

1 平成 22 年度 重点施策・改善目標

1-1.重点施策

「大学全体の年次別実行計画」の記載年次別行動計画については、以下のとおり：

22-1「各研究科や研究センターの研究戦略・企画組織を充実・強化し、当該組織の学問分野における特色を生かしつつ、長期的展望に立つ基礎研究と学際融合的な研究を計画的に推進する。」

平成 22 年度重点施策：各研究科・研究センターにおいて、研究科等の特色を生かした研究戦略及び研究連携策を検討する。

32-1「共同利用・共同研究拠点は重点戦略経費等により支援する。各拠点は第二期中期目標・中期計画期間中の目標と計画を定め、期間中に評価を実施して実施状況の検証を行いつつ高い研究成果の実現を図る。」

平成 22 年度重点施策：学際共同研究プログラムを実施し、共同研究を推進するとともに、学際計算科学の最先端を開拓する重点研究開発を計画立案・準備を進める。国際的な研究連携に着手し、次世代スパコンとの連携を検討する。

「部局独自の年次別実行計画」および、その詳細については以下のとおり：

【研究】

- (1) 共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」の活動として、特別経費プロジェクト「先端学際計算科学の開拓・推進・展開事業」とともに、学際共同研究プログラムを実施し、学際計算科学の共同研究を実施することにより、計算科学の研究を推進する。
- (2) 次世代スーパーコンピュータ開発実施主体である理化学研究所と、「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト推進のための連携・協力に関する基本協定」に基づき、完成に向けた具体的な課題について共同研究を推進し、設置予定の「計算科学研究機構」との連携を行う。
- (3) KEK、国立天文台と締結した計算基礎科学連携拠点を運営し、これを中心として計算基礎科学分野の次世代スパコンの戦略プログラムの拠点の研究を推進する。
- (4) 学際計算科学の最先端を開拓するポスト・ペタスケール・システムに向けた研究開発を進める。
- (5) センター全体としては、研究推進事業、大型プロジェクト等を中心に、計算科学の学際的研究の遂行と成果の実現を図る。各部門の目標は次のとおりである。

素粒子物理研究部門： QED の効果、アップクォークとダウンクォークの質量差の効果を取り入れた物理的なクォーク質量での計算を行う。有限温度相転移のクォーク質量依存性を精密に調べる。

宇宙・原子核物理研究部門： 宇宙の初代天体から銀河・銀河団形成に至る宇宙進化を、大規模な輻射流体力学、N体シミュレーションによって探究する。時間依存密度汎関数理論に基づき、原子核物理から原子・分子・固体物理に及ぶ幅広い物質相の研究を展開する。

物質生命研究部門： 大規模並列計算により、ナノ構造体の持つ特徴的物性の解明、次世代半導体技術基盤の創成、等の研究を行う。

生命科学研究部門： 重要な生物機能のしくみを、分子構造および電子構造のレベルで原理的に解明すると共に転写制御システムに対しても、生命情報科学的な解析を進める。真核生物の起源の解明と分類とを目的に、網羅的な遺伝子塩基配列の取得を進めると共に、それらを加えて、真核生物の大規模な系統解析を行う。

地球環境研究部門： 大気大循環モデル NICAM を用いた熱帯低気圧、温帯低気圧、北極低気圧のライフサイクルの研究推進。4次元同化技術の開発。領域気象モデル WRF を用いた都市豪雨の研究推進。

高性能計算システム研究部門：大規模・超高性能計算システムを学際共同利用を中心とする応用プロジェクトでの利用技術の研究及び応用グループへの支援を行う。ポストペタスケールシステムの検討を行う。

計算情報学研究部門： 大規模計算に関わるデータ基盤整備や、実時間実世界データや科学データ等の統合利用のための要素技術の検討。大量の環境情報を提示するインタラクティブな計算メディアの要素技術の検討。

【国際】

国際拠点の確立を目指して、国際連携として、エジンバラ大学との連携を進めるとともに、米国のローレンスバークレイ研究所との連携の検討を始める。

【教育】

計算科学に関する人材育成への取り組みとして、計算科学に関する大学院共通科目を実施。計算科学のデュアルディグリー・プログラムを研究科とともに実施。また、グローバル 30 の計算科学の講義の英語化も検討を進める。

1-2.改善目標（法人評価、認証評価、外部評価及び監事監査・内部監査の指摘に対する取組等）

外部評価においては、計算機開発により最先端の計算科学を推進する「学際計算科学」の推進体制の堅持が指摘された。このための計算機システム開発のための予算獲得および開発体制の構築について、センターの最重要事項として取り組む。

2 平成 22 年度 実績報告

2-1.平成 22 年度年度計画並びに改善目標に記載されている事項についての達成状況等

「大学全体の年次別実行計画」の記載年次別行動計画については、以下のとおり：

22-1「各研究科や研究センターの研究戦略・企画組織を充実・強化し、当該組織の学問分野における特色を生かしつつ、長期的展望に立つ基礎研究と学際融合的な研究を計画的に推進する。」

平成 22 年度重点施策：各研究科・研究センターにおいて、研究科等の特色を生かした研究戦略及び研究連携策を検討する。

32-1「共同利用・共同研究拠点は重点戦略経費等により支援する。各拠点は第二期中期目標・中期計画期間中の目標と計画を定め、期間中に評価を実施して実施状況の検証を行いつつ高い研究成果の実現を図る。」

平成 22 年度重点施策：学際共同研究プログラムを実施し、共同研究を推進するとともに、学際計算科学の最先端を開拓する重点研究開発を計画立案・準備を進める。国際的な研究連携に着手し、次世代スパコンとの連携を検討する。

当該年度においては、特別経費（共同利用・共同実施分）「計算科学による先導的知の創出推進事業」の支援により、超並列クラスタ PACS-CS, スパコン T2K-tasukuba システム、融合型クラスタ FIRST を利用して、これらの計算資源の共同利用により、計算科学の共同研究を推進する学際共同利用プログラムを実施、素粒子宇宙分野、物質生命分野、地球生物環境分野等における計算科学の研究を推進した。さらに、学際計算科学のアプローチにより、エクサスケール計算の礎となる、計算基盤の能力および機能の飛躍的な向上のための計算技術開発と計算科学の革新に取り組むプロジェクト「エクサスケール計算技術開拓による先端学際計算科学教育研究拠点の充実」（特別経費（国際的に卓越した教育研究拠点機能の充実））を概算要求とした。なお、これについては内示を受け、平成 23 年度より実施予定となった。

〔重点施策の達成状況〕

【研究】

- (1) 共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」の活動として、特別経費プロジェクト「先端学際計算科学の開拓・推進・展開事業」とともに、学際共同研究プログラムを実施し、学際計算科学の共同研究を実施することにより、計算科学の研究を推進した。当該年度においては、23 課題のプロジェクトを採択し、実施した。

- (2) 次世代スーパーコンピュータ開発実施主体である理化学研究所と、「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト推進のための連携・協力に関する基本協定に基づき、本センターが中心になって開発した実空間汎密度関数法プログラム RS-DFT や格子 QCD などのプログラムを「京」コンピュータで高度利用のための共同研究を推進した。また、「京」コンピュータの運用・研究を行う「計算科学研究機構」については、2名が研究チームリーダー（佐藤、藏増）に就任し、スパコン戦略プログラム実施のために、機構内に神戸分室を設置するなど、連携を深めた。
- (3) KEK、国立天文台と締結した計算基礎科学連携拠点を運営し、これを中心として計算基礎科学分野の次世代スパコンの戦略プログラムを推進した。当該年度においては、これを実施するための研究員の公募および居室の整備などを行った。
- (4) 学際計算科学の最先端を開拓するポスト・ペタスケール・システムに向けた研究開発を進めた。特に、特別経費プロジェクト「エクサスケール計算技術開拓による先端学際計算科学教育研究拠点の充実」を実施するための概算要求を行い、平成 23 年度からの実施の内示を受けた。
- (5) センター全体としては、研究推進事業、大型プロジェクト等を中心に、計算科学の学際的研究の遂行と成果の実現を図った。当該年度においては、受託研究・共同研究等 13 件、科研費（分担を含む）48 件、補助金 2 件、金額ベースで外部資金 457 百万円（H21 年度 283 百万円）と急増した。

各部門の達成状況は次のとおりである。

素粒子物理研究部門： QED の効果、アップクォークとダウンクォークの効果を取り入れた物理的なクォーク質量での本格計算に向けた試験的な研究を行なった。有限温度相転移のクォーク質量依存性をクォーク質量が重い場合に調べ、質量無限大で 1 次相転移だったものが、質量を軽くしていくとある点で消失することを示した。6 つのクォークの束縛状態である H ダイバリオンの存在を格子 QCD 計算で示した。

宇宙・原子核物理研究部門： 宇宙の第一世代天体形成と連続的星形成， 原始銀河形成， 銀河団進化， 巨大ブラックホールの合体成長， で重要な進展があった。時間依存密度汎関数理論に基づきパルス光が誘起する電子・格子ダイナミクス of 解明が進展した。

物質生命研究部門： 実空間密度汎関数に基づく大規模第一原理計算コード (RSDFT)等を用いて、シリコンナノワイヤーの電子構造を計算し、それをもとにシリコンナノワイヤートランジスタの電流電圧特性の理論予測を行った。また、次世代メモリデバイスとして期待されている、MONOS 型メモリの書込／消去によるメモリ機能劣化の原子レベルのメカニズムを明らかにするとともに、書込／消去耐性に優れた次世代メモリデバイスの設計指針を確立した。さらに、光励起による新しい特徴的な量子状態の予言も行った。

生命科学研究部門： 細胞の諸機能を司る酵素や超分子システムについて、それら機能の発現機構を分子および電子構造のレベルから明らかにするための研究を行い、DNA メチル化酵素、ヘモグロビン、シトクロム酸化酵素、光合成反応中心などにおける分子機構を明らかにした。また、転写制御システムに関する生命情報科学的な解析を行い、転写因子が結合・認識するゲノム DNA 配列を自動的に同定するためのシステムを開発した。一方、真核生物の起源と初期進化を解明するために、解析上鍵となる新奇生物種の大量遺伝子配列データを取得して真核生物系統樹の大規模解析を行い、種々の鞭毛虫の系統的位置に関する新知見を得た。

地球環境研究部門： 大気大循環モデル NICAM を用いた熱帯低気圧・温帯低気圧・北極低気圧のライフサイクルの研究を推進した。熱帯低気圧として太平洋の台風と大西洋のハリケーンについて進路と発達予測を行い、NICAM が十分な予測精度を持つ事を確認した。温帯低気圧から延びる寒冷前線に沿って、トラバースラインが発達し、乱気流領域が広がる事を示した。北極低気圧は温帯低気圧と類似した鉛直構造を持ち、極渦とのカップリングで長期間持続する特徴を再現した。領域気象モデル WRF を用いた都市豪雨の研究を推進し、都市の影響によりこの地域で豪雨の頻度が上昇する事を長期ランの結果から示した。

高性能計算システム研究部門： Block Krylov 部分空間法・FFT ライブラリ等の数値計算手法の大規模化・高速化、また MPI 通信プロファイラの開発等、素粒子・物性・地球環境等のアプリケーション高性能化に寄与する研究開発を行い、センターの当該研究部門との共同研究を推進した。また、次世代高性能通信システムや次世代超並列言語の研究開発、大規模並列分散ファイルシステムの効率化、GPU クラスタにおける新しい並列通信機構の検討等を進め、ポストペタスケール時代の並列システム基盤に関する研究を行った。

計算情報学研究部門： 大規模計算に関わるデータ基盤整備や実時間実世界データ・科学データ等の統合利用のための要素技術に関する検討を他部門と連携して推進した。また、大量

センサデータの解析・認識・検索システムの構築、人間の身体特性を利用した情報提示方式、画像センサを用いた人間の動作・心理状態解析の研究開発、実世界計算情報学の基盤形成を他部門と協力して推進した。

【国際】

国際連携として、エジンバラ大学については、エジンバラ大学並列処理センター(EPCC)と、つくばにて2回目のシンポジウムを行い、具体的な交流計画について議論した。米国のローレンスバークレイ研究所については、先方を訪ね、1回目のワークショップを行い、どのような連携ができるか、また、連携の進め方について議論した。また、アジア地域の連携については韓国のスパコンセンターである KISTI を訪ね、国際連携の可能性について意見交換を行った。今後、連携を進めることを検討する。

【教育】

計算科学に関する人材育成への取り組みとして、本年度も計算科学に関する大学院共通科目を実施した。計算科学のデュアルディグリー・プログラムを研究科については、これまでの数理物質研究科に加え、生命環境研究科ともプログラムを実施することとした。今年度末には2名が修士課程を修了した。また、計算科学教育の国際化に向けて、グローバル30の計算科学の講義の英語化も検討を進めた。なお、平成23年度から実施の予定である。

〔改善目標の達成状況〕

外部評価においては、計算機開発により最先端の計算科学を推進する「学際計算科学」の推進体制の堅持が指摘された。このための計算機システム開発のための予算獲得および開発体制の構築について、センターの最重要事項として取り組んだ結果、特別経費プロジェクト「エクサスケール計算技術開拓による先端学際計算科学教育研究拠点の充実」を実施するための概算要求を行い、平成23年度からの実施の内示を受けた。

〔その他特色ある取組の実施状況〕

(1) HA-PACS システム（ベースクラスタ）の調達

概算要求プロジェクトで開発する HA-PACS システムのベースクラスタシステムは、PACS-CS システムのフロントエンドシステム(FCS)の予算を流用して調達することとし、この部分を学内負担としている。当該年度においては、このベースクラスタシステム（フロンティア計算機システム:FCS）についての調達作業を開始した。なお、このシステムについては、平成24年1月の稼働を目標として進めている。

(2) 分野・部門間の連携研究の推進

当センターでは、科学諸分野と計算機科学・情報科学の連携・協働による「学際計算科学」を中心的なコンセプトとして研究活動を行っている。素粒子分野と超高速計算システム分野、地球環境分野と計算知能分野などが具体的な研究課題についてワーキンググループを設置して定期開催を行い、共同研究を進めている。これからは、概算次期マシン開発に向けて、研究開発体制を強化する。

(3) 他のスパコンセンタ等、関連組織との連携の推進

これまで、T2K-tsukuba システムの導入を機会に、東京大学、京都大学との連携を推進している。この取り組みは、グリッド技術を使った連携や、新規のソフトウェア開発プロジェクト(e-science プロジェクト)などに発展している。当該年度においては、この e-science プロジェクトの実用化・加速に向けて、最先端基盤整備事業を実施した。また、スパコンセンター間では HPCI 構築のためのセンター間の共同作業が行われている。

2-2. 自己評価と課題

(1) 自己評価

今年度においては、特別経費プロジェクト「エクサスケール計算技術開拓による先端学際計算科学教育研究拠点の充実」を実施するための概算要求を行い、平成 23 年度からの実施の内示を受け、新規マシン開発を中心とした学際計算科学を推進する体制が整う見込みを得た。また、センターが中心となって、計算基礎科学分野をリードして、次世代スパコン「京」を活用する HPCI 戦略プログラムが、来年度から正式にスタートし、本格化することとなった。

今後国際的な拠点を目指して、エジンバラ大学との連携を本格化させ、ローレンスバークレイ研究所と連携を開始するなど、国内外での拠点の強化に努めていきたい。

(2) 課題

① 次世代スパコン、全国的な計算科学コミュニティの中の位置づけの確保

これまでと比べて飛躍的な計算能力を持つ次世代スパコンが稼動し、その下に計算科学研究機構の設立が計画されている中で、当センターがこれまで以上に存在感を発揮し、全国の大学の中で唯一の計算科学の共同利用・共同研究拠点として、最先端の計算科学をリードしていく体制と戦略が急務である。このなかで、T2K システムの更新の時期に合わせて、センターの計算資源の確保と革新的な技術開発への戦略を練っていく必要がある。

② 予算面での課題

外部資金の間接経費の配分方式は、全学的な研究システムの整備の中で、研究センターの位置づけに関わる課題として引き続き検討の必要がある。

③ 運営体制の課題

センターの充実、T2K・tsukuba システムの稼働、連携の拡大、次世代スパコン戦略プログラムの実施に伴い、研究企画・財務・総務広報等のそれぞれの面で検討事項・処理事項と事務量が大幅に増大した。これらに対応して高い研究活動を維持・発展するには、センター長・部門長を中心とするセンターの執行体制の検討が必要である。また厳しい職員教員数流動化が必要とされる中で効率的な事務体制の構築の必要がある。