平成27年度　先端研究基盤共用・プラットフォーム形成事業

『みんなのスパコン』TSUBAMEによる日本再生

産業利用トライアルユース　利用課題申請書

 利用課題名： ○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○

 英文： □□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□

1. 申請日

平成○○年○○月○○日

1. 利用課題責任者

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 所属機関 | 会社名：○○○○株式会社 | 部署名：□□□□部◇◇◇◇課 | 職名：主任 |
| 氏名 | 漢字表記：共用 太郎 | カナ表記：キョウヨウ タロウ | 英語表記：Kyoyo, Taro |
| 住所 | 〒152-8550東京都目黒区大岡山2-12-1 E2-6 |
| 連絡先 | E-mail：kyoyo@gsic.titech.ac.jp | TEL.：03-5734-2085 | FAX.：03-5734-3198 |

1. 課題の利用区分

利用区分 ［ 2 ］ （以下からいずれか一つを選択）

（１）戦略分野「計算化学手法による創薬技術の開発」

（２）戦略分野「大規模流体－構造連成解析技術の開発」

（３）戦略分野「シミュレーションによるナノ材料・加工・デバイス開発」

（４）戦略分野「社会基盤のリスク管理シミュレーションへのHPC応用技術の開発」

（５）戦略分野「アクセラレータ利用技術の推進」

（６）新規利用拡大

（７）新規利用拡大「商用アプリバンドル型トライアルユース」

選択：（どちらかに☑印を付けて下さい）　　☑ 新規利用申請　／　□ 継続利用申請

1. 利用課題概要

審査に利用します。TSUBAMEを利用して何を目的に何を行なおうとしているのかを具体的かつ簡潔に記述して下さい。継続利用申請の場合は、前回の利用を踏まえた今回の利用目的について記述して下さい。（500字以内）　採択時にWebに公開します。

（記述例）

ペットボトルはポリエステルの一種のポリエチレンテレフタレート（Polyethylene Terephthalate）という通称ＰＥＴ樹脂を原料とし、二軸延伸ブロー成形（用語１）で作られる。二軸延伸ブロー成形法とは、PET樹脂をインジェクション（射出）成型にて試験管状に成形したプリフォームを加熱し、金型に挿入後、延伸ロッドと呼ばれる棒で垂直方向に引き伸ばしながら、加圧空気を吹き込んで円周方向に膨らませるボトルの成形法である。

当社では、このブロー成型の過程を、自社開発の粘塑性体大変形解析プログラムを用い解析し、適切な空気圧とプリフォームの過熱条件を求めている。本課題では、この粘塑性体大変形解析プログラムをMPI並列化させ、複雑形状に対応させるとともに、多様な機能性ペットボトルのブロー成型にも対応させるための高精度化に取り組む。

1. 課題の背景

審査に利用します。課題選定評価委員会以外には非公開です。継続申請の場合、新規利用の内容と同じにして下さい。

（記述例）

ペットボトルは軽量でリサイクル可能なことから、清涼飲料水を中心に広く使われており、ペットボトルの普及とともにペットボトルに対するニーズも、大容量化、高機能化が求められている。大容量化においては、2.0ℓの角型ペットボトルや2.7ℓの把手付きペットボトル、高機能化においてはサラダ油やオリーブオイル等に用いる酸化ケイ素膜を被覆した二層薄膜被覆ボトル（用語2）や、温かい飲み物用耐熱ペットボトルや炭酸飲料用の耐圧ペットボトルが挙げられる。

一方、当社の粘塑性体大変形解析プログラムは、SMP並列で動作しますが、メモリ容量の制限から、単層壁での円筒状のシンプルな形状に対する成型にしか対応できていない。このため複雑な形状や複層壁の機能性ペットボトルに適用させるため、OpenMPIによる複数ノードでの並列化を行ない、新しい機能性ペットボトルの開発に活用できるように整備する。

1. TSUBAMEを利用して得られた成果（継続申請の場合のみ）

審査に利用します。課題選定評価委員会以外には非公開です。継続申請の場合のみ、前回のTSUBAMEの利用で得られた成果および課題について簡潔に記述して下さい。利用成果報告書のダイジェストの内容で結構ですが、図などを貼り付けることはできません。

1. TSUBAMEを利用して課題を実施する目的

審査に利用します。課題選定評価委員会以外には非公開です。研究背景などは書く必要はなく、実際にTSUBAMEを使って計算することにより何をどこまで明らかにすることを目的としているか、及びどのような計算を行うのかの具体的な実施内容を記述して下さい。継続利用申請の場合は、前回の利用を踏まえた今回の利用内容について記述して下さい。最も評価の対象となります。

（記述例）

ペットボトルのブロー成型の解析のため、自社開発の粘塑性体大変形解析プログラムのMPI並列化を施し、TSUBAMEにて検証する目的は、新しい機能性ペットボトルのブロー成形に必要な解析精度と計算量、および必要となる計算能力の検証である。

現状、500mlで単層壁、円筒形のペットボトルの解析においては、壁の厚さに対しては0.01mm、壁面は1mmの格子を用いており、総格子数は約16万格子である。これが複層壁になると膜厚は10～20nmとなることから、膜の破れを再現するには理論的には1000倍の格子が必要と想定される。また複雑形状に対応するために、壁面の格子を0.1mmと仮定すると、160億格子と想定される。

検証では、複層壁の機能性ペットボトルのブロー成形での代表的なエラーの再現について、実際の実験データと、格子数を段階的に増加させた解析結果とのバリデーションにより、解析での必要十分な精度の検証を行なう。

1. 実施計画とリソース
	1. 実施計画

審査に利用します。課題選定評価委員会以外には非公開です。具体的に記述してください。実際に課題を実施すると予定通りには行かない場合が出てくることは十分予想されますので、申請時と実際の実施内容が違ってもかまいません。

（記述例）

4月～6月 粘塑性体大変形解析プログラムのMPI並列化

 領域分割によるMPI並列化

7月～8月 粘塑性体大変形解析プログラムのスケーリング計測（必要口数4口）

 500ml 単層 16億格子のモデルで8,16,32,64,128ノードでのスケーリング計測

9月～12月 500ml 複層 機能性ペットボトルのモデルでのエラー検証（必要口数12口）

 160億、16億、8億、4億格子でのブロー成形での代表的な3つのエラーの再現

* 1. 要員計画

審査に利用します。課題選定評価委員会以外には非公開です。各自の業務従事経験や利用課題への専念できる割合を明記し、具体的に記述してください。

（記述例）

課題従事者A1：課題責任者 兼 解析担当者

ペットボトルの粘塑性体大変形解析に5年間従事。

稼働の50%を本課題に割振り、粘塑性体大変形解析プログラムのOpenMPI化を行なう。

課題従事者A2：解析担当者

ペットボトルの粘塑性体大変形解析に2年間従事。

稼働の50%を本課題に割振り、課題従事者A1をアシストする。

課題従事者B1：技術アドバイザー

ペットボトルの製造に25年間従事

エラー検証での条件の確認等、解析結果について実務経験を通じアドバイスを行なう。

* 1. 必要とする計算資源

審査に利用します。課題選定評価委員会以外には非公開です。はじめてTSUBAMEを利用する場合はお手元の計算機での見積りでも構いません。１口は1ノード(12CPUコア, 3GPU, 55.8GBメモリ)を3000時間占有利用する単位です。4ノード48コアを 約１ヶ月間利用、あるいは予約制キューで100ノード1200CPUコアを約１日利用に相当します。また8.3.3にあるストレージ利用により消費されるTSUBAMEポイントも考慮の上、利用口数を算出して下さい。

* + 1. 年度末（3月末）までの希望口数

希望口数　　16　口

* + 1. 見積り根拠

（記述例）

自社開発の「粘塑性体大変形解析プログラム」では、1格子あたり約200Byteのメモリ領域を必要とする。このため16億格子のモデルでは320GByteのメモリ領域が必要となる。ノードあたり40GByteでの分散を想定すると必要ノード数は8ノードとなる。自社のマシン（Intel Xeon）での16万格子の解析は60秒程度であることから、16億格子のモデルでは10,000倍、8ノード並列により4倍の速度向上を期待し、42時間程度の解析時間を期待している。このため粘塑性体大変形解析プログラムのスケーリング計測に必要な計算資源は、1解析あたり336ノード時間（8ノード×42時間）となるが、1解析が24時間を超えるため -et オプションでの時間延長が必要となるので、336ノード時間×2＝672TSUBAMEポイントを消費する。スケーリング計測では15ケースの解析を必要とするため、672TSUBAMEポイント×15ケース＝10,080TSUBAMEポイント≒4口と見積る。

* + 1. ストレージ

ストレージ利用により消費されるTSUBAMEポイントも考慮の上、8.3.1での利用口数を算出してください。/work0, /work1 は Lustre FS、 /data0 は GPFS であり、それぞれ1TBを1ヶ月利用するために30 TSUBAMEポイントが必要です。これらのストレージ以外に home領域として1ユーザー当たり25GBのストレージが無償で割り当てられます。

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | 4月 | 5月 | 6月 | 7月 | 8月 | 9月 | 10月 | 11月 | 12月 | 1月 | 2月 | 3月 |
| /work1 | 1TB | 1TB | 1TB | 1TB | 1TB | 1TB | 1TB | 1TB | 1TB | 1TB | 1TB | 1TB |
| /data0 | 0TB | 0TB | 0TB | 0TB | 0TB | 0TB | 0TB | 0TB | 0TB | 0TB | 0TB | 0TB |

* 1. 利用するソフトウェア

審査に利用します。課題選定評価委員会以外には非公開です。利用するプログラムは必要に応じて以下の項目を必要数複写し、記述してください。

* + 1. プログラム1

自社開発「粘塑性体大変形解析プログラム」

* + - 1. プログラム種別

☑ 自社開発　　□ オープンソース　　□ 商用ソフト　　□ その他（　　　　　　　　）

* + - 1. 動作環境 （動作実績があるものについて記述）
* アーキテクチャ

☑ Intel x64　　□ SPARC64　　□ PowerPC　　□ SX　　□ その他（　　　　　　　　）

* オペレーティングシステム

☑ Linux　　☑ Windows　　□ AIX　　□ その他（　　　　　　　　）

* コンパイラ

□ gnu　　☑ Intel　　□ PGI　　□ MS　　□ その他（　　　　　　　　）

* ライブラリ

（ ）

* 開発環境等

（ ）

* + - 1. 並列化の有無 （商用ソフトは記述不要）

□ 未対応

☑ OpenMP （共有メモリ型）

□ MPI （分散メモリ型）

□ OpenMPI　　□ IntelMPI　　□ HP（Platform）MPI　　□ MPICH　　□ その他

□ その他 （ ）

* + - 1. 並列実行効率 （商用ソフトは記述不要。基準となる実行に対し何並列で何倍になったなど具体的に記述）

（記述例）

16万格子での演算部のベンチマーク

2コア：112s 基準値

4コア： 86s 0.77倍

8コア： 60s 0.53倍

* + - 1. GPU化の有無 （商用ソフトは記述不要）

□ 対応済み

□ CUDA　　　□ OpenACC　　　□ OpenCL　　　□ その他 （　　　　　　　　）

☑ 未対応

* + - 1. GPU実行効率 （商用ソフトは記述不要。基準となる実行に対し何並列で何倍になったなど具体的に記述）
			2. 想定される1ジョブあたりの最大メモリ量

（記述例）

1格子あたり約200Byteのメモリ領域を必要とするため、160億格子でのメモリ領域は3,200GByteを必要とする。

* + - 1. 想定される1ジョブあたりの必要計算資源量

（記述例）

160億格子を128ノード並列で解く際の計算時間の想定は約34時間となり、4,352ノード時間を必要とする。

* + 1. プログラム2

Ansys社 Polyflow　（比較検証のため利用）

* + - 1. プログラム種別

□ 自社開発　　□ オープンソース　　☑ 商用ソフト　　□ その他（　　　　　　　　）

* + - 1. 動作環境 （動作実績があるものについて記述）
* アーキテクチャ

☑ Intel x64　　□ SPARC64　　□ PowerPC　　□ SX　　□ その他（　　　　　　　　）

* オペレーティングシステム

☑ Linux　　☑ Windows　　□ AIX　　□ その他（　　　　　　　　）

* コンパイラ

□ gnu　　☑ Intel　　□ PGI　　□ MS　　□ その他（　　　　　　　　）

* ライブラリ

（ ）

* 開発環境等

（ ）

* + - 1. 並列化の有無 （商用ソフトは記述不要）

□ 未対応

☑ OpenMP （共有メモリ型）

☑ MPI （分散メモリ型）

□ OpenMPI　　☑ IntelMPI　　□ HP（Platform）MPI　　□ MPICH　　□ その他

□ その他 （ ）

* + - 1. 並列実行効率 （商用ソフトは記述不要。基準となる実行に対し何並列で何倍になったなど具体的に記述）

（記述例）

128コア並列では8コア並列と比較し約10倍というベンチマーク結果がベンダーより公開されている。（注釈1）

* + - 1. GPU化の有無 （商用ソフトは記述不要）

□ 対応済み

□ CUDA　　　□ OpenACC　　　□ OpenCL　　　□ その他 （　　　　　　　　）

☑ 未対応

* + - 1. GPU実行効率 （商用ソフトは記述不要。基準となる実行に対し何並列で何倍になったなど具体的に記述）
			2. 想定される1ジョブあたりの最大メモリ量

（記述例）

ベンダーのベンチマークによると、10億格子でのメモリ量は約15GByteであるので、160億格子でのメモリ量は約240GByteと推定される。

* + - 1. 想定される1ジョブあたりの必要計算資源量

（記述例）

ライセンスの制限から最大16ノード並列までしか実施できないため、16億格子のモデルにて約60時間、約960ノード時間を必要とする。

1. TSUBAMEで得られた成果の公開

同意できる場合は、☑を入れて下さい。

☑ 本利用課題申請書の「TSUBAMEを利用して課題を実施する目的」と「実施計画」のところで書かれた内容について、その結果を利用成果報告書に詳細に記述します。

☑ TSUBAME で流したジョブの詳細（ノード数、並列数、格子点や要素数などのジョブの規模に関係する実行パラメータ、実行時間、ジョブ数等）、TSUBAME 以外で実行経験がある場合は、それとの比較を利用成果報告書に記述します。

1. TSUBAMEの利用に際しての留意事項

適合する際は、☑を入れて下さい。

* 1. 平和利用
* 本申請課題は、安全保障貿易管理に関する法令又は指針等に適合する平和利用である。

参考資料： 経済産業省「安全保障貿易管理について」

 http://www.meti.go.jp/policy/anpo/seminer/shiryo/setsumei\_anpokanri.pdf

 安全保障貿易管理ハンドブック

 http://www.meti.go.jp/policy/anpo/seminer/shiryo/handbook.pdf

* 1. 生命倫理・安全に対する取組み
* 本申請課題は、文部科学省「生命倫理・安全に対する取組」他、生命倫理及び安全の確保に関する法令又は指針に適合している。

参考： 文部科学省「生命倫理・安全に対する取組」

 http://www.lifescience.mext.go.jp/bioethics/index.html

* 1. 人権及び利益保護
* 本申請課題において、相手方の同意・協力や社会的コンセンサスを必要とする研究開発または調査を含む場合には、人権および利益保護への配慮を行っている
1. 課題従事者
	1. TSUBAMEのアカウントを必要とする課題従事者（課題従事者A）

（審査に利用します。課題選定評価委員会以外には非公開です。利用課題責任者についてもTSUBAMEのアカウント発行が必要な場合は、課題従事者Aとして記載が必要です。課題従事者Aは原則5名以内とします。）

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 課題従事者A1 | 役割：課題責任者 兼 解析担当者 | TSUBAMEの利用経験：なし | 既存アカウント名：なし |
| 氏名 | 漢字表記：共用 太郎 | カナ表記：キョウヨウ タロウ | 英語表記：Kyoyo, Taro |
| 所属機関 | 会社名：○○○○株式会社 | 部署名：□□□□部◇◇◇◇課 | 職名：主任 |
| 住所 | 〒152-8550東京都目黒区大岡山2-12-1 E2-6 |
| 連絡先 | E-mail：kyoyo@gsic.titech.ac.jp | TEL.：03-5734-2085 | FAX.：03-5734-3198 |
| 課題従事者A2 | 役割：解析担当者 | TSUBAMEの利用経験：なし | 既存アカウント名：なし |
| 氏名 | 漢字表記：解析 次郎 | カナ表記：カイセキ ジロウ | 英語表記：Kaiseki, Jiro |
| 所属機関 | 会社名：○○○○株式会社 | 部署名：□□□□部◇◇◇◇課 | 職名： |
| 住所 | 〒152-8550東京都目黒区大岡山2-12-1 E2-6 |
| 連絡先 | E-mail：kaiseki@gsic.titech.ac.jp | TEL.：03-5734-2085 | FAX.：03-5734-3198 |
| 課題従事者A3 | 役割： | TSUBAMEの利用経験： | 既存アカウント名： |
| 氏名 | 漢字表記： | カナ表記： | 英語表記： |
| 所属機関 | 会社名： | 部署名： | 職名： |
| 住所 | 〒 |
| 連絡先 | E-mail： | TEL.： | FAX.： |
| 課題従事者A4 | 役割： | TSUBAMEの利用経験： | 既存アカウント名： |
| 氏名 | 漢字表記： | カナ表記： | 英語表記： |
| 所属機関 | 会社名： | 部署名： | 職名： |
| 住所 | 〒 |
| 連絡先 | E-mail： | TEL.： | FAX.： |
| 課題従事者A5 | 役割： | TSUBAMEの利用経験： | 既存アカウント名： |
| 氏名 | 漢字表記： | カナ表記： | 英語表記： |
| 所属機関 | 会社名： | 部署名： | 職名： |
| 住所 | 〒 |
| 連絡先 | E-mail： | TEL.： | FAX.： |

* 1. TSUBAMEのアカウントを必要としない課題従事者（課題従事者B）

（審査に利用します。課題選定評価委員会以外には非公開です。利用課題責任者についてもTSUBAMEのアカウントを必要としない場合は、課題従事者Bとして記載が必要です。課題従事者Bは原則5名以内とします。）

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 課題従事者B1 | 役割：技術アドバイザー | TSUBAMEの利用経験：なし | 既存アカウント名：なし |
| 氏名 | 漢字表記：技術 一徹 | カナ表記：ギジュツ イッテツ | 英語表記：Gijyutsu, Ittetsu |
| 所属機関 | 会社名：○○○○株式会社 | 部署名：□□□□部◇◇◇◇課 | 職名：技師長 |
| 住所 | 〒152-8550東京都目黒区大岡山2-12-1 E2-6 |
| 連絡先 | E-mail：gijyutsu@gsic.titech.ac.jp | TEL.：03-5734-2085 | FAX.：03-5734-3198 |
| 課題従事者B2 | 役割： | TSUBAMEの利用経験： | 既存アカウント名： |
| 氏名 | 漢字表記： | カナ表記： | 英語表記： |
| 所属機関 | 会社名： | 部署名： | 職名： |
| 住所 | 〒 |
| 連絡先 | E-mail： | TEL.： | FAX.： |
| 課題従事者B3 | 役割： | TSUBAMEの利用経験： | 既存アカウント名： |
| 氏名 | 漢字表記： | カナ表記： | 英語表記： |
| 所属機関 | 会社名： | 部署名： | 職名： |
| 住所 | 〒 |
| 連絡先 | E-mail： | TEL.： | FAX.： |
| 課題従事者B4 | 役割： | TSUBAMEの利用経験： | 既存アカウント名： |
| 氏名 | 漢字表記： | カナ表記： | 英語表記： |
| 所属機関 | 会社名： | 部署名： | 職名： |
| 住所 | 〒 |
| 連絡先 | E-mail： | TEL.： | FAX.： |
| 課題従事者B5 | 役割： | TSUBAMEの利用経験： | 既存アカウント名： |
| 氏名 | 漢字表記： | カナ表記： | 英語表記： |
| 所属機関 | 会社名： | 部署名： | 職名： |
| 住所 | 〒 |
| 連絡先 | E-mail： | TEL.： | FAX.： |

1. 利用課題の基礎となる論文や学会発表、プレス発表の有無について

（審査に利用し、課題選定評価委員会以外には非公開です。なくても構いません。）

1. 利用課題の基礎となる知的財産権の有無について

（審査に利用し、課題選定評価委員会以外には非公開です。なくても構いません。）

1. 用語（専門家以外にも分かるように記載をお願いします。項目数は適宜増やしてください。）

１、二軸延伸ブロー成形：

加熱したプリフォームを金型に挿入後、延伸ロッドと呼ばれる棒で垂直方向に引き伸ばしながら、加圧空気を吹き込んで円周方向に膨らませるボトルの成形法。

 



COPYRIGHT Toyo Seikan Co., Ltd. All right reserved.

http://www.toyo-seikan.co.jp/technique/petbottle/making/stretch.html

2、機能性ペットボトル（酸化ケイ素被覆ペットボトル）：

ペットボトルの内面側に、柔軟性、密着性に優れた有機ケイ素膜を被覆し、その上にガス遮断性に優れた酸化ケイ素膜（SiOx膜）を被覆した二層薄膜被覆ボトルで、この容器はガス遮断性、内容物の香気成分の保持など、対フレーバー性に優れている。無色透明で、従来のペットボトルと同様にリサイクルが可能であり、衛生的にも優れた容器で、酸化ケイ素膜が使用されているため、酸素、水蒸気、炭酸ガスなど食品の品質に影響を与えるガスを遮断する効果がある。 これらの特徴を生かし、酸素に敏感な食用油などに利用されているが、耐圧ペットボトルに代表される飲料用ボトルとしても利用可能。



COPYRIGHT Toyo Seikan Co., Ltd. All right reserved.

http://www.toyo-seikan.co.jp/technique/petbottle/barrierbottle/

1. 注釈（専門家以外にも分かるように記載をお願いします。項目数は適宜増やしてください。）

１、Ansys社Polyflowについて：

Ansys社のPolyflowは商用の粘性・粘弾性流体解析プログラムで下記のURLを参照のこと。

http://ansys.jp/products/fluid/polyflow/

東京工業大学 学術国際情報センター

　センター長　山田　功　殿

平成○○年○○月○○日

 住所 ○○○○○○○○

 会社名 ○○○○○○○○

 部署名 ○○○○○○○○

 職位 ○○○○○○○○

 代表者氏名 ○○○○○○　印

平成27年度　先端研究基盤共用・プラットフォーム形成事業

『みんなのスパコン』TSUBAMEによる日本再生

産業利用トライアルユース

応募・利用承諾書

当機関に所属する下記の者を責任者とする一群が、 平成27年度 先端研究基盤共用・プラットフォーム形成事業の利用課題募集に対し、 下記課題を申請すること、および採択された際に利用することについて承諾いたします。

利用課題名：○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○

利用期間：平成27年度

利用区分：産業利用　トライアルユース

カテゴリー：成果公開

利用課題責任者の所属、職名、氏名：

住所　○○○○○○○○

会社　○○○○○○○○

部署　○○○○○○○○

職名　○○○○○○○○

氏名　○○○　○○○

以上

注意事項

※　代表者については利用課題責任者の部門長もしくは決裁権を持つ方でお願いします。