

参考資料

高度情報科学技術研究機構（RIST）

1

目次

- RISTの登録機関としての取り組み
 - 登録機関（RIST）のミッション
 - 組織・予算
 - 利用者選定業務
 - 利用支援業務
 - 国際交流の推進・国際比較

- 分析資料
 - 「京」を中核とするHPCIの応募状況の分析

- 資料・データ集

2

登録機関（RIST）のミッション



登録施設利用促進機関
一般財団法人高度情報科学技術研究機構

登録施設利用促進機関（登録機関）業務

- | | |
|--------|---|
| ①利用者選定 | 公正な利用者選定 |
| ②利用支援 | 一元的相談窓口・高度化支援・産業利用支援
成果の公表と普及・理解増進活動 |

沿革

- 1981年 財団法人原子力データセンター(NEDAC)として設立
- 1995年 財団法人高度情報科学技術研究機構(RIST)に組織変更
- 2012年4月 一般財団法人に移行
(役職員) <理事長> 関 昌弘
<理事> 8名(常勤1名、非常勤7名) <監事>2名 <職員>156名(H27.8.1現在)

利用促進業務実施機関の選定の経緯

- 2011年 7月14日 共用法省令・基本方針改正
- 9月 6日 (財) 高度情報科学技術研究機構を登録
- 10月17日 利用促進業務実施機関選定審査委員会
- 10月28日 (財) 高度情報科学技術研究機構を利用促進業務実施機関として決定(公示)

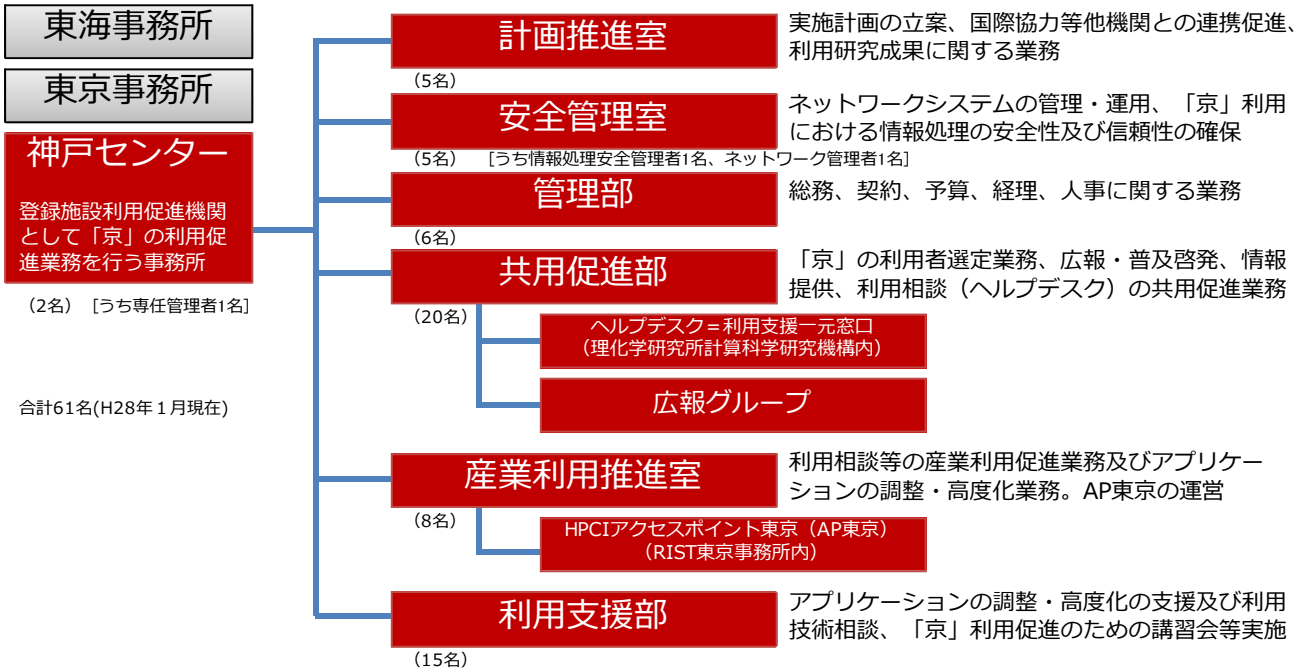
3

組織・予算

4

利用促進体制

高度情報科学技術研究機構(RIST)の組織体制

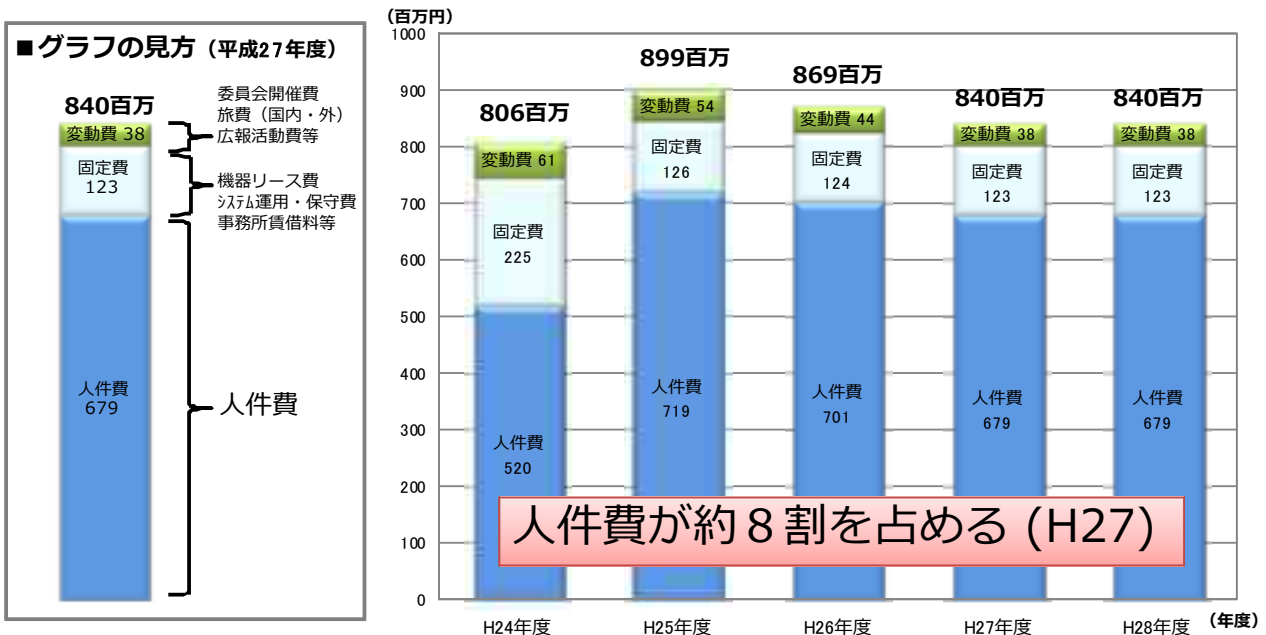


登録施設利用促進機関業務に係る業務及び人員を示す人数は、神戸センター常勤メンバー数（役員は除く）

5

予算の内訳

- 予算は大別して「変動費」と「固定費」に分類できる。これまで、「変動費」としては講習会費、展示会費の削減「人件費」としてはヘルプデスク要員の削減など合理化を図っている。

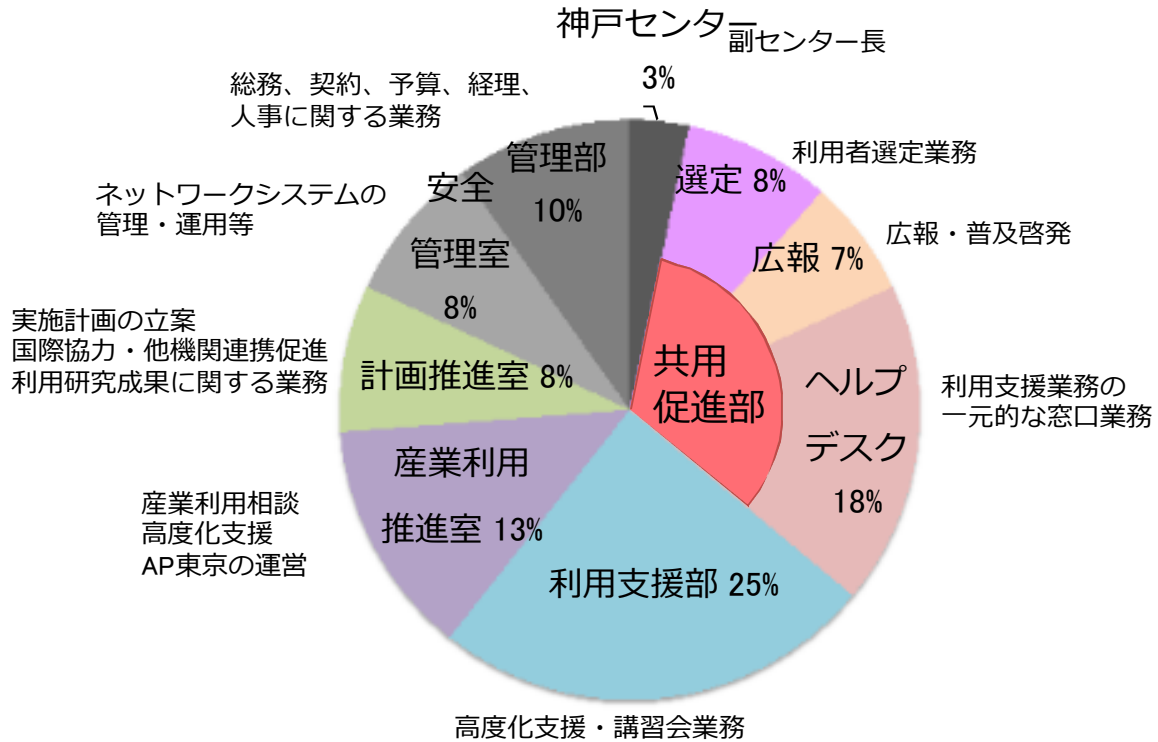


予算（特定先端大型研究施設利用促進交付金）の推移

※四捨五入により、予算配算額と合計額が一致しないことがある。

6

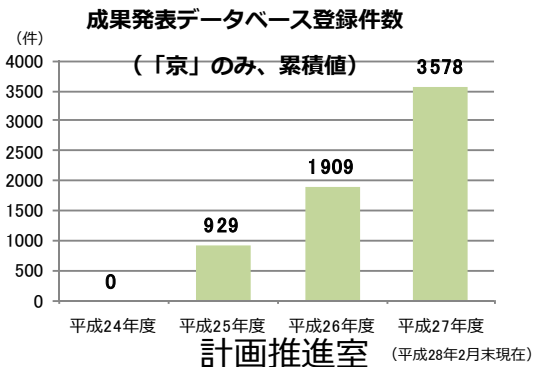
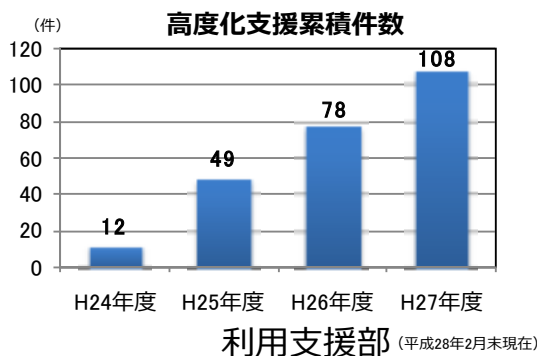
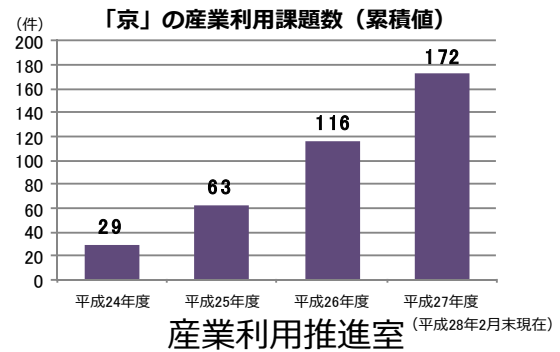
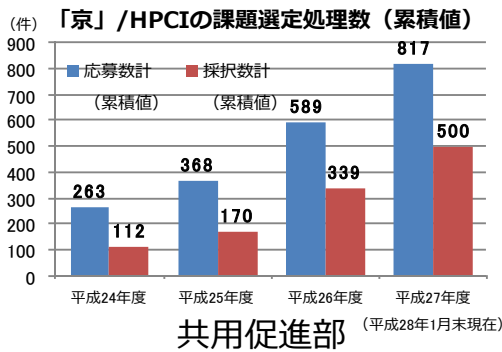
人員配置（役員は除く）



合計61名(H28年1月現在)

7

各部門の実績指標



8

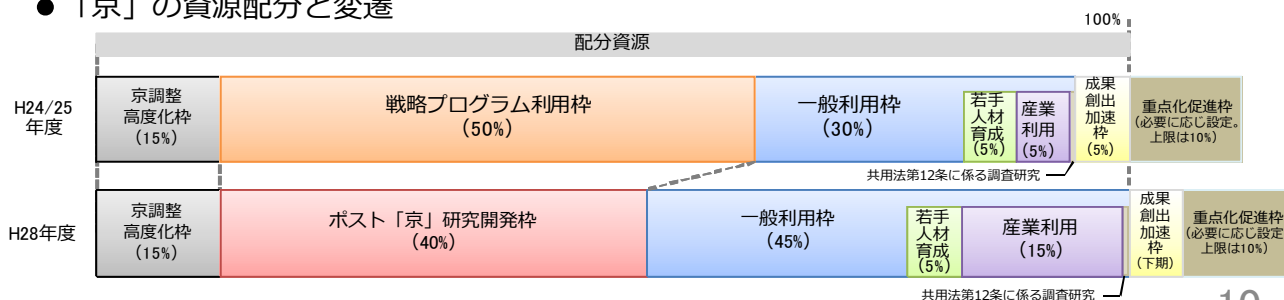
利用者選定業務

超高速電子計算機の共用 「京」の課題種類と資源配分

● 「京」の課題種類と変遷

	平成24年度	平成25年度	平成26年度	平成27年度	平成28年度	備考
一般利用 (公募)	一般利用課題					成果公開、年1回募集
				一般利用課題 (競争的資金等獲得課題: 有償)		成果公開、随時募集
				一般利用課題 (トライアル・ユース)		成果公開、随時募集
	若手人材育成課題					成果公開、年1回募集
	産業利用課題 (実証利用)					成果公開、年1回募集
	産業利用課題 (個別利用: 有償)					成果非公開、年1回募集
			産業利用課題 (個別利用: 有償)			成果非公開、随時募集
	産業利用課題 (トライアル・ユース)					成果公開、随時募集
				産業利用課題 (ASP事業実証利用課題: 有償)		成果非公開、随時募集
	重点的利用 (非公募)	戦略プログラム利用枠課題				
				ポスト「京」研究開発枠重点課題		成果公開
重点化促進枠課題						成果公開、即時対応

● 「京」の資源配分と変遷



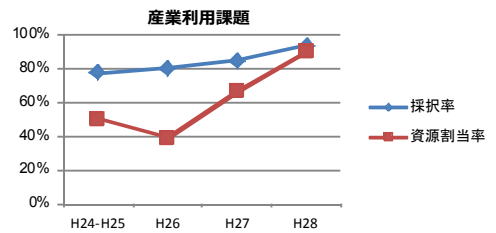
利用枠の変更

●「京」の資源配分の変遷



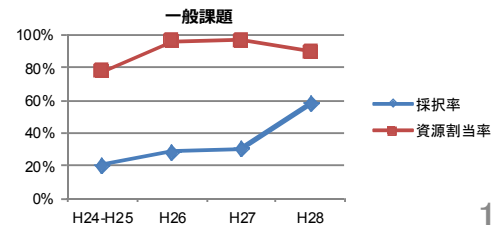
➤ 産業利用枠の拡大

- 「京」の産業利用を促進するため、応募された産業利用課題は最大限採択することとした結果、産業利用枠資源の制約から、割当資源は要求資源量の50%程度に削減。
- 利用者から割り当て資源量が足りないとの指摘を踏まえ、H26募集では産業利用枠を8%程度に、H27募集では10%程度、H28募集では15%程度に拡大させた結果、資源割当率は89%に改善し、利用者の要求に応えている。



➤ 一般利用枠（若手人材育成、産業を除く）の拡大

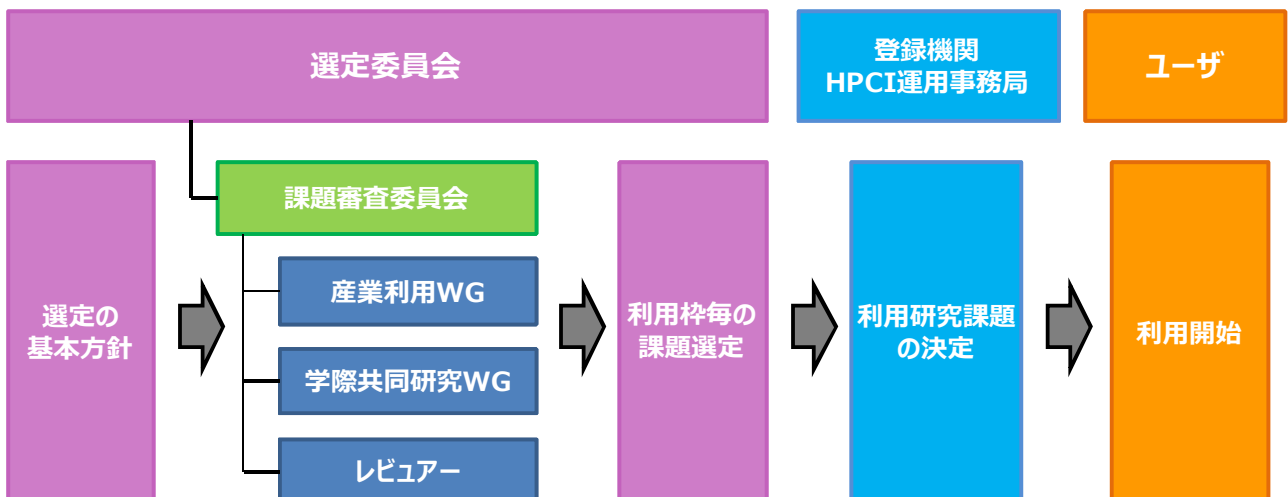
- 一般利用枠（若手人材育成、産業を除く）については、成果の創出を目指し、ほぼ要求資源量通割り当てたため、採択率はH27募集まで30%程度と、大変厳しい選定となっていた。
- H28募集では、一般利用枠から若手人材育成課題、産業利用課題を除いた一般利用課題の枠を25%程度に拡大、採択率は約60%に改善され、成果の増大が期待される。



公正な利用選定の実施 「京」における課題選定について

●課題選定の枠組み

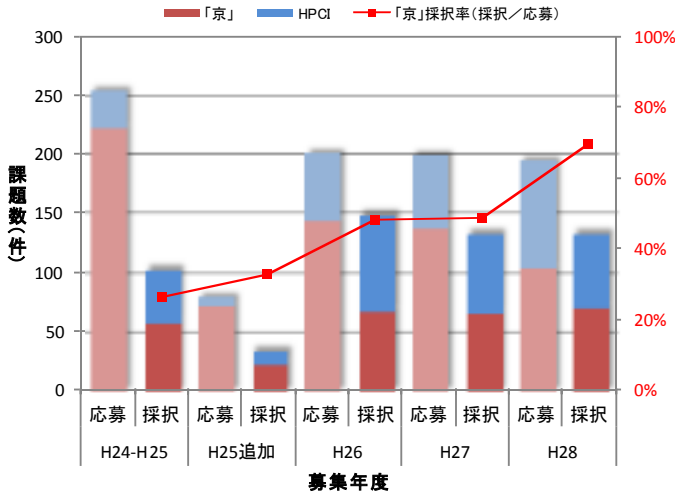
- 利用者及び利用課題の選定に当たっては、「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」に基づき、登録機関として選定された高度情報科学技術研究機構が中立公正な立場で利用者の選定を行う。
- 具体的には、登録機関に設置された選定委員会が選定方針の策定、課題審査委員会が個別の課題の審査、審査結果を踏まえ選定委員会が利用者の選定を行う。



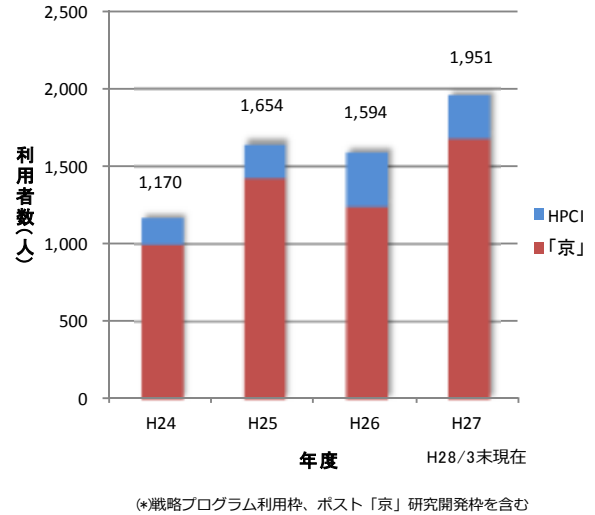
応募・採択状況

- 「京」と「京」以外のHPCI計算資源の役割分担の明確化による採択率の向上
- 課題参加者の着実な増加

課題の応募・採択状況



課題参加者数*の推移



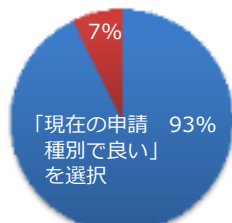
13

応募者のニーズを取り込んだ課題募集 (利用者視点での共用の促進)

- 定期募集 + 追加募集
 - 「京」及びHPCI課題について、4回の定期募集およびH25年度の追加募集を実施し、合計933件の応募から557件の課題を選定
- 随時募集
 - ユーザコミュニティの要望に応え、以下の課題を随時募集化、新設
 - ✓ 産業利用課題（個別利用）を随時募集化（平成26年3月）
 - ✓ 産業利用課題（ASP^(*)事業実証利用）を新設（平成27年4月）
 - ✓ 一般利用課題（競争的資金等獲得課題）を新設（平成27年4月）
 - ✓ 一般利用課題（トライアル・ユース）を新設（平成27年12月）
 - 合計79件の応募から77件の課題を迅速（数日～1か月以内）に審査し、タイムリーな選定を実施

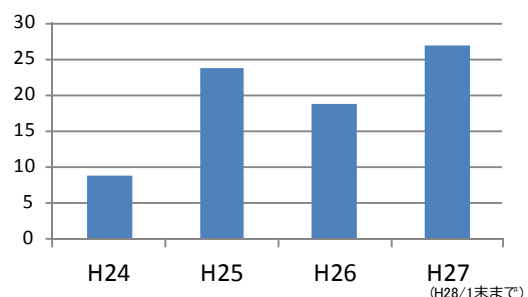
*ASP: Application Service Providerの略でアプリケーションソフトウェアの機能をネットワーク経由でサービスとして利用者に提供すること及びその事業者（アプリケーションベンダーやIT関連企業）を意味する。

質問：「京」利用課題の申請種別（一般課題、若手人材育成利用課題、産業利用課題（実証利用、個別利用、トライアル・ユース））に関してご意見はありますか？（複数選択可）



(*)H26年度未までに終了した一般利用枠課題を対象、計72課題の代表者より回答受領（実施期間：H27.12.1～H28.1.21）

随時募集応募件数の推移



14

利用支援業務

適切な利用支援の実施 利用支援における一元的相談窓口

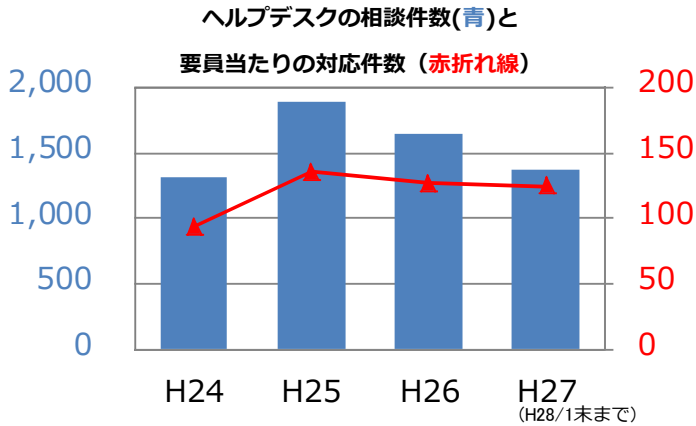
- 利用者からのすべての問い合わせを受け付ける一元的相談窓口としてヘルプデスクを設置し、ワンストップサービスによる利用支援を実施



ヘルプデスクの効率的運用

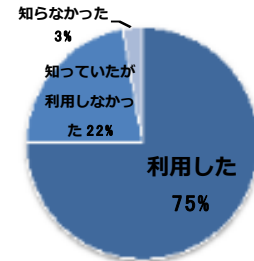
●ヘルプデスクへの相談件数の減少に対応した要員の削減

- ▶ 利用支援における一元的相談窓口であるヘルプデスクについては、相談件数の減少に対応して配置している人員を削減し、経費の削減に努めている。
- ▶ 利用経験の豊富な利用者の増加にとともに、質問の難易度が上昇しているが、要員のスキルアップにより対応している。

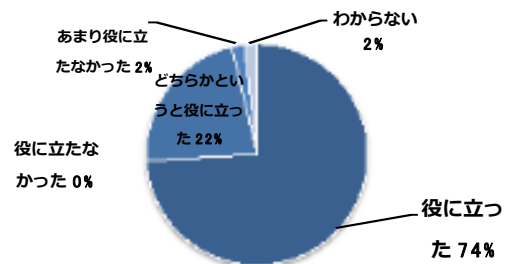


年度	H24下	H25	H26	H27
要員数	14	14	13	11

Q. ヘルプデスクを利用しましたか？



Q. ヘルプデスクは役に立ちましたか？

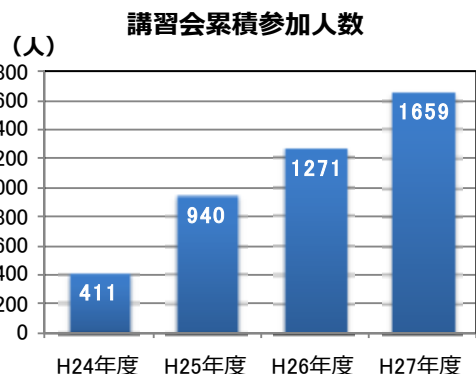
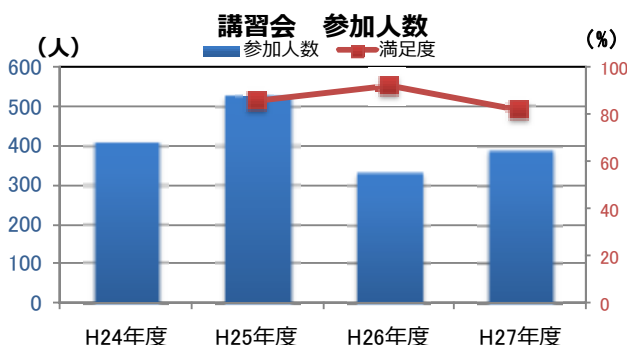
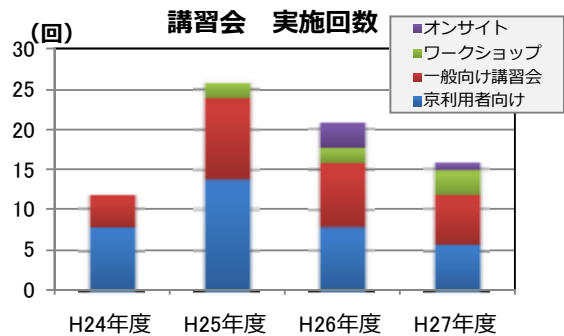


(*) H26年度末までに終了した一般利用枠課題を対象、計68課題の代表者より回答受領（実施期間：H27.12.1～H28.1.21）

17

効率的・効果的講習会の開催

- 参加人数の変化を踏まえ実施回数を調整し、効率的に開催
- 捻出した工数で、高度化支援期間の長期化(3か月→4か月)に対応
- ニーズに合わせワークショップやオンサイト講習会を追加
- H27年度は開催回数を減らしつつ、ニーズに的確に応えることで、参加人数が増加
- 常に80%以上の高い満足度
- 主催した講習会に累計1,659人が参加



18

高度化支援

● 高度化支援の必要性

- ▶ 「京」の資源有効活用のため、大規模並列に対応できる高度な技術とノウハウによるプログラムの高度化が必要

● 体制

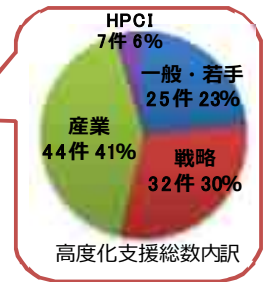
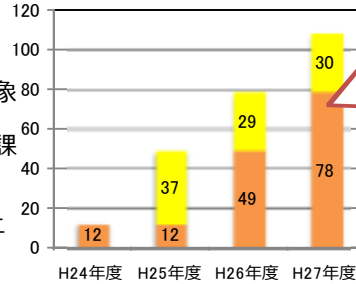
- ▶ 14名の研究実施相談者、5名の支援補助技術者
- ▶ 構造、流体、粒子、量子の4グループで支援し、集約された情報を共有することで効率的な支援と人員のスキルアップを促進

● 実績

- ▶ 合計108件実施(「京」以外のHPCI支援含む)
 - 「京」一般利用枠219課題中32%に対して支援
- ▶ アカデミアと産業への支援を一体的に行い、支援対象課題数の変動にも柔軟に対応
- ▶ 先端的・革新的ニーズである「京」戦略プログラム課題にも支援を実施
- ▶ プログラムの移植、最適化技術等の情報を講習会、WS等の場で紹介するとともにHPCIポータルサイト上でノウハウ集として公開

http://www.hpci-office.jp/pages/k_koudoka_knowhow

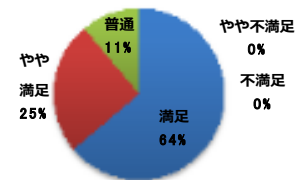
(件) 高度化支援累積件数



● 質の高い支援

- ▶ 高並列化支援で平均2.9 (中央値2.2) 倍の高速化
- ▶ 支援後のアンケートで89% (満足、やや満足) の高い満足度

満足頂けましたか (回答数36)



高度化支援による経費削減

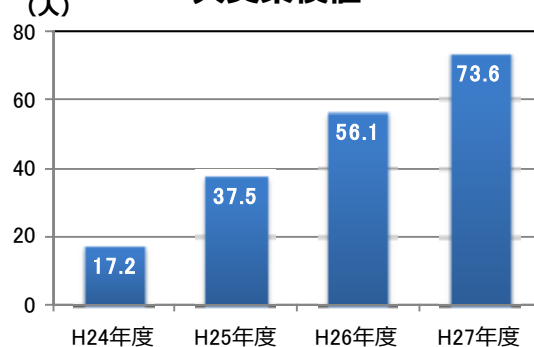
- 高度化支援および講習会業務は年平均18.4人*で実施

(*) 産業利用推進室の高度化支援員を含む

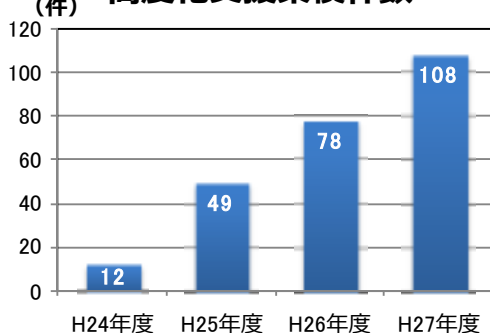
- 高度化支援件数は合計108件

- 高度化支援による高速化により、**約42億7300万円** (ノード時間あたり14.53円として換算) 相当の資源増加効果を生み、「京」の効率的利用に貢献

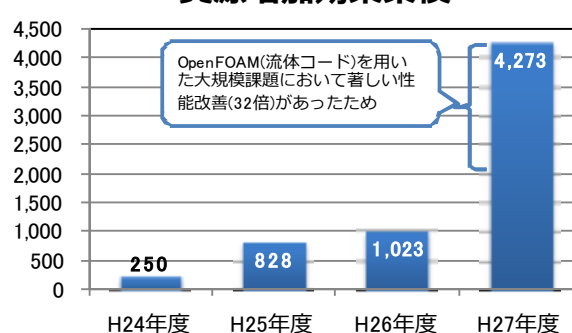
人員累積値



(件) 高度化支援累積件数



(百万円) 資源増加効果累積



産業利用支援の内容と実績

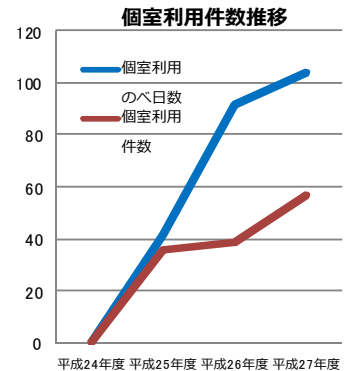
産業利用推進室

利用支援項目	内容・実績
①コンシェルジュ的相談窓口	<ul style="list-style-type: none"> 初心者・初級者向けのHPCよろず相談・応募前相談を神戸センター及びアクセスポイント東京において207件実施し、その内118件が課題応募、採択は108件。
②ソフトウェア移植・チューニング支援	<ul style="list-style-type: none"> 保有する利用支援用スパコンFX10において、アプリベンダーとの共同研究のもとで5種の商用ソフトを移植。 流体解析用のOpenFOAMや材料解析用のLAMMPS等、産業界に利用ニーズの高いオープンソースソフトウェアの移植・高度化支援を実施。 利用頻度の高いアプリケーションのコンパイル方法、環境設定方法等の情報を整備し、利用者に提供。
③アプリケーション講習会	<ul style="list-style-type: none"> OpenFOAMワークショップを3回開催（計192名の参加者中、企業は146名）。LAMMPSを中心とした材料系ワークショップを1回開催（67名の参加者中、企業は46名）。
④高度化支援	<ul style="list-style-type: none"> 産業利用課題で利用されるアプリケーションの高度化を利用支援部と協力して、「京」の課題の支援を44件、「京」以外の課題の支援を2件実施。
⑤プリ・ポスト処理支援	<ul style="list-style-type: none"> プリ・ポスト処理の専門支援員によって可視化等を支援 AP東京に高速ネットワーク環境とプリ・ポスト処理用ソフトを整備。計算結果が格納された大規模データの高速ダウンロード等を支援（ダウンロードを目的としたアクセスポイントの利用件数は47件、延べ157日）

(H24.9.28～H28.2.19の数値)

アクセスポイント
(産業界向け利用拠点として東京・神戸に設置)

- セキュリティに配慮した作業用個室(2室)とHPCI利用端末を用意。自社からHPCIへのアクセスが困難な利用者に利用環境を提供。
- 技術相談窓口において専任の技術スタッフが応募前相談、利用相談、プログラム高度化支援等を実施。



21

産業利用促進策

- 産業利用課題のための資源として産業利用枠を「京」に確保
 - 産業利用ニーズの急増に対応するため、年々利用枠を拡大

年度	平成24-25年度	平成26年度	平成27年度	平成28年度
「京」全体に占める割合	5%	8%	10%	15%

- 産業利用ニーズに対応した利用種別の設定と募集
 - 実証利用、トライアル・ユース、個別利用(成果専有、ジョブ優遇)を設定、随時受付
- 産業利用課題の特性を踏まえた選定方針・選定方法
 - サイエンスではなく、出口・波及効果を重視した産業利用向け選定基準を設定
 - 課題申請書の書式を申請者の視点に立って、毎年改訂
- 産業利用課題の成果公開義務への対応
 - トライアル・ユースと成果専有利用は、論文・特許等による成果登録義務を免除
 - 知財権を取得する企業のため、利用報告書の公開を最大2年間延長する制度を運用
- 産業利用課題の特性を踏まえた手厚い利用支援
 - 産業利用の支援・普及促進を専門に行うための組織として、産業利用推進室を設置
 - HPC初級者のため、コンシェルジュ的相談対応や応募前相談を重視
 - 関東の対面相談ニーズや巨大データのダウンロードニーズに対応するため、品川にアクセスポイント東京(産業利用支援拠点)を設置・運用
- アプリケーションの整備・情報提供
 - 商用ソフトをベンダーとの共同研究で「京」に移植、OSS講習会を開催し、情報提供

22

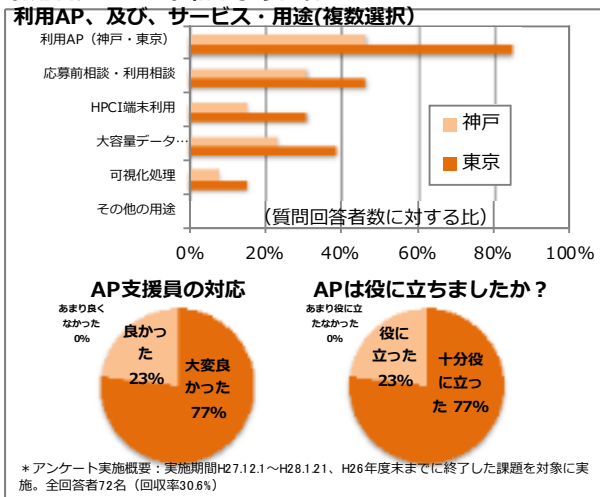
HPCIの産業利用の促進に向けた利用支援

○「京」及びHPCIの産業界の利用は、我が国の産業競争力強化とともに、「京」等の成果を社会に還元する上でも重要。

○「京」を中核とするHPCIシステム利用者に対し、産業界向けの利用拠点(アクセスポイント)を東西に設置。

- ・ **セキュリティに配慮**した作業用個室(2室/各拠点)とHPCI利用端末を用意。自社からHPCIにアクセスすることが難しい産業利用ユーザーに利用環境を提供。
- ・ **技術相談窓口において専任の技術スタッフ**による、利用環境から大規模計算資源利用に至るまでの**利用支援・指導・助言**

利用者アンケート結果より抜粋



HPCIアクセスポイント神戸 (運営: 計算科学振興財団)

住所: 兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-28計算科学センタービル1階
連絡先: 078-599-5025 <http://www.j-focus.or.jp/ap-kobe/>



「京」直結ワークステーション



「京」直結ジョブ管理用端末
HPCI利用端末

HPCIアクセスポイント東京 (運営: 高度情報科学技術研究機構)

住所: 東京都品川区北品川2-32-3六行会総合ビル7階
連絡先: 03-6433-0670 <http://tokyo.rist.jp/ap-tokyo/>



HPCI利用端末



個室での利用相談

23

産業利用の拡大

● スパコンの産業利用ニーズ、利用企業が年々拡大

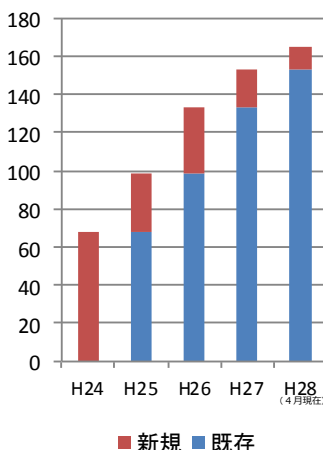
年度	平成24-25年度	平成26年度	平成27年度	平成28年度
「京」全体に占める割合	5%	8%	10%	15%

➢ 総計165社(H28.4時点)がHPCIを利用。

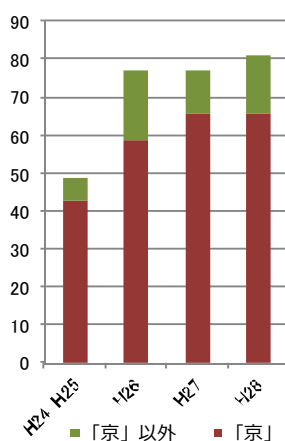
- PRACE(欧州のHPC利用促進組織)は 累計56社 (H27.10現在、中小企業支援枠(30社未満)除く)

➢ 小規模な利用課題は「京」以外の資源に誘導 (平成28年度実証利用)

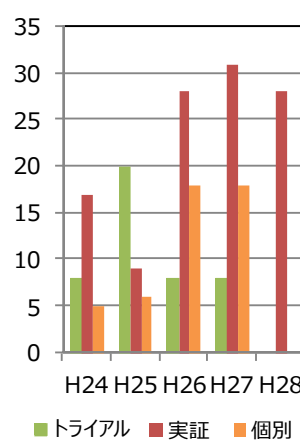
産業利用企業数の累積
(各年度末、H28は4月時点)



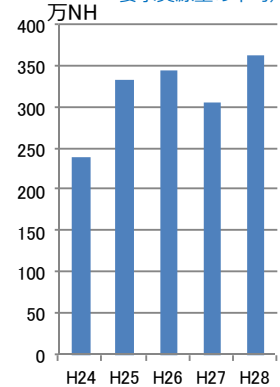
毎年の利用企業数
(定期募集分)



「京」産業利用課題
採択数の拡大



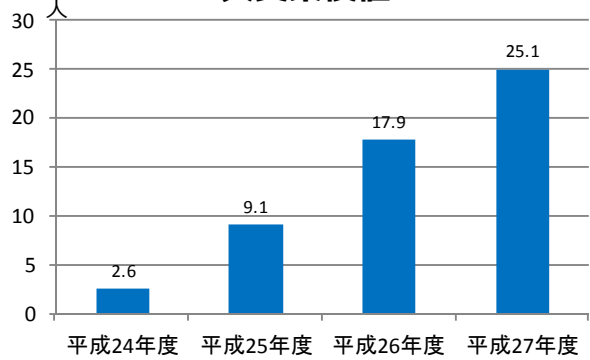
「京」利用規模の拡大
(産業利用課題(実証利用)の
要求資源量の平均)



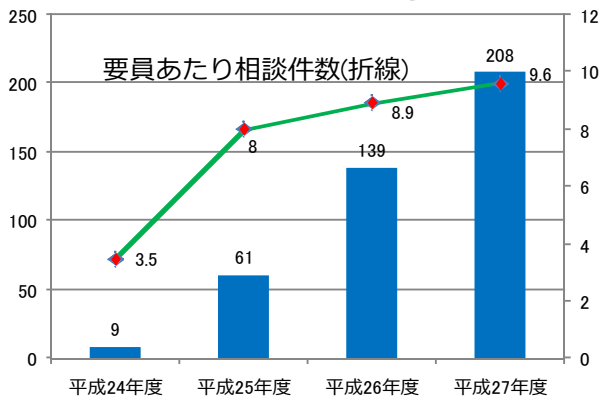
効率的産業利用支援

- 産業利用支援は、年平均 6.3人で実施
- 応募前相談件数は、合計208件、その内、118件(57%)が応募
(一人当たり相談件数は、年々増大 スキルアップにより効率的支援を実施)
- 産業利用課題数は、172件に拡大
- 産業利用課題の高度化支援を利用支援部と協力し、46件実施

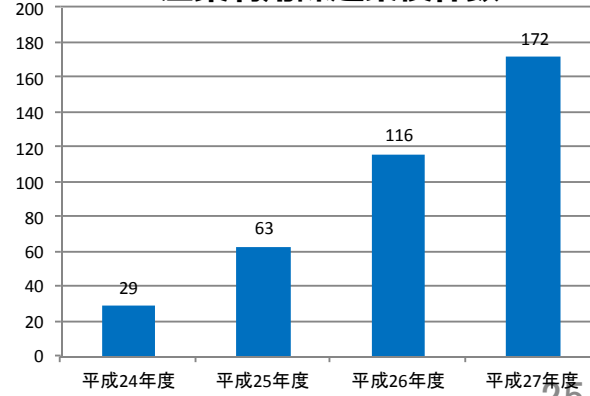
人員累積値



応募前相談累積件数



産業利用課題累積件数



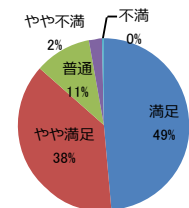
25

計算科学研究及びそれを支える人材の育成

- 初級者から上級者まで幅広い利用技術のニーズに応える講習会による受講者のスキルアップを通じて人材の育成に貢献

	開催回数	参加者数				
		合計	大学	研究機関	産業	他
主催	75	1,659	596	336	689	38
共催	40	960	690	175	89	6

満足度(講習会後アンケートにて集計
回答数668件、期間H25.12.18~)



- 計算科学技術研究を支える高いスキルを持った人材の育成

- 共用法第12条に係る調査研究
 - 利用支援に資する調査研究、及び研究実施相談者のスキルアップを目的として「京」の一般利用枠を資源圧迫しない範囲(「京」一般利用枠の1%以下)で調査研究を実施
- グループ体制による資質の向上
 - 分野毎にグループを形成し共同で支援にあたることで、習熟者の指導による効果的なスキルアップを実現
 - 5名の博士号取得者による専門的知識の提供
- 理化学研究所との連携
 - 連携協力協定を締結し、必要に応じて高度化支援等に関する連絡会を実施し、知見・技術の提供を受けた
- 国内外の会議参加、外部発表
 - 米国SC、欧州ISCへ毎年参加
 - 日本物理学会、気象学会等の国内会議、計算量子化学、核融合、宇宙物理などの国際会議等への参加・発表
- 研究実施相談研究員2名枠の設置
 - 対象：若手の博士号取得者
 - 任期：1年(2回を限度に更新可)
 - 研究活動に専念出来る体制とし、国際会議等での発表を奨励するとともに外部研究機関等との共同研究も実施

H27年度までの実績
8件の調査研究

論文(共著含) 9件
ゴードンベル賞
ファイナリスト(共著) 2件
共用法第12条に係る調査研究 1件
その他外部発表 86件

合計3名
任期を満了した1名が、国立研究開発法人日本原子力研究開発機構の特任研究員として採用

26

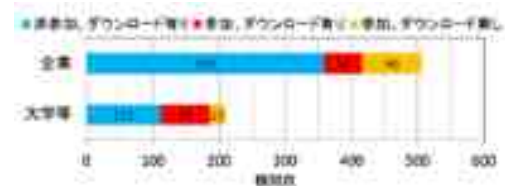
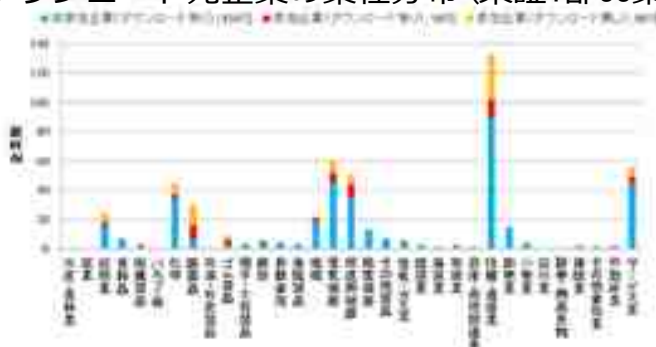
成果の公表と普及

- HPCI利用報告書の公開
 - 公開の実績は全部で422課題、うち「京」;289課題
 - 利用分野からの検索、要約の表示、課題毎の成果発表データベースへのリンクなど高機能を有する。
 - ダウンロード数：20,703回 (H26.7.15～H28.3.31)
 - うち海外から1,207回 (42ヶ国)
- 課題枠別ダウンロード数
 - 「京」産業利用のダウンロード数が最も多い。
 - ダウンロード数トップ20に「京」産業利用、同トライアル・ユースが半数以上含まれている。
- ダウンロード元企業の業種分布 (東証1部33業種で分類) HPCI参加企業と比較



「利用分野から検索」機能による利用報告書要約の表示例

http://www.hpci-office.jp/pages/user_report_bunya



- ダウンロード元の企業、大学等の機関数はそれぞれのHPCI参加機関数を大きく上回る。

➢ HPCI参加企業の業種数: 15(33業種の45%) ⇒ ダウンロード元企業の業種数: 27(同82%)
 → HPCI利用研究成果への産業界の関心の広がりを示す。 27

理解増進活動の実施

潜在的利用者を含めた研究者・技術者に研究成果や利用事例を発信するとともに、利用者との意見交換や利用者相互の交流を通じて、スーパーコンピュータ利用への理解を深め、利用の促進に努めている。

アウトリーチ活動

国民の計算科学に対する理解増進を目的として、計算機発展の歴史を分かり易く説明する博物館型の展示を実施
 青少年の計算科学に対する知的好奇心の活性化のため、小中学生を対象にピー玉式計算機による2進数の原理等を解説した「スパコン探検隊」を実施



講習会、ワークショップ

「京」の有用性の啓発や利用技術の習得を目的として講習会、ワークショップを実施した。幅広いレベルやニーズに対応するため主催、共催含め数多く開催した



高度化支援ノウハウ集

これまでの「京」を含むHPCIシステムにおける高度化支援を通じて得られた高速化ノウハウを講習会、WS、HPCIポータルサイトで共有することで効率的なHPC資源活用に資する

- 「京」を含むHPCIシステムにおけるプログラム高速化ノウハウ集
http://www.hpci-office.jp/pages/k_koudoka_knowhow

国際会議SCへの出展

HPC分野の代表的な国際会議であるSCへ毎年ブース出展を行っている。研究課題の成果についてポスターや動画、講演などを様々な形で発信



利用相談、高度化支援

ヘルプデスクによる一元的窓口対応により、申請前の事前相談から利用相談、アプリケーションの高度化支援などあらゆる利用支援を実施

成果報告会、シンポジウムの開催

一般課題を中心とした成果報告会の他、AICSなどと共同でシンポジウムを開催。研究成果の発表を通し、研究者間の情報交換や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

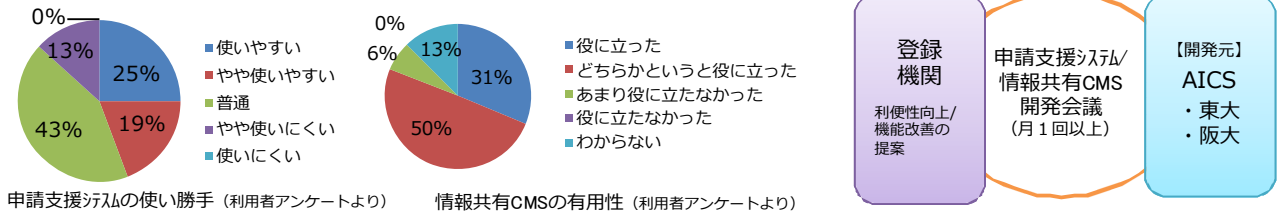
成果事例集、広報誌の発行

成果の普及啓発として、研究課題成果などをわかりやすく説明した成果事例集や広報誌を発行
 (詳細については、次ページを参照)

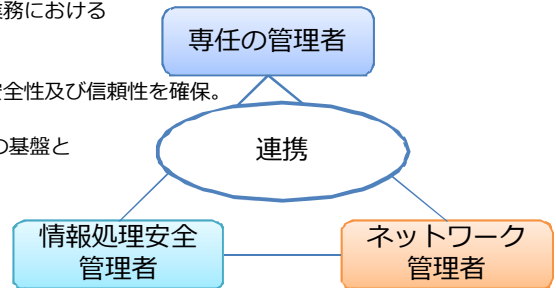


特定高速電子計算機施設の運営に関する事項

- 利用者本位の利用促進業務の実施
 - 幅広い分野における利用者のニーズ把握（成果報告会及び課題終了後のアンケート）
 - 利用者ニーズを理化学研究所にフィードバックし、「京」の運用改善に寄与
- 利用者視点に立ち、各種手続きを簡素化、情報共有の推進
 - 申請支援システムを運用し、課題申請手続き等の簡素化
 - 情報共有CMSを運用し、「京」利用者への情報発信（OSS導入手順、FAQ掲載等）と利用者間情報共有の支援



- 情報管理の徹底と情報システム及びネットワークの安定運用
 - 専任の管理者を置き、「特定高速電子計算機施設等の利用促進業務における情報管理に基本的関する考え方」に則って、情報を徹底管理。
⇨情報セキュリティインシデント発生 ゼロ
 - 情報処理安全管理者を置き、申請支援システム等の情報処理の安全性及び信頼性を確保。
⇨システム重大トラブル ゼロ
 - ネットワーク管理者を置き、AICSと連携し、申請支援システム等の基盤となるネットワークの運用と管理を確実に実施。
⇨ネットワーク停止トラブル ゼロ



29

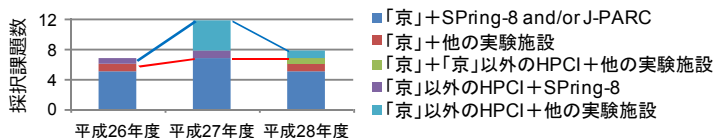
関係機関との連携

- 理化学研究所との連携
 - 連携協力協定を締結し、定期的な連絡会を開催。利用状況及び利用支援に関する情報を共有することで、一体となって特定高速電子計算機施設の共用を促進
- HPCIコンソーシアムとの連携
 - HPCIシステムの整備・運用体制の改善・要望に応え、適宜、制度や運用体制等の見直し
 - HPCIの構築と運営に協力

- 3登録機関の連携協力：「京」/ SPring-8 / J-PARC
 - 大型実験施設との連携利用による新たな研究成果の創出

成果事例：“大規模粗視化分子動力学法を用いたゴム破壊現象の解明による高性能・長寿命タイヤの開発”
→ 省エネ型タイヤの商品開発に寄与

連携利用課題の動向



「連携利用シンポジウム」の開催

- 3登録機関+CMSI（計算科学物質イニシアティブ）による実験とシミュレーションの合同シンポジウム
- 企業からの参加者、企業数ともに増加
第1回：28名（16社）→ 第2回：45名（33社）
- 今年度からは各回毎の中心テーマと密接な関わりのあるポスト「京」重点課題に共催に入ってくださいよう検討



実在化合物のナノスケールの挙動解明が新しいポリマーの開発及びゴム化学分野における更なるイノベーションにつながる



提供：住友ゴム工業株式会社

30

地元自治体との連携

- 地元自治体や産業促進機関との連携を図り、セミナーの共催や情報交換を実施
 - 兵庫県、神戸市、関西経済連合会、経済産業省近畿経済産業局、大阪商工会議所、神戸商工会議所、兵庫県工業技術センター等
- 地元自治体が出資する計算科学振興財団と連携協力協定締結
 - 産業界向け入門用スパコンから「京」へのステップアップを協力して推進
 - 産業利用支援拠点であるアクセスポイント(東京と神戸)の運営で連携協力
- 地元でのアウトリーチ活動を推進
 - 神戸市の医療産業都市一般公開に「計算機歴史博物館」を出展
 - 兵庫県・神戸市等と市民向けスパコンセミナーを共催
 - 神戸市青少年科学館での小中学生向けスパコン授業や高校教員への講習会開催



神戸市青少年科学館でのスパコン授業



医療産業都市一般公開(計算機歴史博物館)

国際交流の推進・国際比較

国際交流の推進

欧州、米国との国際協力

- 欧州全体にわたる高性能計算資源を提供しているPRACEとRISTとの間で、HPCの共用促進に係る情報交換に関するMOUを締結 (H26.10.30)
- MOU締結に関する共同プレスリリースを実施 (日欧同時)
 - 日本のメディア5件、欧州のメディア3件に取り上げられた
- 欧州主要国におけるHPCの取り組みに係る情報をHPCIの運営に反映できる基盤を形成
- 互いの主催する会議に招待し、それぞれの活動状況を発表するなどの交流を進めている
- SC15 (H27.11)にて、米国の大学のHPC利用促進組織であるXSEDEを含め、今後RIST/PRACE/XSEDEの3者協力を推進すべく3者間で意見の一致をみた
 - 米国も含めることにより、更に国際交流の幅を広げることが期待できる



調印式 (RIST神戸センター)



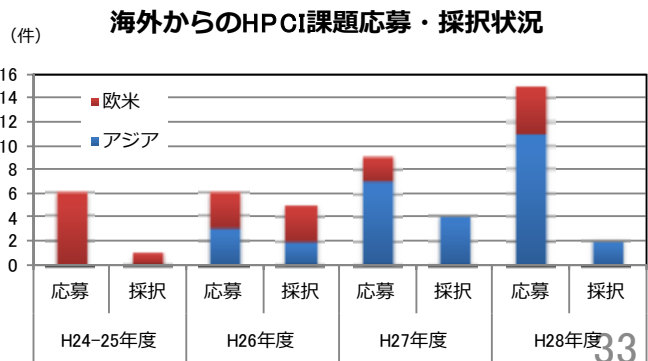
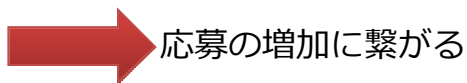
第1回 成果報告会 (東京) H26.10.31



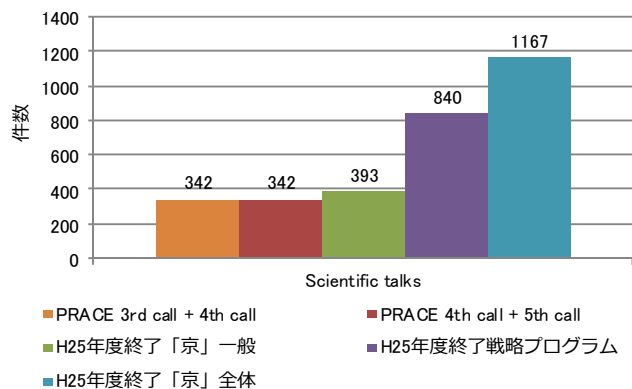
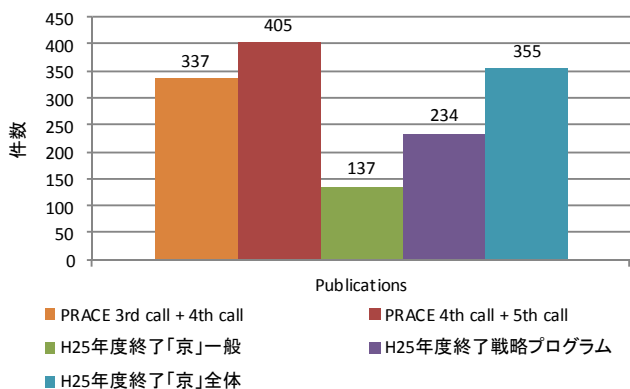
PRACEdays 15 (ダブリン) H27.5.27

海外に対する利用促進

- 申請支援システム・申請書・ポータルサイト・成果事例集の英語化
- 海外向け募集説明会等を開催
 - 国際会議等において、「京」の利用制度について発信
 - 平成28年度の募集説明会を開催



費用対効果：成果発表件数のPRACEとの比較



● 比較の前提：

- ▶ どちらも課題数は100程度、予算規模もPRACE:約110億円/年、「京」:112億円(H27)とほぼ同程度
 - 「京」:平成25年度終了課題 (一般利用:77課題、戦略プログラム:29課題(含体制構築課題))の2016年2月13日時点のデータ (課題終了後1年10ヶ月経過)
 - PRACE: 3rd call (24課題; 2012年12月末終了)、4th call (43課題; 2013年6月末終了)、5th call (57課題; 2013年12月末終了)の2015年6月21日時点のデータ (課題終了後1年5ヶ月以上経過)
 - PRACEは年2回公募のため、連続する2回のcallの成果の和で「京」と比較する
- ▶ PRACEは単にPublicationsという表現を使っているため、「京」も査読なしを含めた論文全体をカウント
- ▶ 「京」のScientific talksは国際会議・シンポジウムと国内会議・シンポジウムの合計。

結果：

- 論文数では「京」とPRACEはほぼ互角
- 会議発表件数では「京」はPRACEをはるかに上回る。

課題選定方式の比較

		PRACE	HPCI
課題募集	年間頻度	2回（9月と3月）募集し、5か月後に選定結果発表	1回（9月募集開始、2月に選定結果発表）
	課題実施期間	1年間（複数年も有り）	1年間（戦略プログラムは5年継続）
	年度を跨ぐ課題実施	有	有（随時募集課題）
課題の評価	プロセス	センターによる技術評価（2週間） ピアレビュー（科学的評価、4週間）	ピアレビュー（～4週間）
	年間申請数	約100課題 * 2回	約200課題
	課題毎のレビュー数	平均3人	平均4人
	レビューの担当課題数	2課題	平均8課題
	採択数	67（最近の募集2回分合計）	134（平成27年度）
レビュー	レビュー総数	約500人	約160人
	所属	大学 + 研究機関	大学 + 研究機関
	レビューの選定	事務局にて選定 課題実施者から最大3人のレビュー指定希望を受け付けるが、その通りになる保証は無い	課題審査委員長の意見を聴いて選定 3人は同じ研究分野、1人は計算機科学分野から選定
	利益相反	自己申告にて回避	自己申告にて回避
	氏名の公開	無	無

35

分野別応募課題数とレビュー PRACEとHPCIの比較

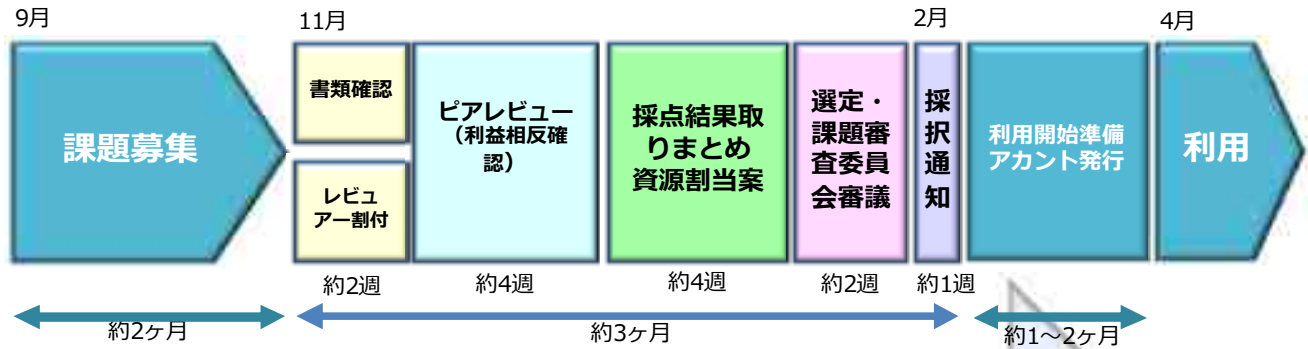
- ・ PRACEは年2回募集、年間の応募数はPRACEの90×2、HPCIの195とほぼ同数
- ・ PRACEの募集課題分野数7に対し、HPCIの課題分野数は8（分科数23）
- ・ レビューの課題当たりの割り当て数は、PRACEが3、HPCIが4
- ・ レビュアー一人が審査する課題数は、PRACEが2、HPCIは約8

PRACE					HPCI						
Categories	# proposals	reviewers per proposal	proposals per reviewer	# reviewers	分類	科研費の分科	課題数	課題当のレビュー数	レビュー当の平均課題数	レビュー数	
Biochemistry, Bioinformatics and Life sciences	11	3	2	17	バイオ・ライフ	生物科学 薬学 ゲノム科学	27	3	7.7	101	
Engineering	11				工学・ものづくり	機械工学Ⅰ 機械工学Ⅱ 総合工学Ⅰ 総合工学Ⅱ					50
Universe Sciences	22				原子力・核融合	物理工学Ⅰ	35				
Fundamental Constituents of Matter					物理・宇宙・素粒子	物理学Ⅱ					53
Chemical Sciences and Materials	38				物質・材料・化学	プラズマ科学	30				
						物理学Ⅲ					
						物理学Ⅳ					
		応用物理Ⅰ 応用物理Ⅱ									
Earth System Sciences	8	環境・防災・減災	材料工学 プロセス・化学工学 ナノ・マイクロ科学	12							
			地球惑星科学Ⅰ								
			地球惑星科学Ⅱ								
Math and Computer Sciences		数理学 情報・計算機科学・その他	工務工学 土木工学 計算科学	30							
			情報学基礎								
			情報学基礎								
					(全課題共通)	計算基礎	195	1			
	課題数 90			レビュー数 136			課題数 195		レビュー数 101		
				レビュー候補 500					レビュー候補 132		

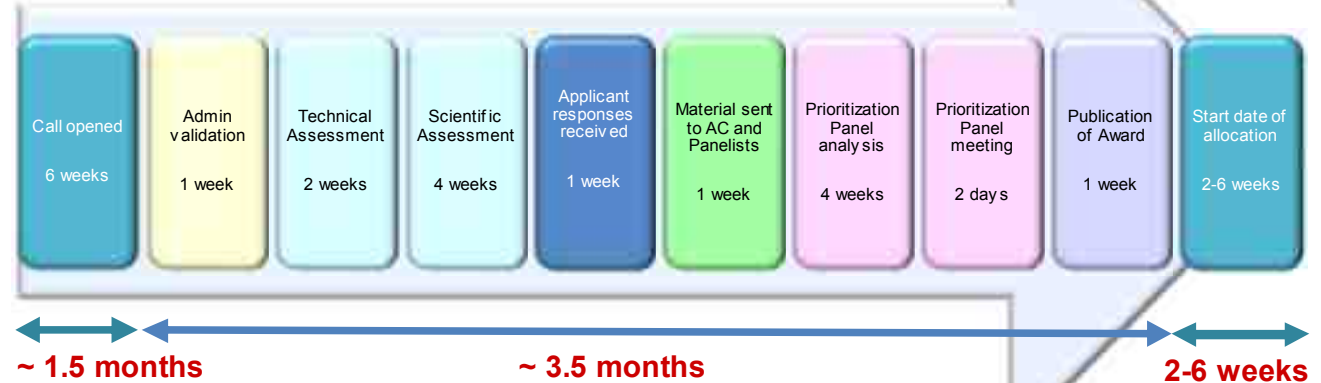
36

ピアレビュープロセスの比較

□ HPCI



□ PRACE



37

海外と比較した「京」産業利用の拡大理由

● 比較対象

- PRACE EUが主導する欧州(25か国)のHPC利用促進機関、産業利用企業数は累計56社
- INCITE 米国DOEの予算で2種のスパコンを共用、企業が代表の課題は年5~10%(数課題)
- XSEDE 米国国立科学財団の予算で10数種のスパコンを共用、課題数非公開

項目	「京」	PRACE	INCITE	XSEDE
産業利用枠	有り	無し	無し	無し (産学連携課題限定)
産業利用向けの審査基準	サイエンスではなく、産業応用の出口・波及効果重視	無し(アカデミックと同一、サイエンスの観点のみ)	無し	無し
成果専有(有償利用)	可能	不可(成果公開・無償利用のみ)	成果公開を強く推奨	成果専有・有償利用も可能だが、詳細不明
産業利用促進	・専門組織(産業利用推進室)設置 ・アクセスポイント(産業利用支援拠点)設置 ・企業のHPC初級者への応募前の支援(他機関には無い)	中小企業(SME)支援プログラム有り	具体的な取り組みは不明	産業利用促進プログラム有り (XSEDEと利用者が人的リソースを提供し、共同で推進)

38

海外主要推進機関との比較表

	HPCI (日)	PRACE (欧)	INCITE (米)	XSEDE (米)						
利用枠	<ul style="list-style-type: none"> ○一般利用枠(「京」の35%) ・一般課題 <ul style="list-style-type: none"> 無償、成果公開、1年 ・若手人材育成課題 <ul style="list-style-type: none"> 無償、成果公開、1年 ・産業利用課題 <ul style="list-style-type: none"> ・トライアル・ユース <ul style="list-style-type: none"> 無償、成果公開、6か月、随時受付 ・実証利用 <ul style="list-style-type: none"> 無償、成果公開、1年 ・個別利用 <ul style="list-style-type: none"> 有償、成果非公開、～1年、随時受付 ・ASP(*)事業実証利用 <ul style="list-style-type: none"> 有償、成果非公開、～1年、随時受付 ・競争的資金等獲得課題 <ul style="list-style-type: none"> 有償、成果公開、～1年、随時受付 <p>※産業利用枠を設定 ※有償で成果非公開が可能</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ Preparatory Access <ul style="list-style-type: none"> 3か月(予備の利用) ・ Project Access (1～3年) <ul style="list-style-type: none"> 1年単位3年迄(年2回公募) 大規模科学技術計算 ・ Programmatic Access <ul style="list-style-type: none"> 大規模、長期間課題(非常に高い科学レベルで全欧州的視野・重要性を有するもの) <p>※産業利用枠無し ※全て無償</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・一般枠(60%) <ul style="list-style-type: none"> 無償利用 <ul style="list-style-type: none"> 1年単位で3年迄(年1回公募) 有償利用 <ul style="list-style-type: none"> 不明 ・資源提供機関の裁量枠(10%) <ul style="list-style-type: none"> 詳細不明 ・エネルギー省(DOE)のLeadership Computing Challenge枠(30%) <ul style="list-style-type: none"> 詳細不明 <p>※産業利用枠無し ※無償利用・成果公開を推奨 ※有償利用の詳細は不明</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ Startup <ul style="list-style-type: none"> 初期的利用 <ul style="list-style-type: none"> 1年単位(随時受付) ・ Education <ul style="list-style-type: none"> 教育的利用 <ul style="list-style-type: none"> 1年単位(随時受付) ・ Research <ul style="list-style-type: none"> 研究的利用 <ul style="list-style-type: none"> 1年単位(年4回公募) <p>※無償利用が基本 ※産業利用はアカデミック機関との共同メンバになり資源を利用 ※Industry Challenge Program(XSEDEと利用者が人的リソースを提供しプロジェクトを推進)</p>						
採択数	<ul style="list-style-type: none"> ○「京」 <ul style="list-style-type: none"> ・平成27年度募集 <ul style="list-style-type: none"> 採択：67課題、応募：138課題 ・平成27年度随時募集(H27.6.1現在) <ul style="list-style-type: none"> トライアル&個別利用 9課題 ○「京」以外のHPCI <ul style="list-style-type: none"> ・平成27年度募集 <ul style="list-style-type: none"> 採択件数：72課題、143課題 	<ul style="list-style-type: none"> ・ Preparatory Access <ul style="list-style-type: none"> 直近の採択；12課題/回 ・ Project Access (1～3年) <ul style="list-style-type: none"> 直近の採択 48課題/回 ・ Programmatic Access <ul style="list-style-type: none"> 今後公募 	<ul style="list-style-type: none"> ・一般枠(無償利用) <ul style="list-style-type: none"> 2015年の採択数；56課題 有償利用は不明 	<p>申込み件数/年</p> <table border="1"> <tr> <td>Startup</td> <td>1,000</td> </tr> <tr> <td>Education</td> <td>100</td> </tr> <tr> <td>Research</td> <td>800</td> </tr> </table> <p>採択率(非公開)</p>	Startup	1,000	Education	100	Research	800
Startup	1,000									
Education	100									
Research	800									
提供資源	○HPCI全体(H27年度) : 約14.9PF 「京」+ 12機関	○PRACE全体 : 約18.8PF 6機関(Tier-0)	○INCITE全体 : 約37PF 2機関	○XSEDE全体 : 約13PF 10数機関						
課題当たりの計算規模(最大/平均) [NH:ノード時間積]	○HPCI全体(H27年度) : 最大2450万NH / 平均430万NH	○PRACE全体 : 最大925万NH / 平均353万NH	○INCITE全体 : 平均1063万NH	○XSEDE全体 : (規模の異なる複数の計算資源が存在するため比較困難)						

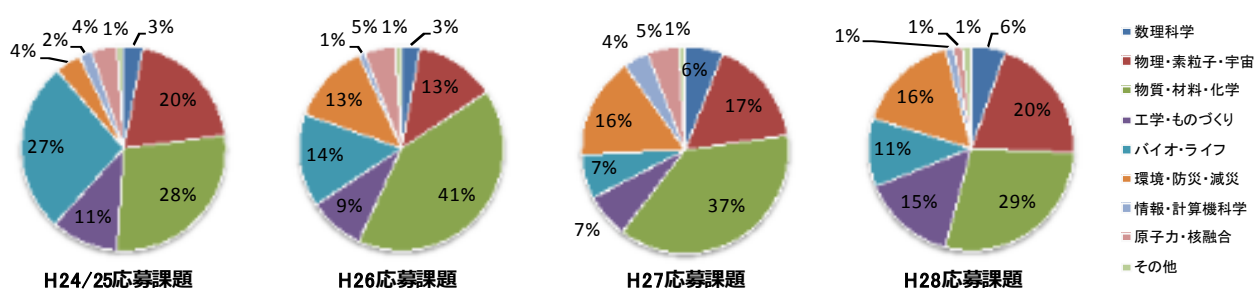
分析資料

「京」を中核とする HPCIの応募状況の分析

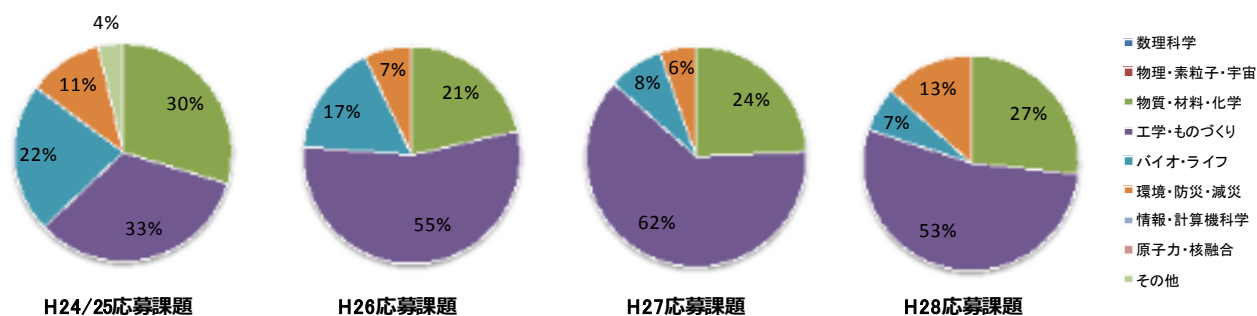
課題の分野分布

● 応募課題の分野分布

➤ 一般課題・若手人材育成課題



➤ 産業利用課題



応募課題の分野分布の傾向（一般課題）

一般課題

傾向

- 「京」における「物質・材料・化学」分野については、若干の低下傾向はあるが、継続的に際立って大きな割合を占めている。
- 「京」における「環境・防災・減災」分野は増加傾向、「バイオ・ライフ」分野は減少傾向

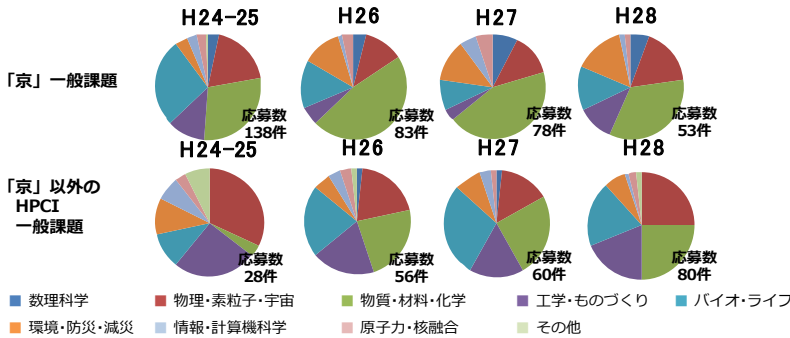
結論

- 「京」一般課題においては、「物理・素粒子・宇宙」分野及び「物質・材料・化学」分野が継続的に約半数の応募数を占めている。
- 「京」以外のHPCIでは、この2分野は当初の約3割程度から約半分程度に伸びており、需要は高い。
- H28年度募集においては、「京」の応募数が減少し、「京」以外のHPCIで増加している。その変化は、「物質・材料・化学」分野で顕著。この分野で利用がHPCIシフトしたと考えられる。
- 「京」の応募課題の規模（平均要求資源量）に関しては、依然として増加

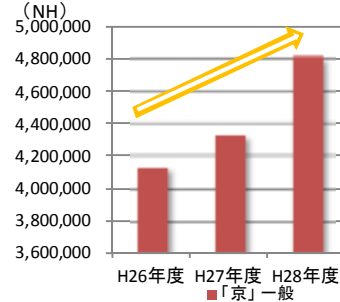
「京」及び「京」以外のHPCIにおける応募課題数（一般課題）の分野分布

募集年度		H24-H25	H26	H27	H28
「京」 一般課題	数理科学	5	3	6	3
	物理・素粒子・宇宙	26	10	10	9
	物質・材料・化学	40	39	34	18
	工学・ものづくり	16	5	2	0
	バイオ・ライフ	37	12	7	7
	環境・防災・減災	5	10	10	8
	情報・計算機科学	4	1	4	1
	原子力・核融合	4	3	4	1
	その他	1	0	0	0
	計	138	83	78	53
「京」以外のHPCI 一般課題	数理科学	0	1	1	0
	物理・素粒子・宇宙	9	11	9	20
	物質・材料・化学	1	13	15	20
	工学・ものづくり	7	11	10	15
	バイオ・ライフ	3	12	17	16
	環境・防災・減災	3	3	5	5
	情報・計算機科学	2	2	2	1
	原子力・核融合	1	2	1	2
	その他	2	1	0	1
	計	28	56	60	80

「京」及び「京」以外のHPCIにおける応募課題数（一般課題）の分野分布の推移



「京」一般課題における平均要求資源量（課題当たり）



43

応募課題の分野分布の傾向（産業利用課題）

産業利用課題

傾向

- 「京」においては、初回募集を除き、各募集ともほぼ同一の分野分布傾向を示している。
- 「京」については、初回募集を除き、「工学・ものづくり」分野が過半数を占める。

結論

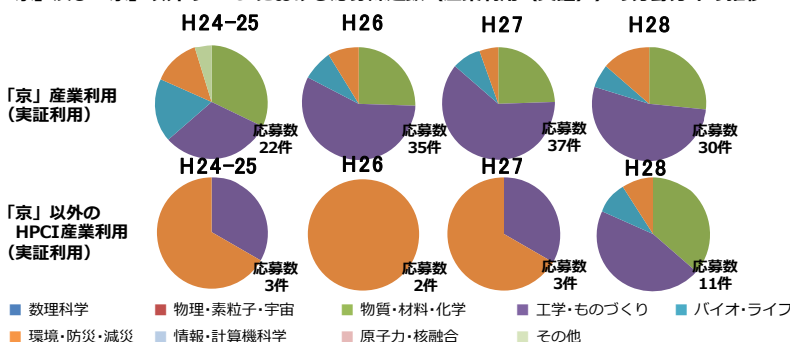
- 「京」産業利用課題においては、初回募集を除き、約半分以上が「工学・ものづくり」分野への応募となっている。
- 「物質・材料・化学」分野を加えると初回募集を除き、約8割以上となり、産業界における需要はこの2分野に集中している。
- H28年度募集では、産業利用における小規模な課題を「京」以外のHPCI利用に誘導(*)したことから、応募数が「京」から「京」以外のHPCIへシフトした。その変化は、「物質・材料・化学」分野、「工学・ものづくり」分野及び「バイオ・ライフ」分野に現れた。

(*) 「京」の産業利用課題への応募条件を平均利用ノード数200以上とし、小規模な課題をHPCIに誘導した。その結果、平均要求資源量（課題当たり）はH27年度の300万NHからH28年度は350万NHに増加。

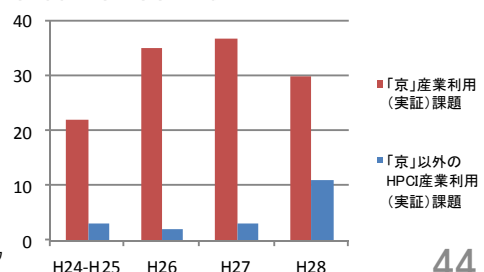
「京」及び「京」以外のHPCIにおける応募課題数（産業利用（実証））の分野分布

募集年度		H24-H25	H26	H27	H28
「京」 産業利用（実証） 課題	数理科学	0	0	0	0
	物理・素粒子・宇宙	0	0	0	0
	物質・材料・化学	7	9	9	8
	工学・ものづくり	7	20	23	16
	バイオ・ライフ	4	3	3	2
	環境・防災・減災	3	3	2	4
	情報・計算機科学	0	0	0	0
	原子力・核融合	0	0	0	0
	その他	1	0	0	0
	計	22	35	37	30
「京」以外のHPCI 産業利用（実証） 課題	数理科学	0	0	0	0
	物理・素粒子・宇宙	0	0	0	0
	物質・材料・化学	0	0	0	4
	工学・ものづくり	1	0	1	5
	バイオ・ライフ	0	0	0	1
	環境・防災・減災	2	2	2	1
	情報・計算機科学	0	0	0	0
	原子力・核融合	0	0	0	0
	その他	0	0	0	0
	計	3	2	3	11

「京」及び「京」以外のHPCIにおける応募課題数（産業利用（実証））の分野分布の推移



「京」及び「京」以外のHPCIにおける応募課題数（産業利用（実証））の推移

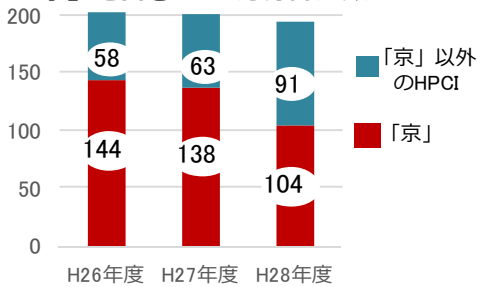


44

応募課題と応募者の動向

応募課題（一般利用課題）

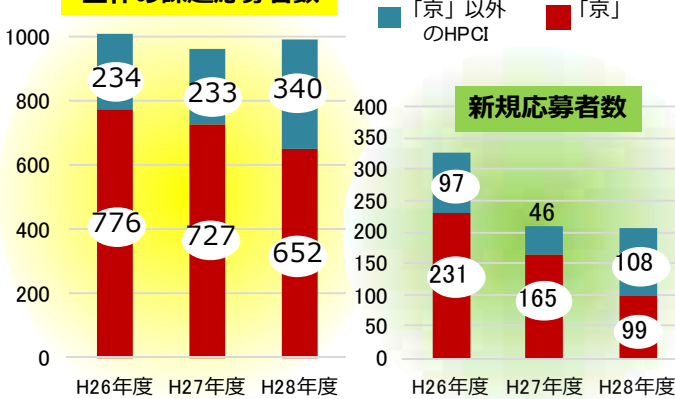
「京」を含むHPCI応募課題数



- ・毎年度の応募課題数は約200件であり、ほぼ一定
- ・「京」及び「京」以外のHPCIの応募課題件数：
H26年度及びH27年度で大差なく、7：3
H28年度は前年度と比べ、
「京」が減、「京」以外が増 → 5：5

課題応募者（一般利用課題）

全体の課題応募者数



- ・HPCI全体の毎年の課題応募者総数は約1000名、ほぼ一定
- ・全体の課題応募者数：
→応募課題状況と同一傾向
H26年度及びH27年度で大差なし
- ・新規応募者：
H28年度は前年度と比べ、
「京」が減(66名)、「京」以外が増(62名)
しかし、**HPCI全体の新規応募者数は約200名であり、前年度と大差なし**

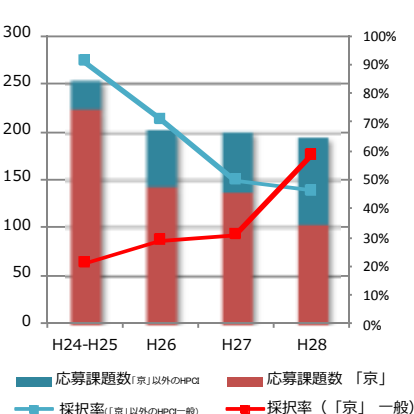
40

応募課題とHPCI資源の動向

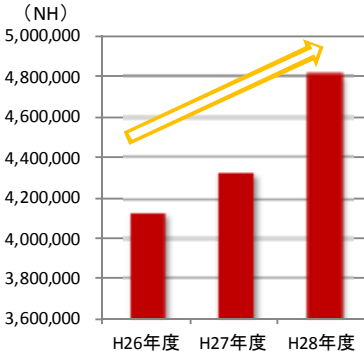
- 「京」及び「京」以外のHPCIの応募総数はH26年度以降は200件前後で推移し、大きな変化はない。
- H28年度募集において「京」の応募数は減少、「京」以外のHPCIは増加。この要因は、
 - ・ 「京」一般課題の採択率がH27年度まで30%程度と大変厳しい競争、一方「京」以外のHPCIの採択率は50%以上と高いこと（左端図）、
 - ・ 「京」の課題の計算規模が拡大（中央図参照）、
 - ・ 「京」以外のHPCI資源の充実(右端図参照)により、提供可能資源量が増加、
 - ・ 「京」の混雑緩和のため、小規模の課題については「京」から「京」以外のHPCI利用に誘導。

→結果として、申請が「京」以外のHPCIへシフト。
「京」の課題の計算規模は拡大し、本来の「京」の利用形態に改善。

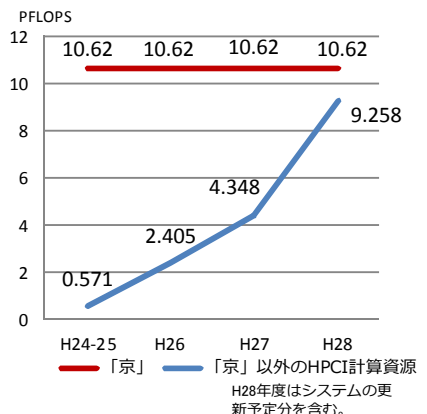
「京」および「京」以外のHPCI応募課題数と採択率



「京」の平均要求資源量（課題当たり）



「京」及び「京」以外のHPCIの提供可能資源量



新規利用者の導入・育成

- 「京」において、新規応募者の60%以上（昨年・本年度は80%以上）が新規利用者として、研究課題に取り組んでいる
 - 「京」を含む全てのHPCIで、新規応募者の85%以上（昨年・本年度は90%以上）が課題実施に参画
- 「京」を中核とするHPCIは、計算科学人材育成の場として重要な役割を果たしている

		H26	H27	H28
京	新規応募者	231	165	99
	新規利用者	148	135	87
	採用率(%)	64	82	88
HPCI全体	新規応募者	328	211	207
	新規利用者	278	200	194
	採用率(%)	85	95	94

- 人材育成、新規利用者の裾野の拡大などの重要な取組は、「京」単体で取り組むのではなく、HPCI全体として適切な役割分担のもと実施することが重要。

47

データ集

高度情報科学技術研究機構(RIST)

48

内容

- 利用者選定関連
 - 利用枠、課題の種類、選定の基準
 - 応募・採択情報
- 利用支援関連
- 産業利用事例
- 利用報告書ダウンロード分析
- 成果発表状況
 - 発表件数
 - 論文の被引用回数
 - 掲載誌のインパクトファクター
- 成果事例（「京」一般利用枠、重点化促進枠）
- 成果公開普及関連
 - 成果報告会優秀成果賞受賞課題一覧
 - HPCI利用報告書の公開
 - 成果公開の促進
- アンケート結果
- その他

49

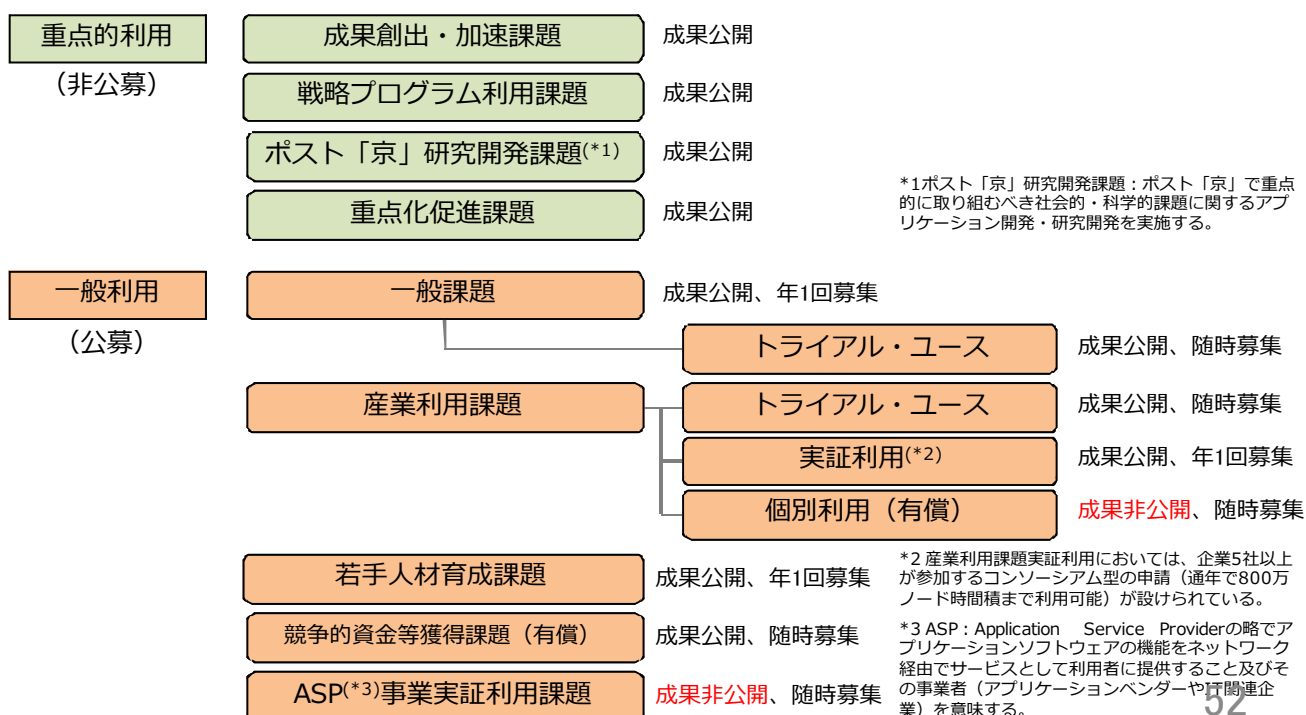
利用者選定関連

50

利用枠、課題の種類、 選定の基準

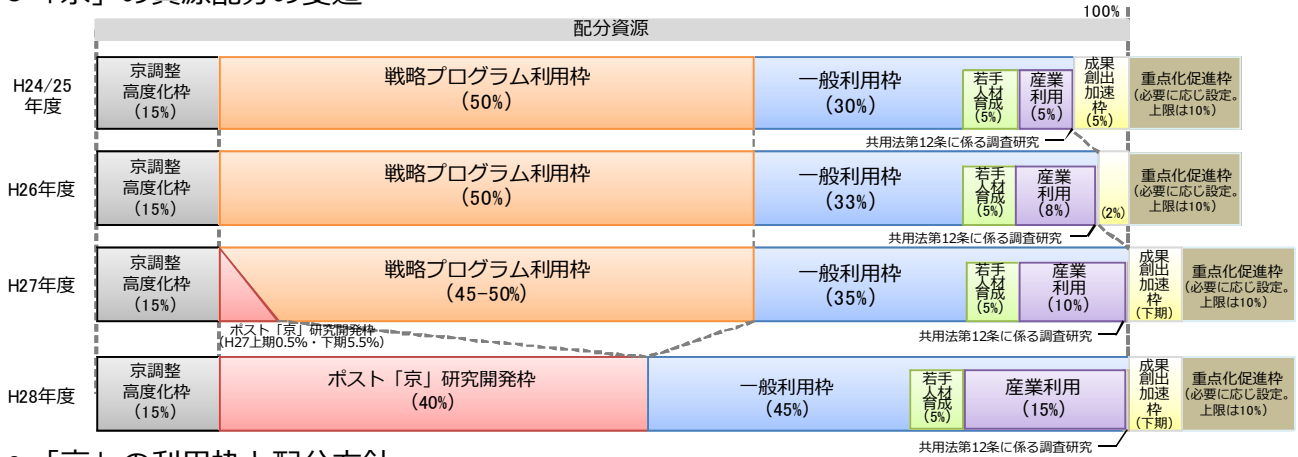
「京」の利用枠と利用研究課題の種類

- 成果を公開とする課題は無償（ただし、競争的資金等獲得課題は除く）
- 成果を非公開とする課題は有償



「京」の資源配分

● 「京」の資源配分の変遷



● 「京」の利用枠と配分方針

利用枠	配分方針
京調整高度化枠	「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
戦略プログラム利用枠	戦略機関が提案した利用希望課題について、文部科学省が配分内容を決定（非公募）
ポスト「京」研究開発枠	重点課題実施機関が提案した利用希望課題について、文部科学省が配分内容を決定（非公募）
一般利用枠	共用開始後の利用のニーズ等も踏まえ、柔軟に対応し、必要に応じて弾力的に見直し（公募）
成果創出・加速枠	一般利用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として設定（非公募）
重点化促進枠	政策的、重要かつ緊急な課題の実施（当初は留保せず、課題が設定されれば、他の利用枠より優先的に実施）（非公募）

53

資源枠の決定

- 各利用枠への資源配分バランスは、HPCI計画推進委員会にて決定
- トップダウン的課題：重点的利用枠
 - 全資源の50%程度(H24/25)、国が決定
 - 戦略プログラム課題等
 - H28年度より、萌芽研究課題を開始
- ボトムアップ的課題：一般利用枠
 - 全資源の30%程度(→45%)、登録機関が選定を担当
 - 一般利用課題(20%→25%)・若手人材育成課題(5%)・産業利用課題(5%→15%)
 - 研究分野、課題、テーマに制限を設けず広く一般から公募
 - 一般利用課題の平均採択率が30%と学術コミュニティの中で厳しい淘汰
 - H28年度応募課題より総合評価方式を導入（先端的・革新的課題が有利に）
 - 戦略的選定を行うプロセスはない。
 - 一般利用枠の課題でサイエンスに掲載された論文は、若手人材育成課題

「京」における課題選定について

● 選定の基準

選定基準	一般課題	若手人材育成課題	産業利用課題	
			通常	コンソーシアム型(*)
(1) 科学的に卓越し、又は社会的に意義が高く、ブレークスルーが期待できる課題であること。	○	-	-	-
(2) 「京」が有する計算資源を必要としていること。	○	○	○	○
(3) ソフトウェアの効率性(並列性)、計算処理、データ収集、結果の解析手法等が十分に検証済みであるとともに、各種資源の利用計画や研究体制が妥当であること。	○	○	○	○
(4) 提案課題の実施及び成果の利用が平和目的に限定される等、科学技術基本法や社会通念等に照らして、当該利用研究課題の実施が妥当であること。	○	○	○	○
(5) 若手人材育成課題 利用研究課題応募年度の4月1日現在で39歳以下の利用者が一人で行う研究計画であること。将来の発展が期待できる優れた着想を持つ研究計画であること。	-	○	-	-
(6) 産業利用課題 (イ) 自社内では実施できない解析規模や難易度の課題であること。 (ロ) 産業応用の出口戦略が明確な課題であること。	-	-	○	-
(ハ) 産業利用の開拓に向けた波及効果(社会への貢献)が十分期待できる課題であること。	-	-	○	-
(ニ) 各社単独では実施が困難であるが、コンソーシアムやグループによるノウハウの共有や役割分担等により、実施が可能となる解析規模や難易度の課題であること。	-	-	-	○
(ホ) 課題としての出口戦略が明確であることに加え、参加する各企業毎に明確な出口戦略を持っていること。	-	-	-	○
(ヘ) 産業利用の開拓に向けた波及効果(社会への貢献)が、各社単独で実施する場合よりも大きな効果が期待できる課題であること。	-	-	-	○

* 産業利用課題実証利用においては、企業5社以上が参加するコンソーシアム型の申請(通年で800万ノード時間積まで利用可能)が設けられている。

選定基準とHPCIコンソーシアムの提言

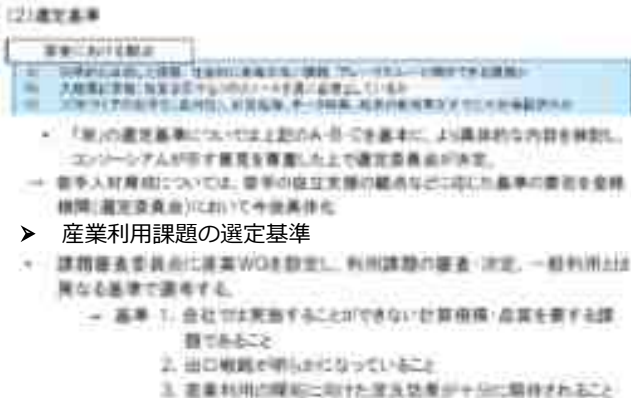
● 共用法とHPCIコンソーシアムの提言の関係

- ▶ 共用法第四条第一項の規程に基づき定められた「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」第二の二「公正な利用者選定の実施」において、以下の通りとしている:
(工) 選定委員会及び課題審査委員会の委員の選任や課題審査の方法及び基準等については、HPCIコンソーシアムの枠組みの下での構成機関の合意形成により決定された意見を尊重する。

● HPCIコンソーシアムの提言

(「HPCIとその構築を主導するコンソーシアムの具体化に向けて」
-最終報告- 平成24年1月30日 から抜粋)

▶ 一般課題・若手人材育成課題の選定基準



● 「京」の選定基準

目的	選定基準	一般課題	若手人材育成課題	産業利用課題	
				通常	コンソーシアム型(*)
サイエンス上の成果	(1) 科学的に卓越し、又は社会的に意義が高く、ブレークスルーが期待できる課題であること。	○	-	-	-
	(2) 「京」が有する計算資源を必要としていること。	○	○	○	○
	(3) ソフトウェアの効率性(並列性)、計算処理、データ収集、結果の解析手法等が十分に検証済みであるとともに、各種資源の利用計画や研究体制が妥当であること。	○	○	○	○
	(4) 提案課題の実施及び成果の利用が平和目的に限定される等、科学技術基本法や社会通念等に照らして、当該利用研究課題の実施が妥当であること。	○	○	○	○
若手人材育成	(5) 若手人材育成課題 利用研究課題応募年度の4月1日現在で39歳以下の利用者が一人で行う研究計画であること。将来の発展が期待できる優れた着想を持つ研究計画であること。	-	○	-	-
	(6) 産業利用課題 (イ) 自社内では実施できない解析規模や難易度の課題であること。 (ロ) 産業応用の出口戦略が明確な課題であること。	-	-	○	-
産業への貢献	(ハ) 産業利用の開拓に向けた波及効果(社会への貢献)が十分期待できること。	-	-	○	-
	(ニ) 各社単独では実施が困難であるが、コンソーシアムやグループによるノウハウの共有や役割分担等により、実施が可能となる解析規模や難易度の課題であること。	-	-	-	○
	(ホ) 課題としての出口戦略が明確であることに加え、参加する各企業毎に明確な出口戦略を持っていること。	-	-	-	○
	(ヘ) 産業利用の開拓に向けた波及効果(社会への貢献)が、各社単独で実施する場合よりも大きな効果が期待できる課題であること。	-	-	-	○

H 2 8 応募課題とレビュアー割り付け

- ・ 8分野への応募課題をキーワードに基づき再分類（23）
- ・ レビュアーの専門分野（複数）についても再分類し、DB化
- ・ 各課題に専門分野3名、計算科学1名の計4名のレビュアーを割り付け
- ・ 132名のレビュアーから101名にレビュー依頼

分類	科研費の分科	代表的なキーワード	申請課題		レビュアー	
			8分類	細分化	8分類2	細分化2
バイオ・ライフ	生物科学	タンパク質	27	24	14	12
	薬学	創薬		9		4
	ゲノム科学	DNA		1		9
工学・ものづくり	機械工学Ⅰ	流体、音響	47	34	20	25
	機械工学Ⅱ	構造解析		3		7
原子力・核融合	総合工学Ⅰ	原子力	3	0	8	4
	総合工学Ⅱ	核融合		2		9
物理・宇宙・素粒子	物理学Ⅰ	素粒子・原子核	35	15	16	4
	物理学Ⅱ	宇宙物理		9		6
	プラズマ科学			6		13
物質・材料・化学	物理学Ⅲ	物性Ⅱ（超伝導、量子コンピュータ）	53	2	26	6
	物理学Ⅳ	熱工学（沸騰）		0		7
	応用物理Ⅰ	物性Ⅰ（光電子工学、結晶）		13		14
	応用物理Ⅱ	物性Ⅱ（磁性）		12		8
	材料工学	熱物性（金属物性）		4		4
	プロセス・化学工学	反応、触媒、抽出、吸着		16		16
	ナノ・マイクロ科学	材料系、フラレン		13		6
環境・防災・減災	地球惑星科学Ⅰ	気象	22	10	11	6
	地球惑星科学Ⅱ	海洋物理		1		6
	土木工学	河川、地震動		10		5
数理科学	計算科学	FFT、固有値	4	6	2	13
情報・計算機科学・その他	情報学基礎	数理計画、最適化問題	4	5	35	7
	計算基盤	並列処理、可視化		0		33
計			195	195	132	224

57

選定委員会・課題審査委員会委員一覧

● 選定委員会 委員一覧

氏名	所属機関・役職	備考
松本洋一郎	東京大学 大学院工学系研究科・工学部 教授	平成26年度まで委員長 平成26年度未で退任
岩崎洋一	高エネルギー加速器研究機構 監事	平成26年度まで委員長代理 平成27年度から委員長
上田和夫	東京大学 物性研究所 教授	
大富浩一	(2014/12/31まで) 株式会社東芝 生産技術センター 参事 (2015/1/1より) 東京大学 工学系研究科精密工学専攻 特任研究員	
小原雄治	情報・システム研究機構 国立遺伝学研究所 特任教授	
北川源四郎	情報・システム研究機構 機構長	
善南康成	法政大学 情報科学部 教授	
武田 廣	神戸大学 学長	平成27年度から委員長代理
中島 浩	京都大学 学術情報メディアセンター 教授	
安岡善文	情報・システム研究機構 監事	
渡辺 治	東京工業大学 大学院情報理工学系研究科 数理・計算科学専攻 教授	

(敬称略)

● 課題審査委員会 委員長および退任一覧

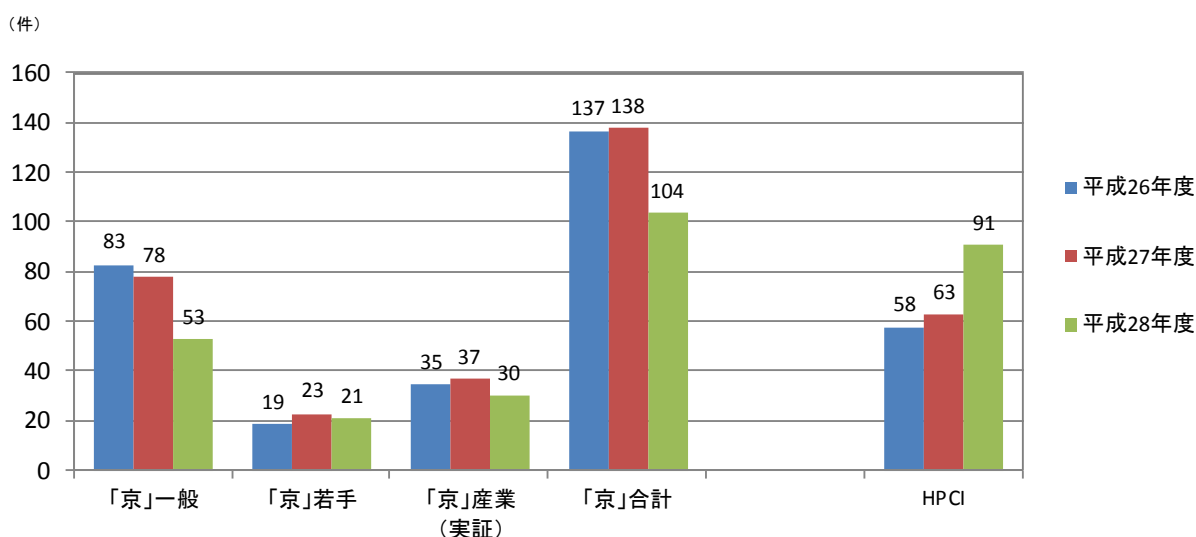
氏名	所属機関・役職	備考
小柳 義夫	神戸大学 計算科学教育センター 特命教授	委員長
富田 勝	慶応義塾大学 先端生命科学研究所 所長	平成25年度で退任
初田 哲男	理化学研究所 仁科加速器研究センター 主任研究員	平成25年度で退任
松宮 徹	新日鐵住金株式会社 顧問	平成25年度で退任
袴田 和喜	F D K 株式会社 技術開発部 統括部長	平成26年9月就任 平成27年8月退任

(敬称略)

58

応募・採択情報

応募件数の推移*

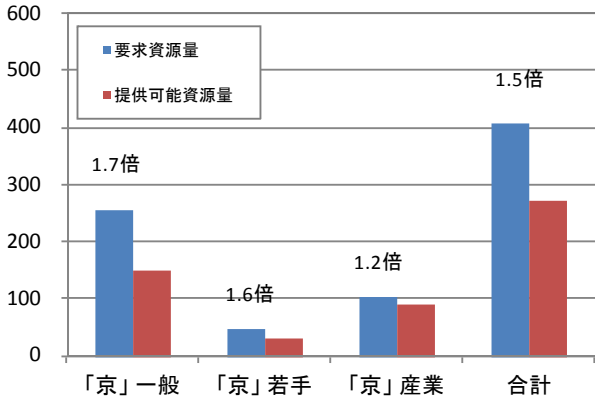


- 平成28年度利用研究課題の応募総数は195件。
- 平成27年度募集と比べて「京」を利用する課題の応募数が138件から104件へ減少。
- 「京」以外のHPCIを利用する課題への応募が63件から91件へ増加。

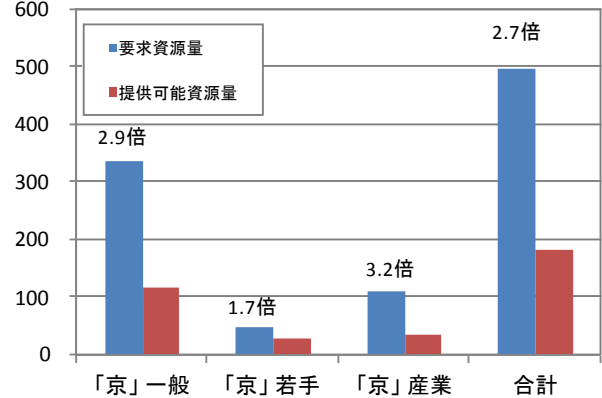
* 第9回選定委員会(H28.2.4)資料より抜粋

「京」の要求資源量*

百万NH **平成28年度募集**



百万NH **平成27年度募集**

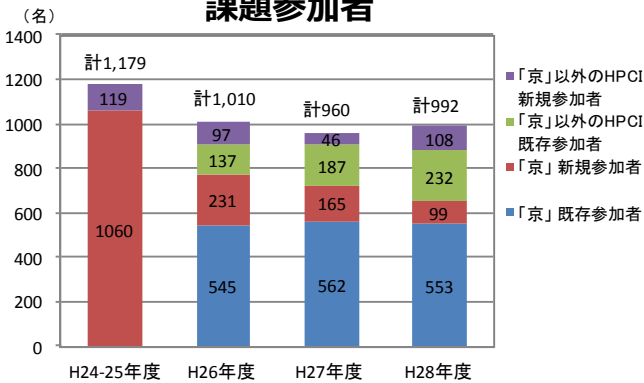


- 平成28年度利用研究課題募集における提供可能資源量が増加するため、要求資源量の割合は1.5倍に改善。

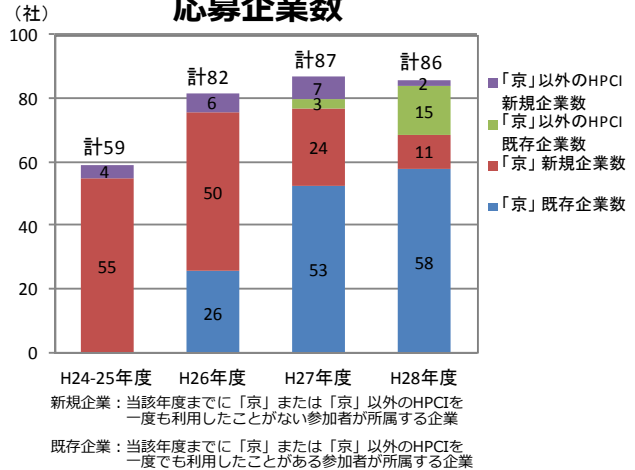
* 第9回選定委員会(H28.2.4)資料より抜粋

課題参加者、応募企業、継続／新規課題数*

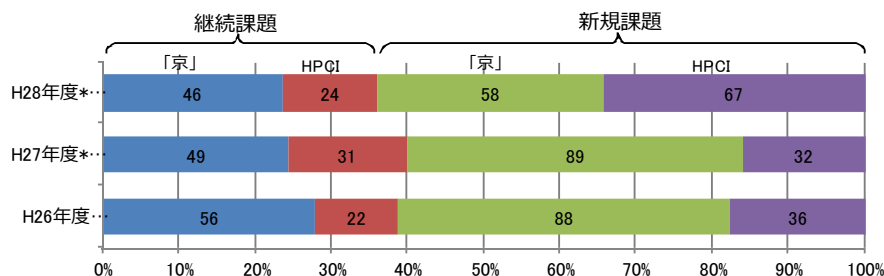
課題参加者



応募企業数



継続課題と新規課題の件数

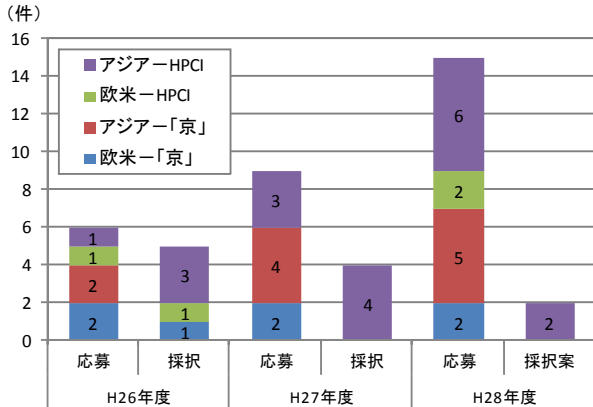


* 課題採択後の修正を反映。

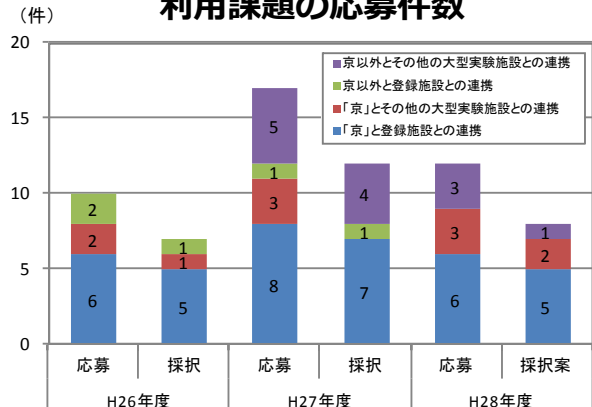
* 第9回選定委員会(H28.2.4)資料より抜粋 (一部更新)

海外からの課題・連携利用課題の応募件数*

海外からの応募件数



大型実験施設との連携 利用課題の応募件数



- 応募数合計：15件（海外機関に所属する日本人による応募を含む）
 - 「京」一般課題：6件
 - 「京」若手人材育成利用：1件
 - 「京」以外一般利用：8件
- 応募のあった国
 - 欧米（3か国）：イギリス、スペイン、ロシア
 - アジア（7か国）：韓国、カザフスタン、ベトナム、シンガポール、マレーシア、台湾、インド

- 三登録施設を含む大型実験施設等との主な連携利用
 - 「京」/Spring-8/J-PARC 1件
 - 「京」/Spring-8 5件

* 第9回選定委員会(H28.2.4)資料より抜粋

応募・採択の状況

● 一般利用

➤ 定期募集

年度	H24-H25		H25追加		H26		H27		H28		合計		
	応募	採択	応募	採択	応募	採択	応募	採択	応募	採択	応募	採択	
「京」	一般	138	29	36	7	83	24	78	24	53	31	388	115
	若手人材育成	58	8	12	4	19	10	23	12	21	13	133	47
	産業利用（実証利用）	22	17	21	9	35	28	37	31	30	28	145	113
	産業利用（個別利用）	5	5	4	4	7	7	0	0	0	0	16	16
	合計	223	59	73	24	144	69	138	67	104	72	682	291
HPCI (*)	一般	28	43	8	11	56	77	60	63	80	51	232	245
	産業利用（実証利用）	3	2	0	0	2	4	3	4	11	11	19	21
合計	31	45	8	11	58	81	63	67	91	62	251	266	
合計	254	104	81	35	202	150	201	134	195	134	933	557	

(*) HPCIの採択数には「京」の第2希望として利用する採択数を含む。

採択率（「京」全体）（採択/応募）	26%	33%	48%	49%	69%
採択率（全体）（採択/応募）	41%	43%	74%	67%	69%

➤ 随時募集

年度	H24		H25		H26		H27		合計			
	応募	採択	応募	採択	応募	採択	応募	採択	応募	採択		
「京」	一般	競争的資金等獲得課題					5	5	5	5		
		トライアル・ユース					0	0	0	0		
	産業利用	個別利用		2	2	11	11	15	15	28	28	
		トライアル・ユース	9	8	21	20	8	8	6	6	44	42
		ASP事業実証利用						0	0	0	0	
合計	9	8	23	22	19	19	26	26	77	75		
HPCI	産業利用	トライアル・ユース		1	1	0	0	1	1	2	2	
合計	9	8	24	23	19	19	27	27	79	77		

(*) 応募数、採択数ともに申請年度で集計

採択率（「京」全体）（採択/応募）	89%	96%	100%	100%
採択率（全体）（採択/応募）	89%	96%	100%	100%

応募・採択の状況（続き）

●重点的利用

年度		H24	H25	H26	H27	合計
「京」	戦略プログラム利用課題(*1)	35	29	29	29	122
	ポスト「京」研究開発課題(*2)				33	33
	重点化促進課題	0	1	1	1	3
合計		35	30	30	63	158

(*1)計算科学推進体制構築を含む

(*2)平成27年度より利用開始

65

課題参加者数

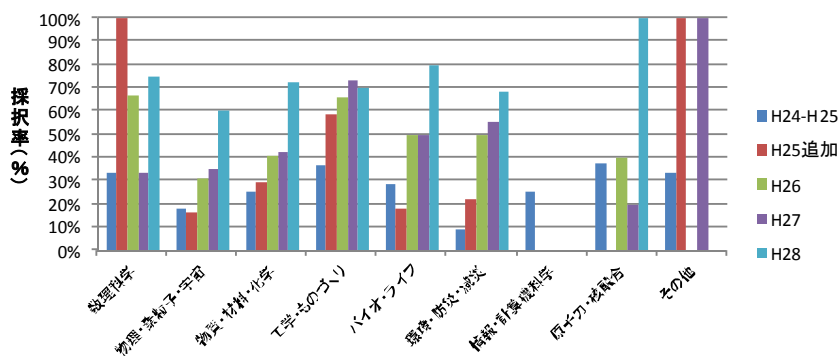
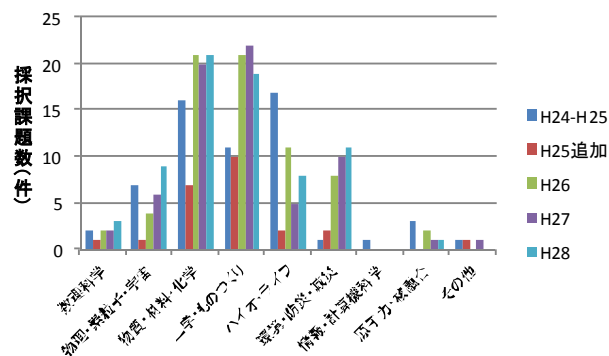
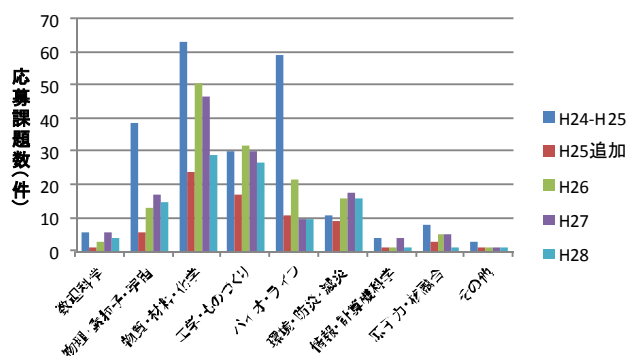
●「京」及びHPCIシステムの課題参加者数の推移

年度		H24		H25		H26		H27 (H28/1未現在)	
		学术界	産業界	学术界	産業界	学术界	産業界	学术界	産業界
「京」	一般利用	259	192	473	341	259	352	318	383
	戦略プログラム利用	507	44	548	66	568	68	565	60
	ポスト「京」研究開発枠							340	22
	重点化促進枠			0	3	0	2	0	2
	小計	766	236	1021	410	827	422	1223	467
		1,002		1,431		1,249		1,690	
HPCI	一般利用	159	9	203	20	309	36	259	18
	小計	168		223		345		277	
合計		925	245	1224	430	1136	458	1482	485
		1,170		1,654		1,594		1,967	

66

分野別の応募、採択状況

●「京」の分野別の応募数、採択数、採択率

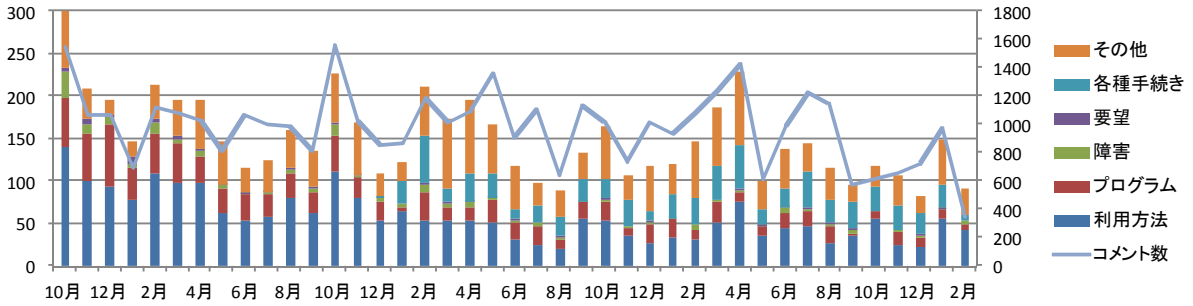


利用支援関連

一元相談窓口（ヘルプデスク）の利用相談件数

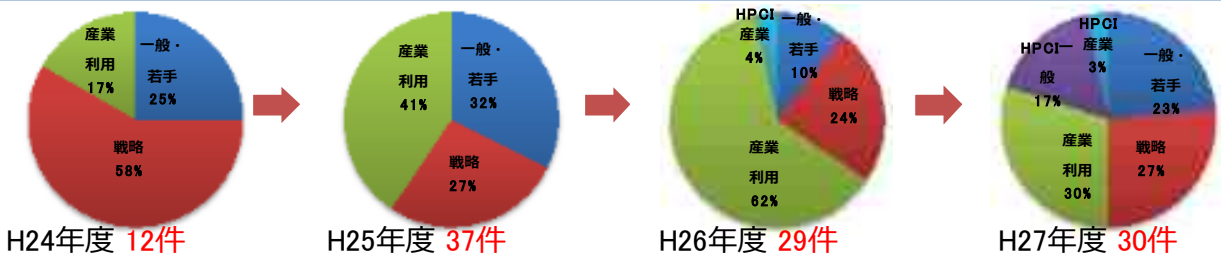
- ヘルプデスクによる利用者からの相談件数の推移

ヘルプデスク相談件数（H24.10-H28.2.15）

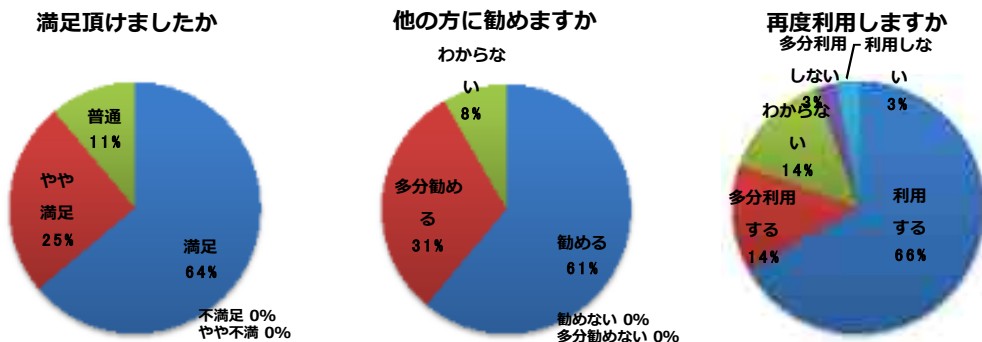


高度化支援の実績

高度化支援件数は年間約30件を維持（HPCI含）



- 支援後アンケート（回答数36）での満足度89%



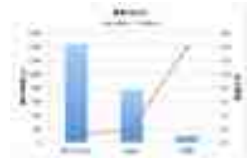
高度化支援の例

課題：都市全域の地震等自然災害シミュレーションに関する研究（戦略分野3）
 計算規模：16,384ノード
 支援内容：
 I/Oの最適化
 行列ベクトル積ルーチン的高速化
 CG法ルーチンのスレッド並列化

支援成果：
 メイン処理3.2倍の高速化
 支援員が共著となった論文がゴードン・ベル賞ファイナリスト（SC14, SC15）

課題：高分子複合材料の粗視化MD解析の京スケール・コンピューティングの基盤的研究（若手）
 支援内容：
 演算性能最適化
 ・SIMD化
 ・ソフトウェアパイプラインの適用
 ・スレッド並列化
 ・組込関数最適化
 ロードインバランス解消

支援成果：14倍の高速化



課題：OpenFOAMを使用する課題（産業14件）
 計算規模：12,288MPI並列他
 支援内容：
 移植、ジョブ実行方法の検証
 最適ノード形状調査
 性能調査
 パッチ提供
 メモリ使用量の削減

支援成果：
 1.3倍高速化
 最大MPI並列数を2.4万から4.9万まで改善

課題：LAMMPSを使用する課題（産業5件、若手1件）
 支援内容：
 入力データの「京」ランクディレクトリ対応方法提案
 出力結果のポスト処理支援
 最適ノード形状調査
 最適実行時オプション調査
 ライブラリ性能調査

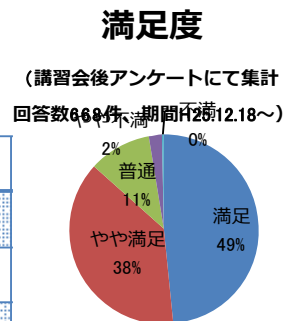
支援成果：
 数十GBの入力データを使用して「京」で実行する際の問題を解決した
 1.2倍の高速化

産業利用では無償で利用出来るOSSであるOpenFOAMやLAMMPSの利用が多く、これらの高度化支援によって資源の有効活用に貢献した

講習会実施実績

- 「京」の有用性の啓発や利用技術の習得のため、ユーザーニーズ・レベルにあわせて様々な講習会・ワークショップを主催
 - 一般向けセミナー（チューニング技法入門、MPI並列化技法入門、OpenMP入門）
 - 「京」利用者向け講習会（初級、中級）
 - オンサイト講習会（上記講習会内容を開催地、日時を柔軟に対応し開催）
 - 「京」高速化ワークショップ
 - OpenFOAMワークショップ、材料系ワークショップ（LAMMPS）
- 開催回数および参加者

	開催回数	参加者数				
		合計	大学	研究機関	産業	他
主催	75	1,659	596	336	689	38
共催	40	960	690	175	89	6



参加者を増やす様々な工夫

- 開催場所を神戸、東京とし、全国から参加しやすく
- 一般向け講習会、「京」利用者向け講習会を連続して開催しステップアップを促す
- 産業界のニーズに対応し、OpenFOAMやLAMMPS等ユーザーの多いOSSに関するワークショップを開催
- 柔軟な開催場所、日程に対応可能なオンサイト講習会の実施
- 実演デモやFX10を用いたハンズオン講習にも対応し、よりわかりやすい内容へ改善

満足度

- 平均87%の高い満足度
- アンケートにて参加者ニーズを調査し、OpenMP講習やハンズオン、オンサイト講習会などを追加

講習会年度内訳

年度ごとの主催	回数	人数	大学関係	研究機関	民間企業	その他	企業数
H24	12	411	163	91	133	24	41
H25	26	529	186	145	195	3	127
H26	21	331	120	46	162	3	130
H27	16	388	127	54	199	8	157
合計	75	1659	596	336	689	38	455

年度ごとの共催	回数	人数	大学関係	研究機関	民間企業	その他	企業数
H24	5	171	135	20	16	0	0
H25	7	121	102	13	6	0	6
H26	19	543	370	128	45	0	0
H27	9	125	83	14	22	6	0
合計	40	960	690	175	89	6	6

73

共用法第12条課題

利用支援に資する調査研究、及び研究実施相談者のスキルアップを目的として、「京」の一般利用枠を利用する研究課題を実施

- 性能最適化のための研究
 - ▶ 京における最適化手法の調査研究（H24）
 - 目的：実アプリケーション、特に数値気候モデルについて「京」における最適化手法を研究
 - 成果：新しい気候モデルに関する知見の集積と、L1キャッシュミスによる性能阻害とその対策方法について把握
 - ▶ 京におけるハイブリッド並列最適化に関する調査研究（H25,26）
 - 目的：量子化学プログラムDIRACについて「京」におけるハイブリッド並列化の効果を調査
 - 成果：自動並列化では性能が低下するが、OpenMPによる手動スレッド化では有効性を確認
- 先端的アルゴリズムの研究
 - ▶ 京における超並列大規模シミュレーションのための数値計算手法に係る調査研究（H24,25）
 - 目的：超並列計算に伴って誤差の集積が問題となる中、4倍精度ライブラリの性能について調査
 - 成果：広く利用される3次元FFTライブラリルーチンに関する「京」における性能を把握
 - ▶ 高次精度離散化手法に関する調査研究（H27）
 - 目的：現代のプロセッサの性能を活用する方法として発展が期待される離散化手法の高次精度化について性能特性調査
- 利用拡大のための研究
 - ▶ 京におけるC++言語の利用促進のための調査研究（H25）
 - 目的：HPCにおけるC++言語の利用において性能上の問題点を克服するためExpression Template技法の有効性について性能調査
 - 成果：「京」におけるC++コンパイラの特性を把握
 - ▶ 量子化学のオープンソースプログラムの性能評価と応用的利用に関する調査研究（H27）
 - 目的：量子化学分野で利用されるOSSについて並列化・最適化手法・性能を調査

74

産業利用事例

75

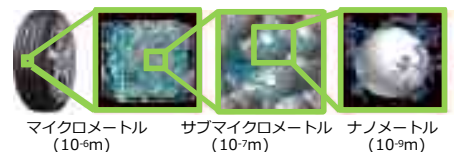
「京」産業利用による製品開発例：住友ゴム工業(株)

● 「京」によるシミュレーションの目的

- 互いに相反するタイヤの3大性能: ①低燃費性能 ②グリップ性能 ③ 耐摩耗(破壊)性能のうち、耐摩耗(破壊)性能の向上研究
- ゴムの磨耗(破壊)の時空間スケールは数桁に及ぶため、実験的観察や理論構築が困難であり、シミュレーションが極めて有効。
- 数億規模粒子による大規模粗視化分子動力学計算により、ゴムの破壊(磨耗)現象を分子レベルで観察、ゴムの構造の設計指針を獲得

● 「社会的なインパクト」

- 「京」とSPring8, J-PARCを連携利用する新材料開発技術「ADVANCED 4D NANO DESIGN」の完成を発表



- 耐摩耗マックスレッドゴム搭載タイヤを第44回東京モーターショー2015にコンセプトタイヤとして参考出品

- **耐摩耗性能を200%に向上**

⇒ 国内上位4位までのタイヤメーカー (H25-26年の市場シェア85%)が 全てHPCIを利用中あるいは利用経験有り

- **平成28年度以降の製品に本技術を適用**

- タイヤの耐摩耗(破壊)性能の向上は、タイヤの長寿命化に直結
- 天然ゴム使用量の約9割がタイヤ向けであり、天然ゴムの供給不足が危惧される中、ゴムの省資源化において社会へのインパクト大

76

「京」産業利用事例(1)：富士フイルム(株)

～リチウムイオン電池内の反応過程を解明～

リチウムイオン電池の電解液中にできる被膜は電池性能を向上させる働きを持ち、添加剤を加えるとその性質を高めることができます。電池の高出力、長寿命、安全性向上のために、高機能な添加剤を開発することが重要。

目的

高機能な添加剤の開発 → 電極近傍での電解液と添加剤との間で起きている正確な化学反応プロセスの解明

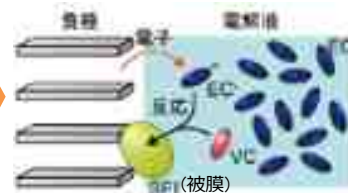
課題

従来のスパコンでは現実的な時間で結果を得るため、電解液の溶媒分子数や化学反応に関わるサンプル数を限定 → 正確な化学反応プロセスのシミュレーションができない

「京」利用の成果

溶媒分子、添加剤、リチウムイオン等の重要な要素をすべて取り込み計算。

- ・ 充電時に電極から電子が移動し、電解液(エチレンカーボネート:EC)が還元される過程
- ・ 電解液(EC)と添加剤(ビニレンカーボネート:VC)が反応して、被膜の素材を形成する過程
- ・ 副産物ガスが発生する仕組み



明らかになった化学反応

上記を分子レベルで → 充電時の、電解液分子と添加剤分子の反応による解明することに成功。 → SEI被膜素材形成の化学反応プロセスが明らかに。

77

「京」産業利用事例(2)：住友ゴム工業(株)

～「京」と大型実験施設を利用し、タイヤの新材料を開発～

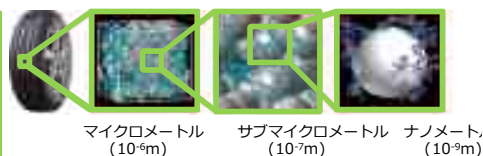
高性能タイヤの開発では、低燃費、グリップ性能、更に耐摩耗性能という相反する性能を同時に向上させる必要があり、高機能ゴム材料の開発が重要。

目的

高機能ゴム材料の開発 → ゴム内部のナノの領域を可視化する材料シミュレーションの開発。

課題

高分子ポリマーやカーボン等様々な原材料から構成されるゴムは、ナノレベルからミクロンレベルまでマルチスケールの階層構造をとる。新材料開発には、分子スケールの大規模計算が必要だが、スパコンの性能不足でシミュレーションができていない。



マルチスケールでの計算が必要

画像提供：住友ゴム工業株式会社

「京」利用の成果

従来の計算と比較し、約1000倍という大規模なスケールでの計算が可能に。

J-PARC/SPRing-8 :
高精度な実験データから現実
に即した初期モデルの作成



「京」：
現状の分析、更に条件を変えて
シミュレーションを展開

大型実験施設を利用し、材料中の原子、分子の動きを把握
「京」では大規模なモデルで、原子、分子の動きを
よりリアルな現象として把握することが可能に。

新材料開発技術完成
に貢献。

78

「京」産業利用事例(3)：清水建設(株) ～全長100m風洞を忠実に再現し、局部風圧を予測～

建物は強い風による局部風圧（集中的な風圧）により、外装材等の破損が生じる可能性があり、局部風圧の予測とその低減が重要。

現在の局部風圧評価の流れ



目的 高い精度の局部風圧予測・合理的設計の提案 → 大規模計算による高精度のシミュレーション手法の確立・現象の詳細な解明

課題 -模型製作から性能評価まで手間・時間がかかる。
-従来のスパコンのシミュレーションでは、1億格子程度の解析のため精度が課題。現象の解明は困難。



「京」利用の成果

-全長100メートルの風洞をシミュレーションで忠実に再現。
-最大100億格子かつ流れ場の乱流構造を直接解析できるシミュレーションを行い、高い精度で風圧を予測。
-実験では得られなかった局部風圧の起因する複雑な流れ場とその挙動を解明。

「京」での計算



現象の動的挙動の観察
(流れ場の時刻歴)

79

利用報告書ダウンロード分析

利用報告書のダウンロードについて



- HPCI利用報告書は、利用分野／課題枠別の一覧から、ダウンロードできる。**ダウンロードの際は、タイトルを確認して、興味のある報告書だけを選択可能。**
- 閲覧者の所属分類により異なったダウンロード内容
 - 例：企業からのダウンロードは、「工学・ものづくり」分野の報告書の参照数が多い。
- 報告書ダウンロード数Top20の公開開始(H27新機能)
(現在、Top20の大半が産業利用課題)

日本語版：http://www.hpci-office.jp/pages/user_report_bunya
英語版：http://www.hpci-office.jp/pages/e_user_report_bunya



81

利用報告書ダウンロード分析

- 利用報告書ダウンロード数 (2014/7/15～2016/3/31) : 20,703(クローラ*を除く)



➢ H26年度利用報告書の公開に伴いH24～H25年度の利用報告書のダウンロード数も増大

- 課題枠別ダウンロード数
 - 「京」産業利用のダウンロード数が最も多く、次いでHPCI一般、戦略プログラム、「京」一般が続く。
 - 1課題あたりのダウンロード数では「京」産業利用が抜きん出ている。
 - ダウンロード数トップ20の中に「京」産業利用、及び同トライアル・ユースが半数以上含まれている。



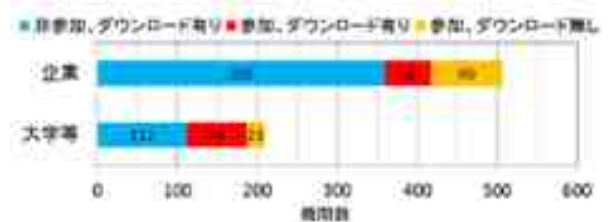
*Webを自動的に巡回して、文書や画像を収集するプログラム。収集したデータをデータベース化して、検索サービスの検索に使用する。 82

利用報告書ダウンロード分析（続）

● ダウンロード元の分類、機関数

分類	機関数	ダウンロード数
大学等	186	5148
企業	417	4546
研究機関等	38	1963
行政・立法	34	441
報道・公共サービス	11	53
医療	13	27
ISP回線	-	7318
海外	(42ヶ国)	1207

▶ ダウンロード元の大学等、企業の機関数はそれぞれHPCI参加機関数を大きく上回る。



▶ 報道・公共サービスや医療を含む社会の幅広い分野からダウンロード

● 海外からのダウンロードは42ヶ国に達している。

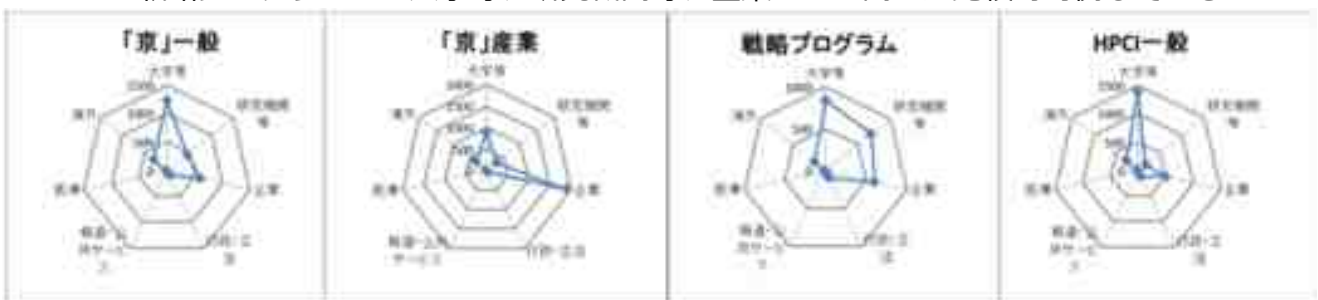
- ▶ 42ヶ国内訳；北米（米国、カナダ、メキシコ）、中米（ブラジル）、欧州(21ヶ国；英国、アイルランド、フランス、ドイツ、イタリア、スペイン、ベルギー、オランダ、デンマーク、ノルウェー、スウェーデン、スイス、オーストリア、ハンガリー、ポーランド、ルーマニア、ブルガリア、クロアチア、ウクライナ、ベラルーシ、トルコ)、ロシア、アジア(14ヶ国；中国、韓国、台湾、ベトナム、シンガポール、マレーシア、インドネシア、タイ、フィリピン、インド、パキスタン、イラン、カザフスタン、サウジアラビア)、アフリカ（アルジェリア）、オセアニア（オーストラリア）
- ▶ ダウンロード元分類；大学等(18ヶ国)44機関、企業(14ヶ国)51社、研究機関等(11ヶ国)16機関、行政(2ヶ国)2機関、医療(1ヶ国)1機関、ISP回線(33ヶ国)

利用報告書のダウンロード状況から見た

HPCI利用研究成果への関心度（概要）

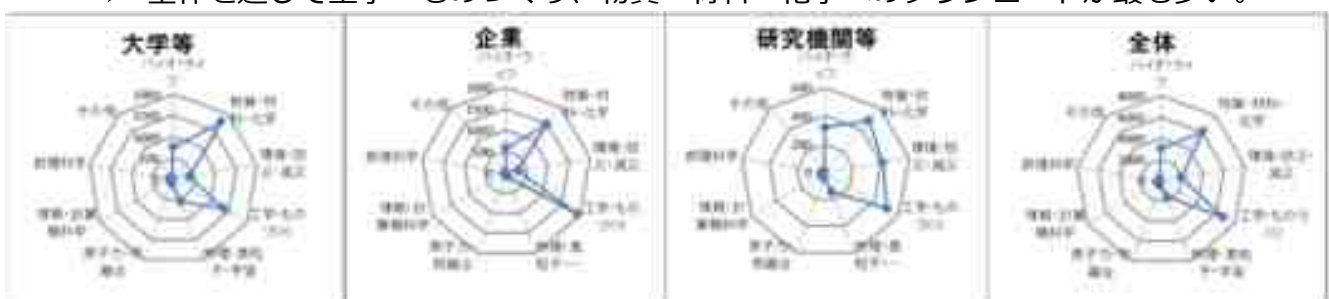
● 課題枠毎のダウンロード元分布

- ▶ 「京」一般、HPCI一般には、大学等からの関心が最も強い。
- ▶ 「京」産業利用には、企業からの関心が突出して強い。
- ▶ 戦略プログラムには大学等、研究機関等、企業からの関心が比較的均衡している。



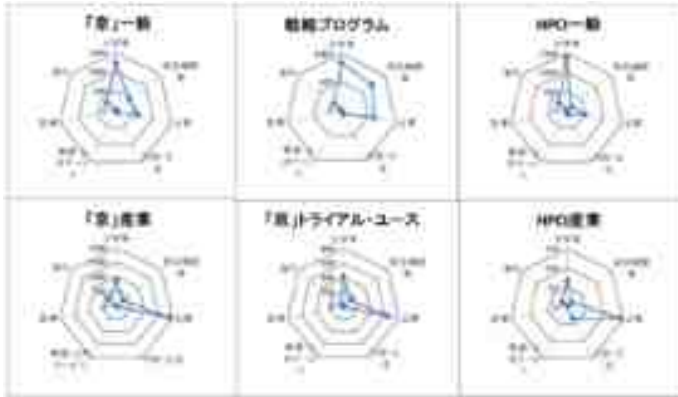
● ダウンロード先の分布（利用分野別）

- ▶ 大学等、企業、研究機関等でそれぞれ特徴的な傾向を示す。
- ▶ 全体を通じて工学・ものづくり、物質・材料・化学へのダウンロードが最も多い。



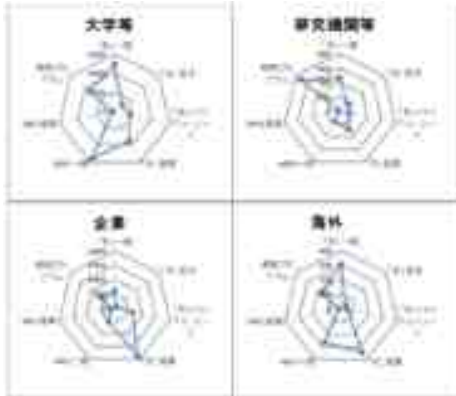
HPCI利用研究成果への関心度（課題枠別）

1) 課題枠毎のダウンロード元分布（2014/7/15-2016/3/31）



- 「京」一般、HPCI一般には、大学等からの関心が最も強い。
- 戦略プログラムには大学等、研究機関等、企業からの関心が比較的均衡している。
- 「京」産業利用、「京」トライアル・ユース、HPCI産業利用には、企業からの関心が突出して強い。

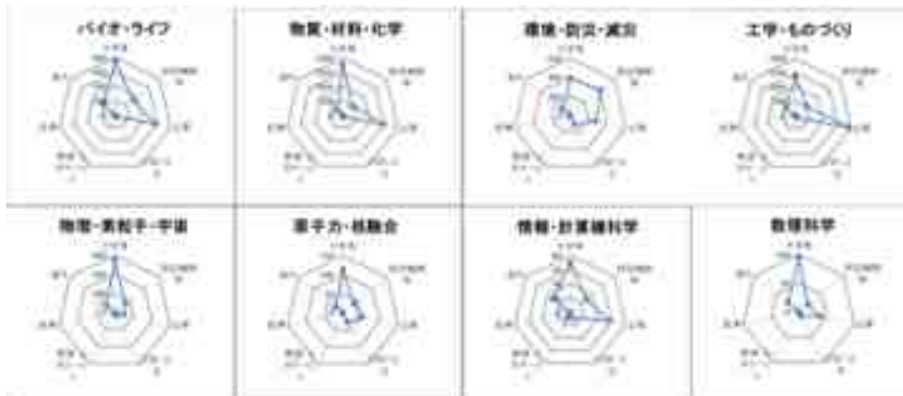
2) 大学等、研究機関等、企業、海外からのダウンロード先（2014/7/15-2016/3/31）



- 大学等は、「HPCI一般」、次いで「京」一般への関心が高い。
- 研究機関等は戦略プログラム、次いで「京」一般への関心が高い。
- 企業は、「京」産業利用への関心が突出して高い。
- 海外は、「京」産業利用、「京」一般、次いで「HPCI一般」への関心が高い。

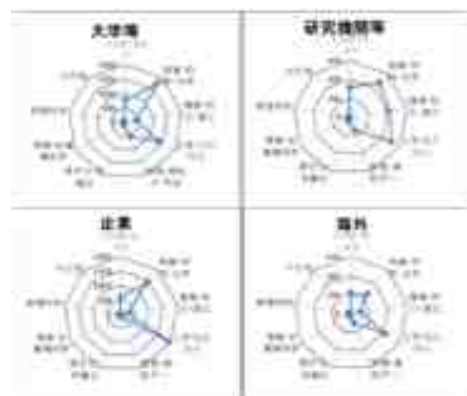
HPCI利用研究成果への関心度（利用分野別）

1) 利用分野別ダウンロード元分布（2014/7/15-2016/3/31）



- 「バイオ・ライフ」、「物質・材料・化学」は大学等、企業、次いで研究機関等からの関心が高い。
- 「環境・防災・減災」は研究機関等、次いで大学等、企業の関心が高い。
- 「工学・ものづくり」は企業、次いで大学等の関心が高い。
- 「物理・素粒子・宇宙」、「原子力・核融合」、「数理科学」は大学等からの関心が突出して高い。
- 「情報・計算機科学」は大学等、次いで企業からの関心が高い。

2) 大学等、研究機関等、企業、海外からのダウンロード先（2014/7/15-2016/3/31）

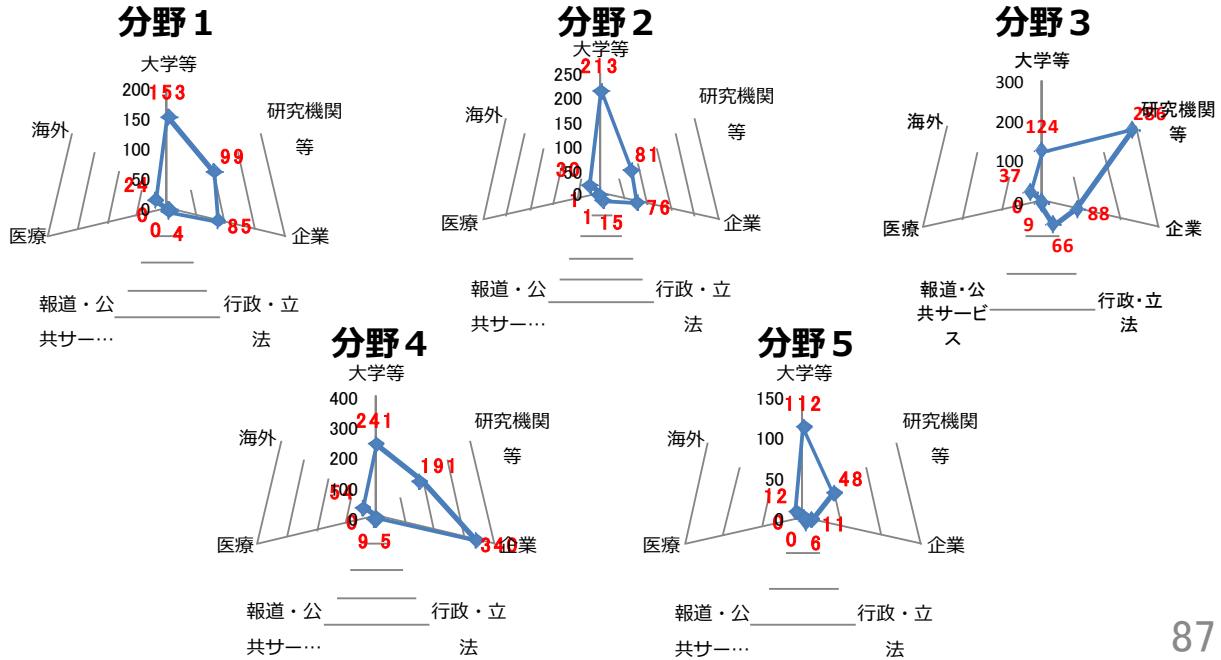


- 大学等は、「物質・材料・化学」、次いで「工学・ものづくり」への関心が最も高い。
- 研究機関等は、「工学・ものづくり」、「物質・材料・化学」に加え、「環境・防災・減災」、「バイオ・ライフ」への関心も比較的高い。
- 企業からは、「工学・ものづくり」、次いで「物質・材料・化学」への関心が高い。
- 海外からは、「工学・ものづくり」への関心が高く、次いで「物質・材料・化学」、「バイオ・ライフ」への関心が高い。

HPCI利用研究成果への関心度（戦略分野別）

● ダウンロード元分布（分野別）

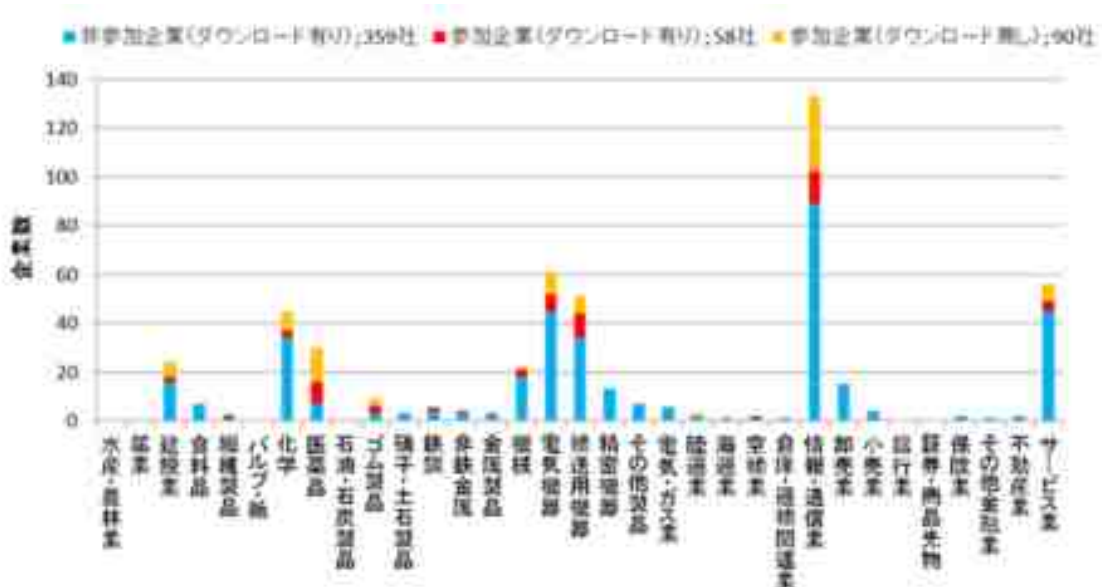
- ▶ 分野1では大学等、研究機関等、企業からのダウンロードが比較的均衡
- ▶ 分野2、分野5は大学等からのダウンロードが支配的
- ▶ 分野3は研究機関等から、分野4は企業からのダウンロードが支配的



産業利用成果の波及状況 (利用報告書ダウンロード分析)

● HPCI参加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）

2016/3/31時点



HPCI参加企業の業種数: 15 (33業種の45%) ⇒ダウンロード元企業の業種数: 27 (同82%)
→ HPCI利用研究成果への産業界の関心の広がりを示す。

産業利用成果の波及状況（続）

（利用報告書ダウンロード分析）

HPCIの研究成果は、HPCIに参加していない業種も含む、多くの業種に波及している。

- 一つの業種に対して他の多くの業種から利用報告書がダウンロードされている。
 - ▶ 例えば化学の場合、化学以外の18業種の企業からダウンロードされている。
- HPCI参加企業の属する業種（15業種、赤丸）の間で密に利用報告書の相互参照が行われている。
- HPCIに参加していない業種（12業種、青丸）からの利用報告書の参照もある。
 - ▶ ダウンロード元企業(412社)の業種は27業種（東証1部33業種の82%）に及ぶ。

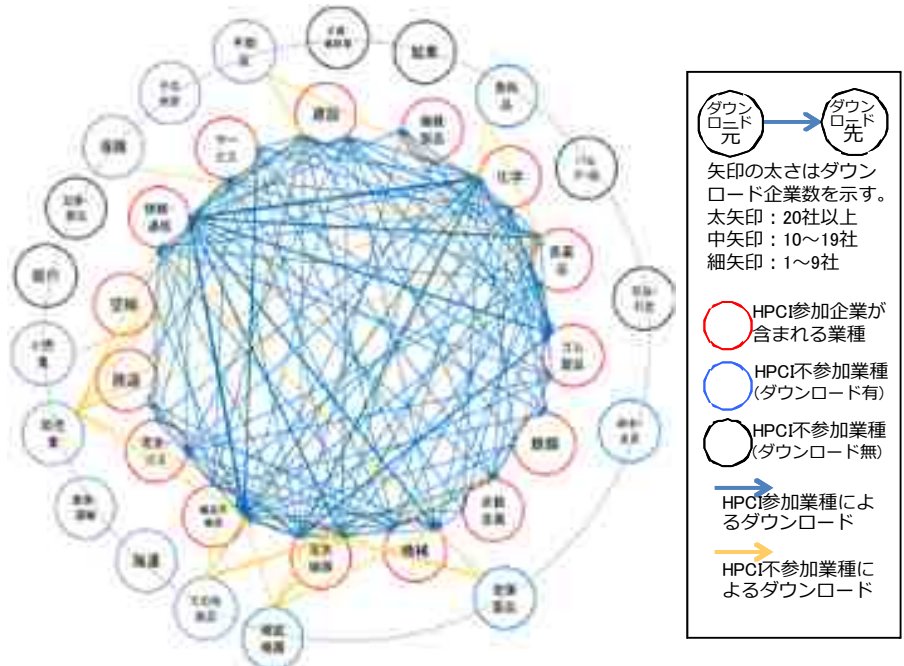


図 利用報告書の業種間ダウンロード（参照）状況

赤丸は参加企業が含まれる業種(15業種)、青丸は非参加だがダウンロード元企業が含まれる業種(12業種)、黒丸はいずれでもない業種(6業種)。産業利用課題の利用報告書に対する企業からのダウンロード全2628件(H26/7/15～H28/3/7)を業種別に分類。

ニーズとシーズの整合性（全体）

（利用報告書ダウンロード分析）

採択課題数（シーズ）と利用報告書のダウンロード数（ニーズ）は相関しており、全体的にニーズとシーズはバランスしている。

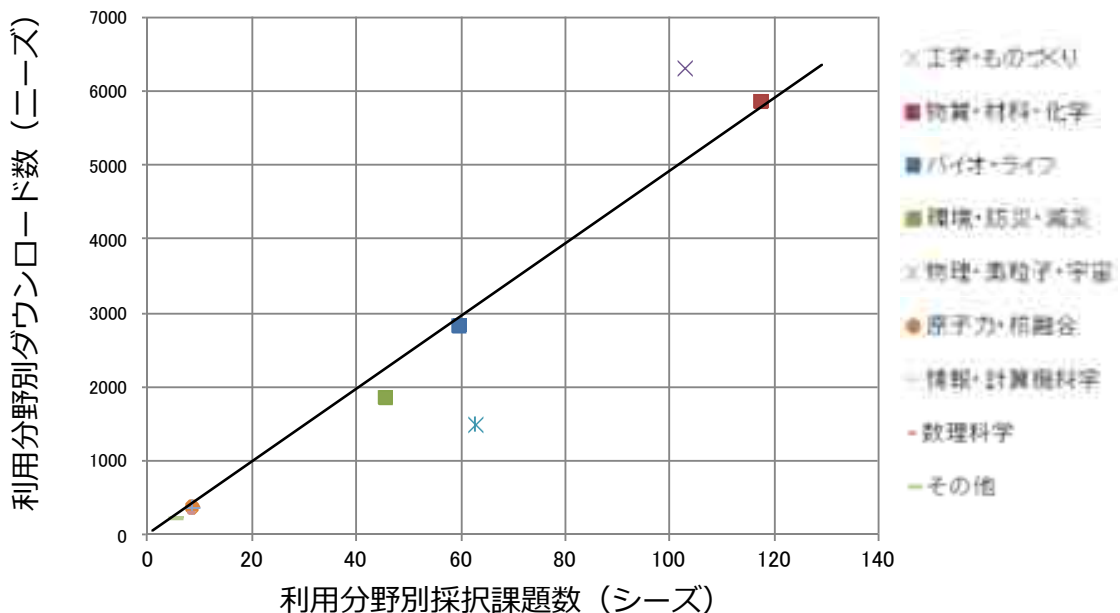


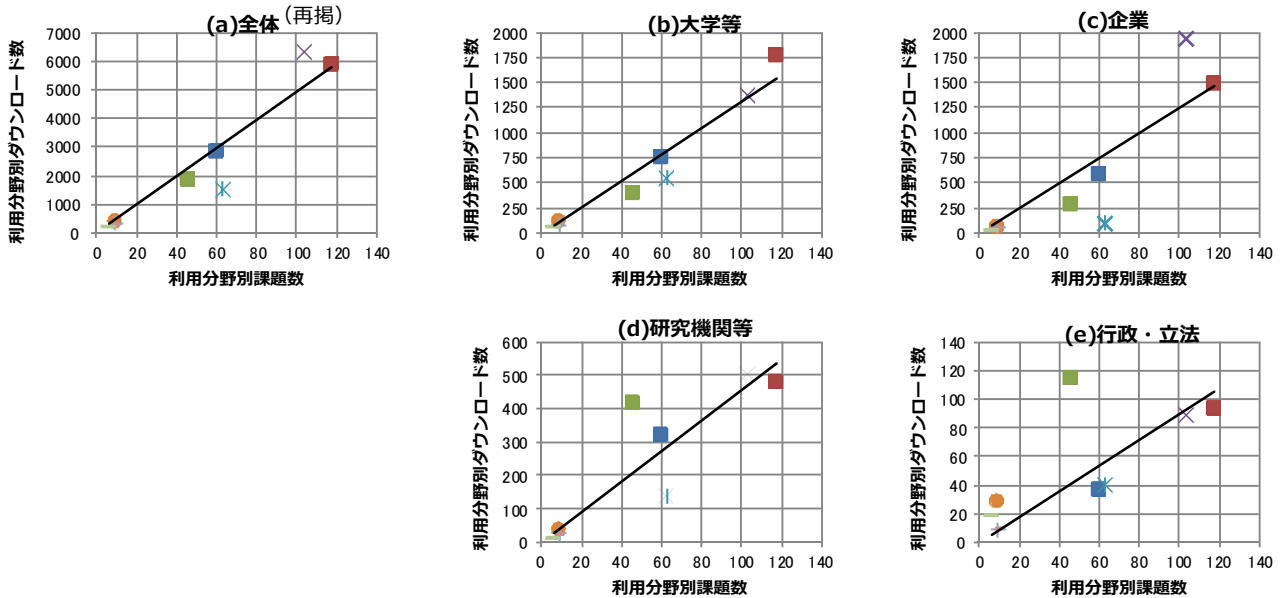
図 利用分野別のダウンロード数（ニーズ）と採択課題数（シーズ）の相関
 利用報告書の国内に於けるダウンロード19,496件を分類(H25.7.15～H26.3.31)

ニーズとシーズの整合性（分類別）

（利用報告書ダウンロード分析）

ダウンロード元（大学等・企業...）により、ニーズの特徴が異なる。

- ダウンロード元の分類別にみると、大学等(b)が最もバランスしている。企業(c)は「工学・ものづくり」は+側、「物理・素粒子・宇宙」は-側のシフトがより顕著となる。研究機関等(d)では「環境・防災・減災」が+側に、「物理・素粒子・宇宙」は-側にシフトしている。
- 社会的なニーズの観点からは行政・立法(e)では「環境・防災・減災」の+側のシフトが顕著。



● 工学・ものづくり ● 物理・素粒子・宇宙 ● 環境・防災・減災 ● 化学・材料 ● 医学・健康 ● 工学・ものづくり ● 物理・素粒子・宇宙 ● 農学・林業 ● 情報・計算科学 ● 数理科学 ● その他

91

成果発表状況

発表件数・論文の被引用回数・インパクトファクター

発表件数(1)

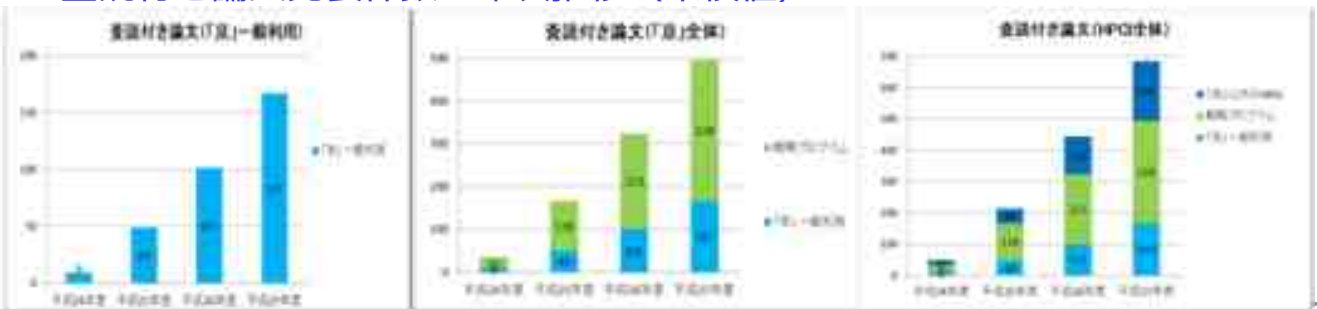
HPCI成果発表データベースから抽出：多数の成果が創出されてきている。

■ 成果発表件数(査読付き論文、会議・シンポジウム、特許出願)

成果発表年度	「京」一般利用				戦略プログラム				「京」以外のHPCI			
	「京」(共用ストレージを含む)				戦略プログラム(共用ストレージを含む)				「京」以外のHPCI(共用ストレージを含む)			
	査読付き論文	国際会議・シンポジウム	国内学会・シンポジウム	特許出願	査読付き論文	国際会議・シンポジウム	国内学会・シンポジウム	特許出願	査読付き論文	国際会議・シンポジウム	国内学会・シンポジウム	特許出願
平成24年度	9	59	68	0	22	188	172	2	13	38	27	0
平成25年度	40	76	73	4	96	215	250	0	33	59	40	0
平成26年度	52	62	75	1	105	244	211	0	74	77	48	2
平成27年度	66	80	61	0	105	228	204	1	70	53	30	2
合計	167	277	277	5	328	875	837	3	190	227	145	4
	726				2,043				566			

※ 登録件数は平成28年7月13日のデータであり、登録漏れ等で今後変動する可能性がある。特許出願を除き上記件数は利用枠間に一部重複を含む。戦略プログラムの平成24年度の発表件数には平成23年度分を含む。

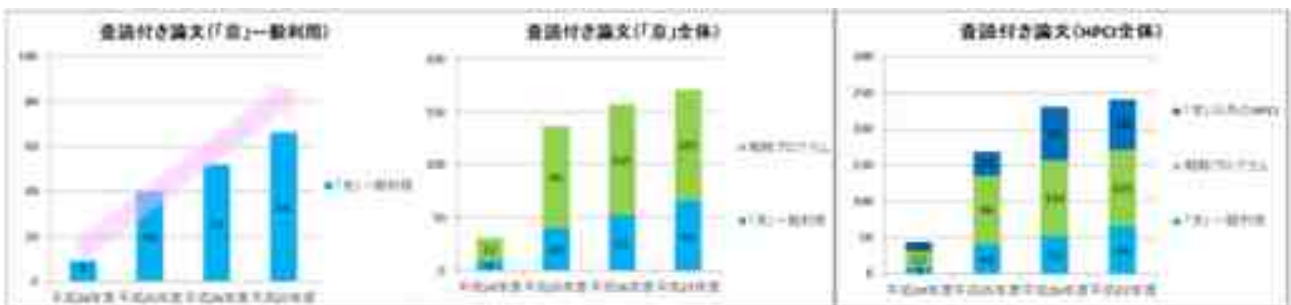
■ 査読付き論文発表件数の年次推移(累積値)



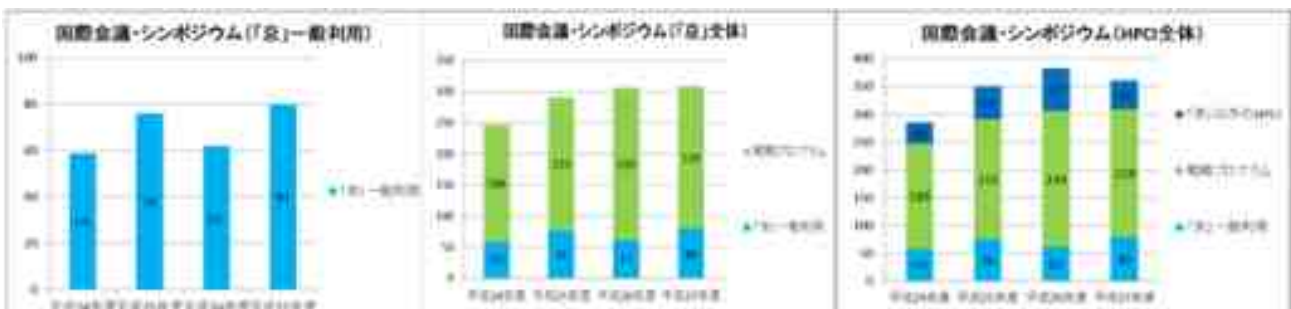
93

発表件数(2)

■ 査読付き論文発表件数の年次推移



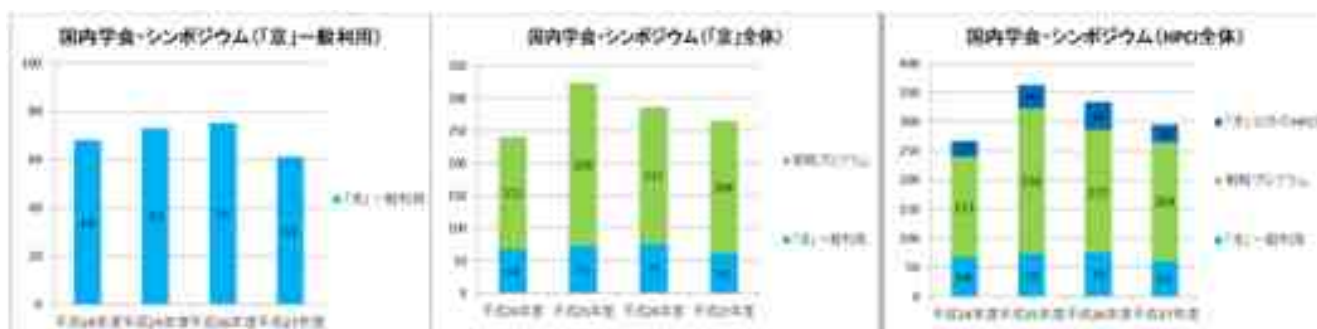
■ 国際会議・シンポジウムでの発表件数の年次推移



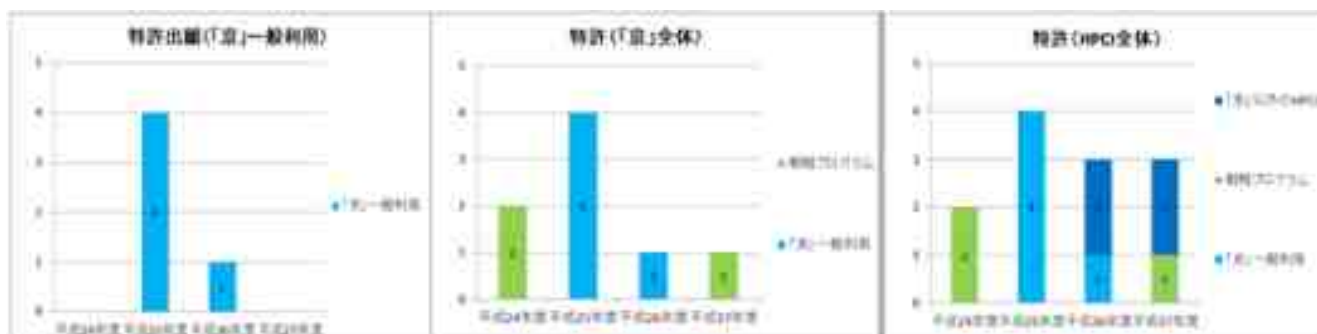
94

発表件数(3)

国内学会・シンポジウムでの発表件数の年次推移



特許出願件数の年次推移



95

論文の被引用回数

- 「京」を中核とするHPCI利用研究課題の成果論文の被引用回数調査を行った。
 - ・ 調査対象：平成28年2月13日時点の成果公開データベースに登録された査読付き論文(554編)
 - ・ 調査方法：Web of Science(トムソン・ロイター)にて、各論文の被引用回数を調査
- 平均被引用回数：「京」一般利用；2.6回、戦略プログラム；4.7回、「京」を除くHPCI；3.4回

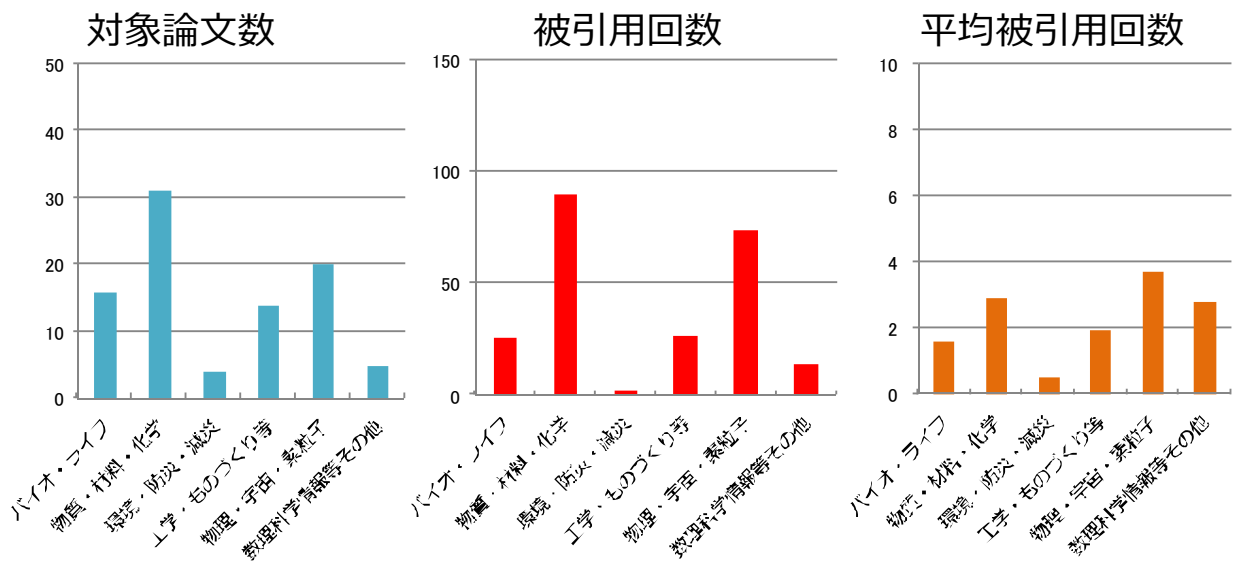
	「京」		「京」全体*1	「京」を除くHPCI
	一般利用	戦略プログラム		
査読付き論文の総数	152	293	397	157
被引用回数参照可の論文数(A)	87	244	287	107
総被引用回数(B)	223	1135	1219	360
平均被引用回数(B/A)	2.6	4.7	4.2	3.4
成果公開対象課題数	平成24年度終了	2	31	-
	平成25年度終了	77(26)*2	25	102(26)*2
	平成26年度終了	62(27)*2	25	87(27)*2
	合計	141(53)*2	81	222(53)*2

*1 「京」一般利用、戦略プログラム間の重複を排除

*2 括弧内は産業利用課題数（内数）

論文の被引用回数（「京」一般利用）

利用分野別の整理



総論文数：87

総被引用回数：223

総平均被引用回数：2.6

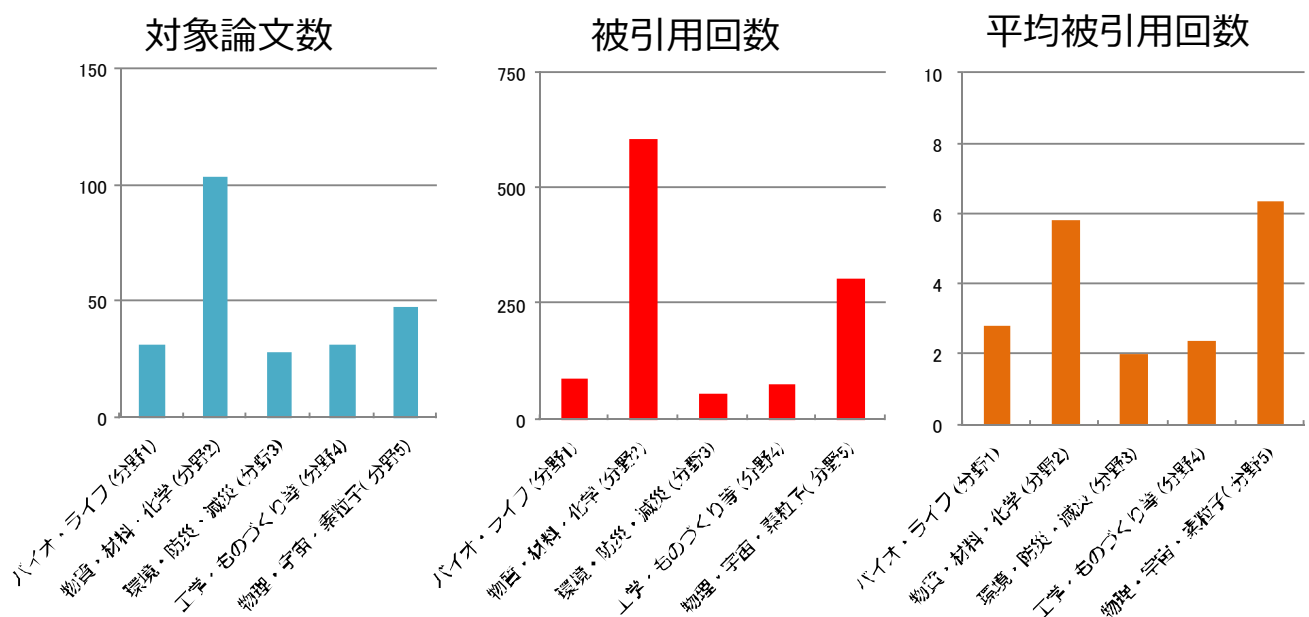
Web of Science(トムソン・ロイター)を基にした調査

H28.2.13

97

論文の被引用回数（戦略プログラム）

利用分野別の整理



総論文数：244

総被引用回数：1135

総平均被引用回数：4.7

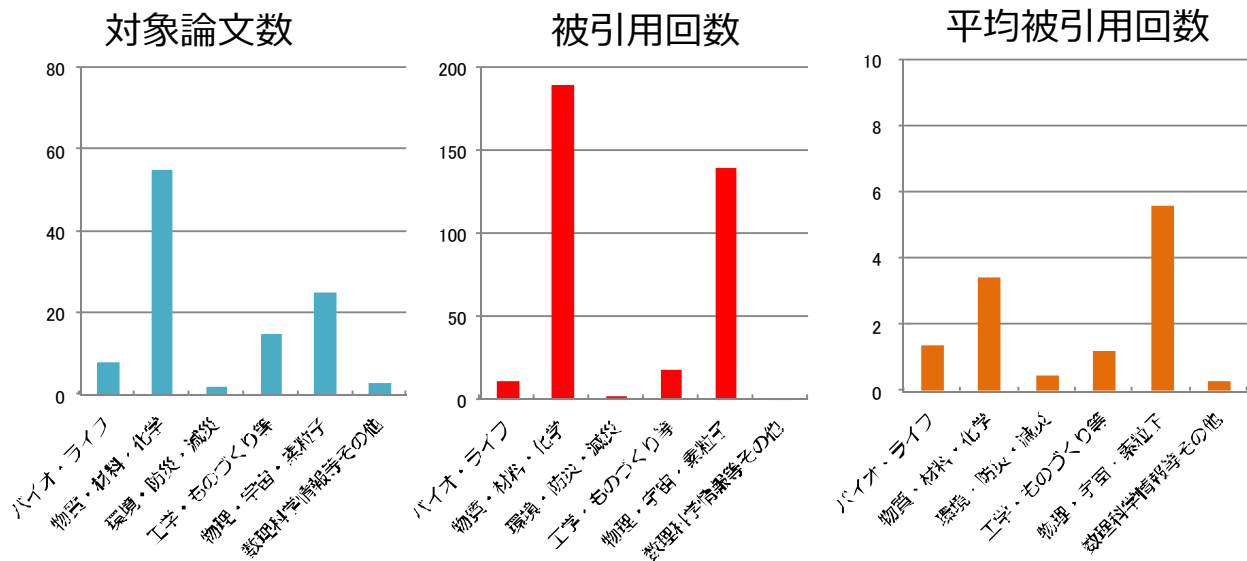
Web of Science(トムソン・ロイター)を基にした調査

H28.2.13

98

論文の被引用回数（「京」を除くHPCI）

利用分野別の整理



総論文数：107

総被引用回数：360

総平均被引用回数：3.4

Web of Science(トムソン・ロイター)を基にした調査

H28.2.13

99

論文の被引用回数（トップ5：「京」一般利用）

順位	被引用回数	論文情報	課題番号	利用分野	利用枠
1	23	Formation of Massive Molecular Cloud Cores by Cloud-Cloud Collision, Inoue, T., et al., Astrophysical Journal Letters, (2013)	hp120087	物理・宇宙・素粒子	「京」若手
2	19	Additive Effect on Reductive Decomposition and Binding of Carbonate-Based Solvent toward Solid Electrolyte Interphase Formation in Lithium-Ion Battery, Ushirogata, K., et al., Journal of the American Chemical Society, (2012)	hp120181 hp130021*	物質・材料・化学	「京」産業利用
3	15	Computational Nuclear Quantum Many-body Problem: The UNEDF Project, Bogner, S., et al., Computer Physics Communications, (2013)	hp120192 hp120287*	物理・宇宙・素粒子	「京」一般利用
4	10	Gapless Spin-Liquid Phase in an Extended Spin 1/2 Triangular Heisenberg Model, Kaneko, R. et al., Journal of the Physical Society of Japan, (2014)	hp120043 hp120283* hp130007*	物質・材料・化学	「京」一般利用
5	9	Identification of Metallic Phases of In Atomic Layers on Si(111) Surfaces Uchida, K., et al., Physical Review B, (2013)	hp120245	物質・材料・化学	「京」一般利用
5	9	Sacrificial Anion Reduction Mechanism for Electrochemical Stability Improvement in Highly Concentrated Li-Salt Electrolyte Sodeyama, K., et al., Journal of Physical Chemistry C, (2014)	hp140071 hp130021* hp140232*	物質・材料・化学	「京」産業利用

*戦略プログラム

H.28.2.13

論文の被引用回数（トップ5：戦略プログラム）

順位	被引用回数	論文情報	課題番号	利用分野	利用枠
1	68	Absence and Presence of Dirac Electrons in Silicene on Substrates, Guo, Z. X., et al., Physical Review B, (2013)	hp130004	物質・材料・化学	戦略分野2
2	44	Structural Basis for Dynamic Mechanism of Proton-coupled Symport by the Peptide Transporter POT, Doki, S., et al., Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, (2013)	hp130003	バイオ・ライフ	戦略分野1
3	38	Unusual Stability of Acetonitrile-Based Superconcentrated Electrolytes for Fast-Charging Lithium-Ion Batteries, Yamada, Y., et al., Journal of the American Chemical Society, (2014)	hp130021 hp140232	物質・材料・化学	戦略分野2
4	35	Comparison of Two-and Three-Dimensional Neutrino-Hydrodynamics Simulations of Core-Collapse, Yamazaki, T., et al., Astrophysical Journal, (2014)	hp120285	物理・宇宙・素粒子	戦略分野5
4	35	Helium Nuclei, Deuteron, and Dineutron in 2+1 Flavor Lattice QCD, Misawa, T., et al., Physical Review D, (2012)	hp120281	物理・宇宙・素粒子	戦略分野5

H.28.2.13

101

論文の被引用回数（トップ5：「京」以外のHPCI）

順位	被引用回数	論文情報	課題番号	利用分野	利用枠
1	32	Time-Dependent Hartree-Fock Calculations for Multinucleon Transfer Processes in Ca-40, Ca-48+Sn-124, Ca-40+Pb-208, and Ni-58+Pb-208 Reactions, Sekizawa, K., et al., Physical Review C, (2013)	hp120204	物理・宇宙・素粒子	HPCI一般利用
1	32	Termination Dependence of Tetragonal CH ₃ NH ₃ Pb ₃ Surfaces for Perovskite Solar Cells, Haruyama, J., et al., Journal of Physical Chemistry Letters, (2014)	hp140110	物質・材料・化学	HPCI一般利用
3	23	Effect of the Background Magnetic Field Inhomogeneity on Generation Processes of Whistler-Mode Chorus and Broadband Hiss-Like, Katoh, Y., et al., Journal of Geophysical Research-Space Physics, (2013)	hp120150	物理・宇宙・素粒子	HPCI一般利用
4	18	Evolution of Protostellar Outflow Around Low-mass Protostar, Machida, M. N., et al., Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, (2013)	hp120025	物理・宇宙・素粒子	HPCI一般利用
5	16	Space-Charge Layer Effect at Interface Between Oxide Cathode and Sulfide Electrolyte in All-Solid-State Lithium-Ion Battery, Haruyama, J., et al., Chemistry of Materials, (2014)	hp140110 hp140232*	物質・材料・化学	HPCI一般利用

*戦略プログラム

H.28.2.13

102

掲載誌のインパクトファクター

- 「京」を中核とするHPCI利用研究課題の成果論文の掲載誌のインパクトファクター(IF)調査を行った。
 - 調査対象：平成28年2月13日時点の成果公開データベースに登録された査読付き論文(554編)
 - 調査方法：Web of Science(トムソン・ロイター)にて、各論文の掲載誌のインパクトファクターを調査
- IF=1以上の学術誌に掲載された論文数：
 - 「京」一般利用；85編、戦略プログラム；181編、「京」を除くHPCI；94編

	「京」		「京」全体*1	「京」を除くHPCI
	一般利用	戦略プログラム		
査読付き論文の総数(A)	152	293	397	157
IF=1以上の学術誌の論文数(B)	85	181	234	94
B/A	56%	62%	59%	60%
成果公開対象課題数	平成24年度終了	2	31	-
	平成25年度終了	77(26)*2	25	102(26)*2
	平成26年度終了	62(27)*2	25	87(27)*2
	合計	141(53)*2	81	222(53)*2

*1 「京」一般利用、戦略プログラム間の重複を排除

H28.2.13

*2 括弧内は産業利用課題数(内数)

103

掲載誌のインパクトファクター(IF) — 「京」一般利用 (IF=1以上、研究分野別)

〈バイオ・ライフ〉雑誌名	Impact Factor	件数	〈物質・材料・化学〉雑誌名	Impact Factor	件数	〈物理・宇宙・素粒子〉雑誌名	Impact Factor	件数	〈数理科学情報・計算機科学その他〉雑誌名	Impact Factor	件数
WIRES Comput. Mol. Sci.	11.9	1	J. Am. Chem. Soc.	12.1	1	Science	33.6	1	Phys. Rev. Lett.	7.51	1
J. Chem. Theory Comput.	5.50	1	Nature Communications	11.5	2	J. High Energy Physics	6.11	2	Phys. Rev. B	3.74	1
Frontiers in Neuroinformatics	3.26	2	J. Chem. Theory Comput.	5.50	1	Astrophys. J	5.99	1	J. Chem. Phys.	2.95	1
PLoS One	3.23	1	J. Phys. Chem. C	4.77	3	Astrophys. J. Lett.	5.34	1	J. Phys. Soc. Jpn.	1.59	2
Comput. Phys. Commun.	3.11	1	Phys. Chem. Chem. Phys.	4.49	1	Phys. Rev. D	4.64	3	小計		5
J. Chem. Phys. 等	3未満1以上	8	Phys. Rev. B	3.74	7	Phys. Rev. C	3.73	2			
小計		15	Appl. Phys. Lett.	3.30	1	Comput. Phys. Commun.	3.11	1			
			J. Electrochemical Society	3.27	1	Prog. Theor. Exp. Phys. 等	3未満1以上	5			
			Comput. Phys. Commun.	3.11	1	小計		16			
			J. Chem. Phys. 等	3未満1以上	14						
			小計		32						
〈工学・ものづくり原子力・核融合〉雑誌名	Impact Factor	件数				〈環境・防災・減災〉雑誌名	Impact Factor	件数			
Phys. Rev. Lett.	7.51	1				Phys. Rev. Lett.	7.51	1			
Comput. Phys. Commun.	3.11	1				Ann. Glaciol. 等	3未満1以上	3			
Nucl. Fusion	3.06	4				小計		4			
Phys. Plasma 等	3未満1以上	7									
小計		13									

総件数

Impact Factor	件数
30以上	1
10以上	5
5以上	15
3以上	45
1以上	85

査読付き論文総数：152

H28.2.13

(IF値データ:2014年版)

104

掲載誌のインパクトファクター(IF) — 戦略プログラム (IF=1以上、研究分野別)

＜バイオ・ライフ＞ 雑誌名	Impact Factor	件数	＜物質・材料・化学＞ 雑誌名	Impact Factor	件数	＜物理・宇宙・素粒子＞ 雑誌名	Impact Factor	件数	＜環境・防災・減災＞ 雑誌名	Impact Factor	件数
Nature Genetics	29.4	1	J. Am. Chem. Soc.	12.1	3	Science	33.6	1	Nature Commun.	11.5	1
Proc. Natl. Acad. Sci. USA	9.67	1	Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science	11.9	1	Astrophysical Journal Supplement Series	11.2	1	Scientific Reports	5.58	1
Ann. Oncol.	7.04	1	Nature Commun.	11.5	1	Phys. Rev. Lett.	7.51	1	Earth Planet. Sci. Lett.	4.73	1
Biophysical J.	3.97	1	Phys. Rev. X	9.04	1	J. High Energy Phys.	6.11	1	Geophys. Res. Lett.	4.20	3
J. Comput. Chem	3.60	2	Chem. Mater.	8.35	1	Astrophys. J	5.99	10	Mon. Weather Rev.	3.36	2
Front. Physiol	3.53	1	Phys. Rev. Lett.	7.51	3	Mon. Not. R. Astron. Soc.	5.11	2	Ann. Glaciol.等	3未満1以上	11
Frontiers in Neuroinformatics	3.26	1	Nanoscale Res. Lett.	7.01	1	Phys. Rev. D	4.64	6	小計		19
PLoS One	3.23	4	Chem. Commun.	6.83	1	Astron. Astrophys. Research Note	4.38	1			
J. Synchrotron Rad.等	3未満1以上	12	J. Chem. Theory Comput.	5.50	4	Phys. Rev. C	3.73	6			
小計		24	J. Phys. Chem. C	4.77	4	Comput. Phys. Commun.	3.11	1			
＜工学・ものづくり原子力・核融合＞ 雑誌名	Impact Factor	件数	PLoS Comput. Biol.	4.62	1	Prog. Theor. Exp. Phys.等	3未満1以上	2			
Phys. Rev. Lett.	7.51	1	Phys. Chem. Chem. Phys.	4.49	2	小計		32			
Phys. Chem. Chem. Phys.	4.49	1	J. Royal Society Interface等	4未満3以上	29						
Fuel	3.52	1	J. Chem. Phys.等	3未満1以上	31						
Nucl. Fusion	3.06	1	小計		83						
Energy Fuels等	3未満1以上	19									
小計		23									

総件数	
Impact Factor	件数
30以上	1
10以上	9
5以上	38
3以上	106
1以上	181

査読付き論文総数：293
H28.2.13
(IF値データ:2014年版)

掲載誌のインパクトファクター(IF) — 「京」を除くHPCI (IF=1以上、研究分野別)

＜バイオ・ライフ＞ 雑誌名	Impact Factor	件数	＜物質・材料・化学＞ 雑誌名	Impact Factor	件数	＜物理・宇宙・素粒子＞ 雑誌名	Impact Factor	件数	＜数理科学情報・計算機科学その他＞雑誌名	Impact Factor	件数
J. Chem. Theory Comput.	5.50	3	Chem. Mater.	8.35	1	Science	33.6	1	Physics Fluids	2.03	1
Bioinformatics	4.98	1	J. Phys. Chem. Lett.	7.46	1	Phys. Rev. Lett.	7.51	2	小計		1
PLoS One	3.23	1	Nano Research	7.01	1	Astrophys. J.	5.99	1			
J. Synchron Radiat.等	3未満1以上	3	J. Phys. Chem. C	4.77	7	Astrophys. J. Lett.	5.35	1			
小計		8	J. Hazard. Mater.	4.53	1	Mon. Not. R. Astron. Soc.	5.11	3			
			Phys. Chem. Chem. Phys.	4.49	4	Phys. Rev. D	4.64	2			
			Soft Matter	4.03	2	Phys. Rev. C	3.73	4			
			RSC Advances	3.84	1	Phys. Rev. A等	3未満1以上	4			
			J. Comput. Chem	3.59	1	小計		17			
			Org. Biomol. Chem.	3.56	1						
			Int. J. Hydrogen Energy	3.31	1	＜環境・防災・減災＞ 雑誌名	Impact Factor	件数			
			J. Phys. Chem. B	3.30	5	J. Phys. Soc. Jpn.	1.59	1			
			Computer Physics Communications	3.11	1	小計		1			
			J. Chem. Phys. 等	3未満1以上	28						
小計		12	小計		55						

総件数	
Impact Factor	件数
30以上	1
10以上	2
5以上	15
3以上	49
1以上	94

査読付き論文総数：157
H28.2.13
(IF値データ:2014年版)

成果事例

(「京」一般利用枠、重点化促進枠)

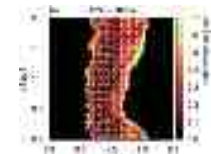
107

成果事例_a (論文被引用回数上位)

a-1 「京」若手人材育成

高エネルギー天体衝撃波における乱流磁場増幅と疑似観測による偏光度と空間微細構造の予言

本研究では大規模な高分解能3次元磁気流体シミュレーションによって超新星残骸衝撃波で期待される磁気乱流状態をその発生から一貫して追跡することに成功した。特に自然な乱流生成をシミュレートしたことにより衝撃波面近傍での磁場構造を理解することができるようになり、その結果として従来の理論では理解不能であったシンクロトロン放射の偏向面整列機構を解明することができた。この成果は超新星残骸における粒子加速の検証に向けた新しい観測提案に利用されることが期待できる。



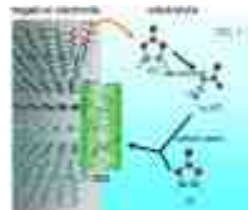
シミュレーションデータから計算されるシンクロトロン放射の偏光度と偏光ベクトル

国立天文台・理論研究部 井上 剛志
hp120087 若手人材育成 物理・宇宙

a-2 「京」産業利用

第一原理計算によるLi電池SEI形成に果たす添加剤の機能解析

広く実用化されている添加剤ビニレンカーボネート(VC)のリチウムイオン界面における化学反応機構を明らかにする事が出来、そこでは従来考えられていた添加剤同士が重合するというVC添加剤の役割とは異なる新しい機構、即ち電解液エチレンカーボネート(EC)分子還元ラジカルとの反応性が、VC添加剤のリチウムイオン電池内での中心的な役割である新しい事実を見出す事が出来た。またVC添加剤から出来た電極界面被膜(SEI)の性質なども電子論的に計算しており、多数の分子、電極界面を含め量子計算によって反応や物性を調べる事ができたのは京に依るところが大きい。



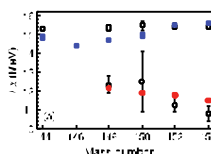
リチウムイオン電池内におけるVC添加剤とEC電解液の反応

富士フイルム株式会社 奥野 幸洋
hp120181 産業利用 物質・材料・化学

a-3 「京」一般利用

変形超流動原子核における素励起モード・応答関数の研究

原子核の代表的な高エネルギーの素励起である巨大共鳴状態の研究で成果を得た。中重核における線形応答TDDFT(時間依存密度汎関数理論)計算により、基底状態の形状の変化に伴って、様々な巨大共鳴状態に現れる特徴的な変化を解明し、さらに実験データの観測と照らし合わせることで、核物質の状態方程式に与える制限を精査した。また、ニュートリノス二重ベータ崩壊の観測からニュートリノ質量を決定するために必要となる原子核行列要素の計算を、¹⁵⁰Ndから¹⁵⁰Smへの崩壊に対して行った。大量の行列要素を計算する必要があり、京によって初めて可能となった成果である。



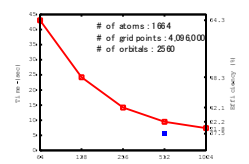
Smアイソトープにおける単極子巨大共鳴エネルギー(質量数148以上で形状変化による低エネルギー共鳴状態が出現)

筑波大学・計算科学研究センター 中務 孝
hp120192 一般利用 物理・宇宙

a-4 「京」一般利用

大規模第一原理電子状態計算手法の開発とシリコンおよび炭素ナノ物質への応用

- 「京」において高い性能を示す、実空間密度汎関数法プログラム「RSDFT」に対し、さらに広範な物性研究に応用するために、ウルトラソフト擬ポテンシャル法、Sakurai-Sugiura法、Car-Parrinello分子動力学法の実装と「京」上でのチューニングを行った。
- またこれらを用いて、捻れ角を持った二層グラフェンの電子状態、シリコンナノワイヤおよびPドーパバルクSiのバンド構造計算等、数千~数万原子規模の第一原理計算に応用した。



RSDFT-CPMD法1ステップの計算時間および実行効率のCPU数依存性(赤:初期の実装、青:最終的な実装での結果)

東京大学大学院工学系研究科 岩田 潤一
hp120245 一般利用 物質・材料・化学

108

成果事例_a (論文被引用回数上位)

No.	順位	被引用回数	論文情報	課題番号	利用枠
a-1	1	23	Formation of Massive Molecular Cloud Cores by Cloud-Cloud Collision, Inoue, T., et al., Astrophysical Journal Letters, (2013)	hp120087	若手人材育成
a-2	2	19	Additive Effect on Reductive Decomposition and Binding of Carbonate-Based Solvent toward Solid Electrolyte Interphase Formation in Lithium-Ion Battery, Ushirogata, K., et al., Journal of the American Chemical Society, (2012)	hp120181 hp130021*	産業利用
a-3	3	15	Computational nuclear quantum many-body problem: The UNEDF project, Bogner, S., et al., Computer Physics Communications, (2013)	hp120192 hp120287*	一般利用
	4	10	Gapless Spin-Liquid Phase in an Extended Spin 1/2 Triangular Heisenberg Model, Kaneko, R. et al., Journal of the Physical Society of Japan, (2014)	hp120043 hp120283* hp130007*	一般利用
a-4	5	9	Identification of metallic phases of In atomic layers on Si(111) surfaces, Uchida, K., et al., Physical Review B, (2013)	hp120245	一般利用
	5	9	Sacrificial Anion Reduction Mechanism for Electrochemical Stability Improvement in Highly Concentrated Li-Salt Electrolyte, Sodeyama, K., et al., Journal of Physical Chemistry C, (2014)	hp140071 hp130021* hp140232*	産業利用

*戦略プログラム

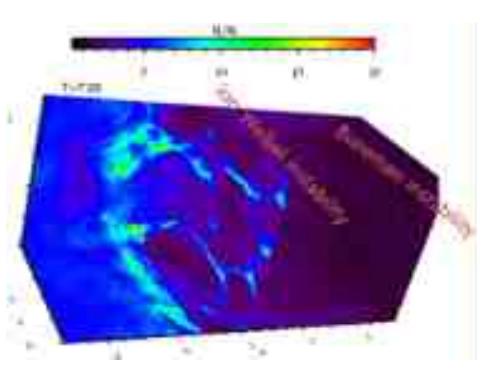
109

成果事例_b (サイエンス掲載)

b-1 「京」若手人材育成

超新星残骸衝撃波における宇宙線加速機構の解明に向けた1兆個粒子シミュレーション

非相対論的高マッハ数衝撃波の3次元PIC (particle-in-cell) シミュレーションを実施した。その結果、衝撃波前方では電子スケールの不安定性(ブーネマン不安定)が高強度に励起され、衝撃波遷移領域ではイオンワイベル不安定による磁気乱流が3次的に卓越している様子が得られ、世界で初めて3次元衝撃波構造を得ることができた。下流では2次元計算では得られないような相対論的エネルギーの電子が存在していることが明らかになった。これはブーネマン不安定による電子の衝撃波波乗り加速で生成された高エネルギー電子が、更に遷移領域での磁気乱流中で散乱・加速された結果であると推測される。



高マッハ数衝撃波の3次元構造
(色は電子密度を表す)

千葉大学

松本 洋介

hp140127

若手人材育成

物理・宇宙

No.	課題番号	利用枠	論文タイトル	掲載誌	発表年月
b-1	hp140127	若手人材育成	Stochastic electron acceleration during spontaneous turbulent reconnection in a strong shock wave	Science, 347, 974-978	2015年2月

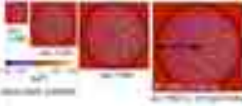
110

成果事例_c (受賞)

c-1 「京」一般利用

核融合プラズマの乱流シミュレーション

数百万ノード時間/ショットという「京」ではじめて可能となるベタスケール流体計算によって、ITER規模のイオン系乱流の第一原理乱流シミュレーション、および、イオン-電子系マルチスケール乱流の第一原理乱流シミュレーションを初めて実現した。これにより、ITER規模に至るイオン熱輸送の装置サイズスケールングを評価し、スケールングを決定する物理機構を解明した。また、電子熱輸送をもたらすマルチスケール電子乱流スペクトルを第一原理モデルで決定し、イオンスケールと電子スケールのスペクトル間相互作用を発見した。



イオン系乱流の装置サイズスケールング数値実験で観測した乱流場の静電ポテンシャル

日本原子力研究開発機構 井戸村 泰宏
hp120011 一般利用 原子力・核融合

c-2 「京」産業利用

GFD*による船舶推進性能推定精度向上に関する研究

本課題では当初予定していた曳航試験状態のレイノルズ数 ($Re=4.6E6$) の流れ場を解像可能な320億格子規模の計算が、計算資源が削られたために実行することができなかったが、この段階小さい規模 ($Re=2.3E6$) の計算 (40億格子規模で「京」ではじめて実施可能) を行う事が出来た。結果として曳航試験と計算の抵抗値を比較し、それらの差が曳航試験の誤差範囲に収まる程度であることが確認され、本レイノルズ数に於ける計算の妥当性が示された。



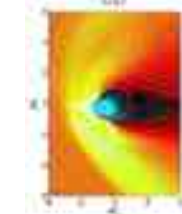
全抵抗係数 (試験と計算の比較)

(*) CFD: 数値流体力学
日本造船技術センター 西川 達雄
hp130042 産業利用 工学・ものづくり

c-3 「京」若手人材育成

弱磁化天体のグローバルプラズマシミュレーション

SPARC64 プロセッサに特化したチューニングを行い、ノード数が 96×2^n の場合において実効効率17%を達成した。また全ノードを用いた場合は1.2PFlops、実効効率11%であった。また弱磁化小天体の高解像度シミュレーションにより、デバイ長スケールのミクロ素過程が磁気圏の形状やイオンの密度分布にあまり影響を与えないことが分かった。一方で、低解像度シミュレーション結果と比較して、高解像度シミュレーションではデバイ長スケールの強い沿磁力線電場が発生することが分かった。これらの結果は、デバイ長スケールの電場が $\nabla \times E=0$ を満たし、磁場の発達に影響を与えないことを示しており、「京」を用いた高解像度シミュレーションにより初めて確認できた。



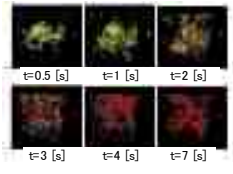
「京」を用いた高解像度計算結果で得られた弱磁化小天体近傍のイオン密度及び磁力線のプロファイル

名古屋大学・太陽地球環境研究所 梅田 隆行
hp120092 若手人材育成 物理・宇宙

c-4 「京」一般利用(条件付選定)*

雲マイクロ物理シミュレータによる雲-乱流相互作用の解明

温度・水蒸気と微細雲粒子からなる雲乱流の振る舞いを、これまでにない規模の高レイノルズ数 ($R_\lambda=252$) と雲粒子数 (約1億3千万個) により解析した。レイノルズ数は雲粒子の平均半径成長よりもその半径分布の広がりに強く影響を与えることが分かった。乱流スカラー揺らぎについての世界最大規模の計算により揺らぎのスケールング指数の普遍性が弱いことを見出した。高層にあるサブ μm 規模の氷結晶の融解を大規模シミュレーションにより解析し、その表面で生じる擬似液体層の存在を見出し性質を詳しく調べた。



乱流中における雲粒子の成長と分散の時間発展

名古屋工業大学大学院 後藤 俊幸
hp120147 一般利用(条件付選定)* 環境・防災・減災

* 「京」の本格利用に移行するための準備枠 (平成24年度選定)

111

成果事例_c (受賞)

No.	課題番号	利用枠	授与団体	賞名	タイトル	受賞日
c-1	hp120011	一般利用	ACM, IEEE	SC13 Best Poster Award	Optimizations of a spectral/finite difference gyrokinetic code for improved strong scaling toward million cores	2013 11/21
			日本シミュレーション学会	JSST 2013 Outstanding Presentation Award	Optimizations of the gyrokinetic Vlasov simulation code GKV for the K computer	2013 9/13
			プラズマ・核融合学会	Plasma 2014 若手優秀発表賞	Multi-scale interactions between electron- and ion-scale turbulence and their effects on turbulent transport	2014 11/21
			核融合エネルギー連合講演会	第10回核融合エネルギー連合講演会 若手優秀発表賞	電子/イオン系マルチスケール乱流シミュレーションによる電子熱輸送解析	2014 6/20
c-2	hp130042	産業利用	Conference on Computer and IT Application in the Maritime Industries	Compit Award 2015	Application of Fully-resolved Large Eddy Simulation to Self Propulsion Test Condition of Double-Model KVLC2	2015 5/13
c-3	hp120092	若手人材育成	文部科学省	平成27年度 科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞	先端的宇宙プラズマ計算機シミュレーション手法の研究	2015 4/15
			地球電磁気・地球惑星圏学会	大林奨励賞	計算機シミュレーション手法の開発とその宇宙プラズマ現象への応用	2012 10/22
c-4	hp120147	一般利用	日本物理学会	JPSJ Papers of Editor's Choice	Fluctuating Local Recrystallization of Quasi-Liquid Layer of Sub-Micrometer-Scale Ice: A Molecular Dynamics Study	2014 7/10

成果事例_d (重点化促進枠)

d-1 「京」重点化促進枠

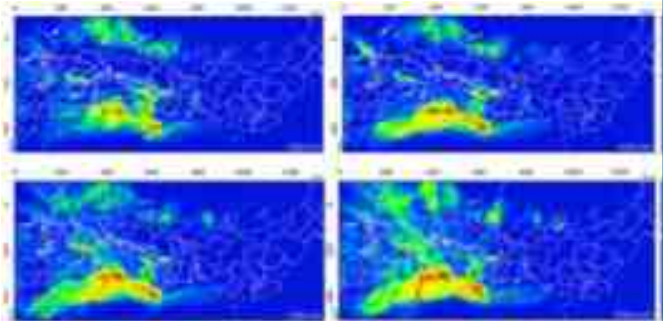
南海トラフ巨大地震による被害予測の高度化(長周期地震動)

◆ 利用成果

- ▶ 南海トラフ沿いで巨大地震が発生した場合、「長周期地震動」がどのような影響を与えるか。その全体像が初めて明らかにされた。
- ▶ 南海トラフ巨大地震による長周期地震動が引き起こす広範囲にわたる地表の揺れと、超高層建築物における揺れの推計が可能になった。

◆ 将来展望

巨大地震により発生した長周期地震動の伝わり方を予測し、そのデータを防災や建築などの各専門機関が詳細に検討できるようになることで、超高層建築物や石油タンクなどの巨大構造物における防災対策や、建造物の性能評価や建築基準に生かされていくと期待される。



過去の南海トラフ地震による長周期地震動の推計計算結果例

内閣府(防災担当)

名波 義昭

hp140252, hp130128, hp130134

環境・防災・減災

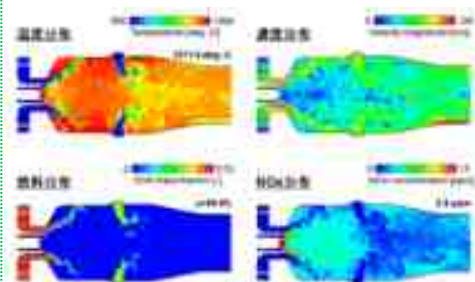
113

成果事例_e (電子ジャーナル ダウンロード数トップ)

e-1 「京」産業利用

ガスタービン燃焼器における過渡的挙動に付随する問題の原因究明

- これまで、LES燃焼解析による予測精度は、中圧の試験条件において検証が行われており、高圧となるエンジン条件においては予測精度が低下するという課題があった。そこで、常圧から高圧における燃焼速度の計測結果に基づき、新たな燃焼モデルを構築、実機燃焼器解析に適用した。
- 「京」の計算リソースを用いることで燃焼モデルの検証をスピーディーに行うことができ、これまで正確に予測できていなかった高圧条件における燃焼温度およびNOx生成量を予測することが可能となった。
- また負荷を減少させた際の温度の推移も捉えることができた。



L30A-DLE燃焼器中心断面における各物理量分布

川崎重工業・技術研究所

平野 昂志

hp130114

産業利用

工学・ものづくり

No.	ダウンロード数	課題番号	利用枠	論文タイトル	発表年月
e-1	151	hp140127	産業利用	ガスタービン燃焼器実圧条件における燃焼場の検討	2015年9月

114

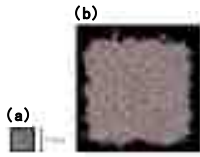
成果事例_f (利用報告書ダウンロード数上位)

f-1 「京」産業利用(トライアル・ユース)

電子写真システム設計のための並列シミュレーション技術の開発

◆ MD(分子動力学法)計算

ポリカーボネイト分子を対象に、全原子および粗視化United Atomモデルと、最大約400万原子、2048コア(256ノード)までのリソースを用いて、計算時間の原子数・並列コア数依存性を検証した。数100コア規模以上では、粗視化United Atomモデルは全原子モデルより15倍程度高い並列性能を示した。また約83万原子からなるポリカーボネイトの粗視化United Atomモデルに対して、512コア(64ノード)でのMD計算を実行し、著者の先行研究の約79倍もの大規模化となる25nm規模の分子構造計算を実証できた。



分子構造計算結果
(a) 先行研究, (b) 本研究

◆ DEM(個別要素法)計算

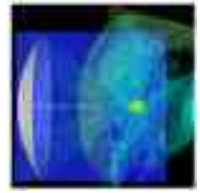
社内開発したプログラムの動作検証を行い、京においてMPIスレッド関連の処理が実行できない不具合が抽出できた。プログラムの改造を実施するため、今期の検証は取りやめとした。

富士ゼロックス株式会社 世古 文裕
hp140242 産業利用(トライアル) 物質・材料・化学

f-2 「京」一般利用

超音波治療機器開発のためのHIFU治療シミュレーション

12の乳房モデルを利用して、乳がんに対する集束超音波治療を模擬したシミュレーションを行った。その結果、乳腺組織と脂肪の構造により焦点の拡散および位置ずれが生じており、ターゲットから最大音圧の位置のずれは、ほとんどが5mm以内の範囲であり最大で8mm程度であることが示された。また、256chアレイトランスデューサを用いた時間反転法に基づく焦点制御によって、超音波を適切にターゲットに集束させることができることを確認した。京の利用により、これまでよりも大規模かつ高精度なシミュレーションによって、乳がんに対する集束超音波治療の人体への安全性の評価や超音波機器の焦点制御に対して新たな知見が得られた。



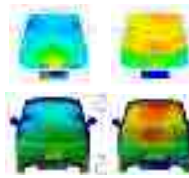
乳がんに対する集束超音波シミュレーション

日本大学・生産工学部 沖田 浩平
hp130110 一般利用 バイオ・ライフ

f-3 「京」産業利用

大規模CFDを用いたハイトワゴン型車両の空気抵抗低減技術の開発

FrontFlow/redを用いた4億規模の非定常LESにより、自動車空力でも予測が困難な空気抵抗低減パーツ(エアダム)による効果、流れ場の変化を精度よく再現することができた。得られた計算結果から空気抵抗低減パーツの効果を最大限に得るための条件を検証していく。



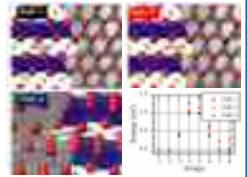
バックドア圧力分布

スズキ株式会社 橋爪 祥光
hp140035 産業利用 工学・ものづくり

f-4 「京」産業利用

Liイオン二次電池正極材料の劣化解析

層状岩塩型正極活物質表面で確認される立方晶の界面モデルを作成し、密度汎関数理論とNEB(Nudged Elastic Band)法によりLiイオンの輸送特性を調査した。その結果、層状岩塩構造の内部で約0.99eVの活性化エネルギーを示したLiイオンは、立方晶界面に近づくと共にそのエネルギーは増大し、その値は最大約1.45eVとなった。それ故に界面層はLiイオンの拡散障壁として振る舞う可能性を示した。



Liイオンの軌跡とエネルギーポテンシャル曲線
Path 1,2: 層状岩塩構造
Path 3: 立方晶界面

(*)NEB法: 化学反応における遷移状態を探し出すための手法

株式会社コベルコ科研 世木 隆
hp140095 産業利用 物質・材料・化学

115

成果事例_f (利用報告書ダウンロード数上位)

No.	順位	ダウンロード数 (H27.4.1-H28.2.13)	課題番号	利用枠
f-1	1	138	hp140242	「京」産業利用(トライアル)
	2	133	hp130033	「京」産業利用(トライアル)
f-2	3	120	hp130110	「京」一般利用
f-3	4	119	hp140035	「京」産業利用
	5	113	hp140241	「京」産業利用(トライアル)
f-4	6	106	hp140076	HPCI一般
	7	104	hp140095	「京」産業利用
	7	104	hp140028	「京」若手人材育成
	9	93	hp120250	HPCI一般
	10	91	hp140097	「京」産業利用

成果公開普及関連

117

成果報告会 優秀成果賞受賞課題一覧

118

成果報告会 優秀成果賞受賞課題一覧(1/2)

- 優秀成果賞課題の選定方法
 - 外部有識者からなるプログラム委員会を設置し、委員の審議により選定
- 選定基準
 - 課題の利用実績及び利用率が高く、かつ顕著な成果が認められる課題

第1回成果報告会（平成26年10月31日開催）

■平成26年度

「京」一般利用

課題ID	課題名	課題代表者	所属	分野	利用計算機
hp120011	核融合プラズマの乱流輸送シミュレーション	井戸村 泰宏	日本原子力研究開発機構	原子力・核融合	「京」
hp120131	大規模タンパク質間ネットワーク推定に関する研究	秋山 泰	東京工業大学	バイオ・ライフ	「京」
hp120027	最小自由エネルギー経路探索法による多剤排出トランスポーターの薬剤排出機構の解明	木寺 昭紀	理化学研究所	バイオ・ライフ	「京」
hp120086	新磁石材料探索とその保磁力発現機構の解明	合田 義弘	東京大学	物質・材料・化学	「京」
hp120076	惑星探査計画に資する、惑星大気の高解像度実験	林 祥介	神戸大学	物理・素粒子・宇宙	「京」

「京」若手人材育成利用

課題ID	課題名	課題代表者	所属	分野	利用計算機
hp120084	磁気プラズマセイル宇宙機開発のための3次元プラズマ粒子シミュレーションによる推力特性の解明	岡田 康将	京都大学	工学・ものづくり	「京」

「京」産業利用（実証利用）

課題ID	課題名	課題代表者	所属	分野	利用計算機
hp120181	第一原理計算によるLi電池SEI形成に果たす添加剤の機能解析	奥野 幸洋	富士フイルム株式会社	物質・材料・化学	「京」
hp120051	超大規模数値流体解析による建物局部風圧の予測とその制御システムの開発	菊池 浩利	清水建設株式会社	工学・ものづくり	「京」

「京」以外

課題ID	課題名	課題代表者	所属	分野	利用計算機
hp120093	ソフト分子集団系における物質分配・輸送機能の解析	松林 伸幸	大阪大学	物質・材料・化学	東工大 TSUBAME2.5 京大 CRAY XE6
hp120204	密度汎関数理論に基づく原子核ダイナミクスの研究	橋本 幸男	筑波大学	物理・素粒子・宇宙	筑波大 T2K-Tsukuba 北大 SRI 6000/M1

119

成果報告会 優秀成果賞受賞課題一覧(2/2)

第2回成果報告会（平成27年10月26日開催）

■平成27年度

「京」一般課題

課題ID	課題名	課題代表者	所属	分野	利用計算機
hp140046	全球規模大気環境汚染に関わる統合環境モデリング	中島 映至	宇宙航空研究開発機構	環境・防災・減災	「京」
hp140067	大規模数値シミュレーションで解き明かす超弦理論の物理	花田 政範	京都大学	物理・素粒子・宇宙	「京」 阪大 NEC Express 5800/530h
hp140092	強相関超伝導体に対する第一原理量子モンテカルロシミュレーション	柚木 清司	理化学研究所	物質・材料・化学	「京」
hp140135	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	名古屋大学	工学・ものづくり	「京」 名大 FX10, CX400
hp140151	昆虫嗅覚系全脳シミュレーション	神崎 亮平	東京大学	バイオ・ライフ	「京」 東大 FX10
hp140164	化学反応シミュレーションによるCO2分離回収のためのアミン溶液の探索	中井 浩巳	早稲田大学	物質・材料・化学	「京」

「京」若手人材育成課題

課題ID	課題名	課題代表者	所属	分野	利用計算機
hp140127	超新星残骸衝撃波における宇宙線加速機構の解明に向けた1兆個粒子シミュレーション	松本 洋介	千葉大学	物理・素粒子・宇宙	「京」

「京」産業利用課題（実証利用）

課題ID	課題名	課題代表者	所属	分野	利用計算機
hp140037	大規模振動解析による船体の振動現象の再現	平川 真一	ジャパンマリンユナイテッド株式会社	工学・ものづくり	「京」
hp140154	DESおよび知的可視化による多段軸流圧縮機の旋回失速初生現象の解明	松岡 右典	川崎重工株式会社	工学・ものづくり	「京」

「京」以外

課題ID	課題名	課題代表者	所属	分野	利用計算機
hp140076	経済社会データおよび環境データを用いた空間評価指標の大規模計算	佐藤 彰洋	京都大学	情報・計算機科学	統数研 データ同化スーパーコンピュータシステム
hp140096	実用デバイス中の複雑界面に関するハイブリッド量子古典計算	尾形 修司	名古屋工業大学	物質・材料・化学	九大 FX10
hp140119	都市域を対象とした汚染物質・危険物質の拡散に関する検討	宮下 康一	株式会社風工学研究所	環境・防災・減災	統数研 データ同化スーパーコンピュータシステム
hp140157	分子動力学計算を用いた生体膜・膜タンパク質機能の定量解析	李 秀栄	理化学研究所	バイオ・ライフ	東大 FX10

120

HPCI利用報告書の公開

公開実績・利用報告書の例（成果公開課題の例・成果非公開課題の書式）

121

HPCI利用報告書の公開

- 利用報告書の提出は課題実施終了60日以内
 - ▶ 知的財産権の獲得を行う場合は、提出された利用報告書の公開を2年間延期することが可能
- 対象利用枠：全利用枠（京調整高度化枠、JHPCNを除く）
 - ▶ 成果非公開である産業利用（個別利用）は課題番号、公開用課題名、課題代表者名・所属、利用計算機名、配分ノード時間のみを公開
- 様式
 - ▶ 日本語／英語のどちらでも可
 - ▶ 課題情報（含計算資源情報、ソフトウェア情報）、成果概要及び要約で構成
 - ▶ 成果概要：図表込みA4版2頁以上＋参考文献（最大10頁以内）、項目立て指定
 - ▶ 要約：図入りA4版1頁で概要を表示。平成27年度からは日英版両方を作成
- 提出方法
 - ▶ 成果公開版：オンライン投稿システム（平成26年5月から運用開始）
 - ▶ 成果非公開版：報告会等支援システム

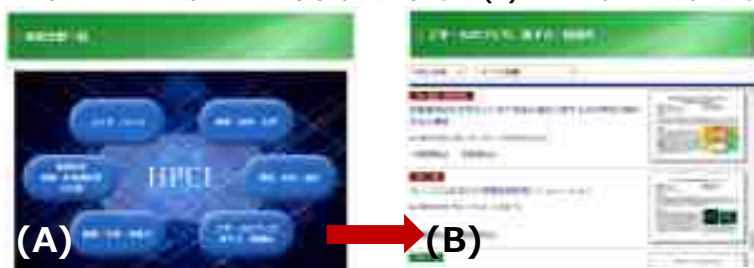
<成果>

- 利用研究成果の公開、普及、利用者間の情報交流に大きく貢献

「利用報告書オンライン投稿システム」ログイン画面



HPCI利用報告書の公開ページ: (A) 利用分野一覧、(B)報告書要約のサムネイル表示



(日本語版) http://www.hpci-office.jp/pages/user_report_bunya
(英語版) http://www.hpci-office.jp/pages/e_user_report_bunya

122

HPCI利用報告書の公開実績

- 利用報告書公開の実績は全部で422課題（うち「京」：289課題）

課題終了年度	課題枠		利用報告書公開課題数	
平成24年度	一般利用枠	「京」	7	
			2	
	戦略プログラム利用課題	「京」	35	
合計			44	
平成25年度	一般利用枠	「京」	一般利用	36
			若手人材育成利用	12
			一般利用（条件付選定）*	20
			産業利用	26
		「京」を除くHPCI	産業利用（トライアル・ユース）	19
			共用法第12条調査研究	3
			一般利用	51
	戦略プログラム利用課題	「京」	産業利用（実証利用）	2
				29
	重点化促進枠		1	
合計			199	
平成26年度	一般利用枠	「京」	一般利用	24
			若手人材育成利用	10
			産業利用	27
			産業利用（トライアル・ユース）	7
		「京」を除くHPCI	共用法第12条調査研究	1
			一般利用	75
			産業利用（実証利用）	4
	戦略プログラム利用課題	「京」	産業利用（トライアル・ユース）	1
				29
	重点化促進枠		0	
合計			178	
平成27年度	一般利用枠	「京」	産業利用（トライアル・ユース）	1
総計				422

課題枠別内訳		利用報告書公開課題数
「京」	一般利用	60
	若手人材育成利用	22
	一般利用（条件付選定）*	20
	産業利用	53
	産業利用（トライアル・ユース）	34
	共用法第12条調査研究	6
	戦略プログラム利用課題	93
重点化促進枠	1	
合計		289
「京」を除くHPCI	一般利用	126
	産業利用（実証利用）	6
	産業利用（トライアル・ユース）	1
合計		133
総計		422

* 「京」の本格利用に移行するための準備枠（平成24年度選定）

123

成果公開課題の利用報告書の例(1/5)

成果公開課題は、一部英語を併記

HPCIシステム利用研究課題 利用報告書 HPCI User Report				
課題番号 Project Number	140211			
課題名 Project Name	大規模 CFD を用いたハイブリッド車乗車の空気抵抗削減のための研究 Study on the aerodynamic drag reduction of the lightweight type vehicle using Large Scale CFD			
課題代表者 Project Representative	氏名: 橋本 洋平 所属機関: 株式会社 本田技研工業 Affiliation: Honda Motor Co., Ltd. 所属機関の国名: 日本 Country: Japan			
キーワード Key-words	大規模 CFD, 本田技研工業, Honda Motor Co., Ltd.			
課題内容 Project Content	Automotive CFD, Air Dynamics, Front/Powering, LEE			
所属機関の名称 Institution	Honda Motor Co., Ltd.			
利用枠 Project Category	（京）産業利用（実証利用） "C" Validation Use			
報告書公開 Release of Use	2019/4/1 - 2019/3/31			
利用対象装置情報: Resource Information				
装置名 Hardware	資源名 Computer Resources	単位 Units	利用定数値: 消費 Physical Resource	稼働定数値: 消費 CPU Memory
機種 Manufacturer	富士通 Fujitsu	サーバ機 Server	20A, 20G	10A, 10F

124

成果公開課題の利用報告書の例(2/5)

開発者：トヨタ自動車

1. 本稿は CFD を用いたエアロダイナミクスシミュレーションの結果について報告する。

種別：技術論文

1. 研究の背景と目的

自動車は複雑な形状であり、自動車中心部には複雑な流れが生じることが多い。この流れは車体周囲に滞留し、空気抵抗を増加させることにも関係している。一方、自動車は複雑な形状であり、車体周囲に滞留する空気はエンジン冷却やブレーキ冷却に悪影響を及ぼす可能性がある。本研究では、車体周囲に滞留する空気の流れをシミュレーションによって解析し、車体周囲の滞留空気量を低減させることを目的とする。

To improve the problem of airflow stagnation, it is required that CFD simulation. Since the vehicle development design schedule of the vehicle is an important element to reduce CO₂ emissions, the vehicle development team is aware of the importance of this issue. In this study, the flow of air around the car body is simulated using CFD simulation to reduce the amount of air stagnation. The results of the simulation are compared with the results of the wind tunnel test to verify the accuracy of the simulation. The results of the simulation are used to optimize the car body design to reduce the amount of air stagnation.

2. 研究内容

本研究では、車体周囲の滞留空気量を低減させることを目的として、車体周囲の滞留空気量をシミュレーションによって解析し、車体周囲の滞留空気量を低減させることを目的とする。

By using CFD simulation with accuracy of 10% or more, the flow of air around the car body is simulated. The results of the simulation are compared with the results of the wind tunnel test to verify the accuracy of the simulation. The results of the simulation are used to optimize the car body design to reduce the amount of air stagnation.

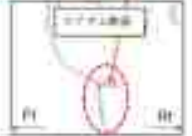
3. 結果

本研究では、車体周囲の滞留空気量を低減させることを目的として、車体周囲の滞留空気量をシミュレーションによって解析し、車体周囲の滞留空気量を低減させることを目的とする。

エアロダイナミクスシミュレーションの結果は、従来の風洞試験よりも高精度で、かつコスト削減が期待できる。また、従来の風洞試験よりも、車体周囲の滞留空気量を低減させることが可能である。この結果は、車体周囲の滞留空気量を低減させるための設計に役立つ。また、この結果は、車体周囲の滞留空気量を低減させるための設計に役立つ。

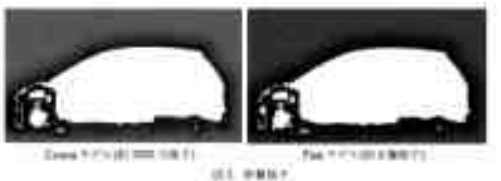
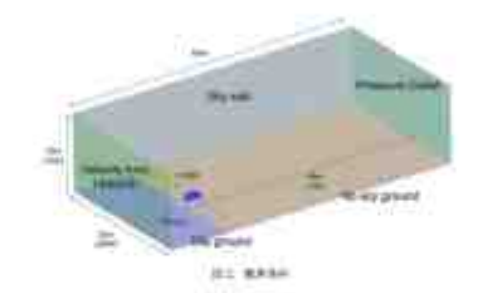
表1. 対象車両

車種	軽自動車
メーカー	トヨタ自動車
型式	トヨタ自動車
エンジン	トヨタ自動車
駆動方式	トヨタ自動車
備考	軽自動車



成果公開
課題は、
英語を併記

成果公開課題の利用報告書の例(3/5)



本研究では、車体周囲の滞留空気量を低減させることを目的として、車体周囲の滞留空気量をシミュレーションによって解析し、車体周囲の滞留空気量を低減させることを目的とする。

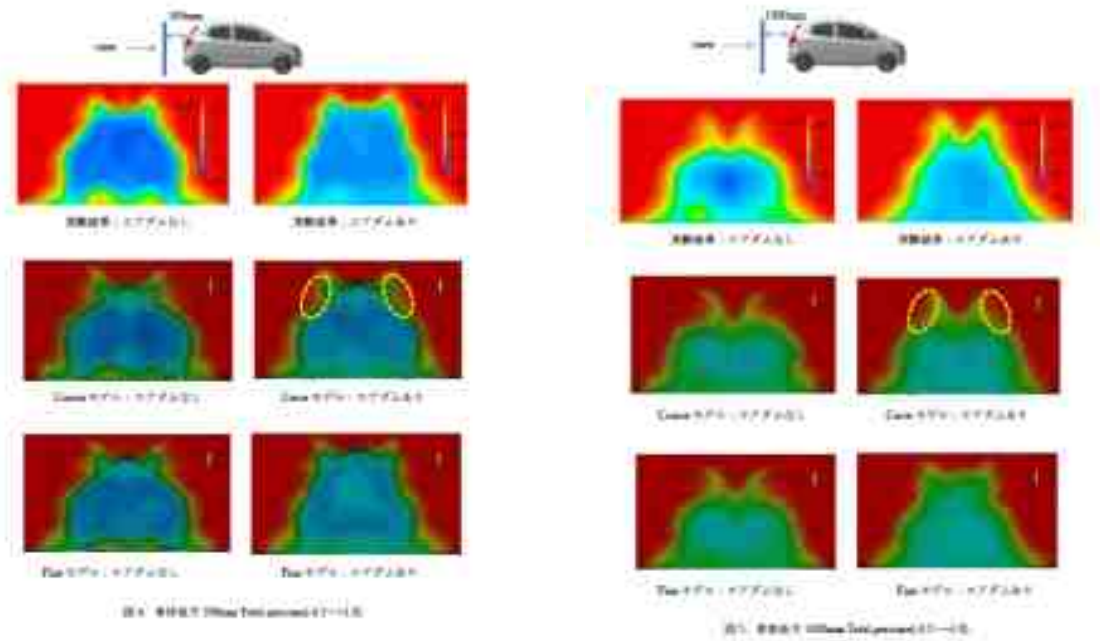
表2. 評価結果

項目	従来の風洞試験	本研究	評価
精度	低	高	向上
コスト	高	低	削減
柔軟性	低	高	向上

表3. 性能比較表

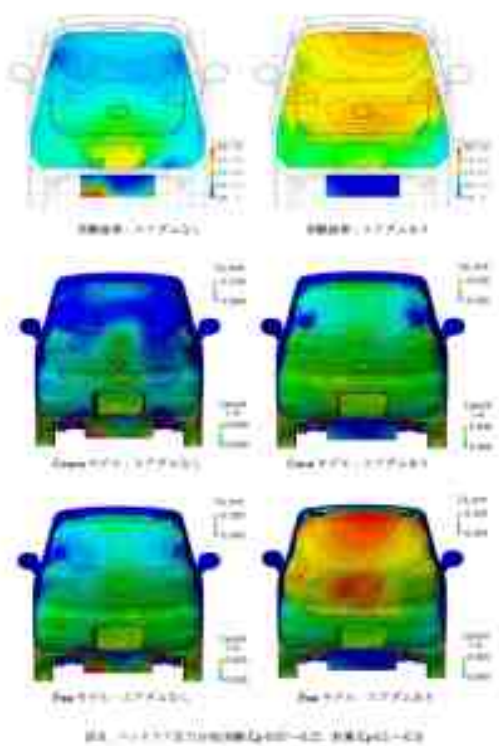
項目	従来の風洞試験	本研究	評価
精度	低	高	向上
コスト	高	低	削減
柔軟性	低	高	向上

成果公開課題の利用報告書の例(4/5)



27

成果公開課題の利用報告書の例(5/5)



6. ホットスポットの解析
 CFD解析を用いて、自動車などの車体外部の圧力負荷(ホットスポット)を解析し、その解析結果に基づいて車体構造を最適化する。車体外部の圧力負荷は、車体外部の空気流動を解析することで解析が可能である。解析結果に基づいて車体構造を最適化することで、車体の強度を向上させることができる。また、解析結果に基づいて車体構造を最適化することで、車体の重量を削減することができる。解析結果に基づいて車体構造を最適化することで、車体の燃費を向上させることができる。解析結果に基づいて車体構造を最適化することで、車体の騒音を低減させることができる。

参考文献
 [1] Toyota Motor Sales, U.S.A., Inc. (2016). Toyota Camry (2016-2017).

28

成果非公開課題の利用報告書書式(1/2)

表紙記入要領	
・事務局記入欄以外の各項目について、もれなくご記入願います。 ・(*)の項目：非公開課題のため公開はされません。	
HPCIシステム利用研究課題 利用報告書 HPCI User Report	
課題番号	
課題名(*)	
公開用課題名	
課題代表者	氏名
	所属機関
	所属機関の国名
キーワード(*) [5-10語程度]	
利用ソフトウェア(*)	
利用枠	事務局記入欄
実施期間	事務局記入欄

成果非公開課題では、「公開用課題名」を併記

129

成果非公開課題の利用報告書書式(2/2)

<p>成果非公開課題の報告書には、必ず「公開用課題名」を併記してください。</p> <p style="text-align: center;">公開用課題名</p> <p>1. 研究の目的と意義 (5-10語程度)</p> <p>2. 研究の概要 (5-10語程度)</p> <p>3. 研究の成果 (5-10語程度)</p> <p>4. 今後の課題</p>	<p>4. 並列計算の方法と効果 (性能)</p> <p>5. 研究成果 (特に「京」の課題の場合は、「京」でこそ出せた成果を明記)</p> <p>6. まとめと今後の課題</p> <p>参考文献 (本報告書をまとめる上での参考文献であり、網羅的な成果発表リストである必要はありません。当該課題に係る成果発表の業績は、本報告書の提出と同時に成果発表データベースにもれなく登録して下さい)</p> <p>[1] I. Kei and J. Kobe, Phys. Rev. Lett. 109, 12456 (2012). [2] 京一郎、神戸二郎、日本物理学会誌、66, 100-108 (2011). [3] I. Kei and J. Kobe, Phys. Rev. Lett. 55, 200-203 (2000).</p> <p style="text-align: center;">成果発表記入要領</p> <ul style="list-style-type: none"> ・図表読み込み、原則としてA4版2頁以上+参考文献、最大10頁以内 ・文字10.5ポイント、MS明朝、Times New Roman(英語部分) ・用紙の余白は各25mm ・容量は5MB程度以下
---	--

公開中の情報の一例 (参考)

課題終了後に課題情報を公開 (公開情報：課題番号・公開用課題名・課題代表者・所属機関名・国名・配分ノード時間数・課題実施機関、公開場所：<http://www.hpci-office.jp/pages/adoption>)

公開中の課題「京」(京大東研) (資料利用) (実施機関一覧)

課題番号	公開用課題名	課題代表者	所属機関	国名	配分ノード時間数	実施機関
2012-001	京大東研	京大東研	京大東研	日本	10000	京大東研
2012-002	京大東研	京大東研	京大東研	日本	10000	京大東研

130

成果公開の促進

131

レビューを伴う成果公開の促進

成果公開（課題実施終了後3年以内）

- 以下のいずれかの方法による*1
 - a) 課題番号が明記されている査読付き論文（査読付きプロシーディングス、博士学位論文を含む）
 - b) HPCI利用研究成果集（登録機関発行の電子ジャーナル）
 - c) 企業の公開技術報告書（産業利用のみ）
 - d) 特許（特許権の取得まで）
- 成果の認定・審査は、課題審査委員会のもとで行われる。*2
 - ▶ a), c), d)については認定のみ
 - ▶ b)については投稿された原稿の審査（査読）が課題審査委員会のもとに設置されるHPCI利用研究成果集編集局によって行われる。
 - ▶ HPCI利用研究成果集
 - ・ 学術研究成果／産業利用成果の2セクションからなる。
 - ・ 原則4ページ以上6ページ以内（図、表を含む）（項目立ては利用報告書と同様）
 - ・ 日本語／英語のいずれでも可とする。
 - ・ 一利用課題につき、一論文とする。
 - ・ 課題審査委員会の承認を受けた原稿は、原著論文として公開される。
 - ・ 提出方法；オンライン投稿システム(平成26年12月から運用開始)
 - ▶ 企業の公開技術報告書で公開する場合は、公開技術報告書としての認定を行う。(初回のみ)

成果公開の申告

- ▶ 課題実施終了後 60日以内
- ▶ 課題実施終了直後に、課題代表者にa)～d)のどの方法で成果を公開するかを申告を依頼する。
- ▶ 成果公開の期限（3年以内）の延期（最長1年）を申請することが出来る。

*1 「特定高速電子計算機施設等の利用促進業務における情報管理に関する基本的考え方」

*2 「HPCIシステム利用研究課題実施終了後の成果の認定・審査に関する基本的考え方」

132

成果公開の認定数

- 「京」利用に係る各終了年度別の認定課題数と成果公開対象課題数に対する割合（第8回課題審査委員会（平成28年1月25日）時点）

- 平成24年度終了課題：31課題（94%）
- 平成25年度終了課題：71課題（70%）
- 平成26年度終了課題：42課題（48%）

成果公開の認定実績

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	平成24年度	2	0
	平成25年度	77	48
	平成26年度	63	21
HPCI戦略プログラム	平成24年度	31	31
	平成25年度	25	23
	平成26年度	25	21
総計		223	144

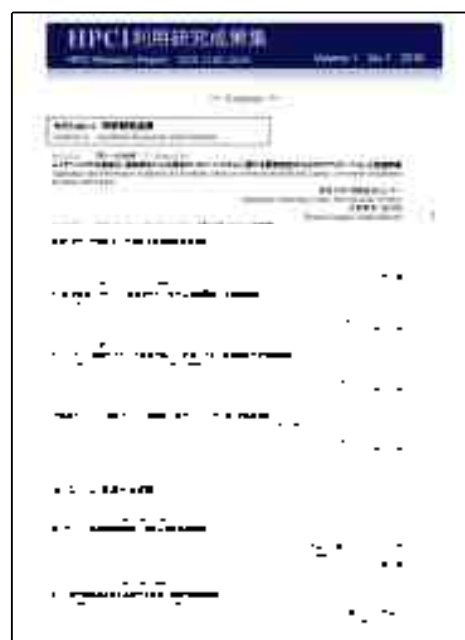
133

HPCI利用研究成果集(電子ジャーナル)の発行

- 一般の査読付き論文になりがたい課題の成果を論文化するため、登録機関が査読付き電子ジャーナルの発行を行っている。
 - 挑戦的な計算や何らかの理由で計算が不成功に終わった場合でも、その原因を詳細に記述することにより論文にすることが出来、成果公開の促進とともに他の研究者の有益な情報となる。
- 最初の掲載論文の公開を平成27年9月9日から開始
- 平成28年3月31日に全7編を掲載した第1巻No.1を発行（右図）
- 同年6月30日にNo.2の早期公開として新たに2編を公開
- 公開論文の全ダウンロード数は369回に達している。（平成28年7月13日時点）
- 上記の内ダウンロード数トップの論文は188回



<http://www.hpci-office.jp/annex/resrep/>



134

HPCI成果発表データベース(DB)の公開

● HPCI成果発表DB

- HPCI利用研究課題に係るあらゆる成果発表情報が一元的に集積。
- HPCIポータルサイトより閲覧・検索可。
- 成果発表情報の登録はHPCI課題の利用者単位で随時Web入力可。



このようなハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラに係る一元的な成果発表データベースは米国、欧州には例を見ない。

● 登録データ

- 登録成果件数：7,023件(H28.7.13現在)
うち、査読付論文数1,470件
「京」利用成果としての発表登録件数：3,881件(査読付論文440件)
- HPCI利用成果に係る受賞実績を公開
ゴードン・ベル賞の2件を含め登録件数：82件

● アクセス数：7,686回(H27.1.1～H28.7.13)



検索結果画面

論文(査読付き)、論文(査読なし)、国際会議・シンポジウム、国内会議・シンポジウム、研究会等、一般向講演会・セミナー等、新聞・TV・Web配信・雑誌・広報誌等、書籍、プログラム・データベース公開に加え、特許出願・取得、受賞の実績の登録が随時出来るようになっている。

<https://www.hpci-office.jp/hpcidatabase/publications/search.html>

135

利用者アンケート結果

アンケート実施概要

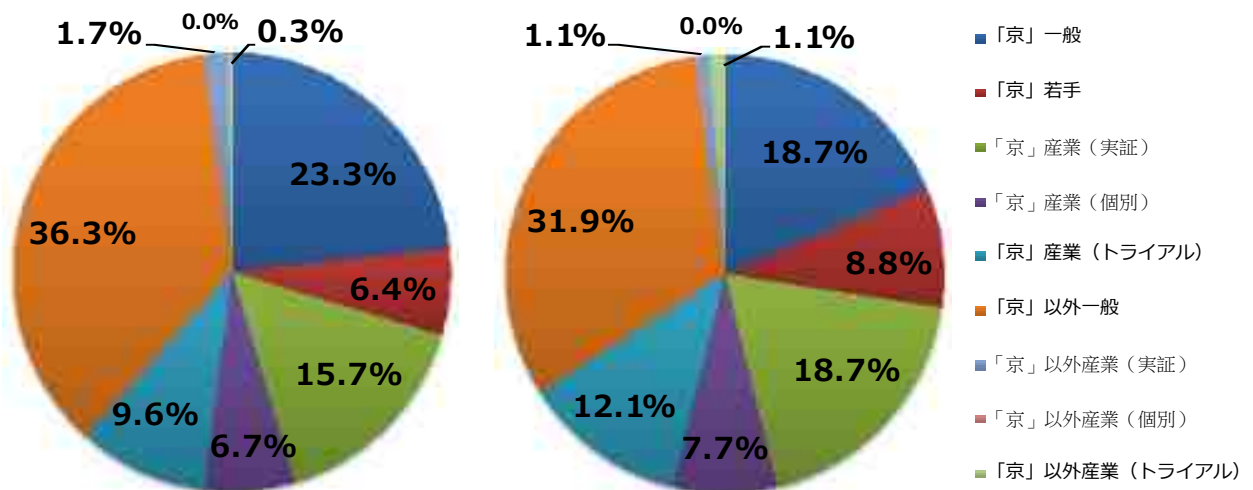
- 実施主体：
 - ▶ 一般財団法人高度情報科学技術研究機構(RIST)
- 実施期間：平成27年12月1日～平成28年1月21日
- 調査対象：
 - ▶ 平成26年度末までに終了した一般利用枠課題代表者235名
 - ▶ (外国語を母語とする方の単独の課題(1名)は対象外としました。)
- 調査目的：
 - ▶ 登録機関・HPCI運用事務局として、「今後の利用者選定・利用者支援業務およびHPCI運営の改善」のために、利用者視点での選定・利用支援・HPCI運営の現状を調査します。
- 調査方法：
 - ▶ 平成27年12月1日、電子メールによりアンケート様式を発信し、回答入力と返信を依頼しました。(希望者には印刷したアンケート冊子体を郵送しました。)
- 調査内容：
 - ▶ 利用者の計算機環境
 - ▶ 参加課題・課題募集について
 - ▶ 課題の実施・実施後の報告等について
 - ▶ 産業利用課題参加者の計算機利活用状況と課題実施状況について
- 有効回答数：72件*1 (送信235件、回収率30.6%)

*1 うち、産業利用課題参加者分26件

137

アンケート回答者の課題分布

- 本アンケート回答者の採択課題の分布は、アンケート対象課題全体(H24～H26年度終了課題)の分布と良く対応しており、回答者の集団が利用者の全体像を適切に表していると考えられます。



全体の課題分布 (参考) アンケート回答者の課題分布

138

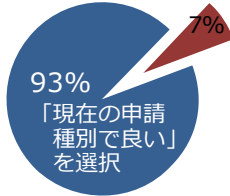
1. 公募制度と利用について(1)

公募制度について

- ・申請種別については、ほとんどの方が現状の制度*1で良いとのご意見でした。
- ・募集回数・時期・スケジュールに関して、7割以上の方が適切との評価でした。ただし、募集回数については、回数増加へのご希望が多いことがわかりました。

*1「京」利用課題の申請種別（一般課題、若手人材育成利用課題、産業利用課題（実証利用、個別利用、トライアル・ユース））

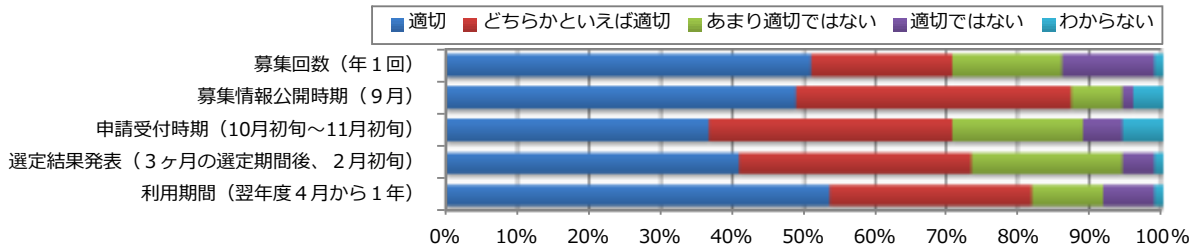
Q. 「京」利用課題の申請種別に関してご意見はありますか？



新たな枠の提案・希望*2 (7%)
小規模な追加計算の枠、ソフトウェア開発向け枠、
科研費の萌芽のような申請枠、一般課題のトライアル・ユース

*2 現在、資源を使い切っても低優先度でジョブ投入可(H27下期より)であり、一般課題のトライアル・ユース、重点的利用枠に萌芽的課題の枠が新設されており、これらの少数意見も実現済

Q. 定期課題募集の回数・時期・スケジュールに関して



「あまり適切ではない」または「適切ではない」の主な選択理由：

- ・募集回数の増加（2回等）の希望（21%）
- ・複数年の利用期間の要望（8%）
- ・受付期間の変更希望（科研費申請時期の回避・メ切を1ヶ月後へ等）（4%）
- ・ほか、選定結果発表（4%）や、募集情報公開（3%）の前倒しの要望

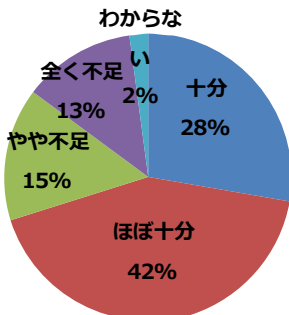
139

1. 公募制度と利用について(2)

資源の利用と待ち時間について（「京」のみ）*1

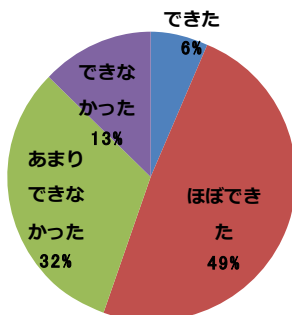
- ・「京」に関する、配分資源量、計画的な資源利用、ジョブ待ち時間、ジョブ実行時間の上限について、6～7割の方は満足されていました。
- ・計画的な資源利用について、「（あまり）できなかった」と回答された方は、プログラム・データの準備やジョブ待ち時間等を理由として挙げておられました。
- ・大規模計算の待ち時間が長いとの意見もありました。

Q. 配分資源量は、研究課題を遂行するのに十分でしたか？



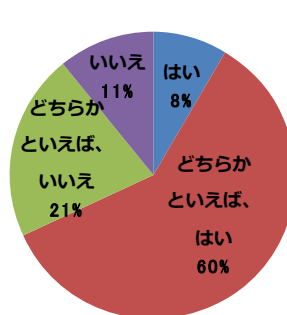
十分でない主な理由
・割り当て資源の削減(17%)
・トライアル・ユース、または、条件付き採択の課題だった(4%)

Q. 年間を通して、計画的に資源の利用ができましたか？



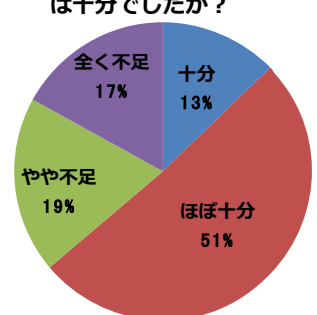
出来なかった主な理由
・プログラム・データの準備に時間がかかった(23%)
・混雑・長い待ち時間のため(13%)

Q. ジョブの待ち時間は合理的範囲内でしたか？



合理的範囲でない主な理由
・大規模・長時間ジョブの待ち時間が長い(13%)
・期末・年度末の混雑(6%)

Q. ジョブの実行時間の上限（「京」の場合24時間）は十分でしたか？



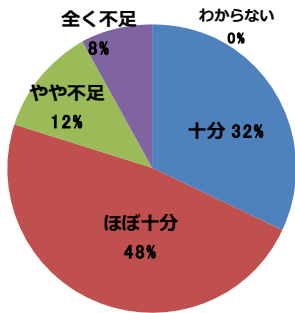
妥当な上限時間（主な意見）
・48時間(15%)
・~72時間=3日(13%)
・~5日(4%)

*1 「京」の利用者47名の意見を抽出しました。

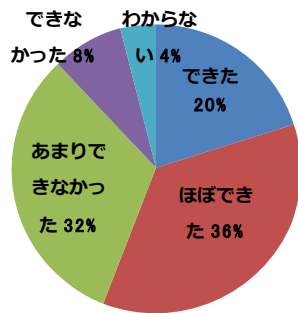
1. 公募制度と利用について(3) 資源の利用と待ち時間について（「京」以外）*1

- 「京」以外のHPCI資源に関する、配分資源量、ジョブ待ち時間、ジョブ実行時間の上限について、8～9割と多くの方が満足されています。
- 計画的な資源利用については、「京」利用者と同様6割程度の方が満足されています。
- 計画的な資源利用について「（あまり）できなかった」理由として、プログラム準備遅れをはじめとするユーザー側の理由を挙げる方が多く見られました。

Q.配分資源量は、研究課題を遂行するのに十分でしたか？

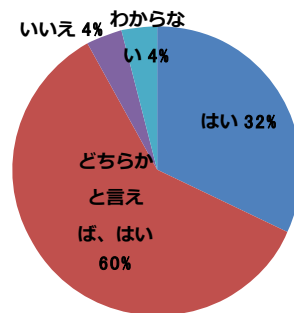


Q.年間を通して、計画的に資源の利用ができましたか？

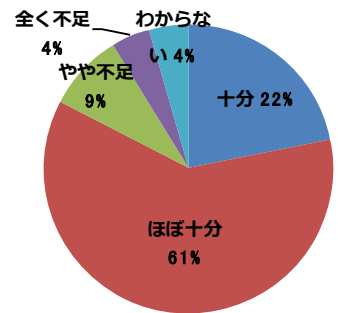


- 出来なかった主な理由
- ・プログラム準備遅れ等の利用者側の理由(16%)
 - ・利用可能期間の短さ(12%)
 - ・ジョブ投入しずらさ(12%)

Q.ジョブの待ち時間は合理的範囲内でしたか？



Q.ジョブの実行時間の上限は十分でしたか？



- 妥当な上限時間（主な意見）
- ・1週間以上

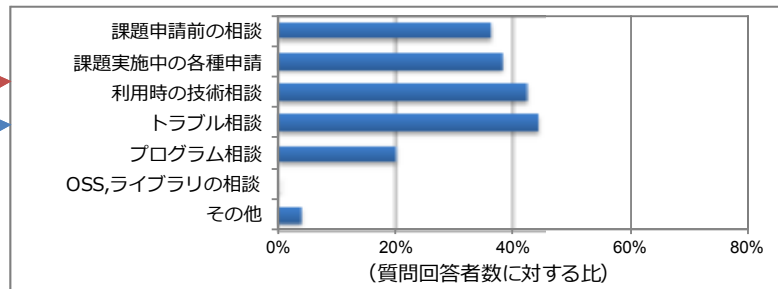
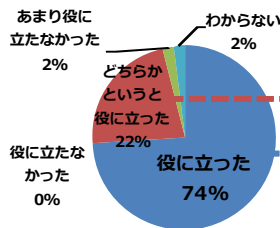
*1 「京」課題代表者以外の利用者25名の意見を抽出しました。

2. ユーザ支援と広報について(1) 一元的相談窓口(ヘルプデスク)と高度化支援

一元的相談窓口(ヘルプデスク)

- ヘルプデスクは97%の方に認知され、75%の方が利用されています。（図省略）
- 課題申請前の相談を含めて幅広い状況で役に立っていると評価いただいています。

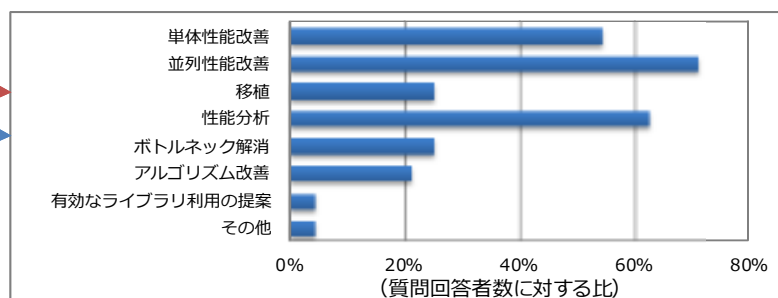
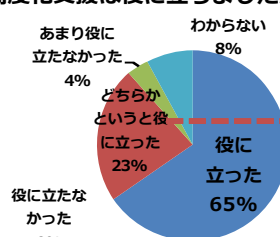
Q.ヘルプデスク役に立ちましたか？（利用した方）



高度化支援

- 高度化支援は83%の方に認知され、35%の方が利用されています。（図省略）
- 特に並列性能や単体性能の改善、性能分析に役立ったと評価いただいています。

Q.高度化支援は役に立ちましたか？（利用した方）

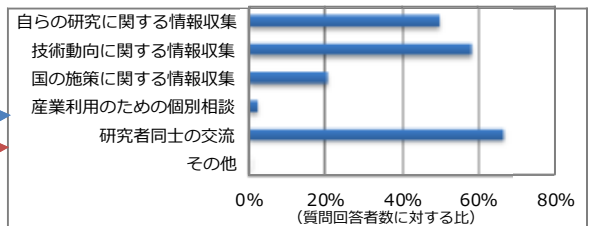
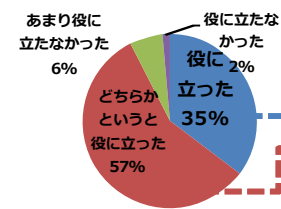


2. ユーザ支援と広報について(2) 成果報告会・利用報告書WEB・成果発表DB

成果報告会

- ・90%の方が成果報告会に参加されました。(図略)
- ・研究者同士の交流、技術動向・自らの研究に関する情報収集に役立ったと評価いただいています。

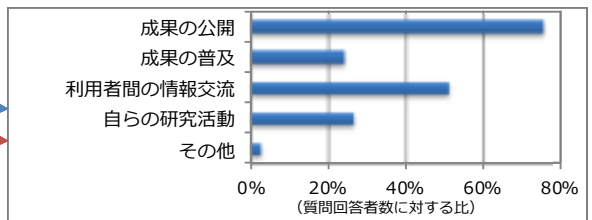
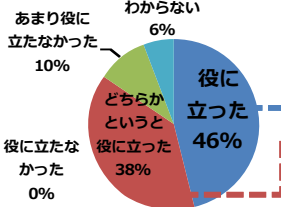
Q.成果報告会は、役に立ちましたか？(参加した方)



利用報告書のWEBページ

- ・72%の方が利用報告書のWEBページにアクセスされました。(図略)
- ・成果の公開、利用者間の情報交流に役立ったと評価いただいています。

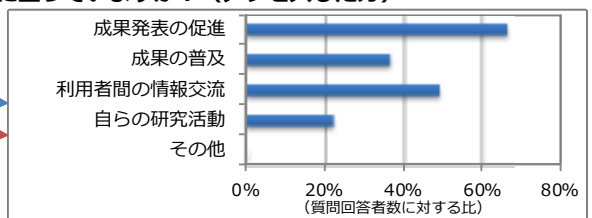
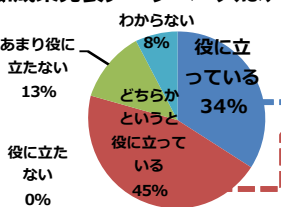
Q.利用報告書のWEBページは、役に立ちましたか？(アクセスした方)



成果発表データベース(DB)

- ・73%の方が成果発表DBにアクセスされました。(図略)
- ・成果発表の促進、利用者間の情報交流、成果の普及に役立っていると評価いただいています。

Q.成果発表データベースは、役に立っていますか？(アクセスした方)

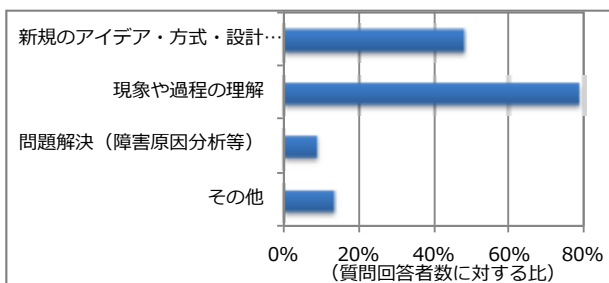


143

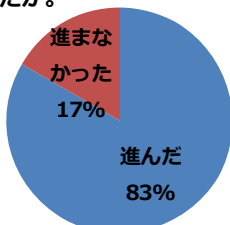
3. 産業界における利用状況について(1) 計算の目的、応募した理由、成果について

- ・計算の目的として、多くが「現象や過程の理解」を選択し、研究開発で重要な本質の理解を計算目的とされた方が多いことがわかりました。
- ・実証・個別利用の応募理由として、多くの方が、京の特徴を生かした大規模計算をあげています。
- ・トライアル・ユース課題利用者の多くが実証利用・個別利用に進んだと回答されており、トライアルユース制度が「京」を中核とするHPCIの産業利用への普及に役立っていることを示しています。

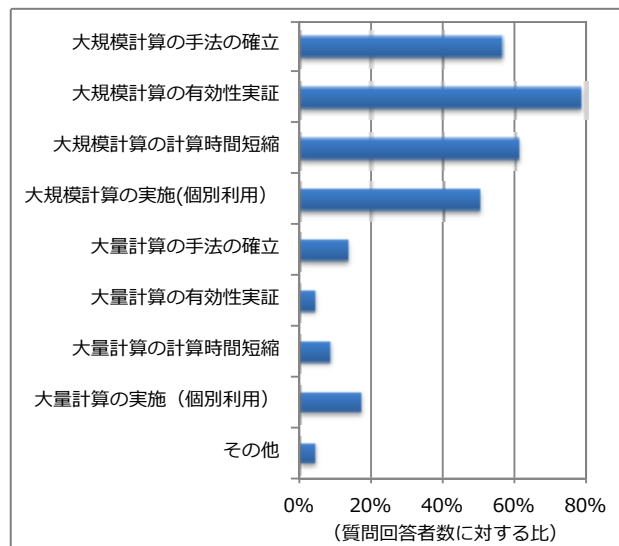
Q. 実証/個別利用での計算目的 (複数選択可)



Q. トライアル・ユース実施後に実証利用、個別利用に進まれましたか。



Q. 実証/個別利用に申し込まれた理由(複数選択可)

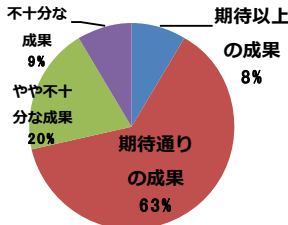


144

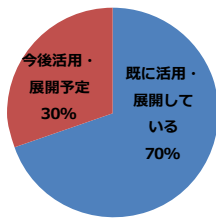
3. 産業界における利用状況について(2) 得られた成果とその活用・展開について

- 得られた成果について、7割以上が期待通り、期待以上と回答しており、「京」を中核とするHPCIの資源が有効に活用されていることがわかりました。
- 得られた成果の活用・展開については、予定を含めると全ての方が活用・展開していると回答されており、京の利用成果が早い段階で活用されている様子が見られました。
- 成果の社内での活用・展開内容としては、「シミュレーション技術・利用技術の開発・整備、活用の方向性見極め」に次いで「研究開発業務、製品開発への活用」を挙げる方が多く、将来の計算環境・技術の検討・見極め等だけでなく、業務への活用も予定されている方も多いことがわかりました。

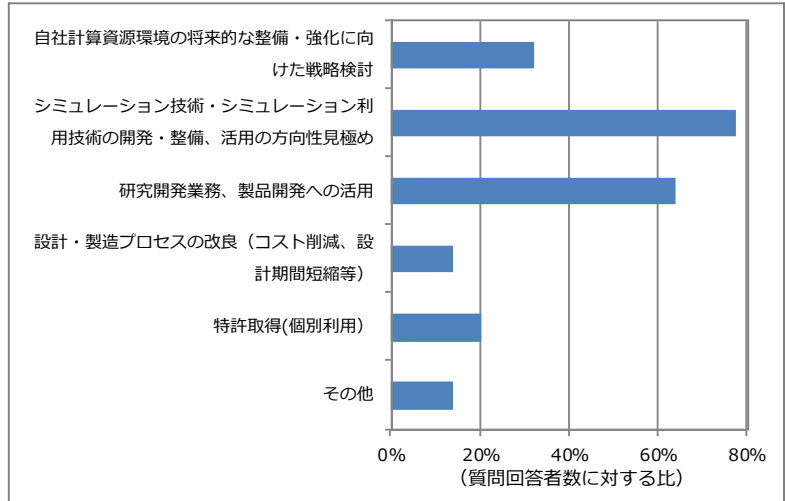
Q. 期待通りの成果を達成できましたか。
(対象：トライアル、実証、個別利用)



Q. 得られた成果を自社で、いつ、活用・展開する予定ですか。



Q. 得られた成果を自社で、どのように、活用・展開する予定ですか。
(複数選択可)

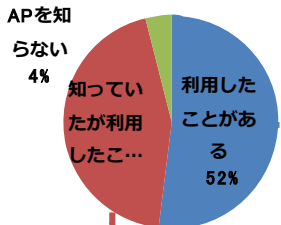


145

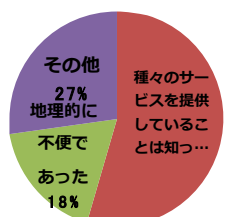
3. 産業界における利用状況について(3) アクセスポイントについて

- HPCIの産業利用拠点であるHPCIアクセスポイント(AP)について、96%の方に認知され、52%の方に利用頂いております。不利用の理由は、その55%は利用する必要がなかったからとし、18%は地理的な不便さを挙げています。
- 一方、利用された方については、すべての方に「役に立った」と評価頂いております。主な用途は、応募前相談・利用相談であり、続いて、大容量データのダウンロードに利用頂いております。また、AP支援員の対応もすべての方が「良かった」と評価頂いております。
- 「必要があれば」も含め、9割以上の方が今後も利用したいと回答頂きました。

Q. アクセスポイント(AP)の利用経験

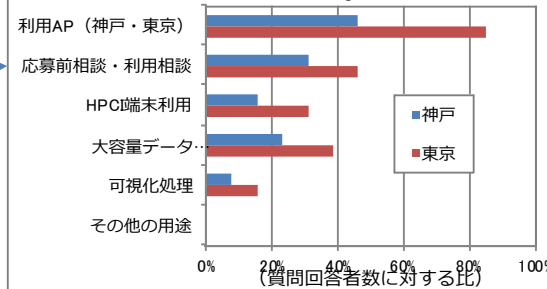


「知っているが利用したことない」(不利用)理由

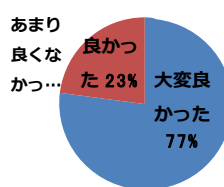


<利用したことがある方への質問>

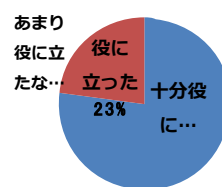
利用AP、及び、サービス・用途(複数選択)



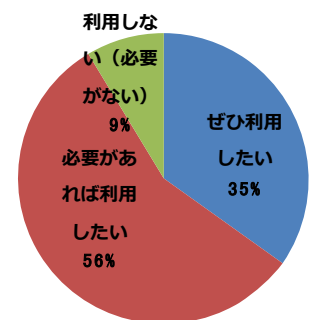
AP支援員の対応



APIは役に立ちましたか?



Q. 今後のアクセスポイントの利用についてお聞きます。



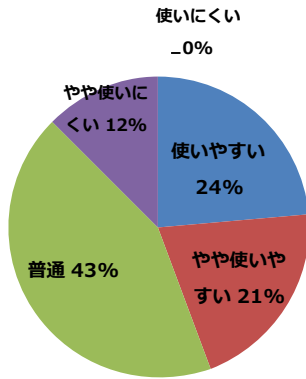
146

4. HPCIの共通環境について(1)

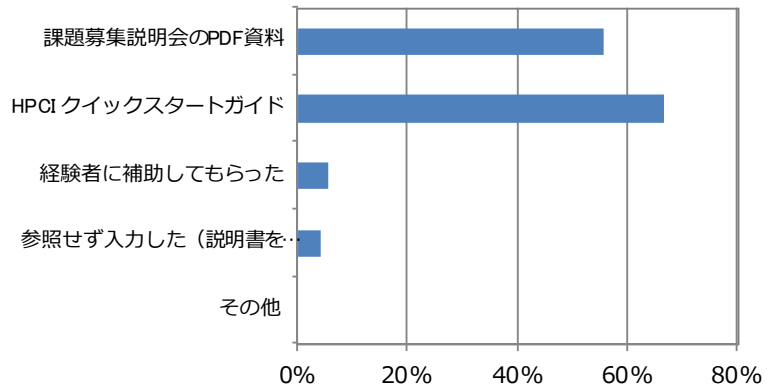
HPCI申請支援システムについて

- HPCI申請支援システムについて、12%の方が「やや使いにくい」と回答されていますが、「使いにくい」と回答された方はおられませんでした。申請提出時には、HPCIクイックスタートガイドのほか、課題募集説明会のPDF資料も多く参照して頂いております。

Q. HPCI申請支援システムの操作性



Q. HPCI申請支援システムで申請提出するにあたって、参照された説明書（複数選択）

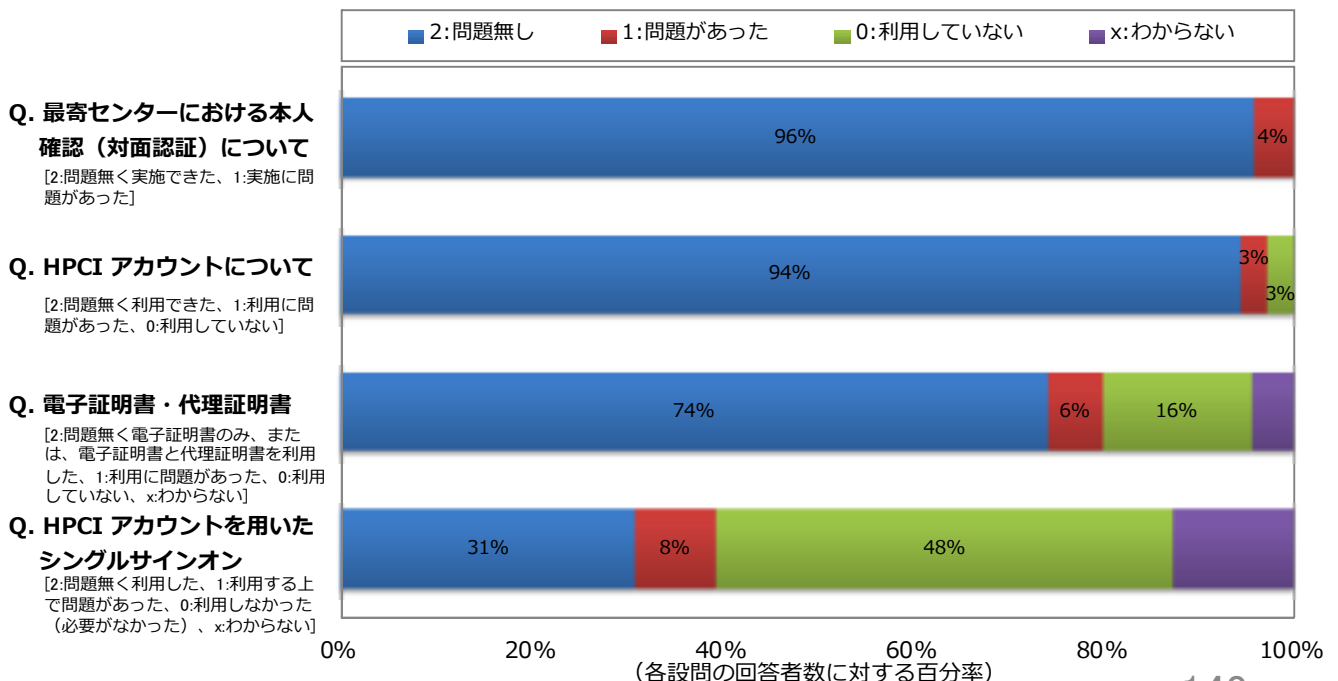


147

4. HPCIの共通環境について(2)

HPCIの認証基盤について

- HPCIの認証基盤に関して、本人確認（対面認証）・HPCIアカウント利用・電子証明書については、利用した人のほとんどが問題無いと回答いただきました。
- シングルサインオンについても、利用された方の多くが問題がなく利用できたと回答されていますが、環境構築の手間の多さを問題点として挙げた方もおられました。

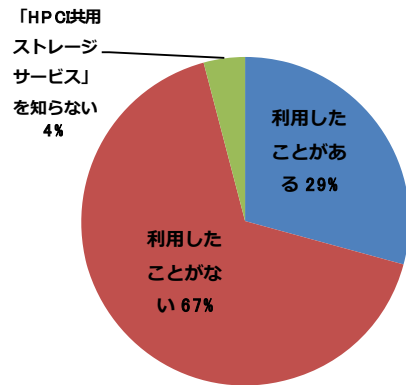


148

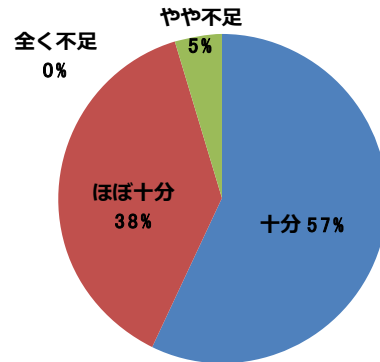
HPCI共用ストレージについて

- HPCI共用ストレージについて、3割の方が利用され、利用者の9割以上から十分な配分資源量だったと回答頂いております。

Q.42 HPCI共用ストレージサービスを利用したことがありますか？



Q.43 共用ストレージの配分資源量は、研究課題を遂行するのに十分でしたか？
(HPCI共用ストレージサービス利用者向け質問)



その他

手続きの簡素化など利用者負担の軽減・ 利便性の向上への取組

- 選定に関する事項
 - ▶ 平成25年度の追加募集、成果専有の産業利用の随時募集、競争的資金等獲得課題の導入、産業利用に限定していたトライアル・ユースの一般課題への拡大を実施し、利用者の「京」を利用する上での利便性を改善。
 - ▶ 競争的資金や国のプロジェクトで採択された課題については、審査を簡素化した「京」の競争的資金等獲得課題（有償、成果公開）として、平成27年度より随時募集を開始し、成果の創出を加速するための方策を実施。
 - ▶ 平成27年度募集では、「京」産業利用（実証利用）課題の年間の要求資源量を拡大し、800万ノード時間まで申請可能なクラスを新設することにより、企業コンソーシアムからの要望に応えた。
 - ▶ 「京」一般課題においてHPC活用の裾野を広げる斬新なテーマへの挑戦を促すために、ソフトウェアの動作確認等を目的とした「京」一般課題（トライアル・ユース）を平成27年12月から随時募集として開始。
 - ▶ 課題申請書が記入しづらいとの指摘を受けて、利用者等になじみのある科研費の申請書の構成に準拠した申請書に改訂することで利用者の負担を軽減。
- 成果公開に関する事項
 - ▶ 利用者は課題終了後60日以内に利用報告書の提出、3年以内に査読付き論文等による成果公開の義務を有する。研究者の負担軽減のために以下の方策をとっている。
 - ▶ 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論文化するため、登録機関が査読付き電子ジャーナルの発行を行っている。ここでは挑戦的な計算や何らかの理由で計算が不成功に終わった場合でも、その原因を詳細に記述することにより論文にすることが出来る。
 - ▶ 利用報告書様式の改良：利用報告書の構成は平成26年度時点では課題情報、成果概要、要約の3部構成で且つそれぞれExcel、Word、PowerPointが用いられ利用者にとって煩雑であった。平成27年度からは表紙（簡略化した課題情報）、成果概要、要約の構成とし、且つWordファイルに統一し利用者の負担軽減を図った。
 - ▶ 成果発表データベース登録の負担軽減：研究者（課題代表者／課題参加者）以外の事務担当者でも拡張アクセス権を付与することにより成果発表情報の入力可能なシステムとしている。
 - ▶ 成果公開申告の単純化：課題実施終了後に課題代表者に依頼する成果公開の方法に関する申告について、従来より手間を軽減するWEB申告とするように現在準備を進めている（運用開始：平成28年4月20日）。