筑波大学
計算科学研究センター

Center for Computational Sciences,
University of Tsukuba

筑波大学
University of Tsukuba

筑波大学計算科学研究センター

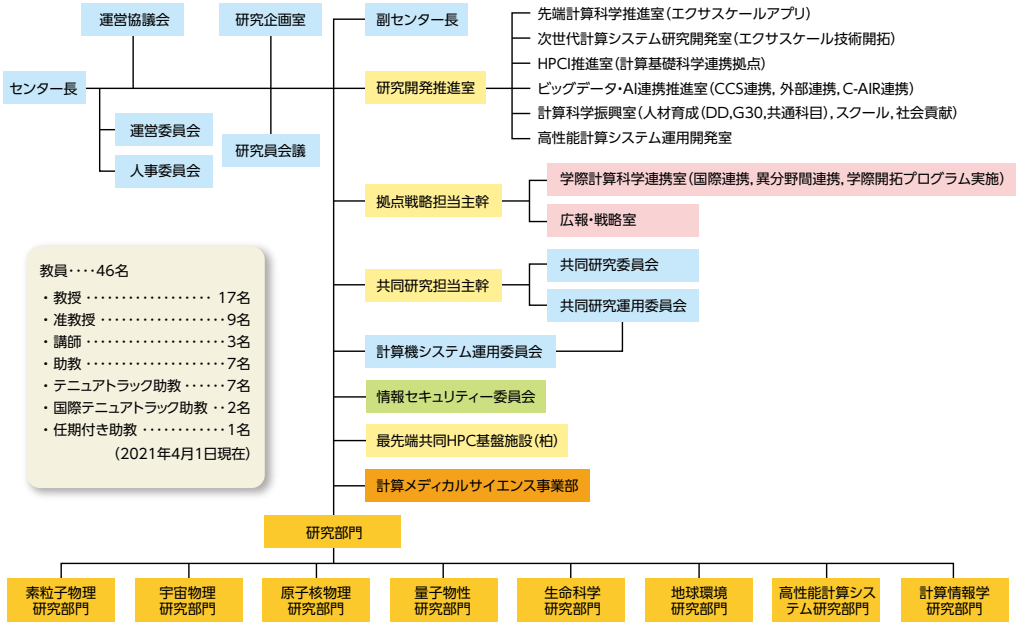
概要

筑波大学計算科学研究センターは、科学諸分野と計算機科学分野の協働・融合を軸とした「学際計算科学」を推進し、超高速計算機システムおよび超高速ネットワーク技術の開発を行うことによって、科学の諸領域における超高速シミュレーションおよび大規模データ解析や情報技術の革新的な応用方法の研究を行っています。扱う科学の領域は、素粒子物理、宇宙物理、原子核物理、ナノサイエンス、生命科学、地球環境科学、ビッグデータなど多岐にわたります。

本センターは、1992年（平成4年）度に設置された計算物理学研究センターを前身とし、2004年（平成16年）4月に改組・拡充されて設立されました。1996年（平成8年）に開発した超並列計算機「CP-PACS」は世界第1位の性能を達成しました。現在、学内の「先端的研究型重点研究センター」として位置付けられ、重点的な機能強化が行われています。2013年（平成25年）には、東京大学情報基盤センターとの協定に基づき、全国初の大学間共同計算機開発施設として「最先端共同HPC基盤施設」を設置し、2016年（平成28年）に国内最速となる新たなスーパーコンピュータを導入しました。センターには、8つの研究部門があり、46名の専任教員が従事しています。

また、学際計算科学の戦略的推進と普及・振興のために、6つの「研究開発推進室」と「学際計算科学連携室」、「広報・戦略室」を設置し、計算科学の分野間協働、次世代システムの基盤技術開発、国内外の連携、計算科学の普及・振興、センターの計算資源の運用と開発を行っています。さらに、「計算基礎科学連携拠点」、「宇宙生命計算科学連携拠点」及び「計算メディカルサイエンス事業」を推進し、様々な異分野間連携を加速しています。

本センターは、研究・開発を行う機関であると同時に、外部の研究者に計算機資源を提供し幅広く研究を支援する全国共同利用施設としての役割を果たしています。2010年（平成22年）には、文部科学省共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」に認定され、2015年（平成27年）に再認定されました。拠点の機能として、「学際共同利用プログラム」の下でセンターの持つスーパーコンピュータ資源を国内外の研究者に提供するとともに、「研究集会開催支援」、「研究者招聘支援」、「共同研究旅費支援」、「短期雇用支援」など、共同研究に向けて研究者や学生の交流を図るための支援を行っています。



センター長挨拶

筑波大学計算科学研究センター長
朴　泰祐

計算機によって科学を探究する「計算科学」は、基礎から応用分野に至るまで欠くべからざる科学の研究手段となっています。これにより、多くの分野で科学の発展に貢献しています。

最先端の計算科学は、単に高速なスーパーコンピュータが存在し応用分野毎のプログラムがあるだけではもはや成立しなくなっています。それらは計算科学のための必要条件ですが、決して十分条件ではありません。なぜなら、現在の最先端超高速計算機システムは半導体技術、システム規模、消費電力等のあらゆるハードウェア的制約が限界に達しつつあり、従来のように計算機は速くなり続け、ユーザはこれを自由に使っているだけでは性能の限界が目前に迫っているからです。この壁を乗り越えるには、計算機システムをアプリケーションが求める条件に沿って最適化し、アプリケーションも計算機システムの限界を意識しつつ改変するという、双方の相互理解に基づく「コデザイン（協調設計）」が必要不可欠です。本センターは発足当初より、このコデザイン・コンセプトに基づくシステムとアプリケーションの開発を行ってきました。そして、この枠組みは応用分野同士の協働にも発展し、システム利用のための知見の共有やライブラリの相互利用等にも発展しています。これを我々は「学際計算科学」と定義づけています。学際計算科学は、未来に予想される高度化および多様化する科学を探究する強力な手段であり、無限の可能性を秘めています。本センターではこのコンセプトを多くの科学分野の重要な学術成果につなげて来ており、応用分野の異分野間連携を一層強める努力を続けています。

本センターは、今後も「学際計算科学」を推進し、国内外との連携強化の下、学際計算科学のハブ拠点を形成したいと考えています。

計算科学研究センターのビジョン「学際計算科学」

計算科学は、超高速計算機と高速ネットワークを用いた数値シミュレーションを中心的な研究手段とします。その発展には、計算機を活用する科学諸領域の研究者と、ハードウエアからソフトウエア、アルゴリズム、プログラミングの研究を行う計算機科学者、データやメディア処理の研究を行う情報科学の研究者の協働が鍵となります。このような科学諸分野と計算機科学・情報科学の協働と融合を行うのが「学際計算科学」です。これまで、物理学者と計算機科学者の協力（コデザイン）により、1996年に超並列計算機「CP-PACS」を開発・製作し、同年10月にスーパーコンピュータ・トップ500の世界第1位となりました。これを用いて素粒子・宇宙分野で世界最先端の研究成果を上げてきました。2006年度から国立大学法人運営費交付金特別研究経費の交付を受けて、高性能超並列クラスタ「PACS-CS」を開発・運用しました。さらに2007年には、科研費（特別推進研究）に基づく学際的な研究協力により、融合型並列計算機「宇宙シミュレータFIRST」を開発しました。2011年には、特別研究経費の交付により、超並列演算加速器クラスタ「HA-PACS」プロジェクトを開始しました。それらの経験を元に、2019年には複数種類の演算加速装置を搭載する世界でも類を見ない多重複合型演算加速スーパーコンピュータ「Cygnus」を開発し、運用を開始しました。

本センターは設置以前から、長年にわたり、基礎科学分野において計算機科学との共同研究体制を構築し、その中から活動を開始した経緯があります。センターでは、この体制が拡充し、現在では素粒子・宇宙・原子核などの基礎科学に加えて、物質・生命・地球環境などにおける計算科学の研究を発展させています。そして、その中から様々な領域で、異分野間の連携と融合が生まれており、これも学際計算科学のもつ重要なポテンシャリティです。

国内外の密接な研究協力体制

国内の研究協力として、2013年に、東京大学情報基盤センターとの協定を締結し、全国で初めての大学間共同計算機開発施設として「最先端共同HPC基盤施設」を設置しました。この協働により、これまでにない大規模な計算機の構築が可能になり、メニーコア型の新たなスーパーコンピュータOakforest-PACSを導入しました。また、様々な分野の計算科学を統合する「計算基礎科学連携拠点」「宇宙生命計算科学連携拠点」「計算メディカルサイエンス事業」を推進し、基礎物理や物質・生命科学との連携を進めると共に、計算情報学や医学との融合研究も生まれています。さらに、理化学研究所計算科学研究センター（R-CCS）と基本協定を結び、高性能スーパーコンピュータを用いた最先端計算科学推進のための連携・協力を行っています。加えて、つくば市には本学の他に多くの国の研究機関があり、この特徴を生かして、高エネルギー加速器研究機構（KEK）、産業技術総合研究所（AIST）、物質材料研究機構（NIMS）、気象研究所（MRI）、国立環境研究所（NIES）などの主要研究機関と、密接な研究協力関係を結んでいます。

国際的な協力は、学際的な計算科学をグローバルに展開するために重要な活動です。筑波大学と英国エジンバラ大学および米国ローレンス・バークレー国立研究所との間では、連携協定を締結し毎年ワークショップを開催して計算科学の研究交流を深めています。韓国科学技術情報研究院（KISTI）とは、ウィンタースクールやワークショップ開催を通じて密接な連携を図っています。また、米国のバンダービルト大学、ワシントン大学とも日本学術振興会二国間交流事業により計算物質科学の共同研究を行ってきました。このほか16件の国際交流協定を結び、国際連携による研究を推進しています。

ILDG（International Lattice Data Grid）では、格子QCD（量子色力学）の配位データを全世界レベルで共有するためのデータグリッドを開発する国際プロジェクトを推進しています。米国、英国、ドイツ、オーストラリアおよび日本ではすでに地域ごとのグリッドも構築されており、ILDGの日本のグリッドがJLDG（Japan Lattice Data Grid）です。JLDGについては、国立情報学研究所が進めている「サイバーサイエンス基盤プロジェクト（CSI）」の支援を受けて研究開発が行われました。

計算科学研究センター年譜

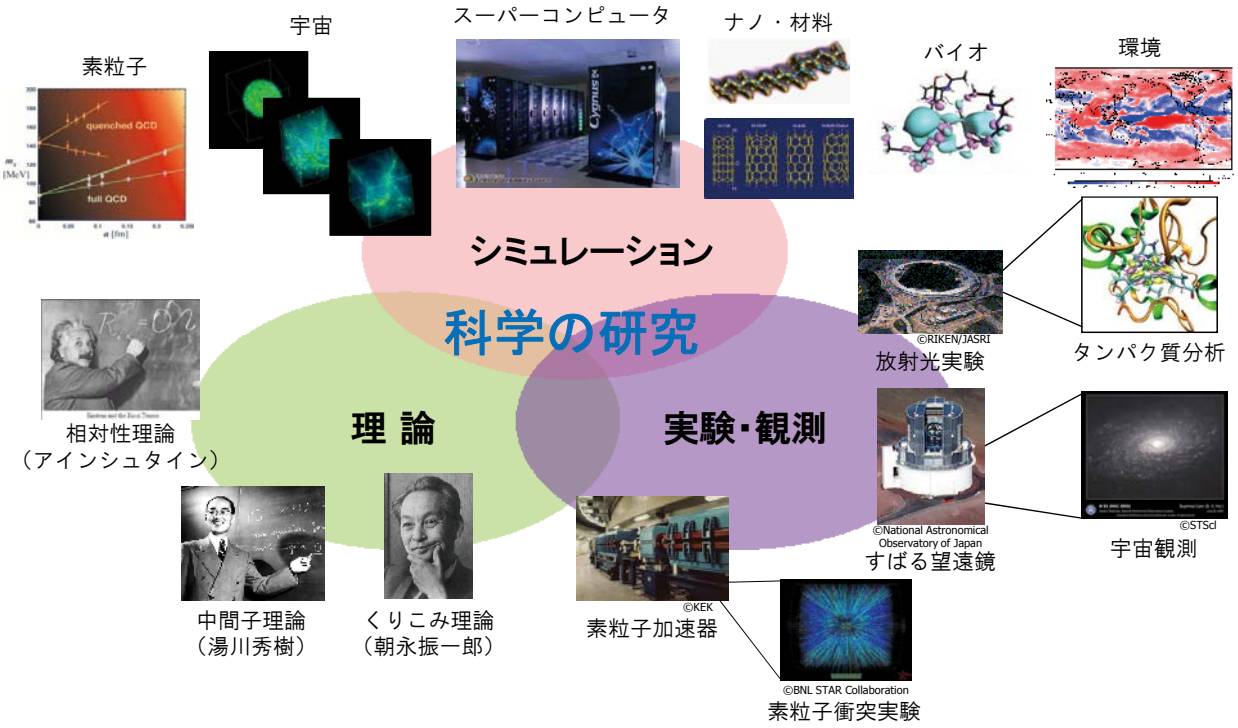
1992年	4月	新プログラム研究「専用並列計算機による「場の物理」の研究」（CP-PACSプロジェクト）開始（5カ年計画）、計算物理学研究センター設置（10年計画）
1993年	8月	計算機棟竣工
1995年	3月	研究棟（第1期）竣工
1996年	9月	CP-PACS（2048PU）完成、設置
	11月	CP-PACSが世界のスーパーコンピュータTOP500で第1位認定
1997年	4月	未来開拓研究「次世代超並列計算機の開発」開始（5カ年計画）
2002年	4月	計算物理学研究センターを組織拡充し、新たな10年時限の活動を開始
2004年	4月	計算物理学研究センターを改組拡充し、計算科学研究センターを設置
2005年	4月	高性能超並列クラスタ「PACS-CS」プロジェクト開始（3カ年計画）
2007年	3月	研究棟（第2期）竣工
	4月	宇宙シミュレータFIRST完成
2008年	6月	T2K-Tsukubaオープンスーパーコンピュータ運用開始
2010年	4月	共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」の認定を受ける。計算科学研究センターの5研究部門を7研究部門に改組拡充
2011年	4月	超並列演算加速器クラスタ「HA-PACS」プロジェクト開始（2カ年計画）
2012年	2月	HA-PACS運用開始
2013年	3月	東京大学との協定に基づき「最先端共同HPC基盤施設」を設置
2014年	4月	COMA（PACS-IX）運用開始
2015年	4月	計算科学研究センターの7研究部門を8研究部門に改組拡充
2016年	12月	最先端共同HPC基盤施設としてOakforest-PACS運用開始
2019年	4月	多重複合型演算加速スーパーコンピュータCygnus運用開始

計算科学とは

最先端の研究

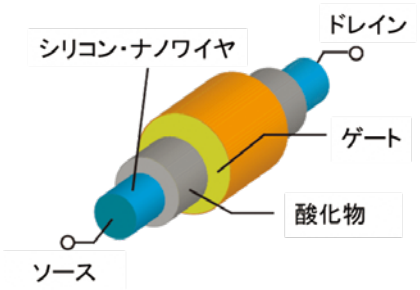
これまでの科学は、理論と実験によって発展してきました。しかし、実験が難しい現象や、原理的なことはわかっていても“紙と鉛筆”だけでは理論計算できない場合がたくさんあります。このような難しい問題を、コンピュータを使って解明する方法が計算科学です。

超高速計算機（スーパーコンピュータ）や超高速インターネットを用い、大規模シミュレーションや大量のデータ解析によって研究を行う計算科学は、科学の全分野で、実験・観測、理論と並び、欠くべからざる研究手段となっています。



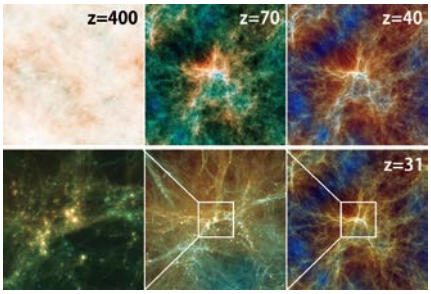
2年連続でゴードン・ベル賞を受賞

ゴードン・ベル賞は、並列計算の科学技術への応用で最も優れた成果を挙げた論文に与えられる、権威ある賞です。筑波大学計算科学研究センターが、スーパーコンピュータ「京」を用いて行った共同研究が評価され、2年連続でゴードン・ベル賞を受賞しました。



◎2011年ゴードン・ベル賞 最高性能賞（筑波大・東大・理研）

現実の材料のサイズに近い10万原子規模のナノワイヤの電子状態について、量子力学的計算を実施した。



◎2012年ゴードン・ベル賞（筑波大・理研・東工大）

世界最大規模のダークマターシミュレーション。約2兆個のダークマター粒子の宇宙初期における重力進化の計算を「京」を用いて行った。

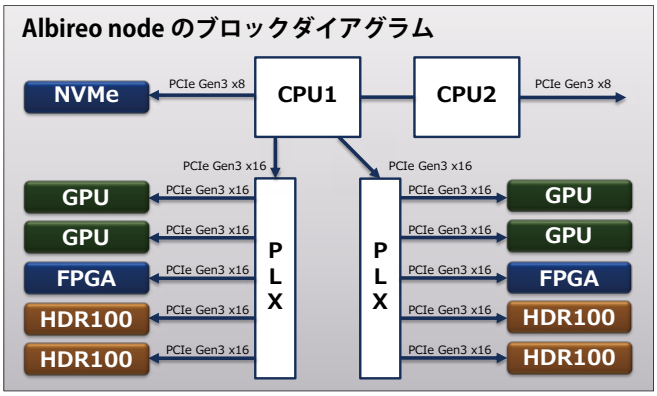
Cygnus

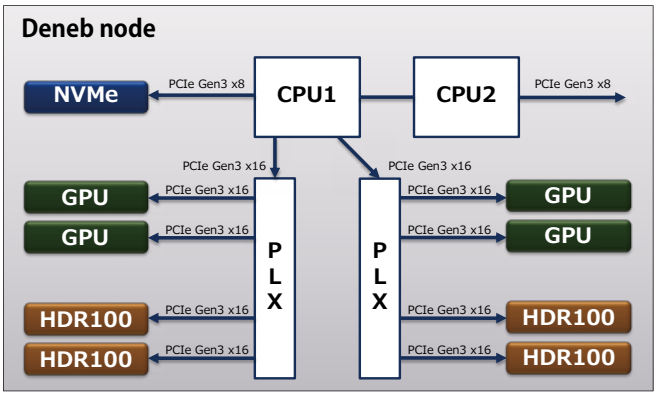
Cygnusは本センターで研究開発が進められてきたPACSシリーズの第10世代のスーパーコンピュータのための実証システムです。2019年4月より稼働を開始しました。GPUとFPGAを備えた大規模並列GPU・FPGAクラスタシステムで、全81ノードで構成されます。FPGAを除く理論ピーク性能は2.43 PFLOPSです。

全計算ノードに2.6GHz 12コアのIntel Xeon Gold 6126プロセッサを2基、NVIDIA Tesla V100 GPUを4基搭載し、内32ノードのFPGAノードでは更にIntel Stratix 10 FPGAを2基搭載しています。計算ノード間はInfiniBand HDR100の4ポート(400 Gbps)で接続され、78ノードはフルバイセクションバンド幅のFat Treeネットワークにより接続されています。更にFPGAノードでは64枚のFPGAカードが100Gbpsの光リンクにより8×8の2次元トーラスで接続されています。GPUだけでは演算加速できない不規則な計算や大規模並列性を持たない部分的処理をFPGAで加速することを狙っています。

Cygnus

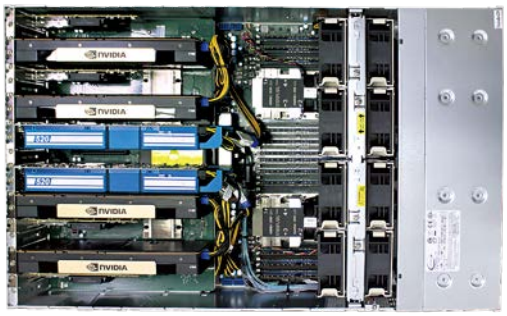
全計算ノードに3.2TBのNVMe SSD (Intel SSD DCP4610) を搭載し、科学技術計算におけるファイル入出力の高速化だけではなく、ビッグデータアプリケーション、AIアプリケーションを強力にサポートします。





Cygnusの緒元

項目	仕様
理論ピーク性能	倍精度浮動小数点演算 **2.43 PFLOPS** (GPU: 2.27 PFLOPS、CPU: 0.16 PFLOPS) FPGA部: 単精度浮動小数点演算 0.64 PFLOPS
総ノード数	81 (Albireoノード32台、Denebノード49台)
各ノードの主記憶	CPU部: 192 GB DDR4-2666 (255.9 GB/s) GPU部: 32 GB x 4 (3.6 TB/s)
各ノードのCPU	2.6GHz 12コア Intel Xeon Gold 6126 x2基
各ノードのGPU	NVIDIA Tesla V100 x 4基 (PCIe 3.0 x 16)
各ノードのFPGA	Nallatech 520N with Intel Stratix10 x2基, 各FPGAに100Gbps x 4 linksの光インターコネクトを装備
各ノードのSSD	3.2TB Intel SSD DC P4610
共有ファイルシステム	DDN Lustre, RAID6, 2.5 PB
相互結合網(FPGAネットワークとは独立)	Mellanox InfiniBand HDR100 x4, 48 GB/sの通信性能
プログラミング言語	CPU: C, C++, Fortran, OpenMP GPU: OpenACC, CUDA FPGA: OpenCL, Verilog HDL
システム導入業者	NEC



Cygnusノード

最先端共同HPC基盤施設（JCAHPC）

●施設長：田浦健次朗　東京大学情報基盤センター長　　●副施設長：朴　泰祐　筑波大学計算科学研究センター長

概要

筑波大学計算科学研究センターは、東京大学情報基盤センターとともに次期スーパーコンピュータシステムを設計し共同運営・管理するために「最先端共同HPC基盤施設（JCAHPC: Joint Center for Advanced High Performance Computing）」を2013年に設置しました。最先端共同HPC基盤施設は、東京大学柏キャンパスの東京大学情報基盤センター内に両機関の教職員が中心となり設計するスーパーコンピュータシステムを設置し、最先端の大規模高性能計算基盤を構築・運営するための組織です。本施設を連携・協力して運営することにより、最先端の計算科学を推進し、我が国の学術および科学技術の振興に寄与していきます。

背景・経緯

21世紀において世界の科学・技術をリードする立場を維持するには、世界最高水準のHPC基盤による計算科学の推進が重要です。理化学研究所計算科学研究センターで稼働していたスーパーコンピュータ「京」は、2011年に世界最高速を達成し、2012年から共用が開始されました。このような世界最高水準を今後も維持するには、HPC基盤を提供している情報基盤センター群やスーパーコンピュータを所有する附置研究所が協力して体制を構築すべきであると考え、両センターは2013年「最先端共同HPC基盤施設」を設置し、次期スーパーコンピュータの共同設計開発と共同運転・運営を行い、諸分野の研究に供して、最先端の計算科学を推進することとしました。

ミッション

最先端共同HPC基盤施設では、我が国の計算科学の拠点を担うに足る大規模HPCシステムの設計・開発を行います。これからのHPCシステムの中心的なテクノロジーであるメニーコアを利用し、最先端のシステムを構築します。さらに、システムソフトウエアの核となる技術である、OS、プログラミング言語、数値計算ライブラリなどを、他の組織とも連携しながら研究開発していきます。この設計・開発をもとにスーパーコンピュータを共同で調達し、運営・運転を行います。この方針に基づき、メニーコアアーキテクチャ型スーパーコンピュータOakforest-PACSが設計され、運用されています。

システム稼働後、両センターは計算利用量によってシステムを案分してセンターごとに運用し、それぞれの利用プログラムによって各ユーザーに対するサービスを提供しています。また、文部科学省が主導するHPCI（High Performance Computing Infrastructure）プログラムにはJCAHPCとして参加し、「京」コンピュータに次ぐ主力リソースとして活用されています。これらの共同運用により、管理等のコストが削減されるだけでなく、各センターが単独でスーパーコンピュータシステムを保有する場合に比べて大規模な計算が可能となります。このような施設を作り、スーパーコンピュータを共同運営・管理するのは国内初の試みです。

Oakforest-PACS

最先端共同HPC基盤施設では設置当時として国内最高性能スーパーコンピュータOakforest-PACSの運用を2016年12月より開始しました。同システムはそれまでのスーパーコンピュータ「京」の性能を上回るシステムであり、Intel社Xeon Phi 7250と同社のOmni Path Architectureネットワークを持つ計算ノードを8208台搭載した最先端メニーコアクラスタで、メニーコアプロセッサをメインCPUとして用いています。さらに26PByteの大規模共有ファイルシステムと960TByteの超高速共有ファイルキャッシュを持ちます。2016年11月のTOP500リストでは、ピーク性能25Pflops、Linpack性能13.5Pflopsとして世界第6位、国内第1位にランクされました。さらに、2017年6月のIO500ベンチマークでは総合性能で世界第1位、2019年6月の同ベンチマークでは総バンド幅性能として世界第1位にランクされています。メニーコアプロセッサは今後の超高性能システムの重要なプロセッサ技術として注目されており、2021年に共用が開始された国家フラグシップスーパーコンピュータである「富岳」にもつながるアプリケーション開発にも我々のシステムが使われています。今後もより多様なアプリケーションの開発と、我が国の主要スーパーコンピュータとして幅広い計算科学研究に用いられます。

Oakforest-PACSの運用は2022年3月をもって終了する予定ですが、JCAHPCはその後継システムについても両大学による共同調達・共同運用を行い、引き続き国内のスーパーコンピューティングを主導していく方針を決定しています。

Oakforest-PACS

計算資源の提供

本センターは、さまざまな科学分野の研究者が単に計算機を利用するのではなく、計算科学と計算機科学の研究者の協働により、科学の探究に最適な計算機を開発し研究を発展させてきました。さらに全国的な計算科学の発展に寄与するべく、2002年度より、開発した計算機を共同利用に供してきました。これを発展させ、2007年度より、計算機科学との連携を強化した「学際共同利用プログラム」を推進しています。2010年には、文部科学省共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」として認定され、この下で学際共同利用を行っています。また、学際計算科学推進のための共同研究支援として、「研究集会開催支援」「研究者招聘支援」「共同研究旅費支援」「短期雇用支援」を行っています。

2018年度の申請からオンライン申請システムを導入し、2019年度からは、大幅に増加する申請計算資源量に対応するため、申請資源量に上限値を設定し、その規模に応じたクラス分けを導入しました。また国際化を進めるため、申請書およびオンライン申請システムを英語化し、海外からの直接申請を可能にしました。これにより、海外の利用者数が大きく増加しました。

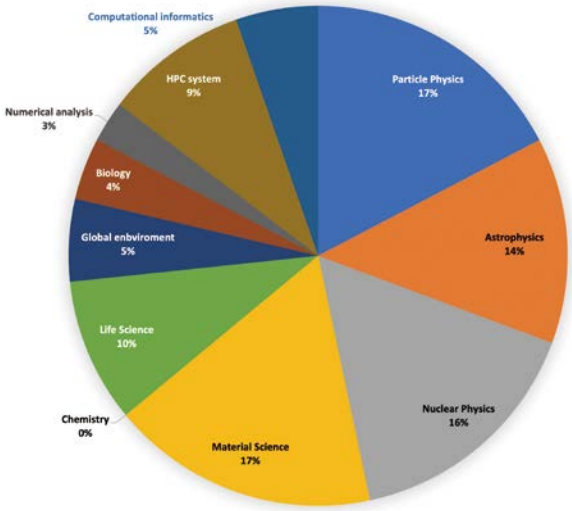
科学分野としては、素粒子、宇宙、原子核、物質科学、生命科学、化学、地球環境、生物の諸分野、そして計算機工学分野として、超高速計算システム、計算情報学、数値解析の諸分野の研究課題を募集し、研究を推進してきました。学際共同利用プログラムにおいて無償で利用できる計算機資源として、2007～2011年度にはPACS-CS、2009～2011年度にはFIRST、2008～2013年度にはT2K-Tsukuba、2012～2017年度にはHA-PACS、2014～2018年度にはCOMA (PACS-IX)、2017年度からは最先端共同HPC基盤施設の運用するOakforest-PACSの一部、そして2019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

表には、2010年度以降の学際共同利用プログラムの採択件数を示しています。最近は70件を超える課題が審査によって採択されています。グラフに、2021年度における応募課題の分野別の内訳を示しています。自然科学と工学の幅広い分野で、様々な課題が研究されていることが分かります。

学際共同利用プログラム採択件数（2010年度以降）

年度	採択件数	計算機システム
2010年度	24件	PACS-CS, T2K-Tsukuba, FIRST
2011年度	31件	PACS-CS, T2K-Tsukuba, FIRST
2012年度	48件	T2K-Tsukuba, HA-PACS
2013年度	59件	T2K-Tsukuba, HA-PACS
2014年度	41件	HA-PACS, COMA
2015年度	51件	HA-PACS, COMA
2016年度	62件	HA-PACS, COMA
2017年度	61件	HA-PACS, COMA, Oakforest-PACS
2018年度	67件	COMA, Oakforest-PACS
2019年度	78件	Oakforest-PACS, Cygnus
2020年度	83件	Oakforest-PACS, Cygnus
2021年度	75件	Oakforest-PACS, Cygnus

2021年度応募課題件数の分野別割合



● センターシンポジウム ●

（学際共同利用成果報告会を含む）

2010年5月に開催された第1回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム以降、毎年1回のシンポジウムを開催しています。2018年からは主要言語を英語とし、海外からも講演者を招いて国際シンポジウムとして開催しています。2020年度は感染症対策として、オンラインにて開催しました。

CCS International Symposium 2019 (11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences)

素粒子物理分野

●研究部門主任：藏増嘉伸 教授
●メンバー　　：石塚成人 准教授／谷口裕介 准教授／吉江友照 准教授／大野浩史 助教

分野の説明

自然界には、「重力」、「電磁気力」、「弱い力」、「強い力」と呼ばれる4つの基本的な力が存在します。これらのうち、強い力は恒星を輝かせている源であり、私たちの体を形作っている様々な分子の中の原子核を構成している力でもあります。強い力は物質の最小構成粒子（素粒子）であるクォークに作用し、非摂動効果により「閉じ込め」と呼ばれる特徴的な現象を引き起こします。実験で観測されるものはハドロンと呼ばれる複数のクォークによる束縛状態だけであり、クォーク単体が観測されることはありません。そのため、強い力の研究のためには何らかの非摂動的手法が必要となります。格子QCDの目的は、空間3次元と時間1次元から成る4次元時空間を離散化した格子上に量子色力学（QCD）と呼ばれる理論を定義し、スーパーコンピュータを用いた第一原理計算によって強い力の織り成す10^{-15} mの世界を定量的に研究することにあります。

研究トピックス

- ハドロン質量スペクトラムの精密計算
- QCDの基本パラメータ（結合定数およびクォーク質量）の精密決定
- ハドロン内部構造の解明
- クォークを自由度とした軽原子核の構成
- QCDに基づくハドロン間相互作用の研究
- 超高温状態（宇宙初期）や高密度状態（中性子星内部）を含めたQCDの相構造の解明
- テンソル繰り込み群の相対論的量子場理論への応用

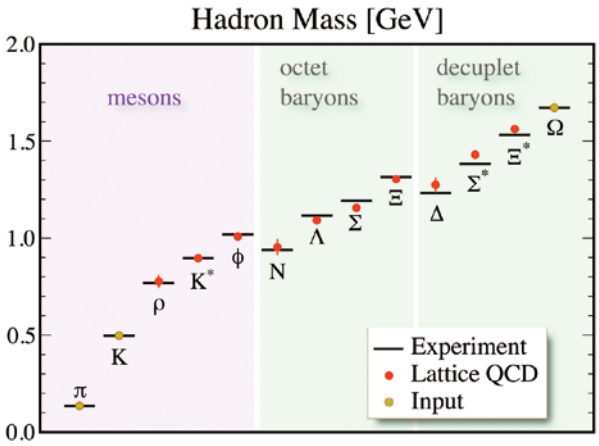


図1　格子QCD計算によるハドロン質量と実験値（黒横棒）の比較

現在までの成果

近年のアルゴリズム改良および計算機性能の向上により、長年の目標であった物理点計算（自然界のクォーク質量そのものを用いた計算）が可能となってきており、これによって格子QCD計算は誤差10%レベルの段階から誤差1%レベルの精密計算の時代を迎えつつあります。図1は2009年に発表した格子QCDによるハドロン質量の計算結果ですが、既にほぼ実験値を再現できていることがわかります。その後格子QCD計算は更なる進歩を重ね、現在は、実験値と理論計算との微小な乖離から、これまで知られていなかった新たな物理の探索を目指す時代へと入ってきています。例えば、図2では$|V_{us}|$と呼ばれる物理パラメータの格子QCDによる理論計算（誤差付きシンボル）と実験値（水色縦帯）との比較を行っています。両者の乖離は未知の物理現象の存在の証拠となりますので、今後の更なる精密計算により、このずれを確定させることが重要となります。

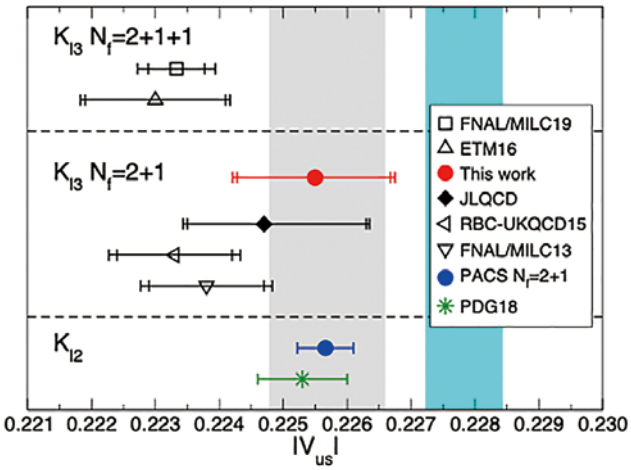


図2　格子QCD計算と実験値（水色縦帯）との比較。赤丸と青丸が筑波大学グループの計算結果を表す。

<研究部門主任>

藏増 嘉伸 筑波大学計算科学研究センター教授

1995年東京大学大学院理学系研究科物理学専攻修了。博士（理学）。高エネルギー加速器研究機構素粒子原子核研究所助手、筑波大学計算科学研究センター講師・准教授を経て現職。

宇宙物理分野

●研究部門主任：梅村雅之 教授
●メンバー　　：大須賀健 教授／森　正夫 准教授／矢島秀伸 准教授／吉川耕司 講師／Wagner Alexander Takeshi 助教／中里直人 客員准教授

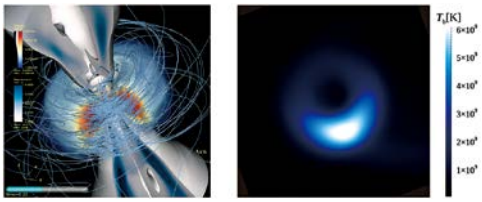
分野の説明

宇宙最初の恒星や銀河の誕生・進化、それらが放つ光の特性、銀河・銀河団や大規模構造の形成進化、ブラックホールの形成進化と活動性、惑星形成、さらには宇宙生命の誕生など多岐にわたる問題を、基礎物理学から理解することを目指しています。また、そこで培われた技術の医療への応用も研究しています。

研究トピックスと成果

●ブラックホール物理

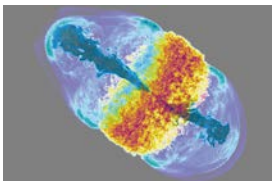
ブラックホールの強い重力で物質が集積した降着円盤では、重力エネルギーの解放によって強い放射やジェットが発生します。こうしたブラックホール周囲の高エネルギー天体現象およびブラックホール天体の放射特性を一般相対論的輻射磁気流体力学シミュレーションによって調べています。



(左) 一般相対論的輻射磁気流体力学シミュレーションによるブラックホール降着円盤およびジェット (右) 一般相対論的輻射輸送計算で再現したブラックホールシャドウ

●超巨大ブラックホールと銀河進化

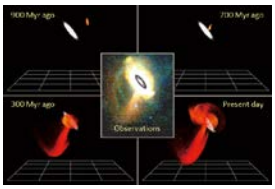
銀河の中心には超巨大ブラックホールが遍く存在し、周囲の星や星間物質を飲み込みながら成長する一方で、ジェットを噴出して星間物質を吹き飛ばし、銀河進化に強い影響を与えています。この複雑な相互依存関係を相対論的電磁流体シミュレーションにより調べ、銀河進化の謎に挑戦しています。



星間ガスとジェットの相互作用

●銀河進化とダークマター

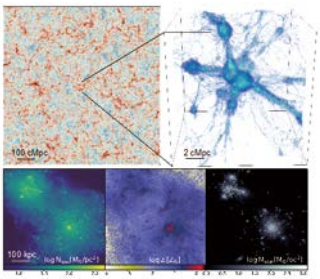
銀河進化にはダークマターが重要な役割を果たすことが解っていますが、その性質については未だ謎に包まれており、既存理論との矛盾も多数指摘されています。我々は、銀河同士の衝突現象を調べ、ダークマターハローの性質について研究を進めています。



今から約10億年前にアンドロメダ銀河で起こった銀河衝突

●銀河形成

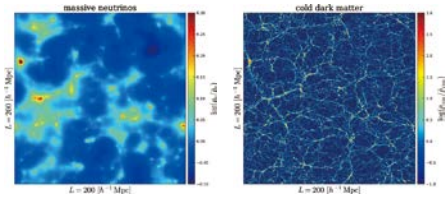
初期宇宙の原始銀河団と呼ばれる銀河の密集領域では、頻繁な銀河同士の合体や物質降着によって、大質量銀河や超巨大ブラックホールが形成された可能性があります。宇宙論的輻射流体計算によって、原始銀河団で起きる物理現象を研究しています。



(左上) 宇宙の大域的な物質分布 (右上) 原始銀河団の中心銀河付近のガスの構造 (下) 左から銀河のガス、重元素、星の表面柱密度

●宇宙大規模構造形成とニュートリノ

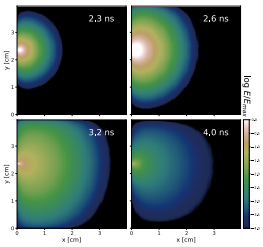
未だ解明されていないニュートリノの質量を将来の銀河の大規模探査によって調べるための理論的な研究を行っています。このために従来のN体シミュレーションに代わる高精度数値シミュレーション手法としてVlasovシミュレーションを世界で初めて実現しました。



**(左) ニュートリノの効果ありの結果
(右) ニュートリノの効果なしの結果**

●医療分野への応用

新しい医療診断法として、波長700～1000 nmの近赤外線を使用した拡散光トモグラフィ技術 (DOT) が注目されています。DOTは非侵襲かつ被曝が無いため、新生児や幼児にも安心して使用が出来ます。宇宙物理で培った高精度輻射輸送計算技術をDOTへ応用し、生体内での光伝播を研究しています。



生体へのパルス光照射を想定した輻射輸送シミュレーション

<研究部門主任>

梅村 雅之 筑波大学計算科学研究センター教授

理学博士。1987年北海道大学大学院博士課程修了。1989年国立天文台助手。1993年筑波大学計算物理学研究センター助教授、2002年同教授。2004年から計算科学研究センター教授。専門は、理論宇宙物理学。特に宇宙輻射流体力学による銀河形成、巨大ブラックホール形成の研究に従事。

原子核物理分野

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

分野の説明

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

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

研究トピックスと成果

中性子星は、規則正しい周期的な信号を発信するパルサーとして、発見から半世紀以上が経過した現在でも、多くの謎に包まれた天体です。近年、重力波による中性子星合体の観測や、太陽質量の2倍を超える中性子星の同定などにより、中性子星の研究は新たな段階を迎えています。地球上の原子核は、全てミクロなサイズのもので、高々 10^{-14} メートル程度の大きさで、これより大きなものは存在できません。しかし、宇宙には半径10キロメートルという巨大な原子核が存在し、これが中性子星です。中性子星の表面付近には、陽子・中性子が非一様な構造を作ることが予想されていますが、これまでの研究は主に準古典近似を用いたものでした。我々は、この中性子星の構造を、原子核を普遍的・定量的に記述できる理論であるエネルギー密度汎関数理論によって、量子的かつ非経験的な記述を目指し、3次元実空間表示による有限温度ハートレー・フォック・ボゴリューボフ計算のコード開発を進めてきました。図1は、これに基づいて計算された中性子星の内殻（インナー・クラスト）の構造を示しています。内殻では、中性子が空間を満たすように広がって存在する一方、陽子は局在化して結晶構造のように周期的に出現しています。また、中性子は対凝縮を起こした超流動状態にあることも確かめられました。

この密度汎関数理論を時間依存版に拡張することで、原子核の応答・反応・励起モードなどを研究することが可能です。特に低エネルギー核反応においては、対凝縮相からの核子対移行や反応中の核形状変化の起こり易さなど、未解決の課題が多く、核子超流動を考慮した3次元空間における実時間シミュレーション計算の遂行、大振幅集団運動論に基づく核反応経路の微視的決定等を推進しています。図2に示す核分裂現象の解析では、原子炉の中で核分裂片としてキセノン周辺核が大量に生成されるメカニズムを解明しました。原子炉内で核分裂の結果生成されるヨウ素135はキセノン135に変換され蓄積すると、原子炉の出力低下が引き起こされることが知られており、キセノンオーバーライドと呼ばれます。チェルノブイリ事故の原因と考えられている有名な現象ですが、これまでヨウ素135の原子核が大量に生成されるメカニズムは未解明でした。

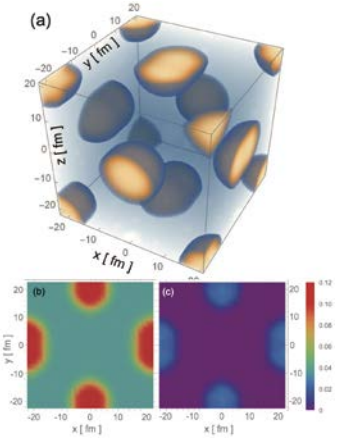


図1　(a) 面心立法格子構造を仮定し、ある温度・密度を与えた時に出現が予言される中性子星内殻構造。図で示す領域内に、陽子が136個、中性子が約4000個存在する。xy断面における (b) 中性子、および (c) 陽子の密度分布。

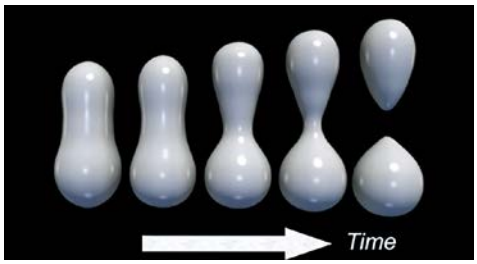


図2　プルトニウム原子核の核分裂シミュレーションの結果。左端から右端までの時間は、2×10^{-20}秒程度。

<研究部門主任>

中務　孝 筑波大学計算科学研究センター教授

1994年京都大学大学院博士課程修了。カナダ・チョークリバー研究所、英国・マンチェスター工科大学、理化学研究所等でのポスドク研究員を経て、2001年東北大学大学院理学研究科助手、2003年筑波大学物理学系講師、2007年理化学研究所准主任研究員、2014年から現職。専門は理論核物理学。特に核子多体系としての原子核構造・反応、中性子星の構造の研究に従事。

量子物性分野

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

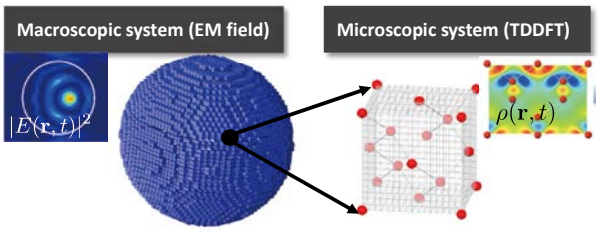
分野の説明

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

研究トピックスと成果

●光と物質の相互作用

光は物質の性質を精密に測定する手段を与えてきました。最近の光科学では、高強度で非常に短いパルス光を用いることにより、電子の超高速運動に対する実時間測定や、光による電子運動の操作が行われています。我々は時間依存密度汎関数理論をはじめとする第一原理計算手法に基づく計算により、光と物質の相互作用の解明に取り組むとともに、超並列計算に適した第一原理計算コードSALMON (Scalable Ab initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience) の開発を、計算機科学者やセンター外の研究者と協力して進めています。SALMONはオープンソースソフトウェアとして開発しており、ウェブページhttps://salmon-tddft.jpからダウンロードが可能です。



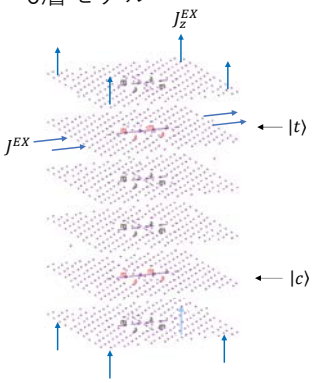
●固体と液体の界面における化学反応の第一原理シミュレーション

環境問題への関心の高まりから、燃料電池や蓄電池などのエネルギー関連デバイスの大幅な性能・耐久性向上が求められています。我々はミクロなスケールからこれらのデバイス内で起こる化学反応のシミュレーションを実行し、反応のメカニズムなどを量子力学の立場から明らかにしています。計算結果はデバイス設計や材料開発に利用され、デバイスの性能向上に役立ちます。また、シミュレーションに用いる計算手法やプログラムの開発も行っており、それらのコードはオープンソースソフトウェアとして公開されて、国内外の研究者に広く利用されています。

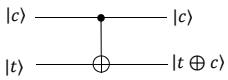
●超伝導体、強相関物質、トポロジカル物質等の創発ゲージ場を持つ物質

超伝導体、磁性体、強相関物質、トポロジカル物質では、ベリー接続という数学的形式で導入される、電磁場とは異なる創発的なゲージ場が生じます。このような物質群の機能や、外場への応答を考える場合には、この創発ゲージ場を取り込んだ計算が必要となります。我々は、その手法の開発とそれを用いた物質科学的量子計算を行っています。創発ゲージ場は“トポロジカル量子状態”をもたらしますが、この状態の持つ量子情報を利用し量子コンピューターを作ることが可能です。その実現を目指した研究も行っています。また、理論模型を用いたシミュレーションにより、強相関物質やトポロジカル物質に高強度レーザーを照射した場合に生じる超高速ダイナミクスやレーザー光による電子状態制御に関する研究を進めています。

6層モデル



2量子ゲート(CNOT)



- 積層方向へ外部電流 J_z^{EX} を流し、$|c\rangle$ と $|t\rangle$ をカップリングさせる。
- $|t\rangle$のある層に外部電流J^{EX}を流し、Landau-Zener遷移を起こす。
  - $|c\rangle = |0\rangle$ の時、 $|t\rangle \to |t\rangle$
  - $|c\rangle = |1\rangle$ の時、 $|t\rangle \to X|t\rangle$

<研究部門主任>

矢花 一浩 筑波大学計算科学研究センター教授

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

生命機能情報分野

●研究部門主任：重田育照 教授
●メンバー　　：原田隆平 准教授／庄司光男 助教／西澤宏晃 助教／堀　優太 助教／原嶋庸介 助教

分野の説明

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

研究トピックス

(1) 分子動力学計算と機械学習を用いた効率的構造サンプリング手法の開発

(2) ハイブリッドQM/MM法によるタンパク質の反応解析（光化学系II、ヒドロゲナーゼなど）

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

現在までの成果

(1) タンパク質の構造変化は極めて時間スケールの長い現象であり、従来の分子動力学（MD）シミュレーションで追跡することは困難です。我々はこれまで並列カスケード選択型MD（Parallel Cascade Selection MD: PaCS-MD）を用いて、タンパク質の折りたたみ経路（図1）を効率的に探索してきました。さらに情報科学的手法である機械学習を用いることにより、そのサンプリング効率が飛躍的に上昇することが明らかになりました。本手法は超並列環境に極めて適した手法であり、計算科学研究センターのスーパーコンピューターを用いて計算を実行しています。

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

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

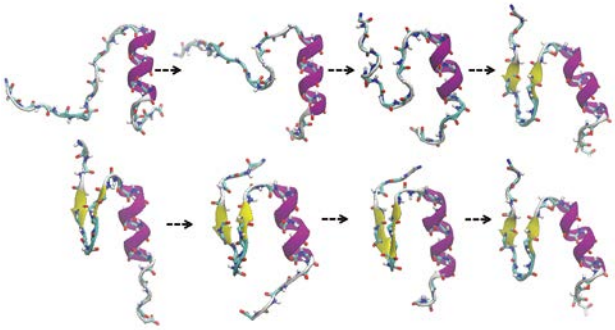


図1　トリプトファンケージの折りたたみシミュレーション

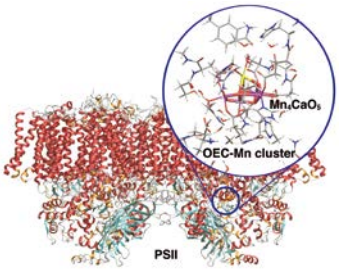


図2　光化学系IIの全体構造と活性中心構造

図3　星間空間での分子進化とアミノ酸生成のイメージ

<研究部門主任>

重田 育照 筑波大学計算科学研究センター教授

博士（理学）。2000年大阪大学大学院理学研究科修了。2000年より日本学術振興会研究員、2004年東京大学助手、2007年筑波大学講師、2008年兵庫県立大学准教授、2010年大阪大学准教授を経て、2014年より計算科学研究センター教授。専門は、理論生物物理学。

分子進化分野

●分野リーダー：稲垣祐司 教授
●メンバー　　：中山卓郎 助教

分野の説明

真核生物における大系統群間の系統解析：真核生物は6つ程度の主要系統群に分けることができると提唱されています。我々はそれぞれの主要系統群が本当に単系統なのか、またグループ間の近縁関係はどのようなものなのかを、複数遺伝子配列を用いた分子系統解析を用いて推測しています。また偏りの少ない推測を行うため、系統解析の方法についても研究しています。さらに真核生物の進化には、単細胞生物同士の共生が大きな役割を果たしてきたことが知られています。私達はこの共生進化のメカニズムについてもゲノミクスを通じた研究を行っています。

地球上には多種多様な生物が生息しています。たとえば、我々ヒトは背骨を持ち、自らの体を動かし、食物（他の生物）を摂取することにより生きています。またヒトの体は、たくさんの細胞から構成されています。一方、植物の体は、ヒトと同じように多数の細胞でできていますが、その生き方はヒトとは大きく異なります。植物は自ら動くことなく、食物を食べる必要はありません。代わりに、光エネルギーをもとに光合成を行って生きています。その他にも、日頃実感することはありませんが、地球上には肉眼では見ることのできない莫大な数の生物種が存在します。そのような生物は、多種多様な外見を持ち、その生活様式も多様です。これら地球上のすべての生物は、たった1つの原始的生物から長い時間をかけ、現在の姿まで進化してきました。我々の研究グループは、地球上に現在生息している生物種の中でもとくに細胞に核をもつ生物、すなわち「真核生物」に焦点を当て、真核生物の主要系統群がどのような進化関係にあるのかを解明し、真核生物の進化の道筋を理解することを目指しています。また真核生物の進化過程において、全く別の系統の生物が細胞の中に共生し、細胞の一部となるような進化が複数回起きたことがわかっています。このような「共生進化」は真核生物の多様化に大きく貢献したと考えられていますが、2つの別々の系統の生物が1つの生物へと融合するその仕組みについてはまだ不明な部分が多く残されています。我々はゲノム情報などをもとに、現在の真核生物の多様性を生み出した共生進化の原理の理解にも取り組んでいます。

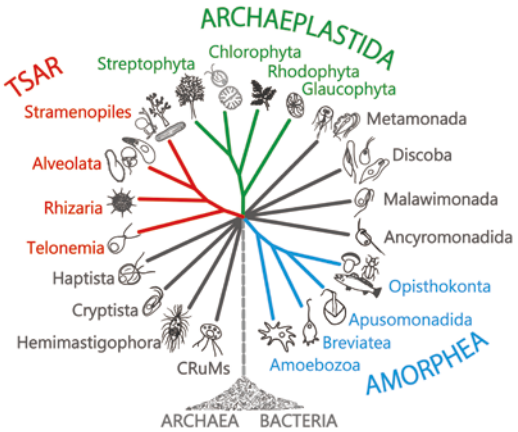


図1　真核生物の主要系統群

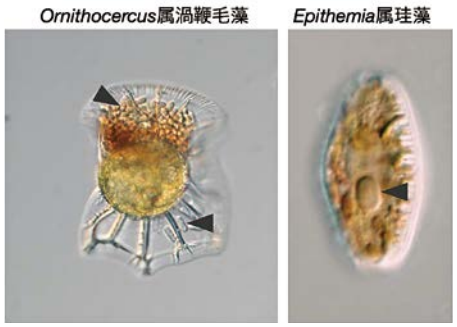


図2　バクテリア（矢頭）を共生させる単細胞性真核生物の一例

研究トピックスと成果

我々は、現存生物種の遺伝子（DNA）塩基配列やタンパク質アミノ酸配列のデータに基づいて、真核生物の系統関係の推測やゲノム比較解析を行い、進化の道筋の理解を試みています。さらに、自然環境にはこれまで研究されていない「新しい」生物が未だに多く存在しますが、このような未発見の生物が真核生物の進化における各種の問題を解決する鍵となることがあります。このような進化的に重要にもかかわらず、未だに調べられていない生物の調査も行っています。そこで、様々な系統の真核生物から大規模な遺伝子・ゲノム情報を獲得して、それぞれの生物の進化的な特徴の解析を行っています。

分子系統解析には最尤法による統計学的処理が必要なため、コンピュータを使用します。塩基配列やアミノ酸配列の中には、過去に起きた進化のイベントに対応した「シグナル」と、進化の過程で蓄積したランダムな変化（いわゆるノイズ）が共存しています。困ったことに、配列中のノイズの量は時間とともに増加しますが、シグナルの量は逆に減少します。したがって、遠い過去に分岐したと思われる主要な真核生物系統群の関係を精度よく推測するためには、大量の配列データを解析する必要があります。我々はトランスクリプトームデータ、ゲノムデータを用いた複数の遺伝子情報を含む巨大データを取り扱うため、スーパーコンピュータによる解析を行っています。

<分野リーダー>

稲垣 祐司 筑波大学計算科学研究センター教授

1995年に名古屋大学理学部で博士（理学）を取得。1996-1997年、奨励研究員として（株）JT生命誌研究館に勤務。その後、日本学術振興会海外特別研究員としてカナダ・ダルハウジー大学へ2年間派遣され（1998-2000年）、引き続き同大学で博士研究員として4年間勤務（2001-2004年）。2004年4月に長浜バイオ大学講師として帰国、2005年8月筑波大学に助教授として着任。2016年4月から現職。

地球環境分野

●研究部門主任：日下博幸 教授
●メンバー　　：田中　博 教授／松枝未遠 助教／
ドアン グアン ヴァン 国際テニュアトラック助教

分野の説明

地球環境研究部門では、地球規模から都市規模までの気候や気象に関わる研究を、全球雲解像モデル「NICAM」や、領域気象モデル「WRF」、都市街区気象モデル「LES」などを組み合わせて総合的に企画推進しています。

研究部門には、センター専属教員4名のほか、学内に共同研究員がいます。専属教員は、地球規模の大気科学を専門とする田中 博教授、都市気候や山岳気象などの身近な気象を専門とする日下博幸教授、アンサンブル予報を用いた気象予測精度の向上を目指す松枝未遠助教、都市気候や東南アジアの気候を専門とするドアングアンヴァン助教です。

学内共同研究者として、気候システムを専門とする植田宏昭教授（生命環境系）と都市気候を専門とする中村祐輔特任助教（生命環境系）がおり、研究協力を行っています。

研究トピックスと成果

全球雲解像モデルNICAM（Nonhydrostatic ICosahedral Atmospheric Model）は、東京大学気候システム研究センター（CCSR）と海洋研究開発機構（JAMSTEC）により共同開発された次世代型の大気大循環モデルです。計算科学研究センターのOakforest-PACSに移植され、重要な研究ツールとして役立てられています。我々はNICAMを用いて、熱帯低気圧である台風やハリケーン、温帯低気圧、北極低気圧、ブロッキング高気圧、北極振動、成層圏突然昇温などを対象に研究を行っています。

領域気象モデルWRF（Weather Research and Forecasting）は、米国の大気研究センター（NCAR）が中心となって開発し、一般に公開された汎用性の高い気象のシミュレーションモデルです。本部門はWRFを用いて、都市のヒートアイランド現象、ゲリラ豪雨、フェーン現象、山岳にできる笠雲・吊るし雲などの身近な気象の未解決問題に挑戦しています。また、社会のニーズにこたえるべく、地球温暖化と都市気候、熱中症の将来予測などの研究も行っています。

さらには、都市街区内の気温や風の分布を再現できる世界最高レベルの空間分解能を持つ都市気象モデル（LESモデル）を本センターの高性能計算システム研究部門と共同で開発しています。

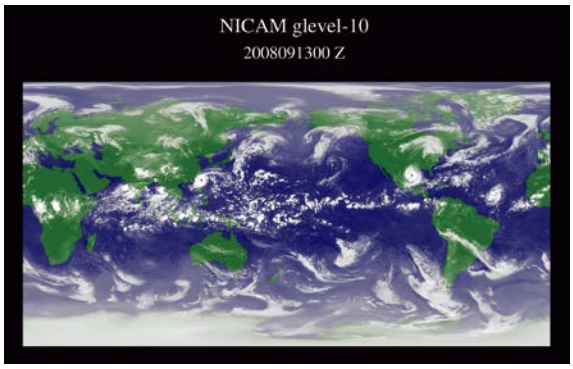


図1　NICAM全球7km解像度モデルによる雲画像。2008年の台風13号（Sinlaku）とハリケーン（Ike）の2つが同時に発達している。

図2　富士山に出現する笠雲と吊るし雲。

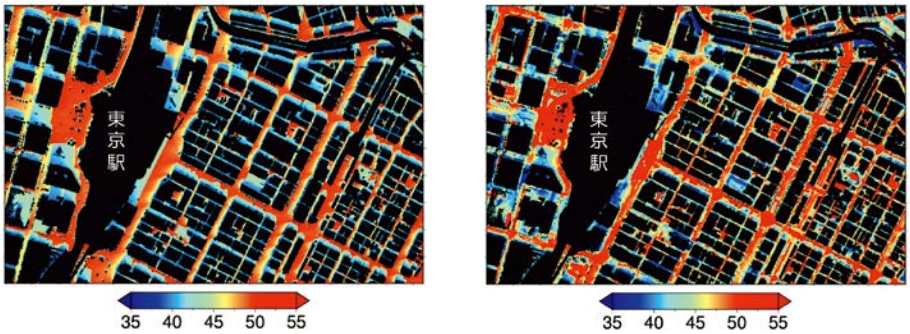


図3　東京駅周辺の表面温度分布。黒色は建物。左図は本センターで開発したLESモデルによるシミュレーション結果で、右図は東京都環境科学研究所によるヘリコプター観測の結果。

<研究部門主任>

日下 博幸 筑波大学計算科学研究センター教授

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

高性能計算システム分野

●研究部門主任：朴　泰祐 教授（センター長）
●メンバー　　：高橋大介 教授／建部修見 教授／額田　彰 教授／多田野寛人 助教／小林諒平 助教／藤田典久 助教／塙　敏博 客員准教授

分野の説明

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

研究対象は、高性能計算アーキテクチャ、並列プログラミング言語、大規模並列向け数値計算アルゴリズムおよびライブラリ、GPUなどの演算加速システム、大規模分散ストレージシステム、グリッド/クラウド環境など、多岐に渡ります。高性能計算機アーキテクチャに関する研究はp.20「次世代計算システム研究開発室」に示します。

研究トピックスと成果

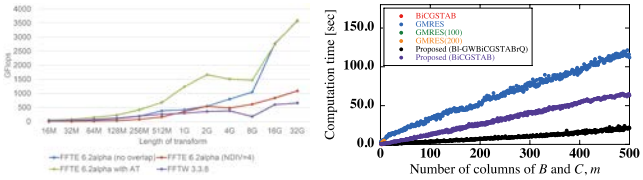
●並列I/O・ストレージシステムの基盤技術

大規模データ解析、ビッグデータによるAIなどをスーパコンピュータで実施する場合、ストレージ性能がボトルネックとなっています。この性能ボトルネックを軽減するため並列I/O・ストレージシステムの基盤技術の研究開発を行っています。計算ノードのストレージシステムを活用し、並列アプリケーションの実行時に一時的に並列ファイルシステムを構成するGfarm/BBを研究開発しました。また、計算ノードのストレージシステムを効率的に活用する並列I/Oの標準ライブラリ（NSMPI）の設計・実装を行いました。いずれもノード数に応じてスケーラブルな性能を示し、性能ボトルネックの軽減に大いに貢献します。

Gfarm/BBの読込、書込み性能（左）と、NSMPIの書込み性能（右）

●高性能・大規模並列数値アルゴリズム

FFTEは我々の部門で開発されているオープンソースな高性能並列FFTライブラリで、自動チューニング機構を持ち、PCクラスタから超並列システムまで幅広く対応します。また、大規模線形計算アルゴリズムの研究を行っています。鞍点型連立一次方程式の行列構造を利用した手法を構築し、従来法よりも高速な求解を可能にしました。



Oakforest-PACS（1024ノード）における並列一次元FFTの性能（左）と鞍点型連立一次方程式の求解時間（右）

●GPUコンピューティング

GPU（Graphics Processing Unit）はもともと画像処理用に多数の演算器を搭載するアクセラレータですが、汎用計算を行うこともできます。そのコストパフォーマンスや電力効率の高さで注目され、今や多くのスーパーコンピュータで採用されています。GPUによりアプリケーションが高速化されてきましたが、その結果より大規模な計算を行うようになり、実行時間はむしろ長くなることも多いのです。スーパーコンピュータなどの共用システムでは実行時間制限がありますが、それを超えた実行を行いたい場合には、後から再開できるように実行の途中でアプリケーションの状態をファイル等に保存するチェックポイントという技術が使用されます。

CPUのみを使用するアプリケーションのチェックポイント技術は確立されているので、それをGPUに拡張します。GPUはCPUとは別にメモリを搭載しており、GPUアプリケーションはCPUから専用のAPI関数でGPUを制御しています。これらのAPI関数の呼び出しを全てモニタリングして実行を再開するために必要な情報を収集し、それをCPUのメモリに保存しておきます。またチェックポイントを保存する際の前処理でGPU側のメモリにあるデータをCPU側に回収することによって一緒にファイルに保存されるようになります。チェックポイントに対応するために実行時間が伸びてしまっては本末転倒ですので、このAPIのモニタリングを最小限のオーバヘッドで実現しなければなりません。監視するAPI関数を最小限に絞り、また本当に必要なデータのみを保存することが重要になります。

<研究部門主任>

朴　泰祐 筑波大学計算科学研究センター教授・センター長

HPCシステム研究者として、計算科学研究センターが所有してきたCP-PACS、FIRST、PACS-CSなどほぼすべてのスーパーコンピュータの開発に携わりました。センターの各応用分野の研究者との緊密な議論と共同研究に基づいて、これらのシステムを実現してきました。主な研究分野は高性能相互結合網、大規模クラスタ設計、並列プログラミング、実アプリケーション性能チューニング、GPU及びFPGAコンピューティングです。

データ基盤分野

●分野リーダー：天笠俊之 教授
●メンバー　　：塩川浩昭 准教授／堀江和正 助教／ Bou Savong 助教

分野の説明

計算科学において、ビッグデータの管理や活用はきわめて重要な課題です。計算情報学研究部門データ基盤分野は、ビッグデータ利活用のためのデータ工学関連分野の研究開発を担当しています（図1）。具体的には、多様な情報源やリアルタイムデータを統合的に扱うためのデータ統合基盤技術、高性能大規模データ分析技術、大規模科学データやソーシャルメディアに埋もれた知識やパターン等を発見するためのデータマイニング・知識発見技術、インターネット環境における様々なデータや知識を統一的に扱うためのオープンデータ関連技術などの基盤技術の研究を継続して行っています。また、計算科学研究センター地球環境研究部門、素粒子物理研究部門、生命科学研究部門、国際統合睡眠医科学研究機構（IIIS）、人工知能科学センター（C-AIR）等と連携して、計算科学の各分野における応用的な研究を推進しています。

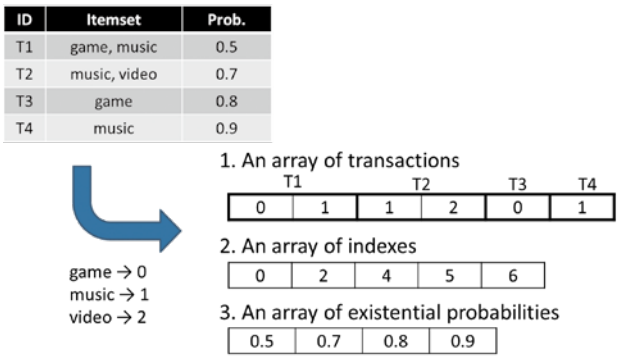


図1　GPUによる確率的頻出アイテム集合マイニング

研究トピックス

●ビッグデータ基盤技術

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

●データマイニング・知識発見

多様なデータに対するデータマイニングおよび知識発見手法に関する研究：1）テキスト、画像、グラフ等に対する各種分析アルゴリズム、2）ソーシャルメディア分析およびマイニング、3）機械学習を用いた生体データ分析。

●科学データ利活用

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

現在までの成果

●ビッグデータ基盤技術

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

●データマイニング・知識発見

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

●科学データ利活用

気象庁が公開している数値気象データ（GPV）をアーカイブし、研究者などに公開するためのデータベースGPV/JMAアーカイブおよびJRA-55アーカイブの開発と運用を行っています（図2）。

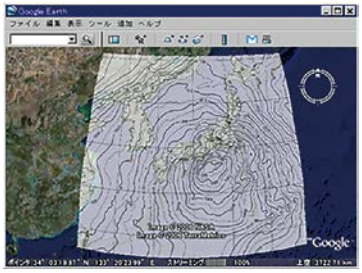


図2　GoogleEarthを利用した天気図の閲覧

<分野リーダー>

天笠 俊之 筑波大学計算科学研究センター教授

群馬大学大学院工学研究科修了。博士（工学）。奈良先端科学技術大学院大学助手を経て、2005年筑波大学着任。データベース、データ工学、データマイニング等の研究に従事。情報処理学会、電子情報通信学会、IEEE各シニア会員。日本データベース学会およびACM各会員。

計算メディア分野

●研究部門主任：亀田能成 教授
●メンバー　　：北原　格 教授／宍戸英彦 助教

分野の説明

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

具体的な取り組みとしては、“実世界の情報をセンシングする機能”、“多様な情報を処理する潤沢な計算機能”、“情報を選択・蓄積する大規模データベース機能”を、コンピュータネットワーク上で融合することにより大規模知能情報メディアを実現していきます。計算メディカル事業における研究への取り組みを重点的に実施しています。

研究トピックス

- スポーツ関係の映像解析およびVR利用による可視化スキル習得の方法論
- 多様な観点で撮影空間を観察する映像閲覧方式
- 撮影から提示までをリアルタイムで処理する多視点映像提示方式
- 注視点再設定と視点切替え処理を自動的に行える多視点映像提示方式
- ヒト行動の精密計測とリアルタイム視覚フィードバック
- 深層学習と三次元点群処理との融合
- 対応点探索に基づく過去の画像と現在の画像のマッチング
- 3DCGバーチャル手術

現在までの成果

●スポーツ分野における視覚的探索活動の計測と解析

サッカープレイヤーとコーチの両方がアクティブビジュアル探索的活動パターン（AVEA）を測定できるバーチャルリアリティ（VR）システムを提案しています。この研究の主な目的は、プレッシャーのかかる状況下でサッカー選手の「ゲームを読む」能力を分析できるようにすることです。ヘッドマウントディスプレイ（HMD）技術とヘッドトラッキング機能、視線追跡機能を始めとするバイオメトリックスを利用することで、ユーザーのゲーム中の視覚探索運動を正確に計測し、解析を可能としました。

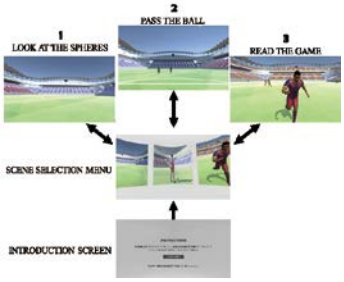


図1　VR空間における視覚探索運動の計測

●3次元画像処理と敵対的生成ネットワークを用いた全方位多視点画像閲覧法

3次元画像処理とGAN（敵対的生成ネットワーク）を用いた全方位多視点画像閲覧方式を提案しています。Structure from Motion処理によって、全方位多視点画像からカメラパラメータと撮影空間の3次元情報を推定し、デプス情報に基づく任意視点画像レンダリング処理によって自由視点画像を生成することにより、滑らかな視点移動を実現しています。さらに、GANを用いた深層学習により自由視点画像の画質を改善し、高品質な全方位多視点画像閲覧を実現しています。

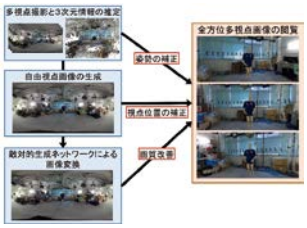


図2　全方位多視点画像閲覧法の概要

●文化遺産建造物の3次元復元における時系列変化の可視化

文化財遺産建造物の経年による劣化や破損、あるいは改築・改変の度合いを調べることは重要な課題です。長期間に渡って観察記録を同一視点で撮影し続けることは現実的ではありません。本研究では、自己符号化器（オートエンコーダ）とGuided Matching手法を利用することで、過去と現在の撮影画像を、対象となる建造物に合わせて正確に位置合わせを可能にし、時系列変化を精密に可視化することに成功しました。

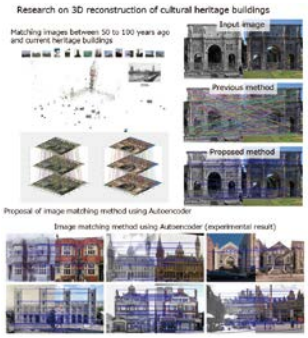


図3　提案手法による過去画像と現在画像の重ね合わせ

<研究部門主任>

亀田 能成 筑波大学計算科学研究センター教授

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

計算メディカルサイエンス事業部

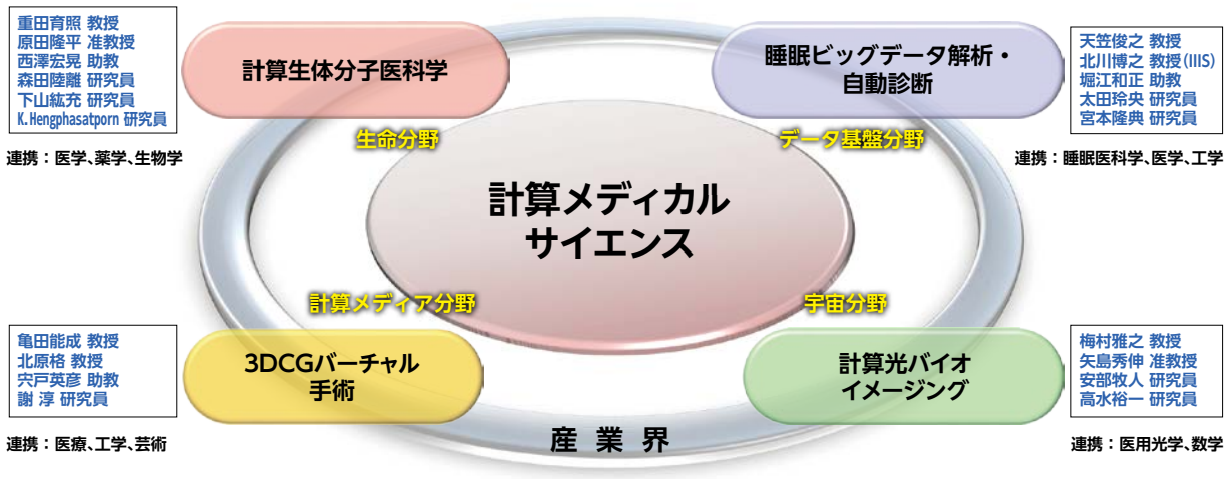
事業部長　梅村　雅之 教授

事業目的

医療に関わる新技術の研究開発において、大学などの教育・研究機関の工学系研究者と民間企業の医療関係者が連携する「医工連携」や理学系研究者を加えた「医理工連携」がこれまで行われてきました。昨今、計算科学が急速に発展し、物理学や生命科学分野で高精度な計算技術が開発され、理論、実験にならぶ研究手法として確立されています。また、データ基盤分野や情報メディア分野では、ビッグデータサイエンスや機械学習の手法も目覚ましい発展を見せています。筑波大学計算科学研究センターでは、これらの最先端の計算科学を医学と連携させる新たな取組みとして「医計連携」を創出する「計算メディカルサイエンス事業」を推進します。本事業は、物理学、生命科学およびデータ基盤、情報メディア分野の計算科学と医学、産業界が連携し、最新の計算手法、画像処理技術ならびに機械学習、ディープラーニングを用いて、計算科学による医療技術を開拓することを目的とします。この目的のため、(1) 計算生体分子医科学、(2) 睡眠ビッグデータ解析・自動診断、(3) 3DCGバーチャル手術、(4) 計算光バイオイメージングのプロジェクトチームを設置し、学内外の連携とチーム間連携を図り研究を推進します。

計算生体分子医科学

従来の医薬品開発では、ある特定の標的に対して高い選択性と結合能を併せ持つ副作用の少ない小分子や、様々なタンパク質に特異に結合する抗体の開発を目指してきました。それらをサポートするため、近年、上市に10年・1薬剤あたり1000億円にもなるコストを減少できるものと期待されて*in silico*技術の高度化が行われてきました。小分子に関しては、様々なリード化合物に対して網羅的に官能基を導入し、ドッキングシミュレーションやその構造をもとにした分子動力学計算を実行する（またその逆過程も繰り返し行う）ことで、低分子化合物をスクリーニングすることが可能となっています。一方で、新型コロナウィルス感染症に対する薬剤の開発には膨大な時間を要することから、こうした緊急性の高い疾病に対して素早く対応する必要があります。本研究グループは、ドッキングシミュレーション、分子動力学シミュレーション、第一原理計算などの分子科学的計算手法の全てを駆使し、薬剤スクリーニングやリード化合物の最適化に資する新たな研究手法の開発を通じ、社会に貢献する研究を志向しています。



睡眠ビッグデータ解析・自動診断

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

3DCGバーチャル手術

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

計算光バイオイメージング

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

研究開発
推進室紹介

先端計算科学推進室

計算機の性能をフルに活かして研究を発展させる

室長　矢花　一浩 教授

計算科学は、理論、実験・観測と並び、21世紀の科学の最先端を切り拓く柱となる研究手法として、計算機能力の飛躍的な向上に支えられて、著しい発展を遂げています。今日では、多数のCPUを連結した超並列計算機は言うに及ばず、グラフィック・プロセッシング・ユニット（GPU）を演算加速器とする大規模計算機、そして今後の大規模計算で中心となることが期待されるメニーコアプロセッサを搭載した超並列計算機など、次々に新しいアーキテクチャに基づく計算機が出現しています。これら多様な計算機の性能をフルに活かした計算を行い、研究を発展させることは、容易なことではなくなってきています。

本センターには、素粒子物理学や宇宙物理学の分野で、物理学者と計算機科学者が日常的な交流を行う中、計算科学にとって最適な計算機を開発し、科学研究にブレークスルーをもたらしてきた実績があります。このような計算科学と計算機科学の協働を様々な分野で実現し、さらに科学分野間の連携や学外研究者との連携を図るために、先端計算科学推進室を設けました。

これまでGPU超並列スパコンHA-PACSや、メニーコアプロセッサを搭載したCOMA、Oakforest-PACSに対して、新たな計算機開発を推進する次世代計算システム開発室との密接な連携のもと、主要なアプリケーションのホットスポットの解明や最適化の検討を行ってきました。現在はさらに、演算加速装置としてGPUとFPGAを同時に搭載するCygnusへの取り組みを進めています。

先端計算科学推進室のOakforest-PACSにおける取り組み

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

エクサフロップスとその先に向かう最先端基盤技術開発

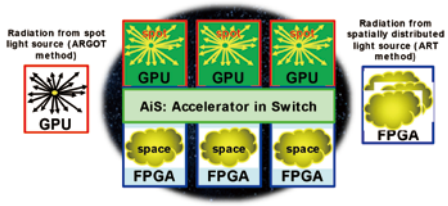
室長　朴　　泰祐 教授

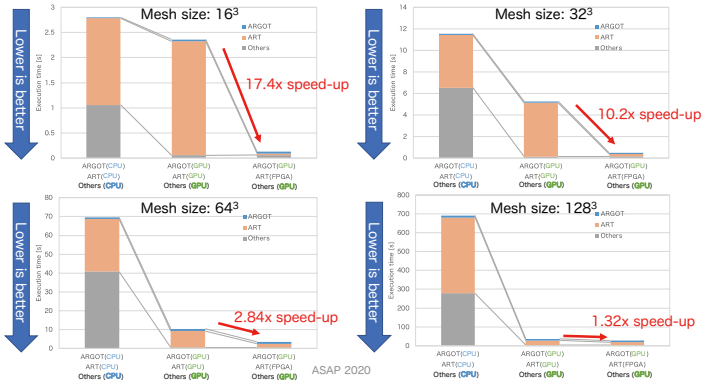
並列型スーパーコンピュータシステムのピーク演算性能は、ノード（プロセッサ）性能×ノード数によって表されます。これまでノード数を増やすことで性能向上を追求してきましたが、電力消費や故障率などの問題があり、単純なノード数増強による性能向上は限界に近づきつつあります。世界最高性能スーパーコンピュータはエクサスケールに達しつつありますが、これを達成しさらにその先の性能を実現するには、数十万～数百万ノードにおける耐故障技術を確立することと、ノード単体の演算性能を100TFLOPSレベルまで引き上げる必要があります。後者を達成するためには演算加速機構が有望で、これによりシミュレーションのステップあたりの時間短縮（strong-scaling）が可能になると考えられます。

次世代計算システム研究開発室では、多重複合型演算加速（MHAS: Multi-Hybrid Accelerated Supercomputing）コンセプトに基づく次世代の高性能計算システムの基盤技術研究を行っています。ここで中心的役割を果たすのはFPGA（Field Programmable Gate Array）で、このデバイスの演算と通信の飛躍的な高性能化を背景に、これを演算・通信の融合に適用します。従来のCPUとGPUの組み合わせだけでは十分な演算加速が行えなかったアプリケーションに対し、FPGAを補完的に用いることで理想的な演算加速を行うというコンセプトの下、2017年度よりその実証実験のためのミニクラスタであるPPX（Pre-PACS-X）を開発・拡張し、その実用化システムとしてPACSシリーズの第10世代スーパーコンピュータであるCygnusを開発、2019年度より運用を開始しました。ここで開発されている主な技術をご紹介します。

FPGAとGPUを協調利用するアプリケーションの開発

高性能計算システム研究部門と宇宙物理研究部門の協働により、宇宙初期天体形成シミュレーションにおける輻射輸送問題を含むARGOTコードについて、GPUとFPGAが密結合したプラットフォームで高速に動作するようにコードを開発しています。ARGOTコード全体を1ノードのGPU+FPGAの協調計算で実行できるようになり、GPUのみの計算に比べ最大17倍の高速化を達成しました。さらにGPUとFPGAの間でCPUを介さない高速通信を行うDMAエンジンも開発しています。さらに、地球環境研究部門・量子物性研究部門などとの共同研究を通じ、センターで独自開発されている応用コードのGPU/FPGA連携高速化も順次進めています。





宇宙初期天体形成シミュレーションにおけるGPU+FPGAの協調計算の性能

FPGA間接続高速光ネットワークのためのOpenCLインタフェース

100Gbpsの物理性能を持つFPGA間ネットワークをユーザレベルから容易に用いる通信フレームワークCIRCUS（Communication Integrated Reconfigurable CompUting System）を開発し、Cygnusスーパーコンピュータ上で90Gbpsの高性能通信を達成しています（理論ピーク性能の90%）。これをARGOTコードのFPGAオフロード部分に適用し、並列FPGA処理性能が台数に比例して向上していることも確認しています。

GPUとFPGAの統一プログラミング環境

理化学研究所計算科学研究センター及び米国Oak Ridge National Laboratoryと共同で、MHOATと呼ぶOpenACCトランスレータを開発しています。これにより、FPGAとGPUの連携プログラミングをOpenACCのみで実現可能になります。MHASのコンセプトを簡便なプログラミング環境で利用可能とすることで幅広いアプリケーションへの適用を目指します。

研究開発
推進室紹介

HPCI推進室

計算基礎科学連携拠点による計算科学推進体制の構築

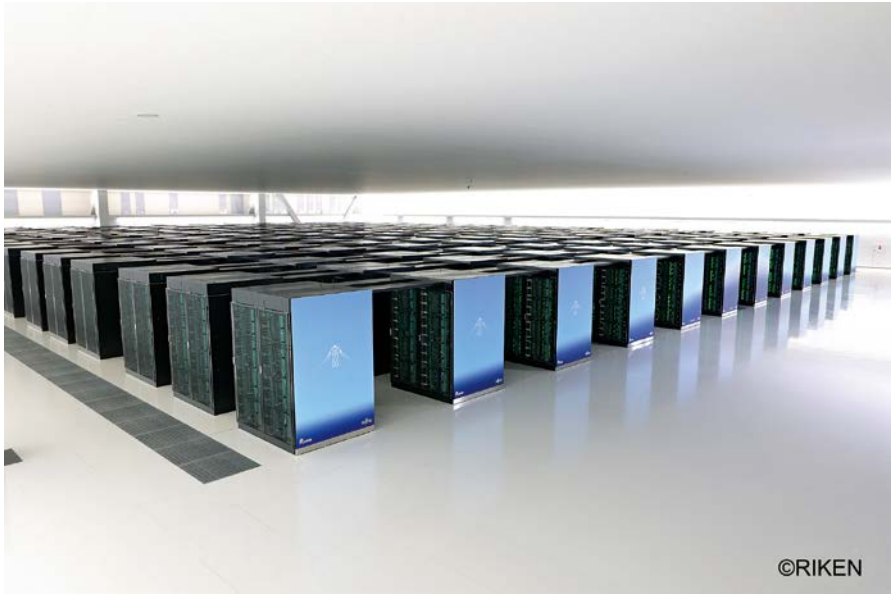
室長　藏増　嘉伸 教授

HPCI計画と計算基礎科学連携拠点形成の歴史

革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（HPCI）は、2010年代初めに、スーパーコンピュータ「京」を中核とし、多様なユーザーニーズに応える革新的な計算環境を実現するHPCIを構築するとともに、その利用を推進することを目指すものとして計画されました。その具体的な当初目標の一つとして、HPCIを用いた画期的成果を創出するとともに、主要分野において計算科学推進体制を構築すること、が掲げられました。2011年度から2015年度までの5年間推進されたHPCI戦略プログラムでは、スーパーコンピュータ「京」の計算機資源を必要とし、かつ社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる分野（戦略分野）として5つの分野が選定され、その5番目である「分野5：物質と宇宙の起源と構造」は、素粒子・原子核・宇宙物理を中心とした基礎物理の分野でした。分野5の研究開発を牽引する機関（戦略機関）は、筑波大学計算科学研究センター・高エネルギー加速器研究機構・国立天文台を中心とする共同研究組織である計算基礎科学連携拠点（JICFuS：Joint Institute for Computational Fundamental Science）が担い、計算科学の成果創出と体制構築を推進しました。スーパーコンピュータ「京」は2019年8月に運用を停止しましたが、その後も、計算基礎科学連携拠点は基礎物理分野における計算科学推進の役割を担っています。

新たなスーパーコンピュータ「富岳」と今後のHPCIの利活用

2014年度以降、スーパーコンピュータ「京」の後継として、ポスト「京」（2019年5月に正式名称が「富岳」と決定）の研究開発プロジェクトが推進され、それに伴い、「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発」として9つの重点課題が選定され、その中の重点課題9「宇宙の基本法則と進化の解明」は、HPCI戦略プログラム分野5における研究開発を発展させたものであり、実施機関として筑波大学計算科学研究センターと7つの分担機関が選ばれました。また、重点課題7「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」においても、筑波大学計算科学研究センターが分担機関として参画しました。さらに重点課題とは別に、ポスト「京」で新たに取り組むチャレンジングな課題として4つの萌芽的課題が選定され、その中の萌芽的課題1「基礎科学のフロンティア－極限への挑戦」と萌芽的課題3「太陽系外惑星（第二の地球）の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明」においても本センターは分担機関として参画しました。以上のような準備期間を経て、スーパーコンピュータ「富岳」は2021年3月から共用が開始され、現在は一般利用研究課題とともに早期の戦略的利活用を目指した成果創出加速プログラムが推進されています。本戦略室では、今後も継続して「富岳」およびHPCIの利活用に向けたアプリケーション開発・研究開発を推進するとともに、科学成果の創出を目指します。また、素粒子・原子核・宇宙物理における分野の枠を越えた勉強会や研究会を開催し、基礎物理学分野の計算科学の発展を推進していきます。



スーパーコンピュータ「富岳」

計算科学の人材育成と社会貢献を推進する

室長　高橋　大介 教授

計算科学振興室では、大学院と連携した計算科学に関わる人材育成プログラムの整備、サマースクール等の啓蒙活動、当センターにおける先端研究に関わる情報発信等を含めた社会貢献などを推進しています。

人材育成

・大学院デュアルディグリープログラム

大学院は、博士前期課程(修士)と博士後期課程(博士)から構成され、両課程を通して1つの専門分野を修めて博士号を取得します。しかし、計算科学においては、物理、地球環境、生物などのサイエンス分野の研究を、コンピュータを高度に活用しながら進める必要があり、サイエンスとコンピュータの両分野に関わる複合的な専門性が求められます。このニーズに対応するため、大学院「デュアルディグリープログラム」を推進しています。博士後期課程におけるサイエンス分野の研究と、博士前期課程でのコンピュータに関する研究を同時並行的に進め、サイエンス分野での博士号と、コンピュータ科学の修士号を同時期に取得することが可能です。

・情報理工英語プログラム

海外留学生の増加に伴い、英語だけで修了可能なように、情報理工学位プログラムの博士前期課程に「情報理工英語プログラム」を開設しています。14科目の英語授業や研究指導を通して修士号を取得できます。

科目区分	科目群	科目名	科目名(英語)
専門科目	研究群共通科目群	Principles of Software Engineering	Principles of Software Engineering
		コンピュータサイエンス英語講義I	Topics in Computational Science I
		データ工学特論I	Data Engineering I
		プログラミング環境特論	Programming Environment
		基礎計算生物学	Basic Computational Biology
		高性能コンピューティング特論	Advanced Course in High Performance Computing
		数値シミュレーション特論	Special Lecture on Numerical Simulation
		数理アルゴリズム特論	Advanced Course in Computational Algorithms
		適応的メディア処理	Adaptive Media Processing
		フロンティアインフォマティクス特論A	Frontier Informatics A
		フロンティアインフォマティクス特論B	Frontier Informatics B
専門基礎科目	研究群共通科目群	Experiment Design in Computer Sciences	Experiment Design in Computer Sciences
学術院共通専門基盤科目	学術院共通専門基盤科目(シス情)	計算科学リテラシー	Computational Science Literacy
		計算科学のための高性能並列計算技術	High Performance Parallel Computing Technology for Computational Sciences

社会貢献

・他機関との連携

国内では、理化学研究所やつくば市内の各研究機関とも密接な研究協力関係を結んでいます。素粒子物理の国際データ共有プロジェクト ILDGや、英国エジンバラ大学、米国ローレンス・バークレー国立研究所との交流など、国際的な研究協力体制も築いています。これまで進めてきた国内外の研究協力を強化、展開し、共同研究に向けて研究者や学生の交流を行うための懸け橋として活用していきます。

・筑波山プロジェクト

筑波山 (877m) 山頂にて気象観測を行い、上空の気温・湿度などの気象データを継続的に記録・公開することで、研究・教育活動に役立て、社会に貢献することを目的としています。

・情報発信

広報・戦略室と連携して国内の高校生や海外の大学生などの見学を受け入れ、一般公開を行ってつくば市や関東を中心とした地域の方々とも交流を深めています。また、教員個人としても、出張授業・後援会などを積極的に行っています。

研究開発
推進室紹介

ビッグデータ・AI連携推進室

スーパーコンピュータを活用した ビッグデータ・AI研究の推進

室長　天笠　俊之 教授

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

計算科学の各分野における ビッグデータ・AI技術の応用

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

スーパーコンピュータを活用した ビッグデータ・AI研究の推進

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

筑波大学人工知能科学センター（C-AIR） および他機関との連携

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

CCSビッグデータ・AI連携推進室会議

高性能計算システム運用開発室

研究開発
推進室紹介

コデザインによるスーパーコンピュータの開発と運用

室長　建部　修見 教授

高性能計算システム運用開発室では、素粒子物理研究部門、宇宙物理研究部門、原子核物理研究部門、量子物性研究部門、生命科学研究部門、地球環境研究部門、計算情報学研究部門のアプリケーションとのコデザインによりスーパーコンピュータの設計、開発を行い、実際にセンターに導入し運用を行っています。スーパーコンピュータの設計においては、単純に演算性能を向上させるだけではなく、アプリケーションの性能を向上させることが重要となります。従って、演算性能とメモリ性能、ネットワーク性能、ストレージ性能をバランスよく向上させることが必要になります。また、演算性能、メモリ性能を向上させるため、演算加速機構の利用が必須となってきていますが、その性能をフルに活用するためにはアプリケーション側の対応が必要となります。計算機側の発展とアプリケーション側の発展を同時に考慮し、コデザインすることにより、アプリケーションの性能向上をもたらし、計算科学、データ駆動科学、AI駆動科学の発展につながります。

Cygnus

2021年は、GPU/FPGA混載型のCygnusと、大規模メニーコア型のOakforest-PACSの運用を行っています。Cygnusは次世代計算システム研究開発室で研究開発がすすめられたGPUとFPGAを混載するアーキテクチャとなっています。FPGAは、GPUによる演算加速の補完に用いるだけではなく、FPGA間ネットワークによる高速ネットワークにも利用されています。これにより、宇宙物理研究部門で開発されているARGOTアプリケーションの演算加速が可能となりました。また、データ駆動科学、AI駆動科学の推進のため、不揮発性メモリを搭載した計算ノードによる強化システムも導入しました。今後、このシステムを用いて大規模データ解析、ビッグデータAIの研究開発を進めていきます。Oakforest-PACSは東京大学と共同で設置する最先端共同HPC基盤施設（JCAHPC）により運用を行っています。Oakforest-PACSは2016年に稼働を開始し、稼働当初は国内最高性能のスーパーコンピュータでした。2021年度をもって運用を終了しますが、現在も国内4位の性能を誇り、多くの科学的成果を上げてきました。

Oakforest-PACS

学際計算科学連携室

計算科学の国際ハブ拠点形成にむけて

室長　稲垣　祐司 教授

本センターでは、科学諸分野と計算機科学の連携・協働による「学際計算科学」を中心的なコンセプトとして研究活動を行っています。学際計算科学連携室は、計算科学の国際ハブ拠点形成に向けた本センターの取り組みの一環です。

異分野間連携

学際計算科学を推進するためには、異分野間の連携が重要になります。2011年に理化学研究所、筑波大学、東京大学および富士通による研究グループは、スーパーコンピュータ「京」を用いた10万原子シリコン・ナノワイヤの電子状態の第一原理計算の研究成果により、高性能計算分野では著名なゴードン・ベル賞の最高性能賞を受賞しました。これは本センターにおける長年の異分野間連携の成果の1つといえます。これからも異分野連携を進めてまいります。

国際連携

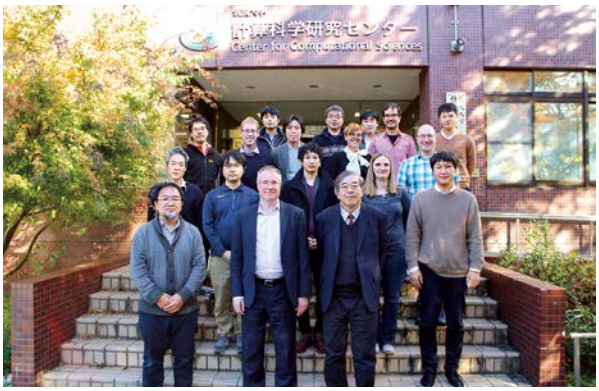
国際的な連携として、筑波大学と英国エジンバラ大学および米国ローレンス・バークレー国立研究所との間で連携協定を締結しています。エジンバラ大学並列処理センター（EPCC）とシンポジウム、米国ローレンス・バークレー国立研究所とワークショップを、韓国科学技術情報研究院（KISTI）とHPCウィンタースクール・ミニワークショップを毎年開催し、計算科学の研究交流を深めています。

学際開拓プログラム

学際開拓プログラムは、異分野間連携に重点をおいて行う研究の推進を奨励するものです。計算物理学分野（理学）と数値解析分野（工学）が連携を図り、実行効率の高い計算コードの生成とこれによる大規模シミュレーションを行うプロジェクトや、計算科学分野で手法を同じくする異分野間で有機的連携を行うことにより、研究の新たな展開や格段の発展を図るプロジェクトなどがあります。本センターの学際共同利用プログラムと連携して実施しています。

宇宙生命計算科学連携拠点

この十数年、系外惑星観測や星間分子観測などにより、宇宙生命学（アストロバイオロジー）が注目を集めています。本拠点は、計算機科学分野との連携の下、宇宙分野、生命分野、惑星分野が協働して、宇宙における生命の起源に関わるキープロセスを第一原理計算により探究し、計算科学としての宇宙生命学を創出するものです。研究課題は、星間分子生物学、惑星生命科学、星・惑星形成を柱とします。現在、筑波大学が中心となり、20研究機関、51名の研究者が参加しています。



CCSとエジンバラ大学との共同ワークショップ2019

CCSとローレンス・バークレー国立研究所との共同ワークショップ2019

CCSとKISTIとの合同ウィンタースクール2019

広報・戦略室

計算科学研究センターの発展と計算科学の推進を支援する

室長　重田　育照 教授

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

筑波山神社との共同
気象観測所設置記者会見

Cygnus運用
開始記者会見

プレスリリース・記者発表・メディア対応

研究成果やセンターの活動をメディアや一般向けに発信し、全国紙、TV、ネットニュースなどに多数取り上げられています。

一般向けコンテンツ

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

ウェブサイトでは一般向けパンフレット、研究者のインタビューなども見ることができます。YouTubeチャンネルも開設し、スーパーコンピュータや研究の紹介動画を発信しています。

(YouTube: https://www.youtube.com/channel/UCVX0tpHNmCAo8-2ho0mLG5Q)

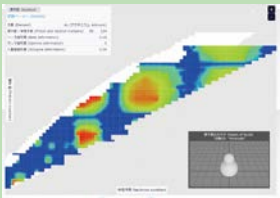
見学・一般公開

中高校生等の団体見学、大学説明会、4月の一般公開などで、センターの活動やスーパーコンピュータを紹介しています。年間2,000人以上の見学者を受け入れています。

プロジェクト支援

筑波山神社と共同で進める筑波山山頂での気象観測プロジェクト支援を行っています。また、東京大学情報基盤センターと設置した最先端共同HPC基盤施設とスーパーコンピュータ Oakforest-PACS の広報活動にも取り組んでいます。研究成果の一般向け公開ツール作成支援も行っています。毎年アメリカ、ドイツで開催されるスパコン分野の大きな学会 (SC、ISC) でのブース展示なども運営しています。

筑波山プロジェクトフライヤー



さわれる核図表「InPACS」
http://wwwnucl.ph.tsukuba.ac.jp/InPACS/

SC18の様子

筑波大学
University of Tsukuba

Access

■つくばエクスプレス（TX）＋バス

・つくば駅（快速で、秋葉原駅から45分）
A3、A4出口から、つくばセンター（バスターミナル）へ

・つくばセンターバス乗り場6から
「筑波大学中央」または「筑波大学循環（右回り）」行きのバスに乗車（所要時間約10分）
「第一エリア前」下車　徒歩1分（道路を挟んだ向かい側の建物）

■東京駅から高速バス

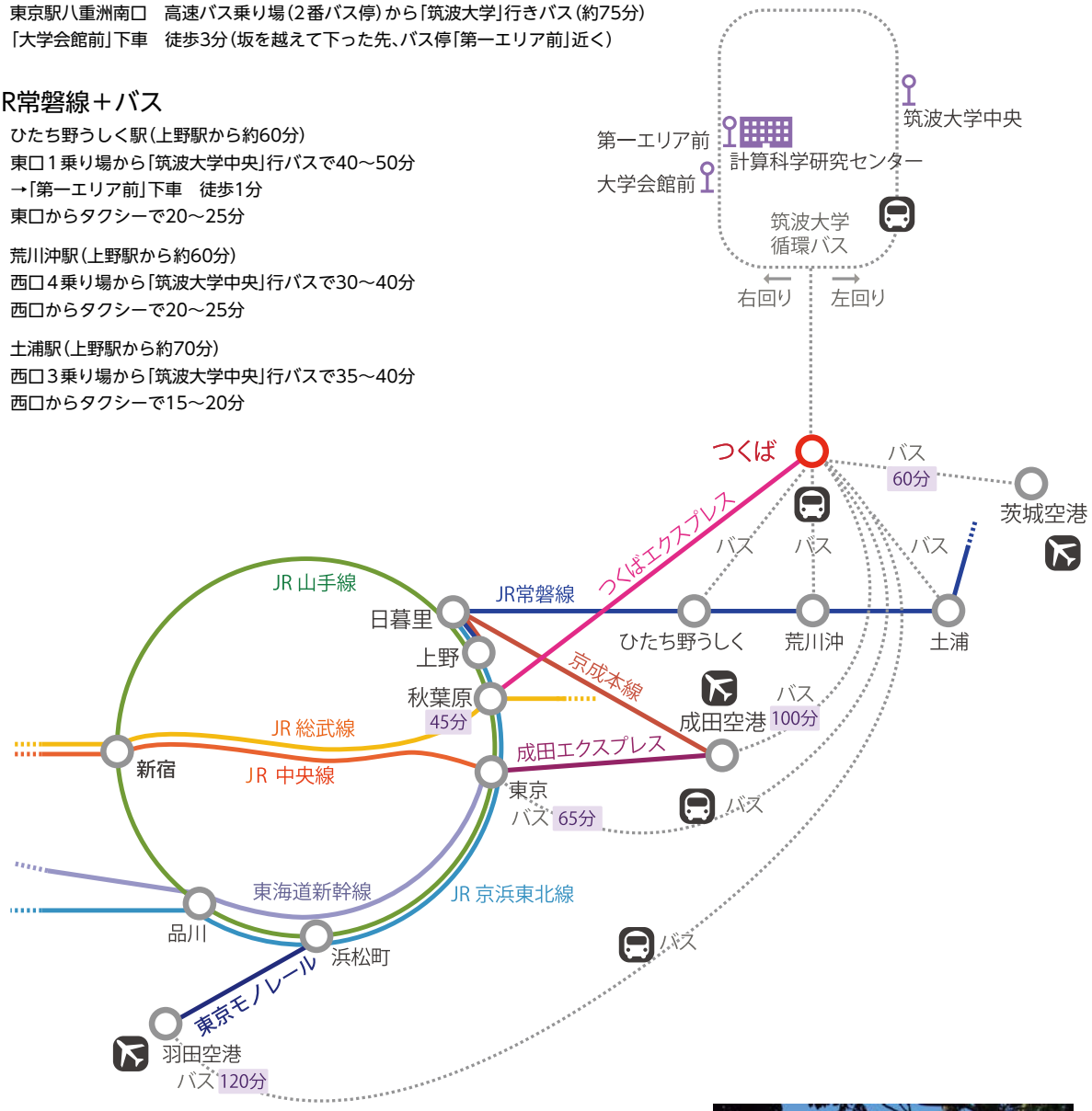
・東京駅八重洲南口　高速バス乗り場（2番バス停）から「筑波大学」行きバス（約75分）
「大学会館前」下車　徒歩3分（坂を越えて下った先、バス停「第一エリア前」近く）

■JR常磐線＋バス

・ひたち野うしく駅（上野駅から約60分）
東口1乗り場から「筑波大学中央」行バスで40～50分
→「第一エリア前」下車　徒歩1分
東口からタクシーで20～25分

・荒川沖駅（上野駅から約60分）
西口4乗り場から「筑波大学中央」行バスで30～40分
西口からタクシーで20～25分

・土浦駅（上野駅から約70分）
西口3乗り場から「筑波大学中央」行バスで35～40分
西口からタクシーで15～20分



筑波大学 計算科学研究センター

〒305-8577　茨城県つくば市天王台 1-1-1

TEL. 029-853-6487, 6488 ／ FAX. 029-853-6406, 6489

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

発行年：2021 年