

2020年12月17日

筑波大学計算科学研究センター学際共同利用 2021年度公募

計算科学研究センター（以下 センター）では、下記のスーパーコンピュータを運用しています。

・メニーコア（Knights Landing アーキテクチャ）搭載スパコン Oakforest-PACS (OFP)。2017年4月より本格運用、25 PFLOPS、東京大学情報基盤センターと筑波大学計算科学研究センターが共同運営する最先端共同 HPC 基盤施設が運用。以下では、OFP と呼ぶ。

・NVIDIA 社 V100 GPU と Intel 社 Stratix10 FPGA を搭載した多重複合型スパコン Cygnus。2019年5月より運用開始。総ピーク演算性能約 2.4 PFLOPS（倍精度浮動小数）、ノード当たり 30 TFLOPS（同）の超高性能演算ノードを持つ。

センターでは、全国の学際的計算科学の発展に資するべく「学際共同利用プログラム」を実施し、OFP の筑波大運用計算資源の約 30%（全資源の約 10%）、Cygnus 全計算資源の約 50%を本プログラムに供します。

学際共同利用についての詳細は、本センターホームページ

<https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/kyodoriyou/gakusai>

に記載されています。以上をご了承の上、奮ってのご応募をお待ち申し上げます。

筑波大学計算科学研究センター長
朴 泰祐

日程

公募期間：	2020年12月17日～2021年1月24日 24:00 メンバー登録は1月31日 24:00まで可能
採択決定通知：	2021年3月23日
利用期間：	2021年4月1日～2022年3月31日
報告書提出：	2022年4月
成果報告会：	2022年秋頃

1 学際共同利用プログラム

本センターの学際共同利用プログラムは、大規模計算を必要とする革新的研究課題、異分野間連携を推進する研究課題に加えて、本センターのスタッフと共同で推進する研究課題を公募する。2021年度公募する研究分野は、科学分野として、素粒子分野、宇宙分野、原子核分野、物質科学分野、生命分野、地球環境分野、生物分野、化学分野、計算機工学分野として、超高速計算システム分野、計算情報学分野、数値解析分野である。

2 成果報告会

学際共同利用採択プロジェクトは、1年間のプロジェクト終了後に開催されるシンポジウム CCS International symposium “Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences” における成果報告が義務づけられている。例年、秋頃に開催される。

3 計算機使用料

学際共同利用の計算機使用料は無料とする。

4 利用可能計算資源と計算規模

4.1 Oakforest-PACS について

Oakforest-PACS (OFP) は筑波大学と東京大学が共同運営する最先端共同 HPC 基盤施設 (Joint Center for Advanced High Performance Computing, 以下 JCAHPC) が運営する超並列型メニーコアアーキテクチャクラスターである。OFP は JCAHPC の下、両大学によって共有されるが、筑波大学計算科学研究センター学際共同利用においては、総リソースの約 10% を充てる。

OFP のシステム概要・ハードウェア諸元については以下を参照。

URL: <https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/supercomputer/#OFP>

OFP の利用方法の詳細については、「Oakforest-PACS 利用の手引き」(プロジェクト採択後にアクセス方法を通知) を参照のこと。

4.1.1 共同利用ユーザのアクセス範囲

OPF では、システムの利用単位はノードであり、1 ノード上に複数ジョブが実行されることはない。すなわち、各ジョブは割り当てられたノード内の全てのリソースを利用することができる。1 つのジョブで複数ノードを利用する場合、MPI による並列プログラミングを行うことが推奨されるが、単一ノードで実行可能なタスクを複数のノードで同時実行するような使い方もできる。割り当てられたバジェットはノード単位で消費される。

各プロジェクト（研究課題）において、同時利用可能な最大ノード数及び総計算時間は課題申請及び審査結果に基づいて決定される。ファイルシステムに関しても、各プロジェクトの利用最大容量には制限が課される。なお、計算ノードの利用はプロジェクト実施の年度末で終了するが、OPF のログインノードへのログイン及びファイルシステムへのアクセスについては、プロジェクト終了の年度末後の1ヶ月間（4月末まで）は許可される。各プロジェクトのユーザはこの1ヶ月以内に全てのファイルを引き上げる必要がある。この期間を過ぎた時点で、終了プロジェクトの全ファイルは消去される。

4.1.2 利用可能計算機資源

以下、並列ジョブを実行する単位（何台のノードを計算に利用するか）を「並列環境(PE)」と呼ぶ。最大で2048 ノード単位の PE が利用可能である。今回の募集では、2021 年度を通して合計約 7,000,000 ノード時間を利用する課題申請を募集する。なお、OPF では最大で 8208 ノードまでの超大型ジョブを実行することが可能であるが、このためのプログラムは特別利用として別途扱い、学際共同利用では取り扱わない。

4.1.3 計算時間

並列処理に利用する計算ノード数に関わらず、全てのジョブの最大計算時間はジョブ当たり 24 時間までである。これは CPU 利用時間（user time）ではなく、並列処理の同期・通信時間やファイルアクセスの時間を全て含んだ wall clock 時間（elapsed time）である。

各プロジェクトに与えられる総計算時間（計算ノード数×計算時間）は「バジェット」と呼ばれる。1 つのジョブが終了する度に、そのプロジェクトのバジェットから、ジョブが利用した計算ノード数×計算時間が減算され、バジェット残高がゼロになった時点で、当該プロジェクトのジョブの投入は禁止される。各プロジェクトに属するユーザは当該プロジェクトのバジェットを共有し、プロジェクト内のどのユーザがジョブを実行しても、バジェットは減算される。ただし、重要なシステム上の障害等によって、ユーザジョブが不慮の中断を余儀なくされた場合、当該ジョブのバジェットはプロジェクトのバジェットに差し戻される。

4.1.4 ディスク割り当て

各プロジェクトが使用可能なファイルサーバ上のディスク領域は、標準で 20TB である。ただし、特にプロジェクトの性質上より多くのディスク領域が必要な場合は、必要な容量とその容量が必要な理由を申請書に記入すること。また、前年度より継続しているプロジェクトについては、原則として前年度に最終的に利用可能であったディスク容量を継続して利用することができる。その場合は、前年度にその容量が認められていた旨を申請書に記述すること。ディスク容量の決定は共同研究委員会の判断により、申請した値より削減される場合がある。

4.2 Cygnus について

Cygnus は、筑波大学計算科学研究センターが運営する、GPU と FPGA を同一ノード内に搭載する多重複合型スパコンである。筑波大学計算科学研究センター学際共同利用に対して、総リソースの約 50%を充てる。

Cygnus のシステム概要・ハードウェア諸元については以下を参照。

URL: <https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/supercomputer/#Cygnus>

Cygnus の利用方法の詳細については、「Cygnus 利用の手引き」(プロジェクト採択後にアクセス方法を通知)を参照のこと。

4.2.1 共同利用ユーザのアクセス範囲

Cygnus では、システムの利用単位はノードであり、1 ノード上に複数ジョブが実行されることはない。すなわち、各ジョブは割り当てられたノード内の全てのリソースを利用することができる。1 つのジョブで複数ノードを利用する場合、MPI による並列プログラミングを行うことが推奨されるが、単一ノードで実行可能なタスクを複数のノードで同時実行するような使い方もできる。割り当てられたバジェットはノード単位で消費される。

各プロジェクト(研究課題)において、同時利用可能な最大ノード数及び総計算時間は課題申請及び審査結果に基づいて決定される。ファイルシステムに関しても、各プロジェクトの利用最大容量には制限が課される。なお、計算ノードの利用はプロジェクト実施の年度末で終了するが、Cygnus のログインノードへのログイン及びファイルシステムへのアクセスについては、プロジェクト終了の年度末後の 1 ヶ月間(4 月末まで)は許可される。各プロジェクトのユーザはこの 1 ヶ月以内に全てのファイルを引き上げる必要がある。この期間を過ぎた時点で、終了プロジェクトの全ファイルは消去される。

4.2.2 利用可能計算機資源

Cygnus では、最大で 78 ノード単位の PE が利用可能である。今回の募集では、2021 年度を通して合計約 320,000 ノード時間を利用する課題申請を募集する。Cygnus の計算ノード数は全 80 台であり、全てのノードに CPU 及び GPU が搭載される。さらに、80 台中 32 台のノードにはこれらに加え FPGA が搭載される。FPGA を利用するプロジェクトは、上記とは別のカテゴリー(FPGA)として課題募集する。

4.2.3 計算時間

並列処理に利用する計算ノード数に関わらず、全てのジョブの最大計算時間はジョブ当たり 24 時間までである。これは CPU 利用時間(user time)ではなく、並列処理の同期・通信時間やファイルアクセスの時間を全て含んだ wall clock 時間(elapsed time)である。

各プロジェクトに与えられる総計算時間(計算ノード数×計算時間)は「バジェット」と呼ばれる。1 つのジョブが終了する度に、そのプロジェクトのバジェットから、ジョブが利用した計算ノード数×計算時間が減算され、バジェット残高がゼロになった時点で、当該プロジェクトのジョブの投入は禁止される。各プロジェクトに属するユーザは当該プロジェクトのバジェットを共有し、プロジェクト内のどのユーザがジョブを実行しても、バジェットは減算される。ただし、重要なシステム上の障害等によって、ユーザジョブが不慮の中断を余儀なくされた場合、当該ジョブのバジェットはプロジェクトのバジェットに差し戻される。

4.2.4 ディスク割り当て

各プロジェクトが使用可能なファイルサーバ上のディスク領域は、標準で 15 TB である。ただし、特にプロジェクトの性質上より多くのディスク領域が必要な場合は、必要な容量とその容量が必要な理由を申請書に記入すること。ディスク容量の決定は共同研究委員会の判断により、申請した値より削減される場合がある。

4.2.5 Cygnus-FPGA 部の利用について

Cygnus の FPGA 部を利用するプロジェクトは、筑波大学計算科学研究センター・高性能計算システム研究部門との共同研究プロジェクトとして実施する。この共同研究プロジェクトでは研究代表者または共同研究者として最低 1 名、高性能計算システム研究部門の教員を含めることとし、当該教員との協議で研究内容を定めた上で、研究計画書の中にその教員の役割分担を明記する必要がある。

5 申請・利用条件

5.1 申請資格

プロジェクト申請代表者は、次のいずれかに該当する者とする。

1. 筑波大学の役員及び職員、学生（科目等履修生、研究生、特別聴講学生及び特別研究学生を含む）、研究員、企業等共同研究員
2. 国内の大学（大学院大学及び短期大学）、下記のグループ A に属する国の大学、高等専門学校及び大学共同利用機関の教員、学生及びこれに準ずる者
3. 学術研究及び学術振興を目的とする国又は自治体が所轄する機関（下記のグループ A の国の機関を含む）に所属し、研究に従事する者
4. 特に、センター長が利用を認めた者

5.2 利用資格

上記の 1. から 4. に該当する者に加え、企業の研究者についても、計算により得られた成果を公開する場合に限り、共同研究者として利用が可能である。プロジェクト申請代表者は、企業の研究者を共同研究者に含める場合、成果の公開に関する確約を予め得ることが必要である。

国籍に関わらず、海外の研究機関等に在籍する研究者については、下記のグループ A に指定されている国の機関に在籍する者は、所定の手続きを経て利用を認める。手続きの詳細は、共同研究運用委員会に問い合わせること。

<グループ A> 下記ページに記載の「輸出令別表第 3 の地域」に該当する国。

<https://www.meti.go.jp/policy/anpo/anpo03.html#howaitokoku>

2020 年 12 月現在、以下の地域が当てはまります。ただし、変更される可能性があります。

アルゼンチン、オーストラリア、オーストリア、ベルギー、ブルガリア、カナダ、チェコ、デンマーク、フィンランド、フランス、ドイツ、ギリシャ、ハンガリー、アイルランド、イタリア、ルクセンブルク、オランダ、ニュージーランド、ノルウェー、ポーランド、ポルトガル、スペイン、スウェーデン、スイス、英国、アメリカ合衆国

5.3 HPCI を通した利用申請者について

OFP および Cygnus は、学際共同利用とともに HPCI への申請による利用が可能であり、筑波

大学計算科学研究センターとしては、学際共同利用と HPCI の双方を通じた効率の良い資源提供を目指している。この観点から、学際共同利用とともに、関連した研究で HPCI への申請を行った課題に対して、後者の採否に関わらず、学際共同利用の配分時間を全て消費した後の追加配分などでインセンティブを付与することがある。学際共同利用プロジェクト申請代表者が、OFP および（または）Cygnus の HPCI を通した利用申請において課題（副）代表者であることを条件とする。

HPCI を通した利用申請については、以下の URL を参照。

<http://www.hpci-office.jp>

6 プロジェクトの申請

6.1 公募時期と利用期間

公募期間は、2020 年 12 月 17 日～2021 年 1 月 24 日である。本公募の採択プロジェクトの決定は、2021 年 3 月 23 日を予定しており、利用期間は 2021 年 4 月 1 日より 2022 年 3 月 31 日までである。

6.2 申請カテゴリーと申請フォーム

OFP および Cygnus の GPU 部のみを利用するプロジェクトは、申請規模に応じて以下のように 3 つのカテゴリーに分類する。MCRP-L については、プロジェクトの主目的は「プロダクトラン」に限るが、MCRP-M/S については「コード開発」を主目的とする申請も認める。OFP と Cygnus を併用するプロジェクトは、一つの申請フォームに 2 つの内容を併記することとし、申請書を 2 つ提出する必要はない。MCRP-L については、プロジェクトの主目的は「プロダクトラン」に限る。Cygnus の FPGA 部を利用するプロジェクトは、これらとは別のプロジェクトとして申請書を作成する。このプロジェクトは、筑波大学計算科学研究センターとの「共同研究プロジェクト」として実施するため、申請書「MCRP-FPGA」のフォームを用いて作成する。

(1) MCRP-L (大型), 申請書言語：英語

OFP: 申請可能最大ノード時間積：1,000,000 ノード時間

Cygnus: 申請可能最大ノード時間積：50,000 ノード時間

(2) MCRP-M (中型), 申請書言語：英語または日本語

OFP: 申請可能最大ノード時間積：300,000 ノード時間

Cygnus: 申請可能最大ノード時間積：20,000 ノード時間

(3) MCRP-S (小型), 申請書言語：英語または日本語

OFP: 申請可能最大ノード時間積：50,000 ノード時間

Cygnus: 申請可能最大ノード時間積：5,000 ノード時間

(4) MCRP-FPGA (Cygnus FPGA 利用), 申請書言語：英語または日本語

Cygnus: 申請可能最大ノード時間積：10,000 ノード時間

6.3 プロジェクトの申請方法

申請はオンライン申請となる。別ファイルのオンライン申請の手引きを参照すること。上記の申請規模に応じて申請フォームが異なるので注意すること。

6.4 申請に関する注意事項

6.4.1 申請数の制限

プロジェクト代表者としての申請は1課題まで、プロジェクト・メンバーとしては、代表となっている課題も含めて3課題までとする。同一のプロジェクトにおいて、OFPとCygnusを併用することは可。また、CygnusのFPGA部を利用する共同研究プロジェクトは、別枠として取り扱い、この申請数制限は適用しない。

6.4.2 特記事項

MCRP-Lで不採択となった課題は、MCRP-M/Sのカテゴリーで再審査し、中小規模の計算資源を提供する場合がある。

7 応募プロジェクトの審査

共同研究委員会は、申請書類の書面審査を行い、採否および配分計算資源量を決定する。

共同研究委員会の構成

分野	素粒子	宇宙	原子核	物質	生命	地球	生物	計算機
センター内委員	1	1	1	1	1	1	1	1
センター外委員	3	2	2	2	2	2	2	2

MCRP-S および MCRP-FPGA の申請は、センター内委員のみで審査する。また、必要に応じて国内外の研究者に書面審査を依頼する場合がある。

8 旅費および研究集会開催の補助

8.1 プロジェクト研究実施・プロジェクト研究成果発表

プロジェクト研究実施のためにセンターに滞在する必要がある場合は、共同利用旅費を申請することができる。また、学際共同利用で得られた成果を発表するための国内外旅費を申請することができる。成果発表の際、学際共同利用で得られた結果である旨の謝辞を明記すること。

8.2 研究集会開催支援

プロジェクト研究実施に必要な研究集会をセンター主催で開催し、その支援をセンターに申請することができる。また、研究集会開催に際し、研究者の招聘およびアルバイト等の短期雇用の申請を行うことができる。ただし、センターに所属しないプロジェクト代表者が申請する場合には、センター内の担当者を置くこととする。

8.3 申請方法

センターに所属しないプロジェクト代表者が上記の補助を希望する場合は、ホームページの

全国共同利用／共同研究支援のページにある申請書に必要事項を記入の上、実施の2ヶ月以上前までに、下記に添付ファイルとしてメールで送ること。

送付先：project-shien@ccs.tsukuba.ac.jp

9 成果公開・共同利用ユーザの義務

1. プロジェクトに採択された者は、センター主催のユーザズミーティングやシンポジウムで研究成果・進捗状況の報告を行い、年度毎に報告書を提出するものとする。ただし、国内に課題参加者がいないプロジェクトについては、シンポジウムでの研究成果・進捗状況の報告を免除することがある。
2. プロジェクトによって得た結果を学術雑誌、学会発表、プレスリリース等で発表する際には、筑波大学計算科学研究センター学際共同利用プログラムによったことに言及すること。例については、「学際共同利用」謝辞の手引きを参照のこと。

学際共同利用謝辞の手引き：

<http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/kyodoriyou/gakusai/acknowledgement>

10 共同利用ユーザの管理

1. 共同利用ユーザの管理は、プロジェクト毎に定める **group id** と、ユーザ毎に定める **user id** によるものとする。
2. OFP では、**group id** 及び **user id** はセンター側が機械的に決定する。Cygnus では、**group id** は、プロジェクト申請者が申請時に希望名を記載し、必要に応じセンター側で変更を加えた上、決定するものとする。**user id** はアカウント登録システムからユーザ自身の作業によって決定される。
3. 複数のプロジェクトに属するユーザの **user id** は、同一である。ホームディレクトリはプライマリグループの1つのみとし、作業用の **work** ディレクトリについてはプロジェクト毎に準備される。
4. 認証は公開鍵認証のみ許可する。ユーザはアカウント登録システム上でのアカウント登録時にパスワードが設定された秘密鍵に対応する自身の公開鍵を登録する。
5. 終了したプロジェクトに属するユーザのアカウントは、プロジェクト終了後1ヶ月を後処理のための期間として継続することとし、2ヶ月経過時点で残存ファイルとともに消去する。以上の旨を、プロジェクト終了時点で、当該ユーザに通知する。

11 その他

- ・ 不慮の事故によって利用者のプログラムやデータが破損、消滅する場合があるので、計算機の利用に当っては、この点に十分留意し、バックアップなどの事前の策を講じること。
- ・ センター側で必要と判断される場合（障害発生時の障害発生原因追求などの時）は、利用者のソースコードの開示をその目的に限って求めることがあるので、協力すること。

12 技術事項に関する問い合わせ先

共同利用に関わる計算機の技術事項についての問い合わせは、共同利用サポート担当委員が受け付けるので、project-support@ccs.tsukuba.ac.jp へ電子メールにて連絡のこと。

〒305-8577 茨城県つくば市天王台 1-1-1
筑波大学計算科学研究センター
共同研究運用委員会