

# 令和元年度事業報告書

## I 概要

当財団は、情報科学技術の高度化、大規模高速計算機の利用技術の開発、原子力分野のコード、データベース等の調査収集・整備提供を総合的に推進してきた。近年においては、先端的スーパーコンピュータの進展に即応する科学技術研究用ソフトウェア等の高度化開発を通じて、先進的科学技術の発展に寄与している。

令和元年度においては、特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律(以下「共用法」という。)に基づく登録施設利用促進機関として、特定高速電子計算機施設の利用促進業務(事業予定期間：令和3年度まで)を引き続き推進するとともに、文部科学省科学技術試験研究委託事業「HPCIの運営」(事業予定期間：令和3年度まで)を代表機関として実施し、画期的な研究成果の創出及び科学技術の発展や産業競争力強化、並びにハイパフォーマンス・コンピュータ利用の裾野の拡大に貢献した。

情報科学技術の高度化では、国立研究開発法人日本原子力研究開発機構(以下「原子力機構」という。)が進める原子力研究開発に供する各種原子力コードの高度化開発を実施するとともに、文部科学省のセンター・オブ・イノベーション(COI)プログラム「世界の豊かな生活環境と地球規模の持続可能性に貢献するアクア・イノベーション拠点」に参画し、大規模シミュレーション用ソフトウェア開発を実施した。また、文部科学省の民間委託事業「研究開発推進事業等の実施に係る運営管理業務(研究振興事業に関する課題の運営管理業務)」を実施した。

大規模高速計算機の利用技術の開発では、原子力機構及び国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構(以下「量研」という。)の大型計算機運用の技術支援を実施した。

原子力分野の解析コードに関する情報の調査収集・整備提供では、原子力コードの調査収集と産業界を含む国内ユーザへの提供を実施した。

これらの事業の推進にあたっては、定款に基づき一般財団法人としての適正な法人運営を図ってきた。また、特定高速電子計算機施設の利用促進業務及びHPCIの運営業務については、国及び特定高速電子計算機施設設置・運営主体者である国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究センター(以下「理研 R-CCS」という。)並びに9大学の情報基盤センター、2大学共同利用機関法人及び3国立研究開発法人(以下「HPCIシステム構成機関」という。)等と緊密に連携協力し、利用者本位の業務運営に努めた。

当財団の業務に係る情報資産の保存・管理体制については、情報セキュリティマネジメントシステム (JIS Q 27001:2014/ ISO/IEC 27001:2013) の考え方にに基づき、その維持、改善を継続的に進めた。

令和元年度事業計画に従い実施した個別事業は、以下のとおりである。

## II 事業内容

### 1. 特定高速電子計算機施設の利用促進業務

#### (1) 利用者選定業務

選定委員会及び利用研究課題審査委員会を開催し、特定高速電子計算機施設「京」における随時募集課題の利用者選定及び利用者の利便性向上を図る取り組みの検討等を行った。なお、令和元年 8 月 16 日に「京」の運用が終了し、後継の特定高速電子計算機施設である「富岳」への移行期間に入ったことから、令和元年度は「京」から「富岳」への移行措置に係る業務を実施するとともに、令和 3 年度の共用開始を目指している「富岳」利用制度の検討等に着手した。

- ① 平成 30 年度より開始したポスト「京」性能評価環境利用課題の募集を引き続き行い、3 件の申請を受け付けた。
- ② 「京」随時募集課題では、産業利用課題の個別利用(有償・成果非公開)に 3 件、同課題のトライアル・ユースに 1 件の応募があり、全て選定した。なお、令和元年度の利用期間が最長 4.5 ヶ月間と短期であったこと等のため、随時募集課題のうち一般利用課題のトライアル・ユース、競争的資金等獲得課題及び産業利用課題の ASP(アプリケーションサービスプロバイダ)事業実証利用課題への応募はなかった。
- ③ 国の施策として実施する重点化促進課題では、1 件の利用があり、720 万ノード時間の資源を配分した。
- ④ 令和 2 年度の成果創出加速プログラムについて、採択された 19 件の課題の選定プロセスを審査・確認した。
- ⑤ 利用者の利便性向上を図る取り組みとして、申請件数が多い課題参加者変更手続きのうち、特に変更申請理由の 6~7 割を占める事案の手続きに要する期間の大幅短縮に資する改善方策を、利用研究課題審査委員会にて検討、審議した。
- ⑥ 当財団に、「富岳」利用制度の検討等に資するアドバイザー委員会を新たに設

置し、第1回委員会(令和2年3月17日)において、「富岳」の利用研究課題募集・選定等に関する意見を聴取した。

## (2) 利用支援業務

### 1) 情報支援

- ① 「京」を中核とする HPCI 計算資源の利用成果の公開情報を一元的にまとめた公開データベース(HPCI 成果発表データベース)に登録された成果発表件数は、令和元年度末で通算 8,146 件(内、査読付き論文数は 1,908 件)に達した。
- ② 平成 30 年度から令和元年 8 月 16 日の「京」運用終了までに実施した「京」を中核とする HPCI 利用研究課題(成果公開型の計 207 課題)を中心に、これら課題の利用報告書 245 件(令和元年度末で通算 1,278 件)を HPCI ポータルで公開した。利用報告書のダウンロード数は、令和元年度末で通算 128,828 件に達した(令和元年度は 35,957 件)。利用報告書をダウンロードしている企業は 1,084 社あり、その業種は東京証券取引所の 33 業種中 32 業種に及ぶなど、成果の公表・普及が着実に進展した。
- ③ HPCI 利用研究成果集(当財団発行の査読付き電子ジャーナル)に通算 60 編の論文が掲載され、全体のダウンロード(DL)数は 10,190 回、うち DL 数トップ論文の DL 数は 686 回に達した。
- ④ 「京」における成果や「京」の利用についての情報発信のために、季刊誌「京算百景」vol. 26~29、成果事例集 7、及び成果事例集 6 の英語版を発行し、特定高速電子計算機施設の利用に関心を持つ研究者、技術者に配布するとともに、一般国民に向けた分かりやすい成果の説明資料としてホームページに公開した。

### 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ことで効率的な利用を支援するとともに、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等の高度化支援を 14 課題(うち、産業利用 4 課題)について実施した。
- ② 利用者の利便性向上等を目指して、オープンソースソフトウェア(以下、「OSS」という。)の利用環境整備を進めた。
- ③ 共用法第 12 条に基づき、特定高速電子計算機施設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、OSS を用いた固体材料の磁気応答計算に関する調査研究を行った。

### 3) その他の支援

#### ① 講習会等の利用支援

特定高速電子計算機施設の利用技術の習得等を目的として、初級・中級講習会、ハンズオン講習会、利用者のすそ野を広げる一般向け HPC セミナー、及び産業界で利用が多い LAMMPS の入門講習会を、都合 15 回主催した。これらの講習会等への参加者は、下記の②に示すワークショップを含めて延 696 名で、その内産業界からの参加者は約 5 割を占めるなど、産業利用の推進にも着実に貢献した。

#### ② セミナー・シンポジウム等

「京」を中核とする HPCI システム利用課題成果報告会(令和元年 11 月、東京)を開催し、281 名の参加を得た。また、材料系分野や CAE 分野に特化したワークショップ(令和元年 10 月、12 月、令和 2 年 2 月、東京)を開催し、産業利用事例や利用技術に関する情報提供を行うとともに、利用者とソフトウェアベンダーとの情報交流の機会とした。

「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(第 6 回)～物質構造の階層性とフォノン物性の理解～」(令和元年 9 月、東京)を公益財団法人高輝度光科学研究センター(JASRI) 及び一般財団法人総合科学研究機構(CROSS)と共同開催し、この分野での有益な情報交換や議論等が行われた。

#### ③ 展示会等

特定高速電子計算機施設及び HPCI の利用促進に向け、ISC19(令和元年 6 月、独国フランクフルト)、SC19(令和元年 11 月、米国デンバー)に出展し、海外向けに情報提供、情報発信を行った。また、ポスト「京」重点・萌芽的課題の協力を得て、各課題の成果を HPCI ポータルサイト上で Web 展示した。

#### ④ アウトリーチ活動

青少年の科学技術への理解増進、将来の HPCI 利用者となる研究技術者育成を目的に、高校生を対象にした「スパコン体験塾」(令和元年 8 月、神戸)を開催し 2 校より 21 名が参加した。また、「はじめてのプログラミング出前授業」(令和元年 7 月、令和 2 年 2 月)を 2 校で開催し計 64 名が受講した。その他、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」(令和元年 11 月、神戸)にて、「計算機歴史博物館」を開催した。

⑤当財団(RIST)、欧州の PRACE(Partnership for Advanced Computing in Europe)、米国の XSEDE(eXtreme Science and Engineering Discovery Environment)との三者間で平成 29 年 4 月に締結した MOU(その後平成 30 年度に更新)に基づき、三者共同による計算機利用支援に関する募集を令和元年 11 月より開始した。

⑥NSCC(シンガポール国立スーパーコンピューティングセンター)との間で平成 28 年 6 月に締結した MOU を更新し、ISC19(令和元年 6 月、独国フランクフルト)における会合で MOU 交換セレモニーを行った。

## 2. HPCI の運營業務

当財団は、文部科学省科学技術試験研究委託事業「HPCI の運営」の中核的役割を担う代表機関として、理研 R-CCS、国立大学法人東京大学情報基盤センター(以下「東大情報基盤センター」という。)、大学共同利用機関法人情報・システム研究機構国立情報学研究所(以下「国立情報学研究所」という。)、及び公益財団法人計算科学振興財団からなる分担機関に一部業務を再委託し、総合調整を図りつつこれら分担機関と緊密かつ一体的に連携した体制を構築して以下の業務を主体的に実施した。

### (1) HPCI の運営企画・調整

#### 1) 今後の運営の在り方に関する調査検討

一般社団法人 HPCI コンソーシアムと協力して、平成 30 年度に取りまとめた報告書「ポスト「京」による成果創出と HPCI の継続的発展に向けて」を文部科学省に提出した。また、「富岳」の運用開始に先立ち、HPCI がこれまで以上に大きな成果を創出し我が国の HPCI が長期にわたり持続的に発展を続けるために、今後の HPCI の構築と運用に関する基本的な考え方を再整理した。

#### 2) 技術企画・調整

HPCI システム構成機関により構成される HPCI 連携サービス委員会を開催し、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 システムの全体的な運用に係るソフトウェアの改良に関する検討等を議論するなど、適切に委員会を運営した。特に、次期認証システムに係る検討やクラウド

ドサービスの活用に関する技術要件等の更新など、昨今の情報技術環境の進展を踏まえた対応を進めた。なお、新型コロナウイルス感染症拡大により、各種委員会や部会は高速ネットワークを活用して TV 会議を効率的に実施した。

## (2) HPCI の利用促進

### 1) 課題選定及び共通窓口の運用

① 「京」の運用終了に伴い追加提供された補填資源を含む HPCI 計算資源を利用する令和 2 年度研究課題として、118 件の応募課題の中から 92 課題を選定した。平成 30 年度に新設した若手人材育成課題は、引き続き募集した。若手人材育成課題への応募件数は前年度比 28% 増であり、若手研究者の要求に応えることができた。HPCI としては、前年度に比べ応募件数が 10 件増加(前年度比 109%)したが、「京」を含む応募総数 142 件を全て吸収するには至らなかった。また、令和元年度の随時募集課題については、HPCI 産業利用課題(トライアル・ユース)に 2 件の応募があり、いずれも選定した。

② HPCI 計算資源及び JHPCN 計算資源の利用に伴う利用負担金の支払いについては、HPCI システム構成機関及び JHPCN(JHPCN：学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点事業)参加機関からの請求に基づき、適宜支払い事務を実施した。

### 2) 産業利用促進

① 産業界のユーザ向けの利用環境として当財団の東京事務所内に設置した「京」及び HPCI システムへのアクセスポイント(アクセスポイント東京)を運用し、HPCI システムの利用前相談や利用相談、高並列計算の指導・助言、大容量データの転送利用、対面認証などの目的で延べ約 180 名に利用された。また、セミナーやシンポジウムを開催して、HPCI の産業利用に関する PR 活動を実施するとともに、その都度、産業利用相談会を開催して新規利用者の開拓を行い、課題応募につながる成果を得た。

② 新規利用企業の応募拡大のため、初めて HPCI を利用した企業へのインタビュー記事を掲載するリーフレット「はじめての HPCI」を 2 種類発行した。

### 3) 技術支援

OSS や国家プロジェクトとして開発されたプログラム(以下、「国プロアプリ」と

いう。)の利用環境整備を進めるとともに、国プロアプリの普及を目指して、開発グループや整備先の HPCI システム構成機関と連携してプログラムの講習会を 7 回(令和元年 10 月に 1 回、同 11 月に 2 回、同 12 月に 3 回及び令和 2 年 1 月に 1 回)実施した。

### (3) HPCI システムの運用

#### 1) HPCI 共用ストレージ等の運用・保守

本事業は、東大情報基盤センター及び理研 R-CCS に再委託して、代表機関との調整のもと実施した。

#### 2) 認証局の運用

本事業は、国立情報学研究所に再委託して、代表機関との調整のもと実施した。

#### 3) 課題選定及び共通窓口に関する基盤システムの機能拡充

HPCI ヘルプデスクシステム、HPCI 情報共有コンテンツマネジメントシステム(CMS)等の機能拡充を実施した。

### 3. 大型計算機システム及びネットワークシステムの運用支援

原子力機構の大型計算機システム、ネットワークシステム、及び情報セキュリティ対策システムの運用に係る技術支援を実施した。また、IT 化を推進するための各種情報システムの運用に係る技術支援を受託した。

量研の大型計算機システム及びネットワークシステムの運用に係る技術支援を実施した。

これらにより、各システムの利用者に対する円滑かつ継続的な利用支援サービスの提供に大きく貢献した。

### 4. 情報科学技術の高度化に関する研究開発・調査

#### (1) 原子力研究開発コードの高度化に関する研究・調査

- ① 原子力機構と協力して開発を進めている粒子・重イオン輸送コードシステム PHITS を使用して、福島第一原子力発電所事故によって拡散した放射性物質の空間線量率値からその周辺の地域における核種分布を推定するシステムの開発、画像データから構造物を認識し空間線量率を評価するシステムの開発、放射線源

逆推定のための機械学習システムの開発、粉塵輸送と連携した空間線量率解析システムの開発、及び J-PARC 中性子ビームラインの遮蔽設計を実施した。また、使用済核燃料貯蔵施設モデルの敷地境界線量の高精度化を目的とした PHITS コードの新規機能の開発・整備を実施した。

- ② PHITS の原子力分野以外への応用として、粒子線がん治療施設の遮蔽設計や放射化評価、有人宇宙施設の宇宙放射線環境評価等を実施した。
- ③ 原子力機構のスーパーコンピュータで利用される原子力研究開発コードの開発・改良、計算結果の評価手法の開発及び可視化ソフトウェアの開発・改良を実施した。また、原子力機構の研究者等が開発・整備した各種の原子力研究開発コードのチューニング及び並列化による高速化を実施した。
- ④ 量研のトカマク型核融合装置のディスラプション解析、電磁流体平衡解析、非線形安定性解析、不純物輸送解析、グローバルジャイロ運動論解析等の大規模な核融合プラズマ特性解析ソフトウェアの高度化、及び関連モジュールの作成、を実施した。また、トカマク型核融合装置のプラズマ制御にかかわる設計パラメータの影響評価及びこれを支援するソフトウェアの開発を実施した。

## (2) 大規模シミュレーション技術の開発・研究

ナノ材料、気象モデルの分野で、新アルゴリズム・計算手法のシミュレーションソフトウェアへの実装、次世代材料開発を目的としたシミュレーションの産業応用など、ソフトウェア開発から実用化研究までスーパーコンピュータを活用して以下のとおり実施した。

- ① 文部科学省のセンター・オブ・イノベーション(COI)プログラムにおいて、信州大学を拠点とする「世界の豊かな生活環境と地球規模の持続可能性に貢献するアクア・イノベーション拠点」の参画機関として、信州大学の実験データをもとに、革新的ナノ炭素逆浸透膜に対して第一原理シミュレーション及び分子動力学シミュレーションを実施し、ナノ炭素材の複合化により水処理膜とスぺーサーに汚染物が付着し難くなる耐ファウリング現象について、シミュレーションでそのメカニズムを解明した。
- ② 文部科学省の「統合的気候モデル高度化研究プログラム」において、地球規模気候変動に関する予測・影響解析の一部として、日本版標準カップラ開発・適



用・性能評価及びカップラを介した大規模データ利用に関する入出力ソフトウェア開発等を引き続き実施した。

- ③ NEDOのエネルギー・環境新技術先導プログラムにおいて、住友電気工業株式会社、筑波大学と共同で「革新的次世代軽量高強度構造材の研究開発」を継続した。カーボンナノチューブを層流のガス流中で引っ張ると高品質長尺化する現象について、シミュレーションでその過程を再現、メカニズムを解明した。
- ④ 産業界との実践的なシミュレーションとして、「光吸収材料のシミュレーションによる理論設計」、「リチウムイオン二次電池用正極材料のシミュレーションによる性能向上設計」の共同研究開発を実施した。

### (3) 情報科学技術分野の研究振興に関する課題の運営管理

文部科学省の民間委託事業「研究開発推進事業等の実施に係る運営管理業務(研究振興事業に関する課題の運営管理業務)」として、スーパーコンピュータ開発公募事業を実施するために必要とされる以下の業務を継続して実施した。

- ① 文部科学省と課題実施機関との委託契約締結に係る諸事務手続き、委託契約書に基づく事務処理及び課題実施状況に関する進捗管理について文部科学省業務を支援するとともに、公募事業の推進に必要な情報の把握等を行った。
- ② スーパーコンピュータ開発公募事業(委託事業 17 課題、補助事業 21 課題)について、採択課題の契約締結手続きの支援、各課題の事業面・経理面での進捗管理、平成 30 年度の委託契約額及び補助金額の確認調査等を実施した。
- ③ 上記の業務を通じて、本公募事業のあり方や問題点等の調査・考察を行い、本公募事業の今後に向けた提案を行った。

## 5. 原子力分野の解析コードに関する情報の調査収集・整備提供

### (1) 原子力分野の解析コードの調査収集・提供

わが国の原子力コードセンターとして、原子力機構等の国内機関から収集した 6 件の原子力コードを新規登録した。産業界を含む国内加盟機関への原子力コードの提供は 114 件であった。なお、NEA データバンクが利用者への直接ダウンロード配付サービスを令和 2 年度より開始することに伴い、RIST による NEA コードの配付業務は令和 2 年 3 月 31 日をもって終了した。

米国オークリッジ国立研究所・放射線安全情報計算センター(ORNL/RSICC)との契約の下で、新規に12件の原子力コードを収集・整備するとともに、「RSICC ユーザ会」加盟機関に384件の原子力コードを配付した。また、原子力コード利用の促進に資するため、「RSICC ユーザ会」加盟機関向けに「SCALE6.2を用いた臨界解析と遮蔽解析の初歩」に関する講習会(令和元年10月、東海)を開催した。なお、当財団が運営している「RSICC ユーザ会」の加盟機関は、令和元年度末で70機関である。

## 6. 事業の成果の普及等

計算科学技術研究の成果の普及を目的として、最新の研究開発成果の紹介、関連研究の解説、事業動向の報告、トピックス等を内容とする「RIST ニュース No.65」を令和元年9月に刊行し、関連機関に配付するとともに当財団の公開ホームページに掲載し、成果の普及を図った。また、当財団における研究開発の成果を国内外の学術論文誌、学会等で発表するとともに、日本物理学会2019秋季大会、プラズマ・核融合学会第36回年会、Materials Research Meeting 2019、大学ICT推進協議会2019年度年次大会、第33回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウムの展示会に参加して「京」を中核とするHPCIシステムの利用及び成果事例を、第33回分子シミュレーション討論会の企業展示ブースで材料シミュレーション技術事例を紹介するなど、事業成果の普及活動を行った。

## III その他

### 1. 一般状況

- 令和元年度の評議員及び役員は(1)のとおりである。
- 令和元年度における評議員会及び理事会の開催状況は(2)及び(3)のとおりである。
- 令和2年3月31日現在の職員配置は(4)のとおりである。平成30年度末から5名の減員である(内訳：東海事務所1名増、東京事務所2名増、神戸センター8名減)。
- 令和元年度監査結果は(5)のとおりである。

(1) 評議員及び役員

評 議 員

石 塚 昶 雄	片 山 正一郎
木 阪 崇 司	住 明 正
出 沼 節 男	野 田 健 治
堀 田 平	村 上 博 幸
山 田 昌 彦	

役 員

理 事 長	関 昌 弘	
専務理事	平 山 俊 雄 (令和元年 6 月 21 日まで)	
理 事	高 津 英 幸 (令和元年 6 月 22 日から同年 6 月 30 日まで)	
常務理事	高 津 英 幸 (令和元年 7 月 1 日から)	
理 事	谷 正 之 (令和元年 6 月 22 日から同年 6 月 30 日まで)	
常務理事	谷 正 之 (令和元年 7 月 1 日から)	
理 事	愛 野 茂 幸	理 事 木 下 佳 明
理 事	高 園 武 治	理 事 高 橋 桂 子
理 事	中 島 徳 嘉	理 事 橋 爪 秀 利
監 事	宇留野 哲 郎	
監 事	黒 岩 克 彦 (令和元年 6 月 30 日まで)	
監 事	荻 野 伸 明 (令和元年 7 月 1 日から)	

(2) 評議員会

① 第 16 回評議員会(定時)

期 日 令和元年 6 月 21 日 (金)

会 場 RIST 東京事務所

出席者 評議員 8 名

審議事項

第 1 号議案 平成 30 年度決算報告書について

第 2 号議案 理事の選任について

第 3 号議案 監事の選任について

報告事項 平成 30 年度事業報告書

② 第17回評議員会(臨時)(書面報告)

期 日 令和2年3月27日(金)

同意書 評議員9名

報告事項 令和2年度事業計画書及び収支予算書

(3) 理事会

① 第21回理事会

期 日 令和元年6月6日(木)

会 場 RIST 東京事務所

出席者 理事6名 監事2名

審議事項

第1号議案 平成30年度事業報告書について

第2号議案 平成30年度決算報告書について

第3号議案 定時評議員会の招集について

報告事項 職務執行状況について

② 第22回理事会(書面決議)

期 日 令和元年7月1日(月)

決議書面 理事9名(同意書) 監事2名(確認書)

決議事項

第1号議案 高津英幸理事及び谷正之理事を常務理事とする件

第2号議案 高津英幸常務理事及び谷正之常務理事の報酬支給額の件

③ 第23回理事会

期 日 令和2年3月10日(火)

会 場 RIST 東京事務所

出席者 理事9名 監事1名

審議事項

第1号議案 令和2年度事業計画書について

第2号議案 令和2年度収支予算書について

第3号議案 臨時評議員会の招集について

報告事項 職務執行状況について

(4) 職員配置 (令和2年3月31日現在)

総務部	7名
コード開発部	57名
データベース部	2名
計算科学技術部	9名
研究支援部	5名
神戸センター	65名
合計	145名

(5) 監査

- ① 令和元年度事業計画に関する中間レビュー結果について、令和元年11月7日(木)に宇留野監事及び荻野監事に報告し、承認を受けた。
- ② 令和元年度決算について、令和2年5月22日(金)に宇留野監事及び荻野監事にそれぞれ承認を受けた。