

國家科學及技術委員會 函

機關地址：臺北市和平東路二段106號
聯絡人：林瑜芳

受文者：國立臺灣科技大學

發文日期：中華民國111年11月30日

發文字號：科會綜字第1110073385號

速別：普通件

密等及解密條件或保密期限：

附件：如文(附件1 A095M0000Q0000000_111C0P027692_111D2034363-01.pdf、附件2 A095M0000Q0000000_111C0P027692_111D2034364-01.pdf、附件3 A095M0000Q0000000_111C0P027692_111D2034365-01.pdf)

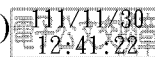
主旨：本會112年度專題研究計畫補助案，增加高效能計算資源審查機制，檢附相關說明資料，請查照轉知。

說明：

- 一、為提升國家高效能計算資源之運用成效，國家實驗研究院國家高速網路與計算中心(國網中心)建立高效能計算資源審查機制，供本會核定專題研究計畫計算資源之參考。
- 二、審查機制相關說明及申請表詳如附件，請於國網中心網站(<https://rac.nchc.org.tw>)進行高效能計算資源使用申請。
- 三、本案聯絡人：相關作業如有疑義，請洽國網中心楊安正副研究員，電話：(03)577-6085分機262。

正本：專題研究計畫受補助單位（共301單位）

副本：本會各處室（共23單位）、財團法人國家實驗研究院、財團法人國家實驗研究院國家高速網路與計算中心(均含附件)



主任委員吳政忠

高效能計算資源審查機制說明

一、目的：提升財團法人國家實驗研究院國家高速網路與計算中心(以下簡稱國網中心)高效能計算資源之運用成效，落實資源合理分配，協助學研用戶擴大計算規模與能量，增進研發成果之國際競爭力。

二、適用範圍：

(一) 本機制審查對象，為申請國家科學及技術委員會(以下簡稱國科會)補助之專題研究計畫。

(二) 本機制所分配之計算資源，為國網中心台灣杉三號之 CPU 計算時數，不包含台灣杉二號、TWCC 等 GPU 計算時數及其他儲存服務。

(三) 經審查及國科會核定通過之專題研究計畫，可於計畫執行期間內以一般資源費率使用高優先資源，不須額外負擔價差。

(四) 高優先資源係指在國網中心可隨需即算、不需等待的計算資源。

三、審查方式：

(一) 由國科會各學門推薦專家與國網中心共同組成「高效能計算資源審查委員會」進行審查。

(二) 審查委員依據申請計畫所提計算資源需求之必要性、使用規劃與可行性、效率評估等項目，給予計算資源核給建議，供國科會參考。

四、申請方式：

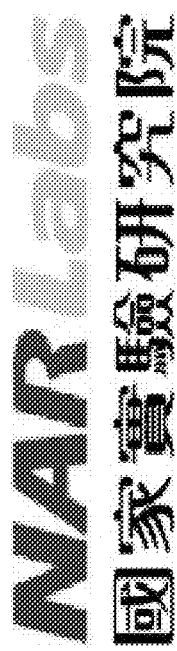
(一) 請國科會專題研究計畫申請書之基本資料中，勾選申請「高效能計算資源」。

(二) 於專題研究計畫申請期限內，填寫「高效能計算資源使用申請表」，並檢附相關資料，於國網中心網站提出申請(<https://rac.nchc.org.tw>)。

五、相關資訊及聯絡窗口：

(一) 申請相關說明，請參見國網中心「高效能計算資源申請網」(<https://rac.nchc.org.tw>)。

(二) 如有疑義，請洽國網中心，電話：03-5776085 分機 262，電子信箱：rac@narlabs.org.tw。



112年度國科會專題研究計畫 高效能計算資源申請說明

國研院國網中心

rac@narlabs.org.tw

www.narlabs.org.tw



背景說明

■ 背景

現有高效能計算採開放式服務，以不同費率供用戶選擇對應資源，易產生計算排程壅塞等問題，也較難呈現國家級計算設施之效益。

■ 目標

成立計算資源審查委員會，由國科會學術處與學門代表審議，國網中心提供計算資源配置建議。

■ 實施後資源使用原則

經核定通過後之計畫，可於計畫補助期間內以一般資源費率使用高優先資源，不須額外負擔價差。





申請流程

■ 步驟一

請於國科會專題研究計畫申請書之基本資料中，「本計畫是否申請高效能計算資源」勾選「是」。

■ 步驟二

請參考國網中心「高效能計算資源申請網」(<https://rac.nchc.org.tw>)說明，填寫使用申請表，於專題研究計畫申請期間內，檢附相關資料進行線上申請。





NAR Labs

使用申請表 填寫說明及參考範例



為簡化申請流程，「高效能計算資源使用申請表」僅保留必要之申請人基本資訊及高效能計算相關內容。

請於國科會學術服務網，匯出完整基本資料(CM01.pdf)及中英文摘要(CM02.pdf)。

請將「高效能計算資源使用申請表」及CM01.pdf、CM02.pdf，於國網中心網站上傳(<https://rac.nchc.org.tw>)。

[illegible]



填寫參考範例

■ 使用規劃與可行性

- 三元合金設計工作，擬以電腦計算進行虛擬篩選，各元素成分比例分為10個level，參數空間將有1000種組合。
- 每個組合計算消耗2,240 core-hr，總計算量為2,240,000 core-hr。
- 使用40個台灣杉三號節點，可於41.6天內完成。





填寫參考範例

■ 必要性

□ 利用Taiwania3 (T3)高密度核心的優勢，用1~2個T3計算節點，便可完成實驗室PC cluster動輒10~20台的計算資源消耗，T3對於高通量材料計算的研究推進加速效果是十分顯著的。

■ 使用兩個T3計算節點計算SiC相關材料，大約2.5小時。使用自建PC cluster (8 cores/node)需要同時動用到15台才有相同核心數量，但低速的網路連結(eth)加上更多的節點數使得VASP計算效率不彰，需要10小時才能完成相同工作(整體提升約四倍速度)。

■ 相同工作在Taiwania1 (T1)執行，使用2個T1計算節點(40 cores/node)，約需4.5小時。

可用文字敘述





填寫參考範例

■ 必要性

可用表格敘述

案例說明	高通量第一—原理材料計算	
平台	使用者自建平台	Taiwania3
硬體	i7-9700*15	xeon 8280*4
運算時間	10 hr	2.5 hr
加速比		4倍

案例說明	高通量第一—原理材料計算	
平台	Taiwania1	Taiwania3
硬體	xeon 6148*4	xeon 8280*4
運算時間	4.5 hr	2.5 hr
加速比		1.8倍





填寫參考範例

■ 效率評估

□ 建議可提供strong scaling, weak scaling測試

■ <https://en.wikipedia.org/wiki/Scalability>

■ <https://hpc-wiki.info/hpc/Scaling>

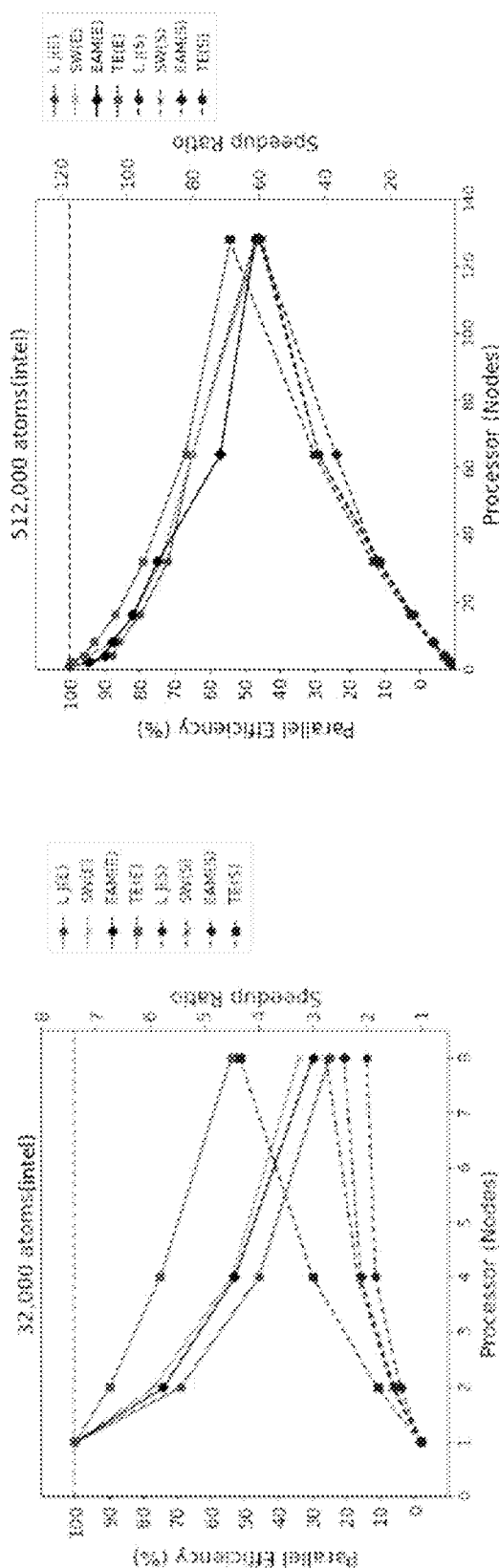


Figure strong scalability (left), weak scalability (right)



高效能計算資源使用申請表

一、基本資料：

申請條碼：

請填寫專題研究計畫申請書之申請條碼

申請機構/系所(單位)			
本計畫主持人姓名		職 稱	
 本計畫名稱	中 文		
	英 文		
計畫連絡人		姓名：_____ 電話：(公)_____ (宅/手機)_____	
E-MAIL			

計畫主持人簽章：_____

日期：_____

填寫說明：為簡化申請計畫書，請隨附國科會專題研究計畫申請書 CM01、CM02 檔案(可由國科會學術服務網匯出)。

二、研究計畫內容：研究計畫之背景及目的、目的、重要性。(可節錄 CM03 有利審查部分)



三、使用高速計算資源說明：就下列各點進行論述

(一) 使用規劃

例如：單一工作消耗多少核心小時，一個完整研究需要多少 case，總共需要計算資源。

(二) 必要性

例如：網格數量、原子數量超過單一工作站所能負荷，或是計算規模以單一工作站無法在可接受時間內完成等等。

(三) 可行性

例如：利用 Adaptive strain-boost hyperdynamics simulations 來進行長時間分子動力學模擬，避免長時間模擬可能的誤差累積。

(四) 效率評估

例如：提出 strong scaling, weak scaling 測試

(五) 其他

例如：國內外有關本計畫之計算資源使用情況。



註：本節篇幅以五頁為限。

四、高速計算資源需求表

核心需求數量 (core)	
時間 (hr)	
資源總量 (core-hr)	
計算機使用費 (NTD)	
計算方法的分類	☐ Mesh ☐ Particle ☐ Other _____
計算瓶頸屬性	☐ Computation ☐ Memory ☐ I/O
套件名稱	
數值方法說明	
記憶體需求 (GB/core)	
儲存空間需求 (TB)	
單一工作執行時間 (hr)	

註：請於國科會專題研究計畫申請書，編列相對應之計算機使用費。費率請以台灣杉三號 NRQ 方案(0.08 NTD/core-hr)進行計算(參見國網中心 iService 計算資源服務網 <https://iservice.nchc.org.tw/>)。



五、近五年使用本中心資源衍生研究成果與致謝情形：使用本中心計算資源而衍生之研究成果，須於論文中載明，或致謝本中心所提供之設施與服務。惠請提供有致謝論文清單，供審查委員參考。

