



筑波大学

計算科学研究センター

平成21年度 年次報告書

平成22年10月

筑波大学計算科学研究センター

目次

1. 平成21年度 基本方針、重点施策・改善目標等	4
1.1. 基本方針	4
1.2. 重点施策・改善目標等	4
2. 平成21年度 実績報告	7
2.1. 重点施策・改善目標等の達成状況	7
2.2. 教育・研究、大学運営上の特色ある取組及びそれらの活動を円滑に進めるための工夫	9
2.3. 自己評価と課題	10

各研究部門の報告

1. 素粒子宇宙研究部門	13
1.1. 素粒子分野	13
1. メンバ	13
2. 概要	13
3. 研究成果	13
4. 研究業績	19
5. シンポジウムの開催	25
6. 受賞	25
1.2. 宇宙分野	26
1. メンバ	26
2. 概要	26
3. 研究成果	26
4. 科研費採択状況	34
5. 学位論文	35
6. 研究業績	36
7. 連携・国際活動・社会貢献、その他	46
2. 物質生命研究部門	48
2.1. 物質工学理論グループ	48
1. メンバ	48

2.	概要	48
3.	研究成果	48
4.	研究業績	52
2.2.	生命物理グループ	55
1.	メンバ	55
2.	概要	55
3.	研究成果	55
4.	研究業績	62
2.3.	計算物性グループ	66
1.	メンバ	66
2.	概要	66
3.	研究成果	66
4.	研究業績	72
2.4.	原子核理論グループ	80
1.	メンバ	80
2.	概要	80
3.	研究成果	80
4.	研究業績	83
3.	地球生物環境研究部門	88
3.1.	地球環境学分野	88
1.	メンバ	88
2.	概要	88
3.	研究成果	88
4.	研究業績	91
3.2.	生物分野	96
1.	メンバー	96
2.	概要	96
3.	研究成果	96
4.	研究業績	98
4.	超高速計算システム研究部門	102
1.	メンバ	102
2.	概要	102
3.	研究成果	102

4. 研究業績	107
5. 計算情報学研究部門.....	110
5.1. 計算知能分野	110
1. メンバ.....	110
2. 概要	110
3. 研究成果	110
4. 研究業績	116
5.2. 計算メディア分野.....	123
1. メンバ.....	123
2. 概要	123
3. 研究成果	124
4. 研究業績	132
5. 連携・国際活動・社会貢献、その他	134

1. 平成21年度 基本方針、重点施策・改善目標等

1.1. 基本方針

- (1) 基礎科学・物質科学・生命科学・環境科学における重要課題に対し、大規模シミュレーション・大規模データ解析等を中心とする計算科学の方法による研究を推進・発展させる。
- (2) これを実現するための超高速計算機システムの開発・製作及び超高速ネットワークに関する計算機科学・情報科学の先進的研究を推進・発展させる。
- (3) 計算科学分野における、国際的研究拠点機能並びに全国共同利用研究センターとしての研究拠点機能を提供し、当該分野における国内外の共同研究を推進・発展させる。

1.2. 重点施策・改善目標等

- (1) 計算科学研究推進事業・大型プロジェクト研究の推進

超並列クラスタシステム PACS-CS による計算科学を推進する特別教育研究経費プロジェクト「計算科学による先導的知の創出推進事業」を実施、進行中の大型プロジェクトの諸研究と、相互に有機的に関連させて推進する。

- (2) 次世代スーパーコンピュータ開発プロジェクトへの貢献

開発実施主体である理化学研究所と、「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト推進のための連携・協力に関する基本協定に基づき、完成に向けた具体的な課題について共同研究を推進する。

- (3) 共同研究・共同利用体制の整備、共同利用・共同研究拠点への申請

PACS-CS および T2K-Tsukuba システムの全国共同利用のためのプログラム「学際共同利用プログラム」を実施し、全国の計算科学の研究の推進に貢献する。共同利用・共同研究拠点への申請を受けて、拠点整備を行う。

- (4) 計算科学に関する人材育成への取り組み

計算科学に関する大学院共通科目を実施。前年度から始めた計算科学についてのデュアルディグリティ制度を本格的に実施する。

- (5) 計算基礎科学に関する連携、および国際連携の推進

前年度、KEK、国立天文台と締結し計算基礎科学連携拠点について協定に基づき、連携を進めるとともに、国際的な連携を開拓・推進する。

(6) 次期中期計画に向けての将来計画策定

将来計画検討委員会を設け、計算科学の研究拠点としての、次期中期計画期間中の計画を策定する。

(7) 重点とする研究目標

センター全体としては、研究推進事業、大型プロジェクト等を中心に、基本方針に掲げる計算科学の学際的研究の遂行と成果の実現を図る。各部門の目標は次のとおりである。

素粒子宇宙研究部門: 物理的なクォーク質量で、体積や格子間隔を変えた計算をさらに進行させる。近似無しゲージ配位を使った核力の計算を引き続き行い完了させる。FIRST プロジェクトをさらに推進し、第一世代天体の質量がその後の宇宙構造形成に与える影響について、詳細な計算を行う。

物質生命研究部門: 大規模並列計算により、ナノ構造体の持つ特徴的物性の解明、次世代半導体技術基盤の創成、光支援等による高速ダイナミクス解明、バイオ機能と構造のダイナミクスの相関の解明、等の研究を行う。

地球生物環境研究部門: 大気大循環モデル NICAM を用いた北極域のプロセス研究を発展させる。都市豪雨に対する都市の効果を数値モデル WRF を用いて評価する。クリプト藻類・ハプト藻類に進化的に近縁であると考えられる生物種から網羅的に遺伝子配列を取得し、そのデータをもとに大規模系統解析をおこなう。

超高速計算システム研究部門: PACS-CS, T2K-Tsukuba, FIRST という大規模・超高性能計算システムを学際共同利用を中心とする応用プロジェクトで最大限の効率で活用できるような利用技術の研究及び応用グループへの支援を行う。また、グリッド技術の実応用として、他大学の情報基盤センターとのスパコン運用連携を進める。

計算情報学研究部門: 大規模データ、センシングデータの管理・統合や科学データの高度利用基盤に関する研究開発を他部門と連携して推進する。大量センサデータの解析・加工、人間への情報提示に関する研究開発と実世界計算情報学の基盤形成を他部門とも協力して推進する。

運営・予算面での改善目標・課題については以下にあげる。

- (1) 運営体制の整備: 研究体制の充実と強化に対応して研究企画・財務・総務広報等の執行体制及び事務体制の高度化と効率化を図る必要がある。特に次期スパコンの稼動に当たり運用支援体制の強化を図る必要がある。

- (2) 予算面での課題:全学的な研究システムの整備の中で、基盤教育研究経費および間接経費の配分方式について、研究センターの位置づけに関わる課題として引き続き検討の必要がある。

2. 平成21年度 実績報告

2.1. 重点施策・改善目標等の達成状況

(1) 計算科学研究推進事業・大型プロジェクト研究の推進

- 超並列クラスタシステム PACS-CS による計算科学を推進する特別教育研究経費プロジェクト「計算科学による先導的知の創出推進事業」を実施した。招聘、研究集会支援などを制度化し、実施した。
- 計算宇宙物理学のためのプロジェクト FIRST は、科学研究費(基盤 S)で推進した。
- 次世代 IT 基盤「e-サイエンス実現のためのシステム統合・連携ソフトウェアの研究開発」において、並列プログラミング言語やグリッドの研究を推進した。
- その他、JST CREST、科学振興調整費プロジェクト、科研費による大型プロジェクトなどを推進。

(2) 次世代スーパーコンピュータ開発プロジェクトへの貢献

- 国の次世代スーパーコンピュータプロジェクトの開発実施主体である理化学研究所と、「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト推進のための連携・協力に関する基本協定」に基づき、共同研究を実施、センターにプロジェクトチームを構成し、定期的に研究打ち合わせをしつつ実施中。
- センター教員3名が理化学研究所客員研究員に委嘱され、次世代スーパーコンピュータの開発に貢献している。さらに、センター教員2名が計算科学研究機構準備室室員として、計画策定に参画した。

(3) 共同研究・共同利用体制の整備

- 超並列クラスタ、スパコン T2K-tsukuba、融合型クラスタ FIRST を学際共同利用プログラムの元で公募プロジェクトおよび全国共同利用を実施した。
- 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、平成22年度から活動開始することとなった。

(4) 計算科学に関する人材育成への取り組み

- 計算科学に関する大学院共通科目を実施。
- 計算科学についてのデュアルディグリー制度を実施した。成23年度からはグローバル30での英語マスターコースを計画している。

(5) 計算基礎科学に関する連携、および国際連携の推進

- KEK,天文台との素粒子・原子核・宇宙分野の「計算基礎科学連携拠点」について、運営を進めた。
- 「計算基礎科学連携拠点」として、「次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム」実施可能性調査実施機関に採択された。(分野5物質と宇宙の起源と構造、代表:青木慎也)
- 国際連携の一つとして、エジンバラ大学並列処理センター(EPCC)とワークショップを開催し、連携を進めた。

(6) 次期中期計画に向けての将来計画策定

- 次期中期目標・計画期間に向けての計画の策定を取りまとめた。

(7) 重点とする研究目標

センター全体としては、上記(1)に記した拠点形成事業、大型プロジェクト等と(3)に記した公募プロジェクト「学際共同利用プログラム」の実施を中心に、計算科学の学際的研究の遂行と成果の実現を図り、さらに、(2)に記した次世代スーパーコンピュータへの貢献に努力を傾注した。各部門の成果は次のとおりである。

素粒子宇宙研究部門:物理的なクォーク質量で、格子 QCD 大規模計算を行い、Reweighting 法を用いてパラメタの調整を正確に行えるようにした。近似無しの場合のゲージ配位を使った核力の計算を進め、クォーク質量依存性を研究した。FIRST プロジェクトを推進し、ダークマターカスプが第一世代天体の質量決定に果たす役割を明らかにした。また、6次元ボルツマン方程式の数値解法を開発し実装した。

物質生命研究部門: 実空間密度汎関数法(RSDFT)、実時間密度汎関数法(TDDFT)、QM/MM 法等の大規模並列計算プログラムを開発し、次世代半導体デバイスとして期待されている Si ナノワイヤの電子状態計算の実現、分子等の光支援のダイナミクス の 解 明、原子レベルでのバイオ機能発現機構の提案等の物質生命分野において極めて重要な知見を得ることに成功した

地球生物環境研究部門:大気大循環モデル NICAM を用いた北極域のプロセス研究を発展させた。都市豪雨に対する都市の効果を数値モデル WRF を用いて評価した。クリプト藻類・ハプト藻類に進化的に近縁であると考えら得れる生物種から網羅的に遺伝子配列を取得し、そのデータをもとに大規模系統解析をおこなった。

超高速計算システム研究部門:センターのスパコン群における各種計算科学応用プログラムに対し、数値解析的手法・並列通信最適化等による性能向上を行い、応用分野研究を助成した。また、T2K 連携機関を始めとする各大学情報基盤センターとのスパコン・グリッド運用基盤を整備し、相互運用体制を整えた。

計算情報学研究部門:大規模データ、センシングデータの管理・統合や科学データの高度利用基盤に関する研究開発を他部門と連携して推進した。大量センサデータの解析・加工、人間への情報提示に関する研究開発と実世界計算情報学の基盤形成を他部門とも協力して推進した。

2.2. 教育・研究、大学運営上の特色ある取組及びそれらの活動を円滑に進めるための工夫

(1) 分野・部門間の連携研究の推進

当センターでは、科学諸分野と計算機科学・情報科学の連携・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る。素粒子分野と超高速計算システム分野、地球環境分野と計算知能分野などが具体的な研究課題についてワーキンググループを設置して定期開催を行い、共同研究を進めている。今年度からは、次期マシン開発に向けて、応用分野と高性能計算機部門が中心となって、演算加速機構に関する研究会を定期的に開催した。

(8) 大規模計算設備を利用する「学際共同利用プログラム」の実施

全国共同利用施設として、大規模クラスタ PACS-CS と T2K-tsukuba システムを利用する公募プロジェクト「学際共同利用プログラム」を実施している。この公募プロジェクトはセンターのミッションの中心的な活動として、今後とも積極的に推進していく。

(9) 関連組織との連携の推進

これまで、T2K-tsukuba システムの導入を機会に、東京大学、京都大学との連携を推進している。この取り組みは、グリッド技術を使った連携や、新規のソフトウェア開発プロジェクト(e-science プロジェクト)などに発展している。また、素粒子・原子核・宇宙分野の計算科学の連携として、KEK と国立天文台との間で「計算基礎科学連携拠点に関する協定」を締結し、連携を進めている。この組織を中心として、「次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム」実施可能性調査実施機関に採択された。

(10) 人材育成への取り組み

計算科学に関する人材育成への取り組みとして、計算科学に関する大学院共通科目やデュアルディグリー制度などを実施している。計算科学に関する拠点を強化する取り組みとして、これからも進めていきたい。

(11) 国際連携の推進

国際連携については、センターの活動の国際化の活動として積極的に進めている。当該年度においては英国エジンバラ大学並列処理センターとのワークショップを開催するなど、連携を開始している。

2.3. 自己評価と課題

(1) 自己評価

今年度においては、これまでの実績を認められ、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、平成22年度から活動開始することとなった。また、前年度から素粒子・原子核・宇宙分野の計算科学の連携として、KEKと国立天文台との間で組織した「計算基礎科学連携拠点」を核に、「次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム」実施可能性調査実施機関に採択された。エジンバラ大学との連携を始めるなど、国内外での拠点の強化に努めた。その一方で、新規のマシン開発のための予算獲得など、今年度策定した将来計画に沿って更なる発展を目指していく必要がある。

(2) 課題

① 新規マシン開発のための概算要求

本センターは計算科学と計算機科学を連携・協働させ、計算基盤の能力および機能の飛躍的な高度化を図り、計算科学による諸課題の研究を推進してきた。このアプローチ、すなわち計算科学と計算機科学の協働により最先端を開拓するための根幹を成す部分であり、このためのマシン開発の予算獲得は喫緊の課題である。

② 次世代スパコン、全国的な計算科学コミュニティの中の位置づけの確保

これまでと比べて飛躍的な計算能力を持つ次世代スパコンが稼動し、その下に計算科学研究機構の設立が計画されている中で、当センターがこれまで以上に存在感を発揮し、全国の大学の中で唯一の計算科学の共同利用・共同研究拠点として、最先端の計算科学をリードしていく体制と戦略が急務である。

③ 予算面での課題

外部資金の間接経費の配分方式は、全学的な研究システムの整備の中で、研究センターの位置づけに関わる課題として引き続き検討の必要がある。

④ 運営体制の課題

センターの充実、T2k-tsukuba システムの稼動、連携の拡大、次世代スパコン戦略プログラムの実施に伴い、研究企画・財務・総務広報等のそれぞれの面で検討事項・処理事項と事務量が大幅に増大した。これらに対応して高い研究活動を維持・発展するには、センター長・部門長を中心とするセンターの執行体制の検討が必要である。また厳しい職員教員数流動化が必要とされる中で効率的な事務体制の構築の必要がある。