

目次

まえがき	- 2 -
1 センター組織と構成員	- 3 -
2 平成 29 年度の活動状況	- 7 -
3 各研究部門の報告	- 13 -
I. 素粒子物理研究部門	- 13 -
II. 宇宙物理研究部門	- 38 -
III. 原子核物理研究部門	- 61 -
IV. 量子物性研究部門	- 85 -
V. 生命科学研究部門	- 104 -
V-1. 生命機能情報分野	- 104 -
V-2. 分子進化分野	- 121 -
VI. 地球環境研究部門	- 136 -
VII. 高性能計算システム研究部門	- 155 -
VIII. 計算情報学研究部門	- 208 -
VIII-1. データ基盤分野	- 208 -
VIII-2. 計算メディア分野	- 236 -

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、2017 年に設立 25 周年の節目の年を迎えました。これを記念し、設立 25 周年記念シンポジウム「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウムー計算科学の発展と将来ーを開催し、これまでの取り組みを総括すると共に、今後の計算科学の発展を展望しました。

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。

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および超高速ネットワーク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っています。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、37 名の専任教員が従事している他、任期付助教 4 名、研究員 25 名がいます。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 10 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。異分野間連携として、ポスト「京」重点課題・萌芽的課題の推進や、「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。2017 年には、「計算メディカルサイエンス推進事業」を創始し、計算生体分子医科学、睡眠ビッグデータ解析・自動診断、3DCG バーチャル手術、計算光バイオイメージングによる医学分野との連携を開始しました。

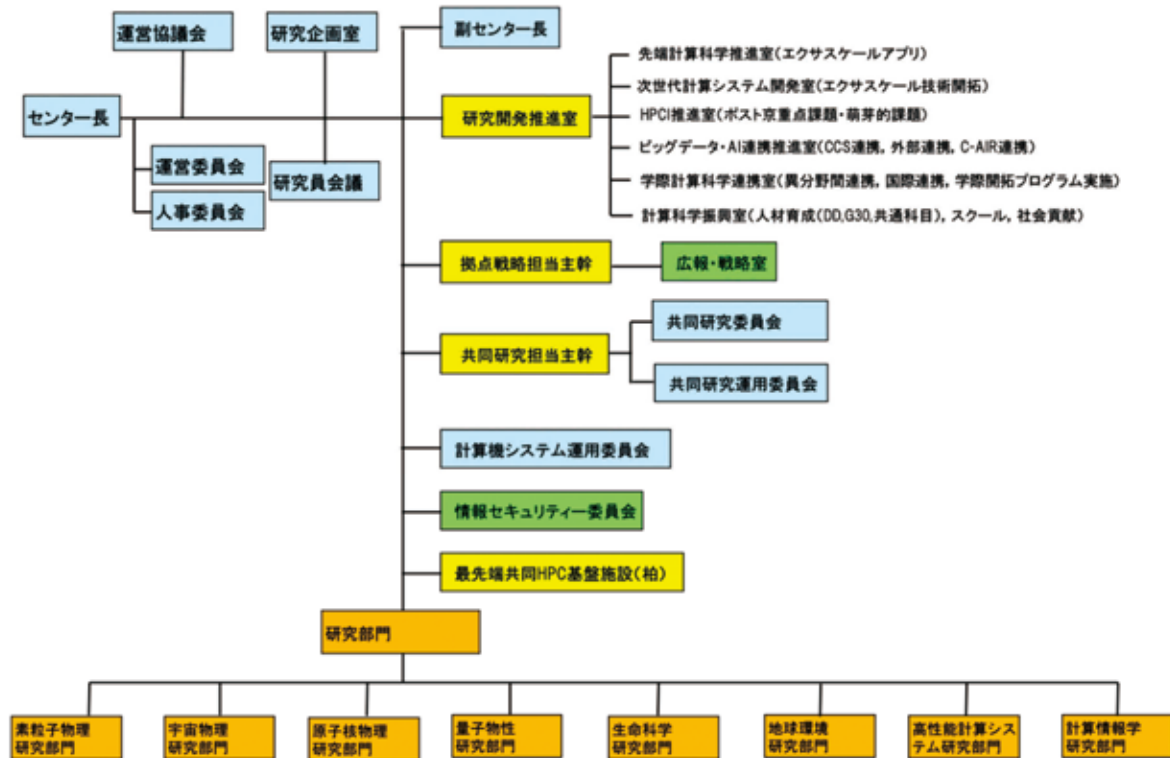
本小冊子は、平成 29 年度の計算科学研究センターの活動内容をまとめたものです。ご高覧いただければ幸甚に存じます。

平成 30 年 6 月吉日

計算科学研究センター長
梅村 雅之

1 センター組織と構成員

計算科学研究センター組織図



組織人員・教員一覧リスト

センター長	梅村 雅之
副センター長	朴 泰祐
運営協議会	委員長 中村 宏（東京大学）
運営委員会	委員長 梅村 雅之
人事委員会	委員長 梅村 雅之
研究企画室	室長 梅村 雅之
研究員会議	議長 梅村 雅之
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開発室	室長 朴 泰祐
• HPCI 推進室	室長 蔵増 嘉伸
• ビッグデータ・AI 連携推進室	室長 北川 博之

- 学際計算科学連携室 室長 高橋 大介
- 計算科学振興室 室長 北川 博之

拠点戦略担当主幹 梅村 雅之

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 朴 泰祐

情報セキュリティ委員会 委員長 梅村 雅之

最先端共同 HPC 基盤施設施設長 中村 宏（東京大学） 副施設長 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、山下 巧
 客員教授 青木 慎也（京都大学）
 共同研究員 金谷 和至（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）
 准教授 森 正夫
 講師 吉川 耕司
 助教 Wagner, Alexander、古家 健次
 研究員 三木 洋平、田中 賢、高水 裕一、安部 牧人、桐原 崇亘、五十嵐 朱夏（数理物質科学研究科）
 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 鷲山 広平、野村 昂亮、Guillaume Scamps

量子物性研究部門

教授	矢花 一浩（部門主任）
准教授	小泉 裕康、全 暁民、小野 倫也
講師	前島 展也
研究員	植本 光治、山田 篤志、山田 俊介、Arqum Hashmi
客員准教授	押山 淳（東京大学）
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）
助教	庄司 光男、栢沼 愛
研究員	佐藤 竜馬、原田 隆平、鬼頭（西岡） 宏任、Bui Thi Kieu My
共同研究員	広川 貴次（教授）

分子進化分野

教授	稲垣 祐司（分野リーダー）
研究員	石谷 佳之、矢崎 裕規（生命環境系）
共同研究員	橋本 哲男（教授）
特任助教	湯山 育子（生命環境系）

地球環境研究部門

教授	田中 博（部門主任）、日下 博幸
助教	松枝 未遠
研究員	池田 亮作、Doan Quang Van、山上 晃央
共同研究員	植田 宏昭（教授）

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
准教授	川島 英之
助教	多田野 寛人、小林 諒平
研究員	田中 昌宏、Mohamed Amin Jabri、藤田 典久
客員准教授	塙 敏博（東京大学）
共同研究員	安永 守利（教授）、和田 耕一（教授）、櫻井 鉄也（教授）、山口 佳樹（准教授）、今倉 暁（助教）

計算情報学研究部門

データ基盤分野

教授	北川 博之（部門主任）、天竺 俊之
准教授	
助教	塩川 浩昭
研究員	Salman Ahmed Shaikh、駒水 孝裕、Savong Bou、堀江 和正

計算メディア分野

教授	亀田 能成（分野リーダー）
准教授	北原 格
助教	宍戸 英彦
共同研究員	白川 友紀（特命教授）

2 平成 29 年度の活動状況

2.1 計算科学研究センター25 年の歩み

筑波大学計算科学研究センターは、2017 年に設立 25 周年の節目の年を迎えました。これを記念し、設立 25 周年記念シンポジウム「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウムー計算科学の発展と将来ーを開催し、計算科学・計算機科学のフロンティア、分野間の連携を幅広く議論し、今後の発展を展望しました。



筑波大学計算科学研究センターは、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、平成 4 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 年後の平成 8 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、これは今でいう**コデザイン**の先駆けでも

ありました。センター設立と CP-PACS の開発に関わる大変な労苦と様々なエピソードは、センターホームページにも掲載している小冊子「超並列計算機 CP-PACS」に詳しく書かれていますので、是非ご笑覧ください。

計算物理学研究センターの時代は、研究分野としては、素粒子物理分野を主体とし宇宙物理分野が新設される形で始まりましたが、CP-PACS 完成後に共同利用による物性物理分野も加わりました。その後、ちょうど国立大学法人化の平成 16 年に改組し、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、平成18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。さらに平成19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き、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。平成23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、平成 20 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 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、筑波大では T2K-Tsukuba を調達しました。これは、センターのメニーコア型超並列計算機 COMA の導入につながりました。そして、この流れを受けて、平成 25 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が、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)」を設置しました。そして、昨年 (平成 28 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。

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、34 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、平成 22 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、平成 28 年度には、予算執行や人事を独立しておこな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。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 平成 29 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、「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推進事業」を中心に、異分野間連携を強化し、国際共同研究拠点化に向けた研究体制の構築を図る。

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), COMA (PACS-IX) (393 ノード, 1,001TFlops) 及び GPU 融合型システム HA-PACS/TCA (64 ノード, 364TFlops) 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」、③本センターが開発したプログラムやシステムを用いて研究を共同で推進する「共同研究推進プログラム」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、素粒子、宇宙、原子核、物質科学、生命、地球環境、生物、化学、超高速計算システム、計算情報学、数値解析の 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。

「学際共同研究プログラム」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のメーリングリストを活用して行う。

■ 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、昨年度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 のストレージシステムが、11 月の IO-500 リストにおいて、世界最高性能システムとして認定された。学際共同利用プログラムにより、素粒子分野、宇宙分野、原子核分野、物質科学分野、生命分野、地球環境分野、生物分野、化学分野、超高速計算システム分野、計算情報学分野、数値解析分野で、計 61 課題の研究プロジェクトを採択し共同研究を実施した。重点課題についても、学際共同利用プログラムのプロジェクトとして実施した。これらの共同研究により、

学術論文 277 件を発表した。各分野におけるプロジェクト採択数を表 1 に、学際共同利用プログラムによる成果発表論文数を表 2 に、プログラムの参加状況を表 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

素粒子	宇宙	原子核	物質科学	化学	生命	地球環境	生物	HPCシス テム	計算情報 学	数値解析
12	9	6	10	1	5	4	3	6	1	4
計算機毎の採択数										
HA-PACS										
素粒子	宇宙	原子核	物質科学	化学	生命	地球環境	生物	HPCシス テム	計算情報 学	数値解析
7	4	1	3	0	2	1	1	2	0	1
COMA										
素粒子	宇宙	原子核	物質科学	化学	生命	地球環境	生物	HPCシス テム	計算情報 学	数値解析
9	5	6	8	1	4	3	2	4	1	3
Oakforest-PACS										
素粒子	宇宙	原子核	物質科学	化学	生命	地球環境	生物	HPCシス テム	計算情報 学	数値解析
11	7	2	9	0	0	3	3	5	1	2

表 2 学際共同利用プログラムによる成果として発表された論文の総数

区分	平成29年度		うち国際学術誌掲載論文数
化学	38	(7)	37 (7)
材料科学	0	(0)	0 (0)
物理学	130	(25)	128 (25)
計算機&数学	64	(16)	57 (12)
工学	16	(2)	15 (1)
環境&地球科学	13	(3)	10 (3)
臨床医学	0	(0)	0 (0)
基礎生命科学	16	(3)	16 (3)
人文社会系	0	(0)	0 (0)
合計	277	(56)	263 (51)

* 右側の () 内の数字は、拠点に所属するもの（大学院生を含む）が、特に重要な役割・高い貢献（ファーストオーサー、コレスポンディングオーサー、ラストオーサー等）を果たしている論文（内数）

表 3 学際共同利用プログラムの参加状況

平成29年度									
区分	機関数	受入人数	外国人	若手研究者 (35歳以下)	大学院生	延べ人数	外国人	若手研究者 (35歳以下)	大学院生
学内(法人内)	6	272 (17)	24 (3)	152 (11)	110 (8)	90488 (5,675)	8129 (1,080)	51784 (3,925)	37740 (2,845)
国立大学	16	125 (3)	0 (0)	58 (3)	39 (1)	42973 (1,095)	0 (0)	20592 (1,095)	13762 (365)
公立大学	1	2 (0)	0 (0)	1 (0)	0 (0)	641 (0)	0 (0)	350 (0)	0 (0)
私立大学	9	13 (2)	0 (0)	3 (1)	2 (0)	4481 (700)	0 (0)	932 (350)	582 (0)
大学共同利用機関法人	3	26 (0)	3 (0)	10 (0)	1 (0)	8752 (0)	1013 (0)	3404 (0)	365 (0)
独立行政法人等公的研究機関	3	42 (2)	3 (0)	14 (0)	0 (0)	14077 (689)	1054 (0)	4939 (0)	0 (0)
民間機関	4	9 (2)	0 (0)	3 (1)	0 (0)	1994 (466)	0 (0)	596 (116)	0 (0)
外国機関	18	35 (7)	29 (7)	17 (2)	8 (1)	12719 (2,555)	10544 (2,555)	6205 (730)	2920 (365)
その他	4	7 (0)	0 (0)	1 (0)	0 (0)	2451 (0)	0 (0)	365 (0)	0 (0)
計	64	531 (33)	59 (10)	259 (18)	160 (10)	178576 (11,180)	20740 (3635)	89167 (6216)	55369 (3575)

※下段 () 内は女性の内数

2.4 国際連携と異分野融合

国際連携として、米国ローレンスバークレー国立研究所 (LBNL) との合同ワークショップを、4 月に米国 LBNL で、3 月に計算科学研究センターにて開催した。12 月にはエジンバラ大学 (EPCC) において、計算科学研究センターと合同のワークショップを開催し、2 月には、韓国 KISTI と計算科学研究センターにて、HPC Winter School とワークショップを開催し、国際的な活動を進めた。また、「計算基礎科学連携拠点」を基盤に、ポスト「京」重点課題⑨「宇宙の基本法則と進化の解明」の代表機関として連携研究を推進した。さらに、ポスト「京」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」のサブ課題 A「高性能半導体デバイス」、ならびにサブ課題 B「光・電子融合デバイス」の協力機関として研究を推進した。また、ポスト「京」萌芽的課題①「基礎科学のフロンティアー極限への挑戦」「基礎科学の挑戦－複合マルチスケール問題を通した極限の探求」のサブ課題 D「量子力学の基礎と情報」を分担機関として推進した。ポスト「京」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」では、「生命を育む惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明」のサブ課題 D「原始太陽系における物質進化と生命起源」を「宇宙生命計算科学連携拠点」の下で、分担機関として推進した。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推進事業」を創始し、本学において労働契約法の特例を適用するプロジェクトとしての認定を受けた。

2.5 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、平成 28 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、今年度創始した「計算メディカルサイエンス推進事業」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。