



筑波大学
University of Tsukuba

筑波大学 計算科学研究センター 2014



概要

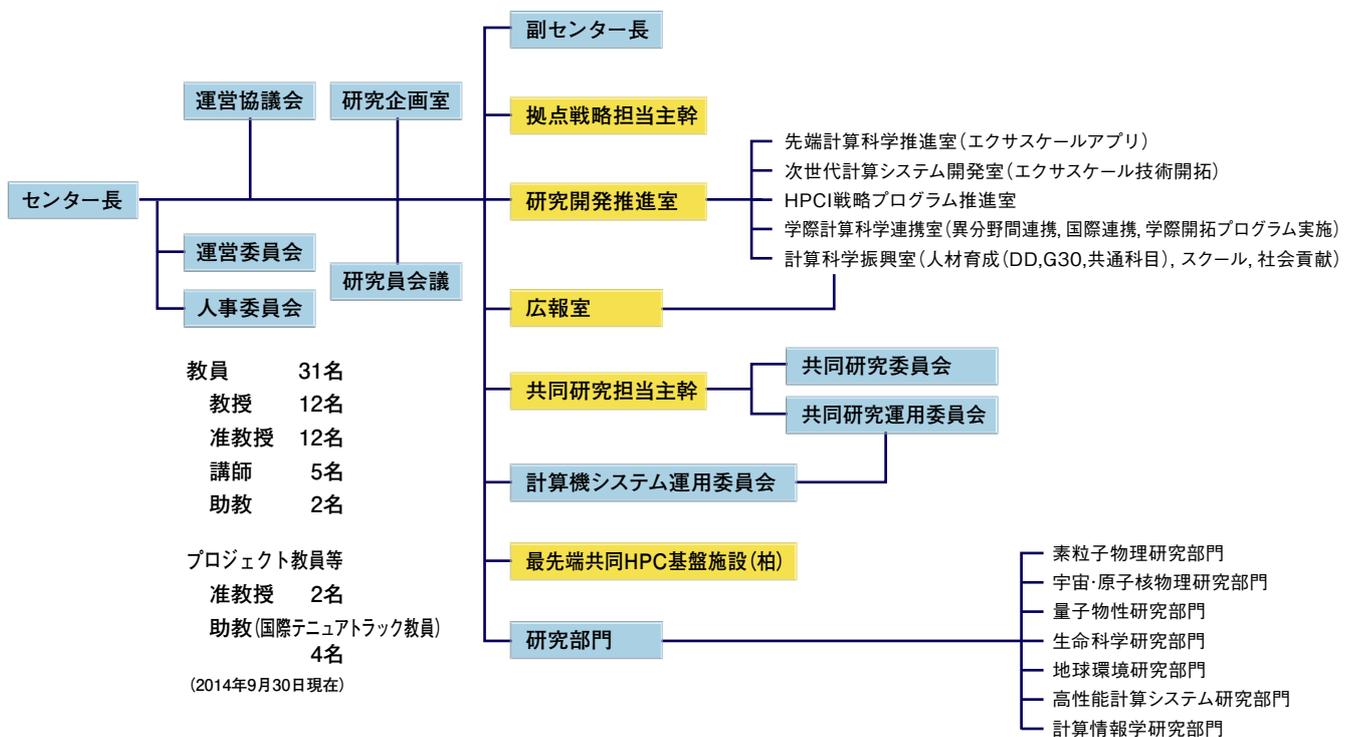
筑波大学計算科学研究センターは、科学諸分野と計算機科学分野の協働・融合を軸とした「学際計算科学」を推進し、超高速計算機システムおよび超高速ネットワーク技術の開発を行うことによって、科学の諸領域における超高速シミュレーションおよび大規模データ解析や情報技術の革新的な応用方法の研究を行っています。扱う科学の領域は、素粒子物理、宇宙物理、原子核物理、ナノサイエンス、生命科学、地球環境科学など多岐にわたります。

本センターは、1992年(平成4年)度に設置された計算物理学研究センターを前身とし、2004年(平成16年)4月に設置されました。上記の研究開発を行う機関であると同時に、これらの研究に従事する外部の研究者の利用に供する全国共同利用施設としての機能も持っています。2010年(平成22年)には、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」に認定されました。

本センターは、学際共同利用プログラムの下で全国にセンター計算機資源を提供するとともに、「研究集会開催支援」、「研究者招聘支援」、「共同研究旅費支援」、「短期雇用支援」など、共同研究に向けて研究者や学生の交流を図るための支援を行っています。

また、HPCI戦略プログラムの1つ「物質と宇宙の起源と構造」の拠点に採択され、スーパーコンピュータ「京」を用いた計算科学の推進を行うとともに、エクサスケールのスパコン開発に向けた調査研究も行っています。

計算科学研究センター組織



センター長挨拶



筑波大学計算科学研究センター長
梅村 雅之

計算機によって科学を探究する“計算科学”は、基礎から応用分野に至るまで欠くべからざる科学の探究手法となっています。これにより、多くの分野で科学の発展に寄与しています。

本センターは、科学諸分野が単に計算機を利用するのではなく、計算機科学との協働・融合により、科学の探究に最適な計算機の開発・製作を行ってきたことに特色があります。これは、世界的に見ても非常にユニークな研究活動です。

これまで、計算科学の手法によって、多くの科学分野で、実験・観測や解析の研究と相補的な重要成果を上げてきました。さらに、第一原理に根差した計算科学の手法は、異分野間連携を実質的なものにする新たな可能性を示してきました。

本センターは、今後も科学諸分野と計算機科学との協働による「学際計算科学」を推進し、国際連携の強化の下、学際計算科学のハブ拠点を形成したいと考えています。

計算科学研究センターのビジョン「学際計算科学」

計算科学は、超高速計算機と高速ネットワークを中心的な研究手段とします。その発展には、計算機を活用する科学諸領域の研究者と、ハードウェアからソフトウェア、アルゴリズム、プログラミングの研究を行う計算機科学、データやメディア処理の研究を行う情報科学の研究者、これらが協働して研究を行うことが鍵となります。このような科学諸分野と計算科学の協働と融合を行うのが「学際計算科学」です。

本センターは設置以前から、基礎科学分野において長年にわたりこのような共同研究体制を構築し、その中から活動を開始した経緯があります。この体制を最大限に活用し、素粒子・宇宙・原子核などの基礎科学に加えて、物質・生命・地球環境などにおける計算科学の研究の発展を目指しています。

これまで、物理学者と計算機科学者の協力により、1996年に超並列計算機「CP-PACS」を開発・製作し、同年10月にスーパーコンピュータ・TOP500の世界第1位となりました。これを用いて素粒子・宇宙分野で世界最先端の研究成果を上げてきました。2006年度から国立大学法人運営費交付金特別研究経費の交付を受けて、高性能超並列クラスター「PACS-CS」を開発・運用しました。さらに2007年には、科研費(特別推進研究)に基づく学際的な研究協力により、融合型並列計算機「宇宙シミュレータFIRST」を開発しました。2011年には、特別研究経費の交付により、超並列演算加速器クラスター「HA-PACS」プロジェクトを開始しました。

「学際計算科学」のアプローチは、国策による次世代のエクサスケール・スパコン開発に向けた「将来のHPCIシステムのあり方の調査研究」に基づいて行っている「演算加速機構を持つ将来のHPCIシステムに関する調査研究」にも活かされています。

グローバルな研究協力体制

計算科学の研究における国際的な協力は学際的な計算科学を促進、加速させるために重要な活動です。

筑波大学と英国エジンバラ大学および米国ローレンス・バークレー国立研究所との間では、連携協定を締結し計算科学の研究交流を深めています。また、米国のバンダービルト大学、ワシントン大学とも日本学術振興会二国間交流事業により計算物質科学の共同研究を進めています。

ILDG(International Lattice Data Grid)では、格子QCD(量子色力学)の配位データを全世界レベルで共有するためのデータグリッドを開発する国際プロジェクトを推進しています。米国、英国、ドイツ、オーストラリアおよび日本ではすでに地域ごとのグリッドも構築されており、ILDGの日本のグリッドがJLDG(Japan Lattice Data Grid)です。JLDGについては、国立情報学研究所が進めている「サイバーサイエンス基盤プロジェクト(CSI)」の支援を受けて研究開発が行われました。

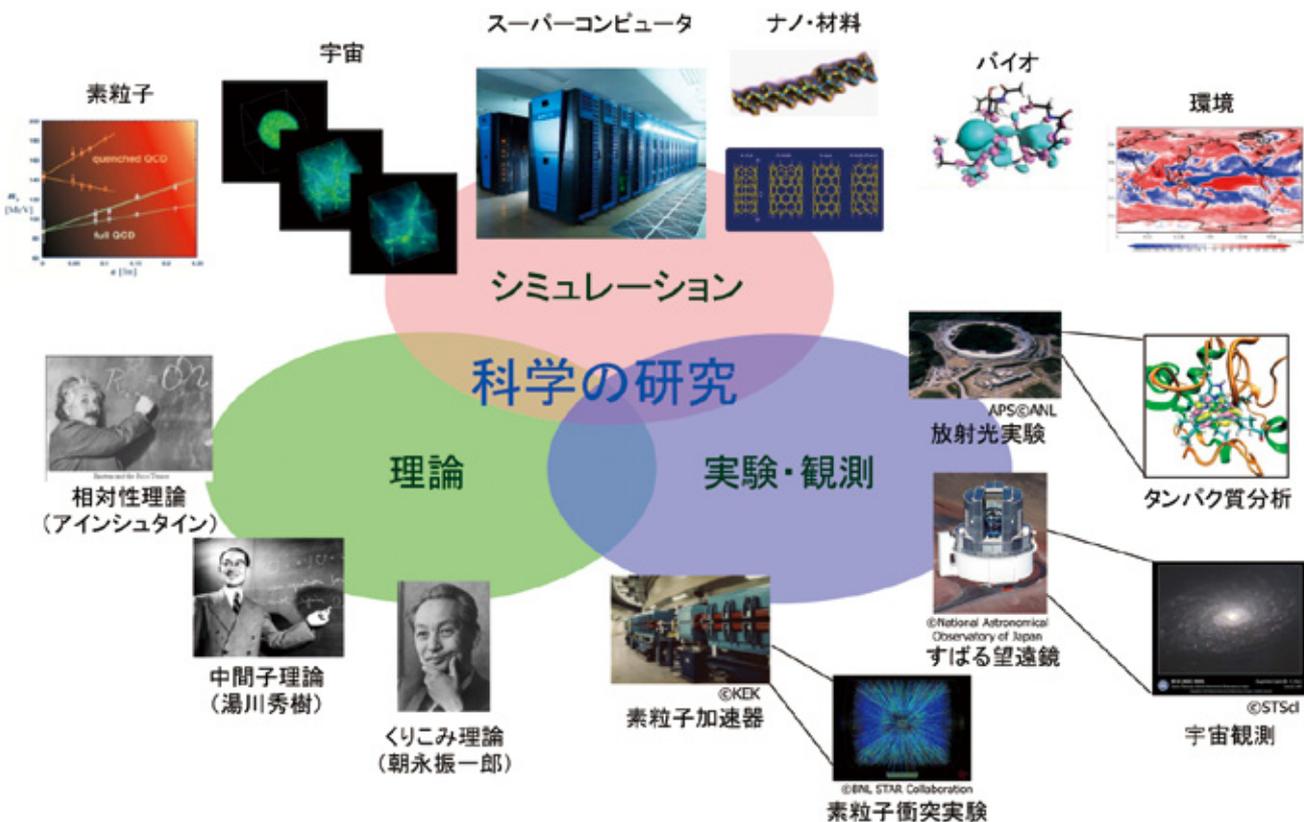
国内の研究協力に関しては、東京大学と京都大学との間でT2Kアライアンスとして研究協力を進めています。2013年には、東京大学との協定を締結し、全国で初めての大学間共同計算機開発施設として「最先端共同HPC基盤施設」を設置しました。これにより、これまでにない大規模な計算機基盤の構築が可能になります。また、つくば市には本学の他に多くの国の研究機関があります。この特徴を生かして、高エネルギー加速器研究機構(KEK)、産業技術総合研究所(AIST)、物質材料研究機構(NIMS)、気象研究所(MRI)、国立環境研究所(NIES)などの主要研究機関と、密接な研究協力関係を結んでいます。

計算科学研究センター年譜

1992年	4月	新プログラム研究「専用並列計算機による「場の物理」の研究」(CP-PACSプロジェクト)開始(5カ年計画)、計算物理学研究センター設置(10年計画)。
1993年	8月	計算機棟竣工。
1995年	3月	研究棟(第1期)竣工
1996年	9月	CP-PACS(2048PU)完成、設置。
	11月	CP-PACSが世界のスーパーコンピュータTOP500で第1位認定。
1997年	4月	未来開拓研究「次世代超並列計算機の開発」開始(5カ年計画)。
2002年	4月	計算物理学研究センターを組織拡充し、新たな10年時限の活動を開始。
2004年	4月	計算物理学研究センターを改組拡充し、計算科学研究センターを設置。
2005年	4月	高性能超並列クラスター「PACS-CS」プロジェクト開始(3カ年計画)。
2007年	3月	研究棟(第2期)竣工
	4月	宇宙シミュレータFIRST完成。
2008年	6月	T2K-Tsukubaオープンスーパーコンピュータ運用開始。
2010年	4月	共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」の認定を受ける。計算科学研究センターの5研究部門を7研究部門に改組拡充。
2011年	4月	超並列演算加速器クラスター「HA-PACS」プロジェクト開始(2カ年計画)。
2012年	2月	「HA-PACS」運用開始。
2013年	3月	東京大学との協定に基づき「最先端共同HPC基盤施設」を設置。
2014年	4月	COMA(PACS-IX)運用開始

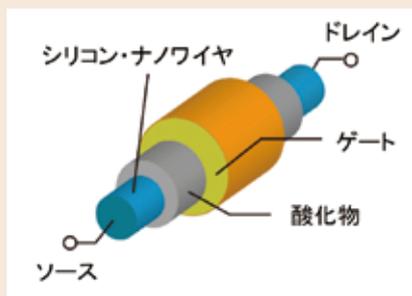
最先端の研究

これまでの科学は、理論と実験によって発展してきました。しかし、実験が難しい現象や、原理的なことはわかっているが「紙と鉛筆」だけでは理論計算できない場合がたくさんあります。このような難しい問題を、コンピュータを使って解明する方法が計算科学です。超高速計算機(スーパーコンピュータ)や超高速インターネットを用い、大規模シミュレーションや大量のデータ解析によって研究を行う計算科学は、科学の全分野で、実験・観測、理論と並ぶ、重要・最先端の研究手段となっています。

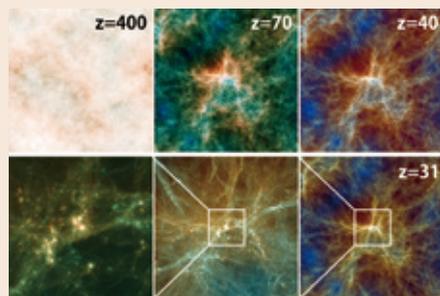


◆2年連続でゴードン・ベル賞を受賞

ゴードン・ベル賞は、並列計算の科学技術への応用で最も優れた成果を挙げた論文に与えられる、権威ある賞です。筑波大学計算科学研究センターが、スーパーコンピュータ「京」を用いて行った共同研究が評価され、2年連続でゴードン・ベル賞を受賞しました。



©2011年ゴードン・ベル賞 最高性能賞(筑波大・東大・理研)
現実の材料のサイズに近い10万原子規模のナノワイヤの電子状態について、量子力学的計算を実施した。



©2012年ゴードン・ベル賞(筑波大・理研・東工大)
世界最大規模のダークマターシミュレーション。約2兆個のダークマター粒子の宇宙初期における重力進化の計算を「京」を用いて行った。

HA-PACS

HA-PACSベースクラスタシステムはCPUとGPUの両方に最新の技術を用いた大規模並列GPUクラスタで、わずか268ノードで802 Tflopsの理論ピーク性能を実現しています。同システムは2012年6月のTop 500リストにおいて41位にランクされました。各計算ノードとしてはIntel E5-2680 CPUを2台とNVIDIA社Tesla M2090 GPUを4台、高密度搭載したAppro International社(現Cray社)のGreenBlade 8200シリーズを用いています。全ての計算ノードは2系統のInfiniBand QDRx4リンクを持ち、full-bisectionバンド幅を持つFat-Treeにより接続されています。

2013年11月、HA-PACSベースクラスタを拡張する形でHA-PACS/TCAが稼働開始しました。TCA (Tightly Coupled Accelerators)は、GPU等の演算加速装置を計算ノードを跨いで直接結合する、本センターが独自に提唱するアーキテクチャで、FPGA実装によって実現したPEACH2 (PCI Express Adaptive Communication Hub ver.2)で実装されています。各計算ノードにはIntel E5-2680v2 CPUを2台とNVIDIA社K20X GPUを4台の他、PEACH2によるTCA通信ボードが装着され、最小2.1 μ 秒での超低レイテンシ遠隔GPU間通信が可能です。HA-PACS/TCAは364 Tflopsの理論ピーク性能を持ち、Linpack電力性能値 3518 Mflops/Wを実現、2013年11月のGreen500 リストにおいて世界第3位にランクされました。また、ベースクラスタ部とInfiniBandネットワークで結合され、HA-PACS全体では1.166 Pflopsのピーク性能を実現し、本センターとして初めてのPflops級スーパーコンピュータとなりました。



HA-PACS

COMA (PACS-IX)

COMA (Cluster Of Many-core Architecture processor) は、本センターで研究開発が続けられてきたPACSシリーズの第9世代のスーパーコンピュータで、2014年4月より稼働を開始しました。従来のマルチコアCPUのコア数を大幅に増強し、次世代の高性能プロセッサとして注目されているメニーコア型プロセッサIntel Xeon Phiを演算加速装置として搭載した、HA-PACSに次ぐ演算加速装置付き超並列クラスタで、全計算ノード数は393台、理論ピーク演算性能は1.001Pflopsです。同システムは2014年6月のTop 500リストにおいて51位にランクされ、Intel Xeon Phiプロセッサを搭載したスーパーコンピュータとして日本最高性能のシステムとなりました。各計算ノードはIntel E5-2680v2 CPUを2台と、Intel Xeon Phi 7110Pコプロセッサを2台搭載し、InfiniBand FDRネットワークによるfull-bisectionバンド幅のFat Tree構成で全ノードが結合され、ここにRAID6ディスク装置によるLustreファイルシステム1.5 PByteが備えられています。システム全体はCray社のCS300クラスタシステムによって実装されています。

本センター及び東京大学情報基盤センターが共同運用する最先端共同HPC基盤施設では、メニーコアプロセッサ技術に基づく超並列スーパーコンピュータの導入・運用を開始する計画で、COMAにおけるメニーコアプロセッサ利用技術と経験を活かし、同システム上で超高性能計算科学アプリケーションの開発を進める予定です。



COMA

計算資源の提供

本センターは、さまざまな科学分野の研究者が単に計算機を利用するのではなく、計算科学と計算機科学の研究者の協働により、科学の探究に最適な計算機を開発し研究を進展させてきました。さらに全国的な計算科学の発展に寄与するべく、平成14年度より、開発した計算機を共同利用に供してきました。これを発展させ、平成19年度より、計算機科学との連携を強化した「学際共同利用プログラム」を推進しています。平成22年には、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」として認定され、この下で学際共同利用を行っています。また、学際計算科学推進のための共同研究支援として、「研究集会開催支援」「研究者招聘支援」「共同研究旅費支援」「短期雇用支援」を行っています。

学際共同利用プログラムは、①学際開拓プログラム、②重点課題推進プログラム、③学際共同研究推進プログラムの3つからなります。学際開拓プログラムは、異分野間連携に重点をおいた研究の推進を奨励するものです。重点課題推進プログラムは、大規模計算によって探究すべき計算科学の重点課題を推進するものです。学際共同研究推進プログラムは、本センターの研究者と共同で、自然科学や工学などにおける計算科学的手法の開発や先端研究を推進するものです。

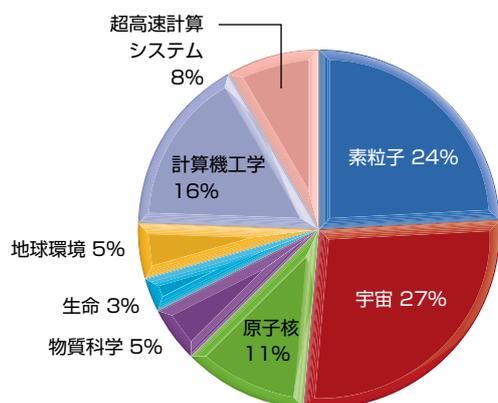
科学分野としては、素粒子、宇宙、原子核、物質科学、生命科学、地球環境、生物の諸分野、そして計算機工学分野として、超高速計算システム、計算情報学、数値解析の諸分野の研究課題を募集し、研究を推進してきました。学際共同利用プログラムにおいて無償で利用できる計算機資源として、平成19～23年度にはPACS-CS、平成21～23年度にはFIRST、平成20～25年度にはT2K-Tsukuba、平成25年度からはHA-PACSが供されています。平成26年度からは、COMA (PACS-1X)の汎用CPU部のおよそ3割を共同利用に供します。

表には、最近7年間の学際共同利用プログラムの採択件数を示しています。毎年30～60件の課題が審査によって採択されています。グラフに、平成25年度における課題の分野別の内訳を示しています。自然科学と工学の幅広い分野で、様々な課題が研究されていることが分かります。

学際共同利用プログラムの採択件数

年度	件数	計算機システム
平成19年度	13件(前期のみ)	PACS-CS
平成20年度	36件(前後期計)	PACS-CS, T2K-Tsukuba
平成21年度	53件(前後期計)	PACS-CS, T2K-Tsukuba, FIRST
平成22年度	24件(通年)	PACS-CS, T2K-Tsukuba, FIRST
平成23年度	31件(通年)	PACS-CS, T2K-Tsukuba, FIRST
平成24年度	48件(通年)	T2K-Tsukuba, HA-PACS
平成25年度	59件(通年)	T2K-Tsukuba, HA-PACS
平成26年度	41件(通年)	HA-PACS, COMA

平成25年度分野別内訳



これまでのセンターシンポジウム一覧

(学際共同利用成果報告会を含む)

- ◆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 —
平成26年10月21～22日 筑波大学大会館国際会議室(予定)
- ◆第5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
— 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 —
平成25年11月5～6日 筑波大学大会館国際会議室
- ◆第4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
平成24年度 学際共同利用成果報告会
平成24年10月25日 筑波大学計算科学研究センターワークショップ室
- ◆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
筑波大学計算科学研究センター設立20周年記念シンポジウム
— エクサスケールへの学際計算科学の展開 —
平成24年9月7日 つくば国際会議場(エポカルつくば)中ホール
- ◆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 —
平成23年9月12～13日 筑波大学大会館国際会議室、計算科学研究センターワークショップ室
- ◆第1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
— ポストベタスケールコンピューティングへの学際計算科学の展開 —
(「先端学際計算科学共同研究拠点」キックオフ・シンポジウム)
平成22年5月6～7日 筑波大学大会館国際会議室
- ◆第3回「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システムと計算科学 —
平成19年9月3～4日 筑波大学計算科学研究センターワークショップ室
- ◆第2回「計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム
計算科学の戦略と次世代スーパーコンピュータ
平成18年4月4～5日 つくば国際会議場(エポカルつくば)
- ◆第1回「計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム
— 筑波大学計算科学研究センター発足シンポジウム —
平成16年6月10～11日 筑波大学大会館国際会議室

概要

筑波大学計算科学研究センターは、東京大学情報基盤センターとともに次期スーパーコンピュータシステムを設計し共同運営・管理するために「最先端共同HPC基盤施設(JCAHPC: Joint Center for Advanced High Performance Computing)」を設置しました。最先端共同HPC基盤施設は、東京大学柏キャンパスの東京大学情報基盤センター内に両機関の教職員が中心となり設計するスーパーコンピュータシステムを設置し、最先端の大規模高性能計算基盤を構築・運営するための組織です。本施設を連携・協力して運営することにより、最先端の計算科学を推進し、我が国の学術および科学技術の振興に寄与していきます。

背景・経緯

21世紀において世界の科学・技術をリードする立場を維持するには、世界最高水準のHPC基盤による計算科学の推進が重要です。理化学研究所計算科学研究機構で稼働しているスーパーコンピュータ「京」が世界最高速を達成し、平成24年から共用が開始されていますが、今後も世界最高水準を維持するには、HPC基盤を提供している情報基盤センター群やスパコンを所有する附置研究所が協力して体制を構築すべきであると考えます。

これを踏まえて両センターは「最先端共同HPC基盤施設」を設置し、次期スーパーコンピュータの共同設計開発と共同運転・運営を行い、諸分野の研究に供して、最先端の計算科学を推進することとしました。

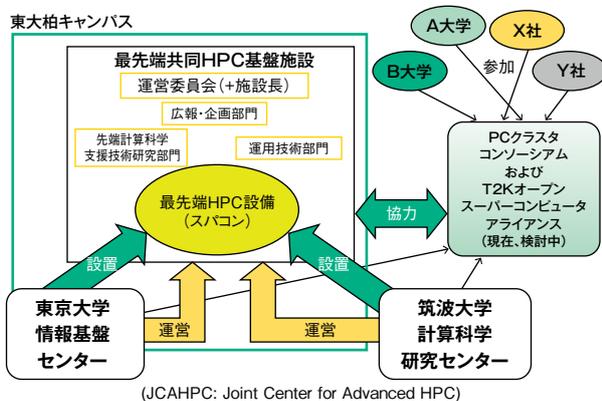
ミッション

最先端共同HPC基盤施設では、我が国の計算科学の拠点を担うに足る大規模HPCシステムの設計・開発を行います。これからのHPCシステムの中心的なテクノロジーであるメモリーコアを利用し、最先端のシステムを構築します。さらに、システムソフトウェアの核となる技術である、OS、プログラミング言語、数値計算ライブラリなどを、他の組織とも連携しながら研究開発していきます。この設計・開発をもとにスーパーコンピュータを共同で調達し、運営・運転を行います。

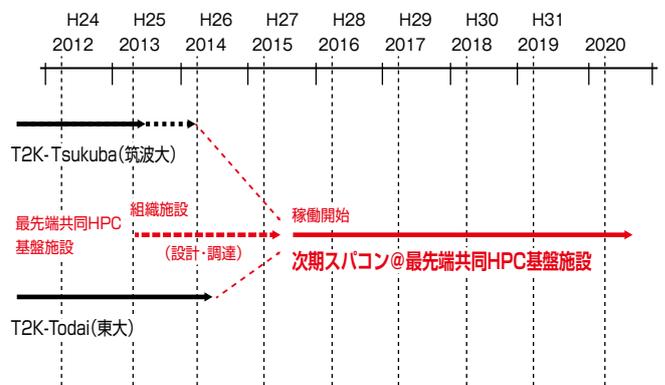
本システムは、2015年4月以降に設置、運営・管理する予定です。

システム稼働後、両センターは計算利用量によってシステムを案分してセンターごとに運用し、それぞれの利用プログラムによって各ユーザーに対するサービスを提供します。これにより、管理等のコストが削減されるだけでなく、各センターが単独でスーパーコンピュータシステムを保有する場合に比べて大規模な計算が可能となります。このような施設を作り、スーパーコンピュータを共同運営・管理するのは国内初の試みです。

最先端共同HPC基盤施設の組織図



計画



素粒子物理分野

研究部門主任：藏増嘉伸 教授 メンバー：吉江友照 准教授／石塚成人 准教授／根村英克 准教授／谷口裕介 講師／大野浩史 助教／青木慎也 客員教授(計算基礎科学連携拠点長)

■ 分野の説明

自然界には、「重力」「電磁気力」「弱い力」「強い力」と呼ばれる4つの基本的な力が存在します。このうち、強い力は恒星を輝かせている源であり、私たちの体を形作っている様々な分子の中の原子核を構成している力でもあります。強い力は物質の最小構成粒子(素粒子)であるクォークに作用し、非摂動効果により「閉じ込め」と呼ばれる特徴的な現象を引き起こします。実験で観測されるものはハドロンと呼ばれる複数のクォークによる束縛状態だけであり、クォーク単体が観測されることはありません。そのため、強い力の研究をするには何らかの非摂動的手法が必要となります。格子QCDの目的は、空間3次元と時間1次元からなる4次元時空間を離散化した格子に量子色力学(QCD)と呼ばれる理論を定義し、スーパーコンピュータを用いた第一原理計算によって、強い力の織り成す 10^{-15} mの世界を定量的に研究することにあります。

■ 研究トピック

- ・ハドロン質量スペクトラムの精密計算
- ・QCDの基本パラメータ(結合定数およびクォーク質量)の精密決定
- ・不安定ハドロン崩壊の研究
- ・クォークを自由度とした原子核の構成
- ・QCDに基づくバリオン間有効相互作用の解明
- ・超高温状態(宇宙初期)や高密度状態(中性子星内部)を含めたQCDの相構造の解明

■ 現在までの成果

近年のアルゴリズム改良および計算機性能の向上により、長年の目標であった物理点計算(自然界のクォーク質量そのものを用いた計算)が可能となってきており、これによって格子QCD計算は、誤差10%レベルの段階から誤差1%レベルの精密計算の時代を迎えつつあります。最新の研究では、格子QCDによるハドロン質量の計算結果はほぼ実験値を再現できています(図1)。さらに、自然界よりも重いクォーク質量ながら、クォークを自由度としてヘリウム原子核と重陽子を構成することにより、それらの束縛エネルギー計算にも成功しています。また、異なるアプローチとして、格子QCDを用いてバリオン間ポテンシャルを計算し、バリオンを自由度とした場合の有効相互作用を決定する試みも行われています(図2)。

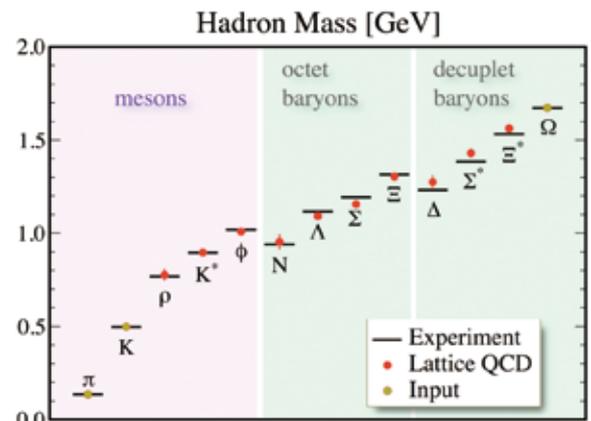


図1 格子QCD計算によるハドロン質量と実験値の比較

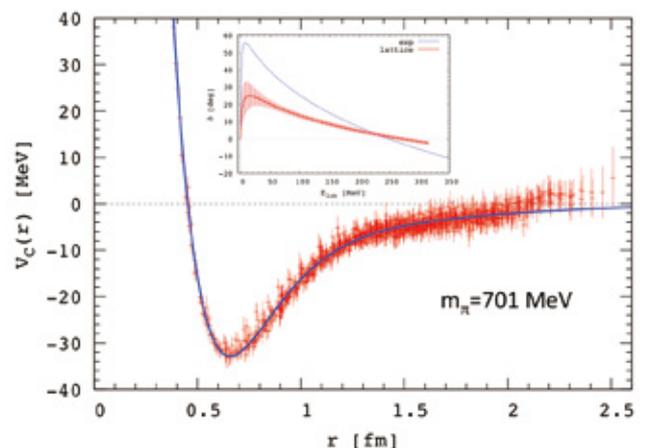


図2 核子間ポテンシャルとそれをもとに得られる散乱位相シフト



<研究部門主任> 藏増 嘉伸

筑波大学数理解物質系／計算科学研究センター教授

1995年東京大学大学院理学系研究科物理学専攻修了。博士(理学)。高エネルギー加速器研究機構素粒子原子核研究所助手、筑波大学計算科学研究センター講師・准教授を経て現職。理化学研究所計算科学研究機構 連続系場の理論研究チーム チームリーダーを兼任。

宇宙物理分野

研究部門主任：梅村雅之 教授（センター長） メンバー：森 正夫 准教授／吉川耕司 講師／Wagner Alexander Takeshi 助教／中里直人 客員准教授

■分野の説明

宇宙は、今から約137億年前に“ビッグバン”によって誕生したと考えられています。その後、宇宙は膨張を続け、灼熱の状態から徐々に温度と密度が下がってきました。宇宙に初めて水素原子が誕生したのはビッグバンから約38万年後(宇宙の晴れ上がり)です。その頃の宇宙の温度は約3000Kで、星や銀河はなく、10万分の1ほどのわずかな密度の濃淡があっただけであることがわかっています。

一方、最近になって、ビッグバンから1億年経った頃の宇宙に、生まれだての銀河がたくさん見つかってきました。これは、宇宙誕生後38万年から1億年の間に、宇宙が銀河形成という大きな変化を遂げたことを物語っています。しかしながら、どのように銀河が誕生したのかは謎に包まれています。

その後、宇宙はさらに膨張と進化を続け、大規模な構造を作っていきます。このような銀河の形成と宇宙の進化は、宇宙に普遍的に存在すると考えられているダークマター(暗黒物質)が鍵を握っていると考えられています。

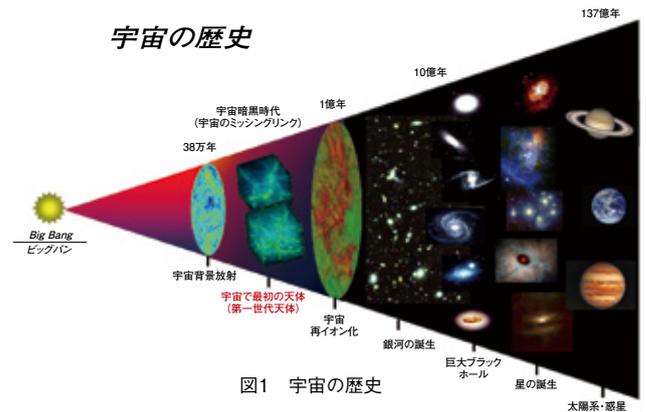


図1 宇宙の歴史

■研究トピック

宇宙物理分野では、宇宙最初の星や銀河の誕生、それらが放つ光の特性、銀河や銀河団の形成進化、ブラックホールの形成進化と銀河中心核活動、そして星・惑星系形成などについて、基礎物理学から理解することを目指しています。研究の特色は、輻射輸送方程式や相対論的輻射流体力学方程式を扱うことにより、物質と光の相互作用を忠実に採り入れていることと、多成分多体からなる天体の形成進化において互いの重力の相互作用を忠実に採り入れていることです。研究手法としては、解析的研究やコンピュータでの演算をはじめとして、計算科学研究センターのスーパーコンピュータを利用した大規模数値シミュレーションを用いています。

■現在までの成果

図2は、宇宙最初に誕生した星の輝きが周辺環境に及ぼす影響を、世界初の高精度3次元輻射流体シミュレーションによって描き出したものです。この研究により、星から発せられる強い紫外光によって周辺のガスの物理状態が変化していく様子が詳細にわかり、新たな星の誕生にどのように影響するかが明らかになりました。

図3は、今から約10億年前にアンドロメダ銀河で起こった銀河衝突のシミュレーションです。アンドロメダ銀河の約1/400の質量しかない小さな銀河が、アンドロメダ銀河の強い重力に捕まり、無残にもバラバラに引き裂かれる様子がスーパーコンピュータによるシミュレーションで明らかになりました。この小さな銀河の残骸は、約40万光年にも渡って夜空を流れる“アンドロメダの涙”を作り上げ、幾重にも重なる貝殻状の星の群れを生み出すことが示されました。

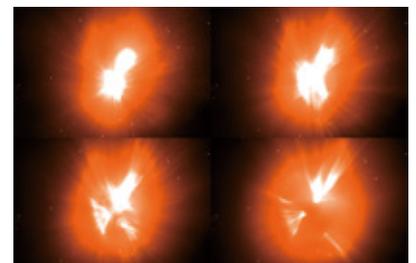


図2 宇宙初期に誕生した星が周辺環境に及ぼす影響

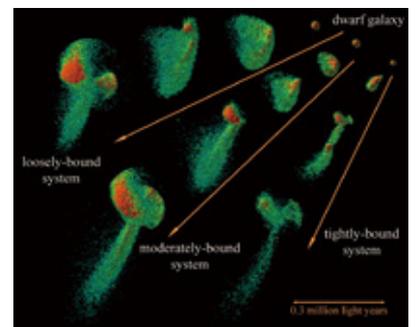


図3 アンドロメダ銀河で起こった銀河衝突のシミュレーション



<研究部門主任> 梅村 雅之

筑波大学数理物質系教授／計算科学研究センター・センター長

理学博士。1987年北海道大学大学院博士課程修了。1989年国立天文台助手。1993年筑波大学計算物理学研究センター助教授。2002年同教授。2004年から計算科学研究センター教授。専門は、理論宇宙物理学。特に宇宙輻射流体力学による宇宙第一世代天体形成、銀河形成の研究に従事。

原子核物理分野

分野リーダー：中務 孝 教授 メンバー：矢花一浩 教授／寺崎 順 准教授／橋本幸男 講師／日野原伸生 助教

■分野の説明

ミクロな世界では、物質は波の性質を示します。原子核分野では、物質の波動性を基本にした量子力学に基づくシミュレーション法を開発し、ミクロな物質の量子ダイナミクスを明らかにする研究を展開しています。

■研究トピック1

陽子と中性子からなる有限量子多体系である原子核の構造を核図表の全領域にわたって調べる理論として、核物質のエネルギー密度を出発点にする密度汎関数理論が発展してきました。これをさらに、応答や反応などのダイナミクスへと応用するのが「時間依存密度汎関数理論」です。私たちのグループでは、この理論に基づき、原子核の光応答の系統的計算を進めています。これは核物質の性質を理解するとともに、超新星爆発の中で合成される重い原子核の生成過程を理解する上でも重要な情報をもたらします。また多くの原子核は、基底状態で陽子と中性子それぞれが超流動状態にあり、原子核の回転運動や応答に顕著な影響を及ぼすことが知られています。この超流動性を考慮した時間依存密度汎関数計算の遂行は、次の重要な課題となっています。

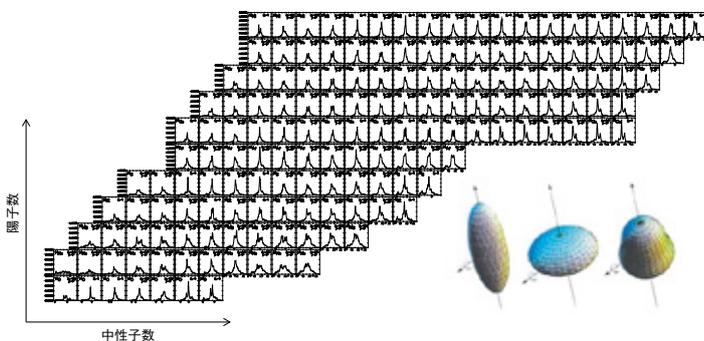


図1 原子核の光応答の系統的計算

■研究トピック2

原子核を構成する陽子と中性子は、フェルミ粒子と呼ばれる性質を持つ粒子です。原子や分子、固体などの物質は電子と原子核からなる量子多体系ですが、実は電子もフェルミ粒子であるために、物質内の電子ダイナミクスを記述するのに原子核の場合と同じく時間依存密度汎関数理論が有効です。私たちのグループでは、原子核分野で発展してきた時間依存密度汎関数理論に基づくシミュレーション法を物質科学に応用する研究を進めています。最近では、強いパルスレーザーと物質の相互作用で見られる非線形電子ダイナミクスが引き起こす様々な現象を、物質科学の第一原理計算手法と結び付けて明らかにする研究を進めています。これまでコヒーレントフォノンの生成過程や、誘電体の光絶縁破壊のメカニズム解明などで成果を挙げています。

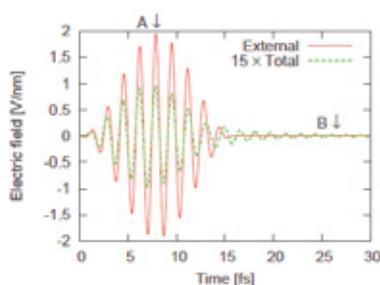


図2 リアルタイム電子ダイナミクス・シミュレーション



<分野リーダー> 中務 孝

筑波大学数理物質系/計算科学研究センター教授、理学博士。

1994年京都大学大学院博士課程修了。2001年東北大学大学院理学研究科助手。2007年理化学研究所准主任研究員等を経て、2014年から現職。専門は、理論核物理学。特に核子多体系としての原子核構造・反応の研究に従事。

量子物性分野

研究部門主任：矢花一浩 教授 メンバー：小野倫也 准教授／小泉裕康 准教授／Tong Xiao-Min 准教授／前島展也 講師／押山 淳 客員教授

▼分野の説明

世の中には超伝導体、絶縁体、金属など多くの異なる性質を有する物質があります。我々は、ミクロの世界の基礎方程式であるシュレディンガー方程式を、大型計算機を使って解くことにより、多様な物質の性質の解明、予言、そして新しい性質をもつ物質のデザインを行っています。

量子物性研究部門では、次世代技術の基盤となる知見を、大型計算機を用いた理論研究によって獲得しています。

▼研究トピックと成果

(1) 電磁場中の電子は、通常とは異なる性質を示すことを明らかにしました。これは「光をまとった電子」が通常とは全く異なる性質を持っていることを意味します。

(2) カーボンナノチューブにおけるナノ炭素系は、その幾何学的な構造によって金属、半導体などの性質だけではなく、磁性体としての性質を持ちうることを、計算機を用いた理論研究によって予言しています。

(3) 次世代半導体産業の基礎となる有益な知見を得ています。

- シリコンナノワイヤFET(Field effect transistor:電界効果トランジスタ)において、実際のデバイスでの使用が考えられている内径10nm程度のシリコンナノワイヤのバンド構造を明らかにし、さらにその電流-電圧特性も理論的に予言しています。本研究は世界最大規模の第一原理電子状態計算を実行したもので、世界中から注目を集めました(図1)。

- 次世代絶縁膜として実用化されつつある酸化ハフニウムを持つ斬新な界面物性を理論的に予言し、半導体技術開発のトレンドが世界規模で変わることになりました。我々の研究結果は、インテル社などが発表している最新のトランジスタ開発の大きな指針となっています。第一原理計算に基づく計算科学が、産業に直接結びつくことを世界中が認識した大きな成果です。

- MONOS型メモリの書き込み/消去時に窒化シリコン中の欠陥が起こす挙動を原子レベルで明らかにしました。このメモリは、フラッシュメモリの後継として期待されている電荷トラップ型メモリの代表格です。また、高性能のメモリを作製するためのメモリ構造も、理論的に提案しています(図2)。

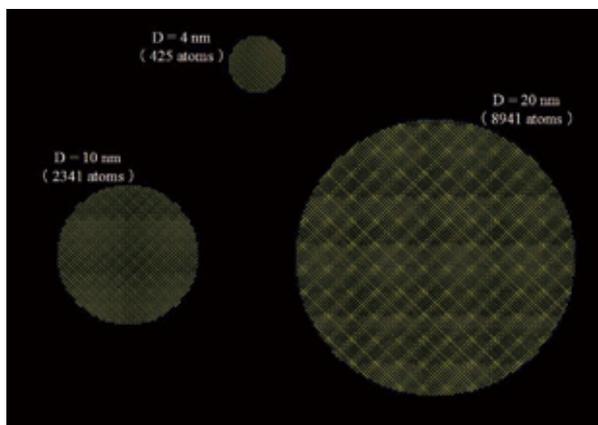


図1 シリコンナノワイヤ原子モデルの断面

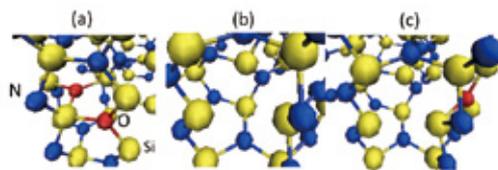


図2 窒化シリコン中の欠陥における原子構造。
(a)二酸素置換、(b)一酸素空孔、(c)一酸素置換+一酸素空孔。



<研究部門主任> 矢花一浩

筑波大学数理物質系/計算科学研究センター教授

京都大学の原子核理論グループで大学院時代を過ごす。1990年代から、原子核物理とともに物質科学にも研究を広げ、様々な量子ダイナミクス現象を記述するシミュレーション法を発展させている。

生命機能情報分野

研究部門主任：重田育照 教授 メンバー：庄司光男 助教

▼ 分野の概要

生命は物質(高分子)で構成されているにもかかわらず、遺伝や意識(思考)といったきわめて高度で驚異的な機能を持っています。生物分野には、いまだに立体構造や機能が分かっていない分子(タンパク質、核酸など)も多く、未解明の効率的な化学反応も多く存在しています。そこで、我々は生命という神秘的なシステムを物理的に解明することを目的とし、生体分子の計算機シミュレーションを行っています。

▼ 分野の説明

生体内現象は多自由度複雑系で、理論解析を行うと膨大な計算量が必要となります。そのため、計算科学研究センターの所有するスーパーコンピュータを利用して、分子動力学法(MD)と量子力学計算法(QM/MM)によるリアリスティックな計算機シミュレーションを行っています。それにより、生体内で特に重要な働きをしているタンパク質や核酸などに対し、動的挙動や化学反応を初めて正確に解明(予言)しています。我々は実験グループと密に連携しながら、研究を進めています。それにより理論と実験の双方を劇的に進展させ、生命の根本原理に対する新たな知見を得ようとしています。また、様々な応用分野:化学合成、創薬、医療への展開にも取り組んでいます。

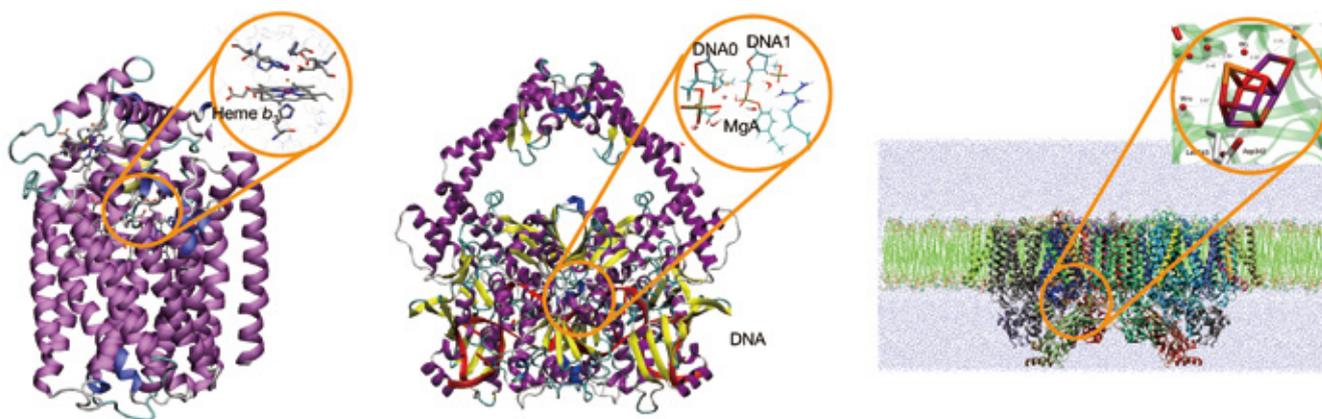


図1 生体分子の全体構造(リボンモデル)と反応活性中心構造(丸中の拡大図)。
(左)亜硝酸還元酵素(NOR)、(中央)DNAトポイソメラーゼ(Topo)、(右)光化学系II(PSII-OEC)

▼ 研究トピックと成果

- ・重要な生体分子(図1)に対して、特異的反応機構を生み出す分子メカニズムを解明しました。これらの成果により、機能改変や新規創薬への応用が期待されます。
- ・スーパーコンピュータ(T2K-Tsukuba, HA-PACS)の効率的利用(高並列化)に取り組んでいます。さらなる高速化と次世代計算機環境での効率的実行のため、GPU化についても取り組んでいます。
- ・宇宙分野との連携により、L型アミノ酸生成過程について理論的解析を行いました。それにより原始太陽系における生体構成分子の形成可能性について議論するなど、宇宙生命研究分野の開拓に挑戦しています。



<研究部門主任> 重田 育照

筑波大学数理物質系/計算科学研究センター教授

理学博士。2000年大阪大学大学院理学研究科修了。2000年より日本学術振興会研究員、2004年東京大学助手、2007年筑波大講師、2008年兵庫県立大准教授、2010年大阪大学准教授を経て、2014年より計算科学研究センター教授。専門は、理論生物物理学。

分子進化分野

分野リーダー：稲垣祐司 准教授

▼分野の概要

真核生物における大系統群間の系統解析:真核生物は6つ程度の主要系統群に分けることができると提唱されています。我々はそれぞれの主要系統群が本当に単系統なのか、またグループ間の近縁関係はどのようなものなのかを、複数遺伝子配列を用いた分子系統解析を用いて推測しています。また偏りの少ない推測を行うため、系統解析の方法についても研究しています。

▼分野の説明

地球上には多種多様な生物が生息しています。たとえば、我々ヒトは背骨を持ち、自らの体を動かし、食物(他の生物)を摂取することにより生きています。またヒトの体は、たくさんの細胞から構成されています。一方、植物の体は、ヒトと同じように多数の細胞でできていますが、その生き方はヒトとは大きく異なります。植物は自ら動くことなく、食物を食べる必要はありません。代わりに、光エネルギーをもとに光合成を行って生きています。

その他にも、日頃実感することはありませんが、地球上には肉眼では見ることのできない莫大な数の生物種が存在します。そのような生物は、多種多様な外見を持ち、その生活様式も多様です。

これら地球上のすべての生物は、たった1つの原始的生物から長い時間をかけ、現在の姿まで進化してきました。我々の研究グループは、地球上に現在生息している生物種の中でもとくに細胞に核をもつ生物、すなわち「真核生物」に焦点を当て、真核生物の主要系統群がどのような進化関係にあるのか、つまり真核生物進化の道筋の解明を目指しています。またこの系統樹をどんどん廻り、最も原始的な真核生物はどんな細胞であったのか、どんな遺伝子をもっていたのか、などの疑問を解決したいと考えています。

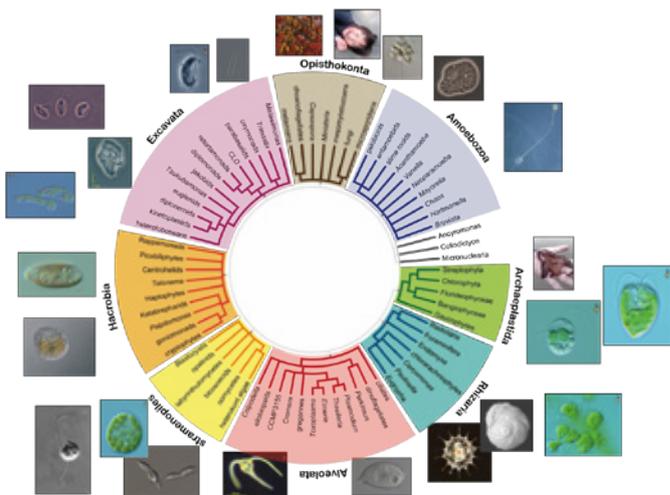


図1 真核生物の主要系統群

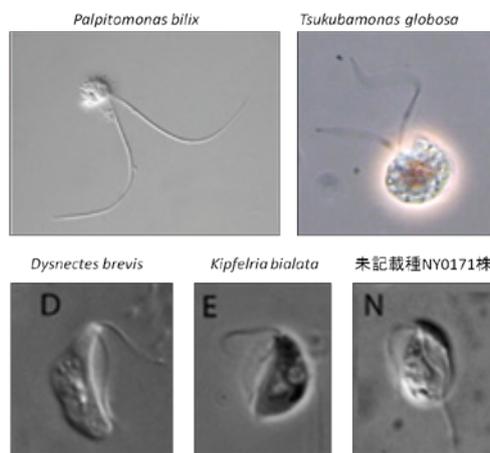


図2 自然環境から単離され、現在研究されている「新しい」真核生物

▼研究トピックと成果

我々は、現存生物種の遺伝子(DNA)塩基配列やタンパク質アミノ酸配列のデータに基づく分子系統解析を用いて、真核生物の系統関係を推測しています。特に、真核生物の進化における各種の問題を解明するため、様々な自然環境からこれまで研究されていない「新しい」生物の単離も行っています。これらの真核生物から次世代シーケンズ技術を用い、大規模な遺伝子・ゲノム情報を獲得して、分子系統解析を行っています。

分子系統解析には最尤法による統計学的処理が必要なため、コンピュータを使用します。塩基配列やアミノ酸配列の中には、過去に起きた進化のイベントに対応した「シグナル」と、進化の過程で蓄積したランダムな変化(いわゆるノイズ)が共存しています。困ったことに、配列中のノイズの量は時間とともに増加しますが、シグナルの量は逆に減少します。したがって、遠い過去に分岐したと思われる主要な真核生物系統群の関係を精度よく推測するためには、大量の配列データを解析する必要があります。我々は次世代シーケンズデータを用いた複数の遺伝子情報を含む巨大データを取り扱うため、スーパーコンピュータによる解析を行っています。



<分野リーダー> 稲垣 祐司

筑波大学生命環境系/計算科学研究センター准教授

1995年に名古屋大学理学部で博士(理学)を取得。1996-1997年、奨励研究員として(株)JT生命誌研究館に勤務。その後、日本学術振興会海外特別研究員としてカナダ・ダルハウジー大学へ2年間派遣され(1998-2000年)、引き続き同大学で博士研究員として4年間勤務(2001-2004年)。2004年4月に長浜バイオ大学講師として帰国、2005年8月筑波大学に助教として着任。

地球環境分野

研究部門主任：田中 博 教授 メンバー：日下博幸 准教授／松枝未遠 助教

■ 分野の説明

地球環境研究部門では、地球規模、総観規模、局地スケールの気候や気象に関わる研究を、全球雲解像モデル「NICAM」や、領域気象モデル「WRF」などを組み合わせて総合的に企画推進しています。

研究部門には、センター専属教員2名のほか、学内外に共同研究員がいます。専属教員は、地球規模の大気科学を専門とする田中 博教授と、都市気候などの局地気象を専門とする日下博幸准教授です。

学内共同研究者として、モンスーン気候学と古気候学を専門とする植田宏昭教授(持続環境学専攻)とメソ降水系を専門とする若月泰孝助教(地球環境科学専攻)がおり、学外共同研究者として、領域気候を専門とする木村富士男教授(海洋研究開発機構)や極域の気象を専門とする寺崎康児特任研究員(国立極地研究所)がおり、研究協力を行っています。

■ 研究トピックと成果

全球雲解像モデルNICAM (Nonhydrostatic ICosahedral Atmospheric Model) は、東京大学気候システム研究センター (CCSR) と海洋研究開発機構 (JAMSTEC) により共同開発された次世代型の大気大循環モデルです。計算科学研究センターのT2K-Tsukubaに移植され、重要な研究ツールとして役立てられています。我々はNICAMを用いて、熱帯低気圧である台風やハリケーン、温帯低気圧、北極低気圧、ブロッキング高気圧、北極振動、成層圏突然昇温などを対象に研究を行っています。

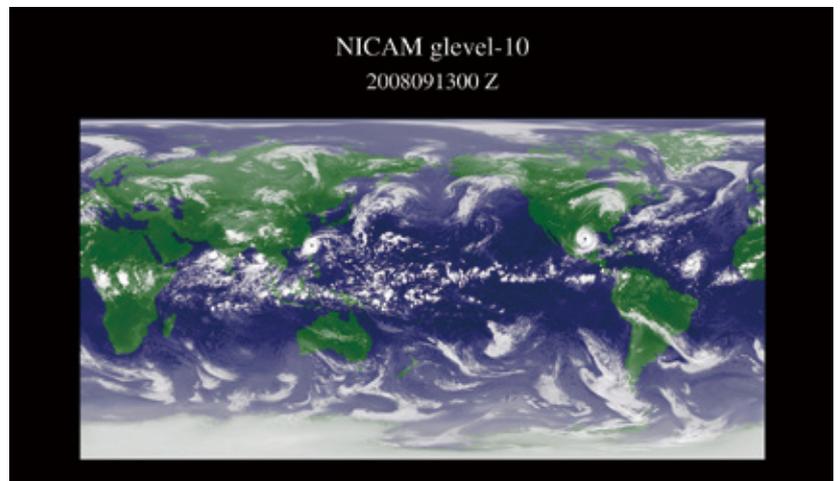


図1 NICAM全球7km解像度モデルによる雲画像。2008年の台風13号(Sinlaku)とハリケーン(Ike)の2つが同時に発達している。

領域気象モデルWRF (Weather Research and Forecasting) は、米国の大気研究センター (NCAR)、環境予測センター (NCEP)、海洋大気局 (NOAA)、空軍気象局 (AFWA) により共同開発され、一般に公開された汎用性の高い数値モデルです。我々はWRFを用いて、都市のヒートアイランド、埼玉県熊谷市と岐阜県多治見市で観測された40.9℃の当時の国内最高気温の発生メカニズム、地球温暖化に関係する都市気候の将来予測などの研究を行っています。さらには、都市街区スケールの微気象場を再現可能なLES (Large Eddy Simulation) モデルを本センターの高性能計算システム研究部門と共同で開発しています。

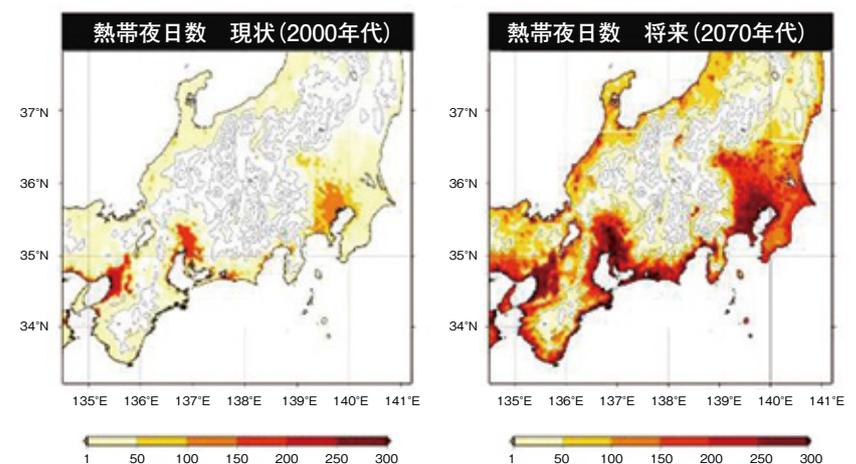


図2 温暖化予測の1つの指標となる熱帯夜の将来予測。世界最新の領域気象モデルWRFと、計算科学研究センターのスーパーコンピュータを用いて研究を行っている。



<研究部門主任> 田中 博

筑波大学生命環境系／計算科学研究センター教授

筑波大学3期生で、米国に留学して学位 (Ph. D.) を取得、米国での授業や研究指導の経験もあります。これまでに研究指導を行った100名近い学生・院生はとて優秀で、誰ひとりとして留年していないのが自慢です。

高性能計算システム分野

研究部門主任：朴 泰祐 教授(副センター長) メンバー：佐藤三久 教授/児玉祐悦 教授/高橋大介 教授/建部修見 准教授/川島英之 講師
/多田野寛人 助教/石川 裕 客員教授

分野の説明

高性能計算システム研究部門では、最先端の計算科学の推進のために求められる超高速・大容量計算の要望に応えるため、様々な高性能計算(HPC)向けハードウェアおよびソフトウェアの研究開発を行っています。センター内の各応用分野チームとの連携により、実問題に対する理想的なHPCシステムの提供を目指しています。

研究対象は、高性能計算アーキテクチャ、並列プログラミング言語、大規模並列向け数値計算アルゴリズムおよびライブラリ、GPUなどの演算加速システム、大規模分散ストレージシステム、グリッド/クラウド環境など、多岐に渡ります。

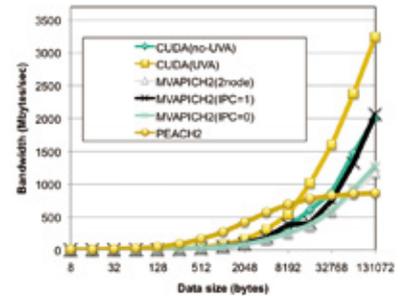
研究トピックと成果

・TCA: 密結合演算加速装置アーキテクチャ

GPUなどの演算加速装置の利用は、大規模な超高速並列システムの演算性能を大幅に高める、HPC技術の大きな流れです。我々は、高速ネットワークで直接結合された演算加速装置間結合によるアーキテクチャTCA(Tightly Coupled Accelerators)と、現行技術に基づく実装系として、このネットワークをPCI Expressリンクの直接結合のみで実現した、PEACH2チップおよびテスト環境の開発を行っています。これらはTCA技術実験クラスタHA-PACS/TCAに組み込まれ、各種アプリケーションへの適応実験が行われる予定です。



図1 PEACH2テストボード(左)と基本通信性能(右)



・XcalableMP: 次世代大規模並列向けプログラミング言語

数十万台の分散メモリノードを持つような次世代並列システムにおいては、従来の明示的なメッセージパッシング型プログラミングではソフトウェアの生産性を高めることが困難です。簡単な並列プログラミングを実現しつつ性能チューニングの自由度を高めるために、我々はXcalableMPと名付けた新言語を開発しています。これはベースとなるCまたはFORTRAN言語に、OpenMPライクな指示文を追加することにより、分散配列の処理を簡潔に記述します。それとともに、高度なチューニングを許容するPGAS的なローカルビューモデルを提供します。

・Gfarm: 大規模広域分散ファイルシステム

現実的な大規模広域分散計算環境において、高性能分散ファイルシステムは極めて重要な技術です。Gfarmは我々の部門で開発されているオープンソースな分散ファイルシステムで、数百台規模の分散ノード、数百Tbyteのストレージ、毎秒数千のファイル処理を実現します。メタデータサーバーが性能ボトルネックとならず、クライアント数における高い拡張性を保つように設計されています。

・高性能・大規模並列数値アルゴリズム

FFT-Eは我々の部門で開発されているオープンソースな高性能並列FFTライブラリで、自動チューニング機構を持ち、PCクラスタから超並列システムまで幅広く対応します。Block Krylov部分空間反復法を用いたBlock BiCGGR法に関する研究では、複数解を持つ線形方程式において、計算精度を保ちつつ反復回数を削減することを可能にしました。本手法は素粒子研究部門において実用されています。

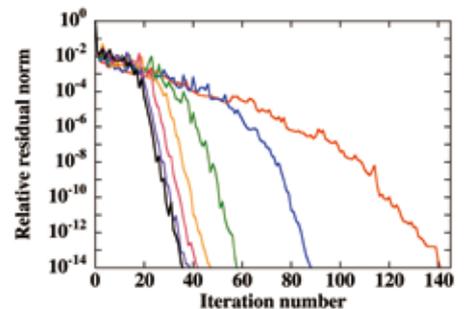
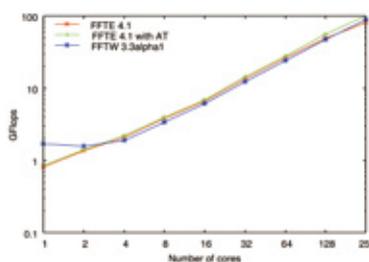


図2 T2K-Tsukubaにおける3次元FFTの結果(左)とBlock Krylov部分空間法によるヤコビ法を用いた前処理における収束性(右)



<研究部門主任> 朴 泰祐

筑波大学システム情報系/計算科学研究センター教授・副センター長

HPCシステム研究者として、計算科学研究センターが所有してきたCP-PACS、FIRST、PACS-CSなどほぼすべてのスーパーコンピュータの開発に携わりました。センターの各応用分野の研究者との緊密な議論と共同研究に基づいて、これらのシステムを実現してきました。主な研究分野は高性能相互結合網、大規模クラスタ設計、並列プログラミング、実アプリケーション性能チューニング、GPUコンピューティングです。

データ基盤分野

研究部門主任：北川博之 教授 メンバー：天笠俊之 准教授

■分野の概要

計算科学において、大規模データの管理や活用はきわめて重要な課題です。計算情報学研究部門データ基盤分野は、データ工学関連分野の研究開発を担当しています。具体的には、異種データベースや多様な情報源を統合的に扱うための情報統合基盤技術、データ中に埋もれた知識や規則を発見するためのデータマイニング・知識発見技術、インターネット環境において様々なデータを統合的に扱うためのXML関連技術、プライバシー技術などの基盤技術の研究を継続して行っています。また、計算科学研究センター地球環境研究部門や素粒子物理研究部門、独立行政法人産業技術総合研究所と連携して、計算科学の各分野における応用的な研究を推進しています。

■研究トピック

1. 情報統合基盤技術

関係データベースやWebなど従来型の静的な情報源に加えて、ストリームデータやセンサデータなどを統合するための基盤ソフトウェアであるJsSpinnerの開発：1)セキュアなストリーム処理方式、2)ストリームデータに対する外れ値検出とそのマルウェア検知に対する応用、3)トランザクショナルなストリーム処理。

2. データマイニングと知識処理

多様なデータに対するデータマイニングおよび知識発見手法に関する研究：1)不確定データに対する外れ値検出、2)GPUを活用した各種データマイニングアルゴリズムの高速化、3)ソーシャルデータ分析およびマイニング。

3. 科学データ管理

爆発的に増加する科学データの管理と運用を目的とした研究開発：1)衛星センサデータからのホットスポット検出、2)大規模気象データベースGPV/JMAおよびJRA-25アーカイブの研究開発、3)格子QCDデータグリッドJLDG/ILDGの研究開発。

■現在までの成果

1. 情報統合基盤

情報統合基盤ソフトウェアであるJsSpinnerの開発を進めており、イノベーションジャパン(2005～2011年)などに出席しています。また、問い合わせ最適化方式などの技術開発も行っています。

2. データマイニングおよび知識発見

GPUを用いた不確定トランザクショナルデータに対する確率的頻出アイテム集合マイニングの高速化手法を提案しました。GPU固有のメモリアウトおよび計算機構を活用することにより(図1)、CPUに比べて数十倍から百倍程度の性能向上を達成しました。

3. 科学データ管理

気象庁が公開している数値気象データ(GPV)をアーカイブし、研究者などに公開するためのデータベースGPU/JMAアーカイブおよびJRA-25アーカイブの開発と運用を行っています(図2)。2012年時点で10TBのデータを格納しています。

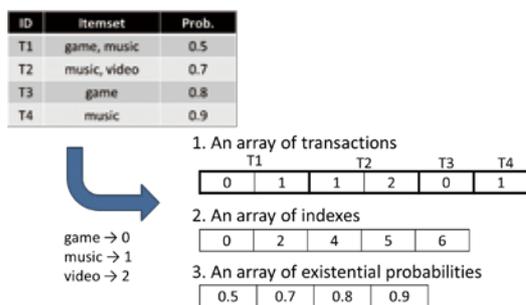


図1 GPUによる確率的頻出アイテム集合マイニング

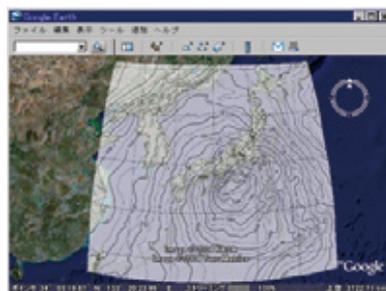


図2 GoogleEarthを利用した天気図の閲覧



<研究部門主任> 北川 博之

筑波大学システム情報系 / 計算科学研究センター教授

1980年東京大学大学院理学系研究科修士課程修了。日本電気(株)勤務の後、1988年筑波大学講師。現在、同大学システム情報系教授。

理学博士(東京大学)。異種情報源統合、XMLとデータベース、データマイニング、センサデータベース、WWWデータ管理などの研究を行う。日本データベース学会副会長、情報処理学会および電子情報通信学会フェロー。

計算メディア分野

分野リーダー：大田友一 理事・副学長 メンバー：亀田能成 准教授／北原 格 准教授

▼分野の説明

計算メディアとは、カメラなどの実世界をセンシングする機能と潤沢な計算資源とを、コンピュータネットワーク上で融合することによって実現される先端的な情報メディアです。人間社会とそれを取り巻く環境の情報を、誰もが必要な時に最適な形で手に入れることを支援する情報メディアの実現を目指し、研究を進めています。そのためには、映像情報の高度で知的な加工技術に加えて、適切なセンサ群を検索する仕組み、情報を受け取るユーザを認証する仕組み、ユーザの資格や利用形態に応じて情報を適切に加工する仕組み、情報の盗聴・コピー・改ざんを防止する仕組み、なども必要になります。

▼研究トピック

- ・自由視点映像中継：自分の好みの視点から観戦可能な次世代スポーツ映像中継システム
- ・シースルービジョン：監視カメラなどのセンサ情報を、被写体である一般市民に開放することにより、目に見える便利さという価値を提供する枠組み
- ・協調型複合現実感：実世界と仮想世界をシームレスに融合した複合現実感を利用する次世代コミュニケーション技術
- ・マッシブセンシング：膨大(マッシブ)な数の環境カメラ群による多視点同時観測技術
- ・環境カメラ映像とモバイルカメラ映像の特長を統合した次世代映像監視技術
- ・高速撮影カメラなどを用いた顔表情解析により対象人物の深層意図を推定する研究
- ・歩行者に装着したカメラ映像から市中での歩行位置を求める技術

▼現在までの成果

我々は、サッカー場のような大規模空間において行われるイベントを多数のカメラで撮影し、それらの映像データを計算機内部で統合することにより、任意視点からの見え方(自由視点映像)を生成・提示する研究に取り組んでいます。昨年は、自由視点映像をより多くのユーザに楽しんでもらうために、選手の視点からゲームを観察する方式(図1)、両手を使って自在に仮想カメラを操作する閲覧システム(図2)、広く普及しているタブレット端末を用いて簡単・快適な視聴を可能にする方式(図3)の研究に取り組み、国内外の学会における発表を通じて高い評価を得ています。

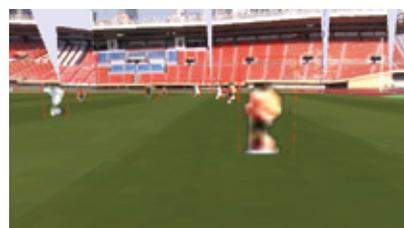


図1 選手視点映像

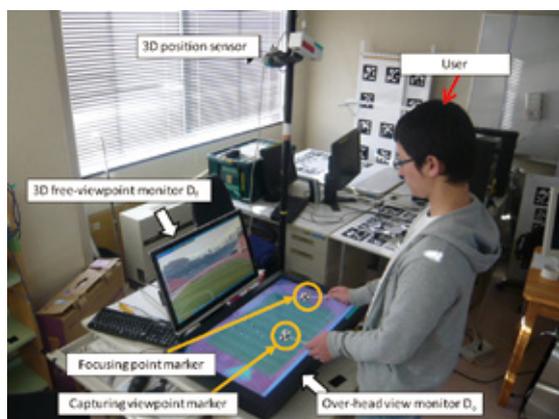


図2 自由視点映像閲覧システム



図3 タブレット端末を用いた自由視点映像視聴方式



<分野リーダー> 大田 友一

筑波大学理事・副学長

学生時代からパターン認識というロボットの眼をつくる技術を専門として40年になります。15年前から、メディア技術としてのパターン認識に取り組んでいます。人を代替する技術から、人を支援する技術へ、研究方針の舵をきりました。国際パターン認識連盟、電子情報通信学会、情報処理学会、各フェロー。

先端計算科学推進室

計算機の性能をフルに活かして研究を発展させる

室長
矢花一浩 教授

計算科学は、理論、実験・観測と並び、21世紀の科学の最先端を切り拓く柱となる研究手法として、計算機能力の飛躍的な向上に支えられて、著しい発展を遂げています。今日では、多数のCPUを連結した超並列計算機は言うに及ばず、グラフィック・プロセッシング・ユニット (GPU) を演算加速器とする大規模計算機、そして今後の大規模計算で中心となることが期待されるメニーコア・プロセッサを搭載した超並列計算機など、次々に新しいアーキテクチャに基づく計算機が出現しています。これら多様な計算機の性能をフルに活かした計算を行い、研究を発展させることは、容易なことではなくなってきました。

本センターには、素粒子物理学や宇宙物理学の分野で、物理学者と計算機科学者が日常的な交流を行う中、計算科学にとって最適な計算機を開発し、科学研究にブレークスルーをもたらしてきた実績があります。このような計算科学と計算機科学の協働を様々な分野で実現し、さらに科学分野間の連携や学外研究者との連携を図るために、先端計算科学推進室を設けました。

これまでGPU超並列スパコンHA-PACSに最適なアプリケーションの開発を行うことを目的として、新たな計算機開発を推進する次世代計算システム開発室との密接な連携のもと、主要なアプリケーションのホットスポットの解明やそのGPU化の検討を行ってきました。これからは、密結合並列演算加速機構を備えたHA-PACSや、最先端共同HPC基盤施設に導入が予定されるメニーコア・プロセッサを搭載した超並列計算機への対応など、新技術への取り組みを予定しています。

表 先端計算科学推進室の HA-PACS における取り組み

	目標とする科学のターゲット	GPU化に取り組む数値計算
素粒子分野	マルチスケールの物理 有限温度・有限密度の物理	大規模疎行列線形方程式の 求解密行列の行列・行列積計算
宇宙分野	6次元計算宇宙物理の実現 衝突系重力多体シミュレーション	レイトレーシングによる光強度・ 化学反応計算 重力加速度・加速度微分計算
原子核分野	原子核応答・反応ダイナミクスの研究 光と物質の相互作用の第一原理計算	実時間・実空間差分計算 多数回の3次元高速フーリエ変換
物質分野	物質の構造や動的過程の解明と量子過程 の制御	時間依存シュレディンガー方程式の 実時間・実空間差分計算
生命分野	酵素の反応機構 生体分子の動的構造	量子化学計算 分子動力学計算
地球環境分野	次世代大気大循環モデルNICAM 都市型気象計算	3次元ノーマルモード展開 LES
データ基盤分野	大規模データベースからの知識発見	相関ルールマイニング 時系列データ検索 クラスタリング

ペタを超えエクサフリップスに向けた実証研究

室長
朴 泰祐 教授

並列型スーパーコンピュータシステムのピーク演算性能は、ノード(プロセッサ)性能×ノード数によって表されます。これまでノード数を増やすことで性能向上を追求してきましたが、電力消費や故障率などの問題があり、その時代が終わりつつあります(weak-scaling問題)。現在のペタスケールを超えてエクサスケールを達成するには、数十万～数百万ノードにおける耐故障技術を確立することと、ノード単体の演算性能を10TFLOPSレベルにする必要があります。後者を達成するためには演算加速機構が有望ですが、これはシミュレーションのステップあたりの時間短縮(strong-scaling問題)を解決することで可能になると考えられます。

次世代計算システム開発室では、密結合並列演算加速機構アーキテクチャの研究開発と、密結合並列演算加速機構実証システムHA-PACSの構築を行うことで、エクサフリップスに向けた実証実験を行います。密結合並列演算加速機構実証システムHA-PACSは、ベースクラスタ部(802TFLOPS)と、演算加速機構を「密結合並列演算加速機構(TCA:Tightly Coupled Accelerators)」で強化したTCA部(364TFLOPS)からなります。

■ベースクラスタ部

GPGPU(GPU)は、本来グラフィック処理に用いられていたプロセッサを、科学技術計算の加速機構として利用したものです。近年、半導体の急速な進歩にともない多くの演算器を搭載し、大幅な性能向上を実現しています。

■密結合並列演算加速機構HA-PACS/TCA

現在の重要なボトルネックになっている、演算加速機構(GPU)間の通信を直結することによって、通信性能の改善を図り、これまで通信がネックとなって適用できなかったアプリケーションの開拓、これまでのアプリケーションの加速を図ります。

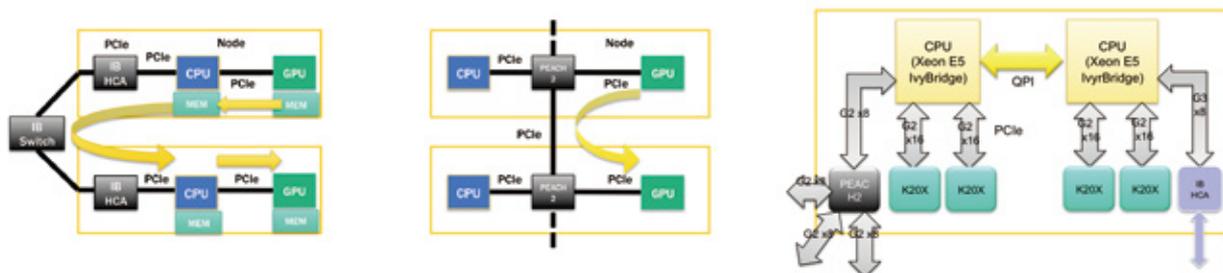
■PEACH2

TCAアーキテクチャの実証実験システムとして、GPUクラスタ上の異なるノードのGPU間を直結する専用ネットワークシステムを開発します。これを実現するのがPEACH2(PCI-Express Adaptive Communication Hub ver.2)チップとこれを搭載するボードです。PEACH2は、ハードウェアを書き換えることのできるFPGA(Field Programmable Gate Array)を用いて設計します。

PEACH2により、以下の機能が実現されます。

- ・CPUに頼らないGPU間の自律通信が可能→汎用コードと加速コードの高性能並列実行
- ・GPUメモリ間コピーをダイレクトに実行可能→GPUのみによる高速並列処理
- ・GPUメモリ上のデータのダイレクトI/O→耐故障実行時のオーバーヘッド削減等

HA-PACSでは、ベースクラスタ部の268ノードに加え、4台の最新型GPU(NVIDIA社Kepler K20X)とPEACH2を搭載した超高性能ノードを64ノード備えたTCA部を実装することにより、TCAアーキテクチャとこれに基づくアプリケーション開発を進め、次世代の演算加速装置による高性能並列処理を実現します。



一般のGPUクラスタにおけるGPU間通信(左)とTCAによるGPU間通信(右)

HA-PACS/TCAの計算ノードのブロック図

HPCI 戦略プログラム推進室

「京」を用いた成果創出と計算科学推進体制の構築

室長
藏増嘉伸 教授

■HPCI計画と戦略プログラム分野5

革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI) 計画とは、スーパーコンピュータ「京」を中核とし、多様なユーザのニーズに応える革新的な計算環境を実現するHPCIを構築するとともに、その利用を推進することを目指します。その具体的な目標の1つとして、HPCIを用いた画期的成果を創出するとともに、主要分野において計算科学推進体制を構築すること (HPCI戦略プログラム) が挙げられています。

HPCI戦略プログラムにおいては、まず「京」の計算機資源を必要とし、かつ社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる戦略分野として5つの分野が選定されています。その1つに「分野5:物質と宇宙の起源と構造」をテーマとする、素粒子・原子核・宇宙物理を中心とした基礎物理の分野があります。分野5の研究開発を牽引する機関(戦略機関)は、筑波大学計算科学研究センター・高エネルギー加速器研究機構・国立天文台を併せた共同研究組織である計算基礎科学連携拠点(JICFuS: Joint Institute for Computational Fundamental Science)が担っています。

■分野5の戦略目標

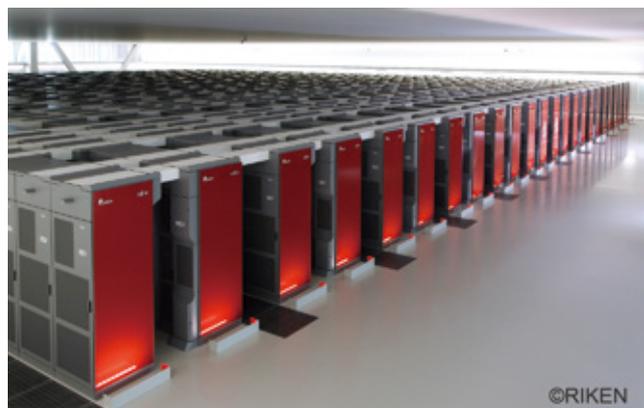
宇宙の歴史は、137億年前にビッグバンと呼ばれる超高温・超高密度の状態から始まったと考えられています。その後、温度が下がるにつれて、陽子や中性子といったバリオンがクォークとグルーオンの束縛状態として作られます。次いで、陽子や中性子が結合して軽い原子核が生成されます。他方、宇宙には、正体不明のダークマター(暗黒物質)がバリオンよりもはるかに大量に存在するとされています。宇宙は、はじめにダークマターが重力により集まって構造を作り、それに引き寄せられて通常のバリオン物質が銀河や星を形成し、現在の姿になったと考えられています。銀河では、星が活発に誕生する一方、重力崩壊・超新星爆発などで死滅しています。この過程で、より重い原子核が生成されます。

このように、宇宙の構造形成の歴史と物質の生成史には密接な関係があります。

分野5の戦略目標は、ビッグバンに始まる宇宙の歴史における、素粒子から元素合成、星・銀河形成に至る物質と宇宙の起源と構造を、複数の階層を繋ぐ計算科学的手法で統一的に理解することにあります。この目標へ向け、4つの研究開発課題が設定されています。

- (1) 格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定
- (2) 大規模量子多体計算による核物性解明とその応用
- (3) 超新星爆発およびブラックホール誕生過程の解明
- (4) ダークマター密度ゆらぎから生まれる第1世代天体形成

これらの課題をピーク性能10.5PFLOPS(1秒間におよそ1京回の計算が可能)のスーパーコンピュータ「京」を用いて研究します。また、これと並行して、計算基礎科学分野の計算資源の効率的な運用、人材育成、研究ネットワークの構築、分野を越えた連携などを進め、分野内の計算科学技術推進体制の構築を目指しています。本推進室では、戦略機関の中核として、研究開発課題の着実な遂行および計算科学技術推進体制の構築を進めていきます。



©RIKEN

計算科学の国際ハブ拠点形成に向けて

室長
高橋大介 教授

本センターでは、科学諸分野と計算機科学の連携・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ます。学際計算科学連携室は、計算科学の国際ハブ拠点形成に向けた本センターの取り組みの一環です。

■異分野間連携

学際計算科学を推進するためには、異分野間の連携が重要になります。2011年に理化学研究所、筑波大学、東京大学および富士通による研究グループは、スーパーコンピュータ「京」を用いた10万原子シリコン・ナノワイヤの電子状態の第一原理計算の研究成果により、高性能計算分野では著名なゴードン・ベル賞の最高性能賞を受賞しました。これは本センターにおける長年の異分野間連携の成果の1つといえます。

■国際連携

国際的な連携として、筑波大学と英国エジンバラ大学および米国ローレンス・バークレー国立研究所との間で連携協定を締結しています。エジンバラ大学並列処理センター(EPCC)とシンポジウムを開催するとともに米国ローレンス・バークレー国立研究所とワークショップを開催し、計算科学の研究交流を深めています。また、米国のバンダービルト大学、ワシントン大学とも、日本学術振興会二国間交流事業により計算物質科学の共同研究を進めています。

■学際開拓プログラム

学際開拓プログラムは、異分野間連携に重点をおいて行う研究の推進を奨励するものです。計算物理学分野(理学)と数値解析分野(工学)が連携を図り、実行効率の高い計算コードの生成とこれによる大規模シミュレーションを行うプロジェクトや、計算科学分野で手法を同じくする異分野間で有機的連携を行うことにより、研究の新たな展開や格段の発展を図るプロジェクトなどがあります。本センターの学際共同利用プログラムと連携して実施しています。

■宇宙生命計算科学連携拠点

この十数年、系外惑星観測や星間分子観測などにより、宇宙生命学(アストロバイオロジー)が注目を集めています。本拠点は、計算機科学分野との連携の下、宇宙分野、生命分野、惑星分野が協働して、宇宙における生命の起源に関わるキープロセスを第一原理計算により探究し、計算科学としての宇宙生命学を創出するものです。研究課題は、星間分子生物学、惑星生命科学、星・惑星形成を柱とします。現在、筑波大学が中心となり、20研究機関、51名の研究者が参加しています。



計算科学振興室

計算科学の人材育成と社会貢献を推進する

室長
北川博之 教授

計算科学振興室では、大学院研究科と連携した計算科学に関わる人材育成プログラムの整備、サマースクール等の啓蒙活動、当センターにおける先端研究に関わる情報発信等を含めた社会貢献などを推進しています。

■人材育成

・大学院デュアルディグリープログラム

大学院は、博士前期課程(修士)と博士後期課程(博士)から構成され、両課程を通して1つの専門分野を修めて博士号を取得します。しかし、計算科学においては、物理、地球環境、生物などのサイエンス分野の研究を、コンピュータを高度に活用しながら進める必要があり、サイエンスとコンピュータの両分野に関わる複合的な専門性が求められます。このニーズに対応するため、大学院「デュアルディグリープログラム」を推進しています。博士後期課程におけるサイエンス分野の研究と、博士前期課程でのコンピュータに関する研究を同時並行的に進め、サイエンス分野での博士号と、コンピュータ科学の修士号を同時期に取得することが可能です。

・計算科学英語プログラム

海外留学生の増加に伴い、英語だけで修了可能なように、コンピュータサイエンス専攻の博士前期課程に「計算科学英語プログラム」を開設しています。13科目の英語授業や研究指導を通して修士号を取得できます。

・大学院共通科目

コンピュータは大学院におけるあらゆる研究の基盤です。全学の大学院生を幅広く対象とした共通科目の形でサマースクール科目としており、学外の研究者や他大学の学生も広く聴講可能としています。



	科目名	科目名(英語)
専門科目	数値アルゴリズム特論	Advanced Course in Computational Algorithms
	数値シミュレーション特論	Special Lecture on Numerical Simulation
	プログラミング環境特論	Programming Environment
	データ工学特論I	Data Engineering I
	高性能コンピューティング特論	Advanced Course in High Performance Computing
	データ解析	Data Analysis
	基礎計算生物学	Basic Computational Biology
	計算科学特別講義I~IV	Special Lecture on Computational Science I~IV
大学院共通科目	計算科学リテラシー	Computational Science Literacy
	計算科学のための高性能並列計算技術	High Performance Parallel Computing Technology for Computational Sciences

■社会貢献

・他機関との連携

国内では、東京大学と京都大学との間でT2Kアライアンスとして高性能計算技術分野の研究協力を進め、つくば市内の各研究機関ともすでに密接な研究協力関係を結んでいます。素粒子物理の国際データ共有プロジェクトILDGや、英国エジンバラ大学、米国ローレンスバークレイ研究所との交流など、国際的な研究協力体制も築いています。これまで進めてきた国内外の研究協力を強化、展開し、共同研究に向けて研究者や学生の交流を行うための懸け橋として活用していきます。

・筑波山プロジェクト

筑波山(877m)山頂にて気象観測を行い、上空の気温・湿度などの気象データを継続的に記録・公開することで、研究・教育活動に役立て、社会に貢献することを目的としています。

・情報発信

国内の高校生や海外の大学生などの見学を受け入れ、一般公開を行ってつくば市や関東を中心とした方々との交流を深めています。また、教員個人としても、出張授業・講演会などを積極的に行っています。

計算科学研究センターと社会のより良い関係づくりを目指す

吉戸智明 主任研究員

計算科学研究センターの発展と計算科学の推進のため、社会とのより良い関係づくりを目指し、2010年度から活動を始めました。本センターの設立目的を背景として3つの広報コンセプトを定め、日々の業務を行っています。

■広報コンセプト

- ・本センターと社会との良好な関係を築くため、双方向のパブリックリレーションズを行う。
- ・本センターおよび計算科学の知名度向上を目指す。
- ・本センター基本方針への理解度、本センターへの信頼度を上げる。

■広報室の活動方針

- ・センターに関わる研究者の広報・広聴活動を支援する。
- ・ステークホルダー(利害関係者)への情報提供を行うため、ウェブサイトをはじめとするコンテンツの作成を行う。
- ・情報収集を積極的に行って、センター内部の研究者に還元する仕組みを作る。
- ・リスクマネジメントの体制づくりを行う。
- ・知名度、理解度、信頼度を測る方法を検討、実施する。

■活動実績

- ・ウェブサイト：<http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/>

研究者・プロジェクト・計算機紹介、データベース公開、シンポジウム・セミナー情報、災害時の対応など。



・パンフレット

読者に合わせて3種類を用意。一般向け「計算科学とスーパーコンピュータ」(高校生以上)、専門向け和文(大学院生以上)、専門向け英文(海外の大学院生以上)。

・ムービー

センター紹介、計算機設備、研究10分野の計12本(日・英)を制作。

・見学・一般公開

見学者数は2010年度(7月以降)351名、2011年度1056名、2012年度844名、2013年度890名。ウェブサイトに、よくある質問コーナーを設けた。

・メディア活用

マスメディアへのプレスリリースは、2011年度7回、2012年度5回、2013年度7回。ソーシャルメディアはTwitter(@CCS_PR)を利用。投稿数3900、フォロワー数1110(2014年10月時点)。

Access

■つくばエクスプレス(TX)+バス

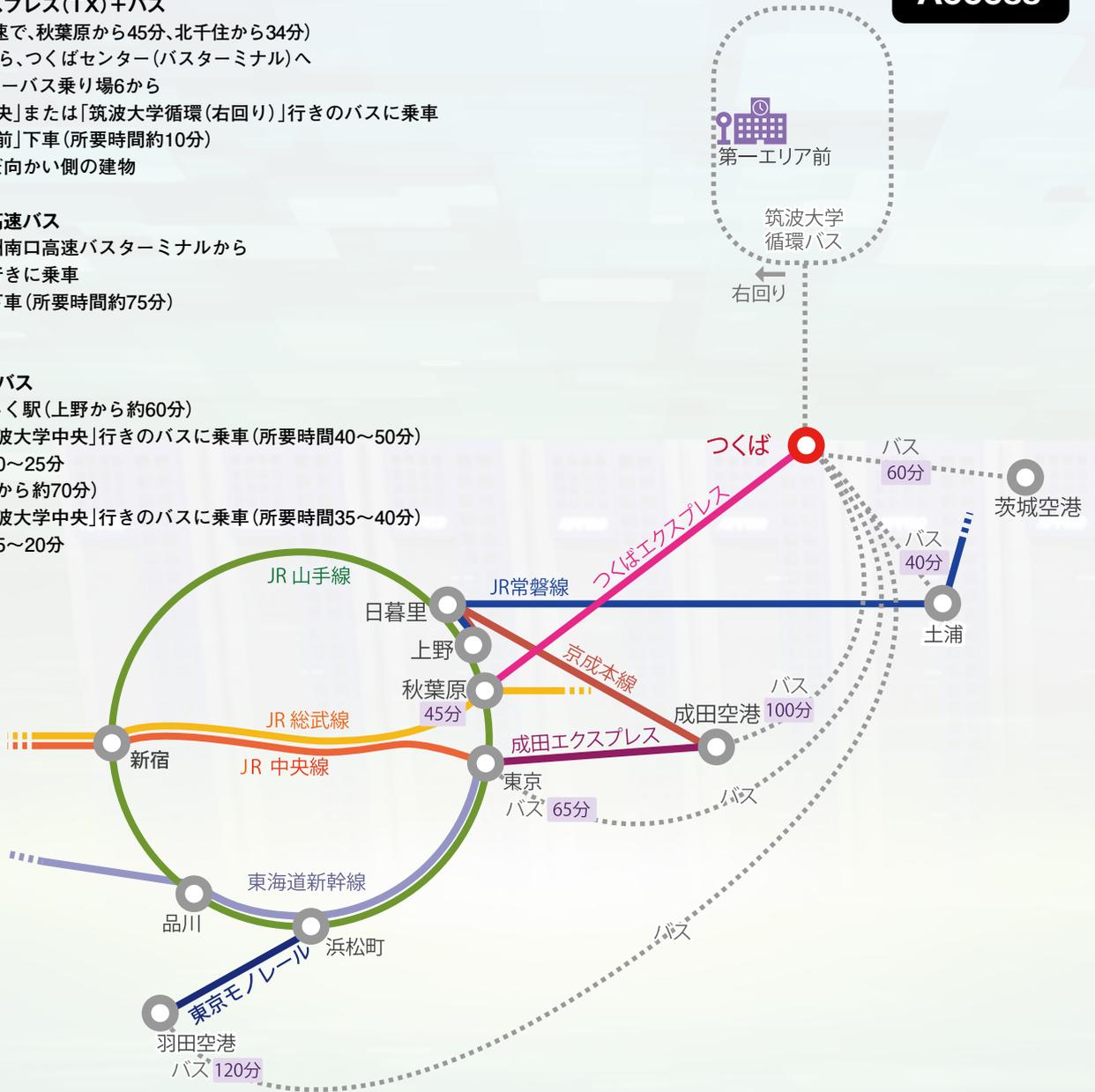
- つくば駅(快速で、秋葉原から45分、北千住から34分)
A3、A4出口から、つくばセンター(バスターミナル)へ
- つくばセンターバス乗り場6から
「筑波大学中央」または「筑波大学循環(右回り)」行きのバスに乗り
「第一エリア前」下車(所要時間約10分)
道路を挟んだ向かい側の建物

■東京駅から高速バス

- 東京駅八重洲南口高速バスターミナルから
「筑波大学」行きに乗り
「大学会館」下車(所要時間約75分)
徒歩3分

■JR常盤線+バス

- ひたち野うしく駅(上野から約60分)
東口から「筑波大学中央」行きのバスに乗り(所要時間40~50分)
タクシーで20~25分
- 土浦駅(上野から約70分)
西口から「筑波大学中央」行きのバスに乗り(所要時間35~40分)
タクシーで15~20分



筑波大学計算科学研究センター

〒305-8577 茨城県つくば市天王台 1-1-1 TEL.029-853-6487, 6488 FAX.029-853-6406, 6489

<http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/>