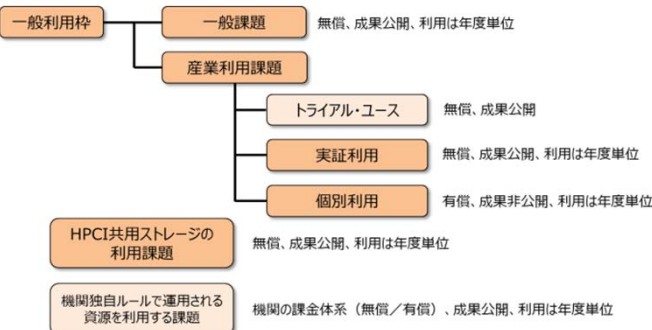
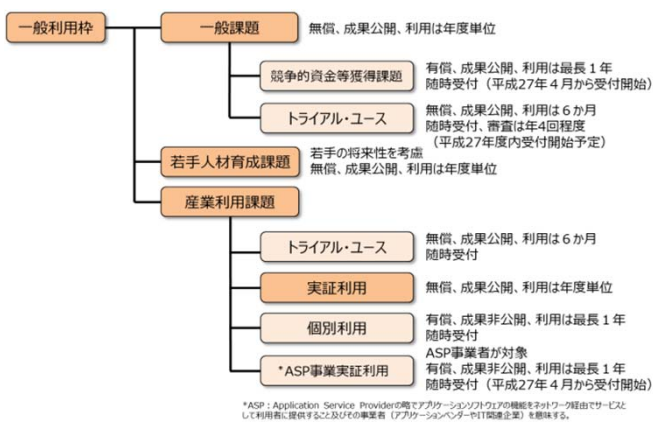


# 「京」を含めたHPCI一般・産業利用と大型施設連携課題紹介

## 「京」を中核とするHPCIシステム構成機関



## 「京」一般利用枠の申請可能な課題



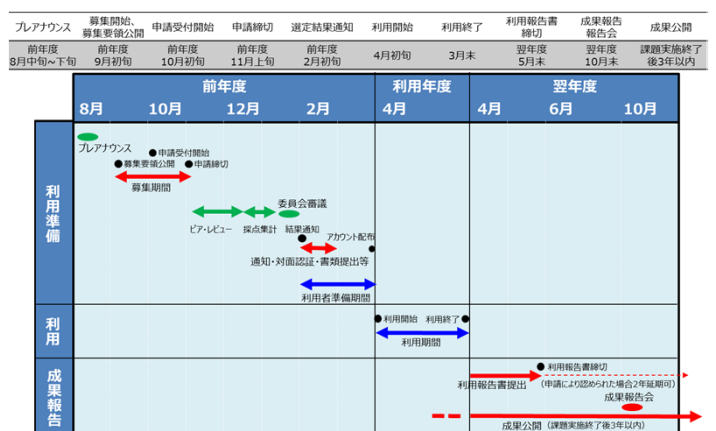
## 「京」平成27年度選定結果

申請件数	選定件数・選定率
京 一般課題 78	京 一般課題 24 30.8%
京 若手人材育成課題 23	京 若手人材育成課題 12 52.2%
京 産業利用課題 (実証利用) 37	京 産業利用課題 (実証利用) 31 83.8%
合計 138	合計 67 48.6%
HPCI資源 (「京」以外) (*) 143	HPCI資源 (「京」以外) (**) 73 51.0%

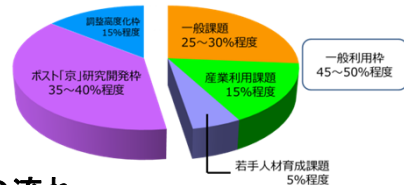
\*1 「京」の同時利用16件、「京」の第2希望64件を含む。

\*2 「京」の同時利用6件、「京」の第2希望18件を含む。

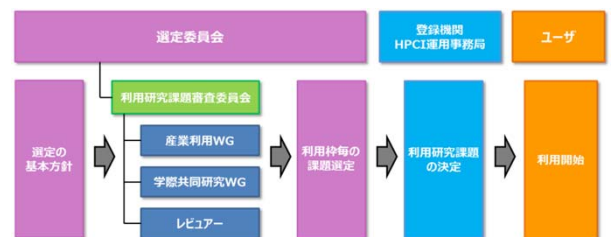
## 課題募集・選定スケジュール



## 「京」の利用可能資源(H28年度予定)



## 選定の流れ



### <選定の仕組み>

- > 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立公正な立場で利用者の選定を行う。
- > 具体的には、登録機関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。

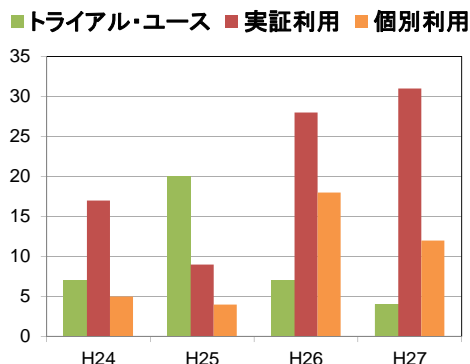
# 「京」を含めたHPCI一般・産業利用と大型施設連携課題紹介

## 産業利用の促進

### □産業利用課題の種類 ⇒ 多様なニーズに対応

利用の種類	目的	募集回数	成果	利用料金
トライアルユース	HPCIの利用環境において、アプリケーションの動作検証や性能評価および自社の課題の試行	随時受付	公開	無償
実証利用	高並列シミュレーション技術の有効性・有用性を自社の課題で実証	年1回		
個別利用	機密性の高い自社の課題を成果非公開で実施	随時/年1回	非公開	有償
ASP事業実証利用	ASP事業の有効性の実証	随時受付		

### □産業利用課題の採択件数 ⇒ 年々拡大傾向(「京」)



### □産業利用課題で使用可能な計算資源 ⇒ 大半の機関で可

資源提供機関	トライアルユース	実証利用	個別利用	ASP事業実証利用	固有制度
理研「京」	○	○	○(随時)	○	—
北海道大学	○	—	○(年1回)	—	○
東北大学	○	○	○(年1回)	—	○
筑波大学	○	○	—	—	—
東京大学	—	—	—	—	○
東京工業大学	○	○	—	—	○
名古屋大学	○	○	○(随時)	—	○
京都大学	○	○	—	—	—
大阪大学	○	○	—	—	—
九州大学	○	○	—	—	○
統計数理研究所	○	○	○(随時)	—	—
海洋研究開発機構	○	—	○(随時)	—	○

### □アプリケーション動作実績 ⇒ 拡大中(分子科学分野の例)

「京」	ABNIT-MP, AMBER, CPMD, ELSER, FMO in GAMESS, GAUSSIAN, GROMACS, J-OCTA VSOP, LAMMPS, MARBLE, MP-CAFFEE, MODYLAS, NTChem, NWChem, OCTA, OpenMX, PHASE, VASP, Wien2K, etc.
「京」以外のHPCIシステム	ADF, AMBER, CHARMM, GAMESS, GAUSSIAN, GROMACS, LAMMPS, Molpro, NAMD, etc.

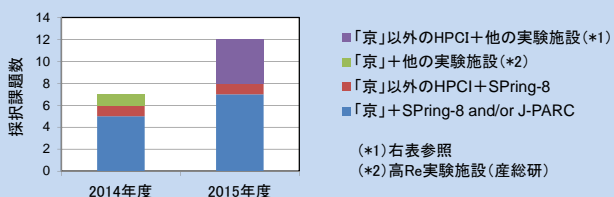
※赤色は商用ソフト

### □RISTで実施している手厚い利用支援

応募前相談、利用相談、プログラム高度化支援、プリポスト処理支援、講習会、他

## 大型実験施設との連携利用の促進

### 連携利用課題の動向 ⇒ 本年度は昨年度に比べて増加



### 連携利用促進の一環として「連携利用シンポジウム」を開催

#### 2014.9.2 第1回「京」と大型実験施設との連携利用シンポジウム

➢ SPring-8、J-PARC/MLF等の大型実験施設と「京」をはじめとするスーパーコンピュータとの連携利用の促進を目的として開催 (参加者総数103名、企業28名(16社))

#### 2015.9.2 第2回 大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム

➢ 中心テーマとして「ソフトマター科学」を設定し、この分野における①連携利用の事例紹介、②今後の連携利用を見据えた研究紹介、③パネル・ディスカッションを実施

➢ 副会場を設け、物質科学計算パッケージソフトの講習会、物質材料計算ソフトウェア紹介、各施設の利用方法案内のポスター展示等を実施

➢ 参加者: 総数126名

企業45名(33社)、大学27名、国立研究開発法人8名、財団法人41名、行政1名、プレス2名(2社)、その他2名



パネル・ディスカッション  
— 第1セッション

計算機	実験施設	採択課題名 (2015年度)
「京」	SPring-8+J-PARC	全原子分子動力学法によるフェノール樹脂ネットワーク構造の架橋不均一性とカウ特性の相関解明 タイヤゴム材料の大規模分子動力学シミュレーション 高性能蓄電デバイス設計に向けた界面の計算-実験融合型解析技術の開発
	SPring-8	永久磁石の微細構造特性解析と新化合物探索 大規模粗視化MDシミュレーションを用いた次世代高機能ポリマー材料の開発 マルチスケール粗視化RMC法によるナノ粒子凝集構造の解析
	J-PARC	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スピン液体状態の研究
「京」以外のHPCI	SPring-8	大規模フェーズフィールド格子ボルツマン計算による合金凝固組織の高精度予測
	高Re実験施設(産総研)	計算科学と実験科学の融合による乱流計測法の高精度化とその応用
	磁場下の液体金属実験施設(核融合研)	核融合炉先進ブランケットデザイン条件下におけるMHD乱流熱伝達機構のスケールアップ
	さばる望遠鏡(国立天文台)	宇宙背景放射 Bモード偏光のデータ解析
	コヒーレントドップラーライダー	格子ボルツマン法による広域管首端における大気乱流の超高精度度計算

### 第2回連携利用シンポジウムのアンケート調査結果

- シンポジウム全体の満足度レベルが第1回に比べて向上  
満足は倍増: 36→72%、やや満足は半減: 61→26%
- パネル・ディスカッションは高評価(やや満足以上: 97%)
- 参加者に占める施設利用有りの割合が第1回から倍増  
「京」を含むスパコン: 19→41%、大型実験施設: 20→43%

