

参考資料

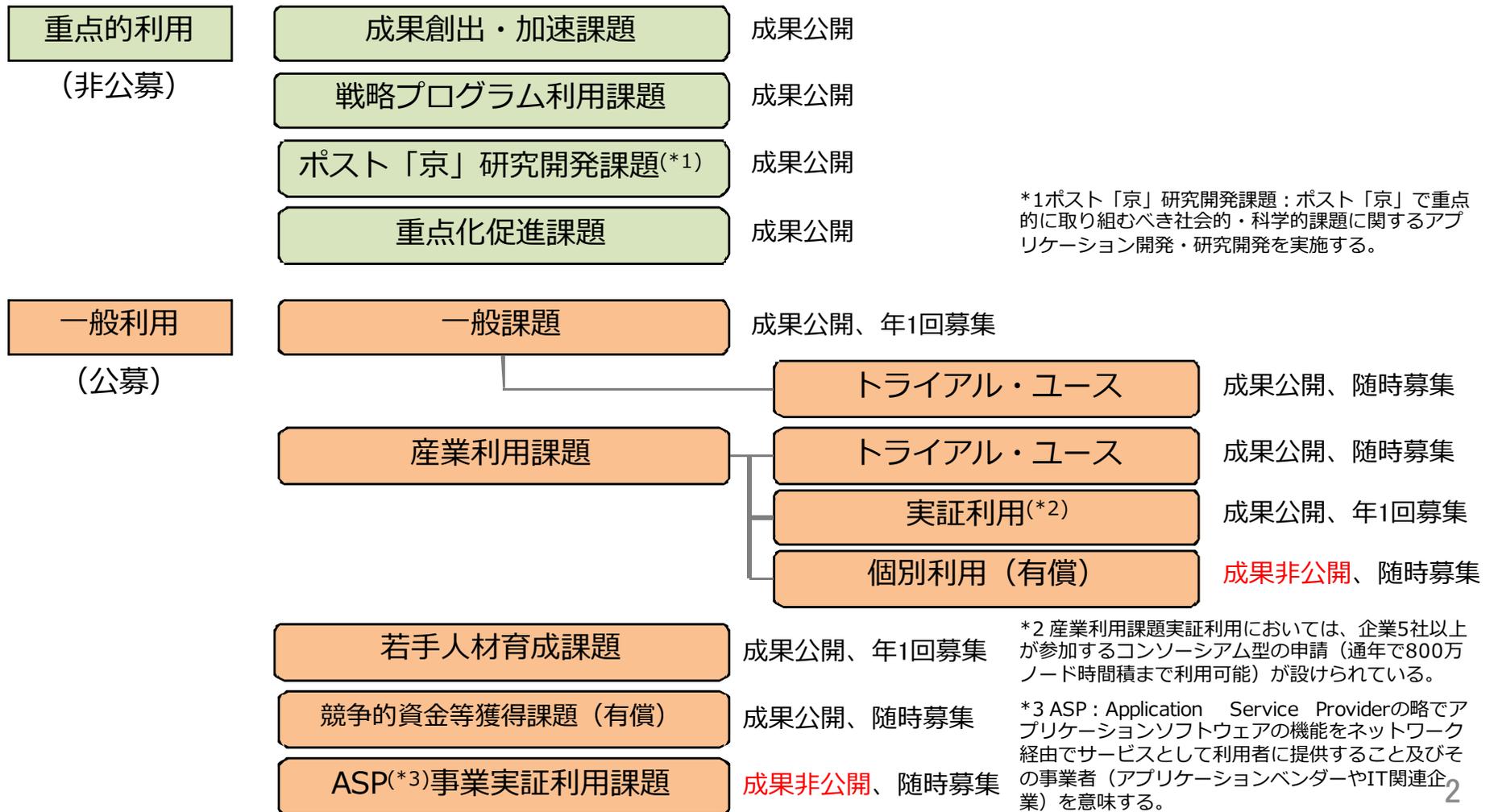
高度情報科学技術研究機構(RIST)





「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」の利用枠の種類

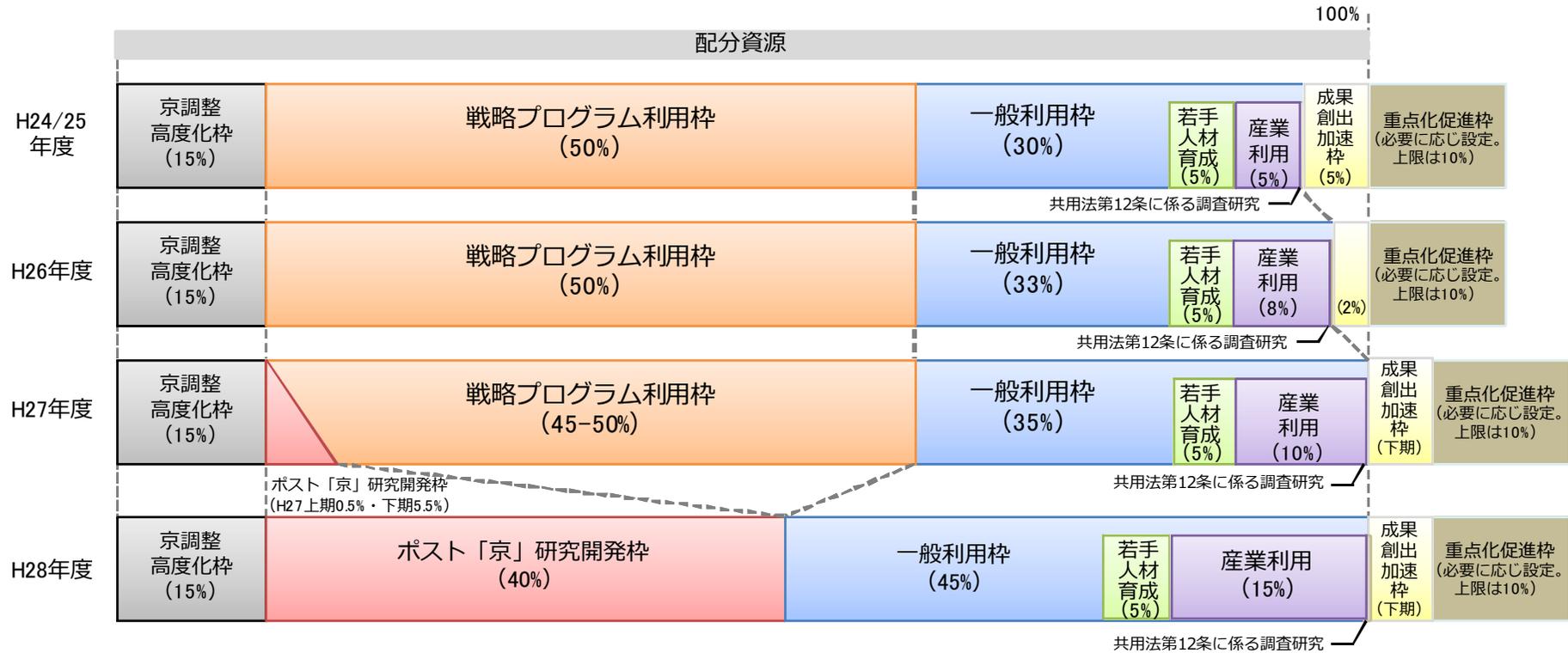
- 「京」の利用枠と配分方針

| 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） |



「京」の資源配分

● 「京」の資源配分の変遷





「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。



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」 | 一般利用 | 138 | 29 | 36 | 7 | 83 | 24 | 78 | 24 | 53 | 31 | 388 | 115 |
| | 若手人材育成利用 | 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 (*) | 一般利用 | 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」 | 一般利用 | 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

● 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



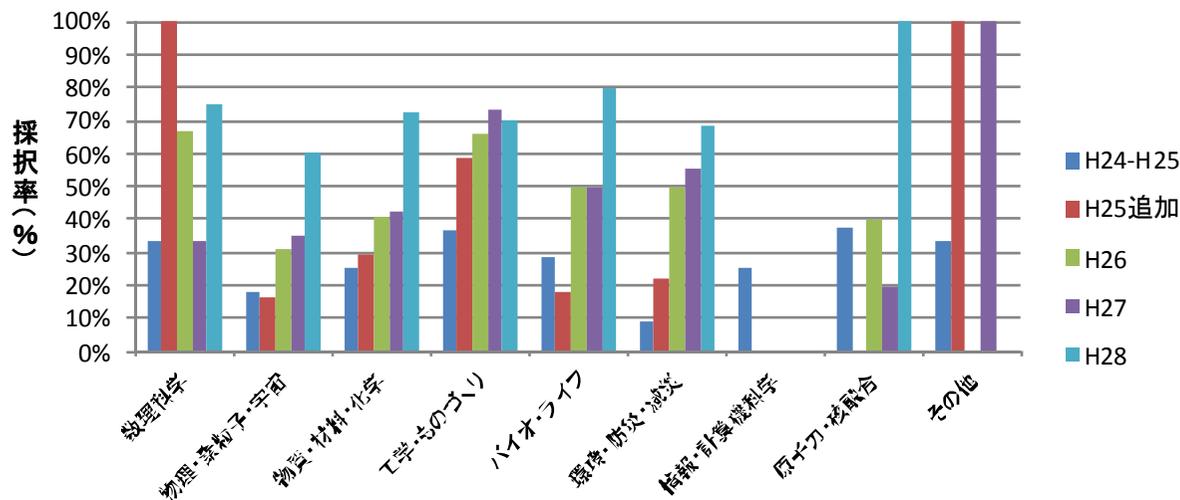
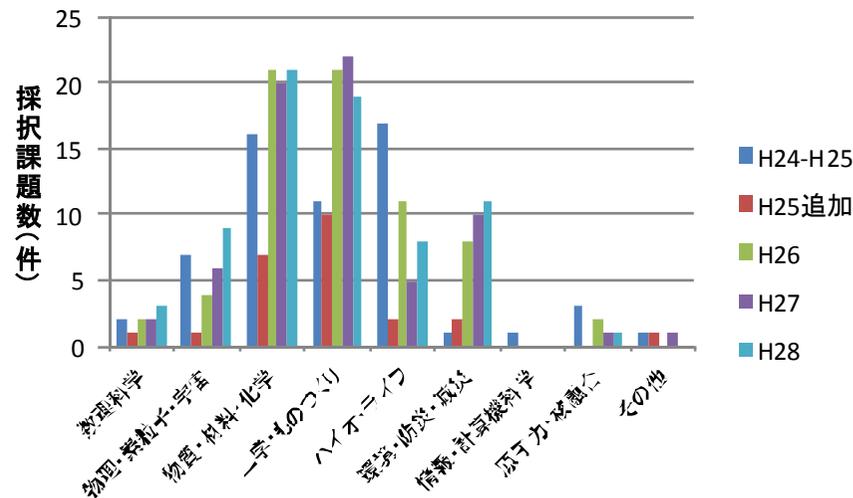
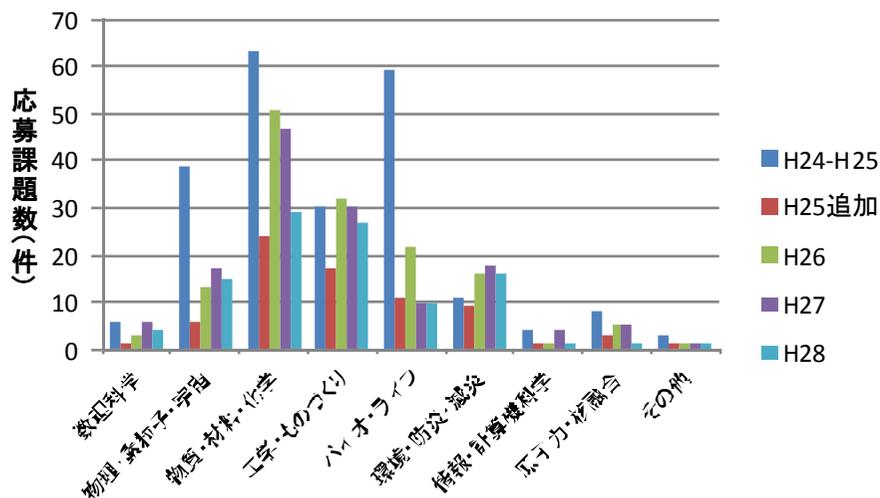
課題参加者数

- 「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末現在) | |
|------|-------------|-------|-----|-------|-----|-------|-----|-------------------|-----|
| | | 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 | |

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

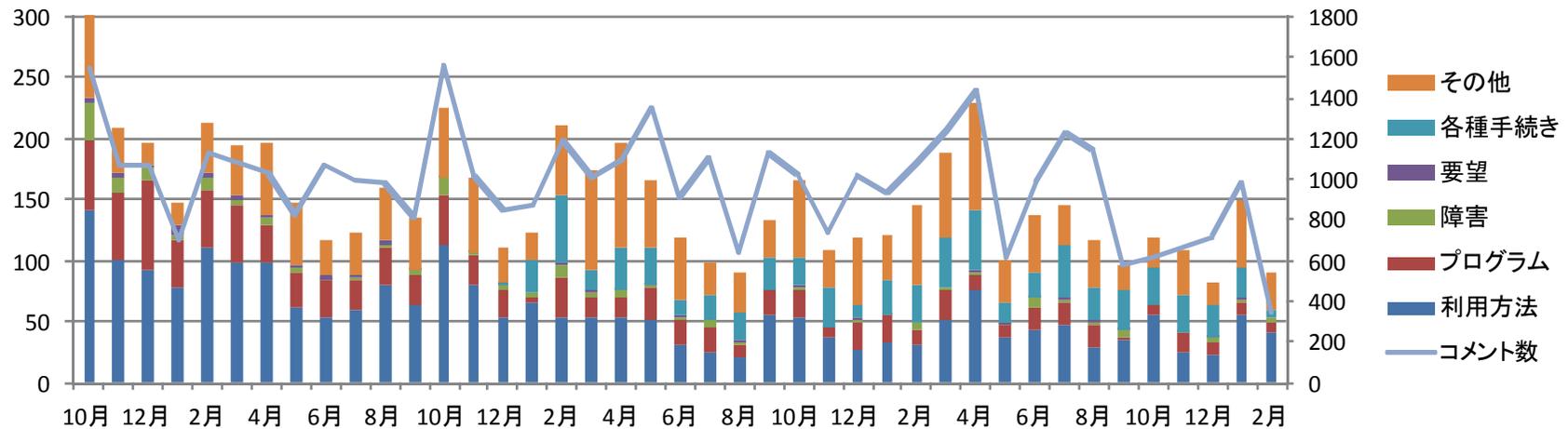




ヘルプデスクの利用相談件数

- 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)





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、フラーレン | | 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 |



分野別応募課題数とレビューア

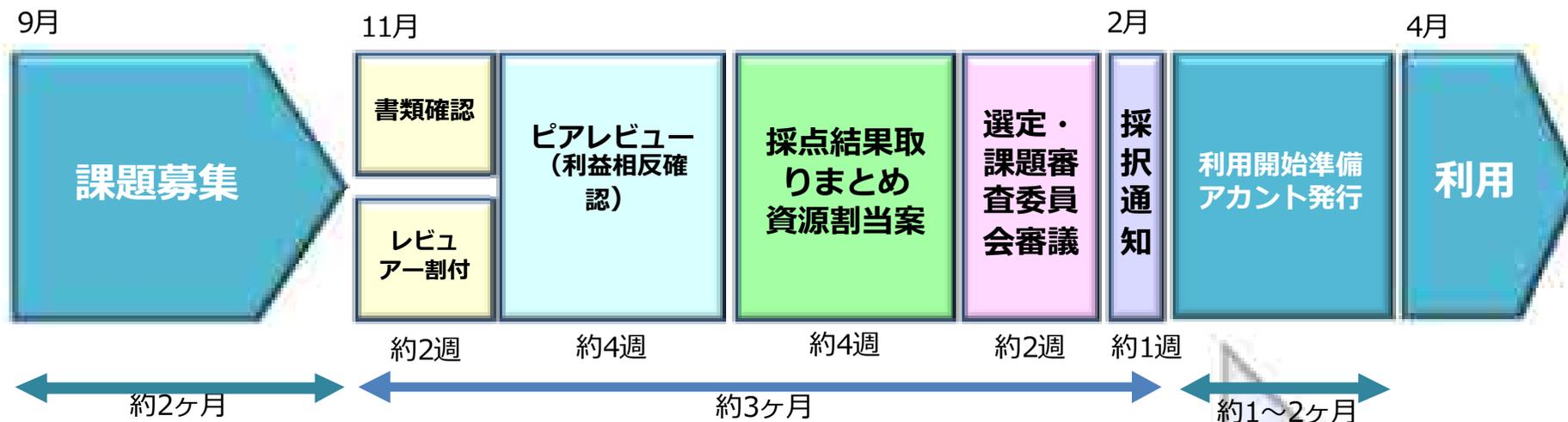
PRACEとHPCIの比較

- 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）
- レビューアの課題当たりの割り当て数は、PRACEが3、HPCIが4
- レビューア一人が審査する課題数は、PRACEが2、HPCIは約8

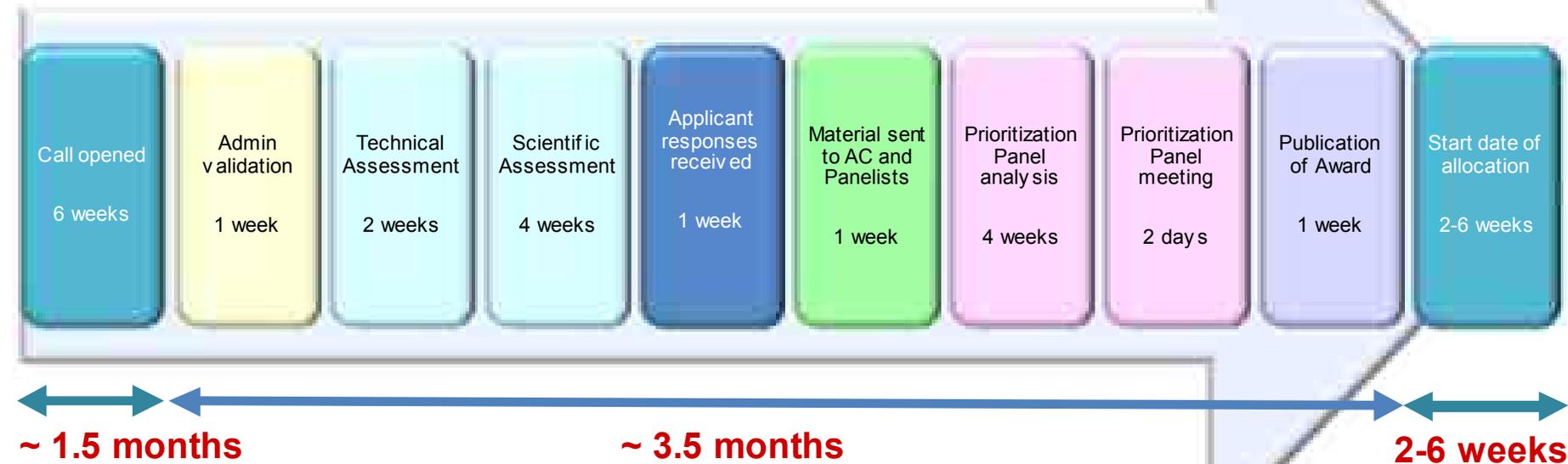
| PRACE | | | | | HPCI | | | | | | |
|--|-------------|------------------------|------------------------|-------------|-----------|--|----------------------------|------------|--------------|--------|--------------|
| Categories | # proposals | reviewers per proposal | proposals per reviewer | # reviewers | 分類 | 科研費の分科 | 課題数 | 課題当のレビューア数 | レビューア当の平均課題数 | レビューア数 | |
| 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 | | | 17 | 工学・ものづくり | 機械工学 I 機械工学 II | 50 | | | | |
| Universe Sciences | 22 | | | 33 | 物理・宇宙・素粒子 | 原子力・核融合 | 総合工学 I 総合工学 II 物理学 I | | | | 35 |
| Fundamental Constituents of Matter | | | | | | 物理学 II | | | | | |
| Chemical Sciences and Materials | 38 | | | 57 | 物質・材料・化学 | 物理学 III 物理学 IV 応用物理 I 応用物理 II 材料工学 プロセス・化学工学 ナノ・マイクロ科学 | 53 | | | | |
| Earth System Sciences | 8 | | | 12 | 環境・防災・減災 | 地球惑星科学 I 地球惑星科学 II | 30 | | | | |
| Math and Computer Sciences | | | | | | 数理科学 | | | | | 工本工学 計算科学 |
| 情報・計算機科学・その他 | | 情報学基礎 | | | | | | | | | |
| (全課題共通) | | | | | 計基盤 | 195 | 1 | | | | |
| 課題数 | 90 | | | レビューア数 | | 課題数 | 195 | | レビューア数 | 101 | |
| | | | | レビューア候補 | | | | | レビューア候補 | 132 | |

ピアレビュープロセスの比較

□ HPCI



□ PRACE





課題選定方式の比較

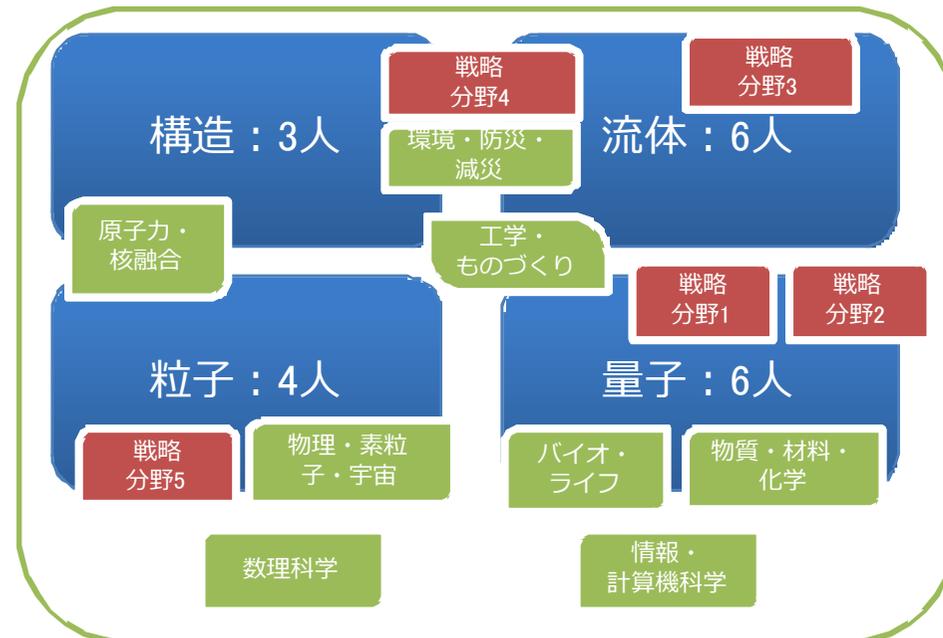
| | | PRACE | HPCI |
|-------|------------|---|--|
| 課題募集 | 年間頻度 | 2回（9月と3月）募集し、5か月後に選定結果発表 | 1回（9月募集開始、2月に選定結果発表） |
| | 課題実施期間 | 1年間（複数年もあり） | 1年間（戦略プログラムは5年継続） |
| | 年度を跨ぐ課題実施 | 有 | 有（随時募集課題） |
| 課題の評価 | プロセス | センターによる技術評価（2週間） ピアレビュー（科学的評価、4週間） | ピアレビュー（～4週間） |
| | 年間申請数 | 約100課題 * 2回 | 約200課題 |
| | 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 |



利用支援について

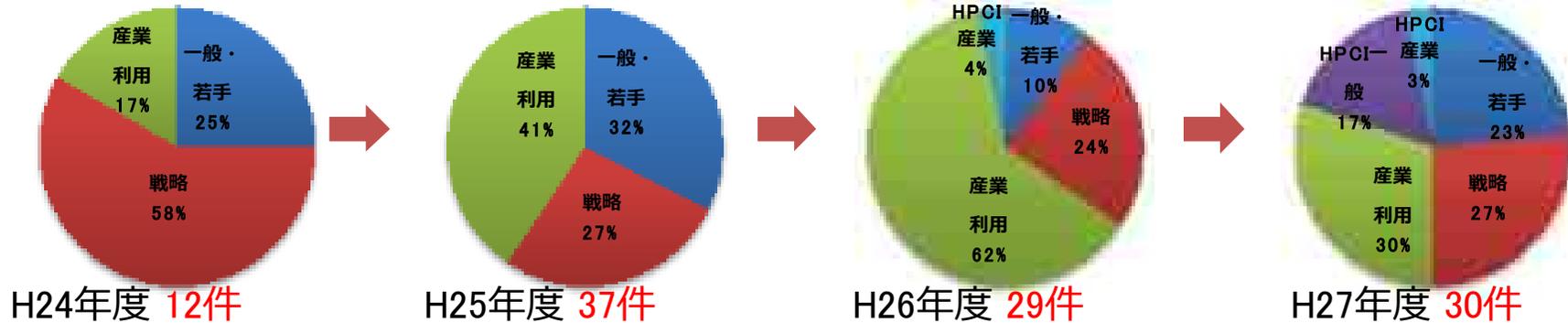
高度化支援

- 高度化支援の必要性
 - 計算機の大規模化が進むにつれ、既存のプログラムを移植しただけでは計算機資源の効率的な利用が困難
 - 計算機の特徴を踏まえ有効な最適化を適用するためには**高度な技術とノウハウ**が必要
 - 専門的知識・ノウハウを有した技術者による利用者プログラムの**高度化支援**によって計算機資源を有効活用
- 支援体制
 - 14名の研究実施相談者、5名程度の支援補助技術者
 - 支援依頼は定期募集、随時受け付け。現在まで原則全ての依頼に対し支援を実施
 - 構造、流体、量子、粒子の専門分野による4グループ体制で支援者の特性に配慮した対応を実施
- 効率的・効果的な支援
 - アカデミアへの支援と産業利用支援を一体的に行うことで、支援対象課題数の変動にも柔軟に対応した、効率的支援を実現
 - 一体的取り組みにより、戦略プログラムおよびアプリケーション(ISV/OSS)の情報を集約化
 - 集約された情報を利用支援体制の中で共有することで、効率的に高度化支援を実施
 - プログラムの移植、最適化技術等の情報を講習会の場で紹介するとともに、HP上にノウハウを公開
 - 「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
- 様々なプログラムへの対応
 - 戦略課題：独自開発コード
 - 産業利用課題：市販コード、OSS
- 支援内容
 - 性能評価と分析
 - 単体性能分析
 - ロードバランス分析
 - 大規模並列性能分析
 - ライブラリ評価
 - 性能改善
 - MPI並列性能の改善
 - スレッド並列性能の改善
 - ファイルI/Oの改善
 - 移植支援
 - 可視化支援



高度化支援の実績

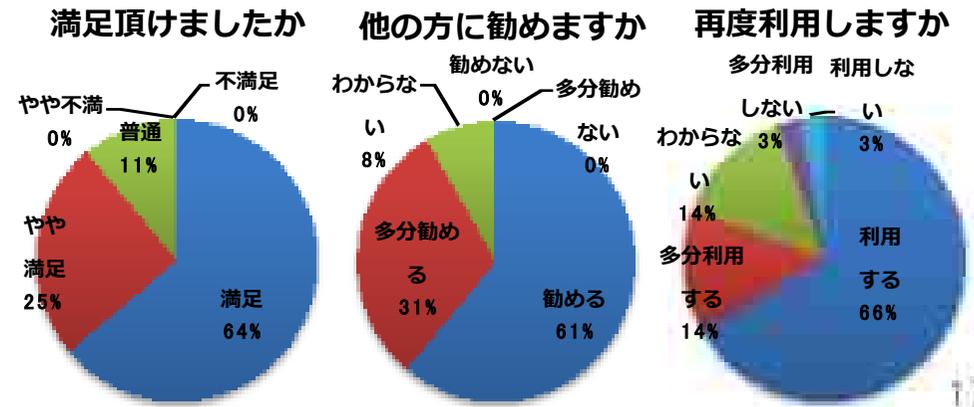
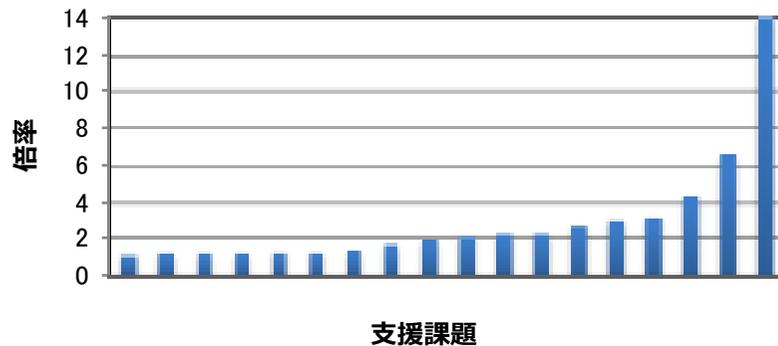
高度化支援件数は年間約30件を維持（HPCI含）



- 高速化を試みた支援において、平均2.9(中央値2.2)倍に高速化
 - 計算機資源の効率的活用寄予

- 支援後アンケート（回答数36）での満足度89%（満足、やや満足）

性能改善状況



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

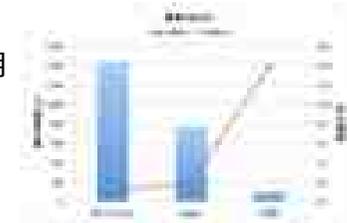
・ソフトウェアパイプラインの適用

・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



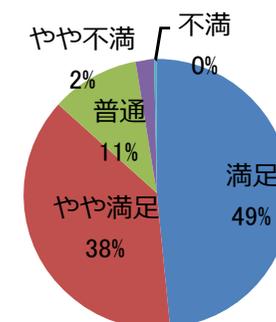
講習会実施実績

- 「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 |

満足度

（講習会后アンケートにて集計
回答数668件、期間H25.12.18～）



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 |

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++コンパイラの特徴を把握
 - ▶ 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



産業利用について

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



「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 耐磨耗(破壊)性能のうち、耐磨耗(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
-
- マイクロメートル (10⁻⁶m) サブマイクロメートル (10⁻⁷m) ナノメートル (10⁻⁹m)
- 耐磨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
 - **耐磨耗性能を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**
 - タイヤの耐磨耗(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

「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こっ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解明することに成功。 ➡ 充電時の、電解液分子と添加剤分子の反応によるSEI被膜素材形成の化学反応プロセスが明らかに。



「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。



マイクロメートル (10⁻⁶m)

サブマイクロメートル (10⁻⁷m)

ナノメートル (10⁻⁹m)

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。

「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。

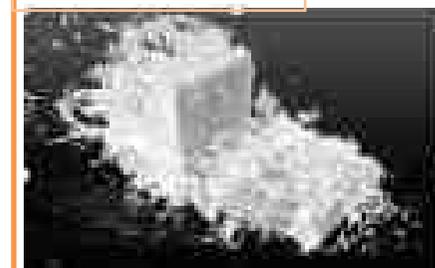
従来の計算



「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





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**。

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

研究成果の公表と社会還元について

1. 施設利用研究の成果の公表を促進する方策
 - 1.1 HPCI利用報告書の公開
 - 1.2 レビューを伴う成果公開の促進
 - 1.3 HPCI利用研究成果集（電子ジャーナル）の発行
2. 利用者相互の情報交換に資する取り組み
 - 2.1 HPCI成果発表データベースの公開
3. 成果の普及、社会還元
 - 3.1 利用報告書ダウンロード分析
 - 3.2 成果発表状況
 - 3.3 査読付き論文の統計
 - 3.3.1 被引用回数
 - 3.3.2 掲載誌のインパクトファクター
 - 3.4 成果事例（「京」一般利用枠、重点化促進枠）

1.1 HPCI利用報告書の公開



1.1 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

1.1 HPCI利用報告書の公開 (続 2)



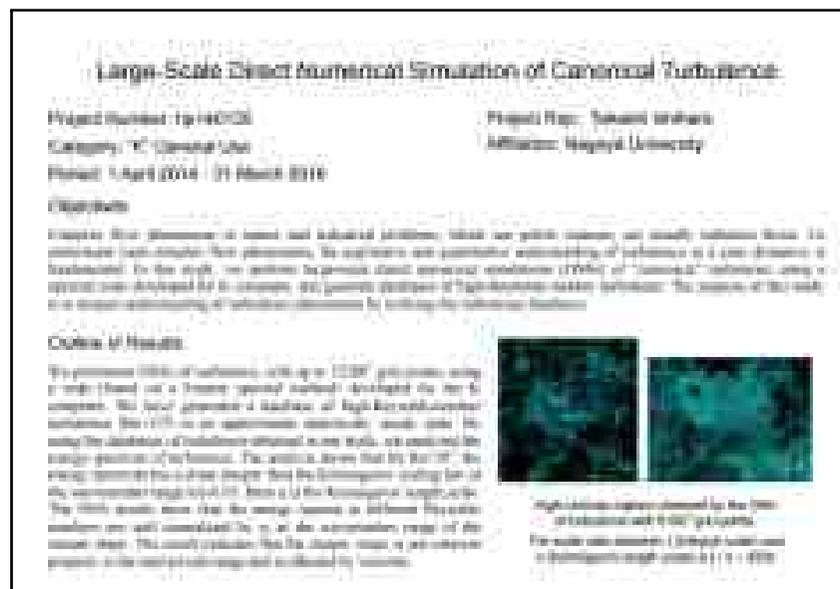
- 2014年度より、従来の課題枠別の一覧表示に加えて、利用分野一覧から検索できる機能を追加した。
- 利用分野は、「バイオ・ライフ」、「物質・材料・化学」、「環境・防災・減災」、「工学・ものづくり・原子力・核融合」、「物理・宇宙・素粒子」、「数理学・情報・計算機科学・その他」の6分野とした。
- 本機能では、利用報告書の要約（図入り）を表示し、各課題の成果の概要を素早く把握できるようにした。
- 各課題ごとにHPCI成果発表データベースにリンクできるようにしている。



1.1 HPCI利用報告書の公開 (続3)



- 2015年度より、利用報告書の一部として日本語版の要約に加えて英語版の要約も作成することにした。
- これに応じて、英語版の利用分野一覧からの検索機能を追加した。





1.1 HPCI利用報告書の公開 (続4)

- 利用報告書公開の実績は全部で421課題 (うち「京」 ; 288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」 | 産業利用 (トライアル・ユース) | 7 | |
| | | | 共用法第12条調査研究 | 2 | |
| 合計 | 戦略プログラム利用課題 | 「京」 | 35 | | |
| 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 | |
| | | | 産業利用 (トライアル・ユース) | 19 | |
| | | | 共用法第12条調査研究 | 3 | |
| | | 「京」を除くHPCI | 一般利用 | 51 | |
| | | | 産業利用 (実証利用) | 2 | |
| | | 戦略プログラム利用課題 | 「京」 | | 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 | |
| | | | 産業利用 (トライアル・ユース) | 1 | |
| 戦略プログラム利用課題 | 「京」 | | 29 | | |
| | | 重点化促進枠 | 0 | | |
| 合計 | | | 178 | | |
| 総計 | | | 421 | | |

| 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) | 33 |
| | 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 | | 288 |
| 「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 | | 421 |

* 「京」の本格利用に移行するための準備枠 (平成24年度選定)

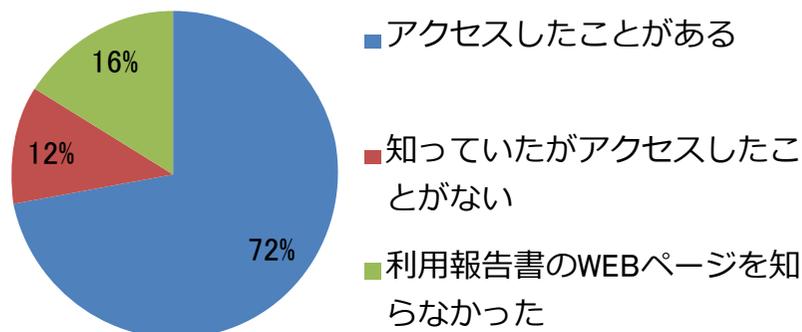


1.1 HPCI利用報告書の公開 (続5)

● 利用者アンケート調査結果 (利用報告書について)

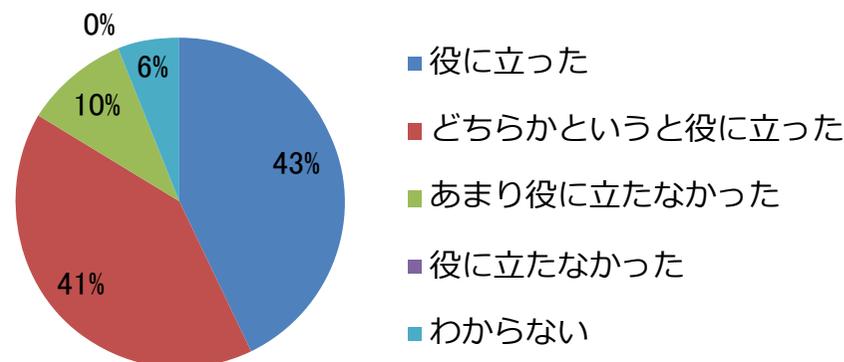
Q.1 利用報告書のWEBページにアクセス

されたことがありますか？



Q.2 Q.1でアクセスしたことがあると答えた方にお聞きします。

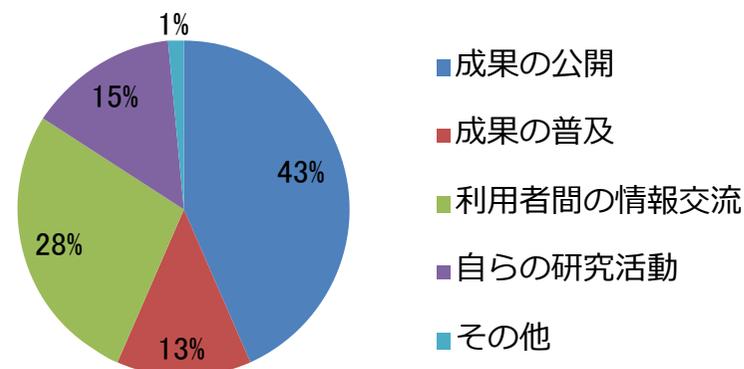
利用報告書のWEBページは役に立ちましたか？



Q.3 Q.2で「役に立った」または「どちらかという

と役に立った」と答えた方にお聞きします。

何の役に立っていますか？ (複数選択可)



● 利用報告書データベース検索サイトを準備中 (運用開始：平成28年3月末頃)

▶ 利用ソフトウェア、計算資源、任意キーワード等による検索が可能に

1.2 レビューを伴う成果公開の促進



1.2 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)
- *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」³⁹



1.2 レビューを伴う成果公開の促進 (続1)

- ▶ 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
の申告を依頼する。
- ▶ 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。
- 第8回課題審査委員会（平成28年1月25日）時点の「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は以下の通りである；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 |

1.3 HPCI利用研究成果集(電子ジャーナル)の発行

1.3 HPCI利用研究成果集(電子ジャーナル)の発行

- 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。



The screenshot shows a webpage titled "HPCI利用研究成果集について" (About HPCI Research Report). On the left is a dark blue cover image with the text "HPCI利用研究成果集" and "Research Report". On the right, there is a text block with the following content:

HPCI利用研究成果集について

HPCI利用研究成果集とは登録機関が発行する査読付き電子ジャーナルです。HPCI利用研究課題の内、成果を公開する課題は、課題開始から1年以内に最終的な論文等が研究成果を公開することが義務付けられています。成果報告はその成果公開の第一歩です。

HPCI利用研究成果集の出版の目的は一般のジャーナルの査読付き論文と同等の課題の成果を論文化することにあります。より情報化によるため、過剰的な計算やその他の理由で計算が不成功に終わった場合や期待通りの結果が得られなかった場合でも、他の研究者が有益な情報となるように、その原因を詳細に記述することにより論文発表を行うことが出来ます。これは一般のジャーナルには見られない特徴です。

採録された論文の審査（査読）は利用研究推進委員会（山下、横谷委員）の審議によって行われます。採録された論文の承認は採録委員会によって行われます。

- 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。



1.3 HPCI利用研究成果集（電子ジャーナル）の発行（続1）

- 最初の掲載論文の公開を平成27年9月9日から開始
- 同年11月30日までに全6編を公開
- 公開論文の全ダウンロード数は平成28年2月13日時点で200回

早期公開

Fig.130002

DL数:6

Fig.130003

DL数:8

Fig.130020

DL数:11

DL数:16

DL数:8

DL数:151

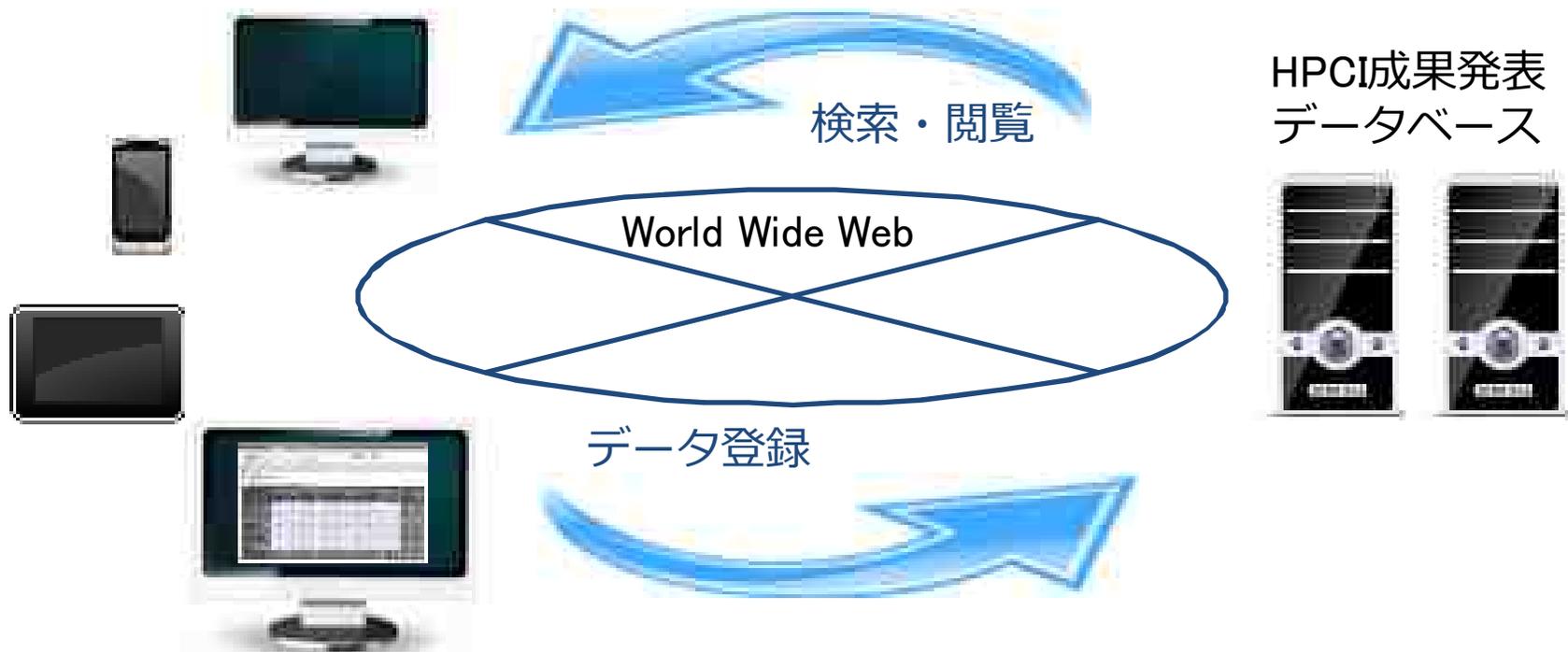
2.1 HPCI成果発表データベースの 公開

2.1 HPCI成果発表データベースの公開

- 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まとめられている。
- HPCIポータルサイトから閲覧、検索が可能
- 成果発表情報の登録はHPCI課題の利用者単位で随時Web入力出来る。



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。





2.1 HPCI成果発表データベースの公開 (続 1)

- 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。

検索条件に該当する成果発表の統計情報

| 検索条件 | 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 | | 合計 |
|------------------|-----------|-------|-----------|-------|-------------|-------|-------------|-------|-------|
| | 件数 | 登録数 | 件数 | 登録数 | 件数 | 登録数 | 件数 | 登録数 | |
| 検索条件 | 1,318 | 1,318 | 5,051 | 5,051 | 1,000 | 1,000 | 1,000 | 1,000 | 8,369 |
| 内、「京」を用いた成果の発表件数 | 3,469 | 3,469 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 3,469 |
| 内、査読付き論文数 | 401 | 401 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 401 |

- 登録件数 ; 6,369件 (内査読付き論文数 ; 1,318)
 - 内、「京」を用いた成果の発表件数 ; 3,469件
 - 内、査読付き論文数 ; 401(H28.2.13)
- アクセス数 ; 6,004回 (H27.1.1~H28.2.13)

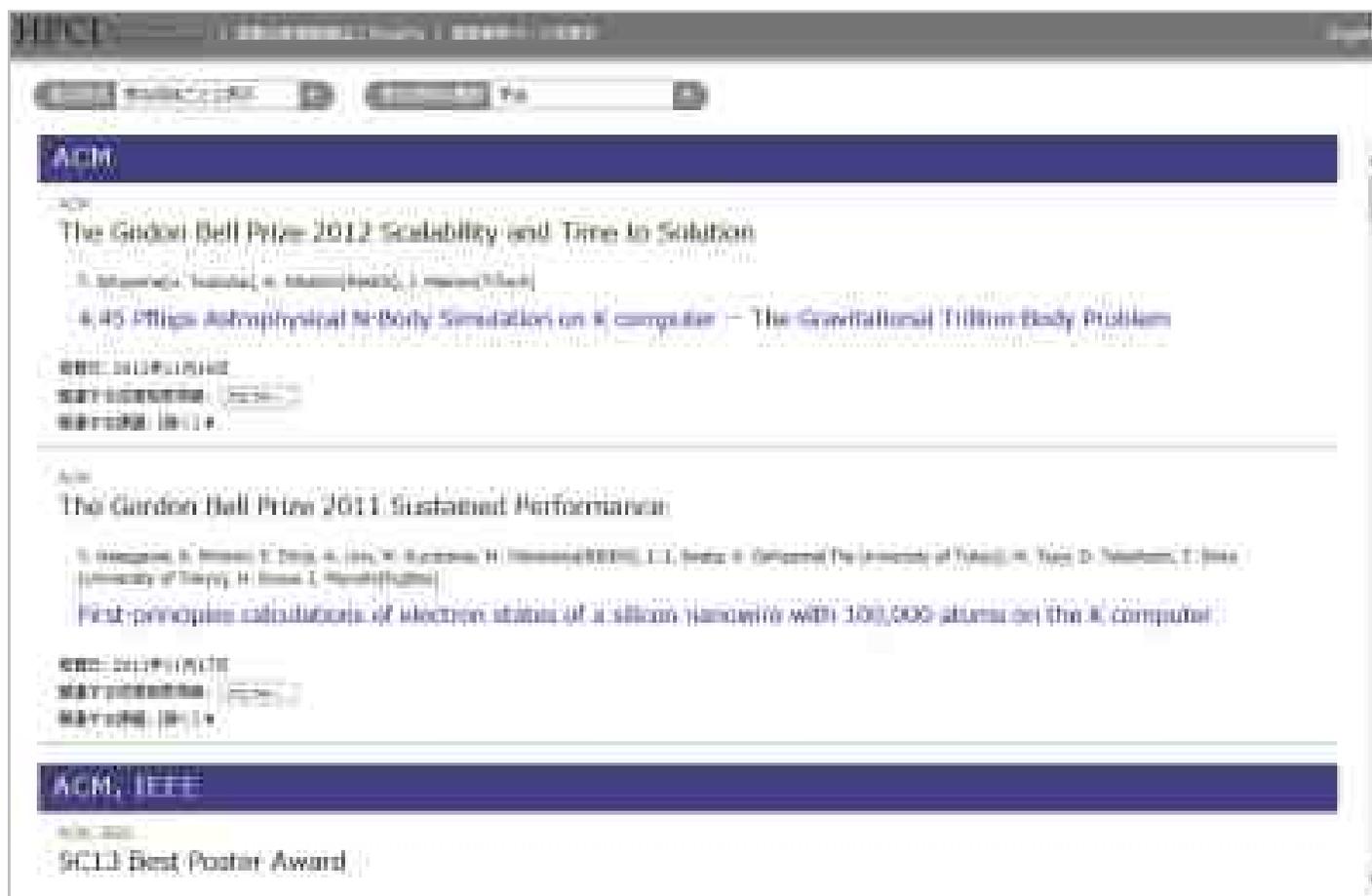
<https://www.hpci-office.jp/hpcidatabase/publications/search.html>



2.1 HPCI成果発表データベースの公開 (続3)

- HPCI利用成果に係る受賞実績をH27.8.7から公開
- ゴードン・ベル賞の2件を含め登録件数：74件（H28.2.13現在）

受賞一覧画面

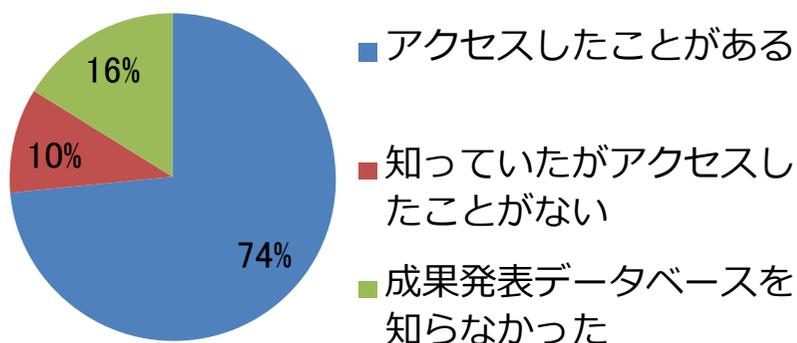




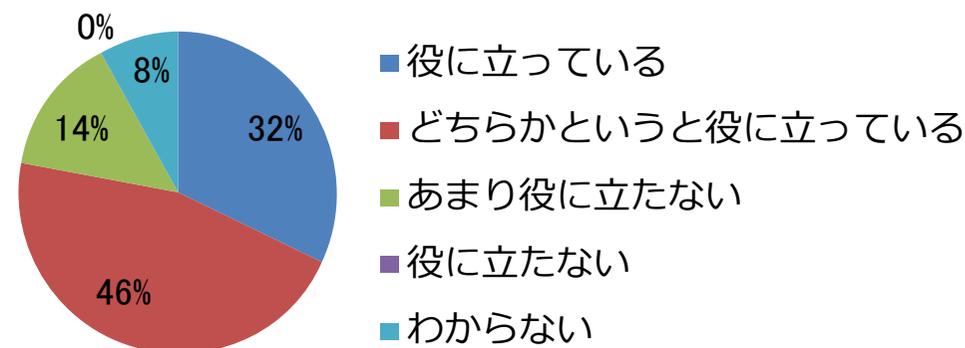
2.1 HPCI成果発表データベースの公開 (続4)

● 利用者アンケート調査結果 (成果発表データベースについて)

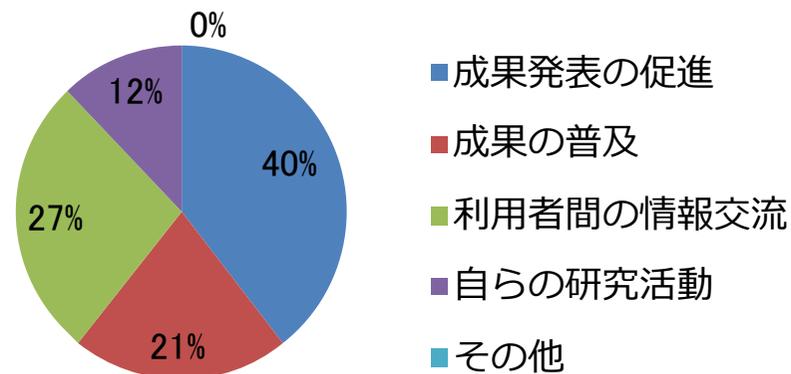
Q.1 成果発表データベースにアクセスされたことがありますか？



Q.2 Q.1でアクセスしたことがあると答えた方にお聞きします。成果発表データベースは役に立っていますか？



Q.3 Q.2で「役に立っている」または「どちらかという役に立っている」と答えた方にお聞きします。何の役に立っていますか？ (複数選択可)

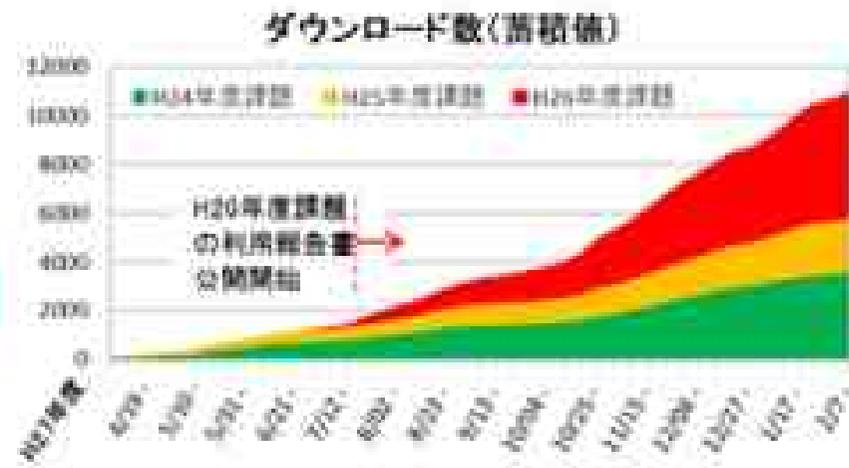


3. 成果の普及、社会還元

3.1 利用報告書ダウンロード分析

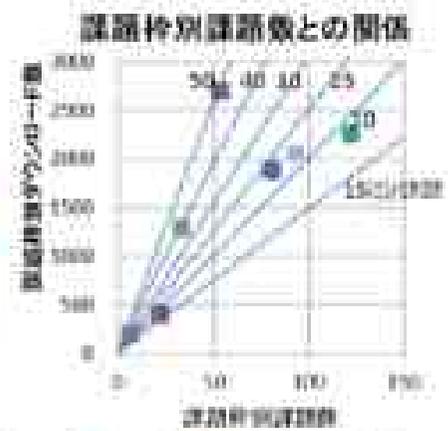
3.1 利用報告書ダウンロード分析

- 利用報告書ダウンロード数 (2015/4/1~2016/2/13) : 10,967 (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、同トライアル・ユースが抜きん出ている。
 - 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。



■「京」一般 ■「京」産業 ■「京」同トライアル・ユース ■「京」産業HPCI一般 ■HPCI一般 ■戦略プログラム

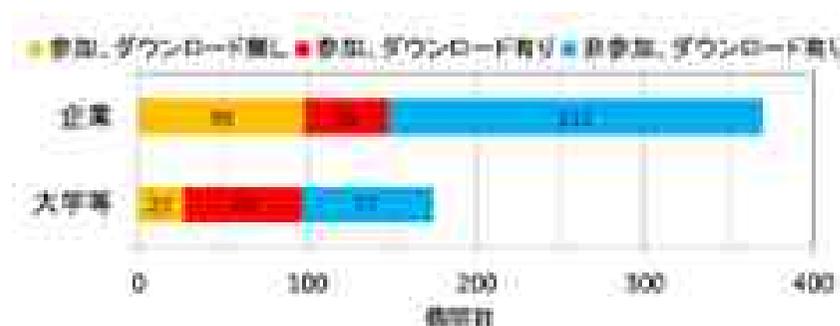
*Webを自動的に巡回して、文書や画像を収集するプログラム。収集したデータをデータベース化して、検索サービスの検索に使用する。

3.1 利用報告書ダウンロード分析 (続1)

● 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 | 147 | 2812 |
| 企業 | 272 | 2467 |
| 研究機関等 | 27 | 1165 |
| 行政・立法 | 17 | 124 |
| 報道・公共サービス | 8 | 29 |
| 医療 | 9 | 14 |
| ISP回線 | - | 3675 |
| 海外 | (31ヶ国) | 675 |

- ▶ 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

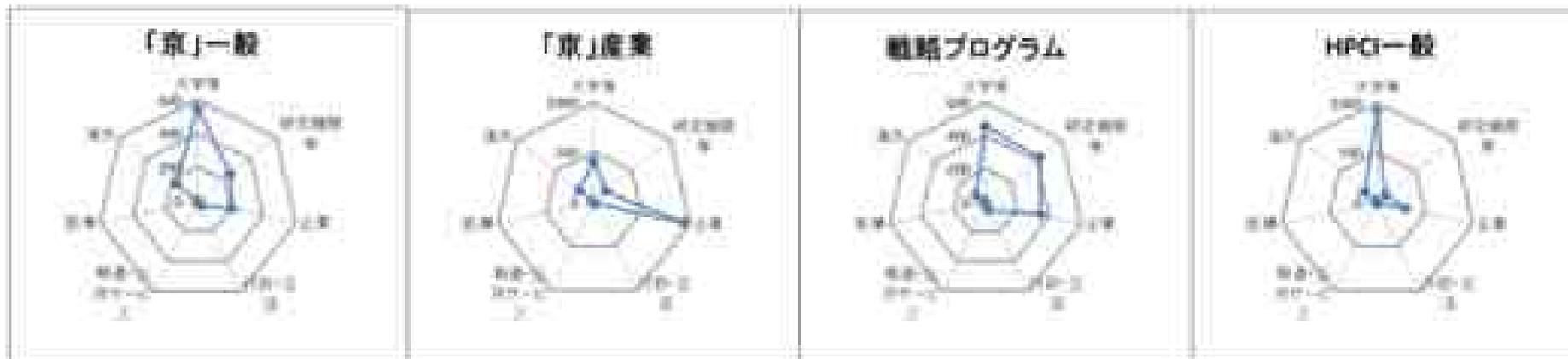
● 海外からのダウンロードは31ヶ国に達している。

- ▶ 31ヶ国内訳；北米（米国、カナダ）、中米（メキシコ）、欧州（英国、フランス、ドイツ、イタリア、ベルギー、ノルウェー、スウェーデン、スイス、オーストリア、ポーランド、ルーマニア、クロアチア、ベラルーシ、トルコ、カザフスタン）、ロシア、アジア（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、インド、パキスタン、イラン）、オセアニア（オーストラリア）
- ▶ ダウンロード元分類；大学等(12ヶ国)24機関、企業(7ヶ国)20社、研究機関等(7ヶ国)9機関、行政(2ヶ国)2機関、医療(1ヶ国)1機関、ISP回線(25ヶ国)

3.1 利用報告書ダウンロード分析（続2）

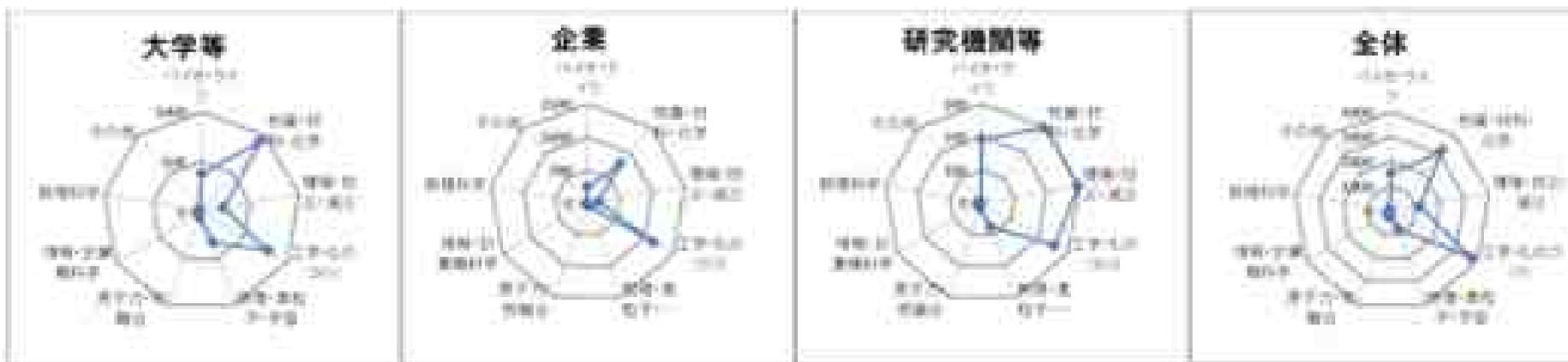
● 課題枠毎のダウンロード元分布

- 「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。

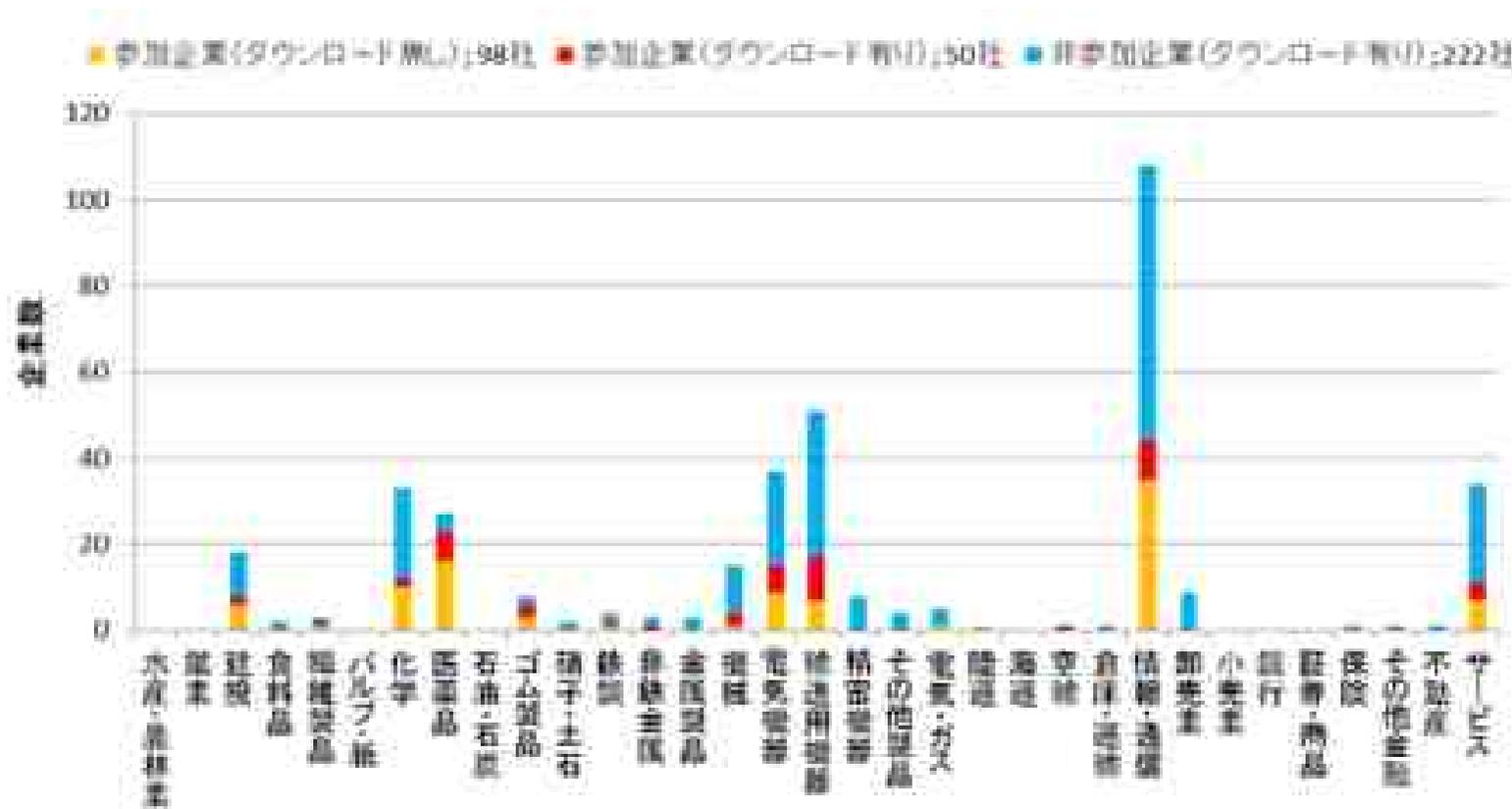




3.1 利用報告書ダウンロード分析（続3）

- 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）

2016/2/13時点

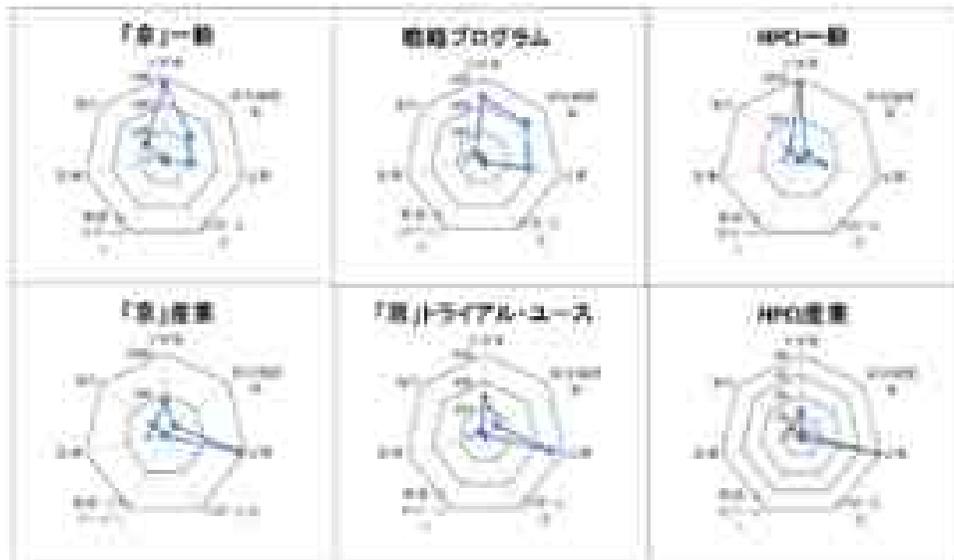


- HPCI参加企業の業種数: 15 (33業種の45%) ⇒ダウンロード元企業の業種数: 24 (同73%)
→ HPCI利用研究成果への産業界の関心の広がりを示す。両者の和集合では25業種 (同76%)



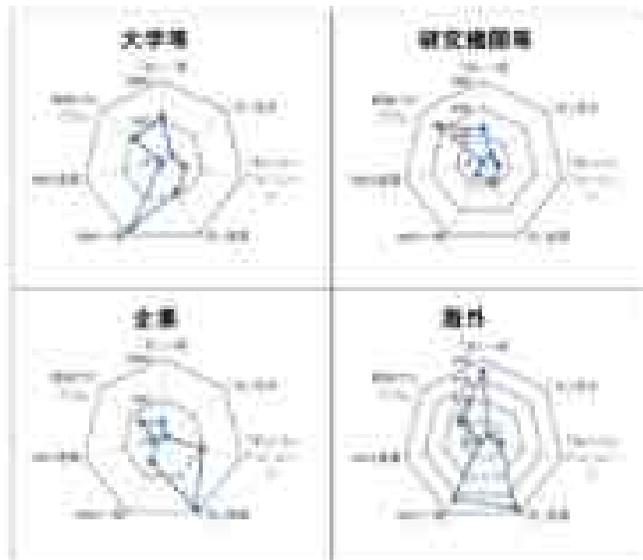
利用報告書のダウンロード状況から見た HPCI利用研究成果への関心度（課題枠別）

1) 課題枠毎のダウンロード元分布（2015/4/1-2016/2/13）



- 「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」トリアル・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（2015/4/1-2016/2/13）

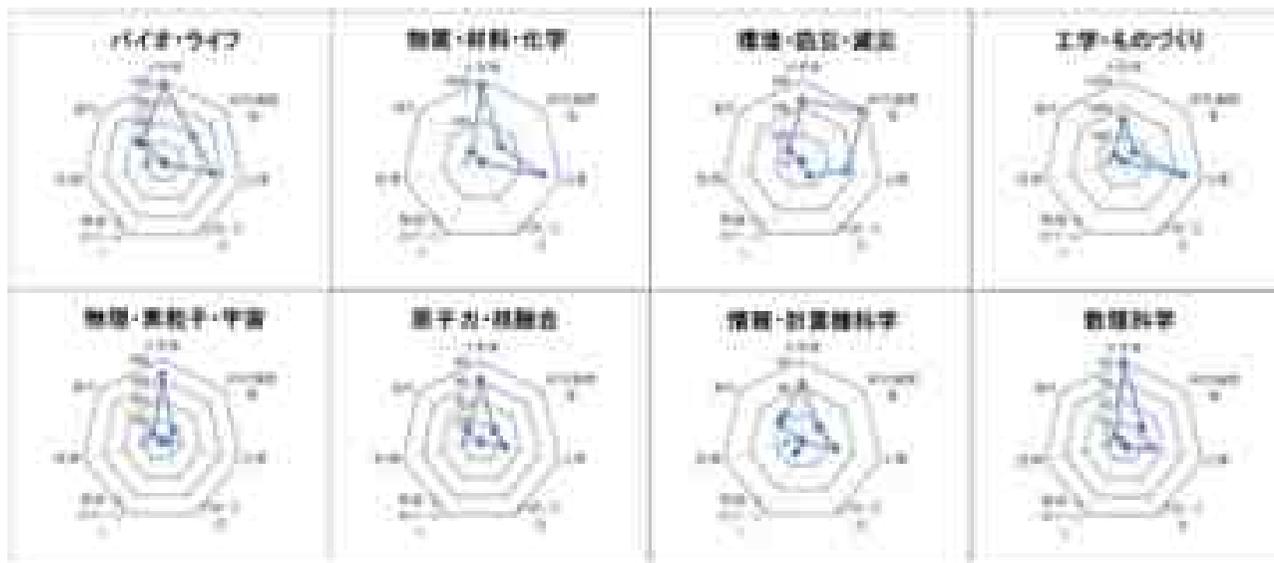


- 大学等は、「HPCI一般」への関心が格段に高く、次いで「京」一般、戦略プログラムへの関心が高い。
- 研究機関等は戦略プログラム、次いで「京」一般への関心が高い。
- 企業は、「京」産業、次いで「京」トリアル・ユースへの関心が高い。
- 海外は、「京」産業、次いで「京」一般、「HPCI一般」への関心が高い。

HPCI利用研究成果への関心度（利用分野別）

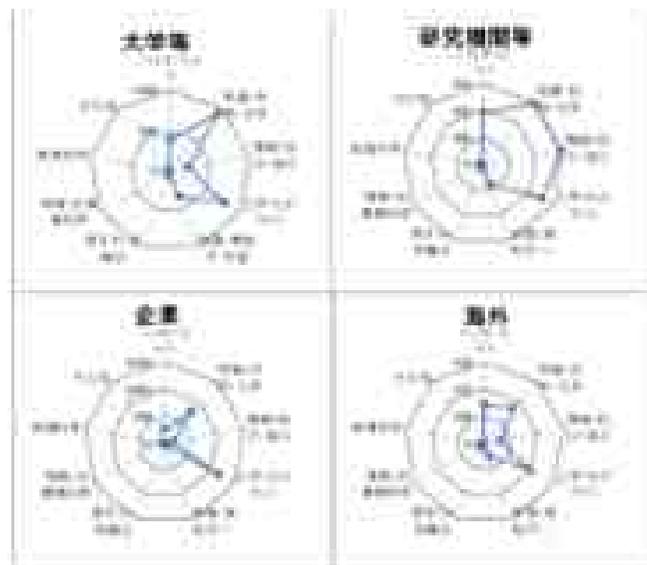


1) 利用分野別ダウンロード元分布 (2015/4/1-2016/2/13)



- 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、情報・計算機科学、数理科学は大学等からの関心が突出して高い。

2) 大学等、研究機関等、企業、海外からのダウンロード先 (2015/4/1-2016/2/13)



- 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、「物質・材料・化学」、「環境・防災・減災」、「工学・ものづくり」への関心が最も高く、且つほぼ均衡している。
- 企業からは、「工学・ものづくり」、次いで「物質・材料・化学」への関心が最も高い。
- 海外からは、「工学・ものづくり」、「物質・材料・化学」、「バイオ・ライフ」への関心が高い。



3.2 成果発表状況

3.2 成果発表状況

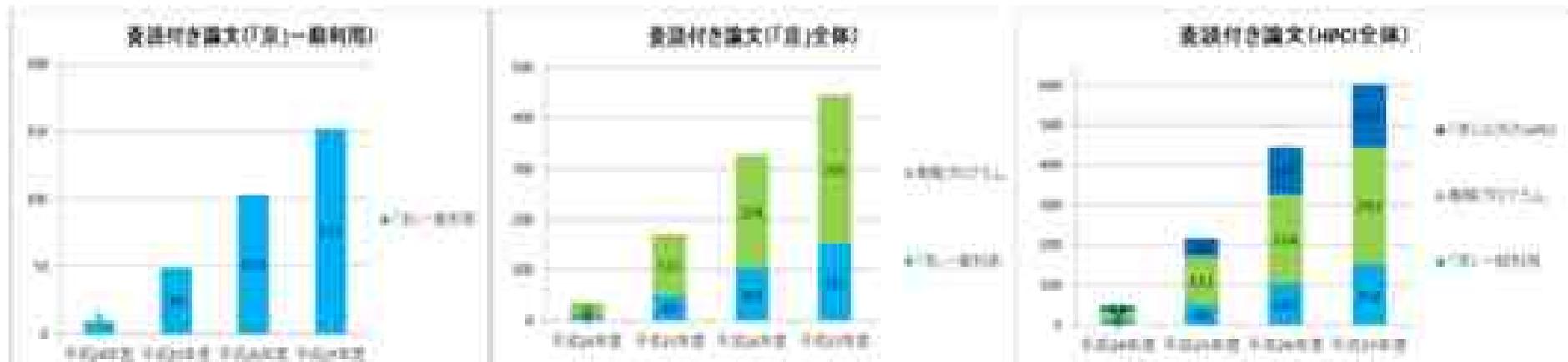
HPCI成果発表データベースから抽出；多数の成果が創出されてきている。

■ 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HPC | | | |
|--------|---------|-------------|-------------|------|---------|-------------|-------------|------|-----------|-------------|-------------|------|
| | 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 | 26 | 194 | 183 | 2 | 13 | 38 | 27 | 0 |
| 平成25年度 | 40 | 76 | 73 | 3 | 96 | 215 | 250 | 0 | 33 | 58 | 40 | 0 |
| 平成26年度 | 54 | 65 | 76 | 2 | 102 | 243 | 211 | 0 | 71 | 69 | 48 | 2 |
| 平成27年度 | 49 | 60 | 38 | 0 | 69 | 169 | 124 | 0 | 40 | 34 | 16 | 0 |
| 合計 | 152 | 260 | 255 | 5 | 293 | 821 | 768 | 2 | 157 | 199 | 131 | 2 |
| | 672 | | | | 1,884 | | | | 489 | | | |

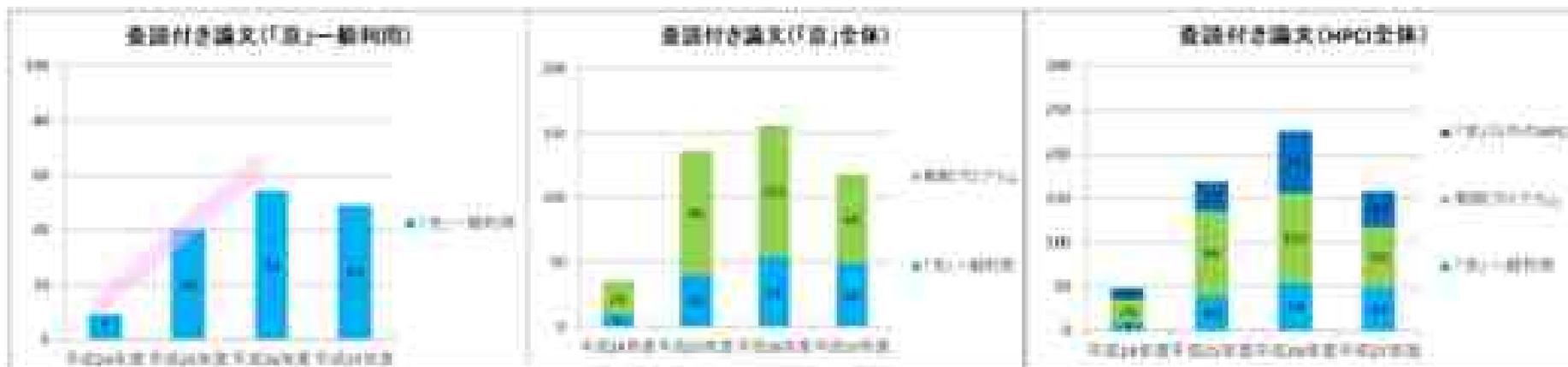
※ 登録件数は平成28年2月13日のデータであり、登録漏れ等で今後変動する可能性がある。平成27年度の件数は年度途中の数字であり参考値である。特許出願を除き上記件数は利用枠間に一部重複を含む。戦略プログラムの平成24年度の発表件数には平成23年度分を含む。

■ 査読付き論文発表件数の年次推移（累積値）

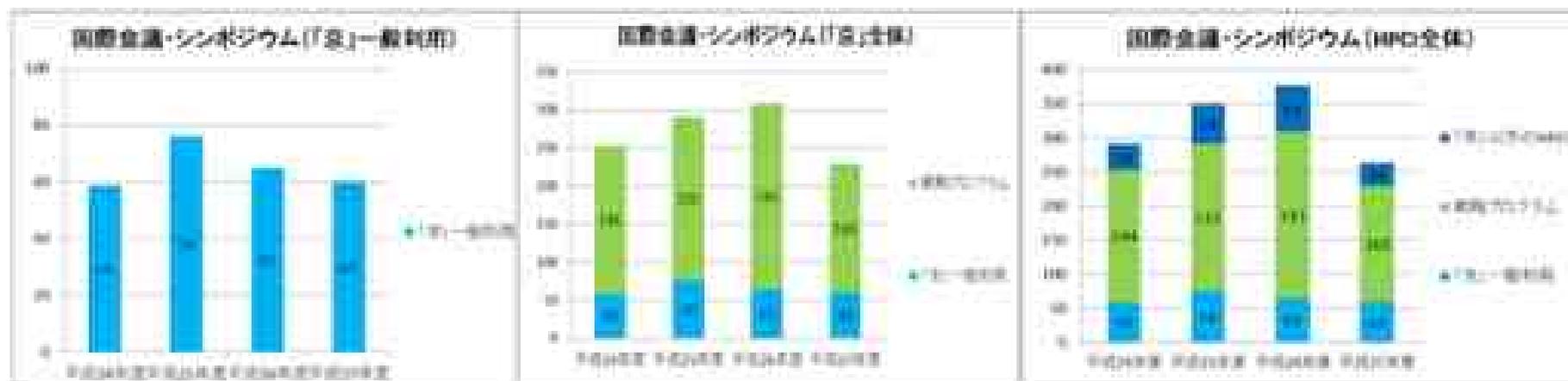


3.2 成果発表状況（続1）

■ 査読付き論文発表件数の年次推移

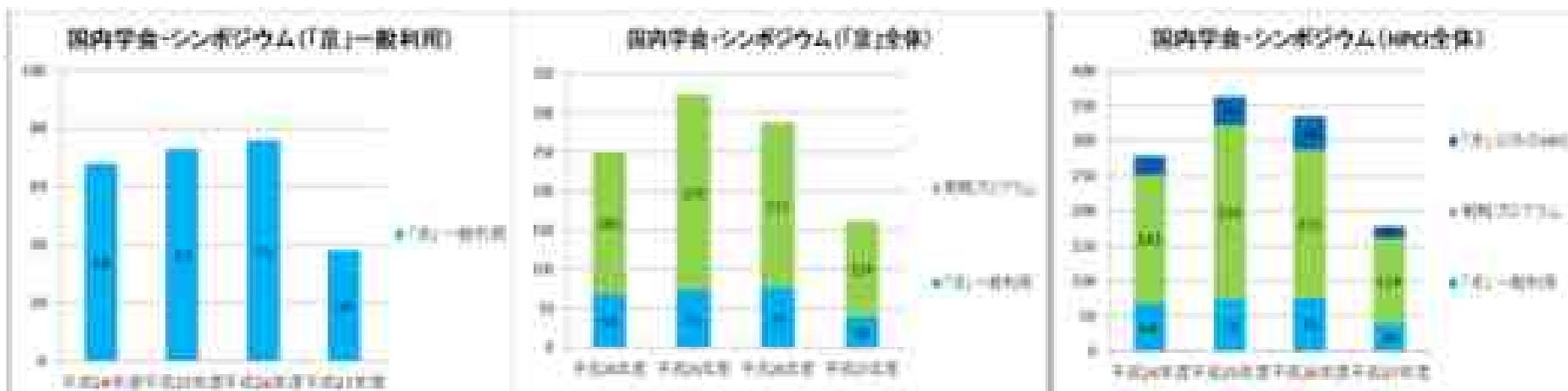


■ 国際会議・シンポジウムでの発表件数の年次推移

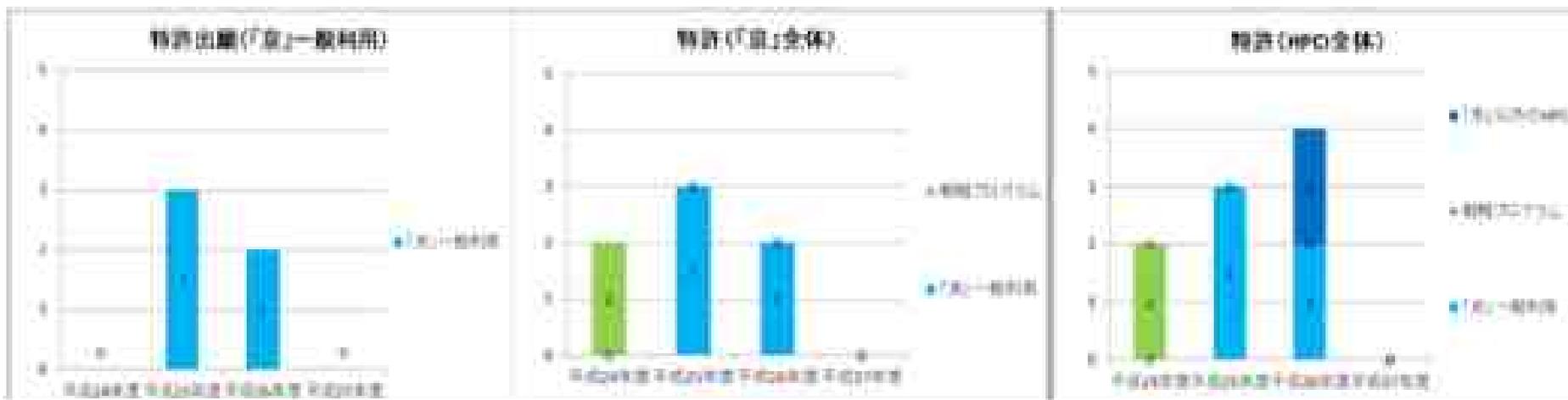


3.2 成果発表状況（続2）

■ 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



3.3 査読付き論文の統計



3.3.1 被引用回数

3.3.1 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

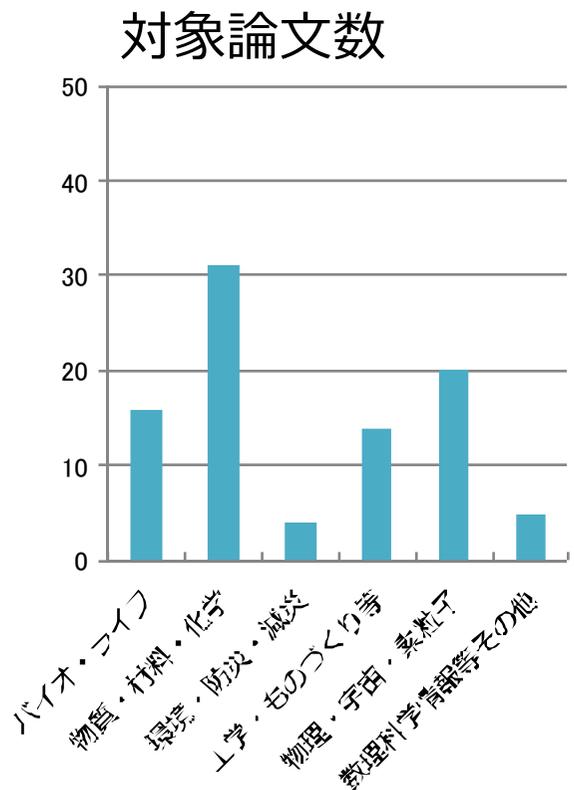
*² 括弧内は産業利用課題数（内数）

H28.2.13

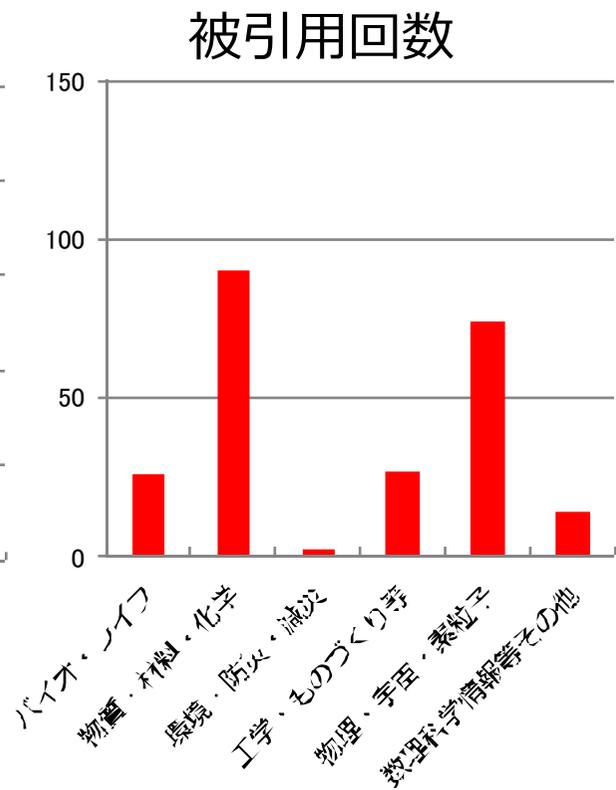


被引用回数 — 「京」 一般利用

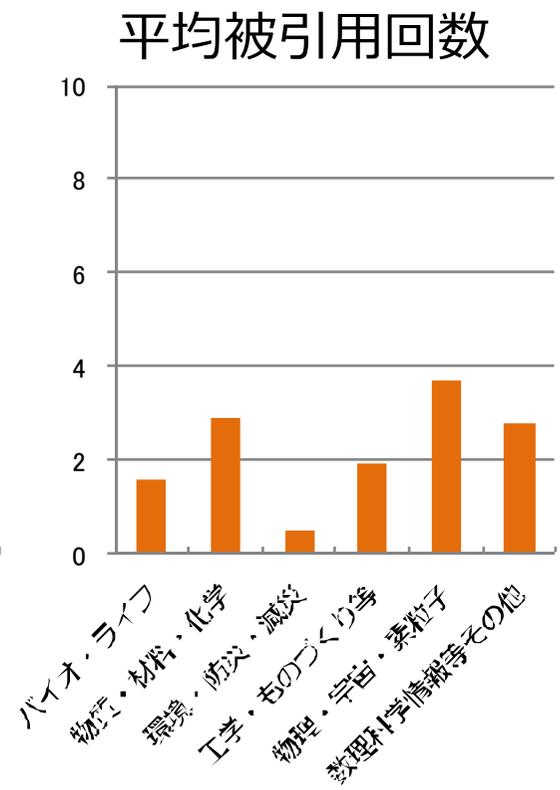
利用分野別の整理



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

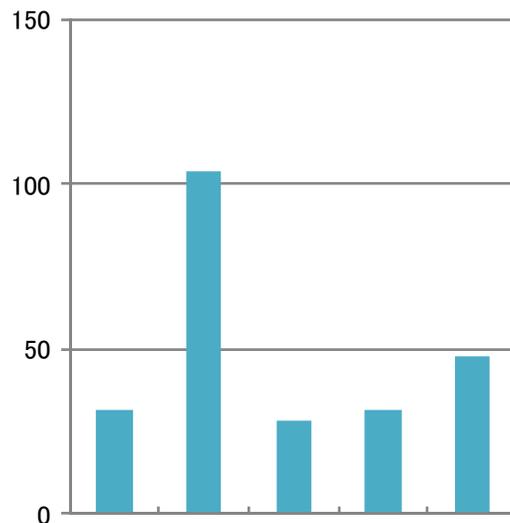
H28.2.13



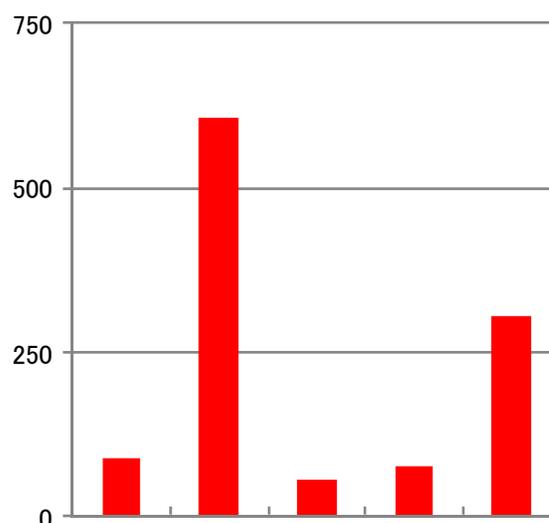
被引用回数 — 戦略プログラム

利用分野別の整理

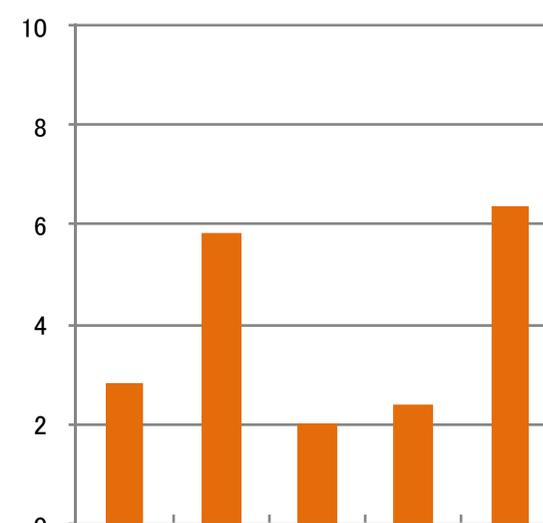
対象論文数



被引用回数



平均被引用回数



バイオ・ライフ(分野1)
物質・材料・化学(分野2)
環境・防災・減災(分野3)
工学・ものづくり等(分野4)
物理・宇宙・素粒子(分野5)

総論文数：244

バイオ・ライフ(分野1)
物質・材料・化学(分野2)
環境・防災・減災(分野3)
工学・ものづくり等(分野4)
物理・宇宙・素粒子(分野5)

総被引用回数：1135

バイオ・ライフ(分野1)
物質・材料・化学(分野2)
環境・防災・減災(分野3)
工学・ものづくり等(分野4)
物理・宇宙・素粒子(分野5)

総平均被引用回数：4.7

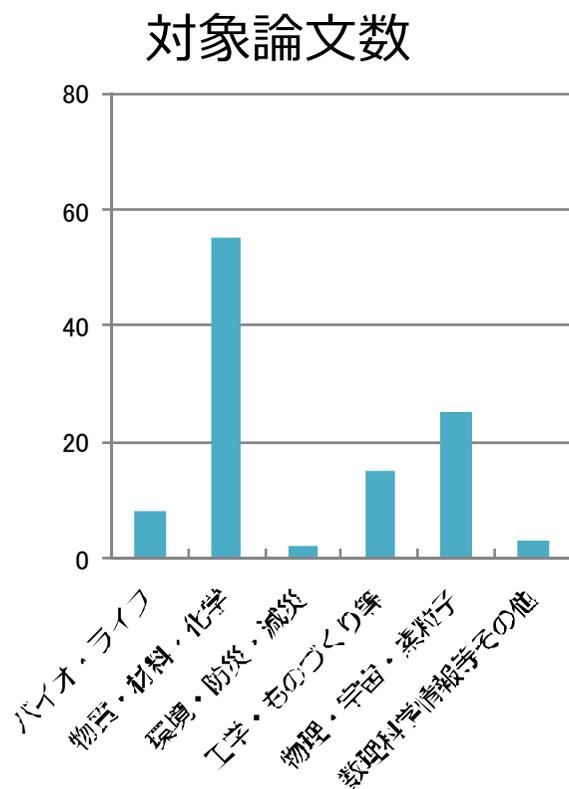
Web of Science(トムソン・ロイター)を基にした調査

H28.2.13

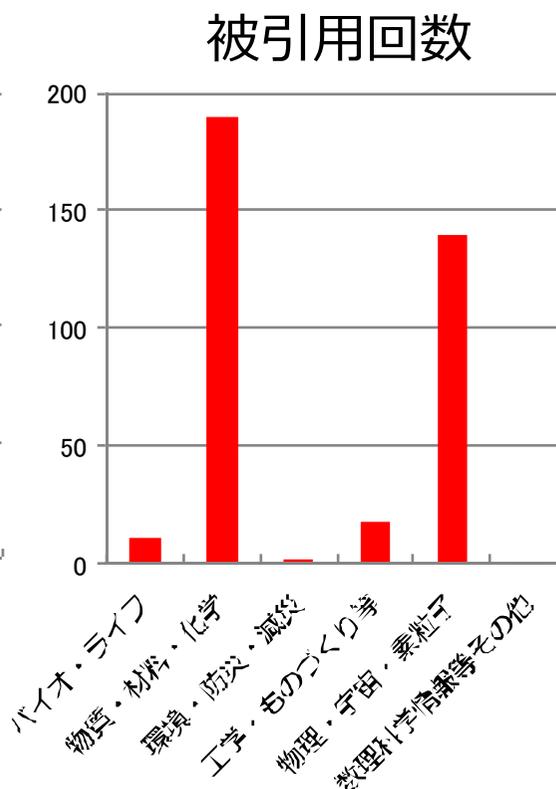


被引用回数 — 「京」を除くHPCI

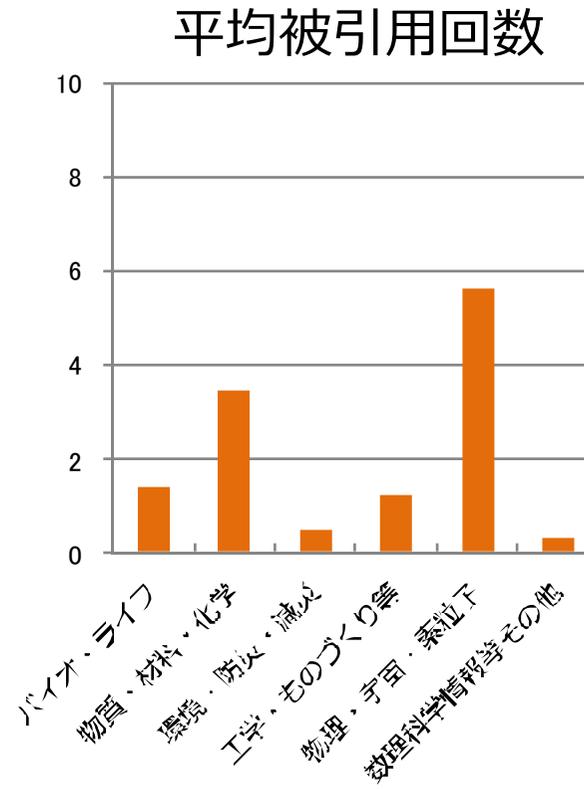
利用分野別の整理



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



論文被引用回数トップ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 | 利用率 |
|----|-------|--|------------------------------------|-----------|---------|
| 1 | 23 | Formation of Massive Molecular Cloud Cores by Cloud-Cloud Collision, Inoue, T., et al., <i>Astrophysical Journal Letters</i> , (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., <i>Journal of the American Chemical Society</i> , (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., <i>Computer Physics Communications</i> , (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., <i>Journal of the Physical Society of Japan</i> , (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., <i>Physical Review B</i> , (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., <i>Journal of Physical Chemistry C</i> , (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



論文被引用回数トップ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 | 利用率 |
|----|-------|---|-----------------------|-----------|----------|
| 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 PbI 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, Kato, 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

3.3.2 掲載誌のインパクトファクター



3.3.2 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 | 33 | - |
| | 平成25年度終了 | 77(26)*2 | 25 | 102(26)*2 | 53(2)*2 |
| | 平成26年度終了 | 62(27)*2 | 25 | 87(27)*2 | 80(4)*2 |
| | 合計 | 141(53)*2 | 81 | 222(53)*2 | 133(6)*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）



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)

3.4 成果事例（「京」一般利用枠、重点化促進枠）



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ン放射の偏面向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。



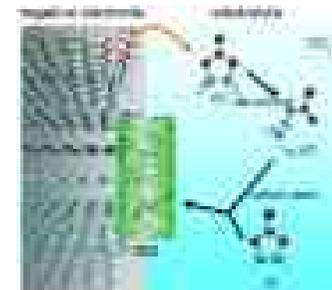
シミュレーションデータから計算されるシンクロトン放射の偏光度と偏光ベクトル

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。



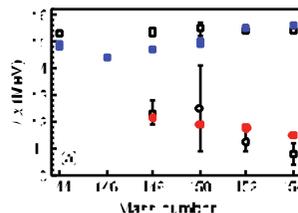
リチウムイオン電池内におけるVC添加剤とEC電解液の反応

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、ニュートリノレ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。



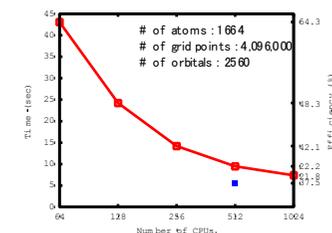
Smアイソトープにおける単極子巨大共鳴エネルギー(質量数148以上で形状変化による低エネルギー共鳴状態が出現)

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ドープバルク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



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 |

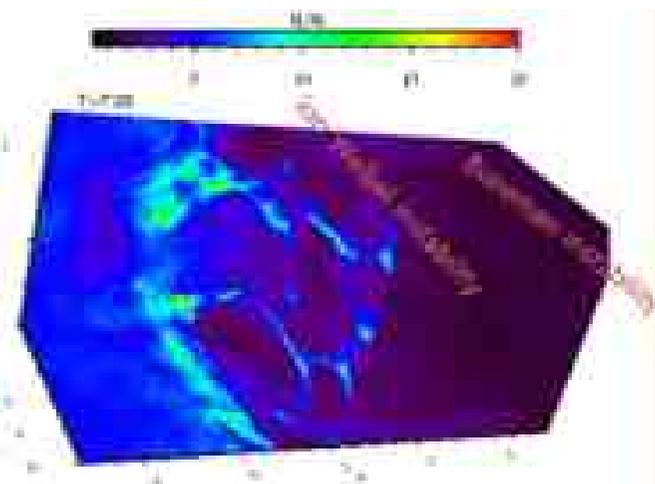
*戦略プログラム

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 |



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ペ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を評価し、スケール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

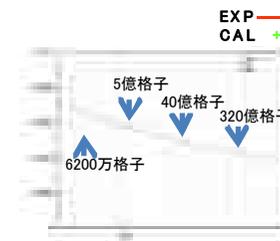
日本原子力研究開発機構 井戸村 泰宏
hp120011 一般利用 原子力・核融合

c-2 「京」産業利用

CFD*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、この一段階小さい規模(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。

(*) CFD: 数値流体力学



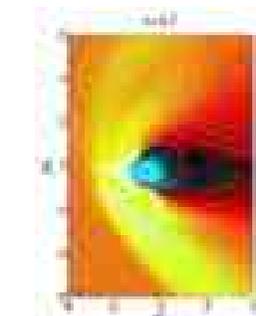
全抵抗係数 (試験と計算の比較)

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マイ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。



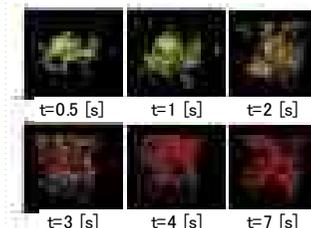
「京」を用いた高解像度計算結果で得られた弱磁化小天体近傍のイオン密度及び磁力線のプロファイル

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)



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 KVLCC2 | 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 |

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

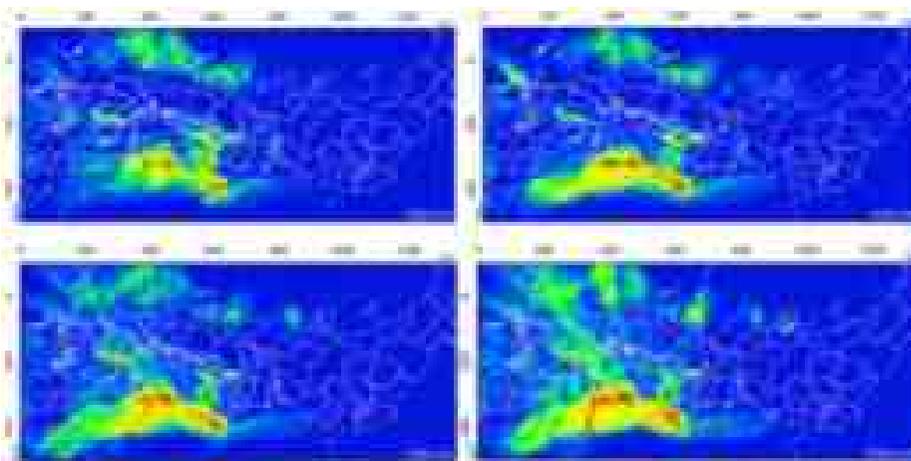
巨大地震により発生した長周期地震動の伝わり方を予測し、そのデータを防災や建築などの各専門機関が詳細に検討できるようになることで、超高層建築物や石油タンクなどの巨大構造物における防災対策や、建造物の性能評価や建築基準に生かされていくと期待される。

内閣府(防災担当)

名波 義昭

hp140252, hp130128, hp130134

環境・防災・減災

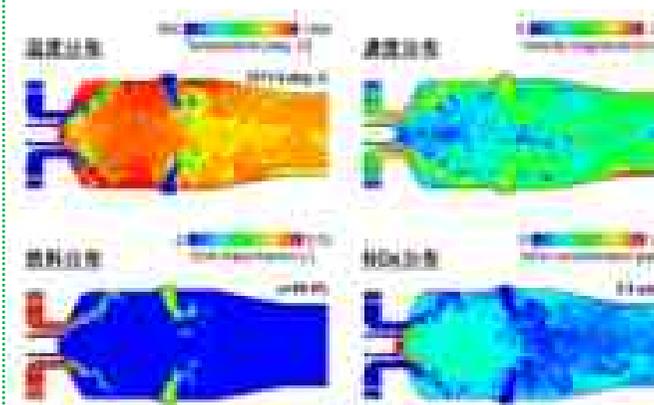


過去の南海トラフ地震による
長周期地震動の推計計算結果例

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NO_x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

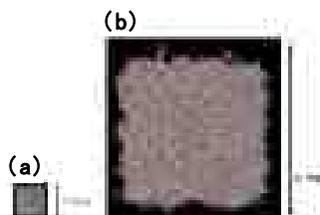
| No. | ダウンロード数 | 課題番号 | 利用枠 | 論文タイトル | 発表年月 |
|-----|---------|----------|------|-------------------------|---------|
| e-1 | 151 | hp140127 | 産業利用 | ガスタービン燃焼器実圧条件における燃焼場の検討 | 2015年9月 |

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、著者らの先行研究の約79 倍もの大規模化となる25 nm 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

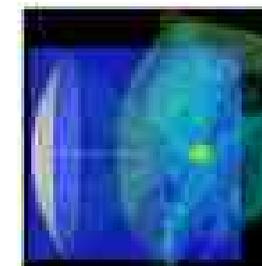
産業利用(トライアル)

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

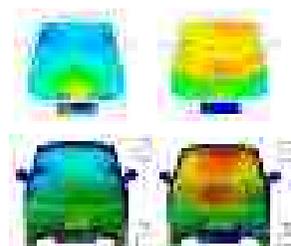
一般利用

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

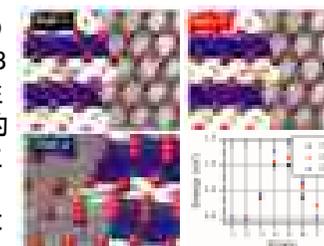
工学・ものづくり

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層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。

(*NEB法: 化学反応における遷移状態を探し出すための手法)



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

株式会社コベルコ科研

世木 隆

hp140095

産業利用

物質・材料・化学



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) |
| | 6 | 106 | hp140076 | HPCI一般 |
| f-4 | 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 |

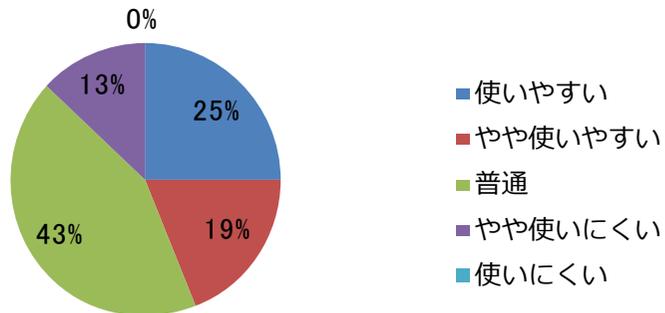
利用者アンケート

H26年度末までに終了した一般利用枠課題を対象にアンケートを実施
計68課題の代表者より回答。実施期間：H27.12.1～H28.1.15

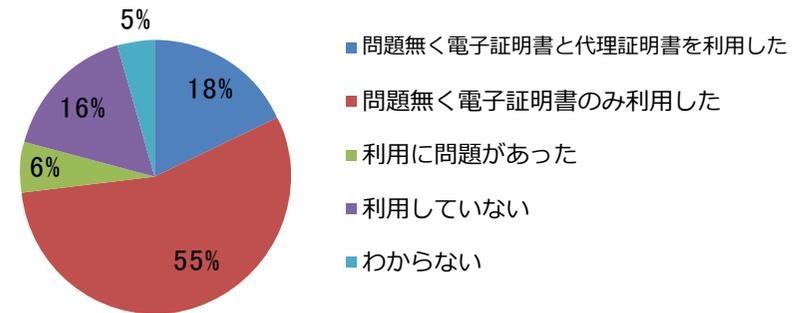


利用者アンケート 利用に際して1/2

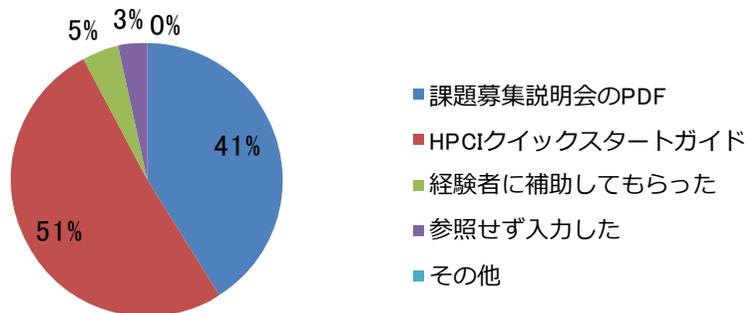
HPCI申請支援システムの操作性についてお答え下さい。



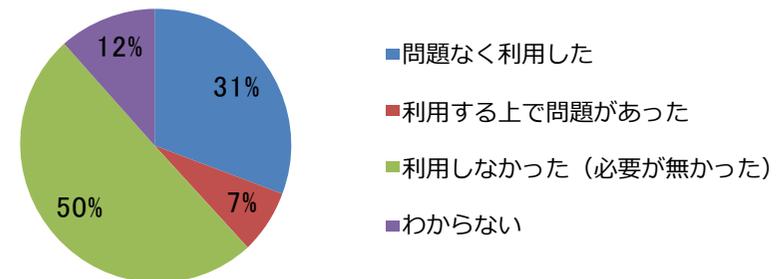
電子証明書・代理証明書は問題無く利用できましたか。



HPCI申請支援システムで申請提出にあたって、何らかの説明書を参照されましたか。



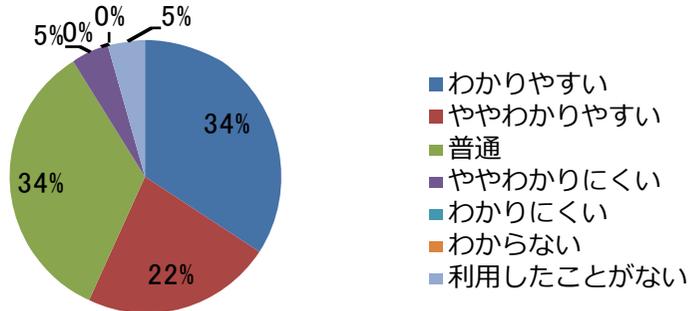
HPCIアカウントを用いたシングルサインオンは利用されましたか。



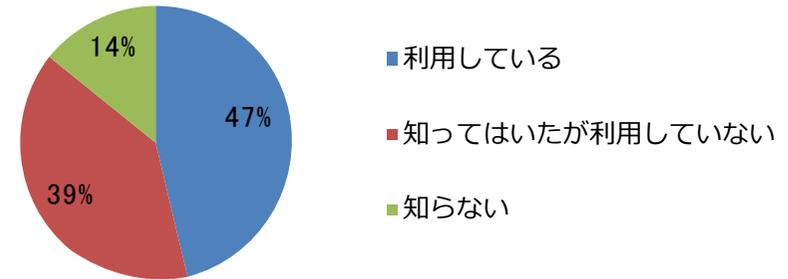


利用者アンケート 利用に際して2/2

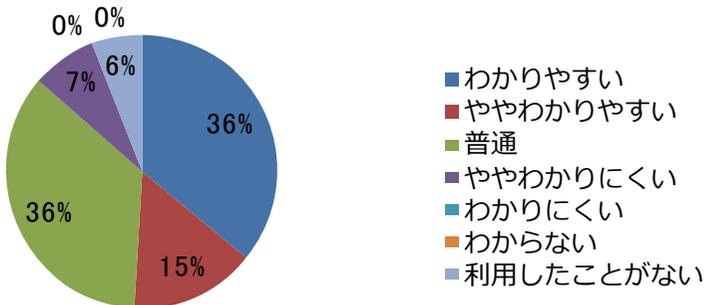
HPCIクイックスタートガイドのわかりやすさについてお答え下さい。



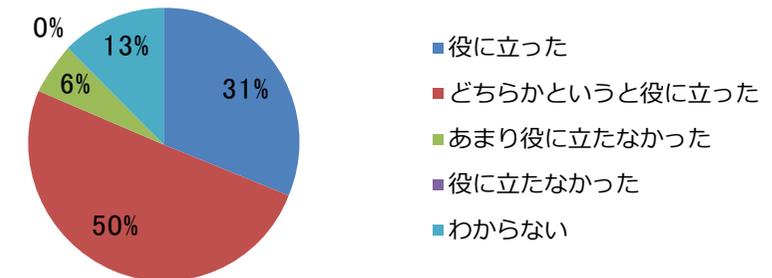
HPCI情報共有CMSを利用していますか。



HPCIログインマニュアルのわかりやすさについてお答え下さい。



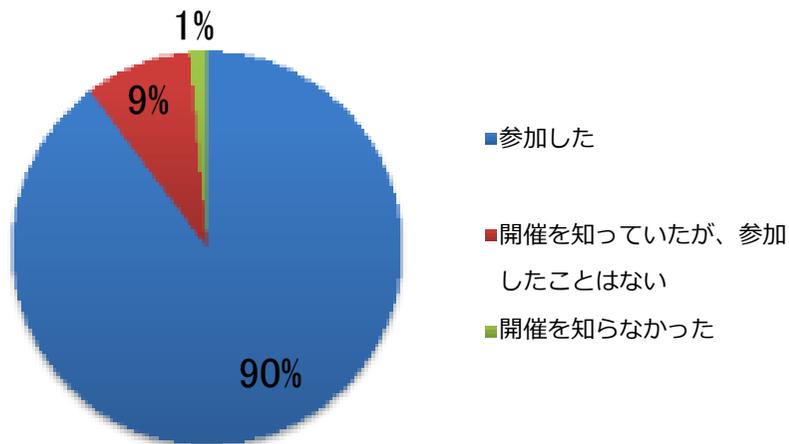
HPCI情報共有CMSを利用している方に、役に立ちましたか。



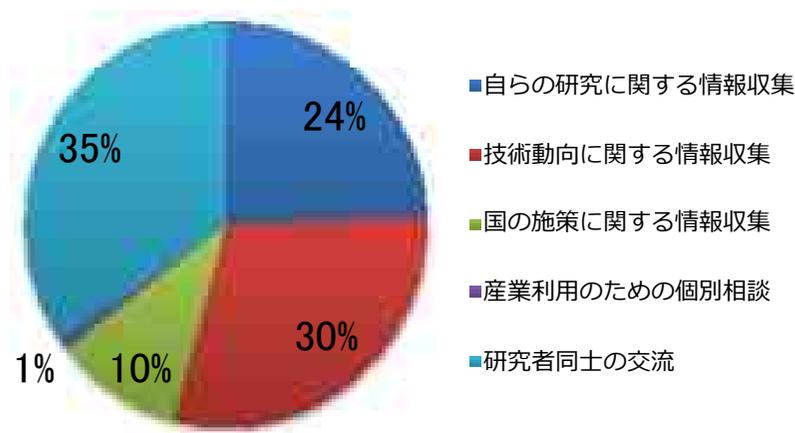


利用者アンケート 利用者相互の情報交換

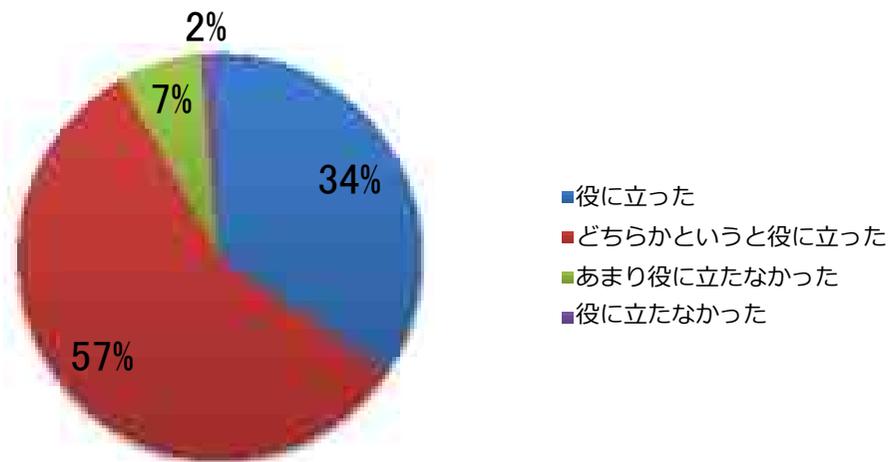
成果報告会（中間報告会を含む）には参加されましたか？



成果報告会が「役に立った」、または「どちらかというと役に立った」を選択された方は、その内容を選択してください



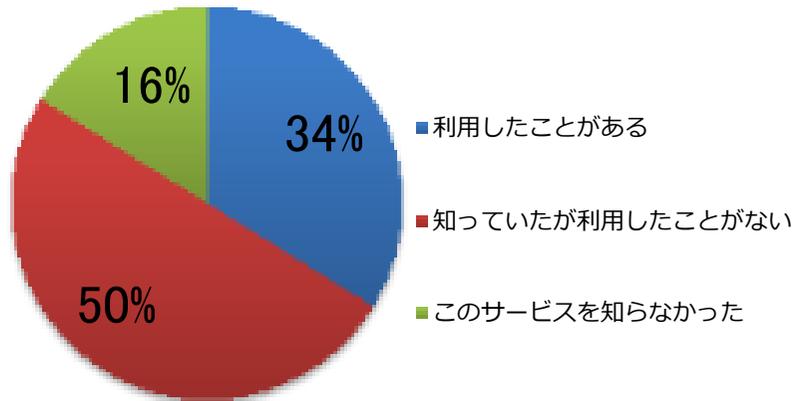
成果報告会に参加された方にお聞きします。成果報告会は役に立ちましたか？



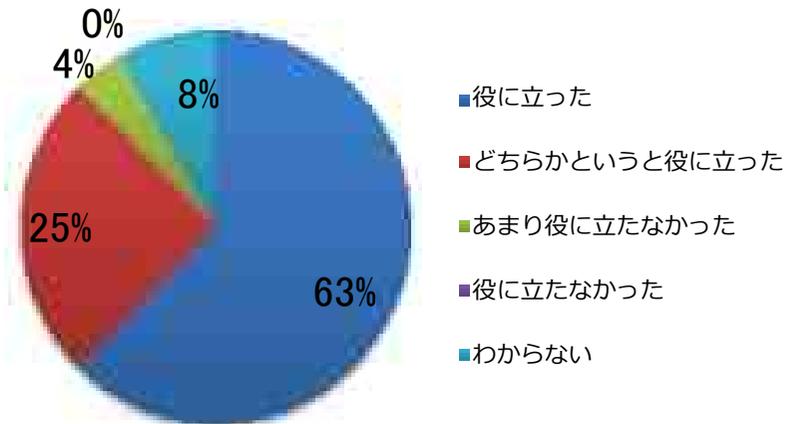


利用者アンケート 高度化支援（1/2）

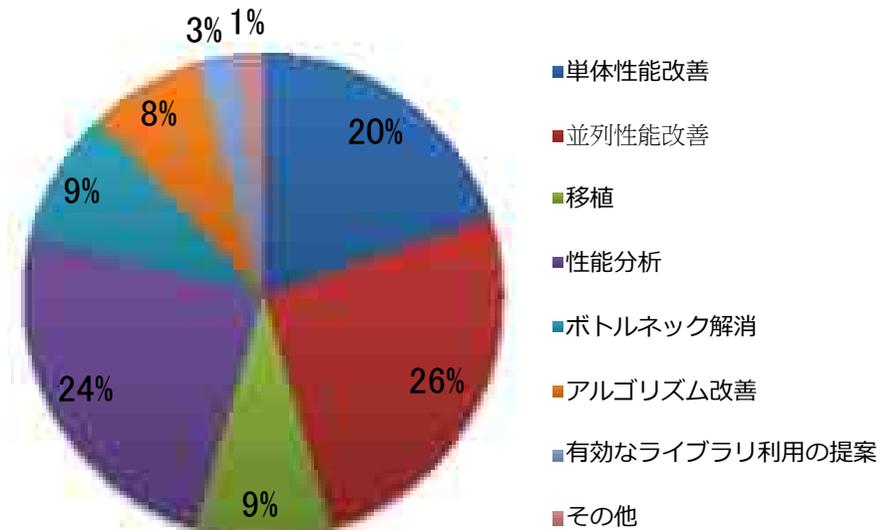
高度化支援（RISTが実施している京・HPCIの利用者向けプログラム並列化・高速化等の支援・相談サービス）を利用したことがありますか？



高度化支援を利用したことがある方にお尋ねします。高度化支援は役に立ちましたか？

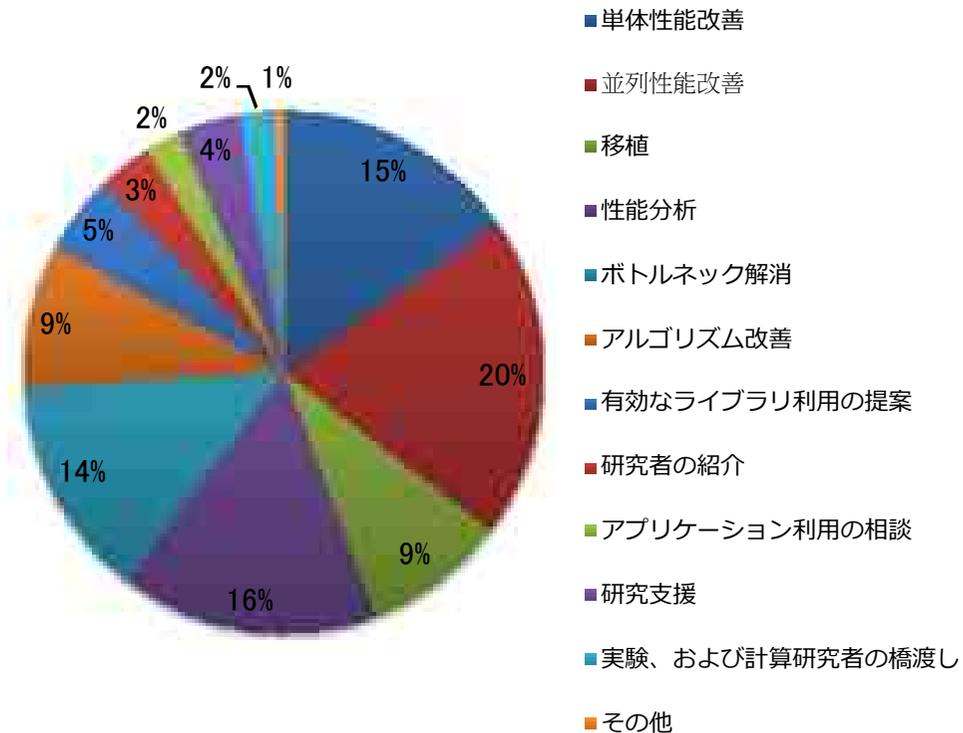


高度化支援が「役に立った」または「どちらかというと役に立った」を選択された方は役にたった内容を以下から選択してください（複数選択可）。



(性能分析とチューニング)

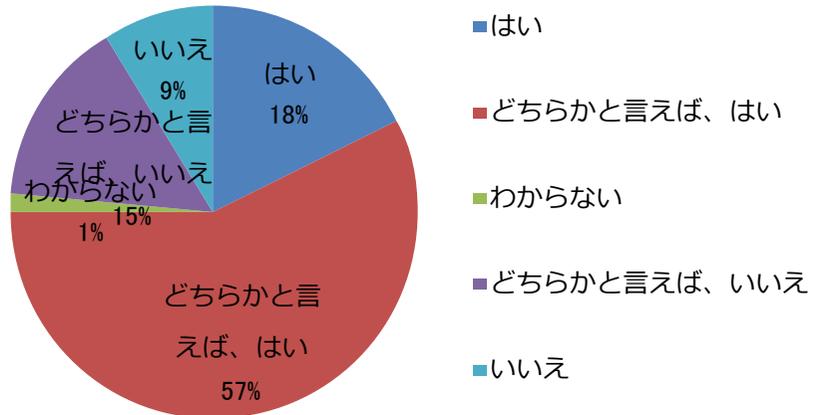
高度化支援について、今後、どのようなことを希望されますか？



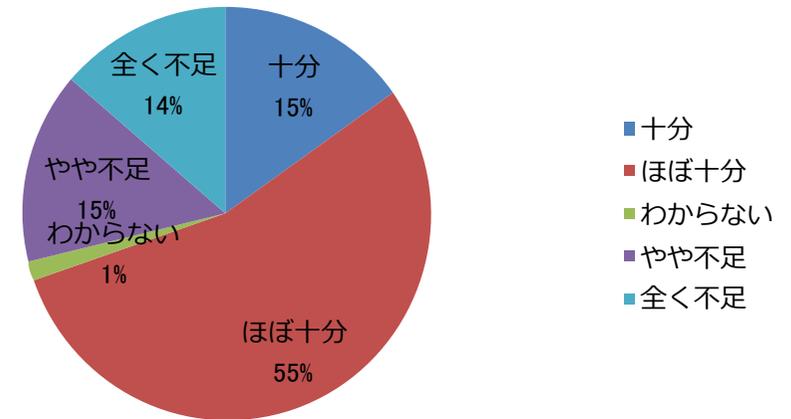


利用者アンケート 運用関連

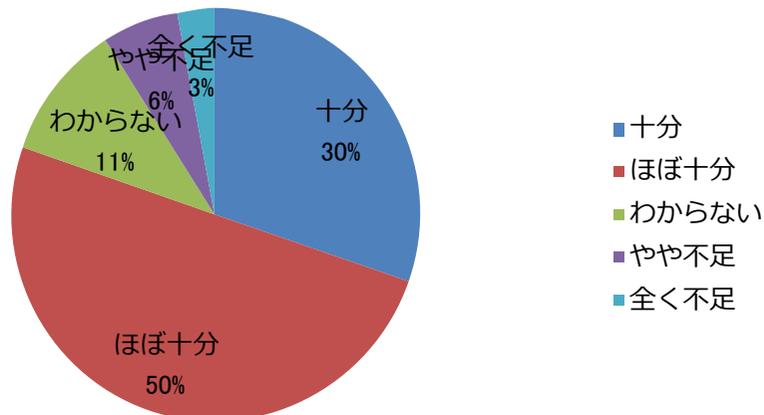
ジョブの待ち時間は合理的範囲内か



ジョブの実行時間上限



ジョブの同時受入数上限



ジョブの同時実行数上限

