

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。2021年度には、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。

ところが、2020年度開始直前から始まったいわゆる COVID-19、世界規模の新型コロナウイルス感染症パンデミックという未曾有の大問題に直面し、これらの海外主要研究機関の研究者との物理的交流が困難となりました。そして、センターからの教員・研究者の海外派遣も、海外からの研究者の招聘も物理的に実現できない事態となりました。しかし、幸いにも COVID-19 下でオンライン会議システムや情報共有システムの開発・普及が飛躍的に発展し、結果的にむしろ今まで以上にコンスタントにテレビ会議などを通じて共同研究を推進することができました。センターでも年度開始前から、全ての教員が Zoom によるテレビ会議をスムーズに行えるライセンス付与などの環境を整えて対応した結果、COVID-19 による国際共同研究への影響を最小限に抑えることができました。2021年度からは大学側が全教員への Zoom ライセンス配布が行われたため、センターでは主要教員のみにライセンス付与を絞りましたが、引き続きテレビ会議を中心とした研究活動は活発に行われています。

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

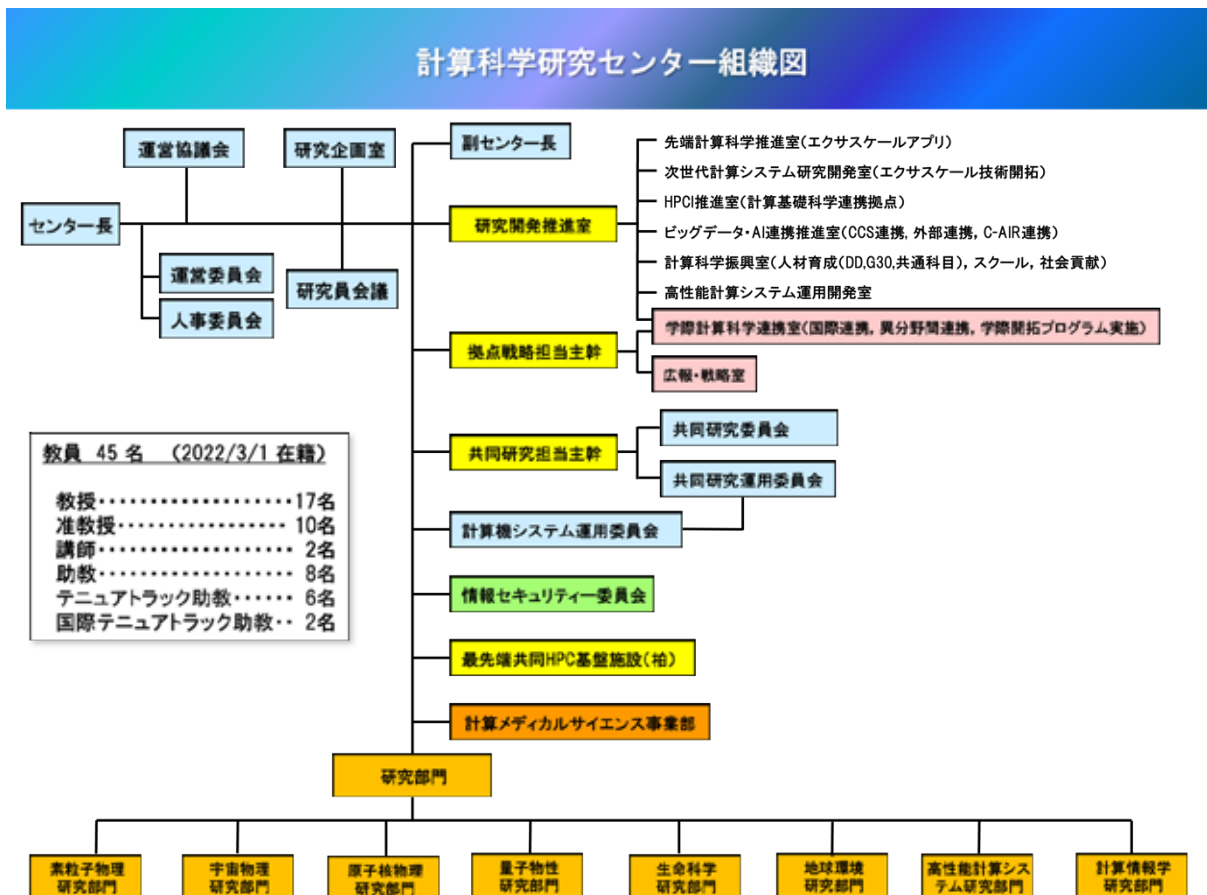
トによるコ・デザインに基づくスーパーコンピュータである Cygnus (PACS-X)の運用を開始し、GPU と FPGA を組み合わせて相補的に利用することを世界で初めて実用化した画期的な多重複合型演算加速システムを実現、運用開始しました。

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、高性能計算システム、計算情報学の 8 つの研究部門があり、45 名の専任教員が従事している他、研究員 27 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 13 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。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。大きな国際交流イベントとしては、エジンバラ大学とローレンスバークレー国立研究所とそれぞれ行っている毎年定例の国際ワークショップも開催しました。これらは COVID-19 下でのテレビ会議方式となりましたが、いつも通りの実りある議論ができ、新しい共同研究の礎も築くことができました。また、韓国 KISTI との日韓 HPC ウィンタースクールについては、両国学生の交流が大きな目的であったことから COVID-19 の影響で 2 年間延期となっていました。2022 年度からは再開する見込みです。

本小冊子は、2021 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。

2022 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 田浦 健次郎 (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	室長 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研究開発室	室長 朴 泰祐
• HPCI 推進室	室長 藏増 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 稲垣 祐司

• 計算科学振興室	室長 高橋 大介
• 高性能計算システム運用開発室	室長 建部 修見
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 健次郎 (東京大学) 副施設長 朴 泰祐
計算メディカルサイエンス事業部	事業部長 梅村 雅之

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
共同研究員	金谷 和至 (特命教授)、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、吉川 耕司
助教	Wagner, Alexander
研究員	高水 裕一、安部 牧人、福島 肇、朝比奈 雄太、 小川 拓未、菊田 智史、井上 茂樹、荻原 大樹
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

量子物性研究部門

教授	矢花 一浩（部門主任）、大谷 実
准教授	小泉 裕康、仝 暁民
講師	前島 展也
助教	佐藤 駿丞、萩原 聡
主任研究員	山田 篤志
研究員	山田 俊介、竹内 嵩、黒川 文彰 金谷 和至
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、堀 優太、原嶋 庸介、西澤 宏晃
研究員	三嶋 謙二、Kowit Hengphasatporn、森田 陸離、 宮川 晃一、下山 充紘
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）
助教	中山 卓郎
共同研究員	橋本 哲男（教授）

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	今井 優真、佐藤 拓人
共同研究員	植田 宏昭（教授）、中村 祐輔（特任助教）

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、額田 彰
助教	多田野 寛人、小林 諒平、藤田 典久
研究員	平賀 弘平
客員教授	埴 敏博（東京大学）

共同研究員 安永 守利（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 天笠 俊之（分野リーダー）
准教授 塩川 浩昭
助教 堀江 和正、Bou Savong（橋本 武彦）
研究員 太田 玲央、宮本 隆典
共同研究員 北川 博之（教授）

計算メディア分野

教授 亀田 能成（部門主任）、北原 格
助教 宍戸 英彦
研究員 鳥屋 剛毅、謝淳

2 令和三年度の活動状況

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、2021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、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継続して行いました。また、2020年から顕在化したCOVID-19下においても、自らの研究力と他機関との共同研究体制に大きな影響が出ないように、インターネット環境を最大限に利用した研究を継続しました。

筑波大学計算科学研究センターは、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、1992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名の振り替えと、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1996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、2004年（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、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」が開発されました。さらに2007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。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」が製作されました。

また、2008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、筑波大学では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を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、2013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、2016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、2022年3月末において45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、2010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、2016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。さらに、学内においてトップレベルの研究を行う格付けである「世界級研究拠点 (R1)」と位置付けられ、2020年度からは世界トップレベル研究形成拠点にも認定されています。さらに、2020年2月に行われた、6年に1度の海外有識者による外部評価の評価結果が2020年9月にまとめられ、その間のセンターの研究活動が世界レベルの成果をあげており、今後の活動にも期待するという評価を頂きました。

さらに、2021年度末には共同利用・共同研究拠点として、第3期中期目標・中期計画期間における評価が行われましたが、我々のこの6年間の研究及び教育における活動、全世界を対象とする国際協力・共同研究活動、数々の学術的成果が認められ、文部科学省よりS評価を頂くことができました。なお、理科系共同利用・共同研究期間として、文部科学省第3期中期目標・中期計画期間においてS評価を受けた拠点は全国で3つしかなく、我々の拠点がそのうちの1つであるということは、我々の研究力と拠点運営力を同省に高く評価して頂いたものと自負しております。これを励みに、より一層の努力を続けて参りたいと思います。

また、2021年度より研究開発推進活動の強化のため、新たに**高性能計算システム運用開発室**を立ち上げました。従来、センターではスーパーコンピュータの設計開発・調達・運用を計算機システム運用委員会を中心として行ってきましたが、我々がコデザインを中核とするシステム開発を自ら行うという独自性に鑑み、これらを研究開発推進室の活動の一つとして位置づけることにしたものです。今後、次世代の高性能計算システムの研究開発と、これを具現化するスーパーコンピュータの開発に一層の拍車がかかるものと期待しています。

以上のように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 令和三年度の活動方針

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 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。本プログラムは①大規模計算によって可能となる計算科学を推進する「重点課題推進プログラム」、②異分野連携・共同研究を支援する「学際開拓プログラム」からなり、学際計算科学の共同研究を推進する。公募する分野は、Particle Physics, Astrophysics, Nuclear Physics, Material Science, Chemistry, Life Science, Global Environment, Biology, Numerical Analysis, HPC System, Computational Informatics の 11 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。

「学際共同利用プログラム」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もメーリングリストを活用して行う。

また、今後のセンターの国際研究拠点化を視野に入れつつ、大型化する学際共同利用申請の処理と円滑なプログラムの運用のため、申請・審査・採択通知・プロジェクト管理等を統合的に処理し電子化し、処理システム自体の英語化を継続する。

■ 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 5 年目に入り安定した稼働率とユーザ利用率を記録した。なお、当初の運用計画に従い、同システムは 2021 年度末（2022 年 3 月末）をもって運用期間を終了し、システムは滞りなく停止された。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 56 課題の研究プロジェクトを採択し共同研究を実施した。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 251 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、参加状況を表 3 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	全体	採択件数	
		OFP利用	Cygnus利用
Particle Physics	13	13	9
Astrophysics	9	9	4
Nuclear Physics	12	11	5
Material Science	13	12	8
Chemistry	0	0	0
Life Science	7	1	6
Global Environment	4	4	2
Biology	3	2	2
Numerical Analysis	2	1	2
HPC System	7	3	7
Computational Informatics	4	0	4
合計	74	56	49

表2 共同利用・共同研究拠点の成果として発表された論文の総数

区分	令和2年度		うち国際学術誌掲載論文数	
	総数	拠点数	総数	拠点数
化学	32	(8)	32	(8)
材料科学	6	(1)	6	(1)
物理学	70	(14)	70	(14)
計算機&数学	31	(3)	29	(2)
工学	8	(2)	7	(2)
環境&地球科学	12	(3)	9	(2)
臨床医学	0	(0)	0	(0)
基礎生命科学	6	(0)	6	(0)
人文社会系	0	(0)	0	(0)
合計	165	(31)	159	(29)

※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および一般利用の参加状況

稼働状況	Cygnus	Oakforest-PACS
使用者の所属	年間利用者数	年間利用者数
	学内（法人内）	170
国立大学	85	100
公立大学	0	1
私立大学	29	10
大学共同利用機関法人	7	12
独立行政法人等公的研究機関	22	17
民間機関	6	12
外国機関	14	4
その他	18	4
合計	351	302

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 Center）との合同ワークショップ及び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を、それぞれ2021年3月に行った。当初予定では両拠点からの主要研究者の来訪を受け、本センターで開催する計画であったが、COVID-19の影響により、昨年度に引き続きテレビ会議（Zoom）形式での開催となった。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、学生及び若手研究者の直接的な対面での交流が主目的であることから、昨年度に引き続きCOVID-19の影響で休止となった。なお、本活動については2022年度に再開することでKISTIと合意している。

ナショナル・フラッグシップ・スーパーコンピュータ「富岳」を用いた研究については、2020年度より開始された「富岳」成果創出加速プログラムにおける「シミュレーションで探る基礎科学：素粒子の基本法則から元素の生成まで」「宇宙の構造形成と進化から惑星表層環境変動までの統一的描画の構築」「省エネルギー次世代半導体デバイス開発のための量子論マルチシミュレーション」の3課題にそれぞれ共同研究機関として参加し、「富岳」を用いた最先端の計算科学研究を推進した。

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事業部」において、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知の発見・統合・創造シンポジウム」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ており、2021年度もこれを継続したが、COVID-19の影響によりプログラムを1日に短縮し、全ての講演セッション及び学際共同利用プログラムの成果発表を中心としたポスター発表を、Zoomを用いたオンライン会議形式で行った。結果として合計248人と、過去最大の参加者を集める実りあるシンポジウムとなった。

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。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は継続していく予定である。

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、2016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。