



*Research
Center
for
Computational
Science*

*National Institutes of Natural Sciences
Okazaki Research Facility*

History and Mission

センター設立の目的と沿革



自然科学研究機構 岡崎共通研究施設 計算科学研究センターの前身である分子科学研究電子計算機センターは、実験データの収集解析、分子科学プログラムライブラリの開発と整備、分子科学データベースの開発、広域ネットワークへの参加、基礎生物学研究所と生理学研究所の計算処理、特に大学計算機センターでは実行の困難な分子科学の大規模理論計算などを重点的に行うことを目的に1977年5月に分子科学研究センターの研究施設として設立され、大型計算機を導入し、共同利用サービスとして、国内の研究者に広く利用されてきました。

その後、2000年4月、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、分子科学やバイオサイエンス分野における計算科学理論、方法論のさらなる展開をはかるべく研究機能を強化し、岡崎国立共同研究施設 共通研究施設 計算科学研究センターへと転換しました。これに伴い、共同利用サービスに加え、2003年4月より分子科学研究センターにおいて開始された文部科学省「超高速コンピュータ網形成プロジェクト(通称 NAREGI)」における「ナノサイエンス実証研究」では、グリッドコンピューティングシステムの導入・運用を行うなど、プロジェクトの中核施設としての活動を行ってきました。

2005年4月には、大学共同利用機関法人 自然科学研究機構として再編され法人化されたことに伴い、岡崎共通研究施設 計算科学研究センターとして再出発いたしております。同年、機構による「分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成」事業の一環として分子科学研究センターを中心に組織された「巨大計算新手法の開発と分子・物質シミュレーション中核拠点の形成」にも積極的に参画しています。さらには、2006年4月より開始した「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用プロジェクト」における「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」においても中心的役割を果たしてきており、単なるCPUサービスにとどまらず、分子科学、ナノサイエンスに関わる計算科学研究の中核拠点としての活動を活発に行っています。

今後、岡崎地区3研究所および岡崎共通研究施設の計算基盤研究センターとしてはもちろんのこと、全国の分子科学研究者、バイオサイエンス研究者に、大学等の研究機関では不可能な大規模計算処理環境を提供する共同利用施設としての基盤強化を目指していくと同時に、プロジェクトの場を提供し理論・方法論開発などの研究活動も推進していく予定です。

2009年現在におけるセンター職員は、教授2名、准教授1名、助教6名、技術職員7名、事務支援員2名から構成されています。

The Computer Center of IMS, which was the forerunner of the Research Center for Computational Science, was established in May, 1977, primarily in order to provide an opportunity for large scale computation in molecular

science which could not be carried out at regional university computer centers. Further, the Center supported experimental data collection and analysis, developed and maintained the program library and database in molecular science, and provided the computational service to neighboring National Institute for Basic Biology and National Institute for Physiological Sciences.

In April, 2000, the Center was reorganized into the Research Center for Computational Science of the Okazaki National Research Institutes in order to extend its activity to the frontier between molecular and bio sciences. Since then, the Center has been engaged not only in the facility service but also in science, for example, development of new theory and simulation method in these fields. After April, 2005, when Okazaki National Research Institute, itself, was reorganized into the National Institute of Natural Sciences, the Center has been showing its activity as a member of Okazaki Research Facilities.

The Center made a major contribution to the project, "Grid Application Research in Nanoscience", by IMS as a grid computer center, which was a part of the activity of the national project, "National Research Grid Initiative(NAREGI)", by MEXT, Japan, from 2003 to 2005. Now, the Center is working for the project, "Development of New Computational Methods for Large-Scale Systems and Establishment of Bases for Advanced Simulation of Molecular and Material Systems", by IMS forming a part of the project, "Formation of Interdisciplinary and International Bases Across Fields of Study", by NINS. The Center is playing an important role, too, in the national project, "Grand Challenge to Next Generation Nanoscience", by IMS in "Development & Application of Advanced High-Performance Supercomputer Project" by MEXT, Japan.

In September, 2009 the Center is managed and operated by two professors, one associate professor, six assistant professor, seven technical staffs, and two secretary.

Services of open facilities

共同利用サービス

本センターの共同利用は全国の大学や公的研究機関の研究者などに開かれており、利用申請と審査に基づいて、許可されたユーザーは無料で計算資源を利用することができます。センターの利用には、比較的小規模な分子軌道計算による実験研究のサポートから超大規模な電子状態計算や分子シミュレーションなど多岐にわたっており、ユーザーの用途に応じて利用申請にもA(小規模)、B(中・大規模)、S(超大規模)のクラスに分かれています。利用申請はセンターのホームページからも可能です。ユーザーは主としてインターネット経由によってセンターのフロントエンドマシンに接続し、さらにセンター内の各マシンの会話処理およびバッチジョブを利用できます。バッチジョブでは、PCの10倍程度の計算資源を単位として提供しており、各ユーザーのPCよりも格段に大きな計算能力を必要とする要望に応じています。また、分子・物質科学でよく用いられるアプリケーションプログラムやデータベースも提供し、ユーザーの研究を支援しています。また利用の手引きや運用状況などユーザーに役立つ情報をセンターのホームページにて公開しています。

The facilities of RCCS are open to all academic researchers in Japan. An eligible researcher can gain an allocated amount of resources for free after the proposal is accepted by the RCCS committee. The proposal can be submitted via the web page of RCCS. The review processes are categorized by the required amount of resources into class A (small), B (medium and large), and S (extremely large). Permitted users can connect the front-end machines via internet, and further access the interactive nodes and batch queuing system of the RCCS computers. The batch queuing system provides cpu resources more than 10 times as much as that of a current high-end PC for each user. RCCS is also equipped with a variety of application programs and databases in the field of computational molecular and material sciences. Useful information for the RCCS users is provided on the web page of RCCS as follows,

● ネットワークサービス

センター内の主要なサーバは、ネットワークスイッチより光ファイバを使ったギガビットイーサネットによって相互に接続されており、高速なデータ転送を可能としています。センター内のネットワークは、スーパー SINET を通じてインターネットに接続されており、外部からの利用が可能となっています。

● アプリケーションプログラム

センターでは分子・物質科学分野を中心にして、国内外の研究者から提供されたプログラムや、公開・商用アプリケーションプログラムを整備しており、ユーザーは自由に利用できます。現在提供しているアプリケーションプログラムには、Gaussian, GAMESS, Molpro, Molcas などの量子化学計算用、Amber, NAMD などの分子動力学計算用、さらに汎用数値計算ライブラリなどがあります(2009年10月現在)。

● データベースサービス

分子科学研究データベースとして次の2件を登録しています。特にQCLDBはその設計段階から関与し、現在も毎年行うデータ更新に協力しています。

- (1) QCLDB(量子化学文献データベース)
- (2) FCDB(力の定数に関するデータベース)

● スーパーコンピューターワークショップ

計算センターでは、毎年スーパーコンピューターワークショップを開催し、ユーザーの交流や情報交換の機会をつくっています。そこではユーザーによる成果発表に加えて、センターの計算資源の効率的な利用についての講習会、運営に関するセンタースタッフとユーザーとの情報交換、計算分子科学の動向についての招待講演などが行われています。

● 施設利用 S(超大規模計算)クラス

本センターの計算資源を最大限に活用して世界に発信する成果をあげるために、超大規模計算の利用申請を年に数件受け付けています。厳格な審査のもとで採用された S クラスのユーザーは、年間を通じて超大型計算を優先的に実行することができます。共同利用の中から先鋭的な大規模計算の成果をあげる機会が開かれています。



<http://ccportal.ims.jp>

● Network System

The servers of RCCS are interconnected by gigabit Ethernet using optical fiber from the network switch, which enable high-speed data transfer between the servers. The RCCS network is connected to the internet via the super SINET, and the users can thereby access the RCCS machines from outside the campus.

● Application Programs

RCCS provides application programs in the field of molecular and material sciences, either free or commercial, to all the users. As of October, 2009, RCCS is equipped with quantum chemistry program packages, including Gaussian, GAMESS, Molpro and Molcas, molecular dynamics program packages, such as Amber, NAMD, and general mathematical subroutines optimized to each server.

● Database Services

The following two databases are open to all users. RCCS has also been supporting and collaborating with the QCLDB project.

- (1) QCLDB (Quantum Chemistry Literature Data Base)
- (2) FCDB (Force Constant Data Base)

● Supercomputer Workshop

RCCS hosts annual workshop for the users, called Supercomputer Workshop, where users report their achievements by using the RCCS resources. The Supercomputer workshop also provides instructions on efficient use of RCCS computers, meeting of RCCS staff and users, and invited lectures on the current progress in computational science.

● S (extremely large) Class

The users in S class have privilege of performing extremely large jobs by making full use of RCCS resources. A few users are nominated per year in the S class through rigorous screening, and these selected users have great chances of outstanding achievements in the computational molecular and material sciences.

Researches

研究紹介

本センターの利用者の研究分野は、量子化学、分子動力学シミュレーション、化学反応動力学、統計力学、固体電子論など多岐にわたります。センターの計算機は、それらの多様なヘビーユーザーの要望に応えるように、巨大なメモリ空間、超高速で大容量のディスク I/O、高速なネットワーク通信、ベクトル計算機など多くの特徴ある計算機環境が活用されています。

(1) 量子化学計算

量子化学分子動力学計算により鉄クラスタ上のカーボンキャップの炭素原子衝突にともなうナノチューブへの生長のシミュレーションを行なった。

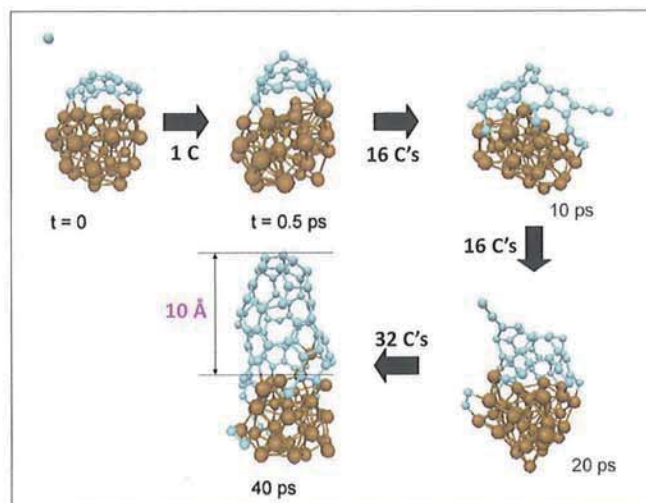
量子化学分子動力学計算による鉄クラスタ上のカーボンキャップの炭素原子衝突にともなうナノチューブへの生長のシミュレーション
資料提供：諸熊 達治(京都大学)

Quantum chemical molecular dynamics simulation of growth of carbon nanotube from a carbon cap on an iron cluster upon shooting of carbon atoms, by courtesy of Dr. K. Morokuma (Kyoto University).

The research activities of the RCCS users range over a variety of fields, including quantum chemistry, molecular dynamics simulation, chemical reaction dynamics, statistical mechanics, and solid state physics. The computational facilities of RCCS provide a variety of solutions to these users, with large shared memory, high-performance disks, fast interconnect, and vector processors. The following examples illustrate some typical calculations performed in RCCS.

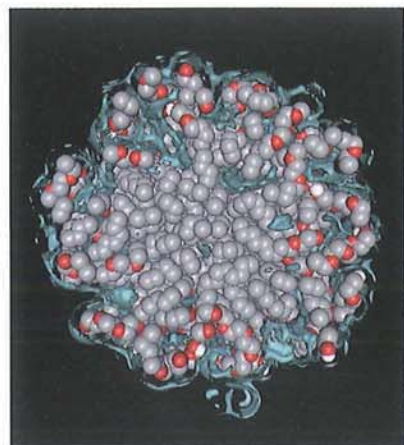
1) Quantum Chemistry

Quantum chemical molecular dynamics simulation was performed for growth of carbon nanotube from a carbon cap on an iron cluster upon shooting of carbon atoms.



(2) Statistical Mechanics

Huge CPU power and memory space are required for the theoretical calculations of solvation around a large solute molecule based on the statistical mechanics. Ample computational resources provided by RCCS make it possible for the theoretical/computational molecular scientists to contribute significantly toward the nanoscience field.



非イオン性界面活性剤 $C_{12}E_8$ からなる球状ミセルの構造と水との MD/3D-RISM 連成計算(ミセルの断面図)
資料提供：宮田 竜彦、平田 文男(分子科学研究所)

MD/3D-RISM combined calculation both for the structure of and for the hydration around a spherical micelle composed of nonionic surfactant $C_{12}E_8$ (the picture shows a cross section of the micelle), by courtesy of Dr. T. Miyata and Prof. F. Hirata (IMS).

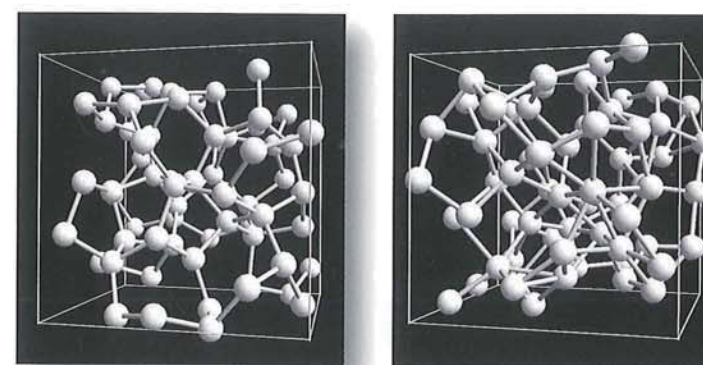
(3) 分子動力学シミュレーション

非秩序相である液体やアモルファス物質の静的及び動的な性質を、第一原理分子動力学 (MD) シミュレーションによって調べている。共有結合性が保持されている液体やアモルファスは、液相間やアモルファス相間の相転移の可能性を秘めており、熱力学における新しい概念というだけでなく、新材料設計の観点からも注目されている。我々はこれまでに、アモルファスシリコン (Si) の圧力変化に伴う構造変化を中心に調べてきた。温度及び圧力制御可能な第一原理MD計算 [1] により、低密度アモルファス相 (LDA: low density amorphous) が、加圧により高密度アモルファス相 (HDA: high density amorphous) へ構造相転移することを明らかにした。

[1] T. Morishita, Phys. Rev. Lett. 93, 055503 (2004).

(3) Molecular dynamics simulation

Polymorphism in liquids and glasses, "polyamorphism", has attracted significant attention because of its potential for new properties or functions. In particular, many investigations have focused on substances with tetrahedral coordination, such as water, silicon, and silica, because open atomic configuration such as tetrahedral coordination may play a crucial role in polyamorphism. Recently, we have performed isothermal-isobaric first-principles molecular-dynamics calculations to investigate polyamorphism of silicon (Si), and have discovered a new high-density amorphous form of Si by pressurizing a normal amorphous Si.

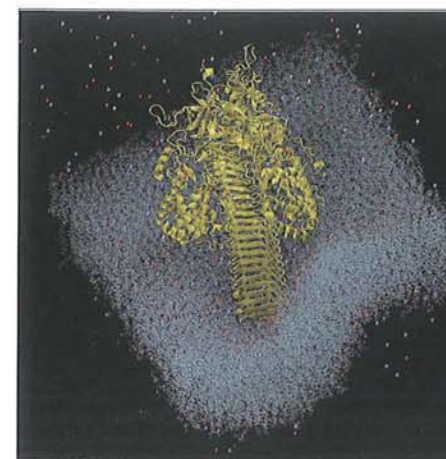


第一原理動力学法によるアモルファスシリコンの構造相転移 LDA(左図)とHDA(右図) Siの構造
資料提供：森下 徹也(産業技術総合研究所)

Polyamorphic transformation of silicon in FPMD simulation LDA(Left picture) and HDA(Right picture) Structure of Si by courtesy of Dr. T. Morishita (RICS, AIST).

溶媒分子などシステムを構成するすべての原子をあらわに含めて行う大規模分子動力学シミュレーションは、実験では直接観察できない生体中の複雑な反応過程を原子レベルでコンピュータ上に作り出し、詳細なメカニズムを明らかにすることを可能にします。このシミュレーションでは、大腸菌に感染して増殖するウイルスである T4 ファージが、菌内に DNA を注入するために細胞膜に穴を開ける過程を 85 万個の原子からなるシステムの分子動力学計算によって観察したものです。

Massive molecular dynamics simulation in which all the atoms in the system such as solvent and other molecules are included explicitly enables us to reproduce complex reactions in biological system and to elucidate detailed mechanisms inaccessible directly by experiments. In this simulation, the membrane puncturing process of T4 phage that infects and multiplies in E. coli is observed by 0.85-million-atom molecular dynamics simulation.



T4 ファージの蛋白質 gp5 の 3 量体が脂質 2 重膜に貫通する過程の分子動力学シミュレーション
資料提供：二島 渉、北尾 彰朗(東京大学)、金丸 周司、有坂文雄(東京工業大学)

Molecular dynamics for simulating T4 phage protein gp5 trimer penetrating lipid bilayer, by courtesy of Drs W. Nishima, A. Kitao (U. Tokyo), S. Kanamaru and F. Arisaka (Tokyo Tech).

Project

プロジェクト

文部科学省「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

◆ ナノ分野グランドチャレンジ課題 ◆

計算科学研究センターは、文部科学省「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクトにおいて、分子科学研究が担当しているアプリケーション開発拠点（ナノ分野）の中核組織として活動しています。本開発拠点におきましては、ナノ分野のグランドチャレンジとして、将来の社会や科学技術基盤を支える重要な要素となり得る (1) 次世代ナノ情報機能・材料、(2) 次世代ナノ生体物質、(3) 次世代エネルギーの3領域に対して計算科学方法論の学術基盤を形成すべく、平成23年度に完成する次世代スーパーコンピュータ（10PFLOPS級）を最大限活用する次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発を産学官の国家プロジェクト体制で行っています。

ナノスケールの物質が示す新たな現象、機能をシミュレーションによりとらえ、解析、予測することのできる計算科学技術を確立するためには、原子、分子を直接扱うマイクロからのアプローチが不可欠です。このため、本拠点においては、特に量子化学、分子動力学、統計力学理論、そして固体電子論等の基礎方程式から出発し、ナノスケールの物質を取り扱う理論、方法論の開発からベタフロップス級の高度並列アルゴリズムの開発、そして異種方法論間の連携ツールを含む統合ソフトウェアの開発に至るまで系統的に研究開発を進めています。

以下の図は、次世代ナノ統合ソフトウェアの構成を示しています。また、右ページの図は、各研究領域において目指しているグランドチャレンジ課題を示しています。

Possible Contributions to Society and Future Life 未来社会に向けたナノ分野グランドチャレンジ課題

(1) Towards the Development of High-Speed, Powerfully-Featured, Energy-Saving Electronic Devices: Integrated Nano Electronic Device Simulation
高速、高機能、省エネルギー電子デバイスの開発へ

The diagram illustrates the process of developing advanced electronic devices. It shows a circuit board with various components and a simulation environment. Text in Japanese describes the goals: to develop devices with high speed, power, and energy efficiency, and to simulate their performance accurately. It mentions a target of 10 PFLOPS for the simulation.

(2) Towards Overcoming Infectious Diseases: Full Atomic Wires Simulation
感染症の克服に向けて

The diagram shows a molecular model of a virus and a simulation environment. Text in Japanese describes the goal: to understand the mechanism of infectious diseases at the atomic level and develop effective treatments. It mentions the use of full atomic simulation to study the interaction between the virus and the host cell.

(3) Towards the Production of Biomass Ethanol from Cellulose: Complete Analysis of Enzyme Reaction
セルロースからバイオエタノール生産へ

The diagram shows a molecular model of cellulose and a simulation environment. Text in Japanese describes the goal: to understand the mechanism of cellulose degradation by enzymes and optimize the process for ethanol production. It mentions the use of complete analysis of enzyme reactions to improve efficiency.

Development and Use of an Advanced, High-Performance, General-Purpose Supercomputer Project, by MEXT, Japan

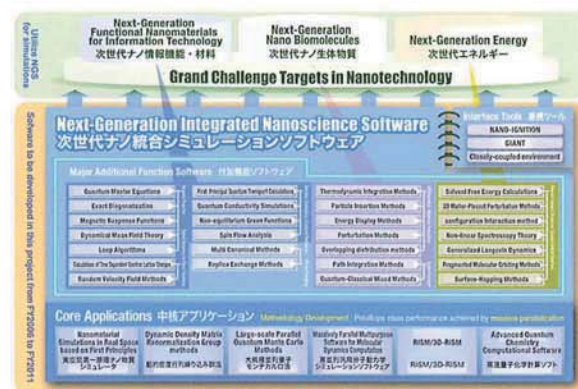
Next-Generation Integrated Nanoscience Simulation Software

◆ Grand Challenges in Next-Generation Integrated Nanoscience ◆

We have been playing a central role in the national research project of Development of Next Generation Integrated Nanoscience Simulation Software: the Grand Challenges in Next-Generation Integrated Nanoscience, where we are establishing a basis of computational nanoscience targeting on (1) Next-Generation Functional Nanomaterials for Information Technology, (2) Next-Generation Nano Biomolecules, and (3) Next-Generation Energy. The software we are developing is designed to make usage of full performance of the Next-Generation Supercomputer (NGS) to be completed in FY2011. A nationwide project team consisting of the national institutes, universities, and industries has been organized.

Scientific approaches giving explicit descriptions of electrons, atoms, and molecules are indispensable to reach new phenomena and new functions which are shown by the nano-scale materials. Based upon microscopic theories such as quantum chemistry, molecular dynamics method, statistical mechanics, and solid-state electronic theory, we are developing new simulation methods, new parallelizing algorithms for peta-flops computation, and the general-purpose interface tools between different simulation programs for coupled simulations.

The Figure below shows what make up Next-Generation Integrated Nanoscience Simulation Software. The Figures in next page show three Grand Challenge Targets in this project.



Operating status

演算性能と利用数の変遷

表1. 演算性能値の変遷
History of the CPU performance in RCCS

年 YEAR	機種 Machine type	理論演算性能 MFLOPS
1979	HITACHI M-180 (2台)	36
1980	HITACHI M-180	18
	HITACHI M-200H	48
	TOTAL	66
1982	HITACHI M-200H (2台)	52
1986	HITACHI M-680H	16
	HITACHI S-810/10	315
	TOTAL	331
1988	HITACHI M-680H	16
	HITACHI S-820/80	2,000
	TOTAL	2,016
1991	HITACHI M-680 (+)	32
	HITACHI S-820/80	2,000
	TOTAL	2,032
1994	HITACHI M-680 (+)	32
	NEC SX-3/34R (3 CPU)	19,200
	TOTAL	19,232
1995	IBM SP2 (Wide 24台)	288.0×24
	IBM SP2 (Thin 24台)	118.0×24
	NEC HSP	300
	NEC SX-3/34R (3CPU)	19,200
	TOTAL	0
1999	IBM SP2 (Wide 24台)	288.0×24
	IBM SP2 (Thin 24台)	118.0×24
	NEC SX-5 (8CPU)	64,000
	NEC SX-3/34R (3CPU)	19,200
	TOTAL	0
2000	IBM SP2 (Wide 24台)	288.0×24
	IBM SP2 (Thin 24台)	118.0×24
	NEC SX-5 (8CPU)	64,000
	Fujitsu VPP5000 (30PE)	288,000
	SGI SGI 2800 (256CPU)	153,000
	TOTAL	0
2001	IBM SP2 (Wide 24台)	288.0×24
	IBM SP2 (Thin 24台)	118.0×24
	NEC SX-5 (8CPU)	64,000
	Fujitsu VPP5000 (30PE)	288,000
	SGI SGI 2800 (192CPU)	115,200
	SGI Origin 3800 (128CPU)	102,400
	TOTAL	0
2003	NEC SX-7 (32CPU)	282,560
	NEC TX-7 (64CPU)	332,800
	Fujitsu VPP5000 (30PE)	288,000
	SGI SGI 2800 (192CPU)	115,200
	SGI Origin 3800 (128CPU)	102,400
	TOTAL	1,120,960
2006	NEC SX-7 (32CPU)	282,560
	NEC TX-7 (64CPU)	332,800
	Fujitsu PRIMEQUEST (64CPU×10Nodes)	4,096,000
	SGI Altix4700 (512CPU+128CPU)	4,096,000
	TOTAL	8,807,360
2008	Hitachi SR16000 (32CPU×9Nodes)	5,414,400
	Fujitsu PRIMEQUEST (64CPU×10Nodes)	4,096,000
	SGI Altix4700 (512CPU+128CPU)	4,096,000
	TOTAL	13,606,400

図1. 演算性能値の変遷
Fig. 1 History of the CPU performance in RCCS

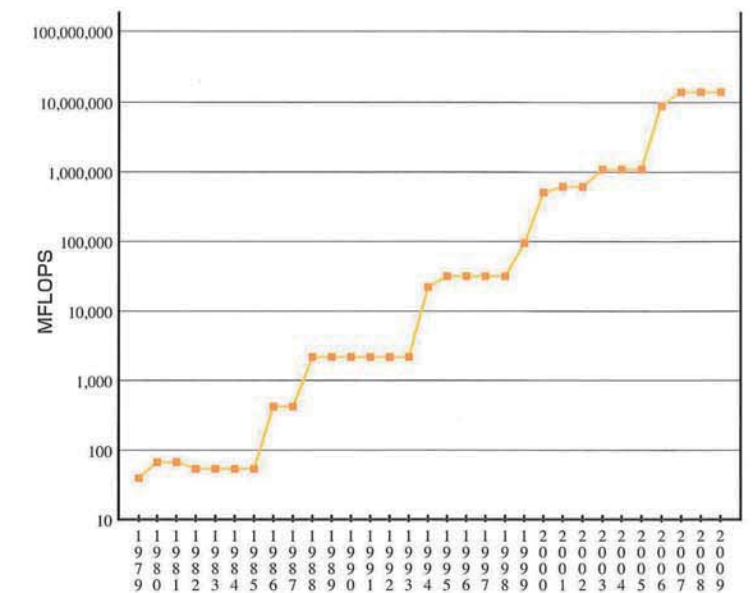
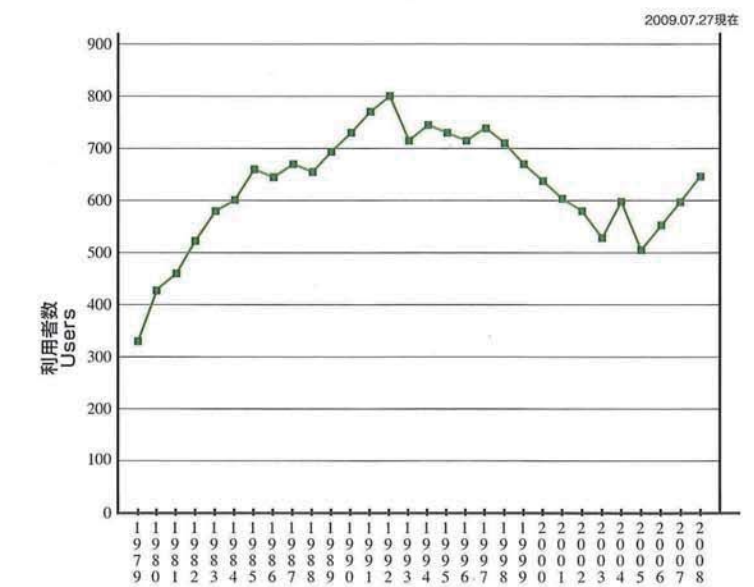


図2. 共同利用計算機利用者数の変遷
Fig. 2 Number of users and papers



超高速分子シミュレーションシステム

SGI Altix4700



◎ 高速 I/O 演算サーバ / SGI Altix4700

SGI Altix4700 は、総理論演算性能 4096 GFLOPS、総メモリ容量 8TByte の CC-NUMA 型論理共有メモリ超並列コンピュータで、システムは 512Core(256CPU)、6TByte メモリと 128Core(64CPU)、2TByte メモリの演算ノード 2 台で構成されています。各演算ノードは主記憶を論理的に共有メモリとして利用でき、大規模な電子状態計算等に利用されています。さらに 114TByte の高速ディスクとの間を 40Gbps で接続しており、メモリ転送に匹敵するディスクアクセス速度を実現しています。これによって、メモリに収まりきれない様なさらに大規模な計算が実現できます。

◎ SGI Altix4700

SGI Altix4700 is a super-parallel computer with the peak performance of 4096 GFLOPS. This system consists of two nodes; one has 512 Cores (256 dual-core CPUs) with 6 TB shared memory, and the other 128 Cores (64 CPUs) with 2 TB, where the extensive shared memory is logically provided by the cc-NUMA architecture. As a peripheral configuration, the system has also a high-performance RAID disk device with the total effective amount of about 114 TB and with the I/O speed of 40 Gbps. This I/O speed of the disk is nearly equivalent to that of the memory transfer. This system is particularly suitable to large and accurate calculations of electronic states and other purposes which require huge memory and/or disk space.

Fujitsu PRIMEQUEST



◎ 密結合演算サーバ / Fujitsu PRIMEQUEST

Fujitsu PRIMEQUEST は、総理論演算性能 4096 GFLOPS、総メモリ容量 2TByte の共有メモリ型スカラ並列コンピュータで、システムは 64Core(32CPU) を持つ演算ノード 10 台から構成されています。ノード間は 160Gbps で相互接続されています。これにより、MPI 等の分散処理ライブラリによりノードを超えた大規模計算を高速に処理することが可能であり、タンパク質立体構造シミュレーション等の大規模な分子動力学計算、モンテカルロ計算に利用されています。周辺装置として、24TB の RAID ディスク装置を装備し、大容量ディスクを要求する分子動力学計算などの一時保管用として利用されています。

◎ Fujitsu PRIMEQUEST

Fujitsu PRIMEQUEST has scalar-parallel architecture, providing the total performance of 4096 GFLOPS by 10 nodes. Each node consists of 64 Cores (32 dual-core CPUs) and 256 GB of shared memory. The nodes are connected with the fiber inter-connect, and any pair of nodes can thereby communicate at the bandwidth of 160 Gbps using the message-passing library (MPI). The system is also equipped with a RAID disk device about 24 TB for temporal storage. This server is mainly used for large-scale molecular dynamics and Monte Carlo calculations, including application to biomolecules.

Resources-2

主なコンピュータの紹介 -2

高性能分子シミュレータシステム

HITACHI SR16000



◎HITACHI SR16000

Hitachi SR16000 は、総理論演算性能 5414GFLOPS、総メモリ容量 2250GB の共有メモリ型スカラ並列コンピュータで、システムは 32Core を持つ演算ノード 9 台から構成されています。周辺装置として、21TB の RAID ディスク装置を装備し、大容量ディスクを要求する計算の一時記憶として利用されています。

◎HITACHI SR16000

Hitachi SR16000 has a scalar-parallel architecture with shared memory, providing you the performance up to 5414 GFLOPS using 288 Cores. 1 node has 32 Cores and 256 GB memory. Peripheral configuration the system has about 21 TB RAID disk device which provides you a huge amount of storage

Front-end server



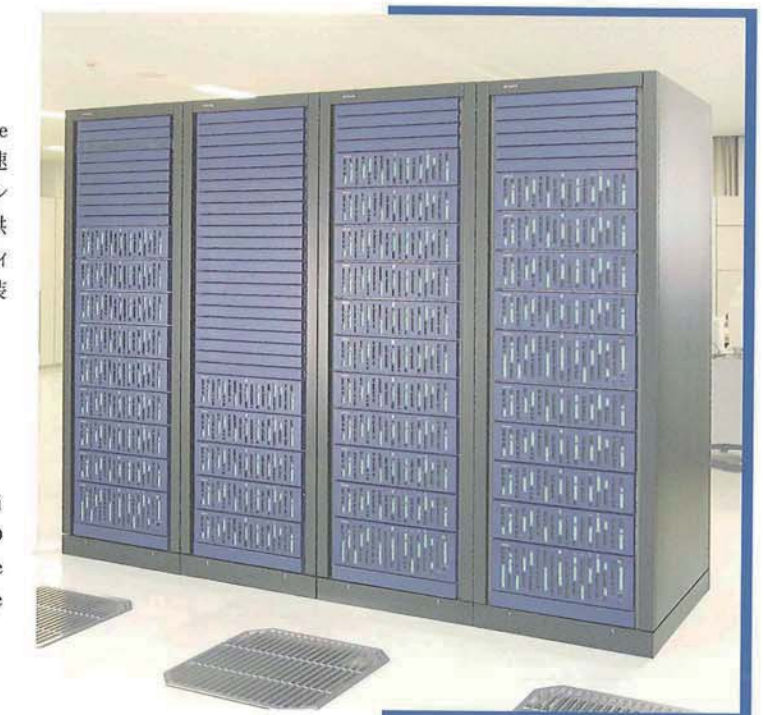
◎フロントエンドサーバ

フロントエンドサーバは、Hitachi EP8000/550Q の 8Core モデル 2 台で構成されており、利用者が直接ログインをして会話処理を行います。超高速分子シミュレータシステムおよび高性能分子シミュレータシステムへバッチジョブ処理要求を行うために、統括的なジョブ管理を行うジョブキューイングシステム (JQS) を装備しています。

◎ Front-end server

The front-end server of RCCS consists of 2 nodes of Hitachi EP8000/550Q. The front-end machines are open to the RCCS users via ssh or other protocols for interactive use. The job-queuing system (JQS) for the batch uses of other system is also controlled by the front-end server.

File Server




◎ファイルサーバ

ファイルサーバは、Hitachi EP8000/550Q の 16Core モデル 2 台から構成されており、NFS 機構により超高速分子シミュレータシステムおよび高性能分子シミュレータシステムへ 600人以上の利用者のホームディレクトリを提供しています。120TByte の容量をもつ RAID 型磁気ディスク装置とバックアップ RAID 型次期ディスク装置を装備しています。

◎ File Server

The file server consists of 2 sets of Hitachi EP8000/550Q(16 CPU model) with 120 TB RAID disk device and backup disk device. The disk device is NFS mounted by other systems, and is used as the home directories of the RCCS users.

Resources-2



Research
Center
for
Computational
Science

計算科学研究センター
Research Center for Computational Science

自然科学研究機構 岡崎共通研究施設
National Institutes of Natural Sciences, Okazaki Research Facility

〒444-8585 岡崎市明大寺町字西郷中38
Myodaiji, Okazaki 444-8585, JAPAN TEL 0564-55-7462 FAX 0564-55-7025