

1 平成 25 年度重点施策および改善目標の達成状況

1-1. 全体的な状況

ミッション再定義に基づき、センターの組織改革を行うと共に、「計算基礎科学連携拠点」や「宇宙生命計算科学連携拠点」を中心とした学内外連携体制を強化した。平成 26 年 2 月には、3 日間にわたり海外委員 8 名、国内委員 3 名による外部評価を実施した。また、センター人事委員会を設置し、センター部局化に向けた取り組みを開始し、転出枠 (2 枠)、全学戦略枠 (2 枠)、国際テニュアトラック枠 (4 枠) により、計算基礎科学、物質・生命、地球環境、宇宙生命の新たな人事を行った。共同利用・共同研究拠点の共同研究プログラムとして、学際共同利用プログラムにより 37 課題のプロジェクトを採択し共同研究を実施した。また、第 5 回「学際計算科学による新たな知の発展・統合・創出」シンポジウム -T2K-Tsukuba, HA-PACS による計算科学の発展と次世代コンピューティングの展望- を 11 月に開催し、T2K-Tsukuba と HA-PACS による学術成果を総括した。各研究グループが行う重点課題についても、学際共同利用プログラムのプロジェクトとして実施し、着実に研究を進めた。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」においては、密結合並列演算加速機構 (TCA 機構) を開発し、これを HA-PACS に実装することで、システムの総ピーク演算性能 1.166 ペタフロップスを実現した。T2K システムの後継システムについては、パイロットシステム COMA(PACS-IX)を導入すると共に、東京大学情報基盤センターと共同設置した「最先端共同 HPC 基盤施設」において次期マシンの検討を行った。さらに、東工大、理研、会津大、日立とともに「将来の HPCI システムのあり方に関する調査研究」において、演算加速機構をもつ次世代スパコンについての提案を取りまとめた。また、学外連携強化のため、名古屋大学大学院工学研究科との連携協定を締結した。

1-2. 重点施策の達成状況

25 年度重点施策・改善目標と実施内容は以下の通り。

(1) 次期 T2K マシンとして、東大と共同して大規模システムを開発・運用する体制を構築する。

T2K システムの後継システムについては、東京大学情報基盤センターとともに柏キャンパスに共同して次期スパコンを設置、運用することを計画している。そのため、昨年度東大と協定を締結し、「最先端共同 HPC 基盤施設」を設置した。今年度は、各々の大学において資料提供招請 (平成 26 年 2 月末提出締切) を行い、提出された資料に基づき、合同で各社へのヒアリングを開始し、技術的な検討を始めた。また、次期導入予定のシステムの設計・予備研究のためのパイロット・システムとして大規模メニーコア実験システム COMA (PACS-IX) を計算科学研究センター別棟に平成 26 年 3 月末に導入した。なお、T2K-Tsukuba システムについては、平成 26 年 2 月 28 日に運用を終了し、ファイルシステム等を調達し、移行の準備を行った。

(2) HA-PACS 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」および、「将来の HPCI システムに関する調査研究」を実施し、将来のエクサスケールシステムに検討する。

HA-PACS については、「学際共同利用プログラム」に組み入れ、本システムを用いた共同研究を行った。また、本プロジェクトの一つの重要な研究項目である、演算加速機構(GPU)間を直接結合する PEACH2 については設計・実装を完了し、これを組み込んだ密結合並列演算加速機構(TCA 機構)システムを完成させ、システムの総ピーク演算性能 1.166 ペタフロップスを実現した。アプリケーションについても、先端計算科学推進室で開発を進めた。また、センターを中心に東工大、理研、会津大、日立とともに「将来の HPCI システムのあり方に関する調査研究」のプロジェクトの下で、演算加速機構をもつ次世代スパコンについての提案を取りまとめた。

(3) HPCI 戦略プログラム(分野 5)を中心に、「京」コンピュータを活用し、研究を推進する。

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 HPCI 戦略プログラム(分野 5)「物質と宇宙の起源と構造」を推進し、素粒子、原子核、宇宙分野で重要な成果を上げた。

(4) 研究成果を基に、国際連携を進める。

7月4~5日にエジンバラ大学とのワークショップを筑波大で開催し、連携の状況についてミーティングを行った。共同研究のテーマについて情報交換する他、研究協力全般の MoU を締結した。また、韓国 KISTI との連携に関しては、韓国の HPC 関係機関と共に、2月24~27日に日韓 HPC Winter School ならびにワークショップを開催した。ローレンスバークレイ研究所とは、H26年4月に筑波でミーティングを行う予定である。

(5) 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、学際共同利用プログラムを演算加速機構を持つスパコンや次期 T2K マシンに移行しつつ、共同研究を推進する。

「先端学際計算科学共同研究拠点」として、「先端学際計算科学の開拓・推進・展開事業—計算科学による先導的知の創出—」プロジェクトを推進し、共同研究プログラムとして、T2K-Tsukuba と HA-PACS を活用する学際共同利用プログラムを実施し、(1) 学際開拓プログラム、(2) 重点課題推進プログラム、(3) 共同研究推進プログラムについて、計 37 課題のプロジェクトを採択し共同研究と重点研究を推進した。

1-3. 研究の年度目標と達成状況

(1) 素粒子物理研究部門

京での「格子 QCD による物理点でのバリオン間相互作用の決定」の計算に向け、ゲージ配位の

生成の第 1 段階を完了し、それを用いたバリオン間相互作用の計算方を開始する。

「京」でのゲージ配位生成が目標の 90%程度まで到達し、残りは来年度初めに終了する予定である。バリオン間相互作用の計算に関しては、「京」を用いたテスト計算を実行し、来年度からの本格計算へ向けた準備が進められた。有限密度 QCD では、4 フレーバーにおいて有限サイズスケールリング法を用いた相構造解析に成功した。また、有限温度 QCD では、3 フレーバーにおける臨界終点を同定する計算が進行中である。

(2) 宇宙・原子核物理研究部門

宇宙における初代天体形成、銀河進化と相互作用、巨大ブラックホールの形成史を、輻射流体力学、N体シミュレーションによって探究する。多フェルミオン系の量子ダイナミクスに対する大規模計算により、元素合成に関わる原子核反応や、光と物質の相互作用に関する理解を発展させる。

宇宙分野では、初代銀河形成と宇宙再電離、ダークマター宇宙における構造形成と銀河進化、銀河と矮小銀河の衝突過程、ブラックホール多体系の合体過程、活動銀河核による星間物質のダイナミクスを、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と共に、自己重力多体系の 6 次元ボルツマン計算を実現させた。原子核分野では、重元素生成に重要なトリプルアルファ反応に対し、当グループが発展させた虚時間理論を適用し、広い温度範囲で信頼のおける反応率を得ることに成功した。二重ベータ崩壊からニュートリノ質量を決定するために必要となる原子核行列要素の計算を進めた。また、星間空間アミノ酸、系外惑星上の光合成の量子計算で、生命分野と協働した。

(3) 量子物性研究部門

第一原理量子論等によりナノ構造体の持つ特徴的物性の解明、次世代技術基盤の創成等の研究を行う。つくばナノテクアリーナの産業界との連携をさらに強固なものとし、計算科学の知見を得る。

光と物質の相互作用に関して、計算科学手法を用いた研究を発展させた。高強度なレーザーと原子の相互作用では、中赤外線における原子電離過程に対して多重散乱の寄与を明らかにした。高強度なパルス光と誘電体の相互作用では、極限的なパルス光により誘起されるカレントの特性を明らかにした。強相関物質と光の相互作用では、多軌道強相関電子系における特異な光照射効果を見出した。また、銅酸化物超伝導体でその存在が予言されている‘スピン渦誘起ループ電流’の方向を、レーザーにより変換可能であることが計算により示された。

(4) 生命科学研究部門

特に、宇宙分野と連携して宇宙生物学分野に資する知見を第一原理量子論によって獲得する。分子進化分野では、クリプト生物群とフォルニカータ生物群の多様性と系統関係の解明を目指し、

網羅的発現遺伝子データに基づく大規模系統解析を行う。

生命科学の重要な課題を解決するために、計算機シミュレーションによる生命機能の理論的解明と GPU を用いた量子力学計算手法の開発を行った。宇宙分野と連携した宇宙生物学分野においては、当該分野においてパイオニアとなる「L 型アミノ酸過剰の起源」や「系惑星における光合成の可能性」等の量子論的知見を得ることに成功した。また、分子進化分野では、クリプト生物群に含まれるカタブレファリス類 *Roombia* sp. とフォルニカータ生物群に含まれる *Dysnectes brevis* と未記載種 NY0171 株の網羅的発現遺伝子を行い、そのデータを使用した大規模分子系統解析を行うことで、これらの新奇生物種の系統的位置を確定した。

(5) 地球環境研究部門

文科省 GRENE プロジェクトにおいて、NICAM を用いた北極圏の温暖化の再現実験を行い、北極振動との関係を調べる。街路樹による都市熱環境緩和効果に対する数値実験を行い、街路樹モデルの LES への導入を進める。

文科省グリーン北極事業の北極温暖化研究プロジェクトを実施した。北極振動と北極温暖化の関係を分析。2000 年以降に北極温暖化増幅が強化され、同時に負の北極振動が顕在化した。その結果、温和な北極圏と寒冷な中緯度が発現することを示した。線形傾圧モデル(LBM)を用いて北極振動の特異固有解理論を発展させ、北極振動指数(AOI)の正負に伴う傾圧不安定解の構造変化を解析した。前年度開発した建物間放射モデルと樹木モデルを結合させ、建物と樹木が混在する都市街区内における放射・熱環境をシミュレートできるモデルを開発した。夜間の都市熱環境に対する植生の効果を評価するための人工気象室（ポリエチレンチャンバー）を開発した。環境省の S8 プロジェクトで開発した「温暖化ダウンスケーラ」をインドネシア気候・気象・地球物理庁 (BMKG) に導入した。このソフトウェアの導入により、今後、途上国が独力で地域の温暖化予測ができるようになると期待される。

(6) 高性能計算システム研究部門

HA-PACS における並列言語 XMP 及びその演算加速向け拡張、また密結合演算加速機構の大規模実アプリケーションでの評価を進める。広域分散ファイルシステム Gfarm の HPCI での安定実稼働と一層の性能向上を行う。並列数値アルゴリズムの一層の大規模高速化と演算加速機構向け高度化を進める。

並列言語 XMP の演算加速装置向け拡張を HA-PACS 上に実装し、CPU/GPU 間のワークシェアリングの付加分散を適応的に制御する言語系を開発した。また、XMP 言語によるプログラムが「京」の上で H P C C Challenge Class2 アワードを受賞した。密結合演算加速機構のハード/ファームウェア/ドライバソフト等の開発を終え、HA-PACS/TCA として 64 ノードに実装した。基本通信性能が現在の I n f i n i Band 技術を上回ることを示し、いくつかの

アプリケーションにおける性能評価を実施した。Gfarm に関しては HPCI での全国規模の運用を継続支援し、大規模システムにおける運用の安定性向上と高性能化を行った。FFT、クリロフ部分空間法の改善を進め、各種アプリケーション分野との連携の下で高性能化を進めた。

(7) 計算情報学研究部門

データ基盤分野では、大規模データに対応するためのデータ管理・分析技術や異種データ連携技術の高度化等に取り組む。また、科学データの高度利用基盤に関する研究開発を他部門と連携して推進する。計算メディア分野では、人介在型データ解析に、実世界の 3 次元情報を取り込むことにより、計算メディアの有効性を検討する。

データ基盤分野では、ストリームを含むデータ連携技術を深化させると共に、GPU を活用した大規模計算に関わるデータマイニング・知識発見や XML・Web プログラミング等のデータ基盤技術に関する研究を推進した。また、X 線天文データ検索、ゲノムデータ管理等の応用的な研究開発も遂行した。計算メディア分野では、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、人間の直感的な操作と計算機の定量性な補正処理を組み合わせた人介在型の映像データ閲覧法、大規模画像データ群を用いた位置情報探索方式、複合現実感技術によってコミュニケーションの円滑化を実現するビデオ会議システム、多種センサによる人物の表情表出のデータベース化、などの研究により、計算メディアの有効性を検証した。

1-4. 国際連携の年度目標と達成状況

各共同利用・共同研究拠点は、国際研究拠点化に向けた体制構築に係る活動を実施する。【各副学長等との重点施策 14-32-1】 具体的には、これまで進めてきた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推進し、国際研究拠点化に向けた体制構築を進める。

7 月 4～5 日にエジンバラ大学とのワークショップを筑波大で開催し、連携の状況についてミーティングを行った。共同研究のテーマについて情報交換する他、研究協力全般の MoU を締結した。ローレンスバークレイ研究所とは、H26 年 4 月に筑波でミーティングを行う予定である。また、韓国 KISTI との連携に関しては、韓国の HPC 関係機関と共に、2 月 24～27 日に日韓 HPC Winter School ならびにワークショップを開催した。

1-5. 教育の年度目標と達成状況

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し、グローバル 30 およびヒューマンバイオロジプログラム、大学院共通科目等の計算科学の教育に関する英語プログラムを充実させる。

計算科学デュアルディグリー・プログラムに関しては、新たに開設した生命環境研究科とシス

テム情報研究科との計算科学デュアルディグリー・プログラムのコースに博士課程の学生が1名入り、プログラムを実施している。計算科学デュアルディグリー・プログラムに在籍する学生については RA として雇用する他、海外インターンシップを支援している。グローバル30の計算科学英語コースに加えて、ヒューマンバイオロジープログラム対応の英語コースも行い、英語による計算科学の教育の充実を図っている。

1-6. 業務運営等の年度目標と達成状況

第三者評価を実施し、実施状況の検証を行い、高い研究成果の実現を図る。これまでの拠点の運営、研究、連携について第三者評価を行う。

2月18日～20日の3日間、海外委員8名、国内委員3名による外部評価を実施した。委員の内訳は、素粒子分野海外1名、宇宙分野海外1名、原子核分野海外1名、量子物性分野海外1名、国内1名、生命科学分野海外1名、地球環境分野海外1名、国内1名、高性能計算システム分野海外1名、国内1名、計算情報学分野海外1名である。初日から2日目にかけて、各分野の研究進捗報告を行い、2日目後半は、分野ごとのパラレルトラックにより、詳細な報告を行うと共にこれに対する助言を受けた。3日目は、センター将来計画について、計算機開発および、「計算基礎科学連携拠点」、「宇宙生命計算科学連携拠点」などによる学際計算科学の推進計画を取りまとめ報告した。

1-7. 改善目標の達成状況

センター評価、監事監査での指摘事項に基づき、本研究センターがこれまで実績を積んできた研究領域を中心に推進しつつ、生命科学やナノ科学との協業・連携を活発化、推進する方策を検討する必要がある。そのための、その分野の研究者の確保や協力体制をどのようにすべきかについて検討を進める。分野間連携と人材育成を強化するためにセンター改組を行う。

これまで空き枠となっていた応用分野の充実のため、転出枠(2枠)、全学戦略枠(2枠)、国際テニュアトラック枠(4枠)により、計算基礎科学、物質・生命、地球環境の新たな人事を行った。これにより、生命分野教授1名、物質分野准教授1名、原子核分野教授1名、宇宙生命分野教授1名、素粒子分野国際テニュアトラック助教1名、原子核分野国際テニュアトラック助教1名、宇宙分野国際テニュアトラック助教1名、地球環境分野国際テニュアトラック助教1名、の人員配置が行われることとなった。分野間連携と人材育成を強化のため、ミッション再定義に基づき、センターの組織改革を行った。また、センター人事委員会を設置し、センター部局化に向けた取り組みを開始した。

1-8. 特色ある取組の実施状況

(1) 分野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、宇宙、地球環境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。また、全国的な学際融合として、「宇宙生命計算科学連携拠点」をセンターが中核拠点となって設置し、宇宙、惑星、物質、生命科学の連携を行った。また、この拠点の学外連携強化のため、名古屋大学大学院工学研究科との連携協定を締結した。基礎科学分野では「計算基礎科学連携拠点」を継続推進し、京コンピュータを用いた分野間連携のみならず、広く HPCI を通じた連携を実施した。

(2) データ共有基盤 JLDG の運用と分散ファイルシステム Gfarm の研究開発

主に、計算素粒子物理学のデータを分野の研究者で共有するシステム JLDG(Japan Lattice Data Grid)を運営している。現在、主に HPCI 戦略プログラム（分野 5）の支援を受けて運営しているが、この取組は十年に渡ってセンターを中心に取り組んできたものである。昨年までの最先端基盤整備による支援も受け、現在、7 機関、20 サーバーを結ぶシステムとなっており、ディスク総量は 2.6PB を提供するまでになっている。また、このシステムを支えるシステムソフトウェアである分散ファイルシステム Gfarm も本センターが開発を行っており、このシステムは HPCI システムの実運用にも供されている。

2 自己評価と課題

2-1. 自己評価

ミッション再定義に基づくセンターの組織改革は、「計算基礎科学連携拠点」や「宇宙生命計算科学連携拠点」などを中心とした学際計算科学推進体制を明確にし、外部評価委においても高い評価を得た。また、全学戦略枠、国際テニユアトラック枠、転出枠によって行った、計算基礎科学、物質・生命、地球環境、宇宙生命の計 8 枠の新たな人事は、長年センターにおいて重点化が望まれていた分野の体制強化につながった。共同利用・共同研究拠点としての学際共同利用プログラムは、37 課題を採択し、T2K-Tsukuba、HA-PACS による多くの共同研究が行われ、各分野の重点課題についても着実に研究が進展した。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」においては、密結合並列演算加速機構（TCA 機構）を HA-PACS に実装することで、所期の性能を達成した。T2K の後継システムとして、パイロットシステム COMA(PACS-IX)を導入すると共に、東京大学情報基盤センターと共同設置した「最先端共同 HPC 基盤施設」において次期マシンの検討を行った。「将来の HPCI システムのあり方に関する調査研究」では、エクサスケール・コンピューティングに向け演算加速機構をもつ次世代計算機アーキテクチャの提案を取りまとめた。また、他大学との連携協定により、学際計算科学のハブ拠点へ向けた取り組みを推し進めた。

2-2. 課題

(1) 部局化の課題

本年度、センター人事委員会を設置し、センター部局化に向けた取り組みを開始したが、本格的な部局化の実現に向けては、解決すべき課題が残っている。教員組織については、教員所属の変更は、関連する系・学域との間の研究活動や運営に支障がないよう十分な準備が必要である。また、教員は学群・研究科にも所属することになり、予算管理については、研究経費、教育経費の別をどのように行うかを検討する必要がある。事務体制についても、研究（センター）業務、教育（学群、研究科）業務の切り分けが必要であり、またそのために必要な事務の人員体制も再検討の必要がある。さらに、現在センター教員の半数以上は、センター外に居室（研究室）を持っており、所属変更となる場合の居住空間の確保は喫緊の課題である。これらの課題を解決し、本格的な部局化の実現時期をどこに設定するか、十分な検討が必要である。

(2) 国際拠点化の課題

国際的な学際計算科学のハブ拠点形成に向けては、諸外国機関との具体的な研究連携が必要であり、この取り組みを加速するために、これまでの国際連携に加えて、国際テニュアトラック等を活用した連携強化を図ることが望まれる。

(3) HPCI 中での位置づけの確保

国策によるエクサスケールに向けた次世代スパコン開発の検討が進む中、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ことのできる体制を考えていかなければならない。東京大学情報基盤センターと共同設置した「最先端共同 HPC 基盤施設」は、大学間連携による計算科学の推進という新たな取り組みとして重要である。今後、計算機科学者と計算科学者とのコデザインによる計算機開発を大学においてどのように推進していくかは予算措置も含めて十分な戦略を考える必要がある。そのためには、基礎科学、実験・観測等を含む幅広い分野との連携が重要になると考えられる。