	100	713	100	710	100	710	100	711	100	5,689	487
7月		733	100	735	100	734	100	734	100	734	100	5,874	420
8月		736	100	736	100	734	100	732	100	735	100	5,881	411
9月		653	100	657	100	656	100	655	100	657	100	5,249	417
10月		727	99	733	100	734	100	725	99	731	100	5,849	381
11月		713	100	713	100	704	99	710	100	711	100	5,690	359
12月		733	100	735	100	728	99	734	100	734	100	5,869	352
平成16年1月		734	100	736	100	735	100	735	100	735	100	5,883	364
2月		686	100	687	100	686	100	686	100	687	100	5,494	370
3月		734	100	734	100	734	100	734	100	734	100	5,874	372
合計		8,524	100	8,548	100	8,524	100	8,525	100	8,539	100	68,295	410

※ *は、マシン稼働率（マシン稼働時間+計画停止時間）÷通電時間（暦月度）です。

5.3 計算機利用状況

5.3.1 CPU 使用時間

年月	CPU使用時間									
マシン名	VPP	*	cco2k0	*	cco2k1	*	cco2k2	*	cco2k31	*
平成15年4月	12,833	67	309	6	12,615	62	13,182	65	33,908	42
5月	17,272	78	172	3	20,051	85	19,565	84	66,172	70
6月	16,895	79	309	5	21,095	92	17,434	76	49,515	55
7月	13,389	61	117	2	20,683	88	17,625	75	31,548	34
8月	8,386	38	344	6	19,786	84	19,411	82	55,552	59
9月	11,507	58	17	0	18,995	90	12,791	61	28,451	34
10月	13,303	60	128	2	15,707	67	8,242	35	40,140	43
11月	14,426	68	22	0	19,841	87	15,565	68	45,388	50
12月	11,325	51	9	0	19,962	85	15,212	65	57,501	61
平成16年1月	14,084	64	99	2	15,219	65	11,430	49	62,315	66
2月	11,304	55	55	1	9,682	44	15,044	68	58,607	67
3月	9,521	43	79	1	10,452	44	9,881	42	29,668	32
合計	154,245	60	1,661	2	204,087	75	175,381	64	558,765	51

年月	CPU使用時間							
マシン名	cco3k1	*	SX-7	*	TX-7	*	合計	@
平成15年4月	4,985	6	6,573	32	488	1	84,893	35
5月	86,920	92	9,221	39	2,062	4	221,435	57
6月	55,837	61	9,255	41	1,909	4	172,249	52
7月	88,448	94	11,372	48	2,346	5	185,528	51
8月	82,417	87	12,595	54	1,225	3	199,716	52
9月	8,037	10	11,149	53	1,804	4	92,751	39
10月	7,555	8	8,951	38	2,673	6	96,699	32
11月	8,352	9	9,009	40	3,816	8	116,419	41
12月	72,108	77	7,954	34	3,999	9	188,070	48
平成16年1月	56,609	60	11,807	50	3,875	8	175,438	46
2月	46,793	53	17,150	78	3,756	9	162,391	47
3月	12,001	13	11,754	50	6,934	15	90,290	30
合計	530,061	48	126,790	46	34,887	6	1,785,877	44

※ CPU 時間の単位は時です。

※ CPU はスカラプロセッサ(SPU)とベクトルプロセッサ(VPU)それぞれの消費時間の和です。

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

※ @は、各マシンの CPU 稼働率の平均値です

5.3.2 VPU 使用時間

年月	VPU使用時間						
	マシン名	VPP	*	SX-7	*	合計	@
平成15年4月		8,693	46	5,146	25	13,839	36
5月		12,695	58	4,442	19	17,137	39
6月		11,354	53	5,880	26	17,234	40
7月		9,721	44	8,972	38	18,693	41
8月		5,431	25	9,363	40	14,794	33
9月		8,340	42	8,338	40	16,678	41
10月		9,236	42	7,155	30	16,391	36
11月		10,132	48	5,874	26	16,006	37
12月		7,755	35	4,670	20	12,425	28
平成16年1月		8,446	38	6,757	29	15,203	34
2月		7,626	37	12,172	55	19,798	46
3月		6,985	32	7,855	33	14,840	33
合計		106,414	41	86,624	32	193,038	37

※ VPU 時間の単位は時です。

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

※ @は、各マシンの VPU 稼働率の平均値です。

5.3.3 バッチジョブ処理件数

年月	バッチジョブ処理件数								
	マシン名	VPP	cco2k1	cco2k2	cco2k31	cco3k1	SX-7	TX-7	合計
平成15年4月		1,234	158	116	270	0	851	114	2,743
5月		2,170	193	142	652	0	832	2,278	6,267
6月		2,798	488	133	587	0	807	2,540	7,353
7月		1,925	43	23	67	0	1,410	163	3,631
8月		2,197	275	121	427	0	750	120	3,890
9月		1,929	383	215	401	0	1,068	2,243	6,239
10月		1,957	582	90	507	0	938	465	4,539
11月		1,944	469	246	673	0	1,145	857	5,334
12月		2,002	355	194	588	0	788	538	4,465
平成16年1月		1,954	482	196	682	0	958	776	5,048
2月		1,928	464	208	413	0	1,420	583	5,016
3月		1,427	280	189	456	0	866	1,041	4,259
合計		23,465	4,172	1,873	5,723	0	11,833	11,718	58,784

5.4 クラス別 CPU 使用時間

5.4.1 VPP5000

VPP	V1	V2	V3	V4	V5	VP6	VC
平成15年 4月	42:26:54	1006:44:16	806:04:09	1979:33:08	2831:40:14	5816:19:04	0:00:00
5月	98:18:00	1065:40:12	1287:15:07	2575:34:50	5292:52:09	6310:50:10	0:00:00
6月	151:32:42	1461:08:37	1266:07:35	4279:57:14	6366:00:07	2398:43:29	0:00:00
7月	129:28:55	1006:23:32	772:50:32	2070:39:20	5449:08:41	3545:37:51	0:00:00
8月	94:39:12	701:02:24	380:50:49	1888:44:27	4936:23:07	3:43:02	0:00:00
9月	63:25:46	950:33:09	604:51:24	1594:45:23	4839:34:02	3425:36:49	0:00:00
10月	183:58:48	1209:52:22	1008:58:46	2692:06:16	6200:39:58	1975:13:09	0:00:00
11月	154:03:43	1337:50:58	969:23:23	3492:41:45	6198:12:59	2239:07:59	0:00:00
12月	174:54:21	1161:38:25	881:24:37	2265:05:41	5565:14:38	1239:02:45	0:00:00
平成16年 1月	122:53:41	885:35:18	1102:11:52	3512:41:01	7341:03:42	1081:43:14	0:00:00
2月	94:37:42	660:34:57	1083:04:06	3067:33:36	5012:15:29	1348:56:19	0:00:00
3月	84:43:08	502:09:53	645:09:04	2206:24:19	4546:30:22	1494:12:02	0:00:00
合 計	1395:02:52	11949:14:03	10808:11:24	31625:47:00	64579:35:28	30879:05:53	0:00:00

VPP	VP23	ZZ1	ZZ2	合計	ETC	総合計
平成15年 4月	5:46:52	0:00:06	134:42:37	12623:17:20	209:45:36	12833:02:56
5月	0:00:00	626:54:36	0:00:00	17257:25:04	14:33:03	17271:58:07
6月	0:00:00	908:51:24	0:00:00	16832:21:08	62:12:30	16894:33:38
7月	0:02:31	271:32:27	0:00:00	13245:43:49	143:29:57	13389:13:46
8月	0:00:00	349:58:16	0:00:00	8355:21:17	30:38:17	8385:59:34
9月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	11478:46:33	28:23:50	11507:10:23
10月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	13270:49:19	32:29:06	13303:18:25
11月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	14391:20:47	34:48:25	14426:09:12
12月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	11287:20:27	37:36:57	11324:57:24
平成16年 1月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	14046:08:48	38:07:51	14084:16:39
2月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	11267:02:09	37:25:06	11304:27:15
3月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	9479:08:48	41:44:54	9520:53:42
合 計	5:49:23	2157:16:49	134:42:37	153534:45:29	711:15:32	154246:01:01

5.4.2 SGI2800,Origin3800

02K	G1	G2	G3	G4	G2S	G5S	G5S1
平成15年 4月	7216:32:29	10263:00:11	6750:24:54	17247:57:43	0:00:00	0:00:00	0:00:00
5月	13446:07:24	15319:07:23	18175:29:47	36938:08:35	0:00:00	0:00:00	0:00:00
6月	12158:37:42	13738:27:46	19197:45:53	24656:39:28	0:00:00	0:00:00	0:00:00
7月	1181:41:22	3064:59:12	3486:51:43	139:36:05	0:00:00	0:00:00	0:00:00
8月	15734:15:36	15093:31:04	17683:58:23	18905:16:09	0:00:00	0:00:00	0:00:00
9月	15414:06:47	10048:44:04	18322:16:07	414:56:45	0:00:00	0:00:00	0:00:00
10月	12873:38:28	6263:35:59	29934:33:22	620:56:04	0:00:00	0:00:00	0:00:00
11月	15792:53:13	11577:49:19	22384:00:51	1130:50:09	0:00:00	0:00:00	0:00:00
12月	15371:26:47	11538:41:39	27185:08:46	10639:48:23	0:00:00	0:00:00	0:00:00
平成16年 1月	15770:06:13	6089:55:47	26208:28:43	15020:36:20	0:00:00	0:00:00	0:00:00
2月	5185:13:46	8837:22:11	30938:35:22	12903:32:41	0:00:00	0:00:00	0:00:00
3月	4868:51:12	3433:24:48	10087:34:42	6688:21:30	0:00:00	0:00:00	0:00:00
合 計	135013:30:59	115268:39:23	230355:08:33	145306:39:52	0:00:00	0:00:00	0:00:00

02K	G5S2	G5S3	G5S4	合計	ETC	総合計
平成15年 4月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	41477:55:17	23519:52:48	64997:48:05
5月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	83878:53:09	109000:08:29	192879:01:38
6月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	69751:30:49	74438:01:21	144189:32:10
7月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	7873:08:22	150547:50:01	158420:58:23
8月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	67417:01:12	110093:10:14	177510:11:26
9月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	44200:03:43	24090:26:48	68290:30:31
10月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	49692:43:53	22079:46:40	71772:30:33
11月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	50885:33:32	38283:16:40	89168:50:12
12月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	64735:05:35	100055:40:58	164790:46:33
平成16年 1月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	63089:07:03	82582:32:24	145671:39:27
2月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	57864:44:00	72316:13:31	130180:57:31
3月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	25078:12:12	37003:43:37	62081:55:49
合 計	0:00:00	0:00:00	0:00:00	625943:58:47	844010:43:31	1469954:42:18

5.4.3 SX-7

SX-7	P	S	合計	ETC	総合計
平成15年 4月	2481:12:03	4064:04:29	6545:16:32	28:01:36	6573:18:08
5月	5132:49:44	4070:37:49	9203:27:33	17:34:27	9221:02:00
6月	4115:08:13	5048:56:17	9164:04:30	91:05:01	9255:09:31
7月	5745:38:19	5372:16:30	11117:54:49	253:54:53	11371:49:42
8月	5958:46:30	6144:55:42	12103:42:12	491:28:10	12595:10:22
9月	2781:19:10	7618:53:46	10400:12:56	748:39:19	11148:52:15
10月	1789:12:56	6840:19:19	8629:32:15	321:52:48	8951:25:03
11月	5528:54:35	3435:09:07	8964:03:42	45:20:51	9009:24:33
12月	4899:50:56	2918:53:19	7818:44:15	134:54:10	7953:38:25
平成16年 1月	6711:27:13	4941:10:48	11652:38:01	154:50:50	11807:28:51
2月	11536:03:23	5566:15:25	17102:18:48	47:22:46	17149:41:34
3月	4255:08:09	7444:34:36	11699:42:45	54:05:59	11753:48:44
合 計	60935:31:11	63466:07:07	124401:38:18	2389:10:50	126790:49:08

5.4.4 TX-7

TX-7	T2	B	合計	ETC	総合計
平成15年 4月	487:33:08	0:00:00	487:33:08	0:00:00	487:33:08
5月	801:21:43	1260:52:44	2062:14:27	0:00:00	2062:14:27
6月	1227:01:29	682:24:38	1909:26:07	0:00:00	1909:26:07
7月	2274:16:18	72:10:16	2346:26:34	0:00:00	2346:26:34
8月	1225:17:25	0:00:03	1225:17:28	0:00:00	1225:17:28
9月	738:35:10	1065:07:55	1803:43:05	0:00:00	1803:43:05
10月	2621:45:46	51:10:05	2672:55:51	0:00:00	2672:55:51
11月	3739:37:59	75:53:47	3815:31:46	0:00:00	3815:31:46
12月	3981:42:35	17:21:19	3999:03:54	0:00:00	3999:03:54
平成16年 1月	3823:00:32	51:39:46	3874:40:18	0:00:00	3874:40:18
2月	3727:48:53	28:03:27	3755:52:20	0:00:00	3755:52:20
3月	6873:14:14	60:42:57	6933:57:11	0:00:00	6933:57:11
合 計	31521:15:12	3365:26:57	34886:42:09	0:00:00	34886:42:09

5.5 クラス別 VPU 使用時間

5.5.1 VPP5000

VPP	V1	V2	V3	V4	V5	VP6	VC
平成15年 4月	18:25:17	495:06:28	531:30:02	1322:20:30	1711:52:29	4544:43:08	0:00:00
5月	51:49:29	667:16:37	828:41:24	2030:14:35	3731:04:26	5014:32:56	0:00:00
6月	76:33:09	901:12:12	922:07:39	2705:32:22	3862:21:31	2322:26:45	0:00:00
7月	71:02:46	636:19:05	544:00:41	1396:04:43	3443:01:28	3470:43:30	0:00:00
8月	51:40:43	353:09:46	244:10:28	1264:15:17	3303:29:08	2:32:40	0:00:00
9月	30:20:17	438:06:52	385:26:37	954:19:35	3302:25:47	3229:39:34	0:00:00
10月	100:32:44	685:44:23	628:39:09	1703:20:03	4277:12:06	1840:08:36	0:00:00
11月	110:33:39	818:19:01	684:03:02	2417:09:02	4065:07:13	2036:37:41	0:00:00
12月	90:52:22	696:33:05	538:36:49	1460:29:23	3793:25:39	1174:35:54	0:00:00
平成16年 1月	82:00:57	625:20:37	778:38:26	1947:28:37	4103:17:22	909:00:13	0:00:00
2月	51:59:22	350:38:13	654:54:09	2147:18:00	3198:21:26	1222:22:00	0:00:00
3月	42:01:10	307:33:20	410:46:08	1544:49:22	3200:10:23	1479:37:30	0:00:00
合 計	777:51:55	6975:19:39	7151:34:34	20893:21:29	41991:48:58	27247:00:27	0:00:00

VPP	VP23	ZZ1	ZZ2	合計	ETC	総合計
平成15年 4月	5:30:18	0:00:00	63:04:07	8692:32:19	0:00:08	8692:32:27
5月	0:00:00	371:48:33	0:00:00	12695:28:00	0:00:10	12695:28:10
6月	0:00:00	563:34:14	0:00:00	11353:47:52	0:02:25	11353:50:17
7月	0:00:43	159:38:02	0:00:00	9720:50:58	0:00:05	9720:51:03
8月	0:00:00	212:03:05	0:00:00	5431:21:07	0:00:03	5431:21:10
9月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	8340:18:42	0:00:02	8340:18:44
10月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	9235:37:01	0:09:48	9235:46:49
11月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	10131:49:38	0:00:02	10131:49:40
12月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	7754:33:12	0:00:04	7754:33:16
平成16年 1月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	8445:46:12	0:04:49	8445:51:01
2月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	7625:33:10	0:00:27	7625:33:37
3月	0:00:00	0:00:00	0:00:00	6984:57:53	0:21:54	6985:19:47
合 計	5:31:01	1307:03:54	63:04:07	106412:36:04	0:39:57	106413:16:01

5.5.2 SX-7

SX-7	P	S	合計	ETC	総合計
平成15年 4月	1760:13:56	3385:31:05	5145:45:01	0:21:42	5146:06:43
5月	2169:52:29	2271:51:47	4441:44:16	0:06:41	4441:50:57
6月	2977:29:35	2877:11:30	5854:41:05	25:05:19	5879:46:24
7月	4626:13:22	4237:59:23	8864:12:45	107:57:35	8972:10:20
8月	3916:58:19	5127:29:14	9044:27:33	318:21:58	9362:49:31
9月	1615:30:10	6202:15:58	7817:46:08	519:44:24	8337:30:32
10月	1193:36:15	5887:34:38	7081:10:53	73:38:26	7154:49:19
11月	3015:33:04	2848:05:41	5863:38:45	10:35:03	5874:13:48
12月	2125:51:52	2495:39:45	4621:31:37	48:30:41	4670:02:18
平成16年 1月	4022:09:44	2726:06:48	6748:16:32	8:47:41	6757:04:13
2月	8213:06:39	3958:19:06	12171:25:45	0:12:06	12171:37:51
3月	2900:01:17	4953:13:35	7853:14:52	1:23:01	7854:37:53
合 計	38536:36:42	46971:18:30	85507:55:12	1114:44:37	86622:39:49

5.6 ジョブ処理件数

5.6.1 VPP5000

VPP	V1	V2	V3	V4	V5	VP6	VC	VP23	ZZ1	ZZ2	合計	ETC	総合計
平成15年 4月	100	295	102	350	245	137	0	5	7	3	1,234	0	1,234
5月	207	438	205	510	599	211	0	0	34	0	2,170	0	2,170
6月	430	871	223	694	535	45	0	0	33	0	2,798	0	2,798
7月	151	601	216	447	436	70	0	4	7	0	1,925	0	1,925
8月	372	643	101	616	453	7	0	0	5	0	2,197	0	2,197
9月	190	510	178	439	485	127	0	0	0	0	1,929	0	1,929
10月	177	564	149	496	494	77	0	0	0	0	1,957	0	1,957
11月	198	439	150	496	553	108	0	0	0	0	1,944	0	1,944
12月	251	451	197	491	576	36	0	0	0	0	2,002	0	2,002
平成16年 1月	405	274	234	580	410	51	0	0	0	0	1,954	0	1,954
2月	459	263	149	505	500	52	0	0	0	0	1,928	0	1,928
3月	192	292	114	396	394	39	0	0	0	0	1,427	0	1,427
合 計	3,132	5,641	2,018	6,020	5,680	960	0	9	86	3	23,465	0	23,465

5.6.2 SGI2800,Origin3800

O2K	G1	G2	G3	G4	G2S	G5S	G5S1	G5S2	G5S3	G5S4	合計	ETC	総合計
平成15年 4月	158	116	125	145	0	0	0	0	0	0	544	0	544
5月	193	142	559	93	0	0	0	0	0	0	987	0	987
6月	488	133	478	109	0	0	0	0	0	0	1,208	0	1,208
7月	43	23	60	7	0	0	0	0	0	0	133	0	133
8月	275	121	305	122	0	0	0	0	0	0	823	0	823
9月	383	215	312	89	0	0	0	0	0	0	999	0	999
10月	582	90	416	91	0	0	0	0	0	0	1,179	0	1,179
11月	469	246	504	169	0	0	0	0	0	0	1,388	0	1,388
12月	355	194	381	207	0	0	0	0	0	0	1,137	0	1,137
平成16年 1月	482	196	582	100	0	0	0	0	0	0	1,360	0	1,360
2月	464	208	377	36	0	0	0	0	0	0	1,085	0	1,085
3月	280	189	412	44	0	0	0	0	0	0	925	0	925
合 計	4,172	1,873	4,511	1,212	0	0	0	0	0	0	11,768	0	11,768

5.6.3 SX-7

SX-7	P	S	合計	ETC	総合計
平成15年 4月	261	590	851	0	851
5月	324	508	832	0	832
6月	163	644	807	0	807
7月	154	1,256	1,410	0	1,410
8月	182	568	750	0	750
9月	125	943	1,068	0	1,068
10月	76	862	938	0	938
11月	222	923	1,145	0	1,145
12月	90	698	788	0	788
平成16年 1月	205	753	958	0	958
2月	321	1,099	1,420	0	1,420
3月	229	637	866	0	866
合 計	2,352	9,481	11,833	0	11,833

5.6.3 TX-7

TX-7	T2	B	合計	ETC	総合計
平成15年 4月	110	4	114	0	114
5月	87	2,191	2,278	0	2,278
6月	218	2,322	2,540	0	2,540
7月	150	13	163	0	163
8月	115	5	120	0	120
9月	221	2,022	2,243	0	2,243
10月	437	28	465	0	465
11月	778	79	857	0	857
12月	530	8	538	0	538
平成16年 1月	735	41	776	0	776
2月	577	6	583	0	583
3月	1,020	21	1,041	0	1,041
合 計	4,978	6,740	11,718	0	11,718

6 資料

6.1 計算科学研究センター運営委員

永瀬 茂	計算科学研究センター長 分子科学研究所理論研究系 分子基礎理論第一研究部門	教授
岡崎 進	計算科学研究センター	教授
森田 明弘	計算科学研究センター	助教授
岡本 祐幸	分子科学研究所理論研究系 分子基礎理論第一研究部門	助教授
石田 俊正	分子科学研究所分子スケールナノサイエンスセンター 分子クラスター研究部門	助教授
西村 幹夫	基礎生物学研究所細胞生物学研究系 細胞機構研究部門	教授
堀内 嵩	基礎生物学研究所形質統御実験施設 遺伝子発現統御第二研究部門	教授
永山 國昭	統合バイオサイエンスセンター 戦略的方法論研究領域	教授
定藤 規弘	生理学研究所大脳皮質機能研究系 心理生理学研究部門	教授
田中 秀樹	岡山大学 理学部	教授
波田 雅彦	東京都立大学 大学院理学研究科	教授
常行 真司	東京大学 大学院理学系研究科	助教授
中井 謙太	東京大学 医科学研究所附属ヒトゲノム解析センター	教授
中村 春木	大阪大学 蛋白質研究所附属生体分子解析センター	教授

6.2 計算科学研究センター職員

永瀬 茂	センター長
岡崎 進	教授
森田 明弘	助教授
南部 伸孝	助手
高見 利也	助手
三浦 伸一	助手
大野 人侍	助手
内山 郁夫	助手
片岡 正典	助手
水谷 文保	技官 (係長)
南野 智	技官
手島 史綱	技官
内藤 茂樹	技官
澤 昌孝	技官
加納 聖子	事務補佐員
禿子 瞳	事務補佐員
明石 志保子	事務補佐員
川口 律子	事務補佐員
矢崎 稔子	事務補佐員

6.3 応用プログラム相談員一覧

田中 純志	特別研究員	平成 15 年 4 月	—	平成 16 年 3 月
三上 泰治	特別研究員	平成 15 年 4 月	—	平成 16 年 3 月
木村 将浩	総研大生	平成 15 年 6 月	—	平成 16 年 3 月

6.4 利用者数とCPU時間の推移

	53年度	54年度	55年度	56年度	57年度	58年度	59年度
計算機システム	M-180 2台	M-180 2台	M-200H M-180	M-200H M-180 疎結合	M-200H 2台 疎結合	同57年度	同57年度
運 転 方 式	3カ月 有人	9月から無人	200H 無人 180 有人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	63	176	192	183	198	199	207
利 用 者 数							
機 構 内 ^a	48	70	69	91	94	102	110
機 構 外	107	254	325	330	375	426	446
合 計	155	334	394	421	469	528	556
稼働時間(時間)	1,087	6,071	6,553	6,721	6,305	6,170	6,316
CPU時間利用申請(時間)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)
申 請	929	4,666	11,033	10,230	11,938	13,053	14,799
許 可	816	3,171	7,427	8,306	10,141	10,091	10,768
総使用CPU時間 ^c (時間)	509	2,405	5,405	6,320	8,205	8,489	8,508
ジョブ処理件数 ^c	41,521	155,980	183,840	214,847	239,771	236,519	226,727
ライブラリプログラム 新規登録数	0	20	43	20	699	10	118
データベース新規登録数	0	2	0	0	3	3	0
センター使用論文数 ^d	0	24	93	118	190	185	202

	60年度	61年度	62年度	63年度	平成元年度	平成2年度	平成3年度
計算機システム	(~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 疎結合	同63年度	同63年度	同63年度
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	226	234	213	231	239	256	272
利 用 者 数							
機 構 内 ^a	130	141	143	137	146	140	158
機 構 外	464	496	520	515	544	593	623
合 計	594	637	663	652	690	733	781
稼働時間(時間)	6,016	6,368	6,444	6,091	5,694	6,768	6,749
CPU時間利用申請(時間)	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b	(M-680H基準) ^b
申 請	15,536	33,832/8,458*	9,880	12,439	14,694	16,622	20,606
許 可	12,080	28,184/7,046*	7,978	10,418	12,347	14,626	17,846
総使用CPU時間 ^c (時間)	12,770	20,092/5,023e*	6,624	7,872	8,300	11,975	11,874
ジョブ処理件数 ^c	274,431	289,915	278,956	278,104	253,418	295,5038	346,987
ライブラリプログラム 新規登録数	160	39	4	7	3	0	0
データベース新規登録数	1	0	1	0	0	0	0
センター使用論文数 ^d	206	237	223	211	218	248	229

a:機構内利用者にはアイドル課題のための重複を含めません。

b:申請および使用の詳細については、5.1を参照してください。

c:CPU時間、件数ともライブラリ開発、センター業務使用分などすべてを含みます。

d:センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたものです。

e:S-810、S-820、SX-3、SX-5、SX-7、VPPのCPU時間については、スカラー時間とベクトル時間の単純な和です。

*:下段はM-680H基準

	平成4年度	平成5年度	平成6年度	平成7年度	平成8年度	平成9年度
計算機システム	同63年度	M-680H S-820/80(～12月) SX-3/34R(1月～)	M-680H(～11月) SX-3/34R HSP(1月～) SP2(1月～)	SX-3/34R HSP(1月～) SP2(1月～)	SX-3/34R HSP SP2 HPC(9月～)	SX-3/34R HSP SP2 HPC SR2201(11月～)
運転方式	無人	無人	無人	無人	無人	無人
プロジェクト数	271	225	222	210	201	188
利用者数						
機構内a	143	127	139	129	139	126
機構外	661	589	601	597	574	609
合計	804	716	740	726	713	735
稼働時間(時間)	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	(SX-3/34R) 8,352 (HSP) 8,293 (SP2) 8,333	SX-3/34R HSP SP2 HPC(9月～)	SX-3/34R HSP SP2 HPC SR2201(11月～)
CPU時間利用申請(時間)	(M-680H基準)b	(M-680H基準)b	(M-680H基準)b	(HSP基準)b	(HSP基準)b	(HSP基準)b
申請	21,153	18,311	21,781	40,358	58,425	73,910
許可	19,110	16,027	19,393	37,446	51,499	58,650
総使用CPU時間c(時間)	12,491	16,306	24,781	156,076	207,790	262,365
ジョブ処理件数c	297,638	227,650	107,194	84,102	70,308	51,738
ライブラリプログラム 新規登録数	0	10	10	7	15	3
データベース 新規登録数	0	1	1	1	0	0
センター使用論文数d	282	267	306	275	279	331

	平成10年度	平成11年度	平成12年度	平成13年度	平成14年度	平成15年度
計算機システム	SX-3/34R HSP SP2 HPC SR2201 Origin2000 (10月～) SX-5 (3月～)	SX-3/34R (12月まで) SX-5 SP2 HPC SR2201 Origin2000	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC	VPP5000 SGI2800,Origin3800 SX-7 TX-7
運転方式	無人	無人	無人	無人	無人	無人
プロジェクト数	174	166	156	148	144	119
利用者数						
機構内a	138	125	101	100	104	89
機構外	566	539	534	504	479	449
合計	704	664	635	604	583	538
稼働時間(時間)	(SX3-3/34R) 8,579 (HSP) 8,587 (SP2) 8,574 (HPC) 8,590 (SR2201) 8,694 (Origin2000) 3,570	(SX-3/34R) 6,365 (SX5) 8,301 (SP2) 8,375 (HPC) 8,363 (SR2201) 8,381 (Origin2000) 8,380	(VPP5000) 8,234 (SGI系) 8,319 (SX5) 8,496 (SP2) 8,492 (HPC) 8,490	(VPP5000) 8,492 (SGI系) 8,422 (SX5) 8,558 (SP2) 8,555 (HPC) 8,555	(VPP5000) 8,506 (SGI系) 8,324 (SX5) 8,391 (SP2) 7,118 (HPC) 8,386	(VPP5000) 8,553 (SGI系) 8,545 (SX-7) 8,524 (TX-7) 8,525
CPU時間利用申請(時間)	(HSP基準)b	(SP2 Thin基準)b	(SP2 Thin基準)b	(SP2 Thin基準)b	(SP2 Thin基準)b	(TX-7基準)b
申請	76,804	97,788	249,405	251,785	237,872	278,177
許可	67,159	79,964	209,393	234,866	229,401	277,697
総使用CPU時間c(時間)	273,575	239,671	619,294	678,128	2,030,643	1,785,877
ジョブ処理件数c	45,173	40,697	58,685	70,680	55,522	58,784
ライブラリプログラム 新規登録数	13	14	18	4	15	5
データベース 新規登録数	0	0	0	0	0	0
センター使用論文数d	347	391	302	302	281	284

a:機構内利用者にはアイドル課題のための重複を含めません。

b:申請および使用の詳細については、5.1を参照してください。

c:CPU時間、件数ともライブラリ開発、センター業務使用分などすべてを含みます。

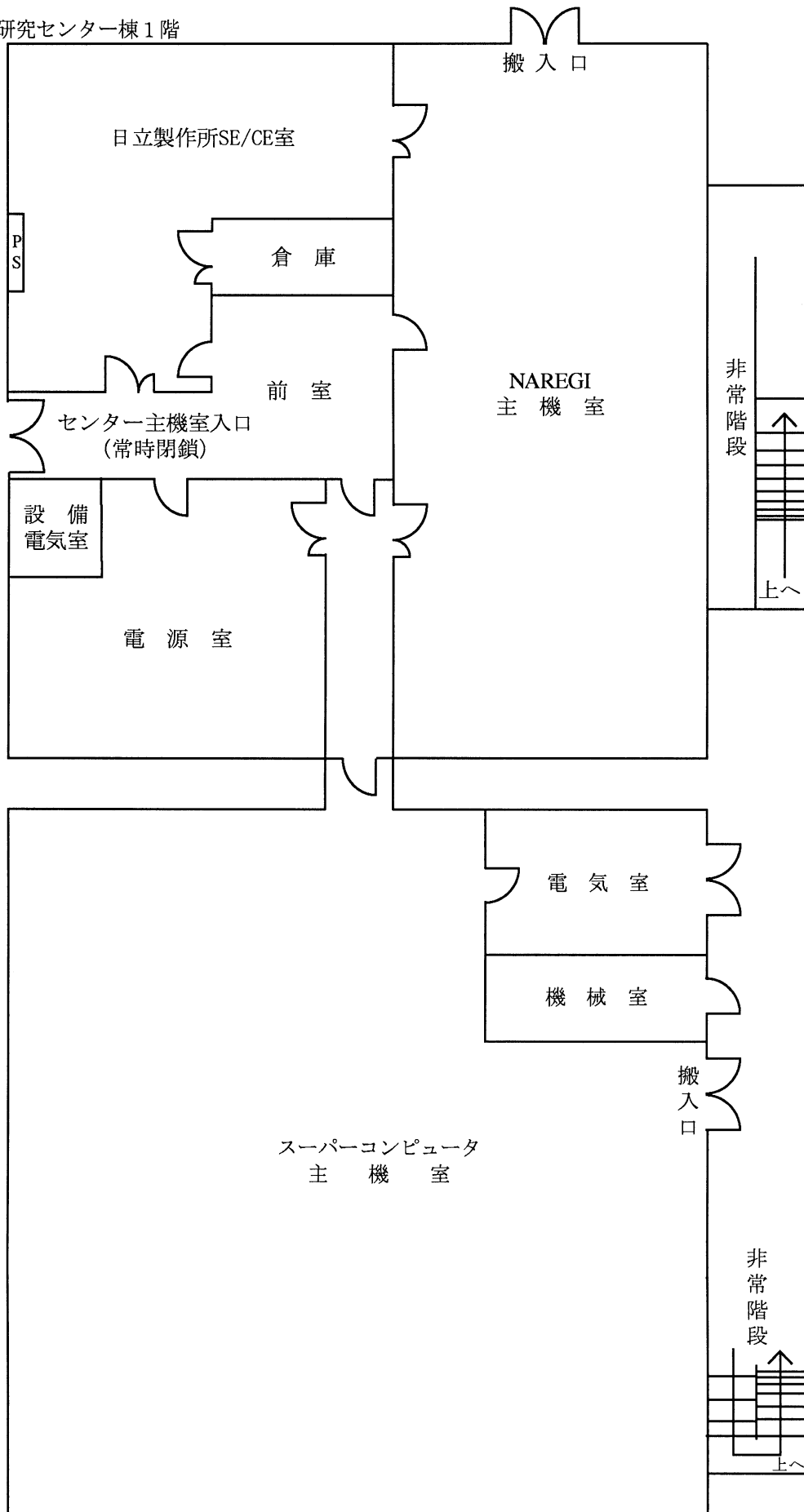
d:センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたものです。

e:S-810、S-820、SX-3、SX-5、SX-7、VPPのCPU時間については、スカラー時間とベクトル時間の単純な和です。

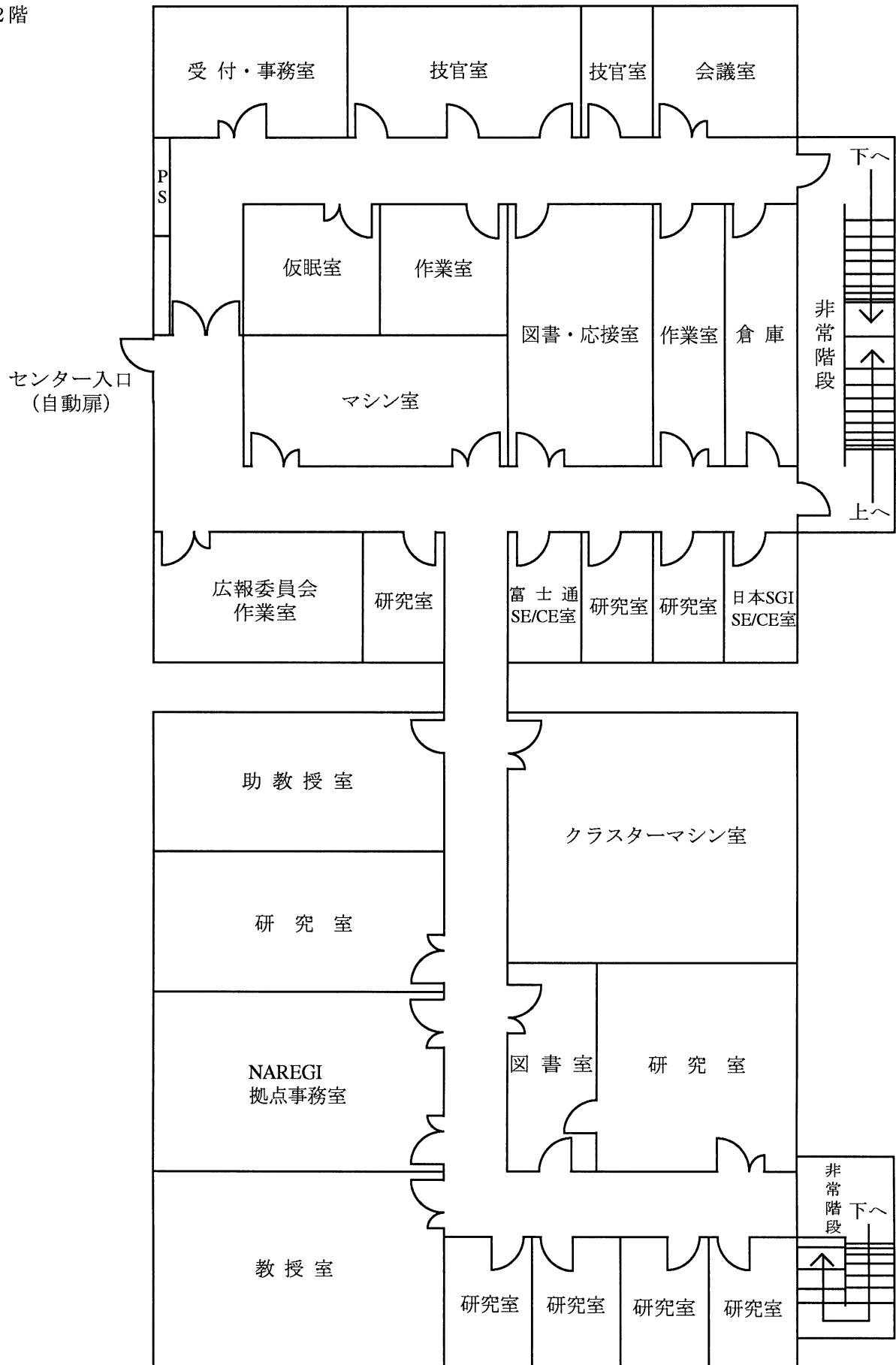
*:下段はM-680H基準

6.5 建物図

B地区 計算科学研究センター棟1階

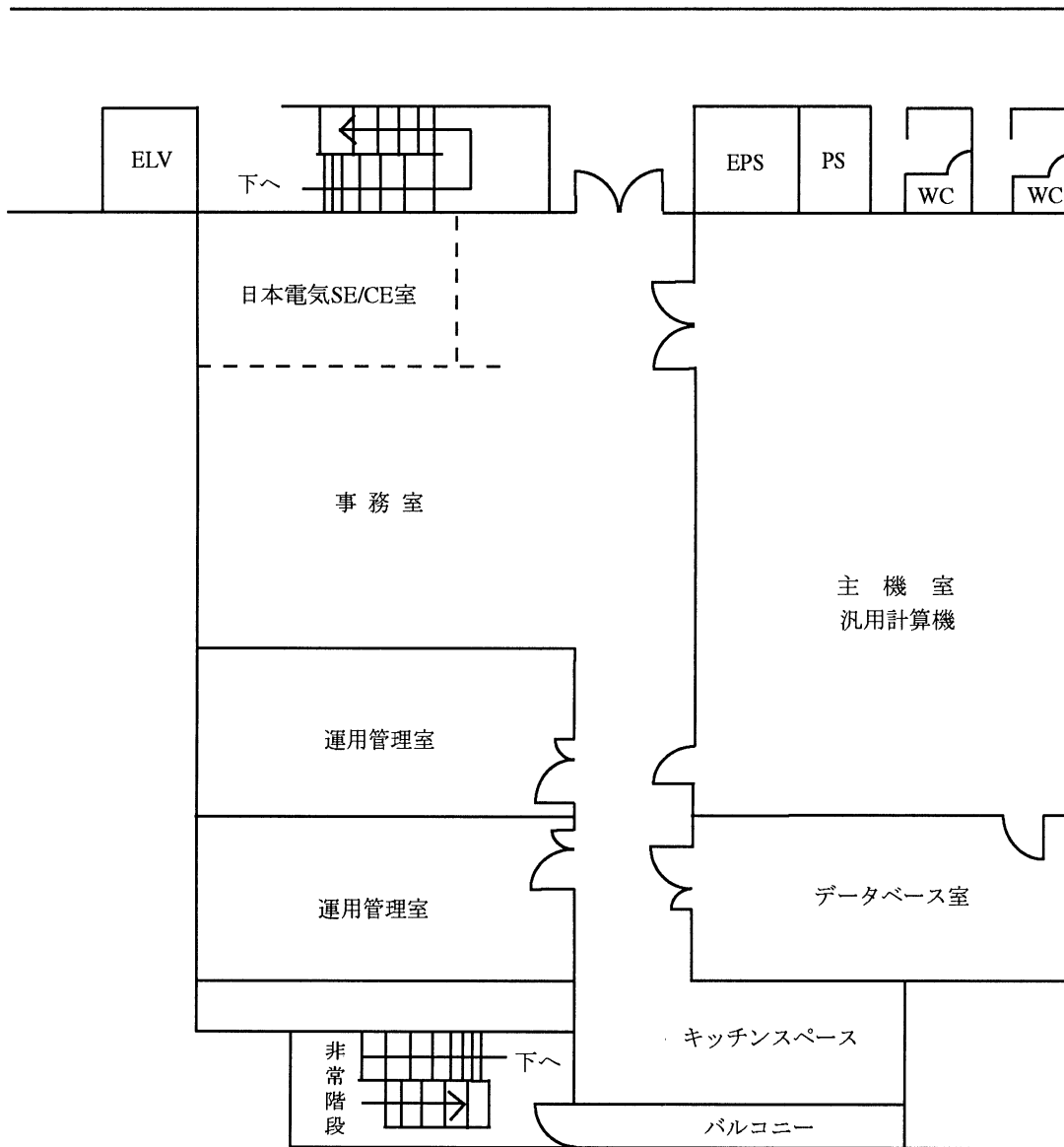


2階



NAREGI : 超高速コンピュータ網形成プロジェクト

E地区 山手2号館 2階



6.6 マニュアル一覧

よく利用されるマニュアルには以下のようなものがあります。センターではセンター内端末室においてありますが、個人での購入を希望される場合は 6.6.8 「マニュアルの購入と問い合わせ先」の問い合わせ先に直接連絡して下さい。

6.6.1 VPP5000 用マニュアル (日本語版)

- (1) UXP/V V20 Online Manual (日本語版)
- (2) UXP/V Fortran 使用手引書 V20 用
- (3) UXP/VFortran メッセージ説明書 V20 用
- (4) UXP/V Fortran プログラミング ハンドブック V20 用
- (5) UXP/V Fortran/VPP 使用手引書 V20 用
- (6) UXP/V VPP Fortran プログラミング ハンドブック V20 用
- (7) UXP/V HPF 使用手引書 V20L20 用
- (8) UXP/V アナライザ使用手引書 V20 用
- (9) UXP/V C 言語使用手引書 V20 用
- (10) UXP/V C++ 使用手引書 V20 用
- (11) C-SSL II/VP オンラインマニュアル
- (12) UXP/V DPCE 使用手引書 V20 用
- (13) UXP/V MPI 使用手引書 V20 用
- (14) FUJITSU MPTools 使用手引書
- (15) UXP/V PVM 使用手引書 V20 用
- (16) BLAS/VP LAPACK/VP ScaLAPACK オンラインマニュアル
- (17) SSL II/VP オンラインマニュアル
- (18) SSL II/VPP オンラインマニュアル
- (19) UXP/V TotalView 使用手引書 V20 用
- (20) UXP/V ネットワークキューイングシステム V20 用
- (21) UXP/V ネットワークキューイングシステム-JM V20 用
- (22) UXP/V ネットワークキューイングシステム-JS V20 用

6.6.2 VPP5000 用マニュアル (英語版)

- (1) UXP/V V20 Online Manual (English Version)
- (2) UXP/V Fortran User's Guide V20
- (3) UXP/V Fortran Messages V20
- (4) UXP/V Fortran Programming Handbook V20
- (5) UXP/V Fortran/VPP User's Guide V20
- (6) UXP/V VPP Fortran Programming Handbook V20
- (7) UXP/V HPF User's Guide V20
- (8) UXP/V ANALYZER User's Guide V20

- (9) UXP/V C Language User's Guide V20
- (10) UXP/V C++ User's Guide V20
- (11) C-SSL II/VP Online Documents
- (12) UXP/V DPCE User's Guide V20
- (13) UXP/V MPI User's Guide V20
- (14) FUJITSU MPTools User's Guide
- (15) UXP/V PVM User's Guide V20
- (16) BLAS/VP LAPACK/VP ScaLAPACK Online Documents
- (17) SSL II/VP Online Documents
- (18) SSL II/VPP Online Documents
- (19) UXP/V TotalView User's Guide V20
- (20) UXP/V Network Queuing System Handbook V20
- (21) UXP/V Network Queuing System-JM Handbook V20
- (22) UXP/V Network Queuing System-JS Handbook V20

6.6.3 SGI2800/Origin3800 用マニュアル (英語版)

- (1) C++ Programm C Programmer's Guide (IRIX6.5)
- (2) C++ Programmer's Guide (IRIX6.5)
- (3) MIPSpro F90 Manuals (IRIX6.5)
- (4) MIPSpro F77 Manuals (IRIX6.5)

6.6.4 SX-7 用マニュアル (日本語版)

- (1) 利用者の手引
- (2) コマンド操作ハンドブック
- (3) 日本語機能利用の手引
- (4) プログラミングの手引
- (5) プログラミングハンドブック
- (6) ネットワークプログラミングの手引き
- (7) ストリームプログラミングの手引き
- (8) 言語支援機能利用の手引
- (9) C++言語説明書
- (10) Fortran90/SX 言語説明書
- (11) Fortran90/SX プログラミングの手引き
- (12) Fortran90/SX 並列処理機能利用の手引き
- (13) MPI/SX ユーザーズガイド
- (14) DBX 利用の手引き
- (15) PDBX 利用の手引き
- (16) PSUITE 利用の手引き
- (17) C++/SX プログラミングの手引き

- (18) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(基本機能編 1/4)
- (19) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(基本機能編 2/4)
- (20) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(基本機能編 3/4)
- (21) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(基本機能編 4/4)
- (22) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(高速機能編)
- (23) 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引(並列処理機能編)
- (24) 科学技術計算ライブラリ ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第1分冊)
- (25) 科学技術計算ライブラリ ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第2分冊)
- (26) 科学技術計算ライブラリ ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第3分冊)
- (27) 科学技術計算ライブラリ ASLCINT/SX 利用の手引(基本機能編 第4分冊)
- (28) 科学技術計算ライブラリ ASLCINT/SX 利用の手引(高速機能編)
- (29) 科学技術計算ライブラリ ASLCINT/SX 利用の手引(並列処理機能編)

6.6.5 SX-7用マニュアル（英語版）※

英語版マニュアルについては、日本電気株式会社 中部支社公共第二営業部（6.6.8 マニュアルの購入と問い合わせ先の「SX-7用マニュアルの購入に関する問い合わせ先」を参照）に直接問い合わせして下さい。

6.6.6 TX-7用マニュアル（日本語版）

TX-7に関するマニュアルは、すべてオンライン版のみの提供となっています。センターホームページ <http://www.rccs.orion.ac.jp/> から、「センター利用者限定ページ」の「日本電気 TX7 オンラインマニュアル」から閲覧・取得できます。ただし、OS 関連については、RedHat Linux 7.2（平成15年現在）を使用しますので、一般的な「RedHat Linux に関する情報」を利用して下さい。

- (1) 科学技術計算ライブラリ ASL 利用の手引き（基本機能編第1分冊）
- (2) 科学技術計算ライブラリ ASL 利用の手引き（基本機能編第2分冊）
- (3) 科学技術計算ライブラリ ASL 利用の手引き（基本機能編第3分冊）
- (4) 科学技術計算ライブラリ ASL 利用の手引き（基本機能編第4分冊）
- (5) 科学技術計算ライブラリ ASL 利用の手引き（スーパーコンピュータ対応機能編）
- (6) 科学技術計算ライブラリ ASLINT/ASLCLIB 利用の手引き（基本機能編第1分冊）
- (7) 科学技術計算ライブラリ ASLINT/ASLCLIB 利用の手引き（基本機能編第2分冊）
- (8) 科学技術計算ライブラリ ASLINT/ASLCLIB 利用の手引き（基本機能編第3分冊）
- (9) 科学技術計算ライブラリ ASLINT/ASLCLIB 利用の手引き（基本機能編第4分冊）
- (10) 科学技術計算ライブラリ ASLINT/ASLCLIB 利用の手引き
（スーパーコンピュータ対応機能編）
- (11) 科学技術計算ライブラリ ASLINT/ASLCLIB 利用の手引き（統計機能編）
- (12) 科学技術計算ライブラリ統計機能 ASLSTAT 利用の手引き
- (13) 科学技術計算ライブラリ外部記憶拡張機能 ASLEME 利用の手引き
- (14) NEC Fortran コンパイラ リリースノート
- (15) NEC Fortran コンパイラ ユーザーズ・ガイド
- (16) NEC Fortran プログラマーズ・リファレンスマニュアル

(17) NEC Fortran ライブラリ・リファレンスマニュアル

6.6.7 TX-7 用マニュアル (英語版)

英語版マニュアルに関しては、6.6.6 TX-7 用マニュアル (日本語版) の(1)~(17)に対する英語版と、さらに以下の(1)~(2)が英語版で提供されています。これらについても日本語版と同様に、オンライン版のみの提供となっています。

- (1) MPI/EX ユーザーズガイド
- (2) MathKeisan ユーザーズガイド

6.6.8 マニュアルの購入と問い合わせ先

VPP5000 用マニュアルの購入にあたっての問い合わせ先

〒460-8585 名古屋市中区錦一丁目 10 番 1 号
富士通株式会社 東海営業本部 公共営業部
担 当 : 岡本、赤木
電 話 : 052-239-1110
F A X : 052-239-1154

SGI2800,Origin3800 用マニュアルの購入にあたっての問い合わせ先

〒471-0034 豊田市小坂本町 1-13-11 富士火災豊田ビル 5 階
日本 SGI 株式会社 中部支社
担 当 : 和田、平島
電 話 : 0565-35-2908
F A X : 0565-35-2189

SX-7 用マニュアルの購入にあたっての問い合わせ先

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

7 現状と今後（分子研レポート 2003 より転載）

5-4 計算科学研究センターの現状と今後

1977年に設置された分子科学研究所・電子計算機センターは、2000年4月より分子科学ばかりでなくバイオサイエンス分野の計算科学を含めた岡崎国立共同研究機構・計算科学研究センターに改組され今日に至っている。この間、一貫して計算科学分野の学術研究発展の先導的な役割はもとより、全国共同利用センターの中心拠点として大きな貢献をなしてきている。一方、計算科学研究センターを廻る環境は大きく変化しようとしている。その一つは2004年4月から始まる独立法人化およびそれともなう分子科学研究所および「岡崎国立共同研究機構」の「自然科学研究機構」への再編成である。しかし、分子科学を基盤とする国内の計算科学の裾野をさらに大きくもち上げて、国際的に先導的な研究の発信拠点としての役割と進展に何らの変更があるものではない。

5-4-1 現在の計算機システム

2003年12月現在の計算機システムの概要を下図に示す。図の左側は2000年3月に導入されたスーパーコンピュータシステムで、図の右側は2003年3月に更新されて山手地区に設置された汎用高速演算システムである。

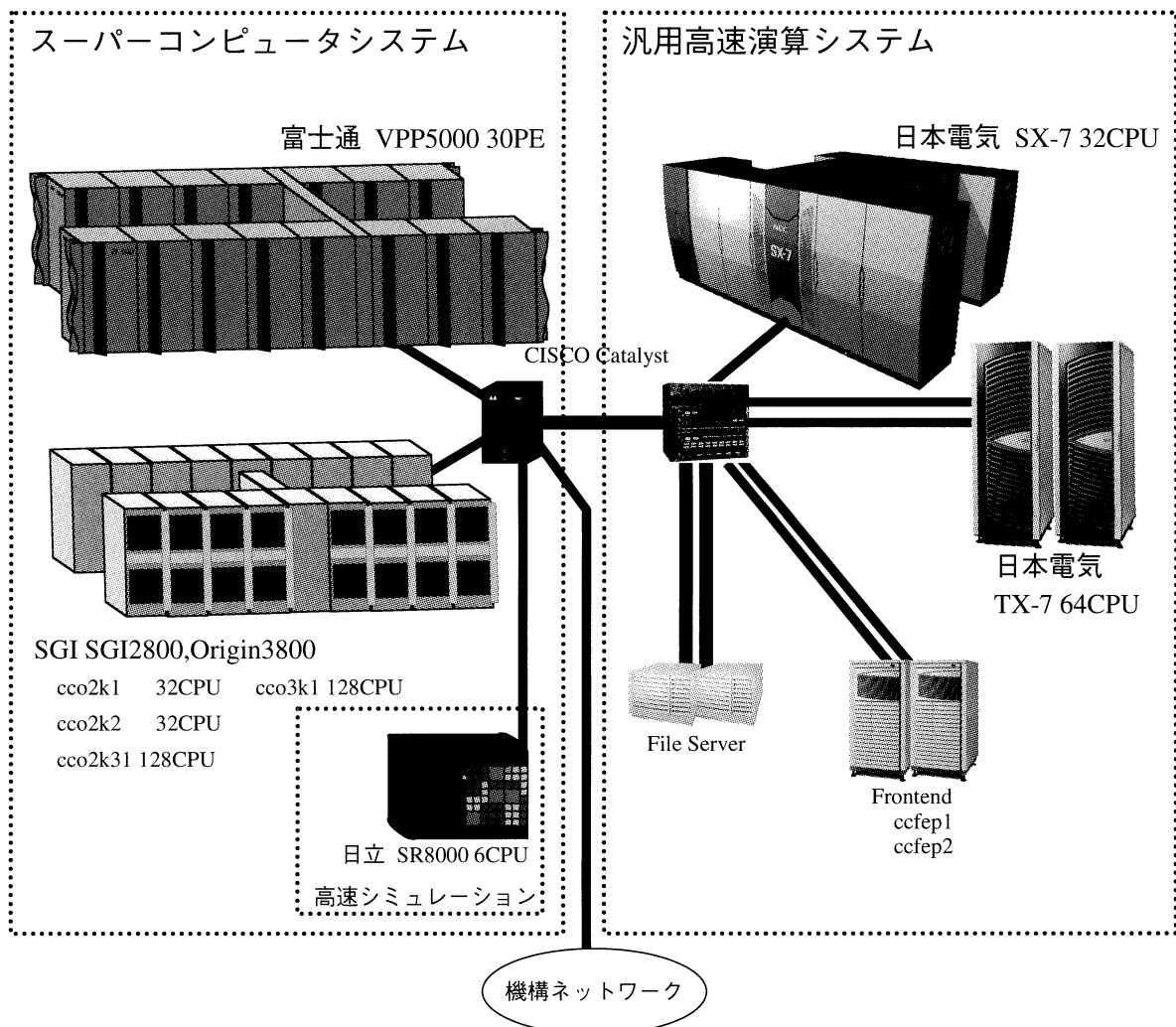


図1 システム構成図（平成15年12月1日現在）

スーパーコンピュータシステムは、富士通製 VPP5000 と SGI 製 Origin から構成されている。VPP5000 は 1 CPU 当たりの最高演算性能が 9.6 Gflops のベクトル演算装置 30 台から構成され、各 CPU に 8 ～ 16 GB の主記憶装置をもつベクトル並列計算機である。一方、SGI Origin は 1 CPU 当たりの最高演算性能が 0.6 ～ 0.8 Gflops のスカラー演算装置 320 CPU から構成され、1 CPU 当たり 1 GB の主記憶をそれぞれの CPU から共有メモリとしてアクセスが可能な分散共有方式の超並列計算機である。VPP5000 では高速なベクトル演算能力を活かした大型ジョブの逐次演算処理はもちろん、例えば 8 台以上のベクトル演算装置を使った大規模なベクトル並列演算が可能である。Origin2800/3800 は Non Uniform Memory Access (NUMA) 方式と呼ばれる論理的な共有メモリ機構を有する。NUMA は主記憶装置が各 CPU に分散して配置されているため CPU から主記憶へのアクセス速度が非等価ではあるが、利用者プログラムから大容量のメモリを容易に利用することができるので、大規模な並列ジョブの実行が可能となる。高速シミュレーションシステムの日立製 SR8000 は、主に機構内における利用を目的として運用されている。

一方、2003年3月に導入された汎用高速演算システムは、NEC 製 SX-7 で構成される主システムと TX-7 で構成される副システムとから成る。NEC SX-7 は 1 CPU あたり 8.8 Gflops の最高演算能力を持ち、256 GB の共有メモリに結合された 32 CPU の演算装置から構成され、総合演算性能 282.5 Gflops の共有メモリ型ベクトル計算機である。また、TX-7 は 4 GB のメモリを持ち最大 4 Gflops の演算性能を有する CPU を 32 台搭載したノードを基本単位として構成されている。本システムは 2 ノードから成り、合わせて 64 CPU、256 GB、256 Gflops の総合性能を有する分散メモリ型スカラー計算機である。このうち主システムは高速演算、大容量メモリを活用した大規模分子科学計算に用いられ、また副システムは分子科学計算に加え、ホモロジー検索を主としたバイオサイエンス分野での利用に供されている。

本年度も約 120 の研究グループの 600 名にもおよぶ全国の利用者に共同利用施設として広くサービスを提供し、計算科学分野の中核的拠点センターとしての役割を果たしている。一方で、世界の最先端研究をリードしこれを推進していくために、各研究室にあるワークステーションやパソコンクラスターはもちろんのこと、他の計算機センターでは不可能な大規模計算を実行可能とするために環境整備を行ってきている。

5-4-2 大規模計算のための環境整備

高速パソコンクラスターの普及などに伴って、計算科学研究センターへの期待と役割が最近変化してきている。このために、利用者の意見を広く集めて、魅力ある中核計算センターとしてさらに大きく発展するために、8月25日から9月8日にかけて、計算速度、ハード、ソフト、プログラムライブラリ、運用法、利用申請と利用報告等に関する利用者アンケート調査を実施した。また、主な利用者にセンターに集まってもらって、意見交換会を開催した。これらをもとにして議論を重ねて、これまでと比較してはるかに高度で便利な利用形態を目指して、2004年4月より運用の抜本的な変更を予定している。詳細は <http://www.rccs.orion.ac.jp/> にある。変更の主なポイントは、

- (a) CPU 時間とメモリーの上限を大幅に緩和して、大きな分子の電子状態計算を可能にする。また、ディスク容量の上限を大幅に緩和して、MD 計算の巨大データの保存を可能にする。
- (b) 大規模計算を高速処理するための並列計算キューを大幅に拡充する。
- (c) これまでの特別申請を簡素化した特別利用キューを新設し、申請時に簡単な説明を追記するだけで、360 時間 (16-32 CPU、128 GB メモリー) もの長時間ジョブを可能にする。
- (d) アプリケーション利用キューを新設し、機種に依存しない Web からの標準入力で、最も利用頻度が高い Gaussian プログラムの効率的実行を初心者にも容易にする。

これらの変更により、これまでと比較して格段に大規模な計算が実行できることになる。例えば、HF/6-31G(d)法で、

原子数 338, 基底関数 4,238 の分子の SCF (21 回) +force の計算が TX-7 (16 CPU) を利用して 8 時間 48 分で終了するので、巨大な分子の理論研究が可能になる。今回の変更によって大規模な計算ばかりでなく、小規模な計算も効率的に実行できるのも特徴である。

5-4-3 ナノサイエンス実証研究プロジェクト

2003年4月より「ナノサイエンス実証研究プロジェクト」が分子科学研究所と計算科学研究センターを中心にスタートした。この研究プロジェクトは、我が国にグリッド計算環境を整備することを主眼とする国家プロジェクト「超高速コンピュータ網形成プロジェクト (NAREGI: National Research Grid Initiative)」のアプリケーション開発拠点として、「グリッド計算環境を活かした計算科学をナノサイエンス分野で展開し、グリッド計算の有効性を実証する研究」の推進を目的に5年間の計画で行われる。このプロジェクトは、我が国の産業技術の基盤を育成するための「産学連携プロジェクト」としての性格をももっているのが特徴である。

本プロジェクトは、分子研、東大物性研、東北大金研、物構研、京大化研、産総研の6研究所を中心にして、いくつもの大学および企業からのナノ計算科学分野の第一線の研究者の参加をえて、我が国の計算科学の総力を結集した取り組みになっている。具体的な研究課題と担当研究機関は、①機能性ナノ分子 (分子研)、②ナノ分子集合体 (分子研)、③ナノ電子系 (東北大・金研)、④ナノ磁性 (東大・物性研)、⑤ナノ複合系設計 (産総研)、⑥総合ナノシミュレーションシステム (産総研)、⑦ナノ設計実証 (産業界から公募) である。これらの課題研究を遂行し、その研究成果を通じてグリッド計算環境の有効性を実証すると同時に、ナノサイエンス分野における統合シミュレーションシステムを構築し、大学や産業界の研究者に広く公開することを目指している。

このナノサイエンス実証研究のために昨年度補正予算が組まれ、2004年4月に運用開始予定で、総理論演算能力が 10 Tflops の大型計算機システムが導入される。計算科学研究センターでは、アプリケーション開発拠点としての研究推進はもとより、事務局と計算機システムの運用という重要な役割を果たすことになる。このためにセンタースタッフは現在万全の準備を行っている。

5-4-4 計算分子科学研究系の新設

自動車、船、飛行機、建物などを合理的に設計するためにはコンピュータでまず仮想実験をすることが早くからルーチン化されているように、物質科学はもとより生命科学分野でも、分子科学を基盤とする計算科学とコンピュータシミュレーションは、実験に並ぶあるいはそれ以上に有力で強力な研究方法として今後ますます重要になる。これは、実験では困難な条件もさまざまに設定でき、高速に多数回の仮想実験をクリーンにできるので、新しい機能をもつ分子や集合体を精密・合理的に設計して反応も自在に制御できる。現在の計算科学手法は、比較的小さい分子系を精度良く取り扱えるが、ナノスケールサイズの巨大な分子系の精度の高いコンピュータシミュレーションには飛躍的な進展が望まれている。サイズの大きな分子系は、新規な構造、物性、機能、自己集合の宝庫である。このために、巨大な分子系を精度高く高速に取り扱える理論と超並列演算やグリッド環境を駆使した高度な計算法の開発が、今後の計算科学のきわめて重要な挑戦課題になっている。分子科学を基盤とするナノサイエンスおよびバイオサイエンスとの境界領域において、世界の潮流の先端になるナノ計算科学を展開して発信していくことは緊急の課題である。このことは、分子研の理論研究系の昨年度の外部評価でも指摘されていることで、従来の計算科学の単なる延長ではなく、新機軸を切り開いていくための中核的研究推進体制と人材が求められている。ナノ計算科学分野の独創的な先端研究を集中的に行うために、下記の計算分子科学研究系を分子科学研究所に新設することが煮詰まっている。

(1) 計算分子科学第1

ナノスケールの分子並びに分子集合体の構造と動力学に関する計算科学の研究を行う。特に、分子の自己組織化による構造形成の原理とその動力学を明らかにし、水中でのタンパク質や生体膜などの構造予測と、その構造に基づいた動力学の解明のための計算科学的方法論を確立する。

(2) 計算分子科学第2

ナノスケールの分子並びに分子集合体の機能と物性に関する計算科学の研究を行う。特に、巨大分子系やその複合体のもつ機能や物性および化学反応を合理的に設計して解析する計算科学的方法論を確立して、機能性新規触媒や分子エレクトロニクス、分子磁性、機能性高分子などへの応用を目指す。

(3) 計算分子科学第3（客員部門）

超並列アルゴリズムやグリッドコンピューティング手法を、量子化学計算、分子動力学計算、モンテカルロ計算などへ適用し、大規模計算の最高演算ピーク性能を実現して計算効率の最大化を図るための情報科学的研究を幅広く行う。

計算分子科学研究系の教官は、理論研究系（理論分子科学研究系と改名予定）の協力のもとに、21世紀の計算科学の基盤となる理論と方法論の開発はもとより、計算科学研究センターの運営と発展に中心的な役割を果たす。上記の研究の具体的内容はまだ暫定的であるが、分子科学ばかりでなく生命科学分野のナノ計算科学に新展開と大きなインパクトをもたらすことになる。