

筑波大学 計算科学研究センター
令和2年度 研究評価



Center for Computational Sciences,
University of Tsukuba
Research Assessment FY2020

目 次

はじめに	1
1. 研究評価委員会の設置	2
2. 評価の方法	3
3. 評価報告	
3. 1 素粒子物理研究部門	4
3. 2 宇宙物理研究部門	6
3. 3 原子核物理研究部門	8
3. 4 量子物性研究部門	10
3. 5 生命科学研究部門	12
3. 6 地球環境研究部門	14
3. 7 高性能計算システム研究部門	16
3. 8 計算情報学研究部門	
3. 8. 1 データ基盤分野	18
3. 8. 2 計算メディア分野	21
4. 総合評価	23

はじめに

筑波大学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2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、各研究部門・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、各研究部門・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、委員の皆様にご挨拶を申し上げます。次第である。

令和3年12月

筑波大学計算科学研究センター
センター長 朴 泰祐

1. 研究評価委員会の設置等

筑波大学計算科学研究センター運営協議会（以下「運営協議会」）は、令和3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による研究評価委員会の設置、及び書面による評価の実施を決定した。

なお、研究評価委員会の委員は、次のとおりである。

委員氏名	職名	所属
田浦 健次朗	教授・センター長	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
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
長尾 秀実	教授	金沢大学大学院自然科学研究科
富田 浩文	チームリーダー	理化学研究所計算科学研究センタ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	理事・副学長	九州大学

（順不同、敬称略、所属・職名は令和3年9月27日現在）

研究評価委員会の委員には、「令和2年度年次報告書」、及び必要に応じて「令和元年度研究評価」を参照していただき、評価の実施をお願いした。

なお、評価を担当する委員は、次のとおりである。

研究部門・分野等	委員氏名
委員長（全体の評価）	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

（委員長、研究部門・分野順、敬称略）

2. 評価の方法

以下の「令和2年度評価報告（評価フォーム）」に記入することにより、各研究部門・分野における研究活動・成果について評価を行った。

なお、各研究部門・分野の評価、及び全体の評価については、「3. 評価報告」並びに「4. 総合評価」に示すとおりである。

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：
- ・ 令和元年度の評価や指摘に関する改善状況：

上記のほか、その他のコメントがあれば、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、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. PACS Collaboration による Oakforest-PACS を用いた大規模シミュレーション【1】。これまでの研究に引き続き、物理点クォーク質量、 10fm^4 超という大体積、連続極限に向けた3種類の格子間隔（ 0.085fm 、 0.065fm 、 0.045fm ）に対する量子色力学のゲージ場配位生成が順調に進捗（パラメータによっては既に完了）している点は、高く評価できる。こうしたパラメータセットは、格子シミュレーション計算における系統誤差の低減に極めて理想的なものである（ここで得られた物理点クォーク質量パラメータの値は私自身も有限温度でのゲージ場配位生成に利用させて頂いている）。最も大規模な格子間隔 0.045fm 格子サイズ 256^4 の計算は OFP から「富岳」へ成功裏に移行されているようで、この点も高く評価できる。これらは大変コストの掛かる計算であるが、一旦こうしたゲージ場配位が得られれば、量子色力学の各種物理量の測定に長年に渡り活用でき、そこから得られるであろう研究成果は計り知れない。実際、当該年度は、上記のゲージ場配位を利用することで、現実的クォーク質量を用いた K 中間子セミレプトニック崩壊形状因子計算【2】、格子 QCD を用いた核子構造研究【3】などの研究課題が遂行されている。特に前者の研究では CKM 行列要素の値に関して興味深い結果が得られており、上記ゲージ場配位生成の進行とともにさらに不定性の少ない重要な成果が期待される。
2. Wilson 型クォークを用いた 2+1 フレーバー有限温度 QCD における臨界終点の研究【7】、Highly improved staggered quark を用いた有限温度・密度 QCD の研究【8】、クォークユニウムスペクトル関数の研究【9】。大野氏は有限温度・有限密度 QCD の相構造、ダイナミクスを伝統的な、しかし独自の観点から綿々と追求されており、着実に成果を挙げている継続性が評価できる。後者二つの研究は国際共同研究である点も評価できる。
3. 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】。いわゆる符号問題の解決は、極めて興味があるがこれまで計算科学の適用が困難であった広い範囲の問題の研究を可能にすると考えられている。素粒子物理学の文脈では、有限密度 QCD やカイラルゲージ理論などがそれにあたる。この符号問題の解決に関しては、現在、複素 Langevin 法、Lefschetz-thimble 法、テンソルネットワーク法の三者（いずれも日本人研究者の貢献が大きい）がしのぎを削っており、どの方法が優位かは予断を許さない。当研究グループは、かねてよりテンソルネットワーク法の基本的定式化と数値実験に精力的に取り組み、世界的な成果を挙げて来た。テンソルネットワーク法の特徴は、系の体積に対する計算量の増加がほとんどないことで、これが現実的な系の研究において優位性を持つと期待させる。一方で、テンソルネットワーク法には系の空間次元に対して計算量が急激に増大する困難があり、この点の解消が大きな課題になっている。当研究グループは、今回、現実的な 4 次元の複素スカラー場理論の有限密度での相変化を 1024^4 という巨大体積で観測し、この困難の解消が可能であることを示して見せた。その後、同様の成果を 4 次元の Nambu-Jona-Lasinio 模型でも得ている。これらの成果は極めて高く評価できる。このプロジェクトは科研費基盤研究(A)

の支援を受けている。また、共同研究の大学院生が日本物理学会学生優秀発表賞を受賞している。今後の更なる進展に大いに期待したい。

- ・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：
特になし

- ・令和元年度の評価や指摘に関する改善状況：

1. 昨年度、**gradient flow** (勾配流) を用いた **QCD** 物理量の定義に基づく研究、に対してあった「より大規模で系統的な研究を望む」については、改良型 **Wilson** クォークを用いた格子 **QCD** シミュレーションによる有限温度・有限密度 **QCD** の研究【6】で述べられている系統的研究の遂行により部分的には答えられている。連続極限の問題は依然残っている。
2. 昨年度、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、に対してあった「非可換ゲージ群を取り入れた系の解析が望まれる」については、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】で述べられているように、目下の研究ターゲットにされている。

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：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

当研究グループは、伝統と先取の気質のバランスの取れた研究活動を継続しておられるように思われる。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システムを用いて世界最高水準の巨大体積 **QCD** ゲージ場配位生成を行い、それを素粒子物理の解析に活用する拠点になっている。先取の気質という面では、今年度の例で言うならば、テンソルネットワーク法の4次元場の理論における世界初の成功に代表されるものである。素粒子物理学における計算科学は真に最先端の計算リソースを要求するため一定の研究成果を得るには極めて忍耐強い研究を要するが、当研究グループはその困難に打ち勝ち一定の成果を出し続けているように思われる。

D) その他

特になし

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：

多重 AGN と銀河の共進化、降着円盤から生じる円盤風と X 線スペクトル、銀河衝突がもたらす大質量ブラックホールの非活性化、原始銀河団の形成過程、ニュートリノを含む宇宙構造形成の Vlasov シミュレーション、AGN ジェットと星間物質の相互作用、宇宙輻射輸送計算の FPGA 化、生体輻射輸送計算と機械学習を利用した計算メディカル研究等、さまざまな課題について研究が進展中であり、その幅の広さは非常に高く評価できる。大須賀教授、森准教授、吉川准教授によるそれぞれ別のテーマについてのプレスリリースなどもあり、活発な研究発表が認められる。

- ・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：

特になし

- ・令和元年度の評価や指摘に関する改善状況：

令和元年度の評価書においては論文投稿が伴っていない研究報告がいくつかある点を指摘したが、令和 2 年度は 23 本の出版論文があり、成果報告の状況が上向きになっていると認められる。

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： 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： A

上記の評点の理由などに関するコメント

HPC 部門との連携として宇宙輻射輸送計算の FPGA 化、宇宙生命連携、計算メディカルなどの活動があり、「センター内連携」について S 評価とした。

コロナ禍において国際連携は非常に難しい時期ではあったが、海外研究者との共著論文は出版されており、個人レベルでの研究交流は続けていることが認められる。

C) 総評

宇宙物理研究部門は、グループ長である梅村教授の強力なリーダーシップのもと、大きなグループに成長して活発な研究活動が行われている。梅村教授と矢島准教授による計算メディカル研究においては、創発的研究支援事業に採択され (代表：矢島)、宇宙物理の輻射輸送計算の

知見が本当に生体医学に応用される大きな弾みとなりそうで大いに期待が持てる。森准教授の *Nature Astronomy* 論文では銀河衝突が大質量ブラックホールの冬眠を生み出す可能性が議論されており、興味深い研究結果である。吉川准教授によるニュートリノの Vlasov シミュレーションは、Oakforest-PACS での計算結果が論文出版され、富岳におけるプロダクションランが始まっており、こちらも今後の進展が期待される。このように多様な研究は計算科学研究センターならではのものである。修士論文 7 編、学士論文 6 編、出版論文 23 本、シンポジウムや研究会などの発表などもあわせると合計 80 以上の研究発表がなされており、非常に活発である。外部資金も多数獲得している。梅村教授には日本天文学会の学会長という重責も担われて、計算科学研究センターが天文学会全体に対して大きな貢献を果たしたとも言えるだろう。

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：

前年度の重要な進展の延長とそれをさらに展開するための準備（中性子クラスト構造に関する研究）や、今後の展開次第で大きな発展に繋がる可能性を感じさせる研究（高スピン状態の八重極相関、ベータ崩壊への pn 対相関効果、二重ベータ崩壊の計算、等）はあるものの、令和 2 年度の研究だけをもって「顕著な進捗があった」と言えるものは見当たらなかった。進捗が目に見えづらい年度があっても不思議ではなく、次年度以降の発展に期待したい。

- ・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：

特になし

- ・令和元年度の評価や指摘に関する改善状況：

令和元年度評価でセンター内連携に関する明示的な記述がないことを指摘したのに対し、令和 2 年度報告では概要欄で今後のセンター内連携について言及があった。展開に期待したい。JST-ImPACT プロジェクトに関して、プロジェクト自体は終了しているが核データの公開と更新を継続することが述べられている。大変意義深い活動で、敬意を表したい。昨年度評価に引き続き、改めて「社会貢献」として例えば更新履歴やアクセス状況などその運営・管理に関わる活動の記載を勧めたい。

その他のコメント

研究業績欄に、リストにある令和 2 年度の部門メンバーの名前が含まれていない論文や講演が散見される。過去にセンターで行われた研究によるものや、共同研究による成果であろうと推察するが、もし記載するのであれば事情が分かるような形にさせていただくことを希望する。

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：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

COVID-19 による困難の中にも関わらず、活発な国際共同研究が継続されている。センター内連携は、量子物性部門・矢花教授の兼任はあるものの、本年度の成果の記述の中に明瞭なものが見当たらないため B 評価とした。上述した通り今後の発展が期待される。社会貢献・社会

活動についても、既述の通り意義深い活動をされているので、その内容や成果について具体的な記載があるとより評価しやすい。

C) 総評

中務孝教授のリーダーシップの下、原子核の密度汎関数理論による核構造・核反応への微視的アプローチを基盤とし、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として研究活動が推進されている。令和 2 年度は、核子超流動性を考慮した有限温度 HFB ソルバーや二重ベータ崩壊核行列要素の効率的計算法といった新たな計算法・計算コードの開発という数値計算上の基礎的問題、及び高スピン状態における八重極相関、ベータ崩壊に対する陽子・中性子対相関の影響、核融合過程での超流動性の効果や集団運動の質量パラメータに対する時間反転対称性の破れの影響といった、物理として挑戦的な問題への取組みが主となっている。多様なテーマに取り組みながらも個々の研究内容は革新的である。偶然に萌芽的なテーマが重なったようで、進捗が見え辛い印象を受けるが、将来の発展を見据えたものと捉えられ、今後の大きな成果に繋がることを期待される。新型コロナ禍の中にも関わらず国内外で活発な共同研究が行われていることは印象的である。

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2年度においてコード内部の統一化がなされ、v.2として一般公開された。本開発により孤立系から周期系まで統一的に扱えるようになり、ユーザーへの利便性が向上しただけでなく、今後のコード開発の基盤が整備されたことは評価できる。SALMON の整備に伴い、現実には即した様々な応用研究が展開されている。例えばナノ薄膜の高次高調波発生シミュレーションにより、その機構の理解を深めると共に高次高調波を最大化する膜厚を予測することが可能となっている。またプラズモニックメタ表面の非線形光学応答のシミュレーションは企業との共同研究となっており、基礎理論の整備、ソフトウェア開発、応用研究が三つ巴となつてうまく展開している。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。小泉グループではベリー接続を位相変数とするボゴリューボフ・ド ジャン形式の超伝導理論の構築を精力的に進めており、粒子数を保存する定式化と計算手法の開発に成功しており、今後のさらなる発展と応用展開が期待される。

- ・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：

該当なし

- ・令和元年度の評価や指摘に関する改善状況：

令和元年度の評価では、「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。」とのコメントがあったが、令和2年度には4件のプレス発表が行われており、研究成果を広く周知する努力がなされている。

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：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

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ェア SALMON の開発において着実な進展が見られる。ソフトウェアの整備に伴い、応用研究や企業との共同研究も盛んに進められており、光と物質の相互作用の第一原理的研究では国際的にも先導的な役割を果たしている。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大きく貢献している。国際テニユアトラック助教は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認められ、今後の益々の活躍が期待される。また強レーザー場における励起過程の研究も実験グループとの国際共同研究として進められており、実験とシミュレーションの協奏的な研究が展開され、今後のさらなる発展が予期される。量子物性分野は物質と光との相互作用を軸として国際的にも評価の高い研究が展開されており、今後もこの強みを活かした研究が展開・発展していくことが望ましいと考えられる。

D) その他

特になし

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、中分子環状ペプチドの膜透過プロセスに関する研究において大きな成果が認められる。この膜透過プロセスを抽出するための計算手法を開発し、現実的な計算コストで生体分子の機能発現に関わる長時間ダイナミクスを効率的にかつ精度良く抽出することを可能にした。この方法を用いて中分子環状ペプチドの膜透過プロセスが評価できたことにより、中分子医薬を実現する設計情報を提供し得る可能性が示され今後の展開に期待できる。また今年度から、マテリアルズインフォマティクスを用いた半導体組成解析を新たにスタートさせている。機械学習と分子動力学計算を組み合わせた研究では結晶系での成功例があるが、欠陥がある系では問題が生じることが知られている。第一原理計算や実験結果と機械学習を組み合わせたシミュレーターの創出技術は、生命系での組成解析でも期待できる。この研究内容での今後の研究成果が注目できる。さらに無水プロトン伝導物質中の伝導機構の解明に向けた解析も新たにスタートさせている。企業助成金による産学連携によるこれらの研究を開始し、研究の新しい動向が見出される。これらの研究成果の発展に期待する。

分子進化学分野では、現在まで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。今年度では渦鞭毛藻に関連する研究結果が多く報告されている。非光合成化したクリプト藻の色素体ゲノムの解読など他研究機関研究者と共同で研究成果を報告している。渦鞭毛藻に共生した共生藻痕跡核の解析結果など大きな成果が認められ、継続的な研究の今後の発展に期待する。また今年度は、異分野間連携の研究成果が報告されている。計算科学研究センター生命科学研究部門機能情報分野との共同研究として、系統解析における方法論およびタンパク質立体構造と分子進化を統合した研究が進んでいる。さらに、国立感染症研究所寄生動物部の研究者との共同研究もスタートして研究活動の広がりも見出せる。今年度では国際連携や国際活動の報告も多く評価できる点である。例えば、カナダ・ダルハウジー大学との嫌気性ミトコンドリア機能解析に関する共同研究や、チェコ共和国・オストラヴァ大学とのオルガネラ DNA ポリメラーゼの進化に関する共同研究などの今後の研究成果に期待する。

- ・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く、前年度以前からの継続的研究成果も多く報告されている。また、今年度からスタートさせている研究内容も多くあり、産学連携による研究や、国際連携による研究など幅広く展開させている。分子進化学分野における国際連携の研究成果として国際論文が多く出ると更に良いと思われる。新しくスタートさせた研究領域が大きく発展することを期待する。

- ・令和元年度の評価や指摘に関する改善状況：

センター内連携推進については、宇宙物理分野との宇宙生命連携の実施が行われている。また、センター生命科学研究部門内での機能情報分野と分子進化学分野の間でも連携研究の成果が報告されており、センター内連携による研究は前年度に比べ改善されている。データサイエンス分野との共同研究として、産学連携によるマテリアルズインフォマティクスによる研究成果報告がなされており十分に改善している。これら連携研究のさらなる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：S
- ・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

センター内連携が改善されて有効に行われており順調に研究成果が上がっている。また、産学連携によるマテリアルズインフォマティクスに関連する研究も順調に進捗している。国際連携や国際活動も活発に展開されている。

C) 総評

渦鞭毛藻の系統関係の研究など継続的かつ順調に進展している。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など大きな成果が認められる。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。産学官連携による共同研究の実施、外部資金の獲得、若手研究員の活躍が認められ、今後の研究推進や国際連携による研究成果の多くの報告を期待したい。

D) その他

特になし

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：

ローカルな気象予測について：都市街区気象 LES モデルの開発では、ドライミストの効果モデル内に取り入れ、街区での気温評価が劇的に完全され、熱中症救急搬送者予測モデルを様々な方法で比較・検証し、実際に「使えるモデル」として着実に進歩している。VLES の力学的な改良とともに高く評価する。

グローバル・総観場の気候研究について：太陽活動変化による重力波伝播のメカニズムを3次元ノーマルモード展開での理論で明らかにしようとする試みは、長期的な気候を理解する上で大変重要である。熱圏での力学・熱力学、特に状態方程式などは対流圏と異なってくるが、今後その影響の評価も期待したい。また、気圧配置の特定のためにデータ科学を用いるなど、時勢にマッチした研究もおこなわれており、更なる研究発展を期待したい。また、S2S 予測をするために、モデル結果の解析により中緯度ジェットのパイアスを軽減する必要性を見出したことは今後のモデル改善につながり評価したい。このほか、北極域における予測精度急低下と夏季の循環場との関係について、多くのモデルの評価を行い現象の再現性に結び付けていることも今後のモデル改良の指針となりうる。そのほか、気候研究のための自己組織化マップなど新規な課題にも取り組んでおり現象の関連性を明らかにする取り組みは様々な応用が期待できる。火山灰追跡モデルシステムの構築：火山灰の予測に、モデルシミュレーションだけでなく、XバンドMPレーダー観測値を用いてデータ同化を用いて予測精度を向上させたことは、新しい試みであり、高く評価する。

- ・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：

LESでドライミストの設置場所や噴霧量を自由に変更できるユーザーインターフェースの開発を行っているが、これらを含めて使い方等のユーザーへの周知を強化するとよいと思われる。また、筑波山の観測の利活用をどのように取り入れているかを具体化することが望ましい。

- ・令和元年度の評価や指摘に関する改善状況：

総観規模の研究では、予測において何が重要かの研究がおこなわれており、昨年の指摘事項に対しての改善が大いに認められる。筑波山の気象観測の利活用についての方向性については、いまだ何をどのように何のために有効利用するするのかが伝わってこない。より具体的な目標を掲げることが望ましい。

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：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

C) 総評

多くの研究機関と民間企業と連携し、構成員の数に比して、大変多くの成果を上げていることは驚きである。多くの本質的な成果が学術誌に掲載されており、最終的なアウトプットまで昇華されていることは素晴らしい。また、理論的な研究と実利的な研究がバランスよく行われており、データサイエンスを適切に駆使し、それぞれの得意な分野を最大限生かしていると感じる。一方、都市スケールの研究と全球規模の研究が個別に行われている感があり、その中間のメソスケール気象の研究が強化されれば大変よい体制になると思われる。各課題の深掘りは引き続き進めつつ、課題間の連携を意識されるとよい。

昨年同様、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。

D) その他

特になし

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

本テーマは、性質の異なる演算加速装置、すなわち GPU と FPGA を統一的にプログラミング可能なシステムの開発と、本格的なアプリケーションコードを使って本システムの記述性と高速化の効果を評価し、その有用性を明らかにする取り組みである。本システムのコア技術となる MHOAT によって FPGA と GPU という 2 種類のデバイス用に分離された OpenACC コードは、それぞれのバックエンドコンパイラ (GPU: PGI Compiler, FPGA: OpenARC) によってオブジェクトが生成され、最終的に gcc によるリンクを経て、1 つのホストプログラムから FPGA と GPU の各デバイス用カーネルプログラムを起動可能なオブジェクトが完成する。本年度は MHOAT の実用性を宇宙物理学研究部門が開発する宇宙初期天体シミュレーションコードの実装によって明らかにし、併せて GPU のみの計算に比べて 17 倍もの高速を達成したことは、MHOAT の記述性の高さで生成されるオブジェクトコードの高速性の両面を実証したことであり、顕著な進捗があったと認められる。

2. ノードローカルストレージを用いたシステムソフトウェアの研究

計算ノードのローカルストレージを活用してファイル I/O の高速化を実現する取り組みである。単一共有ファイルシステムへのアクセスにおいて、高いスケーラビリティを発揮できることを東工大の TSUBAME3.0 および筑波大学の Cygnus で実証している。また、成果を Gfarm システムへ実装し、直ちに実運用に供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：

GPU アプリケーションのチェックポイント・リスタート機能や、FFT の高速化や連立一次方程式の高速求解法など優れた成果が生み出されていると思われるが、やはりセンターでの研究開発成果はその実用性が問われる。センターのシステムを活用して、運用システムへの導入や、センターライブラリとして利用者に提供し、活用されることが重要と思われる。学会、研究会発表にとどまらず、その実用性についての評価も期待したい。

・令和元年度の評価や指摘に関する改善状況：

令和元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。昨年指摘した若手研究者の外部資金の獲得状況も改善されていることは評価できる。

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

C) 総評

昨年同様ではあるが、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。その成果を是非運用に生かす方策を進め、成果の学界・産業界への展開をはかり、ユーザコミュニティの形成、関係計算科学分野への貢献などを進めてほしい。

研究テーマには「大規模データ解析アプリケーション、深層学習フレームワークの高速化」があげられていたが具体的な成果の記述が無く、データ科学の取り組みが少し低調にも思われる。センター内研究部門連携にとどまらず、筑波大学や関連機関の大規模実験設備を使った実験科学と Cygnus の特徴を生かしたシミュレーション科学・データ科学の融合分野の開拓などの取り組みも期待したい。

D) その他

研究テーマに「「富岳」における数値計算ライブラリ開発及び性能評価」があり、また理研から共同研究受け入れもあるようだが、その取り組みの概要と得られた成果が示されていないかった。

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、データ工学分野ではデータ利活用の基本技術の発展と共に異分野との連携が期待されている。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・データサイエンスと多岐のテーマに関し、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。また、科学技術振興機構・未来社会創造事業（令和元年11月～令和2年度）、JST 戦略的創造研究推進事業「さきがけ」（令和2年12月～令和7年度）、NEDO（令和2年度～令和3年度）等の外部研究資金を受け、研究の内容が広く評価されている。

情報統合基盤技術では、ストリームデータを対象に研究が進められている。連続的に配信するストリーム形態のデータに対し様々なストリーム処理エンジン（SPE）が開発されている。ストリームとして配信される多次元データを分析するために、複数次元に基づくデータ分析の代表的手法である Online Analytical Processing（OLAP）を SPE 内にて実行するため、OLAP 処理用基本演算子として cubify を考案し、従来の SPE と OLAP ツールを並行利用の場合と比較し高い性能が得られ、その有効性を明らかにした。また、GPS 搭載モバイルデバイスや SNS の普及に伴い、人々の移動に対応した様々なロケーションベースのサービスにおいて、その位置や興味が時々刻々と変化する移動オブジェクトに対する空間キーワード検索の手法を新たに開発した。さらに、位置情報や地理情報等の空間データを実社会におけるデータ活用において効率よく利用するために、空間データストリーム処理 Apache Flink を基に、空間データストリームを処理可能な GeoFlink を開発し、グリッド構造の空間索引をシステム内部で用い、不要な距離計算等を大幅に削減し、効率的な処理を可能としている。

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、Affinity Propagation の高速化および分散グラフクラスタリングのスケラビリティ向上の研究が進められている。Affinity Propagation は多次元データを含む多様なデータオブジェクトを対象としたクラスタリングアルゴリズムである。最適解に対して非常に性能の良い近似解を求めることができる性質が知られており、幅広い領域で利用されているが、クラスタの検出には全点对計算を必要とするため膨大な計算時間を必要とする。そこで Data Skewness とその決定性を利用することで、必要最低限のデータのみ計算するようにアルゴリズム ScaleAP を提案し、数百万件程度のデータセットにて、精度を劣化させず従来手法より 100 倍以上高速な処理を可能とした。また、実世界のグラフデータが持つエッジには、両端のノードが持つ次数に大きな偏りが存在することに着眼し、次数比の偏りを捉え同期不要なエッジを特定することで不要な同期処理を削減し、効率的な分散グラフクラスタリングを行う DSCAN 手法を提案した。さらに、サブグラフ数え上げ問題として、パターンのサイズに上限を設定し、サイズが上限となるあらゆるパターンに対して数え上げを行なう問題に取り組み、5 ノードサブグラフ数え上げ（ESCAPE）に対し GPU による並列処理手法を提案、評価した。グラフにおける 2 頂点の超転換の最短距離を求めるために、既存手法である PLL（pruned landmark labeling）に対し

て、最小頂点被覆によってランドマーク数を削減可能であることを示した。

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) 関係予測の各ステップ毎に単純なニューラルネットワーク、あるいは、ニューラルネットワーク以外のシンプルなモデルを適用する手法を提案し、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。また、知識ベース中のエンティティ間の関係に着目した検索インタフェース (RelFacet) を提案し、「関係ファセット」を加えることで、利用者が興味のあるエンティティおよび関連の強い関係に対話的に表示し、関係に関連した情報の探索により適していることを評価実験で示した。

科学分野におけるデータベース・機械学習応用では、筑波大学国際統合睡眠医科学研究機構 (WPI-IHIS) と連携、新しい自動判定手法を Sleep-CAM を開発した。本手法は、判定精度を高めるために深層ニューラルネットの採用に加え、その構造決定には既存の自動判定の知見が多く利用されており、自動判定の手順をモデルで再現する。また、Class Activation Mapping を基に判定理由の提示機構を構築し、手法が自動判定に近い基準で判定を行っていることが明らかにし、医師・技師によるダブルチェックの労力削減につながった。さらに、異種テキストの相関を利用した潜在的な知識の抽出として、宇宙航空研究開発機構 (JAXA) の宇宙機の設計レビューを実施する際レビューの支援を目的に、JAXA 内で蓄積された宇宙機に関連する異なる文書群 (仕様書および不具合記録) の関連付けを行なう手法を開発した。

- ・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：

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。また、国際統合睡眠医科学研究機構や JAXA 等と成果をあげており、他機関との共同研究強化をさらに進められたい。

- ・令和元年度の評価や指摘に関する改善状況：

令和元年度の評価、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。平成29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支援ツールとして成果を出しており、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：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

産学連携として、国際統合睡眠医科学研究機構との睡眠データ分析研究が支援ツールとして成果、高い最終評価を得られたことを評価したい。また、外部資金の獲得も積極的に行われている。

C) 総評

最近の計算機科学において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、データ工学分野ではデータ利活用の基本技術の発展と共に異分野との連携が期待されている。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・データサイエンスと多岐のテーマに関し、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。筑波大学国際統合睡眠医科学研究機構（WPI-IIIIS）と連携、新しい自動判定手法を Sleep-CAM が実用化に向けて進展していること、また、宇宙航空研究開発機構（JAXA）との連携研究等、他分野との共同研究が実施されている。さらには、外部研究資金の複数採択は、本研究プロジェクトの内容が学外からも評価されていると考える。

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：

1. 自由視点画像をテキスト情報が連動する電子メディア

多視点映像と文章が連動するインタラクティブな電子メディアを開発し、立体芸術を対象とした閲覧方式を提案している。ポインティングなどの説明文への操作によって多視点画像の視点を切替えたり、多視点画像の視点切替え操作によって説明文を強調表示することができる、多視点映像と説明文が相互に作用する新たなインタラクティブ電子メディアを実現している。新しい多視点映像の使い方として興味深い成果と言える。

2. 腹腔鏡映像から内臓の3次元形状復元法

単眼腹腔鏡映像から、AR手術ナビゲーションシステムなどでの使用に資する密な3次元点群によって構成される3次元臓器モデルを生成する手法を考案している。深層学習を用いて腹腔鏡画像から生成したデプス情報と、Shape from Motionで推定した疎な3次元点群を統合し、臓器全体の形状が高密度で復元された3次元モデルを獲得できることを示している。従来の手法より高密度かつ分布が均一な3次元点群の生成が可能であることを示しており、International Forums on Medical Imaging in Asia (IFMIA2021)においてBest Paper Awardを受賞するなど高い評価を得ていると認められる。

3. 視覚障がい者のためのTurn-By-Turnナビゲーションの情報表示デザイン

視覚障がい者のターンバイターンナビゲーションを支援するために、音と振動を利用した新しいインタフェースを提案している。音と振動によるナビゲーションの指示は、視覚障がい者の歩行に対して最小限かつ十分な手がかりを与えるように設計されており、予備的なシステムを構築し、視覚障がい者を対象とした被験者実験を通してその有用性を確かめている。この研究は、社会的包摂性を高めるという点で極めて重要な研究であり、引き続き研究を進めて頂くことを期待している。

・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：

特になし

・令和元年度の評価や指摘に関する改善状況：

計算メディカルサイエンスとの連携については、研究成果などが明示的に記載されるようになっており、前年度の指摘に適切に対応していると思われる。

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：A

・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：B

上記の評点の理由などに関するコメント

1. 産学官連携については、企業との共同研究が実施されているので、一定の産学官連携が行われていると推察され、Bとした。しかし、7.異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等での記述がないので、産学官連携としての位置づけが明確でないように思われる。次回以降の報告書ではその点を積極的に明記することが望ましい。
2. 社会貢献等については、学会等の委員会活動によるものが認められるものの、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。研究内容として社会貢献につながるものがあるだけに、社会貢献としての側面を報告書にも明示されることを期待したい。
3. センター内連携については、計算メディカルサイエンスとの連携による成果が出ており、有効に行われていると判断した。ただ、7.異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等においてセンター内の異分野連携点が明記されていないので、次回以降の報告書ではその点を明記した方が良いと思われる。

C) 総評

計算メディア分野の課題解決に向けて、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、共同研究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点を評価したい。特に、「グローバルに広がる人間社会とそれを取り巻く環境（生活空間や都市環境など）を対象とし、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ーテーションの新しい枠組み」を提案している点は、一つのフィロソフィーに沿って研究を展開しようとする姿勢が明確であり、評価できる。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と思われるが、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

報告書の記載項目で空欄の部分が数カ所見られる（例えば、7.異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等の異分野間連携（センター内外）や産学官連携など）。該当する事項がないのであれば、該当なしと明記した方が良いと思われるし、なんらかの関連する事案があれば、極力記載する方が良い。空欄は良い印象にはならないので、検討をお願いしたい。

上記に加えて、報告書として見たとき、図の説明が十分でないものが見られた（例えば図2、図10）。計算メディアの場合、図はその成果を示す重要な情報であり、その図で何を示そうとしているのか丁寧に説明されていることが重要である。その点にも留意して欲しい。

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。各分野の評価委員からは総じて高い評価を受けている。

また、研究部門の他に多くの課題に応じた研究開発室を立ち上げ、研究部門間の連携が実際に機能するよう組織的な工夫を行っている。さらに、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。令和元年度からは 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。Cygnus の特徴を生かした利用推進に関しても継続的な努力が行われているように見受けられる。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。令和元年度からは計算メディカルサイエンス事業部が新設され、研究分野のさらなる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

