

## 1 平成 26 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

理学・工学分野で実施したミッション再定義ならびに昨年度実施した外部評価に基づき、センター部門体制の再構築を行うと共に、「計算基礎科学連携拠点」ならびに「宇宙生命計算科学連携拠点」を含む学内外連携体制を強化した。人事としては、9月よりポイント制を先行導入し、センターの人事計画を策定した。新たな人事として、全学戦略枠（物質科学分野准教授、宇宙生命分野教授）、転出枠（原子核分野教授、生命科学分野教授）、国際テニュアトラック助教枠（素粒子、原子核、宇宙、地球環境分野）の計8枠の人事を行った。また、システム情報分野における2名の教授の転出に伴う後任人事として助教（テニュアトラック）2名の配置を決定すると共に、宇宙生命分野での任期付助教1名の配置を行うこととした。共同利用・共同研究拠点としては、学際共同利用プログラムにより41課題のプロジェクトを採択し共同研究を実施した。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。11月には、第6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-HA-PACSとCOMAによる計算科学の発展と、分野融合への取り組みを開催し、HA-PACSとCOMAによる学術成果を総括した。学内外の連携の取組みとしては、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、次期導入計算機の仕様策定を行った。4月には、米国のローレンスバークレイ研究所との合同ワークショップを開催し、計算科学発展のための協働を進めた。1月には、韓国KISTI（Korea Institute of Science and Technology Information）と合同で、HPC Winter SchoolをSeoul National Universityにて開催した。3月には、エジンバラ大学にて合同ワークショップを開催した。また、センターと理化学研究所計算科学研究機構、日立製作所の3者間で「次世代演算加速機構に関する共同研究」の覚書を取り交わし、エクサスケール・コンピューティングの実現に向けた要素技術開拓の共同研究を開始した。「計算基礎科学連携拠点」では、これまでの3機関連携から、8機関連携へ拡大した包括協定を締結し、この下で計算科学研究センターは、『ポスト「京」で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の開発・研究開発重点課題』の一つである課題⑨「宇宙の基本法則と進化の解明」の代表機関として採択され、事業を開始した。「宇宙生命計算科学連携拠点」では、オーストラリア国立大学、名古屋大学との連携の下で、星間アミノ酸部会、系外惑星バイオマーカー部会、宇宙乱流部会の活動を進めた。地球環境分野では、アラスカ大学との国際交流協定の締結を更新した。

### 1-2. 重点施策の達成状況

研究面では、文部科学省共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」とし

て、計算機システムの開発・運用とこれを用いた学際計算科学の研究を推進した。また、「計算基礎科学連携拠点」「宇宙生命計算科学連携拠点」などを中心に、学外連携を強化し、国際拠点化に向けた体制構築を行なった。教育面では、計算科学の教育に関する英語プログラムを充実させた。また、センターの本格的な部局化に向けた取り組みを実施した。26 年度重点施策・改善目標と実施内容は以下の通り。

(1) T2K 後継機としてパイロットシステム COMA (PACS-IX) を運用すると共に、次期マシンとして、東京大学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。

メニーコアパイロットシステム COMA (PACS-IX) を運用し、学際共同利用及び HPCI プログラムにおいて全国共同利用に供した。センターとしては、各種大規模計算科学アプリケーションのメニーコアプロセッサ向けコード開発と性能評価を実施し、メニーコアプロセッサの予備評価を先行研究として行った。また、東大で開発中の McKernel の試験的利用と性能特性に関する研究も行った。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」においては、これらの実績に基づき、次期導入計算機の資料招請ならびに仕様策定を行った。

(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を検討する。

HA-PACS プロジェクトにおいて開発した GPU 間直接通信機構である PEACH2 を JST-CREST によるフォローアップ研究で高度化し、基本通信ライブラリの整備、QCD, CG 法, FFT 等の主要アプリケーションに適用した。特に、演算加速クラスターで難しいとされる小中規模問題における強スケーリング性能が得られることを確認した。「将来の HPCI システムに関する調査研究」では、次世代超並列型演算加速装置の提案とシミュレーション及び机上評価による各種アプリケーションの性能評価を行った。最終的に、同種の装置を用いた超並列システムが、特定のクラスの応用問題においてエクサスケール規模のシステムを高い電力性能比の下で実現可能であることを示し、文部科学省に報告した。

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

4 つの研究開発課題、課題(1) 格子 QCD による物理点でのバリオン間相互作用の決定、課題(2) 大規模量子多体計算による核物性解明とその応用、課題(3) 超新星爆発およびブラックホール誕生過程の解明、課題(4) ダークマターの密度ゆらぎから生まれる第 1 世代天体形成について、「京」コンピュータおよび HPCI 計算資源を活用し、研究を推進した。特に、課題(1)では、物理点における格子 QCD 計算、格子 QCD を用いた軽い原子核の計算、格子 QCD によるバリオン間相互作用の計算、課題(2) では、原子核殻模型計算による E1 励起の記述、軽い

核におけるモンテカルロ殻模型による第一原理計算の現状，核力から出発した有効相互作用の構築とその応用，課題(3) では，ブラックホール磁場中性子星連星合体の数値相対論シミュレーション，連星中性子星合体における r-process 元素合成，多次元ボルツマン輻射流体コードによる超新星計算，課題(4)では，超臨界降着円盤の一般相対論的輻射磁気流体シミュレーション，Kninja を使った微惑星の大領域集積計算：アイスラインから外側への惑星移動，ダスト再放射を考慮した輻射流体計算コードの開発において進展があった。

(4) 「計算基礎科学連携拠点」および「宇宙生命計算科学連携拠点」を中心とした学内外連携を一層強化し，国際連携を進める。

「計算基礎科学連携拠点」では，これまでの3機関連携（国立大学法人筑波大学計算科学研究センター，大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構，大学共同利用機関法人自然科学研究機構国立天文台）から，8機関連携（大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構，大学共同利用機関法人自然科学研究機構国立天文台，国立大学法人筑波大学計算科学研究センター，国立大学法人京都大学基礎物理学研究所，国立大学法人大阪大学核物理研究センター，国立大学法人東京大学原子核科学研究センター，国立大学法人千葉大学大学院理学研究科附属ハドロン宇宙国際研究センター，独立行政法人理化学研究所仁科加速器研究センター）へ拡大した包括協定を締結し，各機関の研究開発能力及び人材，設備等を活かし，計算科学の手法による素粒子・原子核・宇宙分野の戦略的な研究教育拠点の形成を行った。そして，この連携に基づき，計算科学研究センターは，『ポスト「京」で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の開発・研究開発重点課題』の一つである課題⑨「宇宙の基本法則と進化の解明」の代表機関として採択された。「宇宙生命計算科学連携拠点」では，オーストラリア国立大学，名古屋大学との連携により，星間アミノ酸部会で，第一原理計算に基づくアミノ酸生成・キラリティー発生・アミノ酸前駆体形成についての共同研究を行った。また，系外惑星バイオマーカー部会では，中心星のスペクトルタイプを考慮した紅色細菌光合成の計算を行った。宇宙乱流部会では，名古屋大学流体工学分野と連携のもとで乱流と慣性粒子の相互作用に関する計算を進めた。これらの共同研究推進のため，名古屋大学大学院工学研究科との連携協定を締結した。

(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，HA-PACS と COMA 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、HA-PACS 29 課題、COMA 42 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

素粒子物理研究部門：格子 QCD における微細化と多体系への展開を目指し、「京」を用いた物理点でのバリオン間相互作用の計算を行う。また、有限温度・有限密度 QCD における相構造解析を進める。

「京」でのゲージ配位生成が終了し、ハドロン質量などの基本物理量測定、軽原子核の直接構成、バリオン間ポテンシャル計算が進行中である。また、有限温度 QCD では、世界で初めて 3 フレーバーにおける臨界終点を決定することに成功した。今後は、3 フレーバーの臨界終点の精度を上げるとともに、より現実世界に近い 2+1 フレーバーへの拡張に着手する。

#### (2) 宇宙・原子核物理研究部門

宇宙における初代天体形成、銀河の形成・進化と相互作用、活動銀河核の進化と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。また、宇宙生命計算科学で生命分野と連携する。核子を基本自由度とみなした原子核に対して、密度汎関数理論を中心とする量子多体論に基づく計算手法を発展させ、不安定核の構造や応答、宇宙元素合成に関わる反応の研究を推進する。

宇宙分野では、初代天体形成、銀河形成、活動銀河核の進化について輻射流体シミュレーションを行った。また、銀河の進化と相互作用についての流体・N 体シミュレーションを行った。宇宙生命計算科学連携拠点では、星間空間アミノ酸部会で、キラリティーと前駆体の形成について、生命分野との連携の下に第一原理計算を行った。系外惑星バイオマーカー部会では、紅色細菌光合成のスペクトル計算を行った。宇宙乱流部会では、流体工学分野と連携のもとで乱流と慣性粒子の相互作用に関する計算を進めた。これらの研究により、26 編の原著論文を発表した。

原子核分野では、原子核のより精密な記述に向けて、これまで無視されてきたアイソスピン対称性を厳密に取り入れたエネルギー密度汎関数を開発し、荷電類似状態の計算を可能にした。また、時間依存密度汎関数計算では、原子核の形状について制限を課さない 3 次元実空間およびハイブリッド基底計算を用いて、中性子過剰核の低エネルギー励起モードの系統的計算と分析、核子超流動性を取り入れた核融合反応の非経験的計算に向けた開発を行った。さらに、ニュートリノ質量の絶対値を決定するために必要な二重ベータ崩壊の原子核行列要素計算では、準粒子乱雑位相近似に基づく大規模並列計算を進めるとともに、これと相補的

な生成座標法を用いた配位混合計算の開発を実行した。元素合成を理解する鍵となるトリプル・アルファ反応について、虚時間理論を用いたより高精度な計算法を検討した。

### (3) 量子物性研究部門

光と物質の相互作用を記述する第一原理計算や模型計算の手法を発展させ、物質中における電子・イオンの超高速ダイナミクスや、光による相変化のメカニズムを解明する。

光と物質の相互作用に関し、時間依存密度汎関数理論に基づく大規模計算により、パルス光が誘電体に照射して生じる超高速光電流の発生を明らかにした。また、時間依存シュレーディンガー方程式に基づく大規模計算により、パルス光を用いた重水素分子の電離を制御する方法を提案し、それが最新の実験で確認された。強相関係では、厳密対角化を用いた解析により、光励起状態において電子スピンの整列する傾向にあることを示した。また、銅酸化物超伝導のスピントル誘起ループ電流に関し、外部からの電流供給がある場合に計算が可能となるよう理論を拡張した。

### (4) 生命科学研究部門

生命機能情報分野では、生命機能の理論解析を進めると共に、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。

生命科学研究部門の生命機能情報分野では、生命機能の理論解析を進めると共に、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研究を遂行し、22報の論文報告、ならびに16件の招待講演（うち国際学会は6件）を行った。また、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遂行し、8報の論文報告、ならびに3件の招待講演を行った。全体のその他の業績として、8件の外部資金導入、1件の受賞、1件のプレスリリースがあった。

### (5) 地球環境研究部門

文科省 GRENE 北極プロジェクトにおいて、全球モデル NICAM を用いた北極圏の温暖化のプロセス研究を行い、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。

地球温暖化のプロセスを解明し、将来を予測することは重要であるが、気候モデルによる温暖化予測に反して最近 15 年間の全球平均気温は停滞したままとなっている。これは地球温暖化のハイエイタスと呼ばれている。その原因としては、人為起源の地球温暖化を相殺するように気候システムの自然変動（内部変動）が負の温暖化として重なったためと考えられ

ている。システムの内部変動としては海洋の数十年スケールの変動が注目されているが、大気の数十年変動としては北極振動が最も卓越する内部変動である。そこで、北極振動の成因の力学的解明と地球温暖化との関係についての研究を推進した。また、局地スケールの気候変動を理解するために、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 への導入を進めた。

#### (6) 高性能計算システム研究部門

HA-PACS 及び COMA という 2 種類の演算加速装置における高性能演算プログラミング・言語・アルゴリズム・ライブラリの開発を、各アプリケーション分野との連携を視野に進め、密結合演算加速機構の研究もその一環として展開する。広域分散ファイルシステム Gfarm の一層の性能・機能の拡張を行う。

HA-PACS における GPU 間直接通信機構 PEACH2 の通信ライブラリを整備し、各種実応用に適用可能とした。特に QCD, FFT, CG 法における強スケーリングが実現可能であることを示した。また、HA-PACS における演算加速装置向け並列拡張言語 XscalableACC を開発し、国際会議 SC14 において HPC Challenge Class2 部門において最高性能賞を 2 年連続で受賞した。COMA については実行性能を向上させるのが難しいとされる現行のメニーコアプロセッサにおいて、量子物性研究分野との共同研究により、実時間実空間密度汎関数法コードの性能を大幅に引き上げ、COMA における計算性能をほぼ 2 倍に向上させた。GPU 及びメニーコアプロセッサにおけるグラフ問題及び FFT の最適化をさらに推進した。全国のスパコン共通基盤である HPCI において全国規模で利用されている Gfarm 広域分散ファイルシステムの運用を安定化させ、高速なアトリビュートアクセス機能実装や性能の一層の向上を図り、国内の計算科学研究ユーザの研究に貢献した。

#### (7) 計算情報学研究部門

データ基盤分野では、ビッグデータ利活用に資する管理・分析技術や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。また、映像メディアを用いた可視化技術を他部門の科学データに適用するなどの連携をはかる。

データ基盤分野では、ビッグデータ利活用に資する管理・分析技術やストリーム OLAP やメタデータ推定等のデータ連携技術の高度化に取り組むと共に、GPU を活用したデータマイニング・知識発見や XML・Web プログラミング等の研究を推進した。また、ゲノムデータ管理等の応用的な研究開発を他部門と連携して遂行した。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について研究を進

めてきた。研究項目は多岐に渡るが、具体的には、“実世界の情報をセンシングする機能”，“膨大な情報を処理する潤沢な計算機能”，“情報を選択・蓄積する大規模データベース機能”を、コンピュータネットワーク上で融合することにより大規模知能情報メディアを構築し、そのバックボーン上で、先端的要素技術の研究開発と、ニーズに密着した応用システムの研究開発を並行して進めている。

#### 1-4. 国際連携の年度目標と達成状況

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。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の下で共同研究を推進し、国際研究拠点化に向けた体制構築を進める。

毎年行っている米国ローレンスバークレイ国立研究所（LBNL）との合同ワークショップを計算科学研究センターにて4月に開催し、高性能計算技術及びこれを用いた計算科学に関し、両研究機関の主要研究部門の研究者が最新研究成果を発表し、議論を行った。これにより、高性能計算／計算科学研究における連携を強化し、共同研究を推進するための共通認識を深めた。1月には、計算科学研究センターと韓国 KISTI (Korea Institute of Science and Technology Information) と合同で、HPC Winter School を Seoul National University にて開催した。3月には、エジンバラ大学にて合同ワークショップを開催し、計算機科学、データ基盤、計算物質科学、計算生命科学について発表と議論を行った。

#### 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リジプログラム、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。

生命環境科学研究科（博士後期）とシステム情報工学研究科（博士前期）に関わる計算科学デュアルディグリー・プログラムの博士前期課程修了者1名を出した。次年度新規に1名が同デュアルディグリー・プログラムを履修予定である。また、コンピュータサイエンス専攻における英語プログラムに新規に2科目が追加となった。

#### 1-6. 改善目標の達成状況

外部評価、監事監査での指摘事項に基づき、本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、各分野の協業・連携体制を強化する。そのための研究者の確保や部門体制をどのようにすべきかについて検討を進める。また、センターの本格的な部局化に向けた取り組みを実施する。

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）、

国際テニユアトラック枠（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ユアトラック助教 1 名、原子核分野国際テニユアトラック助教 1 名、宇宙分野国際テニユアトラック助教 1 名、地球環境分野国際テニユアトラック助教 1 名、の人員配置が行われることとなった。また、システム情報分野における 2 名の教授の転出に伴う後任人事として助教（テニユアトラック）2 名の配置を決定すると共に、宇宙生命分野での任期付助教 1 名の配置を行うこととした。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、センター部局化に向けた取り組みを開始した。

## 1-7. 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。共同利用・共同研究拠点として進めている学際共同利用では、(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を推進し、分野間連携、計算機利用、プログラム開発サポートなどを行っている。また、素粒子、原子核、宇宙、物質、生命、地球環境分野と超高速計算システム分野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的に開催し、共同研究を進めている。また、全国的な学際融合の取り組みとして、「宇宙生命計算科学連携拠点」の下で、宇宙、惑星、物質、生命科学の連携を行った。さらに、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 8 機関に拡大し、『ポスト「京」で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の開発・研究開発重点課題』の一つである課題⑨「宇宙の基本法則と進化の解明」が採択され、当センターが代表機関となった。

### (2) 計算科学の学外連携の推進

東京大学情報基盤センターとの連携協定の下に、「最先端共同 HPC 基盤施設」を共同設置し、次期導入計算機の資料招請を行うと共に、ベンチマークテストを実施し、仕様策定を行った。平成 28 年 6 月運用開始を目指し、共同利用のための体制構築を進めた。また、理化学研究所計算科学研究機構、株式会社日立製作所との間で「次世代演算加速機構に関する共同研究」の覚書を取り交わし、エクサスケール・コンピューティングの実現に向けた要素技術開拓の共同研究を開始した。

### (3) 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



センターが推進するクラウドコンピューティングの一つとして、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。これまで、主に HPCI 戦略プログラム (分野 5) の支援を受けて運営してきたが、今後は当センターが継続的な支援を行うこととした。現在、筑波大学 (計算科学研究センター) を主幹として、高エネルギー加速器研究機構、理化学研究所、東京大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、広島大学、金沢大学の 9 拠点で共同運用し、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 5PB 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。

#### (4) ミッションの再定義を踏まえた取組状況

ミッション再定義により、センター組織をプロジェクト推進型に改組し、「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確立し、新たな人事も行った。この体制の下で、科学諸分野間、ならびに計算機科学との間での連携が一層強化され、成果が上がっている。

#### (5) チャレンジプランの取組状況

【研究】post-T2K 計画：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」においては、大規模計算重点プロジェクトの選定とプロトタイプによるテストを行い、これらに基づき、次期導入計算機の資料招請ならびに仕様策定を行った。

【研究】エクサスケールシステム：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、文科省に報告した。採用には至らなかったが、理化学研究所計算科学研究機構、株式会社日立製作所との間で、エクサスケール・コンピューティングの実現に向けた要素技術開拓の共同研究を継続することとした。

## 2 自己評価と課題

### 2-1. 自己評価

全学戦略枠、転出枠、国際テニュアトラック枠によって行った計算基礎科学 (素粒子、原子核、宇宙分野)、物質科学、生命科学、地球環境、宇宙生命の計 8 枠の新たな人事は、重点化が望まれていた分野の体制強化につながり、センターの部門再編を実現すると共に、「計算基礎科学連携拠点」および「宇宙生命計算科学連携拠点」における学際的、国際的連携も進展した。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、41 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。体制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」の下で HA-PACS に実装導入した密結合並列演算加速機構（TCA 機構）は、各分野での利用が進み初期成果を上げることができた。T2K の後継システムとして導入したメニーコア・システム COMA(PACS-IX)も順調に稼働し、この実績を基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仕様策定を行った。「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、文科省に報告した。最終的には、ポスト「京」のアーキテクチャとしては採用には至らなかったが、センターと独立行政法人理化学研究所計算科学研究機構、株式会社日立製作所の3者間で「次世代演算加速機構に関する共同研究」の覚書を取り交わし、エクサスケール・コンピューティングの実現に向けた要素技術開拓の共同研究を継続することを取り決めた。

## 2-2. 課題

### (1) 部局化の課題

本年度、センター部局化に向けた取り組みを開始したが、センター全体の真の部局化に向けては、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・研究科の担当を前提とすることから、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。また、各種委員会の立ち上げが必要となるが、部局としての規模が小さいため、それらの委員会がうまく機能するかも問題となる。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。これらの課題を解消し、本格的な部局化の実現時期をどこに設定するかは、十分な検討が必要である。これまで、現在センター教員の半数以上は、センター外に居室を持っており、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ったが、今年度センター建物増築案が承認され、本部との調整の下で進めることとなった。

### (2) 共同利用・共同研究拠点としての位置づけ

全国の共同利用・共同研究拠点の中で、当センターは、唯一の単独型の計算科学の拠点となっている。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が進み、我が国の HPCI の体制が変化する中で、当センターは、これまで以上に存在感を発揮し、学際計算科学の拠点として、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。概算要求の厳しい予算措

置の中で、今後、計算科学者と計算機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。