

目次

まえがき	2
1 センター組織と構成員	4
2 平成 30 年度の活動状況	8
3 各研究部門の報告	15
I. 素粒子物理研究部門	15
II. 宇宙物理研究部門	40
III. 原子核物理研究部門	65
IV. 量子物性研究部門	83
V. 生命科学研究部門	110
V-1. 生命機能情報分野	110
V-2. 分子進化分野	125
VI. 地球環境研究部門	140
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	207
VIII-1. データ基盤分野	207
VIII-2. 計算メディア分野	229

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、2018年に設立27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、次の四半世紀の研究を着実に進めました。

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年度にはさらに、これまで長期間の海外滞在のみを視野に入れていたのに対し、これをより柔軟かつ効果的に展開するために、センター独自のマンスリーサバティカル制度を開始し、数週間から数ヶ月単位でのサバティカルを奨励し、国際的な研究展開を強力に押し進める新たな試みを開始しました。さらに、こちらからの中期訪問だけでなく、先方からも同じような期間で海外のトップレベル研究者を招聘し、集中した共同研究を支援する中期招聘体制も整えました。

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。

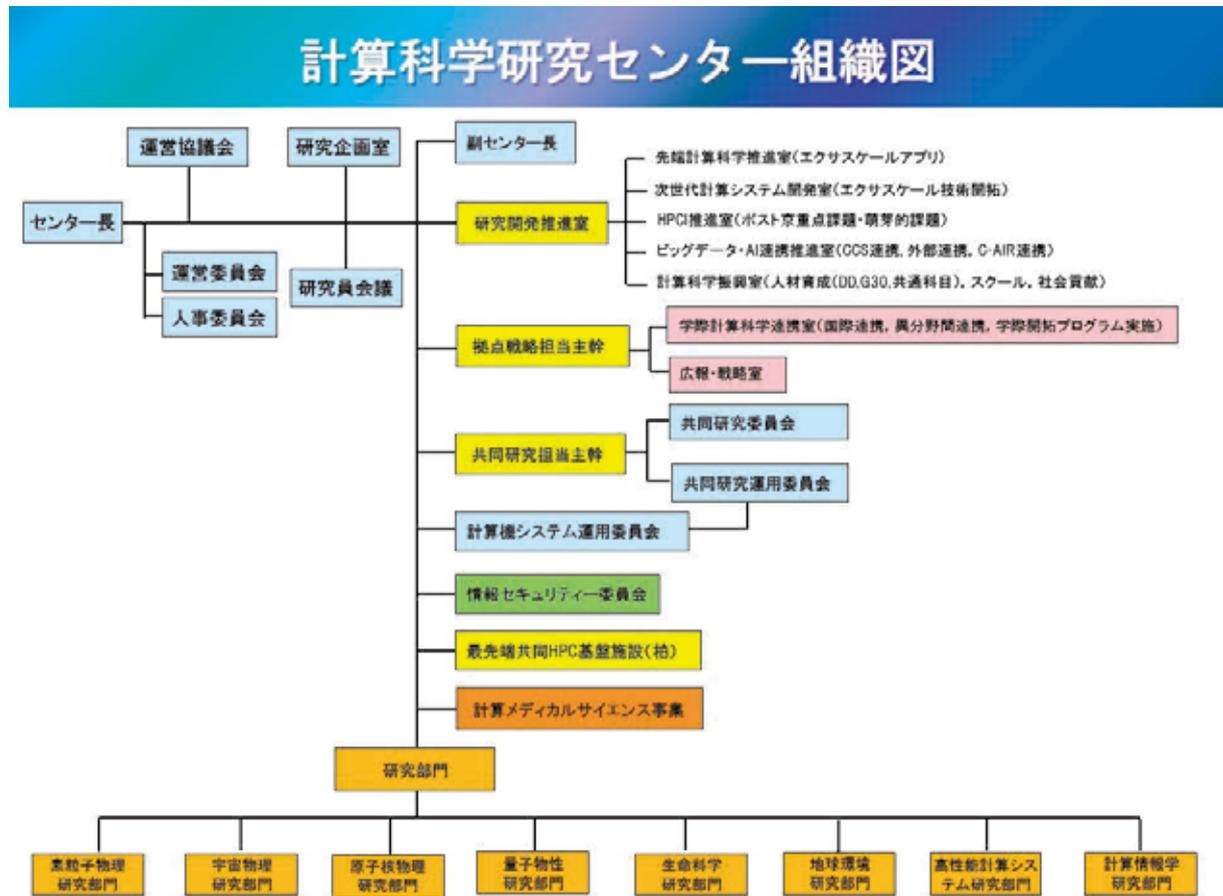
センターには、素粒子物理、宇宙物理、原子核物理、量子物性、生命科学、地球環境、高性能計算システム、計算情報学の8つの研究部門があり、38名の専任教員が従事している他、任期付助教3名、研究員27名が在籍しています。また、国際連携として、英国エジンバラ大学、米国ローレンスバークレー国立研究所を始めとする海外13機関とMOUを締結するとともに、37機関（北米15、欧州13、アジア・オセアニア9）と国際共同研究連携を行っています。異分野間連携として、ポスト「京」重点課題・萌芽的課題の推進や、「計算基礎科学連携拠点」、「宇宙生命計算科学連携拠点」を行っています。国際的教育活動としては韓国KISTIとの日韓HPCウィンタースクールを毎年開催しています。2017年より開始した「計算メディカルサイエンス推進事業」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、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継続し、医計連携のコンセプトの下、共同研究と人材交流を加速しています。

筑波大学 計算科学研究センター 平成 30 年度 年次報告書

本小冊子は、平成時代最後である 2018 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。

2019 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	梅村 雅之
副センター長	朴 泰祐
運営協議会	委員長 佐藤 正樹 (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	委員長 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 藏増 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 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 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 田浦 健次郎（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
 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）、大須賀 健
 准教授 森 正夫、矢島 秀伸
 講師 吉川 耕司
 助教 Wagner, Alexander、古家 健次
 研究員 田中 賢、高水 裕一、安部 牧人
 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 鷺山 広平、Guillaume Scamps、Kai Wen

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、仝 暁民、小野 倫也
講師	前島 展也
主任研究員	山田 篤志
研究員	植本 光治、山田 俊介、竹内 嵩、野田 真志、Hashmi Arqum、 廣川 祐太
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、栢沼 愛、西澤 宏晃
研究員	鬼頭（西岡） 宏任
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）
研究員	石谷 佳之
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	山上 晃央、Doan Quang Van、石崎 紀子、荒木 貴光
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
助教	多田野 寛人、小林 諒平
研究員	藤田 典久
客員准教授	埴 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（准教授）

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）、天笠 俊之
助教 塩川 浩昭、堀江 和正
研究員 Savong Bou、太田 玲央

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 30 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

筑波大学計算科学研究センターは、2017 年度に設立 26 年目に入り、次の四半世紀の活動に向け新たな一歩を踏み出しました。2018 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に加え、特に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行いました。

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、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、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。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（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すると同時に、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、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、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 (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、38 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。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 30 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する。さらに、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), メニーコア型演算加速クラスタ COMA (PACS-IX) (393 ノード, 1,001TFlops) 及び GPU 間直接通信機構を持つ演算加速クラスタ 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，原子核，宇宙，物質科学，生命科学，地球環境，生物，化学，計算機工学の 9 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。

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図る。

■ 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，一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 は運用 3 年目に入り安定した稼働率とユーザ利用率を記録した。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 79 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 235 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	HPCS	計算情報学	数値解析
15	10	9	10	1	7	3	2	5	2	3
計算機ごとの採択数										
COMA										
素粒子	宇宙	原子核	物質科学	化学	生命	地球環境	生物	HPCS	計算情報学	数値解析
12	6	6	7	1	6	3	2	2	1	2
Oakforest-PACS										
素粒子	宇宙	原子核	物質科学	化学	生命	地球環境	生物	HPCS	計算情報学	数値解析
10	7	2	8	0	3	2	0	5	2	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30年度			
			うち国際学術誌掲載論文数	
化学	5	(0)	5	(0)
材料科学	0	(0)	0	(0)
物理学	114	(44)	114	(44)
計算機&数学	22	(12)	21	(12)
工学	17	(9)	14	(9)
環境&地球科学	23	(9)	21	(8)
臨床医学	0	(0)	0	(0)
基礎生命科学	54	(22)	54	(22)
人文社会系	0	(0)	0	(0)
合計	235	(96)	229	(95)

※右側の ()内には、拠点に所属する者(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)を示す

表3 学際共同利用プログラムの参加状況

平成30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	207 (15)	14 (4)	106 (11)	87 (7)	69145 (5,169)	4678 (1,387)	36143 (3,709)	29472 (2,395)
国立大学	18	110 (2)	0 (0)	46 (0)	32 (0)	38433 (702)	0 (0)	16290 (0)	11338 (0)
公立大学	2	3 (1)	0 (0)	1 (1)	0 (0)	1033 (351)	0 (0)	351 (351)	0 (0)
私立大学	7	12 (1)	0 (0)	3 (1)	3 (0)	4190 (365)	0 (0)	1047 (365)	1033 (0)
大学共同利用機関法人	3	25 (0)	3 (0)	7 (0)	0 (0)	8502 (0)	1018 (0)	2367 (0)	0 (0)
独立行政法人等公的研究機関	5	28 (3)	5 (1)	7 (1)	0 (0)	9594 (1,061)	1791 (365)	2415 (365)	0 (0)
民間機関	3	5 (1)	0 (0)	2 (0)	0 (0)	1767 (365)	0 (0)	701 (0)	0 (0)
外国機関	10	21 (1)	17 (1)	8 (1)	2 (1)	5245 (365)	3785 (365)	2332 (365)	730 (365)
その他	5	5 (0)	0 (0)	2 (0)	0 (0)	1768 (0)	0 (0)	687 (0)	0 (0)
計	59	416 (24)	39 (6)	182 (15)	124 (8)	139677 (8,378)	11272 (2117)	62333 (5155)	42573 (2760)

※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、英国エジンバラ大学（EPCC: Edinburgh Parallel Computing Cent）との合同ワークショップを12月に同大学で行い、また米国ローレンスバークレー国立研究所（LBL: Lawrence Berkeley National Laboratory）との合同ワークショップを3月に同研究所で行なった。また、2月には韓国 KISTI との共催で、ソウル市内の梨花女子大学において Korea-Japan 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 「高機能半導体デバイス」、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」「基礎科学の挑戦ー複合マルチスケール問題を通じた極限の探求」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」の本格的活動を開始し、次年度における事業部化の足がかりを作った。

2.5 センターシンポジウムの国際化

センターでは毎年 10 月、「学際計算科学による新たな知の発見・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。平成 29 年度の同シンポジウムはセンター設立 25 周年シンポジウムとして四半世紀の研究の総括と今後の展開という意味を込めて拡大して行われた。平成 30 年度のシンポジウムでは、今後の国際研究拠点化を睨み、初めてセンターシンポジウムを国際化し、シンポジウムの全講演を英語化、国際シンポジウムとして開催した。

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。平成 30 年度におけ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により、今後の活動の基盤を作った。

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、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、医計連携を目指す「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。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。