

1. 平成 23 年度 重点施策・改善目標

1-1. 重点施策

「第 2 期中期計画に関わる大学全体の年次別実行計画」の重点施策は、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 23 年度重点施策：各研究科・研究センターの学問分野における特色を生かしつつ、長期的な展望に立った基礎研究と学際融合的な研究を計画的に遂行

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 23 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。学際計算科学の最先端を開拓する重点研究開発を実施する。国際的な研究連携および次世代スパコンとの連携については、具体的な活動を行う。

【研究】

(1) 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」を確実に推進する研究開発体制を構築し、研究開発を実施する。

(2) 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。

(3) KEK、国立天文台とともに運営する計算基礎科学連携拠点において、HPCI 戦略プログラム（分野 5、計算基礎科学）を実施する。また、理化学研究所、次世代スパコン開発実施本部ならびに「計算科学研究機構」と連携し、国の「京」コンピュータにおける最先端計算科学の推進に貢献する。我が国の計算資源の有効利用を図る HPCI コンソーシアムに参画し、我が国の計算科学の基盤構築に寄与する。

(4) 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。各部門の目標は次のとおりである。

素粒子物理研究部門：物理的なクォーク質量でのゲージ配位を使ったいろいろな物理量の計算を行う。ハドロン間相互作用の研究をさらに進める。有限温度有限密度相転移のクォーク質量依存性の研究を進める。

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。密度汎関数理論に基づく量子ダイナミクス計算により、原子核や物質と光の相互作用を解明する。

量子物性研究部門：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。当該年度ではつくばナノテクアリーナに参画している産業界にも貢献する計算科学の知見を得る。

生命科学研究部門：酵素や超分子システムの機能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、転写制御システムに関する生命情報科学的な解析を進める。真核生物の起源と初期進化を解明するために真核生物系統樹の大規模解析を行うとともに、大規模解析の問題点を明らかにしその解決策を探る。

地球環境研究部門：大気大循環モデル NICAM を用いた北極低気圧のライフサイクルの研究と北極温暖化における海氷と大気の相互作用の研究を行う。領域気象モデル WRF を用いた都市気候の研究を実施する。

高性能計算システム研究部門：アプリケーションの大規模並列化や次世代並列言語の実応用への適用と GPU 適応化を通じ、各応用分野との学際的共同研究を展開。新規開発予定の HA-PACS における実証実験を進める。

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を進めると共に、大規模実時間実世界データの利活用を進める。大量情報の提示方式、人介在型の高精度データ解析の実装を通じて計算メディアの有効性を検討。

【国際】

国際拠点の確立を目指して、国際連携として、エジンバラ大学および、米国のローレンスバークレイ研究所との連携を進める。また、アジアにおいては韓国 KISTI との連携を検討する。

【教育】

計算科学に関する人材育成への取り組みとして、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を実施。

1-2. 改善目標

外部評価において指摘された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」の推進体制については、概算要求プロジェクトおよびHPCI戦略プログラム等で確実に推進されつつあるが、それを支える事務体制の構築・充実が喫緊の課題になっている。

2. 平成 23 年度実施報告

2-1. 平成 23 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

共同利用・共同研究拠点の共同研究プログラムとして、センターの主要計算設備を活用する学際共同プログラムを実施した。当該年度においては、31 課題のプロジェクトを採択、実施し、25 件の旅費支援、2 件の集会支援を行った。長期的な基礎研究を含む、各研究グループが行う重点課題についても、この学際共同プログラムのプロジェクトとして実施し、研究を着実に進めている。

学際計算科学の最先端を開拓する、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」について、計算科学推進室と次世代計算システム開発室を設置し、確実に推進する研究開発体制を構築し、進めている。本プロジェクトを推進するためのシステムとして HA-PACS システムを調達し、2 月から運用を開始した。

国際的な連携として、エジンバラ大学とローレンスバークレイ研究所とワークショップを開催し、交流を進めるとともに、国内においては、KEK、国立天文台とともに計算基礎科学分野の HPCI 戦略プログラム分野 5 を推進した。さらに、理研と共同で、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 による研究成果について、ゴードン・ベル賞の最高性能賞を受賞した。また「京」を中心として我が国のスパコンを連携させる HPCI システムの構築においては広域のストレージを担当し、HPCI の構築に貢献した。

〔重点施策の達成状況〕

【研究】

(1) 当該プロジェクトを実施する体制として、計算科学推進室と次世代計算システム開発室を設置した。計算科学推進室においては、エクサスケール計算を見据えた次世代の計算科学プログラムを開発する。次世代計算システム開発室においては、演算加速機構を直接結合するインタコネクトを中心とする計算機システムアーキテクチャの研究を行う。当該年度においては、プロジェクトを推進するためのシステムとして HA-PACS システムを調達し、2 月から運用を開始した。

(2) 共同利用・共同研究拠点の共同研究プログラムとして、センターの主要計算設備である、T2k-tsukuba、PACS-CS、FIRST を利用する学際共同プログラムを実施し、学際計算科学の研究を推進した。当該年度においては、31 課題のプロジェクトを採択、実施した。25 件の旅費支援、2 件の集会支援を行った。なお、PACS-CS システムについては、震災による省電力の要請に対し、5 月から夜間のみの運転し、9 月末をもって、稼働を終了した。

その総括と次の展開を議論する、第 2 回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム—PACS-CS による計算科学の発展と次世代コンピューティングへの展開—を 9 月に開催した。

(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（分野 5）を推進した。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ための共同研究を推進した。

当該年度においては、RS-DFT による研究成果について、「京」を用いた研究成果を、ハイ・パフォーマンス・コンピューティング（高性能計算技術）に関する国際会議 SC11（米国・シアトル開催）で発表し、ゴードン・ベル賞の最高性能賞を受賞した。また、この研究の中で行った高速 FFT についても HPC チャレンジベンチマークで 1 位になった。また、HPCI システムの構築においては広域のストレージを担当し、分散ファイルシステム Gfarm を用いた我が国の計算資源の有効利用を図る HPCI の共有ファイルシステムを構築した。また、これを維持運営する HPCI コンソーシアムに参加することになった。

(4) 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 19 件、科研費（分担を含む）41 件、補助金 2 件、金額ベースで外部資金 902 百万円（うち、493 百万円は戦略プログラム、H22 年度 457 百万円）である。

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：物理的なクォーク質量のゲージ配位を用いて、アップクォークとダウンクォークの質量差及び電磁相互作用の効果を取り入れたハドロン質量の計算を行い、その結果と実験値との比較から、クォーク質量を精密に決定した。バリオン間ポテンシャルを効率よく精密に決定する方法を開発し、核子の散乱位相の計算を行った。また、フレーバーSU(3)対称な格子 QCD 計算を大きな体積で行い、H ダイバリオンが束縛状態として存在することを示すとともに、束縛エネルギーを決定した。クォーク質量が重い場合に、有限温度有限密度の相転移点の質量依存性を決定した。

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ならびに近傍宇宙における銀河考古学を、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した。時間依存密度汎関数理論に基づき、光と物質の相互作用を第一原理から記述するマルチスケール・シミュレーション法を開発し、また量子ダイナミクス計算により原

子核の励起と反応を記述する理論を進展させた。

量子物性研究部門：RSDFTを「京」にチューニングしてシリコンナノワイヤーの大規模第一原理計算を行なった。また、次世代メモリである抵抗変化型メモリの動作機構の電子レベルでの解明等、つくばナノテクアリーナ参画している産業界に貢献するナノサイエンスの知見を計算科学によって獲得する方策について検討した。

生命科学研究部門：近年立体構造が初めて決まり、現在極めて注目されている生体酵素、一酸化窒素還元酵素とDNAトポイソメラーゼ、の反応機構について理論的解明を行った。高精度計算手法（QM/MM法）を用いた反応中間体構造や遷移エネルギーの決定により、活性中心近傍のアミノ酸が反応に重要な役割をしていることを明らかにした。また、アラニンやバリンなど宇宙空間でも存在するアミノ酸に対して、D体L体の存在比の偏りが発生するプロセスについて理論的研究を行った。

真核生物大系統で最近の議論の焦点の一つであるハプト・クリプト生物群、真核生物系統の根元（起源）にかかわる可能性の高いディスコバ生物群の研究を遂行した。ハプト・クリプト生物群である可能性のある新奇真核微生物 *Palpitomonas bilix*、およびディスコバ生物群の *Tsukubamonas globosa* の網羅的発現遺伝子解析を行った。この配列データをもとに159遺伝子データセット整備し、現在大規模系統解析にむけて準備中である。

地球環境研究部門：近年の北極圏の温暖化の研究は、地球温暖化研究における最前線に位置づけられている。北極圏の海氷激減の要因としてボーフォート高気圧と対をなす北極低気圧が海氷を駆動し、海氷の激減の要因となっていることから、大気大循環モデルNICAMを用いた北極低気圧のライフサイクルの研究と北極温暖化における海氷と大気の相互作用の研究を推進した。建物解像LESモデルを計算機科学分野との共同で開発した。多治見市とCCSとの協定に基づき、多治見猛暑の実態調査を行った。領域気象モデルWRFを用いた温暖化ダウンスケーラーを開発し、都市気候の将来予測の研究を実施した。

高性能計算システム研究部門：次世代並列言語XMPの仕様確定とコンパイラ開発、大規模GPUクラスター向け拡張を実施した。HA-PACSの密結合演算加速機構のプロトタイプをFPGAで実装し、実証実験を開始した。広域分散ファイルシステムGfarmのHPCIにおける大規模共有ファイルシステムとしての実運用の設計と、さらに高度なコピー作成・耐故障機能を開発した。各種並列数値アルゴリズムの高速化を行い、特に「京」コンピュータにおける実アプリケーション高速化を実現した。

計算情報学研究部門：データマイニング、XML等に関わるデータ基盤技術や、実時間ストリームデータ基盤技術に関する研究をこれまでの研究成果を発展させるべく展開した他、

気象データ、QCDデータ、衛星センサデータ等に関する技術の高度化を他部門と連携して推進した。また、映像・画像メディアにおいてデータ解析を効率よく行えるインタフェースの方法論を構築してきた。特に、スポーツシーンでの視点誘導、屋外映像の利活用、ユーザの協調的介入による解析精度の向上、などの研究により、計算メディアの有効性を検証した。

【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、エジンバラにて3回目のシンポジウムを行い、エクサスケール計算技術について議論した。米国のローレンスバークレイ研究所については、2回目のワークショップを行い、共同研究の課題について議論した。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 において、高性能計算技術についてのウインタースクールを開催し、人材育成・研究について連携していくことになった。

【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、これまでの数理工学研究科に加え、生命環境研究科ともプログラムを実施することとし入試を開始した。今年度末には1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を行った。

〔改善目標の達成状況〕

センターの充実、T2k-tsukuba システムに加えて、新 HA-PACS システムの運用開始、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。特に、次世代スパコン戦略プログラムについてはセンター事務とは別に事務組織を立ち上げ運営している。また、「共同利用・共同研究拠点形成強化事業」の支援により、計算機システムの運営のための人員1名を雇用して改善を図っている。しかし、依然として事務体制の人員は不足しており、改善する必要がある。

〔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・運用

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 HA-PACS(800TF の性能)についての調達し、2月から運用を開始している。来年度に向け

では、学際共同利用プログラムによる共同利用を検討する予定である。

(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。これを核にして、エクサスケールの計算科学を目指した特別経費プロジェクトを進めるとともに、外部資金の獲得についても取り組んでいる。

(3) 他のスパコンセンター等、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。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を行った。来年度においては、実際に運用を行う予定となっている。

2-2. 自己評価と課題

(1) 自己評価

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」の初年度であり、研究を着実に進めるための体制の構築をするとともに、プロジェクトを推進するための計算機システム HA-PACS の調達を行うなど、着実にスタートした。また、学際共同利用プログラムについても、着実に進捗している。当該年度においては、震災後の計算機運用再開の作業をスムーズに進め、省電力運転を行い昨年夏の省電力に貢献した。

次世代スパコンに関して理研と共同研究を行ってきたが、本センターが貢献してきた RS-DFT や FFT について、世界的な賞を獲得し、その成果が実ったといえる。今後、本センターが中心となって基礎科学の分野の戦略プログラムの運営を鋭意進めるとともに、スパコン連携基盤である HPCI の運営にも協力していきたい。

(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「京」が稼動し、その運営組織として計算科学研究機構が設立されるなど、我が国の計算科学の体制が変化する中で、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 の次のシステムについて、つぎの最先端システムの検討・調達と革新的

な技術開発への戦略を練っていく必要がある。

② 省電力への取り組み、予算面での課題

震災後の電力事情の変化により、電気料金の高騰が予想されている。電気料金は本センターの予算の大きな部分を占める部分であり、高騰した場合の対処を検討しておく必要がある。また、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。