

## 2019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年度より分子科学、物性科学、材料科学の3分野に関係する事業として、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題についての検討委員会によりポスト「京」重点課題アプリケーション開発（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、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 基礎科学の挑戦・複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求）が設定され、さらにJSTの科学技術人材育成の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、また元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>も開始されました。これらの新しいプロジェクトの開始を受け、上記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支援し、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大物性研、東北大金研、分子研の3研究所で「計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業」を立ち上げることとなりました。これを受け、当センターでは、2016年度より全CPU資源の20%を上限とする「計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業利用枠」を設置することといたしました。

### 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20%を上限」とします。

2019年度の計算科学研究センターのCPU計算資源量は2.9億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5800万点までです。

### 研究対象

以下に列記する計算科学研究を対象とします。

1. ポスト「京」重点課題アプリケーション開発 「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）」のサブ課題
2. ポスト「京」重点課題アプリケーション開発 「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）」のサブ課題
3. ポスト「京」萌芽的課題アプリケーション開発 「萌芽的課題 基礎科学の挑戦・複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」のサブ課題
4. 科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業 「計算物質科学人材育成コンソーシアム」の次世代若手研究者による研究課題
5. 元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>における各プロジェクトの研究課題

\* 計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業利用枠は代表者として上記の1～5の中から、1つの枠からしか申請することはできません。

### 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

上記の研究対象の課題責任者が、利用を希望する研究担当者の情報を纏め、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。

- ▶ [2019年度申請書](#) [Word file: 86kB]
- ▶ [2019年度申請書の記入例](#) [Word file: 94kB]
- ▶ [2019年度募集要項（本文章と同じ）](#) [Word file: 50kB]

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。

### 申込期間

2018年12月1日（土）～ 2019年1月31日（木）

### 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

2019年4月3日（水）17:00～ 2020年4月6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。用紙は別途送付します。

### 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. 昨年度からの変更点
  - ▶ FX10が廃止になりました。
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）となるようにして下さい。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頂きます。
  - ▶ 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、/saveはグループ全体でそれぞれ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、/saveはグループ全体でそれぞれ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. 最小申請点数は30,000点です。
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、課題単位で行って下さい。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下さい。
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。

キュー係数表

システム名	キュー係数	単位	備考
TypeNN	28	[点/(ノード数×時間)]	1ノードは40Core
TypeNF	42	[点/(ノード数×時間)]	1ノードは40Core
TypeC	1	[点/(Core数×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
TypeCA(GPU)	10	[点/(GPU数×時間)]	