

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」についての重点施策は、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 24 年度重点施策：各系・研究センターにおいて、系等の特色を生かした研究戦略及び研究連携策を推進する。

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 24 年度重点施策：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。

【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」についての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。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の運営に貢献する。また、次のエクサに向けた検討を進め、国のエクサスケール計算の計画に貢献する。
- (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： 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、アルゴリズムの改良やバリオン間相互作用の計算方法と研究を行う。有限密度での格子 QCD の研究を行う。

宇宙・原子核物理研究部門： 宇宙における初代天体，銀河，巨大ブラックホールの形成史を，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。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。

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い，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。また，宇宙分野，生命分野等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。

生命科学研究部門： 生命科学の重要な課題について計算機シミュレーションによる理論的解明とともに，GPU を用いた量子力学計算手法の開発を行い，生命科学研究において必要となる膨大な計算量に対応できるようにする。分子進化分野では，ハプト・クリプト生物群に近縁となる新奇真核微生物の探索と網羅的発現遺伝子解析を行う。

地球環境研究部門： 大気大循環モデル NICAM を用い北極低気圧のライフサイクルの研究を推進し，北極海海氷激減との関係を解明する。領域気象モデル WRF とともに建物解像 LES モデルを開発し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： 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 実運用を通じた評価・改良を行う。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。

計算情報学研究部門： 大規模計算に関わるデータ基盤技術の整備を継続すると共に，実時間実世界データの利活用についても応用的側面から技術の深化を図る。また，人介在型の高精度データ解析を，複合現実感型インタフェースを通じて行えるようにすることで，計算メディアの有効性を検討する。

【国際】

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。アジアでは韓国 KISTI との連携を進める。連携のために計算機システムを国際共同研究に活用できるように手続きを確立する。

【教育】

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、このプログラムの学生の数を増やす。グローバル 30 の計算科学の英語による講義、計算科学に関する大学院共通科目を実施し、国際化・普及を進める。

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、特別経費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、次の課題として T2K 後継システムのスパコン開発・調達について推進体制が強化できるように注意深く検討していく必要がある。

2 平成 24 年度 実績報告

2-1.平成 24 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

センターの計算科学と計算機科学の協働による「学際計算科学」を強みとして、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」を実施している。今年度においては、アプリの開発、演算加速機構(GPU)間を直接結合するハードについては設計・実装を完了し、量産品の調達を終え、着実に進行している。さらに、本年度から、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、これからの我が国のスパコンについての検討を進めており、エクサスケールを目指す計算科学を推進している。また、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、運用することとし、そのための組織「最先端共同 HPC 基盤施設」の設置・運営について協定を締結した。

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。48 課題のプロジェクトを採択、実施し、38 件の旅費支援、1 件の集会支援の他、本年度は、センター設置 20 周年記念シンポとして、第 3 回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウムを 9 月に開催した。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。

国際的な連携として、これまで、米国はローレンスバークレイ研究所と、欧州はエジンバラ大学との協力関係づくりを進めている。さらに、人材育成においても、計算科学英語プログラムの推進や計算科学デュアルデグリー・プログラムの海外インターンシップの支援を行い、国際的な活動ができる人材育成に取り組んでいる。

〔重点施策の達成状況〕

【研究】

(1) 平成 24 年 2 月から運用を始めた HA-PACS については、当該プロジェクトの研究に供するとともに、10 月からは「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開始した。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、量産品の調達を終えた。次年度においては、これを組み込んだ TCA 部 HA-PACS システムの完成に向けて、調達作業を進めている。アプリケーションについても、昨年度設置した先端計算科学推進室で開発を進めている。

(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, FIRST に、10 月からは HA-PACS を加え、これらのシステム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、48 課題のプロジェクトを採択、実施した。38 件の旅費支援、1 件の集会支援を行った。本年度は、センタ設置 20 周年記念シンポとして、第 3 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 HCPI 戦略プログラム（分野 5）を推進した。HPCI コンソーシアムに参加し、本センターから宇川副学長が、理事長として組織運営にあたっている。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、引き続き、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の整備を行った。さらに、この 7 月からは、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」のプロジェクトに採択され、これからの我が国のスパコンについての検討を進めている。

(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。各部門の達成状況は次のとおりである。

素粒子物理研究部門：京コンピュータでのゲージ配位生成のためのアルゴリズムの改良が完了し、24 年 10 月からはゲージ配位生成が本格的に始まった。バリオン間相互作用に関しては、計算方法の改良が完成し、それを使った研究が進められた。また、京コンピュータへのコード移植や京でのコードのチューニングなどを作業がほぼ終了した。有限密度での格子 QCD では、ヒストグラム法に基づく reweighting 法により、クォーク質量が重い領域での相構造の解析が完了した。

宇宙・原子核物理研究部門：宇宙における初代天体、銀河、巨大ブラックホールの形成史を、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。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た。

量子物性研究部門：第一原理量子論等によるナノ構造体のもつ特徴的物性の解明を行うと同時に産業界にも貢献する知見の獲得を目指して研究を行った。その結果、グラフェン、光物性等の基礎物理学分野において大きな知見が得られた。また、つくばナノテクアリーナと連携して産業界に貢献する知見をえることにも成功した。中でも、パワーエレクトロ

ニクス分野においては、つくばパワーエレクトロニクスコンステレーション (TPEC) に参画している産業界に大きく貢献する計算科学的知見を得ることに成功し、次世代パワーデバイスの設計指針の獲得に成功した。

生命科学研究部門: 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。特に、生命分野、宇宙分野と連携して宇宙生物学分野においてはパイオニアとなる「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。

地球環境研究部門: 2008 年 6 月に北極海上で発生した北極低気圧に対し、水平解像度 14km (gl-9) の NICAM を用いた再現実験を行い、北極低気圧の発達と維持に関する詳細な分析結果を査読付き国際会議に発表した。北極海の海氷の減少に伴い、北極温暖化増幅をもたらす温度場の第 2EOF モードが正のトレンドを示す一方で、第 1EOF モードとしての北極振動が負のトレンドを示すことを明らかにし、国際誌に掲載するとともに、第 3 回国際北極研究シンポジウム(ISAR-3)で発表した。都市気象 LES 用の街路樹モデルを開発し、街路樹の中心断面の温度分布の再現実験を行った。領域気象モデル WRF-UCM による力学的ダウンスケーリングを行い、IPCC SRES A2 シナリオ下での三大都市圏の夏季気候の将来予測を実施した。

高性能計算システム研究部門: 並列言語 XMP の演算加速装置向け拡張を HA-PACS 上で評価すると共に、GPU と CPU の全リソースを並列プログラム内で無駄なく利用する機構を組み込み、プロトタイプコンパイラを実装・評価した。密結合演算加速機構はハードウェアの基本開発を終え、予備性能評価により従来方法に比べ通信遅延を大幅に低減することを確認し、研究最終年度に向けたハードウェアの量産を終えた。またセンター内計算科学研究グループとの共同により、宇宙物理学ツリーコード、気象コード等の HA-PACS への移植と高速化を進めた。Gfarm に関しては HPCI 実運用を支援し、性能ボトルネックを検出・改善し、全国規模の運用を推進した。並列数値アルゴリズムについては、FFT コードの改善により「京」コンピュータにおける HPC Challenge で再度世界第一位にランクされた。また、クリロフ部分空間法の改善により QCD を始めとするアプリケーションへの適用と高速化を進めた。

計算情報学研究部門：データ基盤分野では、ストリームを中心にした情報統合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、GEOGid データの利活用や X 線天文データ検索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、複合現実感型インタフェースを通じた人介在型の高精度データ解析法、多種センサによる人物の表情データベース収集システム、3 次元的な情報や指示を共有できるインタフェース、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】

3 月 7～8 日にローレンスバークレイ研究所とのワークショップを先方で行い、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 を締結される見込みとなった。エジンバラ大学とは、筑波でミーティングを行う予定であったが、先方の状況から調整がつかず、4 月以降になる見込みである。また、韓国 KISTI との連携に関しては、先方の組織改編のために調整中である。なお、計算機システムを国際共同研究のために海外からの利用に関しては整備を行い、手続きを運用している。当該年度は、海外からの利用件数は 7 件であった。

【教育】

計算科学デュアルディグリー・プログラムに関しては、残念ながら、プログラムの学生の数は増やすことはできなかったが、今年度から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 名入ることになった。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。今年度は、2 人のインターンシップを支援した。グローバル 30 の計算科学英語コースに加えて、今年度から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開始され、英語による計算科学の教育の充実を図った。

〔改善目標の達成状況〕

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。そのための組織を「最先端共同 HPC 基盤施設」として、そのための東大との協定書および覚書を準備し、協定の締結を行った。次年度からは、当該施設の組織整備を行い、システムの設計、調達準備など、具体的な運営を進めていく。また、次期システム設計・研究開発の準備として、平成 24 年度補正予算によりパイロットシステムを整備する他、情報環境機構との協議の上、「筑

波大学におけるスーパーコンピュータシステムの整備についてのガイドライン」に基づき、次期システムが設置されるまでの間の予算により、平成 26 年度にパイロットシステムの増強を図り、「最先端共同 HPC 基盤施設」に設置される次期スパコンと本センター設置のシステムの運用体制を検討していく。なお、現状の T2K システムについては、当初スケジュールを見直し、平成 26 年 2 月までの運用とし、次年度ではファイルシステム等を調達し、移行の準備を行う。

〔その他特色ある取組の実施状況〕

(1) 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) 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。

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」では最終的な目標とする「密結合並列演算加速機構アーキテクチャ」を持つシステムの構築に向けて着実に進捗しており、共同利用・共同研究拠点の核となる、学際共同利用プログラムについても、着実に運営されている。センターの次期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「最先端共同 HPC 基盤施設」を設置し、柏キャンパスに共同して次期スパコンを設置、運用する計画である。そのための協定について締結され、来年度から計画をスタートすることとなった。本システムは 2015 年に運用になる計画で、稼働すれば我が国有数のスパコンシステムになる見込みである。

全国的観点からは、現在、本センターでは HPCI 戦略プログラム（分野 5、計算基礎科学）を戦略機関として推進しており、HPCI コンソーシアムの運営、ファイルシステムを中心として HPCI システムの構築にも大きく貢献している。今年度から、「将来の HPCI システムのあり方に関する調査研究」のプロジェクトを開始しており、これからの我が国のスパコン開発に貢献していく。さらに、計算科学デュアルディグリー・プログラムや計算科学の英語プログラムなどの人材育成、国際連携を進めていきたい。

(2) 課題

① 生命科学やナノ科学の分野の研究体制の整備

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。

② 事務支援体制の充実

センターの充実、T2k-tasukuba システムに加えて、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。

③ 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。