

筑波大学 計算科学研究センター
平成 30 年度 研究評価



Center for Computational Sciences,
University of Tsukuba
Research Assessment FY2018

はじめに

計算科学研究センターでは、研究事業に関する外部委員を含む諮問機関として運営協議会を設置し、研究事業全般及び共同利用に関する指導助言を受け、年度毎の研究評価を行っている。この研究評価については、運営協議会の下に運営協議会の外部委員による研究評価委員会を設置し実施することとしている。

この度、研究評価委員会から、平成30年度の研究成果の評価についてのご報告をいただいた。

研究評価委員会委員からの評価は、各分野の研究活動について、自己点検をさらに深めるための重要な判断材料となるばかりでなく、当センターのこれからの発展のための貴重な指針となる。

研究評価委員会委員の方々には、大変ご多忙のところ、各研究分野の研究成果について研究評価をしていただき、貴重な所見を頂戴した。特に、佐藤委員長にはとりまとめにご尽力をいただいた。

謹んで、委員の皆様にご挨拶を申し上げます次第である。

令和2年2月

筑波大学計算科学研究センター
センター長 朴 泰 祐

目次

1. 研究評価委員会の設置	3
2. 評価の方法	4
3. 評価報告	
3. 1 素粒子物理研究部門	5
3. 2 宇宙物理研究部門	8
3. 3 原子核物理研究部門	10
3. 4 量子物性研究部門	12
3. 5 生命科学研究部門	14
3. 6 地球環境研究部門	16
3. 7 高性能計算システム研究部門	18
3. 8 計算情報学研究部門	
3. 8. 1 データ基盤分野	20
3. 8. 2 計算メディア分野	23
4. 総合評価	25

1. 研究評価委員会の設置

筑波大学計算科学研究センター運営協議会は、令和元年9月27日開催の運営協議会において、運営協議会の外部委員で「研究評価委員会」を構成し、書面により、平成30年度の研究評価を行うことが了承され、以下の方々に研究評価委員会委員を依頼した。

菊川芳夫	教授	東京大学大学院総合文化研究科
小久保英一郎	教授	国立天文台科学研究部
中田 仁	教授	千葉大学大学院理学研究院
常行真司	教授	東京大学大学院理学系研究科
白井 剛	教授	長浜バイオ大学バイオサイエンス学部
佐藤正樹	教授	東京大学大気海洋研究所
田浦健次朗	教授	東京大学情報基盤センター
中野美由紀	教授	津田塾大学学芸学部情報科学科
谷口倫一郎	教授	九州大学システム情報科学研究院

(順不同、所属・職名は令和元年9月27日現在)

研究評価委員会委員には、「平成30年度年次報告書」、及び必要に応じて、「平成29年度研究評価」を参照していただき、評価報告をお願いした。

なお、分野の分担は、次のとおりである。

委員長 (全体取りまとめ)		佐藤 正樹
素粒子物理研究部門	素粒子物理分野	菊川 芳夫
宇宙物理研究部門	宇宙物理分野	小久保 英一郎
原子核物理研究部門	原子核物理分野	中田 仁
量子物性研究部門	量子物性分野	常行 真司
生命科学研究部門	生命科学分野	白井 剛
地球環境研究部門	地球環境分野	佐藤 正樹
高性能計算システム研究部門	高性能計算システム分野	田浦健次朗
計算情報学研究部門	データ基盤分野	中野美由紀
計算情報学研究部門	計算メディア分野	谷口 倫一郎
		(敬称略)

2. 評価の方法

以下の評価フォームに、記入することにより、各分野の研究活動・成果について評価を行った。各分野の評価報告について、第3章に示す。

A) 計画進捗度

以下の項目について、それぞれ具体的な記入をお願いします。

- ・ 顕著な進捗のあったと認められる研究課題と評価すべき点：
- ・ 進捗が不十分であると認められる研究課題と改善すべき点：
- ・ 平成29年度の評価や指摘に関する改善状況：

その他、コメントがあれば、以下にご記入ください。

B) 多角的視点からの評価

以下の項目について、S、A、B、C及びXで、評価をお願いします。

S（特に成果がある）、A（良好）、B（おおむね良好）、C（不十分）、
X（評価対象外）

- ・ センター内連携が有効に行われているか：
- ・ 産学官連携が有効に行われているか：
- ・ 国際連携、国際活動が活発に行われているか：
- ・ 社会貢献・社会活動などが行われているか：

上記の評点の理由など、コメントがあれば以下にご記入ください。

C) 総評

全体に対する総評をお願いします（400字程度）

D) その他

その他、コメントがあればご記入ください。

3. 評価報告

3. 1 素粒子物理研究部門

3. 1. 1 素粒子物理分野

A) 計画進捗度

- ・ 顕著な進捗のあったと認められる研究課題と評価すべき点：
 - 1) OFP を用いた大型プロジェクトとなる、物理点における 2+1 フレーバーQCD の系統的研究【1】(格子間隔 0.085fm, 格子サイズ 128^4)には更なる進捗が見られ、高精度計算に基づく格子サイズ 128^4 と 64^4 の比較により有限体積効果の系統誤差の検証がなされた。
 - 2) 核子構造の研究【3】の研究にも更なる顕著な進捗が見られる。現実のクォーク質量直上で、一辺が 10fm を超える体積において、H29(2018)年度の結果(HPCI 利用研究課題優秀成果賞を受賞)より高精度の計算がなされて、実験値とよく一致した結果が得られた。この結果は大変印象的であり、“陽子パズル”の解明に向けて、期待の持てる結果である。
 - 3) π 中間子質量 250MeV における K 中間子崩壊振幅の研究【7】において、CP 非保存パラメータ $\text{Re}(\varepsilon' / \varepsilon)$ に関して実験値と矛盾しない結果が得られた。 $\Delta I=1/2$ 則の兆候が見られおり、今後の研究の進展に期待が持てる。
 - 4) Gradient 法による有限温度 2+1flavor QCD の研究【9】の進捗は著しい。2018 年度までの研究により、重いクォークに対して Gradient 法の有効性が明確に示されたことを受けて、PACS-CS Collaboration の生成した $32^3 \times 64$ 格子、格子間隔 $a=0.09\text{fm}$ のゼロ温度物理点ゲージ配位を利用して、 $T=122\text{--}544\text{MeV}$ ($N_t=18-4$) の有限温度のシミュレーションが系統的に進められた。また、クォークが重い場合であるが、エネルギー運動量テンソルの二点関数から評価された剪断粘性係数(shear viscosity η)に関する結果の中間報告がなされた。
 - 5) テンソルネットワーク形式に基づく格子ゲージ理論の研究【12】では、高次元モデルへの応用研究の進捗が著しい。先ず、HOTRG 法アルゴリズムの改良により、3次元 Z_2 ゲージ理論の有限温度相転移の高精度解析に成功している。一方、4次元イジングモデルへの応用も試みられて、不純物テンソル法の導入によって、相転移次数の決定がなされた。また、2次元 ϕ^4 模型では自発的対称性の破れの解析が行われ、臨界結合定数の高精度計算が行われた。
- ・ 進捗が不十分であると認められる研究課題と改善すべき点：

上記のコアの研究課題の他、K 中間子セミレプトニック崩壊形状因子の計算、

K → π π 崩壊におけるハドロン行列要素計算、標準理論を超える物理の探求など、多岐に渡る研究課題が進められ、研究成果が着実に得られている。以下の研究課題については、今後、研究をさらに精力的に推進することが望ましい：

- 1) Gradient flow を用いた Kaon B パラメータの計算【8】については、演算子混合やくりこみに課題のある Weak Matrix elements 計算一般への拡張と数値シミュレーションの遂行が望まれる。
- 2) テンソルネットワーク形式に基づく格子ゲージ理論の研究【12】については、課題となる (i) 非可換ゲージ理論への拡張、(ii) 高次元モデルへの応用、(iii) 物理量計算のための手法開発のうち、(i) について、さらなる研究の進捗が望まれる。

・ H 2 9 年度の評価や指摘に関する改善状況：
特になし。

・ その他のコメント：
特になし

B) 多角的視点からの評価

S (特に成果がある)、A (良好)、B (おおむね良好)、C (不十分)、X (評価対象外)

- ・ センター内連携が有効に行われているか： A
- ・ 産学官連携が有効に行われているか： X
- ・ 国際連携、国際活動が活発に行われているか： A
- ・ 社会貢献・社会活動などが行われているか： A

C) 総評

物理点直上、(10fm)³ 超の大空間体積、複数の格子間隔による、2+1 フレーバーQCD の系統的大規模シミュレーションは、OFP を用いた大型プロジェクトとして、着実に進捗している。核子・パイオン構造因子、原子核束縛エネルギー、有限温度-状態方程式についても、物理点直上ないし物理点により近いクォーク質量を用いて、系統誤差の制御された計算が実施され、顕著な成果が得られている。QCD の基本的性質に関わるこれらの研究のさらなる進捗が期待できる。

Gradient Flow の有用性が明確に示され、これを応用した物理点直上での本格的な計算が進んでいる。輸送係数や Weak Matrix Elements の計算等への研究の展開が望まれる。

軽いクォークのダイナミクス、有限密度 QCD、Strong CP 問題などの残され

た課題に格子 QCD / 計算科学からアプローチするための基礎研究として、テンソルネットワーク法に関する研究に期待したい。H30 年度には、高次元モデルへの応用で着実に成果が得られている。HOTRG 法は、ごく最近、さらに改良できることが明らかになってきており、今後、高次元モデルへの応用研究は飛躍的に進む可能性がある。また、実時間形式への適用にも進展が見られる。このような状況にあって、非可換ゲージ理論に適用するための基礎研究を中心的な課題の一つと見据えて、人的資源、計算資源、研究費などを集中することが検討されてよい。

3. 2 宇宙物理研究部門

3. 2. 1 宇宙物理分野

A) 計画進捗度

- ・顕著な進捗のあったと認められる研究課題と評価すべき点：
今年度から新教授(大須賀健氏)が加入したことによって、輻射流体シミュレーションを用いた高エネルギー天体の理論研究が進んでいる。ブラックホールの成長、中性子星の X 線パルス生成機構に関する研究は新規性が高く、今後の進展も期待できる。
- ・進捗が不十分であると認められる研究課題と改善すべき点：
特になし
- ・H 2 9 年度の評価や指摘に関する改善状況：
H 2 9 年度の評価では特に改善が必要になる指摘がなかった。
- ・その他のコメント：
特になし

B) 多角的視点からの評価

S (特に成果がある)、A (良好)、B (おおむね良好)、C (不十分)、X (評価対象外)

- ・センター内連携が有効に行われているか：A
- ・産学官連携が有効に行われているか：X
- ・国際連携、国際活動が活発に行われているか：A
- ・社会貢献・社会活動などが行われているか：A

C) 総評

宇宙物理分野は、宇宙の様々な時間・空間スケールでの天体现象のシミュレーション研究と、そのための様々なシミュレーションコード開発で、多数の成果を挙げている。シミュレーション研究では、宇宙の大規模構造から、銀河、活動銀河核、星間物質、初代星、ブラックホール、パルサー、原始惑星系円盤、ダスト、そして星間有機分子まで、様々な階層の天体や物質の構造や形成に関する研究が行われている。そして、これらのシミュレーションを可能にするための流体計算、多体計算、輻射輸送計算などのシミュレーシ

ョンコードが開発されている。これらの成果として、平成 30 年度は 28 編の査読論文が出版されている。教育活動も活発で、博士論文 1 編、修士論文 4 編、学士論文 6 編がまとめられている。また、生命科学研究部門、高性能計算システム研究部問との連携も有効に継続されていて、センターならではの独自の研究が展開されていることは高く評価できる。中核として推進する「宇宙生命計算科学連携拠点」による成果も継続的に出されており、高く評価できる。

このような活発な活動性を維持しさらに向上させていくためには、構成メンバーのバランスから考えるに助教などの常勤若手研究者を増員することが重要であると考えます。

D) その他

特になし

3. 3 原子核物理研究部門

3. 3. 1 原子核物理分野

A) 計画進捗度

- ・顕著な進捗のあったと認められる研究課題と評価すべき点：

理論計算核データと InPACS

エネルギー密度汎関数法による微視的立場から核図表の広大な領域に亘る原子核の形状や密度分布を計算した上で、質量・半径等と併せて web 上で公開し、核データとして広く参照できるようにした。今後の原子核物理学に関する実験や、天体物理学及び原子力工学のための input として、他の多くの研究に役立つものと見込まれる。

Effect of octupole deformation on the fission of actinides

重い原子核、特にアクチノイド領域核の分裂について、核子多体系の多様な変形の自由度を考慮に入れた動力学計算を実行し、例えば ^{240}Pu では洋ナシ形分裂片を経由した非対称分裂を起こし得ることを示した。核分裂の理論的記述が容易でない中で、動的過程での洋ナシ形変形の役割を明らかにし、理論的立場からの実験データの理解、及び中性子星合体時の元素合成をも含め実験の困難な核の分裂確率の予言にも繋がる重要な成果である。

- ・進捗が不十分であると認められる研究課題と改善すべき点：

特になし。

- ・H 2 9 年度の評価や指摘に関する改善状況：

研究内容でなく報告書への記載という意味で、他分野とのセンター内連携、ImPACT 関連の研究への言及が薦められていた。H30 年度報告はある程度分かるものになっている。但し、より明瞭に述べていただけると一層評価しやすい。

- ・その他のコメント：

特になし

B) 多角的視点からの評価

S (特に成果がある)、A (良好)、B (おおむね良好)、C (不十分)、X (評価対象外)

- ・センター内連携が有効に行われているか： A

- ・産学官連携が有効に行われているか： X
- ・国際連携、国際活動が活発に行われているか： A
- ・社会貢献・社会活動などが行われているか： S

上記の評点の理由などに関するコメント：

センター内連携は、矢花氏の兼任と修士論文から物質科学との連携が見て取れるものの、研究成果としての明瞭な記載がないため A 評価とした。国際連携・国際活動では、日野原、Scamps 両氏が大いに活躍しているが、次年度は学振二国間協力事業の成果も期待したい。社会貢献では ImPACT 事業への参加、またそれとも関連した InPACS の公開が高く評価される。

C) 総評

これまでに引き続き平成 30 年度も、中務孝教授のリーダーシップの下で極めて高い水準で研究活動が推進されている。原子核における密度汎関数理論に基づく微視的アプローチを軸として、大規模数値計算によりこれを核構造から核反応、さらに二重ベータ崩壊や中性子星の構造に至る様々な問題に応用するという方向を中心に、新しい計算法を開発するという方向、集団座標の取扱いなど理論的な基盤の整備と拡張を行う方向とも併せ、いずれも世界最高の水準でバランスよく展開されている。計算科学研究センターという利を生かし大規模数値計算を想定し実行すると同時に、将来の発展も見据えて研究が進められている。社会貢献として放射性廃棄物処理の基礎研究を行う ImPACT 事業への参加、及び恐らくそれとも関連した InPACS の公開が高く評価される。国際連携や共同研究も活発である。天体物理学との関連を特に意識されているように見受け、今後のセンター内外での連携による展開を大いに期待させる。

D) その他

特になし

3. 4 量子物性研究部門

3. 4. 1 量子物性分野

A) 計画進捗度

- ・顕著な進捗のあったと認められる研究課題と評価すべき点：
矢花グループでは、パルス光と物質の相互作用を物質の第一原理電子状態計算に基づき記述する汎用ソフトウェア SALMON の開発を進めている。H30 年度はパルスの斜方入射のシミュレーション手法の開発、パルス光の伝搬と格子振動をマルチスケールモデルの枠組みで連立させた手法、ポスト「京」コンピュータ（富岳）を想定した最適化実装など、SALMON の機能強化が進められ、様々な応用計算が進んだ。小野グループでは伝導計算を得意とする実空間差分法を用いた第一原理電子状態計算のソフトウェア RSPACE を開発中である。ここでも伝導計算に関する大幅な高速化などの改良がなされた。SALMON、RSPACE に関しては、公開しただけでなくハンズオンチュートリアルを実施するなど、普及に向けた活動を活発に行っており、ユーザーコミュニティづくりも進み始めている。
- ・進捗が不十分であると認められる研究課題と改善すべき点：
該当なし。
- ・H29 年度の評価や指摘に関する改善状況：
H29 年度の評価では、SALMON を国際標準アプリとするため、ユーザーコミュニティの拡充が要望された。これに応じて H30 年度に国際スクール・チュートリアルを実施し、海外からも多数の参加があったことは、高く評価したい。

B) 多角的視点からの評価

S（特に成果がある）、A（良好）、B（おおむね良好）、C（不十分）、X（評価対象外）

- ・センター内連携が有効に行われているか：A
- ・産学官連携が有効に行われているか：A
- ・国際連携、国際活動が活発に行われているか：S
- ・社会貢献・社会活動などが行われているか：S

上記の評点の理由などに関するコメント

国際共同研究が活発に行われている。また、開発したアプリの公開・普及に向けた努力が際立っている。

C) 総評

本研究分野では、独自の方法論に基づく複数のソフトウェア開発と、それを用いた物性研究が行われている。中でも TDDFT と巨視的なマックスウェル方程式を組み合わせる独自のマルチスケール手法のソフトウェア SALMON の開発は、毎年着実に進展しており、様々な機能を追加することで、これまで以上に多彩な実験研究との直接比較が可能となりつつある。ソフトウェアの公開と普及にも多大な努力が重ねられており、特に H30 年度は SALMON の国際スクール・チュートリアルを実施し、海外からも多数の参加があった。このきわめてオリジナリティの高いソフトウェアの国際的認知度が高まり、継続的发展に不可欠な国際的コミュニティが育ちつつあるように思われることは、非常に喜ばしいことである。第一原理電子状態計算のソフトウェア RSPACE も公開され、普及に向けて努力がなされている。今回、RSPACE が強みとする伝導計算で大幅な高速化が図られたので、強みを生かした普及加速を期待したい。当研究分野では、それ以外にも興味深い研究がおこなわれているが、成果の見せ方や公表に関しては、工夫の余地があるように思われる。

3. 5 生命科学部

3. 5. 1 生命科学分野

A) 計画進捗度

・顕著な進捗のあったと認められる研究課題と評価すべき点：

V-1 生命機能情報分野では、QM/MM 法により、光化学系 II 反応経路の探索で新たな O-O 結合形成経路を発見し、ビリルビンオキシダーゼ (BOD) において野生型と変異体 (M467Q) の T1Cu 構造の再現などに成功した。また、*ab initio* 分子動力学計算によるメタノール光解離反応の解析では、電子基底状態での反応性の違いから固相で CH₂OH+H が過剰に生じる理由を説明し、9,10-ジフェニルアントラセン (DPA) と誘導体のフォトンアップコンバージョンの FMO (FMO-LCMO) 解析では、DPA より C7-sDPA のほうが反応効率が高いことを再現した。長距離補正密度汎関数法により Li イオン電池の代替材料としての Na 含有遷移金属酸化物の酸化還元反応における電荷移動パラメータのより精密な再現に成功した。これらの分子(動)力学・分子軌道法の改良による広範な物性研究を着実に進めていることは高く評価できる。また、超並列分子動力学シミュレーション (PaCS-MD) 法を SAX S データのフィッティングに適用し、periplasmic binding protein の open-close 構造に相当する溶液構造に収束することを示した。相関構造解析による生体分子の動的構造解析は近年重要な課題であり、この成果は高く評価できる。

V-2 分子進化分野では、有孔虫類 5 目のトランスクリプトーム (157 遺伝子) 解析から、有孔虫の初期分岐年代をこれまで提唱されていた 770 (95%CI 650-920) Ma から 507 (95%CI 502-523) Ma に精密化することに成功した。また、新奇真核微生物の系統帰属研究では、157 遺伝子解析で帰属不明であった *Microheliella maris* および SRT605 株について、338 遺伝子データに基づき *M. maris* が Cryptista の基部に位置することを示した。*Hemiarma marina* のミトコンドリアゲノム解析では、細菌型のシトムロム c 成熟 (CCM) 系遺伝子の存在を示し、細菌型 CCM 系の喪失が進化上複数回起こったことを示唆した。さらに、アミノ酸配列に基づくミトコンドリア輸送予測法 NomPred を改良し、非モデル生物の予測において既存法以上の予測性能を示した。これらの進化研究をデータの更新・改善により着実に精密化している点が高く評価できる。

V-1 生命機能情報分野と V-2 分子進化分野のセンター内連携では、EFL と共存する EF-1 α (divEF-1 α) の解析を継続し、分子モデリングによる表面負電荷分布の予測、およびドッキングシミュレーションから、divEF-1 α -aa-tRNA 結合の安定性は EFL より低く、aa-tRNA 伸長因子として機能しない可能性を示した。この成果は、それぞれの研究グループの特性を生かした共同研究として評価できる。

- ・進捗が不十分であると認められる研究課題と改善すべき点：
個々の研究課題において、特に進捗が不十分であるものは認められない。昨年度に引き続き指摘できる改善点として、V-1 生命機能情報分野における反応経路探索法や、V-2 分子進化分野における大規模分子系統解析法などの開発・実施に、計算科学研究センターの高性能計算機資源がどのように活用されているかについての、より詳しい説明が記載されることが望ましい。
- ・H29年度の評価や指摘に関する改善状況：
H29年度評価で指摘した、V-1 生命機能情報分野と V-2 分子進化分野のセンター内連携(伸長因子 EF-1 α の立体構造の進化に関する理論的研究)の経過および成果が本年度報告書には比較的詳細に記載されており、改善が認められる。本年度報告書の成果から、例えばペリディニン色素体の関与する光合成経路の解析など、両分野の連携による高度化が可能な研究テーマが他にもあるように思われるので、さらに連携が深まることを期待したい。

B) 多角的視点からの評価

S (特に成果がある)、A (良好)、B (おおむね良好)、C (不十分)、X (評価対象外)

- ・センター内連携が有効に行われているか：S
- ・産学官連携が有効に行われているか：B
- ・国際連携、国際活動が活発に行われているか：A
- ・社会貢献・社会活動などが行われているか：A

C) 総評

研究成果は引き続き高いレベルで順調に積み重ねられている。またその研究の過程で、国際連携およびセンター内連携が有効に機能していると認められる。特にセンター内連携は今後の発展が期待される。産学官連携のうち産学連携については報告書からは状況が不明である。本年度報告書からも、Liイオン電池の代替材料の物性評価など産学連携に応用可能な研究テーマおよび計算技術を有していると思われるので、今後の積極的なコミットを期待したい。

3. 6 地球環境研究部門

3. 6. 1 地球環境分野

A) 計画進捗度

- ・顕著な進捗のあったと認められる研究課題と評価すべき点：

地域規模の気候の研究として、内閣府 SIP プロジェクトでのフェーン研究による 2018 年の熊谷と新潟の記録的な猛暑のメカニズムの解明は、社会的にも学術的にも評価できる。

地球規模の気象研究での全球雲解像モデル NICAM を用いた北極低気圧の研究は、センターの特徴を生かした研究といえる。また、世界各国の予報センターの予測精度に対する GCM と初期値の貢献度を算定した研究は、数値予報データの活用という点と学術的な成果の両方の点で評価できる。

- ・進捗が不十分であると認められる研究課題と改善すべき点：

地球規模の研究における NICAM、地域規模の研究における都市気象 LES モデルについて、さらなる計算科学的な連携と高解像度計算の実施を期待する。また、これら気象モデルの計算効率の向上や FPGA の利用等について期待したい。筑波山の気象観測の利活用の方向性が示されることが望ましい。

- ・H29 年度の評価や指摘に関する改善状況：

昨年度記述がなかった火山灰予測研究について、外部機関との連携を進めていることが報告されている。筑波山での継続的な観測が再開したことは評価できる。都市気象研究や温暖化研究では、官公庁の競争的資金を獲得して、国内の研究機関と共同研究を行っていることが記述されている。

B) 多角的視点からの評価

S (特に成果がある)、A (良好)、B (おおむね良好)、C (不十分)、X (評価対象外)

- ・センター内連携が有効に行われているか：A
- ・産学官連携が有効に行われているか：S
- ・国際連携、国際活動が活発に行われているか：S
- ・社会貢献・社会活動などが行われているか：S

上記の評点の理由などに関するコメント：

センター内連携について、都市気象 LES モデルの Oakforest-PACS への移植

と高速化や、都市気象 LES モデルの full-GPU 版を高速計算機部門と共同開発している。

産官学連携について、企業共同研究を通じて産業界との連携を行っていることは評価できる。文科省の SI-CAT、北極域推進、内閣府 SIP などの官公庁の外部資金を得て研究を進めている。

国際連携・国際活動について、アラスカ大学と筑波大学の大学間連携、ベトナム国家大学ハノイ自然科学大学と CCS の連携、ハノイ科学技術大学と CCS の連携の 3 つの MOU を結んで国際連携を推進している点は評価できる。特に、日下教授がベトナム国家大学日越大学で講師、タイのアジア工科大学院でのモデルトレーニングの講師を務める等、海外の大学で教育活動を行っている点は評価できる。筑波大学・ドイツ学術交流会パートナーシッププログラムを通じた国際連携や、NCAR やオックスフォード大学と国際的な共同研究を行う等、多岐な取り組みが見られる。

社会貢献・社会活動について、環境省地域適応コンソーシアムを通じて、さいたま市の温暖化対策に貢献している。日下教授・田中教授は、多様な外部組織の委員等で社会貢献しており、自治体での講演やマスメディアで多数回出演し、顕著な成果をあげている。

C) 総評

昨年度より引き続き、多様な外部連携・外部資金により、都市気候研究、北極域研究が進められている。これらによる社会連携・社会貢献は、地球環境研究部門の顕著な成果である。若手による予測可能性研究はユニークな研究であり、準リアルタイムアンサンブル予報 TIGGE/S2S Museum によるデータ提供は、外部からも高く評価されている。地域規模研究と地球規模研究の双方について多様な研究が進められており、いささかオーバーワーク気味ではないかと推察される。今後は、新しく萌芽的な研究に取り組むとともに、特徴的な研究をさらに伸ばす方向での進展を考えてもよいのではないかと。センターとしての特徴を生かした計算機インテンシブな高解像度高負荷計算、先端的な計算機環境の利用連携について、今後の進展を期待したい。センターの特徴を生かした国内外の研究連携を進めるとともに、国内の研究グループのコアとしての役割を期待したい。筑波山の気象観測については、センター全体での連携のもとで安定的に継続し、さらなる活用の方策を期待したい。

3. 7 高性能計算システム研究部門

3. 7. 1 高性能計算システム分野

A) 計画進捗度

- ・顕著な進捗のあったと認められる研究課題と評価すべき点：

(1) FPGA を用いた高性能計算システムに関する研究

FPGA を高性能計算システムの一部とすべく、数々のシステム開発とその評価がなされており、得られている性能も高く、質の高いエンジニアリングが行われている。プログラム開発環境を提供するための取り組みも行われている。

(2) 分散ファイルシステムに関する研究

Gfarm ファイルシステムの性能向上に関する研究 (PPMDS) とともに、いくつかのケーススタディによって有用性の評価が行われている。PPMDS に関する研究では国際ワークショップでベストペーパーを受賞している。また、Gfarm は HPCI 共有ストレージの分散ファイルサーバとして使われている。その文脈でレプリカ機能に関する改善が行われ、リリース版 Gfarm に取り込まれているなど、実運用上生じた問題の改善に対する努力が継続的に行われている点も評価に値する。

- ・進捗が不十分であると認められる研究課題と改善すべき点：

不十分な点は特にない（当初の予定というものが示されているわけでもないので「進捗」を判断する材料もない）。

- ・H29年度の評価や指摘に関する改善状況：

指摘事項は特になかった。

B) 多角的視点からの評価

S（特に成果がある）、A（良好）、B（おおむね良好）、C（不十分）、X（評価対象外）

- ・センター内連携が有効に行われているか： S
- ・産学官連携が有効に行われているか： X
- ・国際連携、国際活動が活発に行われているか： A
- ・社会貢献・社会活動などが行われているか： S

上記の評点の理由などに関するコメント：

センター内連携は他部門のコードの性能改善など、着実になされている（センター内連携）。

Cygnus クラスタや Gfarm システムを HPCI に提供している（社会貢献・社会活動）

C) 総評

筑波大学で導入した Cygnus システムはアクセラレータとしてこれまで使われてきた GPU の他に、FPGA を用いた先進的なシステムで、そのための FPGA-GPU 連携や、プログラミング環境などの開発や性能評価が精力的に行われている。それと並行した、メニーコア環境(Oakforest-PACS)のためのアルゴリズム(FFT)やアプリケーション(ARTED)の性能向上の研究も、部門内および他部門との共同で行われている。分散ファイルシステム Gfarm に関してはメタデータサーバを分散化させて高速化する方式の研究が国際ワークショップでベストペーパー賞を受賞する、ワークフローの実行性能が商用ファイルシステム GPFS を上回ることを示した研究が IEEE International Conference on Cluster Computing で採択されるなど高く評価されている。実運用に基づいたソフトウェアの改善も継続的に行われている。

D) その他

FPGA-GPU 搭載の HPC 環境の普及に向けたさらなる発展と、Gfarm システムが研究用のベースとして、実用的システムとしてコミュニティへ貢献することを期待する。

3. 8 計算情報学研究部門

3. 8. 1 データ基盤分野

A) 計画進捗度

・顕著な進捗のあったと認められる研究課題と評価すべき点：

最近の計算機科学において、データ工学関連分野は、大規模データの管理、解析、活用は極めて重要な課題であり、異分野との連携が期待される分野である。そのような背景をもとに、情報統合基盤技術、データマイニング・知識発見技術、XML・Web プログラミング、科学分野におけるデータベース・機械学習応用の4テーマ毎に、アルゴリズムの提案に加え、処理負荷低減のための計算機資源の効率的な利用の研究まで、幅広く、かつ精力的に研究が進められている。自治体と連携した実証実験、国際統合睡眠医科学研究機構との連携による睡眠データ分析研究、大規模データ管理・分析に関するデータ工学分野の研究推進、科学データの高度利用基盤に関する研究開発と、基盤アルゴリズムの研究、評価に加え、処理負荷低減のための計算機資源の効率的な利用の研究、他分野との連携まで、幅広く、かつ精力的に研究が進められている。

情報統合基盤技術では、自治体と連携したビッグデータ利活用のためのデータ連携技術の研究開発と実証実験が行われている。自治体を巻き込み、社会実装による実証実験は、データ利活用の観点から大変期待されている分野であり、大きな成果を得ている。また、シーケンス OLAP 分析として、時系列シーケンスデータから特定パターンの発生箇所を抽出・分析するためのパターンマッチング・アルゴリズムの提案、評価が行われている。シーケンスデータから各行ごとのパターンマッチングを行うアルゴリズムの効率化とその性能評価、また、シーケンス OLAP として分析を容易に行うための複数行パターンマッチング処理が提案され、実データベースシステム上にて、その有効性の評価が行われている。また、ストリームに対する集約計算処理として、特定の窓幅ごとの集約値を順次段階的にバッファリングすることにより、重複する集計を避け、効率のよいアルゴリズムを提案し、ジュライの手法と比較して高い性能を得ている。

データマイニング・知識発見技術では、大規模多次元グラフデータのクラスタリング処理として、従来の手法よりの精度の高い Affinity Propagation 手法に着目し、O-PACS 上にて超並列化手法を提案し、他の手法よりも 60 倍程度の高速化を実現している。また、文書データからのトピック抽出、音声処理、グラフからのコミュニティ検出等で利用される非負値行列分解として、従来の手法よりも精度のあがる確率的な制約を考慮した非負値行列分解手法を提案し、評価を行っている。

XML・Web プログラミングでは、昨今、アカデミア、行政府で特に着目され

ているオープンデータを対象として、関係ストリームに対してキーワード検索を効率よく行う手法を提案し、既存手法と比較して大幅に処理性能を改善できることを示している。

科学分野におけるデータベース・機械学習応用では、異分野との連携を中心に、生体信号解析に基づく睡眠ステージ分析を進展させ、機械学習による判断手法が人による判断とほぼ同程度の精度をあげており、さらに、ヒト睡眠ステージ特徴波形の判定・検出を可能としている。また、すばる望遠鏡 Hyper Suprime-Cam による遠方銀河データの自動分類として、機械学習を用いた分類手法を提案し、実験評価データでは専門家が実用に際して必要とする検出精度 95%を達成している。

・進捗が不十分であると認められる研究課題と改善すべき点：

改善すべき点は特にない。データ基盤分野では、研究の過渡期にあるため、知的財産権を継続的に出すことは難しいと思われるが、是非積極的な検討をしてほしい。

・H29年度の評価や指摘に関する改善状況：

H29年度の評価、指摘は改善に関するコメントがないため、改善状況という観点からは特に問題ない。H29年度で異分野との連携として着手した国際統合睡眠医科学研究機構との連携による睡眠データ分析研究が着実に進展しており、異分野連携の良い事例として高く評価する。今後の積極的な研究とのその成果を期待したい。

B) 多角的視点からの評価

S (特に成果がある)、A (良好)、B (おおむね良好)、C (不十分)、X (評価対象外)

・センター内連携が有効に行われているか：S

・産学官連携が有効に行われているか：A

・国際連携、国際活動が活発に行われているか：A

・社会貢献・社会活動などが行われているか：A

上記の評点の理由などに関するコメント：

産学連携として、理化学研究所、情報通信研究機構等と大型研究プロジェクトを進めていることを評価したい。

C) 総評

最近の計算機科学において、データ工学関連分野は、大規模データの管理、解析、活用は極めて重要な課題であり、異分野との連携が期待される分野である。そのような背景をもとに、情報統合基盤技術、データマイニング・知識発見技術、XML・Web プログラミング、科学分野におけるデータベース・機械学習応用の4テーマ毎に、アルゴリズムの提案に加え、処理負荷低減のための計算機資源の効率的な利用の研究まで、幅広く、かつ精力的に研究が進められている。自治体と連携した実証実験、国際統合睡眠医科学研究機構との連携による睡眠データ分析研究、大規模データ管理・分析に関するデータ工学分野の研究推進、科学データの高度利用基盤に関する研究開発と、基盤アルゴリズムの研究、評価に加え、処理負荷低減のための計算機資源の効率的な利用の研究、他分野との連携まで、幅広く、かつ精力的に研究が進められている。

また、積極的に学生、若手研究者の育成に取り組んでおり、重要国際会議に多くの論文を発表すると共に、優秀論文賞に加え学生発表において多数の受賞があるなど、データ基盤分野における若手研究者育成に関し、高く評価したい。

D) その他

特になし

3. 8. 2 計算メディア分野

A) 計画進捗度

- ・顕著な進捗のあったと認められる研究課題と評価すべき点：

「ホモグラフィ変換と画素分布に基づく競泳者位置推定」についてはスポーツ応用のメディア処理として有用な技術を提供している。ただし、報告書においては、その処理内容が簡単に述べられているだけなので、どのような問題をどのように解決したかをもう少し詳述してほしかった。問題の難易度を推し量る上で重要と思われる。

「多視点映像を用いた不特定人称視点映像の閲覧方式」については、作業支援を目的として記録映像を作成することが主な目的である。労働人口の減少などから、作業を自ら学ぶ仕組みは重要であり、効果的な映像を作成しようとする本研究は意義が大きいと考えられる。特に、開発したシステムの定性的な評価実験を通して、Weighted Workload が改善することを明らかにするなど、本システムの有効性を明らかにした点は評価できる。

「多視点映像によるオンサイト資格フィードバック方式」については、自由視点映像を再構成するのではなく、多数枚の画像の切り替え提示によって視点移動感を再現するパレットタイム映像を用いて簡便にオンサイトのフィードバックに用いる技術の開発に取り組んだ点が評価できる。特に、滑らかな多視点映像切り替えを実現するための注視点再設定の自動化や動作中のキーフレーム検出により、多視点映像の切り替え処理の自動化を実現した点は優れていると認められる。先の課題も含めて、多視点映像解析は本グループの特色ある研究課題であり、着実に研究が進められていると思われる。

「文化遺産建造物を対象とした3次元復元に関する研究」については、文化遺産建造物の過去（50-100年前）の画像と現在の画像群を整合させる技術に取り組んでいる。長期間の渡る建造物の形状劣化により、画像の整合が難しくなり、誤対応が発生するという問題が生じるが、これに対して対応に用いるべき特徴点の検出方法を構築した点が評価できる。また、これにより、過去に撮影した際のカメラ位置姿勢の推定も可能になった点も評価できる。報告書にも触れられているように、この成果を基に、過去から現在までの建造物の変化の様子を克明に可視化できれば、優れた研究成果になると思われる。

- ・進捗が不十分であると認められる研究課題と改善すべき点：

進捗が不十分であると認められる研究課題は特に見当たらない。

- ・ H 2 9 年度の評価や指摘に関する改善状況：
国際連携の強化については、若手研究者の長期海外派遣が行われ、成果が得られている。引き続き、国際連携強化に取り組んでほしい。

B) 多角的視点からの評価

S (特に成果がある)、A (良好)、B (おおむね良好)、C (不十分)、X (評価対象外)

- ・ センター内連携が有効に行われているか： X
- ・ 産学官連携が有効に行われているか： A
- ・ 国際連携、国際活動が活発に行われているか： A
- ・ 社会貢献・社会活動などが行われているか： A

上記の評点の理由などに関するコメント：

センター内連携については報告書に明示的な記述がなく評価できないため、評価対象外とした。ただし、他組織との共同研究は活発に行われているため、研究の連携という点では問題ない。

C) 総評

計算メディア分野の課題解決に向けて、新しい視点での研究テーマが加わるなど、適切なテーマが設定されており、また、科学研究費や JST 関連経費など外部資金などを活用して様々な研究が行われている。特に、「実世界計算情報学」として、実世界のセンシング、多様な情報処理、大規模な実世界データベースなどを統合した知能情報メディアの基盤を構築している点は、単に様々なメディア・アプリケーションを個別に構築するのとは異なり、アプリケーション間の連携や、新しいアプリケーション構築の容易性などの点で極めて有効であり、評価できる点である。また、具体的な応用課題としても、新しいメディア技術の開発と並行して、スポーツ応用といった分かりやすいテーマだけでなく、視覚障がい者支援といった社会的包摂性を高める社会的意義の高いテーマを精力的に進めている点は、この研究グループの特徴であり、評価できる。

研究成果の公表については、国際会議などを利用して適切に公表されているが、今後も引き続き、会議や雑誌のインパクトを意識しつつ、研究成果を公表することを期待したい。特に昨年度は若手研究者を長期海外に派遣することを行うなど、国際連携の強化も進めているので、引き続きその方向にも注力してほしい。

4. 総合評価

計算科学研究センターの各研究部門では、本研究評価で示されているように国際的にも評価の高い研究が遂行されており、活発な研究活動を示している。筑波大学においても、計算科学研究センターの活動は先端研究センター群の中でも高い評価を得ており、近年、人員・予算の面からも拡充が図られてきた。平成30年度には新スーパーコンピュータ CYGNUS の導入が進められ、また組織的には計算メディカルサイエンス事業部が新設され、現代的な要請に応えるべく研究体制の整備が進められた。

計算科学研究センターには、第一に、最先端のスーパーコンピュータを利活用した第一級の研究成果をあげることと、時代の変革に対応した社会的な要請に計算科学的な側面から応えることが求められている。各研究部門の活動は、このような期待に応える成果をあげている。

計算科学研究センターの各研究部門には、共同利用・共同研究拠点として国内外の研究のハブとなり、研究コミュニティの求心力となる活動が期待されている。現状において、各研究部門とも、さまざまなプロジェクト研究の中核的な役割を務めることで、十分な実績をあげている。

近年の計算科学に対する社会的要請として、従来からのハイパフォーマンスコンピューティングに加えて、ビッグデータ・機械学習等の新しい展開が求められており、計算科学研究センターにおける活動も、多岐な社会的要請に応える必要が問われている。計算科学研究センターは組織改編によって、これらに応える体制を整備しつつある。研究部門によっては、このような社会貢献・社会活動、産学官連携がそぐわない分野があるが、これらが期待されている研究部門では、原子核物理研究部門、地球環境研究部門、計算情報学研究部門等で社会からの要請に対応する活発な活動が行われており、センターのアクティビティを健全なものとすることに貢献している。

引き続き、学内外の支援を得るべく、共同利用・共同研究拠点として計算科学研究センターの活動を活発化することを期待したい。

研究評価委員会委員長 佐藤 正樹

