

## 自己点検結果報告書（事後評価用）

課題名：「京」の利用促進業務（登録施設利用促進機関：RIST）

### 1. 課題概要

本業務は、特定高速電子計算機施設を中核とした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（以下「HPCI」という。）を、利用者視点に立って構築し、世界最高水準の成果創出と成果の社会還元を推進するものである。

特定高速電子計算機施設「京」は、国立研究開発法人理化学研究所（以下「理化学研究所」という。）が設置、運用する、極めて高度な演算処理を行う能力を有する電子計算機を使用して研究等を行う施設である。

「京」が、HPCI の中核として科学技術の振興や国際競争力の向上に寄与していくために、理化学研究所、利用促進業務を行う登録施設利用促進機関（以下「登録機関」という。）及びスーパーコンピュータを利用する機関等からなる一般社団法人 HPCI コンソーシアム（以下「HPCI コンソーシアム」という。）が連携・協力し、一体となって業務を遂行することで、目標の達成に大きな役割を果たしていく。

登録機関は、「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」（以下「共用法」という。）及び同法第4条において文部科学大臣が定める「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」（以下「基本方針」という。）に基づき、「京」の利用促進業務として、中立・公正な利用者選定及び研究者等の先端的・革新的なニーズにも対応できる適切な利用支援を実施する。「京」の登録機関である一般財団法人高度情報科学技術研究機構（以下「RIST」という。）は、共用法第8条に基づく利用促進業務を、平成24年4月1日から、「京」の共用終了（令和元年8月16日）まで実施した。また、現在（令和2年3月31日時点）は、共用法施行規則（直近改正：令和元年九月十七日文部科学省令第十六号）に基づき、「京」の利用促進業務のうち利用支援業務を引き続き実施している。

### 2. 事業の目標

#### （1）「京」の共用

- ・社会が期待する画期的な成果を創出するために、「京」の共用については、登録機関による公募に基づく一般利用枠とともに、公募を行わない重点的利用枠（国が国の重要政策・重要プロジェクトの推進上必要な研究であると認めたものを実施するための特別利用枠）を設けるものとする。

#### （2）公正な利用者選定の実施

- ・「京」の共用にあたっては、産業界を含め、多様な分野の研究者等に対して、透明かつ公正な手続きにより利用機会を提供する。
- ・利用者選定の中立性・公正性を確保するため、外部有識者により構成される選定委員会及び利用研究課題審査委員会（以下「課題審査委員会」という。）を設置すると

もに、利用者選定業務を実施するため、専ら利用者選定業務を行う部門を設置し、専任の管理者を置く。

- ・選定委員会及び課題審査委員会の委員の選任や課題審査の方法及び基準等については、HPCI コンソーシアムの枠組みの下での構成機関の合意形成により決定された意見を尊重しつつ設定する。
- ・利用者選定の結果を公表する等、透明かつ公正な選定を行う。

### (3) 適切な利用支援の実施

- ・利用者選定及び利用支援業務に係る一元的な対応窓口を設けるとともに、各種の情報提供及び利用相談、アプリケーションの調整・高度化の支援、課題についての技術相談、講習会の実施その他利用支援に資する業務を行う。
- ・専ら利用支援業務を担う部門を設置し、同部門に「研究実施相談者」、「ネットワーク管理者」、「情報処理安全管理者」を置く。

### (4) 計算科学研究及びそれを支える人材育成の推進

- ・計算科学技術研究を支える高いスキルを持った人材を育成する。

### (5) 施設利用研究の成果の取り扱い

- ・施設利用研究の成果は、知的公共財として積極的に公表し、普及を図る。そのための成果の公表を促進する方策を実施するとともに、利用者相互の情報交換が適切に行われるよう配慮する。
- ・ただし、知的財産保護の観点から施設利用研究の成果を公表することが難しい場合には、特許権の確立、製品化等による成果の普及を図る。

### (6) 理解増進活動の実施

- ・理化学研究所と協力し、各種広報誌やWeb サイト、各種シンポジウム、学会等の場を活用して積極的な情報発信を行い、利用者の裾野を広げるとともに、利用者との情報交換等を活発に行う。
- ・「京」の必要性・重要性等について、国民に対しわかりやすい形で成果の発表や公開を行い、「京」に対する国民の理解と支持を求める。

### (7) 国際交流の推進

- ・原則として、「京」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。
- ・海外 HPC 事業の動向調査や、海外機関とスーパーコンピュータの共用促進に係る情報交換等を行う。

### (8) 「京」の運営に関する事項

- ・幅広い分野における利用者のニーズの把握に努めるとともに、理化学研究所と協力してそれらニーズ等を施設の運営に反映することで、利用者本位の利用促進業務を行う。

### (9) 関係機関との連携

- ・HPCI の整備・運用に積極的に関与し、「京」を中核とした HPCI の構築と一体的な利活用の促進に貢献する。

### (10) 地元自治体等との連携

・「京」が立地する地元自治体と連携し、地域における科学技術活動を活性化する。

(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伴い、移行に伴う計算機資源の確保検討及び「富岳」立ち上げ後の早期成果創出に資する事項の検討・準備を行う。

3. 課題の進捗状況（令和2年3月31日時点）

(1) 進捗状況及び成果等について

① 事業の計画及び進捗状況（令和2年3月31日時点）



② 事業の目標及び計画の変更理由と対応

変更する事項	変更理由	対応
(11)「京」から「富岳」への移行に伴う検討等の追加	「京」から「富岳」への移行スケジュール等の具現化に伴い、移行に伴う計算機資源の確保検討及び「富岳」立ち上げ後の早期成果創出に資する事項の検討・準備を行う必要があるため。	平成30年度の登録機関実施計画（共用法に基づく毎事業年度文部科学大臣認可事項）より、当該移行に伴う検討等の実施を明記のうえ、移行に伴う計算機資源の確保検討の実施や、「京」の実績等を踏まえた「富岳」利用制度や効率的・効果的な利用支援の検討等を開始。 なお、本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（令和元年度より2年間の予定）において、HPCI第2階層資源より計算機資源を補填。

③ 成果について（令和2年3月31日時点）

(1)「京」の共用

a)「京」を利用して重点的に行うべき研究等の分野

「京」の能力を最大限に活用し成果を上げていくため、重点的に行うべき研究分野については、国の方針等を踏まえ、以下の課題を重点的利用枠に設定した。

1) 戦略プログラム利用枠課題（平成24～27年度）

文部科学省が選定した戦略プログラム利用枠における課題。

2) 成果創出・加速枠課題（平成24年度～）

計算資源量を追加配分することにより早期の成果創出が期待される課題。

※平成29年度以降は、「京」の定期募集を年2回行うことにより、当該課題に配分可能となる一定の未利用資源が見込めないことから、運用を休止。

3) ポスト「京」研究開発枠課題（平成27年度～「京」共用終了）

文部科学省が選定したポスト「京」研究開発枠における課題。重点課題及び萌芽的課題の2種で構成。

4) 重点化促進枠課題（平成24年度～「京」共用終了）

文部科学省が決定した政策的に重要かつ緊急な課題。

b) 基礎的、応用的分野及び開発的な研究等に対する「京」の利用時間配分

採択課題の利用時間配分は、理化学研究所が定める年間提供可能資源量の範囲で、HPCI 計画推進委員会により決定される利用枠ごとの配分方針に基づき、選定委員会の審議を経て決定した。

平成 24 年 9 月 30 日の共用開始以降、利用研究課題を公募し選定する一般利用枠において、HPCI コンソーシアムの意見を踏まえ、以下の課題を設定した。

1) 一般課題

科学的に卓越した課題、社会的に意義の高い課題、ブレークスルーが期待できる課題。なお、一般課題の中にトライアル・ユース課題及び有償による競争的資金等獲得課題を設定

2) 産業利用課題

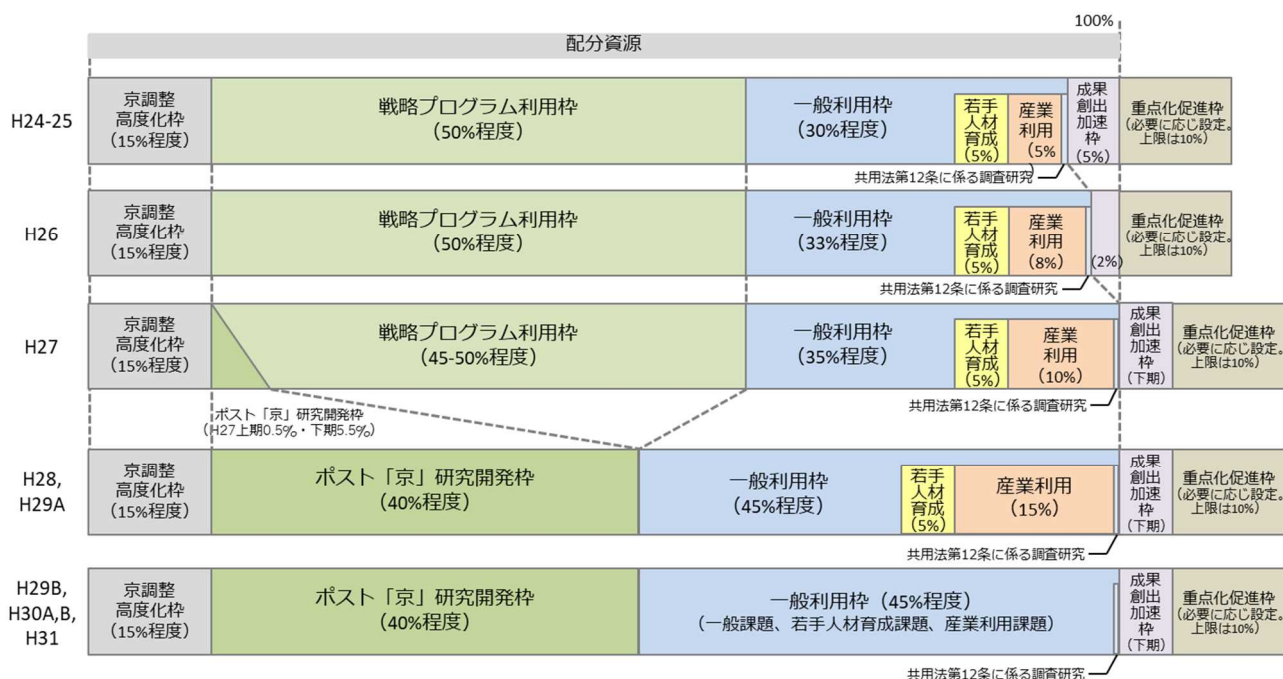
計算科学が産業利用に役立つことを実証するための課題。実証利用課題、トライアル・ユース課題、及び有償により成果を公開せず占有する個別利用課題並びに ASP 事業実証利用課題を設定

3) 若手人材育成課題

将来の発展が期待できる優れた着想を持つ課題

利用枠ごとの利用時間配分については、利用制度の変遷に伴い、図 1 のとおり利用ニーズ等に適宜対応しつつ設定した。うち、一般利用枠については、当該割合に基づく配分可能資源量を目安に課題を選定した。なお、理化学研究所が、「京」の安定運転のためのシステム調整、幅広い分野のユーザーの利用に資する高度化研究を実施する枠として、「京」調整高度化枠を設定し、15%程度の利用時間を配分した。

図 1 利用時間配分変遷



一般利用枠については、研究開発サイクルの短期化・迅速化等に伴い多様化するニーズに対応するため、平成 29～30 年度においては、4 月から原則翌年 3 月末まで「京」を利用する従来の年 1 回定期募集に加え、10 月から翌年 9 月末まで利用する年 2 回の定期募集を行った。第 1 回目（A 期）は年間配分可能資源量の 7 割程度を目安に、第 2 回目（B 期）は同 3 割程度を目安に、それぞれ課題を選定した。

一般利用枠内の産業利用課題に関しては、各種産業利用裾野拡大施策に伴う利用ニーズの増大に適切に対応するため、産業利用枠への利用時間配分を 5%→8%→10%→15%と順次拡大した。平成 29 年度 B 期募集からは、産業界の HPC に対する知識や経験が蓄積されてきたことを考慮し、全体の応募状況を反映した採択とするべく、産業利用枠を撤廃した。また、当初年 1 回の募集であった、有償により成果を公開せず占有する個別利用課題については、HPCI コンソーシアムの意見を踏まえ平成 26 年 3 月より随時募集に変更し、多様化する産業利用ニーズに応えた。

それ以外の随時募集課題として、平成 27 年度より一般課題にトライアル・ユース課題、公的な競争的研究資金や国のプロジェクトで採択された課題（以下「競争的資金等獲得課題」という。）を設定するとともに、産業利用課題に HPC アプリケーションの機能をネットワーク経由でサービスとして顧客に提供する ASP 事業の有効性を実証する課題（以下「ASP 事業実証利用課題」という。）を設定し、利便性の高い利用環境を望む産業界の要請に応えた。

各採択課題については、評価者の審査結果・計算資源査定に基づき、課題審査委員会・選定委員会の審議を経て、適切に利用時間を割り当てた。また、成果創出・加速枠課題などへの追加資源配分も行い、利用が進んだ課題への支援も適切に行った。

表 1 利用区分（「京」共用終了時点）

利用区分	課題の種類		種別	募集	
一般利用枠 (公募)	一般課題		成果公開	年 2 回	
		トライアル・ユース	成果公開	随時	
		競争的資金等獲得課題(有償)	成果公開	随時	
	産業利用 課題		トライアル・ユース	成果公開	随時
			実証利用	成果公開	年 2 回
			個別利用(有償)	成果非公開	随時
			ASP 事業実証利用(有償)	成果非公開	随時
	若手人材育成課題	成果公開	年 2 回		
重点的利用枠 (非公募)	成果創出・加速枠課題		成果公開	X	
	戦略プログラム利用枠課題(H27 終了)		成果公開		
	*ポスト「京」研究開発枠課題(H28 開始)		成果公開		
	重点化促進枠課題		成果公開		

\* : ポスト「京」研究開発の準備課題は、H27 より開始。

## (2) 公正な利用者選定の実施

a) 特定高速電子計算機施設を利用して研究等を行う者の募集及び選定に係る計画  
「京」の利用期間は、理化学研究所により策定される運転計画に基づき、平成 28 年度までは 4 月から原則翌年 3 月末まで利用する一つの期を、平成 29~30 年度はこれに加え 10 月から原則翌年 9 月末まで利用する二つの期（A 期及び B 期）を、それぞれ設定した。

利用開始初年度は、平成 24 年 4 月に第 1 回選定委員会を開催し、「特定高速電子計算機施設の利用研究課題選定に関する基本的考え方」、「特定高速電子計算機施設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」及び「課題審査委員会運営要領」を定めた。「京」の共用開始が当初予定より 1 ヶ月前倒しの 9 月 30 日に設定されたため、平成 24 年度利用研究課題の公募を 5 月に開始し、1.5 ヶ月程度の募集期間を設定した。第 1 回課題審査委員会を 7 月に開催し、課題の審査要領等を定めたのち、第 2 回課題審査委員会を 8 月に開催し、利用研究課題の審査・選定を行った。第 2 回の選定委員会を 8 月に開催し、9 月に選定結果を通知・公表した。

平成 26~28 年度は、1 期を 1 年間とし、9 月頃に公募を案内した。2 ヶ月程度

の公募期間、3ヶ月程度の審査・選定期間を設定のうえ、翌年2月上旬に課題申請者へ選定結果を通知した。平成29～30年度は、これに加え10月から利用する第2期（B期）を設定した。3月頃に公募案内、第1期（A期）同様の公募期間、審査・選定期間を設定のうえ、8月中旬に課題申請者へ選定結果を通知した。

また、新たに設定した随時募集課題についても迅速な利用者選定に努め、利用者視点に立った利用促進を実施した。

## b) 特定高速電子計算機施設を利用して研究等を行う者の募集及び選定の方法

### b-1) 募集に係る情報の発信について

利用研究課題の募集にあたっては、平成24年4月に開設したWebページ「HPCIポータルサイト」を用いて、申請方法、選定基準その他必要な事項、課題選定後の利用手続き及び研究成果に関する手続き等に係る情報を課題募集ページに公開するとともに、募集（及び選定結果）に係るプレスリリースを都度行った。共用終了までの全10回の利用研究課題定期募集に際し、「京」の利用についての情報を多くの研究者等に対して適時に、かつ、的確に提供するために、計44回の募集説明会（於：東京、神戸他）を開催し、延べ865名の参加者（うち企業が202社、361名）に対して積極的な情報発信を行った。

これらの方法により、国内外の産学官の幅広い分野の研究者等に対して広く募集に係る情報を周知した。

### b-2) 利用研究課題選定のための委員会の設置・運営について

選定委員会及び課題審査委員会の委員の選任や課題審査の方法及び基準等の策定については、HPCIコンソーシアムの枠組みの下でのユーザーコミュニティの合意形成により決定された意見（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」(以下「最終報告書」という。))に基づき実施した。

- ・選定委員会の委員は、HPCIコンソーシアム等の意見を尊重しながら、計算科学、計算機科学に高い知見を有する者に加え、実験科学者、産業界の技術開発研究者、大規模計算機の運用技術の知見を有する者等の中から、大所高所から議論のできる学識経験者10名程度で構成した。なお、委員の専門分野等に著しい偏りが生じないようにバランスの取れた委員構成とした。
- ・利用研究課題選定については、選定委員会が、選定の方針等利用者選定に係る事項について幅広い観点から意見を述べるとともに、計算科学・計算機科学の専門的知見を有する者で構成される課題審査委員会が利用研究課題の審査を行い、透明・公正な課題選定を実施した。
- ・一般課題及び若手人材育成課題については、専門分野の学識経験者等が課題の一次評価(ピア・レビュー)を行い、その結果を踏まえ課題審査委員会で審査した。
- ・産業利用課題の審査については、課題審査委員会の下に設置された産業利用ワーキンググループ(産業利用WG)が課題の評価(レビュー)を平成29年度



A期課題まで実施した。平成29年度B期課題からは、産業界のHPCに対する知識や経験が蓄積されてきたことを考慮し、全体の応募状況を反映した採択とすべく、「京」産業利用枠を撤廃した。併せて平成29年8月に産業利用WGも廃止し、以降は産業利用課題の評価と審査は一般課題及び若手人材育成課題の選定と同様の手順で進めた。

- ・産業利用課題のうち、成果非公開の個別利用課題については、企業情報の秘匿性に配慮し、課題審査委員長単独で審査を行った。また、トライアル・ユース課題については、課題審査委員長が指名する課題審査委員が審査を行った。ASP事業実証利用課題は4名の課題審査委員による審査後、課題審査委員会のメール審議を行った。

### c) その他特定高速電子計算機施設を利用して研究等を行う者の募集及び選定の実施に関する事項

利用者選定業務を実施するため、専ら利用者選定業務を行う共用促進部門を設置し、専任の管理者を置くとともに、所要の事務要員を配置した。専任の管理者は、選定委員会等の運営及び公正・透明性の確保された事務体制の運営を統括した。選定業務を担当する事務要員のグループは、多数の利用者と接触する一元的相談窓口のグループとは分離し、事務所も別の建屋とすることで、公正な選定を遂行できる事務体制とした。

利用者選定業務は、選定委員会における審議を経て実施し、選定委員会の構成員及び議事録概要を公開することで選定の透明性を確保した。さらに、第9回選定委員会から選定委員会資料についても公開することとした。

利用者選定業務の遂行にあたっては、専任の管理者の指揮命令の下で、事務従事者が、利用課題申請書とともに、データベースから抽出した過去の資源利用情報・利用成果等を取りまとめ、100名を超える評価者に送付した。作業の省力化・迅速化のために、申請書提出及びピア・レビューの電子化を行い、多数の応募課題の処理に対応できる体制とするとともに、課題申請者の手続きの簡素化及び利便性の向上を図った。

「京」の共用終了までに延べ1,145件の「京」一般利用枠応募課題を処理した。うち、983件は10回の定期募集で、162件は随時募集として受付け、遅延なく、利用者選定業務を実施した。

## (3) 適切な利用支援の実施

### a) 情報支援

各種の情報提供及び利用相談やアプリケーションの調整・高度化の支援等について、利用者選定及び利用支援業務の一元的な相談対応等窓口機能であるヘルプデスクを設け、応募前の事前相談から「京」の利用方法に関する相談、技術支援、産業利用相談に対応するなど、利用者の要望に基づき多種多様な情報提供及び利用相談を実施した。

ヘルプデスクでは、ワンストップサービスの対応を 12,667 件（共用開始から令和元年 9 月末までの件数。HPCI の問合せを含む）実施した。極めて多様な利用者からの相談や要望が HPCI を構成する機関や部署間でたらい回しされることなく、RIST のヘルプデスクが一元的窓口として対応する効率的な仕組みは利用者から高く評価されている。

## b) 技術支援

技術支援の実施にあたっては、共用法施行規則第 8 条で定める「京」に係る員数以上の研究実施相談者等による技術支援体制を構築した。高度なスキルを有する研究実施相談者 14 名及び支援補助技術者 6 名で構成される専門組織を設けるとともに、アカデミア及び産業利用課題に対し一元的な利用支援体制とすることにより、アカデミアへのプログラム支援で得られたノウハウの産業利用課題への適用及び支援依頼課題数の変動への柔軟な対応が可能となり、効率的・効果的な利用支援を実現した。また、理化学研究所と連絡会を設け、理化学研究所の知見・技術を支援に生かせる体制とした。

利用者が抱える問題の内容に応じて、アプリケーション移植にあたって生じた問題の解決から、高度化による計算性能の向上や大規模並列実行のための並列性能最適化など幅広い支援を実施した。

計算性能向上に資する高度化支援を行うにあたり、基本的に研究実施相談者等のうち当該分野の専門知識を有する高度化支援を行う者及び当該支援内容等をチェックする者の二人を支援課題ごとに充てる体制とし、「京」を利用する上で課題となる超高並列への対処案及び単体性能向上のための対処策等について分析評価することで、確度の高い性能予測を実現した。支援対象課題については、一般利用枠だけではなく戦略プログラム利用枠及びポスト「京」研究開発枠課題に対する支援も実施することにより、先端的・革新的ニーズにも対応した。

より効率的・効果的な施設利用に資するため、「京」において実行された数万件の計算を対象として性能情報を理化学研究所と連携し分析した。その調査結果から大規模計算を実行している課題や効率改善の余地があると推測される課題を洗い出し、ユーザーにヒアリングを行うとともに高度化支援を提案する取り組みを実施した。この活動による高度化支援を 21 件実施し、「京」の一層の効率的利用に繋がった。

「京」の利用研究課題への高度化支援としては、平成 24 年度から共用終了までに計 173 件（上記 21 件はこの内数）の支援を実施した。分野別では、ものづくり：65 件、バイオ：14 件、物質・材料：51 件、環境：27 件など、広範囲にわたって対応した。うち 70 件が産業利用課題への支援であった。戦略プログラム利用枠及びポスト「京」研究開発枠課題に対し、同計 63 件（上記 173 件の内数）の支援を実施した。これら戦略プログラム枠及びポスト「京」研究開発枠課題代表者からも支援結果について高い評価を得た。さらに、ポスト「京」に向けたプ

プログラムの性能評価や最適化の検討を目的として実施されたポスト「京」性能評価環境利用課題に対し4件（上記173件の外数）の支援を実施した。

具体的な高度化支援の実績として、例えば「OpenFOAMの高度化支援」がある。数値流体力学分野を中心に活用されているオープン・ソース・ソフトウェア（OSS）であるOpenFOAMについて、大規模データを用いた性能評価を通じてMPI通信処理のボトルネック検出/改善等を行うことで、1.3倍～2.1倍の性能向上を得ることができ、実行効率についても1.4%から2.1%（640mpi時）に向上することができた。

理化学研究所と連携し、定期的にアプリ利用環境整備連絡会を開催して双方の整備等に関する情報交換を行うとともに、共同で利用者に対するアンケート調査や情報発信を実施した。この連携の下に、利用の多い4本のOSSについてRISTが整備し、利用者へ提供した。

改善すべき項目を確認し、利用支援業務に反映するよう努めた結果、各課題への支援終了時アンケート調査においては、利用支援に対する満足度94%が得られるなど、利用研究課題の特性等に配慮し、質・量ともに十分な支援体制を取ることができたことを示している。

また、高度化支援作業を通じて得られた技術的知見や高度化事例について、「京」の利用者をはじめ他の機関における利用支援に資することを目的としてHPCIポータルサイト上で情報公開した。

## c) その他の支援

### c-1) 講習会等の開催

「京」の有用性の啓発や利用技術の習得等を目的として、数多くの講習会を主催するとともに、理化学研究所等とも共催した。主催した定期講習会としては、「京」利用者向け講習会及び一般HPC利用者向け講習会を実施し、それぞれ初級、中級と分けることで、幅広いレベルの利用者に対応した。

さらに、上級者向けの講習会として「京」における高並列化・高速化技術について高度化支援の実例に基づき、参加者とノウハウを共有することを目的とする「京」の高速化ワークショップを主催し、より専門的な技術の習得の場を設けた。講習会全体で、平成24年度から共用終了までに計160回の講習会、ワークショップ等を開催し、合計3,822名の参加者を得て、利用者への利用情報の提供及び利用者の裾野拡大に努めた。うち、産業界からの参加者は1,831名であった。受講者からは、平均87%の高い満足度が得られた。

企業では商用アプリケーションの利用が一般的であるが、「京」で動く商用アプリケーションの数が限られている上に、ライセンス料が極めて高額となる問題がある。そのため、多くの企業はライセンス料が生じないOSSの利用を希望するが、開発者からの支援のないOSSには、「京」への移植、実行環境整備及び

性能向上に多くの課題があり、「京」の産業利用に大きな障害となっていた。そのため、RIST は産業界からのニーズが高く利用者の多いアプリケーションである OpenFOAM や LAMMPS といった OSS に特化したワークショップやハンズオン形式の入門講習会を開催し、基本的な利用方法、「京」への移植、高速化及び C++ コンパイラの改善情報等を発信し利用者のニーズに合わせた利用支援活動を行った。

CAE 分野では、OSS を利用する課題が多く、なかでも多様な機能を持つ流体分野の OpenFOAM の利用ニーズが高く、また、構造や電磁界分野のニーズも高い。これらのニーズに応えるため、各計算機で実施された移植・高度化の情報を RIST が集約するとともに、CAE ワークショップを 3 年連続して計 3 回開催し、利用支援を通じて RIST に蓄積されたノウハウを広く共有した。延べ出席者数 171 名中、企業からは 125 名 (73%) と、産業界のニーズに応えた。

また、材料系ワークショップを計 9 回開催し、総参加者数 1,047 人のうち産業界参加者は 648 人 (62%) に及ぶなど、受講者のスキルアップを通して産業界における計算科学研究の人材育成に貢献した。

#### c-2) 産業利用支援

産業界における HPC 技術の活用を推進するため、RIST に産業利用推進室(令和元年度から産業利用推進部)を設置し、多岐にわたる産業利用支援を実施した。また、産業界では外部とのインターネット接続を制限する企業が多いため、「京」の利用及びデータのダウンロードが課題となっている。そのため、東京にアクセスポイントを設置し、「京」を含む HPCI へのインターネットアクセス及び大規模データのダウンロードができる環境を備えた東の利用相談拠点(アクセスポイント東京)を設置し、運用した。

産業界の新規課題申請者は、大規模並列計算のスキル・経験が大学・研究機関と比較すると少ないため、課題申請前のコンシェルジュ的相談対応を特に重視した。その結果、対応した 294 件のうち 154 件 (52%) が利用課題応募に至った。

さらに、産業利用においては、共用開始時からトライアル・ユース課題を設定するとともに初心者等向けのプロモーションや相談対応を行うことで、トライアル・ユース計 59 課題のうち、実証利用又は有償・成果非公開の個別利用へのステップアップ率は 45.8%に達した。コンシェルジュ的応募前相談対応の重視とトライアル・ユースの運用は、産業利用の拡大に極めて有効であった。

アクセスポイント東京において対応した利用相談(平成 24~令和元年度)207 件から 111 件が「京」を含む HPCI 利用課題応募に至り、うち、103 課題が選定された。また、「京」で実施した計算結果の大規模データのダウンロードを目的とする利用も 156 件(延べ利用日数 310 日)に及ぶなど、アクセスポイント東京の設置が関東地区における産業利用の促進に貢献した。

【注】アクセスポイントは神戸にも設置。アクセスポイント東京は RIST が、アクセスポイント神戸は公益財団法人計算科学振興財団が HPCI 運営業務の一環として運営を担当。

#### c-3)「京」互換機を用いた利用支援

産業利用支援・裾野拡大を目的に「京」と同一アーキテクチャの FX10 (48 ノード) を RIST に設置し、平成 25 年 11 月より運用を行った。

「京」の応募前にアプリケーションが動作するか否かを確認したいという企業のニーズに応え、FX10 を用いたアプリケーションごとのインストールや動作確認をすることにより、企業の「京」への応募の支援を行った。また、「京」においてジョブ投入が集中しやすい時期にはジョブ実行までに長い待ち時間を要する場合があります、FX10 を利用することで効率的に移植支援(下記)を含めた検証作業を実施することができた。

さらに、講習会での実習利用や高度化支援に関わる利用にも積極的に活用し、産業利用支援及び裾野拡大の推進に寄与した。

#### c-4)商用アプリケーションの「京」への移植支援

「京」へのアプリケーションの移植については、FX10 を移植環境として利用・検証しながら、「京」で利用できる商用アプリケーションを拡大した。商用アプリケーションはソースコードが非公開であることから、アプリベンダー等との共同研究の下、5 本の商用アプリケーションの移植を支援した。本支援を通じて「京」のシステム上の制約から実行ができないアプリケーションが存在することも判明したため、今後の課題として理化学研究所と情報共有を行った。

### (4) 計算科学研究及びそれを支える人材育成の推進

基本方針に定められた、「理化学研究所及び登録機関等の関係機関が適切な役割分担のもと研究及び人材育成に関する機能を果たしていく。」に従い、前述のように、幅広い利用技術のニーズに応じて各種の講習会やワークショップを開催し、参加者(ユーザー)のスキルアップにより計算科学研究及びそれを支える人材の育成に貢献した。ワークショップでは、企業や研究機関等の研究・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した。なお、計 9 回開催した「材料系ワークショップ」においては、全参加者のうち約 6 割を企業参加者が占めるなど、産業利用の促進にも貢献した。また、地元教育機関との連携の下、若年層に対し「京」を利用した並列計算に挑戦するスパコン体験塾(詳細後述)等を実施することで、理解増進とともに広く将来的な計算科学分野の発展を担う人材育成の役割も担った。

研究実施相談者等は、HPC 分野での代表的な国際会議である米国 SC、欧州 ISC 等へ毎年参加するとともに、日本物理学会、気象学会等の国内会議や計算量子化学、核融合、宇宙物理を始めとする国際会議等への参加・発表を通して、最先端の研究動向の調査、技術情報の収集を図り、利用支援業務を行う者の資質の向上を図った。また、計算科学分野における博士号取得者等を任期付の研究者として RIST へ採用し、利用支援業務を充実させると同時に、将来の HPC を担う人材育成を図った。

理化学研究所と連携協力協定を締結のうえ、支援実施の際には高速化チューニングに関する意見交換会を定期に開催することで、研究実施相談者等による理化学研究所の持つ最新の HPC 分野に関する知見・技術の習得に努めた。

利用支援に資する調査研究及び研究実施相談者等の技術の習得やスキルアップを目的として、「京」の一般利用枠を利用する共用法第 12 条に基づく調査研究に資する課題を計 14 課題実施した。具体的には、「京」で推奨されているハイブリッド並列最適化に関する調査・研究により、研究実施相談者等の専門分野のソフトウェアに関して、「京」に特化、或いは、関連する知見及び技術を蓄積し、高度化支援における提案などの場面で生かしている。これにより、計算機科学と計算科学の双方に精通する人材の育成を図ってきた。

また、共用法に基づく三つの登録機関が合同で主催している連携利用シンポジウム（詳細後述）においては、実験研究者と計算科学研究者が一堂に会して議論及び情報交換を行うことにより、実験科学と計算科学の融合の促進及びこれら分野における利用研究者の知見向上等に務めた。さらに、これら登録機関における研究実施相談者等が実験科学・計算科学相互の最先端研究動向等に係る情報交換・共有や支援の在り方等について議論を行う勉強会を 3 回（平成 29 年 1 月、平成 30 年 1 月、平成 31 年 2 月）開催し、連携利用促進支援に係る知識等の習得に努めた。

研究実施相談者等が、国内外の会議への参加や雑誌等で発表した件数は 200 件以上に及ぶ。このような活動を進める中で、登録機関の研究実施相談者等が共著となった論文が 2 年続けて Gordon Bell 賞のファイナリストに選ばれたのをはじめ、米国 SC においてポスター発表を計 5 件行うなど、研究実施相談者等の資質の向上のための様々な措置を着実に実施した。

#### （5）施設利用研究の成果の取り扱い

利用研究課題の成果は、知的公共財として積極的に公表し、普及されるべきものとして、その成果の公表を促進するために以下の方策を実施した。併せて、利用者相互の情報交換が適切になされるよう成果報告会を開催した。

- ・全ての課題代表者は、課題実施終了後 60 日以内に利用報告書を提出する。その後、成果非公開の産業利用課題（個別利用及び ASP 事業実証利用）を除き、RIST で閲読のうえ HPCI ポータルサイトで公開する。
- ・トライアル・ユース等の一部課題を除く成果公開型課題の代表者は、課題実施終了後 3 年以内（原則。申請に基づき最長 1 年間の延期可）に下記のいずれかの方法による成果公開を行う。

① 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、

博士學位論文を含む)

- ② HPCI 利用研究成果集 (RIST 発行の電子ジャーナル)
- ③ 企業の公開技術報告書 (産業利用のみ)
- ④ 特許 (特許権の取得まで)

#### a) 利用報告書の公開

利用報告書の HPCI ポータルサイトでの公開に当たっては課題種類別の一覧表示に加えて、利用分野から検索できる機能、利用報告書の要約表示機能を導入した (平成 27 年度からは英語版要約も表示)。また、課題毎に HPCI 成果発表データベース (下記 d)) にリンクできる機能を備える。さらに、公開されている全課題の利用報告書が Web ブラウザ上にて検索可能となっており、カテゴリ検索 (課題番号、課題名、課題代表者、所属機関名、利用ソフトウェア、利用枠、実施期間、利用計算資源、研究分野の 9 項目) 及び任意のキーワードによる検索機能を有するなど、利用ニーズ等に応じた利用報告書の高機能検索が可能である。平成 24 年度～共用終了までに実施された利用報告書の公開の実績は、HPCI 全体で 1,278 課題、うち「京」利用に係る課題は 873 課題 (令和 2 年 3 月 31 日時点) である。また、ダウンロード数は HPCI 全体で 128,828 回、うち「京」利用に係る課題は累計 93,501 回 (統計データ取得を開始した平成 26 年 7 月 15 日～令和 2 年 3 月 31 日) である。

なお、知財権を獲得する課題については、利用報告書の公開を 2 年間延期する制度を設け、技術成果の早期権利化を促進した。

#### b) レビューを伴う成果公開の促進

成果を公開する課題には、課題実施終了後 3 年以内 (原則。申請に基づき最長 1 年間の延期可) に、査読・審査を伴う論文等の成果公開を義務付けている。終了課題の成果公開の実施状況について適宜フォローアップしつつ、課題審査委員会において成果公開の認定を行った。第 18 回課題審査委員会 (令和 2 年 1 月 16 日) 時点の「京」利用に係る各終了年度別の認定課題数と全成果公開課題数に対する割合は以下のとおり。; 平成 24 年度終了 33 課題 (100%)、平成 25 年度終了 101 課題 (99%)、平成 26 年度終了 83 課題 (94%)、平成 27 年度終了 112 課題 (86%)、平成 28 年度終了 99 課題 (74%)、平成 29 年度終了 69 課題 (53%)、平成 30 年度終了 25 課題 (21%)、令和元年 8 月 16 日終了 5 課題 (14%)。

#### c) 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し、公開するため、RIST が査読付き電子ジャーナルの発行を行っている。最初の掲載論文の公開を平成 27 年 9 月 9 日から開始し、令和 2 年 3 月 31 日時点で全 60 編 (うち、「京」の利用研究課題 38 編) を公開した。公開論文の全ダウンロード数は令和 2 年 3 月 31 日時点で 10,190 回であった。

d) HPCI 成果発表データベースの公開

HPCI で共通運用される計算資源を利用した利用研究課題に係るあらゆる成果発表情報を一元的にまとめた HPCI 成果発表データベースを構築し、平成 25 年 5 月から公開した。HPCI 運用開始から令和 2 年 3 月 31 日までのすべての成果発表情報として 8,148 件（査読付き論文数 1,910 件を含む）、うち「京」を用いた成果の発表件数として 7,019 件（査読付き論文数 1,425 件を含む）が登録されている。また、これとは別に、同年月日までに HPCI 利用成果に係る受賞実績 202 件が登録されている。これら登録情報へのアクセス数は累計 31,144 回（令和 2 年 3 月 31 日時点）である。

e) 研究者相互の情報交換

「京」の共用の促進に関する事業と連携して実施した利用研究課題について計 2 回の中間報告会及び計 6 回の成果報告会を開催し、延べ 2,420 名の参加を得た。参加した利用者へのアンケート（直近第 6 回成果報告会）においては、59%の「研究者と交流ができた」又は「有意義な議論ができた」との回答を得た。また、成果報告会自体について、96%の「非常に満足」又は「満足」との回答を得た。このように、成果報告会は研究者相互の情報交換にも寄与したと言える。

(6) 理解増進活動の実施

RIST 広報誌「京算百景」、理化学研究所との共同開催の「京」シンポジウム等を通じて一般にわかりやすく成果を公開した。加えて、神戸医療産業都市の一般公開などのアウトリーチ活動も行った。神戸青少年科学館と連携し、青少年の計算科学に関する啓蒙活動の一環として計算回路の作成やビー玉式計算機による 2 進数の原理等を解説した「スパコン探検隊」を開催した。小中学生の出席者からは、「おもしろかった」、「スパコンの仕組みがよくわかった」等の声が寄せられた。また、平成 30 年度より高校生・高専生を対象にした初心者向けプログラミング講習会「はじめてのプログラミング」、実際にスパコンを使って並列計算に挑戦する経験者向け講習会「スパコン体験塾」を開催した。参加者からは数値シミュレーションの意義やスパコンの性能の高さを実感できた等の声が多数寄せられ、青少年の計算科学に対する知的好奇心の活性化に貢献した。また、初心者向けの「はじめてのプログラミング」は出前授業として高校でも開催しており、地元の教育機関との連携を深めた。

国民に対するわかりやすい成果公表のため、一般利用研究課題の成果について外部有識者から構成されるプログラム委員会によるサイエンスレビューを実施し、選出された優秀課題を成果報告会で表彰するとともに、成果事例集として継続的に発行した。

また、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した。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」を実施し、課題毎に成果



動画を含む Web ブース展示を実施するなど、新しい方法での理解増進に努めた。

## (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した。

「京」を活用した国際交流を推進するために、平成 27 年 3 月にシンガポールにおける HPC 動向調査を実施した。シンガポール科学技術庁配下の 2 研究機関と HPC の推進について意見交換を行い、平成 27 年 9 月に平成 28 年度の募集説明会を開催し、国内の研究者等と同様に「京」が利用できることを周知した。その結果、海外からの応募件数は、平成 27 年度の 9 件に対し、平成 28 年度は 15 件と倍増し、海外の応募者を拡大した。

将来の連携推進に資するため、NSCC（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）と MOU を平成 28 年 6 月に締結した（令和元年 6 月に更新）。平成 28 年 10 月には MOU に基づく第一回の情報交換会を日本で、また、平成 29 年 3 月には第 2 回をシンガポールで開催した。以降、シンガポールによる国際会議の開催の機会を利用して人員交流や情報交換を毎年実施し、令和 2 年 2 月には国際会議 SCAAsia2020 の場において、先方からの依頼によりチュートリアルレクチャーを予定していたが、新型コロナウイルス感染症蔓延に伴い当該会議自体が中止となった。

欧州全体にわたる高性能計算資源を提供している PRACE<sup>1</sup> と RIST の間で、スーパーコンピュータの共用促進に係る情報交換に関する覚書（MOU）を平成 26 年 10 月に締結した（平成 29 年 4 月に後述の米国 XSEDE を加えた 3 機関 MOU へ発展することで解消）。これにより、欧州主要国における HPC の取り組みに係る情報を HPCI の運営に反映できる基盤を形成するとともに、それぞれの主催する会議に相互招待し、各々の活動状況を発表するなどの交流を推進した。

<sup>1</sup> Partnership for Advanced Computing in Europe

<https://www.prace-ri.eu>

登録機関主催の第 1 回成果報告会（平成 26 年 10 月 31 日）、第 2 回成果報告会（平成 27 年 10 月 26 日）及び第 3 回成果報告会（平成 28 年 10 月 21 日）において PRACE が基調講演（第 1、2 回）及び招待講演（第 3 回）を行うとともに、PRACE 主催の国際会議（PRACEdays15）にて、RIST が基調講演を実施した（平成 27 年 5 月 27 日、ダブリン）。

米国の大学の HPC 利用促進組織である XSEDE<sup>2</sup> を含め、RIST/PRACE/XSEDE 間の協力を推進すべく HPC の共用促進に係る情報交換に関する MOU を、平成 29 年 4 月に 3 者間で締結した（平成 31 年 3 月に更新）。

登録機関及び HPCI コンソーシアム合同開催の第 4 回成果報告会・HPCI コンソーシアム国際シンポジウム（平成 29 年 11 月 2 日）において、XSEDE が招待講演を行った。

<sup>2</sup> Extreme Science and Engineering Discovery Environment

<https://www.xsede.org/home>

PRACE、XSEDE 及び RIST 共同による計算機利用支援に関する募集を、令和元年 11 月より開始した。

今後の HPCI フラッグシップ機が「京」から「富岳」へ移行するに伴い、利用者への計算資源提供の在り方等検討に資するため、令和元年 7 月～10 月にかけて Top 500（令和元年 6 月時点）の上位スーパーコンピュータを保有する欧米のスパコンセンターの運用に関する調査を行った。調査は、各センターの Web サイトから情報を収集し、その結果を基に、より詳細な情報を得るべく訪問先を 9 機関（米国：ALCF ほか 2 機関、欧州：PRACE ほか 5 機関）選定し、直接ヒアリングを実施した。調査結果は、令和 2 年 2 月の HPCI 計画推進委員会等において報告した。

#### （8）特定高速電子計算機施設の運営に関する事項

利用研究課題の成果報告会等において、また利用研究課題終了後のアンケート調査を実施することにより、幅広い分野における利用者のニーズの把握に努めた。収集した情報は、理化学研究所にも提供し、それを施設の運営に反映することで、利用者本位の利用促進業務を実施した。

登録機関に情報処理安全管理者を置き、情報処理の安全性及び信頼性を確保するための活動を積極的に展開し、情報処理の安全性及び信頼性を確保した。

- ・登録機関業務の遂行によって知り得た情報（機密情報や個人情報）を適切に取り扱うための方策として、共有サーバや個人情報専用サーバの運用ルールを定め、職員に対し周知徹底を行った。特に、個人情報については毎年管理台帳の見直しを徹底し、適切な管理が行われていることを確認した。
- ・情報セキュリティマネジメント活動として、職員の情報セキュリティ教育を毎年実施し、職員全員の受講による情報セキュリティ・リテラシーの向上に努めた。

登録機関にネットワーク管理者を置き、課題申請時の情報を一元的に管理する申請支援システム及びネットワークの運用管理を適切に実施した結果、不正アクセスやネットワークインシデントの発生を未然に防ぐことができた。また、第三者機関によるセキュリティ診断を定期的実施し、サイバーセキュリティ対策に関する必要性・有効性を確認した。

## (9) 関係機関との連携

理化学研究所と締結した連携協力協定の下に、定期的な連絡会を開催し、利用状況及び利用支援に関する情報を共有することで、理化学研究所及び登録機関は一体となって特定高速電子計算機施設の共用の促進に努めた。

HPCI コンソーシアムが主導する HPCI の構築と運営に協力した。HPCI コンソーシアムが実施したアンケート調査結果に基づく HPCI システムの整備・運用体制の改善・要望に応え、利用者の利便性の向上に努めた。HPCI コンソーシアム理事会に対して「京」の利用促進状況を適宜報告するとともに、競争的資金等獲得課題など、新たな利用制度の導入や運用の見直しの際には HPCI コンソーシアムの意見を聴いて、制度や運用に反映した。

HPCI システムの複数の構成機関にまたがる課題を議論・調整する HPCI 連携サービス委員会やその運営・作業部会に対して、HPCI システムの利用状況を適宜報告するとともに HPCI の運用に必要なさまざまな提案を行い、HPCI の構築と運営に貢献した。

大型放射光施設 SPring-8/SACLA、大強度陽子加速器施設 J-PARC MLF 等の大型実験施設と「京」をはじめとするスーパーコンピュータとの連携利用は、数値シミュレーション手法と実験的手法の特性を相互に補い合う形での研究成果の創出につながることを期待される。このため、他の登録機関（公益財団法人高輝度光科学研究センター（SPring-8/SACLA）、一般財団法人総合科学研究機構（J-PARC MLF））との連携の下、平成 26 年度より令和元年度までに連携利用シンポジウムを毎年、計 6 回共同開催し、延べ 673 名の参加を得た。

連携利用シンポジウムの回を重ねることにより、実験科学研究者と計算科学研究者との議論が深化してきており、また企業からの参加者、参加する企業数も増加している。実験と計算科学の連携を進めた結果、大型実験施設との連携利用課題の応募数は、平成 26 年度募集の 10 件から平成 29 年度募集の 28 件へと増加するなど（直近令和元年度は、8 月 16 日に「京」が共用終了したこともあり 15 件）、裾野が拡大した。

連携利用課題の成果として、例えば「ゴム材料を分子から見つめ直すことによる高性能タイヤの製品化」がある。SPring-8 及び J-PARC において現実のタイヤ素材の構造を解析する研究を進めること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ることで、飛躍的に効率よくタイヤを開発することが可能となった。これらにより、従来品より 51%も耐摩耗性を高めたタイヤを製品化するなどの成果につながっている。

## (10) 地元自治体等との連携

「京」が立地する兵庫県、神戸市、公益財団法人関西経済連合会、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、兵庫県立工業技術センター等、地元自治体や産業促進機関との連携を図り、セミナーの共催や情報交換を実施した。

神戸市と兵庫県が出資し、産業界向けの入門用スパコンを運用する公益財団法人計算科学振興財団（FOCUS）とは連携協力協定を締結し、東西アクセスポイントの運営に関わる調整やFOCUSスパコン利用企業へのHPCI産業利用紹介等を実施した。その結果、兵庫県に事業所を有する11の企業が「京」を利用しており、地元企業による「京」の利用を拡大したい自治体の意向に応えた。

前述の理解増進活動の一環として、神戸医療産業都市の一般公開や兵庫県・神戸市主催の市民向けスパコンセミナーに協力するとともに神戸青少年科学館での小中高校生向けのスパコン授業や神戸市立科学技術高校の教師への講習会等のアウトリーチ活動を実施した。

#### (1.1) 「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伴い、移行に伴う計算機資源の確保検討を行った。（本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（令和元年度より2年間の予定）において、HPCI第2階層資源より計算機資源を補填。）

令和元年度に、登録機関からの申請に基づく「富岳」利用促進業務実施機関の審査が文部科学省により実施され、RISTが「京」に引き続き「富岳」の利用促進業務を実施することが令和2年1月に決定した（決定時における当該業務開始時期は令和2年度中を想定）。本決定に際し文部科学省より示された指摘事項に基づき、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した。

「富岳」に向けた利用支援の準備を効率的に進めるため、「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した。また、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優先的に進めた。整備にあたっては「富岳」の共同開発者である富士通株式会社と連携して移植、性能評価及びチューニングに向けた検討を開始した。「京」から「富岳」への移行に伴うこれら早期の情報収集・調査等によりCPUアーキテクチャやコンパイラに関する知見を得ることができ、「富岳」早期成果創出促進に資する効率的・効果的な利用支援準備作業を進めている。

#### ④ 独創性・優位性について

##### a) 事業実施体制

本事業は、共用法で定められた「京」の運用業務を担う理化学研究所及び利用促進業務を担う登録機関に加えて、ユーザーコミュニティ等の意見集約を担うHPCI

コンソーシアムが事業開始当初から組織され、これら3機関による三位一体の連携体制が構築されたことが、本事業の迅速な発展に大きな効果があった。これら、「京」を中核とし、国内の大学等が有するスーパーコンピュータを一元的に利用できる革新的な計算環境を実現する仕組みである HPCI 事業体制は、諸外国での取り組みに比べて独創性・優位性を有している。

#### b) 特定高速電子計算機施設の利用促進

HPCI は、「京」を頂点とし第2階層に至る多様な計算機資源から構成され、スカラー並列計算からベクトル並列計算、可視化処理に至る利用者の多様なニーズに応えることのできる資源を提供している。「京」の応募利用研究課題については、「京」で選定されなかった課題も、「京」以外の HPCI 共用計算機資源の利用研究課題として予め申請のうえ審査の対象にできることとしている。これにより、国内の幅広い計算資源を有効に活用することが可能となっている。また、利用者は、申請支援システムを用いることで、複数の多様な計算機資源の利用申請を一度の申請で行うことができる。このように、第1階層と第2階層の計算機資源を併せた利用申請及び利用を同時にできる独自の仕組みとすることで、HPCI の効率的・効果的利用に大きく寄与している。

#### c) 産業利用促進

##### ア) アクセスポイントの設置、運用

- ・米国(INCITE、XSEDE)、欧州(PRACE)にはアクセスポイントのような産業利用に特化し、システムの利用環境まで装備した利用支援拠点は設置されておらず、「京」を含む HPCI 独自の取り組みである。

##### イ) 課題選定の柔軟性

- ・産業利用課題の選定基準として、科学的卓越性に加え、自社内では実施できない規模や難易度であること、産業応用の出口戦略の明確性等を設定しており、産業界の特性を考慮した基準を設けている。欧米では科学的卓越性が重要な選定基準となっており、産業利用の実情とは必ずしも合っていない。これは、米国(INCITE、XSEDE)、欧州(PRACE)にはない「京」を含む HPCI 独自の取り組みである。

##### ウ) 利用支援

- ・「京」の産業利用は、トライアル・ユース、実証利用、個別利用、ASP 事業実証利用と4種類の利用形態を設け、産業界の多様な利用ニーズに応えるとともにそれぞれの特性に応じた利用支援を実施した。国外においては、アカデミアと産業利用を区別せずに運用しているところが大半であり、産業利用のための資源量を予め設定し、資源を確保している機関や多様な利用形態を可能としている機関は少ない。
- ・HPCI コンソーシアムの提言を受け、平成29年度より、アプリケーションソフトウェアの利用環境整備を進め、「京」の利用拡大や裾野の拡大を図った。利用頻度の高いOSS やポスト「京」重点課題で開発されたアプリソフトを「京」や HPCI システム構成

機関のスパコンに整備し、「京」利用者の拡大に貢献した。このようなアプリソフト利用環境整備は、学术界のみならず、産業界の利用者にとっても利便性の向上に繋がるもので、特にプロアクティブなサービスを実施したことは新しい試みである。

#### d) 成果の公表と普及

利用報告書の公開及び成果発表データベースの整備は、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した。

利用報告書のダウンロード数は、平成 26 年 7 月 15 日から令和 2 年 3 月 31 日の間に、HPCI 全体で 128,828 件、うち「京」の利用に係る課題は 93,501 回に達した。

HPCI 全体の利用報告書のダウンロード元は、大学等が 323 機関、企業が 1,084 社、また海外から 80 の国又は地域に及んだ。特に、「京」産業利用課題（実証利用）の利用報告書が「ダウンロード数トップ 20」の半数以上を占め、さらに HPCI 未利用の 987 社が利用報告書をダウンロードしていることなど、我が国産業界における産業利用課題成果への高い関心とその普及が確認できた。

#### ⑤ 必要性・有効性・効率性について

##### 【必要性】

「京」を中核とする HPCI は、国内トップクラスの計算資源をユーザーが容易に、また効果的・効率的に利用できる環境を実現するものであり、計算科学を用いた我が国の科学技術の振興や、産業競争力の向上に資するオープン・イノベーションの基盤となることが期待される。中でも、世界トップクラスのスーパーコンピュータである「京」は、多くの研究者等により積極的に活用され、優れた研究成果を世界に向けて発信している。「京」の産業利用も開始初年度である平成 24 年度に比べ平成 30 年度 A 期の採択課題あたりの平均提供資源量が 3 倍強に達する等（平成 24 年度は 1 年あたりの提供資源量に換算）、産業界における計算科学技術の活用が着実に拡大したことは、特筆すべき成果である。また、成果がまとまった形で速報される利用報告書は、東証 1 部 33 業種中 32 業種（97%）からダウンロードされ、産業界において広く参照されている。講習会等を通じた計算科学技術を担う人材の育成や利用者の裾野の拡大に貢献していることから、「京」を中核とする HPCI の利用促進の必要性が示されている。

##### 【有効性・効率性】

我が国の計算科学技術に関わるコミュニティの幅広い意見を集約した HPCI コンソーシアムの主導により、「京」を中核とする HPCI について、利用者視点からの推進を図った結果、利用者の利便性の向上や利用の促進に有効に機能している。また、最終報告書の提言に基づき、一元的窓口や利用資源の第 2 希望の受付等の制度を設けたことにより、「京」だけではなく我が国のスーパーコンピュータ資源全体の利用の活性化・効率化が促進された。

産業利用課題の成果を占有する有償利用課題（個別利用課題）の 63%が、得られた

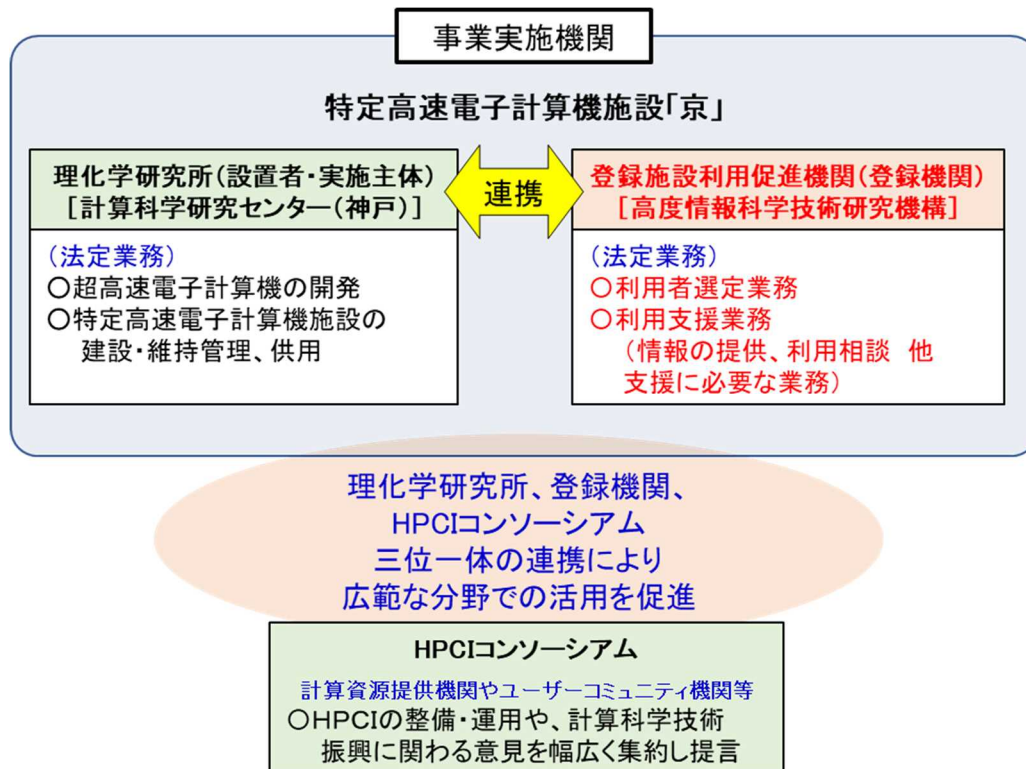
成果を既に自社で活用・展開済（注：これまでに計5回実施した当該利用課題実施者へのアンケート結果に基づく）であることから、産業利用推進の制度設計の有効性が示されている。また、アカデミアと産業利用課題への利用支援を一体的に取り組むことにより、先端的・革新的アプリケーションについての知識が共有され、その知識を用いて産業利用支援の効率化が実現した。

他の登録機関（高輝度光科学研究センター（SPring-8/SACLA）、総合科学研究機構（J-PARC MLF））や関連する戦略プログラムと連携して、SPring-8/SACLA、J-PARC MLF等の大型実験施設と「京」をはじめとするスーパーコンピュータとの連携利用を推進している。我が国の特定先端大型研究施設間の有効利用が促進される結果、異分野の研究者等の交流の促進と数値シミュレーション手法と実験的手法の特性を相互に補い合う形での研究成果の創出につながることを期待される。

経費の効率性については随時検証を行った。利用者選定及び利用支援業務における一元的相談窓口であるヘルプデスクについては、相談件数の推移に対応して配置している人員を調整し、経費の効率化に努めた。高度化支援においては、「京」と「京」以外の HPCI、アカデミアと産業利用の一体的支援（情報共有）により効率的に支援を実施した。利用者向け講習会についても、当初は講師・教育コンテンツ作成とともに外部へ委託していたが、RISTの職員が蓄積した知識・経験・ノウハウ等を活用しながら当該業務を実施することで、経費の効率化を実現した。また、RISTの職員自らが高度化支援等で経験したアプリケーションの高速化技術等を、教育コンテンツに盛り込むとともに、講師として解説することで分かりやすい講習会を実現した。その結果、満足・ほぼ満足が約90%と高い評価を得た。

## （2）事業実施体制について

本事業実施機関が関係機関と連携・協力を図りつつ、主体的に業務を実施した。また、本事業実施機関も含めた多様なユーザーコミュニティで構成される HPCI コンソーシアムとの協力体制を構築し、利用者視点に立ち、世界最高水準の成果創出と成果の社会還元を推進する「京」の運営を実施した。



### (3) 成果の利活用について

HPCI の利用促進における成果を分かりやすく、広く公表するため、以下の工夫を行っている。

#### 【成果指標】

##### ① HPCI 利用報告書の公開

- ・ HPCI 利用研究課題実施終了後 60 日以内に成果概要（利用報告書）の提出を課題代表者に求めている。
- ・ 知財権を獲得する課題については、利用報告書の公開を 2 年間延期する制度を設け、技術成果の早期権利化を促進している。これまでに、公開延期制度を使って「京」の産業利用課題の 5 課題が特許出願（計 7 件）し、うち 6 件が特許権取得に至った。
- ・ 利用報告書の公開を迅速かつ的確に行うため、オンライン投稿システムを採用するとともに（平成 26 年 5 月から運用開始）、RIST 神戸センターの利用支援者による閲読体制を取り、わかりやすい利用報告書の公開に努めている。
- ・ HPCI ポータルサイトでの利用報告書の公開には課題枠別の一覧表示に加えて、利用分野から検索できる機能を導入し、成果の普及・活用のための利便性を提供している。
- ・ 本機能では各課題の要約（図入り）がサムネイル表示されており、これをクリックすると拡大表示される。これにより各課題の結果の概要を直ちに把握することが出来る。また、課題毎に HPCI 成果発表データベース（下記②）にリンクできるようになっている。



- ・このような高機能を有する利用報告書の公開は、米国、欧州の HPC インフラには例を見ない。
- ・HPCI 利用研究成果の社会への普及状況について、HPCI 利用報告書のダウンロード分析に関する解説記事（「京」を中核とする HPCI 利用研究成果の普及状況 -利用報告書のダウンロード分析-、情報処理、60(12)、1212-1219(2019-11-15)）を令和元年 11 月情報処理学会誌に公開した。HPCI 利用報告書のダウンロード状況の詳細な分析を行うことにより、我が国の産業界における HPCI 産業利用課題成果への高い関心とその普及状況を示した。

## ② 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を一元的にまとめた HPCI 成果発表データベースの運用を行っている。（平成 25 年 5 月から運用開始）
- ・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、一般向け講演会・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。
- ・利用者の視点に立ち、HPCI 共用計算機資源を用いた成果のみならず、準備研究などそれ以外の計算機資源を用いた関連成果や理論研究など計算機を使用しない関連成果の発表情報も登録できる。
- ・HPCI 共用計算機資源を用いた成果と、それ以外の計算機資源を用いた成果や計算機を用いなかった成果を峻別出来る検索機能を有している。
- ・HPCI 運用開始から令和 2 年 3 月 31 日現在までのすべての成果発表情報として 8,148 件（査読付き論文数 1,910 件を含む）、うち「京」を用いた成果発表件数として 7,019 件（査読付き論文数 1,425 件を含む）が登録されている。
- ・このような HPC インフラに係る一元的な成果発表データベースは米国の XSEDE に例が見られるが、成果発表情報は論文、会議発表に限られている。米国の INCITE、欧州の PRACE では公開されていない。
- ・成果発表 DB のうち、査読付き論文（英文）に関しては、クラリベイト・アナリティクス社の学術データベース Web of Science (WOS) との照合を行い、登録データの信頼性の向上を図るとともに、WOS に収録されている HPCI 利用研究課題に関連する論文で成果発表 DB に未登録の論文に対しては利用者に登録依頼を行い、データベースの充実に努めている。
- ・「京」を中核とする HPCI 計算機資源の利用によって創出された成果論文に対し、論文の評価指標として広く用いられている相対被引用度 (CNCI) を用いた分析を行っている。平成 24~30 年度に実施された「京」及び「京」以外の HPCI 一般課題に対し、成果の注目度を反映する CNCI の全体平均値が「京」一般課題で約 1.7、「京」以外の HPCI 一般課題で約 1.1 と、それぞれ CNCI 値=1（世界平均と同等のパフォーマンス）を上回っていることを確認した。
- ・課題単位の CNCI の合計値（合計 CNCI）等の成果指標と選定時の評価点群（6 種）及び評価に直接関係しない国際共著論文割合等の非評価点群（3 種）からなる説明変

数(全9種)との間で相関分析、主成分分析、回帰分析を行った。課題の成果の注目度の総量を反映する合計 CNCI の回帰分析から、これに寄与する説明変数には「京」一般課題、HPCI 一般課題とも論文数、国際共著論文割合に加え、研究計画の妥当性(評価点群)も含まれることが明らかになり、課題選定の妥当性を支持する分析結果も得られた。詳細は、令和2年10月22日発行予定の RIST NEWS No. 66 に「HPCI 利用研究成果論文のデータ分析 - 「京」一般課題、HPCI 一般課題 -」として公開予定。

### ③ HPCI 利用研究成果集の発行

- ・ HPCI 利用研究成果集とは RIST 発行の査読付き電子ジャーナルである。最初の掲載論文の公開を平成27年9月9日から開始し、令和2年3月31日時点で全60編(うち、「京」の利用研究課題38編)を公開した。公開論文の全ダウンロード数は令和2年3月31日時点で10,190回である。
- ・ 本利用研究成果集では挑戦的な計算やその他の理由で計算が不成功に終わった場合や期待どおりの結果が得られなかった場合でも、その内容を詳細に記述することにより論文発表を行うことが出来る。
- ・ 投稿された原稿の審査(査読)は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、査読者(2名)は課題審査のレビュアーの中から選ばれる。

### ④ 成果報告会の開催

- ・ 令和元年度までに中間報告会を計2回及び成果報告会を計6回開催し、延べ2,420名の参加を得た。
- ・ 課題実施により生み出された研究成果の発表や、研究者間の情報交換、異分野の研究者間の交流を促進し、研究成果の普及を図るとともに、新たな計算科学分野へのアプローチ及び研究者の裾野拡大に貢献した。

### ⑤ 事例集・パンフレット等の発行

- ・ HPCI における成果や利用についての情報発信、それを通じた幅広い国民の理解の増進のために、「京」の共用の促進に関する事業と連携して広報誌「京算百景」、成果事例集を発行した。
- ・ 理化学研究所と協力し、「京」の運用状況、利用促進の状況、研究活動及び利用研究成果情報等を網羅した年報を毎事業年度発行した。
- ・ HPCI システム構成機関の情報提供や RIST の取り組みを紹介するパンフレットを作成し、展示会や講習会において参加者に配布するとともに、関係機関に配布した。

## 【活動指標】

### ① HPCI 利用報告書の公開

- ・ 平成24年度～令和2年3月31日時点の利用報告書公開の実績は HPCI 全体で1,278課題、うち「京」利用に係る課題は873課題である。

課題の種類	利用報告書公開課題数
一般利用（トライアル・ユース、競争的資金等獲得課題を含む）	239
若手人材育成利用	72
産業利用（トライアル・ユース、実証利用を含む）	217
共用法第 12 条調査研究	14
戦略プログラム利用枠	122
ポスト「京」研究開発枠	202
重点化促進枠	7
合計	873

・海外の読者にも HPCI 利用研究成果を周知するために、平成 26 年度の利用報告書からは英語版の要約も公開している。

## ② HPCI 成果発表データベースの公開

・HPCI 成果発表データベースに登録された成果発表情報のうち、「京」を用いた成果発表件数は 7,019 件である（HPCI 運用開始から令和 2 年 3 月 31 日時点まで）。その主たる内訳は以下のとおり。

### ○査読付き論文

- ・一般利用枠 602 編（うち、博士学位論文 6 編）
- ・戦略プログラム利用枠 533 編（うち、博士学位論文 2 編）
- ・ポスト「京」研究開発枠 593 編（うち、博士学位論文 3 編）
- 上記重複なし計 1,425 編（うち、博士学位論文 9 編）

### ○国際会議・シンポジウム

- ・一般利用枠 581 編（うち、基調講演/招待講演 194 件）
- ・戦略プログラム利用枠 973 編（うち、基調講演/招待講演 350 件）
- ・ポスト「京」研究開発枠 552 編（うち、基調講演/招待講演 197 件）
- 上記重複なし計 1,794 編（うち、基調講演/招待講演 592 件）

### ○国内会議・シンポジウム

- ・一般利用枠 498 編（うち、基調講演/招待講演 131 件）
- ・戦略プログラム利用枠 913 編（うち、基調講演/招待講演 204 件）
- ・ポスト「京」研究開発枠 701 編（うち、基調講演/招待講演 229 件）
- 上記重複なし計 1,862 編（うち、基調講演/招待講演 476 件）

### ○特許出願 計 22 件

○上記査読付き論文のうち\*、高被引用論文（Top 10%、1%）の割合は以下のとおりであり、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に比べいずれも高い。

- ・一般利用枠 15.3%、1.7%
- ・戦略プログラム利用枠 20.4%、1.5%

- ・ポスト「京」研究開発枠
  - 重点課題 14.7%、2.5%
  - 萌芽的課題 8.5% -
- ・国内の科学分野全体 8.4% 1.0%

（「国内の科学分野全体」の出典：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)）

○同様に、上記査読付き論文のうち\*、累計の被引用数が100を超える論文が21編、うち、200を超える論文が6編、また、累計の被引用数1位の論文の当該数が414（いずれも令和2年6月30日時点）に及ぶなど、注目度の高い論文が創出されている。

\* 対象はWeb of Scienceと成果発表データベースの両方に収録されている論文（さらにArticleとReviewのみ）。高被引用論文は、InCitesデータに基づく。

### ③ HPCI 利用研究成果集（電子ジャーナル）の発行

- ・全60編（うち「京」一般利用課題8編、「京」産業利用課題19編、「京」若手人材育成課題5編、共用法第12条調査研究4編、ポスト「京」研究開発枠課題2編）を公開した。公開論文の累計ダウンロード数は10,190回（うち累計ダウンロード数トップは平成24年度実施「京」一般課題の686回（令和2年3月31日時点）である。

### ④ 成果報告会の開催

- ・報告会の開催状況は以下のとおり。

	開催日	参加者数	口頭発表 件数	ポスター発表 件数
第1回中間報告会	H25/3/14-15	332	33	67
第2回中間報告会	H25/10/2-3	337	29	98
第1回成果報告会	H26/10/31	313	15	124
第2回成果報告会	H27/10/26	269	13	137
第3回成果報告会	H28/10/21	272	12	130
第4回成果報告会	H29/11/2	310	13*	138
第5回成果報告会	H30/11/2	306	9	155
第6回成果報告会	R1/11/1	281	11*	142

\*) 成果報告会に包含された形で開催のHPCIコンソーシアム、理化学研究所との3者共催シンポジウムにおける発表を含む。

### ⑤ 事例集・パンフレット等の発行

- ・RISTにおける主な刊行物と発行部数は以下のとおり。

刊行物	部数
技術情報誌「京算百景」 第1巻～第29巻	各2,000部程度
成果事例集 第1号～第6号（日/英）	累計24,300部
成果事例集 第7号（日）	2,000部
RISTの取り組みに関するパンフレット（日/英）	累計4,000部
産業利用推進パンフレット	累計15,020部
競争的資金等獲得課題の募集パンフレット	1,000部
一般課題トライアル・ユースの募集パンフレット（日/英）	各200部
Introduction to HPCI	累計300部
はじめてのHPCI 第1号～第2号	累計6,000部
スーパーコンピュータ「京」年報 平成24～30年度	累計3,700部

#### 4. その他

「京」を中核とするHPCIのアカデミア及び産業利用の高度化・拡大は国としての重要な施策の一つであり、第5期科学技術基本計画に定められたオープン・サイエンス、オープン・イノベーションの加速や、世界に先駆けた「超スマート社会」の実現（Society 5.0）を推進する重要な手段と考えられる。

今後の「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となっている。

RISTは登録機関として、「京」を中核とするHPCIの利用促進に一元的に取り組んだことにより、多様な利用ニーズ・社会ニーズ等に応じた課題募集～利用に至るまでの一連の利用者選定業務に係るシステム並びに運用ノウハウや、高いスキルを持った利用支援人材、高速化チューニング、及び広範なアプリケーションに関する高度な知識・経験・ノウハウ等を蓄積した。これらをさらに蓄積・活用・拡充し続けることで、今後ますます多種多様化・高度化する利用ニーズや技術的要請等に対し柔軟に対応することが一層重要であると認識している。