

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。

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。2015年度より、材料科学、物性科学、分子科学の3分野関係事業として、ポスト「京」重点課題アプリケーション課題(重点課題(5) エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発、および重点課題(7) 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成)や、ポスト「京」萌芽的課題アプリケーション開発(萌芽的課題 基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦)が設立され、さらにJSTの「科学技術人材育成コンソーシアムの構築事業」として「計算物質科学人材育成コンソーシアム事業」、「元素戦略プロジェクト」<研究拠点形成型>が開始されたことを受け、3分野に共通性の高い大規模並列計算を志向したプロジェクトをサポートし、各分野コミュニティにおける並列計算の高度化へさらなる取り組みを促すことを目的として東北大学 金属材料研究所、東京大学 物性研究所および本センターが共同で「計算物質科学スノボコン共用事業」を立ち上げ支援を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。

2018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3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.

Starting in FY 2015, as a three field related project in materials science, physical science, and molecular science, Post-K Priority Application Issues (Priority Issues (5) Development of new fundamental technologies for high-efficiency energy creation, conversion/storage and use, (7) Creation of new functional devices and high-performance materials to support next-generation industries), Post-K Exploratory Challenge (Frontiers of Basic Science: Challenging the Limits) was established. Furthermore, the "Professional development Consortium for Computational Materials Scientists" was launched as JST's "Building of Consortia for Development of Human Resources in Science and Technology". In response to "Elements Strategy Initiative", Tohoku University IMR CCMS, The University of Tokyo ISSP CCMS and this Center jointly launched "Supercomputing Consortium for Computational Materials Science" and supported them.

In September, 2018 the Center is managed and operated by two professors, one associate professor, three assistant professors, seven 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

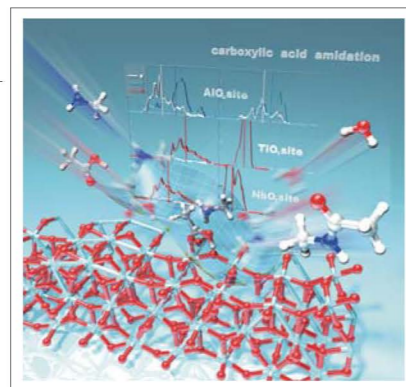


本センターの利用者の研究分野は、量子化学、分子力学シミュレーション、化学反応動力学、統計力学、固体電子論など多岐にわたっています。センターの計算機は、それらの多様なヘビーユーザーの要望に応えるように、巨大なメモリ空間、超高速で大容量のディスクI/O、高速なネットワーク通信など多くの特徴ある計算機環境が活用されています。

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) 表面触媒反応の理論シミュレーション

アミド化合物は医薬品などに広く利用されています。スーパーコンピュータを利用した量子化学計算によって、アミド化反応を高効率に実現するNb₂O₅表面の触媒活性の要因を明らかにしました。
P. Hirunsit, T. Toyao, S. M. A. H. Siddiki, K. Shimizu, M. Ehara, ChemPhysChem (2018).



アミド化反応の効率は、Nb₂O₅表面の伝導バンドの位置および表面と反応系のC=O基との相互作用によって制御されている。
資料提供: 江原正博(分子科学研究所)

Efficiency of amidation reaction on Nb₂O₅ surface is correlated with the position of conduction band of active metal sites and the hybridization to substrates
By courtesy of Prof. M.Ehara (IMS)

(1) Simulations of Catalytic Reactions on Surface

Amide compounds are widely used for fine chemicals, medical drugs, and agricultural chemicals. By using quantum chemical calculations on supercomputer, we clarified the origin of the catalytic activity of Nb₂O₅ surface which performs highly efficient amidation reactions.

(2) 第一原理反応ダイナミクスと反応経路自動探索

化学反応は固有反応座標(IRC)に沿って起こるのか?金5量体に対しab initio MD計算による古典軌道をグローバル反応経路地図上にマッピングして動的経路を解析し、反応経路跳躍の概念を提案。
資料提供: 武次徹也(北海道大学)

(2) Divergent applications of ab initio reaction dynamics and automated reaction path search

Analyses of ab initio MD trajectories for gold cluster structural transformation based on the global reaction route map clarify the dynamic reaction route going beyond the IRC pathways, leading to a new concept of "reaction path-jumping."
By courtesy of Prof.T.Taketsugu (Hokkaido University)



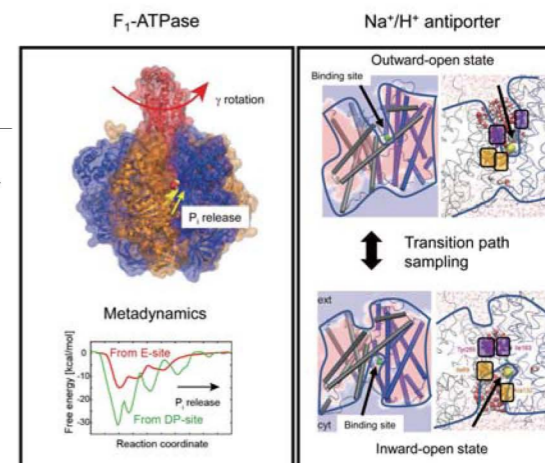
T. Tsutsumi, Y. Harabuchi, Y. Ono, S. Maeda, and T. Taketsugu, Phys. Chem. Chem. Phys., 20, 1364 (2018).

(3) 生体分子マシンの機能ダイナミクスのシミュレーション

機能ダイナミクスは、生体分子マシンが働く仕組みを理解する上で必要不可欠である。例えば、膜輸送タンパク質(トランスポーター)は、内向き開構造と外向き開構造の間をいったりきたりすることで、膜をこえた基質輸送を行っている。このような生体分子マシンの全原子モデルでのシミュレーション系は数十万原子数にも及び、機能発現にかかる時間ミリ秒スケールの直接的なシミュレーションは困難であるが、ダイナミクスの促進や遷移ダイナミクスを集中的にサンプリングする手法によって、機能発現の瞬間の分子メカニズムを解明している。

(3) Molecular simulations of functional dynamics in biomolecular machines

Functional dynamics plays an important role when biomolecular machines fulfill their functions. For example, transporter proteins transport their substrates across the membrane by changing their conformation between inward-open and outward-open conformations. Although it is difficult to directly simulate millisecond functional time of these biomolecular machines whose total atoms amount to several hundred thousand, we use techniques such as metadynamics or transition path sampling to uncover molecular mechanism of the functioning moments.



F1-ATPase: 回転子γサブユニットの回転を引き起こすP_i解離のシミュレーション、Na⁺/H⁺ antiporter: 内向き開構造・外向き開構造間の遷移ダイナミクスのシミュレーション
資料提供: 岡崎圭一(分子科学研究所)

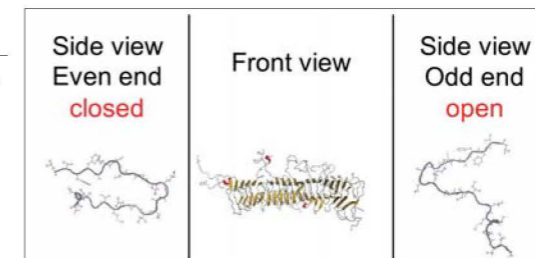
F1-ATPase: Simulation of P_i release that induces rotation of the rotor γ-subunit. Na⁺/H⁺ antiporter: Simulation of transition dynamics between the inward-open and outward-open states.
By courtesy of Prof.K.Okazaki (IMS)

(4) アミロイド線維の非対称性:分子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ベータ(Aβ)ペプチドというペプチドが凝集してアミロイド線維という線維状の物質を形成することで引き起こされる。これまでアミロイド線維は一方方向にしか伸長しないことが知られていたが、その理由は明らかになっていなかった。分子力学シミュレーションによりAβアミロイド線維の構造と揺らぎが右端と左端で異なることを発見し、これがアミロイド線維伸長の一方方向性の理由であることを明らかにした。この成果はアルツハイマー病の原因物質が生成されないようにするための薬剤開発に応用されることが期待される。
H. Okumura and S. G. Itoh, Sci. Rep. 6 (2016) 38422 (9 pages).

(4) Asymmetry of amyloid fibrils: Molecular Dynamics Simulations

Alzheimer's disease, one of dementia, is caused by amyloid fibrils of amyloid-β (Aβ) peptides. It has been known that the Aβ amyloid fibrils extend only in one direction, but the reason has not been clarified. We found that the structure and fluctuation of the Aβ amyloid fibrils differ between the right and left ends by molecular dynamics simulations and clarified that this is the reason for the unidirectionality of the amyloid-fibril elongation. This result will be applied to develop inhibitors for the causative substance of the Alzheimer's disease.
H. Okumura and S. G. Itoh, Sci. Rep. 6 (2016) 38422 (9 pages).



左右の末端構造が異なるアミロイド線維。
資料提供: 奥村久士, 伊藤暁(分子科学研究所)

Amyloid fibrils with different right and left terminal structures.
By courtesy of Profs. H.Okumura and 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 / NEC LX Series

2017年10月から運用を開始したNEC社製スパコンの特長は、ノード単位で提供する TypeN と、コア単位で提供する TypeC に分けられたクラスタ構成になっていることです。さらに TypeN では特にメモリを強化した TypeNF、および TypeC では特に演算性能を強化するためにアクセラレータを搭載した TypeCA を用意しています。

各タイプの構成は以下のとおりです。

- TypeNN NEC LX 406Rh-2 794ノード 2CPU 40コア 2.4GHz 192GBメモリ
- TypeNF NEC LX 110Rh-1 20ノード 2CPU 40コア 2.4GHz 768GBメモリ
- TypeCC NEC LX 110Rh-1 159ノード 2CPU 36コア 3.0GHz 192GBメモリ
- TypeCA NEC LX 108Rh-4G 96ノード 2CPU 24コア 3.0GHz 192GBメモリ +P100 2枚

本クラスタは合計で 40,588コア、216TBメモリ、192GPGPU を有し、総理論演算性能は 4,076PFLOPS あります。大規模な電子動力学計算、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。

Computer Cluster / NEC LX Series

The feature of supercomputer made by NEC which started operation in October 2017 is that it has a cluster configuration divided into TypeN provided on a per-node basis and TypeC provided on a per-core basis.

In TypeN especially, TypeNF which strengthened memory is especially prepared, and TypeCA equipped with accelerator is especially prepared for Type C to enhance computing performance.

The configuration of each type is as follows.

- TypeNN NEC LX 406Rh-2 794nodes, 2CPU 40cores 2.4GHz, 192GB memory
- TypeNF NEC LX 110Rh-1 20nodes, 2CPU 40cores 2.4GHz, 768GB memory
- TypeCC NEC LX 110Rh-1 159nodes, 2CPU 36cores 3.0GHz, 192GB memory
- TypeCA NEC LX 108Rh-4G 96nodes, 2CPU 24nores 3.0GHz, 192GB memory, +P100 2boards

In total this cluster has 40,588 cores, 216 TB memory, 192 GPGPU, total theoretical computing performance is 4,076 PFLOPS. It is used for large-scale molecular dynamics and Monte Carlo simulations as well as electronic state calculations.



ファイルサーバおよびインターコネク

ファイルサーバは、Lustre ファイルシステムによる 9.4PByte のディスクを装備しています。

コンピュータ間、およびコンピュータとファイルサーバ間は、100Gbpsの通信速度を有するOPA(Omni-Path Architecture)インターコネクで相互に接続しています。

File server and Interconnect network

The file server is equipped with 9.4 PByte disk by the Lustre file system.

Between computers, and computers and file server are mutually connected by OPA (Omni-Path Architecture) interconnect network which has a communication speed of 100 Gbps.

冷却設備

コンピュータの熱は、ラックの背後に設置したリアドアを通じて、循環水に放熱します。

循環水は、夏季でも冷却塔のみで放熱させるため、高い省エネルギーを実現しています。

Cooling system

The heat of the computer radiates to the circulating water through the rear door installed behind the rack.

Even in summer, the circulating water cools down with only the cooling tower, thus achieving high energy saving.

NEC LX

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。

● 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。



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

● 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。

- (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) SGBS (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。

● 3Dプリンタ出力サービス

センターで管理している3Dプリンタで出力支援しています。特に分子模型作成は設計から完成まで対応します。

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.

● 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.

- (1) QCLDB (Quantum Chemistry Literature Database)
- (2) FCDB (Force Constant Database)
- (3) SGBS (Segmented Gaussian Basis Set Database)

● 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.

● Output service with 3D printers

RCCS support output with 3D printers managed at the center. Especially preparation of molecular model corresponds from arrange to completion.

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	理論総演算性能 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, Thin 24nodes)	9,744
	NEC HSP	300
	NEC SX-3/34R (3CPUs)	19,200
	TOTAL	29,244
1999	IBM SP2 (Wide 24nodes, Thin 24nodes)	9,744
	NEC SX-5 (8CPUs)	64,000
	NEC SX-3/34R (3CPUs)	19,200
	TOTAL	92,944
2000	IBM SP2 (Wide 24nodes, Thin 24nodes)	9,744
	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, Thin 24nodes)	9,744
	NEC SX-5 (8CPUs)	64,000
	Fujitsu VPP5000 (30PEs)	288,000
	SGI SGI 2800 (192CPUs), Origin 3800 (128CPUs)	217,600
	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), Origin 3800 (128CPUs)	217,600
	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
2017	NEC LX (40cores×794nodes, 40cores×20nodes)	2,500,000,000
	NEC LX (36cores×159nodes, 24cores×96nodes)	770,000,000
	NVIDIA TeslaP100 (192boards)	806,000,000
	Fujitsu PRIMEHPC FX10 (16cores×96nodes)	20,152,320
	TOTAL	4,096,152,320

図1. 演算性能値の変遷

Fig. 1 History of the CPU performance in RCCS

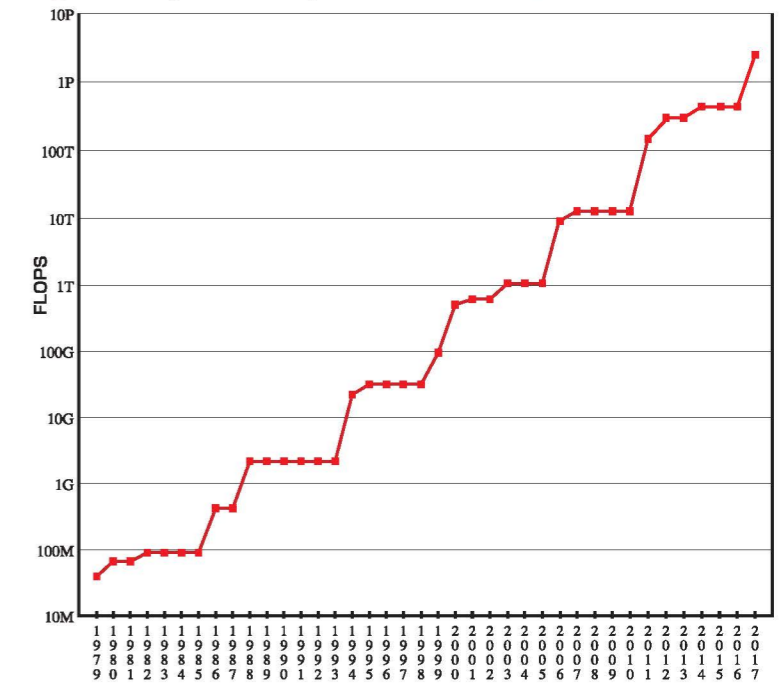
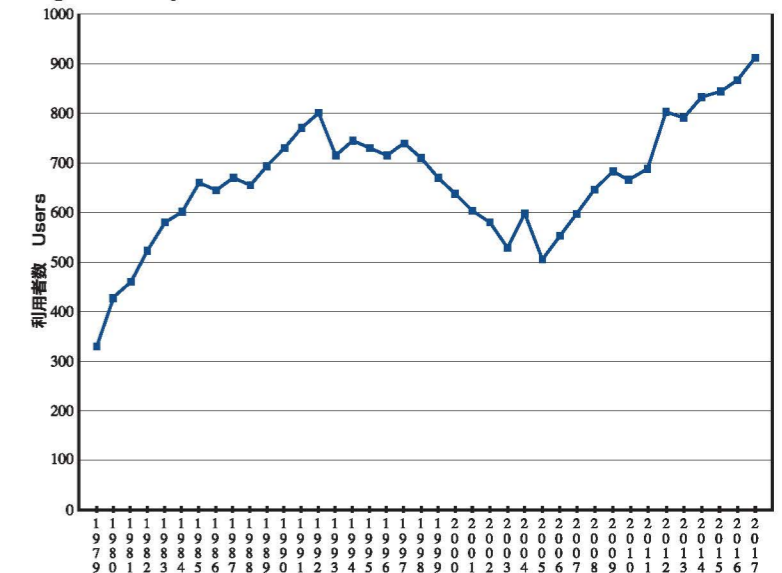


図2. 利用者数の変遷

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