Center for Computational Sciences,
University of Tsukuba

筑波大学
計算科学研究センター

筑波大学
University of Tsukuba

筑波大学計算科学研究センター

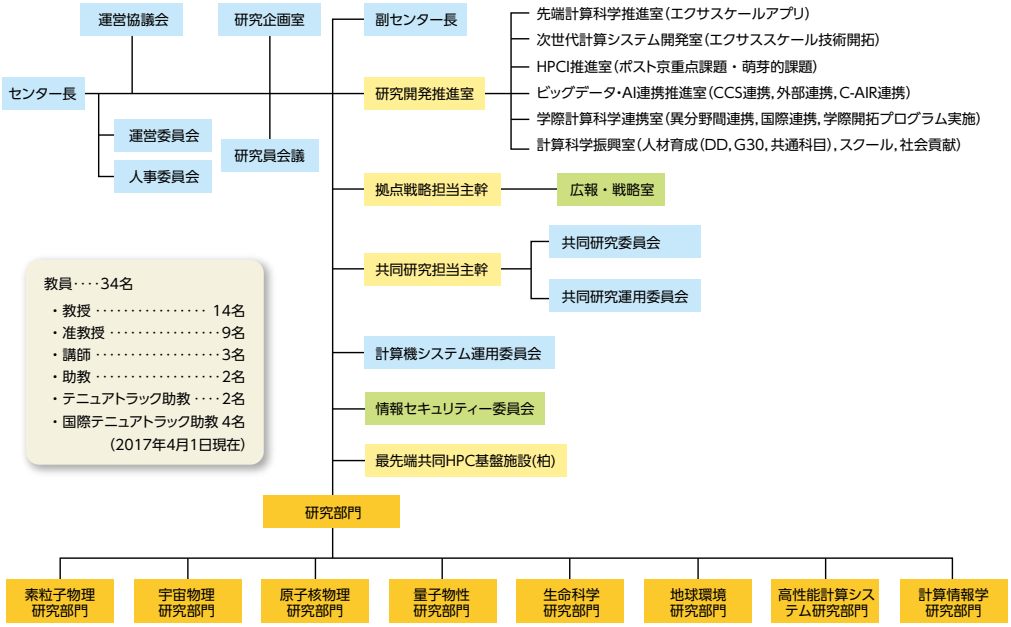
概要

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、ビッグデータ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月に改組・拡充されて設立されました。1996年(平成8年)に開発した超並列計算機「CP-PACS」は世界第1位の性能を達成しました。現在、学内の「先端的研究型重点研究センター」として位置付けられ、重点的な機能強化が行われています。2013年(平成25年)には、東京大学情報基盤センターとの協定に基づき、全国初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、2016年(平成28年)に国内最速となる新たなスーパーコンピュータを導入しました。センターには、8つの研究部門があり、34名の専任教員が従事しています。

また、学際計算科学の戦略的推進と普及・振興のために、5つの「研究開発推進室」と「広報・戦略室」を設置し、計算科学の分野間協働、次世代のシステム開発、国内外の連携、計算科学の普及・振興を行うと共に、フラッグシップ2020プロジェクト（ポスト「京」の開発）において重点課題・萌芽的課題を推進しています。さらに、「計算基礎科学連携拠点」、「宇宙生命計算科学連携拠点」を推進し、様々な異分野間連携を加速しています。

本センターは、研究・開発を行う機関であると同時に、外部の研究者に計算機資源を提供し幅広く研究を支援する全国共同利用施設としての役割を果たしています。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、2015年(平成27年）に再認定されました。拠点の機能として、「学際共同利用プログラム」の下で全国にセンターの持つスーパーコンピュータ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。



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研究手段となっています。これにより、多くの分野で科学の発展に貢献しています。

計算科学を音楽に例えると、“楽器”が計算機、“楽譜”がプログラム、“演奏”が計算ということができます。楽器は共通でも様々なジャンルの音楽が誕生し、フュージョンのような融合音楽も生まれます。また、楽譜が共通でも、異なる楽器で奏でることが可能です。計算科学研究センターでは、計算機という共通の楽器を使って、様々な分野のプログラムを演奏し、またよりよい演奏のために、新たな計算機を開発しています。そして、計算機という共通の装置を使うことによって異なる科学分野間の融合も生まれやすくなります。これが“学際計算科学”のもつ大きな力です。学際計算科学は、未来に予想される高度化および多様化する科学を探究する強力な手段であり、無限の可能性を秘めています。

本センターは、発足当初より、科学諸分野と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・製作を行ってきました。これは、現在世界的に普及している「コ・デザイン」の先駆けです。これは、多くの科学分野で、重要な学術成果につながりました。さらに、計算科学の手法は、研究の深い所で異分野間融合を可能にすることを実証してきました。

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、国内外との連携強化の下、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用いた数値シミュレーション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、ハードウエアからソフトウエア、アルゴリズム、プログラミングの研究を行う計算機科学者、データやメディア処理の研究を行う情報科学の研究者の協働が鍵となります。このような科学諸分野と計算機科学・情報科学の協働と融合を行うのが「学際計算科学」です。

これまで、物理学者と計算機科学者の協力(コ・デザイン)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・トップ500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「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「HA-PACS」プロジェクトを開始しました。

本センターは設置以前から、長年にわたり、基礎科学分野において計算機科学との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。センターでは、この体制が拡充し、現在では素粒子・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を発展させています。そして、その中から様々な領域で、異分野間の連携と融合が生まれており、これも学際計算科学のもつ重要なポテンシャリティです。

国内外の密接な研究協力体制

国内の研究協力として、2013年に、東京大学情報基盤センターとの協定を締結し、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。この共同により、これまでにない大規模な計算機の構築が可能になり、メニーコア型の新たなスーパーコンピュータOakforest-PACSを導入しました。また、様々な分野の計算科学を統合する「計算基礎科学連携拠点」や「宇宙生命計算科学連携拠点」を推進し、基礎物理や物質・生命科学との連携を進めると共に、計算情報学や医学との融合研究も生まれています。さらに、理化学研究所計算科学研究機構(AICS)と基本協定を結び、高性能スーパーコンピュータを用いた最先端計算科学推進のための連携・協力を行っています。加えて、つくば市には本学の他に多くの国の研究機関があり、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。

国際的な協力は、学際的な計算科学をグローバルに展開す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、連携協定を締結し毎年ワークショップを開催して計算科学の研究交流を深めています。韓国KISTI (韓国科学技術情報研究院) とは、ウィンタースクールやワークショップ開催を通じて密接な連携を図っています。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行ってきました。

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。

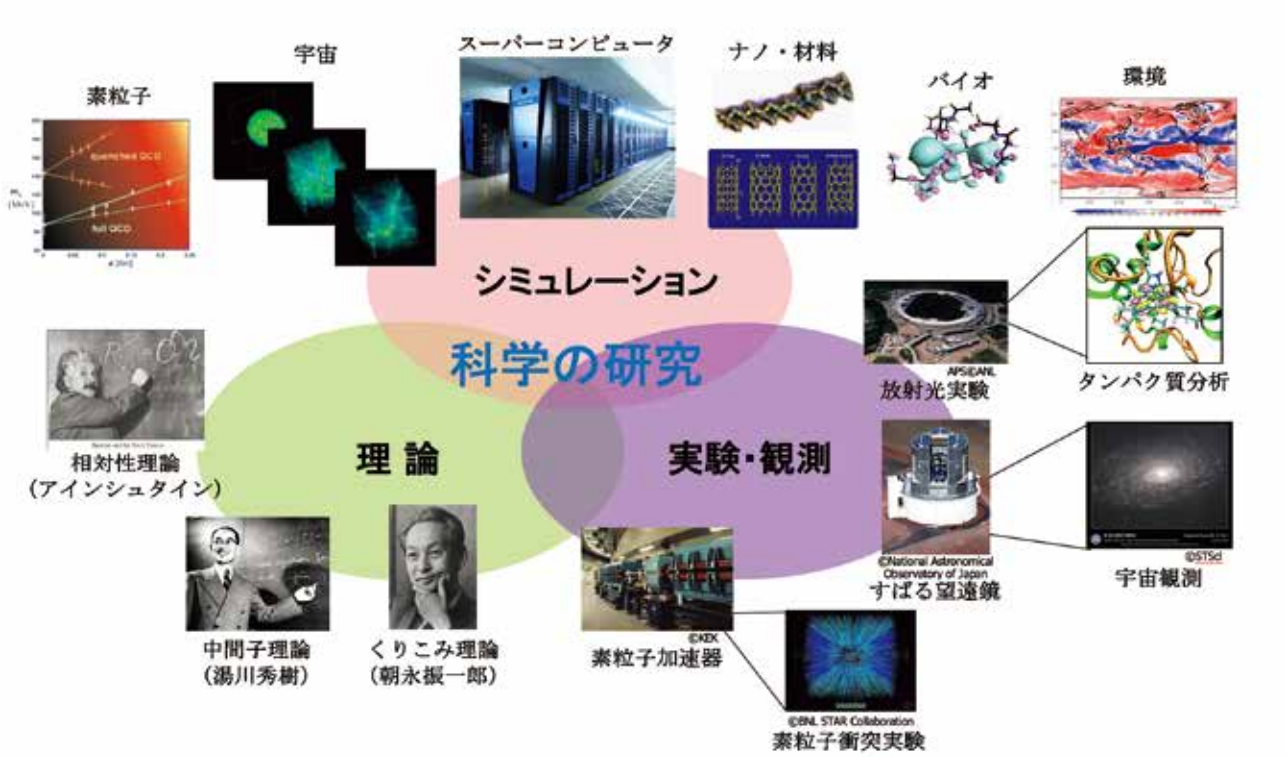
計算科学研究センター年譜

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「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「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
2015年	4月	計算科学研究センターの7研究部門を8研究部門に改組拡充
2016年	12月	最先端共同HPC基盤施設としてOakforest-PACS運用開始

計算科学とは

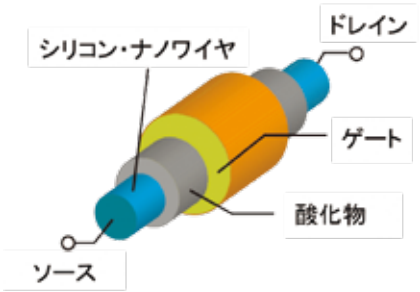
最先端の研究

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ても“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、理論と並び、欠くべからざる研究手段となっています。



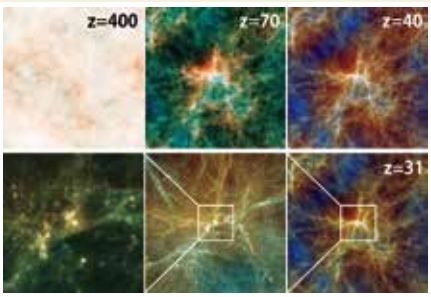
2年連続でゴードン・ベル賞を受賞

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/TCA

HA-PACS/TCAは、各計算ノードにIntel社E5-2860v2 CPUを2台とNVIDIA社K20X GPUを4台搭載した、64ノードからなる高密度GPUクラスタで、2013年11月に稼働を開始しました。各計算ノードには計算科学研究センターが提唱するTCA (Tightly Coupled Accelerators)機構のプロトタイプ実装であるPEACH2 (PCI Express Adaptive Communication Hub ver.2)通信ボードが搭載され、これにより最小2.1μ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。

HA-PACS/TCAは、それに先だって導入された超並列GPUクラスタHA-PACS (2017年3月に運用終了) と一体運用され、同時稼働時のピーク性能は1.13Pflopsで、計算科学研究センターとして初めてのPflopsスーパーコンピュータとして稼働しました。現在、HA-PACS/TCAは単体で引き続き運用されています。

HA-PACS/TCA (手前部分)

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、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Top500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。

同システムのXeon Phi演算加速部は、通常プログラムから呼び出して使えるだけでなく、それ自体を自律動作するメニーコアプロセッサとして利用可能であり、JCAHPCで運用されるOakforest-PACSのためのプログラムを先行開発するためにも用いられています。

COMA

最先端共同HPC基盤施設(JCAHPC)

●施設長：中村宏　東京大学情報基盤センター長　　●副施設長：梅村雅之　筑波大学計算科学研究センター長

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ニーコアを利用し、最先端のシステムを構築します。さらに、システムソフトウエ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。

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。

Oakforest-PACS

最先端共同HPC基盤施設では国内最高性能スーパーコンピュータOakforest-PACSの運用を2016年12月より開始しました。同システムはそれまでのスーパーコンピュータ「京」の性能を上回る国内最高性能システムであり、Intel社Xeon Phi 7250と同社のOmni Path Architectureネットワークを持つ計算ノードを8208台搭載した最先端メニーコアクラスタで、計算科学研究センターで運用されているCOMAシステムと異なりメニーコアプロセッサをメインCPUとして用いています。さらに26PByteの大規模共有ファイルシステムと960TByteの超高速共有ファイルキャッシュを持ちます。2016年11月のTOP500リストでは、ピーク性能25Pflops、Linpack性能13.5Pflopsとして世界第6位、国内第1位にランクされました。メニーコアプロセッサは今後の超高性能システムの重要なプロセッサ技術として注目されており、今後、多様なアプリケーションの開発と、我が国の主要スーパーコンピュータとして幅広い計算科学研究に用いられます。

Oakforest-PACS

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発展させてきました。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。

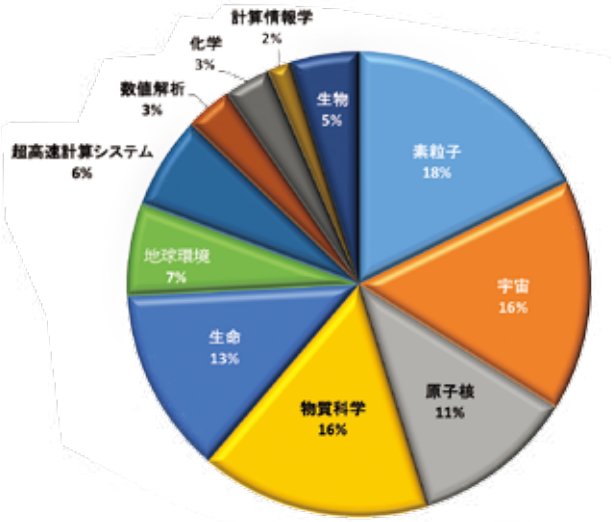
科学分野としては、素粒子、宇宙、原子核、物質科学、生命科学、地球環境、生物、化学の諸分野、そして計算機工学分野として、超高速計算システム、計算情報学、数値解析の諸分野の研究課題を募集し、研究を推進してきました。学際共同利用プログラムにおいて無償で利用できる計算機資源として、平成19～23年度にはPACS-CS、平成21～23年度にはFIRST、平成20～25年度にはT2K-Tsukuba、平成24年度からはHA-PACS、そして平成26年度からは、COMA(PACS-IX)を共同利用に供しています。平成29年度からは、最先端共同HPC基盤施設の運用するOakforest-PACSの一部を共同利用に供します。

表には、最近10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28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27年度	51件(通年)	HA-PACS, COMA
平成28年度	62件(通年)	HA-PACS, COMA

平成28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8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
— 発展する計算科学と次世代の計算機 —
平成28年10月17～18日 筑波大学大学会館国際会議室

◆第7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
— 多分野に広がる計算科学の発展と将来像 —
平成27年10月19～20日 筑波大学大学会館国際会議室

◆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 筑波大学大学会館国際会議室

◆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 筑波大学大学会館国際会議室

◆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 筑波大学大学会館国際会議室、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
— ポストペ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 筑波大学大学会館国際会議室

◆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 筑波大学大学会館国際会議室

素粒子物理分野

●研究部門主任：藏増嘉伸 教授
●メンバー　　：石塚成人 准教授／谷口裕介 准教授／吉江友照 准教授／大野浩史 助教／青木慎也 客員研究員(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。これらのうち、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、強い力の研究のため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次元から成る4次元時空間を離散化した格子上に量子色力学(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。

研究トピックス

- 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
- テンソル繰り込み群の格子ゲージ理論への応用

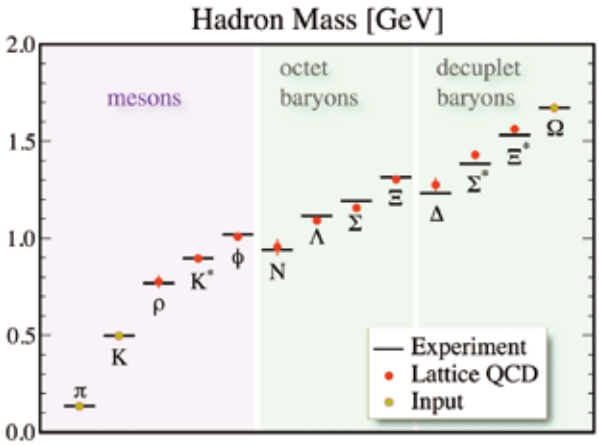


図1　格子QCD計算によるハドロン質量と実験値の比較

最新の成果

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)。また、有限温度・有限密度QCDにおける相図を決めることは、格子QCD研究の最大の目標の一つですが、近年、われわれのグループは世界で初めて3フレーバー (アップ、ダウン、ストレンジクォークの質量が同じ)QCDにおけるゼロ密度での臨界終点の決定に成功しました(図2)。

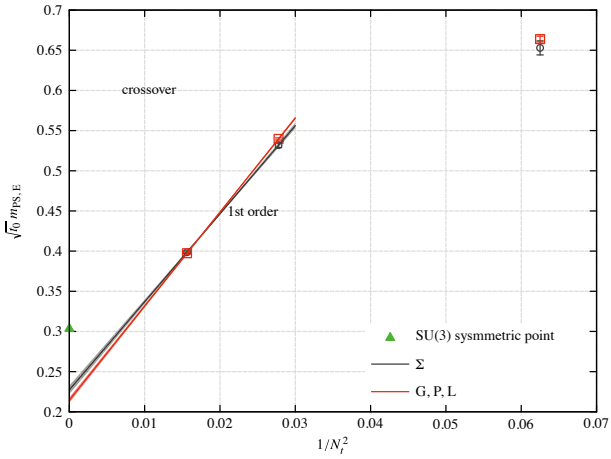


図2　3フレーバー QCDにおけるゼロ密度での臨界終点

<研究部門主任>

藏増 嘉伸 筑波大学計算科学研究センター教授

博士(理学)。1995年東京大学大学院理学系研究科物理学専攻修了。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／古家健次 助教／
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138億年前に“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6億年経った頃の宇宙に、生まれた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6億年の間に、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。

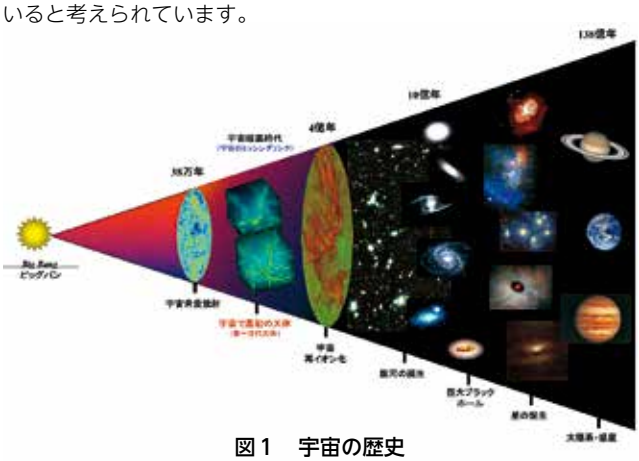


図１　宇宙の歴史

研究トピックス

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。

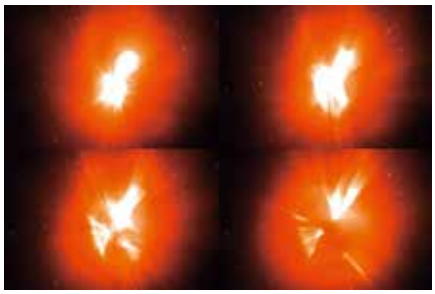


図２　宇宙初期に誕生した星が周辺環境に及ぼす影響

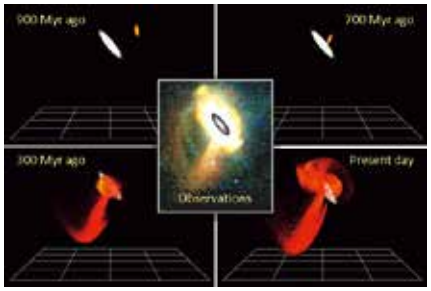


図３　アンドロメダ銀河で起こった銀河衝突のシミュレーション

<研究部門主任>

梅村 雅之 筑波大学計算科学研究センター教授・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。1988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

●研究部門主任：中務　孝 教授
●メンバー　　：矢花一浩 教授／橋本幸男 講師／日野原伸生 助教

分野の説明

原子核は核子と呼ばれるフェルミ粒子(陽子と中性子)の集合体として記述できますが、多粒子系の量子力学や場の量子論といったミクロな世界を支配する力学が必須となる分野です。原子核の存在には、自然界の4つの力のうち、「強い力」、「電磁気力」、「弱い力」の3つが複雑に絡み合って、様々な構造と反応の様相を示し、それが我々の身の回りの物質の存在に関与しています。例えば、太陽や夜空の星々は原子核を燃料として輝いていますが、それは元素を生成する工場の明かりです。また、その燃焼(核反応)過程は、関与する力の性質や核構造に依存し、星の明るさ・寿命、生成する元素の種類・量などを支配しています。

原子核物理は、加速器を用いた実験と計算機を用いた理論計算の両輪で進歩してきました。原子核のような量子力学の多体問題には、数値計算が不可欠です。原子核物理研究部門では、量子力学に基づく理論、モデル、数値計算法を開発し、核構造、核反応、星の構造、物質の量子ダイナミクスを解明する研究を展開しています。

研究トピックスと成果

有限量子多体系である原子核を普遍的・定量的に記述できる理論として、エネルギー密度汎関数を出発点にする密度汎関数理論が発展してきました。図１はこれに基づいて計算された核変形を示します。さらに時間依存密度汎関数理論では、応答・反応・励起モードなどを研究することができます。我々は、原子核の光核反応と巨大共鳴、低エネルギー励起状態と核反応の数値解析に大きな成果を挙げており、核反応のミクロな機構や、核構造における対称性の自発的破れと量子揺らぎに関して多くの知見を得ることに成功しています。

数値シミュレーションによって得られた成果は、核構造・核反応・核物質の性質を理解するとともに、超新星爆発等の爆発的天体現象の中で合成される重元素の生成過程を理解する上でも重要な情報になります。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対凝縮を起こした超流動状態にあることが、図１の結果でも確かめられており、回転運動等の集団運動への影響を研究しています。核反応においては、対凝縮相からの核子対移行や反応中の核形状変化の起こり易さなど、未解決の重要課題が多く、現在、核子超流動を考慮した3次元空間における実時間シミュレーション計算の遂行、大振幅集団運動論に基づく核反応経路の微視的決定等を推進しています。日本初の元素名を獲得した「ニホニウム」は、核融合反応によって人工的に生成された113番元素ですが、関連する重イオン融合反応や核分裂現象のミクロな機構解明にも、数値シミュレーションが成果を挙げています(図２)。

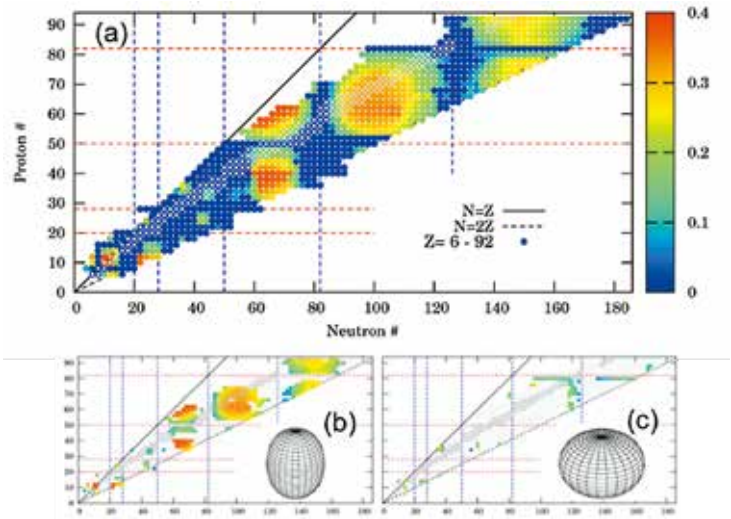


図１　(a) 原子核の変形の大きさ(変形度)の核図表。比較的大きく変形した原子核のうち、(b) ラグビーボール型、(c) パンケーキ型に変形したもの。

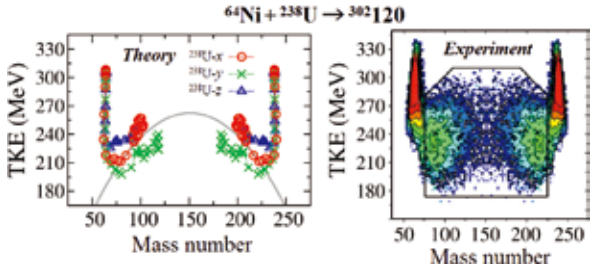


図２　ニッケルとウランの原子核の衝突によって生成される様々な原子核の質量と運動エネルギー。シミュレーションの結果(左)と実験データ(右)。

<研究部門主任>

中務　孝 筑波大学計算科学研究センター教授

博士(理学)。1994年京都大学大学院博士課程修了。カナダ・チョークリバー研究所、英国・マンチェスター工科大学、理化学研究所等でのポスドク研究員を経て、2001年東北大学大学院理学研究科助手、2004年筑波大学物理学系講師、2007年理化学研究所准主任研究員、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

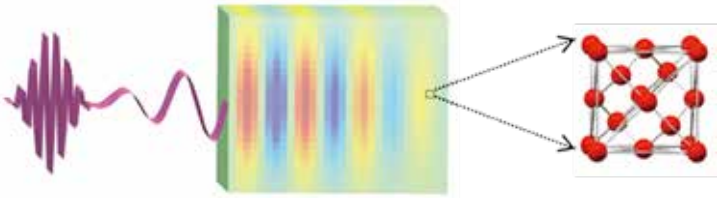
分野の説明

我々の周囲に存在している物質は原子から成り立っており、原子は原子核と電子で構成されています。これらの物質は、その組成や構造により様々な性質を示し、それらの利用が今日の科学技術を支えています。本部門では、多様な物質をクーロン相互作用により結合した量子多体系と捉え、計算機を用いて量子力学的な運動方程式を解きます。そして、物質のさまざまな性質の解明や新たな機能を持つ物質の探索により、次世代の技術の基盤となる知見を得ることを目指します。

研究トピックスと成果

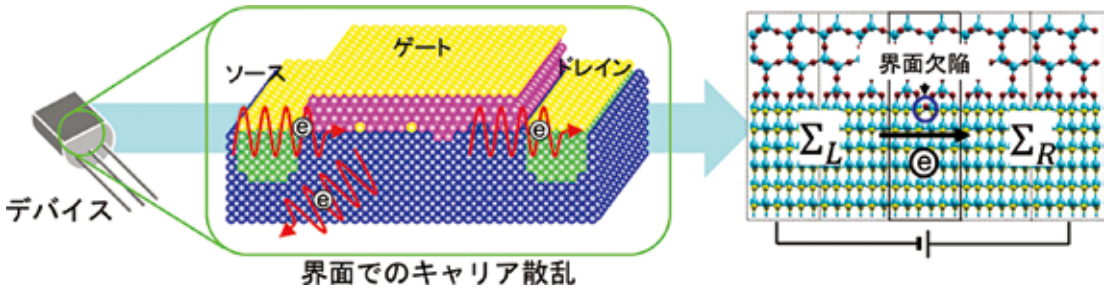
●光と物質の相互作用

光は物質の性質を精密に測定する手段を与えてきました。最近の光科学では、高強度で非常に短いパルス光を用いることにより、電子の超高速運動に対する実時間測定や、光による電子運動の操作が行われています。我々は電子ダイナミクスに対する第一原理計算に基づく計算コードを開発し、光と物質の相互作用の解明に取り組んでいます。



●物質の表面・界面における現象とデバイス

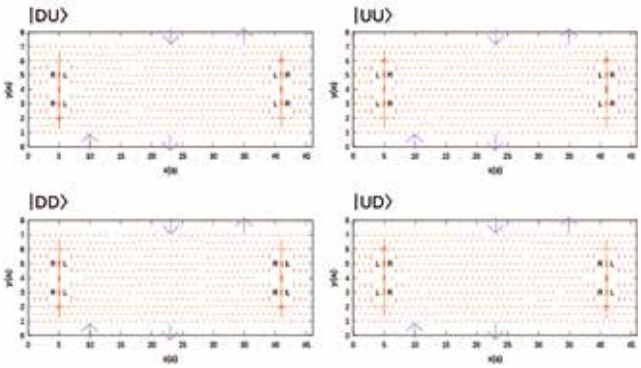
表面・界面では、電子は物質の内部と異なった運動をします。コンピュータなどに搭載されるデバイスでは、表面・界面での電子の振舞いがデバイスの機能を支配します。我々は、計算により表面・界面での電子の振舞いを解明し、デバイスの高性能化や新機能デバイスの開発に役立てる研究を行っています。



●強相関物質、トポロジカル物質

電子の相関が強い物質や、物質の形状が性質に反映するトポロジカル物質は、バンド理論では理解できない様々な性質を示します。我々はそのような物質に対し、電子状態や相転移、光応答などの計算の手法の開発、および量子情報デバイスへの応用に関わる研究を行っています。

右図は、スピン渦誘起ループ電流による２量子ビット４状態を表しています。



<研究部門主任>

矢花 一浩 筑波大学計算科学研究センター教授

理学博士。1987年京都大学大学院理学研究科修了。1988年新潟大学理学部助手、1999年筑波大学物理学系助教授、2002年教授を経て、2004年より現職。専門は計算物質科学と原子核理論。電子ダイナミクスの第一原理計算、高強度パルス光と物質の相互作用に関する研究に従事。

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／栢沼　愛 助教

分野の説明

生命現象はタンパク質、核酸、脂質、糖類などの生体内分子によって駆動される一連の化学反応によって支配されています。そのため、生命現象の根本的分子メカニズムは化学反応に伴う電子状態変化と原子の空間配置を探索することで明らかにできます。生命機能情報分野では、量子論に基づく第一原理計算や古典（統計）力学に基づく分子動力学計算などの計算科学的手法を駆使して、生体内分子に内在する動的な構造-機能相関を明らかにし、生命現象の本質を捉える研究を行っています。

研究トピックス

(1) 分子動力学計算タンパク質の構造変化の解析（タンパク質の折りたたみ経路解析）

(2) ハイブリッドQM/MM法によるタンパク質の反応解析（ニトリルヒドラターゼ、光化学系IIなど）

(3) 星間空間でのアミノ酸生成機構、L体過剰生成起源の解明（グリシン、アラニン生成など）

現在までの成果

(1) タンパク質の構造変化を効率的に誘起するサンプリング手法を開発し、タンパク質の折りたたみ、ドメイン運動、誘導適合過程、多量体形成過程など、タンパク質機能において極めて重要な構造変化過程を抽出する方法を開発しています。本手法は超並列環境に極めて適した手法であり、計算学研究センターのスーパーコンピュータを用いて計算を実行しています。

(2) 光化学系IIはマンガン、カルシウム、酸素原子で構成される極めて特徴的な反応活性中心を持っており、光エネルギーを利用して多段階の化学反応で水分子から酸素分子を生成しています。我々は、本反応（水分解反応）での構造•電子•プロトン移動変化についてハイブリッドQM/MM法を用いて明らかにしてきました。

(3) 生命を構成する生体内分子のいくつかは隕石中で発見されていることから、星間空間に生命起源が存在する可能性があります。我々は高精度第一原理計算手法を用いて、アミノ酸合成・分解の様々な反応経路を網羅的に解析しています。宇宙物理研究部門と協力し、生命起源につながる分子進化過程について研究を行っています。

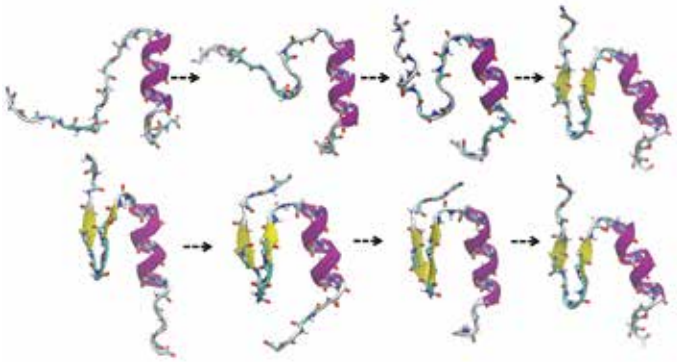


図１　トリプトファンケージの折りたたみシミュレーション

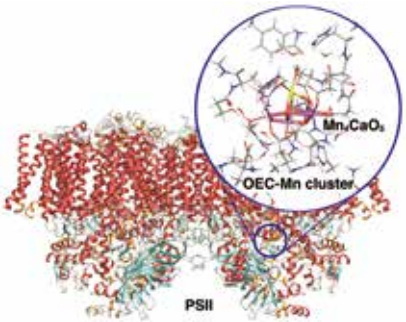
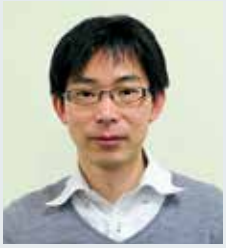


図２　光化学系IIの全体構造と活性中心構造

図３　星間空間での分子進化とアミノ酸生成



<研究部門主任>

重田 育照 筑波大学計算科学研究センター教授

博士（理学）。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 教授

分野の説明

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。

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遡り、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。

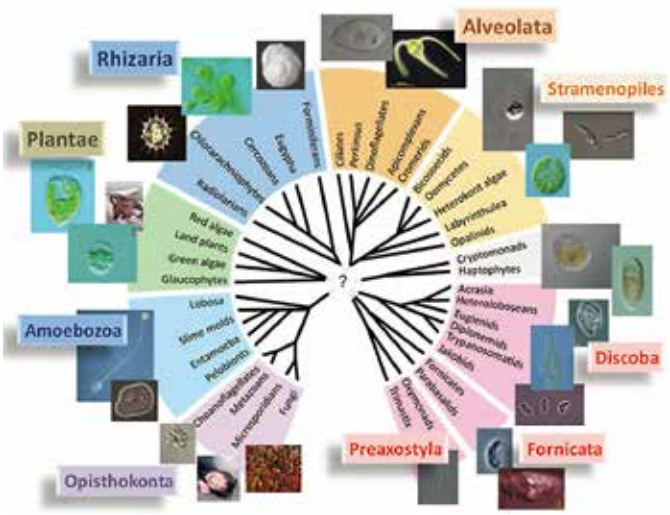


図１　真核生物の主要系統群

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

研究トピックスと成果

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クエンス技術を用い、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。我々は次世代シークエンス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 筑波大学計算科学研究センター教授

博士（理学）。1995年名古屋大学大学院理学研究科生物学専攻博士課程（後期）修了。1994-1995年、日本学術振興会特別研究員DC2、1996-1998年㈱JT生命誌研究館奨励研究員、1998-2000年日本学術振興会海外特別研究員（カナダ・ダルハウジー大学）、2000-2004年カナダ高等研究所博士研究員（カナダ・ダルハウジー大学）、2004-2005年長浜バイオ大学講師、2005年筑波大学に助教授として着任。

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 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３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、都市気候などの局地気象を専門とする日下博幸教授、アンサンブル予報を用いた予測精度の向上を目指した松枝未遠助教です。

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)、学外共同研究者として、4次元同化を研究する寺崎康児研究員(理化学研究所)がおり、研究協力を行っています。

研究トピックスと成果

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COMA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。

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。

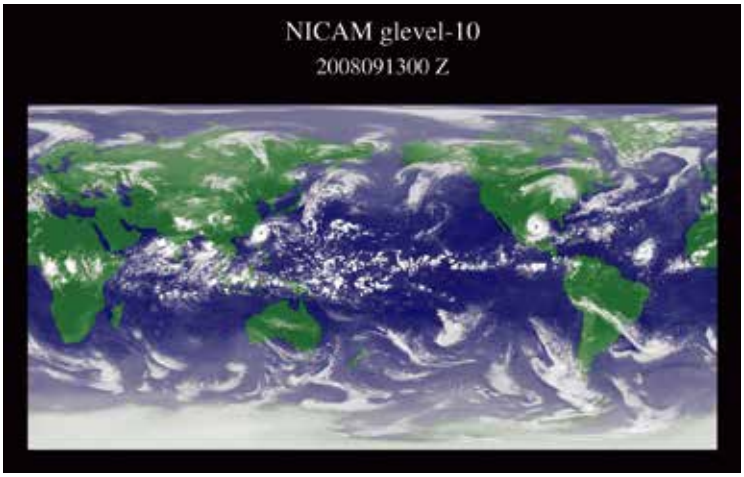


図１　NICAM全球7km解像度モデルによる雲画像。2008年の台風13号(Sinlaku)とハリケーン(Ike)の2つが同時に発達している。

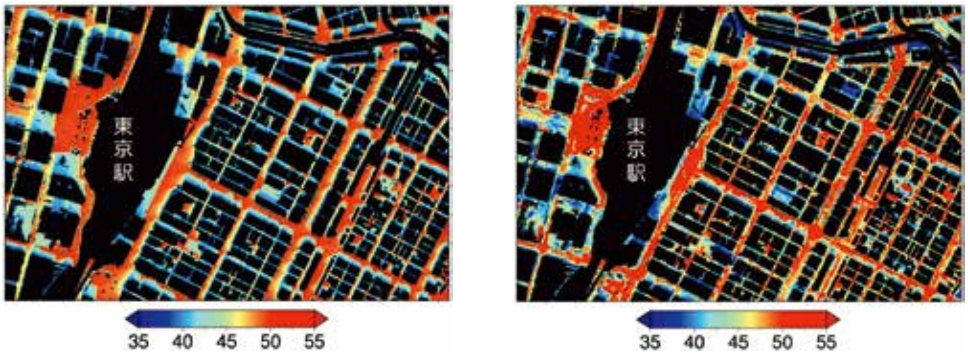


図２　東京駅周辺の表面温度分布。黒色は建物。左図はCity-LESによるシミュレーション結果で、右図は東京都環境科学研究所によるヘリコプター観測の結果。

<研究部門主任>

田中　博 筑波大学計算科学研究センター教授

Ph.D。1988年米国ミズリー大学コロンビアキャンパス大気科学博士課程修了。筑波大学3期生です。Ph.D取得後はアラスカ大学地球物理研究所で授業や研究指導を行いました。本学の国際化に貢献したいと考えます。

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　　：高橋大介 教授／建部修見 教授／川島英之 准教授／多田野寛人 助教／小林諒平 助教／塙　敏博 客員准教授

分野の説明

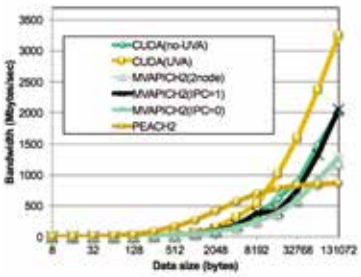
高性能計算システム研究部門では、最先端の計算科学の推進のために求められる超高速・大容量計算の要望に応えるため、様々な高性能計算(HPC)向けハードウエアおよびソフトウエアの研究開発を行っています。センター内の各応用分野チームとの連携により、実問題に対する理想的なHPCシステムの提供を目指しています。

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。

研究トピックスと成果

●TCA：密結合演算加速装置アーキテクチャ用

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ています。



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

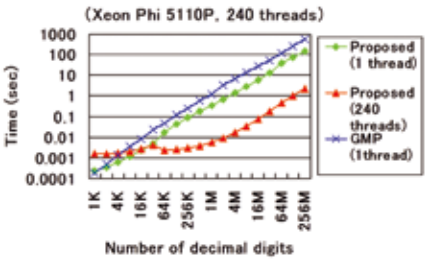
数十万台の分散メモリノードを持つような次世代並列システムにおいては、従来の明示的なメッセージパッシング型プログラミングではソフトウエアの生産性を高めることが困難です。簡単な並列プログラミングを実現しつつ性能チューニングの自由度を高めるために、我々はXcalableMPと名付けた新言語を開発しています。これはベースとなるCまたはFORTRAN言語に、OpenMPライクな指示文を追加することにより、分散配列の処理を簡潔に記述します。それとともに、高度なチューニングを許容するPGAS的なローカルビューモデルを提供します。

●Gfarm：大規模広域分散ファイルシステム

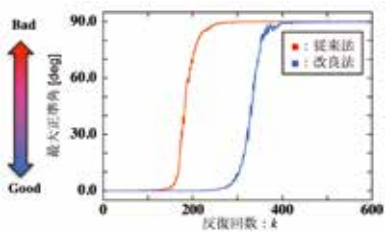
現実的な大規模広域分散計算環境において、高性能分散ファイルシステムは極めて重要な技術です。Gfarmは我々の部門で開発されているオープンソースな分散ファイルシステムで、数百台規模の分散ノード、数百Tbyteのストレージ、毎秒数千のファイル処理を実現します。メタデータサーバーが性能ボトルネックとならず、クライアント数における高い拡張性を保つように設計されています。

●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。



多倍長精度浮動小数点乗算の性能



シフトブロッククリロフ部分空間法における2つの部分空間が成す最大正準角の維持の改良

<研究部門主任>

朴　泰祐 筑波大学計算科学研究センター教授・副センター長

工学博士。1990年慶應義塾大学大学院理工学研究科電気工学専攻博士課程修了。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 教授／塩川浩昭 助教

分野の説明

計算科学において、ビッグ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、ビッグデータ利活用のためのデータ工学関連分野の研究開発を担当しています(図1)。具体的には、多様な情報源やリアルタイムデータを統合的に扱うためのデータ統合基盤技術、高性能大規模データ分析技術、大規模科学データやソーシャルメディアに埋もれた知識やパターン等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ける様々なデータや知識を統一的に扱うためのオープンデータ関連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、素粒子物理研究部門、生命科学研究部門、国際統合睡眠医科学研究機構等と連携して、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。

研究トピックス

●ビッグデータ基盤技術

3V(Volume、Variety、Velocity)に特徴付けられるビッグデータの処理・分析のための基盤技術の研究：1)データベースやWeb等に加えて、センサデータ等のストリームを連携するための基盤システムの開発、2)GPUやメニーコア等による超並列処理を活用した高性能ビッグデータ分析技術、3)ビッグデータ処理におけるプライバシーやセキュリティ、4)RDF、LOD等のオープンデータ処理基盤。

●データマイニング・知識発見

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)テキスト、画像、グラフ等に対する各種分析アルゴリズム、2)ソーシャルメディア分析およびマイニング、3)機械学習を用いた生体データ分析。

●科学データ利活用

爆発的に増加する科学データの管理や利活用を目的とした研究：1)大規模気象データベースGPV/JMAおよびJRA-55アーカイブの運用・開発、2)格子QCDデータグリッドJLDG/ILDGの運用・開発、3)機械学習を用いたゲノム・生物データ利用の高度化。

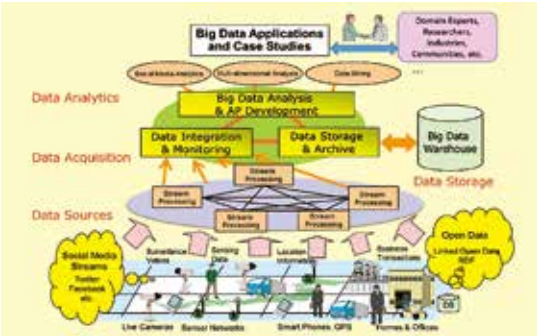


図1 ビッグデータに対するデータ基盤分野の取組み

現在までの成果

●ビッグデータ基盤技術

異種ストリーム統合基盤システム、ストリーム・バッチ統合型ビッグデータ処理基盤、GPUを活用した超高性能データ分析手法等の研究開発が進んでいます。

●データマイニング・知識発見

大規模グラフや画像に対する高速分析アルゴリズム、ソーシャルメディアの活用範囲を飛躍的に向上させる高度なメタデータ抽出アルゴリズム等の研究開発が進んでいます。

●科学データ利活用

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-55アーカイブの開発と運用を行っています(図2)。

図2　GPV/JMAアーカイブ

<研究部門主任>

北川 博之 筑波大学計算科学研究センター教授

理学博士。1987年東京大学大学院理学系研究科（論文博士）。日本電気㈱勤務を経て、1988年筑波大学着任。データベース、情報統合、データマイニング、情報検索等の研究に従事。情報処理学会フェロー、電子情報通信学会フェロー、日本学術会議連携会員。

計算メディア分野

●分野リーダー：亀田能成 教授
●メンバー　　：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、映像情報の高度で知的な加工技術に加えて、多種多様なセンサ群を適切に組み合わせて現実社会の状況を知る仕組み、情報を受け取るユーザを確認してその人に合わせて加工する仕組み、などの研究も進めています。

研究トピックス

- 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
- 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
- 現実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
- 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
- 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
- 多視点映像を高精細かつ滑らかに切り替えることで実現する高臨場感技術

図１　選手視点映像

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。

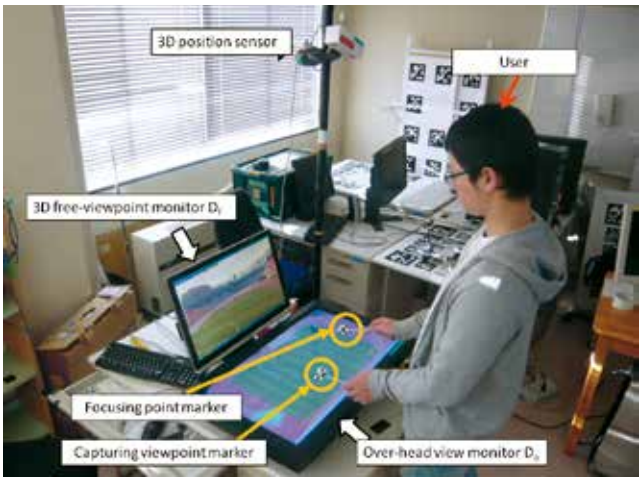


図２　自由視点映像閲覧システム

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>

亀田 能成 筑波大学計算科学研究センター教授

博士(工学)。1996年3月京都大学 大学院 博士後期課程 研究指導認定退学。1999年7月京都大学博士(工学)受領。京都大学助手、MIT客員研究員、筑波大学講師、助教授、准教授を経て現職。映像メディア、画像メディアを中心とする計算メディアに基いて、人と情報との関わりをより洗練させていくための研究に従事。電子情報通信学会マルチメディア・仮想環境基礎(MVE)研究会委員長。

研究開発
推進室紹介

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ています。

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や、メニーコアプロセッサを演算加速装置として搭載したCOMA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最適化の検討を行ってきました。現在は、最先端共同HPC基盤施設に導入されるメニーコアプロセッサを搭載した超並列計算機Oakforest-PACSへの対応を中心とする取り組みを進めています。

先端計算科学推進室のOakforest-PACS活用に向けた取り組み

	目標とする科学のターゲット	メニーコア・プロセッサを用いた主要な数値計算
素粒子分野	・素粒子標準理論の高精度計算 ・マルチスケールの物理 ・有限温度・有限密度の物理 ・素粒子標準理論を超える物理	・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 ・固有値・特異値計算
宇宙分野	・宇宙初期における初代天体形成の解明 ・銀河スケールから宇宙大規模構造に亘る天体形成の解明	・レイトレーシング法による輻射輸送・輻射流体シミュレーション ・6次元位相空間でのVlasovシミュレーション
原子核分野	・核構造・核反応の統一的記述に基づく多核子ダイナミクスの解明	・射影法・配位混合計算 ・対凝縮を含む時間依存密度汎関数計算
物質分野	・光と物質の相互作用と、物質中の超高速電子ダイナミクスの解明	・実時間・実空間密度汎関数法計算
生命分野	・生体内でおこる酵素反応の解析 ・真核生物の分子系統樹解析	・フラグメント分子軌道法 ・実空間Car-Parrinello分子動力学法
地球環境分野	・北極振動の解明 ・都市気象、局地風の解明	・ポアソン方程式の高速解法 ・高次元データの類似検索
データ基盤分野	・大規模科学データの管理および知識発見	・大規模グラフデータ処理 ・大規模科学データに対するクラスタリング
計算ソフトウェア分野	・計算科学における大規模並列計算手法の数理	・密行列一般化固有値問題並列解法 ・疎行列向け固有値計算ソフトウェアz-Pares、CISSの開発

次世代計算システム開発室

ペタを超えエクサフロ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、単純なノード数増強による性能向上は限界に近づきつつあります。現在の100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、これによりシミュレーションのステップあたりの時間短縮(strong-scaling)が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 (TCA: Tightly Coupled Accelerators)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/TCAの運用を行うことで、エクサフロップスに向けた実証実験を行ってきました。現在、このコンセプトを発展させ、FPGA (Field Programmable Gate Array)を高性能並列処理に用いる、Accelerator in Switchアーキテクチャによるシステム開発を進めています。これは、従来のCPUとGPUの組み合わせだけでは、柔軟性の不足、並列度の部分的な不足、並列通信ボトルネック等の理由により、十分な演算加速が行えなかったアプリケーションに対し、FPGAを補完的に用いることで理想的な演算加速を行うというコンセプトです。ここでは、FPGAを以下のような多様な目的で用います。

高性能ノード間通信

TCAでは主としてFPGAをPCI Expressプロトコルのみを用いた通信系として用いましたが、近年のFPGAは100Gbpsクラスの通信チャネルを複数持つことが可能で、これを積極的に用いた高バンド幅・低レイテンシ通信に用います。

FPGAへの部分オフローディング

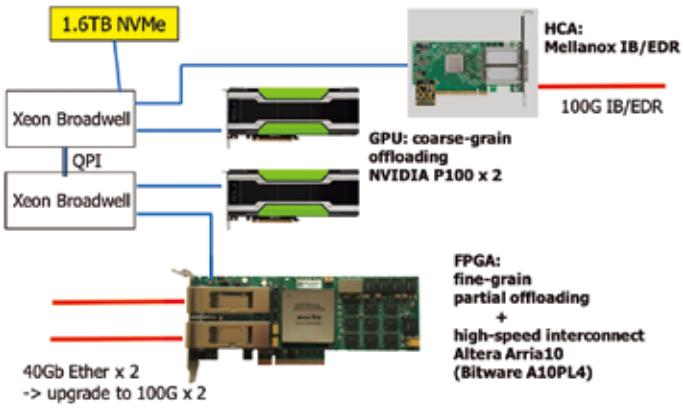
GPUは大規模な均一並列処理が得意ですが、アプリケーションによってはその実行中に例外処理が多い部分や並列性が不足する部分があり、GPUの性能を十分に活かせません。CPUでは遅すぎ、GPUにも不向きなこのような処理をFPGAでハードウェア処理することにより、最適な機能分散処理をノード内で実現します。

演算加速と通信の融合

高性能通信と部分オフローディングを同一のFPGA内で実現することにより、通信と演算が密接に関係する処理をFPGA内で処理すれば、従来のGPUコンピューティングでボトルネックとなっていた処理を円滑に行い、strong-scalingを効率的に実現できます。

PPX (Pre-PACS-X)

Accelerator in Switchのコンセプトをベースに、PACSシリーズの第10世代システムとしてPACS-X (PACS ver.10)システムの実現が計画されています。同コンセプトの実証実験プラットフォームとして、PACS-Xのプロトタイプシステム PPX (Pre-PACS-X)を構築しています。PPXは最先端GPUであるNVIDIA社のTESLA P100 GPUカードを2台、Intel社E5-2680v3 CPUを2台、Intel社のArria10 FPGAを搭載したFPGAボード、1.6TByteのNVMeストレージからなる計算ノードを持つ、6ノードのミニクラスタです。Arria10 FPGAからは40Gbps Ethernetを2ポート引き出すことができ、マルチリンクを用いた高速ノード間通信が可能です。また、ノード間は汎用並列ネットワークとしてInfiniBand EDR (100Gbps)でも結合され、各種性能評価や比較を行うことができます。今後、PPXでのFPGAプログラム及びアプリケーションの総合的開発を進め、PACS-Xの実現に向けた研究を進めていきます。



HPCI推進室

フラッグシップ・マシンによる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、多様なユーザー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一つとして、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、が挙げられます。2011年度から2015年度までの5年間推進されたHPCI戦略プログラムでは、スーパーコンピュータ「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分野(戦略分野)として5つの分野が選定され、その5番目である「分野5：物質と宇宙の起源と構造」は、素粒子・原子核・宇宙物理を中心とした基礎物理の分野です。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・国立天文台を中心とする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)が担い、計算科学の成果創出と体制構築を推進しました。

ポスト「京」にむけて

現在、スーパーコンピュータ「京」の後継として、その約100倍の計算性能を有するポスト「京」の研究開発プロジェクトが推進されています(フラッグシップ2020プロジェクト)。それに伴い、「ポスト「京」で重点的に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開発・研究開発」として9つの重点課題が選定され、その中の重点課題9「宇宙の基本法則と進化の解明」は、HPCI戦略プログラム分野5における研究開発を発展させたものであり、実施機関として筑波大学計算科学研究センターと7つの分担機関が選ばれています。また、重点課題7「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」においても、筑波大学計算科学研究センターが分担機関として参画しています。さらに重点課題とは別に、ポスト「京」で新たに取り組むチャレンジングな課題として4つの萌芽的課題が選定されており、その中の萌芽的課題1「基礎科学のフロンティア － 極限への挑戦」と萌芽的課題3「太陽系外惑星(第二の地球)の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明」においても本センターは分担機関として参画しています。本戦略室では、重点課題・萌芽的課題における中核実施機関として、ポスト「京」に向けたアプリケーション開発・研究開発を推進していきます。

スーパーコンピュータ「京」

学際計算科学連携室

計算科学の国際ハブ拠点形成にむけて

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

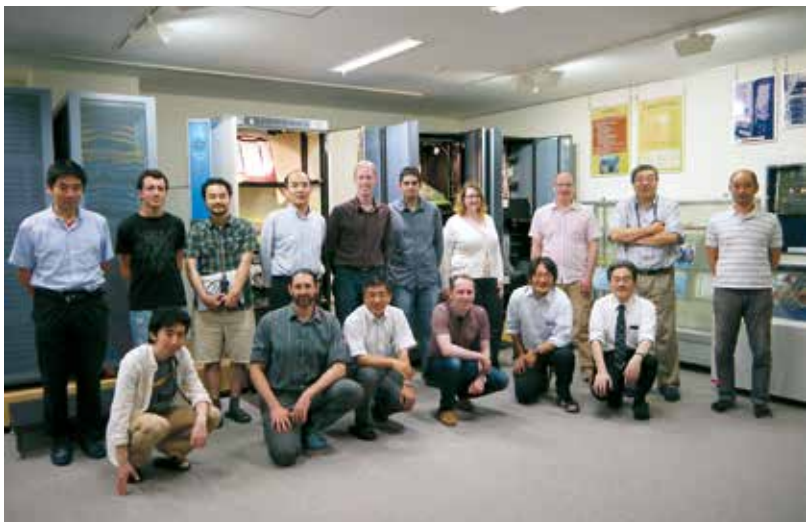
国際的な連携として、筑波大学と英国エジンバラ大学および米国ローレンス・バークレー国立研究所との間で連携協定を締結しています。エジンバラ大学並列処理センター (EPCC) とシンポジウム、米国ローレンス・バークレー国立研究所とワークショップを、韓国科学技術情報研究院 (KISTI) とHPCウィンタースクール・ミニワークショップを毎年開催し、計算科学の研究交流を深めています。

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。



CCS-エジンバラ大学共同ワークショップ

研究開発推進室紹介

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。

・コンピュータサイエンス英語プログラム

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「英語プログラム」を開設しています。1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	数理アルゴリズム特論	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
	統計解析	Statistical Analysis
	基礎計算生物学	Basic Computational Biology
	コンピュータサイエンス英語講義I	Topics in Computational Science I
	Principles of Software Engineering	Principles of Software Engineering
	情報システム評価特論	Advanced Performance Evaluation for Computer and Communication Systems
	適応的メディア処理	Adaptive Media Processing
	Experiment Design in Computer Science	Experiment Design in Computer Science
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、東京大学との間でJCAHPCを設置し、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・バークレー国立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

広報・戦略室と連携して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地域の方々とも交流を深めています。また、出張授業などを積極的に行っています。

計算科学研究センターの発展と計算科学の推進を支援する

室長　梅村　雅之 教授

計算科学研究センターの発展と計算科学の推進のための広報活動に加え、本センターにおける戦略的プロジェクト推進のサポートを行うことを目的として、2016年に広報・戦略室を新設しました。計算科学振興室、学際計算科学連携室等とも連携をしてセンターの研究活動の支援と広報活動に取り組んでいます。

Oakforest-PACS
運用開始記者会見

筑波山神社との共同気象
観測所設置記者会見

プレスリリース・記者発表・メディア対応

研究成果やセンターの活動をメディアや一般向けに発信しています。

全国紙、TV、ネットニュースなどに多数取り上げられています。

一般向けコンテンツ

ウェブサイトでもざまざまな情報を発信しています。
(http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/)

ウェブサイトではセンター紹介動画や一般向けパンフレット、研究者のインタビューなども見ることができます。

見学・一般公開

中高校生等の団体見学や年に一度の一般公開で、センターの活動やスーパーコンピュータを紹介しています。年間 2,000人前後の見学者を受け入れています。

プロジェクト支援

筑波山神社と共同で進める筑波山山頂での気象観測プロジェクトや、東京大学情報基盤センターと設置した最先端共同HPC基盤施設とスーパーコンピュータ Oakforest-PACS の広報活動にも取り組んでいます。毎年アメリカで開催されるスパコン分野の大きな学会(SC)でのブース展示なども運営しています。

筑波山プロジェクトフライヤー

Oakforest-PACS に関する記事,
HPCWIRE Japan

SC16の様子

ACCESS

■つくばエクスプレス(TX)＋バス

- つくば駅(快速で、秋葉原駅から45分、北千住駅から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)」行きのバスに乗車(所要時間約10分)
  「第一エリア前」下車　徒歩1分(道路を挟んだ向かい側の建物)

■JR常磐線＋バス

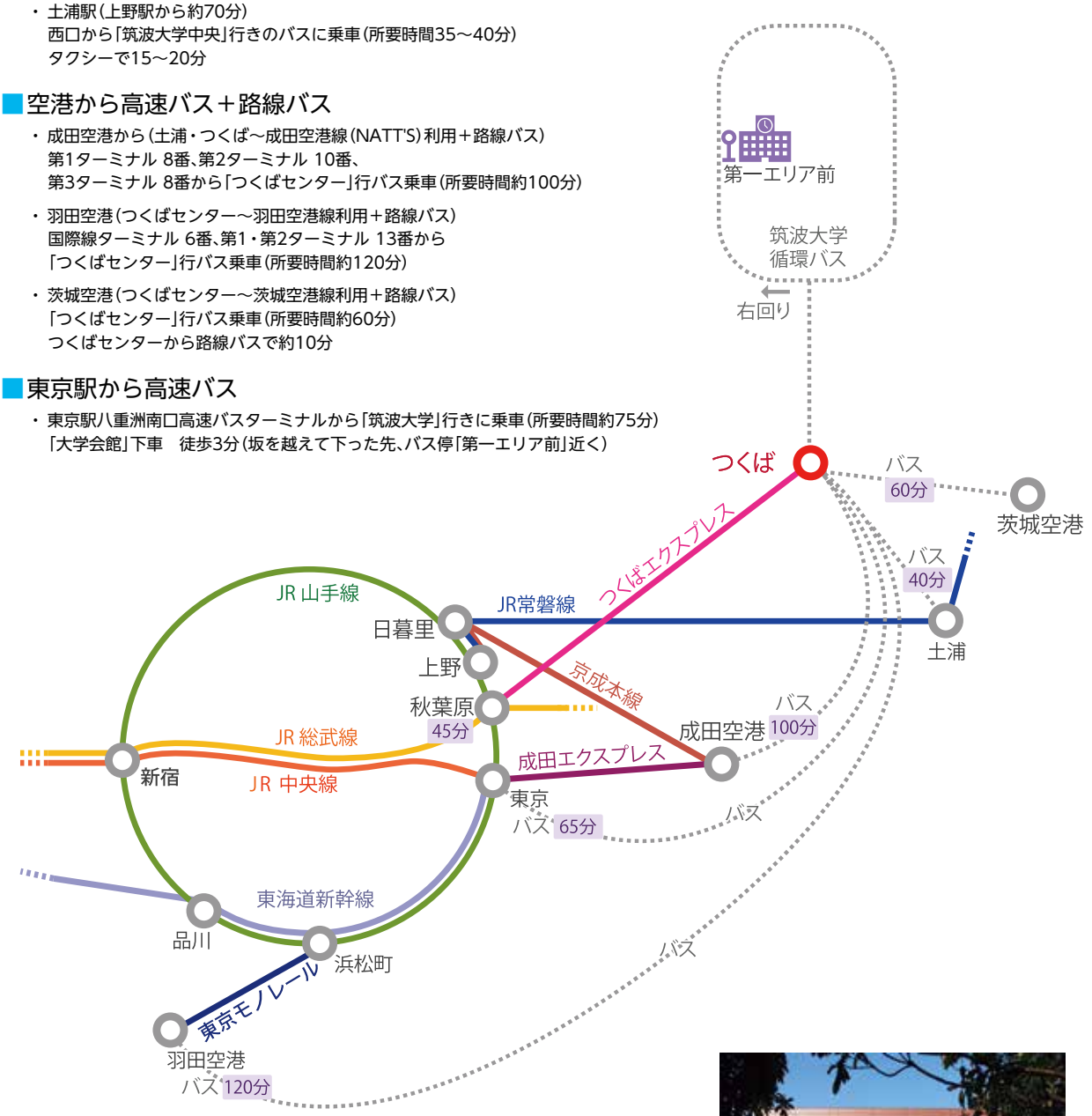
- ひたち野うしく駅(上野駅から約60分)
  東口から「筑波大学中央」行きのバスに乗車(所要時間40～50分)「第一エリア前」下車
  徒歩1分　タクシーで20～25分
- 土浦駅(上野駅から約70分)
  西口から「筑波大学中央」行きのバスに乗車(所要時間35～40分)
  タクシーで15～20分

■空港から高速バス＋路線バス

- 成田空港から(土浦・つくば～成田空港線(NATT'S)利用＋路線バス)
  第1ターミナル 8番、第2ターミナル 10番、
  第3ターミナル 8番から「つくばセンター」行バス乗車(所要時間約100分)
- 羽田空港(つくばセンター～羽田空港線利用＋路線バス)
  国際線ターミナル 6番、第1・第2ターミナル 13番から
  「つくばセンター」行バス乗車(所要時間約120分)
- 茨城空港(つくばセンター～茨城空港線利用＋路線バス)
  「つくばセンター」行バス乗車(所要時間約60分)
  つくばセンターから路線バスで約10分

■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」行きに乗車(所要時間約75分)
  「大学会館」下車　徒歩3分(坂を越えて下った先、バス停「第一エリア前」近く)



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/

発行年：2017 年