

# RCCS移行説明会

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

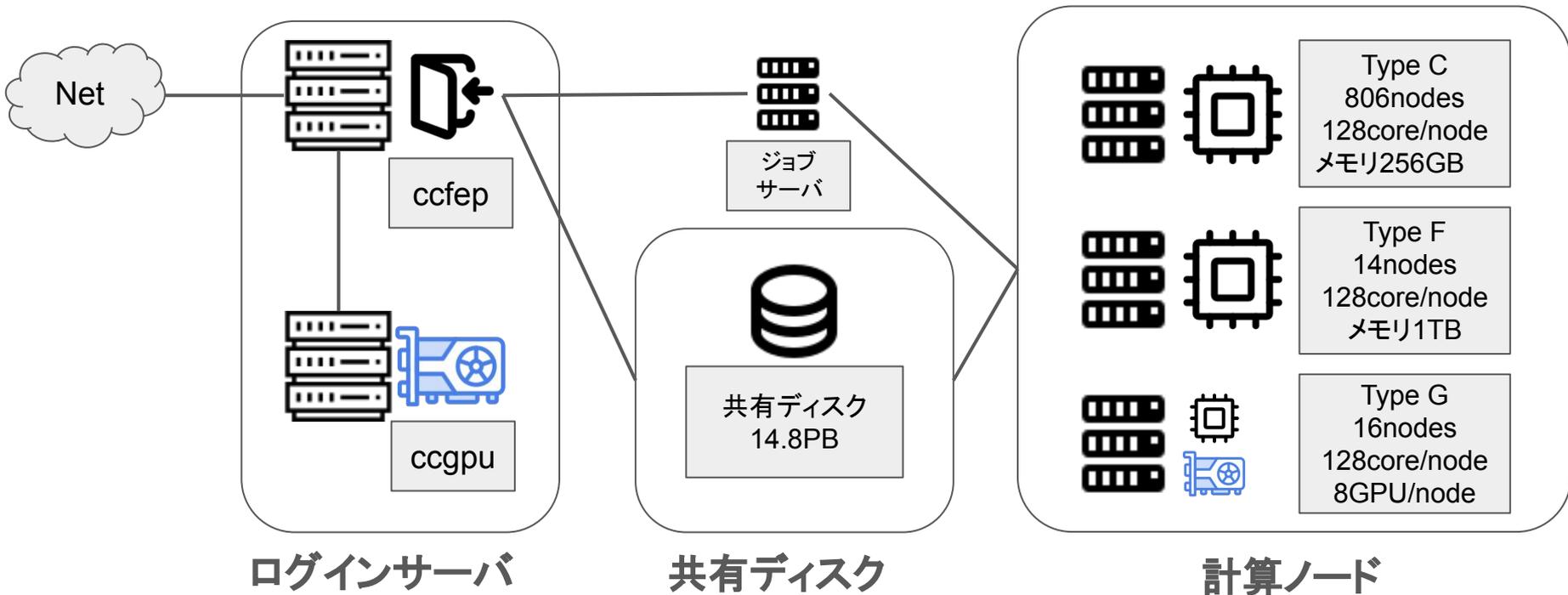
SINETメンテナンスのため、5/25(土) 0:00-1:30 AM の間に 15 分程度の通信断が最大 2 回発生します。通信断の間は ccfep や本ウェブサイトへのアクセスができなくなります。投入済のジョブには影響ありません。

続きを見る

公式サイト <https://ccportal.ims.ac.jp/>

# 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、旧BIASの利用者は原則として「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。  
2024年度後期は6月末日までに申請
  - 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。

# 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。

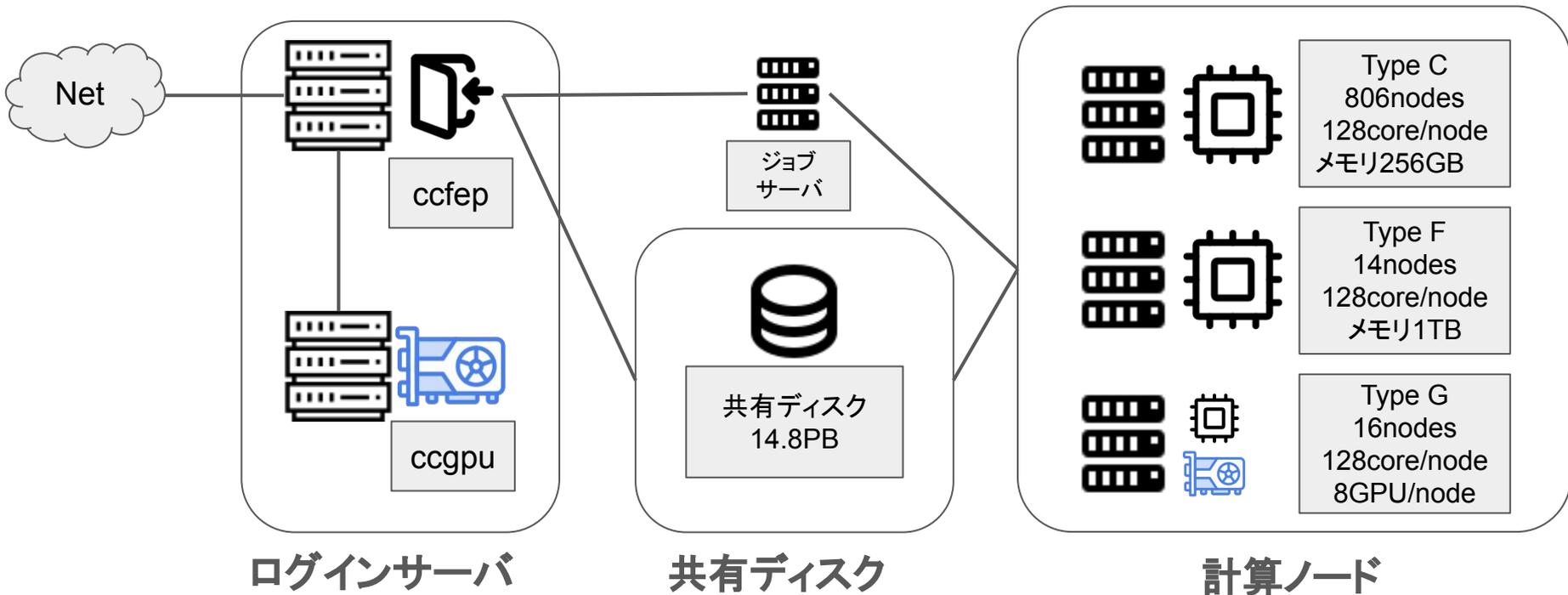
メンテナンス予定は ccportal に記載されています。

(閲覧にはログインが必要です)

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

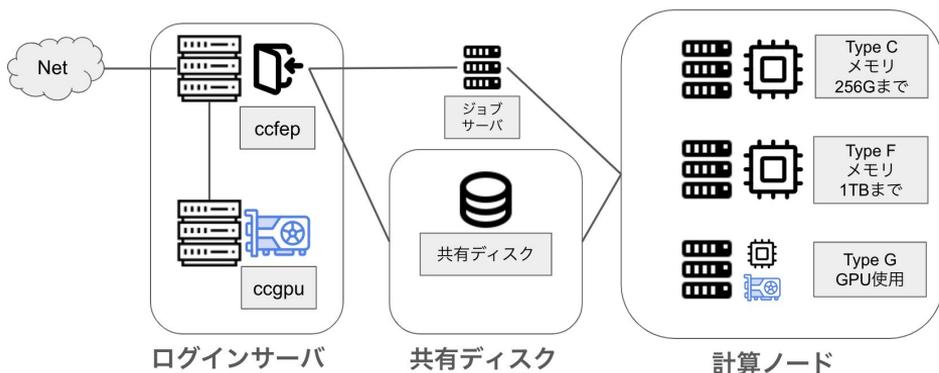
# RCCS構成図(模式図)

 : 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>

# RCCS構成図(模式図)



:対話型処理可



:ユーザーログイン不可

・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3種類あります。通常はTypeCが使用されます。大きなメモリが必要な場合はTypeF、gpuが必要な場合はTypeGを使用します。

・3TBまで使用できる大容量のメモリマシンは近日導入予定です。

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

## 分子研RCCSと基生研BIASの比較

	クラスター型	共有メモリ型	GPU	ストレージ
分子研	102,912 cores 200TB 総mem.	1TB x 14台  (3TB x 1台 を追加設置 予定)	8GPU x 16台(A100)	14.8PB
基生研	800 cores 3.9TB 総mem. 20台	3TB x 1台 4TB x 1台 512GB x 2台	(なし)	2.9PB

# 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

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>

# RCCSへのログイン

1) 公開鍵を生成する。

Terminalから ssh-keygen コマンドで鍵を作成する。Ed25519, ECDSA-384, ECDSA-256, RSA 4096 ビットが利用できる。

- ・Ed25519(推奨): ssh-keygen -t ed25519
- ・ECDSA-384: ssh-keygen -t ecdsa -b 384
- ・ECDSA-256: ssh-keygen -t ecdsa -b 256
- ・RSA 4096 ビット: ssh-keygen -t rsa -b 4096

2) 公開鍵を交換する。

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

# RCCSへのログイン

RCCSのウェブサイトブラウザを用いて接続する。

ccportal.ims.ac.jp

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

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 ▾

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

新型コロナウイルスのRNA依存性RNAポリメラーゼは、新型コロナウイルスの遺伝子を複製するタンパク質であり、その複製過程を分子動力学シミュレーションにより解析されています。RNAポリメラーゼには、RNAの5'末端のリン酸基と3'末端のヒドロキシル基との間で形成されるリン酸エステル結合を形成するリジン残基が、RNAの複製に重要な役割を果たしています。本研究では、リジン残基がRNAの複製にどのように関与しているかを解析しました。

S. Tanimoto, S. G. Itoh, and H. Okumura: Biophys. J. (2021), DOI: 10.1083/jcb.121.12.2611-2621

パスワードの設定がまだの場合、「パスワードの初期化」

パスワードの設定が完了している場合、  
ID:「3文字名アカウント」  
PASSWORD:  
「指定したパスワード」  
でログイン。

## RCCSへのログイン(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(公開鍵の交換)

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、公開鍵ファイルの交換は  
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

## bias5からのデータ移行

基本的には、BIAS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。ローカルでのSSH公開鍵と、bias5上でのSSH公開鍵は異なることに注意してください。

- SSH鍵作成をbias5上で実行
- RCCSのWeb上で公開鍵を登録
- bias5上から、ccfep.ims.ac.jp に scp -p コマンドでデータを移行  
(なお、RCCS→BIASへのコピーはできません)

# 分子生物学用アプリケーションとデータベース

- コマンド: `source /apl/bio/etc/bio.sh`
- bias5同様に`module`コマンドが使えます
- データベースへのパス: `/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

- **RCCSオリジナルのコマンドを利用**
  - 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
```
- 分子生物学アプリケーションの多くは、複数プロセス立ち上げや、複数マシンにまたがった計算を行いません
  - 使えるメモリ量はCPU数と計算ノードタイプに依存し、メモリ量を指定することはできません
  - メモリを余分に使おうとしてプロセスが落ちることはありません
  - キュー名の指定はありません

## (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)     |