

今後の HPCI 第二階層計算資源の整備とその活用に関する提言

平成 29 年 5 月 24 日

一般社団法人 HPCI コンソーシアム

目次

要旨	P. 1
はじめに	P. 3
1. HPCIにおけるフラッグシップ計算機と第二階層計算資源の役割	P. 5
2. 第二階層計算機上で稼働するアプリケーション・ソフトウェア等の整備	P. 7
2.1 国プロ開発アプリおよびオープン・ソース・ソフトウェアの整備	P. 8
2.2 商用アプリケーションの整備	P. 9
3. 第二階層計算資源とユーザとのマッチング	P. 10
3.1 第二階層計算資源に関する情報提供	P. 11
3.2 マッチング調整役のあり方	P. 12
3.3 課題選定のあり方と改善に向けた取り組み	P. 13
3.4 産業利用課題に関する基本的な考え方	P. 13
4. 第二階層計算資源の活用のためのユーザ支援	P. 14
4.1 多様な第二階層計算資源におけるユーザ支援のあり方	P. 14
5. 将来のHPCIの持続的な発展を目指して	P. 16
関連資料	P. 17
附録	P. 28

要旨

- ① フラッグシップ計算機である「京」の運用が開始されてから 4 年半余りが経過し、「ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)」の計算資源構造がハケ岳型の計算資源構造に変化しており、第二階層計算資源の重要性が相対的に増している。第二階層計算資源に対して、「京」からポスト「京」に移行する期間の HPCI 全体の計算資源の提供、アプリケーション開発のためのプラットフォーム、ならびに、裾野の拡大といった新たな役割が期待されるようになっている。システム構成機関は、フラッグシップシステムが更新されるまでの間、様々なユーザーニーズに応じた計算資源の提供に一層協力し、国は引き続き計算資源提供者に対する措置を充実願いたい。
- ② 国のプロジェクトで開発されたアプリケーションの成果の波及効果の増大、HPCI の産業利用の拡大を図るために、国は、国のプロジェクトで開発されたアプリケーション等や商用アプリケーションを第二階層計算資源に整備していくべきである。すなわち、国は、国のプロジェクトの成果によるアプリケーションを第二階層計算資源に移植するための整備支援を実施していくべきである。また、国は、商用アプリケーションの整備に対しては、アプリケーションのベンダー会社と交渉し、第二階層計算資源に対して商用アプリケーションの移植や最適化を進めたり、ライセンスの相互認証ができるようにしたりするための環境を整備していくべきである。
- ③ 多様化している第二階層計算資源とユーザーとのマッチングを図るために、国は、HPCI ポータルサイトを通じ、インストールされているアプリケーション、メモリ容量、ディスク容量などに関する情報を一元的に提供していくべきである。産業利用に関しては、企業が持つ研究課題と当該分野をリードしている研究者、および当該課題に最適な計算資源を紹介できるような支援体制を整備していくべきである。
- ④ 第二階層計算資源を最大限に活用するために、国は、最適化チューニングを支援したり、ユーザー登録・ネットワーク利用・ストレージ利用を支援したりするための支援員を HPCI 運用事務局、システム構成機関両方に配置するべきである。その際、ノウハウの共有のための情報交換の仕組みを両者間に設けることが望ましい。ユーザー支援は原則的に無償とすべきであるが、支援に対する優先順位付けや有償支援サービスも含めて具体策を検討しておく必要がある。また、システム構成機関、HPCI 運用事務局、および、スパコンのメーカー・ベンダ等で支援員の人事交流を促進するような制度を検討していくべきである。

- ⑤ 将来の HPCI の持続的な発展を可能にするために、国は、計算機アーキテクチャ、計算アルゴリズム、システムソフトウェア、並びにアプリケーションの総合的な検討を早期に開始すべきである。

はじめに

我が国の頂点に立つスパコン(以下、「フラッグシップ計算機」という。)、「京」の供用が開始されてから4年半が経過した。

この間、フラッグシップ計算機として「京」は数々の革新的な成果を創出してきた。一方、「京」を頂点とするピラミッド型の計算資源構造を有していた我が国の HPCI(ハイ・パフォーマンス・コンピューティング・インフラ)の重要な一翼を担ってきた第二階層計算資源もこの4年半の間に進歩を続け、「京」に匹敵したり、「京」を凌駕したりする性能のマシンも登場してきた。たとえば、昨年 11 月に発表されたスパコンの性能ランキングにおいて、東京大学と筑波大学の計算機センターが共同で設備整備したスパコンである Oakforest-PACS が「京」の約 1.3 倍の性能を記録し、我が国で最高性能、世界でも第 6 位の性能を誇るマシンとして、本年 4 月から本格的な運用を開始している。このように、我が国の HPCI 計算資源は、第二階層計算資源の高性能化により、これまで頂点に立っていたフラッグシップ計算機の性能が相対的に低下し、フラッグシップ計算機を頂点とするピラミッド構造からいわゆる八ヶ岳型へと変貌しつつある。また、スパコンの中央処理装置(CPU)のアーキテクチャは年々進歩しているため、第二階層計算機資源の方がアーキテクチャ的にも先進している状況が生まれている。

フラッグシップ計算機については、「京」の運用開始からしばらくして 2014 年 4 月に「京」のリプレース機、ポスト「京」の開発に着手しているが、当初の共用開始予定が 2019 年度末であり、フラッグシップ計算機のリプレースの間隔が 8 年間と比較的長いことに加えて、半導体プロセス技術上の問題もあり、共用の開始がさらに 1 年から 2 年遅れる見込みである。このため、上記のような HPCI 計算機資源の構造変革の流れは必然的なものであるが、従来はフラッグシップ計算機を補完する計算資源と位置づけられてきた第二階層計算資源について、その位置づけを再度明確にし、今後どのように設備整備し、どのように活用していくべきかという問題が、我が国の計算科学振興上の大きな課題として顕在化している。

本提言は、今後の HPCI に対する長期的なビジョンを明確にした上で、特に、ポスト「京」が稼動を開始するまでの今後数年間にわたり、第二階層計算資源をどのように整備し、活用していくべきかという課題について調査・検討した結果を、HPCI のユーザやシステム構成機関との意見交換会における意見も反映させて、まとめたものである。

なお、我が国全体の計算科学、計算機科学の振興を考えた場合、フラッグシップ計算機と、HPCI に資源提供している第二階層計算資源からなる HPCI ばかりでなく、HPCI に資源提供していない大学附置研究所や国立研究開発法人等に設置された HPC ハー

ドウェアや、それらの機関により開発され、維持・管理されているソフトウェア等についても議論を深めるべきと考えるが、フラッグシップ計算機「京」のリプレイス時期が喫緊に迫っているという事情もあり、今回の提言では HPCI の中の第二階層計算資源に焦点を絞ったことを付記する。

1. HPCIにおけるフラッグシップ計算機と第二階層計算資源の役割

HPCI は、さまざまな分野の科学や産業の発展に大きく貢献することを目的として、世界最高レベルの性能を誇るフラッグシップ計算機と全国各所にあるスパコンを高速ネットワークで接続し、ひとつのユーザアカウントで利用できるように整備された計算機環境であり、2012年9月から本格的な共用が開始されている。HPCIの計算資源は、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、改正：平成18年5月17日法律第37号)に基づき、特定高速電子計算機施設として共用に供されてきたフラッグシップ計算機「京」と、大学の情報基盤センター等が大学共同利用機関等として独自の研究活動を推進するために自律的に整備してきた計算資源の一部を供出しあってユーザに提供している第二階層計算資源とから構成されている。

フラッグシップ計算機である「京」の共用が開始されてから4年半余りが経過し、「京」を中核とする HPCI は多くの社会的・科学的な課題の解決に貢献してきた。我が国がスーパーコンピューティング分野において今後も世界的な優位性を堅持し、科学や技術の発展に大きく貢献していくためには、世界最高レベルの性能を誇るフラッグシップ計算機の開発・整備は必須のものであり、「京」の共用が開始されてから間もなくして、2014年4月に次期フラッグシップ計算機ポスト「京」の開発に着手された。ポスト「京」は当初計画では2019年度中に共用が開始される予定であったが、世界的にも開発の困難さが増している半導体技術の開発遅延もあり、ポスト「京」は2021年度から2022年度に共用が開始される見込みである。

半導体プロセスの微細化とそれに伴う CPU やメモリアーキテクチャの進歩とにより、スパコンの性能は年々向上している。そのため、最近では「京」の性能に匹敵する、あるいは、「京」の性能を凌駕する性能を持つ第二階層計算機も出現している。たとえば、昨年6月に市場に投入されたインテルの最新のメニーコア CPU は「京」の CPU の約27倍のピーク性能を有する。この CPU を8,000個余り搭載し、東京大学と筑波大学とが共同で設備整備したスパコンである Oakforest-PACS が「京」の約1.3倍の性能を記録し、我が国で最高性能、世界でも第6位の性能を誇るマシンとして本年4月に本格運用を開始している。各大学等の計算機整備計画を資料1(p.17)に示すが、このような状況はポスト「京」が共用を開始する2021年度から2022年度頃までは続くものと予想されている。このため、HPCI の計算資源構造は、これまではフラッグシップ計算機という一つの頂点を有するピラミッド型の計算資源構造であったものから、複数の頂点を有する、いわゆる八ヶ岳型の計算資源構造に変化しており、第二階層計算資源の重要性が相対的に増している。

このような状況の中、フラッグシップ計算機へのステップアップを支援したり、フラッグ

シップ計算機が必ずしも得意としない分野の計算をカバーしたり、あるいは、フラッグシップ計算機で有効性が実証されたアプリケーション・ソフトウェアを下方展開したりするための計算資源として位置づけられてきた第二階層計算資源の位置づけを見直す必要性が生じている。第二階層計算資源に対しては、上記の役割に加えて、今後は次のような役割を担うことが期待される。

【HPCI 全体への計算資源の提供】

HPCI システム構成機関から提供されている第二階層計算資源は年々増大しており、フラッグシップ計算機により提供される計算資源と比較して無視できない大きさの資源となっている。たとえば、2017 年度に HPCI として提供される計算資源はフラッグシップ計算機「京」が 6.6 万ペタ・フロップス時間であるのに対して、第二階層計算資源の合計は 4.9 万ペタ・フロップス時間であり、第二階層計算資源は今後も年々増大していく見込みである。一方、次期フラッグシップ計算機であるポスト「京」は 2021 年度もしくは 2022 年度から共用が開始される予定であるが、その前には「京」の共用が終了する見込みである。したがって、2020 年度、あるいは 2021 年度までの今後 4 年から 5 年の間は、第二階層計算資源が HPCI として提供される重要な、あるいは主要な計算資源となる。我が国の計算科学の切れ目のない発展を図るために、限られた予算の中で、どのような計算機によりどの程度の第二階層計算資源を整備し、広くユーザに提供していくのかということに関するポートフォリオを明確にしていく必要がある。特にフラッグシップ計算機停止中は、第二階層計算資源に対する需要が大幅に増大することが予想される。国はこの間においても計算科学の持続的な発展を維持すべく、第二階層計算機による資源提供に関して早急に具体的な対応策を検討すべきである。

【アプリケーション開発のためのプラットフォーム】

前述のように、第二階層計算資源として提供されている計算機の CPU やメモリのアーキテクチャはフラッグシップ計算機の CPU やメモリのアーキテクチャよりも先進しているものが多い。たとえば、現在のスパコンの性能向上は主として、コア数の増大と同時に計算する要素データ数の増大により実現されている。フラッグシップ計算機である「京」の CPU は、2 つの要素データに対して同時に同一の命令を実行する 128 ビットの SIMD (Single Instruction Multiple Data Stream) 演算器を持つ 8 つのコアを有している。これに対して、第二階層計算資源としても提供されている最新のインテルの CPU は、8 つの要素データに対して同時に同一の命令を実行する 512 ビットの SIMD 演算器を持つコアが最大 72 個搭載されている。次期フラッグシップ計算機であるポスト「京」の CPU やメモリのアーキテクチャは公表されていないが、このような全体的な流れの中に位置づけられるものと予想される。したがって、第二階層計算資源は、次期フラッグシップ計算機で稼働するアプリケーションを開発するためのプラットフォームとしても重要な役割を果たすことが期

待される。

【裾野の拡大】

大学情報基盤センター等は計算機の整備やその運用に関して多様性があり、これまでもその独自の活動によって、計算科学の裾野の拡大、新分野の開拓、HPC を利用するユーザ数の増大に大きく貢献してきており、多くの HPC ユーザを抱えている。今後、大学情報基盤センター等は、HPCI システム構成機関としても、裾野の拡大についての役割を担っていくことが期待されている。

このような状況の中、第二階層計算資源は、我が国の計算科学の振興に不可欠な構成要素となっている。大学情報基盤センター等は、自律的に計算機設備を整備しつつ、システム構成機関として HPCI の活動に参画してきた。この自律性を前提としながらも、これらのセンター等が、第二階層計算資源を担う主体として、その継続的な整備運用に対してこれまで以上に積極的に参画していくことが期待されている。システム構成機関は、フラッグシップ計算機が更新されるまでの間、様々なユーザニーズに応じた計算資源の提供に一層協力し、国は引き続き計算資源提供者に対する措置を充実願いたい。

なお、社会的、科学的ニーズの変化、スパコンの性能向上や CPU・メモリアーキテクチャの進歩、あるいは国際情勢の変化等により、HPC の適用分野も変化している。このため、HPCI を利用することにより大きな進展が見込まれる研究分野や当該分野で用いられる計算アルゴリズムの検討を絶えず進めておく必要がある。

以上述べてきたとおり、フラッグシップ計算機と第二階層計算資源の役割は、フラッグシップ計算機の更新サイクルに従って常に変化している。我が国が世界最高レベルの計算科学、計算機科学の競争力を維持するためには、フラッグシップ計算機および第二階層計算資源からなる HPCI 総体としてのパフォーマンスを常に最大化する必要がある。国は、その時点時点における、フラッグシップ計算機と第二階層計算資源の関係に基づき、課題選択基準の見直し、支援要員の配置、共用ストレージ等の整備を進めていくべきである。

2. 第二階層計算機上で稼働するアプリケーション・ソフトウェア等の整備

高性能な計算資源を整備し、ユーザに提供していくことと並んで、高性能な計算機上で稼働するアプリケーション・ソフトウェア等を整備し、広くユーザが利用できる環境を提供していくことも HPCI の重要な役割である。本章では、アプリケーション・ソフトウェア等（以下、「アプリケーション」という。）の整備計画に関して述べる。HPCI 上で稼働しているアプリケーションは、大きくは (1) 国のプロジェクトで開発されたアプリケーション（以下、「国プロ開発アプリ」という。）、(2) オープン・ソース・ソフトウェア、(3) 商用アプリケーション

に分類される。本提言では、(1)および(2)に分類されるアプリケーションと(3)に分類されるアプリケーションにわけて、それぞれの整備に関して言及する。ただし、フラッグシップ計算機におけるアプリケーションの整備に関しては、ポスト「京」の重点課題において別途研究開発が行われていたり、ハードウェア開発に係る機密情報が関係したりするため、本提言では、第二階層計算機上で稼働するアプリケーション等の整備方針に関してのみ言及する。

2.1 国プロ開発アプリおよびオープン・ソース・ソフトウェアの整備

2009年度から2015年度に掛けてHPCI戦略プログラムが推進され、5つの戦略分野において、フラッグシップ計算機「京」に対するアプリケーションの最適化や最適化されたアプリケーションによる実証研究が「京」を用いて行われ、数々の革新的な成果が創出された。また、2014年度からはポスト「京」の重点課題において、社会的・科学的に重要な9つの課題の解決に資するアプリケーションの開発が行われている。さらに、2016年度からは、スーパーコンピューティングに関する新分野の開拓や裾野の拡大に資するアプリケーションの開発のために4つの萌芽的課題が採択され、当該課題においてアプリケーションの開発が開始されている。

これらのアプリケーションは主としてフラッグシップ計算機である、「京」やポスト「京」に対して最適化されたもの、あるいは開発されているものであるが、これらのアプリケーションを第二階層計算機上においても高速に稼働するように整備し、第二階層計算資源のユーザが広く利用できるような環境を整備していく、いわゆる「下方展開」は、上記のような国のプロジェクトの成果を普及させるという観点で極めて重要なことである。また、2010年度からは、国立研究開発法人科学技術振興機構の戦略的創造研究推進事業(JST-CREST)の研究領域の一つとして、「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」が設定され、プログラミング言語、コンパイラ、ランタイムシステムなどのシステムソフトウェアの研究開発が行われているが、開発されたシステムソフトウェアの維持・整備も重要な課題である。

しかしながら、上記のようなアプリケーション等の開発の国のプロジェクトのスコープには下方展開は必ずしも入っていないことに加えて、アプリケーション等の整備・維持は、アプリケーション等の開発事業の終了後も、当該アプリケーション等の利用価値が高く、かつ、利用者が多い限りは継続的に実施すべき事業であり、元来、アプリケーション等の開発事業だけで対応できるものではない。オープン・ソース・ソフトウェアに関しても、事情は大同小異であることに加えて、これらの作業を効率的に実施するために不可欠になる、アプリケーションの開発者の協力が得られるとも限らない。

さらに、前述のように、第二階層計算資源は多様性に富んでおり、必ずしもフラッグシップ計算機と同一のアーキテクチャを有しているわけではないため、これらのアプリケーション等を第二階層計算機に移植し、高速化チューニングを施し、最適な状態でユーザに提供するためには相当な時間と労力が掛かる場合が多い。大学情報基盤センター等が独自にこのような作業を実施することは困難である。国プロ開発アプリやオープン・ソース・ソフトウェア等のアプリケーションの整備に関する取り組みとしては、国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究機構(AICS)では、「ソフトウェアセンター(仮称)」という、「京」用に開発されたアプリケーションをメンテナンスする体制を検討している。また、一般財団法人高度情報科学技術研究機構(RIST)においては、「京」を中核とした HPCI の利用支援の枠組みの中で、国プロ開発アプリ、オープン・ソース・ソフトウェアの整備について検討を開始している。

このような状況の中、国は、上述のような取り組みをさらに強化し、国プロ開発アプリやオープン・ソース・ソフトウェアを第二階層計算機においても最適な状態で利用できるように整備し、広くユーザに提供していく仕組みを検討していくべきである。具体的には、HPCI 運用事務局や大学情報基盤センター等が保有している、第二階層計算機上で多く利用されているアプリケーションに関する情報などから、ユーザニーズの多いアプリケーション等を厳選し、多様性に富んだ第二階層計算資源の中でも、代表的なアーキテクチャを持った計算資源上に移植するための整備支援を実施していくべきである。資料 2-1(p.18)に HPCI においてよく利用されているアプリケーションを示す。また、資料 2-2(p.19)には HPCI に整備されている国プロ開発アプリおよびオープン・ソース・ソフトウェアのリストを示す。整備支援の対象とするアプリケーション等の選定にあたっては、利用頻度の高さに加えて、移植に要する経費、同じような機能を有するソフトウェアの整備支援の有無、産業界における将来的な利用の可能性などを総合的に考慮すべきである。ただし、本提言が念頭においている、研究開発投資という予算の性格上、アプリケーション等の整備支援を半永久的に継続することは不可能であり、3年間ないしは5年間が経過した後は、別の形態により、当該アプリケーション等を整備・維持していく必要がある。たとえば、産業利用に供するアプリケーション等であれば、産業界の負担により、当該アプリケーション等を維持・発展させていくような仕組みを同時に検討する必要がある。つまり、国による整備支援が終了した後も、持続的な整備・発展を見込むことができるかどうか整備支援を行うアプリケーション等の選定に関しては考慮すべきである。なお、国プロ開発アプリやオープン・ソース・ソフトウェアの移植、最適化、維持・管理に当たる人材の育成やキャリアプランを検討することも重要であるが、それらに関しては、「4. 1 多様な第二階層計算資源におけるユーザ支援のあり方」のところで言及する。

2.2 商用アプリケーションの整備

商用アプリケーションの最大のユーザは産業界であるが、第二階層計算資源に商用アプリケーションを整備する目的は、HPC を利用すれば産業界として将来的にどのようなことが実施できるかを調査する環境を提供するためである。しかしながら、将来的にそのようなアプリケーションを利用し、生産活動を通じて利益を享受するのは産業界であることを考慮すると、商用アプリケーションを第二階層計算資源上で稼働するように移植したり、チューニングしたりするために必要となる費用や、それらのアプリケーションを実際に利用したりするためのライセンス料は当該企業が負担することが妥当である。

一方、採択された HPCI の利用課題ごとに、計算資源の利用が認められた第二階層計算機に対して、当該企業が利用する商用アプリケーションの移植や最適化、利用ライセンスの交渉をアプリケーションのベンダー会社(Independent Software Vender:ISV)と個別に行うことは効率的ではなく、全体として HPC の産業利用の拡大を阻害する要因になりかねない。そこで、HPCI 運用事務局である RIST、フラグシップ計算機の運用主体である AICS、および「京」をはじめとするスーパーコンピュータの産業利用の促進をするために設立された公益財団法人計算科学振興財団(FOCUS)の三機関が連携してリーダーシップを取り、ISV との交渉を行い、第二階層計算資源に対して商用アプリケーションの移植や最適化を進めたり、ライセンスの相互認証ができるようにしたりするための環境を整備していくべきである。このことによって、課題採択後にユーザが直ちに計算を開始できるようになり、HPCI の産業利用が加速されることが期待される。また、複数の HPCI システム構成機関が管理運用する第二階層計算資源上に同じ商用アプリケーションがインストールされている場合、当該システム構成機関間で常に商用アプリケーションに関するアップデート情報を交換し、結果として、産業界ユーザに対する商用アプリケーションの利用に関する窓口機能が一元化されていくことが望ましい。資料 2-3(p.26)に第二階層計算資源に整備されている商用アプリケーションの一覧を示す。

第二階層計算資源に対する商用アプリケーションのポーティングに関しては、ISV に明確なビジネスモデルが確立されていないこともあり、上記の折衝は困難を伴う。したがって、動作確認済みの国プロ開発アプリやオープン・ソース・ソフトウェアへの乗り換えを推進していくことも一案として考えらえる。一方、アプリの乗り換えはユーザにとって必ずしも簡単なことではなく、相当な支援が必要となることも想定される。したがって、商用アプリケーションの導入を推進するか、あるいは、国プロ開発アプリ等への乗り換えを進めるかに関しては慎重な判断が必要である。

3. 第二階層計算資源とユーザとのマッチング

これまでの応募課題と選定結果からは、計算資源とユーザ課題の mismatching の例は多くないが、前述のように、第二階層計算資源は多様化している。このため、ある課題

に対して最適な計算資源が別の課題に対しても最適な計算資源であるとは限らない。目的とする計算に合致した計算資源を選ばないと計算の目的を達成できないばかりか、システム構成機関としては、貴重な計算資源を無駄にしてしまうという問題も生じる。ユーザの利用課題と利用する計算資源とのマッチングは、第二階層計算資源の効率的な利用を図り、その成果を最大化するために必須の課題である。本章では第二階層計算資源とユーザとのマッチングを図るための具体的な方策に関して言及する。

3.1 第二階層計算資源に関する情報提供

現在、第二階層計算資源に関する情報としては、各システム構成機関が情報基盤センター等のユーザに対して開示している情報と、HPCI 運用事務局が利用課題毎に纏めている利用成果報告書があり、ユーザの閲覧回数やダウンロード件数から見て、これらの情報は有効に活用されていると思われる。既に提供済みの情報を含め、今後、HPCI ポータルサイトから次のような情報を発信していくべきである。

- CPU、演算加速器、メモリなどの計算ノードと計算ノード同士を接続するネットワークに関する情報
- 使用可能なディスクのタイプとその容量
- 1回のジョブで使用できるリソース量
- 稼働実績のある国プロ開発アプリやオープン・ソース・ソフトウェアに関する情報
- 商用アプリケーションの導入状況やライセンス料金
- アプリケーション毎の実効効率
- アプリケーション毎の並列化効率
- 課題選定時の競争率
- 支援の状況

現在でも、HPCI のポータルサイト上からは、これらの情報が共通のフォーマットにより記載され、第二階層計算資源や稼働しているアプリケーションの情報がユーザに提供されている。また、各情報基盤センター等へのホームページにリンクが張られており、ユーザはこれらの情報を詳細に調査することが可能である。さらに、アプリケーションの実効性能などが定量的に比較できるよう形で情報提供されれば、ユーザは自分の計算に最も合致した計算資源をより容易に選択できるようになる。特に、各情報基盤センター等にインストールされているアプリケーションについて、その利用例や実効効率などに関する情報が一元的に提供されれば、第二階層計算資源を活用するユーザにとって極めて有益な情報が得られる。第二階層計算資源の過去の競争率もユーザにとっては重要な情報であり、そのような情報の開示も第二階層計算資源の効率的な活用のためには有効である。しかしながら、これらの情報は利用したデータへの依存度が高く、さらに現

状ではまとめられた形で情報が整理されていないので、関連する論文等の公開資料の集約といった形で進める検討が必要である。また、計算が高度になってくればくほど、計算科学の専門家のアドバイスが必要となってくる。したがって、ユーザにとっては、利用したい計算資源に関する支援の状況も重要な関心事であり、上記のポータルサイトから提供すべきである。

3.2 マッチング調整役のあり方

第二階層計算資源の有効活用に対しては、適切な情報発信に加えて、ユーザの課題と計算資源とのマッチングを図るための調整役の配置及び課題の研究ニーズと大学等が有している研究のシーズとのマッチングを図る研究相談の体制整備が有効である。各計算資源とユーザとの十分なマッチングを実現するために、このような調整役は HPCI の課題選定の責任を持っている HPCI 運用事務局と第二階層計算資源の運用責任を持っている大学情報基盤センター等の両方に配置し、HPCI ポータルサイト(ワンストップ窓口)上の一元的な窓口を介して、マッチングの調整依頼が可能なようにすべきである。特に、HPCI 運用事務局には全ての第二階層計算資源について広範な知識を持つ計算科学の専門家を配置すべきである。一方、各システム構成機関には当該計算資源の特徴に精通し、当該システムで稼働実績のあるアプリケーションに熟知し、高度な計算技法等に関する助言が可能な人員を配置すべきである。これらのマッチング調整役がお互いに連携して課題選定のマッチングの促進を図る体制を整備すべきである。これまでの応募課題と選定結果からは、計算資源と課題のミスマッチの例は多くないが、今後新しい計算機アーキテクチャが広がる中でマッチングの問題に対応する必要性が生じてくる。ユーザの問題解決への支援という本質的な課題に対しては、上記の専門家・調整役と連携して、次に述べるコンシェルジュ的支援が重要である。

「HPCI 産業応用推進に向けた提言」(平成 27 年 12 月 3 日:スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(産応協))によれば、「HPCI で想定される利用はもっぱら研究開発に関わる利用」であり、産業利用といえども性格的にはアカデミックユースと同質のものである。そのため、企業側が解きたい問題に対して、当該研究分野をリードするアカデミアの研究者と連携し、多様な第二階層計算資源の中で最も適切な計算資源を利用して研究開発をすることが第二階層計算資源の効率的な利用に繋がる。現在、HPCI 運用事務局が東京アクセスポイントと神戸センターで実施しているコンシェルジュ的な研究相談の窓口機能をさらに強化し、第二階層計算資源の利用を検討している企業の研究課題に対し、当該分野をリードしている研究者、および当該課題に最適な計算資源を紹介できるような支援体制を整備していくことが、特に、産業利用の促進に対しては有効である。

3.3 課題選定のあり方と改善に向けた取り組み

課題選定のあり方としては、科学の進歩や産業の発展に対する、期待される貢献度に基づく、専門家によるピアレビュー(peer review)による優先度付けが基本となるが、多様化している第二階層計算資源の特性を考えると、計算資源とユーザの課題とのマッチングを最大化するという観点も重要となっている。2017年度からは、第二階層計算資源の利用を申請している課題に対して、HPCI システム構成機関からも計算機科学の専門家が審査委員に加わる体制となっているが、このような課題審査体制の下で、第二階層計算資源の特性に熟知したシステム構成機関の専門家が審査選定の過程に積極的に加わることにより、ユーザの課題と利用する計算資源とのマッチングがさらに図られることが期待される。

現在、HPCI の利用課題終了後には、利用課題成果報告書の提出に加えて、査読付き論文の提出を求めている。また、専門家のレビューにより、特に優れた成果を上げた HPCI の利用課題を「優秀成果賞」として表彰している。このように、現在の課題選定の在り方や選定課題の事後評価に関しては妥当に行われているものと判断されるが、次期 HPCI の構築に当たっては、たとえば、これまで HPC を全く利用していなかった分野を開拓したり、HPC の利用者の裾野を拡大したりする観点も含めて、課題選定のあり方を全体的に検討していく必要がある。また、運用開始後、ある程度の年数が経過した後のフラッグシップ計算機の活用法については再検討の時期に来ていると考えられる。それに応じて HPCI の課題選定基準も見直されるべきであり、柔軟な対応が必要である。

3.4 産業利用課題に関する基本的な考え方

一般に産業界における製品開発は主として、研究開発フェーズと設計製造フェーズにより行われる。HPC を利用した製品開発に関しては、研究開発フェーズにおいては、たとえば、高速鉄道車両のまわりの空気の流れから騒音が発生する原理的なメカニズムを解明したり、半導体製造プロセスにおいて格子欠陥が発生する条件を割り出したりするための基礎研究や、将来的な実用化が期待される、HPC やビッグデータ解析を利用した設計最適化技術の有効性を検証したりするための実証研究などが行われる。これらの研究成果は学術の進歩や産業技術の発展に幅広い貢献が期待できるものであり、アカデミックユースと同様に成果公開の原則の下、無償で HPCI を利用することが認められている。一方、設計製造フェーズにおいては、前記の基礎研究で解明した知見を利用したり、あるいは、有効性が実証された最適設計手法を利用したりした上で、実際に種々の設計パラメータを決定するために、多数の計算を実行する、いわゆる、プロダクション・ランが実施される。プロダクション・ランは各企業が保有するスパコンや民間のクラウドサーバなどを利用して実施すべきものである、ということが HPCI の産業利用に関する基本的な考え方である。また、研究開発フェーズが完了し、実際の設計製造フェーズに移行

する過程において、当該アプリケーションの信頼性や強靱性などを確認したり、自社のシステムと連携させたりすることも必要になる。

ただし、HPCの普及が必ずしも十分には進んでいない状況から、HPCの産業利用を促進するために、成果を公開しない有償利用も認めており、その中におけるプロダクション・ランも排除していない。少なくとも当面の間は、HPCの産業利用を促進する観点から、このような産業利用の形態を継続すべきである。

ものづくり分野に関連した方法論やプログラミングなどに関する研究成果は、新製品の創出や既存製品の性能向上・高機能化に結びついて始めて真の意味で結実する。したがって、成果非公開の有償利用により、そのことを確認することは、高度なシミュレーションの普及を介して、学術の発展のために必要なことと考えられる。

4. 第二階層計算資源の活用のためのユーザ支援

第二階層計算資源は多様化しており、かつ、個々の計算機の性能を最大限に発揮するためには、計算機科学に関する高度な知識が必要な状況となっている。たとえば、CPU内の多数のコアを同時に並列実行させたり、各コアに実装されているSIMD演算器を有効に活用したり、あるいは、演算器とメモリ、キャッシュ等との間で高速かつ効率的なデータ転送が行われるようにプログラミングしなければ、現在のスパコンは十分高い性能を出すことができない。第二階層計算資源を最大限に活用するためには、このような最適化チューニングを支援したり、ユーザ登録・ネットワーク利用・ストレージ利用を支援したりするための要員の配置も重要である。資料3(p.27)に示すように、HPCIに資源を提供している機関では、ユーザから寄せられた支援に対するさまざまな要望を踏まえ、今後新たなサービスを拡大していく意向である。2016年6月8日に文部科学省研究振興局長に手交された、一般社団法人HPCIコンソーシアムからの提言書である、「今後のHPCIシステムの整備・運用のあり方に関する提言」には、必要な国費投入の下、各大学情報基盤センター等のスタッフの活用の必要性が明記されている。本章では、支援人材の育成、活用という観点も含めて、ユーザ支援のための具体的な方策に関して言及する。

4.1 多様な第二階層計算資源におけるユーザ支援のあり方

ユーザ支援要員は、マッチング調整役と同様、HPCIの課題選定の責任を持っているHPCI運用事務局と第二階層計算資源の運用責任を持っている大学情報基盤センター等の両方に配置し、HPCIポータルサイト(ワンストップ窓口)から一元的に支援の申し込みができるようにすべきである。HPCI運用事務局に配置する支援要員は、ユーザの課題で利用するアプリケーションの最適化を支援するとともに、ユーザ登録(シングルサイ

ンオン)やネットワーク(SINET)・共用ストレージの利用など、HPCI として共通の部分に関して支援すべきである。一方、大学情報基盤センター等の第二階層計算資源に熟知した専門家を HPCI のシステム構成機関に配置し、当該センターでプログラムを最適に動かすためのチューニングを支援すべきである。ただし、その配置にあたっては効率的なノウハウ共有・支援が実施できるように、情報を互いに交換できる体制も並行して検討すべきである。

HPCIの利用は科学の進歩や産業の発展に広く貢献することを前提に、基本的に無償としており、上記のユーザ支援に関しても無償の枠組みの中で実施すべきである。現状、HPCI 運用事務局では、第二階層計算資源のユーザ(「京」以外の HPCI 利用課題のユーザ)に対して、1 件当たり延べ 4 人月程度の人件費を掛けて、1 年間に 6 件程度の支援を実施しており、このような支援の結果、たとえば、アプリケーションの最適化チューニングにより計算性能が 2.4 倍になった結果、割当資源量の 90 万ノード・時間が実質 217 万ノード・時間に拡大する等、計算資源の有効活用となる成果が得られている。前述のように、第二階層計算資源が多様化していることに加えて、最新の CPU や GPGPU はプログラムの最適化が困難になっているため、第二階層計算資源のより多くのユーザに対して支援が必要となることが予想される。たとえば、第二階層計算資源の全利用課題(平成 28 年度の実績数は 69 課題)の 3 分の 1 の課題に対して前記と同等な支援が必要となった場合、支援に要する人件費コストは一年間に 100 人月となり、限られた予算の中で、希望するユーザ全てに対して支援を実施することが不可能になることが予想される。このため、支援に対する優先順位付けを検討しておく必要がある。また、支援料を払っても支援を受けたいユーザが出てくる可能性も高い。したがって、ユーザ支援に対しては有償支援サービスも含めて、その在り方の具体策を検討しておく必要がある。

上記のような、支援の在り方や支援員の適切な配置に加えて、支援員の育成や支援員のキャリアパスの検討も、今後の HPCI の発展のためには重要な課題である。特に、ポスドク等がユーザ支援の業務を担当する場合も多いと思われるが、このような場合、支援員の将来的なキャリアパスが必ずしも保証されていないという問題がある。また、計算科学や計算機科学は日進月歩で進歩しているために、このような進歩に伴い支援要員自身がスキルアップしていけるような体制を構築する必要がある。京都大学の情報環境機構や、HPC 分野ではないが、大阪大学の情報推進本部などでは、研究職とは別の専門職としてのキャリアパスを用意しているところもある。このような先駆的な事例も参考にしながら、システム構成機関、HPCI 運用事務局、および、スパコンのメーカー・ベンダの間で支援員の人事交流を促進するような制度を検討していくべきである。このような制度の導入により、支援員のキャリアパスに対する将来的な不安を解消することができ、同時に、さまざまな計算機システムに精通していくことにより、HPC 分野を全体的に俯瞰で

きるような支援員の育成が期待される。

5. 将来の HPCI の持続的な発展を目指して

「将来のスーパーコンピューティングのあり方についての提言－最終報告－」(平成 26 年 1 月 28 日:一般社団法人 HPCI コンソーシアム)において、第二階層計算資源の構成システムのひとつとして「将来の計算科学技術の振興につながるチャレンジングなシステム」が位置づけられている。

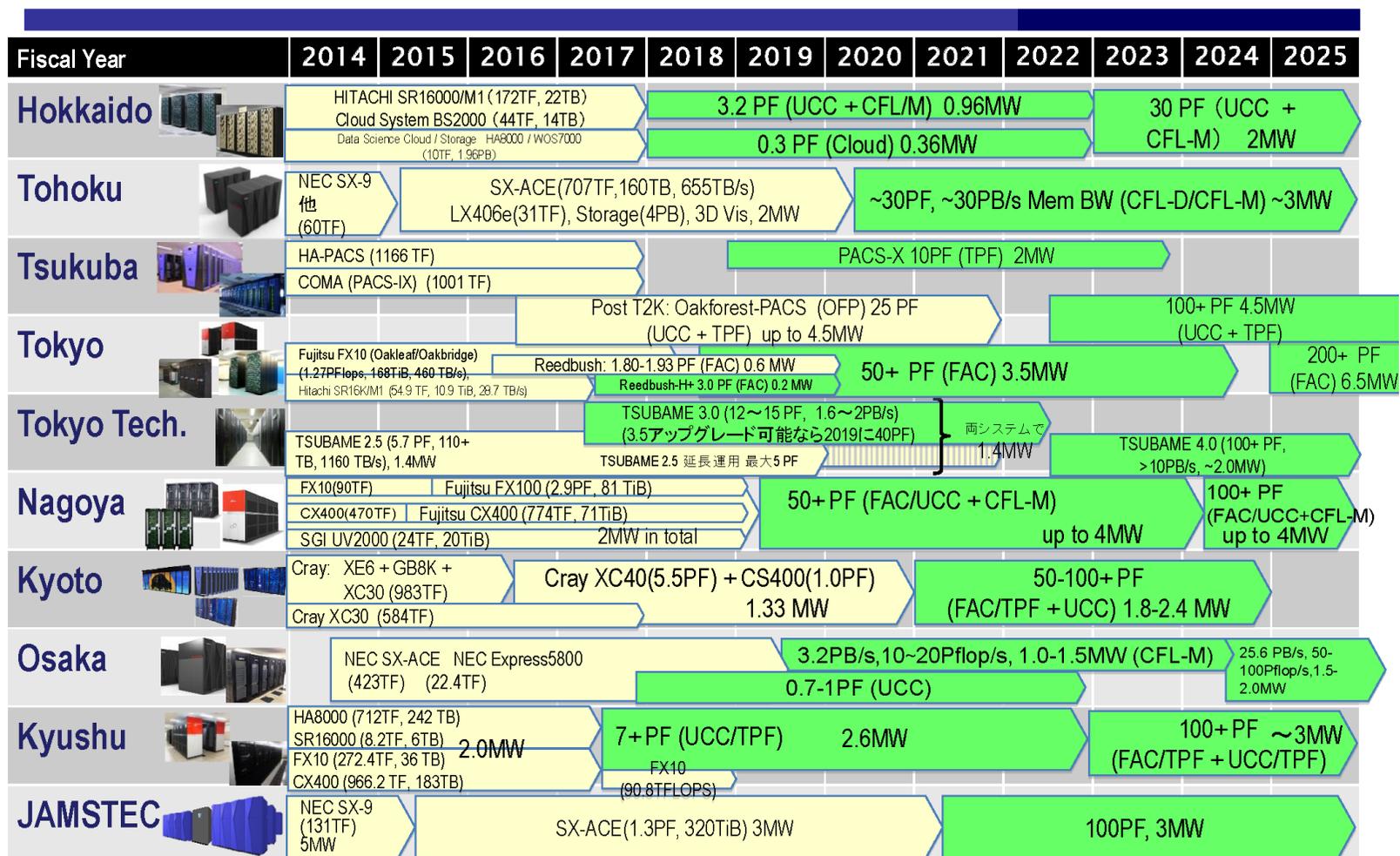
スパコンに用いられる CPU やメモリの駆動周波数の向上は既に限界に達しており、2005 年以降、スパコンの性能向上はもっぱら半導体プロセスの微細化とそれに伴う CPU やメモリアーキテクチャの高度化および演算コア数の増大により実現されている。2017 年現在、半導体プロセスの微細化による CPU の性能向上にも限界が見え始めており、従来の延長線上にはない、革新的なアーキテクチャの採用による CPU やスパコンの性能向上に対する期待が高まっている。

ただし、革新的なアーキテクチャのスパコン上で性能を発揮できるアプリケーション・ソフトウェアを開発するためには、アプリケーションの基礎となっている計算アルゴリズムの抜本的な見直しや CPU とメモリ等との間のデータ転送のスケジューラであるコンパイラ等の飛躍的な高度化も必要であり、単に、ハードウェアの開発だけでは HPCI の持続的な発展は期待できない。そこで、将来の HPCI の持続的な発展を可能にするための検討を早期に開始すべきであり、前記のチャレンジングなシステムの研究開発と合わせて、その具現化に向けた取り組みを開始することが望まれる。

以 上

関連資料

HPCI第2階層システム 運用 & 整備計画 (2016年9月時点)



2016/10/17

資料1 大学情報基盤センター等のスパコンの整備計画

電力は最大供給量(空調システム含む)

HPCIで良く利用されているアプリケーション・ソフトウェアの情報

順位	アプリ名	利用・申請課題			分野	計算手法・対象	言語	並列実装	性能情報 (最大並列数の実績)	プロセッサ種別						開発種別、 ライセンス等	開発元、その他
		合計	学術	産業						SPARC	Xeon	Xeon Phi (KNC)	GPGPU	SX	Power		
1	GROMACS	27	24	3	バイオ/物質・材料	古典MD (主に生体分子)	C/C++	MPI, OpenMP, GPU対応版あり (CUDA)	京130,720ノード 演算効率0.6% 実数は、1ノード〜12ノード種別の18種の多数コア実行が最大	○	○					OSS (LGPL v2.1)	Science For Life Laboratory, Stockholm University (Head authors & project leaders)
2	OpenFOAM	17	4	13	CAE/気象・防災	流体解析 (定常/非定常/圧縮/非圧縮)	C++	MPI	京198,304 MPI並列, 1000磁格子	○	○					OSS (GPL)	OpenCFD Ltd (ESI Group) 商用版の Helix-core を含めてカウント
3	MODYLAS	16	14	2	バイオ/物質・材料	古典MD (主に生体分子)	Fortran77/90	MPI, OpenMP	京165,536ノード 演算効率40% チャンピオンデータとしてこのデータが複数の課題で引用されている	○	○					国プロ	名古屋大学 (分子研⇒名大、NAREGI⇒Grand Challenge⇒「京」⇒ボスト「京」)
4	FrontFlow/blue (FFB)	13	4	9	CAE/気象・防災	流体解析 (非定常非圧縮)、有限要素法、乱流モデル (LES, DES, RANS)、ターボ機械本等流れ 空力解析 他	Fortran90	MPI, OpenMP	京138,000ノード 実効効率 3%	○	○					国プロ (CLASS7 リソースウェア)	重点課題8、東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター (CISS)
5	GENESIS	10	10	0	バイオ/物質・材料	古典MD (主に生体分子)	Fortran/C++	MPI, OpenMP, GPU対応版あり (CUDA)	16,384ノード (京)	○						国プロ (GPL v2)	重点課題1、理研AICS
5	FrontFlow/red (FFR)	10	4	6	CAE/気象・防災	流体解析 (定常/非定常/非圧縮性/圧縮性/対流/熱伝導/燃焼/化学反応)、有限体積法、乱流モデル (LES, RANS, k-εモデル)	Fortran90	MPI, OpenMP	2,048ノード (京)	○	○			○		国プロ (非営利 目的の使用にのみ無償)	北海道大学工学院 工学研究院 機械守工工学専攻 計算流体工学研究室 代表: 大島祥行 他に、商用のアドバンスソフト版と数値フローデザイン版がある。
7	LAMMPS	10	4	6	物質・材料	古典MD	C++	MPI, OpenMP, GPU対応版あり	8,192ノード (京)	○	○	○	○			OSS (GPL)	Sanjia National Labs and Temple University (Core Group)
8	Quantum ESPRESSO (PWscf)	9	6	3	物質・材料	第一原理MD (DFT, 平面波基底)	C/Fortran-90,95,2003	MPI, OpenMP	256コア (TSUBAME2.5)	○	○		○			OSS (GPL v2)	QE Foundation
8	NTChem	9	9	0	物質・材料	DFT、電子状態計算、高在基底	不明	MPI, OpenMP		○						国プロ	重点課題5、理研AICS (開発代表者: 中島輝人) 「京」、分子研RCCS、FOCUS2/3に向けた実行形式を公開、利用するには開発代表者への連絡が必要
8	SCALE	9	9	0	気象・防災	気象・気候数値計算ソフトウェア (領域モデルと全球モデルがあるが、全球は力学上のみ)	不明	MPI	65,536ノード (京)	○	○		○			国プロ (BSD-2)	理研AICS
11	LANS3D	8	7	1	CAE	流体解析 (圧縮)、構造格子	Fortran77	MPI, 自動並列	24,576ノード (京)	○	○				○	独自開発	JAXA
11	NICAM	8	8	0	気象・防災	全球気象非静力学モデル (正20面体格子)	Fortran90	MPI, 自動並列	20,480ノード (京)	○	○		○	○		国プロ	重点課題4、JAMSTEC、東大、他
11	LS-DYNA	8	3	5	CAE	衝突解析	Fortran	MPI	12,288コア (京)	○	○		○	○		商用	Livermore Software Technology Corporation (米)
14	VASP	7	7	0	物質・材料	第一原理MD (DFT)	Fortran90	MPI, OpenMP	800ノード (京)	○	○		○	○		商用	・Doris Vogtenhuber (University of Vienna) 重点課題4 (NICAMと組み合わせて使用) ・Eric Kostelich (Arizona State University) ・Weather Chaos team (University of Maryland)
14	LETKF	7	7	0	気象・防災	Local Ensemble Transform Kalman Filter; 局所アンサンブル変換カルマンフィルタ、データ同化	Fortran90	MPI		○	○					OSS (BSD-3)	
16	GAMFERA	5	5	0	気象・防災	地震揺動解析 (FEM)	不明	MPI, OpenMP	663,552コア (京)	○	○					国プロ	重点課題3、東大
16	AMBER	5	4	1	バイオ	古典MD (主に生体分子)	Fortran90/C	MPI, GPU対応版あり	36コア (TSUBAME2.5)	○	○		○	○		商用	AMBER Software Admin. (University of California)
18	CReSS	4	4	0	気象・防災	霧解像非静力学気象モデル	Fortran90	MPI, OpenMP	8,192ノード (京)	○	○					国プロ	1997年の科学技術振興調整による研究の一環として理木和久 (名古屋大学教授) が中心となって開発。
18	NHM	4	4	0	気象・防災	気象非静力学モデル	Fortran90	MPI, 自動並列	4,608ノード (京)	○	○					独自開発	気象庁
20	myPresto	2	2	0	バイオ	古典MD (医薬品開発) Medicinally Yielding Protein Engineering SimulaTOr	不明	MPI, GPU対応版あり		○	○		○	○		国プロ	大阪大学 蛋白質研究所 附属蛋白質解析先端研究センター 蛋白質情報科学研究室 2000年以降、経済産業省、NEDOなどの支援を受けて、大阪大学、横浜国立大学、バイオ産業情報化コンソーシアム、産業技術総合研究所などが開発を始め、2003年、公開開始。 2015年以降、国立研究開発法人日本医療研究開発機構などの支援を受けて開発している。

アプリ分類: アプリ開発種別; OSS (青)、国プロ (緑)、商用 (赤)、独自開発 (黒)、重点課題ターゲットアプリ (italic+下線)
 利用課題数は、H27年度の利用報告書 (H28年11月10日時点提出分) とH28年度の課題申請書 (不採択課題含む) で対象アプリの記述があったものをカウント。
 学術/産業の分類は、産業利用課題は産業、それ以外の課題 (一般、若手、戦略、重点) は学術でカウント。
 並列実装は、プログラム情報の実測情報等でチェックされたものを記入。別途、ユーザーマニュアル等でGPU等に対応している場合はその旨を追記。
 プロセッサ種別の○は、利用報告書において、対象のマシンで対象のアプリを実行したと記述のある場合、または課題申請書のプログラム情報で実測情報が記入されていることを示す。

資料2-1 HPCIで良く利用されているアプリケーション・ソフトウェア

国のプロジェクトで開発されたソフトウェアの状況 (HPCI)

重点課題/戦略分野	ソフトウェア名	ソフトウェア分野	稼働する基盤センター名	資源名	利用条件
重点課題(1)	GENESIS	バイオ	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		バイオ	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
		バイオ	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンスパコン「TSUBAME2.5」	
戦略分野1	SCUBA	バイオ	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	可、ただし量研機構との覚書が必要
	CafeMol	バイオ	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
重点課題(2)	SGN-BN Para-OS	バイオ	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	Genomom2	バイオ	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	Virtual Grid Engine	バイオ	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
戦略分野1	神経・筋・骨格シミュレータ	バイオ	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	Genomom fusion for K computer	バイオ	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	EEM	バイオ	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	SGN-BN HC-Boostrap	バイオ	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	SGN-BN NNSR	バイオ	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	BENIGN	バイオ	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
重点課題(4)	NHM-LETKF	気象	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	産業利用は不可
	SGN-BN	気象	東北大学 サイバーサイエンスセンター	スーパーコンピュータシステムSX-ACE	産業利用は不可
	NHM-BIN	気象	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	産業利用は不可
	NHM-EnVAR	気象	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	産業利用は不可
	SCALE-LETKF	気象	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	産業利用は不可
	CUBE	気象	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	Frontflow/Red	気象	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンスパコン「TSUBAME2.5」	
		気象	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	NICAM	気象	海洋研究開発機構 地球情報基盤センター	地球シミュレータ	
		気象	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
		気象	最先端共同HPC基盤施設 (JCAHPC)	Oakforest-PACS	
	COCO	気象	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	NICAM-COCO	気象	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	NICAM-Chem	気象	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	NICAM-TM	気象	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	NICAM-LETKF	気象	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	MIRCO-LETKF	気象	海洋研究開発機構 地球情報基盤センター	地球シミュレータ	
	CRess	気象	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		気象	海洋研究開発機構 地球情報基盤センター	地球シミュレータ	
	CRess-NHOSE	気象	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		気象	海洋研究開発機構 地球情報基盤センター	地球シミュレータ	
	CRess-LETKF	気象	京大 学術情報メディアセンター	スーパーコンピュータ Gray XC30 (システムD)	産業利用は不可
	KNHM	気象	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	GRRR-FI	気象	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	NDA AORI LES/DNS	気象	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
	JMANHM-LES	気象	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	HD2D(Hydro-Debris2D)	気象	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	産業利用は不可
	HD2D(Hydro-Debris2D Horizontal version)	気象	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	産業利用は不可
	HD3D (Hydro-Debris3D)	気象	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	産業利用は不可
	重点課題(5)	NTChem	物質、材料、バイオ	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」
		物質、材料、バイオ	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンスパコン「TSUBAME2.5」	
		物質、材料、バイオ	九州大学 情報基盤研究開発センター	スーパーコンピュータFujitsu PRIMEHPC FX10	
GELLAN		物質、材料	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	ライセンス契約締結の上、ソース提供 ※重点課題5基盤アプリ
		物質、材料	名古屋大学 情報基盤センター	FX100	
MODYLAS		物質、材料、バイオ	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	MODYLASのライセンスに従う。論文の引用 ※重点課題5基盤アプリ
		物質、材料、バイオ	名古屋大学 情報基盤センター	FX100	
		物質、材料、バイオ	名古屋大学 情報基盤センター	CX400	
		物質、材料、バイオ	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
		物質、材料、バイオ	最先端共同HPC基盤施設 (JCAHPC)	Oakforest-PACS	
stat-CFMD	物質、材料	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	ベースのCFMDは、CFMDライセンスにより非営利団体へは無料配布。営利団体は、メールでの確認が必要。 ※重点課題5基盤アプリ	
	物質、材料	名古屋大学 情報基盤センター	FX100		
STATE	物質、材料	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	開発者との協議による。(通常、一般研究者には無償利用を許可)	
	物質、材料	名古屋大学 情報基盤センター	FX100		
RedMoon(混合MC/MD反応法)	物質、材料	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	開発者との協議により個別にバイナリを提供。 ※科学研究費補助金、JST-CREST分子技術、などにより開発。	
GRRM	物質、材料	東北大学 サイバーサイエンスセンター	並列コンピュータシステムLX 406Re-2	GRRMが導入されている計算機センターのユーザとして利用、または個別にバイナリ提供。 ※科学研究費補助金、京大大学白鳥プロジェクト、JST-CREST分子技術、などにより開発。	
DC-DFTB-K	物質、材料	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	使用には事前相談が必要。放異物に対する共着を条件として、バイナリを無料配布。その他は、ライセンス契約締結の上、バイナリを提供。	
SMASH	物質、材料	名古屋大学 情報基盤センター	FX100	ライセンス: Apache License 2.0 (オープンソース)	
	物質、材料	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」		

資料2-2 HPCIに整備されているアプリケーション一覧
国プロ開発アプリ (1)

国のプロジェクトで開発されたソフトウェアの状況 (HPCI)

重点課題/戦略分野	ソフトウェア名	ソフトウェア分野	稼働する基盤センター名	資源名	利用条件
重点課題(6)	FrontFlowRed(FFR)	液体・燃焼	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		液体・燃焼	京都大学 学術情報メディアセンター	スーパーコンピュータCray XE6 (システムA)	
		液体・燃焼	九州大学 情報基盤研究開発センター	スーパーコンピュータFujitsu PRIMEHPC FX10	
	GKV	核融合	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		核融合	名古屋大学 情報基盤センター	FX100	
	GT5D	核融合	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ FX10	
		核融合	名古屋大学 情報基盤センター	FX100	
	MEGA	核融合	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	共同研究に基づく利用
		核融合	最先端共同HPC基盤施設(JCAHPC)	Oakforest-PACS	
	PHASE/0	核融合	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	独自ライセンスの元、フリー
		物質	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	動作確認(ユーザによるインストール)
		物質	海洋研究開発機構 地球情報基盤センター	地球シミュレータ	動作確認(ユーザによるインストール)
	ADVENTURE_Solid	固体	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	独自ライセンスの元、オープンソース
		固体	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	独自ライセンスの元、オープンソース
固体		名古屋大学 情報基盤センター	FX100	独自ライセンスの元、オープンソース	
REVOCAP_Coupler	達成	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	独自ライセンスの元、オープンソース	
ADVENTURE_Thermal	熱	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」		
	熱	名古屋大学 情報基盤センター	FX100		
ABINIT-MP	材料・バイオ	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」		
	材料・バイオ	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンパコン「TSUBAME2.5」		
PBVR	材料・バイオ	最先端共同HPC基盤施設(JCAHPC) 導入中	Oakforest-PACS		
	可視化	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」		
重点課題(7) 戦略分野2	ALPS/Loope	物質・材料	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	ALPS Licence
		物質・材料	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	RSDFT	物質・材料	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	#VALUE!
		物質・材料	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	Apache License V2.0
	OpenMX	物質・材料	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	GNU-GPL
		物質・材料	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	GNU General Public License (GPL) Version 3
	DSQSS	物質・材料	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	License Agreement and Registration Required
		物質・材料	東京大学 情報基盤センター		
	TOMBO	物質・材料	北海道大学 情報基盤センター		
		物質・材料	大阪大学 サイバーメディアセンター		
Emod	バイオ・物質・材料	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	開発者との合意に基づくものと しています。	
	バイオ・物質・材料	東北大学 サイバーサイエンスセンター	並列コンピュータシステムX 406Re-2		
	バイオ・物質・材料	筑波大学 計算科学研究センター	COMA(PACS-IX)		
	バイオ・物質・材料	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10		
	バイオ・物質・材料	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンパコン「TSUBAME2.5」		
	バイオ・物質・材料	名古屋大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータCray XE6 (システムA)		
戦略分野2	FMO in Qames	バイオ・物質・材料	京都大学 学術情報メディアセンター	スーパーコンピュータ Cray XC30 (システムD)	
		バイオ・物質・材料	統計数理研究所 統計科学技術センター		QAMESSのライセンス(フリーだが登録は必要)
重点課題(8)	FrontSTR	CAE	東京大学 情報基盤センター	Reedbush-U	
		CAE	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	FFV-C	CAE	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		CAE	九州大学 情報基盤研究開発センター	スーパーコンピュータFujitsu PRIMEHPC FX10	
		CAE	九州大学 情報基盤研究開発センター	高性能演算サーバPRIMERGY CX400	
		CAE	東京大学 情報基盤センター	次期システムA	
	CUBE(富士通コンパイル)	CAE	名古屋大学 情報基盤センター	FX100	
		CAE	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
	CUBE(intel fortran)	CAE	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		CAE	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
戦略分野4	FrontFlow/red-HPC(日立最速化Fortran)	CAE	東京大学 情報基盤センター	Reedbush-U	
		CAE	東京大学 情報基盤センター	Reedbush-U	
	FrontFlow/red-HPC(富士通コンパイル)	CAE	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		CAE	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
	FrontFlow/red-HPC(MPI/SX)	CAE	名古屋大学 情報基盤センター	FX100	
		CAE	名古屋大学 情報基盤センター	CX400	
	FrontFlow/red-HPC(gfortran)	CAE	海洋研究開発機構 地球情報基盤センター	地球シミュレータ	
		CAE	東京大学 情報基盤センター	Reedbush-U	
	FrontFlow/blue	CAE	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		CAE	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
FrontFlow/blue	CAE	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」		
	CAE	名古屋大学 情報基盤センター	FX100		

資料2-2 HPCIに整備されているアプリケーション一覧
国プロ開発アプリ(2)

国のプロジェクトで開発されたソフトウェアの状況 (HPCI)

重点課題/戦略分野	ソフトウェア名	ソフトウェア分野	稼働する基盤センター名	資源名	利用条件
重点課題 (9)	QCDコード irairo++	素粒子	筑波大学 計算科学研究センター	COMA(PACS-I)	
	行列複製コード	素粒子	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	超対称ゲージ理論シミュレーションコード	素粒子	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	DDHMC/Modified Block BCGStab	素粒子	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		素粒子	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
	Hadron-Force Code	素粒子	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		素粒子	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
	アプリ原子核	原子核	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		原子核	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
	アプリ宇宙	宇宙	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		宇宙	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
	アプリnbody	宇宙	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	アプリvlasov	宇宙	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	アプリ3nhd	宇宙	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		宇宙	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
アプリplasma	宇宙	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」		
戦略分野5	DDHMC/Modified Block BCGStab	素粒子	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		素粒子	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
	Hadron-Force Code	素粒子	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		素粒子	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
	mcsm	素粒子	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		素粒子	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
	KSHLL	原子核	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		原子核	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
	空間3次元運動量空間1次元超新星爆発用輻射流体コード	宇宙	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		宇宙	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
	適合多層格子法数値相対論磁気流体コード	宇宙	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		宇宙	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
	適合多層格子法数値相対論輻射流体コード	宇宙	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		宇宙	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
	超新星爆発用ボルツマン流体コード	宇宙	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		宇宙	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
	GreenM	宇宙	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
		宇宙	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	START	宇宙	筑波大学 計算科学研究センター	COMA(PACS-I)	
		宇宙	京都大学 学術情報メディアセンター	スーパーコンピュータ Gray XC30 (システムD)	
	AMaTeRAS	宇宙	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	R3MHD	宇宙	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	Kinija	高エネルギー物理学	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
Bridges++	宇宙	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」		
CAHS+	宇宙	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」		
pCAHS	宇宙	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」		

資料2-2 HPCIに整備されているアプリケーション一覧
国プロ開発アプリ (3)

(参考) 国のプロジェクトで開発されたソフトウェアの状況 (HPCI以外)

重点課題/戦略分野	ソフトウェア名	ソフトウェア分野	HPCI以外で稼働している実題名	利用条件
重点課題(1)	GENESIS	バイオ	WS(Xeon)など	
	SCU6A	バイオ	原子力機構(CX, WS(Xeon))	
戦略分野1	CafeMol	バイオ	汎用的なPCクラスター	可、ただし量研機構との覚書が必要
重点課題(2)	SiGN-BN Para-OS	バイオ	Shirokane3(東大医科研), FX100(AICS)	
	Genomon2	バイオ	Shirokane3(東大医科研), FX100(AICS)	
	Virtual Grid Engine	バイオ	Shirokane3(東大医科研), FX100(AICS)	
戦略分野1	Genomon fusion for K computer	バイオ	Shirokane3(東大医科研), FX100(AICS)	
	EEM	バイオ	Shirokane3(東大医科研)	
	SiGN-BN HC+Bootstrap	バイオ	Shirokane3(東大医科研), FX100(AICS)	
	SiGN-BN NNSR	バイオ	Shirokane3(東大医科研), FX100(AICS)	
重点課題(4)	NHM-LETKF	気象	FX100(気象庁気象研究所), WSなど	産業利用は不可
	NHM-BN	気象	FX100(気象庁気象研究所), WSなど	産業利用は不可
	NHM-EiVAR	気象	FX100(気象庁気象研究所), WSなど	産業利用は不可
	NHM-4DVAR	気象	FX100(気象庁気象研究所)	産業利用は不可
	NHM-Chem-LETKF	気象	FX100(気象庁気象研究所)	
	SCALE-LETKF	気象	WSなど	
	CUBE	気象	WSなど	
	Frontflow/Red	気象	WSなど	
	NICAM	気象	WSなど	
	NICAM-LETKF	気象	WSなど	
	MRP-CCM2	気象	FX100(気象庁気象研究所)	産業利用は不可
	CRSS-LETKF	気象	WS(Xeon)など	産業利用は不可
	HD2DH(Hydro-Debris2D)	気象	WS(Xeon)など	産業利用は不可
	HD2DH(Hydro-Debris2D Horizontal version)	気象	WS(Xeon)など	産業利用は不可
	HD3D(Hydro-Debris3D)	気象	WS(Xeon)など	産業利用は不可
	重点課題(5)	NTChem	物質、材料、バイオ	自然科学研究機構 計算科学研究センター FOCUS、PCクラスター(Xeon)など
GELLAN		物質、材料	PCクラスター(Xeon), Maoなど	ライセンス契約締結の上、ソース提供 ※重点課題5基盤アプリ
MODYLAS		物質、材料、バイオ	自然科学研究機構 計算科学研究センター 東京大学物性研究所スーパーコンピュータセンター、FOCUS、PCクラスター(Xeon)など	MODYLASのライセンスに従う。論文の引用。 ※重点課題5基盤アプリ
stat-CPMD		物質、材料	PCクラスター(Xeon)など	ライセンス契約締結の上、ソース提供 ※重点課題5基盤アプリ
STATE		物質、材料	自然科学研究機構 計算科学研究センター 東京大学物性研究所システムB+C PCクラスター(Xeon)など	開発者との協議による。(通常、一般研究者には無償利用を許可)
RedMoon(混合MC/MD反応法)		物質、材料	自然科学研究機構 計算科学研究センター PCクラスター(Xeon)など	開発者との協議により個別にバイナリーを提供。 ※科学研究費補助金、JST-CREST分子技術、などにより開発。
GRRM		物質、材料	自然科学研究機構 計算科学研究センター PCクラスター(Xeon)など	GRRMが導入されている計算機センターのユーザとして利用、または個別にバイナリー提供。 ※科学研究費補助金、京都大学白眉プロジェクト、JST-CREST分子技術、などにより開発。
DC-DFTB-K		物質、材料	自然科学研究機構 計算科学研究センター PCクラスター(Xeon)など	使用には事前相談が必要。成果物に対する共有を条件として、バイナリーを無料配布。その他は、ライセンス契約締結の上、バイナリーを提供。
SMASH		物質、材料	自然科学研究機構 計算科学研究センター PCクラスター(Xeon)など	ライセンス: Apache License 2.0(オープンソース)
重点課題(6)	GKV	核融合	核融合科学研究所プラズマシミュレータ(FX100) 日本原子力研究開発機構SGI ICE X	
	GT5D	核融合	核融合科学研究所プラズマシミュレータ(FX100) ENEA/CINECA(イタリア) Marsomi(Xeon)	共同研究に基づく利用
	MEGA	核融合	核融合科学研究所プラズマシミュレータ(FX100)	
戦略分野4	ABINIT-MP	材料・バイオ	WS(Xeon)など	
	GKV	核融合	国立核融合研究所(韓国)クラスター(Xeon)	
	PBVR	可視化	日本原子力研究開発機構SGI ICE X PC(Win/Mac/Linux)	
重点課題(7)	HPhi	物質・材料	東大物性研スバコン・東北大金研スバコン・Intel系システムなど	GNU General Public License version 3 (GPL v3)
重点課題(7)/戦略分野2	ALPS/Loope	物質・材料	東大物性研スバコン・Intel系システムなど	ALPS License
	RSDFE	物質・材料	東大物性研スバコン・東北大金研スバコン・Intel系システムなど	Apache License V2.0
	OpenMX	物質・材料	東大物性研スバコン・東北大金研スバコン・Intel系システムなど	GNU-GPL
	Feram	物質・材料	東北大金研スバコン・Intel系システムなど	GPL v3
	xTAPP	物質・材料	東大物性研スバコン・Intel系システムなど	GPL version 3
	DSQS	物質・材料	東大物性研スバコン・Intel系システムなど	GNU General Public License (GPL) Version 3
	nVMC	物質・材料	東大物性研スバコン・Intel系システムなど	GNU General Public License version 3
	TOMBO	物質・材料	東北大金研スバコン・Intel系システムなど	License Agreement and Registration Required
	Ermod	物質・材料	分子研、Intel系システムなど	開発者との合意に基づいています。
	MaterialApp LIVE	物質科学パッケージ	東大物性研スバコン・Intel系システムなど	インストールアプリ依存
戦略分野2	FMO in Gamess	バイオ・物質・材料	東大物性研・分子研、Intel系システムなど	GAMESSのライセンス(フリーだが登録が必要)
重点課題(8)	FrontISTR	CAE	FX10, WS(Xeon), PC	
戦略分野4	Cheetah	設計最適化	JAXAスバコンJS2, WS(Xeon)など	

参考資料 HPCI以外に整備されているアプリケーション一覧
国プロ開発アプリ (1)

(参考) 国のプロジェクトで開発されたソフトウェアの状況 (HPCI以外)

重点課題/戦略分野	ソフトウェア名	ソフトウェア分野	HPCI以外で稼働している装置名	利用条件
重点課題(9)	QCDコード <i>linalg++</i>	素粒子	KEK, 京大XC40	
	DDHMC/Modified Block	素粒子	国立天文台XC30、基研XC40、理研仁科北斎、KEKスバコン	
	BiCGStab	素粒子	国立天文台XC30、基研XC40、理研仁科北斎、KEKスバコン	
	Hadron-Force Code	素粒子	国立天文台XC30、基研XC40、理研仁科北斎、KEKスバコン	
	アプリ原子核	原子核	国立天文台XC30、基研XC40、理研仁科北斎、KEKスバコン	
	アプリ宇宙	宇宙	国立天文台XC30、基研XC40、理研仁科北斎、KEKスバコン	
	Bridge++	素粒子	KEKスバコン	
	アプリnbody	宇宙	XC30(国立天文台、Xeon), SRI 6000(千葉大学)	
	アプリr3mhd	宇宙	Cray XC30, 国立天文台OfCA	
戦略分野5	DDHMC/Modified Block	素粒子	基研XC40、理研仁科北斎、KEKスバコン	
	BiCGStab	素粒子	基研XC40、理研仁科北斎、KEKスバコン	
	Hadron-Force Code	素粒子	基研XC40、理研仁科北斎、KEKスバコン	
	imcsm	原子核	基研XC40、理研仁科北斎、KEKスバコン	
	KSHLL	原子核	基研XC40、理研仁科北斎、KEKスバコン	
	空間3次元運動量空間1次元 超新星爆発用輻射流体コード	宇宙	基研XC40、理研仁科北斎、KEKスバコン	
	適合多層格子法数値相対論 磁気流体コード	宇宙	基研XC40、理研仁科北斎、KEKスバコン	
	適合多層格子法数値相対論 輻射流体コード	宇宙	基研XC40、理研仁科北斎、KEKスバコン	
	超新星爆発用非ニュートン流体	宇宙	基研XC40、理研仁科北斎、KEKスバコン	
	GrseM	宇宙	XC30(国立天文台、Xeon), SRI 6000(千葉大学)	
	START	宇宙	WS(Xeon)	
	AMaTeRAS	宇宙	XC30(国立天文台), Yellowstone(NCAR, USA)	
	R3MHD	宇宙	XC30(国立天文台)	

参考資料 HPCI以外に整備されているアプリケーション一覧
国プロ開発アプリ (2)

オープンソースソフトウェアの整備状況

ソフトウェア名	稼働する基盤センター名	資源名	利用条件
ABINIT-MP	東京大学 情報基盤センター	Reedbush-U	
	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
	京都大学 学術情報メディアセンター	スーパーコンピュータCray XC40 (新システム)	産業利用の可否はソフトウェアの配布条件による
AkaIKKR	最先端共同HPC基盤施設(JCAHPC)	Oakforest-PACS	
	東京大学 情報基盤センター	Reedbush-U	
ALPS	最先端共同HPC基盤施設(JCAHPC)	Oakforest-PACS	
	東京大学 情報基盤センター	Reedbush-U	
BioPerl	最先端共同HPC基盤施設(JCAHPC)	Oakforest-PACS	
	東京大学 情報基盤センター	Reedbush-U	
BioRuby	最先端共同HPC基盤施設(JCAHPC)	Oakforest-PACS	
	東京大学 情報基盤センター	Reedbush-U	
BLAST	最先端共同HPC基盤施設(JCAHPC)	Oakforest-PACS	
	東京大学 情報基盤センター	Reedbush-U	
BWA	東京大学 情報基盤センター	Reedbush-U	
Caffe	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンサーバコン「TSUBAME2.5」	ノンサポート
CP2K	東北大学 サイバーサイエンスセンター	並列コンピュータシステムLX 406Re-2	センター提供ではないが動作実績あり
feram	東京大学 情報基盤センター	Reedbush-U	
	最先端共同HPC基盤施設(JCAHPC)	Oakforest-PACS	
FFV-C	九州大学 情報基盤研究開発センター	次期システムA	
	九州大学 情報基盤研究開発センター	スーパーコンピュータFujitsu PRIMEHPC FX10	
	九州大学 情報基盤研究開発センター	高性能演算サーバ PRIMERGY CX400	
FrontFlow/Blue	東北大学 サイバーサイエンスセンター	スーパーコンピュータシステムSX-ACE	センター提供ではないが動作実績あり
	東北大学 サイバーサイエンスセンター	並列コンピュータシステムLX 406Re-2	センター提供ではないが動作実績あり
	東京大学 情報基盤センター	Reedbush-U	
	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
	最先端共同HPC基盤施設(JCAHPC)	Oakforest-PACS	
FrontFlow/Red	京都大学 学術情報メディアセンター	スーパーコンピュータCray XC40 (新システム)	産業利用の可否はソフトウェアの配布条件による
FrontISTR	東北大学 サイバーサイエンスセンター	並列コンピュータシステムLX 406Re-2	センター提供ではないが動作実績あり
	東京大学 情報基盤センター	Reedbush-U	
	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
	最先端共同HPC基盤施設(JCAHPC)	Oakforest-PACS	
GAMESS	名古屋大学 情報基盤センター	CX400	
	京都大学 学術情報メディアセンター	スーパーコンピュータCray XC40 (新システム)	産業利用の可否はソフトウェアの配布条件による
	九州大学 情報基盤研究開発センター	次期システムA	次期システム調達中のため利用条件は未定
	九州大学 情報基盤研究開発センター	次期システムB	次期システム調達中のため利用条件は未定
GATK	東京大学 情報基盤センター	Reedbush-U	
	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	東北大学 サイバーサイエンスセンター	並列コンピュータシステムLX 406Re-2	センター提供ではないが動作実績あり
	東京大学 情報基盤センター	Reedbush-U	
	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
GROMACS	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンサーバコン「TSUBAME2.5」	ノンサポート
	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンサーバコン「TSUBAME2.5」	ノンサポート
	名古屋大学 情報基盤センター	CX400	
	京都大学 学術情報メディアセンター	スーパーコンピュータCray XC40 (新システム)	産業利用の可否はソフトウェアの配布条件による
	大阪大学 サイバーメディアセンター	大規模可視化対応PCクラスター(高精細表示装置と連動可能)	
	九州大学 情報基盤研究開発センター	次期システムA	次期システム調達中のため利用条件は未定
	九州大学 情報基盤研究開発センター	次期システムB	次期システム調達中のため利用条件は未定
LAMMPS	九州大学 情報基盤研究開発センター	スーパーコンピュータFujitsu PRIMEHPC FX10	産業利用の場合はお問い合わせ
	最先端共同HPC基盤施設(JCAHPC)	Oakforest-PACS	
	理化学研究所 計算科学研究機構	スーパーコンピュータ「京」	
	東北大学 サイバーサイエンスセンター	並列コンピュータシステムLX 406Re-2	センター提供ではないが動作実績あり
	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンサーバコン「TSUBAME2.5」	ノンサポート
LAPACK	北海道大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータHITACHI SR16000/M1	
	東京大学 情報基盤センター	Reedbush-U	
MapReduce	東京大学 情報基盤センター	Reedbush-U	
Meeo	京都大学 学術情報メディアセンター	スーパーコンピュータCray XC40 (新システム)	産業利用の可否はソフトウェアの配布条件による
MEGADOCK	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンサーバコン「TSUBAME2.5」	ノンサポート
MODYLAS	東京大学 情報基盤センター	Reedbush-U	
	最先端共同HPC基盤施設(JCAHPC)	Oakforest-PACS	
NAMD	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンサーバコン「TSUBAME2.5」	ノンサポート
	名古屋大学 情報基盤センター	CX400	
	京都大学 学術情報メディアセンター	スーパーコンピュータCray XC40 (新システム)	産業利用の可否はソフトウェアの配布条件による
OpenFOAM	九州大学 情報基盤研究開発センター	高性能演算サーバ PRIMERGY CX400	
	北海道大学 情報基盤センター	クラウドシステムHITACHI BS2000	
	東北大学 サイバーサイエンスセンター	並列コンピュータシステムLX 406Re-2	センター提供ではないが動作実績あり
	東京大学 情報基盤センター	Reedbush-U	
	東京大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ FX10	
	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンサーバコン「TSUBAME2.5」	ノンサポート
	名古屋大学 情報基盤センター	CX400	
	大阪大学 サイバーメディアセンター	大規模可視化対応PCクラスター(高精細表示装置と連動可能)	
九州大学 情報基盤研究開発センター	次期システムA	次期システム調達中のため利用条件は未定	
OpenFOAM	九州大学 情報基盤研究開発センター	次期システムB	次期システム調達中のため利用条件は未定
	九州大学 情報基盤研究開発センター	高性能演算サーバ PRIMERGY CX400	産業利用の場合はお問い合わせ
	最先端共同HPC基盤施設(JCAHPC)	Oakforest-PACS	
	京都大学 学術情報メディアセンター	スーパーコンピュータCray XC40 (新システム)	産業利用の可否はソフトウェアの配布条件による

資料2-2 HPCIに整備されているアプリケーション一覧
 オープン・ソフト・アプリケーション(1)

オープンソースソフトウェアの整備状況

ソフトウェア名	稼働する基盤センター名	資源名	利用条件
OpenMX	東京大学 情報基盤センター 最先端共同HPC基盤施設(JCAHPC)	Reedbush-U Oakforest-PACS	
ParaView	名古屋大学 情報基盤センター	CX400	
PHASE	東京大学 情報基盤センター 東京大学 情報基盤センター 最先端共同HPC基盤施設(JCAHPC)	Reedbush-U スーパーコンピュータ FX10 Oakforest-PACS	
Pov-Ray	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型クリーンスパコン「TSUBAME2.5」	ノンサポート
ppOpen-HPC	東京大学 情報基盤センター 東京大学 情報基盤センター 最先端共同HPC基盤施設(JCAHPC)	Reedbush-U スーパーコンピュータ FX10 Oakforest-PACS	
Quantum Espresso	東京工業大学 学術国際情報センター 東北大学 サイバーサイエンスセンター 東北大学 サイバーサイエンスセンター 東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型クリーンスパコン「TSUBAME2.5」 スーパーコンピュータシステムSX-ACE 並列コンピュータシステムLX 406Re-2 クラウド型クリーンスパコン「TSUBAME2.5」	ノンサポート センター提供ではないが動作実績あり センター提供ではないが動作実績あり ノンサポート
R	京都大学 学術情報メディアセンター	スーパーコンピュータCray XC40 (新システム)	産業利用の可否はソフトウェアの配布条件による
REVOCAP_Coupler	東京大学 情報基盤センター 東京大学 情報基盤センター 最先端共同HPC基盤施設(JCAHPC)	Reedbush-U スーパーコンピュータ FX10 Oakforest-PACS	
SAMtools	東京大学 情報基盤センター	Reedbush-U	
Tinker	東京工業大学 学術国際情報センター 東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型クリーンスパコン「TSUBAME2.5」 クラウド型クリーンスパコン「TSUBAME2.5」	ノンサポート ノンサポート
WRF	京都大学 学術情報メディアセンター 九州大学 情報基盤研究開発センター	スーパーコンピュータCray XC40 (新システム) 高性能演算サーバPRIMERGY CX400	産業利用の可否はソフトウェアの配布条件による
xTAPP	東京大学 情報基盤センター 最先端共同HPC基盤施設(JCAHPC)	Reedbush-U Oakforest-PACS	
ARPACK	北海道大学 情報基盤センター 京都大学 学術情報メディアセンター	スーパーコンピュータHITACHI SR16000/M1 スーパーコンピュータCray XC40 (新システム)	産業利用の可否はソフトウェアの配布条件による
BLAS	北海道大学 情報基盤センター 名古屋大学 情報基盤センター 名古屋大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータHITACHI SR16000/M1 CX400 FX100	
FFTW	京都大学 学術情報メディアセンター 北海道大学 情報基盤センター 東京工業大学 学術国際情報センター	スーパーコンピュータCray XC40 (新システム) スーパーコンピュータHITACHI SR16000/M1 クラウド型クリーンスパコン「TSUBAME2.5」	産業利用の可否はソフトウェアの配布条件による FFTW2.1.5/3.2.2 ノンサポート
GCC	名古屋大学 情報基盤センター 名古屋大学 情報基盤センター	CX400 FX100	
Gfortran	名古屋大学 情報基盤センター 名古屋大学 情報基盤センター	CX400 FX100	
GMT	京都大学 学術情報メディアセンター	スーパーコンピュータCray XC40 (新システム)	産業利用の可否はソフトウェアの配布条件による
GrADS	京都大学 学術情報メディアセンター	スーパーコンピュータCray XC40 (新システム)	産業利用の可否はソフトウェアの配布条件による
HDF5	名古屋大学 情報基盤センター 名古屋大学 情報基盤センター 京都大学 学術情報メディアセンター	CX400 FX100 スーパーコンピュータCray XC40 (新システム)	産業利用の可否はソフトウェアの配布条件による
Java	名古屋大学 情報基盤センター 名古屋大学 情報基盤センター	CX400 FX100	
LAPACK	北海道大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータHITACHI SR16000/M1	
NetCDF	京都大学 学術情報メディアセンター	スーパーコンピュータCray XC40 (新システム)	産業利用の可否はソフトウェアの配布条件による
NUMPAC	名古屋大学 情報基盤センター 名古屋大学 情報基盤センター	CX400 FX100	
OpenCV	京都大学 学術情報メディアセンター	スーパーコンピュータCray XC40 (新システム)	産業利用の可否はソフトウェアの配布条件による
Perl	名古屋大学 情報基盤センター 名古屋大学 情報基盤センター	CX400 FX100	
PETSc	京都大学 学術情報メディアセンター	スーパーコンピュータCray XC40 (新システム)	産業利用の可否はソフトウェアの配布条件による
Python	名古屋大学 情報基盤センター 名古屋大学 情報基盤センター	CX400 FX100	
SALS	京都大学 学術情報メディアセンター	スーパーコンピュータCray XC40 (新システム)	産業利用の可否はソフトウェアの配布条件による
ScalLAPACK	北海道大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータHITACHI SR16000/M1	
Spark	東京大学 情報基盤センター	Reedbush-U	
SuperLU	京都大学 学術情報メディアセンター	スーパーコンピュータCray XC40 (新システム)	産業利用の可否はソフトウェアの配布条件による

資料2-2 HPCIに整備されているアプリケーション一覧
オープン・ソフト・アプリケーション (2)

商用ソフトウェアの整備状況

ソフトウェア名	稼働する基幹センター名	製品名	利用条件
Abaqus	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンズパコン(TSUBAME2.5)	東工大の学内向けのみ提供
ADF	名古屋大学 情報基盤センター	GX400	産業課程では利用不可
	北海道大学 情報基盤センター	GX400	産業課程では利用不可
AMBER	北海道大学 情報基盤センター	クラウドシステムHITACHI BS2000	産業課程では利用不可
	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンズパコン(TSUBAME2.5)	東工大の学内向けのみ提供
	名古屋大学 情報基盤センター	GX400	産業課程では利用不可
	九州大学 情報基盤研究開発センター	高性能演算サーバ PRIMERGY GX400	産業課程では利用不可
ANSYS	北海道大学 情報基盤センター	クラウドシステムHITACHI BS2000	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
	九州大学 情報基盤研究開発センター	高性能演算サーバ PRIMERGY GX400	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
ANSYS CFX	九州大学 情報基盤研究開発センター	次期システムB	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
AVS	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンズパコン(TSUBAME2.5)	東工大の学内向けのみ提供
AVS / Express	九州大学 情報基盤研究開発センター	次期システムB	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
AVS / Express Viz	九州大学 情報基盤研究開発センター	高性能演算サーバ PRIMERGY GX400	産業課程では利用不可
AVS/Express Dev&PCE	名古屋大学 情報基盤センター	GX400	産業課程では利用不可
AVS/Express Developer	北海道大学 情報基盤センター	クラウドシステムHITACHI BS2000	産業課程では利用不可
CHARMM	九州大学 情報基盤研究開発センター	高性能演算サーバ PRIMERGY GX400	産業課程では利用不可
	九州大学 情報基盤研究開発センター	次期システムB	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
COMSOL Multiphysics	北海道大学 情報基盤センター	クラウドシステムHITACHI BS2000	産業課程では利用不可
GSI Studio Suite	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンズパコン(TSUBAME2.5)	東工大の学内向けのみ提供
EnSight_HPC	名古屋大学 情報基盤センター	GX400	産業課程では利用不可
ENVI	名古屋大学 情報基盤センター	GX400	産業課程では利用不可
Exceed onDemand	九州大学 情報基盤研究開発センター	高性能演算サーバ PRIMERGY GX400	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
	九州大学 情報基盤研究開発センター	次期システムB	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
FieldView	九州大学 情報基盤研究開発センター	高性能演算サーバ PRIMERGY GX400	九州大の学内向けのみ提供
FLUENT	北海道大学 情報基盤センター	クラウドシステムHITACHI BS2000	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンズパコン(TSUBAME2.5)	東工大の学内向けのみ提供
FrontFlow/red	九州大学 情報基盤研究開発センター	高性能演算サーバ PRIMERGY GX400	産業課程では利用不可
GAMMSS	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンズパコン(TSUBAME2.5)	東工大の学内向けのみ提供
	名古屋大学 情報基盤センター	GX400	産業課程では利用不可
Gaussian	九州大学 情報基盤研究開発センター	高性能演算サーバ PRIMERGY GX400	産業利用の場合はお問い合わせ
	北海道大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータHITACHI SR16000/M1	産業課程では利用不可
	東北大学 サイバーサイエンスセンター	非列コンピュータシステムX 408Pe-2	産業課程では利用不可
	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンズパコン(TSUBAME2.5)	東工大の学内向けのみ提供
	名古屋大学 情報基盤センター	GX400	産業課程では利用不可
	九州大学 情報基盤研究開発センター	高性能演算サーバ PRIMERGY GX400	産業課程では利用不可
Gaussian09	九州大学 情報基盤研究開発センター	高性能演算サーバ PRIMERGY GX400	産業利用の場合はお問い合わせ
	九州大学 情報基盤研究開発センター	スーパーコンピュータFujitsu PRIMEHPC FX10	産業課程では利用不可
	九州大学 情報基盤研究開発センター	次期システムB	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
	九州大学 情報基盤研究開発センター	次期システムB	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
Gaussian09	北海道大学 情報基盤センター	クラウドシステムHITACHI BS2000	産業課程では利用不可
HyperWorks	東京工業大学 学術国際情報センター	スーパーコンピュータGray X249 (新システムA)	産業課程では利用不可
IDL	名古屋大学 情報基盤センター	GX400	産業課程では利用不可
	九州大学 情報基盤研究開発センター	高性能演算サーバ PRIMERGY GX400	産業課程では利用不可
IS-DYNA	九州大学 情報基盤研究開発センター	次期システムB	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
	名古屋大学 情報基盤センター	GX400	産業課程では利用不可
Marc	北海道大学 情報基盤センター	クラウドシステムHITACHI BS2000	産業課程では利用不可
	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンズパコン(TSUBAME2.5)	東工大の学内向けのみ提供
Marc / Mentat	北海道大学 情報基盤センター	クラウドシステムHITACHI BS2000	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
	九州大学 情報基盤研究開発センター	高性能演算サーバ PRIMERGY GX400	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
Mentat	北海道大学 情報基盤センター	クラウドシステムHITACHI BS2000	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
	東北大学 サイバーサイエンスセンター	非列コンピュータシステムX 408Pe-2	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
Materials Studio	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンズパコン(TSUBAME2.5)	東工大の学内向けのみ提供
	北海道大学 情報基盤センター	クラウドシステムHITACHI BS2000	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
Mathematica	東北大学 サイバーサイエンスセンター	非列コンピュータシステムX 408Pe-2	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
	九州大学 情報基盤研究開発センター	次期システムB	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
MATLAB	北海道大学 情報基盤センター	クラウドシステムHITACHI BS2000	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
	東北大学 サイバーサイエンスセンター	非列コンピュータシステムX 408Pe-2	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンズパコン(TSUBAME2.5)	東工大の学内向けのみ提供
	九州大学 情報基盤研究開発センター	高性能演算サーバ PRIMERGY GX400	産業課程では利用不可
MD Nastran	北海道大学 情報基盤センター	クラウドシステムHITACHI BS2000	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
MicroAVS	九州大学 情報基盤研究開発センター	次期システムB	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
MicroAVS Pro	九州大学 情報基盤研究開発センター	高性能演算サーバ PRIMERGY GX400	産業課程では利用不可
Molpro	九州大学 情報基盤研究開発センター	高性能演算サーバ PRIMERGY GX400	産業課程では利用不可
	九州大学 情報基盤研究開発センター	次期システムB	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
MSC Nastran/Marc	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンズパコン(TSUBAME2.5)	東工大の学内向けのみ提供
Nastran / Patran	九州大学 情報基盤研究開発センター	高性能演算サーバ PRIMERGY GX400	産業課程では利用不可
	九州大学 情報基盤研究開発センター	次期システムB	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
NEC Ftrace Viewer	東北大学 サイバーサイエンスセンター	スーパーコンピュータシステムSX-ACE	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
Particleworks	東北大学 サイバーサイエンスセンター	非列コンピュータシステムX 408Pe-2	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
Patran	北海道大学 情報基盤センター	クラウドシステムHITACHI BS2000	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
PHITS	東北大学 サイバーサイエンスセンター	非列コンピュータシステムX 408Pe-2	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
Povray	名古屋大学 情報基盤センター	GX400	産業課程では利用不可
SAS	北海道大学 情報基盤センター	クラウドシステムHITACHI BS2000	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
	九州大学 情報基盤研究開発センター	次期システムB	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定
SCIQRESS ME	九州大学 情報基盤研究開発センター	高性能演算サーバ PRIMERGY GX400	産業課程では利用不可
Star-CCM+	名古屋大学 情報基盤センター	GX400	産業課程では利用不可
STREAM	東北大学 サイバーサイエンスセンター	非列コンピュータシステムX 408Pe-2	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。次期システム調達のため利用条件は未定

資料2-3 第二階層計算資源に整備されているアプリケーション一覧
商用アプリケーション(1)

商用ソフトウェアの整備状況

ソフトウェア名	提供する基幹センター名	装置名	利用条件
VASP	東北大学 サイバーサイエンスセンター	並列コンピュータシステムX 408Pc-2	センター提供ではないが動作実績あり
	東北大学 サイバーサイエンスセンター	スーパーコンピュータシステムSX-AGE	センター提供ではないが動作実績あり
	九州大学 情報基盤研究開発センター	高性能演算サーバ PRIMERGY GX400	利用者が別途ライセンス購入の必要あり
	九州大学 情報基盤研究開発センター	次期システムB	同等以上の機能を有するソフトウェアを調達予定。 次期システム調達中のため利用条件は未定
WIEN2k	東北大学 サイバーサイエンスセンター	並列コンピュータシステムX 408Pc-2	センター提供ではないが動作実績あり
ASL	東北大学 サイバーサイエンスセンター	スーパーコンピュータシステムSX-AGE	センター提供ではないが動作実績あり
ASLSTAT	東北大学 サイバーサイエンスセンター	スーパーコンピュータシステムSX-AGE	
CULA	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンズバコン(TSUBAME2.5)	
ESSL	北海道大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ-HITACHI SR16000/M1	
Intel Compiler (C/C++/Fortran)	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンズバコン(TSUBAME2.5)	
Intel IPP	東北大学 サイバーサイエンスセンター	並列コンピュータシステムX 408Pc-2	
Intel MKL	東北大学 サイバーサイエンスセンター	並列コンピュータシステムX 408Pc-2	
Intel MPI	東北大学 サイバーサイエンスセンター	並列コンピュータシステムX 408Pc-2	
Intel TB8	東北大学 サイバーサイエンスセンター	並列コンピュータシステムX 408Pc-2	
Intel コンパイラ(C++ Fortran)	東北大学 サイバーサイエンスセンター	並列コンピュータシステムX 408Pc-2	
Intel® C++ Composer XE for Linux	名古屋大学 情報基盤センター	CX400	
Intel® Fortran Composer XE for Linux	名古屋大学 情報基盤センター	CX400	
Intel® IPP	名古屋大学 情報基盤センター	GX400	
Intel® Math Kernel Library for Linux	名古屋大学 情報基盤センター	GX400	
MathKern	東北大学 サイバーサイエンスセンター	スーパーコンピュータシステムSX-AGE	
MATHEX/MPP	北海道大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ-HITACHI SR16000/M1	
MATRIX/MPP/SSS	北海道大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ-HITACHI SR16000/M1	
MPI/SX/MPI2/SX	東北大学 サイバーサイエンスセンター	スーパーコンピュータシステムSX-AGE	
MSL2	北海道大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ-HITACHI SR16000/M1	
NAO Library for SMP & Multicoe	北海道大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ-HITACHI SR16000/M1	
NEO シェアライブラ	東北大学 サイバーサイエンスセンター	スーパーコンピュータシステムSX-AGE	
NumeroFactory	東北大学 サイバーサイエンスセンター	並列コンピュータシステムX 408Pc-2	
Parallel ESSL	北海道大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ-HITACHI SR16000/M1	
PGI Compiler (C/C++/Fortran, OpenACC)	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンズバコン(TSUBAME2.5)	
Total View Debugger	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型グリーンズバコン(TSUBAME2.5)	
XL C/C++ (IBM)	北海道大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ-HITACHI SR16000/M1	
XL-Fortran (IBM)	北海道大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ-HITACHI SR16000/M1	
富士通 Technical Computing Language (Fortran/C/C++/XPFortran)	名古屋大学 情報基盤センター	FX100	
群論(FORTTRAN90(日立))	北海道大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ-HITACHI SR16000/M1	
富士通MPI	名古屋大学 情報基盤センター	FX100	
富士通SSL II, C-SSL II, SSL II/MPI, BLAS, LAPACK, ScalAPACK	名古屋大学 情報基盤センター	GX400	
富士通 Technical Computing Language (Fortran/C/C++/XPFortran)	名古屋大学 情報基盤センター	FX100	
富士通 Technical Computing Language (Fortran/C/C++/XPFortran)	名古屋大学 情報基盤センター	CX400	

資料2-3 第二階層計算資源に整備されているアプリケーション一覧
商用アプリケーション (2)

第2期 HPCI システムの整備・運用に関するアンケート(平成27年度)

今後、新たに提供を予定・検討しているサービスについて (HPCIに資源提供していると回答した10機関から)		
性能チューニング等の高度な利用サポート(4機関)		
既に提供済み 2機関	平成29年度以降 1機関	平成30年度以降 1機関
超並列化等を含む先進的な利用サポート (4機関)		
既に提供済み 3機関	平成30年度 1機関	
特定の商用ソフトウェアの提供 (3機関)		
既に提供済み 2機関	予算状況に応じて拡充予定 1機関	
特定のアプリケーション・ツールの提供 (2機関)		
既に提供済み 2機関		
アプリケーションデータの可視化サポート(4機関)		
既に提供済み 2機関	既に提供済みだが平成29年度以降強化予定 1機関	平成28年度以降に必要に応じて順次対応予定 1機関
その他		
平成28年度以降、高速な記憶領域(SSD構成)を提供予定		

資料3 平成27年度 アンケート・現状のユーザ支援の体制の調査結果

附録

○「第二階層計算資源のあり方等に関する調査検討ワーキンググループ」委員

	氏名	所属
主査	加藤 千幸	東京大学生産技術研究所 教授 革新的シミュレーション研究センター センター長
委員	青木 尊之	東京工業大学学術国際情報センター 副センター長
委員	伊藤 宏幸	スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
委員	奥野 恭史	京都大学大学院医学研究科 教授
委員	佐藤 三久	理化学研究所計算科学研究機構 副プロジェクトリーダー
委員	常行 真司	東京大学大学院理学系研究科 教授
主査代理	中村 宏	東京大学情報基盤センター センター長
委員	平山 俊雄	高度情報科学技術研究機構神戸センター センター長
委員	堀 宗朗	東京大学地震研究所 教授

○検討の記録

第1回 WG	平成28年 9月29日	於:理化学研究所 東京連絡事務所
第2回 WG	平成28年10月31日	於:TKP 東京駅前カンファレンスセンター
第3回 WG*	平成28年11月21日	於:TKP 東京駅日本橋カンファレンスセンター
第4回 WG*	平成28年12月27日	於:東京大学情報基盤センター
意見交換会	平成29年 2月 1日	於:TKP 東京駅前カンファレンスセンター
第5回 WG	平成29年 2月17日	於:理化学研究所 東京連絡事務所
第6回 WG	平成29年 3月16日	於:東京大学情報基盤センター
意見交換会	平成29年 4月17日	於:TKP 東京駅前カンファレンスセンター
HPCI コンソーシアム定時総会	平成29年 5月17日	於:東京大学理学部4号館

*)「今後の HPCI 第二階層システム検討委員会」と合同開催

「今後の HPCI 第二階層システム検討委員会」委員

	氏名	所属
委員長	中村 宏	東京大学情報基盤センター センター長
委員	岩下 武史	北海道大学情報基盤センター 教授
委員	小林 広明	東北大学サイバーサイエンスセンター センター長

委員	朴 泰祐	筑波大学計算科学研究センター 副センター長
委員	中島 研吾	東京大学情報基盤センター 教授
委員	青木 尊之	東京工業大学学術国際情報センター 副センター長
委員	森 健策	名古屋大学情報基盤センター センター長
委員	中島 浩	京都大学学術情報メディアセンター 教授
委員	下條 真司	大阪大学サイバーメディアセンター センター長
委員	谷口 倫一郎	九州大学情報基盤研究開発センター センター長
委員	安達 淳	国立情報学研究所 副所長
委員	佐藤 三久	理化学研究所計算科学研究機構 副プロジェクトリーダー
委員	高橋 桂子	海洋研究開発機構地球情報基盤センター センター長