

参考資料

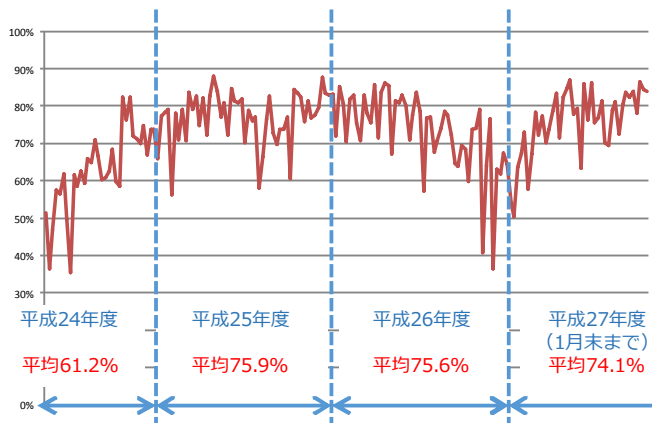
理化学研究所計算科学研究機構(AICS)

1. 「京」の運転

「京」の運転

ジョブ充填率

(利用可能な計算資源のうち実際に利用された割合)



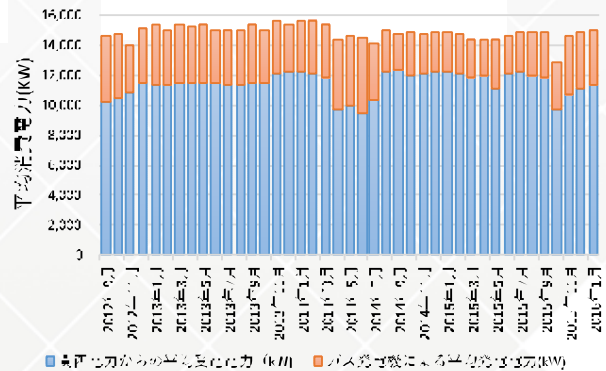
- 大規模実行期間※(3日/月)を除き、ほとんどの期間で80%前後のジョブ充填率をキープ
- 平均のジョブ充填率は75%以上の高水準を維持。今年度も最終的には同程度と想定
- H26年度末からH27年度初にかけて、やや利用が落ち込んだものの、現在は回復。
- 平準的な利用を促進するための改善策を来年度から実施予定

※大規模実行期間の詳細はP.13参照

「京」は極めて安定的に稼働



月別平均消費電力の推移



「京」の稼働率

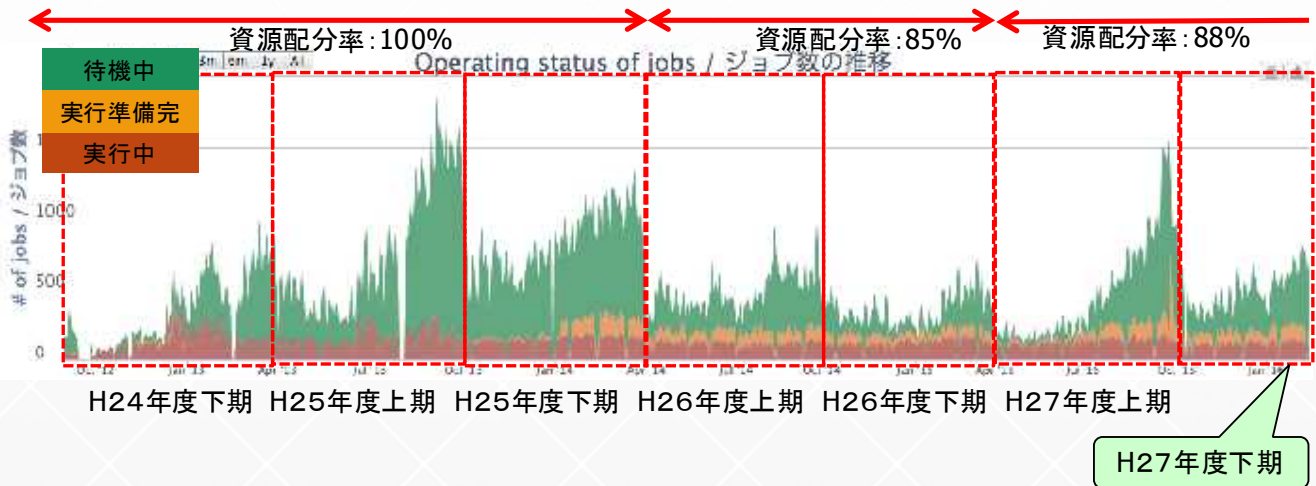
○実時間

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%

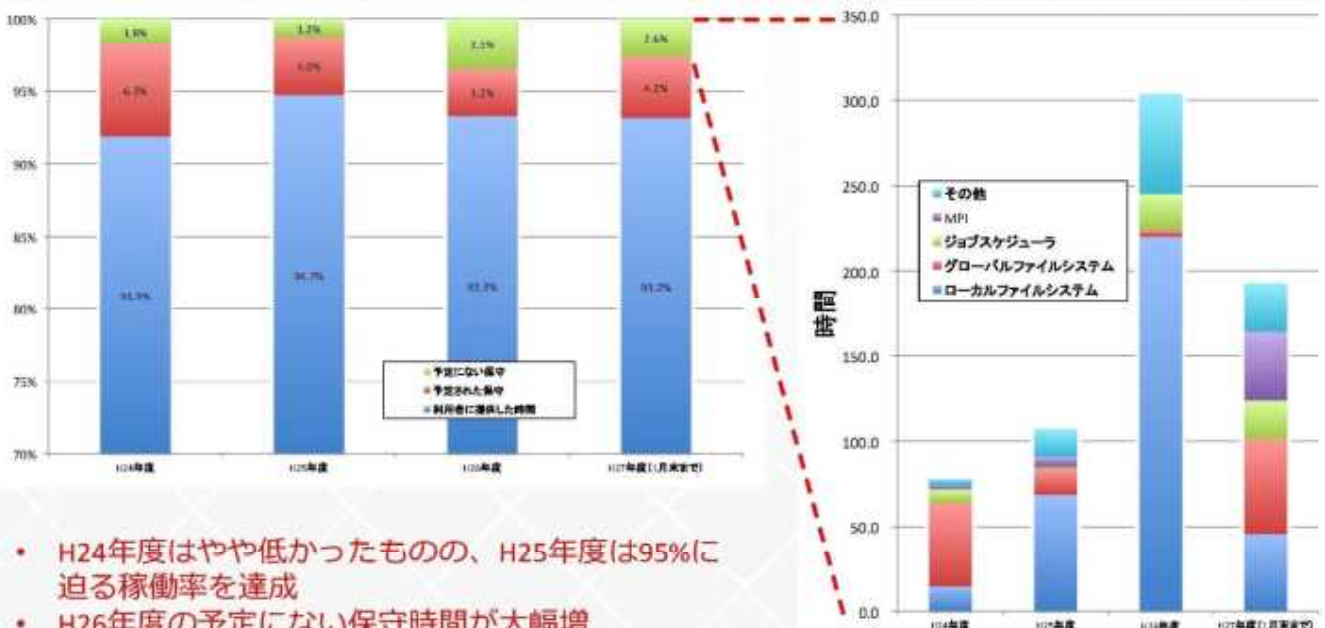
「京」の利用状況 (ジョブの本数)



H27年上期末は、利用が集中し過去最悪に近い混雑度に
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



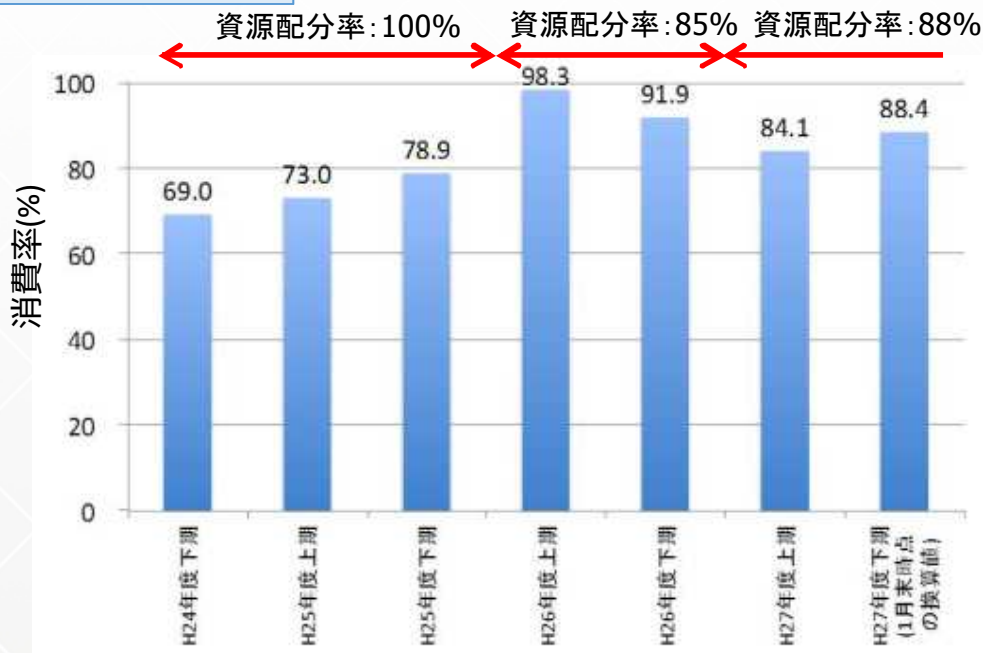
- H24年度はやや低かったものの、H25年度は95%に迫る稼働率を達成
- H26年度の予定にない保守時間が大幅増
- H27年度は、3年に一度の電気設備点検 (10/8-10/16) に伴う保守作業のため予定された保守が増

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年度は100%、H25年度は85%、H26年度は85%、H27年度は88%



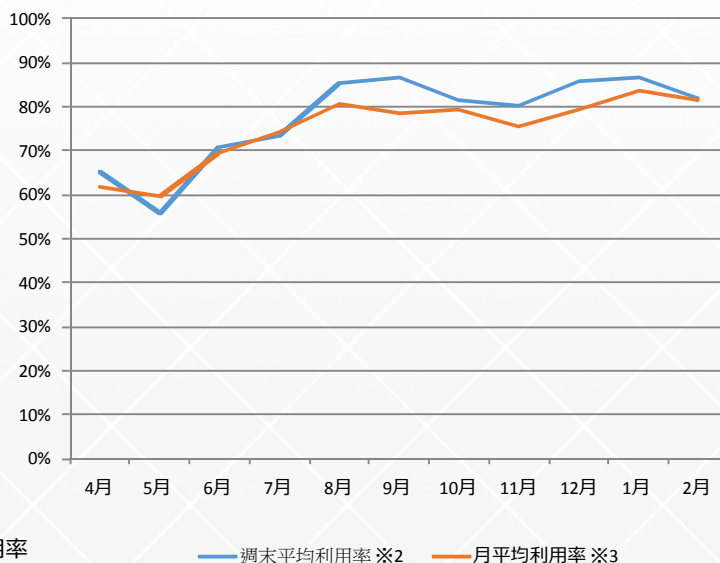
- 共用開始直後はやや低迷したものの徐々に増加
- 資源配分率を適正化したH26年度は90%以上を達成
- H27年度は期首にやや利用が停滞したが、最終的には90%近くになる見込み

6

月平均と大規模実行期間直後の週末平均の利用率の比較

保守対応の都合により現時点では対応が困難な状況であるが、ニーズが増えてくれば対応について検討する。なお、大規模実行期間直後の週末について、過去の状況を確認するとジョブの充填率の観点では低下は見られなかった。

月 *1	週末平均利用率 *2	月平均利用率 *3
4	65.20%	61.76%
5	55.78%	59.59%
6	70.61%	69.46%
7	73.47%	74.23%
8	85.18%	80.61%
9	86.56%	78.52%
10	81.39%	79.45%
11	80.08%	75.38%
12	85.65%	79.52%
1	86.80%	83.44%
2	81.85%	81.39%



- *1...2015年4月～2016年2月までのデータ
- *2...週末平均利用率は実際に利用されたノードの利用率
- *3...月平均利用率は課金ベースの計算であるが、大きな障害が発生しない限り、※2の計算とその差は殆ど無い

7

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

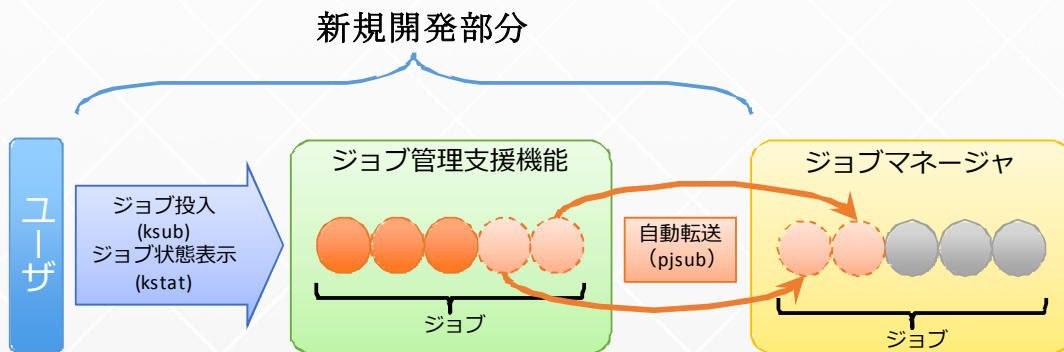
-----
small queue
-----
      12    24    48    96   192   384 nodes
elapse -----
 30 m    0    0    0    0   1218  2382
 60 m    0    0    0    0   1218  2382
120 m    0    0    0   246  1656  2382
240 m    0    0    0  1092  1656  2382
480 m    0    0    0  1218  2142  2382
960 m    0    0    60    -    -    -
-----
large queue
-----
      768   1536  3072  6144  12288  24576 nodes
elapse -----
 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)

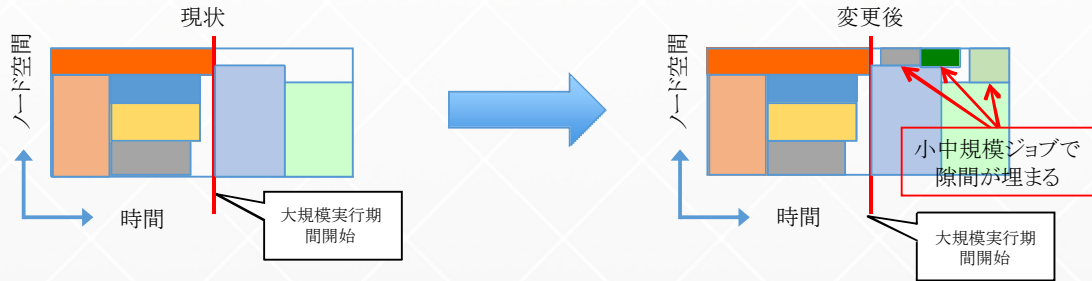


ジョブマネージャの負荷を上げることなく、同時受付数制限を実質的に緩和

ジョブ充填率の改善のために

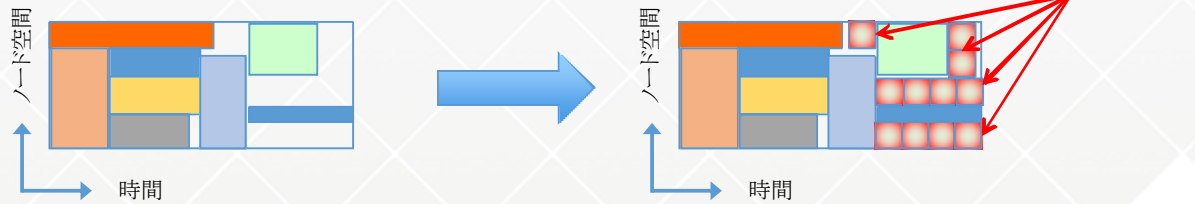
● 大規模実行のやり方を変更

- 月あたり2日×2回を3日×1回へ
- 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



● 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



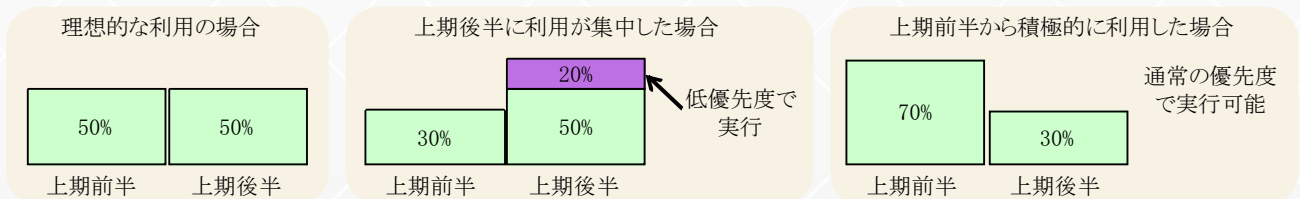
年度当初における利用促進について

● 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

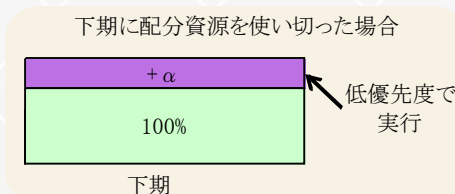
- 上期後半に利用が集中することによる混雑と未利用資源の増加
- 前倒し利用の増加による下期資源の枯渇と未利用資源の増加
 - 今年度から前倒し利用には一定の制約を設定

→ 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



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



2/4の選定委員会で承認

「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となっていた。
- 36865ノード以上のジョブは、小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。

12

「京」の運用改善について(続き)

平成26年度

- **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リ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へ開放。
- **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。

13

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。

14

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。

15

2. AICSについて

AICSのミッション

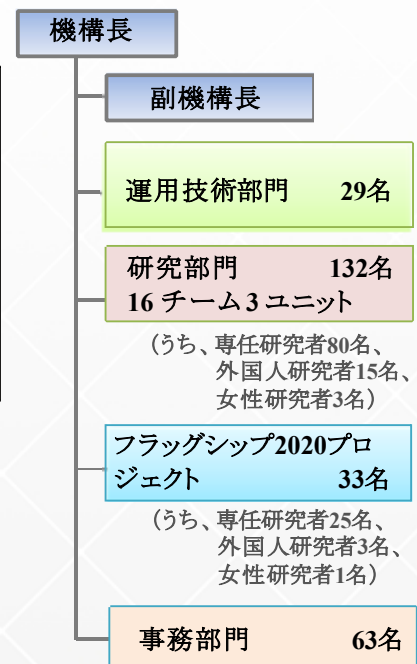
2010年7月に設立。わが国を代表する計算機科学・
計算科学の研究所

ミッション

- 共用法に基づき、利用者視点に立った共用施設としての「京」コンピュータの運用
- 「京」を核とした、計算機科学と計算科学の連携により科学技術のブレークスルーを生み出す国際的な研究開発拠点の構築
- ポスト「京」の開発、我が国の計算科学技術の在り方、将来構想の策定

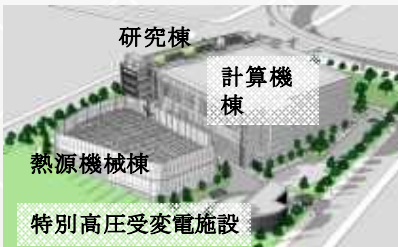
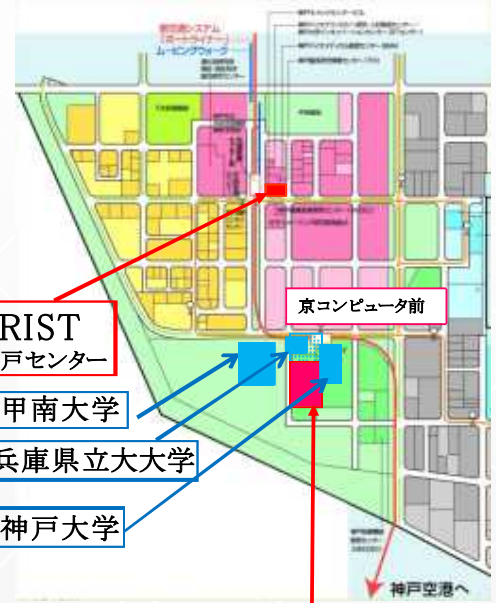
上記ミッションに基づき、以下に従事

- 共通基盤技術開発、分野融合研究、将来重要となる領域の開拓を行い、我が国の計算科学及び計算機科学を先導
- 戦略分野の研究者、理論研究者や実験研究者との連携
- 計算科学、計算機科学の両方がわかる人材、将来の学際計算科学を担う人材を育成
- HPCIの中核として、他のスパコンセンター等との連携を促進
- HPCIコンソーシアムの牽引役として我が国の計算科学技術のコミュニティの強化に貢献
- 先端的研究の下、産学協働を支援、促進
- 計算科学技術と人、社会をつなぐためのOutreach活動の拠点、研究集会、広報等の企画立案



2016年2月 259名

AICSと「京」



<所在地> 兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-26
 <敷地面積> 約2ha(準工業地域)
 <総電力> 最大約15MW(計算機システム)
 <電力設備> 70kV特高受電、コージェネレーション発電併用
 <冷却設備> 計算機棟空調機台数: B1F計14台、2F計50台
 <免震システム> 震度6強レベルの大地震でも主要な機能を確保

理研 AICS
 RIST一元化窓口
 事務所(AICS内)

海外機関との連携

AICSは計算科学の世界的ネットワークの中心になりつつある

○海外機関との研究協力協定等に基づく研究協力、研究者交流等

相手国	相手機関名
アメリカ	National Center for Supercomputing Applications(NCSA)※更新中
	Argonne Leadership Computing Facility(ALCF)
	University of Maryland
ドイツ	Jülich Supercomputing Center
オーストラリア	National Computational Infrastructure (NCI)※更新中
フランス	Maison de la Simulation(MDLS), Centre National de la Recherche Scientifique(CNRS)
イタリア	THE SCUOLA INTERNAZIONALE SUPERIORE DI STUDI AVANZATI (SISSA)
アメリカ、ヨーロッパ	The Joint-Laboratory for Extreme-Scale Computing(JLESC) The University of Illinois, INRIA, Argonne NL, Barcelona Supercomputing Center, Jülich Supercomputing Center and the Riken AICS



ALCFとの覚書調印



International Summer School@NYC

○海外機関との合同研究会やスクール等の開催(最近の主な実績例)

開催時期	名称
2016年2月	The 6 th AICS International Symposium (過去実績5件)
2015年6月	International Summer School on HPC Challenges in Computational Sciences 2015 (過去実績2件)
2014年9月	US-Japan Workshop on Exascale Applications

この他、エクサスケールスパコンのシステムソフトウェア開発に向けた日米科学技術協力(文部科学省と米国DOEがMOU締結)、日米欧の研究プロジェクトや、ソフトウェア等の性能評価のためのスパコン相互利用等の取り組みに参加。また、国内においても、大学、HPCI関連機関との連携を進めている。

AICSの人材育成事業

計算科学研究機構では、国際頭脳循環の中核的拠点として、国内外への幅広い情報提供や、海外の研究機関等との連携による研究者等の交流を推進している。

○各種スクーリングの実施

・RIKEN AICS HPC サマースクール及びスプリングスクールの実施

(参加実績)	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
サマースクール	43名	41名	37名	21名	22名
スプリングスクール	—	—	22名	17名	(3月開催予定)

・International Summer School on HPC Challenges in Computational Science への参加
(参加実績) 平成25年度:73名(14か国、日本からは11名が参加)
平成26年度:80名(19か国、日本からは10名が参加)
平成27年度:80名(21か国、日本からは8名が参加)



○神戸大学大学院との連携大学院の実施

神戸大学大学院システム情報学研究科(計算科学専攻)に連携講座として大規模計算科学講座を設置し、大規模数値シミュレーションに関する授業科目を平成25年度より開始。

○インターンシップ受入

平成26年度より、大学院生を対象にインターンシップの受入を開始。機構の研究チームにおいて、その研究を実習・体験することを通じて、計算科学技術への理解を深め、最先端の計算科学の研究開発に従事する人材を指向してもらうことを目的とする。平成26年度は6研究チームに13名、平成27年度は9研究チームに10名の受入を行った。

○講義の動画アーカイブ作成

機構及び戦略機関のスクール等講義の動画・資料をアーカイブし、平成26年度に開設。計算科学技術に係る自己学習に役立ててもらうことを目的とし、現在約150コンテンツをUPLしている。

また、この他にも他機関からのリサーチアソシエイト、大学等からの研修生の受け入れ等も積極的に実施。

20

AICSの広報活動

▶ ミッション

京・ポスト「京」を含むスパコン開発の意義やAICSの理念、計算科学・シミュレーションの役割を、一般国民の視点に立ってわかりやすく伝え、相互の信頼関係を構築する。

▶ 主な広報活動 (2015年度の実績: 1月末まで)

- ・マスメディアを通じた幅広いターゲットへの広報
 - 重要案件に関する記者会見の実施・リリースの発信: リリース9件(イベント含む)
 - 新聞、雑誌、テレビ、専門誌からの取材対応: 掲載・放送 340件
 - 記者向け見学会・勉強会: 3回開催(生命科学、スパコンランキング、重点9課題)

・ウェブやコンテンツによる深い情報の発信

- ホームページ・フェイスブック: 訪問者数 145,000人
- 機構パンフレット: ポスト京開始に伴う改訂中(約11,000冊配布)
- 一般向け広報誌「計算科学の世界」: 11号発行、12号発行予定
- 成果動画: 自動車空力制作、防災減災制作中
- 若年層向け: バーチャルツアー、神戸市中学生向け副読本等

・イベントを通じた直接対話

- シンポジウムいまこれ(「京」シンポ): 講演、パネルディスカッション、ポスタ、記者勉強会を実施
- 海外カンファレンスへの参加: ISC15、SC15に出展
- 知る集い開催: 富山、高松、仙台で開催。教育委員会や高校からのバックアップ
- 神戸市、科学館など他施設との連携や展示会への参加: 産業メッセ、サイエンスフェア兵庫、等
- 若年層向け: 夏休みイベント、子ども霞ヶ関ディ

・見学者の受け入れ・交流

- 見学者の受入: 10,300人
- 内、教育機関からの見学受け入れ: 小・中・高・大・専(80件、約2,600人)
- 神戸地区理研一般公開開催: 医療産業都市各機関と連携
- 理研他事業所における一般公開への参加: 和光・播磨・横浜等



NHKサイエンスZERO (2015年10月)



スパコン成果動画



知る集い 高松

21

AICSの予算概要

(単位:千円)

機構の運営費等

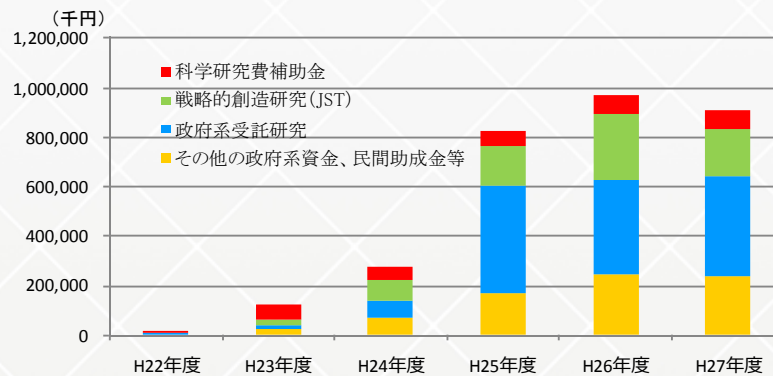
	平成22年度	平成23年度	平成24年度	平成25年度	平成26年度	平成27年度
高性能汎用計算機システム利用・運転維持費補助金 *1	1,060,539	6,499,827	9,653,322	—	—	—
特定高速電子計算機施設の運営(補助金) *1	—	—	—	10,587,077	10,416,499	10,373,167
次世代超高速電子計算機システムの開発・整備等(補助金) *1	—	—	—	—	1,150,444	3,524,312
計算科学技術研究事業費(運営費交付金) *2	—	—	—	81,490	77,416	62,984

*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	平成27年度
科学研究費補助金	1,950	55,250	50,300	62,256	75,023	75,261
戦略的創造研究(JST)	0	27,625	84,471	160,934	266,191	191,439
政府系受託研究	8,000	15,300	74,508	435,448	378,204	407,297
その他の政府系資金、民間助成金等	0	24,075	67,871	170,199	250,577	237,423
総計	9,950	122,250	277,150	828,837	969,994	911,420



22

予算とコストパフォーマンスの改善

京が1年間、フル稼働した初年度である平成25年度と平成28年度の予算額を比較する。原子力発電所の停止や燃料調整費単価の上昇により、電気料金等(下記、ユーティリティ利用料に含む。)が急騰する状況の中で、京の保守経費や建屋設備維持管理の内容を精査することで、全体の予算額は削減している。一方、京は共用開始以来、90%を超える稼働率で極めて安定的に稼働しており、国内外の幅広い分野のユーザーに活発に活用されている。

<固定的な経費>

項目	H25からH28の削減割合	削減努力
建屋設備維持管理	17%削減	◆ 運用状況を踏まえた保守項目の見直しによる削減
システムのメンテナンス(ハードウェア・ソフトウェア保守費を含む)	6%削減	◆ 利用率や故障発生頻度の低いソフトウェアの更新停止等、運転ノウハウの蓄積を踏まえた保守内容の合理化による削減
事業所等の運用(人件費を含む)	21%削減	◆ 会議開催費等の効率化による削減
「京」の高度化	43%削減	◆ 「京」の性能の高度化に関する経費等の削減
ユーティリティ利用料(基本電力、ネットワーク)	8%削減	◆ 通信費の見直しによる削減
合計	12%削減	—

<運転経費>

項目	H25からH28の増加割合	削減努力
ユーティリティ利用料(従量電力、ガス、冷却用水)	45%増加	<ul style="list-style-type: none"> ◆ 電気とコージェネレーションシステムによるガス発電の効率的な運転 ◆ 「京」の運転実績を踏まえ機器の故障率に悪影響が出ない範囲での空調機の送風温度と風量のバランス調整 ◆ 大規模ジョブ実行時の事前審査制度による電力超過料金を削減 ◆ 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

※上記の削減努力の取組による削減を反映した結果、運転経費の増加割合が45%に留まっている。

23

「京」の運用に係る予算額について

- 「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」(共用法)に基づき、広く研究者等の利用に供するため、年間を通じて最大限、安定的に「京」を運用することが必要。
- これまで、電気料金が高騰する中、保守経費の見直し、高度化経費の削減、広報費の縮減、建屋の維持管理費や事務所の運営費等の見直し等を行い、経費の合理化・効率化を図っている。

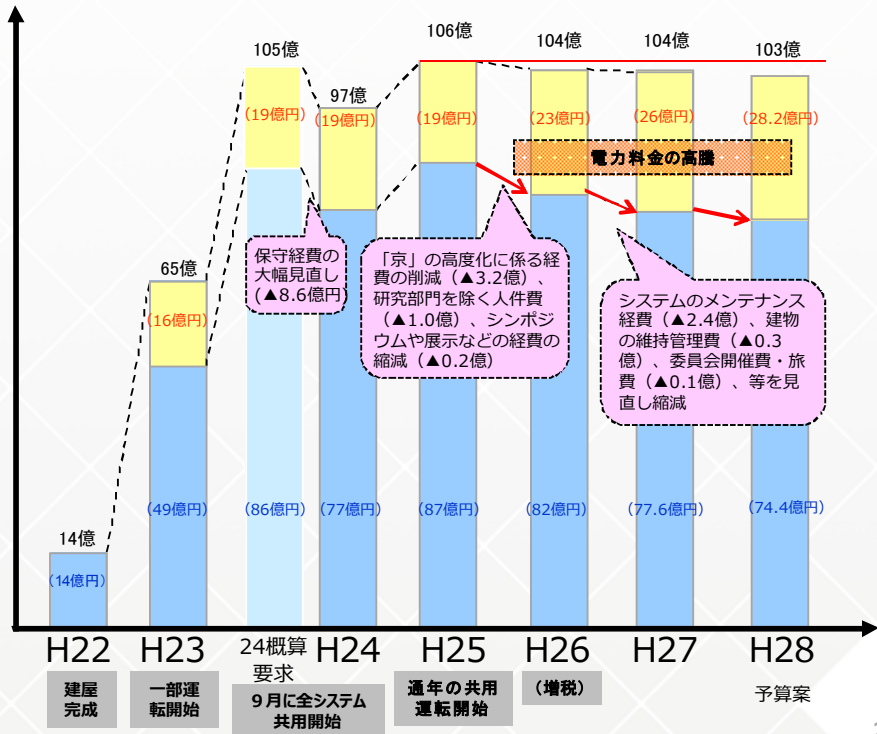
■グラフの見方(平成27年度)

103.7億円
運転経費
 26.1億円

103.7億円
固定的な経費
 77.6億円

先端共用施設として、24時間365日、最大限の運用を行うために必要な経費。
 (運転時間に応じた光熱水費)
 ※電気代は約16億円

施設の維持・管理等に必要な固定的な経費。
 (機器等の保全・保安の光熱水費(電気基本料金等)、施設保守費(法定点検等)、京の保守費、人件費、保険・税金等)。



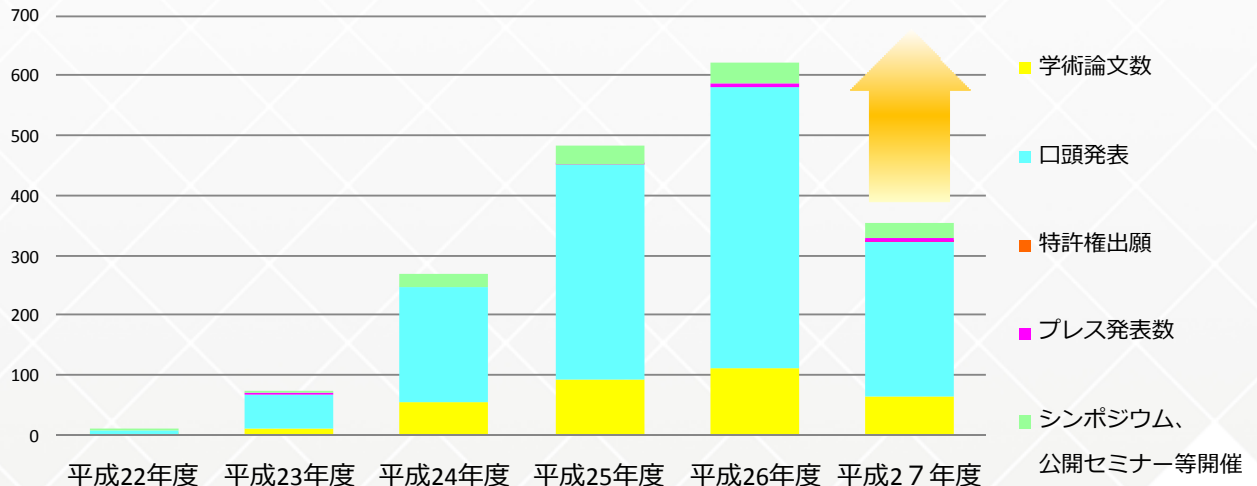
※四捨五入により、各項目額と合計額が一致しないことがある。

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

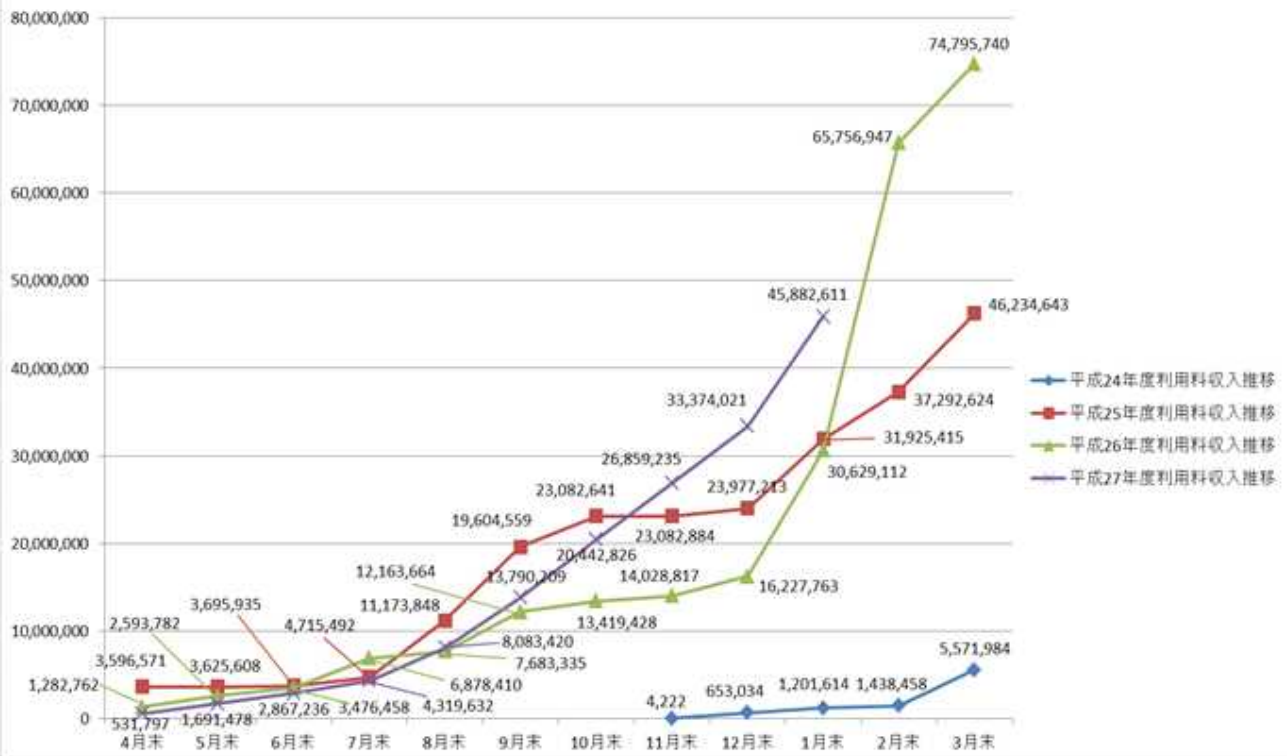
(件)

* 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。



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



3. AICSの基盤研究等

AICSの基盤研究

2016年2月現在30本のソフトウェアを公開

<代表事例>

- **XcalableMP (XMP)**
並列プログラミング言語、SC13, SC14でHPC Challenge(Class2)賞受賞
- **EigenExa**
高性能固有値ソルバ、100万次元の密行列のすべての固有値、固有ベクトルが1時間以内に解ける
- **HIVE**
「京」上で直接大規模データを可視化するシステム
- **GENESIS**
生体高分子材料向け分子動力学シミュレーションソフトウェア。高並列化に対応し、レプリカアンサンブル法等の高度な手法も実装。巨大生体分子システム(1億原子系)のMDシミュレーションを実現
- **NTChem**
分子科学計算ソフトウェア。数千原子分子系に対する第一原理電子状態計算や数百原子分子系の化学反応過程追跡計算を実現
- **SCQS**
量子モンテカルロ法と密度行列繰り込み群法による強相関量子系に対するソルバーパッケージ
- **CUBE**
ものづくり分野での流体・熱・構造・音響・反応・粒子等の複合流体現象を統一的に扱うソフトウェア
- **SCALE**
次世代気象気候科学における基盤ライブラリ。気候・気象科学を専門とする科学者と計算機科学を専門とする科学者が共同で開発
- **OASIS**
離散事象を扱うソフトウェア
- **GAMERA**
都市地震シミュレーションを実現するソフトウェア。SC14, SC15でゴードン・ベル賞のファイナルリストに選ばれている

28

AICS公開ソフトウェア一覧

AICSの研究部門、及び運用技術部門が共通基盤研究の一環として開発、または「京」用に最適化したソフトウェアをAICS公開ソフトウェアとして提供

2016年2月現在

名称	機能概要
システムソフトウェア研究チーム	
NetCDF	プラットフォームに独立なファイルを扱うためのライブラリ。Parallel netCDF、HDF5、Szipのライブラリを含む。Frontend、シリアル、MPIのそれぞれの環境でSzipありとなしの合計6環境を提供。
PRDMA (Persistent Remote DMA)	Remote DMA (RDMA)が利用可能なインターコネクト上で通信レイテンシや計算と通信の並行処理を改善するため、MPI標準の永続通信(Persistent Communication)プリミティブの高速実装を提供するライブラリ。
プログラミング環境研究チーム	
Omni XcalableMP	Fortran および C の拡張として定義された指示文ベースの並列言語 XcalableMP のコンパイラ。
Scalasca	MPI, OpenMP, MPI/OpenMPハイブリッドを使ったプログラムや並列プログラミング言語(XcalableMP/C)のプログラムの性能最適化を支援するためのツール。特に通信や同期でのボトルネックになっているところを特定し、その原因を調査するために使う。
MUMPS	連立一次方程式を直接解法で解く高並列数学ライブラリ。
大規模並列数値計算技術研究チーム	
EigenK	「京」コンピュータのアーキテクチャを意識して開発された標準固有値問題のための固有値計算ライブラリ。密対称行列を対象として大規模並列計算はもちろん小規模問題でも既存の固有値ソルバよりも高速に計算できる。
EigenExa	EigenKの後継として「京」コンピュータでの性能チューニングが施された標準固有値問題のための高性能固有値計算ライブラリ。EigenK同様に密対称行列を対象として大規模並列計算はもちろん小規模問題でも既存の固有値ソルバよりも高速に計算できる。
KMATH_RANDOM	高品質な乱数として知られるメルセンズツイスター乱数生成器を並列分散環境で使用するための数学ライブラリ。Fortran90, C, C++から利用可能。
離散事象シミュレーション研究チーム	
OACIS(Organizing Assistant for Comprehensive and Interactive Simulations)	MacやLinux系OSがインストールされた計算機上でウェブサーバとして動作するシミュレーション実行管理ソフト。ユーザが、シミュレーション条件を与えると、OACISは、実行スクリプトの生成、京コンピュータなどの計算ホストでの実行、そして、シミュレーション結果の取り込みを自動的に行う。

29

AICS公開ソフトウェア一覧(つづき)

2016年2月現在

名称	機能概要
利用高度化研究チーム	
Xcrypt	並列ジョブ制御スクリプティング言語Xcryptを「京」上に実装。統一的で使いやすいユーザーインターフェイスを提供。
TAU	Fortran, C, C++ で書かれた並列プログラムの性能解析ツール群である。プログラムの性能測定、解析、可視化などの機能を持ち、総合的に性能解析を支援する。プロファイル機能を使用することによって、各関数の実行時間 (inclusive/exclusive)、関数呼び出し回数、一回の呼び出しにあたっての平均実行時間などを知ることができる。またトレース機能を使用することで、プログラム実行中の各イベント(MPI通信などがいつどこで発生したか、プロセスやソースコード等の単位で知ることができる。
Eclipse PTP for K and FX10 computers	Eclipse PTPという統合ソフトウェア開発環境を「京」コンピュータおよびFX10で使うために必要なソフトウェア。以下の2つのパッケージを含んでいる。(1)「Target System Configurations」Eclipse PTPから京やFX10でジョブを実行するときに必要なものである。(2)「LML DA Driver for PJM」京やFX10のユーザーのホームディレクトリーにインストールするもので、モニタリングに必要なものである。
量子系分子科学研究チーム	
NTChem	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。既存ソフトウェアの持つ多くの機能をカバーしつつ、他のプログラムでは利用することのできない多くの量子化学計算法を含んでいる。「NTChem」の第一版には数千原子分子系に対する第一原理電子状態計算や数百原子分子系の化学反応過程追跡計算を実現するための分子科学理論が実装されている。さらに、京コンピュータなどのマルチコア超並列クラスタ計算システムの性能を引き出すことが可能な並列アルゴリズムが実装されている。
量子系物質科学研究チーム	
2D-DMRG	強相関系の研究を目的として開発された密度行列繰り込み群法(Density Matrix Renormalization Group, DMRG)のプログラム。京コンピュータの利用を想定して開発されており、大規模並列計算に対応。密度行列繰り込み群法は、通常、1次元系の研究に利用されるが、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モデルに対応している。
粒子系生物物理研究チーム	
GENESIS	高機能・超並列な分子動力学計算ソフトウェア。SPDYN、ATDYNという二つのプログラムが存在しており、SPDYNは超並列計算、ATDYNはマルチスケールシミュレーションやレプリカ交換分子動力学法を可能としている。
粒子系シミュレータ研究チーム	
FDPS (Framework for Developing Particle Simulators)	「京」のような超大規模並列計算機の上で効率的に実行できる粒子系シミュレーションソフトウェアを容易に開発できるようにするためのアプリケーション開発プラットフォームである。FDPSを使えば、チューニングや並列化の経験がない人でも数万ノードまで性能がスケールする粒子系アプリケーションを開発できる。
複合系気候科学研究チーム	
SCALE	気象シミュレーション用のライブラリおよびそれを利用した気象ラージエディターシミュレーションモデル。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専門家とのコデザインにより設計されている。

30

AICS公開ソフトウェア一覧(つづき)

2016年2月現在

名称	機能概要
プログラム構成モデル研究チーム	
KMR (K Map-Reduce)	ポスト処理等のデータ処理を容易に記述するためのライブラリ。定評のあるデータ処理ツールmap-reduceを「京」上で提供。
可視化技術研究チーム	
Polylib	領域分割型の並列計算で物体の形状情報等を管理するライブラリ。シミュレーション入力データ作成および結果の可視化に使用。
Cutlib	ポリゴンデータと背景格子との交点計算を行うライブラリ。直交格子、BCM格子、8分木格子に対応。
CPMlib	領域分割型のアプリケーションを記述するためのツールウェア。データ領域確保、並列領域管理、通信などの機能を提供。
TextParser	YAML的な記述方式の構造化されたテキストファイルを読み・書きするライブラリで、シミュレータの入力パラメータ記述などに利用。
PMLib	プログラムの性能測定と統計情報を表示するツールで、プロセスグループやPAPIにも対応。被測定ルーチンは利用者が指定可。
CIOlib	直交等間隔格子の分散並列ファイルの管理機能を提供する。
HIVE	大規模並列環境で高い性能を発揮する利便性の高い可視化システムで、「京」の上で多数のノードを用いた並列レンダリングが可能。「京」以外にも多くの計算プラットフォームで動作し、リモート/ローカル動作、高並列性能、機能拡張性、移植性、メンテナンス性などを考慮して開発されている。現在、ベータ版で、Mac, Linux向けのバイナリパッケージを配布している。
FFV-C	直交格子を用いて、短時間で複雑な形状まわりの流れをシミュレートできる三次元非定常熱流体シミュレータ。本シミュレータは、流体解析における困難な課題である格子生成を自動化し、大規模な計算を短時間で実行することが特徴。また、「京」の全てのプロセッサを用いて90%以上の弱スケール性を達成するチューニングが施され、工学分野の実設計課題を支援できるように様々な機能開発を行っている。
KFoundation	AICSで開発された汎用C++APIを収集。以下のAPIが含まれる。(1)自動メモリ管理を備えた定数時間計算複雑性の性能および向上の安定性とデバッグ機能(2)XMLとJSONなどとの互換性のオブジェクトのシリアル化・逆シリアル化(3)ネットワークI/Oを含む、多様なI/Oストリーム(4)マルチチャンネル・マルチレベルのロガー(5)エクセプションを備えた出力・シリアル化可能なスタックトレース(6)分散ステンシル計算をアシストするための「Range Arithmetics」(7)Thread, Mutex, ConditionおよびJavaに類似するSystemクラス
libKnoRBA	KnoRBAエイジェント作成のためのC++ライブラリ。知識リクエスト・ブローカー・アーキテクチャ又はKnoRBA(ノルバ)技術は汎用コンポーネント・モデルとして「オブジェクト」の代わりに「エイジェント」が使う世界初の分散システム開発プラットフォーム。高度な抽象化レベルでの自律性、ポータビリティ、柔軟性、拡張性、および安定性の提供を目的としている。このライブラリで作成したエイジェントはKnoRBA Agent Runtime Environment (ARE)を使用し、クラスターや他の分散システムでの実行が可能。
ソフトウェア技術チーム	
K-scope	Fortran向けプログラム解析ツール。本ツールを用いることでコードの全体把握が容易となる。(本ソフトは「京」上ではなくユーザーの端末上で動作する。)
システム運転技術チーム	
Kを待ちわびて	ジョブが実行されるまでの予想待ち時間を計算、表示するツール群。

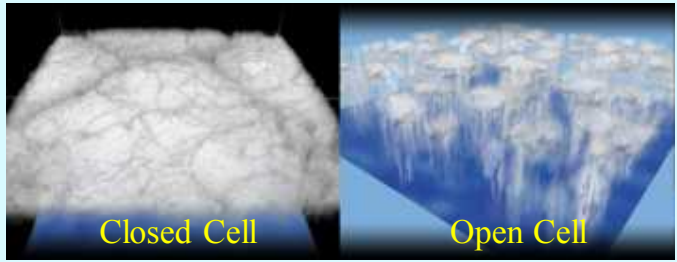
31

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>

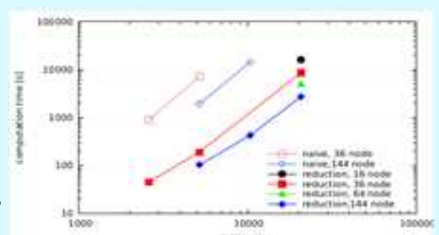
- ・ 神戸大学 惑星科学研究センター「火星計算が可能となるような機能拡張」(対応済)
- ・ 京都大学 生存圏研究所「都市ゲリラ豪雨予測に向けた高解像度実験を行うためのオンラインネスティングの導入」(対応済)
- ・ 東京大学 大気海洋研究所「京一般課題『全球規模大気環境汚染に関わる総合環境モデリング』『次世代型大気汚染物質輸送モデルの精緻化と排出量の推定』に関する全球大気汚染物質ならびに物質輸送のシミュレーションに向けた、SCALE-LESにNICAMをネスティングするシステムの導入」(対応中) ・ 兵庫県立大学「超水滴法の実装、及び拡張」(対応中)
- ・ JAMSTEC(国際モデル間比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

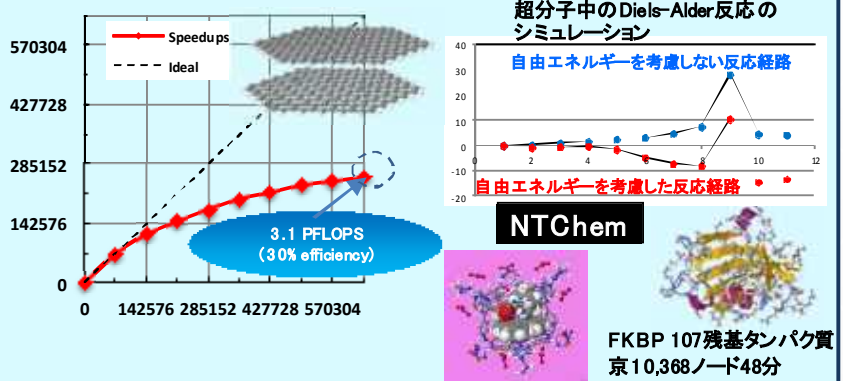
- ・ Block solver(大規模疎行列に対する線形方程式反復解法高度化の成果、AICS-Technical Report:2014-001にて公表済)の活用(筑波大学、京都大学、大阪大学などが所属する戦略分野5研究開発課題1) (対応中) 利用中。今後も継続してサポート予定。(対応中)
- ・ RSDFT(計算物質科学における主要アプリの一つ)における大規模疎行列に対する線形方程式について、求解部分の最適化の要望を受け。約3倍の性能向上を実現(AICS-Technical-Report:2014-002にて公表済)。(JST・CRESTの研究チームである筑波大学、鳥取大学、電気通信大学、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に向けた基礎研究」(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)
 - 「素粒子物理現象の理論的解析」(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)

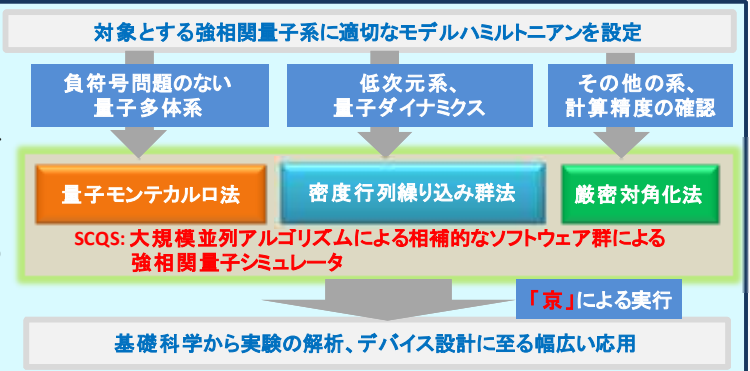
＜ユーザ利用事例＞

- ・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)

34

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次元系 (京都大学、東京理科大学)(対応済) ・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) ・量子化学計算向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系の数値的研究)、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サーバで研究利用

35

「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＞

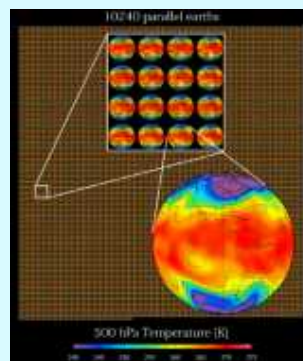
- 京都大学理学研究科: 分子混雑環境を考慮した酵素反応のQM/MM自由エネルギー解析を行うため、QM部分を動かさないダイナミクスを行うための改変を導入依頼(実装済。戦略分野1の課題として京でのシミュレーションを実行)
- Los Alamos National Labo.: R-path法による大規模構造変化のシミュレーションを導入依頼(実装中)、実施見込み
- Univ. Warsaw: AMBER力場を用いたRNAのシミュレーションを導入依頼(実装済、HPCIのリソースを用いた共同研究実施中)
- 新学術領域研究「動的構造生命」のチーム(九州大学、金沢大学、他): 昨年9月の第2回GENESIS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)

36

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っている。

＜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)

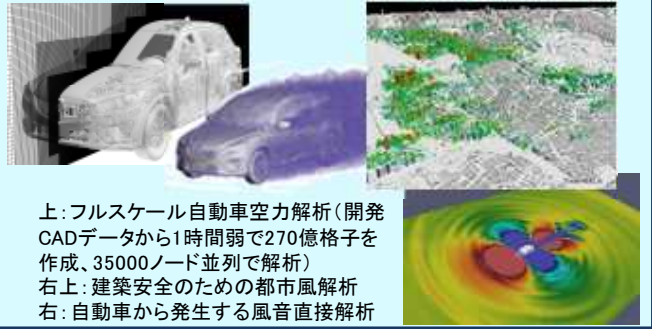
＜ユーザ利用事例＞

- 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、プ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)

37

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

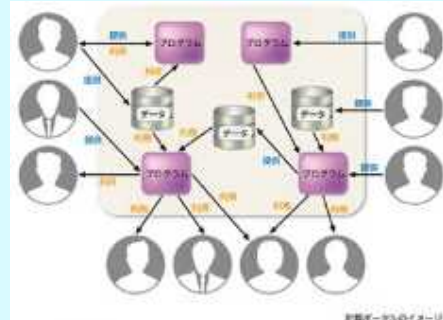
<今後の産業界への普及展開>

- ・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。



<ユーザ要望例>

- ・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Extrac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。

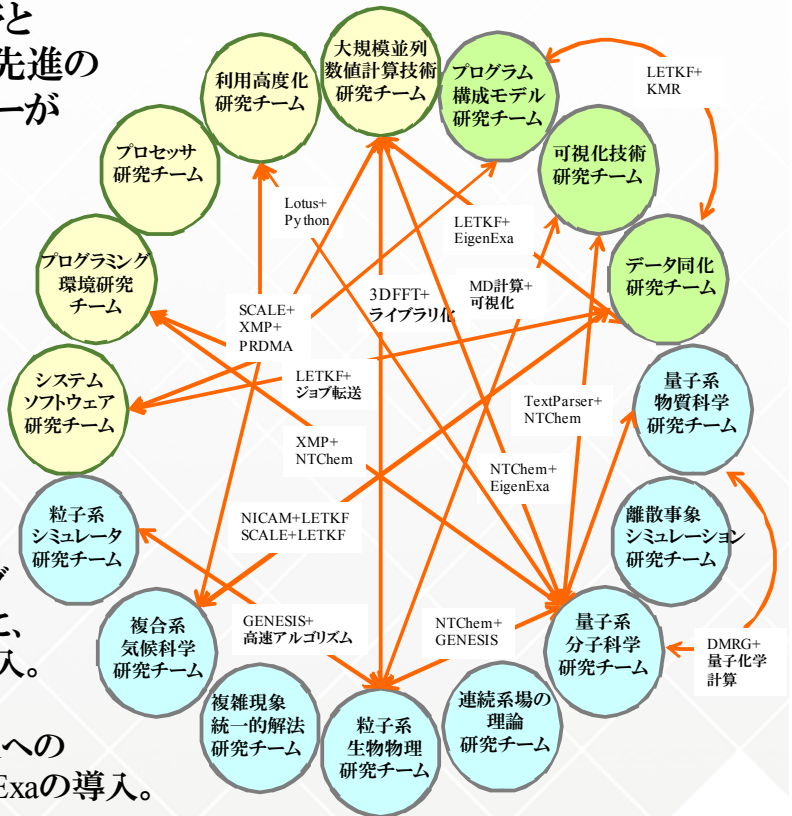
AICS研究チーム間における連携について

AICSに集積する計算機科学分野と計算科学分野の連携、融合により先進の科学的成果と技術的ブレークスルーが創出され始めている。

(AICS Café 85回開催、
研究進捗ミーティング 34回開催)
※ 2016年2月現在

【共通基盤的連携事例】

- 局所アンサンブル変換カルマンフィルタLETKFへのMapReduceデータ処理ツールKMRの導入
- 気象シミュレーション用ライブラリSCALEの一部を並列プログラミング言語XcalableMPで開発するとともに、隣接通信ソフトウェアPRDMAに導入。
- 電子状態計算ソフトウェアNTChemへの高性能固有値計算ライブラリEigenExaの導入。



大型施設との連携 (SACLA)

SACLAから発生する輝度の高い高速短パルスにより、情報量の多いX線画像を高速・大量に取得
→『京』との連携により、大量の回析像データをリアルタイムに解析
解析結果をSACLAの実験にフィードバックし、2次元・3次元の高解像度イメージングを構築

大量の回析像データ



SACLA

ビームライン研究開発グループ
矢橋 牧名グループディレクター

～兵庫県内の2つの
国家基幹技術～

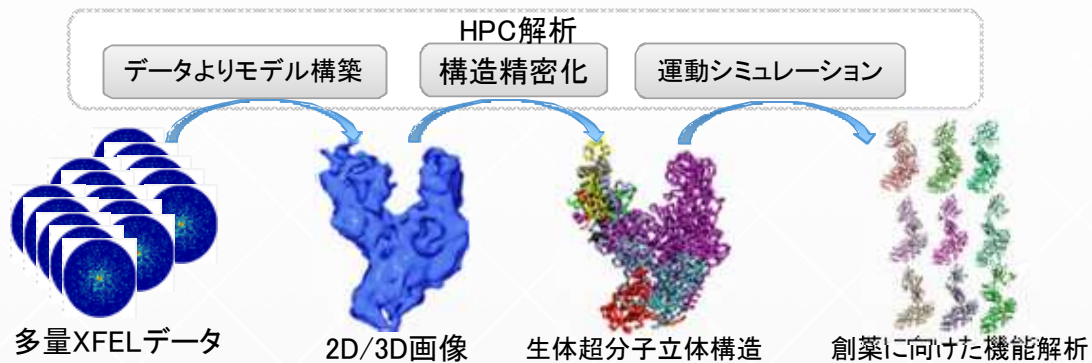
スパコンによる
高解像度イメージング(2D or 3D)



『京』

粒子系生物物理研究チーム 杉田有治チームリーダー
計算構造生物学研究ユニット Tama Florenceユニットリーダー

大型施設との連携 (SACLA) つづき



活動実績・成果等

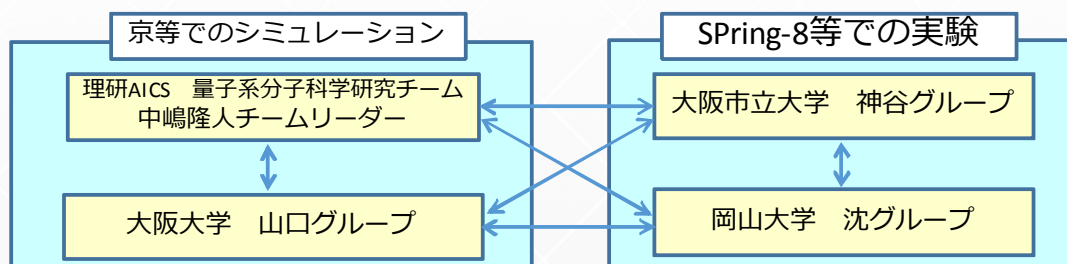
- 分子動力学シミュレーターGENESISの開発(杉田T)「『京』調整高度化枠」
「京」上で高い並列化効率を出すことのできる分子動力学ソフトウェア。全原子分子モデルと粗視化分子モデルを実装し、創薬や材料設計などの幅広い分野で利用できる (WIREs Comput. Mol. Sci., DOI: 10.1002/wcms.1220)
- 立体構造精密化モジュールの開発(タマU, 杉田T)
実験データを利用して精密な構造モデルを構築するためのアルゴリズムをGENESISに実装 (論文準備中)
- XFEL実験データ解析アルゴリズムの開発(タマU)「『京』若手人材育成枠」
XFELにより生体超分子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))

42

大型施設との連携 (SPring-8)

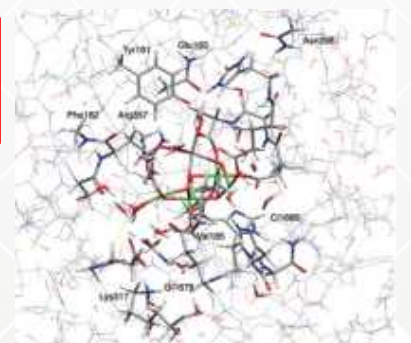
○光合成システムの共同研究 「『京』一般利用枠」

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

43