

「京」の利用促進業務

— 事後評価自己点検結果報告の要点 —

2020(令和2)年10月14日

登録施設利用促進機関

一般財団法人高度情報科学研究機構(RIST)



目次

- 登録施設利用促進機関(RIST)の概要・ミッション
- 利用促進体制
- 利用促進業務
 - (1)「京」の共用
 - (2)公正な利用者選定の実施
 - (3)適切な利用支援の実施
 - (4)計算科学研究及びそれを支える人材育成の推進
 - (5)施設利用研究の成果の取り扱い
 - (6)理解増進活動の実施
 - (7)国際交流の推進
 - (8)「京」の運営に関する事項
 - (9)関係機関との連携
 - (10)地元自治体等との連携
 - (11)「京」から「富岳」への移行に伴う検討等
- まとめ



登録施設利用促進機関(RIST)の概要

一般財団法人高度情報科学技術研究機構

Research Organization for Information Science and Technology (RIST)



■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 一般財団法人に移行、共用法に基づく登録施設利用促進機関(登録機関)業務開始

■役職員

理事長 田島 保英

〈理事〉8名(常勤2名、非常勤6名) 〈監事〉2名 〈職員〉145名 ※人数はR2.3.31時点

■業務内容(RIST定款より)

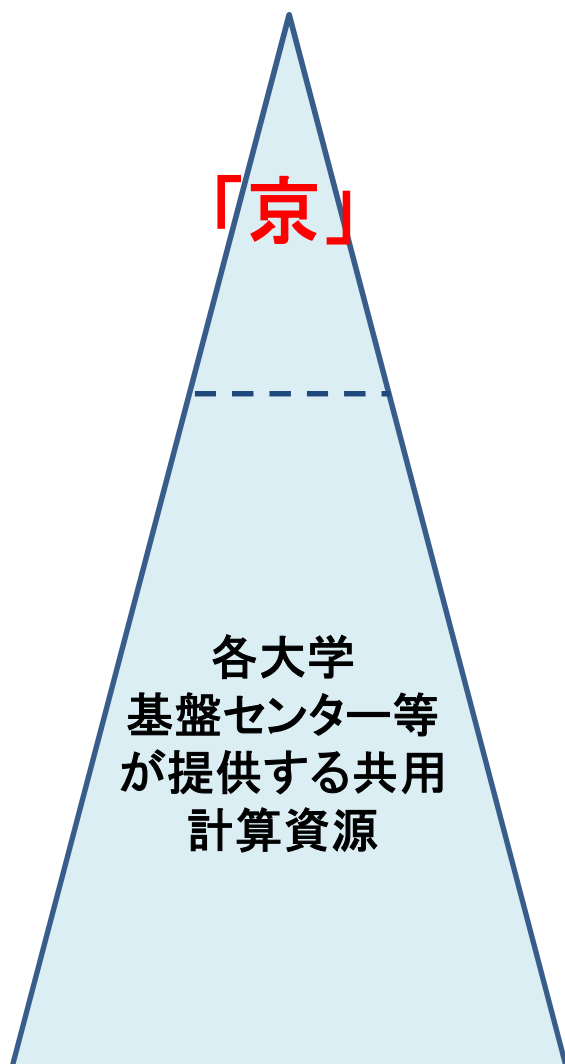
情報科学技術に係る研究・技術開発及び科学技術分野の情報の調査収集等を総合的に推進することにより、学術及び科学技術の発展に寄与することを目的とし、次の事業を行う。

- (1) 情報科学技術の高度化に関する研究開発及び調査
- (2) 情報科学技術の利用に関する技術開発及び技術支援
- (3) 原子力、地球環境その他の分野におけるコード、データベース及び情報等の調査収集及び整備提供
- (4) 前各号に掲げる事業の成果の普及
- (5) その他この法人の目的を達成するために必要な事業



登録施設利用促進機関(RIST)のミッション

HPCIシステム



共用法に基づく登録機関利用促進業務

- 利用者選定業務
中立・公正な利用者選定業務(利用制度設計、課題募集、審査等)
- 利用支援業務
一元的な窓口、各種の情報提供及び利用相談・技術相談、
アプリの高度化支援、成果の普及・公開等

文部科学省委託事業「HPCIの運営」に係る代表機関業務

- HPCIの運営に係る総合調整
 - 課題選定、共通窓口及び利用支援利用
 - アクセスポイント東京の運営及び産業利用促進
- 【分担機関へ再委託】
- HPCI共用ストレージ(東拠点及び西拠点)運用・保守・機能整備
 - HPCI認証局の運用・保守等
 - アクセスポイント神戸の運用及び産業利用の拡大



利用促進体制

RISTの組織体制

東海事務所

東京事務所

神戸センター
(センター付 3名)

登録施設利用促進機関として特定高速電子計算機施設の利用促進業務等を行うセンター

[法定要件]
うち、利用者選定に係る専任の管理者1名

[法定要件]
うち、研究実施相談者14名

計画推進室 5名

実施計画の立案、国際協力等他機関との連携促進、利用研究成果公開等に関する業務

安全管理室 4名

ネットワークシステムの管理・運用、施設利用における情報処理の安全性及び信頼性の確保

[法定要件] うち、ネットワーク管理者1名、情報処理安全管理者1名

管理部 6名

総務、契約、予算、経理、人事に関する業務

共用促進部 17名

利用者選定業務、利用相談(ヘルプデスク)等の共用促進業務

ヘルプデスク(一元的窓口機能)
(理化学研究所計算科学研究センター内)

産業利用推進部 7名

利用相談等の産業利用促進業務及びアプリケーションの調整・高度化業務、アクセスポイント(AP)東京の運営

HPCIアクセスポイント東京(AP東京)
(RIST東京事務所内)

利用支援部 12名

アプリケーションの調整・高度化の支援及び利用技術相談、施設利用促進のための講習会等実施

広報部 6名

広報・普及啓発、情報提供に関する業務

HPCI連携推進部

(RIST東京事務所駐在)

HPCIの運営に係る代表機関業務等

<参考>

HPCIの運営に係る代表機関業務実施主体部門。上記の利用促進業務実施部門と密接に連携

人数:登録施設利用促進機関業務に係る神戸センター常勤スタッフ数 計60名(役員を除く、R2.3.31時点)



(1)「京」の共用 / 課題種類変遷

| | ～27年度 | 平成28年度 | 平成29年度 | 平成30年度 | 平成31年度 令和元年度 ※2 | 備考 | |
|------------------------|---------------------------------|------------------|--------|---------------------------|--------------------|------------|------------|
| 一般利用枠 (公募) | | | | | ※1 | | |
| | 一般課題(通年:無償、4月開始、3月末完了) | | | | | | 成果公開、年2回募集 |
| | | | ※3 | 一般利用課題(通年:無償、10月開始、9月末完了) | | | |
| | 一般課題(トライアルユース:無償、競争的資金等獲得課題:有償) | | | | | | 成果公開、随時募集 |
| | 若手人材育成課題(通年、4月開始、3月末完了) | | | | | | 成果公開、年2回募集 |
| | | | ※3 | 若手人材育成課題(通年、10月開始、9月末完了) | | | |
| | 産業利用課題(実証利用) | | | | | | 成果公開、年2回募集 |
| | | | ※3 | 産業利用課題(通年:無償、10月開始、9月末完了) | | | |
| | 産業利用課題(個別利用:有償) ※4 | | | | | | 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 | |
| 重点的利用枠 (非公募) | | ポスト「京」研究開発枠重点課題 | | | | 成果公開 | |
| | 戦略プログラム | ポスト「京」研究開発枠萌芽的課題 | | | | 成果公開 | |
| | 重点化促進枠課題 | | | | | 成果公開、即時対応 | |

※1 R1.8.16「京」共用終了

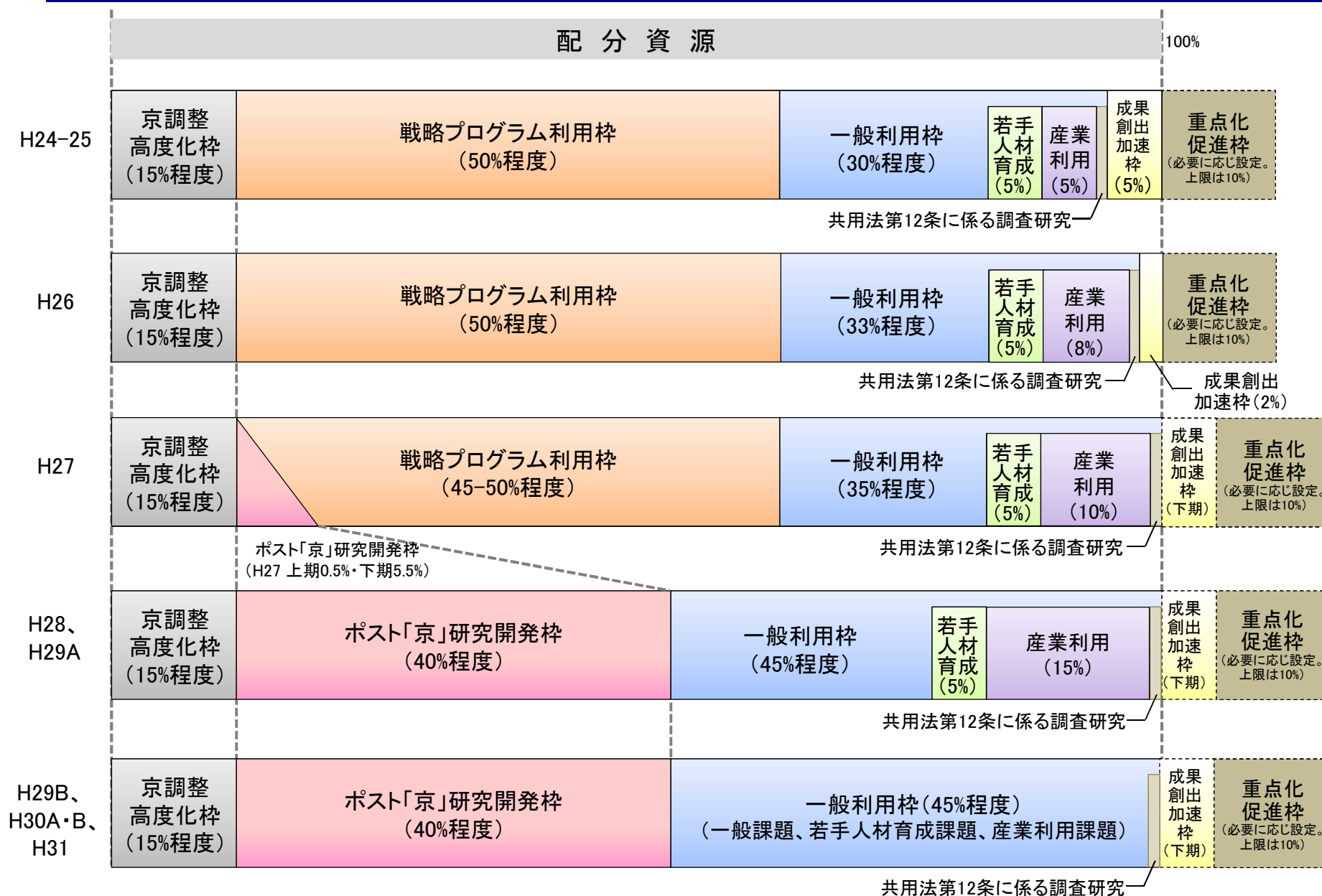
※2 H31(R1)年度「京」定期募集では半年課題として募集したが、課題の実施は上記「京」共用終了日までとなった

※3 H29年度下期利用より年2回の定期募集

※4 H26年度までは年1回の定期募集。H26年3月より随時募集



資源配分の変遷





利用者ニーズを取り込んだ課題募集

○定期募集＋追加募集

「京」及びHPCI課題について、共用開始からR2年度課題募集まで10回の定期募集*及びH25年度の追加募集を実施し、合計1,672件の応募から995件の課題を選定

* H29、H30年度の「京」利用課題は、年2回募集を実施

○随時募集

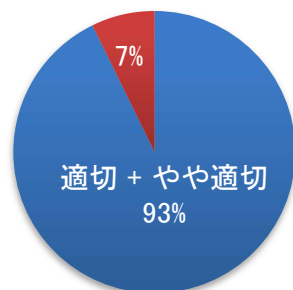
ユーザコミュニティ等の要望に応え、以下の課題を随時募集化又は新設

- ・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)
- ・HPCI共用ストレージ(共有型)利用課題を随時募集化(平成31年3月)

*ASP: Application Service Providerの略。
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)の意

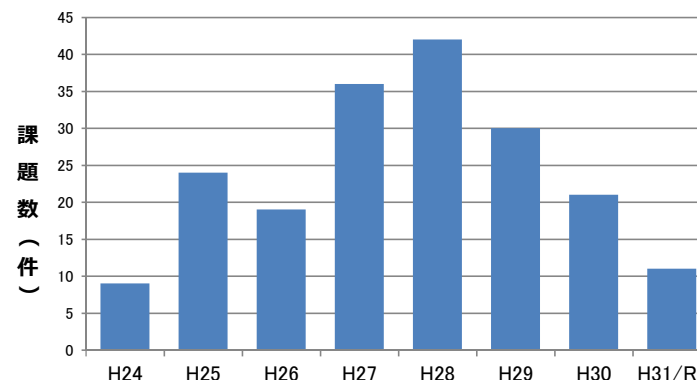
合計192件の応募から190件(令和2年3月末時点)の課題を迅速(数日～1か月以内)に審査し、タイムリーな選定を実施

様々な課題種別の設定は適切か



H28年度「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題及びH28年度中に終了した随時募集課題対象としたアンケート結果。
83課題の代表者より回答受領(第3回アンケート実施期間: H29.8.1～H29.10.2)

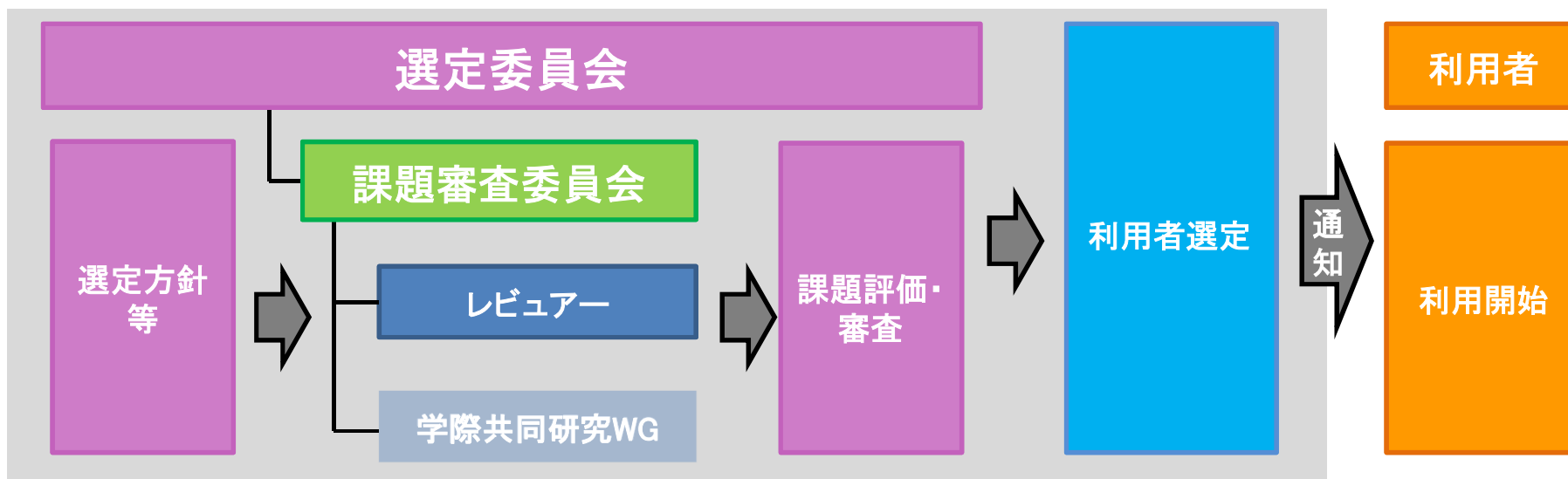
随時募集応募件数の年度推移



(2) 公正な利用者選定の実施 / 課題選定

課題選定の枠組み

- 施設利用研究課題(課題)の選定に当たっては、登録機関が中立・公正な立場で募集・審査及び選定を行う。
- 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等を策定のうえ、利用研究課題審査委員会/レビュアーがこれら方針等に基づき個別課題の評価・審査を実施する。審査結果は選定委員会に諮り、その意見を踏まえてRIST理事長が選定(各課題の採否等を決定)する。

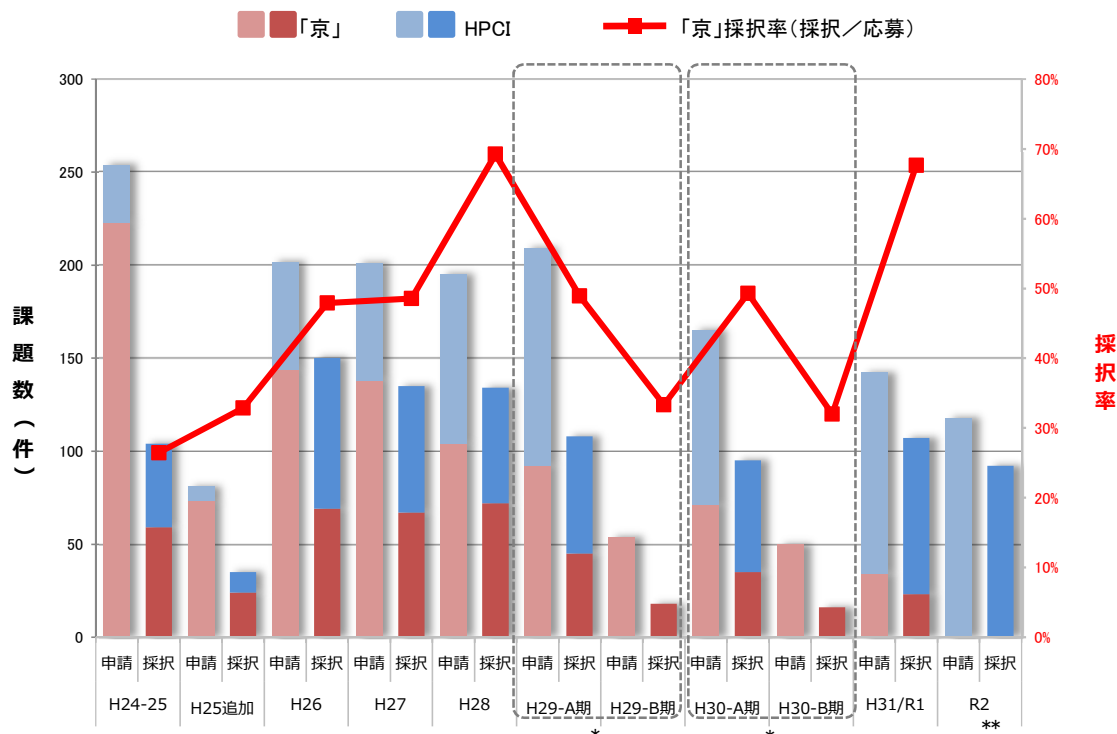


HPCIコンソーシアム等コミュニティの意見、利活用ワーキンググループ報告書、特定高速電子計算機施設の共用の促進に関する基本的な方針等を踏まえながら、利用枠の設定や選定基準の策定等を含め適切な利用者選定業務を実施。

応募・採択状況

- 「京」及び「京」以外のHPCIを合わせた年間応募数は200件前後で推移
- 「京」については、平成29年度から年2回募集とし、応募機会を拡大
- 各年度の実施課題の延べ参加者数は平成27年度以降2000名前後で推移
- H24共用開始からの実施課題の累積参加者数は、延べ約13,600人(R2年3月末時点)

課題の応募・採択状況

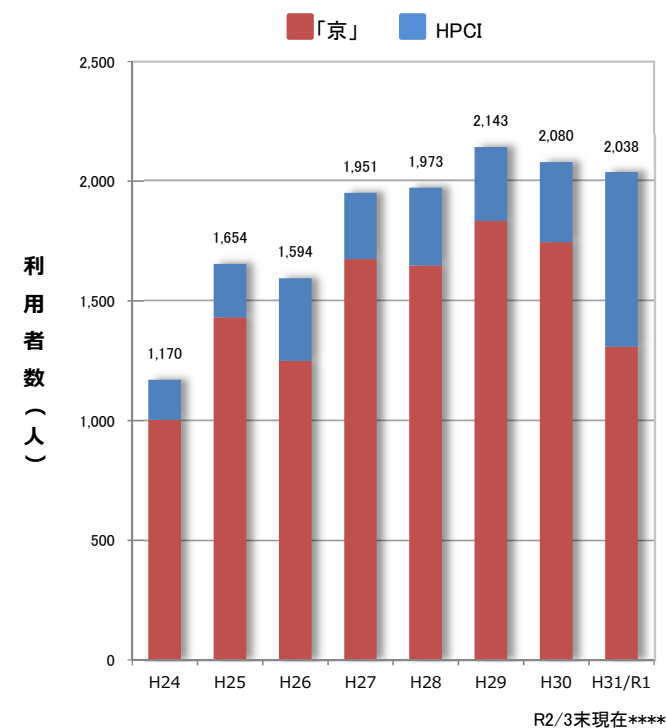


* H29、H30年度の「京」利用課題は、年2回募集を実施

** 「京」は、2019年8月16日に計算資源の共用を終了。

それに伴い、R2年度の課題募集では「京」以外のHPCI共用計算資源のみを対象に公募

実施課題参加者数***の推移



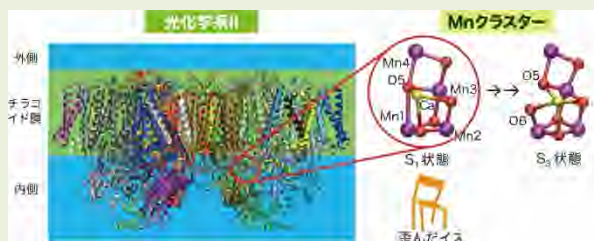
*** 戦略プログラム利用枠、ポスト「京」研究開発枠を含む

**** H31/R1の「京」参加者数は、共用終了時点を示す

化学分野 「京」一般課題及びHPCI一般課題

太陽光エネルギーを効率的に変換する人工光合成への貢献

- 光合成の最初の反応は水分解酸素発生反応である。本反応は「光化学系II」と呼ばれる巨大タンパク質のマンガン(Mn)クラスターで起こる。
- シミュレーションにより、Mnクラスターの全反応過程で起こる構造変化を明らかにした。それにより、自然系が獲得した最も効率的な水分解酸素発生反応の仕組みが解き明かされた。
- 本成果を人工光合成の触媒設計に応用する研究を進めている。



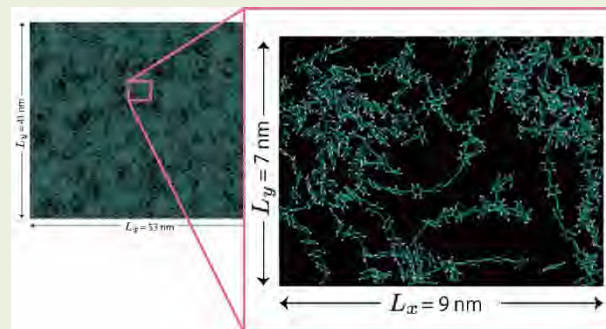
↑ 光化学系IIタンパク質の中のMnクラスター

- 「京」及び筑波大学COMA(PACS-IX)利用
- hp180154(H30「京」一般課題)、hp180163(H30 HPCI一般課題)
- 筑波大学／庄司光男助教

物質科学分野 「京」一般課題

物質中を走る電子の波を探る

- 分子のジャングルともいえる膨大な分子の集合体である有機高分子材料の中を流れる電子の波の様子を、世界で初めてシミュレーションで解明。
- 「京」全体を利用した世界最大の量子計算を行い、1億原子の大規模なレベルで高分子材料の中の電気が流れるメカニズムをシミュレーションで解明。
- 将来的には光と電子の相互作用を大規模なスケールで解明し、超フレキシブル電子機器や次世代ウェアラブル端末等の開発につながることを期待。



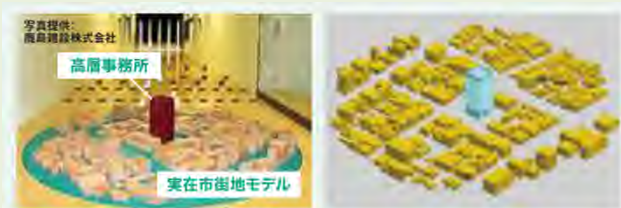
↑ 1億原子からなる有機高分子集合体計算の一部領域を可視化したもの(~53nm)と、その一部の拡大図(~9nm)

- 「京」利用
- hp150144(H27「京」一般課題)
- 鳥取大学／星建夫准教授

防災・減災分野 「京」産業実証利用(コンソーシアム型)課題

最大瞬間風速に耐える建築物設計 へのシミュレーション応用

- 風洞実験と同様に、10度ずつ方向を変えて高層建築物の全周から風をあてるシミュレーションを行い、耐風安全性評価に関し、風洞実験とほぼ一致する結果を得た。
- 都市部の実際の建築物の位置、高さ、詳細な形状を用いたシミュレーションに成功し、さらに、上空の気象が建物の高さ付近の風の変動に影響することを明らかにした。
- 風洞実験に代えて、より高度な解析ができるシミュレーションが活用されることで、建築物の設計法に変革をもたらすと期待。



↑ 左:風洞実験に用いた模型、右:シミュレーションに用いたモデル

- 「京」利用
- hp180056 (H30「京」産業実証利用(コンソーシアム型)課題)
- 東京工業大学/田村哲郎教授

生命科学分野 「京」産業実証利用(コンソーシアム型)課題

日本発の理論計算手法により 新しい創薬基盤の確立をめざす

- 「京」を使い、累積1,500種を超えるタンパク質-薬物候補物質の複合体のFMO法(タンパク質と薬物候補物質の結合性を計算機により精密に解析するフラグメント分子軌道法)による大規模計算を行い、結果を評価。
- FMO法による大規模な計算結果をデータベース化する取り組みをスタートさせた。
- 精査されたタンパク質の大規模計算結果を「FMOデータベース」として公開することで、創薬のスクリーニング期間短縮、新薬創製、創薬精度の向上に貢献する新たな創薬基盤となることが期待。



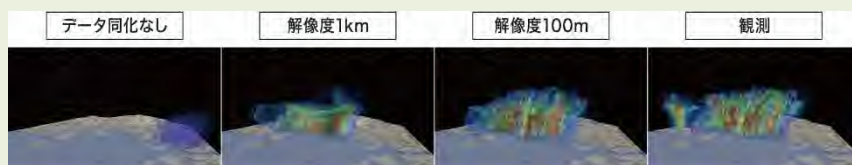
HPCIを利用した
FMO創薬研究体制 →

- 「京」利用
- hp160103 (H28「京」産業実証利用(コンソーシアム型)課題)
- 星薬科大学/福澤薫准教授

環境分野 「京」一般課題

予測不能だったゲリラ豪雨を 予測する手法を開発

- 気象レーダーの観測データとシミュレーションを融合することで、予測不能だったゲリラ豪雨を予測する手法を開発。
- ひまわり8号の気象データを「京」で解析することで、従来1時間ごとにしか更新されなかった天気予報シミュレーションを10分ごとに早めることが可能となった。
- スパコンによる高精度シミュレーションと気象観測ビッグデータの組み合わせは天気予報を革新し、気象災害から人々を守ることが期待される。



↑ 2014. 9.11に神戸市付近で発生したゲリラ豪雨の観測データ(右)と「京」によるシミュレーション結果

○「京」及び東京大学FX10利用
○hp170178(H29「京」一般課題)
○理化学研究所／三好建正氏

ものづくり 「京」産業実証利用課題

船舶のプロペラ性能向上 海上では不可能な実験を「京」で再現

- 大型船舶に使用されるプロペラは直径10mにもなり、実際の海での試験・性能測定実施は困難。
- 水流の状態を示すレイノルズ数が異なる条件下で、高速回転するプロペラ周辺の流れ場をシミュレーションで再現し、縮尺模型の実験では測定不可能であったプロペラ表面の渦の可視化をはじめ、詳細な流れ場のデータ取得に成功。
- 本成果が現実のプロペラ性能を高め、大型船舶の燃費性能が向上すれば、輸出入に係る膨大なコスト削減や温室効果ガス排出削減にも寄与できる。



←
左: 縮尺模型に色付き油を塗布した実験結果
中・右: 「京」シミュレーションを可視化した図。ピンク色の飛沫に見える粒は、高速回転時の表面における微細な渦を表す

○「京」利用
○hp170069(H29「京」産業実証利用課題)
○ジャパン マリンユナイテッド株式会社／藤澤竹春氏

(3) 適切な利用支援の実施 / 一元的相談窓口

- HPCIコンソーシアムの提言に基づき、特定先端大型研究施設を中核とするHPCIシステムに対し、利用者からのすべての問合せを受け付ける一元的相談窓口機能としてヘルプデスクを設置し、ワンストップサービス及び利用支援を実施
- 多種多様なレベルの異なる問合せに対し統一的に対応

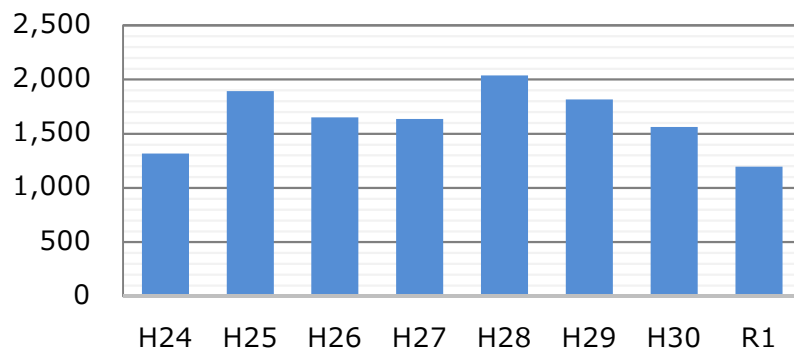


ヘルプデスクの運用

○ヘルプデスクでは、年間約1,600件の利用者からの問合せに対応

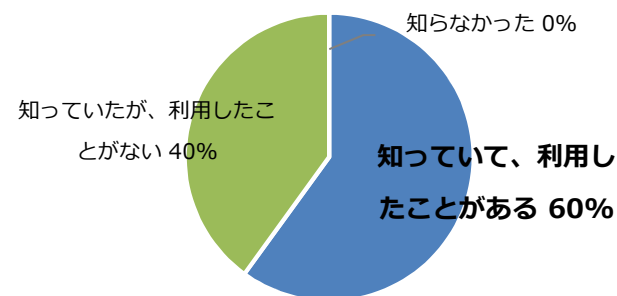
○関連機関と協力して早期解決に取り組み、問合せのうち約7割は1週間以内に解決

相談件数の年度推移(H24/9-R2/3)

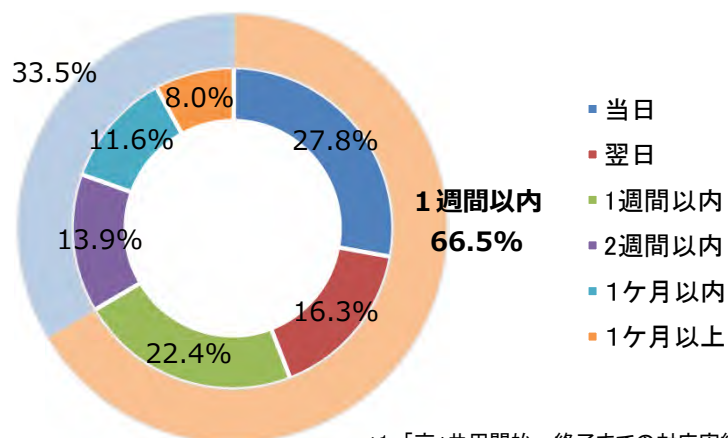


R2年3月末時点

Q. ヘルプデスクを利用しましたか？*2

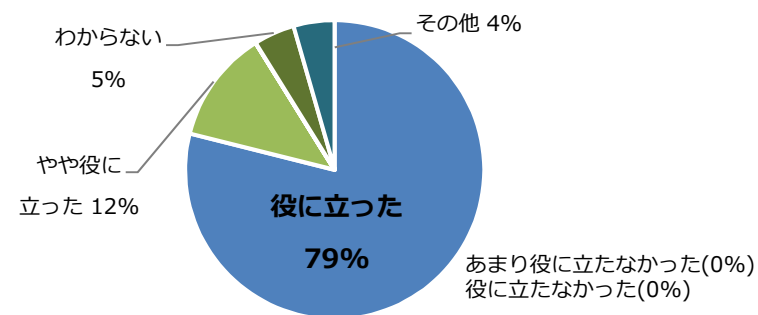


解決までの日数*1



*1 「京」共用開始～終了までの対応実績より

Q. ヘルプデスクは役に立ちましたか？*2

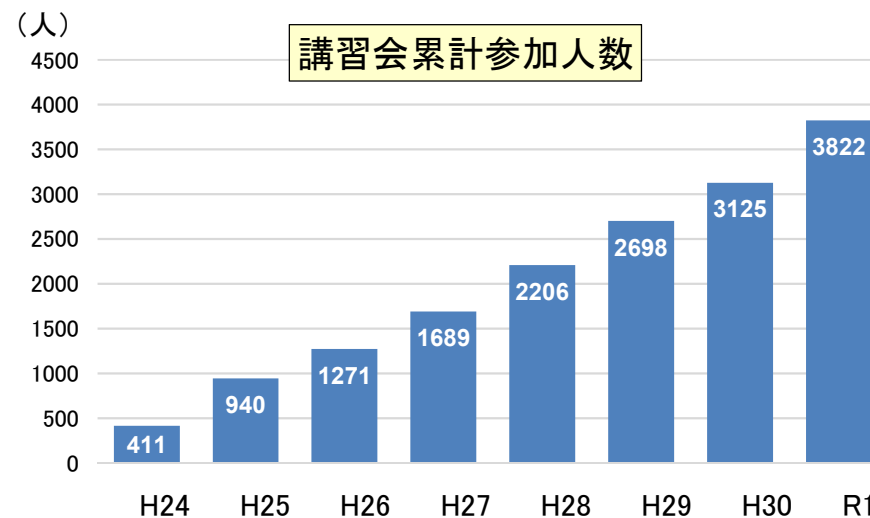
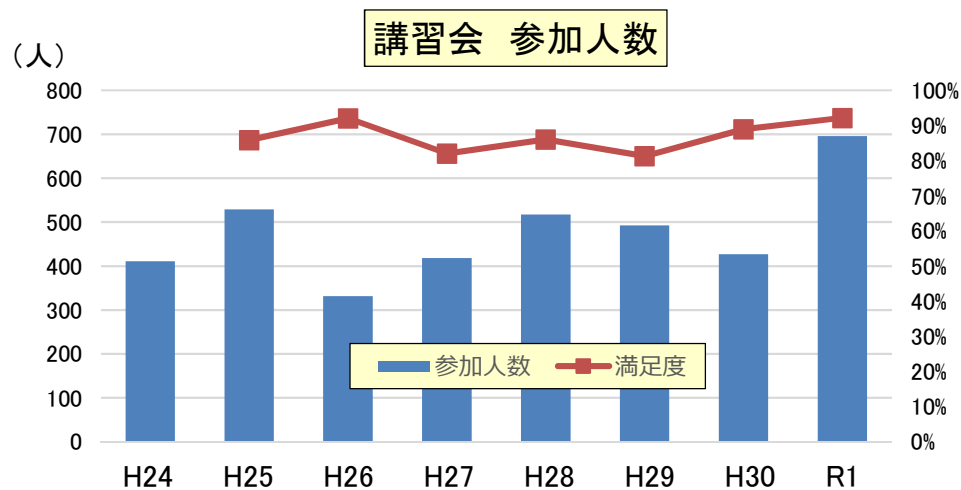
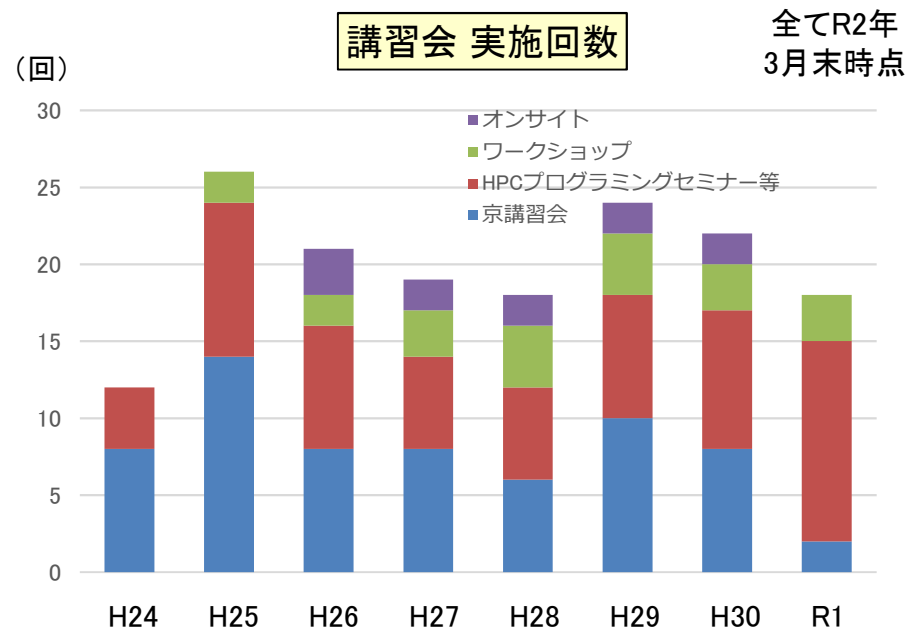


*2 H30年度中に終了したHPCI利用研究課題を対象にアンケート調査実施、計135課題の代表者より回答(実施期間:R1.8.7~R1.9.2)



講習会等の開催

- 利用者のニーズに応じて、目的を明確にしたワークショップ(WS)、オンサイト講習会、特定のアプリに特化した講習会を追加
- H27-28年度は開催回数を減らしつつ、ニーズ(H27年度から材料系WSを開始)に的確に応えることで参加人数が増加
- H29年度から「京」の募集が年2回になったことに合わせて「京」講習会の回数を増加
- R1年度はポスト「京」重点課題等と共催でWSを開催し、約200名が参加
- 常に80%以上の高い満足度
- 主催した講習会に累計3,822人が参加



○高度化支援の必要性

計算資源の有効活用と利用するアプリケーションによる成果の早期創出のため、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

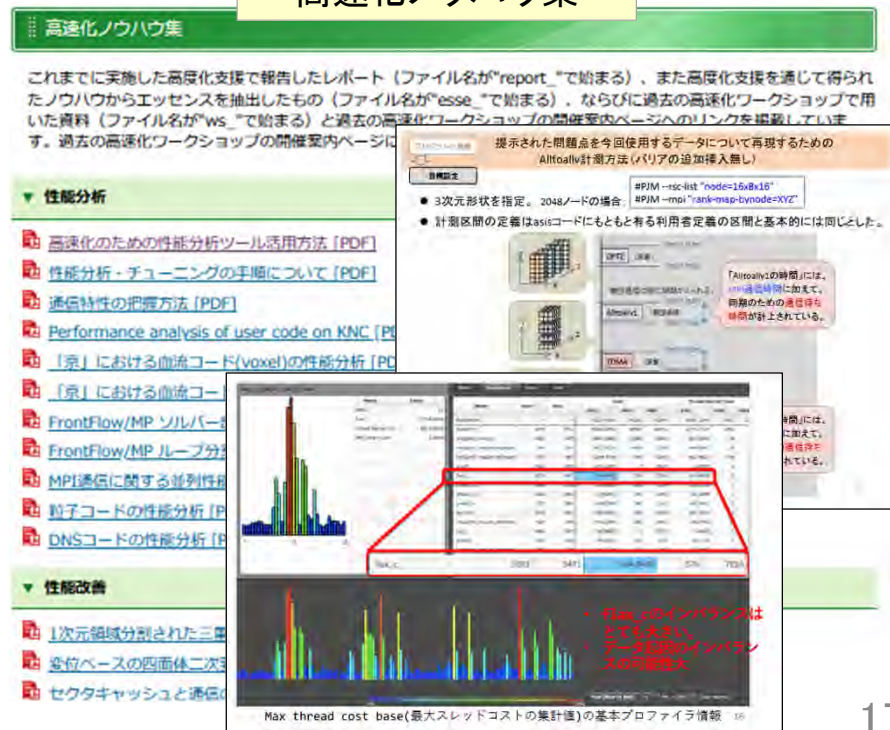
○体制

- ・14名の研究実施相談者、6名の支援補助技術者が高度化支援を実施
- ・材料、構造、流体、気象、量子、宇宙の分野の専門家が支援し、集約された情報を共有することで効率的・効果的な支援と支援員のスキルアップを促進

○実績 R2年3月末時点

- ・合計173件実施(うち70件は産業利用課題)、
「京」一般利用枠536課題中21%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、ポスト「京」重点課題等にも支援を実施
- ・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

高速化ノウハウ集



高速化ノウハウ集

これまでに実施した高度化支援で報告したレポート(ファイル名が"report_"で始まる)、また高度化支援を通じて得られたノウハウからエッセンスを抽出したもの(ファイル名が"esse_"で始まる)。ならびに過去の高速化ワークショップで用いた資料(ファイル名が"ws_"で始まる)と過去の高速化ワークショップの開催案内ページへのリンクを掲載しています。過去の高速化ワークショップの開催案内ページに

提示された問題点を今回使用するデータについて再現するための
Altociv計画方法(バリエアの追加挿入無し)

目標設定

- 3次元形状を指定。2048ノードの場合 #PJM --sc-list "node=16#x16"
- #PJM --mpi "rank-map-by-node=XYZ"
- 計測区間の定義はaxisコードにもともとする利用者定義の区間と基本的には同じとした。

「Altocivの計画」には、
この設定情報に加えて、
問題のための責任得る
情報が計上されている。

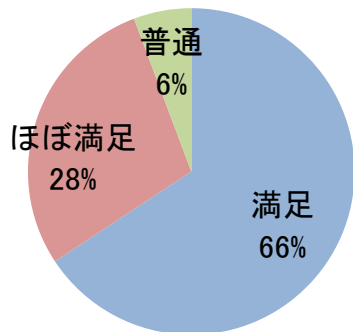
「Altociv」には、
この設定情報に加えて、
問題のための責任得る
情報が計上されている。

Max thread cost base(最大スレッドコストの集計値)の基本プロファイル情報

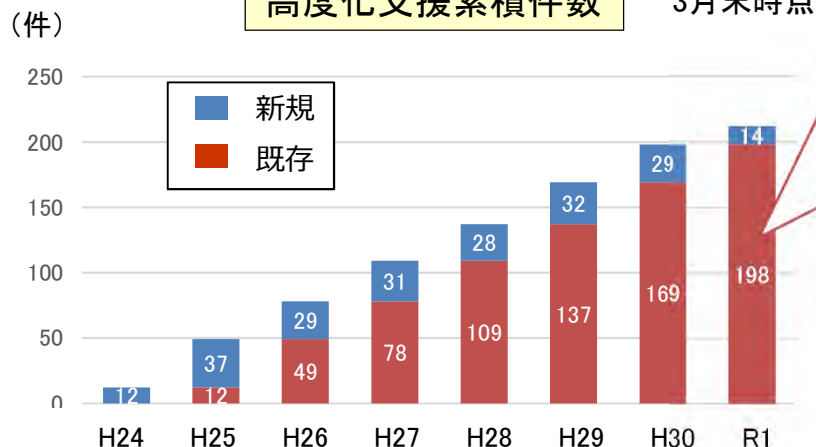
- ・Flax_cのインバランスはとて大きい。
- ・アーキテクチャのインバランスの可能性大

高度化支援 2/2

満足頂けましたか(回答数70)
(支援後のアンケート結果)

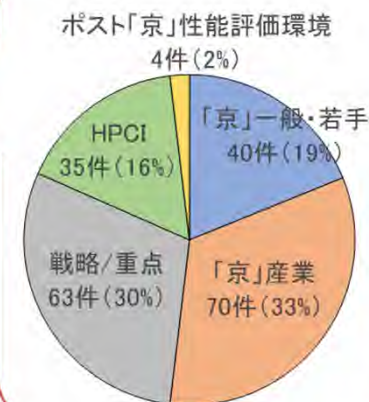


高度化支援累積件数



R2年
3月末時点

高度化支援総数内訳



○高度化支援/高速化による効果

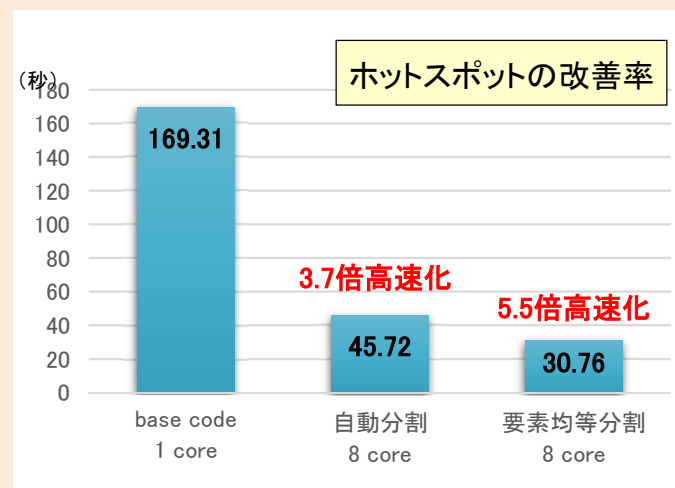
- ・高並列化支援で平均3.1(中央値1.7)倍の高速化、94%の高い満足度(満足+ほぼ満足)
- ・「京」利用に係るアプリソフトの高度化支援によって計算効率を高めることで、計算機資源の効率的な利用に換算された累積資源量は約58.2億円(ノード時間あたり14.53円として換算)分に相当

○アプリケーションソフトウェア(アプリソフト)利用環境整備

- ・利用者の利便性の大幅な向上、成果の早期創出、システムの効率的利用、利用者の裾野拡大等を図るため、アプリソフト利用環境整備(プレインストール、利用に有用な情報の提供等)を実施
- ・「京」その他HPCI共用計算機へ4本のOSS、及びHPCI共用計算機へ11本の国プロアプリを整備(利用者ニーズ、ソースコードの入手是非、有識者の意見等を基に整備対象アプリを決定)
 - 4本のOSS: [OpenFOAM](#)、[GROMACS](#)、[LAMMPS](#)、[Quantum ESPRESSO](#)
- ・HPCIシステム構成機関やアプリソフト開発者の協力を得て、国プロアプリのハンズオン講習会を実施

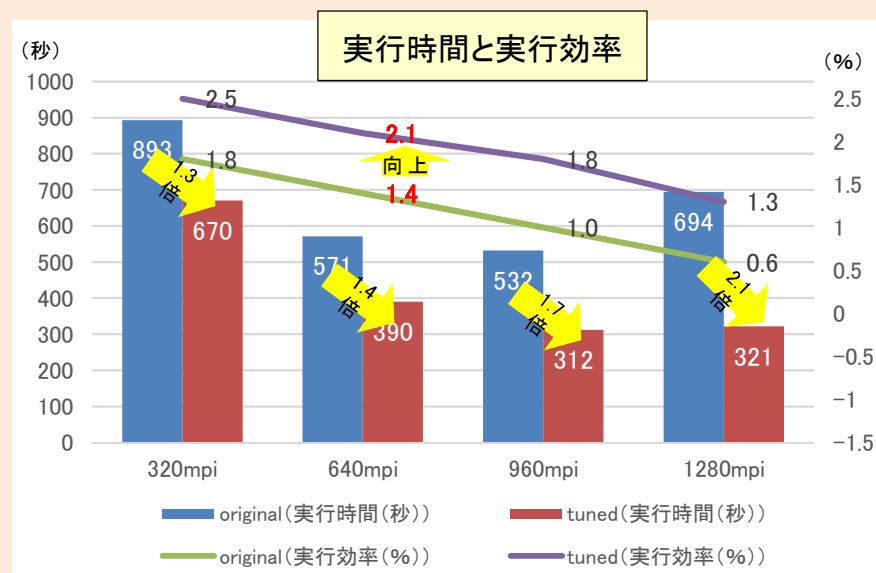
FrontISTR の高度化支援

- FrontISTRは、構造解析分野におけるOSS。
- 四面体二次要素(節点数84,056)を用いて性能評価した結果、高コストルーチンが「京」のノードが持つ8つのコアを活用できていないことが判明。
- ソースレベルでの依存関係解析を行うとともにロードインバランスを検出/改善と、キャッシュ利用効率最適化等の詳細なレベルでの最適化により、コンパイラによる自動分割で3.7倍、要素を均等に分割することで、5.5倍の性能向上を得る事ができた。



OpenFOAM の高度化支援

- OpenFOAMは、数値流体力学分野を中心に活用されているOSS。
- 大規模データ(9,700万格子)を用いて性能評価を行い、MPI通信処理のボトルネックを検出。
- ソースを詳細に解析し、通信順序変更による性能向上を得ることができた。さらにコンパイルリストから最適化の余地があるルーチンに対して、最適化を促進するコンパイラオプションを指定することにより、1.3倍~2.1倍の性能向上を得ることができ、実行効率も1.4%から2.1%(640mpi時)に向上することができた。





産業利用推進・支援

産業
利用
推進
体制

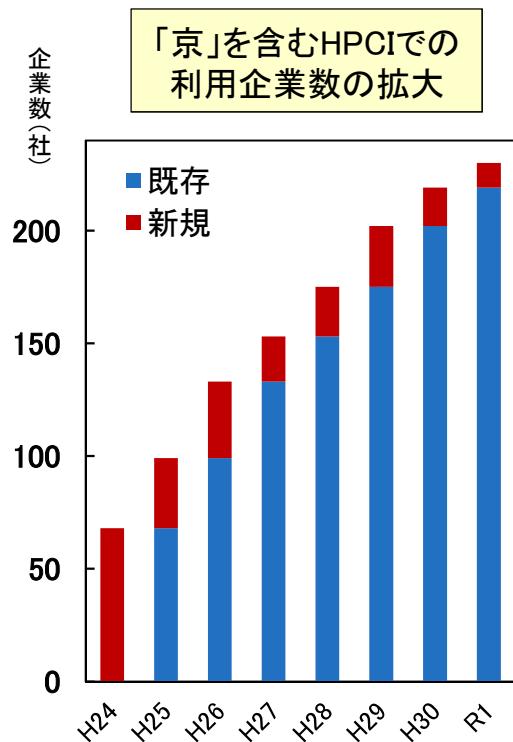
RIST産業利用推進部
(産業利用コーディネータを含む産業
利用推進に特化した組織)

東京分室/アクセスポイント
(産業界向け利用拠点として東京に設置)

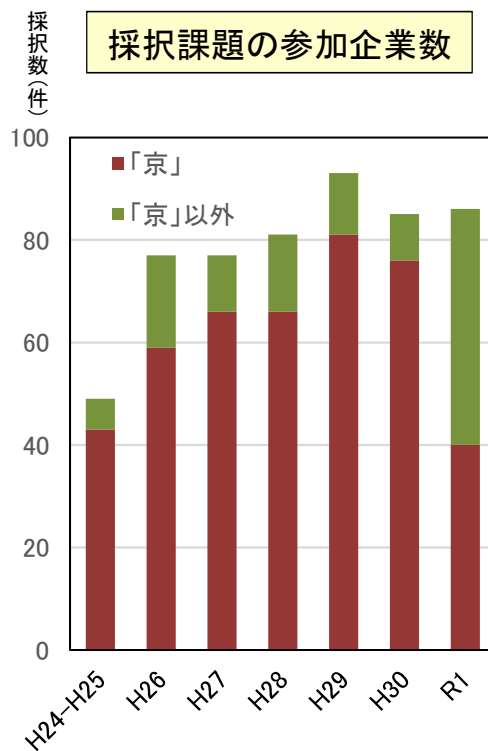
- 技術相談窓口において専任の技術スタッフが利用前相談、利用相談、プログラム高度化支援等を実施。
- アクセスポイント東京
セキュリティに配慮した作業用個室とHPCI利用端末を整備し、大規模データのダウンロード環境を提供。

| 利用促進・支援項目 | 内容・実績(R2年3月までの累積値) |
|--------------------------------|---|
| 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・利用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380件実施し、その内172件が課題に応募、採択は150件。 |
| ソフトウェア移植・アプリケーションソフトウェアの利用環境整備 | <ul style="list-style-type: none"> ● 保有する利用支援用スパコンFX10を活用し、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「京」上に移植・最適化するための支援を実施。 ● 産業界で利用ニーズが高いオープンソースのアプリケーションソフトウェアであるOpenFOAM(流体解析)、LAMMPS・QuantumESPRESSO・GROMACS(材料解析)等を「京」上に移植し、高速化・高並列化を実施。利用環境を整備し、Ready-to-useの環境を利用者に提供。 |
| 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4回開催(計253名の参加者中、企業は191名)。CAEワークショップを3回開催(計171名の参加者中、企業は125名)。材料系ワークショップを9回開催(1047名の参加者中、企業は648名)。 |
| 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支援を利用支援部と協力して実施。「京」の課題70件、「京」以外の課題9件を支援。 |
| 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。 ● アクセスポイント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156件、延べ310日)。 |

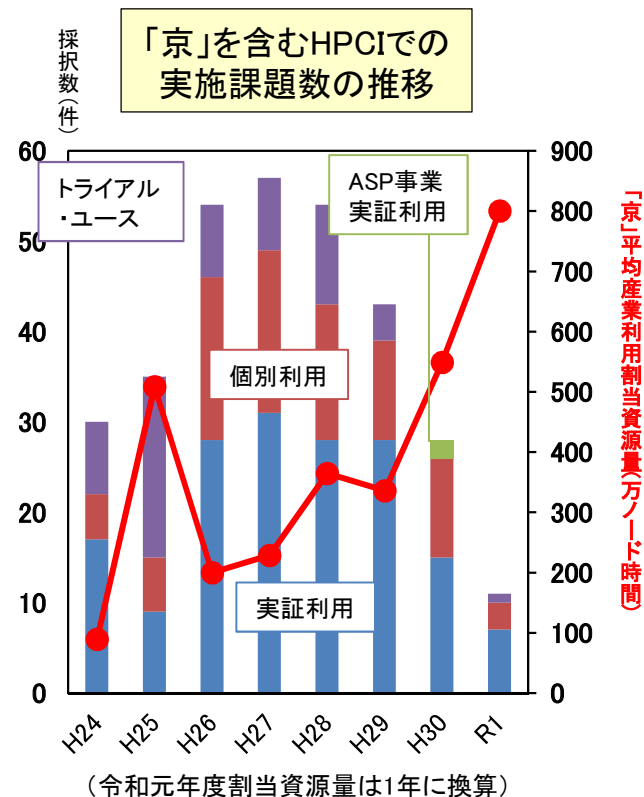
令和2年3月末時点



- ・企業数は着実に増加
- ・新規企業の伸びは緩やか



- ・毎年80社前後の企業がHPCIを利用
- ・H30まで「京」に利用が集中



- ・H29以降の課題数減少は、課題規模の増大が大きい
- ・大規模計算技術の向上が寄与

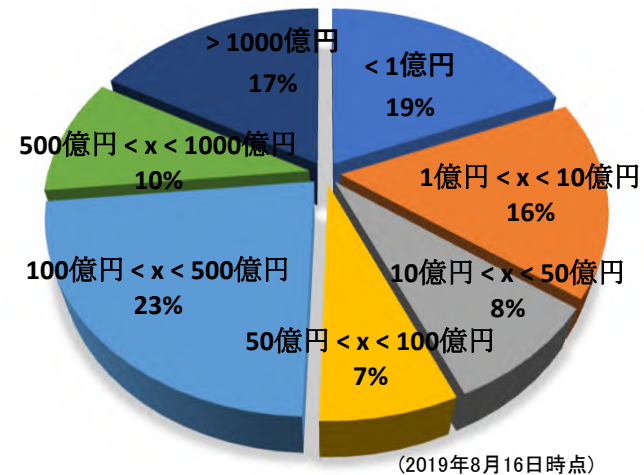
- ・「京」の利用を通じて、スパコンの産業利用が当初想定を大きく超えて進展
- ・利用環境の整備、丁寧な利用前相談や利用支援が産業利用の促進に有効

産業利用の実績 2/2

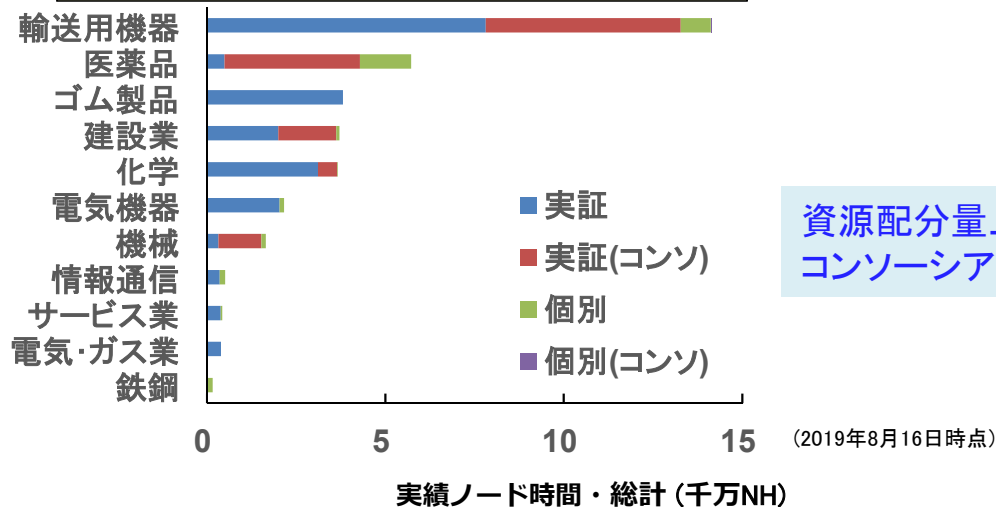
売上高トップ10におけるHPCI利用企業

| 業種 | トップ10内のHPCI利用企業数 | 当該業種のHPCI利用企業数 |
|-------|------------------|----------------|
| 輸送用機器 | 9 | 25 |
| 医薬品 | 7 | 24 |
| 電気機器 | 7 | 22 |
| ゴム製品 | 6 | 6 |
| 化学 | 5 | 15 |
| 建設 | 5 | 10 |

資本金別の「京」産業利用実績資源量



業種別の「京」産業利用実績資源量



半数が100億円以上で、1億円以下は19%と少なく、中堅・中小企業への更なる裾野拡大が今後の課題

資源配分量上位の業種では、コンソーシアム型実証利用(赤帯)が多い

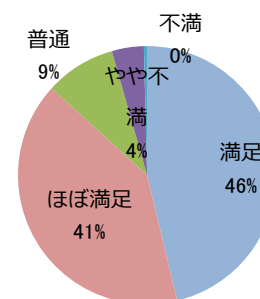


(4) 計算科学研究及びそれを支える人材育成の推進

○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 R2年3月末時点

| | 開催回数 | 参加者数 | | | | |
|----|------|-------|-------|-----|-------|-----|
| | | 合計 | 大学 | 研究所 | 産業 | 他 |
| 主催 | 160 | 3,822 | 1,285 | 558 | 1,831 | 148 |
| 共催 | 98 | 1,538 | 850 | 211 | 271 | 9 |

満足度
(講習会后アンケート結果、
回答数2,084件)



○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

■ 高度化支援や共同研究を通じた人材育成

- ・若手と習熟者をペアとして共同で高度化支援にあたることで、習熟者の指導による効果的な若手のスキルアップ・人材育成を実現
- ・大学等との共同研究におけるアプリソフト開発等を通して人材育成を実施
- ・8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のうえ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・技術を相互提供

■ 国内外の会議参加、外部発表

- ・米国SC、欧州ISCへ参加
- ・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、宇宙物理ほか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

R01年度までに14件の調査研究を実施

論文(共著含) 19件
 ゴードンベル賞 2件
 ファイナリスト(共著) 2件
 共用法第12条に係る調査研究 5件
 その他外部発表 219件

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

講習会等による人材育成事例

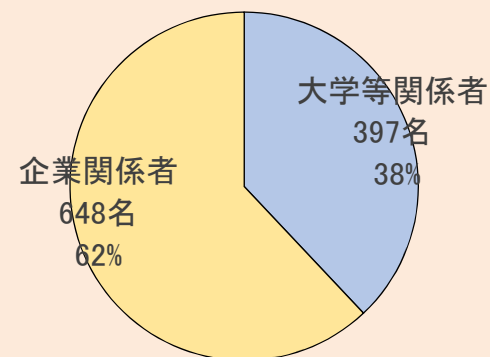
材料系ワークショップ

- 企業や研究機関等の材料系分野の研究・開発者を対象に、シミュレーションを行う際に有益となる技術情報の提供や、利用者間の情報交換、意見交換等に資するパネルディスカッションを実施。
- 材料系シミュレーションに活用可能なアプリケーションや研究事例を紹介するとともに、ワークショップにおいて紹介したアプリケーションを実際に利用するハンズオン講習会をその後に開催するなど、HPCIの利用の拡大や利用者の具体的なスキルアップにつながるメニューを展開。
- 平成28年2月より年2回のペースで、令和2年2月までに計9回開催。
毎回80名程度の参加者があり、累計参加者数は1,047名（うち、企業参加者は648名）。
- スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(産応協/ICSCP)や材料系のポスト「京」重点課題との共催や、他の材料系シミュレーションに関係する各機関の協賛により開催し、各関係機関等と連携しながら当該研究分野の利用を振興。

○利用者及び登録機関支援スタッフのスキルアップを促進
○産業利用関連団体との連携や、多数の企業関係者参加により産業利用を促進

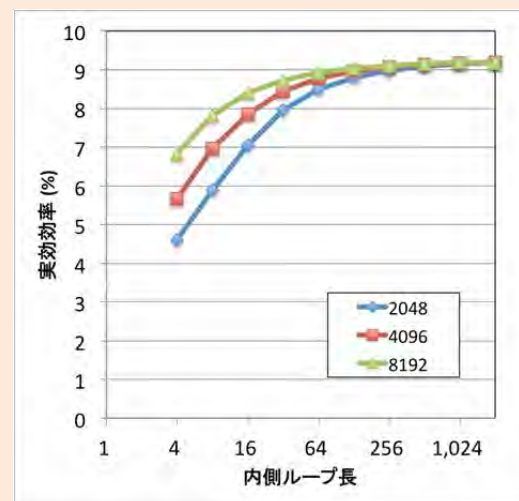


参加者の分類



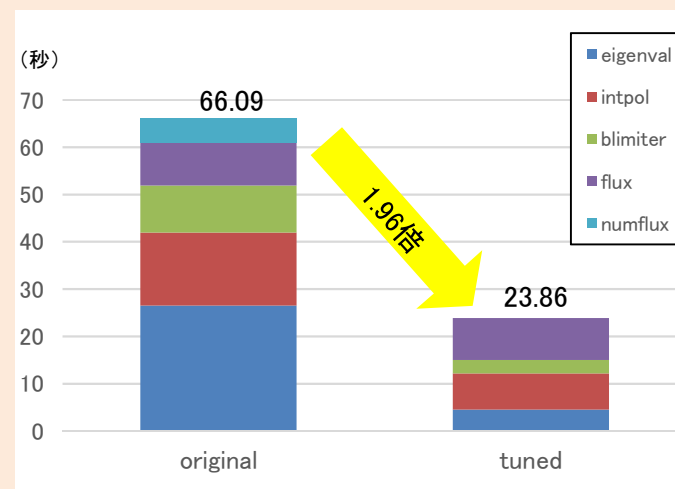
高次精度離散化手法に関する調査研究

- 「京」の高いSIMD性能とバンド幅性能を活かす計算手法は利用研究の効率的な推進に資する一つの重要な要素技術である。
- 格子分割を伴う離散化手法の精度を上げるために幾つかの方法があるが、離散化の帰結として得られる疎行列ベクトル積のデータと演算の局所性を高める方法として高次精度離散化手法がある。この手法を模擬するテストプログラムを調査したところ、局所性能増大(2048→8192)に伴い、実効効率が向上することが確認できた。(右図)
- 今回検証したアルゴリズムは汎用的で、様々な離散化手法に適用することができるため、同手法を利用する研究課題に広く資することが期待できる。



「京」における大規模磁気流体シミュレーションのための調査研究

- 磁気流体シミュレーションは宇宙物理や地球惑星科学等の分野における重要な研究手段のひとつである。
- 時間3次・空間2次精度の陽解法・オイラー的有限体積法と磁場の制限輸送法に基づいたコード(2,3次元版)を「京」上に移植し、性能分析および性能改善を実施した。
- 演算処理は、SIMD化の促進により1.96倍(2次元版)を達成。同様の処置は3次元版にも適用可能。また、I/O処理も出力方法とファイル操作方法の見直しで192ノードで6倍を達成したさらに並列化効率を下げることなく実行できる問題サイズを把握することができた。本コードにおける計算手法は当該分野で一般的であるため得られた知見は他コードにも適用可能。





(5) 施設利用研究の成果の取り扱い

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

- 利用報告書の公開
- 査読付き論文等発表による成果公開 (課題実施終了後3年以内)
- HPCI成果発表データベースへの登録
(査読付き/無し論文、国内外学会/会議/シンポジウム発表、新聞、TV、書籍、特許出願・取得、各種受賞実績など)

<成果公開例>
RIST発行の査読付き電子ジャーナル



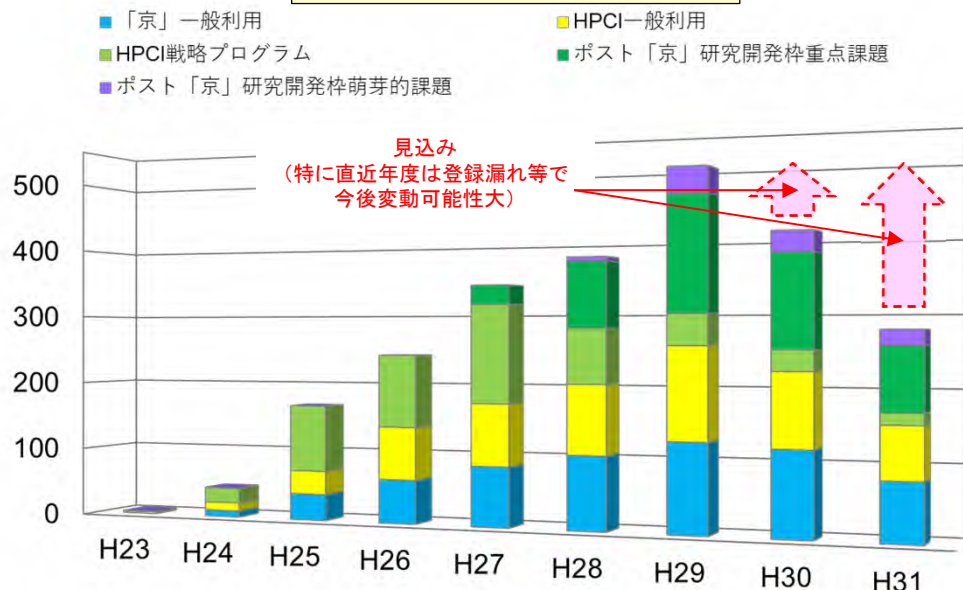
「利用分野から検索」機能による 利用報告書要約の表示例

The screenshot shows a search interface with a '分野別一覧' (List by field) section. A search for 'HPCI' is performed, leading to a detailed report summary for '全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開' (Development of Molecular Science of Virus by All-Atom Simulation). The summary includes the project title, dates, lead researcher, and a detailed description of the research goals and achievements.

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

査読付き発表論文数

令和2年3月末時点





成果の公開と普及

○HPCI利用報告書の公開

- ・報告書をデータベース化し、利用分野からの検索、課題毎の成果発表データベースへのリンクなどの機能を有する ※前ページ左下「利用分野検索」を例示
- ・公開中は計1,278課題、うち「京」が873課題
- ・ダウンロード数:約128,828回 (H26.7.15~R2.3.31)、うち「京」が93,501回

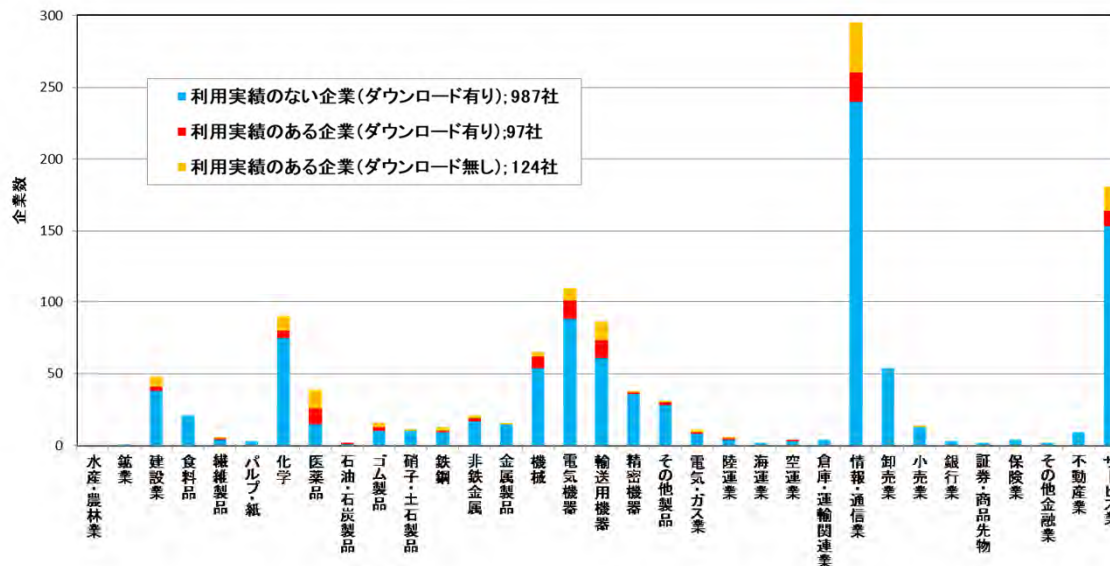
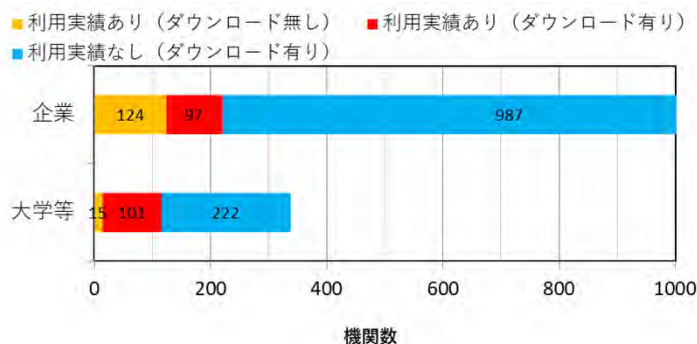
ダウンロード数トップ20(直近30日間、90日間)を公開
ほぼ常に「京」産業利用関係課題が半数以上を占める



○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

R2年3月末時点

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利用実績のある企業の業種数:21(33業種の64%) ⇒ ダウンロード元企業の業種数: 32(同97%)
→ HPCI利用研究成果への産業界の関心の広がりを示す



高被引用論文と国際共著論文*1

○「京」利用課題に係る高被引用論文 (Top 10%、Top 1%) の割合 (赤色) は、一部課題 (ポスト「京」萌芽的課題) を除き国内の科学分野全体 (青色) に比べ高い。なお、HPCI利用課題 (一般利用課題) においても、国内の科学分野全体に比べ同等以上である。

○全論文数に占める国際共著論文数の割合は国内の科学分野全体と同程度 (約3割) あり、「京」利用課題に係る高被引用論文割合 (赤色) は、国内の科学分野全体 (青色、但しTop 1%はデータなし) に比べ高い。

| 課題の種類 | 査読付き論文全体 | Top 10% 論文 | Top 10% 論文割合 | Top 1% 論文 | Top 1% 論文割合 | 国際共著論文 | 同左割合 | うち Top10% 論文 | 同左割合 | うち Top1% 論文 | 同左割合 |
|-------------|----------|------------|--------------|-----------|-------------|--------|--------|--------------|--------|-------------|-------|
| | A | B | B/A | C | C/A | D | D/A | E | E/D | F | F/D |
| 「京」一般利用 | 356 | 53 | 14.9 % | 6 | 1.7 % | 105 | 29.5 % | 24 | 22.9 % | 2 | 1.9 % |
| HPCI一般利用 | 423 | 43 | 10.2 % | 6 | 1.4 % | 134 | 31.7 % | 19 | 14.2 % | 1 | 0.7 % |
| 戦略プログラム | 404 | 81 | 20.0 % | 6 | 1.5 % | 133 | 32.9 % | 44 | 33.1 % | 4 | 3.0 % |
| ポスト「京」重点課題 | 394 | 52 | 13.2 % | 8 | 2.0 % | 119 | 30.2 % | 30 | 25.2 % | 3 | 2.5 % |
| ポスト「京」萌芽的課題 | 59 | 3 | 5.1 % | 0 | 0 % | 11 | 18.6 % | 0 | 0 % | 0 | 0 % |
| 合計 (重複排除) | 1,267 | 174 | 13.7 % | 19 | 1.5 % | 381 | 30.1 % | 86 | 22.6 % | 8 | 2.1 % |

国内全体 78,747 6,613 8.4 % 798 1.0 % 25,886 32.9 % 3,986 15.4 % - -

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

*1 Web of Scienceと成果発表DBの両方に収録されている論文数(ArticleとReviewに限定)(HPCI計算機資源を用いた成果、課題の種類間で重複あり)、高被引用論文はInCitesデータに基づく(2020/3/26)

査読付き論文被引用数トップ10*

* HPCI成果発表データベースに登録されている査読付き論文におけるトップ10

| 順位 | 被引用数 | 論文情報 | 課題番号 | 利用分野 | 課題の種類 |
|----|--------|---|----------------------------------|-----------|---------------------------|
| 1 | 414*** | Particle and Heavy Ion Transport code System, PHITS, version 2.52, Sato, T. <i>et. al.</i> JOURNAL OF NUCLEAR SCIENCE AND TECHNOLOGY(2013) | hp120091 | バイオ・ライフ | 「京」一般 |
| 2 | 354** | Unusual Stability of Acetonitrile-Based Superconcentrated Electrolytes for Fast-Charging Lithium-Ion Batteries, Yamada, Y. <i>et. al.</i> JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY (2014) | hp130021 hp140232 | 物質・材料・化学 | 戦略プログラム (分野2) |
| 3 | 285** | First-Principles Study of Ion Diffusion in Perovskite Solar Cell Sensitizers, Haruyama, J. <i>et. al.</i> JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY (2015) | hp150055 hp150068 | 物質・材料・化学 | HPCI一般 |
| 4 | 253* | O(N) methods in electronic structure calculations, Bowler, D. R. <i>et. al.</i> REPORTS ON PROGRESS IN PHYSICS (2012) | hp120301 | 物質・材料・化学 | 戦略プログラム (分野2) |
| 5 | 246** | Integrated molecular analysis of adult T cell leukemia/lymphoma, Kataoka, K. <i>et. al.</i> NATURE GENETICS (2015) | hp150232 | バイオ・ライフ | 戦略プログラム (分野1) |
| 6 | 219*** | Superconcentrated electrolytes for a high-voltage lithium-ion battery, Wang, J. <i>et. al.</i> NATURE COMMUNICATIONS(2016) | hp160075 hp160225 | 物質・材料・化学 | 「京」一般/ ポスト「京」 重点課題5 |
| 7 | 210** | Hydrate-melt electrolytes for high-energy-density aqueous batteries, Yamada, Y. <i>et. al.</i> NATURE ENERGY(2016) | hp150275 hp160075 hp160225 | 物質・材料・化学 | ポスト「京」 重点課題5/ 「京」一般 |
| 8 | 184** | Termination Dependence of Tetragonal CH ₃ NH ₃ PbI ₃ Surfaces for Perovskite Solar Cells, Haruyama, J. <i>et. al.</i> JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS (2014) | hp140110 | 物質・材料・化学 | HPCI一般 |
| 9 | 163*** | Modeling GW170817 based on numerical relativity and its implications, Shibata, M. <i>et. al.</i> Physical Review D (2017) | hp150262 hp170230 | 物理・素粒子・宇宙 | ポスト「京」 重点課題9 |
| 10 | 161* | Absence and presence of Dirac electrons in silicene on substrates, Guo, ZX. <i>et. al.</i> PHYSICAL REVIEW B (2013) | hp130004 | 物質・材料・化学 | 戦略プログラム (分野2) |

「高被引用論文」に該当する論文

*** トップ0.1% ** トップ1% * トップ10%

令和2年6月30日時点 InCitesデータ

(6) 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

若年層の計算科学に対する理解増進のため、初心者向けとして「はじめてのプログラミング」、経験者向けとしてスパコンを使って課題に取り組む「スパコン体験塾」を開催。



国際会議への出展

HPC分野の代表的な国際会議であるSCをはじめ、ISC、SCAsiaへも出展し、研究課題の成果について動画、講演、ポスターなど様々な形で発信。



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、理研R-CCS等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。

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。



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

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

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。

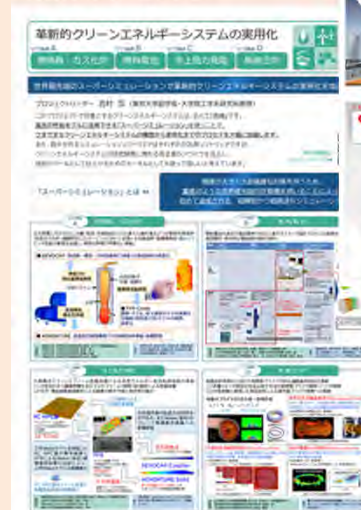
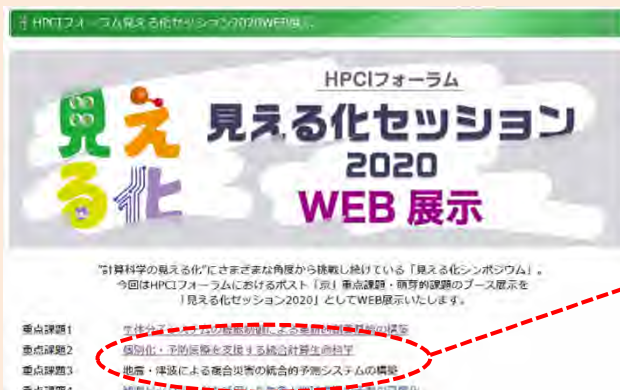
成果事例集、広報誌の発行

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。



見える化セッション

- 計算科学分野における成果の“見える化”を様々な方法で推進。
- 直近の令和元年度においては、「京」研究開発枠/重点課題及び萌芽的課題と連携し、「HPCIフォーラム」の中で「見える化セッション2020 Web展示」を実施。課題毎に成果動画を含むWebブース展示を実施。



- 次世代蓄電池の開発を目指して (5:49) 秒
- CO₂の分離・回収 [フルサイズ版] (7:24) 秒
- CO₂の分離・回収 [短縮版] (3:46) 秒
- リニューアルしたホームページ

上：動画展示
左：ポスター展示

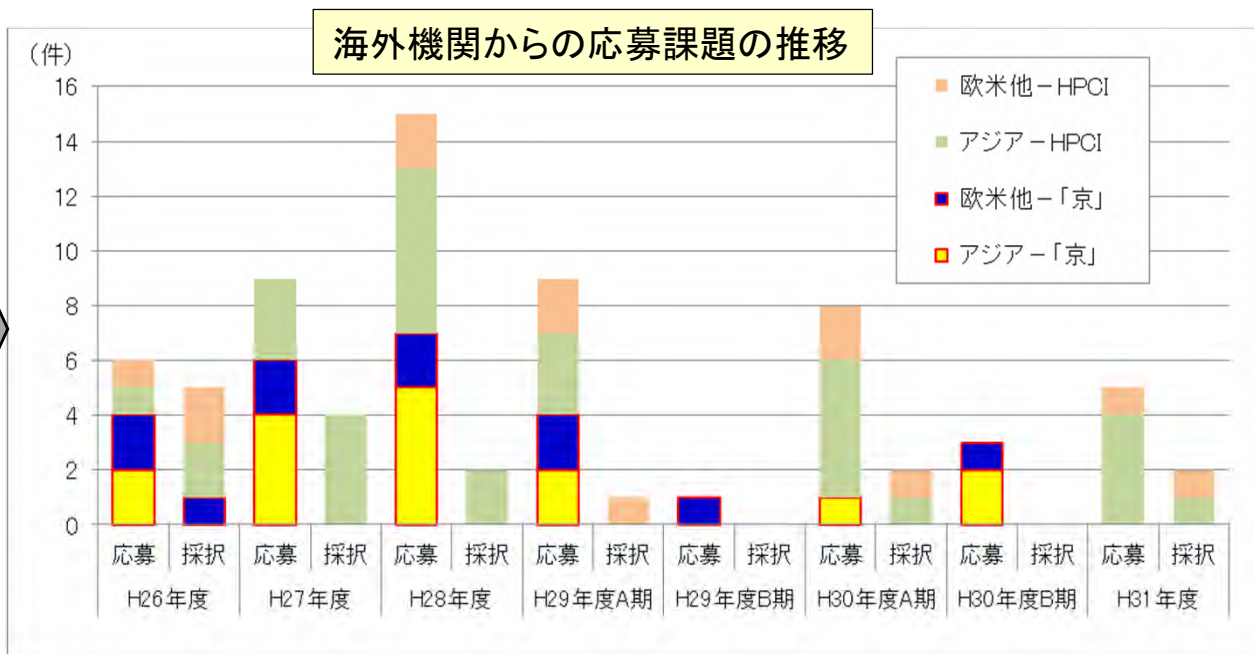
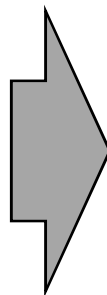
スパコン体験塾

- 高校の先生から寄せられた「進路を決める前の中高生のうちから実際にスパコンを体験させたい」という要望にこたえる形で平成30年度から令和元年度にかけて2回開催。
- 参加者(スパコンに興味のある中高生)は、HPCI構成機関である大阪大学と東京工業大学の主催しているプログラミングコンテスト「SuperCon」の過去本選問題を題材に、スパコンの性能を体験。
- 令和元年度においては「京」を使用し、自分で一からアルゴリズムを構築し自分でコードを作成のうえ、MPIを使った並列計算にも挑戦。



(7) 国際交流の推進

国際競争力の向上及び国際協力の推進を図るため、原則として、「京」を含むHPCIを海外の研究者等にも国内の研究者等と同様に公平に共用に供することで、国内外の研究者による先端的・革新的な研究等を促進



海外HPC運営機関等とのMOUを通じた施設利用促進に資する情報交換、3機関[RIST、PRACE、XSEDE]共同利用支援の推進等



欧州 PRACE
Partnership for Advanced Computing
in Europe



米国 XSEDE
The Extreme Science and Engineering
Discovery Environment



シンガポール NSCC
National Supercomputing Center

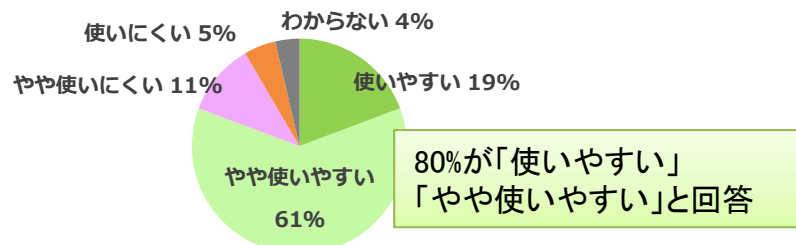
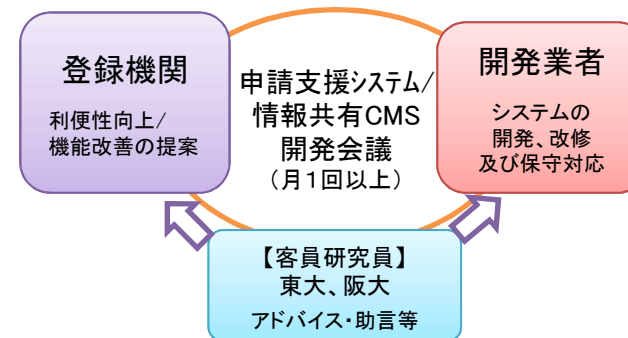
(8)「京」の運営に関する事項

○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

○利用者視点に立った各種手続き簡素化、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



平成28年度「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題、および同年度中に終了した随時募集課題対象アンケート。83課題の代表者より回答。

○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。

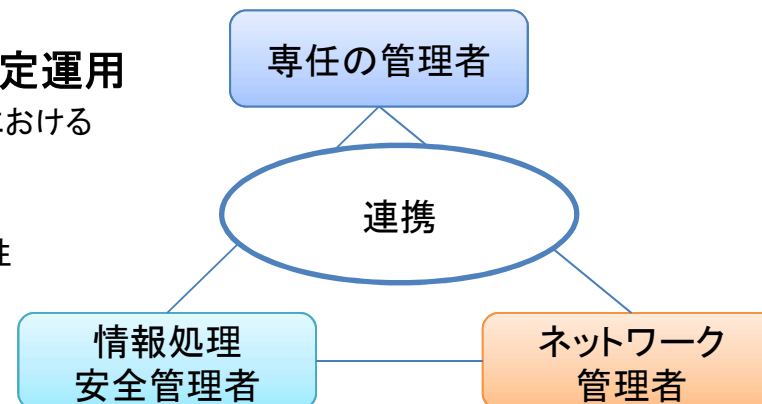
⇒ **情報セキュリティインシデント発生 ゼロ**

- ・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、理研R-CCS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**



(9) 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、「京」の共用を一体的に促進

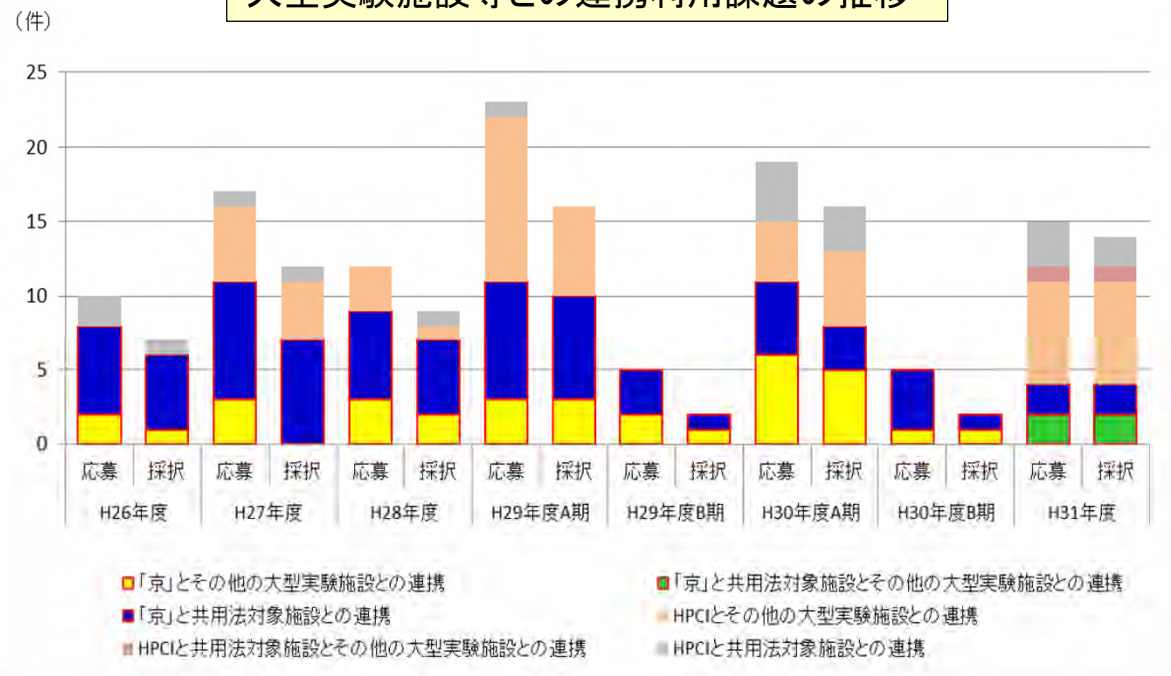
○HPCIコンソーシアムとの連携

- ・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を実施
- ・HPCIの構築と運営に協力

○大型実験施設とスーパーコンピュータの連携

- ・大型実験施設(SPring-8/SACLA、J-PARC MLF等)との連携利用促進による新たな研究成果の創出
- ・連携利用シンポジウムによる実験科学研究者と計算科学研究者との融合・連携研究促進

大型実験施設等との連携利用課題の推移



連携利用シンポジウム実績

| 年度 | サブテーマ | 参加者数 |
|-----|--------------------|------|
| H26 | - | 103名 |
| H27 | ソフトマター科学を中心として | 126名 |
| H28 | 最先端電池材料 | 135名 |
| H29 | 生体物質のダイナミクス | 125名 |
| H30 | 熱電材料 | 82名 |
| R1 | 構造物性の階層性とフォノン物性の理解 | 102名 |

連携利用課題例

ゴム材料を分子から見つめ直し 高性能タイヤの製品化を実現

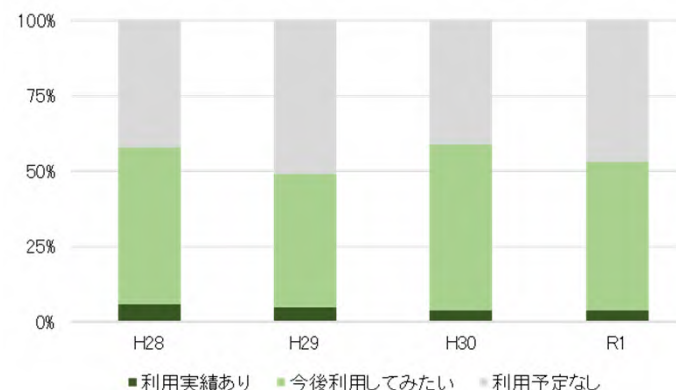
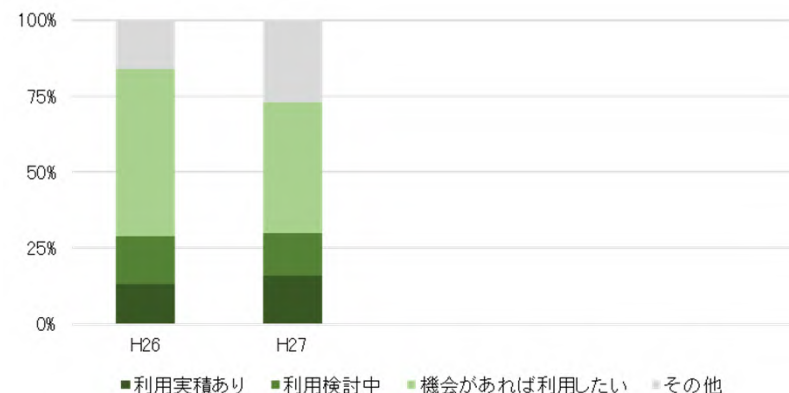
- 「京」によるゴム材料のシミュレーションにより、従来品より51%も耐摩耗性を高めたタイヤを製品化。
- 本シミュレーションとともに、大型放射光施設「SPring-8」と、大強度陽子加速器施設「J-PARC」で、現実のタイヤ素材の構造を解析する研究も同時に進めている。これらの施設で得られたタイヤ素材の分子レベルのデータをもとに「京」でシミュレーションを行い、その結果をもとに素材開発や工程開発に役立てている。こういった2012年からの継続した取り組みによる、計算速度向上、モデルの精度向上によって、従来より飛躍的に効率よくタイヤを開発することが可能になっている。



↑「京」で作成したシリカの粒子にカップリング材が結合しているモデル図

住友ゴム工業の大型実験施設との連携及び「京」産業利用
 ○「京」、SPring-8(2015年)、J-PARC(2015年)
 ○hp120032、hp140049、hp170063(「京」産業利用)

連携利用シンポジウム参加者アンケート 「連携利用について」



参加者のうち55%が「利用検討中」又は「利用したい/利用してみたい」と回答

(10) 地元自治体等との連携

○地元自治体や関係する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

- ・兵庫県・神戸市等と市民向けスパコンセミナーを共催
- ・高校生を対象とした「スパコン体験塾」「はじめてのプログラミング」を開催
- ・神戸青少年科学館でのサイエンスフェスティバルへの出展



神戸医療産業都市一般公開(計算機歴史博物館)



はじめてのプログラミング

(11)「京」から「富岳」への移行に伴う検討等

- 「京」から「富岳」への移行スケジュール等の具現化に際し、移行に伴う計算機資源の確保検討を実施。「京」の利用促進業務に関連し、「京」の共用終了から「富岳」共用開始までの移行期間において、HPCI第2階層資源より計算機資源を補填。

| 計算資源 | H30年度 | R1年度 | R2年度 | R3年度 |
|--------|------------------------|---------------|-------------------------------------|-----------------------------|
| 「京」 | H30A「京」課題 H29B「京」課題 | | H31A「京」課題 H30B「京」課題 | |
| 「富岳」 | 補填資源相当 | | 成果創出加速プログラム課題 「富岳」試行的利用公募課題(下期~) | 成果創出加速プログラム課題 「富岳」一般公募課題 |
| 第二階層資源 | H30 HPCI課題 | H31/R1 HPCI課題 | R2 HPCI課題 | R3 HPCI課題 |

▼ 8/16

「京」共用終了 → 成果公開手続き、補填資源への移行支援等

- 令和2年3月に外部有識者により構成するアドバイザー委員会をRIST内に設置し、これまでの「京」の利用者選定実績、利用ニーズ、及び「富岳」共用開始後の早期成果創出促進を踏まえた利用制度等の検討を開始。
- 「富岳」CPUに採用されているARMアーキテクチャを開発したArm社と情報交換のための打ち合わせ等を開始するとともに、理化学研究所との連携の下、「富岳」共用前評価環境を利用し、「富岳」での利用希望が多いと考えられる4本のOSSの整備に向けた調査を実施。

まとめ

- 「京」の設置・運用者である理化学研究所、利用促進業務を行う登録機関及びHPCIコンソーシアムは、連携・協力し、一体となって世界最高水準の成果創出と成果の社会還元を目指して、「京」の共用の促進に努めた。
- 利用者選定にあたっては、中立性・公正性を保証した利用者選定業務を実施し、産業界を含め、多様な分野の研究者等に対して「京」の利用機会を提供した。
- 利用支援にあたっては、あらゆる相談を一元的に受けるワンストップ窓口（ヘルプデスク）を設置・運営するなど、利用者側視点に立った支援業務を実施した。
- 産業利用については、産業利用コーディネータによるコンシェルジュ的相談対応その他様々な促進施策により、「京」の利用は当初の3倍強の規模（注：H24 → H31/R1における採択課題あたりの平均提供資源量）に拡大するなど、産業界における計算科学の活用を大きく進展させた。
- 今後、「京」の後継機である「富岳」をはじめとするスーパーコンピュータの性能の飛躍的向上に伴い、これまで、「京」を中核とするHPCIで行われているシミュレーションの更なる超並列化・高度化・大規模な利用への対応、新適用分野（人工知能、ビッグデータ、IoT等）への挑戦、大型実験施設との更なる連携等に係る利用促進について、これまで以上に多種多様な取り組みが必要かつ重要。

