

筑波大学計算科学研究センターの評価、2007

結論ならびに勧告の要約

1. 評価委員会は、計算科学研究センター（CCS）の成果、その学際的なカルチャ、リーダーシップ、ならびにその将来に向かったビジョンに感銘を受けた。委員会は、センターが全体として持つ専門性とセンターが作りあげてきた研究環境は世界的に見てもユニークなものであると確信する。前身である計算物理学研究センターから引き続いて、CCS は15年間にわたって、計算機科学者と物理学者の間の非常に良好な協力関係を確立し、一連の世界クラスのコンピュータを開発して、それを用いて計算物理学の最先端の結果を生み出してきた。このことは、他の分野の計算科学への例になっており、協力による研究はセンターのカルチャに良く織り込まれている。計算科学の研究に対する、この学際的なアプローチの振興は CCS の主要な目的であり続けるべきである。このような成功をさらに続けるためには、アプリケーションと計算機の研究者が目標を共有できるプロジェクトを設定する必要がある。CCS は、計算科学と計算機科学の最先端の優れた研究プロジェクトのポートフォリオ、この研究に従事する有能な教職員、そして共有する目標が生まれ育まれる環境を保持するべきである。そのためには、学際的なプロジェクトに参加する仕組みとインセンティブを継続的に追求していかなくてはならないであろう。評価委員会は大学に対し、CCS を称揚するとともに、大学がその戦略的な価値を認識し、そのミッションの遂行をサポートし、より広い学術分野がその活動にかかわることを勧告するものである。
2. 2004年のセンターの再編は成功裏に成就され、評価委員会は、センターの組織の拡大と、それぞれの分野の最先端にあり21世紀において益々その重要性を増す幅広いアプリケーションに関する新しい研究グループの設置を、喜ばしいことと評価する。新しいグループの中には、その規模において十分でないものもあり、それらはセンターの外部と強い協力関係を構築するか、新しい人員の雇用を検討する必要がある。評価委員会は計算科学に対するセンターのビジョンと、委員会に対するすべてのプレゼンテーションに明確に反映されていた、センターが育ててきた研究者の間の共同研究のカルチャを強く支持する。
3. 評価委員会は、格子 QCD 分野の CCS の研究は世界トップレベルであり、また ILDG/JLDG プロジェクトは重要なグローバルな基盤を構築しつつあると考える。高性能計算システム(HPC)部門も世界トップレベルであり、アカデミアの立場において HPC システムを成功裏に構築している世界でも数少ないグループの一つである。これらの部門は高く認知されており、生産性が高くイノベティブである。宇宙物理学では多様な研究が実施され、そのいくつかは最先端のレベルにある。FIRST を用いた研究では新しいアプリケーション領域に重要なブレイクスルーをもたらす可能性がある。したがって、計算宇宙物理学グループは、もしその強みとする領域においてさらに大きな一貫性のある成果を得ることができれば世界トップレベルのグループになる可能性がある。物性物理学の研究は将来のデバイス応用に関する基礎的な側面に焦点を当てており、優れ

ている。時間依存密度汎関数理論の分子および核物理への応用はユニークな組み合わせであり、計算物性物理、量子多体系、計算生命科学のグループ間の協力は、この新しいアプローチにおいて CCS を世界をリードする研究グループにすることができるであろう。計算メディアグループもまた優れており、世界クラスに迫っているが、HPC とのリンクはこれからの課題である。生物科学グループは優れているが、サイズにおいて十分とはいえ、HPC とのシナジーもまた実りのある成果を得るには時間がかかるであろう。地球環境科学グループはいくつかの優れた成果を出しており、気候変化のダウンスケールに焦点を当てることには適切であるが、そのサイズは十分とはいえない。計算知能グループもまた優れており、地球環境の研究者と協力により、気候科学に関する情報を一般に公開する重要な場を造ることとなった。

4. CCS は、それぞれの分野で最大限のインパクトを持つことを確実にするために適切な計算資源を集中できるように、研究プロジェクトをサポートする国際的に競争力のある計算設備を持つべきである。大学の研究向けスーパーコンピューティングサービスに責任を持つとのセンターの戦略は、センターが適切なシステムを管理運用する助けになるであろうし、計画されている T2K の調達は、今後 3 ~ 4 年についてこの目的を達成するであろう。さらに、CCS は、最も厳しいアプリケーションの要求に対応して、新しいコンピューティングテクノロジーの開発を継続するべきであり、計算科学の特定の領域でのブレークスルーを可能にするために、それらのテクノロジーを実用にもっていく力を持つべきである。革新的なアーキテクチャの開発はリスクが高いが、得られるものも大きく、個々の開発に必要な予算の調達は保障ができないとしても、この領域におけるセンターの実績は世界でも稀有であり、失ってはならない重要な強みである。計算科学での重要な進歩のために利用できるであろう新しい技術は急激に進歩しており、センターはそれらを評価し、活用するのに特に良い位置にある。
5. CCS の技術スタッフの数は、プロジェクトの範囲が拡大したことによるコンピュータの利用の増加、ならびに、競争力を維持するのに枢要となるであろうペタスケールのアーキテクチャで効率的にスケールするアプリケーションコードの開発に対して、少なすぎる。この状況は、センターが大学のスーパーコンピュータのユーザ、さらには CCS の研究員が参加していない外部のプロジェクトに責任を持つようになるにしたがって、悪化するであろう。しかしながら、これは大学に取っては、スーパーコンピュータサービスの責任を移すと同時に、必要なサポートスタッフあるいはそれに対応する予算を、CCS に移管するきっかけとなる。CCS は、広い範囲にわたる様々なユーザに対してさらにサービス指向のユーザサポートの仕組みをとり入れる必要があるであろう。なぜならば、サービスが不十分であった場合にはセンターの優れた評判を落とす恐れがあるからである。しかしながら、センターは、このようなサービス活動が研究を中心とするセンターの焦点をぼかすことがないように注意する必要がある。
6. 計算科学でのデュアルデグ्रीプログラムを含む、センターの大学院教育についての活動を拡大していくことについては、評価委員会は強く支持するものである。なぜなら、大学における強固な計算科学のコミュニティを構築し、計算科学の次世代の科学者を養成するに役に立つからである。委員会は大学の学生とより幅広い教員双方にとって魅力的

なカリキュラムを決めることは簡単ではないことを認識している。我々は大学が CCS によるこの企画をサポートすることを推奨する。

7. CCS の学際的な研究に焦点を当てた活動、教育に関する諸活動、および新しいテクノロジーの開拓により、CCS は次世代スーパーコンピュータプロジェクト（ペタフロップスプロジェクト）などのプロジェクトの支援に大きな役割を果たすべきである。センターはこのような国家的なプロジェクトと戦略的なパートナーシップを模索するべきである。このようなパートナーシップは、計算科学の新しいアプリケーション分野の開拓を通して CCS の技術知識を補完するとともに、革新的アルゴリズム、高性能計算ソフトウェア、新しいハードウェア技術の先駆者としての能力を駆使するチャンスになるであろう。
8. CCS は、ペタスケールのスーパーコンピューティング施設が多国間組織に向かいつつある傾向を認識し、ILDG の成功に立って、将来のコアプロジェクトに向けて国際的な協力関係を積極的に開拓するべきである。今日、CCS は国際的に高いプロファイルを持っている。今こそ、これを梃子として多くの国際的なプロジェクトに参加して、日本における学際的な計算科学研究の COE として認められ続けるようにするべきである。
9. PACS-CS プロジェクトは、センターの拡大された分野のプロジェクト群をサポートするための適切な計算資源を提供するための、成功でタイムリーな研究開発であり、大学の次期スーパーコンピュータまでの橋渡しとなった。センターのシステム開発の能力により、当時の市場で調達可能なインタコネクト以上の能力のネットワーク（ハイパークロスパーネットワーク）を構成することが可能となり、それは既に 256 や 512 ノードの分割で実行されるアプリケーションで活用されている。これは、システムが 2048 ノードで実行されるアプリケーションを実行するために設定されたときにさらに役にたつであろう。CCS は現在、この全体の構成を使って QCD や材料科学でのブレークスルーを狙える良い位置にある。
10. FIRST プロジェクトは国際的にみてもユニークで、アプリケーションからのニーズによって革新的なコンピュータアーキテクチャやシステム研究をドライブし、これが翻ってアプリケーション分野における最先端の科学の成果をもたらすという、センターの能力を特徴付けるプロジェクトである。このプロジェクトにより GRAPE の技術が広い範囲の最先端の宇宙物理学アプリケーションに有効に使えるようになった。特定の分野においては特殊なハードウェアは重要な手段であり続けるであろう。CCS が汎用クラスタに組み込み型の加速器を組み込むことに関して得た知見は将来広い応用範囲に適用でき、これを後継プロジェクトの礎とするべきである。

評価委員会のオペレーションと目的

11. 評価委員会は、委員長 Richard Kenway 教授（エジンバラ大学）、副委員長小柳義夫教授（工学院大学）、喜連川優教授（東京大学）、Michael Norman 教授（カルフォルニア大学サンディエゴ校）、Hervé Philippe 教授（モントリオール大学）、Horst Simon 教授

(ローレンスパークレイ国立研究所)、住明正教授(東京大学)、寺倉清之教授(北陸先端科学技術大学院大学)の各メンバーで構成された。

12. 外部評価の目的は、2004年のセンターの改組以降および6年間の中期計画期間中の計算科学研究センター(CCS)の研究活動について、そのミッションに照らして評価することであった。評価委員会はそれぞれの研究グループの業績および、PACS-CS、FIRST、ILDG/JLSTの3つのコアプロジェクトについて、その成果と学際的なコラボレーションの有効性の双方の観点から、焦点を当てるように要請された。委員会は、成果のオリジナリティとインパクトという点から、次のカテゴリにしたがって、それぞれの研究グループをランキングした。“世界トップレベル”“world-leading”(世界的に上位5つのグループに属する); “世界クラス”“world-class”(日本国内では最も優れており、国際的には一貫して優秀な研究成果を出していると認知されているが、世界的に最も優秀であるところから少し外れる); “優れている”“excellent”(日本国内で上位5位内に入っており、国際的にいくつかの業績が認知されているが、世界クラスのグループのインパクトあるいは一貫した業績に欠けている)。最後に、委員会は CCS の将来のビジョンと戦略についてのコメントを求められた。
13. 評価委員会は、CCS を 2007 年の 10 月 30 日から 11 月 1 日に訪問した。“PART I, Overview of Center for Computational Sciences, Summary of Activities 2004-2007”, “PART II, Research Activities, Results, Collaborations and Plan 2004-2007” と “PART III, Vision and Strategies of Center for Computational Sciences”の3つの報告書が用意されていた。訪問の期間中、センター長の佐藤三久教授と前センター長の宇川彰教授(現在は学長特別補佐)から、2004年以降のセンターの活動についての説明を受け、それぞれの研究グループ(計算素粒子物理学、計算宇宙物理学、計算物性物理学、計算生命科学、量子多体物理学、地球環境科学、生物学、計算知能、計算メディア)、HPC システム部門、PACS-CS、FIRST および ILDG/JLDG プロジェクトから説明を受けた。加えて、委員会のメンバーは3つのサブグループに分かれて、それぞれの分野の研究成果についてのさらに説明を受けた。最後に、佐藤教授が CCS の将来ビジョンと戦略について説明した。委員会は CCS のメンバーと一対一に、さらに運営上の課題についてもまとめて議論することができた。後者の運営的な面についての議論ではプレゼンテーションの間に生じた疑問についての返答を得た。委員長は、委員会の訪問の最後にセンターの全員のメンバーとの会合において委員会の結論と勧告について発表した。

研究活動

素粒子宇宙研究部門

14. 計算素粒子物理学グループ。このグループはセンターのすべての主要な面において、センターが構想された時から、明確な役割を担ってきた。特に、CP-PACS プロジェクトでは、アプリケーションとコンピュータ科学者の協力により世界を大幅にリードし数年にわたってこの分野のトップとして君臨できるような体制を作れる、ということを実証した。このプロジェクトは quenched QCD の問題点を立証する画期的な成果を上げ、現在は PACS-CS を用いて、連続極限以外の外挿を必要としない物理的なパラ

メータでの格子 QCD の最初のシミュレーションという次の画期的な計算に取り掛かりつつある。同時に、格子 QCD から様々な範囲の物理量についての結果を生み出し続けており、そのうちのいくつかは世界で最初の計算であり、多くのものが最新技術を駆使した結果である。このグループは長年にわたって物理分野のプログラムにおいて一貫した方向性を保ってきており、この分野で国際的に卓越した名声を確立してきた。加えて、このグループは、International Lattice Field Theory Network におけるリーダーシップを通して国際的な協力を推進するなど、ILDG と JLDG における推進力になってきた。これまでのものよりも非常に高速な新しいアルゴリズム、このグループの豊富な経験、近い将来実現される数百テラフロップス・年の計算機資源などは、これまでなかった物理学上の成果に向かって研究を加速させている。この研究グループは、センターの研究プログラムにおける「宝石」であり続けるべきである。

15. 計算宇宙物理学グループ。このグループは、梅村教授のリーダーシップの下、規模の大きい、多様な分野にわたるものとなっている。2005 年と 2007 年の若手スタッフの増員は将来に向けての健全な配置である。4 人のポスドク研究員、15 人の大学院生、4 人の学類生があり、世界で最も大きな計算宇宙物理学グループの一つとなっている。また、FIRST や PACS-CS などのユニークな計算機資源の活用によって、世界で最も優れたグループの一つになる可能性を有している。宇宙物理学と宇宙論の多様な研究課題が探求されており、先駆的な研究がいくつかある。特に際立っているのは計算アルゴリズム開発、輻射流体力学シミュレーションによる研究課題、磁気駆動型アウトフローの先進的モデルの構築である。説明のあった研究のすべてが一様に高いレベルにあったというわけではないが、おそらくそれは新たに着手したテーマの予備的研究であったり、学生が進めている課題であったりしたためである。一つ危険性があるのは、非常に多くのコードや豊富な計算資源が使えることで、多くの分野に手を出しすぎてしまうことである。観測データに立脚して、いくつかの主要課題に集中して取り組み、よく練られた研究計画を推し進めることによって、このグループは、計算素粒子物理学グループがやったように、科学的なインパクトと顕在性を増大させることができるであろう。評価委員会としては、日本の観測を含め、新しい観測結果に則したプロジェクトについても多数聞くことができたのは良かったと思う。評価委員会は、計算宇宙物理学グループが、将来計画として FIRST コンピュータを十二分に活用していくこと、Multiple Architecture Seamless System (MASS) について HPC 部門と協力していくこと、初代星形成の研究に関連した分子水素形成 3 体反応の第一原理計算を計算物質生命部門と協力して行っていくことを支持したい。計算天文台プロジェクトについては、注意を要する。アイデアは正しいが、それを実現し維持するには相当の労力が必要となり、現時点では見返りが明らかではない。そのような取り組みは International Virtual Observatory Association (IVOA) の Theory Virtual Observatory Working Group と調整して進めるべきであると考えられる。

物質生命研究部門

16. 計算物性科学グループ。このグループの研究活動は、次世代のデバイステクノロジーに関わる基礎研究に上手に焦点が当てられているのが特徴であり、この分野の研究の科学的なレベルは非常に高い。シリコン中の divacancy の原子構造、電子構造の大規模第一

原理計算による解析は、このグループの現在そして近未来のシリコンのテクノロジーに関する研究の好例である。実際の計算は、このグループで新規に開発された高並列実空間密度汎関数法コード(RSDFT)によって行われた。近未来のデバイステクノロジーに関するもう一つの技術的、科学的に重要な成果としては、Schottky barrier の新しい理論構築が挙げられる。また、次世代ナノデバイスに向けた新材料に対する研究においては、カーボンナノチューブ(CNT)に焦点があてられ、新特性や新現象に対する研究が行われている。例としては、CNTとSiやAl, Caなどの異なる基板との間のインタラクションや、ナノキャパシタンスのバイアス電圧依存性、CNTのedge stateの磁性などがある。一方で、このグループは、生体系における電子レベル並びに原子レベルの素過程の解析を計算生命グループと共同で行っている。実際の計算はほとんどがParrinelloのグループが元々開発したCPMDパッケージに実装されているQM/MM法を用いて行われている。ボエロ准教授は、元来、Parrinelloのグループのメンバーであり、現在もCPMDコードの開発に貢献している。なお、シトクローム酸化酵素のproton diffusion mechanismの解析は非常に重要な成果である。このグループでHPC部門とともに行われている、汎密度関数法(DFT)に基づいた電子構造計算の高並列プログラムの開発は計算科学と計算機科学のコラボレーションの非常に重要な例で、次世代スパコン開発プロジェクトにとってきわめて重要な事例となると期待される。2048ノードでの10,000原子のDFT計算を実行が計画されており、この分野における画期的な成果となるであろう。

17. 計算生命科学グループ。このグループは生体分子(タンパク質とRNA)の機能をシミュレーションを用いて研究している。いくつかの異なるシミュレーション技術が用いられており、もっとも有望なコードは計算物性グループと共同で開発されたものである。DFTを用いることは生命分野においては新しいことであり、CCSはしたがってセンター内のユニークな相互作用により、リーダーになることのできる絶好の位置にある。シミュレーションは様々な分子(例えば、ribozymesからcoxまで)を研究するのに用いることができる。この技術的および応用に向けた広い多様性は、生物機能の困難な課題に取り組むために有用となる可能性を有するが、手を広げすぎて研究を妨げ国際的なインパクトを低下させることにならないように最大限の注意を払うべきである。
18. 量子多体系グループ。計算物性グループとは対比的に、このグループは主に励起状態を扱っている。このグループのターゲットは電子および原子核の系である。中心的に用いられている方法は、時間依存(TD) Schrodinger 方程式と時間依存密度汎関数法(TD-DFT)である。励起状態のダイナミクスは、材料科学分野はもちろん生物学分野においても重要な課題になっている。このグループは計算物性グループおよびHPCシステム部門と共同研究をしてきた。TD-DFTに対してKohn-Sham方程式を解く際に有限差分法を用いたのはこのグループが最初である。今後、計算生命グループとの共同研究も実りあるものになるであろう。このグループの、同じ手法のフレームワーク(特に、TD-DFTに対して)を用いて電子および原子核双方の励起に関する研究は特に興味深い。レーザ照射下にある物質がTD-DFTとTD-Schrodinger方程式を用いて研究されている。両方ともトンネルイオン化と再散乱を扱っている。前者のアプローチは、大きい系を扱うことができるに対して、後者は精度がよい。TD-Schrodinger方程式に基づく新しい

アプローチが反陽子ヘリウム生成などの核子についての少数系反応のプロセスの量子ダイナミクスを研究するために開発されてきた。TD-DFTの手法が、有機分子の電子励起と原子核励起の両方に適用されてきた。光学的な応答についての研究から、分子および原子核の形状についての有益な情報が得られている。特に原子核系では、DFTにおけるさらに高精度な汎関数の探索が国際的に進行中である。このグループは、米国のSciDACのフレームワークの中で行われているプロジェクト、Universal Nuclear Energy Density Functional (UNEDF)に貢献している。クラスタの量子化学的な計算に基づいて、高温超伝導体の基礎的な電子的特性が研究されてきた。強い電子格子結合の重要性が強調されている。

地球生物環境研究部門

19. 地球環境科学グループ。地球環境科学グループの最初の研究課題として大気科学はよい選択であった。なぜならば、大気科学には高性能のコンピュータを用いた数値シミュレーションの長い歴史があり、気象データや気象予測は社会において広く浸透しているからである。計算知能グループと協力して行っているJMA/GPVデータアーカイブプロジェクトは、広範囲にインパクトを与える基盤的な研究開発を狙ったものであり、計算機科学者と大気科学者とのよいコラボレーションである。このグループはペタフロップスコンピュータシステムに向けてNICAM (non-hydrostatic global atmospheric model)の開発を始めており、地球温暖化の地域的な影響を解明するためにダウンスケールに集中的に取り組んでいる。この研究領域は日本では比較的弱い領域であり、今後の拡大が期待される。企画内容の規模を考慮すると、現在のグループでは小さいので、企画を成功させるためには他のグループとの共同研究や、サポートスタッフ、ポスドク研究員の増員が必要であろう。

20. 生物科学グループ。このグループは、少人数で最近できたグループではあるが、非常に活発であり、ハイインパクト・ジャーナルに多くの論文を發表している。特に真核生物系統樹全体の中での単細胞真核生物の進化について研究を行っている。研究活動の大部分は、競争力を維持するためには最も重要であるところのデータ収集（培養株の単離、培養、そして最終的にDNA塩基配列の取得）に費やされている。彼らは分子系統樹推定の困難さについては十分認識しており、その一つについて(separateモデルにもとづく対数尤度計算)に取り組むために計算科学研究者と共同研究を開始した。その共同研究の結果がTree-PuzzleのMPIバージョンである。この並列化プログラムを用いて効率よく網羅的樹形探索を行えば局所解にトラップされるという分子系統解析の方法論上の問題点の1つを回避することが可能であり、MPIバージョンのTree-Puzzleは分子系統解析の研究分野において広く利用されると考えられる。生物科学グループと計算科学研究者との共同研究は非常に有望ではあるが、2つの離れた研究分野のギャップを埋めるために新たな研究者を増員すれば大きな発展が得られるであろう。

超高速計算システム部門

21. この部門は朴教授が率いている。評価委員会はこのグループのプロジェクトについていくつかの説明を聞いた。それらのプロジェクトとは、スケーラブルかつ高性能なクラスタネットワーク(朴)、グリッドデータファーム、Gfarm及び分散ファイルシステム(建

部) FFT と古典グラムシュミット直交化(高橋)そして Power Aware コンピューティングである。この部門は中心的な役割を担い、戦略的な分野において素晴らしい研究を行っている。それらのプロジェクトは2つのテーマに分けられる。一つは CCS の他の計算科学に直接的なインパクトを与える応用研究のプロジェクトであり、もう一つは省エネルギー技術である。このいずれの研究の方向も適切に選択されており、確実な成果を挙げている。

22. Gfarm プロジェクトは、近い将来、大規模なデータセットの扱う場合に直面する課題について取り組んでいる。例としては、CERN の LHC から生成されるペタスケールのデータがある。これは、クラスタのすべてのノードおよびクライアントからマウントできる、コモデティベースの分散ファイルシステムで、耐障害機能をサポートしており、不必要な複製を避けることができる。Gfarm は FIRST における適用等、既に CCS に導入されている。Gfarm はまた、顕著な性能を達成しており、実測で 52.0 GB/s の並列読み込み性能が確認されて、SC06 では賞を受賞した。Gfarm はオープンソースで開発されている。Lustre が潜在的にクローズドな企業製品となる等、オープンソースの選択肢が少なくなっている背景を考えると、CCS はその開発を継続するように推奨されるべきである。
23. FFTE の研究は非常に素晴らしい。FFTE は複素数及び混在基底に対応した並列 FFT のためのパッケージで、SSE2/SSE3 命令をサポートしており、ポータブルで、高性能なライブラリである。実空間 DFT アプリケーションのための古典グラムシュミット(CGS)直交化の研究は、最先端の数値アルゴリズムの研究が大規模なアプリケーションコードにどのように統合できるかを示す、素晴らしい例になっている。このような成功は CCS のような分野融合的な環境でのみ可能である。最大 2 度の反復で十分なような Daniel 反復法を用いて古典グラムシュミット法を実装し、再帰的ブロッキング手法により直交化を level-3 BLAS に帰着させることにより、このチームは Xeon プロセッサの理論ピーク性能に近づく性能を実現している。これは、まだ広くは知られていない、もしくは利用されていない数値的手法を巧妙に用いることによって達成された、非常に印象深い研究である。高橋准教授はここで素晴らしい数値的な研究を成し遂げた。
24. この部門の第二のテーマは省エネルギー技術に焦点を当てている。電力効率のよいネットワーク技術について今日まであまり研究が行われていない中で、RAID のようなアイデアでマルチリンクを集約する技術に関する研究は、革新的で創造的なものである。同様に、電力を考慮した大規模化を可能とするクラスタ設計のために、DVFS (dynamic voltage frequency scaling)を用いたり、エネルギーを意識した最適化技術を実装したりすることは非常にうまいアプローチである。CCS はこの分野での研究を継続するべきである。特に、エネルギー効率とコンピュータアーキテクチャに関する研究は、この先数年にわたってインパクトを持つ可能性がある。

計算情報学研究部門

25. 計算知能グループ。本グループは、異種データベースや種々の情報源を統合するためのツール、大規模データから知識や規則を発見するためのデータマイニング、インターネ

ット上の様々なデータを扱うための XML 関連技術について研究開発している。日本では最も強力なデータベース研究グループの一つである。本グループは、地球環境科学グループとの連携の下、GPV/JMA 気象データアーカイブと web サイトの構築、運用に関して、主要な役割を担っている。このシステムは先進的 XML 技術を活用し良く体系化されたものであり、気候学のオントロジーを用いて複数のデータソースを統合することを目指している。本システムは研究コミュニティにおいて広く利用されつつある。気象データ統合に関する本グループによる研究論文は、IEEE e-Science 国際会議に採択されている。これら 2 つのグループのコラボレーションは CCS により推進されるべき学際的な研究の好例である。計算知能グループが開発中のストリーム処理システム StreamSpinner は、異種データソース、特イベント駆動のセンサーシステムを統合する上で非常に強力なツールである。将来、複雑なセンサーストリームのマイニングが大規模計算を必要とする CCS にとって興味深いアプリケーションドメインとなり、HPC システム部門とのさらに密接な連携の機会となることが十分考えられる。

26. 計算メディアグループ。大田教授のグループは、人間の知覚を増強するために、センシング、ネットワーク、グリッド、可視化技術の統合を目指している。このグループの国際的地位は高く、数多くの優れた論文発表の実績がある。さらに、このグループは優れた機能を持つ幾つかの実システムを実装してきた。特に、実時間 3 次元自由視点システムや複合現実型シースルービジョンシステムは、傑出している。このグループは比較的最近 CCS に加わったために、CCS で利用可能な計算能力をまだ活用できていない。しかしながら、野心的なチャレンジである「実世界計算情報学」は、人間社会や環境からセンシングされる膨大なデータを人間が容易に把握できるように加工しようというもので、大規模な計算資源の新しい需要を作り出す可能性が高い。従って、HPC システム部門は、計算メディアグループによって新たに定義される、このエキサイティングな研究ターゲットに重要な貢献をすることになる可能性があり、このプロジェクトは CCS の活動の重要なコア要素のひとつになりうる。

主要な CCS プロジェクト

PACS-CS

27. PACS-CS は、QCD、ナノ材料化学、宇宙物理学、環境や生物学のいくつかの特定のアプリケーション向けのカスタム設計の HPC システムである。選択されたターゲットアプリケーションでは、全部がコモデティで作られたクラスタよりも大きなメモリバンド幅とネットワークバンド幅が必要となる。したがって、大きな成功を収めた CP-PACS のモデルを継承し、朴教授に指導されたチームは上記のアプリケーションに対してバランスがよくなるように、コモデティ技術に基づいた MPP-like なシステムを構築した。それらのアプリケーションは隣接通信と集団通信が必要であるという特徴を持つ。彼らは、10 ~ 20 ポートの L2 スイッチ等のコモデティ技術を使って 3 次元ハイパークロスバー型相互結合網を構築した。このようにして構築された相互結合網は、3 次元構成の場合、1 次元当たり 16 台のノードで最大 4096 ノードまでのシステムをサポートできる。実際のシステムはノード当たり 2GB のメモリを持ち、物理的には 59 ラックのシステムで、電力は 550kW となっている。

28. PACS-CS プロジェクトは、センターの拡大した分野のプロジェクトをサポートし、次の大学のスーパーコンピュータへの橋渡しとなる、最適な計算資源を提供するための適切かつ時宜を得た研究開発であった。朴教授の指揮による CCS チームは、既存の技術をうまく使い、当時の商用のものよりも高い性能を達成可能な技術を開発するという素晴らしい仕事をした。従って、CCS はプロダクションレベルの科学ユーザの期待に沿うことのできる、カスタム開発のシステムを構築できる技術を持つ、世界でも数少ないセンターの一つである。PACS-CS システムの演算速度、及びその障害や問題点の少なさは、カスタム開発のシステムとしては驚くべきことである。PACS-CS には既に、256 および 512 ノードのパーティション単位での利用により、アプリケーションに活用されている。システムが 2048 ノード単位でのジョブを実行するようになった時、その恩恵はより増すであろう。センターは今、physical point での QCD シミュレーションや、10000 原子クラスの密度汎関数法のシミュレーション等の計画で、このシステムを用いた科学のブレークスルーを達成する好位置にある。

FIRST

29. FIRST プロジェクトは国際的に見ても比類のないものであり、アプリケーションからのニーズによって革新的なコンピュータアーキテクチャやシステム研究が進み、それが今度はアプリケーション分野の最先端の科学的成果につながるという、このセンターの能力を典型的に表しているプロジェクトである。このプロジェクトは、GRAPE の技術をより広い最先端の宇宙物理学アプリケーションで有効に使うことを可能にした。GRAPE は、N 体計算の重力を直接計算するためのハードウェア加速器である。GRAPE は、N 体衝突系（例えば、星団）の直接数値シミュレーションや P3M を用いた無衝突系 N 体計算（例えば、ダークマターの集団化）の PP 部分のハードウェア加速器として使うことができる。GRAPE と高性能のホストクラスタとの統合は流体力学計算により適した形であり、これにより流体と N 体が結合した新しいタイプの大規模システムに挑戦できるようになった。
30. 計算宇宙物理学グループが初めてのこのようなハイブリッドシステムを開発できたことは喜ばしいことであり、このシステムを最大限に活用し、そのことを実証できるアプリケーションを設定するとよいと思う。その一例は星団形成で、これは流体力学系として始まり、流体と N 体が結びついた過程を経て、純粋な N 体系で終わるものである。CCS は FIRST の存在によってユニークな位置づけにあり、ここで新たな領域の開拓が行われる。

ILDG/JLDG

31. このプロジェクトは CCS において計算機科学者と素粒子物理学研究者との過去 5 年間にわたるコラボレーションがうまくいった、もう一つの例である。彼らは格子 QCD データを格納・共有するための、地域データグリッドを結合したグローバルなグリッドを構築することを目的とした国際的な ILDG プロジェクトの中で、国内をリードしてきた。これと平行して、日本の格子 QCD コミュニティをサポートする為の日本国内のグリッド基盤 JLDG を構築してきている。これらのプロジェクトのキーとなる特徴はユーザのニーズに密着して初期の段階からコミュニティの便に供し、世界中に早く普及させるこ

とである。

32. これらのプロジェクトの成功への鍵は格子 QCD のデータのための標準の XML 準拠のマークアップ言語 (QCDml) が定義され、国際的に受け入れられたことである。QCDml は、吉江准教授のリーダーシップの下に、ILDG メタデータワーキンググループにより開発された。CCS のメンバーは、全体的なアーキテクチャと様々なコンポーネント間のインタフェースを定義する ILDG ミドルウェアワーキンググループにおいて、重要な役割を担っている。
33. JLDG は、Gfarm を用いてファイル共有を実現し、日本の 5 つのサイトに展開されている。ILDG プロジェクトはグリッド技術の進歩に歩調をあわせて改善を行い機能を向上していく、現在も継続中の研究開発であるが、世界中で最もうまくいっているデータグリッドの一つとして証明済みであり、そのように認知されつつある。標準的なデータ管理環境として、格子場理論コミュニティ全体に早期に受け入れられる可能性が高い。このことは、最初からユーザと開発者が密接に協力してきた事によって保障されており、CCS チームがやってきたことが、その最もよい例の一つである。ミドルウェアの機能はなり一般的なもので、メタデータについてのコミュニティ内の合意がなされる分野であれば、同じ仕組みを応用する機会があろう。

学際的な活動とコラボレーション

34. 評価委員会は、CCS が計算科学の研究において学際的なアプローチを推進するとのミッションに成功しつつあることについての説得力のある証拠を見つけた。コラボレーションの活動と機会について、委員会に対するすべてのプレゼンテーションにおいて強調されており、CCS のすべてのメンバーがそれを重要視していることを示していた。以前の CP-PACS での計算機科学者と素粒子物理学者とのコラボレーションは他のプロジェクトへの強力な実例になっており、戦略に影響を与え続けている。FIRST プロジェクトはこのモデルの最近の成功例である。2004 年以降の多くの研究分野への急速な拡大をもってしても、CCS にとって、2 つ (もしくはそれ以上の) 学問分野が十分に重要な目標を共有し、同時に単独の学問分野の成果を超えて、それらを成功まで育てあげることができるプロジェクトを見つけることは重要な課題であろう。すべての研究グループに対して、様々なタイムスケールで潜在的なチャンスがあるが、生物科学と計算メディアグループが、現在までセンターの中最も統合する効果を持ってきた HPC システム部門の持つ能力から遠い分野である。HPC 部門と計算情報学部門が将来の学際的なプロジェクトの鍵を握っている。現在のプロジェクトや分野のバランスは取れており、うらやむほどの実績があるとしてもセンターは学際的な活動への仕組みやインセンティブを追求し続ける必要がある。
35. 評価委員会は、CCS が育ててきた大学院との強い関係に感心した。この関係は、センターをより大きな研究コミュニティに組み込み、その研究グループが一定以上の規模を達成することを助け、重要な博士課程の学生の供給元としている。委員会は、計画されている計算科学のデュアルデグ्रीプログラムも強く支持する。これは、センターの教育

と人材育成の役割を拡大させるものである。大学内の学生並びに教員双方にとって魅力的なカリキュラムを開発することは重要な課題であるが、見返りとして、より強い計算科学コミュニティと適切に教育された新規の研究者を生み出すことができる。これは大学と学生の将来の雇用者にも有益であろう。センターと大学の研究者の関係は、大学のスーパーコンピュータサービスの運営を通して拡大していくであろうし、このことは、そのサービスがユーザのニーズと適合しており、且つセンターのリソースに過大な負担をかけない限りにおいて、有益であろう。

36. CCS は、計算科学における国際的に競争力のある研究において典型的な、外部との様々なコラボレーションを行っている。加えて、センターは、成功裡に進められている ILDG グローバル基盤プロジェクトで顕著な役割を果たした。その結果、現在、CCS は高い国際的なプロファイルを持つにいたっている。研究プロジェクト自体はもちろん、計算科学のための基盤と支援が次第に多国間に渡るものになっていくにつれて、CCS は国際的なリーダーシップについてのより大きい競争に直面するであろう。従って、センターが日本の学際的な計算科学の COE として認知され続けるには、より幅広く国際的なプロジェクトに参加する必要がある。この戦略は規模の小さい研究グループの強化にも役に立つであろう。

ミッションの遂行におけるセンターの成果

37. CCS は、前身の計算物理学研究センターから引き続いて、15年に渡り、計算機科学者と物理学者の非常に良好な協力関係を確立し、一連の世界クラスのコンピュータを開発し、それを使って計算物理学の最先端の結果を生み出してきた。これは、計算科学の他の分野への典型例となっており、共同作業はセンターのカルチャにうまく融合されてきている。評価委員会は計算科学に対するセンターのビジョンを強く支持し、この学際的なアプローチを推進することは CCS の核となる目的であり続けるべきであると考えている。
38. 2004年のセンターの改組は、教員数の大幅な拡大と、それぞれの分野の最先端にある幅広いアプリケーションを持つ新研究グループを設置により、成功裏に成就された。研究テーマは21世紀において重要性を増すものが選ばれた。新しいグループには、そのサイズが十分でないグループがあり、それらはセンターの外部と強い共同研究のリンクを構築するか、新たな雇用を目指す必要があるであろう。たとえそうであっても、評価委員会はこのような短期間での新規のグループの達成した科学的な成果と、センターの学際的なカルチャに融け込んだ度合いに、非常に感銘を受けた。研究の結果のほとんどは世界クラスであるか、そうなる可能性があるかと判断された。多くの分野において、新しいアプローチがとられており、非常にエキサイティングで大きなブレイクスルーへの期待が持てる。
39. PACS-CS と FIRST プロジェクトは、科学のニーズに基づき推進され、最先端の研究を行うユニークな手段を提供する、重要なコンピュータ開発の卓越した例である。挑戦的なアプリケーションをターゲットにした新しい競争力のあるコンピュータハードウェアを設計、開発、運用する能力はセンターの正に心臓部であり、保持しなくてはならな

い。それは、他の何処にもまねができない、環境と才能の混在から生まれているもので、センターに競争力のある強みを与えている。

将来ビジョンと戦略

40. 評価委員会は、グローバルかつ長期的な視点をもって学際的な計算科学における世界的な COE となるとの、センターの全体的な将来ビジョンと戦略を支持する。過去3年間の大きな変化の後で統合するための時間が必要であり、評価委員会はセンターが国際的なプロジェクトへの参加やビジタープログラム、仮想組織のサポートを進めることを推奨すると同時にすべての研究グループならびに部門の計画をサポートする。研究グループの現在の守備範囲で、CCS は計算機科学ならびに計算科学の最先端での有望な研究プロジェクトのポルトフォリオとこの研究を担当する有能な人員を維持するべきである。学際性を促進し、共有すべき目標が生まれ育つ環境を提供することを継続するべきである。
41. CCS は、それぞれの分野で最大限のインパクトを持つことを確実にするために適切な計算資源を集中的に利用できるように、研究プロジェクトをサポートする国際的に競争力のある計算設備を持つべきである。大学の研究向けスーパーコンピューティングサービスに責任を持つとのセンターの戦略は、センターが適切なシステムを管理運用する助けになるであろうし、計画されている T2K の調達は、今後3～4年についてこの目的を達成するであろう。しかし、もはや CCS の研究員が含まれないかもしれない広い範囲のプロジェクトによるコンピュータの利用は勿論、大学のサービスをサポートするには CCS のテクニカルスタッフの数は少なすぎる。大学はスーパーコンピュータサービスの責任を移す同時に、必要なサポートスタッフあるいはそれに対応する予算を CCS に措置する必要がある。CCS は、広い範囲にわたる様々なユーザに対してさらにサービス指向のユーザサポートの仕組みをとり入れる必要があるであろう。なぜならば、サービスが不十分であった場合にはセンターの優れた評判を落とす恐れがあるからである。しかしながら、センターはこのようなサービス活動が研究を中心とするセンターの焦点をぼかすことがないように注意する必要がある。
42. CCS は最も厳しいアプリケーションの要求に対応して新しいコンピューティングテクノロジーの開発を継続するべきであり、計算科学の特定の領域でのブレークスルーを可能にするために、それらのテクノロジーを実用にもっていく力を持つべきである。特定の分野においては特殊なハードウェアは重要な手段であり続けるであろう。CCS が汎用クラスターに組み込み型の加速器を組み込むことに関して得た知見は将来広い応用範囲に適用でき、FIRST の後継として積極的に追及されるべきである。評価委員会は、革新的なアーキテクチャの開発はリスクは高いことは承知しているが、得られるものも大きい。個々の開発に必要な予算の調達は保障ができないとしても、この領域におけるセンターの実績は世界でも稀有であり、失ってはならないものである。計算科学での重要な進歩のために利用できるであろう新しい技術は急激に進歩しており、センターはそれらを評価し活用するのに特に良い位置にある。

43. CCS の教育活動は大学の幅広いコミュニティならびに社会にそれを溶け込ませる重要な役割がある。拡大した大学院のプログラムはスタッフにとって、それを開発し実行するには多くの時間を必要とし、学際的なコンセプトに対していくつかの障害を乗り越えていく必要があるであろう。しかしながら、センターのスタッフはこの仕事をやりがいのあるものと捉えるべきであるし、学生に対するアウトリーチ活動は新しいアイデアや新しい学生の勧誘につながるに違いない。大学は、広い基盤を持つ計算科学のコミュニティの確立と学際性の推進を、CCS が提供する重要な戦略的機会と見るべきであり、センターに取ってはそれは教育ならびに研究の双方の観点から真に競争力のある特徴を与えるであろう。大学は拡張された教育プログラムに適切な経済的支援を行うべきである。
44. CCS の学際的な研究に焦点を当てた活動、教育に関する諸活動、および新しいテクノロジーの開拓により、次世代スーパーコンピュータプロジェクト（ペタフロップスプロジェクト）などのプロジェクトの支援に CCS は大きな役割を果たすべきである。センターはこのような国家的なプロジェクトと戦略的なパートナーシップを模索するべきであり、それは計算科学の新しいアプリケーションの開発において補完的な役割を果たし、革新的なアルゴリズム、高性能計算ソフトウェア、新しいハードウェア技術の先駆者としての能力を生かすことになる。

その他、推奨すべき事項

45. 全体にわたって、評価委員会は CCS の達成した成果、その学際的なカルチャ、将来に対するリーダーシップとビジョンについて感銘を受けた。委員会はセンターに集結した英知とそれが作り出した研究環境が世界的にユニークであると考え、すでに世界をリードする科学的な成果を挙げており、センターに国際的に高い位置付けを与えている。2004 年のセンターの拡大は、研究と教育の双方において幅広いインパクトを与える可能性を与え、21 世紀において戦略的に重要なターゲットとなる領域を含んでいる。評価委員会は、センターを大学に対して称揚するとともに、大学がその戦略的な価値を認識し、そのミッションの遂行をサポートし、より幅広い学術的なコミュニティがその活動に関わることを勧告するものである。