

Report of the Review Committee

外部評価委員会レポート

May 6, 2014

2014 年 5 月 6 日

**Center for Computational Sciences
University of Tsukuba**

筑波大学計算科学研究センター

Table of Contents

1	Introduction.....	5
1.1	Summary of Conclusions and Recommendations.....	5
2	CCS Major Projects	13
2.1	Promotion of Multidisciplinary Computational Science	13
2.2	T2K-Tsukuba Project.....	14
2.3	HA-PACS Project.....	15
2.4	COMA (PACS IX) Project	16
2.5	JCAHPC Project (Joint Center for Advanced High Performance Computing)	16
2.6	Feasibility Study for Exascale Computing	17
2.7	ILDG/JLDG Project.....	19
2.8	Joint Institute for Computational Fundamental Science (JICFuS)	20
2.9	Organization for Collaborative Research on Computational Astrobiology (CAB)	20
3	Research Activities	21
3.1	Division of Particle Physics.....	21
3.2	Division of Astrophysics & Nuclear Physics: Astrophysics Group.....	23
3.2.1	Strategic points.....	24
3.3	Division of Astrophysics & Nuclear Physics: Nuclear Physics Group	25
3.4	Division of Quantum Condensed Matter Physics	27
3.4.1	Computational optical science	27
3.4.2	Computational Nano-Science	28
3.4.3	Strongly correlated systems.....	28
3.4.4	General remarks.....	29
3.5	Division of Life Science.....	30
3.5.1	Molecular Evolution group	30
3.5.2	Biological Function and Information group	33
3.6	Division of Global Environmental Science.....	36
3.7	Division of High Performance Computer Systems.....	37
3.8	Division of Computational Informatics	39
4	Success of the Center in Achieving its Mission	41
4.1	Additional Observations.....	42
4.1.1	International tenure track positions	42

4.1.2	Educational activities	43
-------	------------------------------	----

Member List of the External Review Committee

Name	Research Field	Title, Affiliation
Jeffrey Vetter (Chair)	Computer Science 計算機科学	Professor Computer Science and Mathematics Division Oak Ridge National Laboratory USA
Shinji Tsuneyuki (Vice Chair)	Material Science 物質科学	Professor School of Science The University of Tokyo Japan
Karl Jansen	Particle Physics 素粒子物理学	Professor John von Neumann Institut für Computing (NIC) Germany
Andreas Burkert	Astrophysics 宇宙物理学	Professor Physics Department University Observatory Munich, Ludwig-Maximilians-University Germany
James Vary	Nuclear Physics 原子核物理学	Professor Department of Physics and Astronomy Iowa State University USA
Joachim Burgdörfer	Material Science 物質科学	Professor Institute for Theoretical Physics Vienna University of Technology Austria
Andrew Roger	Biological Science 生命科学	Professor Department of Biochemistry and Molecular Biology, Faculty of Medicine Dalhousie University, Halifax, Nova Scotia Canada
Jack Wells	Computational Science 計算科学	Professor, Director of Science National Center for Computational Science Oak Ridge National Laboratory USA
Takemasa Miyoshi	Geoscience 地球科学	Professor, Team Leader Data Assimilation Research Team RIKEN Advanced Institute for Computational Science Japan
Hiroshi Nakashima	Computer Science 計算機科学	Professor Academic Center for Computing and Media Studies Kyoto University Japan
Xiaofang Zhou	Computational Informatics 計算情報学	Professor School of Information Technology and Electrical Engineering The University of Queensland Australia

1 Introduction

1.1 Summary of Conclusions and Recommendations

結論と提言のまとめ

1. The Review Committee was impressed by the achievements of the Center for Computational Sciences (CCS), its interdisciplinary culture, its leadership, and its vision for the future. The Committee believes that the collective expertise in the Center and the research environment it has built are unique worldwide. In continuing the work of the original Center for Computational Physics, the CCS has established over a period of nearly two decades, a highly successful collaboration among computer scientists, physicists, chemists, atmospheric scientists, applied mathematicians, and others that has built or helped design a series of world-class computers and then used them to produce results at the forefront of computational science, such as the research recognized with the Gordon Bell Prizes in 2011 and 2012. This level of collaboration in the Center serves as an example to other areas in computational science. Moreover, this promotion of this interdisciplinary approach to computational science research should remain the core objective of CCS, and CCS should continue to expand these collaborations with other areas in science and engineering, including knowledge discovery and data-intensive computing. The CCS should maintain a portfolio of exciting research projects at the forefront of computational and computer science, a talented faculty engaged in this research, and an environment in which shared goals can be synthesized, nurtured, and executed. CCS will need to identify mechanisms and incentives for its members to participate in interdisciplinary projects. The Review Committee commends the CCS to the University and recommends that the University acknowledges its strategic value, supports the execution of its mission, and encourages the wider academic community to engage with its activities.

評価委員会は、計算科学研究センター（CCS）の業績、学際的なカルチャー、リーダーシップ、ならびに将来へのビジョンに感銘を受けた。センターが有する多くの専門知識とこれまで築いてきた研究環境は、間違いなく世界的にユニークなものである。CCSは、前身である計算物理学研究センターの研究を継続し、20余年にわたって、計算機科学者、物理学者、化学者、大気科学者、応用数学者及び他の分野の研究者と、非常に実り多い協働体制を確立し、一連の世界クラスのコンピュータを開発・設計して、それを用いて、2011年及び2012年のゴードンベル賞の受賞に代表されるような最先端の計算科学の結果を生み出してきた。CCSのこのような協働体制は、計算科学の他の分野への好例になる。計算科学研究に対するこの学際的な取り組みは、CCSの中心目標として堅持すべきであり、知の発見やビッグデータを含む理工学の他分野との協働体制へと拡大を続けるべきである。CCSは、計算科学と計算機科学の最先端における数々の優れた研究プロジェクト、これに携わる優秀な研究者、そして、目標の共有、統合、育成、実行という現在の研究環境を維持すべきである。CCSは、学際的なプロジェクトに参加する仕組みとそれによるメンバーのインセンティブを明確にしていく必要がある。評価委員会は、筑波大学に対してCCSの活動を称賛するとともに、大学がCCSの戦略的な価値を認め、ミッションの遂行をサポートし、より広い学術分野と連動できるように後押しすることを提言させて頂きたい。

2. CCS responded to recommendations from the 2008 review report, many of which are recognized later in this report. The Center continued to grow interdisciplinary programs, and, most recently, acquired eight new faculty positions from the University. These positions include four international tenure track faculty positions -- a new, innovative concept to promote external collaboration. In addition, the Center successfully maintained computing facilities on both the production and research tracks: T2K and HA-PACS, respectively. Accordingly, the Center plays an important role in the programs subsequent to T2K and HA-PACS, including JCAHPC and Japan's Exascale program.

CCS は、本レポートで後ほど詳述の通り、2008 年の評価レポートにある提言に答えてきた。CCS は、学際的なプログラムを拡大し続け、ごく最近、大学から新しく 8 名の教員枠を獲得した。これらの教員枠の中には、海外との共同研究の推進を目的とする斬新で革新的な国際テニユアトラック教員枠が 4 つある。それに加えて、CCS は、T2K や HA-PACS など、計算機開発と研究の両面から見事に計算機設備を維持してきた。その結果として、CCS は、JCAHPC 及び日本のエクサスケールプログラムなどの T2K や HA-PACS の後続プログラムにおいても、重要な役割を果たしている。

3. The CCS official mission statement serves as a critical point of reference for internal and external consumption. Multiple, partly overlapping, statements of the mission were presented. The review panel recommends that the CCS develop and adopt an official mission statement - likely along the lines of the version presented by Director Umemura which reflects more accurately current and planned activities.

CCS の公式なミッションの記述は、内外の需要を決める上で決定的に重要である。過去には、部分的に重複したミッションの記述が見られた。梅村センター長が提示した内容は、より正確に現状と今後の計画を示すものであり、評価委員会は、この線に従って、公式なミッションを作成・採択することを提言したい。

4. JICFuS has played a successful lead role in the preparation for the K-supercomputer and is the organization that promotes efficient and productive use of K in the fundamental sciences. As lead organization for promoting the fundamental science drivers of supercomputers, it is natural to recommend that JICFuS plays a central role in developing a consensus within their community for key architectural design elements of next generation supercomputers. Such a consensus should have impact on the achievement of future systems that will, in turn, enable fundamental scientific discoveries.

JICFuS は京スーパーコンピュータの準備段階において先導的役割を十分に果たし、現在基礎科学分野において京を有効に使い、成果を出す組織となっている。JICFuS は、スーパーコンピュータを用いた基礎科学を先導する組織であり、次世代スーパーコンピュータの主要な技術設計において、当然のこととしてコミュニティとの合意形成に中心的な役割を果たすことが期待されている。この合意形成は、基礎科学の様々な発見を可能にする計算機システムの実現にとって大きな影響力をもつ。

5. To achieve success in the CCS mission over the long term requires the hiring and ongoing development of an outstanding faculty. The current faculty, while excellent in quality, consists of just 37 scientists distributed over all faculty ranks and over all divisions. Given the broad scope of projects, and the CCS leadership roles in these projects that are critical to the nation's efforts in computational science and technology, it is important to increase the faculty. The review panel recommends that

CCS pursues and creates additional faculty positions and maintain a balance in the research divisions consistent with needs for training students and scientific discovery potential.

長期間に渡って CCS のミッションを成功させるためには、優れた教員の雇用とその拡大が必要である。現在の教員の質は素晴らしいが、多くの学部や専攻にまたがっており、その数は 37 名に過ぎない。CCS のプロジェクトは広範囲にわたっており、CCS のプロジェクトの主導が計算科学と計算機技術の国家的なプロジェクトにも欠かせないものになっていることを考えると、教員組織の拡大は重要である。評価委員会は、CCS が教員の増強を進め、学生の養成と科学分野の将来性を考えた研究部門間のバランスを図っていくことを提言したい。

6. The CCS has hired several technical staff members to support their T2K and HA-PACS systems since the past review period. However, the Committee believes that CCS has too few technical staff to support the porting, development, and optimization of applications on increasingly complex computer architectures, which are arriving now (e.g., GPU, Xeon Phi) and anticipated in the next decade. This situation will be aggravated as the Center becomes responsible for a broad range of projects: users of the University's PACS-IX supercomputer, for external projects on the separate JCAHPC system in 2015, and marquee application efforts on the eventual Exascale system. CCS will need to introduce a more service-oriented user support mechanism for this wider range of users and computer architectures. Yet, the Center will need to balance this advanced application support activity against more research-oriented activities in computer science and applications domains, or it will risk its excellent research reputation. In some cases, these interactions will create new opportunities. For example, these interactions could create additional opportunities for the University to drive research into software and programming systems that are portable, efficient, and productive for many applications across a broad range of these architectures (e.g., GPU, Xeon Phi, vector, Exascale).

前回の外部評価期間の後、CCS は何人かの技術スタッフを雇用し、T2K と HA-PACS システムをサポートしてきた。しかしながら、既に普及している計算機アーキテクチャ（例えば、GPU, Xeon Phi）や次の 10 年に到来するアーキテクチャは、複雑度を増しており、その上でアプリケーションの入出力管理、開発、最適化をサポートする技術スタッフの数としては少なすぎると、評価委員会は考える。この状況は、PACS-IX スーパーコンピュータのユーザや、2015 年に導入予定の JCAHPC システムの外部プロジェクト、ひいてはエクサスケールシステムにおける大規模アプリケーションなどセンターが広範なプロジェクトに責任を持つようになるにしたがって、増々問題となるであろう。CCS は、より広い範囲にわたるユーザと計算機アーキテクチャに対して、サービス指向のユーザサポートの仕組みを取り入れる必要があるであろう。その上で、先端的なアプリケーションのサポートを、計算機科学やアプリケーション分野における研究指向の活動と、うまくバランスさせていく必要がある。でないと、現在の高い評判を落とすことにもなりかねない。これらの相互活動は、場合によっては、新たな機会を生み出すことにもなる。例えば、この相互活動は、広範な計算機アーキテクチャ（GPU, Xeon Phi, Vector, Exascale など）に対して、多くのアプリケーションの移植性、効率性、生産性を高めるようなソフトウェアとプログラミングシステムの研究を始める機会となり得るからである。

7. The CCS is already pursuing an international visitor and student exchange program, organizing schools and conferences and inviting 3-4 senior researchers per year from

abroad for longer, 2 month visits. This activity is of very high importance and has been appreciated very much by the review committee. The review panel recommends that CCS make this international exchange program even stronger and extend it by inviting more researchers from abroad to spend time at the institute. At the same time, there should be a mutual exchange program for students by inviting students, for example, in form of a summer student program, to the CCS and sending students of the CCS to institutions abroad.

CCS は既に、海外のビジターや学生と交流を行うプログラムを進め、スクールや研究会を開催し、一流の研究者を 2 か月以上にわたり長期招聘するプログラムを年間 3-4 件施行している。この活動は、極めて重要であり、評価委員会においても非常に高く評価された。評価委員会は、CCS がこの国際的な交流プログラムをさらに強く押し進め、海外からより多くの研究者を招聘してセンターに滞在できるようにすることを提言したい。同時に、例えばサマースクールなどで海外の学生を CCS に招待し、日本の学生を海外の研究所に派遣するといった相互交流プログラムもあるとよいであろう。

8. Given the substantial increase in computing power, the CCS is starting to focus on the next generation of complex multi-dimensional numerical problems that require even more sophisticated analyses and visualization tools. One example is the unique trillion body cosmological simulation that reveals the 3-dimensional fine structure of the dark universe with unprecedented resolution. The committee sees an enormous synergy effect in this development where different groups would strongly profit from developing in a joint effort visualization tools and software and even might consider running a joint, professional visualization lab.

計算機能力の格段の向上によって、CCS は今よりもはるかに洗練された解析や可視化ツールを必要とするような次世代の複雑な多次元数値計算に注力していこうとしている。一つの例は、前例のない分解能で宇宙の 3 次元構造を解き明かした 1 兆粒子の宇宙論的シミュレーションである。可視化ツールやソフトウェア開発で協力し合うことで、異なる研究グループに受益があり、この研究開発で大きな相乗効果があったことを見て取ることができた。今後、専門の可視化チームを共同で結成することを考えても良い。

9. Emerging from its scientific and technical mission and vision, the CCS is a pioneering institute in the joint, coordinated design and development of hardware and software. This excellence in “codesign” is becoming a widely recognized process within the community. It appears that achievements in this regard have emerged primarily from the computational physics, which is a historical core of CCS. It is to be expected that the topical areas initiated with the 2004 expansion of the center would not have had as much time to develop achievements in codesign approaches to application development. However, future outcomes and successes of the CCS may depend upon the successful expansion of application codesign in divisions such as life sciences, global environmental sciences, and computational informatics. Therefore, the committee recommends that codesign process should be extended to more application areas in order to better prepare these divisions for future successes. These newer divisions are rather small organizations and expectations need to be commensurate with the level of effort. Therefore, opportunities for new codesign need to be initiated with careful strategic planning, including the provision of scientific computing support professionals as described in recommendation #6 above.

科学的、技術的ミッションやビジョンに謳われている通り、CCS はハードウェアとソフトウェアの共同開発・製作を世界に先駆けて行った研究所である。共同開発（コデザイ

ン)の素晴らしさは、今やコミュニティで広く認識されるようになってきている。このようなコデザインは、主として、CCSが初期に注力した計算物理の分野で実現したものと思われる。2004年の改組の際に加わった新分野については、アプリケーション開発においてコデザインに多大な労力を払うことは必ずしも期待されていない。しかしながら、CCSの将来の発展と成功は、コデザインを生命科学や地球環境科学、計算情報学に拡大することにかかっているかもしれない。評価委員会は、コデザインを多くのアプリケーション分野に拡大し、その分野の将来の成功に備えていくことを提言したい。これらの新分野はかなり小さなグループであり、努力に見合った結果がでるようにすべきである。従って、新たなコデザインを始めるにあたっては、上記6で述べたような科学計算サポートの専門家を配置するなど、戦略的計画をよく検討して行う必要がある。

10. The CCS currently has seven Research Divisions each of which has a successful track record and a promising future. These divisions exhibit selective excellence within their disciplines and their senior members are leaders of successful multi-disciplinary projects of CCS.

CCSには現在7つの研究部門があり、それぞれが立派な業績をもち将来性も高い。これらの研究部門の学問領域での卓越性は際立っており、経験豊かなメンバーがCCSの卓越した学際的プロジェクトのリーダーとなっている。

- a) **Particle Physics** is prominent for its lattice QCD program. The group is highly visible and top-ranking world-wide. It has contributed original and pioneering ideas to the field, and its contributions to the ILDG/JLDG was further developed and remains an important infrastructure for a global data exchange.

素粒子物理研究部門は格子QCD研究において卓越している。CCSを中心とした研究グループは世界的に高く評価されており、トップクラスの研究成果を生み出している。オリジナルかつ先駆的のアイデアに基づいた研究を行うとともに、ILDG/JLDG構築・高度化に尽力し、グローバルなデータ共有を可能とする重要なインフラ基盤構築にも貢献している。

- b) **Astrophysics & Nuclear Physics:** **Astrophysics** is prominent in various topics that address some of the most important, unsolved theoretical puzzles of astrophysics and cosmology. These topics include the large-scale structure of the Universe, the nature of dark matter, the origin of elements in the Universe, and the formation of galaxies and supermassive black holes. Pioneering developments in computational astrophysics include the first development of a relativistic, 3-dimensional radiation transfer code, the combination of quantum mechanics with radiation transfer, and a GPU-based gravitational cosmological N-body code.

宇宙・原子核物理研究部門：宇宙物理学分野では、様々な研究テーマで際立っており、宇宙物理学および宇宙論における最も重要かつ未解決の理論的な問題を扱っている。例えば、宇宙の大規模構造、ダークマターの正体、宇宙における元素の起源、銀河と巨大ブラックホールの形成等が挙げられる。また、計算宇宙物理学分野では、世界初の3次元相対論的輻射輸送コードの開発、量子力学と輻射輸送の結合、そしてGPUを利用した宇宙論的N体コードの開発等の先駆的な研究が行われている。

- c) **Astrophysics & Nuclear Physics: Nuclear Physics** is prominent for its program in nuclear many-body theory, and in particular, its development and applications of time-dependent formalisms, nuclear reactions, and nuclear double beta-decay. The group has pioneered developments in the theory and applications of energy density functional theory to nuclear phenomena including a major extension to time-dependent problems with large amplitudes. The group's recent development of imaginary time theory for reactions provides a promising new path to investigation reactions in a fully microscopic approach.

宇宙・原子核物理研究部門：原子核分野は、原子核多体問題の研究計画、特に時間依存形式の開発と応用、原子核反応、原子核 2 重ベータ崩壊の研究で有名である。この研究グループは、エネルギー汎関数理論とその核現象への応用において先駆的な研究開発を行い、特に大振幅運動の時間依存問題への重要な拡張を実現した。また、最近このグループで開発した核反応の虚時間理論は、将来性が高く、完全微視的手法への新たな可能性を示している。

- d) **Quantum Condensed Matter Physics** is prominent for its development and applications of time-dependent many-body theory that focus on non-perturbative response to strong laser fields. It is also prominent for first principles calculations of nano-systems for future electronic devices. Their leading-edge simulation programs are fully optimized for massively parallel supercomputers, and have been developed in fruitful collaboration with computer scientists in CCS Tsukuba.

量子物性研究部門は、強レーザー場に対する非摂動的な応答に重点を置いた時間依存多体理論の発展と応用に傑出している。同分野はまた未来の電子デバイスに向けたナノシステムの第一原理計算にも卓越している。その先端のシミュレーションプログラムは、センターの計算機科学者との実り多い協力のもとで開発され、超並列スーパーコンピュータに対して十分に最適化されている。

- e) **Life Sciences** is prominent in the development and application of new computational phylogenetic methods for reconstructing the early evolutionary events in eukaryotic cell evolution using next-generation DNA sequencing data. They are also prominent in the development of quantum mechanical/molecular mechanical approaches and molecular dynamics simulation methods to investigate the catalytic mechanisms and physical properties of biomolecules.

生命科学研究部門は、次世代 DNA シーケンサーデータを用いた、真核細胞の進化の初期段階の再構成に対する新しい系統発生的手法の開発、および、その応用研究において傑出した成果を挙げている。また、QM/MM 法や分子動力学シミュレーション法を用いた酵素反応機構解明や蛋白質薬剤結合解析の研究においても、傑出した成果を挙げている。

- f) **Global Environment Science** is prominent for its development of global and regional scale general atmospheric circulation models including the role of regional topological features and urban climate, specifically heat island processes. Notable insights and contributions are present in this divisions research of abnormal weather patterns associated with oscillations of the arctic atmospheric circulation and the groundbreaking work in development of the multilayer urban canopy model for the heat-island phenomenon.

地球環境研究部門では、地球規模の大気循環モデルや領域モデルの開発を行うことで、特に、都市気候におけるヒートアイランド現象の解明に精力的に取り組んでいる。当該部門の研究として、大気大循環における北極圏の役割や北極振動に伴う異常気象の原因究明と、ヒートアイランド研究を目的とした都市キャノピー多層モデルの開発による第一線の研究が行われている。

- g) **High Performance Computer Systems** is prominent for both its research impact as well as its deployment of HPC facilities for the broader University and national interests. With respect to research, HPCS contributes multiple projects including its design and implementation of computer architectures (e.g., tightly coupled accelerators), a distributed file system, and high-performance parallel numerical algorithms. These projects not only result in research prototypes but widely used artifacts in the community (e.g., Gfarm, FFTE). With regards to facilities, HPCS plays a very important (and often silent) role in making computing facilities available to other researchers at CCS, the University, and the country (cf. #2, #4, and #6 above). These deployments help other members of CCS and the University by providing both access to contemporary architectures, and vision and expertise for these new architectures before they are commonly available.

高性能計算システム研究部門は自身の研究と、大学及び全国の研究において重要となる HPC 資源の提供という両者の役割において傑出した成果を挙げている。同部門は計算機アーキテクチャの設計と実装（密結合演算加速機構等）、分散ファイルシステム、高性能並列計算アルゴリズムの各プロジェクトにおいて研究成果を挙げている。これらのプロジェクトは単なるプロトタイプ研究に留まらず、研究コミュニティの資産として広く利用されている（例えば Gfarm や FFTE 等）。計算機資源に関しては、同部門は計算科学研究センター、筑波大学、そして全国の多くの研究者に提供される共同利用計算機システムの構築に非常に重要な（そして多くの場合は潜在的な）役割を演じている（先述の項目 2, 4, 6 参照）。これらの計算機資源の提供は、計算科学研究センター及び学内において、一般的なアーキテクチャによる計算機システムの利用を可能とするだけでなく、研究段階にある先進的アーキテクチャに対する新しい視点と専門的見地からの導入も推進している。

- h) **Computational Informatics** is prominent for its research on Big Data and development of tools for computational media. The database group has extensive publications in leading conferences, and has collaborated with other computational scientists to develop the ILDG data archive and advanced algorithms for database and data mining on GPUs, such as those in HA-PACS. The computational media group focuses on important, emerging areas like video browsing, massive sensing, and image recognition. This group has world-class expertise in multimedia, visualization and human-computer interaction, which has recently gained more importance in the intersection of big data research and HPC.

計算情報学研究部門は、ビッグデータに関する研究や計算メディアのためのツール開発において卓越した成果をあげている。データ基盤グループは、主要国際会議において多くの論文発表を行っており、また、他の計算科学研究者と連携して、ILDG データアーカイブの開発や、HA-PACS 等にも組み入れられている GPU を用いたデータベース・データマイニングアルゴリズムの開発を行っている。計算

メディアグループは、ビデオブラウジング、マッシブセンシング、イメージ認識等の重要かつ新規性の高い領域に焦点を当てている。本グループは、マルチメディア、可視化、ヒューマンコンピュータインタラクションにおいて世界水準の研究力を有する。これらの分野は、ビッグデータ研究や HPC との接点において、近年重要性が増加している。

11. The committee broadly endorses the positive emphasis placed on public relations, marketing, and outreach, and considers the content and plans presented during this review to be of high quality. The committee also encourages the ongoing effectiveness evaluation as mentioned as a “Future Plan”. Indeed, this aspect of CCS is an emerging opportunity for collaboration between researchers in science and engineering together with social scientists and communication professionals and is emerging as a “hot topic” in North America and Europe. The committee does encourage more attention on user community stakeholders, as the user-facility role played by CCS did not stand out within the products and plans presented during this review. Scientific users of the CCS form an important constituency and base upon which the CCS can build broader awareness and appreciation of its achievements and impact.

評価委員会は、センターが広報、マーケティング、アウトリーチに重きを置いている点を手放しで支持すると同時に、広報担当が報告した活動内容と計画は質の高いものであると考える。また、広報の“将来計画”として掲げた継続的な有効性の評価は是非行って頂きたい。実際、CCS の広報活動は、理工学の研究者、社会学者、報道機関が一体となった協働が進む機会となりうるし、北アメリカやヨーロッパで“ホットトピックス”として注目されるであろう。また、CCS が果たしてきた共同利用の役割は、外部評価で提示された成果物や計画の中ではあまり目立っていなかったが、ユーザコミュニティの利害関係者をもっと重視して頂くのがよいと考える。CCS のユーザは、センターにとって重要な支持層であるし、彼らによってセンターの知名度が上がり、その実績や影響力が高く評価されるであろう。

12. In order to broaden the scope and deepen the national and international impact of CCS, the committee recommends that Multidisciplinary Cooperative Research Program (MCRP) user collaboration be strengthened within the newer topical areas within CCS, such as Global Environmental Sciences, Life Sciences, and Materials Sciences. And, we recommend that, across MCRP that the research outcomes across all technical areas be more clearly communicated through public relations, communications, and outreach activities.

評価委員会は、CCS がさらに拡大し、国内外への影響力を高めるためには、地球環境科学や生命科学、物質科学のような新しい分野で、学際共同利用のユーザ間の共同研究が強力に推し進められるようになることを提言したい。そして、学際共同利用全体にわたって、全ての技術分野での研究成果が広報、コミュニケーション、アウトリーチ活動を通じて、しっかりと連携することが望まれる。

13. The review committee endorses the future vision and actions presented at this review. With regard to future plans and visions the committee strongly supports the proposed large scale projects including: COMA, JCAHPC (collaborative center with Tokyo for next large scale HPC system), the feasibility study with respect to exascale computing, the Joint Institutes for Computational Fundamental Science (JICFuS), and the broadly collaborative Computational Astrobiology Plan.

評価委員会は、外部評価で示されたセンターの将来ビジョンと構想を支持する。将来計画と方針について、COMA, JCAHPC（次期大規模 HPC システム導入のための東京大学との共同施設）、エクサスケール・コンピューティングに関するフィージビリティ検討、計算基礎科学連携拠点（JICFuS）、広い分野間連携による計算宇宙生命計画、などの大規模プロジェクト計画を強く支持する。

2 CCS Major Projects

2.1 Promotion of Multidisciplinary Computational Science

Since 2002, the CCS has been making computer resources available to collaborative research efforts in order to facilitate nationwide progress in computational sciences. Since 2007, these activities have been reinforced by enhanced links with computer sciences through the promotion of the Multidisciplinary Cooperative Research Program (MCRP). Since 2010, the CCS has been recognized as a national core-center under the Advanced Interdisciplinary Computational Science Collaboration Initiative (AISCI), through which it has been active in the MCRP, while also providing cooperative assistance and support in the areas of research meetings, visitor information, cooperative research travel and short-term employment.

There is a strong correspondence between the topical structure of the CCS Research Divisions and the topics included within the solicitation for the Multidisciplinary Cooperative Research Program, the CCS user program. And, by program design, proposing work within the topics spanned by the CCS divisions appears to be an important determinant for inclusion in the user program. (One assumes that users working in other topical areas are computing elsewhere in Japan.) In order to broaden the scope and deepen the national and international impact of CCS, the committee recommends that Multidisciplinary Cooperative Research Program (MCRP) user collaboration be strengthened within the newer topical areas in CCS, such as Global Environmental Sciences, Life Sciences, and Materials Sciences. And we recommend that, across MCRP that the research outcomes across all technical areas be more clearly communicated through public relations, communications, and outreach activities. As presented at the review, the technical successes within the MCRP program were largely mute.

学際計算科学の推進

2002 年以来、CCS は全国の計算科学の発展に資するため、共同研究で利用可能な計算機を作り続けてきた。2007 年以降、この取り組みは、学際共同利用プログラム (MCRP) の推進を通じ、計算機科学とのより密な連携の下で強化されてきた。2010 年には、全国共同利用施設の一つ「先端学際計算科学共同研究拠点」として認定され、学際共同利用プログラムが強力に推し進められると同時に、研究会開催、情報提供、共同研究旅費、短期雇用等を通じて、様々な分野に対して協力と支援を行ってきた。

CCS に置かれている研究部門の学問分野と学際共同利用プログラムの公募分野は大変良く一致している。学際共同利用プログラムにとって、CCS の研究部門で行われている分野での課題申請することは、研究課題の採択において重要な決定要因になっていると思われる。CCS がさらに拡大し、国以外への影響力を高めるためには、地球環境科学や生命科学、物質科学のような新しい分野で、学際共同利用のユーザ間の共同研究が強力に推し進められるようになることを提言したい。そして、学際共同利用全体にわたって、全ての技術分野での研究成果が広報、コミュニケーション、アウトリーチ活動を通じて、しっかりと連携することが望まれる。外部評価では、学際共同利用プログラムの技術的成功は、あまり強調されていなかった。

2.2 T2K-Tsukuba Project

T2K is a national effort involving University of Tsukuba, University of Tokyo, and Kyoto University to provide supercomputing resources to national users. T2K-Tsukuba, the portion of the system sited at Tsukuba, had 648 nodes, where each node was had four AMD quad-core Opteron processors with 32GB of memory, resulting in a peak performance of 147 GFLOPS/node. The nodes were connective via Infiniband 4xDDR. The system used a standard open-source software stack based on Linux, MPI, and common languages like C, C++, and FORTRAN90. The system obtained the #20 ranking at 76.5 TFLOPS on the TOP500 list for June 2008.

CCS will decommission the T2K-Tsukuba system in March 2014 after being put into operation in 2008, and serving a large number of users during this time. The original decommissioning date was extended by 1 year to March 2014 due to user requests and the system utilization. Average utilization for more than 5 years was 70% with a wide variety of users from local and national programs. CCS communicated that user requests for allocations are 30% over subscribed. That is, they receive 130% of the requests that they can satisfy with allocations.

T2K-Tsukuba プロジェクト

T2K は国内において筑波大学・東京大学・京都大学の 3 大学において国内のユーザにスーパーコンピュータ資源を提供する連携の試みである。筑波大学に設置された T2K-Tsukuba においては、各計算ノードは AMD 社の 4 コア搭載 Opteron プロセッサを 4 基と 32GB のメモリを持ち、ノード当たりのピーク演算性能は 147GFLOPS で、これを 648 台結合している。全ノードは 4 チャンネルの InfiniBandDDR ネットワークで結合されている。システムは Linux, MPI といった標準的なオープンソースソフトウェアと、プログラミング言語として標準的な C++, Fortran90 を提供している。同システムは 2008 年 6 月の TOP500 リストにおいて 76.5TFLOPS の性能で世界第 20 位にランクされた。

計算科学研究センターは 2008 年から T2K-Tsukuba の運用を開始、2014 年 3 月にこれを終了し、その間、多数のユーザを支援した。当初はこの 1 年前に運用を終了する予定であったが、ユーザの要望及び高いシステム利用率もあって期間が延長された。5 年以上に渡る平均利用率は 70% で、学内及び全国共同利用プログラムの下で、幅広いユーザに利用された。計算科学研究センターでは全リソースで可能な CPU 時間を 30% 上回るリソース割り当てを計画的に行った。全体で 130% のリソースに相当する利用申請を許可したが、これによって結果として高い利用率が維持された。

2.3 HA-PACS Project

Concurrently, with T2K-Tsukuba, CCS initiated the HA-PACS (Highly Accelerated Parallel Advanced system for Computational Sciences) project; it began as a 3 year project from April 2011 until Mar 2014. The HA-PACS project continues the CCS tradition of high-end supercomputers based on MPP architectures that is designed and deployed in collaboration with computational and computer scientists; the first system, PACS-9 at 7 KFLOPS, was deployed in 1978! The system has two parts: a base cluster, and a smaller experimental research cluster.

The HA-PACS system was deployed on Feb 2012 for a variety of applications. From Oct 2012, 100% of resources have been dedicated for multidisciplinary research in CCS. The system will remain in operation until Mar 2016. The budget was \$4.5M. The base cluster is a GPU-accelerated commodity cluster consisting of nodes with 4 NVIDIA Fermi GPUs directly connected to 2 Intel Sandy Bridge CPUs. Each node has 16GB of main memory, and two rails of IB QDR network. The system has 268 nodes for a total peak performance of 802 TFLOPS.

The experimental cluster, HA-PACS/TCA is a research prototype that uses a CCS-designed communication systems and chip for tightly coupling the GPUs. The system is named PEARL and the chip is named PEACH2. In HA-PACS, 60 nodes in the cluster have been engineered with the PEACH2 prototype for experimentation. Tightly Coupled Accelerator (TCA) chip in order to facilitate high bandwidth communication directly between any two GPUs bypassing the CPU when possible. CCS developed prototype devices using GPUs (PEACH and PEACH2 chips. PEACH2 was implemented with FPGAs. HA-PACS/TCA hardware effort appears very impressive, with the PEACH2 networking and GPU direct. TCA provides direct communication between GPUs without intervention by the CPU, resulting in lower latency and higher throughput.

HA-PACS プロジェクト

計算科学研究センターでは、T2K-Tsukuba と平行して、HA-PACS (Highly Accelerated Parallel Advanced system for Computational Sciences) プロジェクトを開始した。これは 2011 年 4 月から 2014 年 3 月までの 3 年間のプロジェクトとして始まった。1978 年に 7KFLOPS の性能を持つ PACS-9 が構築されて以来の計算科学研究センターのこれまでの伝統に従い、HA-PACS プロジェクトは計算科学と計算機科学の両分野の研究者の共同研究として実施されている。同システムは 2 つの部分、ベースクラスター部と小型の開発実験システム部からなる。

HA-PACS は 2012 年 2 月から、広い範囲のアプリケーションを対象として整備され、運用を開始した。2012 年 10 月からは、システムの全ての資源は計算科学研究センターが推進する学際共同利用プログラムに提供されている。同システムは 2016 年 3 月まで運用される予定で、システム本体の導入予算は 450 万ドルである。ベースクラスター部では、各計算ノードは 4 台の NVIDIA 社 Fermi アーキテクチャの GPU と 2 台の Intel 社 Sandy Bridge アーキテクチャの CPU を直結して構築されている。各ノードは 128GB の主記憶を持ち（注：16GB は誤り）、2 チャンネルの InfiniBand QDR ネットワークで結合されている。システム全体は 268 ノードで、802TFLOPS のピーク演算性能を持つ。

実験用クラスタである HA-PACS/TCA 部は、計算科学研究センターで独自開発された、複数ノード上の GPU 間を密に結合するネットワーク技術の実験プロトタイプとして利用されている。ネットワークシステムは PEARL と呼ばれ、これを実現するチップは PEACH2 と名付けられている。HA-PACS では 64 台の計算ノード（60 台は誤り）に PEACH2 ボードが搭載され、結合されている。これらの技術は密結合演算加速機構（TCA: Tightly Coupled Accelerators）というコンセプトの下で、システム上の複数の GPU 間を、可能な限り CPU を経由することなしに直接通信させ、高いバンド幅の通信を実現する。計算科学研究センターでは GPU を利用するプロトタイプシステムとして PEACH と PEACH2 チップを開発した。PEACH2 は FPGA を用いて実装されている。HA-PACS/TCA 部の開発は非常に素晴らしく、PEACH2 による GPU 直接通信が可能としている。TCA コンセプトにより CPU を介さない GPU 間直接通信が実現され、低遅延・高バンド幅な通信が可能となった。

2.4 COMA (PACS IX) Project

COMA, or PACS-IX, is the successor to HA-PACS, which will be deployed in April 2014. This new system's nodes will consist of 2 Intel Xeon Ivy Bridge processors combined with 2 Intel Xeon Phi processors, 64GB of main memory, and an Infiniband FDR network interface. The system will have 393 nodes that will provide a total peak performance of 1.001 PFLOPS. COMA when deployed will run several workloads including HPCI, Large-scale general use, and Multi-disciplinary Collaborative Research Program (MCRP). CCS will provide training for programming and porting applications to the new Xeon Phi accelerator.

COMA (PACS IX) プロジェクト

PACS-IX の別名を持つ COMA は、HA-PACS に続くシステムで、2014 年 4 月に稼働を開始する予定である。この新しいシステムの計算ノードは、2 台の Intel 社製 IvyBridge プロセッサと、2 台の Intel 社 Xeon Phi プロセッサを搭載し、主記憶容量は 64GB で、InfiniBand FDR ネットワークを備えている。全システムは 393 台の計算ノードを持ち、総ピーク性能は 1.001PFLOPS に達する。運用開始後は、COMA は HPCI プログラム・大規模一般利用・学際共同利用に供される予定である。計算科学研究センターでは新技術である Xeon Phi 演算加速装置におけるプログラミングとアプリケーション移植に関するトレーニングを開催する予定である。

2.5 JCAHPC Project (Joint Center for Advanced High Performance Computing)

This multi-disciplinary project, a joint project of the CCS in cooperation with the University of Tokyo Information Technology Center (ITC), aims to design, acquire, operate and manage a large-scale next-generation high performance computing platform for advanced computational science and technology in Japan. This project is the ambitious sequel to the T2K project that deployed and managed three separate but architecturally similar systems (Tokyo, Tsukuba, Kyoto). In the JCAHPC project a single state-of-the-art many-core platform will be located at the Information Technology Center at the Kashiwa Campus of the University of Tokyo. The

anticipated 20 peta-flop capacity of the new facility represents an increase of capacity of about 30 over the total T2K capacity, and is double the capacity of the K-supercomputer.

The schedule calls for the design, procurement and installation to be sufficiently fast that operation begins in 2015. The capacity will be divided between the two partners, CCS and ITC, who then allocate these resources within their respective centers as well as to other users. Partnerships with other universities and consortia are envisioned.

Both CCS and ITC manage JCAHPC and provide its budget and human resources. JCAHPC operates with an Administrative Council which elects the Director and Deputy Director. Misuhisa Sato of CCS is the JCAHPC Director and Yutaka Ishikawa of ITC is JCAHPC Deputy Director. It is understood that periodic evaluation of the JCAHPC project is conducted by CCS and ITC working in partnership.

JCAHPC プロジェクト(最先端共同 HPC 基盤施設)

この分野連携プロジェクトは、東京大学情報基盤センター(ITC)と CCS の共同プロジェクトであり、日本の先端の科学技術のために大規模な次世代の高性能計算プラットフォームを設計、調達、運用を目的にしたものである。このプロジェクトは、東京大、筑波大、京都大学の3大学共同で、共通のアーキテクチャを決め、それぞれの大学において、別々のシステムを設置、運用した T2K プロジェクトの野心的な後継プロジェクトである。JCAHPC プロジェクトでは、最先端のメニーコアによるプラットフォームが1つ東京大学の柏キャンパスにある情報基盤センターに設置される。新しい計算設備の性能は20ペタフロップスが期待されており、この演算性能の増強により、以前の T2K の総演算性能の30倍以上、京コンピュータの倍の演算性能となる。

設計、調達、設置のスケジュールは、運用が2015年中に開始できるようになっている。計算資源は CCS と ITC の両パートナー間に分配され、それらの計算資源は、他のユーザはもちろんそれぞれのセンター内に割り当てられる。

CCS と ITC は共同して予算と人的資源をそのために提供し、JCAHPC を運営する。JCAHPC は、運営委員会により運営されて、運営委員会において施設長と副施設長を選出する。現在 CCS の佐藤が JCAHPC の施設長で、ITC の石川が副施設長である。当然のことながら、JCAHPC プロジェクトの評価は CCS と ITC と共同して定期的に行われることになっている。

2.6 Feasibility Study for Exascale Computing

CCS is responsible of one of four feasibility study (FS) projects toward the development of Japan's next generation Exascale supercomputer. The project led by Prof. Mitsuhisa Sato aims to propose an accelerator-based straw-man supercomputer architecture, named PACS-G, with the first-level approximation of its performance and power consumption based on the study of a few application kernels expected to fit to PACS-G architecture. A chip of PACS-G will be configured with 4096 SIMD-controlled processor cores of 4GFLOPS connected by two-dimensional 64x64 mesh on-chip interconnect to form a "extreme SIMD" processor of 16TFLOPS and about 300W (or less), or a ultra-modern version of Connection Machine. Each core will have a 128KB slice of 512MB "on-chip memory" as its

working space, while an additional 16 or 32GB 3D-stacked memory will be attached to the PACS-G chip by 2.5D TSV technology for applications too large to be accommodated by the on-chip memory. PACS-G chips are then connected by inter-chip network of 100 to 150GB/s per link to form a tightly connected processor group of 1024-2048 chips, whose peak performance will be 16-32 PFLOPS. Application programming for PACS-G should not be straightforward but an extended C language for lower-level programming and/or XcalableMP with OpenACC offloading for higher-level will ease programming toughness.

The performance and power estimates are preliminary, and thus the FS team is now refining them with various design parameters expectedly available by 2018-2020, PACS-G gives us a feasible target of Exascale system with reasonable power consumption of 20MW or less. It is highly appreciated that CCS leads this project in collaboration with RIKEN-AICS and other institutes and is greatly contributing to the national project of Japan. The source of such leadership and contribution is found in the past and ongoing HPC research activities in CCS such as the FIRST system with SIMD-type accelerator GRAPE, the HA-PACS system and GPGPU programming on in, and XcalableMP and its extension for GPGPU offloading.

エクサスケール・コンピューティングの実現に向けた検討

CCS は、日本の次世代のエクサスケールコンピュータの開発に向けた 4 つのフィージビリティプロジェクトの内の 1 つを担当している。佐藤教授をリーダーとして実施されているこのプロジェクトは、PACS-G と名付けられた演算加速機構を基本としたたたき台のアーキテクチャを提案するもので、PACS-G アーキテクチャに適合すると期待されるいくつかのアプリケーションカーネルについて検討し、その性能と消費電力の第一近似の推定を与える。PACS-G のチップは 4GFLOPS の SIMD 制御される、4096 のプロセッサコアで構成されており、プロセッサコアは多次元のメッシュネットワークで結合されており、16TFLOPS, 300W(以下)の"extreme SIMD"を構成しており、これは、超近代的なコネクションマシンともいえる。それぞれのコアに 128KB, 全体で 512MB の作業領域として使えるオンチップメモリがあり、それに加えて 2.5D TSV 技術で PACS-G チップに接続された 16 もしくは 32GB の 3 次元積層メモリがある。これは、オンチップに収まらないアプリケーションのために用いられる。PACS-G チップはリンクあたり 20GB/s のチップ間ネットワークで結合され、1024~2048 チップの密に結合されたグループを構成し、その全体性能は 16-32PFLOPS となる。PACS-G のアプリケーションは簡単ではないが、低レベルのプログラミングには拡張 C 言語、プログラミングの困難さを和らげる高レベルなプログラミングには OpenACC によるオフロード機能を拡張した XcalableMP が提供される。

性能と電力の推定はまだ初期評価であり、FS のチームは 2018~2020 年に利用可能となると期待される、さまざまな設計パラメータを用いて精査している状況である。PACS-G は、20MW 以下の適切な消費電力でエクサスケールシステムが実現できるターゲットとなりうる。CCS が RIKEN AICS や他の機関と協力してこのプロジェクトを主導し、日本の国家プロジェクトに貢献することは非常に望ましいことといえる。このようなリーダーシップと貢献の元になっているのは、SIMD 型の演算加速機構 GRAPE を使った FIRST システムや、HA-PACS システムとそこでの GPGPU プログラミング、XcalableMP と GPGPU オフロードのための拡張など、以前の、そして現在進行中のプロジェクトである。

2.7 ILDG/JLDG Project

The international lattice data grid (ILDG) and its local version, the Japanese lattice data grid (JLDG) has been and still is a very important and successful infrastructure for the global exchange of computer time expensive gluon field configurations generated on supercomputers. Based on the markup language QCDml and in collaboration of the particle physics and science information groups, JLQCD has been further developed by providing now a faceted navigation system to help users to narrow ensemble search by using facets which are the physics parameters for the generated gluon configurations. In this way, the search for a particular ensemble will become faster and easier for the user. Given the fact that over 2500 accesses to the public Japanese configurations were recorded, with certainly many more accesses within Japan, the faceted navigation system is certainly a very important new achievement. In the future, it is planned to provide the configurations with a DOI number to better trace the usage of configurations and record publications where these configurations were used. This plan is strongly supported by the review committee.

Storage is provided by the Gfarm and FUSE distributed file system with many sites across Japan. The file system has been built and is maintained through collaboration with computer scientists. The storage system consists presently of about 4PB.

The review committee supports the JLDG activity strongly and recommends keeping this infrastructure functioning by eventually providing more storage capacity given the ongoing and planned large volume simulations of the particle physics group.

ILDG/JLDG プロジェクト

International Lattice Data Grid (ILDG) とその国内版の Japanese lattice data grid (JLDG) は、スーパーコンピュータで貴重な計算時間を使って生成されるグルーオン場の配位を国際規模で交換するための、きわめて重要で有効な研究基盤であり続けている。JLQCD は、さらに発展させ、マークアップ言語 QCDml に基づき、素粒子物理と科学情報の研究グループの協力で、ファセットナビゲーションシステムを提供し、ユーザが、グルーオン配位を生成する際の物理パラメータ（ファセット）を用いてアンサンブルの絞り込み検索を行うことを可能にした。この様にして、ユーザが特定のアンサンブルをより速く、かつ容易に検索できるようになる。日本の公開配位へのアクセスが 2500 回以上記録され、国内でのアクセスはこれより遙かに多い、という事実が示すように、ファセットナビゲーションシステムは、きわめて重要な新たな成果であることは明らかである。配位群の利用の追跡を容易にし、特定の配位が使われた刊行物を記録するため、将来、配位群に DOI 番号を付与する計画がある。本評価委員会は、この計画を強く支持する。

ストレージには、日本を縦断する多拠点に渡る Gfarm 及び FUSE 分散ファイルシステムがあてられている。このファイルシステムは、計算機科学者の協力で構築され、維持されている。ストレージシステムは、現在、約 4PB からなる。

本評価委員会は JLDG の活動を強く支持し、素粒子物理グループが実行中の、あるいは計画中の大きい体積のシミュレーション用に、さらなるストレージ容量を適宜追加することで、この研究基盤の機能を維持する様、推奨するものである。

2.8 Joint Institute for Computational Fundamental Science (JICFuS)

JICFuS is a joint collaboration between CCS, KEK and NAOJ. Its mission is of enormous importance for the future of computational science in Japan as it has the ambitious goal to coordinate computational fundamental science, advise researchers all over Japan in using supercomputers and help them in the development of algorithms. JICFuS also intends to promote interdisciplinary research and collaboration. Combining forces and knowledge to link computational tools and research in nuclear, particle and astrophysics and construct a common platform for interaction and exchange of expertise will allow researchers in Japan to compete with other international centers that are built on a similar strategy, like e.g. the Cluster of Excellence in Origin and Structure of the Universe in Garching, Germany. The committee strongly supports this activity and encourages JICFuS to get in contact and maybe start collaborations with other international centers of this kind.

計算基礎科学連携拠点（JICFuS）

JICFuS は CCS, KEK, NAOJ の 3 機関の研究者で構成される共同研究組織である。その役割は、計算基礎科学全体の連携を図り、国内の研究者に対してスーパーコンピュータの効率的利用に関する助言を行ったり、アルゴリズム開発の手助けを行うことであり、このような野心的目標は日本の計算科学の未来に対して計りしれない重要性を持つ。また、JICFuS という共同研究組織設立には、学際的共同研究促進の意図もある。日本の素粒子・原子核・宇宙分野の研究者が知恵をしばり力を合わせて各々の分野の計算手法と研究における共通課題を探り、専門的知識・計算技術の交流・交換の場を作り出すことは、例えば、ドイツのガルヒングにおける Cluster of Excellence in Origin and Structure of the Universe のような同様の戦略性をもって組織された国際的センター群と比肩されるべきものであろう。本委員会は JICFuS のこのような活動内容を強く支持し、目的を同じくする他の国際センターとの共同研究の可能性を探り、実現させることを推奨する。

2.9 Organization for Collaborative Research on Computational Astrobiology (CAB)

The ‘Organization for Collaborative Research on Computational Astrobiology’ is an impressively interdisciplinary initiative, with 54 researchers, spanning 22 institutes across Japan that was initiated by CCS. The CCS and its collaborators are ideally qualified to lead the development of the field of Computational Astrobiology, especially given their expertise in three component disciplines of computational Astrophysics, computational planetary science and quantum mechanics. A highlight of this collaboration is the investigation of the symmetry breaking of the chirality of amino acids in the solar system that leads to all life forms being composed of L-forms. It was shown that this unique pattern could result from a cosmic event, caused by the irradiation of circular polarized light onto the interstellar medium that eventually formed the solar system. They are also conducting impressive research into the mechanisms and roles of hydrodynamic and magneto-hydrodynamic turbulence. The review committee finds this new Astrobiology initiative potentially

exciting and serves to continue to cement CCS reputations as a leader in cross-disciplinary, highly collaborative computational science in Japan. Collaboration with Astrobiology groups outside of Japan is greatly encouraged if international prominence in this field is to be secured.

宇宙生命計算科学連携拠点（CAB）

「宇宙生命計算科学連携拠点」は、CCS が創始したもので、日本全国 22 研究機関にまたがり 54 名の研究者が参加するこれまでにない学際的な取組みである。CCS のメンバーと共同研究者は、理想的な適任者ばかりであり、特に計算宇宙物理学、計算惑星科学、量子力学の 3 つの学問分野にまたがった専門知識を活かして、計算宇宙生命分野の発展を牽引している。この連携のハイライトの一つは、太陽系におけるアミノ酸キラリティの対称性の破れの研究である。これは、L 型アミノ酸のみから作られている地上の生物の起源に関わる問題である。彼らは、この特異な対称性の破れは、宇宙空間において太陽系を作った星間物質に円偏光波が照射することで引き起こされた可能性があることを示した。彼らはまた、流体・磁気流体乱流の発生機構と役割についても素晴らしい研究を行っている。この新しい宇宙生命の取り組みは画期的成果を生む可能性を持ち、また日本において緊密な連携による広い学際領域の計算科学を牽引するリーダーとしての CCS の評判を確固たるものにしていくであろう。また、今後計算宇宙生命分野の国際的な認知度が高まれば、国外の宇宙生命との共同研究も大いに進むであろう。

3 Research Activities

3.1 Division of Particle Physics

The particle physics group has worked very successfully using the previous generations of supercomputers, i.e. the PACS-CS and T2K machines. They have calculated as one of the first lattice QCD groups the complete hadron spectrum from first principles and have pioneered a new approach to compute baryon potentials and to determine phase shifts for multi-baryon systems. Through algorithmic developments, i.e. the mixed precision, blocked BiCGstab, the group could also significantly improve their simulations.

The group has now moved to the new HA-PACS machine, where they also use the accelerators in an efficient way. The new element for the next generation of simulations for QCD is to work now directly at or very close to the physical value of the pion mass, avoiding thus the sometimes difficult extrapolation in the pion mass. To this end, the group is generating configurations employing a very large volume of 96^4 lattice points in order to suppress finite volume effects. Working at a lattice spacing of about 0.1fm, the physical box length is thus about 10fm. In addition, the effects of electromagnetism and iso-spin breaking are included by reweighting techniques. These simulations, which are carried out on the K-computer, are unique world-wide and the generated configurations can be used for many physically interesting quantities. The configurations will also be stored on the International Lattice Data Grid (ILDG) and will thus be made publicly available. The group is planning to address direct calculations for baryon bound states, phase shifts and

moments of parton distribution functions. The work of the group is complemented by a dedicated effort to obtain improvement coefficients and renormalization constants by using the Schroedinger functional. Within this approach also a computation of the strong coupling constant for three flavors of quarks are targeted. The group will also continue their world-leading effort to compute a number of baryon potentials and phase shifts by computing the baryonic wave function non-perturbatively on the lattice. Here the group has already obtained many results for a number of baryonic systems. Although this activity is clearly very promising for studying nuclear physics in the future, it would be desirable to perform a more systematic study of this new approach invented by the group in order to understand better how to make best use of the method and look for possible drawbacks.

There is also a long and successful tradition in studying lattice QCD at non-zero temperature and chemical potential. Here the group has injected a number of new ideas. In particular, the approach of the fixed scale finite temperature simulations in combination with a mixed method of hybrid Taylor expansion and reweighting technique is highly adequate to make best use of the very large volume simulations at zero temperature. Targets for the area is the phase structure of QCD and the determination of the equation of state.

The activities of the group are highly visible internationally. The results by the group are top ranking in the field and in some areas, e.g. the baryon potential calculations and aspects of finite temperature and chemical potential simulations; the group plays a world leading role. In the next years, the group seems to be lacking sufficient human resources. In particular, the code tuning on the new architecture with their complicated design will be very demanding. It would therefore be very good, if the group could be supported with additional personal and help for the code development.

素粒子物理研究部門

素粒子物理グループは、前世代機の PACS-CS および T2K を用いた研究によって大きな成功を収めた。本グループは世界で最初に第一原理に基づいたハドロン質量計算を完成させたグループの一つであり、バリオン間ポテンシャルを計算するという先駆的なアプローチによってバリオン散乱における位相のずれを計算した。これらの研究は、精度混合演算やブロック版 BiCGStab などのアルゴリズム開発によるシミュレーション技法の大幅な改良によって成し遂げられた。

現在、本グループの主力機は HA-PACS となり、加速機構を効率的に利用することに成功している。次代の格子 QCD 計算に期待される新たな要素は、 π 中間子質量の外挿にまつわる困難を排除した、物理点直上あるいはそれに非常に近い領域でのシミュレーションの実現である。本グループは、「京」コンピュータを用いて、有限体積効果を抑えるために 96^4 という非常に大きな格子サイズの配位の生成に取り組んでいる。格子間隔は約 0.1fm であり、物理的な格子一辺の長さは約 10fm に達する。更に、電磁相互作用とアイソスピン破れの効果は再重み付け法によって取り入れる。これらのシミュレーションは、世界的に他に類をみないものであり、生成された配位は多くの興味深い物理量の計算に用いることが可能である。なお、将来的にはこれらの配位は International Lattice Data Grid (ILDG) に登録・保管され、世界中の研究者に共有される予定である。また、本グループは原子核を含めたバリオン束縛状態の直接計算、ハドロン散乱に

における位相のずれ、パートン分布関数のモーメント計算も計画している。これらの研究は、クォーク作用の改良係数や繰り込み定数に対するシュレディンガー関数法を用いた綿密な計算に裏打ちされている。もちろん、3 フレーバーQCD における結合定数の決定も、シュレディンガー関数法を用いた計算の枠内の目標の一つである。

本グループは、格子 QCD を用いてバリオン波動関数を非摂動的に計算し、それに基づいて種々のバリオン間ポテンシャルや散乱位相のずれを計算するという試みを世界に先駆けて続けており、既に種々のバリオン系に対して多くの計算結果を得ている。このような方向性は将来の原子核物理研究に対して非常に有望であることは間違いないが、本グループが考案した方法の有効活用法をいま一度検討し、欠点を洗い出してみることを目的として、より系統的な方法論の調査・検討を行うことが望まれる。

有限温度・有限密度における格子 QCD の研究には、長くそして成功を積み重ねてきた歴史があるが、本グループも数々の新しいアイデアをその歴史に刻んで来た。特に、格子間隔を固定した有限温度シミュレーション法は、ハイブリッドテイラー展開法と再重み付け法を組み合わせた方法の援用によって、ゼロ温度シミュレーションで得られた大きな体積の配位を有効活用することが可能となる。本研究領域の目標は、有限温度・有限密度 QCD における相図の解析と状態方程式の決定である。

本グループの研究活動は国際的に高く評価されている。その研究成果は、バリオン間ポテンシャルの計算や有限温度・有限密度 QCD を含めた格子 QCD 分野で世界トップクラスであり、世界を先導する役割を果たしている。ただし、近い将来、本グループでは研究遂行のための人材不足が起こるだろうと予想される。特に、複雑な機構を持つ新しいアーキテクチャに対するコードチューニングは非常に負荷が大きく、コード開発のための人員増強によるサポートがあれば大変好ましい。

3.2 Division of Astrophysics & Nuclear Physics: Astrophysics Group

The astrophysics group, led by **Prof. Umemura**, **Prof. Mori** and **Dr. Yoshikawa** includes 5 Postdocs and 21 graduate and undergraduate students. With a total of order 30 people it has reached a critical mass to perform in-depth research on fundamental problems in astrophysics.

The group has a broad research program, from the origin of the first stars to galaxy formation and evolution, cosmic nucleosynthesis and dark matter research. It is very strong especially in the field of computational and numerical astrophysics. Pioneering work in this field includes a new 6-dimensional radiation transfer scheme, radiation hydrodynamics in curved space geometries around supermassive black holes, a TREECODE developed for GPU Clusters to study the nature of dark matter and the origin of dark matter structures, the first 6-dimensional VLASOV Code (investigation of hot and cold dark matter and neutrino physics).

These codes provide an enormous potential to investigate numerous problems of modern astrophysics and cosmology and have been applied already to various interesting questions. A **highlight** certainly is the trillion body simulation of large-scale structure formation in a cold-dark-matter universe.

Other **key science projects** include radiation hydrodynamics effect on astrophysical phenomena like the evolution of the first populations of stars in the Universe or the investigation supermassive black hole feedback on galaxy evolution through galactic jets (*Umemura group*).

Archeological surveys now explore the substructure of the Galaxy and our neighbor, the Andromeda galaxy, with unprecedented details. Numerical simulations of the *Mori group* provide insight into the origin of those structures and how they are related to the formation and evolution of these galaxies within the framework of the cosmic hierarchical structure formation scenario. The *Yoshikawa group* has embarked on investigating neutrino physics with the exciting perspective to measure neutrino masses from the damping scale in large-scale cosmological simulations.

宇宙・原子核物理研究部門: 宇宙分野

宇宙物理グループは、梅村教授、森准教授、吉川講師の3人のスタッフで構成され、研究員5人と大学院生及び大学生合わせて21人が在籍している。総勢約30人というのは、宇宙物理学における様々な基本的な問題について徹底的な研究を行うことのできるぎりぎりの人数に達しているといえる。

このグループは初代星の起源から銀河の形成と進化、宇宙元素合成、ダークマター研究に至るまで幅広い研究を行っている。特に計算宇宙物理学と数値シミュレーション分野の研究は非常に強力である。この分野における先駆的な研究として、新しい6次元輻射輸送スキーム、超巨大ブラックホール近傍の曲がった時空における輻射流体力学、ダークマターの正体とダークマターハローの構造を研究するためのGPUクラスター向けのツリーコードの開発、(ホットダークマターやコールドダークマター、ニュートリノの研究を進めるための)世界初の6次元VLASOVコードの開発等が挙げられる。

これらの計算コードは現代宇宙物理学と宇宙論の幾多の問題を解決できる大きな可能性を齎し、既に様々な興味深い問題に適用されている。その中で1兆体の粒子を用いたコールドダークマター宇宙の大規模構造シミュレーションは、一つのハイライトであることは間違いない。

その他のキーサイエンス・プロジェクトとして、宇宙における初代星進化や、超巨大ブラックホールからのジェットによる銀河進化へのフィードバックといった宇宙物理現象における輻射流体効果の研究が梅村グループで進められている。

また、最近ではかつてないほどの詳細な宇宙観測による銀河系と隣のアンドロメダ銀河に付随するサブストラクチャーの考古学的探索が行われているが、森グループで行われている数値シミュレーションは、それらの構造の起源や、宇宙の階層的構造形成論に立脚した銀河形成・進化との関連を理解する手掛かりとなる。吉川グループでは、ニュートリノ質量を宇宙大規模構造シミュレーションの減衰スケールから測定するという興味深いニュートリノ物理学の研究に着手している。

3.2.1 Strategic points

The group has made a strong investment in developing new numerical techniques e.g. in radiation hydrodynamics, that have numerous applications from the physics of the interstellar matter to galaxy evolution. It plays a very active role in strategic program of Innovative Research Field 5 “Origin of matter and the universe” of the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology of Japan. There exists already an impressive list of international collaborations. However their research deserves more international visibility. The unique data set of the cosmological simulations could be very useful for an international community.

Future plans aim to tackle some of the most important questions in astrophysics, like the nature of dark matter, the origin of supermassive black holes and the evolution of galaxies, the fundamental building blocks of the Universe. This will require a next-generation hybrid computing system using special purpose processors.

On order to analyze the enormous amount of data that is already now becoming available with much more expected in the future will require strong investment in developing tools for data visualization. As this is also a major task for other groups we encourage the Center to join forces between the various groups as this will certainly require additional manpower.

戦略的なポイント

宇宙物理グループは、これまで星間物質の物理から銀河進化まで適用可能な輻射流体力学などの新しい数値計算スキーム開発を強力に推進してきた。これは文部科学省 HPCI 戦略プログラム分野 5 「物質と宇宙の起源と構造」に積極的な役割を果たしている。既に立派な国際共同研究が行われているが、これらの研究成果は、もっと国際的に注目されてしかるべきである。宇宙論的シミュレーションの専売的なデータは世界中の研究者にとって非常に役に立つ可能性がある。

将来的には、ダークマターの正体、超巨大ブラックホールの起源、宇宙の基本的構成単位である銀河の進化など宇宙物理学で最も重要な問題に取り組む計画である。そのためには専用プロセッサ付きの次世代のハイブリッドコンピュータが必要となるであろう。

また、現在利用可能で今後も増大し続ける膨大なデータを解析するためにはデータ可視化プログラムの開発を強力に推し進める必要があるであろう。これは他の研究グループにとっても重要な仕事であり、センターには是非様々なグループ間で力を合わせて取り組んで頂きたい。そのためには、明らかに更なる人材の投入が必要となるであろう。

3.3 Division of Astrophysics & Nuclear Physics: Nuclear Physics Group

The focus of the group's research is the non-relativistic quantum many-body problem with strong nuclear interactions and the coulomb interaction. Here, the main techniques are density functional theory including time-dependent processes and imaginary time theory for reactions. The group also addresses fundamental symmetries of nature through investigation of the hypothesized neutrinoless double beta decay. Understanding the rates for this process, once observed, will be a key to the discovery of physics beyond the Standard Model.

These are frontier research topics that are well-known physics drivers for supercomputer resources. Computational complexity arises due to the complexities of the quantum many-body equations, the strong interactions and the multiple scales involved in the solutions sought. The fact that nuclei are open systems implies that proper accounting for continuum effects is often essential. Viewed in the time domain, there are multiple time scales that complicate solutions of large amplitude time-dependent processes such as fusion and fission.

In recent years, frontier research in nuclear theory and condensed matter theory has significantly converged in the area of time-dependent density functional theory. This

division at CCS has played a major role in that convergence. It is natural, therefore, that Kazuhiro Yabana has taken leadership positions in both divisions until the present time. It is also natural to surrender leadership on one of these two divisions, which he will do in the coming months, in order to place primary emphasis on one of the two divisions while maintaining a significant role in the other division. In April, Kazuhiro Yabana will turn over his duties as Leader of the nuclear physics group to Takashi Nakatsukasa.

Future plans include developing and applying an improved time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov (TDHFB) approach to address both the important pairing and deformation degrees of freedom that compete with each other to govern dynamics of medium-weight and heavy nuclei. The overarching question here is whether one can obtain a quantitative prediction for the astrophysical r-process path which is key to understanding isotopic abundances in nature.

In the long term, they aim to achieve a realistic time-dependent density functional theory capable of accurately describing the complexities of nuclear fission. This will be a major contribution to our fundamental understanding of nuclei as well as having many practical applications in future nuclear reactor designs for increased safety and efficiency.

Future plans also include performing state-of-the-art calculations of nuclear matrix elements for neutrinoless double beta decay. The interplay between collective spatial degrees of freedom and the long-range pairing field will be calculated with unprecedented precision providing new predictions for these decay rates as a function of the adopted Standard Model extension.

宇宙・原子核物理研究部門：原子核分野

原子核グループの研究の焦点は、強い相互作用とクーロン相互作用をもつ系に対する非相対論的量子多体問題研究にある。用いられる中心的な技法は、時間依存過程を含む密度汎関数理論と、反応に対する虚時間理論である。また、ニュートリノレス2重ベータ崩壊の仮説に関する研究を通して、自然界の基本的対称性の問題にも取り組んでいる。この過程が実験で観測された場合、崩壊率の理論的解明は、標準模型を超える物理の発見への鍵となる。

これらは最前線の研究課題であり、スパコン開発の原動力となる物理として良く知られており、量子多体問題の方程式や強い相互作用の複雑さ、マルチスケールの解が求められることなどに起因して、複雑な数値計算を必要とする。また、原子核は開かれた量子系であり、多くの場合において、連続状態を適切に扱うことが重要である。さらに、異なる時間スケールの混在は、核融合や核分裂といった大振幅時間依存過程の解を非常に困難なものにしている。

近年、原子核理論と物性理論の研究の最前線は、時間依存密度汎関数理論の分野において顕著な融合を見せつつある。この点において、本センターの本部門は中心的な役割を果たしてきている。矢花一浩はこれまでこの両部門において指揮をとってきたが、これからは2つの部門で重要な役割を果たしつつも、どちらか一方に軸足を置くようにすることは自然であろう。4月に、原子核研究分野のリーダーを中務孝に交代することになった。

将来計画には、改良された時間依存ハートレー・フォック・ボゴリューボフ法の開発と応用がある。これにより、中重核より重い原子核のダイナミクスにおいて特に重要な対相関と変形相関の競合が記述可能になる。宇宙における r 過程経路の定量的な予言が可能かという大きな問題が関わっており、自然界に現存する様々なアイソトープの量を理解する鍵となる。

長期的には、核分裂の複雑な過程を正確に記述することのできる時間依存密度汎関数理論の完成を目標にしている。これは、原子核の基本的理解に関わるだけでなく、安全性と効率を高めた原子炉の設計といった多くの工学的応用にも貢献できるであろう。

これ以外にも、ニュートリノレス 2 重ベータ崩壊の原子核行列要素の最高レベルの計算を行う計画も進んでいる。集団的な空間自由度とペア場との相互作用をこれまでにない精度で計算することで、異なる標準模型の拡張を判別できるレベルで、崩壊率の予言を行うことができるようになるであろう。

3.4 Division of Quantum Condensed Matter Physics

量子物性研究部門

3.4.1 Computational optical science

The research of the computational optical science group focuses on the modification and the coherent control of matter on the nanoscale by non-linear optical processes. A remarkable broad spectrum of topics ranging from isolated atoms and semiconductor superlattices to bulk dielectrics is covered. Many of the contributions are undoubtedly world-class. Making use of GPU accelerating capabilities in solving the time-dependent Schrödinger equation, unprecedented simulations of atoms driven by strong laser fields at mid-infrared wavelength have been achieved. With their work on self-consistent coupling of time-dependent density functional theory (TDDFT) for the non-linear response of extended systems with a Maxwell solver for propagating the laser field in the medium, they have become one of the world-leading groups in the field of multi-scale optical simulations. Concepts of coherent control and manipulation are applied to the electronic dynamics in superlattices formed by semiconductor heterostructures. Solving the Wannier equations for excitonic Floquet states, light-field control of dynamically induced Fano resonances could be demonstrated. Photoinduced midgap states and phase transitions could be identified for the Hubbard model. Overall, the optical science group is internationally highly visible as reflected by an impressive publication record and the active involvement in a large number of international collaborations.

計算光科学

計算光科学グループの研究は、非線形光学プロセスによるナノスケールでの物質の改変やコヒーレント制御に集中している。孤立した原子や半導体超格子からバルク誘電体にいたる幅広い対象に対して研究は注目すべき広がりを示している。成果の多くは疑いなく世界的水準にある。時間依存シュレディンガー方程式を解く際に、GPU 加速器を

活かすことにより、中赤外波長の強いレーザー場に操られた原子に対する先例のないシミュレーションが行われた。また、無限周期系における時間依存密度汎関数理論(TDDFT)による非線形応答と物質中のレーザー場の伝播に対するマクスウェルソルバを自己無撞着に結合する研究により、マルチスケール光学シミュレーションの分野で国際的に主導するグループの一つとなっている。コヒーレントな制御と操作の考え方は、半導体ヘテロ構造により形成された超格子における電子ダイナミクスに応用されている。励起子のフロケ状態に対するワニエ方程式を解くことにより、動的に誘起されたファノ共鳴を光制御できることが示された。ハバード模型において、光誘起されたギャップ間状態や相転移が同定された。総合すると、光科学グループは、印象的な出版成果や、多くの活発な国際研究協力活動に反映されているように、国際的に高く認知されている。

3.4.2 Computational Nano-Science

A highly parallelized code for large-scale electronic structure calculation based on the density functional theory (RSDFT) has been developed under close collaboration of researchers in computational physics and computer science, with which first-principles electronic structure calculation of 100,000 atoms was made possible by the K computer with high efficiency. They investigated shape-dependence of the electronic structure of a silicon nanowire, a possible key technology for the next generation semiconductor devices, and got ACM Gordon Bell Prize of Peak-Performance at SC11. Many other applications of electronic structure calculation have also been reported aiming at realization of nano-scale devices: carbon nanotubes (CNT), SiO₂ on graphene, bilayer graphene-ionic liquid sandwich, multiple exciton generation in CNT, magnetism at the surface of rhombohedral graphite thin film, etc. Their first-principles study on defect state in silicon nitride contributed to the realization of mass production of modern nano devices called MONOS (Metal-Oxide-Nitride-Oxide-Semiconductor) memory.

計算ナノサイエンス

密度汎関数理論に基づく高度に並列化された大規模電子構造計算コード(RSDFT)は、計算科学と計算機科学の研究者の密接な協力により開発され、京コンピュータを高い効率で用いることにより 10 万原子の第一原理電子構造計算が可能となった。このグループは、次世代の半導体デバイスの鍵となりうる技術であるシリコンナノワイヤの電子構造の形状依存性を調べ、SC11 において、ピークパフォーマンスに関する ACM ゴードンベル賞を受賞した。ナノスケールデバイスの実現を目指した多くの電子構造計算に対する応用：カーボンナノチューブ、グラフェン上の酸化シリコン、グラフェンとイオン液体の 2 層サンドイッチ構造、炭素ナノチューブにおける多重エキシトン生成、菱面グラファイト薄膜表面の磁性等、が報告されている。窒化シリコンにおける欠陥状態の第一原理計算は、MONOS メモリと呼ばれる現代社会に必要な不可欠なナノデバイスの大量生産の実現に寄与した。

3.4.3 Strongly correlated systems

The work on strongly correlated systems in the division addresses fundamental issues concerning the understanding of high-temperature superconductivity in cuprates. Ab-initio cluster calculations are performed to explore the role of spin-

vortices and spin-vortex induced loop currents for electronic and magnetic properties. This work deals mostly with model development and small scale simulations. It appears that this project could benefit from bringing the considerable computational science expertise available at the CCS more fully to bear on this class of challenging problems in the field of strongly correlated systems.

強相関係

この部門における強相関係の研究は、銅酸化物の高温超伝導の理解に関わる基本的な事項に関するものである。非経験クラスタ計算により、電氣的磁氣的性質に対するスピン渦や、スピン渦に起因するループ電流の役割が探求されている。この研究の多くは模型の発展と小規模なシミュレーションに関するものである。このプロジェクトでは、センターで利用可能な多くの計算科学の実績をより充実した形で強相関係の分野におけるこの挑戦的な問題群に持ち込むことにより、利益を得ることができるようと思われる。

3.4.4 General remarks

The division quantum condensed matter physics has been highly successful in exploring forefront condensed-matter and material science topics with state-of the art computational science tools. Development of highly parallelized codes for electronic structure calculations allowed ab-initio simulations with unprecedented supercell sizes and opened the door to realistic simulations of nano-scale electronic devices and light-field induced excited- states dynamics. One unique feature is the close interdisciplinary interactions and resulting synergies. For example, development and application of the TDDFT methodology is an overarching theme in both the condensed matter group and the nuclear physics group. The capabilities of the large-scale real space ground-state DFT calculations developed for materials science lend themselves to applications in astrobiology and the life sciences. Simulations of biologically relevant large molecules, for example ab-initio simulations of the homochirality of amino acids have become possible.

One measure of success of the computational condensed matter division are the attractive outside offers to senior scientists from prestigious institutions. As a result, the condensed matter group is at the verge of becoming undercritical in size. The committee therefore supports the plan that Prof. Yabana who currently shares his time equally between the division of astrophysics and nuclear physics and the division of condensed matter physics to focus in future primarily on directing the condensed matter effort. Moreover, the committee recommends to further strengthen this successful and highly visible effort by adding a tenure track slot for a high-potential young researcher. As members of the condensed matter group belong to different academic units, their location is currently spread over the campus of the University of Tsukuba. Strengthening CCS as a prime research unit and fostering synergy effects could be facilitated by relocating members of the condensed matter division in closer proximity to each other and to the CCS itself.

全般的な意見

量子物性研究部門は、先端の物性物理や材料科学の課題を最新の計算科学手法を用いて探求することに高い成功を収めている。電子構造計算に対する高度に並列化された計算コードの開発により、先例のない超格子サイズの非経験シミュレーションを可能にし、ナノスケール電子デバイスの現実的なシミュレーションや、光場が誘起した励起状態ダイナミクスへの門戸を開いた。密接な学際的相互作用と協働が特徴的である。例えば、TDDFT 方法論の発展と応用は、量子物性グループと原子核物理グループに共通するテーマである。物質科学で開発された大規模実空間基底状態 DFT 計算の能力は、宇宙生命や生命科学における応用に役立つ。例えばアミノ酸のホモキラリティーの非経験的シミュレーションなどの、生物学に関わる巨大分子のシミュレーションが可能となっている。

計算量子物性部門の成功を測る一つの基準として、名声のある研究機関からシニア研究者に対する共同研究の申し入れがある。結果として、量子物性グループは人員不足の限界に至りつつある。したがって委員会は、矢花教授が宇宙・原子核物理学研究部門と量子物性研究部門の両方に等しく時間を割く現状から、将来は量子物性部門の発展に主に集中するという方針を支持する。さらに委員会は、この成功し高く認知されている活動をさらに強化するために、高い能力を持つ若手研究者のためのテニユアトラック枠を加えることを勧める。量子物性グループのメンバーは異なる学内組織に属するため、現在は筑波大学のキャンパスに分散している。量子物性部門のメンバーを互いに、そしてセンターに近接することにより、センターを主要な研究組織として強化し、協奏効果を促進することができる。

3.5 Division of Life Science

The Division of Life Sciences comprises two groups: the Molecular Evolution group (led by Prof. T. Hashimoto) and the Biological Function and Information group (led until recently by Prof. K. Shiraishi, with Prof. Shigeta as the new group leader).

生命科学研究部門

生命科学部門は分子進化学グループ（橋本教授）と生命機能情報グループ（最近まで白石教授に率いられていたが、現在、重田教授が新しいグループリーダーとなっている）の2つのグループから成り立っている。

3.5.1 Molecular Evolution group

The Molecular Evolution group's research activities have had two major foci:

i) Comparative genomics and evolutionary cell biology of microbial eukaryotes. Hashimoto (group leader) and Inagaki (CCS Faculty) have made important inroads into characterizing key lineages to improve the phylogenomic inferences of early eukaryote phylogeny. They characterized and placed key lineages in the tree of eukaryotes including: *Palpitomonas* (a deep branching 'Hacrobian' lineage), *Tsukubamonas* (a deep-branching discobid) and a large number of 'Carpediemonas-like organisms' (CLOs), that are the closest free-living relatives of the human parasite *Giardia intestinalis*. The addition of these key lineages have been important to clarify deep relationships amongst the major eukaryotic supra-kingdom-level

groupings. This work has been supported by several research grants awarded to Inagaki from the Japan Society for the Promotion of Science (JSPS).

This next-gen. sequencing approach has also been used to clarify not only the 'branches' of the tree of life, but also to map important evolutionary events on this phylogeny. Inagaki and Hashimoto's investigations have included the origins of mysterious anaerobic organelles of mitochondrial-origin in CLOs, a novel green plastid found in dinoflagellate lineages and clarifying the early events of 'organellogenesis' through characterization of nitrogen-fixing cyanobacteria in rhopalodiacean diatoms and the chromatophores of the testate amoeba *Paulinella*. Several of these projects are supported by grants from JSPS or the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT) and results obtained so far have been reported in high quality publications in field-specific journals.

ii) Computational phylogenetic method development. Phylogenetic analysis of molecular sequences rely on the probabilistic modeling of the evolutionary process over trees relating the sequences to obtain the likelihood of the data at the tips of the tree. Both maximum likelihood and Bayesian approaches require the evaluation of this likelihood function over trees and finding optimal trees is computationally complex (NP-hard) and so heuristic searches are necessary. Computational complexity increases with the number of species analyzed, the number of genes and the need for bootstrap resampling analyses to estimate reliability.

An important, often neglected, phenomenon is change in the composition of the nucleotides or amino acids in the sequences in different lineages. Through extensive simulations studies, Profs. Inagaki and Hashimoto have shown the detrimental impact of this phenomenon on the accuracy of phylogenetic inference. To combat the problem, more complex non-homogeneous Markov models of sequence evolution must be used, but these are restricted by their computational burden ($O(N^4 \times M)$). This problem is being tackled by a talented graduate student (Ishikawa, enrolled in the dual degree program between Life/Environmental Sciences and Computational sciences) co-supervised by Profs. Inagaki, Hashimoto and Sato (Div. of HPCS). Ishikawa has developed an efficient hybrid OpenMP/MPI parallelization of the non-homogenous ML tree inference software. This is the only parallel implementation of these models currently available world-wide.

In summary, the molecular evolution group are internationally recognized leaders in the field of deep eukaryotic phylogenetics and evolution. Despite their small size (one CCS Faculty member (Inagaki), one postdoc (Nakayama) and a graduate student (Ishikawa)), they are extremely productive, having published 39 journal papers and 2 conference proceeding papers since 2008. They have an impressively large network of international (three in Canada, one in the US, one in Norway, one in the Czech republic) and national collaborators. In light of their productivity and international reputation, the review committee feels that expansion of the group to include a second CCS Faculty member is important. Ideally, a faculty member who specialized in the development of computational phylogenetic methods and improving the biomolecular 'realism' of their model would strengthen the link between the molecular evolution group and the biological function and information group as well as the High Performance Computational Sciences group.

生命科学研究部門: 分子進化学分野

分子進化学分野は、以下の 2 つの主要目標をめざして研究活動を行ってきた。

i) 真核微生物を対象にした比較ゲノミクスと進化細胞生物学

グループリーダーである橋本と、計算科学研究センター所属の稲垣は、次世代シーケンス (NGS) により目的の生物から遺伝子配列データを大量に取得し、大規模分子系統解析 (phylogenomic 解析) を行うことで、現存する真核生物系統がどんな順序で分岐してきたかを解明することを目指している。これまでに、真核生物の初期進化を解明するにあたりカギとなる新奇系統について重要な貢献を行った。橋本、稲垣らは、①「ハクロビア」とよばれる生物群の中で初期に分岐した *Palpitomonas*, ②「ディスクリスタータ」とよばれる生物群の中で初期に分岐した *Tsukubamonas*, ③ヒトの寄生原虫 *Giardia intestinalis* に近縁な自由生活性系統である *Carpediemonas* 様生物 (*Carpediemonas*-like organisms ; CLOs) を、自然環境から単離、同定し、さらにはこれらの系統的位置を確定することに成功した。これらの新奇生物種は、真核生物進化のごく初期に分岐した主要系統群間の系統関係の解明を目指す Phylogenomic 解析に、今後欠くことができないものである。これら新奇生物種に関する一連の研究は、稲垣が獲得した日本学術振興会からの科学研究費補助金により実施された。

NGS データを基盤とした Phylogenomic 解析により、真核生物の系統関係を解明するだけでなく、推測した系統樹上に真核生物進化上重要なイベントをマッピングし、どんなイベントが進化上のどんなタイミングで起きたのかを解明することも可能となる。稲垣と橋本らは、*Carpediemonas* 様生物細胞中に存在するミトコンドリアが退化した嫌気オルガネラの起源や、一部の渦鞭毛藻が持つ緑色を呈する葉緑体の起源の探索と解明に取り組んできた。また、一部の珪藻 (ロパロディア科珪藻) や有殻アメーバ *Paulinella* の細胞内に共生するシアノバクテリアの研究を通して、細胞内共生バクテリアがオルガネラと変化する初期段階の解明にも取り組んでいる。上記の研究プロジェクトは、日本学術振興会あるいは文部科学省からの研究費により実施されている。

ii) 分子系統解析用コンピュータプログラムの開発

配列データに基づく系統解析は、解析する配列の系統関係についての尤度を計算するため、配列がどのように進化してきたかを記述する確率モデルに依存している。最尤法とベイズ法では、データから生成可能なすべての樹形に対する尤度関数の計算を行うため最適解の発見には計算負荷が高く、発見的探索法の使用が必要となる。計算負荷は、解析する配列データ中の配列数、遺伝子の数により増大する。同様に樹形の信頼性を検証するためにブートストラップ解析を行うが、このブートストラップ解析にも大きな計算量が必要である。

異なる生物系統から取得された配列間で塩基あるいはアミノ酸組成が異なるという観察結果は、分子系統解析には重要であるがしばしば無視される。稲垣と橋本らはシミュレーション配列を用いた緻密な研究を行い、系統間での塩基組成の違いが系統解析を誤った結果に導くことを示した。この現象を解消するためには、現在一般的に系統解析に使われているものよりも、より複雑な配列進化モデル (non-homogeneous モデル) を使用する必要がある。しかし、このような複雑な配列進化モデルを使用した系統解析には莫大な計算量が必要となる。この non-homogeneous モデルを用いた系統解析は、橋本・稲垣が指導する生命環境科学研究科生物科学専攻博士課程 (後期) に所属する石川により研究されている。石川は生物科学専攻博士課程 (後期) に所属すると同時に、佐藤三久を指導教員としてシステム情報学研究科コンピュータサイエンス専攻博士課

程（前期）にも所属している。石川は、世界に先駆けて non-homogeneous モデルを実装した最尤法をもちいた系統解析プログラムを OpenMP/MPI ハイブリッド並列化することに成功した。

稲垣・橋本らの研究グループは、真核生物の初期系統進化に関する研究を先導していることが国際的に認知されている。分子進化分野は、正式に計算科学研究センターに所属している稲垣、研究員の中山、博士課程後期学生の石川で構成される小さなグループにもかかわらず、2008 年以降 39 報の査読付き英文論文と 2 報の学会紀要（査読付き）を発表してきた。彼らは国内に加え、カナダに 3 グループ、アメリカに 1 グループ、ノルウェーに 1 グループ、チェコ共和国に 1 グループと国際共同研究を行っている。分子進化分野の実績と国際的評価を鑑み、外部評価委員会はセンター所属のスタッフをもう一名加えることによりこのグループを拡張することが重要であると考えている。新たなスタッフが分子系統解析の方法論およびより「現実的」な配列進化モデルの作成に特化した人物であれば、分子進化分野、生命機能情報分野、高性能計算システム部門の間の連携を強化することができ、理想的であると考えている。

3.5.2 Biological Function and Information group

The Biological function and Information group has several major research thrusts:

i) QM/MM approaches to studying biomolecular mechanisms. The three dimensional structures of biological molecules like protein are organized such that they often have 'active sites' where they facilitate chemical reactions or important structural changes. Understanding how these reaction mechanisms occur in detail on the atomic level requires quantum mechanical calculations for the 'local' 3D environment of the active site. The remainder of biomolecule forms a kind of scaffold for the reaction and it is only necessary to model it using molecular mechanical calculations. The complexity of this QM/MM approach requires significant computational resources and parallelization strategies. CCS faculty members Profs. Shoji and Shigeta (a former collaborator and now group leader) are world-leaders in applying the QM/MM approach to understanding reaction mechanisms in proteins. Using the QM/MM approach, Shoji, Kayanuma and Shigeta have investigated in detail the reaction mechanisms catalyzed by a number of proteins including nitric oxide reductase, DNA topoisomerase, the oxygen-evolving complex of photosystem II, theonine synthase, nylon-oligomer hydrolase and nitrile hydratase. Experimental investigations of the reaction mechanisms of enzymes like these are often extremely difficult if not impossible to conduct and so computational approaches are extremely important. They have been very successful, in many cases being able to select amongst alternative hypothetical reaction mechanisms (e.g. nitrile hydratase), provide predictions of energy profiles of reaction mechanisms that agree well with experimental data (e.g. threonine synthase) and gather new information on essential catalytic residues in the proteins.

ii) GPU-based acceleration of MD and QM calculations. Simulations of MD of biomolecules are critically important to clarify how they carry out their functions in detail. However, the complexity of the atomic/electronic interactions in large biomolecules is such that even with traditional super-computing resources, computations are time-limited. To address this, the group has investigated and applied GPU-based acceleration of MD calculations as well as explored hybrid use

of GPU and CPUs on HA-PACS. Using these methods, they were able to complete extensive MD simulations of the vitamin D receptor (VDR) bound with its ligand and gather new insights into the dynamics of ligand binding. This approach is promising for VDR-targeted drug design.

With respect to the QM calculations, in collaboration with Profs. Boku and Hanawa (Div. HPCS), Umeda has been developing GPU accelerated calculations of the Hartree-Fock (HF) calculation as well as MPI parallelization, allowing the use of multiple GPUs. They have achieved impressive speedups of the calculations which will greatly expand the possible use of QM techniques. For example, they have been able to perform *ab initio* QM calculations for proteins of up to 60 amino acids with this framework; an impressive feat.

iii) Astrobiology. Prof. Shiraishi and other members of the group have been tackling the question why almost all biological systems use only L-type enantiomer of amino acids. This excess of L-type enantiomers has also been observed in meteorites suggesting it may have been a starting condition for life on Earth. Their hypothesis is that homochirality could be a result of circularly polarized UV light emission (that selectively destroyed D-enantiomers) in early solar system. Using the TDDFT method, they confirmed the feasibility of this hypothesis and determined more precisely wavelength requirements. This research program has a clear cross-CCS collaborative flavour involving the Life Sciences, Computer Science, Condensed matter and Astrophysics groups.

In summary, the Biological Function and Information group have been extremely productive and have made significant advances in research problems at the boundary between quantum chemistry and structural biology/enzymology. Their collaborations with many others at the University of Tsukuba (e.g., Prof. Kayanuma) as well as with the High Performance Computing System group in CCS (Prof. Boku and Prof. Hanawa) have helped them make important advances. Indeed, there are few groups worldwide with this combined knowledge/expertise in quantum chemistry and high performance computing. Their planned collaborations with the molecular evolution group on combining their structural/dynamical approaches with evolutionary and phylogenetic approaches are very promising. Their productivity is extremely impressive (61 papers, 2 conf. proceedings) for a small group (two CCS faculty members, an associate, and two graduate students at Univ. Tsukuba). Addition of another faculty member slot (discussed above in context Molecular Evolution group) at the interface of computational structural biology/phylogenetics would greatly strengthen future collaborations between the two groups within the Life Sciences division.

生命科学研究部門: 生命機能情報分野

生命機能情報グループでは3つの研究領域に取り組んできた。

1) 生体分子の機能解明のための QM/MM アプローチ

タンパク質で代表される生体内分子は、特異的構造変化により極めて効率よく複雑な化学反応を司っている。生体内反応がどのような分子機構で起きているのかを理解するためには、QM/MM 法が適している。QM/MM 法は QM 計算と MM 計算を連結した計算手法であり、化学反応を起こす活性中心に量子力学(QM)に基づいた正確な電子状態

計算を、残りの蛋白質環境には分子力場(MM)計算を行う。QM/MM 法は生体内化学反応を効率よく計算できる手法であるが、高速な実行の為に並列化技術が要求される。CCS のファカルティメンバーである庄司と重田（以前は共同研究員であったが、現在、グループリーダー）は、生体内の化学反応メカニズムの解明において、世界トップレベルの実力を有している。

QM/MM 法を用いて、庄司、栢沼、重田らは、一酸化窒素還元酵素(NOR)、DNA トポイソメラーゼ、光合成 II 系の酸素発生中心(PSII-OEC)、トレオニン合成酵素、ナイロンオリゴマー分解酵素、ニトリルヒドラーターゼによって触媒される反応メカニズムを解明してきた。酵素の反応機構解明は実験的手法では非常に難しいため、理論計算による方法は極めて有益なアプローチとなっている。トレオニン合成酵素の研究では可能な反応経路を網羅的に理論検証する事で最も妥当な反応経路を明らかにした。本経路は実験データと良い一致を示している。また、酵素機能に重要なアミノ酸残基の理由を解明するなど、新たな知見を多く明らかにしている。

2) GPU による MD および QM 計算の加速

生体内分子シミュレーションにおいて MD 計算はそれらの機能がどのように発現するのかを詳しく知るために極めて重要である。しかしながら、巨大な生体分子では膨大な相互作用（静電相互作用）計算が必要であり、スーパーコンピュータを用いたとしても非常に多くの計算時間がかかる。これらのボトルネックの解消のため、GPGPU による演算加速を検討している。

MD 計算では、GPU 利用を推進し、先進的計算を行った。その結果、リガンドと結合したビタミン D 受容体(VDR)の長時間の MD 計算(64 μ sec) の実行が可能となり、リガンド結合時の詳細な基質コンフォメーション解析を行う事が可能となった。これらの研究により VDR をターゲットとしたドラッグに対して新たな創薬指針を与えることを明らかにした。

QM 計算では、朴教授・埴准教授 (HPCS ディビジョン) と連携し、Hartree-Fock 計算の GPU 化および MPI 並列を実装し、複数の GPU による演算加速を可能にした。顕著な計算のスピードアップを達成したことで QM 計算の適用を飛躍的に広げた。60 アミノ酸残基からなるタンパク質の *ab initio* QM 計算を可能にするなど、印象的業績がなされている。

3) 宇宙生命

白石教授ならびに本グループメンバーは、“なぜ地球上の全ての生物が L-アミノ酸のみで構成されているのか？”という生命起源における根源的問題の解明に取り組んでいる。隕石中のアミノ酸においてすでに L 体の光学異性体過剰が観測されていることから、宇宙空間で既に異性体過剰が起こっていたのではないかと推測される。この仮説では、原始太陽系において偏光された UV 光により D 体がより選択的に分解されて異性体過剰が起こったとしている。時間依存密度汎関数 (TDDFT) 法により仮説を検証し、より詳細な光の波長の条件を決定した。複数分野にまたがる根本的問題を解明できるようになった事は生命科学部門、計算機科学部門、物性部門、宇宙部門を含む CCS 連携により初めて可能にした大きな進展であるといえる。

生命機能情報グループは非常に生産性が高く、量子化学と構造生物学/酵素学の境界領域の諸問題において重要な寄与をしている。筑波大学内での様々な研究者（栢沼助教など）や CCS 内の HPCS グループ（朴教授、埴准教授）との共同研究は、その重要な成果の一助となっている。実際、量子化学と高性能計算分野の専門知識を兼ね備えた世界的に著名なグループはごく僅かである。彼らの構造/ダイナミクスに基づくアプロ

チと、分子進化グループの進化学的・系統発生的アプローチとの共同研究は、将来的に期待が持てる。また、小さなグループ（2名の CCS ファカルティーメンバー、1名の助教、2名の大学院生）であるにも関わらず、彼らの生産性は非常に顕著（61 報の論文、2 報の国際会議録）である。（分子進化グループの所でも言及した様に）計算構造生物学と系統発生の境界領域におけるさらなる CCS ファカルティースタッフの増員によって、将来的に生命科学部門の 2 グループの共同研究が大いに進むことが望まれる。

3.6 Division of Global Environmental Science

The Review Committee was impressed by the excellent achievements in broader topics in atmospheric science, ranging from global atmospheric dynamics such as the Arctic Oscillation, Arctic Cyclone, and power spectrum analysis using high-resolution NICAM simulations, to regional and local scale simulations considering city functions and even large eddy simulations (LES) to resolve a-meter-scale building structures. The future perspectives include the continuation of ongoing research, as well as potential contribution to multi-disciplinary astrophysics.

Considering the division's excellent scientific achievements in the broad areas so far, the Review Committee had an impression that this division has a great potential to make effective use of more resources both in terms of computational time and FTE and to make more impact on the scientific community. Collaborations with computer scientists for better using the HA-PACS architecture are active and fruitful, but could be improved by having an easier access to technical staff for simpler questions in code developments.

The CCS at U. Tsukuba is a highly productive computational science research organization with very strong outcomes. And the Division of Global Environmental Sciences is exemplary in this regard. Two full-time professors, Professor Tanaka and Associate Professor Kusaka, are very productive scientifically in regard to high-quality publications and graduate student production. Currently they are carrying 7 doctorate students and 10 masters students. Two additional university-affiliated professors round out the division: Professor Ueda and Assistant Professor Wakazuki. This division is making very strong contributions to CCS, working on relevant topics (including computationally intensive science), collaborating with relevant groups (including CCS Division of Computational Informatics, Division of High-Performance Computing Systems, and Division of Astrophysics and Nuclear Physics), performing fore-front work within their area of expertise, educating impressive numbers of students. By any measure, they are doing an excellent job.

Based on this productivity, the committee would like to see a more aggressive growth agenda for this division. With the potential availability for additional support from the university, what are the strategic areas and topics into which this division should move? We encourage more strategic thinking along these lines.

Along these same lines of reasoning, the committee would like to see more effective use of the CCS Multidisciplinary Cooperative Research Program (MCRP) to include a larger number of Atmospheric and Climate Scientists within the research and user programs and, therefore, exercise greater influence scientifically and programmatically. It is easy to argue that, given the productivity of this group in terms, that the committee is surprised to learn that only 5% of MCRP compute

resources where allocated/used within Global Environmental Sciences. Clearly there is opportunity and reason to grow in this area, and resources should be allocated and plans made in this direction.

地球環境研究部門

地球環境研究部門では、北極振動や北極低気圧、全球雲解像大気大循環モデル NICAM を用いた全球エネルギー収支解析などの大気大循環研究から、領域気象モデルを用いた都市気候研究や、数メートルスケールのビル周辺の熱環境を対象とした LES モデルを用いた研究などが幅広く行なわれている。評価委員は当該部門におけるこれらの広範な研究活動を高く評価する。研究の将来展望としては、現在行っているこれらの研究の一層の推進の他、当センターが中心となって推進する学際的な宇宙生命科学への参入が期待される。

このような当該部門による研究内容を勘案し、評価委員としては、既存の先端的計算機環境とセンター研究員の人的リソースを総動員することで、本国における気象学・大気科学の一層の発展に貢献することを期待する。当センターが運営する HA-PACS を、計算機科学の研究者との共同研究により一層活用することを期待する一方、より基礎的なプログラム開発に関しては専任の技術職員の雇用が望まれる。

筑波大学計算科学研究センターは、高度な計算科学による応用研究を推進する機関として十分な成果を挙げている。そして、地球環境研究部門は、当センターのひとつの研究部門として十分に貢献していると言える。当センターの専任研究者として部門を率いる田中教授と日下准教授のこれまでの研究業績は、気象学界において卓抜したものであり、学群・大学院教育においても、きわめて多くの若手研究者の育成につとめている。当該部門において、上記 2 名は大学院博士課程に 7 名、修士課程に 10 名の大学院生の研究指導を担当しており、若手の教育という面でも健全といえる。上記 2 名に加えて、生命環境系に所属する植田教授と若月助教の 2 名が本学の学内共同研究者として研究活動に参加している。当該部門は、気象学における大規模数値計算を通して当センターの計算情報学研究部門、高性能計算システム研究部門、宇宙・原子核物理研究部門等と協働して研究を推進する一方、多くの若手研究者を育成することで、当センターの研究・教育推進に多大な貢献を行っている。したがって、当該部門の総合評価は十分に高いと言える。

これらの研究業績を勘案し、評価委員は当該部門の今後のさらなる飛躍に期待する。本学による一層の研究支援を要請するとともに、今後、当該部門が戦略的に取り組むべき大型の研究課題を模索して欲しい。評価委員としても今後の発展に期待する。

以上の理由により、評価委員としては、当センターにおける学際共同利用プログラム (MCRP) に多くの気象学者や大気科学者を効果的に参入させ、研究推進やプログラム開発を担当してもらうことで、本国の気象学界への影響力をさらに高めて欲しいと願う。当該部門における研究活動の貢献度と比較すると、学際共同利用プログラムにおける計算機資源の僅か 5 % しか地球環境研究に割り当てられていないことに、評価委員は驚きを隠せないでいる。今後は当センターの計算機資源を最大限、有効に活用することで、当該部門のさらなる躍進に期待する。

3.7 Division of High Performance Computer Systems

This division, led by Prof. Taisuke Boku, provides the core competence of interdisciplinary computational science from computer science field. The research activities in this division on HPC system architecture, software and

algorithms/libraries not only exhibit excellence of the division by themselves but also act as the driving force of CCS's major accomplishments in the development, procurement, and installation of supercomputers, inter-university collaboration of HPC infrastructure such as T2K, HPCI and JCAHPC, and prominent research works winning awards and prizes, and providing infrastructure – both hardware and software – for the computational scientists both locally in CCS and beyond. For example, several projects presented during the review exemplify these qualities.

The Tightly Coupled Accelerators (TCA) architecture is to connect GPUs of multiple hybrid computing nodes directly via PCI Express (PCIe) bus rather than via the high-latency path involving host CPUs, HCA and inter-node links. For an implementation of TCA architecture, a FPGA-based PCIe switching hub named PEACH2 was designed and installed on each of 64 HA-PACS/TCA nodes of four NVIDIA K20X GPUs and two Xeon E5-v2 processors. The implementation successfully improved the performance of inter-node GPU-to-GPU communication drastically reducing the latency by one-third and enlarging the bandwidth more than twice compared to MVAPICH2 over InfiniBand FDR and GPUDirect.

XcalableMP (XMP) is a directive-base parallel programming language for HPC having both features of HPF-like global view and PGAS-type local view. It is designed and implemented by the division in collaboration with other academic, governmental and industrial organizations in PC Cluster Consortium. The excellence of the language design, together with the efficient implementation on K computer, is proved by winning the HPC Challenge Class-2 Award in SC13. The language also acts as the substrate on top of which accelerator-oriented extensions are overlaid for GPGPU programming with HA-PACS and extreme-SIMD programming with PACS-G.

The widely distributed file system Gfarm is another prominent system software product developed by the division. Thanks to its efficiency, robustness and easy-to-use feature, Gfarm is so widely used that more than 14,000 downloads have taken place since 2007 and many nation-wide projects including HPCI adopted Gfarm as their infrastructures. Recent and ongoing researches on Gfarm improvement and extension, such as Hadoop plug-in, workflow management/scheduling and robust and/or distributed meta-data servers, also prove that Gfarm is a promising solution of widely distributed data-intensive computing.

Another award-winning research carried out by the division aims to provide a highly efficient and massively parallelized FFT library named FFTE. Its cache-aware implementation with CCS's original recursive six-step algorithm and 2D-decomposition to reduce the all-to-all communication cost makes FFTE the world-fastest FFT since 2012 in which its implementation on 82,944 nodes of K computer won the HPC Challenge Class-1 Award. The other researches on the accuracy of numerical computing, such as multiple-precision arithmetic and accuracy improvement of block-Krylov-subspace solvers, will make important contributions to exa-scale simulations involving a tremendously large-scale numerical computations.

高性能計算システム研究部門

朴泰祐教授が率いる本部門は、計算機科学の立場から、学際的計算科学を推進する中心的な牽引力となっている。高性能計算においてこの部門が展開している、HPC シス

テムアーキテクチャ、ソフトウェア、アルゴリズム、ライブラリにおける研究は、自身の研究に閉じることなく、スーパーコンピュータの開発・調達・設置といった計算科学研究センターにおける重要な活動や、T2K, HPCI, JCAHPC 等の卓越した大学間共同研究、さらに各賞受賞の原動力となり、またハードウェア・ソフトウェアの両面から、センター内及び国内における計算科学研究者を支える重要な役割を演じている。一例として本外部評価において発表された数々の研究内容は、その質の高さを十分に示している。

密結合演算加速機構 (TCA: Tightly Coupled Accelerators) は複数のハイブリッド計算ノード上の GPU 間を PCI Express (PCIe) によって直接結合するアーキテクチャであり、複数ノードに跨がるホスト CPU、ネットワークインタフェース、リンク等の遅延時間増大要因を回避する技術である。TCA アーキテクチャの実装として PEACH2 と名付けられた FPGA による PCIe スイッチチップを開発し、これを 64 台の全ノードに配備した HA-PACS/TCA システムでは、各ノード上の 4 基の NVIDIA 社 K20X GPU と 2 台の Xeon E5-v2 プロセッサを搭載している。この実装により、ノード間に跨がる GPU 間直接通信性能は大幅に改善され、単方向通信方式による通信性能は InfiniBand FDR による GPUDirect 技術を用いた MVAPICH2 実装に比べ、2 倍以上のバンド幅を提供可能になっている。

XcalableMP (XMP) は指示文に基づく並列プログラミング言語であり、HPF ライクなグローバル配列ビューと PGAS ライクなローカルビューの双方を提供する。この言語は本部門を中心に開発され、国内の大学・研究所・企業の共同研究者と共に PC クラスタコンソーシアム内で研究が進められている。言語設計の優秀に加え、「京」コンピュータ上の効率的な実装により、本言語は SC13 における HPC Challenge Class-2 において最優秀賞を受賞した。さらに本言語は、演算加速装置を備えた計算ノードへの対応拡張が行われ、HA-PACS や高度な SIMD 命令セットを持つ PACS-G システムへの実装が進められている。

幅広い展開が行われている広域分散ファイルシステム Gfarm は、本部門におけるもう一つの卓越したシステムソフトウェア研究開発である。その効率と堅牢性、さらに使い易さによって、Gfarm は 14000 以上のダウンロード数を誇っており、2007 年以降多数の国内プロジェクトに応用されており、HPCI プログラムでは Gfarm が共有インフラストラクチャとして採用されている。Gfarm の向上と機能拡張のための最近の研究では、Hadoop 対応プラグイン、ワークフローの制御とスケジューリング、堅牢性向上のための分散メタデータサーバの構築等が行われており、Gfarm が今後のデータ中心的な広域分散高性能計算において重要な役割を果たすであろうことが予想される。

もう一つの国際賞受賞対象となった研究として、高性能大規模 FFT ライブラリである FFTe がある。計算科学研究センターにおける独自開発の 6 ステップ FFT はキャッシュ効率を大幅に上げ、2 次元分割による高速な全対全通信機能により、「京」コンピュータの 82944 ノードを用いた実装によって FFTe は 2012 年の HPCChallenge Class-1 における最優秀賞を受賞し、世界最速の FFT ライブラリと認められた。また、数値計算における高精度計算に関する研究では、ブロック Krylov 部分空間計算法における多倍長精度と数値計算の高精細化は、超大規模数値計算におけるエクサスケールシミュレーションに大きく寄与すると考えられる。

3.8 Division of Computational Informatics

As one of two Computer Science divisions in CCS, Division of Computational Informatics is an integral part of CCS's vision of multidisciplinary computational

science. The committee is very impressed by the high quality research conducted in this Division, for its originality and high relevance to computational science.

(1) Database Group: this group is one of the best and most internationally visible database research groups in Japan. Their research on XML markup language was closely motivated by and partially designed for ILDG Data Archive, leading to top publications as well as practical powerful search tools used by computational scientists to manage large scale data archives. They have also developed advanced GPU based sorting algorithms, demonstrating significant potential to use HPC for database and data mining research. Other research conducted in this group over this evaluation period are part of the main stream database and data mining research activities internationally, including data streams, data uncertainty and location-based and social media data analytics.

(2) Computational Media Group: this group enjoys the reputation as one of leading computer vision and pattern recognition research groups in the world. Its research work and working prototypes on 3D video browsing, video object tracking, facial enhancement, see-through drive support, massive sensing and video-based walker navigation for vision-impaired people are truly impressive. This group has world-class expertise in multimedia, visualization and human-computer interfaces, which are critical skills required to do big data research for computational scientists.

With its world-leading research expertise in databases, scientific data management, computer vision and multimedia, this Division complements the advanced computing facilities and computational science research in CCS, positioning CCS well for the coming era of Big Data Analytics. Both the Database Group and the Computational Media Group should continue to take computational approaches towards data intensive and computing intensive computer science problems, such as new database systems and algorithms based on GPU, multicore/MIC systems and computer clusters, peta-scale data analytics, billion-node graphs, data mining and knowledge discovery with streaming data and data uncertainty, advanced 3D visualization, real-time 3D video processing and video search. Further, they are uniquely positioned in the world to conduct user-driven computer science research and development to support computational science, especially for large-scale scientific data management with a focus on data exchange, integration and archiving, data quality management and data provenance support, and data visualization.

計算情報学研究部門

CCS におけるコンピュータサイエンス系の 2 部門の一つとして、計算情報学研究部門は CCS が学際計算科学を目指す上で中核的な役割を果たしている。本委員会は、本部門において行われている質の高い研究、特にその独創性と計算科学との高い関連性に関して、大いに感銘を受けた。

(1) データ基盤グループ：本グループは、データベース分野において最も卓越し国際的にも活動が知られている日本の研究グループの一つである。本グループにおける XML マークアップ言語に関する研究は、ILDG データアーカイブによって具体的に動機付けされ、部分的にはそのための設計も行われており、その成果が大規模データアーカイブ管理を行う際の実践的で強力な検索ツールとして計算科学研究者によって利用

されているのはもとより、高水準の論文発表も行われている。本グループで開発した GPU を用いたソーティングアルゴリズムは、データベース・データマイニング研究における HPC の潜在的な意義を具体的に指し示すものである。本評価期間内に本グループで実施された他の研究は、国際的にもデータベース・データマイニング研究の本流をなすものである。これらの中には、データストリーム、不確実データ、位置情報を含むソーシャルメディアデータ分析が含まれる。

(2) 計算メディアグループ：本グループは、コンピュータビジョン、パターン認識分野において国際的に卓越した研究グループの一つとしての評価を得ている。本グループが開発した、自由視点映像の閲覧方式、映像中の物体追跡、顔表情の増強処理、シースルー型提示による運転者支援、マッシュセンシング、視覚障害者のためのビデオベースの歩行ナビゲーションに関する研究やプロトタイプは、真に印象的である。本グループは、計算科学者がビッグデータ研究を行う上で必須のスキルである、マルチメディア、可視化、ヒューマンコンピュータインタラクションにおいて世界水準の研究力を有している。

データベース、科学データ管理、コンピュータビジョン、マルチメディアに関する世界水準の研究力を有する本部門は、CCS における先端的計算科学研究や計算施設を補強する役割を果たしており、ビッグデータ分析時代の到来に向けた CCS のポジショニングを有利なものとしている。データ基盤グループ、計算メディアグループのいずれについても、データインテンシブあるいは計算インテンシブなコンピュータサイエンスの課題に対する計算指向のアプローチを、今後も継続すべきである。具体的な課題としては、GPU・マルチコア/MIC・クラスタに立脚した新しいデータベースシステムやアルゴリズム、ペタスケールデータ分析、超大規模グラフ、ストリームデータや不確実データに対するデータマイニングや知識発見、先端的 3 次元可視化、実時間 3 次元ビデオ処理、ビデオ検索等がある。さらに、本部門は、データ交換、統合、アーカイブに焦点を当てた大規模科学データ管理、データ品質管理や来歴管理、データ可視化等、計算科学のサポートを担っており、その観点からは、ユーザサイドからコンピュータサイエンスの研究開発を推進する組織となっている。これは、世界的にも他にあまり例のない特徴的な点である。

4 Success of the Center in Achieving its Mission

The center has clearly demonstrated that scientific discoveries were obtained through computational science in a broad area of research reaching from particle, astroparticle and condensed matter physics to life sciences and atmospheric sciences to data-intensive and image processing. These discoveries became possible through the usage of leading edge computing systems that were operated by the center which also provided important user support. The center has developed in the past powerful supercomputer architectures and is continuing this effort in a co-design style moving toward the future. Thus, the committee sees the mission of the center to be accomplished in a convincing way and expects the center to continue its successful line of research in computational and computer science in the future following its plan presented during the review. It is the opinion of the committee that the CCS is well focused on their effective communication of their mission success within the

international scientific community as well as the general public stakeholders in Japan. For all of these actions, they are to be commended and encouraged.

センターにおけるミッション遂行の成功

センターは、これまで素粒子、宇宙、物性物理から生命科学、大気科学、ビッグデータ、画像処理にいたるまで、広範な分野において、重要な発見が計算科学的手法によってなされることをはっきりと証明してきた。これらの発見は、センターが最先端の計算機資源を運用し、しっかりとしたユーザサポートをすることで得られたものである。センターはこれまで、強力なスーパーコンピュータ群を開発してきたし、将来もコデザインのスタイルで努力し続けていくであろう。よって、評価委員会は、センターのミッションは見事に達成されたことを確信するとともに、今後も外部評価で示された計画に従って、計算科学と計算機科学の連携が発展していくことを期待するものである。CCSは、ミッションの成功を国際的な科学コミュニティおよび日本における一般的な利害関係者の間に浸透させていくことに注力してきたというのが評価委員会の意見である。これらすべての取り組みに対して、CCSの活動は称賛され、支持されるべきであると考えられる。

4.1 Additional Observations

その他の感想

4.1.1 International tenure track positions

The committee strongly endorses the innovative concept of “international tenure-track” positions allocated by the University of Tsukuba to the CCS. A cornerstone concept of this program is that young faculty members are required to spend a considerable fraction of time during their tenure-track appointment abroad, and the outcome of the eventual tenure review will be strongly influenced by their research accomplishments abroad. This model has the potential to become an excellent tool to launch internationally visible careers of young scientists. Benefits will likely include closer ties to the international scientific community and informal networks, which the candidates will bring back with them when they return to Japan. Such a long-term strategic investment promises a high return in terms of future heightened international visibility of both the individual faculty member and the CCS.

国際テニュアトラック教員について

評価委員会は、大学が CCS に配置した“国際テニュアトラック”教員という画期的な考え方を強く支持する。このプログラムの礎にある考え方は、若手教員がテニュアトラックのかかなりの期間を海外で過ごし、海外で成果を上げることが最終的なテニュア審査の重要な判断材料となるということである。この制度は、若手研究者がしっかりと海外経験を積むための素晴らしい方法となる将来性をもっている。利点として、海外の科学コミュニティと強い絆を作るとともにインフォーマルなネットワークを作ることなどが挙げられ、これらは候補者が日本に戻ってから保っていくことができる。このような戦略的な雇用投資は、将来個々の教員だけでなく CCS の国際的な知名度を大きく引き上げるという大きな見返りが約束されている。

4.1.2 Educational activities

The recently established dual degree program combining training in computational science with a more traditional curriculum in one of the natural sciences appears to be an excellent path towards a truly interdisciplinary education. This program has a high potential for enhancing employment opportunities in both academia and industry. Increasing the currently relatively small enrollment in this dual-degree program by with more aggressive marketing, both nationally and internationally, both in industry and in academia, should be a practical goal. Increasing the enrollment and, more generally, the number of graduates in the academic programs connected to the CCS will most likely require enhancing their appeal to future graduate students. As one key element towards this goal, the committee suggests to consider the transition to an entirely English-based curriculum. It can help to attract an increasing number of top-level international students which would otherwise move to the US or Europe. Equally important, it would strongly improve the communication skills of domestic students in the primary language of scientific exchange and, thus, their future international opportunities an increasing globalized world.

教育活動について

最近始まったデュアルディグリー・プログラムは、計算科学の実践と自然科学の正統的なカリキュラムとが一体となっており、真に学際的な教育を行う素晴らしい課程であると思う。このプログラムは、学术界と産業界のどちらでも雇用機会を増やすことのできる高い可能性を秘めている。現在はこのデュアルディグリー・プログラム在籍者数はさほど多くはないが、国内外の学术界、産業界でより積極的に入学を薦め、学生数を増やすことが実質的な一つの目標であろう。このプログラムの在籍者数、もっと一般的には CCS に関係する学位プログラムの学生数を増やすためには、将来の学生に対してプログラムをもっとアピールしていくことが必要と思われる。この目標のための重要な要素として評価委員会が一つ提案できるのは、完全に英語化されたカリキュラムへの移行の検討である。これにより、今どんどん増えてきている米国やヨーロッパに行くトップレベルの国際的な学生たちを日本に向かわせることができるようになる。また、同じぐらい大事なこととして、科学的な情報交換を母国語で行っている国内の学生のコミュニケーション能力を大幅に改善し、結果として、日増しに国際化する世界の中で彼らの国際的な可能性を高めることにつながるであろう。