

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、2021年に設立30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、過去30年に渡って進めてきたコ・デザインコンセプトに基づく高性能計算システムとその応用に関する研究を本年も継続しました。

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。

2018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整備してきました。また、そ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～中期間柔軟に招聘する中期招聘制度も継続し、海外の主要研究拠点との双方向の研究交流を通じ、世界レベルの国際共同研究とそれに基づく成果を上げるべく努力してきました。2024年度は国際会議等も対面を基本としつつ、COVID-19期間に培われたリモート会議技術を併用し、ハイブリッド形式にて実施しました。また、同様にCOVID-19の影響下で中断していた海外渡航・海外からの研究者の招聘も通常に戻り活発化しています。

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、2025年3月末をもって運用を終了しました。

また、2022年度からは最新鋭のGPU及びCPU、そして革新的記憶システムである永続性メモリ（Persistent Memory）を全面的に採用したビッグメモリ・スーパーコンピュータPegasus（PACS-XI）を導入し、データサイエンスとAI処理を中心に、HPC技術とAI技術の融合を目指す新しい計算科学の展開を開始しました。

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、42名の専任教員が従事している他、客員教員2名、常勤研究員18名、非常勤研究員4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5機関とMOUを締結するとともに、多数の海外研究機関と国際共同研究連携を行っています。この他に異分野間連携として、「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。また、「計算メディカルサイエンス推進事業部」では、計算生体分子医科学、睡眠ビッグデータ解析・自動診断、3D Surgical Vision、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。さらに、2023年度後半から文部科学省が新たに開始した「共同利用・共同研究システム形成事業～学際領域展開ハブ形成プログラム～」において、我々の提案課題「AI時代における計算科学の社会実装を実現する学際ハブ拠点形成」が採択され（全国で8件）、産学官連携による計算科学の社会実装のためのアプリケーション開発・共同研究を開始しました。この活動は2022年度に創設した計算科学社会実装推進室を中心に、関連する企業・国研・大学との緊密な共同研究を進めるもので、2024年度からは「学際ハブ拠点スパコンお試し利用」として、エントリ・レベルのスーパーコンピュータ・ユーザを企業を中心に募り、利用の裾野を広げる事業も開始しました。

大きな国際交流イベントとしては、MOUに基づき継続している国際共同研究ワークショップとして、2024年11月に米国ローレンスバークレー国立研究所を訪問し、合同ワークショップを開催して国際共同研究推進への新たなステップとしました。さらに韓国 KISTI との日韓 HPC ウィンタースクールについても、2025年3月に本学にて開催しました。さらに、2024年度新たな取り組みとして、インド理科大学院（IISc）との共催ワークショップを開催しました。また、COVID-19の終息に伴い、今後も本センターの最大の強みである国際的研究力を一層強化していく所存です。

本小冊子は、2024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。

2025年7月吉日

計算科学研究センター長

重田 育照