

スーパーコンピュータ「京」 年報 2019-20

Kcomputer Annual Report 2019-20



国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究センター



一般財団法人高度情報科学研究機構

巻頭言

国立研究開発法人 理化学研究所
計算科学研究センター長 松岡 聡



科学技術の発展により社会がますます進化を遂げる一方で、その急速な変化が引き起こす社会課題はこれまでにないほど複雑化・高度化しています。いまだ解の存在しない課題に対して、私たちは世界中の知を結集し、最適な解決策をいち早く示していくことが求められています。複雑で困難な課題に潜むさまざまな要素を、膨大なデータから科学的に読み解き、コンピュータ上で再現し、最適な解決策を導き出す。これを支えるのが、高性能計算を行うスーパーコンピュータを活用した高度なシミュレーションやデータ解析、更に人工知能などの様々な高度でかつ高性能な「計算」です。これらは、正に我が国が目指している Society5.0 において、中心的な役割を果たします。

理化学研究所計算科学研究センター(RIKEN Center for Computational Science, R-CCS)は、2018 年 4 月に計算科学研究機構(AICS)から衣替えし、理化学研究所の研究センターとして、その内外組織と高度に連携し、高性能な「計算」に関する科学的な研究を推進しています。そのためには、世界最高レベルのスーパーコンピュータである「京」や「富岳」を単に擁するだけでなく、高性能な計算科学を推進する世界トップレベルの中核拠点の研究センターとして、「計算の科学」「計算による科学」を探究し、それら両面からの高度な相乗効果より卓越した「計算のための科学」を確立し、将来の高性能計算を推進していきます。

「京」や「富岳」のような現代の世界トップレベルのスーパーコンピュータは、数十万から一千万個にも上る CPU コアや、それにデータを供給する莫大なバンド幅のメモリ・ネットワーク・I/O を有し、とてつもない規模の計算を可能にします。しかしながら、それらは無限の資源を用いてはできず、同時に高度な超省電力・超高信頼性を達成し、かつ、それらをさまざまなユーザが高性能を維持しながら使いこなす高度なプログラミングやソフトウェアが不可欠です。さらには、近年ではビッグデータや AI などの新たな計算パラダイムが頭角を現し、それらの加速や大規模化も強く求められ、それら全ては Society5.0 を実現するための根幹的な情報技術となります。「計算の科学」では、それらを実現するさまざまな技術のベースとなる、高性能計算の本質に関する研究を推進します。

また、スーパーコンピュータは現代の科学技術の発展にとって不可欠なツールです。宇宙や素粒子あるいは生命科学の研究などの基礎科学は言うに及ばず、地球温暖化の科学的予測、地震や津波、集中豪雨や台風の予測による被害軽減、遺伝子治療の基礎となるヒトゲノムの解析やタンパク質の解析によるドラッグデザイン、新しいデバイスや材料のデザイン、自動車の衝突シミュレーションやジェットエンジンの設計など、私たちの生活に直結する、国民の関心の高い最先端の研究開発に欠くことのできないものです。「計算による科学」では、「京」や「富岳」などの、世界のトップレベルのスーパーコンピュータを用いて、これらの研究を推進していくとともに、それらを持続的に性能進化させていくにはどうするか、という「計算の科学」とのコ・デザインを目指します。また、これらが解決する社会的問題は正に Society5.0 が課題として挙げるものであり、今後「富岳」が国民の期待に応えていく為には大変重要な技術となります。

「京」は、計算科学研究センターおよび理化学研究所の他のセンターを含む多くの研究機関で行っている上記の基礎研究から、産業界における応用研究まで広く利活用され、国が定めた利用課題の各分野、一般利用課題

の利用者から、多くの優れた成果が発表されています。また企業との共同研究も活発に行われており、成果の製品化への取り組みも進められています。さらに「京」の後継機である「富岳」の開発プロジェクトは順調に進んでおり、2020 年頃の設置を経て、2021 年度の共用開始を目指しています。私たちは、理化学研究所の他のセンター、国内外の各大学や研究機関、企業の研究所、世界のトップスパコンセンターとの協力を拡大し、「計算の科学」と「計算による科学」がタイトに融合する、世界中からトップ研究センターと認知される国際的な「計算のための科学」の知の拠点を目指し、Society5.0 の様々な課題解決を通じて、新たな価値を創造していきます。

巻頭言

一般財団法人高度情報科学技術研究機構

理事長 田島 保英



「京」の共用開始から 8 年、本報が最終年である 2019 年年報となりました。「京」の利用者選定と利用者支援を担う登録機関として、一般財団法人高度情報科学技術研究機構(Research Organization for Information Science and Technology、RIST)は当初から一貫して、その目的を達成するために常に組織の総力を挙げて任務遂行に最大限の努力を傾注して参りました。その間、広汎・着実な利用を得て、「京」を起点とする多大な研究成果が創成、集積された事実を誇りに思うものです。例えば成果発表データベースに登録された研究成果を数えれば、2019 年度末で通算 8,682 件に達しており、このうち査読付き論文数は 1,798 件に上っています。また、2019 年度中に新たに 204 件が HPCI ポータルサイトで追加公開された利用報告書は、社会各層から幅広く参照を得ており、2019 年度末までの「京」を含む全 HPCI 利用報告書のダウンロード数では 12 万件を超えるに到りました。ダウンロード情報を分析すると、企業からのものは、東証 33 業種中 32 業種にのぼり、アカデミアのみならず、産業界の興味・関心をも惹きつけていた事実がわかります。

2019 年度を振り返れば、8 月 16 日に「京」の共用が終了する一方、「富岳」の供用開始が 2021 年以降であるため、「京」もしくは「富岳」に対する新たな利用研究課題募集は実施せず、4 月 1 日から 8 月 16 日にかけて「京」を利用する随時募集課題(競争的資金等獲得課題、産業利用課題(個別利用)及びトライアル・ユース(一般/産業))について、申請に応じて課題選定を行いました。また成果公開及び情報発信のため、2019 年 11 月には「第 6 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会」を開催し、281 名の参加者を得ました。ここでは「～スーパーコンピュータ『富岳』の胎動、計算科学、AI の融合に向けて～」というテーマ設定で講演やパネルディスカッションを企画し、活発な議論が行われました。

また、「京」を利用した研究成果については専門家間での共有を進めるとともに、一般の方々にもわかりやすくお伝えすることを念頭に、昨年に引き続き、季刊誌「京算百景」Vol.26～Vol.29、成果事例集 7、成果事例集 6 英語版をそれぞれ発行しました。

「京」が広く社会各層に利用され、上記に一端をお示ししたような実績や成果が生まれたのは、関係する研究者の皆さん全てによる創造的 efforts の賜物であることを痛感するとともに、RIST 業務の遂行にあたっては HPCI コンソーシアム及び理研 R-CCS との緊密な連携・協力関係が前提であったことを申し添え、両機関には心からの感謝を表明するものです。

一方、登録機関としての RIST は、「京」の利用が円滑に推進されるよう、利用者募集から選定、支援のプロセスについて選定委員会や課題審査委員会をはじめとする関係者のご指導をいただきながら、継続的に利用促進の方法・手続き等の改善、改良に取り組んで参りました。2019 年 3 月末には利用者の皆さんへのアンケートを通じて、各界の皆さんから忌憚のない貴重なご意見を多くいただくこともできました。RIST はこれらを踏まえ、登録機関の業務をさらに適時、的確に実施することによって、計算科学手法の普及・活用及び情報の高度利用にかかる研究活動の推進と成果の創出に一層の貢献を果たして参ります。

皆様方には、今後とも変わらぬご指導を賜りますよう、宜しくお願い申し上げます。

目 次

1 「京」の共用	1
1-1 共用の枠組み	1
1-2 理化学研究所 計算科学研究センター	2
1-3 高度情報科学技術研究機構 神戸センター	8
2 「京」の運用	12
2-1 稼働状況	12
2-2 施設管理	16
3 「京」の共用の促進	22
3-1 「京」における利用枠と利用研究課題の種類	22
3-2 利用者選定	25
3-3 利用支援	29
3-4 産業利用促進	38
3-5 利用状況	41
3-6 利用研究成果の報告・公開	47
4 「京」の共用のための研究活動	54
4-1 「京」の高度化研究	54
4-2 共用法第 12 条に基づく研究	56
5 研究会等	57
5-1 シンポジウム・会議・報告会	57
5-2 研究会・ワークショップ	58
6 広報活動	61
6-1 広報活動の概要	61
6-2 マスメディアを通じた情報発信	62
6-3 ウェブサイト・制作物	65
6-4 イベント	70
6-5 見学・視察対応	78
参考資料1 利用研究課題一覧	80
参考資料2 成果論文リスト	
(1) 一般課題	
(2) 若手人材育成課題	
(3) 産業利用課題	
(4) ポスト「京」研究開発枠(重点課題)	
(5) ポスト「京」研究開発枠(萌芽的課題)	
(6) 戦略プログラム	

全体概要

はじめに

スーパーコンピュータ「京」は、2012 年 9 月 28 日の共用開始以来、順調に稼働し、毎年 150 程度の利用研究課題に供されている。ここでは、2019 年度(2019 年 4 月～2020 年 3 月)の年報の全体概要として、各章の記載内容を以下に要約する。

1. 「京」の共用

「京」は「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律(2006 年 7 月施行)」(以下、共用法)に基づく共用施設であり、「京」の共用にあたっては、国の基本方針の下、「京」の設置者・運用実施主体である国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究センター(以下、R-CCS)、及び登録施設利用促進機関(以下、登録機関)である一般財団法人高度情報科学技術研究機構(以下、RIST)が連携・協力して業務を実施している。

(1) R-CCS の組織

R-CCS は、研究部門、運用技術部門及び事務部門を構成部門として、2010 年 7 月に発足した。2016 年 4 月に事務部門を計算科学推進室と神戸事業所研究支援部に再編した。また、2014 年 4 月からフラッグシップ 2020 プロジェクト(旧称:エクサスケールコンピューティング開発プロジェクト)、2016 年 1 月からフラッグシップ 2020 プロジェクト企画調整室を設置している。

(2) RIST の組織

RIST 神戸センターは、登録機関利用促進業務を実施する組織として 2012 年 4 月に発足した。2019 年度は 5 月に産業利用推進室は産業利用推進部、HPCI 連携推進室は HPCI 連携推進部へ改称しこの体制の下で活動を実施した。

2. 「京」の運用

(1) 稼働状況

2019 年度の「京」の運用は 4.5 カ月間であったが非常に安定しており、通年の稼働率は約 99.8% と非常に高かった。これには、保守作業の最適化や障害対策として実施してきた運用ログの分析、ハードウェアの定期的な性能測定による障害発生の兆候の検出および対処についての取り組み等の結果によるものが大きいと考えられる。

利用状況は、例年と同じく年度初めの利用が低く後半が高くなる傾向がみられ、年間では約 77% の充填率であった。ジョブの待ち時間は 2018 年度と同程度かそれよりも短く、利用が集中する期末時期の待ち時間も短かった。

(2) 施設管理

2019 年 8 月 16 日、「京」は約 7 年間におよぶ共用を終了した。同月 30 日にシステム電源がシャットダウンされた後、「京」の撤去作業を開始し、11 月末までに「富岳」搬入準備を完了した。2014 年度から開発を進めていた「富岳」の製造は 2019 年 4 月から開始され、12 月から本体の搬入が開始されて 2020 年 3 月末までに 300 台以上の「富岳」本体の電源が投入された。

「富岳」の消費電力は「京」の倍以上と想定されていたため、必要な電源設備と冷却システムの大規模増強工事を 2019 年度に実施した。8 月末までは「京」の運用を継続する中で工事を実施し、9 月から 11 月の間で電源系統および冷却水配管系統の切替工事を実施した後、12 月から 3 月にかけて「富岳」の設置状況に合わせた試運転調整を実施した。

電気設備、空調冷却設備などユーティリティ施設の運転、維持管理業務の目的は、「京」および「富岳」を中核とする R-CCS の研究施設を安全、安定に運転・維持することにより、施設全体の稼働率を上げ、共用施設である「京」および「富岳」を最大限に利用可能とすることである。

設備の運転管理においては、「京」および「富岳」が 24 時間連続稼働であることから、常時ユーティリティ施設を適切に運転するため、24 時間体制で施設管理を実施している。

設備の性能を維持するため、計画的に保守点検を実施し、「京」および「富岳」を停止させることのないよう努めている。また、研究チームや他の研究機関等が持ち込むサーバ類についても、設置場所の整備、電源や空調の増設工事を行い、研究環境の維持整備も実施している。

3. 「京」の共用の促進

(1) 利用者選定

選定委員会及び利用研究課題審査委員会を開催し、以下の利用者選定を実施した。

1) 2019 年度においては、8 月 16 日に「京」の共用が終了し、また、「富岳」の共用開始は 2021 年以降となるため、「京」もしくは「富岳」に対する新たな(2020 年度)利用研究課題募集は実施していない。ただし、4 月 1 日から 8 月 16 日の間に「京」を利用する随時募集課題(競争的資金等獲得課題、産業利用課題(個別利用)、トライアル・ユース(一般/産業))については、申請に応じて課題選定を実施した。

2) 2019 年度に行った随時募集課題のうち、産業利用課題(トライアル・ユース)は 1 件、産業利用課題(個別利用)は 3 件の応募があり、すべて選定した。

3) 国から提案された「富岳」成果創出加速プログラム課題について、2020 年度の 19 課題(うち 1 課題は 2 つのサブ課題で計算機を利用するため、利用課題数は 20 課題)を選定した。これらの選定された課題には、2020 年度から「富岳」共用前評価環境を利用する資源が配分される(ただし、うち 2 課題は 2020 年度「富岳」の利用予定なし)。

なお、2020 年度においては、「富岳」成果創出加速プログラムに対し、「京」停止期間中に第二階層として提供する「京」以外の HPCI 計算資源を配分している。

4) 成果創出・加速枠課題について、2017 年度以降は、年 2 回募集を開始したことにより、選定に必要な十分な未利用資源が見込めないことから選定は休止している。

5) 同じく国から提案された重点化促進枠課題について、2019 年度は 1 課題を選定した。

(2) 利用支援

1) 利用支援のための一元窓口として設置したヘルプデスクを活用し、利用者にワンストップ・サービスを提供するとともに、利用者の意見を運営に適宜反映した。

2) 「京」の利用を促進するため、「京」へのプログラム移植等の調整支援、プログラム性能の分析評価・最適化促進等の高度化支援を、4 課題(すべて重点課題)について実施した。

3) 「京」の利用技術の習得等を目的とし、延べ 2 回の講習会・セミナーを開催した(初級 1 回、中級 1 回)。

(3) 産業利用促進

1) 延べ 36 件の利用相談、3 社(3 課題)に対する高度化支援を実施した。

2) 産業利用普及・利用促進活動として、シンポジウム・報告会・ワークショップの主催を 6 回、国内外の展示会などへの出展やポスター展示を 6 回、利用相談会を 12 回実施した。

(4) 利用研究成果の報告・公開

2019 年度は、「京」利用課題の利用報告書、計 204 件を HPCI ポータルサイトに公開した。利用

報告書の年間ダウンロード(DL)は、2018年度の約29,400件から、2019年度は約36,000件に増加し、成果の公表・普及が更に進展した。また、「HPCI 利用研究成果集」(登録機関 RIST 発行の電子ジャーナル)は2019年6月に第4巻 No.1(6編の論文を収録)を、12月に第4巻 No.2(10編の論文を収録)を発行するとともに、次巻号発行前の先行の早期公開として5編の論文を公開した。2019年度末までに HPCI 成果発表データベースに登録された論文数は、「京」一般利用枠では通算 622 件、ポスト「京」研究開発枠(重点課題及び萌芽的課題)では通算 649 件、戦略プログラムでは通算 547 件、京調整高度化枠では通算 74 件に達した。

4. 「京」の共用のための研究活動

「京」調整高度化枠において、「京」の安定運転のためのシステム調整、ユーザ利用支援のための研究開発等、幅広い分野のユーザの利用に資する高度化研究として、33 課題(R-CCS 31 課題、RIST 1 課題、FOCUS 1 課題)の研究を実施した。

RIST は登録機関として、共用法第 12 条に基づき、「京」の利用促進の方策検討及び利用者支援業務を行う者の資質向上のために、1 課題の調査研究を実施した。

5. 研究会等

R-CCS 及び RIST は、「京」に関する研究成果の公表・普及、研究交流等を目的とし、以下の合計 3 件のシンポジウム・会議・報告会を主催した。

(1) 第 6 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会

～スーパーコンピュータ「富岳」の胎動、計算科学、AI の融合に向けて～(参加者 281 名)

(2) 第 6 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 ― 物質構造の階層性とフォノン物性の理解 ―(参加者 102 名)

(3) 第 2 回 R-CCS 国際シンポジウム開催(参加者 176 名)

また、より小規模(参加者 100 名程度以下)で限定的な目的を持つ研究会・ワークショップを、合計 11 件開催した。

6. 広報活動

一般市民に加えて、「京」の将来の利用者(企業関係者、青少年等)や、マスメディア、政治家、国・地方自治体関係者等の理解を得るため、R-CCS と RIST は連携して広報活動を行った。

マスメディアを通じた情報発信としては、プレスリリース 16 件(うち、「京」の受賞に関して 1 件)を行った。新聞・雑誌・テレビ等への掲載数は 317 件であった。

成果の公表・普及、情報発信等を行うため、公式ウェブサイト及び Facebook の管理・運営(R-CCS)、HPCI ポータルサイトの管理・運営(RIST)、Twitter の管理・運営(R-CCS)を行った。また、新たに Instagram による発信を開始した(R-CCS)。制作物としては、各種パンフレットの作成、広報誌「計算科学の世界」(計 2 号)、「京算百景」(計 4 号)、成果事例集 7・英語版成果事例集 6 及び新たにリーフレット「はじめての HPCI」(計 3 号)の発行を行った。また、R-CCS では、「富岳」の設置状況等を知らせる動画シリーズ「FUGAKU NEWS」を製作し、2019 年度には Vol.1~Vol.3 と特別編の 4 本を作成した。

イベントとしては、国際会議(ISC2019・ドイツ、SC19・アメリカ合衆国)等での展示を行った。加えて、「スーパーコンピュータ『富岳』を知る集い」を金沢で開催した。R-CCS と RIST も出展した一般公開(11 月 9 日神戸地区)では、R-CCS 施設に 1,143 名の来場者を迎えた。また、R-CCS は理化学研究所の他事業所で行われた一般公開で、ブース展示やポスター展示を行った(和光、仙台、

1 「京」の共用

1-1 共用の枠組み

2012年9月より共用を開始したスーパーコンピュータ「京」(以下、「京」)は共用開始から7年半が経ち、科学技術の広範な分野で基礎研究から産業利用まで幅広く活用され、既に様々な成果を創出している。

「京」は「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律(2006年7月施行)」(以下、共用法)に基づく共用施設であり、「京」の共用にあたっては、国の基本方針の下、「京」の設置者・運用実施主体である国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究センター(RIKEN Center for Computational Science 以下、R-CCS)及び登

録施設利用促進機関である一般財団法人高度情報科学技術研究機構(Research Organization for Information Science and Technology 以下、RIST)は連携・協力して業務を実施している。また、業務の実施においては、計算科学技術に関わるユーザによって形成された一般社団法人 HPCI コンソーシアムをはじめとする関係機関とも協力している。この枠組の中で、R-CCS は「京」の運用及び高度化等を担う。一方、RIST は「京」の利用者選定業務及び利用支援業務を担い、利用者に対する一元的窓口業務としてのヘルプデスクによる利用相談やプログラム高度化支援などを実施している(図1)。

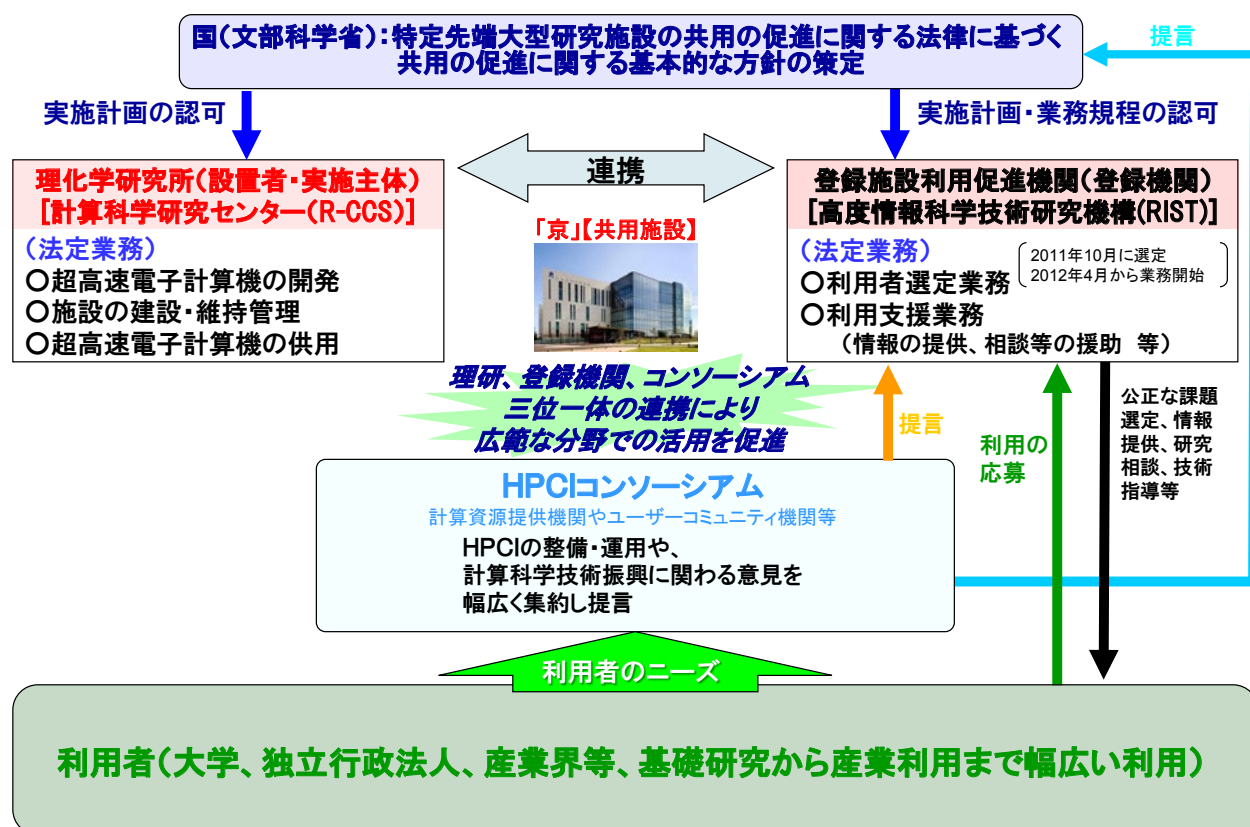


図1 「京」の共用の枠組み

1-2 理化学研究所 計算科学研究センター

R-CCS はコンピュータ・シミュレーションにより、科学的に未来を見通す「予測の科学」の確立を目指し 2010 年 7 月に計算科学研究機構として発足、2018 年 4 月からは組織名称を計算科学研究センターに変更した。R-CCS は「京」の運用を行い、利用者視点に立ったユーザにとって使いやすい計算環境を提供するとともに、計算科学及び計算機科学の先導的研究開発を推進し、高性能計算科学 (High Performance Computing 以下、HPC) の国際的な研究教育拠点の構築を目指している。

1-2-1 計算科学研究センターの概要

1. 計算科学研究センターの組織

「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクトは 2009 年度より「京」を中核とし、多様なユーザニーズに応える革新的な計算環境インフラ (HPCI) を構築し、その利用を推進するプロジェクトとなった。R-CCS は HPCI の中核として、我が国全体の計算科学技術の発展に中心的な役割を担っており、以下をミッションとしている。

- ・共用法に基づく、利用者視点に立った共用施設としての「京」の運用
- ・計算機科学と計算科学の連携・融合により先進の科学的成果と技術的ブレークスルーを生み出す国際的な研究拠点の形成
- ・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

これらの任務を実現するため、R-CCS は以下の部門により構成されている。図 2 に、2019 年度における R-CCS の組織について示す。

○研究チーム: 計算科学の共通基盤的研究、分野融合研究を進めるとともに、将来重要となる領域の開拓を行い、「京」を核として我が国の計算科学を先導する。戦略機関等とも密な連携を取り、優れた成果の創出を目指す。

○運用技術部門: 「京」を中心とする R-CCS の計算機システムの運用や、空調、電源、冷却施設等の維持管理・運転、システム高度化等の実施

○フラッグシップ 2020 プロジェクト: 「富岳」(ポスト「京」)の開発を実施

また、R-CCS をサポートする事務担当として、理化学研究所内に計算科学研究推進室及びフラッグシップ 2020 プロジェクト企画調整室、神戸事業所内に研究支援部が設置されている。

2. 計算科学研究センターの予算

2019 年度には「京」の運営ならびに「富岳」(ポスト京)の運営に向けた必要な経費として総額 72.2 億円が R-CCS に措置された。このうち、建屋や計算機システムの保守費、光熱水費、通信ネットワーク等の経費として 61.7 億円が措置された。

計算科学研究センター組織図

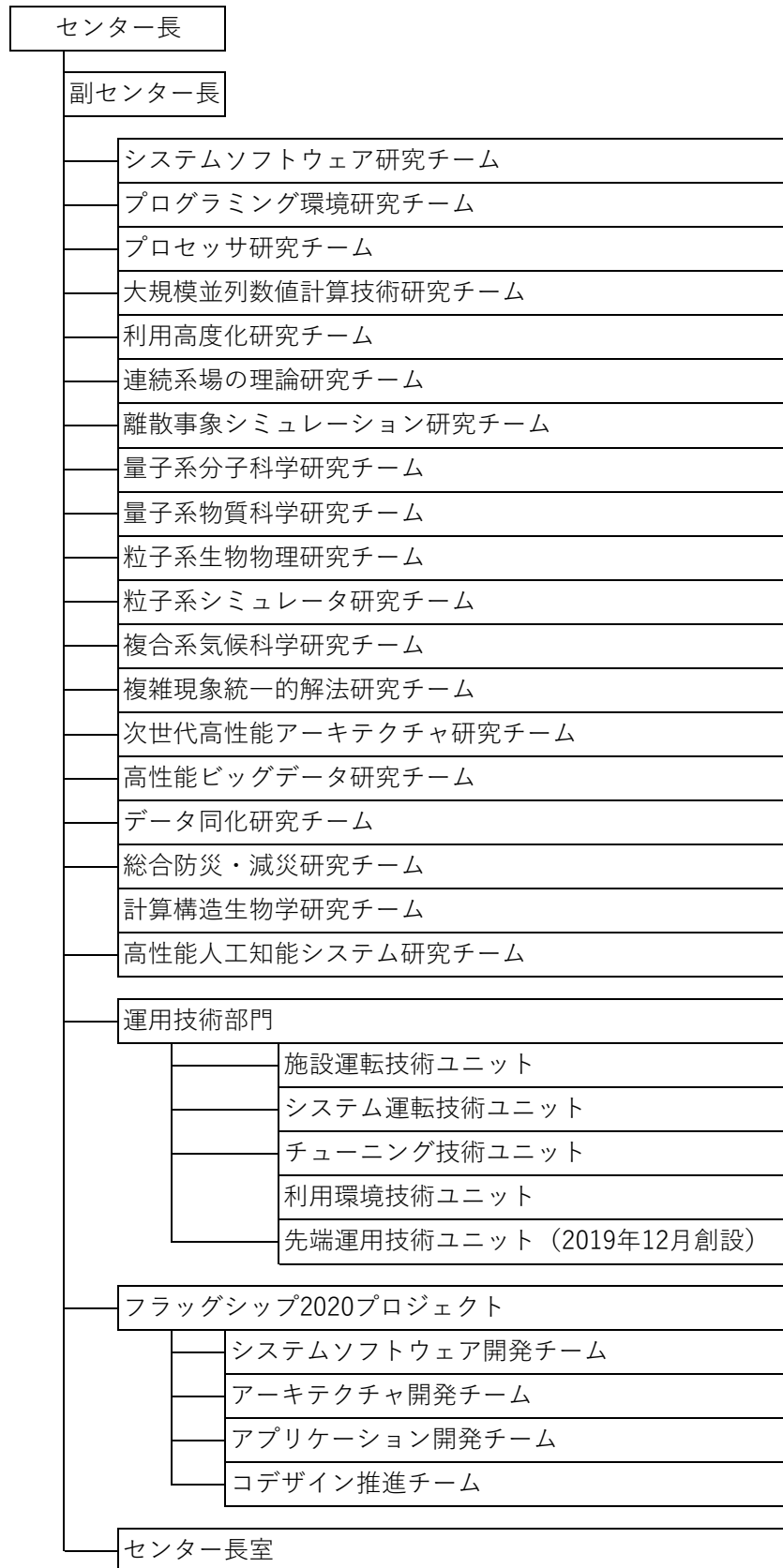


図2 R-CCSの組織 (2019年4月1日現在)

1-2-2 計算科学研究センターの活動について

1. 国際協力

(1) 連携協力協定等

R-CCS では、これまでに表 1 に示す機関と連携協力に関する契約を締結し、連携活動を行っている。

表 1 連携協力協定締結先と締結時期

契約締結機関	契約締結時期
Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA)	2011 年 5 月
National Center for Supercomputing Applications (NCSA)	2012 年 10 月
Australian National University / National Computational Infrastructure (ANU/NCI)	2012 年 11 月
University of Maryland	2013 年 2 月
Jülich Supercomputing Center (JSC)	2013 年 10 月
Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS)/ Maison de la Simulation (MDLS)	2014 年 4 月
Joint Laboratory for Extreme-Scale Computing (JLESC)	2015 年 3 月
University of Reading	2017 年 1 月
(*)Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA)	2017 年 2 月
(*)Beijing Computational Science Research Center (CSRC)	2017 年 7 月
(*)IMT Atlantique	2019 年 3 月
The Pennsylvania State University	2019 年 6 月
PEER(Pacific Earthquake Engineering Research Center)、神戸大学、防災科学技術研究所、海洋研究開発機構	2019 年 10 月
National Chiao Tung University	2019 年 11 月
National Central University	2019 年 12 月
Supercomputing&Bigdata Center, Daegu Gyeongbuk Institute of Science&Technology(Korea), National Supercomputing Centre(NSCC)Singapore, National Center for High-Performance Computing, National Applied Research Laboratories(Taiwan)	2020 年 1 月
Zuse Institute Berlin	2020 年 2 月

DAEGU University

2020 年 3 月

(*)は理研本部で締結

2018 年度以前に締結し、2019 年度時点で有効であった契約に関しては、これまでと同様、シンポジウムや共同研究等において相手先機関との連携協力を図った。

2014 年度に加盟した JLESC は、Extreme Scale Computing の開発を見据えて、各国の関連機関が相互に連携・協力することにより、一層の研究推進を図ることを目的としたグループであり、現在は INRIA (France) 、The University of Illinois at Urbana-Champaign(UIUC) 、Argonne National Laboratory(ANL) 、Barcelona Supercomputer Center(BSC) 及び Jülich Supercomputing Centre(JSC) 、University of Tennessee Knoxville(UTK) で構成される。1 年に一度各機関が持ち回りでワークショップを開催することとなっており、2019 年度には 4 月にアメリカ・ノックスビルで実施し、共同研究の模索や研究者の人材交流を行った。今後もこれらの枠組み等を活用して国際連携を図る予定である。

(2) R-CCS 国際シンポジウム

運用が終了する「京」の今までの取り組みを総括するとともに、「富岳」利用に向けた新しい利用方法・応用分野・エコシステムに加え、将来を見据えた計算機科学や計算科学研究について議論することを目的として、国内外の著名な研究者集め、最先端の研究に関する情報交換を行う The 2nd R-CCS International Symposium を、2020 年 2 月 17 日(月)～2 月 18 日(火)にニチイ学館にて開催した。新型コロナウイルスの感染拡大防止対応のため、招聘や来日が中止となり、一部オンラインによる招待講演を行った。またオンサイトでは、国内外から 176 名の参加があった。

2. 国内機関との連携

国内では、R-CCS において計算科学振興財団(2008 年 3 月締結)、高度情報科学技術研究機構(2011 年 11 月締結)、神戸大学(2012 年 5 月締結)、筑波大学計算科学研究センター(2017 年 2 月締結)、東京工業大学情報理工学院(2018 年 10 月)との包括協定をそれぞれ締結し、研究等にかかる連携活動を行っている。

神戸大学大学院システム情報学研究科とは、この協定に基づき共同研究等を行っている。

さらに、2015 年度には神戸大学に「大規模計算科学講座」を、

2019 年度には東北大学に「先進的計算システム論講座」を 2 設置し、連携大学院において若手研究者の人材育成をおこなっている。

2019 年度は新たに大学等 14 機関と合計 18 件の共同研究契約を締結しており、積極的に外部機関との共同研究を行っている。

3. 人材育成

(1)神戸大学との連携大学院

理化学研究所と神戸大学との間の連携大学院協定により、2013 年 4 月以降、連携講座として神戸大学院生の人材育成を担っている。現在 9 名がシステム情報学研究科の客員教員(客員教授 6 名、客員准教授 3 名)である。

2019 年度は、システム情報学研究科内に博士課程前期課程として、大規模シミュレーション総論 I、II (前期 14 回、後期 14 回、それぞれ 2 単位)を行った。

(2)KOBE HPC サマー・スプリングスクール

「京」に代表されるスーパーコンピュータを駆使して新しいことに挑戦したいと考えている大学院生や若手研究者等の人材育成を目的として、2019 年 8 月 25 日(日)～29 日(木)に、KOBE HPC サマー・スクール(初級)を実施した。R-CCS、神戸大学先端融合研究環境統合拠点、兵庫県立大学において講義及び実習が行われ、32 名が参加した。

KOBE HPC スプリングスクール(中級)は 2020 年 3 月 9 日(月)～11 日(水)に実施予定であったが、新型コロナウイルスの感染拡大を防ぐため、開催を中止した。

開催に当たっては、R-CCS、神戸大学計算科学教育センター、兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科との三者で共催し、ポスト「京」重点 9 課題実施機関、RIST、計算科学振興財団の後援にて実施した。

(3)International HPC Summer School on HPC Challenges in Computational Science

2010 年から欧州 PRACE 及び米国 XSEDE が開催してきた HPC における国際的な人材育成を目的としたサマー・スクールに、2013 年度から R-CCS も主催者として参加している(2014 年度から Compute/Calcul Canada が参加、2018 年度より SciNet HPC Consortium に交替)。同スクールは、2019 年 7 月 7 日(日)～12 日(金)に日本・R-CCS、神戸大学先端融合研究環境統合拠点で開催さ

れ、日本からは 18 名の応募があり、選考の結果、13 名が参加した。

(4)RIKEN R-CCS HPC 計算科学 Internship program

2014 年から国内在住の学生(高専、大学院生)を対象に、計算科学研究センターの研究チームでの研究を実習・体験することを通じ、計算科学技術への理解を深めること、また最先端の計算科学の研究開発に従事する人材の育成事業として実施している。2019 年度は 10 名(7 チーム)を受入れた。

(5)RIKEN R-CCS HPC International Internship Program

国内在住学生を対象としたインターンシップへの海外学生からの問合せや研究チームでの海外学生の受入れ増加の実態を踏まえ、2017 年から海外在住の学生(博士後期課程)を対象に実施し、2019 年度は 5 名(4 チーム)を受入れた。

(6)RIKEN R-CCS HPC Youth Workshop

2016 年度より、国内及び海外の計算科学技術分野の学生、若手研究者を対象に開催し、英語でのプレゼンテーションやディスカッションを通じて、国際的な場でのコミュニケーション能力、研究発信力の向上と若手研究者の交流・ネットワーク作りを目指す。2019 年度は 16 名が参加した。

※実習生・研修生の受け入れ

前掲のインターンシップの他、R-CCS の研究チームでは多くの学生を受け入れ、研究の推進、他機関との連携、若手人材の育成に注力している。

2019 年度は、R-CCS 全体で、実習生 25 名、研修生 40 名の受け入れをおこなった。

(7)e ラーニングアーカイブ

2015 年に、R-CCS web ページ上に計算科学技術分野に係る e ラーニングアーカイブページを開設した。「計算科学・計算機科学についての学習を深めたい」、「スーパーコンピュータによる大規模な計算科学を駆使した新しい科学を開拓したい」と考える学生や研究者をはじめ、計算科学技術分野に興味がある一般の方に向けて、R-CCS やポスト「京」重点 9 課題実施機関等が行ったスクール、シンポジウム等の講義動画や関連資料を集約しており、現在 508 を超えるコンテンツを公開している。

(8)R-CCS Café の開催

異分野間の壁を超えた研究協力を促進し、新しい学問分野の開拓を目指すため、研究者間の情報交換・相互理解の場を提供し、研究協力のきっかけを作ることを目的として、R-CCS Café を開催している。これは R-CCS 内の研究者等がお互いの研究内容をわかりやすく紹介するもので、飲み物を飲みながら誰でも気軽に参加できるものとなっている。2020 年 3 月末までに 191 回開催、毎回 20～30 名程度が参加し、活発な質疑応答が行われている。

4. 研究成果の普及促進

(1)ソフトウェアの公開

R-CCS の高度化研究の一環として、「京」向けに最適化または開発したプログラムを「京」ユーザへ利用者向け公開ソフトとして提供した。2020 年 3 月末までに 24 件のプログラムを公開している。公開ソフトの一覧は表 2 の通りである。

表 2 利用者向け公開ソフト一覧

ソフト名称	研究チーム
NetCDF	システムソフトウェア研究チーム
PRDMA	
Carp	
EARTH on K	
OACIS	離散事象シミュレーション研究チーム
Omni XcalableMP	プログラミング環境研究チーム
Scalasca	
MUMPS	
Eigen K	大規模並列数値計算技術研究チーム
EigenExa	
KMATH_RANDOM	大規模並列数値計算技術研究チーム
Xcrypt	利用高度化チーム
Eclipse PTP for K and FX10 computers	
TAU	
Extrac	

CCA/EBT	
NTChem	量子系分子科学研究チーム
2D-DMRG	量子系物質科学研究チーム
FDPS	粒子系シミュレータ研究チーム
GENESIS	粒子系生物物理研究チーム
SCALE	複合系気候科学研究チーム
K-scope	ソフトウェア技術チーム
一発性能分析	
1PAtool	
K を待ちわびて	システム運転技術チーム

(2)利用者向け公開ソフトに関する講習会の開催

R-CCS で公開するソフトを対象として講習会を実施した。講習会の実績については表 3 の通りである。

表 3 利用者向け公開ソフトに関する講習会の開催実績

対象ソフト名	開催日	参加人数
OACIS	2019 年 6 月 28 日	14 人

(3)R-CCS ソフトウェアセンターの活動

R-CCS で開発されたソフトウェアの普及を支援する目的で 2017 年より R-CCS ソフトウェアセンターの活動を行っている。

2019 年度には、NTChem の性能チューニングに加え、FrontFlow/red-HPC、SCALE、GENESIS、EigenEXA に関して富岳における利用および普及に向け Spack レシピを作成した。また、FrontFlow/red-HPC の普及と利便性向上のため、ポータルサイトに概要と応用事例を掲載した。

5. その他の研究事業活動

R-CCS では計算機科学と計算科学の連携・融合により先進の科学的成果と技術的ブレークスルーを生み出す国際的な研究拠点の

形成を目指して、次のような研究事業にも取り組んだ。

(1) 文部科学省「HPCI の運営」(HPCI の運営企画・調整)

R-CCS では、東京大学 情報基盤センターと連携し、HPCI 共用ストレージシステムの保守運用に関して、年度始めに年間稼働率 99.3%以上、データ消失、セキュリティインシデント共にゼロはじめ明確な運用目標を定め、運用目標達成に向けた施策を実施した。昨年度に引き続き、平成 31 年度も理研・東大両拠点にそれぞれ一つ以上データを配置する拠点間データ二重化運用を実施した。拠点間データ二重化運用により、片方の拠点でメンテナンスや障害のために運用を停止しても、もう一方の拠点を運用することによりサービスを停止することなく連続稼働を実施することができた。平成 31 年度では、年間合計6回のメンテナンスを実施し、新期課題への対応、基本ソフトウェアのバージョンアップ、ハードウェア障害対応、拠点のネットワーク停止への対応を行なった。いずれにメンテナンスも東大、理研で交互に片拠点運用を実施することでサービスを継続した。平成 31 年 10 月に富岳設置に伴い、一月間設備工事を実施し、HPCI 共用ストレージ機器も停止したが、東大設置機器による片拠点運用を実施することでサービスを継続した。1 年間無停止連続稼働(稼働率 100%)、データ消失、セキュリティインシデント共にゼロ件など運用目標を達成した。

HPCI 共用ストレージのログインサーバ 4 台において、PBS バッチスケジューラ等の整備を実施した。PBS が提供するキューの最適化、MPIをはじめとする並列実行ジョブへの対応、Singularity コンテナからの共用ストレージの利用環境整備を実施することで課題実施者がより効率的に研究業務を行えるようにした。

(2) 計算科学振興財団「研究教育拠点(COE)形成推進事業」

兵庫県、神戸市の協調のもと、防災・減災や創薬などの地域の課題解決等に資する分野における「京」を活用した、また「富岳」の利用を見込む最先端の研究を、研究助成を受けて実施している。また、研究成果の地域への還元を図るための普及啓発活動を通じて、計算科学・計算機科学の研究教育拠点(COE)の形成とその振興を図っている。

R-CCS では地域の課題解決等に資する研究として、2017 年度より、新たに以下の 6 つの研究課題に取り組んでいる。

①ポスト「京」、ポスト・ポスト「京」をみすえたハードウェア・アルゴリズム・ソフトウェアの総合的研究

②シミュレーションと実験の協働による強相関人工光合成系の実現

③複数の災害リスク評価に基づく都市計画に資する計算科学研究

④テンソルネットワーク(TN)スキームに基づく異分野融合型計算科学研究

⑤ハイパフォーマンスコンピューティングによる構造生物学の革新

⑥分子シミュレーションに基づくゲノム医療・ゲノム創薬基盤の構築

1-3 高度情報科学技術研究機構 神戸センター

1-3-1 RIST 神戸センターの組織

RIST は、共用法に基づき「京」の利用促進業務を行うための登録施設利用促進機関（以下、「登録機関」という）として 2012 年度から 2016 年度までの事業予定期間をもって選定され、2012 年 4 月 1 日に発足した神戸センター

において業務を開始した。2017 年度から 2021 年度までの事業予定期間においても、引き続き「京」の利用促進業務実施登録機関としての役割を担うこととなった。

2019 年度末における RIST 神戸センターの組織図は図 3 の通りである。

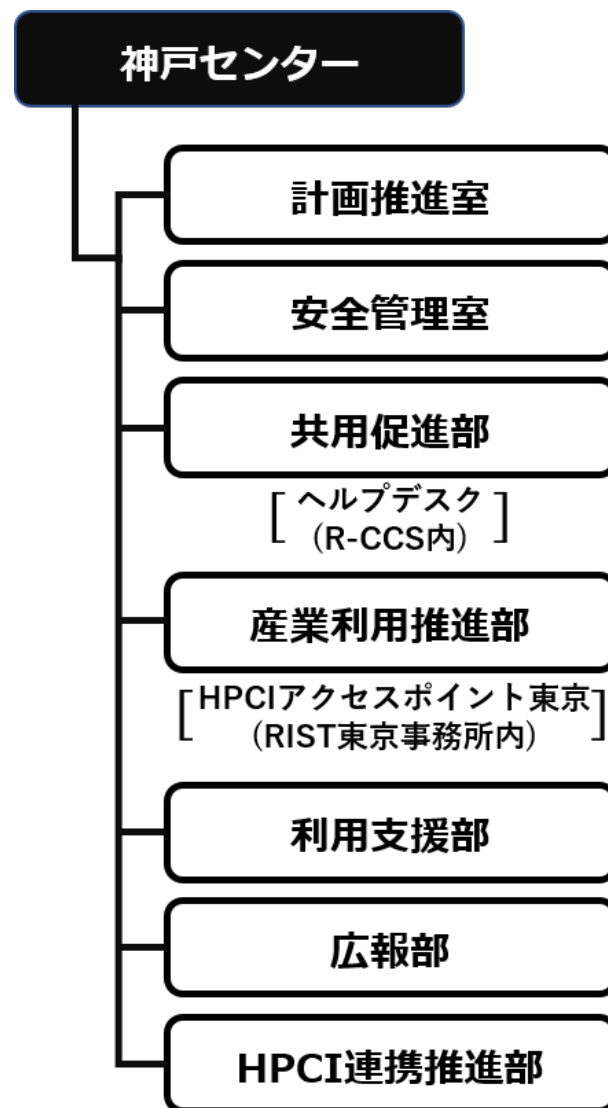


図 3 RIST の組織図（2020 年 3 月 31 日現在）

1-3-2 RIST 神戸センターの活動の概要

RIST は、2017 年度以降も引き続き共用法に基づく「京」の利用促進業務実施登録機関(事業予定期間:2017 年度から 2021 年度まで)に選定され、RIST 神戸センターが 2019 年度の利用促進業務を実施した。

1. 利用者選定業務

(1)選定方法

応募された一般課題、産業利用課題(実証利用)及び若手人材育成課題について、専門分野の学識経験者(レビュアー)による課題の評価(レビュー)を行い、その結果を取りまとめた課題選定・資源配分案を、課題審査委員会が審査する。その後、上位機関である選定委員会がその結果を確認し、最終的に登録機関である RIST の理事長が選定課題の決定を行う。

2019 年度においては、8 月 16 日に「京」の共用が終了し、また、「富岳」の共用開始は 2021 年以降となるため、「京」もしくは「富岳」に対する新たな(2020 年度)利用研究課題募集は実施していない。ただし、4 月 1 日から 8 月 16 日の間に「京」を利用する随時募集課題(競争的資金等獲得課題、産業利用課題(個別利用)、トライアル・ユース(一般/産業))については、申請に応じて課題選定を実施した。

(2)選定結果

2019 年度においては、新たな(2020 年度)利用研究課題募集による課題選定は実施していない。

2. 利用支援業務

(1)情報支援

- 1)2019 度は、「京」利用課題の利用報告書、計 204 件を HPCI ポータルサイトに公開した(2018 年度の 190 件より約 7%増)。
- 2) HPCI 成果発表データベースに登録された 2019 年度末までの「京」に関する成果発表件数は、「京」一般利用枠では通算 2,168 件(うち査読付き論文数は 602)、ポスト「京」研究開発枠(重点課題及び萌芽的課題)では通算 2,409 件(うち査読付き論文数は 592)、戦略プログラムでは通算 3,475 件(うち査読付き論文数は 533)、京調整高度化枠では通算 630 件(うち査読付き論文数は 71)に達した。
- 3)「京」を含む HPCI 利用研究課題の利用報告書のダウンロード総数は 2014 年 7 月の統計データ取得開始以降、2019 年度末で通算約 128,800 件に達し(年間 DL 数では 2018 年度の約 29,400 件

から 2019 年度は約 36,000 件に増加)、成果の公表・普及が更に進展した。

- 4)HPCI 利用研究成果集(RIST 発行の査読付き電子ジャーナル)については、2019 年 6 月に第 4 巻 No.1(6 編の論文を収録)を、12 月に第 4 巻 No.2(10 編の論文を収録)を発行するとともに、次巻号発行前の先行の早期公開として 5 編の論文を公開した。
- 5)「京」における成果やその利用についての情報発信のために、季刊誌「京算百景」vol.26~29、成果事例集 7、成果事例集 6 英語版を発行し、「京」に関心を持つ研究者、技術者に配布、公開等を行った。
- 6)R-CCS と連携して「京」の全利用者を対象に、計 4 回のユーザーフィッシングを実施し、「京」技術情報の提供を行うとともに、運用・利用等に関する意見交換を行い、施設の適切な運用に資した。
- 7)第 6 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会 ～スーパーコンピュータ「富岳」の胎動、計算科学、AI の融合に向けて～ を 2019 年 11 月に東京で開催し、281 名の参加を得た。また、R-CCS と共同で「HPCI フォーラム<『京』の時代から『富岳』への期待>(2020 年 3 月、東京) の開催を予定していたが、新型コロナウイルス感染拡大の状況を受け、開催を中止する事となった。

(2)技術支援

- 1)利用相談等のための一元的窓口として設置したヘルプデスクを活用し、利用者にワンストップ・サービスを提供するとともに、利用者の意見を運営に適宜反映することで、円滑な支援を実施した。
- 2)「京」へのプログラム移植等の調整支援、プログラム性能の分析・最適化促進等の高度化支援を、4 課題(すべて重点課題)について実施した。
- 3)共用法第 12 条に基づき、「京」の利用促進の方策検討及び利用者支援業務を行う者の資質向上のために、1 件の調査研究を行った。
- 4)RIST の利用支援用スーパーコンピュータ(FX10)を用いて、企業が事前に「京」でソフトウェアが動作することを確認するための支援を実施した。

(3)その他の支援

1)産業利用支援

産業利用促進のために、①利用相談、②プログラム並列性能向上等の高度化支援、③プリポスト処理支援、④アプリケーション情報整備、⑤情報提供・情報発信などを実施した。なお、「京」の産業利用課題(個別利用)の募集は原則年 1 回であったが、民間企業のニーズに迅速に対応するため、2014 年 3 月に随時募集に移行した。

2)講習会等の利用支援業務

2019 年度は共催を含め、延べ 27 回の講習会・セミナーを開催した(主催 15 回、共催 12 回)。主催では、「京」の利用技術の習得等を目的とした初中級者向けの定期講習会を2回(内1回が、RISTFX10を使用したハンズオン講習会を内包)、利用者の裾野を広げる一般利用者向けの HPC プログラミングセミナー・ワークショップを 12 回とアプリの入門講習会を 1 回実施した。

また共催では、ポスト「京」重点課題と連携して開催するアプリソフト講習会を 8 回、大学と連携した OSS に関する講習会・セミナーを 4 回実施した。

3)展示会等

「京」の利用促進に向け、ISC 2019(2019 年 6 月、ドイツ・フランクフルト)、SC19(2018 年 11 月、アメリカ合衆国・デンバー)、SCAsia 2019(2019 年 3 月、シンガポール・セントーサ島)等に出展し、利用者向けに情報提供、情報発信を行った。

4)セミナー・シンポジウム等

流体解析・構造解析全体を対象とした CAE ワークショップを昨年に引き続き東京にて開催し(2019 年 12 月)、産業利用事例や利用技

術に関する情報提供及び発信を行った。また、第 6 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を RIST を含む 3 登録機関で共同開催し(2019 年 9 月、東京)、大型実験施設との連携利用の促進を図った。

5)アウトリーチ活動

夏休み特別イベント「スパコン体験塾」を昨年に引き続き開催した。

さらに神戸市主催の「神戸医療産業都市一般公開」(2019 年 11 月、神戸)において、「計算機歴史博物館」の展示を行った。また、神戸医療産業都市 20 周年記念事業の一環として、春休み特別イベント「はじめてのプログラミング」(2020 年 3 月、神戸)の開催を予定していたが、新型コロナウイルス感染拡大の状況を受け、開催を中止する事となった。

3. その他の業務

(1)「HPCI の運営」(HPCI の運営に関わる総合調整等)

当該事業では、我が国の幅広い HPC ユーザ層が、全国の HPC リソースを効率よく利用できる体制と仕組みを整備し、提供することにより、全国規模でニーズとリソースのマッチングを可能とし、萌芽的研究から大規模研究まで、また産業利用にわたる幅広い HPC 活用を加速するとともに、計算科学技術関連コミュニティを醸成・拡大し、成果の社会還元にも資することを目的としている。

このため、RIST は文科省から委託を受け、HPCI の運営に関わる代表機関として、理化学研究所、国立大学法人東京大学、大学共同利用機関法人情報・システム研究機構、及び公益財団法人計算科学振興財団(以下、これら 4 機関を「分担機関」という)と密接かつ一体的に連携した体制を構築し、主体的に業務を行った。

技術企画・調整業務では、HPCI システム運用の全体にわたる技術面での統括的な業務や共通運用の対象となる HPCI システムの運用機関等との調整業務として下記を実施し、多様なユーザーニーズに応える HPCI システムの運用環境維持を行った。

HPCI の運営に係る代表機関としての初年度である 2017 年度は、主に、東京に HPCI 連携推進室を設けるなどの対応により委託業務全体を効率的に統括し、分担機関等との連絡窓口を設け、文部科学省等との連絡体制を整備した。

2 「京」の運用

2-1 稼働状況

2-1-1 稼働状況

1. 稼働率

「京」は2012年9月28日から2019年8月16日までの約7年間共用を行い、フルノード(82,944 ノード)を課題採択された利用者に提供した。2019年度の月別の予定された保守日数及び停止を伴う障害等による停止日数を表1に示す。2019年度の予定された保守の合計は2.2日、障害等による停止日数は合計で0.3日であった。2019年度は4月1日から8月16日までの4.5カ月間の運用であったが非常に安定していた。

表1 2019年度の予定された保守の日数と障害等による停止日数

	予定された保守の日数	障害等による停止日数
2019年4月	1.5	0
2019年5月	0.2	0.2
2019年6月	0.2	0
2019年7月	0.2	0.1
2019年8月	0	0
合計	2.2	0.3

注: 予定された保守の日数、障害等による停止日数の合計は、四捨五入の関係により各月の合計とは一致しない場合がある。

2019年度の稼働率を図1に示す。8月は16日間の運用であったため、他の月よりも運用時間は短い。ここで示す稼働率は、以下の式に従い算出している。

当該月の稼働率

＝(当該月の全時間－予定された保守の時間－障害等による停止時間)／(当該月の全時間－予定された保守の時間)

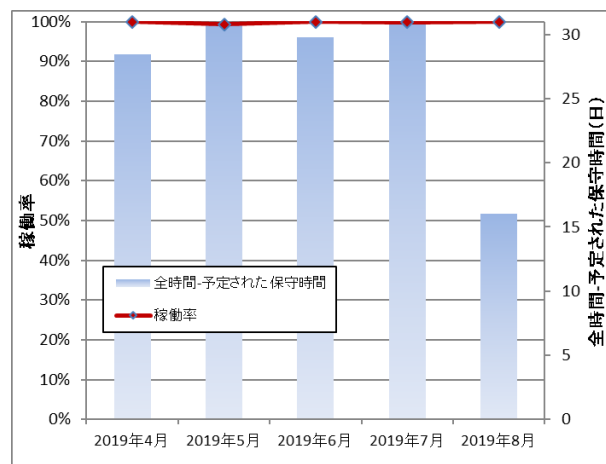


図1 2019年度の稼働率

2019年度の通年の稼働率は約99.8%と他の年度と比べても非常に高かった。図2に共用開始後の年度毎の稼働率を示す。

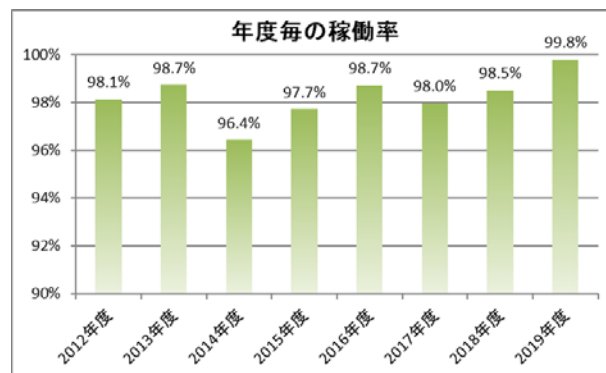


図2 年度毎の稼働率

2. 障害の発生状況

2019年度に発生した主な障害の状況は表2の通りである。ここでは、影響がシステム全体に渡り、かつ1時間以上の停止を伴ったものを記載している。

表2 2019年度に発生した主な障害と停止期間

発生日時	障害内容	停止時間 (H)
2019年5月14日	Tofu ネットワークの異常により全系ジョブの実行不可	2.0
2019年5月26日	CGS 停止	3.0
2019年7月2日	pjstat コマンドが無反応	1.5

2019年度の障害は3件で、いずれの停止時間も3時間以内と短く、非常に安定した運用であった。

3. 利用者数(課題数)の推移

2019 年度の実際に「京」を利用した利用者数及び課題数の推移を図 3 に示す。ここで示す「京」を利用した利用者数及び課題数とは、実際にジョブを実行した利用者数及び課題数を表している。

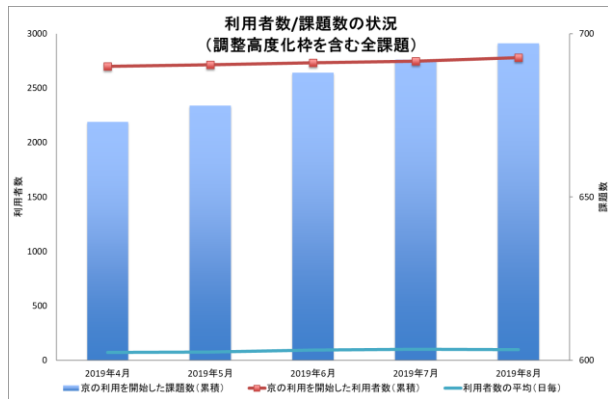


図 3 「京」を利用した利用者数及び課題数の推移

一日あたりの利用者数(アクティブユーザ数)は平均して約 90 名で、多くのユーザが「京」を常にご利用していたことがわかる。

4. ジョブ数の推移

2019 年度に処理されたジョブ件数の推移を図 4 に示す。

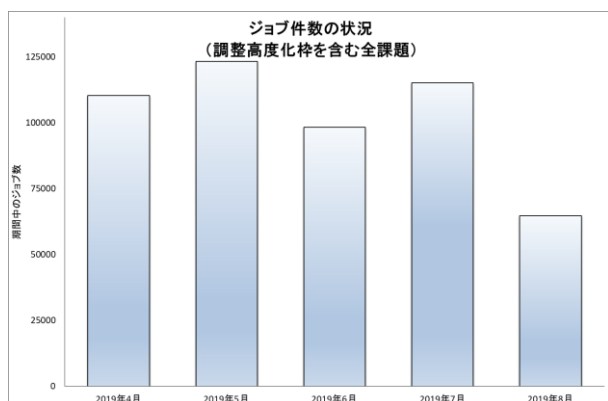


図 4 処理されたジョブ件数の推移

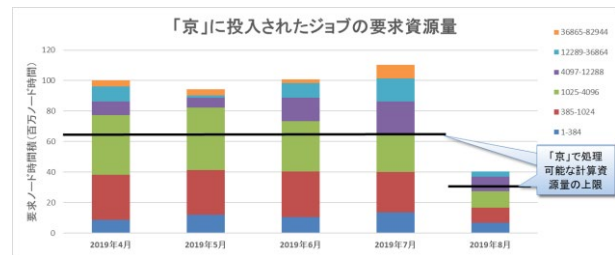


図 5 「京」に投入されたジョブの要求資源量の総和の推移

図 5 に「京」に投入されたジョブの要求資源量の総和の推移を示す。ジョブの投入時に利用者が指定したノード数及び経過時間をもとに算出しており、要求ノード数の規模別に 6 グループに分類している。2019 年度は、常に「京」が提供可能な資源量を超えた要求があったことがわかる。

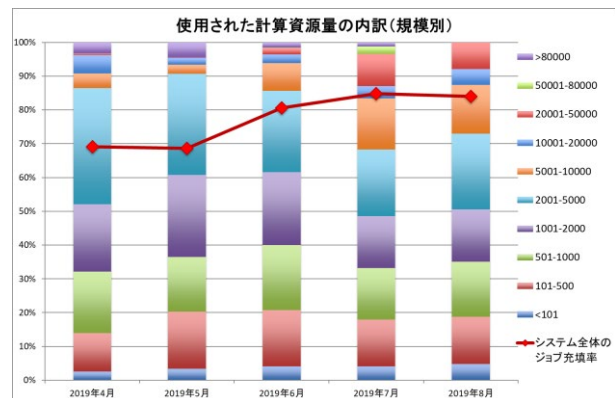


図 6 使用された計算資源量の内訳

図 6 に 2019 年度に使用された計算資源量の内訳を示す。各月の内訳は割り当てられたノード数の規模別に 10 グループに分類している。例年と同じく年度始めの利用は低く、ジョブ充填率(実際にジョブを処理した時間/サービスを提供した時間)が低下したが、それを除くと 80%を超える充填率で、年間では約 77%であった。

2015 年度から年度末の利用率の改善のため、割当計算資源の 98%を使った課題に対して割当計算資源とは別に低優先度での利用を許可している。2019 年度の運用は 4.5 カ月間であったが、この制度を利用して約 1,540 万ノード時間を使用され、2018 年度の通年での約 2,000 万ノード時間と比較して大幅に増加した。

5. 待ち時間の分析

ジョブが投入されてから実行されるまでの待ち時間の推

移を、ジョブの規模や経過時間指定毎に集計した結果を
図 7 から図 11 に示す。

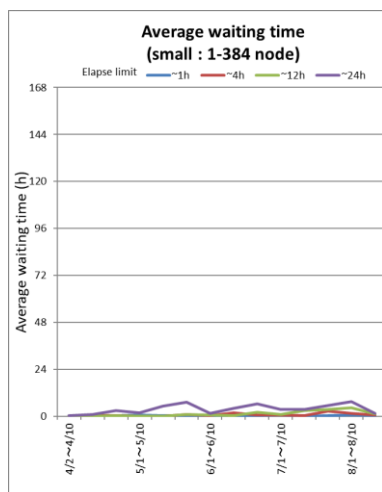


図 7 待ち時間の推移 (1-384 ノード)

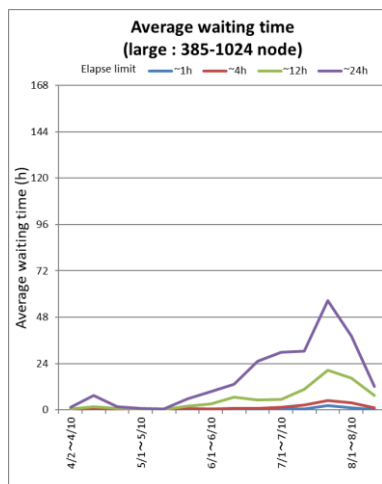


図 8 待ち時間の推移 (385-1,024 ノード)

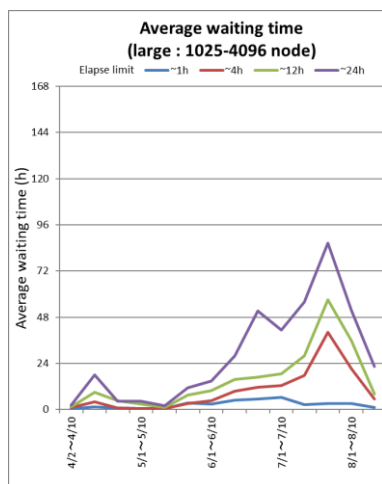


図 9 待ち時間の推移 (1,025-4,096 ノード)

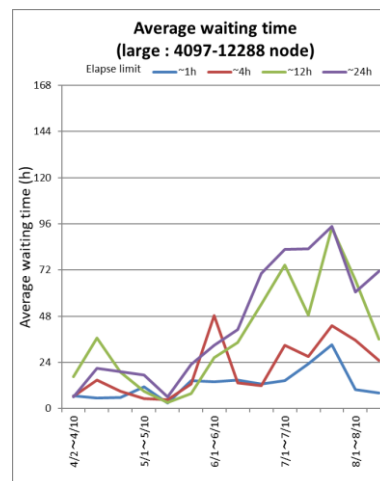


図 10 待ち時間の推移 (4,097-12,288 ノード)

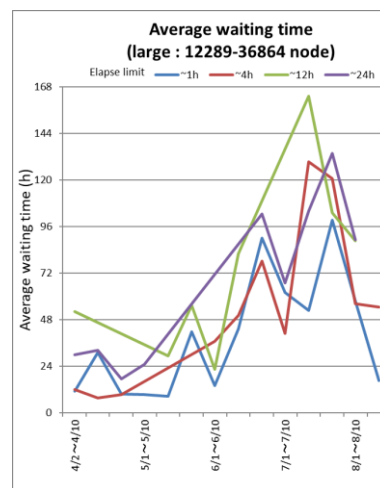


図 11 待ち時間の推移 (12,289-36,864 ノード)

2019 年度は、2018 年度と比べて規模の小さいジョブの
待ち時間は短く、規模の大きいジョブは同程度の待ち時間
であった。

2-1-2 まとめ

2019 年度の「京」の運用は 4.5 カ月間であったが非常
に安定しており、通年の稼働率は約 99.8%と非常に高かつ
た。これには、保守作業の最適化や障害対策として実施し
てきた運用ログの分析、ハードウェアの定期的な性能測定
による障害発生 の兆候の検出および対処についての取り
組み等の結果によるものが大きいと考えている。

利用状況を見ると、例年と同じく年度初めの利用が低く
後半が高くなる傾向がみられ、年間では約 77%の充填率
であった。ジョブの待ち時間は 2018 年度と同程度かそれよ
りも短く、利用が集中する期末時期の待ち時間も短かった。

「京」の運用は2019年度で終了したが、約7年間にわたる「京」の運用を通じてえられた知見を「富岳」の運用に生かし、「富岳」の安定した運用の実現を目指したい。

2-2 施設管理

2-2-1 はじめに

2019年8月16日、「京」は約7年間におよぶ共用を終了した。同月30日にシステム電源がシャットダウンされた後、「京」の撤去作業を開始し、11月末までに「富岳」搬入準備を完了した。2014年度から開発を進めていた「富岳」の製造は2019年4月から開始され、12月から本体の搬入が開始されて2021年3月末までに300台以上の「富岳」本体の電源が投入された。

「富岳」の消費電力は「京」の倍以上と想定されていたため、必要な電源設備と冷却システムの大規模増強工事を2019年度に実施した。8月末までは「京」の運用を継続する中で工事を実施し、9月から11月の間で電源系統および冷却水配管系統の切替工事を実施した後、12月から3月にかけて「富岳」の設置状況に合わせた試運転調整を実施した。

電気設備、空調冷却設備などユーティリティ施設の運転、維持管理業務の目的は、「京」および「富岳」を中核とするR-CCSの研究施設を安全、安定に運転・維持することにより、施設全体の稼働率を上げ、共用施設である「京」および「富岳」を最大限に利用可能とすることである。

設備の運転管理においては、「京」および「富岳」が24時間連続稼働であることから、常時ユーティリティ施設を適切に運転するため、24時間体制で施設管理を実施している。

設備の性能を維持するため、計画的に保守点検を実施し、「京」および「富岳」を停止させることのないよう努めている。また、研究チームや他の研究機関等が持ち込むサーバ類についても、設置場所の整備、電源や空調の増設工事を行い、研究環境の維持整備も実施している。

原子力発電所の停止状態が続いた時期の電力状況に対しては、構内コージェネレーションシステム常用自家発電設備(以下CGSと呼ぶ)の運転計画を調整することにより、「京」の運用計画に支障を及ぼすことなく、かつ電力会社からの節電要請にも協力してきた。しかし、2013年度初めまでの燃料原価高騰の影響は大きく、運転経費を圧迫する状況が継続していた。このため、電力会社からの受電量と自家発電量のバランスを常時確認しながら、光熱費最小コストでの運用となるよう調整を継続的に実施している。

「京」から「富岳」に切り替わった後も、これまで以上に光熱費最小コストでの運用に注力していく予定である。

2-2-2 光熱水管理

1. 電気

R-CCSの電力は、電力会社からの受電とCGSの発電により供給されている。電力会社からの受電電圧は77kV、前年度の使用電力の実績を反映して契約電力を調整している。都市ガス燃料による自家発電設備では、発電電圧6.6kV、最大発電電力6,120kWのCGSが2機設置されている。受電電力と発電電力を連携することにより、一次エネルギー消費量を最小化するとともに、万が一の停電時にも重要負荷に対して無停電で電力を供給することが可能である。

R-CCSの建屋竣工(2010年5月末)以降、職員の入居や「京」の稼働状況に合わせて契約電力を変更してきた。CGSは2011年1月末に竣工引き渡しを受け、「京」の本格的な試運転が開始された2011年3月より24時間連続運転を実施している。契約電力を過大としないため、その時々電力並びに熱需要に合わせ、CGSの発電量を調整している。

2012年9月の共用開始以降、R-CCS全体の消費電力は徐々に増加してきたが、節電の努力の効果もあって「京」では平均15MW程度で落ち着き、CGS1機稼働が通常状態となっていた。

CGS1機を常時運転し、もう1機を予備機として1~2週間ごとに切り替えて運用しており、2機のCGSの運転時間を均一化してきた。ベンチマーク測定時や大規模ジョブ実行時には、大電力の需要が見込まれるため、状況に応じてCGS2機を稼働させ、「京」の電力需要並びに熱需要に追従させるとともに、契約電力を超過しないよう運用してきた。

施設の最大電力に関しては、省エネ活動の成果により徐々に減少する傾向が続いてきた。また、2016年度と2017年度はガス単価の方が電力単価に比べて安くなったが、2018年度は電力単価が安価に調達出来たことから、自家発電量をバランス調整して光熱費最小コストの電力運用を実現してきた。しかし、2018年度の台風による電気設備故障の影響でCGS発電系統を単独で運用する期間が生じたため、自家発電とのバランス調整が出来ず受電量が増加する結果となった。

2019年8月末の「京」の運用終了以降の施設全体の消費電力が激減するタイミングでCGSを停止し、受電電力のみで施設全体の運用を実施した。12月に入り「富岳」本体の設置台数が増加して消費電力が2MWを超過した後にCGS1台の稼働を再開した。(図12、13参照)。



図 12 受電電力量の推移

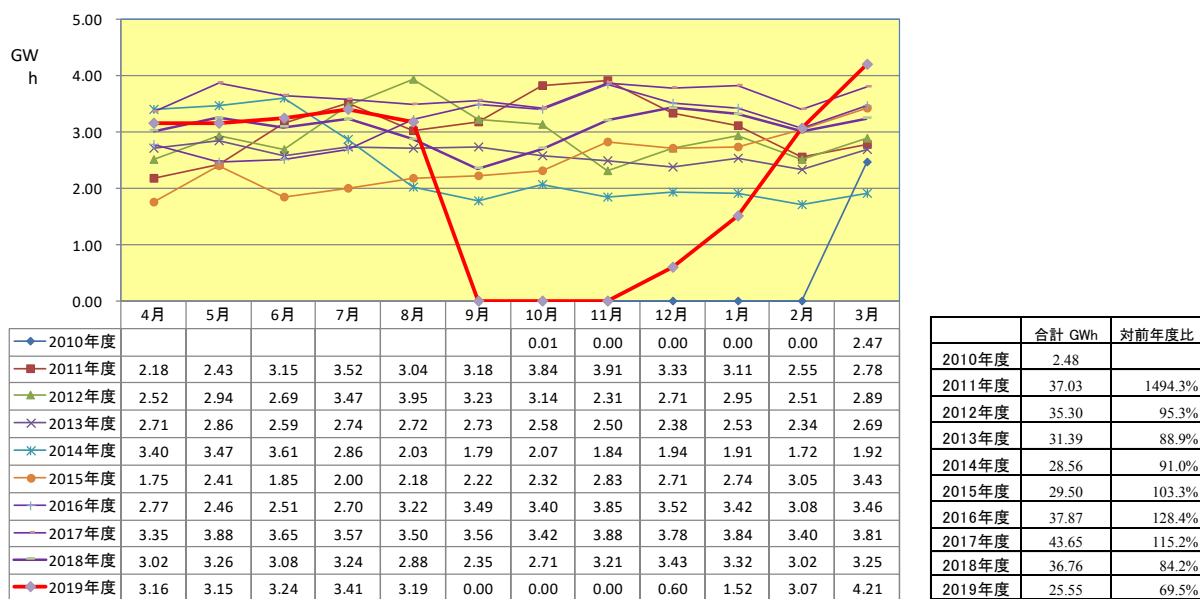


図 13 CGS 発電電力量の推移

2. 都市ガス

都市ガスは、ガス会社より中圧 A により供給されており、供給された都市ガスのほぼ全量を CGS が消費している。CGS から回収される排熱をすべて利用することにより、ほぼ常時 70 %以上の熱効率で運用している。月毎のガス使用量の推移を図 14 に示す。

2013 年度から 2015 年度に燃料原価が高騰したことを受け、光熱費コストを最小にするために受電電力の比率を高くし、自家発電電力を最小とする運用を実施した。2015 年度から 2017 年度にかけては原料価格の下落傾向が続き、自家発電電力を常時増やしたが、

2018 年度は電力単価が下がったため、CGS 出力を低めで運転したが、台風の影響による電気設備故障の影響で CGS 自家発電システムを独立に運用する期間が生じたため、更に CGS 出力を下げた運用を実施せざるを得なかった。2019 年度は「京」の運用終了時点で CGS 発電を停止したが、「富岳」本体が60台搬入した時点で CGS 発電を再開した。

3. 水

R-CCS で使用する水は、神戸市水道局より工業用水並びに上水の 2 システムが供給されている。工業用水は主に「京」を冷却した熱を

大気中に放熱するための冷却塔補給水として利用されている。「京」の冷却のためには、最大 1,000 t/日もの水を蒸発させる必要があるため、安価な工業用水を使用している。上水は研究棟飲用水、手洗いの他、冬季の加湿蒸気にも使用している。また、雨水並びに冷却塔ブロー水は貯留、滅菌した上で、トイレ洗浄水や構内植栽の灌水として再利用しているため、受水量に比べ下水道使用量は非常に

少ない。また、「京」の停止に伴い CGS 発電を12月まで停止したため、工業用水および下水道の使用量も激減している。なお、上水道については、「富岳」搬入時に CPU 冷却系統の純粋を総入れ替えしたため、10月から3月まで例年以上の水量を使用している(図 15、16、17 参照)。

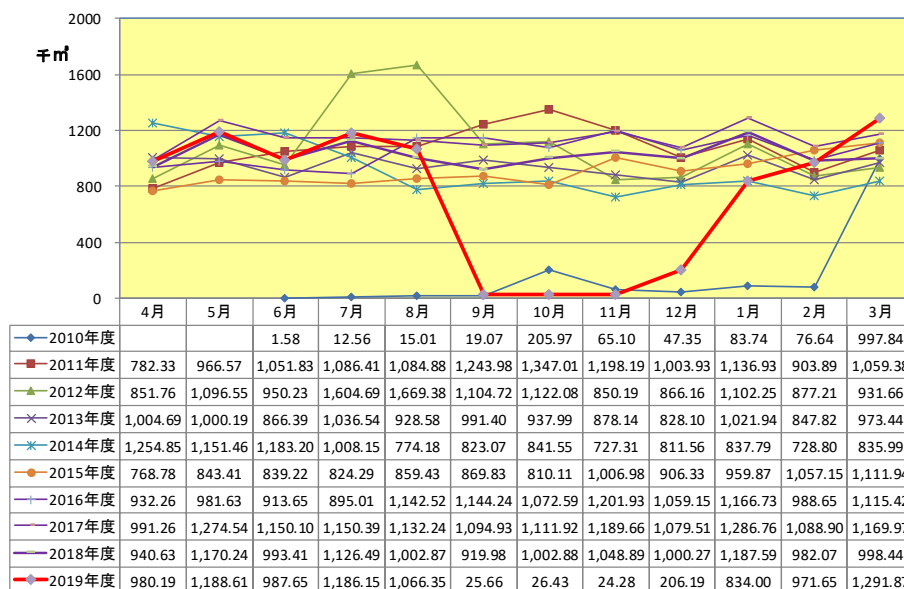


図 14 ガス使用量の推移

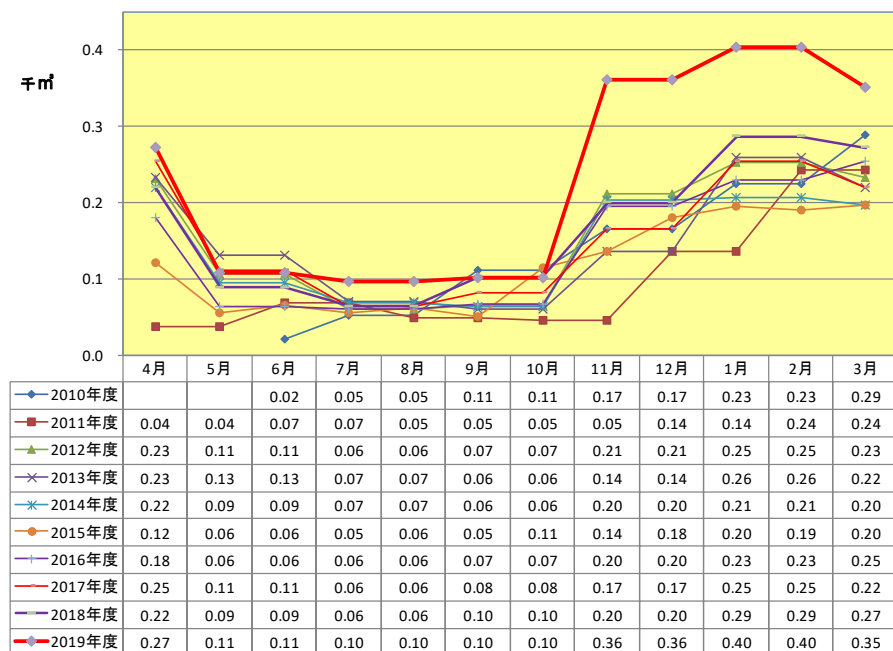


図 15 上水道使用量の推移

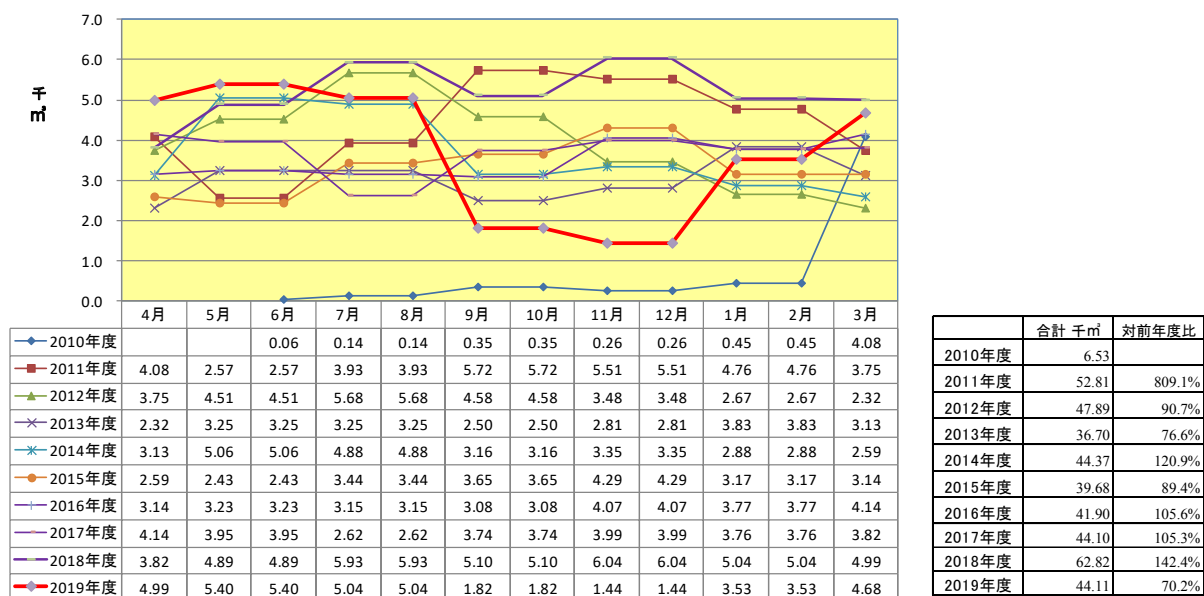


図 16 下水道使用量の推移

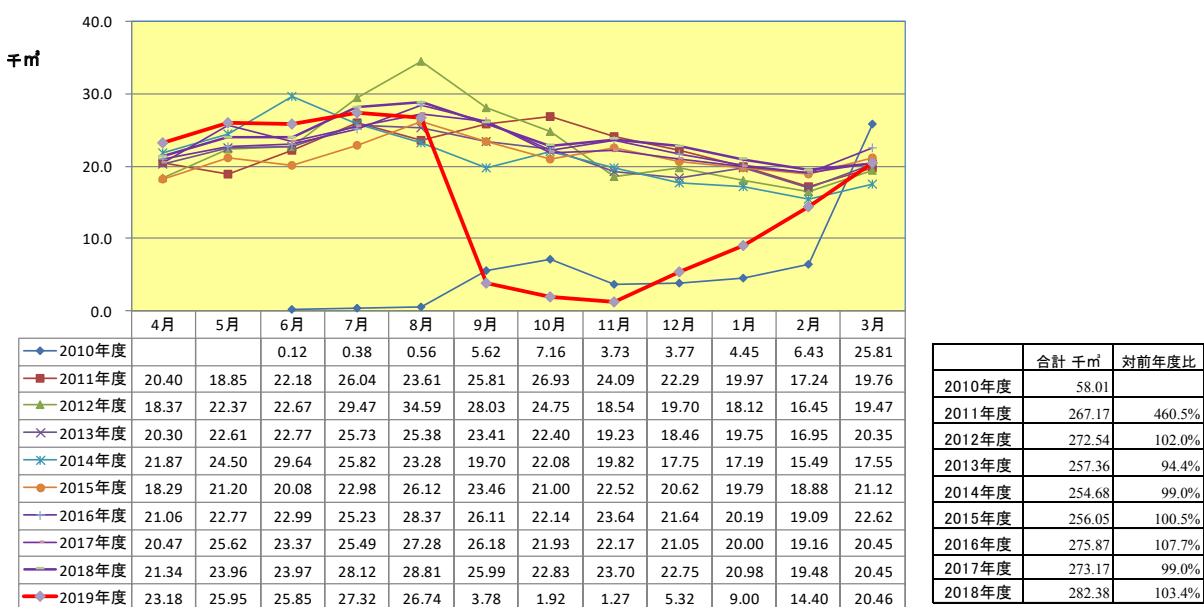


図 17 工業用水使用量の推移

4. 省エネルギー

R-CCS は 2012 年 1 月 20 日付けで、エネルギーの使用の合理化に関する法律における第一種エネルギー管理指定工場等に指定され、理化学研究所全体の省エネルギー管理のもと省エネ活動を推進している。2013 年度は「京」の安定稼働を確認しつつ、「京」空冷の風量と温度差(吹出し／戻り)を調整することで、2 階空調機の運転台数の削減を行い、約 450 kW の電力削減を達成した。また、2014 年度は 2 階空調機の耐故障機能を省エネに活用することで約 200kW の電力削減を達成した。2015 年度では地下 1 階空調機に

対して同様の対策を実施することで約 40kW の電力削減を達成した。更に冷却塔の効率改善の試みとして、プーリー交換による風量アップ及び熱源棟屋上パネルの一部撤去による冷却塔ショートサーキットの防止の取り組み等により、2016 年度に約 190kW の電力削減を達成した。2017 年度から 2018 年度前半にかけて、冷凍機と蓄熱槽の効率的な運用を実施することで約 200kW の電力削減を達成した。これにより、年平均 1%以上の省エネ目標達成に大きく貢献することができた。2019 年度は「京」の運用終了および「富岳」の搬入開始があり、大規模な消費電力

の消費が無かったため、電力とガスの使用量は前年度の 7 割程度にとどまった。

2-2-3 設備の運転監視、維持管理

1. 設備の運転保守

「京」の運転計画に基づき、年間、月間、週間、日単位で施設運転計画を作成し、設備の運転保守を確実に実施した。設備の運転監視については、熱源機械棟中央監視室に常時 2 名以上の監視員を置き、24 時間体制で実施している。また、日勤者平日 7 名、休日 1 名を配置し、構内設備類の巡回点検、薬液補充、フィルター清掃、水質管理等を計画的に実施することにより、安定した施設運用に努めている。毎朝設備担当スタッフによるミーティングを実施し、前日に行った保守作業の確認と不具合の報告を受け、対応内容の精査と情報共有を行っている。また、当日実施予定の保守作業の確認を行い、必要な指示を出している。

2. 維持管理

(1) 電気設備

電気設備の定期点検は、電気事業法に基づく R-CCS 自家発電電気工作物保安規程に則り行うものであり、保安の確保により電気事故を防ぎ、電力の安定的な使用を確保している。2011 年度と 2012 年度では、構内全停電により各施設の点検を実施し、すべての電気設備が健全であることを確認した。2013-2014 年度は全停電での点検は行わず日常点検のみとし、保安規定に基づき 2015 年度に構内全停電点検を実施した。また、電気主任技術者による従事者への安全教育を計画的に実施し、事故時の対応等の訓練を行っている。

設備導入後 5 年を経過し電子機器の故障率が高まる傾向にあったため、機器の保守整備を念入りに実施し、消耗部品の定期交換を進めている。また、機器障害が全体運用に及ぼす影響を考慮し、構内停電を伴う電気設備点検を毎年実施するよう保安規定の改訂を行った。この規定に基づき、今後の重大事故の発生を未然に防ぐために計画的な保守整備を実施している。

2016 年度から 2018 年度の計画停電では、外部電源を仮設することで基幹ネットワークスイッチ装置及び電話交換機を通電した状態で必要な照明及び内線電話による通信手段も確保し、確実な保守点検を実施することができた。

2019 年度では、「京」から「富岳」への世代交代のために必要な電気設備の増強工事を「京」の運用に影響を与えることなく実施した。

(2) CGS 常用自家発電設備

CGS の点検は、電気事業法並びに保安規程及びボイラ安全規則に則り行うものであり、保安の確保並びに労働災害を防止し、発電設備並びに排熱回収ボイラの安定運用を確保するものとしている。毎年 6 月にボイラ安全規則による排熱回収ボイラの法定点検を中心に本体及び補機類の点検を実施している。点検にあたっては 1 機ずつ交互の点検とし、「京」の運転計画に影響を与えないように常時 1 機は運転した状態で点検を実施した。また、保安規程に定められたボイラタービン主任技術者による従事者への安全教育並びにボイラ安全規則に定められた安全教育を計画的に実施し、事故時の対応等の訓練も行った。

CGS ガスタービンの運転時間が 32,000 時間に達するとオーバーホール点検を実施する必要があるため、各号機の運転時間調整を行い 2017 年度に 1 号機、2018 年度に 2 号機に対して実施した。2019 年度は京を撤去し、富岳搬入までの間で CGS を停止し、共通設備系等の保守整備を実施した。

(3) 冷凍空調設備

2014 年度以降、熱源機械棟内にある蒸気吸収式冷凍機 4 台、ターボ冷凍機 3 台、スクリー冷凍機 1 台の精密点検を定期的実施しており、冷却水系統凝縮器、蒸発器のチューブ清掃並びに制御機器等精密点検を実施している。実施にあたっては、冷凍機を 1 台ずつ停止・点検することにより、「京」の冷却に支障がないように実施した。2017 年度は、稼働時間が 3 万時間を超えてきた冷凍機のオーバーホール点検を実施した。2018 年度では、冷却塔およびポンプ系統のオーバーホール点検を実施することで、冷却システム全体の能力改善を図った。更にターボ冷凍機を 1 台増設し、冷却能力の強化に取り組んだ。2019 年度では、富岳向けの冷却設備増強として、空冷モジュールチラーを屋外熱源置場に整備した。

各空調機については、日常保守作業の計画の中で、フィルター清掃、グリスアップ、老朽部品の交換等を行い、健全性の維持に努めた。定期点検としては、中央監視装置主装置に加えて、ローカル機器の点検を実施した。いずれも「京」の冷却に支障のないように 1 台ないし数台ずつ停止して点検を行った。

CPU 冷却設備については、毎日水質チェックを行い、必要に応じてフィルター、デミナー、脱気膜の交換を行い、水質を維持した。溶存酸素濃度計など純水維持装置のセンサー校正点検を実施し、維持管理が適正に行えるようにした。また、故障によって CPU 冷却系が停止しないように、ポンプの点検整備を予防保守的に計画的に実施した。

「富岳」では「京」の倍以上の CPU 冷却能力が必要となるため、2019 年度に熱交換器及びポンプ系設備の大幅な増強工事を「京」

の運用に影響を与えることなく実施した。

2-2-4 環境保全への取り組み

施設全体の電力需要、熱需要に対し、一次エネルギー消費量が最小になるように CGS の発電電力を調節し、省エネルギー並びに省 CO₂ 対策を実施している。CGS は低 NO_x 運転を実施しており、神戸市条例による排出基準である 60ppm を大きく下回る 24ppm 以下での運転を実施している。また、CGS からの排気ガスは 2 ヶ月に一度測定し、NO_x や煤煙などの発生量が法令や神戸市条例を超えないよう管理している。

雨水や冷却塔ブロー水については再利用により、水資源の有効活用をし、下水排出量を低減している。

3 「京」の共用の促進

3-1 「京」における利用枠と利用研究課題の種類

「京」の計算資源は、一般利用枠、ポスト「京」研究開発枠、重点化促進枠及び京調整高度化枠として利用されており、以下にその概要を示す。

3-1-1 一般利用枠

一般利用枠は公募の対象となっており、採択された課題は、成果の公開を原則として無償で利用することができる。この他に、一部の利用研究課題は有償¹で成果を非公開とした利用が可能である。

2019 年度の一般利用枠における配分資源量は、図 1 に示す通り「京」の利用可能資源量の 45%程度²であった。2019 年度利用研究課題は上期中に「京」の共用終了が予定されていたことから、半年課題として募集した。枠内の資源配分については、2018 年度 B 期に引き続き、一般課題、産業利用課題（実証利用）及び若手人材育成課題のすべての課題に対して、一括した選定を行う方式とし、個々への配分枠を撤廃している。

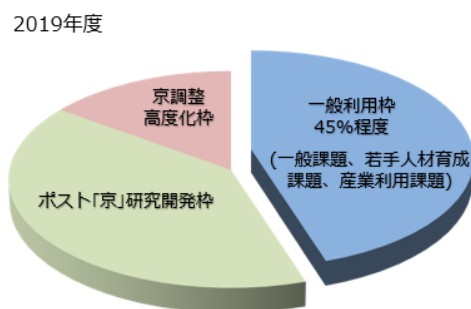


図 1 「京」全体の資源配分

なお、「京」の利用可能資源量は、「京」の物理的な資源量の 95%（計画停止や保守等で停止する期間を除く稼働率）に、ジョブの充填率を考慮した配分率を乗じた資源量であり、R-CCS により決定される。2019 年度の配分率は 88%であった。

ただし、2019 年度における「京」の共用は 8 月 16 日に終了したため、資源の提供期間は 4 月からの 4.5 か月であった。以下の 3-1-2～5 の利用枠についても同様である。

3-1-2 ポスト「京」研究開発枠

ポスト「京」研究開発枠は、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発を実施するため、2015 年度に新設された。

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題（重点課題）の一覧を表 1 に、ポスト「京」で取り組むチャレンジングな課題（萌芽的課題）の一覧を表 2 に示す。

2019 年度のポスト「京」研究開発枠における配分資源量は「京」の利用可能資源量の 40%程度である。うち 36%程度は重点課題に、4%程度は萌芽的課題に配分された。

3-1-3 成果創出・加速枠

一般利用枠において実施中の課題の中から、早期の成果創出に向け、加速すべき課題への追加配分の枠である。利用可能資源は 2%程度³を設定しているが、2017 年度以降、年 2 回募集の開始により、前倒し利用等による未割当資源は期待できず、成果創出・加速枠の選定は休止している。

3-1-4 重点化促進枠

政策的に重要かつ緊急な非公募の課題の実施のための枠である。課題が設定されれば上限を 10%程度⁴とし、他の利用枠より優先的に実施される。

3-1-5 京調整高度化枠

理化学研究所が、「京」の安定運転のためのシステム調整、ユーザ利用支援のための研究開発、幅広い分野のユーザの利用に資する高度化研究を実施するための枠であり、「京」の利用可能資源量の 15%程度を占める。

¹ 2015 年度に新設した競争的資金等獲得課題は、有償による利用であるが成果は公開する。

² 随時募集としている一般課題（競争的資金等獲得課題）、産業利用（個別利用、ASP 事業実証利用）及びトライアル・ユースの配分資源量は「京」の利用可能資源量の枠外である。

³ 成果創出・加速枠の配分資源量は「京」の利用可能資源量の枠外である。

⁴ 重点化促進枠の配分資源は、従前通り「京」の利用可能資源量の枠外である。

表1 ポスト「京」研究開発枠 重点課題一覧

	課題名	実施機関(※は代表)
重点課題1	生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築	理化学研究所生命機能科学研究センター※、京都大学、横浜市立大学
重点課題2	個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学	東京大学医科学研究所※、大阪大学、株式会社 UT-Heart 研究所
重点課題3	地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築	東京大学地震研究所※、海洋研究開発機構、神戸大学
重点課題4	観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化	海洋研究開発機構地球情報基盤センター※、東京大学
重点課題5	エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発	自然科学研究機構分子科学研究所※、神戸大学、東京大学、岡山大学
重点課題6	革新的クリーンエネルギーシステムの実用化	東京大学大学院工学系研究科※、豊橋技術科学大学、日本原子力研究開発機構
重点課題7	次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成	東京大学物性研究所※、筑波大学、大阪大学、自然科学研究機構分子科学研究所、産業技術総合研究所、名古屋大学
重点課題8	近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発	東京大学生産技術研究所※、神戸大学、宇宙航空研究開発機構
重点課題9	宇宙の基本法則と進化の解明	筑波大学計算科学研究センター※、高エネルギー加速器研究機構、京都大学、東京大学

表2 ポスト「京」研究開発枠 萌芽的課題一覧

	課題名	実施機関(※は代表)
萌芽的課題1	基礎科学のフロンティア ― 極限への挑戦	
1-1	基礎科学の挑戦―複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求	東北大学金属材料研究所※、東北大学、理化学研究所、東京大学物性研究所
1-2	極限の探究に資する精度保証付き数値計算学の展開と超高性能計算環境の創成	東京女子大学現代教養学部※
1-3	複合相関が織りなす極限マテリアル―原子スケールからのアプローチ	東京大学大学院工学系研究科※
萌芽的課題2	複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究	
2-1	多層マルチ時空間スケール社会・経済シミュレーション技術の研究・開発	理化学研究所計算科学研究センター※、兵庫県立大学、東京工業大学、東京大学、産業技術総合研究所、神戸大学
2-2	堅牢な輸送システムモデルの構築と社会システムにおける最適化の実現	東京理科大学工学部※
萌芽的課題3	太陽系外惑星(第二の地球)の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明	
3-1	生命を育む惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明	神戸大学大学院理学研究科※、東京工業大学、名古屋大学、筑波大学
萌芽的課題4	思考を実現する神経回路機構の解明と人工知能への応用	
4-1	脳のビッグデータ解析、全脳シミュレーションと脳型人工知能アーキテクチャ	沖縄科学技術大学院大学※、京都大学、理化学研究所、電気通信大学、東京大学
4-2	ボトムアップで始原的知能を理解する昆虫全脳シミュレーション	東京大学先端科学技術研究センター※

3-1-6 利用研究課題の種類

利用研究課題には、公募対象の一般利用課題と非公募である重点的利用課題がある。また、「京」の利用は広く研究開発の進展や産業競争力の強化に貢献することが目的であるため、成果の公開を原則とし、無償で利用できる。ただし、産業利用課題において企業が機密性の高い課題

を実施する場合、成果を非公開とすることができ、その場合は有償での利用となる。利用研究課題の種類を図2にまとめる。

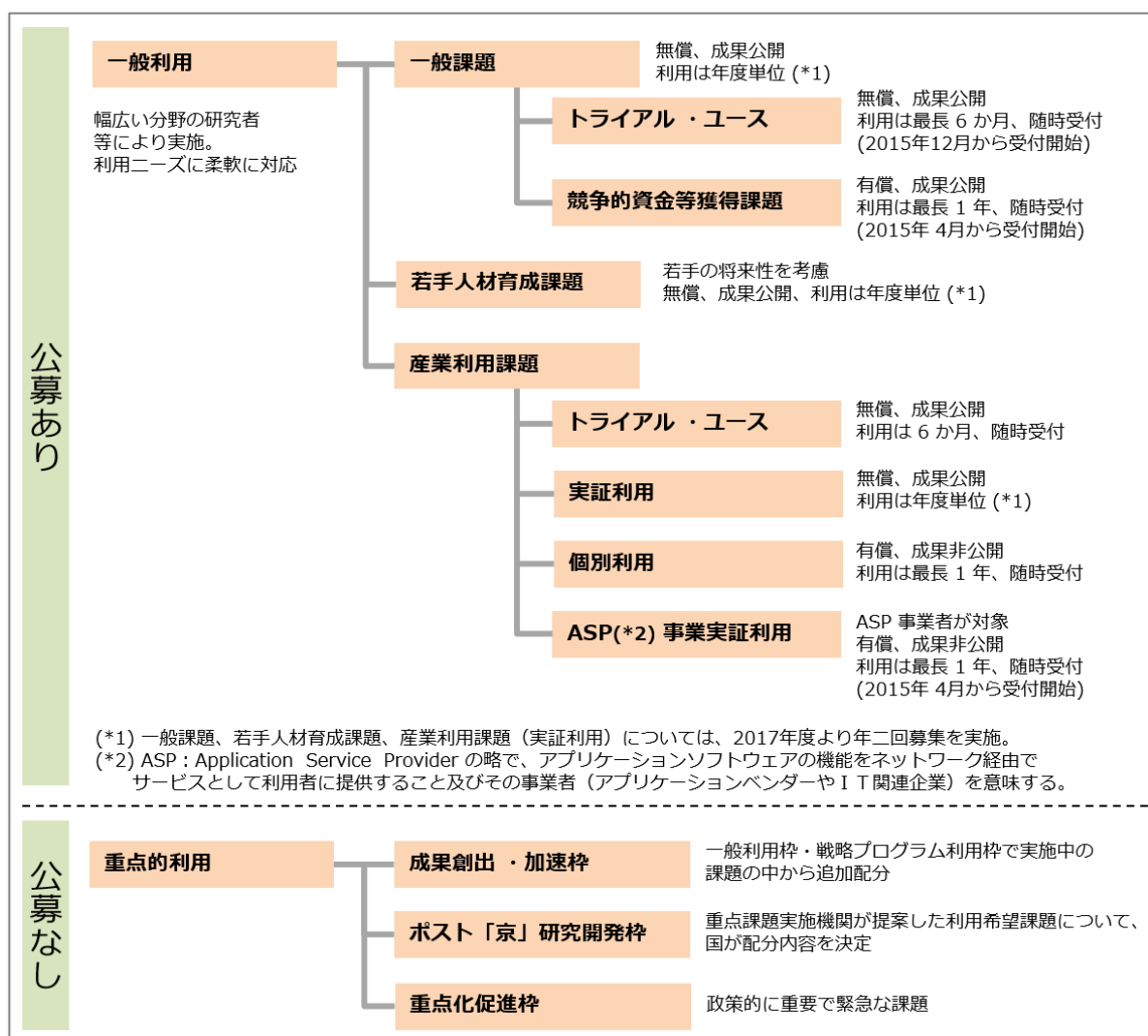


図2 「京」の利用研究課題の種類

3-2 利用者選定

3-2-1 一般利用枠の利用者選定

1. 選定方法

「京」の利用者選定に当たっては、「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、登録機関として認可された RIST が中立・公正な立場で選定を行う。

具体的には、応募された一般課題、産業利用課題(実証利用)及び若手人材育成課題について、専門分野の学識経験者(レビュアー)⁵による課題の評価(レビュー)を行い、その結果を取りまとめた課題選定・資源配分案を、課題審査委員会が審査する。その後、上位機関である選定委員会がその結果を確認し、最終的に登録機関である RIST の理事長が選定課題の決定を行う。

2019 年度においては、8 月 16 日に「京」の共用が終了し、また、「富岳」の共用開始は 2021 年以降となるため、「京」もしくは「富岳」に対する新たな(2020 年度)利用研究課題募集は実施していない。ただし、4 月 1 日から 8 月 16 日の間に「京」を利用する随時募集課題(競争的資金等獲得課題、産業利用課題(個別利用)、トライアル・ユース(一般/産業))については、申請に応じて課題選定を実施した。

2. 選定結果

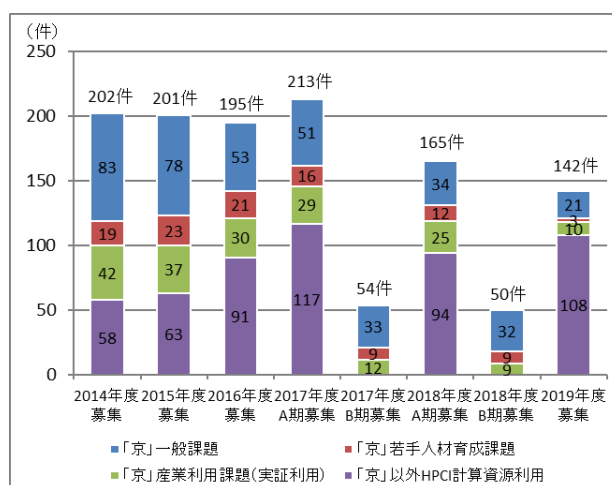
2019 年度においては、新たな(2020 年度)利用研究課題募集による課題選定は実施していない。

2019 年度の随時募集課題の選定状況は表 3 の通りである。

表 3 2019 年度随時募集課題の選定状況

課題種類	申請件数	選定件数	選定率
一般課題 (トライアル・ユース)	0	0	-
一般課題 (競争的資金等獲得課題)	0	0	-
産業利用課題 (トライアル・ユース)	1	1	100%
産業利用課題 (個別利用)	3	3	100%
産業利用課題 (ASP 事業実証利用)	0	0	-

なお、参考までに「京」共用開始以降の記録として、2019 年度利用研究課題募集までの課題申請件数の推移を図 3 に、また、提供可能資源量と要求資源量の推移を図 4 示す。

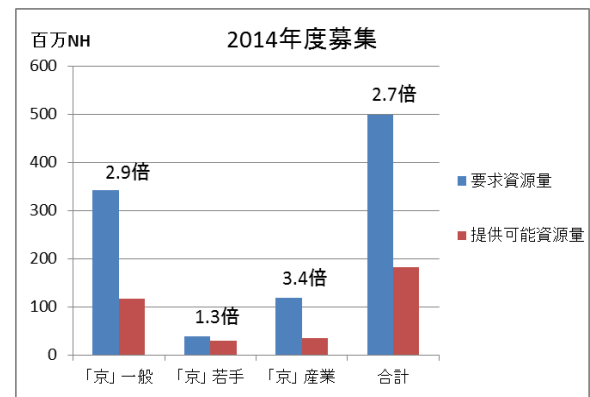
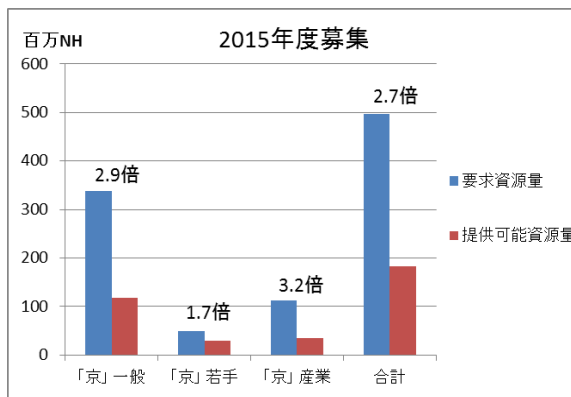
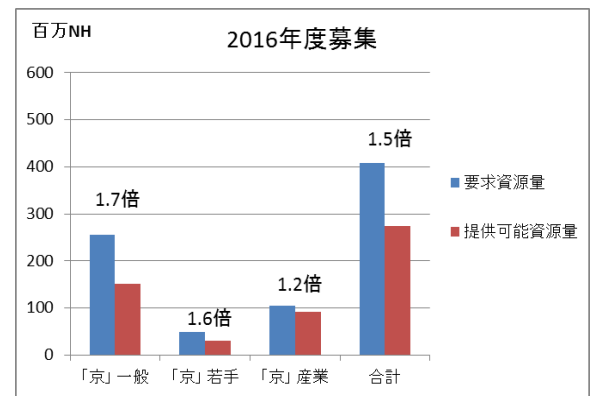
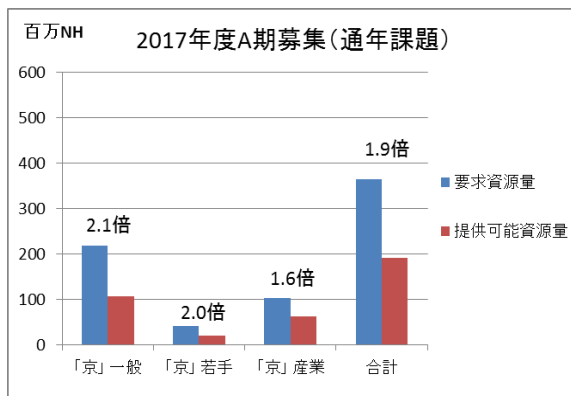
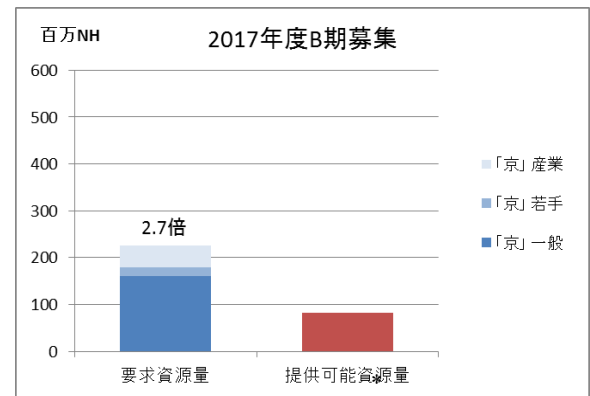
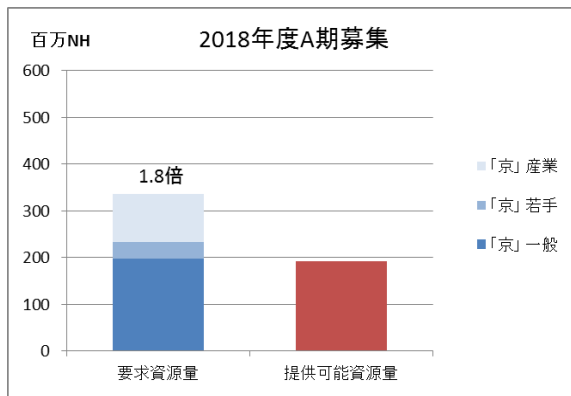
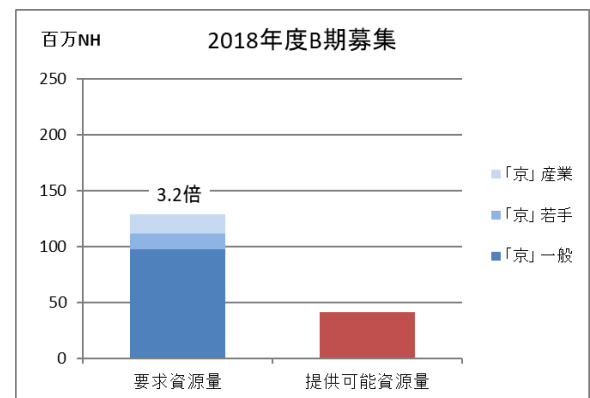
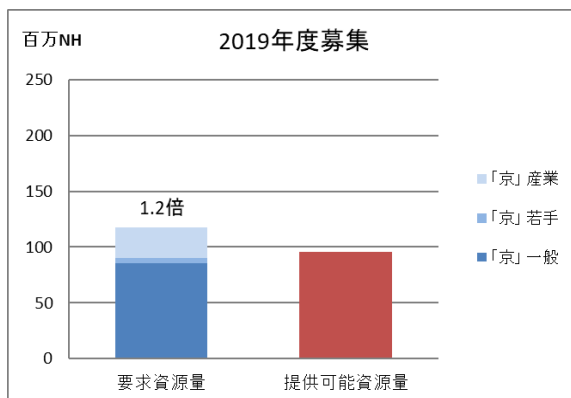


(2014 年度募集の「京」産業利用課題の件数は個別利用 7 件を含む)
(2017 年度 A 期募集の「京」一般課題の件数は半年課題 4 件を含む)

図 3 申請件数の推移

⁵ レビューの専門分野については、2016 年度利用研究課題の選定以降、科研費の分科(細目名)に合わせて細分化している。

これにより、申請された課題の分野との整合性をより適切に確保している。



*比較のため 2014 年度の産業利用課題(個別利用)の要求資源量、提供可能資源量は含まない。

**選定時の倍率を示すため、2018 年度 B 期の提供可能資源量は、募集対象期間である 2018 年 10 月～2019 年 3 月の半年分(3 割)を示す。

***選定時の倍率を示すため、2019 年度の提供可能資源量は、選定時に想定した 2019 年 4 月～9 月の半年分(3 割)を示す。

図 4 提供可能資源量と要求資源量の推移

3-2-2 重点的利用枠の利用者選定

重点的利用枠では、「京」の能力を最大限に活用し成果を上げていくため、「京」を利用して重点的に行うべき研究分野について、2019 年度も引き続き、国の方針等を踏まえ、成果創出・加速枠、ポスト「京」研究開発枠、重点化促進枠を重点分野に設定している。また、2019 年度には、国により、「富岳」成果創出加速プログラムが制度化された。これらの 4 つの枠は非公募である。

新たに設けられた「富岳」成果創出加速プログラム課題は、文部科学省がポスト「京」研究開発枠の成果を最大限活用し、2020 年度から試行的な「富岳」利用を通して、シミュレーションを中心とする計算科学と AI やデータ科学を組み合わせた新たな科学的パラダイムを構築し、早期に成果を創出することを目的として選定する。課題選定においては、外部有識者による「富岳」成果創出加速プログラム課題レビュー委員会による審査、提案が行われ、結果が登録機関に通知された後に、課題審査委員会により提案までのプロセスが審査され、選定される。2019 年度においては、2020 年度の 19 課題（うち 1 課題は 2 つのサブ課題で計算機を利用するため、利用課題数は 20 課題）を選定した。

これらの選定された課題には、2020 年度から「富岳」共用前評価環境を利用する資源が配分される（ただし、うち 2 課題は 2020 年度「富岳」の利用予定なし）。

なお、2020 年度においては、「富岳」成果創出加速プログラムに対し、「京」停止期間中に第二階層として提供する「京」以外の HPCI 計算資源も配分している。

成果創出・加速枠は一般利用枠（随時募集課題を除く）にて選定された課題を対象に、利用者への成果創出の見通し等の調査を行い、また、R-CCS における計算資源の利用実績調査の結果を併せて検討し、課題審査委員会にて選定を行う。しかし、2017 年度以降は、年 2 回募集を開始したことにより、選定に必要な十分な未利用資源が見込めないことから選定は休止している。

重点化促進枠については、文部科学省からの通知を受け選定する。2019 年度においては内閣府からの 1 課題（「相模トラフ沿いの巨大地震に伴う長周期地震動による被害予測の高度化」）を選定した。

2019年度に開催した選定委員会、課題審査委員会、学際共同研究ワーキンググループは表4の通りである。

種別	回数	開催年月日	開催地	主な議題等
選定委員会	第16回	2019 年 8 月 9 日	東京	令和 2 年度利用研究課題募集および選定の方針について
	第17回	2020 年 1 月 29 日	東京	令和 2 年度利用研究課題の採択および資源配分について
課題審査委員会	第17回	2019 年 8 月 28 日	東京	ペナルティ適用手順の具体化について
	第18回	2020 年 1 月 16 日	東京	令和 2 年度利用研究課題の採択および資源配分について
学際共同研究 WG	第1回	2019 年 7 月 12 日	東京	公募型共同研究 HPCI-JHPCN システム利用課題の募集要領について
	第2回	2020 年 2 月 7 日	東京	公募型共同研究 HPCI-JHPCN システム利用課題の審査について

種別	回数	開催年月日	開催地	備考
募集 説明会	第1回	2019年 9月5日	神戸	2020年度募集
	第2回	2019年 9月12日	東京	2020年度募集
	第3回	2019年 9月20日	東京	東京工業大学にて、 2020年度募集要領 を説明



3-2-4 募集活動

2020 年度 HPCI システム利用研究課題の募集にあたり、募集説明会⁶を表 5 の通り 3 回開催した。また、HPCI ポータルサイトでの公開を行うとともに、ポスター及びチラシを関係機関に配布した(図 6)。なお、第 3 回募集説明会は、HPCI システム全体の利用促進及び利用者の裾野拡大を目的として、資源提供機関と協力し開催した。

6 本募集においては、「京」の共用が 2019 年 8 月 16 日に終了し、「富岳」への移行準備期間となることから、「京」の課題は募集していない。しかしながら、これまでの「京」を中核とした HPCI シス

テム利用研究課題の流れを踏襲した説明会であるため、本項に報告事項として記載している。

3-3 利用支援

RIST は、特定高速電子計算機施設(「京」)の優れた演算能力等を活用し、多様な分野の研究者が円滑に研究を行えるように、一元的に情報を提供する窓口機能を設置し、利用前相談(各種手続き、利用に関する相談)を受けるとともに、技術支援を行うため研究実施相談者等による支援体制を構築・運用している。なお、この研究実施相談者は、特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律施行規則(平成 18 年文部科学省令第 28 号)の第 8 条に定められた特定高速電子計算機施設に係る数(14 名)を確保している。このような技術支援体制により、「京」の利用課題に対して、アプリケーションの調整・高度化の支援並びにアプリケーション・ソフトウェア(以下「アプリソフト」という。)の利用環境整備を実施した。

その他の支援として、「京」の利用技術の習得等を目的として、利用者向け講習会を企画して開催した。更に、HPC 分野の利用者の裾野を拡大し、将来「京」の利用者となる人を増やすための活動として、「京」利用者に限定しない一般の方を対象としたチューニング技法及び並列プログラミングに関するセミナー、各種ワークショップを開催した。

3-3-1 利用支援体制

利用支援体制として、利用者からのすべての問い合わせを受け付けるワンストップサービス窓口としてのヘルプデスクを設置・運用し、さらに産業界への利用支援も実施した(図 7)。

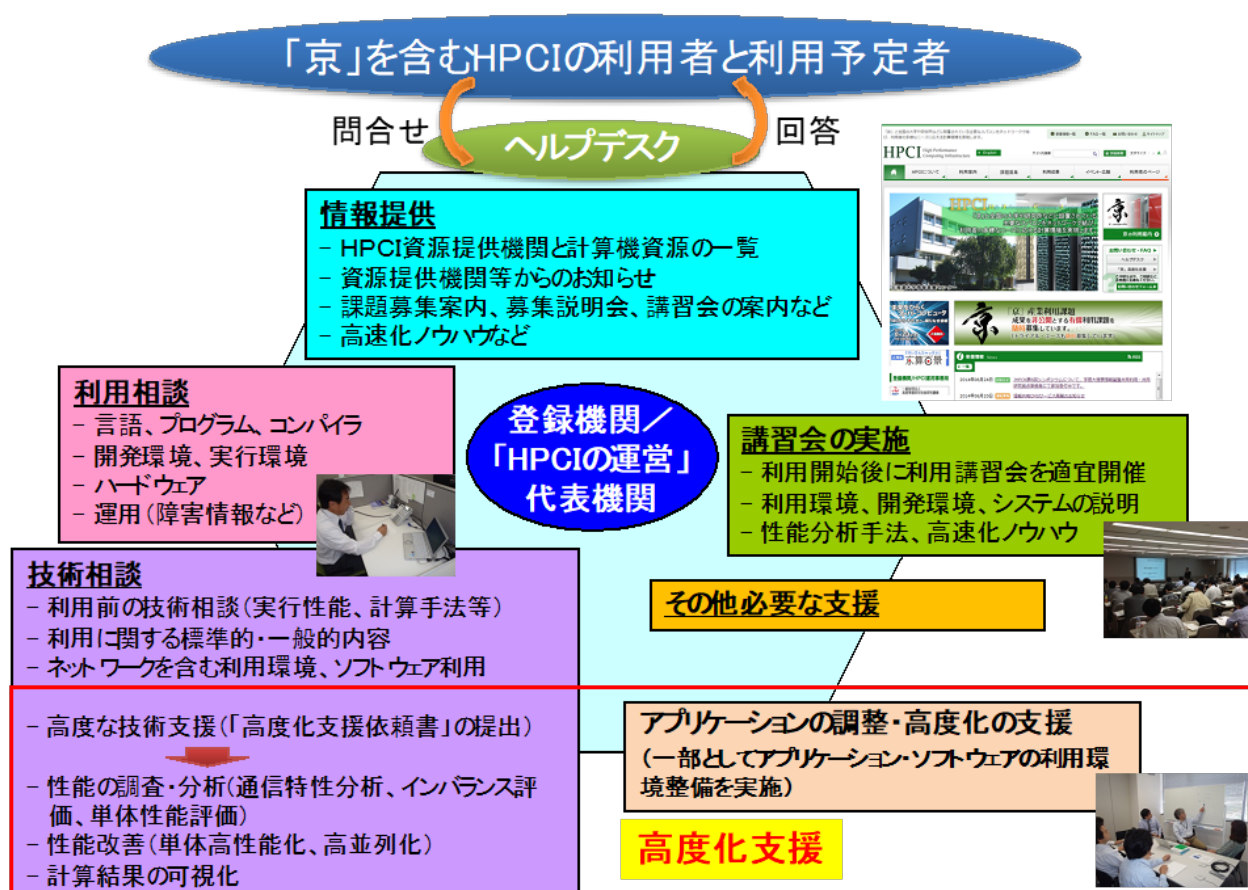


図 7 RIST における利用支援体制の概要

3-3-2 一元的利用支援窓口 : ヘルプデスク

「京」を利用するあるいは利用しようとする方への支援のため、一元的窓口としてヘルプデスクを設置し、利用前相談、利用時相談・技術支援、情報提供を行った。相談者からヘルプデスクへの問い合わせについては、HPCI ヘルプデスクシステムを活用し、問題点を的確に切り分け、効率的に実施する体制を整備した。これにより、利用者への情報提供、利用相談等を通し、早期成果創出に貢献した。また、情報共有 CMS を活用し、情報の蓄積、利用者への情報提供を行った。

1. 利用前相談

2019 年度は、「京」の共用終了に伴い次年度の定期募集は行われなかったが、一般課題(トライアル・ユース、競争的資金等獲得課題)、産業利用課題(トライアル・ユース、個別利用、ASP 事業実証利用)の随時募集があり、課題採択前から、自らが抱える課題にどのように HPC 技術を適用すれば解決できるかを相談できるコンシェルジュ機能を有する窓口として、利用促進に貢献した。

2. 利用時の相談

「京」利用時の利用者支援の一元的窓口として、ヘルプデスクが対応し、相談内容によりさらに専門化した支援を受けられるようコンシェルジュとして機能した。例えば、プログラムの調整、高度化支援に関しては課題によっては利用支援部と連携・協力し、また産業利用者に対しては産業利用を総合的に支援する産業利用推進部と連携・協力して利用支援を行った。

(1) ヘルプデスクによる技術相談

技術相談として、以下のような項目に対して情報提供や問い合わせに対する調査や回答などを実施した。

- ・システム運用
 - ・ハードウェアやベーシックソフトウェア及びミドルウェア
 - ・プログラム言語
 - ・プログラム開発環境や実行環境
 - ・利用者ポータル等「京」に装備されている各種ツール
- また、利用者からのプログラム相談、利用相談、共用ストレージのデータ保存に関する相談などに対応した。

(2) 利用時のトラブル相談

「京」を利用する利用者の一元的窓口として、トラブル相談への対応を実施した。

- ・利用者プログラムとハードウェアやソフトウェアの各コンポーネント等のシステムとの問題の切り分け等
- ・トラブルについての問題解決支援、あるいは代替策検討支援等

(3) 各種手続き相談

各課題に対する課題参加者の追加や削除、課題参加者の所属機関変更等の手続きについて支援した。

(4) 利用終了時の相談

2018 年度および 2019 年度利用研究課題の終了時の手続き(利用報告書の提出、「京」や共用ストレージにおける計算データ保管等)について、利用者の相談に対応した。また、「京」の共用終了に伴い、確実なデータ退避の注意喚起や技術的な支援を実施した。

3. R-CCS との連携・協力

「京」の利用相談、技術支援については、施設設置者である R-CCS と月 2 回の定期的なミーティングを開催するなど、密接な連携・協力を行いながら実施した。

- ・利用者のディスク領域の拡大、複数の課題間のファイル共有等の各種システム設定変更要望への対応
- ・定期保守の実施やパラメータ設定等の変更、システム障害等「京」の運用情報の提供
- ・「京」のデータ領域利用量、障害による課金の返却等、利用者との調整連絡
- ・各課題の毎月の資源利用状況を示すマンスリーレポートの配信
- ・データ退避に関する利用者への支援

4. 「京」ユーザブリーフィング

「京」利用者と R-CCS、RIST における「京」の運用と利用に関する情報提供、意見交換の場として、「京」ユーザブリーフィングを開催した。2019 年度は、8 月の「京」共用終了まで合計 2 回開催した。会場は神戸のほか、RIST 東京事務所に遠隔会場を設置し、また利用者個々のテレビ会議システムによる参加も可能とした。

会場には「京」運用に係る責任者、技術者を配置し、利用者の意見等を直接伺うことで、円滑な情報のやり取りや迅速な問題解決が可能な体制を整えた。当日の参加が出来ない利用者に対しては、「京」利用者のみがアクセスできるウェブサイトにおいて発表資料を提供した。

5. 情報提供

2018 年度に引き続き、主に利用者等からの要望や問合せ等を元にニーズの高いオープンソースソフトウェア (OSS) を選出し、翻訳、動作確認を行い「京」ポータルサイトに追加掲載した。また、情報共有 CMS を利用し、「京」利用者

のみにアクセス制限した情報 (問合せ事例集及び FAQ 計 110 件、オープンソース導入手順書 (表 6)) の提供を行った。

6. 「京」利用相談対応実績

ヘルプデスクにおける月別の利用支援の状況を示す (図 12)。「京」の利用相談件数は、2019 年 4 月から共用終了後、データ退避のための猶予期間が終了した 2019 年 9 月の間で、約 760 件であった。

表 6 オープンソースソフトウェア導入手順書 (2019 年度追加分)

ソフトウェア名	バージョン	ライセンス	ソフトウェア概要
CP2k	6.1	GNU GPLv3	固体、液体、分子および生体システムにおける、原子と分子のシミュレーションをするプログラム
Gnuplot	5.2.4	オープンソース (独自)	2 次元もしくは 3 次元のグラフを作成するためのコマンドラインアプリケーションソフトウェア
LIGGGHTS	3.8.0	GNU GPLv2	個別要素法解析システム
OCTA(COGNAC,SUSHI)	8.3	独自	ソフトマテリアルに対する統合的なシミュレータ

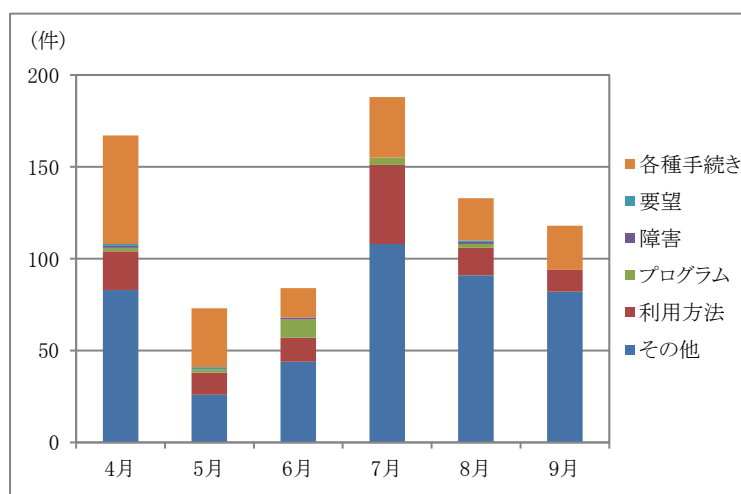


図 8 利用相談件数 (期間 2019 年 4 月 1 日～2019 年 9 月 30 日)

3-3-3 高度化支援

2019 年度に実施した高度化支援を加え、共用開始の 2012 年度下期以降の総高度化支援件数は 174 件となった。過去 7 年に亘り、毎年、一定数の支援を行っている(表 7)。2 年目以降は相対的に産業界からのニーズが高かったが、6 年目以降は理研と協力してシステムの稼働率向上を目指し、共用終了まで支援を実施した(図 9)。

表 7 高度化支援件数内訳表

年度	「京」				合計
	戦略	重点	一般	産業	
2012	7		3	2	12
2013	10		12	15	37
2014	7		3	18	28
2015	9		7	9	25
2016		5	6	11	22
2017		6	7	11	24
2018		15	2	5	22
2019		4	0	0	4
小計	33	30	40	71	174

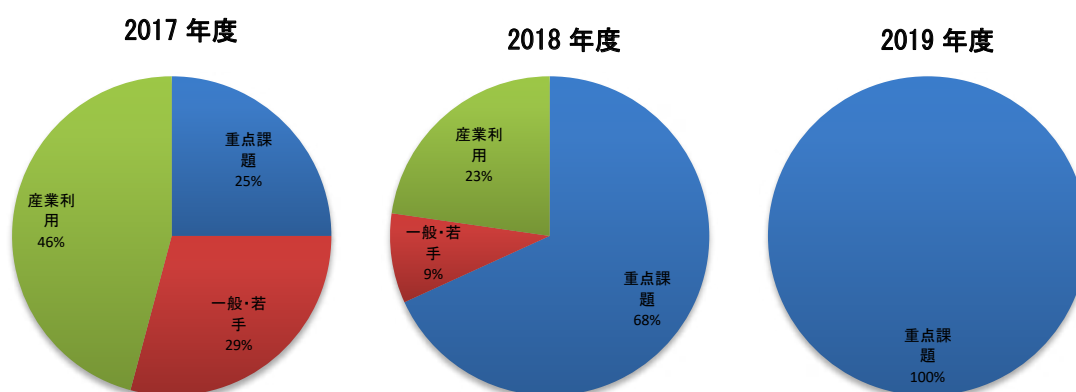


図 9 過去 3 年間の高度化支援における対象別比率

一方、分野別に見ると工学・ものづくりと物質・材料・化学は、包含する範囲が広いとため、例年 20%～50%程度を占めている(図 10)。次いで、環境・防災・減災(10%～20%前後)と続いており、この傾向は例年変わっていない。一方で、毎年一定数(5%～15%程度)の支援を実施してきたバイオ・ライフは、2019 年度の支援実績がなく、原子力・核融合は過去 6 年間支援実績が無く、物理・素粒子・宇宙も過

去 3 年間で 2 件にとどまっている。また、情報・計算機科学、数理学は、2016 年度に初めて 1 件支援して以来、2018 年度に 1 件の支援を実施した。

なお、高度化支援の支援事例は、下記 HPCI ポータルサイトにおいて公開している。

https://www.hpci-office.jp/pages/support_past

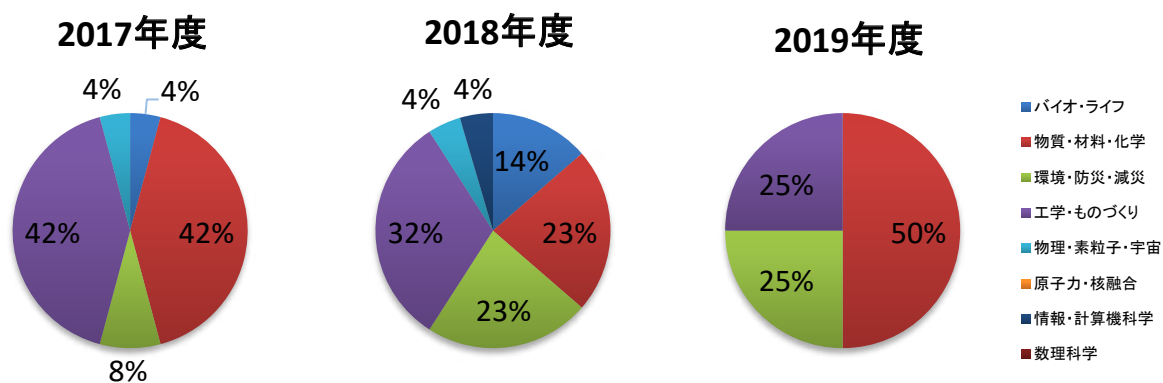


図 10 過去 3 年間の高度化支援における分野別比率

3-3-4 アプリソフト利用環境整備

2017 年度より、ユーザの利便性の大幅な向上、成果の早期創出、システムの効率的な利用、ユーザの裾野拡大等を目的に、アプリソフト利用環境整備を行っている。「利用者が多いまたは見込まれるアプリソフト」や「国で開発された重要なアプリソフト・新しい分野として利用が見込まれるアプリソフト」をユーザがすぐに利用できる環境の整備を進めた。

利用者のニーズ、有識者の意見、海外を含めた動向調査結果等を踏まえ、2017,2018 年度において「京」に整備した、OpenFOAM、GROMACS、LAMMPS、Quantum ESPRESSO の 4 本のオープンソースソフトウェア（以下「OSS」という。）は、2019 年 8 月に共用を終了するため、新たな整備を行わなかった。

表 8 これまでに整備した OSS とそのバージョン

ソフトウェア名	バージョン
OpenFOAM(OpenCFD 版)	v1612+,v1706,v1712,v1806
OpenFOAM(Foundation 版)	2.4.0, 4.1, 5.0, 6.0
GROMACS	5.07, 5.1.5 2016.4, 2016.5 2018,2018.1,2018.2,2018.3
LAMMPS	7-Dec-15, 17-Nov-16 11-Aug-17, 22-Aug-18
Quantum ESPRESSO	5.1.1, 6.1, 6.2.1, 6.3

3-3-5 講習会・セミナー

表 9 のとおり、2019 年度は共催を含め、21 回の講習会・

セミナーを開催した（主催 9 回、共催 12 回）。RIST が主催したものでは、「京」の共用終了を前に最後の初中級者向けの定期講習会を 2 回（内、RIST の FX10 を使用したハンズオン講習会を 1 回）、また、利用者の裾野を広げる一般利用者向けの HPC プログラミングセミナー・アプリソフト講習会を 6 回、アプリソフトの入門者向け講習会を 1 回開催した。また共催として、ポスト「京」重点課題と連携して開催するアプリソフト講習会を 8 回、大学と連携した OSS に関する講習会・セミナーを 4 回実施した。その他、ワークショップについては 5-2 を参照のこと。

主催した講習会・セミナーでは参加者に対してアンケート調査を行っている。2019 年度の回答数は計 302 件で、その中で内容の満足度を尋ねた項目では、満足とほぼ満足が合わせて 93%を占めており、概ね高い評価を得ている（図 11）。この結果から、RIST の開催する講習会等が、ユーザのニーズに応えていると考えている。一方、6%程度の参加者からやや不満との回答があった。これらについては、その内容を分析して問題点を抽出し、次年度以降の改善点として活かしたい。

満足度(講習会后アンケートにて集計)

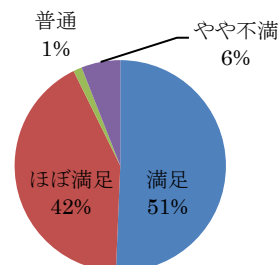


図 11 2019 年度 RIST 主催講習会の満足度調査

表 9 2019 年度に利用支援活動として開催した講習会・セミナーの一覧(主催・共催順)

	講習会・セミナー		開催日	会場	参加者
1	第 1 回「京」初中級者向け講習会 「京」初級者向け入門コース+ハンズオンと「京」見学会	主催	2019 年 4 月 11 日	R-CCS(神戸)	10
2	第 1 回「京」初中級者向け講習会 「京」中級者向けコース	主催	2019 年 4 月 12 日	R-CCS(神戸)	2
3	第 24 回 HPC プログラミングセミナー チューニング技法入門、並列プログラミング入門 (OpenMP 編、MPI 編)	主催	2019 年 5 月 16 日～ 5 月 17 日	RIST 東京事務所(東京)	24
4	第 25 回 HPC プログラミングセミナー Introduction to tuning on manycore architectures, アクセラレータ入門	主催	2019 年 5 月 24 日	RIST 東京事務所(東京)	22
5	第 26 回 HPC プログラミングセミナー チューニング技法入門、並列プログラミング入門 (OpenMP 編、MPI 編)	主催	2019 年 9 月 19 日～ 9 月 20 日	秋葉原 UDX(東京)	45
6	第 27 回 HPC プログラミングセミナー Introduction to tuning on manycore architectures, アクセラレータ入門	主催	2019 年 9 月 24 日	秋葉原 UDX(東京)	52
7	第 28 回 HPC プログラミングセミナー チューニング技法入門、並列プログラミング入門 (OpenMP 編、MPI 編)	主催	2020 年 2 月 5 日～ 2 月 6 日	渋谷ソラスタ(東京)	23
8	第 29 回 HPC プログラミングセミナー Introduction to tuning on manycore architectures, アクセラレータ入門	主催	2020 年 2 月 7 日	渋谷ソラスタ(東京)	24
9	第 3 回 LAMMPS 入門講習会	主催	2019 年 11 月 29 日	RIST 東京事務所(東京)	8
10	LAMMPS の基礎的利用セミナー	共催	2019 年 7 月 11 日	高度計算科学研究支援センタ ー(神戸)	21
11	LAMMPS での仮想実験セミナー	共催	2019 年 7 月 12 日	高度計算科学研究支援センタ ー(神戸)	17
12	HΦ講習会ー全国共同利用大規模並列計算システム OCTOPUS を用いたハンズオンー	共催	2019 年 10 月 16 日	大阪大学(豊中)	8
13	PHASE/0 講習会ーTSUBAME3.0 を用いたハンズオンー	共催	2019 年 11 月 25 日	東京工業大学(東京)	7
14	SALMON 講習会ー並列コンピュータ LX 406Re-2 を 用いたハンズオンー	共催	2019 年 11 月 28 日	東北大学(仙台)	9
15	OpenMX 講習会ースーパーコンピュータ Cray XC40 を 用いたハンズオンー	共催	2019 年 12 月 2 日	京都大学(京都)	8
16	FrontISTR 講習会 ITO を用いたハンズオン	共催	2019 年 12 月 3 日	九州大学(福岡)	6
17	ABINIT-MP 講習会ーCX400 を用いたハンズオンー	共催	2019 年 12 月 6 日	名古屋大学(名古屋)	9
18	CCMS ハンズオン:xTAPP 講習会	共催	2019 年 12 月 16 日	東京大学(柏)	3
19	LAMMPS の基礎的利用セミナー	共催	2019 年 12 月 17 日	高度計算科学研究支援センタ ー(神戸)	13
20	LAMMPS の仮想実験セミナー	共催	2019 年 12 月 18 日	高度計算科学研究支援センタ ー(神戸)	12
21	ABINIT-MP 講習会ーTSUBAME3.0 を用いたハンズ オンー	共催	2020 年 1 月 28 日	東京工業大学(東京)	9

3-3-6 利用支援環境の整備・運用

「京」利用者への支援の一環として、利用支援用スーパーコンピュータ FX10(以下、「利用支援用スパコン」という。)の運用を、2013 年 11 月より開始し、2019 年度も継続して運用した。利用支援用スパコンは、各種講習会での実習や産業利用課題を含む HPCI 利用研究課題への高度化支援に活用されることで、産業利用の裾野拡大に向けた取り組みの推進に寄与している。その他、申請支援システム等のユーザ管理支援システムの運用を継続した。

1. 利用支援用スパコンの運用

(1) 利用支援用スパコンの整備

利用支援用スパコンは各種講習会での実習や利用支援の他に、利用前相談におけるソフトウェアの動作確認や

性能調査にも活用されている。2019 年度においては、2019 年 8 月の「京」の運用終了の影響を受け、「京」と同一アーキテクチャを持つ利用支援用スパコンの利用目的を失いつつあることから利用率が低下した。

利用支援用スパコンの 2019 年度の運用状況とシステムの概要を図 12 と図 13 にそれぞれ示す。

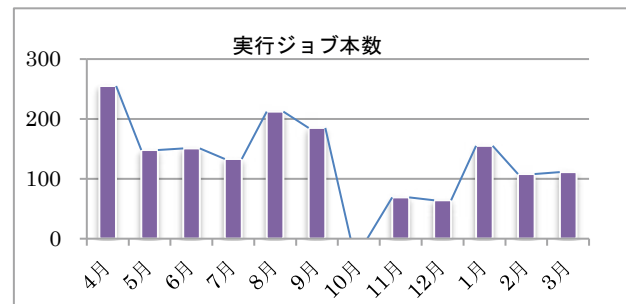


図 12 利用支援用スパコンの運用状況(2019 年度)

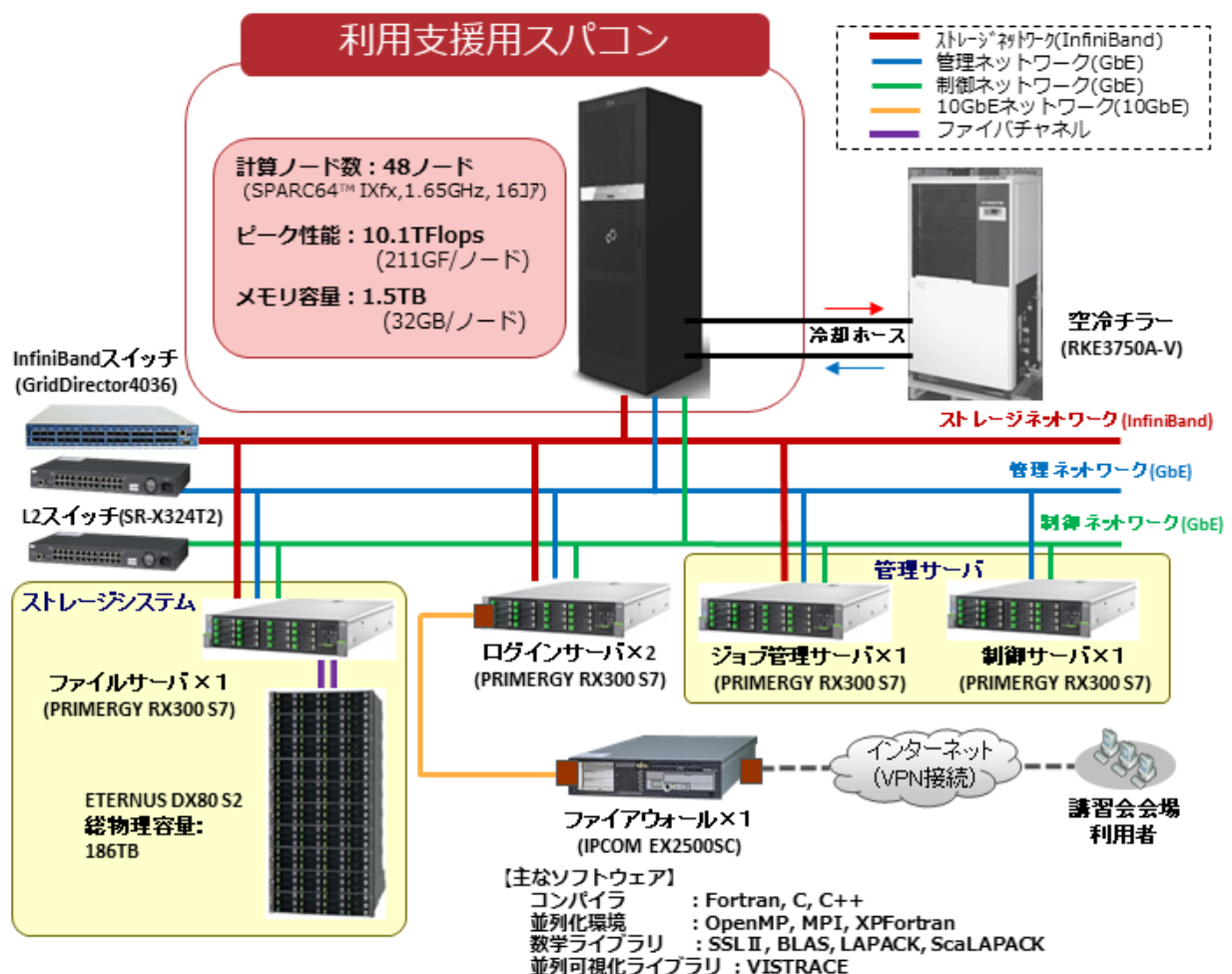


図 13 利用支援用スーパーコンピュータシステムの概要

(2) 利用支援用スパコンの活用

1) 講習会

2019 年度は、スパコンを使った「京」初級者向け入門コースの一環としてハンズオンを計 1 回(神戸で 1 回)開催した。受講者は計 10 名であった。神戸でのハンズオンの様子を図 14 に示す。



図 14 利用支援用スパコンを用いたハンズオン講習会の様子
(2019 年 4 月 11 日、神戸、定期開催)

「京」を講習会等で使用することはジョブ待ちの時間の調整が必要なこと、同時に大量のユーザが使用することによるログインノードへの負荷の懸念があるため、「京」と同等の計算機アーキテクチャを搭載した利用支援用スパコンを活用することにより、受講者全員に「京」と同等の計算環境を提供し、スムーズな演習課題の実習による効果的な「京」の利用技術習得を可能にした。経験の浅い新規課題参加者に実機を通じて「京」の操作手順を体験する機会を提供することで、より実践的な講習会を実施できた。

2) 「京」の利用支援に係るスキルアップを目的とした共同研究

「京」の利用支援業務に携わる研究実施相談者のスキルアップを目的とし、「京」で頻繁に利用されているアプリケーションを用いた共同研究を実施した。2019 年度は、2018 年度に引き続き、平面波密度汎関数法に基づく第一原理計算オープンソースソフトウェア Quantum ESPRESSO(QE)を利用し、磁気応答計算における遮蔽定数の評価を行った。特に、リン原子核を持つ物質の種類に応じた計算値の変動傾向を調査し、当該分野の de facto とされる商用コード VASP との結果比較も実施した。

3) 利用支援

アプリソフトの利用環境整備やその他アウトリーチ活動等に利用支援用スパコンを活用した(表 12)。

表 10 利用支援での活用事例

利用枠/利用目的	分野	プログラム
アプリソフト利用環境整備	材料物性	Quantum ESPRESSO

4) 産業利用の裾野拡大に向けた活動

産業利用の裾野拡大に向けた活動の一環として、「京」上での産業利用分野について研究利用課題数の多かったオープンソフトウェアのビルド手順書及び動作確認に関わるドキュメントを整備する際、利用支援用スパコンを活用した。これらのドキュメント類は「京」の課題実施者を対象とした情報共有コンテンツマネジメントシステム(CMS)に登録し、利用者の便宜を図った。

導入手順書の作成に当たっては、小規模なジョブを何度も実行する必要があるため、待ち時間の長い「京」ではなく利用支援用スパコンを利用することで、効率的に短期間で作業を完了することができた。導入手順書が整備されているソフトウェアは 3-3-2 を参照されたい。

2. ユーザ管理支援システムの運用

「京」を中核とする HPCI システムを使用するためのユーザ管理支援システムの維持管理及び運用を行っている。「京」の運用は 2019 年 8 月にて終了となったので、それ以降は「京」以外の HPCI システムを利用する課題向けとポスト「京」研究開発枠の課題向けに運用を行った。

(1) 申請支援システム

2020 年度課題募集(「京」以外の HPCI システム)に向けた機能強化版(英語対応、操作性改善等)にて、課題申請の受付を実施した。申請支援システムは利用者が課題申請をする他、HPCI 運用事務局やシステム構成機関等が使用する機能から構成されている。

(2) 情報共有 CMS

課題参加者間の情報共有や課題利用者と HPCI 運用事務局/システム構成機関との情報共有を支援するためのサービスを運用している。情報共有 CMS では情報共有スペースと呼ばれる単位に区別して管理している。情報共有 CMS の仕組みを図 15 に示す。



図 15 情報共有 CMS の仕組み

(3)ヘルプデスクシステム

ヘルプデスク受付に関わる実績管理のシステムであり、利用者からの問合せに対してメール及び Web 受付けをしている。Web 受付では、問合せの受付に加え、対応状況を随時 Web で確認することができ、ヘルプデスク業務の効率向上に繋がっている。

(4)ピア・レビューシステム

応募課題のピア・レビューを支援するためのシステムを運用しており、レビュアーからの操作性を中心とした改善要望に応えながら機能追加を行っている。2020 年度課題のレビュー時に活用され、レビュー作業の効率化に繋がっている。

3-4 産業利用促進

3-4-1 産業利用支援体制強化

「京」の利用においては、産業界が積極的に「京」を活用し、所期の成果を挙げて各社の研究開発が加速され、ひいては我が国の国際競争力が強化されることが強く期待されている。「京」の産業利用を効率的に推進するために2013年4月に設置した産業利用推進室において、産業利用推進コーディネーター及び産業応用アプリケーションの主要分野や可視化対応に精通した支援員を配した体制を整備した。また、「京」の利用相談や支援を対面で受けたいとの関東の企業ニーズに対応するため、産業利用推進室の東京駐在を設置し、高度化支援や企業への普及促進活動を含む体制を整備した。2019年度は、5月に産業利用推進部へと改称し、この体制のもとで産業利用推進活動を実施した。

3-4-2 産業利用相談・支援実績

2019年度に産業利用相談・支援として実施した活動を下記5項目に分けて記載する。

1. 利用相談

課題申請前の時点から自社の課題にどのようにHPC技術を適用すれば解決できるかを相談できる、産業利用に関するコンシェルジュ的な相談業務を行っている。応募を検討している企業の多くが、「京」あるいは「富岳」を使いこなせるのか、セキュリティは大丈夫か、などの不安を抱えており、相談の中でそれらが解消され、具体的な応募に至るよう努めた。神戸センターとアクセスポイント東京（産業利用相談・支援拠点）において、HPCIの利用相談として延べ36件に対応した。

2. 高度化支援

「京」の共用が2019年8月16日に終了したため、「京」の産業利用課題に対する高度化支援の依頼は無かった。「富岳」への準備として、ポスト「京」性能評価環境利用課題の高度化支援を産業利用課題3課題（3社）に対して実施した。支援対象はいずれもオープンソースソフトウェア（OSS）で、LAMMPS（分子動力学法）、Quantum ESPRESSO（第一原理計算）、OpenFOAM（流体解析）の3本であった。

これまでに実施した高度化支援の具体的な例は、HPCIポータル利用支援のページに掲載している。

https://www.hpci-office.jp/pages/tuning_support

3. アクセスポイント東京における利用支援

産業利用支援拠点であるアクセスポイント東京において、産業界における「京」を中核とするHPCIの利用を促進するため、技術的な利用相談や高並列計算の指導・助言、プリ・ポスト処理等の利用支援を実施した。

また本年度は、産業界の関心が高いセキュリティと大規模データハンドリングについて「京」及びHPCIシステム構成機関と産業界との情報交換会を開催した。セキュリティの状態を各機関に問い合わせるためのひな型質問シート（項目）及びアクセスポイント東京と「京」及び各HPCIシステム構成機関とのデータ転送速度の実測データが成果として得られた。

4. アプリケーション情報整備・利用環境整備

一般的に、産業利用では評価が高く、自社の業務で使い慣れている有償ソフトウェアが使われることが多いが、「京」においては、オープンソースソフトウェア（OSS）や大規模シミュレーションの実績のある国家プロジェクトで開発・整備されてきたソフトウェアを利用する課題も多い。このような課題の利用相談で上位を占めるのは、ソフトウェアに関する内容であり、ソフトウェアの動作実績や入手方法、実行スクリプトの事例などである。

2019年度は「京」の共用が終了することを踏まえ、これまで整備してきたOSS（表11）の「京」上でのバージョンアップは実施せず、「富岳」の整備に向けて、Arm環境での性能・技術調査を実施した。

表 11 整備対象のオープンソースソフトウェア

GROMACS	分子動力学計算
LAMMPS	分子動力学計算
OpenFOAM	流体解析
Quantum ESPRESSO	第一原理計算

また、HPCI利用研究課題への応募を検討されている方と利用者を対象に、HPCIポータルのソフトウェア検索ページにおいて、利用可能なソフトウェアの検索機能の強化と

関連情報へのリンクを充実させた。

具体的には、興味のあるソフトウェアを見つけやすくするためにソフトウェアの名称あるいは分類による検索を可能にし、HPCI の利用報告書及び各資源提供機関のソフトウェア関連ページへのリンクを張り、特に利用者の多いソフトウェアに関しては詳細情報（公式ページ、ライセンス情報、RIST が整備したブリインストール情報、その他関連情報）へのリンクを追加することで、利便性を向上させた。

5. 普及・利用促進活動

2019 年度は産業利用の企業への普及・利用促進活動として、以下の活動を実施した。

(1) シンポジウム、報告会、ワークショップの主催 5 回

- 1) 第 6 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(主催)
ー物質構造の階層性とフォノン物性の理解ー
- 2) 第 6 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会(主催)
ースーパーコンピュータ「富岳」の胎動、計算科学、AI の融合に向けてー
- 3) 第 3 回 CAE ワークショップ(主催)
ースーパーコンピュータ「京」から「富岳」へ
CAE シミュレーションの最前線ー
- 4) 第 8 回材料系ワークショップ(主催)
ー「富岳」時代の材料系シミュレーションの最前線ー
- 5) 第 9 回材料系ワークショップ(主催)
ー「富岳」で飛躍へ！計算データの価値ー

(2) 展示会等への出展及びポスター展示 6 回

- 1) ISC 2019
- 2) SC19
- 3) 第 16 回 SPring-8 産業利用報告会
- 4) 第 6 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
- 5) 国際フロンティア産業メッセ 2019
- 6) スーパーコンピュータ・ソリューションセミナー 2019

(3) 講習会・セミナー 10 回

- 1) HΦ講習会(共催)

- 2) PHASE/0 講習会(共催)
- 3) SALMON 講習会(共催)
- 4) 第 3 回 LAMMPS 入門講習会(主催)
- 5) OpenMX 講習会(共催)
- 6) FrontISTR 講習会(共催)
- 7) ABINIT-MP 講習会(共催)
- 8) LAMMPS の基礎的利用セミナー(共催)
- 9) LAMMPS での仮想実験セミナー(共催)
- 10) ABINIT-MP 講習会(共催)

(4) 利用相談会の主催 12 回

- 1) 2019 年度 J-PARC MLF 産業利用報告会
- 2) 第 6 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会
- 3) 第 3 回 CAE ワークショップ
- 4) 第 8 回材料系ワークショップ
- 5) 第 9 回材料系ワークショップ
- 6) 第 24 回 HPC プログラミングセミナー
(プログラミング技法入門)
- 7) 第 25 回 HPC プログラミングセミナー
(メニーコアとアクセラレータ入門)
- 8) 第 26 回 HPC プログラミングセミナー
(プログラミング技法入門)
- 9) 第 27 回 HPC プログラミングセミナー
(メニーコアとアクセラレータ入門)
- 10) 第 28 回 HPC プログラミングセミナー
(プログラミング技法入門)
- 11) 第 29 回 HPC プログラミングセミナー
(メニーコアとアクセラレータ入門)
- 12) 第 3 回 LAMMPS 入門講習会

(5) 共催・協賛・後援 9 回

- 1) 2019 年度 J-PARC MLF 産業利用報告会(協賛)
- 2) ポスト「京」重点課題(7) 第 5 回シンポジウム「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成(CDMSII)」(協賛)
- 3) SPring-8 データ科学研究会(第 7 回)／第 43 回 SPring-8 先端利用技術ワークショップ／兵庫県マテリアルズ・インフォマティクス講演会(第 3 回)「放射光計測インフォマティクス」(協賛)

- 4) 第 16 回 SPring-8 産業利用報告会(協賛)
- 5) 第 4 回ポスト「京」重点課題⑥シンポジウム(後援)
- 6) AHeDD2019/IPAB2019 合同シンポジウム(後援)
- 7) 第 12 回スーパーコンピューティング技術産業応用シンポジウム(協賛)
- 8) 「第 4 回元素戦略シンポジウム」 ～産学連携研究新展開～(共催)
- 9) The 2nd R-CCS International Symposium(後援)

開催情報等の詳細については、講習会・セミナーは 3-3-4 の表 9、シンポジウム・会議・報告会は 5-1、研究会・ワークショップは 5-2、イベントは 6-4 を参照。

3-5 利用状況

3-5-1 「京」全体

1. 2019 年度に実施された課題の利用実績

2019 年度に実施された一般利用枠、ポスト「京」研究開発枠重点課題及び萌芽的課題の利用実績は、それぞれ表 13、表 14 及び表 15 に示す通りである。2019 年度においては、「京」の共用が 8 月 16 日で終了したため、利用期間は 4 月からの 4.5 か月間であった。

なお、利用率改善策として選定委員会により審議、承認された割当資源量を使い切った課題を対象に、ジョブの実行優先度を下げ、超過利用を認める制度¹⁾は、2017

年度に引き続き 2018 年度以降も適用された。併せて、同じく待機ノードを減らすことで利用率を改善する方策として 2014 年度に導入されたジョブキュー micro に対する更なる利用促進として 2018 年 10 月から一部制約の緩和²⁾が試行されている。表 12 表 13 及び表 14 に示す利用実績は、これらの制度による利用分の実績を含んでいる。

また、2019 年度には重点化促進課題が実施され、約 632 万ノード時間積(NH)が利用された。

表 12 2019 年度一般利用枠 利用実績

		課題数	割当資源量 (NH)		利用実績 (NH)		利用率	
			2019年度 (※2)	(参考) B期課題の 通期合計	2019年度 (※2)	(参考) B期課題の 通期合計	2019年度 (※2)	(参考) B期課題の 通期利用率
一般課題	2018年度B期(※1)	8	23,233,815	55,113,867	17,672,545	46,098,618	76.1%	83.6%
	2019年度	14	55,913,320	-	40,679,700	-	72.8%	-
	競争的資金等獲得課題(随時)	0	-	-	-	-	-	-
	トライアル・ユース(随時)	0	-	-	-	-	-	-
	小計	22	79,147,135	-	58,352,245	-	73.7%	-
若手人材育成課題	2018年度B期(※1)	2	3,463,653	8,000,800	2,683,771	6,570,278	77.5%	82.1%
	2019年度	2	2,200,000	-	1,540,686	-	70.0%	-
	小計	4	5,663,653	-	4,224,457	-	74.6%	-
産業利用課題	実証利用(2018年度B期)(※1)	1	2,000,000	8,740,000	1,989,421	7,600,194	99.5%	87.0%
	実証利用(2019年度)	7	19,800,000	-	19,913,263	-	100.6%	-
	個別利用(随時)	8	2,836,494	-	381,603	-	13.5%	-
	トライアル・ユース(随時)	1	50,000	-	1	-	0.0%	-
	ASP事業実証利用(随時)	2	2,200,100	-	190,383	-	8.7%	-
	小計	19	26,886,594	-	22,474,671	-	83.6%	-
一般利用枠 合計		45	111,697,382	-	85,051,373	-	76.1%	-

*1:2018 年度 B 期課題(2018 年度下期～2019 年度上期)については、2019 年度実施分の課題数、割当資源量、利用実績、利用率を示し、割当資源量は 2018 年度下期に前倒し利用した分を除く、2019 年度上期に利用可能な資源量を示す。当課題全体の割当資源量、利用実績、利用率は通期欄を参照。

*2:2019 年度の割当資源量、利用実績、利用率は、共用終了(2019 年 8 月 16 日)時点を示す。

¹ R-CCS 及び RIST から利用率改善策として提案し、第 9 回選定委員会(2016 年 2 月 4 日開催)において承認された。

² 同じく第 14 回選定委員会(2018 年 8 月 6 日開催)において承認された。

表 13 2019 年度ポスト「京」研究開発枠重点課題 利用実績

	課題数	割当資源量 (NH)	利用実績 (NH)	利用率
重点課題1	3	7,627,869	7,279,235	95.4%
重点課題2	3	6,059,511	5,535,188	91.3%
重点課題3	2	4,247,802	2,134,984	50.3%
重点課題4	3	12,032,682	13,652,509	113.5%
重点課題5	3	6,335,883	6,279,778	99.1%
重点課題6	4	6,176,103	10,840,873	175.5%
重点課題7	7	8,643,245	8,351,354	96.6%
重点課題8	6	9,317,968	9,300,547	99.8%
重点課題9	3	12,450,328	13,007,277	104.5%
ポスト「京」重点課題 合計	34	72,891,391	76,381,745	104.8%

表 14 2019 年度ポスト「京」研究開発枠萌芽的課題 利用実績

	課題数	割当資源量 (NH)	利用実績 (NH)	利用率
萌芽的課題1-1	3	3,384,345	4,891,294	144.5%
萌芽的課題1-2	1	724,787	621,007	85.7%
萌芽的課題1-3	3	561,956	399,326	71.1%
萌芽的課題2-1	4	759,655	580,496	76.4%
萌芽的課題2-2	1	259,107	258,226	99.7%
萌芽的課題3-1	4	1,426,874	973,082	68.2%
萌芽的課題4-1	5	724,787	590,590	81.5%
萌芽的課題4-2	1	257,531	249,891	97.0%
ポスト「京」萌芽的課題 合計	22	8,099,042	8,563,912	105.7%

2. 課題参加者数

2019 年度実施課題による「京」共用終了(2019 年 8 月 16 日)時点の一般利用枠(一般課題、若手人材育成課題、産業利用課題)、ポスト「京」研究開発枠重点課題及び萌芽的課題、重点化促進課題における課題参加者数は、産業界 248 名、大学・研究機関で 821 名、国立研究開発法人 239 名、の合計 1,308 名であった(表 15)。

表 15 2019 年度課題参加者数

利用枠	利用者数 内訳			利用者数
	産業界	大学・研究機関	国立研究開発法人	
一般課題	1	108	48	157
若手人材育成課題	0	3	1	4
産業利用課題	137	105	12	254
ポスト「京」重点課題	100	435	144	679
ポスト「京」萌芽的課題	7	170	34	211
重点化促進枠	3	0	0	3
合計	248	821	239	1,308

3-5-2 一般利用枠（一般課題）

1. システム利用実績

2019 年度の一般課題における月別のシステム利用実績の推移を図 16 に示す。2019 年度は上期中に「京」の共用終了が予定されていたことから、利用期間を共用終了までとして、年 2 回募集による 2018 年度 B 期課題の後半部分と、2019 年度課題が実施された。2018 年度 B 期課題は採択された課題のうち、2019 年度上期の利用を希望した 8 課題が実施され、2019 年度課題は半年課題として 14 課題が実施された。

「京」共用終了までの 4.5 か月においては、2018 年度 B 期課題が期間を通じて堅実な利用実績となった。一方、2019 年度課題は例年の立ち上がりの鈍い傾向はみられず、利用期間が限られていることから、前半から好調な利用実績となった。このため、利用実績はほぼ一定の割合で増加する傾向が見られ、最終的な利用実績は 73.7%となった。2018 年度通年の利用実績 84.1%に比べ低くなっているのは、各課題に対する割当資源量は 6 か月分配分しており、これを 4.5 か月の期間で消費する必要があり、一部は期間内に消費できなかったためである。

なお、競争的資金等獲得課題及び一般課題（トライアル・ユース）は期間を通じて利用はなかった。

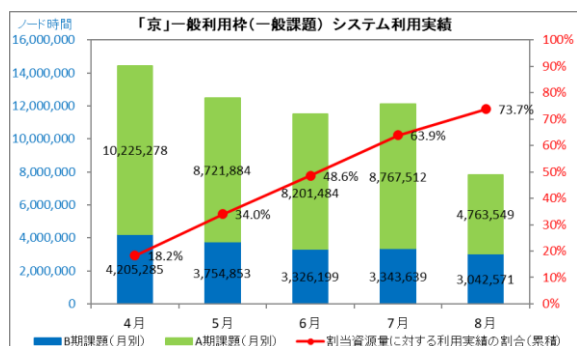


図 16 システム利用実績（資源量）の月別推移（2019 年度）

〔一般利用枠（一般課題）〕

2. 分野別利用実績

一般課題（随時募集を含む）のシステム利用実績（資源量）の分野別比率を図 17 に示す。

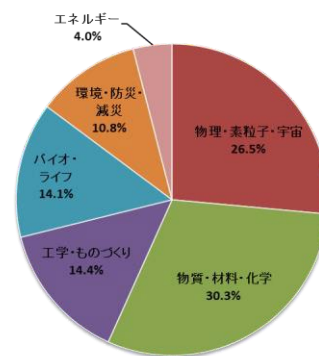


図 17 システム利用実績（資源量）の分野別比率（2019 年度）

〔一般利用枠（一般課題）〕

3-5-3 一般利用枠（若手人材育成課題）

1. システム利用実績

2019 年度の若手人材育成課題における月別のシステム利用実績の推移を図 18 に示す。若手人材育成課題についても、一般課題と同様に、利用期間を共用終了までとして、年 2 回募集による 2018 年度 B 期課題の後半部分と、2019 年度課題が実施された。2018 年度 B 期課題は採択された課題のうち、2019 年度上期の利用を希望した 2 課題が実施され、2019 年度課題は半年課題として 2 課題が実施された。

「京」共用終了までの 4.5 か月においては、2018 年度 B 期課題が期間を通じて堅実な利用実績となった。一方、2019 年度課題は 7 月度に集中した利用が見られた。このため、利用実績は 7 月度に増加する傾向が見られ、最終的な利用実績は 74.6%となった。2018 年度通年の利用実績は 68.1%と低かったため、昨年度比では上昇しているが、例年の利用実績に比べ、低くなっている。これは、一般課題と同様に、各課題に対する割当資源量は 6 か月分配分しており、これを 4.5 か月の期間で消費する必要があり、一部は期間内に消費できなかったためである。

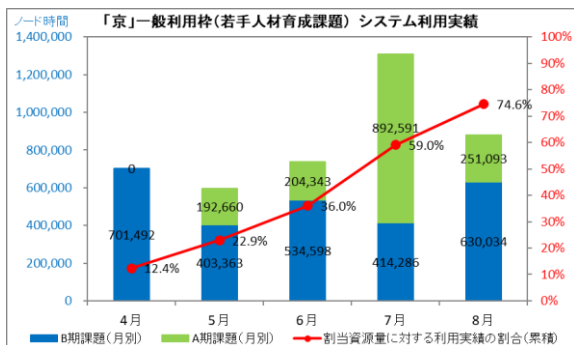


図 18 システム利用実績(資源量)の月別推移(2019 年度)
[一般利用枠(若手人材育成課題)]

2. 分野別利用実績

若手人材育成課題のシステム利用実績(資源量)の分野別比率を図 19 に示す。

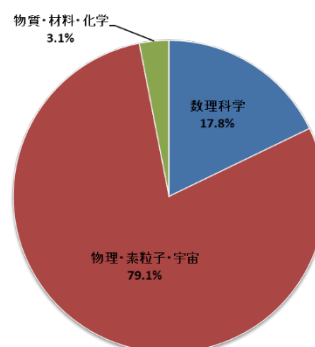


図 19 システム利用実績(資源量)の分野別比率(2019 年度)
[一般利用枠(若手人材育成課題)]

3-5-4 一般利用枠(産業利用課題)

1. システム利用実績

2018 年度の産業利用課題(実証利用)における月別のシステム利用実績の推移を図 20 に示す。産業利用課題(実証利用)についても、一般課題と同様に、利用期間を共用終了までとして、年 2 回募集による 2018 年度 B 期課題の後半部分と、2019 年度課題が実施された。2018 年度 B 期課題は採択された課題のうち、2019 年度上期の利用を希望した 1 課題が実施され、2019 年度課題は半年課題として 7 課題が実施された。

「京」共用終了までの 4.5 か月においては、2018 年度 B 期課題は 7 月度を中心に割当資源量のほぼ全量を消費した。また、2019 年度課題についても、前半の使用は伸び悩んだものの、期間内に割当資源量を全量消費した。このため、利用実績は超過利用分を含め、100.5%となった。2018 年度通年の利用実績 87.7%に比べ大幅に上昇する結果となった。

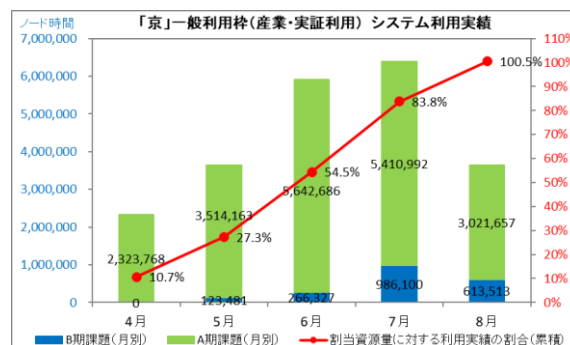


図 20 システム利用実績(資源量)の月別推移(2019 年度)

〔一般利用枠(産業利用課題(実証利用))〕

産業利用課題(個別利用)の月別のシステム利用実績の推移を図 21 に示す。産業利用課題(個別利用)は期間を通じて 8 件の課題が実施され、利用実績は 13.5%であり、2018 年度の 55.4%から減少した。8 件の課題中、2018 年度から継続実施の課題が 5 件あり、共用終了までの早期に利用を終了したものと考えられる。

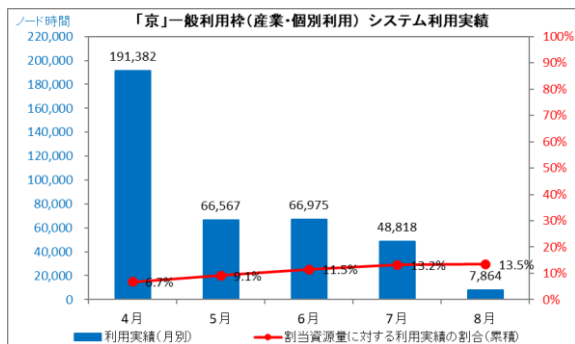


図 21 システム利用実績(資源量)の月別推移(2019 年度)
〔一般利用枠(産業利用課題(個別利用))〕

また、産業利用課題(トライアル・ユース)は期間を通じて 1 件の課題実施に留まった。利用実績はほぼ 0%で、採択されたものの、期間内の利用には至らなかった模様である。

産業利用課題(ASP 事業実証利用)については、2018 年度に 2 件の応募があり、2019 年度も継続利用されたが、利用実績は 8.7%に止まった。

2. 分野別利用実績

産業利用課題(随時募集を含む)のシステム利用実績(資源量)の分野別比率を図 22 に示す。

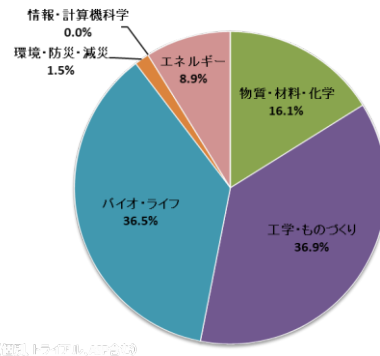


図 22 システム利用実績(資源量)の分野別比率(2019 年度)
〔一般利用枠(産業利用課題)、随時募集を含む〕

3-5-5 ポスト「京」研究開発枠 重点課題

1. システム利用実績

2019 年度のポスト「京」研究開発枠重点課題³における月別のシステム利用実績の推移を図 23 に示す。ポスト「京」研究開発枠重点課題は 2015 年度下期から利用が開始され、通年の利用実績は 2015 年度が 93.4%、2016 年度が 94.1%、2017 年度が 89.6%、2018 年度が 94.1%と高い水準で推移してきた。2019 年度は、5 年間にわたるポスト「京」研究開発枠重点課題の最終実施年度であり、超過利用分を含め、104.8%の利用実績となった。なお、資源の有効利用を図るために実施してきた重点課題内の資源再配分は、2019 年度は利用期間が 4.5 か月と短いことから実施していない。

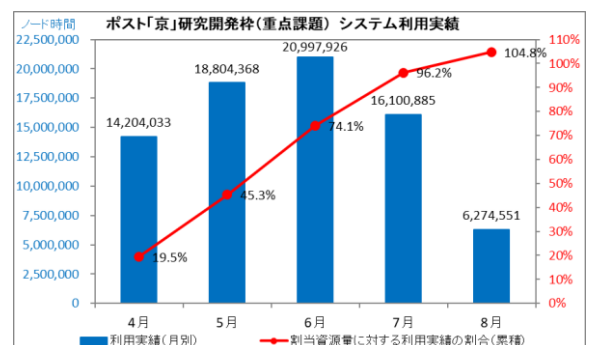


図 23 システム利用実績(資源量)の月別推移(2019 年度)
〔ポスト「京」研究開発枠(重点課題)〕

2. 分野別利用実績

ポスト「京」研究開発枠重点課題のシステム利用実績(資源量)の分野別比率を図 24 に示す。

³ 2019 年度ポスト「京」研究開発枠重点課題については、「京」の共用が 2019 年 8 月 16 日に終了することから、「京」を補填する資

源として、「京」以外の HPCI 第二階層資源を併せて配分している。

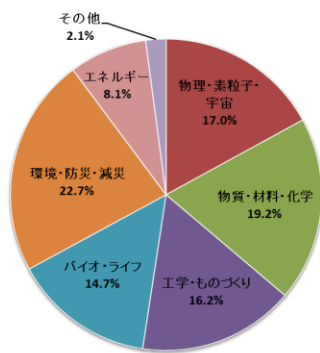


図 24 システム利用実績(資源量)の分野別比率(2019 年度)

[ポスト「京」研究開発枠(重点課題)]

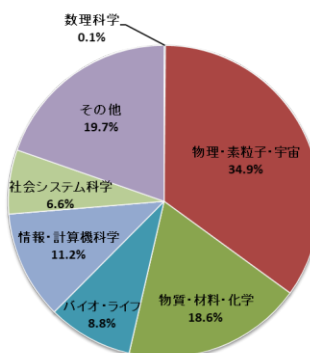


図 26 システム利用実績(資源量)の分野別比率(2019 年度)

[ポスト「京」研究開発枠(萌芽的課題)]

3-5-6 ポスト「京」研究開発枠 萌芽的課題

1. システム利用実績

2019 年度のポスト「京」研究開発枠萌芽的課題⁴における月別のシステム利用実績の推移を図 25 に示す。ポスト「京」研究開発枠萌芽的課題は 2016 年 8 月から利用が開始された。2016 年度の通年の利用実績は 75.3%に留まったが、2017 年度は 83.2%、2018 年度では 99.5%まで上昇した。2019 年度は、4 年間にわたるポスト「京」研究開発枠萌芽的課題の最終実施年度であり、超過利用分を含め、105.7%の利用実績となった。なお、萌芽的課題内の資源再配分についても、2019 年度は実施していない。

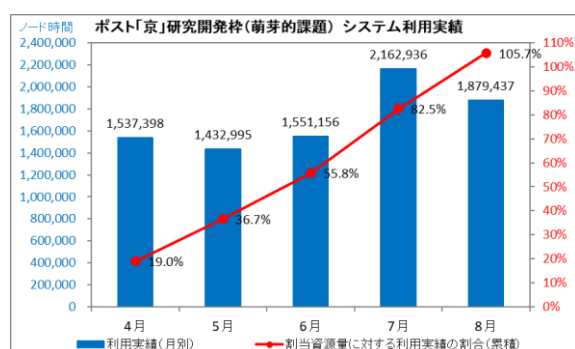


図 25 システム利用実績(資源量)の月別推移(2019 年度)

[ポスト「京」研究開発枠(萌芽的課題)]

⁴ 2019 年度ポスト「京」研究開発枠萌芽的課題についても、重点課題と同様に、「京」の共用が 2019 年 8 月 16 日に終了することから、「京」を補填する資源として、「京」以外の HPCI 第二階層資

源を併せて配分している。

3-6 利用研究成果の報告・公開

3-6-1 はじめに

「特定高速電子計算機施設の共用の促進に関する基本的な方針」(平成 23 年文部科学省告示第 120 号)では、「施設利用研究の成果は、科学技術の振興を図るとともに、スーパーコンピュータの利用分野等に関する新たな知見を生かした特定高速電子計算機施設の更なる利用を促進する観点から、知的公共財として積極的に公表し、普及されるべきものである。」とされている。

この方針に従い、「京」を中核とする HPCI では、基本的に利用者に以下の要請を行っている。

- ・利用報告書の提出 (課題実施終了後 60 日以内)
- ・成果公開 (課題実施終了後 3 年以内)

また、以下の依頼を利用者に行っている。

- ・HPCI 成果発表データベースへの登録(随時)

2019 年度は、「京」利用課題の利用報告書、計 204 件を HPCI ポータルサイトに公開した(2018 年度の 190 件より約 7%増)。また、2019 年 8 月 16 日(「京」の共用終了)までに終了した「京」の成果公開対象課題(全 774 課題)のうち 89 課題(通算 527 課題)の成果公開の認定が行われた。さらに、2015 年 9 月から公開を開始した「HPCI 利用研究成果集」(登録機関 RIST 発行の電子ジャーナル)は 2019 年 6 月に第 4 巻 No.1(6 編の論文を収録)を、12 月に第 4 巻 No.2(10 編の論文を収録)を発行するとともに、次巻号発行前の先行の早期公開として 5 編の論文を公開した。以上、通算公開論文数 60 編となった(2018 年度から 21 件増)。

利用報告書のダウンロード(DL)総数は 2014 年 7 月の統計データ取得開始以降、2019 年度末で通算約 128,800 件に達し(年間 DL 数では 2018 年度の約 29,400 件から 2019 年度は約 36,000 件に増加)、成果の公表・普及が更に進展した。ダウンロードを行った企業は通算約 1,100 社に増加し、その業種は東京証券取引所の 33 業種中 32 業種に及ぶ。

HPCI 成果発表データベースに登録された 2019 年度末までの「京」に関する成果発表件数は、「京」一般利用枠では通算 2,234 件(うち査読付き論文数は 622)、ポスト「京」研究開発枠(重点課題及び萌芽的課題)では通算 2,583 件(うち査読付き論文数は 649)、戦略プログラムでは通算

3,499 件(うち査読付き論文数は 547)、京調整高度化枠では通算 644 件(うち査読付き論文数は 74)に達した。以下の各項で、それぞれの詳細を記す。

3-6-2 利用報告書の公開

2019 度は、「京」利用課題の利用報告書、計 204 件を HPCI ポータルサイトに公開した(2018 年度の 190 件より約 7%増)。このうち、2018 年度末及び 2019 年度の 8 月 16 日(「京」の共用終了)までに終了した課題(181 課題)の利用報告書が 171 件(表 16)、2018 年上期以前に終了した課題の利用報告書が 33 件であった。

表 16 2018 年度末及び 2019 年度の 8 月 16 日までに終了した「京」利用課題数と利用報告書公開数の利用枠別内訳

「京」利用枠		課題数	公開数
一般利用枠	一般課題	40	37
	一般課題 (トライアル・ユース)	1	1
	一般課題 (競争的資金等獲得課題)	3	3
	産業利用課題 (実証利用)	22	19
	産業利用課題 (トライアル・ユース)	1	1
	若手人材育成課題	12	11
	共用法第 12 条による調査研究課題	3	3
ポスト「京」研究開発枠		58	55
重点化促進枠		2	2
京調整高度化枠		39	39
合計		181	171

また、2015 年度末より、利用者等の利便性向上を目的として「利用報告書検索サイト」の運用を開始しており、現在公開されている全課題の利用報告書が Web ブラウザ上に検索可能である。本サイトはカテゴリー検索(課題番号、課題名、課題代表者、所属機関名、利用ソフトウェア、利用枠、実施期間、利用計算資源、研究分野の 9 項目)及び任意のキーワードによる検索機能を有し、利用報告書の高機能検索が可能である。

2016 年度以降は、大型実験施設との連携利用の成果の可視化のため、利用報告書のページに「大型実験施設との連携利用」という項目を設け、これまでに連携利用を行った課題の利用報告書をまとめて表示している。課題毎に連携した実験施設とその関連課題番号を示し、それらの実

験報告書にリンクできるようになっている。図 27 に J-PARC 及び SPring-8 との連携利用の表示例を示す。

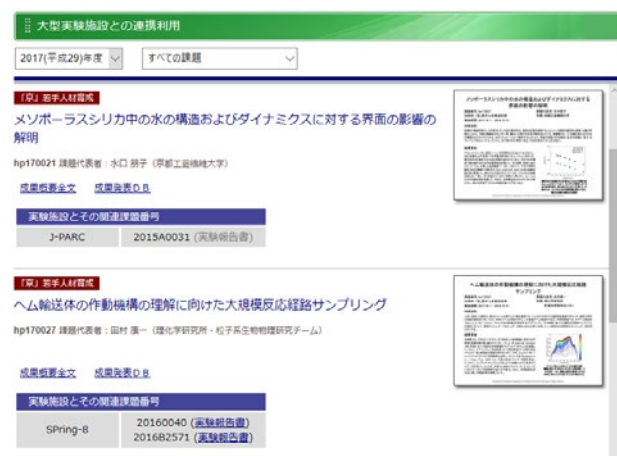


図 27 利用報告書「大型実験施設との連携利用」ページ表示例

3-6-3 成果公開マネジメント

登録機関 RIST が定める「情報管理に関する基本的考え方」において、成果公開が義務付けられている課題は、課題実施終了後 3 年以内に、以下の 4 つのいずれかの方法により研究成果を公開することが義務付けられている。

- 課題番号が明記されている査読付き公開論文(査読付き公開プロシーディングス、博士学位論文を含む)
- HPCI 利用研究成果集(登録機関 RIST が発行する電子ジャーナル)(3-6-4 参照)
- 企業の公開技術報告書(産業利用のみ)
- 特許(特許権の取得)

成果公開が義務付けられている課題の代表者に対して課題実施終了後 60 日以内に a)～d) のどの方法で成果を公開するかの予定(または実績)の申告を依頼している。過去、この申告手続きはメールベースで行っていたが、2016 年以降は WEB を介したオンラインワークフロー管理システムである成果公開マネジメントシステム(PUMAS)を用いて行っている。

登録機関 RIST が定める「成果の認定・審査に関する基本的考え方」において、上記の成果の認定・審査は登録機関 RIST 理事長の下に設置されている利用研究課題審査委員会(以下、「課題審査委員会」という。)の下で行うことが定められている。上記 a)、c)、d) については公開された成果の認定が課題審査委員会によって行われる。2019 年度に開催された第 17 回及び第 18 回課題審査委員会で、2012 年度から 2019 年 8 月 16 日(「京」の共用終了)まで

に終了した「京」の一般利用枠、HPCI 戦略プログラム利用枠、及びポスト「京」研究開発枠(全 774 課題)のうち 89 課題に対して成果公開の認定が行われた。課題枠別の内訳を表 17 に示す。

表 17 「京」の利用枠別 2019 年度認定課題数(括弧内は累積値)

利用枠	終了年度	成果公開対象 課題数	認定課題数
「京」一般利用枠	2012	2	(2)*
	2013	77	1(76)
	2014	63	2(58)
	2015	74	7(60)
	2016	78	13(54)
	2017	71	14(33)
	2018	63	10(12)
	2019 (共用終了 8/16 まで)	35	5(5)
HPCI 戦略プログラム	2012	31	(31)*
	2013	25	(25)*
	2014	25	(25)*
	2015	25	0(24)
ポスト「京」研究開発枠 <注>	2015	31	1 (28)
	2016	56	12(45)
	2017	60	11(36)
	2018	58	13(13)
総計		774	89(527)

*2018 年度までに全数認定済み
<注>2019 年度のポスト「京」研究開発枠における課題は、「京」の共用終了後も引き続き「京」以外の HPCI 共用計算機資源を利用したため、課題自体の終了は 2019 年度末であり、従って成果認定は 2020 年度以降となる。

3-6-4 HPCI 利用研究成果集の公開

HPCI 利用研究成果集は、一般のジャーナルの査読付き論文になりがたい課題の成果を公開論文化することを主たる目的としている。積極的にとらえれば、挑戦的な計算やその他の理由で計算が不成功に終わった場合や期待通りの結果が得られなかった場合でも、他の研究者の有益な情報になるように、その原因を詳細に記述することにより論文発表を行うことが出来る。これは一般のジャーナルには見られないユニークな特徴である。

2019 年度は第 4 巻 No.1 を同年 6 月 25 日に、同 No.2 を同年 12 月 26 日に、それぞれ発行した。掲載論文はセクション A 学術研究成果計 10 編、セクション B 産業利用成果計 6 編の全 16 編である。なお、当該年度末時点の早期公開(巻号等の書誌情報が未確定の論文を先行公開)は

5 編である。

公開論文の全ダウンロード数は 2020 年 3 月 31 日時点で 10,190 回であり、そのうちダウンロード数トップの論文は 686 回であった。

3-6-5 成果発表データベース

HPCI 利用研究分野別(図 28)及び利用枠別(図 29)の成果発表状況を表示する成果発表データベースを公開している。分野別と利用枠別の表示は、「表示オプション」ボタンで切り替える。

成果発表データベース登録アプリケーションには、DOI(Digital Object Identifier)番号による DOI データベースからのインポート機能(DOI インポート機能)や CSV 一括登録機能も用意されている。DOI インポート機能は、利用

者が入力した論文 DOI 番号をシステムがリアルタイムに DOI データベースに問い合わせ、当該論文の属性を入力画面にインポートする機能である。また CSV 一括登録機能は、利用者が手元に用意した CSV ファイルをアップロードすることにより一度に複数の成果情報を登録できる機能である。

2018 年度より外部アプリケーション向けデータ検索 API を公開した。現在、この API を利用したオンライン検索アプリケーションが理化学研究所計算科学研究センターホームページにて公開されている。

(<https://www.r-ccs.riken.jp/outreach/activities/>)

2020 年度から利用がはじまる「富岳」成果創出加速プログラム利用枠のリポジトリを新たに追加した。

	課題の種類（複数の課題が関与する成果発表は各「課題の種類」の件数としてカウントされます） 表示オプション										合計	正味の 成果発表 件数
	HPCI利用研究分野											
	バイオ ライフ	物質 材料 化学	環境 防災 減災	工学 ものづくり	物理 素粒子 宇宙	エネルギー	情報・ 計算機科学	数理科学	社会 システム 科学	その他		
査読付き論文	290	667	234	321	335	57	46	36	18	41	2045	1909
査読なし論文	44	21	43	54	14	6	1	1	2	4	190	183
国際会議・シンポジウム	315	394	467	316	408	162	21	23	6	29	2141	2073
国内学会・シンポジウム	560	351	319	425	278	117	16	10	10	41	2127	2041
研究会等	238	139	167	77	141	14	16	7	1	22	822	803
一般向け講演会等	202	36	56	40	58	0	2	0	0	6	400	397
新聞/TV/雑誌/WEB配信等	329	58	157	17	70	0	1	1	0	10	643	632
書籍	44	15	7	3	1	0	1	0	0	2	73	72
プログラム・DB公開	5	4	0	1	1	0	0	0	0	0	11	11
特許出願	5	4	0	0	0	0	0	0	0	0	9	9
特許取得	6	8	0	4	0	0	0	0	0	1	19	17
合計	2038	1697	1450	1258	1306	356	104	78	37	156	8480	8147
	8480											

図 28 HPCI 成果発表データベースの表示画面(HPCI 利用研究分野別表示)

	課題の種類（複数の課題が関与する成果発表は各「課題の種類」の件数としてカウントされます）						表示オプション	合計	正味の 成果発表 件数
	「京」一般利用	「富岳」・「京」 以外のHPCI 一般利用	「富岳」成果創出 加速プログラム	ポスト「京」 研究開発枠 重点課題	ポスト「京」 研究開発枠 萌芽的課題	HPCI 戦略プログラム			
	田 Expand	田 Expand	田 Expand	田 Expand	田 Expand	田 Expand			
査読付き論文	602	607	0	499	93	533	2334	1909	
査読なし論文	42	28	0	39	2	88	199	183	
国際会議・シンポジウム	581	360	0	528	24	973	2466	2073	
国内学会・シンポジウム	498	262	0	660	41	913	2374	2041	
研究会等	220	111	0	223	5	346	905	803	
一般向け講演会等	92	47	0	126	0	177	442	397	
新聞/TV/雑誌/WEB配信等	101	32	0	119	0	421	673	632	
書籍	16	12	0	42	2	9	81	72	
プログラム・DB公開	6	0	0	3	0	4	13	11	
特許出願	3	1	0	0	0	5	9	9	
特許取得	7	4	0	3	0	6	20	17	
合計	2168	1464	0	2242	167	3475	9516	8147	
	2168	1464	0	2242	167	3475			

図 29 HPCI 成果発表データベースの表示画面(HPCI 利用枠別表示)

3-6-6 成果の普及

1. 利用報告書ダウンロード分析

「京」以外の HPCI 分を含む利用報告書のダウンロード (DL) 総数は、2014 年 7 月の統計データ取得開始以降、2019 年度末で通算約 128,800 件に達した。2019 年度の年間 DL 数は約 36,000 件であり、前年度と比較して約 22% 増加した。図 30 にダウンロード数及びその蓄積値の月次変化を示す。2017 年 2 月頃からは月間 2 千件レベルをほぼ連続的に維持し、2018 年 10 月からは月間 2 千～5 千件の範囲で変動しつつ現在に至っている。また、2014 年度以前の実施課題の利用報告書のダウンロード数が現在でも全体の半分近くを占めている。

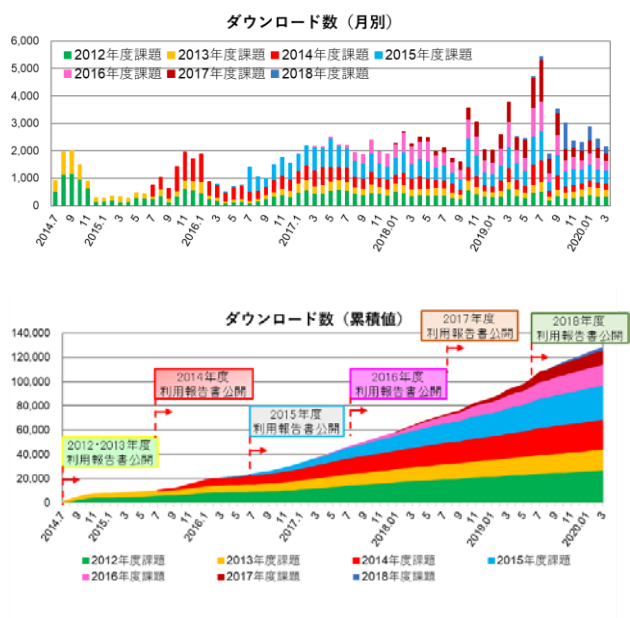
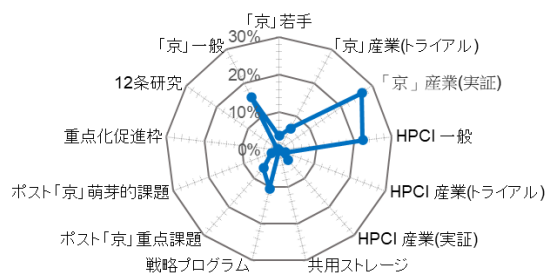


図 30 利用報告書ダウンロード数の月次変化

図 31 (上) に全ダウンロード数に対する課題別ダウンロード割合を示す。「京」産業利用 (実証利用) のダウンロード数が最も多く、次いで HPCI 一般、「京」一般、戦略プログラムの順に大きい。図 45 (下) には各課題枠における 1 課題あたりのダウンロード数を示す。「京」産業利用 (実証利用) が最も大きく、次いで HPCI 産業利用、「京」産業利用トライアル・ユースの順に大きい。

課題別ダウンロード割合 (%)



1課題あたりのダウンロード数



図 31 (上) 課題別利用報告書ダウンロード割合 (%),
(下) 1 課題あたりのダウンロード数

図 32 に機関分類別ダウンロード割合を示す。ネットワーク事業サービスを通じて利用者が直接ダウンロードした場合 (ネットワーク事業) 以外では、大学等 (323 機関)、企業 (1084 社) の順に多い。また、国外からのダウンロードが約 14% を占めており、80 の国と地域に亘っている。これは昨年度の約 8% (74 の国と地域) から大幅に増加しており、海外からの関心が高まっていることを示している。

機関分類別ダウンロード割合 (%)

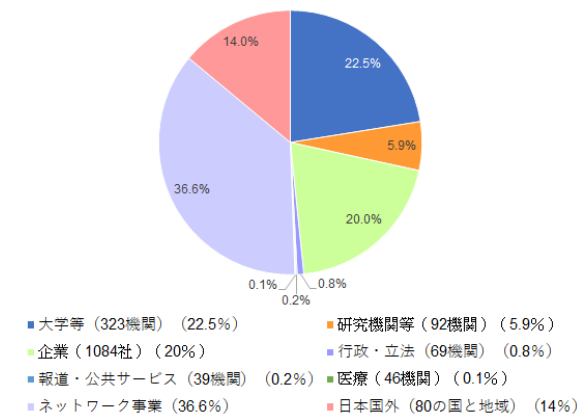


図 32 機関分類別利用報告書ダウンロード割合 (%)

図 33 に HPCI 利用企業及びダウンロード元企業の業種分布を示す。HPCI 利用実績のある業種名は赤色で記載している。HPCI 利用企業の業種数は、2019 年度末時点の累積で、2018 年度末より 2 業種(小売業、石油・石炭製品)増加し、21 業種(東京証券取引所の業種分類計 33 業種の 64%)となった。また、同時点のダウンロード元企業の業種数は水産・農林業を除く 32 業種に及んでおり、

HPCI 利用実績のない企業(987 社)からも幅広くダウンロードされている。以上のことから、我が国産業界における産業利用課題による成果への一層の関心の高まりとその普及が確認できる。

尚、HPCI 利用報告書のダウンロード分析に関する解説記事が 2019 年 11 月情報処理学会誌に公開された[1]。

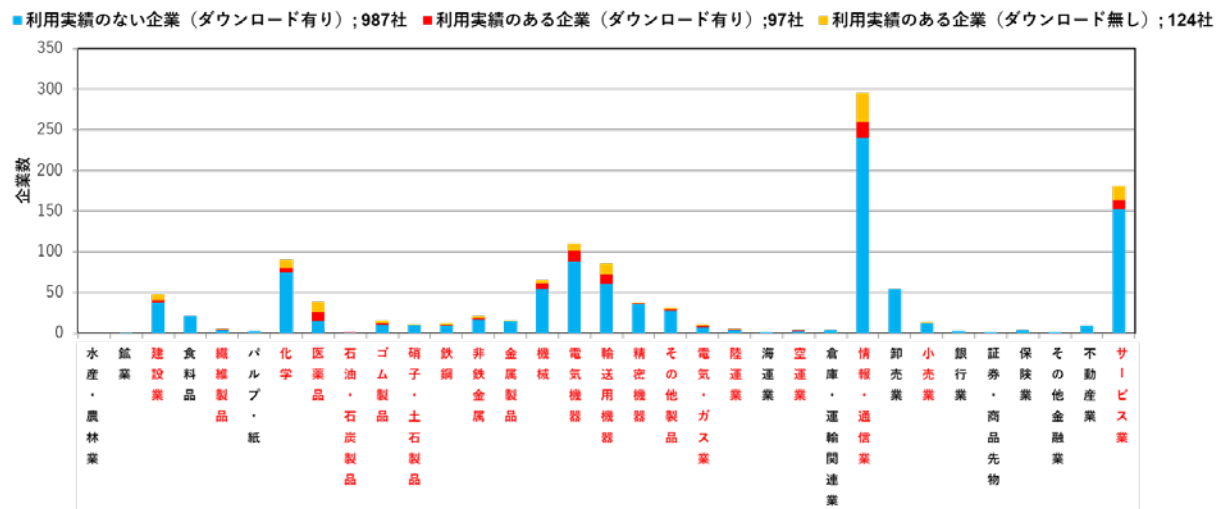


図 33 HPCI 利用企業及びダウンロード元企業の業種分布(東証 1 部 33 業種で分類)

参考文献

- [1] 木村 晴行、丸山 順子、平塚 篤:「京」を中核とする HPCI 利用研究成果の普及状況 -利用報告書のダウンロード分析-、情報処理、60 (12)、1212-1219 (2019-11-15).

2. 成果発表状況

HPCI 成果発表データベースに登録された 2019 年度末までの「京」に関する成果発表件数は、「京」一般利用枠では通算 2,234 件(うち査読付き論文数は 622)、ポスト「京」研究開発枠(重点課題及び萌芽的課題)では通算 2,583 件(うち査読付き論文数は 649)、戦略プログラムでは通算 3,499 件(うち査読付き論文数は 547)、京調整高度化枠では通算 644 件(うち査読付き論文数は 74)に達した(2020 年 7 月 28 日時点、各成果件数には課題の種類間で重複がある)。

図 34 は、(a) 査読付き論文、(b) 国際会議・シンポジウム、(c) 国内会議・シンポジウムの発表件数の年度推移を示したものである。

査読付き論文は、戦略プログラムが 2015 年度末に終了した後は、ポスト「京」研究開発枠重点課題関係が増えて、2017 年度発表分以降はその割合が最も多くなっている。これは、「京」からポスト「京」に係る研究開発へと成果発表対象が移行していることを表している。年度ごとの査読付き論文総数も、2017 年度に重点課題、萌芽的課題の論文発表が大きく伸びて以降、2015 年度以前に比較すると、全体に高いレベルにある。なお、2019 年度分については、論文発表データの登録までに遅れがあるため、今後増加が期待される。

国際会議・シンポジウムおよび国内会議・シンポジウムについては、2015 年度までは HPCI 戦略プログラム関係の発表が突出しており、その後はそれを引き継ぐように、ポスト「京」研究開発重点課題関係の発表が最も多くなっている。また、査読付き論文の場合と同様に 2019 年度については、発表データの登録までに遅れがあるため、今後増加が期待される。

表 18 は、成果発表データベースと Web of Science 両方に登録されている査読付き論文(論文の種別のうち Article と Review に限定)に於ける高被引用論文の割合を日本全体の論文データと比較して示したものである。日本全体の論文の高被引用論文(Top10%)の割合は 8.4%であるのに対して、「京」一般利用の成果論文における割合は 15.3%と 2 倍近い。重点的利用の課題(ポスト「京」研究開発枠萌芽的課題を除く)についても日本全体よりも高い値を示し、「京」の利用研究成果として注目度の高い論文が産出されていることが分かる。

表 18 には、それぞれの国際共著論文の中での高被引用論文の割合を括弧内に示している。一般に国際共著論文については高被引用論文の割合が高くなるが、「京」においても同様で、一般利用、重点的利用とも高被引用論文の割合が高くなる事が分かる。例えば、「京」一般利用の Top 10%の割合は 24.3%であり、日本全体のデータ(15.4%)と比較して約 1.6 倍、高被引用論文割合が高い。

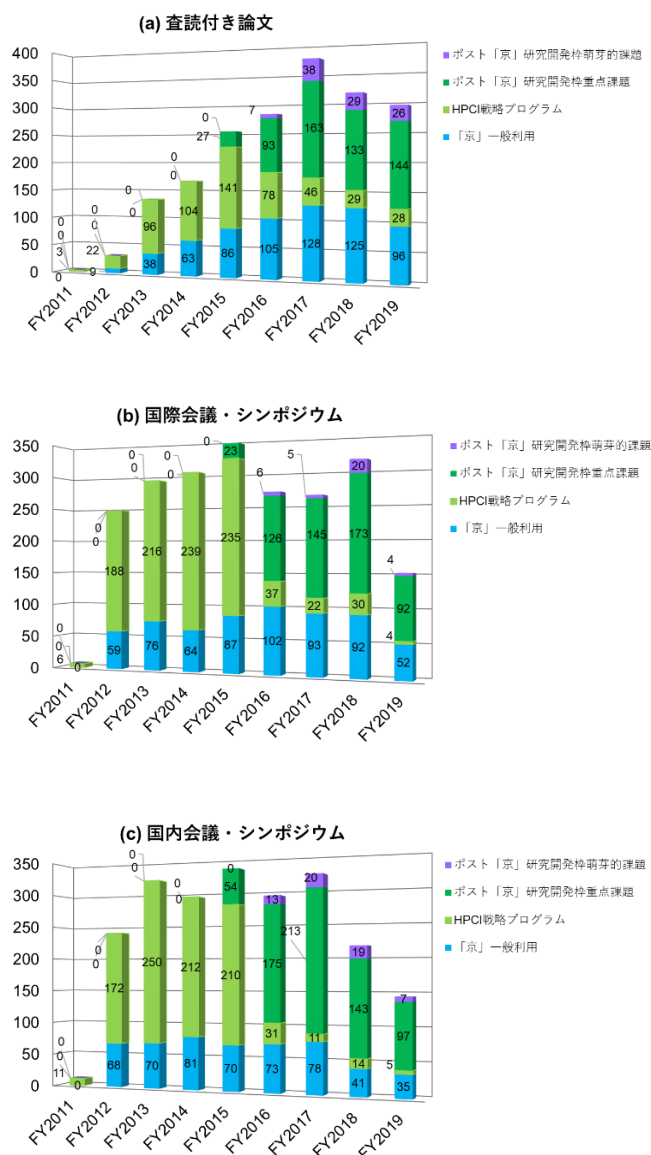


図 34 成果発表データベースに登録されている

(a) 査読付き論文、(b) 国際会議・シンポジウム、(c) 国内会議・シンポジウムの年度推移

表 18 成果発表データベースと Web of Science 両方に登録されている査読付き論文⁽¹⁾及び日本全体の論文⁽²⁾に対する高被引用論文の割合

(カッコ内は国際共著論文の中での割合)

課題の種類	高被引用論文[Top10%] (%)	高被引用論文[Top1%] (%)
「京」一般利用	15.3 (24.3)	1.7 (1.9)
HPCI戦略プログラム	20.4 (34.8)	1.5 (3.0)
ポスト「京」研究開発 枠重点課題	14.7 (29.8)	2.5 (3.2)
ポスト「京」研究開発 枠萌芽的課題	8.5 (0)	0 (0)
日本全体 ⁽²⁾	8.4 (15.4)	1.0 (-)

(1) 論文種別のうち、Article と Review に限定、HPCI 計算機資源を用いた成果に限定、課題の種類間で重複あり。高被引用論文は InCite データ(2020/3/26)に基づく。

(2)出典:文部科学省 科学技術・学術政策研究所、科学研究のベンチマーキング 2019、調査資料-284、2019 年 8 月、2015-2017 (平均値)

4 「京」の共用のための研究活動

4-1 「京」の高度化研究

「京」の安定運転のためのシステム調整、ユーザ利用支援のための研究開発、幅広い分野のユーザの利用に資する高度化研究として 2018 年には、下記の 33 課題(R-CCS:31 課題、RIST:1 課題、FOCUS:1 課題)を実施した。表 1 に、各課題の利用研究課題名、代表者名、研究チーム名、割当資源量、利用実績を示す。各課題の研究内容は、HPCI ポータルサイト(http://www.hpci-office.jp/pages/k-rep_r01_ck-use)で利用報告書として公開している。研究内容の詳細は、リンク先の成果概要で閲覧可能。

表1 「京」調整高度化枠 課題一覧

	課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	チーム名	割当資源量 (ノード時間積)	消費資源量 (ノード時間積)
1	rcs-atd	R-CCS ソフトウェア並びに今後利用者の増大が見込まれるアプリケーションの高度化による、ポスト京を見据えた京のユーザー利便性向上	黒田 明義	チューニング技術ユニット	80,000	75,454
2	rcs-hud	京のソフトウェア利用環境の整備および運用改善に関する開発研究	庄司 文由	利用環境技術ユニット	25,000	14,686
3	rcs-sys	京の利用環境の高度化のための研究開発	宇野 篤也	システム運転技術ユニット	500,000	499,961
4	focus	アクセスポイントでの接続確認	木下 朋子	FOCUS	0	0
5	rist	「京」の利用支援	野口 孝明	RIST	947,330	676,595
6	ra000001	スケーラブルかつポータブルな通信・I/O ライブラリの研究開発	石川 裕	システムソフトウェア研究チーム	10,000	0
7	ra000002	「京」のプログラミング環境の高度化に関する研究開発	佐藤 三久	プログラミング環境研究チーム	1,000,000	506,595
8	ra000005	大規模並列数値計算アルゴリズムおよびライブラリの研究開発	今村 俊幸	大規模並列数値計算技術研究チーム	500,000	173,333
9	ra000006	計算方法組み合わせの比較・計算方法評価のための基盤的ライブラリの研究開発	富田 浩文	複合系気候科学研究チーム	3,692,270	3,688,245
10	ra000008	粒子系シミュレーションプラットフォームの開発	牧野淳一郎	粒子系シミュレータ研究チーム	1,000,000	484,564
11	ra000009	分子動力学計算の高機能化のための共通基盤的研究開発	岩橋 千草	粒子系生物物理研究チーム	983,040	219,023
12	ra000010	超並列環境に資する分子科学計算ソフトウェアの研究開発	中嶋 隆人	量子系分子科学研究チーム	2,492,270	2,214,164 + 3,077(micro)
13	ra000012	複雑流体現象に対する統一アルゴリズムと解法に関する研究	坪倉 誠	複雑現象統一解法研究チーム	2,392,270	2,371,513
14	ra000013	強相関量子シミュレータの研究開発	柚木 清司	量子系物質科学研究チーム	2,392,270	2,331,959
15	ra000014	離散事象シミュレーション研究	伊藤 伸泰	離散事象シミュレーション研究チーム	797,423	250,459
16	ra000015	データ解析とシミュレーションの融合研究のための共通基盤的研究開発	三好 建正	データ同化研究チーム	3,142,270	3,140,839
17	ra000022	ポスト「京」の開発	石川 裕	フラッグシップ 2020 プロジェクト	2,403,872	2,381,885
18	ra000025	地震・津波災害と地盤災害のシミュレーションの高度化	大石 哲	総合防災・減災研究チーム	797,423	755,999
19	ra000026	低解像度実験データを活用した生体分子動的構造解析の新手法	TAMA, Florence E. Muriel	計算構造生物学研究チーム	500,000	316,605
20	ra000027	データフロー計算プラットフォームの開発	佐野健太郎	プロセッサ研究チーム	1,000	0
21	ra000028	京コンピュータ使用のための共通インタフェースの研究開発	松葉 浩也	利用高度化研究チーム	1,000	291
22	ra000029	格子場の理論シミュレーション手法の基礎研究	青木 保道	連続系場の理論研究チーム	1,000,000	861,868
23	ra000030	高性能・高信頼・高生産性のためのビッグデータ処理基盤	佐藤 賢斗	高性能ビッグデータ研究チーム	25,000	1
24	ra000031	高性能計算機システムの高電力効率化に関するコデザイン評価	近藤 正章	次世代高性能アーキテクチャ研究チーム	197,423	4
25	ra001002	粗視化モデル開発による細胞内分子ダイナミクス	杉田 有治	粒子系生物物理研究チーム	650,000	0

		研究の加速と国際研究ネットワークの構築				
26	ra001004	理研-CEA 間の研究協力取り決めに基づく分子科学・物質科学分野における京コンピュータ利用	中嶋 隆人	量子系分子科学研究チーム	650,000	585,177
27	ra001005	デジタルエンジニアリングテストベッド構築に向けた産業界向けソフトウェアの戦略的開発と展開	坪倉 誠	複雑現象統一的解法研究チーム	1,950,000	1,928,419
28	ra001006	クライオ電顕, XFEL の大規模データを活用した生体分子の動的構造解析	TAMA, Florence E. Muriel	計算構造生物学研究チーム	10,000	0
29	ra001010	SDM(超水滴法)の実用化へ向けた研究開発	富田 浩文	複合系気候科学研究チーム	1,300,000	1,298,892
30	ra001011	データ同化のハブ拠点形成に係る共同研究	三好 建正	データ同化研究チーム	1,040,000	964,811
31	ra001012	ブレインシミュレータ NEST 5g の性能評価	佐藤 三久	プログラミング環境研究チーム	770,000	625,469
32	ra001015	先進的数値計算ソフトウェアのポスト「京」への展開を含む国際協力	今村 俊幸	大規模並列数値計算技術研究チーム	70,000	0
33	ra001017	柔軟な理想実験を行うコード整備	富田 浩文	複合系気候科学研究チーム	1,170,000	1,162,721

4-2 共用法第12条に基づく調査研究

RIST では、登録機関として、以下に示す課題について、共用法第 12 条に基づく調査研究を実施した。表 2 に、課題の利用研究課題名、代表者名、所属、割当資源量、利用実績を示す。課題の研究内容は、HPCI ポータルサイト(https://www.hpci-office.jp/pages/k-rep_r01_12-use)で利用報告書として公開している。研究内容の詳細は、リンク先の成果概要で閲覧可能。

表 2 共用法第 12 条に基づく研究課題一覧

	課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	所属	割当資源量 (ノード時間積)	利用実績 (ノード時間積)
1	hp190202	オープンソースソフトウェアによる固体材料の磁気 応答計算に対する調査研究	太田 幸宏	RIST 利用支援部	4,320	4,318

5 研究会等

5-1 シンポジウム・会議・報告会

R-CCS 及び RIST は、「京」に関する研究成果の公表・普及、研究交流等を目的として、主催あるいは共催により、「京」に関する研究会等(シンポジウム・報告会、並びにセミナー・ワークショップ、講習会等)を開催している。2019 年度に開催したシンポジウム・会議・報告会(参加者が 100 人程度であり、内容・テーマが複数にわたるもの)は、下記のとおりである。

5-1-1 第 6 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 ― 物質構造の階層性とフォノン物性の理解 ―

【開催日】 2019 年 9 月 17 日

【会場】 秋葉原 UDX4 階(東京都千代田区外神田 4-14-1)

【参加者数】 102 名

【主催】 高輝度光科学研究センター、総合科学研究機構、RIST

【協賛】 R-CCS

【概要】 「京」と SPring-8、J-PARC/MLF の大型実験施設との連携利用促進のため、毎年シンポジウムを開催している。本年は「物質構造の階層性とフォノン物性の理解」をテーマとし最新の研究講演やパネルディスカッションが行われた。各種化合物による誘電体材料の研究事例等の紹介、材料開発における実験・計算の更なる連携等について情報交換・意見交換を行った。

【URL】 https://www.hpci-office.jp/pages/renkei_symposium_190917

5-1-2 第 6 回 「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会 ～スーパーコンピュータ「富岳」の胎動、計算科学、AI の融合に向けて～

【開催日】 2019 年 11 月 1 日

【会場】 THE GRAND HALL(東京都港区港南 2-16-4)

【参加者数】 281 名

【主催】 RIST

【共催】 R-CCS、HPCI コンソーシアム

【概要】 HPCI 利用研究課題実施により生み出された研究成果の発表や、研究者間の情報交換、異分野の研究者間の交流を促進し、研究成果の普及を図るとともに、新た

な計算科学分野へのアプローチおよび研究者の裾野拡大に資することを目的としている。また、スーパーコンピュータ「富岳」を中核とする次世代計算基盤についての情報提供およびその利活用のための意見交換を行った。さらに、1 名のモデレーター、6 名のパネリストによる意見交換が行われ、多岐にわたる内容が、会場の一般参加者も交え議論された。また、HPCI 利用研究課題優秀成果賞に選ばれた課題の口頭報告および表彰(8 課題)、HPCI 利用研究課題の研究成果の発表と、その他発表・展示(118 課題)、並びに協賛、協力、後援をいただいた各機関による発表・展示(24 機関)が行われた。

【URL】 https://www.hpci-office.jp/pages/r0111_houkokukai

5-1-3 第 2 回 R-CCS 国際シンポジウム開催

【開催日程】 2020 年 2 月 17 日～18 日

【会場】 ニチイ学館 神戸ポートアイランドセンター(兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-5)、R-CCS

【参加者数】 176 名

【主催】 R-CCS

【協賛】 RIST

【概要】 R-CCS が開催する国際シンポジウム。第 2 回となる本シンポジウムでは、運用が終了した「京」の今までの取り組みを総括すると共に、「富岳」利用に向けた新しい利用方法・応用分野・エコシステムに加えムーア則が終焉を迎える「ポストムーア」時代を見据えた将来の研究について議論した。

【URL】 <https://www.r-ccs.riken.jp/jp/outreach/library/event/200217-18.html>

5-2 研究会・ワークショップ

2019 年度に開催した「京」に関する研究会・ワークショップ(参加者が 100 人程度以下であり、特定の内容・テーマを対象としたもの)は、以下のとおりである。

5-2-1 ADIOS2 Adaptable I/O Framework チュートリアル

【開催日】 2019 年 4 月 15 日

【会場】 R-CCS(兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26)1 階 セミナー室

【参加者数】 30 名

【主催】 R-CCS

【概要】 HPC システムから出力される大規模データを効率よく可視化・解析処理プロセスへの橋渡しを行うために、Oak Ridge National Laboratory(ORNL)で研究開発されてきた ADIOS2 Adaptable I/O Framework のハンズオン・チュートリアルを開催した。ADIOS2 や可視化アプリケーションの VisIt 等が入った VirtualBox VM が ORNL より提供され、持参したノート PC に仮想化ソフトウェアである VirtualBox 上で(バージョン 6.0.4)実際に利用しながら行われた。

【URL】 [https://www.r-](https://www.r-ccs.riken.jp/jp/outreach/library/event/190415.html)

[ccs.riken.jp/jp/outreach/library/event/190415.html](https://www.r-ccs.riken.jp/jp/outreach/library/event/190415.html)

5-2-2 Spack Tutorial

【開催日程】 2019 年 4 月 23 日～24 日

【会場】 R-CCS 6 階講堂(兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26)1 階 セミナー室

【参加者数】 約 100 名

【主催】 R-CCS

【概要】 HPC 向けパッケージ管理ツールである Spack のチュートリアルを行った。Spack は米国ローレンスリバモア国立研究所において開発された HPC 向けパッケージ管理ツール。「富岳」においても Spack を利用する予定である。

【URL】

[https://www.r-](https://www.r-ccs.riken.jp/jp/outreach/library/event/190423-24.html)

[ccs.riken.jp/jp/outreach/library/event/190423-24.html](https://www.r-ccs.riken.jp/jp/outreach/library/event/190423-24.html)

5-2-3 日欧米カナダ共同の HPC 国際サマースクール(International HPC Summer School 2019)

【開催日】 2019 年 7 月 7 日～12 日

【会場】 R-CCS(兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26)、

神戸大学統合研究拠点(兵庫県神戸市中央区港島南町 7 丁目 1 番 48)

【参加者数】 約 80 名

【主催】 R-CCS

【後援】神戸大学計算科学教育センター(ECCSE)、兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科

【協力】ポスト「京」重点課題実施機関

【概要】 欧州、米国およびカナダとの共同開催事業 International HPC Summer School は、10 回目の節目を迎え、日本での初開催が決まった。この国際サマースクールの目的は、通常、特定分野に特化して研究を行っている学生及び若手研究者を対象に、HPC 関連分野の第一線の研究者による講義や実習を通して、より広い視点で新たな知見を得る機会を提供することである。さらに、同世代間の国際交流を深め、今後の HPC 分野の発展を担う国際的人材の育成、輩出をめざす。

【URL】 <https://www.r-ccs.riken.jp/library/event/181205>

5-2-4 Energy Efficient HPC State of the Practice Kobe Meeting

【開催日】 2019 年 8 月 4 日

【会場】 R-CCS(兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26)1 階 セミナー室

【参加者数】 約 20 名

【主催】 R-CCS

【概要】 8 月 5 日に京都で開催された Energy Efficient HPC State of the Practice Workshop 2019 に先立ち、神戸の理研 R-CCS にて日本、米国、および EU 間の研究者間の交流、共同研究の促進を目的としたプレ会議を開催した。7 名の登壇者による各研究機関の HPC システムの Energy Efficiency に関する情報提供と意見交換が行われた。

さらに、参加者らによる R-CCS の施設(計算機室、空調機械室、免震ピット、熱源機械棟)の見学がおこなわれた。

【URL】 <https://www.r-ccs.riken.jp/en/events/190804.html>

5-2-5 KOBE HPC サマースクール(初級)

【開催日程】 2018 年 8 月 25 日～29 日

【会場】 R-CCS 6 階講堂(兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26)1 階 セミナー室

【参加者数】 32 名

【共催】 R-CCS、神戸大学計算科学教育センター、兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科

【後援】 RIST

【概要】 大規模並列スーパーコンピュータによるシミュレーションを活用するためには、並列アプリケーションの開発に必要な基本的な並列計算法についての知識が必要となる。並列計算についての知識と基本的な並列計算のプログラミング技術を習得し、スパコンによる大規模な計算機シミュレーションを駆使し、新しい計算科学の世界を開拓したいと考えている若手研究者、企業の研究者を育成することを目的とする。基礎的な並列計算のプログラミング技術である各種並列計算（スレッド並列、プロセス並列、アクセラレータ・オフロード）について、OpenMP、MPI、OpenACC でのプログラミング法を学習し、演習により利用法を習得する。また、いくつかの高速計算のためのプログラミング技術についても解説した。

【URL】

http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/simulation_school/kobe-hpc-summer-basic-2019/

5-2-6 第 8 回材料系ワークショップ

～「富岳」時代の材料系シミュレーションの最前線～

【開催日】 2019 年 10 月 18 日

【会場】 秋葉原 UDX 4 階 NEXT-1(東京都千代田区外神田 4-14-1)

【参加者数】 88 名

【主催】 RIST

【概要】 企業や大学などの物質・材料開発者や研究者を対象に、計算シミュレーションの利用拡大を目的として、分子動力学アプリケーションの事例紹介や、大規模な材料系シミュレーションの計算手法やその結果の紹介を行った。

「「富岳」時代の材料系シミュレーションの最前線」を副題とし、「富岳」時代の新しいスーパーコンピュータにおける材料系シミュレーションの活用に向けて、材料計算に対する量子コンピュータの活用の展望や、機械学習を用いた新しい計算手法の紹介を行った。パネリストから、機械学習の新アルゴリズム SPACIER の紹介、ポスト「京」のマシンの機械学習への対応状況、高分子分野における機械学習の問題点、などの話題提供があり、この分野における機械学習の有効性やポスト「京」へ向けた機械学習への期待などが

議論された。

【URL】

https://www.hpci-office.jp/pages/ws_material_191018

5-2-7 第 3 回 LAMMPS 入門講習会

【開催日】 2019 年 11 月 29 日

【会場】 RIST 東京事務所(東京都港区浜松町 1-18-16)

【参加者数】 8 名

【主催】 RIST

【概要】 LAMMPS を初めて実行する方を対象に、複数の物質科学アプリソフトがプリインストールされている Linux 環境 MateriApps LIVE!を用いて、LAMMPS の example の実行などを実習形式で体験して頂くレクチャーを行った。

「京」および HPCI の利用者のみならず、計算シミュレーションを始めたい実験家や、これまで他の分子動力学計算アプリソフトを使っていたが、LAMMPS も試してみたい方、MateriApps LIVE!を用いて物質科学シミュレーションを試してみたい方など幅広いユーザを対象に開催した。

【URL】

https://www.hpci-office.jp/pages/seminar_lammps_191129

5-2-8 第 3 回 CAE ワークショップ ～スーパーコンピュータ「京」から「富岳」へ CAE シミュレーションの最前線～

【開催日】 2019 年 12 月 5 日

【会場】 秋葉原 UDX 4 階 NEXT-2(東京都千代田区外神田 4-14-1)

【参加者数】 53 名

【主催】 RIST

【概要】 来るべきスーパーコンピュータ「富岳」の時代に向けて、産業界及び産業界との連携による「京」を活用した大規模 CAE シミュレーションの研究事例やシミュレーションの高精度化に向けた取り組み、機械学習を適用した CAE 解析技術や設計支援事例を紹介した。また、HPCI システムの利用方法や利用支援、アプリケーション利用環境整備の状況などについても紹介した。

【URL】

https://www.hpci-office.jp/pages/ws_cae_191205

5-2-9 BMDP 研究開発コンソーシアム全体会議

【開催日程】 2019 年 12 月 6 日

【会場】 R-CCS（兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26 ）
6F 講堂

【参加者数】 62 名

【主催】 BMDP 研究開発コンソーシアム(担当:R-CCS)

【概要】 内閣府主導の SIP プログラム「スマートバイオ産業・農業基盤技術」の中で、革新的バイオ素材・高機能品等の機能設計技術及び生産技術開発を担当する BMDP 研究開発コンソーシアムは、理研を代表機関(代表者:中嶋隆人)として、共同研究機関8機関、協力企業11社から構成され、2018/11 から研究開発を進めている。本格始動となった本年度から、全機関及び関係機関の参集により、SIP プログラムの全体概況、コンソーシアムの研究開発状況等の共有を図る目的で、年2回程度の全体会議を行った。第1回は、6/12 に東京で開催したが、R-CCS で第2回目を開催し、今後の「富岳」活用も紹介し、コンソーシアム全体の求心力を高めるものとした。

5-2-11 第 9 回材料系ワークショップ

～「富岳」で飛躍へ！計算データの価値～

【開催日】 2020 年 2 月 17 日、18 日

【会場】 秋葉原コンベンションホール(東京都千代田区外
神田 1-18-13 秋葉原ダイビル 4F)

【参加者数】 184 名(2/17),155 名(2/18)**名

【主催】 RIST

【概要】 企業や研究機関などの材料系分野の研究・開発者の方に、ポスト「京」プロジェクトにおける材料系の成果や、成果創出加速プログラムの展望として、新しい材料シミュレーション手法の開発、ビッグデータの構築など、「富岳」を用いて創出される物質科学計算データの価値を高めるための取り組み等を紹介した。

【URL】

https://www.hpci-office.jp/pages/ws_material_200217-18

5-2-10 International Workshop on High-Performance Computing and Programming on Quantum Chemistry and Physics 2020 (HPCPQCP2020)

【開催日程】 2020 年 1 月 15 日～17 日

【会場】 R-CCS 1 階セミナー室（兵庫県神戸市中央区
港島南町 7-1-26 ）

【参加者数】 42 名

【主催】 R-CCS、超並列プログラミング国際 WS 実行委員会

【概要】 本ワークショップでは、次期スーパーコンピュータ「富岳」に代表される超並列スーパーコンピュータのための量子化学、物性物理、素粒子・原子核物理分野における計算プログラム開発・構築に携わり、国内外の第一線で活躍している研究者による講演、チュートリアル、及び出席者間の議論を通し、異分野で共通する計算手法・アルゴリズムの理解と習得を目的とした。あわせて、ソフトウェアの開発・普及・サポートが可能な人材育成も目的とした。

【URL】 http://molsc.riken.jp/mpqcp2020_ws_ja.html

6 広報活動

6-1 広報活動の概要

R-CCSとRISTは、一般市民に加えて、「京」の将来の利用者(企業関係者、青少年等)、マスメディア、政治家、国・地方自治体関係者等の理解を得るため、互いに連携して広報活動を行っている。2019年度に行った広報活動の概要は、以下の通りである。

1. マスメディアを通じた情報発信 (6-2 参照)

2019年度のリリースの発信は16件であった。そのうち、「京」に関連する成果や受賞に関して1件のプレスリリースを行った。新聞・雑誌・テレビ等への掲載数は317件であった。

2. ウェブサイト・制作物 (6-3 参照)

ウェブサイトについて、R-CCSではウェブサイトの更新、広報誌関連のコンテンツの拡充、Facebook、Twitterでの情報発信を行った。また、新規にInstagramのアカウントを開設し、一般向けを中心とした情報発信を行った。ウェブサイト・SNSを用いた広報としては、「富岳」の名称が決定したことを受け、これを広めるために「みんなで作る！スーパーコンピュータ「富岳」ポスタープロジェクト」を企画し、富士山等の画像をウェブサイト・SNS上で募集した。募集した画像でモザイクアートを作成し、ウェブサイトならびに一般公開・知る集い等のイベントで公開した。RISTでは、2019年度(2019年4月～2020年3月)利用分の一般枠課題の利用報告書を公開した。

制作物については、R-CCSは広報誌「計算科学の世界」について、No.19とNo.20の2号を新たに発行した。また、「富岳」の設置状況等を知らせる動画シリーズ「FUGAKU NEWS」を製作し、2019年度にはVol.1～Vol.3と特別編の4本を作成した。

RISTでは、広報誌「京算百景」についてVol.26からVol.29までの計4号を発行した。また、昨年発行した「成果事例6」の英語版を海外への発信強化のために作成し、昨年度に引き続き「成果事例集7」(日本語版)を発行した。さらに、新規の課題応募者の拡大を目的として比較的新しい利用者から応募に至るまでの経緯等を聞き出し、エピソードとして紹介する「はじめてのHPCI」を計2号と番外編を発行した。

3. イベント (6-4 参照)

専門的な情報から、一般にわかりやすい情報まで、イベントを通じた直接対話形式の広報活動を実施している。

R-CCSとRISTは連携して研究者、利用者向けに国際会議展示をISC2019(ドイツ)、SC19(アメリカ合衆国)において行うなど、海外及び国内のシンポジウム・展示会への参加を行い、ブース展示や特別講演などを設けて広く専門家向けに情報発信を行った。

一般向けについてR-CCSでは「スーパーコンピュータ『富岳』を知る集い」を金沢で開催した。そのほか、学校向けの出前授業等を実施した。RISTでは中高生を対象とした「スパコン体験塾」を開催した。

年に1回実施している一般公開(神戸地区)にR-CCS、RISTは近隣諸団体とともに出展し、R-CCS施設では1,143名の来場者を迎えた。RISTは、計算機歴史博物館の展示を行った。また、R-CCSは理化学研究所の他事業所で行われた一般公開で、ブース展示やポスター展示を行った(和光、仙台、筑波)。

4. 見学・視察対応 (6-5 参照)

「京」運用終了に伴い、2019年8月をもって見学・視察受け入れを終了した。研究機関、企業、学校、政界、国・地方自治体関係者などを受け入れた。2019年度の見学・視察者数は4,539名であった。

6-2 マスメディアを通じた情報発信

6-2-1 プレスリリース及び取材対応

R-CCS 及び RIST は、「京」を利用した研究成果について、論文等の学術発表と並行して一般向けに情報発信を強化している。その一環として、マスメディアの活用を念頭に記者の理解度向上を目指し、必要に応じてプレスリリースをおこなっている。

2019 年度に R-CCS 及び RIST が行ったプレスリリースは表 1 のとおりである。また、表 2 にメディアへの掲載件数、表 3 に概要を示す。

表 1 プレスリリース一覧

日付	件名	発表者
2019 年 5 月 2 日	魔法数研究に金字塔 ーついに中性子過剰なニッケル原子核の二重魔法性に結論ー	R-CCS、東京大学
2019 年 5 月 10 日	月は地球のマグマオーシャンからできた	R-CCS、海洋研究開発機構、神戸大学
2019 年 5 月 23 日	ポスト「京」の名称「富岳(ふがく)」に決定 ー世界トップクラスのスーパーコンピュータであること等で選考ー	R-CCS
2019 年 5 月 30 日	「京」シャットダウンおよびセレモニー開催について ー「京」から「富岳」へー	R-CCS
2019 年 5 月 30 日	「Society 5.0 に向けた高性能計算科学研究支援及び研究者育成支援に関する寄附金」の募集について	R-CCS
2019 年 6 月 19 日	スーパーコンピュータ「京」が Graph500 において 9 期連続で世界第1位を獲得 ービッグデータの処理で重要となるグラフ解析で最高レベルの評価ー	R-CCS、九州大学、東京工業大学、パレセロナ・スーパーコンピューティング・センター、富士通株式会社、株式会社フィックスターズ、科学技術振興機構
2019 年 7 月 23 日	スパコン「京」を自分の手で動かしてみよう！ 夏休みイベント「スパコン体験塾」の開催について	RIST
2019 年 8 月 5 日	みんなで作る！ スーパーコンピュータ「富岳」ポスタープロジェクト ー公募した写真やイラストで「富岳」のイメージポスターを作成ー	R-CCS
2019 年 8 月 22 日	令和 2 年度 HPCI システム利用研究課題の募集について	RIST
2019 年 10 月 16 日	第 6 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会の開催について	RIST
2019 年 10 月 24 日	科学館等への「京」の贈呈式 取材のご案内について	R-CCS
2019 年 11 月 15 日	スーパーコンピュータ「富岳」 クラウド的利用に向けた共同研究プロジェクト提案の募集	R-CCS
2019 年 11 月 18 日	スーパーコンピュータ「富岳」のプロトタイプが Green500 で世界 1 位を獲得 ー世界トップの消費電力性能を実証ー	R-CCS、富士通株式会社
2019 年 11 月 21 日	令和 2 年度 HPCI システム利用研究課題の応募状況について	RIST
2019 年 12 月 3 日	スーパーコンピュータ「富岳」搬入開始	R-CCS
2020 年 2 月 04 日	令和 2 年度 HPCI システム利用研究課題の選定結果について	RIST

表 2 メディア掲載件数

	4 月	5 月	6 月	7 月	8 月	9 月	10 月	11 月	12 月	1 月	2 月	3 月	計
掲載(新聞・雑誌)	7	11	11	10	89	30	11	19	6	0	0	0	194
掲載(ネット)	6	18	13	9	18	8	1	5	1	4	2	0	85
放送(TV・ラジオ)	1	2	2	3	13	10	1	2	1	2	1	0	38

表3 メディアへの主な掲載概要

掲載日・放送日	メディア名	概要
4/11/2019	日本経済新聞	ブラックホール撮影成功 日米欧など、世界の望遠鏡連動
5/7/2019	化学工業日報	慶大など、「京」でEGFR変異と肺癌薬の相性予測
5/7/2019	朝日新聞	対馬沖漁船転覆、「竜巻状の渦」原因か 東大など、スパコン「京」で再現【西部】
5/8/2019	日刊工業新聞	肺がん患者のゲノム活用 治療薬 スパコン「京」で効果予測
5/10/2019	ITmedia News	月は地球の“マグマの海”からできたという新説
5/12/2019	NHK スペシャル	人体 遺伝子 第2集“DNAスイッチ”が 運命を変える
5/13/2019	日経産業新聞	抗がん剤効果、スパコンで予測。
5/18/2019	毎日新聞	スパコン「京」:駅名「京」と共に去る? 更新で今夏停止 神戸
5/19/2019	日本経済新聞	中性子多い原子核の安定性 「二重魔法性」を証明 理研など
5/24/2019	科学新聞	月の起源はマグマの海から コンピュータシミュレーションで解明
5/31/2019	神戸新聞	「京」8月30日シャットダウン 理研、スパコン運用停止へ
6/12/2019	沖縄タイムス	『がんゲノム医療』検査に保険適用を読み解く
6/19/2019	読売新聞	スパコン「京」 10 回目の 1 位 国際ランキング
6/19/2019	IT Leaders	スパコン「京」がビッグデータ処理性能ランキング「Graph500」で 9 期連続 1 位
6/21/2019	神戸新聞	計算科学研究への寄付お礼に 京の部品プレゼント
6/22/2019	読売新聞	スパコン「京」運用停止前の最後の見学会と不思議な数の世界(社告)＝兵庫
6/24/2019	日本経済新聞	TOP500ランキング、スパコン番付「サミット」首位。
6/24/2019	財形新聞	スパコン「京」、運用終了後は廃棄 維持費の高さが再利用の障害に
6/25/2019	財形新聞	理研の計算機科学研究センター、寄付への返礼品として京の CPU など提供へ
7/2/2019	Web 論座	スパコン「京」が 1 位を取り続けるランキングとは
7/10/2019	マイナビニュース	第 53 回 Top500 に見るスパコンの動向 - Green500/HPCG では日本勢が健闘
7/30/2019	神戸新聞	「京」9 期連続、世界 1 位 ”有終の美”飾る ビッグデータ解析
7/30/2019	HPCwire Japan	【京コンピュータ】肺がんの増殖に関わる新規長鎖ノンコーディング RNA を発見
7/31/2019	中日新聞	新薬に期待 肺がん増殖RNA特定 愛知県がんセンター・名大
8/2/2019	QLife Pro	肺がんの増殖に関わる新規長鎖ノンコーディング RNA を発見-AMEDら
8/5/2019	朝日新聞	スパコン「京」最後に一日 16 日に運用終了 見学にぎわい
8/6/2019	朝日新聞	(天声人語)さよなら京
8/11/2019	日本経済新聞	16日、スパコン「京」運用停止一後継「富岳」裾野広がるか(NewsForecast)
8/11/2019	産経ニュース	スパコン京 医療、防災で利用拡大
8/12/2019	おはよう朝日です	「2 位じゃダメなんですか？」 スパコン「京」運用終了へ
8/16/2019	読売新聞	さよなら 世界の「京」 スパコン今夜運用終了 後継「富岳」21年にも始動
8/16/2019	日経産業新聞	スパコン「京」きょう運用停止。
8/16/2019	時事通信	「京」の運用終了 本格稼働7年 「富岳」に継承 スパコン
8/17/2019	読売新聞	「京」から「富岳」へ スパコン 世界一奪還の夢託す
8/17/2019	毎日新聞	スパコン:7年「京」算に幕 理研運用終了 防災、医療に貢献
8/17/2019	日本経済新聞	スパコン「京」歴史に幕、後継「富岳」に代替わり。
8/17/2019	共同通信	スパコン「京」解体へ／「富岳」にバトンタッチ
8/18/2019	毎日新聞	社説:スパコン「京」運用終了 成果と技術力を後継機に
8/19/2019	ITmedia News	スパコン「京」運用に幕 後継機「富岳」設置へ
8/20/2019	日経産業新聞	医療・IT融合の起業支援、米VCと神戸市タッグ。
8/23/2019	静岡新聞	大自在(2019年8月23日・金曜日)＝「京」
8/28/2019	サイエンスポータル	スパコン「京」、多くの成果残し 30 日にシャットダウン 後継機「富岳」に引き継ぐ
8/30/2019	神戸新聞	「京」記憶に残る歴史 時の政権から攻撃 部品工場被災 医療産業都市に貢献 世界級の実績 神戸・スパコンきょう電源オフ
8/30/2019	日本経済新聞	新素材・創薬支えた7年、スパコン「京」きょう電源停止、200社超が活用。

8/30/2019	日本経済新聞電子版	スパコン「京」がシャットダウン 7年の歴史に幕
8/30/2019	日経 xTECH	スパコン「京」引退、後継「富岳」と入れ替え始まる
8/30/2019	神戸経済ニュース	(動画)「京」シャットダウン式典 理研の松本理事長「世界中の研究者を支援」
8/30/2019	やさしいニュース1	スーパーコンピュータ「京」・7年で運用に幕
8/30/2019	やさしいニュース1	くきょうの気になる！>スーパーコンピュータ「京」の功績
8/30/2019	ニュースほっと関西	スーパーコンピュータ「京」・波瀾万丈の”生涯”
8/30/2019	ミント！	スーパーコンピュータ「京」・運用終えシャットダウン
8/30/2019	ニュースしゅぶ 5 時	兵庫県神戸市・スーパーコンピュータ「京」・電源落とすセレモニー
8/30/2019	かんさい情報ネットten. 第1部	スーパーコンピュータ「京」・運用終えシャットダウン
8/30/2019	報道ランナー	理化学研究所・スーパーコンピュータ「京」運用終了
8/30/2019	newsevery.	<気になるミダシ>理化学研究所・スーパーコンピュータ「京」運用終了
8/31/2019	読売新聞	スパコン「京」が7年の運用に幕 後継は「富岳」
8/31/2019	毎日新聞	スパコン:「京」7年、有終の「計」 富岳に「継」、電源オフ
8/31/2019	朝日新聞	スパコンの「京」、7年の歴史オフ 【大阪】
8/31/2019	共同通信	スパコン「京」幕下ろすー世界一計算速度、運用7年
8/31/2019	時事通信	スパコン「京」シャットダウン＝7年の歴史に幕ー理研
8/31/2019	ニュースおはよう日本	スーパーコンピュータ「京」・運用終了
9/1/2019	神戸経済ニュース	(解説)コンピュータ「京」が親しまれた理由3つ 神戸医療産業都市のモデルか
9/1/2019	あさチャン！	スパコン「京」役割終え
9/2/2019	日経産業新聞	スパコン「京」多大な貢献、電源停止、車・創薬など200社利用。
9/2/2019	日刊工業新聞	スパコン「京」稼働停止 理研がセレモニー
9/2/2019	電波新聞	スパコン「京」7年の歴史に幕 後継の「富岳」に期待
9/3/2019	毎日新聞	追跡:スパコン「京」運用終了、「富岳」で次の頂に 単純計算速度争わず
9/3/2019	朝日新聞	(取材考記)スパコン「京」から「富岳」へ 「世界一」の情熱、「非軍事」に込め
9/3/2019	毎日新聞	追跡:計算速度は2位でもいいんです スパコン、利便性に比重
9/3/2019	財形新聞	理研、スパコン「京」をシャットダウン
9/4/2019	共同通信	スパコン「京」を解体撤去、神戸
9/4/2019	GIZMODO	【解説】京スーパーコンピュータのすごさ
9/4/2019	ニュースほっと関西	スパコン”京” 撤去作業が始まる
9/4/2019	ABC ニュース	スパコン「京」 撤去始まる
9/4/2019	4時！キャッチ	スパコン「京」「富岳」整備へ撤去始まる
9/15/2019	読売新聞	[サイエンスReport]スパコンの道 広げた「京」
9/30/2019	週刊医学界新聞	【対談】スパコン「京」が開いた分子シミュレーション研究の扉 研究から医療応用へ
10/6/2019	東奥日報	サンデー特集/天気予報 最新技術で常に進化
10/18/2019	科学新聞	「100万気圧で酸素が金属化」電子状態変化を解明
11/5/2019	共同通信	理研スパコン「京」、部品各地へ
11/5/2019	ニュースほっと関西	兵庫 スパコン「京」の部品 科学館などに寄贈
11/6/2019	読売新聞	スパコン「京」の部品、全国の科学館に寄贈
11/18/2019	読売新聞	今日のノート＝「京」の形見分け
11/22/2019	朝日新聞	イベントガイド /高知県・愛媛県 ※「京」の常設展示について
11/26/2019	日本経済新聞電子版	東大・理研など、原子核の形の基本原理と量子系での自己組織化について発表
12/20/2019	南海放送	日本誇るスパコン「京」展示 県総合科学博

6-3 ウェブサイト・制作物

6-3-1 ウェブサイトの管理・運営

R-CCS 及び RIST では、ウェブサイトでの情報発信を行っている。R-CCS においては一般向けから研究者・技術者向けの情報、RIST においては主として利用者選定及び利用者支援の情報となっている。

1. R-CCS

一般の読者を意識した情報発信を継続するとともに、研究者・技術者向けのコンテンツの追加などを行った。

(1) 公式ウェブサイト

一般から研究者・技術者までを対象に広く情報を発信する公式ウェブサイトとして、「京」の成果や「富岳」の開発状況、イベントの告知・報告、メディア掲載情報等を掲載。2019年度は、5月にポスト「京」の名称が「富岳」に決定したこと、8月に「京」が共用終了・シャットダウンされたこと、見学が終了したことを受け、公式ウェブサイトにも必要な変更を加えた。(図1)

サイト全体のアクセス数は年間 290,056 件(うち英語は約 7%)であった。



図1 R-CCSウェブサイト

(2) Facebook

公式ウェブサイトには掲載されない情報なども写真とともに発信。Facebook については SNS の中では研究者・関係者向けの情報発信の場と位置付け、R-CCS Café、SC/ISC の出展情報等を中心に発信した。フォロワーは約日本語版が約 2,000 人、英語版が約 500 人である。

(3) Twitter

2018年9月よりアカウントを開設し、スパコンになじみにない一般向けへの情報発信ツールとして活用した。2019年8月に実施した「みんなで作る！スーパーコンピュータ「富岳」ポスタープロジェクト」では、Twitterを通じての画像投稿も受け付け、82件の応募があった。また、「京」の撤去

の様子や「富岳」の設備工事の様子を投稿し、多くのインプレッションを獲得した。フォロワーは約 1,600 名となった。



図 2 R-CCS Twitter

(4) Instagram

2019 年 8 月、「みんなで作る！スーパーコンピュータ「富岳」ポスタープロジェクト」の画像募集の間口を広げるため、新規にアカウントを開設した。同プロジェクトへの Instagram での画像投稿は 48 件であった。また、Twitter 同様「京」撤去や「富岳」設備工事の様子を公開し、多くのインプレッションを獲得した。フォロワーは約 150 人である。

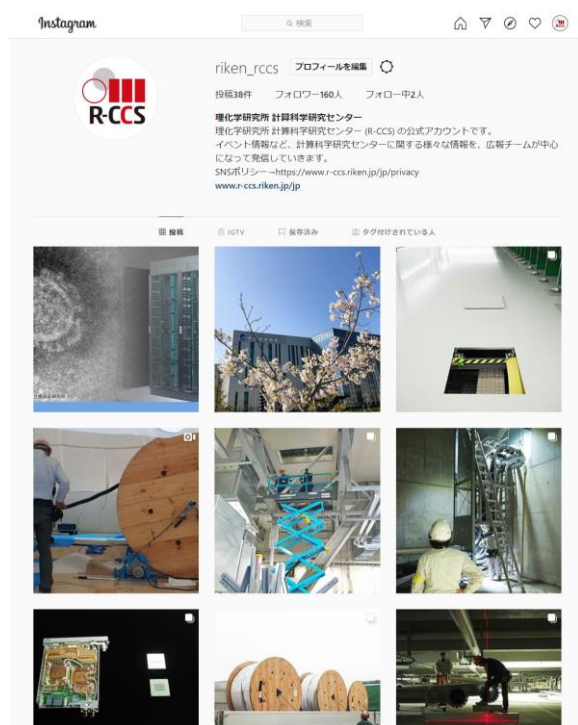


図 3 R-CCS Instagram

2. RIST

RIST は 2012 年 4 月 19 日より HPCI ポータルウェブサイト運営し、課題公募の広告・受付・選定結果の発表などについて、情報発信する場として活用している。2019 年度

は、2018 年度(2018 年 4 月～2019 年 3 月)利用分の一般枠課題の利用報告書が公開された。利用報告書は利用報告書データベース検索をはじめとし、分野ごと、年度ごとに検索できるようになっている(図 4)。

サイト全体のアクセス数は年間 73,948 件(うち英語は約 12%)であった。

イベント・広報情報としては、広報誌「京算百景」の HPCI ポータルサイトからのダウンロード件数が、Vol.26:339 件、Vol.27:324 件、Vol.28:161 件、Vol.29:89 件であった(Vol.29 は、3 月発行につき集計期間が短い)。



図 4 HPCI ポータルサイトでの利用報告書の公開

6-3-2 制作物

R-CCS 及び RIST では、パンフレット、広報誌、ニューズレター等を制作している。2019 年度に制作、更新した制作物は下記のとおりである。

1. R-CCS

(1) 広報誌「計算科学の世界」

一般向け広報誌「計算科学の世界」は、主に理系高校生をターゲットとして、計算科学の魅力を紹介する広報誌である(図 5)。計算科学の最先端研究を紹介するメイン記事、高校生が研究者にインタビューし、コラムを執筆する「研究者に聞いてみよう!」、計算科学系の大学研究室を紹介する「研究室へようこそ」を掲載している。2019 年度は No.19～20 の制作を行い、昨年度に引き続き、誌面や動画の閲覧やダウンロードができるよう、広報誌専用のウェブサイトに掲載した。

なお、広報誌の冊子は兵庫県内のすべての高等学校、

及び全国のスーパーサイエンスハイスクール指定校、関連機関など、およそ 500 か所に配布された。

・No.19(2019 年 11 月 7 日発行)

メイン記事: 月は地球のマグマオーシャンからできた
巨大衝突説の矛盾を「京」によるシミュレーションで解く

・No.20 (2020 年 3 月 27 日発行)

メイン記事: スパコンはどこまで速くできるのか
新しいアーキテクチャの可能性を追求する



図 5 計算科学の世界 No.19～20

2. RIST

(1)リーフレット「はじめての HPCI」

「京」を中核とする HPCI システムの新規応募者を今以上に増やすため、HPCI 利用研究課題の応募経験のない企業の経営者層、経営企画部門など、企業経営方針の意思決定に関わる方へ向けた 1 枚紙のリーフレットとして、2018 年 8 月、2020 年 2 月に「はじめての HPCI」を発行した。主に産業利用を中心に、トライアル・ユースの課題参加者からピックアップし、はじめての利用にあたっての経験を取材してまとめることで、利用前の障壁の低さをアピールし、新規応募増につなげるものである。

また、さいごの「京」特集として中高生ユーザの生の声を掲載した番外編を 2019 年 9 月に発行した。(図 6)。

なお、「はじめての HPCI」はリーフレットの他、Web 記事としても HPCI ポータルサイトで公開している。

図 6 はじめての HPCI No.3～4、番外編



(2) 広報誌「京算百景」

「京」を利用した研究成果や利用についての情報発信などを通じ、利用者のすそ野拡大、利用者との情報交換、「京」やスパコンに対する国民の理解増進をはかるために、広報誌「京算百景」を発行している。今年度は Vol.26～29 を発行し、利用者や関係機関などに配布するとともに、展示会や講習会でも参加者に配布した(図 7)。

「京算百景」は、「京」の利用研究成果などを紹介するメイン記事(クロスアップ)のほか、課題募集の案内、近日開催予定のイベントの情報、HPCI ユーザにとって役立つ読み物などから構成されている。また、Vol.27 では 2019 年 8 月に「京」の運用が終了したことから特別企画「京算百景」座談会を掲載した。各号の発行日とメイン記事は以下の通りである。

・Vol.26 (2018 年 7 月 4 日発行)

未来社会を支える二次電池の開発をめざして

・Vol.27 (2018 年 9 月 24 日発行)

特別企画「京算百景」座談会「京」が生み出したもの、そして次の世代に向けて

・Vol.28 (2018 年 12 月 20 日発行)

宇宙機の大気圏再突入時の“通信ブラックアウト”を回避する手段を探る

・Vol.29 (2019 年 3 月 2 日発行)

着雪被害の少ない鉄道車両の開発に向けて



図 7 京算百景 Vol.26～29



図 8 成果事例集 7

(3) 成果事例集 7

昨年度に発行した成果事例集 6 に引き続き、成果事例集 7 を 2020 年 2 月に発行した(図 8)。掲載した 5 事例は以下の通りである。

・工学

自転車レースにおける最適な位置取りを
シミュレーションで明らかに

・化学

光合成の最初に起こる反応のしくみを詳しく解明し、
太陽光エネルギーを効率的に変換する人工光合成への
貢献を目指す

・防災・減災

「最大瞬間風速」に耐える建築物の設計への
シミュレーション活用を目指して

・環境

大気汚染物質の放出削減で地球温暖化を
食い止められるかをシミュレーションで予測する

・生命

細菌は、自分の育成に必須の栄養素である「鉄」を
ヒトから奪うそのときに働くタンパク質の動きを
明らかにする

(4) 成果事例集 6(英語版)

海外向け活動強化の一環として、2018 年 2 月に発行した「成果事例集 6」を翻訳した英語版を 2019 年 5 月に発行した(図 9)。



図 9 成果事例集 6(英語版)

6-3-3 映像コンテンツの更新及び新規作成

R-CCS は、「富岳」の開発状況等を広く一般にわかりやすく広報することを目的として、映像コンテンツ(動画)の制作を行った。2019 年度に制作した映像コンテンツは下記の

とおりである。

(1) シリーズ動画「FUGAKU NEWS」

2019 年度に製作した「FUGAKU NEWS」は下記の 4 本である。

・Vol.1 名称発表記者会見

ポスト「京」と仮称されていた次世代スパコンの名称が「富岳」と決定したことを受けて理研が行った記者会見を中心に、「富岳」の名称に込められた意味を解説。

・Vol.2 Green500 世界 1 位獲得

「富岳」のプロトタイプがスパコンの省エネ性能を競うランキング Green500 で 1 位を獲得したことを知らせるとともに、その意義や「富岳」の特長を解説。

・Vol.3 設備工事

「富岳」を設置するにあたりおこなった施設の増強工事

を紹介。

・特別編 もっと！施設工事スペシャル

Vol.3 に収録しきれなかった工事の動画を特別編として公開。施設工事の様子は SNS の投稿でも特に人気があったため、一般の方の関心も高いとみて製作した。



6-4 イベント

R-CCS 及び RIST は、イベントを通じた直接対話による広報活動を行っている。イベントは、主として研究者・利用者向け(学会・展示会等)と、一般向け(一般公開・講演会等)に大別される。2019 年度に主催、共催、協賛、後援、出展、または参加した主なイベントは下記のとおりである(新型コロナの影響により、中止となったイベントも含む)。

表 4 R-CCS 及び RIST が主催、共催、協賛、後援、出展、または参加した主なイベント一覧

分類	開催年月日	種別	名称	備考
研究者・利用者向け(国外)	2019 年 6 月 16 日～20 日	国際会議 (展示会含む)	ISC 2019 (International Supercomputing Conference)	R-CCS、RIST 出展
	2019 年 11 月 17 日～22 日	国際会議 (展示会含む)	SC19 (Supercomputing Conference)	R-CCS、RIST 出展
	2020 年 2 月 24 日～27 日	国際会議 (展示会含む)	SCAsia 2020(中止)	R-CCS、RIST 出展
研究者・利用者向け(国内)	2019 年 7 月 18 日～19 日	報告会	2019 年度 J-PARC MLF 産業利用報告会	RIST 協賛
	2019 年 8 月 9 日	シンポジウム	ポスト「京」重点課題(7) 第 5 回シンポジウム「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成(CDMSI)」	R-CCS、RIST 協賛
	2019 年 9 月 4 日	ワークショップ	SPring-8 データ科学研究会(第 7 回)	R-CCS、RIST 協賛
	2019 年 9 月 5 日～6 日	報告会	第 16 回 SPring-8 産業利用報告会	RIST 協賛
	2019 年 9 月 10 日～13 日	学会	日本物理学会 2019 年秋季大会[物性]	RIST 出展
	2019 年 10 月 24 日～25 日	学会	サイエンティフィック・システム研究会合同分科会 2019 年度会合	RIST 出展
	2019 年 11 月 29 日～12 月 2 日	学会	プラズマ・核融合学会 第 36 回年会	RIST 出展
	2019 年 12 月 10 日	シンポジウム	第 12 回 スーパーコンピューティング技術産業応用シンポジウム	RIST 協賛
	2019 年 12 月 11 日～13 日	国際会議	MATERIALSRESEARCHMEETING2019(MRM19)	RIST 出展
	2019 年 12 月 12 日～14 日	学会	大学 ICT 推進協議会 2019 年度年次大会 (AXIES2019)	RIST 出展
	2020 年 1 月 11 日～12 日	学会	第 33 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム	RIST 出展
	2020 年 2 月 3 日	シンポジウム	第 4 回元素戦略シンポジウム～産学連携研究新展開～	R-CCS、RIST 共催
	2020 年 3 月 5 日～7 日	学会	情報処理学会第 82 回全国大会(中止)	RIST 出展
	2020 年 3 月 8 日～11 日	国際会議	国際会議 COMPSAFE2020(中止)	RIST 出展
	2020 年 3 月 10 日	シンポジウム	重点課題 5 第 6 回公開シンポジウム(最終報告会)(中止)	RIST 協賛
一般向け	2019 年 4 月 20 日	イベント	理化学研究所和光地区 一般公開	R-CCS 出展
	2019 年 6 月 5 日	セミナー	第 66 回理研イブニングセミナー「スパコンが拓く未来創薬」	理研主催、R-CCS 講演
	2019 年 7 月 21 日	セミナー	一般向けスパコンセミナー「スーパーコンピュータ「京」がつなぐ、新時代への架け橋」	R-CCS 共催、RIST 主催
	2019 年 7 月 27 日	イベント	理化学研究所仙台地区 一般公開	R-CCS 出展
	2019 年 8 月 3 日	イベント	理化学研究所筑波地区 一般公開	R-CCS 出展

分類	開催年月日	種別	名称	備考
	2019年8月5日～9月13日	イベント	みんなでつくる！スーパーコンピュータ「富岳」ポスタープロジェクト	R-CCS 主催
	2019年11月9日	イベント	神戸地区一般公開	R-CCS、RIST 他共催
	2019年11月10日	イベント	大人のためのサイエンスカフェ2019「計算機科学の最前線」	R-CCS 協力
	2020年1月25日	イベント	スーパーコンピュータ「富岳」を知る集い	R-CCS 主催
	2020年1月26日	イベント	サイエンスフェア in 兵庫	R-CCS 共催
	2020年3月4日	フォーラム	HPCI フォーラム「京」時代の成果から、「富岳」への期待(中止)	R-CCS、RIST 主催
	2020年3月26日	イベント	はじめてのプログラミング(中止)	RIST 主催
・ 学校向け 出前授業	2019年7月9日	出前授業	兵庫県立尼崎小田高等学校(はじめてのプログラミング)	RIST 主催
	2019年8月1日～2日	イベント	スパコン体験塾2019	RIST 主催
	2020年2月13日	出前授業	兵庫県立北摂三田高等学校	R-CCS 主催
	2020年2月13日	出前授業	奈良学園高等学校(はじめてのプログラミング)	RIST 主催

6-4-1 研究者・利用者向けイベント

1. 海外開催の学会、展示会

(1)ISC 2019 (International Supercomputing Conference)

【開催日程】 2019年6月16日～20日

(展示期間:6月17日～19日)

【開催場所】 ドイツ・フランクフルト

【出展】 R-CCS、RIST(合同ブース)

【展示概要】 ブース展示(ポスター、映像上映)。

・HPCGで「京」が3位、Graph 500で「京」が1位

【来場者】 約350名



図10 ISC2019 展示の様子

(2)SC 19 (Supercomputing Conference)

【開催日程】 2019年11月17日～22日

(展示期間:11月18日～21日)

【開催地】 米国コロラド州、デンバー

【出展】 R-CCS、RIST

【展示概要】

R-CCS ブース展示(ポスター、映像提示)。

・「京」、R-CCS での研究、ポスト「京」についてなどのポスターを中心とした展示

・HPCGで「京」が1位

・Graph 500で「京」が1位

・TOP500で「京」が10位

RIST ブース展示(映像展示)

・HPCIの仕組みや利用可能な計算資源の紹介

・HPCI利用課題の研究成果事例の紹介

・HPCI紹介動画の展示

【来場者数】 R-CCS ブース来場者:約590名。RIST ブース:約300名。



図11A SC19 展示の様子(R-CCS)



図 11B SC19 展示の様子 (RIST)

2. 国内開催の学会、展示会、セミナー等

(1) 2019 年度 J-PARC MLF 産業利用報告会

【開催日】 2019 年 7 月 18 日～19 日

【開催地】秋葉原コンベンションホール(東京都千代田区)

【主催】J-PARC センター、総合科学研究機構(CROSS)中性子科学センター、茨城県、中性子産業利用推進協議会

【共催】J-PARC MLF 利用者懇談会

【協賛】RIST

【出展】RIST

【展示概要】「京」を中核とする HPCI システム利用についてポスター展示

(2) ポスト「京」重点課題(7) 第 5 回シンポジウム「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成(CDMSI)」

【開催日】 2019 年 8 月 9 日

【開催地】 東京大学伊藤国際学術研究センター 伊藤謝恩ホール(東京都文京区)

【主催】ポスト「京」重点課題(7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」

(代表機関: 東京大学物性研究所)

【協賛】 R-CCS、RIST

【出展】 RIST

【展示概要】「京」を中核とする HPCI システム利用についてポスター展示

(3) SPring-8 データ科学研究会(第 7 回)

【開催日程】 2019 年 9 月 4 日

【開催地】 AP 品川アネックス(東京都港区)

【主催】兵庫県(兵庫県マテリアルズ・インフォマティクス研究会)、(公財)高輝度光科学研究センター(JASRI)、SPring-8 利用推進協議会、物質・材料研究機構情報統合型物質・材料研究拠点

【共催】(公財)ひょうご科学技術協会

【協賛】R-CCS、RIST、

【出展】 RIST

【展示概要】

「京」を中核とする HPCI システム利用についてポスター展示

(4) 第 16 回 SPring-8 産業利用報告会

【開催日程】 2019 年 9 月 5 日～6 日

【開催地】 川崎市産業振興会館(神奈川県川崎市)

【主催】産業用専用ビームライン建設利用共同体(サンビーム)、兵庫県、(株)豊田中央研究所(豊田中研)、(公財)高輝度光科学研究センター(JASRI)、SPring-8 利用推進協議会(推進協)

【協賛・出展】 RIST

【展示概要】「京」を中核とする HPCI システム利用についてポスター展示

(5) 日本物理学会 2019 年秋季大会[物性]

【開催日程】 2019 年 9 月 10 日～13 日

【開催地】 岐阜大学(岐阜県岐阜市)

【出展】RIST

【展示概要】「京」を中核とする HPCI システム利用についてポスター展示

(6) サイエティフィニック・システム研究会 合同分科会 2019 年度会合

【開催日程】 2019 年 10 月 24 日～25 日

【開催地】 ANA クラウンプラザホテル神戸(兵庫県神戸市)

【出展】 RIST

【展示概要】「京」を中核とする HPCI システム利用についてポスター展示

(7) プラズマ・核融合学会 第 36 回年会

【開催日】 2019 年 11 月 29～12 月 2 日

【開催地】 中部大学春日井キャンパス(愛知県春日井市)

【主催】 一般社団法人 プラズマ・核融合学会

【展示概要】 「京」を中核とする HPCI システム利用についてポスター展示

(8)第 12 回 スーパーコンピューティング技術産業応用シンポジウム

【開催日】 2019 年 12 月 10 日

【開催地】 ステーションコンファレンス東京(東京都千代田区)

【主催】 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)

【協賛】 R-CCS、RIST

【出展】 RIST

【展示概要】 「京」を中核とする HPCI システム利用についてポスター展示

(9)MATERIALS RESEARCH MEETING2019(MRM19)

【開催日程】 2019 年 12 月 10 日～14 日

【開催地】 横浜シンポジア(神奈川県横浜市)

【出展】 RIST

【展示概要】 「京」を中核とする HPCI システム利用についてポスター展示

(10)大学 ICT 推進協議会 2019 年度年次大会 (AXIES2019)

【開催日程】 2019 年 12 月 12 日～14 日

【開催地】 福岡国際会議場(福岡県福岡市)

【主催】 一般社団法人 大学 ICT 推進協議会

【出展】 RIST

【展示概要】 「京」を中核とする HPCI システム利用についてポスター展示

(11)第 33 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム

【開催日】 2020 年 1 月 10 日～12 日

【開催地】 ウィンクあいち(愛知県名古屋市中区)

【主催】 第 33 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム組織委員会

【出展】 RIST

【展示概要】 「京」を中核とする HPCI システム利用についてポスター展示

(12)第 4 回元素戦略シンポジウム～産学連携研究新展開～

【開催日】 2020 年 2 月 3 日～4 日

【開催地】 東京大学伊藤謝恩ホール(東京都文京区)

【主催】 文部科学省「元素戦略プロジェクト<研究拠点形成>」

【共催】 R-CCS、RIST

【出展】 RIST

【展示概要】 「京」を中核とする HPCI システム利用についてポスター展示

(13)The 2nd R-CCS International Symposium

【開催日】 2020 年 2 月 17 日～18 日

【開催地】 ニチイ学館(兵庫県神戸市)

【主催】 R-CCS

【出展】 RIST

【展示概要】 「京」を中核とする HPCI システム利用についてポスター展示

6-4-2 一般向けイベント

1. スーパーコンピュータ「富岳」を知る集い

「富岳」の開発、スパコンやシミュレーションの役割・意義や将来性について、理解増進を図るための講演会。2019 年度は、以下のとおり金沢にて開催した(図 12 参照)。なお、2019 年度は 3 月 20 日に第 14 回スーパーコンピュータ「富岳」を知る集い in 高知の開催を予定していたが、新型コロナウイルス感染拡大の状況を受け、やむを得ず開催を中止した。

第 1 回 スーパーコンピュータ「富岳」を知る集い in 金沢

【開催日】 2020 年 1 月 25 日

【開催地】 金沢歌劇座 大集会室 (石川県金沢市下本多町 6 番丁 27 番地)

【主催】 R-CCS

【対象】 中学生以上の一般

【参加者数】 266 名

【URL】 <https://www.r-ccs.riken.jp/shirutsudoi/meeting33.html>



図 12 スパコンを知る集い(金沢)の様子

2. 一般公開

R-CCS と RIST は、神戸医療産業都市・京コンピュータ一般公開に、近隣諸団体(※)とともに主催団体として公開を行った。

R-CCS は、第 10 回となる一般公開を行った。今年は「京」が既に撤去されていたため、「富岳」搬入前の計算機室の工事状況を公開した。また、「富岳」の CPU・CMU の展示(図 13A)、R-CCS 研究チームによる研究紹介、ミニ講演会、ライフやものづくりや宇宙などさまざまな分野のシミュレーションが学べる「スパコン『富岳』でできること、わかること」、「京」や「富岳」やシミュレーション画像をあしらった缶バッジを作る「缶バッジファクトリー」、アンケートに基づく「R-CCS で働く人はどんな人? ～研究者実態調査～」などを行った。RIST は、計算科学振興財団 高度計算科学研究支援センター2 階にて計算機歴史博物館と題して、スパコンが誕生するまでの道のりについて、そろばん、手回し計算機、電卓、「京」の CPU・システムボードなどの機器の展示を行った(図 13B)。

【開催日】 2019 年 11 月 9 日

【来場者数】 1,143 名(R-CCS 施設来場者数)

※理化学研究所神戸事業所(BDR、RCH、iTHEMS)、神戸市医療産業都市推進協議会、甲南大学フロンティアサイエンス学部、兵庫県立大学大学院、神戸大学統合研究拠点・計算科学教育センター、計算科学振興財団、日本ベーリンガーインゲルハイム(株)

【URL】

<https://www.r-ccs.riken.jp/jp/outreach/library/event/191125.html>



図 13A 一般公開の様子(R-CCS)



図 13B 一般公開の様子(RIST)

また、R-CCS では理化学研究所他事業所の一般公開にも出展を行い、パネル展示などで「京」の紹介を行った。2019 年度は、以下のとおり 3 回出展した。

(1)理化学研究所和光地区 一般公開

【開催日】 2019 年 4 月 20 日

【開催地】 理化学研究所 和光地区(埼玉県和光市広沢 2-1)

【参加者数】 8,300 名(全体来場者数)、うち約 630 名が R-CCS ブース来訪。

(2)理化学研究所仙台地区 一般公開

【開催日】 2019 年 7 月 27 日

【開催地】 理化学研究所 仙台地区(宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 519-1399)

【参加者数】 427 名(全体来場者数)

(3)理化学研究所筑波地区 一般公開

【開催日】 2019 年 8 月 3 日

【開催地】 理化学研究所 筑波地区(茨城県つくば市
高野台 3-1-1)

3. その他一般向けイベント

2019 年度のそのほかの一般向けイベントは以下のとおりである。

(1) 第 66 回理研イブニングセミナー「スパコンが拓く未来創薬」

【開催日】 2019 年 6 月 5 日

【開催地】 健康生き活き羅針盤リサーチコンプレックス三
宮拠点「iKafe (あいかふえ)」(兵庫県神戸市中央区雲井
通 5-3-1 サンパル 7 階)

【主催】 理研 イノベーション事業本部 企業共創部
理研 健康生き活き羅針盤リサーチコンプレックス推進プロ
グラム

【概要】 「GENESIS」を用いた次世代創薬への取り組みを、
実例を交えて紹介。講演者は R-CCS 粒子系生物物理研
究チーム/BDR 生命機能科学研究センター 分子機能シ
ミュレーション研究チーム 李 秀栄上級研究員

(2) 一般向けスパコンセミナー「スーパーコンピュータ「京」が つなぐ、新時代への架け橋」

【開催日】2019 年 7 月 21 日

【開催地】神戸大学 先端融合研究環 統合研究拠点コンベン
ションホール(神戸市中央区港島南町 7 丁目 1 番 48)

【参加者数】350 名

【主催】兵庫県、神戸市、計算科学振興財団、高度情報科学
技術研究機構

【共催】理化学研究所計算科学研究センター、神戸大学計算
科学教育センター、兵庫県立大学、バイオグリッドセンター関
西、バンドー神戸青少年科学館、ひょうご科学技術協会、ひ
ょうご神戸サイエンスクラスター協議会

【後援】文部科学省、HPCI コンソーシアム、スーパーコンピ
ューティング技術産業応用協議会、関西広域連合、関西経済
連合会、神戸商工会議所、新産業創造研究機構、神戸医療
産業都市推進機構

【概要】スーパーコンピュータやシミュレーションがどのように活
用され、今後私たちの暮らしにどのような変化をもたらすか等
について、わかりやすく解説する一般向けのセミナーとスーパ
ーコンピュータ「京」等の見学会。

(3) みんなでつくる！スーパーコンピュータ「富岳」ポスター プロジェクト

【開催日】 2019 年 8 月 5 日～9 月 13 日

【主催】 R-CCS

【概要】 「富岳」の名前決定を祝し、広く一般から公募した
1877 枚の写真(イラストも含む)を集めて「富岳」のモザイク
アートポスターを制作した。ポスターは一般公開でお披露
目し、ウェブサイトにも掲載した。

【URL】

<https://www.r-ccs.riken.jp/mosaic/fugaku-mosaic.html>

(4) ありがとう「京」シャットダウンセレモニー

【開催日】 2019 年 8 月 30 日

【開催地】 R-CCS

【参加者数】 180 名

【概要】2012 年 9 月の共用開始以来、多くの研究機関・企
業に利用され、目覚ましい成果をあげてきた「京」が 8 月 16
日に共用終了した。セレモニーでは多くの来賓の方々を含
め、「京」にゆかりの深い方々が集まり、シャットダウンが執
行われた。

https://www.riken.jp/pr/news/2019/20190830_1/

(5) 大人のためのサイエンスカフェ 2019「計算機科学の最 前線」

【開催日】 2019 年 11 月 10 日

【開催地】三菱みなとみらい技術館(横浜市西区みなとみ
らい三丁目 3-1、三菱重工横浜ビル)

【主催】 三菱みなとみらい技術館

【協力】 R-CCS

【概要】 科学技術の話題について、専門家と語らう大人の
ためのサイエンスカフェ。「計算機科学の最前線」シリーズ
において、R-CCS 佐藤 三久副センター長が講演を行っ
た。

【URL】

<https://www.mhi.com/jp/expertise/museum/minatomirai/pdf/sciencecafe2019.pdf>

(6) はじめてのプログラミング(中止)

プログラミングに興味を持っている高校生・高専生を対

象にした春休み特別イベント「はじめてのプログラミング」をも昨年に引き続き開催予定であったが、新型コロナウイルス感染症拡大のため中止となった。

【開催日程】 2020 年 3 月 26 日～27 日

【申込者数】 38 名

【主催】 RIST

【URL】

https://www.hpci-office.jp/pages/pg_200326

(7)その他

例年共催し、会場提供等の協力も行っている高校生のイベント「サイエンスフェア in 兵庫(主催:「咲いテク (Science & Technology)」事業推進委員会、2020 年 1 月 26 日)」については、今回の開催が知る集い in 金沢と重なったため、共催名義のみの協力となった。また、「京」シンポとして開催していた「HPCI フォーラム～「京」時代の成果から、「富岳」への期待～」(2020 年 3 月 4 日、東京ステーションコンファレンス)についても新型コロナウイルス感染症拡大の状況を受け、中止となった。



図 14 スパコン体験塾の様子

6-4-3 学校向けイベント・出前授業

1. 学校向けイベント

(1)スパコン体験塾

【開催日】 2019 年 8 月 1 日、2 日

【場所】R-CCS 6 階講堂

【参加者数】 21 名

【主催】RIST

【共催】R-CCS

【内容】 昨年に引き続き、夏休み特別イベント「スパコン体験塾」を開催した。HPCI 構成機関である大阪大学と東京工業大学の主催しているプログラミングコンテスト「SuperCon」と連携し、参加者は過去出題問題を題材に並列計算など、実際にスパコンを用いてその性能を体験した。2019 年は会場を R-CCS に移し、「京」を使つての開催となった (図 14)。計算機室内に入つての記念撮影及び「京」の見学会も開催し、その様子は「はじめてのプログラミング 番外編」としてリーフレットにまとめた。

【URL】

https://www.hpci-office.jp/pages/or_190801

2. 出前授業

R-CCS・RIST では、「京」及び計算機科学・計算科学への理解増進のため、依頼に応じて学校団体向けの出前授業を行っている。2019 年度に行った出前授業は下記のとおりである。

(1)兵庫県立尼崎小田高等学校(兵庫県)

【開催日】2019 年 7 月 9 日

【場所】兵庫県立尼崎小田高等学校

【対象】生徒 25 名

【講師】RIST 利用支援部 小林寛、澤井秀朋

【内容】「はじめてのプログラミング」としてプログラミング言語 Python の文法を学び、数値シミュレーションに挑戦。実際に「京」の計算処理と自分のプログラムを比較することでスパコンの速度が実感でき、スパコンの並列計算の仕組みも体験することができた。

(2)兵庫県立北摂三田高等学校

【開催日】2019 年 11 月 14 日

【場所】兵庫県立北摂三田高等学校(兵庫県三田市)

【対象】生徒 700 名、職員 50 名および保護者(希望者)

【講師】複合系気候科学研究チーム 足立 幸穂 研究員
離散事象シミュレーション研究チーム 榎本 大悟 客員研究員

【内容】「コンピュータの中のもう1つの地球でタイムトラベル」
「数理で考える渋滞の起こしかた」

(3) 奈良学園高等学校(奈良県)

【開催日】2020 年 2 月 13 日

【場所】奈良学園高等学校

【対象】生徒 39 名

【講師】RIST 利用支援部 小林寛、澤井秀朋

【内容】「はじめてのプログラミング」としてプログラミング言語 Python の文法を学び、数値シミュレーションに挑戦。実際に「京」の計算処理と自分のプログラムを比較することでスパコンの速度が実感でき、スパコンの並列計算の仕組みも体験することができた。

6-5 見学・視察対応

R-CCS では、「京」及び計算機科学・計算科学への理解増進のため、主に研究機関、企業、官公庁、学校など、見学を希望する団体の受け入れを行っている。基本的に広報の見学担当者による対応だが、要望に応じて、運用技術部門及び研究部門の研究者・技術者による解説や施設内ツアーを行っている。

また、政界関係者、国・地方自治体関係者、企業や研究機関の幹部などによる視察も数多く行われており、研究支援部総務課を事務局として、理化学研究所役員及びR-CCS幹部により、理解増進のため概要説明や意見交換を含めた対応を行っている。

「京」見学について、運用終了に伴い、2019年8月をもって見学・視察の受け入れを原則停止とした。その後の「京」撤去・「富岳」搬入の視察を含めると、2019年度の見学、視察受け入れ実績は表5のとおりであり、合計4,539名に対応した。

【主な団体】

研究機関： 重点課題実施機関、学会等

企 業： IT 関連企業、電力・ガス等インフラ関連企業、土木・建設関連企業等

官 公 庁： 省庁関連、神戸市関連、兵庫県関連

学校団体： 小中学校、高等学校(理系選択クラス、スーパーサイエ

ンスハイスクール指定校等)、高等専門学校、大学生及び大学院生

【主な視察】

2019年6月 平井 卓也 科学技術政策担当大臣

2019年9月 ドイツ連邦議会

2019年12月 竹本 直一 科学技術政策担当大臣

表5 見学・視察対応件数一覧

				4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月	総合計
見学	①	一般	見学会実施件数	0	1	1	4	0	0	0	2	0	0	0		8
			見学者数	0	9	36	112	0	0	0	12	0	0	0		169
	②	政府・官公庁・自治体	見学会実施件数	0	4	1	1	0	0	0	0	0	0	0		6
			見学者数	0	30	5	5	0	0	0	0	0	0	0		40
	③	企業	見学会実施件数	6	10	16	13	6	0	0	0	0	0	1		52
			見学者数	66	155	294	179	81	0	0	0	0	0	4		779
	④	教育機関	見学会実施件数	6	9	6	24	17	0	0	0	0	0	0		62
			見学者数	293	327	251	575	385	0	0	0	0	0	0		1831
	⑤	学術関係	見学会実施件数	1	1	2	2	0	0	0	0	0	0	0		6
			(参考) 主要団体名	RIST 水産研究・教育機構	東京大学アプリ高 級化会館	エリートワーカーズ 会館										
			見学者数	8	10	13	61	0	0	0	0	0	0	0		92
	⑥	理研内	見学会実施件数	5	5	5	2	4	0	0	0	5	1	4		31
			(参考) 主要団体名	ISTE Supercomputing Center	名古屋大学 大学院	ISPRAC2023開催 地	日本女子大学理 学部	第4回 HPC Prize授賞式				BMOPコンテス ト	中核チーム CCS国際シンポジ ウム			
			見学者数	15	15	19	30	28	0	0	0	39	10	149		305
	⑦	海外	見学会実施件数	4	5	2	9	0	0	0	0	0	0	1		21
			見学者数	48	116	15	224	0	0	0	0	0	0	12		415
見学会実施件数合計（見学）			22	35	33	55	27	0	0	2	5	1	6		186	
見学者数合計（見学）			430	662	633	1186	494	0	0	12	39	10	165		3631	
視察	⑦	政府・官公庁・自治体	見学会実施件数	0	1	2	3	3	0	0	0	1	2	1		13
			(参考) 主要団体名	種子 安 文樹科学省審議官	平野 重昭 内閣府特命担当大 臣	大塚 啓司 内閣府特命担当大 臣	JST佐伯理事				竹本科学技術政策 担当大臣	青山文部科学大臣 政務官	岩間市議会議 長			
			見学者数	0	6	14	35	13	0	0	0	12	4	9		93
	⑧	海外（機関・研究者）	見学会実施件数	0	1	0	0	3	0	1	0	0	0		5	
			(参考) 主要団体名	国際化 ICTワークショップ 参加者				タイ国National Innovation Agency関係者			ドイツ連邦議会					
			見学者数	0	10	0	0	54	0	12	0	0	0			76
	⑨	その他VIP	見学会実施件数	1	0	1	2	4	0	0	0	0	0	1		9
			(参考) 主要団体名	九州大学理事・副 学長		プラタスソリュー ションズ株式会社	大学等環境安全協 議会	meat社 株式会社 取締役役						独立経路		
			見学者数	1	0	13	83	14	0	0	0	0	0	3		114
	見学会実施件数合計（視察）			1	2	3	5	10	0	1	0	1	2	2		27
見学者数合計（視察）			1	16	27	118	81	0	12	0	12	4	12		283	
イベント	⑩	イベント	見学会実施件数	0	0	0	6	0								6
			(参考) イベント名				一般向けスバ ーコンピュータ セミナー									0
			見学者数	0	0	0	625	0								625
合計			見学会実施件数	23	37	36	66	37								219
			見学者数	431	678	660	1929	575								4539

参考資料1 利用研究課題一覧

2019 年度に「京」を利用して実施した利用研究課題（一般課題、若手人材育成課題、産業利用課題、ポスト「京」研究開発枠重点課題 1～9、ポスト「京」研究開発枠萌芽的課題 1～4、重点化促進課題）の一覧を、以下に示す。なお、京調整高度化枠及び共用法第 12 条に基づく研究の利用研究課題は、それぞれ 4-1 節の表 1 及び 4-2 節の表 2 に示した。所属機関名等は「京」共用終了時点のものである。また、割当資源量及び利用実績は、当該課題における通期分を示す。

■一般課題(2018 年度 B 期課題)

課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	所属機関名	分野	割当資源量 (ノード時間積)	利用実績 (ノード時間積)	備考
hp180232	ニュートリノレス二重ベータ崩壊の原子核行列要素	岩田 順敬	東京工業大学 科学技術創成 研究院	物理・素粒子・ 宇宙	5,460,000	3,997,571	
hp180239	超新星爆発のボルツマン輻射流体計算で探る核物質の状態 方程式	山田 章一	早稲田大学・理工学術院	物理・素粒子・ 宇宙	10,000,000	9,867,861	
hp180256	計算機実験を援用するXFEL/バイオイメーシング	西野 吉則	北海道大学・電子科学研究所	バイオ・ライフ	2,100,000	2,020,132	
hp180258	バクテリオロドプシンのプロトン輸送ダイナミクスに関する理論 的研究(2)	中井 浩巳	早稲田大学 先進理工学部	物質・材料・化 学	10,000,000	9,590,479	
hp180268	広域高解像度シミュレーションによるアジアモンスーン降水帯の 解明	梶川 義幸	神戸大学都市安全研究セン ター	環境・防災・減 災	3,940,000	3,412,408	
hp180271	大規模地震発生後30年の複合災害リスク評価の定量化研究	大石 哲	理化学研究所・計算科学研究 センター	環境・防災・減 災	6,000,000	5,760,656	
hp180274	細胞膜受容体・リガンド結合の拡張アンサンブルシミュレーシ ョン	李 秀栄	理化学研究所 生命機能科学 研究センター 分子機能シミュ レーション研究チーム	バイオ・ライフ	8,186,880	4,364,119	
hp180275	細胞内ATPIによる蛋白質凝集抑制効果の微視的解明	優 乙石	前橋工科大学 生命情報学科	バイオ・ライフ	4,434,987	2,088,270	

■一般課題(2019 年度課題)

課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	所属機関名	分野	割当資源量 (ノード時間積)	利用実績 (ノード時間積)	備考
hp190023	銅酸化物高温超伝導体の磁気励起・動的密度行列繰り込み群 法によるt- $\bar{t}$ -J模型の動的スピン構造因子の計算	遠山 貴巳	東京理科大学・理学部	物質・材料・化 学	3,600,000	3,557,129	
hp190036	勾配流法を用いたクォーク・グルーオンプラズマの物性的研究	谷口 裕介	筑波大学 計算科学研究セン ター	物理・素粒子・ 宇宙	4,464,000	2,297,623	
hp190043	クラウドシミュレータによる雲乱流混合と雨粒子形成全過程の 解明	後藤 俊幸	名古屋工業大学ながれ領域	環境・防災・減 災	4,980,000	3,755,900	
hp190053	五角形構造を有する磁性体の異常量子現象解明の新展開	中野 博生	兵庫県立大学大学院物質理学 研究科	物質・材料・化 学	4,750,000	4,948,614	
hp190076	カノニカル乱流の大規模直接数値シミュレーション	石原 卓	岡山大学・大学院環境生命科 学研究科	工学・ものづく り	4,700,000	2,871,959	
hp190080	3次元非圧縮乱流のエクサスケール並列計算に向けて	岡本 直也	愛知工業大学 基礎教育セン ター	工学・ものづく り	4,344,320	1,839,452	
hp190087	動的密度行列繰り込み群法による三角格子反強磁性ハイゼン ベルク模型の励起ダイナミクスの解析	曾田 繁利	理化学研究所・計算科学研究 センター	物質・材料・化 学	1,900,000	1,683,526	
hp190101	二次電池用新規水系電解液の動的挙動解析	山田 淳夫	東京大学	エネルギー	2,850,000	2,348,238	
hp190103	格子QCDによるハドロン間力の研究	土井 琢身	理化学研究所仁科加速器研究 センター初田量子ハドロン物理 学研究室	物理・素粒子・ 宇宙	5,000,000	1,818,933	
hp190107	第一原理量子モンテカルロ法によるグキャリアドープグラフェン の解析	白川 知功	理化学研究所・計算科学研究 センター・量子系物質科学研究 チーム	物質・材料・化 学	1,650,000	1,769,011	
hp190121	剥離乱流境界層マルチスケール物理のレイノルズ数効果とモデ リング	河合 宗司	東北大学・大学院工学研究 科・航空宇宙工学専攻	工学・ものづく り	3,800,000	3,697,588	
hp190125	磁気回転不安定性による降着円盤乱流の飽和条件の解明	町田 真美	九州大学大学院理学研究院物 理学部門	物理・素粒子・ 宇宙	5,000,000	5,014,009	
hp190126	次世代二次電池の電解質・電極界面の電子・イオン移動機構 の解明2	館山 佳尚	物質・材料研究機構 国際ナノ アーキテクトニクス研究拠点	物質・材料・化 学	4,500,000	701,745	
hp190129	B型肝炎ウイルスの全原子シミュレーションを利用したカプシド 内への治療薬の透過・吸収メカニズム解明と新規治療薬設計 手法の開発	田中 靖人	名古屋市立大学・大学院医学 研究科	バイオ・ライフ	4,375,000	4,375,973	

■若手人材育成課題(2018 年度 B 期課題)

課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	所属機関名	分野	割当資源量 (ノード時間積)	利用実績 (ノード時間積)	備考
hp180257	乱流境界層のエネルギーカスケードの物理機構説明	本告 遊太郎	大阪大学大学院基礎工学研究 科機能創成専攻	物理・素粒子・ 宇宙	4,000,000	3,946,566	
hp180282	雲の発生環境場の大規模パラメータスイープ実験による「雲・環 境場相互作用」の定量化	末木 健太	理化学研究所 計算科学研究 センター	数理科学	3,200,000	2,367,949	

■若手人材育成課題(2019 年度課題)

課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	所属機関名	分野	割当資源量 (ノード時間積)	利用実績 (ノード時間積)	備考
hp190070	低質量星の熱対流と磁場活動の探査	堀田 英之	千葉大学	物理・素粒子・ 宇宙	2,000,000	1,411,168	
hp190123	Characterizing surface molecular architectures under water by means of host-guest interaction: a joint AFM and MD simulation study	Yang Lei	Kanazawa University, NanoLSI	物質・材料・化 学	200,000	129,518	

■産業利用課題(実証利用) (2018 年度 B 期課題)

課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	所属機関名	分野	割当資源量 (ノード時間積)	利用実績 (ノード時間積)	備考
hp180248	球状火炎伝播とその壁面干渉に関する直接数値計算(DNS)	増田 耀	株式会社豊田中央研究所 パ ワトレ制御研究室	エネルギー	4,500,000	4,352,094	

■産業利用課題(実証利用) (2019 年度課題)

課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	所属機関名	分野	割当資源量 (ノード時間積)	利用実績 (ノード時間積)	備考
hp190006	タイヤ用ゴム材料の大規模分子動力学シミュレーション	角田 昌也	住友ゴム工業株式会社 研究 開発本部 研究第一部	物質・材料・化 学	2,500,000	2,393,959	
hp190020	新薬開発を加速するインシリコ創薬基盤の構築 -タンパク質-リ ガンド結合解離パスウェイの効率的な予測方法の開発-	志水 隆一	特定非営利活動法人バイオグ リッドセンター関西	バイオ・ライフ	3,500,000	3,497,766	
hp190032	乱流の直接シミュレーションによる曳航水槽代替技術の実用化	西川 達雄	一般財団法人日本造船技術セ ンター	工学・ものづく り	3,800,000	4,113,364	
hp190039	第一原理計算による全固体電池におけるガーネット型酸化物 LLZO/正極活物質間界面物性に関する研究	奥野 幸洋	富士フイルム株式会社・解析 技術センター	物質・材料・化 学	1,500,000	920,905	
hp190052	想定を超える巨大地震作用時の長大トラス橋の大規模崩壊シ ミュレーション	中村 真貴	株式会社地震工学研究開発セ ンター	環境・防災・減 災	500,000	304,984	
hp190115	ターボ機械における大規模非定常流体解析技術の実用化(そ の3)	加藤 千幸	東京大学生産技術研究所	工学・ものづく り	4,000,000	3,968,636	
hp190119	HPCIを活用したFMO創薬プラットフォームの構築 ～熱揺らぎ 効果を考慮したFMOデータベースの整備～	福澤 薫	星薬科大学 薬学部 薬品物 理化学教室	バイオ・ライフ	4,000,000	4,713,649	

■産業利用課題(個別利用)(随時募集)

課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	所属機関名	分野	割当資源量 (ノード時間積)	利用実績 (ノード時間積)	備考
hp180234	ラージエディシミュレーション解析による調節弁の流路構造の評価	尹 鍾皓	アズビル株式会社	工学・ものづくり	612,000	(非公開)	
hp180289	LESIによる都市域内の流れ場・拡散予測および建築物の風圧力評価の実用化検討	宮下 康一	株式会社風工学研究所	環境・防災・減災	375,120	(非公開)	
hp180303	調節弁の最適流路構造の研究	尹 鍾皓	アズビル株式会社	工学・ものづくり	417,600	(非公開)	
hp180304	ゼオライト吸着・反応に関するシミュレーション解析	奥野 好成	昭和電工株式会社・計算科学・情報センター	物質・材料・化学	138,000	(非公開)	
hp180305	LESIによる斜流ポンプの流量条件を変更した非定常大規模解析	張 会来	株式会社数値フローデザイン	工学・ものづくり	300,000	(非公開)	
hp190203	充填層の大規模計算	高雄 保嘉	JFEテクノリサーチ株式会社	工学・ものづくり	20,000	(非公開)	
hp190204	京コンピュータを活用した鉄鋼プロセスの現象解明と高効率化	佐藤 新吾	JFEスチール株式会社 数値解析研究部	工学・ものづくり	70,000	(非公開)	
hp190206	流体—構造物連成解析による長大斜張橋の空力不安定振動に関する研究	杉山 裕樹	阪神高速道路株式会社 建設・更新事業本部 神戸建設所 設計課	工学・ものづくり	1,540,000	(非公開)	

■産業利用課題(トライアル・ユース)(随時募集)

課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	所属機関名	分野	割当資源量 (ノード時間積)	利用実績 (ノード時間積)	備考
hp190208	スーパーコンピュータ「富岳」を見据えた顧客ビッグデータ分析	樋口 健	株式会社ジーユー	情報・計算機科学	50,000	1	

■産業利用課題(ASP 事業実証利用)(随時募集)

課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	所属機関名	分野	割当資源量 (ノード時間積)	利用実績 (ノード時間積)	備考
hp180297	VINAS CFD SaaS on スーパーコンピュータ「京」	秋永 宣伸	株式会社ヴァイナス プロジェクト推進部	情報・計算機科学	200,100	0	
hp180299	京コンピュータ向けのFOCUS計算化学ASP	高原 浩志	計算科学振興財団	物質・材料・化学	2,000,000	190,383	

■ポスト「京」研究開発枠 重点課題(1/2)

課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	所属機関名	分野	割当資源量 (ノード時間積)	利用実績 (ノード時間積)	備考
hp190181	ポスト「京」でのMD高度化とアルゴリズム深化	杉田 有治	理化学研究所・杉田理論分子科学研究室	バイオ・ライフ	2,310,192	1,964,395	重点課題1
hp190171	次世代創薬計算技術の開発	池口 満徳	横浜市立大学・生命医科学研究科	バイオ・ライフ	3,583,614	3,582,388	重点課題1
hp190154	創薬ビッグデータ統合システムの開発	奥野 恭史	京都大学・医学研究科	バイオ・ライフ	1,734,063	1,732,452	重点課題1
hp190158	大量シーケンスによるがんの個性と時間的・空間的多様性・起源の解明	宮野 悟	東京大学医科学研究所	バイオ・ライフ	1,259,511	731,561	重点課題2
hp190187	データ同化生体シミュレーションによる個別化医療支援	和田 成生	大阪大学 大学院基礎工学研究科	バイオ・ライフ	3,200,000	3,203,537	重点課題2
hp190179	心臓シミュレーションと分子シミュレーションの融合による基礎医学と臨床医学の架橋	久田 俊明	株式会社UT-Heart研究所	その他	1,600,000	1,600,090	重点課題2
hp190177	地震・津波の災害被害予測の実用化研究	堀 高峰	海洋研究開発機構・地震津波・防災研究プロジェクト	環境・防災・減災	3,739,518	1,559,523	重点課題3
hp190191	統合的予測のための社会科学シミュレーションの開発	井科 隆雅	神戸大学大学院工学研究科	環境・防災・減災	508,284	575,461	重点課題3

■ポスト「京」研究開発枠 重点課題(2/2)

課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	所属機関名	分野	割当資源量 (ノード時間積)	利用実績 (ノード時間積)	備考
hp190156	革新的な数値天気予報と被害レベル推定に基づく高度な気象防災	瀬古 弘	気象研究所/JAMSTEC	環境・防災・減災	6,684,823	6,809,473	重点課題4
hp190152	シームレス気象・気候変動予測	佐藤 正樹	東京大学大気海洋研究所	環境・防災・減災	4,010,894	5,272,969	重点課題4
hp190151	総合的な地球環境の監視と予測	滝川 雅之	海洋研究開発機構	環境・防災・減災	1,336,965	1,570,067	重点課題4
hp190175	新エネルギー源の創出・確保ー太陽光エネルギー	天能 精一郎	神戸大学システム情報学研究科	物質・材料・化学	2,400,381	2,315,669	重点課題5
hp190174	エネルギーの変換・貯蔵ー電気エネルギー	杉野 修	東京大学物性研究所	物質・材料・化学	1,979,948	1,980,510	重点課題5
hp190168	エネルギー・資源の有効利用ー化学エネルギー	田中 秀樹	岡山大学 異分野基礎科学研究所	物質・材料・化学	1,955,554	1,983,599	重点課題5
hp190166	高圧燃焼・ガス化を伴うエネルギー変換システム	吉村 忍	東京大学	工学・ものづくり	1,541,103	1,539,297	重点課題6
hp190178	気液二相流および電極の超大規模解析による燃料電池設計プロセスの高度化	鹿園 直毅	東京大学・生産技術研究所	工学・ものづくり	1,545,000	1,556,180	重点課題6
hp190188	高効率風力発電システム構築のための大規模数値解析	飯田 明由	豊橋技術科学大学	環境・防災・減災	1,545,000	1,560,265	重点課題6
hp190190	核融合炉の炉心設計	井戸村 泰宏	日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター	エネルギー	1,545,000	6,185,131	重点課題6
hp190172	高機能半導体デバイス	押山 淳	名古屋大学・未来材料・システム研究所	物質・材料・化学	2,035,894	2,046,847	重点課題7
hp190193	光・電子融合デバイス	矢花 一浩	筑波大学計算科学研究センター	物質・材料・化学	1,385,931	1,378,155	重点課題7
hp190145	超伝導・新機能デバイス材料	今田 正俊	東京大学大学院・工学系研究科	物質・材料・化学	1,385,931	1,375,085	重点課題7
hp190169	高性能永久磁石・磁性材料	三宅 隆	産業技術総合研究所・機能材料コンピュータデザイン研究センター	物質・材料・化学	804,837	641,718	重点課題7
hp190180	高信頼性構造材料	香山 正憲	産業技術総合研究所・電池技術研究部門	物質・材料・化学	1,191,510	1,142,603	重点課題7
hp190149	次世代機能性化学品	松林 伸幸	大阪大学・大学院基礎工学研究科	物質・材料・化学	1,542,938	1,521,481	重点課題7
hp190198	共通基盤シミュレーション手法	尾崎 泰助	東京大学物性研究所計算物質科学研究センター	物質・材料・化学	296,204	245,465	重点課題7
hp190197	設計を革新する多目的設計探索・高速計算技術の研究開発	大山 聖	宇宙航空研究開発機構	工学・ものづくり	652,000	647,015	重点課題8
hp190182	リアルタイム・リアルワールド自動車統合設計システムの研究開発	坪倉 誠	神戸大学大学院システム情報学研究科	工学・ものづくり	1,397,000	1,373,869	重点課題8
hp190153	準直接計算技術を活用したターボ機械設計・評価システムの研究開発	加藤 千幸	東京大学生産技術研究所	工学・ものづくり	4,660,968	4,741,715	重点課題8
hp190164	航空機の設計・運用革新を実現するコア技術の研究開発	高木 亮治	宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所	工学・ものづくり	2,003,000	1,930,269	重点課題8
hp190200	新材料に対応した高度成形・溶接シミュレータの研究開発	奥田 洋司	東京大学大学院・新領域創成科学研究科	工学・ものづくり	326,000	328,572	重点課題8
hp190155	マルチスケール熱可塑CFRP成形シミュレータの研究開発	吉川 暢宏	東京大学・生産技術研究所	工学・ものづくり	279,000	279,107	重点課題8
hp190159	究極の自然法則と宇宙開闢の解明	橋本 省二	高エネルギー加速器研究機構	物理・素粒子・宇宙	2,473,575	2,428,367	重点課題9
hp190160	物質創成史の解明と物質変換	柴田 大	京都大学・基礎物理学研究所	物理・素粒子・宇宙	7,420,725	8,335,624	重点課題9
hp190161	大規模数値計算と広域宇宙観測データの融合による宇宙進化の解明	吉田 直紀	Department of Physics, University of Tokyo	物理・素粒子・宇宙	2,556,028	2,243,286	重点課題9

■ポスト「京」研究開発枠 萌芽的課題

課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	所属機関名	分野	割当資源量 (ノード時間積)	利用実績 (ノード時間積)	備考
hp190194	破壊とカタストロフィ	久保 百司	東北大学金属材料研究所	物質・材料・化学	1,194,475	1,194,476	萌芽的課題 1-1
hp190186	相転移と流動	川勝 年洋	東北大学 大学院理学研究科	その他	995,395	1,387,270	萌芽的課題 1-1
hp190196	量子力学の基礎と情報	川島 直輝	東京大学物性研究所	物理・素粒子・宇宙	1,194,475	2,309,548	萌芽的課題 1-1
hp190192	極限の探究に資する精度保証付き数値計算学の展開と超高性能計算環境の創成	荻田 武史	東京女子大学現代教養学部数理科学科	情報・計算機科学	724,787	621,007	萌芽的課題 1-2
hp190201	複合相関マテリアルのための電子状態計算基盤 - DFTを超えて超高精度へ	松下 雄一郎	東京工業大学	物質・材料・化学	118,356	0	萌芽的課題 1-3
hp190176	極限高圧下マテリアルの相変態シミュレーション - 室温超伝導に向けて	明石 遼介	東京大学大学院理学系研究科	物質・材料・化学	221,800	183,267	萌芽的課題 1-3
hp190147	強光子場中マテリアルの原子論的シミュレーション - 波動関数理論から臨む光と物質の相互作用	篠原 康	東京大学	物質・材料・化学	221,800	216,059	萌芽的課題 1-3
hp190148	マクロ経済シミュレーション	藤原 義久	兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科	社会システム科学	88,144	85,615	萌芽的課題 2-1
hp190165	企業ネットワークシミュレーション	高安 美佐子	東京工業大学大学院総合理工学研究科	数理科学	58,392	11,372	萌芽的課題 2-1
hp190195	交通・人流シミュレーション	野田 五十樹	産業技術総合研究所 人工知能研究センター	社会システム科学	58,392	0	萌芽的課題 2-1
hp190189	社会・経済シミュレーションモデルの評価手法の開発	上東 貴志	神戸大学・経済経営研究所	社会システム科学	554,727	483,509	萌芽的課題 2-1
hp190163	堅牢な輸送システムモデルの構築と社会システムにおける最適化の実現	藤井 孝蔵	東京理科大学 工学部 情報工学科	情報・計算機科学	259,107	258,226	萌芽的課題 2-2
hp190143	惑星の起源の解明	井田 茂	東京工業大学・地球生命研究所	その他	298,648	993	萌芽的課題 3-1
hp190170	惑星内部・表層のダイナミクスと進化	林 祥介	神戸大学・大学院理学研究科	その他	298,648	295,470	萌芽的課題 3-1
hp190183	太陽活動による地球環境変動の解明	草野 完也	名古屋大学・太陽地球環境研究所	物理・素粒子・宇宙	650,389	650,590	萌芽的課題 3-1
hp190185	原始太陽系における物質進化と生命起源の探究	梅村 雅之	筑波大学・計算科学研究センター	物理・素粒子・宇宙	179,189	26,029	萌芽的課題 3-1
hp190144	大脳皮質神経回路のデータ駆動モデル構築	五十嵐 潤	理化学研究所 情報基盤センター	バイオ・ライフ	230,000	196,368	萌芽的課題 4-1
hp190146	ヒト全小脳モデル構築と大脳小脳連関シミュレーション	山崎 匡	電気通信大学 大学院 情報理工学研究科	バイオ・ライフ	230,000	229,635	萌芽的課題 4-1
hp190157	大脳皮質・基底核・小脳モデル統合による全脳シミュレーション	銅谷 賢治	沖縄科学技術大学院大学	バイオ・ライフ	120,000	81,706	萌芽的課題 4-1
hp190173	脳型人工知能用大規模高性能計算プラットフォームの開発	高橋 恒一	理化学研究所生命システム研究センター	情報・計算機科学	100,000	82,881	萌芽的課題 4-1
hp190184	脳型人工知能の大規模実問題への応用	原田 達也	東京大学 大学院情報理工学系研究科	情報・計算機科学	44,787	0	萌芽的課題 4-1
hp190199	ボトムアップで始原的知能を理解する昆虫全脳シミュレーション	神崎 亮平	東京大学先端科学技術研究センター	バイオ・ライフ	257,531	249,891	萌芽的課題 4-2

■重点化促進枠利用課題

課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	所属機関名	分野	割当資源量 (ノード時間積)	利用実績 (ノード時間積)	備考
hp190205	相模トラフ沿いの巨大地震に伴う長周期地震動による被害予測の高度化	参事官 林 正道	内閣府(防災担当)	環境・防災・減災	7,200,000	6,319,685	

スーパーコンピュータ「京」
年報 2019-20
(全体概要)

令和2年10月

国立研究開発法人理化学研究所

計算科学研究センター

〒650-0047 兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-26

電話 (078) 940-5555 FAX (078) 304-4956

<https://www.r-ccs.riken.jp/>

一般財団法人高度情報科学技術研究機構

〒650-0047 兵庫県神戸市中央区港島南町1-5-2

神戸キメックセンタービル

電話 (078) 599-9511 FAX (078) 599-9512

HPCI ポータルサイト : <https://www.hpci-office.jp/>

