

# 「京」を中核とするHPCIの産業利用ご紹介

平成27年1月22日



登録施設利用促進機関

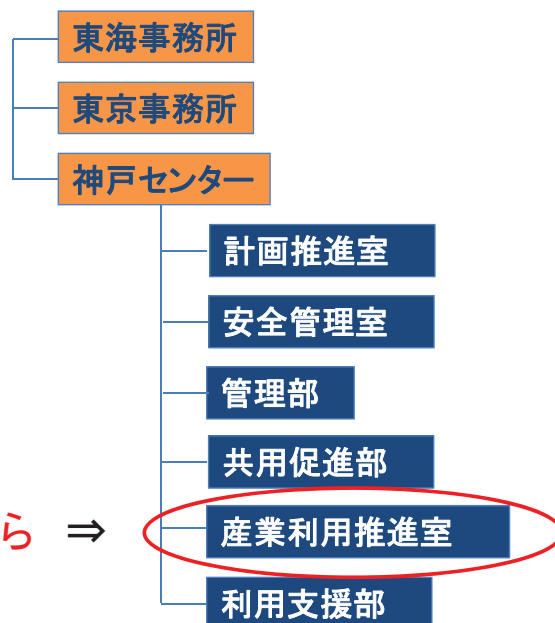
一般財団法人 高度情報科学研究機構

産業利用推進室

福田 佳子

## 高度情報科学研究機構(RIST)とは

- 1981年 財団法人原子力データセンター(NEDAC)設立
- 1995年 高度情報科学研究機構  
(Research Organization for Information Science and Technology)  
に改名
- 2012年 一般財団法人へ移行
- 2012年4月より、特定高速  
電子計算機研究施設「京」の  
登録施設利用促進機関(登録  
機関)としての業務を開始



私の所属はこちら ⇒

# RIST神戸センターの業務概要

## ■登録機関業務

登録機関(\*)は「特定先端大型研究施設」ごとに選定されており、RISTは「京」の登録機関として以下の業務を行っています。

| 1.利用者選定業務                                                                               | 2.利用支援業務                                                                                                                                                    | 3.共用促進業務                                                                                                                       |
|-----------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <ul style="list-style-type: none"><li>利用研究課題の募集</li><li>課題選定</li><li>選定課題の公表等</li></ul> | <ul style="list-style-type: none"><li>一元的相談窓口(ヘルプデスク)</li><li>申請前の事前相談</li><li>産業利用支援</li><li>技術支援(プログラム移植支援、高性能化支援、高並列化支援、可視化支援)</li><li>講習会等の開催</li></ul> | <ul style="list-style-type: none"><li>情報発信</li><li>成果の公表及び普及</li><li>人材育成の推進</li><li>国際交流の推進</li><li>関係機関・地元自治体等との連携</li></ul> |

## ■HPCIシステムの利用促進(HPCI運用事務局)

RISTは、HPCI運用事務局として利用促進のために、HPCIの課題選定及び共通窓口運用、産業利用促進を行っています。

| 1.課題選定及び<br>共通窓口の運用                                                                                                                                        | 2.産業利用促進                                                                                                                   |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <ul style="list-style-type: none"><li>HPCIユーザの窓口業務</li><li>HPCIの利用研究課題選定</li><li>HPCIの広報</li><li>HPCIシステム構成機関への利用負担金の支払事務</li><li>JHPCNの利用研究課題選定</li></ul> | <ul style="list-style-type: none"><li>産業界におけるHPCIの利用促進</li><li>東京アクセスポイントの運営</li><li>技術的利用相談・利用支援</li><li>講習会の実施</li></ul> |

(\*) 登録機関とは

登録施設利用促進機関(登録機関)とは、「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」に基づき文部科学大臣により登録され、利用者の選定や利用支援などの利用促進業務を行う機関のことです。第三者機関が利用促進業務を実施することで、利用者に対する公平性・透明性を確保する仕組みとなっています。

登録機関は「特定先端大型研究施設」ごとに選定されており、RISTは「京」の登録機関として上記の業務を行っています。

3

## 目次

- 1.HPCI産業利用について
- 2.HPCIについて
- 3.「京」募集課題について
- 4.「京」で利用可能なソフトウェアについて
- 5.「京」に関する利用支援

4

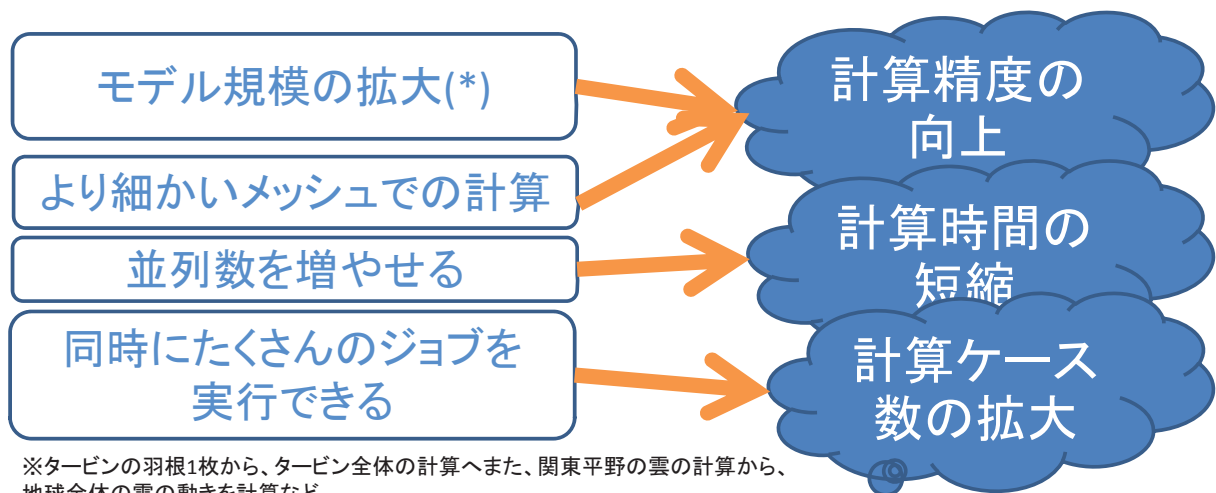
# 1. HPCI 産業利用について

1-1 なぜ大規模計算機が必要か？

1-2 民間企業の利用について

5

## 1-1. はじめに ～なぜ大規模計算機が必要か？～



シミュレーション、CAEにより

⇒実験条件の探索、実験回数の削減

⇒実験コスト、商品開発リードタイムの削減（低コスト化）

高精度な設計のための判断材料が得られる可能性

➡「京」を中核とするHPCIが提供する大規模計算資源を活用下さい。

6

## 1-2. 「京」を利用した主な企業\*1（業種毎）

| 業種              | 「京」産業利用課題(H24～H26)の課題代表者の所属                                                                                                                                | 企業数 | 課題件数 |
|-----------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|------|
| 輸送用機器           | 川崎重工業(株)<br>[自動車] スズキ(株)、トヨタ自動車(株)、トヨタテクニカルディベロップメント(株)、<br>日産自動車(株)、富士重工業(株)、(株)本田技術研究所、マツダ(株)、<br>一般財団法人日本自動車工業会<br>[船舶] ジャパンマリニュナイツ(株)、一般財団法人日本造船技術センター | 12  | 26   |
| 化学              | (株)コベルコ科研、JSR(株)、昭和電工(株)、住友ベークライト(株)、住友化学(株)、<br>東洋紡(株)、日東電工(株)、日本ゼオン(株)、(株)半導体理工学センター、富士フイルム(株)                                                           | 10  | 23   |
| ソフトウェア・<br>情報処理 | (株)アスミス、茨城日立情報サービス(株)、(株)ヴァイナス、(株)CAEソリューションズ、<br>(株)数値フローデザイン、(株)ヒューリンクス、(株)フォーラムエイト、<br>富士通アドバンステクノロジー(株)、みずほ情報総研(株)、アドバンスソフト(株)                         | 9   | 14   |
| 建設              | (株)大林組、鹿島建設(株)、清水建設(株)、(株)竹中工務店、千代田化工建設(株)、阪神高速道路(株)                                                                                                       | 6   | 8    |
| 医薬品             | 第一三共(株)、第一三共RDノバレー(株)、大日本住友製薬(株)、武田薬品工業(株)、<br>パイオグリッド関西(製薬企業のコンソーシアム)                                                                                     | 5   | 12   |
| 電気機器            | 京セラ(株)、日立アプライアンス(株)、富士ゼロックス(株)、富士電機(株)、三菱電機(株)、パナソニック(株)                                                                                                   | 6   | 7    |
| ゴム製品            | 住友ゴム工業(株)、東洋ゴム工業(株)、(株)ブリヂストン、三ツ星ベルト(株)                                                                                                                    | 4   | 8    |
| 防災・環境           | 応用地質(株)、(株)地震工学研究開発センター                                                                                                                                    | 2   | 4    |
| 鉄鋼              | JFEスチール(株)、新日鐵住金(株)                                                                                                                                        | 2   | 4    |
| 機械              | (株)IHI、三菱重工業(株)                                                                                                                                            | 2   | 4    |
| 非鉄金属            | 住友電気工業(株)                                                                                                                                                  | 1   | 1    |
| 鉄道              | 東海旅客鉄道(株)、(公財)鉄道総合技術研究所                                                                                                                                    | 2   | 2    |
| 電気・ガス           | 関西電力                                                                                                                                                       | 1   | 1    |
| 合計              |                                                                                                                                                            |     | 113  |

\*1 利用中企業を含む。

平成27年1月16日現在

7

## <「京」利用事例1>（成果報告書より抜粋） 超大規模数値流体解析による建物局部風圧の予測と その制御システムの開発

（実施期間：2012年9月28日～2014年3月31日）

課題番号：hp120051 「京」産業利用（実証利用）

課題代表者：菊池 浩利

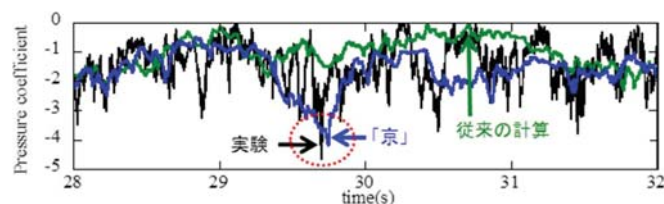
利用目的

所属：清水建設株式会社

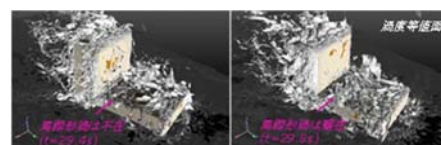
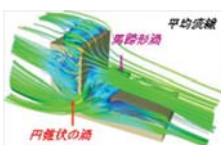
台風・竜巻等の強風に置かれた建物では、集中的な局部風圧の発生により、建物の外装材や内部空間の損壊が生じるため、耐風安全性設計において、その局部風圧の予測と低減を行う必要がある。本利用課題では、非常に細かい計算格子を用いることにより、流れ場の乱流構造を直接に解析できるシミュレーションに基づく局部風圧の予測システムを開発する。また、超大規模数値流体解析による飛躍的な予測精度の向上を実現し、得られた詳細な物理量とその3次元可視化により、局部風圧の生成機構を解明し、その制御機構を提案するとともに、建築分野のものづくりににおける画期的な流体設計法を確立することを目的とする。

### 成果概要（要旨）

既存のスパコンや保有している計算機で予測困難とされてきたセットバック建物の局部風圧とそのピーク値は、「京」コンピュータで最大100億規模の格子を用いることや、流れ場の乱流構造を直接に解析できる超大規模シミュレーションにより、飛躍的に高い精度で予測できた。また、計算から得られた詳細な物理量の3次元可視化により、実験で解明できなかった局部風圧の発生を起因とした複雑な流れ場とその挙動を明らかにし、隣接低層建物等の工夫により、その流れ場の制御と、対象とした建物の局部風圧の軽減ができる新たな知見を得られた。今後、その知見に基づいて建築分野のものづくりに貢献する。



入隅部近傍での風圧係数の時刻歴の相対比較



従来の計算による定性評価

「京」の計算による現象の詳細な挙動の観察

## 2.HPCIについて

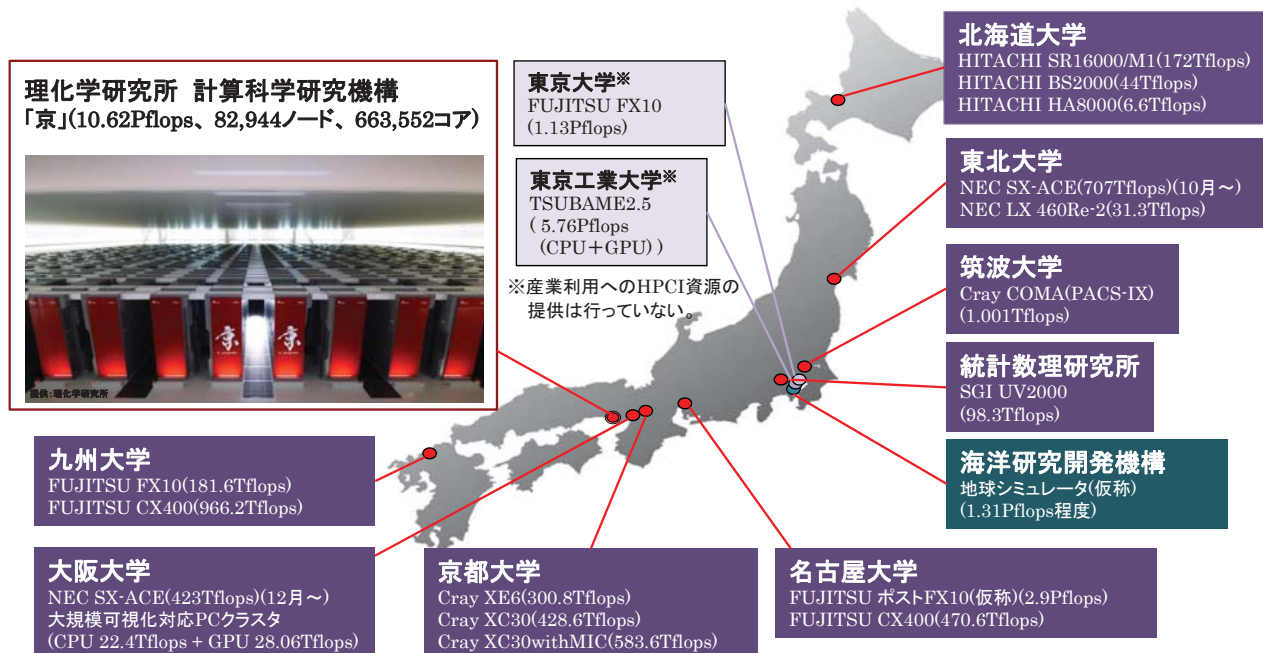
- 2-1 HPCI資源提供機関
- 2-2 HPCI資源を利用するために
- 2-3 HPCI 産業利用課題の種類
- 2-4 産業利用が可能な機関と課題

9

### 2-1. HPCI資源提供機関

HPCIとは「京」を中核とし、多様なユーザニーズに応える  
革新的な共用計算環境を実現するハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ

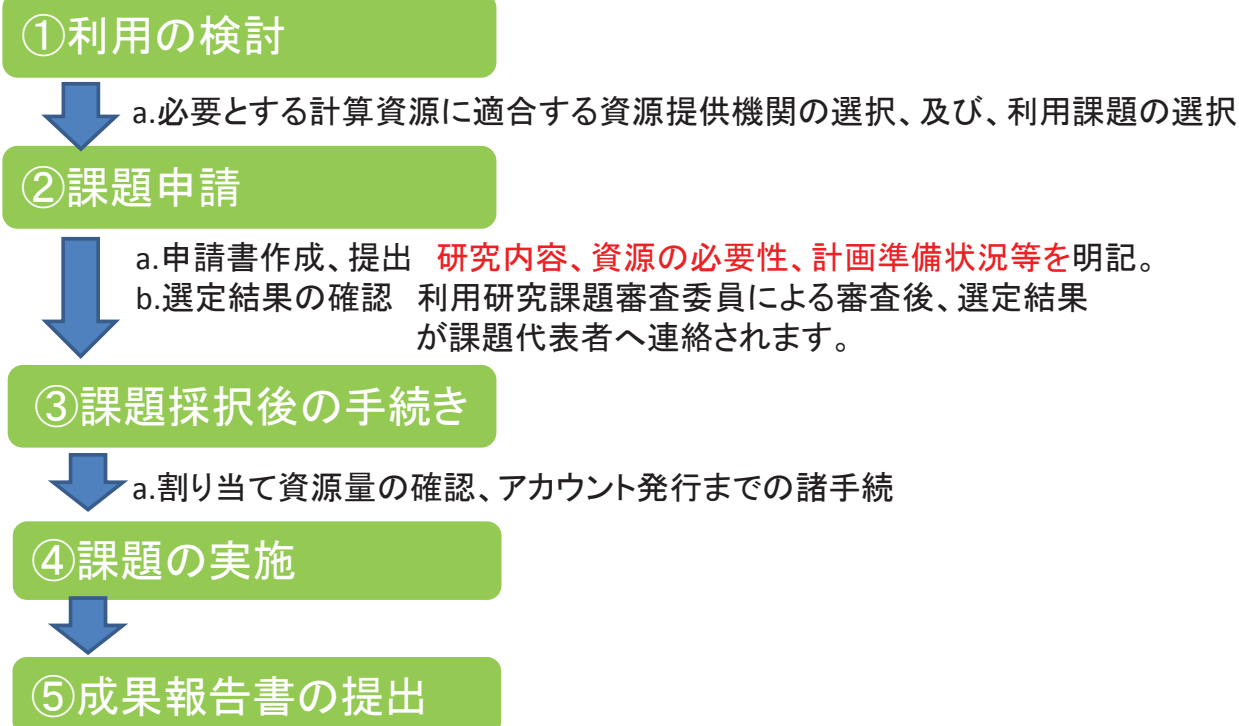
#### HPCI資源提供機関と主要計算機(理論ピーク性能)



※利用可能な資源の最新情報はHPCIポータル(<http://www.hpci-office.jp/>)参照

10

## 2-2. HPCI資源を利用するには？



利用案内についての詳細説明：<https://www.hpci-office.jp/pages/guide>

11

## 2-3. HPCI産業利用課題の種類

| 利用の種類     | 目的                         | 募集回数             | 利用期間                     | 成果  | 利用料金 |
|-----------|----------------------------|------------------|--------------------------|-----|------|
| トライアル・ユース | 研究課題テーマの計算準備、成果が得られそうかの見極め | 随時受付             | 「京」6カ月<br>（「京」以外はポータル参照） | 公開  | 無償   |
| 実証利用      | 研究課題テーマの実証                 | 原則年1回            | 1年                       |     |      |
| 個別利用      | 機密性の高い自社研究課題の実施            | 「京」のみ随時<br>原則年1回 | 最長1年                     | 非公開 | 有償   |

トライアル・ユース課題と個別利用課題（「京」のみ）はいつでも申請が可能です！

12

## 2-4. 産業利用が可能な機関と課題

| 資源提供機関   | トライアル・ユース(無償) | 実証利用(無償) | 個別利用(有償) |
|----------|---------------|----------|----------|
| 理化学研究所   | ○             | ○        | ○        |
| 北海道大学    | ○             | ×        | ○        |
| 東北大学     | ○             | ○        | ○        |
| 筑波大学     | ×             | ○        | ×        |
| 名古屋大学    | ○             | ○        | ×        |
| 京都大学     | ○             | ○        | ×        |
| 大阪大学     | ○             | ○        | ×        |
| 九州大学     | ×             | ○        | ×        |
| 統計数理研究所  | ○             | ○        | ○        |
| 海洋研究開発機構 | 検討中           | ×        | ○        |

課題種類により、利用可能な資源・期間等が異なります。

最新情報はHPCIポータルを参照ください。

<https://www.hpci-office.jp/> → 利用案内 → 提供されるハードウェア・ソフトウェア資源一覧

13

## 3.「京」募集課題について

3-1 「京」の概要

3-2 「京」募集課題について

3-3 「京」利用課題の課題申請

3-4 「京」の利用課題の選定基準

3-4 「京」以外のHPCI募集課題について(トライアル・ユース)

随時更新されますので、最新の詳細情報はHPCIポータルを参照ください。

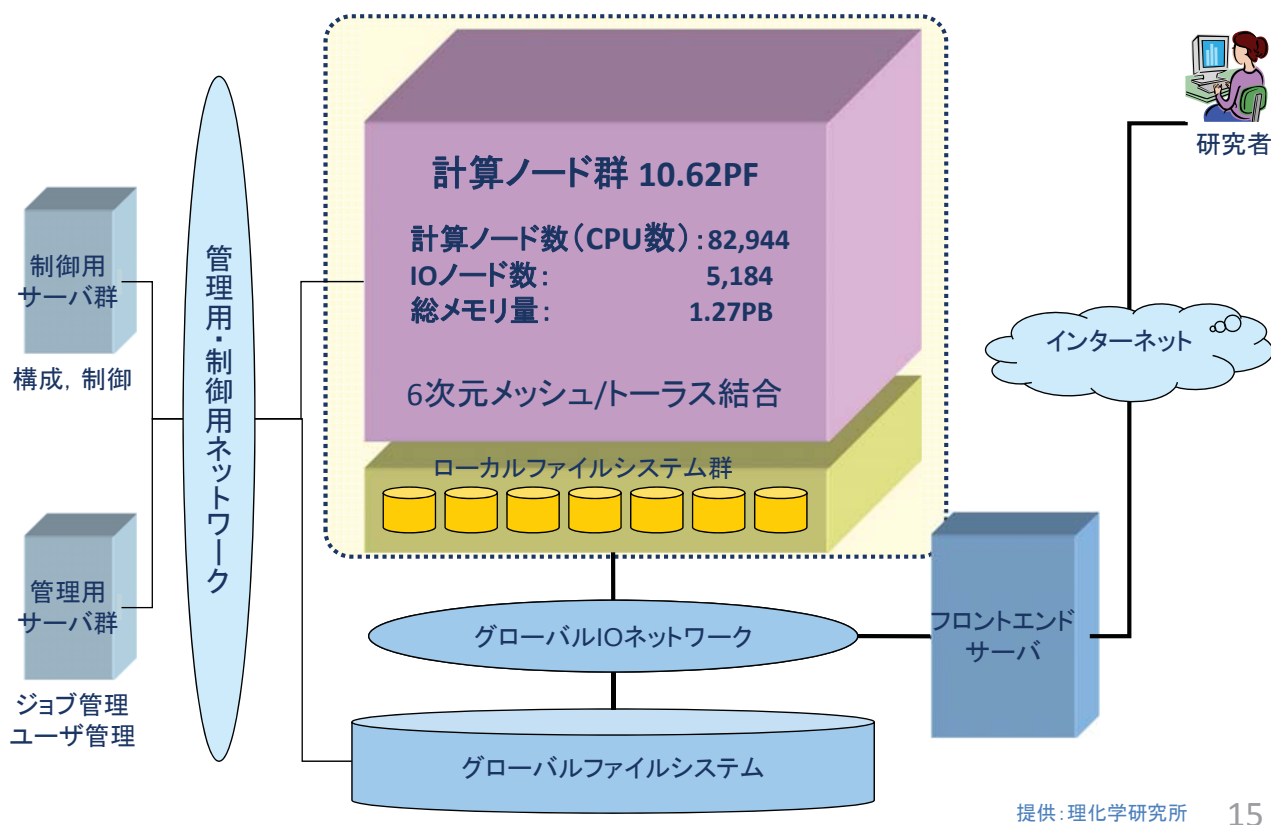
<https://www.hpci-office.jp/> → 課題募集 → 現在受付中の課題募集 →

「京」以外のHPCI共用計算資源の産業利用課題(トライアルユース)の随時募集 → 提供資源一覧表

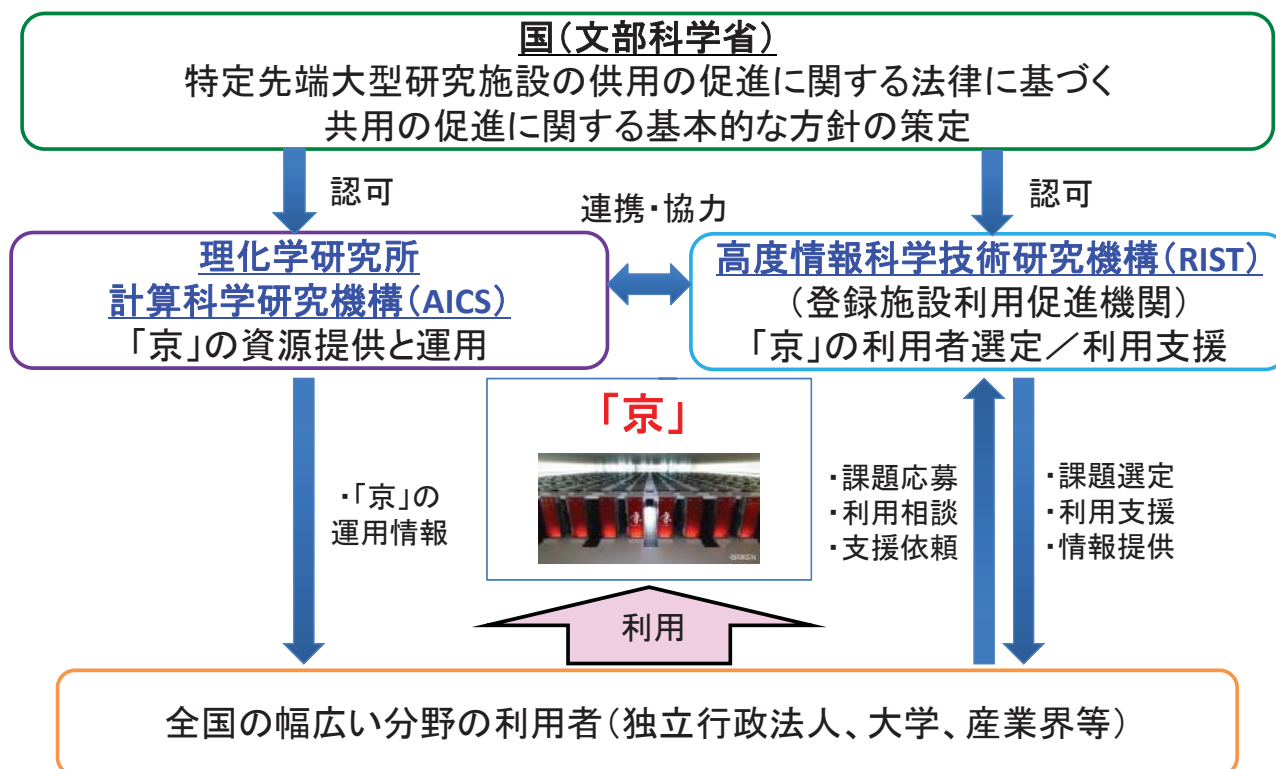
14



### 3-1.「京」の概要



### 3-1.「京」の概要 ～利用の枠組み～





## 3-2.「京」募集課題 ～トライアル・ユース～

産業界の皆様のみ、  
トライアル・ユース制度を利用できます。

募集中

トライアル・ユースを利用することにより、自社の課題に「京」が適用可能か、有効な結果が得られそうかを見極めることができます。

本格利用(実証利用・個別利用)に向けたソフトウェアの準備もできます。

### <募集概要>

- ◆ 募集時期 随時受付中
- ◆ 利用期間 6か月
- ◆ 利用計算資源 1課題あたり最大5万ノード時間積  
利用ノード数は24ノード以上で申請して下さい。
- ◆ 利用料金 無償
- ◆ 利用報告書 課題終了後60日以内に利用報告書(成果公開版)を提出  
願います。HPCIのポータルサイトで公開されます。  
企業秘密に関する内容までの記載は不要です。
- ◆ 成果公開 課題終了後3年以内の成果の公開は不要です。  
トライアルユースの審査は、迅速に行われ、速やかに結果をお知らせします。

これまで35課題の応募があり、その内33課題が採択されました。

17

## 3-2.「京」募集課題 ～実証利用～

成果を公開することにより、  
無償で大規模なシミュレーションを実施可能。

### <募集概要>

- ◆ 募集時期 毎年秋に募集開始(H27年度募集は、H26/10/1)
- ◆ 利用開始 毎年4月 (H27年度課題開始 H27年4月より)
- ◆ 利用期間 1年間。
- ◆ 利用計算資源 最大800万(\*)/最大500万ノード時間積
- ◆ 利用料金 無償
- ◆ 利用報告書 課題終了後60日以内に利用報告書(成果公開版)を  
提出願います。HPCIのポータルサイトで公開されます。
- ◆ 成果公開 課題実施終了後、3年以内に査読付き論文、「京」利用  
研究成果集(登録機関発行の電子ジャーナル)、  
公開技報、特許のいずれかに登録願います。

(\*) 企業5社以上が参加するコンソーシアムやグループの場合のみ申請可能。

18

## 3-2. 「京」募集課題 ～個別利用～

年1回の課題募集では  
予算要求のタイミング  
に合わない

必要に応じて  
タイムリーに利用を  
開始したい

募集中

産業界からの要望を踏まえて、  
個別利用課題の「随時」受付を開始。

個別利用課題のジョブは、他課題のジョブより**高い優先度(\*1)**で実行されます。

### <募集概要>

- ◆ 募集時期 随時受付中
- ◆ 利用計算資源 最大600万ノード時間積
- ◆ 利用期間 最長1年間で、利用者が期間を設定
- ◆ 利用料金 14,53円／ノード時間(H26年度) (\*2)
- ◆ 利用報告書 課題終了後60日以内に利用報告書(成果非公開版)を提出願います。  
具体的な成果の内容は非公開です。
- ◆ 成果公開 課題終了後3年以内の成果の公開は不要です。

(\*1) 9月、3月及び大規模ジョブ実行期間を除いた期間に適用

(\*2) -計算資源量の使用量に応じた費用が必要となります。-利用料金は年度ごとに改定されます。

-翌年度にまたがる課題は、各年度の利用実績に対して該当年度の利用料金(単価)が適用されます。

19

## 3-3. 「京」利用課題の課題申請

### 課題申請書に記入する項目(抜粋)

#### <研究内容>

- 研究の意義
- 研究の目的
- 研究の特色
- 期待される効果

#### <研究の波及効果>

#### <希望する計算資源を使う必要性>

#### <要求する計算資源量の利用計画>

#### <研究課題実施体制及び要員計画>

HPCI産業利用促進事業(トライアル・ユース) 募集申請書(追加シート)

| 研究情報                                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |          |              |             |      |           |      |     |    |           |        |     |    |           |          |       |    |
|----------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------|--------------|-------------|------|-----------|------|-----|----|-----------|--------|-----|----|-----------|----------|-------|----|
| 利用研究課題名                                |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |          |              |             |      |           |      |     |    |           |        |     |    |           |          |       |    |
| 研究課題代表者                                | HPCI産業利用促進事業(トライアル・ユース) 募集申請書(追加シート)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |          |              |             |      |           |      |     |    |           |        |     |    |           |          |       |    |
| 研究内容(研究の<br>基となる研究の<br>目的や期待される<br>効果) | 要求する計算資源量の利用計画<br>※研究に必要な計算資源量の試算結果を併記し、具体的な利用計画を記述願います。<br>「京」のトライアル・ユースでは、9ヵ月間、5万ノード時間までの利用が可能です。<br>「京」以外のトライアル・ユースでは、利用する計算機資源によって、利用期間、利用資源量が異なり<br>ますので、HPCIポータル等で最新の情報を確認の上、ご記入下さい。<br><記入例><br>(計算対象データ)<br><table border="1"><thead><tr><th>データ名</th><th>データサイズ(原データ)</th><th>タイムスラップ数</th><th>実行実績</th></tr></thead><tbody><tr><td>データA(小規模)</td><td>144万</td><td>100</td><td>あり</td></tr><tr><td>データB(中規模)</td><td>3,880万</td><td>600</td><td>あり</td></tr><tr><td>データC(大規模)</td><td>1億4,400万</td><td>5,000</td><td>なし</td></tr></tbody></table>                                                                                                                                                                                                                 | データ名     | データサイズ(原データ) | タイムスラップ数    | 実行実績 | データA(小規模) | 144万 | 100 | あり | データB(中規模) | 3,880万 | 600 | あり | データC(大規模) | 1億4,400万 | 5,000 | なし |
| データ名                                   | データサイズ(原データ)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | タイムスラップ数 | 実行実績         |             |      |           |      |     |    |           |        |     |    |           |          |       |    |
| データA(小規模)                              | 144万                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | 100      | あり           |             |      |           |      |     |    |           |        |     |    |           |          |       |    |
| データB(中規模)                              | 3,880万                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 600      | あり           |             |      |           |      |     |    |           |        |     |    |           |          |       |    |
| データC(大規模)                              | 1億4,400万                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | 5,000    | なし           |             |      |           |      |     |    |           |        |     |    |           |          |       |    |
| 2) 研究の目的                               | ※ご希望の利用開始月より、およびその利用資源量を記入下さい。<br>1. プログラムの移植と小規模データでの実行確認<br>(1)移植作業: 6月<br>プログラムのmake作業に1ヵ月程度を見込む。(Oライオンノードのクロスコンパイル)<br>(2)小規模データでの実行確認: 7月~8月<br>トライアル・ユースでの実行確認<br>並列実行での動作確認、性能測定、高速化作業<br>データA: 12ノード×360秒×1ケース×100回 → 120ノード時間<br>移植~高速化作業については、EISTに実装を依頼する予定。<br>2. 中規模データでの実行<br>(1)中規模データでの実行: 9月<br>データB: 324ノード×1,000秒×10ケース×10回 → 9,000ノード時間<br>3. 大規模データでのテスト実行とプログラムの最適化<br>(1)中規模データの作成: 9月<br>(2)テスト実行と結果検証: 9~10月<br>データC: 1,200ノード×1.8時間×20ケース → 36,000ノード時間<br>4. 追加計算とデータのバックアップ<br>(1)追加計算: 11月<br>追加実行: 6,700ノード時間程度<br>(2)データのバックアップ: 12月<br>※利用終了後、1ヵ月間はデータアクセスが可能で、その期間にバックアップできます。<br>※低価格帯の実験<br>当該利用研究費<br><table border="1"><thead><tr><th>要求資源量</th><th>合計</th></tr></thead><tbody><tr><td>50,000ノード時間</td><td></td></tr></tbody></table> | 要求資源量    | 合計           | 50,000ノード時間 |      |           |      |     |    |           |        |     |    |           |          |       |    |
| 要求資源量                                  | 合計                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |          |              |             |      |           |      |     |    |           |        |     |    |           |          |       |    |
| 50,000ノード時間                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |          |              |             |      |           |      |     |    |           |        |     |    |           |          |       |    |
| 3) 研究の特色                               |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |          |              |             |      |           |      |     |    |           |        |     |    |           |          |       |    |
| 4) 期待される効果                             |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |          |              |             |      |           |      |     |    |           |        |     |    |           |          |       |    |
| 5) その他事項                               |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |          |              |             |      |           |      |     |    |           |        |     |    |           |          |       |    |

<トライアル・ユース課題申請書>

## 3-4.「京」の利用課題の選定基準

| 選定基準(*1)                                                                      | トライアル・ユース<br>募集中 | 実証利用            |                | 個別利用<br>募集中 |
|-------------------------------------------------------------------------------|------------------|-----------------|----------------|-------------|
|                                                                               |                  | 100万/<br>250万NH | 800万NH<br>(*2) |             |
| (1)京が有する計算資源を必要としていること。                                                       | ○                | ○               |                | ○           |
| (2)ソフトウェアの効率性(並列性)、計算処理、データ収集、結果の解析手法等が十分に検証済みであるとともに、各種資源の利用計画や研究体制が妥当であること。 | ○                | ○               |                | ○           |
| (3)提案課題の実施及び成果の利用が平和目的に限定される等、科学技術基本法や社会通念等に照らして、当該利用研究課題の実施が妥当であること。         | ○                | ○               |                | ○           |
| (4)産業利用課題<br>(イ)自社内では実施できない解析規模や難易度の課題であること。                                  |                  | ○               |                | ○           |
| (ロ)産業応用の出口戦略が明確な課題であること。                                                      | ○                | ○               |                | ○           |
| (ハ)産業利用の開拓に向けた波及効果(社会への貢献)が十分期待できる課題であること。                                    | ○                | ○               |                | ○           |
| (ニ)実利用に向けた計画や展望があること。                                                         | ○                |                 |                |             |

(\*1) 産業利用WG ⇒ 課題審査委員会 ⇒ 選定委員会の3階層で公正・透明な手続きにより審査

(\*2) 800万ノード時間積クラスは企業5社以上が参加するコンソーシアムやグループの場合のみ申請可能。

「京」も「京」以外の課題も課題申請書のみで審査されます。  
上記の選定基準(利用条件)を満たしていることを記述してください。

21

## 3-4.「京」の利用課題の選定基準

| 選定基準(*1)                                                                    | トライアル・ユース<br>募集中 | 実証利用            |                | 個別利用<br>募集中 |
|-----------------------------------------------------------------------------|------------------|-----------------|----------------|-------------|
|                                                                             |                  | 100万/<br>250万NH | 800万NH<br>(*2) |             |
| (ホ)各社単独では実施が困難であるが、コンソーシアムやグループによるノウハウの共有や役割分担等により、実施が可能となる解析規模や難易度の課題であること |                  |                 | ○              |             |
| (ヘ)課題としての出口戦略が明確であることに加え、参加する各企業毎に明確な出口戦略を持っていること。                          |                  |                 | ○              |             |
| (ト)産業利用の開拓に向けた波及効果(社会への貢献)が、各社単独で実施する場合よりも大きな効果が期待できる課題であること。               |                  |                 | ○              |             |

(\*1) 産業利用WG ⇒ 課題審査委員会 ⇒ 選定委員会の3階層で公正・透明な手続きにより審査

(\*2) 400万ノード時間積クラスは企業5社以上が参加するコンソーシアムやグループの場合のみ申請可能。

「京」も「京」以外の課題も課題申請書のみで審査されます。  
上記の選定基準(利用条件)を満たしていることを記述してください。

22

## 3-5. 「京」以外のHPCIトライアル・ユース

募集中

| 資源提供機関名                   | 利用可能資源名       | 提供期間     | 1課題の資源量                                  | 1課題の利用期間                              |
|---------------------------|---------------|----------|------------------------------------------|---------------------------------------|
| 理化学研究所<br>計算科学研究機構        | スーパーコンピュータ「京」 | 提供中      | 最大5万ノード時間                                | 6か月                                   |
| 北海道大学<br>情報基盤センター         | SR16000/M1    | 提供中      | 演算時間:<br>49,000,000秒まで<br>ファイル容量:7.88TB迄 | 6ヶ月程度                                 |
| 東北大学<br>サイバーサイエンス<br>センター | LX406Re-2     | 提供中      | LX406Re-2:24ノード                          | 3ヶ月程度<br>(新規利用企業が対象)                  |
|                           | SX-ACE        | 2015/4～  | 512ノード                                   |                                       |
| 名古屋大学<br>情報基盤センター         | CX400         | 提供中      | 50,000ノード時間程度                            | 6ヶ月程度                                 |
|                           | FX10          | 提供中      |                                          |                                       |
| 京都大学<br>学術情報メディア<br>センター  | CRAY XE6      | 提供中      | 8,12,16ノードから選択                           | 3ヶ月/6ヶ月の選択<br>開始時期は年4回<br>(1/4/7/10月) |
| 大阪大学<br>サイバーメディアセンター      | SX-ACE        | 2014/12～ |                                          | 1,3,6か月,1年等                           |
| 統計数理研究所<br>統計科学技術センター     | SGI<br>UV2000 | 提供中      | 一般利用の制限値に準<br>ずる                         | 6か月                                   |

23

## 3-5. 「京」以外 HPCI資源問合せ先

| 資源提供機関名                   | 利用期間                           | 問い合わせ先                          |
|---------------------------|--------------------------------|---------------------------------|
| 北海道大学<br>情報基盤センター         | 情報環境推進本部<br>共同利用・共同研究担当        | kyodo@oicte.hokudai.ac.jp       |
| 東北大学<br>サイバーサイエンス<br>センター | センター本館三階<br>共同利用支援係(受付)        | uketuke@cc.tohoku.ac.jp         |
| 名古屋大学<br>情報基盤センター         | 情報連携統括本部 情報推進部<br>情報基盤課 共同利用担当 | kyodo@ itc.nagoya-u.ac.jp       |
| 京都大学<br>学術情報メディアセンター      | 共同利用                           | zenkoku-kyo@media.kyoto-u.ac.jp |
| 大阪大学<br>サイバーメディアセンター      | 情報推進部情報基盤課<br>研究系システム班(2F)     | system@cmc.osaka-u.ac.jp        |
| 統計数理研究所                   | 統計科学技術センター                     | kks@ism.ac.jp                   |

随時更新されますので、最新の詳細情報はHPCIポータルを参照ください。

<https://www.hpci-office.jp/> → 課題募集 → 現在受付中の課題募集 →

「京」以外のHPCI共用計算資源の産業利用課題(トライアルユース)の随時募集 → 提供資源一覧表

24

## 4.「京」で利用可能なソフトウェアについて

4-1 「京」で利用可能なソフトウェアの種類

4-2 「京」の産業利用課題の利用状況

25

### 4-1.「京」で利用可能なソフトウェアの種類

#### 国のプロジェクトにおいて開発されたソフトウェア

⇒「京」上で高並列(数万ノード規模)による実行が可能

- ・グランドチャレンジアプリケーションの研究開発  
(次世代生命体統合シミュレーションソフトウェア、次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア)
- ・イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発

→戦略5分野の研究課題への適用による機能・性能向上

#### オープンソースソフトウェア (OSS)

⇒ 無償利用可能。高並列に対応しているソフトもある。  
ソースコードの改変が可能。

#### 商用ソフトウェア

#### 自社開発ソフトウェア

26

## 4-2.「京」の産業利用課題のソフトウェア利用状況

### 実証利用およびトライアル・ユースにおいて利用実績のある主なソフトウェア

|           |                   |             |          |                   |             |
|-----------|-------------------|-------------|----------|-------------------|-------------|
| 工学・ものづくり  | FrontFlow/red     | 国プロソフト      | 物質・材料・化学 | PHASE             | 国プロソフト      |
|           | FrontISTR         | 国プロソフト      |          | OCTA/SUSHI        | オープン・フリーソフト |
|           | LS-DYNA           | 商用ソフト       |          | modylas           | 国プロソフト      |
|           | PAM-MEDYSA        | 商用ソフト       |          | Car-Parrinello MD | オープン・フリーソフト |
|           | ADVENTURECluster  | 商用ソフト       |          | VSOP              | 商用ソフト       |
|           | FINAS/CFD         | 商用ソフト       |          | WIEN2K            | 商用ソフト       |
|           | FrontFlow/blue    | 国プロソフト      |          | RMC++             | オープン・フリーソフト |
|           | ADSTEFAN          | 商用ソフト       |          | LAMMPS            | オープン・フリーソフト |
|           | OpenFOAM          | オープン・フリーソフト |          | ELSES             | オープン・フリーソフト |
|           | NuFD/FrontFlowRed | 商用ソフト       |          | VASP              | 商用ソフト       |
|           | LIGGGHTS          | オープン・フリーソフト | バイオ・ライフ  | GROMACS           | オープン・フリーソフト |
|           | Poynting          | 商用ソフト       |          | AMBER12           | 商用ソフト       |
| 防災・減災、その他 | OpenFOAM          | オープン・フリーソフト |          | CGBVS             | 商用ソフト       |
|           | 情報・計算機科学          | LuxRender   |          | MP-CAFEE          | オープン・フリーソフト |
| MP2-FMO   |                   |             |          | オープン・フリーソフト       |             |
|           |                   | Modylas     |          | 国プロソフト            |             |
|           |                   | Czeeks      | 商用ソフト    |                   |             |

27

## 4-2.「京」の産業利用課題のソフトウェア利用状況

### 「京」の産業利用で良く利用されているアプリケーション・ソフトウェア

| 利用プログラム        | 利用企業数 | 利用課題数 | 分野       | 種別       |
|----------------|-------|-------|----------|----------|
| LAMMPS         | 9     | 13    | 計算化学(MD) | オープンソース  |
| OpenFOAM       | 6     | 9     | 流体解析     | オープンソース  |
| FrontFlow/blue | 6     | 6     | 流体解析     | 国家プロジェクト |
| FrontFlow/red  | 4     | 6     | 流体解析     | 国家プロジェクト |
| LS-DYNA        | 4     | 6     | 構造解析(衝突) | 商用       |
| FrontISTR      | 3     | 4     | 構造解析     | 国家プロジェクト |
| MODYLAS        | 2     | 4     | 計算化学(MD) | 国家プロジェクト |
| GROMACS        | 2     | 3     | 計算化学(MD) | オープンソース  |
| VSOP           | 2     | 3     | 計算化学(MD) | 商用       |
| ELSES          | 2     | 2     | 電子構造計算   | 国家プロジェクト |

H24年度～H26年度までの「京」産業利用課題(トライアル・ユースと実証利用)の採択課題の申請書から、利用企業数の多い上位のソフトウェア(インハウスを除く)を集計。(2014.10.10現在)

28

## 5.「京」に関する利用支援

5-1 「京」に関する利用支援

5-2 産業利用のための拠点

29

### 5-1.「京」に関する利用支援

---



「京」以外のHPCIシステム構成機関に関わる内容は、一元的窓口としてヘルプデスクが受け付けた後、各構成機関が対応します。

30



## 5-1.「京」に関する利用支援 ～ 利用相談 ～

### 利用相談例

- － 利用前の事前相談(申請書の記載方法、応募方法等)
- － 「京」上で動作するアプリ、ライブラリ、ツール等の問合せ
- － シングルサインオン、データ転送等の方法
- － コンパイル、実行等で問題が発生した時
- － プログラムの移植で問題が発生した時
- － 実行性能情報の採取方法
- ・
- ・
- ・

31

## 5-1.「京」に関する利用支援 ～高度化支援～

### ■ 利用者のプログラムの並列化、高速化支援

- 実行性能分析支援
  - ・ 性能情報採取の支援、性能ホットスポットの調査
  - ・ CPU単体性能、並列性能、インバランス、ボトルネック分析等
- 単体性能・並列性能向上策のアドバイス等
- 打合せを随時実施し、密接なサポートを実施

※1件当たりの支援期間は、3ヶ月を目安。

※**利用支援の費用は無償**。計算資源は、支援課題の資源を使用。

共用開始後、**1年半で48課題を支援**

事例: OpenFOAM移植支援(パッチ提供、性能評価)

LAMMPS 分割ファイルによるリスタート対応

SIMD化、ソフトウェアパイプラインによる実行性能の改善(効率3.9%⇒8.7%)

MPIジョブのインバランス改善(2倍強の改善)

詳細はこちら [https://www.hpci-office.jp/pages/k\\_koudoka\\_results](https://www.hpci-office.jp/pages/k_koudoka_results)

32

## 5-1. 「京」に関する利用支援 ～各種情報提供～

### HPCIポータル URL

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



### HPCIポータルサイトで提供している内容

- **HPCIについて**
  - HPCIシステム、ネットワーク基盤
  - 登録機関およびHPCI運用事務局の役割など
- **利用案内**
  - 利用のための仕組み、手続き
  - 提供されるハードウェア・ソフトウェア資源一覧など
- **課題募集**
  - 募集中の課題、過去の課題募集
  - 課題選定の結果など
- **利用成果**
  - 成果発表DB、利用報告書、中間報告会
  - 研究成果報告に関する手続き
- **イベント・広報**
  - 講習会、セミナー、シンポジウム、研究会の案内
  - 広報誌(京算百景)・パンフレットなど
- **利用者のページ**
  - 利用相談・技術相談
    - ヘルプデスク
    - 「京」高度化支援課題の募集について
    - アクセスポイント
  - 利用者講習会・セミナー・シンポジウム等のお知らせ
  - 課題参加者の変更手続き
  - 各資源提供機関が提供するHPCI関連情報
  - HPCI基盤利用に関するマニュアルなど

33

## 5-1. 「京」に関する利用支援 ～利用成果DB～

### [成果の種類]

論文(査読付)  
論文(査読なし)  
国際会議・シンポジウム  
国内学会・シンポジウム  
研究会等  
一般向け講演会・セミナー  
新聞・TV・雑誌・広報誌等  
書籍  
プログラム・DB公開  
特許出願・取得

成果情報の最新(H27/1)  
登録件数: 2,399件

|                 | 課題の種類（複数の課題が関与する成果発表は各「課題の種類」の件数としてカウントされます） |      |      |                    |      |             |        |        |        |        | 合計   | 正味の<br>成果発表<br>件数 |
|-----------------|----------------------------------------------|------|------|--------------------|------|-------------|--------|--------|--------|--------|------|-------------------|
|                 | 「京」 一般利用                                     |      |      | 「京」以外のHPCI<br>一般利用 |      | HPCI戦略プログラム |        |        |        |        |      |                   |
|                 | 一般                                           | 若手育成 | 産業利用 | 一般                 | 産業利用 | 分野1...      | 分野2... | 分野3... | 分野4... | 分野5... |      |                   |
| 論文(査読付き)        | 66                                           | 9    | 6    | 69                 | 2    | 10          | 69     | 8      | 25     | 19     | 283  | 247               |
| 論文(査読なし)        | 5                                            | 2    | 6    | 4                  | 0    | 10          | 4      | 11     | 11     | 2      | 55   | 52                |
| 国際会議・シンポジウム     | 159                                          | 15   | 7    | 130                | 0    | 36          | 137    | 75     | 109    | 56     | 724  | 665               |
| 国内学会・シンポジウム     | 113                                          | 18   | 41   | 82                 | 2    | 51          | 101    | 82     | 156    | 45     | 691  | 643               |
| 研究会等            | 72                                           | 4    | 36   | 35                 | 0    | 29          | 49     | 58     | 27     | 29     | 339  | 323               |
| 一般向け講演会等        | 11                                           | 2    | 16   | 8                  | 0    | 23          | 9      | 5      | 10     | 6      | 90   | 87                |
| 新聞/TV/WEB配信/雑誌等 | 12                                           | 0    | 56   | 19                 | 1    | 12          | 31     | 38     | 2      | 27     | 198  | 188               |
| 書籍              | 2                                            | 0    | 2    | 5                  | 0    | 1           | 1      | 2      | 0      | 0      | 13   | 13                |
| プログラム・DB公開      | 1                                            | 1    | 0    | 0                  | 0    | 2           | 0      | 0      | 0      | 0      | 4    | 4                 |
| 特許出願・取得         | 0                                            | 0    | 0    | 0                  | 0    | 2           | 0      | 0      | 0      | 0      | 2    | 2                 |
| 合計              | 441                                          | 51   | 170  | 352                | 5    | 176         | 401    | 279    | 340    | 184    | 2399 | 2224              |
|                 | 662                                          |      |      | 357                |      | 1380        |        |        |        |        |      |                   |

データベース最終更新日: 2015年01月20日

### HPCIポータル

([www.hpci-office.jp](http://www.hpci-office.jp))  
→ 利用成果

| 研究内容<br>「京」 (産業利用)                                                           | タイトル<br>発表者/発表 年度 | 研究分野<br>研究機関                                           |
|------------------------------------------------------------------------------|-------------------|--------------------------------------------------------|
| 1. hpci20025 DSPにおけるスライム系の利用<br>(山崎一夫(大日本印刷))                                |                   | 科学技術振興機構 COIワークショップ<br>東京                              |
| 2. hpci20026 スライム系により記されるインシリコ創薬の可能性<br>(山崎一夫(大日本印刷))                        |                   | 創薬連携フォーラム第5回シンポジウム<br>東京                               |
| 3. hpci20027 スライム系により記されるインシリコ創薬の可能性<br>(山崎一夫(大日本印刷))                        |                   | CRISPR技術「創薬を促した大規模創薬の活用」<br>東京                         |
| 4. hpci20028 精神神経疾患治療薬の副作用抑制に対する作用機序解析<br>(山崎一夫(大日本印刷))                      |                   | 第1回分子シミュレーション研究会<br>新潟                                 |
| 5. hpci20029 Spring-8とスライム系を用いた低コストタイパ開発 ～物質材料研究のマルチスケール問題～<br>(山崎一夫(大日本印刷)) |                   | 科学技術振興機構 COIワークショップ インノベーション創成に向けた大規模シミュレーションの活用<br>東京 |
| 6. hpci20030 タイパシステムのナノ粒子集積構造とマクロ物性制御<br>(山崎一夫(大日本印刷))                       |                   | 日本学術振興会 研究開発費助成<br>大阪                                  |
| 7. hpci20031 タイパシステムの開発における分子シミュレーションの活用<br>(山崎一夫(大日本印刷))                    |                   | J-OC3A3-ユーザー会議2013<br>東京                               |
| 8. hpci20032 ナノ粒子集積システムにおける結晶成長解析<br>(山崎一夫(大日本印刷))                           |                   | Spring-8利用推進協議会 ガラス・セラミックス研究会第4回<br>大阪                 |

34

## 5-1. 「京」に関する利用支援 ～講習会・セミナー～

### <一般・初心者向け>



#### HPCプログラミングセミナー

チューニング・並列化 (OpenMP・MPI)に関するセミナー

### <一般・経験者向け>



#### ワークショップ

高速化事例紹介等、ユーザ間の情報共有のためのワークショップ

### <「京」利用者・利用予定者向け>



#### 「京」初中級者向け講習会

「京」利用者・利用予定者を対象にした初級者ハンズオンコース、中級者向けチューニングコース

35

## 5-2. 産業利用のための拠点（アクセスポイント）

### ◇「京」を含むHPCIの産業利用のため、HPCIシステムの利用拠点

- 事前申込みにより、無料で利用可能
- ICカードによる入退室管理などセキュリティに配慮
- HPCIのネットワーク基盤に高速にアクセスできる端末
- 専任の技術スタッフによる利用相談・利用支援（無料）

#### ● HPCIアクセスポイント東京（AP東京）

RIST東京事務所に設置

（京浜急行線新馬場駅から徒歩2分）

<http://tokyo.rist.jp/ap-tokyo/>

#### ● HPCIアクセスポイント神戸（AP神戸）

公益財団法人計算科学振興財団(FOCUS)に設置

（最寄り駅「京コンピュータ前駅」（ポートライナー）より徒歩約3分）

<http://www.j-focus.or.jp/ap-kobe/>



36

## 5-2. 産業利用のための拠点（アクセスポイント東京）

- ・ 常駐の技術スタッフによるユーザー支援
  - － HPCI申請前相談（申請書の書き方、内容のご相談）
  - － HPCI利用方法、コンパイル、性能測定方法のご相談
  - － 高度化支援（性能分析支援、並列化・高速化支援、プリポスト支援）
- ・ HPCI接続用端末を設置
- ・ 10Gbpsの専用回線を整備
- ・ 各種イベントの実施
  - － ソフトウェア講習会、ユーザブリーフィング、利用相談会

<http://tokyo.rist.jp/ap-tokyo/>

Tel: 03-6433-0670

E-mail: [ap-tokyo@rist.jp](mailto:ap-tokyo@rist.jp)



The poster for HPCI Access Point Tokyo features a blue background with a city skyline. At the top, it says '利用前からチューニングまで 産業界のスパコン利用を幅広くサポートする利用拠点' (From before use to tuning, a utilization base that broadly supports supercomputer utilization in the industrial sector). The main title is 'HPCIアクセスポイント東京'. Below the title, there are several callouts: '手持ちのアプリケーションをスパコン用にチューニングしたい' (I want to tune my own applications for supercomputers), '誰にも見られない環境で京やHPCIのスパコンを利用したい' (I want to use Keio or HPCI supercomputers in an environment where no one can see), '京やHPCIのスパコンを利用するためにはどうすればいいか?' (How should I do it to use Keio or HPCI supercomputers?), and 'アプリケーションの高並列化について具体的な相談をしながら作業をしたい' (I want to work while consulting specifically about high parallelization of applications). The bottom section is titled '専任のスタッフによる利用支援' (Utilization support by dedicated staff) and describes the services. It also mentions 'セキュリティに配慮した作業用個室' (A private work room with security considerations) and shows a diagram of the workflow from application tuning to high parallelization.

37

## 問い合わせ先

### ■ ヘルプデスク:

- ご相談対応時間: 平日9:00～17:30
- メールによるお問い合わせ先: [helpdesk@hpci-office.jp](mailto:helpdesk@hpci-office.jp)
- 電話によるお問い合わせ先: 078-940-5795

### ■ RIST 産業利用推進室(東京)

- ご相談対応時間: 平日9:00～17:30
- メールによるお問い合わせ先: [ap-tokyo@rist.jp](mailto:ap-tokyo@rist.jp)
- 電話によるお問い合わせ先: 03-6433-0670

38

