

## センター設立の目的と沿革 History and Mission

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所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月に分子科学研究所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、岡崎国立共同研究機構 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所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まいりました。

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しました。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所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ました。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まいりました。

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。

2015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4名、技術職員6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. The Center was 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 was 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, 2015 the Center is managed and operated by two professors, one associate professor, four assistant professors, six technical staffs, and two secretaries.

RESEARCH  
CENTER  
FOR  
COMPUTATIONAL  
SCIENCE

# 計算科学研究センター

自然科学研究機構  
岡崎共通研究施設



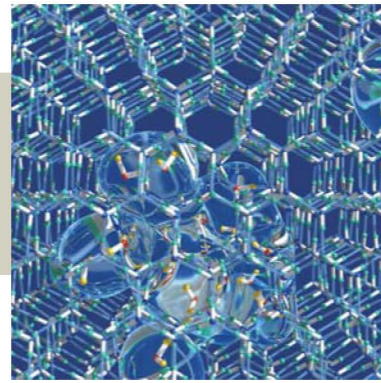
# 研究紹介 Researches

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っています。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など多くの特徴ある計算機環境が活用されています。

## (1) 相転移ダイナミクスの分子機構

分子動力学計算を用いて、均質氷の秩序が崩壊し、乱雑な液体の水へ相変化する融解ダイナミクスを再現した。乱れを定義する新しい尺度を開発する事で、単純な欠陥の集合では融解が起こらないが、水素結合ネットワークの“からまり”を生じさせる欠陥対の分離が融解を導く事を明らかにした。

K. Mochizuki, M. Matsumoto, and I. Ohmine Nature 498, 350-354 (2013) Defect pair separation as the controlling step in homogeneous ice melting



6員環から成る氷構造から、乱れた液体構造が出現する時のイラスト。  
資料提供: 望月建爾, 松本正和 (岡山大学)

Illustration of melting moment inside the crystalline structure consisting of 6-membered rings.  
By courtesy of Profs. K. Mochizuki, M. Matsumoto (Okayama 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, and fast interconnect. The following examples illustrate some typical calculations performed in RCCS.

## (1) Dynamics of phase transitions

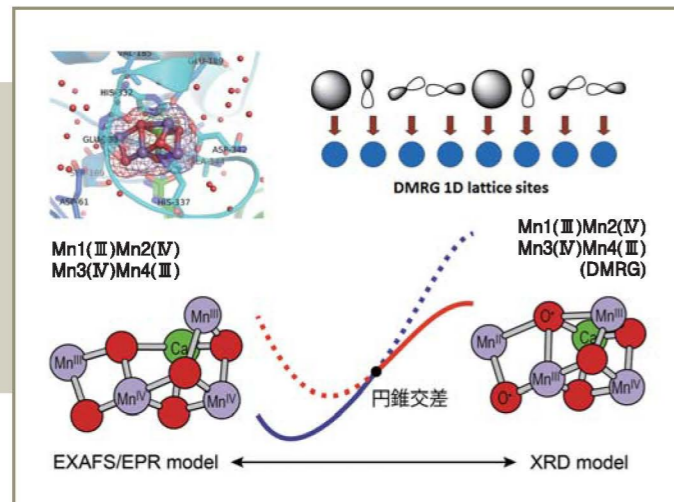
We have performed the molecular dynamics simulations of homogeneous ice melting, in which the ordered crystalline structure is transformed to the disordered liquid structure. The developed new ordered parameter revealed that the accumulation of simple defects is hardly enlarged. Instead, the spatial separation of a defect pair induces the entanglement of hydrogen bond networks and leads to ice melting.

## (2) 量子化学計算

量子化学計算では、分子の中の電子の状態や動きを計算できます。それにより化学反応、スペクトル、電子移動などの研究に利用されています。本センターのスーパーコンピュータによって、大規模分子の反応機構の解明や巨大次元の量子化学方程式の高精度計算など先端的研究が達成されています。

## (2) Quantum Chemistry

Quantum chemical methods to calculate the electronic structure of molecular system are used for studying chemical reactions, spectra, and electron transfer processes. By using supercomputers in RCCS, advanced electronic structure calculations are carried out for chemical reactions involving large systems and high-accuracy solution of large-dimensional quantum chemical equations.



光合成水分解金属コアである四核マンガングラスタの高精度電子状態計算: 最新X線結晶構造に対する密度行列繰り込み群理論による多参照計算。  
資料提供: 倉重佑輝, 柳井毅 (分子科学研究所)

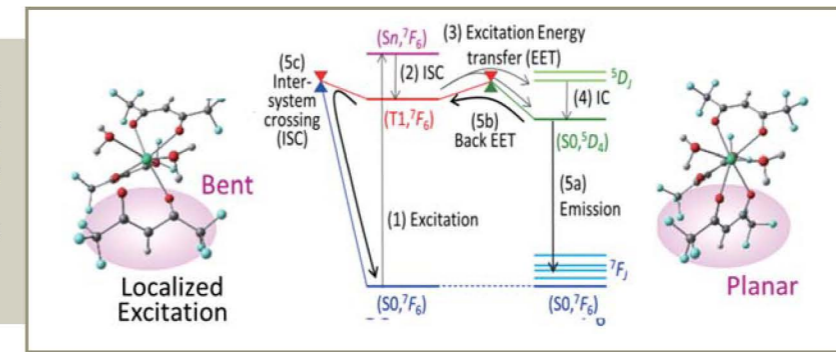
Large-dimensional multireference calculation of the electronic states of the photosynthetic water-splitting catalytic core, tetra-nuclear manganese complex: density matrix renormalization group calculation for the X-ray crystal structure.  
By courtesy of Profs. Y. Kurashige and T. Yanai (IMS).

## (3) 複雑分子系の化学反応のシミュレーション

ランタニド錯体の内核f-f発光は熱センサーなどとして広く用いられている。発光過程は、基底-重項 S0 状態から配位子Sn状態への励起に始まり、最低三重項T1状態への項間交差(ISC)、配位子T1 状態からランタニド4f<sup>5</sup> 5D<sub>J</sub>励起状態への励起エネルギー移動(EET)、5D<sub>J</sub> 状態から5D<sub>4</sub>状態への内部変換(IC)、f-f遷移による緑色発光で起こる。この一連のイベントにT1からS0へのISCが競合すれば、発光は弱まる。3種のTb<sup>3+</sup>錯体にたいし、これらのイベントが起こる遷移状態や交差状態を最近開発した反応経路自動探索(GRRM)戦術で決定し、発光強度の温度依存性の起源を明らかにした。

諸熊奎治 (京都大学 福井謙一記念研究センター)

M. Hatanaka and K. Morokuma, Exploring the reaction coordinates for f-f emission and quenching of lanthanide complexes - thermo-sensitivity of terbium(III) luminescence. J. Chem. Theo. Comp. 2014, 10, 4184-4188.



フェリチンはロジウム錯体を不活化して、制御された重合反応を行わせるユニークな反応場を作っている。  
資料提供: 諸熊奎治 (京都大学)

Ferritin with immobilized Rh-complexes can construct unique reaction space to perform controllable polymerization.  
By courtesy of Prof. K. Morokuma (Kyoto University).

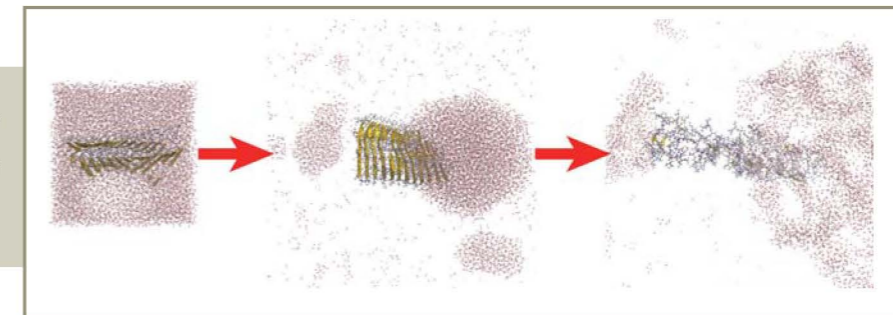
## (4) 超音波によるアミロイド線維の破壊: 非平衡分子動力学シミュレーション

認知症の1つであるアルツハイマー病はアミロイドペプタイドというペプタイドが凝集して不溶性のアミロイド線維を形成することで引き起こされる。超音波によるアミロイド線維の破壊過程を分子動力学シミュレーションにより解明した。超音波により圧力が低くなった時にアミロイド線維の周囲に気泡が生じ、圧力が再び正になった時に気泡が崩壊し水のジェット流によりアミロイド線維が破壊される。

H. Okumura and S. G. Itoh, J. Am. Chem. Soc. 136 (2014) 10549-10552.

## (4) Amyloid Fibril Disruption by Ultrasonic Cavitation: Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulations

Alzheimer's disease, one of dementia, is caused by amyloid fibrils of amyloid-β peptides. We performed nonequilibrium molecular dynamics simulations to describe the disruption of the amyloid fibrils by ultrasonic cavitation. A bubble is formed when the pressure is negative. When the pressure becomes positive, the bubble collapses and the jet flow of water disrupts the amyloid fibril.



気泡により破壊されるアミロイド線維。  
資料提供: 奥村久士, 伊藤暁 (分子科学研究所)

Amyloid Fibril Disrupted by Cavitation.  
By courtesy of Profs. H. Okumura, S. Itoh (IMS).

## 主なコンピュータの紹介 Major computers in RCCS

### クラスタ演算サーバ/ Fujitsu PRIMERGY RX300S7

Fujitsu PRIMERGY RX300S7 は、ノード内に16コア (2CPU) を有するx86\_64サーバ機で、メモリ容量は128GByteです。クラスタは総数342ノード5472コアで構成されており、総演算性能は126.9TFLOPSあります。このうち32台のノードに NVIDIA 社のTesla M2090アクセラレータを搭載しており、この分の総演算性能は21.2TFLOPSあります。さらにScaleMP社のvSMPを導入することで、最大64ノードを1台のコンピュータとして運用できる機能を有しています。また1PByteの共有ディスクにPanasas 社のPAS12とPAS11を導入することで、Parallel NFSによる高速転送を実現しています。このため大規模な分子動力学計算、モンテカルロ計算などに利用されるだけでなく、電子状態計算にも利用されています。



Fujitsu  
PRIMERGY  
RX300S7

### Computer Cluster / Fujitsu PRIMERGY RX300S7

Fujitsu PRIMERGY RX300S7 is x86\_64 server with 16 cores (2 CPUs) whose memory size is 128GByte. This cluster consists of 342 nodes and has 5472 cores and its peak performance is 126.9 TFLOPS. A GPGPU accelerator of NVIDIA's Tesla M2090 is built in 32 nodes and its total peak performance is 21.2 TFLOPS. In order to get a large memory space, up to 64 nodes can be used as one computer by using ScaleMP's vSMP. Fast transfer between the system and the external disks with 1 PByte is realized by using Panasas's PAS12 and PAS11. This system is used for large scale molecular dynamics and Monte Carlo simulations as well as electronic state calculations.

### クラスタ演算サーバ/ Fujitsu PRIMERGY CX2550M1

Fujitsu PRIMERGY CX2550M1は、ノード内に28コア(2CPU)を有するx86\_64サーバ機で、メモリ容量は128GByteです。クラスタは総数260ノード7280コアで構成されており、総演算性能は302.8TFLOPSあります。インターコネクには InfiniBandFDR を採用しており、56Gbpsでノード間を接続しています。このため大規模な分子動力学計算、モンテカルロ計算などに利用されています。また全システムへ共有ディスクを提供しているファイルサーバには、1.8PByteのディスクを有し、InfiniBand でノード間と接続して高速I/Oを実現しています。



Fujitsu  
PRIMERGY  
CX2550M1

### Computer Cluster / Fujitsu PRIMERGY CX2550M1

Fujitsu PRIMERGY CX2550M1 is x86\_64 server with 28cores (2CPUs) whose memory size is 128GByte. This cluster consists of 260 nodes and has 7280 cores and its peak performance is 302.8 TFLOPS. This cluster connects each other by InfiniBand FDR, its peak speed is 56Gbps. This system is used for largescale molecular dynamics and Monte Carlo simulation. This system has File Server to shared large disk with allcomputers, its size is 1.8PByte. It is attached to InfiniBand, too.

### 「京」用開発サーバ/ Fujitsu PRIMEHPC FX10

Fujitsu PRIMEHPC FX10は、理化学研究所の「京」コンピュータと同じアーキテクチャを有するコンピュータで、1ラック96ノードを導入しています。総演算性能は1536コアにより20.2TFLOPS あります。作業領域として48TByteのディスクも有しています。主に「京」のソフトウェア開発や計算結果解析等に利用するために利用されています。



Fujitsu  
PRIMEHPC  
FX10

### Development Server for "K computer" / Fujitsu PRIMEHPC FX10

Fujitsu PRIMEHPC FX10 has the same architecture as the "K computer" in RIKEN. This system, which consists of 96 nodes with 1536 cores and has a disk space of 48 TByte as work area, provides 20.2 TFLOPS. The system is used not only for parallel calculations but also for development of programs used on the K computer.

### 高速 I/O 演算サーバ/ SGI UV2000

SGI UV2000は、総演算性能21.2TFLOPS、総メモリ容量8TByteのcc-NUMA型論理共有メモリコンピュータで、1024コア(128CPU)を1台のコンピュータとして動作します。作業領域には400TByteの高速ディスクを有し、コンピュータとは12GByte/秒で接続しています。このハードウェアの特性を生かし、大規模な電子状態計算等に利用されています。



SGI  
UV2000

### Large SMP Server with Fast I/O / SGI UV2000

SGI UV2000 system consists of only one node with 1024cores (128CPUs). 21.2 TFLOPS. One of the characteristic feature of the system is the extensive shared memory with 8TByte TByte logically provided by the cc-NUMA architecture. Another feature is a high performance disk device with the total effective amount of about 400 TByte as work area and with the I/O speed of 12 GByte/s. This system is particularly suitable to calculations which require huge memory and/or disk space, such as electronic state calculation.

# 共同利用サービス Services of open facilities

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)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えています。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) and B (medium and 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10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、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。

## ● 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3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)
- (3) WGBS (基底関数のデータベース)

## ● 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。



<http://ccportal.ims.ac.jp>

## ● Network System

The servers of RCCS are interconnected by 10gigabit 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. 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 three 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)
- (3) WGBS (Segmented Gaussian Basis Set 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.

# 演算性能と利用数の変遷 Operating status

表1. 演算性能値の変遷

Table 1. History of the CPU performance in RCCS

年 YEAR	機種 Machine type	理論演算性能 MFLOPS
1979	Hitachi M-180 (2systems)	36
1980	Hitachi M-180	18
	Hitachi M-200H	48
	TOTAL	66
1982	Hitachi M-200H (2systems)	96
1986	Hitachi M-680H	16
	Hitachi S-810/10	315
	TOTAL	331
1988	Hitachi M-680H	16
	Hitachi S-820/80	3,000
	TOTAL	3,016
1991	Hitachi M-680 (+)	32
	Hitachi S-820/80	3,000
	TOTAL	3,032
1994	Hitachi M-680 (+)	32
	NEC SX-3/34R (3CPUs)	19,200
	TOTAL	19,232
1995	IBM SP2 (Wide 24nodes)	6,912
	IBM SP2 (Thin 24nodes)	2,832
	NEC HSP	300
	NEC SX-3/34R (3CPUs)	19,200
	TOTAL	29,244
1999	IBM SP2 (Wide 24nodes)	6,912
	IBM SP2 (Thin 24nodes)	2,832
	NEC SX-5 (8CPUs)	64,000
	NEC SX-3/34R (3CPUs)	19,200
	TOTAL	92,944
2000	IBM SP2 (Wide 24nodes)	6,912
	IBM SP2 (Thin 24nodes)	2,832
	NEC SX-5 (8CPUs)	64,000
	Fujitsu VPP5000 (30PEs)	288,000
	SGI SGI 2800 (256CPUs)	153,000
	TOTAL	514,744
2001	IBM SP2 (Wide 24nodes)	6,912
	IBM SP2 (Thin 24nodes)	2,832
	NEC SX-5 (8CPUs)	64,000
	Fujitsu VPP5000 (30PEs)	288,000
	SGI SGI 2800 (192CPUs)	115,200
	SGI Origin 3800 (128CPUs)	102,400
	TOTAL	579,344
2003	NEC SX-7 (32CPUs)	282,560
	NEC TX-7 (64CPUs)	332,800
	Fujitsu VPP5000 (30PEs)	288,000
	SGI SGI 2800 (192CPUs)	115,200
	SGI Origin 3800 (128CPUs)	102,400
	TOTAL	1,120,960
2006	NEC SX-7 (32CPUs)	282,560
	NEC TX-7 (64CPUs)	332,800
	Fujitsu PRIMEQUEST (64cores×10nodes)	4,096,000
	SGI Altix4700 (512cores+128cores)	4,096,000
	TOTAL	8,807,360
2007	Hitachi SR16000 (32cores×9nodes)	5,414,400
	Fujitsu PRIMEQUEST (64cores×10nodes)	4,096,000
	SGI Altix4700 (512cores+128cores)	4,096,000
	TOTAL	13,606,400
2011	Hitachi SR16000 (32cores×9nodes)	5,414,400
	Fujitsu PRIMERGY RX300S7 (16cores×346nodes)	128,435,200
	NVIDIA TeslaM2090 (32boards)	21,280,000
	SGI UV1000 (576cores)	6,128,640
	Fujitsu PRIMEHPC FX10 (16cores×96nodes)	20,152,320
	TOTAL	181,410,560
2012	Fujitsu PRIMERGY CX250S1 (16cores×368nodes)	136,601,600
	Fujitsu PRIMERGY RX300S7 (16cores×346nodes)	128,435,200
	NVIDIA TeslaM2090 (32boards)	21,280,000
	SGI UV2000 (1024cores)	21,299,200
	Fujitsu PRIMEHPC FX10 (16cores×96nodes)	20,152,320
	TOTAL	327,768,320
2014	Fujitsu PRIMERGY CX2550M1 (28cores×260nodes)	302,800,000
	Fujitsu PRIMERGY RX300S7 (16cores×346nodes)	128,435,200
	NVIDIA TeslaM2090 (32boards)	21,280,000
	SGI UV2000 (1024cores)	20,480,000
	Fujitsu PRIMEHPC FX10 (16cores×96nodes)	20,152,320
	TOTAL	493,147,520

図1. 演算性能値の変遷

Fig. 1 History of the CPU performance in RCCS

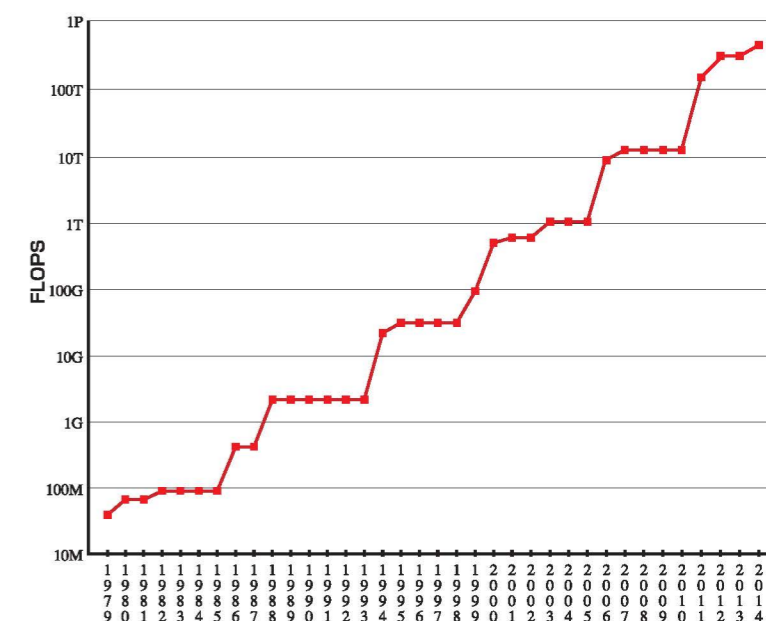
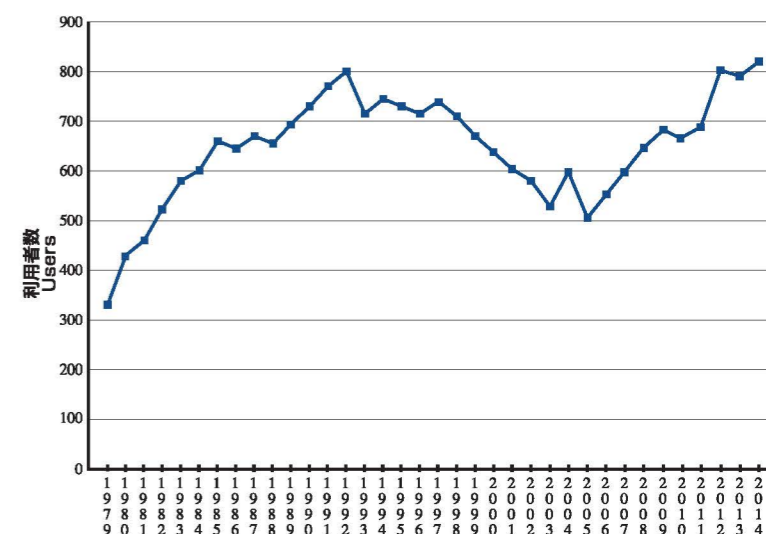


図2. 利用者数の変遷

Fig. 2 History of the number of users



# 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  
Myodajji, Okazaki 444-8585, JAPAN TEL 0564-55-7462 FAX 0564-55-7025