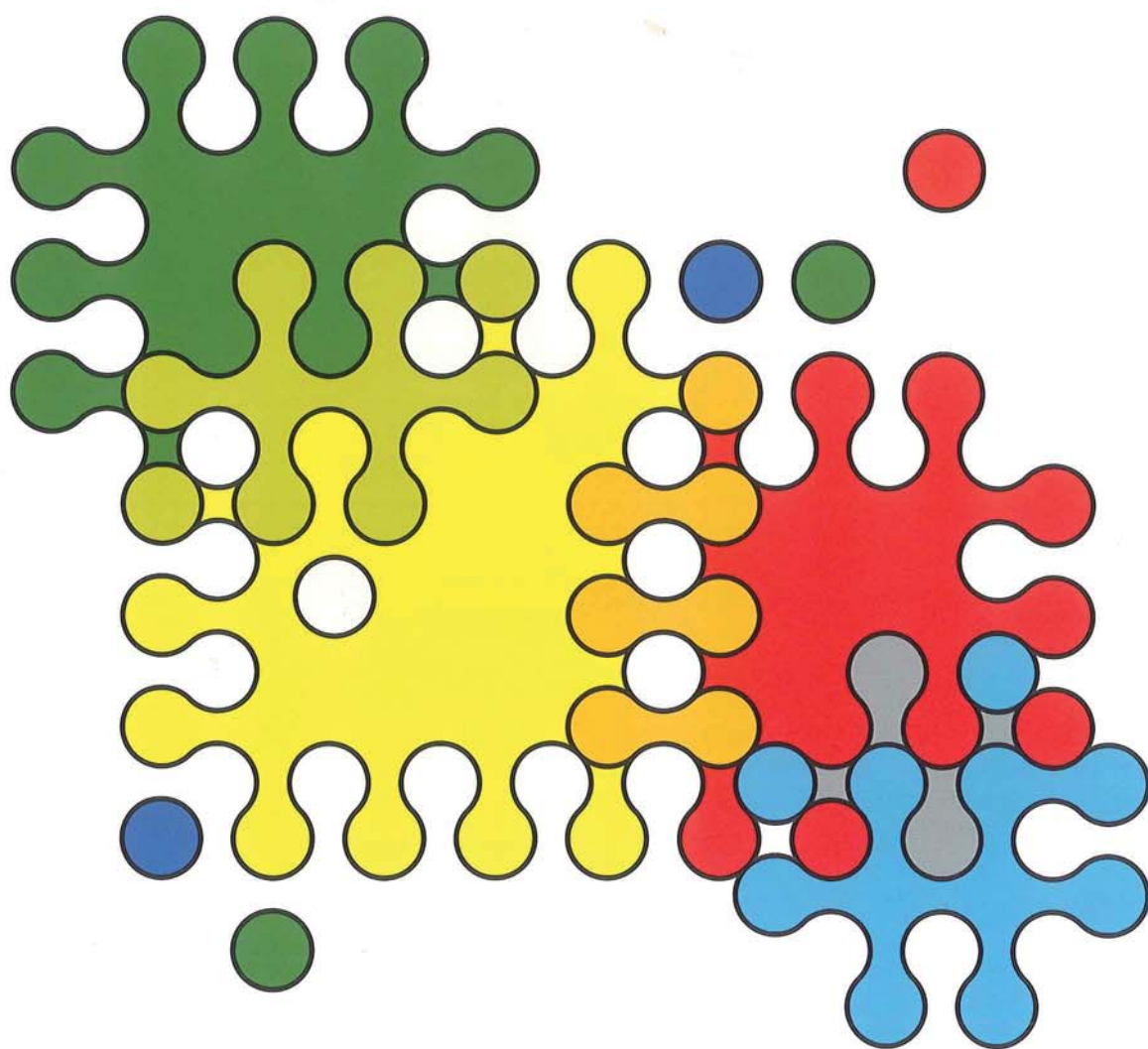


RESEARCH  
CENTER  
FOR  
COMPUTATIONAL  
SCIENCE



Okazaki National Research Institutes

# 1. History and Mission

## センター設立の目的と経緯



2000年4月1日付で、分子科学研究所 電子計算機センターは、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、バイオサイエンス分野における計算科学的手法を更に強化・高機能化する目的で、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に転換しました。

岡崎国立共同研究機構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ました。

1978年6月には日立製作所製 HITAC M-180 2台の導入が決まり、翌年1月より利用者へのサービスを開始しています。1979年9月には全国にさきがけて無人運転システムが稼働を始め、長期にわたる連続無人運転を可能にしました。1980年4月には M-200HとM-180それぞれ1台の構成となり、さらに1982年4月には M-200H 2台のシステムに更新されました。

1986年1月には、かねてから分子科学研究者の夢であったスーパーコンピュータ (HITAC S-810/10) が導入され、同時に汎用機として当時、最高性能を誇った M-680Hへの更新が実現しました。その後も分子科学計算の計算規模は拡大の一途をたどり、1988

年にはスーパーコンピュータの性能向上 (S-820/80) が行われ、1991年には汎用計算機 (M-680H) の主記憶増強を行いました。

1994年には、スーパーコンピュータが日本電気製 SX-3/34Rに更新され、1995年には、汎用計算機が日本電気製 HSP及び IBM製 SP2を主計算サーバとして含む分散型の高演算システムへと更新されました。これによりセンターの全ての計算機がUNIXを基本とするOSの上で稼働するようになりました。

1999年には、汎用計算機が日本電気製 SX-5 及び IBM製 SP2に更新され、2000年には、スーパーコンピュータが富士通製 VPP5000 及び SGI製 SGI2800 へとユーザの多様化した要求に応えるためベクトル計算機およびスカラ超並列計算機環境を平行して整備してきました。その後、2003年には汎用計算機が日本電気製 SX-7及び TX-7 に更新され、センター所有機器の総理論演算性能が1TFlops (1秒間に1兆回の浮動小数演算ができる性能) を越えました。

今後、機構内の3研究所および機構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、国内外の分子科学研究者、バイオサイエンス研究者に大学等の研究機関では処理が困難な大規模な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計画です。

2003年現在におけるセンター職員は、センター長 (併任)、教授1名、助教授1名、助手6名、技官5名から構成されています。



In April, 2000, the Computer Center of Institute for Molecular Science was reorganized into the Research Center for Computational Science as a common facility for the Okazaki National Research Institutes. The purpose of reorganization is to expand its frontier to boundary area between molecular and bio sciences. Since then the newly established Center has continued to provide the computational resources not only for the researchers inside the institutes but also for molecular and bio scientists around the world, expanding its own resources to solve the hard problems which might be impossible in their own universities or other institutes.

The Computer Center of IMS, which is the forerunner of the Research Center for Computational Science, was established in May, 1977, primarily in order to provide an opportunity for large scale computing in molecular science which could not be carried out at regional university computer centers. In addition, the Center was required to provide experimental data collection and analysis, development and maintenance of the molecular science program library and database with the participation in the computer network, and computational service to neighboring National Institute for Basic Biology and National Institute for Physiological Sciences. In June, 1978, the introduction of two sets of HITAC M-180 was decided, and the service was started in January, 1979. The fully automated unmanned operating system was installed in September of that year. It was the first system of this kind in Japan and probably in the world, and an uninterrupted week-long operation service was initiated. In April, 1980, the system was upgraded to HITAC M-200H and M-

180 and again in April, 1982 to two sets of M-200H. In January, 1986, a super-computer (HITAC S-810/10) was installed, which had been a molecular scientists' dream for a long time. At the same time, an upgrade to M-680H, which was famous for its best performance as a general-purpose computer at that time, came true. Since then, the scale of molecular science calculation has been steadily enlarged. In 1988, the super-computer (S-810/10) was replaced by a more powerful one (HITAC S-820/80), and in 1994, it was upgraded to NEC SX-3/34R, and also the general-purpose computer was replaced by a distributed processing system composed of NEC HSP and IBM SP2 cluster. As a result, all computers in the Center have come to work according to one operating system which is based on UNIX OS. In 1999, the general-purpose computer was replaced by NEC SX5 and IBM SP2 cluster, and then in 2000, the super-computer was also replaced by Fujitsu VPP5000 and SGI SGI2800. After that, in 2003, the general-purpose computer was replaced by NEC SX-7 and TX7. The total CPU performance is over 1TFLOPS.

Now the Center is not just a common facility for the Okazaki National Research Institutes. Many researchers of molecular and bio sciences around the world expect the Center to provide more convenient environment for large scale computing, and the staff members of the Center are working hard to respond to their expectations.

As of the year 2003, the Center staff is made up of the director (interlocking), one professor, one associate professor, six research associates and five technical staffs.

## 2. Services

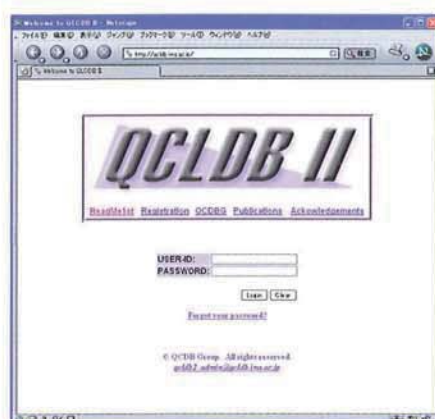
### 利用者サービス

#### バッチジョブ処理サービス

センターの利用は、バッチジョブでの利用が主体となっています。ユーザは、センター2階に設置されている端末室から、またはSINET やインターネット経由による機構外から接続し、プログラム開発やデータ処理など比較的負荷の少ない処理は会話処理が利用できますが、大規模計算処理の様な高負荷な処理はバッチジョブへ登録して利用が可能です。

#### Batch Processing Service

The main service of the Center is batch processing via workstations installed in a terminal room on the 2nd floor of the Center. You can also use the service via academic information network or INTERNET from outside the Center. You can also use the interactive processing service for jobs of low loading such as program development and data processing. But as for large scale computing, batch processing is more effective.



URL <http://qcldb.ims.ac.jp>

#### 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)

これらデータベースをWebからの利用を可能とするための環境整備も行っています。

#### Database Service

The following two databases have been registered as the databases of Institute for Molecular Science. Since the first stage of designing the QCLDB, the Center has participated in the project and even now takes part in the annual renewal. And also the QCLDB is in preparation for publishing on web page.

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

#### プログラムライブラリ

センター開設以来、ライブラリの収集と開発に努め、以下の様なベクトル型およびスカラー型計算機用のプログラムが登録されており、ユーザは自由に利用できます。

##### (a) 分子科学プログラムパッケージ

国内および国外の研究者から提供されたプログラム、ならびに (b) QCPEプログラムや (c) アプリケーションプログラムを現行システムに移植・最適化したものなど、全体で200件以上のプログラムが登録されています。

##### (b) アプリケーションプログラム

Gaussian03, Molpro2000などの最新の電子状態計算プログラムをはじめ、Amberなどの生体関連シミュレーションプログラムやBlastなどのゲノム検索プログラムが整備されています。

#### Program Library

The Center has been supporting collection and development of the library since its establishment, and the following programs for scalar and vector computers have been registered.

##### (a) Molecular Science Program Package

More than 200 programs in total have been registered including programs provided by foreign as well as domestic researchers, and those which have been installed from (b) Application programs to the current system and optimized.

##### (b) Application Programs

Not only quantum chemistry programs (1) but also bio simulation programs (2) are available for users.

- (1) Gaussian03, Molpro2000, etc.
- (2) Amber, Blast, etc.



URL <http://ccinfo.ims.ac.jp>

#### 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。センターネットワークは、機構ネットワークに接続されており、機構内の端末接続、実験データ、グラフィックデータの転送等に利用されています。さらに、外部ネットワークSINETを通じてインターネットに接続されており、機構外からの利用が可能となっています。センターの利用の手引きやセンターレポートなどの情報は、Webによって公開されており、センターのホームページより参照が可能です。

#### Network System

The servers of the Center are interconnected by gigabit Ethernet using optical fiber from the network switch and enable the high-speed data transfer. The Center network is connected with the network of Institute for Molecular Science via optical fiber, and used for terminal connections from research departments and research facilities, and for transferring experimental data and graphical data, etc. through the local area network in the Center. The system is also connected with INTERNET through the outside network SINET, so you can use it from outside the institutes. The latest information about the Center can be found on RCCS web page.

### 3. Resources

1

主なコンピュータの紹介

#### スーパーコンピュータシステム

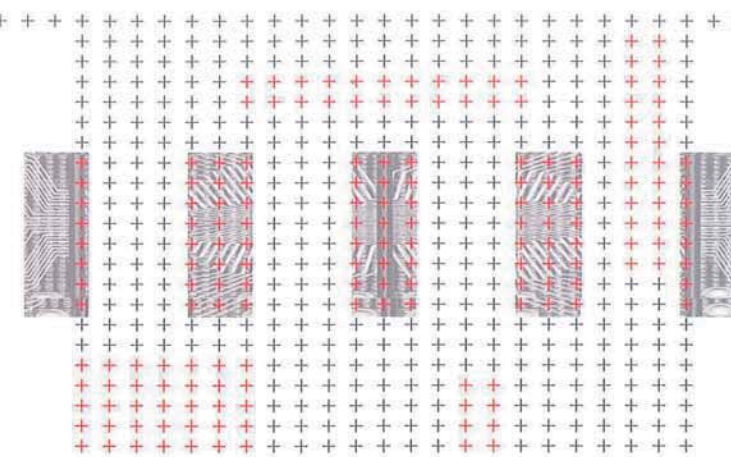


#### Fujitsu VPP5000

Fujitsu VPP5000 は、総理論演算性能 288 GFLOPS の分散メモリ型ベクトル並列コンピュータで、システムは30PE (Processor Element) から構成されています。3GBから16GBの主記憶を利用した電子構造計算、量子反応動力学計算をはじめ、MPI等のメッセージパッシングライブラリにより8PE以上の演算器を用いた大規模なベクトル並列計算が実行されています。総主記憶容量は256 GBで、周辺装置として、約 3TB のRAIDディスク装置を装備し、大容量のディスクを要求する分子動力学計算及び量子波束計算にも利用されています。

#### Fujitsu VPP5000

Fujitsu VPP5000 has a vector-parallel architecture, providing you the performance up to 288 GFLOPS using 30 processor elements (PEs). With this supercomputer, a large scale calculation can be performed; for example, a quantum chemistry calculation which would need 3 to 16 GB memory and also a high-performance computing based on the message-passing library (MPI) in which more than 10 PEs would be needed. Total main memory is about 256 GB, and as a peripheral configuration the system has about 3 TB RAID disk device which provides you a huge amount of storage. For the researchers of molecular simulation and wave packet dynamics, it is indispensable to store their results.



#### SGI SGI2800, Origin3800

SGI2800 は、総理論演算性能 115 GFLOPS の CC-NUMA 型の論理共有メモリ超並列コンピュータで、192 CPU から構成されており、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。また総主記憶容量は 192 GB を持ち、現在の構成では128GBまでの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。Origin3800は、総理論演算性能が102GFLOPSで、128CPUから構成されています。周辺装置として、約4TBのRAIDディスク装置を装備しています。

#### SGI SGI2800, Origin3800

SGI2800 is a super-parallel computer which consists of 192 CPUs, and the logical shared memory is provided by its CC-NUMA architecture. Its peak performance is about 115 GFLOPS and it can be used for large scale molecular dynamics calculation and Monte Carlo method such as protein structure simulation. The total memory size is 192 GB, but in practice it is limited up to 128 GB under the present configuration. It can be used for large scale calculation of electronic state. On the other hand, Origin 3800 consists of 128 CPUs and has 128 GB memory. Its peak performance is 102 GFLOPS. As a peripheral configuration, the system has about 4 TB RAID disk device.

### 3. Resources

2

#### 主なコンピュータの紹介

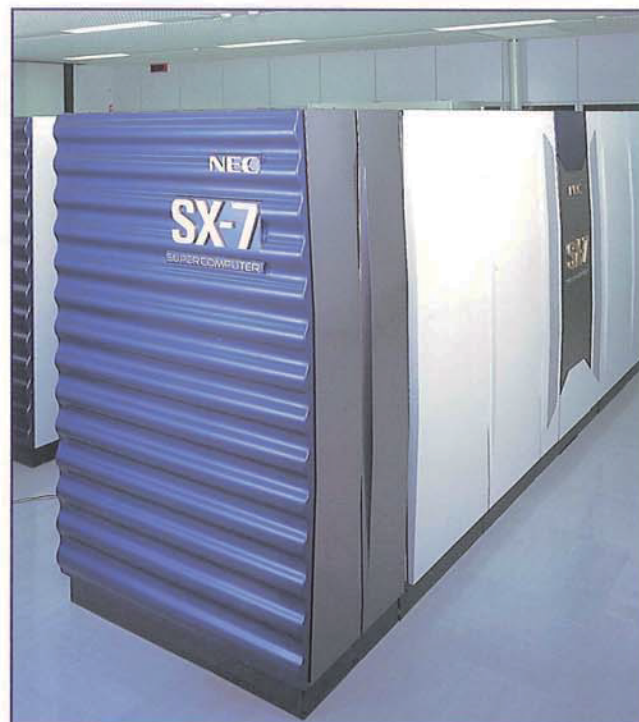
#### 汎用高速演算システム

##### NEC SX-7

NEC SX-7 は、総理論演算性能282GFLOPSの演算速度をもつ共有メモリ型ベクトル並列コンピュータで、主記憶として256GBを持ち、Fujitsu VPP5000と同じベクトル型演算器をもち、分散型メモリ環境では並列化が困難な大規模プログラムを高速に処理することができます。周辺装置として、約4.5TBのRAIDディスク装置を装備しています。

##### NEC SX-7

NEC SX-7 is a vector-parallel computer which provides you the performance up to 282 GFLOPS and a shared memory of 256 GB. It has a vector computing unit just like VPP5000, and enables high-speed processing of large scale programs which is difficult to be parallelized in distributed memory system. About 4.5 TB RAID disk device is also available in this system.



##### NEC TX7

NEC TX7 は、総理論演算性能332GFLOPSの演算速度をもつ共有メモリ型スカラ並列コンピュータです。1ノードに32CPU、128GBのメモリを装備し、2ノード構成されています。スカラ処理が早さを生かした小規模なジョブや共有メモリを生かした大規模並列ジョブの実行が可能です。周辺装置として、約3TBのRAIDディスク装置を装備しています。利用者が研究室で使用している環境に近いIntel Itanium2 CPUでLinux OSを使用しています。

##### NEC TX7

NEC TX7 is a scalar parallel computer with shared memory. Its peak performance is 332 GFLOPS. It consists of 2 nodes, each of which has 32 CPUs and 128 GB memory. You can use this machine for executing rather small jobs and also large scale parallel jobs. As a peripheral configuration, the system has about 3 TB RAID disk device. It is mounted with Intel Itanium2 CPU and installed Linux OS.



##### フロントエンドサーバ

フロントエンドサーバは、NEC TX7 の2CPU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。スーパーコンピュータシステムおよび汎用高速演算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。利用者が研究室で使用している環境に近いIntel Itanium2 CPUでLinux OSを使用しています。

##### Front-end server

NEC TX7 is a front-end machine of RCCS. Users are not allowed to enter directly to the supercomputers (VPP500, SGI2800, and so on) and the general purpose machines (SX-7 and TX7) and have to login to this machine first. The job-queuing system (JQS) of the Center is also controlled by this machine. It is mounted with Intel Itanium2 CPU and installed Linux OS.



##### ファイルサーバ

ファイルサーバは、PA-8600 CPUを採用したNEC TX7の1CPUモデル2台から構成されており、NFS機構によりスーパーコンピュータおよび汎用高速演算システムへ700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。約6TBの容量をもつRAID型磁気ディスク装置とテープバックアップ装置を持ち、高い信頼性で高速な入出力が可能です。

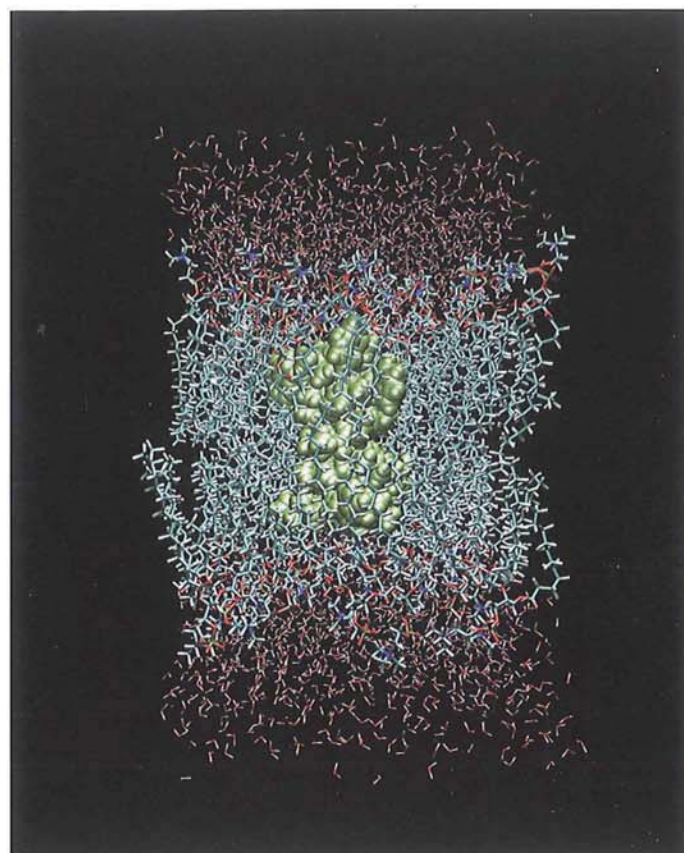
##### File Server

The file server consists of 2 sets of NEC TX7 (1 CPU model) with PA-8600 CPU. It is NFS-mounted and provides home directories for more than 700 users in the system of supercomputers and general-purpose computers. It has 6 TB RAID type disk device and backup tape device with high reliability and high-speed I/O performance.



## 4. Researches

研究成果の紹介

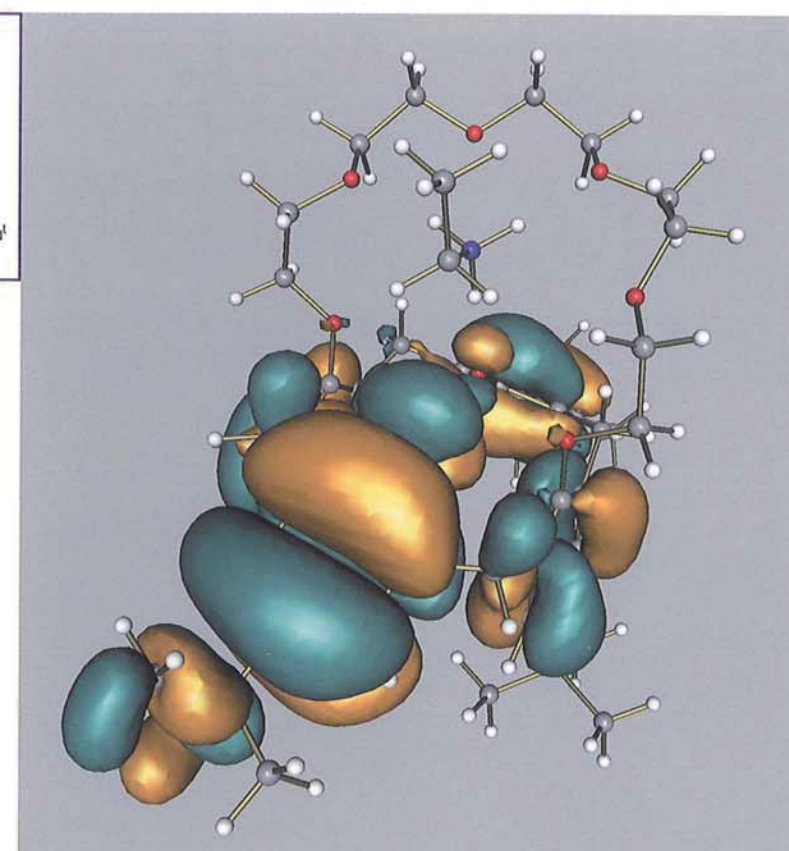
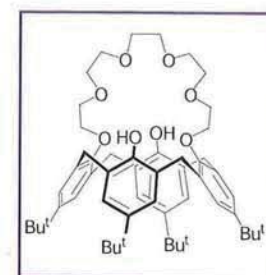


### 生体膜の分子動力学シミュレーション

生体系に対する分子動力学計算は、スーパーコンピューティングの科学への数ある応用の中でも最も興味深いもののひとつである。図は、水中にあるDMPC脂質二重層膜中のグラミシジンAのスナップショットである。グラミシジンAは、生体膜中ではイオンチャンネルとして働き、実際の生体系におけるより複雑なイオンチャンネルのモデルとしてよく研究されている。系を構成する分子の軌跡を分子動力学法を用いて追跡し、特にチャンネルの構造や動力学を分子レベルで詳細に解析している。

### Molecular Dynamic Simulation of Biomembrane

Molecular dynamics calculation of biosystems has been one of the most interesting applications of the supercomputation. The figure shows gramicidin A in DMPC lipid bilayer immersed in water. The gramicidin A in biomembrane works as an ion channel, which has been investigated actively as a primitive model for more complicated channels in real biosystems. Structure and dynamics of the channel have been analyzed in detail at a molecular level based upon a set of long-time molecular trajectories traced by the molecular dynamics calculation.



Highest Occupied Molecular Orbital (HOMO)

### 分子認識

ホスト-ゲスト化学はいろいろな系において重要な骨子として、研究者を魅了してきた。特に、生物系における多くの重要な過程で起る分子認識の理解にはホスト-ゲスト化学が欠かせないため、より複雑な生物系のシミュレーションがその中の一つである。つまり、酵素は分子結合のメカニズムを使って、気質を認識することができる。図に示す *p*-tert-butylcalix[4]crown-6-ether分子は、その一つの例である。Ethly ammonium cationと錯体をつくることを非経験的分子軌道法により研究された。[文献 Minamino, Choe, Chang, Mizutani, and Nanbu, Chem. Phys. Lett. 374,572(2003)]

### Molecular Recognition

The "host-guest" chemistry has fascinated researchers for a long time as a basic skeleton of a wide variety of intriguing supramolecular systems. Especially, one of them is the simplified simulation of much more complex biological systems, because it is indispensable for understanding the molecular recognition caused in many vital processes of the biological systems. In the other words, the enzyme can recognizes the substrates within its active sites by taking the molecular binding mechanism. The *p*-tert-butylcalix[4]crown-6-ether is one of the examples, as shown in the figure. The complex with ethyl ammonium cation was studied by *ab initio* molecular orbital calculations. [Minamino, Choe, Chang, Mizutani, and Nanbu, Chem. Phys. Lett. 374,572(2003)]

# 5. Operating status/research results

## 演算性能値の変遷と利用状況

表1. 演算性能値の変遷

History of the CPU performance in RCCS

年 Year	機種 Machine type	理論総演算性能 MFLOPS
1979	HITACHI M-180 ( x 2 )	36
1980	HITACHI M-180	18
	HITACHI M-200H	48
	Total	66
1982	HITACHI M-200H ( x 2 )	52
1986	HITACHI M-680H	16
	HITACHI S-810/10	315
	Total	331
1988	HITACHI M-680	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 x 24 )	6,912
	IBM SP2 ( Thin x 24 )	2,832
	NEC HSP	300
	NEC SX-3/34R ( 3 CPU )	19,200
	Total	29,244
1999	IBM SP2 ( Wide x 24 )	6,912
	IBM SP2 ( Thin x 24 )	2,832
	NEC SX-5 ( 8 CPU )	64,000
	NEC SX-3/34R ( 3 CPU )	19,200
	Total	92,944
2000	IBM SP2 ( Wide x 24 )	6,912
	IBM SP2 ( Thin x 24 )	2,832
	NEC SX-5 ( 8 CPU )	64,000
	Fujitsu VPP5000 ( 30 PE )	288,000
	SGI SGI 2800 ( 256 CPU )	153,000
	Total	514,744
2001	IBM SP2 ( Wide x 24 )	6,912
	IBM SP2 ( Thin x 24 )	2,832
	NEC SX-5 ( 8 CPU )	64,000
	Fujitsu VPP5000 ( 30 PE )	288,000
	SGI SGI 2800 ( 192 CPU )	115,200
	SGI Origin 3800 ( 128 CPU )	102,400
Total	579,344	
2003	NEC SX-7 ( 32 CPU )	282,560
	NEC TX-7 ( 64 CPU )	332,800
	Fujitsu VPP5000 ( 30 PE )	288,000
	SGI SGI 2800 ( 192 CPU )	115,200
	SGI Origin 3800 ( 128 CPU )	102,400
Total	1,120,960	

図1. 演算性能値の変遷

Fig. 1 History of the CPU performance in RCCS

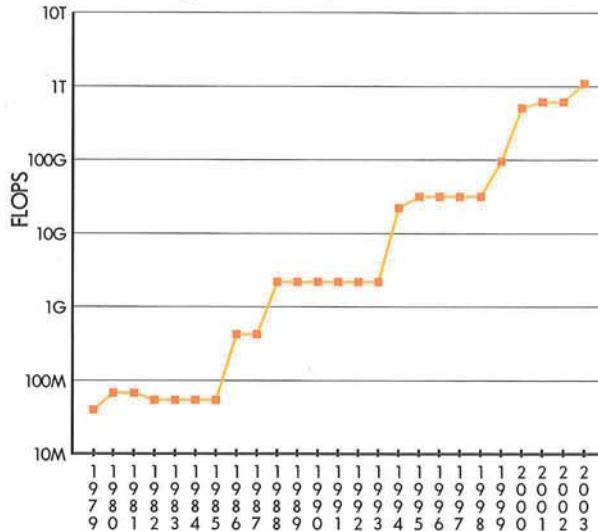
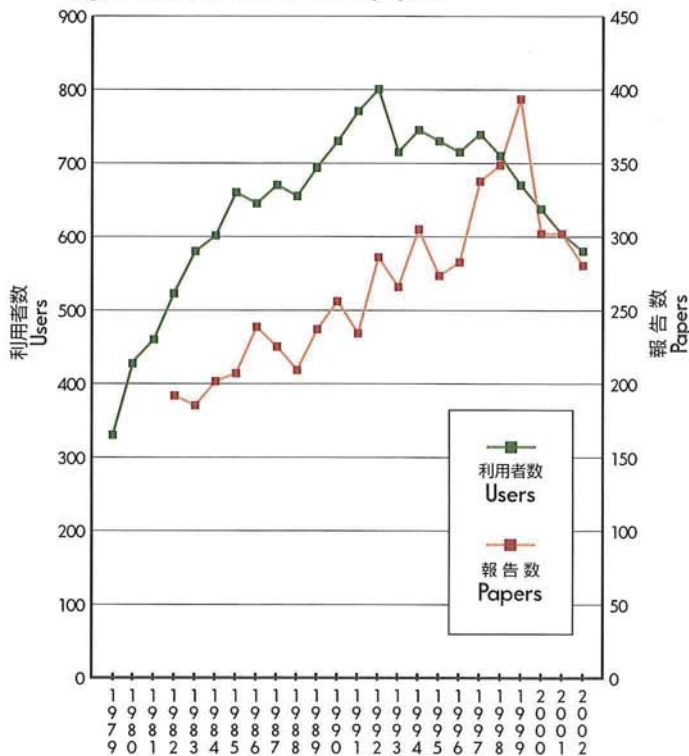


図2. 利用者数と研究成果報告数の変遷

Fig. 2 Number of users and papers



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

岡崎国立共同研究機構

Okazaki National Research Institutes

〒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

200310