

## 計算科学研究センターの共同利用申請の記入例（一部）

計算科学研究センターの共同利用申請の注意点と記入例（一部）です。参考にしてご記入ください。

### [80,000点を超えて希望する理由]

#### 一般的な注意点

- 複数の研究項目がある場合はそれぞれの項目について点数の見積りを記述して下さい。
- 利用する予定のソフト名、jobtype の種類、ノードやコアやGPU の数についても記述するようお願いします。

#### 例 1

##### (1) XXX と YYY の結合、解離状態の構造解析

XXX と YYY に溶媒の水を含めた全系の大きさは 150,000 原子程度であり、結合状態と解離状態の 2 つの状態についてそれぞれ XXX ナノ秒の分子動力学シミュレーションを行う。分子動力学計算には AAA-version を使い、small ジョブタイプで N ノード並列で計算を行う。以前に RCCS で同程度の大きさの系の計算を同じ条件で行った際、1 ns あたり約 H 時間を要したことから、2 (状態) \* XXX (ns) \* N (ノード数) \* H (時間/ns) \* 45 (点/ノード時間) = ZZZ 点を要すると見積もられる。

##### (2) XXX と YYY の会合自由エネルギー計算

1 で得られた構造を元にして、AAA-version に実装されたアンブレラサンプリング法を用いて XXX と YYY の会合自由エネルギー計算を行う。十分な精度で結果を得るためには、結合状態と解離状態を合計 W 個のウィンドウでつなぎ、各ウィンドウについてそれぞれ XXX ナノ秒の計算(平衡化を含む)を行う必要があると想定している。各ウィンドウについて 1 と同様に small ジョブタイプで N ノードを利用した場合、W (ウィンドウ数) \* XXX (ns) \* N (ノード数) \* H (時間/ns) \* 45 (点/ノード時間) = YYY 点を要する。

1 と 2 の合計にダイナミクス解析やアンブレラ計算後の後処理等のために要すると想定される UUU(小さい値) 点を加え、ZZZZZ 点を希望する。

#### 例 2

錯体 XXX の配位子 YYY の A, B, C の各位置についてそれぞれ Na, Nb, Nc 種類の置換の全パターンを検討する。全ての組み合わせ(Na \* Nb \* Nc)について構造を作成し、BBB-version を使って XXX/YYY の計算レベルで構造最適化を行う。特に ZZZ 反応の触媒として有望な構造が得られたものについてはさらに VVVVV 計算レベルで詳細に構造や性質を検討する。

研究室のコンピュータ(CPU: \*\*\* \*\*\*) で N コアを使って 1 つの候補について XXX/YYY レベルの構造最適化を行った際に H 時間を要した。同様に VVVVV レベルで N コア使った計算の場合には R 時間を要した。研究室のコンピュータは若干 RCCS のものより性能が劣るものの、置換基の中にテストに使ったものより大きいものが混じっていること、構造決定の際にある程度の試行錯誤を行うことを考慮して、RCCS の core タイプで N コア使った場合にも同程度の時間を要すると想定する。また、詳細な VVVVV 計算を行う候補の数は 10 種類程度と想定している。

以上を踏まえ、Na \* Nb \* Nc (組み合わせ数) \* N (コア数) \* H (時間) \* 1 (点/コア時間) + 10 (候補数) \* N (コア数) \* R (時間) \* 1 (点/コア時間) = ZZZZZ 点を希望する。

### [ホームディレクトリを標準値を超えて希望する理由]

#### 例

- XXX のトラジェクトリーは一本あたり SSS GB 程度の容量を要し、これが NNNN 本生じることになる。そして、後に行う解析にはこの全てを利用する。ファイル操作等のために容量に多少の余裕を持たせることを考慮して、1.2 (マージン係数) \* SSS \* NNNN (GB) の容量を利用したい。
- 計算に必要なデータセットが 1 つあたり XXXXX GB と非常に大きい、研究の円滑な遂行のために同時に N 個のデータセットを同時に検証したいと考えている。他の解析データが生じることとも考慮して、標準の 500 GB に XXXX \* N GB を加えた ZZZZ GB の利用を希望する。