

文部科学省と国立大学附置研究所・センター 個別定例ランチミーティング

第45回 筑波大学 計算科学研究センター (2023.6.9)

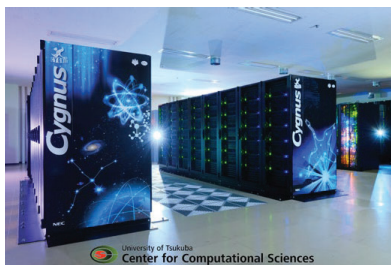
12:05-12:10(5分) : 筑波大学計算科学研究センターの概要
センター長 朴 泰祐

12:10 – 12:25(15分) : 光と物質の相互作用に関する研究と国際テニユアトラック制度
助教 佐藤 駿丞

12:25 – 12:45(20分) : 質疑応答



筑波大学計算科学研究センター 概要ご紹介 (文部科学省ランチミーティング)



筑波大学・計算科学研究センター
センター長： 朴泰祐
taisuke@ccs.tsukuba.ac.jp
<http://www.ccs.tsukuba.ac.jp>

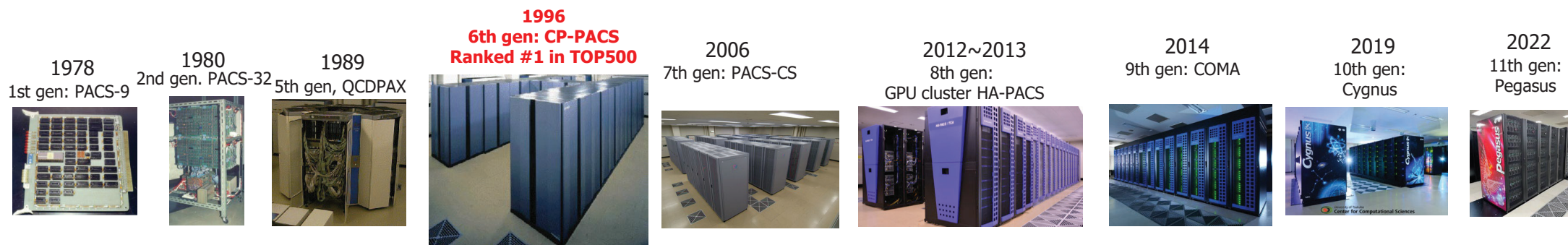


計算科学研究センター (CCS: Center for Computational Sciences)

- 沿革
 - 1992年：「**計算物理学研究センター**」として発足
 - 文科省概算要求：「学術の新たな展開のためのプログラム」採択課題『専用並列計算機による場の物理の研究』（総予算：22億円、5年間）で開発されたCP-PACSシステムの運営と研究推進のため設立
 - 2004年：国立大学法人化と同時に「**計算科学研究センター**」に改組、教員数を3倍に純増し計算科学の主要分野をカバー
 - CP-PACS以後、6世代に渡り独自開発スパコンを研究開発
CP-PACSは本センターが主導し日立製作所の協力の下で1996年後半に完成、**1996年11月期のTOP500リストで世界第1位**にランクイン（日本の大学開発システムとして唯一）
- **計算科学（Computational Science：応用）**と**計算機科学（Computer Science：システム）**の両者の研究者が日常的に共同研究を推進
 - 計算科学（応用分野）：6分野（全教員の約2/3）
 - 計算機科学（システム）：2分野（全教員の約1/3）
- **co-design（協調設計）**を発足時から推進する国立大学唯一の研究組織、**第3期中期計画評価**において**S評価（スパコン共拠点として唯一の単独機関）**



筑波大学とCCSで開発されたスーパーコンピュータ群



年	名称	性能
1978	PACS-9	7 KFLOPS
1980	PACS-32	500 KFLOPS
1983	PAX-128	4 MFLOPS
1984	PAX-32J	3 MFLOPS
1989	QCDPAX	14 GFLOPS
1996	CP-PACS	614 GFLOPS
2006	PACS-CS	14.3 TFLOPS
2012~13	HA-PACS	1.166 PFLOPS
2014	COMA (PACS-IX)	1.001 PFLOPS
2019	Cygnus (PACS-X)	2.5 PFLOPS
2022	Pegasus (PACS-XI)	6.5 PFLOPS

↓
CCP/CCS

- 応用とシステムの両サイドの研究者による**コ・デザイン (codesign)** により、実効性能重視の**独自システムを開発**
- **アプリケーション・ドリブン+最先端技術**
例：最新のPegasusはCPU・GPU・メモリの**全てが世界最先端パーツ**
- 30年に渡る研究開発とCP-PACSから始まった**成功体験の積み重ね**
- 他の国立大学基盤センター（スパコンセンター）とは**全く異なる研究・運用体制**

組織図

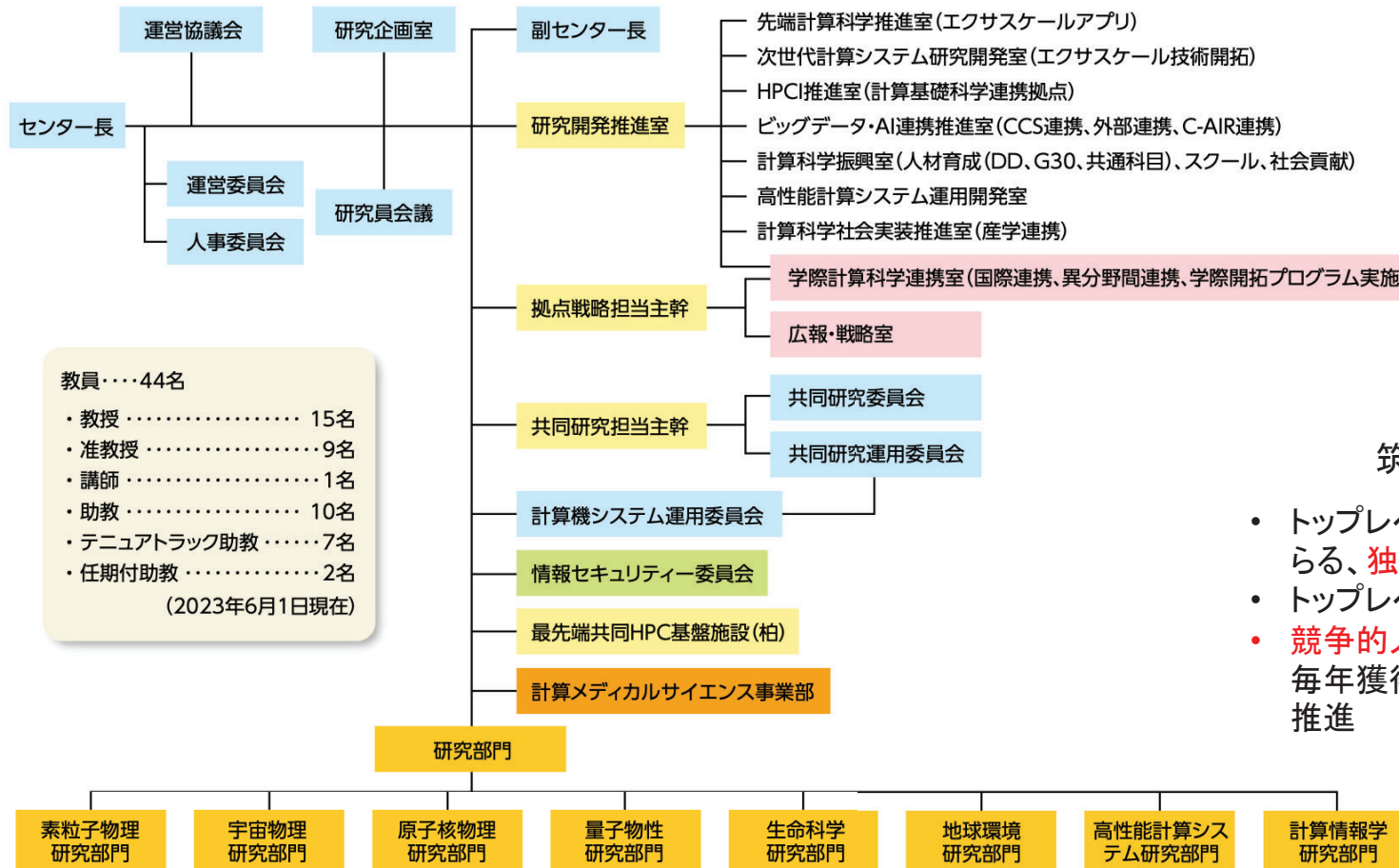


朴泰祐

矢花一浩
(応用)



建部修見
(システム)



教員・・・44名

- ・教授……………15名
- ・准教授……………9名
- ・講師……………1名
- ・助教……………10名
- ・テニュアトラック助教……………7名
- ・任期付助教……………2名

(2023年6月1日現在)

筑波大学内において

- ・ トップレベル研究組織(R1)と位置づけられる、**独立した人事組織**
- ・ トップレベルの**若手研究者率、約23%**
- ・ **競争的人事枠(戦略的人事)**枠をほぼ毎年獲得、**若手人材の獲得と育成を推進**

計算機システム開発とアプリケーションの融合による計算科学の発展

先端計算科学推進室

次世代計算システム研究開発室

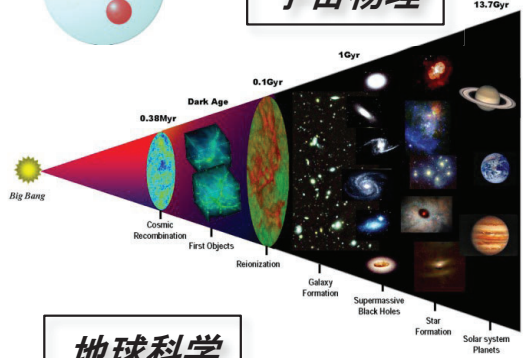
素粒子物理



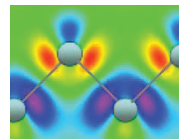
原子核物理



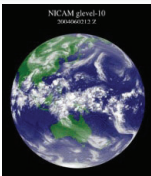
宇宙物理



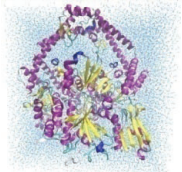
量子物性



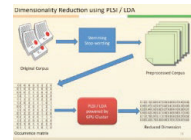
地球科学



生命科学



データベース・メディア



Cygnus



Pegasus



Oakforest-PACS

様々な研究連携(一例)

■ センター内

- 応用6分野とシステム2分野間の密な協力関係
 - 都市気象モデルCity-LESの完全GPU化によりCPU版の**8倍の性能をGPUで達成**
 - 宇宙物理の初期天体モデルシミュレーションをGPUとFPGAを駆使して**10倍の性能向上**

■ 学内連携

- 計算メディカルサイエンス事業
 - **医理工連携**を目指し、医学系・国際睡眠研究機構と連携し生命科学・睡眠データベース・3Dバーチャル手術等の最先端研究を展開

■ 国内連携

- 東京大学情報基盤センターとスパコン予算と運用を統合し**Oakforest-PACS (2016-2022)**を調達、「京」コンピュータを抜き国内最高性能スパコンを実現
- 独自の「学際共同利用プログラム」により**スパコン資源の50%以上を無償**で全国の計算科学研究者に提供(**2022年度総論文数121編+CCS内論文数133編**)

■ 海外連携

- 米国**Lawrence Berkeley National Lab.**、英国**University of Edinburgh Parallel Computing Center**、韓国**KISTI**等、世界13のトップレベル研究機関とのMOUに基づく包括的共同研究



2016年: 国内最高性能(世界第6位)
スパコンOakforest-PACS



LBNL, EPCCとの国際合同ワークショップ
(毎年開催)

国際的に認知された研究基盤

■ ACM Gordon Bell 賞を2011年、2012年に連続受賞

- スパコンを用いた応用計算を世界最高レベルの規模と性能で実現したグループに与えられる(毎年11月)
- 量子物性と宇宙物理の2分野で受賞、中心となったプログラム開発研究者はCCS所属
- FinalistではなくAwardを2度受賞をしている国立大学センターはCCSのみ

■ 世界有数のスパコン開発技術

- CP-PACS: 1996年11月のTOP500リスト(世界のスパコンランキング)で第1位
- Oakforest-PACS: 2016年11月、東大との共同調達により「京」を抜いて国内第1位
- Cygnus: 世界で唯一のGPUとFPGAのダブル演算加速装置を持つスパコン
- Pegasus: 最新のNVIDIA H100 GPUとIntel Sapphire Rapids CPUを導入、2023年6月においてH100搭載スパコンは世界に5台のみ、うち第2位の性能、2023年6月のGreen500リスト(省電カスパコン)で国内第1位とほぼ同じ電力性能

- 毎年11月に米国で開催されるSC(世界最大のスパコン・計算科学関連国際会議)において国立大学として初めて展示ブースを設営、以後約20年継続して日本を代表するアカデミアブースとして認知

メディア活動: 多くの紹介ビデオがYouTubeにあります

最新版CCS概要紹介 <https://www.youtube.com/watch?v=S9kWWWCUV5M>

CCS YouTube Channel <https://www.youtube.com/@CCStsukuba>



光と物質の相互作用に関する研究 と

国際テニュアトラック制度

筑波大学 計算科学研究センター 量子物性部門、助教

佐藤 駿丞



自己紹介

学歴

2012.3: 筑波大学 理工学群 物理学類 卒業

2014.3: 筑波大学 数理物質科学研究科 物理学専攻 博士前期課程 修了

2016.3: 筑波大学 数理物質科学研究科 物理学専攻 博士前期課程 博士

職歴

2016.4 - 2017.3: 日本学術振興会 特別研究員(PD)@筑波大計算科学研究センター

2017.4 - 2017.5: ドイツ・マックスプランク研究所(ハンブルク) 研究員

2017.4 - 2019.5: Alexander von Humboldtフェローシップ

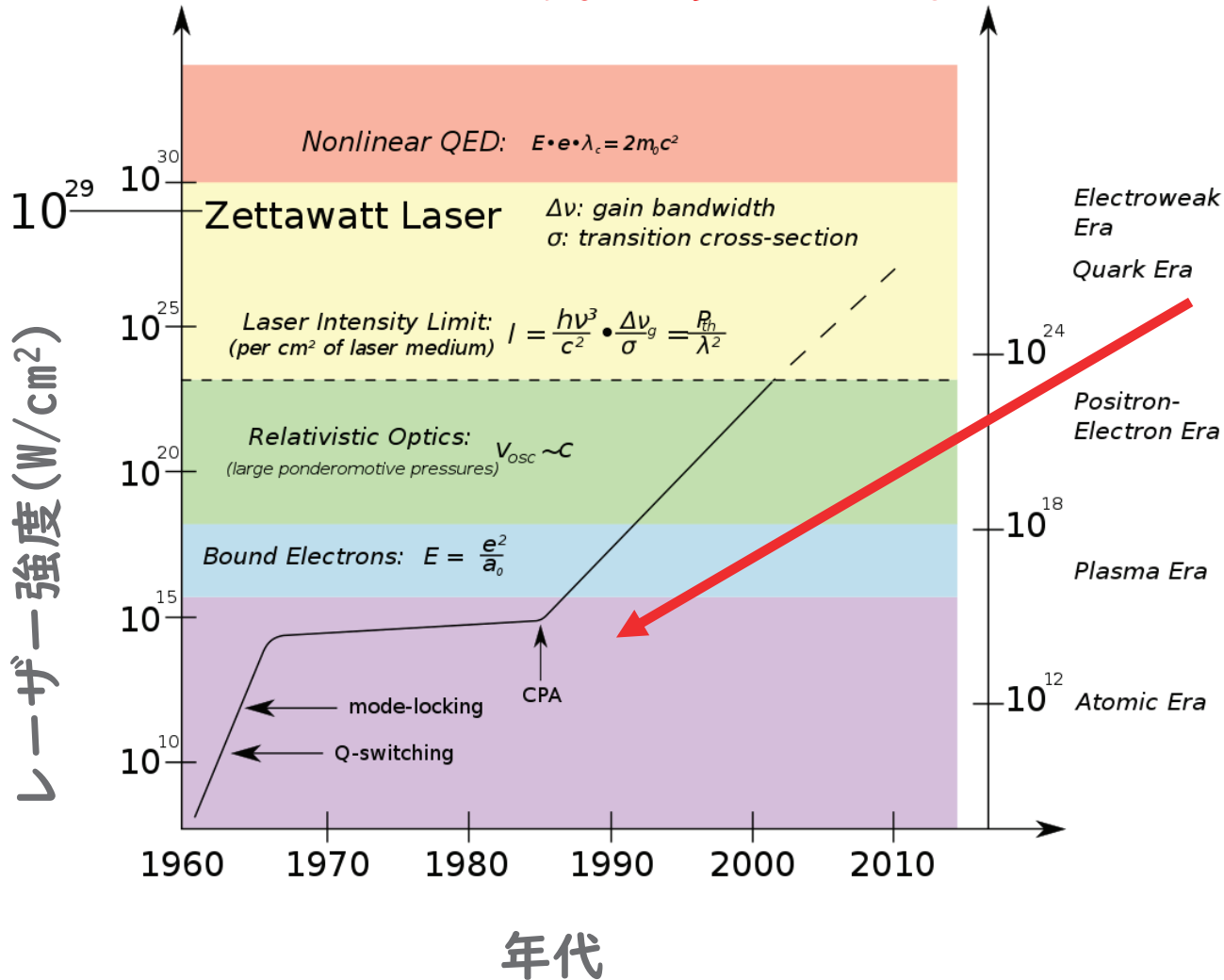
ドイツ・マックスプランク物質構造ダイナミクス研究所(MPSD)@ハンブルクで研究

2019.5 - 2023.3: 筑波大学 計算科学研究センター 国際テニュアトラック助教

2023.4 - 現在: 筑波大学 計算科学研究センター 助教

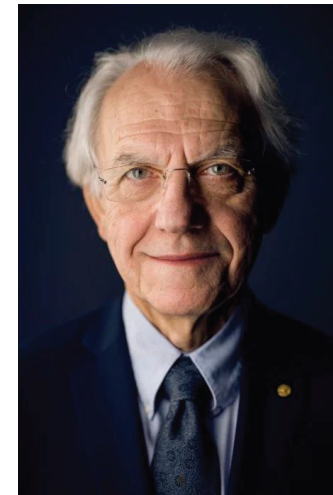
光と物質の相互作用に関する研究

レーザー強度発展の歴史



Chirped pulse amplification (CPA)

2018年 ノーベル物理学賞



G. Mourou

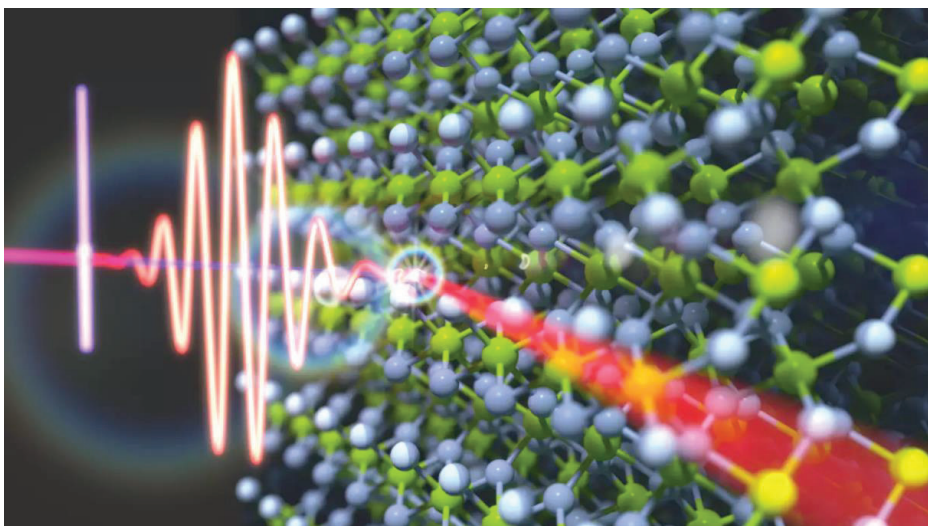


D. Strickland

今日では、**テーブルトップ**の装置で、**光によって物質を制御**するための環境が整うようになってきた。

目標：光による物質の制御

強く短い光で物質を駆動！



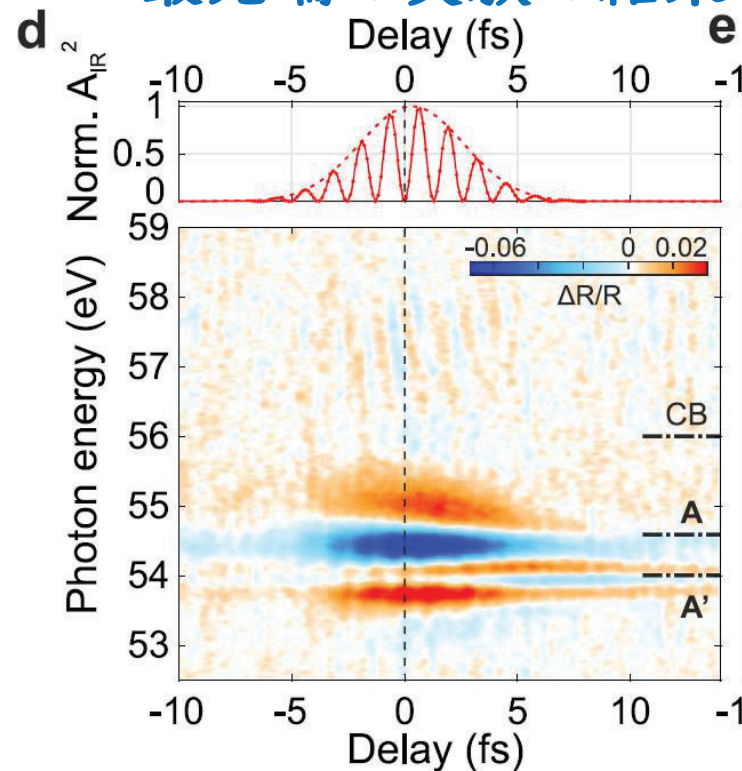
© Matteo Lucchini, Politecnico di Milano

光によって物質内の電子やイオンを超高速制御し、望んだ機能や現象を実現！

例. 超高速光エレクトロニクスの実現
(一人一台、スパコン級の演算性獲得)

M. Lucchini, S.A. Sato et al., Nat. Commun.12, 1021 (2021)

最先端の実験の結果



- ◆ サブフェムト秒 (10^{-15} 秒) の時間スケールで物質の光学応答が変化！
- ◆ ミクロな機構は？

量子力学に基づくミクロな電子ダイナミクス計算

- 実験結果のようなマクロな情報だけでは、現象の背後にあるミクロな物理機構を理解するのは難しい。
- 光によって自在に物質を制御する学理を構築するにはミクロな理解が不可欠

ミクロな世界の電子の運動を記述する方程式(時間依存密度汎関数理論)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} u_{bk}(\mathbf{r}, t) = \left[\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(t) \right)^2 + V_{ion} + \int d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + V_{XC}[\rho(\mathbf{r}, t)] \right] u_{bk}(\mathbf{r}, t)$$

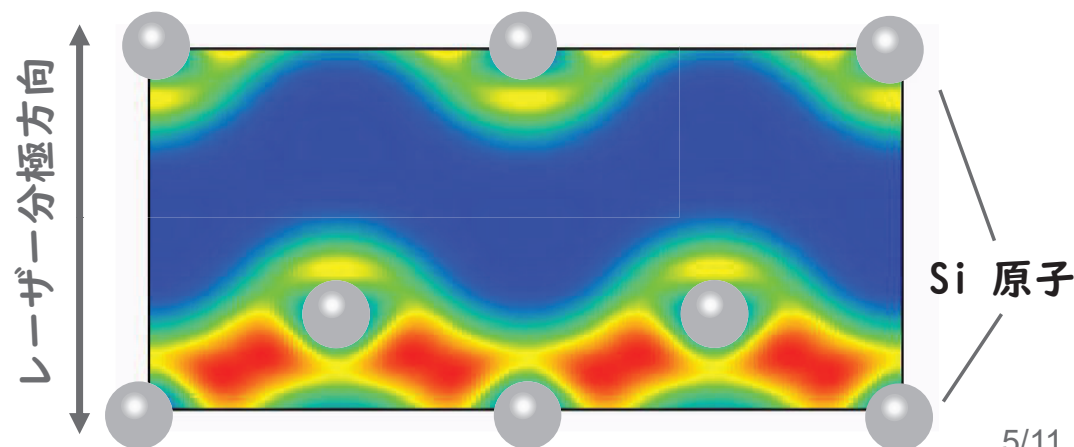


スパコンを利用して、一生懸命にミクロな電子の運動を計算！



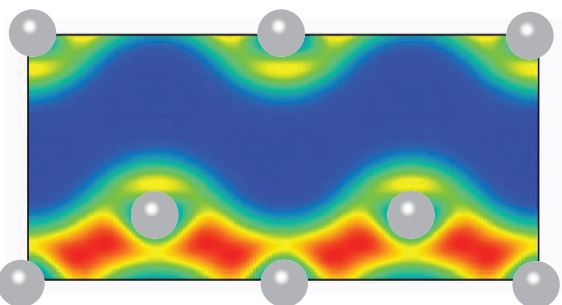
得られた情報を基に、マクロな現象の背後にあるミクロな機構の理解を発展！

Siの電子密度



目標：光による物質の制御と将来の展望

量子力学に基づく
ミクロな理解



光によって物質を自在に制御する学理を構築！

1. 光によって物質内を流れる電流を超高速に制御

- ギガ(十億)ヘルツで動作する現在のエレクトロニクスを超えた将来の超高速ペタ(千兆)ヘルツエレクトロニクスの実現へ！
- 制御された電流からの光の放射を利用した、新奇な光源の開発、及び次世代光学の開拓！

2. 光による化学反応の制御

- 光によってターゲット反応物の生成率を自在に増大・抑制(欲しいものを増やし、不要なものを減らす！)
- 光駆動非平衡状態を介した新奇な化学反応経路を開拓し、これまで実現できなかった反応を実現！

3. レーザーによる精密微細加工

- ナノスケールあるいは原子層単位での極限的構造制御！
- 自在な微細加工による機能付加の最適化！

ペタヘルツエレクトロニクス実現に向けた微視的機構解明に関するこれまでの論文

赤字の論文(超高速制御関連)

アト秒(10^{-18} 秒)光物理に関する研究

A. Sommer, E. M. Bothschafter, S. A. Sato et al., Nature 534, 86 (2016)

M. Lucchini, S. A. Sato et al., Science 353, 916 (2016)

S. A. Sato et al., Phys. Rev. B 99, 214302 (2019)

F. Schlaepfer, M. Lucchini, S. A. Sato et al., Nature Physics 14, 560 (2018)

M. Volkov, S. A. Sato et al., Nature Physics 15, 1145 (2019)

S. A. Sato, et al. New J. Phys. 21, 093005 (2019)

M. Lucchini, S. A. Sato et al., Nat. Commun. 12, 1021 (2021)

S. A. Sato, Comput. Mater. Sci. 194, 110274 (2021)

S. A. Sato, A. Rubio, New J. Phys. 23, 063047 (2021)

A. Niedermayr, M. Volkov, S. A. Sato et al., Phys. Rev. X 12, 021045 (2022)

W. Mao, Angel Rubio, S. A. Sato, Phys. Rev. B 106, 024313 (2022)

Z. Schumacher, S. A. Sato et al., PNAS. 120, e2221725120 (2023)

青字の論文(電流制御関連)

光駆動非平衡系における輸送現象に関する研究

-
- ◆ 2016年5月にドイツに移動した後(7年間)に上記の論文を含む**60編**の論文を出版
 - ◆ 様々なプロジェクトに関わらせてもらうことが出来、**研究者として成長するために実りの多い7年**だった

筑波大学 国際テニュアトラック制度


制度趣旨

参考URL: <https://ura.sec.tsukuba.ac.jp/tenure-track>

筑波大学は、研究大学強化促進事業の一環として、国際テニュアトラック制を実施しています。本制度は、優れた若手研究者を国際テニュアトラック教員として雇用し、テニュアトラック期間内の2年間以上にわたって海外超一流研究者のもとへ派遣するシステムです。競争的環境の下で最先端研究を行う能力を育成するとともに、**国際共同研究の強化、国際共著論文の増加、海外超一流研究者との人脈形成**などをはかり、筑波大学の研究力を向上することを目的としています。

特色

本制度は、**若手研究者が帰国後の不安を感じずに海外の超一流研究室で研究に専念できる**という点で、特色あるプログラムです。



自分の経験を振り返ってみると、これらの**趣旨や特色が実際に実現されていた制度**であり、帰国後(テニュア獲得後)の発展を視野に入れた**長期的な視点での研究・教育・ネットワークの強化に取り組むことが出来た**。
これは**時限付き(短期)の支援とは質的に異なる**。

マックス・プランク研究所@ハンブルクでの研究の様子

◇ゲストを含めて40-50人程の様々な専門家が研究を行っている



佐藤駿丞
(アト秒物理)

↑↓ 光駆動系の
輸送現象



Hannes Hübener
(光ドレス状態)



Director, Rubio教授

光駆動系の緩和現象

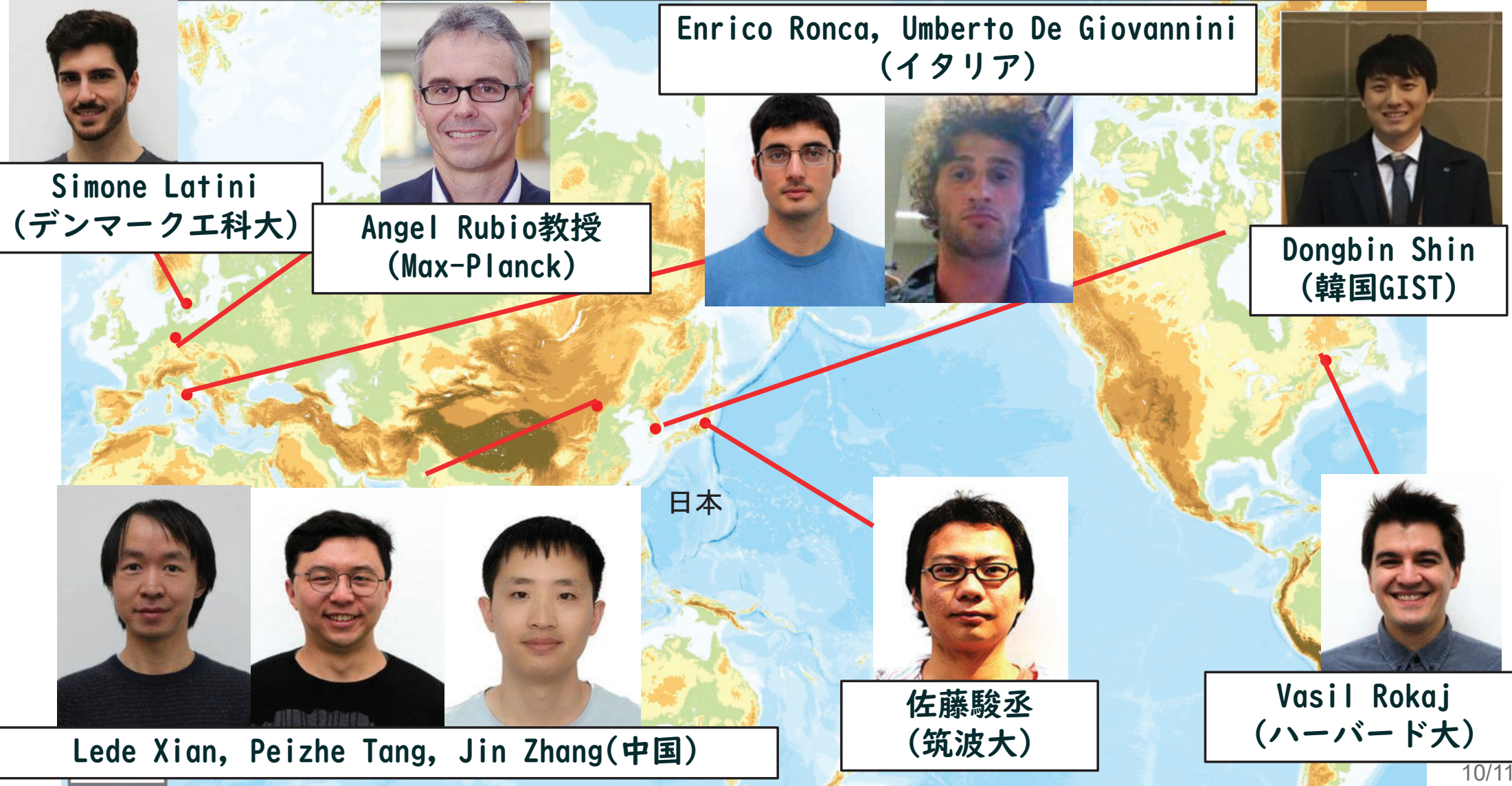


Aaron Kelly
(非平衡ダイナミクス)

特色

- ◆ 様々な分野の専門家が一か所に集まっている
- ◆ 十分な研究時間が確保されている(朝から晩まで研究!)
- ◆ 気軽に他の専門家と議論できる環境
- ◆ 解きたい問題によっては、Rubio教授がグループ内外の人と繋いでくれて共同研究がスタート!(ネットワーク拡張をサポートしてくれる幅広い知見を持った人の重要性)

国際研究ネットワークの発展(異動したMax-Planckの同僚達)



まとめ

研究

- ◆ 光による自在な物質制御を目指して、光が駆動する物質の非平衡ダイナミクスを量子力学に基づく微視的な計算によって調べている(精密で複雑な計算にはスパコンの利用が必要不可欠！)
- ◆ 光が駆動する現象のミクロな機構が解れば、光によって電流や化学反応、微細加工の制御を実現するための基盤を構築できる！

若手支援・国際研究ネットワーク

- ◆ 国際テニュアトラック制度の経験から、帰国後の方向性が見えていることで「長期的な視点で国際的な共同研究やネットワークを発展させることができる」と感じた。
- ◆ 「十二分な研究時間」と「多数の専門家と気軽に議論できる環境」が、若手研究者が力を伸ばしていく上で大事だったと感じた。
- ◆ 環境があれば自発的に共同研究は発生するが、他方で需要と供給についてよく理解した人が間に入ってコーディネートすることで、質の高い共同研究が生まれる機会が増えると感じた(ネットワーク拡張をサポートしてくれる人の重要性)。