

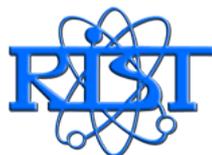
# 「京」を中核とするHPCIシステムの 共用開始状況と今後の計画について

～CAEの活用によるHPCの普及を目指して～

2012年12月15日

一般財団法人 高度情報科学技術研究機構

峯尾真一



登録施設利用促進機関 / HPCI運用事務局  
一般財団法人 高度情報科学技術研究機構

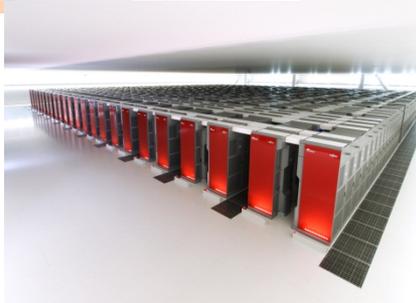
# 「京」を中核とするHPCIシステム

「京」と全国の大学や研究機関に設置されたスパコンを高速ネットワーク(SINET4)で結び、多様なユーザーニーズに応える革新的な共用計算環境を実現する基盤

\* 産業利用可能機関



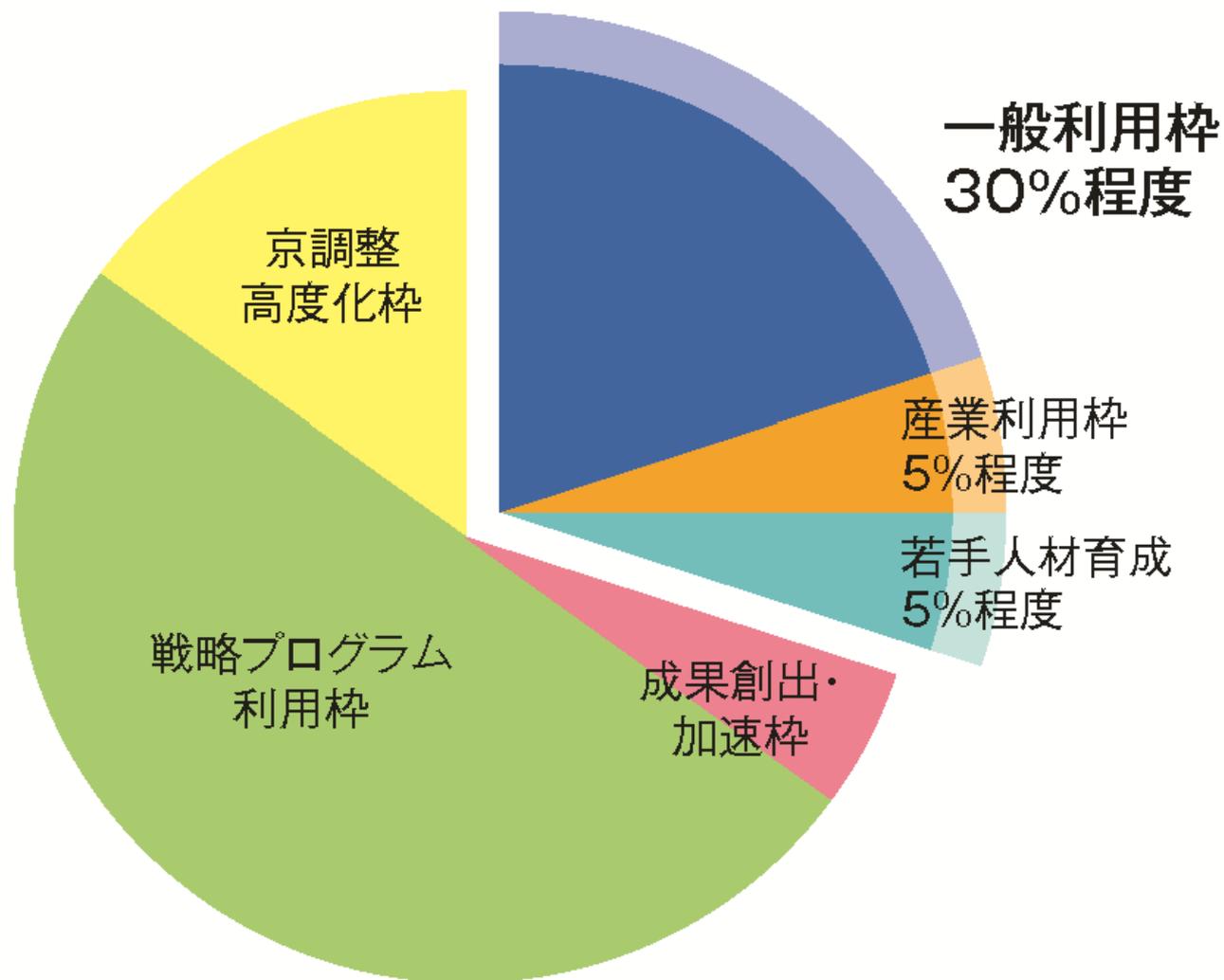
理化学研究所\*  
計算科学研究機構



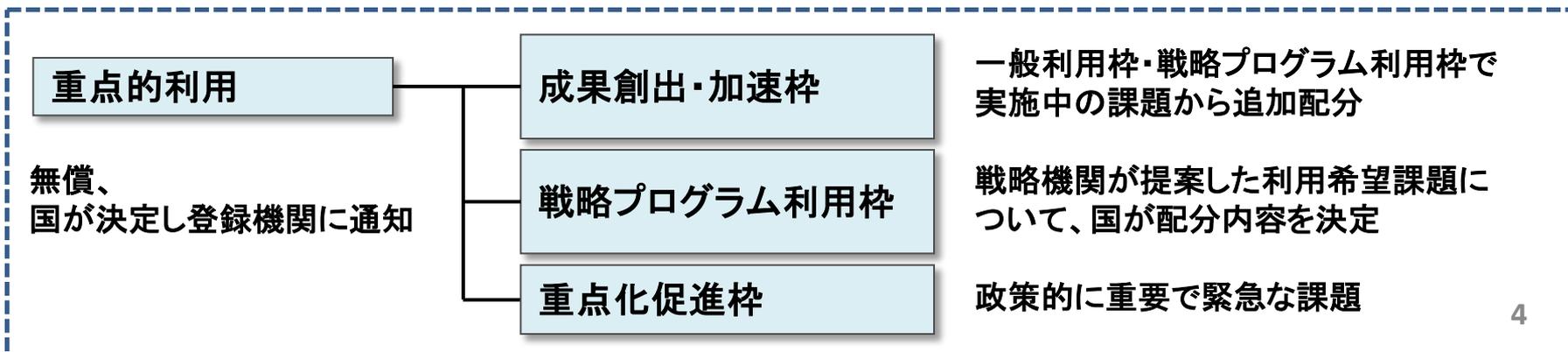
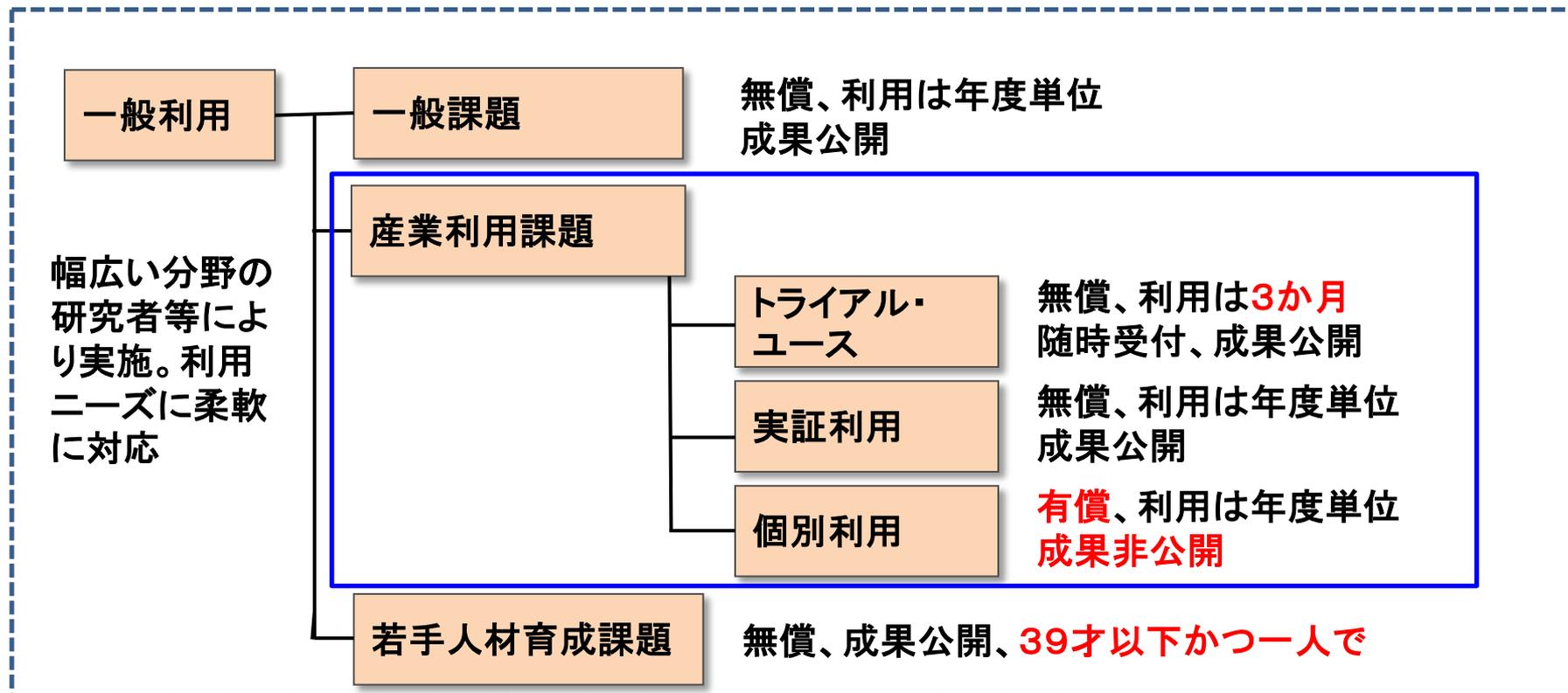
九州大学情報基盤\*  
研究開発センター



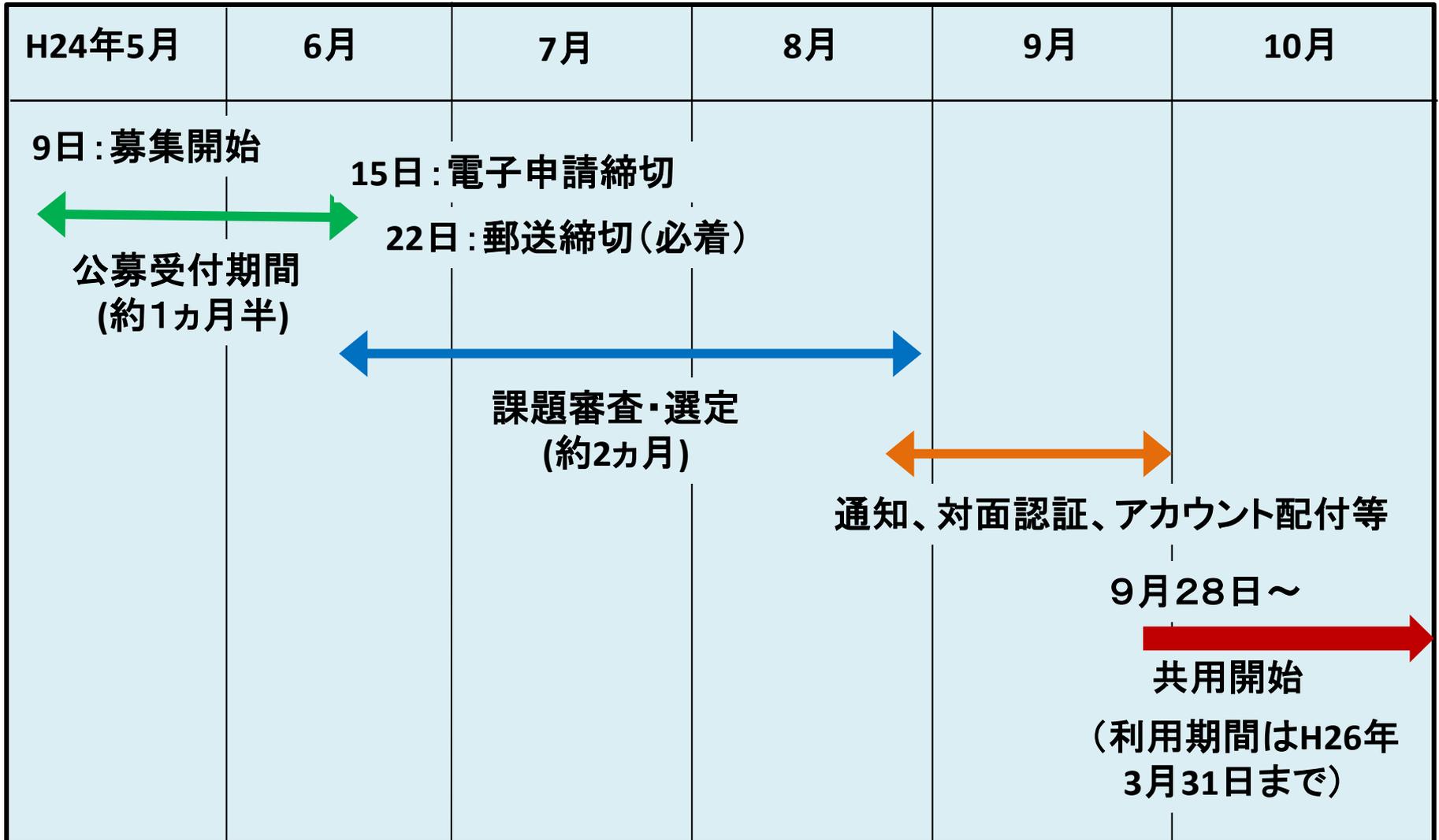
# 「京」における一般利用枠（公募対象）



# 「京」の利用研究課題の種類



# 平成24年度 課題募集・選定スケジュール



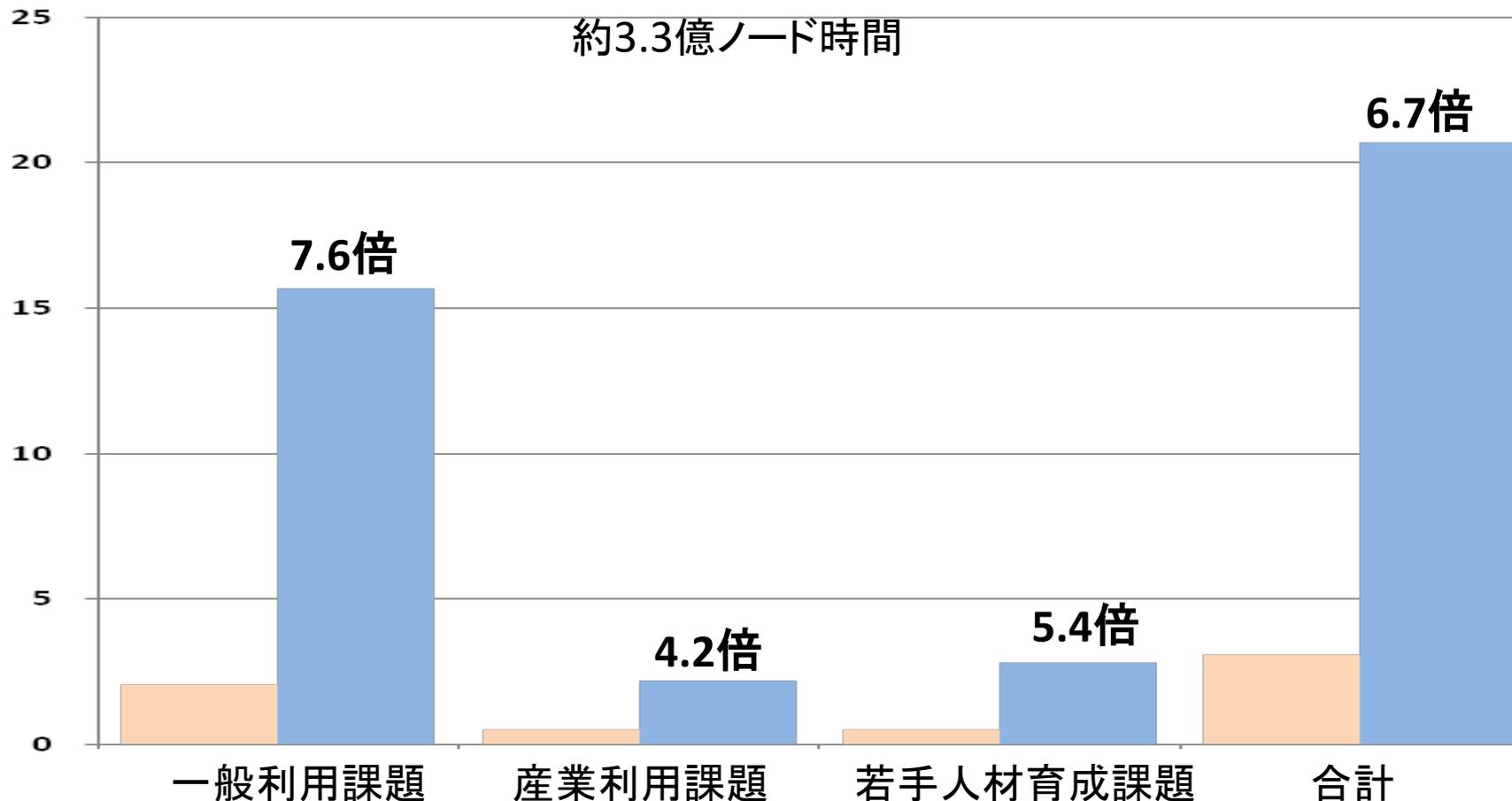
# 「京」: 提供可能量の約7倍の応募(要求資源量)

億ノード・時間積

提供資源量

要求資源量

約3.3億ノード時間



※ 京+HPCI資源(33件)  
の京利用分を含む。

# 選定結果(1) 全体件数

## 申請件数

京一般利用	138
京若手人材育成利用	58
京産業利用(トライアルユース)	4
京産業利用(実証利用)	22
京産業利用(個別利用非公開)	5
合計	227
HPCI資源(京以外) *	67

\*「京」以外の資源のみを利用する課題と「京」と「京」以外の両方を利用する課題の合計  
HPCI利用研究課題の申請総数としては、261件

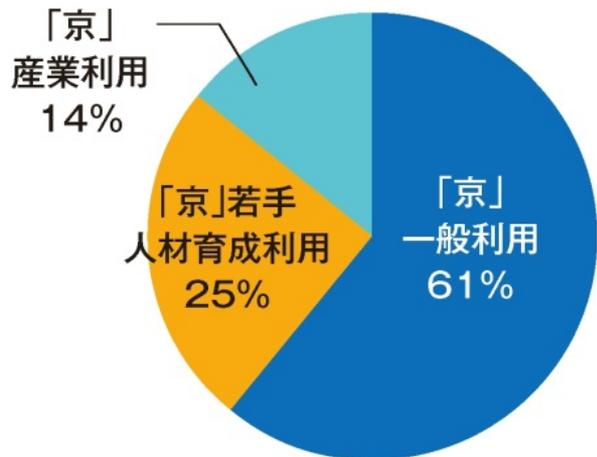
## 選定件数・選定率

京一般利用 (*)	29	21%
京若手人材育成利用	8	14%
京産業利用(トライアルユース)	3	75%
京産業利用(実証利用)	17	77%
京産業利用(個別利用非公開)	5	100%
合計	62	27%
HPCI資源(京以外)	57	85%

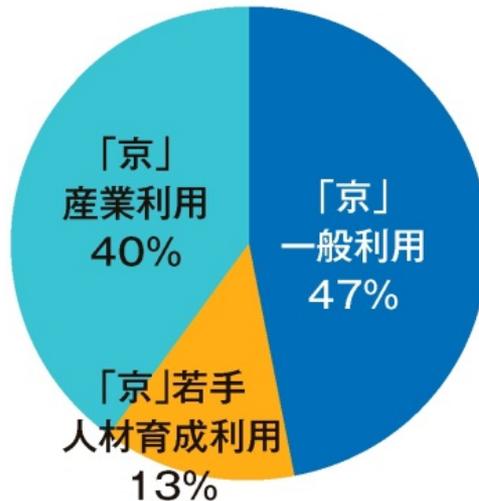
\*これに加え、「京」準備のための課題20件を選定。

# 選定結果(2) 区分別・機関別

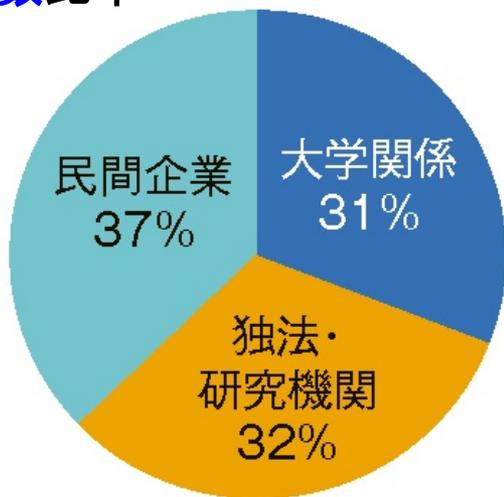
■ 区分別「京」申請件数比率



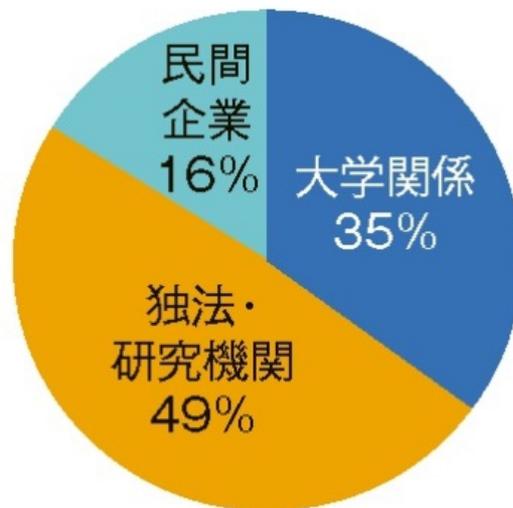
■ 区分別「京」選定件数比率



■ 機関別「京」選定件数比率

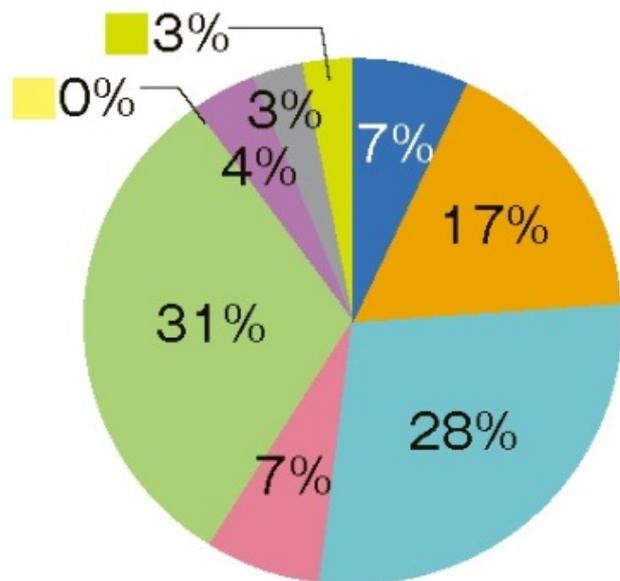


■ 機関別「京」資源配分量比率

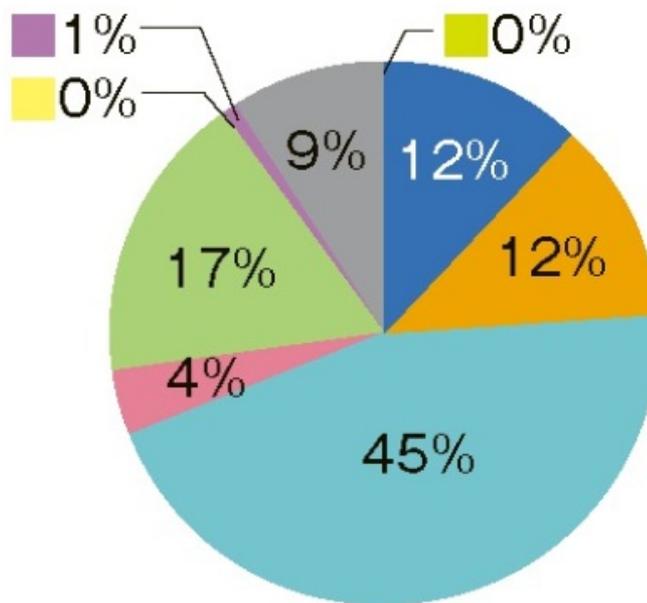


# 選定結果(3) 分野別(一般課題)

■ 分野別「京」選定件数比率



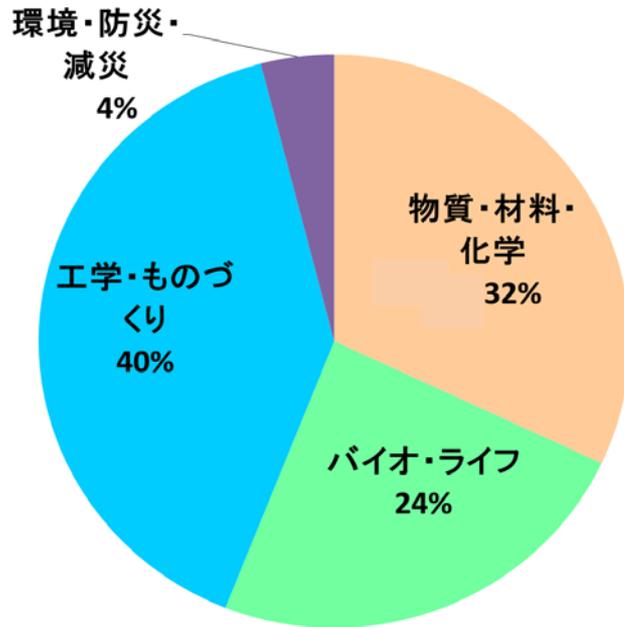
■ 分野別「京」配分資源量比率



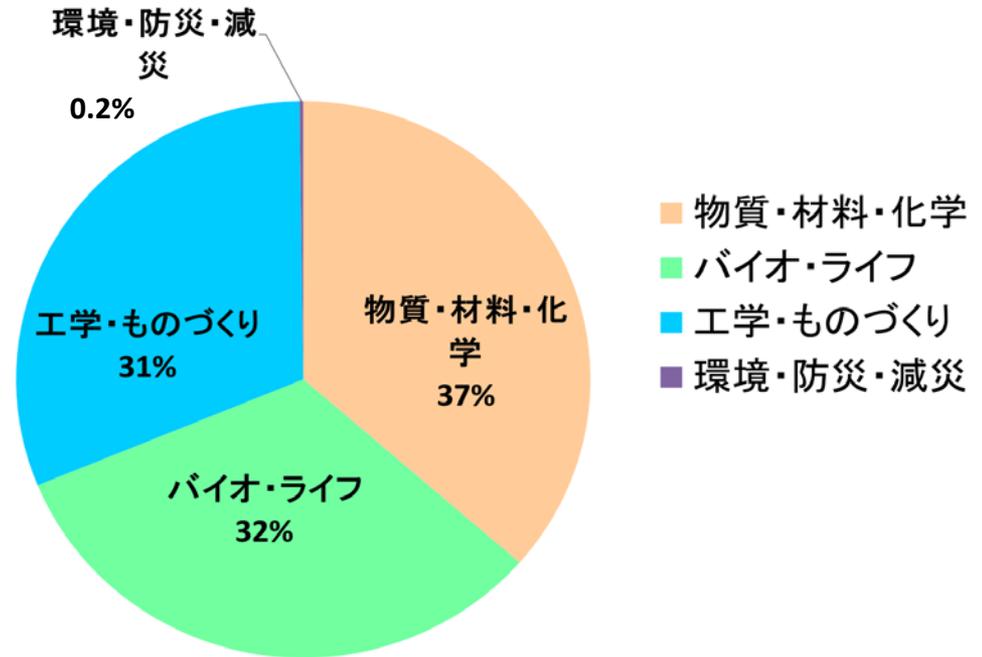
- 数理科学
- 物理・素粒子・宇宙
- 物質・材料・化学
- 工学・ものづくり
- バイオ・ライフ
- 環境・防災・減災
- 情報・計算科学
- 原子力・核融合
- その他

# 選定結果(4) 分野別(産業利用)

■ 分野別「京」選定件数比率



■ 分野別「京」資源配分量比率



- 物質・材料・化学
- バイオ・ライフ
- 工学・ものづくり
- 環境・防災・減災

# 「京」に関する利用相談・利用支援

## 「京」の利用者

問合せ

ヘルプデスク

回答



### (1) 申請前の事前相談

- 応募手続きについての相談
- 課題申請書類の記入方法相談
- 「京」の計算機環境(HW,SW)の問合せ



### (2) 利用相談

- コンパイルエラー、実行時エラー等
- 他システムからの移行
- ライブラリ、ツール等
- 性能情報採取方法
- 実行結果不正



登録機関

### (4) 情報提供

- 一元的に各種の情報をポータルサイトで提供
- HPCIシステムの提供機関と計算機資源の一覧
- 各種お知らせ
- 課題募集開始、説明会、講習会の案内など
- 高速化ノウハウなど

### (3) 技術支援

- 利用者からの高速化支援の依頼
- 重点的に支援するプログラムをピックアップ
- プログラム性能情報の採取
- ボトルネック調査(通信特性分析, インバランス評価, 単体性能評価) など
- 高速化支援



### (5) 利用講習会の実施

- 利用開始後に利用講習会を適宜開催
- 利用環境, 開発環境, システムの説明
- 性能分析手法, 高速化ノウハウ



# 講習会・セミナーの実施

講習会名称		開催日	会場		参加者数
「京」利用者向け講習会	利用環境編	2012/09/27	神戸 AICS	兵庫	43
	プログラミング環境編	2012/09/28	神戸 AICS	兵庫	38
「京」利用者向け講習会	利用環境編	2012/10/03	神戸 AICS	兵庫	41
	プログラミング環境編	2012/10/04	神戸 AICS	兵庫	35
「京」利用者向け講習会	利用環境編	2012/10/10	神戸 AICS	兵庫	39
	プログラミング環境編	2012/10/11	神戸 AICS	兵庫	35
一般向けHPCセミナー	チューニング技法編入門	2012/11/05	神戸 AICS	兵庫	51
	並列プログラミング入門(MPI編)	2012/11/06	神戸 AICS	兵庫	55
「京」利用者向け講習会	利用環境編	2012/11/26	トラスト・シティー・コンファレンス	東京	24
	プログラミング環境編	2012/11/27	トラスト・シティー・コンファレンス	東京	16
一般向けHPCセミナー	チューニング技法編入門	2013/02/21	神戸 AICS	兵庫	
	並列プログラミング入門(MPI編)	2013/02/22	神戸 AICS	兵庫	

# 「京」で利用可能なソフトウェアの情報

## 1. 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

(研究開発拠点: 分子研)

- ・京で稼働するソフトウェア46本を開発。
- ・分子研ポータルサイト PAL (<http://pal.ims.ac.jp/pal>) で公開。
- ・中核アプリは高並列化対応済み。

## 2. 次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

(研究開発拠点: 理研)

- ・京で稼働するソフトウェア34本を開発。
- ・理研ポータルサイト ([http://www.islim.org/islim-dl\\_j.html](http://www.islim.org/islim-dl_j.html)) より13本のソフトウェアが、現在、ダウンロード可能。11本が今後公開予定

## 3. イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発

(研究開発拠点: 東大生研)

- ・京での利用も想定した高並列化構造解析・流体解析および材料解析向けソフト11本開発。
- ・ダウンロードサイト (<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/dl/index.php>)

戦略5分野に関連するソフトの最新情報、ISVソフトやOSSの「京」での動作実績情報等も今後、HPCIポータルに掲載していく予定です。

# 「京」で動作するフリーソフトウェア例

- LAPACK \* :線形代数の問題を解くライブラリ
- SCALAPACK\* :MPIで並列化した線形代数ライブラリ
- BLAS\* :ベクトル演算や行列演算を行うライブラリ
- FFTW3/FFTW2\* :高速フーリエ変換を行うライブラリ
- HDF5 :ファイル入出インターフェイス・ライブラリ
- NetCDF :ファイル入出インターフェイス・ライブラリ
- LAMMPS :並列計算機のための古典的な分子動力学シミュレータ
- Frontflow/Red :流体解析ソフトウェア
- CMAKE :メイクツール
- ImageMagick :画像処理ツール
- libjpeg/libpng :画像操作ライブラリ
- Zlib :データの圧縮および伸張を行うライブラリ
- Parallel-NetCDF :NetCDFの機能にMPI-IO によるParallel IOを実現

\*「京」の数値演算ライブラリとして提供

# 今後のスケジュール

12月	H25年1月	2月	3月	4～9月	10～H26年3月
<p>▲ 戦略プログラム 加速枠選定</p> <p>↔ 一般利用 成果創出・ 加速枠の 選定</p>	<p>▲ HPCS2013出展</p> <p>▲ ナノテク展出展</p>	<p>▲ 技術講習会 (チューニング技法)</p>	<p>▲ 14-15 ▲ 中間報告会</p>	<p>▲ ▲ 各種技術 講習会(予定)</p>	<p>▲ H24年度 選定課題 利用終了</p> <p>▲ 最終成果 報告会</p> <p>↔ H26年度 課題募集・ 課題選定 (「京」と「京」 以外)</p>