

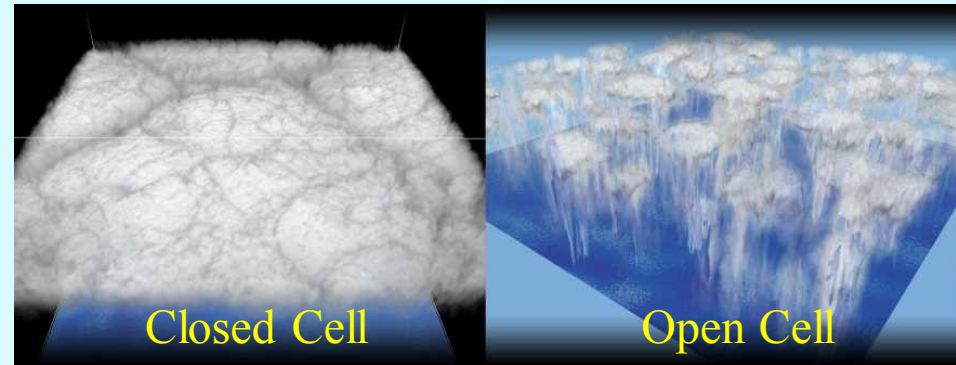
次世代気象気候科学における基盤ライブラリ

SCALE

SCALEは超並列計算機システムで性能を出せるよう、計算科学と計算機科学の研究者が共同で開発した気象シミュレーション用ライブラリ。

従来手法よりも広い領域を、高解像度でシミュレーションすることが可能。これまで再現が困難であった二種類の低層雲の再現に成功するなど、層積雲の更なる理解に向けたブレークスルーが期待される。

SCALE-LESを「京」で実行させることにより、2種類の低層雲の再現に成功



降水を伴わない低層雲の形状 降水を伴う低層雲の形状

<ユーザ要望例>

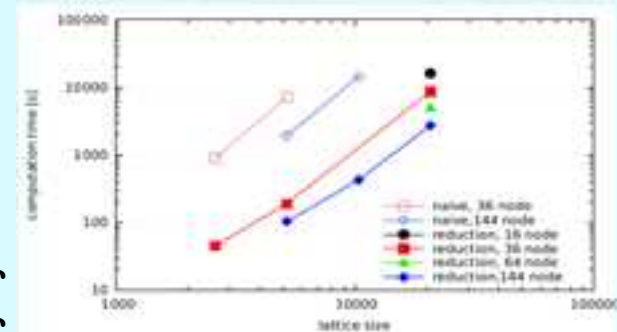
- ・ **神戸大学** 惑星科学研究センター「火星計算が可能となるような機能拡張」(対応済)
- ・ **京大** 生存圏研究所「都市ゲリラ豪雨予測に向けた高解像度実験を行うためのオンラインネスティングの導入」(対応済)
- ・ **東京大** 大気海洋研究所「京一般課題『全球規模大気環境汚染に関わる総合環境モデリング』『次世代型大気汚染物質輸送モデルの精緻化と排出量の推定』に関連する全球大気汚染物質ならびに物質輸送のシミュレーションに向けた、SCALE-LESにNICAMをネスティングするシステムの導入」(対応中) ・ **兵庫県立大** 「超水滴法の実装、及び拡張」(対応中)
- ・ **JAMSTEC**(国際モデル間比較プロジェクト)「SCALEにへのDNSモジュール追加」(対応中)
- ・ **気象研究所** 「高解像度エアロゾル・化学輸送モデルの構築」(平成28年度に対応予定)

<ユーザ利用事例>

- ・ 2013年の公開以後、地図投影座標系等の実装などを順次行いながら、頻繁にバージョンアップし、これまでに**京都大学**、**東京大学**、**JAMSTEC**、**気象研究所**、**兵庫県立大学**、**神戸大学**等の研究者を含む40人(計算結果の解析者も含む)が利用
- ・ 「京」一般利用課題として、**東京大**「全球規模大気環境汚染に関わる総合環境モデリング」及び「次世代型大気汚染物質輸送モデルの精緻化と排出量の推定」、**兵庫県立大**「超水滴法を用いた発雷予測の基盤となる雲氷粒子の微物理モデリング」にて利用
- ・ 戦略プログラム課題として、**JAMSTEC**「高精度領域大気モデルの開発とそれを用いた基礎研究」にて利用
- ・ HPCI一般課題として、**神戸大**「惑星探査計画に資する惑星大気の高解像度実験」及び「惑星探査計画に資する火星大気の領域気象予測実験」にて利用

「負の重みの問題」を持つ物理システムの計算アルゴリズム、大規模疎行列線形方程式反復解法の研究開発

物質をつくっている原子の中には原子核があり、その原子核はクォークという素粒子からできている。クォークの振る舞いをシミュレーションすれば、原子核の成り立ちや宇宙誕生のころのようすを解明できると期待されており、これは格子量子色力学(QCD)という理論に基づいて行われる。格子QCDでは、空間と時間を格子で区切り、その中でクォークの振る舞いを計算するが、大規模な上に、計算しにくいステップをいくつか含んでいるため、「京」でうまく行うための計算法を開発。新機能材料の開発につながる物性研究など、素粒子以外の分野にも応用可能。



新規開発した方法(reduction)と従来の方法(naive)の計算時間の比較。
約20倍の計算時間短縮を達成

<ユーザ要望例>

- Block solver(大規模疎行列に対する線形方程式反復解法高度化の成果、AICS-Technical Report:2014-001にて公表済)の活用(筑波大学、京都大学、大阪大学などが所属する戦略分野5研究開発課題1) (対応中) 利用中。今後も継続してサポート予定。(対応中)
- RSDFT(計算物質科学における主要アプリの一つ)における大規模疎行列に対する線形方程式について、求解部分の最適化の要望を受け。約3倍の性能向上を実現(AICS-Technical-Report:2014-002にて公表済)。(JST・CRESTの研究チームである筑波大学、鳥取大学、電気通信大学、名古屋大学、北海道大学) (対応中)
- 汎用固有値解析ライブラリz-Paresへの素粒子物理計算への応用(筑波大学) (対応中)

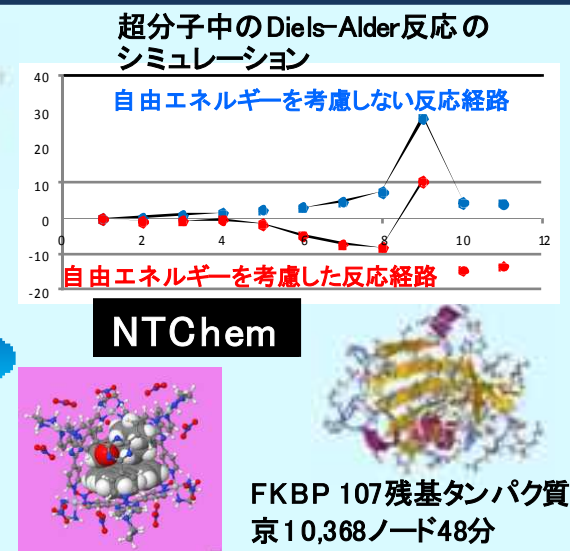
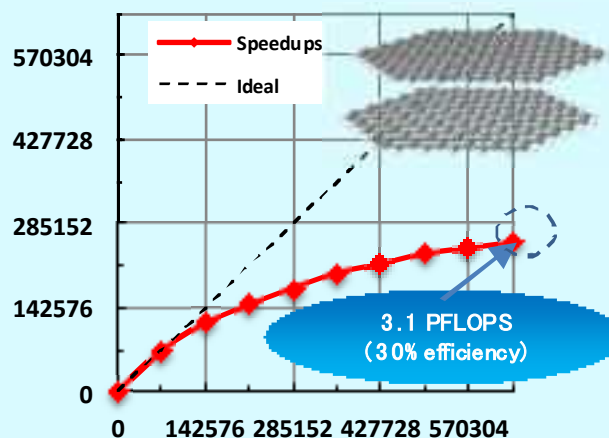
<ユーザ利用事例>

- 筑波大学、京都大学、大阪大学などが所属する戦略分野5研究開発課題1がBlock solverを試行利用中、今後も継続サポート
- 筑波大学、鳥取大学、電気通信大学、名古屋大学、北海道大学が参画するJST・CRESTの研究チームが、高度化研究で最適化したRSDFTを継続して利用
- 広島大学、金沢大学、名古屋大学が高度化研究の成果として最適化および高速化したアルゴリズムを共同研究を通して利用
- 「京」を除くHPCIシステム一般利用で平成27年度に採択された以下課題について、平成28年度「京」一般利用で課題申請予定、採択となれば、開発したアルゴリズムなど高度化研究の成果が活用される見込み
 - 「格子QCDを用いた原子核構造計算へ向けた基礎研究」(筑波大学)
 - 「3フレーバーQCDの有限温度相転移における臨界終点の精密決定」(金沢大学)
 - 「素粒子質量起源の理論探索」(名古屋大学)

「京」の超並列環境に資する国産分子科学計算ソフトウェア NTChem

NTChemは一から設計をした新しい国産分子科学計算ソフトウェア。従来の計算法に加えて、独自に開発した理論・方法が実装されており、他プログラムでは計算することのできない様々な化学現象の解明に利用できる。

さらに、大規模高精度分子計算のために、京全ノード規模までスケールすることのできる新規計算アルゴリズムが実装されており、京80,199ノードを用いて実行効率30%で世界最大の電子相関計算を実現している。



＜ユーザ要望例＞

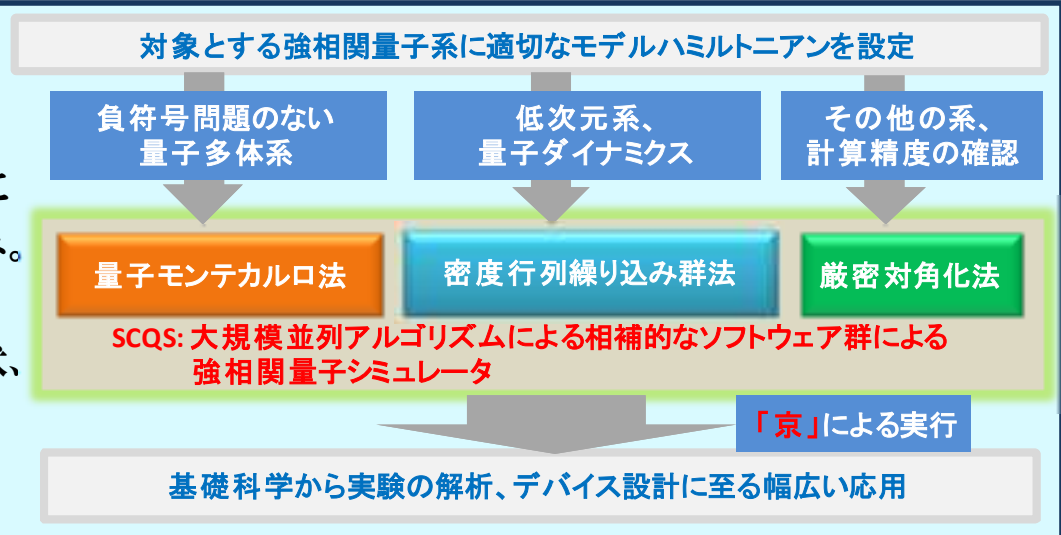
- 汎用並列化プログラム(戦略分野2)(対応済)・100原子程のTDDFT (東京大学)(対応済)・重原子分子計算(戦略分野2)(対応済)
- 高速化,並列化の促進(戦略分野2・北海道大学)(対応中)・周期系の計算(東京大学)(対応中)・FMO(京都大学)(対応中)
- Modylasとの組合せ(東洋紡)(対応中)・Hessian(京都大学)(平成28年度に対応予定)・QM/MMの簡易入力(東洋紡)(対応中)
- constrained-DFT(東京大学)(将来的に対応予定)・CASSCF(京都大学,北海道大学)(将来的に対応予定)
- 実時間ダイナミクスTDDFT,Erenfestダイナミクス(戦略分野2・東京大学)(将来的に対応予定)

＜ユーザ利用事例＞

- 東洋紡、三菱化学の自社サーバ・分子科学研究所、FOCUSのスパコンで公開
- 北海道大学の2研究室、東京大学の2研究室、理化学研究所(他センター)の研究室サーバ
- 東京大学、京都大学、九州大学などの計算機センター(公開検討中)
- NTChem利用講習会参加者の利用として、京都大学(H26年度、一般課題)、東京大学(H26年度、戦略分野2)、横浜市大(H27年度、一般課題)(北海道大学グループ、東洋紡(株)、三菱化学 R&Dシナジーセンター)が利用準備中)

強相関量子系の研究に使われる様々な計算手法による大規模並列プログラム SCQS

SCQSは「京」で実行する大規模並列アルゴリズムによる相補的なソフトウェア群による強相関量子シミュレータ。この内、密度行列繰り込み群法に基づいたプログラムである2D-DMRGは公開済み。この2D-DMRGは2次元系を初めとする多次元系への応用を想定して開発されており、任意の形状、様々なタイプの量子格子模型に対応する。量子モンテカルロ法のプログラムも公開予定。



<ユーザ要望例>

- 動的密度行列繰り込み群法の多次元化(京都大学、東京理科大学) (対応済) ・ 多次元時間依存密度行列繰り込み群法(京都大学、東京大学、東京理科大学、Lanzhou Univ. (中国)、J Stefan Inst. (スロベニア)) (対応済)
- Spring-8等、実験の解析への対応(東京大学、東京理科大学、他) (対応済) ・ ダイヤモンド格子等、計算可能な量子格子模型の拡張(京都大学、東京理科大学) (対応済) ・ 有効スピン模型への拡張(東京大学、京都大学、東京理科大学) (対応済)
- 光格子中の冷却原子の量子ダイナミクスへの対応(原子力研究開発機構) (対応済) ・ 高速化, 並列化の促進(京都大学、東京理科大学、東京大学、SISSA(イタリア)) (対応中) ・ 量子化学計算むけ密度行列繰り込み群法(首都大学東京、大阪大学) (対応中) ・ 時間依存動的密度行列繰り込み群法(京都大学、東京理科大学) (対応中) ・ 各種量子格子模型等への拡張(東京理科大学、仙台高等専門学校) (逐次対応中) ・ 有限温度への拡張(東京理科大学) (将来的に対応予定)

<ユーザ利用事例>

- 「京」を除くHPCI等計算機センターでの利用として、東京大学(密度行列繰り込み群法による三角格子ハバード模型の研究)、(密度行列繰り込み群法によるフラストレートスピン梯子系の研究)、(三角格子Kitaev-Heisenberg模型の量子相の研究)、京都大学(密度行列繰り込み群法による強相関関係の数値的研究)、大阪大学(量子モンテカルロ法による強相関2次元ディラック電子系の物性解明)、九州大学(密度行列繰り込み群法による二次元三角格子ハバード模型の解析)
- HPCI戦略プログラム分野2で利用、また、京都大学と東京理科大学の研究室サーバで研究利用

「京」の計算能力を引き出す分子動力学ソフトウェア GENESIS

GENESISはInverse Table法、Midpoint Cell法、体積分割FFT法などの新規手法を導入した超並列分子動力学計算ソフトウェア。特に、1億原子系では、京の1/2弱のノードを使っても並列性能が落ちないことが示されている。さらに、複数の分子動力学計算を並列に実行するアルゴリズム(レプリカ交換分子動力学法など)や、粗視化分子モデルを導入することで、分子スケールから細胞スケールに至る様々な問題解決に利用することが可能。



「京」による細胞内のタンパク質のシミュレーション

<ユーザ要望例>

- CHARMM以外の力場の利用 (Univ. Warsaw)(AMBERとGROMOS力場を利用可能に対応済)
- Lagrange形式に基づくTargetted MD法 (Los Alamos National Labo) (対応済)
- ユーザーが定義した粗視化分子モデルの利用 (Michigan State Univ) (対応中)
- 全原子Go-modelに基づくシミュレーション (Los Alamos National Labo) (対応中)
- Implicit solvent/membraneの利用 (製薬企業) (対応検討中)
- 自由エネルギー摂動法の導入 (製薬企業、横浜市立大学、京都大学) (対応検討中)
- 新しいReplica-exchange法の導入 (製薬企業、横浜市立大学) (平成28年度対応予定)

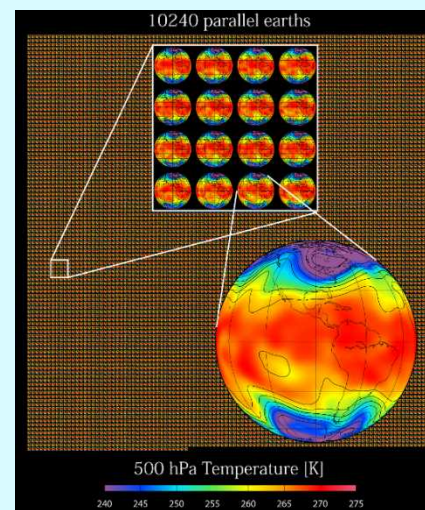
<ユーザ利用事例>

- **京都大学理学研究科**: 分子混雑環境を考慮した酵素反応のQM/MM自由エネルギー解析を行うため、QM部分を動かさないダイナミクスを行うための改変を導入依頼(実装済。戦略分野1の課題として京でのシミュレーションを実行)
- **Los Alamos National Labo.**: R-path法による大規模構造変化のシミュレーションを導入依頼(実装中)、実施見込み
- **Univ. Warsaw**: AMBER力場を用いたRNAのシミュレーションを導入依頼(実装済、HPCIのリソースを用いた共同研究実施中)
- 新学術領域研究「動的構造生命」のチーム(九州大学、金沢大学、他): 昨年9月の第2回GENESIS利用講習会で連携。計算科学者だけでなく実験科学者も含む多くの参加者。ソフトウェアの利用促進を図っている。(第1回講習会の参加者10名)

並列計算効率に優れたアルゴリズムとして設計されたデータ同化ソフト

LETKF

アンサンブル・カルマンフィルタ(EnKF)の手法の一種であり、並列計算効率に特にすぐれた実用的な手法であるLETKFは、アンサンブル手法とデータ同化手法とを融合し、日々変動する誤差構造を考慮した高度なデータ同化を行うとともに、解析誤差を反映したアンサンブル初期摂動を生成する。変分法と比べて実装が簡便なEnKFは、データ同化研究の敷居を下げ、観測的研究と数値モデル研究との橋渡しとして期待されている。また、アンサンブル手法としてもすぐれていることから、広く予測可能性研究にも有効。



世界最大規模の10240メンバーのアンサンブルデータ同化に成功。LETKFに大規模並列数値計算技術研究チームのEigenExaを取り込み、京のための最適化を行った。誤差の構造を詳細に表現し、データ同化の精度向上へのアルゴリズム開発に役立てる。

<ユーザ要望例>

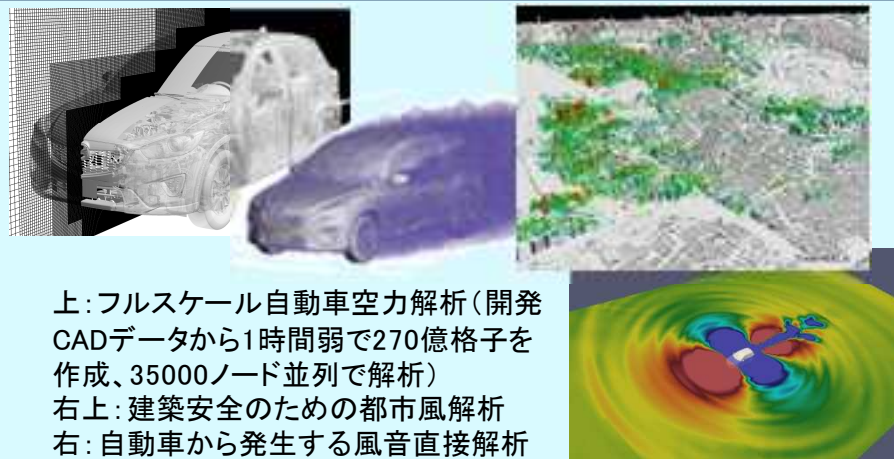
- ・アンサンブルデータ同化で実行される多数の小規模ジョブのキュー待ち時間の改善 (JAMSTEC、東京大学、東北大学、気象庁) (対応済)
- ・アンサンブルデータ同化における局所化手法の高度化 (JAMSTEC、東京大学、東北大学、気象庁) (一部対応済、対応中)
- ・降水観測データ同化手法の確立 (JAXA、東京大学、JAMSTEC) (一部対応済、対応中)
- ・京・ポスト京におけるアンサンブルデータ同化手法の高速化 (JAMSTEC、東京大学、東北大学、気象庁) (対応中)

<ユーザ利用事例>

- ・国内では、気象庁気象研究所、JAMSTEC、東大、東北大、土木研究所が利用
 - ・海外では、アメリカ海洋大気庁、メリーランド大学、アルゼンチン気象庁、ブエノスアイレス大学、ブラジルINPE、ブラジルCPTEC、韓国KIAPS、台湾国立中央大学などが利用
- (※データ同化ソフトとして米国大気海洋研究所NCARのデータ同化ソフトDARTと、LETKFが国内外の研究機関で広くユーザに使用されているが、LETKFは並列計算効率に優れたアルゴリズムとして設計されており、京・ポスト京での利用に適している)

流体・化学反応・音といった様々な現象の連成解析を可能とする基盤ソルバー CUBE

CUBEは、階層直交格子データ構造に基づく流体・構造・化学反応・音等の統一解析ソフトウェア。複雑形状物体の複雑・複合流れ現象解析を得意とし、現在産業界の主流である非構造格子解析に対して、CADデータからの高速格子作成と高い単体・並列性能が特徴である。現在までに、圧縮性・非圧縮性流体統一解析モジュール、詳細化学反応モジュール、移動境界モジュールが完成しており、自動車空力解析やメソスケール都市風解析で実証実績がある。



上: フルスケール自動車空力解析(開発CADデータから1時間弱で270億格子を作成、35000ノード並列で解析)
右上: 建築安全のための都市風解析
右: 自動車から発生する風音直接解析

<ユーザ要望例>

- ・空力音統一解析アルゴリズム改良(マツダ)(対応中) ・空力予測高精度化アルゴリズム改良(スズキ)(対応中)
- ・自動車部品の熱流体統一解析アルゴリズム(小糸製作所)(対応中) ・自動車の要素技術解析(京都大学、自動車会社数社)(対応中)
- ・自動車エンジンまるごと解析のための実証解析(京都大学、自動車会社数社)(平成28年度対応予定)
- ・自動車空力まるごと解析のための実証解析(日産、プリジストン、デンソーなど自動車コンソーシアム参画企業)(平成28年度対応予定)

<ユーザ利用事例>

- ・京一般利用課題(平成26年度)にてマツダ、日産自動車、スズキ、東京工業大学・鹿島建設・清水建設が利用
- ・京一般利用課題(平成27年度)にてマツダ、スズキが利用
- ・戦略プログラム分野4の「自動車コンソーシアム」にて検討アプリとして検証中

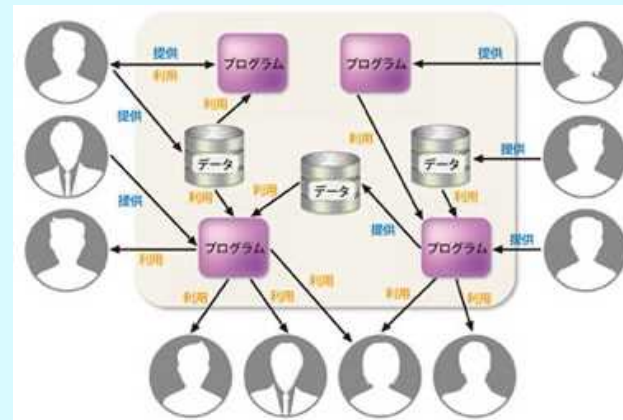
<今後の産業界への普及展開>

- ・自動車会社数社、京都大学と自動車エンジンまるごと解析に向けた開発
- ・小糸製作所と熱連成解析の実用化に向けた開発。将来的には広く業界全体へ展開予定
- ・日産自動車、マツダ、スズキとの空力関連アルゴリズム改良結果を、将来的には自動車コンソーシアムへ展開予定
- ・鹿島建設、清水建設、東京工業大学にて展開されるCUBEの都市風解析を、広く産業界で展開予定

京のための計算ポータル構築支援システムの提供

プログラム開発者がプログラムを、データ提供者がデータを持ち寄る「計算ポータル」を構築し、プログラムとデータをさまざまな組み合わせで多くのユーザーに使ってもらえるしくみを提供。

また計算ポータルの開発と同時に、2つの基盤技術を研究。1つは、仮想化技術を用いて「京」の中に仮想的な「京」を何台もつくる研究。もう1つは、間違っただプログラムを事前に検証する方法の研究。これらにより、多くの人に計算ポータルを公平かつ安全に利用してもらうことが可能になる。



計算ポータルのイメージ

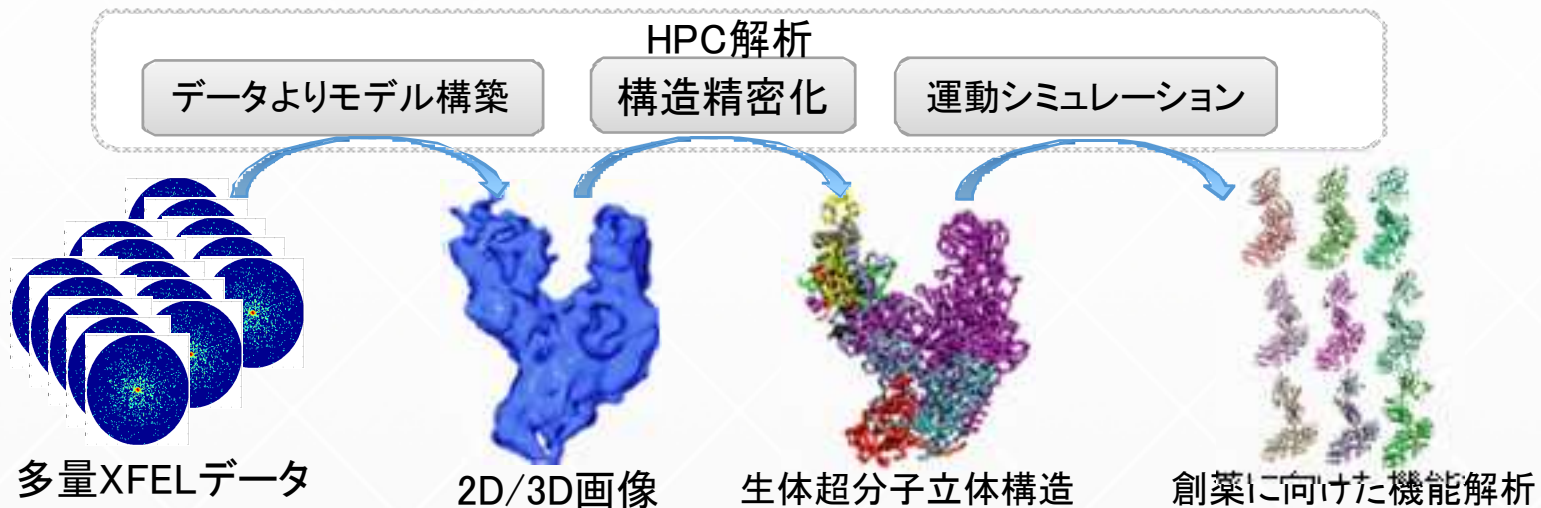
<ユーザー要望例>

- ・性能測定ツールScalascaの京向け移植 (Jülich Supercomputing Centre) (一部対応済・対応中)
 - ・性能測定ツールExtraeの京向け移植 (Barcelona Supercomputing Center) (一部対応済・対応中)
 - ・性能測定ツールTAUの京向け移植 (Oregon Univ.) (一部対応済・対応中)
 - ・仮想計算機システムの実装・テスト・評価 (東京大学) (対応中)
 - ・「京」上への Python ※の移植 (東京大学) (一部対応済・対応中) ・ McSpinの改善・バグ修正 (国内大学) (対応中)
- (※Pythonは今日の計算機環境で一般的に利用されるようなソフトウェアで、潜在的需要は大きい)

<ユーザー利用事例>

- ・ McSpin : 国内大学、米Cray社より相談、及び既に利用しているという連絡あり。
McSpinはプログラム検証ツールの一種のため、各利用者のPC・サーバ上での実行が想定される。
- ・ Xcrypt (京向けの移植) : 京都大学の計算機に導入されていたものを「京」へ移植し、東京大学研究者による利用がなされた。「京」以外の計算機においては京都大学、北海道大学、東京大学の研究者等による利用がなされており、「京」での利用拡大が見込める。
- ・ Python (京向けの移植) : 戦略機関分野2で使用のライブラリrokkoをプログラム言語Pythonへ変更する作業を実施中であり、活用が見込まれる。

大型施設との連携 (SACLA) つづき



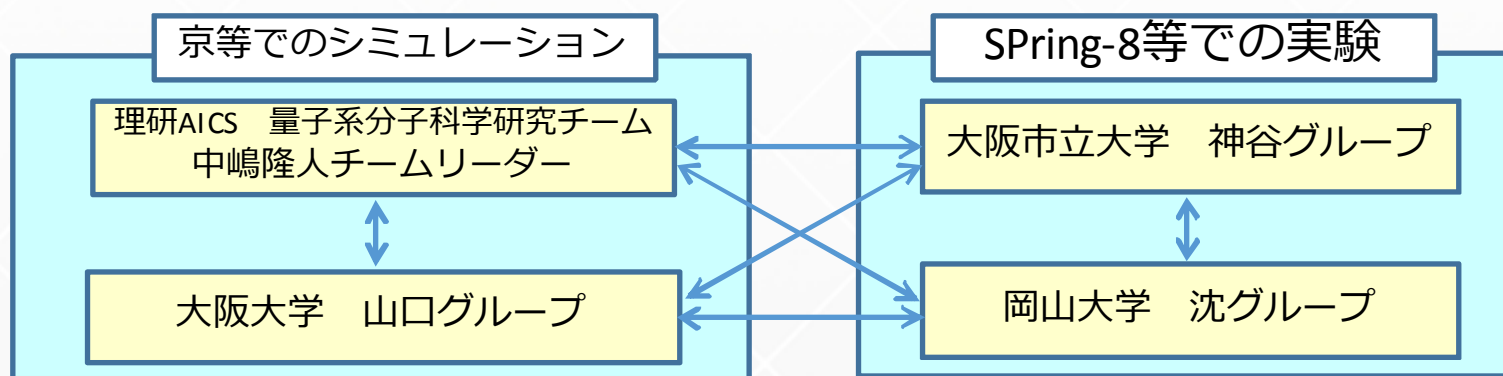
活動実績・成果等

- 分子動力学シミュレーターGENESISの開発(杉田T)「『京』調整高度化枠」
「京」上で高い並列化効率を出すことのできる分子動力学ソフトウェア。全原子分子モデルと粗視化分子モデルを実装し、創薬や材料設計などの幅広い分野で利用できる (WIREs Comput. Mol. Sci., DOI: 10.1002/wcms.1220)
- 立体構造精密化モジュールの開発(タマU, 杉田T)
実験データを利用して精密な構造モデルを構築するためのアルゴリズムをGENESISに実装 (論文準備中)
- XFEL実験データ解析アルゴリズムの開発(タマU)「『京』若手人材育成枠」
XFELにより生体超分子の動的構造解析を行うためのアルゴリズム (論文投稿中)
- バイオマテリアルの構造解析(タマU)
XFELとsynchrotronを用いた医療的応用が期待されているバイオナノマテリアルRNAi spongeの構造解析 (Nat Commun 5, 3798 (2014))

大型施設との連携 (SPring-8)

○光合成システムの共同研究 「『京』一般利用枠」

太陽光を用いた水分解反応の学理解明と研究成果の人工光合成への展開を目的とした研究。SPring8等の利用により天然光合成系の酸素発生中心の高精度な電子状態計算が可能になったため、京のシミュレーションなどにより更に水分解による酸素発生メカニズムの理論を解明する。

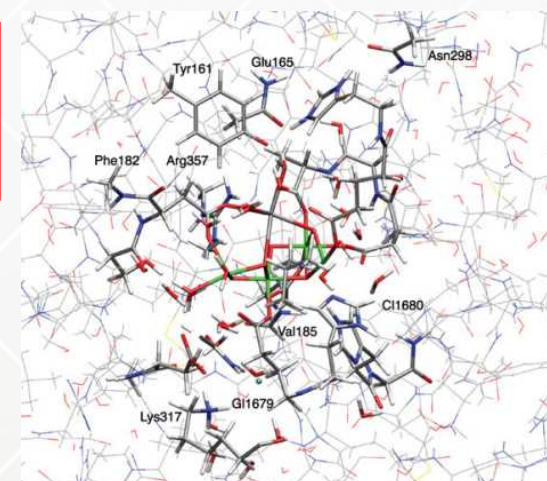


大阪市立大学・神谷グループ、岡山大学・沈グループらによるSPring-8でのX線結晶構造解析

→ X線結晶構造解析の分解能では水素原子の位置が見えない

京を用いた量子力学/分子力学(QM/MM)計算 (プロトン輸送経路の構造最適化)

→ 水素原子の位置を構造最適化で決定できる



天然光合成の酸素発生中心の電子状態シミュレーション

国内外協定等一覧(1/2)

(2015年3月末時点)
(施設利用関連等の軽微のものは除く)

	相手国	相手機関名	名称	開始日	終了(予定)日	内容
1	イタリア	THE SCUOLA INTERNAZIONALE SUPERIORE DI STUDI AVANZATI (SISSA)	Agreement between SISSA and AICS	2011/5/20	2016/5/19	研究者、学者、院生の交換など
2	米国	National Center for Supercomputing Applications (NCSA)	Memorandum of Understanding	2012/10/13	2015/10/12	計算科学・計算機科学の研究交流、計算資源の相互利用
3	オーストラリア	National Computational Infrastructure (NCI)	Memorandum of Understanding	2012/11/20	2015/11/19	計算科学・計算機科学の研究交流、計算資源の相互利用
4	米国	University of Maryland	Memorandum of Understanding	2013/2/25	2016/2/25	数値計算モデリングやデータ同化に関する分野での研究交流
5	ドイツ	Jülich Supercomputing Center	Memorandum of Understanding	2013/2/25	2015/12/31	計算科学・計算機科学の研究交流、計算資源の相互利用の合意に向けた交渉
6	米国	Argonne Leadership Computing Facility	Memorandum of Understanding	2013/11/18	2016/11/17	計算科学・計算機科学の研究交流、計算資源の相互利用についての交渉
7	フランス、米国、スペイン、ドイツ	国際組織 JLESC(Joint Laboratory for Extreme-Scale Computing)	Memorandum of Understanding	2014/5/21	2018/5/20	ワークショップや人員交流等 現在はINRIA(France)、University of Illinois、Argonne National Laboratory、Barcelona Supercomputer Center及びJülich Supercomputing Centreで構成

国内外協定等一覧(2/2)

(2015年3月末時点)
(施設利用関連等の軽微のものは除く)

	相手国	相手機関名	名称	開始日	終了(予定)日	内容
8	日本	国立大学法人東北大学	独立行政法人理化学研究所と国立大学法人東北大学との連携・協力に関する協定	2009/4/14	2018/3/31	共同研究等による研究開発、人材交流及び人材養成、産業界及び他機関との連携・協力など
9	日本	国立大学法人筑波大学	独立行政法人理化学研究所と国立大学法人筑波大学との間における「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト推進のための連携・協力に関する基本協定	2006/9/8	2016/3/31	情報交換、共同研究等による研究開発、人材交流及び人材養成、産業界や他機関との連携協力
10	日本	国立大学法人神戸大学	国立大学法人神戸大学と独立行政法人理化学研究所計算科学研究機構との計算科学、計算機科学及びこれらに関連する分野における連携・協力に関する協定書	2012/4/1	2016/3/31	計算科学、計算機科学及びこれらに関連する分野における共同研究 人材育成、その他
11	日本	計算科学振興財団	次世代スーパーコンピュータの利用の促進等についての連携・協力に関する協定書	2008/3/21	2016/3/31	土地の使用、施設の整備・運営・利用促進、人材交流及び人材養成、産業界及び他機関への技術情報の提供や技術支援、一般への情報発信・普及啓発等
12	日本	高度情報科学技術研究機構	スーパーコンピュータ「京」の利用者向け講習会用資料に関する覚書の締結について	2013/5/15		スーパーコンピュータ「京」の利用者向け講習会用資料の取り扱いについて定める(計算科学研究機構が所有する京ユーザ向け講習会用資料を元としている)
13	日本	高度情報科学技術研究機構	特定高速電子計算機施設に係る利用促進業務等に関する連携協力協定	2012/4/1		利用促進業務の連携、連携協力会議の設置、施設利用、経費応分負担など
14	日本	計算科学振興財団	革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)の運営業務の推進に関する協力協定書	2012/4/2	両者が当該業務を受託している期間	土地使用、施設整備、人材交流、情報提供、技術支援、情報発信等の連携・協力

広報活動の中長期強化事項・2015年度重点事項

▶ 中長期的な強化事項

(1)優先ターゲットの絞り込み

- ・ 知的好奇心が高い現役世代：食いつきがよく、話を広めてもらえる人
- ・ 次世代を担う若年層：小中学生、高校生、大学生、教員、保護者、教育系出版

(2)訴求内容の両面化

- ・ 京の成果、価値創出事例(製品等)、ポスト京の必要性：論理的に訴求
- ・ 科学へのブレイクスルー(志・挑戦)：感情的に訴求

(3)間接的な発信の強化・追加

- ・ メディアの活用増：マスメディア個別訪問、科学ジャーナリスト、教科書掲載
- ・ インフルエンサーの活用：「自画自賛」ではなく、客観的な影響力の活用

▶ 2015年度重点事項

(1)「ポスト京」浸透に向けた広報活動

- ・ 目標：ポスト京についても、京並みの認知度・理解度を目指す
- ・ 売り込みポイント：何が達成できたか(重点課題と連携)、ポスト京の先への継続

(2)「京」成果の把握・発信

- ・ 「京」成果の売り込み継続：受信者視点での発信：自分ゴト化・生活とのかかわり
- ・ 戦略分野最終年度にあたり、各分野とさらに密に連携

(3)若年層向け広報

- ・ 年代別 企画・プログラムの拡充：高校生向け教材等
- ・ 神戸市青少年科学館とのタイアップ：京展示コーナー、動画制作等
- ・ 学校・教員に対し、より積極的なアプローチ：知る集い、出張授業等
- ・ 2014年度作成したコンテンツの活用：ハロースパコン、シミュレーション体験アプリ等

AICSの広報活動 参考データ (リリース・マスメディア)

積極的な取材対応のほか、記者向け勉強会を開催することで、好意的な内容の掲載が継続

● リリース・マスメディア掲載数

	2012年度	2013年度	2014年度	2015年度*
リリース数(AICS)	6	15	11	9
掲載(新聞・雑誌)	366	479	314	340
掲載(ネット)	369	325	227	139
放送(TV・ラジオ)	65	42	14	16
掲載・放送計	800	846	555	495
前年度比		106%	66%	89%

*2015年度は1月末まで

※2012年4月～2016年1月

● マスメディア(新聞、テレビ、雑誌など) 約1,600件

2012年7月TBS「夢の扉+」

2015年3月日本経済産業新聞

2015年5月日本経済新聞



2015年10月 NHK-Eテレ「サイエンスZERO」

2015年2月日刊工業新聞

AICSの広報活動 参考データ（ウェブ・コンテンツ作成）

成果をわかりやすくウェブで解説。「イベント参加前に事前学習できた」との感謝の声も。

● ウェブ訪問数

	2012年度	2013年度	2014年度	2015年度*
訪問数	158,861	160,816	156,160	145,109
前年度比		101%	97%	93%

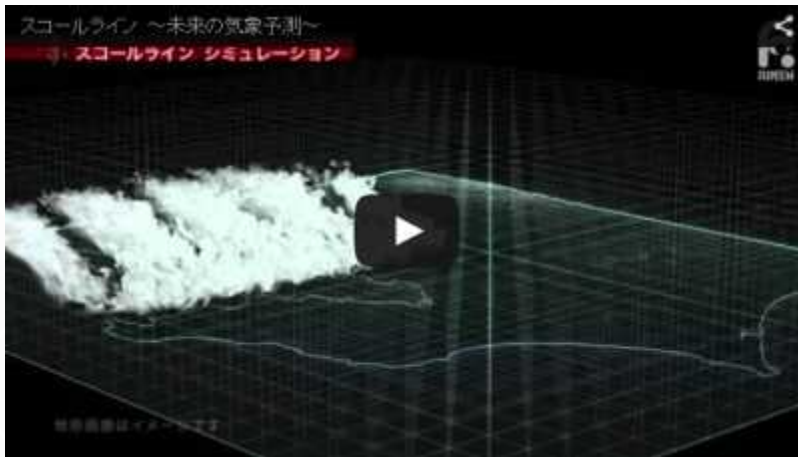
*2015年度は1月末まで

● 戦略分野、RIST、FOCUS等と連携しながら、さまざまな媒体で情報発信



AICSの広報活動 参考データ (成果動画)

見学対応(年間1万人)、各地イベント(年間5千人)、ウェブ公開などで利用



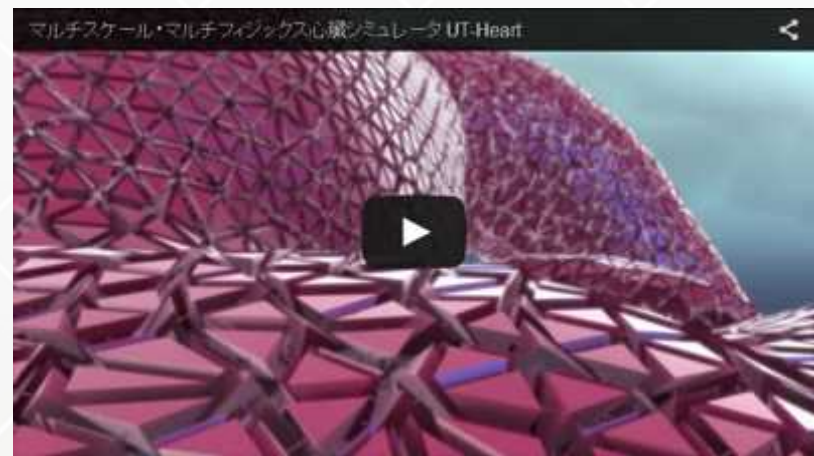
スコールライン
ウェブ公開：約1年前 閲覧数：1,300回



リチウムイオン(短縮版+完全版)
ウェブ公開：約1年4か月前 閲覧数：10,600回



自動車空力 (短縮版)
ウェブ公開：約8か月 閲覧数：2,700回



UTハート(戦略分野1制作) ※SIGGRAPH 受賞作品
ウェブ公開：約1年4か月 閲覧数：27,580回 (日本語)
閲覧数：262,900回 (英語)

AICSの広報活動 参考データ (イベント)

認識度・理解度の低い若年層の参加増に向け、教委・学校等との連携により、高松では若年層が4割に。

● シンポジウム・講演など 147件

※2012年4月～2016年1月

● イベント来場者数

	2012年度	2013年度	2014年度	2015年度
京シンポ	389	321	229 (展示 1,400)	207
一般公開	3,435	2,150	2,500	2,590
和光一般公開 (和光全体)		(8,481)	2,537 (11,190)	約1,100 (7,057)
ISC(欧州)		170	520	170
SC(米国)	249*	147*	780	500

知る集い	2012年度	2013年度	2014年度	2015年度
	金沢 216	新潟 241	大阪 159	富山* 563
	広島 233	東京* 416	静岡 189	高松 170
	東京 309	盛岡 294	松江 106	仙台 (3月)
	長崎 278	熊本 326		富山は、 富山県・ 県教委と 共同開催
	秋田 259	東京は 「特別 版」とし て開催		

*2015年度は1月末まで

*SC12、SC13は、アンケート回収数

※2015年度は、仙台、富山、高松など各地で開催



京都、仙台、東京、神戸、福岡、名古屋、松山、札幌、金沢、広島、長崎、秋田、新潟、盛岡、熊本、大阪、静岡、松江、富山などで開催(2010年～)。



AICSの広報活動 参考データ（見学者（イベント参加者を含む））

地元のみならず、全国各地から受け入れ。毎年楽しみにしている学校等もある。

● 見学者数（イベント参加者を含む）

	2012年度	2013年度	2014年度	2015年度*
件数	447	542	408	426
見学者数	12,646	11,537	9,419	10,249
前年度比		91%	82%	109%

*2015年度は1月末まで

※2012年4月～2016年1月

● 主な見学（学校、企業など）約4万4千人(1823件)

<2015年度の見学事例>

- 4月 敦賀工業高校(福井県)、徳島科学技術高校
- 5月 広島三育学院高校、JR東日本
- 6月 津山高専(岡山県)、米国アルゴンヌ国立研究所
- 7月 桜ノ宮中学校(兵庫県)、富山いずみ高校
- 8月 米沢興譲館高校(山形県)、札幌開成中等教育学校
巨摩高校(山梨県)、大阪大学、パナソニック
- 9月 名城大学(愛知県)、松江高専、静岡県立大学
- 10月 鶴甲小学校(兵庫県)、九州工業大学、NTTドコモ
- 11月 都城高専(宮崎県)、磐城高校(福島県)
- 12月 富谷高等学校(宮城県)、茨城工業高専
- 1月 神戸大学、インド工科大学

スーパーコンピュータ性能の国際的な指標

<平成27年11月発表のランキング>

ランキング 名称	HPCG	Graph500	Top500	Green500
第1位	Tianhe-2 (中国) 580(TF)	京 (日本) 38,621.4(GTEPS)	Tianhe-2 (中国) 33,862.7 (PF)	Shoubu (日本) 7,031.58(MF/W)
第2位	京 (日本) 461(TF)	Sequoia (アメリカ) 23,751(GTEPS)	Titan (アメリカ) 17.59(PF)	TSUBAME-KFC/DL (日本) 5,331.79(MF/W)
第3位	Titan (アメリカ) 322(TF)	Mira (アメリカ) 14,982(GTEPS)	Sequoia (アメリカ) 17.17(PF)	(システム名なし) (ドイツ) 5,271.81 (MF/W)
第4位	Trinity※ (アメリカ) 183(TF)	JUQUEEN (ドイツ) 5,848(GTEPS)	京 (日本) 10.51(PF)	(システム名なし)※ (中国) 4,778.46(MF/W)
第5位	Mira (アメリカ) 167(TF)	Fermi (イタリア) 2,567(GTEPS)	Mira (アメリカ) 8.59(PF)	XStream (アメリカ) 4,112.11(MF/W)
第6位	Hazel Hen※ (ドイツ)	Tianhe-2 (中国)	Trinity※ (アメリカ)	(システム名なし)※ (中国)
第7位	Pleiades (アメリカ)	第7位タイ	Piz Daint (スイス)	(システム名なし)※ (中国)
第8位	Piz Daint (スイス)	Turing(フランス) Blue Joule (イギリス)	Hazel Hen※ (ドイツ)	(システム名なし)※ (中国)
第9位	Shaheen II (サウジアラビア)	DIRAC(イギリス) Zumbrota (フランス)	Shaheen II (サウジアラビア)	(システム名なし)※ (中国)
第10位	Stampede (アメリカ)	Avoca (オーストラリア)	Stampede (アメリカ)	(システム名なし)※ (中国)
概要	実アプリケーションでよく使用されている計算を実行する性能を評価。 計算速度だけでなく、メモリやネットワークの性能も重要。	大規模かつ複雑なデータ解析を行う性能を評価。 計算速度だけでなく、アルゴリズムやプログラムも重要。	単純計算の速度を評価。 現時点で国際的に最も通用している指標。	消費電力当りの演算性能を評価。 計算速度だけでなく、エネルギー消費効率も重要。

「京」関連定量データ

予算、運用状況

AICSの予算概要

(単位:千円)

機構の運営費等

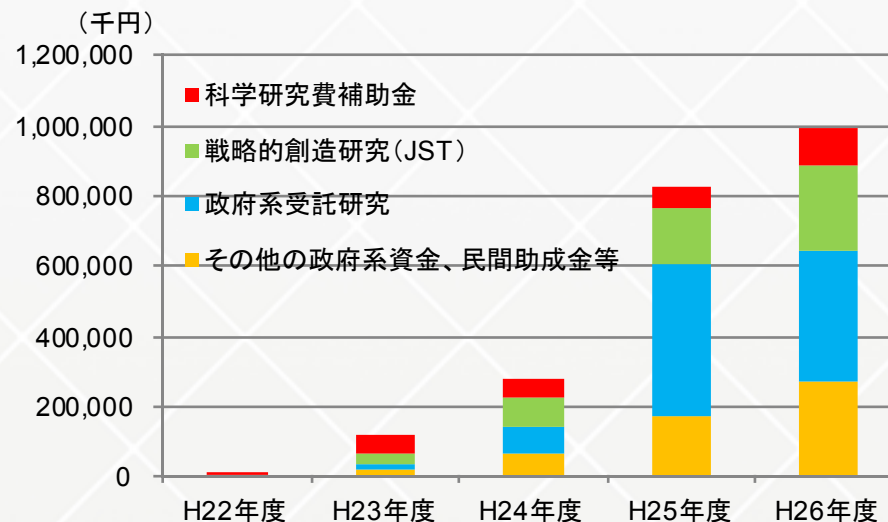
	平成22年度	平成23年度	平成24年度	平成25年度	平成26年度	平成27年度
高性能汎用計算機システム利用・運転維持費補助金 *1	1,060,539	6,499,827	9,653,322	—	—	—
特定高速電子計算機施設の運営(補助金) *1	—	—	—	10,587,077	10,416,499	10,373,167
次世代超高速電子計算機システムの開発・整備等(補助金) *1	—	—	—	—	1,150,444	3,524,312
計算科学技術研究事業費(運営費交付金) *2	—	—	—	81,490	77,416	62,984

*1 特定先端大型研究施設運営費等補助金 *2 理研内部連携のための運営費交付金

外部資金獲得状況

(単位:千円)

	平成22年度	平成23年度	平成24年度	平成25年度	平成26年度
科学研究費補助金	1,950	55,250	50,300	62,256	75,023
戦略的創造研究(JST)	0	27,625	84,471	160,934	266,191
政府系受託研究	0	15,300	74,508	435,448	378,204
その他の政府系資金、民間助成金等	8,000	24,075	67,871	170,199	250,577
総計	9,950	122,250	277,150	828,837	969,994



「京」の稼働率

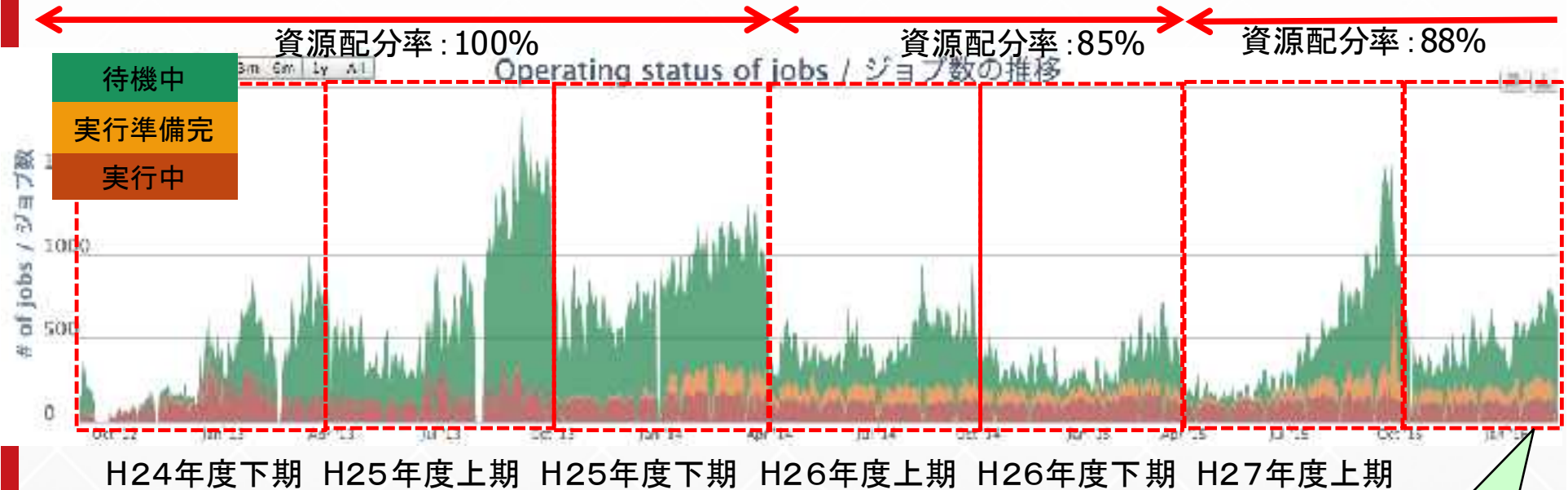
○実時間

事項	H24年度	H25年度	H26年度	H27年度 (1月末まで)
利用者に提供した時間	4066.3	8299.2	8171.8	6842.4
予定された保守	280.8	353.7	284.6	308.6
予定にない保守	77.9	107.1	303.6	193.0

○割合

事項	H24年度	H25年度	H26年度	H27年度 (1月末まで)
利用者に提供した時間	91.9%	94.7%	93.3%	93.2%
予定された保守	6.3%	4.0%	3.2%	4.2%
予定にない保守	1.8%	1.2%	3.5%	2.6%

「京」の利用状況(ジョブの本数)

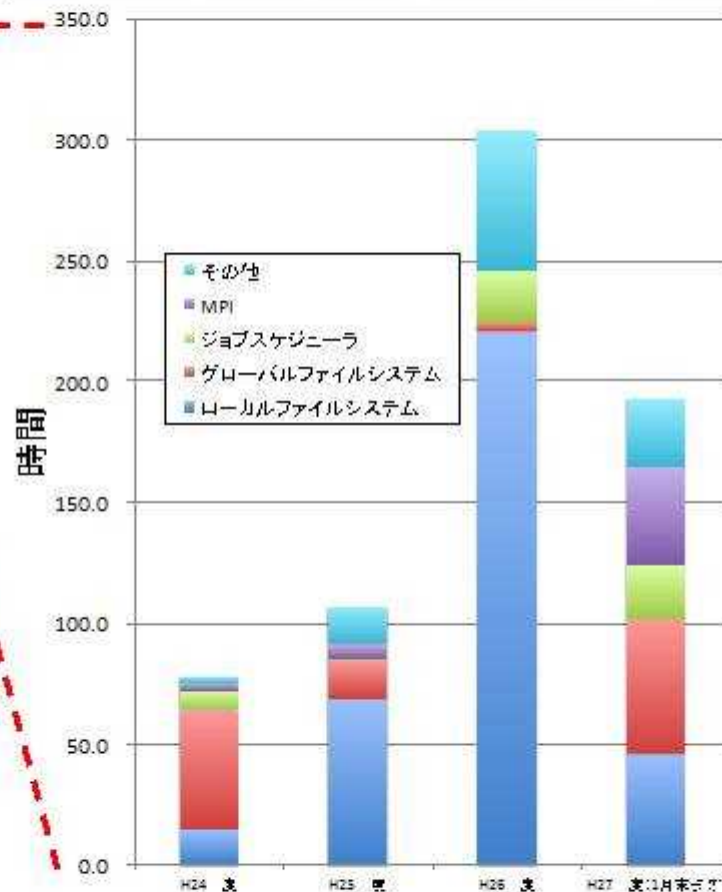
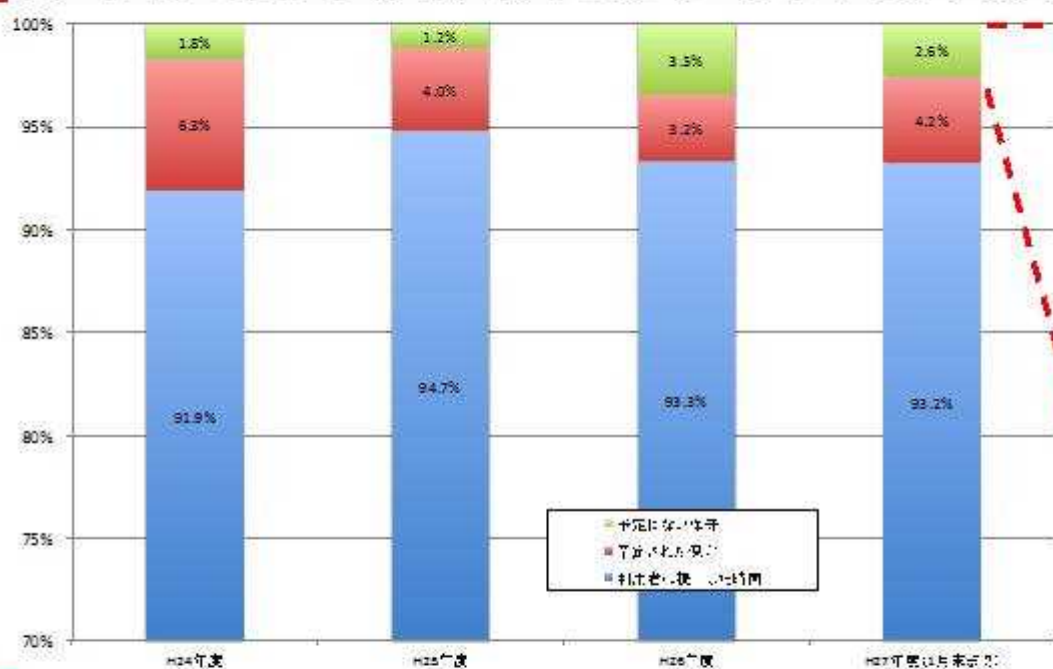


H27年度下期

H27年上期末は、利用が集中し過去最悪に近い混雑度
下期末に近づき、混雑度が増してきている

年度毎の稼働率と停止の原因

実時間に対する稼働時間と保守時間の割合(稼働率) 「予定にない保守」の内訳



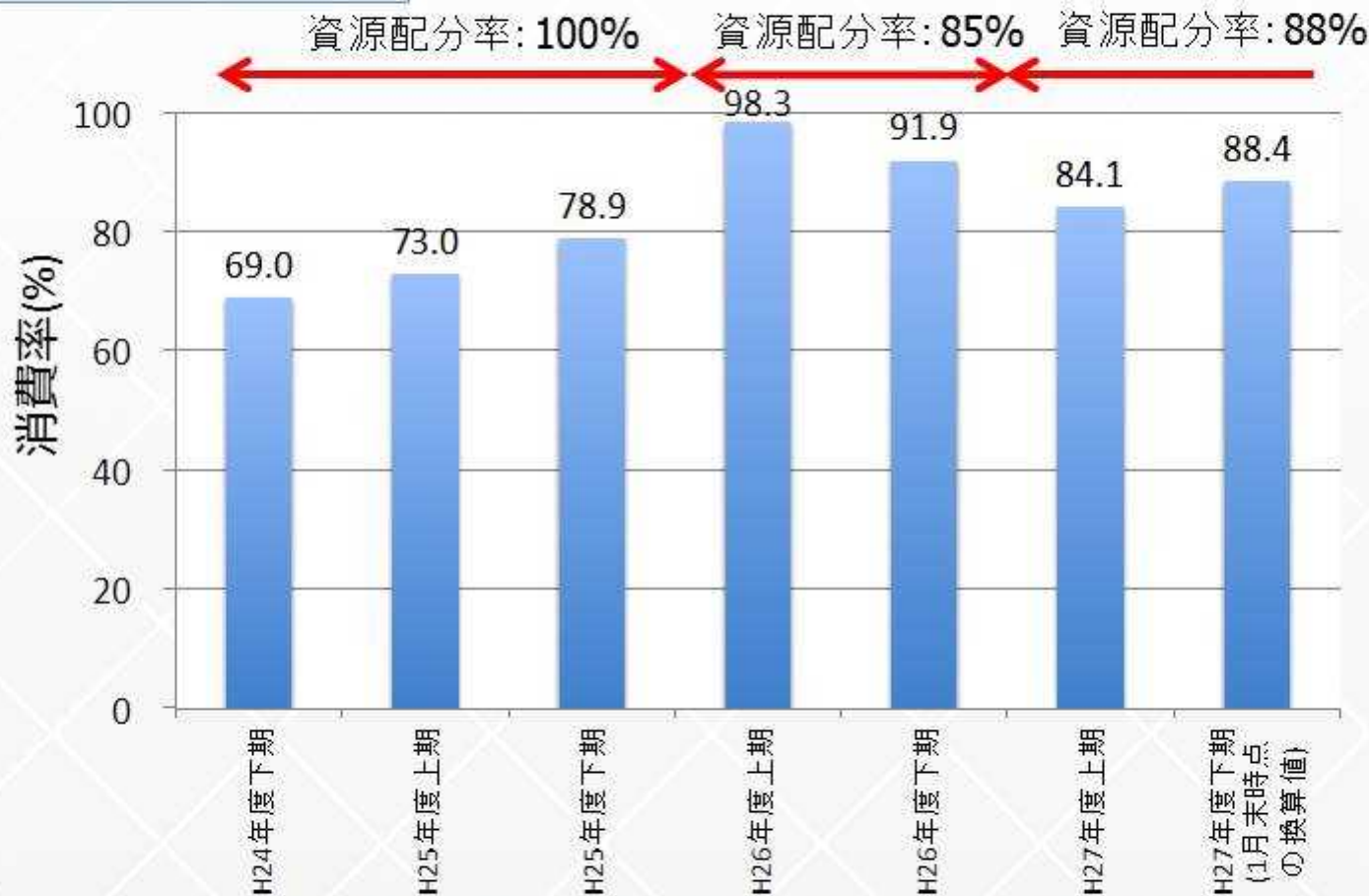
- H24年度はやや低かったものの、H25年度は95%に迫る稼働率を達成
- H26年度の予定にない保守時間が大幅増
- H27年度は、3年に一度の電気設備点検(10/8-10/16)に伴う保守作業のため予定された保守が増

年度を重ねるにつれて予定にない停止時間が増加。ファイルシステム由来の停止が主たる原因

消費率の推移

$$\text{消費率} = \frac{\text{実際に消費した資源量}}{\text{配分された資源量}}$$

※配分された資源量は、365日24時間の5%を保守時間として除外した残り95%に、ジョブ充填率等の割合を考慮し算出。H24、H25年度は100%、H26年度は85%、H27年度は88%



- 共用開始直後はやや低迷したものの徐々に増加
- 資源配分率を適正化したH26年度は90%以上を達成
- H27年度は期首にやや利用が停滞したが、最終的には90%近くになる見込み

「京」の運用上の工夫

「京」の運用改善について

平成24年度

- **36865ノード以上の大規模実行用の期間を設定(月に2日間を2回)**
 - ✓ 大規模ジョブを常時実行可能としていることで、大規模ジョブが流れにくくなる上、大規模ジョブの実行前に必要なノードを空ける必要があるため、計算資源の利用が非効率的となっていた。
- 36865ノード以上のジョブは、小中規模ジョブと混在させず、日を限定して実行。
- **ジョブスケジューリングの改善**
 - ✓ 京ではファイルステージング方式を採用しているため、新規のジョブが割当てられるにはノードに加え、ローカルディスクも空いている必要がある。しかし、ローカルディスクが空いていないためにジョブが割り付けられず、ジョブ充填率が低下するという状況がしばしば発生した。
- 時間的、空間的にジョブをより効率的に充填するために以下の対策を実施。1) 空間的なジョブの割り付け方法を変更するとともに、ステージインの開始時期を実行直前に変更。これによりローカルディスクの枯渇によるジョブ充填率低下を回避。2) ジョブの規模により割当領域を分割。これにより、小規模ジョブが点在することによる中大規模ジョブの待ち時間増加を抑制。

平成25年度

- **ジョブ待ち時間の情報を提供**
 - ✓ ジョブを投入してから実行されるまでの時間が、利用者にとってはわかりにくく、研究の進捗の見通しが立てにくい状況だった。
- ノード数や形状、経過時間を入力すると、現在の待ち時間を返すコマンドを提供するとともに、ジョブの種別に過去1ヶ月間の平均待ち時間をポータルサイトで提供。
- **小規模短時間用ジョブ向けのジョブキューの新設**
 - ✓ ジョブ充填率が頭打ちになったため、別の観点でジョブ割当ての隙間を埋める方法が求められていた。
- 小規模短時間のジョブをステージングなしで実行できるジョブキューを新設することで、既存ジョブの割当にほとんど影響を与えずに隙間を埋めることが可能に。大規模実行期間でも運用
- **大規模実行用の期間を月1回の3日間に**
 - ✓ 大規模ジョブ実行期間中に実行されるジョブ数が少なく、月2回では計算資源の利用が非効率となった
- 大規模実行期間を月1回の3日間に変更し、効率化を図る。

平成26年度

「京」の運用改善について(続き)

大規模実行期間における充填率の低下を改善

- ✓ 全ノードを利用するような大規模ジョブを実行する大規模実行期間(3日/月)を設けているが、余剰ノードが大量に発生するために、当該期間に利用効率が低下。

→ 利用効率を考慮し、ジョブの実行順序を入れ替え。

ノード専有利用をノード専有型から優先度調整型に変更

- ✓ 優先課題向けの制度として、一部のノードをある期間専有するサービスを提供していたが、利用者の希望通りの日数や規模の確保、割当てられた資源の消費が困難などの問題が発生。

→ ノード専有ではなく、ジョブ単位で優先度を調整する方式に変更。一般利用者有償課題向けの優先サービスについて、リソースグループの範囲を緩和。

プリポスト環境の増強

- ✓ ジョブ実行前後のデータ加工などのための大メモリを持ったプリポスト環境が1台しかなく、常に混雑している状況。

→ 4台に増強するとともに、バッチ利用システムを導入し、効率的にデータ解析を行える環境を整備。

平成27年度

省電力化に向けた取り組み

- ✓ 京で実行されるアプリケーションは最適化により年々消費電力が増加しており、契約電力を超過する事態が増加。全体の消費電力を精度良く推定し、契約電力の上限を越えないジョブスケジューリングが必要。

→ ジョブ実行時の性能情報蓄積及び消費電力との関連調査から消費電力推定方法を確立。得られた情報を元に電力上限を意識したスケジューリングを実施。消費電力あたりの演算性能が低いジョブを特定し、利用者とともに改善方法を検討。

ジョブ投入環境を改善

- ✓ 京の公平な利用と運用ソフトウェアの処理能力のためにジョブの同時実行数を制限しており、大量のジョブを一度に投入することを制限

→ 運用ソフトウェアと独立したジョブ管理支援機能を提供し、大量ジョブの同時投入を可能に

データ転送環境を改善

- ✓ 京と外部との大量データの転送速度の改善が必要。

→ 京との間で高速なデータ転送が可能なりファレンス環境を用意し、十分な転送性能が出るようチューニングした上で利用者に開放。

前倒し使用の制限

- ✓ H26年度は多くの課題で計算資源の前倒し利用があり、上期分の資源が残っている課題の利用を妨げる等の状況が発生。

→ 前倒し利用を15%までに制限。