

まえがき

筑波大学計算科学研究センター（以下、センター）は、2019年に設立28年目に入り、次世代の計算科学と高性能コンピューティングの研究開発に向かってより一層の努力を続けることを改めて確認し、次の四半世紀の研究を着実に進めました。

本センターは、1992年度に設置された計算物理学研究センターを前身とし、2004年4月に改組・拡充されて設立されました。2010年には、文部科学省共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」に認定され、「学際共同利用プログラム」によって、外部の研究者に計算機資源を提供し幅広く計算科学研究を支援する全国共同利用施設としての役割を果たしています。また、「研究集会開催支援」、「研究者招聘支援」、「共同研究旅費支援」、「短期雇用支援」など、共同研究における研究者や学生の交流を図るための支援も行っています。2019年度には、前年度から開始したセンター独自のマンスリーサバティカル制度（センターの教員・研究員を数週間～数ヶ月単位で海外派遣）を広く活用し、本学が提供する一般のサバティカル制度より柔軟で利用しやすい形での海外派遣を通じて、海外主要研究拠点との共同研究をより密に行う環境を提供しています。また、このカウンタープログラムとして、海外拠点の研究者を同じように短期間～中期間で柔軟に招聘する中期招聘制度も継続して運用し、双方向の人的交流を通じた国際共同研究の活発化に取り組みました。

センターでは、科学諸分野と計算機科学分野の協働・融合を軸とした「学際計算科学」を推進し、超高速計算機システム技術の開発を行うと共に、科学の諸領域における超高速シミュレーションおよび大規模データ解析や情報技術の革新的な応用方法の研究を行う、コ・デザインと呼ばれる研究手法を続けていますが、このコンセプトは現在の超高性能・超大規模コンピュータ開発の礎となっています。2019年度からは第10世代のセンター独自コンセプトによるコ・デザインに基づくスーパーコンピュータである Cygnus (PACS-X)の運用を開始し、GPUとFPGAを組み合わせて相補的に利用することを世界で初めて実用化した画期的な多重複合型演算加速システムを実現、運用開始しました。

センターには、素粒子物理、宇宙物理、原子核物理、量子物性、生命科学、地球環境、高性能計算機システム、計算情報学の8つの研究部門があり、43名の専任教員が従事している他、研究員26名が在籍しています。また、国際連携として、英国エジンバラ大学、米国ローレンスバークレー国立研究所を始めとする海外14機関とMOUを締結するとともに、37機関（北米15、欧州13、アジア・オセアニア9）と国際共同研究連携を行っています。異分野間連携として、ポスト「京」重点課題・萌芽的課題の推進や、「計算基礎科学連携拠点」、「宇宙生命計算科学連携拠点」を行っています。国際的教育活動としては韓国KISTIとの日韓HPCウィンタースクールを毎年開催しています。2017年より開始した「計算メディカルサイエンス推進事業」については、2019年度より「計算メディカルサイエンス事業部」という形でセン

ターにおける位置づけを明確化し、計算生体分子医科学、睡眠ビッグデータ解析・自動診断、3DCG バーチャル手術、計算光バイオイメージングによる医学分野との連携を継続し、医理工連携のコンセプトの元、共同研究と人材交流を加速しています。

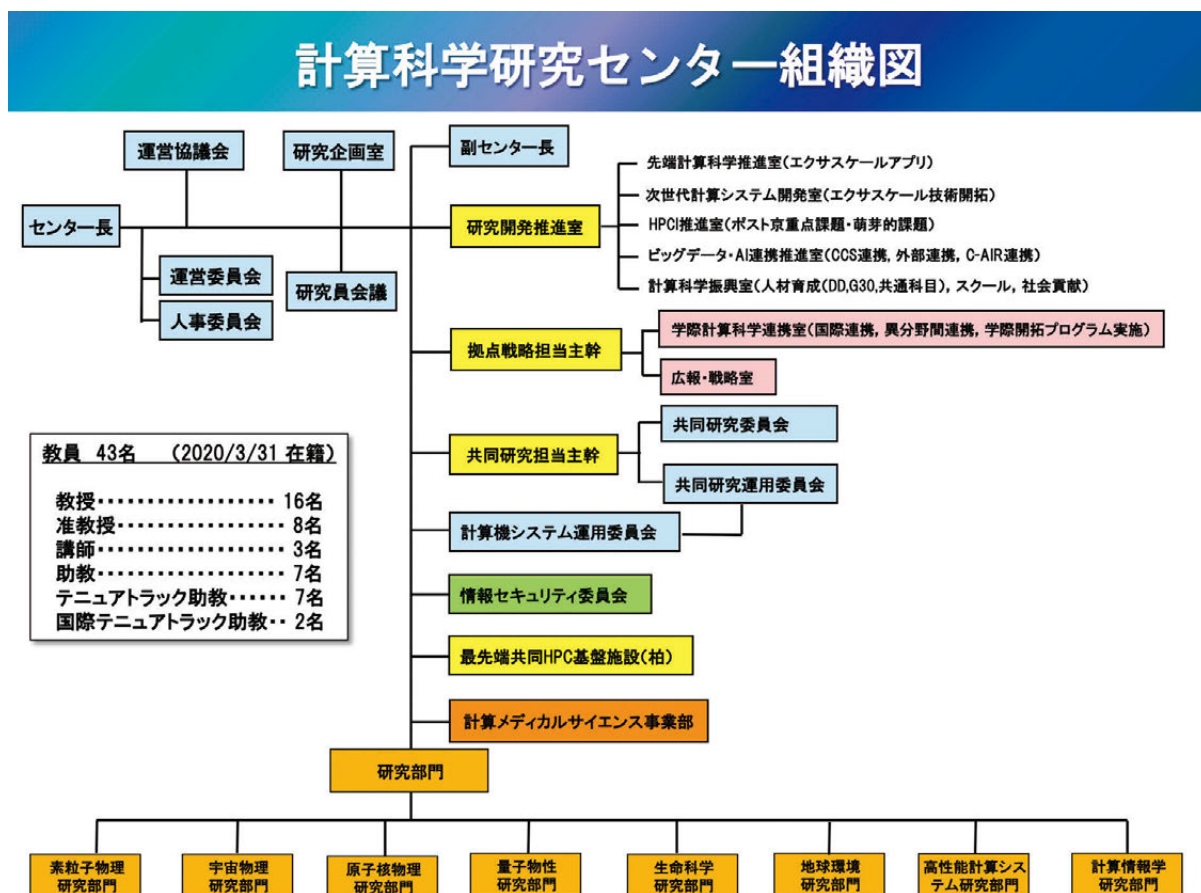
本小冊子は、平成最後である 2019 年度の計算科学研究センターの活動内容をまとめたものです。ご高覧いただければ幸甚に存じます。

2020 年 6 月吉日

計算科学研究センター長

朴 泰祐

1 センター組織と構成員



組織人員・教員一覧リスト

センター長	朴 泰祐
副センター長	矢花 一浩
運営協議会	委員長 佐藤 正樹 (東京大学)
運営委員会	委員長 朴 泰祐
人事委員会	委員長 朴 泰祐
研究企画室	委員長 朴 泰祐
研究員会議	議長 朴 泰祐
研究開発推進室	
・ 先端計算科学推進室	室長 矢花 一浩
・ 次世代計算システム開発室	室長 朴 泰祐
・ HPCI 推進室	室長 蔵増 嘉伸

- ビッグデータ・AI 連携推進室 室長 天笠 俊之
 - 学際計算科学連携室 室長 亀田 能成
 - 計算科学振興室 室長 高橋 大介
- 拠点戦略担当主幹 重田 育照
- 共同研究担当主幹 中務 孝
- 共同研究委員会 委員長 中務 孝
 - 共同研究運用委員会 委員長 中務 孝
- 計算機システム運用委員会 委員長 建部 修見
- 情報セキュリティ委員会 委員長 朴 泰祐
- 最先端共同 HPC 基盤施設施設長 田浦 健次朗（東京大学） 副施設長 朴 泰祐

研究部門（共同研究員は学内のみ記載）

素粒子物理研究部門

- 教授 藏増 嘉伸（部門主任）
- 准教授 吉江 友照、石塚 成人、谷口 裕介
- 助教 大野 浩史
- 研究員 浮田 尚哉、吉村 友佑、新谷 栄悟
- 客員教授 青木 慎也（京都大学）
- 共同研究員 金谷 和至（教授）、山崎 剛（准教授）

宇宙物理研究部門

- 教授 梅村 雅之（部門主任）、大須賀 健
- 准教授 森 正夫、矢島 秀伸
- 講師 吉川 耕司
- 助教 Wagner, Alexander、古家 健次
- 研究員 田中 賢、高水 裕一、安部 牧人、福島 肇、朝比奈 雄太、井上 茂樹、五十嵐 朱夏
- 客員准教授 中里 直人（会津大学）

原子核物理研究部門

- 教授 中務 孝（部門主任）、矢花 一浩
- 講師 橋本 幸男
- 助教 日野原 伸生
- 研究員 温凱、Bharat Kumar

量子物性研究部門

教授	矢花 一浩（部門主任）
准教授	小泉 裕康、全 暁民
講師	前島 展也
助教	佐藤 駿丞
主任研究員	山田 篤志
研究員	植本 光治、山田 俊介、竹内 嵩、野田 真史、Arqum Hashmi、 廣川 祐太
客員教授	小野 倫也（神戸大学）
共同研究員	日野 健一（教授）、岡田 晋（教授）

生命科学研究部門

生命機能情報分野

教授	重田 育照（部門主任）
准教授	原田 隆平
助教	庄司 光男、西澤 宏晃、堀 優太
研究員	三嶋 謙二、鬼頭（西岡） 宏任、Kowit Hengphasatporn、満田 祐樹
共同研究員	広川 貴次（教授）、吉野 龍之介（助教）

分子進化分野

教授	稲垣 祐司（分野リーダー）
研究員	石谷 佳之
共同研究員	橋本 哲男（教授）
特任助教	湯山 育子（生命環境系）

地球環境研究部門

教授	日下 博幸（部門主任）、田中 博
助教	松枝 未遠、Doan Quang Van
研究員	山上 晃央、西 暁史
共同研究員	植田 宏昭（教授）

高性能計算システム研究部門

教授	朴 泰祐（部門主任）、高橋 大介、建部 修見
助教	多田野 寛人、小林 諒平、藤田 典久
客員准教授	塙 敏博（東京大学）
共同研究員	安永 守利（教授）、和田 耕一（教授）、櫻井 鉄也（教授）、 山口 佳樹（准教授）、今倉 暁（准教授）

計算情報学研究部門

データ基盤分野

教授	北川 博之（部門主任）
准教授	天笠 俊之
助教	塩川 浩昭、堀江 和正
研究員	太田 玲央、宮本 隆典

計算メディア分野

教授	亀田 能成（分野リーダー）、北原 格
助教	宋戸 英彦
共同研究員	白川 友紀（特命教授）

2 令和元年度の活動状況

2.1 計算科学研究センターの次のステップに向けて

本センターの活動として、2019年度はこれまで続けてきた本センターの歩み、特に計算科学者と計算機科学者が協力し、高性能計算システムの開発とそれを有効利用する計算科学アプリケーションの開発を同時に行う**コ・デザイン**のコンセプトの下、両分野の研究協力をより一層推進することに加え、特に国際研究展開力の向上と世界トップレベルの研究機関への進化を目指した活動を行いました。

筑波大学計算科学研究センターは、1992年(平成4年)度に設置された**計算物理学研究センター**を前身とします。計算物理学研究センターは、岩崎洋一先生(後に初代センター長、筑波大学学長)が、平成4年に文部科学省の“学術の新しい展開のためのプログラム(通称新プロ)”に申請した“専用並列計算機による「場の物理」の研究”の採択を受けて設立されたものです。当初は物理学系からの6名の振替えと純増で認められた4名の教員からなる組織で、センター独自の建物はありませんでした。そして、物理学計算の超高速化を目指したスーパーコンピュータ「CP-PACS」の開発予算が認められ、計算機棟設置が決まりました。その4年後の平成8年に、超並列計算機 CP-PACS が完成し、スーパーコンピュータ・トップ500の世界第1位に登録されました。大学が主導したプロジェクトで、世界最高速のスーパーコンピュータを開発したのは我が国初の快挙でした。CP-PACSの完成は、物理学研究者と計算機工学の専門家の協働が実を結んだものであり、今でこそ広く認知されるようになった**コ・デザイン**の先駆けでもありました。その後、平成16年の国立大学法人化の節目に改組し、部門を拡充して、素粒子宇宙研究部門、物質生命研究部門、地球生物環境研究部門、超高速計算機システム研究部門、計算情報学研究部門の5部門からなる**計算科学研究センター**が発足しました。

その後、平成18年度から国立大学法人運営費交付金特別研究経費の交付を受けて、高性能超並列クラスタ「PACS-CS」が開発されました。さらに平成19年には、重力演算加速器を融合させた新たなアーキテクチャHMCSを発展させ、特別推進研究に基づく融合型並列計算機「宇宙シミュレータFIRST」が開発されました。平成23年には、特別研究経費の交付により、超並列演算加速器クラスタ「HA-PACS」が製作されました。

また、平成20年には、当センターと東京大学情報基盤センター、京都大学学術情報メディアセンター間で、T2K(Tsukuba-Tokyo-Kyoto)オープンスーパーコンピュータアライアンスを結成し、それぞれの大学のスーパーコンピュータの共同仕様を策定し、筑波大ではT2K-Tsukubaを調達しました。これは筑波大学としては初めて超並列クラスタ型スーパーコンピュータの導入であると同時に、筑波大学として初めて米国メーカーによるスーパーコンピュータの導入ということにもなりました。クラスタ型計算機はその後のHA-PACSを経てメニーコア型超並列クラスタCOMAの開発・導入へとつながりました。

この流れを受け、平成25年に計算科学研究センターと東京大学情報基盤センターによる、

我が国で初めてとなる 2 大学連携によるスーパーコンピュータの開発・運用を目的とした「最先端共同 HPC 基盤施設 (JCAHPC)」が設置されました。そして、平成 28 年には、JCAHPC において新たなメニーコア型のスーパーコンピュータ Oakforest-PACS を導入し、我が国最高性能を達成しました (Top500 ランキングでは当時世界第 6 位)。

この間、センター組織として、素粒子と宇宙、物質と生命が独立した部門となるとともに原子核部門も加わって 8 部門の体制となり、その後もセンターとしての研究力を着々と強め、令和 2 年 3 月末において 43 名の専任教員を置く大センターへと発展しました。そして研究開発推進室が設置され、各分野の研究のみならず、計算機工学分野との協働や異分野間連携が広く展開されるようになりました。計算科学研究センターは、平成 22 年度からは、文部科学省共同利用・共同研究拠点「**先端学際計算科学共同研究拠点**」に認定されました。学内では、研究大学強化促進事業の下で、**先端的研究型重点研究センター**の一つとして位置付けられ、重点的な機能強化が行われると共に、平成 28 年度には予算執行や人事を独立して行う部局となりました。学術センターが独立した部局となるのは、筑波大学では初めてのことです。センターがここまで発展できたのは、文部科学省の多大なご支援、大学執行部の強いサポート、他大学・研究機関の多くの研究者の協力と支援、科学者と計算機工学者の協働ならびにセンター内の研究者の尽力の賜物であり、この場を借りて関係各位に心より御礼申し上げます。

2.2 令和元年度の活動方針

文部科学省共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」として、計算機システムの開発・運用、並びにこれを用いた学際計算科学の研究を推進する。「最先端共同 HPC 基盤施設」においては、東京大学との協働によりスーパーコンピュータ Oakforest-PACS を運用し、幅広い分野の学術研究に供し、計算科学の発展に資する。また、2019 年 4 月より運用を開始した第 10 世代の PACS システムである Cygnus (PACS-X) を活用し、コ・デザインのコンセプトに基づく理工連携研究を強力に推進する。さらに、「計算基礎科学連携拠点」「宇宙生命計算科学連携拠点」「計算メディカルサイエンス事業部」を中心に、異分野間連携を強化する。国際共同研究拠点化に向けた研究体制の構築も継続して進める。

2.3 共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」の活動状況

■ 実施計画

大規模メニーコア型システム Oakforest-PACS (8,208 ノード, 25 PFlops), 多重複合型演算加速クラスター Cygnus (PACS-X) (81 ノード, 2.5 PFLOPS) を計算資源として、プロジェクト共同研究を公募し、「学際共同研究プログラム」を実施する。本プログラムでは、大規模計算を必要とする革新的研究課題、異分野間連携を推進する研究課題、および、本センターのスタッフと共同で推進する研究課題を公募し、学際計算科学の共同研究を推進する。公募する

分野は、科学分野として、素粒子分野、宇宙分野、原子核分野、物質科学分野、生命分野、地球環境分野、生物分野、化学分野、計算機工学分野として、超高速計算システム分野、計算情報学分野、数値解析分野である。共同研究プロジェクトの課題公募は年初めに受け付け、利用状況を勘案し年度後半に追加配分を検討する。

「学際共同研究プログラム」の実施においては、共同研究委員会と共同研究運用委員会を設置して審査を行う。共同研究委員会は、各分野について学外 2 名・学内 1 名からなり、応募課題についてピアレビューを行い、共同研究委員会は審査結果を受けて採否案を策定し、センター長がこれを決定する。共同利用・共同研究に関する情報発信は、本センターHP の他、各研究分野の研究者コミュニティのメーリングリストを活用して行う。また、学際共同利用プログラムの申請・審査・採択通知・プロジェクト管理等は電子（オンライン）化されており、申請と課題審査の英語化も 2018 年度より実施されている。

■ 実施状況

東京大学情報基盤センターと共同設置した「最先端共同 HPC 基盤施設」において、2016 年度に導入し運用を開始したメニーコア型大規模スーパーコンピュータシステム Oakforest-PACS は運用 4 年目に入り安定した稼働率とユーザ利用率を記録した。Particle Physics, Astrophysics, Nuclear Physics, Material Science, Chemistry, Life Science, Global Environment, Biology, Numerical Analysis, HPC System, Computational Informatics の 11 分野で、計 78 題の研究プロジェクトを採択し共同研究を実施した。重点課題についても、学際共同利用プログラムのプロジェクトとして実施した。

これらの学際共同利用プログラムを含む共同利用・共同研究により、学術論文 305 件を発表した。各分野における学際共同利用プログラムのプロジェクト採択数を表 1 に、学際共同利用プログラムを含む共同利用・共同研究による成果発表論文数を表 2 に、登録者数を表 3 に、学際共同利用プログラムの累積利用率を表 4 に示す。

表1 各分野における学際共同利用プログラム・プロジェクト採択数

分野	採択件数		
	全体	OFP利用	Cygnus利用
Particle Physics	14	14	11
Astrophysics	11	10	4
Nuclear Physics	11	11	5
Material Science	11	11	4
Chemistry	5	5	3
Life Science	6	4	2
Global Environment	3	3	1
Biology	3	2	2
Numerical Analysis	2	2	1
HPC System	10	3	9
Computational Informatics	2	1	2
合計	78	66	44

表2 学際共同利用プログラムを含む共同利用・共同研究による成果として発表された論文の総数

区分	令和元年度		うち国際学術誌掲載論文数	
化学	36	(9)	32	(8)
材料科学	3	(2)	3	(2)
物理学	114	(20)	103	(19)
計算機&数学	70	(14)	36	(11)
工学	48	(12)	14	(4)
環境&地球科学	18	(7)	17	(6)
臨床医学	0	(0)	0	(0)
基礎生命科学	16	(3)	14	(2)
人文社会系	0	(0)	0	(0)
合計	305	(67)	219	(52)

※右側の（）内には、拠点に所属する者が特に重要な役割を果たしている論文数を示す

表 3 学際共同利用プログラムを含む共同利用・共同研究の登録者数

登録者の所属機関	Cygnus	Oakforest-PACS
学内（法人内）	148	182
国立大学	75	101
公立大学	3	4
私立大学	17	14
大学共同利用機関法人	12	21
独立行政法人等公的研究機関	28	23
民間機関	3	8
外国機関	16	18
その他	1	2
計	303	373

表 4 学際共同利用プログラムの累積利用率

区分	累積利用率(%)											
	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月
Cygnus		1.4	4.4	7.8	11.8	15.1	17.6	20.2	23.7	27.0	34.8	43.2
Oakforest-PACS	7.5	18.0	24.0	28.1	31.3	37.3	43.3	48.2	53.7	64.0	71.5	90.4

※Cygnusは5月7日運用開始

※初期配分時間に対する消費率(%)

2.4 国際連携と異分野融合

国際連携として、英国エジンバラ大学（EPCC: Edinburgh Parallel Computing Cent）との合同ワークショップを12月に同大学で行った。また米国ローレンスバークレー国立研究所（LBNL: Lawrence Berkeley National Laboratory）との合同ワークショップは例年行っている3月開催を4月にずらし、2020年4月に本センターで実施する予定であったが、これは新型コロナウイルス感染症の影響により延期されている（開催日程は未定）。また、同じく例年2月に開催している韓国 KISTI との Japan-Korea HPC Winter school 及び合同ワークショップについては、本来は本センターに関係者を招待して開催する予定であったが、同じく新型コロナウイルス感染症対応のため中止となった。

また、「計算基礎科学連携拠点」を基盤に、ポスト「京」重点課題⑨「宇宙の基本法則と進化の解明」の代表機関として連携研究を推進した。さらに、ポスト「京」重点課題⑦「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」のサブ課題 A「高機能半導体デバイス」、ならびにサブ課題 B「光・電子融合デバイス」の協力機関として研究を推進した。また、ポス

ト「京」萌芽的課題①「基礎科学のフロンティアー極限への挑戦」「基礎科学の挑戦ー複合マルチスケール問題を通じた極限の探求」のサブ課題 D「量子力学の基礎と情報」を分担機関として推進した。ポスト「京」萌芽的課題③「太陽系外惑星（第二の地球）の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明」では、「生命を育む惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明」のサブ課題 D「原始太陽系における物質進化と生命起源」を「宇宙生命計算科学連携拠点」の下で、分担機関として推進した。これらのポスト「京」関連プロジェクトについては2019年度末をもって予定通り終了し、大きな成果をもって研究を終結した。

さらに、医学分野との連携により、計算科学による医療技術の開拓を目的とした、「計算メディカルサイエンス推進事業」は「事業部」として改めて位置づけ、医理工連携の共同研究を加速させた。

2.5 センターシンポジウム

センターでは毎年10月、「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出シンポジウム」の名の下に、センターの活動と先進的計算科学及び高性能計算に関するシンポジウムを、学際共同利用中間発表会を兼ねて開催してきた。2018年度より同シンポジウムを国際化し、全てのプログラムを英語化し、国際的研究発信力を高める試みを行った。2019年度も継続して同じ形式で国際シンポジウムとして実施したが、本年度は従来2日間に渡って実施していたシンポジウムを1日に短縮した。これは、従来は初日が一般的な招待講演を含めたシンポジウムとし、2日目は学際共同利用に基づく研究の中間及び最終発表という形で実施していたものであるが、1日のプログラムに後者に関するポスター発表を併せて組み入れることにした。これにより、一般講演の聴衆にも幅広く学際共同利用成果を公開でき、併せて同プログラムの学術的周知と成果の共有を推進することができた。

今後、世界トップレベルの国際的研究拠点を目指す上で、様々なイベントやプログラムの英語化は重要なステップである。2019年度における学際共同利用の申請システムの電子化・英語化と、センターシンポジウムの国際化により、今後の活動の基盤を作った。

2.6 今後のあり方

計算科学研究センターは、筑波大学の研究センター組織再編の下で、先端研究センター群の中の世界級研究拠点（R1）に位置付けられた。これにより、全学戦略枠の人員配置やプロジェクト予算の配分等を通じて重点的な機能強化が行われ、平成28年度より本学の独立した部局の一つとなり、大学の研究力強化に貢献している。計算科学研究センターは、計算機科学分野と科学諸分野が融合・連携して「学際計算科学」を推進し、我が国の計算科学の発展に資する高性能計算機の開発・運用を行っている。筑波大学の理念は、国、機関、学内組織などの境界を超えた教育研究のトランスボーダー化の加速であり、計算科学研究センターの役

割は、計算科学を通じた学際融合と国際化の加速である。学際計算科学は、計算機工学と科学諸分野の融合だけでなく、科学の異分野間融合の高い可能性をもつものであり、当センターでは「計算」を共通軸とした共同研究が多く行われている。センターが推進する「宇宙生命計算科学連携」および「計算基礎科学連携」は、分野の境界を越えたグローバルな研究展開を実践できる拠点であり、既に様々な異分野間共同研究が進んでいる。また、医理工学連携を目指す「計算メディカルサイエンス事業部」における共同研究は、医学分野との連携基盤を作るものであり、将来は産業界との連携へと発展していく。今後、これらセンターのもつ学際性と人材育成によって、機能強化・特色化を加速し、国際的なハブ拠点へと発展させる。これらの活動全てについて、世界トップレベルの国際研究拠点に向けた発展を目指し、活性化と成果の創出を目指す。