

■ 計算科学研究センター

本センターは我が国唯一の分子科学計算のための共同利用基盤センターとしての経験を活かし、これまでの分子科学計算に加えて分子科学－生物科学の境界領域に展開を図る目的で昨年度発足した機構共通施設である。

本センターの前身である分子科学研究所電子計算機センターは国内における分子科学者の共同利用施設として1977年に設立され、一方では国際的にもピークをなす計算を行い、他方では国内の計算化学全体の底上げを行うという二重の役割を果たしてきた。

まだ、ワークステーションが普及していなかった時期に地方の大学などで計算機にアクセスできなかった研究者に計算資源を提供し、その中から国際的にも高い評価を受けている分子科学のリーダーを数多く輩出してきた。現在、世界で発表されている量子化学関連論文全体の2, 3パーセントが旧「分子研電算センター」を使って行われたものである。旧分子研電算センターは分子研「電子計算機室」に改組され、そのスタッフは計算科学研究センターも兼務し、その中核としてセンターのハードウェア・ソフトウェアの維持・管理、共同利用者へのサービス業務、マシンの更新・導入などの業務に携わっている。

現在、センターにおいて稼動している主なコンピュータは(1) Fujitsu VPP5000 (30 PE; 総理論演算性能, 288 GFLOPS; 総主記憶容量, 256 GB), (2) SGI Origin2800 (192 CPU; 総理論演算性能, 115 GFLOPS; 総主記憶容量, 192 GB), Origin3800 (128 CPU; 最高演算性能, 102 GFLOPS; 総主記憶容量, 128 GB), (3) NEC SX-7 (32 CPU; 総理論演算性能, 282 GFLOPS; 総主記憶容量, 256 GB) および (4) NEC TX-7 (64 CPU; 総理論演算性能, 256 GFLOPS; 総主記憶容量, 256 GB) であり、全国のユーザーのサービスに提供されている。また、機構内の生物関連分野の高速シミュレーション計算を主な対象としたHITACH SR8000F1も稼動している。

現在、センターは共同利用施設として分子科学分野を中心に機構内外の約150グループ以上、700名弱のユーザーにサービスを提供しており、文字どおり我が国における理論分子科学分野の計算センターであるが、最近、その環境に変化が生まれつつある。以前、センターの重要な機能のひとつはコンピュータにアクセスできない多くの研究者に計算機資源を提供することであった。しかしながら、ワークステーションの急速な普及によって、通常の計算は自前のワークステーションで行うことができるようになり、大型計算センターとしての位置づけは、むしろ、ワークステーションでは処理が困難であるような大規模計算を可能とする点に比重が移りつつある。このような計算機環境の変化を考慮して、計算科学研究センターでは通常の利用申請の他に全CPU時間の半分程度を上限として「特別利用申請」枠を設け、特別プロジェクトの募集を行っている。

計算科学研究センターを巡るもうひとつの重要な変化は生物関連の計算・情報処理に関する要求の増大である。センターでは、当面、分子科学－生物科学の境界領域における分野への展開を図り、同時に、より広い生物分野に守備範囲を拡大するための条件づくりをハード、ソフト、およびスタッフの面で進めようとしている。



(後列左から) 明石志保子、岡本慶之、三上泰治、小松孝弘、田中純志
(前列左から) 佐藤昌宏、松田成信、岡崎 進、三浦伸一、岩橋建輔