

# 筑波大学計算科学研究センター 学際共同利用 平成 21 年度前期 公募

計算科学研究センター（以下 センター）では、平成 17 年度より 3 年計画で特別教育研究経費による拠点形成事業「計算科学による新たな知の発見・統合・創出」（平成 17 年度～19 年度）を推進し、超並列計算機システム PACS-CS (Parallel Array Computer System for Computational Sciences, ピーク性能 14.4TFLOPS) を開発・製作しました。また、2007 年に発足した「T2K Open Supercomputer Alliance」の下、新スパコンとして T2K-Tsukuba (ピーク性能 95TFLOPS) を導入しました。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、PACS-CS 全体と T2K-Tsukuba の約半分の計算機資源を共同利用に供することになりました。公募プログラムとして、従来の学際開拓プログラム、重点課題推進プログラム、その他、センターの研究グループとの共同研究を目的とした共同研究推進プログラムが新たに加われました。共同研究推進プログラムにおいては、PACS-CS、T2K-Tsukuba および融合型宇宙シミュレータ FIRST の利用が可能です。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 <http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/ccs/kyoudou/> の「学際共同利用案内」に記載されています。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  
佐藤 三久

## 1 学際共同利用プログラム

本センター学際共同利用プログラムは、学際開拓プログラム、重点課題推進プログラム、共同研究推進プログラムからなる。

### 1.1 学際開拓プログラム

学際開拓プログラムは異分野間連携に重点を置いて行う研究の推進を奨励するものである。学際開拓プログラムで公募する分野は、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、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。このプログラムは、申請の段階で、連携を具体化して申し込むことができるが、申請段階では具体的な連携が出来上がっていない場合であっても、連携を強く要望し、その効果が十分見込まれるプロジェクトについては、センター学際共同利用プログラム支援委員会が連携のコーディネート支援を行う。

<学際開拓プログラムの例>

1. 原子核・物質科学分野と生命分野が連携し、RS-DFT(実空間密度汎関数法)における超並列化の研究を行う。1000 ノード規模までスケールするナノ領域のアプリケーションを開発する。

2. 計算素粒子物理におけるアルゴリズムとプログラミングの研究。数値解析分野と連携し、最新の数値計算アルゴリズム技術を用いて、C++のオブジェクト指向による生産性の向上のライブラリ開発を行う。
3. 生命物理分野と情報科学分野（データベース，論理計算）が連携し，ゲノム・ワイドなデータに基づく生体情報分子間の相互作用ネットワーク・システムのダイナミクスを研究する。

## 1.2 重点課題推進プログラム

重点課題推進プログラムは，大規模計算によって探究すべき計算科学の重点課題を推進するものである。このプログラムは，PACS-CS または T2K-Tsukuba の計算時間を集中配分することで初めて可能になる革新的な課題の推進を奨励するものである。その性格上，PACS-CS または T2K-Tsukuba を用いることの明確な根拠が求められる。重点課題推進プログラムで公募する分野は，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，生物分野である。

## 1.3 共同研究推進プログラム

学際共同研究推進プログラムは，本センターのスタッフと共同で，自然科学や工学等における計算科学的手法の開発や先端研究を推進するものである。本プログラムは，こうした方針に基づく 共同研究課題を公募 することにより，新しい研究課題の発掘や，その領域の拡張および革新を目指す。本プログラムでは，共同研究および成果発表のための旅費の支援，共同研究ワークショップ開催支援等も行う。

本プログラムは，理論研究者に閉じるものではなく，実験・観測と計算科学の共同研究によって飛躍的な展開へつながら研究課題の提案も期待されている。従来は，実験・観測によって得られた基礎的成果が，計算科学との協働によって大幅な発展が可能であることが分かっているにもかかわらず，協働の具体的方策がなく，そのまま看過されることが多かったが，本プログラムは，実験・観測と計算科学の協奏的な発展が可能となる研究課題や領域について，共同研究課題として提案することによって，本センターのスタッフと共同で取り組むことを可能とする。

本プログラムでは，共同研究の推進のために必要ならば，PACS-CS, T2K-Tsukuba, および FIRST の利用を申請することができる。共同研究推進プログラムで公募する分野は，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，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。

共同研究課題の実施テーマとして，現在センター側の受け入れ準備があるものに，下記のような課題があるが，下記以外の提案も可能である。

### 1. 気候学・気象学（地球環境分野）

#### ・数値モデル（WRF 等）を用いた都市気候および局地気象の研究

都市のヒートアイランド現象，都市型豪雨をはじめとする都市気候もしくは局地気象を解明・予測するための研究を，当センターとの共同で進めるための研究を公募する。数値シミュレーション・大規模統計解析・データ同化といった計算技術の手法を活用する共同研究が望ましい。ただし，数値モデルを活用できる内容が含まれていれば，観測研究・衛星リモセン研究・統計解析的研究も大いに歓迎する。また，予測システムの構築・可視化・データベースなどの情報工学分野の研究も大いに歓迎する。

( <http://air.geo.tsukuba.ac.jp/kusakaken/index.html> )

## 2. 生命科学分野 ( 1 )

### ・ QM/MM ハイブリッド分子動力学シミュレーションを用いた生体機能情報高分子の機能発現機構の研究

タンパク質や RNA による新しい酵素反応や電子・プロトン移動などの詳細な機構を、分子構造および電子構造のダイナミクスに基づいて解明するための研究課題を公募する。例えば、ヘム結合タンパク質による生物機能の発現機構を、上記の計算技術を用いて解析した最近の研究例がある。

( <http://www.px.tsukuba.ac.jp/home/tcm/mtateno/research.html> )

## 3. 生命科学分野 ( 2 )

・ 細胞シグナル情報伝達ネットワークシステムのシミュレーションによる生物機能発現機構の研究  
Growth Factor などのシグナルを細胞が受け取った後、細胞内では様々な情報伝達カスケードが作用し、核内の特定の遺伝子 ( DNA ) の活性化をもたらすことによって、細胞の応答がなされる。こうした細胞内シグナル情報伝達ネットワーク機構の解明を目的に、シミュレーションによる生物機能発現の機構を研究する。

( <http://www.px.tsukuba.ac.jp/home/tcm/mtateno/research.html> )

## 4. 宇宙分野

### ・ 6次元輻射輸送および6次元ボルツマン方程式による宇宙構造形成の研究

第一世代天体、銀河形成、銀河団、銀河間物質などの研究の新たな展開を目指し、6次元輻射輸送および6次元ボルツマン方程式の手法を用いた研究課題を共同で進める。先端的観測と輻射輸送計算を付き合わせるような共同研究の提案も歓迎する。必要に応じて、T2K-Tsukuba や FIRST を利用する。

( <http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/people/umemura/FIRST/index-j.html> )

## 2 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。

## 3 利用可能計算資源と計算規模

### 3.1 PACS-CS について

PACS-CS は 2560 ノードから成る超並列クラスタである。理論ピーク性能は 14.3Tflops で、各ノードには Intel LV Xeon EM64T ( 2.8GHz ) が搭載されている。1 ノード当たりのメモリ容量は 2GB であり、各ノードは 3 次元ハイパクロスバ網 ( ノード間ピーク通信性能 ( 片方向 ): 750MB/s ) で接続されている。各ノードにはローカルディスクとして RAID-1 の 160GB × 2 のディスクが搭載されている。

#### 3.1.1 共同利用ユーザのアクセス範囲

共同利用ユーザの group\_id 及び user\_id は、以下の計算機にのみ設定する。

- PACS-CS ( 直接 Login 不可 )
- ccshfr1 ( 標準 Login ホスト )
- ccshfr2 ( 緊急時 Login ホスト )

### 3.1.2 利用可能パーティション

1. 128PU, 256PU, 512PU の S または C タイプ分割のパーティションが利用可能（詳しくは、「利用法概要」を参照）。実際に使用するパーティションは、申請パーティションを勘案し、共同利用委員会でジョブのスケジュール調整を行った上で決定する。
2. デバッグ用として 8 ノードの D8（ジョブクラス q8[sa][SC]）が利用可能。
3. 512PU を超えるジョブの実行を希望する場合は、その理由と利用期間を添えて申請することができる。利用の可否は、共同利用委員会で審査し決定する。

### 3.1.3 計算時間

1. 平成 21 年度前期で公募する計算時間は 256PU 相当で総計約 43000 時間である。これを審査結果に応じて配分する。
2. 使用 CPU 時間の管理は、PACS-CS の課金情報機能を用いて行ない、各プロジェクト毎の、総 CPU 時間に対して設定することとする。

### 3.1.4 ディスク割り当て

ディスクは、ユーザホーム、PACS-CS ローカルディスク、拡張ファイルサーバの 3 つが利用可能であり、それぞれの位置づけは以下の通りである。

- ユーザホーム [ プロジェクト当たり 100GB ]: ソースファイル、ジョブ実行スクリプト、構成定義ファイル等（計算実行中、PACS-CS からの直接参照はできない）
- PACS-CS ローカルディスク [ 各ノード当たり 123GB ]: 計算実行中の入出力先
- 拡張ファイルサーバ [ 標準 1TB ]: 計算結果の格納場所（計算実行中、PACS-CS からの直接参照はできない）

ユーザホーム 共同利用ユーザのホームは、フロントエンドサーバ（ccshfr1, ccshfr2）に置かれる。ユーザホームの容量は、1 プロジェクト当たり 100GB を上限とする。ユーザホームには、ソースファイル等の必要最小限のファイルを置くものとし、計算結果の格納等は、拡張ファイルサーバの割り当て領域を使うものとする。

#### PACS-CS ローカルディスク

1. 計算実行中のファイル I/O は、PACS-CS ローカルディスクの /home (1GB) ないし /work (122GB) 領域を用いる。
2. ユーザが /home, /work 領域に作成したファイルは、ジョブ終了時に消去するものとする。

拡張ファイルサーバ データ格納は、拡張ファイルサーバの割り当て領域を用いるものとする。容量は、1 プロジェクト当たり標準を 1TB とする。これ以上の容量が特に必要な場合は、理由を付して最大 10TB までの申請を可能とする。使用可能領域と容量は、共同利用委員会で決定する。

## 3.2 T2K-Tsukuba について

T2K-Tsukuba は 648 ノードから成る超並列クラスタである。各ノードには CPU コアを 4 つ持つ quad-core Opteron (2.3GHz) プロセッサが 4 台搭載されており、トータル理論ピーク性能は 95Tflops である。1 ノード当たりのメモリ容量は 32GB であり、全ノードは 4 本の Infiniband DDR (1 本当たりのピーク性能 (片方向): 2GB/s) を Fat-Tree 接続したネットワークで接続されている。また全ノードは RAID-6 構成の大規模ファイルサーバに接続されており、どのノードからも共通したファイルシステムを参照することができる。

### 3.2.1 共同利用ユーザのアクセス範囲

共同利用ユーザの group\_id 及び user\_id は、以下の計算機にのみ設定する。

- T2K-Tsukuba (直接 Login 不可)
- t2k-0001 ~ t2k-0008 (Login ホスト)

### 3.2.2 利用可能並列環境

T2K-Tsukuba では、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。

1. 標準的には、1, 2, 4, 8, 16, 32 ノード単位の PE を利用できる。ただし、実際にどのサイズの PE までを利用可能かは、申請で希望された PE サイズを共同利用委員会で勘案し、調整した上で決定する。
2. 特別な大規模並列ジョブ実行環境として、64, 128, 256, 512, 640 ノード単位の PE が利用可能である。ただし、これらの大規模並列実行環境は、特にそれが必要とされる理由が申請書に明記されており、かつこれを共同利用委員会が認めた場合にのみ許可される。

### 3.2.3 計算時間

1. 平成 21 年度前期で公募する計算時間は 32node 相当で総計約 43000 時間である。これを審査結果に応じて配分する。
2. 使用 CPU 時間の管理は、T2K-Tsukuba の課金情報機能を用いて行ない、各プロジェクト毎の、総 CPU 時間に対して設定することとする。

### 3.2.4 ディスク割り当て

T2K-Tsukuba ではログインノード (t2k-0001 ~ t2k-0008) からのみ参照可能なホームファイルシステム (/home) と、ログインノード及び全計算ノードから参照可能な共有ファイルシステム (/work) が利用可能である。それぞれの位置づけは以下の通りである。

- ホームファイルシステム [プロジェクト当たり 50GB]
- 共有ファイルシステム [プロジェクト当たり標準 5TB]

ホームファイルシステム ログイン時に必要な諸スクリプト，メール転送用ファイル等，必要最低限の環境のみを置く。T2K-Tsukuba 上で実行するプログラム，バイナリファイル，入出力ファイルは原則としてここには置かず，/work 上に置く。1 プロジェクト当たり 50GB を上限とする。

共有ファイルシステム RAID-6 及び大規模クラスタファイルシステムによる，ユーザ領域 800TB の高バンド幅な並列ファイルサーバによって提供される。並列ジョブ実行に関する全てのファイルを置く。1 プロジェクト当たり標準 5TB を上限とする。ただし，特別な理由がある場合は最大 20TB までの使用を認めるが，これは申請書にその必要性を明記し，共同利用委員会が了承した場合に限られる。

### 3.3 FIRST について

FIRST は，重力計算専用ボード Blade-GRAPE が組み込まれた PC クラスタである。FIRST は，256 の計算ノード、496 の CPU からなり，2 つの管理ノード，2 つのファイルサーバをもつ。計算ノードのうち，16 ノードは 32 ビット型 Blade-GRAPE を有し，224 ノードは 64 ビット型 Blade-GRAPE X64 を有する。FIRST の総演算性能は，36.1TFLOPS であり，内ホスト部分 3.1TFLOPS，Blade-GRAPE 部分 33TFLOPS である。主記憶容量は総計 1.6TB である。ファイルサーバは 2 台で合計 4.5TB の容量をもつ。また，分散したローカルディスクから一つの共有ファイルシステムを構築する Gfarm システムが導入されており，総計 22TB の共有ファイルシステムが構築されている。FIRST の利用は，センター計算宇宙物理分野と調整の上行うものとする。

( <http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/people/umemura/FIRST/index-j.html> )

## 4 申請資格

次のいずれかに該当する者とする。

1. 本学の役員及び職員，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. 本学以外の大学（大学院大学及び短期大学を含む），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

ただし，大学院生，研究生は，指導教員がプロジェクト申請代表者である場合に，共同研究者として連名で利用を申請することができる。

外国籍の研究者については，原則として日本滞在期間が 6 ヶ月以上であり，プロジェクト申請代表者が日本籍である場合に，共同研究者として連名で利用を申請することができる。

## 5 プロジェクトの申請

### 5.1 公募時期と利用期間

公募は，年 2 回（前期，後期）とし，前期公募は，公募 2 月，審査 3 月，利用開始 4 月，後期は，公募 8 月，審査 9 月，利用開始 10 月である。利用期間は，前期は 4 月 1 日から 9 月 30 日まで，後期は 10

月1日から3月31日までである。応募プロジェクトの採否は、計算科学研究センター長より申請者へ通知する。

本公募の採択プロジェクトの決定は、平成21年3月23日を予定しており、利用期間は平成21年4月1日より平成21年9月30日までである。

## 5.2 プロジェクトの申請方法

- 申請書の提出

「筑波大学計算科学研究センター学際共同利用申請書」を、本センターホームページ

<http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/ccs/kyoudou/>

より入手し、必要事項を記入の上、Word ファイル、および PDF 化したファイルの 両方 を

[project-submit@ccs.tsukuba.ac.jp](mailto:project-submit@ccs.tsukuba.ac.jp)

宛に、件名を「平成21年度前期学際共同利用申請」として、電子メールにて送付するものとする。

- 提出期限

平成21年2月16日(月)17:00(必着)

ヒアリングに選定された課題については、ヒアリングの日時を通知する。最終的な申請プロジェクトの採否の通知は平成21年3月23日までに行う。

## 5.3 申請上の注意

申請にあたっては、下記の諸点に注意のこと。

1. 申請書の 部分は記入しない。
2. プロジェクトのカテゴリを、学際開拓プログラム・重点課題推進プログラム、から選択。
3. 学際開拓プログラムの場合、コーディネート支援の必要性について、必要・不必要、から選択。
4. 応募する分野(学際開拓プログラムの場合は主たる分野)を、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、計算機工学分野から選んで記入。
5. プロジェクト名、研究者氏名は、日本語と英語の両方を記入。
6. グループ名、ユーザ名は英数字8文字以内とすること。
7. 必要計算機資源については、PACS-CS、T2K-Tsukuba、FIRST のうち必要なものをチェックし(複数可)、PACS-CS の場合は各ジョブクラス(128PU・256PU・512PU)における使用希望時間をジョブクラスに応じて、また T2K-Tsukuba の場合は各 PE (1, 2, 4, 8, 16, 32 node) における使用希望時間を、それぞれ明記すること。複数を希望する場合は、その理由がわかるように a) に記載のこと。なお、PACS-CS と T2K-Tsukuba の配分時間については、計算機資源有効利用の観点から、申請通りとはならない場合がありますので、予めご承知置きください。FIRST については、希望ノード数と計算時間を、その根拠と合わせて、c) に記入してください。FIRST の利用は、センター計算宇宙物理分野と調整の上行います。
8. PACS-CS において 512PU を超えるジョブクラスを希望する場合、及び T2K-Tsukuba において 32 node を超える並列環境の使用を希望する場合は、右端欄に希望 PU 数又は並列環境サイズと計算時間を記入の上、a) に理由を明記のこと。

9. ファイルサーバについては、PACS-CSにおける拡張ファイルサーバ容量は1プロジェクト当たり1TBを標準とする。また、T2K-Tsukubaにおける共有ファイルサーバ容量は1プロジェクト当たり5TBを標準とする。これらを超える容量を希望する場合は、数値を記入の上、d)に理由を明記のこと。
10. 関連論文がある場合は、別刷りまたは論文リスト(別紙)を添付のこと。
11. 「学際開拓プログラム」については、いかなる分野とどのような連携を図るかを具体的に記入のこと。また、連携のコーディネート支援を希望する場合には、希望する支援内容を具体的に記入のこと。
12. 「共同利用推進プログラム」については、どの分野とどのような共同研究を推進するのか具体的に記入のこと。

## 6 応募プロジェクトの審査

応募プロジェクトの審査は、書面審査とヒアリング審査の2段階で行う。審査にあたっては、以下の点に重点を置く。

- 必然性  
センター計算機資源を使用しなければならない必然性が十分に記述されているか。その理由は十分に妥当であるか。
- 準備状況  
超並列計算機を利用して結果を得るのに必要な準備が十分なされているか。
- 計算時間  
計算時間の見積もりは妥当であるか。
- 目的と計画  
研究の目的が明確であるか。目的に対して、研究計画が適切であるか。学際開拓プログラムにあっては、異分野間で有機的連携を行うことにより、研究の新たな展開や格段の発展が見込まれるか。
- 期待される成果  
計算して得られる結果と期待される成果の重要性がわかりやすく記述されているか。

### 6.1 書面審査

共同利用審査委員会は、申請書類の書面審査を行い、ヒアリング課題を決定する。

### 6.2 ヒアリング審査

共同利用委員会は、ヒアリング課題について、1件15分～20分のヒアリングを行い、採択候補課題を決定する。センター支援が必要な学際開拓プログラムのプロジェクトについては、学際共同利用プログラム支援委員会のコーディネート支援の結果を勘案して共同利用委員会が採否を決定する。

## 7 旅費の補助

### 7.1 プロジェクト研究実施旅費

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ます。

### 7.2 研究成果発表旅費

センター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ます。

### 7.3 旅費申請方法

旅費の補助を希望する場合は、プロジェクト代表者が、「共同利用旅費申請書」(センターホームページの共同利用のページにあります)に必要事項を記入の上、出張するプロジェクトメンバー毎に記入し、下記に郵送下さい。

送付先：〒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利用係

## 8 共同利用ユーザの義務

- プロジェクトに採択された者はセンター主催のユーザーズミーティングやシンポジウムで研究成果、研究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。
- プロジェクトによって得た結果を学術雑誌等に発表する場合は、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、以下を参照のこと。

Numerical calculations for the present work have been carried out under the “Interdisciplinary Computational Science Program” in Center for Computational Sciences, University of Tsukuba.

また、別刷りを各2部センターに提出すること。

## 9 平成21年度研究会

本センターでは、平成21年度プロジェクトの報告会を兼ねた研究会「計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム」を平成21年度初めに開催予定である。

## 10 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、計算機の利用に当たっては、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。

## 11 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](mailto: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  
共同利用係  
TEL: 029-853-6488  
以上