



筑波大学 計算科学研究センター

Center for Computational Sciences,
University of Tsukuba



筑波大学
University of Tsukuba

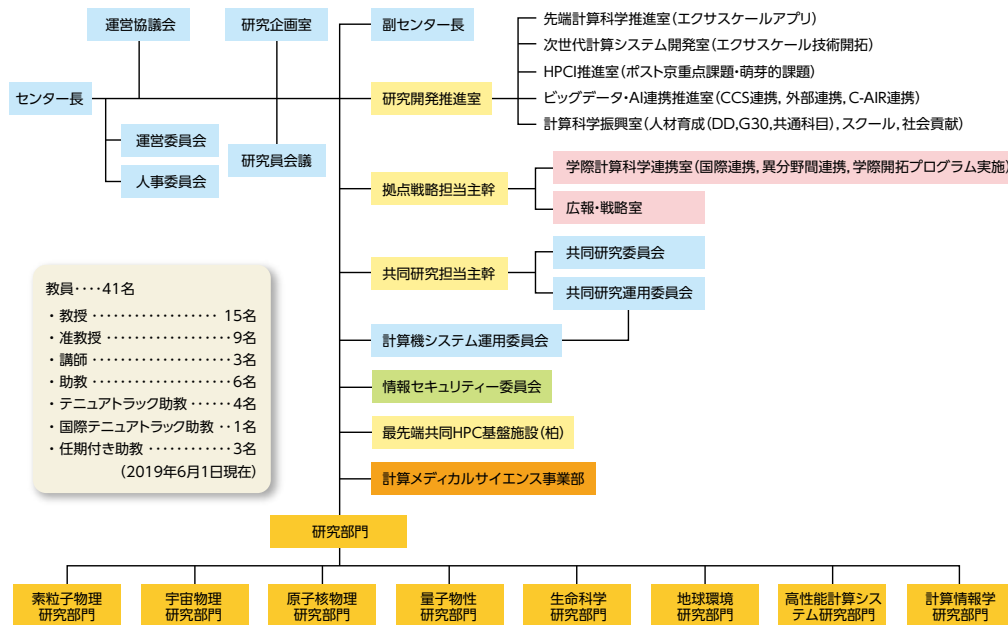
概要

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、38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」及び「計算メディカルサイエンス事業」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
朴 泰祐



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”が計算とすることができます。楽器は共通でも様々なジャンルの音楽が誕生し、ヒ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。それらの経験を元に、2019年には複数種類の演算加速装置を搭載する世界でも類を見ない多重複合型演算加速スーパーコンピュータ「Cygnus」を開発し、運用を開始しました。

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進展させています。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ルです。

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、メモリ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」「宇宙生命計算科学連携拠点」「計算メディカルサイエンス事業」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センター（R-CCS）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。

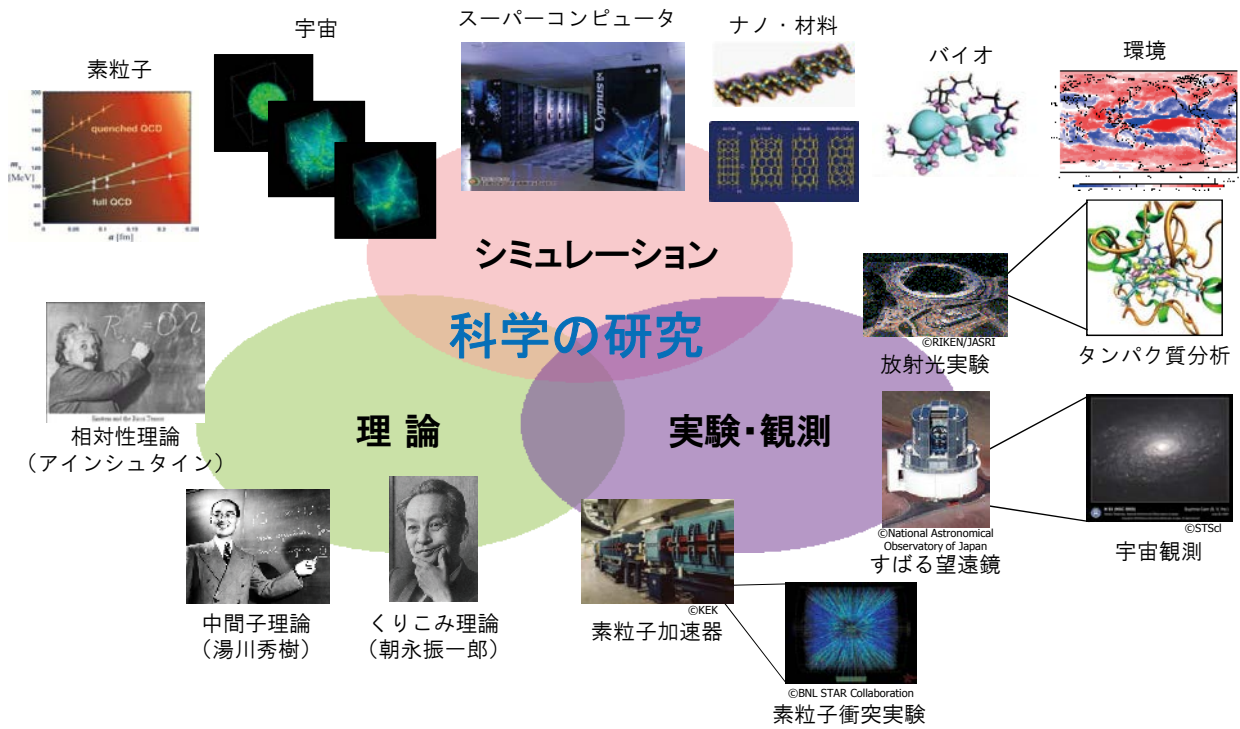
計算科学研究センター年譜

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
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
2019年 4月	多重複合型演算加速スーパーコンピュータCygnus運用開始

最先端の研究

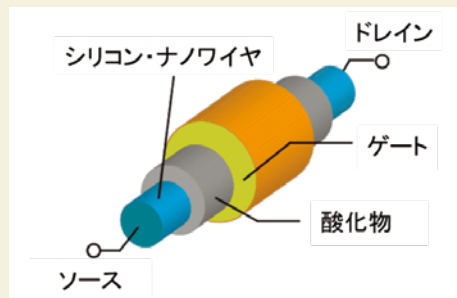
これまでの科学は、理論と実験によって発展してきました。しかし、実験が難しい現象や、原理的なことはわかっているでも“紙と鉛筆”だけでは理論計算できない場合がたくさんあります。このような難しい問題を、コンピュータを使って解明する方法が計算科学です。

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。



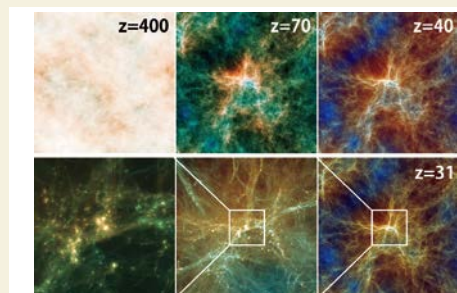
2年連続でゴードン・ベル賞を受賞

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。



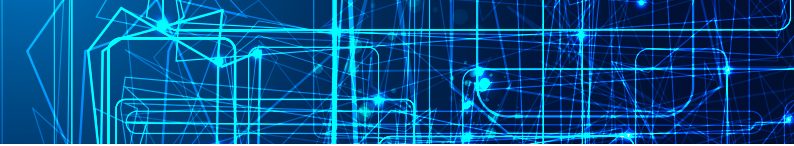
◎2011年ゴードン・ベル賞 最高性能賞 (筑波大・東大・理研)

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。



Cygnus

Cygnusは本センターで研究開発が進められてきたPACSシリーズの第10世代のスーパーコンピュータのための実証システムです。2019年4月より稼働を開始しました。GPUとFPGAを備えた大規模並列GPU・FPGAクラスタシステムで、全80ノードで構成されます。FPGAを除く理論ピーク性能は2.4 PFlopsです。

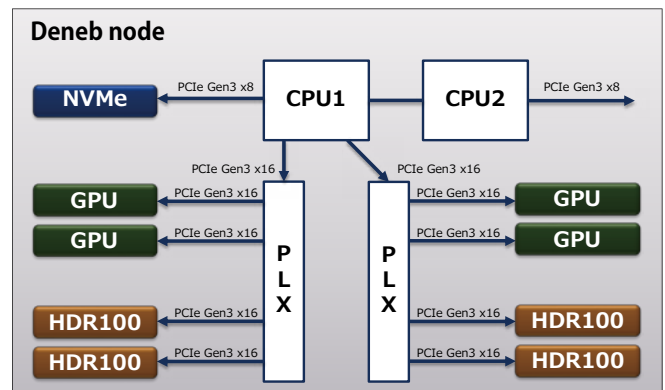
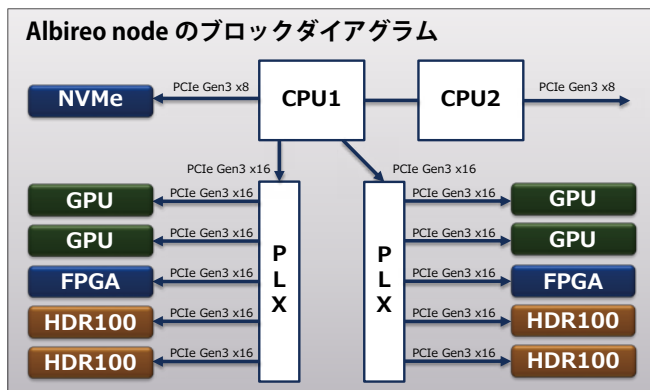
全計算ノードに2.6GHz 12コアのIntel Xeon Gold 6126プロセッサを2基、NVIDIA Tesla V100 GPUを4基搭載し、内32ノードのFPGAノードでは更にIntel Stratix 10 FPGAを2基搭載しています。計算ノード間はInfiniBand HDR100の4ポート (400 Gbps) で接続され、78ノードはフルバイセクションバンド幅のFat Treeネットワークにより接続されています。更にFPGAノードでは64枚のFPGAカードが100Gbit Ethernetにより8×8の2次元トラスで接続されています。GPUだけでは演算加速できない不規則な計算をFPGAで加速することを狙っています。Cygnusは、夏の代表的な星座のはくちょう座の英語名です。GPUノードは1等星のDenebノードとよばれ、FPGAノードは美しい二重星のAlbireo



Cygnus

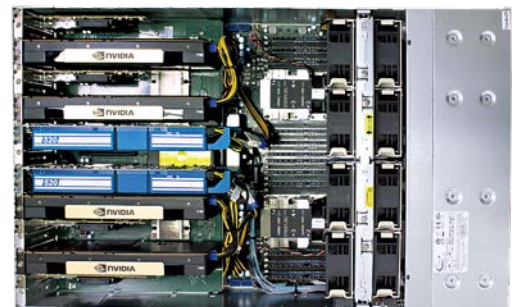
ノードとよばれています。

全計算ノードに3.2TBのNVMe SSD (Intel SSD DC P4610) を搭載し、科学技術計算におけるファイル入出力の高速化だけではなく、ビッグデータアプリケーション、AIアプリケーションを強力にサポートします。



Cygnusの緒元

項目	仕様
理論ピーク性能	倍精度浮動小数点演算 2.4 PFLOPS (GPU: 2.24 PFLOPS, CPU: 0.16 PFLOPS) FPGA部: 単精度浮動小数点演算 0.64 PFLOPS
総ノード数	80 (Albireoノード32台、Denebノード48台)
各ノードの主記憶	CPU部: 192 GB DDR4-2666 (255.9 GB/s) GPU部: 32 GB x 4 (3.6 TB/s)
各ノードのCPU	2.6GHz 12コア Intel Xeon Gold 6126 x2基
各ノードのGPU	NVIDIA Tesla V100 x 4基 (PCIe 3.0 x 16)
各ノードのFPGA	Nallatech 520N with Intel Stratix10 x2基, 各FPGAに100Gbps x 4 linksの光インターコネクトを装備
各ノードのSSD	3.2TB Intel SSD DC P4610
共有ファイルシステム	DDN Lustre, RAID6, 2.5 PB
相互結合網 (FPGAネットワークとは独立)	Mellanox InfiniBand HDR100 x4, 48 GB/sの通信性能
プログラミング言語	CPU: C, C++, Fortran, OpenMP GPU: OpenACC, CUDA FPGA: OpenCL, Verilog HDL
システム導入業者	NEC



Cygnusノード

最先端共同HPC基盤施設 (JCAHPC)

● 施設長：田浦健次郎 東京大学情報基盤センター長

● 副施設長：朴 泰祐 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営・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。この方針に基づき、メニーコアアーキテクチャ型スーパーコンピュータOakforest-PACSが設計され、運用されています。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ています。また、文部科学省が主導するHPCI (High Performance Computing Infrastructure) プログラムにはJCAHPCとして参加し、「京」コンピュータに次ぐ主力リソースとして活用されています。これらの共同運用により、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。

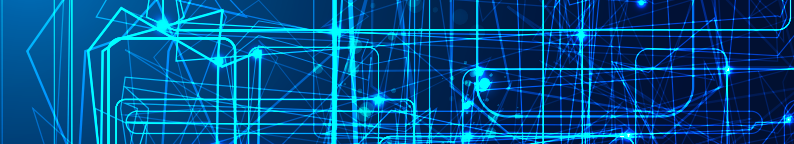
Oakforest-PACS

最先端共同HPC基盤施設では設置当時として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ーで、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。さらに、2017年6月のIO500ベンチマークでは総合性能で世界第1位、2019年6月の同ベンチマークでは総バンド幅性能として世界第1位にランクされています。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、2021年に稼働開始予定の国家フラッグシップスーパーコンピュータである「富岳」にもつながるアプ

リケーション開発にも我々のシステムが使われています。今後もより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、2002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、2007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。2010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。

2018年度までの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つから構成されていました。2019年度の申請からは、これらを廃止する一方、申請リソースの規模に応じたカテゴリ分けを導入しました。また国際化を進めるため、申請書およびオンライン申請システムを英語化し、海外からの直接申請を可能にしました。これ

により、海外の利用者数が大きく増加しました。

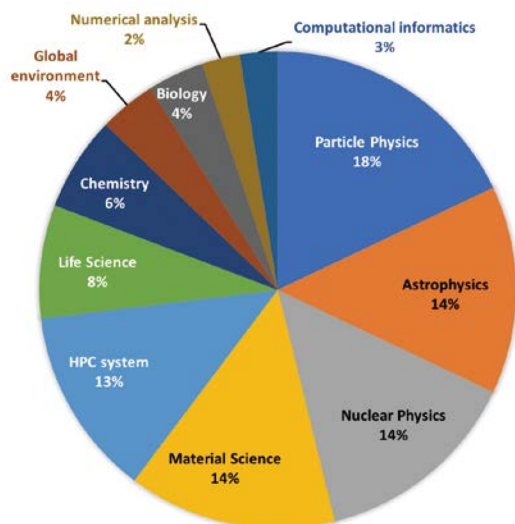
科学分野としては、素粒子、宇宙、原子核、物質科学、生命科学、地球環境、生物の諸分野、そして計算機工学分野として、超高速計算システム、計算情報学、数値解析の諸分野の研究課題を募集し、研究を推進してきました。学際共同利用プログラムにおいて無償で利用できる計算機資源として、2007～2011年度にはPACS-CS、2009～2011年度にはFIRST、2008～2013年度にはT2K-Tsukuba、2012～2017年度にはHA-PACS、2014～2018年度にはCOMA (PACS-IX)、2017年度からは最先端共同HPC基盤施設の運用するOakforest-PACSの一部、そして2019年度からはCygnusを共同利用に供しています。

表には、2010年度以降の学際共同利用プログラムの採択件数を示しています。最近では60件を超える課題が審査によって採択されています。グラフに、2019年度における応募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わかります。

学際共同利用プログラム採択件数(2010年度以降)

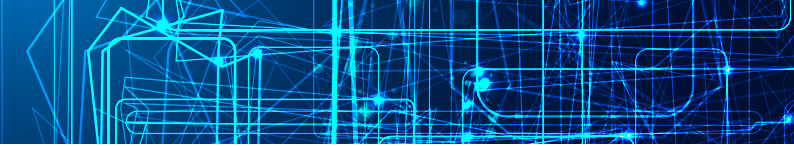
年度	採択件数	計算機システム
2010年度	24件	PACS-CS, T2K-Tsukuba, FIRST
2011年度	31件	PACS-CS, T2K-Tsukuba, FIRST
2012年度	48件	T2K-Tsukuba, HA-PACS
2013年度	59件	T2K-Tsukuba, HA-PACS
2014年度	41件	HA-PACS, COMA
2015年度	51件	HA-PACS, COMA
2016年度	62件	HA-PACS, COMA
2017年度	61件	HA-PACS, COMA, Oakforest-PACS
2018年度	67件	COMA, Oakforest-PACS
2019年度	78件	Oakforest-PACS, Cygnus

2019年度応募課題件数の分野別割合



● 2010年以降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)

- ◆10th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences
2018年10月15～16日 International Conference Room, University Hall, University of Tsukuba
- ◆計算科学研究センター 25周年記念シンポジウム
および第9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
— 計算科学の発展と将来 —
2017年10月10～11日 つくば国際会議場(エポカルつくば) 多目的ホール
- ◆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 —
2016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 —
2015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 —
2014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 —
2013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
2012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 —
2012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 —
2011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)
2010年5月6～7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)

分野の概要

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
- ・ ハドロン内部構造の解明
- ・ クォークを自由度とした軽原子核の構成
- ・ QCDに基づくハドロン間相互作用の研究
- ・ 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相対論的量子場理論への応用

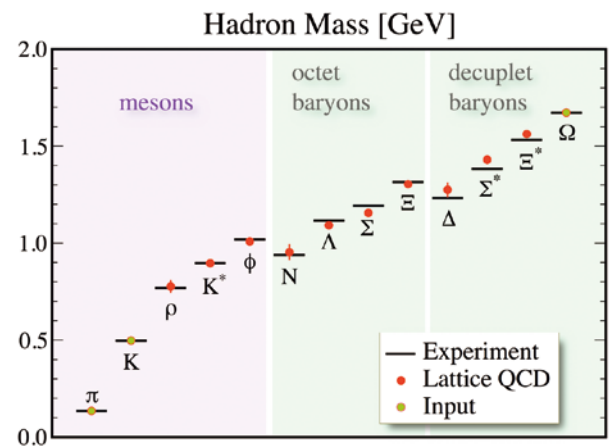


図1 格子QCD計算によるハドロン質量と実験値(黒横棒)の比較

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、大体積のシミュレーションを行うことによってハドロン内部の構造も詳細に調べられるようになってきています。例えば、図2では陽子の内部構造を表す電気形状因子と呼ばれる物理量に対して格子QCDによる計算結果(□、○)と実験値(赤線)との比較を行っていますが、両者は非常に良く一致していることがわかります。

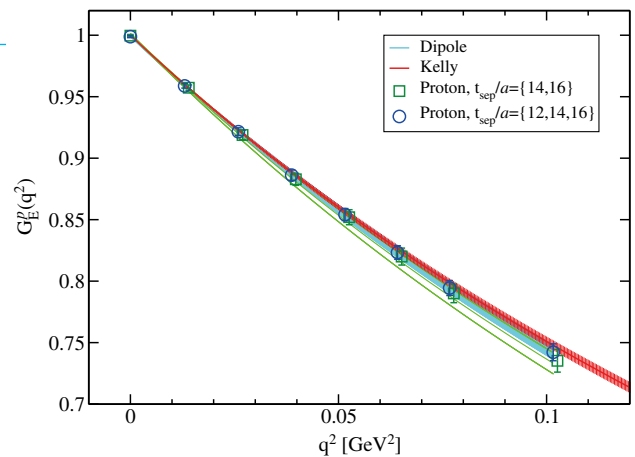


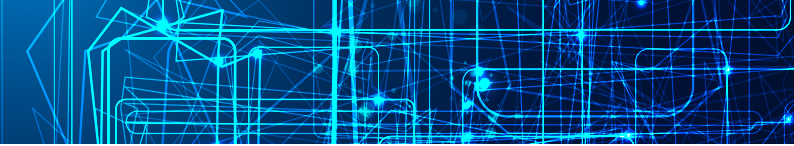
図2 格子QCD計算による陽子電気形状因子と実験値(赤線)との比較



<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

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。



宇宙物理分野

- 研究部門主任：梅村雅之 教授
- メンバー：大須賀健 教授／森 正夫 准教授／矢島秀伸 准教授／吉川耕司 講師／Wagner Alexander Takeshi 助教／古家健次 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3,000K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。

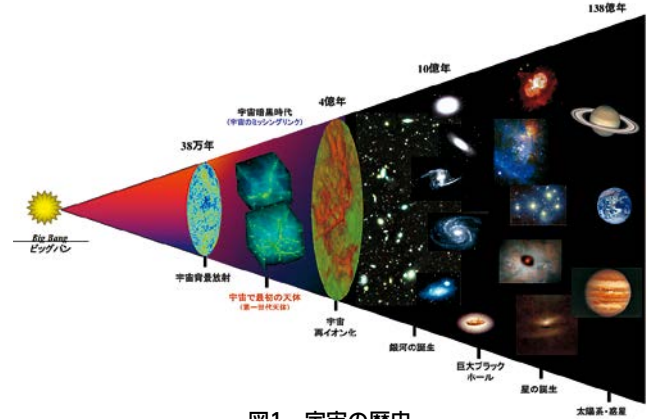


図1 宇宙の歴史

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、一般相対論的輻射磁気流体力学シミュレーションで解明されたブラックホールを取り巻く降着円盤と、そこから吹き出すジェットを示しています。ブラックホールの強力な重力に引きつけられた物質は、降着円盤を形成し、徐々にブラックホールに吸い込まれます。降着円盤内部では重力エネルギーが解放され、大量の光子が発生します。そして、ブラックホールの重力をも凌ぐ光の力で、円盤の一部の物質がジェットとして噴出することが明らかになりました。

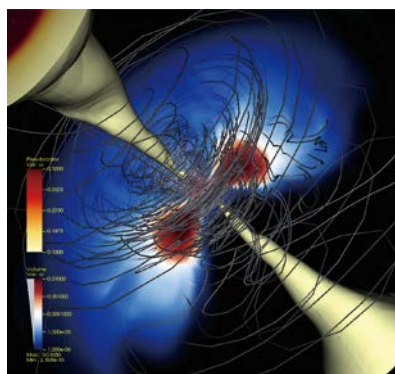


図2 ブラックホール周囲の降着円盤とジェット

図3は、初期宇宙の銀河の形成を、高精度な宇宙論的流体シミュレーションによって描き出したものです。銀河形成期には大規模なフィラメント構造に沿ってガスが銀河に降着し、爆発的な星形成が起こります。その後は、超新星爆発の影響によって銀河のガスは排出され、星形成はすぐに止

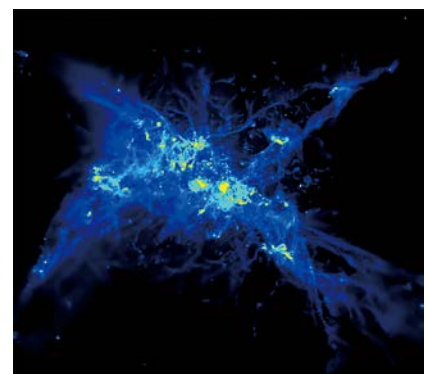


図3 初期宇宙の銀河形成シミュレーション

まる事が分かりました。初期宇宙の銀河の星形成史は、このような活発な星形成と抑制を繰り返しながら間欠的に進む事が明らかになりました。

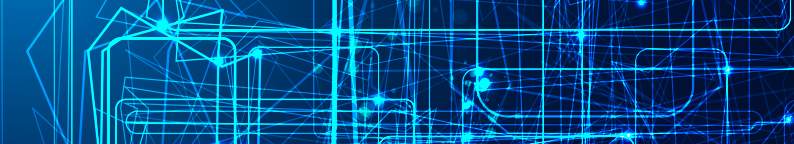
まる事が分かりました。初期宇宙の銀河の星形成史は、このような活発な星形成と抑制を繰り返しながら間欠的に進む事が明らかになりました。



<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

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、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銀河形成、巨大ブラックホール形成の研究に従事。



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おり、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と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やすさなど、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。最近、核分裂現象の解析にも着手し、これまで未解明であった、原子炉の中で核分裂片としてキセノン周辺核が大量に生成されるメカニズムを解明しました。図2には、プルトニウム核 (^{240}Pu) の分裂の様子がシミュレーションの結果として示されていますが、大きい方（図の下側）の分裂片が洋ナシ型に変形しています。この変形によって、キセノン周辺の原子核がエネルギー的に得をすることが確かめられ、シミュレーション結果は実験データとも良い一致を示しています。

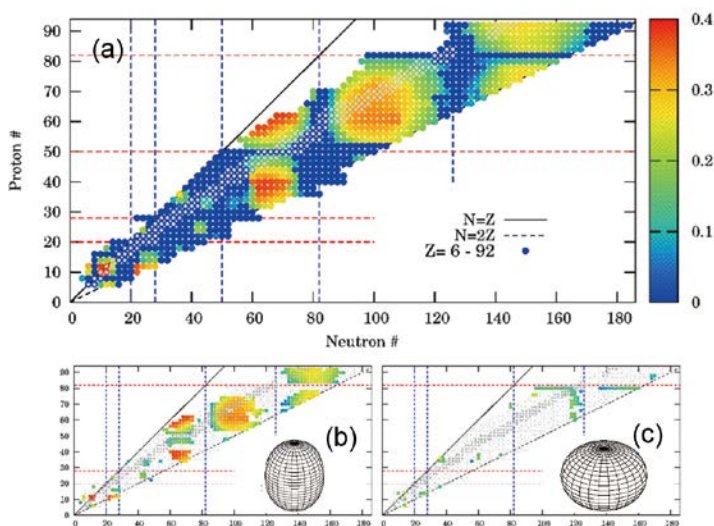


図1 (a) 原子核の変形の大きさ(変形度)の核図表。比較的大きく変形した原子核のうち、(b) ラグビーボール型、(c) パンケーキ型に変形したもの。

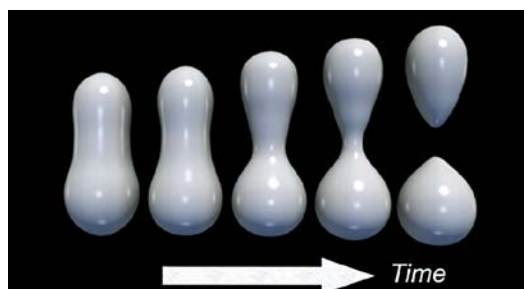


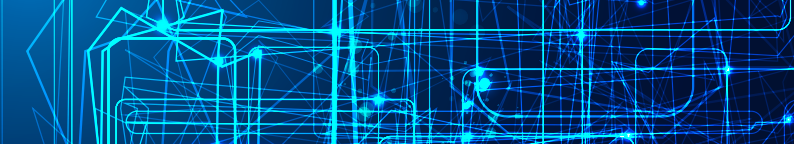
図2 プルトニウム原子核の核分裂シミュレーションの結果。左端から右端までの時間は、 2×10^{-20} 秒程度。



<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

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、2003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、中性子星の構造の研究に従事。



量子物性分野

- 研究部門主任：矢花一浩 教授
- メンバー：小泉裕康 准教授 / Tong Xiao-Min 准教授 / 前島展也 講師 / 佐藤駿丞 国際テニュアトラック助教 / 小野倫也 客員教授

分野の説明

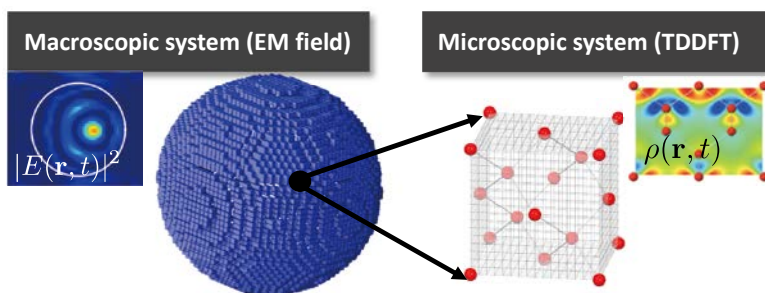
我々の周囲に存在している物質は原子から成り立っており、原子は原子核と電子で構成されています。これらの物質は、その組成や構造により様々な性質を示し、それらの利用が今日の科学技術を支えています。本部門では、多様な物質をクーロン相互作用により結

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

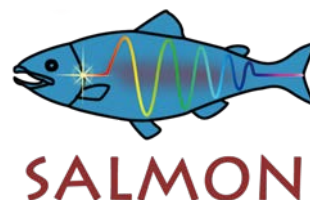
光は物質の性質を精密に測定する手段を与えてきました。最近の光科学では、高強度で非常に短いパルス光を用いることにより、電子の超高速運動に対する実時間測定や、光による電子運動の操作が行われています。我々は時間依存密度汎関数理論をはじめとする第一原理計算手法に基づく計算により、光と物質の相互作用の解明に取り組んでいます。



● 実時間・実空間計算法を用いた光科学第一原理シミュレーション法の開発

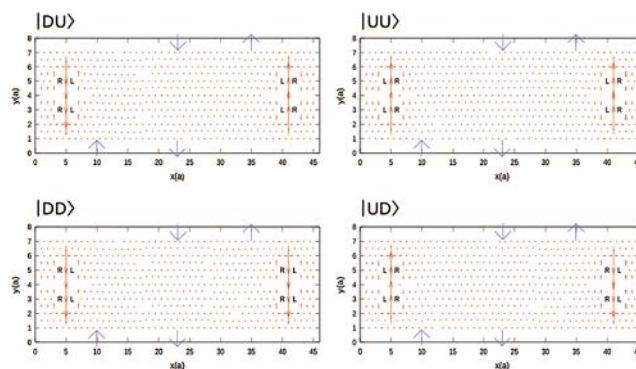
最近の光科学では、光と物質の相互作用を電子のミクロなダイナミクスから出発して記述する、新しいシミュレーション法が求められています。我々は、超並列計算に適した実空間法や実時間法を用いた密度汎関数理論に基づく第一原理計算コード SALMON (Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience) の開発を、計算機科学者やセンター外の研究者と協力して進めています。SALMONはオープン

ソースソフトウェアとして開発しており、ウェブページ <https://salmon-tddft.jp> からダウンロードが可能です。



● 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。



<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：原田隆平 准教授／庄司光男 助教／西澤宏晃 助教／堀 優太 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、計算科学研究センターのスーパーコンピューター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。

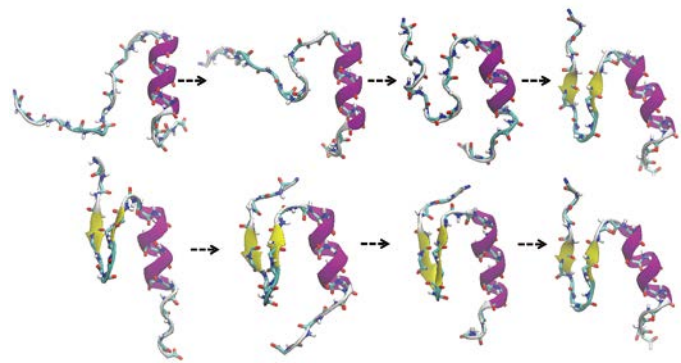


図1 トリプトファンケージの折りたたみシミュレーション

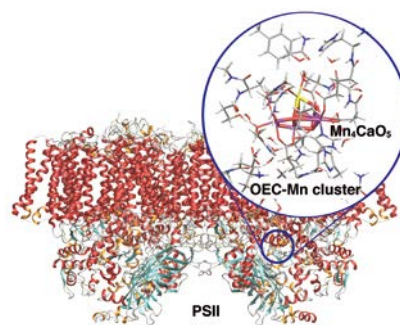


図2 光化学系IIの全体構造と活性中心構造

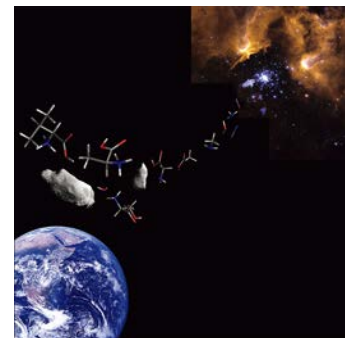


図3 星間空間での分子進化とアミノ酸生成



<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。

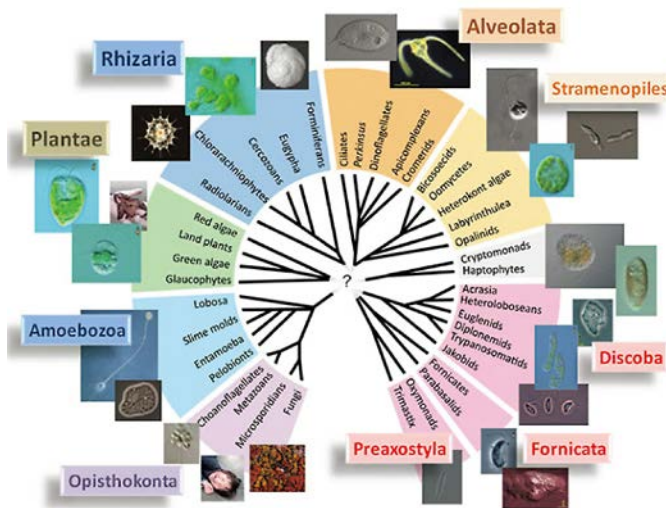


図1 真核生物の主要系統群

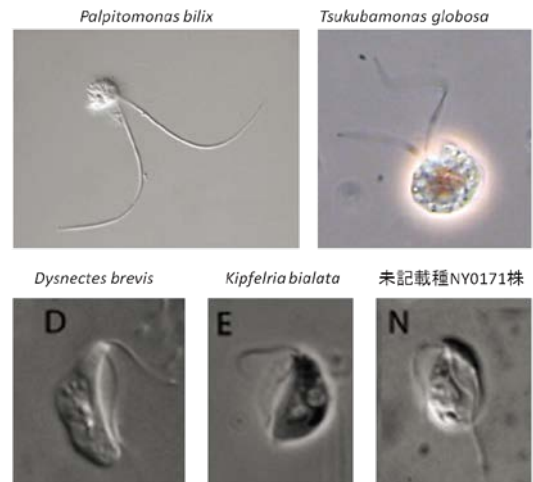


図2 自然環境から単離され、現在研究されている「新しい」真核生物

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

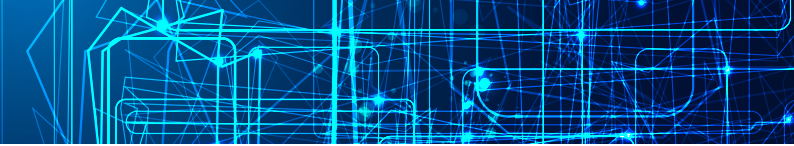
起きた進化のイベントに対応した「シグナル」と、進化の過程で蓄積したランダムな変化(いわゆるノイズ)が共存しています。困ったことに、配列中のノイズの量は時間とともに増加しますが、シグナルの量は逆に減少します。したがって、遠い過去に分岐したと思われる主要な真核生物系統群の関係を精度よく推測するためには、大量の配列データを解析する必要があります。我々は次世代シーケンズデータを用いた複数の遺伝子情報を含む巨大データを取り扱うため、スーパーコンピュータによる解析を行っています。



<分野リーダー>

稲垣 祐司 筑波大学計算科学研究センター教授

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月筑波大学に助教授として着任。2016年4月から現職。



地球環境分野

- 研究部門主任：日下博幸 教授
- メンバー：田中 博 教授 / 松枝未遠 助教

分野の説明

地球環境研究部門では、地球規模から都市規模までの気候や気象に関する研究を、全球雲解像モデル[NICAM]や、領域気象モデル[WRF]、都市気象モデル[LES]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、都市気候や山岳気象などの身近な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気象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、気候システムを専門とする植田宏昭教授(持続環境学専攻)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)が中心となって開発し、一般に公開された汎用性の高い気象のシミュレーションモデルです。我々はWRFを用いて、都市のヒートアイランド現象、ゲリラ豪雨、フェーン現象、山岳にできる笠雲・吊るし雲などの身近な気象の未解決問題に挑戦しています。また、社会のニーズにこたえるべく、地球温暖化と都市気候、熱中症の将来予測などの研究も行っています。

さらには、都市街区内の気温や風の分布を再現できる世界最高レベルの空間分解能を持つ都市気象モデル(LES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。

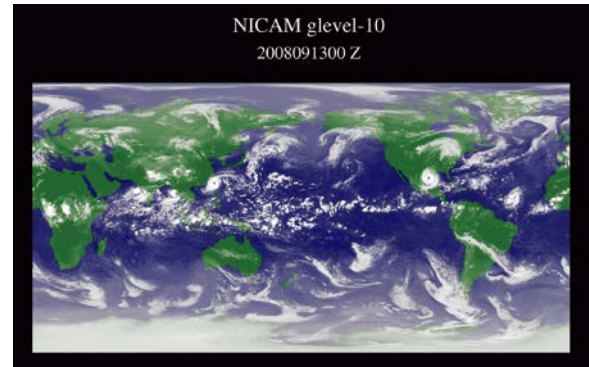


図1 NICAM全球7km解像度モデルによる雲画像。2008年の台風13号(Sinlaku)とハリケーン(Ike)の2つが同時に発達している。



図2 富士山に出現する笠雲と吊るし雲。

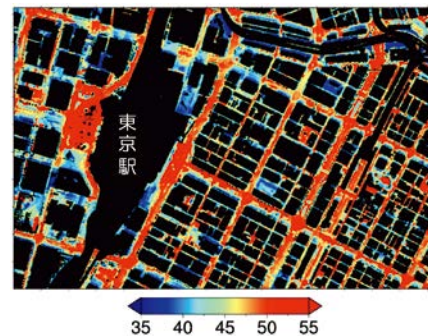
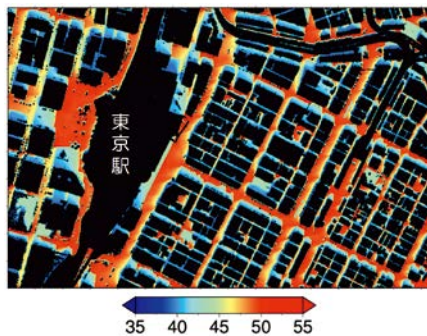


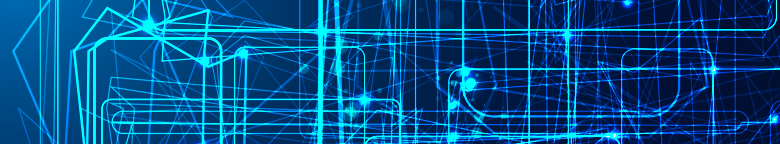
図3 東京駅周辺の表面温度分布。黒色は建物。左図は本センターで開発したLESモデルによるシミュレーション結果で、右図は東京都環境科学研究所によるヘリコプター観測の結果。



<研究部門主任>

日下 博幸 筑波大学計算科学研究センター教授

都市のヒートアイランド現象、フェーン現象、山岳の雲と風などの身近な気象の未解決問題に挑戦しています。スーパーコンピュータを用いた数値シミュレーションの手法と現地での野外観測の二刀流です。



高性能計算システム分野

- 研究部門主任：朴 泰祐 教授(センター長)
- メンバー：高橋大介 教授/建部修見 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。

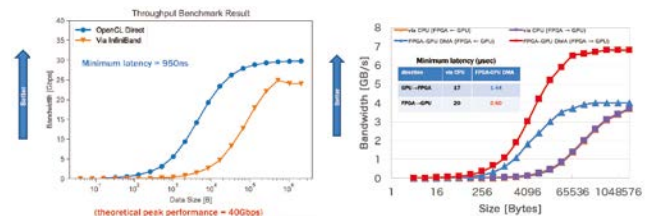
研究対象は、高性能計算アーキテクチャ、並列プログラミング言語、大規模並列向け数値計算アルゴリズムおよびライブラリ、GPUなどの演算加速システム、大規模分散ストレージシステム、グリッド/クラウド環境など、多岐に渡ります。

研究トピックスと成果

●多重複合型演算加速計算システム

GPU (Graphics Processing Unit) 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ことで高い演算加速性能を持ちますが、並列性が低かったり頻繁な並列通信を求めるアプリケーションでは十分に性能を発揮できません。我々はこの問題に対し、GPUとFPGA (Field Programmable Gate Array) を組み合わせ、両デバイスの持つ並列演算特性を組み合わせ、さらにFPGAが持つ高性能並列通信チャネルを組み合わせ、Strong Scaling並列性を高めるシステムコンセプト AIS (Accelerator in Switch) の研究を行っています。同コンセプトは2019年4月から本センターで運用を開

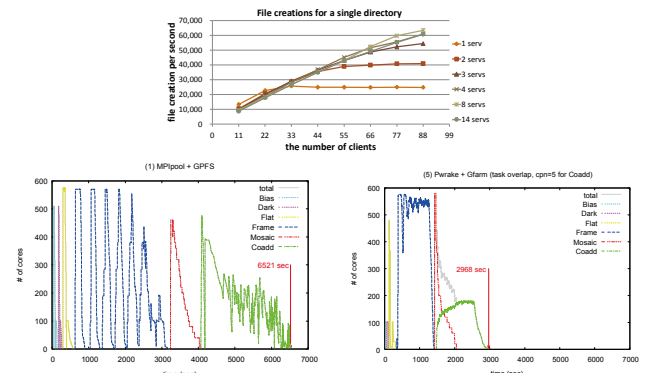
始した新型スーパーコンピュータCygnusに全面的に採用されています。今後、各種アプリケーションへの適用を行いその有効性を示し、次世代の演算加速システムの姿を提案します。



FPGA間通信性能(左)、GPU・FPGA間DMA通信性能(右)

●エクストリームビッグデータの基盤技術

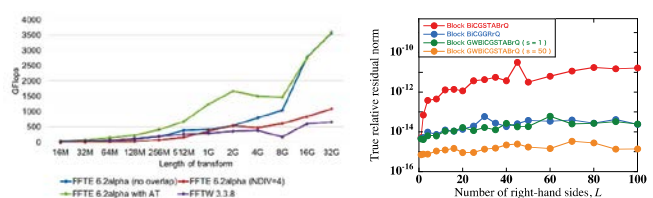
エクストリームビッグデータ (EBD) アプリケーションの実行に求められる、数万~数十万プロセスからの並列アクセスを想定したIOPS、プロセス数に比例した読込、書込アクセスバンド幅性能を目標として、分散オブジェクトストアの研究を行っています。POSIXインターフェースに基づく分散メタデータサーバPPMDSの研究開発を進めています。ビッグデータサイエンスに関する研究としては、すばる望遠鏡におけるHyper Sprime-Cam (HSC) で撮影された天体データのパイプラインデータ処理の高速化を行っています。従来使われていたGPFSファイルシステムの代わりに、計算ノード数を増やしても性能が頭打ちにならないGfarmファイルシステムとデータ解析ワークフローに対しPwrokeを用い、高速化を図っています。



PPMDSメタデータサーバのスケールビリティ(上)と、HSC処理における従来のGPFSによる処理(左下)と我々の手法による処理(右下)の比較

●高性能・大規模並列数値アルゴリズム

FFTE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。また、複数右辺ベクトルをもつ連立一次方程式の近似解を高精度に計算する数値解法の研究を行っています。開発されたBlock GWBiCGSTAB法は、従来法よりも高精度の近似解を得ることを可能にしました。



Oakforest-PACS (1024ノード)における並列次元FFTの性能(左)とブロッククリロフ部分空間反復法の近似解精度(右)



<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・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及びFPGA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 / 堀江和正 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。

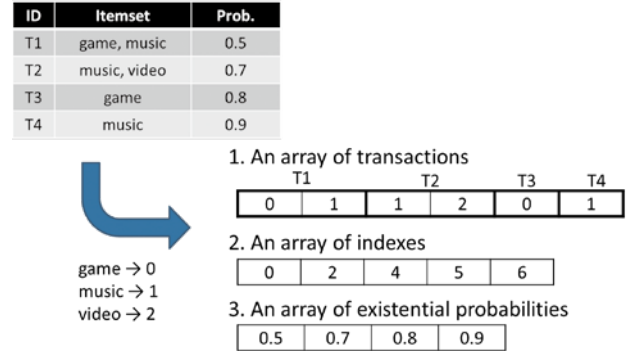


図1 GPUによる確率的頻出アイテム集合マイニング

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GPU/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。

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)。

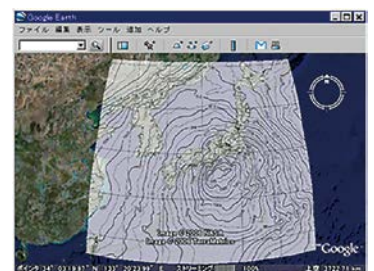


図2 GoogleEarthを利用した天気図の閲覧



<研究部門主任>

北川 博之 筑波大学計算科学研究センター教授

東京大学大学院理学系研究科修了後、日本電気(株)勤務を経て、1988年筑波大学着任。理学博士(東京大学)。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。情報処理学会および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 教授／穴戸英彦 助教

分野の説明

純粋なデータ処理の効率や速度が求められる通常のスーパーコンピュータ分野とは違い、人間に纏わる情報を処理対象とする計算科学では、情報処理の時間軸を人間に合わせることが必須です。そのために、グローバルに広がる人間社会とそれを取り巻く環境(生活空間や都市環境など)を対象とした研究を進めています。それによって得られる実観測データとシミュレーション結果とを融合させた情報を、人間に分かり易い形で提示し人間社会へフィードバックするために、計算メディアを仲立ちとするコンピューテーションの

新しい枠組みを提案しています。

具体的な取り組みとしては、“実世界の情報をセンシングする機能”、“多様な情報を処理する潤沢な計算機能”、“情報を選択・蓄積する大規模データベース機能”を、コンピュータネットワーク上で融合することにより大規模知能情報メディアをバックボーンとして実現していきます。これを総称して実世界計算情報学と呼んでいます。そのバックボーン上で、先端的要素技術の研究開発と、ニーズに密着した応用システムの研究開発を並行して進めています。

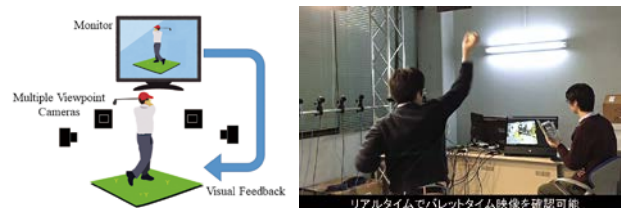
研究トピックス

- ・ スポーツ関係の映像解析およびVR利用による可視化スキル習得の方法論
- ・ 多様な観点で撮影空間を観察する映像閲覧方式を提案
- ・ 撮影から提示までをリアルタイムで処理する多視点映像提示方式
- ・ 注視点再設定と視点切替え処理を自動的に実行する多視点映像提示方式
- ・ ヒト行動のリアルタイム視覚フィードバックシステム
- ・ 深層学習処理の一つである自己符号化器を用いた対応点探索法の考案
- ・ 上記対応点探索に基づく数十年過去の画像と現在の画像のマッチング処理

現在までの成果

●多視点映像によるオンサイト視覚フィードバック方式の研究

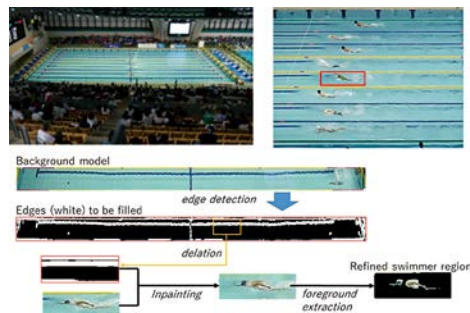
多数のカメラで同一シーンを様々な角度から撮影した多視点映像を用いることにより、視覚フィードバック方式の実現を目的とした研究に取り組んでいます。高品質な映像を高速に生成・提示可能なバレットタイム映像に、注視点再設定の自動化と多視点



映像の切り替えの自動化処理を導入し、スポーツトレーニングなどの現場での利用可能な方式を実現しています。

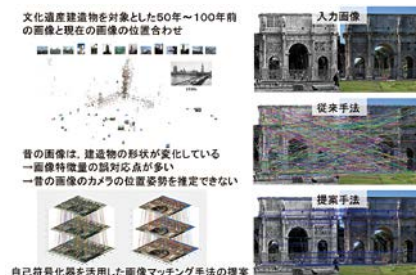
●ホモグラフィ変換と画素分布に基づく競泳者位置推定

競泳において、観客席の最上段に設置したカメラ映像から、時間軸に沿った詳細なパフォーマンス解析を可能にする映像解析の研究を進めてきました。提案手法により、全てのレーンの泳者の位置を高精度に推定することが可能になりました。



●文化遺産建造物を対象とした3次元復元に関する研究

文化遺産建造物の過去の写真と現在の写真の画像マッチングを目標としています。文化遺産建造物の長期間に渡る建物の形状劣化や、建物に対称性がある場合に生じる画像マッチングの正誤対応が混在する課題に対して、自己符号化器とGuided Matching手法を活用した過去と現在の画像マッチングを実現しています。



<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

映像メディアを中心に、潤沢な計算機資源を媒介にして、人と情報との関わりをより洗練されたものにするべく研究を進めています。画像や映像から情報を得ることと、自分が見ている世界と本来不可視の情報とを複合現実感技術で統合して見せることに研究の主眼を置いています。

計算メディカルサイエンス事業部

事業部長 梅村 雅之 教授

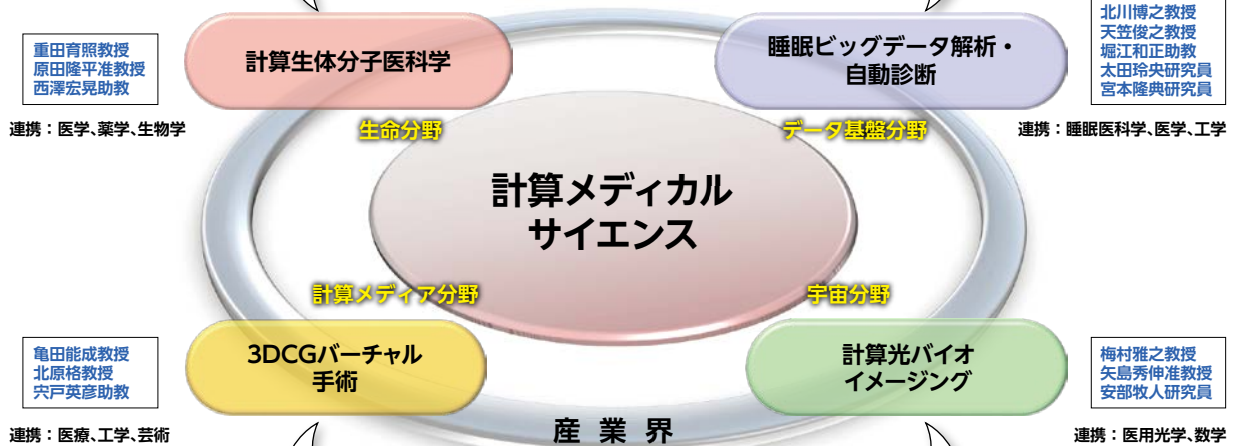
事業目的

医療に関わる新技術の研究開発において、大学などの教育・研究機関の工学系研究者と民間企業の医療関係者が連携する「医工連携」や理学系研究者を加えた「医理工連携」がこれまで行われてきました。昨今、計算科学が急速に発展し、物理学や生命科学分野で高精度な計算技術が開発され、理論、実験にならぶ研究手法として確立されています。また、データ基盤分野や情報メディア分野では、ビッグデータサイエンスや機械学習の手法も目覚ましい発展を見せています。筑波大学計算科学研究センターでは、これらの最先

端の計算科学を医学と連携させる新たな取組みとして「医計連携」を創出する「計算メディカルサイエンス事業」を推進します。本事業は、物理学、生命科学およびデータ基盤、情報メディア分野の計算科学と医学、産業界が連携し、最新の計算法、画像処理技術ならびに機械学習、ディープラーニングを用いて、計算科学による医療技術を開拓することを目的とします。この目的のため、(1) 計算生体分子医科学、(2) 睡眠ビッグデータ解析・自動診断、(3) 3DCGバーチャル手術、(4) 計算光バイオイメージングのプロジェクトチームを設置し、学内外の連携とチーム間連携を図り研究を推進します。

生体内のタンパク質を構成する物質は20種類のL型アミノ酸(や補因子)であり、基本的にL型アミノ酸の1次元鎖が特異的かつ動的な3次元立体構造、さらにはその複合体である4次構造を形成することで、タンパク質(集合体)はその機能を発現します。従来の医薬品開発では、ある特定の標的に対して高い選択性と結合能を併せ持つ副作用の少ない小分子や、様々なタンパク質に特異的に結合する抗体の開発を目指してきました。それらをサポートするため、近年、上市に10年・1薬剤あたり1000億円にもなるコストを減少できるものと期待されて*in silico*技術の高度化が行われてきました。小分子に関しては、様々なリード化合物に対して網羅的に官能基を導入し、ドッキングシミュレーションやその構造をもとにした分子動力学計算を実行する(またその逆過程も繰り返し行う)ことで、低分子化合物をスクリーニングすることが可能となっています。また後者に対しても、計算機シミュレーションによる結合能の評価や耐熱性・高安定性抗体の分子設計がなされてきています。しかし、様々な試みにもかかわらず、実用化されたケースはそれほど多くありません。本研究では、第一原理計算を用いた反応経路解析や、分子動力学計算を用いた基質-タンパク質結合過程の解析の研究を行い、中規模分子をターゲットとした創薬を行います。

睡眠は人々の日常生活に大きな影響を与え、睡眠の問題が引き金となって様々な疾患につながることも知られています。しかし、睡眠に関する多くが科学的には未だ解明されていません。睡眠研究においては、睡眠現象を正確に計測し解析することが必要です。医学的計測方法である睡眠ポリソムノグラフィー検査(PSG)では、多数のセンサを被験者に取り付け、脳波・呼吸運動・眼球運動等の多様な睡眠データを一晩中連続して取得します。しかし、被験者の負担やコストが大きく、長期間にわたる計測は不可能です。また、取得したデータの分析は専門家のマニュアル診断によっており、大規模なデータを対象に分析することは不可能です。一方、近年の睡眠に対する社会的関心の高まりに対応し、スマートフォン等を用いて睡眠状態を簡易的に計測する手法等も開発されていますが、現状では、専門医と同水準で正確かつ簡便に計測する手段は未だありません。本研究は、睡眠ビッグデータ解析・機械学習技術と新たなセンシング技術の融合により、睡眠の自動解析・診断を実現し、さらに、睡眠ビッグデータの活用による新たな計算メディカルサイエンス分野の開拓を目指します。



日本人の死亡原因1位は癌であり、その治療法の第一選択は手術です。医療技術の進歩によって手術の安全性は飛躍的に向上しているものの、依然数%の患者の命が手術によって失われています。一方で、医療の高度化は習得すべき知識や技術を増大させるため、医師毎の技能のバラツキ(癌の切除治療における5年生存率の地域格差は10%以上)や、外科医師数不足の問題(教育に15年を要する)が一層深刻になることが危惧されています。これまでもIT技術を用いたバーチャル手術に関する研究開発が行われてきましたが、3次元視覚情報に基づいた手術ナビゲーションシステムの実現は多くの例を見ません。本研究では、医師が術前検討で用いる3DCGシミュレーションと3次元映像処理技術に基づくオンサイトナビゲーションを統合することで、適切な施手術手順や高度な医療技術の直感的な把握を可能とする3D手術ナビゲーションシステムを構築し、施手術レベルの向上を目指します。また、3次元映像処理や拡張現実(AR)提示などの基盤技術を活用することで遠隔診断・VR治療システムの実現も可能であり、医療技術の地域格差の是正への効果も期待できます。さらに、視認性の高い開腹手術だけでなく、腹腔鏡手術に対しても同様のシステムを実現することにより、患者の身体的負担の少ない術式の実現にも取り組みます。

近年、光イメージング技術の進歩は目覚ましく、生きている細胞や組織の中で生じている分子プロセスの追跡が可能になっています。現在、医療分野ではX線CTやMRIなどのイメージング法が広く用いられており、これらは主として臓器・組織レベルの形態変化を捉えますが、被曝の危険性を伴い、大がかりな装置や特殊な計測室を必要とします。光イメージングは、分子から臓器までマルチレベルの機能ならびに形態学的情報を動的に可視化することができ、ゼロ被曝、非侵襲、ベッドサイド計測、低コスト、低拘束性、長時間分解能といった多くの利点を持ちます。これによって、自動診断・予測、遠隔診断、患者モニタ、スクリーニングが可能となり、妊婦や乳幼児へも安心して適用することができます。しかしながら、光イメージング技術を生体に適用する場合、生体が強散乱体であるため散乱光から生体局所の情報を引き出す必要があり、高度な計算科学技術が要求されることから、これまで実用化に向けての十分な研究はなされてきませんでした。本研究では、宇宙放射輸送方程式(RTE)をベースとする生体内光伝搬モデルの構築、数学的手法に基づく逆問題解析、生体医用光学実験の3つの柱が連携して、安全・安心な近赤外線CT技術を開拓します。



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搭載したCOMA、Oakforest-PACSに対して、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。現在はさらに、演算加速装置としてGPUとFPGAを同時に搭載するCygnusへの取り組みを進めています。

先端計算科学推進室のOakforest-PACSにおける取り組み

	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	<ul style="list-style-type: none"> 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 	<ul style="list-style-type: none"> 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	<ul style="list-style-type: none"> 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 	<ul style="list-style-type: none"> 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	<ul style="list-style-type: none"> 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 	<ul style="list-style-type: none"> 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	<ul style="list-style-type: none"> 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 	<ul style="list-style-type: none"> 実時間・実空間密度汎関数法計算
生命分野	<ul style="list-style-type: none"> 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 	<ul style="list-style-type: none"> 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	<ul style="list-style-type: none"> 北極振動の解明 都市気象、局地風の解明 	<ul style="list-style-type: none"> 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	<ul style="list-style-type: none"> 大規模科学データの管理および知識発見 	<ul style="list-style-type: none"> 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	<ul style="list-style-type: none"> 計算科学における大規模並列計算手法の数理 	<ul style="list-style-type: none"> 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

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数十TFLOPS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HAPACS/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、このコンセプトを進展させ、FPGA（Field Programmable Gate Array）を高性能並列処理と通信処理に用いる、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。このコンセプトに基づき、2017年度よりAiSの実証実験のためのミニクラスタである PPX（Pre-PACS-X）を開発・拡張し、コンセプトの有用性とそれに基づくシステムソフトウェア及び典型的なアプリケーションの開発を進めています。

高性能ノード間通信

近年のFPGAは100Gbpsクラスの通信チャン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させません。CPUでは遅すぎ、GPUにも不向きなこのような処理を

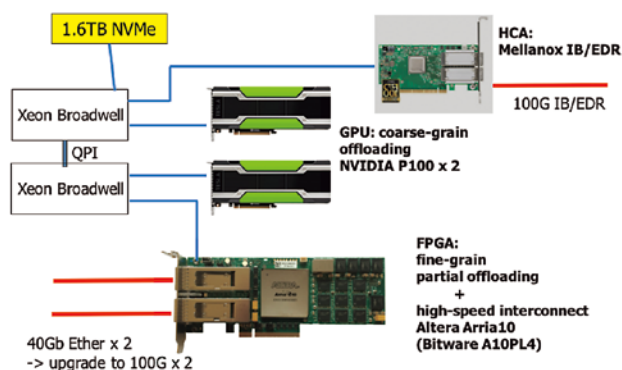
FPGAでハードウェア処理することにより、最適な機能分散処理をノード内で実現します。

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)

AiS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（PACSver.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（一部ノードでは同V100カード）を2台、Intel社E5-2680v3 CPUを2台、Intel社のArria10FPGAを搭載したFPGAボード（一部ノードでは同Stratix10搭載FPGAボード）またはXilinx Kintex 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、13ノードのミニクラスタです。Arria10またはKintex 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。一部ノードに搭載されたStratix10ボードには4本の100Gbpsリンクが搭載され、合計400Gbpsもの超高速ネットワークが実現できます。PPXでのFPGAプログラム及びアプリケーションの総合的开发成果は、AiSコンセプトに基づくスーパーコンピュータCygnusに活用されています。





我が国のフラグシップ・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すものです。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イ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。スーパーコンピュータ「京」は2019年8月に運用を停止する予定です。

新たなスーパーコンピュータ「富岳」にむけて

2014年度以降、スーパーコンピュータ「京」の後継として、ポスト「京」の研究開発プロジェクトが推進されています。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。現在、ポスト「京」の開発も大詰めを迎えており、2019年5月にはその正式名称が「富岳」と決定しました。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、引き続き「富岳」に向けたアプリケーション開発・研究開発を推進するとともに、稼働開始後の科学成果の創出を目指します。



©RIKEN

計算科学の国際ハブ拠点形成にむけて

室長 亀田 能成 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。これからも異分野連携を進めてまいります。

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。

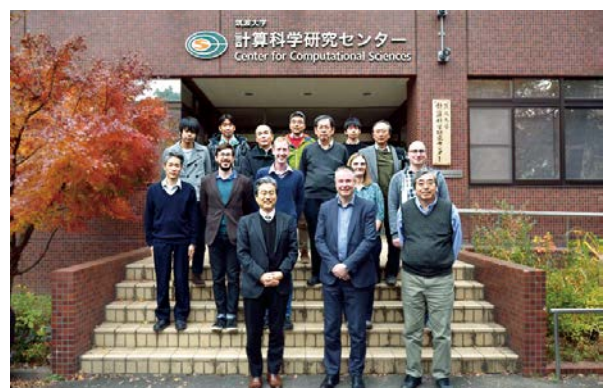
学際開拓プログラム

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

この数十年、系外惑星観測や星間分子観測などにより、宇宙生物学（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物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とエジンバラ大学との共同ワークショップ2017



CCSとローレンス・バークレー国立研究所との共同ワークショップ2019



CCSとKISTIとの合同ウィンタースクール2019



計算科学の人材育成と社会貢献を推進する

室長 高橋 大介 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「計算科学英語プログラム」を開設しています。17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
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、教員個人としても、出張授業・後援会などを積極的に行っています。

スーパーコンピュータを活用した ビッグデータ・AI研究の推進

室長 天笠 俊之 教授

一般的なコンピュータでは扱うことが困難なほど膨大かつ複雑なデータを分析することによってデータに埋もれている情報を見出すビッグデータ解析、さらには、膨大な学習データに対して深層学習に代表される機械学習的手法を適用することで、従来では到底実現できなかったような高精度な判別や予測を可能にするAI技術が脚光を浴びています。ビッグデータ・AI連携推進室では、計算科学の各分野におけるビッグデータ・AI技術の応用、スーパーコンピュータを活用したビッグデータ・AI研究の推進、筑波大学人工知能科学センター（C-AIR）および他機関との連携等の活動を行っています。

計算科学の各分野における ビッグデータ・AI技術の応用

科学の多くの分野において、蓄積された膨大なデータに対してビッグデータ解析、あるいは、機械学習を適用することで新たな知見を見出す試みが活発に行われています。もっとも知られたものに、バイオインフォマティクスがあります。計算科学研究センターにおける計算科学およびビッグデータ・AIに関連した部門の連携によって、計算科学の各分野におけるビッグデータ・AI技術の応用を推進しています。

スーパーコンピュータを活用した ビッグデータ・AI研究の推進

ビッグデータ解析やAIには膨大な計算資源（計算能力およびメモリ）が必要とされます。このため、スーパーコンピュータはビッグデータ解析やAIの実行に最も適した環境の一つと考えられており、主要なスーパーコンピュータでは、このような用途での利用が増加しています。ビッグデータ・AI連携推進室では、計算科学研究センターが運営するスーパーコンピュータを活用したビッグデータ解析・AI研究を推進しています。

筑波大学人工知能科学センター（C-AIR） および他機関との連携

ビッグデータ・AIの推進に関する上記活動に関連して、筑波大学人工知能科学センター（C-AIR）および他機関との連携を推進しています。



CCSビッグデータ・AI連携推進室会議

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 重田 育照 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。



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

ウェブサイトでもさまざまな情報を発信しています。
(<https://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8月の大学説明会、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人以上の見学者を受け入れています。

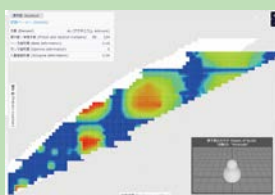


プロジェクト支援

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支援を行っています。また、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。また、研究成果の一般向け公開ツール作成支援を行っています。毎年アメリカ、ドイツで開催されるスパコン分野の大きな学会 (SC、ISC) 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



さわれる核図表 [InPACS] Webページ公開



SC18の様子

Access

■つくばエクスプレス (TX) + バス

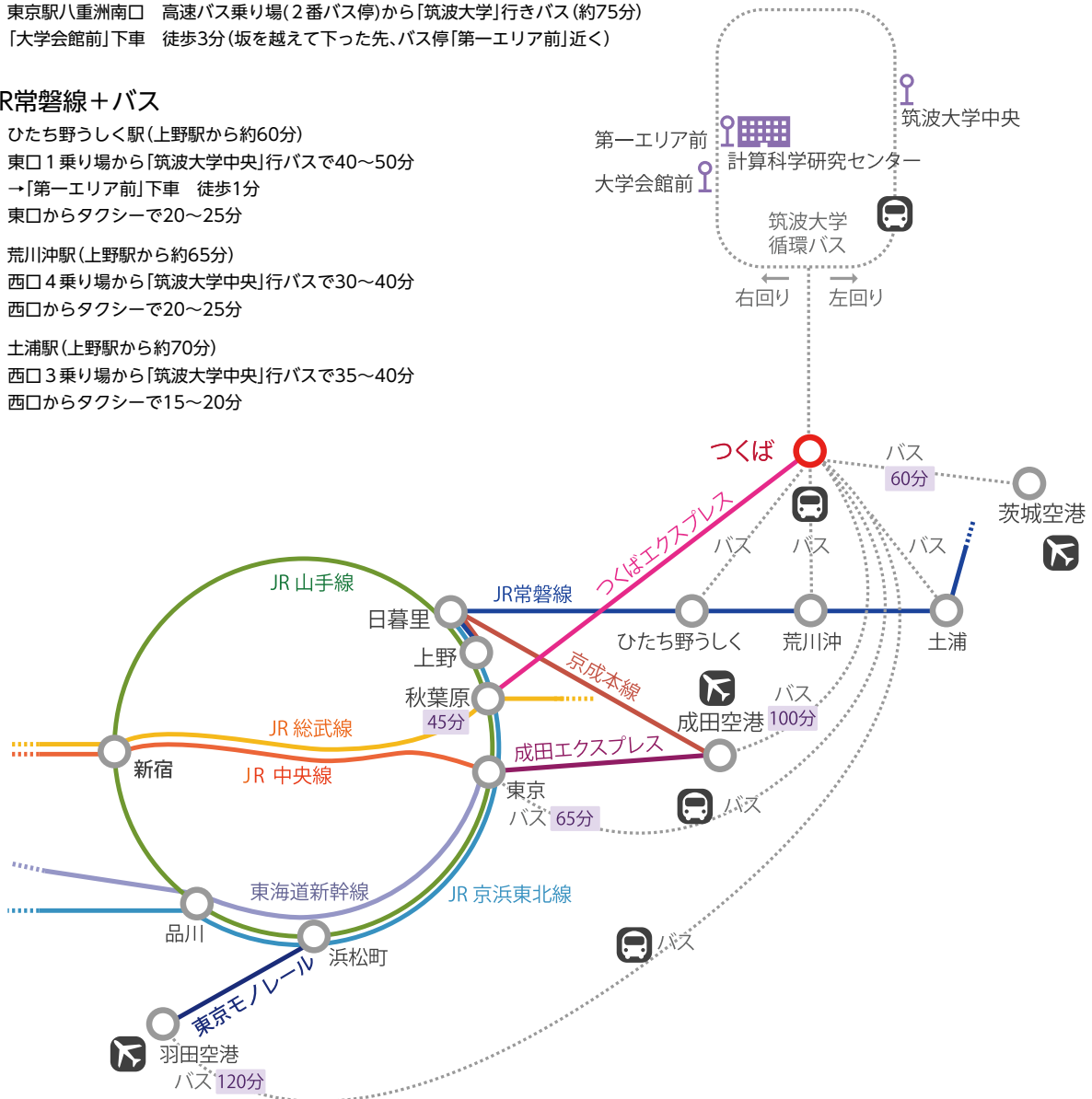
- つくば駅 (快速で、秋葉原駅から45分)
A3、A4出口から、つくばセンター (バスターミナル) へ
- つくばセンターバス乗り場 6 から
「筑波大学中央」または「筑波大学循環 (右回り)」行きのバスに乗車 (所要時間約10分)
「第一エリア前」下車 徒歩1分 (道路を挟んだ向かい側の建物)

■東京駅から高速バス

- 東京駅八重洲南口 高速バス乗り場 (2番バス停) から「筑波大学」行きバス (約75分)
「大学会館前」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)

■JR常磐線 + バス

- ひたち野うしく駅 (上野駅から約60分)
東口1 乗り場から「筑波大学中央」行バスで40~50分
→「第一エリア前」下車 徒歩1分
東口からタクシーで20~25分
- 荒川沖駅 (上野駅から約65分)
西口4 乗り場から「筑波大学中央」行バスで30~40分
西口からタクシーで20~25分
- 土浦駅 (上野駅から約70分)
西口3 乗り場から「筑波大学中央」行バスで35~40分
西口からタクシーで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



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

発行年：2019年