

# ジョブの待ち時間情報の提供

- 空きノード情報の提供

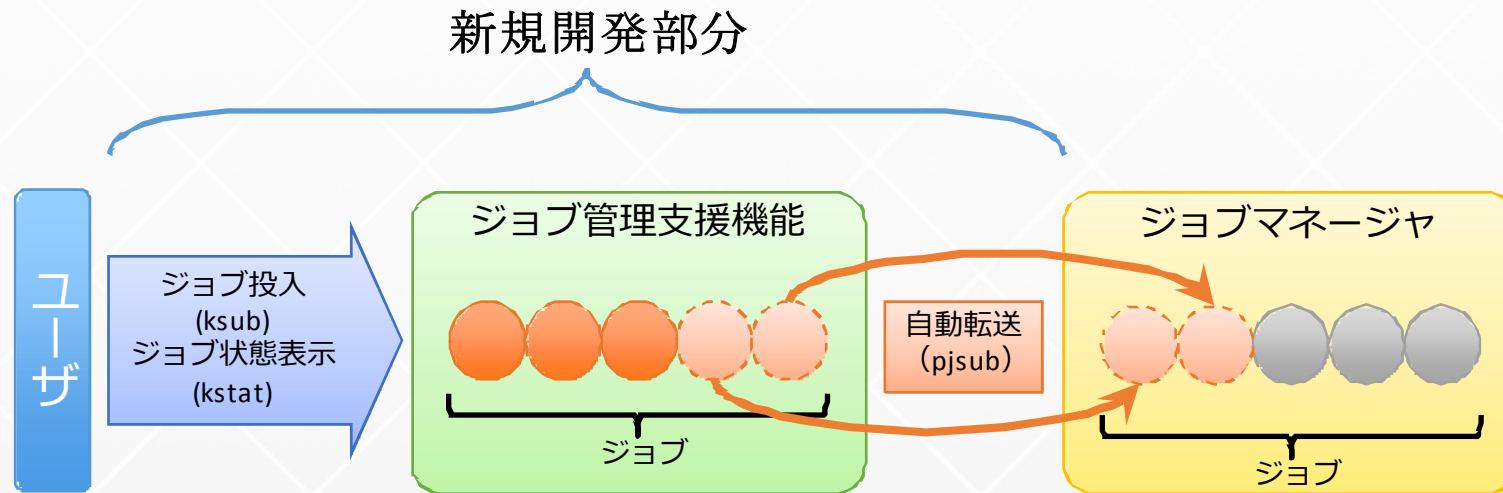
```
klogin5$ /opt/aics/job/k_waittime
UPDATE DATE : 2013/07/16 12:15:03
-----
small queue
  elapse 12 24 48 96 192 384 nodes
  30 m   0  0  0  0 1218 2382
  60 m   0  0  0  0 1218 2382
 120 m   0  0  0 246 1656 2382
 240 m   0  0  0 1092 1656 2382
 480 m   0  0  0 1218 2142 2382
 960 m   0  0  60  -  -  -
-----
large queue
  elapse 768 1536 3072 6144 12288 24576 nodes
  30 m   852 2862 2862 2862 2862  -
  60 m   852 2862 2862 2862 2862  -
 120 m   852 2862 2862 2862 2862  -
 240 m   852  -  -  -  -  -
 480 m   -  -  -  -  -  -
 960 m   -  -  -  -  -  -
klogin5$
```

ノード数と経過時間指定に応じた待ち時間がわかる

- k\_sched\_now: 今すぐに空いているノード数と経過時間の組み合わせを表示
- k\_sched\_calc: 与えられたノード数と経過時間から待ち時間を表示

## ジョブ管理支援機能の提供

- ジョブ管理支援機能では, ジョブ投入, ジョブ状態表示などの利用者向けコマンドを提供
- 運用ソフトウェアとは独立したジョブのキューイングを行うため受付数に制限はなく, 投入されたジョブを運用ソフトウェア (ジョブマネージャ) の同時受付数制限の範囲内で自動的に転送 (pjsub)

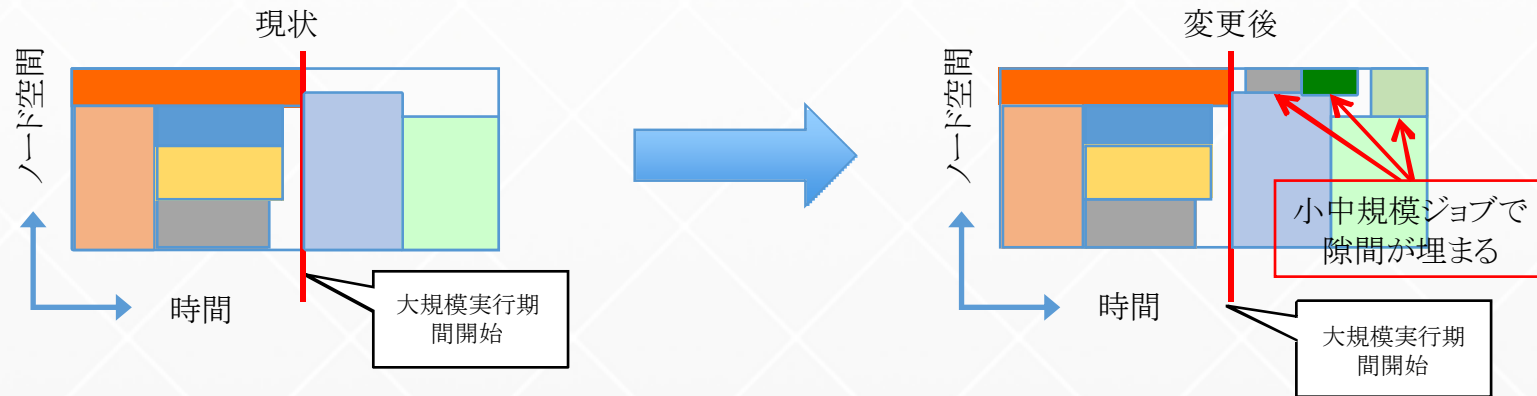


ジョブマネージャの負荷を上げること無く、同時受付数制限を実質的に緩和

# ジョブ 充填率の改善のために

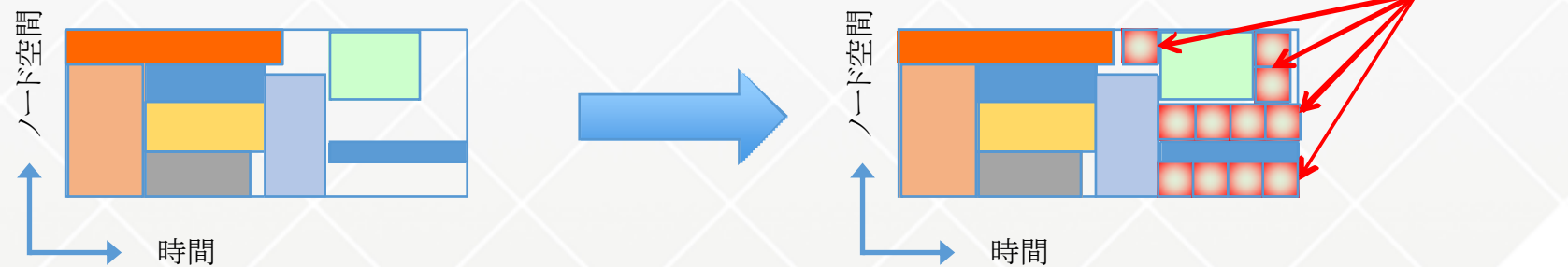
- 大規模実行のやり方を変更

- 月あたり2日×2回を3日×1回へ
- 試行的に大規模ジョブの隙間に小中規模ジョブが入るように設定変更し、効果を観察



- 小規模かつ短時間ジョブ用リソースグループの新設

- 最大384ノード、最長30分程度の規模でステージングなし



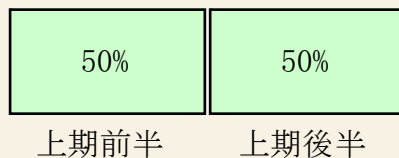
# 年度当初における利用促進について

- 上期前半と下期後半の利用が伸び悩み、計算資源が有効に活用できていない状況が発生

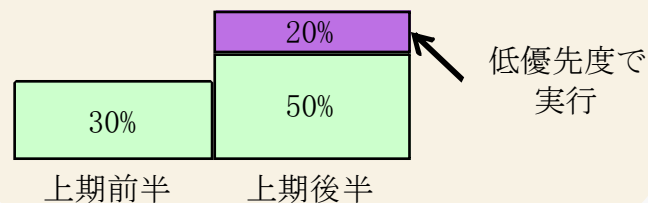
→ 利用の平準化を促す施策を実施

1. 上期後半において、一定量(上期配分資源量の50%程度を想定)を越えた利用に対し、当該課題のジョブ優先度を下げる
  - 上期の前半と後半で平準的な利用を促進

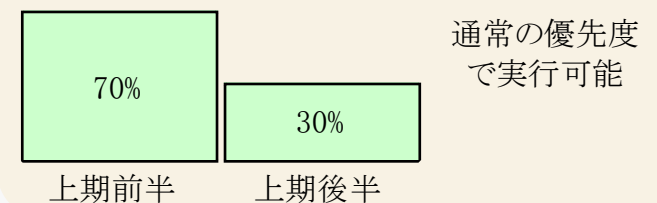
理想的な利用の場合



上期後半に利用が集中した場合

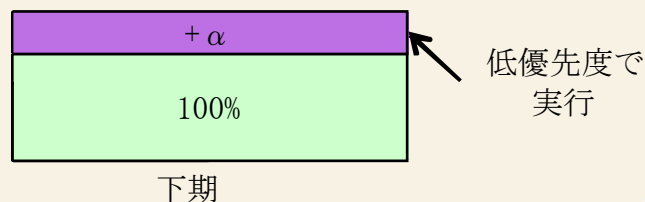


上期前半から積極的に利用した場合



2. 下期において、割当計算資源を使い切った場合でも、当該課題のジョブ実行を低優先度で許可

下期に配分資源を使い切った場合



# 利用者とのミーティングについて

- 「京」ユーザーブリーフィング
  - RISTと共同開催
  - 「京」の利用者なら誰でも参加可能(TV会議もOK)
  - H24年5月から毎月1回開催(H26年4月からは隔月)
- 重点課題ミーティング
  - HPCI戦略課題の重点課題の担当者との情報交換
  - H24年8月より毎月2回開催(H25年9月から毎月1回に変更)
- 運用懇談会
  - 「京」の運用方針についての意見交換
  - 各戦略分野の代表、RIST、AICSの代表で構成
  - H25年9月以降、半年に1度のペースで開催

# 電力料金増額に伴う研究実施への影響について(1/2)

## • 平成25年度以前における取り組みと結果

- ✓ 従量制電力単価が30%増、燃料調整費単価が127%増、再生可能エネルギー発電促進賦課金単価が48%増、ガス単価が3%増等、電気料金、ガス料金が想定以上に急騰し、光熱水料費が前年度比で8%増となることが分かった。そのため、光熱水料費の増に対応すべく下記の取り組みを実施。
  - 電力単価とガス単価の状況に応じて、ガスによる自家発電量のコスト最適化
  - 契約電力超過を防止するための電力制御方式の検討を開始
  - 京の保守項目の見直しによる保守費用の削減
  - 旅費や消耗品、広報費、ネットワーク維持費等の合理化
- ✓ 上記の取り組みを実施した結果、「京」の停止は回避。

## • 平成26年度における取り組みと結果

- ✓ 従量制電力単価が3%増、燃料調整費単価が67%増、再生可能エネルギー発電促進賦課金単価が88%増、ガス単価が13%増等、電気料金、ガス料金が更に急騰し、光熱水料費が前年度比で約10%増となることが分かった。そのため、光熱水料費の増に対応すべく前年度の取り組みに加えて下記を実施。
  - 電力超過防止活動の一環として大規模ジョブ実行時の事前審査制度開始
  - 電力料金補てんのため利用料収入の増額に向けた登録機関とWGを立ち上げ、検討の実施
- ✓ 上記の取り組みを実施しても赤字が解消できない場合は、年末年始に「京」の運転を数日間停止しなければならない状況ではあったが、最終的には上記の取り組み等により「京」の停止は回避。

## 電力料金増額に伴う研究実施への影響について(2/2)

### • 平成27年度の状況と取り組み

- ✓ 平成27年度は原子力発電所の再稼働が遅延していることにより、従量電力料金単価が17%増および再生可能エネルギー発電促進賦課金単価が111%増となった。そのため、光熱水料費が前年度比で10%増となる見込みとなった。
- ✓ 原油安の影響で、燃料費調整単価およびガス単価が7月以降、大幅に下振れしたため、結果として光熱水料費は予算内に収まる見込み。
- ✓ 平成26年度と同様の経費削減施策を実施することにより運用コストの低減に努めた。更に、下記の取り組みを実施した。
  - ▶ ガス発電機の出力を最適化することによるエネルギー効率の改善
  - ▶ ジョブ単位の消費電力情報を蓄積・分析する環境を整備し、電力効率の改善効果が高い利用者の情報を利用者支援で活用

なお、今後もコスト削減の取り組みを継続するとともに、電力業界の動向を注視し、他の事業者による電力供給の可能性を探索する。

# 「京」の産業利用(利用料関係)



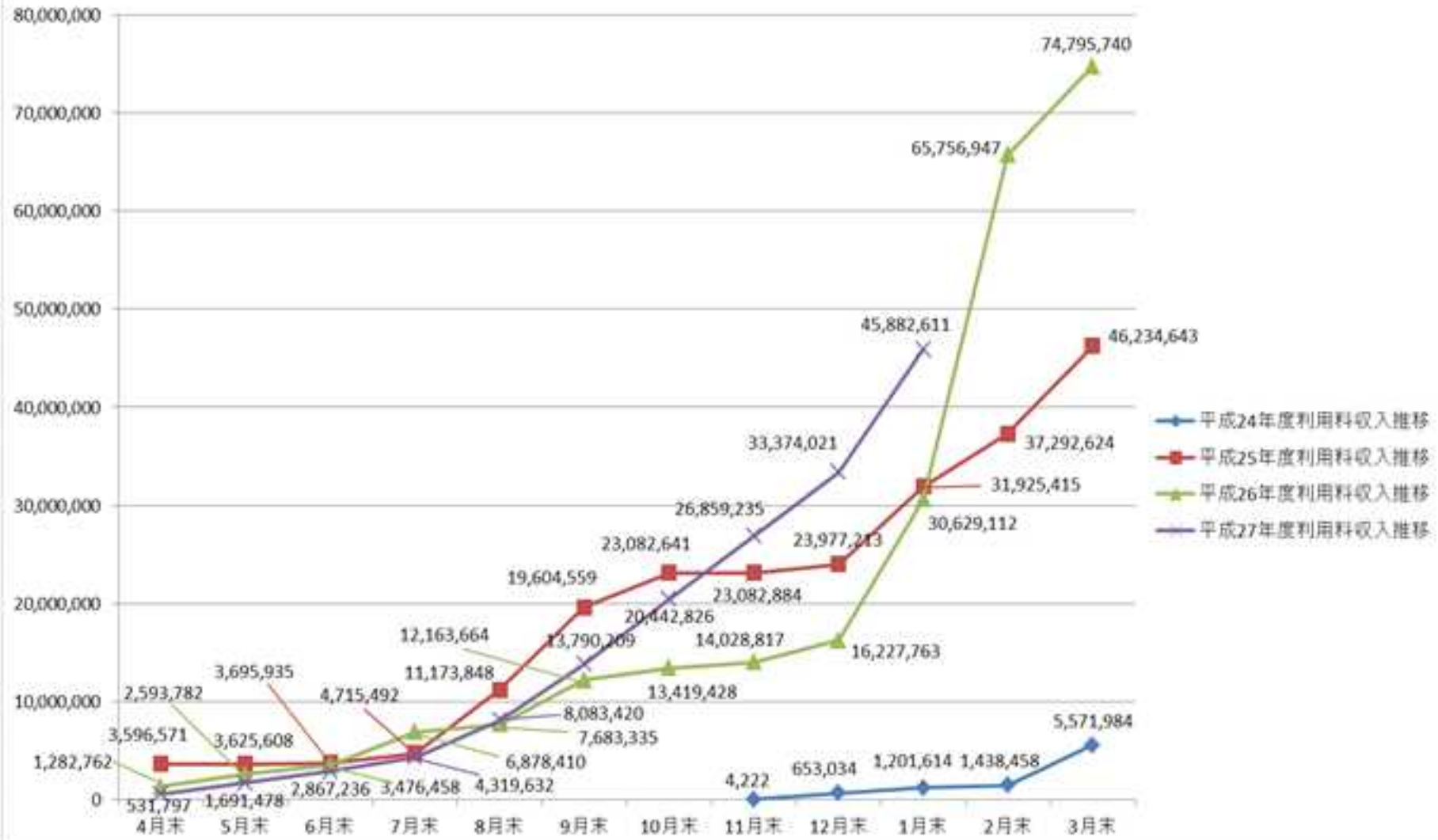
# 京の利用料(平成27年度)

利用料金については、特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律(平成6年6月29日法律第78号)第6条第1項に基づく実施計画において、(他の特定先端大型研究施設の利用料金算定方式と同様に、)運営費回収方式によって算定することとしている。

運営費回収方式(減価償却費を料金に算入しない)では、年間の資源提供可能な時間を全体の95%として、調整高度化枠に係る経費を除く年間の運営費を、資源提供可能時間及びノード数で割り、算定。この場合、1ノード・1時間当たりの単価は、現在14.53円/ノード・時間。

# 京の利用料収入

## 平成24年度～平成27年度の利用料収入比較



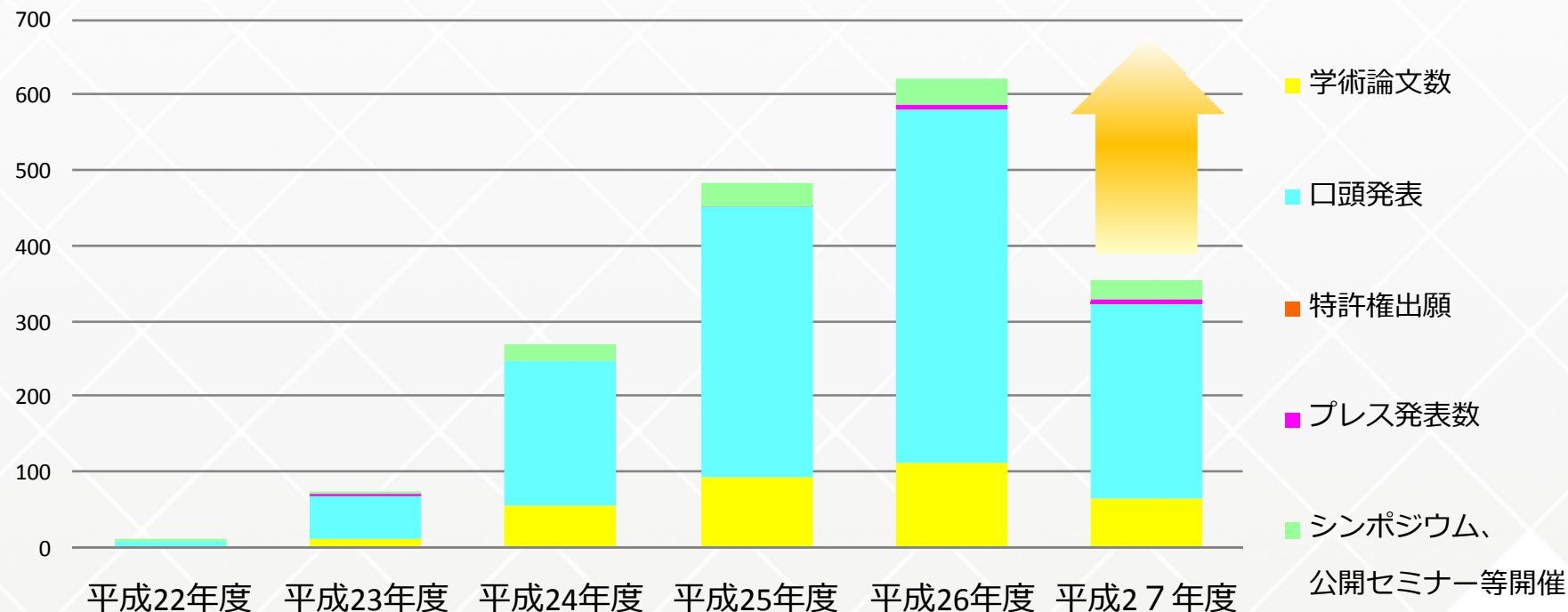
# AICSによる研究成果論文

# AICS 誌上・口頭発表等件数

	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
学術論文数	1 (1)	12(11)	54 (20)	92 (58)	111(75)	207*
口頭発表	7 (5)	56 (7)	192 (86)	359 (113)	471(114)	303*
特許権出願	0	0	0	0	0	2
プレス発表数	0	3	0	4	5	5
シンポジウム、 公開セミナー等開催	2	4	22	29	33	27

(件)

\* 平成27年度の学術論文数・口頭発表数は集計中のため、平成27年1月～12月の値  
括弧は内数。欧文及び国外での論文、発表等を示す。



# 調整高度化枠の「京」利用研究事例

# 「京」の最近の成果発表事例

## 調整高度化枠の成果

2015年11月18日発表

### 2期連続でスーパーコンピュータ「京」がGraph500で世界第1位を獲得

#### 【概要】

スーパーコンピュータ「京」が2015年7月に引き続きGraph500で1位を獲得しました。この指標は、グラフ解析という解析の性能を競う、新たなスパコンのランキングです。グラフ解析は、サイバーセキュリティー、医療情報、ソーシャルネットワーク等、様々な場面で利用されています。

Graph500では、グラフ※の幅優先探索(1秒間にグラフのたどった枝の数(Traversed Edges Per Second; TEPS))という計算を行う速度で、スパコンの性能が評価されます。「京」は、国際研究グループによりアルゴリズムとプログラムの開発が行われ、2014年6月に17,977GTEPSの性能を達成し第1位を獲得、また「京」のシステム全体を効率良く利用可能にするアルゴリズムの改良が行われて2倍近く性能を向上させ、2015年7月に38,621GTEPSを達成し第1位を獲得しました。そして今回も前回と同スコアにて、世界第1位を2期連続で獲得しました。



本成果は、「京」が汎用性が高く、ビッグデータ解析を含む幅広い分野のアプリケーションに対応できることを実証するものです。

※グラフ・・・”節”と呼ばれる多数の点と点の間を繋ぐ線(”枝”と呼ばれる)から構成される集合。  
データ間の関連性を示す様々な分野で使われている。

上野 晃司(東京工業大学/理化学研究所), 鈴木 豊太郎(ユニバーシティ・カレッジ・ダブリン),  
SC15にて発表. Graph 500 (2015年11月)のリストは [http://www.graph500.org/results\\_nov\\_2015](http://www.graph500.org/results_nov_2015).

#### 【関連記事】

(理化学研究所トピックス: [http://www.riken.jp/pr/topics/2015/20151118\\_1/](http://www.riken.jp/pr/topics/2015/20151118_1/))

(東京工業大学プレスリリース: <http://www.titech.ac.jp/news/2015/032762.html>)

# 「京」の最近の成果発表事例

## 調整高度化枠の成果

2015年11月10日プレスリリース

### 「京」にて現実大気の世界最大規模アンサンブルデータ同化に成功 — 天気予報シミュレーションの精度向上へ —

#### 【概要】

天気予報シミュレーションの高精度化を目指し、「京」を使って、現実大気で世界最大規模となる10,240個の「全球大気アンサンブルデータ同化」に成功しました。

2014年7月23日発表のプレスリリースでは、通常100個程度のアンサンブルを10,240個に飛躍的に向上させることに成功したものの、疑似観測データと低解像度で単純化されたSPEEDYモデル※<sup>1</sup>を用いたシミュレーション実験による結果でした。今回、現実大気の観測データと解像度112kmの全球大気モデルNICAM※<sup>2</sup>を使って、10,240個のアンサンブルデータ同化に成功しました。

その結果、実際の天気予報シミュレーションにおいて数千kmに及ぶ遠方の観測データを活用できる可能性があることが分かりました。全球降水観測GPM※<sup>3</sup>による衛星観測データなどさまざまな観測データをより効果的に活用して天気予報の改善に役立てられる可能性があります。

理化学研究所 計算科学研究機構 三好 建正 チームリーダー (データ同化研究チーム) .  
論文発表: Miyoshi T, Kondo K, Terasaki K, (2015) *Computer*, 48:15-21. doi: 10.1109/MC.2015.33.

#### 【理化学研究所】

(プレスリリース: [http://www.riken.jp/pr/press/2015/20151110\\_2/](http://www.riken.jp/pr/press/2015/20151110_2/))

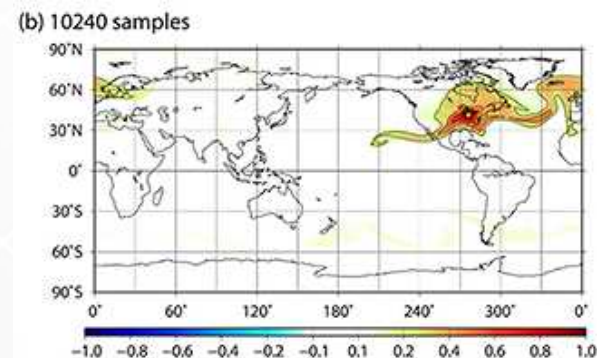
※SPEEDYモデル・・・2003年にMolteniらによって開発された低解像度で単純化された全球大気シミュレーションモデル。

※NICAM(Nonhydrostatic ICosahedral Atmospheric Model)・・・地球全体で雲の発生・挙動を直接計算することにより高精度の計算を実現した全球気象モデル。

※GPM(Global Precipitation Measurement)計画・・・JAXA、NASAなどによる国際計画で、水循環変動観測衛星「しずく」やGPM主衛星などの人工衛星の

さまざまなセンサを使って地球上の降水を観測する。衛星全球降水マップ(GSMaP)では、準リアルタイムで世界中の降水分布を取得できる。

RIKEN AICS 未来をひらく



アンサンブルデータ同化による  
対流圏界面付近での水蒸気量の相関マップ  
(理化学研究所プレスリリースより)

北アメリカ大陸五大湖付近(図中☆印)の観測データの影響が、はるか数千km遠方まで及ぶ相関パターンを発見した。観測データの湿度が高い場合に、湿度が高くなったり(暖色系)、低くなる(寒色系)ことを示す。

# 「京」の最近の成果発表事例

## 調整高度化枠の成果

2015年7月14日発表

### スーパーコンピュータ「京」がGraph500で1位を奪還

#### 【概要】

スーパーコンピュータ「京」がGraph500で2014年6月以来、再び1位を獲得しました。この指標は、グラフ解析という解析の性能を競う、新たなスパコンのランキングです。グラフ解析は、サイバーセキュリティ、医療情報、ソーシャルネットワーク等、様々な場面で利用されています。

Graph500では、グラフ※の幅優先探索(1秒間にグラフのたどった枝の数(Traversed Edges Per Second; TEPS))という計算を行う速度で、スパコンの性能が評価されます。今回、「京」の82,944個の計算ノードを用いて、1兆個の”節”と16兆個の”枝”からなる大規模なグラフを、わずか0.45秒で探索しました。今回、「京」のシステム全体を効率良く利用可能にするアルゴリズムの改良が行われ、2014年6月の2倍近くの性能向上を達成し、38,621 GTEPS(ギガテップス)というスコアで、「京」が再び1位を獲得しました。

本成果は、「京」が汎用性が高く、ビッグデータ解析を含む幅広い分野のアプリケーションに対応できることを実証するものです。

※グラフ・・・”節”と呼ばれる多数の点と点の間を繋ぐ線(”枝”と呼ばれる)から構成される集合。  
データ間の関連性を示す様々な分野で使われている。

上野 晃司(東京工業大学/理化学研究所), 鈴木 豊太郎(ユニバーシティ・カレッジ・ダブリン).  
ISC15にて発表. Graph 500 (2015年7月)のリストは [http://www.graph500.org/results\\_jul\\_2015](http://www.graph500.org/results_jul_2015).

#### 【関連記事】

(理化学研究所トピックス: [http://www.riken.jp/pr/topics/2015/20150714\\_1/](http://www.riken.jp/pr/topics/2015/20150714_1/))

(東京工業大学プレスリリース: <http://www.titech.ac.jp/news/2015/031846.html>)





# 「京」の最近の成果発表事例

## 調整高度化枠の成果

2015年5月8日プレスリリース

### 超並列分子動力学計算ソフトウェア「GENESIS」を開発

～「京」を活用し生体分子の運動を1分子レベルから細胞レベルまでの幅広い空間スケールで解析可能に～

#### 【概要】

生命科学では分子動力学法<sup>(※)</sup>と呼ばれるシミュレーション技法が、タンパク質の立体構造予測や、酵素反応のメカニズムの解明、薬の理論設計などに広く応用されています。従来、タンパク質1分子の計算は可能でしたが、細胞の中のようにタンパク質や核酸(DNAやRNA)など多数の生体分子や、水、イオンが混在するシステムを、高速に計算することは困難でした。

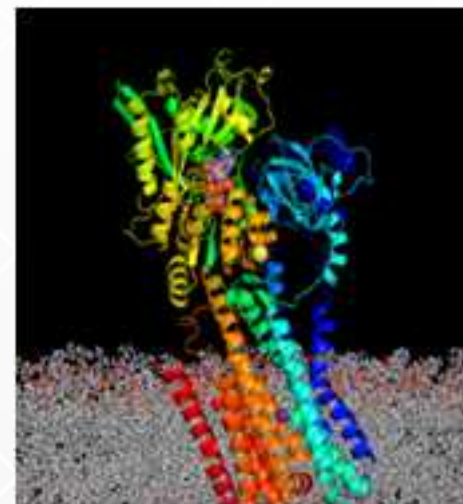
GENESISは、スーパーコンピュータ「京」のアーキテクチャ(基本設計)を考慮に入れた独自の計算アルゴリズムを導入することで、並列計算を高効率化し、細胞環境を想定した1億個の原子で構成されるシステムに対しても高速な分子動力学シミュレーションを実現しました。従来のように生体分子1分子のシミュレーションも可能であり、今後、創薬研究などに幅広く適用されると期待できます。(353文字)

※分子動力学法 …粒子同士の力をクーロンの法則などの物理法則に基づいて計算し、ニュートンの運動方程式 $F = ma$ を解くことで分子の動きをコンピュータ内で仮想的に再現する方法。この手法を用いることで、分子集団系のピコ秒～マイクロ秒(1兆分の1秒～100万分の1秒)の時間変化を原子レベルの解像度で観察できる。

理研AICS粒子系生物物理研究チーム 杉田 有治、Jaewoon Jung、小林 千草、松永 康佑  
杉田理論分子科学研究室 森 貴治、長浜バイオ大学 依田 隆夫、ミシガン州立大学 Michael Feig  
論文発表： J. Jung, T. Mori, C. Kobayashi, Y. Matsunaga, T. Yoda, M. Feig, and Y. Sugita, *WIREs Computational Molecular Science*, doi: 10.1002/wcms.1220.

GENESISホームページ：

<http://www.riken.jp/TMS2012/cbp/en/research/software/genesis/index.html>



**GENESISを用いた生体分子シミュレーション**  
(クレジット: 杉田理論分子科学研究室 森 貴治)  
GENESISは、2つの分子動力学プログラム(ATDYNとSPDYN)と解析ツールで構成している。バクテリアの細胞質分子混雑環境を模倣した約1,170万個の原子を含む分子集団系に対して1日あたり17.5 ナノ秒、約1億370万個の原子を含む分子集団系に対しては1日あたり6.5 ナノ秒という性能を、「京」を用いて達成した。

#### 【プレスリリース】

(理化学研究所)

[http://www.riken.jp/pr/press/2015/20150508\\_2/](http://www.riken.jp/pr/press/2015/20150508_2/)

# 「京」の最近の成果発表事例

## 調整高度化枠の成果

2014年11月20日発表

「京」が新たなスパコン性能指標「HPCG」で世界トップレベルの高性能を達成  
～産業利用など実際のアプリケーションにおける高い性能を証明～

### 【概要】

世界のスパコン関係者が集まる国際会議SC14で、スパコンの性能を評価する新しい性能指標(ベンチマーク)により、「京」が世界トップレベルの高いスコアを達成しました。この新しい「HPCG」ベンチマークは、いろいろなアプリケーションで良く使われる計算手法(共役勾配法)の処理速度を評価するものです。

今回の結果は「京」が産業利用など実際のアプリケーションにおいても高い性能を発揮できることを意味します。「HPCG」は、世界ランキングTOP500で使用されていた「LINPACK」と並ぶ新しい指標として期待が集まっています。



理化学研究所 計算科学研究機構 南 一生 チームヘッド(ソフトウェア技術チーム) .  
SC14にて発表. HPCGのリストは <https://software.sandia.gov/hpcg/results.php>

### 【理化学研究所】

(最新研究成果: <http://www.aics.riken.jp/jp/science/research-highlights/more/hpcg2014.html>)

# 「京」の最近の成果発表事例

## 調整高度化枠の成果

2014年11月19日発表

スーパーコンピュータ「京」でHPCチャレンジ賞クラス1、2を受賞  
—スパコンの総合的な性能と並列プログラミング言語の生産性について高い評価—

### 【概要】

理研、筑波大学と富士通は、スパコンの総合的な性能を評価するHPCチャレンジベンチマークを「京」で測定した結果により、2014年「HPCチャレンジ賞クラス1」の4部門中2部門で第1位を獲得しました。「京」は「HPCチャレンジ賞クラス1」を2011年から今年2014年まで4年連続第1位を獲得しています。

さらに、理研と筑波大学が共同開発したスパコン用並列プログラミング言語「XcalableMP」と「XcalableACC」が、プログラミング言語の生産性を評価する「HPCチャレンジ賞クラス2パフォーマンス賞」を受賞しました。XcalableMPは2年連続の受賞になります。

本受賞はXcalableMPおよびXcalableACCの持つ高い生産性と性能を実証するものであり、「京」のように大規模な計算環境で動作するHPCアプリケーションの開発に対してこれらの言語が極めて有効であることを示すものです。

理化学研究所 計算科学研究機構 中尾 昌広 研究員(プログラミング環境研究チーム) .  
SC14にて発表. HPCチャレンジ賞 (2014年) のリストは

<http://www.hpcchallenge.org/custom/index.html?lid=103&slid=272>

### 【関連記事】

(理化学研究所トピックス: [http://www.riken.jp/pr/topics/2014/20141119\\_2/](http://www.riken.jp/pr/topics/2014/20141119_2/))

(筑波大学プレスリリース: <http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/pr/media/hpcc20141119>)



# 「京」の最近の成果発表事例

## 調整高度化枠の成果

2014年7月23日プレスリリース

「京」を使い1万個の全球大気のアサンブルデータ同化に成功  
～1万km遠方の気象観測データから大気状態を高精度に推定できる可能性も～

### 【概要】

10,240個のアサンブルを使って、全球大気のアサンブルデータ同化を3週間分行うことに成功しました。必要とされる計算量は、従来の100個程度のアサンブルを使用する場合に比べて、およそ100万倍になります。

アサンブルデータ同化システム「LETKF」に、高性能固有値計算ソフトウェア「EigenExa(アイゲンエクサ)」を組み込むことで、アサンブルデータ同化の計算を、125分から15分へ約8倍高速化して、極めて高い実行効率(理論ピーク性能比 44%超)を達成しました。

これによって、例えば、日本から1万km離れた地点の観測データから、瞬時に日本の大気状態を高い精度で推定できるかもしれません。本成果は、天気予報シミュレーションの改善に貢献することが期待されます。

※データ同化・・・シミュレーションと現実世界とを結びつける統計数理に基づいた学際的科学。スパコンを用いた天気予報の精度を左右する根幹的な役割を果たす。

※アサンブルデータ同化・・・複数のシミュレーションによるアサンブル予報を用いて、日々変動する誤差を考慮する高度なデータ同化手法。

理化学研究所 計算科学研究機構 三好 建正 チームリーダー(データ同化研究チーム)

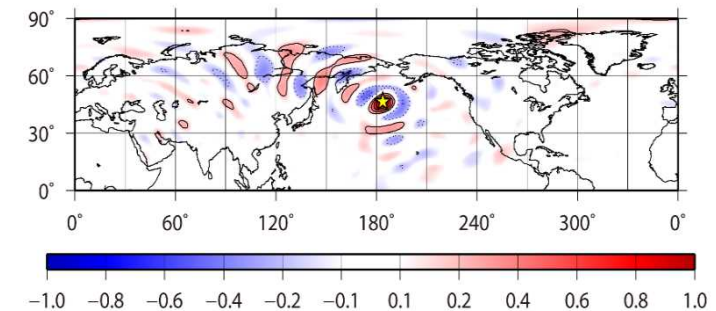
論文発表: T. Miyoshi, K. Kondo, and T. Imamura. (2014) *Geophysical Research Letters*.

doi:10.1002/2014GL060863.

### 【理化学研究所】

(プレスリリース: [http://www.riken.jp/pr/press/2014/20140723\\_2/](http://www.riken.jp/pr/press/2014/20140723_2/))

10240 members w/o localization



### アサンブルデータ同化による18日目の水蒸気量の 相関マップ(理化学研究所プレスリリースより)

10,240個のアサンブルを使うと、北部太平洋にある黄色い星の場所(図の中心付近)で水蒸気量が多いときに、遠くロシア西部(図の左上)で、水蒸気量が多くなったり(赤)、

少なくなったり(青)する傾向があることが分かる。

# 「京」の最近の成果発表事例

## 調整高度化枠の成果

2014年6月24日発表

### スーパーコンピュータ「京」がGraph500で1位を獲得

#### 【概要】

スーパーコンピュータ「京」がGraph500で1位を獲得しました。この指標は、グラフ解析という解析の性能を競う、新たなスパコンのランキングです。グラフ解析は、サイバーセキュリティー、医療情報、ソーシャルネットワーク等、様々な場面で利用されています。

Graph500では、グラフ※の幅優先探索(1秒間にグラフのたどった枝の数(Traversed Edges Per Second; TEPS))という計算を行う速度で、スパコンの性能が評価されます。今回、「京」の約2/3(に相当する)65,536個の計算ノードを用いて、1兆個の”節”と16兆個の”枝”からなる大規模なグラフを、わずか0.98秒で探索しました。その結果、17,977 GTEPS(ギガテップス)というスコアで、「京」は1位を獲得しました。

本成果は、「京」が汎用性が高く、ビッグデータ解析を含む幅広い分野のアプリケーションに対応できることを実証するものです。



※グラフ・・・”節”と呼ばれる多数の点と点の間を繋ぐ線(”枝”と呼ばれる)から構成される集合。  
データ間の関連性を示す様々な分野で使われている。

上野 晃司(東京工業大学/理化学研究所), 鈴木 豊太郎(ユニバーシティ・カレッジ・ダブリン).  
ISC14にて発表. Graph 500 (2014年6月)のリストは [http://www.graph500.org/results\\_jun\\_2014](http://www.graph500.org/results_jun_2014).

#### 【関連記事】

(理化学研究所トピックス: [http://www.riken.jp/pr/topics/2014/20140624\\_1/](http://www.riken.jp/pr/topics/2014/20140624_1/))

(東京工業大学プレスリリース: <http://www.titech.ac.jp/news/2014/028052.html>)

# 「京」の最近の成果発表事例

## 調整高度化枠の成果

2013年12月5日プレスリリース

### 「京」の計算能力を引き出す新開発ソフトウェア「EigenExa(アイゲンエクサ)」

#### 【概要】

新開発のソフトウェア、「EigenExa(アイゲンエクサ)」が、「京」のシミュレーションで使用するアプリケーションの計算速度を飛躍的に向上させることを実証しました。実際にこのソフトウェアを「京」で使い、世界最大規模である計算(100万×100万の行列での固有値計算)を行った結果、「京」登場以前は1週間程度かかると考えられてきた計算時間を、わずか1時間に短縮することに成功しました。

今後、半導体のデバイス設計や新材料開発、新薬の探索などを行うための大規模コンピュータシミュレーションに加え、バイオインフォマティクス(※)や社会科学などで用いられるデータの相関関係を解析するスピードアップに期待が寄せられます。この「EigenExa」は一般にも公開されています。

※バイオインフォマティクス・・・生物情報科学ともいい、ゲノムなど生物に関係する膨大なデータをコンピューターで解析する研究分野。

理化学研究所 計算科学研究機構 今村 俊幸 チームリーダー(大規模並列数値計算技術研究チーム)  
学会発表: Kazuo MINAMI. "Performance Improvement of Applications on the K computer". 2013年11月20日 *The international Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis 2013 (SC13)* にて口頭発表。

#### 【理化学研究所】

(プレスリリース: [http://www.riken.jp/pr/press/2013/20131205\\_1/](http://www.riken.jp/pr/press/2013/20131205_1/))



図 今回実証した「新しい」数値スキーム

# 「京」の最近の成果発表事例

## 調整高度化枠の成果

2013年11月22日発表

スーパーコンピュータ「京」でHPCチャレンジ賞クラス1、2(初)を受賞  
—スパコンの高性能並列言語の実装における生産性(日本初受賞)と総合的な性能が高い評価—

### 【概要】

理研と筑波大学が共同開発したスーパーコンピュータ用並列言語「XcalableMP」による実装が、「京」で測定した結果により、プログラミング言語の総合的な性能を評価する「HPCチャレンジ賞クラス2」を日本で初めて受賞しました。

また、理研、筑波大学および富士通は、「京」で測定した、スパコンの総合的な性能を評価するHPCチャレンジベンチマークの実測結果により、2013年「HPCチャレンジ賞クラス1」の4部門中3部門で第1位を獲得しました。「京」は「HPCチャレンジ賞クラス1」を2011年より今年2013年まで3年連続第1位を獲得しています。

本受賞はXcalableMPの持つ高生産性と高性能性の両方を実証するものであり、「京」のように大規模な計算環境で動作するHPCアプリケーションの開発に対してXcalableMPが極めて有効であることを示すものです。

理化学研究所 計算科学研究機構 中尾 昌広 研究員(プログラミング環境研究チーム) .  
SC13にて発表. HPCチャレンジ賞 (2013年) のリストは

<http://www.hpcchallenge.org/custom/index.html?lid=103&slid=263>

### 【関連記事】

(理化学研究所トピックス: [http://www.riken.jp/pr/topics/2013/20131122\\_1/](http://www.riken.jp/pr/topics/2013/20131122_1/))

(筑波大学プレスリリース: <http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/pr/media/hpcc20131122>)



# 調整高度化枠以外の「京」利用研究事例



# 「京」の最近の成果発表事例

## 一般利用課題の成果

2016年1月12日プレスリリース

### 世界最大規模の磁化反転シミュレーターを開発し、ジスプロシウム不要のネオジム磁石開発の指針を初めて提示

#### 【概要】

世界最大規模（従来の約60倍、3億メッシュ以上の規模）の磁化反転シミュレーターを開発し、永久磁石であるネオジム磁石の微細構造と磁石の強さの関係性を明らかにする大規模シミュレーションを「京」上で行いました。

その結果、ジスプロシウム<sup>\*1</sup>を使用せずに、従来の2倍以上の抗磁力<sup>\*2</sup>を持つ強力なネオジム磁石の開発指針を示すことに世界で初めて成功しました。

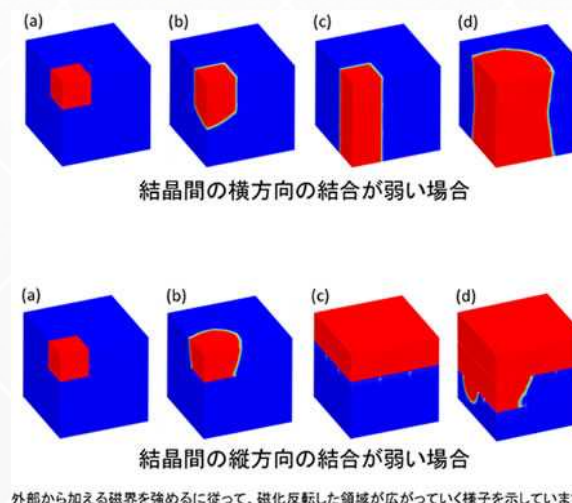
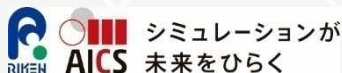
本シミュレーションの結果より、ジスプロシウムを必要としない強力なネオジム磁石の実現に向けた、新たな磁石材料の研究開発の加速化が期待できます。

「京」一般利用課題 合田義弘（東京工業大学）

学会発表：2016年1月12日 13th Joint MMM-Intermag Conferenceにて発表。  
Uehara Y, Shimizu K, Ataka T, Tanaka T, Oshima H, Ohkubo T, Hirose S, and Hono K. "Micromagnetic Simulation of the Influence of Orientation Dependence of Grain Boundary Properties on Coercivities of Nd-Fe-B Sintered Magnets".

#### 【プレスリリース】

（富士通：<http://pr.fujitsu.com/jp/news/2016/01/12.html>）



多結晶モデルの磁化反転シミュレーション  
（富士通プレスリリースより）

ジスプロシウム：希少な希土類元素である重レアアースのひとつ。同じく重レアアースであるテルビウム(Tb)と同様に、ネオジム磁石の抗磁力を高めるのに効果的な元素であるが、地球上の存在比がネオジムの10%程度であるため、使用量の削減が大きな課題となっている。

抗磁力：磁石が、自らの発する磁力に対抗する磁界をかけても磁石としての働きを維持できる力。電気自動車の駆動モーターに使われるネオジム磁石には高い抗磁力が求められるため、資源的に希少なジスプロシウム(Dy)が使われている。

# 「京」の最近の成果発表事例

## 重点化促進枠利用課題の成果

2015年12月18日報道発表

### スーパーコンピュータ「京」による長周期地震動のシミュレーション ～「南海トラフ沿いの巨大地震による長周期地震動」への貢献～

#### 【概要】

「南海トラフ巨大地震」が発生した場合に、「長周期地震動」の揺れがどのように各地に伝わり、各地でどのような揺れが発生するかを明らかにすることができました。長周期地震動による地表の揺れや超高層建築物の揺れについて、「京」を利用した詳細な計算を行いました。その結果、地表の揺れが継続する時間は3大都市圏で長くなり、超高層建築物の揺れは沿岸や内陸の一部地域で最大250cm/秒になると推定されました。

今後、巨大地震で発生した長周期地震動の伝わり方を予測し、そのデータを防災や建築などの各専門機関が詳細に検討できるようになることで超高層建築物や石油タンクなどの巨大構造物における防災対策や、建造物の性能評価や建築基準に生かされていくと期待されます。

「京」重点化促進枠利用課題 藤山 秀章（内閣府）、名波 義昭（内閣府）

#### 【関連記事】

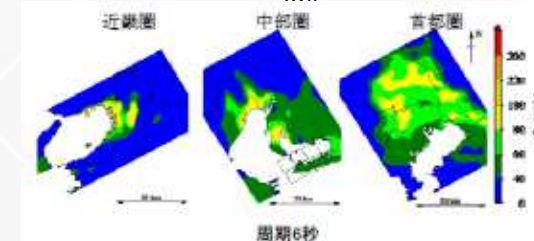
（文部科学省プレスリリース：[http://www.mext.go.jp/b\\_menu/houdou/27/12/1365496.htm](http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/27/12/1365496.htm)）  
（内閣府報道発表：[http://www.bousai.go.jp/jishin/nankai/nankaitrough\\_report.html](http://www.bousai.go.jp/jishin/nankai/nankaitrough_report.html)）



#### 地表の揺れの推計結果

（文部科学省プレスリリースより）

地表の揺れの継続時間は3大都市圏で長くなるのがわかる。



#### 超高層建築物の揺れの推定と影響評価

（文部科学省プレスリリースより）

沿岸や内陸の一部地域で最大250m/秒になる。

# 「京」の最近の成果発表事例

## 戦略プログラム分野3の成果

2015年11月30日プレスリリース

### 地震・津波観測監視システム「DONET」で海底における長周期地震動を観測

#### 【概要】

2013年4月淡路島での中規模地震（M 5.8）の発生時における、地震・津波観測監視システム「DONET」※1の海底強震計データの解析を行い、長くゆっくりとした大きな揺れ「長周期地震動」※2が深海底の広い領域で発生していることを明らかにしました。

さらに、「京」を使った大規模シミュレーションで海底における長周期地震動の特徴を再現した結果、南海トラフ周辺に広範囲にわたって広がっている軟らかい海洋堆積層の存在が長周期地震動の発達に本質的な影響を与えていることが分かりました。

海底における長周期地震動の特徴を把握し、発達過程を解明することは、陸域における地震動予測の高精度化や地震の規模・メカニズム解析手法の高度化につながり、地震防災・減災のための基礎的な知見となると考えられます。

HPCI戦略プログラム分野3 中村武史(JAMSTEC)、竹中博士(岡山大)、岡元太郎(東京工業大)、大堀道広(福井大)、坪井誠司(JAMSTEC)。

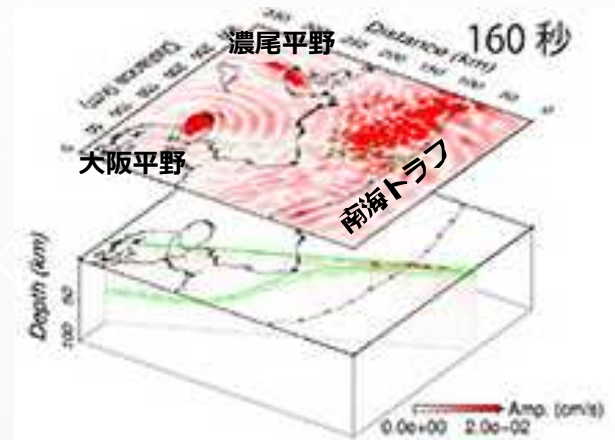
論文発表：Nakamura T, Takenaka H, Okamoto T, Ohori M, Tsuboi S. (2015) *Sci Rep.* 5:16648. doi: 10.1038/srep16648.

プレスリリース

(JAMSTEC : [http://www.jamstec.go.jp/j/about/press\\_release/20151130/](http://www.jamstec.go.jp/j/about/press_release/20151130/))

(東京工業大学 : <http://www.titech.ac.jp/news/2015/032892.html>)

RIKEN AICS シミュレーションが未来をひらく



2013年4月13日に発生した淡路島中規模地震における地震波伝播シミュレーション (JAMSTECプレスリリースより)

DONET：海域で発生する地震・津波を常時観測監視するため、JAMSTECが南海トラフ周辺の深海底に設置している地震・津波観測監視システム。

「DONET1」は、紀伊半島沖熊野灘の水深1,900～4,400 mの海底に設置。現在、四国沖室戸海盆周辺の水深1,100～4,400 mの海底に「DONET2」を構築中。

長周期地震動：地震波の伝播に伴う周期2秒程度以上の地震動（地面の揺れ）。震源が浅い場合、地球表層を伝わる表面波が観測されやすい周期帯域である。

# 「京」の最近の成果発表事例

## 産業利用課題の成果

2015年11月12日付 住友ゴム工業プレスリリースより

SPring-8・J-PARC・「京」を連携活用させたタイヤ用新材料開発技術を確立  
— 低燃費性能・グリップ性能に加え耐摩耗性能200%のタイヤ —

### 【概要】

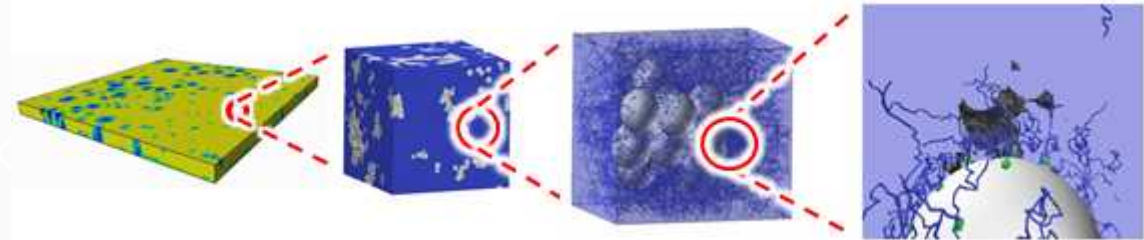
住友ゴム工業は、新材料開発技術「ADVANCED 4D NANO DESIGN」を完成させました。大型放射光施設「SPring-8」・大強度陽子加速器施設「J-PARC」・スーパーコンピュータ「京」を活用した高度なシミュレーション解析により、ゴムの内部構造をナノからミクロンレベルまで連続的かつ鮮明に解析しシミュレーションすることが可能となり、タイヤの背反性能の大幅な向上を期待できます。

新技術を採用したコンセプトタイヤ「耐摩耗マックスレッドゴム搭載タイヤ」のトレッドゴムは、低燃費性能とウエットグリップ性能を維持しながら、耐摩耗性能を200%に向上させることに成功しています。この新技術を活用することで材料開発のスピードをさらに上げ、今後も高性能で経済性と環境性に優れたタイヤの開発が期待されます。

「京」産業利用課題 岸本 浩通（住友ゴム工業株式会社 材料開発本部 材料第三部）

### 【プレスリリース】

（住友ゴム工業: [http://www.srigroup.co.jp/data/open/cnt/3/6433/1/2015\\_137.pdf](http://www.srigroup.co.jp/data/open/cnt/3/6433/1/2015_137.pdf)）



### 4D-CT技術と大規模シミュレーションによる ゴム破壊のトータル解析技術

（住友ゴム工業プレスリリースより）

左図：4D-CT法で観察したゴム破壊の様子。

右図：濃い青：ポリマー分子。白：ゴムの強度を向上させるために配合する充填材。

直径は約10～20nm。黒：破壊起点部分

※SPring-8 … 世界最高性能の放射光を生み出すことができる大型放射光施設(兵庫県佐用郡佐用町)

※J-PARC …最先端研究を行うための陽子加速器群と実験施設群(茨城県那珂郡東海村)