

# 「京」の運営 事後評価結果（案）

令和3年2月

情報委員会

## 情報委員会 委員名簿

(敬称略、50音順)

乾 健太郎	東北大学大学院情報科学研究科教授
井上 由里子	一橋大学大学院法学研究科教授
上田 修功	日本電信電話株式会社コミュニケーション科学基礎研究所上田 特別研究室長/NTT フェロー 理化学研究所革新知能統合研究センター副センター長
奥野 恭史	京都大学大学院医学研究科ビッグデータ医科学分野教授
梶田 将司	京都大学情報環境機構 IT 企画室教授
来住 伸子	津田塾大学学芸学部情報科学科教授
○喜連川 優	情報・システム研究機構国立情報学研究所長 東京大学生産技術研究所教授
鬼頭 周	ソフトバンク株式会社事業開発統括顧問 サイバーリーズン・ジャパン株式会社 CTO
栗原 和枝	東北大学未来科学技術共同研究センター教授
佐古 和恵	早稲田大学基幹理工学部情報理工学科教授
田浦 健次朗	東京大学情報基盤センター長
瀧 寛和	和歌山大学前学長/学術情報センター長
辻 ゆかり	NTT アドバンステクノロジー株式会社取締役/ネットワークイノベ ーション事業本部副本部長
津田 宏治	東京大学大学院新領域創成科学研究科教授
◎西尾 章治郎	大阪大学総長
長谷山 美紀	北海道大学副学長/大学院情報科学研究院長/教授
引原 隆士	京都大学図書館機構長/附属図書館長
福田 雅樹	大阪大学社会技術共創研究センター教授/副センター長/総合 研究部門長/大学院法学研究科教授
八木 康史	大阪大学産業科学研究所複合知能メディア研究分野教授
安浦 寛人	九州大学名誉教授
若目田 光生	日本経済団体連合会デジタルエコノミー推進委員会企画部会デ ータ戦略ワーキンググループ主査 株式会社日本総合研究所リサーチ・コンサルティング部門上席主 任研究員

(令和3年2月現在)

◎ : 主査 ○ : 主査代理

## H P C I 計画推進委員会 委員

(敬称略、50音順)

	伊藤	公平	慶應義塾大学工学部物理情報工学科 教授
	伊藤	宏幸	ダイキン工業株式会社・テクノロジー・イノベーションセンター リサーチ・コーディネーター
	上田	修功	理化学研究所 革新知能統合研究センター 副センター長／NTT コミュニケーション科学基礎研究所 フェロー・上田特別研究室長
	梅谷	浩之	トヨタ自動車株式会社 I T 革新推進室 主幹／株式会社トヨタシステムズ C A E 部 部長
	大石	進一	早稲田大学理工学術院 教授
※	小柳	義夫	東京大学名誉教授／高度情報科学技術研究機構神戸センターサイエンスアドバイザー
	喜連川	優	情報・システム研究機構国立情報学研究所 所長
	小林	広明	東北大学大学院情報科学研究科 教授／東北大学サイバーサイエンスセンター センター長特別補佐／東北大学総長特別補佐 (ICT 革新担当)
	田浦	健次郎	東京大学情報基盤センター センター長
	土井	美和子	情報通信研究機構 監事／奈良先端科学技術大学院大学理事
	中川	八穂子	株式会社日立製作所研究開発グループデジタルテクノロジーイノベーションセンター シニアプロジェクトマネージャ
○	藤井	孝藏	東京理科大学工学部情報工学科 教授
◎	安浦	寛人	九州大学 名誉教授

令和2年10月現在

◎ : 主査 ○ : 主査代理 ※ : 利害関係者のため審議には加わらない。

## 「京」の運営 事後評価に係る評価項目及び視点等について

### 1. 背景等

- 共用開始(平成 24 年 9 月末)から約 7 年の運用を終えたスーパーコンピュータ「京」の運用について事後評価を行う。
- 具体的には、政策的位置づけや意義(必要性・有効性・効率性等)を総括するとともに、中間評価時(平成 28 年度)における留意事項等への対応状況等について確認・評価を行う。また、令和 3 年度に予定されている「富岳」の運用開始に向けた展開の参考とする。

### 2. 事業目的・事業概要等

#### (1) 課題実施期間及び評価実施時期

平成 22 年度～令和元年度

平成 29 年 4 月：中間評価、令和 2 年 12 月：事後評価

#### (2) 研究開発概要・目的

『革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)の中核となる次世代スーパーコンピュータの運営』

#### (3) 研究開発の必要性等

##### ○必要性・有効性・効率性(中間評価時)

- ・ スーパーコンピュータによる高精度・高速なシミュレーションやデータ解析は、今後とも我が国が世界をリードし、科学技術や産業の発展を牽引し続け、国民生活の安心・安全を確保するため、様々な分野において必要不可欠なツールとなっている。
- ・ また、スーパーコンピュータによるシミュレーションは「精度」、「サイズと時間」という 2 つの軸の解像度を飛躍的に伸ばすことにより、高精度・高速なシミュレーションやデータ解析を可能にするものであり、実験不可能な自然現象等を再現して実験を代替することや極限状態を含む広範な探索範囲から予測を超える未来や未知の状態を発見するものとして従来の実験よりも安全・高速・高精度が期待できるものであり、他に代替のきかない極めて有効な手段である。
- ・ さらに、大規模なスーパーコンピュータは、従来数年かかっていた解析を数日で実現できることや、条件を多数変えた繰り返し実験を仮想空間で高精度かつ高速に実現することが可能であり、極めて効率的である。

#### (4) 予算(執行額)の変遷

年度	H22(初年度)	H23	H24	H25	H26	H27
予算額	1,383百万 <sup>※1</sup>	6,500百万	10,551百万	11,484百万	11,287百万	11,213百万
(内訳)	「京」運用 <sup>※2</sup> 1,383百万	「京」運用 6,500百万	「京」運用 9,653百万 登録機関 <sup>※3</sup> 897百万	「京」運用 10,587百万 登録機関 897百万	「京」運用 10,416百万 登録機関 870百万	「京」運用 10,373百万 登録機関 840百万
執行額	1,848百万	5,955百万	10,284百万	11,361百万	11,171百万	10,791百万
(内訳)	AICS(現・R-CCS) 1,848百万	AICS 5,955百万	AICS 9,548百万 RIST 736百万	AICS 10,465百万 RIST 897百万	AICS 10,301百万 RIST 869百万	AICS 9,950百万 RIST 840百万

年度	H28	H29	H30	R1
予算額	11,098百万	11,182百万	11,176百万	8,064百万
(内訳)	「京」運用 10,258百万 登録機関 840百万	「京」運用 10,342百万 登録機関 840百万	「京」運用 10,336百万 登録機関 840百万	「京」運用 7,222百万 <sup>※4</sup> 登録機関 842百万
執行額	10,953百万	10,986百万	10,934百万	7,791百万 <sup>※5</sup>
(内訳)	AICS 10,113百万 RIST 840百万	AICS 10,150百万 RIST 837百万	R-CCS 10,094百万 RIST 839百万	R-CCS 6,953百万 RIST 838百万

※ 千円単位で計算した後、百万円単位で四捨五入した金額

※1 高性能汎用計算機システムの開発・整備等(「京」の開発)より500百万円を流用

※2 特定先端大型研究施設運営費等補助金(理化学研究所へ交付)

※3 特定先端大型研究施設利用促進交付金(登録機関(RIST)へ交付)

※4 「富岳」の運用費含む

※5 額の確定実施中の為、暫定額を記載

#### (5) 課題実施機関・体制

【特定高速電子計算機施設設置者】

理化学研究所 計算科学研究センター(R-CCS)(旧・計算科学研究機構(AICS))

【登録施設利用促進機関】

一般財団法人 高度情報科学技術研究機構(RIST)

### 3. 評価項目及び視点等

評価に際しては「特定高速電子計算機施設(スーパーコンピュータ「京」)中間検証報告書」(平成28年12月5日)等を踏まえ、以下の項目を中心に評価を行う。

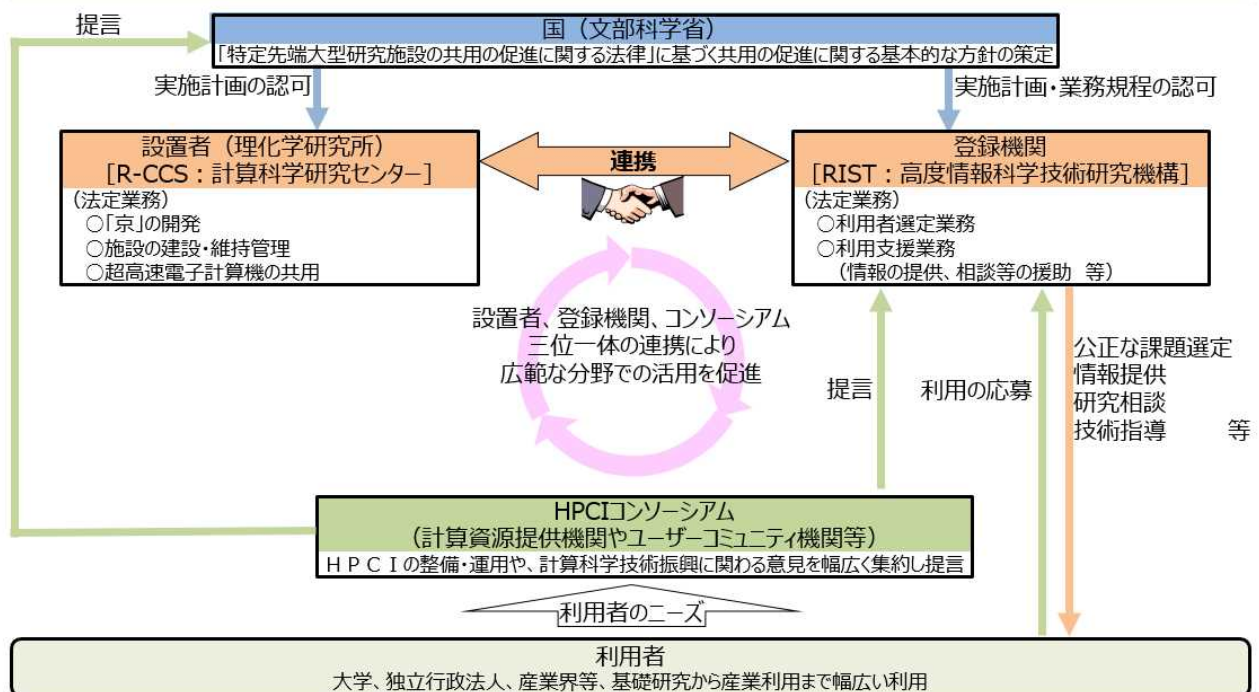
#### (1) 共用の促進について

- ① 推進体制とマネジメント体制
- ② 利用者視点での共用の促進
- ③ 利用者の拡大(産業利用を含む)
- ④ 有償利用

- ⑤ 利用支援
- ⑥ 利用者選定
- (2) 研究成果の創出及び社会への還元について
  - ① 研究開発目標の達成状況
  - ② 科学的成果の創出
  - ③ 分かりやすい説明（費用対効果や社会的成果を含む）
  - ④ 理解増進活動
  - ⑤ アプリケーション開発・普及の体制の構築
- (3) 施設の運営・整備等について
  - ① 効率的・効果的な施設運営
  - ② 施設設置者・登録機関・課題実施機関などとの連携・役割分担
  - ③ 自己収入の努力
- (4) 研究教育拠点の形成
  - ① 国際協力・国際貢献
  - ② 他の大型研究施設等との連携
  - ③ 計算機科学と計算科学の双方に精通する人材の育成（大学等との連携含む）
  - ④ 地元自治体等との連携

## スーパーコンピュータ「京」の共用の枠組み

スーパーコンピュータ「京」の運用は、共用法に基づき、**設置者・登録機関が連携**して実施。また、**HPCIコンソーシアム**を含めた**三位一体の連携**により、「京」の広範な分野での活用を促進。



# 事後評価票（案）

（令和3年2月現在）

1. 課題名 スーパーコンピュータ「京」の運営

2. 研究開発計画との関係

施策目標：未来社会を見据えた先端基盤技術の強化

大目標（概要）：ICT を最大限に活用し、サイバー空間とフィジカル空間（現実世界）とを融合させた取組により、人々に豊かさをもたらす「超スマート社会」を未来社会の姿として共有し、その実現に向けた一連の取組を更に深化させつつ「Society 5.0」として強力に推進し、世界に先駆けて超スマート社会を実現していく。このため、国は、超スマート社会サービスプラットフォームの構築に必要となる基盤技術及び個別システムにおいて新たな価値創出のコアとなり現実世界で機能する基盤技術について強化を図る。

中目標（概要）：我が国が世界に先駆けて超スマート社会を形成し、ビッグデータ等から付加価値を生み出していくために、産学官で協働して基礎研究から社会実装に向けた開発を行うと同時に、技術進展がもたらす社会への影響や人間及び社会の在り方に対する洞察を深めながら、中長期的視野から超スマート社会サービスプラットフォームの構築に必要となる基盤技術の強化を図る。

重点的に推進すべき研究開発の取組（概要）：

「次世代アーキテクチャと革新的なハードウェアの研究開発」

様々なモノがインターネットにつながる IoT 社会を迎えて、多様なニーズに応える革新的な計算環境を構築し、その利用を推進することで、我が国の科学技術の発展、産業競争力の強化、安全・安心な社会の構築に貢献する。

本課題が関係するアウトプット指標：

情報科学技術分野における研究開発の論文数、学会発表数

本課題が関係するアウトカム指標：

各研究機関において実施される研究開発の進捗状況

### 3. 評価結果

#### (1) 課題の達成状況

##### <概要>

スーパーコンピュータ「京」(以下、「京」)は、科学技術・学術審議会下での議論等を踏まえ、平成18年度より開発プロジェクトが開始された。平成22年、「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」(平成6年法律第78号、以下「共用法」という。)に基づく特定高速電子計算機施設の設置者である理化学研究所計算科学研究機構(AICS)(現・計算科学研究センター(R-CCS))へ開発された筐体の搬入が開始され、システム開発途中ではあったものの、平成23年6月・11月のスーパーコンピュータランキング(TOP500)で1位を獲得し、平成24年9月より共用が開始され、約7年にわたり安定的に運用された。(その後、スーパーコンピュータ「富岳」設置のため、令和元年8月にシャットダウンされた。)

「京」の特徴として、我が国を代表し、世界トップレベルの高い計算性能と幅広い分野への汎用性を有するフラッグシップシステムであり、第3期並びに第4期「科学技術基本計画」に記載される国家の基幹的な技術である次世代スーパーコンピュータ技術の中心的存在として、我が国の計算科学・計算機科学を発展させるとともに、科学技術の発展や産業競争力の強化に貢献した。

なお、「京」の開発については、既に、平成25年度に文部科学省(情報科学技術委員会)及び内閣府(総合科学技術会議)にて事後評価を実施しているため、本評価については、「京」の運営(運用および利用促進)を中心に評価するものとする。

##### <主な成果>

- ・ 全体での稼働率は93%(最後の通年運用である平成30年度は98.5%)と高い水準で運用されるとともに、インターコネクト技術の活用やアプリケーション実行の高性能化・高信頼化及びスケーラビリティを担保した運用を実施した。
- ・ 中立・公平な利用者選定の実施とともに、公募回数の拡大やオープンソフトウェア(OSS)の利用環境整備、講習会を通じた利用促進によって、利用者はのべ約11,100人(うち3割弱が産業界利用者、利用企業数200社以上)と多数利用された。
- ・ 「京」でなければ成し得なかった成果として、例えば、心臓シミュレータがあげられる。医学的見地からも分子・細胞レベルに基づく心臓シミュレーションが必須であると考えられてきたが、「京」以前は、マルチスケールシミュレーションに関する理論面からの研究開発が中心であった。「京」によって、心臓モデルを構成する数百万個の細胞モデルについて、分子の動きから心臓の働きを再現するというマルチスケール心臓シミュレーションが大きく前進した(「京」以前では計算に年単位の時間がかかることから事実上不可能であったが、「京」により拍動1回分の計算が1日で実行可能となった。)
- ・ 細胞を構成する分子から心拍動までを繋ぐマルチスケール心臓シミュレーションは、計算科学の歴史でも類を見ないものであるとともに、心筋症等の病態解明への道を拓く成果でもある。令和2年現在では、「京」の大規模シミュレーションによって得られた心電



図等をデータベース化し、薬の副反応等の予測に貢献する「心毒性ハザードマップ」として公開するとともに、ペースメーカーを埋め込んだ後の動作予測や先天性心疾患の術後予測等の実用化に向けた臨床研究が進んでいる。

- ・ また、我が国が直面する重要な課題である台風・豪雨予測についても、「京」によって世界で初めて超高解像度（水平格子間隔 1km 未満）での全球シミュレーションに成功した。これまでの全球シミュレーションでは再現が難しかった積乱雲をリアルに表現できるようになっており、こうした知見は実際の予報の精度向上にも活かされている。令和 2 年、「富岳」によって、全球気象シミュレーションとデータ同化の複合計算が過去に例を見ないほどの規模（世界の気象機関が日々行っている気象予測のおよそ 500 倍）で実施され、ゴードン・ベル賞のファイナリストに選出されたほか、令和 2 年 7 月豪雨で発生した線状降水帯を高精度に予測した研究も実施されている。これらの研究課題は気象庁気象研究所の参画あるいは連携協力のもとで進められており、将来の予報に更なる革新をもたらすことが期待される。
- ・ さらに、地震・津波による災害については、「京」を用いたシミュレーションにより、内閣府・自治体などの防災システムに実装しうる、過去の被害経験からでは予測困難な複合災害のための統合的予測システムを構築した。本システムは、想定された地震が引き起こす都市全域の地震動と被害を計算することで、従来の地震災害とは一線を画す、科学的合理性の高い地震災害の評価を可能とするものである。構成する地震波動の数値解析コンポーネントは、極めて高い計算性能を発揮し、計算科学・計算機科学の分野でも評価され、平成 26 年、平成 27 年、平成 30 年のゴードン・ベル賞のファイナリストに選出されている。今後、「富岳」を活用することで、重要インフラや都市全体を襲う地震動をより高い分解能・信頼度で評価することが可能となり、政府や産業界での活用に繋がる成果の創出が期待される。
- ・ 上記のほか、世界最大規模のシミュレーションによるダークマター進化過程の解明といった基礎科学の解明に係る重要な成果をあげた。また、他の先端大型研究施設と連携した、グリップ性能と低燃費性能を両立したタイヤ素材の開発や燃料電池として有力な水素電池の電解質膜の開発への貢献といった我が国の産業競争力の強化につながる成果をあげた。これらはいずれも「京」でなければ到達しえない成果であり、我が国が直面する課題の解決に資すると同時に、科学技術の新たな発見をもたらした。
- ・ また、平成 27 年度より、ポスト「京」研究開発枠が設けられ、ポスト「京」（「富岳」の開発に「京」の計算資源の一部が充てられるようになり、「富岳」の開発プロジェクトの中核の一つであるシステムとアプリケーションの協調開発（“Co-design”（コ・デザイン））の実施に必要な不可欠な研究基盤として機能した。
- ・ 『ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発 事後評価結果』にも記載しているとおり、9 つの重点課題と 4 つの萌芽的課題に関する研究開発が実施され「京」を用いたシミュレーションによって、様々な分野において多くの画期的な成果が生み出されてきた。なお、「富岳」において、これらのアプリケーションは令和 2 年 11 月時点でほぼ全てにおいて目標を超える性能倍率を達成している。
- ・ また「京」は平成 24 年の共用開始後から、国立大学・国立研究開発法人のスーパーコンピュータやストレージと高速ネットワーク（SINET）で繋がれ、ユーザ窓口を一元化し

た、多様な利用者のニーズに応える利便性の高い研究基盤（革新的ハイパフォーマンスコンピューティング・インフラ（HPCI））の中心的な構成要素として、他の計算資源などと一体的に運用された。その中で「京」は約7年間運用され、計算資源量については、時の経過とともに「京」を上回る計算機が現れたものの、計算科学の研究開発の推進、分野連携や産学連携の推進にあたり、中心的な役割を果たした。

- ・ 「京」と大型放射光施設“SPring-8”、X線自由電子レーザー施設“SACLA”等の大型研究施設との連携活用を進め、シミュレーションと実験的手法の特性を相互に補う成果の創出に繋がった。
- ・ 若手研究者枠の設定や各種講習会の開催、国内外の研究機関との連携等により計算科学・計算機科学の推進に必要な人材が育成された。

以上のことから、「京」の運用により、「京」でしかなし得なかった成果を創出しただけでなく、利用者や利用分野の裾野拡大、計算科学・計算機科学の推進に必要な人材の育成、次世代のフラッグシップ計算機である「富岳」に繋がる貢献、我が国の情報基盤の包括的な構築等情報科学全体に貢献したと考えられる。

## （2）各観点の再評価

### ＜必要性＞

#### 評価項目

研究開発基盤としてのスーパーコンピュータ「京」の共用促進

#### 評価基準

推進体制とマネジメント体制の在り方、利用者視点での共用促進、利用者の拡大（産業利用を含む）、有償利用・利用支援・利用者選定の在り方が適切なものであること。

#### 【推進体制とマネジメント体制の在り方】

- ・ R-CCSにおける「京」の運用及び共用法に基づく登録施設利用促進機関（登録機関）である一般財団法人高度情報科学技術研究機構（RIST）における利用促進については、共用法及び「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）に基づき適切に行われた。

#### 【利用者視点での共用促進】

- ・ 中立・公平な利用者選定が行われるとともに、研究者等との意見交換等を踏まえ、広く一般ユーザの利便性の向上に向けた取組が行われた。具体的には、待機時間に準拠したジョブスケジューリングアルゴリズムの開発、ユーザコミュニティであるHPCIコンソーシアムとの協力体制の構築、公募回数の増加、ユーザへのアンケート実施・要望反映（OSSの利用環境整備等）などである。
- ・ 特に、「京」を中核とするHPCIが構築され、我が国全体の計算資源として、利用者視点での計算科学推進の環境がオールジャパンで整ったことは極めて大きな成果である。一つの共通窓口で利用相談等を受けつけるワンストップサービスや、「京」を含めて申請者の希望する計算資源を複数選択可能とするなど、ユーザの利便性向上が図られた。

#### 【利用者の拡大】

- ・ 利用者視点での共用促進により、共用開始から終了までに、のべ 11,100 人以上（うち、3 割弱が産業界利用者）に利用され、研究基盤として大きな役割を果たした。
- ・ 産業利用については、ニーズの高まりに対応し専用利用枠を拡大する（平成 24 年度 5% →平成 26 年度 8%→平成 27 年度 10%→平成 28 年度 15%、平成 29 年度後半以降は一般利用枠（45%）の内数として設置）とともに、相談窓口の設置、講習会、アプリ利用環境整備、審査基準の整備、成果専有（成果非公開）利用制度の導入など、利用促進のための積極的な取組が行われ、累計 312 課題（平成 24 年～令和元年度）が採択・利用された。
- ・ 産業利用の成果の自社活用・展開に関するアンケート調査が実施され、6 割以上から成果活用・展開済と回答を得た。また、利用報告書のダウンロード数（令和元年度末までの累計 93,000 回以上）は産業利用課題が非常に多く、HPCI を利用していない企業からも多数参照されている（東証 1 部 33 業種中 32 業種からダウンロード）。
- ・ 特に、「京」以前ではシミュレーションの実行時間が長過ぎるために非現実的であり、実質的に不可能であった大規模計算や大量実行が、「京」によって実現可能となり、今後の研究開発の方向性の検討及び産業利用上の効果の検証が実現できたことは、産業利用上大きな成果の一つである。

※ 「京」以前には産業界で困難であった大規模計算（例<sup>※注</sup>）

- 心疾患のマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション
- 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
- インシリコ創薬基盤の構築
- 第一原理計算によるリチウムイオン電池内の正極・電解液界面での化学反応解析
- ・ また、産業界も含めユーザの裾野が広がり、同業種の企業のコンソーシアムによる戦略的な利用体制が出現したことも成果の一つと言える。
  - 自動車次世代 CAE コンソーシアム
  - ライフインテリジェンスコンソーシアム 等
- ・ 大型放射光施設“SPring-8”等大型実験施設との連携利用を進め、実験とシミュレーションの相互に補完する研究成果の創出等、研究の裾野を拡大した。

※注：産業利用については、成果非公開型（有償）により公開不可の課題が存在

#### 【有償利用】

- ・ 産業利用の利用料金については、HPCI 準備段階コンソーシアムの「HPCI とその構築を主導するコンソーシアムの具体化に向けて-最終報告-」（平成 24 年 1 月 30 日）を踏まえ、成果公開によって科学技術の振興や新たな利用促進につなげるとともに、知的公共財として社会や国民へ還元することを目指し、成果を公開する場合には無償としている。一方、成果を非公開とする場合には、成果による恩恵をユーザが独占することに対する対価として利用料金を有償としている。利用料金の算定は運営費回収方式とし、ノード数×時間当たりで課金している。
- ・ 「京」の共用期間（平成 24 年度～令和元年度）における利用料収入は年度当たり約 6,073 万円（累計：約 4.9 億円）であった。
- ・ 「富岳」では「京」で培ったノウハウや有償利用制度を活用して産業利用を含む更なる多様な利用を促進していくことが重要である。

#### 【利用支援】

- ・ RIST は一元的相談窓口（ヘルプデスク）を設置し、応募前の事前相談、具体的な利用

方法に関する相談、アプリケーションの高速化などの技術支援、ポータルサイトによる各種情報提供や案内、利用講習会の実施、研究相談などワンストップサービスによる利用支援を実施した。

- ・ 特に、高度化支援については、「京」利用研究課題にて、累計 173 件（ものづくり：65 件、バイオ：14 件、物質・材料：51 件、環境：27 件 等）で支援を実施（うち約 4 割以上が産業利用課題）し、計算資源の効率的な利用、計算の大規模化に貢献するとともに得られた技術的知見・高度化事例について公開している。本件に係るアンケートでは 9 割以上の利用者が満足と回答した。

#### 【利用者選定】

- ・ RIST は、共用法に基づいて外部有識者により構成された選定委員会及び利用研究課題審査委員会の設置等による中立・公正な利用者選定を実施する体制をとっており、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。
- ・ RIST は、選定基準や公募・採択状況等を公開しており、選定委員会の議論についても個別の申請内容や課題が特定できる情報に関わるものや、利用者選定に著しい障害となるもの以外は公表することとして、透明性の確保に努めた。

いずれの項目でも、事業は円滑に遂行されるとともに、利用者視点での利用促進の結果、「京」に対する需要は高まり、さらに「京」でなければ事実上到達しえない成果が多数生み出されており、本事業の必要性は高いと考えられる。

### <有効性>

#### 評価項目

研究成果の創出及び社会への還元

#### 評価基準

科学的成果の創出、分かりやすい説明（費用対効果や社会的成果を含む）、広報普及活動、アプリケーション開発・普及の体制が構築されているか。

#### 【「京」で可能となった大規模な計算の有効性】

- ・ 我が国の計算機科学の粋を集めて構築された 10PFLOPS 級、約 82,000 ノードを用いた大規模計算として、科学の発展や我が国の産業の発展、社会課題の解決に向けて、以下の大規模計算が実現された。

※「京」以前には困難であった大規模計算（例）

- 心疾患のマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション
- 世界最大規模の全球大気／現実大気アンサンブルデータ同化
- 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
- 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
- ダークマターシミュレーション
- インシリコ創薬基盤の構築
- 第一原理計算によるリチウムイオン電池内の正極・電解液界面での化学反応解析
- 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

- 「京」による 100,000 原子シリコン・ナノワイヤの電子状態の第一原理計算
  - 大規模・並列数値計算アルゴリズム及びライブラリの研究開発
  - 超並列分子動力学計算ソフトウェア“GENESIS”を開発
  - 乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発
  - 粒子線治療における2次発がんリスク評価のための全身線量計算
- ・ 「京」により、「精度」と「サイズ・時間」という2つの軸の解像度を飛躍的に伸ばすことで、それまで不可能だった、様々な物質における原子や分子の挙動、電子の状態、生体・生命現象、天体・宇宙現象などをシミュレーションすることが可能となり、それぞれの研究分野を大きく発展させるとともに、その成果の一部は社会実装への道を拓いた。例えば、生体分子システムのシミュレーションでは、薬剤の候補物質とタンパク質（病気の原因因子）の結びつきやすさを世界最大規模で計算し、新薬候補物質の探索につながる研究が実施された。また、化学反応を予測する、電子状態の高精度な計算が可能となった。さらに、大量の観測データや実験データを計算に取り込むことが可能となったことで、例えば、地盤と建物の揺れ及びこれによる建物被害を統合した詳細な大規模シミュレーションや従来再現できなかった集中豪雨現象のシミュレーションが可能となった。
  - ・ 「京」で可能となった大規模な計算により、「予測の科学」ともいべきものが広がり、様々な分野の研究開発において、シミュレーションを活用したイノベーション創出の道が拓かれた。前述のとおり、気象分野の研究課題は気象研究所の参画あるいは連携協力のもとで実施されており、「京」で得られた成果が、実際の予報の精度向上に活かされている。
  - ・ 時間・コストの削減、製品性能の向上、従来にない設計上の最適解の探索等、産業利用上の効果の数多くが「京」により初めて実証された。最先端のスーパーコンピュータでのプログラミングやアルゴリズム構築は容易ではないことから、企業が新たな技術に挑戦する上で産業上の効果が実証されたことの意義は大きい。
  - ・ 「京」は、これまでわからなかったメカニズムを解明し、新たなサイエンスを拓く先行プラットフォームとしての役割と、数ヶ月かかる大規模計算を短時間で検証できる大きな計算リソースを擁する研究開発基盤としての役割を担う日本のフラッグシップスーパーコンピュータとして有効であった。また、「京」により、我が国の計算科学全体が底上げされ、超並列大規模計算を利用した新段階の科学手法へ導かれたとも言える。
- 【科学的成果の創出】
- ・ 「京」でなければ成し得なかった成果として前述したものを含め、世界最大規模のシミュレーションによるダークマター進化過程の解明といった基礎科学の解明、衛星データとのデータ同化による新たな気象予測技術の開発や、南海トラフ・相模トラフ地震などの将来想定される地震発生時の長周期地震動シミュレーションといった我が国の安心・安全の確保及び気象予測・防災に係る成果や、他の先端大型研究施設と連携したグリッド性能と低燃費性能を両立したタイヤ素材の開発や燃料電池として有力な水素電池の電解質膜の開発への貢献といった我が国の産業競争力の強化につながる成果があげられた。なお、「京」を用いた成果が、計算科学・計算機科学で高い評価を得た課題に授与されるゴードン・ベル賞を平成23年、24年に受賞、平成26年、27年、30年に選考過程でファイナリストに選出されるなど、国際的にも高い評価を得ている。

- ・ 平成 27 年度から開始された、ポスト「京」研究開発枠を用いた研究開発においては、『ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発 事後評価結果』にも記載しているとおり、9つの重点課題と4つの萌芽的課題に関する研究開発が実施され「京」を用いたシミュレーションによって、様々な分野において多くの画期的な成果が生み出されてきた。なお、これらのアプリケーションは令和2年11月時点で、「富岳」上でほぼ全てにおいて目標を超える性能倍率を達成している。
  - ・ なお「京」の一般利用枠・HPCI 戦略プログラム枠・ポスト「京」研究開発枠（重点課題・萌芽的課題）においては、令和2年3月末までに学術論文（査読付き）は国内外併せて1,425編\*（利用枠間の重複を除く）、学会発表は国内外併せて3,656件\*（同左）、受賞等（ゴードン・ベル賞（平成23・24年）、日本物理学会論文賞（平成26年他）、International Society for Computational Biology Fellow（平成25年）、日本気象学会山本賞（平成30年）、等）は159件であった。
- \* HPCI 成果発表データベースに登録された令和2年8月26日時点のデータ

#### 【広報普及活動】

- ・ R-CCS、RIST、HPCI 戦略プログラム／重点課題・萌芽的課題の実施機関等が連携して、広報普及の積極的な取組が行われてきた。具体的には、R-CCSからの計147件（平成23年度～令和元年度）のプレス発表による、マスメディアを通じた幅広いターゲットへの広報、ウェブやコンテンツによる深い情報の発信（成果動画をホームページ（HP）等で公開、R-CCS ホームページ を通じた広報（訪問者数：164万件以上（平成24年～令和元年度）、イベントを通じた直接対話（「京」の成果紹介・産業界での活用に向けたシンポジウム：1,641人（全7回）、一般市民向けの理解増進イベント：7,204人（全33回））、見学者の受け入れ・交流（見学者は9万人以上）、出前授業・出張講演の実施など若い世代への興味を促進する活動、マスメディアに対する研究内容や成果等に関する勉強会などである。また、国際学会（米国 SC、欧州 ISC 等）での展示や英語コンテンツの制作・発信、海外からの見学者の受け入れなど国際的な広報活動も推進した。
- ・ RIST においては、平成26年から令和2年まで年度ごとに、「京を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会」を開催し、優れた課題の成果について広く発信した。外部有識者によるサイエンスレビューを実施し、本成果報告会で優秀な課題を表彰するとともに、成果事例集を発行している。また、HPCI 利用報告書を公開し、成果をまとめた形で速報している。令和元年度末までに利用報告書は9万回以上ダウンロード（海外80の国又は地域からダウンロード）され、注目の高い利用報告書はダウンロード数トップ20としてホームページで公開されている。また、「京」の年度ごとの運用状況・成果をまとめた年報、「京算百景」といった広報誌を発行し、一般にもわかりやすい広報に努めた。

#### 【アプリケーション開発・普及の体制の構築】

- ・ R-CCS においては、研究基盤研究として、「京」に合わせて最適化したソフトウェア（アプリケーション・ライブラリ・コンパイラ）を開発・公開（30本）して、提供しており、それらは海外も含め大学や研究機関、公的機関、民間企業において活用された（例：並列プログラミング言語 XcalableMP およびコンパイラ Omni XcalableMP、高性能固有値ソ

ルバ EigenExa、大規模可視化システム HIVE、生体高分子材料向け分子動力学シミュレーションソフトウェア GENESIS、分子科学計算ソフトウェア NTChem、強相関量子系ソルバーSCQS、複合流体ソフトウェア CUBE、次世代気象気候科学基盤ライブラリ SCALE、離散事象ソフトウェア OASIS、都市地震シミュレーションソフトウェア GAMERA、粒子系シミュレーションソフトウェア FDPS)。

- ・ HPCI 戦略プログラム等で「京」を用いて開発されたアプリケーションは、RISTにより、ニーズに応じて HPCI を構成する第2階層の計算資源へ移植され、「京」を用いた成果が HPCI 全体に波及したと言える。

以上より「京」が有する約 82,000 のノード、CPU の高性能化・高信頼性技術並びにインターコネクト技術を用いた、超高並列計算及びその信頼性に基づいた安定的な運用により、これまで到達困難であった優れた科学的成果を数多く生み出した。加えて、科学的成果を得るまでの過程などで生み出された新たなソフトウェアの一部を HPCI 全体を始め海外も含め広く普及するなど、投資された成果の科学全体への還元積極的に取り組むとともに、得られた成果を国内外に積極的に広報するなど本事業の有効性は高かったと評価できる。

#### <効率性>

##### 評価項目

施設の運営・整備等

##### 評価基準

効率的・効果的な施設運営（コスト低減の取組含む）、施設設置者・登録機関・課題実施機関などとの連携・役割分担等、自己収入の努力が行われているか。

##### 【効率的・効果的な施設運営】

- ・ 「京」は、864 の筐体と 82,944 ノードを有する世界でも類を見ない大規模スーパーコンピュータである中で、約7年間にわたり極めて安定的に稼働して（稼働率93%以上）おり、ジョブ充填率は平均75%以上と極めて効率的・効果的な運営を実施した。
- ・ この技術的背景としては、「京」の開発において、データ一貫性のためのチェック・訂正および再実行の機能を随所に備えること等によりアプリケーション実行における高性能化・高信頼性を実現したこと、計算ノード間ネットワークに超大規模接続が可能な Tofu (Torus fusion) インターコネクトを新たに開発・搭載したことや、Linux をベースとした OS、科学技術分野で広く使われている Fortran、C/C++などの言語環境、さらに並列化用の標準ライブラリである MPIなどをサポートしたことにより、汎用性と高いスケラビリティを実現したこと等が挙げられる。
- ・ また運用の改善として、有償課題等に対するジョブ実行の優遇方法の変更、大規模実行期間のジョブ実行の運用方法見直し、「京」と外部との間で高速なデータ転送が可能なリファレンス環境の構築及び拡充、運用ソフトウェアと独立したジョブ管理支援機能の提供、ジョブスケジューリングの改善、ニーズの高い OSS の重点整備、保守作業時間の短縮、ジョブの待ち時間に関する詳細情報の提供、ジョブ実行環境の最適化、ソースコード解析ツールの開発、故障率の高いハードディスクを除外した運用、ジョブ実行待ち

時間の改善などを積極的に実施した。

- ・ また、電力料金の高騰への対応として、R-CCS はガス発電の併用によるコスト最適化、大規模ジョブの事前確認など契約電力超過の防止対策、保守経費や建屋設備の維持管理の見直し、冷凍機と蓄熱槽の効率運用等を実施した。その結果として、平成 25 年度と平成 29 年度の年間平均消費電力を比較すると 1 MW 以上の削減を実現している。
- ・ これらは、大規模並列計算機システムの構築と運用の実施例として、我が国の計算機科学技術の向上にも大きく貢献した。
- ・ RIST においては、「京」の運用によって年毎に拡大する利用者及びその業務に対して、ヘルプデスク人員の効率化やニーズに合わせたワークショップ等の開催調整、職員のスキルアップ等による効率的な業務遂行を実施した。

#### 【関係機関の連携・役割分担等】

- ・ R-CCS 及び RIST は、連携協力協定を締結し、定期的な連絡会等により、利用状況や利用支援に関する情報の共有を図っており、HPCI コンソーシアムからの提言等について、制度や運用体制等の見直しが行われた。

#### 【自己収入の努力】

- ・ 利用料収入については、累計で約 4.9 億円となっている。このほか、R-CCS は外部資金（競争的資金含む）の獲得についても積極的に活動しており、令和元年度までに累計約 72 億円となっている。

### <その他>

#### 評価項目

研究教育拠点の形成

#### 評価基準

国際協力・国際貢献、他の大型研究施設等との連携、計算機科学と計算科学の双方に精通する人材の育成（大学等との連携含む）、地元自治体等との連携

#### 【国際協力・国際貢献】

- ・ R-CCS は、計算機科学及び計算科学の中核拠点として、国内外の大学・研究機関と連携関係を積極的に推進している。協定については半数以上（24/43 件）が海外の研究機関との締結であり、政府間の協力関係にとどまらず、海外機関との積極的な連携関係を構築している。アジア・オセアニア地域においては、ASEAN 諸国の計算科学の発展を通じた各分野での課題解決に協力するなど、国際的な取組を実施している。
- ・ RIST では、欧州の PRACE や米国の XSEDE、シンガポール国立スーパーコンピューティングセンター（NSCC）と協力の覚書を締結し、スーパーコンピュータの共用促進に係る積極的な情報交換を実施した。

#### 【他の大型研究施設等との連携】

- ・ 同県内に設置されている大型放射光施設“SPring-8”、X 線自由電子レーザー施設“SACLA”を中心として、大型研究施設を複数連携活用した成果が得られている。例えばグリップ性能と低燃費性能を両立したタイヤ素材の開発であり、シミュレーションと実



験的手法の特性を相互に補う成果の創出に繋がった。

- ・ R-CCS では、引き続き「京」の後継機である「富岳」と他の大型研究施設との高速・高性能ビッグデータ処理システムの構築等の研究開発を実施しており、積極的な連携体制を構築している。

#### 【計算機科学と計算科学の双方に精通する人材の育成】

- ・ R-CCS では、計算科学・計算機科学に関する国際的な研究拠点の一角を担うとともに、国内の教育機関との連携、インターンシップによる国内外の学生の積極的な受け入れ、連携講座の設置等を通じ、計算科学・計算機科学の推進に必要な人材の育成等に取り組んだ。また RIST においては、初級者から上級者までを対象に、幅広い利用技術のレベルやニーズに応える講習会・ワークショップ等の実施による受講者のスキルアップを通じて、人材育成に取り組んだ。
- ・ 共用開始時より若手人材育成のために「京」の一般利用枠に5%程度の資源配分枠を設けるなど、将来の計算科学研究を担う若手人材育成に取り組んだ。また、「京」を活用したアプリケーション開発・利用により各研究分野において画期的な研究成果が創出されるとともに人材が育成された。これらにより、「京」利用研究課題を通じた学位（博士）の取得や、若手研究者を対象とした多数の各種受賞につながった。さらに、小中学生を対象としたイベントや高校生・高専生を対象とした初級者向けプログラミング講習会等を実施した。

#### 【地元自治体等との連携】

- ・ R-CCS においては、兵庫県・神戸市といった地元自治体の研究教育拠点（COE）形成推進事業等を通じ、研究成果を地域に還元した。
- ・ R-CCS に隣接している公益財団法人計算科学振興財団（FOCUS）との連携による地元団体主催の産業総合展示会への出展や地元経済団体等での講演を通じた、地元企業との連携について、積極的な取組を行った。
- ・ RIST では、「スパコン体験塾」「はじめてのプログラミング」といった人材育成・普及啓発を目的とした取組を通じ、地元教育機関とも連携した人材育成施策に継続的に取り組んだ。

以上より「京」は高いジョブ充填率で極めて安定的に運用されたとともに、継続的なコスト低減の取組を行った。また、利用体制についても、設置機関 R-CCS・登録機関 RIST は HPCI コンソーシアム等関係機関と役割分担・連携し人材育成、国際連携、地元との連携に取り組んでおり、事業は効率的に実施された。

## （2）科学技術基本計画等への貢献状況

本事業は、平成 17 年科学技術・学術審議会下での計算科学技術推進ワーキンググループにて 10 ペタフロップス超級の汎用スーパーコンピュータの実現を目指すことが提言され、開発プロジェクトが開始された。第 3 期「科学技術基本計画」（平成 18 年 3 月閣議決定）では次世代スーパーコンピューティング技術が国家基幹技術と定義され、法改正や中間評価等を踏まえ、「京」は国立大学・国立研究開発法人等有する様々なスーパーコンピュータを高速ネットワークでシームレスにユーザに提供する革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（HPCI）のフラッグシップシステムとして整理された。第 4 期

「科学技術基本計画」（平成 23 年 8 月閣議決定）でも引き続き、国家基幹技術として位置づけられ、平成 24 年 9 月に共用が開始となった。

その後、令和元年 8 月のシャットダウンまでの約 7 年間にわたり、のべ 1 万人以上、200 社以上の企業に利用され、我が国の安心・安全の確保、健康医療の発展、産業競争力の強化などといった様々な分野で成果を生み出した。また、「京」と同じアーキテクチャを持つ CPU を搭載したスーパーコンピュータが東京大学、名古屋大学、九州大学等に導入されるなど、「京」の技術が着実に広がっている。

「京」の後継プロジェクトである「富岳」については、第 5 期「科学技術基本計画」（平成 28 年 1 月閣議決定）にて提唱された、サイバー空間とフィジカル空間が高度に融合した「超スマート社会」である「Society 5.0」の実現に向け、中心的な情報基盤として活躍するべく、令和 3 年度に全面的な共用開始が予定されている。「富岳」の開発にあたっては、「京」の計算資源が活用されるなど、本事業は、実施期間のみならず、幅広い分野の発展に貢献する情報基盤として、科学技術の発展のために果たした役割は大きいと考えられる。

### （3）総合評価

本事業は、我が国に初めて設置された 10 ペタフロップス超級の汎用スーパーコンピュータの安定的な運用及び中立・公正な利用促進という前例のない事業であった。計算機科学に基づく技術的な裏付け、運用の工夫・継続的な改善、各機関の緊密な連携等を通じ、「京」は運用期間を通じて極めて安定的・効率的に運用され、大学・国研等の研究者のみならず産業界を含む幅広い利用者に活用されたスーパーコンピュータであったといえる。

安定的かつ効率的な運用、高い汎用性を活かし、医学、化学、物質科学、気象・防災、生命科学、ものづくりなど広範囲な分野において、「京」でなければなしえなかった画期的な成果が多数創出された。圧倒的な計算能力と汎用性により、幅広い分野の研究開発の先端を切り拓いただけでなく、我が国の計算科学技術全体を底上げするとともに、高いビッグデータ処理性能を活かしてデータマイニングなど新しい研究領域にも HPC の利用を拡大した。

また、「富岳」は、システムとアプリケーションが協調的に開発（Co-design）されており、また「京」を活用してアプリケーションが開発又は高度化・最適化されていたからこそ、令和 2 年 4 月からの新型コロナウイルス対策に資する研究開発を「富岳」で緊急的に実施するにあたって、成果を早期に創出することができた。これは、計算機科学の視点からも高く評価される。

産業界の利用促進に努め、中には成果が社会実装され商品化に繋がった事例もあり、スーパーコンピュータによる産業技術の発展に寄与した。

「京」の開発・運用を通じ、開発・運用とともに高度化研究を行う計算科学拠点が形成され、国内外の大学等教育機関や研究機関との連携により技術の波及や人材育成、産業連携、国際連携等が進んだ。また、「京」を活用したアプリケーション開発・利用により各研究分野において画期的な研究成果が創出されるとともに、計算科学分野の人材が育成された。これらにより、「京」が計算科学及び計算機科学全体の発展に果たした役割は大きいといえる。

### （4）今後の展望

「京」の後継機となる「富岳」(ポスト「京」)の開発が平成26年度から開始され、文部科学省並びに内閣府(総合科学技術・イノベーション会議)での評価を踏まえ、整備が進められ、令和3年3月の共用開始が予定されている。「富岳」は、「京」での技術を一部踏襲しつつも、Co-designのもと、近年のAIやデータ科学といった新たな潮流にも対応したスーパーコンピュータであり、共用開始前にスーパーコンピュータランキングで4項目(TOP500(単純計算性能)、HPCG(アプリケーション性能)、Graph500(ビッグデータ処理性能)、HPL-AI(人工知能性能))で2期(令和2年6月、11月)連続1位を獲得するなど、開発の成果が共用開始前から表れている。また令和2年4月より、様々なアプリケーション活用のもと、「富岳」の一部を活用して新型コロナウイルス対策研究を実施しており、「Society 5.0」の中心を担う計算基盤として成果が早くも創出され始めている。

現在、共用開始に向けて整備を進めるとともに、「スーパーコンピュータ「富岳」利活用促進の基本方針」に沿って「富岳」の登録機関であるRISTとR-CCSが連携し、利用制度の詳細設計を検討している。

これまでの「京」の運営実績等を踏まえ、今後の「富岳」の運営に係る展望を以下に記載する。

- 「富岳」は、我が国の科学技術の発展、産業競争力の強化に資するため、イノベーションの創出や国民の安全・安心の確保につながる最先端の研究基盤として、世界最高水準の汎用性、最高で「京」の100倍のアプリケーション実行性能を持つスーパーコンピュータとして開発されたものである。今後は、その高い性能を活かした成果、「富岳」ならではの新しい科学技術が継続的に生み出されることが望まれる。
- 一方で、HPC利用の裾野を拡大し、幅広い研究分野でのイノベーション創出に貢献する観点からは、より使いやすい制度、初級者等への手厚い支援、将来を担う若手人材の育成等に努めることも期待したい。「富岳」のみならず、HPCI全体の計算資源を活用して、関係機関が連携のうえ、戦略的な対応を検討すべきである。
- 「富岳」の利活用については、従来の超大規模並列シミュレーションのみならず、AI・データサイエンスとの連携・融合による新たな手法を通じたブレイクスルーを各分野に生み出すとともに、共用法の趣旨である科学技術の振興に貢献することは勿論、サイバー空間とフィジカル空間を高度に融合させたシステムの実現など、我が国全体のイノベーションを推進する「Society 5.0」の実現に不可欠な情報基盤として運用されることを期待したい。
- 運用については、「京」の運用時に蓄積されたノウハウを「富岳」へも活用し、高い稼働率・ジョブ充填率等により、計算資源が最大限ユーザに配分できるように計算機科学の側面からも新しい挑戦を続けることを期待したい。幅広い利用分野により画期的な成果が創出されるよう、引き続き「富岳」の利用環境向上に努めることを期待するとともに、「富岳」の利用方法についても従来の利用方法のみならず、現在、連携機関とともに検討・技術検証が進行しているクラウド的利用についても引き続き検討を進めるべきである。クラウド的利用が先行実施されている各大学情報基盤センター等の取組での知見も踏まえ、「富岳」の利用が促進されるような方式が実装されることを期待したい。また、消費される電気量の増大に伴う運用費増加が想定されるため、「京」運用時に引き続き、消費電力低減に資する取組が実施されることを期待したい。また、

利用者拡大を適切に図った結果として生じる自己収入の増加も含め、更に効率・効果的な運用を期待したい。

- 産業利用については、「富岳」では Arm アーキテクチャを採用した“A64FX”の搭載等により、「京」と比較して、更なる利用促進が期待できる。「Society 5.0」社会の実現に向け、様々なユーザが利用できるよう、引き続き丁寧な利用支援にあたりるとともに、得られた成果については積極的に広報されることを期待したい。
- 「富岳」を含む我が国の情報基盤である HPCI が全体として引き続き緊密に連携され、「富岳」での成果が我が国全体の計算基盤に対し、様々な形で還元されるとともに、大学情報基盤センター等の知見も「富岳」の運用に活用されることを期待したい。
- 「富岳」以降の中長期的な計算基盤の在り方については、文部科学省に設置された有識者会議（次世代計算基盤検討部会）でも議論が開始されているが、アカデミア等でも次世代を担う若手研究者を中心に議論が始まっている。計算機科学・計算科学の中長期的な展望についても「富岳」を活用した検証が実施され、上記在り方の議論に活かされることを期待したい。