

RCCS利用説明会

基礎生物学研究所・データ統合解析室
岡崎共通研究施設・計算科学研究センター

計算科学研究センター(RCCS)

自然科学研究機構 同時共通研究施設
計算科学研究センター

コンタクト サイトマップ ログイン Japanese

センターの概要 計算機利用の手引き 利用申請/利用報告 セミナー・イベント情報 データリポジトリ(β版)

ID
PASSWORD
ログイン
パスワードの初期化
パスワード/公開鍵登録方法

当センターを利用した研究成果の紹介

電子状態インフォマティクスによる一重項分裂を利用した高効率太陽電池材料の迅速探索



化石燃料から環境に優しい再生可能なエネルギー源への移行は、今日の社会と科学分野の中心的な課題の一つである。世界のエネルギー研究において、持続可能なエネルギー生産は記録的な伸びを示しているが、更なる改善が望まれている。太陽エネルギーの利用は、近い将来有望な解決案の一つになると考えられている。

本研究では、半経験的分子軌道法、時間依存密度汎関数法、機械学習を組み合わせた「電子構造インフォマティクス」のアプローチにより、天然色素として有名なインジゴをベースにした400万種以上の誘導体から「一重項分裂」による多重励起子生成で高効率の太陽電池材料となり得る分子を探索した。得られた有望候補分子とそうでない分子の化学構造をランダムフォレスト分類することで一重項分裂を効果的に示す化学構造の規則を見出し、対称的で高い合成可能性を持つ候補物質を提案した。

Weber F, Mori H, *npj Comput. Mater.*, 8, 176 (2022).

新着情報

2024-05-01 5/9(木) 9:00-17:00 NOUS 定期メンテナンス

5/9(木) 9:00-17:00の間、利用申請システム NOUS が定期メンテナンスのためにご利用いただけません。ご不便をおかけいたしますが、ご理解、ご協力のほどよろしくお願いいたします。

続きを見る

2024-04-22 5/25(土) 0:00-1:30: SINETメンテナンスのため一時的にネットワーク停止

SINETメンテナンスのため、5/25(土) 0:00-1:30 AM の間に 15 分程度の通信断が最大 2 回発生します。通信断の間は ccfep や本ウェブサイトへのアクセスができなくなります。投入済のジョブには影響ありません。

続きを見る

公式サイト <https://ccportal.ims.ac.jp/>

基礎生物学分野向け情報

<https://ccportal.ims.ac.jp/node/3729>

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

コンタクト サイトマップ

センターの概要 ▾ 利用者向け情報 ▾ 利用申請/利用報告 ▾ セミナー・イベント情報 ▾ オンラインストレージ ▾

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

コンタクト サイトマップ

センターの概要 ▾ 利用者向け情報 ▾ 利用申請/利用報告 ▾ セミナー・イベント情報 ▾ オンラインストレージ ▾

ID

PASSWORD

ログイン

→ パスワードの初期

→ パスワード/公開

クイックスタート
ガイド

▶

計算機利用の手引
き(マニュアル)

▶

OpenOnDemand

▶

FAQ (一般・分子科
学)

▶

パッケージプログラ
ム一覧(分子科学)

▶

アプリ・ライブラリ
検索方法

▶

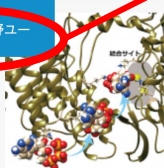
基礎生物学分野ユ
ーザー向け情報

▶

年度(後期) 計算科学研究センター施設利用の公募について
分: 施設利用(B)
始日: 2025年6月1日(日)
初日: 2025年6月30日(月) 24:00
間: 2025年10月1日(水)~2026年4月6日(月) 9:00
募集の施設利用(A)や所内利用についてはこちらのページを参照ください

利用者向けに重要なお知らせがあります。このサイトにログインして詳細をご覧ください

センターを利用した研究成果の紹介



新型コロナウイルスのRNA依存性RNAポリメラーゼにおけるレムデシビルが取り込まれる過程を分子動力学シミュレーションで解明するにはマイナス電荷を持つリン酸基があり、RNAポリメラーゼの結合があります。さらにRNAポリメラーゼにはプラス電荷を持つアミノ酸残基が結合サイトに向かって一列に並んでいます。リジン残基がレムデシビルを、それを隣のリジン残基に受け渡すことを繰り返しながら、バケツ状の結合サイトに運んでいることが明らかになりました。

S. Tanimoto, S. G. Itoh, and H. Okumura: Biophys. J. (2021), DOI: 10.1016/j.bpj.2021.05.011

基礎生物学分野で申請されたユーザー向け情報

- パッケージプログラム一覧 (基礎生物学)
- 分子生物学用データベース一覧
- FAQ (基礎生物学)

3TBメモリマシンの使い方

- キュー名が異なります (キュー名: HB)
- 指定できる最大メモリ量は、1.5TB または 3TB です
- (必要なメモリ量が1Tb以下の場合はHBキューでなく、下記の設定で実行ください)
 - 256Gb以下に収まる場合は、ncpus=64 (128Gbメモリ) または ncpus=128(256Gbメモリ) を指定
 - 256Gb~1Tbに収まる場合は、jobtype=largemem を使うこと

■ リソース指定の書き方

- 1.5Tbメモリを使う (最大同時実行2ジョブ)

```
#PBS -l select=1:ncpus=48:mpiprocs=1:ompthreads=48
```

- 3Tbメモリを使う (同時利用1ジョブ)



```
#PBS -l select=1:ncpus=96:mpiprocs=1:ompthreads=96
```

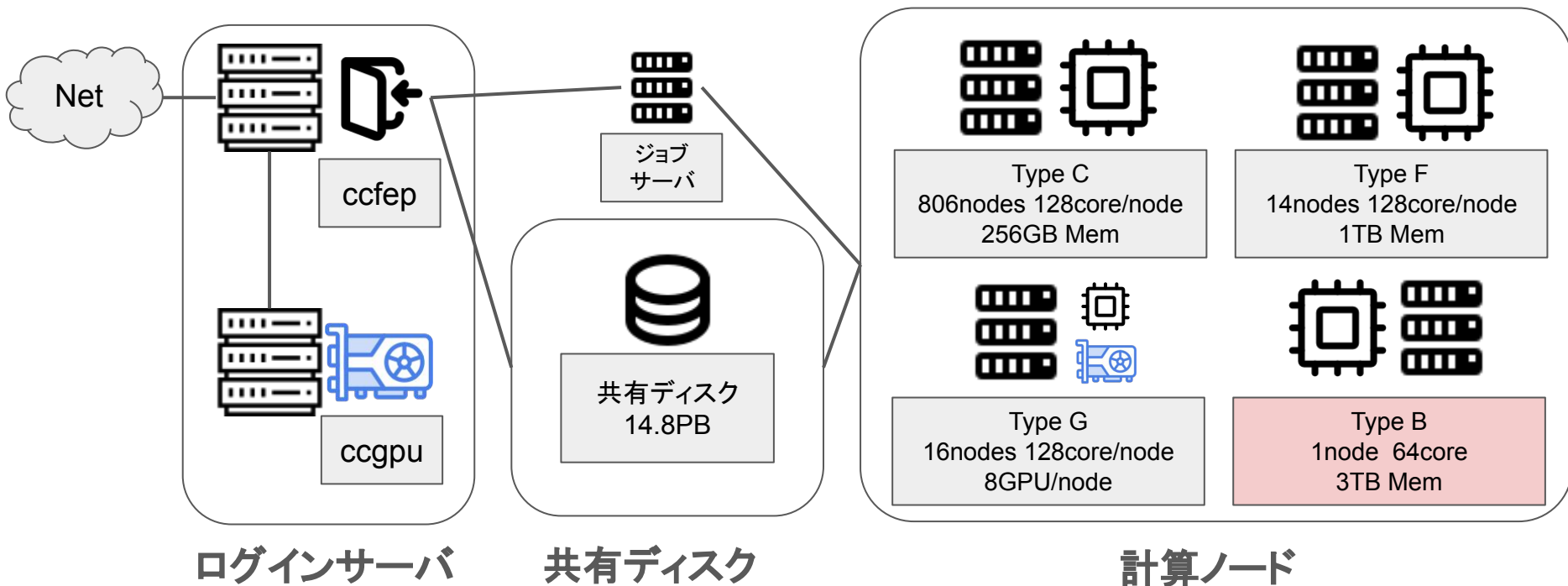
■ ジョブの投入方法

- 必ず -q HB と付けてキューを指定する

```
jsub -q HB jobfile.sh
```

RCCS構成図(模式図)

 : 対話型処理可
 : ユーザーログイン不可



参照: <https://ccportal.ims.ac.jp/manual/overview>

利用申請

- 申請にはNOUSを利用する (<https://www.nins.jp/nous/>)

基生研HP内の[申請システムNOUSの使い方・申請内容別記入例](#)も参照

- 申請は**研究グループ単位**で、「提案代表者」が代表して行う
- 最初の「Select the institute」で「IMS: 分子科学研究所」から
所内の方は「計算科学研究センター所内利用」
所外の方は「計算科学研究センター施設利用(A or B)」
- 申請書中の各種区分の項目では、「基礎生物学」での申請にしてください

詳細はRCCS公式サイト内の「[RCCS利用申請/利用報告に関する情報](#)」を参照

利用申請

1. Select the institute and year.

All IMS:分子科学研究所[IMS]

2. Then, select the application category.

2024	協力研究_ (前期) 【随時】
2024	協力研究(マテリアル先端リサーチインフラ)_ (通年) 【随時】
2024	研究会_ (通年) 【随時】
2024	若手研究活動支援_ (通年) 【随時】
2024	UVSOR施設利用_ (前期) 【随時】_ :国内申請
2024	UVSOR施設利用_ (前期) 【随時】_ UVSOR Facility -English Application- 1st Semester 【On Demand】
2024	UVSOR施設利用(マテリアル先端リサーチインフラ)_ (前期) 【随時】
2024	機器センター施設利用(マテリアル先端リサーチインフラ)_ (通年) 【随時】
2024	装置開発室施設利用_ (通年) 【随時】
2024	装置開発室施設利用(マテリアル先端リサーチインフラ)_ (通年) 【随時】
2024	計算科学研究センター_ライブラリ開発
2024	RCCS_ Category(L)
2024	計算科学研究センター_施設利用(A)
2024	RCCS_ Category(A)
2024	計算科学研究センター_所内利用
2024	RCCS_ Category(I)
2024	計算科学研究センター_施設利用(B)
2024	RCCS_ Category(B)

CPU点数とディスク使用量

- グループ毎にリソース使用量が制限されており、申請時に使用量を指定
- CPU点数
 - CPU/メモリの使用量は「CPU点数制」で管理される。
 - 所外利用者向けの申請(施設利用)には、リソース量上限によって2つの種別がある。
 - 施設利用A:CPU点数8万点まで。年内随時申請が可能。
 - 施設利用B:CPU点数8万点をこえる申請。年2回の申請時期に申請。
 - ざっくり 1点=1CPU時間、8万点 は CPUコア9個(メモリは x 1.875Gb = 16.9Gb)を365日休まず動かせるくらいの目安。
- ディスク使用量
 - デフォルトはユーザ1人当たり500GBまで。それを超える申請も可能だが、申請時に理由の記入が必要(理由は、どのような目的でどの程度必要になるかを、なるべく具体的に記載して下さい)。
- 追加申請
 - CPU点数、ディスク容量とも、足りなくなったら追加申請が可能。RCCS公式ページから申請書をダウンロードしてメールで申請する。
 - CPU点数の追加申請は、最初の申請量を上限として、年2回まで。

利用申請(毎年度必要)

申請のタイミングについて

- 前期／通年募集 (前年度1月中旬が締切)
施設利用Bに通年で応募する場合、または施設利用Aで次年度からシームレスに継続利用するにはここで応募する必要がある。
- 随時申請
施設利用Aは随時申請が可能だが、審査に一定時間がかかるため、年度当初に利用できない期間が生じる可能性がある。
- 後期募集 (募集期間 6/1~6/30)
10月以降から利用する場合。施設利用Aの利用者が施設利用Bに年度後半から移行する場合、後期募集で申請する必要がある。

報告書の提出、謝辞について

- 報告書について

年度の変わり目ごとに報告書を提出する必要があります。(昨年度分は6月1日締切)

割り当て点数によって報告書のページ数が決まっています。詳しくは公式サイト「[報告書の書き方と提出方法](#)」

- 謝辞について

成果発表時は、以下の通りに謝辞記載を行ってください。(基礎生物学分野の利用であることを明示するため、「NIBB」の記載を忘れずをお願いします)

The computation was performed using Research Center for Computational Science, Okazaki, Japan (Project: **NIBB**, 23-IMS-C987)

詳しくは公式サイト「[謝辞記載の方法](#)」

その他

- ・定期メンテナンス

原則として偶数月第一月曜日はメンテナンスのため1日(9:00～17:00)ログインできなくなります。

メンテナンス予定は ccportal に記載されています。

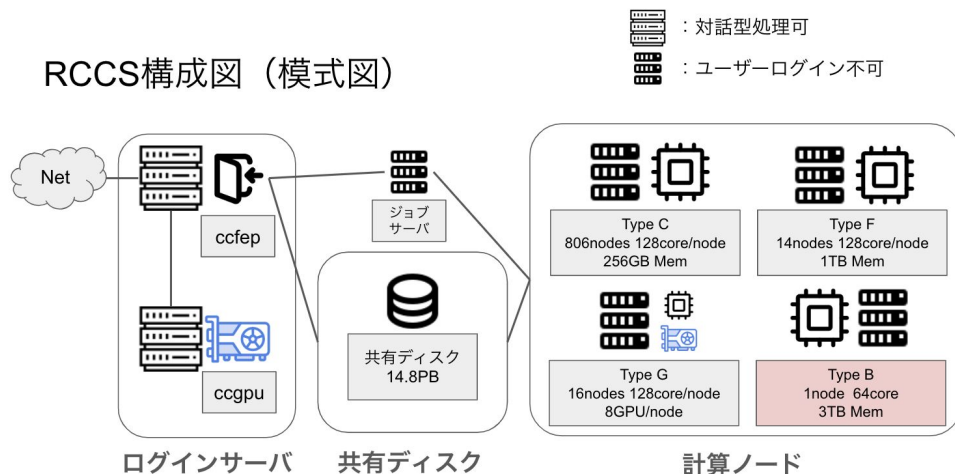
(閲覧にはログインが必要です)

<https://ccportal.ims.ac.jp/maintenance>

RCCS使用方法

ホストとノード

RCCS構成図 (模式図)



・外部から直接ログイン可能なホストは ccfep (ccfep1-4) のみです。

・ccgpu はgpuを使用した開発向けです。インターネットに直接アクセスできません。外部からのファイルのダウンロードは ccfep で行うようにしてください。

・共有ディスクにユーザーホームがあります。
(/home/Users/\$USER)

・使用されるノードは4種類あります。通常はTypeCが使用されます。gpuが必要な場合はTypeGを使用します。大きなメモリが必要な場合は TypeF (1TB)、または TypeB (3TB)をお使いください。

RCCSの使用方法

RCCS公式サイト: <https://ccportal.ims.ac.jp/>

(システム構成などはこちらを参照)

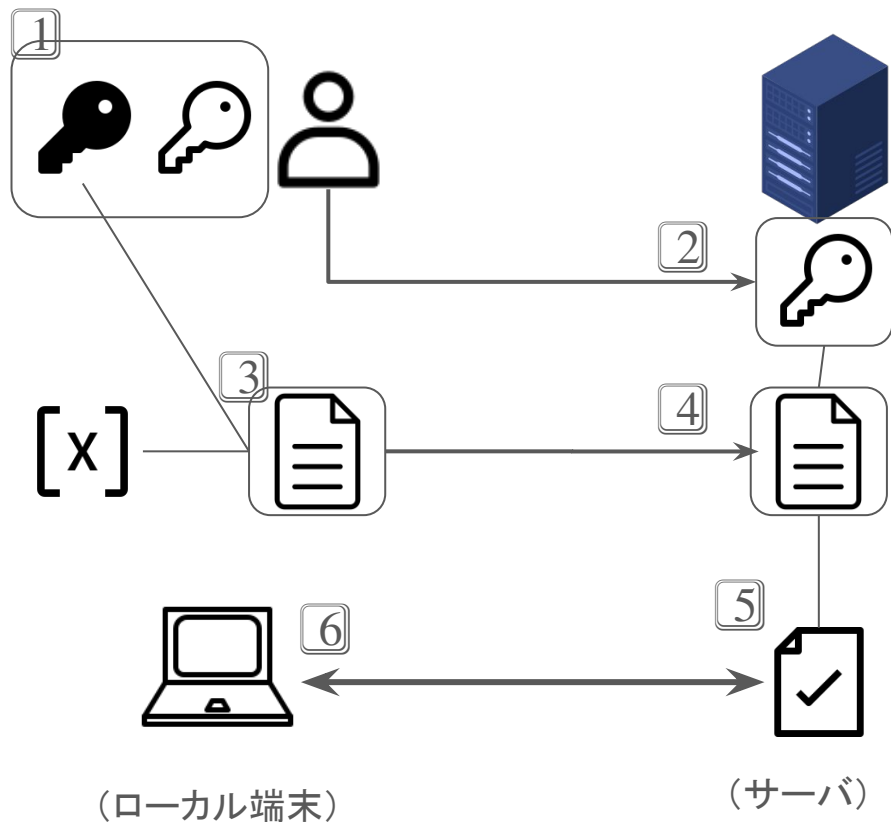
- ログイン方法はsshの公開鍵認証を使用(パスワードは使用しません)
- 使用するクライアントごとに公開鍵の交換が必要
- 公開鍵の登録はRCCSのWebサイト上で行う(Webサイトへのアクセスにはパスワードが必要)

詳細はRCCS公式サイト「RCCS計算機利用の手引き」を参照

クイックスタートガイドは下記サイトを参照

<https://ccportal.ims.ac.jp/QuickStart>

鍵認証のしくみ



署名鍵と検証鍵は常にペアで作成される。署名鍵は秘密鍵とも呼ばれ、内部に秘匿される。検証鍵は公開鍵とも呼ばれ、検証を必要とする相手に公開される。

- 1) ユーザーが署名鍵と検証鍵のペアを作成する。
- 2) 検証鍵をサーバに登録する。
- 3) 署名鍵とランダム値を用いて署名を作成
- 4) 署名をサーバに送信
- 5) サーバは検証鍵を用いて署名を検証
- 6) 検証が是なら通信を確立

RCCSへのログイン準備（パスワードの初期化）

パスワードの初期化を行う場合、「申請したメールアドレス」を入力する。

その後、入力したメールアドレス宛に、以下のsubjectのメールが送信される。

”Replacement login information for (ユーザーコード)”

ユーザーコードは3文字のIDである。

その後、メール文面内にあるURLを踏むと、登録作業を続けることができます。

RCCSへのログイン準備

接続しようとするクライアント側で鍵を生成する。

Terminalから ssh-keygen コマンドで鍵を作成する。Ed25519 での暗号化を推奨している。(他の利用可能な暗号化方法についてはWebページを参照のこと)

・Ed25519(推奨): ssh-keygen -t ed25519

その後、出来た公開鍵をccportal経由で登録する。(秘密鍵は移動させないこと)

参照: <https://ccportal.ims.ac.jp/account>

RCCSへのログイン準備（公開鍵の登録）

新しいパスワードを入力。（2回）

ログインシェルを選択。（bash, csh, zsh）

ローカルで作成した公開鍵ファイルを貼り付けます。
公開鍵ファイルをテキスト表示したい場合は
Terminal内でcatコマンドなどをお使いください。

最後に、“Save”を押すと、公開鍵ファイルの登録は
終了です。

ログインシェルの変更については実際に反映されるまでに最大20分を要します。
SSH公開鍵やウェブサイトのパスワード変更については即時反映されます。

☺ You have just used your one-time login link. It is no longer necessary to use this link to log in. It is recommended that you set your password.

Home >

View Edit

Email address *

A valid e-mail address. All e-mails from the system will be sent to this address.

Password

Password strength:

Confirm password

Passwords match:

To change the current user password, ログインシェルを bash, csh, zsh から選ぶことができます

Login shell *

/bin/bash

RCCS public key

ssh-ed25519

ssh-ed25519

SSH公開鍵を貼り付けます

Please paste your public key of ssh which is used in RCCS systems.

Save

入力後、ここをクリックして保存します

利用者限定ページにアクセスするための新しいパスワードを登録します

ログインシェルを bash, csh, zsh から選ぶことができます

SSH公開鍵を貼り付けます

入力後、ここをクリックして保存します

RCCSへのsshログイン

公開鍵を登録した後、ターミナルアプリを使用してRCCSへのログインを行います。

コマンド例: `ssh [3文字ユーザー]@ccfep.ims.ac.jp`

ローカルからのデータ移行

基本的には、ローカルからRCCSへscpコマンドを用いてデータをコピーします。

scpコマンドの実行時には、事前にSSH公開鍵を交換しておく必要があります。

ローカル上から、ccfep.ims.ac.jp に scp コマンドでデータを移行するようにしてください。

(RCCS上からローカルへのscpコマンド実行はできません)

分子生物学用アプリケーションとデータベース

分子生物学用アプリケーションをRCCS上で使用することができます。

- 以下のコマンドを実行してから使用します。

```
source /apl/bio/etc/bio.sh
```

- moduleコマンドを使用してアプリケーションを使用可能にします。
- データベースへのパスは以下になります。 /apl/bio/db

(詳しくは後ほどの講義で出てきます)

キューイング(ジョブ管理)システム

- **PBSを使用していますが、RCCSオリジナルのコマンドに置き換えられています。**
- ジョブスクリプトにおけるリソース指定の書き方

必ず指定するリソース: ノード数、CPU数、ノードあたりのプロセス数、プロセスあたりのスレッド数

実行条件によって指定するリソース: ジョブのタイプ、GPU数

例: BLAST 1ノード、16CPU、1プロセス、16スレッド、メモリは16コア分(16 x 1.875Gb = 30Gb)を使って計算する場合:

```
#PBS -l select=1:ncpus=16:mpiprocs=1:ompthreads=16
```

```
blastx -db nr -query test.fa -out blastout.txt -outfmt 6 -num_threads 16
```

- 使えるメモリ量はCPU数と計算ノードタイプに依存して決まります。メモリ量を指定することはできません

(詳しくは後ほどの講義で出てきます)

(参考)PBSコマンドとの対応表

PBSコマンド	RCCSコマンド	説明
<code>qsub file_name</code>	<code>jsub file_name</code>	ジョブを投入する
<code>qstat -u my_account</code>	<code>jobinfo</code>	自分のジョブの状態を表示
<code>qstat -Q</code>	<code>jobinfo -s</code>	キューの詳細を表示
<code>qstat</code>	<code>jobinfo -a</code>	全てのジョブを表示(-g で同グループのみを表示)
<code>qdel jobID</code>	<code>jdel jobID</code>	指定したIDのジョブを削除
<code>qhold jobID</code>	<code>jhold jobID</code>	指定したIDの待機中ジョブを実行されないようにホールド
<code>qrls jobID</code>	<code>jrls jobID</code>	ホールド状態のジョブをリリース(実行待ち状態にする)
<code>tracejob jobID</code>	<code>joblog</code>	終了したジョブの履歴を表示(CPU点数も表示)