

## 2022年度 計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業利用枠 利用募集

### 概要

2015年度より、東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所、自然科学研究機構分子科学研究所・計算科学研究センターの3研究所では、材料科学、物性科学、分子科学の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3分野に共通性の高い大規模並列計算を志向した大型プロジェクトを支援してきました。これまで支援対象となったものとして、文科省ポスト「京」重点課題、同じくポスト「京」萌芽的課題、スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム課題、JST科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業、元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>などがあります。

2022年度も引き続きこの目的を達成するため、計算資源の提供や計算技術・成果に関する情報交換などを通じて、計算物質科学を主なテーマとする大型プロジェクトの推進を支援していきます。

### 公募する計算機利用

計算科学研究センター計算機利用 計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業利用枠

### 計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業利用枠が利用可能なCPU資源

「全CPU資源の10%程度」とします。

2022年度の計算科学研究センターのCPU計算資源量は2.8億点を予定していますので、当センターにおいて計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業利用枠に配分可能なCPU資源は合計で2,800万点までです。

### 申請資格

1. 「富岳」成果創出加速プログラムのうち計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業プロジェクトとして認定を受けた課題の課題代表者
2. 計算科学人材育成コンソーシアム(PCoMS)の次世代若手研究者
3. 元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>の4拠点の課題代表者

### 認定条件

1. 国そのほかの公的機関が支援する大型プロジェクト（スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム、PCoMS、元素戦略に準ずる規模のもの）であり、かつ計算科学的手法による物質科学研究がそのテーマの主要な部分になっているもの。
2. 支援を受けた利用者グループが年1回開催される報告会で成果を報告できること。またその際の旅費を負担できること。

### 認定手続き

以下のホームページより様式をダウンロードし、必要事項を記入して [sccms-committee@sccms.jp](mailto:sccms-committee@sccms.jp) までお送りください。過去に認定された大型プロジェクトは新たに認定を受ける必要はありません。

提出期限は2021年12月3日(金)です。

<http://www.sccms.jp/overview/>

### 利用資格

上記の研究対象を推進する者で、国・公・私立大学及び国・公立研究所等の研究機関に所属している研究者及び大学院生（大学の6年制学部においては5,6年生を含む）。

### 申込方法

認定が必要な場合、初めに認定申請書を提出ください。

課題申請は、所定の様式に従い申請を行ってください。申請書はこの項下のリンクよりWord形式の様式を入手することができます。

- [2022年度申請書](#) [Word file: 66kB]

申請は、[sinsei@draco.ims.ac.jp](mailto:sinsei@draco.ims.ac.jp) (@を半角にして下さい) 宛にWordファイルを送付してください。なお、申し込みにあたり、各研究者について所属機関の長（大学の場合は研究科長等）の内諾が得られているものとします。

### 公募締切り日

2022年1月28日(金) 24時

### 審査等

申請の可否および計算資源の割り当てに関しては、計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業利用委員の審査に基づき計算科学研究

センター運営委員会において承認を行い、センター長が許可します。

## 利用期間

2022年4月6日（水）17:00 ～ 2023年4月3日（月）9:00

## 利用課金

許可された割当点数による課金管理を行います。利用料金は徴収しません。

## 利用報告書

次年度の初めに利用報告書をセンター長宛に提出して頂きます。

## 研究成果の公表

研究成果は原則公表するものとします。

センター利用による研究の成果が出版される場合には、「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電子計算機を利用した。」の旨を論文中に明記し、また、その別刷1部をPDFファイルの形式にて当センターあてに送付してください。

(例) The computations were performed using Research Center for Computational Science, Okazaki, Japan.

## 研究成果の取り扱い

自然科学研究機構のメンバーが関与していない場合の研究成果は弊機構に帰属しません。

## 申請上の留意点

1. 現行システムは2022年9月末頃まで稼働し、新システムは2022年12月初旬ごろに運用を開始する予定です。
2. 施設利用も申請されている場合の計算資源量
  - 申請点数の合算値が施設利用枠以内（施設利用Bであれば15,000,000点）となるようにしてください。もし施設利用枠を超えている場合には施設利用割当点数を調整させていただきます。
  - ディレクトリ容量はどちらの申請にも増加の希望が申請されていなければ施設利用と同様に/homeで一人当たり500GBが割り当てられます。どちらかの申請にて増加が希望されていればその値に、どちらの申請にも増加が規模されている場合はその合算値が割り当てられます。
3. 施設利用は申請されていない場合の計算資源量
  - 使用可能なディレクトリ容量は通常、/homeで一人当たり500GBが割り当てられます。それ以上を希望される場合は希望値と理由を記入して申請を行ってください。
4. 申請点数に応じて計算科学研究センターの施設利用の施設利用A、Bそれぞれと同じ扱いとします。例えば、30,000点であれば施設利用Aと等価に取り扱います。それより多い場合は、施設利用Bと等価に取り扱います。詳細は、計算科学研究センターホームページ上の、「[利用申請/報告に関する情報](#)」を参照してください。
5. 最大総申請点数は15,000,000点、最小申請点数は30,000点です。総枠制限のため、申請点数を調整させて頂く場合があります。
6. 申請で使用する点数は、システム毎に定められた課金係数に使用コア数またはノード数と経過時間をかけたものの合計になります。（下記のキュー係数表参照）
7. ディレクトリ容量やCPU点数が期間中に不足するような場合には追加申請が行えます。
8. 申請は、課題単位で行ってください。課題申請の中に複数の研究グループが含まれる場合は、研究グループ単位で申請点数等の利用希望を記述してください。
9. 同一研究者が、複数の研究グループに所属することはできません。

(現行システムの) キュー係数表

システム名	キュー係数	単位	備考
TypeNN	28	[点/(1ノード×1時間)]	1ノードは40コア
TypeNF	42	[点/(1ノード×1時間)]	1ノードは40コア
TypeC	1	[点/(1コア×1時間)]	GPUを使用する場合はTypeCの使用点数+下のGPUの使用点数
GPU(Tesla P100)	10	[点/(1GPU×1時間)]	
GPU(Tesla V100)	15	[点/(1GPU×1時間)]	

Attachment	Size
<a href="#">SCCMS-IMS-2022.doc</a>	65.5 KB

