



スーパーコンピュータ「京」年報 2016-17

スーパーコンピュータ「京」 年報 2016-17

K computer Annual Report 2016-17



 国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究機構
 一般財団法人高度情報科学研究機構

巻頭言

国立研究開発法人 理化学研究所
計算科学研究機構長 平尾 公彦



スーパーコンピュータ(スパコン)は現代の科学技術の進展にとってなくてはならない基盤技術です。産業の国際競争力の強化や安全・安心な社会の構築、人類社会が抱える様々な課題の解決にもスパコンは大きな役割を果たします。スパコン「京」が共用を開始して5年、「京」は驚くほど安定的に稼働しています。ジョブ充填率も高く、いつも80%前後を維持しています。「京」はプロセッサのスピード、メモリ、通信のバランスがとれたスパコンとして国際的にも高い評価を得ています。すでに科学技術のさまざまな分野でワクワクするような素晴らしい成果を挙げています。「京」以前には見渡すことができなかった眺望を「京」は与えてくれています。

「京」の出現で産業界のスパコン利用も大いに進みました。我が国の計算科学が一気に花を開いた感があります。登録施設利用促進機関である一般財団法人高度情報科学研究機構(RIST)をはじめとする皆さまのご支援、ご愛顧の賜物と心から感謝しています。引き続き「京」を活用して、世界がギクリとする成果を挙げ、国民の期待に応えたいと思っています。

「京」の後継機であるポスト「京」スパコン開発プロジェクトもスタートしました。これからは **Big Computing** と **Big Data** が社会を変えることになるでしょう。ポスト「京」はこれまで以上に大規模なシミュレーションを実現し、多くの分野で永年の懸案であった問題の解決に力を発揮します。気象予測、創薬、ものづくり、災害時の避難、交通量制御、金融工学などのシミュレーションには多数の変数、パラメータがあり、きわめて複雑です。あいまいさや不確実さを取り除くためのアンサンブル・ビッグデータ同化シミュレーションがますます重要になることでしょう。スパコンとAI(深層学習)との連携も進むことでしょう。深層学習により特徴量を抽出することで、シミュレーションの新たなモデル化や高次元のパラメータ統御が実現できる可能性があります。

シミュレーションは未来を科学的に予測する技術です。多くの分野でペタからエクサに至る途中で「予測の科学(Predictive Science)」の **tipping point** に到達します。「経験に追随していた計算科学」から「実験に先行する計算科学」へのパラダイム変換が静かに、しかし確実に進行しています。自然の懐の深さから比べると、われわれのシミュレーションはまだまだかも知れません。しかし結構おもしろいこともできるようになりました。信頼性をこれまで以上に高め、謙虚さを失うことがなければ、われわれ人類は新しい認識を獲得する強力なツールを手にするようになります。大いに楽しみです。今後とも益々のご支援とご協力を賜りますよう、よろしくお願い申し上げます。

巻頭言

一般財団法人高度情報科学技術研究機構

理事長 関 昌弘



「京」の共用が開始されて5年。RISTは「京」の一般利用枠である全計算資源の45%について、利用課題の選定を行いました。2016年度からは年2回の募集とし、通年の課題は45件、半年の課題は22件選定いたしました。また、22課題の利用者支援を行っています。

「京」を利用した研究成果は着実に積み上がっています。成果発表データベースに登録された「京」についての研究成果は2016年度末で通算5,531件に達し、このうち査読付き論文数は773件となっています。

提出を義務づけられている利用報告書は161件全てがHPCIポータルサイトで公開されています。この報告書は広く参照されており、2016年度末までの「京」を含む全HPCI利用報告書のダウンロード数は4万件近く、特に産業界において広く興味を持たれていることがわかりました。

専門家間の情報共有を進めるために、2016年10月には第3回研究成果報告会を開催し、272名の出席者による講演やポスター発表が盛況裏に行われました。報告会では、欧州PRACEのSergio Bernardi博士とシンガポール科学技術庁(A*STAR)のTan Tin Weeディレクターに御講演いただきました。また、国際交流の推進として、NSCC(シンガポール国立スパコンセンター)とMOUを締結し、NSCC-RIST間の情報交換会を日本とシンガポールで2回開催しました。

このように「京」を利用した研究成果については、専門家間での共有を進めるとともに、一般の方々にもわかりやすくお伝えできるよう努力しています。昨年に引き続き、季刊誌「京算百景」第14号～17号、成果事例集Ⅳ、成果事例集Ⅲ英語版を発行しました。

さて、RIST業務である利用者の募集から選定、支援のプロセスについては毎年、選定委員会や課題審査委員会をはじめとする関係者のご指導をいただき、改善、改良を図ってきました。2016年には登録機関として国の中間検証を受け、これまでの業務の進め方について高い評価を受ける一方、新規利用者の拡大等、さらなる努力の方向が指摘されました。

2016年度をもってRISTは登録機関の任期を全うしました。この間、理化学研究所計算科学研究機構をはじめ、多くの皆様にご支援を賜りましたこと、厚く御礼申し上げます。

RISTは引き続き、2017年4月から5年間、登録機関としての役割を担って参ります。中間検証の指摘事項を踏まえ、関係機関と緊密に連携しつつ新たな気持ちで業務に邁進する所存です。皆様方には変わらぬご指導を賜りますよう、宜しくお願い申し上げます。

目 次

全体概要

1 「京」の共用について	1
1-1 共用の枠組み	1
1-2 理化学研究所 計算科学研究機構	2
1-3 高度情報科学技術研究機構 神戸センター	8
2 「京」の運用	11
2-1 稼働状況	11
2-2 施設管理	15
3 「京」の共用の促進	20
3-1 「京」における利用枠と利用研究課題の種類	20
3-2 利用者選定	23
3-3 利用支援	28
3-4 産業利用促進	38
3-5 利用状況	40
3-6 利用研究成果の報告・公開	46
4 「京」の共用のための研究活動	53
4-1 「京」の高度化研究	53
4-2 共用法第12条に基づく調査研究	65
5 研究会等	66
5-1 シンポジウム・会議・報告会	66
5-2 研究会・ワークショップ	68
6 広報活動	72
6-1 広報活動の概要	72
6-2 マスメディアを通じた情報発信	73
6-3 ウェブサイト・制作物	77
6-4 イベント	81
6-5 見学・視察対応	87
参考資料 1 利用研究課題一覧	89
参考資料 2 成果論文リスト	94
(1) 一般課題	94
(2) 若手人材育成課題	98
(3) 産業利用課題	100
(4) ポスト「京」研究開発枠(重点課題)	101
(5) ポスト「京」研究開発枠(萌芽的課題)	108
(6) 戦略プログラム	109

全体概要

はじめに

スーパーコンピュータ「京」は、2012年9月28日の共用開始以来、順調に稼働し、毎年150程度の利用研究課題に供されている。ここでは、2016年度(2016年4月～2017年3月)の年報の全体概要として、各章の記載内容を以下に要約する。

1. 「京」の共用

「京」は「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律(2006年7月施行)」(以下、共用法)に基づく共用施設であり、「京」の共用にあたっては、国の基本方針の下、「京」の設置者・運用実施主体である国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究機構(以下、AICS)、及び登録施設利用促進機関(以下、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)が連携・協力して業務を実施している。

(1) AICS の組織

AICSは、研究部門、運用技術部門及び事務部門を構成部門として、2010年7月に発足した。2016年4月に事務部門を計算科学研究推進室と神戸事業所研究支援部に再編した。また、2014年4月からフラッグシップ2020プロジェクト(旧称:エクサスケールコンピューティング開発プロジェクト)、2016年1月からフラッグシップ2020プロジェクト企画調整室を設置している。

(2) RIST の組織

RIST 神戸センターは、2012年4月に発足した。2016年度には、広報部が新設された。

2. 「京」の運用

(1) 稼働状況

2016年度の「京」の稼働状況は非常に安定しており、障害等による停止時間は4.6日であった。発生した障害についてはファイルシステムに関する障害が多く、特にローカルファイルシステムが高負荷状態になりシステムダウンにいたるといった障害が多く発生したが、全体的には安定的に稼働した。現在、本障害への対応策を検討している。

「京」に投入されたジョブの要求資源量は、常に提供可能な資源量を超えていた。2016年度は例年と比べて上期前半の利用率が高かった。また、ジョブの待ち時間も2015年度と比べて大きく改善された。

(2) 施設管理

施設の運転保守については、「京」の運転計画に基づき、年間、月間、週間、日単位で施設運転計画を作成し、設備の運転保守を確実に実施した。また、設備の運転監視については、監視員を熱源機械棟中央監視室に常時配置し、24時間体制で運転監視を実施している。施設の維持管理は電気設備、コージェネレーションシステム(CGS)、冷凍空調設備について実施した。2016年度は、外部電源を仮設することで基幹ネットワークスイッチ装置及び電話交換機を通電した状態で点検作業を実施した。外部電源供給により必要な照明及び内線電話による通信手段も確保することができ、確実な保守点検を実施することができた。また、CGSのオーバーホール点検に備えて、運転時間の調整を実施した。

3. 「京」の共用の促進

(1) 利用者選定

2017年度は、2017年4月から課題を実施するA期課題に加え、第2回目として2017年10月から実施するB期課題を試行することとした。選定委員会及び利用研究課題審査委員会を開催し、以下の利用者選定を実施した。

- 1) 2017年度A期の「京」一般利用研究課題の募集について、92件の応募課題から45課題を選定した。半年課題では、22件を選定した。
- 2) 2016年度に行った随時募集課題のうち、一般課題(トライアル・ユース)は3件、一般課題(競争的資金等獲得課題)は6件、産業利用課題(トライアル・ユース)は11件、産業利用課題(個別利用)は15件の応募があり、すべて選定した。産業利用課題(ASP事業実証利用)については2015年度に続き、2016年度に応募はなかった。
- 3) 国から提案されたポスト「京」研究開発枠について、2017年度の重点課題34課題を選定した。萌芽的課題について、2016年度(8月利用開始)に22課題、2017年度に26課題を選定した。
- 4) 2016年度成果創出・加速枠課題について、6件の応募課題から3課題を選定した。
- 5) 文部科学省が決定する重点化促進課題について、2016年度の利用はなかった。

(2) 利用支援

- 1) 利用支援のための一元的窓口として設置したヘルプデスクを活用し、利用者にワンストップ・サービスを提供するとともに、利用者の意見を運営に適宜反映した。
- 2) 「京」の利用を促進するため、「京」へのプログラム移植等の調整支援、プログラム性能の分析評価・パイプライン等の最適化促進等の高度化支援を、22課題(うち産業利用11課題)について実施した。
- 3) 「京」の利用技術の習得等を目的とし、延べ44回の講習会・セミナーを開催した(主催15回、共催29回)。

(3) 産業利用促進

- 1) 延べ58件の応募前利用相談、9社(11課題)に対する高度化支援を実施した。
- 2) 産業利用普及・利用促進活動として、シンポジウム・報告会・ワークショップの主催を7回、国内外の展示会などへの出展やポスター展示を7回、利用相談会を5回実施した。
- 3) アクセスポイント東京の個室利用については、効率的な利用を促進するため、2016年10月1日以降の利用を有償化した。

(4) 利用研究成果の報告・公開

「京」及びその他のHPCI計算資源によって創出された成果の公開情報を一元的にまとめたデータベース(HPCI成果発表データベース)に登録された成果発表件数は、「京」一般利用枠では通算1,347件(うち査読付き論文数は264)、戦略プログラムでは通算3,208件(うち査読付き論文数は387)、ポスト「京」研究開発枠重点課題では通算575件(うち査読付き論文数は86)、京調整高度化枠では通算346件(うち査読付き論文数は44)に達した。

また、2015年度に終了した第3期の「京」一般利用枠課題を含む全161課題の利用報告書[「京」一般利用78件(産業利用トライアル・ユース課題6件、「京」一般利用トライアル・ユース課題2件を含む)、重点的利用枠60件、京調整高度化枠課題23件]を公開した。

4. 「京」の共用のための研究活動

京調整高度化枠において、「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等、幅広い分野のユーザの利用に資する高度化研究として、23 課題(AICS 22 課題、RIST 1 課題)の研究を実施した。

RIST は登録機関として、共用法第 12 条に基づき、「京」の利用促進の方策検討及び利用者支援業務を行う者の資質向上のために、1 課題の調査研究を実施した。

5. 研究会等

AICS 及び RIST は、「京」に関する研究成果の公表・普及、研究交流等を目的とし、以下の合計 5 件のシンポジウム・会議・報告会を主催した。

- (1) 第 3 回 大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム - 最先端電池材料 - (参加者 135 名)
- (2) 京×産業シンポジウム ～つながりが未来をひらく～ (参加者 150 名)
- (3) 第 3 回 「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会 (参加者 272 名)
- (4) 第 7 回 AICS 国際シンポジウム (参加者 173 名)
- (5) 見える化シンポジウム 2017 ～シミュレーションの価値～ (参加者 123 名)

また、より小規模 (参加者 100 名程度以下) で限定的な目的を持つ研究会・ワークショップを、合計 16 件開催した。

6. 広報活動

一般市民に加えて、「京」の将来の利用者 (企業関係者、青少年等) や、マスメディア、政治家、国・地方自治体関係者等の理解を得るため、AICS と RIST は連携して広報活動を行った。

マスメディアを通じた情報発信としては、プレスリリース 22 件 (うち、「京」の利用者募集・選定に関して 4 件、成果や受賞に関して 9 件) 等を行った。新聞・雑誌・テレビ等への掲載数は 500 件以上であった。

成果の公表・普及、情報発信等を行うため、公式ウェブサイト及び Facebook の管理・運営 (AICS)、HPCI ポータルサイトの管理・運営 (RIST) を行った。制作物としては、各種パンフレットの作成、広報誌「計算科学の世界」(計 2 号)、「京算百景」(計 4 号) 及び成果事例集Ⅳ・英語版成果事例集Ⅲの発行を行うとともに、「京」を用いた研究成果の動画 1 本の制作を行った。

イベントとしては、国際会議 (ISC'16・ドイツ、SC16・アメリカ合衆国) 等での展示を行った。加えて、「スーパーコンピュータ『京』を知る集い」を宮崎、岡山、宇都宮で開催し、AICS と RIST も出展した一般公開 (11 月 5 日神戸地区) では、AICS 施設に 2,254 名の来場者を迎えた。また、AICS は理化学研究所の他事業所で行われた一般公開で、ブース展示やポスター展示を行った (和光、播磨、仙台、横浜、大阪)。さらに、出前授業 (計 3 回) に対応した。

以上に加えて、「京」の見学・視察では、研究機関、企業、学校、政界、国・地方自治体関係者など、合計 12,322 名に対応した。

参考資料

参考資料として、利用研究課題の一覧及び成果論文リストを添付する。

1 「京」の共用について

1-1 共用の枠組み

2012年9月より共用を開始したスーパーコンピュータ「京」(以下、「京」)は共用開始から4年半が経ち、科学技術の広範な分野で基礎研究から産業利用まで幅広く活用され、既に様々な成果を創出している。

「京」は「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律(2006年7月施行)」(以下、共用法)に基づく共用施設であり、「京」の共用にあたっては、国の基本方針の下、「京」の設置者・運用実施主体である国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究機構(Advanced Institute for Computational Science 以下、AICS)及び登録施設利用促進機関である一般財団法人高度情報科学技術研究機構(RIST)は連携・協力して業務を実施している。また、業務の実施においては、計算科学技術に関わるユーザによって形成された一般社団法人 HPCI コンソーシアムをはじめとする関係機関とも協力している。この枠組の中で、AICS は「京」の運用及び高度化等を担う。一方、RIST は「京」の利用者選定業務及び利用支援業務を担い、利用者に対する一元窓口業務としてのヘルプデスクによる利用相談やプログラム高度化支援などを実施している。

報科学技術研究機構(Research Organization for Information Science and Technology 以下、RIST)は連携・協力して業務を実施している。また、業務の実施においては、計算科学技術に関わるユーザによって形成された一般社団法人 HPCI コンソーシアムをはじめとする関係機関とも協力している。この枠組の中で、AICS は「京」の運用及び高度化等を担う。一方、RIST は「京」の利用者選定業務及び利用支援業務を担い、利用者に対する一元窓口業務としてのヘルプデスクによる利用相談やプログラム高度化支援などを実施している。

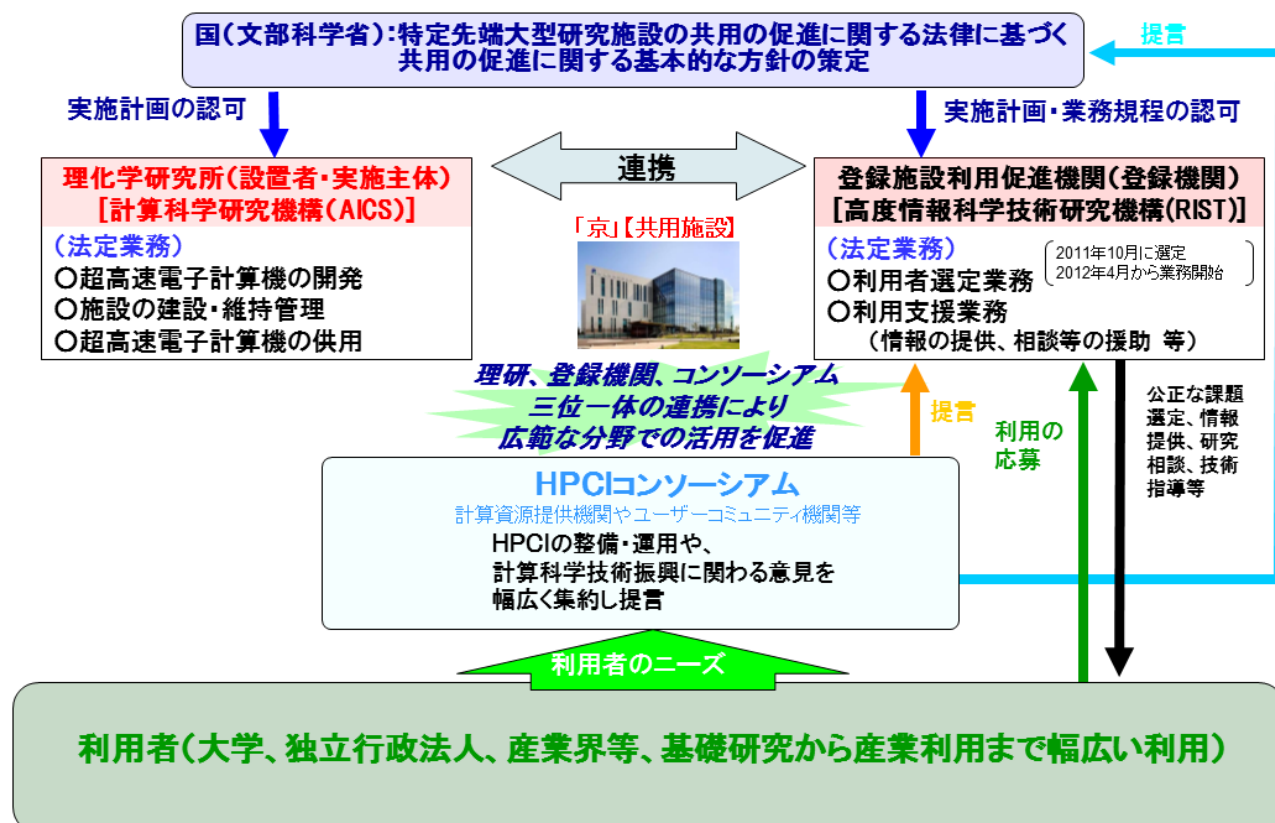


図1 「京」の共用の枠組み

1-2 理化学研究所 計算科学研究機構

AICS はコンピュータ・シミュレーションにより、科学的に未来を見通す「予測の科学」の確立を目指し 2010 年 7 月に発足した。そのため、AICS は「京」の運用を行い、利用者視点に立ったユーザにとって使いやすい計算環境を提供するとともに、計算科学及び計算機科学の先導的研究開発を推進し、計算科学技術 (High Performance Computing 以下、HPC) の国際的な研究教育拠点の構築を目指している。

1-2-1 計算科学研究機構の概要

1. 計算科学研究機構の組織

「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクトは 2009 年度より「京」を中核とし、多様なユーザニーズに応える革新的な計算環境インフラ (HPCI) を構築し、その利用を推進するプロジェクトとなった。AICS は HPCI の中核として、我が国全体の計算科学技術の発展に中心的な役割を担っており、以下をミッションとしている。

- ・共用法に基づく、利用者視点に立った共用施設としての「京」の運用
- ・計算機科学と計算科学の連携・融合により先進の科学的成果と技術的ブレークスルーを生み出す国際的な研究拠点の形成
- ・ポスト「京」の開発、我が国の計算科学技術の在り方、将来構想の策定

これらの任務を実現するため、AICS は以下の部門により構成している。図 2 に、2016 年度末における AICS の組織について示す。

○研究部門: 計算科学の共通基盤的研究、分野融合研究を進めるとともに、将来重要となる領域の開拓を行い、「京」を核として我が国の計算科学を先導する。戦略機関等とも密な連携を取り、優れた成果の創出を目指す。

○運用技術部門: 「京」を中心とする AICS の計算機システムの運用や、空調、電源、冷却施設等の維持管理・運転、システム高度化等の実施

○フラッグシップ 2020 プロジェクト: ポスト「京」の開発を実施

また、AICS をサポートする事務担当として、理化学研究所内に計算科学研究推進室及びフラッグシップ 2020 プロジェクト企画調整室、神戸事業所内に研究支援部が設置されている。

2. 計算科学研究機構の予算

2016 年度には「京」の運用に必要な経費として総額 102.6 億円が AICS に措置された。このうち、建屋や計算機システムの保守費、光熱水費、通信ネットワーク等の経費として 91.9 億円が措置された。

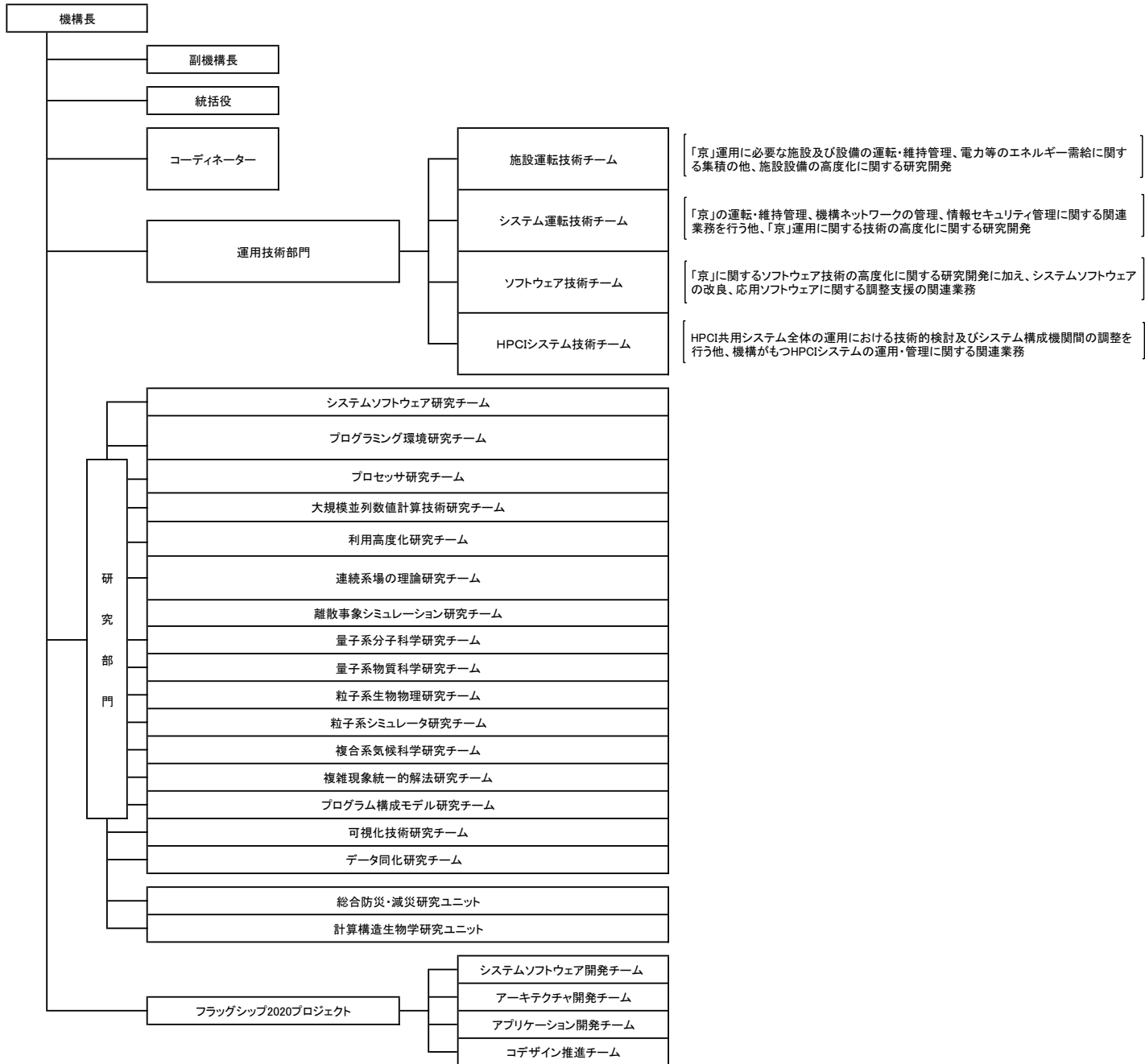


図 2 AICS の組織 (2017 年 3 月 31 日現在)

1-2-2 計算科学研究機構の活動について

1. 国際協力

(1) 連携協力協定等

AICSでは、これまでに表1に示す機関と連携協力に関する契約を締結し、連携活動を行っている。

表1 連携協力協定締結先と締結時期

契約締結機関	契約締結時期
Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA)	2011年5月
National Center for Supercomputing Applications (NCSA)	2012年10月
Australian National University / National Computational Infrastructure (ANU/NCI)	2012年11月
University of Maryland	2013年2月
Jülich Supercomputing Center (JSC)	2013年10月
Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS) / Maison de la Simulation (MDLS)	2014年4月
Joint Laboratory for Extreme-Scale Computing (JLESC)	2015年3月
University of Reading	2017年1月
Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA)	2017年2月

2015年度以前に締結し、2016年度時点で有効であった契約に関しては、これまでと同様に、相手先機関との連携協力を図った。

また2016年度中に、NCSA及びJSCと契約期間を延長するための諸手続きを行った。2014年度に加盟したJLESCは、Extreme Scale Computingの開発を見据えて、各国の関連機関が相互に連携・協力することにより、一層の研究推進を図ることを目的としたグループであり、現在はINRIA (France)、The University of Illinois at Urbana-Champaign (UIUC)、Argonne National Laboratory (ALCF)、Barcelona Supercomputer Center (BSC)及びJülich Supercomputing Centre (JSC)で構成される。半年に一度各機関が持ち回りでワークショップを開催することとなっており、2016年度には6月にフランス・リヨンで、11月に日本・神戸(AICS)で実施し、共同研究の模索や研究者の人材交流を

行った。(次々回以降は9ヶ月に一度の開催予定)今後もこれらの枠組み等を活用して国際連携を図る予定である。

(2) AICS 国際シンポジウム

計算科学と計算機科学の融合による新しい科学の創造に向け、国内外の著名な研究者を集め、最先端の研究に関する情報交換を行うとともに、「京」を用いた国際連携の展開を図ることを目的として、2017年2月23日(木)～2月24日(金)に神戸大学先端融合研究環統合研究拠点 コンベンションホールにおいて、The 7th AICS International Symposiumを開催した。国内外から117名の参加があった。

2. 国内機関との連携

国内では、AICSにおいて東北大学(2009年4月締結)、神戸大学(2012年5月締結)、筑波大学(2017年2月締結)との包括協定をそれぞれ締結し、研究にかかわる連携活動を行っている。

神戸大学大学院システム情報学研究科とは、この協定に基づき共同研究等を行っている。この一環として、可視化技術研究チーム及び大規模並列数値計算技術研究チームが、AICSの東隣に立地する神戸大学統合研究拠点において、共同研究等を積極的に進めた。

また、2013年4月に博士後期課程を設置した兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科とは、今後の連携に向けた検討を進めている。

2016年度は新たに大学等21機関と合計18件の共同研究契約を締結しており、積極的に外部機関との共同研究を行っている。

3. 人材育成

(1) 神戸大学との連携大学院

理化学研究所と神戸大学との間の連携大学院協定により、2013年4月から、6名がシステム情報学研究科の客員教員(客員教授4名、客員准教授2名)となり、連携講座として神戸大学院生の人材育成を担っている。

2016年度は、システム情報学研究科内に博士課程前期課程として、大規模シミュレーション総論I、II(前期12回、後期14回、それぞれ2単位)を行った。

(2) KOBE HPC Summer School 及び Spring School (2015 年度まで RIKEN AICS HPC Summer School 及び RIKEN AICS HPC Spring School との名称で実施)

「京」に代表されるスーパーコンピュータを駆使して新しいことに挑戦したいと考えている大学院生や若手研究者等の人材育成を目的として、2016 年 8 月 1 日(月)～5 日(金)に、KOBE HPC Summer School 2016 を、2017 年 3 月 13 日(月)～15 日(水)に、KOBE HPC Spring School 2017 を実施した。それぞれ AICS 講堂及び神戸大学先端融合研究環統合拠点内において講義及び実習を行い、Summer School においては 19 名が、Spring School においては 17 名が参加した。

開催に当たっては、AICS、東京大学情報基盤センター、神戸大学計算科学教育センター、兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科及び計算科学振興財団との五者で共催し、ポスト「京」重点 9 課題実施機関や RIST 後援にて実施した。

(3) International Summer School on HPC Challenges in Computational Science

2010 年から欧州 PRACE 及び米国 XSEDE が開催してきた HPC における国際的な人材育成を目的としたサマースクールに、AICS も 2013 年度から主催者として参加している(Compute/Calcul Canada も 2014 年度から参加)。同スクールは、2016 年度は 2016 年 6 月 26 日(日)～7 月 1 日(金)にスロベニア・リュブリャナ大学で開催され、日本からは 22 名の応募があり、選考の結果、8 名が参加した。

(4) eラーニングアーカイブ

2015 年に、AICSweb ページ上に計算科学技術分野に係る eラーニングアーカイブページを開設した。「計算科学・計算機科学についての学習を深めたい」、「スーパーコンピュータによる大規模な計算科学を駆使した新しい科学を開拓したい」と考える学生や研究者をはじめ、計算科学技術分野に興味がある一般の方に向けて、AICS やポスト「京」重点 9 課題実施機関等が行ったスクール、シンポジウム等の講義動画や関連資料を集約しており、現在 220 を超えるコンテンツを公開している。

(5) AICS Café の開催

異分野間の壁を超えた研究協力を促進し、新しい学問分野の開拓を目指すため、研究者間の情報交換・相互理解の場を提供し、研究協力のきっかけを作ることを目的として、AICS Café を開

催している。これは AICS 内の研究者等がお互いの研究内容をわかりやすく紹介するもので、飲み物を飲みながら誰でも気軽に参加できるものとなっている。2017 年 3 月末までに 109 回開催、毎回 20～30 名程度が参加し、活発な質疑応答が行われている。

4. 研究成果の普及促進

(1) ソフトウェアの公開

AICS の高度化研究の一環として、「京」向けに最適化または開発したプログラムを「京」ユーザへ利用者向け公開ソフトとして提供した。2017 年 3 月 31 日までに 37 件のプログラムを公開している。公開ソフトの一覧は表 2 の通りである。

表 2 利用者向け公開ソフト一覧

ソフト名称	研究チーム
NetCDF	システムソフトウェア研究チーム
PRDMA	
Carp	
EARTH on K	
OACIS	離散事象シミュレーション研究チーム
Omni XcalableMP	プログラミング環境研究チーム
Scalasca	
MUMPS	
Eigen K	大規模並列数値計算技術研究チーム
EigenExa	
KMATH_RANDOM	
Xcrypt	利用高度化チーム
Eclipse PTP for K and FX10 computers	
TAU	
Extrac	
CCA/EBT	
NTChem	量子系分子科学研究チーム
2D-DMRG	量子系物質科学研究チーム
FDPS	粒子系シミュレータ研究チーム
GENESIS	粒子系生物物理研究チーム
Polylib	可視化技術研究チーム

FFV-C	可視化技術研究チーム
KFoundation	
libKnoRBA	
HIVE	
Cutlib	
CPMlib	
TextParser	
PMlib	
CIOLib	
SCALE	
K MapReduce	プログラム構成モデル研究チーム
Apache Spark	
llvm-sparc64fx	
K-scope	ソフトウェア技術チーム
一発性能分析	
IPAtool	
Kを待ちわびて	システム運転技術チーム

(2) 利用者向け公開ソフトに関する講習会の開催

AICS で公開するソフトを対象として講習会を実施した。講習会の実績については表3の通りである。

表3 利用者向け公開ソフトに関する講習会の開催実績

対象ソフト名	開催日	参加人数
XcalableMP	2016年4月21日	5人
K Map Reduce	2016年4月27日	3人
OACIS	2016年5月11日	5人
FFV-C+HPC/PF	2016年6月3日	8人
PMlib	2016年6月22日	5人
FDPS 初級	2016年7月6日	14人
通信ライブラリおよびファイルIOライブラリ	2016年7月27日	3人
FDPS 中級	2016年8月10日	5人
SCALE	2016年9月7日	21人
HIVE	2016年10月5日	6人
2D-DMRG	2016年10月26日	4人
XcalableMP	2016年12月8日	2人

GENESIS	2017年1月13日	4人
HIVE	2017年2月8日	1人
通信ライブラリおよびファイルIOライブラリ	2017年2月22日	5人
NTChem	2017年3月10日	4人
SCALE	2017年3月15日	4人
FDPS 初級	2017年3月21日	14人
KMATHLIB	2017年3月28日	4人

5. その他の研究事業活動

AICS では計算機科学と計算科学の連携・融合により先進の科学的成果と技術的ブレークスルーを生み出す国際的な研究拠点の形成を目指して、次のような研究事業にも取り組んだ。

(1) 文部科学省「HPCIの運営」(HPCIの運営企画・調整)

当該事業では、我が国の幅広い HPC ユーザ層が、全国の HPC リソースを効率よく利用できる体制と仕組みを整備し、提供することにより、全国規模でニーズとリソースのマッチングを可能とし、萌芽的研究から大規模研究まで、また産業利用にわたる幅広い HPC 活用を加速するとともに、計算科学技術関連コミュニティを醸成・拡大し、成果の社会還元にも資することを目的としている。

そのため、理化学研究所は関係機関と連携を図りながら、今後の運営の在り方に関する調査検討及び技術企画・調整業務を行った。今後の運営の在り方に関する調査検討では、HPCI システムの整備と運用、計算科学技術の振興、将来のスーパーコンピューティングに関し、HPCI コンソーシアムとも連携して検討テーマを設定し、本事業実施機関やコンソーシアム構成機関を対象とした意見収集・集約、有識者によるワーキンググループにおける検討等を通じて、HPCI の今後の運営の在り方に関する調査検討を実施した。

技術企画・調整業務では、HPCI システム運用の全体にわたる技術面での統括的な業務や共通運用の対象となる HPCI システムの運用機関等との調整業務として下記を実施し、多様なユーザニーズに応える HPCI システムの運用環境維持を行った。

- ・HPCI システム構成機関等が参加する調整の場を設定・運営
- ・HPCI システムの運用に際して生じる技術的不具合の原因究明・対応策の検討
- ・HPCI システム全体の運用に係るソフトウェアの改良に関する検討

また、東京大学、東京工業大学と連携し、HPCI 共用ストレージシステムの保守運用に関して、運用方針の検討や問題点の解決に向けた対策を実施した。ユーザへのサービス向上策として、利用容量、利用ファイル数、容量制限値などの自動通知を開始し、信頼性向上策として、データの自動多重化、データ完全性の自動チェックなどを実施した。さらに、運用品質向上策として、監視体制、監視ツールの強化、メンテナンス手順及びメンテナンス実施結果の情報共有促進、アクションアイテムやインシデント情報に対するチケットシステムの導入も実施した。

HPCI へのデータのプリポスト処理のための計算資源提供を2016年12月で終了し、プリポスト処理用計算資源を撤去した。

「今後のHPCIを使った計算科学発展のための検討会」では、将来のHPCで解決すべき社会的・科学的課題を抽出する「計算科学ロードマップ」の更新に向けて議論した。また、その推進母体となる組織に関する検討を行い、2017年度からHPCIコンソーシアムの下で活動を続けることとした。

(2) 計算科学振興財団「研究教育拠点(COE)形成推進事業」

兵庫県、神戸市の協調のもと「京」の立地効果を最大限に活用し、防災・減災や創薬など地域の課題解決等に資する分野における「京」を活用した最先端の研究に対する助成を受けて実施している。また、研究成果の地域への還元を図るための普及啓発を通じて、「京」を中核とする計算科学分野の研究教育拠点(COE)の形成と、計算科学分野の振興を図る。

AICS では地域の課題解決等に資する研究として、以下7つの研究課題に取り組んだ。

- ①計算構造生物学による生体超分子解析と創薬応用研究
- ②関西地域を対象とした都市防災の計算科学研究－地震津波と集中豪雨被害のハザードマップの作成－
- ③京コンピュータ利用による新材料設計
- ④超並列プログラムの開発・利用環境技術の展開と人材育成
- ⑤ポストペタスケールにむけたアプリケーション・アルゴリズム・アーキテクチャの融合型開発
- ⑥ビッグデータ創薬とシミュレーション創薬をつなぐ計算創薬基盤の構築
- ⑦シミュレーションによる天然光合成の解明と人工光合成の構築

※⑥、⑦の課題を2014年度に追加

1-3 高度情報科学技術研究機構 神戸センター

1-3-1 RIST 神戸センターの組織

RIST は、共用法に基づき「京」の利用促進業務を行うための登録施設利用促進機関(登録機関)として2012年度から2016年度までの事業予定期間をもって選定され、2012年4月1日に開設

された神戸センターにおいて業務を開始した。

2016年度には、広報部が新設された。2016年度末におけるRISTの組織図は図3の通りである。



図3 RISTの組織図 (2017年3月31日現在)

1-3-2 RIST 神戸センターの活動の概要

2012年4月に発足したRIST神戸センターは、2016年度においては、共用法に基づく登録機関として、利用促進業務(事業予定期間:2012年度から2016年度まで)の第5年度の業務を実施した。

1. 利用者選定業務

(1) 選定方法

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。)を開催し、2017年度一般利用研究課題の利用者選定と2016年度の随時募集課題の選定を実施した。

2017年度の利用研究課題募集は、利用者からの意見を受けて、従前どおり2017年4月から課題を実施する課題(以下、A期課題という)に加え、第2回目として2017年10月から実施する課題(以下、B期課題という)の年2回募集を試行することとした。

年2回の募集を開始するに当たり、2017年度上半期においては、特例としてA期に併せて半年課題を募集した。

(2) 選定結果

- 1) 2017年度A期の「京」一般利用研究課題(通年課題)の募集では、92件の応募課題から45課題を選定した。半年課題では、22件を選定した。
- 2) 2016年度に行った随時募集課題のうち、一般課題(トライアル・ユース)は3件、一般課題(競争的資金等獲得課題)は6件、産業利用課題(トライアル・ユース)は11件、産業利用課題(個別利用)は15件の応募があり、すべて選定した。産業利用課題(ASP事業実証利用)については2015年度に続き、2016年度に応募はなかった。
- 3) ポスト「京」研究開発枠重点課題について、2017年度の重点課題34課題を選定した。
- 4) ポスト「京」研究開発枠萌芽的課題について、2016年度(8月利用開始)に22課題、2017年度に26課題を選定した。
- 5) 2016年度成果創出・加速枠課題について、6件の応募課題から3課題を選定した。
- 6) 重点化促進枠については、2016年度の利用はなかった。

2. 利用支援業務

(1) 情報支援

- 1) 2015年度末に終了した「京」利用の161課題全てについて、利用報告書をHPCIポータルサイト上で公開した。
- 2) HPCI 成果発表データベースに登録された成果発表件数は、2016年度末で通算5,531件(うち、査読付き論文数は773件)に達した。
- 3) 「京」を含むHPCI利用研究課題の利用報告書のダウンロード総数は2014年7月の統計データ取得開始以降、2016年度末で通算約37,000件に達し、成果の公表・普及が進展した。
- 4) HPCI 利用研究成果集(RIST 発行の査読付き電子ジャーナル)については、2016年12月にNo.2(掲載論文8編)を発刊した。さらに2017年3月に早期公開として論文2編を追加公開した。
- 5) 「京」における成果やその利用についての情報発信のために、季刊誌「京算百景」vol.14~17、成果事例集Ⅳ、成果事例集Ⅲ英語版を発行し、「京」に関心を持つ研究者、技術者に配布、公開等を行った。
- 6) AICSと連携して「京」の全利用者を対象に、計6回のユーザーリーフィングを実施し、「京」技術情報の提供を行うとともに、運用・利用等に関する意見交換を行い、施設の適切な運用に資した。
- 7) 第3回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題成果報告会を2016年10月に東京で開催し、272名の参加を得た。また、AICSと共同でシンポジウム「京×産業シンポジウム ～つながりが未来をひらく～」(2017年8月、東京)を主催し、150名の参加を得た。

(2) 技術支援

- 1) 利用支援のための一元的窓口として設置したヘルプデスクを活用し、利用者にワンストップ・サービスを提供するとともに、利用者の意見を運営に適宜反映することで、円滑な支援を実施した。
- 2) 「京」へのプログラム移植等の調整支援、プログラム性能の分析評価・パイプライン等の最適化促進等の高度化支援を、22課題(うち産業利用11課題)について実施した。
- 3) 共用法第12条に基づき、「京」の利用促進の方策検討及び利用者支援業務を行う者の資質向上のために、1件の調査研究を行った。
- 4) RIST の利用支援用スーパーコンピュータ(FX10)を用いて、企

業が事前に「京」でソフトウェアが動作することを確認するための支援を実施した。

(3) その他の支援

1) 産業利用支援

産業利用促進のために、①応募前利用相談、②プログラム並列性能向上等の高度化支援、③プリポスト処理支援、④アプリケーション情報整備、⑤情報提供・情報発信などを実施した。なお、「京」の産業利用課題(個別利用)の募集は原則年1回であったが、民間企業のニーズに迅速に対応するため、2014年3月より随時受付となっている。

2) 講習会等の利用支援業務

2016年度は共催を含め、延べ44回の講習会・セミナーを開催した(主催15回、共催29回)。主催では、「京」の利用技術の習得等を目的とした初中級者向けの定期講習会が6回(うち、RIST FX10を使用したハンズオン講習会は3回)、利用者の希望に合わせて不定期に実施するオンサイト講習会が2回、利用者の裾野を広げる一般利用者向けのHPCプログラミングセミナー・ワークショップが7回であった。

また共催では、AICSと連携して開催する公開ソフト講習会を19回、各機関と連携した講義・講習会・セミナーを10回実施した。

3) 展示会等

「京」の利用促進に向け、ISC'16(2016年6月、ドイツ・フランクフルト)、SCI16(2016年11月、アメリカ合衆国・ソルトレイクシティ)、SCF17(2017年3月、シンガポール)等に出展し、利用者向けに情報提供、情報発信を行った。日本国内では、第8回トップセミナー(2017年1月、神戸)等への出展を行った。

4) セミナー・シンポジウム等

利用者とソフトウェアベンダーとの情報交換の場として、オープンソースソフトウェア(OSS)の1つであるOpenFOAMを対象としたワークショップ(2016年12月、東京)を昨年に引き続き開催し、産業利用事例や利用技術に関する情報提供及び発信を行った。また、第3回大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウムを3団体と共同開催し(2016年9月、東京)、大型実験施設との連携利用の促進を図った。

3. その他の業務

(1) 国際交流の推進

2016年6月にNSCC(シンガポール国立スパコンセンター)とMOUを締結した。NSCC-RIST間の第1回情報交換会を2016年10月に日本で、第2回を2017年3月にシンガポールで開催した。

また、PRACE-RIST間の第3回情報交換会を2016年10月に開催した。



図4 NSCCとのMOU締結

(2) アウトリーチ活動

神戸市主催の「神戸医療産業都市・京コンピュータ 一般公開」(2016年11月、神戸)において、「計算機歴史博物館」の展示を行った。また、兵庫県、神戸市、計算科学振興財団主催の一般向けセミナー「未来へ続くスパコンの挑戦」(2016年10月、神戸)を共催した。

2 「京」の運用

2-1 稼働状況

2-1-1 稼働状況

1. 稼働率

「京」は2012年9月28日から共用を開始し、フルノード(82,944ノード)を課題採択された利用者へ提供している。2016年度の月別の予定された保守日数及び停止を伴う障害等による停止日数を表1に示す。2016年度の予定された保守の合計は13.7日、停止を伴う障害等による停止日数は合計で4.6日であった。

表1 2016年度の予定された保守の日数と
停止を伴う障害等による停止日数

	予定された 保守の日数	障害等による 停止日数
2016年4月	4.5	0.2
2016年5月	0.3	0.0
2016年6月	0.3	0.3
2016年7月	0.2	0.9
2016年8月	0.3	1.9
2016年9月	0.3	0.0
2016年10月	6.6	0.0
2016年11月	0.2	0.0
2016年12月	0.3	0.0
2017年1月	0.3	0.0
2017年2月	0.2	1.2
2017年3月	0.3	0.0
合計	13.7	4.6

注: 予定された保守の日数、障害等による停止日数の合計は、四捨五入の関係により各月の合計とは一致しない場合がある。

また、2016年度の稼働率は図1の通りである。ここで示す稼働率は、以下の式に従い算出している。

当該月の稼働率

$$= (\text{当該月の全時間} - \text{予定された保守の時間} - \text{障害等による停止時間}) / (\text{当該月の全時間} - \text{予定された保守の時間})$$

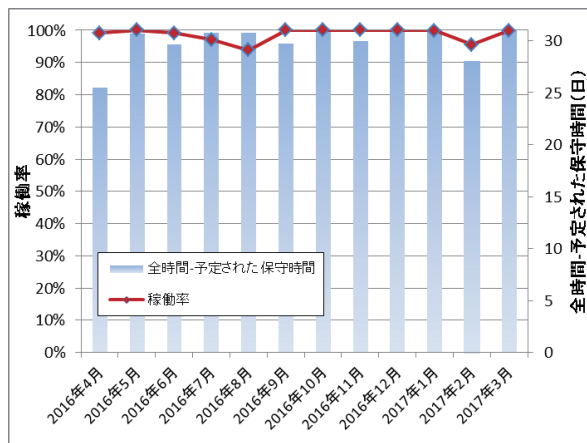


図1 2016年度の稼働率

8月の稼働率の低下はローカルファイルシステムが高負荷状態となり復旧のためにシステムを停止した影響で、2月の稼働率の低下はネットワーク機器が故障したことによりローカルファイルシステムへアクセスできなくなった影響によるものである。それ以外の期間は高い稼働率で、通年では約98.7%であった。図2に共用開始後の年度毎の稼働率を示す。

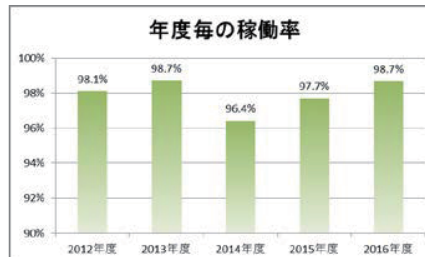


図2 年度毎の稼働率

2. 障害の発生状況

2016年度に発生した主な障害の状況は表2の通りである。ここでは、影響がシステム全体に渡り、かつ1時間以上の停止を伴ったものを記載している。

表2 2016年に発生した主な障害と停止期間

発生日時	障害内容	停止時間 (H)
2016年 4月12日	pleio プロセス残存によるジョブ実行不可	1
2016年 4月13日	LIO 障害時の切替失敗(大規模対応のため即時対応)	1.3
2016年 4月13日	LIO ハード障害(大規模対応のため即時対応)	1.5
2016年 4月14日	計算ノード障害(大規模対応のため即時対応)	1.4
2016年 6月14日	予定保守時間超過	1.3
2016年 6月29日	ローカルファイルシステムスロウダウン	5
2016年 7月8日	ローカルファイルシステム障害(ハード障害)	21.6
2016年 8月9日	予定保守時間超過	1
2016年 8月23日	ローカルファイルシステムへのアクセス不可によるGIOダウン	28.1
2016年 8月26日	特定ジョブの高負荷IOによるローカルファイルシステムスロウダウン	16.6
2017年 2月1日	ネットワーク機器故障によるローカルファイルシステム障害	29.9

2016年度の障害の大部分はファイルシステムに関連した障害であった。特にローカルファイルシステムが高負荷状態になりシステムダウンにいたるといふ障害が多く発生した。これらはジョブに起因することが多く、現在、高負荷状態になりファイルシステムが停止する前に問題のジョブを強制停止し、システム停止を回避することができないか検討をおこなっている。

3. 利用者数(課題数)の推移

2016年度の実際に「京」を利用した利用者数及び課題数の推移を図3に示す。ここで示す「京」を利用した利用者数及び課題数は、実際にジョブを実行した利用者数及び課題数を表している。

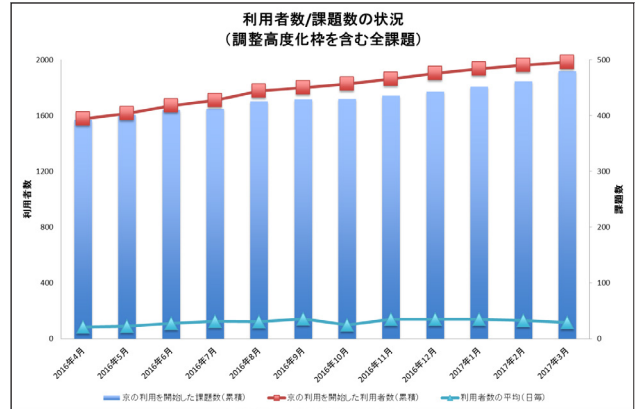


図3 「京」を利用した利用者数及び課題数の推移

一日あたりの利用者数(アクティブユーザ数)は平均して約120名で、非常に多くのユーザが「京」を常に利用していることがわかる。

4. ジョブ数の推移

2016年度に処理されたジョブ件数の推移を図4に、「京」に投入されたジョブの要求資源量の総和の推移を図5にそれぞれ示す。図5はジョブの投入時に利用者が指定したノード数及び経過時間をもとに算出している。

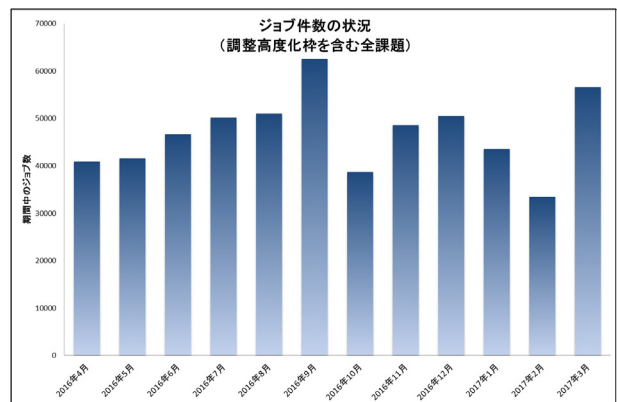


図4 処理されたジョブ件数の推移

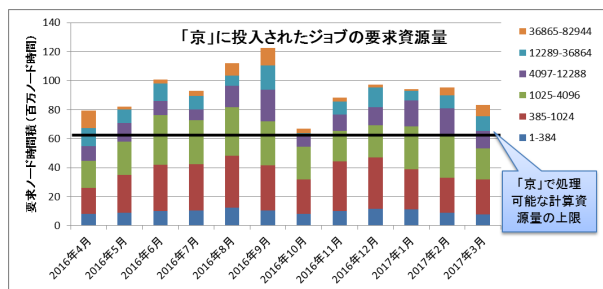


図 5 「京」に投入されたジョブの要求資源量の総和の推移

これらの図から常に「京」が提供可能な資源量を超えた要求があったことがわかる。これまで年度始めの利用は低調なことが多かったが、2016年度は例年より高い利用であった。

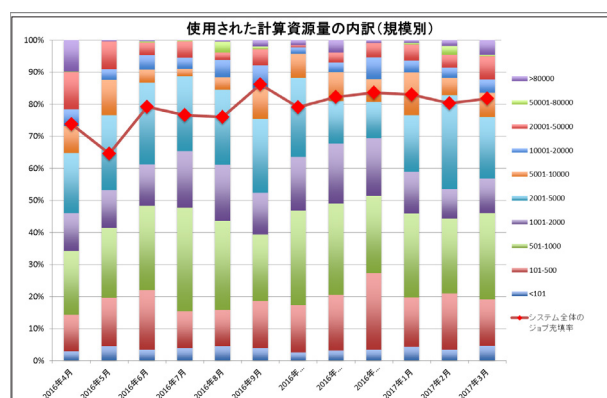


図 6 使用された計算資源量の内訳

図 6 に 2016 年度に使用された計算資源量の内訳を示す。2016 年度は、5 月が連休明けの利用が少なかった影響で、ジョブ充填率(実際にジョブを処理した時間/サービスを提供した時間)が低下したが、それを除くと年間を通して高い充填率であった。年間では約 78.9%とこれまでで最も高い充填率であった。

2015 年度から年度末の利用率の改善のため、割当計算資源の 98%を使った課題に対して低優先度での利用を許可している。2015 年度はこの制度で約 180 万ノード時間が使用されたが、2016 年度は約 970 万ノード時間が使用されており、利用率の改善に大きく貢献したものと考えられる。

5. 待ち時間の分析

ジョブが投入されてから実行されるまでの待ち時間の推移を、ジョブの規模や経過時間指定毎に集計した結果を図 7 から図 11 に示す。

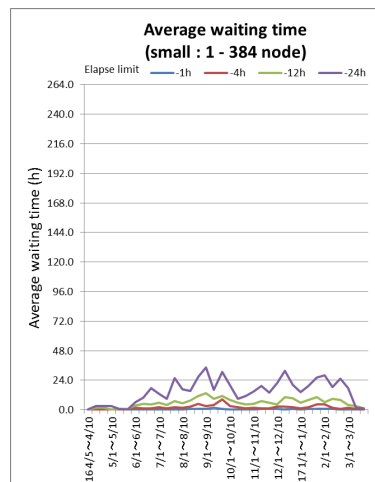


図 7 待ち時間の推移(1-384 ノード)

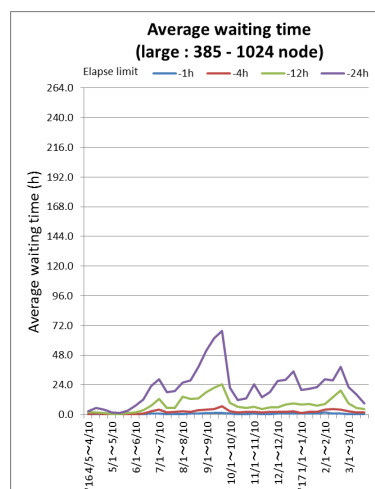


図 8 待ち時間の推移(385-1,024 ノード)

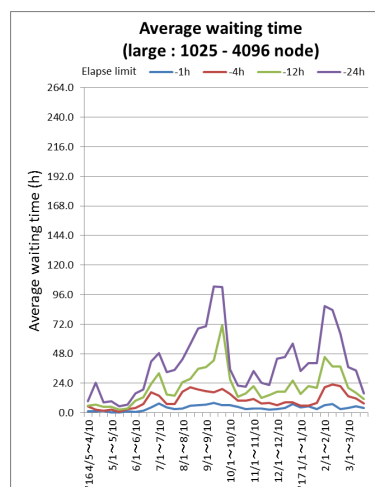


図 9 待ち時間の推移(1,025-4,096 ノード)

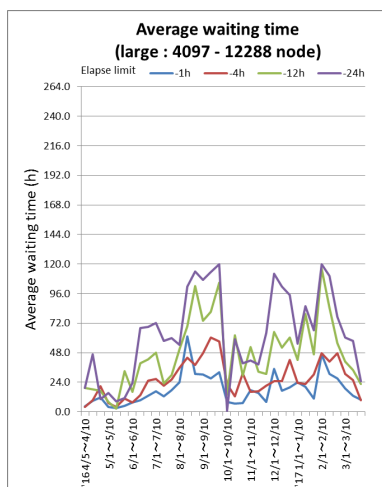


図 10 待ち時間の推移(4,097-12,288 ノード)

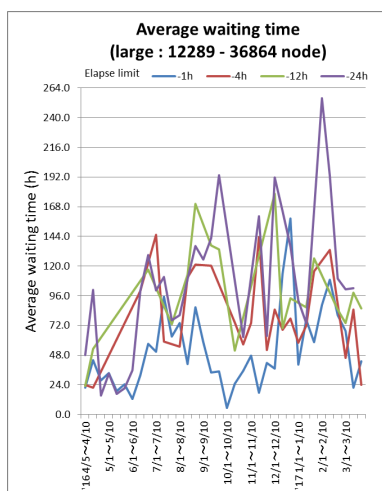


図 11 待ち時間の推移(12,289-36,864 ノード)

2016年度は、2015年度と比較して年間を通して待ち時間は減少した。待ち時間の長期化対策として、2015年度後半から、優先利用制度を利用したジョブに割り当てる計算ノードの領域を通常ジョブのスケジューリングを阻害しない領域への変更と、使用ディスク量を過大に設定していたジョブに対して適切に設定するように促している。2016年度はこれらの他に、通常ジョブの待ち時間が長期化した場合に、優先利用制度を利用したジョブが他にある場合でも実行されるように運用を変更した。これらの対策により、2015年度と比べて待ち時間が大幅に改善されたものと考えている。

2-1-2 まとめ

2016年度の「京」の運用状況は、ファイルシステムの障害が多く発生したが全体的に安定しており、通年では約98.7%と高い稼働率であった。ファイルシステム障害の多くはジョブに起因するもの

で、ローカルファイルシステムが過負荷状態になりシステムがダウンする前に予兆を検出し、当該ジョブを強制停止させるなどの手法の確立が急務と考える。

利用者の利用状況を見ると、5月の連休明けが一時的に低くなったが、年間では約78.9%とこれまでで最も高い充填率であった。ジョブの待ち時間も2015年度と比べて大きく改善されているが、上期末に利用が集中する傾向は依然残っており、引き続き期を通して効率的に計算資源を利用するようにユーザに周知していく。また、「京」の利用支援をするツールの提供や、ジョブ実行に関する情報提供など、今後も運用の改善に努めていく。

2-2 施設管理

2-2-1 はじめに

電気設備、空調冷却設備などユーティリティ施設の運転、維持管理業務の目的は、「京」を中核とする AICS の研究施設を安全、安定に運転・維持することにより、施設全体の稼働率を上げ、共用施設である「京」を最大限に利用可能とすることである。

設備の運転管理においては、「京」が 24 時間連続稼働であることから、常時ユーティリティ施設を適切に運転するため、24 時間体制で施設管理を実施している。

設備の性能を維持するため、計画的に保守点検を実施し、「京」を停止させることのないよう努めている。また、研究チームや戦略機関等が持ち込むサーバ類についても、設置場所の整備、電源や空調の増設工事を行い、研究環境の維持整備も実施している。

原子力発電所の停止状態が続く昨今の電力状況に対しては、構内コージェネレーションシステム常用自家発電設備（以下 CGS と呼ぶ）の運転計画を調整することにより、「京」の運用計画に支障を及ぼすことなく、かつ電力会社からの節電要請にも協力してきた。しかし、2013 年度初めまでの燃料原価高騰の影響は大きく、運転経費を圧迫する状況が継続していた。このため、電力会社からの受電量と自家発電量のバランスを常時確認しながら、光熱費最小コストでの運用となるよう調整を実施している。

2-2-2 光熱水管理

1. 電気

AICS の電力は、電力会社からの受電と CGS による発電により

供給されている。電力会社からの受電電圧は 77 kV、前年度の使用電力の実績を反映して契約電力を調整している。都市ガス燃料による自家発電設備では、発電電圧 6.6 kV、最大発電電力 6,120 kW の CGS が 2 機設置されている。受電電力と発電電力を連携することにより、一次エネルギー消費量を最小化するとともに、万が一の停電時にも重要負荷に対して無停電で電力を供給することが可能である。

AICS の建屋竣工は 2010 年 5 月末であり、以降職員の入居や「京」の稼働状況に合わせて契約電力を変更してきた。CGS は 2011 年 1 月末に竣工引き渡しを受け、「京」の本格的な試運転が開始された 2011 年 3 月より 24 時間連続運転を実施している。契約電力を過大としないため、その時々電力並びに熱需要に合わせ、CGS の発電量を調整してきた。

2012 年 9 月の共用開始以降、AICS 全体の消費電力は徐々に増加してきたが、節電の努力の効果もあり平均 15 MW 程度で落ち着いており、CGS 1 機稼働が通常状態となっている。

CGS 1 機を常時運転し、もう 1 機を予備機として 1~2 週間ごとに切り替えて運用しており、2 機の CGS の運転時間を均一化している。ベンチマーク測定時や大規模ジョブ実行時には、大電力の需要が見込まれるため、状況に応じて CGS 2 機を稼働させ、「京」の電力需要並びに熱需要に追従させるとともに、契約電力を超過しないよう運用している。

最大電力に関しては、省エネ活動の成果により徐々に減少する傾向が続いている。また、2016 年度からガス単価の方が電力単価に比べて安くなってきた状況を踏まえ、自家発電量を増やすバランス調整を実施し光熱費最小コストの電力運用を実現した（図 12、13 参照）。

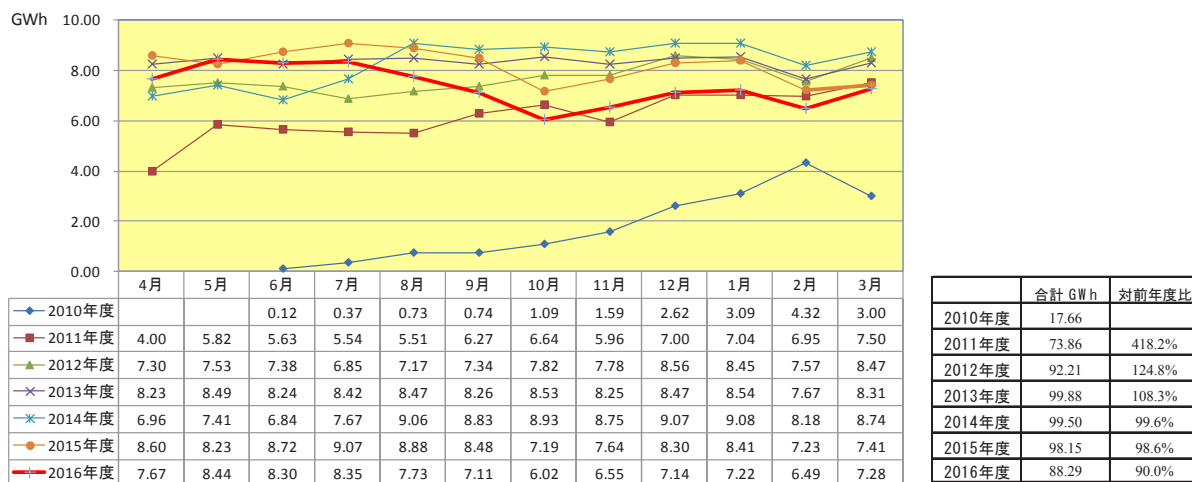
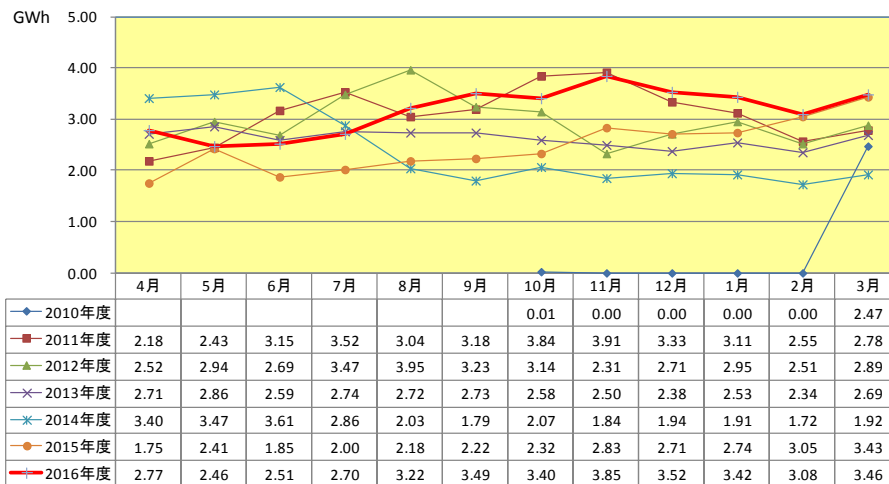


図 12 受電電力量の推移



	合計 GWh	対前年度比
2010年度	2.48	
2011年度	37.03	1494.3%
2012年度	35.30	95.3%
2013年度	31.39	88.9%
2014年度	28.56	91.0%
2015年度	29.50	103.3%
2016年度	37.87	128.4%

図 13 CGS 発電電力量の推移

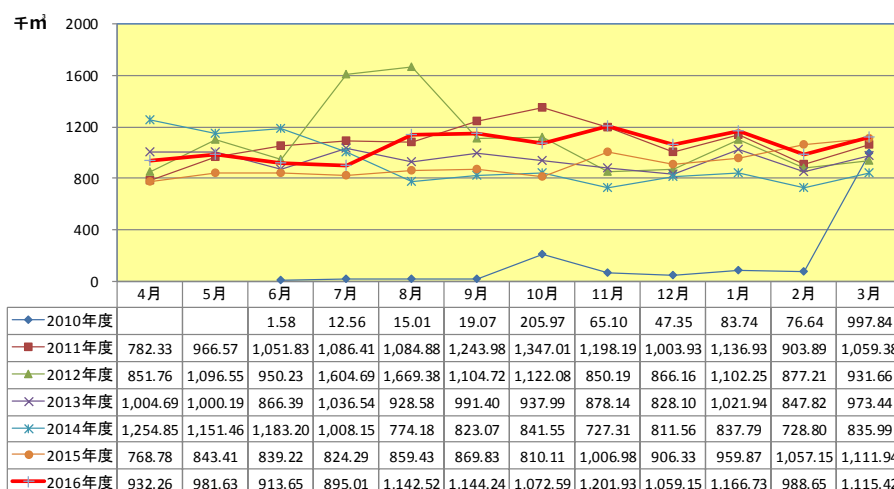
2. 都市ガス

都市ガスは、ガス会社より中圧Aにより供給されており、供給された都市ガスのほぼ全量をCGSが消費している。CGSから回収される排熱をすべて利用することにより、ほぼ常時 70 %以上の熱効率で運用している。月毎のガス使用量の推移を図 14 に示す。

2013 年度から 2015 年度にかけて燃料原価が高騰したことを受け、光熱費コストを最小にするために受電電力の比率を高くし、自家発電電力を最小とする運用を実施した。2015 年度から 2016 年度にかけて原料価格の下落傾向が続いたため、自家発電電力を常時増やすように CGS 運転を実施した。

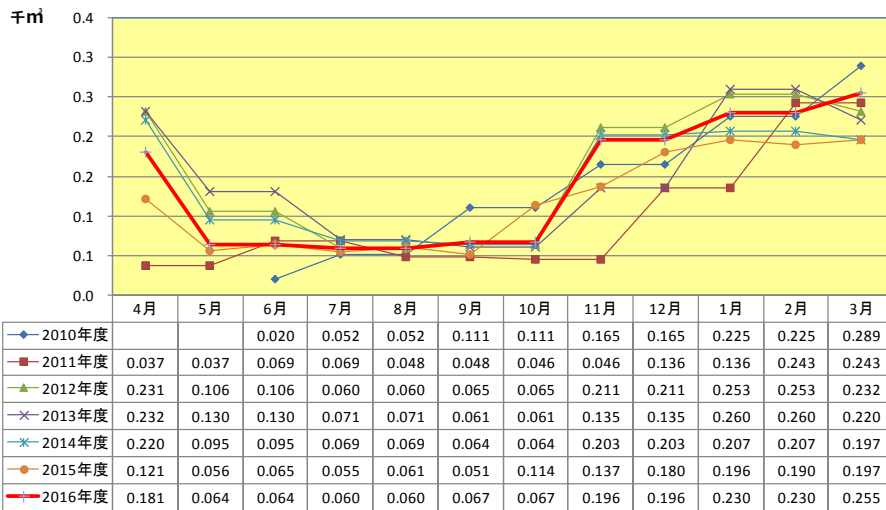
3. 水

AICS で使用する水は、神戸市水道局より工業用水並びに上水の 2 系統が供給されている。工業用水は主に「京」を冷却した熱を大気中に放熱するための冷却塔補給水として利用されている。「京」の冷却のためには、最大 1,000 t/日もの水を蒸発させる必要があるため、安価な工業用水を使用している。上水は研究棟飲用水、手洗いの他、冬季の加湿蒸気にも使用している。また、雨水並びに冷却塔ブロー水は貯留、滅菌した上で、トイレ洗浄水や構内植栽の灌水として再利用しているため、受水量に比べ下水道使用量は非常に少ない(図 15、16、17 参照)。



	合計 千m³	対前年度比
2010年度	1524.86	
2011年度	12865.33	843.7%
2012年度	13026.88	101.3%
2013年度	11315.22	86.9%
2014年度	10977.91	97.0%
2015年度	10857.34	98.9%
2016年度	12613.78	116.2%

図 14 ガス使用量の推移



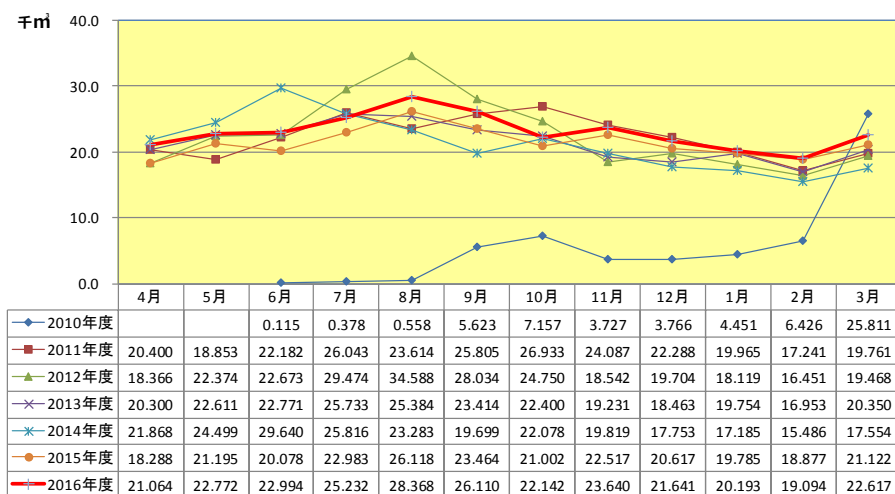
	合計 千m³	対前年度比
2010年度	1.42	
2011年度	1.16	81.8%
2012年度	1.85	160.0%
2013年度	1.76	95.1%
2014年度	1.69	95.8%
2015年度	1.42	84.1%
2016年度	1.67	117.3%

図 15 上水道使用量の推移



	合計 千m³	対前年度比
2010年度	6.53	
2011年度	52.81	809.1%
2012年度	47.89	90.7%
2013年度	36.70	76.6%
2014年度	44.37	120.9%
2015年度	39.83	89.8%
2016年度	41.90	105.2%

図 16 下水道使用量の推移



	合計 千m³	対前年度比
2010年度	58.012	
2011年度	267.172	460.5%
2012年度	272.543	102.0%
2013年度	257.364	94.4%
2014年度	254.680	99.0%
2015年度	256.046	100.5%
2016年度	275.867	107.7%

図 17 工業用水使用量の推移

4. 省エネルギー

AICSは2012年1月20日付けで、エネルギーの使用の合理化に関する法律における第一種エネルギー管理指定工場等に指定され、理化学研究所全体の省エネルギー管理のもと省エネ活動を推進している。2013年度は「京」の安定稼働を確認しつつ、「京」空冷の風量と温度差(吹出し/戻り)を調整することで、2階空調機の運転台数の削減を行い、約450kWの電力削減を達成した。また、2014年度は2階空調機の耐故障機能を省エネに活用することで約200kWの電力削減を達成した。2015年度では地下1階空調機に対して同様の対策を実施することで約40kWの電力削減を達成した。更に冷却塔の効率改善の試みとして、ブーリー交換による風量アップ及び熱源棟屋上パネルの一部撤去による冷却塔ショートサーキットの防止の取り組み等により、2016年度に約190kWの電力削減を達成した。これにより、年平均1%以上の省エネ目標達成に大きく貢献することができた。

2-2-3 設備の運転監視、維持管理

1. 設備の運転保守

「京」の運転計画に基づき、年間、月間、週間、日単位で施設運転計画を作成し、設備の運転保守を確実に実施した。設備の運転監視については、熱源機械棟中央監視室に常時2名以上の監視員を置き、24時間体制で運転監視を実施している。また、日勤者平日7名、休日1名を配置し、構内設備類の巡回点検、薬液補充、フィルター清掃、水質管理等を計画的に実施することにより、安定した施設運用に努めている。毎朝設備担当スタッフによるミーティングを実施し、前日に行った保守作業の確認と不具合の報告を受け、対応内容の精査と情報共有を行っている。また、当日実施予定の保守作業の確認を行い、必要な指示を出している。

2. 維持管理

(1) 電気設備

電気設備の定期点検は、電気事業法に基づくAICS自家用電気工作物保安規程に則り行うものであり、保安の確保により電気事故を防ぎ、電力の安定的な使用を確保している。2011年度と2012年度で、構内全停電により各施設の点検を実施し、すべて

の電気設備が健全であることを確認した。2013-2014年度は全停電での点検は行わず日常点検のみとし、保安規定に基づき2015年度に構内全停電点検を実施した。また、電気主任技術者による従事者への安全教育を計画的に実施し、事故時の対応等の訓練を行っている。

設備導入後5年を経過し電子機器の故障率が高まる傾向にあるため、機器の保守整備を念入りに実施し、消耗部品の定期交換を進めている。また、機器障害が全体運用に及ぼす影響を考慮し、構内停電を伴う電気設備点検を毎年実施するよう保安規定の改訂を行った。この規定に基づき、今後の重大事故の発生を未然に防ぐために計画的な保守整備を実施している。

2016年度の計画停電では、外部電源を仮設することで基幹ネットワークスイッチ装置及び電話交換機を通電した状態で点検作業を実施することができた。外部電源供給により必要な照明及び内線電話による通信手段も確保することができ、確実な保守点検を実施することができた。

(2) CGS 常用自家発電設備

CGSの点検は、電気事業法並びに保安規程及びボイラ安全規則に則り行うものであり、保安の確保並びに労働災害を防止し、発電設備並びに排熱回収ボイラの安定運用を確保するものとしている。毎年6月にボイラ安全規則による排熱回収ボイラの法定点検を中心に本体及び補機類の点検を実施している。点検にあたっては1機ずつ交互の点検とし、「京」の運転計画に影響を与えないように常時1機は運転した状態で点検を実施した。また、保安規程に定められたボイラタービン主任技術者による従事者への安全教育並びにボイラ安全規則に定められた安全教育を計画的に実施し、事故時の対応等の訓練も行った。

CGSガスタービンの運転時間が32,000時間に近づいてきたため、翌年度以降のオーバーホール点検に備えて、CGS1号機及びCGS2号機の運転時間調整を実施した。

(3) 冷凍空調設備

2014年度は、熱源機械棟内にある蒸気吸収式冷凍機4台、ターボ冷凍機3台、スクルー冷凍機1台の精密点検として、冷却水系統凝縮器に加え、蒸発器のチューブ清掃並びに制御機器等精密点検を実施した。実施にあたっては、冷凍機を1台ずつ停止・点検することにより、「京」の冷却に支障がないように計画した。

各空調機については、日常保守作業の計画の中で、フィルター清掃、グリスアップ等を行い、健全性の維持に努めた。定期点検としては、中央監視装置主装置に加えて、ローカル機器の点検を実施した。いずれも「京」の冷却に支障のないように 1 台ないし数台ずつ停止して点検を行った。

CPU 冷却設備については、毎日水質チェックを行い、必要に応じてフィルター、デミナー、脱気膜の交換を行い、水質を維持した。溶存酸素濃度計など純水維持装置のセンサー校正点検を実施し、維持管理が適正に行えるようにした。

2-2-4 環境保全への取り組み

施設全体の電力需要、熱需要に対し、一次エネルギー消費量が最小になるように CGS の発電電力を調節し、省エネルギー並びに省 CO₂ 対策を実施している。CGS は低 NOx 運転を実施しており、神戸市条例による排出基準である 60 ppm を大きく下回る 24 ppm での運転を実施している。また、CGS からの排気ガスは 2 ヶ月に一度測定し、NOx や煤煙などの発生量が法令や神戸市条例を超えないよう管理している。

雨水や冷却塔ブロー水については再利用により、水資源の有効活用をし、下水排出量を低減している。

3 「京」の共用の促進

3-1 「京」における利用枠と利用研究課題の種類

「京」の計算資源は、図1に示す通り、一般利用枠、ポスト「京」研究開発枠及び京調整高度化枠として利用されており、以下にその概要を示す。

3-1-1 一般利用枠

一般利用枠は公募の対象となっており、採択された課題は、成果の公開を原則として無償で利用することができる。この他に、一部の利用研究課題は有償¹で成果を非公開とした利用が可能である。

2016年度の一般利用枠における配分資源量は、図1に示す通り「京」の利用可能資源量の45%程度で、うち一般課題及び産業利用課題(実証利用)にそれぞれ25%及び15%程度²、若手人材育成課題については、従前どおり5%程度であった。2017年度利用研究課題募集における配分資源量も、2016年度と同様の配分である。

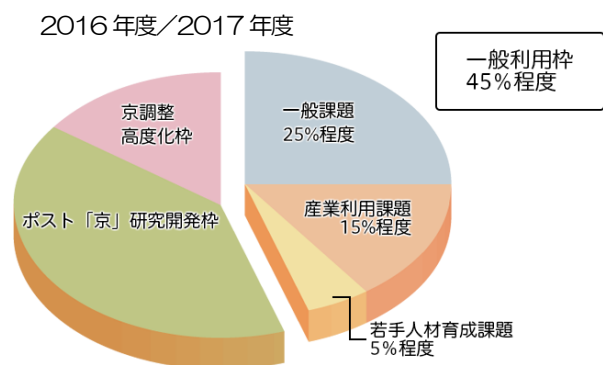


図1 「京」全体の資源配分

なお、「京」の利用可能資源量は、「京」の物理的な資源量の95%(計画停止や保守等で停止する期間を除く稼働率)に、ジョブの充填率を考慮した配分率を乗じた資源量であり、AICSにより決定される。2016年度の配分率は88%で、2017年度も引き続き同じく88%である。

¹ 2015年度に新設した競争的資金等獲得課題は、有償による利用であるが成果は公開する。

² 2016年度及び2017年度募集においても、随時募集としている一般課題(競争的資金等獲得課題)、産業利用(個別利用、ASP事業実証利用)及びトライアル・ユースの配分資源量は「京」の利用可能資源量の枠外である。

3-1-2 戦略プログラム利用枠

戦略プログラムは2015年度で終了したため、2016年度以降の資源配分はない。

3-1-3 ポスト「京」研究開発枠

ポスト「京」研究開発枠は、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・研究開発を実施するため、2015年度に新設された。

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題(重点課題)の一覧を表1に示す。また、2016年度には新たにポスト「京」で取り組むチャレンジングな課題(萌芽的課題)が設定された。萌芽的課題の一覧を表2に示す。

2016年度のポスト「京」研究開発枠における配分資源量は「京」の利用可能資源量の40%程度である。うち36%程度は重点課題に、4%程度は萌芽的課題に配分された。2017年度においても2016年度と同様の配分である。

3-1-4 成果創出・加速枠

一般利用枠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である。2016年度の利用可能資源は2%程度³で、2017年度利用研究課題募集においても同様である。

3-1-5 重点化促進枠

政策的に重要かつ緊急な非公募の課題の実施のための枠である。上限を10%程度⁴とし、課題が設定されれば他の利用枠より優先的に実施される。

3-1-6 京調整高度化枠

理化学研究所が、「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

³ 2016年度及び2017年度においても、成果創出・加速枠の配分資源量は「京」の利用可能資源量の枠外である。

⁴ 重点化促進枠の配分資源は、従前通り「京」の利用可能資源量の枠外である。

に資する高度化研究を実施するための枠であり、「京」の利用可能
資源量の15%程度を占める。

表1 ポスト「京」研究開発枠 重点課題一覧

	課題名	実施機関(*は代表)
重点課題1	生体分子システムの機能制御による 革新的創薬基盤の構築	理化学研究所生命システム研究センター*、横浜市立大学
重点課題2	個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学	東京大学医科学研究所*、大阪大学、(株)UT-Heart 研究所
重点課題3	地震・津波による複合災害の統合的 予測システムの構築	東京大学地震研究所*、海洋研究開発機構、神戸大学
重点課題4	観測ビッグデータを活用した気象と 地球環境の予測の高度化	海洋研究開発機構地球情報基盤センター*、東京大学大気海洋研究所
重点課題5	エネルギーの高効率な創出、変換・ 貯蔵、利用の新規基盤技術の開発	分子科学研究所*、神戸大学、東京大学、岡山大学
重点課題6	革新的クリーンエネルギーシステム の実用化	東京大学大学院工学系研究科*、豊橋技術科学大学、日本原子力研究開発機構
重点課題7	次世代の産業を支える新機能デバ イス・高性能材料の創成	東京大学物性研究所*、東京大学、分子科学研究所、産業技術総合研究所、大阪大学
重点課題8	近未来型ものづくりを先導する革新 的設計・製造プロセスの開発	東京大学生産技術研究所*、東京大学、宇宙航空研究開発機構、神戸大学
重点課題9	宇宙の基本法則と進化の解明	筑波大学計算科学研究センター*、高エネルギー加速器研究機構、京都大学、東京大学

表2 ポスト「京」研究開発枠 萌芽的課題一覧

	課題名	実施機関(*は代表)
萌芽的課題1	基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦	
1-1	基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通した極限の探求	東北大学金属材料研究所*、東北大学、理化学研究所成崎計算宇宙物理研究室、東京大学物性研究所
1-2	極限の探究に資する精度保証付き数値計算学の展開と超高性能計算環境の 創成	東京女子大学*
1-3	複合相関が織りなす極限マテリアル—原子スケールからのアプローチ	東京大学*
萌芽的課題2	複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究	
2-1	多層マルチ時空間スケール社会・経済シミュレーション技術の研究・開発	理化学研究所*、兵庫県立大学、東京工業大学、東京大学、産業技術総合研究所、神戸大学
2-2	堅牢な輸送システムモデルの構築と社会システムにおける最適化の実現	東京理科大学*
萌芽的課題3	太陽系外惑星(第二の地球)の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明	
3-1	生命を育む惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明	神戸大学*、東京工業大学、名古屋大学、筑波大学
萌芽的課題4	思考を実現する神経回路機構の解明と人工知能への応用	
4-1	脳のビッグデータ解析、全脳シミュレーションと脳型人工知能アーキテクチャ	沖縄科学技術大学院大学*、京都大学、理化学研究所、電気通信大学、東京大学
4-2	ボトムアップで始原的知能を理解する昆虫全脳シミュレーション	東京大学先端科学技術研究センター*

3-1-7 利用研究課題の種類

利用研究課題には、公募対象の一般利用課題と非公募である重点的利用課題がある。また、「京」の利用は広く研究開発の進展や産業競争力の強化に貢献することが目的であるため、成果の公開を原則とし、無償で利用できる。ただし、産業利用課題において企業が機密性の高い課題を実施する場合、成果を非公開とするこ

とができ、その場合は有償での利用となる。有償・無償利用や成果公開の有無について図2にまとめる。

2015年4月に新設した一般課題の競争的資金等獲得課題、産業利用課題のASP (Application Service Provider) 事業実証利用課題、また、2015年12月に新設した一般課題のトライアル・ユースは、2016年度も継続して随時募集した。

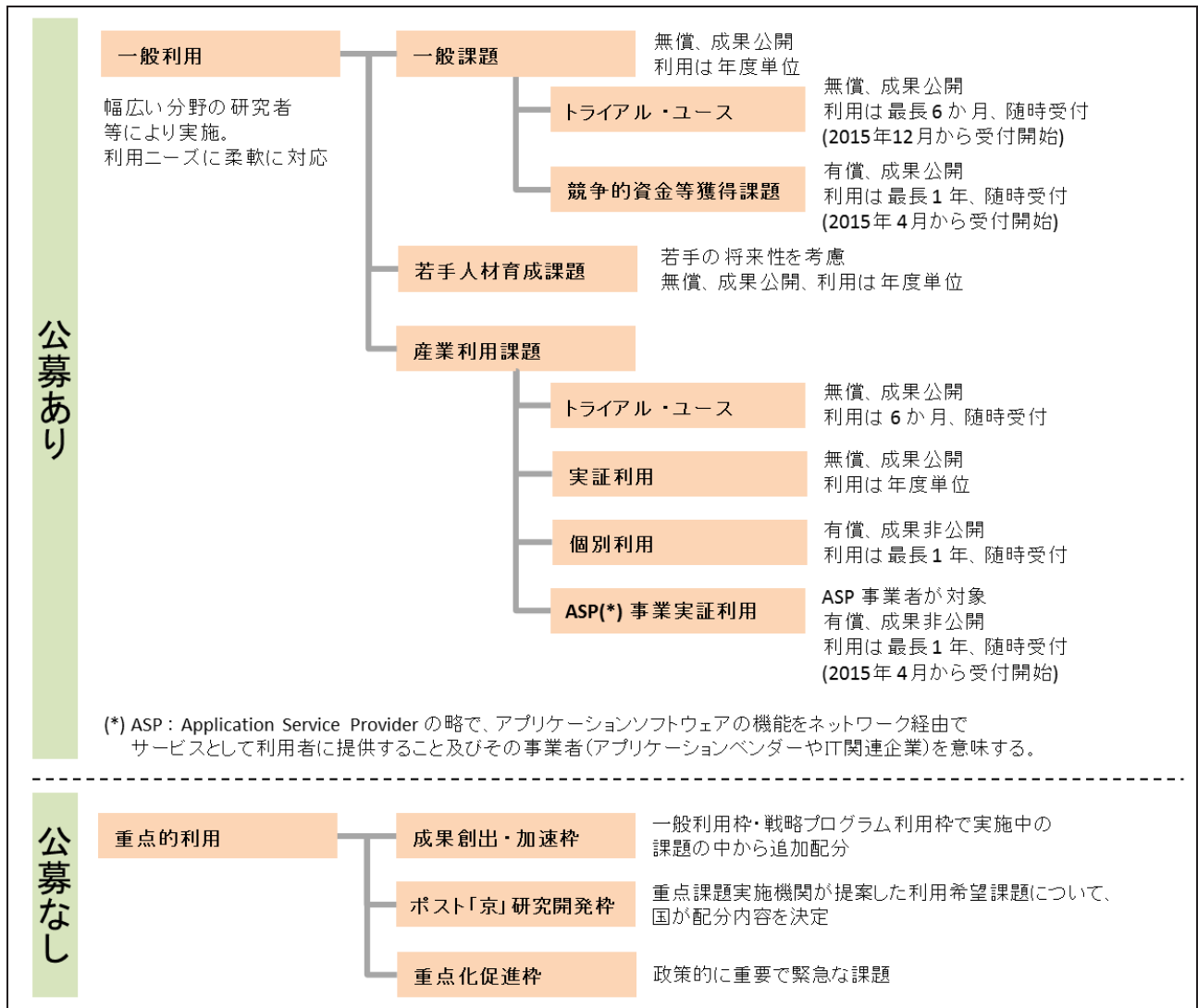


図2 「京」の利用研究課題の種類

3-2 利用者選定

3-2-1 一般利用枠の利用者選定

1. 選定方法

「京」の利用者選定に当たっては、「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」(共用法)に基づき、登録機関として選定された RIST が中立公正な立場で選定を行う。

具体的には、応募された一般課題、若手人材育成課題について、専門分野の学識経験者(レビュアー)⁵による課題の評価(レビュー)を行い、その結果を取りまとめた課題選定・資源配分案を、課題審査委員会が審査する。その後、上位機関である選定委員会がその結果を確認し、最終的に登録機関である RIST の理事長が選定課題の決定を行う。

産業利用課題については、一般課題、若手人材育成課題と同様に、レビュアーによる課題の評価を行い、その後、課題審査委員会設置された産業利用ワーキンググループ(WG)がレビュアーによる評価を確認し、課題選定・資源配分案を作成して課題審査委員会に提示する。以降は一般課題、若手人材育成課題と同一プロセスを経て決定される。

なお、課題の選定における公平性を保つため、選定委員会、課題審査委員会委員長のみを公開情報とし、その他の委員やレビュアーは非公開としている。

2016年度においては、2017年度の利用研究課題の選定と2016年度の随時募集課題の選定を実施した。2017年度の利用研究課題募集は、利用者からの年2回の募集を望む意見を受けて、従前どおり2017年4月から課題を実施する課題(以下、A期課題という。募集開始時期は2016年9月)に加え、第2回目として2017年10月から実施する課題(以下、B期課題という。募集開始時期は2017年3月)の募集を試行することとした(図3)。A期とB期の資源配分は、「京」の利用可能資源量のうち、一般利用枠に割当てられた45%程度を、A期課題に7割程度、B期課題に3割程度配分することとした。

年2回の募集を開始するに当たり、2017年度上半期においては、B期に相当する3割程度の資源が利用可能であるため、特例としてA期に併せて半年課題を募集した。

年2回募集における選定方法は、A期は「京」の利用を確実に実施するため、前述の選定方法の通り一般課題、若手人材育成課

⁵ レビューアーの専門分野については、2016年度利用研究課題の選定以降、科研費の分科(細目名)に合わせて細分化している。これにより、申請された課題の分野との整合性をより適切に確保している。

題及び産業利用課題に設定される利用枠のもとに実施するが、B期は利用可能資源量が限られることもあり、利用枠を撤廃し一括して評価の高い順に課題選定・資源配分案を作成し、その後は同一のプロセスを経ることとした。

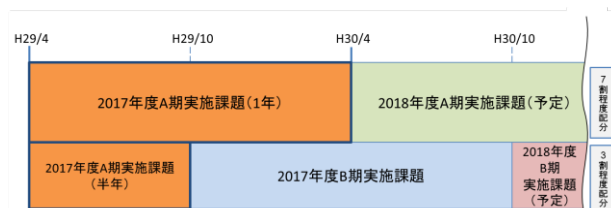


図3 2017年度利用研究課題の実施期間

2. 選定結果

2017年度A期の「京」利用研究課題募集は、一般課題、若手人材育成課題、産業利用課題(実証利用)を対象として通年課題と半年課題を選定した。通年課題では、応募数92件に対する審査の結果、45件を選定し、選定率は48.9%となった。また、半年課題では、4件の応募に加え、事前の選定委員会の審議⁶により、通年課題のうち半年課題としての再審査を希望した課題31件を合わせた計35件に対する審査の結果、22件を選定し、選定率は62.9%となった。なお、B期の選定結果は2017年8月頃となる見込みである。

課題種類別の内訳は表3の通りである。2016年度の利用研究課題募集に引き続き、「京」の採択に漏れた場合に第2希望として「京」以外のHPCI計算資源を希望する併用申請を受け付け、1件を「京」以外のHPCI計算資源利用として選定した。なお、大型実験施設等との連携利用については、「京」以外のHPCI計算資源を利用する課題を含めて23件の応募があり、15件を選定した。

選定状況を見ると、A期通年課題全体の採択率が48.9%で、2016年度69.2%から大きく減少している。これは、2017年度から年2回募集とし、利用可能資源をA期に年間の7割程度としたことによる。課題種類別では、一般課題の選定率が40.4%(2016年度58.5%)、若手人材育成課題は56.3%(同61.9%)、産業利用課題(実証利用)は58.6%(同93.3%)といずれも減少しており、特に産業利用課題(実証利用)では応募件数が29件で、2016年度の30件とほぼ同数であることから厳しい競争となった。

⁶ 利用者の拡大及び「京」を有効活用するとの観点から、半年課題の採択枠に余裕がある場合に限り、不採択となった通年課題で半年課題としての審査を希望する課題の上位から半年課題として採択する。(2016年12月28日付選定委員会メール審議による承認事項)

表 3 2017 年度利用研究課題の選定状況

(「京」通年課題)

課題種類	申請件数	選定件数	選定率
一般利用	47	19	40.4%
若手人材育成利用	16	9	56.3%
産業利用(実証利用)	29	17	58.6%
合計	92	45	48.9%

(「京」半年課題)

課題種類	申請件数	選定件数	選定率
一般利用	22	12	54.5%
若手人材育成利用	4	2	50.0%
産業利用(実証利用)	9	8	88.9%
合計	35*	22	62.9%

HPCI 資源(「京」以外)	155**	69***	44.5%
----------------	-------	-------	-------

*通年課題のうち半年課題としての再審査を希望した課題 31 件を含む

**「京」以外の HPCI 共用計算資源に申請した課題のうち、38 件については「京」との重複申請となっている。

***「京」と同時利用申請の結果、HPCI 資源も採択された 6 件を含む。

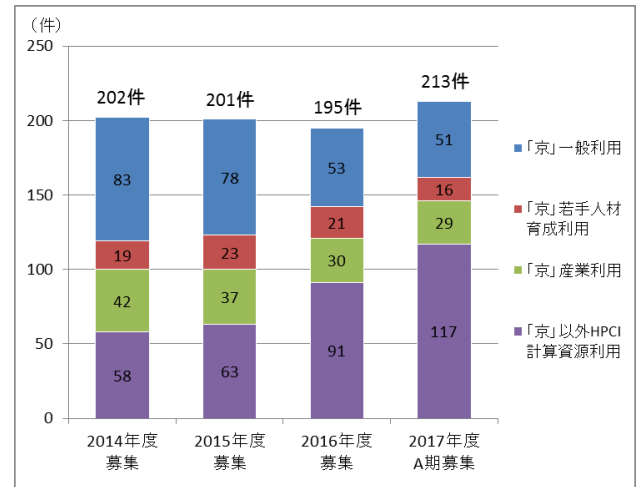
また、2016 年度の随時募集課題の選定状況は表 4 の通りである。なお、産業利用課題(ASP 事業実証利用)については 2015 年度に続き、2016 年度の応募はなかった。

表 4 2016 年度随時募集課題の選定状況

課題種類	申請件数	選定件数	選定率
一般課題 (トライアル・ユース)	3	3	100%
一般課題 (競争的資金等獲得課題)	6	6	100%
産業利用課題 (トライアル・ユース)	11	11	100%
産業利用課題 (個別利用)	15	15	100%
産業利用課題 (ASP 事業実証利用)	0	0	—

2017 年度 A 期利用研究課題募集における「京」の応募件数は、2016 年度利用研究課題募集の 104 件に対し、96 件(半年課題の 4 件を含む)とわずかに減少しているが、利用可能資源量が 7 割程度であるにもかかわらず、ほぼ匹敵する応募数となった。一方「京」以外の HPCI システムを利用する課題は 91 件から 117 件に 2016 年度に続いて大幅に増加した。この結果、応募総数は 213 件となり、2012 年度第 1 回募集(1.5 か年)を除き、過去最大とな

った。なお、「京」に集中していた応募が、「京」以外の HPCI システムの更新により、両システムの適切な利用にシフトする傾向は引き続き見られる(図 4)。

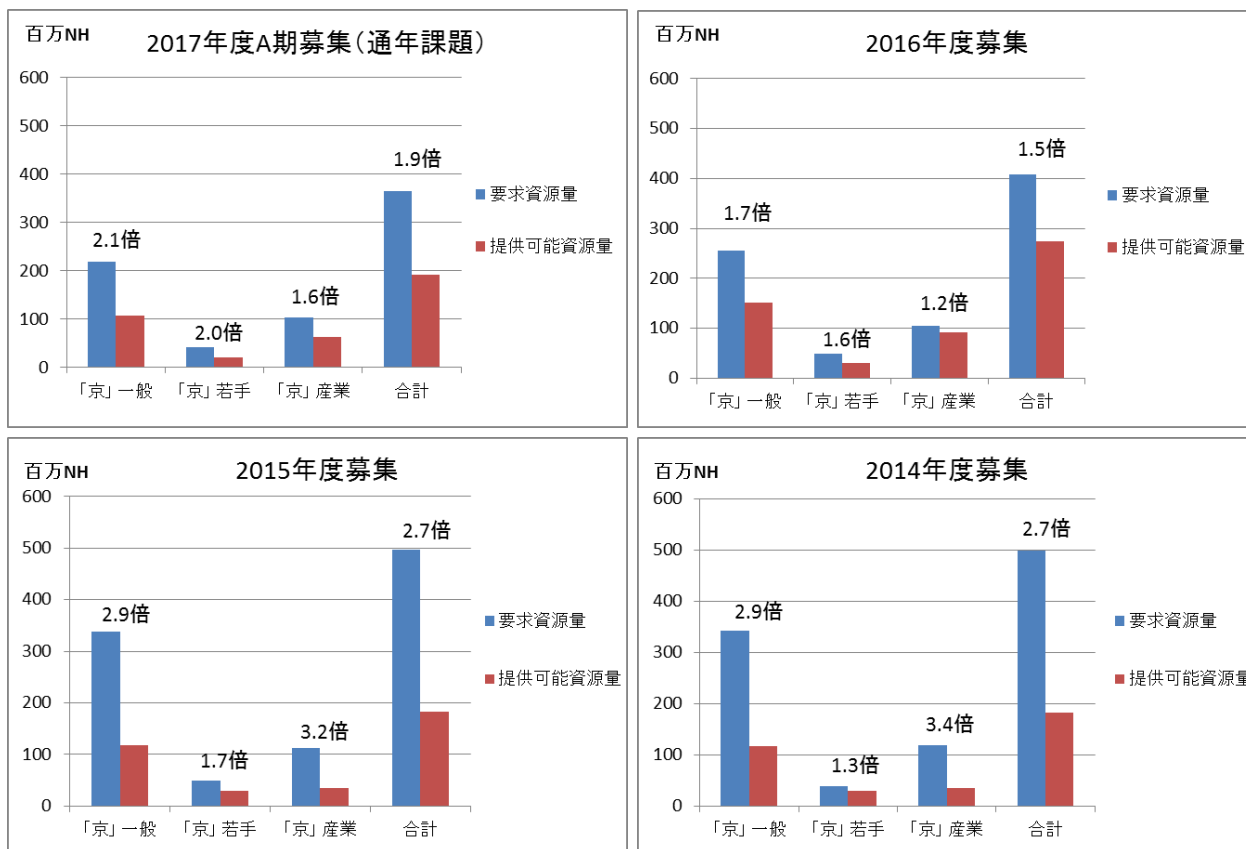


(2014 年度募集の「京」産業利用件数に個別利用 7 件を含む)

(2017 年度 A 期募集の「京」一般利用件数に半年課題 4 件を含む)

図 4 申請件数の推移

また、提供可能資源量に対する要求資源量の比については、2016 年度利用研究課題募集では、一般利用枠の利用可能資源量が 45%程度と拡大したため、1.5 倍と大幅に改善した。2017 年度においては 45%程度の配分は変わらないが、A 期通年課題の利用可能資源量が年間の 7 割程度となったことから、倍率は 1.9 倍に上昇した(図 5)。



(比較のため2014年度の産業利用(個別)の要求資源量、提供可能資源量は含まない)

図5 提供可能資源量と要求資源量の推移

利用分野別に2017年度A期の選定結果を見ると、一般課題・若手人材育成課題では、図6の配分資源量比率に示す通り、「物質・材料・化学」が約33%と最も大きく、2016年度利用研究課題募集とほぼ同じ割合を占めている。2017年度利用研究課題募集の特徴としては、「物理・素粒子・宇宙」が約23%と1ポイントの増加であるが、2016年度には7ポイントほど増加しており、増加傾向が続いている。一方、「環境・防災・減災」は2015年度に大幅な増加があり約23%であったが、2016年度が約15%、今回が約13%と減少する傾向が見られる。なお、各分野の選定件数比率もほぼ配分資源量に比例している。

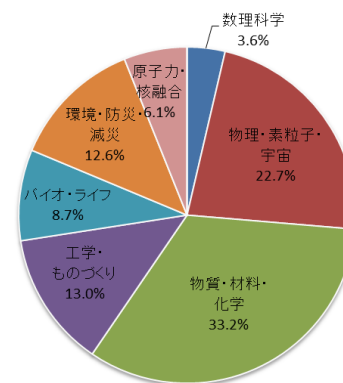


図6 分野別配分資源量比率(一般・若手)
(半年課題含む)

一方、産業利用課題においては、図 7 の配分資源量比率に示す通り、「工学・ものづくり」が約 45%と従来と同じく高い比率を占めているが、2015 年度が約 61%、2016 年度が約 53%とやや大きな減少傾向が続いている。同じく「物質・材料・化学」においても比率が減少する傾向が見られる。一方、「バイオ・ライフ」は約 13%と 3 ポイントほど増加している。また、今回新たに「物理・素粒子・宇宙」の課題が選定され約 7%の比率となった。これまで「工学・ものづくり」と「物質・材料・化学」の 2 つの分野が大きな比率を占めてきた産業利用課題であるが、「バイオ・ライフ」や「物理・素粒子・宇宙」といった新たな分野での利用が進む傾向が見られる。産業利用課題においても、各分野の選定件数比率がほぼ配分資源量に比例していることは一般課題、若手人材育成課題と同じ傾向である。

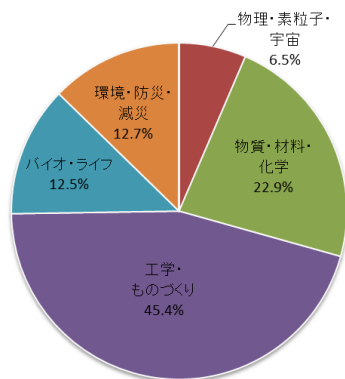


図 7 分野別配分資源量比率(産業利用)
(半年課題含む)

次に、2017 年度 A 期の選定結果における課題参加者の所属機関別分布を図 8 に示す。民間企業からの課題参加者が全体の約 44%で、2016 年度とほぼ同じ割合である。大学・研究機関、国立研究開発法人においても、ほぼ 2016 年度と同じ傾向である。

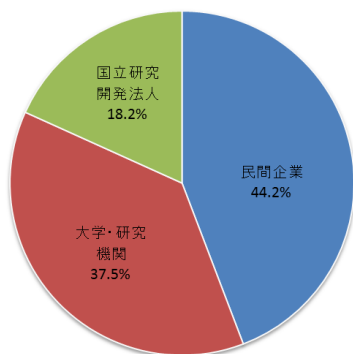


図 8 課題参加者の所属機関別分布(半年課題含む)

一方、2017 年度 A 期の選定結果における配分資源量の比率においては、図 9 に示す通り、大学・研究機関が約 50%、国立研究開発法人が約 25%、民間企業が約 25%となっている。民間企業の割合は 2016 年度とほぼ同じであるが、大学・研究機関が約 10 ポイント増、国立研究開発法人が約 10 ポイント減となっており、これまでにない傾向が見られるため、次年度に向けて注視したい。

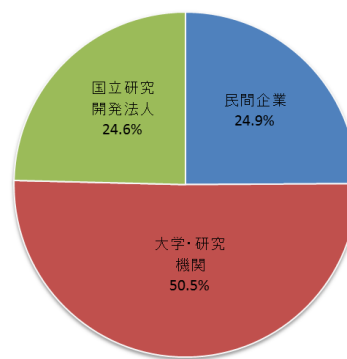


図 9 配分資源量の所属機関別分布
(半年課題含む)

3-2-2 重点的利用枠の利用者選定

重点的利用枠では、「京」の能力を最大限に活用し成果を上げていくため、「京」を利用して重点的に行うべき研究分野について、2016 年度も引き続き、国の方針等を踏まえ、成果創出・加速枠、ポスト「京」研究開発枠、重点化促進枠を重点分野に設定している。これらの 3 つの枠は非公募である。なお、これまで重点的利用枠に位置付けられていた戦略プログラムは 2015 年度で終了した。

このうち、ポスト「京」研究開発枠重点課題は、文部科学省がポスト「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・研究開発を実施するため定めた配分内容について、外部有識者によるポスト「京」重点課題推進 WG 委員による審議が行われ、登録機関に通知後、課題審査委員会のプロセス審議を経て選定される。2016 年度においては、2017 年度の重点課題 34 課題を選定した。

また、ポスト「京」研究開発枠萌芽的課題は、文部科学省がポスト「京」研究開発枠のうち、ポスト「京」で新たに取り組むチャレンジングな課題として定めた配分内容について、外部有識者によるポスト「京」重点課題推進 WG 萌芽的課題サブ WG 委員による審議が行われ、登録機関に通知後、課題審査委員会のプロセス審議を経て選定される。2016 年度においては、2016 年度(8 月利用開始)

に22課題、2017年度に26課題の萌芽的課題を選定した。

成果創出・加速枠は一般利用枠(随時募集課題を除く)にて選定された課題を対象に、利用者への成果創出の見直し等の調査を行い、また、AICSにおける計算資源の利用実績調査の結果を併せて検討し、課題審査委員会にて選定を行う。2016年度においては、希望調査を行い、6件の応募課題から3課題(一般課題2課題、産業利用課題(実証利用)1課題)を課題審査委員会の審議を経て選定した。

重点化促進枠については、2016年度の利用はなかった。

3-2-3 委員会等開催概要

2016年度に開催した選定委員会、課題審査委員会、各種ワーキンググループは表5の通りである。

表5 2016年度委員会等開催一覧

種別	回数	開催年月日	開催地	主な議題等
選定委員会	第10回	2016年8月1日	東京	平成29年度利用研究課題募集方針について
	第11回	2017年2月6日	東京	・平成29年度A期利用研究課題の採択および資源配分について ・平成29年度B期利用研究課題募集方針について
課題審査委員会	第10回	2016年9月5日	東京	平成29年度利用研究課題の審査要領について
	第11回	2017年1月26日	東京	・平成29年度A期利用研究課題の採択および資源配分について ・平成29年度B期利用研究課題の審査要領について
産業利用WG	第1回	2016年12月28日	東京	産業利用課題の審査について
学際共同研究WG	第1回	2017年2月10日	東京	公募型共同研究HPCI-JHPCNシステム利用課題の審査について

3-2-4 募集活動

2017年度HPCIシステム利用研究課題の募集にあたり、募集説明会を表6の通りA期募集に向け4回、B期募集に向け2回開催した。また、HPCIポータルサイトでの公開を行うとともに、ポスター及びチラシを関係機関に配布した(図10)。さらに、A期向けの募集説明会においては、RISTが主催する説明会(第1回~第3回)に加え、HPCIシステム全体の利用促進及び利用者の裾野拡大を目的として、資源提供機関と協力し、第4回目の募集説明会を開催した。

表6 募集説明会開催一覧

種別	回数	開催年月日	開催地	備考
募集説明会	第1回	2016年9月9日	神戸	平成29年度A期募集
	第2回	2016年9月14日	東京	平成29年度A期募集
	第3回	2016年9月16日	大阪	平成29年度A期募集
	第4回	2016年9月30日	東京	東京工業大学の産業利用向け募集説明会にて、平成29年度A期募集要領を説明
	第5回	2017年3月14日	神戸	平成29年度B期募集
	第6回	2017年3月24日	東京	平成29年度B期募集



図10 募集開始広告

3-3 利用支援

RISTは、特定高速電子計算機施設(「京」)の優れた演算能力等を活用し、多様な分野の研究者が円滑に研究を行えるように、一元的に情報を提供する窓口機能を設置し、応募前の事前相談や、各種手続き、利用に関する相談を受けるとともに、技術支援を行うため研究実施相談者等による支援体制を構築・運用している。なお、この研究実施相談者は、特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律施行規則(平成18年文部科学省令28号)の第8条に定められた特定高速電子計算機施設に係る数(14名)を確保している。このような技術支援体制により、「京」の利用課題に対して、アプリケーションの調整・高度化並びに可視化支援を実施した。

その他の支援として、「京」の利用技術の習得等を目的として、利用者向け講習会を企画し開催した。更に、HPC分野の利用者の裾野を拡大し、将来「京」の利用者となる人を増やすための活動として、「京」利用者に限定しない一般の方を対象としたチューニング技法及び、並列プログラミングに関するセミナー、各種ワークショップを開催した。

3-3-1 技術支援体制

技術支援体制として、利用者からのすべての問合せを受け付けるワンストップサービス窓口としてのヘルプデスクを設置・運用し、さらに産業界への利用支援も実施した(図11)。

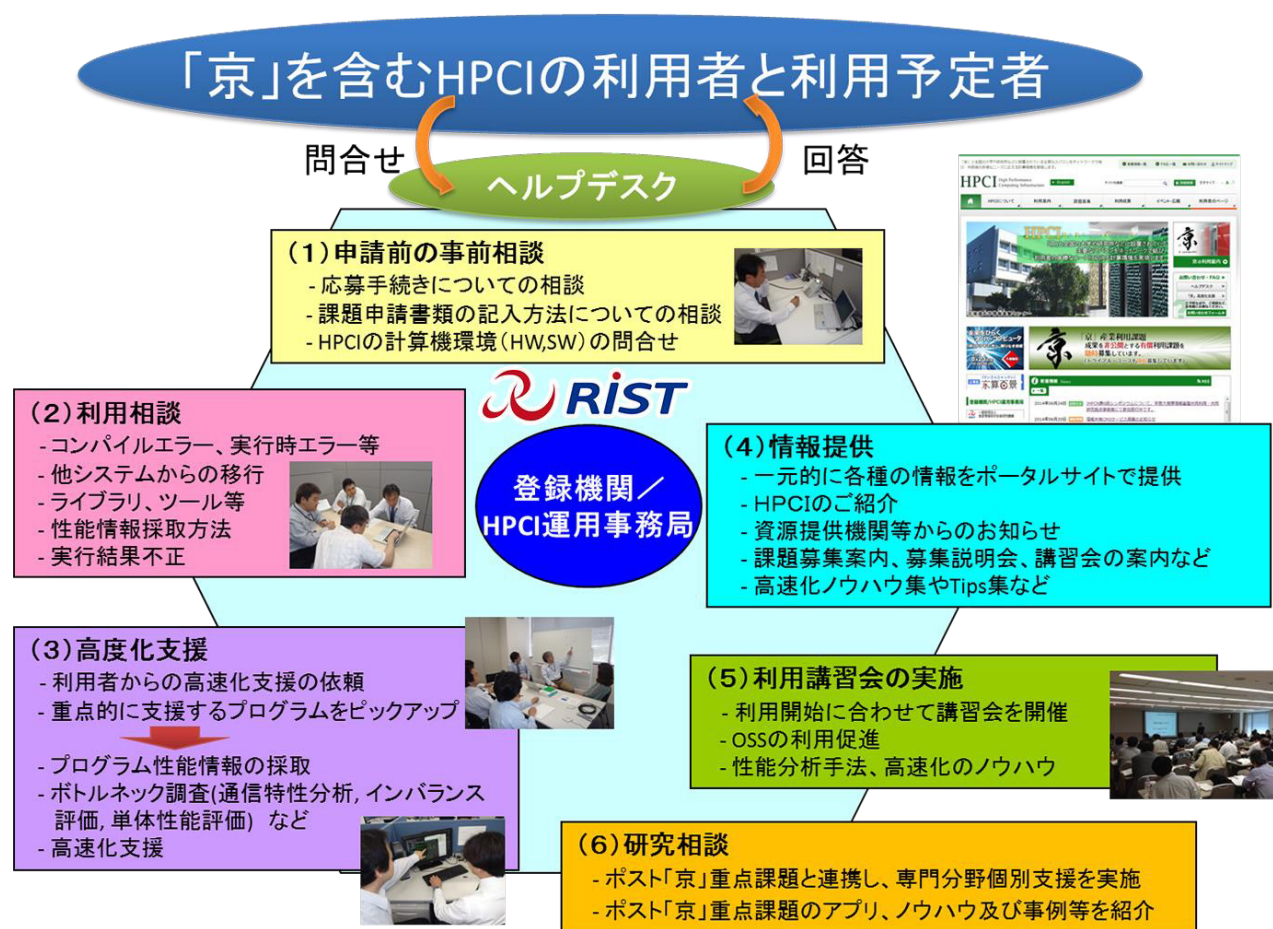


図11 RISTにおける利用支援体制の概要

3-3-2 一元的利用支援窓口 : ヘルプデスク

「京」を利用するあるいは利用しようとする方の支援のため、一元的窓口としてヘルプデスクを設置し、利用前相談、利用時相談・技術支援、情報提供を行った。相談者からヘルプデスクへの問い合わせについては、HPCI ヘルプデスクシステムを活用し、問題点を的確に切り分け、効率的に実施する体制を整備した。これにより、利用者への情報提供、利用相談等を通し、早期成果創出に貢献した。また、情報共有 CMS を活用し、情報の蓄積、利用者への情報提供を行った。

1. 利用前相談

2016年度は、2017年度利用研究課題の募集の他、一般課題(トライアル・ユース、競争的資金等獲得課題)、産業利用課題(トライアル・ユース、個別利用、ASP 事業実証利用)の随時募集があり、課題採択前から、自らが抱える課題にどのように HPC 技術を適用すれば解決できるかを相談できるコンシェルジュ機能を有する窓口として、利用促進に貢献した。

2. 利用時の相談

「京」利用時の利用者支援の一元的窓口として、ヘルプデスクが対応し、相談内容によりさらに専門化した支援を受けられるようコンシェルジュとして機能した。例えば、プログラムの調整、高度化支援に関しては課題によっては RIST 利用支援部と連携・協力し、また産業利用者に対しては産業利用を総合的に支援する専任の利用相談対応者(RIST 産業利用推進室)と連携・協力して利用支援を行った。

(1) ヘルプデスクによる技術相談

技術相談として、以下のような項目に対して情報提供や質問回答などを実施した。

- ・システム運用
 - ・ハードウェアやベーシックソフトウェア及びミドルウェア
 - ・プログラム言語
 - ・プログラム開発環境や実行環境
 - ・利用者ポータル等「京」に装備されている各種ツール
- また、利用者からのプログラム相談、利用相談、共用ストレージのデータ保存に関する相談などに対応した。

(2) 利用時のトラブル相談

「京」を利用する利用者の一元的窓口として、トラブル相談への対応を実施した。

- ・利用者プログラムとハードウェアやソフトウェアの各コンポーネン

ト等のシステムとの問題の切り分け等

- ・トラブルについての問題解決支援、あるいは代替策検討支援等

(3) 各種手続き相談

各課題に対する課題参加者の追加や削除、課題参加者の所属変更等の手続き支援

(4) 利用終了時の相談

2015 年度利用研究課題の終了時の手続き(利用報告書の提出、「京」や共用ストレージにおける計算データ保管等)や2017年度利用研究課題への継続手続きについて、利用者の相談に対応した。

3. AICS との連携・協力

「京」の利用相談、技術支援については、施設設置者である AICS と定期的な(月 2 回)ミーティングを開催するなど、密接な連携・協力を行いながら実施した。

- ・利用者のディスク領域の拡大、複数の課題間のファイル共有等の各種システム設定変更要望への対応
- ・定期保守の実施やパラメータ設定等の変更、システム障害等「京」の運用情報の提供
- ・「京」のデータ領域利用量、障害による課金の返却等、利用者との調整連絡
- ・各課題の毎月の資源利用状況を示すマンスリーレポートの配信

4. 「京」ユーザブリーフィング

「京」利用者と AICS、RIST における「京」の運用と利用に関する情報提供、意見交換の場として、「京」ユーザブリーフィングを開催した。2016年度は、隔月1回、合計6回開催した。会場は神戸のほか、RIST 東京事務所に遠隔会場を設置し、また利用者個々のテレビ会議システムによる参加も可能とした。

会場には「京」運用に係る責任者、技術者を配置し、利用者の意見等を直接伺うことで、円滑な情報のやり取りや迅速な問題解決が可能な体制を整えた。当日の参加が出来ない利用者に対しては、「京」利用者のみがアクセスできるウェブサイトにおいて発表資料を提供した。開催のない月にも開催月と同等の資料を提供した。

5. 情報提供

2015 年度に引き続き、主に利用者等からの要望や問合せ等を元にニーズの高いオープンソースソフトウェア(OSS)を選出し、翻訳、動作確認を行い「京」ポータルサイトに追加掲載した。また、情

報共有 CMS を利用し、「京」利用者のみアクセス制限した情報 (問合せ事例集及び FAQ 計 40 件、オープンソース導入手順書 (表7))の提供を行った。オープンソースについては、さらに利用者への利便性を考慮し、「京」のログインノード及び計算ノードに、ロードモジュール及びライブラリ(表 8)を提供した。

6. 「京」利用相談対応実績

ヘルプデスクにおける月別の利用支援の状況を示す(図 12)。「京」の利用相談件数は、2016 年 4 月 1 日～2017 年 3 月 31 日の間で、約 2,000 件であった。

表 7 オープンソースソフトウェア導入手順書(2016 年度追加分)

ソフトウェア名	バージョン	ライセンス	ソフトウェア概要
OpenFOAM	4.1 v1612+	GNU GPL v3	オープンソースの流体解析ソフト
OpenMX	3.8	GNU GPLv2	原子局在基底と擬ポテンシャルを用いた第一原理計算プログラム
Quantum ESPRESSO	5.1.1	GNU GPLv2	第一原理計算ソフト
gv	3.7.4	MIT license または MIT 類似	PostScript と Portable Document Format(PDF)ビューア
LAMMPS	17-Nov-16	GNU GPLv2	並列計算機のために設計された古典的な分子動力学シミュレータ
UMFPACK	5.7.4	GNU GPLv2	非対称疎行列計算ライブラリ
ARPACK / PARPACK	96	BSD-3-Clause	大規模固有値問題のために開発された FORTRAN サブルーチン群
Hypr	2.11.1	GNU LGPLv2.1	超並列コンピュータ向け大規模疎線形方程式ライブラリ
ICU4C	57.1	ICU license	ソフトウェアアプリケーションのための Unicode とグローバリゼーション・サポートを提供する C/C++ライブラリ

表 8 ログインノード及び計算ノードに提供したロードモジュール及びライブラリ(2016 年度追加分)

ソフトウェア名	バージョン	更新日(掲載日)
UMFPACK	5.7.4	2016 年 7 月 14 日
LAMMPS	7-Dec-15	2016 年 7 月 14 日
OpenMX	3.8	2016 年 9 月 12 日
OpenFOAM	2.4.0	2016 年 9 月 12 日
Quantum ESPRESSO	5.1.1	2016 年 11 月 21 日

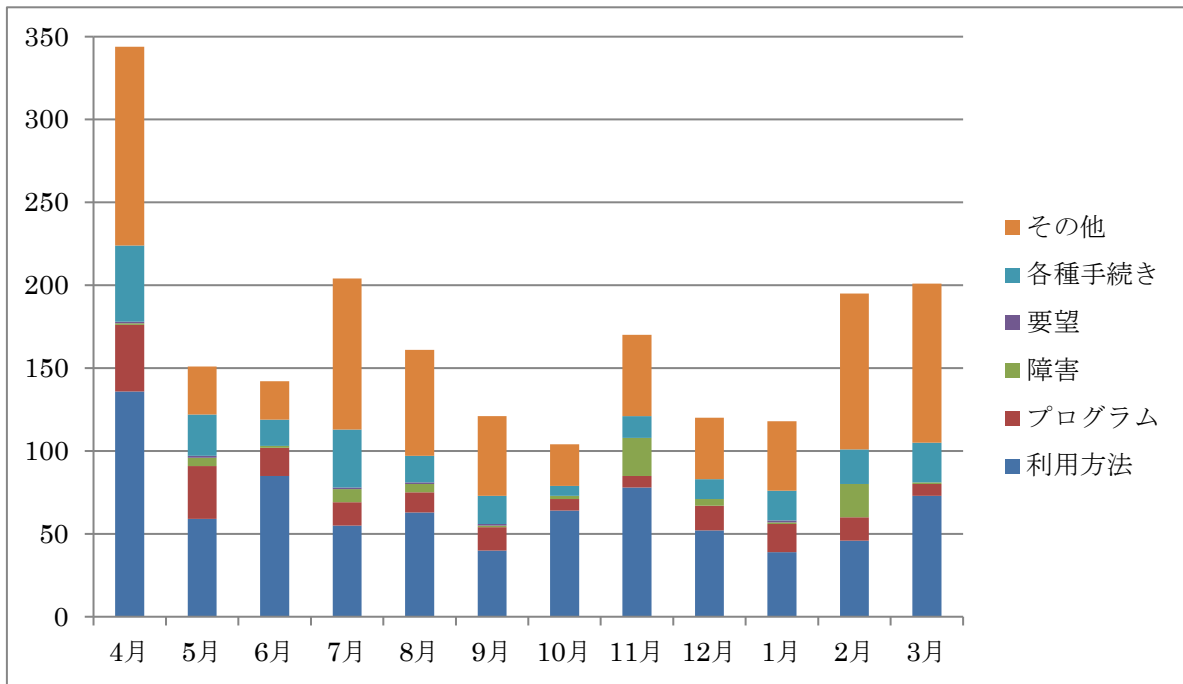


図 12 利用相談件数（期間 2016 年 4 月 1 日～2017 年 3 月 31 日）

3-3-3 高度化支援

共用開始の2012年度下期以降の総支援件数は124件となった。過去4年半に亘り、毎年、一定数の支援を行っている(表9)。対象別に見ると、年度によるばらつきはあるが相対的に産業界からの期待が大きい(図13)。また、2016年度より、戦略5分野がポスト「京」を見据えた重点課題へと変わっている。ポスト「京」開発をにらんだ「京」の運用予測と、各HPCI資源提供機関の導入計画を考慮すると、今後数年間の傾向は変わらないと思われる。

表9 高度化支援件数内訳表

年度	「京」				合計
	戦略	重点	一般	産業	
2012	7		3	2	12
2013	10		12	15	37
2014	7		3	18	28
2015	9		7	9	25
2016		5	6	11	22
小計	33	5	31	55	124

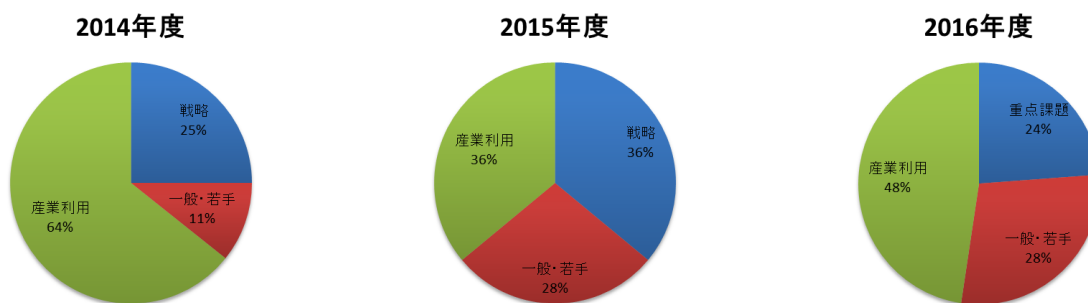


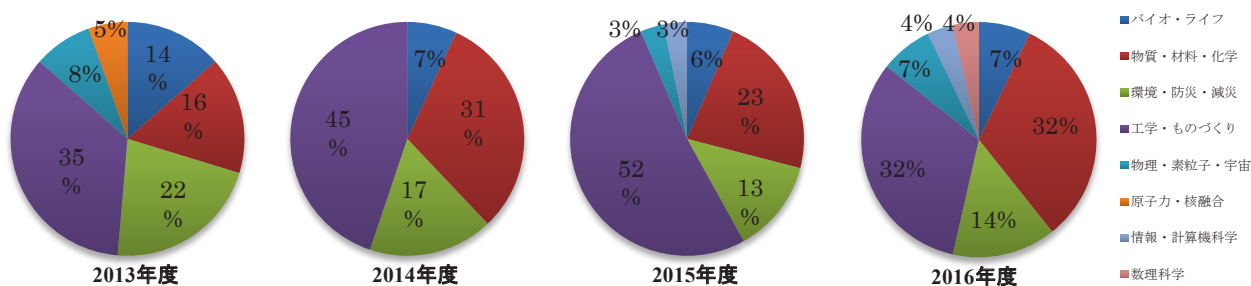
図13 過去3年間の高度化支援における対象別比率

一方、分野別に見ると工学・ものづくりが毎年30%~50%程度を占めている(図14)。次いで物質・材料・化学(20%~30%程度)、環境・防災・減災(10%~20%程度)と続いており、この傾向は例年変わっていない。また、バイオ・ライフも毎年一定数(10%程度)の支援を実施している。一方で原子力・核融合は過去3年間支援実績が無く、物理・素粒子・宇宙も過去3年

間で3件にとどまっている。また、情報・計算機科学は、2016年度1件の支援となった。数理科学は2016年度に初めて1件支援した。

なお、高度化支援の内容は下記HPCIポータルサイト内の高度化支援ホームページにおいて公開している。

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



※サンプル数が少ないため、2012年度の支援実績は除外した。

図14 過去4年間の高度化支援における分野別比率(京とHPCIを合算)

3-3-4 講習会・セミナー

表 10 の通り、2016 年度は共催を含め、延べ 44 回の講習会・セミナーを開催した(主催 15 回、共催 29 回)。主催では、「京」の利用技術の習得等を目的とした初中級者向けの定期講習会が 6 回(うち、RIST FX10 を使用したハンズオン講習会は 3 回)、利用者の希望に合わせて不定期に実施するオンサイト講習会が 2 回、利用者の裾野を広げる一般利用者向けの HPC プログラミングセミナー・ワークショップが 7 回であった。また共催では、AICS と連携して開催する公開ソフト講習会を 19 回、各機関と連携した講義・講習会・セミナーを 10 回実施した。その他、ワークショップについては 5-2 を参照のこと。

主催した講習会・セミナーでは参加者に対してアンケート調査を行っている。2016 年度の回答数は計 222 件。その中で内容の満足度を尋ねた項目では、満足とほぼ満足があわせて 82%を占めており、概ね高い評価を得ている(図 15)。この結

果から、RIST の実施する「京」を中核とする HPCI 資源利用者への支援活動が、望ましい方向で運用されていることがわかる。一方、4%とわずかではあるが、不満とやや不満の回答があった。これらについては、その内容を分析して問題点を抽出し、次年度以降の改善点として活かしたい。

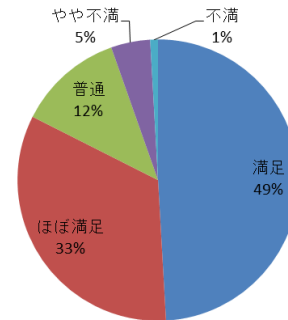


図 15 2016 年度 RIST 主催講習会の満足度調査

表 10 2016 年度に利用支援活動として開催した講習会・セミナーの一覧(主催・共催順)

	講習会・セミナー		開催日	会場	参加者
1	第 1 回「京」初中級者向け講習会 「京」初級者向け入門コース+ハンズオンと「京」見学会	主催	2016 年 4 月 21 日	AICS(神戸)	11
2	第 1 回「京」初中級者向け講習会 「京」中級者向けチューニングコース	主催	2016 年 4 月 22 日	AICS(神戸)	9
3	第 2 回「京」初中級者向け講習会 「京」初級者向け入門コース+ハンズオン	主催	2016 年 5 月 19 日	秋葉原 UDX(東京)	18
4	第 2 回「京」初中級者向け講習会 「京」中級者向けチューニングコース	主催	2016 年 5 月 20 日	秋葉原 UDX(東京)	13
5	第 3 回「京」初中級者向け講習会 「京」初級者向け入門コース+ハンズオン	主催	2017 年 3 月 27 日	秋葉原 UDX(東京)	12
6	第 3 回「京」初中級者向け講習会 「京」中級者向けチューニングコース	主催	2017 年 3 月 28 日	秋葉原 UDX(東京)	9
7	オンサイト講習会 「京」初級者向け入門コース+ハンズオン	主催	2016 年 8 月 15 日	電気通信大学(東京)	5
8	オンサイト講習会 「京」中級者向けチューニングコース	主催	2016 年 8 月 16 日	電気通信大学(東京)	5
9	第 1 回 HPC プログラミングセミナー チューニング技法入門、並列プログラミング入門 (OpenMP 編)	主催	2016 年 5 月 17 日	秋葉原 UDX(東京)	19
10	第 1 回 HPC プログラミングセミナー 並列プログラミング入門(MPI 編)	主催	2016 年 5 月 18 日	秋葉原 UDX(東京)	21
11	第 2 回 HPC プログラミングセミナー チューニング技法入門、並列プログラミング入門 (OpenMP 編)と「京」見学会	主催	2016 年 9 月 15 日	秋葉原 UDX(東京)	25
12	第 2 回 HPC プログラミングセミナー 並列プログラミング入門(MPI 編)	主催	2016 年 9 月 16 日	秋葉原 UDX(東京)	26
13	第 3 回 HPC プログラミングセミナー チューニング技法入門、並列プログラミング入門 (OpenMP 編)	主催	2017 年 3 月 23 日	秋葉原 UDX(東京)	30
14	第 3 回 HPC プログラミングセミナー 並列プログラミング入門(MPI 編)	主催	2017 年 3 月 24 日	秋葉原 UDX(東京)	25
15	平成 28 年度 高速化ワークショップ	主催	2017 年 3 月 24 日	秋葉原 UDX(東京)	30

16	第1回 AICS 公開ソフト講習会「XcalableMP」	共催	2016年4月21日	計算科学振興財団(神戸)	5
17	第2回 AICS 公開ソフト講習会「K MapReduce」	共催	2016年4月27日	計算科学振興財団(神戸)	3
18	第3回 AICS 公開ソフト講習会「OACIS」	共催	2016年5月11日	六行会総合ビル(東京)	5
19	第4回 AICS 公開ソフト講習会「FFV-C+HPC/PF」	共催	2016年6月3日	計算科学振興財団(神戸)	8
20	第5回 AICS 公開ソフト講習会「PMLib」	共催	2016年6月22日	計算科学振興財団(神戸)	5
21	第6回 AICS 公開ソフト講習会「FDPS 初級」	共催	2016年7月6日	計算科学振興財団(神戸)	14
22	第7回 AICS 公開ソフト講習会「通信ライブラリおよびファイル I/O ライブラリ」	共催	2016年7月27日	計算科学振興財団(神戸)	3
23	第8回 AICS 公開ソフト講習会「FDPS 中級」	共催	2016年8月10日	計算科学振興財団(神戸)	5
24	第9回 AICS 公開ソフト講習会「SCALE」	共催	2016年9月7日	計算科学振興財団(神戸)	21
25	CCMS ハンズオン:xTAPP 講習会	共催	2016年9月8日	東京大学物性研究所(東京)	7
26	iTHES データ同化スクール(講義)	共催	2016年9月12日	AICS(神戸)	44
27	iTHES データ同化スクール(実習)	共催	2016年9月13日	AICS(神戸)	34
28	第10回 AICS 公開ソフト講習会「HIVE」	共催	2016年10月5日	計算科学振興財団(神戸)	6
29	第1回目「京」で使える OSS! LAMMPS 講習会初級編	共催	2016年10月19日	計算科学振興財団(神戸)	11
30	第11回 AICS 公開ソフト講習会「2D-DMRG」	共催	2016年10月26日	計算科学振興財団(神戸)	4
31	LAMMPS の基礎的利用セミナー	共催	2016年10月26日	計算科学振興財団(神戸)	22
32	LAMMPS の基礎的利用セミナー	共催	2016年12月6日	計算科学振興財団(神戸)	9
33	LAMMPS での仮想実験セミナー	共催	2016年12月7日	計算科学振興財団(神戸)	18
34	第15回 AICS 公開ソフト講習会「XcalableMP」	共催	2016年12月8日	計算科学振興財団(神戸)	2
35	第16回 AICS 公開ソフト講習会「GENESIS」	共催	2017年1月13日	計算科学振興財団(神戸)	4
36	第17回 AICS 公開ソフト講習会「HIVE」	共催	2017年2月8日	計算科学振興財団(神戸)	1
37	電気化学界面シミュレーションコンソーシアム 第1回チュートリアル	共催	2017年2月21日	秋葉原 UDX(東京)	10
38	電気化学界面シミュレーションコンソーシアム 第1回チュートリアル	共催	2017年2月22日	秋葉原 UDX(東京)	7
39	電気化学界面シミュレーションコンソーシアム 第1回チュートリアル	共催	2017年2月28日	秋葉原 UDX(東京)	10
40	第18回 AICS 公開ソフト講習会「通信ライブラリおよびファイル I/O ライブラリ」	共催	2017年2月22日	計算科学振興財団(神戸)	5
41	第19回 AICS 公開ソフト講習会「FDPS」初級 - Fortran 対応版	共催	2017年3月8日	計算科学振興財団(神戸)	14
42	第20回 AICS 公開ソフト講習会「NTChem」	共催	2017年3月10日	計算科学振興財団(神戸)	4
43	第21回 AICS 公開ソフト講習会「SCALE」	共催	2017年3月15日	計算科学振興財団(神戸)	4
44	第22回 AICS 公開ソフト講習会「KMATHLIB」	共催	2017年3月28日	計算科学振興財団(神戸)	4

3-3-5 利用支援環境の整備・運用

「京」利用者の支援の一環として、利用支援用スーパーコンピュータ FX10(以下、利用支援用スパコンという。)の運用を、2013年11月より開始し、2016年度も継続して運用した。利用支援用スパコンは、講習会での実習利用や高度化支援に活用され、産業利用支援や HPCI の裾野拡大に向けた取り組みの加速の推進に寄与している。その他、申請支援システム等のユーザ管理支援システムの運用を継続した。

1. 利用支援用スパコンの運用

(1) 利用支援用スパコンの整備

利用支援用スパコンは利用支援の他、応募前相談における動作確認に活用されている。また、「京」でソフトウェアが動作することを確認して応募したいとの企業の要請に対応すると共

に、「京」上で利用可能な産業応用ソフトウェアを拡大することを目的としてソフトウェアベンダーとの共同研究を行い、利用支援用スパコンをソフトウェア移植環境として活用した。利用支援用スパコンの2016年度の運用状況と概要を図16と図17にそれぞれ示す。

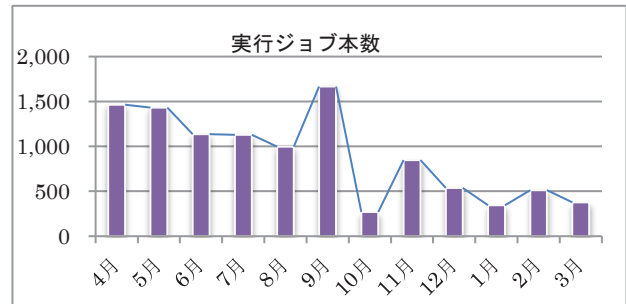


図 16 利用支援用スパコンの運用状況(2016年度)

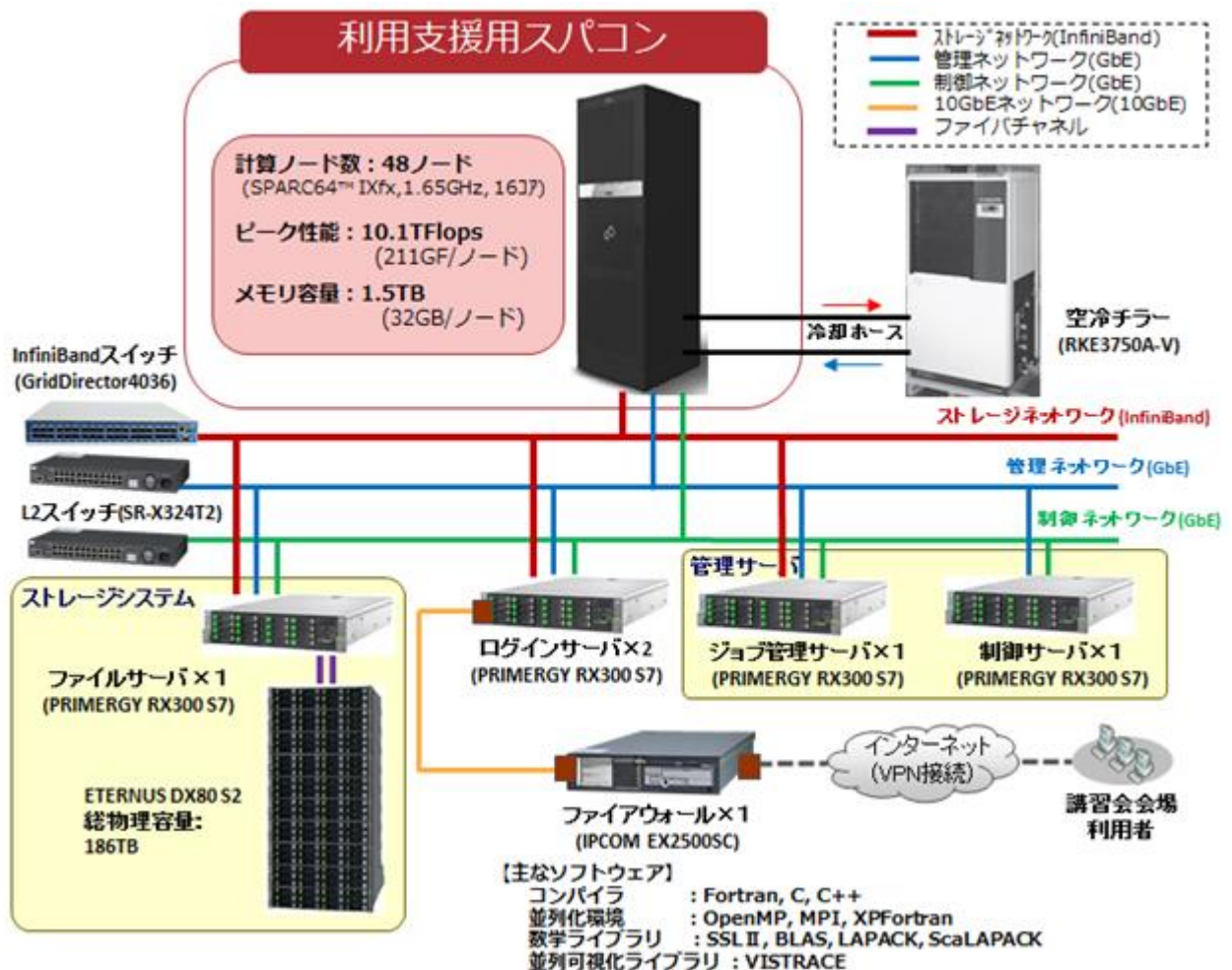


図 17 利用支援用スーパーコンピュータシステムの概要

(2) 利用支援用スパコンの利用

1) 「京」初級者向け講習会での利用

2016年度は「京」初級者を対象にした講習会を計4回開催した。内訳は定期開催が3回(東京・神戸)、オンサイト開催が1回(東京)。定期開催の講習会ではハンズオンと題する計算機演習もあわせて実施した。受講者は計30名(3-3-4表10参照)。各講習会の開催実績と受講者数を表10(上記3-3-4)に、神戸での講習会の様子を図18に示す。



図18 利用支援用スパコンを用いたハンズオン講習会の様子
(2016年4月21日、神戸、定期開催)

「京」を講習会等で使用することはジョブ待ちの時間の調整が必要なこと、同時に大量のユーザが使用することによるログインノードへの負荷の懸念があるため、利用支援用スパコンを活用することにより、受講者全員に「京」と同等の計算機アーキテクチャ上での環境を提供するとともにスムーズな演習課題の実習を可能にした。経験の浅い新規課題参加者に実機を通じて「京」の操作手順を体験する機会を提供することで、より実践的な講習会を実施できた。

2) 「京」の産業利用促進を目的とした共同研究での利用

「京」の産業利用促進を目的として「京」で動作するアプリケーションの整備拡充のため、量子化学計算、流体解析、気液二相流解析、構造解析、音響解析のプログラムの移植及び高度化チューニングを目的とした共同研究を大学及びアプリケーションベンダーと実施した(表11)。

表11 共同研究での利用

共同研究先	分野	プログラム
大学	量子化学	ABINIT-MP
ベンダー	量子化学	Advance/PHASE
ベンダー	流体解析	Advance/Frontflow/red
ベンダー	気液二相流解析	Advance/FrontFlow/MP
ベンダー	構造解析	Advance/FrontSTR
ベンダー	音響解析	Advance/FrontNoise

3) 利用支援での利用

応募前相談支援や大規模実行期間など「京」が利用できない期間の高度化支援として利用支援用スパコンを活用した(表12)。

表12 利用支援での利用

利用枠	分野	プログラム
産業利用課題 (実証利用)	流体解析	OpenFOAM HELYX
	地震動解析	インハウスコード(2本)
産業利用課題 (トライアル・ユース)	流体解析	Advance/FrontFlow/MP カスタマイズ版
	流体解析	インハウスコード
産業利用課題 (個別利用)	創薬	非公開
HPCI 戦略プログラム	物質材料解析	CPMD PHASE/0
一般課題	流体解析	インハウスコード
	可視化	Python および VTK

4) 産業利用の裾野拡大に向けた活動での利用

産業利用の裾野拡大に向けた活動の一環として、「京」上での産業利用分野について問い合わせの多かったオープンソフトウェアのビルド手順、及び動作確認に関わるドキュメントの整備・拡充のため、利用支援用スパコンを活用した。これらのドキュメントは「京」の課題実施者を対象とした情報共有コンテンツ管理システム(CMS)に登録し、利用者の便宜を図った。

導入手順の作成に当たっては、小規模なジョブを多数投入しながら進める必要があるため、利用支援用スパコンを利用することで、短期間で効率的に作業を完了することができた。導入手順が整備されているソフトウェアは 3-3-2 を参照されたい。

2. ユーザ管理支援システムの運用

「京」を使用するためのユーザ管理支援システムの維持管理及び運用を行っている。

(1) 申請支援システム

2017年度課題募集(「京」を含むHPCIシステム)に向けた機能強化版(英語対応、操作性改善等)にて、課題申請の受付を実施した。申請支援システムは利用者が課題申請をする他、HPCI 運用事務局やシステム構成機関等が使用する機能から構成され、月平均約 2,000 回を超えるアクセスがある(図 19 参照)。

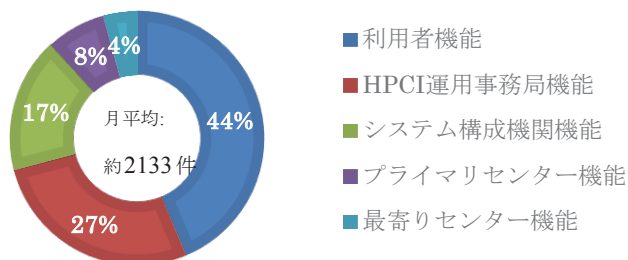


図 19 申請支援システムの利用状況(2016 年度)

(2) 情報共有 CMS

課題参加者間の情報共有や課題利用者と HPCI 運用事務局/システム構成機関との情報共有を支援するためのサービスを運用している。情報共有 CMS では情報共有スペースと呼ばれる単位に区別して管理している。2016 年度のアクセス状況と情報共有 CMS の仕組みを図 20 と図 21 にそれぞれ示す。

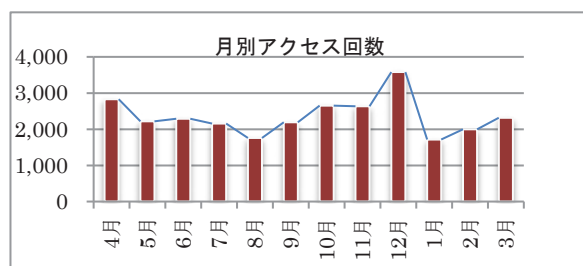


図 20 情報共有 CMS のアクセス状況(2016 年度)



図 21 情報共有 CMS の仕組み

(3) ヘルプデスクシステム

ヘルプデスク受付に関わる実績管理のシステムであり、利用者からの問合せをメール及び Web 受け付けをしている。Web 受付では、問合せの受付に加え、対応状況を随時 Web で確認することができ、利用者の利便性向上に繋がっている。

(4) ピア・レビューシステム

応募課題のピア・レビューを支援するためのシステムを運用しており、レビュアーからの操作性を中心とした改善要望に応えながら機能追加を行っている。2017 年度課題のレビュー時に活用され、レビュー作業の効率化に繋がっている。

3-4 産業利用促進

3-4-1 産業利用支援体制強化

「京」の利用においては、産業界が積極的に「京」を活用し、所期の成果を挙げて各社の研究開発が加速され、ひいては我が国の国際競争力が強化されることが強く期待されている。「京」の産業利用を効率的に推進するために2013年4月に設置した産業利用推進室において、産業利用推進コーディネーター及び産業応用アプリケーションの主要分野や可視化対応に精通した支援員を配した体制を整備するとともに、「京」の利用相談や支援を対面で受けたいとの関東の企業ニーズに対応するため、産業利用推進室の東京駐在を設置し、高度化支援や企業への普及促進活動を含む体制を整備した。2016年度は、この体制のもとで産業利用推進活動を実施した。

3-4-2 産業利用相談・支援実績

2016年度に産業利用相談・支援として実施した活動を下記5項目に分けて記載する。

1. 応募前利用相談

課題申請前の時点から自社の課題にどのようにHPC技術を適用すれば解決できるかを相談できる、産業利用に関するコンシェルジュ的な相談業務を行っている。応募を検討している企業の多くが、「京」を使いこなせるのか、セキュリティは大丈夫か、などの不安を抱えており、相談の中で、それらが解消され、具体的な応募に至るよう努めた。神戸と東京駐在(利用相談・支援の拠点であるアクセスポイント東京を運用中)において、応募手続きの支援や課題申請書への助言等を含めた応募前相談として延べ58件に対応した。

2. 高度化支援

高度化支援の依頼のあった課題のうち、産業利用課題11課題(9社)に対してプログラムの高度化支援を実施した。その内訳を表13に示す。高度化支援の対象となったプログラムは、オープンソースについてはOpenFOAM(流体解析)、LAMMPS(古典分子動力学計算)に加え、QUANTUM ESPRESSO(PWscf, Car-Parrinello 平面波基底と擬ポテンシャルを用いた密度汎関数法)及びPHASE(第一原理擬ポテンシャル平面波法)、企業や大学で独自に開発された構造解析プログラムや電磁界解析プログラム、ソース変更が可能な商用の分子動力学プログラムなどである。

高度化支援の具体的な例は、HPCIポータルの利用者のページに掲載している。

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

表13 産業利用課題の高度化支援内訳

産業利用課題の種類	高度化支援課題数
「京」トライアル・ユース	2 課題(2 社)
「京」実証利用	6 課題(5 社)
「京」個別利用	3 課題(2 社)
計	11 課題(9 社*)

*2 社重複するため

3. プリポスト処理支援

「京」の大規模計算においては、入力データの準備や計算結果の可視化は非常に重要であり、適切な支援が求められる。特に大規模計算による膨大なデータの可視化に顕著なニーズがあり、2016年度は3社に対して可視化支援を実施した。支援した可視化ソフトは、ParaViewとPyGrADSであり、一般的なインタラクティブ処理の可視化に加え、バッチ処理による可視化についても支援した。大容量かつ大量の大規模データの可視化は非常に手間がかかるが、バッチ処理により半自動で可視化画像を作成できるようになり、ユーザの作業負担を大幅に低減することができた。また、大規模データの高速度ダウンロードニーズの高まりに対応するため、産業利用拠点(アクセスポイント東京)に高速データ転送用大容量ストレージを導入しダウンロード環境を強化するとともに、VPN装置によるリモートアクセス環境を整備し、利用者の利便性を向上させた。なお、アクセスポイント東京の個室利用については、効率的な利用を促進するため、2016年10月1日以降の利用を有償化した。

4. アプリケーション情報整備・利用環境整備

企業の利用相談で上位を占めるのは、ソフトウェアに関する内容であり、ソフトウェアの動作実績や入手方法、実行スクリプトの事例などである。企業においては、評価が高く、自社の業務で使い慣れている有償ソフトウェアを利用したいという要望が多い。このような要望を受けて、利用支援のノウハウ取得のため、2016年度は、「京」上で動作可能な有償ソフトウェアとして、バイオ分子相互作用シミュレータMIZUHO BioStaionを購入した。

一般的に、産業利用では上記のように有償ソフトウェアが使われることが多いが、「京」においては、オープンソースソフトウェア(OSS)や大規模シミュレーションの実績のある国家プロジェクトで開発・整備されてきたソフトウェアを利用する課題も多い。

2016年度は、有償ソフトウェア、オープンソースソフトウェアともに、

産業利用課題で支援要請のあった下記のソフトウェアの実行支援、動作確認、手順書の整備等を行った。高度化支援についても、利用者の要望に沿って実施した。

(1) 有償ソフトウェア

MIZUHO BioStation	バイオ分子相互作用シミュレータ
JMAG	電磁界解析
VASP	第一原理計算
HELYX	流体解析

(2) オープンソースソフトウェア

OpenFOAM	流体解析
LAMMPS	古典分子動力学計算
QUANTUM ESPRESSO	第一原理計算
PHASE	第一原理計算

アプリケーションソフトウェアがすぐに使える状態にしてほしいとの利用者の要望に応えるため、利用環境の整備を戦略的に推進することとし、その準備の一環として、欧州において海外調査を実施した。公的研究機関等、9か所の組織を訪問し、CAE (computer aided engineering) や材料系シミュレーション等の分野において世界標準となっているオープンソースソフトウェアを中心に、今後の開発計画・動向、開発体制や普及戦略について情報収集を行った。(詳細については参考文献^[1]を参照)。

5. 情報提供・情報発信

2016年度は産業利用の企業への普及・利用促進活動として、以下の活動を実施した。

(1) シンポジウム、報告会、ワークショップの主催 7 回

- 1) 第 3 回大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム
- 2) 京×産業シンポジウム
- 3) 第 3 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会
- 4) 第 4 回 OpenFOAM ワークショップ
- 5) 平成 28 年度「京」における高速化ワークショップ
- 6) 第 2 回材料系ワークショップ
- 7) 第 3 回材料系ワークショップ

(2) 展示会等への出展及びポスター展示 7 回

- 1) ISC'16
- 2) SC16
- 3) 第 13 回 SPring-8 産業利用報告会
- 4) 日本機械学会 第 29 回計算力学講演会 (CMD2016)
- 5) 第 30 回数値流体力学シンポジウム
- 6) 第 9 回 スーパーコンピューティング技術産業応用シンポジウム
- 7) 第 9 回 トップセミナー

(3) 利用相談会 5 回

- 1) 第 3 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会
- 2) 平成 28 年度「京」における高速化ワークショップ
- 3) 第 2 回材料系ワークショップ
- 4) 第 3 回材料系ワークショップ
- 5) 第 4 回 OpenFOAM ワークショップ

(4) 後援 2 回

- 1) 第 1 回ポスト「京」重点課題 6 シンポジウム
- 2) 第 2 回ポスト「京」重点課題 8 シンポジウム

(1)、(3)については 3-3-4 の表 10、及び 5-1,5-2 を参照。

(2)については、6-4 の表 4 を参照。

^[1]奥田基、宮内敦、太田幸宏、役誠雄 「EU の HPC アプリケーション・ソフトウェア戦略に関する調査報告 - 「京」を中核とする HPCI におけるアプリケーション・ソフトウェア利用環境整備に向けて -」 RIST NEWS, No.63 (2017年9月) 12-24; <http://www.rist.or.jp/mews/63/63s3.pdf>

3-5 利用状況

3-5-1 「京」全体

1. 2016 年度に実施された課題の利用実績

2016 年度に実施された一般利用枠、ポスト「京」研究開発枠重点課題及び萌芽的課題の利用実績は、それぞれ表 14、表 15 及び表 16 に示す通りである。

なお、利用率改善策として選定委員会により審議、承認された割当資源量を使い切った課題を対象に、ジョブの実行優先度

を下げ、超過利用を認める制度*は、2015 年度に引き続き 2016 年度も適用された。表 14 表 15 及び表 16 に示す利用実績は、この超過利用分の実績を含んでいる。

*AICS 及び RIST から利用率改善策として提案し、第 9 回選定委員会 (2016 年 2 月 4 日開催) において承認された。

表 14 2016 年度一般利用枠 利用実績

	課題数	割当資源量 (NH) ※成果創出・加速枠含む			利用実績 (NH)			通期利用率	
		上期	下期	通期	上期	下期	通期		
一般課題	一般課題	31	74,791,442	81,065,751	155,857,193	67,163,244	65,251,862	132,415,106	85.0%
	競争的資金等獲得課題(随時)	5	674,718	51,200	725,918	124	672,711	672,835	92.7%
	トライアル・ユース(随時)	3	150,000	0	150,000	107,963	388	108,351	72.2%
	小計	39	75,616,160	81,116,951	156,733,111	67,271,331	65,924,961	133,196,292	85.0%
若手人材育成課題	13	14,207,114	16,164,325	30,371,439	15,196,174	10,015,919	25,212,093	83.0%	
産業利用課題	実証利用	28	44,194,240	47,920,076	92,114,316	38,285,537	42,776,749	81,062,286	88.0%
	個別利用(随時)	22	3,713,254	11,515,935	15,229,189	754,549	5,796,196	6,550,745	43.0%
	トライアル・ユース(随時)	17	466,399	350,000	816,399	181,537	305,287	486,824	59.6%
	ASP事業実証利用	0	-	-	-	-	-	-	-
	小計	67	48,373,893	59,786,011	108,159,904	39,221,623	48,878,232	88,099,855	81.5%
一般利用枠 合計	119	138,197,167	157,067,287	295,264,454	121,689,128	124,819,112	246,508,240	83.5%	

表 15 2016 年度ポスト「京」研究開発枠重点課題 利用実績

	課題数	割当資源量 (NH)			利用実績 (NH)			通期利用率
		上期	下期	通期	上期	下期	通期	
重点課題1	3	8,942,000	8,942,000	17,884,000	9,419,802	8,524,731	17,944,533	100.3%
重点課題2	3	7,300,000	5,568,699	12,868,699	9,027,381	4,372,693	13,400,074	104.1%
重点課題3	2	8,757,252	7,459,881	16,217,133	5,058,631	6,776,191	11,834,822	73.0%
重点課題4	3	19,872,011	21,465,015	41,337,026	19,595,278	22,288,619	41,883,897	101.3%
重点課題5	3	8,709,508	10,635,812	19,345,320	8,919,833	11,074,418	19,994,251	103.4%
重点課題6	4	10,000,000	9,931,709	19,931,709	6,133,208	9,949,327	16,082,535	80.7%
重点課題7	7	13,169,712	13,169,712	26,339,424	11,722,973	12,423,197	24,146,170	91.7%
重点課題8	6	9,000,000	9,000,000	18,000,000	8,178,573	8,915,962	17,094,535	95.0%
重点課題9	3	23,375,523	23,375,523	46,751,046	20,940,231	22,446,177	43,386,408	92.8%
ポスト「京」重点課題 合計	34	109,126,006	109,548,351	218,674,357	98,995,910	106,771,315	205,767,225	94.1%

表 16 2016 年度ポスト「京」研究開発枠萌芽的課題 利用実績

	課題数	割当資源量 (NH)			利用実績 (NH)			通期利用率
		上期	下期	通期	上期	下期	通期	
萌芽的課題1-1	4	4,050,000	4,800,000	8,850,000	4,064,494	4,582,624	8,647,118	97.7%
萌芽的課題1-2	1	1,700,000	1,250,000	2,950,000	684,994	1,242,751	1,927,745	65.3%
萌芽的課題1-3	3	500,000	1,035,000	1,535,000	42	896,030	896,072	58.4%
萌芽的課題2-1	5	1,525,000	1,525,000	3,050,000	205,160	1,283,354	1,488,514	48.8%
萌芽的課題2-2	1	100,000	325,000	425,000	0	325,471	325,471	76.6%
萌芽的課題3-1	4	3,460,859	1,513,576	4,974,435	2,005,118	1,196,611	3,201,729	64.4%
萌芽的課題4-1	3	500,000	1,250,000	1,750,000	529,854	637,378	1,167,232	66.7%
萌芽的課題4-2	1	300,000	450,000	750,000	186,613	448,669	635,282	84.7%
ポスト「京」萌芽的課題 合計	22	12,135,859	12,148,576	24,284,435	7,676,275	10,612,888	18,289,163	75.3%

2. 課題参加者数

2017 年 3 月末時点の一般利用枠(一般課題、若手人材育成課題、産業利用課題)、ポスト「京」研究開発枠重点課題及び萌芽的課題における課題参加者数は、産業界 505 名、大学・研究機関

818 名、国立研究開発法人 324 名の合計 1,647 名であった(表 17)。

表 17 2016 年度課題参加者数

利用枠	利用者数 内訳			利用者数
	産業界	大学・研究機関	国立研究開発法人	
一般課題	25	138	96	259
若手人材育成課題	0	6	7	13
産業利用課題	399	103	33	535
ポスト「京」重点課題	76	406	148	630
ポスト「京」萌芽的課題	5	165	40	210
重点化促進枠	-	-	-	-
合計	505	818	324	1,647

3-5-2 一般利用枠（一般課題）

1. システム利用実績

2016年度の一般課題における月別のシステム利用実績の推移を図22及び図23に示す。2016年度は上期前半の利用がこれまでになく堅調に進む一方、上期後半に鈍化する傾向が見られた。下期においては、11-12月期の利用は高い水準となったが、下期後半には利用が伸び悩む結果となった。通年での利用実績は85.0%で、2015年度の86.3%とほぼ同水準であった。

競争的資金等獲得課題の月別のシステム利用実績の推移を図24及び図25に示す。競争的資金等獲得課題は年間を通じて5件の課題が実施され、通年の利用実績は92.7%であった。

また、一般課題(トライアル・ユース)は年間を通じて3件の課題が実施され、通年の利用実績は72.2%であった。

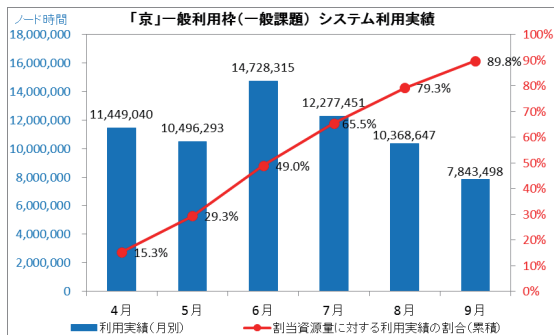


図22 システム利用実績(資源量)の月別推移(2016年度上期)

[一般利用枠(一般課題)]

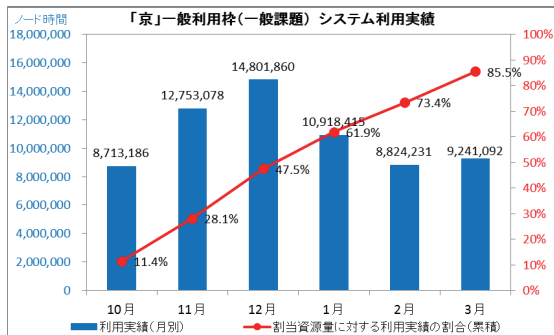


図23 システム利用実績(資源量)の月別推移(2016年度下期)

[一般利用枠(一般課題)]

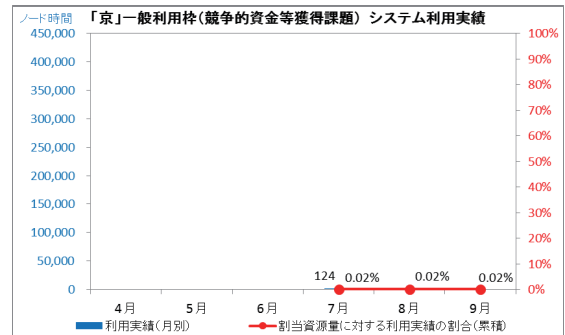


図24 システム利用実績(資源量)の月別推移(2016年度上期)

[一般利用枠(競争的資金等獲得課題)]

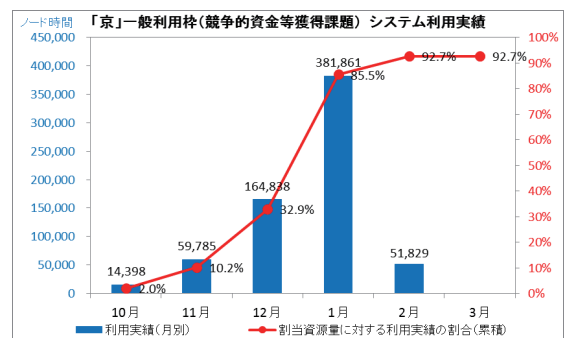


図25 システム利用実績(資源量)の月別推移(2016年度下期)

[一般利用枠(競争的資金等獲得課題)]

2. 分野別利用実績

一般課題(随時募集を含む)のシステム利用実績(資源量)の分野別比率を図26に示す。

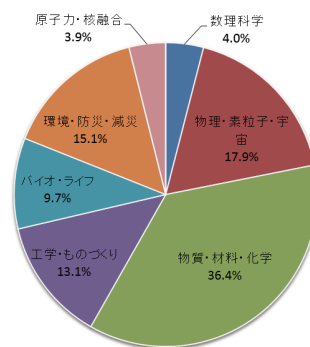


図26 システム利用実績(資源量)の分野別比率(2016年度)

[一般利用枠(一般課題)、随時募集を含む]

3-5-3 一般利用枠(若手人材育成課題)

1. システム利用実績

2016年度の若手人材育成課題における月別のシステム利用実績の推移を図27及び図28に示す。上期、下期とも前半の利用は低調であり、上期の後半は下期資源の前倒し利用を含め利用が大幅に進んだが、下期は期間を通じて低調な利用となった。通年での利用実績は83.0%で、2015年度の89.4%に比べ若干低下した。

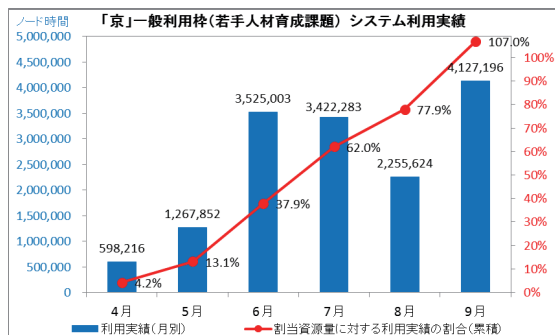


図27 システム利用実績(資源量)の月別推移(2016年度上期)

[一般利用枠(若手人材育成課題)]

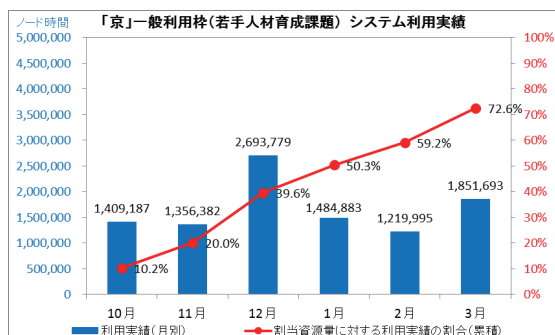


図28 システム利用実績(資源量)の月別推移(2016年度下期)

[一般利用枠(若手人材育成課題)]

2. 分野別利用実績

若手人材育成課題のシステム利用実績(資源量)の分野別比率を図29に示す。

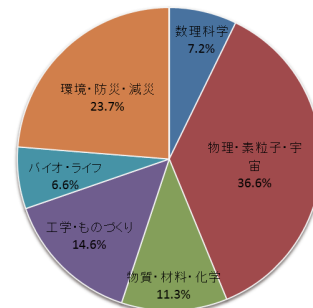


図29 システム利用実績(資源量)の分野別比率(2016年度)

[一般利用枠(若手人材育成課題)]

3-5-4 一般利用枠(産業利用課題)

1. システム利用実績

2016年度の産業利用課題(実証利用)における月別のシステム利用実績の推移を図30及び図31に示す。2016年度上期前半の利用はやや低調な立ち上がりであったが、期間を通して見ると順調な利用となった。下期においても前半から順調な利用が続き、高い利用実績を達成した。通年の利用実績は88.0%で、2014年度の87.1%を超え過去最高となった。

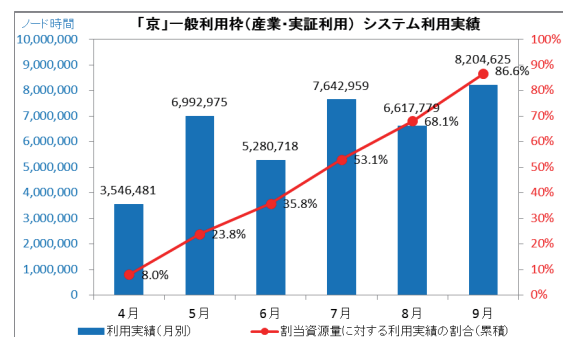


図30 システム利用実績(資源量)の月別推移(2016年度上期)

[一般利用枠(産業利用課題(実証利用))]

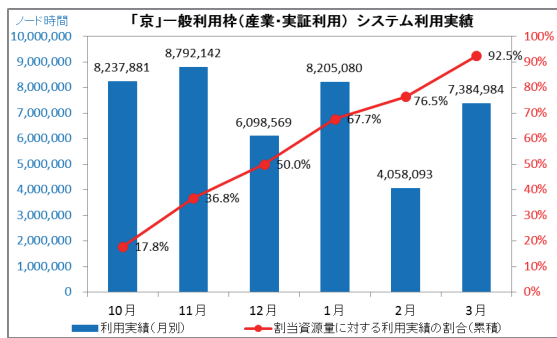


図 31 システム利用実績(資源量)の月別推移(2016 年度下期)
[一般利用枠(産業利用課題(実証利用))]

産業利用課題(個別利用)の月別のシステム利用実績の推移を図 32 及び図 33 に示す。産業利用課題(個別利用)は年間を通じて 22 件の課題が実施され、通年の利用実績は 43.0%であり、ほぼ 2015 年度の 47.0%と同水準であった。これまでと同じく、有償利用であることから慎重な利用が続いている。

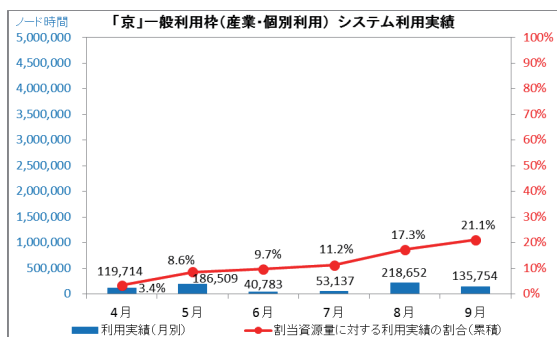


図 32 システム利用実績(資源量)の月別推移(2016 年度上期)
[一般利用枠(産業利用課題(個別利用))]

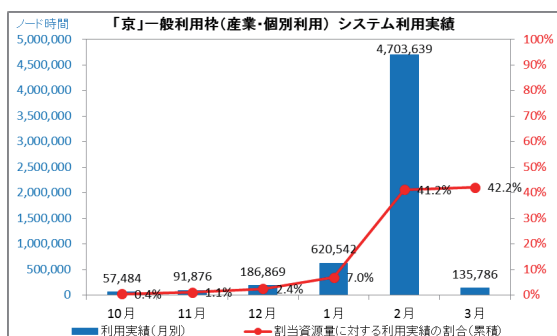


図 33 システム利用実績(資源量)の月別推移(2016 年度下期)
[一般利用枠(産業利用課題(個別利用))]

また、産業利用課題(トライアル・ユース)は年間を通じて 17 件の

課題が実施され、通年の利用実績は 59.6%であった。

産業利用課題(ASP 事業実証利用)については、2015 年度に引き続き 2016 年度も応募はなかった。

2. 分野別利用実績

産業利用課題(随時募集を含む)のシステム利用実績(資源量)の分野別比率を図 34 に示す。

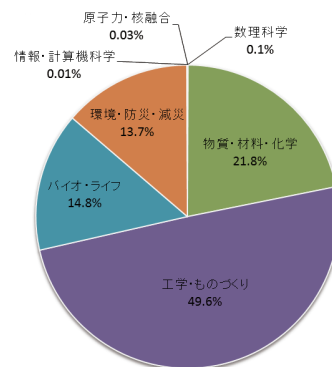


図 34 システム利用実績(資源量)の分野別比率(2016 年度)
[一般利用枠(産業利用課題)、随時募集を含む]

3-5-5 ポスト「京」研究開発枠 重点課題

1. システム利用実績

2016 年度のポスト「京」研究開発枠重点課題における月別のシステム利用実績の推移を図 35 及び図 36 に示す。ポスト「京」研究開発枠重点課題は 2015 年度下期から利用が開始され、2016 年度の利用は上期から、年間を通じて高い水準で推移した。通年の利用実績は 94.1%で、2015 年度の 93.4%をわずかではあるが上回った。なお、資源の有効利用を図るため、重点課題内の資源再配分を上期 2 回、下期 1 回実施している。

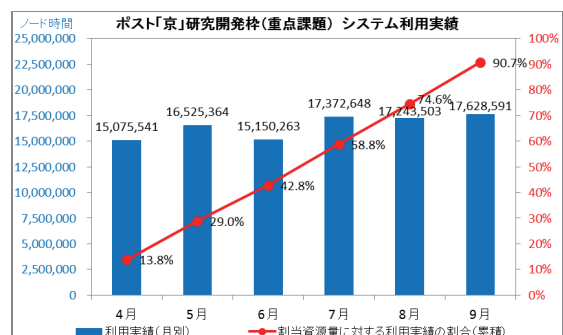


図 35 システム利用実績(資源量)の月別推移(2016 年度上期)
[ポスト「京」研究開発枠(重点課題)]

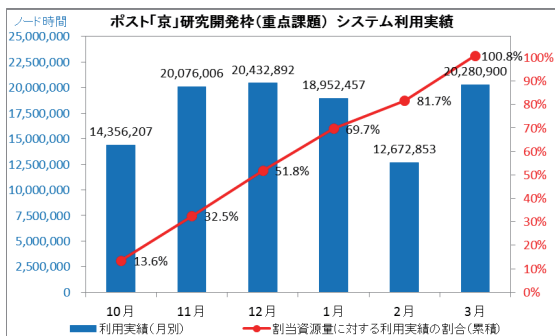


図36 システム利用実績(資源量)の月別推移(2016年度下期)

[ポスト「京」研究開発枠(重点課題)]

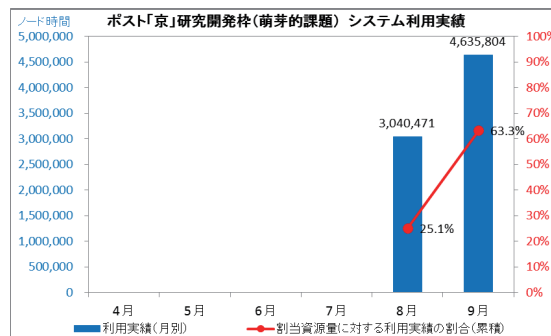


図38 システム利用実績(資源量)の月別推移(2016年度上期)

[ポスト「京」研究開発枠(萌芽的課題)]

2. 分野別利用実績

ポスト「京」研究開発枠重点課題のシステム利用実績(資源量)の分野別比率を図37に示す。

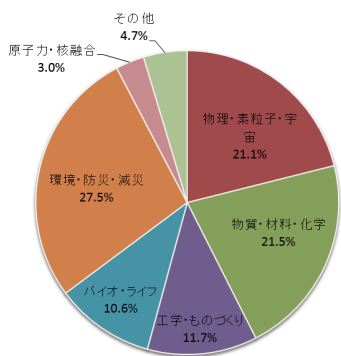


図37 システム利用実績(資源量)の分野別比率(2016年度)

[ポスト「京」研究開発枠(重点課題)]

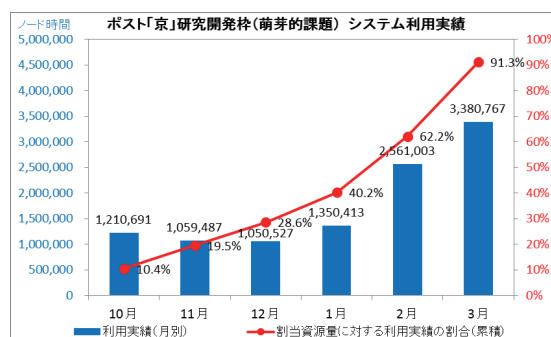


図39 システム利用実績(資源量)の月別推移(2016年度下期)

[ポスト「京」研究開発枠(萌芽的課題)]

2. 分野別利用実績

ポスト「京」研究開発枠萌芽的課題のシステム利用実績(資源量)の分野別比率を図40に示す。

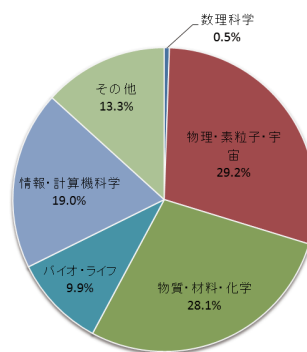


図40 システム利用実績(資源量)の分野別比率(2016年度)

[ポスト「京」研究開発枠(萌芽的課題)]

3-5-6 ポスト「京」研究開発枠 萌芽的課題

1. システム利用実績

2016年度のポスト「京」研究開発枠萌芽的課題における月別のシステム利用実績の推移を図38及び図39に示す。ポスト「京」研究開発枠萌芽的課題は2016年8月から利用が開始された。開始直後の上期後半には一部の課題でのみ利用が進んだが、下期に入っても前半は全体を通して低調な利用状況となった。下期後半には利用が回復したが、通年の利用実績は75.3%に留まった。なお、萌芽的課題内においても資源の有効利用を図るため、資源再配分を上期1回、下期2回実施した。

3-6 利用研究成果の報告・公開

3-6-1 はじめに

「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」[1]（以下、「共用の促進に関する基本的な方針」）では、利用研究成果は、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活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。

この方針に従い、「京」を中核とする HPCI では、利用者に以下の要請・依頼を行っている。

- ・利用報告書の提出（課題実施終了後 60 日以内）
- ・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（随時）

2016 年度は、2015 年度に終了した第 3 期の「京」一般利用枠課題を含む全 161 課題の利用報告書 [「京」一般利用 78 件（産業利用トライアル・ユース課題 6 件、「京」一般利用トライアル・ユース課題 2 件を含む）、重点的利用枠 60 件、京調整高度化枠課題 23 件] を公開した。また、2015 年度末までに終了した「京」の成果公開対象課題（全 353 課題）のうち、78 課題（通算 222 課題）の成果公開の認定が行われた。さらに、2015 年 9 月から公開を開始した「HPCI 利用研究成果集」（登録機関発行の電子ジャーナル）は 2016 年 12 月の Vol.1 No.2（全 8 編の論文を収録）の発行まで進んだ。

なお、2015 年度に準備を進めた HPCI 成果発表データベースと直結した WEB ベースの成果公開管理システム（PUMAS: Publication Management System）の運用が 2016 年 4 月から開始され、上記の成果公開認定業務に役立った。

利用報告書のダウンロード（DL）総数は 2014 年 7 月の統計データ取得開始以降、2016 年度末で通算約 37,000 件に達し（年間 DL 数では 2015 年度の約 12,200 件から 2016 年度は約 16,400 件に増加）、成果の公表・普及が更に進展した。ダウンロードを行った企業の業種数は 2015 年度の 27 業種（東証 1 部 33 業種の 82%）から 2016 年度は 28 業種（同 85%）に増加した。HPCI 成果発表データベースに登録された 2016 年度末までの「京」に関する成果発表件数は、「京」一般利用枠では通算 1,347 件（うち査読付き論文数は 264）、戦略プログラムでは通算 3,208 件（うち査読付き論文数は 387）、ポスト「京」研究開発枠重点課題では通算 575 件（うち査読

付き論文数は 86）、京調整高度化枠では通算 346 件（うち査読付き論文数は 44）に達した。

以下の各項で、それぞれの詳細を記す。

3-6-2 利用報告書の公開

2015 年度終了の HPCI 利用研究課題、全 201 課題（「京」以外の HPCI 利用研究課題を含む）の利用報告書の HPCI ポータルサイトでの公開を 2016 年 7 月 7 日から順次開始した。2017 年 3 月 31 日時点での公開件数は、「京」一般利用枠 72 件（競争的資金等獲得課題 5 件を含む）、HPCI 戦略プログラム利用研究課題 28 件、ポスト「京」研究開発枠重点課題 31 件、重点化促進枠 1 件で、合計 132 件であった。

また、前年度末より、利用者等の更なる利便性向上を目的として「利用報告書検索サイト」の運用を開始しており、現在公開されている全課題の利用報告書を Web ブラウザ上にて検索可能である。本サイトはカテゴリ検索（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し、利用報告書の高機能検索が可能である。

2016 年度は、大型実験施設との連携利用の成果の可視化のため、7 月 15 日から利用報告書のページに「大型実験施設との連携利用」という項目を設け、これまでに連携利用を行った課題の利用報告書をまとめて表示している。課題毎に連携した実験施設とその関連課題番号を示し、それらの実験報告書にリンクできるようにしている。図 41 に SPring-8 との連携利用の場合の表示例を示す。



図 41 利用報告書「大型実験施設との連携利用」ページ表示例

3-6-3 成果公開マネジメント

「情報管理に関する基本的考え方」において、成果公開が義務付けられている課題は課題実施終了後3年以内に、以下の4つのいずれかの方法により研究成果を公開することが義務付けられている。

- 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)

成果公開が義務付けられている課題の代表者に対して課題実施終了後60日以内にa)～d)のどの方法で成果を公開するかを予定(または実績)の申告を依頼している。従来、このプロセスはメールベースで行っていたが、2016年4月からはWEBを介したオンラインワークフロー管理システムである成果公開マネージメントシステム(PUMAS)を用いて行った。

「成果の認定・審査に関する基本的考え方」において、上記の成果の認定・審査は RIST 理事長の下に設置されている利用研究課題審査委員会(以下「課題審査委員会」という。)のもとで行うことが定められている。上記 a)、c)、d) については公開された成果の認定が課題審査委員会によって行われる。2016年度に開催された第10回及び第11回課題審査委員会で、2012年度から2015年度に終了した「京」の一般利用枠、HPCI 戦略プログラム利用枠、及びポスト「京」研究開発枠 重点課題(全353課題)のうち78課題に対して成果公開の認定が行われた。課題枠別の内訳を表18に示す。

表18 「京」の利用枠別2015年度認定課題数(括弧内は累積値)

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	2012	2	2(2)
	2013	77	17(65)
	2014	63	16(37)
	2015	74	18(18)
HPCI 戦略プログラム	2012	31	-(31)
	2013	25	2(25)
	2014	25	3(24)
	2015	25	14(14)
ポスト「京」研究開発枠 重点課題	2015	31	6(6)
総計		353	78(222)

3-6-4 HPCI 利用研究成果集の公開

HPCI 利用研究成果集は登録機関が発行する査読付き電子ジャーナルであり、一般のジャーナルの査読付き論文になりたい課題の成果を論文化することを主たる目的としている。

2016年度は前年度の第1巻 No.1(掲載論文7編)に引き続き、同 No.2を2016年12月28日に発行した。掲載論文はセクションA 学術研究成果4編、セクションB 産業利用成果4編の全8編である。さらに2017年3月22日に早期公開(巻号等の書誌情報が未確定の論文を先行公開)として2編を追加公開した。

公開論文の全ダウンロード数は2017年3月31日時点で1,490回であり、そのうちダウンロード数トップの論文は267回であった。

3-6-5 成果発表データベースの改修

本年度からの戦略プログラムからポスト「京」重点課題への移行に伴い HPCI 成果発表データベースの表示画面の改造を行い、2016年7月2日に公開した。図42に示すように、従来の計算機利用枠別表示に加え新たにHPCI利用研究分野別を追加して2モードとし、表示モードボタンで切り替えられるようにした(デフォルトは一般の人に分かり易い研究分野別表示)。利用枠別表示(図43)においては、ポスト「京」研究開発枠 重点課題(1～9)、戦略プログラム(分野1～5)の順に並べ、すべての利用枠別分類に展開/集約(expand/collapse)スイッチを設けた。また、すべての利用枠別分類に対して、表示/非表示のオプションを設けた(例えば重点課題や戦略プログラムの一部のみ表示させることが可能)。重点課題のそれぞれの番号にマウスオーバーすると、各重点課題名がポップアップするようになっている。

	課題の種類 (複数の課題が関与する成果発表は各「課題の種類」の件数としてカウントされます) 表示オプション									合計	正味の 成果発表 件数
	HPCI利用研究分野										
	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	物理 素粒子 宇宙	エネルギー	情報工学 計算機科学	数理科学	その他		
論文(査読付き)	96	274	106	136	115	32	11	9	10	789	756
論文(査読なし)	21	13	40	37	10	5	1	1	1	129	125
国際会議・シンポジウム	194	313	288	246	299	64	6	17	11	1438	1399
国内学会・シンポジウム	275	258	220	322	180	65	7	8	19	1354	1297
研究会等	139	119	108	58	118	10	10	7	10	579	573
一般向け講演会等	130	30	27	18	43	0	0	0	3	251	251
新聞/TV/WEB配信/雑誌等	253	48	152	13	58	0	1	1	2	528	525
書籍	6	8	4	2	0	0	0	0	0	20	20
プログラム・DB公開	4	1	0	1	0	0	0	0	0	6	6
特許出願・取得	3	8	0	2	0	0	0	0	0	13	13
合計	1121	1072	945	835	823	176	36	43	56	5107	4965

図 42 HPCI 成果発表データベースの表示画面(HPCI 利用研究分野別表示)

	課題の種類 (複数の課題が関与する成果発表は各「課題の種類」の件数としてカウントされます) 表示オプション												合計	正味の 成果発表 件数
	「京」 一般利用	「京」以外のHPCI 一般利用	ポスト「京」研究開発枠 重点課題									HPCI戦略プログラム		
			1...	2...	3...	4...	5...	6...	7...	8...	9...			
	<input type="checkbox"/> Expand	<input type="checkbox"/> Expand	<input type="checkbox"/> Collapse									<input type="checkbox"/> Expand		
論文(査読付き)	230	248	4	9	0	6	6	4	9	1	2	363	882	756
論文(査読なし)	31	19	0	2	0	0	0	0	0	0	0	79	131	125
国際会議・シンポジウム	336	251	19	9	0	10	1	30	0	0	19	903	1578	1399
国内学会・シンポジウム	314	166	43	17	0	3	5	27	0	0	13	863	1451	1297
研究会等	165	62	33	5	0	6	2	4	0	0	7	335	619	573
一般向け講演会等	51	20	22	0	0	0	0	0	0	0	3	174	270	251
新聞/TV/WEB配信/雑誌等	83	27	22	0	0	1	0	0	0	0	0	414	547	525
書籍	4	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	8	20	20
プログラム・DB公開	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4	7	6
特許出願・取得	5	5	1	0	0	0	0	0	1	0	0	3	15	13
合計	1222	806	144	42	0	26	14	65	10	1	44	3146	5520	4965
	1222	806	346									3146		

図 43 HPCI 成果発表データベースの表示画面(利用枠別表示)

3-6-6 成果の普及

1. 利用報告書ダウンロード分析

「京」以外の HPCI 分を含む利用報告書のダウンロード(DL)総数は、2014年7月の統計データ取得開始以降、2016年度末で通算約37,000件に達した。年間DL数では2015年度の約12,200件から2016年度は約16,400件に増加した(増加率35%)。図44にこの間のダウンロード数及びその蓄積値の月次変化を示す。2014年度、2015年度は利用報告書の公開後、ダウンロード数の高いレベル(約2,000)が2~3ヶ月続き、その後は減少に転じていた、即ち2014年度は11月~12月に、2015年度は2月に大きく減少した。2016年度はそれとは大きく傾向が異なり、3月になっても高いレベル(2,000超)を維持している。また、これは2015年度も同じ傾向が見られたが、2016年度における2015年度利用報告書の公開に伴い、それ以前(2012年度~2014年度)の利用報告書のダウンロード数も増大した。

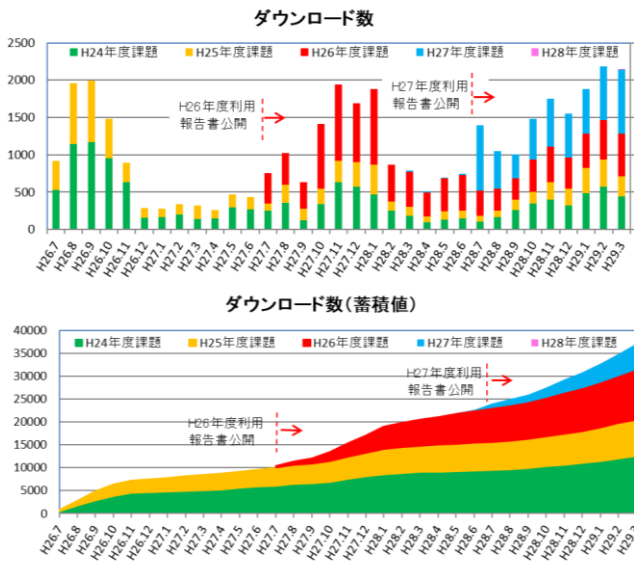


図44 利用報告書ダウンロード数の月次変化

図45(上)に課題別ダウンロード割合を示す。「京」産業利用のダウンロード数が最も多く、次いで「京」一般、HPCI一般、戦略プログラムの順に大きい。図45(下)には1課題あたりのダウンロード数を示す。「京」産業利用、「京」以外のHPCI産業利用が最も大きく、次いで「京」産業利用トライアル・ユース、「京」一般利用が大きい。

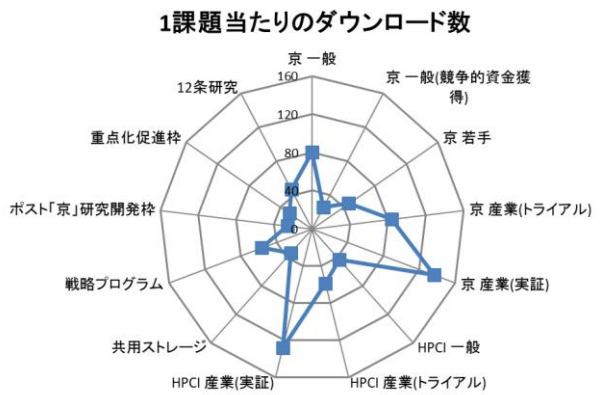
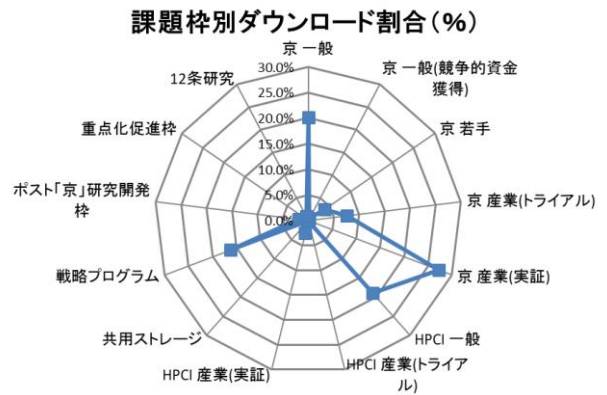


図45(上) 課題別利用報告書ダウンロード割合(%)、
(下) 1課題あたりのダウンロード数

図46に機関分類別ダウンロード割合を示す。約24%が大学等(219機関)から、約8%が研究機関等(47機関)から、約22%が企業(530社)から、約6%が海外(50ヶ国)から、約37%がネットワーク事業者回線からである。

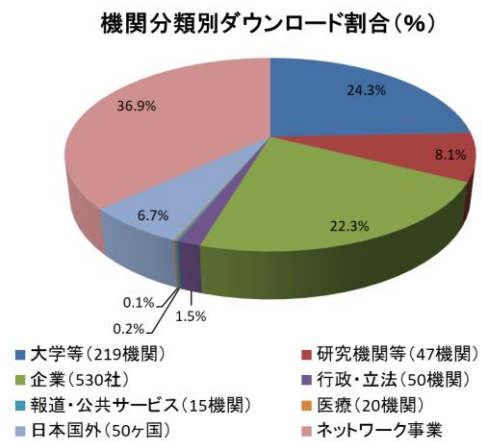


図46 機関分類別利用報告書ダウンロード割合(%)

図 47 に HPCI 参加企業及びダウンロード元企業の業種分布を示す。HPCI 参加企業の業種数は 15(2016 年 3 月末)から 2016 年度は 19(33 業種の 58%)に拡大した(新規参加業種:硝子・土石製品、金属製品、精密機器、その他製品)。ダウンロード元企業の業種数

は 27(2016 年 3 月末)から 2016 年度は 28(同 85%)に増加した。ダウンロード元企業数は 414 社(2016 年 3 月末)から 2016 年度は 530 社に増加した。このように、我が国産業界における産業利用課題成果への一層の関心の高まりとその普及が確認できる。

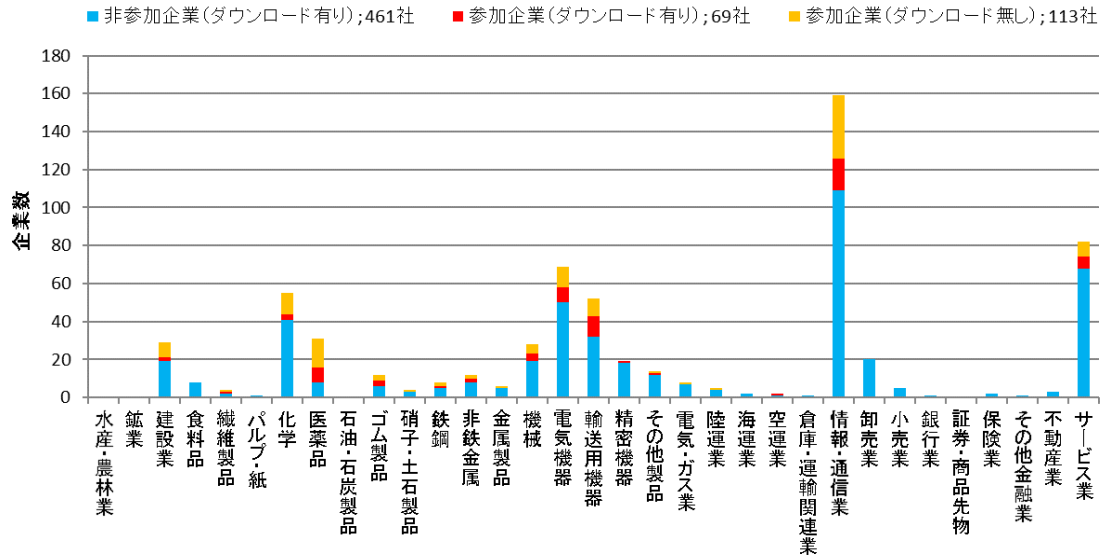


図 47 HPCI 参加企業及びダウンロード元企業の業種分布(東証 1 部 33 業種で分類)

2. 成果発表状況

図 48 に(a) 査読付き論文、(b) 国際会議・シンポジウム、(c) 国内会議・シンポジウムの各発表件数の年次推移(2012 年度～2016 年度)を示す。「京」一般利用は青、HPCI 戦略プログラムは淡緑、ポスト「京」研究開発枠 重点課題は濃緑、同萌芽的課題は淡紫で示す。2016 年度は、2015 年度末に戦略プログラムが終了したことに伴い戦略プログラムに係る成果発表が大きく減少しているが、重点課題からの成果発表が大きく増加している様子が分かる。

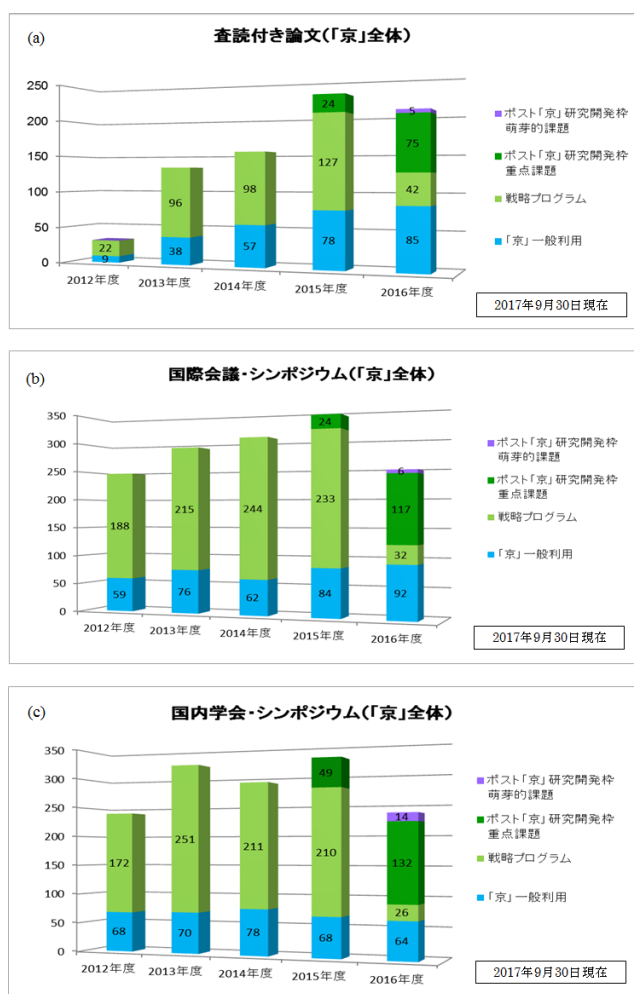


図 48 成果発表件数の年次推移

3. 査読付き論文の統計

「京」を中核とする HPCI 利用研究課題の成果である査読付き論文について、論文掲載誌のインパクトファクター (IF) 値、被引用回数等を HPCI 成果発表データベース、トムソン・ロイター社の Web of Science を基に調査した。「京」一般利用、戦略プログラムについて、査読付き論文に関する統計データを表 19 に示す。IF 値の最も高い値は、「京」一般利用、戦略プログラムで同じ雑誌で約 38 である。IF 値が 1 以上の論文の割合は、戦略プログラムの方が「京」一般利用よりやや高い割合を示し、IF 値が 1 以上の論文数、平均被引用回数は、戦略プログラムの方が約 2 倍多い。「京」一般利用、戦略プログラムについて、利用分野別の調査対象論文数、被引用回数、平均被引用回数をそれぞれ図 49-1 (「京」一般利用) 及び図 49-2 (戦略プログラム) に示す。ともに、2016 年 2 月時点の値も表示している。両利用枠とも、論文数、被引用回数は、物質・材料・化学分野が最も多いが、平均被引用回数は、物理・宇宙・素粒子分野が最も多い。また、研究分野のほぼ全般にわたって平均被引用回数の増大が見られる。

表 19 査読付き論文に関する統計データ

	「京」一般利用	戦略プログラム
査読付き論文の総数 (A)	231 編	363 編
論文の掲載誌の内、IF 値の最も高いもの	Nature (IF=38.1)	Nature (IF=38.1)
IF=1 以上の学術誌の論文数 (B)	115 編	248 編
B/A	50 %	68 %
最も高い被引用回数	32 回	107 回
平均被引用回数 (調査対象論文数)	4.7 回 (138 編)	8.0 回 (311 編)

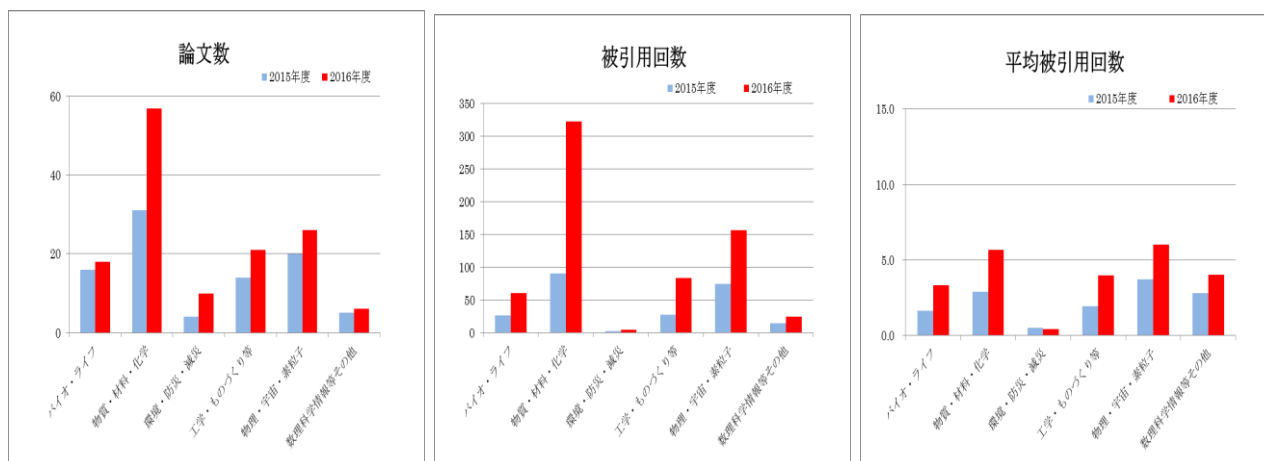


図 49-1 「京」一般利用について利用分野別の調査対象論文数、被引用回数、被金被引用回数

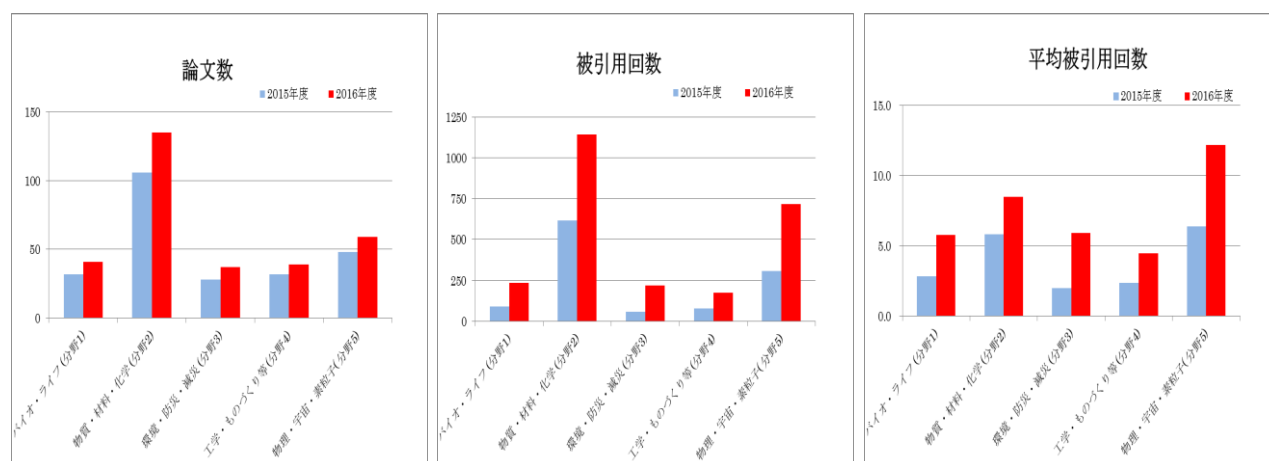


図 49-2 戦略プログラムについて利用分野別の調査対象論文数、被引用回数、被金被引用回数

参考文献

[1] 平成 27 年文部科学省告示第 88 号 (2015 年 3 月 31 日)、(特定高速電子計算機施設(スーパーコンピュータ「京」)に係る評価委員会 (第 1 回) 配付資料、参考資料 1-3); 文部科学省ホームページ (http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/042/shiryo/1368280.htm).

4 「京」の共用のための研究活動

4-1 「京」の高度化研究

「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として2016年には、下記の23課題(AICS:22課題、RIST:1課題)を実施した。以下に、各課題の研究目的と成果概要を示す。なお、各課題の研究内容の詳細は、HPCIポータルサイト上に公開の利用報告書に記載している。

表1 「京」調整高度化枠 課題一覧

	課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	チーム名	割当資源量 (ノード時間積)	利用実績 (ノード時間積)
1	ra000001	スケーラブルかつポータブルな通信・I/Oライブラリの研究開発	石川 裕	システムソフトウェア研究	200,000	181,893
2	ra000002	「京」のプログラミング環境の高度化に関する研究開発	佐藤 三久	プログラミング環境研究	1,852,481	1,569,186
3	ra000003	大規模並列データ処理を高度化するツール・ライブラリの研究開発	丸山 直也	プログラム構成モデル研究	600,000	408,558
4	ra000004	大規模データの可視化とデータ処理に関する研究	小野 謙二	可視化技術研究	564,496	373,488
5	ra000005	大規模並列数値計算アルゴリズムおよびライブラリの研究開発	今村 俊幸	大規模並列数値計算技術研究	795,037	580,018
6	ra000006	計算方法組み合わせの比較・計算方法評価のための基盤的ライブラリの研究開発	富田 浩文	複合系気候科学研究	9,456,742	9,446,863
7	ra000007	「京」の利用高度化のための計算ポータル構築支援システムに関する研究開発	前田 俊行	利用高度化研究	1,046,480	314,322
8	ra000008	粒子系シミュレーションプラットフォームの開発	牧野 淳一郎	粒子系シミュレータ研究	9,967,243	7,236,396
9	ra000009	分子動力学計算の高機能化のための共通基盤的研究開発	岩橋 千草	粒子系生物物理研究	5,826,292	5,701,718
10	ra000010	超並列環境に資する分子科学計算ソフトウェアの研究開発	中嶋 隆人	量子系分子科学研究	10,282,492	8,528,753
11	ra000011	モンテカルロ法と線形方程式反復解法高度化のための共通基盤的研究開発	蔵増 嘉伸	連続系場の理論研究	9,915,359	9,917,006
12	ra000012	複雑流体現象に対する統一的アルゴリズムと解法に関する研究	坪倉 誠	複雑現象統一的解法研究	3,143,424	3,142,376
13	ra000013	強相関量子シミュレータの研究開発	柚木 清司	量子系物質科学研究	8,629,645	8,304,224
14	ra000014	離散事象シミュレーション研究	伊藤 伸泰	離散事象シミュレーション研究	557,913	557,905
15	ra000015	データ解析とシミュレーションの融合研究のための共通基盤的研究開発	三好 建正	データ同化研究	6,627,314	5,588,624
16	ra000018	京のアーキテクチャに最適なソフトウェアの高度化手法の研究開発	泰地 真弘人	プロセッサ研究	2,183,166	2,184,235
17	ra000022	ポスト「京」の開発	石川 裕	フラッグシップ 2020 プロジェクト	3,137,144	2,621,435
18	ra000023	京における大規模グラフ探索アプリケーションの最適化に関する研究開発	庄司 文由	運用技術部門	10,003	9,631
19	ra000024	国際連携による京高度化に資するソフトウェアの評価	丸山 直也	プログラム構成モデル研究	20,000	3,304
20	aics-sft	京のコンパイラとツールの高度化	南 一生	ソフトウェア技術	2,004,693	1,581,492
21	aics-sys	京の利用環境の高度化のための研究開発	宇野 篤也	システム運転技術	1,906,983	1,881,995
22	aics-hpc	HPCI SSOによる「京」アクセスの調整高度化	平川 学	HPCIシステム技術	1,500	0
23	rist	「京」の利用支援	野口 孝明	RIST	3,037,144	1,066,905

1. スケーラブルかつポータブルな通信・I/Oライブラリの研究

開発

【背景】

「京」のユーザに対し、システム・ソフトウェアの研究成果を公開することで、「京」ユーザの実行速度向上及び利便性の向上を目指す。

【研究目的】

「京」の高度利用実現のために、並列アプリケーションのための、スケーラブルかつポータブルな通信機構及びファイルI/Oに関する研究開発を行う。

【成果概要】

公開ソフトウェアのバグ修正に用い、公開ソフトウェアの機能向上に寄与した。

2. 「京」のプログラミング環境の高度化に関する研究開発

【背景】

To program large-scale parallel computers such as the K computer, programming languages and tools that could provide users with both high performance and productivity are strongly demanded.

【研究目的】

The programming environment research team is carrying out research and development of programming languages and performance-tuning tools for large-scale parallel computers, with primary purpose of enhancing the programming environment of the K computer.

【成果概要】

- (1) We enhanced the feature of coarray of the Omni XscalableMP compiler.
- (2) We extended a multi-SPMD programming model to realize fault tolerance without any modification in application-source-code and performed experiments on the K computer.
- (3) We revised the implementation of a task parallel language Tascell to apply MPI-based inter-node communication and evaluated its performance on the K computer.

3. 大規模並列データ処理を高度化するツール・ライブラリの研究開発

【背景】

データ同化気象予測やレプリカ交換分子動力学法などのアンサンブル計算や、ゲノム解析などの観測データ解析など、大規模データ処理を伴うワークフローを「京」で実行する需要が出てきている。従来はそのようなワークフローは、個々のアプリケーション開発者が独自に開発していたが、アプリケーション間で共通する項目も多い。データ処理ワークフローの共通項目をツール・ライブラリとして抽出できれば、「京」利用時の最適化をツール・ライブラリ側で行うことができ、ワークフロー開発コストの大幅な削減が期待できる。

【研究目的】

本課題は「京」の高度化研究課題のひとつとして、以下の2点

を実現することを目的としてツール・ライブラリを研究開発する。

- (1) 膨大な量のデータの中から、目的となる結果を高速に抽出・処理が可能となるアルゴリズムの研究開発を実施し、大規模並列データ処理に関するライブラリを提供する。
 - (2) 大規模データ処理を可能とする並列分散ミドルウェア、並列分散プログラミングの研究開発を実施し、ユーザが基礎データを効率よく利用するためのツールを提供する。
- 上記2点を実現するために「京」を用いたソフトウェアの開発、試験を行う。

【成果概要】

計算科学アプリケーションのワークフロー構築の容易化、及び実行の高速化のために、次の2項目の研究開発を行なった。

- ・「京」上でのタスク起動位置を考慮したタスクスケジューリング
- ・多次元配列データのプロセス間再配置・データ並列処理フレームワーク

前者は昨年度まで開発し続けていた MapReduce ソフトウェア KMR に機能拡張する形で実装し、オープンソースソフトウェアとして公開した。後者は格子 QCD アプリケーションに実際に適用して評価を行い、学術論文としてまとめ、国内会議での発表、及び国際会議への投稿を行なった。

4. 大規模データの可視化とデータ処理に関する研究

【背景】

「京」で行うシミュレーションの結果は大規模かつ分散並列ファイルとなる。このようなデータを効率よく扱い、後処理のコストや時間を削減するため、HIVE 可視化システムを開発している。本研究は、HIVE を構成する要素技術の研究を行うものである。

【研究目的】

「京」の全ノードを利用して、後処理が可能な可視化の要素技術を開発、その性能を評価する。このため、HIVE 開発で採用している SORT-LAST 方式の並列レンダリングシステムで、その中核となる画像重畳モジュールの性能を調べる。また、大規模なデータをファイル出力せずに後処理を行う In-Situ 技術について、POD、DMD などの計算方法を援用し、その実装方法を検討する。

【成果概要】

「京」から出力される超大規模シミュレーション結果を「京」の利用環境下で可視化処理が行える可視化フレームワーク (HIVE: Heterogeneously Integrated Visual-analytics Environment)

の研究開発を進め、その要素技術を開発した。研究開発成果として、HIVE ソフトウェアは <http://avr-aics-riken.github.io/HIVE/> からダウンロードできるようにしている。また、流れ場上の粒子追跡法への Parareal 法を基礎とする時間並列計算法の応用について検討を進めてきた。その結果、粒子追跡法は常微分方程式を基礎としており、その場合、Parareal 法の応用性が高いことが分かった。そこで次に、粒子追跡と流れ場解析の統合の必要性を考慮し、粒子追跡を行う場を生成する流れ場解析(双曲型偏微分方程式)に対する Parareal 法の応用性を調査した。

5. 大規模並列数値計算アルゴリズムおよびライブラリの研究開発

【背景】

「京」における数万コアを超える超並列システムにおいては、並列性を十分引き出すための数値計算ライブラリの充実が急務である。

- ・一般的には現在、米国を中心とした数値計算ライブラリ ScaLapack, PETsc などが主に使われている。
 - ・「京」においては基本的にはメーカー(富士通)提供の並列数値計算ライブラリに依存しているが、数百から数千並列程度にとどまっている。
 - ・グランドチャレンジをはじめ、いくつかのアプリにおいては大学・研究機関等で開発した独自の並列数値計算ライブラリを利用しており、組織化されていないのが現状。
 - ・計算科学アプリの研究者が、「京」を使いこなすには並列性を十分引き出すための数値計算ライブラリの充実が必要。
- また、「京」を使いこなし、さらに効果的に使えるようにするためには、以下のような課題・制約の克服・解消が必要である。

- (1)「京」の一部に障害が起きた場合、通常はアプリケーションの計算が停止する。障害が起きた場合においても障害箇所を回避して計算を継続するような数値計算アルゴリズムが必要。
- (2)複数に分散された計算結果を統合する際、計算機が大規模になるにつれ計算精度に誤差が生じるため、大規模システムにおいては、大規模問題の計算結果と精度を確保する、誤差解析・精度保障手法が必要。
- (3)低並列の数値計算ライブラリは、高並列のアプリケーションに導入できない。数万並列に対応する高度な数値解法の研究開発及びライブラリの提供が必要。

以上の内容から調整高度化枠を利用し、高度な数値計算アルゴ

リズム研究を推進の必要性が認められている。

【研究目的】

本研究プロジェクトの研究課題は、従来にない先進的な並列数値計算ライブラリを開発し、幅広い分野の多くのユーザによる「京」利用の進展につなげることである。以下の内容の研究を進める。

- (1)「京」の一部に障害が起きても、計算を続行できる、耐故障機能を持つ数値計算アルゴリズム及びソフトウェアの開発(耐故障性)
- (2)大規模になった時に問題になる高精度計算及び精度保証付き演算手法の開発(高精度・精度保証)
- (3)「京」の高性能プロセッサを活用し、数万並列に対応する疎行列ソルバ、固有値ソルバ、3次元FFTなどの並列数値計算アルゴリズム及びライブラリを開発(高スケーラビリティ、先進アルゴリズム等)

上記研究について、開発並びに性能評価のために「京」を利用する。特に上記項目中、項目3では「京」に特化した性能チューニングや高並列化機能拡張、通信最適化などの項目を含むため、小規模並列から大規模並列までの利用が想定される。性能評価では「京」全系までをカバーできるソフトを中心に、「京」でなければできない大規模計算における数値計算ライブラリの性能調査を実施する。また、数値計算ライブラリから「京」の高度利用化に資する目的で推進する他機関との共同研究についても本課題の枠内の課題について「京」を利用する。

【成果概要】

本年度は昨年に引き続き、本チームが開発を進める「数値計算パッケージソフト:KMATHLIB」の開発を実施し、(1)通信回避技術について、独自開発を進めてきた固有値ソルバ EigenExa の通信回避技術の改良とブロックアルゴリズム化と CAQR の基礎研究を実施、(2)OSSを統合する KMATHLIB-API の再構成と旧版を用いた教材作成・講習会の実施、(3)高精度版分散並列固有値ソルバ QPEigenK の性能評価を「京」上で実施、(4)KMATHLIB 個別ライブラリに対する非負制約回帰モデルを課した性能推定の研究、の4項目を実施した。

6. 計算方法組み合わせの比較・計算方法評価のための基盤的ライブラリの研究開発

【背景】

モデリング・計算方法の多様化や精緻化、並びに現象統一的理

解のための複数モデルの結合により、現象の再現性を高める努力がなされている。計算スキームやモデルは非線形的に影響を与え合うため、それらの個別の影響を評価するだけでなく、それぞれを組み合わせた際の影響や効果を評価する必要がある。しかしながら、それらの計算方法の組み合わせは肥大化しており、網羅的に調べることは容易ではない。

したがって、新・旧の計算方法の評価、及びその組み合わせによる計算結果の比較を総合的に行うことを可能にする基盤的ライブラリが必要となっている。

【研究目的】

本課題では、機構内計算機科学チームが構築するミドルウェア(I/O、通信など)を基盤とした「京」上で高速に動く、CFD ライブラリ及び関連する物理モデリング(放射・乱流など)ライブラリの整備を行う。さらに、これら既存の計算手法の評価・比較をベースとした新規スキームの開発基盤を提供する。機構内計算機科学チームとのコデザインのもと、複数の計算手法を研究開発し、基盤的ライブラリの開発・整備を行う。また、このライブラリを、領域気象モデル SCALE-RM や全球気候モデル SCALE-GM などの複数のモデルに組み込んで、全体パフォーマンス評価及び気象現象の再現性テストを行う。

【成果概要】

本実施期間においては、計算パフォーマンスやユーザビリティ向上のため、気象・気候計算のための基盤ライブラリ SCALE の改良を行い、バージョンアップを行った。

また、SCALE を利用した領域高解像度大気モデル SCALE-RM 及び全球二十面体準一様格子大気モデル SCALE-GM を用いて、物理パフォーマンスの向上のための検証を行った。

7. 「京」の利用高度化のための計算ポータル構築支援システムに関する研究開発

【背景】

「京」に代表されるような超高性能計算機システムは、超高性能を実現するために先端技術を採用し、また規模が非常に大きくなるため、一般的な PC やスマートフォン向けのソフトウェアを開発・利用する大多数のアプリケーション開発者・利用者にとっては、計算サービスの開発や利用のハードルが非常に高いという問題が存在する。一方で、近年計算機で大規模なデータ処理をしたいというニーズは高まっており、従来の超高性能計算機システムの主な利用目的である数値計算・計算科学・シミュレ

ーションとは別に、潜在的な需要はますます高まっていると考えられる。

このような潜在的な需要に応えるため、利用高度化研究チームでは、大規模高性能計算機システムをより多くの利用者・開発者に使ってもらえるようなフレームワークの研究・開発を行っている。

【研究目的】

利用高度化研究チームは、上記背景に述べたとおり、大規模高性能計算機をより多くの利用者・開発者が簡単・気軽に利用できるようなフレームワークの研究・開発を行っている。具体的には、(1) 計算サービスの利用・提供を容易にするような計算ポータル構築支援フレームワーク、(2) (1)のフレームワークを実現するための仮想化技術、(3) (1)のフレームワーク上でのプログラムの安全性等を検証するためのプログラム解析・検証技術の3項目について研究を行っている。2016年度は、前年度までに引き続き「京」のような大規模高性能計算機のための計算ポータルフレームワーク及びその要素技術・理論等の研究・設計・実装・検討等をすすめた。

【成果概要】

- (1) スーパーコンピュータ向けの計算ポータル構築支援システムの完成度向上及び「京」以外の計算機システムとの互換性・連携機能の強化、加えて計算資源量を管理できるポイントシステム的设计・開発。更に、実装したシステムの一般公開でのデモ。
- (2) 軽量ネットワーク仮想環境の実装及び研究部門の FX10 及び「京」上での実験・評価の継続。
- (3) プログラム(主に Fortran プログラム)のソースコード進化の履歴から性能最適化チューニングのパターンを検出し、これをチューニング時の性能プロファイリング結果の値と関連付けてデータベースに登録し、与えられた性能プロファイリング結果やソースコードから適切な最適化パターンを機械学習の方法論で提示する手法に関する研究に関して、ソースコード進化履歴データ・性能プロファイリングデータを収集する方法についての研究・開発。
- (4) 大規模並列プログラム向けの性能プロファイリングツールの「京」上への移植の継続。
- (5) 「京」上へ移植した性能プロファイリングツール等を用いたアプリケーションの性能解析の継続。
- (6) 軽量スクリプト言語である Python を用いて、「京」などの高性能計算環境上で実行するアプリケーションを作成・実行する

手法について調査・検討・実装の継続。また化学分子データベースPubChemに登録されている分子に対して第一原理計算を実行し、またその結果を集めてデータベース化し、統計や機械学習等のアプローチで解析・推測する手法についての研究(量子系分子科学研究チームの島崎氏との共同研究)。

(7) XcalableMP (プログラミング環境研究チーム)などの共有メモリ型のプログラミングモデルで問題となる「ゆるいメモリ貫性モデル」下においてプログラム解析・検証を行うための汎用的・統一的な理論の構築、及び検査ツール McSPIN の実装の継続。

8. 粒子系シミュレーションプラットフォームの開発

【背景】

粒子法によるシミュレーションは工学や自然科学の様々な分野で幅広く用いられている。しかし、「京」の様な大規模並列計算機上で効率よく動作する粒子法シミュレーションコードの開発は容易ではない。そこで、本研究では効率的な粒子シミュレーションコードの開発を容易にするフレームワーク(Framework for Developing Particle Simulators: FDPS)の開発を行った。

【研究目的】

FDPS 自体の開発及び FDPS を用いた様々なアプリケーション開発を「京」上で行った。また、SPH シミュレーションコードを開発し、原始惑星同士の巨大衝突による月形成のシミュレーションを「京」上で行った。

【成果概要】

FDPS は「京」上で非常に効率よく動作する事が確認された。また、SPH 法による月形成シミュレーションも FDPS を用いることにより先行研究の 100 倍程度の解像度である 1 億粒子での長時間計算を行うことができた。

9. 分子動力学計算の高機能化のための共通基盤的研究開発

【背景】

分子動力学法(MD)などの計算機シミュレーションは、生命科学分野においても広く利用されている。特に MD 手法は、タンパク質などの生体分子が機能するときの詳細な機能ダイナミクス情報を得られることが強みであり、分子構造とダイナミクス、そして機能の関係を理解するために不可欠のアプローチとなってきた。我々のチームでは、MD プログラム「GENESIS」を開発しており、フリーソフトとして公開している。このプログラムで

は独自の高並列・高速化ルーチンを開発、導入することにより、巨大生体分子系において、高い並列効率を示し、最も高速に計算する MD プログラムの一つであることを実証してきた。

【研究目的】

MD、マルチスケールシミュレーションなどの粒子法に基づく計算手法は、生物物理のみならず物質科学分野においても広くもちいられている。「京」を使いこなし、さらに効果的に使えるようにするためには、長時間ダイナミクスから自由エネルギーを計算する手法や QM/MM 自由エネルギー計算など的高機能化と「京」を用いた大規模並列計算を組み合わせる必要がある。そこで、我々が開発している MD ソフトウェア「GENESIS」に対して、拡張アンサンブル法などの手法やアルゴリズムを整備し、「京」に最適化していく。

【成果概要】

「京」による MD の計算手法開発を行った。特に巨大生体分子系における大規模・超並列計算のために、データ通信量を減少させる multiple program / multiple data (MPMD)法を開発し、粒子系生物物理研究チームが開発している分子動力学法プログラム「GENESIS」に実装し、「京」上で大規模・超並列計算を行い、手法の有効性を確認した。また、現在まで行ってきた機能追加・高速化の成果を新バージョン GENESIS1.1 として 2016 年 7 月に公開した。高速化だけでなく、計算可能な力場を増やし、最小自由エネルギー経路を探索する String 法などが追加されている。生体機能のメカニズムの理解、創薬計算などへの更なる応用も期待できる。また、実証研究として、生体機能に重要な役割を果たす膜輸送タンパク質の MD 計算による構造細密化も行った。

10. 超並列環境に資する分子科学計算ソフトウェアの研究開発

【背景】

分子科学計算ソフトウェアは物質科学・生命科学・モノづくりの共通基盤であり、Gaussian(アメリカ合衆国)などの分子科学計算ソフトウェアは計算科学者のみでなく、実験科学者まで幅広く世界中で利用されている。計算機が高度化することに伴い、大規模な系の原子や分子を計算する要望は確実に増してきているため、超並列計算が可能で一般ユーザに利用可能な理論分子科学計算ソフトウェア開発が国際的に急務な課題となっている。

【研究目的】

本利用課題では以下の研究を行い、従来にない先進的な分子科学計算ソフトウェアを開発し「京」のユーザに提供すること

で、幅広い分野のユーザの「京」利用に資することを目的とする。

- (1)他の分子科学計算プログラムでは扱うことのできない大規模分子向けの分子計算法、高速計算法、高精度分子計算法の理論とそのため演算アルゴリズムを開発する。
- (2)それらの理論・アルゴリズムに基づき、我が国独自の分子科学計算ソフトウェアNTChemを新たに開発・公開することで、タンパク質の丸ごと計算などの数万原子分子の電子状態計算や、数百-千原子分子系の化学反応などの詳細な追跡計算を高速かつ高精度に実現する。

【成果概要】

本利用期間中には、NTChem を用いた応用計算においてユーザに広く用いられる計算機能の拡張、及び単体性能と並列性能向上のためのソフトウェアチューニングなどの高度化を行った。具体的には、(1)Molecular-Tailoring Approach に基づく大規模分子の超並列プログラムの開発、(2)大規模 QM/MM 計算のための NTChem-AmberTools インターフェースの開発、(3)Pseudospectral 法を用いた 2 電子積分の高速化・高並列化、(4)超並列疎行列演算ライブラリを開発を行った。本利用期間中に NTChem の機能拡張及び高度化作業が順調に進展したため、2016年8月2日に Ver 8.0 を、2017年1月9日に Ver 9.0 を AICS ソフトウェアとして「京」で一般公開を行った。

11. モンテカルロ法と線形方程式反復解法高度化のための共通基盤的研究開発

【背景】

計算科学による研究遂行のためには計算機の高い実効性能を追求する必要があるが、「京」に代表される階層的大規模並列計算機環境のもとでは、従来とは異なるアルゴリズムの開発や計算手法の開拓の必要性が認識されており、「京」の高度利用を目的とした共通基盤的研究開発を実施する。

【研究目的】

- (1)「負の重みの問題」を持つ物理システムを「京」上において効率的に大規模並列シミュレーションできるアルゴリズムを開発・実装し、その検証実験を行う。
- (2)「京」上での大規模並列拡張に応用可能な大規模疎行列に対する線形方程式反復解法を計算手法・アルゴリズムの両面から高度化し、その検証実験を行う。(1)及び(2)の研究開発課題は格子 QCD シミュレーションをベースにして実施する。

【成果概要】

- (1)原理的にモンテカルロ法における「負の重みの問題」が存在しないテンソルネットワーク(TN)スキームに基づき、3次元以上のフェルミオンシステムに適用可能なグラスマン高次テンソル繰り込み群の開発に成功した。
- (2)固有値・固有ベクトル計算を利用した大規模疎行列に対する線形方程式反復解法である SAP deflation 法を用いて、現在の最先端の格子 QCD 計算で用いられている 964 の問題サイズに対して劇的な計算コスト削減に成功した。

12. 複雑流体現象に対する統一アルゴリズムと解法に関する研究

【背景】

計算機が高度化するにつれ、より複雑な現象や形状に関する研究課題が増えているが、複雑な現象の計算は、流体・構造・熱・電磁波・化学反応などの複数の支配方程式が複雑に関係しており、方程式の型やパラメータを決定することが困難である。これらの複雑な現象を同時に計算できるアルゴリズムやツールの開発が、幅広い分野の共通基盤技術として切望されている。

このような複雑現象に対しては、アルゴリズムの複雑化による計算量の増加と単体・並列性能の確保が、「京」を利用するユーザのアプリケーション開発の大きな障壁となっている。

- (1)複数の支配方程式が関係する問題を計算するためには、ユーザの専門分野以外の支配方程式や解法を用いなければならず、専門分野以外のユーザでも容易に組み込める幅広い分野に利用可能な計算方法の研究開発が必要になる。しかし、複数の支配方程式を扱うアルゴリズムは、複数のプログラムと同等以上の計算量が必要になるため、「京」以外の計算機ではアルゴリズムの正確さや計算結果の検証ができない。
- (2)「京」を利用するユーザがさらに効果的にアプリケーションを利用するためには、機構の計算機科学研究チームと密接な連携・協力をを行い、ハードウェアアーキテクチャ構造を十分考慮した上で、高い効率で自動的に並列処理を実行するためのツールなどを研究開発し、容易に計算結果が出てくる仕組みが必要である。

【研究目的】

このために本年度は以下を目標として、「京」を有効利用する先進的なシミュレータ開発のための開発環境を整備し、幅広い分野の実ユーザと開発者の利用に供する利用拡大につなげる。(1)

複雑化した課題の現象を解くための、複数の支配方程式を連結させたアルゴリズムの研究開発を実施する。そのためにまず特に「京」の性能を十分引き出し、スケーリングを実現するための統一的数据構造に着目し、既存のアルゴリズムを改良して統一解法を可能とし、「京」への実装を目指す。(2) 産業界の実問題を用いた検証解析を実施し、「京」の産業利用促進へ向けた課題を洗い出す。

【成果概要】

- (1) 解析コード CUBE にオイラー型動的構造解析を実装することに成功した。またオイラー型の荷重境界条件の付与法を新たに開発・検証し、手法を確立することができた。
- (2) 実車フルモデルによる自動車空力解析の精度向上及び計算高速化を目指し、壁面近傍局所格子細分化手法を導入し、計算負荷低減を可能にした。また、非圧縮流れ解析フレームワークのアルゴリズム変更、流体力算出手法のチューニング、並びに自動車形状モデルの精査による実測との合わせこみにより、3 つの車体モデルに対する空力解析の予測精度向上を果たした。
- (3) 国内自動車メーカーとの連携による空力音解析を実施した。車両周囲に発生する、乱流現象を起因とする流体騒音を調べ、ビームフォーミングによる音響等高線図と定性的に一致する解が得られた。
- (4) 自動車エンジンシミュレーションを実現するため、流体構造統一解析フレームワークに化学反応モデル及び噴霧モデルを導入した。基礎検証計算で妥当な解が得られていることを確かめることができ、バルブ・ピストン運動を再現した燃焼解析を実現可能とした。
- (5) 風 HPC コンソーシアムに関わる都市キャンピアー内境界層乱流について解析を行い、Immersed Boundary 法、表面圧力データの取得方法、流入乱れの指定方法、空間プローブ点データの補充方法に対する精度検証を行った。

13. 強相関量子シミュレータの研究開発

【背景】

銅酸化物高温超伝導体の発見を契機にして、電子間相互作用が本質的に重要である、いわゆる強相関量子系に関する研究は四半世紀に渡り集中的に行われてきた。それにも関わらず、最も基本的な理論モデルの基底状態についてさえも必ずしも一致した理解は得られておらず、現代物性物理学の最も基礎的で重要な研究課題の一つとして残っている。この問題では強い量子

揺らぎと多体問題の困難さが同時に存在しており、解析的手法で解ける領域は極めて限定される。また、「多体問題」を陽に取り扱うという観点に立てば、平均場近似等の一体描像に基づく取扱いや摂動論アプローチは相補的ではあるが決定的な手法とはなりにくい。

【研究目的】

本研究開発では、強相関量子系に対するシミュレーションとして、量子モンテカルロ法、密度行列繰り込み群法、厳密対角化法などの原理的に近似を含まない計算スキームに基づく量子シミュレータの研究開発、及びそれらの「京」における高度化研究開発を行う。具体的には、(1) (負符号問題が出ない) 大規模電子系に対する量子モンテカルロ法の研究開発、(2) 2次元密度行列繰り込み群法の研究開発、及び(3) 量子ダイナミクスに対する密度行列繰り込み群法の研究開発を行う。

【成果概要】

補助場量子モンテカルロ法に関する利用では、これまで広いパラメータ領域の模型を対象とするため冗長に書かれていた部分のコードを見直し、現在対称としている模型に特化した形の高速度化を行った。これにより、ハーフフィールドには限定されるが、約8倍の性能向上が確認された。昨年度より引き続き行っている引力相互作用を持つ三角格子系に対する実証研究において、この高速化されたコードにより8,000サイトまでの計算が現実的な計算時間で行うことが可能となった。大規模並列密度行列繰り込み群法プログラム「2D-DMRG」の研究開発としては直交多項式展開法による多次元強相関量子系にも適用可能な有限温度密度行列繰り込み群法の実装をはじめとする機能拡張を行った。大規模並列第一原理密度行列繰り込み群法プログラム「paraDMRG」の研究開発としては、「2D-DMRG」の開発で培った大規模並列化手法等の導入や相互作用項に対する計算の効率化等により計算性能の向上が達成された。

14. 離散事象シミュレーション研究

【背景】

「京」及びポスト「京」という大並列計算機を使って社会・経済現象を主な対象としたエージェントモデルシミュレーション実現できるようにすることを目指す。こうしたシミュレーションは一般には、エージェント間の相互作用・やりとりを記述するグラフ構造及びグラフ上のダイナミクスとして実現される。さらに実社会からのデータ分析は膨大であり、また分析結果をモデルに同化して行く際には離散構造特有の多様性を処理する必要がある。

【研究目的】

社会シミュレーションそのものの開発や、それに関する「京」やポスト「京」の通信コストの調査を目的としたソフトウェア開発を行う。さらに、巨大なグラフシミュレーション及びデータマイニングの効率的実現、及び多様なふるまいを統御するデータベース型のシミュレーション実行支援環境の実現を目指す。

【成果概要】

シミュレーション実行支援環境として、OACISとCARAVANという二つのソフトウェアを開発した。また、社会シミュレーションの例として、大規模並列交通流シミュレータを開発した。さらに、通信コストに関して、量子コンピュータのシミュレータを用いて調査を行った。

15. データ解析とシミュレーションの融合研究のための共通基盤的研究開発

【背景】

データ同化は、シミュレーションと実測データをつなぐ学際的科学であり、気象シミュレーションでは天気予報の精度を左右する重要な役割を果たす。シミュレーションは大規模化し、センサ技術は進化し続ける。

本課題では、シミュレーションと観測データとの相乗効果を生み出すための共通基盤として、特に「京」を生かした大規模計算に適した効率的かつ高精度なデータ同化アルゴリズムを研究開発し、様々な応用研究における利用に供することを目的とする。また、データ同化によるシミュレーションモデル及び観測データの誤差評価ツールや、モデルパラメータの最適化ツールといった、シミュレーションにおいて有効な各種ツールを研究開発する。この際、計算機科学の諸分野と連携することで、計算機の構造に適した高速なアルゴリズム開発を行うとともに、統計数理の理論的な側面からも、階層構造に適した手法の探究や、非線形・非ガウスへの挑戦といった、データ同化の精度を高め、応用範囲をますます広げるための研究を進める。

【研究目的】

本課題では、主に共通基盤としての汎用性、応用可能性の観点から、アンサンブルデータ同化手法に集中して研究を進める。具体的には、メリーランド大学で考案された局所アンサンブル変換カルマンフィルタ(LETKF)をベースとして、高精度かつ高速なアルゴリズムの開発を行う。LETKFは元来並列計算性能を重視して開発されたアンサンブルデータ同化手法であり、超並列計算機である「京」との融和性が高い。このLETKFを、広範な

応用を想定した上で、「京」に最適化して実装することで、共通基盤的なソフトウェアとする。

以上のLETKFをベースとして、(1)統計数理に基づいたデータ同化理論研究によるデータ同化手法の精緻化、(2)データ同化による様々なツールの研究開発を行う。理論的な研究として、LETKFで採用されているカルマンフィルタによる線形・ガウスの仮定を打破し、粒子フィルタといった非線形・非ガウスフィルタの考え方を取り込むことや、大規模計算で問題となる系の多重階層構造を適切に考慮したデータ同化手法の探究、また、LETKF自体を改良するための誤差分散膨脹法や誤差共分散局所化法の高度化などに取り組む。ツールとしては、観測及びシミュレーションの誤差評価ツール、モデルパラメータの客観推定ツール、観測インパクト推定ツールといった、新規かつ有効性の高いツールの研究開発を行う。

これらのデータ同化ソフトウェア及びツールは、多様なシミュレーション分野で応用を行う。このための調査研究を進める。

【成果概要】

- (1)NICAM-LETKFに宇宙航空研究開発機構の全球降水マッププロダクトGSMaPを同化するシステムを用いて、モデルパラメータ推定などの実験を行った。
- (2)250m解像度のSCALE-LETKFを用いてフェーズドアレイ気象レーダ同化実験を行い、各格子点において同化する観測データの最大数を制限した場合の解析・予報精度の変化を調査した。
- (3)粒子フィルタを用いて植生モデルSEIB-DGVMに人工衛星MODISの観測データを同化する研究において、従来は地域を限定して行っていたデータ同化を広域で行う取り組みを始めた。
- (4)1280メンバのNICAM-LETKFを用いて改良型マイクロ波探査計(AMSU-A)観測データに対する鉛直方向の共分散局所化のインパクトを調査した。
- (5)10240メンバのSPEEDY-LETKFの予報誤差共分散行列を固有値分解し、その構造を調査した。
- (6)誤差分布の非ガウス性を考慮するSPEEDY-LETKFを開発し、1280メンバを用いて実験を行った。
- (7)SCALE-LETKFを用いたモデルパラメータ推定実験に向けた準備として、パラメータ感度実験を行った。
- (8)SCALE-LETKFを用いて気象衛星ひまわり8号の観測データを同化するためのシステム開発を行った。
- (9)ダム操作の高度化に向けた研究として、SCALE-LETKFに

よるリアルタイムデータ同化実験と、SCALE-RM による降水事例予報実験に着手した。

16. 京のアーキテクチャに最適なソフトウェアの高度化手法の研究開発

【背景】

プロセッサなどの計算機アーキテクチャとソフトウェアの関連性が高まっており、プログラムの高速化のためにアーキテクチャの知識が必須になっている。国際的にも、ハードウェアとソフトウェアの共設計の必要性が認識されている。「京」を使いこなし、さらに効果的に使えるようにするためには、「京」のアーキテクチャと関連した知識、プロセッサ固有の高速化のノウハウの蓄積が必須である。

【研究目的】

本研究では、生命化学・創薬分野に関わる計算技術の開発高度化を目的とする。具体的にはタンパク質と薬剤分子を対象としたドッキングシミュレーションや分子動力学シミュレーションにより、創薬ターゲットに対して高い結合活性を有する医薬品候補を予測する手法を、「京」上で効率的に動作させるための手法を開発高度化し、「京」の創薬応用を加速することを目的とした高度化研究を実施する。

【成果概要】

タンパク質と化合物の結合構造を予測するためのドッキング計算プログラム:rDock に対して、「京」上での並列計算を可能にするための改良を実施し、大規模な化合物ライブラリに対して高速にドッキング計算できる環境を整えた。更に、タンパク質と化合物の結合自由エネルギー (ΔG) を分子動力学シミュレーションに基づいて計算する MP-CAFEE 法を改良し、更に計算精度を上昇させることに成功した (Araki M. et al., J. Chem. Inf. Model, 56 (12), 2445 (2016))。

17. ポスト「京」の開発

【背景】

ポスト「京」開発において、各重点課題ターゲットアプリケーションの「京」上での単体性能(ノード内性能)、及び大並列時の通信パターンの特長など、ポスト「京」での性能推定及びコデザインに用いるほか、各ターゲットアプリケーションのファイル I/O 性能について、「京」の現状での性能、ポスト「京」における性能推定のために「京」の計算資源を利用する。また、システムソフトウェアのうち通信ライブラリ及びファイル I/O の開発のた

めにも利用する。

【研究目的】

ポスト「京」の基本設計で必要となる「京」の性能評価及びアプリケーション及びシステムソフトウェアの「京」上でのチューニングを行う。

【成果概要】

ポスト「京」コデザインを進める上でのターゲットアプリケーション群の性能評価基準プラットフォームとして、コデザインの進展に応じた計算性能の再評価、アプリ開発におけるデバッグ環境としての利用、開発検証用プラットフォームとしての利用など、広い目的に「京」を利用した。また、数値計算ライブラリの開発検証、及びファイル I/O 強化のための MPI-IO の改善手法を評価するための利用も行なった。

18. 京における大規模グラフ探索アプリケーションの最適化に関する研究開発

【背景】

現在、国内を対象とした個々の企業の財務諸表や債務・債権者間の信用関係や取引関係といった、従来、金融機関が単独で公表していた統計情報と比べて非常に詳細なデータベースの整備が進んでいる。これらのデータベースを元に、金融機関及び企業をノードとし、信用関係や取引関係をエッジとした生産ネットワークと呼ばれる重み付き有向グラフを作成し、グラフの一部のノードからネットワーク全体への経済的なストレス(評価量)の伝搬をシミュレーションすることで、経済システムの状態を定量化する試みが行われている。系全体の現象を素過程に分解して評価することが困難な複雑系と呼ばれる領域で、最終的にシミュレーションによって得られた知見により、金融危機や震災等により、ある企業でデフォルトが発生した場合の経済システム全体の影響度を予め計ることができるため、経済政策に示唆を与えることが期待されている。

本課題では経済シミュレーションの手法として、Battiston らが提案した DebtRank アルゴリズムを用いる。DebtRank アルゴリズムは、ネットワーク上に評価量を伝搬させる際に、最短経路探索問題と同様に始点ノードから他の全ノードに対して探索を行う。アルゴリズムの特性上、各始点の探索は独立して行うことができるため、生産ネットワークのデータサイズが一般的なサーバに搭載されているメモリ量で足りている場合は、複数の始点ノードを単位として MapReduce のようなフレームワークを用いて分散

処理させることで、比較的簡単にジョブ全体のターンアラウンドタイムを小さくすることが期待できる。その一方で、経済シミュレーションの高性能計算の報告例は少なく、とくに DebtRank アルゴリズムの性能向上や並列化に関する報告は一切ない。

【研究目的】

本課題は、経済関係のビックデータ解析に資するために、「京」上での大規模グラフ探索処理の最適化に関する研究開発を行う。具体的には、アプリケーションの単体性能及びディスク I/O を含めた大規模実行性能のボトルネックを定量的に評価、最適化を実施することで、処理全体のターンアラウンドタイムの短縮を図る。昨年度までの開発研究で、DebtRank アルゴリズムを用いたシミュレーション環境の「京」への移植が完了している。さらに、K MapReduce を利用した「京」における Embarrassingly parallel なジョブ実行についての基礎評価が完了している。一方で、実運用環境下での評価であるので、測定にはばらつきが避けられない。今年度は、プロダクション・ランを見据えて、本手法により安定的に処理時間（ターンアラウンドタイム）が短縮できるか算出するために複数回の測定を行う。

検証によって、今後さらに普及が見込まれる多数演算コア環境におけるグラフ解析手法及び Embarrassingly parallel の知見が得られることが期待される。最終的に、「京」で実行されるアプリケーションの多様性の促進に資する。

【成果概要】

数千ジョブ規模に分割可能な Embarrassingly parallel な問題に対して、バルクジョブモードで K MapReduce を利用することで大幅な処理時間（ターンアラウンドタイム）の短縮が可能であることを検証した。実運用環境下では、投入時のジョブの混み具合の影響によりターンアラウンドタイムに幅があるため、複数回の測定に基づく定量的な評価を行った。評価により、実運用環境下においても、当初数日かかっていた計算が現実的な時間内で計算が完了することを確認できた。

なお本年度は、ポスト「京」の萌芽的課題のサブ課題（多層マルチ時空間スケール社会・経済シミュレーション技術の研究・開発：マクロ経済シミュレーション）に採択されたため、年度開始すぐに計算リソースを返却した。今後は、萌芽的課題において、発展的に開発研究が継続される予定である。

19. 国際連携による京高度化に資するソフトウェアの評価

【背景】

There have been a wide variety of activities to develop software for supercomputers in world-wide HPC communities. It could be beneficial for the users of the K computer to make such software available and performant on K as well.

【研究目的】

RIKEN AICS has collaborative research activities with a number of leading research institutes. In this project, we exploit our existing collaboration for inviting external researchers to explore the K computer and encouraging porting high-impact software to K. More specifically, we focus on neural simulation, efficient file I/O, fault tolerance, and numerical algorithms.

【成果概要】

In this project period, we were able to successfully improve the scalability of the NEST neural simulation software package. Its previous version had a problem of increasing memory consumption as the number of processes increases. The new version employs a data layout that avoids the problem, and our experimental evaluation using up to 1000 processes validated flat memory consumption. We also extended collective communications used in NEST, improving inter-node scalability significantly.

20. アプリケーション高度化による京の運用効率化

【背景】

「京」の安定的かつ効率的な運用を提供するべく、計算資源の有効活用は重要な問題である。有効活用例として、アプリケーションの性能向上や電力削減による運用効率改善などがあげられる。本課題では、これらの問題を解決すべく、運用状況を解析するシステムやツールの整備、性能向上に資するツール群の整備、登録機関や研究チームとの連携によるアプリケーションの性能向上を推進した。本業務では、運用に関わる情報解析が必要不可欠であり、「京」高度化調整枠の中で実施する必要がある。

【研究目的】

ソフトウェア技術チームは、「京」の安定的かつ効率的な運用を提供するための開発・研究及び研究支援を実施している。課題は以下の 3 つのカテゴリに分類できる。(1)「京」の運用では、チームで開発したツールなどを用いたシステム性能の監視を行う。(2)省電力、運用効率改善について、運用状況を解析

するシステムやツール、作業フローを作り、構築したシステムを用いた解析を実施する。(3)性能改善に対する取り組みでは、HPCGのチューニング、研究チームや登録機関、外部の研究機関と連携して、Gordon-Bell 賞応募アプリケーションの解析・高度化・チューニングのサポート、各種カーネルを用いた性能向上に向けた協力を行う。

【成果概要】

本年度は、「京」の安定的かつ効率的な運用を目指し、3つのカテゴリーに分類される課題に取り組んだ。「京」の運用関係については、整備中のシステム性能データやノウハウに基づいて、利用者支援に資することができ、チェックシートによるシステム性能の監視及びMPI性能評価を整理し公開した。省電力、運用効率改善については、新たにMDS負荷という指標を導入し、ジョブ解析システムに取り入れ、解析手法を確立した。性能改善に対する取り組みにおいて、HPCGベンチマークでは更なる高度化を行った。0.601PFLOPSの性能を達成し、LINPACK性能では「京」は7位であるにも関わらず、世界第1位にランクインした。FFBカーネルの高度化では、更に新しい高度化知見も得られた。HPGMG-FVや、運用改善効率の高いアプリケーションについてユーザと協力して性能向上に向けた高度化や評価を開始した。

21. 京の利用環境の高度化のための研究開発

【背景】

「京」は2012年9月の共用開始から4年以上が経過しているが、実アプリケーションでは高い実効効率を保っており、幅広い分野の多くのユーザが利用している。ユーザからの多様なニーズに応えるためには、引き続き「京」の機能の改良及び高度化を行い、システムとしての競争力を維持・向上させることが必要である。

【研究目的】

「京」が、研究基盤として長期間に渡り、安定的に機能するためには、利用ニーズに合わせた最適化と高度化が不可欠である。

特に、システムコンパイラ、プログラム開発支援ソフトウェア、計算ライブラリ、利用者ポータルなどのユーザ利用環境については、本システム的设计時点から標準規格が改版されているものがあり、このままでは将来的に他のシステムとの互換性が担保できなくなる可能性がある。そこで、改版された標準規格に対応するための、ユーザ環境ソフトウェアの改良を実施する。

また、ジョブスケジューラなどについては、運用を通じて機能強化の必要性が生じるため、これらのシステムソフトウェアについては、運用状況の分析から問題点を把握し、必要な機能強化を実施する。

【成果概要】

「京」の運用状況を分析し問題点に対する対策を行うとともに、運用状況分析に必要な情報を収集する環境の構築などを行った。また、コンパイラの新標準規格対応や機能強化のほか、保守の最適化に関する研究を行った。

22. HPCI SSOによる「京」アクセスの調整高度化

【背景】

当チームは、文部科学省より委託事業として「HPCIの運営」(2012-2016年度)における「HPCI技術企画・調整」業務を担当している。HPCIは「京」や大学の情報基盤センター等の計算機資源及びHPCI共用ストレージ、高速ネットワークを用いて共通運用を行っており、当チームはシステム運用の全体にわたる技術面での統括的な業務を実施している。この中で、HPCIシステムの運用に際して生じる技術的不具合の原因究明や対応策の検討を行うにあたり、HPCIアカウントによるSSO(シングル・サイン・オン)アクセス障害時やHPCI共用ストレージ・HPCIアーカイブシステムの機能改善に伴う動作検証、障害時の調査や対応が不可欠となる。

【研究目的】

HPCIアカウントによるSSOアクセスや「京」ログインノードからHPCI共用ストレージアクセスの障害時には問題個所の切り分けのためHPCI技術チームによる検証が不可欠となるため。

【成果概要】

HPCIヘルプデスク経由でHPCI利用ユーザからの問い合わせが発生した際、動作検証、障害対応等を迅速に行うことが可能となり、また「京」グローバルファイルシステム領域とHPCI共用ストレージ及びHPCIアーカイブシステム間のファイル転送性能の調査と改善、「京」と連動したアカウント登録方法の改善を実施するなど、ユーザサポート及び運用面での成果があった。

また、「京」ログインノードにおけるGSI認証の動作検証、「京」ログインノードでの問題か、HPCIユーザ専用ログインノードであるhpci-gate.aics.riken.jpでの問題かの切り分けと障害対応、動作検証を実施した。

23.「京」の利用支援

【背景】

本課題は、「共用法」が定める利用支援として、利用相談、プログラムの動作確認及び高度化等の利用支援を行うものである。

【研究目的】

本課題では、「共用法」が定める利用支援として、利用相談、プログラムの動作確認及び高度化等の利用支援を行う。利用支援は、一元的相談窓口(ヘルプデスク)への依頼、あるいは利用実績等から利用支援の必要があると RIST(登録機関)が判断したときに利用支援を実施する。その対象は、一般利用枠(若手人材育成、産業利用を含む)及び、ポスト「京」重点課題枠の課題に属する利用者である。

【成果概要】

本課題の実施期間においては、割当資源量の35%を使用して、プログラムの動作確認及び高度化等の利用支援を行った。その結果、2016年度第4四半期における一般利用枠課題の利用促進につながった。

4-2 共用法第12条に基づく調査研究

RIST では、登録機関として、以下の表 2 に示す課題について、共用法第 12 条に基づく調査研究を実施した。

表 2 共用法第 12 条に基づく研究 課題一覧

	課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	所属	割当資源量 (ノード時間積)	利用実績 (ノード時間積)
1	hp160236	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	山木 大輔	RIST 利用支援部	2,000	1,918

1. 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

【研究目的】

量子化学分野のオープンソースプログラムについて並列化・最適化手法、及び利用方法を調査し、蓄積したノウハウを用いて利用支援に資することが本研究の目的である。

【成果概要】

欧州の研究者を中心に近年開発された大規模計算向けの量子化学計算プログラム LSDalton の「京」への移植と、その動作検証・性能評価を行った。

移植においては、「京」のコンパイラ機能を活用することで、コード本体の変更を最小限に抑えた。動作検証・性能評価においては、

水分子20量体のHartee-Fock/6-31G(dp)計算をハイブリッド並列で実行し、計算速度のスレッド数・ノード数依存性を調査した。計算速度の基準(以下「基準計算」という)は、ノード数 8・スレッド数 1 での実行時間で定めた。この基準計算に対し、(1) ノード数を 8 に固定し、スレッド数を 1 から 8 へ増加させたときの速度向上、(2) ノード当たりのスレッド数を 1 に固定し、ノード数を増加させたときの速度向上をそれぞれ評価した。設定(1)では、3.6 倍の速度向上であった。一方、設定(2)では、基準計算の 8 倍のノード数で 3.2 倍の速度向上であった。コア数を同数としたとき、設定(1)は設定(2)と比較して同等以上の速度向上であった。よって、LSDalton に実装されたハイブリッド計算コードは「京」において有効に動作しており、「京」のノード当りのコア数に相当する 8 スレッドまで速度向上を確認できた。

5 研究会等

5-1 シンポジウム・会議・報告会

AICS 及び RIST は、「京」に関する研究成果の公表・普及、研究交流等を目的として、主催あるいは共催により、「京」に関する研究会等(シンポジウム・報告会、並びに、セミナー・ワークショップ、講習会等)を開催している。2016 年度に開催したシンポジウム・会議・報告会(参加者が 100 人程度以上であり、内容・テーマが複数にわたるもの)は、下記のとおりである。

5-1-1 第 3 回 大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム - 最先端電池材料 -

【開催日】2016 年 9 月 1 日

【会場】秋葉原 UDX カンファレンス 6 階(東京都千代田区外神田 4-14-1)

【参加者数】135 名

【主催】高輝度光科学研究センター、総合科学研究機構、RIST、ポスト「京」重点課題⑤「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」

【概要】「京」と Spring-8、J-PARC/MLF、KEK/IMSS/PF 等の大型実験施設との連携利用促進のため、毎年シンポジウムを開催している。本年は最先端電池材料をテーマとし、この分野において実施されているハイレベルの連携利用の研究事例や今後の連携利用を見据えた実験側、計算側の研究内容を紹介した。

【URL】http://www.hpci-office.jp/pages/renkei_sympo_160901

5-1-2 京×産業シンポジウム ～つながりが未来をひらく～

【開催日】2016 年 9 月 2 日

【会場】秋葉原 UDX カンファレンス 6 階(東京都千代田区外神田 4-14-1)

【参加者数】150 名

【主催】AICS、RIST

【概要】「京」の成果が産業界に広く活用されており、特に産業コンソーシアムによって、産業利用に新しい方式・価値が生まれていることを一般国民に知らしめ、理解増進を図ることを目的とし、一般・産業界を対象とした講演会を開催した。

【URL】<http://www.aics.riken.jp/library/event/ksympo2016.html>

5-1-3 第 3 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会

【開催日】2016 年 10 月 21 日

【会場】ココヨホール(東京都港区港南 1 丁目 8-35)

【参加者数】272 名

【主催】RIST

【概要】HPCI システム利用研究課題の研究成果の発表や海外の計算科学の現状並びに最新の研究分野に関する情報発信等を通して、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資することを目的として、第 3 回目となる成果報告会を開催した。

欧州の国際組織 PRACE を代表して Sergio Bernardi 博士、シンガポール国立スパコンセンターを代表して Tan Tin Wee ディレクターにより招待講演が行われた後、HPCI コンソーシアムの加藤千幸 副理事長による活動報告等が行われた。さらに、HPCI 利用研究課題優秀成果賞に選ばれた課題の口頭発表(8 課題)が行われ、またポスターセッションとして、一般利用研究課題(130 課題)の研究成果の発表、並びに協賛、協力、後援を頂いた各機関による発表・展示が行われた。ポスターセッションを中心に活発な意見交換が行われ、研究者間の情報交換や異分野の研究者間の交流を幅広く行うことができた。

【URL】http://www.hpci-office.jp/pages/h2810_houkokukai

5-1-4 第 7 回 AICS 国際シンポジウム

(The 7th AICS International Symposium)

【開催日】2017 年 2 月 23 日～24 日

【会場】神戸大学先端融合研究環統合研究拠点コンベンションホール(兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-48)

【参加者数】103 名(2 月 23 日)、70 名(2 月 24 日)

【主催】AICS

【概要】エクサスケール・ポストムーア時代の計算機科学・計算科学の在り方について、数値計算アルゴリズムの側から方向性と可能性を議論した。具体的には、近年大きな成果をあげている音速抑制法に代表される、陽解法化のアプローチ、FMM 等のノード間通信を削減するアプローチといった、エクサスケールシステムで問

題になる演算速度とメモリアクセス・ノード間通信の速度のギャップを埋めるアルゴリズム、また究極的には問題となる浮動小数点演算事態のコストを削減する方法等について、現状と今後の方向について議論した。

【URL】 <http://www.aics.riken.jp/AICS-Symposium/2017/>

5-1-5 見える化シンポジウム 2017

～シミュレーションの価値～

【開催日】 2017年3月11日

【会場】 日本橋ライフサイエンスハブ(東京都中央区日本橋室町1-5-5)

【参加者数】 123名

【主催】 AICS

【概要】スパコンやシミュレーションを中心としたサイエンスの広報に関する課題整理と解決に向けた議論を行い、スパコンやシミュレーションの認知度・理解度向上の一助とすることを目的に、研究者・広報担当者・一般・メディアなどを対象に開催。講演では研究者の他、マスコミやアーティスト等の立場から見た「シミュレーションの価値」について各講演者が論じた。またサイエンス作家の竹内薫氏による特別講演「サイエンスをどう社会に伝えるか」を実施し、多くの参加者の関心を集めた

【URL】 <http://www.aics.riken.jp/library/event/mieruka.html>

5-2 研究会・ワークショップ

2016 年度に開催した「京」に関する研究会・ワークショップ(参加者が 100 人程度以下であり、特定の内容・テーマを対象としたもの)は、以下のとおりである。

5-2-1 第 22 回 量子系分子科学セミナー

【開催日】2016 年 5 月 17 日

【会場】AICS(兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26)

【参加者数】11 名

【主催】AICS 量子系分子科学研究チーム

【概要】講演者は理研仁科加速器研究センターの肥山 詠美子 准主任研究員で「量子力学的3体・4体問題の解法とその原子分野への応用」と題した講演を行った。

【URL】http://labs.aics.riken.jp/nakajimat_top/seminar_j.html

5-2-2 第 6 回 理研・京大合同データ同化研究会

【開催日】2016 年 9 月 14 日

【会場】AICS(兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26)

【参加者数】36 名

【主催】AICS データ同化研究チーム

【概要】理研 AICS・データ同化研究チームと京大数学・坂上研究室との間の数学応用連携を実質的なものとして深めるため、それぞれの研究室の活動を交互に紹介し、データ同化に関する数理と応用の議論を深めて、参加者の意識共有を図った。

【URL】

http://www.data-assimilation.riken.jp/jp/events/aics_ku_ws_2016fall/index.html

5-2-3 第 2 回材料系ワークショップ

【開催日】2016 年 10 月 4 日

【会場】秋葉原 UDX 4 階 NEXT-1(東京都千代田区外神田 4-14-1)

【参加者数】89 名

【主催】RIST

【概要】古典分子動力学アプリケーションの中でも特に利用者の多い LAMMPS を始めとして、OCTA や MODYLAS などの研究活用事例や、これらを使った大規模計算を行うためのノウハウ、分子動力学アプリケーションにおけるチューニング

手法などの話題を取り上げた。さらに、各アプリケーションの HPCI(全国の研究機関に設置されているスーパーコンピュータ)での動作状況や、性能情報、支援体制などを紹介した。

【URL】http://www.hpci-office.jp/pages/ws_material_161004

5-2-4 理研データ同化ワークショップ

【開催日】2016 年 10 月 14 日

【会場】AICS(兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26)

【参加者数】34 名

【主催】AICS データ同化研究チーム

【概要】「データ同化をハブとした数理学、実験・観測科学、シミュレーション科学の融合研究のイノベーションハブの形成」に取り組むためのキックオフ。様々な応用分野におけるデータ同化研究の課題及び展望を共有、研究者間の交流を促進し、新たな研究を生み出すデータ同化研究コミュニティの形成に向け、実質的な一歩となった。

【URL】

http://www.data-assimilation.riken.jp/jp/events/riken_da_ws_2016/index.html

5-2-5 第 1 回目「京」で使える OSS ! LAMMPS 講習会初級編

【開催日】2016 年 10 月 19 日

【会場】計算科学振興財団(兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-28)

【参加者数】11 名

【主催】AICS

【共催】計算科学振興財団、RIST

【概要】「京」の産業利用において最も利用実績が多いアプリケーションの1つである古典分子動力学計算アプリケーション LAMMPS について、これから使ってみよう方へ初級編の講習会を開催した。

【URL】http://www.j-focus.jp/event_seminar/AICSsoft20161019.html

5-2-6 理研データ同化合宿(基礎編)

【開催日】2016 年 11 月 14 日～18 日

【会場】AICS(兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26)、ニチイ学館(兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-5)

【参加者数】10 名

【主催】 AICS データ同化研究チーム

【概要】「データ同化をハブとした数理学、実験・観測科学、シミュレーション科学の融合研究のイノベーションハブの形成」活動の一環として、データ同化に興味を持つ大学院生や若手研究者等を募り、参加者自身の手によってデータ同化システムを実装する演習を行った。データ同化コミュニティの拡大やレベルアップにも貢献。

【URL】

http://www.data-assimilation.riken.jp/jp/events/riken_da_tr_2016/index.html

5-2-7 第23回 量子系分子科学セミナー

【開催日】 2016年11月18日

【会場】 AICS(兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-26)

【参加者数】 12名

【主催】 AICS 量子系分子科学研究チーム

【概要】 講演者は Indian Association for the Cultivation of Science の Rahul Maitra 博士で「Effective and Efficient Description of Molecular Potential Energy Surface: Single Reference vs. Multi Reference Coupled Cluster Theory」と題した講演を行った。

【URL】http://labs.aics.riken.jp/nakajimat_top/seminar_j.html

5-2-8 第4回 OpenFOAM ワークショップ

— 大規模並列実行に向けた高速化とプリ・ポスト処理への取り組み —

【開催日】 2016年12月16日

【会場】 秋葉原 UDX6 階(東京都千代田区外神田4-14-1)

【参加者数】 61名

【主催】 RIST

【概要】 流体解析のオープンソース最も利用されているソフトウェアの1つである OpenFOAM を取り上げ、「大規模並列実行に向けた高速化とプリ・ポスト処理への取り組み」をテーマとして、実際の活用事例、RIST がこれまでに実施した移植や高速化事例に関する情報を紹介した。

【URL】 http://www.hpci-office.jp/pages/ws_openfoam_161216

5-2-9 International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics 2017

【開催日】 2017年1月9日～10日

【会場】 AICS(兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-26)

【参加者数】 45名

【主催】 AICS 量子系分子科学研究チーム

【概要】 超並列スーパーコンピュータのための量子化学・物性物理分野における計算プログラム構築にあたって、実際にプログラム開発に携わっている国内外の第一線で活躍する研究者による講演を通し議論することで、ノウハウを学ぶ。それにより、ソフトウェアの開発・普及・サポートが可能な人材の育成を目的とする。

【URL】 http://labs.aics.riken.jp/nakajimat_top/mpqcp2017_ws.html

5-2-10 第3回材料系ワークショップ

～計算物質科学を拓く第一原理計算とその機能モジュール～

【開催日】 2017年2月23日

【会場】 秋葉原 UDX 4 階 NEXT-1(東京都千代田区外神田4-14-1)

【参加者数】 109名

【主催】 RIST

【概要】 第一原理計算の話題を中心とし、第一原理計算の専用機能や、ポストアプリケーション、GUI 支援ツール、また物質材料科学とデータ科学を融合させるマテリアルズインフォマティクスへの取り組みを紹介した。さらに、産官学連携推進のためのより良い関係構築、枠組作りのために、パネルディスカッションにて有益な情報交換、意見交換を行った。

【URL】 http://www.hpci-office.jp/pages/ws_material_170223

5-2-11 Frontiers in Computational Biophysics and Biochemistry, GENESIS Tutorial

【開催日】 2017年2月27日～3月1日

【会場】 理研 融合連携イノベーション推進棟(神戸市中央区港島南町6-7-1)

【参加者数】 約60名

【主催】 AICS 粒子系生物物理研究チーム

【概要】 計算生物物理及び計算生物化学の研究の最前線で活躍する研究者を国内外からお呼びし、ワークショップ形式で今後の

研究についての議論を行った。さらに、若手研究者、学生向けの分子動力学プログラム GENESIS のチュートリアルを行うことで、計算機構で開発したソフトウェアの海外普及・展開をはかった。

【URL】

http://www.riken.jp/TMS2012/tms/misc/ws_fcbb_2017/index.html

5-2-12 The 3rd RIKEN International Symposium on Data Assimilation (RISDA2017)

【開催日】 2017年2月27日～3月2日

【会場】 AICS(兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-26)

【参加者数】 115名

【主催】 AICS データ同化研究チーム

【概要】 「データ同化をハブとした数理科学、実験・観測科学、シミュレーション科学の融合研究のイノベーションハブの形成」活動の一環。地球科学のみならず生命科学、脳科学等、応用分野の取り組みを共有・議論。各分野の取り組みや、異なる分野間で共通した問題について議論を深めた。データ同化研究コミュニティの拡大にもつながった。

【URL】 <http://www.data-assimilation.riken.jp/risda2017/>

5-2-13 第7回 NTChem ワークショップ

【開催日】 2017年3月15日

【会場】 理化学研究所 東京連絡事務所(東京都中央区日本橋1-4-1)

【参加者数】 30名

【主催】 AICS 量子系分子科学研究チーム

【概要】 NTChemを実際に研究に利用している講師の方々から実例を中心に紹介していただいた。また、ユーザーからの要望をいただくことで、ユーザーの利用支援も行った。

【URL】 http://labs.aics.riken.jp/nakajimat_top/ntchem7th_ws.html

5-2-14 情報・データ科学との連携・融合による物性物理・量子化学の新展開

【開催日】 2017年3月22日～23日

【会場】 AICS(兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-26)

【参加者数】 80名

【主催】 AICS 量子系物質科学研究チーム、AICS 量子系分子科学研究チーム

【概要】 計算科学研究機構に設置されている「京」コンピュータを始めとした大規模並列計算機による材料設計は、今後の科学技術の発展に対して非常に重要な研究課題の一つとなっている。今回、大規模並列計算機の利用によって今後の材料設計を含む物性・量子化学分野の発展に寄与することが期待されている分野の一つである「機械学習」に焦点を当て、当該分野で活躍されている研究者の方々に講師としてお招きした。本研究会では基礎的事項のレクチャーから最近注目を集めている研究課題への応用までの話が展開された。

【URL】

<http://www.aics.riken.jp/labs/cms/workshop/20170322/index.html>

5-2-15 International workshop on numerical methods and simulations for materials design and strongly correlated quantum matters

【開催日】 2017年3月24日～25日

【会場】 AICS(兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-26)

【参加者数】 58名

【主催】 AICS 量子系物質科学研究チーム、AICS 量子系分子科学研究チーム

【概要】 計算科学研究機構では平成24年度から計算科学振興財団(FOCUS)が実施する研究教育拠点(COE)形成推進事業の助成を受けながら、「京コンピュータ利用による新材料設計」を研究課題として研究に取り組んできた。この助成によって達成された研究成果の総まとめを兼ねた国際ワークショップを開催し、最先端の研究に取り組む国内外の研究者間の情報交換や議論を行うことで、大規模並列計算による強相関系手法の高度化・物質設計の今後の在り方についての方向性を提示した。

【URL】

<http://www.aics.riken.jp/labs/cms/workshop/20170324/index.html>

5-2-16 AICS 公開ソフト講習会

【開催日】 2016年4月21日、4月27日、5月11日、6月3日、6月22日、7月6日、7月27日、8月10日、9月7日、10月5日、10月26日、12月8日、2017年1月13日、2月8日、2月22日、3月10日、3月15日、3月21日、3月28日

【会場】 計算科学振興財団(神戸市・ポートアイランド)、HPCI アクセスポイント東京(RIST 7F / 東京都・品川区)、AICS(1F / 神戸

市・ポートアイランド)

【主催】 AICS

【共催】 計算科学振興財団、RIST

【参加者数】合計 74 名(全 19 回)

【概要】AICS や HPCI 戦略プログラム等で開発または「京」向けに最適化した公開ソフトウェアを、より多くの方に使っていただけるよう、東京・神戸にて定期的に講習会を開催した。

【URL】http://www.aics.riken.jp/jp/outreach/aicsoft_training/

6 広報活動

6-1 広報活動の概要

AICS と RIST は、一般市民に加えて、「京」の将来の利用者(企業関係者、青少年等)、マスメディア、政治家、国・地方自治体関係者等の理解を得るため、互いに連携して広報活動を行っている。

2016 年度に行った広報活動の概要は、以下の通りである。

1. マスメディアを通じた情報発信 (6-2 参照)

「京」やスパコンを利用した研究に関する記者向けの勉強会を 1 回実施した。2016 年度のリリースの発信は 22 件であった。そのうち、「京」の利用者募集・選定に関して 4 件、「京」に関連する成果や受賞に関して 9 件のプレスリリースを行った。新聞・雑誌・テレビ等への掲載数は 500 件以上であった。

2. ウェブサイト・制作物 (6-3 参照)

ウェブサイトについて、AICS ではウェブサイトの更新、広報誌関連のコンテンツの拡充、Facebook での情報発信を行った。RIST では、2015 年度(2015 年 4 月～2016 年 3 月)利用分の一般枠課題の利用報告書を公開した。

制作物については、AICS は広報誌「計算科学の世界」について、no.13 と no.14 の 2 号を新たに発行した。また AICS では、新たに「京」の研究成果を可視化し、成果を伝えるための映像(動画)と、研究者がコンピュータ・シミュレーションの手法などを一般向けに紹介する動画を、各 1 本制作した。

RIST では、広報誌「京算百景」について Vol. 14 から Vol. 17 までの計 4 号を発行した。また、昨年発行した「成果事例集Ⅲ」の英語版を海外への発信強化のために作成し、昨年度に引き続き「成果事例集Ⅳ」(日本語版)を発行した。

3. イベント (6-4 参照)

専門的な情報から、一般にわかりやすい情報まで、イベントを通じた直接対話形式の広報活動を実施している。

AICS と RIST は、連携して、研究者、利用者向けに国際会議展示を ISC'16(ドイツ)及び SC16(アメリカ合衆国)において行うなど、海外及び国内のシンポジウム・展示会への参加を行い、ブース展示や特別講演などを設けて広く専門家向けに情報発信を行った。

一般向けには、「スーパーコンピュータ『京』を知る集い」を宮崎、岡山、宇都宮で開催した。そのほか、出前授業等(計 4 回)や校外学習・修学旅行等に対応した。

年 1 回の一般公開(神戸地区)に AICS、RIST は近隣諸団体とともに出展し、AICS 施設では 2,254 名の来場者を迎えた。RIST は、計算機歴史博物館の展示を行った。また、AICS は理化学研究所の他事業所で行われた一般公開で、ブース展示やポスター展示を行った(和光、播磨、仙台、横浜、大阪)。

4. 見学・視察対応 (6-5 参照)

研究機関、企業、学校、政界、国・地方自治体関係者などを受け入れた。AICS では 2016 年度の見学・視察者数は 12,322 名であった。

6-2 マスメディアを通じた情報発信

6-2-1 記者勉強会

AICS及びRISTは、「京」を利用した研究成果について、論文等の学術発表と並行して一般向けに情報発信を強化している。その一環として、マスメディアの活用を念頭に記者の理解度向上を目指し、記者勉強会を開催した。2016年度における、「京」に関する記者勉強会の開催は下記のとおりである。

1. 「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果に関する記者勉強会

【開催日】 2016年10月14日

【場所】 文部科学省17階 研究振興局連絡室（東京都千代田区霞が関三丁目2番2号）

【主催】 RIST

【概要】 成果報告会で口頭発表される HPCI 利用研究課題優秀成果賞の中の3課題について、研究内容や成果を、わかりやすく説

明した。

・物質中を走る電子の波 ～「京」でのものづくり～（鳥取大学准教授 星 健夫）

・国産技術で迫る「形の無いたんぱく質」の正体（立命館大学生命科学部 助教 笠原 浩太）

・経済モデルの構造推定と政策分析への応用（内閣府経済社会総合研究所 研究官 菅 史彦）

【参加者】 参加者11名（記者・科学ライター3名の他、文部科学省からも参加）

6-2-2 プレスリリース及び取材対応

2016年度に AICS 及び RIST が行ったプレスリリースは表1のとおりである。また、表2にメディアへの掲載件数、表3に概要を示す。

表1 プレスリリース一覧

日付	件名	発表者
2016年05月25日	北極域への「すす」の輸送メカニズムを解明 ー「京」を用いた超高解像度の全球大気汚染物質シミュレーションー	AICS、東京大学、九州大学、国立環境研究所
2016年7月13日	スーパーコンピュータ「京」が Graph500 で世界第1位を獲得 ービッグデータの処理で重要となるグラフ解析で最高の評価ー	九州大学、東京工業大学、理化学研究所、スペインのパルセロナ・スーパーコンピューティング・センター、富士通株式会社
2016年07月20日	火星ダストデビルの性質を解明 ー火星天気予報や火星有人探査への一歩ー	AICS、北海道大学、神戸大学、松江工業高等専門学校、九州大学、京都大学
2016年08月05日	京×産業シンポジウム ～つながり未来をひらく～ 開催について	AICS、RIST
2016年08月08日	平成29年度スーパーコンピュータ「京」・HPCI システム利用研究課題の募集(年二回募集の第一回目)について	RIST
2016年08月09日	「京」と最新鋭気象レーダを生かしたゲリラ豪雨予測 ー「ビッグデータ同化」を実現、天気予報革命へー	AICS、情報通信研究機構、大阪大学、科学技術振興機構
2016年10月05日	第3回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会の開催について	RIST
2016年11月01日	バクテリア細胞質の全原子分子動力学計算 ースーパーコンピュータ「京」で複雑な構造と運動を明らかにー	AICS、ミシガン州立大学
2016年11月10日	『スパコンを知る集い in 宮崎』開催について	AICS

2016年11月16日	「京」が性能指標(HPCG)で世界第1位を獲得 ー産業利用など実際のアプリケーションにおける高い性能を証明ー	AICS、富士通株式会社
2016年11月18日	高性能計算技術の世界最高峰の会議で最優秀論文賞を受賞 ースパコン向けアプリケーション開発を大幅に容易にする手法を開発ー	AICS、東京工業大学、科学技術振興機構
2016年11月18日	スーパーコンピュータ「京」が Graph500 において4期連続で世界1位を獲得 ービッグデータの処理で重要となるグラフ解析で最高の評価ー	九州大学、東京工業大学、理化学研究所、富士通株式会社、科学技術振興機構
2016年12月02日	式が書ければ「京」が使える ー高度なプログラムを自動生成できる新言語「Fomura」を開発ー	AICS、千葉大学、神戸大学、京都大学、富士通株式会社
2016年12月19日	平成29年度スーパーコンピュータ「京」・HPCIシステム利用研究課題(年二回募集の第一回目)の応募状況について	RIST
2017年01月11日	理化学研究所とフランスの原子力・代替エネルギー庁が計算科学及び計算機科学分野における研究協力取り決めに締結	AICS
2017年1月18日	『スパコンを知る集い in 岡山』開催について	AICS
2017年02月14日	平成29年度「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題募集(年二回募集の第一回目)の選定結果について	RIST
2017年2月15日	水力発電用ダムの運用高度化に向けた共同研究の開始について	AICS、東京電力ホールディングス株式会社
2017年2月16日	『スパコンを知る集い in 宇都宮』開催について	AICS
2017年02月21日	平成29年度スーパーコンピュータ「京」利用研究課題の募集(年二回募集の第二回目)について	RIST
2017年2月23日	見える化シンポジウム2017～シミュレーションの価値～開催について	AICS
2017年3月1日	理化学研究所×『3D 雨雲ウォッチ～フェーズドアレイレーダ～』 ～より早くて正確なゲリラ豪雨予測のサービス化を目指し、共同研究を開始～	株式会社エムティーアイ、AICS

表 2 メディア掲載件数

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月	計
掲載(新聞・雑誌)	10	29	29	36	38	27	11	24	26	16	16	20	282
掲載(ネット)	5	18	23	24	37	12	18	38	23	6	13	17	234
放送(TV・ラジオ)	3	0	2	2	6	2	2	0	2	2	0	2	23

表 3 メディアへの主な掲載概要

掲載日・放送日	メディア名	概要	その他
2016年4月1日	教育図書「新技術・家庭 技術分野」	指導用教科書にて「京」を紹介	写真提供
2016年4月1日	開隆堂出版「技術・家庭 技術分野」	教科書(冊子版及びデジタル版)にて、「京」を紹介	写真提供
2016年4月1日	東京書籍「新しい数学(1～3)」	中学生向け教科書(冊子版及びデジタル版)にて、「京」と自動車シミュレーションを紹介	写真提供
2016年4月1日	文部科学省 情報ひろば 展示パネル「国立情報学研究所」	SINET(「京」等のスパコンに利用されている)の紹介	写真提供
2016年4月3日	NHK スペシャル「巨大災害 MEGA DISASTER II」	番組中に「京」を利用した地震津波複合災害予測の展望を紹介	「京」資料映像提供
2016年4月14日	産経新聞(兵庫・京都総合版) 科学の中身へ理研関西編～「ダイナミックな雨雲の動きを予測」	研究者によるショートエッセイ	AICS データ同化研究チーム 大塚研究員
2016年4月20日	NHK 海外向け WEB TV 「Science View」	NHK E テレ「サイエンス ZERO」の「エアロゾルが気候を支配する」を英語翻訳放送	AICS 複合系気候科学研究チーム 佐藤研究員
2016年4月25日,5月9日	週刊プレイボーイ	「京」、「京」を支える施設群を紹介	AICS 運用技術部門 塚本副部門長
2016年5月1日	Journal of Synchrotron Radiation 5月号	住友ゴムの成果を紹介	写真提供
2016年6月24日	週刊日経ビジネス	最先端の天気予報シミュレーション技術	AICS データ同化研究チーム 三好チームリーダー
2016年7月10日	BS 朝日「ニッポンの“深海”大冒険！」	南海トラフ地震津波予測	映像提供
2016年7月29日	朝日新聞(科学面)	局地豪雨予測研究の最前線	AICS データ同化研究チーム 三好チームリーダー
2016年8月9日	日本経済新聞(科学面)	記事掲載	写真提供
2016年8月16日	テレビ東京「ワールドビジネスサテライト」	ゲリラ降雨予測の研究	AICS データ同化研究チーム 三好チームリーダー
2016年8月19日	毎日新聞	「京」による気候・台風の研究	AICS 複合系気候科学研究チーム 富田チームリーダー
2016年8月24日	毎日放送「VOICE」	「京」による台風予測研究	AICS 複合系気候科学研究チーム 富田チームリーダー
2016年9月1日	雑誌「リハビリテーション」	「京」による総合防災・減災研究	AICS 総合防災・減災研究ユニット 堀ユニットリーダー
2016年9月2日	朝日新聞 WEB 講座「WEBRONZA」	天気予報を「革命する」ゲリラ豪雨予測	AICS データ同化研究チーム 三好チームリーダー
2016年9月3日	神戸新聞科学面	ゲリラ豪雨 「京」と新リーダーで直前予測	AICS データ同化研究チーム 三好チームリーダー
2016年9月5日	日本経済新聞	「京」後継機 20年にも稼働 能力100倍 創薬加速	写真提供
2016年9月9日	フジテレビ「ホウドウキョク」ネット TV	ゲリラ豪雨予測の研究	AICS データ同化研究チーム 三好チームリーダー
2016年9月9日	毎日新聞「ひまわり EYE」	未来の天気予報	AICS データ同化研究チーム 三好チームリーダー
2016年9月11日	NHK スペシャル「MEGA CRISIS」	ゲリラ豪雨予測の研究	AICS データ同化研究チーム 三好チームリーダー
2016年9月26日	Newton 11月号	「京」でゲリラ豪雨再現に成功	AICS データ同化研究チーム 三好チームリーダー
2016年9月26日	書籍「基礎から学ぶ電気電子／情報通信工学」	スパコンの簡単な紹介	写真提供
2016年10月12日	テレビ大阪「ニューリアル」	ゲリラ豪雨予測の研究	AICS データ同化研究チーム 三好チームリーダー
2016年10月24日	関西地域振興財団「KANSAI Close-up」WEB 掲載	ゲリラ豪雨予測の研究	AICS データ同化研究チーム 三好チームリーダー

2016年12月16日	BS-TBS 「密着！命の現場最前線 日本初ドクターヘリ&移動処置室の“劇的救命”に迫る！～ビッグデータが医療の未来を変える！病气予防の新常識とは？！～」	インシリコ創薬の説明におけるスーパーコンピュータ「京」の紹介として	京都大学 奥野教授、AICSからは「京」の映像提供
2016年12月22日	NHK 神戸放送局	「総合防災会議」関連取材	AICS 総合防災・減災研究ユニット堀ユニットリーダー
2017年1月1日	NHK おはよう関西	「総合防災会議」関連	AICS 総合防災・減災研究ユニット堀ユニットリーダー、大谷特別研究員
2017年1月12日	日本経済新聞	理化学研究所がフランス原子力・代替エネルギー庁との取り決めに締結	AICS フラッグシップ 2020 プロジェクト企画調整室
2017年1月16日	NHK ニュース7	「総合防災会議」関連	AICS 総合防災・減災研究ユニット堀ユニットリーダー、大谷特別研究員
2017年1月17日	SORA (Web マガジン)	ビッグデータ同化研究についてインタビュー	AICS データ同化研究チーム三好チームリーダー
2017年1月17日	テレビ東京「ワールドビジネスサテライト」たけしのニッポンのミカタ！」	武田双雲さんの仕事紹介	写真提供
2017年2月17日	CBC テレビ	海洋研究開発機構堀先生の「京」成果を紹介	「京」映像提供
2017年3月11日	電波新聞「関西エレクトロニクス特集」	「京」の産業利用例紹介	AICS 複雑現象統一的解法研究チーム 坪倉チームリーダー
2017年3月22日	朝日小学生新聞	小学生による「京」の取材	

6-3 ウェブサイト・制作物

6-3-1 ウェブサイトの管理・運営

AICS 及び RIST では、ウェブサイトでの情報発信を行っている。AICS においては一般向けから研究者・技術者向けの情報、RIST においては主として利用者選定及び利用者支援の情報となっている。

1. AICS

より一般の読者を意識した情報発信を目的とし、コンテンツの追加などを行った。

(1) 公式ウェブサイト

一般向けの公式ウェブサイトとして、「京」の成果や、イベントの告知・報告、メディア掲載情報などから、「京」の利用や稼働状況、研究内容に関する情報まで掲載。研究者・技術者向けにも役立つ情報が得られるサイトとなっている。2016 年度は、開発が進むポスト「京」に関する基本情報の掲載に加え、セミナーや研究会など、研究者の活動に関する報告の掲載を開始するなど、コンテンツの拡充を図った。戦略分野が最終年度を迎えたため、報告ページなどへの動線を設けている。また、若年層向けコンテンツのハロースパコンは、東京の科学技術館の展示もあり、安定して多くのアクセスがある(図 1)。

昨年度スタートした、ウェブサイトからの見学申込数は、増加を続け、2016 年度は毎月 34 件ほどの予約があった。

サイト全体のアクセス数は年間 199,417 件(うち英語は約 8%)と昨年より約 15%増加した。Graph500 の受賞、また、Twitter で「京」の利用報告書が話題になった時にアクセスが増加したと考えられる。



図 1 AICS 公式ウェブサイト

(2) Facebook

公式ウェブサイトには掲載されない情報なども写真とともに発信。イベントや見学などの様子などから「京」やその研究成果、研究者などを、身近に感じてもらうことを狙っている(図 2)。

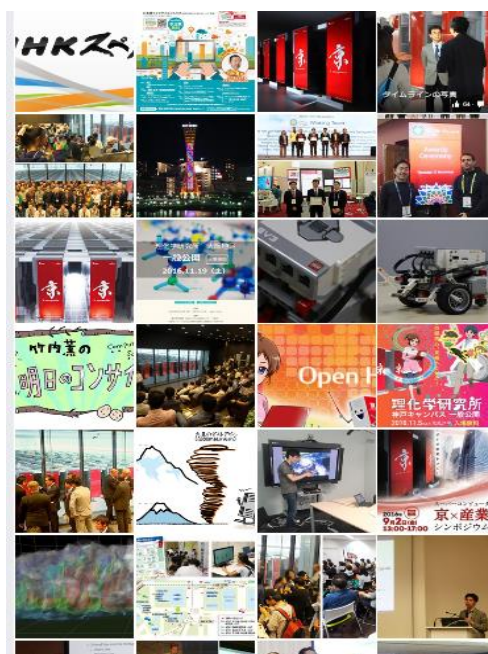


図 2 AICS Facebook

2. RIST

RIST は 2012 年 4 月 19 日より HPCI ポータルウェブサイトを経営し、課題公募の広告・受付・選定結果の発表などについて、情報発信する場として活用している。2016 年度は、2015 年度(2015 年 4 月～2016 年 3 月)利用分の一般枠課題の利用報告書が公開さ

れた。利用報告書は分野ごと、年度ごとに検索できるようになっている(図 3)。

日本語のトップページのアクセス数は、2015 年度の 61,967 件より、2016 年度は 73,737 件と 11,770 件(19%)の増加となった。

また、英語ページのアクセス数は、2015 年度が 9,266 件(月平均:772 件)に対し、2016 年度は 9,807 件(月平均:817 件)と 6%の増加であり、内容の充実がアクセス増に貢献したと言える(2016 年度の HPCI 利用研究課題募集では、外国人研究者の 2 課題が採択された)。

イベント・広報情報としては、広報誌「京算百景」の HPCI ポータルサイトからのダウンロード件数が、Vol.14:597 件、Vol.15:374 件、Vol.16:442 件、Vol.17:311 件であった(Vol.17 は、3 月発行につき集計期間が短い)。



図 3 HPCI ポータルサイトでの利用報告書の公開

6-3-2 制作物

AICS 及び RIST では、パンフレット、広報誌、ニューズレター等を制作している。2016 年度に制作、更新した制作物は下記のとおりである。

1. AICS

(1) 広報誌「計算科学の世界」

一般向け広報誌「計算科学の世界」は、主に理系高校生をターゲットとして、計算科学の魅力を紹介する広報誌である(図 4)。計算科学の最先端研究を紹介するメイン記事、高校生が研究者にインタビューを行いコラムを執筆する「研究者に聞いてみよう!」、

「ポスト『京』が目指すこと」を掲載している。2016 年度は no.13~14 の制作を行い、昨年度に引き続き、誌面や動画の閲覧やダウンロードができるよう、広報誌専用のウェブサイトに掲載した。広報誌全体のページビュー数が 12,767 件となり減少している。ただ他のコンテンツと比べると離脱率が低く、閲覧者は複数のコンテンツを見ていると考えられる。

なお、広報誌の冊子は兵庫県内のすべての高等学校、及び全国のスーパーサイエンスハイスクール指定校、関連機関など、およそ 500 か所に配布された。

・no.13 (2016 年 11 月 4 日発行)

メイン記事:ゲリラ豪雨を予測する

・no.14 (2017 年 3 月 24 日発行)

メイン記事:「京」の中で太陽黒点の 11 年周期が見えてきた

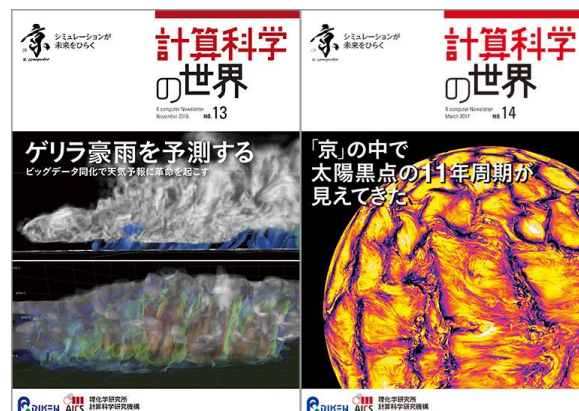


図 4 計算科学の世界 no.13~14

2. RIST

(1) パンフレット

1) 産業利用推進用パンフレット

「京」の産業利用に関して、無償公開型の実証利用、有償非公開型の個別利用、年間を通じて随時募集中であるトライアル・ユース等について、産業界へ紹介するために要点をまとめたものである。2016 年 10 月に HPCI 資源提供機関を追加するなど、一部を改定した(図 5)。



図 5 産業利用推進用パンフレット(2016 年度版)

(2) 広報誌「京算百景」

「京」を利用した研究成果や利用についての情報発信などを通じ、利用者のすそ野拡大、利用者との情報交換、「京」やスパコンに対する国民の理解増進をはかるために、広報誌「京算百景」を発行している。今年度は Vol.14～17 を発行し、利用者や関係機関などに配布するとともに、展示会や講習会でも参加者に配布した(図 6)。

「京算百景」は、「京」の利用研究成果などを紹介するメイン記事(クロスアップ)のほか、課題募集の案内、「京」で利用可能なソフトウェアの紹介などから構成されている。各号の発行日とメイン記事は以下の通りである。

- Vol.14 (2016 年 7 月 14 日発行)
 - 「京」の中で船を走らす
- Vol.15 (2016 年 9 月 28 日発行)
 - 地震による建物の損壊、避難行動までを解析
- Vol.16 (2016 年 12 月 26 日発行)
 - 燃料電池の電極表面反応の謎に挑む
- Vol.17 (2017 年 3 月 14 日発行)
 - 「京」とSPRING-8 の連携で電解質膜の構造を明らかに



図 6 京算百景 Vol.14～17

(3) 成果事例集Ⅳ

昨年度に発行した成果事例集Ⅲに引き続き、成果事例集Ⅳを 2017 年 1 月に発行した(図 7)。掲載した 5 事例は以下の通りである。

- ものづくり
 - 次世代の低騒音タイヤを目指して
- 新材料
 - 「京」が吹き込むシリコンの新しい価値・環境分野
- 生命科学
 - 不思議なタンパク質、転写因子の謎を解く
- 物質科学
 - 物質中を走る電子の波を「京」で探る
- 経済
 - 「京」で精密な経済モデルを構築



図 7 成果事例集Ⅳ

(4) 成果事例集Ⅲ (英語版)

海外向け活動強化の一環として、2016年3月に発行した「成果事例集Ⅲ」を翻訳した英語版を2016年6月に発行した(図8)。



図8 成果事例集Ⅲ(英語版)

に自然現象の解明・予測ができるのか、について感覚的に理解するための動画を制作した。

【映像提供】 神戸大学、HPCI 戦略プログラム分野 1、株式会社 UT-Heart 研究所、富士通株式会社、東京大学地震研究所、海洋研究開発機構、東京大学大気海洋研究所(HPCI 戦略プログラム分野 3)、物質・材料研究機構、計算物質科学イニシアティブ

6-3-3 映像コンテンツの更新及び新規作成

AICS は、「京」の成果を広く一般にわかりやすく広報することを目的として、映像コンテンツ(動画)の制作を行った。2016 年度に制作した映像コンテンツは下記のとおりである。

1. AICS

(1) 創薬シミュレーションが最先端医療を変える (日本語版及び英語版)

「京」による最先端医療を革新する創薬シミュレーションを紹介。がんの個別化医療を可能とする分子標的薬の探索や、薬剤耐性の仕組みを分子レベルで解明したシミュレーションにより、副作用の少ない薬が安価ですばやく開発されることを解説した。

【取材・協力】 京都大学大学院医学研究科、がん研究会、京都大学大学院理学研究科、量子科学技術研究開発機構

(2) シミュレーションってどんなことなの? (日本語版)

研究者がシミュレーションの前提や手法を楽しく解説することによって、スーパーコンピュータによるシミュレーションで、どのよう

6-4 イベント

AICS 及び RIST は、イベントを通じた直接対話による広報活動を行っている。イベントは、主として研究者・利用者向け(学会・展示会等)と、一般向け(一般公開・講演会等)に大別される。2016 年度に参加、あるいは主催したイベントは下記のとおりである。

表 4 AICS 及び RIST の参加、あるいは主催したイベント一覧

分類	開催年月日	種別	名称	備考
研究者利用者向け	2016年6月19日～23日	国際会議 (展示会含む)	ISC'16 (International Supercomputing Conference)	AICS、RIST 出展
	2016年11月13日～18日	国際会議 (展示会含む)	SC16 (Supercomputing Conference)	AICS、RIST 出展
	2016年9月7日～8日	報告会	第13回SPRing-8 産業利用報告会	RIST 協賛、展示
	2016年9月8日～9日	国内展示会	国際フロンティア産業メッセ2016	AICS 出展
	2016年9月22日～24日	国内展示会	日本機械学会 第29回計算力学講演会(CMD2016)	RIST 出展
	2016年12月12日～14日	シンポジウム	第30回数値流体力学シンポジウム	RIST 出展
	2016年12月21日	シンポジウム	第9回スーパーコンピューティング技術産業応用シンポジウム	RIST 共賛、出展
	2017年1月25日	セミナー	第9回トップセミナー	AICS、RIST 後援、出展
一般向け	2016年7月27日～28日	イベント	平成28年度子ども霞が関見学デー	AICS 出展
	2016年10月2日	講演会	平成28年度一般向けスパコンセミナー「未来へ続くスパコンの挑戦」	兵庫県、神戸市、計算科学振興財団 (AICS、RIST:共催)
	2016年10月8日	イベント	Techno-Ocean 2016 「新発見!海のせかい教室」	AICS 講演
	2016年11月5日	イベント	神戸医療産業都市・京コンピューター一般公開	AICS、RIST
	2016年12月10日	講演会	第7回 スパコンを知る集い in 宮崎 ～「京」からポスト「京」へ～	AICS
	2017年2月11日	講演会	第8回 スパコンを知る集い in 岡山 ～「京」からポスト「京」へ～	AICS
	2017年3月4日	講演会	第9回 スパコンを知る集い in 宇都宮 ～「京」からポスト「京」へ～	AICS
学校向け	2017年1月29日	イベント	第9回サイエンスフェア in 兵庫	AICS 協力
出前授業	2016年5月31日	出前授業	出前授業 大阪府立天王寺高等学校	AICS 講演
	2016年10月12日、18日	出前授業	出前授業 大阪府立天王寺高等学校	AICS 講演
	2017年1月26日	出前授業	出前授業 兵庫県立洲本高等学校	AICS 講演

6-4-1 研究者・利用者向けイベント

1. 海外開催の学会、展示会

(1) ISC'16 (International Supercomputing Conference)

【開催日程】 2016年6月19日～23日

【開催場所】 ドイツ・フランクフルト

【出展】 AICS、RIST(合同ブース)

【展示概要】 ブース展示(ポスター、映像上映)。

・TOP500 で「京」が4位、Graph 500 で「京」が1位

【来場者】 約340名



図9 ISC'16 展示の様子

(2) SC16(Supercomputing Conference)

【開催日程】 2016年11月13日～18日(展示期間:14日～17日)

【開催地】 アメリカ合衆国・ユタ州・ソルトレイクシティ

【出展】 AICS、RIST

【展示概要】

AICSブース展示(ポスター、映像提示)

・「京」、AICS での研究、ポスト「京」についてなどのポスターを中心とした展示

・HPCGで「京」が1位

・Graph 500で「京」が1位

・TOP500で「京」が4位

RISTブース展示(パネル、ポスター)

・「京」を含む HPCI の成果発信

・海外の研究者等への「京」利用機会提供の紹介

・登録機関の役割と実績の紹介

【来場者数】 AICS ブース来場者:約500名。RIST ブース:約120名。



図10A SC16 展示の様子(AICS)



図 10B SC16 展示の様子(RIST)

2. 国内開催の学会、展示会、セミナー等

(1) 第13回 SPring-8 産業利用報告会

【開催日程】 2016年9月7日～8日

【開催地】 兵庫県民会館(兵庫県神戸市)

【主催】高輝度光科学研究センター、産業用専用ビームライン建設利用共同体(サンビーム)、兵庫県、(株)豊田中央研究所、SPring-8 利用推進協議会

【出展】 RIST

【展示概要】 HPCI 産業利用についてポスター展示

(2) 国際フロンティア産業メッセ

【開催日程】 2016年9月8日～9日

【開催地】 神戸国際会議場(兵庫県神戸市)

【出展】 AICS、RIST

【展示概要】

- ・ポスター、「京」ミニチュア模型、メイキング映像提示
- ・「京」見学会開催

(3) 日本機械学会 第29回計算力学講演会(CMD2016)

【開催日程】 2016年9月22日～24日

【開催地】 名古屋大学 東山キャンパス(愛知県名古屋市)

【主催】日本機械学会

【出展】 RIST

【展示概要】 HPCI 産業利用についてポスター展示

(4) 第30回数値流体力学シンポジウム

【開催日程】 2016年12月12日～14日

【開催地】 タワーホール船堀(東京都江戸川区船堀)

【主催】 日本流体力学会

【出展】 RIST

【展示概要】 HPCI 産業利用についてポスター展示

(5) 第9回スーパーコンピューティング技術産業応用シンポジウム

～ シミュレーション技術が拓いた世界と未来への挑戦 ～

【開催日程】 2016年12月21日

【開催地】 イノカンファレンスセンター RoomA(東京都千代田区)

【主催】 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

【協賛】 AICS、RIST 他

【展示概要】 HPCI 産業利用についてポスター展示(RIST)

(6) 第9回トップセミナー ～ビジネスチャンスを生み出し産業の未来を拓くスーパーコンピュータ～

【開催日】 2017年1月25日

【開催地】神戸商工会議所会館 神商ホール(兵庫県神戸市)

【主催】 計算科学振興財団(AICS、RIST)ほか8団体後援

【出展】 AICS、RIST

【展示概要】

- ・「京」の概要と利用成果、開発中のポスト「京」の紹介(AICS)
- ・「京」を中核とする HPCI の産業利用についての紹介(RIST)

6-4-2 一般向けイベント

1. スパコンを知る集い

「京」の成果・ポスト「京」開発等、スパコンやシミュレーションの役割・意義や将来性について、理解増進を図るための講演会。2016年度は、以下のとおり3回開催した(図11参照)。

【主催】 AICS

【対象】 中学生以上の一般の方々

(1) 第7回 スパコンを知る集い in 宮崎 ～「京」からポスト「京」へ～

【開催日】 2016年12月10日

【開催地】 宮日会館 11階宮日ホール(宮崎市高千穂通1-1-33)

【参加者数】 163名

【URL】 <http://www.aics.riken.jp/shirutsudo/meeting24.html>

(2) 第8回スパコンを知る集い in 岡山 ～「京」からポスト「京」へ～

【開催日】 2017年2月11日

【開催地】 岡山コンベンションセンター 3階コンベンションホール(岡山市北区駅元町14-1)

【参加者数】 209名

【URL】 <http://www.aics.riken.jp/shirutsudo/meeting25.html>

(3) 第9回スパコンを知る集い in 宇都宮～「京」からポスト「京」へ～

【開催日】 2017年3月4日

【開催地】 コンセーレ(栃木県青年会館) 1階大ホール(宇都宮市駒生1-1-6)

【参加者数】 253名

【URL】 <http://www.aics.riken.jp/shirutsudo/meeting26.html>



図 11 スパコンを知る集いの様子

2. 平成28年度子ども霞が関見学デー

本イベントは、毎年夏休み、各府庁省の取り組みを子供向けに公開しているイベントである。理研は、「文部科学省・文化庁」のスペースに毎年展示を行っており、本年も「京」に関する展示を行った(理研としてのブース出展、「京」は展示の中の一部)。

【開催日】 2016年7月27日～28日

【参加者数】 約919名(ブース来場者)

【主催】 文部科学省

【URL】 http://www.mext.go.jp/a_menu/ikusei/kengaku/1384781.htm

3. 一般公開

AICS と RIST は、神戸医療産業都市・京コンピューター一般公開に、近隣諸団体(※)とともに主催団体として公開を行った。

AICS は、第7回となる一般公開を行った。その中で、見学者ホールからの「京」の見学、免震ピット・熱源機械棟ツアー、AICS 研究チーム・ユニット・フラッグシップ2020プロジェクトによる研究紹介、ポスト「京」重点9課題による研究紹介(「神戸スパコンシミュレーション王国」)、ミニ講演会などを行った。また、新たに計算機室と空調機械室に入室するツアーを実施した(図12A)。ミニ講演会では、研究チーム・ユニットからの講演に加え、ポスト「京」重点課題からの講演、さらにはお笑い芸人「黒ラブ教授」による特別講演も行った。

RIST は、計算科学振興財団 高度計算科学研究支援センター2階にて計算機歴史博物館と題して、スパコンが誕生するまでの道のりについて、そろばん、手回し計算機、電卓などの機器の展示を行った(図12B)。

【開催日】 2016年11月5日

【来場者数】 2,254名(AICS 施設来場者数)

※理化学研究所神戸事業所(CDB、CLST、QBiC、RCH)、神戸市医療産業都市推進協議会、甲南大学フロンティアサイエンス学部、兵庫県立大学大学院、神戸大学統合研究拠点・計算科学教育センター、計算科学振興財団、日本バーリンガーインゲルハイム(株)

【URL】

<http://www.aics.riken.jp/jp/outreach/library/topics/openhouse2016.html>



図 12A 一般公開の様子(AICS)



図 12B 一般公開の様子(RIST)

また、AICS では理化学研究所他事業所の一般公開にも出展を行い、パネル展示などで「京」の紹介を行った。2016 年度は、以下のとおり 5 回出展した。

(1) 理化学研究所和光地区 一般公開

【開催日】 2016 年 4 月 22 日

【開催地】 理化学研究所 和光地区(埼玉県和光市広沢 2-1)

【参加者数】 約 640 名(AICS ブース来場者)

(2) 理化学研究所仙台地区 一般公開

【開催日】 2016 年 7 月 30 日

【開催地】 理化学研究所 仙台地区(宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 519-1399)

【参加者数】 273 名(イベント全体)

(3) 理化学研究所横浜地区 一般公開

【開催日】 2016 年 9 月 10 日

【開催地】 理化学研究所 横浜地区(神奈川県横浜市鶴見区末広町 1-7-22)

【参加者数】 約 200 名(AICS ブース来場者)

(4) 理化学研究所大阪地区 一般公開

【開催日】 2016 年 11 月 19 日

【開催地】 理化学研究所 大阪地区(大阪府吹田市古江台 6-2-3)

【参加者数】 220 名(AICS ブース来場者)

4. 一般向けスパコンセミナー「未来へ続くスパコンの挑戦」

本イベントは、兵庫県、神戸市及び計算科学振興財団が主催する一般向けイベントであり、その一部として、「京」見学会並びに AICS 機構長による講演会が設けられた。

【開催日】 2016 年 10 月 2 日

【参加者数】 約 300 名

【主催】 兵庫県、神戸市、計算科学振興財団

5. Techno-Ocean 2016 「新発見!海のせかい教室」

本イベントは、海洋の科学技術に関する総合的な国際コンベンションとして開催された「Techno-Ocean 2016」の一部として催された一般小学生向け講演会で、AICS は「スパコン『京』でわかったこと。次のスパコンのできること。」と題し講演を行った。

【開催日】 2016 年 10 月 8 日

【参加者数】 270 名

【主催】 The Consortium of the Japanese Organization for Techno-ocean 2016、IEEE/OES、MTS

6-4-3 学校向けイベント

1. 第 9 回サイエンスフェア in 兵庫

本イベントは高校生による課題研究活動の発展と充実及び交流を主な目的とした展示イベントである。兵庫県内のスーパーサイエンスハイスクール 8 校(代表: 県立神戸高等学校)と兵庫県教育委員会が合同で組織する兵庫「咲いてク(Science & Technology)」事業推進委員会が主催となって開催しているイベントで、県内外の高等学校及び高等専門学校(高専)の学生によるポスターセッション形式の研究発表会や、大学、研究機関、企業による展示ブースが設けられ、高校生との交流を行っている。

2016年度は、昨年度に引き続き、関西地区の理化学研究所各事業所(AICS、CDB、CLST、QBiC、HPCI 計算生命科学推進プログラム、播磨研究所)が協力して展示を行い、各事業所の研究を紹介した。AICS では、展示エリアを参加者に開放する他、「京」の見学対応を行った。

【開催日】 2017年1月29日

【参加者数】 約700名(AICS 来場者)

【主催】 兵庫「咲いテク(Science & Technology)」事業推進委員会

【内容】 一般的なスーパーコンピュータや「京」について、また、計算科学における離散化等の数学の手法について、高校生にも出題するなど実演を交えながら解説を行った。

6-4-4 出前授業

AICS では、「京」及び計算機科学・計算科学への理解増進のため、依頼に応じて学校団体向けの出前授業を行っている。2016年度に行った出前授業は下記のとおりである。

1. 出前授業 大阪府立天王寺高等学校

【開催日】 2016年5月31日

【場所】 大阪府立天王寺高等学校 (大阪市阿倍野区三好町2-4-23)

【対象】 1、2年生 約80名

【講師】 川島 雪生 (AICS フラッグシップ2020プロジェクト 研究員)

【内容】 「京」や計算物質科学分野(フラーレンなど)に関する講演を行った。

2. 出前授業 大阪府立天王寺高等学校

【開催日】 2016年10月12日、18日

【対象】 2年生 約40名

【講師】 川島 雪生 (AICS フラッグシップ2020プロジェクト 研究員)

【内容】 「化学の中の電子: 講義とシミュレーション実習」と題し、量子科学の基礎とシミュレーション実習を行った。

3. 出前授業 兵庫県立洲本高等学校

【開催日】 2017年1月26日

【場所】 兵庫県立洲本高校

【対象】 理系探究クラス 1年生 15名

【講師】 南 一生 (AICS 運用技術部門ソフトウェア技術チーム チームヘッド)

6-5 見学・視察対応

AICS では、「京」及び計算機科学・計算科学への理解増進のため、主に研究機関、企業、官公庁、学校など、見学を希望する団体の受け入れを行っている。基本的に広報の見学担当者による対応だが、要望に応じて、運用技術部門及び研究部門の研究者・技術者による解説や施設内ツアーを行っている。

また、政界関係者、国・地方自治体関係者、企業や研究機関の幹部などによる視察も数多く行われており、研究支援部総務課を事務局として、理化学研究所役員及びAICS幹部により、理解増進のため概要説明や意見交換を含めた対応を行っている。

2016年度の見学、視察受け入れ実績は表5のとおりである。

【主な団体】

研究機関： 重点課題実施機関、学会等

企業： IT 関連企業、電力・ガス等インフラ関連企業、土木・建設関連企業等

官公庁： 省庁関連、神戸市関連、兵庫県関連

学校団体： 小中学校、高等学校(理系選択クラス、スーパーサイエンスハイスクール指定校等)、高等専門学校、大学生及び大学院生

【主な視察】

2016年5月 内閣官房行政改革推進本部

2016年5月 遠藤利明五輪担当相

2016年8月 塩崎恭久厚生労働大臣

2016年9月 世界経済フォーラム

2016年9月 G7 神戸保健大臣会合



図 13 G7 神戸保健大臣会合参加各国の保健担当大臣ご視察

[平尾 AICS 機構長によるプレゼンテーション]

表5 見学・視察対応件数一覧

		4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月	合計	
見学	一般	見学会実施件数	1	4	6	4	2	2	3	4	0	1	3	6	36
		見学者数	5	65	150	66	30	52	250	89	0	9	20	103	839
	諸団体	見学会実施件数	9	9	15	22	9	17	23	20	10	3	15	12	164
		見学者数	66	146	208	373	151	294	282	328	85	19	182	120	2,254
	自治体 官公庁	見学会実施件数	0	0	0	1	0	2	1	3	0	1	1	4	13
		見学者数	0	0	0	17	0	50	4	11	0	2	14	42	140
	学会	見学会実施件数	2	7	7	3	8	5	7	3	6	8	14	16	86
		見学者数	17	122	86	31	61	103	71	31	42	78	207	173	1,022
	機関 教育	見学会実施件数	4	6	10	14	20	12	10	16	13	3	3	12	123
		見学者数	102	211	304	584	600	307	237	437	490	31	38	429	3,770
視察	自治体・ 官公庁・ 政府	見学会実施件数	2	6	3	6	7	6	3	2	2	1	1	1	40
		見学者数	26	29	17	74	69	51	33	26	21	4	6	6	362
	海外	見学会実施件数	1	2	1	0	0	3	6	2	1	0	0	0	16
		見学者数	9	36	10	0	0	33	79	17	25	0	0	0	209
	VIP	見学会実施件数	3	2	1	3	1	2	3	1	2	0	0	0	18
		見学者数	16	9	54	40	4	103	99	4	32	0	0	0	361
イベント	見学会実施件数	0	0	0	0	8	0	0	1	0	1	0	1	11	
	見学者数	0	0	0	0	387	0	0	2,254	0	700	0	24	3,365	
計	見学会実施件数	22	36	43	53	55	49	56	52	34	18	37	52	507	
	見学者数	241	618	829	1,185	1,302	993	1,055	3,197	695	843	467	897	12,322	

参考資料1 利用研究課題一覧

2016年度に「京」を利用して実施した利用研究課題(一般課題、若手人材育成課題、産業利用課題、ポスト「京」研究開発枠重点課題1～9、ポスト「京」研究開発枠萌芽的課題1～4)の一覧を、以下に示す。なお、京調整高度化枠及び共用法第12条に基づく研究の利用研究課題は、それぞれ4-1節の表1及び4-2節の表2に示した。所属機関名等は2017年3月31日現在のものである。

■一般利用課題

課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	所属機関名	分野	割当資源量 (ノード時間)	利用実績 (ノード時間)	備考
hp160004	次世代型物質輸送モデルによる大気汚染の気候・環境影響評価	中島 映至	宇宙航空研究開発機構 第一宇宙技術部門地球観測研究センター	環境・防災・減災	5,038,080	5,143,345	
hp160022	大規模分子シミュレーションと実験の融合によるタンパク質ダイナミクス解析	松永 康佑	理化学研究所・計算科学研究機構	バイオ・ライフ	3,600,000	2,057,250	
hp160046	近接場光励起により発現する新奇光機能場の計算科学的設計	信定 克幸	分子科学研究所・理論計算分子科学研究領域	物質・材料・化学	3,679,713	3,972,359	
hp160052	ニュートリノレス二重ベータ崩壊の原子核行列要素	寺崎 順	IEAP, Czech Technical University in Prague	物理・素粒子・宇宙	4,438,500	3,829,714	
hp160064	確率論的手法に基づくon-the-fly多成分系量子化学計算による低障壁水素結合がもたらす光活性黄色タンパク質の機能の理解	立川 仁典	横浜国立大学・大学院生命ナノシステム科学研究科	物質・材料・化学	6,602,500	1,645,401	
hp160066	100ナノ電子状態計算とデータ科学による有機デバイス材料研究	星 健夫	鳥取大学・大学院工学研究科機械宇宙工学専攻	物質・材料・化学	3,300,000	3,200,170	
hp160071	ポルツマン輻射流体コードを用いた回転大質量星の重力崩壊計算	山田 章一	早稲田大学・理工学術院	物理・素粒子・宇宙	6,000,000	5,978,156	
hp160073	タンパク質微結晶の全原子分子動力学シミュレーション	宮下 治	理化学研究所 計算科学研究機構	バイオ・ライフ	4,460,544	2,891,886	
hp160075	ポストリチウムイオン電池開発に向けた電解質界面被膜の物性解明と材料設計	館山 佳尚	物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点	物質・材料・化学	9,500,000	7,528,417	
hp160085	クラウドシミュレータによる雲乱流混合と雨粒子形成過程の解明	後藤 俊幸	名古屋工業大学ながれ領域	環境・防災・減災	3,600,000	3,568,843	
hp160094	数値的相対論-磁気流体シミュレーションで探る傾斜したスピンを持つブラックホールと中性子星連星合体の現実的描像	木内 建太	京都大学基礎物理学研究所	物理・素粒子・宇宙	3,800,000	1,899,363	
hp160099	キャリアドーパされた電荷移動型モット絶縁体の電荷励起	遠山 貴巳	東京理科大学・理学部	物質・材料・化学	7,875,500	7,872,859	
hp160102	カノニカル乱流の大規模直接数値シミュレーション	石原 卓	名古屋大学・大学院工学研究科	工学・ものづくり	8,750,000	8,143,639	
hp160115	格子QCDによる素粒子標準模型のCP非保存パラメータの決定	石塚 成人	筑波大学 数理物質系	物理・素粒子・宇宙	9,000,000	8,591,162	
hp160117	核融合プラズマにおける高エネルギー粒子駆動乱流と同位体効果に関する予測シミュレーション	藤堂 泰	核融合科学研究所 ヘリカル研究部	原子力・核融合	7,600,000	5,197,413	
hp160120	細胞環境シミュレーションによる細胞内蛋白質の構造と相互作用の解明	優 乙石	理化学研究所 杉田理論分子科学研究室	バイオ・ライフ	2,443,468	1,788,201	
hp160122	スピン・軌道相互作用とスピン・フラストレーションに起因する三角格子量子スピン系の新奇量子相の研究	曾田 繁利	理化学研究所・計算科学研究機構	物質・材料・化学	3,215,850	2,904,868	
hp160126	第一原理量子モンテカルロシミュレーションによるグラフェン及びその派生物質の磁性と超伝導	柚木 清司	理化学研究所・計算科学研究機構・量子系物質科学研究チーム	物質・材料・化学	3,450,720	2,845,296	
hp160129	担持された金属ナノ微粒子に対する大規模第一原理シミュレーション	宮崎 剛	物質・材料研究機構、理論計算科学ユニット	物質・材料・化学	1,140,000	742,677	
hp160138	階層型並列固有値解析エンジンz-Paresによる超大規模固有値解析の実現	櫻井 鉄也	筑波大学・システム情報系	数理科学	2,610,000	2,457,963	
hp160143	B型肝炎ウイルスの全原子シミュレーションを用いた、カプシド内への治療薬の透過・吸収メカニズム解析の実用的新薬開発への応用	田中 靖人	名古屋市立大学・大学院医学研究科	バイオ・ライフ	4,250,000	4,189,735	
hp160154	東日本大震災の津波を模擬した福島第一原子力発電所1号機タービン建屋浸水解析	塩谷 隆二	東洋大学	工学・ものづくり	4,500,000	2,454,809	
hp160157	多数地震シナリオを想定した兵庫県の地震被害推定シミュレーション	堀 宗朗	東京大学・地震研究所	環境・防災・減災	3,431,405	2,383,816	
hp160159	引力相互作用を持つディラック電子系における半金属超伝導転移の量子臨界現象の解明	大塚 雄一	理化学研究所 計算科学研究機構 量子系物質科学研究チーム	物理・素粒子・宇宙	3,330,000	3,427,958	
hp160162	ゲリラ豪雨予測を目指した「ビッグデータ同化」の研究	三好 建正	理化学研究所計算科学研究機構	環境・防災・減災	8,397,569	8,610,775	
hp160166	超並列第一原理密度行列繰り込み群法の開発と応用	今村 穰	首都大学東京	数理科学	3,229,644	2,894,074	
hp160170	量子化学シミュレーションによる光化学系II水分解触媒サイトの置換実験	中嶋 隆人	RIKEN AICS	物質・材料・化学	5,472,000	5,239,360	
hp160174	マテリアルズ・インフォマティクスによるリチウムイオン電池の電解液材料探索	袖山 慶太郎	物質・材料研究機構	物質・材料・化学	10,740,000	10,640,106	
hp160176	風車翼に対するマイクロデバイス流体制御の大規模数値解析	青野 光	東京理科大学	工学・ものづくり	6,919,200	6,842,032	
hp160187	昆虫嗅覚系全脳シミュレーション	神崎 亮平	東京大学先端科学技術研究センター	バイオ・ライフ	2,280,000	1,896,841	
hp160194	遷移金属微粒子・金属クラスターの構造、性質、触媒作用に関する理論研究	神 茂好	京都大学・福井謙一記念研究センター	物質・材料・化学	3,202,500	1,576,618	

■一般利用課題(競争的資金等獲得課題)

課題番号	利用研究課題名	研究課題代表者名	所属機関名	分野	割当資源量(ノード時間)	利用実績(ノード時間)	備考
hp160235	京コンピュータを用いた有機薄膜太陽電池の第一原理シミュレーション	島崎 智実	理化学研究所・計算科学研究機構	物質・材料・化学	24,000	124	
hp160238	超大並列計算機による社会現象シミュレーションの管理・実行フレームワーク	野田 五十樹	産業技術総合研究所 人工知能研究センター	その他	29,150	0	
hp160247	分子動力学シミュレーションによる高分子材料破壊の分子機構の解明と破壊シミュレーション手法の確立	岡崎 進	名古屋大学大学院工学研究科	物質・材料・化学	256,000	255,991	
hp160248	建築物の耐風設計に関する基準への数値流体計算の導入に関する検討	田村 哲郎	東京工業大学 環境・社会理工学院	環境・防災・減災	365,568	365,528	
hp160275	ドラッグポジショニングによる色素性乾皮症D型の治療薬の探索	高岡 裕	神戸大学医学部附属病院医療情報部	バイオ・ライフ	51,200	51,192	

■一般利用課題(トライアル・ユース)

課題番号	利用研究課題名	研究課題代表者名	所属機関名	分野	割当資源量(ノード時間)	利用実績(ノード時間)	備考
hp150304	ミュー粒子異常磁気モーメントにおけるハドロンの寄与の第一原理計算	新谷 栄悟	理化学研究所計算科学研究機構連続系場の理論研究チーム	物理・素粒子・宇宙	50,000	44,596	
hp150306	Numerical simulation of flapping wing MAVs in V formation	Tay Wee Beng	Temasek Laboratories, National University of Singapore	工学・ものづくり	50,000	46,106	
hp160242	汎用量子格子模型ソルバーHΦの性能測定	吉見 一慶	東京大学物性研究所	物理・素粒子・宇宙	50,000	17,649	

■若手人材育成課題

課題番号	利用研究課題名	研究課題代表者名	所属機関名	分野	割当資源量(ノード時間)	利用実績(ノード時間)	備考
hp160005	全球雲粒サイズ解像モデルによる雲エアロゾル相互作用に関するシミュレーション	佐藤 陽祐	理化学研究所計算科学研究機構	環境・防災・減災	1,876,288	1,808,737	
hp160026	太陽対流層の底から表面までの一貫した数値計算	堀田 英之	千葉大学	物理・素粒子・宇宙	4,000,000	1,828,521	
hp160057	原初地球における核酸形成過程の第一原理分子動力学シミュレーション	島村 孝平	神戸大学大学院システム情報学研究科計算科学専攻	物質・材料・化学	686,520	117,630	
hp160088	マルチモーメント移流法を用いた磁気リコネクションのプランシミュレーション	篠島 敬	海洋研究開発機構	物理・素粒子・宇宙	3,240,000	2,556,379	
hp160093	格子QCDによる三体力の研究	土井 琢身	理化学研究所仁科加速器研究センター初田量子ハドロンの物理学研究室	物理・素粒子・宇宙	3,600,000	3,141,591	
hp160119	高解像度気象シミュレーションにおける地表面表現の影響	西澤 誠也	理化学研究所 計算科学機構	環境・防災・減災	3,060,000	3,008,484	
hp160121	電子・イオンプラズマにおける3次元Weibel不安定性と粒子加速の理論研究	高本 亮	東京大学理学系研究科地球惑星科学専攻	物理・素粒子・宇宙	1,718,325	1,706,142	
hp160133	超臨界圧・遷臨界乱流境界層の流体物理とモデリング	河合 宗司	東北大学・大学院工学研究科・航空宇宙工学専攻	工学・ものづくり	1,750,000	1,747,777	
hp160152	量子モンテカルロ法を用いたカゲ格子トポロジ粒子の量子液体状態の研究	正木 晶子	理化学研究所・柚木計算物性物理研究室	数理論理学	1,431,330	1,815,855	
hp160158	超音流中の衝撃波・乱流干渉から発生する音響波の大規模数値解析	野々村 拓	東北大学大学院工学研究科航空宇宙工学専攻	工学・ものづくり	2,058,506	1,934,586	
hp160160	地盤-地下構造物群系の非線形地震波動場解析	藤田 航平	理化学研究所 計算科学研究機構 総合防災・減災研究ユニット	環境・防災・減災	1,726,720	1,163,798	
hp160168	ナノサイズπ共役有機分子集合体のメカノクロミック発光機構の解明	河東田 道夫	理化学研究所 計算科学研究機構研究部門量子系分子科学研究チーム	物質・材料・化学	3,473,750	2,723,274	
hp160186	鼻腔内遷移流れの直接数値シミュレーション	木村 真也	千葉大学大学院 工学研究科	バイオ・ライフ	1,750,000	1,659,319	

■産業利用課題(実証利用)

課題番号	利用研究課題名	研究課題代表者名	所属機関名	分野	割当資源量(ノード時間)	利用実績(ノード時間)	備考
hp160010	新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築	志水 隆一	NPO法人バイオグリッドセンター	バイオ・ライフ	5,177,010	5,043,063	
hp160014	界面の大規模第一原理解析に基づく機能性材料設計技術	籾内 真	株式会社日立製作所研究開発グループ	物質・材料・化学	5,000,000	4,512,143	
hp160030	乱流の直接シミュレーションによる曳航水槽代替技術の実用化	西川 達雄	一般財団法人 日本造船技術センター	工学・ものづくり	5,000,000	5,285,955	
hp160032	音響フィードバックを伴う自動車の狭帯域風騒音の現象メカニズム解明	橋爪 祥光	スズキ株式会社 四輪ボディ設計部	工学・ものづくり	2,683,332	2,345,944	
hp160033	車両運動を再現した超大規模非定常流体計算による次世代自動車空力評価技術に関する研究	上岡 孝志	マツダ株式会社 車両実研部	工学・ものづくり	2,223,332	2,189,824	
hp160038	空気抵抗を大幅に低減する新しい車両形状の開発	前田 和宏	トヨタ自動車(株) 性能実験部	工学・ものづくり	3,456,000	2,311,146	
hp160044	持続可能な社会へ向けたタイヤ開発のための大規模数値解析技術に関する研究	門脇 弘	株式会社ブリヂストン 中央研究所	工学・ものづくり	3,000,000	3,000,624	
hp160045	高速鉄道車両と船舶の性能向上を目指した大規模非定常シミュレーション	川本 英樹	川崎重工工業株式会社	工学・ものづくり	4,250,000	4,249,867	
hp160047	第一原理分子動力学計算による電解液の機能発現メカニズム解析	撰 幹士	株式会社豊田自動織機	物質・材料・化学	5,000,000	4,999,973	
hp160054	大規模数値流体解析を用いた電巻による建物被害の検討及び重要施設の評価	菊池 浩利	清水建設(株) 技術研究所 環境基盤技術センター 風環境グループ	環境・防災・減災	3,100,000	3,112,749	
hp160059	船用プロペラ単独性能に関するLESを用いた大規模計算	田中 寿夫	ジャパンマリンユナイテッド株式会社技術研究所	工学・ものづくり	2,992,500	2,538,951	
hp160081	第一原理分子動力学計算による全固体電池電極・電解質界面の研究	奥野 幸洋	富士フイルム(株)	物質・材料・化学	3,200,000	2,300,954	
hp160086	大規模分子動力学法による接着界面現象に関する研究	島津 彰	日東電工株式会社 基幹技術研究センター	物質・材料・化学	759,999	468,857	
hp160087	高分子有機半導体材料の電気伝導特性の計算科学的研究	石田 雅也	住友化学株式会社・先端材料開発研究所	物質・材料・化学	1,450,000	781,790	

課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	所属機関名	分野	割当資源量 (ノード時間)	利用実績 (ノード時間)	備考
hp160089	SPring-8, J-PARC と連携したフェノール樹脂不均一架橋モデルの詳細分析	首藤 晴幸	住友ベークライト株式会社	物質・材料・化学	1,700,000	1,047,336	
hp160090	先進ガスタービン用超音速軸流圧縮機の内部流れ場の高精度予測	松岡 右典	川崎重工(株)ガスタービン・機械カンパニー ガスタービンビジネスセンター 要素技術部	工学・ものづくり	4,500,000	4,422,476	
hp160103	HPCLを活用したFMO創薬プラットフォームの構築	福澤 薫	星薬科大学 薬学部 薬品物理化学教室	バイオ・ライフ	3,100,000	2,861,612	
hp160105	巨大地震時における阪神高速長大橋の大規模モデルの高精度化	金治 英貞	阪神高速道路株式会社 技術部	環境・防災・減災	425,000	418,190	
hp160109	地震と津波の広域3次元統合シミュレーションの地震防災対策への展開	本橋 英樹	株式会社地震工学研究開発センター	環境・防災・減災	2,000,000	1,880,521	
hp160127	炭素繊維強化プラスチックを利用した超軽量ジェットエンジンの開発	黒木 博史	株式会社 I H I	工学・ものづくり	2,180,947	1,138,295	
hp160141	自動車用次世代空力・熱設計システムの実用化を加速する大規模空力実証解析	坪倉 誠	神戸大学大学院システム情報学研究科	工学・ものづくり	6,400,000	6,111,762	
hp160144	強風・弱風下の都市・建築物の快適性・機能性・安全性に関するCFD設計と実務への展開	田村 哲郎	東京工業大学 環境・社会理工学院	環境・防災・減災	6,692,864	6,199,486	
hp160171	FSI計算による複雑表面形状を有する超高層建築物の空力不安定振動解析	近藤 宏二	鹿島建設株式会社・技術研究所	工学・ものづくり	2,500,000	2,297,347	
hp160177	貴金属フリー液体燃料電池の開発	岸 浩史	ダイハツ工業株式会社・開発部	物質・材料・化学	825,000	102,225	
hp160178	京コンピュータを活用した自動車先端CAEの開発	羽貝 正道	一般社団法人 日本自動車工業会	工学・ものづくり	6,133,332	3,649,138	
hp160182	タイヤ用ゴム材料の大規模分子動力学シミュレーション	角田 昌也	住友ゴム工業株式会社 研究開発本部 研究第一部	物質・材料・化学	5,000,000	4,642,204	
hp160188	大電力ワイヤレス給電のための電磁界シミュレーション	太田 智浩	パナソニック株式会社 解析セン パナソニック株式会社 アプリア ランス社 スマートエネルギーシステ ム事業部 スマートメータデバイス 技術グループ	工学・ものづくり	990,000	927,775	
hp160198	超音波流速計測シミュレーションの実用化検討	永原 英知		工学・ものづくり	2,375,000	2,222,079	

■ 産業利用課題(個別利用・随時募集)

課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	所属機関名	分野	割当資源量 (ノード時間)	利用実績 (ノード時間)	備考
hp150247	分子動力学法による蛋白質-阻害剤の結合相互作用解析	宮川 博夫	大正製薬ホールディングスグループ 大正製薬(株) 医薬研究本部 化学 研究所	バイオ・ライフ	247,680	(非公開)	
hp150250	大規模非定常計算による実在市街地風環境の予測	張 会来	株式会社数値フローデザイン	環境・防災・減災	140,800	(非公開)	
hp150252	FrontFlow/blueによるプロペラファンの空力騒音予測	本間 直彦	三菱電機株式会社	工学・ものづくり	600,000	(非公開)	
hp150264	高解像度計算による建物の局部負圧と流れの予測技術の開発	小野 佳之	大林組技術研究所	環境・防災・減災	150,840	(非公開)	
hp150290	多風向同時計算による実建物の風荷重の評価手法の開発	片岡 浩人	株式会社大林組 技術研究所	工学・ものづくり	105,984	(非公開)	
hp150298	原子力施設を対象とした熱流動解析	張 会来	株式会社数値フローデザイン	原子力・核融合	172,800	(非公開)	
hp150303	京コンピュータを活用した鉄鋼プロセスにおける各種現象の解明と最適化	佐藤 新吾	JFEスチール株式会社 数値解析研 究部	工学・ものづくり	434,400	(非公開)	
hp150307	The study of elemental behavior in Fe by using first-principles calculation	赤塚 隆男	J F E スチール 数値解析研究部	数理科学	61,200	(非公開)	
hp150311	長時間MDシミュレーションを活用したインシリコ創薬	山崎 一人	大日本住友製薬株式会社 研究本部	バイオ・ライフ	600,000	(非公開)	
hp160237	真空ポンプ内部の流れの解析	二木 敬一	株式会社 島津製作所	工学・ものづくり	128,800	(非公開)	
hp160239	機能性材料の第一原理計算(2016年度)	世木 隆	株式会社コベルコ科研	物質・材料・化学	150,000	(非公開)	
hp160244	分子動力学法による蛋白質-阻害剤の結合相互作用解析	宮川 博夫	大正製薬ホールディングスグループ 大正製薬(株) 医薬研究本部 化学 研究所	バイオ・ライフ	247,680	(非公開)	
hp160245	Micro-scale simulation for Metal 3D Additive Manufacturing	亘 紀子	三菱重工業 総合研究所 化学研究 部	工学・ものづくり	210,000	(非公開)	
hp160270	大規模非定常計算による高層ビル周りの流れ場の予測	張 会来	株式会社数値フローデザイン	環境・防災・減災	281,600	(非公開)	
hp160274	FrontFlow/blueによる空調ファンの騒音予測	福井 智哉	三菱電機・先端技術総合研究所	工学・ものづくり	668,000	(非公開)	
hp160281	大規模並列分子シミュレーション技術の開発	井波 かつぎ	富士フイルムホールディングス株式 会社	物質・材料・化学	17,217	(非公開)	
hp160283	市街地における高層建物の風荷重予測技術の開発	小野 佳之	大林組技術研究所	環境・防災・減災	146,160	(非公開)	
hp160293	計算創薬	白井 宏樹	アステラス製薬株式会社	バイオ・ライフ	5,168,615	(非公開)	
hp160297	大規模流体構造連成解析による浮体式海洋構造物の動揺予測	ファミン ブック	清水建設株式会社 技術研究所	工学・ものづくり	140,000	(非公開)	
hp160298	気液二相流の大規模解析	穴戸 恵子	日産自動車株式会社	工学・ものづくり	102,400	(非公開)	
hp160299	課題終了後公開用課題名を公開	張 会来	株式会社数値フローデザイン	工学・ものづくり	272,640	(非公開)	課題終了日 2018/2/2
hp160300	課題終了後公開用課題名を公開	奥田 隆之	ジヤトコ株式会社	工学・ものづくり	5,668,903	(非公開)	課題終了日 2018/2/2

■ 産業利用課題(トライアル・ユース)

課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	所属機関名	分野	割当資源量 (ノード時間)	利用実績 (ノード時間)	備考
hp150292	分子動力学計算によるコンフォメーション探索に基づく創薬手法の開発	白井 宏樹	アステラス製薬株式会社	バイオ・ライフ	50,000	971	
hp150293	パワー半導体デバイスの大規模デバイスシミュレーション	原田 昌紀	アドバンスソフト株式会社	工学・ものづくり	50,000	6,486	
hp150299	サンルーフレフレクタ風切音の大規模CFD	葛谷 秀樹	アイシン精機株式会社 CAE技術部	工学・ものづくり	50,000	49,650	
hp150300	車両空力性能向上パーツの大規模CFD	葛谷 秀樹	アイシン精機株式会社 CAE技術部	工学・ものづくり	50,000	48,487	
hp150308	分子動力学シミュレーションによる有機アモルファス薄膜中の発光材料の分子配向に関する研究	齋藤 健	株式会社カネカ R & D企画部 基 盤技術協働研究所	物質・材料・化学	50,000	49,686	
hp150309	カーボンナノチューブの新規成長法の研究開発	日方 威	住友電気工業株式会社 新領域技術 研究所	工学・ものづくり	50,000	33,768	

課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	所属機関名	分野	割当資源量 (ノード時間)	利用実績 (ノード時間)	備考
hp150310	建設機械作業機周りの土砂挙動シミュレーション	今村 一哉	株式会社小松製作所	工学・ものづくり	50,000	45,851	
hp160241	地盤と構造物の相互作用を考慮した3次元動的解析の設計利用検討	沖見 秀秀	鹿島建設	環境・防災・減災	50,000	46,617	
hp160263	大規模流体シミュレーションによる純国産ドローン向けCFRP製プロペラの設計支援システムの開発	佐々木 良浩	株式会社先端力学シミュレーション研究所	工学・ものづくり	50,000	25,551	
hp160276	大規模量子化学計算プログラムを用いた有機材料開発	中田 浩弥	京セラ 総合研究所	物質・材料・化学	50,000	49,143	
hp160282	埋立地での液状化被害軽減のための地盤改良手法の研究	津國 正一	株式会社竹中土木技術・生産本部	環境・防災・減災	50,000	43,119	
hp160286	熱可塑性樹脂ランダム配向繊維複合材の破壊メカニズム解析	林 誠次	株式会社 本田技術研究所 四輪R&Dセンター 第9技術開発室 第2ブロック	物質・材料・化学	50,000	49,939	
hp160287	OpenFOAMを用いた大規模混相流解析の検討	中村 修	新日鐵住金株式会社数理科学研究部	工学・ものづくり	50,000	12,097	
hp160289	Li+イオン内包フラーレン化合物結晶振動モードの第一原理計算	笠間 泰彦	イデア・インターナショナル株式会社	物質・材料・化学	50,000	22,061	
hp160291	多体電子論に基づくSiO2ガラスのUV-Visスペクトル計算	中野 晃佑	旭硝子株式会社 先端技術研究所 共通基盤Gr. ソフトサイエンスT.	情報・計算機科学	50,000	10,409	
hp160296	衛生陶器の抗菌薬中のAg周辺構造解析	山岸 悟	株式会社LIXIL Technology Research本部 分析・評価室	物質・材料・化学	50,000	24,774	
hp160301	データ駆動型手法による新規熱電変換材料探索	玉置 洋正	パナソニック株式会社	物質・材料・化学	50,000	1,816	

■ポスト「京」研究開発枠 重点課題

課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	所属機関名	分野	割当資源量 (ノード時間)	利用実績 (ノード時間)	備考
hp160207	ポスト「京」でのMD高度化とアルゴリズム深化	杉田 有治	理化学研究所・杉田理論分子科学研究室	バイオ・ライフ	5,700,000	5,700,087	重点課題1
hp160223	次世代創薬計算技術の開発	池口 満徳	横浜市立大学・生命医科学研究科	バイオ・ライフ	8,240,000	8,320,081	重点課題1
hp160213	創薬ビッグデータ統合システムの開発	奥野 恭史	京都大学・医学研究科	バイオ・ライフ	3,944,000	3,924,365	重点課題1
hp160219	大量シーケンスによるがんの個性と時間的・空間的多様性・起源の解明	宮野 悟	東京大学医科学研究所	バイオ・ライフ	1,300,000	1,830,414	重点課題2
hp160218	データ同化生体シミュレーションによる個別化医療支援心臓シミュレーションと分子シミュレーションの融合による基礎医学と臨床医学の架橋	和田 成生	大阪大学 大学院基礎工学研究科	バイオ・ライフ	2,000,000	2,000,770	重点課題2
hp160209	久田 俊明	株式会社UT-Heart研究所	その他	9,568,699	9,568,890	重点課題2	
hp160221	地震・津波の災害被害予測の実用化研究	堀 高峰	海洋研究開発機構・地震津波・防災研究プロジェクト	環境・防災・減災	14,595,420	10,213,114	重点課題3
hp160224	統合的予測のための社会科学シミュレーションの開発	井料 隆雅	神戸大学大学院工学研究科	環境・防災・減災	1,621,713	1,621,708	重点課題3
hp160229	革新的な数値天気予報と被害レベル推定に基づく高度な気象防災	瀬古 弘	気象研究所/JAMSTEC	環境・防災・減災	22,965,014	22,305,707	重点課題4
hp160230	シームレス気象・気候変動予測	佐藤 正樹	東京大学大気海洋研究所	環境・防災・減災	13,779,009	13,774,933	重点課題4
hp160231	総合的な地球環境の監視と予測	滝川 雅之	海洋研究開発機構	環境・防災・減災	4,593,003	5,803,257	重点課題4
hp160202	新エネルギー源の創出・確保-太陽光エネルギー	天能 精一郎	神戸大学システム情報学研究科	物質・材料・化学	6,740,715	6,924,601	重点課題5
hp160225	エネルギーの変換・貯蔵-電気エネルギー	杉野 修	東京大学物性研究所	物質・材料・化学	6,625,272	6,874,043	重点課題5
hp160215	エネルギー・資源の有効利用-化学エネルギー	田中 秀樹	岡山大学 大学院 自然科学研究科	物質・材料・化学	5,979,333	6,195,607	重点課題5
hp160220	高圧燃焼・ガス化を伴うエネルギー変換システム	吉村 忍	東京大学	工学・ものづくり	4,431,709	3,524,125	重点課題6
hp160226	気液二相流および電極の超大規模解析による燃料電池設計プロセスの高度化	鹿園 直毅	東京大学・生産技術研究所	工学・ものづくり	5,000,000	3,452,822	重点課題6
hp160217	高効率風力発電システム構築のための大規模数値解析	飯田 明由	豊橋技術科学大学	環境・防災・減災	4,200,000	2,843,986	重点課題6
hp160208	核融合炉の炉心設計	井戸村 泰宏	日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター	原子力・核融合	6,300,000	6,261,602	重点課題6
hp160228	高機能半導体デバイス	押山 淳	東京大学・工学系研究科	物質・材料・化学	5,120,000	4,664,461	重点課題7
hp160204	光・電子融合デバイス	信定 克幸	分子科学研究所・理論計算分子科学研究領域	物質・材料・化学	4,820,000	5,746,518	重点課題7
hp160201	超伝導・新機能デバイス材料	今田 正俊	東京大学大学院・工学系研究科	物質・材料・化学	4,320,000	4,319,362	重点課題7
hp160227	高性能永久磁石・磁性材料	三宅 隆	産業技術総合研究所・ナノシステム研究部門	物質・材料・化学	2,448,000	2,358,275	重点課題7
hp160234	高信頼性構造材料	香山 正憲	産業技術総合研究所・ユビキタスエネルギー研究部門	物質・材料・化学	5,060,000	3,234,947	重点課題7
hp160214	次世代機能性化学品	松林 伸幸	大阪大学・大学院基礎工学研究科	物質・材料・化学	3,540,000	3,333,733	重点課題7
hp160222	共通基盤シミュレーション手法	尾崎 泰助	東京大学物性研究所計算物質科学研究センター	物質・材料・化学	1,031,424	488,874	重点課題7
hp160203	設計を革新する多目的設計探査・高速計算技術の研究開発	大山 聖	宇宙航空研究開発機構	工学・ものづくり	750,000	596,367	重点課題8
hp160232	リアルタイム・リアルワールド自動車統合設計システムの研究開発	坪倉 誠	神戸大学大学院システム情報学研究科	工学・ものづくり	3,900,000	3,608,595	重点課題8
hp160216	準直接計算技術を活用したターボ機械設計・評価システムの研究開発	加藤 千幸	東京大学生産技術研究所	工学・ものづくり	11,800,000	11,459,079	重点課題8
hp160205	航空機設計・運用革新を実現するコア技術の研究開発	高木 亮治	宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研	工学・ものづくり	1,130,000	1,092,552	重点課題8
hp160233	新材料に対応した高度成形・溶接シミュレータの研究開発	奥田 洋司	東京大学大学院・新領域創成科学研究科	工学・ものづくり	300,000	299,869	重点課題8
hp160206	マルチスケール熱可塑性CFRP成形シミュレータの研究	吉川 暢宏	東京大学・生産技術研究所	工学・ものづくり	120,000	38,073	重点課題8
hp160210	究極の自然法則と宇宙開闢の解明	橋本 省二	高エネルギー加速器研究機構	物理・素粒子・宇宙	1,600,000	1,600,705	重点課題9
hp160211	物質創成史の解明と物質変換	柴田 大	京都大学・基礎物理学研究所	物理・素粒子・宇宙	34,751,046	33,132,308	重点課題9
hp160212	大規模数値計算と広域宇宙観測データの融合による宇宙進化の解明	吉田 直紀	Department of Physics, University of Tokyo	物理・素粒子・宇宙	10,400,000	8,653,395	重点課題9

■ポスト「京」研究開発枠 萌芽的課題

課題番号	利用研究課題名	研究課題 代表者名	所属機関名	分野	割当資源量 (ノード時間)	利用実績 (ノード時間)	備考
hp160271	破壊とカタストロフィ	久保 百司	東北大学金属材料研究所	物質・材料・化学	2,500,000	2,380,795	萌芽的課題 1-1
hp160267	相転移と流動	川勝 年洋	東北大学 大学院理学研究科	その他	1,400,000	1,399,756	萌芽的課題 1-1
hp160251	地球惑星深部物質の構造と物性	飯高 敏晃	理化学研究所・茨崎計算宇宙物理研究室	物質・材料・化学	1,950,000	1,863,380	萌芽的課題 1-1
hp160262	量子力学の基礎と情報	川島 直輝	東京大学物性研究所	物理・素粒子・宇宙	3,000,000	3,003,187	萌芽的課題 1-1
hp160255	極限の探究に資する精度保証付き数値計算学の展開と超高性能計算環境の創成	荻田 武史	東京女子大学現代教養学部数理科学科	情報・計算機科学	2,950,000	1,927,745	萌芽的課題 1-2
hp160265	複合相関マテリアルのための電子状態計算基盤 - DFTを超えて超高精度へ	松下 雄一郎	東大院工	物質・材料・化学	300,000	144,935	萌芽的課題 1-3
hp160257	極限高圧下マテリアルの相変態シミュレーション - 室温超伝導に向けて	明石 遼介	東京大学大学院理学系研究科	物質・材料・化学	435,000	302,410	萌芽的課題 1-3
hp160260	強光子場中マテリアルの原子論的シミュレーション - 波動関数理論から臨む光と物質の相互作用	篠原 康	東京大学	物質・材料・化学	800,000	448,727	萌芽的課題 1-3
hp160259	マクロ経済シミュレーション	藤原 義久	兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科	その他	30,000	910	萌芽的課題 2-1
hp160261	企業ネットワークシミュレーション	高安 美佐子	東京工業大学大学院総合理工学研究科	数理科学	150,000	100,222	萌芽的課題 2-1
hp160253	金融シミュレーション	和泉 潔	東京大学	その他	150,000	19,349	萌芽的課題 2-1
hp160284	交通・人流シミュレーション	野田 五十樹	産業技術総合研究所 人工知能研究センター	その他	300,000	140,588	萌芽的課題 2-1
hp160264	社会・経済シミュレーションモデルの評価手法の開発	上東 貴志	神戸大学・経済経営研究所	情報・計算機科学	2,420,000	1,227,445	萌芽的課題 2-1
hp160268	堅牢な輸送システムモデルの構築と社会システムにおける最適化の実現	藤井 孝蔵	東京理科大学 工学部 情報工学科	情報・計算機科学	425,000	325,471	萌芽的課題 2-2
hp160250	惑星の起源の解明	井田 茂	東京工業大学・地球生命研究所	その他	2,004,977	666,588	萌芽的課題 3-1
hp160254	惑星内部・表層のダイナミクスと進化	林 祥介	神戸大学・大学院理学研究科	その他	208,145	200,558	萌芽的課題 3-1
hp160252	太陽活動による地球環境変動の解明	草野 完也	名古屋大学・太陽地球環境研究所	物理・素粒子・宇宙	2,309,050	2,309,333	萌芽的課題 3-1
hp160256	原始太陽系における物質進化と生命起源の探究	梅村 雅之	筑波大学・計算科学研究センター	物理・素粒子・宇宙	452,263	25,250	萌芽的課題 3-1
hp160258	大脳皮質神経回路のデータ駆動モデル構築	五十嵐 潤	理化学研究所 情報基盤センター	バイオ・ライフ	650,000	593,775	萌芽的課題 4-1
hp160249	ヒト全小脳モデル構築と大脳小脳連関シミュレーション	山崎 匡	電気通信大学 大学院 情報理工学研究科	バイオ・ライフ	600,000	573,432	萌芽的課題 4-1
hp160266	大脳皮質・基底核・小脳モデル統合による全脳シミュレーション	銅谷 賢治	沖縄科学技術大学院大学	バイオ・ライフ	500,000	25	萌芽的課題 4-1
hp160269	ボトムアップで始原的知能を理解する昆虫全脳シミュレーション	神崎 亮平	東京大学先端科学技術研究センター	バイオ・ライフ	750,000	635,282	萌芽的課題 4-2

参考資料2 成果論文リスト (2017年9月30日現在)

さらに詳しい情報をお求めの場合は、HPCI成果発表データベースをご覧ください。

(1) 一般課題

課題番号	分類	発表年月	著者・所属	タイトル	掲載誌・巻番号・ページ番号 (発表年)
1 hp120078, hp140075, hp150038, hp150278	原著論文	2016年 4月	Koda Shohei(Department of Chemical System Engineering, School of Engineering, The University of Tokyo, Tokyo, Japan), Mikiya Fujii(Department of Chemical System Engineering, School of Engineering, The University of Tokyo, Tokyo, Japan), Shintaro Hatamiya(Department of Chemical System Engineering, School of Engineering, The University of Tokyo, Tokyo, Japan), Yamashita Koichi(Department of Chemical System Engineering, School of Engineering, The University of Tokyo, Tokyo, Japan)	Dipole analyses for short-circuit current in organic photovoltaic devices of diketopyrrolopyrrole-based donor and PCBM	Theor. Chem. Acc., 135, 115-124
2 hp120242, hp140135, hp150174	会議論文	2016年 4月	石原 卓(名古屋大学 大学院 工学研究科), 宇野篤也(理化学研究所 計算科学研究機構), 森下浩二(神戸大学 計算科学センター), 横川三津夫(神戸大学 システム情報学研究科), 金田行雄(愛知工業大学 基礎教育センター)	高レイノルズ数乱流中の渦の組織構造とその時間変化	ながれ, Vol. 35, pp. 109-113
3 hp150088	原著論文	2016年 4月	Toshiyuki Gotoh(Nagoya Institute of Technology), Tamotsu Suehiro(Nagoya Institute of Technology), Izumi Saito(Nagoya Institute of Technology)	Continuous growth of cloud droplets in cumulus cloud	New Journal of Physics
4 hp120076, hp140171, ra000006	原著論文	2016年 5月	Seiya Nishizawa(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Masatsugu Odaka(Department of CosmoSciences, Hokkaido University), Yoshiyuki O. Takahashi(Department of Planetology/Center for Planetary Science, Kobe University), Ko-ichiro Sugiyama(Department of Information Engineering, National Institute of Technology, Matsue College), Kensuke Nakajima(Department of Earth and Planetary Sciences, Kyushu University), Masaki Ishiwatari(Department of CosmoSciences, Hokkaido University), Shin-ichi Takehiro(Research Institute for Mathematical Sciences, Kyoto University), Hisashi Yashiro(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Yousuke Sato(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Hirofumi Tomita(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Yoshi-Yuki Hayashi(Department of Planetology/Center for Planetary Science, Kobe University)	Martian dust devil statistics from high-resolution large-eddy simulations	Geophysical Research Letters, 43, doi:10.1002/2016GL068896
5 hp140046, hp150156, ra000006	原著論文	2016年 5月	Yousuke Sato(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Hiroaki Miura(Department of Earth and Planetary Science, The University of Tokyo), Hisashi Yashiro(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Daisuke Goto(National Institute for Environmental Studies), Toshihiko Takemura(Research Institute for Applied Mechanics, Kyushu University), Hirofumi Tomita(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Teruyuki Nakajima(Earth Observation Research Center, Japan Aerospace Exploration Agency)	Unrealistically pristine air in the Arctic produced by current global scale models	Scientific Reports, 6:26561, doi:10.1038/srep26561
6 hp140081, hp120092, hp140064, hp150069	原著論文	2016年 5月	Takayuki UMEDA(Solar-Terrestrial Environment Laboratory, Nagoya University), Keiichiro FUKAZAWA(Academic Center for Computing and Media Studies, Kyoto University)	Hybrid parallelization of hyper-dimensional Vlasov code with OpenMP loop collapse directive	Advances in Parallel Computing, Vol.27, pp.265-274
7 hp120031	原著論文	2016年 6月	山岸孝輝(高度情報科学技術研究機構)	京における最適化手法の調査研究	HPCI利用研究成果集 Vol.1, No.2 (2016) 58-63
8 hp140046	原著論文	2016年 6月	Daisuke GOTO, Akinori TAKAMI, Toshinori ARIGA, Keisuke MATSUHASHI(National Institute for Environmental Studies), Kayo UEDA(Faculty of Engineering, Kyoto University), Chris Fook Sheng NG(Department of Pediatric Infectious Diseases, Institute of Tropical Medicine, Nagasaki University), Teruyuki NAKAJIMA(Earth Observation Research Center, Japan Aerospace Exploration Agency)	Estimation of excess mortality due to long-term exposure to PM2.5 in Japan using a high-resolution model for present and future scenarios	Atmospheric Environment, 140, 320-332
9 hp140103, hp140224	原著論文	2016年 6月	A. Sommer, E.M. Botschaffer, C. Jakubeit, T. Lanka, O. Razskazovskaya, H. Fattahi, M. Jobst, W. Schweinberger, V. Shirvanyan, V.S. Yakovlev, N. Karpowicz, M. Schultze, F. Krauss(Max-Planck-Institut für Quantenoptik), S.A. Sato, K. Yabana(Center for Computational Sciences, University of Tsukuba), R. Kienberger(Physik-department, Technische University Munchen)	Attosecond nonlinear polarization and light-matter energy transfer in solids	NATURE 534, pp.86-90
10 hp150127, hp150175	原著論文	2016年 6月	Kohei Fujita(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Keisuke Katsushima(Earthquake Research Institute & Department of Civil Engineering, The University of Tokyo), Tsuyoshi Ichimura(Earthquake Research Institute & Department of Civil Engineering, The University of Tokyo), Muneo Hori(Earthquake Research Institute & Department of Civil Engineering, The University of Tokyo), Lalith Maddegadara(Earthquake Research Institute & Department of Civil Engineering, The University of Tokyo)	Octree-based Multiple-material Parallel Unstructured Mesh Generation Method for Seismic Response Analysis of Soil-Structure Systems	Procedia Computer Science Volume 80, 2016, Pages 1624-1634
11 hp160075, hp160225	原著論文	2016年 6月	Jianhui Wang(The Univ. of Tokyo), Yuki Yamada(The Univ. of Tokyo), Keitaro Sodeyama(NIMS), Ching Hua Chiang(The Univ. of Tokyo), Yoshitaka Tateyama(NIMS), Atsuo Yamada(The Univ. of Tokyo)	Superconcentrated electrolytes for a high-voltage lithium-ion battery	Nat. Commun. 7, 12032 (2016)
12 hp160094, hp140211, hp150225, hp160211	原著論文	2016年 6月	Yuichiro Sekiguchi(Department of Physics, Toho University, Funabashi, Chiba 274-8510, Japan), Kenta Kiuchi(Center for Gravitational Physics, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto 606-8502, Japan), Koutarou Kyutoku(Interdisciplinary Theoretical Science (iTHES) Research Group, RIKEN, Wako, Saitama 351-0198, Japan), Masaru Shibata(Center for Gravitational Physics, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto 606-8502, Japan), Keisuke Taniguchi(Department of Physics, University of the Ryukyus, Nishihara, Okinawa 903-0213, Japan)	Dynamical mass ejection from the merger of asymmetric binary neutron stars: Radiation-hydrodynamics study in general relativity	Physical Review D, 93, 124046 (2016)
13 hp150014	原著論文	2016年 7月	Kousuke Nakano, Kenta Hongo, Ryo Maezono(School of Information Science, JAIST, Asahidai 1-1, Nomi, Ishikawa 923-1292, Japan)	Phonon dispersions and Fermi surfaces nesting explaining the variety of charge ordering in titanium-oxypnictides superconductors	Scientific Reports 6, Article number: 29661
14 hp150082	会議論文	2016年 7月	Yuta Ito(SOKENDAI), Jun Nishimura(KEK, SOKENDAI), Asato Tsuchiya(Shizuoka University)	Large-scale computation of the exponentially expanding universe in a simplified Lorentzian type IIB matrix model	PoS LATTICE2015 (2016) 243
15 hp150173, hp140215, hp150211, hp160201	原著論文	2016年 7月	Takahiro Misawa(Department of Applied Physics, University of Tokyo), Yusuke Nomura(Centre de Physique Theorique, Ecole Polytechnique), Silke Biermann(Centre de Physique Theorique, Ecole Polytechnique), Masatoshi Imada(Centre de Physique Theorique, Ecole Polytechnique)	Self-optimized superconductivity attainable by interlayer phase separation at cuprate interfaces	Science Advances, Vol. 2, no. 7, pp.1-8
16 hp150019, ra000015	原著論文	2016年 8月	Takemasa Miyoshi(RIKEN/AICS, University of Maryland, JAMSTEC), Masaru Kuni(RIKEN/AICS, MRI), Juan Ruiz(RIKEN/AICS, CIMR, CONICET-University of Buenos Aires), Guo-Yuan Lien(RIKEN/AICS), Shinsuke Satoh(NICT), Tomoo Ushio(Osaka University), Kotaro Bessho(MSC), Hiromu Seko(MRI), Hirofumi Tomita, and Yutaka Ishikawa(RIKEN/AICS)	"Big Data Assimilation" Revolutionizing Severe Weather Prediction	Bull. Amer. Meteor. Soc., 97, 1347-1354

課題番号	分類	発表年月	著者・所属	タイトル	掲載誌・巻番号・ページ番号(発表年)
17 hp150101, hp150218	原著論文	2016年 8月	M. Lucchini, A. Ludwig, J. Herrmann, M. Volkov, L. Kasmir, L. Gallmann, U. Keller(Department of Physics, ETH Zurich), S.A. Sato, K. Yabana(Center for Computational Sciences, University of Tsukuba), Y. Shinohara(Photon Science Center, University of Tokyo)	Attosecond dynamical Franz-Keldysh effect in polycrystalline diamond	Science, 353 pp.916-919
18 hp150127, hp140223, hp150175, hp150217	原著論文	2016年 8月	Kohei Fujita(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Tsuyoshi Ichimura(Earthquake Research Institute, University of Tokyo)	Development Of Large-Scale Three-Dimensional Seismic Ground Strain Response Analysis Method and Its Application to Tokyo using Full K Computer	Journal of Earthquake and Tsunami Vol. 10, No. 4 (2016) 1640017
19 hp160075, hp150275, hp160225	原著論文	2016年 8月	Yuki Yamada(The Univ. of Tokyo), Kenji Usui(The Univ. of Tokyo), Keitaro Sodeyama(NIMS), Seongjae Ko(The Univ. of Tokyo), Yoshitaka Tateyama(NIMS), Atsuo Yamada(The Univ. of Tokyo)	Hydrate-melt electrolytes for high-energy-density aqueous batteries	Nat. Energy 1, 16129 (2016)
20 hp160094, hp160211	原著論文	2016年 8月	Kazumi, Kashiyama(Department of Astronomy, Department of Physics, Theoretical Astrophysics Center, University of California, Berkeley, Berkeley, CA 94720, USA), Kohta, Murase(Department of Physics, Department of Astronomy and Astrophysics, Center for Particle and Gravitational Astrophysics, Pennsylvania State University, University Park, PA 16802, USA), Imre, Bartos(Department of Physics, Columbia Astrophysics Laboratory, Columbia University, New York, NY 10027, USA), Kenta, Kiuchi(Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto, 606-8502, Japan), Raffaella, Margutti(Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics, 60 Garden St., Cambridge, MA 02138, USA)	Multi-Messenger Tests for Fast-Spinning Newborn Pulsars Embedded in Stripped-Envelope Supernovae	Astrophysical Journal, 818, 94 (2016)
21 hp120076, hp140171, ra000006	レビュー論文	2016年 9月	Aymeric Spiga(Laboratoire de Meteorologie Dynamique, UMR CNRS 8539, Institut Pierre-Simon Laplace, Sorbonne Universites, UPMC Univ Paris 06, Paris, France), Erika Barth(SouthWest Research Institute, Boulder, CO, USA), Zhaolin Gu(Xian Jiaotong University, Xian, China), Fabian Hoffmann(Institute of Meteorology and Climatology, Leibniz Universitat Hannover, Hannover, Germany), Junshi Ito(Meteorological Research Institute, Ibaraki, Japan), Bradley Jemmett-Smith(Institute of Climate and Atmospheric Science, University of Leeds, Leeds, UK), Martina Klose(Institute for Geophysics and Meteorology, University of Cologne, Cologne, Germany), Seiya Nishizawa(RIKEN Advanced Institute for Computational Science, Kobe, Japan), Siegfried Raasch(Institute of Meteorology and Climatology, Leibniz Universitat Hannover, Hannover, Germany), Scot Rafkin(SouthWest Research Institute, Boulder, CO, USA), Tetsuya Takemi(Disaster Prevention Research Institute, Kyoto University, Kyoto, Japan), Daniel Tyler(Oregon State University, Corvallis, OR, USA), Wei Wei(Wuhan University of Technology, Wuhan, China)	Large-Eddy Simulations of Dust Devils and Convective Vortices	Space Science Reviews, DOI: 10.1007/s11214-016-0284-x
22 hp160046, hp160204	原著論文	2016年 9月	Maiku Yamaguchi(Graduate School of Engineering, The University of Tokyo), Katsuyuki Nobusada(Institute for Molecular Science)	Large Hyperpolarizabilities of the Second Harmonic Generation Induced by Nonuniform Optical Near Fields	J. Phys. Chem. C, 120, 23748-23755
23 hp160187, hp160269	会議論文	2016年 9月	Tetsuya Fukuda(The University of Tokyo), Tomoki Kazawa(The University of Tokyo), Ryohei Kanzaki(The University of Tokyo)	Establishment of the estimation method of the neural network using CMA-ES for elucidating the neural mechanism of a silkworm moth brain.	FRONTIERS IN NEUROSCIENCE, Conference Abstract: Neuroinformatics 2016. doi: 10.3389/conf.fninf.2016.20.00085
24 hp140081, hp120092, hp140064, hp150069, hp160015	原著論文	2016年 10月	Takayuki Umeda(Institute for Space-Earth Environmental Research, Nagoya University), Keiichiro Fukazawa(Academic Center for Computing and Media Studies, Kyoto University)	Performance comparison of Eulerian kinetic Vlasov code between flat-MPI parallelism and hybrid parallelism on Fujitsu FX100 supercomputer	Proceedings of the 23rd European MPI Users' Group Meeting, pp.218-221
25 hp140136, hp140215, hp150142, hp150211, hp160122	原著論文	2016年 10月	S. Shinjo(YITP, Kyoto Univ.), S. Sota(RIKEN AICS), S. Yunoki(RIKEN, RIKEN AICS, RIKEN CEMS), K. Totsuka(YITP, Kyoto Univ.), T. Tohyama(Tokyo Univ. of Sci.)	Density Matrix Renormalization Group Study of Kitaev Heisenberg Model on a Triangular Lattice	Journal of the Physical Society of Japan 85, 114710 (2016)
26 hp140169, hp150108	原著論文	2016年 10月	Jaewoon Jung(RIKEN, RIKEN AICS), Akira Naurse(NVIDIA), Chigusa Kobayashi(RIKEN AICS), Yuji Sugita(RIKEN, RIKEN AICS, RIKEN iTHES, RIKEN QBC)	Graphics Processing Unit Acceleration and Parallelization of GENESIS for Large-Scale Molecular Dynamics Simulations	Journal of Chemical Theory and Computation, Vol.12, pp.4947-4958 (2016)
27 hp150127, hp150175	原著論文	2016年 10月	Tsuyoshi Ichimura(Earthquake Research Institute, The University of Tokyo), Kohei Fujita(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Pher Errol Quinay(Research Institute for Natural Hazards and Disaster Recovery, Niigata University), Muneo Hori(Earthquake Research Institute, The University of Tokyo), Takashi Sakanoue(Tokyo Gas Co., Ltd.), Ryo Hamanaka(Tokyo Gas Co., Ltd.), Fumiki Ito(Tokyo Gas Co., Ltd.), Iwao Suetomi(Eight-Japan Engineering Consultants Inc.)	Comprehensive Seismic Response Analysis for Estimating the Seismic Behavior of Buried Pipelines Enhanced by Three-Dimensional Dynamic Finite Element Analysis of Ground Motion and Soil Amplification	J. Pressure Vessel Technol 138(5), 051801 (Apr 29, 2016) (8 pages) Paper No: PVT-15-1184; doi: 10.1115/1.4033250
28 hp150249, hp150275, hp160225, hp160247	原著論文	2016年 10月	A. Kuo, W. Shinoda, S. Okazaki(Nagoya University)	Molecular Dynamics Study of the Morphology of Hydrated Perfluorosulfonic Acid Polymer Membranes	J.Phys. Chem. C, 120(45), pp 25832-25842, 2016 (DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b08015)
29 hp140092	原著論文	2016年 11月	Guglielmo Mazzola(International School for Advanced Studies (SISSA)), Sandro Sorella(International School for Advanced Studies (SISSA))	Distinct Metallization and Atomization Transitions in Dense Liquid Hydrogen	Physical Review Letters, Vol. 114, pp.105701-1/5
30 hp140150, hp150014, hp160227	原著論文	2016年 11月	Yosuke Harashima(AIST and NIMS), Kiyoyuki Terakura(NIMS), Hiori Kino(NIMS), Shoji Ishibashi(AIST), Takashi Miyake(AIST and NIMS)	First-principles study on stability and magnetism of NdFe11M and NdFe11MN for M5Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn	JOURNAL OF APPLIED PHYSICS 120, 203904
31 hp140200, hp140228, hp150056, hp150230, hp160077, hp160223	レビュー論文	2016年 11月	Takefumi Yamashita(Univ. Tokyo)	Towards Physical Understanding of Molecular Recognition in the Cell: Recent Evolution of Molecular Dynamics Techniques and Free Energy Theories	Biomedical Sciences 2016; 2(5): 34-47 doi: 10.11648/j.bs.20160205.11

課題番号	分類	発表年月	著者・所属	タイトル	掲載誌・巻番号・ページ番号 (発表年)
32 hp150019, hp160162, ra000015	原著論文	2016年 11月	Takemasa Miyoshi(RIKEN/AICS, University of Maryland, JAMSTEC), Guo-Yuan Lien(RIKEN/AICS), Shinsuke Satoh(NICT), Tomoo Ushio(University of Osaka), Kotaro Bessho(MSC), Hirofumi Tomita, Nishizawa, Ryuji Yoshida, Sachiho A. Adachi, Jianwei Liao, Balazs Gerofi, Yutaka Ishikawa(RIKEN/AICS), Masaru Kunii(RIKEN/AICS, MRI), Juan Ruiz(CIMA, CONICET-University of Buenos Aires), Yasumitsu Maejima, Shigenori Otsuka(RIKEN/AICS), Michiko Otsuka, Kozo Okamoto(MRI, RIKEN/AICS), Hiromu Seko(MRI)	"Big Data Assimilation" Toward Post-Petascale Severe Weather Prediction: An Overview and Progress	Proceedings of the IEEE, vol. 104, no. 11, pp. 2155-2179
33 hp150019, ra000015	原著論文	2016年 11月	Kondo, K. (RIKEN/AICS), T. Miyoshi(RIKEN/AICS, University of Maryland, JAMSTEC)	Impact of Removing Covariance Localization in an Ensemble Kalman Filter: Experiments with 10 240 Members Using an Intermediate AGCM	Mon. Wea. Rev., 144, 4849-4865
34 hp160046	原著論文	2016年 11月	Kenichi Koizumi, Katsuyuki Nobusada(Institute for Molecular Science), Mauro Boero(Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg)	An atomic-level insight into the basic mechanism responsible for the enhancement of the catalytic oxidation of carbon monoxide on a Cu/CeO2 surface	Phys. Chem. Chem. Phys., 19, 3498--3505
35 hp160117	原著論文	2016年 11月	Y. Todo(NIFS)	Multi-phase hybrid simulation of energetic particle driven magnetohydrodynamic instabilities in tokamak plasmas	New Journal of Physics, Vol. 18, 115005
36 hp160120, hp130003, hp140229, hp150233, hp160207	原著論文	2016年 11月	Isseki Yu(iTHES Research Group, RIKEN, Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN), Takaharu Mori(Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN), Tadashi Ando(Laboratory for Biomolecular Function Simulation, RIKEN Quantitative Biology Center), Ryuhei Harada(Computational Biophysics Research Team, RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Jaewoon Jung(Computational Biophysics Research Team, RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Yuji Sugita(Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN, iTHES Research Group, RIKEN, Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN, Laboratory for Biomolecular Function Simulation, RIKEN Quantitative Biology Center, Computational Biophysics Research Team, RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Michael Feig(Department of Biochemistry and Molecular Biology, Michigan State University)	Biomolecular interactions modulate macromolecular structure and dynamics in atomistic model of a bacterial cytoplasm	eLife, 2016;5:e19274
37 hp160157, hp160160, hp160221	会議論文	2016年 11月	Kohei Fujita(RIKEN), Takuma Yamaguchi(The University of Tokyo), Tsuyoshi Ichimura(The University of Tokyo), Muneo Hori(The University of Tokyo / RIKEN), Lalith Maddegedara(The University of Tokyo)	Acceleration of Element-by-Element Kernel in Unstructured Implicit Low-order Finite-element Earthquake Simulation using OpenACC on Pascal GPUs	Proceedings of the Third International Workshop on Accelerator Programming Using Directives, pp 1-12
38 hp160170	原著論文	2016年 11月	Mitsuo Shoji a,b,* , Hiroshi Isobe c, Takahito Nakajima d, Yasuteru Shigeta a,b, Michihiro Suga c, Fusamichi Akita c, Jian-Ren Shen c, Kizashi Yamaguchi d, e, f,* a Center for Computational Sciences, University of Tsukuba, Tennodai 1-1-1, Tsukuba, Ibaraki 305-8577, Japan b Graduate School of Pure and Applied Sciences, University of Tsukuba, Tennodai 1-1-1, Tsukuba, Ibaraki 305-8577, Japan c Research Institute for Interdisciplinary Science and Graduate School of Natural Science and Technology, Okayama University, Okayama, Okayama 700-8530, Japan d Riken Advanced Institute for Computational Science, Kobe, Hyogo 650-0047, Japan e Institute for NanoScience Design, Osaka University, Toyonaka, Osaka 560-8531, Japan f Handairigaku Techno-Research (NPO), Toyonaka, Osaka 560-0043, Japan.	Large-scale QM/MM calculations of the CaMn4O5 cluster in the S3 state of the oxygen evolving complex of photosystem II. Comparison between water-inserted and no water-inserted structures	Faraday Discussions, in press.
39 hp120042	原著論文	2016年 12月	大島伸行(北海道大学)	アカデミッククラウドを活用した大規模流体関連シミュレーションのためのHPCIロジスティックスの構築と実証	HPCI利用研究成果集 Vol.1, No.2 (2016) 51-57
40 hp120086, hp140150, hp140214, hp150014	原著論文	2016年 12月	Y. Tatetsu(U Tokyo), S. Tsuneyuki(U Tokyo), Y. Gohda(Tokyo Tech)	First-Principles Study of the Role of Cu in Improving the Coercivity of Nd-Fe-B Permanent Magnets	Phys. Rev. Appl. 6, 064029 (2016).
41 hp120154	原著論文	2016年 12月	太田幸宏, 小久保達信(高度情報科学技術研究機構)	京における倍々精度疎行列ベクトル積の性能に関する行列格納形式依存性	HPCI利用研究成果集 Vol.1, No.2 (2016) 64-74
42 hp120223	レビュー論文	2016年 12月	Akio Kitao(The University of Tokyo), Kazuhiro Takemura(The University of Tokyo)	High anisotropy and frustration: the keys to regulating protein function efficiently in crowded environments	Current Opinion in Structural Biology, 42, 50-58 (2017)
43 hp120223, hp140030	原著論文	2016年 12月	Akio Kitao(The University of Tokyo), Ryuhei Harada(University of Tsukuba), Yasutaka Nishihara(The University of Tokyo), Duy Phuoc Tran(The University of Tokyo)	Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics for Efficient Conformational Sampling and Free Energy Calculation of Proteins	AIP Conference Proceedings, 1790, 020013
44 hp140135, hp150174, hp160102	原著論文	2016年 12月	Takashi Ishihara(Nagoya University), Koji Morishita, Mitsuo Yokokawa(Kobe University), Atsuya Uno(RIKEN AICS), Yukio Kaneda(Aichi Institute of Technology)	Energy spectrum in high-resolution direct numerical simulations of turbulence	PHYSICAL REVIEW FLUIDS 1, 082403(R) (2016)
45 hp140200, hp120297, hp130006, hp140228, hp150056, hp150230	会議論文	2016年 12月	Takefumi Yamashita(Univ. Tokyo)	On the Accurate Molecular Dynamics Analysis of Biological Molecules	AIP Conference Proceedings 1790, 020026 (2016); doi: 10.1063/1.4968652
46 hp150144, hp150281	会議論文	2016年 12月	Hiroto Imachi(Tottori University), Seiya Yokoyama(Tottori University), Takami Kaji(Tottori University), Yukiya Abe(Tottori University), Tomofumi Tada(Tokyo Institute of Technology), Takeo Hoshi(Tottori University)	One-hundred-nm-scale Electronic Structure and Transport Calculations of Organic Polymers on the K Computer	AIP Conference Proceedings 1790, 020010, 4 pp. (2016)
47 hp150286	会議論文	2016年 12月	田村哲郎(東京工業大学), 近藤宏二(鹿島建設), 片岡浩人(大林組), 河合英徳(東京工業大学)	数値流体計算による実建物の風荷重評価	風工学シンポジウム 論文集 Vol.24

課題番号	分類	発表年月	著者・所属	タイトル	掲載誌・巻番号・ページ番号(発表年)
48 hp120086, hp140150, hp150014, hp160227	学術誌記事	2017年 1月	合田 義弘(東京工業大学 物質理工学院、物質・材料研究機構 磁性・スピントロニクス材料研究拠点 ESICMM), 立津 慶幸(東京大学 大学院理学系研究科), 常行 真司(東京大学 大学院理学系研究科、東京大学 物性研究所)	ネオジム磁石の粒界構造と局所磁性の電子論	日本金属学会誌 第81巻 p. 26 (2017)
49 hp150019, hp160162, ra000015	原著論文	2017年 1月	Lien, G.-Y.(RIKEN/AICS), T. Miyoshi(RIKEN/AICS, University of Maryland, JAMSTEC), S. Nishizawa, R. Yoshida, H. Yashiro, S. A. Adachi, T. Yamaura, and H. Tomita(RIKEN/AICS)	The near-real-time SCALE-LETKF system: A case of the September 2015 Kanto-Tohoku heavy rainfall	SOLA, 13, 1-6
50 hp160120, hp140229, hp150145, hp150233, hp160207	原著論文	2017年 1月	Po-hung Wang(Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN), Isseki Yu(THES Research Group, RIKEN, Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN), Yuji Sugita(Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN)	Influence of protein crowder size on hydration structure and dynamics in macromolecular crowding	Chemical Physics Letters 671 (2017) 63-70
51 hp160162, hp150289, hp160229, ra000015	原著論文	2017年 1月	S. Kotsuki(RIKEN/AICS), T. Miyoshi(RIKEN/AICS, University of Maryland, JAMSTEC), K. Terasaki, G.-Y. Lien(RIKEN/AICS), E. Kalnay(University of Maryland)	Assimilating the global satellite mapping of precipitation data with the Nonhydrostatic Icosahedral Atmospheric Model (NICAM)	Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 122, 1-20
52 hp140046, hp150156, hp160004	会議論文	2017年 3月	Daisuke GOTO(National Institute for Environmental Studies.), Yousuke SATO(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Hisashi YASHIRO(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Kentaroh SUZUKI(Atmosphere and Ocean Research Institute, The University of Tokyo), Teruyuki NAKAJIMA(Earth Observation Research Center, Japan Aerospace Exploration Agency)	Validation of high-resolution aerosol optical thickness simulated by a global non-hydrostatic model against remote sensing measurements	AIP Conf. Proc. 1810, 100002-1-100002-4; doi: 10.1063/1.4975557
53 hp150144, hp150281, hp160066, hp160222	会議論文	2017年 3月	Takeo Hoshi(Tottori University), Hiroto Imachi(Tottori University), Kiyoshi Kumahata(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Masaaki Terai(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Kengo Miyamoto(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Kazuo Minami(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Fumiyo Shoji(RIKEN Advanced Institute for Computational Science)	Extremely scalable algorithm for 10 ⁸ -atom quantum material simulation on the full system of the K computer	Proc. ScalA16 in SC16, pp33-40 (2016).
54 hp150144, hp150281, hp160066, hp160222	博士学位論文	2017年 3月	Hiroto Imachi(Tottori University)	Numerical methods for large-scale quantum material simulations	D. Thesis, Tottori University
55 hp160046, hp160204	原著論文	2017年 3月	Kenji Iida, Katsuyuki Nobusada(Institute for Molecular Science)	Atomically modified thin interface in metal-dielectric hetero-integrated systems: control of electronic properties	J. Phys.: Condens. Matter 29, 145503

(2) 若手人材育成課題

課題番号	分類	発表年月	著者・所属	タイトル	掲載誌・巻番号・ページ番号 (発表年)
1 hp120092, hp140064, hp140081, hp150069	原著論文	2016年 5月	Takayuki UMEDA(Solar-Terrestrial Environment Laboratory, Nagoya University), Keiichiro FUKAZAWA(Academic Center for Computing and Media Studies, Kyoto University)	Hybrid parallelization of hyper-dimensional Vlasov code with OpenMP loop collapse directive	Advances in Parallel Computing, Vol.27, pp.265-274
2 hp130122, hp120034, hp120046, hp120314, hp130050, hp140082, hp140191, hp150050	原著論文	2016年 5月	K. Hagita(National Defense Academy), H. Morita(AIST), H. Takano(Keio Univ.)	Molecular dynamics simulation study of a fracture of filler-filled polymer nanocomposites	Polymer 99 (2016) 368-375
3 hp140077	学術誌記事	2016年 5月	Ralph Koitz(Department of Chemistry, University of Zurich), Jurg Hutter(Department of Chemistry, University of Zurich), Marcella Iannuzzi(Department of Chemistry, University of Zurich)	Formation and properties of a terpyridine-based 2D MOF on the surface of water	2D Materials, 3 025026
4 hp150125	会議論文	2016年 5月	Seiya Nishizawa(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Masatsugu Odaka(Department of CosmoSciences, Hokkaido University), Yoshiyuki O. Takahashi(Department of Planetology/Center for Planetary Science, Kobe University), Ko-ichiro Sugiyama(Department of Information Engineering, National Institute of Technology, Matsue College), Kensuke Nakajima(Department of Earth and Planetary Sciences, Kyushu University), Masaki Ishiwatari(Department of CosmoSciences, Hokkaido University), Shin-ichi Takehiro(Research Institute for Mathematical Sciences, Kyoto University), Hisashi Yashiro(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Yousuke Sato(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Hirofumi Tomita(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Yoshi-Yuki Hayashi(Department of Planetology/Center for Planetary Science, Kobe University)	Effects of Disturbed Nozzle-exit Boundary Layers on Acoustic Waves from Ideally-expanded Supersonic Jet	AIAA paper 2016-2936
5 hp120037, hp140122	原著論文	2016年 6月	Yousuke Sato(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Hiroaki Miura(Department of Earth and Planetary Science, The University of Tokyo), Hisashi Yashiro(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Daisuke Goto(National Institute for Environmental Studies), Toshihiko Takemura(Research Institute for Applied Mechanics, Kyushu University), Hirofumi Tomita(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Teruyuki Nakajima(Earth Observation Research Center, Japan Aerospace Exploration Agency)	Laser-driven gamma-ray, positron and neutron source from ultra-intense laser-matter interactions	Physics of Plasmas, vol. 22, pp. 083113
6 hp140053, hp160208	原著論文	2016年 6月	M. Nakata(NIFS), M. Honda(QST), M. Yoshida(QST), H. Urano(QST), M. Nunami(QST), S. Maeyama(Nagoya Univ.), T. -H. Watanabe(Nagoya Univ.), H. Sugama(NIFS)	Validation studies of gyrokinetic ITG and TEM turbulence simulations in a JT-60U tokamak using multiple flux matching	Nuclear Fusion, Vol. 56, 086010
7 hp150175, hp150127	原著論文	2016年 6月	Kohei Fujita(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Keisuke Katsushima(Earthquake Research Institute & Department of Civil Engineering, The University of Tokyo), Tsuyoshi Ichimura(Earthquake Research Institute & Department of Civil Engineering, The University of Tokyo), Munee Hori(Earthquake Research Institute & Department of Civil Engineering, The University of Tokyo), Lalith Madgededara(Earthquake Research Institute & Department of Civil Engineering, The University of Tokyo)	Octree-based Multiple-material Parallel Unstructured Mesh Generation Method for Seismic Response Analysis of Soil-Structure Systems	Procedia Computer Science Volume 80, 2016, Pages 1624-1634
8 hp130122, hp130050, hp140082, hp140191, hp140239, hp150050, hp150064	原著論文	2016年 7月	萩田克美(防衛大), 富永哲雄, 畠添拓実, 曾根卓男(JSR株式会社), 森田裕史(産総研), 高野宏(慶大理工)	フィラー充填末端変性SBRの粗視化MD計算の2次元散乱パターン解析	日本ゴム協会誌 (研究論文), 89 (2016) 199-204.
9 hp150085, hp120281, hp130023, hp140209, hp150223, hp150262	会議論文	2016年 7月	T. Doi, S. Aoki, S. Gongyo, T. Hatsuda, Y. Ikeda, T. Inoue, T. Iritani, N. Ishii, T. Miyamoto, K. Murano, H. Nemura and K. Sasaki	First results of baryon interactions from lattice QCD with physical masses (1) -- General overview and two-nucleon forces --	PoS LAT2015, 086 (2015)
10 hp150175, hp140223, hp150127, hp150217	原著論文	2016年 8月	Kohei Fujita(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Tsuyoshi Ichimura(Earthquake Research Institute, University of Tokyo)	Development Of Large-Scale Three-Dimensional Seismic Ground Strain Response Analysis Method and Its Application to Tokyo using Full K Computer	Journal of Earthquake and Tsunami Vol. 10, No. 4 (2016) 1640017

課題番号	分類	発表年月	著者・所属	タイトル	掲載誌・巻番号・ページ番号 (発表年)
11 hp150166	原著論文	2016年 9月	Sachiho A. Adachi (1,2), Fuji Kimura (3), Hiroshi G. Takahashi (2,4), Masayuki Hara (5), Xieyao Ma (2,6), and Hirofumi Lomita (1,2) 1 RIKEN Advanced Institute for Computational Science, Kobe, Japan 2 Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology, Yokohama, Japan 3 Center for Computational Sciences, University of Tsukuba, Tsukuba, Japan 4 Department of Geography, Tokyo Metropolitan University, Tokyo, Japan 5 Center for Environmental Science in Saitama, Kazo, Japan, 6 Now at School of Hydrometeorology, Nanjing University of Information Science & Technology, Nanjing, Jiangsu, China	Impact of high-resolution sea surface temperature and urban data on estimations of surface air temperature in a regional climate	J. Geophys. Res. Atmos., 121, 10,486-10,504, doi:10.1002/2016JD024961
12 hp120092, hp140064, hp140081, hp150069, hp160015	原著論文	2016年 10月	Takayuki Umeda(Institute for Space-Earth Environmental Research, Nagoya University), Keiichiro Fukazawa(Academic Center for Computing and Media Studies, Kyoto University)	Performance comparison of Eulerian kinetic Vlasov code between flat-MPI parallelism and hybrid parallelism on Fujitsu FX100 supercomputer	Proceedings of the 23rd European MPI Users' Group Meeting, pp.218-221
13 hp140120	原著論文	2016年 10月	Ryo Onishi(Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology), Axel Seifert(Deutscher Wetterdienst, Germany)	Reynolds-number dependence of turbulence enhancement on collision growth	Atmospheric Chemistry and Physics, 16, 12441-12455, 2016
14 hp140129, hp150123	原著論文	2016年 10月	Keizo Fujimoto(University of Tokyo)	Three-dimensional outflow jets generated in collisionless magnetic reconnection	Geophysical Research Letters, Vol. 43, pp. 10557-10564
15 hp150085, hp160093	原著論文	2016年 10月	T. Iritani, T. Doi, S. Aoki, S. Gongyo, T. Hatsuda, Y. Ikeda, T. Inoue, N. Ishii, K. Murano, H. Nemura and K. Sasaki (HAL QCD Collaboration)	Mirage in temporal correlation functions for baryon-baryon interactions in lattice QCD	JHEP 1610 (2016) 101
16 hp150175, hp150127	原著論文	2016年 10月	Tsuyoshi Ichimura(Earthquake Research Institute, The University of Tokyo), Kohei Fujita(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Pher Errol Quinay(Research Institute for Natural Hazards and Disaster Recovery, Niigata University), Muneo Hori(Earthquake Research Institute, The University of Tokyo), Takashi Sakanoue(Tokyo Gas Co., Ltd.), Ryo Hamanaka(Tokyo Gas Co., Ltd.), Fumiki Ito(Tokyo Gas Co., Ltd.), Iwao Suetomi(Eight-Japan Engineering Consultants Inc.)	Comprehensive Seismic Response Analysis for Estimating the Seismic Behavior of Buried Pipelines Enhanced by Three-Dimensional Dynamic Finite Element Analysis of Ground Motion and Soil Amplification	J. Pressure Vessel Technol 138(5), 051801 (Apr 29, 2016) (8 pages) Paper No: PVT-15-1184; doi: 10.1115/1.4033250
17 hp160160, hp160157, hp160221	会議論文	2016年 11月	Kohei Fujita(RIKEN), Takuma Yamaguchi(The University of Tokyo), Tsuyoshi Ichimura(The University of Tokyo), Muneo Hori(The University of Tokyo / RIKEN), Lalith Maddegedara(The University of Tokyo)	Acceleration of Element-by-Element Kernel in Unstructured Implicit Low-order Finite-element Earthquake Simulation using OpenACC on Pascal GPUs	Proceedings of the Third International Workshop on Accelerator Programming Using Directives, pp 1-12
18 hp150085, hp120281, hp130023, hp140209, hp150223, hp150262, hp160093, hp160211	会議論文	2017年 3月	T. Doi, S. Aoki, S. Gongyo, T. Hatsuda, Y. Ikeda, T. Inoue, T. Iritani, N. Ishii, T. Miyamoto, K. Murano, H. Nemura and K. Sasaki	Baryon interactions from lattice QCD with physical masses -- Overview and S = 0, -4 sectors --	PoS LAT2016, 110 (2016)
19 hp150085, hp120281, hp130023, hp140209, hp150223, hp150262, hp160093, hp160211	レビュー論文	2017年 3月	T. Doi (RIKEN) and T. Inoue (Nihon U.)	Baryon-Baryon Interactions from Lattice QCD: The Bridge from Quarks to Nuclei and Cosmos	Nucl. Phys. News 27, 13 (2017)

(3)産業利用課題

課題番号	分類	発表年月	著者・所属	タイトル	掲載誌・巻番号・ページ番号(発表年)	
1	hp120026	原著論文	2016年5月	Osamu Ichikawa, Kazuto Yamazaki(Sumitomo Dainippon Pharma Co., Ltd.), Kazushi Fujimoto, Atsushi Yamada, Susumu Okazaki(Nagoya University)	G-Protein/beta-Arrestin-Linked Fluctuating Network of G-Protein-Coupled Receptors for Predicting Drug Efficacy and Bias Using Short-Term Molecular Dynamics Simulation	PLoS ONE, 11, e0155816
2	hp120034, hp120046, hp120314, hp130050, hp130122, hp140082, hp140191, hp150050	原著論文	2016年5月	K. Hagita(National Defense Academy), H. Morita(AIST), H. Takano(Keio Univ.)	Molecular dynamics simulation study of a fracture of filler-filled polymer nanocomposites	Polymer 99 (2016) 368-375
3	hp140049	レビュー論文	2016年6月	内藤 正登(住友ゴム工業株式会社), 岸本 浩通(住友ゴム工業株式会社)	「京」コンピュータを用いたタイヤ用ゴム材料の大規模分子動力学シミュレーション	日本ゴム協会誌、Vol.89/2016., pp.176-179
4	hp140057, hp150059	企業の技術報告書	2016年6月	佐々木 隆(川崎重工業株式会社 車両カンパニー), 越智 章生(川崎重工業株式会社 航空宇宙カンパニー), 上野 陽亮(川崎重工業株式会社 航空宇宙カンパニー), 佐野 淳(川崎重工業株式会社 車両カンパニー), 吉田 直弘(川崎重工業株式会社 車両カンパニー), 畑 晋一郎(川崎重工業株式会社 車両カンパニー), 富澤 雅幸(川崎重工業株式会社 車両カンパニー)	「より速く」を実現する高速車両の開発	川崎重工技報.No.177 鉄道車両特集号
5	hp130050, hp130122, hp140082, hp140191, hp140239, hp150050, hp150064	原著論文	2016年7月	萩田克美(防衛大), 富永哲雄, 畠添拓実, 曾根卓男(JSR株式会社), 森田裕史(産総研), 高野 宏(慶大理工)	フィラー充填末端変性SBRの粗視化MD計算の2次元散乱パターン解析	日本ゴム協会誌(研究論文), 89 (2016) 199-204.
6	hp160103	会議論文	2016年8月	Ittetsu Kobayashi(Toyohashi University of Technology), Kanako Shimamura(Toyohashi University of Technology), Hiromi Ishimura(Toyohashi University of Technology), Ryushi Kadoya(Toyohashi University of Technology), Noriyuki Kurita(Toyohashi University of Technology), Kentaro Kawai(Kaken Pharmaceutical Co. Ltd), Midori Takimoto-Kamimura(Tejin Pharma)	Effect of cofactor-binding on the specific interactions between androgen receptor and its ligand: ab initio molecular simulations	2016 International Conference On Advanced Informatics: Concepts, Theory And Application (ICAICTA) (2016)
7	hp160103	会議論文	2016年8月	Kanako Shimamura(Toyohashi University of Technology), Hiromi Ishimura(Toyohashi University of Technology), Ittetsu Kobayashi(Toyohashi University of Technology), Ryushi Kadoya(Toyohashi University of Technology), Noriyuki Kurita(Toyohashi University of Technology), Kentaro Kawai(Kaken Pharmaceutical Co. Ltd), Midori Takimoto-Kamimura(Tejin Pharma Ltd.)	Molecular dynamics and ab initio FMO calculations on the effect of water molecules on the interactions between androgen receptor and its ligand and cofactor	2016 International Conference On Advanced Informatics: Concepts, Theory And Application (ICAICTA) (2016)
8	hp140097, hp150096	原著論文	2016年9月	Yasuyuki Shudo(Sumitomo Bakelite Co., Ltd, The University of Tokyo), Atsushi Izumi(Sumitomo Bakelite Co., Ltd), Katsumi Hagita(National Defense Academy), Toshio Nakao(The University of Tokyo), Mitsuhiro Shibayama(The University of Tokyo)	Large-scale molecular dynamics simulation of crosslinked phenolic resins using pseudo-reaction model	Polymer, Vol.103, pp.261-276
9	hp120119	原著論文	2016年10月	Hiroshi Kadowaki, Eisuke Seta, Takanari Saguchi(Central Research Division, Bridgestone Corporation), Gaku Hashimoto, Hiroshi Okuda(Department of Human and Engineered Environmental Studies, The University of Tokyo), Takeshi Higuchi, Hiroshi Jinnai(Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University)	Evaluation of the appropriate size of the finite element representative volume for filled rubber composite analyses	Mechanical Engineering Journal, Vol. 3 (2016) No. 5 p. 16-00372
10	hp150070	企業の技術報告書	2016年11月	扶間貴雅, 伊藤嘉晃, 近藤宏二, 坂敏秀, 山本学(鹿島建設技術研究所), 田村哲郎(東京工業大学), 横川三津夫(神戸大学)	複雑表面形状を有する超高層建築物の流体構造連成解析	鹿島技術研究所年報第64号(2016)
11	hp130055	原著論文	2016年12月	川本英樹(川崎重工業株式会社)	超大規模数値流体解析によるターボ機械非定常性能評価技術の開発	HPCI利用研究成果集 Vol.1, No.2 (2016) 81-87
12	hp130078	原著論文	2016年12月	厚井省吾(一般社団法人日本自動車工業会)	省エネルギー化に向けたプラスチック射出成形の高精度シミュレーション	HPCI利用研究成果集 Vol.1, No.2 (2016) 88-92
13	hp130080	原著論文	2016年12月	岡田芳伸(一般社団法人日本自動車工業会)	エアバッグを含む詳細衝突モデルによる乗員傷害値の高精度予測の予備的研究	HPCI利用研究成果集 Vol.1, No.2 (2016) 93-97
14	hp140055, hp150031	会議論文	2016年12月	ファミン バン フック(清水建設(株)技術研究所), 野津 剛(清水建設(株)技術研究所), 菊池 浩利(清水建設(株)技術研究所), 日比 一喜((株)数値プロデザイン), 田村 幸雄(北京交通大学)	中層実市街地に置かれた高層建物のLESのCSMによる風圧評価	風工学会シンポジウム論文集, Vol.24, pp.241-246
15	hp160010	原著論文	2016年12月	Mitsugu Araki(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Narutoshi Kamiya(Graduate School of Simulation Studies, University of Hyogo), Miwa Sato(Mitsui Knowledge Industry Co., Ltd.), Masahiko Nakatsuji(Graduate School of Medicine, Kyoto University), Takatsugu Hirokawa(Division of Biomedical Science, Faculty of Medicine, University of Tsukuba), Yasushi Okuno(Graduate School of Medicine, Kyoto University)	The Effect of Conformational Flexibility on Binding Free Energy Estimation between Kinases and Their Inhibitors	Journal of Chemical Information and Modeling, Vol.56, 12, pp2445-2456
16	hp140097, hp150096	原著論文	2017年2月	Yasuyuki Shudo(Sumitomo Bakelite, University of Tokyo), Atsushi Izumi(Sumitomo Bakelite), Katsumi Hagita(National Defense Academy of Japan), Toshio Nakao(University of Tokyo), Mitsuhiro Shibayama(University of Tokyo)	Structure-mechanical property relationships in crosslinked phenolic resin investigated by molecular dynamics simulation	Polymer, Vol.116, pp.506-514
17	hp120013	原著論文	2017年3月	Kai Liu(Takeda Pharmaceutical), Etsuro Watanabe(Takeda Pharmaceutical), Hironori Kokubo(Takeda Pharmaceutical)	Exploring the stability of ligand binding modes to proteins by molecular dynamics simulations	J. Comput. Aided Mol. Des 31, 201-211 (2017).
18	hp120033, hp160169	原著論文	2017年3月	Yukihiro Abe(Research Center, TOYOBO Co., Ltd., 2-1-1 Katata, Otsu, Shiga 520-0292, Japan), Mitsuo Shoji(Center for Computational Sciences, University of Tsukuba, 1-1-1 Tennodai, Tsukuba, Ibaraki 305-8577, Japan), Yoshiaki Nishiya(Department of Life Science, Faculty of Science and Engineering, Setsunan University, 17-8 Ikeda-Nakamachi, Neyagawa, Osaka 572-8508, Japan), Hiroshi Aiba(Tsuruga Institute of Biotechnology, TOYOBO Co., Ltd., 10-24 Toyochō, Tsuruga, Fukui 914-0813, Japan), Takahide Kishimoto(Tsuruga Institute of Biotechnology, TOYOBO Co., Ltd., 10-24 Toyochō, Tsuruga, Fukui 914-0813, Japan), Kazuo Kitaura(Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University, 34-4 Takano-Nishihirakicho, Sakyou-ku, Kyoto 606-8103, Japan)	The reaction mechanism of sarcosine oxidase elucidated using FMO and QM/MM methods	Physical Chemistry Chemical Physics, 19, 9811-9822 (2017)
19	hp150102, hp160109	原著論文	2017年3月	本橋英樹(株式会社地震工学研究開発センター), 野中哲也(名古屋工業大学大学院教授, 社会学専攻), 馬越一也(株式会社耐震解析研究所), 中村真貴(株式会社地震工学研究開発センター), 原田隆典(宮崎大学教授, 工学部社会環境システム工学科)	熊本地震の断層近傍における地震動と橋梁被害の再現解析	土木学会, 構造工学論文集, Vol.63A, pp.339-352.

(4)ポスト「京」研究開発枠(重点課題)

課題番号	分類	発表年月	著者・所属	タイトル	掲載誌・巻番号・ページ番号(発表年)
1 hp150268, hp120123, hp130022, hp140096, hp140214, hp150041, hp150231	原著論文	2016年 4月	Takahisa Kouno(Univ. of Tokyo (ISSP), Nagoya Institute of Technology), Shuji Ogata(Nagoya Institute of Technology), Takaaki Shimada(Nagoya Institute of Technology), Tomoyuki Tamura(Nagoya Institute of Technology), Ryo Kobayashi(Nagoya Institute of Technology)	Enhanced Si-O Bond Breaking in Silica Glass by Water Dimer: A Hybrid Quantum-Classical Simulation Study	J. Phys. Soc. Jpn. Vol. 85, pp. 054601
2 hp150278, hp120078, hp140075, hp150038	原著論文	2016年 4月	Koda Shohei(Department of Chemical System Engineering, School of Engineering, The University of Tokyo, Tokyo, Japan), Mikiya Fujii(Department of Chemical System Engineering, School of Engineering, The University of Tokyo, Tokyo, Japan), Shintaro Hatamiya(Department of Chemical System Engineering, School of Engineering, The University of Tokyo, Tokyo, Japan), Yamashita Koichi(Department of Chemical System Engineering, School of Engineering, The University of Tokyo, Tokyo, Japan)	Dipole analyses for short-circuit current in organic photovoltaic devices of diketopyrrolopyrrole-based donor and PCBM	Theor. Chem. Acc., 135, 115-124
3 hp160219	原著論文	2016年 5月	Park H(Yamaguchi University), Shiraishi Y, Imoto S, Miyano S.(Institute of Medical Science, University of Tokyo)	A novel adaptive penalized logistic regression for uncovering biomarker associated with anti-cancer drug sensitivity	IEEE/ACM Transactions on Computational Biology and Bioinformatics, Vol.PP, Issue 99
4 hp150289, hp120282, hp130012, hp140220, hp150214, hp160229	原著論文	2016年 6月	Junshi Ito(Meteorological Research Institute, Japan Meteorological Agency, Tsukuba, Japan), Hiroshi Niino(Atmosphere and Ocean Research Institute, The University of Tokyo, Kashiwa, Japan)	Wind-Speed-Surface-Heat-Flux Feedback in Dust Devils	Boundary-Layer Meteorology, Vol.161, pp.229-235 (2016)
5 hp160208, hp140053	原著論文	2016年 6月	M. Nakata(NIFS), M. Honda(QST), M. Yoshid(QST), H. Urano(QST), M. Nunami(QST), S. Maeyama(Nagoya Univ.), T. -H. Watanabe(Nagoya Univ.), H. Sugama(NIFS)	Validation studies of gyrokinetic ITG and TEM turbulence simulations in a JT-60U tokamak using multiple flux matching	Nuclear Fusio, Vol. 56, 086010
6 hp160209, hp160219	会議論文	2016年 6月	Motomura T, Hisada T, Washio T, Sugiura S, Ogawa D, Kanebako H	Super Computer Simulation for Evaluating EVAHEART Augmented Pulsatility	ASAIO 62nd Annual Conference
7 hp160211, hp140211, hp150225, hp160094	原著論文	2016年 6月	Yuichiro Sekiguchi(Department of Physics, Toho University, Funabashi, Chiba 274-8510, Japan), Kenta Kiuchi(Center for Gravitational Physics, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto 606-8502, Japan), Koutarou Kyutoku(Interdisciplinary Theoretical Science (iTHES) Research Group, RIKEN, Wako, Saitama 351-0198, Japan), Masaru Shibata(Center for Gravitational Physics, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto 606-8502, Japan), Keisuke Taniguchi(Department of Physics, University of the Ryukyus, Nishihara, Okinawa 903-0213, Japan)	Dynamical mass ejection from the merger of asymmetric binary neutron stars: Radiation-hydrodynamics study in general relativity	Physical Review D, 93, 124046 (2016)
8 hp160219	会議論文	2016年 6月	鈴木惣一郎(理化学研究所計算科学研究機構), 伊東聡(東京大学医学研究所), 池田奈生(富士通株式会社), Balazs Gerofi(理化学研究所計算科学研究機構), 三吉郁夫(富士通株式会社), 丸山直也(理化学研究所計算科学研究機構), 滝澤真一郎(理化学研究所計算科学研究機構), 村瀬洋介(理化学研究所計算科学研究機構), 石川裕(理化学研究所計算科学研究機構), 宮野栞(東京大学医学研究所)	ヒトゲノム解析プログラムGenomon-fusionの大規模スーパーコンピュータ向けの最適化と性能モデル化	2016年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム
9 hp160225, hp160075	原著論文	2016年 6月	Jianhui Wang(The Univ. of Tokyo), Yuki Yamada(The Univ. of Tokyo), Keitaro Sodeyama(NIMS), Ching Hua Chiang(The Univ. of Tokyo), Yoshitaka Tateyama(NIMS), Atsuo Yamada(The Univ. of Tokyo)	Superconcentrated electrolytes for a high-voltage lithium-ion battery	Nat. Commun. 7, 12032 (2016)
10 hp160228	原著論文	2016年 6月	Sawada, Keisuke(The University of Tokyo), Iwata, Jun-Ichi(The University of Tokyo), Oshiyama, Atsushi(The University of Tokyo)	Spontaneous appearance of a low-dimensional magnetic electron system on semiconductor nanostructures	Physical Review B, Vol.93, 23, 235421(2016)
11 hp150262, hp120281, hp130023, hp140209, hp150085, hp150223	会議論文	2016年 7月	T. Doi, S. Aoki, S. Gongyo, T. Hatsuda, Y. Ikeda, T. Inoue, T. Iritani, N. Ishii, T. Miyamoto, K. Murano, H. Nemura and K. Sasaki	First results of baryon interactions from lattice QCD with physical masses (1) -- General overview and two-nucleon forces --	PoS LAT2015, 086 (2015)
12 hp150263, hp150226, hp160212	原著論文	2016年 7月	Hiroyuki R, Takahashi(NAOJ), Ken Ohsuga(NAOJ), Tomohisa Kawashima(NAOJ), Yuichiro Sekiguchi(Toho University)	Formation of Overheated Regions and Truncated Disks around Black Holes: Three-dimensional General Relativistic Radiation-magnetohydrodynamics Simulations	The Astrophysical Journal
13 hp160201, hp140215, hp150173, hp150211	原著論文	2016年 7月	Takahiro Misawa(Department of Applied Physics, University of Tokyo), Yusuke Nomura(Centre de Physique Theorique, Ecole Polytechnique), Silke Biermann(Centre de Physique Theorique, Ecole Polytechnique), Masatoshi Imada(Centre de Physique Theorique, Ecole Polytechnique)	Self-optimized superconductivity attainable by interlayer phase separation at cuprate interfaces	Science Advances, Vol. 2, no. 7, pp1-8
14 hp160218, hp160219	原著論文	2016年 7月	T.Otani, S.Ii, T.Shigematsu, T.Fujinaka, T.Ozaki, M.Hirata, S.Wada	Computational study for the effect of coil configuration on blood flow characteristics in coil-embolized cerebral aneurysm	Medical and Biological Engineering and Computing, 55(5):697-710, (2017)

課題番号	分類	発表年月	著者・所属	タイトル	掲載誌・巻番号・ページ番号(発表年)
15 hp150268, hp140096, hp140214, hp150041, hp150231, hp160028, hp160214	原著論文	2016年 8月	Shuji Ogata(Nagoya Institute of Technology), Yusuke Takahashi(Kobe Corporate Research Laboratories)	Moisture-Induced Reduction of Adhesion Strength between Surface Oxidized Al and Epoxy Resin: Dynamics Simulation with Electronic Structure Calculation	J. Phys. Chem. C, Vol. 120, pp. 13630-13637
16 hp150273, hp160228	原著論文	2016年 8月	Batnyam Enkhtaivan(The University of Tokyo), Atsushi Oshiyama(The University of Tokyo)	Multistep atomic reaction enhanced by an atomic force microscope probe on Si(111) and Ge(111) surfaces	Physical Review B 94, 085416
17 hp150275, hp160075, hp160225	原著論文	2016年 8月	Yuki Yamada(The Univ. of Tokyo), Kenji Usui(The Univ. of Tokyo), Keitaro Sodeyama(NIMS), Seongjae Ko(The Univ. of Tokyo), Yoshitaka Tateyama(NIMS), Atsuo Yamada(The Univ. of Tokyo)	Hydrate-melt electrolytes for high-energy-density aqueous batteries	Nat. Energy 1, 16129 (2016)
18 hp150279	原著論文	2016年 8月	Y. Todo(NIFS), M.A. Van Zeeland(General Atomics), W.W. Heidbrink(U.C.Irvine)	Fast ion profile stiffness due to the resonance overlap of multiple Alfvén eigenmodes	Nuclear Fusion, Vol.56, 112008
19 hp150289, hp160229	原著論文	2016年 8月	Masaru Kunii(Meteorological Research Institute), Michiko Otsuka(Meteorological Research Institute), Kazuki Shimoji(Meteorological Satellite Center), Hiromu Seko(Meteorological Research Institute, Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology)	Ensemble Data Assimilation and Forecast Experiments for the September 2015 Heavy Rainfall Event in Kanto and Tohoku Regions with Atmospheric Motion Vectors from Himawari-8	SOLA, Vol. 12 (2016) p. 209-214
20 hp150289, hp130012, hp140220, hp150214, hp160229	原著論文	2016年 8月	Sho Yokota(Meteorological Research Institute, Japan Meteorological Agency), Hiromu Seko(Meteorological Research Institute, Japan Meteorological Agency, and Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology), Masaru Kunii(Meteorological Research Institute, Japan Meteorological Agency), Hiroshi Yamauchi(Meteorological Research Institute, Japan Meteorological Agency, and Observations Department, Japan Meteorological Agency), Hiroshi Niino(Atmosphere and Ocean Research Institute, The University of Tokyo)	The tornadic supercell on the Kanto Plain on 6 May 2012: Polarimetric radar and surface data assimilation with EnKF and ensemble-based sensitivity analysis	Monthly Weather Review, 144, 3133-3157
21 hp160209, hp160219	原著論文	2016年 8月	Ibe T, Wada H, Sakakura K, Ikeda N, Yamada Y, Sugawara Y, Mitsuhashi T, Ako J, Fujita H, Momomura S(Jichi Med Univ)	Pulmonary hypertension due to left heart disease: The prognostic implications of diastolic pulmonary vascular pressure gradient	J. Cardiol, 67, pp. 555-559
22 hp160211, hp160094	原著論文	2016年 8月	Kazumi, Kashiyama(Department of Astronomy, Department of Physics, Theoretical Astrophysics Center, University of California, Berkeley, Berkeley, CA 94720, US), Kohta, Murase(Department of Physics, Department of Astronomy and Astrophysics, Center for Particle and Gravitational Astrophysics, Pennsylvania State University, University Park, PA 16802, USA), Imre, Bartos(Department of Physics, Columbia Astrophysics Laboratory, Columbia University, New York, NY 10027, USA), Kenta, Kiuchi(Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto, 606-8502, Japan), Raffaella, Margutti(Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics, 60 Garden St., Cambridge, MA 02138, USA)	Multi-Messenger Tests for Fast-Spinning Newborn Pulsars Embedded in Stripped-Envelope Supernovae	Astrophysical Journal, 818, 94 (2016)
23 hp160214, hp160013, hp160019	レビュー論文	2016年 8月	Seishi Shimizu, Richard Stenner(Univ of York), Nobuyuki Matubayasi(Osaka University)	Gastrophysics: Statistical thermodynamics of biomolecular denaturation and gelation from the Kirkwood-Buff theory towards the understanding of tofu	Food Hydrocolloids, 62, 128-139 (2017)
24 hp160219	原著論文	2016年 8月	Madan V, Shyamsunder P, Han L, Mayakonda A, Nagata Y, Sundaresan J, Kanojia D, Yoshida K, Ganesan S, Hattori N, Fulton N, Tan KT, Alpermann T, Kuo MC, Rostami S, Matthews J, Sanada M, Liu LZ, Shiraiishi Y, Miyano S, Chendamara E, Hou HA, Malnassy G, Ma T, Garg M, Ding LW, Sun QY, Chien W, Ikezoe T, Lill M, Biondi A, Larson RA, Powell BL, Lubbert M, Chng WJ, Tien HF, Heuser M, Ganser A, Koren-Michowitz M, Kornblau SM, Kantarjian HM, Nowak D, Hofmann WK, Yang H, Stock W, Ghavamzadeh A, Alimoghaddam K, Haferlach T, Ogawa S, Shih LY, Mathews V, Koeffler HP.	Comprehensive mutational analysis of primary and relapse acute promyelocytic leukemia	Leukemia. 30(8): 1672-1681, 2016. doi:10.1038/leu.2016.69
25 hp150255	原著論文	2016年 9月	Seigo Imamura(Kobe University), Kenji Ono(Kyushu University, Riken), Mitsuo Yokokawa(Kobe University)	Iterative-method performance evaluation for multiple vectors associated with a large-scale sparse matrix	International Journal of Computational Fluid Dynamics, Vol.30, No.6, pp.395-401
26 hp160204, hp160046	原著論文	2016年 9月	Maiku Yamaguchi(Graduate School of Engineering, The University of Tokyo), Katsuyuki Nobusada(Institute for Molecular Science)	Large Hyperpolarizabilities of the Second Harmonic Generation Induced by Nonuniform Optical Near Fields	J. Phys. Chem. C, 120, 23748-23755
27 hp160209, hp160219	原著論文	2016年 9月	Adachi Y, Sakakura K, Wada H, Funayama H, Umemoto T, Fujita H, Momomura S	Determinants of Left Ventricular Systolic Function Improvement Following Coronary Artery Revascularization in Heart Failure Patients With Reduced Ejection Fraction (HFrEF)	Int. Heart J., 57, pp. 565-572

課題番号	分類	発表年月	著者・所属	タイトル	掲載誌・巻番号・ページ番号 (発表年)
28 hp160211, hp150224	原著論文	2016年 9月	C. Babcock(Oliver Lodge Laboratory, University of Liverpool, ISOLDE, CERN), H. Heylen(Instituut voor Kern-en Stralingsfysica, KU Leuven), M.L. Bissell(School of Physics and Astronomy, University of Manchester), K. Blaum(Max-Planck-Institut für Kernphysik), P. Campbell(School of Physics and Astronomy, University of Manchester), B. Cheal(Oliver Lodge Laboratory, University of Liverpool), D. Fedorov(Petersburg Nuclear Physics Institute), R.F. Garcia Ruiz(Instituut voor Kern-en Stralingsfysica, KU Leuven), W. Geithner(GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung GmbH), W. Gins(Instituut voor Kern-en Stralingsfysica, KU Leuven), T. Day Goodacre(School of Physics and Astronomy, University of Manchester, ISOLDE, CERN), L.K. Grob(Institut für Kernphysik, TU Darmstadt, School of Physics and Astronomy, University of Manchester), M. Kowalska(ISOLDE, CERN), S.M. Lenzi(Dipartimento di Fisica e Astronomia dell'Universita and INFN, Sezione di Padova), B. Maass(Institut für Kernphysik, TU Darmstadt), S. Malbrunot-Ettenauer(ISOLDE, CERN), B. Marsh(ISOLDE, CERN), R. Neugart(Max-Planck-Institut für Kernphysik, Institut für Kernchemie, Johannes Gutenberg-Universität Mainz), G. Neyens(Instituut voor Kern-en Stralingsfysica, KU Leuven), W. Nortershauser(Institut für Kernphysik, TU Darmstadt), T. Otsuka(Dept. of Physics, University of Tokyo), R. Rossel(ISOLDE, CERN), S. Rothe(ISOLDE, CERN), R. Sanchez(GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung GmbH), Y. Tsunoda(Center for Nuclear Study, University of Tokyo), C. Wraith(Oliver Lodge Laboratory, University of Liverpool), L. Xie(School of Physics and Astronomy, University of Manchester), X.F. Yang(Instituut voor Kern-en Stralingsfysica, KU Leuven)	Quadrupole moments of odd-A 53-63Mn: Onset of collectivity towards N = 40	Physics Letters B, Vol.760, pp.387-392 (2016)
29 hp160218, hp160219	会議論文	2016年 9月	T. Yoshinaga(Graduate School of Engineering Science, Osaka University), K. Nozaki(Osaka University Dental Hospital), S. Wada(Graduate School of Engineering Science, Osaka University)	Experimental validation of sound generated from flow in simplified vocal tract model of sibilant /s/	Proceedings of INTERSPEECH 2016, 3584-87, (2016)
30 hp150275, hp150249, hp160225, hp160247	原著論文	2016年 10月	A. Kuo, W. Shinoda, S. Okazaki(Nagoya University)	Molecular Dynamics Study of the Morphology of Hydrated Perfluorosulfonic Acid Polymer Membranes	J.Phys. Chem. C, 120(45), pp 25832-25842, 2016 (DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b08015)
31 hp150283, hp160224	原著論文	2016年 10月	Leonel Aguilar, Maddegedara Lalith, Tsuyoshi Ichimura, Muneo Hori(Earthquake Research InstituteThe University of Tokyo)	Automatic Evacuation Management Using a Multi Agent System and Parallel Meta-Heuristic Search	PRIMA 2016: Principles and Practice of Multi-Agent Systems. PRIMA 2016. Lecture Notes in Computer Science, vol 9862.
32 hp160211, hp150224	原著論文	2016年 10月	C.Kremer(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt), S.Aslanidou(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt), S.Bassauer(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt), M.Hilleker(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt), A.Krugmann(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt), P.von Neumann-Cosel(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt), T.Otsuka(Department of Physics, the University of Tokyo), N.Pietralla(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt), V.Yu.Ponomarev(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt), N.Shimizu(Center for Nuclear Study, the University of Tokyo), M.Singer(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt), G.Steinhilber(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt), T.Togashi(Center for Nuclear Study, the University of Tokyo), Y.Tsunoda(Center for Nuclear Study, the University of Tokyo), V.Werner(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt), M.Zweidinger(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt)	First Measurement of Collectivity of Coexisting Shapes Based on Type II Shell Evolution: The Case of Zr-96	Physical Review Letters, Vol.117, 172503(2016)
33 hp160211	原著論文	2016年 10月	Tomooki Togashi(Center for Nuclear Study, the University of Tokyo), Yusuke Tsunoda(Center for Nuclear Study, the University of Tokyo), Takaharu Otsuka(Department of Physics, the University of Tokyo), Noritaka Shimizu(Center for Nuclear Study, the University of Tokyo)	Quantum Phase Transition in the Shape of Zr isotopes	Physical Review Letters, Vol.117 172502 (2016)
34 hp160218	会議論文	2016年 10月	Tomohiro Otani(Graduate School of Engineering Science, Osaka University), Satoshi Ii(Graduate School of Engineering Science, Osaka University), Tomoyoshi Shigematsu(Graduate School of Medicine, Osaka University), Toshiyuki Fujinaka(Graduate School of Medicine, Osaka University), Tomohiko Ozaki(Graduate School of Medicine, Osaka University), Masayuki Hirata(Graduate School of Medicine, Osaka University), Shigeo Wada(Graduate School of Engineering Science, Osaka University)	A Computational Approach for Blood Flow Analysis in the Densely Coiled Cerebral Aneurysm	Proceedings of 2016 IEEE 16th International Conference on Bioinformatics and Bioengineering (BIBE)
35 hp160218	会議論文	2016年 10月	Mohd Azrul Hisham Mohd Adib(Graduate School of Engineering Science, Osaka University), Satoshi Ii(Graduate School of Engineering Science, Osaka University), Yoshiyuki Watanabe(Graduate School of Medicine, Osaka University), Shigeo Wada(Graduate School of Engineering Science, Osaka University)	Patient-specific blood flows simulation on cerebral aneurysm based on physically consistency feedback control	16th IEEE International Conference on Bioinformatics and Bioengineering (IEEE BIBE) Proceedings
36 hp150287	原著論文	2016年 11月	TOMOKI OHNO(Atmosphere and Ocean Research Institute, University of Tokyo), MASAKI SATOH(Atmosphere and Ocean Research Institute, University of Tokyo), YOHEI YAMADA(Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology)	Warm Cores, Eyewall Slopes, and Intensities of Tropical Cyclones Simulated by a 7-km-Mesh Global Nonhydrostatic Model	Journal of the Atmospheric Sciences, 73, 4289-4309
37 hp150289, hp160229	原著論文	2016年 11月	Kosuke Ito(University of the Ryukyus), Masaru Kunii(Meteorological Research Institute), Takuya Kawabata(Meteorological Research Institute), Kazuo Saito(Meteorological Research Institute), Kazumasa Aonashi(Meteorological Research Institute), Le Duc(Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology)	Mesoscale Hybrid Data Assimilation System based on JMA Nonhydrostatic Model	Monthly Weather Review, 144, 3417-3439
38 hp160207, hp130003, hp140229, hp150233, hp160120	原著論文	2016年 11月	Isseki Yu(iTHES Research Group, RIKEN, Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN), Takaharu Mori(Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN), Tadashi Ando(Laboratory for Biomolecular Function Simulation, RIKEN Quantitative Biology Center), Ryuhei Harada(Computational Biophysics Research Team, RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Jaewoon Jung(Computational Biophysics Research Team, RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Yuji Sugita(Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN, iTHES Research Group, RIKEN, Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN, Laboratory for Biomolecular Function Simulation, RIKEN Quantitative Biology Center, Computational Biophysics Research Team, RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Michael Feig(Department of Biochemistry and Molecular Biology, Michigan State University)	Biomolecular interactions modulate macromolecular structure and dynamics in atomistic model of a bacterial cytoplasm	eLife, 2016;5:e19274

課題番号	分類	発表年月	著者・所属	タイトル	掲載誌・巻番号・ページ番号(発表年)	
39	hp160208	原著論文	2016年11月	A.Mayumi(JAEA), Y.Idomura(JAEA), T.Ina(JAEA), S.Yamada(JAEA), T.Imamura(Riken)	Left-Preconditioned Communication-Avoiding Conjugate Gradient Methods for Multiphase CFD Simulations on the K Computer	Proceedings of ScalA16 in SC16 workshop proceedings in the ACM Digital Library and IEEE Xplore, DOI: 10.1109/ScalA.2016.007
40	hp160211, hp150224	原著論文	2016年11月	H. Heylen(Instituut voor Kern- en Stralingsfysica, KU Leuven), C. Babcock(Oliver Lodge Laboratory, University of Liverpool, ISOLDE, Experimental Physics Department, CERN), R. Beerwerth(Helmholtz Institute Jena, Theoretisch-Physikalisches Institut, Friedrich-Schiller-Universität Jena), J. Billowes(School of Physics and Astronomy, University of Manchester), M. L. Bissell(Instituut voor Kern- en Stralingsfysica, KU Leuven, School of Physics and Astronomy, University of Manchester), K. Blaum(Max-Planck-Institut für Kernphysik), J. Bonnard(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Padova), P. Campbell(School of Physics and Astronomy, University of Manchester), B. Cheal(Oliver Lodge Laboratory, University of Liverpool), T. Day Goodacre(School of Physics and Astronomy, University of Manchester, ISOLDE, Physics Department, CERN), D. Fedorov(Petersburg Nuclear Physics Institute), S. Fritzsche(Helmholtz Institute Jena, Theoretisch-Physikalisches Institut, Friedrich-Schiller-Universität Jena), R. F. Garcia Ruiz(Instituut voor Kern- en Stralingsfysica, KU Leuven), W. Geithner(GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung GmbH), Ch. Geppert(Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Institut für Kernchemie, Institut für Kernphysik, TU Darmstadt), W. Gins(Instituut voor Kern- en Stralingsfysica, KU Leuven), L. K. Grob(ISOLDE, Physics Department, CERN), Institut für Kernphysik, TU Darmstadt), M. Kowalska(ISOLDE, Physics Department, CERN), K. Kreim(Max-Planck-Institut für Kernphysik), S. M. Lenzi(Dipartimento di Fisica e Astronomia dell'Università and INFN, Sezione di Padova), I. D. Moore(Department of Physics, University of Jyväskylä, Helsinki Institute of Physics, University of Helsinki), B. Maass(Institut für Kernphysik, TU Darmstadt), S. Malbrunot-Ettenauer(ISOLDE, Physics Department, CERN), B. Marsh(ISOLDE, Physics Department, CERN), R. Neugart(Max-Planck-Institut für Kernphysik, Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Institut für Kernchemie), G. Neyens(Instituut voor Kern- en Stralingsfysica, KU Leuven), W. Nortershauser(Institut für Kernphysik, TU Darmstadt), T. Otsuka(Department of Physics, University of Tokyo), J. Papuga(Instituut voor Kern- en Stralingsfysica, KU Leuven), R. Rossel(ISOLDE, Physics Department, CERN), S. Rothe(ISOLDE, Physics Department, CERN), R. Sanchez(GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung GmbH), Y. Tsunoda(Center for Nuclear Study, University of Tokyo), C. Wraith(Oliver Lodge Laboratory, University of Liverpool), L. Xie(School of Physics and Astronomy, University of Manchester), X. F. Yang(Instituut voor Kern- en Stralingsfysica, KU Leuven), D. T. Yordanov(Max-Planck-Institut für Kernphysik)	Changes in nuclear structure along the Mn isotopic chain studied via charge radii	Physical Review C, Vol.94, 054321 (2016)
41	hp160218	会議論文	2016年11月	Yoshiaki Sota, Shigeto Seno, Yoichi Takenaka, Shinzaburo Noguchi, Hideo Matsuda(Osaka University)	Comparative Analysis of Transformation Methods for Gene Expression Profiles in Breast Cancer Datasets	2016 IEEE 16th International Conference on Bioinformatics and Bioengineering, pp.328-333
42	hp160218	会議論文	2016年11月	Naoto YAMAMURA (The University of Tokyo), Shu TAKAGI (The University of Tokyo), Taishin NOMURA (Osaka University)	Development of Multi-scale Musculo-skeletal Simulator	IEEE 16th International Conference on Bioinformatics and Bioengineering, pp. 338-341.
43	hp160221, hp160157, hp160160	会議論文	2016年11月	Kohei Fujita(RIKEN), Takuma Yamaguchi(The University of Tokyo), Tsuyoshi Ichimura(The University of Tokyo), Munee Hori(The University of Tokyo / RIKEN), Lalith Madgededara(The University of Tokyo)	Acceleration of Element-by-Element Kernel in Unstructured Implicit Low-order Finite-element Earthquake Simulation using OpenACC on Pascal GPUs	Proceedings of the Third International Workshop on Accelerator Programming Using Directives, pp 1-12
44	hp160223, hp140200, hp140228, hp150056, hp150230, hp160077	レビュー論文	2016年11月	Takefumi Yamashita(Univ. Tokyo)	Towards Physical Understanding of Molecular Recognition in the Cell: Recent Evolution of Molecular Dynamics Techniques and Free Energy Theories	Biomedical Sciences 2016; 2(5): 34-47 doi: 10.11648/j.bs.20160205.11
45	hp160227, hp140150, hp150014	原著論文	2016年11月	Yosuke Harashima(AIST and NIMS), Kiyoyuki Terakura(NIMS), Hiroyuki Kino(NIMS), Shoji Ishibashi(AIST), Takashi Miyake(AIST and NIMS)	First-principles study on stability and magnetism of NdFe11M and NdFe11MN for M5Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn	JOURNAL OF APPLIED PHYSICS 120, 203904
46	hp150281, hp150144	会議論文	2016年12月	Hiroto Imachi(Tottori University), Seiya Yokoyama(Tottori University), Takami Kaji(Tottori University), Yukiya Abe(Tottori University), Tomofumi Tada(Tokyo Institute of Technology), Takeo Hoshi(Tottori University)	One-hundred-nm-scale Electronic Structure and Transport Calculations of Organic Polymers on the K Computer	AIP Conference Proceedings 1790, 020010, 4 pp. (2016)
47	hp160219, pk160002	原著論文	2016年12月	Hideki Makishima, Tetsuichi Yoshizato, Kenichi Yoshida, Mikkael A Sekeres, Tomas Radivoyevitch, Hiromichi Suzuki, Bartlomiej Przychodzen, Yasunobu Nagata, Manja Meggendorfer, Masashi Sanada, Yusuke Okuno, Cassandra Hirsch, Teodora Kuzmanovic, Yusuke Sato, Aiko Sato-Otsubo, Thomas LaFramboise, Naoko Hosono, Yuichi Shiraiishi, Kenichi Chiba, Claudia Haferlach, Wolfgang Kern, Hiroko Tanaka, Yusuke Shiozawa, Ines Gomez-Segui, Holle D Husseinzadeh et al.:	Dynamics of clonal evolution in myelodysplastic syndromes	Nature Genetics (2016). doi:10.1038/ng.3742
48	hp160229	原著論文	2016年12月	河合英徳(東京工業大学環境・社会理工学院), 田村哲郎(東京工業大学環境・社会理工学院), 近藤宏二(鹿島建設技術研究所), 野津剛(清水建設技術研究所), ラファール パレ(理化学研究所計算科学研究機構), 大西慶治(理化学研究所計算科学研究機構), 坪倉誠(理化学研究所計算科学研究機構)	BCM-LESによる建物周りの圧力場・流れ場解析	風工学シンポジウム論文集, Vol24, 247-252
49	hp150254	会議論文	2017年1月	Yuma Fukushima, Soshi Kawai(Tohoku University)	Wall-modeled large-eddy simulation of transonic buffet over a supercritical airfoil at high Reynolds number	AIAA SciTech Forum 55th AIAA Aerospace Sciences Meeting
50	hp150273	原著論文	2017年1月	Batnyam Enkhtaivan(The University of Tokyo), Atsushi Oshiyama(The University of Tokyo)	Atomic force microscope manipulation of Ag atom on the Si(111) surface	Physical Review B 95, 035309

課題番号	分類	発表年月	著者・所属	タイトル	掲載誌・巻番号・ページ番号(発表年)
51 hp150289, hp160162, hp160229, ra000015	原著論文	2017年 1月	S. Kotsuki(RIKEN/AICS), T. Miyoshi(RIKEN/AICS, University of Maryland, JAMSTEC), K. Terasaki, G.-Y. Lien(RIKEN/AICS), E. Kalnay(University of Maryland)	Assimilating the global satellite mapping of precipitation data with the Nonhydrostatic Icosahedral Atmospheric Model (NICAM)	Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 122, 1-20
52 hp160207, hp140229, hp150145, hp150233, hp160120	原著論文	2017年 1月	Po-hung Wang(Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN), Isseki Yu(THES Research Group, RIKEN, Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN), Yuji Sugita(Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN)	Influence of protein crowder size on hydration structure and dynamics in macromolecular crowding	Chemical Physics Letters 671 (2017) 63-70
53 hp160209, pk160002	原著論文	2017年 1月	Washio T, Hisada T, Shintani S A., Higuchi H	Analysis of spontaneous oscillations for a three-state power-stroke model	Phys. Rev. E, 95 (2) , DOI: 10.1103/PhysRevE.95.022411
54 hp160209, hp160219	原著論文	2017年 1月	Imai, Y(Jichi Med Univ)	Congenital Corrected Transposition of Great Arteries (TGA)	Int. Heart J., 58(1), pp. 5
55 hp160210	原著論文	2017年 1月	Yuta Ito(KEK Theory Center, High Energy Accelerator Research Organization), Jun Nishimura(KEK Theory Center, High Energy Accelerator Research Organization, Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI)), Asato Tsuchiya(Department of Physics, Shizuoka University)	Universality and the dynamical space-time dimensionality in the Lorentzian type IIB matrix model	Journal of High Energy Physics, 03(2017)143
56 hp160211, hp150224	原著論文	2017年 1月	N.Paul(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay, RIKEN), A.Corsi(RIKEN), A.Obertelli(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay, RIKEN), P.Doornenbal(RIKEN), G.Auheet(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay), H.Baba(RIKEN), B.Bally(ESNT, IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay), M.Bender(IPNL, Universite de Lyon), D.Calvet(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay), F.Chateau(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay), S.Chen(Peking University), J.-P.Delaroche(CEA, DAM, DIF), A.Delbart(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay), J.-M.Gheller(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay), A.Giganon(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay), A.Gillibert(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay), M.Girod(CEA, DAM, DIF), P.-H.Heenen(Universite Libre de Bruxelles), V.Lapoux(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay), J.Libert(CEA, DAM, DIF), T.Motobayashi(RIKEN), M.Nikura(Department of Physics, the University of Tokyo), T.Otsuka(Department of Physics, the University of Tokyo), T.R.Rodriguez(Universidad Autonoma de Madrid), J.-Y.Rousse(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay), H.Sakurai(RIKEN, Department of Physics, the University of Tokyo), C.Santamaria(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay), N.Shimizu(Center for Nuclear Study, the University of Tokyo), D.Steppenbeck(RIKEN), R.Taniuchi(RIKEN, Department of Physics, the University of Tokyo), T.Togashi(Center for Nuclear Study, the University of Tokyo), Y.Tsunoda(Center for Nuclear Study, the University of Tokyo), T.Uesaka(RIKEN), T.Ando(RIKEN, Department of Physics, the University of Tokyo), T.Arici(GSI, Justus-Liebig-Universitat Giessen), A.Blazhev(Universitat zu Koln), F.Browne(University of Brighton), A.M.Bruce(University of Brighton), R.Carroll(University of Surrey), L.X.Chung(VAEI), M.L.Cortes(Technische Universitat Darmstadt), M.Dewald(Universitat zu Koln), B.Ding(Chinese Academy of Sciences), F.Flavigny(CNRS-IN2P3, Universite Paris-Sud, Universite Paris-Saclay), S.Franchoo(CNRS-IN2P3, Universite Paris-Sud, Universite Paris-Saclay), M.Gorska(GSI), A.Gottardo(CNRS-IN2P3, Universite Paris-Sud, Universite Paris-Saclay), A.Jungclaus(Instituto de Estructura de la Materia, CSIC), J.Lee(The University of Hong Kong), M.Lettmann(Technische Universitat Darmstadt), B.D.Linh(VAEI), J.Liu(The University of Hong Kong), Z.Liu(Chinese Academy of Sciences), C.Lizarazo(Technische Universitat Darmstadt, GSI), S.Momiyama(RIKEN, Department of Physics, the University of Tokyo), K.Moschner(Universitat zu Koln), S.Nagamine(Department of Physics, the University of Tokyo), N.Nakatsuka(Kyoto University), C.Nita(Horia Hulubei National Institute of Physics and Nuclear Engineering (IFIN-HH)), C.R.Nobs(University of Brighton), L.Olivier(CNRS-IN2P3, Universite Paris-Sud, Universite Paris-Saclay), Z.Patel(University of Surrey), Zs.Podolyak(University of Surrey), M.Rudigier(University of Surrey), T.Saito(Department of Physics, the University of Tokyo), C.Shand(University of Surrey), P.-A.Soderstrom(RIKEN), I.Stefan(CNRS-IN2P3, Universite Paris-Sud, Universite Paris-Saclay), R.Orlandi(Japan Atomic Energy Agency), V.Vaquero(Instituto de Estructura de la Materia, CSIC), V.Werner(Technische Universitat Darmstadt), K.Wimmer(Department of Physics, the University of Tokyo), Z.Xu(The University of Hong Kong)	Are There Signatures of Harmonic Oscillator Shells Far from Stability? First Spectroscopy of Zr-110	Physical Review Letters, Vol.118 032501 (2017)
57 hp160211	原著論文	2017年 1月	Naofumi Tsunoda(Center for Nuclear Study, the University of Tokyo, 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo, Japan), Takaharu Otsuka(Center for Nuclear Study, the University of Tokyo, 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo, Japan, Department of Physics and Center for Nuclear Study, the University of Tokyo, 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo, Japan, National Superconducting Cyclotron Laboratory, Michigan State University, East Lansing, Michigan, 48824, USA, Instituut voor Kern- en Stralingsfysica, Katholieke Universiteit Leuven, B-3001 Leuven, Belgium), Noritaka Shimizu(Center for Nuclear Study, the University of Tokyo, 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo, Japan), Morten Hjorth-Jensen(National Superconducting Cyclotron Laboratory and Department of Physics and Astronomy, Michigan State University, East Lansing, Michigan, 48824, USA, Department of Physics, University of Oslo, N-0316 Oslo, Norway), Kazuo Takayanagi(Department of Physics, Sophia University, 7-1 Kioi-cho, Chiyoda-ku, Tokyo 102, Japan), Toshio Suzuki(Department of Physics, College of Humanities and Sciences, Nihon University, Sakurajosui 3, Setagaya-ku, Tokyo 156-8550, Japan)	Exotic neutron-rich medium-mass nuclei with realistic nuclear forces	PHYSICAL REVIEW C 95, 021304(R) (2017)
58 hp160219	原著論文	2017年 1月	Zhang YZ(The University of Tokyo), Yamaguchi R(The University of Tokyo), Imoto S(The University of Tokyo), Miyano S(The University of Tokyo)	Sequence-specific bias correction for RNA-seq data using recurrent neural networks	BMC Genomics. 18(Suppl 1):1044, 2017. doi: 10.1186/s12864-016-3262-5.
59 hp160227, hp120086, hp140150, hp150014	学術誌記事	2017年 1月	合田 義弘(東京工業大学 物質理工学院、物質・材料研究機構 磁性・スピントロニクス材料研究拠点 ESICMM), 立津 慶幸(東京大学 大学院理学系研究科), 常行 真司(東京大学 大学院理学系研究科、東京大学 物性研究所)	ネオジム磁石の粒界構造と局所磁性の電子論	日本金属学会誌 第81巻 p. 26 (2017)

課題番号	分類	発表年月	著者・所属	タイトル	掲載誌・巻番号・ページ番号(発表年)
60 hp160204	原著論文	2017年 2月	Kenji Iida, Masashi Noda, Katsuyuki Nobusada(Institute for Molecular Science)	Development of theoretical approach for describing electronic properties of hetero-interface systems under applied bias voltage	J. Chem. Phys. 146, 084706
61 hp160211, hp150224	原著論文	2017年 2月	A.I. Morales(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Milano, Dipartimento di Fisica, Universita degli Studi di Milano), G. Benzoni(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Milano), H. Watanabe(IRCNPC, School of Physics and Nuclear Energy Engineering, Beihang University, RIKEN Nishina Center), Y. Tsunoda(Center for Nuclear Study, The University of Tokyo), T. Otsuka(Department of Physics, The University of Tokyo, National Superconducting Cyclotron Laboratory, Michigan State University, Instituut voor Kern-en Stralingsfysica, Katholieke Universiteit Leuven), S. Nishimura(RIKEN Nishina Center), F. Browne(School of Computing, Engineering and Mathematics, University of Brighton, RIKEN Nishina Center), R. Daido(Department of Physics, Osaka University), P. Doornenbal(RIKEN Nishina Center), Y. Fang(Department of Physics, Osaka University), G. Lorusso(RIKEN Nishina Center), Z. Patel(Department of Physics, University of Surrey, RIKEN Nishina Center), S. Rice(Department of Physics, University of Surrey, RIKEN Nishina Center), L. Sinclair(Department of Physics, University of York, RIKEN Nishina Center), P.-A. Soderstrom(RIKEN Nishina Center), T. Sumikama(Department of Physics, Tohoku University), J. Wu(RIKEN Nishina Center), Z.Y. Xu(Department of Physics, The University of Tokyo, RIKEN Nishina Center), A. Yagi(Department of Physics, Osaka University), R. Yokoyama(Department of Physics, The University of Tokyo), H. Baba(RIKEN Nishina Center), R. Avigo(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Milano, Dipartimento di Fisica, Universita degli Studi di Milano), F.L. Bello Garrote(Department of Physics, University of Oslo), N. Blasi(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Milano), A. Bracco(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Milano, Dipartimento di Fisica, Universita degli Studi di Milano), F. Camera(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Milano, Dipartimento di Fisica, Universita degli Studi di Milano), S. Ceruti(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Milano, Dipartimento di Fisica, Universita degli Studi di Milano), F.C.L. Crespi(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Milano, Dipartimento di Fisica, Universita degli Studi di Milano), G. de Angelis(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Laboratori Nazionali di Legnaro), M.-C. Delattre(IPNO Orsay), Zs. Dombradi(MTA Atomki), A. Gottardo(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Laboratori Nazionali di Legnaro), T. Isobe(RIKEN Nishina Center), I. Kojouharov(GSI), N. Kurz(GSI), I. Kuti(MTA Atomki), K. Matsui(Department of Physics, The University of Tokyo), B. Melon(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Firenze), D. Mengoni(Dipartimento di Fisica, Universita degli Studi di Padova, Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Padova), T. Miyazaki(Department of Physics, The University of Tokyo), V. Modamio-Hoybjor(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Laboratori Nazionali di Legnaro), S. Momiyama(Department of Physics, The University of Tokyo), D.R. Napoli(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Laboratori Nazionali di Legnaro), M. Niikura(Department of Physics, The University of Tokyo), R. Orlandi(Instituut voor Kern-en Stralingsfysica, Katholieke Universiteit Leuven, Advanced Science Research Center, JAEA), H. Sakurai(RIKEN Nishina Center, Department of Physics, The University of Tokyo), E. Sahin(Department of Physics, University of Oslo), D. Sohler(MTA Atomki), H. Schaffner(GSI), R. Taniuchi(Department of Physics, The University of Tokyo), J. Taprogge(Istituto de Estructura de la Materia, CSIC, Departamento de Fisica teorica, Universidad Autonoma de Madrid), Zs. Vajta(MTA Atomki), J.J. Valiente-Dobon(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Laboratori Nazionali di Legnaro), O. Wieland(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Milano), M. Yalcinkaya(Department of Physics, Istanbul University)	Type II shell evolution in A=70 isobars from the N>=40 island of inversion	Physics Letters B, Vol.765, pp.328-333 (2017)
62 hp160214	原著論文	2017年 2月	Robert C. Harris, Nanjie Deng, Ronald M. Levy(Temple University), Ryosuke Ishizuka, Nobuyuki Matubayasi(Osaka University)	Computing Conformational Free Energy Differences in Explicit Solvent: An Efficient Thermodynamic Cycle Using an Auxiliary Potential and a Free Energy Functional Constructed from the End Points	J. Comput. Chem., 38, 1198-1208 (2017)
63 hp160219	原著論文	2017年 2月	Park H(The University of Tokyo), Niida A(The University of Tokyo), Imoto S(The University of Tokyo), Miyano S(The University of Tokyo)	Interaction-Based Feature Selection for Uncovering Cancer Driver Genes Through Copy Number-Driven Expression Level	J Comput Biol. 24(2):138-15, 2017. doi: 10.1089/cmb.2016.0140.
64 hp160223, hp150003, hp150233, hp160139	学術誌記事	2017年 2月	池部仁善(量研機構), 櫻庭俊(東大), 河野秀俊(量研機構)	スクレオノーム中におけるH3ヒストンテールの構造とアセチル化の影響	日本生物物理学会誌 2017, 57 (2), 095-097.
65 hp150262, hp120281, hp130023, hp140209, hp150085, hp150223, hp160093, hp160211	会議論文	2017年 3月	T. Doi, S. Aoki, S. Gongyo, T. Hatsuda, Y. Ikeda, T. Inoue, T. Iritani, N. Ishii, T. Miyamoto, K. Murano, H. Nemura and K. Sasaki	Baryon interactions from lattice QCD with physical masses -- Overview and S = 0, -4 sectors --	PoS LAT2016, 110 (2016)

課題番号	分類	発表年月	著者・所属	タイトル	掲載誌・巻番号・ページ番号 (発表年)
66 hp150262, hp120281, hp130023, hp140209, hp150223, hp160211	会議論文	2017年 3月	Noriyoshi Ishii(RCNP, Osaka university, and Theoretical Research Division, Nishina Center, RIKEN), Sinya Aoki(Theoretical Research Division, Nishina Center, RIKEN, and YITP, Kyoto University, and CCS, University of Tsukuba), Takumi Doi(Theoretical Research Division, Nishina Center, RIKEN), Shinya Gongyo(Theoretical Research Division, Nishina Center, RIKEN, and CNRS, Laboratoire de Mathematiques et Physique Theorique, Universite de Tours, France), Tetsui Hatsuda(Theoretical Research Division, Nishina Center, RIKEN, and iTHEMS Program and ITHES Research Group, RIKEN), Yoichi Ikeda(RCNP, Osaka university, and Theoretical Research Division, Nishina Center, RIKEN), Takumi Iritani(Theoretical Research Division, Nishina Center, RIKEN), Takaya Miyamoto(Theoretical Research Division, Nishina Center, RIKEN, and YITP, Kyoto university), Keiko Murano(RCNP, Osaka university, and Theoretical Research Division, Nishina Center, RIKEN), Hidekatsu Nemura(Theoretical Research Division, Nishina Center, RIKEN, and CCS, University of Tsukuba), Kenji Sasaki(Theoretical Research Division, Nishina Center, RIKEN, and YITP, Kyoto University)	Baryon interactions from lattice QCD with physical masses -- S=-3 sector: XiSigma & XiLambda-XiSigma --	PoS(LATTICE2016), 127
67 hp150262, hp120281, hp130023, hp140209, hp150085, hp150223, hp160093, hp160211	レビュー論文	2017年 3月	T. Doi (RIKEN) and T. Inoue (Nihon U.)	Baryon-Baryon Interactions from Lattice QCD: The Bridge from Quarks to Nuclei and Cosmos	Nucl. Phys. News 27, 13 (2017)
68 hp150262, hp140209, hp150223, hp160211	会議論文	2017年 3月	Takashi Inoue (Nihon University, College of Bioresource Sciences, Fujisawa 252-0880, Japan), for HAL QCD Collaboration	Hyperon single-particle potentials from QCD on lattice	PROCEEDINGS OF SCIENCE (INPC2016) 277
69 hp150281, hp150144, hp160066, hp160222	会議論文	2017年 3月	Takeo Hoshi(Tottori University), Hiroto Imachi(Tottori University), Kiyoshi Kumahata(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Masaaki Terai(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Kengo Miyamoto(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Kazuo Minami(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Fumiyooshi Shoji(RIKEN Advanced Institute for Computational Science)	Extremely scalable algorithm for 10 ⁸ -atom quantum material simulation on the full system of the K computer	Proc. Scala16 in SC16, pp33-40 (2016).
70 hp150281, hp150144, hp160066, hp160222	博士学位論文	2017年 3月	Hiroto Imachi(Tottori University)	Numerical methods for large-scale quantum material simulations	D. Thesis, Tottori University
71 hp160203	原著論文	2017年 3月	小平剛央, 鋸持寛正(マツダ), 大山聖(JAXA), 立川智章(東京理科大学)	応答曲面法を用いた複数車種の同時最適化ベンチマーク問題の提案	進化計算学会論文誌 Vol. 8 No.1, 2017
72 hp160204, hp160046	原著論文	2017年 3月	Kenji Iida, Katsuyuki Nobusada(Institute for Molecular Science)	Atomically modified thin interface in metal-dielectric hetero-integrated systems: control of electronic properties	J. Phys.: Condens. Matter 29, 145503
73 hp160209, pk160002	原著論文	2017年 3月	Marcucci L, Washio T, Yanagida T	Including Thermal Fluctuations in Actomyosin Stable States Increases the Predicted Force per Motor and Macroscopic Efficiency in Muscle Modelling	PLOS Computational Biology , DOI:10.1371/journal.pcbi.1005083
74 hp160211	原著論文	2017年 3月	Takumi Iritani(RIKEN)	Baryon interactions in lattice QCD: the direct method vs. the HAL QCD potential method	Proceedings of Science (Lattice 2016) 107
75 hp160219	原著論文	2017年 3月	Tominaga K, Shimamura T, Kimura N, Murayama T, Matsubara D, Kanauchi H, Niida A, Shimizu S, Nishioka K, Tsuji EI, Yano M, Sugano S, Shimono Y, Ishii H, Saya H, Mori M, Akashi K, Tada KI, Ogawa T, Tojo A, Miyano S, Gotoh N.	Addiction to the IGF2-ID1-IGF2 circuit for maintenance of the breast cancer stem-like cells	Oncogene. 36(9):1276-1286. doi: 10.1038/onc.2016.293.

(5) ポスト「京」研究開発枠(萌芽的課題)

課題番号	分類	発表年月	著者・所属	タイトル	掲載誌・巻番号・ページ番号(発表年)
1 hp160269, hp160187	会議論文	2016年 9月	Tetsuya Fukuda(The University of Tokyo), Tomoki Kazawa(The University of Tokyo), Ryohei Kanzaki(The University of Tokyo)	Establishment of the estimation method of the neural network using CMA-ES for elucidating the neural mechanism of a silkworm moth brain.	FRONTIERS IN NEUROSCIENCE, Conference Abstract: Neuroinformatics 2016. doi: 10.3389/conf.fninf.2016.20.00085
2 hp160258, hp150236	原著論文	2016年 12月	Jan Hahne(University of Wuppertal), Moritz Helias(Julich Research Centre, RIKEN, RWTH Aachen University), Susanne Kunkel(KTH Royal Institute of Technology, Julich Research Centre), Jun Igarashi(RIKEN, Okinawa Institute of Science and Technology), Itaru Kitayama(RIKEN), Brian Wylie(Julich Research Centre), Matthias Bolten(Universit at Kassel), Andreas Frommer(University of Wuppertal), Markus Diesmann(Julich Research Centre, RWTH Aachen University, RWTH Aachen University)	Including Gap Junctions into Distributed Neuronal Network Simulations	International Workshop on Brain-Inspired Computing BrainComp 2015: Brain-Inspired Computing, LNCS 10087, pp. 43-57
3 hp160251	原著論文	2017年 1月	Jun Tsuchiya(Chime-u), Taku Tsuchiya(Chime-u)	First principles calculation of the elasticity of ice VIII and X	THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 146, 014501
4 hp160253	原著論文	2017年 1月	Seiya Nishizawa(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Masatsugu Odaka(Department of CosmoSciences, Hokkaido University), Yoshiyuki O. Takahashi(Department of Planetology/Center for Planetary Science, Kobe University), Ko-ichiro Sugiyama(Department of Information Engineering, National Institute of Technology, Matsue College), Kensuke Nakajima(Department of Earth and Planetary Sciences, Kyushu University), Masaki Ishiwatari(Department of CosmoSciences, Hokkaido University), Shin-ichi Takehiro(Research Institute for Mathematical Sciences, Kyoto University), Hisashi Yashiro(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Yousuke Sato(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Hirofumi Tomita(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Yoshi-Yuki Hayashi(Department of Planetology/Center for Planetary Science, Kobe University)	Overlapping Communication and Computation for Large-Scale Artificial Market Simulation	Proc. of 22nd International Symposium on Artificial Life and Robotics (AROB 2017), pp. 708-713
5 hp160251	原著論文	2017年 3月	Yousuke Sato(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Hiroaki Miura(Department of Earth and Planetary Science, The University of Tokyo), Hisashi Yashiro(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Daisuke Goto(National Institute for Environmental Studies), Toshihiko Takemura(Research Institute for Applied Mechanics, Kyushu University), Hirofumi Tomita(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Teruyuki Nakajima(Earth Observation Research Center, Japan Aerospace Exploration Agency)	The first peak splitting of the Ge-Ge pair RDF in the correlation to network structure of GeO2 under compression	Journal of Non-Crystalline Solids, Volume 459, Pages 103-110

(6)戦略プログラム

課題番号	分類	発表年月	著者・所属	タイトル	掲載誌・巻番号・ページ番号 (発表年)
1 hp130022, hp120123, hp140096, hp140214, hp150041, hp150231, hp150268	原著論文	2016年 4月	Takahisa Kouno(Univ. of Tokyo (ISSP), Nagoya Institute of Technology), Shuji Ogata(Nagoya Institute of Technology), Takaaki Shimada(Nagoya Institute of Technology), Tomoyuki Tamura(Nagoya Institute of Technology), Ryo Kobayashi(Nagoya Institute of Technology)	Enhanced Si-O Bond Breaking in Silica Glass by Water Dimer: A Hybrid Quantum-Classical Simulation Study	J. Phys. Soc. Jpn. Vol. 85, pp. 054601
2 hp150212	学術誌記事	2016年 4月	Nobuo Tajima(National Institute for Materials Science, The University of Tokyo), Tomoaki Kaneko(National Institute for Materials Science), Jun Nara(National Institute for Materials Science), Takahisa Ohno(National Institute for Materials Science, The University of Tokyo)	A first principles study on the CVD graphene growth on copper surfaces: A carbon atom incorporation to graphene edges	SURFACE SCIENCE, 653, 123-129.
3 hp130001, hp140207, hp150219	原著論文	2016年 5月	Makoto Sato(Institute of Space and Astronautical Science, Japan Aerospace Exploration Agency), Taku Nonomura(Institute of Space and Astronautical Science, Japan Aerospace Exploration Agency), Koichi Okada(Ryoyu Systems Co. Ltd.), Kengo Asada(University of Tokyo), Hikaru Aono(Institute of Space and Astronautical Science, Japan Aerospace Exploration Agency), Aiko Yakeno(Institute of Space and Astronautical Science, Japan Aerospace Exploration Agency), Yoshiaki Abe(University of Tokyo), Kozo Fujii(Institute of Space and Astronautical Science, Japan Aerospace Exploration Agency)	Mechanisms for laminar separated-flow control using dielectric-barrier-discharge plasma actuator at low Reynolds number	Physics of Fluids, Vol. 27, 117101
4 hp130002, hp140218, hp150212	原著論文	2016年 5月	Tomoaki Kaneko(NIMS, MARCEED), Nobuo Tajima(NIMS, MARCEED), Takahisa Ohno(NIMS, MARCEED, Univ. Tokyo)	First-principles study on bottom-up fabrication process of atomically precise graphene nanoribbons	Japanese Journal of Applied Physics 55, 06GF05 (2016).
5 hp140215, hp150211	原著論文	2016年 5月	Youhei Yamaji(University of Tokyo), Takafumi Suzuki, Takuto Yamada, Sei-ichiro Suga(University of Hyogo), Naoki Kawashima, Masatoshi Imada(University of Tokyo)	Clues and criteria for designing a Kitaev spin liquid revealed by thermal and spin excitations of the honeycomb iridate Na ₂ IrO ₃	Phys. Rev. B. 93,174425(1-14),(2016)
6 hp150212	原著論文	2016年 5月	Tomoaki Kaneko(NIMS, MARCEED), Takahisa Ohno(NIMS, MARCEED, Univ. Tokyo)	First-principles study of electronic structures of graphene on Y ₂ O ₃	Japanese Journal of Applied Physics, 55, 06GF07 (2016).
7 hp120282, hp130012, hp140220, hp150214, hp150289, hp160229	原著論文	2016年 6月	Junshi Ito(Meteorological Research Institute, Japan Meteorological Agency, Tsukuba, Japan), Hiroshi Niino(Atmosphere and Ocean Research Institute, The University of Tokyo, Kashiwa, Japan)	Wind-Speed-Surface-Heat-Flux Feedback in Dust Devils	Boundary-Layer Meteorology, Vol.161, pp.229-235 (2016)
8 hp140210, hp150224	会議論文	2016年 6月	Noritaka Shimizu(Center for Nuclear Study, the University of Tokyo), Yutaka Utsuno(Japan Atomic Energy Agency), Yasunori Futamura(University of Tsukuba), Tetsuya Sakurai(University of Tsukuba), Takaharu Otsuka(Department of Physics, the University of Tokyo)	Stochastic estimation of level density in nuclear shell-model calculations	EPJ Web of Conferences 122, 02003 (2016)
9 hp140211, hp150225, hp160094, hp160211	原著論文	2016年 6月	Yuichiro Sekiguchi(Department of Physics, Toho University, Funabashi, Chiba 274-8510, Japan), Kenta Kiuchi(Center for Gravitational Physics, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto 606-8502, Japan), Koutarou Kyutoku(Interdisciplinary Theoretical Science (iTHES) Research Group, RIKEN, Wako, Saitama 351-0198, Japan), Masaru Shibata(Center for Gravitational Physics, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto 606-8502, Japan), Keisuke Taniguchi(Department of Physics, University of the Ryukyus, Nishihara, Okinawa 903-0213, Japan)	Dynamical mass ejection from the merger of asymmetric binary neutron stars: Radiation-hydrodynamics study in general relativity	Physical Review D, 93, 124046 (2016)
10 hp140224, hp140103	原著論文	2016年 6月	A. Sommer, E.M. Botschafte, T. Jakubeit, T. Lanka, O. Razskazovskaya, H. Fattahi, M. Jobst, W. Schweinberger, V. Shirvanyan, V.S. Yakovlev, N. Karpowicz, M. Schultze, F. Krauss(Max-Planck-Institut für Quantenoptik), S.A. Sato, K. Yabana(Center for Computational Sciences, University of Tsukuba), R. Kienberger(Physik-department, Technische University Munchen)	Attosecond nonlinear polarization and light-matter energy transfer in solids	NATURE 534, pp.86-90
11 hp150218	原著論文	2016年 6月	K. Sawada, J.-I. Iwata, A. Oshiyama(Department of Applied Physics, The University of Tokyo)	Spontaneous Appearance of Low-dimensional Magnetic Electron System on Semiconductor Nanostructures	Physical Review B vol 93 art no. 235421
12 hp120281, hp130023, hp140209	会議論文	2016年 7月	K.-I. Ishikawa(Hiroshima University), N. Ishizuka, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yamazaki, Y. Yoshie(University of Tsukuba), Y. Kuramashi(University of Tsukuba/RIKEN AICS), Y. Nakamura(RIKEN AICS)	2+1 flavor QCD simulation on a 96 ⁴ lattice	Proceedings of Science (LATTICE 2015) 075
13 hp120281, hp130023, hp140209, hp150085, hp150223, hp150262	会議論文	2016年 7月	T. Doi, S. Aoki, S. Gongyo, T. Hatsuda, Y. Ikeda, T. Inoue, T. Iritani, N. Ishii, T. Miyamoto, K. Murano, H. Nemura and K. Sasaki	First results of baryon interactions from lattice QCD with physical masses (1) -- General overview and two-nucleon forces --	PoS LAT2015, 086 (2015)
14 hp140215, hp150173, hp150211, hp160201	原著論文	2016年 7月	Takahiro Misawa(Department of Applied Physics, University of Tokyo), Yusuke Nomura(Centre de Physique Theorique, Ecole Polytechnique), Silke Biermann(Centre de Physique Theorique, Ecole Polytechnique), Masatoshi Imada(Centre de Physique Theorique, Ecole Polytechnique)	Self-optimized superconductivity attainable by interlayer phase separation at cuprate interfaces	Science Advances, Vol. 2, no. 7, pp1-8
15 hp140228, hp150230	原著論文	2016年 7月	Takako Sakano(Univ. Tokyo), Md. Iqbal Mahmood(Univ. Tokyo), Takefumi Yamashita(Univ. Tokyo), Hideaki Fujitani(Univ. Tokyo)	Molecular dynamics analysis to evaluate docking pose prediction	Biophysics and Physicobiology Vol. 13, pp. 181-194
16 hp150226, hp150263, hp160212	原著論文	2016年 7月	Hiroyuki R, Takahashi(NAOJ), Ken Ohsuga(NAOJ), Tomohisa Kawashima(NAOJ), Yuichiro Sekiguchi(Toho University)	Formation of Overheated Regions and Truncated Disks around Black Holes: Three-dimensional General Relativistic Radiation-magnetohydrodynamics Simulations	The Astrophysical Journal
17 hp130012, hp140220, hp150214, hp150289, hp160229	原著論文	2016年 8月	Sho Yokota(Meteorological Research Institute, Japan Meteorological Agency), Hiromu Seko(Meteorological Research Institute, Japan Meteorological Agency, and Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology), Masaru Kunii(Meteorological Research Institute, Japan Meteorological Agency), Hiroshi Yamauchi(Meteorological Research Institute, Japan Meteorological Agency, and Observations Department, Japan Meteorological Agency), Hiroshi Niino(Atmosphere and Ocean Research Institute, The University of Tokyo)	The tornadic supercell on the Kanto Plain on 6 May 2012: Polarimetric radar and surface data assimilation with EnKF and ensemble-based sensitivity analysis	Monthly Weather Review, 144, 3133-3157

課題番号	分類	発表年月	著者・所属	タイトル	掲載誌・巻番号・ページ番号 (発表年)
18 hp140214, hp140096, hp150041, hp150231, hp150268, hp160028, hp160214	原著論文	2016年 8月	Shuji Ogata(Nagoya Institute of Technology), Yusuke Takahashi(Kobe Corporate Research Laboratories)	Moisture-Induced Reduction of Adhesion Strength between Surface Oxidized Al and Epoxy Resin: Dynamics Simulation with Electronic Structure Calculation	J. Phys. Chem. C, Vol. 120, pp. 13630-13637
19 hp140223, hp150127, hp150175, hp150217	原著論文	2016年 8月	Kohei Fujita(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Tsuyoshi Ichimura(Earthquake Research Institute, University of Tokyo)	Development Of Large-Scale Three-Dimensional Seismic Ground Strain Response Analysis Method and Its Application to Tokyo using Full K Computer	Journal of Earthquake and Tsunami Vol. 10, No. 4 (2016) 1640017
20 hp150216	原著論文	2016年 8月	Kei Yamashita(International Research Institute of Disaster Science, Tohoku University), Daisuke Sugawara(Museum of Natural and Environmental History), Tomoyuki Takahashi(Faculty of Societal Safety Sciences, Kansai University), Fumihiko Imamura(International Research Institute of Disaster Science, Tohoku University), Yuichi Saito, Yoshiyuki Imato, Tadashi Kai, Hitoshi Uehara(Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology), Toshihiro Kato, Kazuto Nakata(NEC Corporation), Ryotaro Saka(NEC Informatec Systems, Ltd.), Asao Nishikawa(IX Knowledge Inc.)	Numerical Simulations of Large-Scale Sediment Transport Caused by the 2011 Tohoku Earthquake Tsunami in Hirota Bay, Southern Sanriku Coast	Coast. Eng. J. DOI: http://dx.doi.org/10.1142/S0578563416400155
21 hp150218, hp150101	原著論文	2016年 8月	M. Lucchini, A. Ludwig, J. Herrmann, M. Volkov, L. Kasmí, L. Gallmann, U. Keller(Department of Physics, ETH Zurich), S.A. Sato, K. Yabana(Center for Computational Sciences, University of Tsukuba), Y. Shimohara(Photon Science Center, University of Tokyo)	Attosecond dynamical Franz-Keldysh effect in polycrystalline diamond	Science, 353 pp.916-919
22 hp130007, hp140215	原著論文	2016年 9月	Moyuru Kurita(Department of Applied Physics, University of Tokyo), Youhei Yamaji(Quantum-Phase Electronics Center (QPEC), University of Tokyo), Masatoshi Imada(University of Tokyo)	Stabilization of topological insulator emerging from electron correlations on honeycomb lattice and its possible relevance in twisted bilayer graphene	Phys. Rev. B 94, 125131, pp.1-9
23 hp150224, hp160211	原著論文	2016年 9月	C. Babcock(Oliver Lodge Laboratory, University of Liverpool, ISOLDE, CERN), H. Heylen(Instituut voor Kern-en Stralingsfysica, KU Leuven), M.L. Bissell(School of Physics and Astronomy, University of Manchester), K. Blaum(Max-Planck-Institut für Kernphysik), P. Campbell(School of Physics and Astronomy, University of Manchester), B. Cheal(Oliver Lodge Laboratory, University of Liverpool), D. Fedorov(Petersburg Nuclear Physics Institute), R.F. Garcia Ruiz(Instituut voor Kern-en Stralingsfysica, KU Leuven), W. Geithner(GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung GmbH), W. Gins(Instituut voor Kern-en Stralingsfysica, KU Leuven), T. Day Goodacre(School of Physics and Astronomy, University of Manchester, ISOLDE, CERN), L.K. Grob(Institut für Kernphysik, TU Darmstadt, School of Physics and Astronomy, University of Manchester), M. Kowalska(ISOLDE, CERN), S.M. Lenz(Dipartimento di Fisica e Astronomia dell'Università and INFN, Sezione di Padova), B. Maass(Institut für Kernphysik, TU Darmstadt), S. Malbrunot-Ettenauer(ISOLDE, CERN), B. Marsh(ISOLDE, CERN), R. Neugart(Max-Planck-Institut für Kernphysik, Institut für Kernchemie, Johannes Gutenberg-Universität Mainz), G. Neyens(Instituut voor Kern-en Stralingsfysica, KU Leuven), W. Nortershauser(Institut für Kernphysik, TU Darmstadt), T. Otsuka(Dept. of Physics, University of Tokyo), R. Rossel(ISOLDE, CERN), S. Rothe(ISOLDE, CERN), R. Sanchez(GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung GmbH), Y. Tsunoda(Center for Nuclear Study, University of Tokyo), C. Wraith(Oliver Lodge Laboratory, University of Liverpool), L. Xie(School of Physics and Astronomy, University of Manchester), X.F. Yang(Instituut voor Kern-en Stralingsfysica, KU Leuven)	Quadrupole moments of odd-A 53-63Mn: Onset of collectivity towards N = 40	Physics Letters B, Vol.760, pp.387-392 (2016)
24 hp140215, hp140136, hp150142, hp150211, hp160122	原著論文	2016年 10月	S. Shinjo(YITP, Kyoto Univ.), S. Sota(RIKEN AICS), S. Yunoki(RIKEN, RIKEN AICS, RIKEN CEMS), K. Totsuka(YITP, Kyoto Univ.), T. Tohyama(Tokyo Univ. of Sci.)	Density Matrix Renormalization Group Study of Kitaev Heisenberg Model on a Triangular Lattice	Journal of the Physical Society of Japan 85, 114710 (2016)
25 hp150224, hp160211	原著論文	2016年 10月	C.Kremer(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt), S.Aslanidou(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt), S.Bassauer(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt), M.Hilker(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt), A.Krugmann(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt), P.von Neumann-Cosel(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt), T.Otsuka(Department of Physics, the University of Tokyo), N.Pietralla(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt), V.Yu.Ponomarev(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt), N.Shimizu(Center for Nuclear Study, the University of Tokyo), M.Singer(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt), G.Steinhilber(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt), T.Togashi(Center for Nuclear Study, the University of Tokyo), Y.Tsunoda(Center for Nuclear Study, the University of Tokyo), V.Werner(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt), M.Zweidinger(Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt)	First Measurement of Collectivity of Coexisting Shapes Based on Type II Shell Evolution: The Case of Zr-96	Physical Review Letters, Vol.117, 172503(2016)
26 hp130003, hp140229, hp150233, hp160120, hp160207	原著論文	2016年 11月	Isseki Yu(iTHES Research Group, RIKEN, Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN), Takaharu Mori(Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN), Tadashi Ando(Laboratory for Biomolecular Function Simulation, RIKEN Quantitative Biology Center), Ryuhei Harada(Computational Biophysics Research Team, RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Jaewon Jung(Computational Biophysics Research Team, RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Yuji Sugita(Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN, iTHES Research Group, RIKEN, Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN, Laboratory for Biomolecular Function Simulation, RIKEN Quantitative Biology Center, Computational Biophysics Research Team, RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Michael Feig(Department of Biochemistry and Molecular Biology, Michigan State University)	Biomolecular interactions modulate macromolecular structure and dynamics in atomistic model of a bacterial cytoplasm	eLife, 2016;5:e19274

課題番号	分類	発表年月	著者・所属	タイトル	掲載誌・巻番号・ページ番号 (発表年)
27	原著論文	2016年11月	Kenichi Koizumi, Katsuyuki Nobusada(Institute for Molecular Science), Mauro Boero(Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg)	Simple but Efficient Method for Inhibiting Sintering and Aggregation of Catalytic Pt Nanoclusters on Metal-Oxide Supports	Chem. Eur. J., 23, 1531-1538
28	レビュー論文	2016年11月	Takefumi Yamashita(Univ. Tokyo)	Towards Physical Understanding of Molecular Recognition in the Cell: Recent Evolution of Molecular Dynamics Techniques and Free Energy Theories	Biomedical Sciences 2016; 2(5): 34-47 doi: 10.11648/j.bs.20160205.11
29	原著論文	2016年11月	M. Jakir Hossen, Phil R. Cummins, Jan Dettmer(Research School of Earth Sciences, Australian National University, Canberra, ACT, Australia), Toshitaka Baba(Institute of Technology and Science, University of Tokushima, Tokushima, Japan)	Time reverse imaging for far-field tsunami forecasting: 2011 Tohoku earthquake case study	Geophys. Res. Lett., doi: 10.1002/2015GL065868
30	原著論文	2016年11月	大石裕介(富士通研究所知識情報処理研究所), 今村文彦(東北大学災害科学国際研究所), 菅原大助(ふじのくに地球環境史ミュージアム), 古村孝志(東京大学地震研究所)	津波解析における信頼性の高い市街地浸水モデルに関するスパコンを用いた検討	土木学会論文集B2 (海岸工学), Vol. 72, No. 2, 1_409-1_414
31	原著論文	2016年11月	H. Heylen(Instituut voor Kern- en Stralingsfysica, KU Leuven), C. Babcock(Oliver Lodge Laboratory, University of Liverpool, ISOLDE, Experimental Physics Department, CERN), R. Beerwerth(Helmholtz Institute Jena, Theoretisch-Physikalisches Institut, Friedrich-Schiller-Universität Jena), J. Billowes(School of Physics and Astronomy, University of Manchester), M. L. Bissell(Instituut voor Kern- en Stralingsfysica, KU Leuven, School of Physics and Astronomy, University of Manchester), K. Blaum(Max-Planck-Institut für Kernphysik), J. Bonnard(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Padova), P. Campbell(School of Physics and Astronomy, University of Manchester), B. Cheal(Oliver Lodge Laboratory, University of Liverpool), T. Day Goodacre(School of Physics and Astronomy, University of Manchester, ISOLDE, Physics Department, CERN), D. Fedorov(Petersburg Nuclear Physics Institute), S. Fritzsche(Helmholtz Institute Jena, Theoretisch-Physikalisches Institut, Friedrich-Schiller-Universität Jena), R. F. Garcia Ruiz(Instituut voor Kern- en Stralingsfysica, KU Leuven), W. Geithner(GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung GmbH), Ch. Geppert(Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Institut für Kernchemie, Institut für Kernphysik, TU Darmstadt), W. Gins(Instituut voor Kern- en Stralingsfysica, KU Leuven), L. K. Grob(ISOLDE, Physics Department, CERN, Institut für Kernphysik, TU Darmstadt), M. Kowalska(ISOLDE, Physics Department, CERN), K. Kreim(Max-Planck-Institut für Kernphysik), S. M. Lenzi(Dipartimento di Fisica e Astronomia dell'Università and INFN, Sezione di Padova), I. D. Moore(Department of Physics, University of Jyväskylä, Helsinki Institute of Physics, University of Helsinki), B. Maass(Institut für Kernphysik, TU Darmstadt), S. Malbrunot-Ettenauer(ISOLDE, Physics Department, CERN), B. Marsh(ISOLDE, Physics Department, CERN), R. Neugart(Max-Planck-Institut für Kernphysik, Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Institut für Kernchemie), G. Neyens(Instituut voor Kern- en Stralingsfysica, KU Leuven), W. Nortershauser(Institut für Kernphysik, TU Darmstadt), T. Otsuka(Department of Physics, University of Tokyo), J. Papuga(Instituut voor Kern- en Stralingsfysica, KU Leuven), R. Rossel(ISOLDE, Physics Department, CERN), S. Rothe(ISOLDE, Physics Department, CERN), R. Sanchez(GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung GmbH), Y. Tsunoda(Center for Nuclear Study, University of Tokyo), C. Wraith(Oliver Lodge Laboratory, University of Liverpool), L. Xie(School of Physics and Astronomy, University of Manchester), X. F. Yang(Instituut voor Kern- en Stralingsfysica, KU Leuven), D. T. Yordanov(Max-Planck-Institut für Kernphysik)	Changes in nuclear structure along the Mn isotopic chain studied via charge radii	Physical Review C, Vol.94, 054321 (2016)
32	会議論文	2016年12月	Takefumi Yamashita(Univ. Tokyo)	On the Accurate Molecular Dynamics Analysis of Biological Molecules	AIP Conference Proceedings 1790, 020026 (2016); doi: 10.1063/1.4968652
33	原著論文	2016年12月	Y. Tatetsu(U Tokyo), S. Tsuneyuki(U Tokyo), Y. Gohda(Tokyo Tech)	First-Principles Study of the Role of Cu in Improving the Coercivity of Nd-Fe-B Permanent Magnets	Phys. Rev. Appl. 6, 064029 (2016).
34	原著論文	2016年12月	Jan Hahne(University of Wuppertal), Moritz Helias(Jülich Research Centre, RIKEN, RWTH Aachen University), Susanne Kunkel(KTH Royal Institute of Technology, Jülich Research Centre), Jun Igarashi(RIKEN, Okinawa Institute of Science and Technology), Itaru Kitayama(RIKEN), Brian Wylie(Jülich Research Centre), Matthias Bolten(Universität Kassel), Andreas Frommer(University of Wuppertal), Markus Diesmann(Jülich Research Centre, RWTH Aachen University, RWTH Aachen University)	Including Gap Junctions into Distributed Neuronal Network Simulations	International Workshop on Brain-Inspired Computing BrainComp 2015: Brain-Inspired Computing, LNCS 10087, pp. 43-57
35	原著論文	2017年1月	Po-hung Wang(Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN), Isseki Yu(THES Research Group, RIKEN, Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN), Yuji Sugita(Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN)	Influence of protein crowder size on hydration structure and dynamics in macromolecular crowding	Chemical Physics Letters 671 (2017) 63-70

課題番号	分類	発表年月	著者・所属	タイトル	掲載誌・巻番号・ページ番号 (発表年)
36 hp150224, hp160211	原著論文	2017年 1月	N.Paul(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay, RIKEN), A.Corsi(RIKEN), A.Obertelli(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay, RIKEN), P.Doornenbal(RIKEN), G.Authelet(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay), H.Baba(RIKEN), B.Bally(ESNT, IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay), M.Bender(IPNL, Universite de Lyon), D.Calvet(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay), F.Chateau(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay), S.Chen(Peking University), J.-P.Delaroché(CEA, DAM, DIF), A.Delbart(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay), J.-M.Gheller(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay), A.Giganon(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay), A.Gillibert(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay), M.Girod(CEA, DAM, DIF), P.-H.Heenen(Universite Libre de Bruxelles), V.Lapoux(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay), J.Libert(CEA, DAM, DIF), T.Motobayashi(RIKEN), M.Niikura(Department of Physics, the University of Tokyo), T.Otsuka(Department of Physics, the University of Tokyo), T.R.Rodriguez(Universidad Autonoma de Madrid), J.-Y.Rousse(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay), H.Sakurai(RIKEN, Department of Physics, the University of Tokyo), C.Santamaria(IRFU, CEA, Universite Paris-Saclay), N.Shimizu(Center for Nuclear Study, the University of Tokyo), D.Steppenbeck(RIKEN), R.Taniuchi(RIKEN, Department of Physics, the University of Tokyo), T.Togashi(Center for Nuclear Study, the University of Tokyo), Y.Tsunoda(Center for Nuclear Study, the University of Tokyo), T.Uesaka(RIKEN), T.Ando(RIKEN, Department of Physics, the University of Tokyo), T.Arici(GSI, Justus-Liebig-Universität Giessen), A.Blazhev(Universitat zu Köln), F.Browne(University of Brighton), A.M.Bruce(University of Brighton), R.Carroll(University of Surrey), L.X.Chung(VAEI), M.L.Cortes(Technische Universität Darmstadt), M.Dewald(Universitat zu Köln), B.Ding(Chinese Academy of Sciences), F.Flavigny(CNRS-IN2P3, Université Paris-Sud, Université Paris-Saclay), S.Franchoo(CNRS-IN2P3, Université Paris-Sud, Université Paris-Saclay), M.Gorska(GSI), A.Gottardo(CNRS-IN2P3, Université Paris-Sud, Université Paris-Saclay), A.Jungclaus(Instituto de Estructura de la Materia, CSIC), J.Lee(The University of Hong Kong), M.Lettmann(Technische Universität Darmstadt), B.D.Linh(VAEI), J.Liu(The University of Hong Kong), Z.Liu(Chinese Academy of Sciences), C.Lizarazo(Technische Universität Darmstadt, GSI), S.Momiyama(RIKEN, Department of Physics, the University of Tokyo), K.Moschner(Universität zu Köln), S.Nagamine(Department of Physics, the University of Tokyo), N.Nakatsuka(Kyoto University), C.Nita(Horia Hulubei National Institute of Physics and Nuclear Engineering (IFIN-HH)), C.R.Nobs(University of Brighton), L.Olivier(CNRS-IN2P3, Université Paris-Sud, Université Paris-Saclay), Z.Patel(University of Surrey), Zs.Podolyak(University of Surrey), M.Rudigier(University of Surrey), T.Saito(Department of Physics, the University of Tokyo), C.Shand(University of Surrey), P.-A.Soderstrom(RIKEN), I.Stefan(CNRS-IN2P3, Université Paris-Sud, Université Paris-Saclay), R.Orlandi(Japan Atomic Energy Agency), V.Vaquero(Instituto de Estructura de la Materia, CSIC), V.Werner(Technische Universität Darmstadt), K.Wimmer(Department of Physics, the University of Tokyo), Z.Xu(The University of Hong Kong)	Are There Signatures of Harmonic Oscillator Shells Far from Stability? First Spectroscopy of Zr-110	Physical Review Letters, Vol.118 032501 (2017)
37 hp150224, hp160211	原著論文	2017年 2月	A.I. Morales(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Milano, Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Milano), G. Benzoni(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Milano), H. Watanabe(IRCNP, School of Physics and Nuclear Energy Engineering, Beihang University, RIKEN Nishina Center), Y. Tsunoda(Center for Nuclear Study, The University of Tokyo), T. Otsuka(Department of Physics, The University of Tokyo, National Superconducting Cyclotron Laboratory, Michigan State University, Instituut voor Kern-en Stralingsfysica, Katholieke Universiteit Leuven), S. Nishimura(RIKEN Nishina Center), F. Browne(School of Computing, Engineering and Mathematics, University of Brighton, RIKEN Nishina Center), R. Daido(Department of Physics, Osaka University), P. Doornenbal(RIKEN Nishina Center), Y. Fang(Department of Physics, Osaka University), G. Lorusso(RIKEN Nishina Center), Z. Pate(Department of Physics, University of Surrey, RIKEN Nishina Center), S. Rice(Department of Physics, University of Surrey, RIKEN Nishina Center), L. Sinclair(Department of Physics, University of York, RIKEN Nishina Center), P.-A. Soderstrom(RIKEN Nishina Center), T. Sumikama(Department of Physics, Tohoku University), J. Wu(RIKEN Nishina Center), Z.Y. Xu(Department of Physics, The University of Tokyo, RIKEN Nishina Center), A. Yagi(Department of Physics, Osaka University), R. Yokoyama(Department of Physics, The University of Tokyo), H. Baba(RIKEN Nishina Center), R. Avigo(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Milano, Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Milano), F.L. Bello Garrote(Department of Physics, University of Oslo), N. Blasi(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Milano), A. Bracco(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Milano, Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Milano), F. Camera(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Milano, Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Milano), S. Ceruti(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Milano, Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Milano), F.C.L. Crespi(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Milano, Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Milano), G. de Angelis(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Laboratori Nazionali di Legnaro), M.-C. Delattre(IPNO Orsay), Zs. Dombradi(MTA Atomki), A. Gottardo(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Laboratori Nazionali di Legnaro), T. Isobe(RIKEN Nishina Center), I. Kojouharov(GSI), N. Kurz(GSI), I. Kuti(MTA Atomki), K. Matsui(Department of Physics, The University of Tokyo), B. Melon(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Firenze), D. Mengoni(Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Padova, Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Padova), T. Miyazaki(Department of Physics, The University of Tokyo), V. Modamio-Hoybjor(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Laboratori Nazionali di Legnaro), S. Momiyama(Department of Physics, The University of Tokyo), D.R. Napoli(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Laboratori Nazionali di Legnaro), M. Niikura(Department of Physics, The University of Tokyo), R. Orlandi(Instituut voor Kern-en Stralingsfysica, Katholieke Universiteit Leuven, Advanced Science Research Center, JAEA), H. Sakurai(RIKEN Nishina Center, Department of Physics, The University of Tokyo), E. Sahin(Department of Physics, University of Oslo), D. Sohler(MTA Atomki), H. Schaffner(GSI), R. Taniuchi(Department of Physics, The University of Tokyo), J. Taprogge(Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Departamento de Fisica teorica, Universidad Autonoma de Madrid), Zs. Vajta(MTA Atomki), J.J. Valiente-Dobon(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Laboratori Nazionali di Legnaro), O. Wieland(Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezione di Milano), M. Yalcinkaya(Department of Physics, Istanbul University)	Type II shell evolution in A=70 isobars from the N>=40 island of inversion	Physics Letters B, Vol.765, pp.328-333 (2017)

課題番号	分類	発表年月	著者・所属	タイトル	掲載誌・巻番号・ページ番号 (発表年)
38 hp150233, hp150003, hp160139, hp160223	学術誌記事	2017年 2月	池部仁善(量研機構), 櫻庭俊(東大), 河野秀俊(量研機構)	ヌクレオソーム中におけるH3ヒストンテールの構造とアセチル化の影響	日本生物物理学会誌 2017, 57 (2), 095-097.
39 hp120281, hp130023, hp140209, hp150085, hp150223, hp150262, hp160093, hp160211	会議論文	2017年 3月	T. Doi, S. Aoki, S. Gongyo, T. Hatsuda, Y. Ikeda, T. Inoue, T. Iritani, N. Ishii, T. Miyamoto, K. Murano, H. Nemura and K. Sasaki	Baryon interactions from lattice QCD with physical masses -- Overview and S = 0, -4 sectors --	PoS LAT2016, 110 (2016)
40 hp120281, hp130023, hp140209, hp150223, hp150262, hp160211	会議論文	2017年 3月	Noriyoshi Ishii(RCNP, Osaka university, and Theoretical Research Division, Nishina Center, RIKEN), Sinya Aoki(Theoretical Research Division, Nishina Center, RIKEN, and YITP, Kyoto University, and CCS, University of Tsukuba), Takumi Doi(Theoretical Research Division, Nishina Center, RIKEN), Shinya Gongyo(Theoretical Research Division, Nishina Center, RIKEN, and CNRS, Laboratoire de Mathematiques et Physique Theorique, Universite de Tours, France), Tetsui Hatsuda(Theoretical Research Division, Nishina Center, RIKEN, and iTHEMS Program and ITHES Research Group, RIKEN), Yoichi Ikeda(RCNP, Osaka university, and Theoretical Research Division, Nishina Center, RIKEN), Takumi Iritani(Theoretical Research Division, Nishina Center, RIKEN), Takaya Miyamoto(Theoretical Research Division, Nishina Center, RIKEN, and YITP, Kyoto university), Keiko Murano(RCNP, Osaka university, and Theoretical Research Division, Nishina Center, RIKEN), Hidekatsu Nemura(Theoretical Research Division, Nishina Center, RIKEN, and CCS, University of Tsukuba), Kenji Sasaki(Theoretical Research Division, Nishina Center, RIKEN, and YITP, Kyoto University)	Baryon interactions from lattice QCD with physical masses -- S=-3 sector: XiSigma & XiLambda-XiSigma --	PoS(LATTICE2016), 127
41 hp120281, hp130023, hp140209, hp150085, hp150223, hp150262, hp160093, hp160211	レビュー論文	2017年 3月	T. Doi (RIKEN) and T. Inoue (Nihon U.)	Baryon-Baryon Interactions from Lattice QCD: The Bridge from Quarks to Nuclei and Cosmos	Nucl. Phys. News 27, 13 (2017)
42 hp140209, hp150223, hp150262, hp160211	会議論文	2017年 3月	Takashi Inoue (Nihon University, College of Bioresource Sciences, Fujisawa 252-0880, Japan), for HAL QCD Collaboration	Hyperon single-particle potentials from QCD on lattice	PROCEEDINGS OF SCIENCE (INPC2016) 277

スーパーコンピュータ「京」年報 2016-17

平成 29 年 10 月

国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究機構

〒 650-0047 兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-26

電話 (078) 940-5555 FAX (078) 304-4956

<http://www.aics.riken.jp/>

一般財団法人高度情報科学技術研究機構

〒 650-0047 兵庫県神戸市中央区港島南町 1-5-2

神戸キメックセンタービル

電話 (078) 599-9511 FAX (078) 599-9512

HPCI ポータルサイト : <http://www.hpci-office.jp/>