

# I 部

## 目 次

1	巻頭言 計算科学研究センター 平田 文男 .....	1
2	スーパーコンピュータワークショップについて .....	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	キュー構成方針 .....	11
3.3	キュー構成 .....	11
3.4	利用課金 .....	15
3.5	利用点数 .....	15
4	一般報告 .....	18
4.1	ライブラリプログラムの開発・公開 .....	18
4.2	データベース開発状況 .....	20
5	平成 19 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 .....	21
5.3	計算機利用状況 .....	22
5.4	クラス別 CPU 使用時間 .....	23
5.5	クラス別 VPU 使用時間 .....	24
5.6	ジョブ処理件数 .....	25
6	資料 .....	27
6.1	計算科学研究センター運営委員 .....	27
6.2	計算科学研究センター職員 .....	28
6.3	利用者数と CPU 時間の推移 .....	29
6.4	建物図 .....	31
6.5	マニュアル一覧 .....	34
7	将来計画及び運営方針 (分子研リポート 2007 より転載) .....	39

## 1 巻頭言

計算科学研究センター

平田 文男

本年4月より、名古屋大学へ移動された岡崎教授の後任として計算科学研究センター長を拝命した平田です。実は、私は以前にも2000年から3年間センター長を努め、今回が2度目の拝命となります。本稿では、計算科学研究センターの過去を俯瞰し、将来に対する私の所見を述べさせていただきます。ここで、述べる所見についてはおそらく賛否両論半ばすると思いますが、計算科学研究センターの将来を展望する上でぜひとも必要だと考え、あえてセンターユーザーの皆様の問題提起する次第です。

現在、計算科学研究センターはその第3フェーズに入っていると考えています。その第1フェーズは分子研の草創期にその「電算センター」として出発した時期で、この時期のセンターの主たる位置づけは分子科学分野のユーザーに計算機資源（ハード）を供給することだったように思います。この時期には、まだ、ワークステーションやパソコンが普及しておらず、理論・計算科学分野の分子科学者にとって、本センターがほぼ唯一の可能な選択肢だったことを多くの古手の研究者から伺っています。「センター」が理論・計算科学研究者の「メッカ」だった時期です。第2フェーズはワークステーションが急速に普及した時期で、この時期には理論・計算分子科学分野の「大口ユーザー」は自ら高性能のワークステーションを購入し、「センター」は彼らにとっては「おつきあい」程度で使用する位置づけに甘んじていたようです。しかしながら、この時期には GAUSSIAN や AMBER などの市販あるいは公開ソフトの普及とあいまって、理論・計算分子科学分野のプロパーではない他分野（特に、実験有機化学系）のユーザーに計算資源と市販・公開ソフトを提供する上で重要な役割を果たしてきました。この時期になると、実験研究者もただ「データを出す」とか「ものを作る」だけでは論文レフェリーから文句を言われ、結果の背景にある分子レベルでの物理や化学を合理的（理論的）に説明する必要に迫られるという事情があったと思います。これらの実験研究者にとってワークステーションを自ら維持・管理したり、ソフトウェアを自ら開発することは負担が大きすぎるため、「センター」は理論・計算分子科学分野以外の研究者にとって、まさに、「駆け込み寺」だったわけです。

「センター」の第3フェーズの始めは岡崎「統合バイオ」の創設に絡んで、「センター」の名称が従来の分子研「電算センター」から岡崎機構「計算科学研究センター」に変わった時期で、私はちょうどその時に第1回目のセンター長を努めました。この時期の計算機環境の特徴は並列処理を中心とするスーパーコンピュータやパソコンクラスターが主流ないしは大きなファク

ターになりつつあり、並列化に伴う高度のプログラミング技術が要求されるようになったことです。また、パソコンクラスターが巨大化し、理論・計算分子科学分野と言えども、ひとつの研究室内で維持・管理することが大きな負担になりつつあったことです。このような状況のもとで、これまで「センター」から離れていた「大口ユーザー」の復帰の兆しが見えていました。そこで、私は実験研究者を中心にした「小口ユーザー」の利用を維持しながら、同時に、「大口ユーザー」の利用を奨励するために、新たに「特別利用申請」枠の創設を提案しました。この提案は、その後、私を引き継いだ永瀬センター長および岡崎センター長によって実現され、毎年、数課題が採択されて大きな研究成果を挙げています。

しかしながら、このような小さな管理・運営の修正では「センター」自身の存在すら危うくなるような「大波」に我々は直面しています。その「大波」とは「大学法人化」と連動した機関やセンターの統合・廃止の圧力で、我々の「センター」も例外ではありません。すでに、大学の附置研究所のいくつかがその矢面に立たされているように、「あなたのセンターはどのような位置づけをもっているのですか？」という問いに明確な解答ができない場合、「センター」の命脈は尽きることに成らざるを得ません。

さて、そこでこの「大波」をどう乗り越えていくかが問題ですが、私はその「答えはひとつ」だと思っています。それは従来の「ハード中心」の運営から「ソフト」を主体にした運営に根本的に切り替えることです。と言っても従来の GAUSSIAN や AMBER などの米国産市販・公開ソフトへの依存度を強めるということでは決してありません。（もし、そうであれば本センターの存在意義はほとんど明確になりません。）分子科学分野を中心とするわが国の研究者が開発した国際的にも独自性の高いプログラムを「センター」を通じて、公開していただくという意味です。別の言葉で言えば、GAUSSIAN や AMBER などでは解けない問題が解ける計算センターにしようということです。もし、この構想が実現すれば、「センター」は理論・計算分子科学分野の拠点としての位置づけを確固としたものにすることができます。何故ならば、「ナノ」や「バイオ」の分野では従来の市販・公開ソフトではとても太刀打ちできない問題に理論家や実験家が直面しているからです。

しかしながら、この構想を実現する要件はそう簡単ではありません。要件の第一は、理論・計算分子科学分野の研究者に自ら開発したプログラムを公開していただけるかどうかです。それにはおそらく二つの条件が伴うと思います。ひとつは「センター」を通じて公開することが、自らの研究の発展にも結びつくこと、さらに、「公開」するために自分が大きな負担を背負い込むことにならないこと。この二つの条件を充たすために、第二の要件が発生します。それは、理論・計算分子科学分野の高度の専門性を身につけた技術者集団を形成できるかどうかです。もし、そのような技術者集団が居なければ、プログラムを公開したことにともなう諸々の作業

(マシンの更新やソフトの改訂に伴うプログラムチューニングやマニュアル作成など)はプログラム提供者が負担することになり、その研究室のポストドクや学生がその作業をやることになります。一方、もし、そのような技術者集団がそれらの作業を負担してくれれば、プログラム提供者はその成果を享受することができ、自らの研究の発展にも結びつくことでしょう。このことはプログラム提供者にとって想像以上に強いインセンティブになると思います。何故なら、現在、マシンの超高並列化に伴い計算機工学にそれほど強くない計算科学者が容易にプログラムをチューンすることが事実上不可能になりつつあることを知っているからです。

以上、「センター」長就任にあたっての「所見」の形で「センター」の将来展望に関する問題提起を行いました。この問題提起に対する「センター」ユーザーの皆様のご意見をお待ちしています。

## 2 スーパーコンピュータワークショップについて

本年度のワークショップでは、当センターの計算資源を利用して得られた最新の研究成果の報告会を企画し、昨年度から開始した施設利用 S の課題の中から 2 件の研究成果を報告して頂いた。ポスター発表による成果報告も新たな試みとして行った。また、センターの研究成果報告に加えて、この分野の最前線でご活躍されている研究者をお招きし最近の成果についての講演をして頂いた。特に今回のワークショップでは、分子のダイナミクスを中心テーマに据えてプログラムを構成した。さらに、3月に導入予定の日立 SR11000 次世代モデルに関する説明も行った。参加者は例年の約 2 倍の 144 名であった。

### 平成 19 年度 スーパーコンピュータ ワークショップ

日時： 2008 年 2 月 18 日（月）～19 日（火）

場所： 岡崎コンファレンスセンター

参加者： 144 名

ポスター発表件数： 37 件

テーマ：「大規模計算と分子のダイナミクス」

#### 2 月 18 日（月）（大会議室）

- 13:00-13:10 はじめに 中村宏樹(分子科学研究所所長)
- 13:10-13:50 施設利用 S 研究成果報告  
「大規模分子動力学法による生体超分子の立体構造変化と機能」  
北尾彰朗（東大）
- 13:50-14:30 施設利用 S 研究成果報告  
「極限環境下で発現するシリコンの構造多様性」  
森下徹也（産総研）
- 14:30-14:45 休憩
- 14:45-15:45 特別講演  
「タンパク質の分子動力学シミュレーションに基づいた研究」  
木寺詔紀（横浜市大）
- 15:45-17:45 ポスター発表
- 17:45-18:00 休憩
- 18:00-20:00 懇親会（中会議室）

#### 2 月 19 日（火）（大会議室）

- 9:00-10:30 次期スーパーコンピュータ利用講習会  
「HITACHI SR11000 次世代モデル ご紹介」  
伊藤 新（日立）  
「HITACHI SR11000 次世代モデル プログラムチューニング」  
合田徳夫（日立）
- 10:30-10:40 休憩
- 10:40-11:40 特別講演  
「分子の核波束と電子波束のダイナミクス」  
高塚和夫（東大）

- 11:40-12:10 招待講演  
「量子開放系としての表面吸着分子の局所電子状態」  
安池智一（分子研）
- 12:10-13:30 昼食
- 13:30-14:00 招待講演  
「凝縮系における量子移動ダイナミクスの理論とシミュレーション」  
安藤耕司（京大）
- 14:00-15:00 特別講演  
「分子科学と表面科学における量子ダイナミクス」  
山下晃一（東大）
- 15:00-15:20 休憩
- 15:20-15:50 招待講演  
「Theoretical Investigation of Time-Dependent Phenomena in Solution Systems」  
石田干城（分子研）
- 15:50-16:20 招待講演  
「多配置波動関数による強光子場中分子の電子ダイナミクスの記述」  
加藤毅（東大）
- 16:20-16:50 招待講演  
「大規模量子分子動力学のための基礎理論の開発：量子的キュムラント動力学法」  
重田育照（筑波）
- 16:50-17:00 おわりに 岡崎 進（計算科学研究センター長）

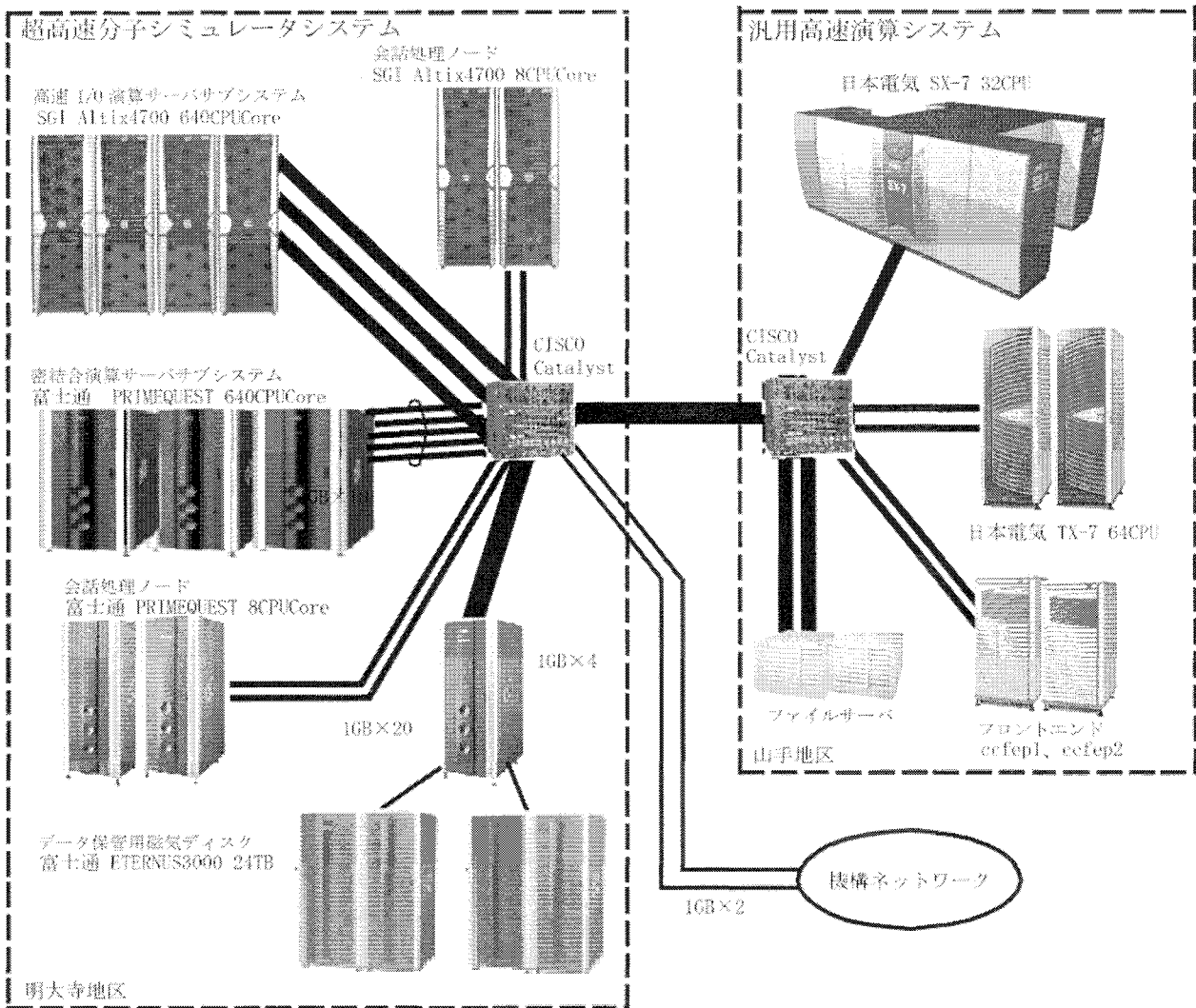


### 3 計算機システムの運用および使い方

#### 3.1 システムの構成と特徴

##### 3.1.1 2007年1月末までのシステム構成と特徴 (SX-7、TX-7は1月末で運用停止)

超高速分子シミュレータシステム (高速 I/O サーバサブシステム(SGI 製 Altix4700)、密結合サーバサブシステム(富士通製 PRIMEQUEST)、汎用高速演算システム (高速演算サーバシステム(日本電気製 SX-7)、高速演算サーバ副システム(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)。



センター内は2台のスイッチングシステム(Cisco Catalyst6506E)を中心に各マシンと各バックボーンが相互に接続されています。

- ・ 機構内に GigaBitEther (8Gbps) の LAN が張り巡らせており、所内はもちろんのこと三研究所(分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所)の支線ネットワーク間を統合的に接続・利用できます。
- ・ SINET を経由してインターネットにアクセスできます。

#### ◆超高速分子シミュレータシステム

- ・高速 I/O サーバサブシステム(SGI 製 Altix4700)

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

##### <演算処理装置>

主記憶容量	8.0TB (6.0TB + 2.0TB)
総理論演算性能	3276.9GFLOPS + 819.2GFLOPS (6.4GFLOPS/CPUCore)
CPU 個数	640 個 (512 個 + 128 台)

OS は、1CPUCore を 1CPU と認識しています。

##### <磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量	114TB
(内訳)	
一時作業ファイル領域(/work)	114TB

- ・密結合サーバサブシステム(富士通製 PRIMEQUEST)

PRIMEQUEST ではジョブ管理(Parallelnavi for Linux Advanced Edition)、バッチ処理と TSS 処理を行います。

##### <演算処理装置>

主記憶容量	2.56TB (256GB × 10node)
総理論演算性能	409.6GFLOPS × 10node (6.4GFLOPS/CPUCore)
CPU 個数	640 個 (64 個 × 10node)

OS は、1CPUCore を 1CPU と認識しています。

##### <磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量	35TB
(内訳)	
一時作業領域(/work)	8TB
短期保存ファイル領域(/week)	24TB

#### ◆汎用高速演算システム

- ・高速演算サーバシステム(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 個数	32 個

##### <磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量	4.5TB
(内訳)	
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。



- ・高速演算サーバ副システム(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	256GB (128GB × 2node)
総理論演算性能	256GFLOPS (4GFLOPS/CPU)
CPU 個数	64 個 (32 個 × 2node)

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量	3TB
(内訳)	
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。	

- ・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 個数	2 個 (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	6TB
(内訳)	
ユーザホームディレクトリ	6TB

- ・フロントエンド(日本電気製 TX-7/i6010)

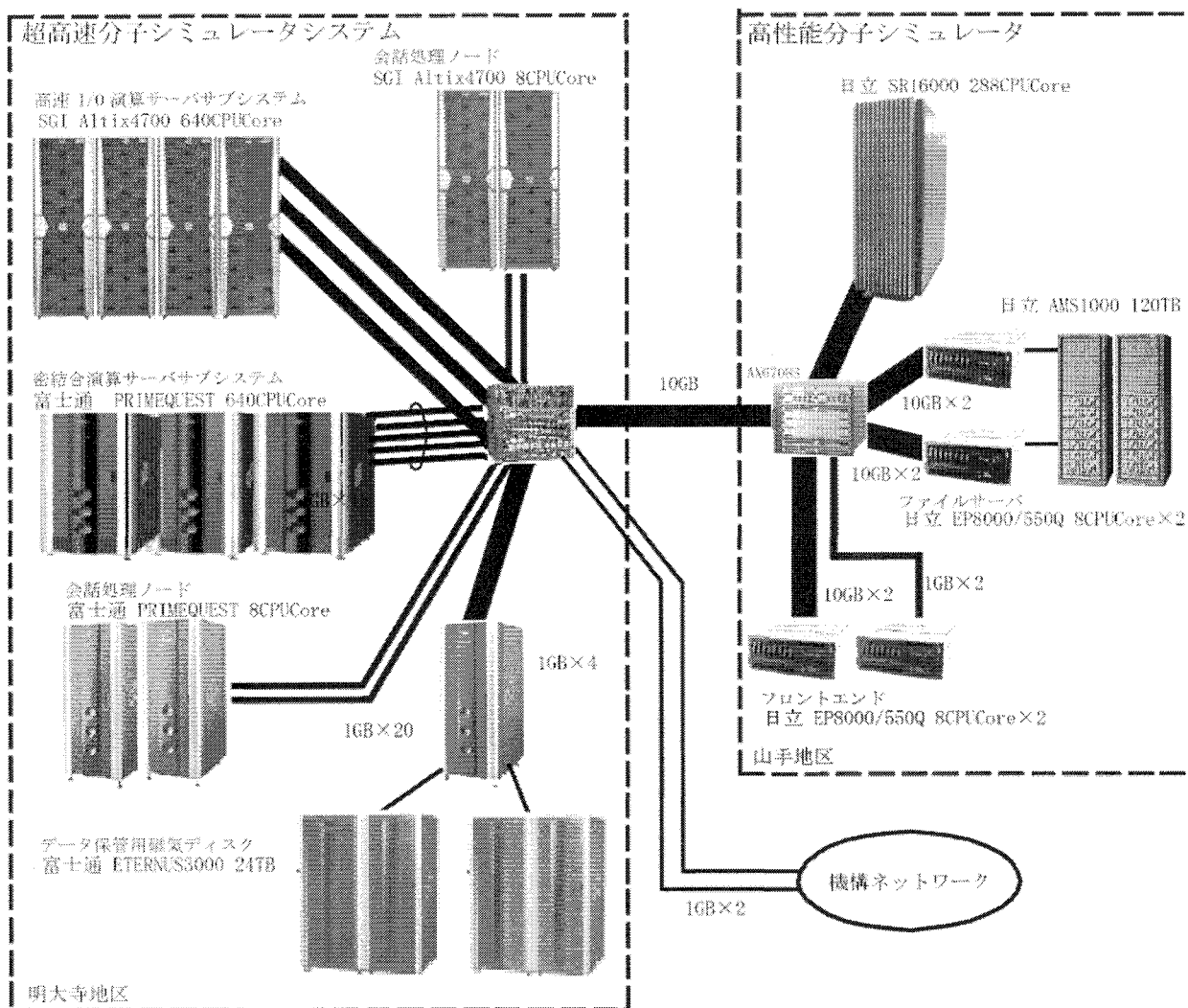
ccfep1 と ccfep2 の 2 台を使用しています。

<演算処理装置>

主記憶装置	4GB (2GB × 2 台)
CPU 個数	4 個 (2 個 × 2 台)

### 3.1.2 2007 年 3 月以降のシステム構成と特徴 (SR16000 は 3 月より運用開始)

超高速分子シミュレータシステム (高速 I/O サーバサブシステム(SGI 製 Altix4700)、密結合サーバサブシステム(富士通製 PRIMEQUEST)、高性能分子シミュレータシステム (日立製 SR16000) による独立性を重視した UNIX 分散処理システムです(ユーザのホームディレクトリはファイルサーバ上にあり、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)。



センター内は2台のスイッチングシステム(CISCO Catalyst 6504 と Alaxala AX6708S)を中心に各マシンと各バックボーンが相互に接続されています。

- ・ 機構内に GigaBitEther (8Gbps) の LAN が張り巡らせており、所内はもちろんのこと三研究所(分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所)の支線ネットワーク間を統合的に接続・利用できます。
- ・ SINET を経由してインターネットにアクセスできます。

#### ◆超高速分子シミュレータシステム

- ・ 高速 I/O サーバサブシステム(SGI 製 Altix4700)

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

##### <演算処理装置>

主記憶容量	8.0TB (6.0TB + 2.0TB)
総理論演算性能	3276.9GFLOPS + 819.2GFLOPS (6.4GFLOPS/CPUCore)
CPU 個数	640 個 (512 個 + 128 台)
	OS は、1CPUCore を 1CPU と認識しています。

##### <磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量	114TB
(内訳)	
一時作業ファイル領域(/work)	114TB

・密結合サーバサブシステム(富士通製 PRIMEQUEST)

PRIMEQUEST ではジョブ管理(Parallelnavi for Linux Advanced Edition)、バッチ処理と TSS 処理を行います。

<演算処理装置>

主記憶容量	2.56TB (256GB × 10node)
総理論演算性能	409.6GFLOPS × 10node (6.4GFLOPS/CPUCore)
CPU 個数	640 個 (64 個 × 10node)

OS は、1CPUCore を 1CPU と認識しています。

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量	35TB
(内訳)	
一時作業領域(/work)	8TB
短期保存ファイル領域(/week)	24TB

◆高性能分子シミュレータシステム

・演算サーバシステム(日立製作所製 SR16000)

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

<演算処理装置>

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

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

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

総容量	23TB
(内訳)	
一時作業ファイル領域(/work)	23TB

・ファイルサーバシステム(日立製作所製 EP8000/550Q)

2 台構成です。

<演算処理装置>

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

<磁気ディスク装置(アレイディスク)>

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

・フロントエンド(日立製作所製 EP8000/550Q)

ccfep1 と ccfep2 の 2 台構成です。

<演算処理装置>

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

OS は、1CPUCore を 2CPU と認識しています。

### 3.2 キュー構成方針

2008年1月末までの構成方針（SX-7、TX-7は1月末で運用停止）

1	パラレル利用キューには、現在のパソコン(Pentium4 3GHz, Itanium2 1.5GHz相当 6GFLOPS, Memory 2GB)の10倍程度を単位としたコンピュータ資源を提供する。多重度は1とする。課金は経過時間とする（キュー占有時間）。CPU数の可変提供するものとし、ないものがある。
2	シリアル利用キューは、最高性能のCPUを提供する。長時間開放を実現する。課金はCPU時間とする。スループットをあげるため、多重度を2とする。
3	ベクトル演算器のあるサーバはシリアル利用キューのみ、それ以外は、パラレル利用キューのみとする。
4	ライブラリ環境整備の一環として、比較的利用の多いアプリケーションについては、初級者利用の便宜を図る。特に機器更新に伴う環境の変化を隠蔽する様にウェブからの利用環境を整備する。
5	申請に特別利用枠を設け、許可されたユーザは特別利用キューを使用できる様にする。長時間利用、大規模CPU利用が可能な環境を提供する
6	キュー構成をシンプルにする。

2008年3月以降の構成方針（SR16000は3月より運用開始）

1	パラレル利用キューには、現在のパソコン(Pentium4 3GHz, Itanium2 1.5GHz相当 6GFLOPS, Memory 2GB)の10倍程度を単位としたコンピュータ資源を提供する。課金は経過時間とする（キュー占有時間）。CPU数の可変提供をする。
2	パラレル利用キューのみとする。
3	ライブラリ環境整備の一環として、比較的利用の多いアプリケーションについては、初級者利用の便宜を図る。特に機器更新に伴う環境の変化を隠蔽する様にウェブからの利用環境を整備する。
4	申請に特別利用枠を設け、許可されたユーザは特別利用キューを使用できる様にする。長時間利用、大規模CPU利用が可能な環境を提供する。
5	キュー構成をシンプルにする

### 3.3 キュー構成

キュー構成表中の言葉の意味は下記の通りです。

- キュー名 : 各ホストのバッチ投入機構(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
- メモリ : 各キューにおいて、利用可能な最大主記憶容量
- 多重度 : 1CPU で同時実行できるジョブ本数
- PE/CPU 数 : 各キューにおいて、利用可能な最大 CPU 数
- ユーザ制限 : 各キューにおいて、あるユーザが同時に実行できる最大ジョブ件数
- グループ制限 : 各キューにおいて、あるグループが同時に実行できる最大のジョブ件数

◆2008年1月末までの構成（SX-7とTX-7は1月末で運用停止）

Altix4700	640CPUを次のように割り当てます。  640CPUは、PA、PAE、PASがお互いに共有して使用します。内384CPUは、PAEとPASが優先的に使用し、256CPUはPAが占有します。
PRIMEQUEST	640CPUを次のように割り当てます。  640CPUは、PB、PBE、PBSがお互いに共有して使用します。内448CPUは、PBEとPBSが優先的に使用し、192CPUはPBが占有します。
SX-7	32CPUを次のように割り当てます。  31CPUは、SNE、SNがお互いに共有して使用します。内16CPUは、SNEが優先的に使用し、15CPUはSNが占有します。  1CPUは、会話処理が占有します。
TX-7	64CPUは、PIが占有して使用します。

(注意)

- (1) 施設利用 S キュー、特別利用キューのジョブが投入された場合、既に実行されているジョブの終了を待ってから実行されます（先入先出）。

施設利用 S 用キュー(Special queue) 最優先ジョブ

キュー名	CPU時間	メモリ	多重度	PE/CPU数	ユーザ制限	グループ制限	備考
PAS	240時間	11.5GB/CPU	1	128から1	128CPU	128CPU	Altix4700 819.2GFLOPS
PBS	240時間	4.0GB/CPU	1	64から1	128CPU	128CPU	PRIMEQUEST 409.6GLOPS

特別利用キュー (Extended Queue: 特別利用申請者のみ利用可、施設利用 S 実行時は運用枠が減少する)

キュー名	CPU時間	メモリ	多重度	PE/CPU数	ユーザ制限	グループ制限	備考
PAE	240時間	11.5GB/CPU	1	128から1	128CPU	128CPU	Altix4700 819.2GFLOPS
PBE	240時間	4.0GB/CPU	1	64から1	128CPU	128CPU	PRIMEQUEST 409.6GLOPS
SNE	360時間	8.0GB	1	1	4CPU	4CPU	SX-7 8.83GFLOPS

パラレル利用キュー (施設利用 S、特別利用キュー実行時は運用枠が減少する)

キュー名	CPU時間	メモリ	多重度	PE/CPU数	ユーザ制限	グループ制限	備考
PA	72時間	11.5GB/CPU	1	64から1	64CPU	64CPU	Altix4700 409.6GFLOPS
PB	72時間	4.0GB/CPU	1	32から1	64CPU	64CPU	PRIMEQUEST 204.8GFLOPS
PI	24時間	32.0GB	1	8	32CPU	32CPU	TX-7 41.6GFLOPS

## シリアル利用キュー

キュー名	CPU時間	メモリ	多重度	PE/CPU数	ユーザ制限	グループ制限	備考
SN	96時間	4.0GB	2	1	8CPU	8CPU	SX-7 8.83GFLOPS

## 会話処理

キュー名	CPU時間	メモリ	多重度	PE/CPU数	ユーザ制限	グループ制限	備考
ccatx	1時間	1GB	-	4	-	-	Altix4700
ccprq	1時間	1GB	-	4	-	-	PRIMEQUEST
ccsx7	1時間	1GB	-	1	-	-	SX-7
ccfep1/2	1時間	1GB		2			TX-7/rp5430

### ◆ 2008年3月以降のキュー構成 (SR16000は3月より運用開始)

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

(注意)

- (1) 施設利用 S キュー、特別利用キューのジョブが投入された場合、既に行われているジョブの終了を待ってから実行されます (先入先出)。

### 施設利用 S 用キュー (Special queue) 最優先ジョブ

キュー名	CPU時間	メモリ	多重度	PE/CPU数	ユーザ制限	グループ制限	備考
PAS	240時間	11.5GB/CPU	1	128から1	128CPU	128CPU	Altix4700 819.2GFLOPS
PBS	240時間	4.0GB/CPU	1	64から1	128CPU	128CPU	PRIMEQUEST 409.6GFLOPS
PHS	240時間	3.2GB/CPU	1	64から1	128CPU	128CPU	SR16000 1,203.2GFLOPS

特別利用キュー (Extended Queue: 特別利用申請者のみ利用可, 施設利用S実行時は運用枠が減少する)

キュー名	CPU時間	メモリ	多重度	PE/CPU数	ユーザ制限	グループ制限	備考
PAE	240時間	11.5GB/CPU	1	128から1	128CPU	128CPU	Altix4700 819.2GFLOPS
PBE	240時間	4.0GB/CPU	1	64から1	128CPU	128CPU	PRIMEQUEST 409.6GFLOPS
PHE	240時間	3.2GB/CPU	1	64から1	128CPU	128CPU	SR16000 1,203.2GFLOPS

パラレル利用キュー (施設利用S、特別利用キュー実行時は運用枠が減少する)

キュー名	CPU時間	メモリ	多重度	PE/CPU数	ユーザ制限	グループ制限	備考
PA	72時間	11.5GB/CPU	1	64から1	64CPU	64CPU	Altix4700 409.6GFLOPS
PB	72時間	4.0GB/CPU	1	32から1	64CPU	64CPU	PRIMEQUEST 204.8GFLOPS
PH	72時間	3.2GB/CPU	1	32から1	64CPU	64CPU	SR16000 601.6GFLOPS

会話処理

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

### 3.4 利用課金

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

### 3.5 利用点数

計算機利用の配分のためにプロジェクト課題ごとに許可点数が割り当てられます。各グループは割り当てられた許可点数を越えて計算機を利用することはできません。

#### 3.5.1 利用点数算出法

Serial	利用点数 = CPU使用時間 × 点数換算係数  ベクトルプロセッサを持つマシンは、次のようになります。  利用点数 = (SPU使用時間 × 点数換算係数) + (VPU使用時間 × 点数換算係数)  SPU使用時間 : スカラプロセッサを使用した実時間 VPU使用時間 : ベクトルプロセッサを使用した実時間
Parallel	利用点数 = ジョブ経過時間 × 要求CPU数 × 点数換算係数  ジョブ経過時間 : ジョブの終了時間から開始時間を引いた時間 要求CPU数 : ジョブが要求したCPU数

利用点数 P は次の式に従ってジョブごとに算出されます。

◆2008年1月末までの課金式 (SX-7、TX-7は1月末で運用停止)

$$P = Patxp + Pprqp + Psx7s + Ptx7p$$

Patxp : Altix4700 のシリアルジョブキューで利用した点数

Pprqp : PRIMEQUEST のパラレルジョブキューで利用した点数

Psx7s : SX-7 のシリアルジョブキューで利用した点数

Ptx7p : TX-7 のパラレルジョブキューで利用した点数

◆2008年3月以降の課金式 (SR16000は3月より運用開始)

$$P = Patxp + Pprqp + Phsrp$$

Patxp : Altix4700 のシリアルジョブキューで利用した点数

Pprqp : PRIMEQUEST のパラレルジョブキューで利用した点数

Phsrp : SR16000 のパラレルジョブキューで利用した点数



### 3.5.2 点数換算係数一覧

◆2008年1月末までの点数換算係数（SX-7、TX-7は1月末で運用停止）

	点数換算係数		CPU1時間当たりの消費点数 (3600×点数換算係数)	
	Scalar	Vector	Scalar	Vector
Altix4700(P)	0.0090	-	32.40	-
PRIMEQUEST(P)	0.0060	-	21.60	-
SX-7(S)	0.0600	0.0600	216.00	216.00
TX-7(P)	0.0040	-	14.40	-

◆2008年3月以降の点数換算係数（SR16000は3月より運用開始）

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

(S):Serial

(P): Parallel

### 3.5.3 キュー別コストパフォーマンス一覧

各キュークラスにおける1時間当たりの利用点数(消費点数/時)は、以下の表のようになります。

(注意)

- (1) 演算性能は、理論ピーク性能の総和です。単位は、GFLOPSです。
- (2) CP（コストパフォーマンス）は、1GFLOPSを得るのに必要な点数で、小さい方がお得です。
- (3) CP算出式は、（消費点数÷演算性能）です。
- (4) 消費点数は、利用点数算出式を使用して利用CPU1時間当たりの点数です。  
 パラレルジョブキューにおいては、経過時間1時間当たりの点数です。  
 ベクトル演算器搭載マシンにおいては、スカラのみで計算しています。
- (5) 標準時間算出式は、（消費点数÷400）です。該当消費点数を消化するCPU時間です。

◆2008年1月末までの点数換算係数（SX-7、TX-7は1月末で運用停止）

シリアルジョブキュー

キュー名	CP	消費点数	標準時間	課金係数	演算性能	マシン名	備考
SN, SNE	24.5	216.0点	0.540時間	0.0600	8.83	SX-7	

パラレルジョブキュー

キュー名	CP	消費点数	標準時間	課金係数	演算性能	マシン名	備考
PA, PAE, PAS	5.06	259.2点	0.648時間	0.0090	51.2	Altix4700	8CPU
PB, PBE, PBS	3.38	172.8点	0.432時間	0.0060	51.2	PRIMEQUEST	8CPU
PI	2.77	115.2点	0.288時間	0.0040	41.6	TX-7	8CPU

◆2008年3月以降の点数換算係数（SR16000は3月より運用開始）

パラレルジョブキュー

キュー名	CP	消費点数	標準時間	課金係数	演算性能	マシン名	備考
PA, PAE, PAS	5.06	259.2点	0.648時間	0.0090	51.2	Altix4700	8CPU
PB, PBE, PBS	3.38	172.8点	0.432時間	0.0060	51.2	PRIMEQUEST	8CPU
PH, PHE, PHS	3.45	259.2点	0.648時間	0.0090	75.2	SR16000	8CPU

## 4 一般報告

### 4.1 ライブラリプログラムの開発・公開

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

平成 19 年度のライブラリプログラム開発の申請件数は 1 件でした。

また、平成 19 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 18 件です。

#### Altix4700 用 (5 件)

<u>プログラム名</u>	<u>タイトル名</u>
Gaussian03	Gaussian03 Rev E.01 : <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	GAMESS2007Mar24 : General atomic and molecular electronic structure system
MOLCAS	MOLCAS 7.0 sp1 : A quantum chemistry software
TURBOMOLE	TURBOMOLE 5.9.1: One of the fastest programs for standard quantum chemical applications
TURBOMOLE	TURBOMOLE 5.10: One of the fastest programs for standard quantum chemical applications

#### PRIMEQUEST 用 (3 件)

<u>プログラム名</u>	<u>タイトル名</u>
Gaussian03	Gaussian03 Rev E.01 : <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	GAMESS2007Mar24 : General atomic and molecular electronic structure system
MOLPRO	Molpro 2006.1 pl137 : A complete system of ab initio programs

#### SR16000 用 (6 件)

<u>プログラム名</u>	<u>タイトル名</u>
Amber 9	Amber 9 (bugfix 41) : Assisted model building with energy refinement
Gaussian03	Gaussian03 Rev D.01 : <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations
Gaussian03	Gaussian03 Rev E.01 : <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	GAMESS2007Mar24 : General atomic and molecular electronic structure system
MOLCAS	MOLCAS 6.4 sp1 : A quantum chemistry software
MOLPRO	Molpro 2006.1 : A complete system of ab initio programs

#### SX-7 用 (1 件)

<u>プログラム名</u>	<u>タイトル名</u>
Gaussian03	Gaussian03 Rev E.01 : <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations

#### TX-7 用 (1 件)

<u>プログラム名</u>	<u>タイトル名</u>
Gaussian03	Gaussian03 Rev E.01 : <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations

#### ccfep1/2 用 (2 件)

<u>プログラム名</u>	<u>タイトル名</u>
GaussiView	GaussView 4.1 : Graphical frontend for the Gaussian program
Molden	Molden 4.6 : A visualization program of molecular and structure.

よって、平成 20 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

\*\*\*\* SGI Altix4700 版 \*\*\*\*

プログラム名	タイトル名
Amber 9	Amber 9 (bugfix20): Assisted model building with energy refinement
Amber 8	Amber 8 (bugfix61): Assisted model building with energy refinement
Gaussian 03	Gaussian 03(E.01): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	GAMESS(2007Mar24): General atomic and molecular electronic structure system
Molcas	Molcas(7.0sp1): Quantum chemistry software
Molpro	Molpro(2006.1): A complete system of <i>ab initio</i> programs
TURBOMOLE	TURBOMOLE 5.10: One of the fastest programs for standard quantum chemical applications

\*\*\*\* Fujitsu PrimeQuest 版 \*\*\*\*

プログラム名	タイトル名
Amber 9	Amber 9 (bugfix31): Assisted model building with energy refinement
Amber 8	Amber 8 (bugfix61): Assisted model building with energy refinement
Gaussian 03	Gaussian 03(E.01): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	GAMESS(2007Mar24): General atomic and molecular electronic structure system
Molpro	Molpro(2006.1): A complete system of <i>ab initio</i> programs

\*\*\*\* HITACHI SR16000 版 \*\*\*\*

プログラム名	タイトル名
Amber 9	Amber 9 (bugfix41): Assisted model building with energy refinement
Gaussian 03	Gaussian 03(E.01): <i>Ab initio</i> molecular orbital calculations
GAMESS	GAMESS(2007Mar24): General atomic and molecular electronic structure system
Molcas	MOLCAS(6.4sp1): Quantum chemistry software
Molpro	MOLPRO(2006.1): A complete system of <i>ab initio</i> programs

\*\*\*\* ccfe1/ccfe2 版 \*\*\*\*

プログラム名	タイトル名
GaussView	GaussView 4.1 : Graphical frontend for the Gaussian program
Molden	Molden 4.6 : A visualization program of molecular and structure.

## 4.2 データベース開発状況

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

### (1) QCLDB（量子化学文献データベース）

（開発代表者）細矢治夫

総件数： 97,718 件

主要学術雑誌に掲載された *ab initio* 分子軌道計算を扱った文献のデータベースで、日本化学情報協会（JAICI）より世界中に配布されています。また、毎年一年分のデータを、論文形式で2004年度まではELSEVIER社の「THEOCHEM」に、またそれ以降は日本コンピュータ化学会の J. Comp. Chem. Jpn. に1号分全部を使って刊行しています。WWW版QCLDBの利用については、平成15年秋からは、モニター制度の制限つきではありますが、本機構の計算科学研究センターから、WWW版QCLDBの無料公開が文部科学省から認められ、新しいQCLDBデータフォーマットに対応したQCLDB IIを、SQLを用いてWWW化したものをURL:<http://qcldb2.ims.ac.jp/> で公開しています。

平成19年度に新規登録されたデータは、8,094件です。

### (2) FCDB（力の定数に関するデータベース）

（開発代表者）田隅三生

総件数： 2,394 件

力の定数（Force Constant）に関する文献のデータベースで、WWW版FCDB（<http://fcdb.ims.ac.jp/>）を原則利用制限なしで公開サービスしています。新規開発は平成13年度で中止になっています。

## 5 平成19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	117	537	856,486	769,737	488,637	307,894,800	195,454,866
		6	10	9,000	9,000	444	3,600,000	177,701
	所内	20	44	138,000	138,000	108,223	55,200,000	43,289,304
基礎生物学	施設利用	2	4	2,000	2,000	731	800,000	292,551
合計		145	595	1,005,486	918,737	598,035	367,494,800	239,214,422

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

### 5.2 電力使用および計算機稼働状況

年月	電力量 (Kwh)			
	マシン名	B,E地区合計	グリッド	総合計
平成19年4月		328,990	439,780	768,770
5月		354,209	455,860	810,069
6月		362,585	442,500	805,085
7月		390,812	474,150	864,962
8月		404,477	497,280	901,757
9月		363,775	422,120	785,895
10月		361,062	437,430	798,492
11月		341,252	405,830	747,082
12月		355,960	407,810	763,770
平成20年1月		363,419	400,370	763,789
2月		297,950	370,220	668,170
3月		352,486	392,840	745,326
合計		4,276,977	5,146,190	9,423,167

年月	システム稼働時間								
	マシン名	Altix4700	*	PRIMEQUEST	*	SX-7	*	TX-7	*
平成19年4月		611	95	610	96	616	97	614	96
5月		728	99	728	99	734	100	734	100
6月		701	98	708	100	710	100	710	100
7月		723	98	726	99	729	99	729	99
8月		732	99	735	100	731	99	731	99
9月		644	94	653	96	709	100	702	100
10月		724	98	725	99	733	100	733	100
11月		667	98	670	98	668	98	668	98
12月		730	99	713	94	734	100	734	100
平成20年1月		654	82	703	95	734	100	734	100
2月		612	89	614	90	-	-	-	-
3月		720	98	720	98	-	-	-	-
合計		8,245	96	8,304	97	7,098	99	7,088	99

※ \*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。

※ SX-7、TX-7は、1月末で運用停止しました。

※ SR16000は、3月の1ヶ月テスト使用期間であった為統計データがありません。

### 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	Altix4700	*	PRIMEQUEST	*	SX-7	*	TX-7	*
平成19年4月		210,937	54	135,050	35	14,495	74	12,683	32
5月		315,109	68	196,645	42	18,027	77	10,885	23
6月		323,547	72	241,021	53	16,792	74	12,229	27
7月		350,027	76	299,651	64	20,146	86	11,032	24
8月		355,461	76	199,222	42	14,309	61	16,247	35
9月		317,145	77	147,422	35	14,972	66	12,813	29
10月		362,487	78	157,941	34	16,411	70	16,461	35
11月		332,172	78	320,970	75	17,039	80	23,412	55
12月		406,580	87	350,883	77	21,483	91	22,499	48
平成20年1月		339,891	81	386,451	86	20,942	89	20,193	43
2月		327,650	84	362,568	92	-	-	-	-
3月		380,614	83	380,488	83	-	-	-	-
合計		4,021,620	76	3,178,312	60	174,616	77	158,454	35

※ 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。

※ SX-7、TX-7は、1月末で運用停止しました。

※ SR16000は、3月の1ヶ月テスト使用期間であった為統計データがありません。

#### 5.3.2 VPU使用時間

マシン名	SX-7	*
平成19年4月	13,440	68
5月	16,710	71
6月	15,243	67
7月	18,388	79
8月	13,552	58
9月	13,940	61
10月	15,056	64
11月	14,716	69
12月	19,364	82
平成20年1月	19,012	81
2月	-	-
3月	-	-
合計	159,421	70

※ 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VPU稼働率(%)です。

※ SX-7は、1月末で運用停止しました。

### 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				合計	
	マシン名	Altix4700	PRIMEQUEST	SX-7		TX-7
平成19年4月		3,377	4,012	669	691	8,749
5月		5,813	1,495	687	760	8,755
6月		6,241	3,855	934	699	11,729
7月		6,811	4,465	788	1,416	13,480
8月		5,916	3,490	666	1,223	11,295
9月		6,547	5,189	540	654	12,930
10月		9,417	2,960	698	1,472	14,547
11月		7,806	6,403	917	921	16,047
12月		5,909	3,095	822	1,184	11,010
平成20年1月		4,890	6,046	987	1,264	13,187
2月		3,902	2,267	-	-	6,169
3月		9,053	3,299	-	-	12,352
合計		75,682	46,576	7,708	10,284	140,250

※ SX-7、TX-7は、1月末で運用停止しました。

※ SR16000は、3月の1ヶ月テスト使用期間であった為統計データがありません。

### 5.4 クラス別CPU使用時間

Altix4700	PA	PAE	PAS	会話処理	Queue合計	ETC	総合計
平成19年 4月	122438:56:06	45108:09:16	43389:58:52	0:00:00	210937:04:14	0:00:00	210937:04:14
5月	148711:38:44	87385:02:34	79012:41:01	0:00:00	315109:22:19	0:00:00	315109:22:19
6月	150020:57:27	88871:18:09	84654:17:46	0:00:00	323546:33:22	0:00:00	323546:33:22
7月	189999:54:28	107628:12:22	52398:23:54	0:00:00	350026:30:44	0:00:00	350026:30:44
8月	159999:34:49	99915:30:03	95545:34:47	0:00:00	355460:39:39	0:00:00	355460:39:39
9月	141829:20:40	110142:36:24	65173:08:17	0:00:00	317145:05:21	0:00:00	317145:05:21
10月	176333:52:29	122235:56:36	63917:17:14	0:00:00	362487:06:19	0:00:00	362487:06:19
11月	106622:52:54	145035:28:37	80514:04:26	0:00:00	332172:25:57	0:00:00	332172:25:57
12月	105706:22:05	177099:17:33	123773:55:03	0:00:00	406579:34:41	0:00:00	406579:34:41
平成20年 1月	129492:32:26	109138:38:10	101259:25:31	0:00:00	339890:36:07	0:00:00	339890:36:07
2月	125215:00:23	118310:28:30	84124:13:20	0:00:00	327649:42:13	0:00:00	327649:42:13
3月	173946:03:05	115476:31:23	91191:36:11	0:00:00	380614:10:39	0:00:00	380614:10:39
合計	1730317:05:36	1326347:09:37	964954:36:22	0:00:00	4021618:51:35	0:00:00	4021618:51:35

PRIMEQUEST	PB	PBE	PBS	会話処理	Queue合計	ETC	総合計
平成19年 4月	55375:41:23	43832:26:29	35841:43:04	0:00:00	135049:50:56	0:00:00	135049:50:56
5月	76138:23:39	76339:32:25	44167:13:43	0:00:00	196645:09:47	0:00:00	196645:09:47
6月	132077:46:41	52351:05:03	56591:52:01	0:00:00	241020:43:45	0:00:00	241020:43:45
7月	136691:05:55	81724:55:38	81234:46:00	0:00:00	299650:47:33	0:00:00	299650:47:33
8月	107874:00:37	74140:25:39	17207:23:56	0:00:00	199221:50:12	0:00:00	199221:50:12
9月	78369:09:26	52448:51:21	16603:37:20	0:00:00	147421:38:07	0:00:00	147421:38:07
10月	121048:26:58	17848:22:20	19044:05:44	0:00:00	157940:55:02	0:00:00	157940:55:02
11月	188182:25:38	119900:46:44	12887:15:03	0:00:00	320970:27:25	0:00:00	320970:27:25
12月	162035:33:01	171104:41:22	17743:06:06	0:00:00	350883:20:29	0:00:00	350883:20:29
平成20年 1月	136862:30:03	187812:53:44	61775:15:13	0:00:00	386450:39:00	0:00:00	386450:39:00
2月	128968:24:57	199371:11:58	34228:31:06	0:00:00	362568:08:01	0:00:00	362568:08:01
3月	164720:52:02	184308:21:45	31458:56:47	0:00:00	380488:10:34	0:00:22	380488:10:56
合計	1488344:20:20	1261183:34:28	428783:46:03	0:00:00	3178311:40:51	0:00:22	3178311:41:13



SX-7	SN	Queue合計	ETC	総合計
平成19年 4月	13240:10:48	14442:48:35	52:20:55	14495:09:30
5月	17043:38:33	17981:12:26	45:39:59	18026:52:25
6月	15337:35:22	16553:44:46	238:38:26	16792:23:12
7月	18741:44:54	20067:48:14	78:33:11	20146:21:25
8月	11100:34:22	14270:43:11	38:29:14	14309:12:25
9月	12063:51:06	14930:05:29	41:36:56	14971:42:25
10月	13793:15:48	16261:26:27	149:58:52	16411:25:19
11月	15212:10:45	16953:56:03	84:49:20	17038:45:23
12月	18856:03:40	21379:42:45	103:06:39	21482:49:24
平成20年 1月	17987:00:01	20642:02:33	299:36:18	20941:38:51
2月	-	-	-	-
3月	-	-	-	-
合 計	153376:05:19	173483:30:29	1132:49:50	174616:20:19

TX-7	PI	Queue合計	ETC	総合計
平成19年 4月	12682:44:30	12682:44:30	0:00:00	12682:44:30
5月	10885:10:09	10885:10:09	0:00:00	10885:10:09
6月	12229:06:57	12229:06:57	0:00:00	12229:06:57
7月	11031:37:09	11031:37:09	0:00:00	11031:37:09
8月	16246:31:51	16246:31:51	0:00:00	16246:31:51
9月	12813:12:52	12813:12:52	0:00:00	12813:12:52
10月	16461:19:25	16461:19:25	0:00:00	16461:19:25
11月	23412:17:37	23412:17:37	0:00:00	23412:17:37
12月	22498:44:47	22498:44:47	0:00:00	22498:44:47
平成20年 1月	20193:09:18	20193:09:18	0:00:00	20193:09:18
2月	-	-	-	-
3月	-	-	-	-
合 計	158453:54:35	158453:54:35	0:00:00	158453:54:35

※ SX-7、TX-7は、1月末で運用停止しました。

※ SR16000は、3月の1ヶ月テスト使用期間であった為統計データがありません。

## 5.5 クラス別VPU使用時間

SX-7	SN	Queue合計	ETC	総合計
平成19年 4月	12247:08:44	13436:40:25	3:28:11	13440:08:36
5月	15786:06:22	16710:09:28	0:01:28	16710:10:56
6月	13902:03:58	15098:14:28	145:14:45	15243:29:13
7月	17067:58:29	18356:00:46	32:28:36	18388:29:22
8月	10420:45:34	13549:20:52	2:21:03	13551:41:55
9月	11137:38:35	13934:45:20	4:59:40	13939:45:00
10月	12538:25:50	14968:10:20	87:42:57	15055:53:17
11月	13059:22:41	14704:20:26	11:36:03	14715:56:29
12月	16901:20:15	19347:39:11	15:58:25	19363:37:36
平成20年 1月	16231:53:35	18789:33:03	222:09:44	19011:42:47
2月	-	-	-	-
3月	-	-	-	-
合 計	139292:44:03	158894:54:19	526:00:52	159420:55:11

※ SX-7は、1月末で運用停止しました。

5.6 ジョブ処理件数

Altix4700	PA	PAE	PAS	Queue合計	ETC	総合計
平成19年 4月	2,208	1,027	142	3,377	0	3,377
5月	3,114	2,407	292	5,813	0	5,813
6月	3,867	1,936	438	6,241	0	6,241
7月	3,882	2,491	438	6,811	0	6,811
8月	2,419	2,739	758	5,916	0	5,916
9月	3,197	2,654	696	6,547	0	6,547
10月	4,694	3,612	1,111	9,417	0	9,417
11月	4,509	2,155	1,142	7,806	0	7,806
12月	2,718	1,959	1,232	5,909	0	5,909
平成20年 1月	2,194	1,647	1,049	4,890	0	4,890
2月	1,516	1,793	593	3,902	0	3,902
3月	6,829	1,829	395	9,053	0	9,053
合 計	41,147	26,249	8,286	75,682	0	75,682

PRIMEQUEST	PB	PBE	PBS	Queue合計	ETC	総合計
平成19年 4月	3,400	562	50	4,012	0	4,012
5月	1,205	206	84	1,495	0	1,495
6月	3,500	266	89	3,855	0	3,855
7月	3,583	700	182	4,465	0	4,465
8月	2,918	530	42	3,490	0	3,490
9月	4,918	264	7	5,189	0	5,189
10月	2,354	577	29	2,960	0	2,960
11月	5,337	1,044	22	6,403	0	6,403
12月	1,793	1,164	138	3,095	0	3,095
平成20年 1月	3,910	1,693	443	6,046	0	6,046
2月	913	957	397	2,267	0	2,267
3月	1,992	1,163	144	3,299	0	3,299
合 計	35,823	9,126	1,627	46,576	0	46,576

SX-7	SN	SNE	Queue合計	ETC	総合計
平成19年 4月	656	13	669	0	669
5月	634	53	687	0	687
6月	870	64	934	0	934
7月	753	35	788	0	788
8月	631	35	666	0	666
9月	462	78	540	0	540
10月	647	51	698	0	698
11月	861	56	917	0	917
12月	756	66	822	0	822
平成20年 1月	889	98	987	0	987
2月	-	-	-	0	-
3月	-	-	-	0	-
合 計	7,159	549	7,708	0	7,708

TX-7	PI	Queue合計	ETC	総合計
平成19年 4月	691	691	0	691
5月	760	760	0	760
6月	699	699	0	699
7月	1,416	1,416	0	1,416
8月	1,223	1,223	0	1,223
9月	654	654	0	654
10月	1,472	1,472	0	1,472
11月	921	921	0	921
12月	1,184	1,184	0	1,184
平成20年 1月	1,264	1,264	0	1,264
2月	-	-	0	-
3月	-	-	0	-
合 計	10,284	10,284	0	10,284

※ SX-7、TX-7は、1月末で運用停止しました。

※ SR16000は、3月の1ヶ月テスト使用期間であった為統計データがありません。

## 6 資料

### 6.1 計算科学研究センター運営委員

岡崎 進	計算科学研究センター長 計算分子科学研究系 計算分子科学第一研究部門	教授
齊藤 真司	計算科学研究センター 計算分子科学研究系 計算分子科学第二研究部門	教授
森田 明弘	計算科学研究センター (2007年4月1日より併任) 東北大学大学院理学研究科	教授
永瀬 茂	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
信定 克幸	分子科学研究所理論研究系 分子基礎理論第二研究部門	准教授
長谷部 光泰	進化多様性生物学領域 生物進化研究部門	教授
望月 敦史	基礎生物学研究所理論生物学領域 理論生物学研究部門	准教授
永山 國昭	統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域 ナノ形態生理学研究部門	教授
鍋倉 淳一	生理学研究所発達生理学研究系 生体恒常機能発達機構研究部門	教授
中井 浩巳	早稲田大学 理工学部	教授
押山 淳	筑波大学大学院 数理物質科学研究科	教授
松本 充弘	京都大学大学院 工学研究科	准教授
中井 謙太	東京大学 医科学研究所附属ヒトゲノム解析センター	教授
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

岡崎 進	センター長
齊藤 真司	教授
森田 明弘	教授
石田 千城	助教
金 鋼	助教
大野 人侍	助教
内山 郁夫	助教
片岡 正典	助教
水谷 文保	技術職員（班長）
内藤 茂樹	技術職員（主任）
手島 史綱	技術職員（主任）
岩橋 健輔	技術職員
澤 昌孝	技術職員
松尾 純一	技術職員
禿子 瞳	事務支援員
石原 麻由美	事務支援員
戸谷 明子	事務支援員

### 6.3 利用者数とCPU時間の推移

	53年度	54年度	55年度	56年度	57年度	58年度	59年度	60年度
計算機システム	M-180 2台	M-180 2台	M-200H M-180	M-200H M-180 疎結合	M-200H 2台 疎結合	同57年度	同57年度	(~11月) 同57年度 (1月~) M-680H S-810/10
運 転 方 式	3カ月 有人	9月から無人	200H 無人 180 有人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	63	176	192	183	198	199	207	226
利 用 者 数								
機 構 内 <sup>a</sup>	48	70	69	91	94	102	110	130
機 構 外	107	254	325	330	375	426	446	464
合 計	155	334	394	421	469	528	556	594
稼 働 時 間 (時間)	1,087	6,071	6,553	6,721	6,305	6,170	6,316	6,016
CPU時間利用申請 (時間)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(200H基準)	(M-680H基準) <sup>b</sup>
申 請	929	4,666	11,033	10,230	11,938	13,053	14,799	15,536
許 可	816	3,171	7,427	8,306	10,141	10,091	10,768	12,080
総使用CPU時間 <sup>c</sup> (時間)	509	2,405	5,405	6,320	8,205	8,489	8,508	12,770
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>	41,521	155,980	183,840	214,847	239,771	236,519	226,727	274,431
ライブラリプログラム 新規登録数	0	20	43	20	699	10	118	160
データベース新規登録数	0	2	0	0	3	3	0	1
センター使用論文数	0	24	93	118	190	185	202	206

	61年度	62年度	63年度	平成元年度	平成2年度	平成3年度	平成4年度	平成5年度
計算機システム	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	同63年度	M-680H S-820/80(~12月) SX-3/34R(1月~)
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	234	213	231	239	256	272	271	225
利 用 者 数								
機 構 内 <sup>a</sup>	141	143	137	146	140	158	143	127
機 構 外	496	520	515	544	593	623	661	589
合 計	637	663	652	690	733	781	804	716
稼 働 時 間 (時間)	6,368	6,444	6,091	5,694	6,768	6,749	7,156	M-680H系 6,689 SX-3/34R 2,101
CPU時間利用申請 (時間)	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>
申 請	33,832/8,458*	9,880	12,439	14,694	16,622	20,606	21,153	18,311
許 可	28,184/7,046*	7,978	10,418	12,347	14,626	17,846	19,110	16,027
総使用CPU時間 <sup>c</sup> (時間)	20,092/5,023 <sup>e</sup> *	6,624	7,872	8,300	11,975	11,874	12,491	16,306
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>	289,915	278,956	278,104	253,418	2,955,038	346,987	297,638	227,650
ライブラリプログラム 新規登録数	39	4	7	3	0	0	0	10
データベース新規登録数	0	1	0	0	0	0	0	1
センター使用論文数	237	223	211	218	248	229	282	267

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

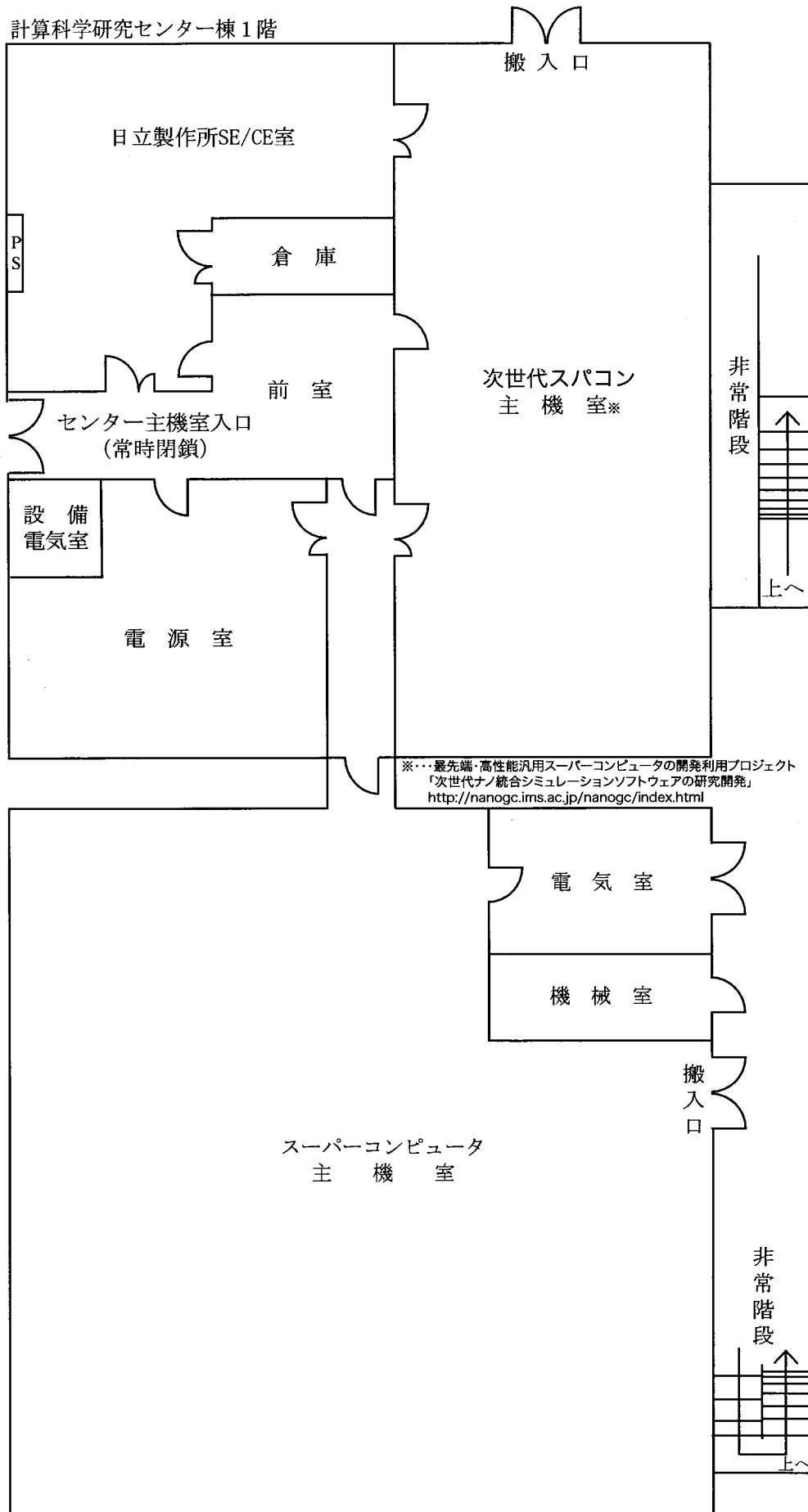
	平成6年度	平成7年度	平成8年度	平成9年度	平成10年度	平成11年度	平成12年度
計算機システム	M-680H(～11月) SX-3/34R HSP(1月～) SP2(1月～)	SX-3/34R HSP(1月～) SP2(1月～)	SX-3/34R HSP SP2 HPC(9月～)	SX-3/34R HSP SP2 HPC SR2201(11月～)	SX-3/34R HSP SP2 HPC SR2201 Origin2000(10月～) SX-5(3月～)	SX-3/34R (12月まで) SX-5 SP2 HPC SR2201 Origin2000	VPP5000 SGL2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	222	210	201	188	174	166	156
利 用 者 数							
機 構 内 <sup>a</sup>	139	129	139	126	138	125	101
機 構 外	601	597	574	609	566	539	534
合 計	740	726	713	735	704	664	635
稼働時間(時間)	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 8,425 HSP 8,431 SP2 8,336 HPC(9月 4,872)	SX-3/34R 8,494 HSP 8,513 SP2 8,515 HPC 8,501 SR2201(11 3,561)	SX3-3/34R 8,579 SX5 8,587 (SP2 8,574) HPC 8,590 SR2201 8,694 Origin2000 3,570	SX3-3/34R 6,365 SX5 8,301 SP2 8,375 HPC 8,363 SR2201 8,381 Origin2000 8,380	VPP5000 8,234 SGL系 8,319 SX5 8,496 SP2 8,492 HPC 8,490
CPU時間利用申請(時間)	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(HSP基準) <sup>b</sup>	(HSP基準) <sup>b</sup>	(HSP基準) <sup>b</sup>	(HSP基準) <sup>b</sup>	(SP2 Thin基準) <sup>b</sup>	(SP2 Thin基準) <sup>b</sup>
申 請	21,781	40,358	58,425	73,910	76,804	97,788	249,405
許 可	19,393	37,446	51,499	58,650	67,159	79,964	209,393
総使用CPU時間 <sup>c</sup> (時間)	24,781	156,076	207,790	262,365	273,575	239,671	619,294
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>	107,194	84,102	70,308	51,738	45,173	40,697	58,685
ライブラリプログラム新規登録数	10	7	15	3	13	14	18
データベース新規登録数	1	1	0	0	0	0	0
センター使用論文数	306	275	279	331	347	347	391

	平成13年度	平成14年度	平成15年度	平成16年度	平成17年度	平成18年度	平成19年度
計算機システム	VPP5000 SGL2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC	VPP5000 SGL2800,Origin3800 SX-5 SP2 HPC	VPP5000 SGL2800,Origin3800 SX-7 TX-7	VPP5000 SGL2800,Origin3800 SX-7 TX-7	VPP5000 SGL2800,Origin3800 SX-7 TX-7	VPP5000(5月まで) SGL2800,Origin3800 (5月まで) Altix4700(7月から) PRIMEQUEST(7月か SX-7 TX-7	Altix4700 PRIMEQUEST SX-7(1月まで) TX-7(1月まで) SR16000(3月から)
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	148	144	119	154	132	141	145
利 用 者 数							
機 構 内 <sup>a</sup>	100	104	89	83	30	40	44
機 構 外	504	479	449	516	480	533	551
合 計	604	583	538	599	510	573	595
稼働時間(時間)	VPP5000 8,492 SGL系 8,422 SX5 8,558 SP2 8,555 HPC 8,555	VPP5000 8,506 SGL系 8,324 SX5 8,391 SP2 7,118 HPC 8,386	VPP5000 8,553 SGL系 8,545 SX-7 8,524 TX-7 8,525	VPP5000 8,502 SGL系 8,496 SX-7 8,451 TX-7 8,489	VPP5000 8,462 SGL系 8,492 SX-7 8,492 TX-7 8,501	VPP5000 1,402 SGL系 1,400 Altix4700 6,196 PRIMEQUEST 6,336 SX-7 8,399 TX-7 8,398	Altix4700 8,245 PRIMEQUEST 8,304 SX-7 7,098 TX-7 7,088
CPU時間利用申請(時間)	(SP2 Thin基準) <sup>b</sup>	(SP2 Thin基準) <sup>b</sup>	(TX-7基準) <sup>b</sup>	(TX-7基準) <sup>b</sup>	(TX-7基準) <sup>b</sup>	(TX-7基準) <sup>b</sup>	(TX-7基準) <sup>b</sup>
申 請	251,785	237,872	278,177	341,788	414,643	702,270	1,005,486
許 可	234,866	229,401	277,697	321,796	368,136	653,468	918,737
総使用CPU時間 <sup>c</sup> (時間)	678,128	2,030,643	1,785,877	1,762,818	1,992,205	4,384,464	6,307,008
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>	70,680	55,522	58,784	28,968	19,896	78,130	140,250
ライブラリプログラム新規登録数	4	15	5	4	4	21	18
データベース新規登録数	0	0	0	0	0	0	0
センター使用論文数	302	302	281	284	205	214	188

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

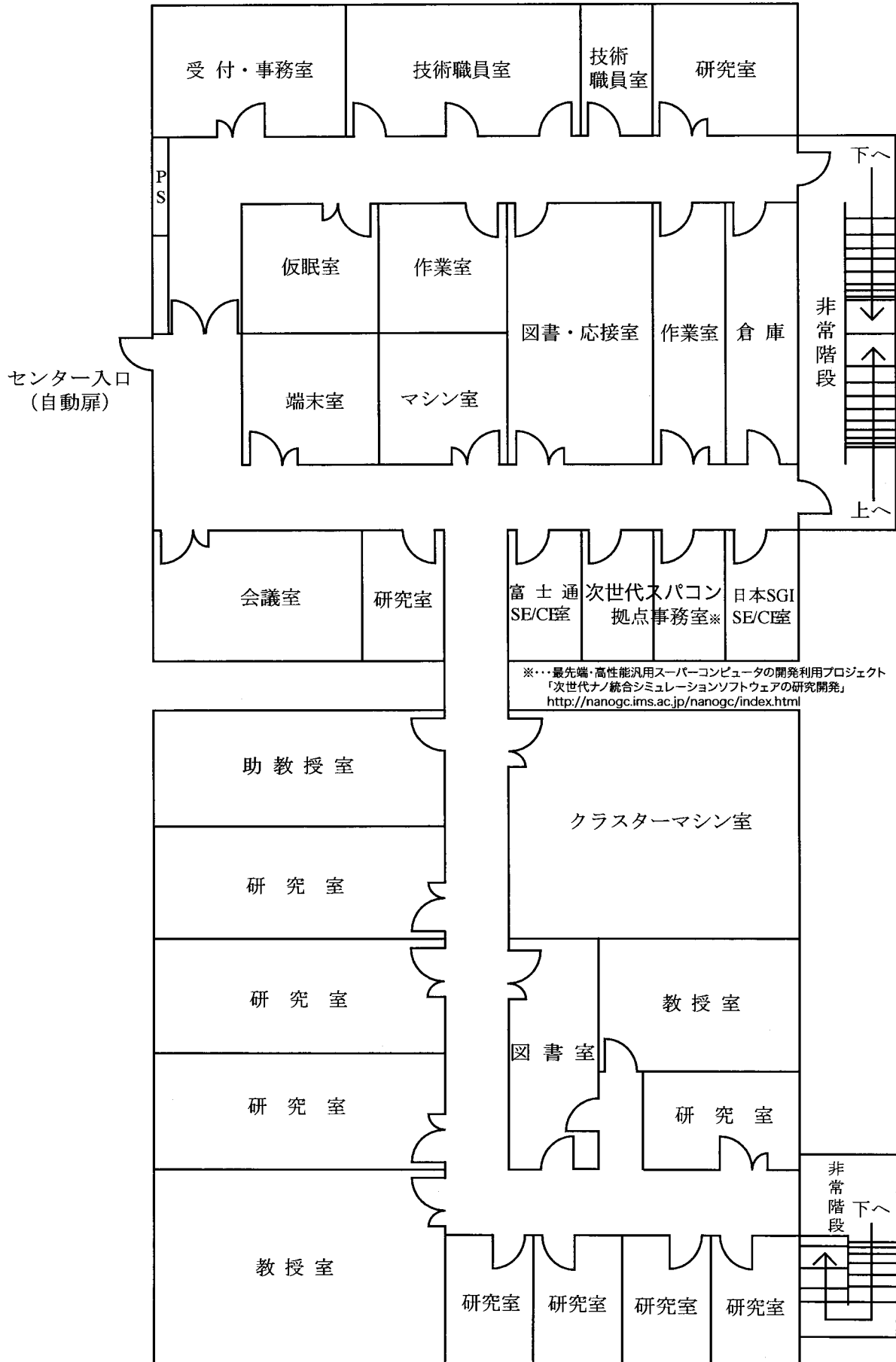
6.4 建物図

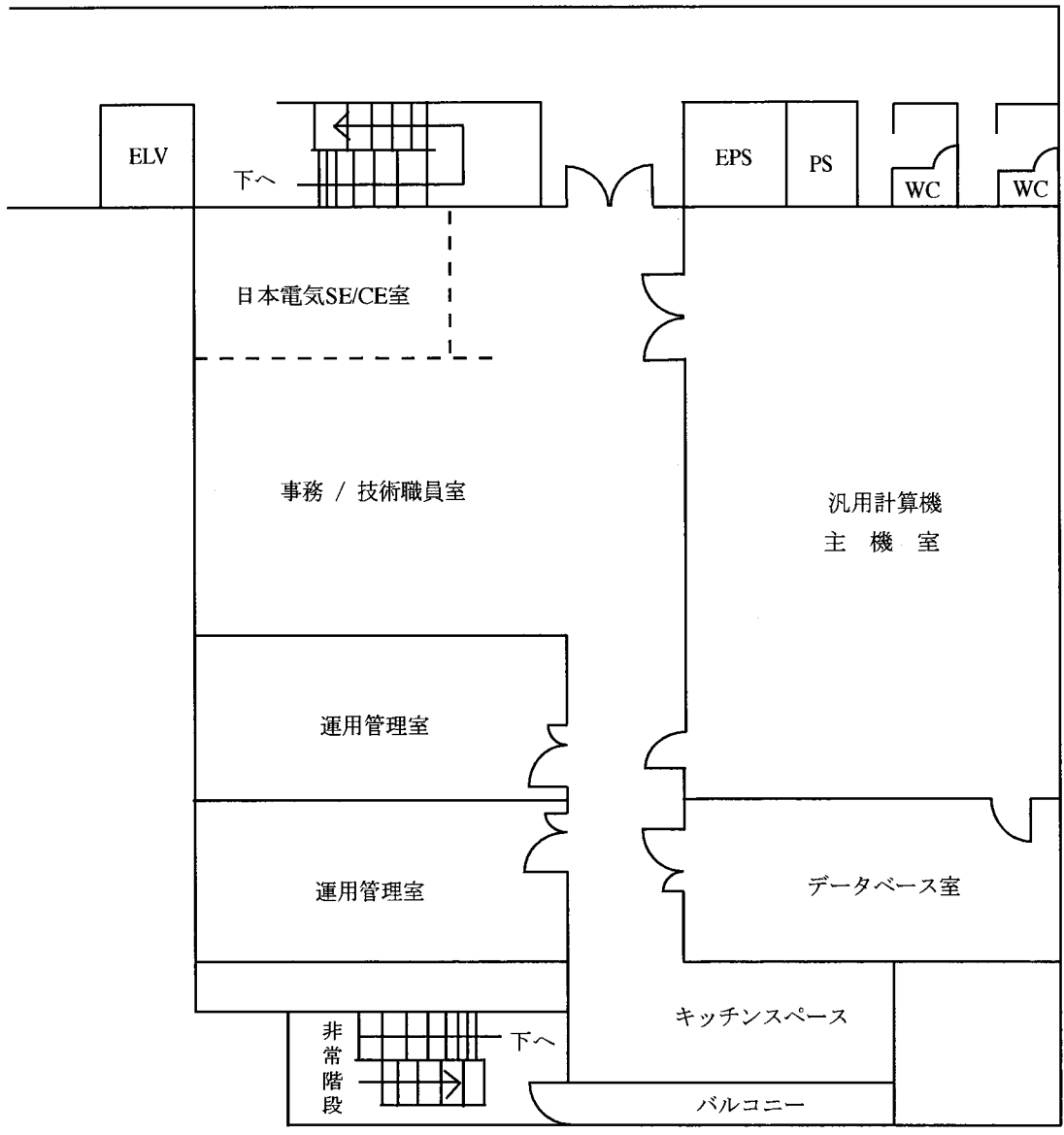
明大寺地区 計算科学研究センター棟 1階





2階





## 6.5 マニュアル一覧

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

### 6.5.1 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)

### 6.5.2 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。

### 6.5.3 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）を使用していますので、一般的な「RedHat Linux に関する情報」を利用して下さい。

- (1) 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

### 6.5.4 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

### 6.5.5 Altix4700用マニュアル（日本語版、英語版）

Altix4700に関するマニュアルは、すべてオンライン版のみの提供となっています。センターホームページ <http://www.rccs.orion.ac.jp/> から、「センター利用者限定ページ」の「SGI Altix4700 オンラインマニュアル」から閲覧・取得できます。ただし、OS 関連については、Linux Kernel2.6(IA64 版)（平成 19 年現在）を使用していますので、一般的な「RedHat Linux に関する情報」を利用して下さい。

- (1) SGI Altix4700 User's Guide
- (2) Altix4700 プログラミングガイド
- (3) MPI マニュアル
- (4) Linux Application Tuning Guide
- (5) Intel Fortran Compiler for Linux Systems User's Guide
- (6) Intel C++ Compiler for Linux Systems User's Guide
- (7) SCSL User's Guide
- (8) PBS User Guide

#### 6.5.6 PRIMEQUEST 用マニュアル (日本語版)

PRIMEQUEST に関するマニュアルは、すべてオンライン版のみの提供となっています。センターホームページ <http://www.rcs.orion.ac.jp/> から、「センター利用者限定ページ」の「富士通 PRIMEQUEST オンラインマニュアル」から閲覧・取得できます。ただし、OS 関連については、Linux Kernel2.6(IA64 版) (平成 19 年現在) を使用していますので、一般的な「RedHat Linux に関する情報」を利用して下さい。

- (1) Fortran 使用手引書
- (2) Fortran 文法書
- (3) Fortran コンパイラメッセージ
- (4) Fortran 実行時メッセージ
- (5) C 使用手引書
- (6) C-SSL II オンラインマニュアル
- (7) C-SSL II スレッド並列機能オンラインマニュアル
- (8) MPI 使用手引書
- (9) BLAS LAPACK ScaLAPACK オンラインマニュアル
- (10) SSLII オンラインマニュアル
- (11) SSL II スレッド並列機能オンラインマニュアル
- (12) デバッガ使用手引書
- (13) プロファイラ使用手引書

#### 6.5.7 PRIMEQUEST 用マニュアル (英語版)

英語版マニュアルに関しては、6.5.9 PRIMEQUEST 用マニュアル (日本語版) が英語版で提供されています。これらについても日本語版と同様に、オンライン版のみの提供となっています。

- (1) Fortran User's Guide
- (2) Fortran Language Reference
- (3) Fortran Compiler Message
- (4) Fortran Runtime Message
- (5) C User's Guide
- (6) C-SSL II Online Documents
- (7) C-SSL II Thread-Parallel Capabilities Online Documents
- (8) MPI User's Guide

- (9) BLAS LAPACK ScaLAPACK Online Documents
- (10) SSL II Online Documents
- (11) SSL II Thread-Parallel Capabilities Online Documents
- (12) Debugger User's Guide
- (13) Profiler User's Guide

#### 6.5.8 SR16000 用マニュアル（日本語版）

下記のマニュアルは、電子マニュアル（PDF）と冊子の両方提供されています。

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

#### 6.5.9 SR16000 用マニュアル（英語版）

下記のマニュアルは、電子マニュアル（PDF）と冊子の両方提供されています。

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

(10)数値計算副プログラム MSL2 操作

(11)数値計算副プログラム MSL2 MATRIX/MPP

#### 6.5.10 マニュアルの購入と問い合わせ先

PRIMEQUEST 用マニュアルの購入にあたっての問い合わせ先

〒460-8585 名古屋市中区錦一丁目 10 番 1 号

富士通株式会社 東海営業本部 公共営業部

担 当 : 岡本、赤木

電 話 : 052-239-1110

F A X : 052-239-1154

Altix4700 用マニュアルの購入にあたっての問い合わせ先

〒471-0034 豊田市小坂本町 1-13-11 富士火災豊田ビル 5 階

日本 SGI 株式会社 中部支社

担 当 : 和田、平島

電 話 : 0565-35-2908

F A X : 0565-35-2189

SX-7、TX-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 : 中村

電 話 : 052-222-2121

F A X : 052-222-2129

SR16000 用マニュアルの購入にあたっての問い合わせ先

〒450-6021 名古屋市中村区名駅一丁目 1 番 4 号

JR セントラルタワーズビル オフィース棟 21 階

株式会社 日立製作所 中部支社

担 当 : 水森 隆太

電 話 : 052-388-3713

F A X : 052-388-3722

E-mail : ryuta.mizumori.my@hitachi.com

## 8-6 計算科学研究センター

計算科学研究センターにおいては、2000年度における計算科学研究センター化にともない、従来の共同利用に加えて、理論、方法論の開発等の研究以外にも、研究の場の提供、ネットワーク業務の支援、人材育成等の新たな業務に取り組んできているところであるが、2007年度においても、次世代スーパーコンピュータプロジェクト支援、分子・物質シミュレーション中核拠点形成、ネットワーク管理室支援等をはじめとした様々な活動を展開してきている。上記プロジェクトについてはそれぞれの項に詳しく、ここでは共同利用に関する活動を中心に、特に設備の運用とセンターの将来構想の検討の必要性について述べる。

2008年2月現在の計算機システムの概要を図と表に示す。システムは大きく分けて2系統からなる。最初のものとは共同利用に供しているシステムであり、超高速分子シミュレータと高性能分子シミュレータからなる。前者は2006年7月に導入し明大寺地区に設置され、後者は今年度2008年2月に更新されて山手地区に設置されている。もうひとつは、次世代スーパーコンピュータプロジェクトにおけるアプリケーションの開発環境であるが、これらはいずれも分子科学やナノサイエンスの計算科学分野における高性能システムである。

「超高速分子シミュレータ」、「高性能分子シミュレータ」は、いずれも量子化学、分子シミュレーション、固体電子論、反応動力学などの共同利用の多様な計算要求に応えうるための汎用性があるばかりでなく、ユーザーサイドのPCクラスターでは不可能な大規模計算を実行できる性能を有する。

まず、「超高速分子シミュレータ」は富士通のPrimeQuestとSGIのAltix4700から構成される共有メモリ型スカラ計算機で、両サブシステムは同一体系のCPU（Intel Itanium2）およびOS（Linux2.6）をもとに、バイナリ互換性を保って一体的に運用される。システム全体として総演算性能8 Tflopsで総メモリ容量10 TByte超である。

PrimeQuestサブシステムは、64 CPUコア/256 GBからなるSMPノード10台で構成される。演算ノード間は16 GB/sのバンド幅で相互接続され、大規模な分子動力学計算などノード間をまたがる並列ジョブを高速で実行することができる。Altix4700サブシステムは2ノード構成からなり、それぞれ512 CPUコア/6 TBおよび128 CPUコア/2 TBを有するNUMA型の共有メモリシステムである。さらに本サブシステムには、磁気ディスク装置SGI TP9700がジョブ作業領域として提供され、実効容量104 TBおよび総理論読み出し性能12 GB/sを有するディスクI/Oを実現する。本サブシステムは大容量（最大6 TB）の共有メモリおよび超高速ディスクI/Oに特徴をもち、大規模で高精度な量子化学計算を可能とする。

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

共同利用に関しては、2007年度も144の研究グループにより、総数589名にもおよぶ利用者がこれらのシステムを日常的に利用しているが、システムの運用にあたり、世界をリードする計算科学研究を本センターから発信していくことができるよう、特に大規模ユーザのために施設利用Sを設定している。これに従い、審査により、平成19年



度は4件の利用グループに本システムを優先的に使用していただき、従来の共同利用の枠を超えた超大規模計算の環境を提供している。

さらに、次世代スーパーコンピュータプロジェクト・ナノ分野グランドチャレンジ研究におけるアプリケーション開発環境として、Hitachi SR11000とHA8000を運用している。このうち、SR11000は、総合理論演算性能5.44 Tflops、総メモリ容量3.072 TBの共有メモリ型スカラ並列コンピュータであり、システムは16way (CPU)を持つ演算ノード50台で構成され、ノード間は8 GByte/sのクロスバーで相互接続されており、周辺装置として6.8 TBのRAIDディスク装置を装備している。HA8000は、総合理論演算性能5.495 GFlops、総メモリ容量1.796 TBの分散型スカラ並列コンピュータで、演算ノードとして2 CPUを持つPCサーバ449台から構成され、128ノードごとに2 Gbpsで相互接続してクラスタを形成している。各クラスタは、周辺装置として1.1 TBのRAIDディスク装置を備えている。

計算科学研究センターは、国家基幹技術の一つとして位置づけられている次世代スーパーコンピュータプロジェクトの中で、ナノサイエンスに関わるアプリケーション開発という重要な役割の一端を担っており、分子科学に関わる計算科学研究のナショナルセンターともいえるべき分野拠点として、活動を展開している。

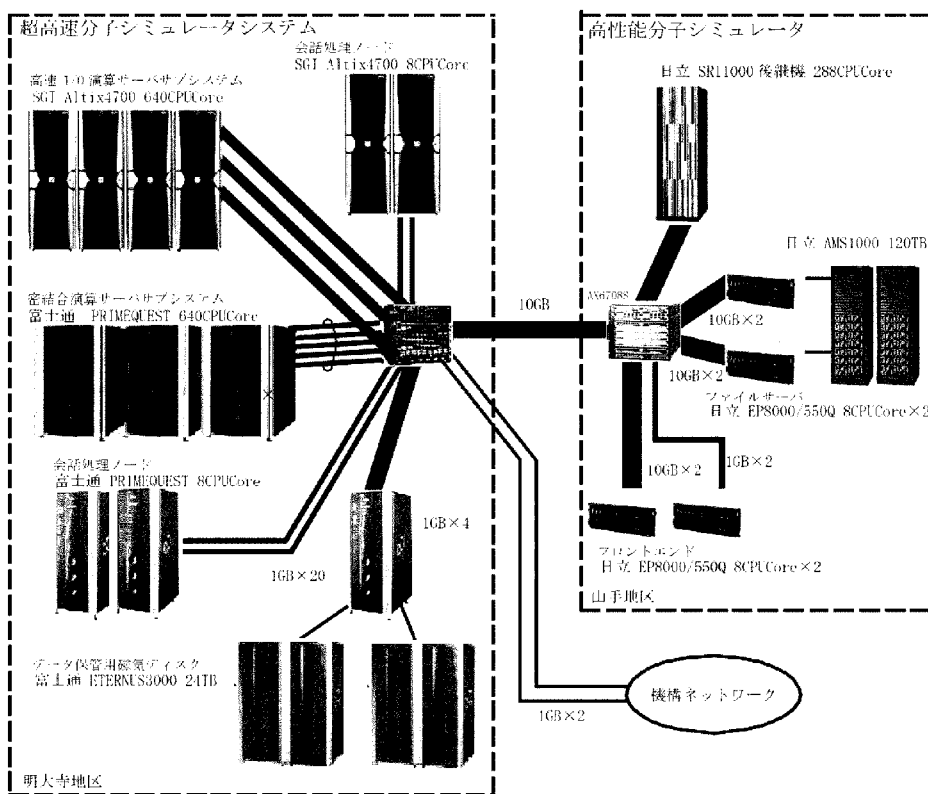
この中で、昨年度は計算科学研究センターの前身である分子科学研究所電子計算機センター設立30周年にあたり、2007年2月に開催された設立30周年記念スーパーコンピュータワークショップにおいては、基調講演、パネルディスカッション等を通して理論・計算分子科学研究コミュニティから計算科学研究センターに対する将来にわたる期待が寄せられた。これを受けて、計算科学研究センターを事務局としてセンターユーザーをはじめとした理論・計算分子科学研究コミュニティの主だった先生方により懇談会が組織され、次世代スーパーコンピュータへの関わりを中心に計算科学研究センターの位置づけ、果たすべき役割等について検討がなされた。そこでの議論は、次世代スーパーコンピュータへの提言として意見書の形にまとめられ、文部科学省へ提出される予定となっている。

その中で計算科学研究センターに期待されている重要なアクティビティの大筋は以下の通りである。

- (1) 神戸に設置される次世代スーパーコンピュータの共用に際して、理論・計算分子科学領域を含め、計算科学研究センターがナノサイエンス分野、分子科学分野の分野拠点として機能していくこと、つまり神戸センターが計算機の運用に対して責任を持つ一方で、分子研は分野の研究に対して責任を持ち、研究をリードし、取りまとめを行っていくこと。
- (2) このため、分子科学研究所に理論・計算ナノサイエンス特別研究センターを設置し、計算科学研究に加えてソフト開発を含めたライブラリの整備や研究支援活動を行っていくこと。

このような提言を受け、計算科学研究センターではこれらを実施していくための体制や事業計画等、具体的な方策を検討するために運営委員会に外部の先生も含めた将来構想委員会を設置し、議論を開始しようとしているところである。

システム構成図



高性能分子シミュレータシステム

演算サーバシステム	
型番	HITACHI SR11000 次世代モデル
OS	AIX
CPUCore 数	288 (32CPUCore × 9 ノード)
総理論性能	5.4TFLOPS
総メモリ容量	2.2TB (256GB × 9 ノード)
ディスク容量	23TB (/work)
ファイルサーバシステム	
型番	HITACHI EP8000/550Q (2 ノード)
OS	AIX
総メモリ容量	64GB (32GB × 2 ノード)
ディスク容量	120TB (/home (37.4TB)、/week (20.0TB)、/save (37.4TB))
	60TB (バックアップ用)
フロントエンドサーバ	
型番	HITACHI EP8000/550Q (2 ノード)
OS	AIX
総メモリ容量	64GB (32GB × 2 ノード)
高速ネットワーク装置	
型番	Alaxala AX6708S

超高速分子シミュレータシステム

蜜結合演算サーバサブシステム	
	型番：富士通 PRIMEQUEST
	OS：Linux
	CPUCore数：640 (64CPUCore × 10 ノード)
	総理論性能：4.096TFLOPS (409.86GFLOPS × 10 ノード)
	総メモリ容量：2.56TB (256GB × 10 ノード)
	ディスク容量：800GB × 10 ノード (/work)
	: 8TB (/week)
高速 I/O サーバサブシステム	
	型番：SGI Altix4700
	OS：Linux
	CPUCore数：640 (128CPUCore + 512CPUCore)
	総理論性能：4.096TFLOPS (819.2GFLOPS + 3276.9GFLOPS) (6.4GFLOPS/CPUCore)
	総メモリ容量：8TB (2TB + 6TB)
	ディスク容量：114TB (/work)
高速ネットワーク装置	
	型番：Catalyst 6504