

HPCI 計画推進委員会

今後の HPCI 計画推進のあり方に関する

検討ワーキンググループ

産業利用アプリケーション

検討サブワーキンググループ報告書

平成 25 年 9 月

HPCI 計画推進委員会

今後の HPCI 計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ

産業利用アプリケーション検討サブワーキンググループ

目次

序章 はじめに.....	1
第1章 スーパーコンピュータの産業利用の位置付け.....	2
1. 1 産業利用を推進する理由.....	2
1. 2 リーディングマシンの産業利用.....	2
第2章 スーパーコンピュータの産業利用の現状と将来展望.....	3
2. 1 産業利用の現状.....	3
2. 2 産業利用の将来展望.....	4
第3章 産業界で利用されるアプリケーションの将来展望.....	4
3. 1 技術的な課題と将来動向.....	4
3. 2 市販ソフトウェアの将来展望.....	5
3. 3 国プロ開発アプリケーションの将来展望.....	6
3. 4 オープンソース・ソフトウェア（OSS）の将来展望.....	7
第4章 アプリケーションの観点からのスーパーコンピュータ利用の推進.....	7
4. 1 市販ソフトウェアと国プロアプリ等との関係.....	8
4. 2 市販ソフトウェアに対する支援.....	9
4. 3 国プロアプリ等の普及促進.....	10
4. 4 産業利用アプリケーションの中長期的高度化.....	11
第5章 おわりに.....	12
参考資料.....	13

序章 はじめに

スーパーコンピュータを用いたシミュレーションは、理論、実験に並ぶ科学技術の第3の手法として、科学技術の様々な分野において不可欠な研究開発基盤である。最近ではものづくりの現場において試作・試験・評価のプロセスをシミュレーションで代替することにより、効果的・効率的に新しい製品の開発を進めている。また、最近の計算機の能力の進展に伴い、様々な物質における原子や分子の挙動、電子の状態などを量子力学などの基本的な法則をベースとしたシミュレーションが可能となり、新しい材料の性質や薬候補物質の効果などを詳細に予測することが現実のものとなってきている。加えて、ビッグデータのような膨大なデータの処理・解析やデータ同化などに関しても、スーパーコンピュータの利用が進みつつある。この際、シミュレーションをはじめとして、産業界等におけるスーパーコンピュータの利活用が進む中で、それによる新たなイノベーションの創出が期待されている。

このような背景のもと、今後とも産業界におけるスーパーコンピュータの利活用を促進し、イノベーションの創出を加速していくためには、産業界が利用するアプリケーション・ソフトウェア（以下「アプリケーション」という。）の検討が欠かせない。産業界におけるスーパーコンピュータの利活用とは、スーパーコンピュータ上で実行されるアプリケーションの利活用と言い換えても過言ではなく、したがって、アプリケーションのあり方を踏まえ、スーパーコンピュータの利用促進方策を検討する必要がある。このため、産業界が利用するアプリケーション（以下「産業利用アプリケーション」という。）の利用の現状及び将来の見通し並びにそれに対する開発計画などについて調査検討し、「今後のHPCI計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ」の議論に反映するべく、当該ワーキンググループの下に「産業利用アプリケーション検討サブワーキンググループ」（以下「サブWG」という。）が設置された。

本サブWGでは、エクサスケール時代（2020年頃）に実用化されている、あるいは、実用化のための実証研究が実施されていることが想定される、市販ソフトウェア、国のプロジェクトで開発されたアプリケーション（以下「国プロ開発アプリケーション」という。）、オープンソース・ソフトウェア（OSS）（※）のそれぞれに関して、現状ではどのような使われ方をしているか、エクサスケール時代におけるそれらの使われ方に関するビジョン及びこれらのアプリケーションの開発者がどのような将来展望や開発計画を持っているかを調査し、アプリケーションが実用化されるまでの過程を見通した上で、支援のあり方を提

言としてまとめた。

※本報告書では、ソースが公開されているアプリケーションのうち、国プロ開発アプリケーション以外のものを、OSS と称している。

第1章 スーパーコンピュータの産業利用の位置付け

1. 1 産業利用を推進する理由

「序章 はじめに」で述べた背景の中で、国全体としてスーパーコンピュータの産業利用を積極的に推進する理由としては、以下のことが挙げられる。

- ・スーパーコンピュータの高度な利用により、我が国の国際的な産業競争力の強化が期待される。
- ・産業界でのスーパーコンピュータ利用が進むことにより、スーパーコンピュータ本体事業、アプリケーション事業及び利用に関連する事業（HPC クラウドなど）が進展し、全体として、我が国のスーパーコンピューティング技術の競争力の強化に資することが期待される。
- ・スーパーコンピュータの産業利用が進むことで将来的な社会的・科学的課題が明確になり、それをアカデミアへフィードバックをかけることによって、大学等における研究のさらなる進展が期待される。

1. 2 リーディングマシンの産業利用

産業界では、基本的にその時代の世界トップの計算機の能力の 1/10 から 1/100 程度の能力（リソース）を用いた計算に対する実証研究が行われ（「京」の産業利用を例にとると、1,000 ノードから 1 万ノードを利用した実証研究）、実証研究が成功した場合には、数年後の実用化を目指した実用化研究が実施される。あるアプリケーションが実用化された場合、企業の直接的な生産活動のためのアプリケーションの実行には、民間の HPC クラウドサービスや企業が自社で整備した計算機が使われることになる。なお、リーディングマシン（現時点では「京」を頂点とした HPCI 資源がこれに相当するが、エクサスケール時代のリーディングマシンについては今後議論される。）は基本的には上記の実証研究に対して供されるべきものであるが、バルクジョブを利用した実証研究においては、実証研究の過程において得られた成果が直ちに実用化されることも期待される。

そのような実証研究と実用化の関係を踏まえると、実証されたアプリケーションに大幅な変更を加えずに実用化するためには、実証研究に供されるリーデ

リングマシンのアーキテクチャは、実用化の際に使用される計算機のアーキテクチャと親和性の高いものであることが必須である。

さらに、上記の構造を踏まえると、我が国に世界トップレベルのリーディングマシンが存在しなければ、当該マシンを実証の場とするような、将来の産業競争力強化に資する先端的应用は生まれず、我が国の産業利用アプリケーションはじり貧になるおそれがある。その意味では、我が国として世界トップレベルのリーディングマシンを開発・整備することは、アカデミアと産業界の両者にとって将来の競争を勝ち抜くための先行投資である。また、ハードウェアの開発だけで終わることなく、同時に、世界トップレベルのリーディングマシンを活用して、競争力に資する我が国発のアプリケーションを開発していくことが重要である。

第2章 スーパーコンピュータの産業利用の現状と将来展望

2. 1 産業利用の現状

現在、産業界では市販ソフトウェアが最も多く利用されているが、その理由は、これらのソフトウェアは検証が十分に行われており、また、プリ・ポスト処理等の機能やサポートが充実しているからである。スーパーコンピュータの利用形態としては、64 コア程度の並列計算によるバルクジョブ的な利用が多く、今後、並列規模は大きくなるが、この傾向は将来的にも続くものと思われる。

一方、大規模並列化による、シミュレーションの高速化・高精度化やマルチフィジックス・マルチスケール現象のシミュレーションの実用化にも大きな期待が集まっている。しかし、市販ソフトウェアの多くは使用コア数に比例したライセンス料を要求するので、市販ソフトウェアで大規模並列計算を実行することが困難なことも多く、64 コア程度の並列計算にとどまっており、マルチフィジックス・マルチスケール現象のシミュレーションもまだ実用的に利用されている状況にはない。そこで、このような大規模並列化によるシミュレーションの高度化・新展開の目的のためには、アカデミアの協力の下で、国プロ開発アプリケーションや OSS（以下「国プロアプリ等」という。）を利用して、1,000 コアから数万コアを使用した大規模並列計算が実証研究として実施されている。このための計算機リソースとしては、京を頂点とした HPCI 計算機資源の利用が進んでいる。

上記のいずれの使い方をする場合も、企業内で実務としてシミュレーションを利用するためには、解析のためのデータ作成、解析の実行、結果の処理も含めてシミュレーションの利用に伴う時間を長くても 1 ケースあたり数日以内に抑

える必要がある。

OSS に関しては利用サービスなどのビジネスが展開され始めている一方で、国プロ開発ソフトウェアを実用化するためにはしばらく時間がかかるものと予想され、開発済みのソフトウェアの維持や改良、普及のための努力を継続する必要がある。

また、産業界では実務で使用しているソフトウェアを乗り換える場合、検証計算の実施、所定の精度を確保するためのノウハウの蓄積、設計データからシミュレーションの入力データの作成、シミュレーション結果の後処理と設計への反映方法の検討などに関して相当なコストがかかる点にも留意する必要がある。

2. 2 産業利用の将来展望

2020 年頃のエクサスケール時代には、現在の「京」の 1/10 程度の能力を有するスーパーコンピュータが産業界でも自社で設備整備されたり、あるいは、HPC クラウドサービスなどを利用したりして、実務に供されているものと予想される。また、ものづくりの現場の試作・試験・評価プロセスにおいてシミュレーションによる実験の代替は更に進み、産業界におけるシミュレーションの重要性はますます高まっていると予想される。この時代には、以下のような利用がされているものと予想される。

- ・現在と同じ規模の計算を多数（数千から数万）同時に実行して、設計最適解を探索するためのバルクジョブ的な利用が進展する。
- ・大規模並列計算により、高精度（高解像度メッシュ）計算や高速化された計算が実行されている。
- ・現状できていない全系を対象としたマルチフィジックス・マルチスケール現象を解析するような、高度なシミュレーションも実用化、あるいは、実証研究フェーズにある。

以上のような利用に伴い、非常に膨大な量のデータを扱うことになることが予想される。

第3章 産業界で利用されるアプリケーションの将来展望

3. 1 技術的な課題と将来動向

産業界で利用されるアプリケーション・ソフトウェアは、市販ソフトウェア、国プロ開発アプリケーション、OSS 及びインハウス・ソフトウェアに大別されるが、そのいずれにも共通する、エクサスケール時代に想定される技術的な課

題を整理する。

まず、エクサスケール時代のスーパーコンピュータは大規模並列化とともに、ノード（CPU）のメニーコア化が進み、相対的にメモリ性能は悪化すると考えられ、このためアプリケーションの実効性能を担保することがますます困難となる。特に、現在産業界で最も多く用いられている熱・流体・構造解析等のアプリケーションで実現される計算速度は、現状のままでは、ピーク性能比で1%～5%程度になることが予想されている。また、分子動力学（MD）計算などのように、長時間のシミュレーション（膨大な数の時間積分計算）を行う要求もあるシミュレーションでは、大規模並列によって空間スケールを大きくすることはできても、時間スケールを大きく取ることは一般に難しい。さらに、現在使用されているアルゴリズムによっては基本的に大規模並列化に適していないものもあり、アプリケーションによっては大規模並列化に向かえないものも出てくるものと考えられる。すなわち、向き・不向きの観点から、アプリケーションごとにある程度の選択が行われていくことになる。

エクサスケール時代のアプリケーションに対するニーズとしては、マルチフィジックスに対応したソフトウェアの整備や、設計パラメータの最適化に対する自動化といった事柄がある。また、シミュレーションで扱うデータ量が膨大化することから、プリ・ポスト処理機能、ユーザインタフェース、大規模データの可視化機能の整備への要望が更に強まるものと予想される。アプリケーションの研究開発状況としては、上記のニーズに対応するためのソルバーの改良が引き続き行われるとともに、コンピュータ支援設計（CAD）といったツールへの集約が進むものと考えられる。

3. 2 市販ソフトウェアの将来展望

現在、産業界で最も利用されているアプリケーションは市販ソフトウェアであり、多くの企業ユーザが、現在利用している市販ソフトウェアを大規模並列計算環境でも使用することを望んでいる。その理由の一つとして、国プロアプリ等に移り換えるためのコストがかかることが挙げられる。

シミュレーションの全体的な動向としては並列化が進むことは自明なので、市販ソフトウェアもそのような方向に向かい、エクサスケール時代には、数百コアから数千コアを利用した中規模な並列計算まではカバーすると予想されるが、前述のように、全ての市販ソフトウェアが大規模並列化に向いているわけではなく、また、大規模並列化に対応したライセンス形態なども定着している状況とは言えない。

このように、現状との親和性という観点で市販ソフトウェアへの期待が大きいが、大規模並列化の問題やライセンスの問題を解決する必要がある。一方で、ソフトウェアベンダはユーザのニーズに敏感であり、そのニーズに応じて上記問題が解決されることも期待されるが、そのスピードを上げるための取組が必要となる。

3.3 国プロ開発アプリケーションの将来展望

大規模並列計算を実行する場合や新規機能を利用する必要がある場合、それに対応していない市販ソフトウェアの利用は考えにくい。アカデミアの協力の下で、国プロアプリ等が使われる。しかし、これまでに蓄積された知見を簡単には捨てることができないため、業務に浸透したソフトウェアを変えることは難しい。例えば、数倍速度が速くなった程度では乗り換えないと声がある。

一方で、市販ソフトウェアは直近の産業界のニーズを重視して開発を進める傾向にあるのに対して、国プロ開発アプリケーションはその時代のリーディングマシンへの対応などといった研究課題への挑戦が可能であり、当該リーディングマシンレベルのスペックを活用する市販ソフトウェア開発の機運が高まるまでは、国プロ開発アプリケーションの担う役割は大きい。また、国プロ開発アプリケーションは、得られた成果の公表には著作権者記載が求められるなどの条件はあるが、自由なライセンス形式をとっており、市販化につなげることができるなど、他のプロジェクトや企業との共同研究に利用が可能になっている。これらに加えて、先端的なスーパーコンピュータでアプリケーションが効率的に実行可能であるかどうかの見極めも、国のプロジェクトに求められている役割であると考えられる。

市販ソフトウェアは堅ろう性の向上や多機能化、高速化など、ユーザのニーズに応じた改良をして産業界の信頼を獲得しているため、国プロ開発アプリケーションを普及していくためには、市販ソフトウェアと差別化しつつ先導するべく、マルチフィジックス化などの複数ソフトウェアの統合や、より現実に近い新規な物理モデルの導入など、市販ソフトウェアにはない画期的な機能、先導的な機能を優先的に研究開発し、独自性をもたせることが必須となる。

また、開発者にとって、国プロ開発アプリケーションをその時代のリーディングマシンに移植することは、その移植自体が研究課題になるとはいえ、大変な労力を要することになるので、ハードウェアに詳しい専門的な技術者のサポートが必要となる。さらに、開発者へのサポートだけでなく、国プロ開発アプ

リケーションをはじめとしたオープンソースのソフトウェアの場合、普及のために、ソフトウェアを使うユーザの技術向上のためのサポートも必要となる。

3. 4 オープンソース・ソフトウェア（OSS）の将来展望

OSS は、ソースコードを公開し、営利・非営利の区別なく自由な利用、及び自由な再配付や派生物の作成を認めているソフトウェアである。このような形態をとることで、多数の有志が開発、検証、サポートを行うことで透明性の保証、開発や知識共有のスピードアップがはかれるという開発側の利点がある。このこととともに、目的に合わせたカスタマイズ（コードの最適化・大規模並列化・大規模化、独自の機能拡張や設計・解析システムへの組み込みなど）が自由であり、多くの場合、無償での利用が可能という利用者への利点もある。これらのため、産業界でも市販ソフトウェアの代替として OSS の利用が期待されている。一方で、ユーザによる開発や検証、サポートが加速すれば、OSS の強みとなりうるが、市販ソフトウェアと比較したときのサポート不足、堅牢性の低さなどによる導入・トレーニング・検証コストの高さもあり、産業界にとってまだ容易に乗換えができるものとはなっていないのが現状である。また、独自改良版として商品化されているアプリケーションの中には、元の OSS のブランドとなってしまい、ユーザによる開発や検証、サポートが行われなくなってしまうものがある。

今後、ハードウェアのアーキテクチャが発展していく中で、それを活用できるソフトウェアの開発・利用を続けるには、ソースが公開されたソフトウェアの発展が求められることから、国プロ開発アプリケーションと同様に、OSS への期待感は高い。その一方で、OSS は、成果をオープンにしていくことが基本姿勢として求められるので、OSS を用いたビジネスを育てることが難しいという課題があるとともに、開発者や有志による自由なカスタマイズが特徴であることから、その開発や普及を国が直接主導することは難しいことに留意が必要である。

第4章 アプリケーションの観点からのスーパーコンピュータ利用の推進

第1章から第3章までの議論を踏まえ、エクサスケール時代に向けて産業界におけるスーパーコンピュータの利活用を推進するため、産業利用アプリケーションの開発はどうあるべきか、さらに、そのために国等は何をすべきかを検討した。その際、単にアプリケーション開発に関する議論だけではなく、アプリケーションの移植の考え方や市販ソフトウェアのライセンス形態等について

も検討した。以下に検討結果をまとめる。

4. 1 市販ソフトウェアと国プロアプリ等との関係

市販ソフトウェアはユーザニーズに基づくベンダの経営・開発戦略に従って改良・高度化され、国プロ開発アプリケーションは政策的な要求（例えば大規模並列化や産業利用促進）に従って改良・高度化され、OSS は開発者やユーザコミュニティの意向に従って改良・高度化されていくことが基本である。その中で、特に国プロ開発アプリケーションについては、市販化される、市販ソフトウェアに取り込まれる、あるいは OSS に移行することなどによって、ある時点以降は自立化していくものもある。

以上のような発展の状況を踏まえ、市販ソフトウェアと国プロアプリ等のターゲットを使われるフェーズで整理すると、

- ・ 実用化後や実用化の手前のフェーズでは主に市販ソフトウェアや一部の普及した国プロアプリ等が使われる。
- ・ 実証研究のフェーズでは主に国プロアプリ等が使われ、このフェーズで産業界に受け入れられて普及すると、実用フェーズでも使われる。

こととなる。なお、実証研究より以前のフェーズでは、産学連携のプロジェクト（基礎基盤的な研究開発）等において、基本的には数年後の実証を目指したより先進的な国プロアプリ等が開発される。

また、同ターゲットをエクサスケール時代において各アプリケーションがカバーする並列コア数で整理すると、

- ・ 数百コアから数千コアを利用した中規模な並列計算までは主に市販ソフトウェアがカバーする。
- ・ 数万コア以上の大規模並列計算や連成解析などは主に国プロアプリ等がカバーする。

こととなる。

すなわち、市販ソフトウェアは直近の産業界のニーズ（実用フェーズのニーズ）を重視して開発を進めるため、国プロ開発アプリケーションは、市販アプリケーションを先導する観点も含め、その時代のトップレベルのスーパーコンピュータ、すなわち数年後の産業界において実用に供される規模のスーパーコンピュータを利用した実証研究に資するアプリケーションとするべきである。

そのため、国は、上記の役割分担を踏まえ、画期的・先導的なアプリケーションを開発していく必要がある。

以下、上記のようなフェーズにある各アプリケーションに対して、国等がど

のような支援をすべきかを議論した結果をまとめる。

4. 2 市販ソフトウェアに対する支援

市販のソフトウェアは既に検証も十分に行われており、産業界においてもその利用のための豊富なノウハウが蓄積されているため、市販ソフトウェアを高並列環境で利用したいというニーズは大きく、この傾向は今後ますます強まることが予想される。しかしながら、ソフトウェアがバイナリで提供されることが多いため、ユーザ自身が大規模並列化に対応することができず、また、現状では市販のソフトウェアの開発者やベンダも大規模並列環境にソフトウェアを移植したり、チューニングしたりする環境が十分に整っているとは言い難い。

そのため、「京」の産業利用枠の確保及び利用支援を引き続き確実に実施するとともに、新たなハードウェアの開発に当たっては、国やハードウェアベンダは、アプリケーションの大規模並列化・大規模化の実現やその新規のハードウェアへの移植作業の負担軽減のための機会として、テストベッド（アプリケーションの性能測定や移植ができる環境）を設け、希望するアプリケーション開発者やそのアプリケーションを利用するユーザがそれを利用できる環境を整える必要がある。また、アプリケーションの高度化を目指して移植を希望する者に対しては、国やベンダが協力した技術的支援体制も必要である。

上記のテストベッド環境はリーディングマシンを含む HPCI システムに構築することが考えられるが、高並列環境に移植された市販のアプリケーションが実際に産業利用される際には、第 1 章で述べたとおり、民間の HPC クラウドサービスや企業が独自に整備した計算機が利用されることになるため、HPCI システムとこれらの計算機とは、アーキテクチャや用意されるライブラリ等が同一あるいは類似のものでなければ、市販ソフトウェアの高並列化の大きな障害となる。このことは、スーパーコンピュータの産業利用を推進するための、HPCI システムの構築の際の重要な留意事項である。

また、産業利用アプリケーションはユーザのニーズに応じた改良や充実したサポートによって産業界の信頼を獲得しているため、ハードウェアのアーキテクチャが大きく変更されたとしても、そのアーキテクチャに対応したアプリケーションの開発・実証が進むまでの間は、既存のアプリケーションがそのまま利用される。この間に、新たなアーキテクチャのハードウェアと既存のアプリケーションとの親和性を担保し、そのハードウェアの産業利用を促進するために、ハードウェア開発者あるいはシステムソフトウェア開発者はエミュレータを開発し、ユーザに適宜提供すべきである。

一方、上記の支援等により市販ソフトウェアの高並列化が進展したとしても、大規模並列化に対応したライセンス形態が定着している状況とはいえ、例えば使用するノード数に比例してライセンス料が要求されるとすると、リーディングマシンによる大規模並列化された実証研究では、莫大なライセンス料が必要になることが懸念される。しかし、ソフトウェアのライセンス料は、開発コスト等を回収するための原資であり、また、市場原理に基づいて決定されるものなので、開発コストを軽減することや大規模並列化アプリケーションの市場を拡大することにより、中長期的にライセンス料の問題はおのずと解決されることが期待されるが、産業界におけるスーパーコンピュータの利用促進のためには、引き続きその解決を加速するための検討を行っていくことが重要である。

4. 3 国プロアプリ等の普及促進

産業界では国プロアプリ等に対する期待が大きい一方で、その利用が進まない理由としては、産業界においては伝統的な市販ソフトウェアの利用が大部分を占めており、蓄積されているデータも当該ソフトウェアを利用して作成されたものなので、国プロアプリ等を利用するには多大な乗換えコストが発生することや、国プロアプリ等の中には必ずしもユーザの要望や使いやすさを意識していないものもあるので、乗換えコストばかりが際立ってしまうことが考えられる。

しかしながら、国プロアプリ等については、市販ソフトウェアとの役割分担の点や市販ソフトウェアにはない画期的・先導的な機能を有する点で、スーパーコンピュータの産業利用の促進及び高度化には不可欠なものなので、開発までで終わることなく、責任を持って普及させていくべきである。それにより、産業界の研究開発を大規模並列化へと誘導することとなり、ひいては将来的な市販ソフトウェアの高度化にも資することとなる。

そのため、国は、国プロ開発アプリケーションについて、画期的・先導的な機能を重視して計画的な開発を行うとともに、アプリケーションの利用支援（使いやすくするための機能や膨大な量のデータを扱うことができるプリ・ポスト処理機能等の導入を行うこと、ユーザニーズの高いアプリケーションを対象としてサポート体制の構築を含む継続的な維持・管理を行うことなど）を充実させることで、市販ソフトウェアとの住み分けを意識しながら、その普及を加速する必要がある。その際、国プロ開発アプリケーションの商用化も含めて考えていく必要がある。

OSS についても、公募事業等を通じて国プロ開発アプリケーションになるこ

とや、逆に国プロ開発アプリケーションがプロジェクト終了後に OSS になることもあるので、そのようなダイナミックなアプリケーションの発展過程を前提として、画期的・先導的な機能を有するものやそのコミュニティの中で育ち、新しい重要な機能を持つことが見込めるものに対しては、国やユーザ等がテストベッド環境を提供するとともに、国プロ開発アプリケーションと同様の支援を検討する必要がある。

計画的な開発や利用支援の充実を図るに際しては、ユーザニーズを把握するためにユーザと開発者が情報共有できる場を設けるとともに、開発者のみによるサポートには限界があるので、それを補完するためにユーザ同士で情報交換できる場を設けることが望まれる。既に、一部の国プロアプリ等でもユーザコミュニティが形成されているが、産業利用の更なる促進のためには、そのほかの国プロアプリ等についても、例えば開発者を主体として、ユーザを含めたコミュニティを形成し、両者が一体となってその充実を図ることが重要であり、そのため、活動が活発になることが望まれるコミュニティに対しては、その活動が軌道に乗るまでの間は、例えばユーザ間の情報共有を目的とした会議の開催などといった活動を支援する方策について検討する必要がある。

4. 4 産業利用アプリケーションの中長期的高度化

産業界では、基本的にその時代の世界トップの計算機の能力の $1/10$ から $1/100$ 程度の能力（リソース）を用いた計算に対する実証研究が行われ、数年後の実用化を目指すことは第 1 章で述べたが、その際、同時代に、現存のアプリケーションにはない機能を有し、数年後の実証研究に利用されるアプリケーションの開発を目指したニーズ主導の基礎基盤的な研究開発が、当該計算機の数分の 1 程度の能力（リソース）を用いて進められていることも重要である。

すなわち、産業利用アプリケーションの中長期的な発展のためには、実証研究フェーズ以降にあるアプリケーションだけに着目するのではなく、プリ・ポスト処理も含めて、産業上の課題をシミュレーションによって解決することに資する、その時代の世界トップの計算機を活用した基礎基盤的な研究開発にも着目し、当該研究開発の成果が普及されることで次世代の実証研究に利用されるアプリケーションが質的に高度化される、という流れを創り出す取組を行うべきである。

そのため、国は、HPCI 戦略プログラムやいわゆるポスト「京」に向けたアプリケーション開発プロジェクト等の産業界のニーズを踏まえた基礎基盤的な研究開発を推進し、その成果を普及するとともに、画期的・先導的な機能を持続

的に生み出すため、アプリケーションの基礎となる理論（モデル、解法）を精緻化する研究や人材育成を支援していく必要がある。

第5章 おわりに

スーパーコンピュータの産業利用は、イノベーション創出等を通じた我が国の産業競争力の強化や、計算科学技術の成果の社会への還元などの観点から重要であり、その促進を図る必要がある。

そのため、本サブ WG では、これまでにない取組として、産業利用アプリケーションに注目し、アプリケーションの観点からスーパーコンピュータの利用促進を調査・検討した。その中で、産業利用の状況と現時点での将来展望を正確に把握するため、産業利用の支援組織、アプリケーションユーザとしての産業界及び産学連携研究者並びにアプリケーションプロバイダとしてのハードウェアベンダ、市販・OSS ソフトウェアベンダ及び国プロ開発アプリケーションの開発者からヒアリングを行い、その結果、第4章に示した提言を含む報告書を取りまとめた。

この報告書に関しては、国に対する提言を中心としつつベンダやユーザに対する問題提起も含まれており、また、4. 3や4. 4で述べた提言のように直ちに実行できること及び4. 2で述べた提言のようにいわゆるポスト「京」の開発に当たって今後重要になること並びにライセンスに係わる提言のように更なる検討が必要なことが複層的に含まれている。

国（国プロアプリの開発者を含む。）及びベンダ並びにユーザは、この報告書を踏まえ、実証研究と実用化、さらには実証研究の前段階の基礎基盤的研究開発という連続的なフェーズと、技術的・金銭的な乗換えコスト、利用支援の不足、ライセンス料等という市販・国プロ・OSS ごとの隘路を意識し、各々が適切に役割分担することで、全員野球で、我が国全体の産業利用アプリケーションを高度化し、そしてスーパーコンピュータの産業利用を促進していく必要がある。

本サブ WG 及びこの報告書が、スーパーコンピュータの産業利用を促進するための一助になれば幸いである。

参考資料

- 参考1 産業利用アプリケーション検討サブワーキンググループの設置について
- 参考2 産業利用アプリケーション検討サブワーキンググループ委員名簿
- 参考3 産業利用アプリケーション検討サブワーキンググループの検討経緯

HPCI 計画推進委員会

今後の HPCI 計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ
産業利用アプリケーション検討サブワーキンググループの設置について

平成 25 年 7 月 22 日
検 討 W G 決 定

1. 趣旨

今後とも産業界におけるスーパーコンピュータの活用を促進し、イノベーションの創出につなげていくためには、産業界が利用するアプリケーション・ソフトウェアの在り方を踏まえ、その利用促進方策を調査検討する必要がある。

このため、産業利用アプリケーションの開発・利用の現状及び将来の見通し等について調査検討し、今後の HPCI 計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループの議論に反映するべく、当該ワーキンググループの下に産業利用アプリケーション検討サブワーキンググループを設置する。

2. 調査検討事項

- ・産業界において利用されているアプリケーションの現状及び見通し
- ・今後の産業利用アプリケーションの開発・利用のあり方
- ・ポスト「京」時代における産業界のスーパーコンピュータ利用

3. 設置期間

平成 25 年 7 月 22 日から調査検討の終了までとする。

(参考2)

HPCI 計画推進委員会
今後の HPCI 計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ
産業利用アプリケーション検討サブワーキンググループ

- 秋山 泰 東京工業大学大学院情報理工学研究科教授
- 天野吉和 株式会社富士通システムズ・ウエスト取締役会長
- 伊藤 聡 理化学研究所計算科学研究機構コーディネーター
- 奥野恭史 京都大学大学院薬学研究科特定教授（寄附講座）
- 笠 俊司 株式会社 IHI 技術開発本部技術企画グループ部長／
スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
- 加藤千幸 東京大学生産技術研究所教授
- 塩原紀行 高度情報科学技術研究機構神戸センター産業利用推進室長
- 善甫康成 法政大学情報科学部教授
- 常行真司 東京大学大学院理学系研究科・物性研究所教授
- 吉村 忍 東京大学工学系研究科教授
- 渡邊國彦 独立行政法人海洋研究開発機構地球シミュレータセンター長

○：主査

(50 音順)

産業利用アプリケーション検討サブワーキンググループ検討経緯

第1回 8月21日(水) 17時～19時

- ・産業利用アプリケーション検討サブワーキンググループの今後の進め方について
- ・産業利用アプリケーション検討サブワーキンググループの共通認識の確認
- ・産業界におけるアプリケーションの利用の現状についてのヒアリング

第2回 9月3日(火) 10時～12時

- ・前回の議論について
- ・産業界におけるスーパーコンピュータの将来的な利用方法に関するヒアリング
- ・シミュレーションの産業利用に関する調査報告の紹介

第3回 9月17日(火) 17時～19時

- ・前回までの議論について
- ・市販ソフトウェアの産業利用に対する将来展望についてヒアリング
- ・国のプロジェクトで開発されたアプリケーションの実証・実用化についてヒアリング
- ・オープンソース・ソフトウェアの産業利用についてヒアリング

第4回 9月30日(月) 14時半～16時半

- ・国やソフトウェアベンダの支援のあり方について
- ・報告書取りまとめ

9月30日(月) 17時～19時

今後のHPCI計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ(第21回)

- ・産業利用アプリケーション検討サブワーキンググループからの報告

HPCI 計画推進委員会今後の HPCI 計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ
産業利用アプリケーション検討サブワーキンググループ

報告書別冊

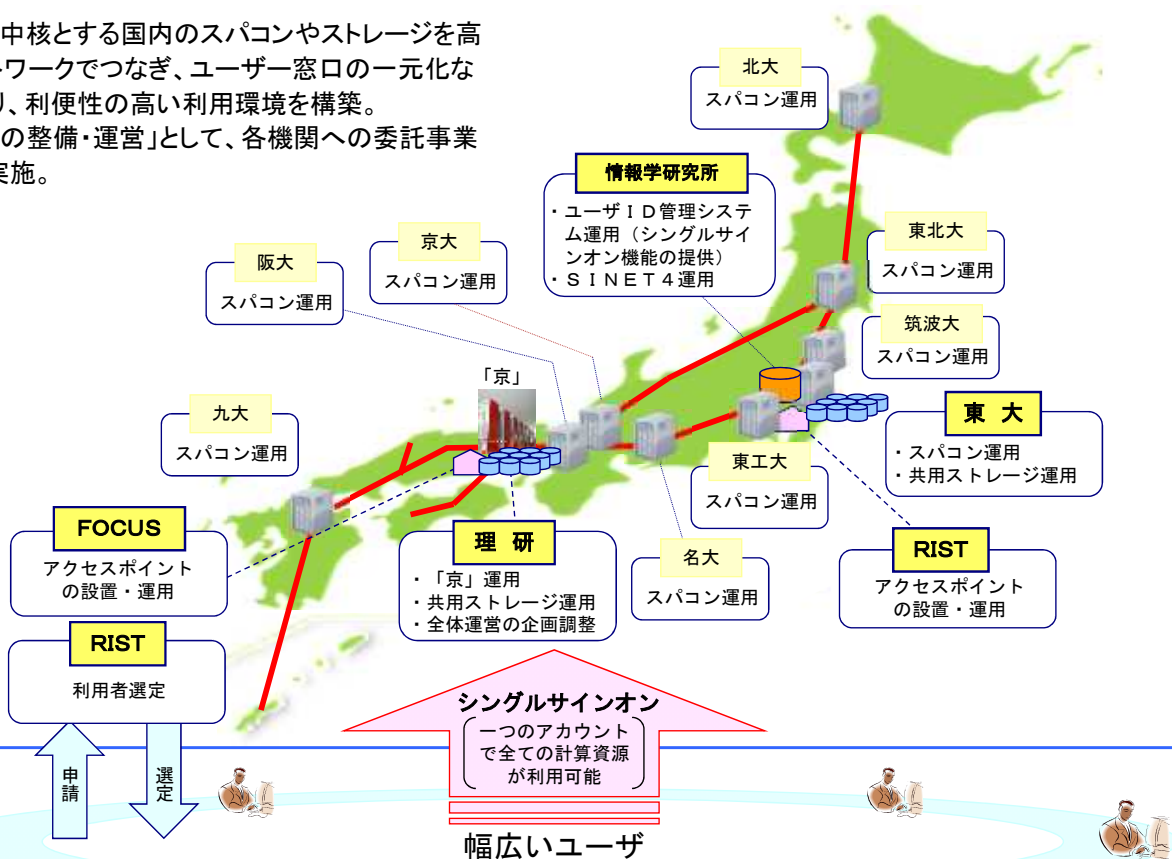
参考資料集

1. スーパーコンピュータ利用環境について.....	1
2. スーパーコンピュータの産業利用の現状.....	7
3. 産業利用アプリケーション開発の取組み.....	12
4. スーパーコンピュータの産業利用の展望.....	15
参考 HPC 産業利用に関するこれまでの提言.....	17

1. スーパーコンピュータ利用環境について

HPCIの枠組み

- 「京」を中核とする国内のスパコンやストレージを高速ネットワークでつなぎ、ユーザー窓口の一元化などにより、利便性の高い利用環境を構築。
- 「HPCIの整備・運営」として、各機関への委託事業により実施。

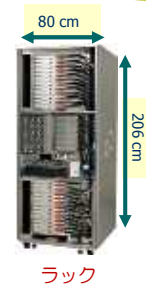


スーパーコンピュータ「京(けい)」の概要

- ・2011年6月と11月の二期連続で世界スパコン性能ランキング(TOP500)において1位を獲得
- ・「京」の利用研究が2年連続でゴードン・ベル賞(コンピュータシミュレーション分野での最高の賞)を受賞

○概要

- ◆平成23年11月にLINPACK性能※1 10ペタフロップス※2達成。
 - ◆平成24年6月システム完成済(兵庫県神戸市の理化学研究所に設置)
 - ◆平成24年9月28日に共用開始
- ※1 スーパーコンピュータの性能を測るための世界的な指標(ベンチマークプログラム,
※2 10ペタフロップス:一秒間に1京回(=10,000兆回=10¹⁶回)の足し算、掛け算が可能な性能



CPU(富士通製)
8万個以上を使用

○プロジェクト経費 約1,110億円(H18~H24)

○特長

- ◆全CPUフル稼働時の連続実行時間は29時間以上で世界最高水準の**信頼性**
- ◆世界トップ10の**実行効率**(理論性能に対する実際の性能の比率)平均が78%のところ、「京」は93%
- ◆アプリケーションプログラムの**実行性能や使いやすさ**に関して高い性能
- ◆**水冷システム**の導入により消費電力の削減や故障率の低減に寄与
- ◆**六次元メッシュ/トラス**結合の採用による高い利便性・耐故障性・運用性
- ◆**共用法**に基づき、登録機関(高度情報科学技術研究機構)と理化学研究所が連携し、「京」を利用する体制を構築。



9大学情報基盤センターの計算リソースの概要

- 大型計算機を運用管理するとともにその整備を図る
- 学術研究等の共同利用に供する
- 計算機の高度利用に関する研究および開発を行う

平成25年4月現在総理論演算性能 6,509Tflops

大阪大学：
SX-9 (16.4Tflops, 10TB)
SX-8R (5.3Tflops, 3.3TB)
Express5800/120Rg-1 (6.1Tflops, 2TB)
Express5800/53Xh (16.6Tflops, 2.6TB)



京都大学：
Cray XE6 (300.8Tflops, 60TB)
APPRO GreenBlade8000 (242.5Tflops, 38TB)
APPRO 2548X (10.6Tflops, 24TB)



九州大学：
PRIMEHPC FX10 (181.6Tflops, 24.6TB)
PRIMERGY CX400 S1 (811.9TF, 185TB)
SR16000/L2 (25.3Tflops, 5.5TB)



名古屋大学：
FX1 (30.7Tflops, 24TB)
HX600 (25.6Tflops, 10TB)
M9000 (3.84Tflops, 3TB)



北海道大学：
SR16000/M1 (172.6Tflops, 22TB)



東北大学：
SX-9 (26.2Tflops, 16TB)
SX-9 (3.3Tflops, 2TB)
Express5800(1.7Tflops, 3TB)



筑波大学：
T2K-Tsukuba (95.4Tflops, 21TB)
70ソティア計算機システム (802Tflops, 34TB)



東京大学：
T2K (140.1Tflops, 31TB)
SR16000/M1 (54.9Tflops, 11TB)
PREMEHPC FX10 (1135.2Tflops, 150TB)



東京工業大学：
TSUBAME2.0 (2400Tflops, 99TB)

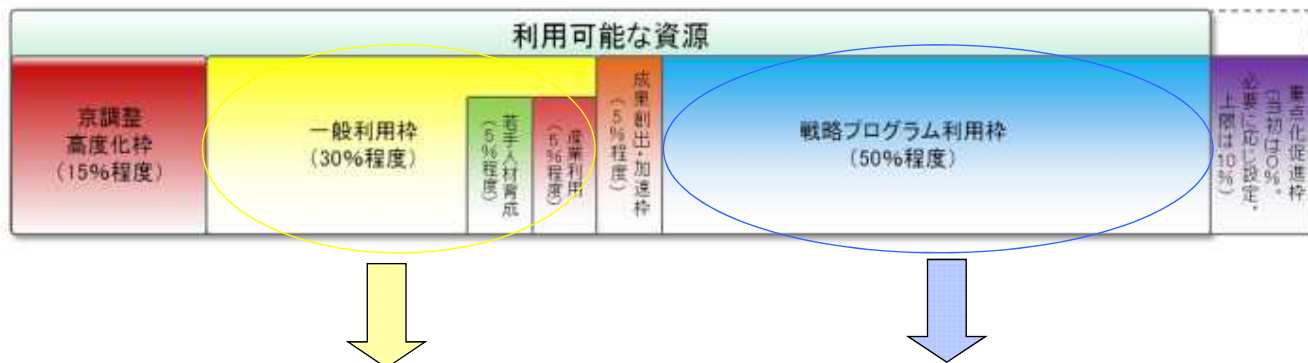


2013年4月現在

「京」の利用者選定について

<京の利用枠>

京の利用については公募に基づいて選定する一般利用枠と公募によらず重要なテーマ・課題を選定する戦略プログラム利用枠等がある。



<一般利用枠>

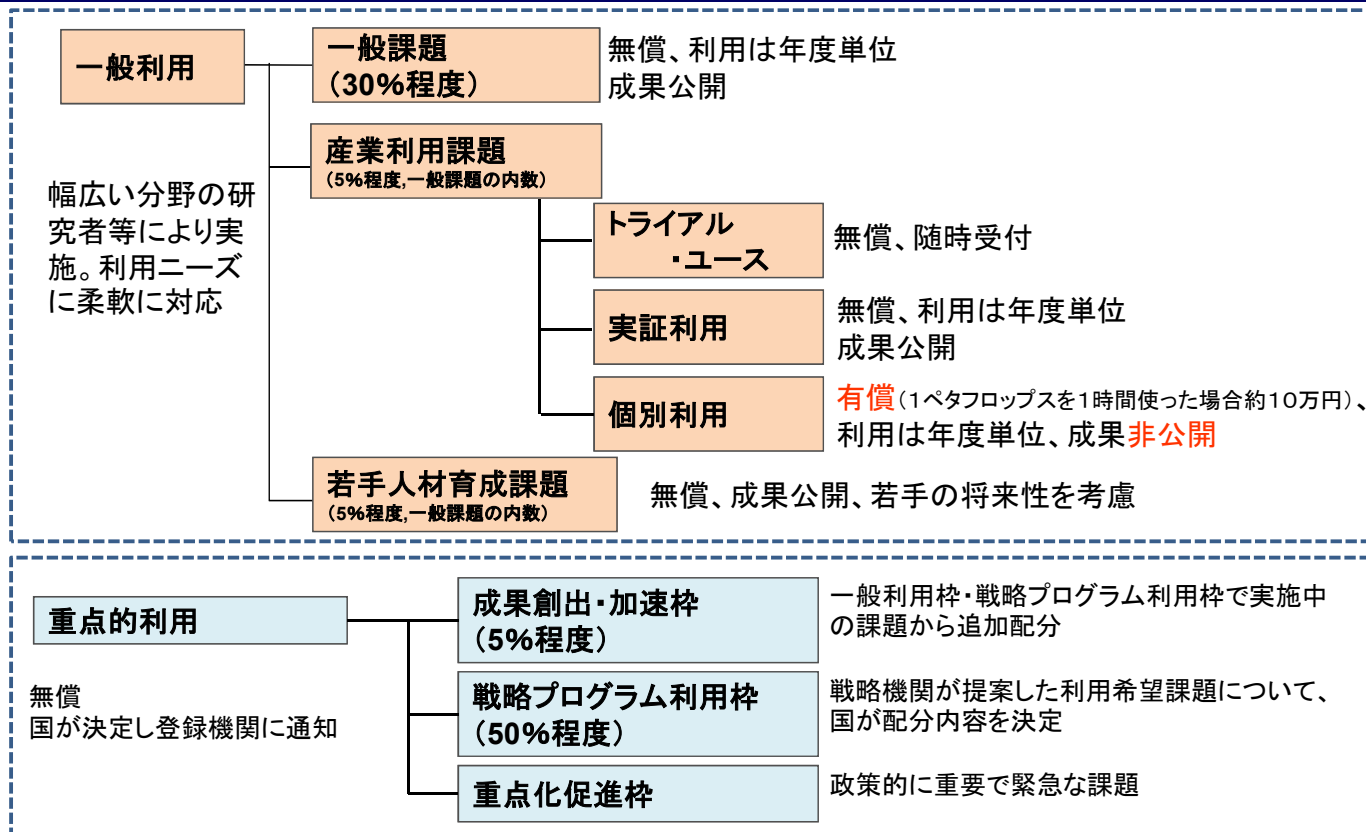
産業界を含め幅広い利用者を対象に公募し、申請のあった者の中から課題審査委員会の審査を経て利用者が選定される。

<戦略プログラム利用枠>

文部科学省が戦略的見地から配分内容を定め、登録機関によるプロセス審査を経て利用者が選定される。

※なお、利用料金については産業利用で成果非公開の場合有償とする。
(1ペタフロップスを1時間使った場合約10万円)

「京」における利用区分、利用料の基本的考え方



※海外の利用については、国際交流推進の観点から、利用することが可能。ただし、海外の企業に所属する者については、国内の法人に所属する者との共同申請とする。

「京」における課題選定について

＜選定の枠組み＞

- 利用者及び利用課題の選定に当たっては、「特定大型施設の共用に関する法律」に基づき、登録機関として選定された高度情報科学技術研究機構が中正公立な立場で利用者の選定を行う。
- 具体的には、登録機関の下におかれた選定委員会が選定方針の策定、利用者の選定等を行い、課題審査委員会が個別の課題の審査を行う。

＜選定の基準＞

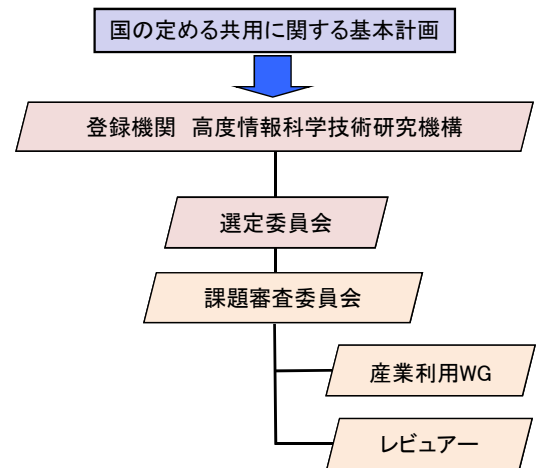
1. 科学的に卓越し、又は社会的に意義が高く、ブレークスルーが期待できる課題であること
2. 「京」が有する計算資源を必要としていること
3. ソフトウェアの効率性(並列性)、計算処理、データ収集、結果の解析手法等が十分に検証済みであるとともに、各種資源の利用計画や研究体制が妥当であること
4. 提案課題の実施及び成果の利用が平和目的に限定される等、科学技術基本法や社会通念等に照らして、当該利用研究課題の実施が妥当であること

（若手人材育成課題）

1. 将来の発展が期待できる優れた着想を持つ研究計画であること。(2. ～4. は上記同様)

（産業利用課題）

1. 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
2. 産業応用出口戦略が明確な課題であること
3. 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(4は上記同様)



課題選定の枠組み

HPCIの課題選定について

＜選定の枠組み＞

- 利用者及び利用課題の選定に当たっては、「京」の枠組みと連携しながら、一括した課題選定の一部として、委託事業により高度情報科学技術研究機構が中正公立な立場で課題選定を行う。
- 具体的には、登録機関の下におかれた選定委員会が選定方針の策定を行い、公募を実施。
- 公募された課題について、課題審査委員会が審査により課題を選定。
- 選定結果を選定委員会に報告。

＜選定の基準＞

■「京」以外のHPCI共用計算資源

1. 大規模、大容量計算に挑戦する計算課題であること
2. 将来的に「京」やそれに続く大規模の計算機利用につながり得る研究課題であること
3. 複数計算機資源を利用することが期待される研究過大であること

■産業利用課題

1. 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
2. 産業応用出口戦略が明確な課題であること
3. 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
4. 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

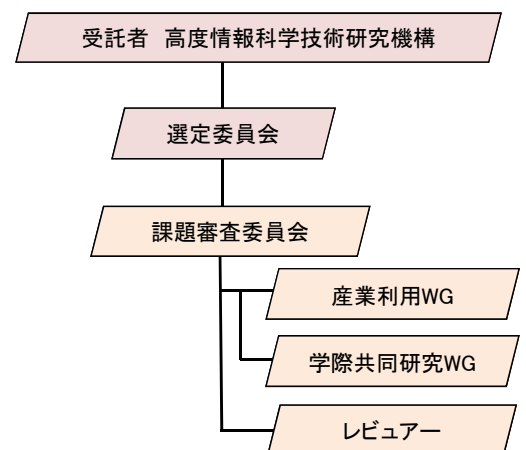
＜対象となる計算資源＞

■スーパーコンピュータ

北海道大学、東北大学、筑波大学、東京大学、東京工業大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学

■共用ストレージ

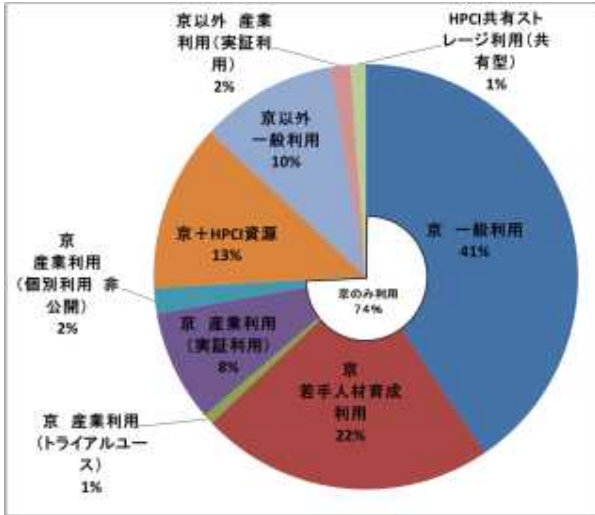
東拠点: 東京大学内、西拠点: 計算科学研究機構内



課題選定の枠組み

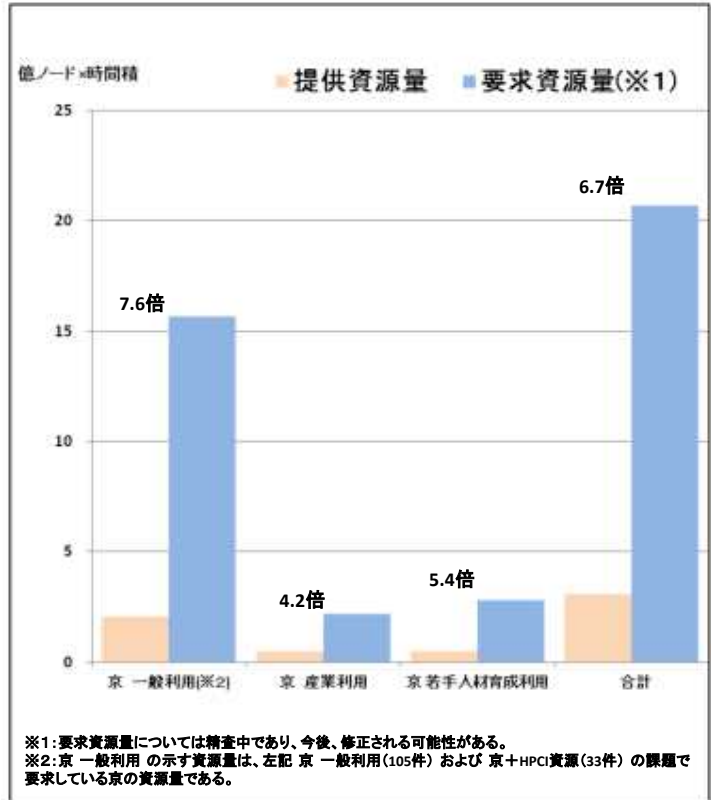
「京」の要求計算資源量(平成24年度 定期公募)

＜申請件数＞



京 一般利用	京 若手人材育成利用	京 産業利用 (トライアルユース)	京 産業利用 (実証利用)	京 産業利用 (個別利用 非公開)	京+HPCI資源	京以外 一般利用	京以外 産業利用 (実証利用)	HPCI共有ストレージ利用 (共有型)	合計
105	58	2	22	5	33	27	4	3	259

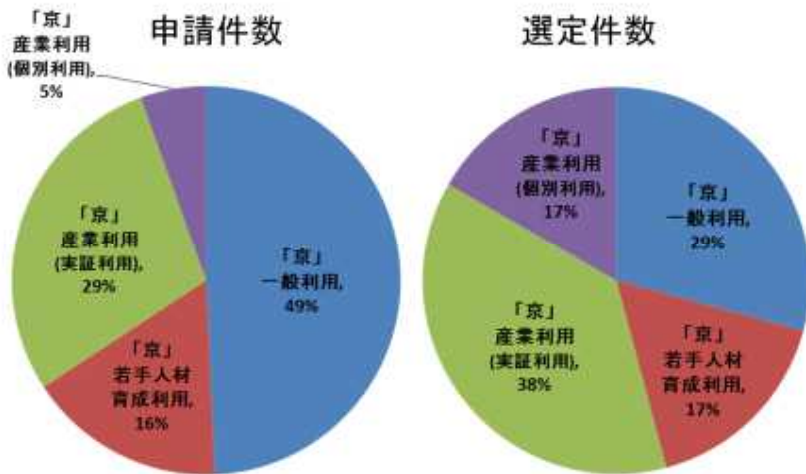
＜「京」要求資源量＞



※高度情報科学技術研究機構発表資料より

平成25年度 追加公募における「京」の課題件数と計算資源量

＜申請件数と選定件数＞

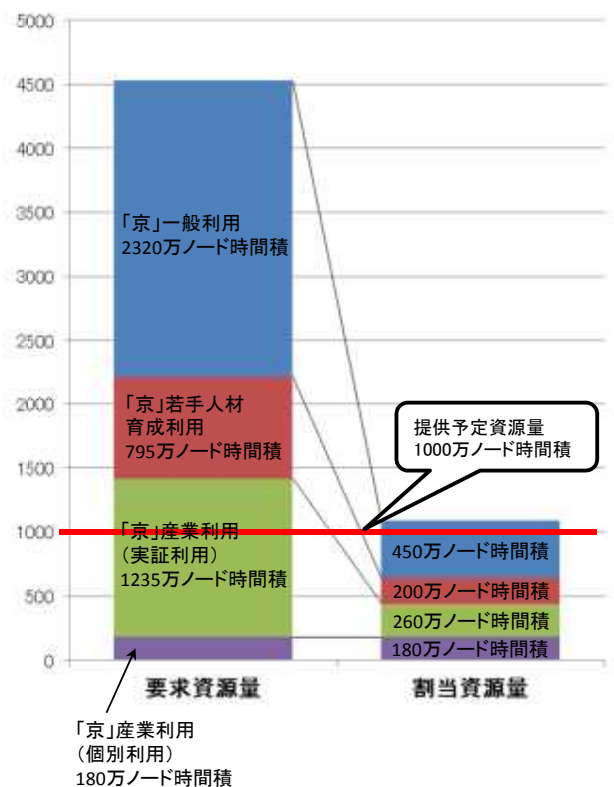


	「京」利用(HPCI資源の併用含む)					HPCI資源のみ利用	合計
	一般利用	若手人材育成利用	産業利用 (実証利用)	産業利用 (個別利用)	小計		
申請件数	36	12	21	4	73	8	81
選定件数	7	4	9	4	24	11*	35

*: 「京」の利用を第1希望としたものの「京」以外のHPCI資源を用いる課題として選定された4件含む

※高度情報科学技術研究機構発表資料より

＜「京」要求資源量と割当資源量＞



その他のスーパーコンピュータの例

FOCUSスパコンの利用目的と対象者

目的		内容	対象者
技術高度化支援	1. HPCスタートアップ支援	小規模のHPC利用を目的とする利用	パソコンやワークステーション等を利用している企業等
	2. HPCステップアップ支援	現状よりも大規模なHPC利用を目的とする利用	ある程度の規模の並列計算機を利用している企業等
	3. HPCを活用した新産業の振興	HPCを活用した新産業の振興に寄与する利用	外部HPC環境を活用した受託解析、クラウドサービス提供事業者、気象情報サービス事業者等
	4. 国産アプリケーションのインキュベート	HPC向けの国産アプリケーションソフトウェアの振興を目的とする利用	HPC向けの国産アプリケーション開発に取り組む企業、新たに国産アプリケーションのトライアル利用をする企業等
	5. 公的アプリケーションソフトの利活用支援	次世代スパコン戦略プログラムの研究成果の産業界への普及を目的とする利用	次世代ものづくり分野等で開発された高並列計算対応アプリを利用する企業等
6. 産学連携研究の推進		理研や戦略機関など、次世代スパコンを中核に集積する大学・研究機関と企業等による産学連携研究を目的とする利用	
7. 実践的な企業の技術者の育成		関西の主要な大学等との連携による実践的な企業技術者の育成 (科学技術振興調整費事業「企業を牽引する計算科学高度技術者の育成」等)	
8. 「京」を中核とする研究教育拠点形成		「京」を中核とする研究教育拠点(COE)形成に資する利用	

利用状況

- 並列化目的の「スタートアップ支援」と「ステップアップ支援」の合計が55%を占めている。
- 日本国内で開発されたアプリケーション利用目的は「国産アプリインキュベート」と「公的アプリ活用支援」の合計で16%を占めている。

(公財)計算科学振興財団提出資料より

2. スーパーコンピュータの産業利用の現状

「京」の産業利用について

- 「京」の産業利用は、我が国の産業競争力強化とともに、「京」の成果を社会に還元する上でも重要。
- 平成24年度に行った「京」の一般公募では、産業利用課題の応募は29件(全体申請件数の約1割)で要求資源量が4倍以上の競争率になるなど、産業界からも想定を上回る利用の申し込み。
- 平成25年度においても産業利用枠を含む追加公募を実施(平成25年度下期分)し、全体申請件数に占める割合が約3割へと大幅に増加する等、産業利用のニーズの高まりが顕著(選定された全24課題のうち13課題が産業利用課題)。

<産業利用促進策>

- 「京」を試用して有用性を見極めと本格利用の準備を行う「トライアル・ユース」を随時募集。
- 「京」の産業利用に当たって、「コンシェルジュ的相談窓口」を設置し、情報提供、技術相談をきめ細かく行うなど、利用支援を強化。
- 産業利用拠点である「アクセスポイント」を東西2カ所に設置し、成果の帰属や知財権を明確にするなど利用環境を整備。

産業利用枠(配分資源量は「京」全体の5%程度) 利用の企業

<成果公開型 (26件)>

清水建設、竹中工務店、ブリヂストン、住友ゴム工業、武田薬品工業、大日本住友製薬、富士フイルム、東洋紡、住友化学、日東電工、川崎重工業、コベルコ科研、みずほ情報総研、トヨタ自動車、トヨタテクニカルディベロップメント、日本自動車工業会、日本造船技術センター、JSR、日立アプライアンス、IHI、日本ゼオン など

<成果非公開型 (9件)>

大日本住友製薬、第一三共、富士通アドバンステクノロジー、アスムス、数値フローデザイン、本田技術研究所、JFEスチール、フォーラムエイトなど

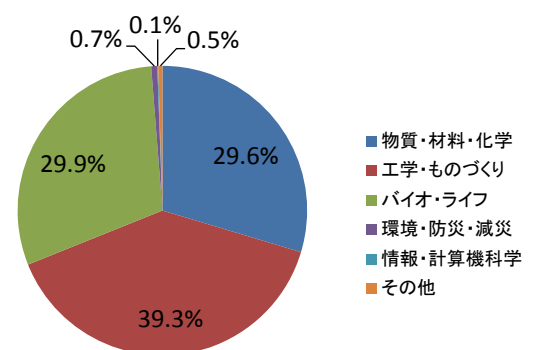
<トライアル・ユース (19件)>

三ツ星ベルト、東洋ゴム工業、茨城日立情報サービス、半導体理工学研究センター、本田技術研究所、昭和電工、地震工学研究開発センター、住友ベークライト、川崎重工業、フォーラムエイト、応用地質、日本ゼオン、新日鐵住金、ヒューリンクス、住友電気工業、ヴァイナス、CAEソリューションズ、三菱電機、富士重工

上記括弧内は課題の件数。(平成25年10月10日現在)

これまでに「京」利用した企業は、一般・戦略プログラム課題の企業含め**総勢83企業**。

産業利用枠課題の利用分野



産業利用枠課題における利用分野別の配分資源量の割合

(平成25年10月7日現在)

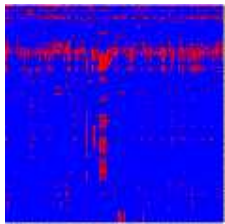
「京」の産業利用における成果事例

● 新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築(研究代表者: 京都大学・奥野恭史)

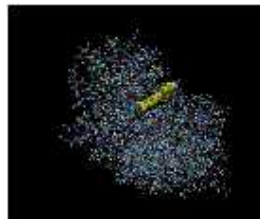
製薬企業11社が参画し、タンパク質と化合物の結合予測を世界最大規模で達成。医薬品開発の成功確率向上と迅速化に貢献。

医薬品の開発には10年以上の長い年月と500億円以上の巨額の費用が掛かると言われており、シミュレーションによる開発期間・コスト縮減が期待されている。

そこで、製薬企業11社と共同で「京」を用いた医薬品開発の研究プロジェクトを推進。論文等で結合することが分かっているタンパク質と化合物の結合ペア(12万ペア)をもとに、大量のタンパク質と化合物の結合データを学習し、結合パターンの統計ルール化を行い、「京」による超高速計算で、世界最大規模(189.3億ペア)の結合予測に成功。今後は、予測結果をもとに、各製薬企業が独自に医薬品開発につなげる。



化合物 (300種)
(→最終的には3000万種)



タンパク質と化合物の結合シミュレーション

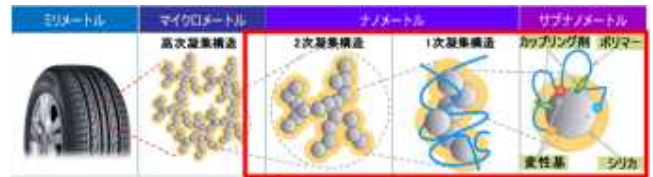
タンパク質 (388種)
(→最終的には631種)
「京」による結合予測結果
(赤色が相互作用あり)

● 大規模分子シミュレーションによるタイヤ材料開発(研究代表者: 住友ゴム工業(株)・岸本浩通)

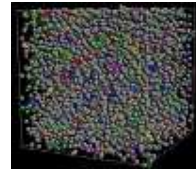
「京」による大規模かつ分子レベルでの詳細な材料シミュレーションにより、低燃費・高グリップ性能を両立させる新しいタイヤ用ゴム素材の開発に成功。

低燃費・安全性(グリップ性能)・省資源(ゴム強度)といった相反するタイヤ性能を両立させ、タイヤゴムを高機能化させるためには、分子・ナノレベルでの構造解析が必要となるが、企業レベルでのスパコン性能の制限から従来は困難であった。

「京」を用いることで、大規模でありながら、分子レベルの詳細なシミュレーションが可能となり、ゴム内部の複雑な構造を大スケールでシミュレーション。タイヤを高機能化させるための研究に活用し、低燃費・高グリップ性能を両立させる新しいタイヤ用ゴム素材の開発に成功。



この領域すべてを分子レベルで丸ごとシミュレーション



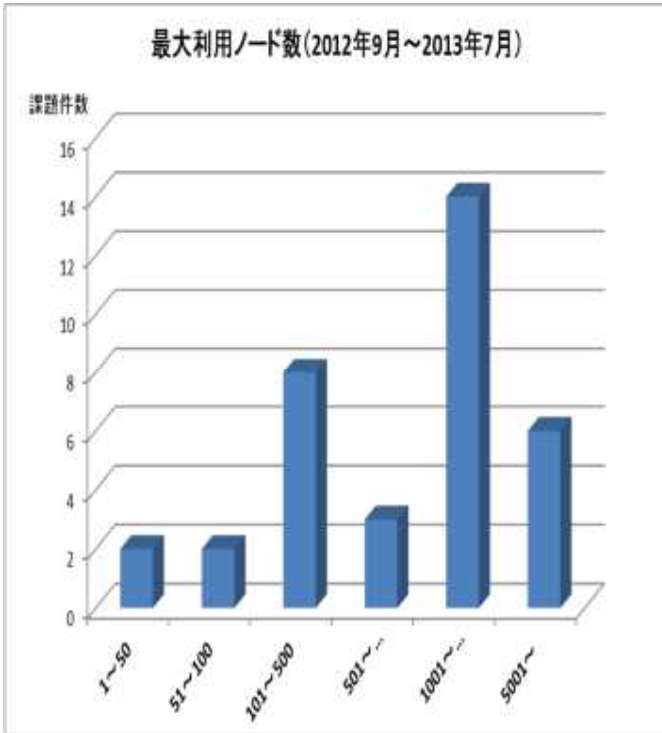
タイヤ材料のナノレベルでのシミュレーション

「京」の産業利用課題の利用アプリケーション

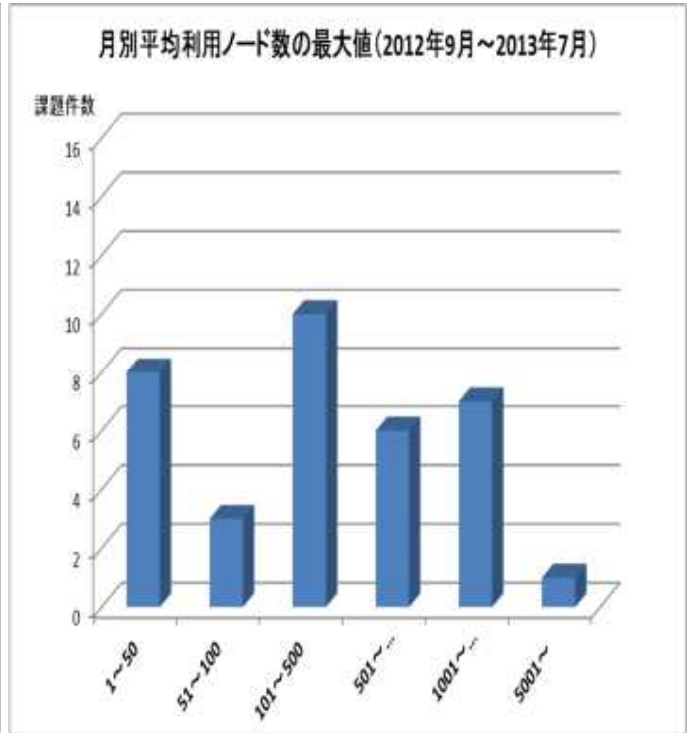
No	分類	利用アプリケーション	アプリケーション形態	利用形態
1	バイオ・ライフ	GROMACS	オープンソース・ソフトウェア	バルクジョブ
		AMBER12	市販ソフトウェア	バルクジョブ
2	バイオ・ライフ	MP-CAFEE	オープンソース・ソフトウェア	バルクジョブ
		GROMACS	オープンソース・ソフトウェア	バルクジョブ
3	バイオ・ライフ	MP-CAFEE	オープンソース・ソフトウェア	バルクジョブ
		MP2-FMO	オープンソース・ソフトウェア	大規模ジョブ
5	バイオ・ライフ	modylas	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
6	バイオ・ライフ	modylas	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
7	物質・材料・化学		インハウス・ソフトウェア	大規模ジョブ
8	物質・材料・化学	VSOP	市販ソフトウェア	大規模ジョブ
9	物質・材料・化学	LAMMPS	オープンソース・ソフトウェア	大規模ジョブ
10	物質・材料・化学	LAMMPS	オープンソース・ソフトウェア	大規模ジョブ
11	物質・材料・化学	LAMMPS	オープンソース・ソフトウェア	大規模ジョブ
12	物質・材料・化学	modylas	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
13	物質・材料・化学	PHASE	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
14	物質・材料・化学	Car-Parrinello MD	オープンソース・ソフトウェア	バルクジョブ
15	物質・材料・化学	PHASE	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
16	物質・材料・化学	LAMMPS	オープンソース・ソフトウェア	大規模ジョブ
17	物質・材料・化学	WIEN2K	市販ソフトウェア	大規模ジョブ
18	物質・材料・化学	RMC++	オープンソース・ソフトウェア	大規模ジョブ
19	物質・材料・化学	OCTA/SUSHI	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
20	防災・減災、その他	OpenFOAM	オープンソース・ソフトウェア	大規模ジョブ
21	防災・減災、その他	OpenFOAM	オープンソース・ソフトウェア	大規模ジョブ
22	防災・減災、その他		インハウス・ソフトウェア	大規模ジョブ
23	工学・ものづくり		インハウス・ソフトウェア	大規模ジョブ
24	工学・ものづくり	NuFD/FrontFlowRed	市販ソフトウェア	大規模ジョブ
25	工学・ものづくり	FrontISTR	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
26	工学・ものづくり		インハウス・ソフトウェア	大規模ジョブ
27	工学・ものづくり	LS-DYNA	市販ソフトウェア	1ジョブの時間短縮
		PAM-MEDYSA	市販ソフトウェア	1ジョブの時間短縮
		ADVENTURECluster	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
		FrontFlow/blue	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
28	工学・ものづくり	FrontISTR	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
			インハウス・ソフトウェア	大規模ジョブ
			インハウス・ソフトウェア	大規模ジョブ
29	工学・ものづくり		インハウス・ソフトウェア	大規模ジョブ
		FINAS/CFD	市販ソフトウェア	大規模ジョブ
		FrontFlow/blue	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
30	工学・ものづくり	FrontFlow/blue	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
31	工学・ものづくり	ADSTEFAN	市販ソフトウェア	大規模ジョブ
32	工学・ものづくり	HyENEXSS	オープンソース・ソフトウェア	1ジョブの時間短縮
33	工学・ものづくり	FrontFlow/red	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
34	工学・ものづくり	HyENEXSS	オープンソース・ソフトウェア	1ジョブの時間短縮
35	工学・ものづくり	LuxRender	オープンソース・ソフトウェア	バルクジョブ
36	工学・ものづくり		インハウス・ソフトウェア	大規模ジョブ
			インハウス・ソフトウェア	大規模ジョブ

「京」で利用されているソフトウェアの実行規模別グラフ

① 計算実行ジョブの最大ノード数
(平成24年9月～平成25年7月末までの最大)



② 計算実行ジョブの平均ノード数
(平成24年9月から25年7月度までの最大月)



塩原委員提出資料より

産業利用例(自動車産業)

自動車産業におけるスパコン利用の歴史



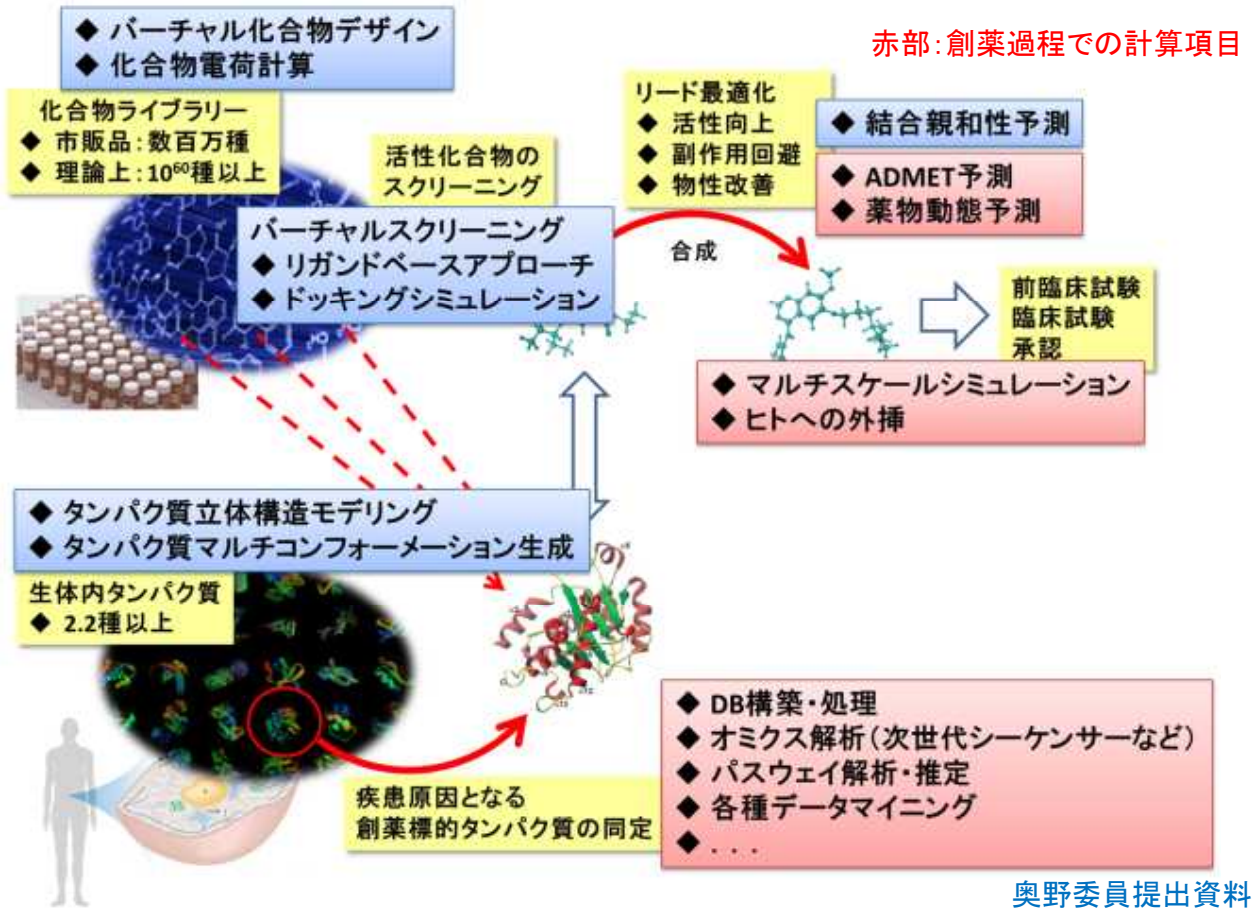
自動車産業で使われている主なソフトウェア

衝突	流体	振動・強度	製造
<ul style="list-style-type: none"> •LS-Dyna •Pam-Crash •Radioss 	<ul style="list-style-type: none"> •STAR-CD •Fluent •Power Flow •Scryu •Open Foam •Front Flow 	<ul style="list-style-type: none"> •Nastran (MSC,NX) •ABAQUS •ANSYS •ADVC •Actran 	<ul style="list-style-type: none"> •MAGMA •Mold Flow •3DTIMON •Auto Form •Forge

- これまで部品単品、アッシー部品の解析を行ってきており、現在では車両全体の解析ができるようになっている。
- 2020年ごろには車と車、車と人、車と社会／環境についての解析を行いたいという要望がある。
- ハードウェアについても、パソコンのレベルのものから、PCクラスタ、地球シミュレータ、そして「京」のように規模が大きくなっている。

産業利用例(創薬)

創薬(分子標的創薬)の流れ



産業利用されているアプリケーション(創薬)・その1

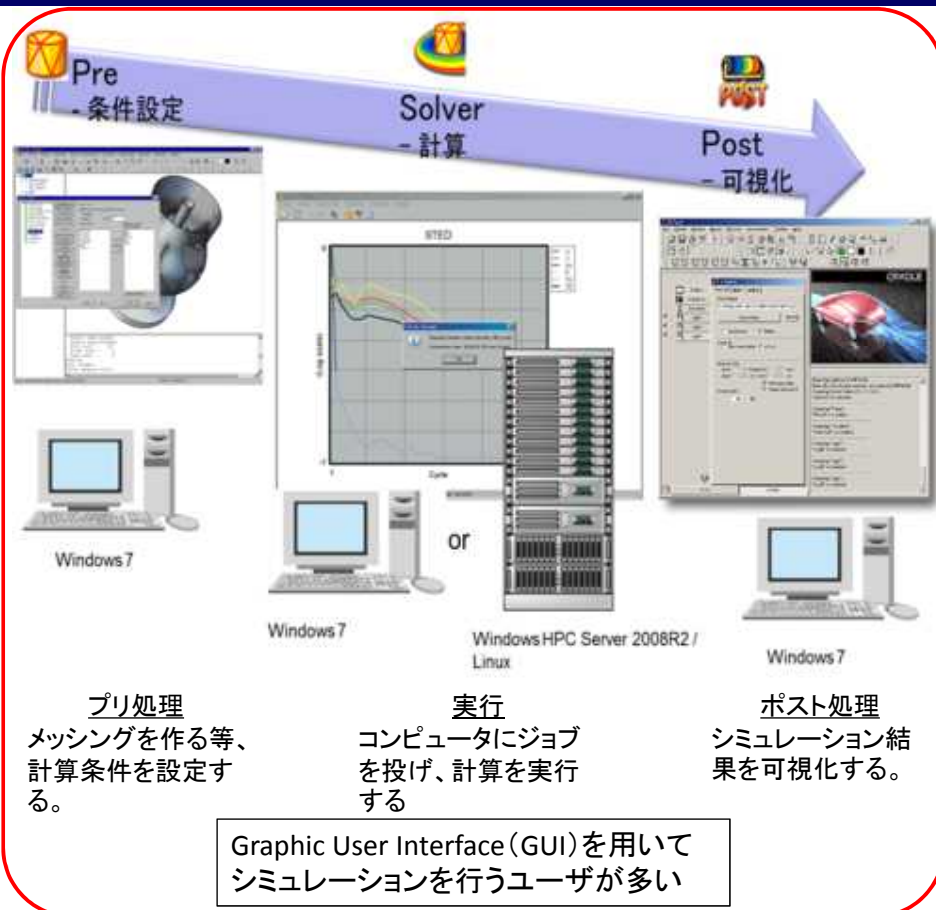
	アプリケーション	計算規模 (計算時間は汎用計算サーバー、数10~数100コアを目安)	実行の形態	ユーザの要望	その他
DB構築・処理	SQL(オープンソース)	最大10の7乗程度(数万遺伝子×数千サンプル)のエントリー数に対し、数秒から数分で検索	インタラクティブジョブ	現状では実験の手間やコストによるサンプル数の制約が大きいが、近い将来はサンプル数が急増する可能性大。よって、将来的に大規模データの高速処理のニーズが高くなる。	
オミクス解析(次世代シーケンサー(NGS)など)	各種バイオインフォマティクスツール(オープンソース、インハウス、市販)	最大10の7乗程度、または、NGSの場合は10の11乗程度(30億塩基×数百サンプル)のエントリー数に対し、数分から数時間で計算	シングルジョブ or バルクジョブ (10負荷のため比較的インメモリ容量大)	同上	理研・東大(宮野G)らにより「京」アプリを開発
パスウェイ解析・推定	バイオインフォマティクスツール(オープンソース、インハウス、市販)	最大10の4乗程度(数百遺伝子×数百サンプル)のエントリー数に対し、数時間から数日で計算	シングルジョブ or バルクジョブ	同上	同上
各種データマイニング	各種バイオインフォマティクスツール(オープンソース、インハウス、市販)	最大10の7乗程度のエントリー数に対し、数分から数時間で計算	シングルジョブ or バルクジョブ	同上	同上
パーチャル化合物デザイン	市販、インハウス	10の数10乗の化学構造発生が可能だが、メモリも問題や、発生後の計算(ドッキング計算など)の制約から、最大でも数万の発生する程度	ドッキングプログラムなどのプラグインツールとして実行することが多い	・発生後の計算(ドッキング計算など)の処理速度が高速になれば、発生する化合物数も増加できる。 ・発生した化学構造の実際に合成可能かどうかの推定も重要(現有の反応可能性予測は、予測精度が良いとは言えない。)	
化合物電荷計算	市販: Gaussian, MOPAC フリー: GAMESS, MOPAC ホモロジーモデリングツール	分子量1000以下の1化合物のHF/RESP電荷計算には数分から数時間程度、AM1電荷計算では数秒程度。	シングルジョブ or バルクジョブ	パーチャルスクリーニング目的などの大規模な化合物数の電荷計算には、簡易なGasteiger電荷やAM1電荷を利用しているが、計算速度がアップすれば、より正確なHF/RESP電荷計算の適用も可能になる。	
タンパク質立体構造モデリング	フリー: MODELLER, SWISS-MODEL等 市販: Mo, Pr等	1つのタンパク質について数秒から数分程度。GUIを使ってモデリングすることも多い	インタラクティブ	タンパク質構造を目視しながらの作業が必要なので、GUIが具備されていることが必要である。また、その後の計算(ドッキングやMD)も同じGUIでシームレスに操作できることが望ましい。	ホモロジーモデリングとは、そのものの結晶構造は無い場合に、類縁タンパクの構造を用いてモデリングする。
タンパク質マルチコンフォーメーション生成	フリー: GROMACS 市販: AMBER等 国プロ: myPresto/cosgene	1つのタンパク質について数時間程度	バルクジョブ(数10ps~数nsのMD)	・長時間MDへの期待 ・Platypus-REIN(レプリカ交換法)などにも期待	この後、複数のコンフォーメーションモデルに対するドッキング計算を必要とするため、計算負荷の問題から現状では当該計算を行わない事も多い。

産業利用されているアプリケーション(創薬)・その2

	アプリケーション	計算規模 (計算時間は汎用計算サーバー、数10~数100コアを目安)	実行の形態	ユーザの要望	その他
バーチャルスクリーニング: リガンドベースアプローチ	類似化合物検索(市販:Pi, Mo, Dr, Op, Ch等)	100万化合物のスクリーニングに、数時間程度	シングルジョブ or バルクジョブ	現状では、最大でも数1000万化合物程度を対象とした計算規模であるが、計算速度がアップすれば、対象化合物数の増加や、複数の標的タンパク質に対する計算も可能になる。	
	ファーマコフォア検索(市販:Co, Li, Mo等)	100万化合物のスクリーニングに、数時間程度	シングルジョブ or バルクジョブ	同上	
	CGBVS(市販、フリー)	100万化合物のスクリーニングに、数時間程度	シングルジョブ or バルクジョブ	同上	京大(奥野G)らにより「京」アプリを開発
バーチャルスクリーニング: ドッキングシミュレーション	市販:Go, Gl, Mo等 フリー:AutoDock 国プロ:myPresto/sievgene	100万化合物のスクリーニングに、数時間から数日程度	シングルジョブ or バルクジョブ	同上	
結合親和性予測	QM/MM(国プロ:Platypus、市販:Q等)	10数化合物の計算に数時間程度	シングルジョブ or バルクジョブ	・対象化合物数を増やすために、計算速度のアップが望まれる。 ・現場利用には、ドッキング計算の結果を開始構造とした計算が必須であるが、十分な検証がなされていない。	神大(北浦G)らにより「京」アプリを開発
	FMO(フリー:GAMESS)	10数化合物の計算に数時間程度	シングルジョブ or バルクジョブ	・対象化合物数を増やすために、計算速度のアップが望まれる。 ・現場利用には、ドッキング計算の結果を開始構造とした計算が必須であるが、十分な検証がなされていない。	
	MM-PB/SA(市販:AMBER等)	10数化合物の計算に数時間から数日程度	シングルジョブ or バルクジョブ	・対象化合物数を増やすために、計算速度のアップが望まれる。 ・現場利用には、ドッキング計算の結果を開始構造とした計算が必須であるが、十分な検証がなされていない。	東大(藤谷G)、京大(奥野G)らにより「京」アプリを開発
	MP-CAFE(フリー:GROMACS)	10数化合物の計算に数週間程度(京をフル利用した場合は、5日程度)	シングルジョブ or バルクジョブ	・現場利用には計算速度の劇的アップが必須。 ・現場利用には、ドッキング計算の結果を開始構造とした計算が必須であるが、十分な検証がなされていない。	
ADMET予測	市販:Ad等 インハウス:回帰モデル、判別モデル	数10化合物の計算に数分程度	シングルジョブ	予測精度に難があり、現状では汎用的な利用されていない。	
薬物動態予測	市販:Ga, Di等	数11化合物の計算に数分程度	シングルジョブ	予備実験無しで、新規な化合物の予測が望まれる。	現在の方法論は、動物などを用いて初期パラメータを取得する実験が予め必要であり、実験無しで新規の化合物の予測はできない。
マルチスケールシミュレーション	-	-	-	・東大(杉浦G)らによる心臓シミュレーション(京アプリ)の薬物作用応用に期待。 ・心臓以外の臓器への適用にも期待。	
ヒトへの外挿	-	-	-	同上	

奥野委員提出資料より

解析作業の流れと環境のイメージ

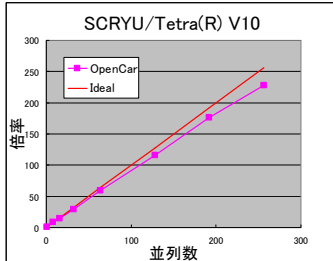


3. 産業利用アプリケーション開発の取組み

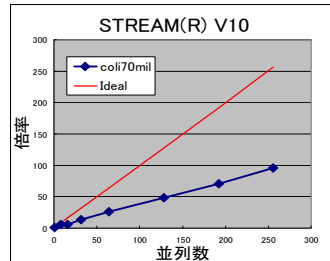
市販ソフトウェアの大規模化への対応例(ソフトウェアクレイドル)

並列処理対応例

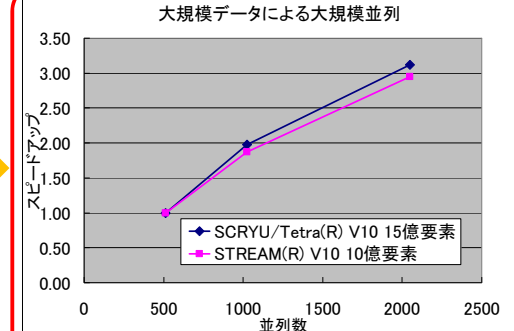
OpenCar (7000万要素、空力解析)



円形競技場 (7000万要素、風解析)



大規模化への対応例



Intel Xeon E5-2670 2.6Ghz x 2 x 256nodes,
Infiniband FDR, LINUX

256 cores(Xeon E5-2960(2.9GHz,
8 cores) x 2 CPUs x16 nodes)
Infiniband FDR, CentOS 6.2

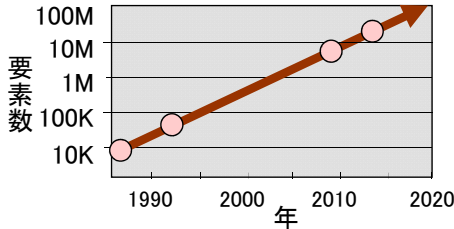
エクサスケール時代へ向けて

- ✓ CFDでは、まだまだリソースを必要とするテーマがある。
 - 音: 大規模 + Strong Scaling
 - 最適化: (中規模 + Strong Scaling) * バルクジョブ実行
 - キャビテーションなど複雑現象を含む全体解析
 - 構造との連成及び上記組み合わせなど
- ✓ 精度向上を目指して、実モデル(詳細モデル)・実環境(境界条件としての正確性)に近い解析のニーズがあり、大規模化の要因となっている。

市販ソフトウェアの大規模化への対応例(富士通)

利用ニーズ

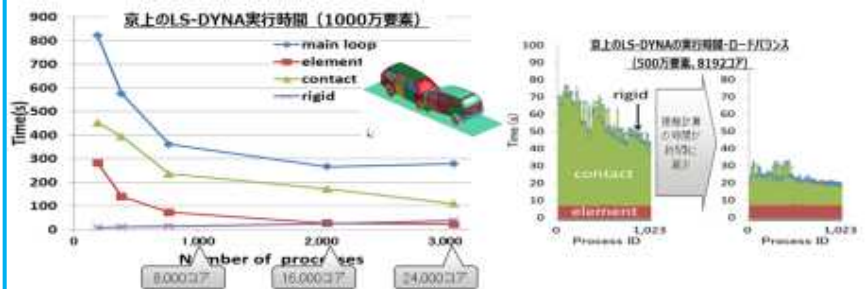
- モデルの大規模化・高精度化
 - 例:自動車衝突解析 ⇒高精度化
 - 安全規制の強化
 - 部品レベルのモデル化



- バルク実行(ロバスト設計、多ケース評価等)
 - 最大規模より1桁程度小さいモデルを、数百から数千ケース実行
- 解析ターンアラウンド時間短縮により、ものづくりプロセスが変わる
 - 「試作レス」(数日~数週間)から「設計時の実時間解析」(数時間~半日)

LS-DYNAの大規模・高精度解析ニーズに対する取組み

- 自動車衝突モデル(1000万要素)で、2万CPUコアまで性能向上(自工会、理研、開発元と共同で実施)
- さらなる性能改善に向けた課題
 - 「接触」計算における通信待ち時間増大
 - プレ・ポストの大規模モデル対応
 - 大規模計算機の利用環境
- 対策:「接触」計算部分の改善
 - 「接触」計算に非同期通信を導入
 - 開発元と共同で数千並列で性能改善を実証
 - アプリの新機能として組込まれユーザ定義により利用可能
- ユーザや開発元と連携し、数年かけて実証計算、実用適用を推進



大規模解析ニーズに応じて、先進ユーザや開発元と共同で、アプリケーションの整備を促進

富士通(株)提出資料より

国プロ開発アプリケーションの展開例

ADVENTUREシステム

自然物や人工物を丸ごと詳細にモデル化し、多様な並列分散計算機環境のもとで固体の変形や熱・流体の流れ等の力学解析から可視化、設計最適化までを行える汎用並列計算力学システム

ADVENTUREシステムの特徴

- 数百~数10億自由度メッシュによる丸ごと解析
 - 数千~数万プロセッサの超並列計算機環境でも90%超の高並列効率
 - 優れた移植性
 - 単一プロセッサ, PCクラスター, 超並列計算機(ES, ES2, 京など), 非均質計算機環境(ITBLなど)
 - 2005.3.10 Windows版公開(登録ユーザ数3,584人)
 - ライセンスフリー/オープンソース
 - 登録ユーザー数7,791人
 - ダウンロードされたモジュール数38,359本
- 市販バージョン ADVENTUREcluster (アライドエンジニアリング)
- IEEE/ACM SC2006 Gordon Bell Award finalist
 - 2008年日本機械学会賞(技術)
 - 2009年科学技術分野の文部科学大臣表彰
 - 2013年日本計算工学会賞・技術賞
- 拡張性と保守性:モジュール構造とIOの標準化、Commodity技術

ADVENTURE vs ADVENTUREcluster

ADVENTURE(国プロ開発アプリケーション)

- ◎コード再利用
- ◎超並列対応
- △汎用性
- ◎チャレンジングな研究課題へ挑戦(ペタ・エクサ対応、連成、国家PJ)
- △開発の計画性

研究成果・ノウハウを無料で提供

モデル作成、解析、可視化を有料で提供

ADVENTUREcluster(市販バージョン)

- ×コード再利用
- ◎超並列対応
- ◎汎用性
- 国PJ対応
- ◎直近の産業界ニーズを重視
- ◎開発の計画性

京やエクサが産業界ニーズにまで高まらない間は、国の動機づけ及び支援が必要

オープンソース・ソフトウェアの展開例

OpenFOAMの特徴

- 豊富な機能
 - 外部ツールへのデータ変換
 - CADからのメッシュ自動生成
 - 多様な物理モデル
- 柔軟な拡張性
 - C++によるオブジェクト指向のコード設計
- MPIによる並列化
- GPLによるライセンス
- 国際的なユーザーの活動が活発
 - 欧米を中心としたユーザー会
 - Web上での情報共有 (ForumやOpenFOAM Wikiなど)
 - 日本では: オープンCAE学会
 - 2013年、アジア太平洋ユーザー会の組織

OpenFOAMの現状

- ◆ 研究での利用に加えて、商用化されたものの利用も進みつつある
- ◆ ユーザーによる開発や検証、サポートが加速すれば、OSSの強みとなりうる

期待されている役割	OpenFOAMの利点
商用ソフトの代替	無償で利用可能
超並列・大規模解析	最適化、ライセンス料不要
独自の機能拡張	拡張性
設計・解析システムへの組み込み	拡張性、多機能性

利用例

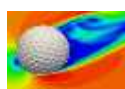
- Volkswagen, Audi (自動メッシュ生成を含めた空力・熱解析ツール)
- 清水建設 (1億メッシュ規模での津波解析や京による10億メッシュ規模の解析)
- 日立 (高精度の燃焼解析ツールの開発)
- その他、学会発表などではIHI、三井造船、BASF、日東電工など

OpenFOAMの課題

- ◆ 商用ソフトと比較したときのサポート不足、ロバスト性の低さなどによる導入・トレーニング・検証コストが高い

- 発散しやすい
 - 自力で調べないと情報がない
 - 機能が不十分なまま
 - バグが潜んでいる
- ➡ 「無償だから」というだけの理由で安易に使えるものではない

みずほ情報総研(株)提出資料より

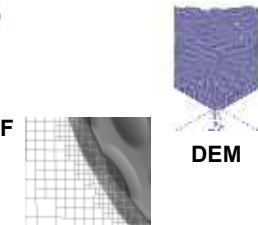


乱流解析



二相流VOF

燃焼 (Combustion) visualization showing a flame.



DEM

CAD適合メッシュ (CAD-compatible mesh) visualization showing a structured grid.

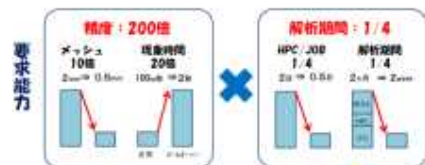
4. スーパーコンピュータの産業利用の展望

スーパーコンピュータの産業利用の展望(自動車産業)

2020年ごろに要求されるスパコンの能力



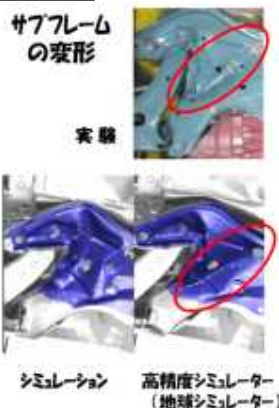
『精度向上』と『期間短縮』の両立



必要能力の爆発的な増大
CPU: 1000倍 データ量: 200倍 メモリ: 50倍

精度200倍, 解析期間1/4を実現するための必要能力

シミュレーションの成功例







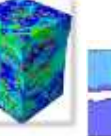
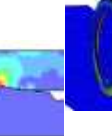

- 地球シミュレータを用いた高精度シミュレーションにより, 実験結果を再現
⇒高精度シミュレーションの重要性が実証された

将来計算が望まれる系



- 全系丸ごとシミュレーションなどの実行が望まれる
- 安全性も含めた, 社会とのかかわりや環境に関連したシミュレーションが増える(流体・強度・衝突・振動シミュレーション)

スーパーコンピュータの産業利用の展望(材料)

スケール	nm	~	μm	~	mm	~	m			
	反応・結合	破壊起点成長		ゴム物性	タイヤ単体特性		タイヤノイズ			
										
	ファイラー界面挙動	ファイラー分散ネットワーク		路面接触挙動	タイヤ路面環境		タイヤ車両特性			
現状	MO	全原子MD	MD	粗子化MD	構造FEM	熱連成	流体FVM	流体構造連成	音響FEM	機構
	「京」での大規模MD									
見通し	<ul style="list-style-type: none"> ・予測精度の向上 → 詳細化による精度向上 → 大規模計算 ・予測性能の拡大 → 長時間現象の表現 ・予測範囲の拡大 → 連成現象の表現 ・多くの計算によるスクリーニング → 速度向上、計算安定化 ・モデリング、結果処理の簡易化、自動化 									

今後の産業利用アプリケーションに望むこと

	開発のあり方	利用のあり方
材料	<ul style="list-style-type: none"> ・マルチスケール／マルチフィジックスに対応したアプリケーションの開発 →産学官が目標・目的を共有し、問題に対し速やかに取り掛かれる開発 ・放射光施設などと連携し、実験検証まで含めた開発 	<ul style="list-style-type: none"> ・サポート、コンサルティング体制の充実 ・超並列化に対応した価格設定 ・産業目的に応じた計算機選択自由度の拡大
構造 流体 熱 音響	<ul style="list-style-type: none"> ・産業界が現場で有効利用できる開発目標の設定 →定番市販ソフト等のベンチマークから、差別化できる性能、機能等の明確化 →マルチフィジックスに対応したアプリケーションの開発 ・産業界の現場での課題を対象としたアプリケーションの開発 →産学官連携での開発 	

住友ゴム工業(株)提出資料より

参考 HPC産業利用に関するこれまでの提言

理研次世代スパコン開発実施本部共用体制検討WG報告書要旨

アプリケーション(ソフトウェア) 次世代スパコン向けにチューニングされたアプリケーション

チューニングされることが保証されているソフトウェア

- ✓ “GC”ソフトウェア
- ✓ イノベーション基盤ソフト
- ✓ CRESTなどで次世代スパコン向けに開発されたもの

- 産業界のさまざまな要求に対しては十分でない
- 従来、産業界で使ってきたソフトウェアとの親和性がない

- 成功事例を積み重ねて有効性／実用性を実証
- 普及・教育の推進

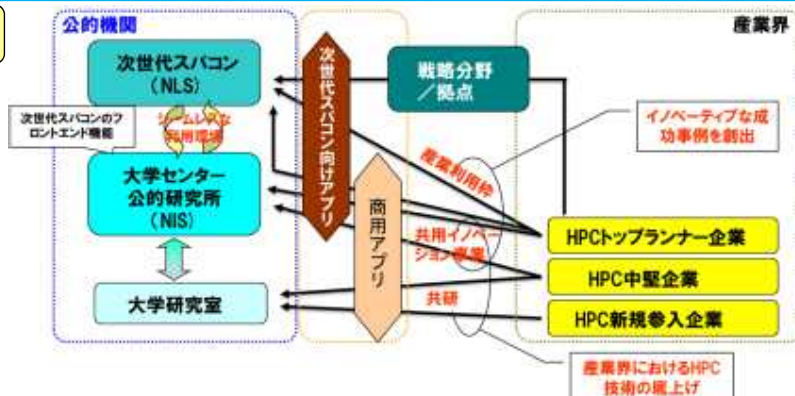
今後チューニングしていかなければならないソフトウェア

- ✓ インハウスソフト(各社自主開発)
- ✓ 商用ソフトウェア

- 次世代スパコンへの移植に技術的な壁
- ライセンス問題がある
- 商用ソフトが搭載できればHPC新規参入企業も利用

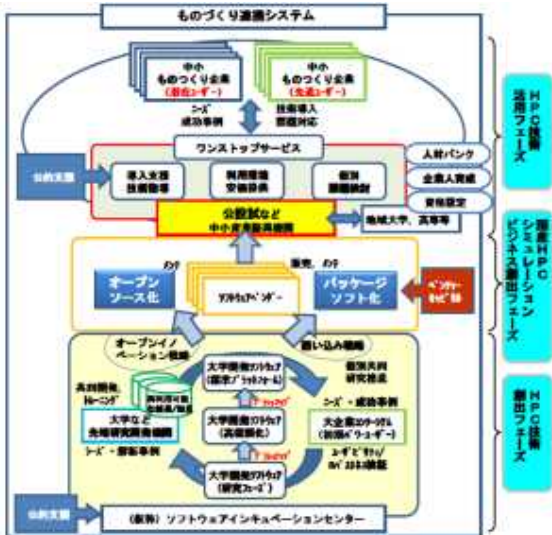
- 移植に対する十分な技術支援
- ライブラリの提供
- ソフトベンダの協力

シームレスな利用環境



産業競争力懇談会(COCN)報告書要旨

COCN HPC応用研究会報告書(平成23年度)

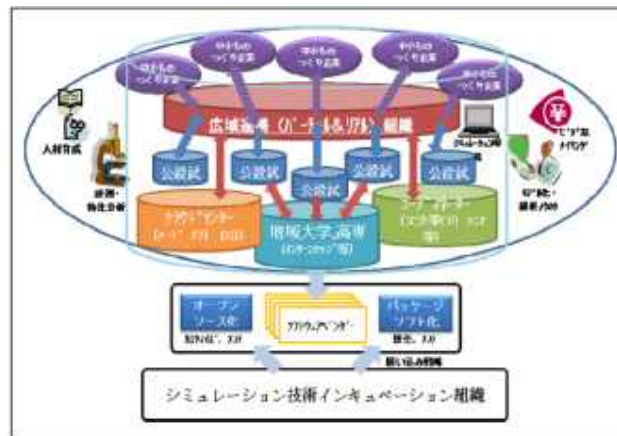


アンケート・ヒアリングをもとにシミュレーション技術の活用に関する意識・問題点を調査

- シミュレーション技術の重要性・可能性は認識
- シミュレーション技術をどう活用するか、ノウハウ・人材等が十分ではない。
- ソフトウェアの自律的成長を可能とする場とノウハウを提供する場の連携システムの提案

<http://www.cocn.jp/common/pdf/thema48-L.pdf>

COCN HPC応用研究会報告書(平成24年度)



次世代クラウドシステムによるものづくり連携プラットフォーム

公設試へのヒアリングをもとにした中小企業での活用・普及促進策の検討

- 柔軟なクラウドシステムにおいて、①課題解決向けモデル化技術、②知識継承実現の人材育成・活用システムを実装
- クラウドシステムに合致したソフトウェアライセンス、自律的成長システム、実験・計測との連携

<http://www.cocn.jp/common/pdf/thema51-L.pdf>

伊藤委員提出資料より