筑波大学 計算科学研究センター **令和元年度 研究評価**



Center for Computational Sciences,
University of Tsukuba
Research Assessment FY2019





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、令和元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、当センターの今後の 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、田浦委員長にはとりまとめにご尽力をいただいた。

謹んで、委員の皆様に御礼を申し上げる次第である。

令和3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	P価多	員	会(の割	置		•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	3
2		評	価の	方法	去	•		•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	4
3		評	価執	告																										
	3		1	素料	立子	·物:	理矿	肝究	部	門			•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	5
	3		2	宇宙	自物	理	研ダ	铝部	門			•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	8
	3		3	原一	子核	物	理矿	肝究	部	門			•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	10
	3		4	量于	一物	性码	研究	部	門		•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	12
	3		5	生命	科	学科	研究	部	門		•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	14
	3		6	地球	∤環	境码	研究	部	門		•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	16
	3		7	高性	註能	計算	算シ	ノス	テ・	ムね	研:	究	部	明		•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	18
	3		8	計算	鵟	報告	学矿	究	部	明																				
		3.	8	. 1	_	デー	ータ	基.	盤	分	野		•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	20
		3.	8	. 2	2	計算	算メ	デ	イ	T!	分!	野		•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	23
4		総	合評	呼価	•	•		•	•	•	•	•		•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	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2年9月28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、令和元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。

田浦健次朗	教 授	東京大学情報基盤センター
鈴木 博	教 授	九州大学大学院理学研究院物理学部門
長峯健太郎	教 授	大阪大学大学院理学研究科
中田 仁	教 授	千葉大学大学院理学研究院
尾崎泰助	教 授	東京大学物性研究所物質設計評価施設
長尾秀実	教 授	金沢大学大学院自然科学研究科
富田浩文	チーム	理化学研究所 計算科学研究センター
田山伯人	リーダー	複合系気候科学研究チーム
小林広明	教 授	東北大学大学院情報科学研究科
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2年9月28日現在)

研究評価委員会委員には、「令和元年度年次報告書」、及び必要に応じて、「平成30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)		田浦健次朗
素粒子物理研究部門	素粒子物理分野	鈴木 博
宇宙物理研究部門	宇宙物理分野	長峯健太郎
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	尾崎泰助
生命科学研究部門	生命科学分野	長尾秀実
地球環境研究部門	地球環境分野	富田浩文
高性能計算システム研究部門	高性能計算システム分野	小林広明
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30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. Oakforest-PACS を用いた、物理点における 2+1 フレーバーQCD の大規模シミュレーション【1】。PACS Collaboration がこれまで行ってきた、物理点クォーク質量、複数の格子間隔(0.085fm、0.064fm さらには0.04fm)、空間サイズが 10fm 超というパラメターでの 2+1 フレーバーQCD の配位生成は、世界最高水準の QCD 配位の生成であり、今後 QCD 物理量の系統誤差を抑えた決定への幅広い応用が期待される成果である。R1 (2019)年度は特に、これらの配位を用いてローメソンの質量とグザイバリオンの質量の高精度計算を行い、これらに対する有限体積効果の定量的解析を行っている。
 - 2. 核子構造研究【3】にも着実な進展が見られる。R1 (2019)年度は特に、核子形状因子のうち核子スカラー電荷と核子テンソル電荷を決定している。これも物理点クォーク質量直上で得られた成果である。
 - 3. K 中間子セミレプトニック崩壊の形状因子計算【4】。素粒子標準模型におけるメソンの電弱行列要素の非摂動論的決定は、メソン崩壊の観測から新物理の兆候を見いだす上で極めて重要である。ここでは、物理点クォーク質量に対する大規模格子 QCD シミュレーションと実験値から CKM 行列のうち Vus を決定し、標準模型での値と矛盾しない結果を得ている。今後連続極限で値がどのように影響を受けるか大いに関心が持たれる。
 - 4. 有限温度・有限密度 QCD の相構造の研究【7】【8】【9】。国際的な共同研究も含め、限温度・有限密度 QCD の相構造の解明を着実に進めている。特に、【9】の摂動論的モデルのフィットによるクォーコニウムスペクトル関数の評価は、スペクトル関数や輸送係数一般に対する方法論の試みとして大変興味深い。
 - 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【10】。平衡確率分布の概念に基づいた従来のモンテカルロシミュレーションは、被積分関数が実正定値でない多くの興味ある物理系に対して(ほぼ)無力である。このいわゆる符号問題を解決する一つの可能性としてテンソルネットワーク法が近年活発に研究されている。これは元々は量子スピン系において考えられた方法であるが、当研究グループは早い時期から素粒子物理学への応用を狙い、世界最先端の研究を行ってきた。特に、クォークの扱いを念頭に置いたグラスマンテンソル繰り込み群はこの研究グループが初めて考

案したものである。R1 (2019)年度には特に、2 次元でゲージ群が U(1)ではあるが、theta 項を含み符号問題があるゲージ理論の解析、またスピン系ではあるが、世界で初めて 4 次元の系への応用を行うといった顕著な成果がみられた。当研究テーマに対しては、R2 (2020)年度より科研費基盤研究 (A) 「テンソルネットワーク法による計算物理学の新展開」も採択されており、さらに着実な成果が挙げられることを期待したい。

- 6. この他にも、素粒子標準模型を超えた理論の探索【11】は多フレーバー ゲージ理論による共形場理論の実現を追求するもので、技術的に難しい問 題ではあるが堅実な進捗が見受けられる。
- ・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: 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と思われる:
- 1. gradient flow (勾配流)を用いた QCD 物理量の定義に基づく研究【6】。 ここでは、H30 (2018)年度の評価で指摘された K 中間子 B パラメター測 定の理論的定式化がなされ、2+1 フレーバーQCD の有限温度での物理量 についてこれまでの研究で方法論がほぼ確立している。ただし、物理点 クォーク質量での数値シミュレーションはまだ連続極限が取られていな いなど現状不満足である。より大規模で系統的な研究が望まれる。
- 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【10】では、 H30 (2018)年度の評価で強調された非可換ゲージ理論への拡張に向けた 方向としてU(1)ゲージ理論の定式化と2次元での数値シミュレーション がなされた。今後、非可換ゲージ群を取り入れた系の解析が強く望まれ る。
- ・H30年度の評価や指摘に関する改善状況: 指摘された方向性について、真摯に対応しようとした姿勢が見られる。

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: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

筑波大学計算科学研究センターは、大規模数値計算による QCD 研究の我が国における発祥の地と言える。その伝統に加え、分野の新しいアイデアや進展を積極的に先取することで最先端の成果を世界に発信し続けている研究拠点である点は頼もしい。伝統という面では、High Performance Computingに dedicate されたスーパーコンピュータを用いて世界最高水準の数値シミュレーション(当研究分野では QCD に関するもの)を行い、その成果を物理に活用する拠点となっている。新しいアイデアという面では、今年度の例で言うならば、巨大体積での QCD 配位生成は、マルコフ鎖モンテカルロシミュレーションの critical slowing down を回避する可能性(Luescher による master field のアイデア)をいち早く取り入れたものであり、また、テンソルネットワークの格子ゲージ理論への応用も基本的定式化の段階から野心的に取り組み世界的成果を挙げている。当研究グループには、こうした伝統と先取の気質のバランスの取れた研究活動を今後も継続して頂けるよう期待したい。

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:

ブラックホール、初代星、銀河形成、原始惑星系円盤、宇宙生命科学、輻射輸送、乱流など、非常に多岐にわたる研究が遂行されていて、その幅の広さは高い評価に値する。特に令和元年度にはブラックホール影の直接撮像という大きな成果が観測サイドからあり、その観測データの解釈には巨大ブラックホール周辺で光子がどのように運動するか、数値シミュレーションで解き明かすことが非常に重要な要素となる。大須賀教授の相対論的輻射輸送の理論研究とコード開発はこのテーマに直結するものであるため、注目を集めることとなった。今後も該当分野に対して理論サイドからの貢献が期待される。

・ 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:

研究成果に挙げられているトピックで、該当する論文が出版されていないものがいくつかあるようであった。今後、それらの成果をまとめて来年度に向けて論文という形で出版することが望まれる。各研究成果の説明において、対応する出版論文や学位論文がどれなのかを番号で明記して対応づけてもらえるとなお良い。

- ・H30年度の評価や指摘に関する改善状況: H30年度の評価では特に改善が必要となる指摘はなかった。
- ・その他のコメント:

成果報告書では、若手の人事異動などについても簡単にコメントがある と、入れ替わりが激しい人員については把握しやすくなり、評価がしやす くなると思われる。

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: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:

高性能計算システム研究部門と輻射輸送シミュレーションコードの開発、 生命科学研究部門生命機能情報分野との宇宙生命連携、計算メディカルサイ エンス事業部との連携など、当センターでなければできない連携活動が活発 に行われているのは素晴らしく、S評価とした。

国際連携、国際活動については、各個人の共同研究というレベルでは交流があるようだが、それを超える研究者の恒常的な行き来や連携があるわけではないようなので、A評価とした。

ブラックホール影の直接撮像に伴って巨大ブラックホール研究に強いスポットライトが当たり、梅村教授と大須賀教授によるアウトリーチ・出張講義なども数多くなされていて、充実した活動が行われているので社会貢献についてもS評価とした。

C)総評

宇宙物理研究部門においては、部門長である梅村教授の強力なリーダーシップのもと、幅広い研究が行われている。例えば、ブラックホールへの物質降着、初代星、銀河形成、星団形成、原始惑星系円盤など、その多様さについては高く評価できる。スケールも宇宙の大規模構造から星に至るまで広い領域をカバーしている。また、単なる宇宙物理学の枠に収まらない宇宙生命計算科学連携による星間空間のキラル有機分子に関する研究などもあり、今後の展開も期待される。計算科学センターの強みを生かした様々なコード開発研究も活発である。査読論文は22本の出版があった。

教育活動としては、6本の修士論文、4本の学士論文があった。博士論文がなかったのは残念であるが、昨今は博士課程にそもそも進学する学生数がどこの大学でも減少しているので仕方がないかもしれない。研究費の獲得状況は非常に活発で、11件の代表者と7件の分担者の科研費などの外部資金があり、グループ全体の活動レベルの高さを裏付けるものである。特に若手の助教らが若手研究枠などを活発に獲得しているのは好ましい状況である。20項目に及ぶ研究成果の説明で、研究がまだongoingで該当する出版論文がなかったものについては来年度の出版を期待したい。

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: 中性子星内殻の構造の有限温度 HFB 計算

核構造論の発展と現在の理解から望まれることであったにもかかわらず、有限温度かつ対相関までを考慮した中性子星内殻の構造の非制限計算は今まで皆無であったと言ってよい。計算技法的な問題を克服し3次元座標空間表現でのコードを新たに開発したことは、中性子星内殻の構造研究に大いに役立つ。年次報告書ではパスタ構造が例示されているが、出版論文ではバンド計算にも言及されており、例えばグリッチ現象の正体に迫る上でも有意義と期待される。

- ・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: 特になし。
- ・H30年度の評価や指摘に関する改善状況: 前年度評価でのコメントには,今年度の成果に該当する内容がなかった。
- 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: B
- ・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:S
- ・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:

国際共同研究が多岐にわたって活発に進められていることは注目に値し, 高く評価される。センター内連携に関して,矢花教授が本部門も兼任され, 理論や計算手法の共通性からも量子物性部門と協力関係にあることが想像 されるが、本年度の成果の中に明瞭な連携の痕跡が見当たらなかった。中性子星の構造の研究が進展しているので、今後宇宙物理部門と適切に連携できれば新たなフェーズを拓く可能性があろう。大いに期待したい。

前年度に公開された InPACS は、単年度でなく継続的に評価すべきものであろう。アクセス数のデータ等を出して、その管理についても報告されてはどうか。

C)総評

今まで同様令和元年度も、中務孝教授のリーダーシップの下で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核構造・核反応への微視的アプローチを軸とし、大規模数値計算によりそれを様々な問題に応用するという方向を中心に、その様々な意味での拡張のための基礎的・革新的研究が進められている。新たな計算法・計算コードの開発、中性子・陽子対凝縮といった新たな自由度の導入、集団座標に沿った質量パラメータといった基礎的問題への取組みが継続・発展しており、さらに今年度は中性子星の構造への展開が特筆される。計算科学研究センターという利を生かし、大規模数値計算を実行すると同時にそれを生かした将来の発展も見据えて、バランスよく研究が進められている。国際連携も非常に活発である。中性子星の構造に加え r 過程元素合成に関する研究への寄与が強く意識されているようであり、今後のセンター内外での天体物理学との連携による展開を期待させる。

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、時間依存密度汎関数理論に基づき記述する汎用のソフトウェア SALMON (Scalable Ab initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience) の開発を精力的に進めており、顕著な進捗が認められる。令和元年度はスーパーコンピュータ「富岳」上での大規模計算の準備を進め、高い実行性能で 10000 原子を超える系の計算が可能となった。今後、より現実に即したシミュレーションが可能となり、実験との連携が強化されていくと期待される。また手法の拡張にも進展が見られ、Maxwell + 分極力場 MD 法の開発により、光の入射、薄膜中の光の伝搬、光ー分子相互作用により生じる分子振動と光の変調、シグナル計測、といった一連の実験プロセスに対応したシミュレーションが実現しつつある。SALMON の普及活動として、講習会を積極的に開催しており、ユーザーコミュニティを含めた分野の発展にも貢献していることも評価できる。

- ・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: 該当なし。
- ・H30年度の評価や指摘に関する改善状況:

H30 年度の評価では、「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」とのコメントがあったが、この点に関しては十分な改善はなされていないように見受けられるため、さらなる検討をお願いしたい。

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: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: A

上記の評点の理由などに関するコメント

国際テニュアトラック助教の制度が順調に機能しており、国際共同研究が活発に行われている。開発したアプリの公開・普及に向けた努力が継続的に行われており、産学官の連携の柱となっている。

C)総評

本研究分野では、物質科学および物性物理学において計算科学に基づくシミュレーション・理論研究を進めており、特に光と物質の相互作用に関連した第一原理的研究において秀でたものがある。時間依存密度汎関数理論+Maxwell 方程式+Newton 運動方程式を連立させた実空間・実時間シミュレーションは独自性の高い計算手法であり、方法論及びソフトウエアSALMON の開発において着実な進展が見られる。SALMON の普及活動として、講習会を積極的に開催しており、関連研究者やユーザーコミュニティを巻き込んで当該分野の発展にお大きく貢献している。令和元年 5 月より国際テニュアトラック助教が着任し、国際共同研究の核としての活動を活発に進めていることが見受けられ、今後の益々の発展が期待される。またスピン渦誘起ループ電流を基本要素としたボゴリューボフ・ドジャン形式の超伝導理論の構築においても本質的な進展が見られ、今後のさらなる発展と応用展開が期待される。当研究分野では、それ以外にも興味深い研究が実施されているが、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 生命科学研究部門

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:

生命機能情報分野では、光化学系 II 酸素発生中心における水分解反応機 構に関する研究において大きな成果が認められる。平成30年に時分割構造 解析法の実験技術の飛躍的な発展により水分解反応の触媒サイクル全ての 反応中間体構造が解明されたことに基づき、大規模計算を実施した結果、実 験結果と良い一致が得られた。しかしながら、例えば Mn-O などの距離に ついての一部の結果は不一致を示したことから、計算及び実験における分解 能の妥当性を考察し、今後、分解能の高精度化が実現した場合には計算結果 に近くなると予想した。実験へのフィードバックが成された良い成果である と判断できる。また、ヘリオバクテリアの励起エネルギー移動に関する研究 成果から若手研究者が活躍していることがわかる。中分子環状ペプチドの膜 透過プロセスの研究、無水プロトンの伝導物質の伝導機構の解明や種々の計 算手法の開発、励起状態構造変化の解明や星間空間のメタノール生成に関す る研究成果も順調に進展している。昨年末から世界的流行をしている新型コ ロナウィルスに関するメインプロテアーゼに関する阻害剤に関する計算成 果は早い対応で研究展開している様子が伺われ、多方面に渡り研究で貢献し ていることがわかる。さらなる貢献に期待したい。

分子進化分野では、現在までに渦鞭毛藻の系統的色素体ゲノム解析を継続的に実施してきている。今年度の研究成果では、宿主渦鞭毛藻と緊密に共生するシアノバクテリアの発見により、海産シアノバクテリアの多様性、生態、進化に重要な知見を見出している。これらの結果から、真核微生物と共生関係を持つ新奇シアノバクテリア系統が海洋環境中に棲息する可能性を見出す重要な発見をしている。これらの成果に続く今後の解析に期待できる。また、338遺伝子データの大規模系統解析を実施することにより、解明できていなかった M.maris などの系統的位置を解明している。緑色色素体を持つ渦鞭毛藻の系統関係の研究など順調に進展している。さらに、生命科学研究部門内生命機能情報分野との共同研究が実施されており、細菌タンパクの近縁性からタンパク質立体構造の検討を行っている。分子系統解析と全原子分子動力学シミュレーションの両手法を用いて実験で解析できなかったタンパク質2次構造の予測を行っている点など、生命科学分野の両部門の特徴を上手く活かした研究成果は高く評価できる。新しい取り組みも実施しており今後の展開を期待する。

・ 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:

研究成果という観点からは特に不十分であると認める点はないが、前年 度以前の活動と比べると、センター内連携、例えば、宇宙物理分野や高性 能システム分野などとの連携研究のさらなる推進を実施できれば、計算科 学研究センターとしての研究活動もより良いものになると思われる。また、 データサイエンス分野の共同研究なども実施できれば新しい研究領域が広 がる可能性があるため今後の展開を期待する。

・H30年度の評価や指摘に関する改善状況:

前年度では、産学官連携についてはおおむね良好という評価であったが、本年度では宇宙航空研究開発機構(JAXA)宇宙科学研究所との共同研究を開始していること、また、量子科学技術開発機構(QST)との共同研究も実施していることから、産学官連携については十分に改善していることが認められる。これらの共同研究の推進など今後の展開を期待する。

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: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

国際連携やセンター内連携により継続的に順調に研究成果が上がっている。 産官学連携の展開が進展してきており、良好である。学会委員や討論会実行 委員なども詰めており社会貢献、社会活動についても順調と判断できる。

C)総評

緑色色素体を持つ渦鞭毛藻の系統関係の研究など順調に進展している。生命科学研究部門内の両分野との共同研究が実施されており、生命科学分野での計算方法の開発やプログラムの高性能化などに見られる技術革新、そこから展開される生命現象解明に向けた研究など、生命機能情報分野、分子進化分野ともに順調に進捗している。産学官の共同研究の実施、外部資金の獲得、大型プロジェクトへの参画や若手研究員の活躍が認められ、今後の研究推進に期待したい。

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:

地域気候研究では、熱環境について新潟での台風時のフェーン現象など大きく寄与していたことを見出すなど多くの成果を上げている。また、当研究室の強みを生かした都市気候をターゲットとする LES、VLES の開発や、その開発における計算機科学研究者との協働作業は高く評価できる。地球規模研究では、昨今、メディアなどで人為起源の地球温暖化へ多くの焦点があてられるところ、人為起源と自然変動を区分けして地球温暖化の理解を探求することは、科学者として真摯な姿勢であり高く評価する。中長期予測の研究も当分野では重要な研究課題であり、様々な現象・時間スケールの研究が行われていることも評価したい。

・ 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:

地球温暖化の理解への探求は科学者として真摯な姿勢であり大変評価する。一方、この研究はピアレビューを経て出版し世に問うことがこの分野の発展につながるため、これを強く推奨する。また、筑波山の観測の利活用をより具体化することが望ましい。中期予測の研究はよく解析されているが、地域や時間スケールに依存する予測可能性にとって何が本質であるかをモデリングへフィードバックする試みがあるとよりよい。

H30年度の評価や指摘に関する改善状況:

昨年度指摘されていた気象モデルの計算効率の向上などは、LESのGPU 化を推し進めるなど一定の成果が得られている。また、機械学習を取り入れ積極的に手法の開発に取り組んでいる。筑波山の気象観測の利活用についての方向性が指摘されていたが、何をどのように何のために有効利用するするのかが今一つ伝わってこない。より具体的な成果を目指し推進していくことを期待したい。

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: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:

国内では、民間企業とも共同研究を行っている。国際連携については、昨年度は、ベルギー王立気象研究所およびアリゾナ州立大、学都市気候研究センターより多くの連携が始まっている。国内外の都市気候研究の拠点の一つを形成しており、大変高く評価する。新聞、テレビなどのメディアでの研究紹介も驚くほどの数があり社会的にも大きな貢献をしている。LES 開発などセンター内での計算機科学者との連携も適切に行われている。センター内連携 LES 自体の計算手法研究なども視野に入れるとよいと感じる。

C)総評

他機関や民間企業とよく連携し、ここ一年でも多くの成果をあげている。 教員のそれぞれの強みを生かした研究がなされており更なる発展を期待したい。計算科学センターの研究室群として、計算機科学者との連携も活発になっていると感じる。シミュレーション科学、データ科学の融合など計算機科学者との連携は今後ますます重要になってきており、当センターの地球環境分野はこれに沿ったものであると確信する。

気候変動適応法が施行されて以降、地域気候・地域気象は、ますます社会要請の高い分野となってきており、当センター地球環境分野は、着実にその要求に応えてきている。地球規模研究では、我々の住む対流圏と上層の熱圏の関係を重力波が結びつける研究は古くて新しいが、このような地球環境を包括的に理解する一助となる基礎研究は引き続き続けてほしい。また、地球温暖化を仮説の域であるとする態度は、人為起源の温暖化を煽り気味なメディアや安易な研究に大きく警鐘を鳴らすものである。より説得力をもって議論し、しかるべき学術雑誌へ出版されることをお勧めする。

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) 多重複合型演算加速スーパーコンピュータ Cygnus のシステム及びランタイムソフトウェア,及びアプリケーションソフトウェアの開発多重複合型演算加速スーパーコンピュータ Cygnus に具備されている CPU,GPU,FPGA を適材適所で活用するためのプログラミングフレームワークの研究では,既存技術及びこれまでの研究成果を発展・統合させるとともに、OpenACC で記述された複合型システム向けコードを適切なデバイス向けに自動的に分離させることが可能な言語処理系の開発に成功している.その結果,複合型システムのプログラミング記述量の大幅な削減を達成している.また,地球環境研究部門で取り組む都市気象モデルシミュレーションコードの OpenACC コード化に取り組み,本言語処理系による複合型システム向け統一プログラミングが適用できることを確認している.これらの成果は,複合型システムである Cygnus の利用環境をより一層改善する重要な成果である.また,GPU・FPGA 連携計算を効率的に行うための通信技術の研究にも取り組み,FPGA による演算・通信融合型並列処理システム,OpenCL 対応 FPGA 間通信機能などを開発し,通信ベンチマ
- (2) 大規模並列分散ファイルシステム性能及び拡張性の向上 大規模並列分散ファイルシステムのファイル I/O 性能強化をめざして、 NVMe SSD などの高速ストレージをノードローカルストレージとして持つ 階層的なストレージシステムの研究に取り組み、ノード数に比例して性能 が向上するバーストバッファシステムを開発している。そして、大規模メ タゲノムデータ解析において本バーストバッファシステムが有効に機能し ていることを実証している。これらは実用上重要な成果である。さらに HPCI で実運用している Gfarm ファイルシステム機能強化にも取り組み、 安全なフェールオーバと暗号化データ格納を新たに実装し、HPCI 共有ストレージのさらなる安全・安心化に貢献していることは高く評価できる。

ークプログラム,および実アプリを使って GPU・FPGA 複合型システムでの評価分析を詳細に行い、その有効性を明らかにしている。これらの成果

・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: 該当無し.

は複合システムの応用範囲を広げる重要な成果である.

・H30年度の評価や指摘に関する改善状況:

H30年度の成果をさらに発展させ、より実用的な成果を生み出している.

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: 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:

アプリケーションの研究開発に取り組む地球環境研究部門などセンタ内連携に取り組み、研究開発したプログラミングフレームワークの有効性を実証していることは優れた取り組みである。また、Gfarm の継続的機能強化に取り組み、HPCI に提供・運用していることは重要な社会貢献として高く評価できる。

C)総評

CPU・GPU・FPGAから構成される複合型スーパーコンピュータ Cygnus を運用しながら、その利用環境の高度化に関する研究開発に取り組み、多くの重要な成果を生み出していることは高く評価できる。さらに、我が国の高性能計算基盤である HPCI の共有ストレージとして Gfarm を提供し、その高度化に継続的に取り組んでいることも重要な社会貢献であると認められる.

CPU・GPU・FPGA を適材適所で利用できるプログラミングフレームワークの研究成果は、複合型システムの高い潜在能力に期待を寄せる多くのアプリケーション研究者・技術者にとって有用であると考えられることから、今後はその成果を HPCI ユーザコミュニティに展開し、利用者のフィードバックを得るような体制の構築も検討していただきたい。それにより、本プログラミングフレームワークのさらなる高度化へつながることを期待している.

数値計算ライブラリや行列計算の高速化と精度向上に関する研究では、基礎的な成果が生み出されていると思われるが、今後はライブラリの運用システムへの登録・提供、実アプリケーション研究者と連携などを行い、その有用性を実証していただくことを期待したい.

D) その他

若手研究者(助教)の外部資金獲得状況が芳しくないように見受けられるので、改善を期待したい.

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、RDF・知識ベース・LOD、データベース応用・データサイエンスの4テーマ毎に、アルゴリズムの提案、処理負荷低減のための計算機資源の効率的な利用、コンテンツ解析、他分野との連携によるデータ解析の研究まで、幅広く、かつ精力的に研究が進められている。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、大規模グラフ処理・分析に関するデータ工学分野の研究推進と、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、国際共同研究プロジェクト「欧州との連携による公共ビッグデータの利活用基盤に関する研究開発」が日欧合同の評価委員による最終評価を受け、高い評価結果を得ている.

情報統合基盤技術では、時系列データ、ログデータ等の大量のシークエンスデータにおいて、処理コストの高い行パターンマッチングに着目し、フィルタリング処理による行パターンマッチングの効率化手法を提案している。また、シーケンス OLAP 分析として、階層関係にある複数のパターンに対するパターンオカレンスを発見し、それらのパターンオカレンス間の親子関係の抽出のために、行パターンマッチングを同時に効率よく実行する手法を提案し、国際会議にて成果を報告している.

データマイニング・知識発見技術では、大規模グラフ分析の高速化として、グラフクラスタリング手法の代表的なアルゴリズムである Modularity クラスタリングの高速化手法、新たなアルゴリズム gScarf 法を提案している. gScarf 法では各部分グラフに対するクラスタリング結果を記憶しておき同型となる部分グラフを新たに計算する際に記憶した計算結果を再利用することで高速化を図っており、14億エッジ規模のグラフデータに対して CorMod 法よりも最大 1,100 倍程度高速であることを示している. また、確率的な制約を考慮した行列分解を行なう「確率的非負値行列分解(probabilistic NMF)」

のアルゴリズムを提案し、グラフにおけるコミュニティー検出およびトピックの検出の問題に適用し、従来手法を上回る精度を達成できることを示している。さらに、大規模グラフからのデータ抽出に用いられる正規パス問合せ(regular-path query; RPQ)を FPGA を用いて高速化し、その効果を示している。

RDF・知識ベース・LOD では、知識ベースに対する単純質問応答(simple question answering)手法を提案し、1)エンティティ検出,2)エンティティリンキング,3)関係予測の3ステップからなる手法により、最新の手法と遜色ない精度を達成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、畳み込みニューラルネット(CNN)による特徴量抽出部と Long short-terms memory(LSTM)を用いた判定部から構成される MC-SleepNet と呼ばれる新しい自動判定手法を開発した。この手法は技師との判定一致率 96.7%と非常に高い精度でのステージ判定を達成している。また、生体信号のノイズ除去に関し、MC-SleepNet 法で得た知見を基に NR-GAN モデルを開発し,ノイズの事前知識を一切用いることなく,ノイズに最適化した周波数フィルタと同等の性能を達成している。さらに,IoT クッションを用いて,機械学習によるユーザの着座姿勢推定を高い精度で行えることを示している。

・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

・H30年度の評価や指摘に関する改善状況:

H30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年度から、異分野連携として着手された国際統合睡眠医科学研究機構との睡眠データ分析研究がジャーナル論文として成果を出し、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

してほしい。

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:S
- ・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、情報通信研究機構の国際大型研究プロジェクトにて、高い最終評価を得られたことを評価したい。

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、RDF・知識ベース・LOD、データベース応用・データサイエンスの4テーマ毎に、アルゴリズムの提案、処理負荷低減のための計算機資源の効率的な利用、コンテンツ解析、他分野との連携によるデータ解析の研究まで、幅広く、かつ的確に研究が推進されている。大規模グラフ処理・分析に関するデータ工学分野の研究推進と、基盤アルゴリズムの研究、評価に加え、FPGAを用いた高速化の研究、他分野間連携として、国際統合睡眠医科学研究機構との睡眠データ分析研究まで、順調に研究が進展し、多くの成果が得られている。また、国際共同研究プロジェクト「欧州との連携による公共ビッグデータの利活用基盤に関する研究開発」が日欧合同の評価委員による最終評価を受け、高い評価結果を得ていることを評価したい.

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:

視覚的探索活動の計測と解析は、人間の行動を分析する上で重要はファクターであり、そのための仮想現実システムを開発するとともに、サッカーの競技状況下および微小重力環境下という通常ではなかなか分析できないような難しい状況下での視覚的探索活動を計測・分析を実現できた点は評価できる.

拡張現実システムを実応用レベルで利用するには、キャリブレーションを精密に行うことが重要であるが、一般には手間がかかるプロセスとなっている。ここでは、投影型の拡張現実システムにおけるプロジェクタ・カメラシステムのキャリブレーションにおいて、モバイルカメラを用いた簡易かつ高精度なキャリブレーション手法を考案し、拡張現実システムの実用性を高めた点が評価できる。

- ・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: 特に見られない.
- ・H30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、企画されてはいたものの年度後半の新型コロナウィルスの影響で実施できないものがあったのは致し方ないと考える. 終息後に改めて活発化され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:B
- ・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: B

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、計算メディカルサイエンス事業との連携についての記述はあるものの、具体的な取り組み、研究成果等が書かれておらず、

どの程度有効な連携になっているのかが不明なためBとした.

社会貢献等については、研究成果の中に社会貢献につながると期待される ものは散見されるものの研究成果の社会貢献への展開に関する具体的な記述 が見られないためBとした.

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 関連経費など多様な外部資金を活用して様々な研究が行われている。特に、「実観測データとシミュレーション結果とを融合させた情報を、人間に分かり易い形で提示し人間社会へフィードバックするために、計算メディアを仲立ちとするコンピュテーションの新しい枠組み」を構築しようとしている点は、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を連携して使える技術を開発するといった点で有効であり、評価できる点である。ただ、先にも述べたように研究成果の中に社会貢献につながると期待されるものは散見されるものの研究成果の社会貢献への展開に関する具体的な記述が見られない点は残念であり、今後に期待したい。

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.

D) その他

研究成果を報告する文書としてみた場合, どのような結果(知見)が得られたかという点が重要であると思われるが, 何をしたかという記述はあるものの, そこから何が得られたかという記述が少ないものが見られる. 良い研究を進めているだけに惜しまれる.

計算メディカルサイエンスとの連携については具体的な記述が見られないのが残念である。本グループのアクティビティの高さをアピールするためにも、計算メディアの報告書の部分にも、それらのアクティビティを記載した方が良いのではないかと思われる。

4. 総合評価

筑波大学計算科学研究センターは、物理学、生命科学、地球環境科学などの自然科学分野と、高性能計算、データ基盤、計算メディアなどのコンピュータ・サイエンスとが同じ組織の元で密に連携しているセンターとして、内外の評価が高いセンターである。今年度もその伝統に沿って、各分野における質の高い研究と、センター内での連携が精力的に行われた。

また、全国共同利用を前提として先進的なスーパーコンピュータを整備して共同研究を受け入れる、共同利用共同研究拠点としても認定されており、全国的な貢献を果たしている。令和元年度には GPU と FPGA を搭載した先進性の高い新スーパーコンピュータ Cygnus の運用が開始され、大型のスーパーコンピュータ Oakforest-PACS と並んで、先進的な計算機科学研究と、計算科学研究を両立させるマシン配備を行っている。これらのスーパーコンピュータを用いた、自然科学分野と、高性能計算分野の連携が多く行われているのがセンターの伝統的な強みである。一方令和元年度には計算メディカルサイエンス事業部が新設され、研究分野の拡充も進められている。

高性能計算分野以外の連携も進んでいる. データ基盤分野においては国際統合睡眠医科学研究機構との連携で睡眠データ分析研究が進んでいる. データ解析やビッグデータ処理は幅広い分野が連携を期待している分野であるのでこのような連携がますます発展することを期待したい.

当センターは国の高性能計算基盤(HPCI)において大学が中心となって構成する第 2 階層の資源提供機関としても、計算科学コミュニティに貢献しているが、HPCI の枠組みにとらわれず、大学の情報基盤センターや情報系の研究機関と協調して、データ基盤、計算メディア、AI など幅広い分野で学際的貢献ができるよう、センターが発展することを期待したい.

研究評価委員会委員長 田浦 健次朗