

Center for Computational Sciences,  
University of Tsukuba  
**Annual Report FY2019**

筑波大学 計算科学研究センター  
**令和元年度 年次報告書**



筑波大学

**計算科学研究センター**  
Center for Computational Sciences

## 目次

|                                            |     |
|--------------------------------------------|-----|
| まえがき .....                                 | 2   |
| 1 センター組織と構成員 .....                         | 4   |
| 2 令和元年度の活動状況 .....                         | 8   |
| 2.1 計算科学研究センターの次のステップに向けて .....            | 8   |
| 2.2 令和元年度の活動方針 .....                       | 9   |
| 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 ..... | 9   |
| 2.4 国際連携と異分野融合 .....                       | 12  |
| 2.5 センターシンポジウム .....                       | 13  |
| 2.6 今後のあり方 .....                           | 13  |
| 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 .....                         | 42  |
| III. 原子核物理研究部門 .....                       | 74  |
| IV. 量子物性研究部門 .....                         | 91  |
| V. 生命科学研究部門 .....                          | 113 |
| V-1. 生命機能情報分野 .....                        | 113 |
| V-2. 分子進化分野 .....                          | 133 |
| VI. 地球環境研究部門 .....                         | 148 |
| VII. 高性能計算システム研究部門 .....                   | 167 |
| 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 .....                     | 230 |

## 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、2019年に設立28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。2019年度には、前年度から開始したセンター独自のマンスリーサバティカル制度（センターの教員・研究員を数週間～数ヶ月単位で海外派遣）を広く活用し、本学が提供する一般のサバティカル制度より柔軟で利用しやすい形での海外派遣を通じて、海外主要研究拠点との共同研究をより密に行う環境を提供しています。また、このカウンタープログラムとして、海外拠点の研究者を同じように短期間～中期間で柔軟に招聘する中期招聘制度も継続して運用し、双方向の人的交流を通じた国際共同研究の活発化に取り組みました。

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。2019年度からは第10世代のセンター独自コンセプトによるコ・デザインに基づくスーパーコンピュータである Cygnus (PACS-X)の運用を開始し、GPUとFPGAを組み合わせて相補的に利用することを世界で初めて実用化した画期的な多重複合型演算加速システムを実現、運用開始しました。

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、高性能計算機システム、計算情報学の8つの研究部門があり、43名の専任教員が従事している他、研究員26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14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」については、2019年度より「計算メディカルサイエンス事業部」という形でセン

ターにおける位置づけを明確化し、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継続し、医理工連携のコンセプトの元、共同研究と人材交流を加速しています。

本小冊子は、平成最後である 2019 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。

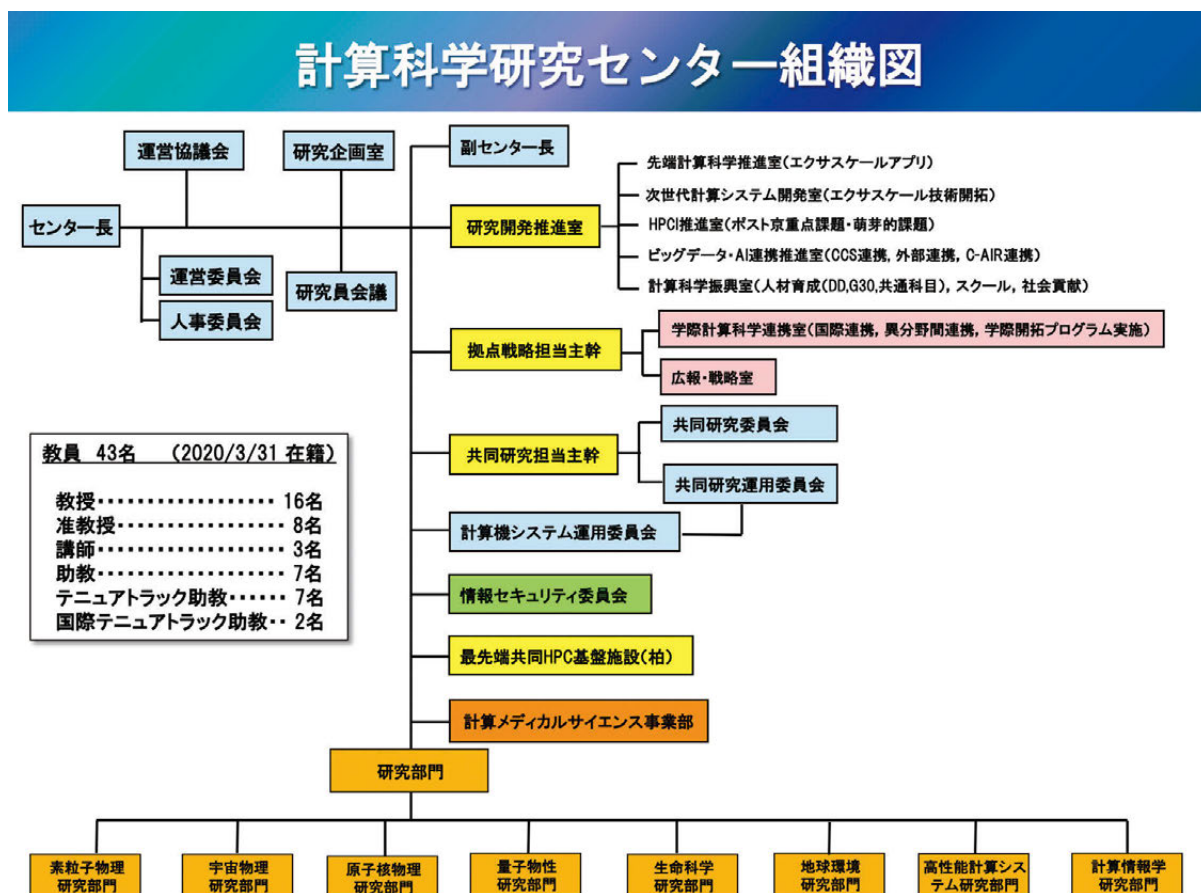
2020 年 6 月吉日

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          | 朴 泰祐             |
| 副センター長         | 矢花 一浩            |
| 運営協議会          | 委員長 佐藤 正樹 (東京大学) |
| 運営委員会          | 委員長 朴 泰祐         |
| 人事委員会          | 委員長 朴 泰祐         |
| 研究企画室          | 委員長 朴 泰祐         |
| 研究員会議          | 議長 朴 泰祐          |
| 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 天笠 俊之
  - 学際計算科学連携室                                  室長 亀田 能成
  - 計算科学振興室                                          室長 高橋 大介
- 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 建部 修見
- 情報セキュリティ委員会                          委員長 朴 泰祐
- 最先端共同 HPC 基盤施設施設長 田浦 健次朗（東京大学） 副施設長 朴 泰祐

## 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、新谷 栄悟
- 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、福島 肇、朝比奈 雄太、井上 茂樹、五十嵐 朱夏
- 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                      温凱、Bharat Kumar

## 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                                    |
| 講師    | 前島 展也                                         |
| 助教    | 佐藤 駿丞                                         |
| 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 真史、Arqum Hashmi、<br>廣川 祐太 |
| 客員教授  | 小野 倫也（神戸大学）                                   |
| 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）                                |
| 准教授   | 原田 隆平                                      |
| 助教    | 庄司 光男、西澤 宏晃、堀 優太                           |
| 研究員   | 三嶋 謙二、鬼頭（西岡） 宏任、Kowit Hengphasatporn、満田 祐樹 |
| 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    | 日下 博幸（部門主任）、田中 博     |
| 助教    | 松枝 未遠、Doan Quang Van |
| 研究員   | 山上 晃央、西 暁史           |
| 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、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）、<br>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） |
| 准教授 | 天笠 俊之       |
| 助教  | 塩川 浩昭、堀江 和正 |
| 研究員 | 太田 玲央、宮本 隆典 |

### 計算メディア分野

|       |                    |
|-------|--------------------|
| 教授    | 亀田 能成（分野リーダー）、北原 格 |
| 助教    | 宋戸 英彦              |
| 共同研究員 | 白川 友紀（特命教授）        |

## 2 令和元年度の活動状況

### 2.1 計算科学研究センターの次のステップに向けて

本センターの活動として、2019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、超高速計算機システム研究部門、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の導入であると同時に、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、その後もセンターとしての研究力を着々と強め、令和 2 年 3 月末において 43 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 令和元年度の活動方針

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、2019 年 4 月より運用を開始した第 10 世代の PACS システムである Cygnus (PACS-X) を活用し、コ・デザインのコンセプトに基づく理工連携研究を強力に推進する。さらに、「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事業部」を中心に、異分野間連携を強化する。国際共同研究拠点化に向けた研究体制の構築も継続して進める。

## 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), 多重複合型演算加速クラスター Cygnus (PACS-X) (81 ノード, 2.5 PFLOPS) 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。本プログラムでは、大規模計算を必要とする革新的研究課題、異分野間連携を推進する研究課題、および、本センターのスタッフと共同で推進する研究課題を公募し、学際計算科学の共同研究を推進する。公募する

分野は、科学分野として、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、計算機工学分野として、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、学際共同利用プログラムの申請・審査・採択通知・プロジェクト管理等は電子（オンライン）化されており、申請と課題審査の英語化も 2018 年度より実施されている。

## ■ 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、2016 年度に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 4 年目に入り安定した稼働率とユーザ利用率を記録した。Particle Physics, Astrophysics, Nuclear Physics, Material Science, Chemistry, Life Science, Global Environment, Biology, Numerical Analysis, HPC System, Computational Informatics の 11 分野で、計 78 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。

これらの学際共同利用プログラムを含む共同利用・共同研究により、学術論文 305 件を発表した。各分野における学際共同利用プログラムのプロジェクト採択数を表 1 に、学際共同利用プログラムを含む共同利用・共同研究による成果発表論文数を表 2 に、登録者数を表 3 に、学際共同利用プログラムの累積利用率を表 4 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

| 分野                        | 採択件数      |           |           |
|---------------------------|-----------|-----------|-----------|
|                           | 全体        | OFP利用     | Cygnus利用  |
| Particle Physics          | 14        | 14        | 11        |
| Astrophysics              | 11        | 10        | 4         |
| Nuclear Physics           | 11        | 11        | 5         |
| Material Science          | 11        | 11        | 4         |
| Chemistry                 | 5         | 5         | 3         |
| Life Science              | 6         | 4         | 2         |
| Global Environment        | 3         | 3         | 1         |
| Biology                   | 3         | 2         | 2         |
| Numerical Analysis        | 2         | 2         | 1         |
| HPC System                | 10        | 3         | 9         |
| Computational Informatics | 2         | 1         | 2         |
| <b>合計</b>                 | <b>78</b> | <b>66</b> | <b>44</b> |

表2 学際共同利用プログラムを含む共同利用・共同研究による成果として発表された論文の総数

| 区分        | 令和元年度      |             | うち国際学術誌掲載論文数 |             |
|-----------|------------|-------------|--------------|-------------|
|           |            |             |              |             |
| 化学        | 36         | (9)         | 32           | (8)         |
| 材料科学      | 3          | (2)         | 3            | (2)         |
| 物理学       | 114        | (20)        | 103          | (19)        |
| 計算機&数学    | 70         | (14)        | 36           | (11)        |
| 工学        | 48         | (12)        | 14           | (4)         |
| 環境&地球科学   | 18         | (7)         | 17           | (6)         |
| 臨床医学      | 0          | (0)         | 0            | (0)         |
| 基礎生命科学    | 16         | (3)         | 14           | (2)         |
| 人文社会系     | 0          | (0)         | 0            | (0)         |
| <b>合計</b> | <b>305</b> | <b>(67)</b> | <b>219</b>   | <b>(52)</b> |

※右側の（）内には、拠点に所属する者が特に重要な役割を果たしている論文数を示す

表 3 学際共同利用プログラムを含む共同利用・共同研究の登録者数

| 登録者の所属機関      | Cygnus     | Oakforest-PACS |
|---------------|------------|----------------|
| 学内（法人内）       | 148        | 182            |
| 国立大学          | 75         | 101            |
| 公立大学          | 3          | 4              |
| 私立大学          | 17         | 14             |
| 大学共同利用機関法人    | 12         | 21             |
| 独立行政法人等公的研究機関 | 28         | 23             |
| 民間機関          | 3          | 8              |
| 外国機関          | 16         | 18             |
| その他           | 1          | 2              |
| <b>計</b>      | <b>303</b> | <b>373</b>     |

表 4 学際共同利用プログラムの累積利用率

| 区分             | 累積利用率(%) |      |      |      |      |      |      |      |      |      |      |      |
|----------------|----------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
|                | 4月       | 5月   | 6月   | 7月   | 8月   | 9月   | 10月  | 11月  | 12月  | 1月   | 2月   | 3月   |
| Cygnus         |          | 1.4  | 4.4  | 7.8  | 11.8 | 15.1 | 17.6 | 20.2 | 23.7 | 27.0 | 34.8 | 43.2 |
| Oakforest-PACS | 7.5      | 18.0 | 24.0 | 28.1 | 31.3 | 37.3 | 43.3 | 48.2 | 53.7 | 64.0 | 71.5 | 90.4 |

※Cygnusは5月7日運用開始

※初期配分時間に対する消費率(%)

## 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月に同大学で行った。また米国ローレンスバークレー国立研究所（LBNL: Lawrence Berkeley National Laboratory）との合同ワークショップは例年行っている3月開催を4月にずらし、2020年4月に本センターで実施する予定であったが、これは新型コロナウイルス感染症の影響により延期されている（開催日程は未定）。また、同じく例年2月に開催している韓国 KISTI との Japan-Korea HPC Winter school 及び合同ワークショップについては、本来は本センターに関係者を招待して開催する予定であったが、同じく新型コロナウイルス感染症対応のため中止となった。

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。これらのポスト「京」関連プロジェクトについては2019年度末をもって予定通り終了し、大きな成果をもって研究を終結した。

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」は「事業部」として改めて位置づけ、医理工連携の共同研究を加速させた。

## 2.5 センターシンポジウム

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・創出シンポジウム」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。2018年度より同シンポジウムを国際化し、全てのプログラムを英語化し、国際的研究発信力を高める試みを行った。2019年度も継続して同じ形式で国際シンポジウムとして実施したが、本年度は従来2日間に渡って実施していたシンポジウムを1日に短縮した。これは、従来は初日が一般的な招待講演を含めたシンポジウムとし、2日目は学際共同利用に基づく研究の中間及び最終発表という形で実施していたものであるが、1日のプログラムに後者に関するポスター発表を併せて組み入れることにした。これにより、一般講演の聴衆にも幅広く学際共同利用成果を公開でき、併せて同プログラムの学術的周知と成果の共有を推進することができた。

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。2019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、医理工学連携を目指す「計算メディカルサイエンス事業部」における共同研究は、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。

### 3 各研究部門の報告

#### 1. 素粒子物理研究部門

##### 1. メンバー

|     |                                                        |
|-----|--------------------------------------------------------|
| 教授  | 藏増 嘉伸、青木 慎也（客員研究員、京都大学基礎物理学研究所）、<br>金谷 和至（共同研究員、数理物質系） |
| 准教授 | 石塚 成人、谷口 裕介、吉江 友照、山崎 剛（共同研究員、数理物質系）                    |
| 助教  | 大野 浩史                                                  |
| 研究員 | 浮田 尚哉、新谷 栄悟、吉村 友佑                                      |
| 学生  | 大学院生 9 名、学類生 2 名                                       |

##### 2. 概要

当部門では、数理物質系との密接な連携のもと、格子 QCD の大型シミュレーション研究を推進している。2016 年秋から JCAHPC（最先端共同 HPC 基盤施設：筑波大学と東京大学両機関の教職員が中心となり設計するスーパーコンピュータシステムを設置し、最先端の大規模高性能計算基盤を構築・運営するための組織）において Oakforest-PACS（略称「OFP」：ピーク演算性能 25PFLOPS の超並列クラスタ計算機、HPC(High Performance Computing)向けとしては「京」を超える国内最高性能システム）が稼働を開始した。昨年度に引き続き、本年度も筑波大学を中心とした PACS Collaboration に基づく共同研究体制のもと、OFP を用いた大型プロジェクト研究を推進した。これと並行して、有限温度・有限密度 QCD の研究、 $K \rightarrow \pi\pi$  崩壊におけるハドロン行列要素計算、テンソルネットワーク(TN)形式に基づく格子ゲージ理論・スピンモデルの研究、標準理論を超える物理の探求など、活発な研究活動を行った。さらに、格子 QCD 配位やその他のデータを共有する為のデータグリッド ILDG/JLDG の構築・整備を推進した。

国内の計算科学全体の動向として、2015 年度で終了した HPCI 戦略プログラムの後継として、「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題」に関するアプリケーション開発・研究開発が始まった。9 つの重点課題が設定され、9 番目の課題である「宇宙の基本法則と進化の解明」が素粒子物理・原子核物理・宇宙物理分野が対象とする基礎科学的研究課題である。その活動は、<http://www.jicfus.jp/jp> に詳しい。また、重点課題と並行して、2016 年度から 4 つの萌芽的課題が設定され、1 番目の課題である「基礎科学のフロンティア 極限への挑戦」は基礎科学における分野横断的な研究課題であり、本グループも分担機関として参加している。重点課題・萌芽的課題ともに 2019 年度末で終了した。ポスト「京」の名称は正式に「富岳」と決定し、2021 年度以降に一般利用が開始される予定である。

### 3. 研究成果

#### 【1】PACS Collaboration による Oakforest-PACS を用いた大規模シミュレーション

(藏増、石塚、谷口、山崎、吉江、浮田、新谷)

2016 年秋に JCAHPC において Oakforest-PACS(OFP)が導入され、稼働を開始した。OFP はピーク演算性能が 25PFlops であり、HPC 向けとしては「京」を抜いて現在日本最速のスーパーコンピュータである。昨年度に引き続き、本年度も PACS Collaboration に基づく共同研究体制のもと、OFP を用いて物理点における 2+1 フレーバーQCD の大規模シミュレーションを推進した。

過去 30 年以上にわたり、格子 QCD は主にハドロン単体の諸性質解明を目指して来た。現在の世界的な状況においては、2 つの大きな問題点が存在する。まず、物理点直上でのシミュレーションが可能になったことは事実だが、実際には物理点のみで物理量の評価を行えるほどの精度を得るレベルには至っていない。次に、現在の格子 QCD シミュレーションに置ける物理量計算は“テーラーメイド”であると評されている。これは、目的とする物理量計算に応じて、適当と思われる物理パラメータ(クォーク質量や空間体積など)を選んでシミュレーションすることを意味している。この場合、例えば、同じゲージ配位を用いた計算であっても、ある物理量に対しては良く実験値と合うが、他の物理量に関しては実験値を再現しないということが起こりうる。OFP を用いたプロジェクトでは、複数の格子間隔において物理点直上で $(10\text{fm})^3$ 超の大空間体積を持つシミュレーションを行うことによって、上記 2 つの課題を克服した計算を実現する。

2018 年度は、格子サイズ  $128^4$  と  $64^4$ (現在世界の格子 QCD 計算で典型的に採用されている格子サイズ) の配位上で  $\pi$ 、K メソン質量と崩壊定数の計算を行い、両格子サイズ上での結果を比較することによって、それらの物理量に対する有限サイズ効果(系統誤差の一つ)を定量的に評価した。2019 年度は、より計算が困難なベクターメソン質量とバリオン質量の高精度計算を実現し、それらの有限体積効果の定量的解析に成功した。図 1(左)は、格子サイズ  $128^4$  と  $64^4$  の配位上で計算された  $\rho$  メソンの 2 点相関関数  $C_\rho(t)$ を用いて、それぞれについて時間  $t$  における  $\rho$  メソンの局所有効質量  $m_\rho^{\text{eff}}(t)=\ln(C_\rho(t)/C_\rho(t+1))$ をプロットしたものである。黒シンボルは  $128^4$  格子サイズの結果で、赤シンボルは  $64^4$  格子サイズの結果である。両データは統計誤差の範囲で重なっているため、有限サイズ効果は無視できることがわかる。局所有効質量は時間とともに単調減少していることが見て取れるが、これは  $\rho$  メソンが不安定粒子(共鳴状態)であり、2 つの  $\pi$  メソンへの崩壊が許されているためである。参考のために、オレンジ色の水平線は実験的に観測されている  $\rho$  メソンのエネルギーを表している。図 1(右)は、格子サイズ  $128^4$  と  $64^4$  の配位上で計算された  $\Xi$  バリオンの局所有効質量を時間の関数としてプロットしたものである。この場合も、異なる格子サイズのデータが重なっているため、有限サイズ効果は無視できることがわかる。 $\Xi$  バリオンは強い相互作用で安定な(崩壊しない) 粒子



であるため、 $t \geq 8$  の領域においてプラトー的振る舞い(局所有効質量が時間に依存しない)を確認できる。青い横棒は2点相関関数をフィットすることによって求めた $\Xi$ バリオンの質量を表しており、格子間隔決定のためのインプットとして用いている。その他のベクターメソン質量やバリオン質量においても、格子サイズ  $128^4$  と  $64^4$  の配位上での計算の結果、有限サイズ効果は無視できるレベルであった。これらの結果は、既に論文(研究論文 A-1)で発表済みである。

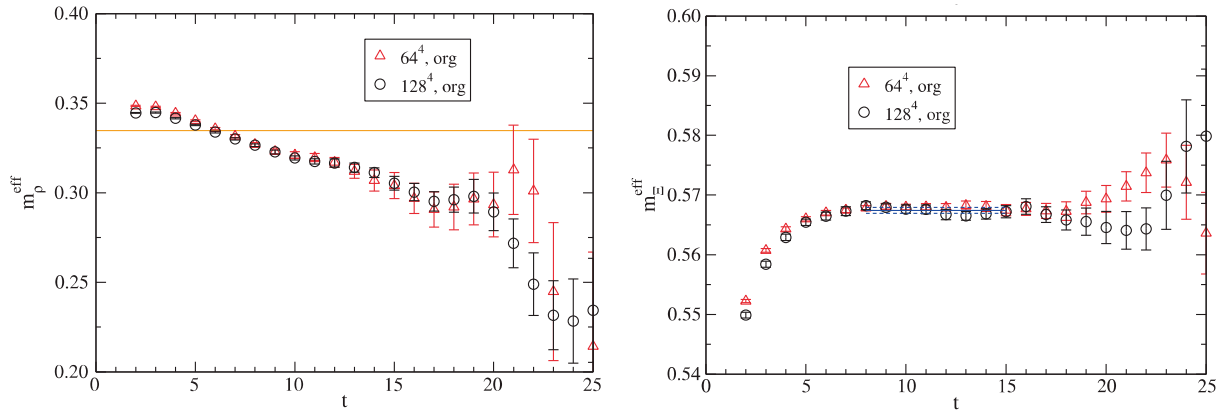


図 1 : 格子サイズ  $128^4$  と  $64^4$  における  $\rho$  メソン局所有効質量(左)と  $\Xi$  バリオン局所有効質量(右)。

## 【2】 格子 QCD によるクォークを自由度とした原子核の直接構成 (藏増、山崎)

藏増、山崎は宇川名誉教授との共同研究により、2010 年世界で初めて格子 QCD によるヘリウム原子核の構成に成功し、そののち 2 核子系の束縛状態である重陽子の構成にも成功した。これらの計算は、計算コストを抑えるためにクエンチ近似かつ重いクォーク質量を用いた試験的なものであった。その後、広島大学石川健一准教授を共同研究者に加え、真空偏極効果を取り入れた 2+1 フレーバー QCD シミュレーションを行い、試験的計算より現実世界に近い状況でのヘリウム原子核および 2 核子系の束縛エネルギー計算に成功した。この計算は  $\pi$  中間子質量 0.5 GeV と 0.3 GeV のクォーク質量を用いたものであり、物理点( $\pi$  中間子質量 0.14 GeV に相当) よりも重い質量を用いていた。この成果を踏まえ、京コンピュータで生成された  $96^4$  格子サイズのゲージ配位を用いた現実に近い  $\pi$  中間子質量 0.146 GeV での軽原子核束縛エネルギー計算を進めている。この計算は統計誤差を抑えることが非常に難しく、ヘリウム原子核については有意な結果は得られていないが、重陽子については現状で実験値から予測された値を再現する結果が見え始めている(図 2 の左図)。今後は計算コード高速化及び計算方法の改良など、統計誤差を小さくする方法の研究を行う。

また、指数型演算子を用いたこれまでの計算に含まれる励起状態の系統誤差について、重いクォーク質量を用いた超高精度計算による調査を行い、この系統誤差は十分小さいと考えられる結果を得た。さらに、ウォール型演算子の有効エネルギー差の体積依存性を調べ、2 核

子散乱状態、核子-励起核子散乱状態を考慮した解析から、ウォール型演算子を用いた結果には散乱状態の寄与が体積に比例して大きくなることを示唆する結果(図2の右図)を得た。

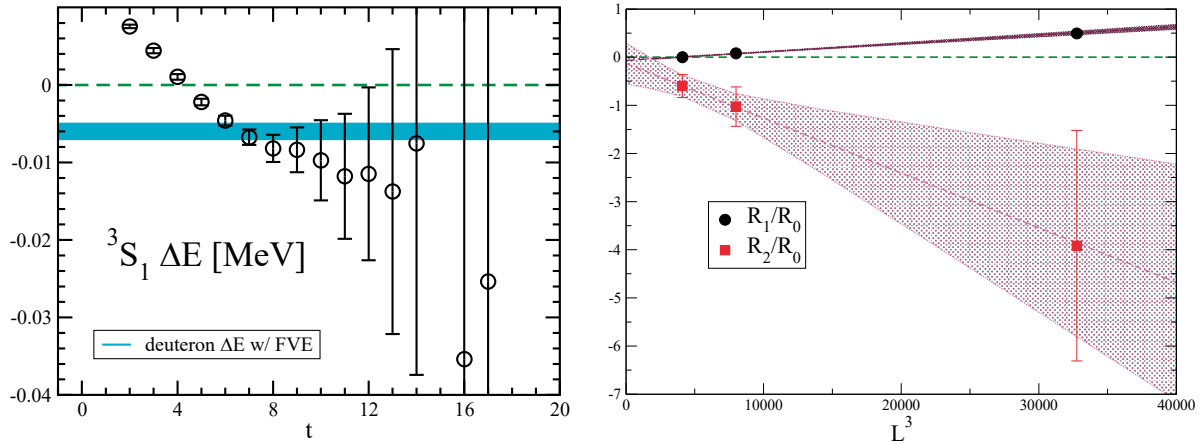


図2：(左) 現実に近いクォーク質量で指数型演算子を用いた有効二核子エネルギー差。横軸は虚時間、水色帯は有限体積効果を考慮した実験値。(右) 重いクォークでのウォール型演算子を用いた、有効二核子エネルギーに含まれる束縛状態に対する散乱状態の割合の体積依存性。茶色と桃色破線はフィット結果。

### 【3】格子QCDを用いた核子構造研究（藏増、山崎、新谷）

陽子と中性子(核子)はクォークの束縛状態であり、その構造を詳細に調べるためには、強い相互作用の第一原理計算である格子QCDを用いた計算が必要である。これまでに格子QCDを用いて、核子構造に関する核子形状因子研究が行われてきたが、非常に良い精度で測定されている実験値を再現できていなかった。

藏増、山崎、新谷は、宇川名誉教授と、広島大学石川健一准教授、東北大学佐々木勝一准教授、東北大学大学院生塚本夏基氏とともに、PACS Collaborationにおいて、現実のクォーク質量に極めて近いパラメータ( $\pi$  中間子質量 146 MeV)及び現実的クォーク質量直上で核子形状因子計算を行った。2019年度は核子スカラー電荷と核子テンソル電荷のための繰り込み計算を終了させそれぞれの物理的値を決定し、これまでの結果と比較し遜色ないことを確認した(研究論文 B-7)。

また、現実的クォーク質量直上での形状因子計算の間違いを修正した結果、荷電半径計算には数パーセントの系統誤差が含まれる可能性を示唆した。この系統誤差の原因を理解するため、異なる格子間隔を用いた計算から、有限格子間隔による系統誤差の大きさを調査する予定である。

### 【4】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

(藏増、石塚、谷口、山崎、吉江、浮田)

賀数研究員(数理物質系)と山崎は現実クォーク質量での  $K$  中間子セミレプトニック崩壊の動的  $2+1$  フレーバー大規模格子 QCD シミュレーションを行うことで、CKM 行列要素の一つである  $V_{us}$  の決定を行った。この物理量はクォークの世代間混合を表す行列である CKM 行列の行列要素のうち、アップクォークとストレンジクォークの混合の度合いを表す量である。この行列は標準理論においてユニタリー性を持つので、ユニタリー性の確認を行うことで標準理論を超える物理の検証を行うことができる。

図 3 に示すように、本研究で得られた  $|V_{us}|$  (赤丸) は、これまでの多くの計算結果 ( $K_{l3}$   $N_f=2+1+1$ ,  $N_f=2+1$ ) と異なり、標準理論から予測される値 (灰色帯) と無矛盾な結果になった (研究論文 A-3)。さらに本研究結果は  $K$  中間子レプトニック崩壊から決定される  $|V_{us}|$  (青丸、緑星) と一致しており、標準模型を超える物理のシグナルに対しては否定的な結論を示唆している。しかし、近年の標準模型の予測では図中の灰色帯を超えた大きな  $|V_{us}|$  が報告されており、標準理論を超える物理の検証を行うために、さらに精密な計算結果を得る必要がある。今後は、本研究結果で最も大きな系統誤差を与えた有限格子間隔起因の系統誤差を取り除くべく、連続極限への外挿を行うために、異なる格子間隔での計算を実行する計画である。

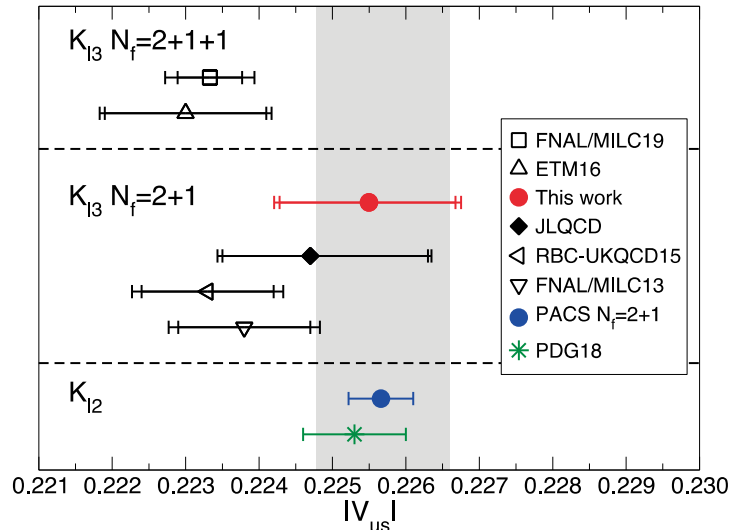


図 3 :  $|V_{us}|$  の比較。灰色帯は CKM 行列のユニタリー性から求まる標準理論の予測。

#### 【5】 格子 QCD による相互作用範囲内の Bethe-Salpeter 波動関数を用いた散乱振幅 (山崎)

散乱長は、粒子間の相互作用を特徴づける基本的な物理量である。これまで散乱長は、相互作用範囲外の Bethe-Salpeter 波動関数から導出された有限体積法により計算されてきた。KEK 滑川研究員と山崎は 2 パイ中間子系において、相互作用範囲内の Bethe-Salpeter 波動関数を用いて散乱振幅を決定した。得られた散乱振幅から散乱長を計算し、既存の手法で求められた結果との一致を確認した。加えて、半オフシェル散乱振幅計算に世界で初めて成功した。さらに散乱振幅のパイ中間子質量依存性を調べ、演算子依存性や虚時間依存性などの散乱振幅の性質についても議論した (研究論文 A-4)。

**【6】改良 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（金谷、谷口）**

ビッグバン直後の宇宙初期に実現したと考えられるクォーク・グルオン・プラズマ状態から通常のハドロン物質への相転移前後のクォーク物質の様々な熱力学的性質は、初期宇宙の物質進化や物質創成メカニズムの解明において重要である。これは本質的に非摂動的な問題であり、格子 QCD による QCD 第一原理からの大規模シミュレーションが不可欠である。クォーク物質の相構造や熱力学特性を引き出すために、有限温度・有限密度格子 QCD を研究し、またそのための技術開発を進めた。

金谷、谷口らは、九州大学鈴木博教授、大阪大学北沢正清助教、新潟大学江尻信司准教授、広島大学梅田貴士准教授らと、改良ウィルソン型格子クォークを用いた有限温度・有限密度 QCD のシミュレーション研究を行なっている。2019 年度も、QCD の相構造やクォーク物質の熱力学的諸性質の共同研究を推進した。

有限温度・有限密度 QCD のシミュレーション研究の多くは、計算量が少ないスタガード型格子クォークを用いて行われているが、連続極限で QCD を再現することが証明されていないという本質的問題を孕んでいる。我々は、理論的基礎が確立している Wilson 型格子クォークを用いて QCD 相転移近傍の温度でクォーク物質がどのような熱力学特性を示すかの大規模シミュレーション研究を推進している。Wilson 型クォークは、連続極限の正しさが保証されている反面、有限の格子上ではカイラル対称性を陽に壊しているため、カイラル対称性に関わる物理量に関して格子化誤差が大きく、それを取り除いて物理量を計算するために膨大な計算資源が要求されるという困難があった。また、並進対称性に伴う保存カレントとして定義されるエネルギー運動量テンソルは系の力学特性を調べる上で基本的な観測量だが(例えば、対角成分はエネルギー密度や圧力などの情報を含み、2点相関関数から様々な粘性率が導かれる)、格子上では連続な並進対称性が陽に壊されているため、複雑な繰り込み操作を行わなければ意味のある評価が出来なかった。

我々は、Gradient flow(勾配流)に基づいて鈴木博らにより開発された SFtX 法(small flow-time expansion method)を応用して、これまでの課題を克服した大きなブレークスルーを目指している。勾配流とは、仮想的な時間パラメータ  $t$ (flow-time)を導入して一種の拡散方程式により場の量を変形させる手法で、 $t > 0$  ではフローさせた演算子が紫外発散も同一点特異性も持たないという目覚ましい特性を持っている。SFtX 法は、勾配流のこの有限性を活用して、連続極限のくりこまれた物理量に対応する量を格子上で評価する一般的な計算方法である。格子化により有限格子上では陽に壊されてしまう対称性と結びついた物理量でも直接評価できる。

クォークを無視したクエンチ近似 QCD による試験研究によって、SFtX 法の有用性が示されている。我々は、SFtX 法が並進対称性の破れだけでなく、Wilson 型クォークによるカイラ

ルの破れの困難にも有効であることに着目し、2+1 フレーバーの動的なクォークを含む現実的 QCD に SFtX 法を応用した一連の研究を推進している。

2016-2017 年度に実行した  $u,d$  クォークが現実よりやや重い場合の  $N_f=2+1$  QCD の研究により、エネルギー運動量テンソルの対角成分が従来の方法による状態方程式の結果を良く再現することを示し、さらに、カイラル感受率がクロスオーバー温度でピークを示すことをウィルソン型クォークとして初めて示した。また、位相感受率を、グルオンを用いた定義式と、それを、連続理論のカイラル関係式を用いてクォークを用いて表し直した評価式の両方で計算し、有限の格子間隔でも両者が極めてよく一致することを示した。通常の計算方法でスタガード型クォークを用いた研究では、この程度の格子間隔では両者は 2 桁も違っており、SFtX 法が物理的に信頼できる結果を得る上で極めて有用であることをあらわしている。

2018 年度からは、この研究を発展させ、現実のクォーク質量（物理点）での研究、及び、 $u,d$  クォークが重い場合に格子間隔を変えたシミュレーションを推進している。SFtX 法により、物理量の観測に関しては計算時間の大きな削減ができたが、物理点や格子間隔が細かい格子の配位生成には膨大な計算が要求され、様々な計算機資源を動員して大規模シミュレーションを遂行している。

2019 年度には、SFtX 法の改良として、くりこみスケールの研究と、マッチング係数における高次項の効果の研究、エネルギー運動量テンソルの相関関数の研究などを  $N_f=2+1$  QCD で行った。また、再重み付け法を用いたクォークが重い極限近くの  $N_f=2+1$  QCD の相構造の研究を進め、重クォーク展開の高次項の効果や格子間隔依存性の研究を行った。

### SFtX 法におけるくりこみスケールの研究

SFtX 法では、格子上で測った  $t>0$  でのフローさせた演算子と求める物理量をマッチング係数で結びつけ、 $t\rightarrow 0$  の極限を取ることで、物理量を計算する。QCD を含む漸近自由な理論では、 $t\rightarrow 0$  の極限近傍で、マッチング係数を摂動論により評価することができる。マッチング係数を計算するときのくりこみスケール  $\mu$  は、計算の摂動計算が破綻しない限り、どんな値を取っても良く、最終的な物理量の結果は  $\mu$  に依存しないはずである。通常は、フローさせた演算子の自然なスケールの一つである  $\mu_d=1/\sqrt{8t}$  (これは勾配流により場が平均化される領域の広がり逆数の逆数に等しい)を取るが、それと同程度の  $\mu$  ならば、何をとっても良い。

他方、摂動展開の質は、 $\mu$  をどう取るかで変化する。SFtX 法で  $t\rightarrow 0$  外挿を実行する上で、どこまで大きな  $t$  を利用できるかは実用上重要である。 $\mu_d=1/\sqrt{8t}$  の形から分かるように、 $t$  を大きくすると赤外領域に近づき、マッチング係数の摂動計算が破綻する。

我々は、現実のクォーク質量(物理点)での研究を、PACS-CS Collaboration のゼロ温度配位が生成された格子間隔 0.09 fm の格子で進めている。この研究や、 $u,d$  クォークが重い場合に格子間隔を粗くした研究において、いくつかの物理量に関して、 $t\rightarrow 0$  外挿を行うための線形領

域が十分見えなくなるといふ現象を経験した。その一つの要因として、格子間隔がやや粗くなったために、摂動計算が破綻する無次元の flow-time  $t/a^2$  が小さくなってしまい、 $t \rightarrow 0$  外挿の十分な領域を確保できなくなったことが考えられる。

図 4 に、くりこみスケールとして、従来の  $\mu_d$  を使った結果と、最近提案された  $\mu_0 = 1/\sqrt{(2e^{\gamma_E}t)}$  ( $\gamma_E$  はオイラー数) を使った結果を比較する。左図は、エントロピー密度  $\epsilon + p$  の flow-time 依存性。右図は、 $u_d$  クォークのカイラル感受率 disconnected part 依存性。 $\mu_d$  を使った結果が  $t/a^2 \leq 1.5$  までしか無いのは、そこで running coupling が大きくなってしまい、摂動展開が破綻するからである。 $\mu_0 \approx 1.5\mu_d$  では、 $t/a^2 \leq 3$  まで摂動計算可能である。左図より、 $\mu_0$  スケールにより、より安定した  $t \rightarrow 0$  外挿が可能であり、その結果は  $\mu_d$  による  $t \rightarrow 0$  外挿と一致していることがわかる。右図より、 $\mu_d$  スケールでは  $t \rightarrow 0$  外挿をどのようにとて良いか分からない場合でも、 $\mu_0$  スケールにより  $t \rightarrow 0$  外挿が可能となる場合があることがわかる(研究論文 B-8)。

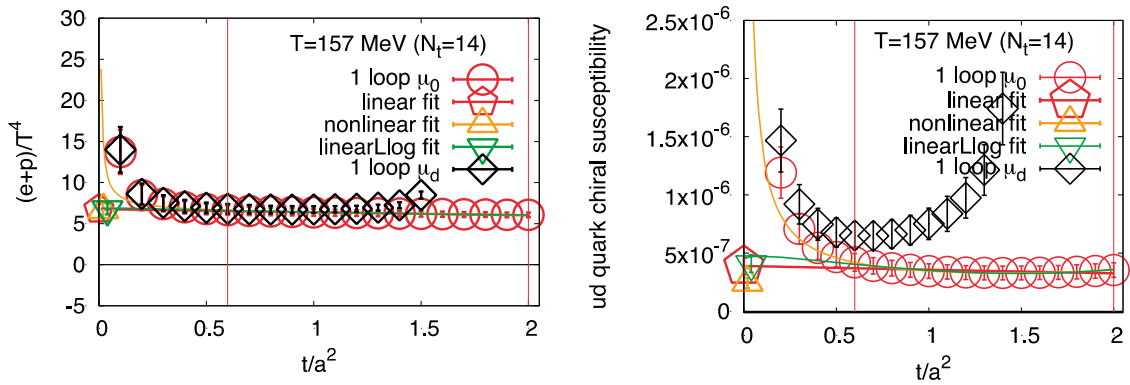


図 4：グラジエントフローに基づく SFtX 法による有限温度(2+1)-flavor QCD の研究：現実のクォーク質量におけるくりこみスケール依存性。左図：エントロピー密度  $\epsilon + p$ 。右図： $ud$  クォークのカイラル感受率の非連結部分。 $T=157 \text{ MeV}$  での結果。横軸は無次元の flow-time  $t/a^2$  で、物理的結果は  $t \rightarrow 0$  外挿によって得られる(研究論文 B-8)。

#### SFtX 法を用いた物理点有限温度(2+1)-flavor QCD の研究

上記の結果を得て、 $\mu_0$  スケールを採用して物理点有限温度(2+1)-flavor QCD の熱力学量を評価したものが、図 5 である。ただし、 $T \approx 122\text{--}146 \text{ MeV}$  のシミュレーションは、まだ進行中で、統計が十分ではない。また、 $ud$  クォークがやや重い場合の経験から、 $T > 247 \text{ MeV}$  ( $N_t \leq 8$ ) では格子化誤差が小さくないと予想される。

図 5 や、他の物理量の挙動から、 $T \approx 122\text{--}146 \text{ MeV}$  が相転移温度近傍の臨界領域にあることが示唆される(研究論文 B-8)。精密な相転移温度を得るために、この温度域でのシミュレーションを推進中である。



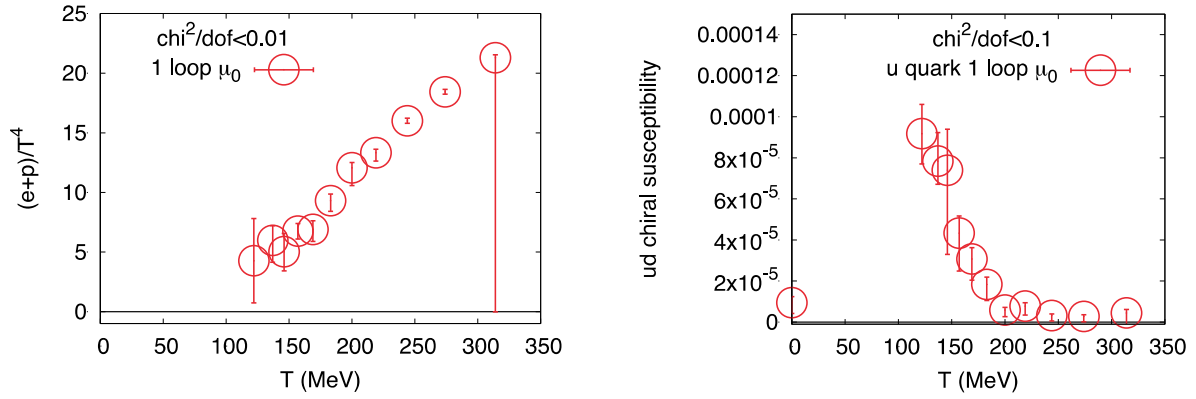


図 5：グラジエントフローに基づく SFtX 法による有限温度(2+1)-flavor QCD の研究：現実のクォーク質量の結果(preliminary)。左図：エントロピー密度  $\epsilon+p$ 。右図：トレース・アノマリ  $\epsilon-3p$ 。横軸は温度  $T$ (研究論文 B-8)。

### SFtX 法における高次マッチング係数の効果の研究

上記の研究は、マッチング係数の 1 ループ摂動計算の結果を用いたものだが、最近、エネルギー運動量テンソルに関するマッチング係数の 2 ループ計算の結果が公表された(R.V. Harlander et. al, Eur. Phys. J. C78, 944 (2018))。図 6 でその効果を研究した。 $\mu_0$  スケールを採用し、統計が十分ある、 $u, d$  クォークが現実よりやや重い場合で試験した。左図のエントロピー密度では、1 ループの結果と 2 ループの結果がよく一致していることがわかる。他方、中央図のトレース・アノマリでは、 $T > 250 \text{ MeV}$  でズレが見える。

実は、Harlander らの 2 ループ計算では、クォークの運動方程式を使って独立な演算子を減らしている。クォークの運動方程式はエネルギー運動量テンソルの対角成分にのみ作用するので、エントロピー密度には影響しないが、トレース・アノマリには効果がある。運動方程式は、SFtX 法で連続極限外挿を行なった後では効果が無いはずだが、有限格子では格子化誤差を持ちうる。高温領域でのズレの原因を明確にするために、Harlander らのマッチング係数の 1 ループ部分だけを取り出してトレース・アノマリを評価したものが、図 6 の右図である。これから、ズレはクォークの運動方程式によるものであることがわかる。この結果は、 $N \leq 10$  の格子では、運動方程式に無視できない格子化誤差があることを示唆している。

なお、中央図と右図の比較から、運動方程式を使った 1 ループの結果と 2 ループの結果はよく一致しており、左図のエントロピー密度と同様に、マッチング係数の高次項の効果そのものは小さいことが結論できる(研究論文 B-8)。

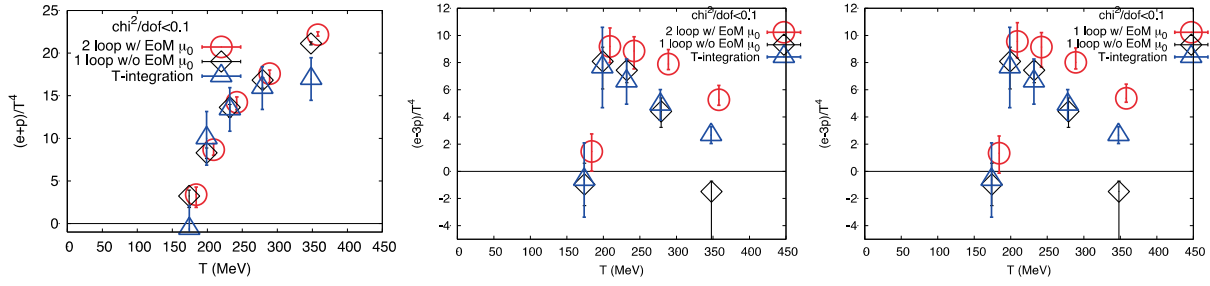


図 6：グラジエントフローに基づく SFtX 法による有限温度(2+1)-flavor QCD の研究：ud クォーク質量がやや重い QCD の結果。2 ループマッチング係数の効果。左図：エントロピー密度  $\epsilon+p$ 。中央図、右図：トレース・アノマリ  $\epsilon-3p$ 。右図では、1 ループマッチング係数で、運動方程式を使った結果との比較。横軸は温度  $T$ (研究論文 B-8)。

### SFtX 法による PCAC クォーク質量の研究

SFtX 法を用いれば、カイラル対称性と関係した他の様々な物理量も Wilson 型クォークで直接評価できると期待している。今回は、ud クォークが現実よりやや重い場合のゼロ温度格子で、クォークの PCAC 質量を SFtX 法により評価した。図 7 に、ud クォーク質量および s クォーク質量の  $t \rightarrow 0$  外挿を示す。SFtX 法によるクォーク質量が、通常の Schrödinger 汎関数法による結果とよく一致していることがわかる(研究論文 B-13)。これを発展させて、SFtX 法による K 中間子バグパラメータ  $B_K$  の計算を行い、CP の破れの研究につなげることを目指している(国際会議発表 B-15)。

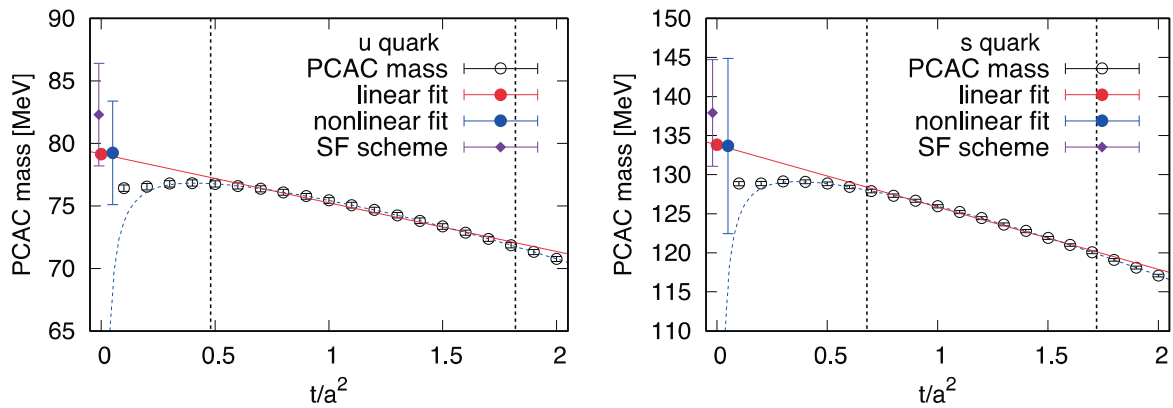


図 7：グラジエントフローに基づく SFtX 法による PCAC クォーク質量。ud クォーク質量がやや重い QCD の結果。左図：ud クォーク質量。右図：s クォーク質量。横軸は無次元の flow-time  $t/a^2$  で、物理的結果は  $t \rightarrow 0$  外挿によって得られる(研究論文 B-13)。

### 再重み付け法によるクォークが重い極限近くの $N_f=2+1$ QCD の相構造の研究

また、再重み付け法を用いたクォークが重い極限近くの  $N_f=2+1$  QCD の相構造の研究を進め、重クォーク展開の高次項の効果や格子間隔依存性の研究を行った(研究論文 A-5)。



図 8 に、クォークが重い極限近くの  $N_f=2+1$  QCD の相構造の結果を示す。縦軸は  $ud$  クォーク質量の逆数に対応する  $ud$  クォークホッピングパラメータで、横軸は  $s$  クォーク質量の逆数に対応する  $s$  クォークホッピングパラメータ。原点はクォーク質量 $=\infty$ の純ゲージ QCD で、有限温度相転移が 1 次相転移であることが知られている。クォーク質量を小さくしていくと、有限温度 QCD 相転移が連続的なクロスオーバーに変わる。両者を区別する臨界線の位置を、再重み付け法を使ってポリアコフ・ループの分布関数の変化から計算した結果が、図 8 に示されている。 $N_f=2$  QCD でのシミュレーション結果を、重クォーク展開を用いて  $N_f=2+1$  QCD の相構造に一般化した。

重クォーク展開の最低次を取り入れた再重み付け法の結果(赤線)が、重クォーク展開のその次の次数の効果を取り入れると、緑線の位置に変化する。左図は  $N_t=4$  格子での結果で、格子間隔がより小さい  $N_t=6$  格子では、右図のようになる。これから、格子間隔依存性がまだ大きく、また、連続極限に近づくにつれて重クォーク展開の収束性が悪くなることがわかる。定量的な予言を行うためにはさらに  $N_t$  を大きくすることが必要だが、有限密度研究では計算コストを抑える上で重クォーク展開が有用であり、より高次の重クォーク展開でどこまで改良できるかが、次の研究の一つの方向性と考えられる。

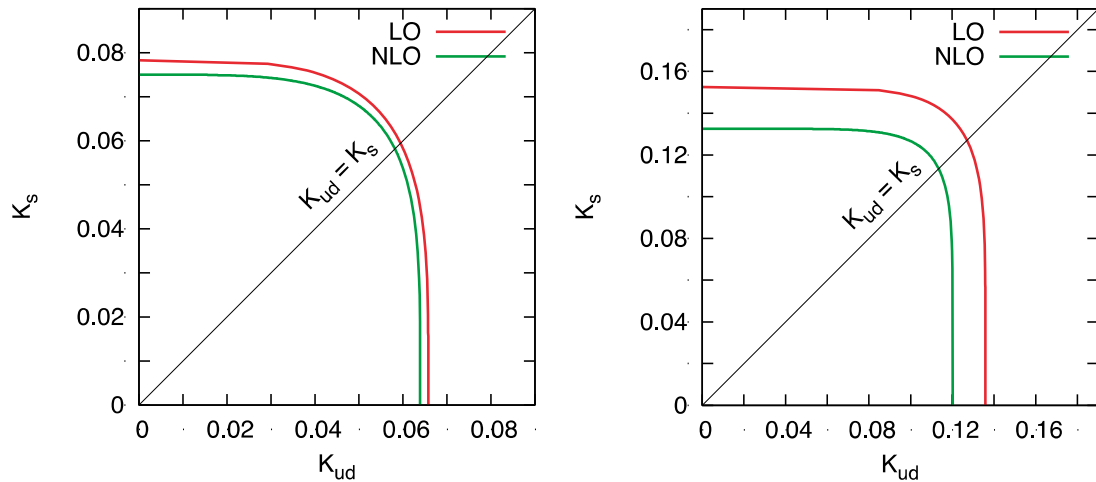


図 8：再重み付け法によるクォークが重い極限近くの  $N_f=2+1$  QCD の相構造。縦軸は  $ud$  クォークホッピングパラメータで、横軸は  $s$  クォークホッピングパラメータ。 $K=0$  がクォーク質量 $=\infty$ に対応する。有限温度 QCD 相転移が、原点近傍では 1 次相転移だが、右上領域ではクロスオーバーとなり、2 つの領域の境界となる臨界線が示されている。LO は重クォーク展開の最低次を取り入れた再重み付け法の結果で、NLO はその次の次数の効果を取り入れた結果。左図： $N_t=4$  格子。右図： $N_t=6$  格子(研究論文 A-5)。

その他

SFtX 法でエネルギー運動量テンソルそのものが計算できるようになったことにより、その非対角要素や二点相関関数も直接評価可能となった。そこから、輸送係数など、クォーク物質の様々な熱力学特性を引き出す試みを進めた(研究論文 B-10, 国際会議発表 B-15, 17)。

フル QCD の研究と並行して、SU(3)ゲージ理論における一次相転移の研究も継続している。SFtX 法を用いて SU(3)ゲージ理論の潜熱評価を見直し、従来の方法との比較や、格子間隔効果、有限体積効果の検証を行った(研究論文 B-9)。

#### 【7】 Wilson 型クォークを用いた 3,4 フレーバー有限温度 QCD における臨界終点の研究 (藏増、大野)

有限温度 QCD の相構造は、クォークの質量やフレーバー数に応じて多様に変化すると予想されている。特に、3 フレーバーでは、クォーク質量ゼロの極限で一次相転移があり、質量を大きくしていくと、二次相転移となる臨界終点を経て、クロスオーバーになると考えられている。このことを確かめるため、格子 QCD に基づく第一原理計算により 3 フレーバーにおける臨界終点の位置を調べる多くの研究が行われてきた。しかしながら、連続極限の取り方やクォーク作用の種類・改良方法でその結果が大きく異なり、未だに最終的な結論が得られていない。従って、より正確な 3 フレーバー QCD における臨界終点の位置の決定や、例えば 4 フレーバー QCD といった、異なる視点からの研究が必要である。

大野と藏増は、金沢大の武田真滋准教授及び理化学研究所の中村宜文研究員とともに、3、4 フレーバー QCD の臨界終点の位置を、O(a)改良された Wilson クォーク作用を用いた格子 QCD シミュレーションにより調べた。まず、3 フレーバー QCD では、これまでの研究で行った、時間方向格子サイズ 4,6,8 及び 10 の計算を 12 まで拡張し、より正確な連続極限での臨界終点の位置を推定した。その結果、図 9 に示す通り、臨界終点における  $\pi$  中間子質量の上限値として、これまでよりもさらに小さい値を得た(研究論文 A-6)。次に、4 フレーバー QCD の研究では、時間方向格子サイズ 4,6 及び 8 の計算を行い、連続極限での臨界終点の位置を推定し、3 フレーバーの結果や異なるクォーク作用での結果と比較した。現在この研究成果をもとに論文を執筆中であり、より正確な結果を得るため、時間方向格子サイズを 10 まで拡張した計算も遂行中である。

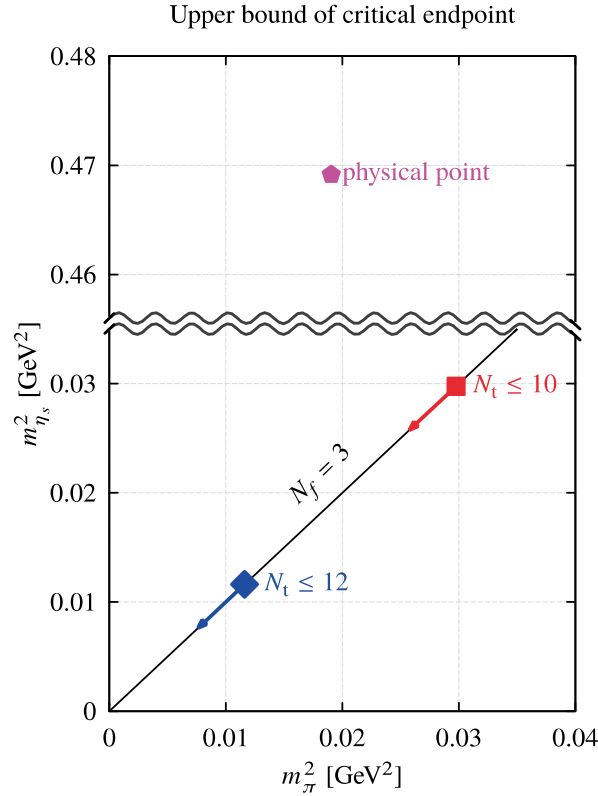
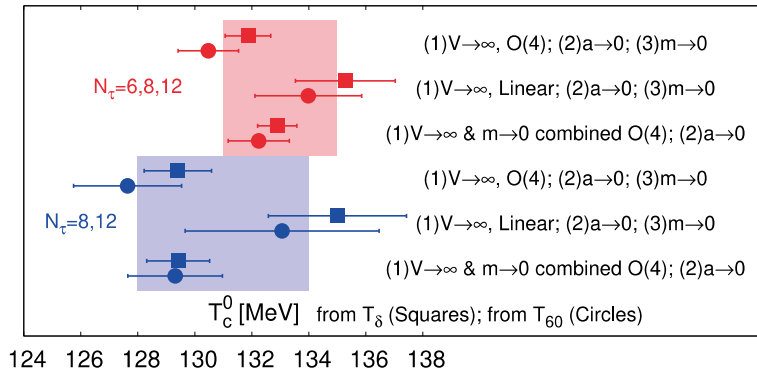


図 9 : 3 フレーバーQCD における臨界終点の位置。

#### 【8】 Highly improved staggered quark を用いた有限温度・密度 QCD の研究（大野）

有限温度・密度 QCD の相構造について調べることは、強い相互作用する物質の高温・高密度媒質中での性質を理解する上で非常に重要である。

大野は、独国 Bielefeld 大の Frithjof Karsch 教授を中心とする HotQCD Collaboration に参加し、highly improved staggered quark 作用を用いた(2+1)-flavor 格子 QCD シミュレーションにより、有限温度・密度 QCD についての様々な研究を行った。まず初めに、ゼロ及び有限 baryon、strangeness、electric charge そして isospin chemical potential における chiral crossover を調べた。その結果、擬転移温度の各 chemical potential に対する Taylor 展開の 2 次及び 4 次の係数と、ゼロ密度における値を決定した。その際、ゼロ密度における擬転移温度の精密な値として、 $156.5 \pm 1.5$  MeV を得た(研究論文 A-7)。次に、 $\pi$  中間子質量ゼロの極限における相転移温度を調べた。図 10 に示す様に様々な系統誤差を考慮した結果、連続極限・無限体積極限の値として、 $132^{+3}_{-6}$  MeV を得た(研究論文 A-8)。最後に、中間子遮蔽質量を幅広い温度領域で調べた。連続極限を取ることで得られた結果を用いて、高温領域における様々な対称性の回復についての議論や、摂動計算との比較を行った(研究論文 A-9)。

図 10 :  $\pi$  中間子質量ゼロの極限における相転移温度。

### 【9】クォーコニウムスペクトル関数の研究（大野）

チャームやボトムクォークといった重いクォークとその反クォークの束縛状態であるクォーコニウムのスペクトル関数は、高温媒質中でのクォーコニウムの振る舞いや重クォーク輸送に関する情報をすべて含んでおり、理論的にその性質を調べることは、重イオン衝突実験の結果を理解する上で非常に重要である。しかしながら、格子 QCD に基づく第一原理計算で直接得られる量は相関関数であり、相関関数からスペクトル関数を計算することは ill-posed な問題で、解くことが非常に困難であることが知られている。従って、より信頼できるスペクトル関数を計算するために、様々な方法が試みられている。

大野は、中国華中師範大の Heng-Tong Ding 教授、独国 Bielefeld 大の Olaf Kaczmarek 博士らとともに、クエンチ近似を用いた大規模な格子 QCD シミュレーションにより、連続極限におけるクォーコニウム相関関数を計算し、これを摂動論的モデルにフィットさせることで、クォーコニウムスペクトル関数を計算した。過去の計算では、手始めに輸送ピークの存在しない擬スカラーチャネルのスペクトル関数を計算したが、今年度はこれをベクターチャネルに拡張した(研究論文 B-14)。その結果、モデルスペクトル関数は、相関関数をよく表せることを確認した。今後はより詳細な解析により、輸送ピークの影響等を調べる予定である。

### 【10】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（蔵増、吉村）

格子 QCD 計算では、近年の計算機能力の向上や新規アルゴリズムの開発・改良の結果、自然界の  $u$ 、 $d$ 、 $s$  クォーク質量上でのシミュレーションや、更には軽原子核の束縛エネルギー計算までもが可能となりつつある。その一方で、長年にわたり本質的問題として認識されながらも、効果的な解決策が見出されことなく取り残されたままの課題として、フェルミオン系を扱う際の負符号問題および複素作用を持つ系のシミュレーションがある。これらは、軽いクォークのダイナミクス、Strong CP 問題、有限密度 QCD、格子 SUSY の研究において避けて通れない問題である。われわれは、近年物性物理分野で提案されたテンソルネットワ

ーク形式に基づく分配関数の数値計算手法を格子ゲージ理論へ応用し、モンテカルロ法に起因する負符号問題および複素作用問題を解決し、これまでの格子 QCD 計算が成し得なかった新たな物理研究の開拓を目指している。なお、本研究課題は、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題における 4 つの萌芽的課題のうち、1 番目の課題である「基礎科学のフロンティアー 極限への挑戦」に含まれており、本グループも分担機関として参加し、テンソルネットワーク法の素粒子物理学への応用に取り組んでいる。

2014 年、蔵増と理研計算科学研究機構(現理研計算科学研究センター)の清水特別研究員は、テンソル繰り込み群をグラスマン数も扱えるように拡張し(グラスマンテンソル繰り込み群)、世界で初めてフェルミオン入りのゲージ理論への応用に成功した。具体的には、グラスマンテンソル繰り込み群を用いて、 $\theta$  項が有る場合と無い場合の 1 フレーバーの 2 次元格子 Schwinger モデル(2 次元格子 QED)における相構造を調べた(論文発表済)。この研究により、グラスマンテンソル繰り込み群が、現在の格子 QCD 計算が抱える負符号問題や複素作用問題を解決していることを示すことに成功した。今後は、最終目標である 4 次元 QCD への応用に向け、(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、(iv) 興味深い低次元素粒子論モデルへの応用、という 4 つの課題に取り組む。

2019 年度における課題(i)~(iv)の主要な研究成果は、以下のとおりである。

課題(i)、(iv) : 2 次元の  $\theta$  項(トポロジカル項)入り  $U(1)$ ゲージ理論を TN 法によって数値計算するためのアルゴリズム開発を行った。具体的には、 $U(1)$ ゲージ理論における連続変数の積分に対して Gauss 求積法を適用し、 $\theta=\pi$  における一次相転移の解析に成功した。図 11(左)は、オーダーパラメータであるトポロジカルチャージ $\langle Q \rangle$ の  $\theta=\pi$  における体積依存依存性をプロットしたものである。体積が増大するにつれて、連続変化から不連続変化へと移行していくことが確認できる(研究論文 A-14)。

課題(ii)、(iii) : 一般的に、TN 法はモデルの次元が上がるにつれて計算コストが増大する。そのため、これまで TN 法の主な応用例は 2 次元モデルに限られており、4 次元モデルへの適用例は存在しなかった。われわれは、4 次元における最も簡単なモデルであるイジングモデルに対して HOTRG 法を応用し、相転移現象の解析を試みた。その際、不純物テンソル法と呼ばれるグリーン関数計算手法を用いて内部エネルギーと磁化を計算し、その温度・体積依存性を詳細に調べることによって、相転移の次数が従来予想されていた 2 次ではなく 1 次であることを見出した。図 11(右)は、内部エネルギーの転移点における体積依存依存性をプロットしたものである。体積が増大するにつれて、ギャップが形成されることがわかる(研究論文 A-12)。

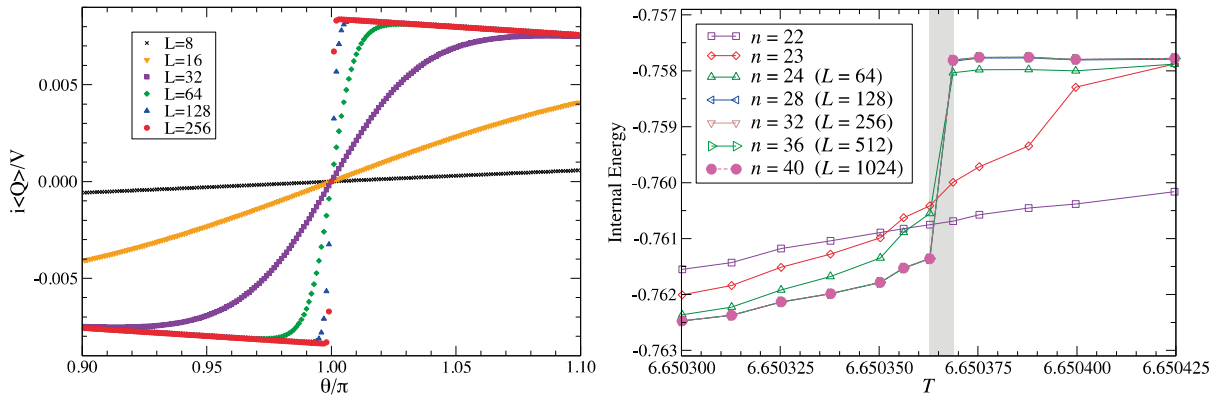


図 11：(左)2 次元  $\theta$  項入り U(1)ゲージ理論の  $\theta=\pi$  におけるトポロジカルチャージ $\langle Q \rangle$ の体積依存性。(右)4 次元 Ising モデルの転移点における内部エネルギーの体積依存性。

### 【11】素粒子標準模型を超えた理論の探索（山崎）

ウォーキングテクニカラー模型は素粒子標準模型を超えた理論の有力な候補の一つである。この模型は、強結合ゲージ理論のダイナミクスにより、素粒子標準模型では手で与えられていた電弱対称性の自発的破れの起源を説明できる可能性がある。しかし、この模型を構築するために必要な強結合ゲージ理論には、近似的共形対称性を持つなど、特殊な条件が課されている。山崎は名古屋大学山脇幸一名誉教授や KEK 青木保道特任准教授らと共に、LatKMI Collaboration において、格子ゲージ理論を用いた数値計算から、そのような条件を満たすゲージ理論が存在するかの探索を行っている。

これまでの 4、8、12 フレーバー SU(3)ゲージ理論の研究から、8 フレーバー理論がそれら条件を満たす可能性があることを示唆した。2019 年度は、フレーバー 1 重項スカラー中間子及びフレーバー 1 重項擬スカラー中間子の質量について、4、8、12 フレーバー理論の比較を行った。

### 【12】格子 QCD 研究用データグリッド JLDG の運用（吉江、大野）

JLDG(Japan Lattice Data Grid)は、国内の計算素粒子物理研究グループが日々の研究データを管理・共有する為のデータグリッドである。国内の主要な 7 つの研究拠点に配したファイルサーバを国立情報学研究所が運用する SINET5VPN で結び、グリッド技術によって、単一のファイルシステムを構成し、研究者に提供している。その運用は、参加拠点の担当者から構成される管理者グループが行っているが、代表は本学計算科学研究センターが務めている。2008 年に実運用を開始して以来 10 年以上経過した現在、国内の複数の大きな研究グループが研究インフラとして使用している。JLDG は実用システムとして、数年前から一定の完成の域に達しており、今年度もシステムの増強・安定運用を主眼に活動を行った。

日常のメンテナンス・ユーザ対応以外の主な活動は、以下の通りである。

- (a) 新拠点設置 : JLDG の新拠点を『理化学研究所計算科学研究センター(R-CCS)』に立ち上げる事となり、R-CCS 担当者と協力し、関係機関との調整・規則策定と、機器・ネットワーク設計を行った。2019 年度末時点で、機器調達が完了し、ネットワーク設定を残すのみである。
- (b) システム増強・機器更新: 筑波大計算科学研究センター(CCS)拠点に 2 台(600TB)のファイナルサーバを増設し、システム全体で 13PB となった。同拠点のネットワーク機器を更新した(旧機器の EOL による)。
- (c) 筑波大 CCS 拠点のスーパーコンピュータ Cygnus に JLDG クライアント機能を導入する計画を推進した。2019 年度末の時点で、システム導入を完了し、関連委員会との最終調整を実施中である。
- (d) 格子 QCD 配位の一般公開 : PACS Collaboration の依頼を受け、京コンピュータでの物理クォーク質量に近い点のシミュレーションによって生成された格子 QCD 配位を JLDG/ILDG の枠組みで、世界の研究者コミュニティに公開した。
- (e) 格子 QCD アンサンブルの DOI 登録 : 前年度策定した規約に基づき、実データへの DOI 登録の準備を進めた。

#### 4. 教育

[修士論文]

##### 1. 羽山 徹

「標準模型有効理論におけるミューオン・電子転換過程の計算」

#### 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

##### 受賞

##### 外部資金

1. 青木慎也(代表)、一般受託研究、H26～R01 年度、『ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発』重点課題 9: 宇宙の基本法則と進化の解明』、総委託額 : 988,869 千円 (R01 年度委託額 : 216,466 千円)
2. 金谷和至(代表)、科学研究費補助金・基盤研究(C)、H31～R03 年度、「グラジエントフローによるクォーク・ハドロン物質の熱力学特性」、総配分額 : 3,300 千円 (R01 年度配分 : 1,000 千円)
3. 藏増嘉伸(分担)、一般受託研究、H28～R01 年度、『ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発』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した極限の探求）』、総委託額：67,155 千円（R01 年度委託額：15,955 千円）

4. 谷口裕介（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(C)、H30～R04 年度、「勾配流法を用いたクォーク・グルーオンプラズマの物性的研究」、総配分額：3,500 千円（R01 年度配分：700 千円）
5. 山崎剛（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(B)、H31～R04 年度、「強い相互作用の第一原理計算による軽ハドロン形状因子の総合理解」、総配分額：13,100 千円（R01 年度配分：2,200 千円）
6. 浮田尚哉（分担）、科学研究費補助金・基盤研究(C)、H31～R03 年度、「超対称フローが導く数値超対称性の新展開」、総配分額：250 千円（R01 年度配分：250 千円）

## 知的財産権

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

1. PACS Collaboration: K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yamazaki, and T. Yoshié, “Finite size effect on vector meson and baryon sectors in 2+1 flavor QCD at the physical point”, Phys.Rev. D100 (2019) no.9, ref.094502.
2. PACS Collaboration: Eigo Shintani and Yoshinobu Kuramashi, “Hadronic vacuum polarization contribution to the muon  $g-2$  with 2+1 flavor lattice QCD on a larger than  $(10 \text{ fm})^4$  lattice at the physical point”, Phys. Rev. D100 (2019) no.3, ref.034517.
3. J. Kakazu, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yamazaki, and T. Yoshié for PACS Collaboration, “K13 form factors at the physical point on  $(10.9 \text{ fm})^3$  volume”, Phys. Rev. D101 (2020) no.9, ref.094504, pp.1-16.
4. Yusuke Namekawa and Takeshi Yamazaki, “Quark mass dependence of on-shell and half off-shell scattering amplitudes from Bethe-Salpeter wave function inside the interaction range”, Phys. Rev. D99 (2019) no.11, ref.114508, pp.1-16.
5. Shinji Ejiri, Shota Itagaki, Ryo Iwami, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Atsushi Kiyohara, Mizuki Shirogane, and Takashi Umeda (WHOT-QCD Collaboration), “End point



- of the first-order phase transition of QCD in the heavy quark region by reweighting from quenched QCD”, Phys. Rev. D101 (2020) no.5, ref.054505.
6. Y. Kuramashi, Y. Nakamura, H. Ohno, and S. Takeda, “Nature of the phase transition for finite temperature  $N_f=3$  QCD with nonperturbatively  $O(a)$ -improved Wilson fermions at  $N_t=12$ ”, Phys. Rev. D101 (2020) no. 5, ref.054509.
  7. A. Bazavov, H.-T. Ding, P. Hegde, O. Kaczmarek, F. Karsch, N. Karthik, E. Laermann, Anirban Lahiri, R. Larsen, S.-T. Li, Swagato Mukherjee, H. Ohno, P. Petreczky, H. Sandmeyer, C. Schmidt, S. Sharma, and P. Steinbrecher (HotQCD Collaboration), “Chiral crossover in QCD at zero and non-zero chemical potentials”, Phys. Lett. B 795 (2019) pp.15-21.
  8. H.-T. Ding, P. Hegde, O. Kaczmarek, F. Karsch, Anirban Lahiri, S.-T. Li, Swagato Mukherjee, H. Ohno, P. Petreczky, C. Schmidt, and P. Steinbrecher (HotQCD Collaboration), “Chiral Phase Transition Temperature in (2+1)-Flavor QCD”, Phys. Rev. Lett. 123 (2019) no.6, ref.062002.
  9. A. Bazavov, S. Dentinger, H.-T. Ding, P. Hegde, O. Kaczmarek, F. Karsch, E. Laermann, Anirban Lahiri, Swagato Mukherjee, H. Ohno, P. Petreczky, R. Thakkar, H. Sandmeyer, C. Schmidt, S. Sharma, and P. Steinbrecher (HotQCD Collaboration), “Meson screening masses in (2+1)-flavor QCD”, Phys. Rev. D100 (2019) no.9, ref. 094510.
  10. D. Kadoh, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, R. Sakai, S. Takeda, and Y. Yoshimura, “Investigation of complex  $\phi^4$  theory at finite density in two dimensions using TRG”, JHEP 2002 (2020) ref.161.
  11. D. Kadoh, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, R. Sakai, S. Takeda, and Y. Yoshimura, “Tensor network analysis of critical coupling in two dimensional  $\phi^4$  theory”, JHEP 1905 (2019) ref.184.
  12. S. Akiyama, Y. Kuramashi, T. Yamashita, and Y. Yoshimura, “Phase transition of four-dimensional Ising model with higher-order tensor renormalization group, Phys. Rev. D100 (2019) no.5, ref.054510.
  13. Y. Kuramashi and Y. Yoshimura, “Three-dimensional finite temperature  $Z_2$  gauge theory with tensor network scheme”, JHEP 1908 (2019) ref.023.
  14. Y. Kuramashi and Y. Yoshimura, “Tensor renormalization group study of two-dimensional  $U(1)$  lattice gauge theory with a  $\theta$  term”, JHEP 2004 (2020) ref.089.
  15. D. Kadoh, Y. Kuramashi, and R. Ueno, “Irregular parameter dependence of numerical results in tensor renormalization group analysis”, PTEP 2019 (2019) 061B01.

## B) 査読無し論文

1. Yusuke Namekawa and Takeshi Yamazaki, “Scattering length from BS wave function inside the interaction range”, PoS(LATTICE2018) (2019) ref.078, pp.1-7.
2. Takeshi Yamazaki and Yoshinobu Kuramashi, “Relation between scattering amplitude and Bethe-Salpeter wave function in quantum field theory”, PoS(LATTICE2018) (2019) ref.077, pp.1-7.
3. Takeshi Yamazaki, “Relation between scattering amplitude and Bethe-Salpeter wave function inside interaction range”, Springer Proceedings Physics 238 (2020) pp.427-432.
4. Takeshi Yamazaki and Yusuke Namekawa, “Two-pion scattering amplitude from Bethe-Salpeter wave function at the interaction boundary”, PoS(LATTICE2019) (2020) ref.032, pp.1-7.
5. J. Kakazu, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yamazaki, and T. Yoshié, for PACS Collaboration, “Calculation of  $K \rightarrow \pi l \nu$  form factor in  $N_f=2+1$  QCD at physical point on  $(10 \text{ fm})^3$ ”, PoS(LATTICE2018) (2019) ref.265, pp.1-7.
6. J. Kakazu, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yamazaki, T. Yoshié for PACS Collaboration, “ $K_{l3}$  form factors in  $N_f=2+1$  QCD at physical point on large volume”, PoS(LATTICE2019) (2020) ref.186, pp.1-7.
7. Natsuki Tsukamoto, Yasumichi Aoki, Ken-ichi Ishikawa, Yoshinobu Kuramashi, Shoichi Sasaki, Takeshi Yamazaki for PACS Collaboration, “Nucleon isovector couplings from 2+1 flavor lattice QCD at the physical point”, PoS(LATTICE2019) (2020) ref.132, pp.1-7.
8. Kazuyuki Kanaya, Atsushi Baba, Asobu Suzuki, Shinji Ejiri, Masakiyo Kitazawa, Hiroshi Suzuki, Yusuke Taniguchi, and Takashi Umeda, “Study of 2+1 flavor finite-temperature QCD using improved Wilson quarks at the physical point with the gradient flow”, PoS(LATTICE2019) (2020) ref.088.
9. Mizuki Shirogane, Shinji Ejiri, Ryo Iwami, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Hiroshi Suzuki, Yusuke Taniguchi, and Takashi Umeda, “Equation of state near the first order phase transition point of SU(3) gauge theory using gradient flow”, PoS(LATTICE2018) (2019) ref.164.
10. Yusuke Taniguchi, Atsushi Baba, Shinji Ejiri, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Takanori Shimojo, Asobu Suzuki, Hiroshi Suzuki, and Takashi Umeda, “Study of energy-momentum tensor correlation function in  $N_f=2+1$  full QCD for QGP viscosities”, PoS(LATTICE2018) (2019) ref.166.

11. Atsushi Baba, Shinji Ejiri, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Takanori Shimojo, Asobu Suzuki, Hiroshi Suzuki, Yusuke Taniguchi, and Takashi Umeda, “Measuring of chiral susceptibility using gradient flow”, PoS(LATTICE2018) (2019) ref.173.
12. Shinji Ejiri, Shota Itagaki, Ryo Iwami, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Atsushi Kiyohara, Mizuki Shirogane, Yusuke Taniguchi, and Takashi Umeda (WHOT-QCD Collaboration), “Determination of the endpoint of the first order deconfinement phase transition in the heavy quark region”, PoS(LATTICE2019) (2020) ref.071.
13. Atsushi Baba, Shinji Ejiri, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Asobu Suzuki, Hiroshi Suzuki, Yusuke Taniguchi, and Takashi Umeda, “Calculation of PCAC mass with Wilson fermion using gradient flow, PoS(LATTICE2019) (2020) ref.191.
14. Anna-Lena Kruse, H.-T. Ding, O. Kaczmarek, H. Ohno and H. Sandmeyer, “Insight into Thermal Modifications of Quarkonia From a Comparison of Continuum-Extrapolated Lattice Results to Perturbative QCD”, MDPI Proc. 10 (2019) ref.45.
15. S. Akiyama, Y. Kuramashi, T. Yamashita, and Y. Yoshimura, Phase transition of four-dimensional Ising model with tensor network scheme, PoS(LATTICE2019) (2020) ref.138.

## (2) 国際会議発表

### A) 招待講演

1. Takeshi Yamazaki 「Direct calculation of two-nucleon energy from lattice QCD」, Frontiers in Lattice QCD and related topics (Kyoto University, Kyoto, April 15-26, 2019).
2. H. Ohno 「Recent progress on in-medium heavy flavor physics from lattice QCD」, The 37th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2019) (Hilton Hotel Wuhan Riverside, Wuhan, China, June 16-22, 2019).
3. Ryo Sakai, Daisuke Kadoh, Yoshinobu Kuramashi, Yoshifumi Nakamura, Shinji Takeda, and Yusuke Yoshimura, 「Tensor network study of two dimensional complex  $\phi^4$  theory at finite density」, The 17th International Conference on QCD in Extreme Conditions (XQCD 2019) (Tokyo Campus, University of Tsukuba, Tokyo, Japan, June 24-26, 2019).
4. Yoshinobu Kuramashi, 「Tensor renormalization group approach to scalar field theories in particle physics」, Computational Approaches to Quantum Many-body Problems (CAQMP 2019), (ISSP, University of Tokyo, Kashiwa, Japan, July 22, 2019).
5. H. Ohno 「Phase structure of lattice QCD at finite temperature/In-medium properties of quarkonia and heavy quark transport from lattice QCD」, ISTC-CERN-JINR Summer School on High Energy Physics and Accelerator Physics 2019 (al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan, August 25-31, 2019).

6. Takeshi Yamazaki 「Nucleon form factors from PACS10 configuration」, Lattice QCD workshop (La Posada de Santa Fe, USA, August 26-30, 2019).
7. Takeshi Yamazaki 「Nucleon couplings in  $N_f=2+1$  lattice QCD」, KEK workshop on Nucleon electric dipole moments and spin structure in 2020 (KEK Tokai Campus, Ibaraki, January 11, 2020).

## B) 一般講演

1. Yoshinobu Kuramashi for PACS Collaboration, 「Study of finite size effect on hadron masses and decay constants with  $(5.4\text{fm})^4$  and  $(10.8\text{fm})^4$  lattices at the physical point in  $2+1$  flavor QCD」, The 37th International Symposium on lattice field theory (Lattice 2019) (Hilton Hotel Wuhan Riverside, Wuhan, China, June 16-22, 2019).
2. Ryo Sakai, Daisuke Kadoh, Yoshinobu Kuramashi, Yoshifumi Nakamura, Shinji Takeda, and Yusuke Yoshimura, 「Tensor network study of two dimensional complex  $\phi^4$  theory at finite density」, The 37th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2019) (Hilton Hotel Wuhan Riverside, Wuhan, China, June 16-22, 2019).
3. Shinichiro Akiyama, Yoshinobu Kuramashi, Takumi Yamashita, and Yusuke Yoshimura, 「Phase transition of 4-dimensional Ising model with higher-order tensor renormalization group」, The 37th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2019) (Hilton Hotel Wuhan Riverside, Wuhan, China, June 16-22, 2019).
4. Takeshi Yamazaki and Yusuke Namekawa 「Two-pion scattering amplitude from Bethe-Salpeter wave function at the interaction boundary」, The 37th International Symposium on lattice field theory (Lattice 2019) (Hilton Hotel Wuhan Riverside, China, June 16-22, 2019).
5. J. Kakazu, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yamazaki, and T. Yoshié for PACS Collaboration 「 $K_{l3}$  form factors in  $N_f=2+1$  QCD at physical point on large volume」, The 37th International Symposium on lattice field theory (Lattice 2019) (Hilton Hotel Wuhan Riverside, China, June 16-22, 2019).
6. Natsuki Tsukamoto, Yasumichi Aoki, Ken-ichi Ishikawa, Yoshinobu Kuramashi, Shoichi Sasaki, Eigo Shintani, Takeshi Yamazaki for PACS Collaboration 「Nucleon isovector couplings from  $2+1$  flavor lattice QCD at the physical point」, The 37th International Symposium on lattice field theory (Lattice 2019) (Hilton Hotel Wuhan Riverside, China, June 16-22, 2019).
7. Y. Nakamura, Y. Kuramashi, H. Ohno and S. Takeda 「Critical endpoint in the continuum limit and critical endline at  $NT = 6$  of the finite temperature phase transition of QCD with

- clover fermions」, The 37th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2019) (Hilton Hotel Wuhan Riverside, Wuhan, China, June 16-22, 2019).
8. A. L. Lorenz, H.-T. Ding, O. Kaczmarek, H. Ohno, H. Sandmeyer and H.-T. Shu 「Thermal modifications of quarkonia and heavy quark diffusion from a comparison of continuum-extrapolated lattice results to perturbative QCD」, The 37th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2019) (Hilton Hotel Wuhan Riverside, Wuhan, China, June 16-22, 2019).
  9. Kazuyuki Kanaya, Atsushi Baba, Shinji Ejiri, Masakiyo Kitazawa, Asobu Suzuki, Hiroshi Suzuki, Yusuke Taniguchi, and Takashi Umeda 「Study of 2+1 flavor finite-temperature QCD using improved Wilson quarks at the physical point with the gradient flow」, The 37th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2019) (Hilton Hotel Wuhan Riverside, Wuhan, China, June 16-22, 2019).
  10. Shinji Ejiri, Atsushi Kiyohara, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Mizuki Shirogane, Ryo Iwami, Shota Itagaki, Takashi Umeda, and Yusuke Taniguchi 「Determination of the endpoint of the first order deconfinement phase transition in the heavy quark region of QCD」, The 37th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2019) (Hilton Hotel Wuhan Riverside, Wuhan, China, June 16-22, 2019).
  11. Atsushi Baba, Shinji Ejiri, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Asobu Suzuki, Hiroshi Suzuki, Yusuke Taniguchi, and Takashi Umeda 「Calculation of PCAC mass with Wilson fermion using gradient flow」, The 37th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2019) (Hilton Hotel Wuhan Riverside, Wuhan, China, June 16-22, 2019).
  12. Yusuke Taniguchi, Atsushi Baba, Shinji Ejiri, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Asobu Suzuki, Hiroshi Suzuki, and Takashi Umeda 「Non-perturbative renormalization of Kaon B parameter using gradient flow」, The 37th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2019) (Hilton Hotel Wuhan Riverside, Wuhan, China, June 16-22, 2019).
  13. K. Kanaya, A. Baba, S. Ejiri, M. Kitazawa, A. Suzuki, H. Suzuki, Y. Taniguchi, and T. Umeda 「Thermodynamic properties of QGP at the physical point with the gradient flow method」, The 17th International Conference on QCD in Extreme Conditions (XQCD 2019) (Tokyo Campus, University of Tsukuba, Tokyo, Japan, June 24-26, 2019).
  14. A. Baba, S. Ejiri, K. Kanaya, M. Kitazawa, A. Suzuki, H. Suzuki, Y. Taniguchi, and T. Umeda 「Measuring chiral susceptibility using gradient flow」, The 17th International Conference on QCD in Extreme Conditions (XQCD 2019) (Tokyo Campus, University of Tsukuba, Tokyo, Japan, June 24-26, 2019).

15. Y. Taniguchi, S. Ejiri, K. Kanaya, M. Kitazawa, M. Shirogane, A. Suzuki, H. Suzuki, T. Umeda, and A. Baba 「QCD energy-momentum tensor using gradient flow」, The 17th International Conference on QCD in Extreme Conditions (XQCD 2019) (Tokyo Campus, University of Tsukuba, Tokyo, Japan, June 24-26, 2019).
16. Shinichiro Akiyama, Yoshinobu Kuramashi, Takumi Yamashita, and Yusuke Yoshimura, 「Phase transition of four-dimensional Ising model with higherorder tensor renormalization group」, Computational Approaches to Quantum Many-body Problems (CAQMP 2019) (ISSP, University of Tokyo, Kashiwa, Japan, July 22, 2019).
17. K. Kanaya, Y. Taniguchi, A. Baba, S. Ejiri, S. Itagaki, M. Kitazawa, T. Shimojo, A. Suzuki, H. Suzuki, and T. Umeda 「(2+1)-flavor QCD thermodynamics using the gradient flow」, CCS International Symposium 2019, "11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences," (EPOCHAL, Tsukuba, Japan, Oct. 15, 2019).

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

#### B) その他の発表

1. 谷口裕介, 馬場惇, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 鈴木博, 梅田貴士「物理的なクォーク質量におけるエネルギー運動量テンソルの研究」, 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(JHPCN) 第11回拠点シンポジウム (THE GRAND HALL, 品川区, 東京, 7.11-12, 2019).
2. 秋山進一郎, 藏増嘉伸, 吉村友佑, 山下巧「高次テンソル繰り込み群による4次元 Ising 模型の相転移の解析」, 基研研究会「熱場の量子論とその応用」(TFQT 2019)(京都大学基礎物理学研究所, 京都府, 京都, 2019年9月2日-4日).
3. 谷口裕介, 馬場惇, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 白銀瑞樹, 鈴木遊, 鈴木博, 梅田貴士「QGP 粘性係数導出に向けた  $N_f=2+1$  QCD エネルギー運動量テンソル相関関数の研究(II)」, 基研研究会「熱場の量子論とその応用」(TFQT 2019)(京都大学基礎物理学研究所, 京都府, 京都, 2019年9月2日-4日).
4. 白銀瑞樹, 江尻信司, 石見涼, 金谷和至, 北沢正清, 鈴木博, 谷口裕介, 梅田貴士, 若林直輝「高次補正項を取り入れたグラディエントフローによる一次相転移点近傍の熱力学量」, 基研研究会「熱場の量子論とその応用」(TFQT 2019)(京都大学基礎物理学研究所, 京都府, 京都, 2019年9月2日-4日).

5. 馬場惇, 梅田貴士, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 下条昂礼, 鈴木博, 鈴木遊, 谷口裕介「Wilson fermion の下での Gradient flow を用いたカイラル感受率の測定」, 基研研究会「熱場の量子論とその応用」(TFQT 2019)(京都大学基礎物理学研究所, 京都府, 京都, 2019 年 9 月 2 日-4 日).
6. 金谷和至, 馬場惇, 江尻信司, 北沢正清, 鈴木遊, 鈴木博, 谷口裕介, 梅田貴士「QGP at the physical point with the gradient flow」, 基研研究会「熱場の量子論とその応用」(TFQT 2019)(京都大学基礎物理学研究所, 京都府, 京都, 2019 年 9 月 2 日-4 日).
7. 藏増嘉伸, 加堂大輔, 坂井涼, 中村宜文, 武田真滋, 吉村友佑「テンソル繰り込み群による 2 次元有限密度複素  $\phi^4$  理論の解析」, 日本物理学会 2019 年秋季大会(山形大学, 山形, 2019 年 9 月 17 日-20 日).
8. 秋山進一郎, 藏増嘉伸, 吉村友佑, 山下巧「高次テンソル繰り込み群による 4 次元 Ising 模型の相転移解析」, 日本物理学会 2019 年秋季大会(山形大学, 山形, 2019 年 9 月 17 日-20 日).
9. 山崎剛, 滑川裕介「相互作用境界の Bethe-Salpeter 波動関数を使った二体パイ中間子散乱振幅」, 日本物理学会 2019 年秋季大会(山形大学, 山形, 2019 年 9 月 17 日-20 日).
10. 金谷和至, 梅田貴士, 江尻信司, 北沢正清, 下条昂礼, 白銀瑞樹, 鈴木遊, 鈴木博, 谷口裕介, 馬場惇「グラジエントフローによる格子 2+1 フレーバーQCD の熱力学研究 II」, 日本物理学会 2019 年秋季大会(山形大学, 山形, 2019 年 9 月 17 日-20 日).
11. 谷口裕介, 梅田貴士, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 鈴木遊, 鈴木博, 馬場惇「gradient flow を用いた K 中間子 B パラメータの非摂動論的な繰り込み」, 日本物理学会 2019 年秋季大会(山形大学, 山形, 2019 年 9 月 17 日-20 日).
12. 馬場惇, 梅田貴士, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 鈴木遊, 鈴木博, 谷口裕介「Wilson fermion の下での Gradient flow を用いた PCAC mass の計算」, 日本物理学会 2019 年秋季大会(山形大学, 山形, 2019 年 9 月 17 日-20 日).
13. 秋山進一郎, 藏増嘉伸, 吉村友佑, 山下巧「テンソル繰り込み群による 4 次元 Ising 模型の解析」, 日本物理学会第 75 回年次大会(名古屋大学, 名古屋, 2020 年 3 月 16-19 日).
14. 馬場惇, 梅田貴士, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 鈴木遊, 鈴木博, 谷口裕介「Wilson fermion の下での gradient flow を用いたカイラル感受率の測定」, 日本物理学会第 75 回年次大会(名古屋大学, 名古屋, 2020 年 3 月 16-19 日).
15. 金谷和至, 梅田貴士, 江尻信司, 北沢正清, 下条昂礼, 白銀瑞樹, 鈴木遊, 鈴木博, 谷口裕介, 馬場惇「グラジエントフローに基づく SFtX 法による格子 2+1 フレーバー QCD の熱力学-2-loop 係数の効果」, 日本物理学会第 75 回年次大会(名古屋大学, 名古屋, 2020 年 3 月 16-19 日).

#### (4) 著書、解説記事等

### 7. 異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等

#### 異分野間連携（センター内外）

1. 計算基礎科学連携拠点

<http://www.jicfus.jp/jp/>

#### 産学官連携

#### 国際連携・国際活動

2. International Lattice Data Grid (ILDG)

<http://ildg.sasr.edu.au/Plone>

3. Japan Lattice Data Grid (JLDG)

<http://www.jldg.org/jldg/>, <http://ws.jldg.org/QCDArchive/index.jsp>

### 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. XQCD2019 組織委員会（江尻信司，大野浩史（委員長），金谷和至，北沢正清，藏増嘉伸，谷口裕介，松古栄夫）主催，

筑波大学計算科学研究センター・筑波大学宇宙史研究センター・高エネルギー加速器研究機構共催，

The 17th International Conference on QCD in Extreme Conditions (XQCD 2019), 2019 年 6 月 24-26 日，筑波大学東京キャンパス，東京，

参加国数:13, 参加者数:89.

### 9. 管理・運営

1. 藏増嘉伸、運営委員会委員、運営協議会委員
2. 吉江友照、共同研究運用委員会委員
3. 吉江友照、藏増嘉伸、計算機システム運用委員会委員

### 10. 社会貢献・国際貢献



## 11. その他

海外長期滞在、フィールドワークなど

## II. 宇宙物理研究部門

### 1. メンバー

|     |                  |                 |
|-----|------------------|-----------------|
| 教授  | 梅村 雅之            |                 |
| 教授  | 大須賀 健            |                 |
| 准教授 | 森 正夫             |                 |
| 准教授 | 矢島 秀伸            |                 |
| 講師  | 吉川 耕司            |                 |
| 助教  | Wagner Alexander |                 |
| 助教  | 古家 健次            |                 |
| 研究員 | 田中 賢             | (HPCI 重点)       |
|     | 高水 裕一            | (CCS)           |
|     | 福島 肇             | (ポスト京萌芽)        |
|     | 安部 牧人            | (計算メディカルサイエンス)  |
|     | 朝比奈 雄太           | (CCS)           |
|     | 井上 茂樹            | (ALMA 共同科学研究事業) |
|     | 五十嵐 朱夏           | (数理物質科学研究科)     |
| 学生  | 大学院生 15 名学類生 7 名 |                 |

### 2. 概要

本年度、当グループは、ブラックホール降着円盤からの熱・輻射円盤風の研究、低赤方偏移銀河間物質における初代星起源金属汚染、強磁場中性子星への超臨界降着柱の理論モデルの構築、M31 恒星ストリームと暗黒物質サブハローの相互作用、周期的な超新星フィードバックによる Ultra-diffuse galaxy の形成、銀河衝突シミュレーションで探る Milky Way disk の進化シナリオ、初代銀河からの金属輝線放射、大質量星近傍の円偏光場生成メカニズム、低金属ガス雲における星団形成過程、宇宙大規模構造形成に対するニュートリノの力学的影響、重元素の超微細構造線を用いた中高温銀河間物質の検出可能性、AGN feedback: The interactions of AGN radiation, jets and winds with the host galaxy, ダスト成長を考慮した原始惑星系円盤の化学進化、星形成領域における水の重水素濃縮度を行った。また、宇宙生命計算科学連携として、星間空間のキラル有機分子の鏡像異性体過剰を引き起こす円偏光波生成の研究、原始太陽系におけるダスト成長過程の研究を行った。計算コード開発としては、スーパーコンピュータ富岳を用いた Vlasov シミュレーションの最適化、スーパーコンピュータ富岳における重力多体計算ライブラリ Phantom-GRAPe の開発、ボルツマン法に基づく一般相対論的輻射磁気流体力学計算コード INAZUMA の開発、一般相対論的偏光輻射輸送計算コードの開発を行った。

### 3. 研究成果

#### 【1】ブラックホール降着円盤からの熱・輻射円盤風の研究

ブラックホールが存在すると考えられている有力な天体が X 線連星である。コンパクトな領域から強力な X 線放射が発せられるという性質が、ブラックホール周囲の降着円盤理論でよく説明できるからである。しかし、X 線の放射メカニズムについてはまだよくわかっていない。特に、青方偏移した鉄の吸収線の存在は、およそ数百 km/s でガスが噴出していることを示唆しているが、その起源および加速機構は問題視されている。そこで本研究では、降着円盤の内縁付近で発せられた X 線が、比較的遠方の円盤に入射することで生じる円盤風を、輻射流体力学シミュレーションで調べた。その結果、ガス圧と輻射圧によって円盤風が噴出することがわかった。X 線はガスを加熱して圧力を増加させつつ、ライン吸収によって直接ガスを加速するからである。このモデルによる円盤風は噴出速度だけでなく、鉄の電離度も観測と合致することがわかった。

#### 【2】低赤方偏移銀河間物質における初代星起源金属汚染

重元素を含まない初代星である Pop III 星は、理論的にその存在が予言されてきたが、現在これを直接観測する方法はない。Pop III 星として、 $0.8M_{\odot}$  以下の星が生まれたとすれば、現在銀河に残っている可能性があり、超低金属星を探す試みがなされている。

もう一つの、間接的証拠として考えられるのは、大質量 Pop III 星が超新星爆発で放出する重元素を、Pop I, II 星起源の重元素と区別することである。Pop III 星は、赤方偏移 15 以上の初期宇宙で誕生するため、Pop III 起源の重元素は、銀河間空間にも存在している可能性がある。これを調べるために、我々は Pop III 星形成モデルを組み込んだ宇宙論的 N 体計算により、 $z \sim 3$  の IGM における Pop III 起源の重元素汚染を調べた。

シミュレーションの結果を右図に示す。左上がダークマター分布、右上が Pop III 起源の重元素、左下が Illustris-1 のダークマター分布、右下が銀河起源 (Pop I, II 星起源) の重元素分布である。この図から分かる通り、Pop III 起源の重元素は、銀河起源の重元素に比べて、より低密度の IGM で支配的になる。このとき、Pop III 起源の重元素量は、太陽組成の  $10^{-5}$  から  $10^{-2}$  の範囲となる。

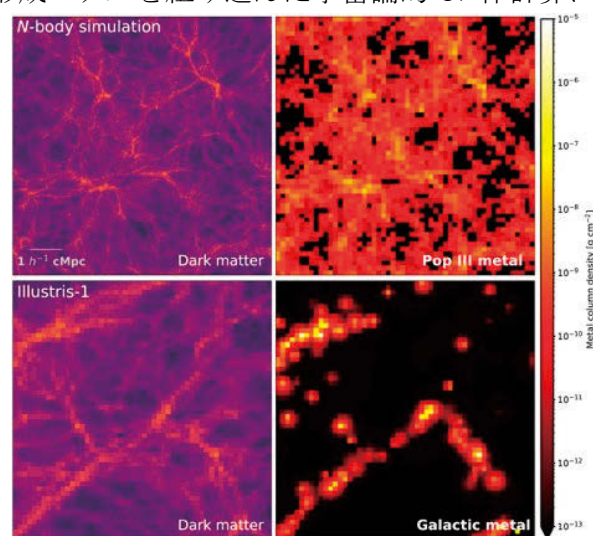


図 1 Pop III 星形成モデルを組み込んだ宇宙論的 N 体計算の結果。

### 【3】強磁場中性子星への超臨界降着柱の理論モデルの構築

超高光度 X 線源 (ULX) の中心天体がブラックホールなのか中性子星なのか、未だ結論が出ていない。しかし、X 線パルスが検出されたため、少なくとも幾つかの ULX の中心天体が磁化した中性子星であると考えられるようになった。ガスが磁極へ落下することで X 線を発する降着柱が形成され、中性子星の自転によってパルス放射が説明できるからである。比較的弱い磁場を持つ中性子星へのガス降着は、我々が既に輻射流体力学シミュレーションで解明した (Kawashima et al. 2016) が、強磁場中性子星の場合についてはまだ調べられていない。そこで我々は、従来のモデルを発展させ、強磁場中性子星の降着柱の輻射流体力学シミュレーションを実施した。その結果、強磁場の場合でも超臨界降着柱（降着率がエディントン限界を超える降着柱）が準定常的に存在可能であることがわかった。そして、弱磁場の場合と異なり、強磁場中性子星の降着柱の内部は多数の細い流れに分裂し、降着する流れと噴出する流れがすれ違うような構造になることを見出した。降着柱側面の光度はエディントン光度を大幅に超えるため、ULX の有力モデルであることがわかった。

### 【4】M31 恒星ストリームと暗黒物質サブハローの相互作用

本研究では、M31 のハロー領域に存在する恒星ストリームである North-Western (NW) ストリームに注目し、NW ストリームと DM サブハローの近接遭遇時の痕跡を理論・観測両側から調べることで、DM サブハロー数の評価を目指している。我々は NW ストリームに注目した研究に継続的に取り組んでおり、NW ストリームの 3 次元構造を N 体計算を用いて再現済みである (Kirihara et al. 2017; Komiyama et al. 2018)。今年度、我々は NW ストリームと DM サブハローの衝突実験を N 体計算を用いて遂行し、DM サブハローの質量が  $10^9 M_\odot$  程度以上の近接遭遇時には位相空間上に明確な痕跡が残ることが分かった。すばる望遠鏡に搭載される PrimeFocus Spectrograph (PFS) は、広視野をカバーした上で 2400 天体の視線速度を同時観測できるために位相空間上の構造探査に適しており、DM サブハローと NW ストリームの近接遭遇の痕跡検出に威力を発揮すると期待できる。また近接遭遇後の長時間進化計算により、衝突時に形成されたギャップが大きく成長する、潮汐相互作用によって形成された DM ストリームと NW ストリームの相互作用の痕跡が残ることも分かった。

### 【5】周期的な超新星フィードバックによる Ultra-diffuse galaxy の形成

Ultra-diffuse galaxy (UDG) は van Dokkum et al. (2015) によって、これまでにない新しい種類の銀河として発見された。その特徴は表面輝度が矮小銀河程度で低いのに対して、半光度半径が天の川の円盤程度と大きいことである。銀河天文学の研究者による精力的な観測により、すでに 1000 以上の UDG が検出されているが、その形成過程の理論的理解は未だ途上である。そのような中で、Di Cintio et al. (2017) は宇宙論的な流体シミュレーションを用

いて UDG の形成過程に関する研究を行い、UDG のような星分布が広がった系の形成にはガスのアウトフローが重要であり、UDG は矮小銀河の一種である事を示唆した。しかし彼らの研究は、その物理過程の詳細に関しては議論しておらず、現象論的な理解でとどまっている。本研究ではこの結果を踏まえて、周期的な超新星フィードバックによるガスのインフローとアウトフローによって、UDG が形成される物理的な条件や過程に着目して研究を行った。Dark matter halo と星で作られた系に、周期的な超新星フィードバックによるガスのインフローとアウトフローによるポテンシャル変動を外場として加えて、N 体シミュレーションを実行した。その結果、フィードバックによって星分布が時間とともに膨張する物理過程を明らかにした。さらに、UDG における半光度半径や質量 - 光度比のような典型的な特徴を再現し、その形成条件に一定の知見を得ることに成功した。本研究の結果は、周期的な超新星フィードバックによるガスのインフローとアウトフローが UDG の形成に決定的な役割を果たすことを示している。

## 【6】銀河衝突シミュレーションで探る Milky Way disk の進化シナリオ

近年の観測的研究により、私たちの住んでいる Milky Way (MW) に massive satellite galaxy が約 10 Gyr 前に衝突したことが示唆され、その衝突した satellite は Gaia Enceladus と名付けられた (Chiba & Beers, 2000; Gaia Collaboration et al., 2018)。この衝突が MW の stellar halo と thick disk の形成に大きく寄与していると考えられている。我々は、 $\Lambda$  Cold Dark Matter モデルに基づく宇宙論的 N 体シミュレーションの結果を初期条件に採用し、また質量分解能を統一したモデルで、satellites と MW disk との相互作用による satellite の破壊や MW disk のバックリアクション及び thick disk の形成について調べた。その結果、宇宙論的シミュレーションのデータでは MW 中心に接近する satellites が少なく、先行研究が、衝突する satellites の数を過大評価していることがわかった。また less massive satellite の多重衝突のみでは、thin disk から thick disk への有効な遷移を見いだすことができなかった。そして、thick disk 形成のためには、質量  $\sim 10^{10} M_{\odot}$  程度の massive satellite の衝突が有効に働くことがわかった。さらに、観測で示唆されるような厚み ( $\sim 1$  kpc) の thick disk を再現するためには、massive satellite が銀河中心付近 ( $\leq 10$  kpc) に衝突する必要があることを明らかにした。

## 【7】初代銀河からの金属輝線放射

近年アルマ望遠鏡によって多数の遠方銀河が観測された。特に、一部の銀河は強い酸素 (88 ミクロン) や炭素 (158 ミクロン) の輝線を放射している。これらの輝線を検出する事で、銀河の赤方偏移が確定し、ガスダイナミクスの研究が可能となりつつある。しかしながら、初代銀河と呼ばれる遠方銀河が、どのような物理状態の時に酸素や炭素の輝線を効率良く放

射するかは分かっていない。本研究では宇宙論的流体計算によって、初代銀河の形成、超新星爆発による金属放出、輸送過程を調べた。そして、輻射輸送計算によって、水素、酸素の電離構造、及び準位分布を詳細に計算した。これにより、初代銀河の進化とともに酸素、炭素放射をモデル化する事に成功した。結果として、スターバーストが起きる際に大量のガス、金属が星形成領域に蓄積し、強い酸素輝線が放射される事が分かった。その後、超新星爆発によって周囲のガスが銀河風として噴出すると、電離光子が脱出するため酸素輝線は急激に小さくなる。スターバーストの際の酸素の光度は  $10^{42}$  erg/s に達し、アルマ望遠鏡で観測された銀河の光度を再現する事が分かった (Arata, Yajima, et al. submitted)。一方で、炭素の輝線は主に銀河円盤から放射されるため、超新星爆発によるアウトフローフェイズでも、炭素の輝線光度はあまり減少しないことが分かった。

#### 【8】大質量星近傍の円偏光場生成メカニズム

星形成領域では、しばしばパーセクスケールに渡った近赤外線円偏光場が観測されている。星間空間の円偏光は、生体内のアミノ酸ホモキラリティとの関係が示唆されており、生命の起源を調べる上で重要である。特に、光度が大きい大質量星付近で 10% を超える強い円偏光場がいくつか報告されている (Kwon et al. 2016)。しかしながら、このような強い円偏光場の生成メカニズムは全く分かっていない。我々はモンテカルロ法に基づいた輻射輸送計算に、散乱の際の線偏光、円偏光 (ストークスパラメータ) の変化率の計算を導入し、大質量星付近の円偏光場を計算した。計算設定としては、星付近に扁平したダストが整列しているスラブを考えた。結果として、ダストサイズが 1 ミクロンメートル程度に大きい場合に、10% を超える強い円偏光場が生成される事が分かった (Fukushima, Yajima, Umemura, submitted)。ダストサイズが大きい場合は、ダスト内部での散乱位置の違いにより大きい位相差を作る事が出来るため、1回の散乱で円偏光度が数十 % を超える事が可能となる。近年の電波観測でも、大質量星付近にミクロンサイズのダストが存在することが示唆されており、本研究のモデルと整合的である。

#### 【9】低金属ガス雲における星団形成過程

近傍の銀河では、散開星団や重力的に束縛されたコンパクトな球状星団など、多種多様な星団が存在する。これらの多様性は、星団が作られる分子雲の物理状態に起因していると考えられているが、分子雲内での星団形成メカニズムは未だ良く分かっていない。近年の観測によって、星団形成、分子雲の破壊は星からの紫外線輻射によるフィードバックが支配的である事が示唆された (Kruijssen et al. 2019)。したがって、本研究では適合格子細分化法を用いた流体計算により、分子雲スケールから分子雲コアまでを同時に分解しつつ、多数の大質量星の輻射フィードバックを考慮した星団形成シミュレーションを行った。結果として、分

子雲がコンパクトかつ金属度が大きい場合に星団の形成効率が大きくなることが分かった (Fukushima, Yajima, et al. submitted)。これは、ダストによる紫外線遮蔽、金属冷却による電離ガスの温度の低下によって、分子雲への輻射フィードバックが弱まるためである。また、低金属ガス雲では、紫外線によって CO 分子形成が阻害され、ほとんどのガスは原子の状態に居続ける事が分かった。

#### 【10】宇宙大規模構造形成に対するニュートリノの力学的影響

ブラソフ方程式の直接数値シミュレーションを用いて、質量を持つニュートリノの宇宙大規模構造形成に対する影響の研究を行った。2019 年度は、これまでの計算では CDM の重力計算を Particle-Mesh 法という空間分解能が劣る手法で計算せざるを得なかったが、これを TreePM 法という空間分解能の良い手法で計算できるように改良し、ダークマターハローの同定や空間分布の精度を大幅に改善したシミュレーションを行った。今後はこのデータを用いて、ニュートリノとダークマターの相対速度に起因するニュートリノ航跡がどのようにダークマターハローや銀河の分布に影響するかを調査する。

#### 【11】重元素の超微細構造線を用いた中高温銀河間物質の検出可能性

現在の宇宙のバリオンの大半は、希薄で温度が  $10^5$  から  $10^7$  K 程度の銀河間ガスの状態で存在していることが知られている。これらの銀河間ガスは宇宙の質量の大半を占めるダークマターの分布の良いトレーサーであると考えられているが観測手段が極めて限られており、現在のところ X 線で明るく輝く天体と我々の間にある銀河間ガスをその影として検出することしかできていない。本研究では、銀河間ガスの新たな観測手段として銀河間ガスに含まれる重元素 (窒素) の超微細構造線を用いることを提案し、宇宙論的構造形成シミュレーションによってこの手法による銀河間ガスの観測可能性を輻射輸送方程式を解くことで調査した。その結果、銀河間ガスのうち銀河群や銀河団の外縁部や宇宙大規模構造のフィラメント中心部に存在する成分についてはこの手法で観測可能であることが分かった。

#### 【12】AGN feedback: The interactions of AGN radiation , jets and winds with the host galaxy

The supermassive black holes in the centers of galaxies accrete gas and launch jets, fast winds, or emit copious amounts of radiation. The jets, winds, and radiation may impact the gas in host galaxy on scales ranging from fractions of parsecs to hundreds of kiloparsec. This cycle of matter and energy affects the evolution of galaxies and is termed the “feedback cycle of galaxy formation”. It leads to a regulated history of star-formation, evidenced through the luminosity functions of galaxies, and to the co-evolution of the central supermassive black hole and the galaxy, evidenced through the scaling relations such as the Magorrian relation. We are pursuing a numerically intensive project running 3-

dimensional relativistic hydrodynamic and radiation-hydrodynamic simulations with multiphase gas aimed at elucidating the physics of the mass and energy transfer in the feedback cycle and the effects of jets, winds, and radiation on star-formation and black hole accretion. In recent work we have: 1) carried out a multi-wavelength study of the  $z = 0.025$  Compact Steep Spectrum radio source hosted by the early-type galaxy UGC 05771, to investigate jet-ISM interactions in a galaxy with a young radio source. The jet is likely accelerating shocked molecular and ionized gas outwards at low velocities, creating a “stalling wind”. The star-formation rate is also somewhat reduced, possibly due to the jet-ISM interactions, as our numerical modelling suggest (Zovaro et al, including Wagner 2019); 2) performed high-resolution simulations of wind-cloud interaction involving a collection of clouds being swept up by a shock. We followed the fragmentation, compression, destruction, and mixing of turbulent clouds embedded in a fast astrophysical flow. The work uncovered the very differing of evolution of turbulent clouds dominated by solenoidal modes, and those dominated by compressive modes, and uncovered a strong dependencies on porosity (Banda-Barragán, including Wagner, 2020); 3) performed VLA and EVN HI absorption observations, modelling, and comparison with molecular gas data of the radio source B2 0258+35, which suggest that the cold gas in the centre of its host NGC 1167 is very turbulent and that this turbulence is induced by the interaction of the jets with the interstellar medium. The ionised gas in the galaxy shows evidence of shock heating at a few kpc from the radio source. The results are consistent with our numerical simulations of radio jets expanding into a clumpy gas disc, which predict that the jets percolate through the gas disc and drive shocks into the ISM at distances much larger than their physical extent (See Fig. 2).

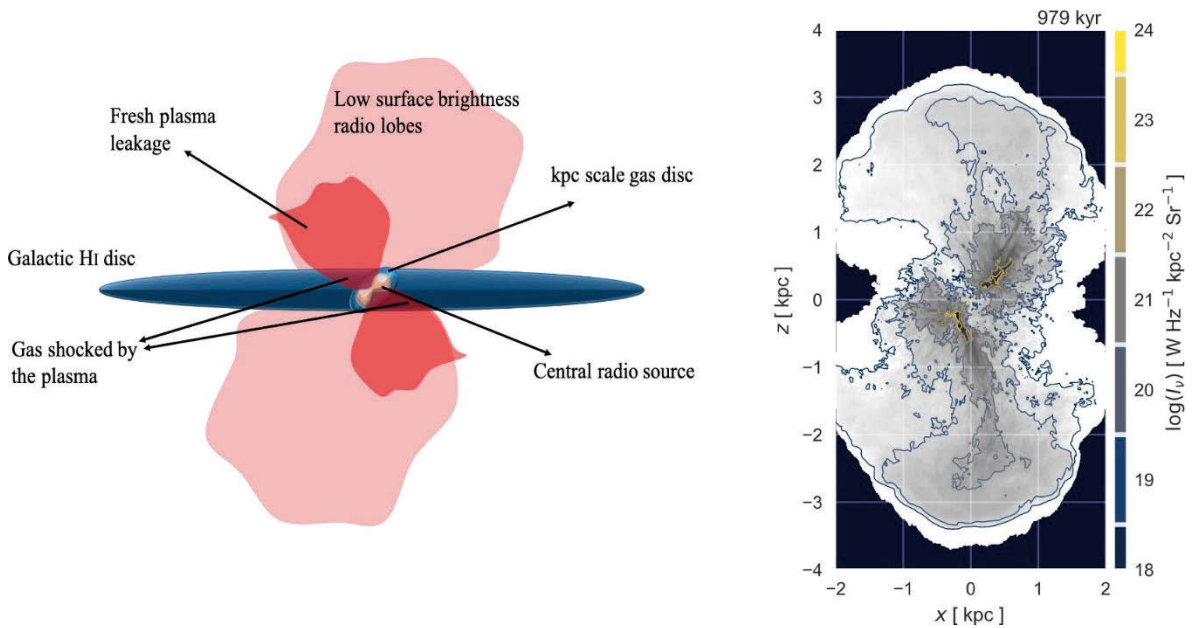


図 2 The small and large scale structures of the jet in B2 0258+35/NGC



**【13】ダスト成長を考慮した原始惑星系円盤の化学進化**

原始惑星系円盤は惑星形成の現場である。円盤内の固体粒子（ダスト+氷）やガスは惑星の材料物質であり、それら材料物質の分子組成が、やがて形成される惑星の組成を決める。近年の ALMA による観測から、ダスト成長が円盤内の揮発性物質分布に大きな影響を与えることが示唆されているが、その詳細は観測的にも理論的にもよく分かっていない。本年度は主に、昨年度開発したダスト成長モデルとガス・固相化学反応モデルをカップルした数値計算コードを用い、原始惑星系円盤内の分子組成分布とその時間発展を調べた。その結果、円盤内の分子分布は、大きく成長した氷ダストの中心星方向への移動、氷の昇華、一酸化炭素 (CO) を他分子へと変換する化学反応の 3 つのプロセスの競合でおよそ決まることを明らかにした。この結果を基に、観測から導出された CO 雪線内側の CO 分子存在量とモデルの予測を比較することで、TW hya 円盤の重要な物理パラメータ (氷ダストの衝突破壊速度と宇宙線電離率) に制限を加えた。

**【14】星形成領域における水の重水素濃縮度**

水の重水素濃縮度 ( $\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$  比) は、星惑星形成に伴う水の進化や太陽系の水の起源を探る強力なツールである。これまでの観測から、分子雲複合体中の原始星天体の  $\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$  比は太陽系の彗星のそれと同程度なことが知られている。星形成領域における  $\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$  比の環境依存性を探るため、分子雲複合体に付随しない孤立した原始星天体について HDO と  $\text{H}^{18}\text{O}$  の観測を ALMA を用いて行った。その結果、分子雲複合体中の原始星天体に比べ、孤立した原始星天体では  $\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$  比が 2 倍程度高いことが分かった。孤立した天体は近傍の星形成の影響を受けないため、星形成のタイムスケールが長いこと、分子雲コア時代の温度がより低いことの 2 点が原因として考えられる。

**【15】星間空間のキラル有機分子の鏡像異性体過剰を引き起こす円偏光波生成の研究（宇宙生命計算科学連携）**

星形成領域におけるダスト粒子光散乱による円偏光波生成過程について明らかにするため、「ストークルパラメータを含むモンテカルロ輻射輸送コードの開発」を行い、以下の 3 つの成果を得た。これによって、星形成領域で観測されている高円偏光波の生成機構についての理解が大きく進むとともに、アミノ酸のホモキラリティ生成を誘発する紫外線波長領域にも円偏光波が存在することを明らかにした。

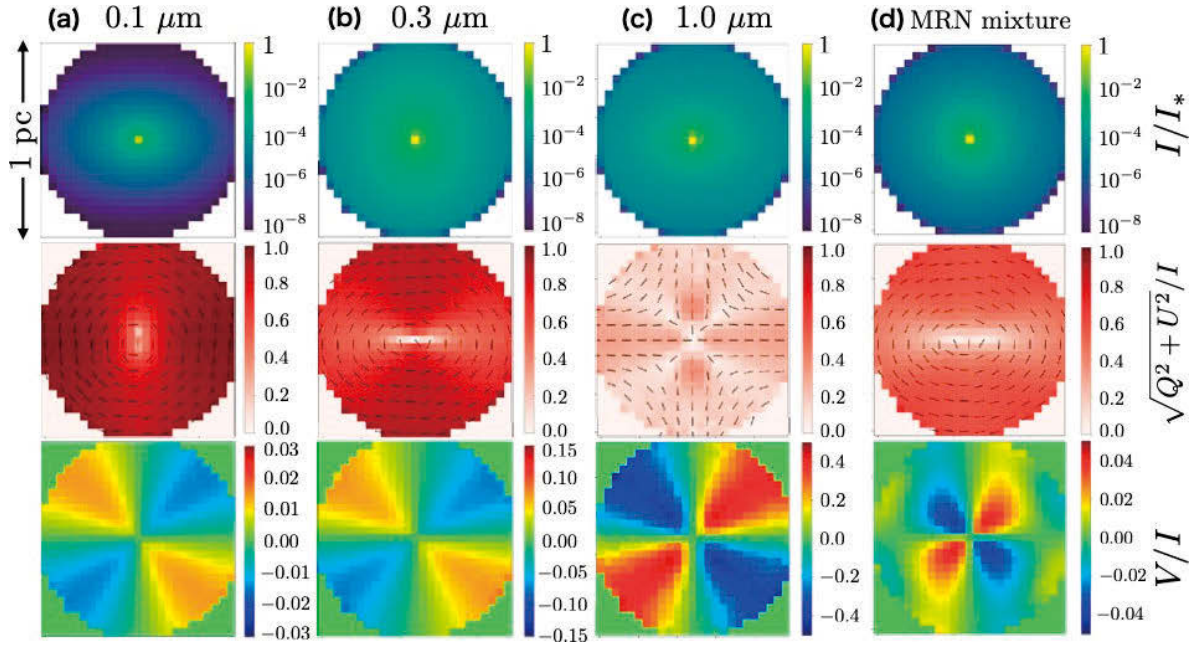


図 3 単一ダストサイズ (0.1, 0.3, 1.0  $\mu\text{m}$ ) および MRN 分布のダストにおける、輝度 (上図) と線偏光度(中図), 円偏光度 (下図)。1.0  $\mu\text{m}$  と MRN 分布の場合は小ダストサイズの場合と円偏光度分布の符号が入れ替わる。

#### A) ストークスパラメータを含むモンテカルロ輻射輸送コードの開発

扁球ダスト粒子による散乱過程を取り扱うために、散乱過程ごとに散乱行列 ( $4 \times 4$  行列) の全ての成分に起因するストークスパラメータの変化を計算する。扁球ダスト粒子では、ダスト短軸方向と光子進行方向によって散乱行列の値も変わるため、各散乱角にテーブルを用意する。これらを考慮したモンテカルロ輻射輸送計算コードを開発した。また、光散乱だけではなく光子吸収および熱放射の効果も含むコードの開発を行った。

#### B) 星形成領域における円偏光度の最大値とダストサイズの関係について

近赤外線観測によると、円偏光度は最大 20% に達し、光源となる星質量と相関があることが知られている。これが実現する条件を明らかにするため、開発したコードを用いて星形成領域について輻射輸送計算を行った。

今回は光源の周囲に光学的厚みが 1 となるようにダストシェルを配置し、単一ダストサイズ (0.1, 0.3, 1.0  $\mu\text{m}$ ) および MRN 分布の場合について調べた。

図 2 に示すように、円偏光度について観測で見られる四重極構造を再現することに成功した。小サイズダスト (0.1, 0.3  $\mu\text{m}$ ), MRN 分布の場合には円偏光度は 10% にも到達しないことがわかった。一方、1.0  $\mu\text{m}$  の単一ダストの場合には円偏光度は 40% まで到達し、高円偏光波が生成されていることがわかった。このことから、より質量が大きい星の周囲ではダス

ト成長が促進され、マイクロサイズのダストが支配的な環境が実現され、結果として高円偏光度で観測されている可能性を提唱した。

### C) 星形成領域に紫外線波長における円偏光波の存在可能性について

紫外線における円偏光波は、円二色性によりアミノ酸の鏡像異性体過剰を誘発する。一方、宇宙空間では近赤外線波長の円偏光波しか観測されておらず、紫外線波長で存在するかは謎であった。今回は、B) と同様の設定で、ダストサイズが MRN 分布の場合に紫外線 (121.6 nm) と近赤外線 (2.14  $\mu\text{m}$ ) 波長について計算を行い、両波長での円偏光度について調べた。図 4 に両波長における円偏光度のダストシェルでの分布をしめす。この場合赤外線波長では、円偏光度は 3% 程度であるのに対し紫外線波長では最大 30% に達することがわかった。このため、赤外線波長で円偏光波が存在する領域では、紫外線波長についてもより強い円偏光波が存在することを明らかにした。

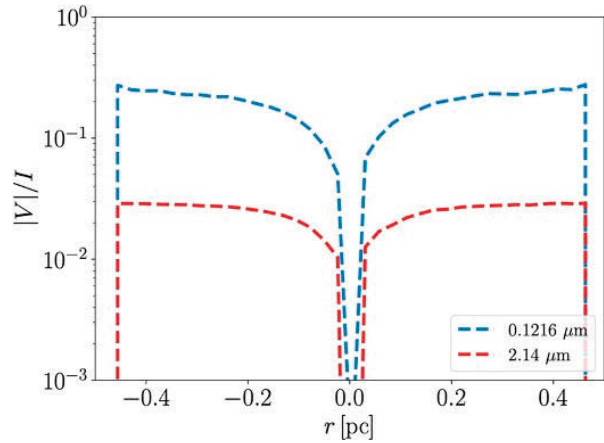


図 4 ダストシェルの 45 度方向における円偏光度分布の半径依存性。青線、赤線は紫外線 (121.6 nm) と近赤外線 (2.14  $\mu\text{m}$ ) 波長の場合を示す。

## 【16】原始太陽系におけるダスト成長過程の研究（宇宙生命計算科学連携）

原始太陽系円盤の最小質量モデルに従えば、円盤内の乱流の局所平均マッハ数は、0.01 から 0.32 の範囲になる。局所平均マッハ数が、1 より十分に小さいことから、これまで原始太陽系円盤の流体計算は、非圧縮を仮定して行われることが多かった。しかし、これまでの計算はほとんどがオイラー方程式を扱うものであり、ナビエ・ストークス方程式を解いた場合に、圧縮性の効果がどのように現れるかは明らかにされてこなかった。我々は、ナビエ・ストークス方程式の直接数値計算を行い、非圧縮性及び圧縮性乱流場の違いがレイノルズ数にどのように依存するかを明らかにし、この中での慣性粒子の振る舞いを調べることで、非圧縮性及び圧縮性乱流場中のダストの衝突付着の比較を行った。

## A) 非圧縮性及び圧縮性乱流場のレイノルズ数依存性

圧縮性乱流の直接数値計算における外力項の取り扱い方の見直しを行い, 乱流場の圧縮性の強さをより細かく制御することが可能になった。これによって, 圧縮性乱流場の統計的な準定常性を向上させることが可能となり, 信頼性の高い結果による比較が実現した。

これを用いて, 右表に示すようなモデルで, 非圧縮性乱流場と圧縮性乱流場との比較を行った。モデル名で, I は非圧縮性流体計算, C は圧縮性流体計算, 1 次元方向のメッシュ数, マッハ数を表す。また, 圧縮性散逸と solenoidal 散逸の小さなものを “w”, 大きなものを “s”, 圧縮性散逸がないものを “n” としている。図 4 (上段) に, 計算の結果得られた速度 divergence 分布関数のレイノルズ数依存性を示す。マッハ数が大きくなるにつれて, 速度 divergence の裾野が広がることは予想通りであるが, レイノルズ数が大きくなっても裾野は広がって

いく。これにより, 図 5 (下段) に見る通り, マッハ数が 1 を超える弱い衝撃波領域が現れる。このことは, 慣性が小さい粒子の衝突付着の統計がわずかに影響を受けること, 及び, 慣性の大きい粒子においても衝突速度分布がわずかに変化し, 付着率が若干高まることが明らかとなった。

| Run        | $N^3$    | $Re$ |
|------------|----------|------|
| I256       | $256^3$  | 933  |
| C256-0.1n  |          | 931  |
| C256-0.1w  |          | 1047 |
| C256-0.3w  |          | 957  |
| C256-0.3s  |          | 1062 |
| I512       | $512^3$  | 2256 |
| C512-0.1w  |          | 2375 |
| C512-0.3w  |          | 2859 |
| C512-0.3s  |          | 2775 |
| I1024      | $1024^3$ | 6128 |
| C1024-0.3s |          | 5685 |

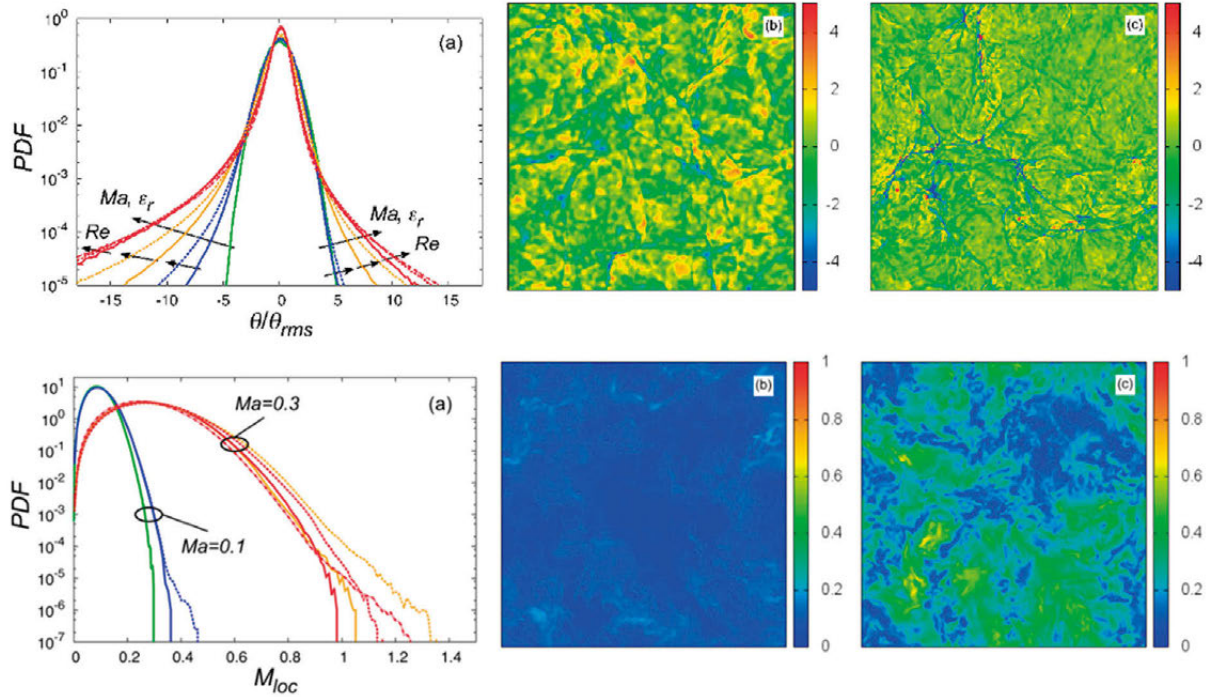


図 5 上段左は、速度 divergence 分布関数のレイノルズ数依存性。上段 (b) はモデル C512-0.1w, (c) はモデル C512-0.3s の密度分布。下段左は、局所マッハ数分布関数のレイノルズ数依存性。下段, (b) はモデル C512-0.1w, (c) はモデル C512-0.3s のマッハ数空間分布。

## B) 非圧縮性及び圧縮性乱流場中のダストの衝突付着の比較

図 6 に、非圧縮性及び圧縮性乱流場中に置かれたダスト粒子の衝突付着確率の結果を示す。

この結果は、衝突付着確率はレイノルズ数および圧縮性に依存し、レイノルズ数が大きくなると衝突付着確率が小さくなること、圧縮性の影響を受けて衝突付着確率が若干大きくなることを示す。よって、これまで行われてきた、非圧縮の取り扱い、ダスト粒子の衝突付着確率については概ね妥当だと結論される。ただし、弱い衝撃波領域が現れる場合には、慣性が小さい粒子の衝突付着の統計がわずかに影響を受けること、及び、慣性の大きい粒子においても衝突速度分布がわずかに変化し、付着率が若干高まることが明らかとなった。

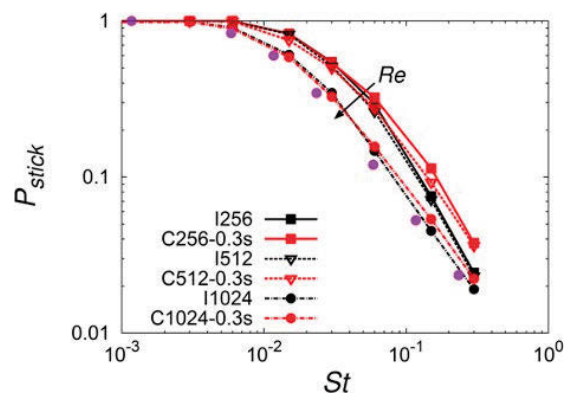


図 6 圧縮性乱流場中のダスト粒子付着確率のレイノルズ数依存性と非圧縮性乱流場中のダスト粒子付着確率との比較



**【17】スーパーコンピュータ富岳を用いた Vlasov シミュレーションの最適化**

スーパーコンピュータ京の後継機として開発されたスーパーコンピュータ富岳において、ニュートリノの分布関数の時間発展を記述するブラソフ方程式を直接数値シミュレーションする Vlasov シミュレーションの最適化を行った。スーパーコンピュータ富岳では ARMv8-A アーキテクチャに基づく A64FX プロセッサを採用しており、Vlasov シミュレーションにおける移流方程式の数値計算を、このプロセッサで実装されている Scalable Vector Extension (SVE) という SIMD 命令を用いた最適化を行った。その際、メモリアドレスの連続領域に沿った方向の移流に関してはデータの並べ替えを行う必要があり SIMD 命令の効率的な実行が困難であるが、データの並べ替えを SIMD レジスタ上で極めて高速に行う Load And Transpose (LAT) 法を開発し最終的にソケット当たり約 800Gflops という性能を達成することができた。

**【18】スーパーコンピュータ富岳における重力多体計算ライブラリ Phantom-GRAPE の開発**

スーパーコンピュータ京の後継機として開発されたスーパーコンピュータ富岳において、重力多体シミュレーションで大きな計算コストを占める粒子間相互作用計算を SIMD 命令を用いて高速化した数値計算ライブラリ Phantom-GRAPE を開発した。Phantom-GRAPE は従来から Intel 社や AMD 社の開発する x86 系プロセッサに対応してきたが、スーパーコンピュータ富岳で採用された A64FX プロセッサで実装されている SIMD 命令に対応した。その結果、コアあたり  $1.2 \times 10^9$  [interaction/sec] という x86 系プロセッサと遜色ない性能を達成することができた。

**【19】ボルツマン法に基づく一般相対論的輻射磁気流体力学計算コード INAZUMA の開発**

ブラックホールや中性子星の周囲の構造を調べるためには、一般相対論、輻射輸送、磁気流体力学を全て加味した一般相対論的輻射磁気流体力学 (GR-RMHD) 計算が必要となる。GR-RMHD 計算は近年ようやく可能となったが、そのほとんどは M1-closure 法に基づいて輻射場を解いている。この場合、輻射場の非等方性を正しく扱うことができないという問題が生じる。そこで本研究では、輻射輸送方程式を解くことで、輻射 intensity の角度分布からエディントンテンソルを求める手法を開発した。これにより、輻射場の非等方性をより正確に扱うことが可能となった。実際、幾つかのテスト計算で M1 法よりも明らかに正しい結果を示した。また、エネルギー方程式とエントロピー式を組み合わせることで安定性を向上させ、陽解法と陰解法を巧みに組み合わせることで精度を向上させた。

## 【20】一般相対論的偏光輻射輸送計算コードの開発

ブラックホール周囲の降着円盤のシミュレーション結果と、イベント・ホライズン・テレスコープ等の観測結果を直接比較することは、円盤の構造やジェットのマカニズムを知る上で必要である。そこで必要となるのが、シミュレーションデータから、観測イメージやスペクトルを理論的に作り出す一般相対論的輻射輸送計算コードである。特に、イベント・ホライズン・テレスコープによる偏光観測が直前に迫っているので、偏光輻射輸送計算が重要視されている。そこで本研究では、ブラックホール周囲の曲がった測地線に沿って偏光輻射輸送計算が実現可能な、一般相対論的偏光輻射輸送計算コードを開発した。ブラックホールシャドウやジェットのイメージを、直線偏光や円偏光と合わせて予言することが可能となった。

## 4. 教育

### 【学位論文】

#### <修士論文>

##### 1. 細谷 亮太郎

Dusty-gas の輻射重力源への Hoyle-Lyttleton 降着; 輻射場の非球対称性と減光の効果

##### 2. 曾我 健太

輻射流体力学で探る原始銀河と AGN の共進化

##### 3. 竹澤 多聞

銀河中心ガス円盤におけるブラックホール合体

##### 4. 田崎 翼

2 次元輻射輸送計算による光バイオイメージング法の開発

##### 5. 中村 帆南

星形成領域における有機分子生成過程とキラリティ

##### 6. 佐々木 竜志

銀河衝突シミュレーションで探る Milky Way disk の進化シナリオ

#### <学士論文>

##### 1. 鈴見 祐悟

星間有機分子の生成過程について

2. 橋 拓海

原始惑星系円盤スペクトルのモンテカルロ輻射輸送シミュレーション

3. Xue YunFan

Dependence of the AGN Feedback Efficiency on the Wind Mach Number

4. 数野 優大

天の川銀河における Subhalo の衝突過程

【集中講義】

1. 大須賀健. 物理学特論 2 「宇宙物理学における流体力学および輻射輸送・輻射流体力学の基礎」, 立教大学大学院. (期間中の 3 日間) . Dec. 2-9, 2019.

5. 受賞・外部資金・知的財産権等

【受賞】

1. 矢島 秀伸. 筑波大学若手教員奨励賞. Nov. 1, 2019.

【外部資金】

<代表者>

- 基盤研究 (A) (一般) H31 年度～H35 年度：梅村雅之  
「多重 AGN の統合研究で紐解く超巨大ブラックホールの起源」  
H31 年度 930 万円／全体 3,460 万円)
- 科学技術試験研究委託事業, H28 年度～H31 年度：梅村雅之  
「ポスト京で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発」萌芽的課題, 「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 (生命を育む惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明)」 (サブ課題 D 原始太陽系における物質進化と生命起源の探求)  
(H31 年度 1,278 万円／全体 4,874 万円)
- 基盤研究 (C) (一般) H30 年度～H32 年度：大須賀健  
「輻射磁気流体力学計算と輻射スペクトル計算で解明する超高光度 X 線源の起源」  
(H31 年度 90 万円／全体 290 万円)
- 基盤研究 (C) (一般) R1 年度～R3 年度：Wagner Alexander  
「Interstellar Turbulence by Supermassive Black-Hole Jets, Winds, and Radiation」



(H31 度 100 万円／全体 260 万円)

- 新学術領域研究（研究領域提案型）H30 年度～H31 年度：大須賀健  
「連星ブラックホール形成の解明に向けた孤立ブラックホールの輻射磁気流体力学計算」

(H31 度 80 万円／全体 170 万円)

- 若手研究 (A) H29 年度～H32 年度：矢島秀伸  
「高分解能数値シミュレーションで迫る初期宇宙の銀河進化メカニズム：多様性の解明へ」

(H31 年度 360 万円／全体 1,400 万円)

- 新学術領域研究（研究領域提案型）H30 年度～H31 年度：矢島秀伸  
「初代銀河と共存する初代星の形成メカニズムの研究」

(H31 年度 100 万円／全体 200 万円)

- ALMA 共同科学研究事業（区分 A）H31 年度～H33 年度：矢島秀伸  
「ALMA 観測と数値シミュレーションの融合で解き明かす大規模構造，原始銀河団，サブミリ波銀河の階層的構造」

(H31 年度 100 万円／全体 300 万円)

- 新学術領域研究（研究領域提案型）公募研究 H30 年度～H31 年度：吉川耕司  
「Vlasov シミュレーションで迫るニュートリノの宇宙大規模構造形成への力学的影響」

(H31 年度 117 万円／全体 221 万円)

- 若手研究 (B) H29 年度～H31 年度：古家健次  
「星間雲から原始惑星系円盤に至る分子組成進化の理論的研究」

(H31 年度 60 万円／全体 240 万円)

- 若手研究 H30 年度～H33 年度：朝比奈雄太  
「宇宙ジェットの加速・収束・相互作用の統一的な数値実験による全容の解明」

(H31 年度 50 万円／全体 200 万円)

#### <分担者>

- 基盤研究 (A)（一般）H27 年度～H31 年度：梅村雅之（代表者：大内正巳）  
「すばる HSC と SDSS で探る宇宙論的スケールの物質循環」  
(H31 年度分担金 15 万円／分担金全体 67.5 万円)
- 基盤研究 (C)（一般）H28 年度～H31 年度：梅村雅之（代表者：高橋芳太）  
「一般相対論的 ART 法による超巨大ブラックホール形成と成長過程の研究」

- (H31 年度分担金 10 万円／分担金全体 60 万円)
- 基盤研究 (A) (一般) H29 年度～H33 年度：大須賀健（代表者：大向一行）  
「理論シミュレーションで解明する巨大ブラックホールの起源」  
(H31 年度分担金 30 万円／分担金全体 195 万円)
  - 基盤研究 (A) (一般) H27 年度～H31 年度：森正夫（代表者：大内正巳）  
「すばる HSC と SDSS で探る宇宙論的スケールの物質循環」  
(H31 年度分担金 40 万円／分担金全体 52.5 万円)
  - 基盤研究 (A) H29 年度～H32 年度：矢島秀伸（代表者：井上昭雄）  
「すばる狭帯域深宇宙探査で暴く宇宙再電離：CHORUS プロジェクト」  
(H31 年度分担金 66 万円／分担金全体 280 万円)
  - 基盤研究 (A) H30 年度～H34 年度：矢島秀伸（代表者：児玉忠恭）  
「銀河形成の加速と減速を司る物理過程の実証的解明」  
(H31 年度分担金 10 万円／分担金全体 40 万円)
  - 科学技術試験研究委託事業，H27 年度～H31 年度：吉川耕司（代表者：青木慎也）  
「ポスト京で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発」 重点課題 9「宇宙の基本法則と進化の解明」  
(サブ課題 C 大規模数値計算と広域宇宙観測データの融合による宇宙進化の解明)  
(H31 年度 732 万円／全体 3,428 万円)

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

1. Suma Murthy, Raffaella Morganti, Tom Oosterloo, Robert Schulz, Dipanjan Mukherjee, et al. “Feedback from low-luminosity radio galaxies: B2 0258+35”. *A&A* 629, A58 (Sept. 2019), A58. doi: [10.1051/0004-6361/201935931](https://doi.org/10.1051/0004-6361/201935931). arXiv: [1908.00374](https://arxiv.org/abs/1908.00374) [[astro-ph.GA](#)].
2. S. S. Jensen, J. K. Jørgensen, L. E. Kristensen, K. Furuya, A. Coutens, et al. “ALMA observations of water deuteration: a physical diagnostic of the formation of protostars”. *A&A* 631, A25 (Nov. 2019), A25. doi: [10.1051/0004-6361/201936012](https://doi.org/10.1051/0004-6361/201936012). arXiv: [1909.10533](https://arxiv.org/abs/1909.10533) [[astro-ph.SR](#)].
3. Kenji Furuya, Yuri Aikawa, Tetsuya Hama, and Naoki Watanabe. “H<sub>2</sub> Ortho-Para Spin Conversion on Inhomogeneous Grain Surfaces”. *ApJ* 882.2, 172 (Sept. 2019), p. 172. doi: [10.3847/1538-4357/ab3790](https://doi.org/10.3847/1538-4357/ab3790). arXiv: [1908.01966](https://arxiv.org/abs/1908.01966) [[astro-ph.GA](#)].

4. Mihkel Kama, Oliver Shorttle, Adam S. Jermyn, Colin P. Folsom, Kenji Furuya, et al. “Abundant Re- fractory Sulfur in Protoplanetary Disks”. *ApJ* 885.2, 114 (Nov. 2019), p. 114. doi: [10.3847/1538-4357/ab45f8](https://doi.org/10.3847/1538-4357/ab45f8). arXiv: [1908.05169](https://arxiv.org/abs/1908.05169) [astro-ph.EP].
5. Seiji Fujimoto, Masami Ouchi, Andrea Ferrara, Andrea Pallottini, R. J. Ivison, et al. “First Identification of 10 kpc [C II] 158  $\mu$ m Halos around Star-forming Galaxies at  $z = 5-7$ ”. *ApJ* 887.2, 107 (Dec. 2019), p. 107. doi: [10.3847/1538-4357/ab480f](https://doi.org/10.3847/1538-4357/ab480f). arXiv: [1902.06760](https://arxiv.org/abs/1902.06760) [astro-ph.GA].
6. Ikkoh Shimizu, Keita Todoroki, Hidenobu Yajima, and Kentaro Nagamine. “Osaka feedback model: isolated disc galaxy simulations”. *MNRAS* 484.2 (Apr. 2019), pp. 2632–2655. doi: [10.1093/mnras/stz098](https://doi.org/10.1093/mnras/stz098). arXiv: [1901.03815](https://arxiv.org/abs/1901.03815) [astro-ph.GA].
7. Henry R. M. Zovaro, Robert Sharp, Nicole P. H. Nesvadba, Geoffrey V. Bicknell, Dipanjan Mukherjee, et al. “Jets blowing bubbles in the young radio galaxy 4C 31.04”. *MNRAS* 484.3 (Apr. 2019). incl. Wagner, A. Y., pp. 3393–3409. doi: [10.1093/mnras/stz233](https://doi.org/10.1093/mnras/stz233). arXiv: [1811.08971](https://arxiv.org/abs/1811.08971) [astro-ph.GA].
8. W. E. Banda-Barragán, F. J. Zertuche, C. Federrath, J. García Del Valle, M. Brüggen, et al. “On the dynamics and survival of fractal clouds in galactic winds”. *MNRAS* 486.4 (July 2019), pp. 4526–4544. doi: [10.1093/mnras/stz1040](https://doi.org/10.1093/mnras/stz1040). arXiv: [1901.06924](https://arxiv.org/abs/1901.06924) [astro-ph.GA].
9. S. Arata, H. Yajima, K. Nagamine, Y. Li, and S. Khochfar. “Radiative properties of the first galaxies: rapid transition between UV and infrared bright phases”. *MNRAS* 488 (Sept. 2019), pp. 2629–2643. doi: [10.1093/mnras/stz1887](https://doi.org/10.1093/mnras/stz1887). arXiv: [1810.07621](https://arxiv.org/abs/1810.07621).
10. Ryota Tomaru, Chris Done, Ken Ohsuga, Mariko Nomura, and Tadayuki Takahashi. “The thermal- radiative wind in low-mass X-ray binary H1743-322: radiation hydrodynamic simulations”. *MNRAS* 490.3 (Dec. 2019), pp. 3098–3111. doi: [10.1093/mnras/stz2738](https://doi.org/10.1093/mnras/stz2738). arXiv: [1905.11763](https://arxiv.org/abs/1905.11763) [astro-ph.HE].
11. Eishun Takeo, Kohei Inayoshi, Ken Ohsuga, Hiroyuki R. Takahashi, and Shin Mineshige. “Super- Eddington growth of black holes in the early Universe: effects of disk radiation spectra”. *MNRAS* (July 2019), p. 1838. doi: [10.1093/mnras/stz1899](https://doi.org/10.1093/mnras/stz1899). arXiv: [1901.04514](https://arxiv.org/abs/1901.04514) [astro-ph.HE].
12. Henry R. M. Zovaro, Nicole P. H. Nesvadba, Robert Sharp, Geoffrey V. Bicknell, Brent Groves, et al. “Searching for signs of jet-driven negative feedback in the nearby radio galaxy UGC 05771”. *MNRAS* (Sept. 2019), p. 2119. doi: [10.1093/mnras/stz2459](https://doi.org/10.1093/mnras/stz2459). arXiv: [1909.00144](https://arxiv.org/abs/1909.00144) [astro-ph.GA].
13. Haibin Zhang, Masami Ouchi, Ryohei Itoh, Takatoshi Shibuya, and incl. Hidenobu Yajima. “CHORUS. III. Photometric and Spectroscopic Properties of Ly $\alpha$  Blobs at  $z = 4.9-7.0$ ”. *ApJ* 891.2 (Mar. 2020), p. 177. doi: [10.3847/1538-4357/ab7917](https://doi.org/10.3847/1538-4357/ab7917). arXiv: [1905.09841](https://arxiv.org/abs/1905.09841) [astro-ph.GA].

14. Akira Kouchi, Kenji Furuya, Tetsuya Hama, Takeshi Chigai, Takashi Kozasa, et al. “Direct Measurements of Activation Energies for Surface Diffusion of CO and CO<sub>2</sub> on Amorphous Solid Water Using In Situ Transmission Electron Microscopy”. *ApJ* 891.1, L22 (Mar. 2020), p. L22. doi: [10.3847/2041-8213/ab78a2](https://doi.org/10.3847/2041-8213/ab78a2).
15. Shigeki Inoue and Naoki Yoshida. “Spiral-arm instability - III. Fragmentation of primordial protostellar discs”. *MNRAS* 491.1 (Jan. 2020), pp. L24–L28. doi: [10.1093/mnras/slz160](https://doi.org/10.1093/mnras/slz160). arXiv: [1908.09576](https://arxiv.org/abs/1908.09576) [astro-ph.GA].
16. Pierre Boldrini, Yohei Miki, Alexander Y. Wagner, Roya Mohayaee, Joseph Silk, et al. “Cusp-to-core transition in low-mass dwarf galaxies induced by dynamical heating of cold dark matter by primordial black holes”. *MNRAS* 492.4 (Mar. 2020), pp. 5218–5225. doi: [10.1093/mnras/staa150](https://doi.org/10.1093/mnras/staa150). arXiv: [1909.07395](https://arxiv.org/abs/1909.07395) [astro-ph.CO].
17. Yuexing Li, Ming F. Gu, Hidenobu Yajima, Qirong Zhu, and Moupiya Maji. “ART<sup>2</sup>: a 3D parallel multiwavelength radiative transfer code for continuum and atomic and molecular lines”. *MNRAS* 494.2 (Mar. 2020), pp. 1919–1935. doi: [10.1093/mnras/staa733](https://doi.org/10.1093/mnras/staa733). arXiv: [2001.11146](https://arxiv.org/abs/2001.11146) [astro-ph.GA].
18. Tomohisa Kawashima and Ken Ohsuga. “Super-critical column accretion on to strongly magnetized neutron stars in ULX pulsars”. *PASJ* 72.1 (Feb. 2020), p. 15. doi: [10.1093/pasj/psz136](https://doi.org/10.1093/pasj/psz136).
19. S. Inoue and N. Yoshida. “Spiral-arm instability - II. Magnetic destabilization”. en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 485.3 (May 2019), pp. 3024–3041. doi: [10.1093/mnras/stz584](https://doi.org/10.1093/mnras/stz584). url: <https://academic.oup.com/mnras/article/485/3/3024/5368075>.
20. Megumi Kayanuma, Mitsuo Shoji, Kenji Furuya, Katsumasa Kamiya, Yuri Aikawa, et al. “First-Principles Study of the Reaction Mechanism of CHO + H on Graphene Surface”. en. *J. Phys. Chem. A* 123.26 (July 2019), pp. 5633–5639. issn: 1089-5639, 1520-5215. doi: [10.1021/acs.jpca.9b02345](https://doi.org/10.1021/acs.jpca.9b02345). url: <http://dx.doi.org/10.1021/acs.jpca.9b02345>.
21. Takanobu Kiriwara, Kenji Hasegawa, Masayuki Umemura, Masao Mori, and Tomoaki Ishiyama. “Discrimination of heavy elements originating from Pop III stars in z = 3 intergalactic medium”. *MNRAS* (Submitted). arXiv: [1909.07034](https://arxiv.org/abs/1909.07034).
22. Shigeki Inoue and Naoki Yoshida. “Clumpy galaxies in cosmological simulations: the effect of ISM model”. en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 488.3 (Sept. 2019), pp. 4400–4412. doi: [10.1093/mnras/stz2076](https://doi.org/10.1093/mnras/stz2076).

## B) 査読無し論文

1. S. Arata, H. Yajima, K. Nagamine, Y. Li, and S. Khochfar. “Galaxy evolution and radiative properties in the early Universe: multi-wavelength analysis in cosmological simulations”. arXiv e-prints (Aug. 2019). arXiv: [1908.01438](https://arxiv.org/abs/1908.01438).

## (2) 国際会議発表

### A) 招待講演

1. 古家健次. “Astrochemical models of water: from molecular clouds to protoplanetary disks”. NOVA Net- work2 meeting (Amsterdam Science Park, Amsterdam, The Netherlands, Oct. 10, 2019).
2. 古家健次. “Volatiles in protoplanetary disks”. NAOJ Science Workshop II: Planet Formation Workshop 2019 (National Astronomical Observatory of Japan, Tokyo, Japan, Nov. 25–28, 2019).
3. 大須賀健. “Radiation Hydrodynamic/Magnetohydrodynamic Simulations of Super- Eddington Accretion Flows and Outflows”. 14th Asia-Pacific Physics Conference 2019 (Kuching, マレーシア, Nov. 18–22, 2019).
4. 大須賀健. “Effects of magnetic field on active galactic nuclei (accretion disk)”. Polarimetry in the ALMA era: A New Crossroads of Astrophysics (NAOJ, Japan, Mar. 26–29, 2019).
5. 大須賀健. “Numerical Simulations of super/near Eddington accretion flows and radiatively-driven out- flows around black holes”. The Accretion Signatures of the Earliest Black Holes in the Universe (Princeton Univ., USA, Apr. 3–5, 2019).
6. 大須賀健. “BH high-power accretion & outflow”. Active Galactic Nucleus Jets in the Event Horizon Telescope Era (Tohoku University, Japan, Jan. 20–22, 2020).
7. Alexander Wagner. “Jet-ISM interactions in gas-rich disc galaxies”. European Week of Astronomy and Space Science (EWASS) 2019 (University of Lyon 3, Lyon, France, June 23–28, 2019). url: <https://eas.unige.ch/EWASS2019/>.
8. 矢島秀伸. “Formation of dusty starburst galaxies in cosmological simulations with radiative transfer”. ALMA workshop: The blind search for hidden galaxies in an abundant line of sight (NAOJ Mitaka, Japan, Mar. 11–12, 2020).

### B) 一般講演

1. 朝比奈雄太. “General relativistic radiation MHD simulations of supercritical accretion flows”. 11th sym- posium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (International Congress Center EPOCHAL TSUKUBA, Japan, Oct. 15, 2019).

2. 朝比奈雄太. “Development of a general relativistic radiation magnetohydrodynamical code based on- solving the Boltzmann equation”. The cosmos at high energies: exploring extreme physics through novel instrumentation (Lecture Hall, Kavli IPMU, Kashiwa, Japan, Oct. 16–18, 2019).
3. Hajime Fukushima, Hidenobu Yajima, Kazuyuki Sugimura, Takashi Hosokawa, Kazuyuki Omukai, et al. “Star-cluster formation in low-metallicity massive clouds under radiative feedback”. First Stars VI (Concepción, Chile, Mar. 2–6, 2020).  
url: <http://www.astro.udec.cl/FirstStarsVI/>.
4. Hajime Fukushima. “Radiative feedback in low-metallicity star-forming clouds”. Modeling High-Mass Stellar Feedback Workshop (Tübingen, Germany, Mar. 9–13, 2020).
5. 古家健次. “Evolution of ices and deuteration during the formation stage of protoplanetary disks”. New Quests in Stellar Astrophysics IV Astrochemistry, Astrobiology and the Origin of Life (Puerto Vallarta, Mexico, Mar. 31–Apr. 5, 2019).
6. 矢島秀伸. “Time-dependent radiative transfer simulations for in-vivo bioimaging”. 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (International Congress Center EPOCHAL TSUKUBA, Japan, Oct. 15, 2019).
7. Kazuki Kato. “Dynamics of the cusp-to-core transformation in the cold dark matter halos”. Dark Matter Searches in 2020s (The University of Tokyo, Kashiwa Campus, Nov. 11–13, 2019).
8. Makito Abe. “Structure Formation in the Early Universe using Radiation Hydrodynamic Simulations”. 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (International Congress Center EPOCHAL TSUKUBA, Japan, Oct. 15, 2019).
9. Masao Mori. “Galaxy collisions and the missing satellite problem in the cold dark matter model”. Dark Matter Searches in 2020s (The University of Tokyo, Kashiwa Campus, Nov. 11–13, 2019).
10. 森正夫. “Formation and Evolution of Local Galaxies”. 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (International Congress Center EPOCHAL TSUKUBA, Japan, Oct. 15, 2019).
11. 大須賀健. “Radiation magnetohydrodynamics simulations of accretion flows onto black holes”. 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (International Congress Center EPOCHAL TSUKUBA, Japan, Oct. 15, 2019).
12. 井上壮大, 大須賀健, and 川島朋尚. “Pulsed fraction of super-critical column accretion flows onto neutron stars: modeling of ultraluminous X-ray pulsars”. The cosmos at high energies:

- exploring extreme physics through novel instrumentation (Lecture Hall, Kavli IPMU, Kashiwa, Japan, Oct. 16–18, 2019).
13. 内海碧人, 大須賀健, and 高橋博之. “General relativistic radiation magnetohydrodynamics simulations of super-Eddington accretion disks around prograde and retrograde black holes”. The cosmos at high energies: exploring extreme physics through novel instrumentation (Lecture Hall, Kavli IPMU, Kashiwa, Japan, Oct. 16–18, 2019).
  14. 大須賀 健. “Hoyle-Lyttleton Accretion of Dusty Gas onto Accretion Disks”. Gravitational wave physics and astronomy: Genesis, Area workshop 2020 Winter (Cottage Biwako Club, Shiga, Japan, Jan. 11–13, 2020).
  15. 内海碧人, 大須賀健, and 高橋博之. “General relativistic radiation magnetohydrodynamics simulations of super-Eddington accretion disks around prograde and retrograde black holes”. Active Galactic Nucleus Jets in the Event Horizon Telescope Era (Tohoku University, Japan, Jan. 20–22, 2020).
  16. Y. Tsunetoe, S. Mineshige, K. Ohsuga, T. Kawashima, and K. Akiyama. “The polarization imaging in M87 jet by general relativistic radiative transfer simulation with GRMHD models”. A Centenary of Astro- physical Jets: Observation, Theory and Future Prospects (Square Kilometre Array Global Headquarters, UK, Jan. 23–26, 2020).
  17. Y. Tsunetoe, S. Mineshige, K. Ohsuga, T. Kawashima, M. Nakamura, et al. “Polarization Imaging of M87 Jets by General Relativistic Radiative Transfer Calculation Based On GRMHD Simulations”. Radiative feedback in low-metallicity star-forming clouds (Charlottesville, VA, USA, Jan. 28–30, 2020).
  18. K. Ohsuga. “Hoyle-Lyttleton Accretion of Dusty Gas onto Accretion Disks”. Gravitational Wave Physics and Astronomy (Konan University, Japan, Feb. 10–12, 2020).
  19. Satoshi Tanaka. “Radiation Hydrodynamic simulations with recombination photon of First stars”. 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sci- ences (Oct. 15, 2019).
  20. 梅村雅之. “Mergers of accreting multiple BHs leading to SMBH formation in galactic nuclei”. The 30th Texas Symposium on Relativistic Astrophysics (Portsmouth, UK, Dec. 15–20, 2019).
  21. 矢島秀伸. “Cosmological simulations of first galaxies and first star clusters”. Gravitational wave physics and astronomy: Genesis, Area workshop 2020 Winter (Cottage Biwako Club, Shiga, Japan, Jan. 11–13, 2020).
  22. Kohji Yoshikawa. “Dynamical Effect of Cosmological Relic Neutrinos”. 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (International Congress Center EPOCHAL TSUKUBA, Japan, Oct. 15, 2019).

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

1. 古家健次. “星形成領域におけるリンの化学”. 第1回リンと生命の起源研究会 (首都大学東京秋葉原キャンパス, Sept. 2–3, 2019).
2. 大須賀健 (理論天文学・宇宙物理学懇談会代表). “現状の評価及び将来への期待”. 国立天文台の成果と将来シンポジウム (国立天文台三鷹キャンパス, 東京, Dec. 12–13, 2019).
3. 大須賀健. “ブラックホール降着円盤およびジェット的一般相対論的輻射磁気流体力学シミュレーション”. 基研研究会「シミュレーションによる宇宙の基本法則と進化の解明に向けて」(京都大学基礎物理学研究所, 京都, Dec. 16–19, 2019).
4. Alexander Y. Wagner. “Simulations of AGN feedback by relativistic jets in disc galaxies”. 「超巨大ブラックホール研究推進連絡会」第6回ワークショップ (京都大学 理学部セミナーハウス, May 30, 2019).
5. 矢島秀伸. “Cosmological simulations of galaxy formation at the epoch of reionization”. 国立天文台科学研究部研究会 2019 (伊豆休暇村, 静岡県, Dec. 2–4, 2019).
6. 矢島秀伸. “三次元輻射輸送計算コードの開発: 宇宙物理から医用ひかり学への新展開”. 日本学術振興会第186委員会 2019年度第1回研究会 (京都大学東京オフィス, June 19, 2019).

#### B) その他の発表

1. 朝比奈雄太, 高橋博之, and 大須賀健. “ボルツマン方程式を解く超臨界降着流の一般相対論的 MHD シミュレーション”. 日本天文学会春季年会 (筑波大学, Mar. 16–19, 2020).
2. 朝比奈雄太. “ボルツマン方程式を解く GRRMHD コードの開発と降着円盤への適用”. 銀河系中心部研究会 2019 (June 10, 2019).
3. 朝比奈雄太. “ボルツマン方程式を解く GRRMHD コードの開発と降着円盤への適用”. 「超巨大ブラックホール研究推進連絡会」第6回ワークショップ (京都大学 理学部セミナーハウス, May 29, 2019).
4. 阿左美進也, 安部牧人, and 梅村雅之. “Effect of Lyman  $\alpha$  ( $\text{Ly}\alpha$ ) photon radiated from primordial cloud to  $\text{H}_2$  formation”. 初代星初代銀河研究会 (名古屋大学, Nov. 11–13, 2019).  
url: <http://tpweb2.phys.konan-u.ac.jp/~shodai/2019/>.



5. 福島肇. “3次元輻射流体シミュレーションによる低金属量星団形成”. 日本天文学会秋季年会 (熊本大学, Sept. 11–13, 2019).
6. 福島 肇. “巨大分子雲における星団形成の金属量依存性”. 初代星・初代銀河研究会 2019 (名古屋大学, Nov. 11–13, 2019). url: <http://tpweb2.phys.konan-u.ac.jp/~shodai/2019/>.
7. 福島肇 矢島秀伸 and 梅村雅之. “星形成領域における円偏光波生成に関する輻射輸送シミュレーション”. 第 32 回 理論懇シンポジウム (国立天文台三鷹キャンパス, Dec. 25–25, 2019).
8. 福島肇. “星形成領域の円偏光生成に関する輻射輸送計算”. ABC 若手分野間連携 WS (国立天文台三鷹キャンパス, Dec. 14, 2019).
9. 福島肇, 矢島秀伸, and 梅村雅之. “星形成領域における円偏光波に関する輻射輸送シミュレーション”. 日本天文学会春季年会 (筑波大学, Mar. 16–19, 2020).
10. 古家健次. “星・惑星形成領域におけるダスト表面上での水素分子のオルソ・パラ変換”. 地球惑星科学連合 2019 年大会 (幕張メッセ, May 26–30, 2019).
11. 井上茂樹. “理論モデルを用いた分子輝線の面分光疑似観測：力学解析へのバイアス”. 面分光研究会 2019-新面分光装置で花開く新しいサイエンス-(国立天文台 (三鷹) , Oct. 29–30, 2019). url: [http://www.ioa.s.u-tokyo.ac.jp/ifu/ifu\\_meeting\\_2019.html](http://www.ioa.s.u-tokyo.ac.jp/ifu/ifu_meeting_2019.html).
12. 井上 茂樹. “理論モデルを用いた銀河の分子輝線疑似観測”. 初代星・初代銀河研究会 2019 (名古屋大学, Nov. 11–13, 2019). url: <http://tpweb2.phys.konan-u.ac.jp/~shodai/2019/>.
13. 井上茂樹, 吉田直紀, and 矢島秀伸. “Connecting molecules with the others in cosmological simulations”. 日本天文学会春季年会 (筑波大学, Mar. 16–19, 2020).
14. 井上茂樹. “Dependence of galactic clumpiness on ISM models for high-density gas in cosmological simulations”. Galaxy Evolution Workshop 2019 (The University of Tokyo, Kashiwa Library, Media Hall, June 5–7, 2019). url: <https://member.ipmu.jp/kiyoto.yabe/gev2019/>.
15. 大滝恒輝 and 森正夫. “銀河衝突によるダークマター欠乏銀河の形成”. 日本天文学会春季年会 (筑波大学, Mar. 16–19, 2020).
16. 三木洋平, 桐原崇亘, 森正夫, 小宮山裕, 千葉柊司, et al. “M31 恒星ストリームと暗黒物質サブハローの相互作用:すばる PFS への期待”. 日本天文学会春季年会 (筑波大学, Mar. 16–19, 2020).
17. 森正夫 and 数野優大. “Milky Way サイズの dark matter halo に付随する subhalo の軌道運動と衝突過程”. 日本天文学会春季年会 (筑波大学, Mar. 16–19, 2020).
18. 桐原崇亘, 長谷川賢二, 梅村雅之, 森正夫, and 石山智明. “宇宙論的シミュレーションで探る  $z=3$  の銀河間物質における初代星起源重元素”. 日本天文学会春季年会 (筑波大学, Mar. 16–19, 2020).

19. 五十嵐朱夏 森正夫 and 新田伸也. “星形成銀河におけるアウトフローの赤方偏移依存性”. 第 32 回 理論懇シンポジウム (国立天文台三鷹キャンパス, Dec. 25–25, 2019).
20. 大滝恒輝 and 森正夫. “ダークマター欠乏銀河の形成”. 第 32 回 理論懇シンポジウム (国立天文台三鷹キャンパス, Dec. 25–25, 2019).
21. 加藤一輝 森正夫 and 穂積俊輔. “周期的な超新星フィードバックと Ultra-diffuse galaxy の形成過程”. 第 32 回 理論懇シンポジウム (国立天文台三鷹キャンパス, Dec. 25–25, 2019).
22. 佐々木竜志 and 森正夫. “銀河衝突と銀河系 thick disk 及び thin disk の形成過程”. 第 32 回 理論懇シンポジウム (国立天文台三鷹キャンパス, Dec. 25–25, 2019).
23. 桐原崇亘 長谷川賢二 梅村雅之 森正夫 and 石山智明. “宇宙論的 N 体シミュレーションを用いた恒星間天体衝突による低質量初代星の重元素汚染”. 第 32 回 理論懇シンポジウム (国立天文台三鷹キャンパス, Dec. 25–25, 2019).
24. 森正夫, 宮川銀次郎, and 三木洋平. “IC10 の銀河衝突シミュレーションで探る Dark Satellite の存在可能性について”. 日本天文学会秋季年会 (熊本大学, Sept. 11–13, 2019).
25. 加藤一輝, 森正夫, and 穂積俊輔. “周期的な超新星フィードバックによる Ultra-diffuse galaxy の形成”. 日本天文学会秋季年会 (熊本大学, Sept. 11–13, 2019).
26. 五十嵐朱夏, 森正夫, and 新田伸也. “星形成銀河からの遷音速アウトフローの赤方偏移依存性”. 日本天文学会秋季年会 (熊本大学, Sept. 11–13, 2019).
27. 小川拓未, 大須賀健, 川島朋尚, and 高橋博之. “多重コンプトン散乱込みの一般相対論的 6 次元輻射輸送計算コードの開発”. 日本天文学会秋季年会 (熊本大学, Sept. 11–13, 2019).
28. 井上壮大, 大須賀健, and 川島朋尚. “ULX Pulsar の超臨界降着柱モデル; Pulsed Fraction と磁軸、見込み角の関係”. 日本天文学会秋季年会 (熊本大学, Sept. 11–13, 2019).
29. 朝比奈雄太, 高橋博之, and 大須賀健. “超臨界降着流の一般相対論的輻射磁気流体シミュレーション”. 日本天文学会秋季年会 (熊本大学, Sept. 11–13, 2019).
30. 川島朋尚, 大須賀健, and 高橋博之. “ブラックホール・スピンの超臨界降着流の輻射スペクトルに与える影響”. 日本天文学会秋季年会 (熊本大学, Sept. 11–13, 2019).
31. 竹尾英俊, 稲吉恒平, 大須賀健, 高橋博之, and 嶺重慎. “降着円盤からのフィードバックが超臨界降着条件に与える影響”. 日本天文学会秋季年会 (熊本大学, Sept. 11–13, 2019).
32. 恒任優, 嶺重慎, 大須賀健, 川島朋尚, and 秋山和徳. “M87 ジェット地平面領域の構造解明輻射輸送計算による EHT 偏波イメージの 理論予測”. 日本天文学会秋季年会 (熊本大学, Sept. 11–13, 2019).

33. 古野雅之, 嶺重慎, 大須賀健, and 北木孝明. “超臨界降着流におけるアウトフローのフラクタル次元解析”. 日本天文学会秋季年会 (熊本大学, Sept. 11–13, 2019).
34. 井上壮大 大須賀健 and 川島朋尚. “Calculation for super-critical column accretion flows onto neutron stars: Modeling of ultraluminous X-ray pulsars”. 第 32 回 理論懇シンポジウム (国立天文台三鷹キャンパス, Dec. 25–25, 2019).
35. 内海碧人 大須賀健 and 高橋博之. “General relativistic radiation magnetohydrodynamics simulations of super-Eddington accretion disks around prograde and retrograde black holes”. 第 32 回 理論懇シンポジウム (国立天文台三鷹キャンパス, Dec. 25–25, 2019).
36. 高橋幹弥 高橋芳太 大須賀健 朝比奈雄太 and 梅村雅之. “一般相対論的輻射輸送コード: ARTIST の開発の現状と今後の展望”. 第 32 回 理論懇シンポジウム (国立天文台三鷹キャンパス, Dec. 25–25, 2019).
37. 大須賀健. “円盤風の噴出による円盤構造の変化について”. 第 9 回アウトフロー研究会 (JAXA, Mar. 25, 2019).
38. 大須賀健. “円盤風の噴出による円盤構造の変化について”. SWANS/SNAWS 会議 (鹿児島大学, Mar. 26–27, 2019).
39. 大須賀 健. “富岳で狙う BH 周辺構造とジェット形成”. ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星 第 4 回公開シンポジウム (神戸大学, Mar. 9, 2020).
40. 都丸亮太, Chris Done, 大須賀健, 小高裕和, and 高橋忠幸. “X 線連星における熱放射駆動型円盤風からの輝線吸収線構造と観測との比較”. 日本天文学会春季年会 (筑波大学, Mar. 16–19, 2020).
41. 小川拓未, 大須賀健, 川島朋尚, and 高橋博之. “多重コンプトン散乱込みの一般相対論的 6 次元輻射輸送計算コードの開発”. 日本天文学会春季年会 (筑波大学, Mar. 16–19, 2020).
42. 井上壮大, 大須賀健, and 川島朋尚. “ULX パルサーの超臨界降着柱モデル; パルスの形状と振幅について”. 日本天文学会春季年会 (筑波大学, Mar. 16–19, 2020).
43. 内海碧人, 大須賀健, and 高橋博之. “順回転、逆回転ブラックホールをもつ超臨界降着円盤の一般相対論的輻射磁気流体シミュレーション”. 日本天文学会春季年会 (筑波大学, Mar. 16–19, 2020).
44. 高橋幹弥, 高橋芳太, 大須賀健, 朝比奈雄太, and 梅村雅之. “ARTIST コードを元にした空間 3 次元一般相対論的輻射輸送コードの開発”. 日本天文学会春季年会 (筑波大学, Mar. 16–19, 2020).
45. 細谷亮太郎 and 大須賀健. “Dusty-gas の輻射重力源への Hoyle-Lyttleton 降着; 輻射場の非球対称性と減光の効果”. 日本天文学会春季年会 (筑波大学, Mar. 16–19, 2020).

46. 川島朋尚, 大須賀健, and 高橋博之. “多波長の一般相対論的輻射輸送計算: ブラックホール・シャドウと電波から X 線・ガンマ線までの輻射スペクトル”. 日本天文学会春季年会 (筑波大学, Mar. 16–19, 2020).
47. Shigeki Inoue. “Secondary proto-star formation triggered by spiral-arm instability”. The Astronomical Society of Japan, 2019 Autumn Annual Meeting (Sept. 11, 2019). url: <http://www.asj.or.jp/nenkai/archive/2019b/>.
48. Shigeki Inoue. “クランピー銀河”. 銀河力学研究会: 「銀河力学研究のこれまでとこれから」 – 遠方銀河から天の川銀河まで (Sendai, Aug. 19, 2019). url: <https://sites.google.com/site/galdyn2019/>.
49. 曾我健太 and 梅村雅之. “高赤方偏移銀河の電離構造に対する AGN の影響”. 銀河・銀河間ガス研究会 2019 (北見工業大学, Aug. 5–9, 2019). url: <https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/domestic/ja/2019/05/14/galaxy-igm/>.
50. 曾我健太 and 梅村雅之. “高赤方偏移銀河の電離構造に対する AGN の影響”. 天体形成研究会 (筑波大学, Oct. 18–19, 2019). url: <https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2019/10/18/tentaikesei/>.
51. 田中 賢. “MP 法における Semi-Lagrangian 法の実装”. 日本天文学会春季年会 (筑波大学, Mar. 16–19, 2020).
52. 田中 賢. “初代星・原始銀河形成における再結合放射の影響”. 第 6 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会 ～スーパーコンピュータ「富岳」の胎動、計算科学、AI の融合に向けて～ (東京, 品川, Nov. 1, 2019).
53. 田中 賢. “大規模数値計算と広域宇宙観測データの融合による宇宙進化の解明 ～宇宙大規模構造形成におけるニュートリノの力学的影響～”. 第 6 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会 ～スーパーコンピュータ「富岳」の胎動、計算科学、AI の融合に向けて～ (東京, 品川, Nov. 1, 2019).
54. 阿左美進也, 安部牧人, and 梅村雅之. “原始ガス雲内部から放出される Ly $\alpha$  光子による水素分子形成抑制効果”. 日本天文学会春季年会 (筑波大学, Mar. 16–19, 2020).
55. 矢島秀伸. “生体光イメージングに向けた並列輻射輸送計算コードの開発”. 計算メディアサイエンス事業部発足シンポジウム (筑波大学, Dec. 6, 2019).
56. 矢島秀伸. “原始銀河団領域における巨大ブラックホール形成”. 日本天文学会秋季年会 (熊本大学, Sept. 11–13, 2019).
57. 矢島秀伸. “数値シミュレーションで探る宇宙再電離期の銀河、原始銀河団、クエーサー”. SKA-Japan シンポジウム 2019 (国立天文台, Sept. 2–6, 2019).

58. 矢島秀伸. “数値シミュレーションで探る大域的輝線マップと銀河形成の関係”. 面分光研究会 2019-新面分光装置で花開く新しいサイエンス-(国立天文台(三鷹), Oct. 29–30, 2019). url: [http://www.ioa.s.u-tokyo.ac.jp/ifu/ifu\\_meeting\\_2019.html](http://www.ioa.s.u-tokyo.ac.jp/ifu/ifu_meeting_2019.html).
59. 矢島秀伸. “原始銀河団領域における銀河と巨大ブラックホールの形成”. 初代星・初代銀河研究会 2019 (名古屋大学, Nov. 11–13, 2019). url: <http://tpweb2.phys.konan-u.ac.jp/~shodai/2019/>.
60. 吉川耕司. “SIMD 命令を用いた SPH 法の高速化”. 日本天文学会秋季年会 (熊本大学, Sept. 11–13, 2019).
61. 吉川耕司. “重元素の超微細構造線による WHIM 探査”. SKA-Japan シンポジウム 2019 (国立天文台三鷹キャンパス, Sept. 2–6, 2019).
62. 吉川耕司. “宇宙大規模構造形成におけるニュートリノの力学的影響”. 基研研究会「シミュレーションによる宇宙の基本法則と進化の解明に向けて」(京都大学 基礎物理学研究所, Dec. 16–19, 2019).

#### (4) 著書・解説記事等

##### A) 記事

1. 森正夫. “銀河の衝突と進化”. Newton 別冊 銀河のすべて (増補第 2 版). ニュートンプレス, Nov. 2019. Chap. 4, pp. 94–111.

#### 7. 異分野連携・国際連携・国際活動等

##### 異分野間連携 (センター内外)

- 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において連携
- 生命科学研究部門生命機能情報分野との宇宙生命連携 (CAB)
- 計算メディカルサイエンス事業部における連携

##### 産学官連携

##### 国際連携・国際活動

## 8. シンポジウム・研究会・スクール等の開催実績

1. 梅村雅之, 大須賀健, 矢島秀伸, and Alex Wagner. 研究会開催: 「超巨大ブラックホール研究推進連絡会第6回ワークショップ」(京都大学, 京都市, May 29–30, 2019).
2. 矢島秀伸. 研究会開催: 「第6回銀河進化研究会」(東京大学 IPMU, 柏市, June 5–7, 2019).
3. 宇宙物理理論研究室 M1 の学生. 研究会開催: 「天体形成研究会」(筑波大学 計算科学研究センター, Oct. 18–19, 2019).  
url: <https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2019/10/18/tentaikaisei/>.
4. 大須賀健. 研究会開催: 第32回理論懇シンポジウム「天文学・宇宙物理学の変遷と新時代の幕開」(国立天文台三鷹キャンパス, Dec. 25–27, 2019).
5. 梅村雅之, 矢島秀伸. 研究会開催: 「光バイオイメージング学術変革領域申請検討会」(フクラシア浜松町, Jan. 10, 2020).
6. 梅村雅之, 大須賀健, 矢島秀伸, Alex Wagner, 朝比奈雄太. 研究会開催: 「超巨大ブラックホール学術変革ミーティング」(筑波大学東京キャンパス, Jan. 16–17, 2020).
7. 梅村雅之 and 矢島秀伸. 研究会開催: 「銀河・銀河間ガス研究会 2019」(北見工業大学, 北見市, Aug. 5–9, 2019).  
url: <https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/domestic/ja/2019/05/14/galaxy-igm/>.
8. 梅村雅之. 研究会開催: 「初代星初代銀河研究会」(名古屋大学, 名古屋市, Nov. 11–13, 2019). url: <http://tpweb2.phys.konan-u.ac.jp/~shodai/2019/>.
9. 梅村雅之. シンポジウム開催: 「計算メディカルサイエンス事業部発足キックオフシンポジウム」(筑波大学 計算科学研究センター, つくば市, Dec. 6, 2019). url: <https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/com-med-sci-sympo-20191206/>.

## 9. 管理・運営

### 【組織運営や支援業務の委員・役員の実績】

- ・ 梅村雅之
  - 計算科学研究センター 運営委員会委員
  - 計算科学研究センター 人事委員会委員
  - 計算科学研究センター 宇宙物理研究部門主任
  - 計算科学研究センター 運営協議会委員
  - 計算科学研究センター 研究企画室委員
  - 物理学域 運営委員会委員
  - 物理学域 宇宙物理理論グループ長

- 大須賀健  
計算科学研究センター 運営委員会委員  
物理学域 運営委員会委員  
AC センター 運営委員会委員  
カリキュラム委員会委員
- 森正夫  
スポーツデー運営委員  
物理学類 4 年担任  
計算科学研究センター共同研究委員会学内委員  
最先端多重複合型計算機システム技術審査委員
- 吉川耕司  
計算科学研究センター 計算機運用委員会委員  
計算科学研究センター 先端計算科学推進室委員

## 10. 社会貢献・国際貢献

1. 森正夫. Newton 2020 年 2 月号「宇宙の終わり」監修. Dec. 26, 2019.
2. 大須賀健. テレビ出演, NHKBS4K ”スペーススペクタクル「第2集 見えた！ ブラックホールの謎」”. Jan. 26, 2020.
3. 大須賀健. テレビ出演, AbemaTV ”Abema Prime”, ブラックホールを解説. Apr. 10, 2019.
4. 大須賀健. テレビ出演, 日本テレビ ”シューイチ”, ブラックホールを解説. Apr. 14, 2019.
5. 大須賀健. インタビュー記事掲載, KADOKAWA 発の情報文芸サイト カドブン, “人類史上初のブラックホール観測に成功！ それってどのくらいすごいこと?”. Apr. 29, 2019.
6. 大須賀健. インタビュー記事掲載, 茨城新聞 5 月 13 日朝刊, “ブラックホール撮影成功 宇宙誕生の謎 解明への手がかり”. May 13, 2019.
7. 大須賀健. 講演会, 円満寺護持会, 「ブラックホール超入門」. June 29, 2019.
8. 大須賀健. 講演会, 常総市立石下中学校, 「ブラックホールを知ろう！」. July 12, 2019.
9. 大須賀健. ラジオ出演, 宇都宮コミュニティ FM『ミヤラジ「マチコ先生のラジ勉!」』July 13, 2019.

10. 大須賀健. テレビ出演, NHK ”NHK スペシャル スペーススペクタクル”. July 28, 2019.
11. 大須賀健. 公開講座, 朝日カルチャーセンター新宿 ” ブラックホール研究の最前線”. July 27, 2019.
12. 大須賀健. 社内講演会, HGST ジャパン ” 謎の天体 ブラックホール”. Aug. 1, 2019.
13. 大須賀健. 宇宙を学べる大学合同進学説明会, 東京理科大学 ” ブラックホール天文学の最前線”. Aug. 24, 2019.
14. 大須賀健. 天文学会公開講演会, 熊本大学 ” ブラックホール天文学の最前線”. Sept. 14, 2019.
15. 大須賀健. 講演会, サハトベに花 ” やさしいブラックホールのおはなし”. Sept. 21, 2019.
16. 大須賀健. 講演会, クレオ大阪 ” ブラックホール超入門”. Nov. 10, 2019.
17. 大須賀健. 新聞掲載, 日経新聞 ” かがくアゴラ”. Dec. 6, 2019.
18. 大須賀健. テレビ出演, NHK ” ニュース シブ 5 時 特集企画「ブラックホール」”. Dec. 12, 2019.
19. 大須賀 健. 理論天文学宇宙物理学懇談会運営委員長.
20. 梅村雅之. 公開講座, 朝日カルチャーセンター新宿 ” 巨大ブラックホールはいかにして作られたか”. Aug. 24, 2019.
21. 梅村 雅之. 新潟県立新潟南高等学校「大学講義体験」, 「銀河と超巨大ブラックホールの共進化」. Dec. 3, 2019.
22. 梅村 雅之. 筑波大学 STEAM リーダーシッププログラム「課題創造学 2」講座, 「宇宙・生命・医療の学際融合」. Jan. 7, 2020.
23. 梅村 雅之. 国立科学博物館天文学普及講演会, 「宇宙の進化と生命の誕生」. Oct. 19, 2019.
24. 梅村 雅之. 竹園東小学校講演会「宇宙の旅」. Dec. 13, 2019.
25. 梅村 雅之. 朝日カルチャーセンター “ブラックホール研究の最前線”, 「巨大ブラックホールはいかにして作られたか」. Aug. 24, 2019.
26. 梅村 雅之. 日本天文学会会長.
27. 梅村 雅之. 日本天文学会欧文研究報告編集顧問.

## 11. その他

1. *External Review 2020*. Feb. 20, 2020.



2. 学術変革領域研究申請, 領域名: ひかり学の革新: 医用光学・宇宙物理学・原子核科学の融合で拓く, 領域代表者: 星詳子 (浜松医科大学光先端医学教育研究センター, 教授), 研究計画代表者: 梅村雅之, 矢島秀伸.
3. 梅村雅之 矢島秀伸. アストロバイオロジーセンターサテライト研究応募申請「宇宙生命計算科学と観測・実験を繋ぐホモキラリティー探求拠点」.

### III. 原子核物理研究部門

#### 1. メンバー

|     |                             |
|-----|-----------------------------|
| 教授  | 中務 孝、矢花一浩（量子物性研究部門兼務）       |
| 講師  | 橋本幸男                        |
| 助教  | 日野原伸生                       |
| 研究員 | 温凱、Bharat Kumar (2019.6 着任) |
| 学生  | 大学院生 3 名                    |

#### 2. 概要

本部門では、核子(陽子・中性子)の多体系である原子核や中性子星の構造・反応・応答などの多核子量子ダイナミクスの研究を推進している。安定線（ハイゼンベルグの谷）から離れた放射性アイソトープの原子核の構造と反応、エキゾチックな励起状態の性質、様々な集団運動の発現機構など、未解決の謎の解明に取り組んでいる。原子核の研究は、フェルミ粒子の量子多体系計算という観点で、物質科学や光科学、冷却原子系の物理と密接なつながりをもつ。また、クォーク・グルーオンのダイナミクスを記述する格子 QCD に基づく核力の計算、軽い原子核の直接計算などが進展する中、素粒子物理学との連携も重要性が増している。ニュートリノの解明に向けたニュートリノレス二重ベータ崩壊の観測実験や、素粒子標準模型のテストに関わる実験などにも原子核理論の精密計算が不可欠とされている。また、元素の起源や星の構造、中性子星の誕生にも関わる爆発的天体現象にも原子核の性質は深く関わり、宇宙物理学とも密接に関係している。さらに、原子力工学分野や応用分野との連携が重要になってきており、本部門も理論計算核データ構築とそのサポートを行ってきている。本部門のメンバーはこのような幅広い課題に取り組み、分野の枠を超えた研究を推進している。

#### 3. 研究成果

##### 【1】座標空間時間依存密度汎関数法の計算コード開発とアイソベクトル電気双極子共鳴への応用（Shi（ハルビン工業大学）、日野原、Schuettrumpf（GSI））

ハルビン工業大学で開発された 3 次元座標基底の原子核密度汎関数法計算コードを拡張し、時間依存密度汎関数法(TDDFT)計算ができるようにした。基底状態での対相関は BCS 近似によって導入し、軌道波動関数の時間依存性を考慮することによって時間依存ダイナミクスへの寄与を部分的に取り込めるように実装した。新しく作られた 3 次元座標基底の TDDFT 計算コードは同じ 3 次元座標空間基底の Sky3D による TDDFT 計算と、軸対称を仮定した調和振動子基底原子核 DFT コード HFBTHO の有限振幅法による準粒子乱雑位相近似計算とベンチマークを行った。Sky3D との比較ではほぼ同一の結果を得ることができた。一方で HFBTHO

による有限振幅法の計算結果との比較では、巨大共鳴のメインピークのエネルギーについては一致を得たが、調和振動子基底では連続状態を正しく表現できないことから高エネルギー側では強度関数に違いが見られた。Zr, Mo, Ru 原子核のアイソベクトル型双極子巨大共鳴の系統的計算を安定核から中性子過剰核領域まで行い、基底状態変形と巨大共鳴の強度関数分布の関連を分析した。

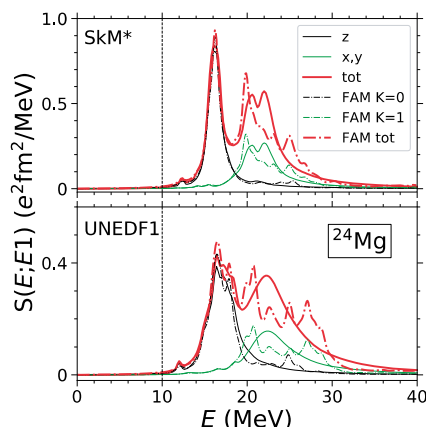


Fig. 1: TDDFT と有限振幅法による  $^{24}\text{Mg}$  の電気双極子強度関数の計算値の比較。

## 【2】陽子過剰不安定核の基底状態でのアイソベクトル型中性子-陽子対凝縮（日野原、Sheikh（カシミア大）、Dobaczewski（ヨーク大）、Nazarewicz（ミシガン州立大））

調和振動子基底の原子核 DFT 計算コード HFBTHO にアイソベクトル型中性子-陽子対相関を導入し、陽子過剰不安定核の基底状態の計算を行った。縮退がある場合も安定して解が求められるように対振幅に対して拘束条件をかけ、アイソベクトル型中性子-陽子対振幅の関数としてエネルギー等の分析を行った。アイソスピン対称な原子核密度汎関数を用いた場合、 $N=Z$  となる原子核ではアイソベクトル対相関によって自発的にアイソスピン対称性が破れ、対振幅のアイソスピン空間での向きが異なる解が縮退するため、中性子対、陽子対、中性子-陽子対の混合凝縮解の縮退が実現する。そのため基底状態の記述ではアイソスピン射影が重要となる。

アイソベクトル型対相関の 3 つの結合定数を変えたり Coulomb 力を加えたりするとアイソスピン対称性が破れ、この縮退は解ける。しかしながら Coulomb 力による対相関のアイソスピン対称性の破れの程度は非常に小さく、対相関チャンネルではアイソスピン対称性は近似的に成立し、アイソスピン回転の量子ゆらぎが非常に大きくなることが示された。 $N \neq Z$  となる原子核ではアイソスピン対称な密度汎関数ではアイソベクトル型中性子-陽子対凝縮は現れず、中性子-陽子対の結合定数が大きい場合に限り凝縮解を得ることができた。

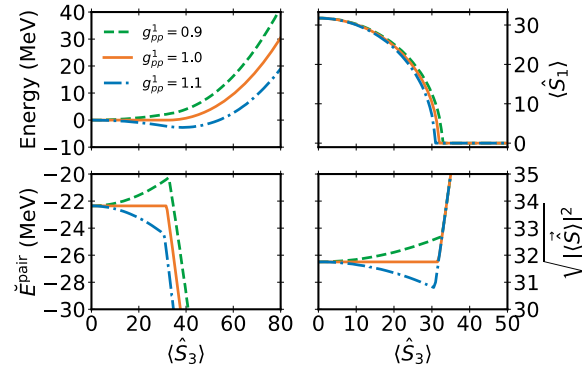


Fig. 2: アイソベクトル型中性子-陽子対振幅の関数としてのエネルギー、同種粒子対振幅、アイソベクトル対振幅の大きさ。

### 【3】ジルコニウム $^{90}\text{Zr}$ 原子核の衝突反応における相対位相の効果（橋本、Scamps（ブリュッセル自由大））

昨年度までにおいて、我々は Gogny-TDHFB 法を用いて超流動原子核の反応における相対位相の効果を調べてきた。プログラムコードの整備と新しい計算技術の開発のために、対象は酸素  $^{20}\text{O}$  やカルシウム  $\text{Ca}$  などの比較的質量の小さな原子核であった。

そこで、ウラニウムやプルトニウムなどの重い原子核の性質、特に分裂の過程における超流動の効果を調べるためにプログラムの拡張と整備を進めてきた。応用を始めた例として、ジルコニウム  $^{90}\text{Zr}$  原子核の正面衝突のシミュレーションにおける超流動性の効果が核間ポテンシャルの違いや対応する相空間内の軌道に現れることが確認できる (Fig. 3 a) )。また、プルトニウム  $^{240}\text{Pu}$  の分裂に伴うポテンシャルエネルギーの計算から、対称性を保った四重極変形の分裂経路よりも八重極変形を伴う経路のほうがより低いエネルギーになることが確認できる (Fig. 3 b) )。これらの重い原子核を対象にして超流動性に伴う位相が原子核内のエネルギー移動にもたらす動的な効果を調べることができる。

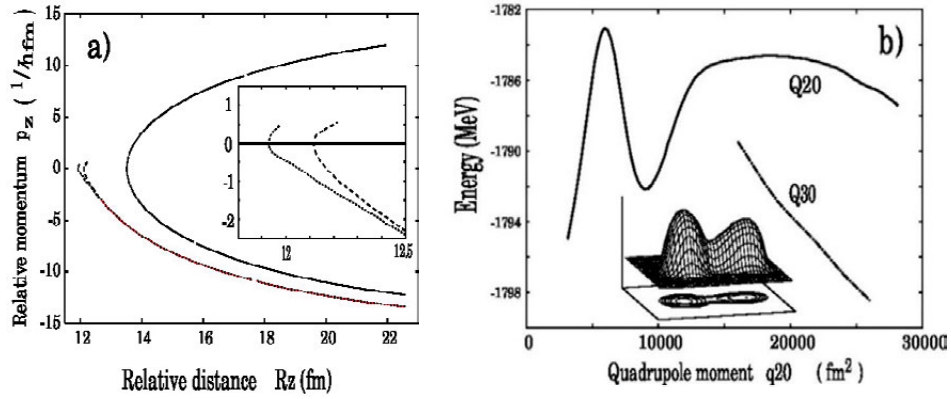


Fig. 3: a)  $^{90}\text{Zr}+^{90}\text{Zr}$  の反応における相空間内の軌道。加速エネルギー70 MeV（実線）および84MeV。相対位相0度（点線）および90度（破線）。挿入図は拡大図。b)  $^{240}\text{Pu}$  の四重極変形を拘束条件にした HFB 計算によるエネルギー曲線。四重極変形のみ（実線）と八重極変形（挿入図）あり（破線）の場合。

**【4】 GW170817 constraints on the properties of a neutron star in the presence of WIMP dark matter (Quddus (Aligarh Muslim University), Panotopoulos (IST), Kumar, Ahmad (Aligarh Muslim University), and Patra (Homi Bhabha National Institute))**

My colleagues and I have considered a relatively light Weakly Interacting Massive Particle (WIMP) as a dark matter candidate with properties suggested by the results of the DAMA/LIBRA collaboration, realized for instance within the framework of the Next-to-Minimal Supersymmetric Standard Model. The dark matter (DM) particle interacts with the baryonic matter of a neutron star (NS) through Higgs bosons. The DM variables are essentially fixed using the results of the DAMA/LIBRA experiment, which are then used to build the Lagrangian density for the WIMP-nucleon interaction inside a NS. We have used the effective field theory motivated relativistic mean field (RMF) model to study the EoS in the presence of dark matter. The predicted EoS are used in the TOV equations to obtain the mass-radius relations (see Fig. 4), the moment of inertia, and effects of the tidal field on a NS. The calculated properties are compared with the corresponding data of the GW170817 event.

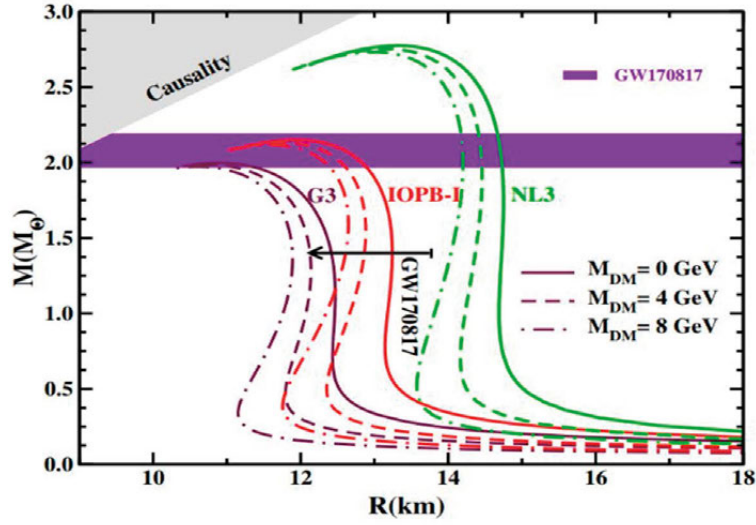


Fig. 4: Mass-radius profile for NSs in the presence of DM.

【5】 Effects of Dark Matter on Nuclear and Neutron Star Matter (Das (Homi Bhabha National Institut\_e), Kumar (Homi Bhabha National Institute), Kumar, Biswal (Xiamen University), 中務, Li (Xiamen University), and Patra (Homi Bhabha National Institute))

We study the DM effects on the nuclear matter (NM) parameters characterising the EoS of super dense neutron-rich nucleonic-matter. The observables of the NM, i.e. incompressibility, symmetry energy and its higher order derivatives in the presence DM for symmetric and asymmetric NM, are analysed with the help of RMF model. The calculations are also extended to  $\beta$ -stable matter to explore the properties of the NS. We analyse the DM effects on symmetric NM, pure neutron matter and NS matter with the help of RMF model using NL3, G3 and IOPB-I forces. The binding energy and pressure are calculated with and without considering the DM interaction with the NM systems. The influences of DM are also analysed on the symmetry energy and its different coefficients. The incompressibility and the skewness parameters are affected considerably due to the presence of DM in the NM medium. We extend the calculations to NS and find its mass, radius and the moment of inertia (see Fig. 5) for static and rotating NS with and without DM contribution. The mass of the NS considerably changes due to rapid rotation with the frequency in the mass-shedding limit. The effects of DM are found to be important for some of the NM parameters, which are crucial for the properties of astrophysical objects.

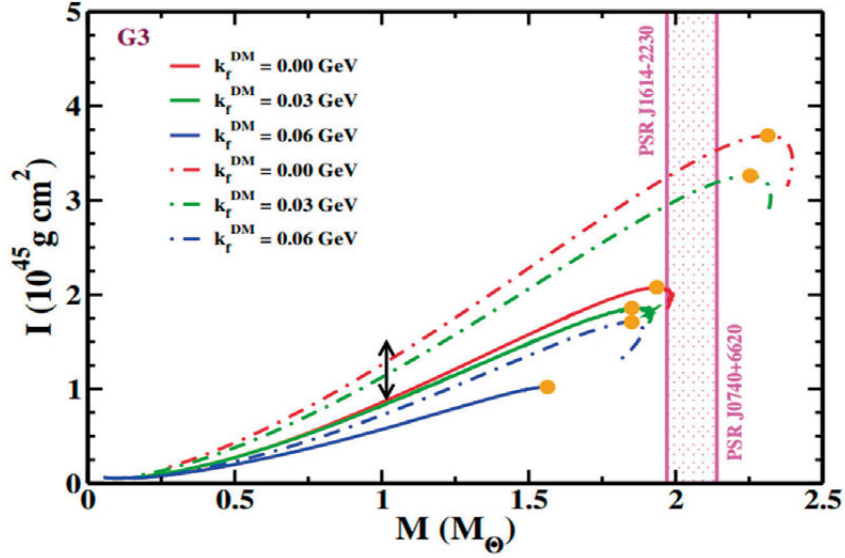


Fig. 5: Moment of inertia of the NSs in the presence of DM.

【6】 Calculations of the collective inertial mass and self-consistent reaction path for low-energy nuclear reactions (温、中務)

Towards the microscopic theoretical description for large amplitude collective dynamics like fusion/fission reactions, we propose a numerical method to determine the optimal collective reaction path for nucleus-nucleus collisions, based on the adiabatic self-consistent collective coordinate (ASCC) method. At the same time, we extracted the coefficients of inertial masses for low-energy nuclear collective dynamics, which is the key ingredient for constructing the nuclear collective Hamiltonian and study the quantum mechanical features of nuclear reactions.

Under the scheme of adiabatic self-consistent collective coordinate (ASCC), we use an iterative method, combining the imaginary-time evolution and the finite amplitude method, for the solution of the ASCC coupled equations. It is applied to light reaction systems of  $\alpha + \alpha \rightarrow {}^8\text{Be}$ ,  $\alpha + {}^{16}\text{O} \rightarrow {}^{20}\text{Ne}$  and  ${}^{16}\text{O} + {}^{16}\text{O} \rightarrow {}^{32}\text{S}$ . We determine the collective paths, the potentials, and the inertial masses. The results are compared with other methods, such as the constrained Hartree-Fock method, Inglis's cranking formula.

The left panel on Fig. 6 shows the fusion path for the fusion reaction of  ${}^{16}\text{O} + \alpha \rightarrow {}^{20}\text{Ne}$ , constructed by the microscopically derived collective coordinate, which can be decoupled from other intrinsic degrees of freedom. This fusion path smoothly connects the two reacting nuclei into the ground state of  ${}^{20}\text{Ne}$ . The right panel shows the derived inertial mass for the same system, the results are compared with other methods. When the two nuclei are far away from each other, the reduced mass can be reproduced. We have demonstrated that the inertial mass calculated by our method is advantageous because it is self-

consistent and not spoiled by the existence of the time-odd mean-field potential in the realistic energy density functional. With these results, it becomes feasible to perform ‘requantization’ of the TDHF(B), which will reveal more quantum effects and microscopic information of nuclear fusion/fission reactions.

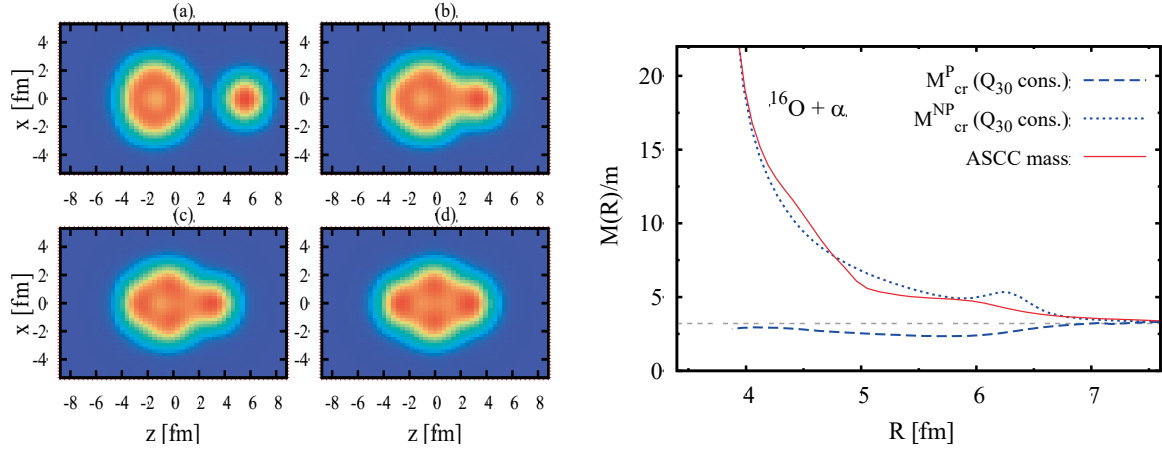


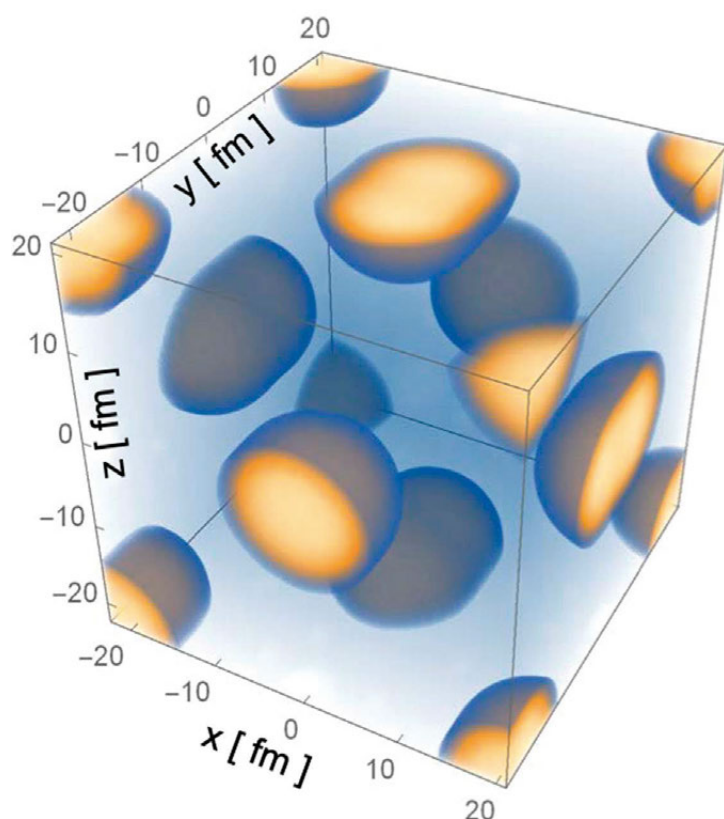
Fig. 6: (Left) Density distribution on the x-z plane at four points on the ASCC fusion reaction path of  $^{16}\text{O} + \alpha \rightarrow ^{20}\text{Ne}$ : (a)  $R = 7.6$  fm, (b)  $R = 5.2$  fm, (c)  $R = 4.2$  fm, and (d)  $R = 3.8$  fm corresponding to the ground state of  $^{20}\text{Ne}$ . (Right) The ASCC inertial mass (red solid curve) in units of the nucleon mass as a function of  $R$  for the same system, compared with the cranking inertial masses based on the CHF states with constraint on octupole deformation. The non-perturbative and perturbative cranking inertial masses are shown with dotted and dashed lines, respectively.

## 【7】 シフト・クリロフ法による3次元座標空間表現での有限温度ハートレー・フォック・ボゴリューボフ計算（柏葉（D3）、中務）

対凝縮による核子超流動性を考慮できる（有限温度）ハートレー・フォック・ボゴリューボフ（HFB）計算では、対称性の仮定を導入して2次元以下の計算に制限する、調和振動子基底を用いて空間次元を小さく抑えるなど、フルの非制限計算はほとんど皆無であった。そこで、3次元座標空間を基底に取った3次元ソルバーの開発を実施した。通常のHFB計算では、準粒子軌道を求め、通常密度・対密度を計算する手法が採られており、HFBハミルトニアンに対角化作業が必要となるため、自己無撞着な解に到達するまでに大次元行列の対角化を何度も実行する必要がある。そこで、この行列対角化を避ける方法として、複素エネルギー面上でのグリーン関数の積分から通常密度・対密度を計算し、グリーン関数をクリロフ・アルゴリズムに基づく反復解法で求める方法を開発した。積分のためには、多数の異なる複素エネルギーでのグリーン関数を計算する必要があるが、ここにはシフト法を用いることで、ほぼエネルギー1点での計算コストで全てのエネルギー点の結果を得ることができる。また、



異なる空間点での計算を、ほとんど通信なしに実行することができるため、並列化効率も非常に高く、Oakforest-PACS を用いた数値計算を実行した。



数値計算の結果として、温度による原子核の形状変化、変形共存現象の温度依存性と安定性に関する結果を得ることができた。また、中性子星の内殻（インナー・クラスト）において、3次元のパスタ構造をフル3次元の有限温度 HFB 計算による初めての解析を実施した。これまで予言されていない新しい相が出現する可能性を示唆する結果を得ている。

Fig.7 中性子星内殻における有限温度・有限密度のベータ平衡状態として得られた構造。大きく変形した Sr の原子核が出現している。

#### 4. 教育

学位

集中講義

#### 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. Asian Nuclear Physics Association & AAPPS-DNP Award for young scientist,  
Kai Wen, Aug. 27, 2019.

外部資金

1. 日本学術振興会科学研究費・基盤研究(B)、中務 孝、代表、2018–2021 年、全年度直接経費：13,200,000 円（2019 年度直接経費：4,200,000 円）、「密度汎関数超並列ソルバの開発と原子核から中性子星までの統一的高精度計算」.
2. 日本学術振興会科学研究費・新学術領域研究(研究領域提案型：研究領域「量子クラスターで読み解く物質の階層構造」)(公募研究)、中務 孝、代表、2019–2020 年、全年度直接経費：2,300,000 円（2019 年度直接経費：1,100,000 円）「量子クラスター出現機構と低エネルギー核反応の非経験的記述」.
3. 日本学術振興会二国間協力事業（JSPS-NSFC）、中務 孝、日本側代表、2017–2019 年、全年度直接経費：4,500,000 円（2019 年度直接経費：1,500,000 円）、「r プロセスの謎解明に向けた核質量と寿命の研究」.
4. 日本学術振興会科学研究費・若手研究(B)、日野原伸生、代表、2016–2019 年、全年度直接経費：2,900,000 円（2019 年度直接経費：600,000 円）、「中性子–陽子対相関・対凝縮の解明」.
5. 文部科学省・研究大学強化促進事業、筑波大学 2019 年度若手研究者中短期海外派遣プログラム、日野原伸生、代表、全年度直接経費：670,000 円（2019 年度直接経費：670,000 円）、「不安定原子核の基底状態における中性子–陽子対凝縮の解明」.

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

1. Y. Kashiwaba, T. Nakatsukasa, “Self-consistent band calculation of slab phase in neutron-star crust”, Phys. Rev. C **100**, 035804 (2019).
2. K. Wen and T. Nakatsukasa, “Collective inertial masses in nuclear reactions”, Front. Phys. **8**, 16 (2020) [Invited paper].
3. G. Scamps and Y. Hashimoto, “Density-constrained time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov method”, Phys. Rev. C **100**, 024623 (2019).
4. N. Hinohara, “Energy-weighted sum rule for nuclear density functional theory”, Phys. Rev. C **100**, 024310 (2019).
5. S. Burrello, M. Colonna, G. Colò, D. Lacroix, X. Roca-Maza, G. Scamps, and H. Zheng, “Interplay between low-lying isoscalar and isovector dipole modes: A comparative analysis between semiclassical and quantum approaches”, Phys. Rev. C **99**, 054314 (2019).

6. A. Quddus, G. Panotopoulos, B. Kumar, S. Ahmad, and S. K. Patra, “GW170817 constraints on the properties of a neutron star in the presence of WIMP dark matter”, JPS Conf. Proc, **31**, 011053 (2020).
7. B. Kumar, “Neutron skins of heavy nuclei and tidal deformability of neutron star”, JPS Conf. Proc. **31**, 011052 (2020).
8. K. Sekizawa and K. Hagino, “Time-dependent Hartree-Fock plus Langevin approach for hot fusion reactions to synthesize the Z=120 superheavy element”, Phys. Rev. C **99**, 051602(R) (2019).
9. Y. Kashiwaba, T. Nakatsukasa, “S Coordinate-space solver for finite-temperature Hartree-Fock-Bogoliubov calculations using the shifted Krylov method”, Phys. Rev. C 掲載決定; arXiv:2001.00500.
10. T. Nakatsukasa, Y. Kashiwaba, F. Ni, K. Washiyama, K. Wen, N. Hinohara, “Nuclear structure and reaction with quantum shape fluctuation”, JPS Conf. Proc., 掲載決定; arXiv:1909.01537.
11. H.C. Das, A. Kumar, B. Kumar, S.K. Biswal, T. Nakatsukasa, A. Li, and S.K. Patra, “Effects of dark matter on the nuclear and neutron star matter”, MNRAS, 掲載決定; arXiv:2002.00594.
12. J. Ha, T. Sumikama, F. Browne, N. Hinohara, A. M. Bruce, et al., “Shape evolution of neutron-rich  $^{106,108,110}\text{Mo}$  isotopes in the triaxial degree of freedom”, Phys. Rev. C, 掲載決定.

## B) 査読無し論文

1. N. Hinohara, “Efficient QRPA calculation for two-neutrino double-beta decay nuclear matrix element”, AIP Conf. Proc. **2165**, 020010 (2019).

## (2) 国際会議発表

### A) 招待講演

1. T. Nakatsukasa, “Energy density functional approach to nuclear dynamics”, XVII Workshop on Nuclear Physics, Havana, Cuba, Apr. 1 - 5, 2019.
2. T. Nakatsukasa, “Collective motion, GCM, and requantization of time-dependent mean field”, Nuclear Physics Symposium “Challenges in theory of heavy nuclei”, York, UK, July 17 - 20, 2019.
3. T. Nakatsukasa, “Self-consistent description of the inner crust of neutron stars”, Microscopic Approaches to Nuclear Structure and Reactions, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA, USA, Nov. 12 - 15, 2019.

4. T. Nakatsukasa, “Green’s function method for nuclear structure theory”, Workshop on new generation nuclear density functionals, Peking, China, Nov. 18 - 22, 2019.
5. N. Hinohara, “Efficient QRPA calculation for two-neutrino double-beta decay nuclear matrix element”, Matrix Elements for the Double beta decay Experiments (MEDEX’19) Czech National Library of Technology, Prague, Czech Republic, May 27 - 31, 2019.
6. N. Hinohara, “Neutron-proton pairing in nuclear density functional theory”, Nuclear Physics Symposium “Challenges in theory of heavynuclei”, York, UK, July 17 - 20, 2019.
7. N. Hinohara, “Isovector pairing and nuclear mass”, RIBF Week 2019, Wako, Japan, Sept. 2 - 4, 2019.
8. N. Hinohara, “Isovector pairing energy density functional and pairing collective motion”, Microscopic Approaches to Nuclear Structure and Reactions, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA, USA, Nov. 12 - 15, 2019.
9. K. Sekizawa, “Time-Dependent Hartree-Fock Theory for Multinucleon Transfer Reactions”, The IV International Conference on Nuclear Structure and Dynamics (NSD2019), Venice, Italy, May 13 - 17, 2019.
10. K. Sekizawa, “Time-Dependent Hartree-Fock Theory and Its Extensions for the Superheavy Element Synthesis”, Heavy Ion Accelerator Symposium on Fundamental and Applied Science (HIAS2019), Canberra, Australia, Sept. 9 - 13, 2019.
11. K. Sekizawa, “Time-Dependent Density Functional Theory for Superfluid Dynamics in the Neutron Star Crust”, The 3rd International Conference on Quarks and Compact Stars (QCS2019), Busan, Korea, Sept. 26 - 28, 2019.
12. K. Sekizawa, “Time-Dependent Density Functional Theory and Its Extensions for Nuclear Dynamics”, International Workshop on “New Generation Nuclear Density Functionals”, Peking University, Beijing, China, Nov. 18 - 22, 2019.
13. K. Sekizawa, “Time-Dependent Hartree-Fock Theory and Its Extensions for Low-Energy Nuclear Reactions: Recent Progress”, The 64th DAE-BNRS Symposium on Nuclear Physics, Lucknow, India, Dec. 23 - 27, 2019.

## B) 一般講演

1. T. Nakatsukasa, “Summary and discussion”, China-Japan Collaboration Workshop on “Nuclear Mass and Life for Unraveling Mysteries of R-process”, Beijing, China, Oct. 9 - 13, 2019.
2. Y. Hashimoto, “Study of structure and reaction mechanism of superfluid nuclei based on the density functional theory”, 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New

- Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba, Japan, Oct. 15, 2019 (Poster).
3. N. Hinohara, “Pairing rotation and pairing energy density functional”, Nuclear Structure and Dynamics (NSC2019) Centro Culturale Don Orione Artigianelli, Venice, Italy, May 13 - 17, 2019.
  4. N. Hinohara, “Isovector neutron-proton pairing condensation in proton-rich unstable nuclei”, 5th workshop on many-body correlations in microscopic nuclear models (SADO2019), Sado, Japan, Sept. 5 - 6, 2019.
  5. N. Hinohara, “Isovector pairing and nuclear binding energy”, China-Japan Collaboration Workshop on “Nuclear Mass and Life for Unraveling Mysteries of R-process”, Beijing, China, Oct. 9 - 13, 2019.
  6. N. Hinohara, “FAM-QRPA calculation for double-beta decay nuclear matrix elements”, 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba, Japan, Oct. 15, 2019 (Poster).
  7. K. Wen, “Optimal collective coordinate in nuclear collective dynamics”, The 18th CNS International Summer School (CNSSS19), Center for Nuclear Study, University of Tokyo, Tokyo, Japan, Aug. 20 - 27, 2019.
  8. K. Wen, “Adiabatic self-consistent collective motion path”, 5th workshop on many-body correlations in microscopic nuclear models (SADO2019), Sado, Japan, Sept. 5 - 6, 2019.
  9. K. Wen, “Microscopic simulations for nuclear fusion reactions”, China-Japan Collaboration Workshop on “Nuclear Mass and Life for Unraveling Mysteries of R-process”, Beijing, China, Oct. 9 - 13, 2019.
  10. B. Kumar, “Neutron skins of heavy nuclei and tidal polarizability of neutron star”, The 15th International Symposium on Origin of Matter and Evolution of Galaxies (OMEG15), Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto, Japan, July 2 - 5, 2019 (Poster).
  11. A. Quddus, G. Panotopoulos, B. Kumar, “GW170817 constraints on the properties of a neutron star in the presence of WIMP dark matter”, The 15th International Symposium on Origin of Matter and Evolution of Galaxies (OMEG15), Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto, Japan, July 2 - 5, 2019 (Poster).
  12. B. Kumar, “New effective interactions IOPB-I and G3”, The 18th CNS International Summer School (CNSSS19), Center for Nuclear Study, University of Tokyo, Tokyo, Japan, Aug. 21 - 27, 2019.
  13. B. Kumar, “Neutron star astrophysics from gravitational waves and nuclear theory”, 5th workshop on many-body correlations in microscopic nuclear models (SADO2019), Sado,

Japan, Sept. 5 - 6, 2019.

14. B. Kumar, “Tidal deformability for neutron and hyperon stars”, Quark and Compact Star 2019 (QCS2019), Busan, Korea, Sept. 26 - 29, 2019 (Poster).
15. B. Kumar, “GW170817: Constraints on the moment of inertia PSR J0737-3039A”, Centenary Celebration Conference on Nuclear Structure and Nuclear Reaction, Aligarh, India, Mar. 2 - 4, 2020 (Poster).
16. K. Sekizawa, “Time-Dependent Hartree-Fock Theory for Multinucleon Transfer Reactions”, The 27th International Nuclear Physics Conference (INPC2019), Glasgow, UK, July 29 - Aug. 2, 2019.
17. K. Sekizawa, “Time-Dependent Hartree-Fock Theory and Its Extensions for Low-Energy Heavy-Ion Reactions”, China-Japan Collaboration Workshop on "Nuclear Mass and Life for Unraveling Mysteries of R-process", ITP/CAS, Beijing, China, Oct. 9 - 13, 2019.
18. K. Sekizawa, “Time-Dependent Hartree-Fock Theory and Its Extensions for the Superheavy Element Synthesis”, YITP international molecule-type workshop on “Nuclear Fission Dynamics 2019”, YITP, Kyoto University, Kyoto, Japan, Oct. 26 - Nov. 8, 2019.
19. K. Sekizawa, K. Hagino, and A. Wakhle, “Time-Dependent Hartree-Fock Theory and Its Extensions for the Superheavy Element Synthesis”, The 4th International Symposium on Superheavy Elements (SHE2019), The Prince Hakone Lake Ashinoko, Hakone, Kanagawa, Japan, Dec. 1 - 5, 2019.
20. K. Sekizawa, K. Washiyama, S. Ebata, and Y. Tanimura, “Heavy-Ion Multinucleon Transfer Reactions within Stochastic Mean-Field Approach”, CCS International Symposium 2019: The 11th Symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba, Ibaraki, Japan, Oct. 15, 2019.

### C) セミナー等

1. N. Hinohara, “Neutron-proton pairing in nuclear density functional theory”, NSCL Theory Seminar, NSCL/FRIB Michigan State University, East Lansing, MI, USA, Jan. 14, 2020.
2. B. Kumar, “Tidal deformability, and new relativistic models IOPB-I and G3”, Hadron theory group at University of Tokyo, Japan, July 23, 2019.
3. B. Kumar, “Relativistic models (G3 and IOPB-I) of the neutron-star matter equation of states”, Kyungpook National University, Daegu, South Korea, Sept. 24, 2019.
4. B. Kumar, “Constraints on the moment of inertia of neutron-star/pulsars from GW170817”, Physical Research Laboratory, Ahmedabad, India, Feb. 27, 2020.

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

1. 中務孝、「中性子星内殻シミュレーションとパルサー・グリッジ」、シミュレーションによる宇宙の基本法則と進化の解明に向けて (QUCS 2019)、京都大学、京都、2019 年 12 月 16 - 19 日.
2. 日野原 伸生、「二重ベータ崩壊原子核行列要素の核構造計算」、ELPH セミナー、東北大学電子光理学研究センター、仙台、2019 年 9 月 12 日.
3. 関澤一之、「時間依存密度汎関数法による中性子星クラストのダイナミクス」、日本物理学会第 75 回年次大会、名古屋大学東山キャンパス、名古屋、2020 年 3 月 16 - 19 日.

#### B) その他の発表

1. 中務孝、「Nuclear clusters in low-energy nuclear reaction and neutron-star crust」、第二回クラスター階層領域研究会、東工大、東京、2019 年 5 月 31 日 - 6 月 1 日.
2. 関澤一之（課題代表：中務孝）、「時間依存密度汎関数理論による原子核反応」、第 6 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会、品川、東京、2019 年 11 月 1 日(ポスター発表).
3. 橋本幸男、「時間依存密度汎関数理論に基づく超流動原子核の反応機構の研究」、第 6 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会、品川、東京、2019 年 11 月 1 日(ポスター発表).
4. 日野原伸生、「二重ベータ崩壊原子核行列要素と中性子-陽子対相関」、大学院理学研究科・物理学第二教室、原子核理論セミナー、京都大学、京都、2019 年 4 月 17 日.
5. 日野原伸生、「有限振幅法を用いた 2 ニュートリノ二重ベータ崩壊原子核行列要素の計算」、日本物理学会 2019 年秋季大会、山形大学小白川キャンパス、山形、2019 年 9 月 17 - 19 日.
6. 日野原伸生, Javid Sheikh, Jacek Dobaczewski, Witold Nazarewicz, 「Skyrme 型密度汎関数へのアイソベクトル型中性子-陽子対相関の導入」、日本物理学会第 75 回年次大会(現地開催中止)、名古屋大学東山キャンパス、名古屋、2020 年 3 月 16 - 19 日.

### (4) 著書、解説記事等

1. T. Nakatsukasa and N. Schunck, “Chapter 6: Large-amplitude collective motion” in Book “Energy density functional methods for atomic nuclei”, IOP Publishing, Bristol, UK, 2019.
2. 中務孝、Academist Journal (オンライン) 研究コラム「原子核のかたちはまんまるで

はない」 URL: <https://academist-cf.com/journal/?p=10868>

3. 中務孝、江幡修一郎、鷲山広平、サイエンスよみもの「原子核のかたちから核図表を見る」、日本原子力学会学会誌、Vol. **61**, pp. 610 – 615 (2019).
4. 中務孝、「未知同位体の計算核データ ～原子核の形と理論計算核データ～」、Isotope News 2019 年 10 月号 No765 「Tracer」 pp.18-21 (2019).
5. 日野原伸生、「二重ベータ崩壊原子核行列要素と中性子-陽子対相関」、原子核研究 Vol. **64** No. 2 pp. 102 - 113 (2020).

## 7. 異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等

### 異分野間連携（センター内外）

#### 産学官連携

#### 国際連携・国際活動

1. 二国間協力事業 JSPS-NSFC「R プロセスの謎解明に向けた核質量と寿命の研究」2017 – 2019（日本側代表：中務）。
2. 日中韓フォーサイト事業「21世紀の原子核物理」2019-2023（中務）。
3. ポーランド・ワルシャワ工科大学の原子核理論グループと共同で、実空間 TDHFB 計算（中務）。
4. 米国・ミシガン州立大学 Nazarewicz 教授と中性子-陽子対相関の共同研究（日野原）。
5. 韓国・ソウル国立大学の大学院生 Ha 氏と理化学研究所における中性子過剰 Mo 原子核の  $\beta$ - $\gamma$  核分光実験に関する共同研究（日野原）。
6. 米国・ミシガン州立大学 Wang 氏、Nazarewicz 教授らと中性子過剰 Mg 原子核の基底状態および低励起状態に関する共同研究（日野原）。

## 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 二国間協力事業 JSPS-NSFC「R プロセスの謎解明に向けた核質量と寿命の研究」2017 – 2019, のサマリー・ミーティング China-Japan Collaboration Workshop on “Nuclear Mass and Life for Unraveling Mysteries of R-process” (Institute of Theoretical Physics, Beijing, China, Oct. 10 - 12, 2019)を開催（日本から 14 名、中国から 18 名）(中務).
2. International advisory and Program committee for Recent Progress in Many-Body Theories (RPMBT-20) Conference, Toulouse, France, Sept. 9-13, 2019（中務）。



3. Chair of organizing committee for 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba, Japan, Oct. 15, 2019 (中務) .

## 9. 管理・運営

組織運営や支援業務の委員・役員の実績

中務 孝

計算科学研究センター 原子核物理研究部門 部門主任

計算科学研究センター 運営委員会委員

計算科学研究センター 人事委員会委員

計算科学研究センター 運営協議会委員

計算科学研究センター 共同研究担当主幹

計算科学研究センター 共同研究委員会および共同研究運用委員会 委員長

計算科学研究センター 学際計算科学連携室員

計算科学研究センター 情報セキュリティ委員

数理物質系物理学域 運営委員会委員

数理物質系物理学域 原子核理論グループ長

数理物質系物理学域 理論グループ懇談会議長

最先端共同 HPC 基盤施設 大規模 HPC チャレンジ審査委員会 副委員長

HPCI コンソーシアム機関代表

日野原伸生

計算科学研究センター 先端計算科学推進室員

計算科学研究センター 情報セキュリティ委員

## 10. 社会貢献・国際貢献

中務 孝

Editor for Journal of Physical Society of Japan

Editor for International Journal of Modern Physics E

JAEA タンデム専門委員会委員

JAEA 黎明研究評価委員会委員

京都大学基礎物理学研究所・運営協議会委員

大阪大学核物理研究センター・運営委員会委員

高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所・運営会議議員

高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所・常置人事委員会委員

高エネルギー加速器研究機構・自己評価委員会委員

高エネルギー加速器研究機構大型シミュレーション研究推進委員会委員

計算基礎科学連携拠点運営委員（ポスト京重点課題9）

中村誠太郎賞選考委員

核理論委員会委員

日野原伸生

RIBF UEC 委員（Vice Chair）

## 11. その他

海外長期滞在

1. 日野原伸生、National Superconducting Cyclotron Laboratory, Michigan State University, East Lansing, MI, USA, 2020 年 1 月 2 - 26 日.

## IV. 量子物性研究部門

### 1. メンバー

|      |                                                     |
|------|-----------------------------------------------------|
| 教授   | 矢花 一浩                                               |
| 准教授  | 小泉 裕康、全 暁民                                          |
| 講師   | 前島 展也                                               |
| 助教   | 佐藤 駿丞 (2019.5～)                                     |
| 研究員  | 植本 光治、山田 篤志、山田 俊介、竹内 嵩、野田 真史、<br>Arqum Hashmi、廣川 祐太 |
| 学生   | 大学院生 7 名、学類生 3 名                                    |
| 教授   | 日野 健一(学内共同研究員、物質工学域)、<br>岡田 晋 (学内共同研究員、物理学域)        |
| 客員教授 | 小野 倫也 (神戸大学大学院工学研究科)                                |

### 2. 概要

本部門は、物質科学や物性物理学、原子分子物理学などのいくつかの分野に渡る計算科学に基づく研究を行っているが、特に光と物質の相互作用に関係した研究に特色を有している。時間依存密度汎関数理論に基づく固体中の電子ダイナミクスや光応答の計算、時間依存シュレディンガー方程式に基づく原子や分子と光の相互作用、強相関電子系の光応答など、多様な物質を対象とした光物質科学分野の計算科学研究を行っている。また、強相関電子系では、銅酸化物高温超伝導の超伝導機構の解明と銅酸化物高温超伝導体を量子ビットとする量子コンピューターを実現するための理論研究を行っている。

これらの計算科学研究に加えて、独自の計算コード開発も行なっている。時間依存密度汎関数理論に基づき光と物質の相互作用を記述する汎用の第一原理光科学ソフトウェアとして、SALMON を開発し、ウェブサイト <http://salmon-tddft.jp> において公開している。

昨年度末に、小野准教授が神戸大学に転出した。また本年 5 月に佐藤国際テニュアトラック助教が着任し、ハンブルクのマックスプランク物質構造動力学研究所に長期滞在し研究を行っている。

### 3. 研究成果

【1】光物質科学分野の第一原理計算ソフトウェア SALMON の開発（矢花、植本、佐藤、竹内、野田、廣川、山田(篤)、山田(俊)、朴[高性能計算システム研究部門]）

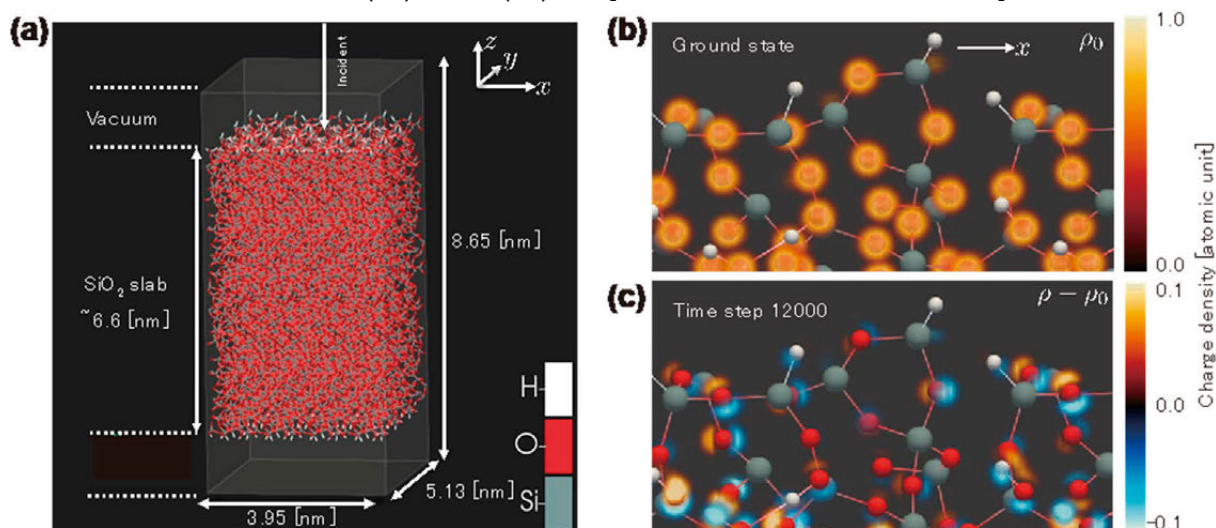


図 1：富岳において行ったガラスにパルス光を照射した際に起こる光・電子・イオンのシミュレーション。(a)はシステムの概要、(b)は基底状態における電子密度分布、(c)はパルスが照射中の電子密度の変化する様子。

パルス光と多様な物質の相互作用を、物質科学の第一原理計算手法の一つである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) の開発を進めている。SALMON は、分子の分極率や物質の誘電関数のような光応答関数とともに、パルス光を照射した物質内で起こる超高速現象を時間領域で計算することができ、先端の光科学実験を丸ごとシミュレーションすることができる、他に例のない特徴を持つソフトウェアである。現在ウェブページ <https://salmon-tddft.jp> を整備し公開している。本年度は、SALMON の基盤となるコードの抜本的な改良を行い、バージョン 2 の公開を目指す活動に多くの時間を費やした。2020 年度の前半には新バージョンの公開を予定している。

SALMON を普及する活動として、9 月に大阪大学が実施するコンピュテーショナル・マテリアルズ・デザインワークショップにおいて、また 11 月には RIST のサポートのもと東北大学サイバーメディアセンターにおいてハンズオンチュートリアルを実施するなどした。

【2】富岳における SALMON を用いた大規模シミュレーション（廣川、山田(篤)、山田(俊)、野田、植本、矢花、朴[高性能計算システム研究部門]）

理化学研究所計算科学研究センター（理研 R-CCS）で開発されている富岳において、大規模計算を行う準備を進め、10,000 原子を超えるサイズの系が、富岳において高い効率で計算

できることを確かめた。文部科学省より募集のあった、ゴードンベル賞へのエントリーにむけた富岳の試験利用に採択され、富岳のおよそ 1/6 のシステムである 27,648 ノードまでを用いて計算を行った。図 1 に、行った計算の概要を示す。表面を水素終端した 10,224 原子からなるアモルファス状の  $\text{SiO}_2$  のガラス薄膜に対して、光電磁場に対するマクスウェル方程式、電子に対する時間依存 Kohn-Sham 方程式、イオンに対するニュートンの運動方程式を同時に解き、パルス照射後の超高速ダイナミクスに対する計算が実行可能であることを実証した。また、13,632 原子までの系に対して、weak/strong スケーリングの性能を調べ、コードのチューニングにより、富岳における Byte/FLOPS 値から予想される限界に近い性能で計算が可能であることを示した。

### 【3】光・電子・フォノンの相互作用を記述するシミュレーションの展開（山田（篤）、矢花）

これまでに SALMON 開発プロジェクトを通じ、光・電子・原子（イオン）の三者の運動方程式を第一原理レベルでマルチスケールモデルに基づき統一的に記述する Maxwell + TDDFT + MD 法を開発してきた。特にフェムと秒パルスにより誘起される瞬間誘導ラマン散乱およびコヒーレントフォノンのポンプ・プローブ分光の詳細な解析を進めた。今年度はさらに、フォノンの典型的な時間スケール（ピコ秒）での記述を可能にするため、本計算手法の枠組みを計算化学分野における分子力場モデルへ応用した新規計算手法、すなわち、光の運動と分子動力学とを統合した Maxwell + 分極力場 MD 法、の開発に着手した。これは、Maxwell 方程式に従った光電磁波と、固体における電子分極を取り入れた分子の運動とを連立させ、時間領域の相互作用を記述する計算手法である。最初の数値計算例として、氷の薄膜に対する (I) 可視光の透過と反射、(II) 赤外吸収測定、(III) 誘導ラマン散乱測定、のシミュレーションを行った。これらは光の入射、薄膜中の光の伝搬、光-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を模倣して再現した計算である。測定プロセスにおける光と分子の運動の詳細を明らかにすると同時に実験測定とよく一致するシグナルが得られ、新規手法の有効性を実証した。

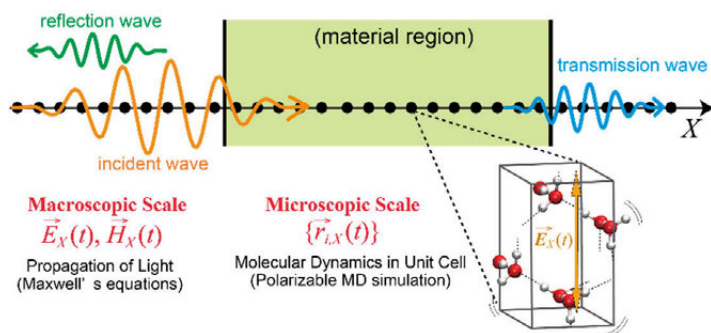


図 2: Maxwell + 分極力場 MD マルチスケールシミュレーション法の概略図

#### 【4】ナノ薄膜とパルス光の相互作用を記述する単一空間格子を用いたマクスウェル方程式と時間依存密度汎関数法の統合シミュレーション(山田(俊)、矢花)

薄膜における高次高調波発生や非熱的なレーザー加工のシミュレーションは、理学・産業両面から興味ある研究テーマである。しかしながら、2次元物質等の極めて薄い薄膜における光・電子相互作用を考える場合、相互作用領域が極端に狭いため、上記のような電子系と光電磁場の空間スケールを分離するマルチスケールの記述は適当でない。そこで我々は、単一の空間スケールで電子系と電磁場を結合する新たな手法の開発を進めてきた。本手法は、光電磁場のための微視的 Maxwell 方程式と電子系のための時間依存 Kohn-Sham 方程式を結合し、共通の実空間グリッド上で同時に時間発展させる第一原理計算法である。

今年度は本手法の応用として、薄膜の高次高調波発生を計算を行った。固体薄膜に高強度パルス光を照射した際に観測される高次高調波は、薄膜中における光伝搬の効果により、バルク中の微視的な高次高調波発生 (HHG) の信号から大きく変調を受ける。また、極めて薄い薄膜においては量子閉じ込め効果あるいは表面効果による HHG の変調が顕著になると考えられる。そのため、薄膜における HHG の包括的な理解のためには、薄膜の微視的性質と光伝播効果を同時に扱うことのできる本手法を用いて、実際に両者が HHG に対してどのような影響をもたらすのかを分析することが有用である。

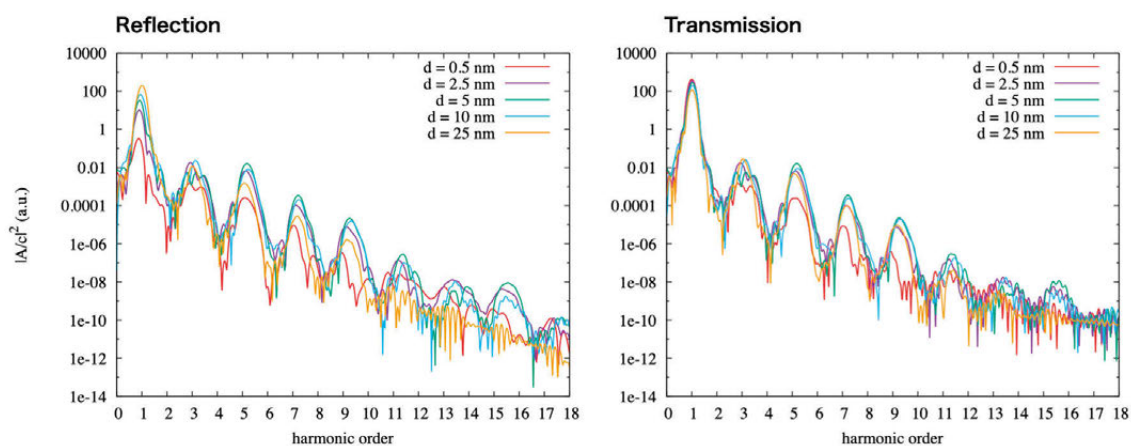


図 3: Si 薄膜 (厚さ  $d$ ) における光振動数 1.5 eV の入射光に対する反射 HHG(左)および透過 HHG(右)の膜厚依存性

#### 【5】サブ nm ギャップを持つプラズモニックメタ表面の光応答 (竹内、矢花)

金属ナノ粒子を二次元的に周期配列した薄膜であるメタ表面は、粒子の素材・形状から決まる特異かつ幅広い光物性を発現することで知られている。特に、近年では金属ナノ粒子間距離(ギャップ)が 1nm 未満のメタ表面を自己組織化により安定かつ大面積に作成できる方法が確立し、基礎科学的にも応用的にも注目を集めている。このようなサブ nm 領域では量子



効果に由来する電子輸送が現れ光物性が大きく変動するが、メタ表面の場合に電子輸送がどれほど影響を及ぼすかは知られていなかった。

そこで我々は SALMON を使い、電子輸送がメタ表面の光物性に及ぼす影響を明らかにした。図 4 はメタ表面の光吸収率に対するギャップ依存性を示す。(a)は量子効果を考慮しない従来の古典電磁気学計算から得られた結果であり、(b)は時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算から得られた結果である。この結果より、両者はギャップ 0.2nm 付近までは概ね一致するものの、より短いギャップ領域では大きな違いが表れている。これは(b)ではこの領域から電子輸送の効果が現れ、金属ナノ粒子に励起したプラズモンが減衰したためである。

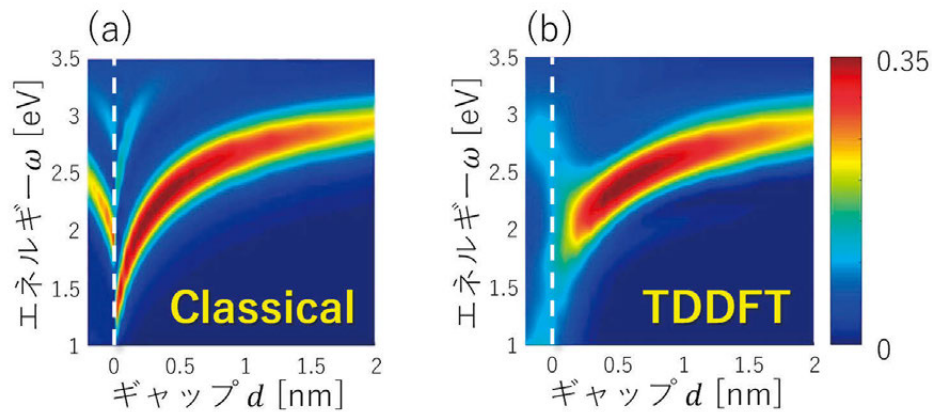


図 4： 様々なギャップ距離を持つメタ表面による光吸収率の比較

#### 【6】遷移金属におけるアト秒過渡吸収分光と光誘起電子局在現象の第一原理計算（佐藤）

我々は、時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算と最先端のアト秒分光実験技術を組み合わせることにより、光が誘起する超高速な電子ダイナミクスの微視的機構の解明に取り組んでいる。本研究では、チューリッヒ工科大のアト秒実験グループとの共同研究により、近赤外フェムト秒レーザーをチタン薄膜に照射した際に誘起される固体中の超高速な電子ダイナミクスについて調べた。実験的には、赤外フェムト秒レーザーをポンプ光、極紫外アト秒レーザーをプローブ光としたアト秒過渡吸収分光実験がチタン薄膜に対して行い、フェムト秒レーザー照射によって金属チタンの M 吸収端(およそ 32eV)における吸光度がサブフェムト秒の時間スケールで増大することが明らかとなった。この超高速な金属チタンの光学特性の変調の微視的機構を解明するため、時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理電子ダイナミクス計算により上記のアト秒ポンプ・プローブ実験を直接シミュレーションした。その結果、図 5 に示すように、レーザー励起によってチタン原子の周りに電子が局在化することが明らかとなった。さらに、時間依存密度汎関数理論計算の結果を微視的に解析することで、実験的に観測された M 吸収端における吸光度の増大は、フェムト秒レーザー励起が引き

起こす電子の局在化により物質内の遮蔽効果(local field effect)が変調されたことに起因していることが明らかとなった。

このような光によって電子の局在性、及び物質内の遮蔽効果を制御する技術は、将来の光による物性制御を実現するための基盤となるものである。本共同研究の成果は、論文 "Attosecond screening dynamics mediated by electron localization in transition metals" として Nature Physics より発表された。

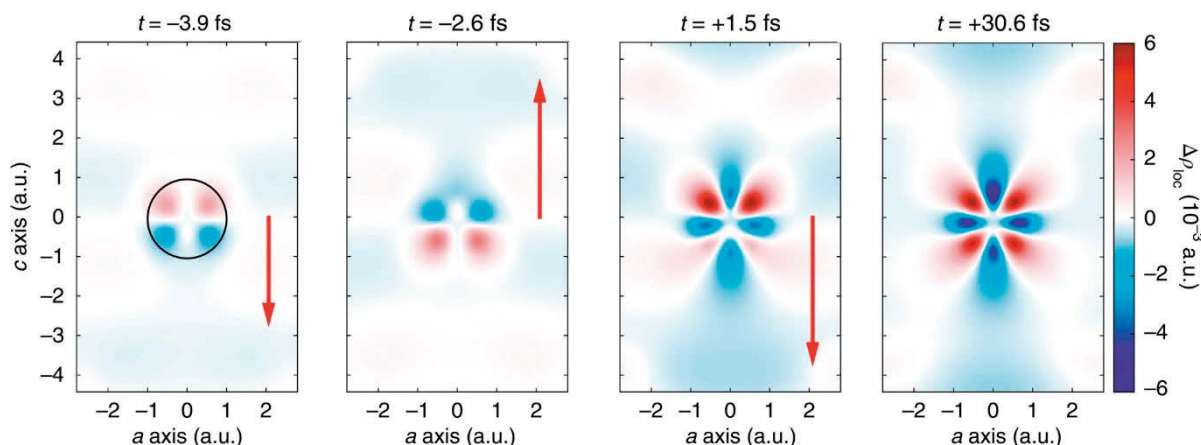


図 5: フェムト秒レーザー照射による電子密度変化ダイナミクスのスナップショット。座標原点にチタン原子が位置する。図上の時刻はフェムト秒レーザーパルスのピーク強度時刻からの差を表している。また、レーザー照射中の電場は赤矢印によって示されている。レーザー照射中は電場により電子密度に偏りが生じ、同時にレーザー励起によって電子がチタン原子付近に局在化している様子が示されている。

## 【7】密度汎関数理論と波動関数理論を結合した高精度電子状態計算手法の検討（佐藤）

密度汎関数理論(DFT)に基づく電子状態計算は、低い計算コストでありながら一定の計算精度が得られるため、今日では幅広い分野で応用されている。しかしながら、DFT 計算の精度を系統的に向上させる方法は存在せず、その精度改善は困難を極めている。他方で、波動関数理論に基づいた計算手法は、解の探索空間を広げていくことにより系統的に計算精度を向上させることが可能であり、高精度電子状態計算が実現されている。本研究では、DFT と波動関数理論を組み合わせた電子状態計算手法の開発へ向けて、有効相互作用を持った Kohn-Sham 系への写像について数値的に解析した。通常の DFT の理論の枠組みでは、相互作用を持った量子系から相互作用を持たない仮想系(Kohn-Sham 系)への写像を介して量子系が取り扱われる。これに対して本研究では有効相互作用を持った仮想系への写像を考えることにより、(i)写像による密度汎関数の導入、及び(ii)有効相互作用を持った仮想系に対する Schrödinger



方程式の波動関数理論による求解、という二段階の過程を経ることで、DFT と波動関数理論を自然に取り入れた理論的枠組みを構築することができる。

本研究では、このようにして導入された有効相互作用する Kohn-Sham 系の厳密交換相関ポテンシャルを数值的に解析した。図 6(a)には解離した 1 次元水素分子の基底状態の電子密度が示されており、図 6(b)には対応する厳密交換相関ポテンシャルが示されている。相互作用のない Kohn-Sham 系の交換相関ポテンシャルでは解離に起因するスパイク構造が確認できるが、有効相互作用する Kohn-Sham 系ではスパイク構造の出現を抑えられている。これは、有効相互作用する Kohn-Sham 系では、電子相関の一部が波動関数理論によって取り入れられているためである。また、有効相互作用する Kohn-Sham 系の自然軌道、及びその占有数を調べることで、系の動的電子相関の大部分が DFT を介して取り入れられていることを確認した。

このような DFT と波動関数理論を組み合わせた理論的枠組みに関する知見は、二つの理論の長所を共有した効果的な電子状態計算手法を発展させるための基礎となるものである。本研究成果は、論文”Exact exchange-correlation potential of effectively interacting Kohn-Sham systems”として Physical Review A から発表されている。

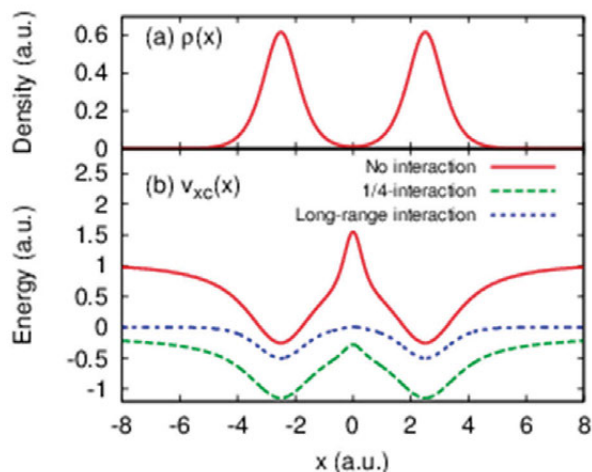


図 6: (a)解離した一次元水素分子における基底状態の電子密度。(b)対応する厳密交換相関ポテンシャル。赤実線:相互作用のない Kohn-Sham 系。緑破線:4 分の 1 に弱められたクーロン相互作用する Kohn-Sham 系。青破線:レンジ・セパレーションにより短距離相互作用が無視された Kohn-Sham 系。

## 【8】密度汎関数理論と波動関数理論を結合した高精度電子状態計算手法の検討(小泉)

銅酸化物高温超伝導の超伝導機構の解明と銅酸化物高温超伝導体を量子ビットとする量子コンピューターを実現するための理論研究を、基礎理論の構築とコンピューターによるシミュレーションを通じて行っている。超伝導機構の解明に関しては、我々が定式化した“スピン渦誘起ループ電流”を電流要素とする超伝導理論に基礎をおいたシミュレーションを行っており、特に、超伝導転移温度のドーピング依存性の解明を目標としている。また、超伝導相の高温側に存在する擬ギャップ相で観測されている各種の密度波状態、特に磁場により誘起される密度波状態に注目し、これらの状態の同定と超伝導との関係を明らかにすることも目標としている。量子ビットに関する研究では、“スピン渦誘起ループ電流量子ビット”によるエラー訂正を備えた量子コンピューターの実現を目指している。これまでこの量子ビッ

トの状態を光を使って制御する方法を研究し、実用レベルの性能が見込まれることを示してきたが、さらに、集積化に有利な外部電流を使った制御に関する研究を行っている。(小泉)

我々が銅酸化物超伝導の理論として提出している“スピン渦誘起ループ電流”を電流要素とする超伝導理論では、電子がスピンの方向をねじりながら遍歴運動することから生じるベリ-接続が安定なループ電流の源泉であるが、この、スピンの方向をねじりながら行う遍歴運動を安定化している相互作用の一つにラシュバ型のスピン軌道相互作用が存在する。この相互作用から、新規な集団スピンモードが生じることを見出した。

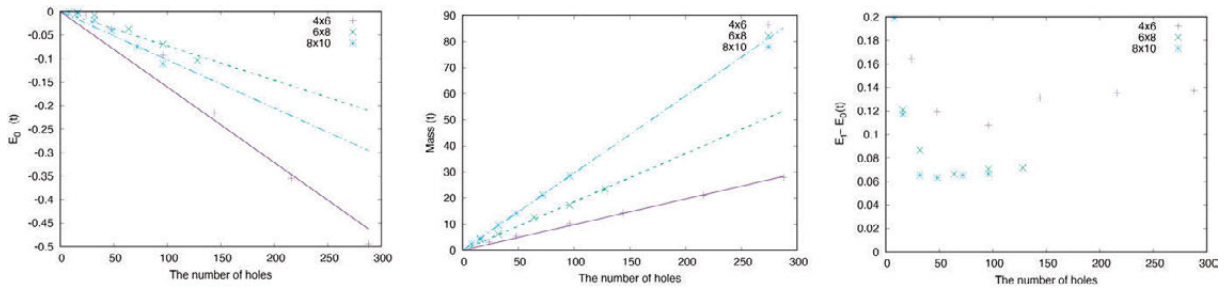


図 7: 左から、励起モードの基底状態のエネルギー、質量、基底状態と第一励起状態のエネルギー差のホール数依存性を示している。ホール数依存性は、システムの大きさへの依存性をあらわす。また、各図で示されている  $N \times M$  という記号は、x 軸方向に格子定数の  $N$  倍の長さ、y 軸方向に  $M$  倍の長さをもつタイルに、4 つのホールが存在するユニットを使い、2 次元  $\text{CuO}_2$  平面で覆った場合をあらわす。

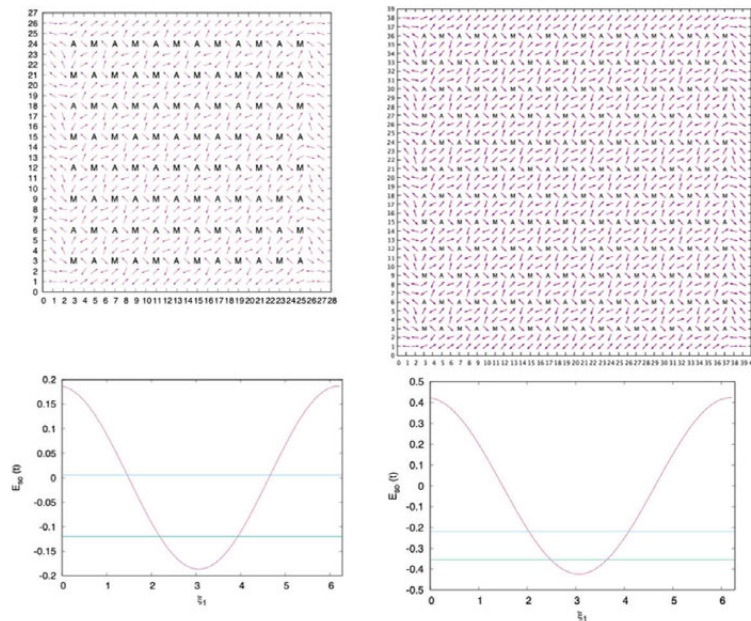


図 8:  $4 \times 6$  のタイルを使った場合のスピン渦と、ポテンシャルエネルギー  $E_{so}$  と、基底状態のエネルギーと第一励起状態のエネルギー。

図 7 にあるように、基底状態のエネルギー、質量、ともにシステムサイズに依存するが、励起エネルギーはサイズによらずに一定になることが見出された。また、一定となった励起エネルギーは 2 次元  $\text{CuO}_2$  平面を覆うタイルの大きさに依存し最適ドープ濃度に対応する  $4 \times 6$  ユニットのタイルの場合に一番大きくなることがわかった。図 8 に  $4 \times 6$  のタイルで覆った場合のスピン渦の様子と、ポテンシャルエネルギー、基底状態と第一励起状態のエネルギーの例として示す。励起エネルギーの大きさがユニットの形状に依存することは、超伝導転移温度のホール濃度依存性を説明する可能性がある。つまり、スピン渦誘起ループ電流の安定化にはスピン渦の安定化も必要であり、新規なスピン励起はスピン渦を破壊するので、このモードの励起により超伝導状態が壊れてしまう。したがって、これが起こり始める温度が超伝導転移温度を決めていることにより、超伝導転移温度のホール濃度依存性がでてくるというシナリオである。今後このシナリオの検討をおこなっていききたい。

#### 【9】ベリー接続をつかった、粒子数を完全に保存する、ボゴリューボフ・ド ジャン形式の超伝導理論の構築（小泉）

現在の超伝導の標準理論で広く使われているボゴリューボフ・ド ジャン形式の超伝導理論と我々が銅酸化物超伝導の理論として提出している“スピン渦誘起ループ電流”を電流要素とする超伝導理論とを繋ぐためには、ボゴリューボフ・ド ジャン形式の超伝導理論を、粒子数を完全に保存する形に書き換えることが必要となるが、それを達成した。この書き換えにおいて、重要な役割を果たすのが、ベリー接続である。ベリー接続を使った理論では、超伝導電流は非自明なベリー接続がもたらす集団運動となる。この集団運動に参加する電子数には揺らぎが生じるが、この揺らぎに対応する励起がボゴリューボフ・ド ジャン形式でのボゴリューボフ準粒子の生成消滅となる。つまり、オリジナルのボゴリューボフ・ド ジャン形式では、ボゴリューボフ準粒子の生成消滅は、粒子数の非保存を前提として計算する必要があるが、新しいボゴリューボフ準粒子は厳密に電子数を保存する。標準理論との接点は、非自明なベリー接続がもたらす集団運動は、電子対の形成により安定化され、新しいボゴリューボフ準粒子の生成にはエネルギーギャップが存在する点にある。また、新しい理論形式を使うと、ヘリウムの超流動に対してのボゴリューボフ理論も再現できることを示した。その上、ランダウが超流動に対して提出していた、量子化された流体力学理論も再現される。つまり、ベリー接続をつかった新しい理論は、超流動・超伝導現象を統一的に記述でき、これまでの理論を統合するものであることが示された。重要な点としてすべての計算が粒子数を完全に保存する形でできるという点があり、これは、量子ビットなどの超伝導ナノデバイスなどの粒子数保存の計算と粒子数非保存の計算に重大な違いがある可能性のある系への応用に適している。今後この形式を使い、銅酸化物高温超伝導の解明を達成したい。

## 【10】強レーザー場における原子励起と電離過程について、統一的な分析方法の開発（全）

強レーザー場における原子の励起と電離過程は二つの独立の過程であるので、別々に分析するのは従来の研究のやり方であった。一方、弱光と原子相互作用の場合は摂動論が適用されるので、量子欠損理論で、二つの過程を統一する手法はよく使われている。我々は、楕円偏光強レーザー場中の電子電離と励起過程の計算結果を分析し、図9のように、電子励起と電離過程は量子欠損理論の元で、統一した分析が可能であることが明らかになった。励起と電離過程だけではない、励起と電離過程に伴う高次高調波も統一分析ができる。その研究結果は Phys. Rev. A に発表した。

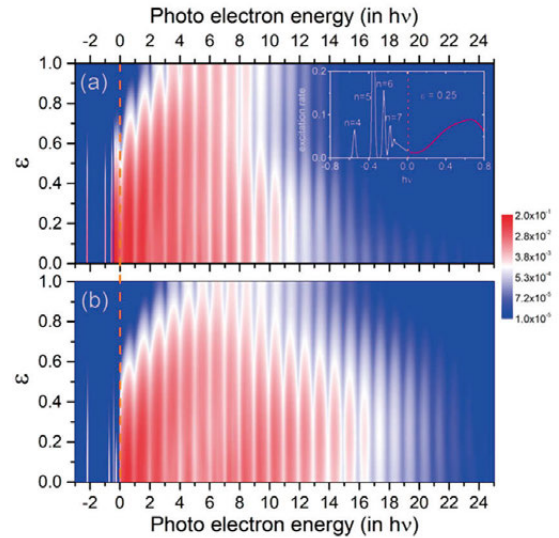


図 9:楕円強レーザーにおける原子励起と電離確率と楕円度の関係。

## 【11】強レーザー補助の原子 X 線電離の異常な角度分布のメカニズムの解明（全）

最近、実験で強レーザー補助の原子X線電離電子の角度分布が測定された。その結果はこの分野でよく使われている強レーザー場近似の予測と異なるということが示された。強レーザー場近似の予測は図10のように、曲線ではなくて、直線である。その原因を調べるために、我々は理論計算を行った。電離された電子と親イオンとのクーロン相互作用の有無を比べて、図のように、その異常な角度分布はクーロン相互作用の影響であると明示された。その研究結果はPhys. Rev. Aに発表した。

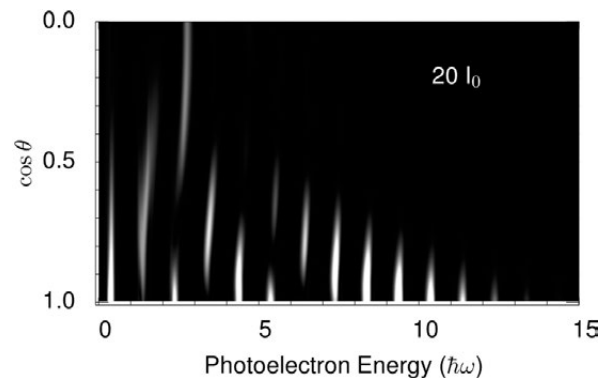


図 10 : Ar 原子の電離される電子の角度分布と光電子エネルギーの関係。

## 【12】強相関電子系における励起状態・レーザー誘起状態の研究（前島）

低次元強相関電子系の理論模型の一種であるイオン性ハバード模型の動的電荷構造因子を厳密対角化などにより数値的に調べ、本来は電荷励起状態を観測する量である動的電荷構造因子にスピン励起状態起源のスペクトルピークが現れることを見出した。中でも 2 本足梯子系において 1 電子ポテンシャルの周期性により出現するスペクトル形状に大きな違いが現れることが分かった。特に leg 方向に変調するがそれと直角方向に位相のそろった in-phase 型ポテンシャルでは、スピン  $S=1$  の準粒子(triplon)を 2 つ含む 2-triplon 状態と呼ばれる連続準位帯の 1 重項状態が動的構造因子スペクトル  $N(k, \omega)$  に有限の寄与を有することを明らかにした(図 11)。これは非弾性中性子散乱実験で観測される 2-triplon の 3 重項状態のスペクトルと相補的な関係にあるものであり、梯子系のスピン励起状態に関する重要な知見を与えうると考えられる。

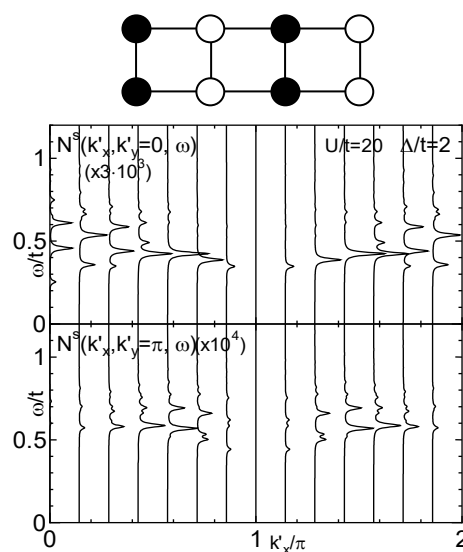


図 11 : (上)in-phase 型ポテンシャル、および(下)同ポテンシャルを有する 2 本足イオン性ハバード梯子模型における電荷動的構造因子  $N(k, \omega)$ 。

## 4. 教育

真鍋 大地（修士（工学））スピン渦誘起ループ電流モデルによる銅酸化物超伝導理論：波動関数一価性の束縛条件を課した計算方法の開発とラシュバスピン軌道相互作用に関する考察

大塩 耕平（修士）二次元トポロジカル絶縁体における高次高調波発生

駒木 悠平（修士）イオン性ハバードモデルにおける動的構造因子

## 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

## 受賞

第 14 回（2020 年）日本物理学会若手奨励賞、佐藤駿丞、固体におけるアト秒電子ダイナミクス of 理論的研究、2020 年 3 月 16 日

## 外部資金

1. JST CREST「光・電子融合第一原理計算ソフトウェアの開発と応用」、矢花一浩、代表、2016-2021 年度、全年度直接経費：177,500 千円（2019 年度直接経費：37,650 千円）
2. 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」サブ課題 B「光・電子融合デバイス」、矢花一浩、分担、2016-2019 年度、全年度直接経費：59,547 千円（2019 年度直接経費：14,373 千円）
3. Q-LEAP 先端レーザーイノベーション拠点「次世代アト秒レーザー光源と先端計測技術の開発」、矢花一浩、分担、2018-2027 年度、全年度直接経費：22,727 千円（2019 年度直接経費：2,174 千円）
4. 科学技術振興機構、A-STEP「アイセーフ波長用高効率 Si 受光センサの開発」、矢花一浩、分担、2019-2020 年度、全年度直接経費：250 千円（2019 年度直接経費：250 千円）
5. 学術指導経費、株式会社住友金属鉱山、「ナノ粒子の光応答／光制御」、矢花一浩、2019 年度、全年度直接経費：909 千円（2019 年度直接経費：909 千円）
6. 科研費基盤（C）、山田篤志、代表、2019－2023 年度、全年度直接経費：2,100 千円（2019 年度直接経費：100 千円）
7. 科研費基盤（C）、野田真史、代表、2018-2020 年度、全年度直接経費：1,400 千円（2019 年度直接経費：100 千円）
8. 科研費若手、Arqum Hashmi、代表、2019-2020 年度、全年度直接経費：2,400 千円（2019 年度直接経費：1,300 千円）
9. 科研費基盤（C）、全曉民、代表、2016-2019 年度、全年度直接経費：3,700 千円（2019 年度直接経費：500 千円）

## 知的財産権

なし

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

1. Nicolas Tancogne-Dejean, Micael J. T. Oliveira, Xavier Andrade, Heiko Appel, Carlos H. Borca, Guillaume Le Breton, Florian Buchholz, Alberto Castro, Stefano Corni, Alfredo A. Correa, Umberto De Giovannini, Alain Delgado, Florian G. Eich, Johannes Flick, Gabriel Gil, Adrián Gomez, Nicole Helbig, Hannes Hübener, René Jestädt, Joaquim Jornet-Somoza, Ask



- H. Larsen, Irina V. Lebedeva, Martin Lüders, Miguel A. L. Marques, Sebastian T. Ohlmann, Silvio Pipolo, Markus Rampp, Carlo A. Rozzi, David A. Strubbe, Shunsuke A. Sato, Christian Schäfer, Iris Theophilou, Alicia Welden, Angel Rubio, "Octopus, a computational framework for exploring light-driven phenomena and quantum dynamics in extended and finite systems", *J. Chem. Phys.* **152**, 124119 (2020).
2. M. Lucchini, S.A. Sato, F. Schlaepfer, K. Yabana, L. Gallmann, A. Rubio, U. Keller, "Attosecond timing of the dynamical Franz-Keldysh effect", *J.Phys. Photonics***2**, Number 2(2020).
  3. A. Yamada, "Multiscale Coupled Maxwell's Equations and Polarizable Molecular Dynamics Simulation Based on Charge Response Kernel Model", *J. Chem. Phys.*, **152**, 094110 (2020).
  4. S. Yamada, K. Yabana, "Symmetry properties of attosecond transient absorption spectroscopy in crystalline dielectrics", *Phys. Rev. B*.**101**, 165128(2020).
  5. A. Hashmi, K. Nakanishi, T. Ono, "Graphene-based symmetric and non-symmetric magnetoresistive junctions", *J. Phys. Soc. Jpn.* **89**, 034708 (2020).
  6. K. Iida, M. Noda, "Electron transfer governed by light-matter interaction at meta-semiconductor interface", *npj Computational Materials* **6**, 5 (2020).
  7. S.A. Sato, Angel Rubio, "Exact exchange-correlation potential of effectively interacting Kohn-Sham systems", *Phys. Rev. A***101**, 012510 (2020).
  8. A. Yamada and K. Yabana, "Modulation of probe signal in coherent phonon detection revisited: Analytical and first-principles computational analyses", arXiv:2004.09069 (2020).
  9. Yuta Hirokawa, Atsushi Yamada, Shunsuke Yamada, Masashi Noda, Mitsuharu Uemoto, Taisuke Boku, and Kazuhiro Yabana, "Ab-Initio Simulation of Light-Matter Interaction at the Atomic Scale in Fugaku", SC20, submitted.
  10. D. Chetty, R. D. Glover, B. A. deHarak, X. M. Tong, H. Xu, T. Pauly, N. Smith, K. R. Hamilton, K. Bartschat, J. P. Ziegel, N. Douguet, A. N. Luiten, P. S. Light, I. V. Litvinyuk, and R. T. Sang, "Observation of dynamic Stark resonances in strong-field excitation", *Phys. Rev. A***101**, 053402 (2020).
  11. W.C. Jiang, X.M. Tong, R. Pazourek, S. Nagele, and J. Burgdorfer, "Theory of bound state coherences generated by optical attosecond pulses", *Phys. Rev. A*, accepted.
  12. H. Koizumi, "Explanation of superfluidity using the Berry connection for many-body wave functions", *J. Supercond. Nov. Magn.*, (2020).
  13. H. Koizumi, "Possible Occurrence of Superconductivity by the  $\pi$ -flux Dirac String Formation Due to Spin-Twisting Itinerant Motion of Electrons", *Symmetry* **12**, 776 (2020).

14. T. Yatsui, S. Okada, T. Takemori, T. Sato, K. Saichi, T. Ogamoto, S. Chiashi, S. Maruyama, M. Noda, K. Yabana, K. Iida and K. Nobusada, "Enhanced photo-sensitivity in a Si photodetector using a near-field assisted excitation", *Communication Physics***2**, 62 (2019).
15. A. Yamada and K. Yabana, "Energy transfer from intense laser pulse to dielectrics in time-dependent density functional theory", *Euro. Phys. J. D***73**, 87 (2019).
16. A. Yamada and K. Yabana, "Multiscale time-dependent density functional theory for a unified description of ultrafast dynamics: Pulsed light, electron, and lattice motions in crystalline solids", *Phys. Rev. B***99**, 245103 (2019).
17. T. Takeuchi, M. Noda, and K. Yabana, "Operation of quantum plasmonic metasurfaces using electron transport through subnanometer gaps", *ACS Photonics* **6**, 2517 (2019).
18. I. Floss, C. Lemell, K. Yabana, and J. Burgdörfer, "Incorporating decoherence into solid-state time-dependent density functional theory", *Phys. Rev. B***99**, 224301 (2019).
19. M. Noda, K. Iida, M. Yamaguchi, T. Yatsui, K. Nobusada, "Direct wave vector excitation in an indirect band gap semiconductor of silicon with an optical near-field", *Phys. Rev. Applied* **11**, 044053 (2019).
20. S.A. Sato, P. Tang, M.A. Sentef, U. De Giovannini, H. Hübener, A. Rubio, "Light-induced anomalous Hall effect in massless Dirac fermion systems and topological insulators with dissipation", *New J. Phys.* **21**, 093005 (2019).
21. M. Volkov, S.A. Sato, F. Schlaepfer, L. Kasmi, N. Hartmann, M. Lucchini, L. Gallmann, A. Rubio, U. Keller, "Attosecondscreening dynamics mediated by electron localization in transition metals", *Nature Physics***15**, 1145-1149 (2019).
22. M. Chávez-Cervantes, G.E. Topp, S. Aeschlimann, R. Krause, S.A. Sato, M.A. Sentef, I. Gierz, "Charge density wave melting in one-dimensional wires with femtosecond subgap excitation", *Phys. Rev. Lett.* **123**, 036405 (2019).
23. S.A. Sato, J.W. McIver, M. Nuske, P. Tang, G. Jotzu, B. Schulte, H. Hübener, U. De Giovannini, L. Mathey, M.A. Sentef, A. Cavalleri, A. Rubio, "Microscopic theory for the light-induced anomalous Hall effect in graphene", *Phys. Rev. B* **99**, 214302 (2019).
24. S.A. Sato, "Photovoltaic effect from the viewpoint of time-reversal symmetry", *J. Phys. Soc. Jpn.* **88**, 115003 (2019).
25. X. Gao and X.M. Tong, "Coulomb effect on the dynamics of atoms in a strong elliptical laser field: unification of the excitation and ionization", *Phys. Rev. A***100**, 063424:1-8 (2019).
26. X.M. Tong, "Photoelectron angular distribution of atoms in pulsed XUV and IR fields", *Phys. Rev. A***99**, 043433:1-5 (2019).



27. K. Ueda, E. Sokell, S. Schippers, F. Aumayr, H. Sadeghpour, J. Burgdörfer, C. Lemell, X.M. Tong and et al., "Roadmap on photonic, electronic and atomic collision physics: I. Light-matter interaction", J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys. **52**, 171001 (2019).
28. Y. Komaki, Y. Iwase, S. Yanagimatsu, Y. Muta, N. Maeshima, and K. Hino, "Dynamical charge structure factor of a one-dimensional ionic hubbard Hubbard model in the low-energy region", J. Phys. Soc. Jpn. **88**, 054709 (2019).
29. Y. Watanabe, K. Hino, N. Maeshima, H. Petek, M. Hase, "Ultrafast asymmetric Rosen-Zener-like coherent phonon responses observed in silicon", Phys. Rev. B **99**, 174304 (2019).

## B) 査読無し論文

1. A. Yamada and K. Yabana, "First-principles electron dynamics simulation study of high intensity laser irradiation on crystal systems: Photon energy dependent energy transfer", EPJ Web of Conferences; **205**, 04020 (2019).
2. M. Uemoto, K. Yabana, S. A. Sato, Y. Hirokawa and T. Boku, "A first-principles simulation method for ultra-fast nano-optics", EPJ Web Conf. Volume **205**, 04023 (2019).
3. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada and K. Yabana, "First-principles method for propagation of ultrashort pulsed light in thin films", EPJ Web of Conferences **205**, 01003 (2019).
4. S. A. Sato, U. De Giovannini, S. Aeschlimann, I. Gierz, H. Hübener, A. Rubio, "Floquet states in dissipative open quantum systems", submitted.
5. Chang-Ming Wang, Nicolas Tancogne-Dejean, Massimo Altarelli, Angel Rubio, Shunsuke A. Sato, "Role of electron scattering on the high-order harmonic generation from solids", submitted.
6. Umberto De Giovannini, Hannes Hübener, Shunsuke A. Sato, Angel Rubio, "Direct measurement of electron-phonon coupling with time-resolved ARPES", submitted.
7. Jiaojian Shi, Edoardo Baldini, Simone Latini, Shunsuke A. Sato, Yaqing Zhang, Brandt Pein, Pin-chun Shen, Jing Kong, Angel Rubio, Nuh Gedik, Nelson, Keith, "Room Temperature Terahertz Electroabsorption Modulation by Excitons in Monolayer Transition Metal Dichalcogenides", submitted.
8. Dongbin Shin, Shunsuke A. Sato, Hannes Hübener, Umberto De Giovannini, Noejung Park, Angel Rubio, "Nonlinear phononics in 2D ferroelectric materials as dynamical amplification of electric polarization", submitted.
9. Y. Sanari, H. Hirori, T. Aharen, H. Tahara, Y. Shinohara, K. L. Ishikawa, T. Otobe, P. Xia, N. Ishii, J. Itatani, S. A. Sato, and Y. Kanemitsu, "Role of Nonlinear Virtual Population for High Harmonic Generation in Solids", submitted.

10. V. Wanie, H. Ibrahim, S. Beaulieu, N. Thiré, B. E. Schmidt, Y. Deng, A. S. Alnaser, I. V Litvinyuk, X. M. Tong, F. Légaré, "Directional control of dissociative ionization by a two-colour laser field", EPJ Web of Conferences **205**, 09030 (2019).

## (2) 国際会議発表

### A) 招待講演

1. K. Yabana, "Ab-initio theory for propagation of extreme optical pulses in solids", 2nd Int. Workshop on Ultrafast Dynamics and Metastability, Georgetown Univ., Washington DC, USA, April 15-17, 2019.
2. K. Yabana, "Ab-initio theory for propagation of strong optical pulse in solids", XXXIst Int. Conf. on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions (ICPEAC2019), Deauville, France, 23-30, Jul., 2019.
3. K. Yabana, "Time-dependent density functional theory for solids under strong laser field", 24th Int. Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology, Odessa, Ukraine, 18-24, Aug. 2019.
4. M. Uemoto, A. Yamada, and K. Yabana, "Maxwell+TDDFT multiscale method for light-propagation in solids", 27th International Conference on Advanced Laser Technologies, Prague, Czech Republic, Sept. 2019.
5. T. Takeuchi, M. Noda, and K. Yabana, "Linear and nonlinear optical responses of plasmonic metasurface with sub-nm gaps", 27th International Conference on Advanced Laser Technologies, Prague, Czech Republic, Sept. 2019.
6. K. Yabana, "Ab-initio Simulations for Propagation of Intense and Ultrashort Optical Pulse", OptoX-Nano 2019, Okayama, Dec.3, 2019.

### B) 一般講演

1. T. Takeuchi, M. Noda, K. Yabana, "Numerical Analysis of Quantum Plasmonic Metasurface by Time-Dependent Density Functional Theory", 19th International Conference on Numerical Simulation of Optoelectronic Devices, Ottawa, Canada, Jul.8-12, 2019.
2. M. Uemoto, S. Yamada, T. Takeuchi, Y. Hirokawa and K. Yabana, "Ab-initio large-scale calculation of laser interactions with nanoscale materials", MCRP-62, 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba, Japan, Oct. 2019.
3. M. Uemoto and K. Yabana, "Development of Multiscale First-Principles Approach for Optical Response in Nanostructure", iSPN2019, Kobe, Japan, Nov. 13, 2019.

4. T. Takeuchi, M. Noda, and K. Yabana, "Refractive index variation of quantum plasmonic metasurface with sub-nm gaps", iSPN2019, Kobe, Hyogo, Japan, Nov. 13, 2019.
5. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, and K. Yabana, "First-principles study for interaction of pulsed light with thin materials", iSPN2019, Kobe, Hyogo, Japan, Nov. 13, 2019.
6. M. Noda, K. Iida, M. Yamaguchi, T. Yatsui, and K. Nobusada, "Direct wave vector excitations of silicon with optical near fields", iSPN2019, Kobe, Hyogo, Japan, Nov. 13, 2019.
7. X.M. Tong and N. Toshima, "Abnormal photoelectron angular distribution of Aratoms in pulsed XUV and IR laser fields", XXXI International Conference on photonic, electronic and atomic collision, July 23-30, 2019 Deauville, France.
8. X. Gao and X.M. Tong, "Photoabsorption of atoms in a strong elliptical laser field", XXXI International Conference on photonic, electronic and atomic collision, July 23-30, 2019 Deauville, France.
9. S. Borbely, X.M. Tong, S. Nagele, J. Feist, I. Brezinova, F. Lackner, L. Nagy, K. Tokesi and J. Burgdorfer, "Energy loss of p and p in He: electron correlation effects", XXXI International Conference on photonic, electronic and atomic collision, July 23-30, 2019 Deauville, France.
10. D. Manabe, H. Koizumi, "Supercurrent generation by spin-twisting itinerant motion of electrons in a model for cuprate superconductors", International Conference on Frontiers of Correlated Electron Sciences, (Tokyo, Japan, May 29–31, 2019).
11. H. Koizumi, D. Manabe, "Appearance of a novel collective spin excitation in cuprate superconductors due to Rashba spin-orbit interaction and spin-twisting itinerant motion of electrons" Spectroscopies in Novel Superconductors 2019, (Tokyo, Japan, June 16–21, 2019).
12. H., D. Manabe, "Appearance of spontaneous current feeding state by Rashba spin-orbit interaction", 7th European conference on molecular magnetism (Firenze, Italy, September 15-19, 2019).
13. Yuhei Komaki, Nobuya Maeshima, and Ken-ichi Hino, "Dynamical Charge Structure Factor of the 1D Ionic Hubbard Model", FSP2019: FRONTIERS OF STATISTICAL PHYSICS, The University of Tokyo, June 7-8, 2019.

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

1. 矢花一浩, "大規模計算による光電磁場・電子・フォノンの第一原理シミュレーション", 第6回大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム-物質構造の階層性とフォノン物性の理解-, 東京秋葉原 UDX, 2019年9月17日.

## B) その他の発表

1. 植本光治、"SALMON コードによる応用研究について"、JST-CREST 研究課題 + ポスト「京」サブ課題 + Q-LEAP 進捗報告・討論会「光・電子融合系の第一原理計算」、QST 関西光科学研究所、2019 年 4 月
2. 植本光治、"TDDFT による第一原理電子ダイナミクス計算とナノフォトニクスへの適用に向けて"、光量子科学連携研究機構 (UTripl) セミナー、2019 年 7 月 1 日.
3. 植本光治、"固体物質の光学応答第一原理計算～RNN による誘電応答学習の提案～"、MI<sup>2</sup>I・元素戦略・ポスト京・計算物質科学コンソ・合同 Working、2019 年 7 月 20 日.
4. 矢花一浩、"第一原理計算に基づく光科学ソフトウェア SALMON の開発と応用"、ポスト「京」重点課題（7）第 5 回シンポジウム、東京大学、2019 年 8 月 9 日
5. 植本光治、山田篤、矢花一浩、"大規模計算をもちいた極限パルス光・固体物質相互作用の第一原理シミュレーション"、ポスト「京」重点課題 7 第 5 回シンポジウム、文京区本郷、2019 年 8 月 9 日.
6. 野田真史、"第一原理計算によるシリコンの波数励起"、ポスト「京」重点課題 7 第 5 回シンポジウム、文京区本郷、2019 年 8 月 9 日.
7. 廣川祐太、植本光治、野田真史、矢花一浩、"A64FX プロセッサに対する電子動力学アプリケーション SALMON のコデザイン"、ポスト「京」重点課題 7 第 5 回シンポジウム、文京区本郷、2019 年 8 月 9 日.
8. 佐藤 駿丞、M. Volkov, F. Schlaepfer, L. Kasmi, N. Hartmann, M. Lucchini, L. Gallmann, U. Keller, A. Rubio, "チタン薄膜に対するアト秒過渡吸収分光の第一原理的解析", 日本物理学会 2019 年秋季大会、岐阜大学、2019 年 9 月 10 日.
9. 植本光治、蔵田真太郎、河口紀仁、矢花一浩、"第一原理計算によるパルス光とグラフィット薄膜の相互作用"、日本物理学会 2019 年秋季大会、岐阜、2019 年 9 月 12 日.
10. 山田俊介、矢花一浩、"結晶対称性と時間分解動的 Franz-Keldysh 効果の関係：理論と第一原理計算"、日本物理学会 2019 年秋季大会、岐阜、2019 年 9 月 10 日.
11. 竹内嵩、野田真史、矢花一浩、"サブ nm ギャップを有するプラズモニックメタ表面の屈折率変動機構の解明"、第 80 回応用物理学会秋季学術講演会、北海道、2019 年 9 月.
12. 山田篤志、矢花一浩、"マルチスケールシミュレーションで直接的に再現したコヒーレントフォノンに対するポンププローブ分光シグナルの解析"、第 13 回分子科学討論会、名古屋、2019 年 9 月 17 日.
13. 矢花一浩、竹内嵩、野田真史、"サブ nm ギャップを有するプラズモニックメタ表面の屈折率変動機構の解明"、第 80 回応用物理学会秋季学術講演会、北海道大学札幌キャンパス、2019 年 9 月 18 日.

14. 山田篤志、矢花一浩、"極限的パルス光とバルク物質の相互作用に対する第一原理計算"、第6回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会、品川、2019 年 11 月 1 日.
15. 山田篤志、"CRK 分極モデルを用いた Maxwell + MD マルチスケールシミュレーションの開発"、第 33 回分子シミュレーション討論会、名古屋、2019 年 12 月 9 日.
16. 竹内嵩、矢花一浩、"サブ nm ギャップを有するプラズモニックメタ表面の非線形光学応答解析 —ジェリウム模型を適用した時間依存密度汎関数理論による検討—"、第 67 回応用物理学会秋季学術講演会、2020 年 3 月 13 日(現地開催中止、予稿のみ).
17. 山田篤志、"デルを用いた Maxwell + MD マルチスケールシミュレーションの開発および分光測定系への適用"、日本物理学会第 75 回年次大会、名古屋大学、2020 年 3 月(現地開催中止、予稿のみ)
18. 山田俊介、矢花一浩、"薄膜における高次高調波発生の第一原理計算"、日本物理学会第 75 回年次大会、名古屋大学、2020 年 3 月(現地開催中止、予稿のみ).
19. 廣川 祐太、野田 真史、山田 俊介、山田 篤志、朴 泰祐、矢花一浩、"電子動力学アプリケーション SALMON のスーパーコンピュータ「富岳」に向けた最適化と性能評価"、第 173 回 HPC 研究会、札幌、2020 年 3 月(現地開催中止、予稿のみ)
20. 佐藤駿丞、"固体におけるアト秒電子ダイナミクス of 理論的研究"、日本物理学会年次大会、3 月 16-19 日
21. 佐藤駿丞、廣理英基、佐成晏之、金光義彦、Angel Rubio、"グラフェンにおける高次高調波発生の理論的解析"、日本物理学会年次大会、3 月 16-19 日
22. 真鍋大地、小泉裕康、"銅酸化物高温超伝導体における Rashba 相互作用から生じる新奇な集団スピン励起モード"、日本物理学会 2019 年秋季大会、岐阜大学、2019 年 9 月 10-13 日.
23. 小泉裕康、真鍋大地、"銅酸化物における自発的外部電流供給状態と超伝導"、日本物理学会 2019 年秋季大会、岐阜大学、2019 年 9 月 10-13 日.
24. 小泉裕康、"銅酸化物高温超伝導体を使った量子ビットの提案"、分野横断ワークショップ「量子コンピュータ研究開発の現在とこれから」、理化学研究所、2020 年 1 月 29 日.
25. 石岡大樹、小泉裕康、"銅酸化物超伝導の超伝導転移温度に対する新規なスピン励起の影響"、日本物理学会第 75 回年次大会 (3 月 16 日-19 日、インターネット公開).
26. 小泉裕康、"多体波動関数より得られるベリー接続による、超流動性の説明"、日本物理学会第 75 回年次大会 (3 月 16 日-19 日、インターネット公開).
27. 張博源、前島展也、日野健一、"レーザー駆動半導体量子井戸におけるフロケットポロジカル絶縁体 II"、日本物理学会 2019 年秋季大会、岐阜大学、2019 年 9 月 10-13 日.

28. 前島展也, 駒木悠平, 日野健一, "イオン性ハバード模型における低エネルギー励起状態 II", 日本物理学会 2019 年秋季大会、岐阜大学、2019 年 9 月 10-13 日.
29. 張博源、前島展也、日野健一、"フロケットポロジカル絶縁体におけるレーザー誘起バンド反転とエッジ状態"、日本物理学会第 75 回年次大会 (3 月 16 日-19 日、インターネット公開) .
30. 前島展也, 駒木悠平, 日野健一, "イオン性ハバード模型における低エネルギー励起状態 III", 日本物理学会第 75 回年次大会 (3 月 16 日-19 日、インターネット公開)

#### (4) 著書、解説記事等

### 7. 異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等

#### 異分野間連携 (センター内外)

1. 光科学ソフトウェア SALMON の開発にあたり、高性能計算システム研究部門の朴グループと密接な研究協力を行なっている。

#### 産学官連携

1. 株式会社住友金属鉱山に対して、SALMON を用いた光科学計算に関して学術指導を行った。来年度は共同研究に発展する予定である (矢花)。
2. 科学技術振興機構の A-STEP 経費により、「アイセーフ波長用高効率 Si 受光センサの開発」に関して、東京大学工学系研究科の八井准教授を中心として、筑波大の矢花、浜松ホトニクスを交えた研究を行った。

#### 国際連携・国際活動

1. アト秒光科学に関し、グラーツ工科大学 (オーストリア・グラーツ)、マックスプランク量子光学研究所 (ドイツ・ガルヒング)、及びバルセロナ大学 (スペイン) の実験グループと共同研究を行っている (矢花)。
2. 時間依存密度汎関数理論を用いた光と物質の相互作用に関する共同研究をウィーン工科大学 (オーストリア) の理論グループと行っている (矢花)。
3. H2020-MSCA-RISE (欧州の国際交流プロジェクト) による光と物質の相互作用の理論と計算に関わる国際ネットワーク形成プロジェクト ATLANTIC に基づく国際共同研究を、今年度より開始した。この枠組み、及び関連するプロジェクトで、以下の研究者がセンターに長期滞在した (矢花)。
  - (1) Tzevta Apostolova ソフィア大学 (ブルガリア) 6/14-7/12
  - (2) Thibault Derrien プラハ大学 (チェコ) 6/13-7/12

(3) François M.G.J. Coppens、 Laboratoire Physique Théorique (LPT)UNIVERSITÉ  
TOULOUSE III - Paul Sabatier (フランス) 9/16-12/15

(4) Anton Husakou、 Max Born Institute of Berlin (ドイツ)、10/10-11/11

(5) Guillaume Dechateau、 ボルドー大学 (フランス) 、10/27-11/8

4. Vanderbilt 大学 (米国) より、Justin Michael Malave 氏 (大学院生) が長期滞在し、研究交流を行った(6/17-8/13) (矢花)。
5. 強レーザー場における原子過程について、ウィーン工科大学の理論グループと共同研究を行っている。(全)
6. 楕円偏光強レーザー場における原子過程について、グリフィス大学の実験グループと共同研究を行っている。(全)
7. 国際テニユアトラック助教としてマックスプランク研究所物質構造ダイナミクス研究所(ドイツ・ハンブルク)の Angel Rubio 教授のグループに長期滞在し、光誘起超高速現象の第一原理的解析、及び第一原理計算コード Octopus の開発等の共同研究を行っている(佐藤)。
8. アト秒光科学に関して、チューリッヒ工科大学(スイス)、及びミラノ工科大(イタリア)の実験グループと共同研究を行っている(佐藤)。
9. 高強度 THz 分光に関して、マサチューセッツ工科大学の実験グループと共同研究を行っている(佐藤)。

## 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

なし

## 9. 管理・運営

矢花：

(センター内) 計算科学研究センター運営委員会委員、人事委員会委員、運営協議会委員、先端計算科学推進室長、共同研究委員会委員、量子物性研究部門長

(学内) 物理学域運営委員、筑波大学 50 年史編纂専門委員会委員、物理学類カリキュラム委員

小泉：

(学内) 筑波大学全学計算機システム 3D サテライト管理, TIB チームリーダー

前島：

(センター内) 計算科学研究センター共同利用委員

(学内) 応用理工学類 e ラーニング委員

## 10. 社会貢献・国際貢献

矢花：

- ・平成31年度テニユアトラック普及・定着事業委員会委員。

小泉：

- ・ヤーン・テラー効果に関する国際会議、ステアリングコミッティー委員

## 11. その他

全：2019年4月1日～2019年9月27日、サバティカルで台湾国立大学、ウィーン工科大学、グリフィス大学に滞在し、強レーザー場に関する共同研究を行った。サバティカル中の研究成果として、ウィーン工科大学との共著論文一件が発表され、もう一件が掲載決定された。グリフィス大学との共著論文も一件発表された。



## V. 生命科学研究部門

### V-1. 生命機能情報分野

#### 1. メンバー

|     |                                                                      |
|-----|----------------------------------------------------------------------|
| 教授  | 重田 育照                                                                |
| 准教授 | 原田 隆平                                                                |
| 助教  | 庄司 光男                                                                |
| 助教  | 西澤 宏晃                                                                |
| 助教  | 堀 優太                                                                 |
| 研究員 | 三嶋 謙二                                                                |
| 研究員 | 鬼頭（西岡） 宏任（JST-PRESTO）                                                |
| 研究員 | 満田 祐樹（JSPS 特別研究員）                                                    |
| 研究員 | Kowit Hengphasatporn                                                 |
| 学生  | 大学院生 5 名（数理物質科学研究科後期課程 1 名（社会人）、前期課程 4 名）<br>学類生 2 名（物理学類）、2 名（生物学類） |

#### 2. 概要

生命機能情報分野では、生体内で重要な働きをしている生体分子に注目し、その機能を分子構造、電子状態レベルからより詳細に解明することを目的としている。令和元年度は、【1】中分子環状ペプチドの膜透過プロセスの解明、【2】光合成酸素発生中心の反応機構の解明、【3】DFTB-MD 計算手法の開発、【4】無水プロトン伝導物質の伝導機構の解明、【5】ヘリオバクテリアの励起エネルギー移動の解明、【6】自由エネルギー反応経路探索法の開発、【7】バーチャルスクリーニング手法の開発、【8】C 型フィコシアニン色素の励起状態構造変化の解明、【9】星間空間におけるメタノール生成シミュレーションなどの研究を大きく進展させることができた。これらの研究では、計算科学研究センターのスパコン（Cygnus）の利用と国内のスパコンを利用した。筑波大学内外の研究グループと共同研究し、新しい研究にも積極的に取り組んだ。

### 3. 研究成果

#### 【1】中分子環状ペプチドの膜透過プロセスを抽出する計算手法の開発（原田、重田）

中分子環状ペプチドは、合成上のコストが安価（中分子）であることに加え、構造が環状であることから、生体内に取り込まれた際に分解されにくく、標的分子と相互作用して効率的に活性を阻害可能であるため、創薬研究において注目を浴びている。本年度は、現実的な計算コストで膜透過プロセスを抽出するために、生体分子のレアイベントサンプリング法である Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics (PaCS-MD) を適用し、その抽出を試みた。PaCS-MD は、生体分子の機能発現に重要な長時間ダイナミクス（レアイベント）を効率的に抽出する計算手法である。具体的には、中分子環状ペプチドの膜透過プロセスをレアイベントとみなして PaCS-MD により抽出し、膜透過に伴う構造変化を原子レベルの分解能で解析した。PaCS-MD による膜透過プロセス抽出の概念に関しては、図 1

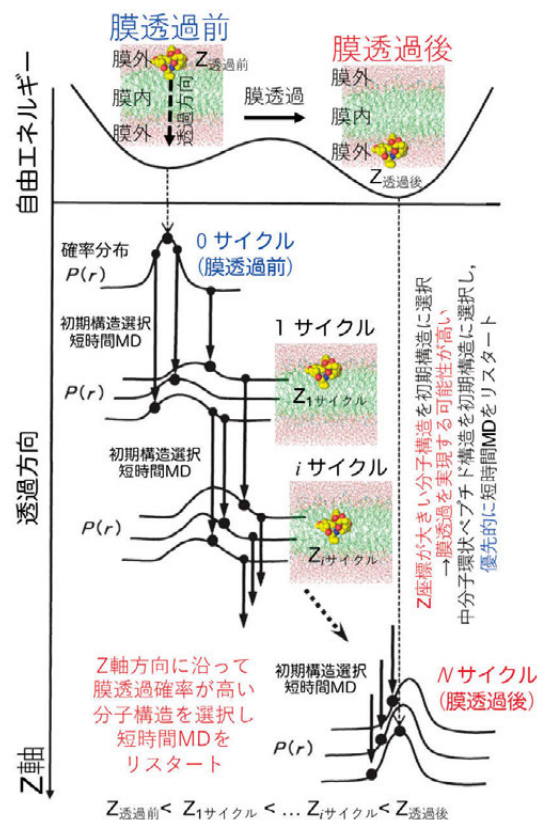


図 1. PaCS-MD に基づく膜透過プロセス

を参照にされたい。膜透過性を定量的に評価するために、抽出した膜透過プロセスの時系列データ（原子座標トラジェクトリ）からマルコフ状態モデルを構築し、膜透過に伴う自由エネルギーを計算した。自由エネルギー情報から、膜透過時の特徴的な構造変化を抽出すると共に、膜透過を実現するにはどれ程の自由エネルギー障壁が存在するのか、また、設計した環状構造（アミノ酸配列）と相関があるのかを考察した。これにより、合理的な中分子医薬を実現する設計情報を提供可能な方法論を構築することが可能となる。具体的な計算として、モデル環状ペプチドの膜透過プロセスの抽出に開発手法を適用し、膜透過に伴う自由エネルギー計算を実行した。詳細な自由エネルギープロファイル解析により、膜侵入時に環状ペプチドは大規模な構造変化を伴うことが明らかになった。物理化学的には、親水性が高い膜外領域では疎水残基を外側に配置した分子の大きさ（慣性半径）が大きな構造をとる確率が高いが、疎水性が高い膜内部では疎水基を内側に配置した慣性半径が小さい構造に遷移することが分かった。膜透過時の構造変化として各々の残基の二面角が大きくフリップすることが観測され、より合理的に疎水性残基を内外に構造変化させることで膜透過性を高めていることが分かった。通常の MD ではこの様な環状ペプチド内の二面角変化を伴うレアイベントを

抽出することが難しく、本研究で適用したレアイベントサンプリング法の重要性を示すことができた。

## 【2】光化学系 II 酸素発生中心(PSII-OEC)における水分解反応機構の理論的解明（庄司）

光化学系 II(PSII)では光エネルギーを利用して水分子を酸素分子に変換する反応( $2\text{H}_2\text{O} + 4h\nu \rightarrow 4\text{H}^+ + 4\text{e}^- + \text{O}_2$ )を触媒しており、クリーンかつ効率的なエネルギー変換システムが非常に注目されている。2018 年には時分割構造解析法(SFX)の発展により、触媒サイクル全ての反応中間体( $\text{S}_i, i=0-3$ )構造が解明され、反応過程の構造変化が直接観測できるようになった。そのため、我々は大規模 QM/MM モデル(QM Atoms=380)を作成し、各 S 状態における Mn クラスターの特徴的構造変化とプロトン化状態、周辺アミノ酸との相互作用について理論解析を進め、SFX 構造との構造比較を行った(図 2)。その結果、Mn-Mn, Ca-Mn 距離については実験結果と良い一致が得られた。Mn-O や O5-O6 距離については未だ一致が良くない結果が得られた。その理由として、電子状態の検討や状態混合、分解能の妥当性について考察を行った。

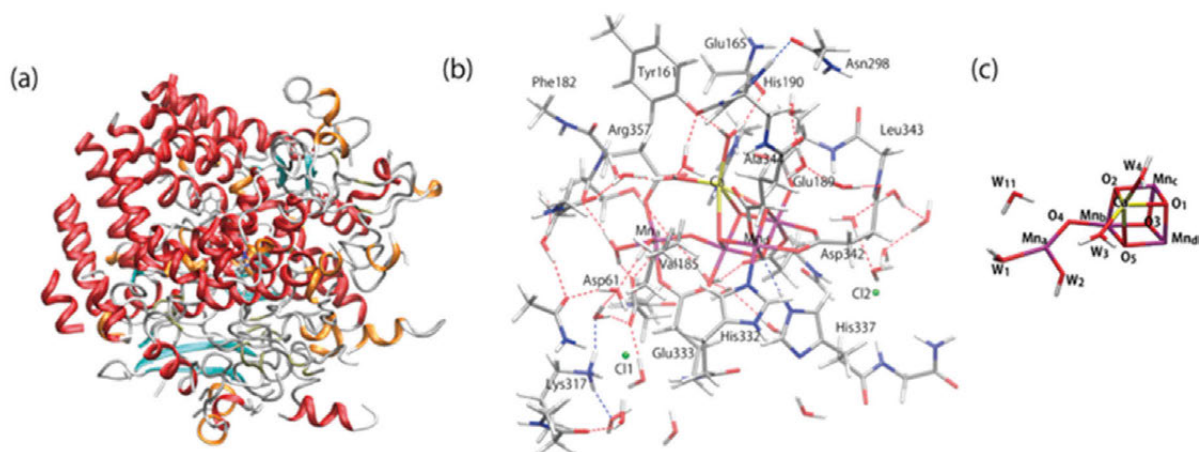


図 2. PSII-OEC の理論計算に用いた(a)QM/MM 計算全系と(b)大規模な QM 領域(Tube 表示)。Mn クラスター周辺のアミノ酸残基や  $\text{Cl}^-$ 、水分子が含まれており、水チャンネルや水素結合ネットワークを含めた。(c)反応中心の Mn クラスター部拡大図。

## 【3】DFTB-MD 計算におけるエネルギー保存と拘束手法の検証（西澤）

分子動力学 (MD) シミュレーションは生体分子の安定性などを求める際に広く用いられ、成功を収めている。しかし、原子間の相互作用を古典的なパラメーターを用いて求めるために、結合変化を伴う反応を取り扱うことができない。このような電子状態の変化を取り扱うには量子化学計算が適しているが、計算コストの大きさが問題であった。そこで近年、計算

コストが低く、比較的精度の良いという理由から半経験的手法の 1 つである密度汎関数強束縛 (DFTB) 法を用いた MD シミュレーション (DFTB-MD) が行われるようになってきた。MD シミュレーションを用いた計算結果から正しい統計平均を得るには多くのサンプリングが必要であり、その全エネルギーが保存している必要がある。しかし、DFTB-MD シミュレーションに対して、統計平均の正しさを保証するような研究結果はあまり多くない。そこで、本研究では DFTB-MD 法に関して全エネルギーが保存しているかを検証し、本手法の妥当性について検証した。その結果、量子化学計算に基づく MD 計算では、通常の古典 MD とは異なり Pulay 力と呼ばれる力の取り扱いが重要であり、この項を取り扱うことで正しく全エネルギーを保存させることができることを示した。また、拘束条件を用いた手法を組み合わせることで時間刻みを大きくしても全エネルギーを保存させることが可能となり、4 倍程度サンプリングの効率を向上させることができることが分かった。

#### 【4】無水プロトン伝導物質中の伝導機構の解明に向けた理論解析（堀）

イミダゾール(Im)を含む酸塩基複合体は、無水プロトン伝導物質として注目されている。その伝導機構は、水素結合ネットワークを介した「プロトン移動」と「水素結合ネットワークの再配向」の過程を含む Grotthuss 型機構が提案されており、再配向過程がプロトン伝導の律速だと考えられている。本研究では、MD 計算によりポリビニルホスホン酸(PVPA)と Im の複合体(PVPA- $x$ Im)中の Im の水素結合構造と分子ダイナミクスを調べることで、複合体中で起こるプロトン伝導機構について考察した (図 3)。

動径分布関数から PVPA- $x$ Im 中では、PVPA と Im 間で強い水素結合が形成されることがわかった。一方で、PVPA- $x$ Im 中では、Im 単体中と同じ局所構造を持つ Im クラスタが形成されることが予想され、その割合は、Im( $x$ )の量が大きくなるにつれて大きくなっていくことが示唆された。

Im の拡散係数および回転の相関関数より PVPA- $x$ Im 中の Im の運動性を調べた。PVPA- $x$ Im 中では、Im 単体に比べ運動性が減少することがわかった。また、 $x$  の値が増加するにつれて Im の運動性が増加するので、PVPA- $x$ Im 中では、Im の濃度( $x$ )が Im の運動をコントロールする重要な因子になり得ることが予想された。

以上より、PVPA- $x$ Im 中では、PVPA と Im 間の強い水素結合のために、Im は PVPA 周辺で凝集した状態にあることがわかった。また、Im の分子運動は、PVPA 周辺ではなく、Im 間のみの水素結合上で促進されると考えられる。よって、プロトン伝導は、PVPA と Im 間および Im と Im 間の水素結合に関わる Grotthuss 型機構で発現することが予想される。

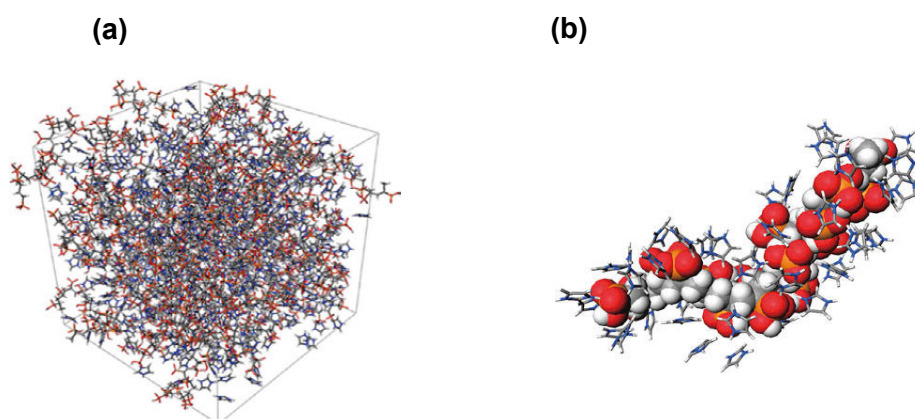


図 3. (a) PVPA-1Im の MD スナップショットと(b) PVPA 周りの局所構造

#### 【5】ヘリオバクテリア Type-I 光合成反応中心の励起子相互作用解析（鬼頭）

光合成反応初期過程を担う反応中心(RC)蛋白質は、大きく 4 種類に分類される。その中で、非酸素発生 I 型 RC のみ、その 3 次元構造が未解明であった。2017 年にヘリオバクテリア I 型 RC(hRC)の X 線結晶構造が遂に報告され、hRC 中ではアンテナ色素として、54 バクテリオクロフィル-g(BChl-g)、4Bchl-g'、2Chl-aF が、図 4 のように 2 回回転対称性を保つように配置されていることが分かった。

本研究では、hRC の持つ光捕集機構を調べる為、アンテナ色素間の励起子相互作用を計算し、シアノバクテリアが持つ酸素発生 I 型 RC(PSI)中の Chl-a 間励起子相互作用と比較した。従来の Förster 理論を用いた研究では、励起子間相互作用は、遷移双極子-双極子相互作用(d-d)で近似される。一方、hRC や PSI のように、アンテナ色素が密に会合している場合には、d-d 近似が成り立たなくなることが良く知られている。そこで、時間依存密度汎関数理論(TD-DFT)法によって各色素の遷移 ESP 電荷を求め、Poisson 方程式と組み合わせることで、蛋白質・溶媒の電子分極遮蔽効果も取り入れた、高精度な励起子相互作用計算(P-TrESP)を実行した。

P-TrESP 法の結果から、PSI では d-d 近似が成り立たないことが分かった。一方、図 4 (右)のように hRC では d-d 近似の相互作用と P-TrESP で求めた相互作用は良い相関を示した。この性質の違いの原因として、(1)BChl-g と Chl-a の遷移電荷分布の違い、(2)hRC と PSI の色素配置の違い、が考えられる。そこで、両 RC 間で仮想的な色素置換を行い、励起子相互作用変化を解析することで、上記の 2 つの要因の定量的な評価を行った。その結果、両方とも重要で、hRC の特有な色素配置に BChl-g を保有することによって、d-d 近似が適用し易い RC になっていることが明らかになった。この性質が、ヘリオバクテリア特有の光捕集効率に重要な役割を果たしていると考えられる。



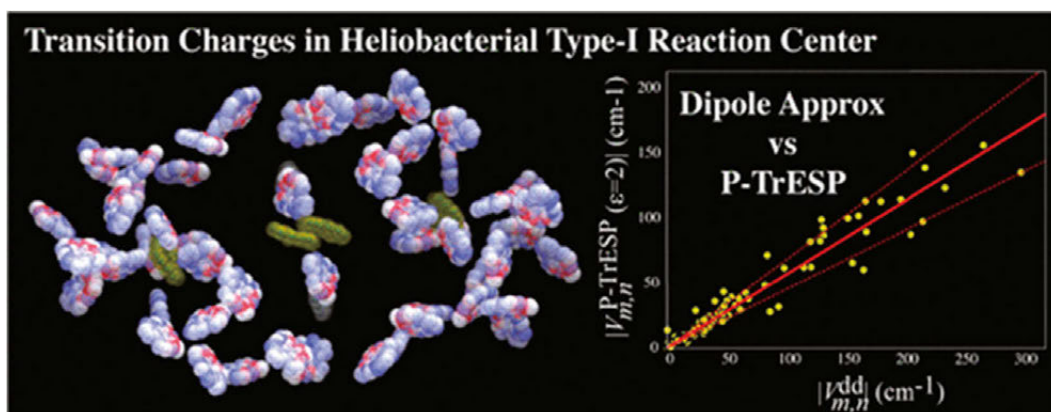


図 4. hRC 中の色素配置と励起子相互作用の計算結果

**【6】有効流量法による自由エネルギー地形での主要反応経路の探索（満田）**

より高次元の自由エネルギー地形計算が可能となるように計算手法の改善、解析手法の開発を行った。まず、解析手法として、「有効流量法」を開発した。この方法では、得られた反応経路ネットワークから反応速度を算出し、それを元に時間発展シミュレーションを行う手法である。このシミュレーションから反応の主要経路を発見することができる。実際にアラニンオクタペプチドに対してこの手法を適用し、重要な経路を割り出すことに成功した。さらに、計算手法自体の改善として、いままで自由エネルギー地形計算をアンブレラサンプリング法に限っていたところを、一般的な自由エネルギー地形計算に適用できるよう計算プログラムを改良した。これによって、メタダイナミクス法などの低コストな手法でも反応経路探索法の適用が可能となり、自由エネルギー反応経路ネットワークの算出が可能となった。さらに、メタダイナミクス法の計算結果から、各反応経路の反応速度を割り出すことができるため、それを元に反応経路ネットワークを定常状態近似で縮約し、フォールディング構造を安定点の集合として捉えることで、構造揺らぎを含めたエントロピー評価が可能となった。

**【7】 Antiviral agent discovery through computational study and calculation at atomistic level (Hengphasatporn, Shigeta)**

According to the Dr. K. Hengphasatporn's previous study, FN5Y was used as a template to search for the novel potent molecule from flavonoid databases using multiple virtual screening strategies that newly develops in this study. Besides, several computational techniques, such as all-atom MD simulations, pharmacophore-based virtual screening, molecular docking, binding free energy calculations, and FMO method, he has also developed a program to predict the possible binding sites of structural protein using a Python script and confirmed the results by the molecular docking method. In addition, the trajectory from molecular dynamics (MD) simulation was analyzed the binding affinity using the integration of quantum and molecular mechanics approaches, including pharmacophore-based

virtual screening to search for the novel potent inhibitors screening. The inhibitory effect and binding affinity of flavone derivative (F18) are greater than FN5Y about three-fold at 4 binding sites, which is confirmed by computational and experimental assay.

Another study, our team reveals the inhibitory effect of phenolic lipid; cardol triene, on dengue E protein using cell-based assay, and the binding pattern and interaction is also supported by the binding free energy calculation. However, the time of addition study showed the series of inhibition that result indicates the compound might disturb other proteins and some inhibitors cannot be specified the protein target based on an experimental study. The possible targets of this compound were predicted using a homopharma concept and network-based method as shown in his recent article.

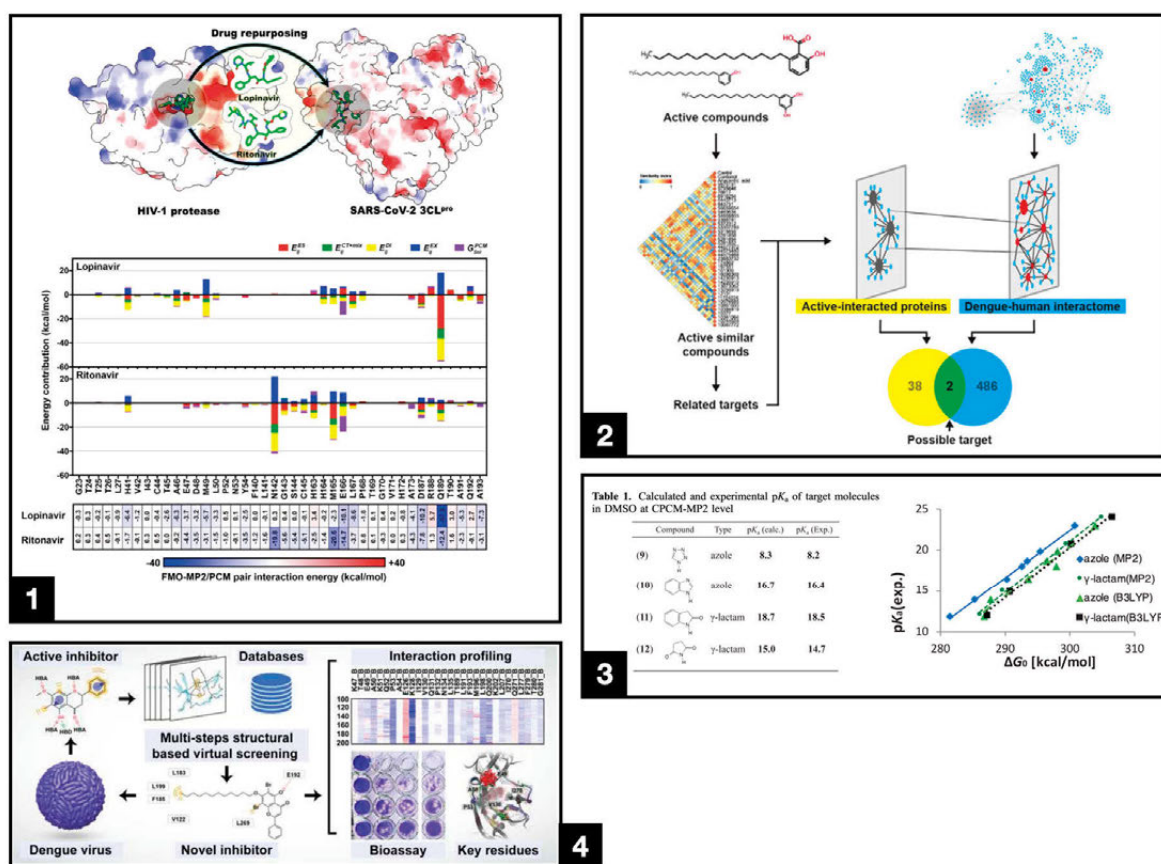


Fig.5. The overview of this study. (1) FMO study of lopinavir and ritonavir on SARS-CoV2 3CL pro, (2) Dengue viral target identification of phenolic lipids, (3) the estimation of acid dissociation ( $pK_a$ ), and (4) the study of multiple virtual screening strategies.

He theoretically estimated  $pK_a$  of N-containing heterocycles in DMSO by a quantum chemistry method with a polarizable continuum model, which was previously developed for estimating  $pK_a$  of molecules in water. Furthermore, he also calculated the permeability of middle-sized drugs through lipid

bilayer using steered MD and umbrella sampling method. Also, his research focuses on structural modeling for biological systems, for example, to evaluate the rotation of the transient receptor potential cation channels (TRP channels) and model the 3D structure of CDK-related protein. Recently, the fragment molecular orbital (FMO) method has been implemented in my latest article in order to carry out the binding pattern and energy contribution of the anti-HIV drugs on SARS-CoV2 main protease which is the cause of COVID-19.

#### 【8】C 型フィコシアニン色素励起状態構造変化の解明（三嶋、庄司）

C 型フィコシアニン色素分子は、光合成初期過程である、光捕集・光エネルギー移動・電気エネルギーへの変換において重要な役割を担っている。特に、光を吸収した際、数十 fs の短時間のうちに、分子の電子状態は、電子基底状態から、電子励起状態へと変化し、その過程の詳細は、後に続く複雑な全光合成過程に対して、大いに影響を及ぼすと考えられる。従って、光合成過程を深く理解するためには、C 型フィコシアニン色素分子の電子励起状態を詳細に研究することが重要である。C 型フィコシアニン色素分子の電子基底状態とその第一電子励起状態については、詳細な実験的・理論的研究がなされているが、第二電子励起状態以上の高電子励起状態についての研究例は非常に少ない。例えば、B. Durbeej [PCCP 2019]は、第二電子励起状態までの分子構造を量子化学計算によって求めた。その結果、電子励起状態において、テトラピロール環鎖炭素原子 C10 を中心とした、分子主鎖ねじれ回転が起こりやすいことを明らかにした。しかし、この研究においては、計算コストを下げるために、テトラピロール環鎖炭素原子 C8、C12 に結合した、二つのプロピオン酸側鎖を無視している。ところが、この二つのプロピオン酸側鎖は、非常に近い位置にあるために、水素結合やファンデルワールス力などの相互作用による影響は、無視できないと思われる。そこで、我々は、Durbeej のモデル(PΦB\*モデル)と、二つのプロピオン酸側鎖を露わに考慮に入れたモデル分子(CYC1 モデル)を構築し、密度汎関数量子化学計算によって、その第五励起状態までの分子構造を各々構造最適化し、二つのプロピオン酸側鎖が及ぼす効果について調べた。第一電子励起状態について、PΦB\*モデルと CYC1 モデルとの、分子構造や、励起エネルギーなどの、物理・化学的物性に大きな差は見られなかった。第二電子励起状態以上の高電子励起状態についての知見を得るために、電子基底状態に対する RMSD(root mean square deviation)を計算した。第二電子励起状態において、PΦB\*モデルでは、2.32 Å、CYC1 モデルでは、1.76 Å であった。PΦB\*モデルでは、この第二電子励起状態が最も大きな分子構造変化を示し、テトラピロール環鎖炭素原子 C4 における分子主鎖ねじれ回転であることがわかった。一方、同様に、CYC1 モデルでも、この第二電子励起状態の分子構造変化は、テトラピロール環鎖炭素原子 C4 における分子主鎖ねじれ回転由来であった。しかし、第三電子励起状態以上の高励起電子励起状態では、PΦB\*モデルと CYC1 モデルとは、異なる挙動を見せた。即ち、PΦB\*モデル



では、第三、四、五励起電子状態の分子構造は、電子基底状態とほぼ同様の分子構造を示した。しかし、CYC1 モデルでは、第三、四励起電子状態の RMSD は、それぞれ、1.80 Å、1.71 Å であり、二つのプロピオン酸側鎖が存在することによる影響が顕著であることがわかった。特に、CYC1 モデルの第四励起電子状態は、二つのプロピオン酸側鎖間の水素結合が顕著に見られた。

### 【9】 星間空間におけるメタノール生成シミュレーション

以前より生体を構成する分子の起源に関して、宇宙空間で生成されたとする説が唱えられている。実際、星間空間ではメタノールやホルムアルデヒド、さらにグリコールアルデヒド(最も単純な糖)などの様々な有機物が観測されている。分子雲では気相中の H、C、N、O のような比較的軽い元素がダスト表面に凍りつき、H<sub>2</sub>O の他に CO、CO<sub>2</sub> などを含む氷を形成する。低温(10–20 K)では、



などの H の付加反応により有機物が生成される。その後、星が形成され、紫外線が照射されると光化学反応により、様々な複雑有機物が生成されたのではないかと考えられている。

本研究では、CO からメタノール(CH<sub>3</sub>OH)が生成される過程を、第一原理計算を用いて求め、モンテカルロシミュレーションで用いるパラメータの精度を上げることを目的とした。反応障壁については二体反応、吸着エネルギーについては CO クラスタ上での反応を第一原理計算で解析した。モンテカルロシミュレーションにおけるダスト表面における Y 分子(= CO/CHO/CH<sub>2</sub>O/CH<sub>2</sub>OH/CH<sub>3</sub>OH)の組成比を図 6 に示した。ダスト表面上の Y 分子の初期値は 0 個とし、ガス中の CO 分子および、H 原子の初期値はそれぞれ  $6 \times 10^5$  個、 $5 \times 10^5$  個とした 1 分子に対する H 付加反応の計算結果より、COH を経由する反応は含まずにシミュレーションを行った。CH<sub>3</sub>O は、CH<sub>2</sub>OH と比較しエネルギー的に安定であるが、反応障壁が高いため、生成されなかった。ダスト表面上で生成された CH<sub>3</sub>OH は CO に対して 18 % の結果が得られ、観測結果の範囲内で一定量の CH<sub>3</sub>OH が生成されることが確認できた。

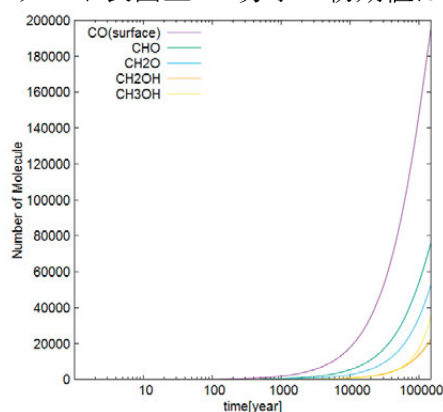


図 6. ダスト表面上での Y 分子の組成比

## 4. 教育

### <卒業研究発表>

奥原千佳、「分子動力学シミュレーションを用いた CRISPR-Cas9 の Off-target 効果に関する理論的研究」

吉岡耕作、「Docking を用いた Protein Arginin Deiminase 4 選択的阻害剤の結合様式」

#### <修士修了研究発表>

新岡侑也、「星間空間における CO 氷表面上での CH<sub>3</sub>OH 生成過程」

石川航平、「酸化型[Ni-Fe]ヒドロゲナーゼの活性中心についての理論的研究」

#### <集中講義>

1. 重田育照、「生物物理学」、4<sup>th</sup> Sep. 2019、秋田大学大学院工学研究科.
2. 原田隆平、「特別講義 9」7<sup>th</sup>Nov. 2019、14<sup>th</sup>Nov.2019、立教大学大学院理学研究科化学専攻.

### 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

#### 受賞

2. 原田隆平、分子シミュレーション学会 2019 年度 学術賞 (受賞日: 2019 年 12 月 10 日)

#### 外部資金

##### (研究代表)

1. 新学術領域研究「ハイドロジェノミクス」、重田育照、「生体ハイドロジェノミクスの理論解析」(H31~R2 年度) 2,400 千円 (R1 年度直接経費: 1,400 千円)
2. 若手研究 (A)、庄司光男、「光化学系 II 酸素発生中心における水分解反応の全反応経路解明」(H29~R1 年度)、全年度直接経費: 19900 千円 (R1 年度直接経費: 1600 千円)
3. 新学術領域研究「光合成分子機構の学理解明と時空間制御による革新的光-物質変換系の創製」、庄司光男、「光化学系 II 酸素発生中心における再活性化機構についての理論的解明」(H30~令和 1 年度)、全年度直接経費: 4000 千円 (R1 年度直接経費: 2000 千円)
4. さきがけ (日本学術振興機構) 庄司光男、「生体内量子多体系における特異的化学反应の機構解明」(R1 年 10 月~ R5 年 3 月)、全年度直接経費: 30,000 千円 (R1 年度直接経費: 26700 千円)
5. 若手研究、堀 優太、「理論計算に基づく酸塩基複合体中のプロトン伝導機構の解明」(R1 年 4 月~R4 年 3 月)、全年度直接経費: 3,200 千円 (R1 年度直接経費: 1,200 千円)

さがけ（日本学術振興機構）、鬼頭（西岡） 宏任、「量子シミュレーション技術による未知の生体電子移動/機能発現の探索」（H29年10月～R3年3月）、全年度直接経費: 25,000 千円 (R1 年度直接経費: 4,300 千円)

#### (分担研究)

1. AMED 次世代治療・診断実現のための創薬基盤技術開発事業・革新的中分子創薬技術の開発・中分子シミュレーション技術の開発、重田育照（研究分担者）「立体構造を基盤とする中分子創薬の合理的設計」 前仲勝実（研究代表者）、（H31～R2 年度）、全年度直接経費: 43,077 千円 (R1 年度直接経費: 13,846 千円)
2. 新学術領域研究(研究領域提案型)「高速分子動画」、庄司光男（研究分担者）、「時分割実験のための多様な反応誘起システムの開発」南後 恵理子（研究代表者）、（R1～5 年度）、全年度直接経費：4500 千円（R1 年度直接経費：4500 千円）
3. 基盤研究(B)、庄司光男（研究分担者）、「酵素活性中心の構造変化とゆらぎにリンクする触媒反応遷移状態の制御機構」岡島 俊英（研究代表者）、（H28～R1 年度）、全年度直接経費：3600 千円（R1 年度直接経費：0 千円）

#### 知的財産権

なし

### 6. 研究業績

#### (1) 研究論文

##### A) 査読付き論文

1. Y. Hori, T. Suetake, Y. Shiota, K. Yoshizawa, Y. Shigeta, T. Ida, M. Mizuno, “Local Hydrogen Bond Structures and Dynamics of Imidazole Molecules in Poly(vinylphosphonic acid)-Imidazole Composite Material: A Molecular Dynamics Study”, *ACS Applied Polymer Materials*, *in press* (2020).
2. T. Takahashi, R. Harada, Y. Shigeta, “Distribution of Counter Ions in Negatively-charged Lipid/Water/Air Interface: Molecular Dynamics Study”, *Chemistry Letters* **49**, 361-363(2020).
3. T. Tian, T. Xu, S. Kirk, I.T. Rongde, S. Manzhos, Y. Shigeta, S. Jenkins, “Intramolecular Mode Coupling of the Isotopomers of Water: A Non-Scalar Charge Density-Derived Perspective”, *Physical Chemistry Chemical Physics* **22**, 2509-2520 (2020).

4. K. Hengphasatporn, K. Plaimas, A. Suratanee, P. Wongsriphisan, J.-M. Yang, Y. Shigeta, W. Chavasiri, S. Boonyasuppayakorn, T. Rungrotmongkol, “Target Identification Using Homopharma and Network-Based Methods for Predicting Compounds Against Dengue Virus-Infected Cells”, *Molecules* **25**(8), 1883 (2020).
5. K. Hengphasatporn, T. Matsui, Y. Shigeta, “Estimation of Acid Dissociation Constants ( $pK_a$ ) of N-Containing Heterocycles in DMSO and Transferability of Gibbs Free Energy in Different Solvent Conditions”, *Chemistry Letters* **49**(3), 307-10 (2020).
6. H. Kitoh-Nishioka, Y. Shigeta, S. Itoh, A. Kimura, “Excitonic Coupling on a Heliobacterial Symmetrical Type-I Reaction Center: Comparison with Photosystem I”, *The Journal of Physical Chemistry B* **124**(2) 389-403 (2020).
7. V. Sladek, R. Harada, Y. Shigeta, “Protein Dynamics and the Folding Degree”, *Journal of Computer Chemistry, Japan*, **60**(3), 1559-1567 (2020).
8. Y. Machida, T. Murakawa, A. Sakai, M. Shoji, Y. Shigeta, H. Hayashi, “Reaction of threonine synthase with the substrate analogue 2-amino-5-phosphonopentanoate: implications into the proton transfer at the active site”, *The Journal of Biochemistry*, **167**(4), 357-364(2020).
9. R. Harada, R. Yoshino, H. Nishizawa, Y. Shigeta, “Temperature-Pressure Shuffling Outlier Flooding Method Enhances the Conformational Sampling of Proteins”, *Journal of Computational Chemistry*, **40**(15), 1530-1537 (2019).
10. R. Harada, R. Yoshino, H. Nishizawa, Y. Shigeta, “Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics Simulation (PaCS-MD) Screens for Protein Complexes Generated by Rigid Docking”, *Journal of Molecular Graphics and Modeling*, **92**, 94-99 (2019).
11. R. Harada, V. Sladek, Y. Shigeta, “Non-targeted Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics Using Time-localised Prediction of Conformational Transitions in Protein Dynamics”, *Journal of Chemical Theory and Computation*, **15**(9), 5144-5153 (2019).
12. R. Harada, Y. Shigeta, “Selection Rules for Outliers in Outlier Flooding Method (OFLOOD) Regulate its Conformational Sampling Efficiency”, *Journal of Chemical Information and Modeling*, **59**(9), 3919-3926 (2019).
13. R. Harada, V. Sladek, Y. Shigeta, “Non-targeted Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics Based on a Non-Redundant Selection Rule for Initial Structures Enhances Conformational Sampling of Proteins”, *Journal of Chemical Information and Modeling*, **59**(12), 5198-5206 (2019).
14. R. Harada, V. Sladek, Y. Shigeta, “Developments of Rare Event Sampling Methods for Proteins”, *Journal of Computer Chemistry, Japan*, **18**(5), 99-201 (2019).

15. K. Miyagawa, H. Isobe, T. Kawakami, M. Shoji, S. Yamanaka, M. Okumura, T. Nakajima, K. Yamaguchi, “Domain-based local pair natural orbital CCSD (T) calculations of fourteen different S2 intermediates for water oxidation in the Kok cycle of OEC of PSII. Re-visit to one LS-two HS model for the S2 state”, *Chemical Physics Letters*, **734**, 136731(2019).
16. K. Miyagawa, T. Kawakami, H. Isobe, M. Shoji, S. Yamanaka, K. Nakatani, M. Okumura, T. Nakajima, K. Yamaguchi, “Domain-based local pair natural orbital CCSD (T) calculations of six different S1 structures of oxygen evolving complex of photosystem II. Proposal of multi-intermediate models for the S1 state”, *Chemical Physics Letters*, **732**, 136660 (2019).
17. K. Miyagawa, T. Kawakami, Y. Suzuki, H. Isobe, M. Shoji, S. Yamanaka, M. Okumura, T. Nakajima, K. Yamaguchi, “Domain-based local pair natural orbital CCSD (T) calculations of strongly correlated electron systems: Examination of dynamic equilibrium models based on multiple intermediates in S1 state of photosystem II”, *Molecular Physics*, 1666171 (2019).
18. K. Yamaguchi, M. Shoji, H. Isobe, K. Miyagawa, K. Nakatani, “Theory of chemical bonds in metalloenzymes XXII: a concerted bond-switching mechanism for the oxygen–oxygen bond formation coupled with one electron transfer for water oxidation in the oxygen-evolving complex of photosystem II”, *Molecular Physics*, **117**, 17, 2320-2354 (2019).
19. M. Shoji, H. Isobe, J.-R. Shen, M. Suga, F. Akita, K. Miyagawa, Y. Shigeta, K. Yamaguchi, “Elucidation of the entire Kok cycle for photosynthetic water oxidation by the large-scale quantum mechanics/molecular mechanics calculations: Comparison with the experimental results by the recent serial femtosecond crystallography”, *Chemical Physics Letters*, **730**, 416-425 (2019).
20. M. Kayanuma, M. Shoji, K. Furuya, K. Kamiya, Y. Aikawa, M. Umemura, Y. Shigeta, “First-Principles Study of the Reaction Mechanism of CHO+ H on Graphene Surface”, *The Journal of Physical Chemistry A*, **123**(26), 5633-5639 (2019).
21. A. Kyan, M. Kayanuma, M. Shoji, Y. Shigeta, “Reaction mechanism of non-enzymatic stereoselective formation of wine lactone”, *Chemical Physics Letters*, **725**, 114-118 (2019).
22. K. Ikeda, Y. Hori, M. H. Mahyuddin, Y. Shiota, A. Staykov, T. Matsumoto, K. Yoshizawa, S. Ogo, “Dual Catalytic Cycle of H<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O Oxidations by a Half-Sandwich Iridium Complex: A Theoretical Study”, *Inorganic Chemistry*, **58**, 117274–7284 (2019).
23. Y. Hori, Y. Shiota, T. Ida, K. Yoshizawa, M. Mizuno, “Local structures and electronic properties of In atoms in In-doped ZnO”, *Thin Solid Films*, **685**, 428–433 (2019).
24. Y. Hori, T. Abe, Y. Shiota, K. Yoshizawa, “Mechanistic Insights into Methane Oxidation by Molecular Oxygen under Photoirradiation: Controlled Radical Chain Reactions”, *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, **92**, 1840–1846 (2019).

25. N. Takumi, Y. Hori, H. Sato, S. Wu, A. Okazawa, N. Kojima, T. Yamamoto, Y. Einaga, S. Hayami, Y. Horie, H. Okajima, A. Sakamoto, Y. Shiota, K. Yoshizawa, O. Sato, “Observation of Proton Transfer Coupled Spin Transition and Trapping of Photoinduced Metastable Proton Transfer State in an Fe(II) Complex”, *Journal of the American Chemical Society*, **141**, 14384–14393 (2019).
26. M. Miyanishi, T. Abe, Y. Hori, Y. Shiota, K. Yoshizawa, “Role of Amino-Acid Residues for Dioxygen Activation in the Second Coordination Sphere of the Dicopper Site of pMMO”, *Inorganic Chemistry*, **58**, 12280–12288 (2019).
27. T. Ida, M. Nishida, Y. Hori, “Revisiting Formic Acid Decomposition by a Graph-Theoretical Approach”, *The Journal of Physical Chemistry A*, **123**, 9579–9586 (2019).
28. H. Kitoh-Nishioka, K. Ando, “Calculation of Charge-Transfer Electronic Coupling with Nonempirically Tuned Range-Separated Density Functional”, *The Journal of Physical Chemistry C*, **123**(18), 11351-11361 (2019).
29. Y. Mitsuta, Y. Sigheta, “Calculation of Free Energy Reaction Network of Alanine Polypeptide by Using Free Energy Reaction Route Mapping Method”, *Journal of Computer Chemistry, Japan*, **18**(5), 221-223 (2019)
30. K. Hengphasatporn, A. P. W. Garon, T. Langer, S. Yasuteru, T. N. Huynh, et al. “Multiple Virtual Screening Strategies for the Discovery of Novel Compounds Active Against Dengue Virus: A Hit Identification Study”, *Scientia Pharmaceutica* **88**(1), 2 (2019).
31. T. Ohto, M. Dodia, J. Xu, S. Imoto, F. Tang, F. Zysk, T. D. Kühne, Y. Shigeta, M. Bonn, X. Wu, Y. Nagata, “Accessing the Accuracy of Density Functional Theory through Structure and Dynamics of the Water–Air Interface”, *The Journal of Physical Chemistry Letters* **10**(17), 4914-4919(2019).
32. Y. Imai, T. Yamamoto, A. Sekimoto, Y. Okano, R. Sato, Y. Shigeta, “Numerical investigation of the nano-scale solutal Marangoni convections”, *Journal of Taiwan Institute of Chemical Engineers* **98**, 20-26 (2019).
33. G. Hirata, Y. Kobayashi, N. Yasuda, H. Maeda, “Pyrrole-Based  $\pi$ -System–Pt(II) Complexes: Structures, Photophysical Properties, and Excited-State Dynamics”, *Chemistry - A European Journal* **25**, 1-9(2019).
34. K. Sakamoto, M. Kayanuma, Y. Inagaki, T. Hashimoto, Y. Shigeta, “*In silico* structural analysis of Elongation factor-1  $\alpha$  and Elongation factor-like proteins”, *ACS Omega* **4**, 7308-7316 (2019).

35. T. Xu, J. Li, M. Hui, H. Roya, W.J. Huang, S. Kirk, Y. Shigeta, S. Jenkins, “Chirality-Helicity Equivalence in the S and R Stereoisomers: A Theoretical Insight”, *Journal of the American Chemical Society*, **141**, 5497-5503 (2019).

## B) 査読無し論文

なし

## (2) 国際会議発表

### A) 招待講演

1. Y. Shigeta, "Computational Studies on Octanol/water Partition Coefficient of Organic Molecules", *7th International Conference on Chemical and Biological Sciences*, National University of Singapore, March 6<sup>th</sup>-8<sup>th</sup> 2020, Singapore.
2. Y. Shigeta, "Theoretical Investigation on Photofunctional  $\pi$ -electron Materials",  $\pi$ -system figuration European-Japanese workshop 2019 ( $\pi$ -EJ 2019, Nov. 12<sup>th</sup>-15<sup>th</sup> 2019, Zabrze, Poland.
3. Y. Shigeta, “Triplet-Triplet Annihilation Up-conversion Processes of Diphenylanthracenes: Theoretical Study”, *The 30<sup>th</sup> Asian Advanced Materials Congress (AMC)*, Oct. 31<sup>st</sup>-Nov. 4<sup>th</sup> 2019, Singapore.
4. Y. Shigeta, “Theoretical Studies on Membrane Permeability of Middle-sized Molecular Drugs using Implicit Membrane Models”, *5<sup>th</sup> Japan-Thai workshop on Theoretical and Computational Chemistry 2019*, Oct. 10<sup>th</sup>-12<sup>th</sup> 2019, Yokohama city University, Yokohama, Japan.
5. Y. Shigeta, “Computational studies on triplet-triplet annihilation up-conversion processes”, *The Collaborative Conference on Advanced Materials (CCAM 2019)*, Aug. 26<sup>th</sup>-30<sup>th</sup> 2019, St. Julian, Malta.
6. Y. Shigeta, “Theoretical Studies on Membrane Permeability of Middle-sized Molecular Drugs”, *10<sup>th</sup> The Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10)*, July 23<sup>rd</sup>-26<sup>th</sup>, Hong Kong, China.
7. Y. Shigeta, “Theoretical studies on triplet-triplet annihilation based photon up-conversion in solution and solid”, *2nd Global Forum on Advanced Materials and Technologies for Sustainable Development (GFMAT-2)*, July 21<sup>st</sup>-25<sup>th</sup>, Toronto, Canada.
8. Y. Shigeta, “Theoretical Studies on Reaction Mechanisms of Metalloenzymes: QM/MM analyses”, *23<sup>rd</sup> International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE23)*, June 27<sup>th</sup>-29<sup>th</sup>, Chiang Mai, Thailand.

9. Y. Shigeta, “Theoretical Studies on Photofunctional Materials: Mutual Collaboration with Experiments”, *Thai-Japan Chemistry Symposium*, June 24<sup>th</sup>-26<sup>th</sup>, Chiang Mai, Thailand.
10. M. Shoji, “Water-Splitting Reactions in the Oxygen-Evolving Complex of Photosystem II Revealed by QM/MM calculations”, International Conference on Photocatalysis and Photoenergy 2019, Incheon, Korea, 2019/5/22.
11. M. Shoji, “Spin States and O-O bond formation mechanisms in the Oxygen-Evolving Complex of Photosystem II”, Awaji Island Conference on Electron Spin Science & Technology 2019, Awaji Yumebutai International Conference Center, 2019/6/17.
12. M. Shoji, “Catalytic Reaction Mechanisms Found by using the GLAS Algorithm”, ICPAC 2019, Rose Garden Hotel, Yangon, Myanmar, 2019/8/7.
13. M. Shoji, “Reaction mechanisms of water splitting in Photosystem II revealed by QM/MM calculations”, 11th CCS International Symposium, International Congress Center, Tsukuba, 2019/10/15.

#### B) 一般講演

1. M. Shoji, “Elucidation of the Entire Kok Cycle of the Photosynthetic Water Oxidation Using QM/MM Calculations”, 3rd International Solar Fuels Conference (ISF-3) and International Conference on Artificial Photosynthesis-2019 (ICARP2019), Hiroshima Convention Hall, 2019/11/24.
2. H. Kitoh-Nishioka, “Pathway Analysis of Protein Electron-Transfer Reactions by Using Ab Initio Electronic Structure Calculations”, QuEBS: Quantum Effects in Biological Systems 2019, Mexico, 2019/10/29 (poster).
3. H. Kitoh-Nishioka, “Pathway Analysis of Protein Electron-Transfer Reactions by Using Ab Initio Electronic Structure Calculations”, 3rd QST International Symposium, 2019/12/4 (poster).

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

1. 重田育照、“計算量子生命科学の最前線”、TIA 光・量子計測マネジメント会議、Nov. 7th 2019、産総研、筑波。
2. 重田育照、“データ同化型分子動力学計算法の開発”、膜タンパク質研究会 2019、Oct. 7th 2019、淡路夢舞台国際会議場、兵庫。



3. 重田育照, “第一原理ダイナミクスによる材料の物性・反応解析”, 第 8 回材料系ワークショップ～「富岳」時代の材料系シミュレーションの最前線～, Oct. 18th 2019, 秋葉原 UDX, 東京.
4. 重田育照, “青色受容タンパク質クリプトクロムの多様な機能と磁気感受応答に関する理論的アプローチ”, 「磁気受容タンパク」量子生命科学会第 1 回大会, May 23<sup>rd</sup> 2019, 東京大学, 東京.
5. 原田隆平, “データ駆動型分子動力学シミュレーションに立脚した効率的タンパク質構造サンプリング手法の開発”, 第 408 回 CBI 学会講演会 「分子シミュレーション技術の新たな展望～AI 活用, 高精度力場, データ駆動型シミュレーション」, 東京工業大学, 東京, 2019/7/16.
6. 原田隆平, “*in silico* タンパク質設計を実現する分子シミュレーション手法の構築”, 生物工学会シンポジウム“*in silico* タンパク質設計で加速するタンパク質工学・応用構造生物学”, 岡山大学, 岡山, 2019/9/18.
7. 原田隆平, “生体機能を解明する分子シミュレーション手法の開発と応用”, 筑波大学 プレ戦略研究会「生命から学ぶ」, 筑波大学, つくば, 2019/10/10.
8. 原田隆平, “中分子環状ペプチドの膜透過性を評価する分子シミュレーション手法の開発”, 計算メディカルサイエンス事業部発足キックオフシンポジウム, 筑波大学, つくば, 2019/12/6.
9. 原田隆平, “タンパク質の機能発現に重要なレアイベントを抽出するサンプリング手法の開発 (2019 年度 分子シミュレーション学会 学術賞 受賞講演)”, 第 33 回分子シミュレーション討論会, 名古屋公会堂, 名古屋, 2019/12/10.
10. 庄司光男, “光合成水分解反応の反応機構についての理論的探求”, ミニシンポジウム『生命科学と物質科学の融合による新規エネルギー・物質変換技術の創造をめざして』, 大阪大学基礎工, 2019/5/18.
11. 堀 優太, “水素移動が寄与する物性および反応の理論的解析: プロトン伝導とメタン水酸化反応”, 機能物性セミナー, 東大物性研, 2019/5/22.

## B) その他の発表

1. 庄司光男, 磯部寛, 重田育照, 中嶋隆人, 山口兆, “光化学系 II 酸素発生中心における水分解反応機構についての理論解析”, 第 46 回生体分子科学討論会, 筑波大学大学会館, 2019/6/22 (口頭).
2. 庄司光男, “光合成酸素発生機構の分子メカニズム”, 筑波大プレ戦略研究会「生命から学ぶ」プログラム, 筑波大学自然科学棟 B, 2019/10/10 (口頭).

3. 西澤宏晃, 重田育照, “拘束条件付き DFTB-MD 計算に対するエネルギー保存の検証”, 第 22 回理論化学討論会, 2019/5.
4. 西澤宏晃, 重田育照, “量子化学計算に基づく分子動力学シミュレーションの拘束手法とエネルギー保存の検証”, 第 46 回生体分子科学討論会, 2019/6.
5. 西澤宏晃, 重田育照, “拘束条件を用いた DFTB-MD シミュレーションの高速化とエネルギー保存の評価”, 第 57 回日本生物物理学会年会, 2019/9.
6. 西澤宏晃, 重田育照, “DFTB-MD シミュレーションの拘束条件を用いた効率化とエネルギー保存の検証”, 日本コンピューター化学会 2019 秋季年会, 2019/10.
7. 鬼頭(西岡) 宏任, 重田 育照, 伊藤 繁, 木村 明洋, “ヘリオバクテリア I 型反応中心の理論モデル II : 量子化学計算によるモデルの拡張と進化への応用”, 第 10 回日本光合成学会年会, 2019/5/26 (ポスター).
8. 鬼頭(西岡) 宏任, 重田 育照, 伊藤 繁, 木村 明洋, “ヘリオバクテリア反応中心の励起子相互作用計算”, 第 22 回理論化学討論会, 2019/5/28 (ポスター).
9. 鬼頭(西岡) 宏任, 安藤 耕司, “蛋白質中電子トンネル移動の第一原理計算”, 第 46 回生体分子科学討論会, 2019/6/22 (口頭).
10. 木村明洋, 浅井智広, 鬼頭(西岡)宏任, 重田育照, 伊藤 繁, “理論が示す構造未開明の緑色硫黄細菌 I 型反応中心の分光特性モデル : ヘリオバクテリアおよび PSI 反応中心との進化的関係”, 第 27 回「光合成セミナー2019」, 2019/7/17 (口頭) .
11. 鬼頭(西岡) 宏任, 重田 育照, 伊藤 繁, 木村 明洋, “ヘリオバクテリア I 型反応中心の量子化学計算による理論モデル : RC 進化への応用”, 第 27 回「光合成セミナー2019」, 2019/7/17 (ポスター) .
12. 鬼頭(西岡) 宏任, 大塚 教雄, 重田 育照, “フラグメント分子軌道法を用いた生体内電子移動経路解析” 第 13 回分子科学討論会 2019, 名古屋, 2019/9/20 (口頭).
13. 鬼頭(西岡) 宏任, 重田 育照, 伊藤 繁, 木村 明洋, “ヘリオバクテリア光合成反応中心の励起子結合強度計算”, 第 9 回日本生物物理学会関東支部会, 2020/3/3 (口頭).
14. 鬼頭(西岡) 宏任, 重田 育照, 伊藤 繁, 木村 明洋, “ヘリオバクテリア I 型反応中心の励起子結合と光化学系 I との比較”, 日本物理学会第 75 回年次大会(2020 年), 2020/3/19 (口頭・講演資料公表をもって発表扱い) .
15. 満田 祐樹, 重田 育照, “自由エネルギー反応経路探索法を用いたアラニンペプチドの反応経路ネットワーク解析”, 第 46 回生体分子科学討論会, 2019/6.
16. 満田 祐樹, 重田 育照, “自由エネルギー反応経路探索法を利用した水中ポリペプチドの自由エネルギーネットワーク解析”, 第 13 回分子科学討論会 2019, 名古屋, 2019/9/20.

17. 満田 祐樹, 重田 育照, “自由エネルギー反応経路探索法による水中アラニンペプチドの自由エネルギーネットワーク計算”, 日本コンピュータ化学会 2019 秋季年会.
18. 満田 祐樹, 重田 育照, “自由エネルギー反応経路探索法によるアラニンペプチドのフォールディング探索”, 第 33 回分子シミュレーション討論会, 名古屋公会堂, 名古屋, 2019/12/10.
19. 満田 祐樹, 重田 育照, “Development of the New Method to Calculate Free Energy Reaction Network of High-Dimensional Metadynamics by Using Scaled Hypersphere Search Method”, 第 100 回春季年会.
20. 三嶋謙二, 庄司光男, 重田育照, 「C 型フィコシアニン色素の吸収スペクトルに関する量子化学計算」, 第 46 回生体分子科学討論会, 2018/6/21 ~22 (ポスター) .

#### (4) 著書、解説記事等

1. R. Harada, “Rare Event Sampling of Biomolecules Based on Distributed Computing”, BUTSURI, 75, 28-33 (2020).
2. 原田隆平, “学術賞受賞寄稿「タンパク質の機能発現に重要なレアイベントを抽出するサンプリング手法の開発」”, アンサンブル, 22, 1-6 (2020).
3. 庄司光男, 電子書籍出版, “Gaussian16 で始める量子化学超入門”, Amazon Kindle direct publishing, ASIN: B0824KP51T, 2019/11.
4. 根来誠司, 武尾正弘, 柴田直樹, 樋口芳樹, 加藤太一郎, 重田育照, 「ナイロン分解酵素 NylB の構造進化, 触媒機構とアミド合成への応用」, 「食品・バイオにおける最新の酵素応用」第 13 章, 195-207, シーエムシー出版刊, 2019 年 7 月

#### 7. 異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等

##### 異分野間連携（センター内外）

1. 宇宙生命連携（CAB）
2. 生命部門内連携
3. 計算メディカルサイエンス推進部

##### 産学官連携

1. 宇宙航空研究開発機構（JAXA）宇宙科学研究所との共同研究
2. 量子科学技術開発機構（QST）との共同研究

## 国際連携・国際活動

1. Academia Sinica（台湾）化学研究所、原子分子科学研究所との MOU 締結
2. イリノイ大学化学科との MOU 締結
3. 湖南師範大化学科との MOU 締結

## 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 第 46 回生体分子科学討論会、2019 年 6 月 21 日（金）～22 日（土）
2. JAXA-CCS 研究交流会 2020 年 1 月 21 日（火）

## 9. 管理・運営

重田育照

物理学類学類長、教養教育機構構成員、学群教育会議構成員、研究戦略室員、  
数理物質科学研究科運営委員、数理物質科学研究科人事委員、  
計算科学研究センター運営委員会委員、人事委員会委員、生命科学研究部門長

## 10. 社会貢献・国際貢献

重田育照

量子科学技術研究開発機構(QST) 客員研究員（2019-2021）  
JAXA・宇宙科学研究所(ISAS) 客員教授（2018-2020）  
ポスト K 課題 7 コデザイン WG 主査（2018-2020）  
生物物理学会代議員（2018-2020）  
分子科学会第 6 期運営委員会委員（2018-2020）  
理論化学会幹事（2019-2020）  
大阪大学 大学院基礎工学研究科 招聘教授（2015-）  
第 46 回生体分子科学討論会実行委員長

## 11. その他

## V-2. 分子進化分野

### 1. メンバー

|      |                                       |
|------|---------------------------------------|
| 教授   | 稲垣祐司、橋本哲男（共同研究員、生命環境系）                |
| 特任助教 | 湯山育子（生命環境系）                           |
| 研究員  | 石谷佳之                                  |
| 学生   | 大学院生 5 名（後期課程 0 名、前期課程在学 5 名）、学類生 2 名 |

### 2. 概要

分子進化分野では、真核生物の主要グループ間の系統関係解明に向け、主に 3 つの「柱」を設定し研究を進めている。

#### 新奇真核微生物の系統的位置の検討

真核生物の多様性の大部分は肉眼で認識することが難しい単細胞生物であるため、これまでの研究では真核生物多様性の全体像を十分に把握しているとは言い切れない。そこで自然環境からこれまでに認識されていない新奇真核微生物を単離・培養株化し、100 以上の遺伝子データから構成される大規模分子系統解析によりその系統的位置を確定する。

#### 各種トランスクリプトーム・ゲノム解析

真核生物の主要グループ間の系統関係を分子系統学的に解明するには、大規模遺伝子データが必須である。そこで系統進化的に興味深い生物種を選び、培養とトランスクリプトームおよびゲノムデータの取得を進めている。これら大規模配列データを基に、核ゲノム解析、オルガネラゲノム解析等を行う。

#### 系統解析における方法論研究およびタンパク質立体構造と分子進化を統合した研究

解析する配列データの特徴、使用する解析法・配列進化モデルなどにより系統推定に偏りが生じるが、その偏りは複数遺伝子解析ではより顕著になる。そこで、大規模配列データ解析においてより偏りの少ない推測を目指し、系統解析プログラムの高速化をふくむ各種の方法論的研究を行う。また、タンパク質の進化中で一次配列（アミノ酸配列）の変化パターンは、機能と立体構造の両者に強く影響されると考えられる。そこで立体構造的知見を取り入れ、新たな側面からタンパク質の分子進化を研究する。

### 3. 研究成果

#### 【1】新奇真核微生物の系統的位置の検討

我々はこれまでの大規模分子系統解析により①*Tsukubamonas globosa* および②*Palpitomoans bilix* の系統的位置の解明、③キネトプラスト類内部の系統関係の解明、④フォルニカータ生物群内部の系統関係の解明、⑤*Rigifila ramosa*、コロディクティオン類、マンタモナス類から

構成される“CRuMs クレード”の提案を行った (Kamikawa et al. 2014 *Genome Biol Evol* 6:306-315; Yabuki et al. 2014 *Sci Rep* 4:4641; Yazaki et al. 2016 *Genes Genet Syst* 92:35-42; Leger et al. 2017 *Nat Ecol Evol* 1:0092; Brown et al. 2018 *Genome Biol Evol* 10:427-433)。また、真核微生物 PAP020 株 (H27 年度年次報告書参照) の系統的位置については、この生物の縮退型ミトコンドリアの代謝機能の予測とともにプレプリントとして発表した (Yazaki et al. 2019 *bioRxiv*, <https://www.biorxiv.org/content/10.1101/805762v1>; *Proc Roy Soc B* 誌への再投稿に向けて改訂中)。SRT308 株 (H29 年度年次報告書参照) については、新たに発見された近縁種のデータを追加し投稿論文を執筆することになった (現在追加実験データを取得中)。

今年度の報告では、*Microheliella maris* の系統的位置について最終的な報告を行う。2018 年度までは *M. maris* の系統的位置を確定できなかったが、2019 年度に 338 遺伝子データをアップデートし再解析したところ、本生物がクリプチスタ生物群の基部に位置することが、高い統計的サポートで復元された。また、細胞内共生したペディノ藻を葉緑体化した 3 種の緑色渦鞭毛藻の系統関係を 75 遺伝子データにより詳細に解明することができたので、この解析についても報告する (Sarai et al. 2020 *Proc Nat Acad Sci USA* 117:5364-5375)。

### 338 遺伝子データに基づく *Microheliella maris* の系統的位置の検討

これまで 150 遺伝子程度から構成されるアライメントデータをもちいて真核生物の系統解析をしてきたが、このサイズのデータでは *Microheliella maris* や未記載真核微生物 SRT605 株の系統的位置を解明できないことが判明した。2018 年度にはカナダ Dalhousie 大学 Gordon Lax 博士が作成した 351 遺伝子データ (Lax et al. 2018 *Nature* 564:20-27) の分与を受け、2019 年度はこのアライメントに我々の興味のある生物種からのデータを追加し、大規模系統解析を開始した (338 遺伝子データ ; 合計 98,904 アミノ酸座位)。この解析により *Microheliella maris* の系統的位置に結論を出すことができたので、その概要を報告する。

2018 年度の解析で *M. maris* の系統的位置が不安定な原因と考えられたテロネマ類の配列データをアップデートした後、解析を行った。アップデート後の 338 遺伝子データから復元された最尤系統樹 (図 1) では、Lax らが発表した 351 遺伝子データに基づく解析結果 (Lax et al. 2018 *Nature* 564:20-27) とおおよそ矛盾しない系統関係が復元された。さらにクリプト藻、ゴニオモナス類 (*Hemiarma marina* をふくむ)、カタブレファリス類、*Palpitomonas bilix* から構成されるクリプチスタ生物群が復元され、*M. maris* はその基部から最尤法によるブートストラップ値 99%の支持を受けて分岐した (図 1)。上述の 338 遺伝子データからの解析結果から、*M. maris* について 2 通りの解釈が可能である。まず、*M. maris* はクリプチスタ生物群の初期分岐系統と解釈できる。一方、*M. maris* はクリプチスタ生物群には含まれず、クリプチスタ生物群と姉妹群となる系統であるとも考えられる。これら 2 つの解釈の妥当性について検討するためには、分子系統解析だけではなく *M. maris* と広範なクリプチスタ生物間での細胞

内微細構造の比較解析が必要である。現在、338 遺伝子データに基づく *M. maris* の系統的位  
置に関して、英文論文執筆のために準備を行っている。

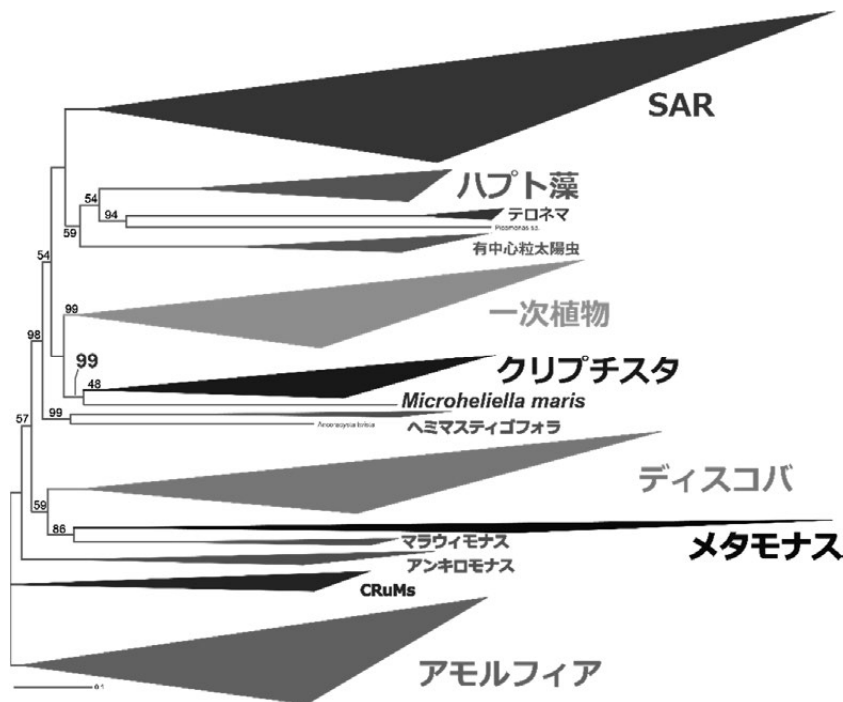


図 1. 338 遺伝子データに基づく最尤系統樹。 *Microheliella maris* はクリプチスタ生物群（クリプト藻、ゴニオモナス類、カタブレファリス類、*Palpitomonas bilix* をふくむ）の基部から分岐した。*M. maris* とクリプチスタ生物群との近縁性は最尤法ブートストラップ値 99%で支持された。

## 75 遺伝子データに基づく緑色色素体（葉緑体）を持つ渦鞭毛藻 3 種の系統関係の検討

大多数の光合成性渦鞭毛藻は紅藻の二次共生によって獲得された色素体（ペリディニン色素体）をもつが、3 種の渦鞭毛藻、*Lepidodinium chlorophorum*、未記載渦鞭毛藻 2 種（MRD-151 株および TRD-132 株）では、祖先型のペリディニン色素体が緑藻に由来するクロロフィル *a* と *b* をふくむ緑色色素体に置換されている（Sarai et al. 2020 *Proc Nat Acad Sci USA* 117:5364-5375）。我々はこれまでに上記 3 種の色素体ゲノム配列を完全に決定し、報告した（Kamikawa et al. 2015 *Genome Biol Evol* 7:1133-1140；H27 年度年次報告書；H28 年度年次報告書）。未発表ではあるが色素体コードの 51 遺伝子に基づく最尤系統解析では、上記渦鞭毛藻 3 種の緑色色素体の起源はペディノ藻、とくに *Pedinomonas* 属に極めて近縁であることが明確である（図 2 左）。しかし渦鞭毛藻 3 種の（細胞内微細構造をふくむ）細胞形態は互いに大きく異なる。もし形態情報をもとに宿主系統が互いに近縁でないと仮定するとペディノ藻の細胞内共生と色素体化が独立に起きたと考えざるを得ないが、リボソーム rRNA 遺伝子配列による系統解析では緑色渦鞭毛藻 3 種間の系統関係について結論を出すことができなかった。そこで核ゲノムコードの 75 遺伝子から構成されるアライメントデータを作成・解析した。その結果、*L. chlorophorum*、MRD-151 株および TRD-132 株の宿主系統は互いに近縁とはならないことが高い統計的サポートで支持された（図 2 右）。従って、渦鞭毛藻進化中で、細胞内共生を経たペディノ藻の色素体化は少なくとも 3 回起きていると考えられる。

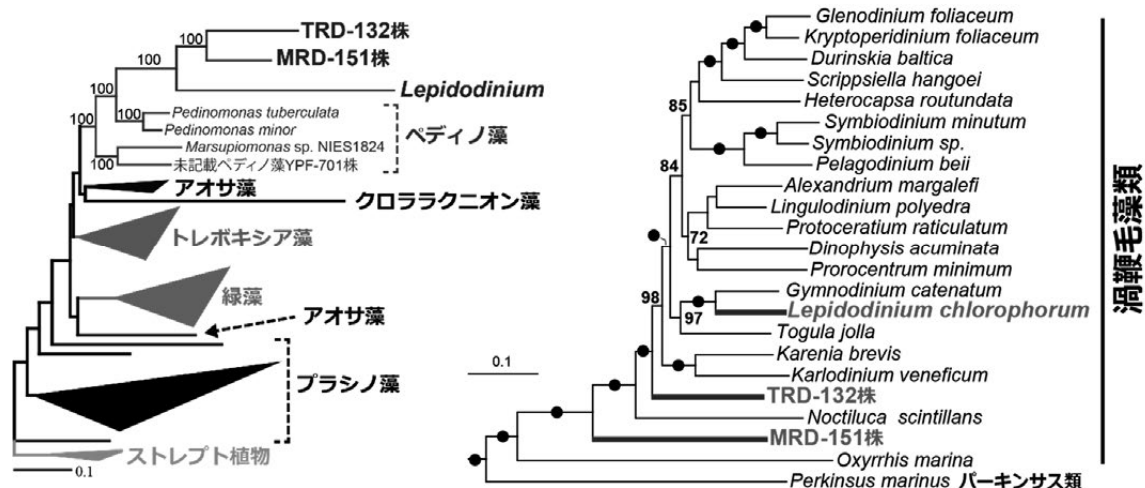


図2. 推測された緑色渦鞭毛藻3種の葉緑体系統（左）と宿主系統（右）。左：色素体コードの51遺伝子に基づく最尤系統樹。渦鞭毛藻 *Lepidodinium chlorophorum*、MRD-132株、TRD-151株は単系統となり、ペディノ藻のなかでも *Pedinomonas* 属に近縁となった。この図では、渦鞭毛藻とペディノ藻クレード以外の部分のブートストラップ値は省略した。右：核ゲノムコードの75遺伝子データに基づく最尤系統樹。渦鞭毛藻3種は単系統とならないことが、高いブートストラップ値で支持されている。枝上の黒丸はブートストラップ値100%を示す。

## 【2】各種トランスクリプトーム・ゲノム解析

### 光合成性真核微生物の色素体ゲノム解析

我々は、これまでに3種の渦鞭毛藻、*Lepidodinium chlorophorum*、未記載渦鞭毛藻2種（MRD-151株およびTRD-132株）の色素体（葉緑体）ゲノム配列を決定した（Kamikawa et al. 2015 *Genome Biol Evol* 7:1133-1140；H27年度年次報告書；H28年度年次報告書）。現在共同研究者（東京大学アジア生物資源環境研究センター・岩滝光儀、高橋和也博士）が主導し、MRD-151株およびTRD-132株の正式な記載論文を執筆中である。両株の記載論文が出版された後、色素体ゲノムに関する論文の執筆に取り掛かる予定である。さらに2018年度からは、「第4の緑色渦鞭毛藻」の色素体ゲノムおよびヌクレオモルフゲノム（共生ペディノ藻の痕跡核）の解読を開始し、現在解析中である。

光合成真核生物の進化上、一旦獲得した光合成能力の2次的欠失が独立に複数回起こっている。この光合成能力の2次的欠失系統では、縮退した非光合成性色素体を保持している。我々は光合成能力の欠失に伴う色素体進化に興味を持ち、非光合成化した珪藻の色素体ゲノム解読を中心に京都大学・神川龍馬博士と共同研究を進めてきた（Kamikawa et al. 2015 *Phycol Res* 63:19-28; Kamikawa et al. 2015 *Mol Biol Evol* 32:2598-2604; Kamikawa et al. 2017 *Mol Biol Evol* 34:2355-2366）。また、珪藻とは系統的に離れたクリプト藻において2次的な非光合成化が独立な複数系統で起こっていることが分かっており、国立科学博物館・谷藤吾朗博士と共同で、非光合成化した複数のクリプト藻の色素体ゲノムの解読を行った。この研究成果は *Genome Biol Evol* 誌に掲載され、その概要を以下に報告する（Tanifuji et al. 2020 *Genome Biol Evol* 12:3926-3937）。



この研究では、非光合成性クリプト藻 2 種 *Cryptomonas* sp. CCAC1634B および SAG977-2f、光合成性の *C. curvata* CCAP979/52 の色素体ゲノムを解読し、これまでに解読された他のクリプト藻色素体ゲノムと比較解析を行った（図 3）。非光合成性色素体ゲノムからは光合成関連遺伝子の大部分は欠失していたが、非光合成種である SAG977-2f 株の色素体ゲノムには少なくとも 10 個の偽遺伝子が検出された。光合成性色素体ゲノム間では遺伝子順序は比較的保存されていたが、ゲノムが縮小した非光合成種の色素体ではゲノム再編成が頻繁に起こったことが判明した。興味深いことに CCAC1634B 株および SAG977-2f 株では、両種とも非光合成性であるにも関わらずクロロフィル *a* 合成に関わる遺伝子が保存されていた。また、先行研究で解読された非光合成種 *C. paramecium* CCAP977/2a の色素体ゲノムにはルビスコとその関連遺伝子が発見されたが、本研究で解読された非光合成性色素体ゲノムのどちらにもルビスコ遺伝子は発見されなかった。本研究により、光合成能力の 2 次的欠失に伴う色素体ゲノム中の遺伝子レパートリーの縮小過程には多様性があることを明らかとなった。

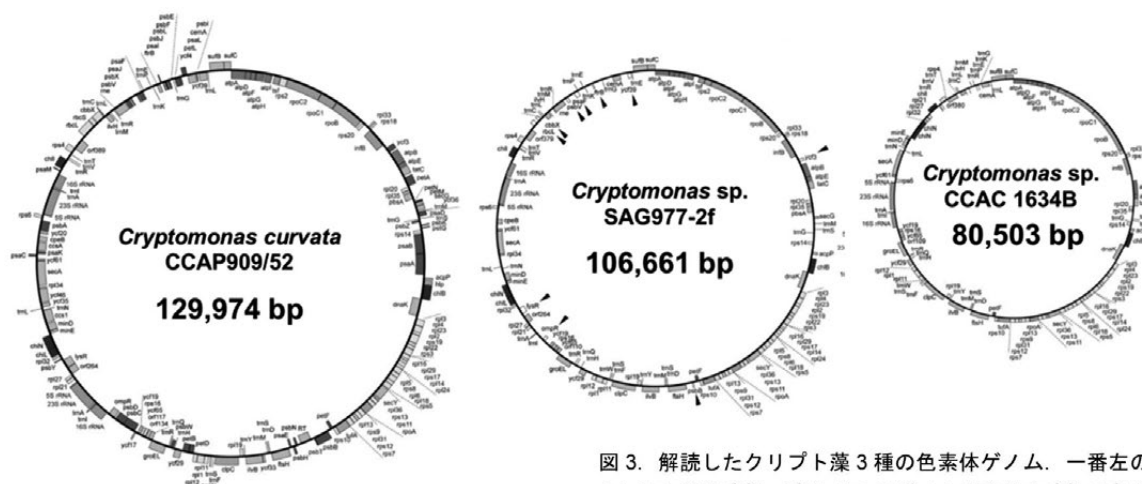


図 3. 解読したクリプト藻 3 種の色素体ゲノム。一番左のゲノムのみ光合成性、残り 2 つのゲノムは非光合成性である。

### ミトコンドリアゲノム解析

我々は、これまで系統的に広範なミトコンドリア (Mt) ゲノムを解読し、真核生物進化における Mt ゲノムの構造、遺伝子組成、可動性イントロンの進化について研究を行ってきた (Masuda et al. 2011 *Harmful Algae* 10:130-137; Nishimura et al. 2012 *PLOS ONE* 7:e37307; Kamikawa et al. 2014 *Genome Biol Evol* 2:306-315; Nishimura et al. 2014 *Mob Genet Elements* 4:e29384; Takeuchi et al. 2015 *PLOS ONE* 10:e000132030; Nishimura et al. 2016 *Genome Biol Evol* 8:3090-3098; Nishimura et al. 2019 *Sci Rep* 9:4850)。H30 年度に報告した通り、我々が解読したクリプチスタ生物群にふくまれる *Hemiarma marina* の Mt ゲノムと、理化学研究所（現東京大学）・西村祐貴博士が解読した同じくクリプチスタ生物群の一系統であるカタブレファリス類に属する *Leucocryptos marina* の Mt ゲノムを合わせて英文論文として *Frontiers in Ecology and Evolution* 誌に投稿した（2020 年 3 月末時点で改訂中、2020 年 4 月 24 日受理）。投稿論文の内容は、H30 年度に報告した通りなので割愛する。

我々はクリプスタ生物群の多様性と進化を解明する 1 つの方策として、本生物群に属する各種生物の Mt ゲノムの解読に取り組んできた (Nishimura et al. 2012 *PLOS ONE* 7:e37307 ; Nishimura et al. 2016 *Genome Biol Evol* 8:3090-3098 ; Nisihimura, Kume et al. *Front Ecol Evol* 2020 8:140) 。興味深いことに、【1】**新奇真核微生物の系統的位置の検討**で報告した通り、*Microheliella maris* はクリプスタ生物群に極めて近縁であると考えられる。そこで 2019 年度には、海洋研究開発機構・矢吹彬憲博士と共同で *M. maris* の Mt ゲノム解読に取り掛かった (現在解析中) 。*M. maris* の Mt ゲノムについては、2020 年度中に 338 遺伝子データ解析で頑健に推測された *M. maris* の系統的位置と合わせて英文論文として投稿する予定である。

次年度以降、以下の真核微生物の Mt ゲノム解読を予定している:①新奇真核微生物 SRT605 株、②SRT312 株 (*Glissandra* sp.)、③SRT706 株、④有孔虫 *Ammonia berccari*、⑤放散虫 (*Didymocystis tetrathulumus* と *Acanthodesmia viniculata*)

### 渦鞭毛藻 *Ornithocercus magnificus* に共生するシアノバクテリアのゲノム解析

真核生物細胞中の酸化的リン酸化をおこなうミトコンドリア、酸素発生型光合成をおこなう色素体 (葉緑体) の起源は、それぞれ細胞内共生した  $\alpha$ -プロテオバクテリアとシアノバクテリアである。真核生物進化の初期段階でこれら 2 種類のオルガネラが確立したことは間違いないが、その成立過程で共生細菌と宿主真核細胞にどのような進化が起きたのか、共生細菌から宿主細胞に支配されるオルガネラへの変化で決定的な要素は何だったのかは解明されていない。現存する真核生物におけるミトコンドリア・色素体はオルガネラとして確立されて長い時間が経過しており、オルガネラ化の初期段階で起きたであろうイベントの痕跡を見つけることが難しい。一方、特定の真核生物では、宿主細胞に依存しているがミトコンドリアや色素体ほど宿主による統合・支配が確立していない細胞内共生細菌をもつ。このような細菌-真核生物共生系の細胞内共生に関する代謝的・遺伝的基盤を解明できれば、その知見を真核生物の初期進化でおきたミトコンドリアや色素体の成立を推測する一助となる。これまで我々は、ロパロディア科珪藻の細胞内に共生する窒素固定シアノバクテリア (楕円体) を細胞内に共生させたロパロディア科珪藻について研究を行ってきた (例えば Nakayama et al. 2014 *Proc Nat Acad Sci USA* 111:11407-11412; Nakayama & Inagaki 2017 *Sci Rep* 7:13075) 。また我々は、最近東北大学・中山卓郎博士と共同で外洋性渦鞭毛藻細胞に共生する細菌類について解析を行ってきた。2019 年度にはこの研究の第 1 報を *Proc Nat Acad Sci USA* 誌に発表することができたので、以下にその概要を報告する (Nakayama et al. 2019 *Proc Nat Acad Sci USA* 116:15973-15978) 。

一般にシアノバクテリアは海洋環境における一次生産者として重要な生物であり、これまで自由生活性種を中心にその生態、多様性、進化が盛んに研究されてきた。さらに近年、海洋微生物と細菌の共生の重要性、特に真核微生物と共生関係にあるシアノバクテリアについての知見が蓄積しており、海洋生態系における共生シアノバクテリアの重要性が認識されつ

つある。しかし現在のところ、海洋環境における共生シアノバクテリアの詳細についての理解は十分とは言えない。本研究では、貧栄養海域に生息する渦鞭毛藻 *Ornithocercus magnificus* の細胞外構造中に共生するシアノバクテリア (OmCya) のゲノムを決定した。ゲノム配列の基盤とした系統解析では、OmCya はこれまでの自由生活性シアノバクテリアを中心とした研究では認識されていない独自の系統であり、これまで海洋生態系に重要な役割を占めると考えられている海産シアノバクテリア系統と極めて近縁であると推測された。メタゲノム解析では、OmCya は全球的分布を示す一方、宿主渦鞭毛藻と緊密に共存することが判明した。これらの結果を総合すると、渦鞭毛藻と共生関係をもつ OmCya はこれまで行われたメタゲノム解析では見過ごされていたと考えられる。OmCya と近縁な自由生活性シアノバクテリア間で遺伝子レパートリーを比較したところ、*Prochlorococcus* 属シアノバクテリアと OmCya は同程度のゲノム縮退を示した。*Prochlorococcus* は自由生活性シアノバクテリアのうちで最も縮退したゲノムを持つが、OmCya と *Prochlorococcus* のゲノム縮退は互いに独立に起こったと考えられる。宿主渦鞭毛藻と緊密に共生する OmCya の発見は、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もたらした。それと同時に、本研究の結果は、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示唆する。

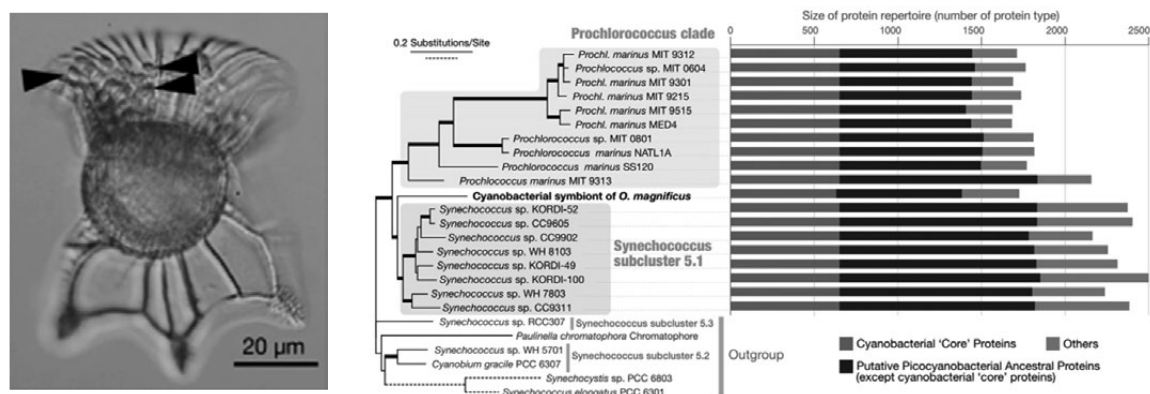


図 4. 左：渦鞭毛藻 *Ornithocercus magnificus* の光学顕微鏡写真。矢頭は共生したシアノバクテリアを示す。中央：41 遺伝子データに基づく海産ピコシアノバクテリアの最尤法系統樹。渦鞭毛藻に共生するシアノバクテリア (OmCyn) は、既知の海産シアノバクテリアと異なる新奇系統である。右：海産ピコシアノバクテリアと OmCyn 間でのタンパク質レパートリーの比較。OmCyn のもつタンパク質レパートリーは他の自由生活性近縁種よりも小さいため、渦鞭毛藻との共生生活中で OmCyn ゲノムは縮退したと考えられる。

上述した *O. magnificus* の近縁種である外洋性渦鞭毛藻 *Histioneis depressa* は、OmCyn とは異なる複数の共生細菌を保持していることが分かった (未発表データ)。現在、我々は *H. depressa* から分離した共生細菌のゲノム配列を解析している。この解析結果については来年度以降に報告する。

### 【3】系統解析における方法論研究およびタンパク質立体構造と分子進化を統合した研究

#### タンパク質立体構造的見地からの CysN- EF-1α 間の近縁性の検証

翻訳伸長因子 EF-Tu と EF-1 $\alpha$  はタンパク質合成に参与する GTP 加水分解酵素であり、すべての生物にとって必須のタンパク質である。細菌類の EF-Tu と古細菌・真核生物の EF-1 $\alpha$  は互いに相同で、1 次構造から 3 次構造レベルで明らかな相同性を持つ。ただし、EF-1 $\alpha$  と EF-Tu の立体構造を詳細に比較すると、EF-1 $\alpha$  の N 末端ドメイン中の 3 番目の  $\alpha$  ヘリックスに相当する 2 次構造が、EF-Tu には存在しない。EF-Tu/EF-1 $\alpha$  はいくつかの代謝系タンパク質の起源となっており、細菌類で硝酸塩と ATP からアデノシン 5'リン酸化硝酸塩を合成する ATP スルフリレースを構成するサブユニット (CysN) はその一例である。興味深いことに CysN を EF-Tu/ EF-1 $\alpha$  とともに分子系統解析を行うと、細菌タンパクである CysN は同じく細菌タンパクである EF-Tu よりも古細菌・真核生物の EF-1 $\alpha$  に近縁となる (Inagaki et al. 2002 *Curr Biol* 12:772-776)。この CysN と EF-1 $\alpha$  間での近縁性が正しいならば、CysN の三次構造中に EF-1 $\alpha$  特異的な  $\alpha$  ヘリックスが存在する可能性が高い。しかし EF-1 $\alpha$  特異的  $\alpha$  ヘリックス相当部分が緑膿菌 CysN 結晶 (PDB 番号 1ZUN ; Mougous et al. 2006 *Mol Cell* 21:109-122) 中の disorder 領域にふくまれたため、その 2 次構造が分からなかった (図 5 左)。

我々は生命科学研究部門生命機能情報分野の原田隆平准教授と共同で、CysN 結晶中の disorder 領域が EF-1 $\alpha$  特異的  $\alpha$  ヘリックスを形成しうるかを確かめるため、水分子中の緑膿菌 CysN タンパクの全原子分子動力学シミュレーションを 2 マイクロ秒間行った。その結果、CysN タンパク結晶の disorder 領域は  $\alpha$  ヘリックスを形成しうると予測できた (図 5)。この結果は、分子系統解析で示唆された CysN と EF-1 $\alpha$  間の近縁性をタンパク質立体構造的見地から補強する結果となった。現在原田准教授を中心に、この結果を英文論文として投稿するために準備を進めている。

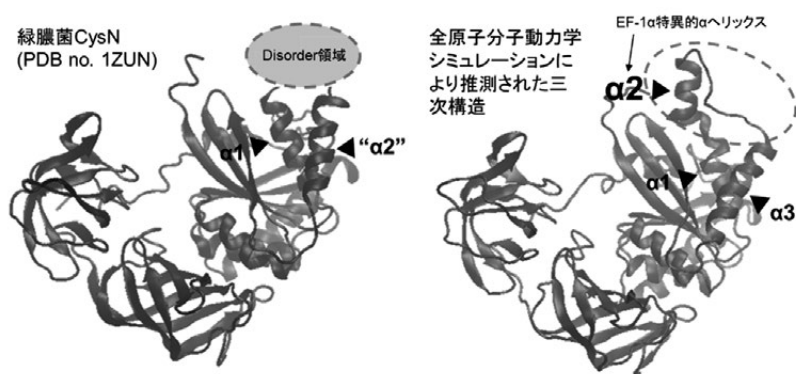


図 5. CysN タンパク質の三次構造 (左) と分子動力学シミュレーションにより推測された三次構造モデル (右)。実験的に決定された緑膿菌 CysN タンパク結晶には disorder 領域が含まれる (左)。分子動力学シミュレーションの結果、この disorder 領域は EF-1 $\alpha$  特異的な  $\alpha$  ヘリックスを持つ可能性が示唆された (右)。

この他、真核生物と古細菌の翻訳終結因子 C 末端ドメインにおける部分的欠失についての構造的・分子進化的見地からの検証を行っている。この研究も生命科学研究部門生命機能情報分野との共同で行っている。

#### 4. 教育

吉永真理, 学士 (理学), 論文名: 真核生物における SMC タンパクファミリーの多様化と二次的喪失

小林祐介, 学士 (理学), 論文名: 嫌気・微好気性鞭毛虫の系統メタモナスにおける解糖系関連酵素の進化

集中講義など

なし

#### 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

##### 受賞

1. 第 52 回日本原生生物学会大会 ベストプレゼンテーションアワード, 原田亮, 2019 年 10 月 26 日

##### 外部資金

(名称、氏名、代表・分担の別、採択年度、金額、課題名)

1. 科学研究費補助金 基盤研究 (B), 稲垣祐司 (代表), 2019-2023 年度, 交付額: 全年度直接経費 13,100 千円 (R1 年度直接経費 2,900 千円), ミトコンドリア DNA ポリメラーゼの多様性と進化の全容解明 (課題番号 19H03280)
2. 科学研究費補助金 国際共同研究加速基金 (国際共同研究強化(B)), 稲垣祐司 (代表), 2018-2023 年度, 交付額: 全年度直接経費 13,700 千円 (R1 年度直接経費 2,900 千円), 海洋原生生物に共生する細菌多様性の実態解明 (課題番号 18KK0203)
3. 科学研究費補助金 基盤研究 (B), 稲垣祐司 (分担) (代表・谷藤吾朗), 2017-2020 年度, 交付額: 全年度直接経費 17,420 千円 (R1 年度直接経費 3,100 千円), 非光合成生物の光適応進化の全容解明 (課題番号 17H03723)
4. 科学研究費補助金 国際共同研究加速基金 (国際共同研究強化(B)), 橋本哲男 (代表), 2019-2022 年度, 交付額: 全年度直接経費 18,330 千円 (R1 年度直接経費 3,300 千円), フォルニカータ生物群におけるミトコンドリア関連オルガネラの機能進化の解明 (課題番号 19KK0185)
5. 科学研究費補助金 基盤研究 (B), 湯山育子 (代表), 2019-2021 年度, 交付額: 全年度直接経費 15,210 千円 (R1 年度直接経費 4,100 千円), サンゴ-褐虫藻共生成立・不成立に関わる遺伝子発現ネットワーク情報の構築 (課題番号 19H03026)

6. 科学研究費補助金 基盤研究 (C), 石谷佳之 (代表), 2018-2020 年度, 交付額: 全年度直接経費 4,420 千円 (R1 年度直接経費 1,000 千円), 大規模分岐年代推定—真核生物の誕生と進化を解き明かす!— (課題番号 18K03820)
7. 科学研究費補助金 基盤研究 (B), 石谷佳之 (分担) (代表・氏家由利香), 2017-2019 年度, 交付額: 全年度直接経費 17,810 千円 (R1 年度直接経費 3,000 千円), 有孔虫における殻形成機構の解明—石灰化のブラックボックスを開く— (課題番号 17H02978)

## 知的財産権

なし

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

1. Sarai C, Tanifuji G, Nakayama T, Kamikawa R, Takahashi K, Miyashita H, Ishida K, Iwataki M, **Inagaki Y**. Dinoflagellates with relic endosymbiont nuclei as models for elucidating organellogenesis. 2020 *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 117:5364-5375
2. Tanifuji G, Kamikawa R, Moore CE, Mills T, Onodera NT, Kashiya Y, Archibald JM, **Inagaki Y**, **Hashimoto T**. Comparative plastid genomics of *Cryptomonas* species reveals fine-scale genomic responses to loss of photosynthesis. 2020 *Genome Biology and Evolution* 12:3926-3937
3. Ciacci C, Grimmelpont MV, Corsi I, Bergami E, Curzi D, Burini D, Bouchet VMP, P. Ambrogini P, Gobbi P, Ujiié Y, **Ishitani Y**, Coccioni R, Bernhard JM, Frontalini F. Nanoparticle-biological interactions in a marine benthic foraminifer. 2019 *Scientific Reports* 19:19441
4. **Yuyama I**, Higuchi T. Differential gene expression in skeletal organic matrix proteins of scleractinian corals associated with mixed aragonite/calcite skeletons under low mMg/Ca conditions. 2019 *PeerJ* 7:e7241
5. Nakayama T, Nomura M, Takano Y, Tanifuji G, Shiba K, Inaba K, **Inagaki Y**, Kawata M. Single-cell genomics unveiled a cryptic cyanobacterial lineage with a worldwide distribution hidden by a dinoflagellate host. 2019 *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 117:5364-5375

6. Arisue N, **Hashimoto T**, Kawai S, Honma H, Kume K, Horii T. Apicoplast phylogeny reveals the position of *Plasmodium vivax* basal to the Asian primate malaria parasite clade. 2019 *Scientific Reports* 9:7274
7. Sakamoto K, Kayanuma M, **Inagaki Y**, **Hashimoto T**, Shigeta Y. *In silico* structural modeling and analysis of elongation factor-1alpha and elongation factor-like protein. 2019 *ACS Omega* 4:7308-7316

## B) 査読無し論文

1. Matsuo M, Katahara A, Tachikawa M, Minakuchi Y, Noguchi H, Toyoda A, Fujiyama A, Suzuki Y, Hata T, Satoh S, Nakayama T, Kamikawa R, Nomura M, **Inagaki Y**, Ishida K, Obokata J. Large DNA virus promoted the endosymbiotic evolution to make a photosynthetic eukaryote. 2019 *bioRxiv* (doi: 10.1101/809541)
2. Yazaki E, Kume K, Shiratori T, Eglit Y, Tanifuji G, Harada R, Simpson AGB, Ishida K, **Hashimoto T**, **Inagaki Y**. Barthelonids represent a deep-branching Matamonad clade with mitochondrion-related organelles generating no ATP. 2019 *bioRxiv* (doi: 10.1101/805762v1)

## (2) 国際会議発表

### A) 招待講演

1. **Yuji Inagaki**. Phylogenomic analyses unveiled multiple endosymbioses of pedinophycean green algae in distantly related dinoflagellates. 2019 CCS-EPCC Workshop, Dec. 2-3, 2019, University of Tsukuba (Tsukuba, Japan)
2. **Yuji Inagaki**. Dinoflagellates as the model for the evolution of eukaryotic cells and genomes. National Taiwan University-University of Tsukuba Bilateral Symposium on Life Science, Sep. 30, 2019, University of Tsukuba (Tsukuba, Japan)

### B) 一般講演

1. Yuki Nishimura, Nagisa Sato, **Yoshiyuki Ishitani**, Takashi Shiratori, Ken-ichiro Ishida, **Tetsuo Hashimoto**, **Yuji Inagaki**, Moriya Ohkuma. Re-exploration of the protein performing plant-type C-to-U RNA editing in diverse eukaryotes. The 14<sup>th</sup> International Colloquium on Endocytobiology and Symbiosis, Sep 1-5, 2018, Universite de Lille (Lille, France)
2. Takuro Nakayama, Mami Nomura, Yoshito Takano, Kogiku Shiba, Kazuo Inaba, Goro Tanifuji, **Yuji Inagaki**, Masakado Kawata. Single-cell genomics unveiled a cryptic cyanobacterial lineage with a worldwide distribution hidden by a dinoflagellate host. CWRU-TOHOKU Joint Work Shop, Aug 5-6, 2019, Case Western Reserve University (Cleveland, USA)

3. Takuro Nakayama, Yoshito Takano, Mami Nomura, Kogiku Shiba, Kazuo Inaba, Goro Tanifuji, **Yuji Inagaki**, Masakado Kawata. Genome analysis of a symbiotic nitrogen-fixing cyanobacterium in a pelagic dinoflagellate, *Histioneis depressa*. VIII European Congress of Protistology, Jul 28-Aug 2, 2019, Crowne Plaza Hotel (Rome, Italy)
4. Euki Yazaki, Tadaaki Uehara, Hirokazu Sakamoto, **Tetsuo Hashimoto**, Noboru Mizushima, **Yuji Inagaki**. Evolutionarily distinct gene-sets for autophagosome formation in dinoflagellates harboring diatom endosymbionts. VIII European Congress of Protistology, Jul 28-Aug 2, 2019, Crowne Plaza Hotel (Rome, Italy)
5. Euki Yazaki, Ayaka Imaizumi, Keitaro Kume, Takashi Shiratori, **Tetsuo Hashimoto**, Akinori Yabuki, Ken-ichiro Ishida, **Yuji Inagaki**. Phylogenomic analysis assessing the position of “orphans” including *Microheliella maris*. VIII European Congress of Protistology, Jul 28-Aug 2, 2019, Crowne Plaza Hotel (Rome, Italy)

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

1. 矢崎裕規, **稲垣祐司**. ゼロから始める大規模分子系統解析. 第 52 回日本原生生物学会大会, Oct 26-27, 2019, 茨城大学水戸キャンパス (水戸市, 茨城県)
2. **湯山育子**. サンゴと褐虫藻の共生関係を褐虫藻の増減からとらえる. 共生起源研究会, Sep 26, 2019, 基礎生物学研究所 (岡崎市, 愛知県)
3. **稲垣祐司**. 新奇真核微生物の探索と細胞内共生に伴う宿主ゲノムの進化: 真核生物初期進化の理解に向けて. KCC セミナー, Aug 26, 2019, 高知大学海洋コア総合研究センター (南国市, 高知県)

#### B) その他の発表

1. 矢吹彬憲, 矢崎裕規, 今泉彩香, 白鳥峻志, 久米慶太郎, **橋本哲男**, **稲垣祐司**. エンドヘレア太陽虫 *Microheliella maris* の系統的位置とミトコンドリアゲノム. 日本藻類学会第 44 回大会, Mar 25-28, 2020, 鹿児島大学郡元キャンパス (鹿児島市, 鹿児島県)
2. 川久保卓志, 松尾恵梨子, 高橋和也, 谷藤吾朗, 岩滝光儀, **稲垣祐司**. 緑色渦鞭毛藻 *Oxytoxum* sp. SG-436 株の共生藻痕跡核のゲノム解析. 日本藻類学会第 44 回大会, Mar 25-28, 2020, 鹿児島大学郡元キャンパス (鹿児島市, 鹿児島県)
3. 原田亮, 中野賢太郎, 矢吹彬憲, 白鳥峻志, Ensoo Kim, **稲垣祐司**. ディスコバ生物群, マラウイモナス類, アンキロモナス類が保持する新奇ミトコンドリア局在 DNA ポリメラーゼ. 日本藻類学会第 44 回大会, Mar 25-28, 2020, 鹿児島大学郡元キャンパス (鹿児島市, 鹿児島県)



4. 石谷佳之, 矢崎裕規, 氏家由利香, 稲垣祐司. 有孔虫の大規模分岐年代推定. 日本古生物学会 2020 年大会, Feb 7-8, 2020, 東京大学駒場キャンパス (目黒区, 東京都)
5. 矢崎裕規, 今泉彩香, 久米慶太郎, 白鳥峻志, 橋本哲男, 矢吹彬憲, 石田健一郎, 稲垣祐司. フィロジェノミック解析により推測された *Microheliella maris* の系統的位置. 第 3 回日本共生学会大会, Nov 19-20, 2019, 理化学研究所横浜キャンパス (横浜市, 神奈川県)
6. 石谷佳之, 久米慶太郎, 稲垣祐司. 有孔虫 *Ammonia beccarii* のミトコンドリアに局在する DNA 分子群. 第 3 回日本共生学会大会, Nov 19-20, 2019, 理化学研究所横浜キャンパス (横浜市, 神奈川県)
7. 中村隆志, 樋口富彦, 宮島利宏, Sylvain Agostini, 湯山育子, 安田直子, 藤村弘行. 光阻害過程とサンゴの白化現象のモデル化. 日本サンゴ礁学会第 22 回大会, Nov 11-13, 2019, 北海道大学 (札幌市, 北海道)
8. 湯山育子, 安田直子, 比嘉彩也香, Sung-Yin Yang, Sylvain Agostini, 樋口富彦, 宮島利宏, 中村隆志, 藤村弘行. サンゴの白化対応策の検討-遺伝子発現レベルでの評価-. 日本サンゴ礁学会第 22 回大会, Nov 11-13, 2019, 北海道大学 (札幌市, 北海道)
9. 神保充, 湯山育子, 山下洋, 鈴木豪, 波利井佐紀, 服田昌之, 新里宙也, 天野春菜, 安元剛. RNAi による *Acropora tenuis* レクチン遺伝子の発現抑制と褐虫藻獲得. 日本サンゴ礁学会第 22 回大会, Nov 11-13, 2019, 北海道大学 (札幌市, 北海道)
10. 樋口富彦, 田中健太郎, 白井厚太郎, 湯山育子, 高畑直人, 佐野有司. NanoSIMS を用いたサンゴ-褐虫藻における硫黄動態の可視化. 日本サンゴ礁学会第 22 回大会, Nov 11-13, 2019, 北海道大学 (札幌市, 北海道)
11. 吉永真理, 稲垣祐司. 真核生物における SMC タンパクファミリーの多様化と二次的喪失. 第 52 回日本原生生物学会大会, Oct 26-27, 2019, 茨城大学水戸キャンパス (水戸市, 茨城県)
12. 原田亮, 平川泰久, 矢吹彬憲, 柏山祐一郎, 丸山萌, 大沼亮, Vlademir Hampl, 谷藤吾朗, 稲垣祐司. ユーグレノゾアにおけるミトコンドリア局在 DNA ポリメラーゼの進化. 第 52 回日本原生生物学会大会, Oct 26-27, 2019, 茨城大学水戸キャンパス (水戸市, 茨城県)
13. 上原忠晃, 栢沼愛, 重田育照, 稲垣祐司. オ翻訳終結因子 C ドメインにみられる部分的欠失の進化とタンパク質機能・構造に与える影響. 第 52 回日本原生生物学会大会, Oct 26-27, 2019, 茨城大学水戸キャンパス (水戸市, 茨城県)
14. 湯山育子, 宇川尚登, 橋本哲男. サンゴに共生する褐虫藻は、サンゴ内でどのように変化するのか. 第 52 回日本原生生物学会大会, Oct 26-27, 2019, 茨城大学水戸キャンパス (水戸市, 茨城県)

15. 矢崎裕規, 坂本寛和, 上原忠晃, 稲垣祐司, 山本林, 水島昇. ATG12-ATG5 における非共有結合非依存化の普遍性について. Sep 18-20, 2019, 第 92 回日本生化学会大会, パンフィコ横浜 (横浜市, 神奈川県)
16. 湯山育子, 宇川尚登, 小林裕介, 橋本哲男. RNA-seq データが示す共生状態への移行に伴う褐虫藻の変化－光合成・アンモニア 利用効率 UP－. 日本微生物生態学会第 33 回大会, Sep 10-13, 2019, 山梨大学甲府キャンパス (甲府市, 山梨県)
17. Sung-Yin Yang, 湯山育子, 安田直子, 比嘉彩也香, 樋口富彦, 藤村弘行, 宮島利宏, 中村隆志, Sylvain, Agostini. Effects of supplementation to increase bleaching resilience on hermatypic coral microbial community. 日本微生物生態学会第 33 回大会, Sep 10-13, 2019, 山梨大学甲府キャンパス (甲府市, 山梨県)
18. 西村祐貴, 佐藤渚, 白鳥峻志, 石田健一郎, 橋本哲男, 稲垣祐司, 大熊盛也. Distribution of plant-type mitochondrial C-to-U RNA editing in diverse eukaryotes. 日本進化学会第 21 回大会, Aug 7-10, 2019, 北海道大学 (札幌市, 北海道)
19. 原田亮, 中野賢太郎, 矢吹彬憲, 稲垣祐司. A novel type of mitochondrion-localized DNA polymerase unites 'orphan eukaryotes' into a new 'super-group'. 日本進化学会第 21 回大会, Aug 7-10, 2019, 北海道大学 (札幌市, 北海道)
20. 西村祐貴, 佐藤渚, 白鳥峻志, 石田健一郎, 橋本哲男, 稲垣祐司, 大熊盛也. 有中心粒太陽虫類におけるミトコンドリアゲノムの比較解析. 日本微生物資源学会第 26 回大会, Jun 27-29, 2019, 山梨大学 (甲府市, 山梨県)
21. 樋口富彦, 湯山育子. Skeletal formation of scleractinian corals in response to Mg/Ca fluctuation. 日本地球惑星科学連合 2019 年大会, May 26-30, 2019, 幕張メッセ (千葉市, 千葉県)

#### (4) 著書、解説記事等

なし

#### 7. 異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等

##### 異分野間連携

1. 筑波大学計算科学研究センター生命科学研究部門生命機能情報分野 (重田育照教授・原田隆平准教授) との共同研究: 立体構造情報と分子進化情報を統合したタンパク質機能進化に関する研究
2. 国立感染症研究所寄生動物部 (永宗喜三郎室長・案浦健主任研究官) との共同研究: ミトコンドリア局在 DNA ポリメラーゼ候補タンパクのアピコンプレクサ寄生虫における細胞内局在解析

## 産学官連携

なし

## 国際連携・国際活動等

1. A. J. Roger 博士および A. G. B. Simpson 博士（ダルハウジー大・カナダ）との共同研究：メタモナス生物群の系統関係と嫌気性ミトコンドリア機能の解析
2. E. Kim 博士（アメリカ自然史博物館・アメリカ合衆国）との共同研究：カタブレファリス類のミトコンドリアゲノム解析，ユーグレノゾア基部から分岐する新奇系統に関する研究
3. M. Eliáš 博士（Ostrava 大学・チェコ共和国）等との共同研究：ヘテロロボサ類の系統関係と嫌気性ミトコンドリア機能の進化
4. C. de Vargas 博士（CNRS／ロスコフ海洋研究所・フランス）との共同研究：海洋原生生物に共生する細菌多様性の実態解明

## 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

なし

## 9. 管理・運営

稲垣祐司：生命環境科学研究科教務委員、生物科学専攻カリキュラム委員、計算科学研究センター運営委員、計算科学研究センター共同研究委員

## 10. 社会貢献・国際貢献

なし

## 11. その他

なし

## VI. 地球環境研究部門

### 1. メンバー

|     |                                              |
|-----|----------------------------------------------|
| 教授  | 日下 博幸（センター勤務）、田中 博（センター勤務）<br>植田 宏昭（学内共同研究員） |
| 助教  | 松枝 未遠（センター勤務）、ドアン グアン ヴアン（センター勤務）            |
| 研究員 | 山上 晃央、西 暁史                                   |
| 学生  | 大学院生 28 名、学類生 5 名                            |

### 2. 概要

地球環境部門における主な活動として、ある地域を対象とした地域規模の気象・気候の研究と地球規模の気象の研究がある。

地域規模の気候の研究は、日下教授のグループが取り組んでいる。令和元年 9 月からは、ドアン助教と西研究員が着任している。プロジェクトとしては、環境省環境研究総合推進費の一環としての「気候変動に伴う都市災害への適応」研究がある。北海道大学、京都大学と共同で、将来の都市気候予測、特にフェーンによる災害レベルの高温予測とその影響評価に関する研究を行っている。研究の結果、新潟市で過去に発生した極端高温の 80%以上が、台風による山越え気流（フェーン）によるものだったこと、21 世紀末の新潟市ではフェーンによって約 45.5℃の異常高温が出現し、熱中症リスクが 16.6 倍になる可能性があることが分かった。このほか、文科省の気候変動適応技術社会実装プログラムなどにも参画している。ここでは、現在および将来の全国都道府県別・市町村別の熱中症リスクマップを作成した。このほかの国内連携として、気象庁気象研究所、農研機構の研究者が代表の科研費に参画している。国際連携としては、すでに協定を結んでいるベトナム国家大学ハノイ自然科学大学やハノイ科学技術大学、さらには、中国気象局都市気候研究所と、アジアのメガシティの都市気候の共同研究を行った。令和元年からは、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と協定を新たに結び、アメリカ大気研究センターとも国際テニユアトラック事業を共同で始めた。これで、アジアと欧米を代表する都市気候研究拠点と共同研究を結んだことになる。このグループのユニークな社会貢献として、筑波山神社と共同で筑波山頂の気象観測所を運営していること、産学連携として、竹中工務店やウエザーニューズなど民間企業と都市街区気象 LES 関係の共同研究がある。CCS 内での連携としては、HPC 部門の朴教授グループとの LES の GPU 化に関する共同研究、建部教授グループとの機械学習に関する共同研究がある。

地球規模の気象研究は、田中教授と松枝助教・山上研究員のグループが取り組んでいる。田中教授のプロジェクトとして、科研費の「ロスビー波の砕波と飽和による地衡風乱流理論の構築」がある。また、基礎研究として「地球温暖化はどこまで自然変動か」の調査をしており、その結果、温暖化の半分は自然変動で、100年後の温暖化は1℃程度であり、温暖化予測はいまだに仮説であるとの見解を示した。国際連携としては、アラスカ大学国際北極圏研究センターと協定を続けており、インドネシア気候・気象・地球物理庁や米国ミズリー大学コンビア校と共同研究を継続している。松枝助教のグループは、準リアルタイム複数モデル・初期値アンサンブルによる顕著現象の予測改善に関する研究を行っており、2週間～2ヶ月先までの予測改善には、ENSOに伴う外力の予測ではなく、中緯度の西風ジェットの予測を正確に表現する必要があることが分かった。また、国際連携としては、筑波大学・ドイツ学術交流会の支援の下、カールスルーエ工科大学と共同で「欧州とアジアにおける天候レジーム」の研究を行っている。国内連携としては、文科省北極研究推進プロジェクトへの参画がある。

### 3. 研究成果

#### 【1】気候変動に伴う都市災害への適応の研究

本プロジェクトの筑波大チームの目標は、新潟市と熊谷市を対象に、将来の暑熱災害を引き起こす気象を予測し、それによる健康影響評価を行い、その適応策を提案することである。

新潟市に暑熱災害をもたらす要因の一つにフェーンがある。フェーンによる極端高温は、ある特定の気圧配置のときに起こりやすく、地球温暖化によって激甚化する可能性がある。本研究では、新潟市における歴代トップ10（および30）の極端高温日を分析し、100%（80%以上）が、北陸地方の西～南西に位置する台風に吹き込むフェーンが原因で発生していたことを明らかにした。

さらに、現在と将来の極端高温日を対象に地域詳細化計算を実施した。その結果、21世紀末までに3℃上昇する場合、新潟平野の日最高気温記録は45.5℃となり、現在よりも4.9℃高くなると予測された（図1-1）。これらは、フェーンが強まることで、極端高温が激甚化することを予見するものである。

このような日の将来の住民の熱中症リスクは、現在の約16.6倍になると予測された。また、この日の熱中症搬送者総数と中等症の搬送者数は、人口が変わらない場合、新潟市でそれぞれ1,180人と361人と見込まれた。これは、新潟消防本部保有の救急車が一台あたり一日で47回の出動を余儀なくされ、現在の新潟医療圏における病床が既に7割が稼働中だとすると、空き病床の22.9%を一日の熱中症入院患者が占めることになる。

解像度が20 kmのd4PDF気候シナリオでは、フェーンに伴う異常高温が表現できなかった。将来の極端高温予測には、本研究のような地域詳細化計算が必要であろう。

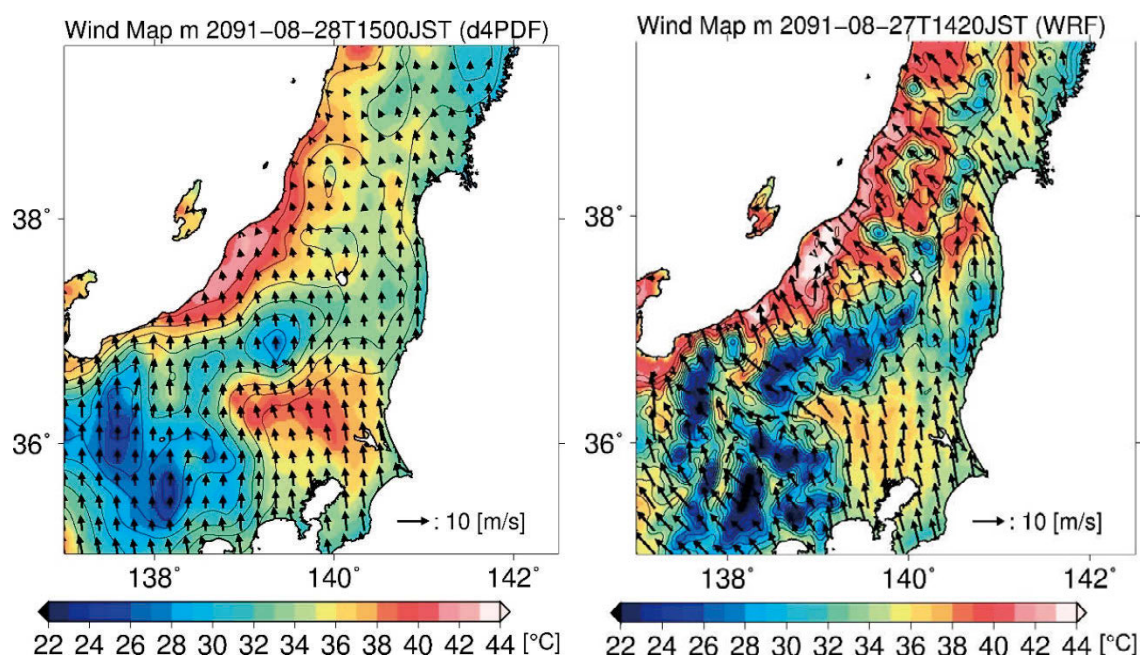


図1：新潟市で将来極端高温が発生した時の気温・風分布。（左）20 km を解像する d4PDF データと（右）それを領域モデルによって 5 km を解像するように計算した結果を用いた結果。色は地上気温（℃）を、矢羽は地上風ベクトル。

## 【2】全国都道府県別・市町村別の熱中症リスク予測の研究

本プロジェクトでは、日本全国都道府県別・市町村別に現在および将来の熱中症リスク評価を行い、リスクマップを作成した。熱中症リスクは、熱中症搬送者数と中等症以上の搬送数によって評価した。

本研究の新規性の一つに、ひと夏を初夏、盛夏、晩夏の3つの期間に分割して、熱中症搬送者数予測モデルを組み立てたことがある。これにより、予測精度は向上した。将来予測の結果、近未来（2031年～2050年）における日本全国の全搬送者数で見たリスク（住民一人ひとりの立場でのリスク）は、気候シナリオに依存するが、SI-CAT 推奨 GCM を用いた場合、RCP2.6 と RCP8.5 シナリオでは、それぞれ 1.3～2.9 倍（平均 2.1 倍）と 1.5～3.3 倍（平均 2.3 倍）に増加すると評価された（図2）。ただし、住民が暑熱順化しながらその行動も含めて暑熱に適応していった場合のリスクを試算したところ、全搬送者数で見たリスクを日本全国の平均値で 2.3 倍から 1.6 倍に抑えられることが分かった。

次に、気温変化から推定されたリスクマップ（住民一人ひとりの立場でのリスク）と気温変化・人口動態変化の両方の情報から推定されたリスクマップ（自治体の立場から見たリスク）を比較した。後者の場合、人口減少がゆるやかな政令指定都市や発展が著しい中規模都市（例えば、茨城県つくば市、守谷市など）でのリスクが相対的に高いことが分かった。

最後に、暑さで有名な埼玉県や岐阜県などを対象に、医療体制に及ぼす影響を調査した。その結果、埼玉県とさいたま市医療圏では、それぞれ、ひと夏に合計 5,515 回と 1,025 回の救急車の出動を余儀なくされ、救急搬送による入院患者数も延べ人 1,984 と 370 人になると評価された。最も暑い日の場合、その一日だけで、救急車一台あたり 6.4 回と 8.3 回の出動、空き病床数の 3.7% (6.1%) を熱中症救急搬送患者が占めると評価された。救急車一台が一回出動する毎に約 6 万円の費用がかかると言われている。自治体の予算の面でも、救急搬送体制の面でも、対策が急務である。(日下)

RCP8.5シナリオの近未来気候下における熱中症リスクマップ  
※現在気候下の値を100%とする

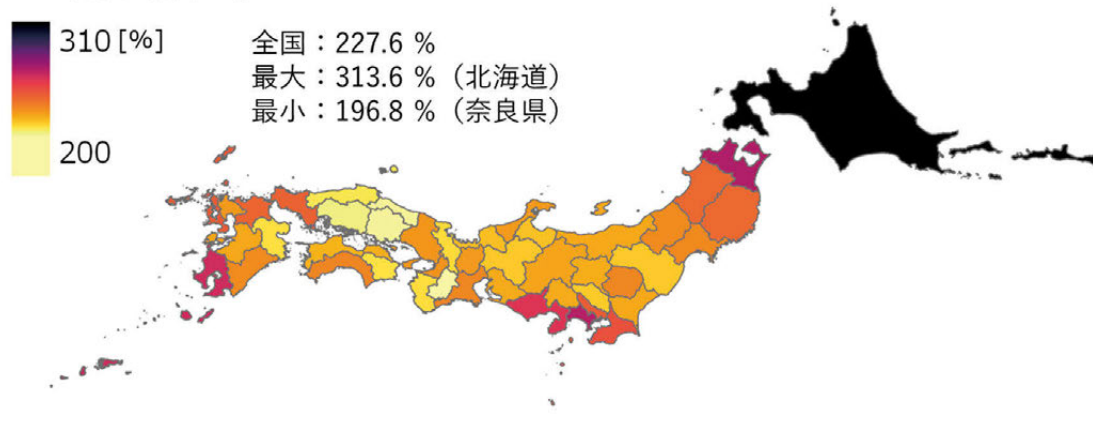


図 2：RCP8.5 シナリオの近未来気候下における全搬送者数の増加率。現在気候下の搬送者数を 100 %としている。搬送者数の値は、GFDL-CM3、HadGEM2-ES、MIROC5、MRI-CGCM3 の 4 種類の GCM から得られた値を平均した。

### 【3】東南アジアの記録的高温の研究

ベトナムの中部および北部において、近年、最高気温記録を更新する猛暑が頻発している。例えば、2016 年 6 月 3～5 日にベトナム北部の首都ハノイにて、40.0℃となる記録的な高温が発生し、2019 年 4 月 20 日にはベトナム中部の都市ビンにて 40.2℃の記録的な高温が発生した。本センターは、ベトナム国家大学自然科学大学およびハノイ科学技術大学との協定に基づき、これらの記録的高温をもたらした要因を調査した。その結果、ハノイの高温に対しては、総観規模の暖気移流の効果とフェーンおよびヒートアイランドという局地的な効果が重なって発生したことが明らかとなった。一方、ビンの高温に対しては、主としてフェーンによって発生していたことが明らかとなった。(日下)

### 【4】都市気象街区 LES モデルの開発に関する研究



ヒートアイランド現象を生み出す要因は複数あり、季節、時刻、地域、都市構造によって、主要因は異なると考えられている。本研究では、これまで開発してきた都市街区気象 LES モデルを用いて、日本最大のエネルギー消費量を誇る新宿副都心とその近くの住宅街を対象に、夜間のヒートアイランド現象の重要な成因と考えられている人工排熱と乱流混合による逆転層の破壊について、定量的に比較調査した。その結果、新宿副都心の高層ビル街では、風の強弱によらず、人工排熱の効果の方がより重要な因子であり、住宅街では人工排熱と乱流混合の効果がおおよそ同程度であることが分かった（図 3）。（日下）

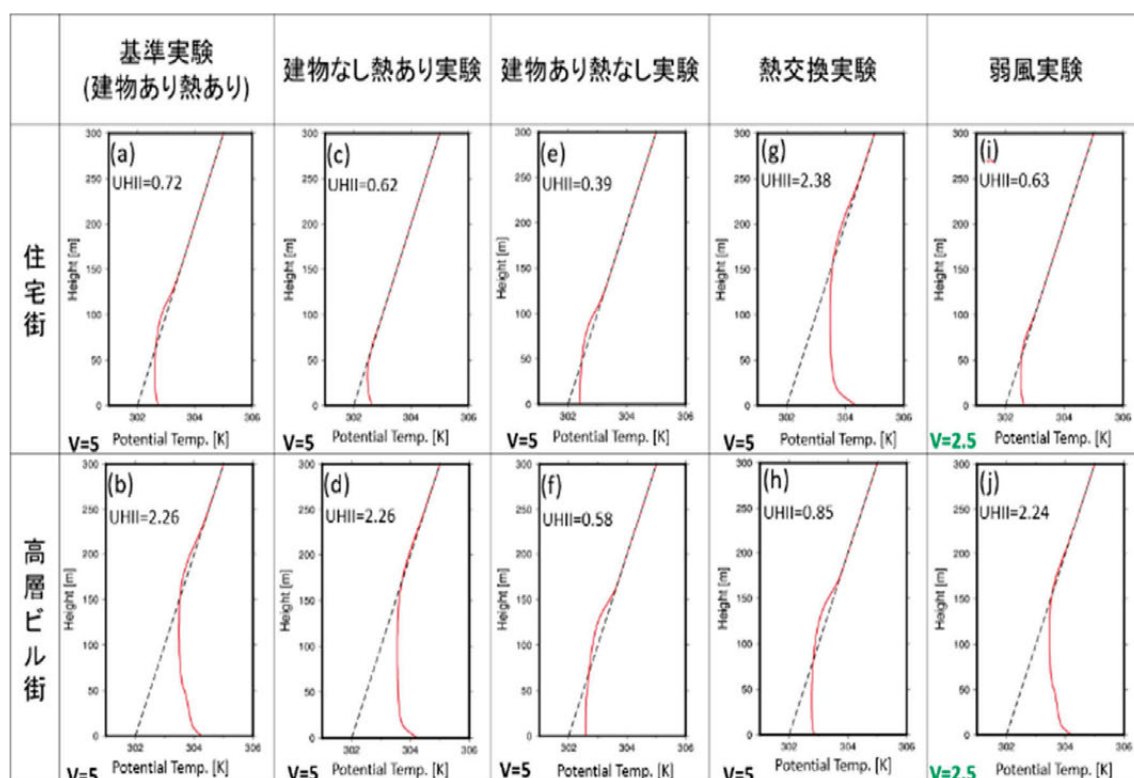


図 3 都市街区気象 LES モデルによって計算された夜間の温位の鉛直分布。上図は、住宅街、下図は高層ビル街の結果。点線は初期値で、赤実線が計算結果。

### 【5】地球温暖化はどこまでが自然変動か

図 4 は欧米の主要な研究機関による気候モデルを過去 1000 年間にわたり走らせた結果の気温変化である(近藤 2003 から引用)。長周期変動を引き起こすメカニズムが組み込まれていない（解っていない）ので、流体の揺らぎとして発生する内部変動（これも自然変動の一部）を除けば、長周期変動は存在せず、トレンドもない。一方、近年観測された温暖化(0.7°C/100 年)は、モデルの自然変動（ここでは内部変動）では説明できない温度上昇となっている。よって、この部分は人為起源の CO<sub>2</sub> の増加によるものである、との考察から、ここだけは人為



起源の外力としてモデルに組み込み、モデルをチューニングすることで観測と一致させているのである。このモデルの結果は、かつてホッケースティックと名付けられた観測結果と同じである。そして、この温度の急勾配を将来に外挿して危機的な将来の地球温暖化が予測されているのである。しかし、このような結果がおかしいことは明らかである。最新の IPCC 第 5 次報告では、西暦 1000 年頃には中世の温暖期があり、1500-1800 年ころには小氷期があったとされ、最近の 200 年間は  $0.5^{\circ}\text{C}/100$  年のリニアートレンドで気温が上昇している。この 1000 年スケールの変動は、人為起源ではなく自然変動であることは確かである。その大振幅の自然変動を気候モデルは再現できないので、図のように真っ平らな気温変化にしかならないのである。もし、この長周期の自然変動の原因が今後解明され、過去 1000 年の大きな変動とともに、近年の  $0.5^{\circ}\text{C}/100$  年のリニアートレンドが自然変動で再現されたとすると、人為起源にその原因を求めた気候モデル予測の根拠は総崩れとなる。温暖化の半分は自然変動ということになり、100 年後の温暖化は高々  $1^{\circ}\text{C}$  程度になる。このように、地球温暖化予測はいまだに仮説であり、検証できないので真実ではない。（田中）

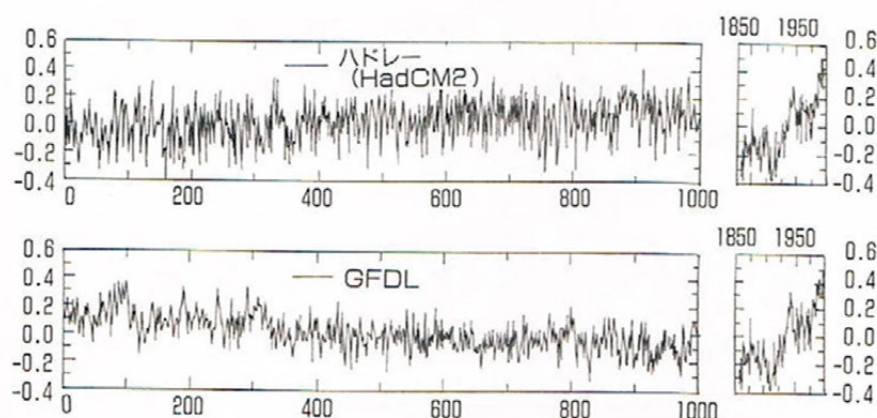


図 4 欧米の主要な研究機関による気候モデルを過去 1000 年間にわたり走らせた結果の気温変化（近藤 2003 より引用）

## 【6】熱圏と対流圏を繋ぐ大気重力波の理論的解析

本研究では、熱圏で生じた大気重力波 (AGWs) が対流圏にどのように伝播するかについて 3 次元ノーマルモード関数 (3-D NMF) 展開を用いて理論的に解析することを目的とする。3 次元 NMF 展開は、観測データを 3 次元 NMF によりスペクトル表記する手法である。球面座標系の線形プリミティブ方程式から、東西風、南北風、ジオポテンシャル高度のそれぞれの摂動についての線形微分方程式を得る。ここから、鉛直・水平方向に変数分離することで、鉛直構造方程式と水平構造方程式を導くことができる。本研究では各方程式の解である鉛直構造関数と水平構造関数を結合させ、従属変数を波数展開し 3 つの変数と温度偏差を求め、下部熱圏の大気で生じた AGWs の下方伝播を理論的に解析した。

図 5 左は中緯度の山岳強制により生じた東西波数 0 の重力波の上方伝播の解析解である。波のエネルギーが群速度により上方伝播する様子が再現されている。図 5 右は、中間圏界面にオーロラオーバルを想定した初期値を与えた際の重力波下方伝播の解析解である。高度場の波の伝播を 24 時間後まで見たところ、線形論の通りの理論的な波を再現できた。地上に腹を持ち、対流圏界面付近に節をもつ定在波が再現された。大気の安定度は温度場が負の値の時に不安定化し、正の値の時に安定化する。これにより、総規模擾乱においては対流圏の安定度を変えるため、低気圧の発達に影響を引き起こす可能性があると考えられる。より高緯度の北緯 70 度から伝播する波も対流圏に到達するが、AGWs の振幅は約数千分から 1 万分の 1 に減少した。熱圏のオーロラによる温度応答は 100K から 1000K であるので、対流圏に到達した際は 0.01 から 1.0K の応答があると考えられる。(田中)

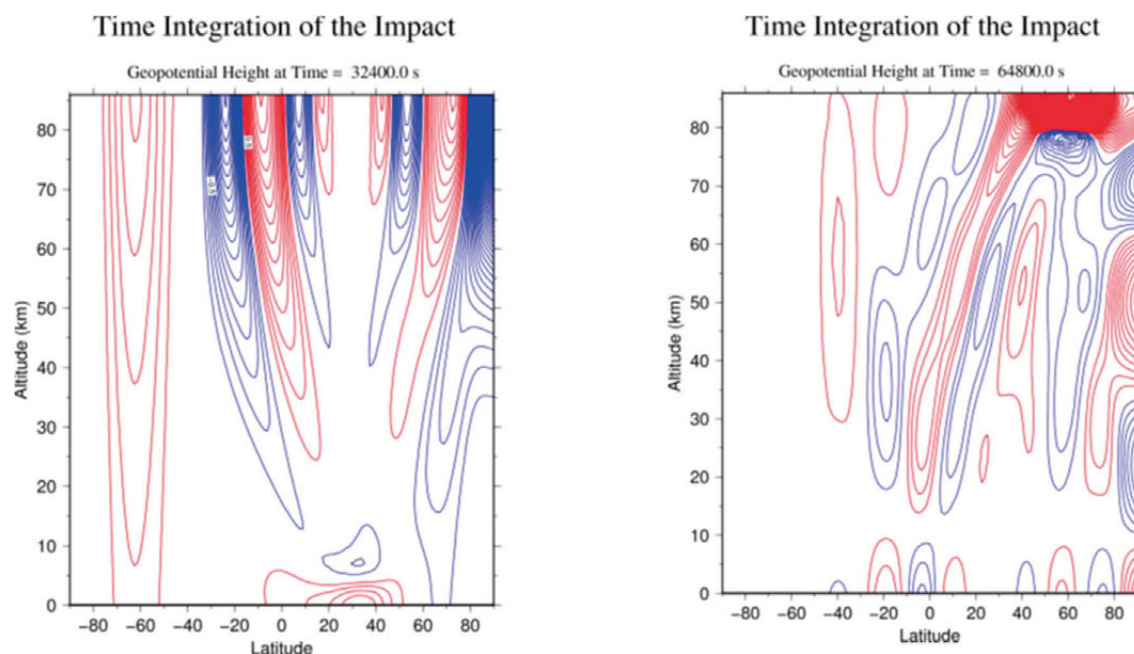


図 5 (左) 中緯度の山岳強制により生じた東西波数 0 の重力波の上方伝播の解析解, (右) 中間圏界面にオーロラオーバルを想定した初期値を与えた際の重力波下方伝播の解析解。

## 【7】 S2S 時間スケールでの予測可能性とテレコネクションとの関係

2 週間から 2 ヶ月程度の時間スケールの数値天気予報は延長(S2S)予報と呼ばれる。S2S 予報は、中期予報 (3 日から 2 週間程度) のように初期状態の影響を受けるには予報時間が長すぎ、季節予報 (3 ヶ月以上) のように海洋などの影響を強く受けるには予報時間が短すぎるため、予測可能性の砂漠と呼ばれている。本研究では、S2S project によりアーカイブされている世界各国の現業数値予報センターのアンサンブル予報データを用いて、北半球における S2S 時間スケールの予測可能性を調査した。その結果、3-4 週間予報におけるスキルが高い領域は、北半球での支配的なテレコネクションパターンである、太平洋-北米パターン (PNA)

および北大西洋振動（NAO）の作用中心と対応していた（図 6）。また、エルニーニョ時には PNA の位相と振幅の 4 週間予測のスキルが、NAO の位相の 3-4 週間予測のスキルが高くなることがわかった。一方、ラニーニャ時には、エルニーニョ時のような顕著な予測スキルの違いは見られなかった。さらに、S2S 時間スケールの予測を改善するには、ENSO に伴う外力の予測ではなく、中緯度の西風ジェットの予測を正確に表現する必要があることが示唆された。本研究の結果は、紋別で行われた第 35 回北方圏国際シンポジウム「オホーツク海と流氷」2020 において口頭発表を行った。（松枝）

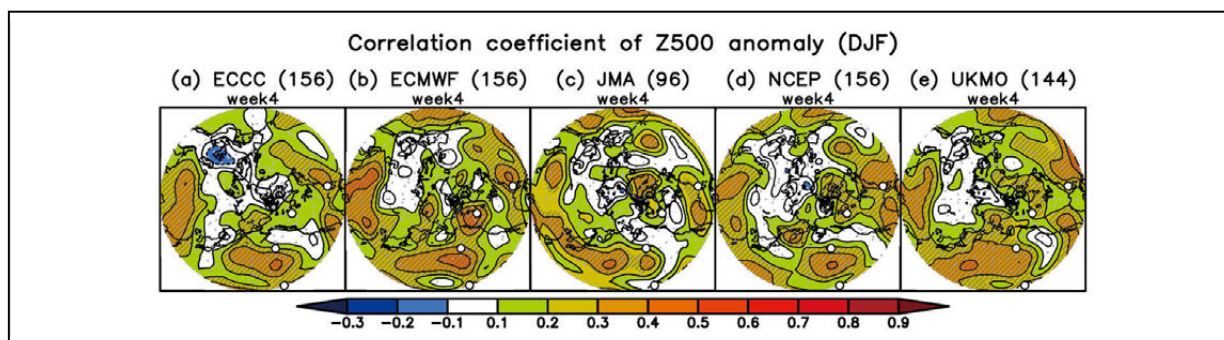


図 6 週間予報のスキル。白い点が PNA の作用中心を示している。

## 【8】欧州とアジアにおける天候レジームの予測可能性

筑波大学・ドイツ学術交流会パートナーシップ・プログラムのもと、カールスルーエ工科大(ドイツ)の Christian Grams 博士の研究グループと相互滞在型の国際共同研究を行った。今年度は、ドイツ側が 1 回、日本側が 2 回、相手国を訪問した。研究テーマは、欧州とアジア域における天候レジーム(しばしば目にする天気パターン)の予測可能性に関する研究で、(1) Grams 博士の開発した年を通してのレジーム検出方法のアジア域への適用、(2) 欧州域天候レジームの季節内スケール(1 ヶ月先まで)における予測可能性の新しい評価方法の確立などに取り組んだ。また、互いの機関でセミナーも行い、プログラムに参加していない研究者とも交流をした。（松枝）

## 【9】北極低気圧の予測における空間解像度依存性

数値予報モデルの予測精度を向上させるもっとも単純な方法としてモデルの高解像度化が考えられる。北極低気圧の予測に対するモデルの水平解像度の依存性を調べるために、ECMWF が研究・教育の用途で公開している簡易版現業予報モデル OpenIFS を用いた予測実験を行った。2008～2018 年における顕著な北極低気圧 13 事例について実験を行った。実験対象の解像度は、T639（赤道上約 32km）、T511（同約 40km）、T319（同約 60km）の 3 種であり、T639 が ECMWF の現業アンサンブル予報で使用されている解像度である。初期値および境界値は ECMWF が提供するデータセット ERA5 の再解析データから作成した。実験の

結果、事例依存性は大きいものの、13 事例を平均すると解像度が高くなるほど予測精度が高く、T639 の予測精度がもっとも高いことがわかった。

事例に関わらず予報期間 4 日までは解像度依存性は小さいが、5 日以降は事例によって大きく差が開く事例とそうでない事例に二分された。3 日程度の予報期間では解像度による違いは明らかでないが、それより長い予報期間では精度の高い予測に数値モデルの高度化が必要であることを示している。予測誤差の空間分布を調べると、解像度が変化しても誤差の分布はほとんど変化しなかった。したがって、北極低気圧は事例ごとに異なる予測しにくい要素があり、それは高解像度化ではほとんど改善されないことが示された。これらの結果より、北極低気圧の予測において、わずかな誤差が非線形的に大きく成長するカオスの影響が比較的小さいことが示唆されている。（松枝）

## 【10】TIGGE Museum および S2S Museum

現業アンサンブル予報表示サイトである、TIGGE Museum（中期（数日～2週間）予報を対象）および S2S Museum（延長（数週間～2ヶ月）予報を対象）の管理・運営を行なった。プロダクトの改良および各数値予報センターの提供するアンサンブル予報データの仕様変更への対応を行なった。（松枝）

## 【11】VLES モデルの開発

数百メートルメッシュで、都市気象・気候を予測できる Very Large Eddy Simulation モデルの開発研究に着手した。CCS の既存の LES をベースに、多層キャノピーモデルを結合するフレームワークをデザインした。今後の開発に必要となるソースコードを整備した。そして、VLES に都市の力学的なバルク効果の導入に着手した。その他、LES の計算効率化のため、ビル形態係数を計算するモジュールの OpenMP 化に取り組んだ。（ドアン）

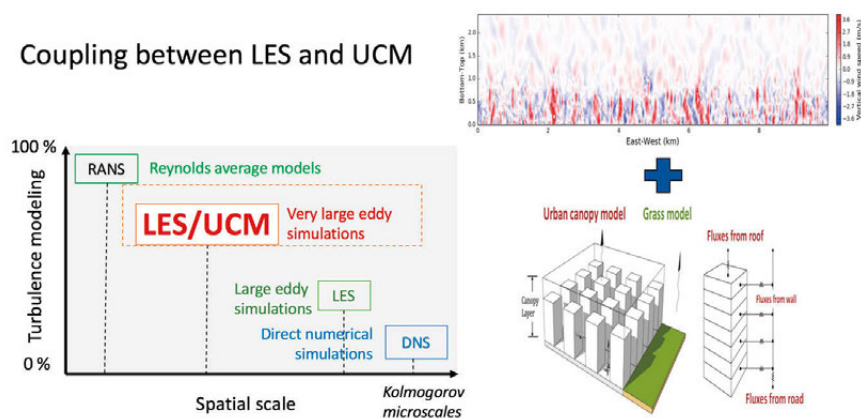


図7 VLES モデルの概要。ビルディングのバルク効果を反映させるため、LES に多層キャノピーモデルを導入する。



## 【12】東南アジアの都市気候の研究

東南アジアの都市気候の研究のための観測データの収集とそれらの解析・分析を行った。熱帯都市における極端降水の数値的研究を行うため、研究対象のシンガポールの WRF 計算領域を設定し、テスト計算を行った。その他、都市化が起因する気候予測の不確実性について、ベトナム・ハノイ市をケーススタディとして、研究を始めた。複数の将来都市化シナリオを用いて、高解像度 WRF モデルで、将来都市気候を予測した。急成長都市を対象にした都市化シナリオによる気候予測の不確実性について世界で初めて定量的に評価した。(ドアン)

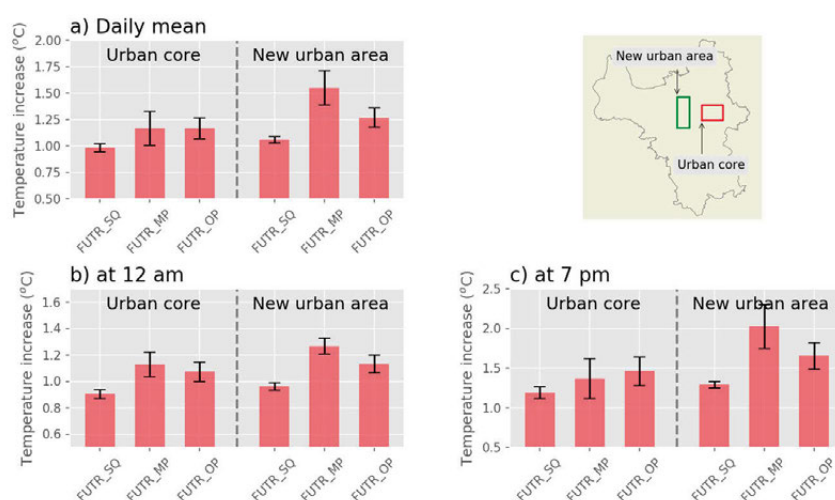


図8 将来都市シナリオ(FUTR\_SQ, FUTR\_MP, FUTR\_OP)の違いによる将来気温予測の不確実性 (ベトナム・ハノイ市の場合)。

## 4. 教育

指導学生 (日下)

D3 (地球) : 加藤隆之、今井優真

D2 (地球) : 浅野裕樹、佐藤拓人、佐藤亮吾

D1 (地球) : 中村真悟、畔上泰彦

M2 (地球) : 根岸もも子、前田知夏、前畑美瑠、永田彩、小林大樹、本橋洋介

M1 (地球) : 池田貴史、五木田夏実、大津佑介

M1 (教育) : 石田理沙

B4 (地球) : 小迫茉里香、小野寺平、小林峻

指導学生 (田中)

M2 (地球) : 栗花卓也、伊藤一輝、松信匠、岡崎晴菜、萩原美沙子、原淑貴

M1 (地球) : 縄司瑛太、豊岡大地、石山涼太、伊藤峻、熊谷怜皇

指導学生（松枝）

B4（地球）：毛利亮、大貫航太郎

## 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

### 受賞

1. ベストポスター賞、佐藤亮吾、佐藤拓人、日下博幸、清水麻美、荒木貴光、地域性と季節性を考慮した熱中症救急搬送者数予測手法の開発、2019年9月22日（日下）

### 外部資金

1. 環境研究総合推進費、日下博幸、分担、2019～2021年度、全年度直接経費：30,000,000円（2019年度直接経費：10,000,000円）、気候変動に伴う都市災害への適応（日下）
2. 気候変動適応技術社会実装プログラム（SI-CAT）、日下博幸、分担、2015～2019年度、全年度直接経費：17,997,838円：（2019年度直接経費：2,796,928円）、気候変動の影響評価等技術の開発に関する研究（日下）
3. 地域適応コンソーシアム事業、日下博幸、分担、2017～2019年度、全年度直接経費：8,041,768円（2019年度直接経費：3,918,326円）、関東地域事業委託業務（日下）
4. 独立行政法人日本学術振興会科学研究費補助金、日下博幸、分担、2019～2022年度、全年度直接経費：未定（2019年度直接経費：500,000円）、基盤研究(A)統合粒子モデル開発による水物質を介した気象変化と環境汚染の相乗効果の解明（日下）
5. 独立行政法人日本学術振興会科学研究費補助金、日下博幸、分担、2019～2022年度、全年度直接経費：未定（2019年度直接経費：1,000,000円）、基盤研究(B)領域気象モデルを活用した農地動態の広域熱環境への影響評価（日下）
6. 独立行政法人日本学術振興会科学研究費補助金、日下博幸、分担、2018～2020年度、全年度直接経費：1,700,000円（2019年度直接経費：350,000円）、基盤研究(B)発展途上諸国の急成長都市群におけるヒートアイランド現象の形成要因と将来予測（日下）
7. 独立行政法人日本学術振興会科学研究費補助金、日下博幸、分担、2017～2019年度、全年度直接経費：990,000円（2019年度直接経費：220,000円）、基盤研究(B)都市大気環境におけるトレードオフの推計と機構解明（日下）
8. 共同研究(株式会社ウェザーニューズ)、日下博幸、代表、2017～2020年8月、全年度直接経費：995,520円（全期間で左記の直接経費）、（日下）
9. 共同研究(株式会社竹中工務店)、日下博幸、代表、2017～2020年度、全年度直接経費：3,133,200円（2019年度直接経費：1,000,000円）、（日下）

10. 独立行政法人日本学術振興会科学研究費補助金、田中博、代表、2017～2019 年度、全年度直接経費 3,400,000 円（R1 年度直接経費：900,000 円）、基盤研究（C）ロスビー波の砕波と飽和による地衡風乱流理論の構築（田中）
11. 文部科学省・北極域研究推進プロジェクト(ArCS)、松枝未遠、分担、2015～2019 年度、全年度直接経費：23,290,000 円（R1 年度直接経費：4,050,000 円）、気象・海氷・波浪予測研究と北極航路支援情報の統合（松枝）
12. 日本学術振興会・学術研究助成基金助成金（研究活動スタート支援）、山上晃央、代表、2019～2020 年度、全年度直接経費：2,100,000 円（R1 年度直接経費：1,100,000 円）、北極大気の予測精度向上に関する研究（山上）

## 知的財産権

特になし

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

1. Koyanagi, T., H. Kusaka, 2020: A climatological study of the strongest local winds of Japan “Inami-kaze”. International Journal of Climatology, 40, 1007-1021.
2. Nishi, A., H. Kusaka, 2019: The “Karakkaze” Local Wind as a Convexity Wind: A Case Study using Dual-Sonde Observations and Numerical Simulations. SOLA, 15, 160-165.
3. 日下博幸, 猪狩浩介, 小久保礼子, 佐藤拓人, ドアングアンヴァン, 2019: 土地利用と人間活動が都市中心部の気温と暑さ指数の分布特性に及ぼす影響. E-Journal GEO, 14(1), 180-196.
4. Nishi, A., H. Kusaka, 2019: A Climatological Study of the Local “Karakkaze” Wind, with a Focus on Temperature Change. SOLA, 15, 149-153.
5. Doan, Q. V., V. N. Dinh, H. Kusaka, T. Cong, A. Khan, D. V. Toan, N. D. Duc, 2019: Usability and Challenges of Offshore Wind Energy in Vietnam Revealed by the Regional Climate Model Simulation. SOLA, 15, 113-118.
6. Nishi, A., H. Kusaka, L. L. Vitanova, Y. Imai, 2019: Contributions of Foehn and Urban Heat Island to the Extreme High-Temperature Event in Niigata City during the Night of 23–24 August 2018. SOLA, 15, 132-136.

7. Tanaka, H.L., and M. Iguchi 2019: Numerical simulations of volcanic ash plume dispersal for Sakura-jima using real-time emission rate estimation, Journal of Disaster Research, 14, No.1, 160-172, 2019.
8. Matsunobu, T. and H.L. Tanaka 2019: Time series analysis of normal mode energetics for Rossby wave breaking and saturation using a simple barotropic model. Atmos. Sci. Let. DOI:10.1002/asl.940.
9. Yamagami, A., M. Matsueda, and H. L. Tanaka 2019: Skill of summertime extraordinary Arctic cyclones in a medium-range reforecast. Polar Science, doi:10.1016/j.polar.2019.02.003.
10. Subramanian, A., M. A. Balmaseda, R. Chattopadhyay, L. R. Centurioni, B. D. Cornuelle, C. DeMott, T. Hamill, H. Hendon, I. Hoteit, M. Flatau, Y. Fujii, S. T. Gille, A. Kumar, J. -H. Lee, D. Lucas, M. Matsueda, A. Mahadevan, S. H. Nam, S. Paturi, S. G. Penny, A. Rydbeck, R. Sun, A. Tandon, Y. Takaya, R. E. Todd, F. Vitart, D. Yuan and C. Zhang, 2019: Ocean observations to improve our understanding, modeling, and forecasting of subseasonal-to-seasonal variability. Front. Mar. Sci., doi:10.3389/fmars.2019.00427
11. Strommen, K., I. Mavilia, S. Corti, M. Matsueda, P. Davini, J. von Hardenberg, P. L. Vidale, and R. Mizuta, 2019: The Sensitivity of Euro-Atlantic Regimes to Model Horizontal Resolution. Geophys. Res. Lett., 46, 7810-7818. doi:10.1029/2019GL082843.
12. Matsunobu, T. and M. Matsueda, 2019: Assessing the predictability of heavy rainfall events in Japan in early July 2018 on medium-range timescales. SOLA, 15A, 19-24. doi:10.2151/sola.15A-004.
13. Vu, D.Q., Q. V. Doan, V. N. Dinh, D. D. Nguyen, 2020: Evaluation of resource spatial-temporal variation, dataset validity, infrastructures and zones for Vietnam offshore wind energy. Vietnam Journal of Science, Technology and Engineering, 62 (1), doi:10.31276/VJSTE.62(1).03-16
14. Doan, Q.V., H. Kusaka, M. T. Nguyen, 2019: Roles of past, present, and future urbanization on urban heat island effects in Hanoi, Vietnam: Numerical experiments with a regional climate model. Sustainable Cities and Society 47, 1-9.

## B) 査読無し論文

特になし

## (2) 国際会議発表

### A) 招待講演



1. 目下博幸: 2019. How to project future climate by dynamical downscaling method? Climate Change Downscaler Training Workshop(招待講演) Khlong Luang, Thailand. 2019/06/03.
2. Matsueda, M., 2019: Flow-dependent predictability of wintertime Euro-Atlantic weather regimes in medium-range forecasts. Workshop on predictability, dynamics and applications research using the TIGGE and S2S ensembles. 2 – 5 April 2019, Reading, UK.

## B) 一般講演

1. Sato, T., O. Tatebe, H. Kusaka 2019: In-situ Data Analysis System for High Resolution Meteorological Large Eddy Simulation Model. 6th IEEE/ACM International Conference on Big Data Computing, Applications and Technologies (BDCAT'19),155-158,2019/12/05.
2. Sato, R., H. Kusaka, 2019: Climatological study of channeling flow focused on surface geostrophic wind. The 35th International Conference on Alpine Meteorology (ICAM) , Riva del Garda/Italy. 2019/09/02
3. Asano, Y.,H. Kusaka, 2019: Dynamical effect of topography of Aso caldera on “Matsubori-kaze” . The 35th International Conference on Alpine Meteorology (ICAM) , Riva del Garda/Italy. 2019/09/02
4. Nishi, A., H. Kusaka, L. L. Vitanova, Y. Imai, 2019: Contributions of Foehn winds and Urban Heat Island to the nocturnal Extreme High-Temperature Event in Niigata City, Japan. The 35th International Conference on Alpine Meteorology (ICAM) , Riva del Garda/Italy. 2019/09/02
5. Kusaka, H., A. Nishi, A. Kakinuma, 2019: Climatological study of south foehn in Japan: Dynamic, thermodynamic, or hybrid/scrambling type? The 35th International Conference on Alpine Meteorology (ICAM) , Riva del Garda/Italy. 2019/09/02
6. Yamagami, A. and M. Matsueda, 2019: Assessment of sub-seasonal forecast skill over the Northern Hemisphere in operational ensemble forecasts. The Tenth Symposium on Polar Science. 3rd – 5th December, 2019, Tokyo, Japan.
7. Yamagami, A. and M. Matsueda, 2020: Predictability of weekly mean atmospheric variability over the Northern Hemisphere on S2S timescales. The 34th International Symposium on the Okhotsk Sea & Polar Oceans. 17th – 19th February, 2020, Mombetsu, Japan.

## (3) 国内学会・研究会発表

### A) 招待講演

特になし

## B) その他の発表

1. 日下博幸, 佐藤亮吾, 2020: クラスタ分析を用いた日本の気候区分, 日本地理学会 2020 年春季学術大会, 東京, 2020/03/27
2. 小野寺平, 日下博幸, 2020: 清川だし吹走時の気温変化とその形成メカニズム, 日本地理学会 2020 年春季学術大会, 東京, 2020/03/27
3. 小林峻, 日下博幸, 2020: ハノイを襲った記録的高温に寄与した異なる時空間スケール現象, 日本地理学会 2020 年度春季大会, 東京, 2020/03/27
4. 石崎 紀子, 日下 博幸, 荒木 貴光, Quan Van Doan, 池田 亮作, 2019: 領域モデルにおける境界層スキームと ramp 現象の再現性, 日本気象学会 2019 年度秋季大会, 福岡, 2019/10/30
5. 阿部 紫織, 中村 要介, 浅野 裕樹, 日下 博幸, 2019: 流域単位の降雨予測による洪水予報精度向上と リードタイム確保の可能性, 日本気象学会 2019 年度秋季大会, 福岡, 2019/10/30
6. 佐藤 亮吾, 佐藤 拓人, 日下 博幸, 清水 麻未, 荒木 貴光, 2019: 地域性と季節性を考慮した熱中症救急搬送者数予測手法の開発, 日本ヒートアイランド学会 第 14 回全国大会, 千葉, 2019/09/22
7. 横山 仁, 安達 聖, 宇治 靖, 金子 竜也, 浅野 裕樹, 日下 博幸, 2019: 茨城県つくば市における 2018 年夏季の気温分布, 日本ヒートアイランド学会 第 14 回全国大会, 千葉, 2019/09/21
8. Vitanova, L. L., H. Kusaka, 2019: Impact of urbanization on the surface air temperature across Bulgaria, 日本地球惑星科学連合 2019 年大会 (Japan Geoscience Union Meeting 2019) , 千葉, 2019/05/26
9. Vitanova, L. L., H. Kusaka, 2019: Possible impact of urbanization on the surface air temperature in Sendai City in the past 150 years, 日本気象学会 2019 年度春季大会 (2019 MSJ Spring Meeting) , 東京, 2019/05/15
10. 萩原・田中 2019, 熱圏と対流圏を繋ぐ大気重力波の解析. 日本気象学会 2019 秋季大会 予稿集
11. 松信・田中 2019, ロスビー波の碎波実験による順圧 3 次元ノーマルモードエネルギー Spektrルの形成過程に関する研究. 日本気象学会 2019 秋季大会予稿集
12. 田中・萩谷 2019, 球面座標系における亜熱帯ジェットの地衡風調節 (解析解). 日本気象学会 2019 秋季大会予稿集
13. 山上晃央, 松枝未遠, 2019: 夏季の顕著な北極低気圧とその予測可能性. 日本気象学会 2019 年度春季大会, 2019 年 5 月 15-18 日, 東京

#### (4) 著書、解説記事等

1. 田中博 2019: 地球大百科事典 地球物理編 翻訳者, 監訳: 井田喜明・木村龍治・鳥海光弘、朝倉書店, 2019 年 10 月.
2. 田中博 2019: 地球温暖化はどこまでが自然変動か. 国際環境経済研究所 (IEEI) 解説記事 2019/10/11.
3. 赤祖父俊一・田中博 2020: 地球温暖化は止まっている. 国家基本問題研究所 (ろんだん) 解説記事 2020/02/05.
4. 田中博 2020: 地球温暖化は止まっていないへの再反論. 国家基本問題研究所 (ろんだん) 解説記事 2020/02/10.
5. 田中博 2020: 地球温暖化予測はあくまで仮説-CO<sub>2</sub> の影響範囲見極めを. 月刊エネルギーフォーラム, No. 5, P98-99

#### 7. 異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等

##### 異分野間連携 (センター内外)

- ・ CCS 内: HPC 研究部門と都市街区気象 LES モデルの開発 (日下・ドアン)
- ・ CCS 外: 建築工学分野 (竹中工務店) と建物設計時の風荷重に関する共同研究 (日下)
- ・ CCS 外: 農業分野 (農研機構) と水田の気候緩和効果に関する共同研究 (日下)
- ・ CCS 外: 情報通信分野 (情報通信機構) と雲のリアルタイム画像解析に関する共同研究 (日下)

##### 産学官連携

1. 株式会社ウェザーニューズとの共同研究 (日下)
2. 株式会社竹中工務店との共同研究 (日下)
3. 気象業務支援センターとの共同研究 (日下)
4. 環境省地域適応コンソーシアム事業・パシフィックコンサルタンツ株式会社との共同研究 (日下)

##### 国際連携・国際活動

1. ベトナム国家大学ハノイ自然科学大学 (VUN/HUS) と本センター間の協定 (日下)
2. ハノイ科学技術大学 (USTH) と本センター間の協定 (日下)
3. アリゾナ州立大学 (UCRC) と本センター間の協定 (日下)
4. 日越大学 (VNU) (ベトナム) との連携 (日下)
5. アジア工科大学院 (Asian Institute of Technology) (タイ) との連携 (日下)

6. ベルギー王立気象研究所 (Royal Meteorological Institute, Belgium) (ベルギー) と本センター間の協定 (日下)
7. アラスカ大学フェアバンクス校、国際北極圏研究センター(IARC)との大学間協定 (田中)
8. インドネシア気候・気象・地球物理庁との共同研究、SATREPS火山灰追跡モデル (田中)
9. 米国ミズリー大学コロンビア校との共同研究、ブロッキング現象、部局間協定 (田中)
10. 筑波大学/筑波大学・ドイツ学術交流会 (DAAD) パートナースhip・プログラム (ドイツ・カールスルーエ工科大学との相互滞在型研究プログラム) (松枝)

## 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 都市気候の将来予測に関する国際ワークショップの開催 (日下)
2. TGSW2019 でのセッション開催 (日下)

## 9. 管理・運営

1. 学長補佐 (日下)
2. 生命環境科学研究科長 (田中)
3. 教育研究評議員 (田中)
4. T-ACT 推進室員 (田中)

## 10. 社会貢献・国際貢献

1. 東京都環境影響評価審議会委員 (日下)
2. オリンピック・パラリンピック暑熱環境測定等検討委員会委員 (日下)
3. 熱中症予防声かけプロジェクト実行委員 (日下)
4. 日本学術会議自然地理学環境防災小委員会委員 (日下)
5. 日越大学での授業、タイのアジア工科大学院での講義 (日下)
6. 筑波山の山頂にて気象観測を行う筑波山プロジェクトの主導 (日下)
7. 東京都環境影響評価審議会 委員 (日下)
8. 日本ヒートアイランド学会 理事 (日下)
9. 気候影響・利用研究会 幹事 (日下)
10. 日本気象予報士 CPD 制度、運営委員、認定委員 (田中)
11. 気象研究所、評議員 (田中)
12. 気象庁異常気象分析作業部会 委員 (松枝)

13. 世界気象機関 (WMO) 大気科学委員会(CAS) 予測可能性・力学過程およびアンサンブル予報に関する作業部会 (PDEF) 委員 (松枝)
14. アメリカ気象学会 (AMS) 都市環境部会 (BUE) 委員 (ドアン)

## 11. その他：メディア関連

1. NHK ラジオ第一「NHKジャーナル」(2019年9月9日)  
オリンピックの暑さ対策に関連して、日下教授の都市気象予測の研究が紹介された。
2. 毎日新聞、新潟日報ほか(2019年8月6日)  
日下教授と西嶋史研究員の、新潟の熱帯夜に関する研究成果が掲載された。
3. NHK 総合「首都圏ネットワーク」(2019年8月6日)  
オリンピックの暑さ対策に関連して、日下教授の都市気象予測の研究が紹介された。
4. 毎日新聞 夕刊(2019年7月29日)  
日下教授と西嶋史研究員の、熊谷猛暑とフェーンの研究結果が掲載された。
5. 読売新聞(2019年7月25日)  
日下教授と民間気象会社「ウェザーニューズ」が共同で行っている都市気象予測モデルの研究に関する内容が一面に掲載された。
6. 日本経済新聞 夕刊(2019年6月17日)  
日下教授と西嶋史研究員の熊谷の猛暑の論文の内容が、新聞、オンラインニュースに掲載された。
7. 産経新聞夕刊(2019年6月17日)  
日下教授と西嶋史研究員の熊谷の猛暑の論文の内容が、新聞、オンラインニュースに掲載された。
8. 東京新聞夕刊(2019年6月17日)  
日下教授と西嶋史研究員の熊谷の猛暑の論文の内容が、新聞、オンラインニュースに掲載された。
9. 信濃毎日新聞(2019年6月17日)  
日下教授と西嶋史研究員の熊谷の猛暑の論文の内容が、新聞、オンラインニュースに掲載された。
10. 神戸新聞(2019年6月18日)  
日下教授と西嶋史研究員の熊谷の猛暑の論文の内容が、新聞、オンラインニュースに掲載された。
11. 静岡新聞(2019年6月18日)

日下教授と西曉史研究員の熊谷の猛暑の論文の内容が、新聞、オンラインニュースに掲載された。

12. 共同通信社

日下教授と西曉史研究員の熊谷の猛暑の論文の内容が、新聞、オンラインニュースに掲載された。

13. 神戸新聞 NEXT

日下教授と西曉史研究員の熊谷の猛暑の論文の内容が、新聞、オンラインニュースに掲載された。

14. 河北新報 ONLINE NEWS

日下教授と西曉史研究員の熊谷の猛暑の論文の内容が、新聞、オンラインニュースに掲載された。

15. デジタル毎日

日下教授と西曉史研究員の熊谷の猛暑の論文の内容が、新聞、オンラインニュースに掲載された。

16. NHK E テレ (2019 年 4 月 24 日)

「又吉直樹のヘウレーカ！」に日下教授が出演。タイトルは「風はどこから吹いてくる？」。

## VII. 高性能計算システム研究部門

### 1. メンバー

教授 朴 泰祐, 高橋 大介, 建部 修見

准教授 塙 敏博 (客員, 東京大学)

助教 多田野 寛人, 小林 諒平, 藤田 典久

学生 大学院生 21 名, 学類生 7 名

学内共同研究員

安永 守利, 和田 耕一, 桜井 鉄也, 山口 佳樹, 今倉 暁

(以上, システム情報系)

学外共同研究員

小柳 義夫 (RIST), 石川 裕 (理化学研究所),

松岡 聡 (理化学研究所), 中島 浩 (京都大学),

天野 英晴 (慶應義塾大学), 後藤 仁志 (豊橋技術科学大学),

関口 智嗣 (産業技術総合研究所), 中尾 昌広 (理化学研究所),

佐野 健太郎 (理化学研究所), 川島 英之 (慶應義塾大学),

田中 昌宏 (慶應義塾大学), 平賀 弘平 (慶應義塾大学)

### 2. 概要

本研究部門では, 高性能計算システムアーキテクチャ, 並列プログラミング環境, GPU 利用技術, FPGA 利用技術, 並列数値処理の高速化研究, 分散システムソフトウェア, エクストリームビッグデータの基盤技術等の研究を行っている。

今年度の研究としては以下のテーマが挙げられる。

- 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
- アプリケーション分野との共同研究による演算加速アプリケーション開発
- 「富岳」における数値計算ライブラリ開発及び性能評価
- 大規模並列分散ファイルシステムの性能及び拡張性の向上
- 複数右辺ベクトルを持つ行列計算の高速化と精度向上

### 3. 研究成果

【1】 OpenACC による GPU+FPGA 混合プログラミングフレームワーク (朴)

OpenACC は近年注目されている GPU を中心とした演算加速装置のプログラミングを、汎用 CPU における OpenMP のように、逐次プログラムをベースに演算加速集中部分に directive (指示文) を挿入することでコンパイラが演算加速デバイス用のカーネルコードを生成するようにし、incremental にプログラムを高速化可能な言語フレームワークである。現状では、商用 OpenACC コンパイラは主として NVIDIA 社製 GPU 向けで、FPGA を対象とするものは存在しない。このため、GPU 用と FPGA 用、それぞれ異なったバックエンドコンパイラを用いてプログラミング環境を開発する。

これまで GPU 向けの OpenACC コンパイラとして NVIDIA 社傘下の PGI 社によるコンパイラが広く用いられており、我々はこれを GPU 用の OpenACC バックエンドコンパイラとして用いる。対して、FPGA 向けの OpenACC 環境としては米国 ORNL (Oak Ridge National Laboratory) の FTG (Future Technology Group) が開発を進めている OpenARC コンパイラに着目する。OpenARC は様々な演算加速デバイス向けの OpenACC コンパイラであり、Intel 社製 FPGA 向けのコンパイル機能がテスト版として実装されている。OpenARC が行う FPGA 向け OpenACC コンパイル機能は、OpenACC 記述を最終的に OpenCL に変換する。この OpenCL コードは Intel 社の FPGA 向け SDK に付属する OpenCL コンパイラで最終的に FPGA の回路合成が行われる。従って、1つのユーザプログラムから GPU で演算加速する部分と FPGA でこれを行う部分を分離し、それぞれを GPU 向け及び FPGA 向けのコンパイラで処理し、最後に部分オブジェクトを合成すれば OpenACC 統一プログラミング環境が完成する。

OpenARC コンパイラについては、FPGA 向け最適化は ORNL 内の開発プロジェクトで行われているため、我々は当該チームとの国際共同研究を進め、この開発版コンパイラを使用することができるようにした。ORNL にとっても、OpenARC コンパイラの先進的利用ケースを得ることができるため、この共同研究は順調に進められている。ただし、1つの OpenACC コードを両デバイス向けに分離することは容易ではなく、これをユーザが手で行うことは大きな負担となる。そこで、今年度研究ではこれを自動的に行う言語処理系 MHOAT (Multi-Hybrid OpenACC Translator)を開発した。図 1 は MHOAT の処理の概念図である。

MHOAT によって FOGA 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。OpenARC が処理した FPGA 向け OpenCL コードを Intel 環境でコンパイルし、NVIDIA 社 GPU のオブジェクトと融合する技術については、昨年度の研究で開発した、OpenCL+CUDA コンパイラを実現する環境を利用している。



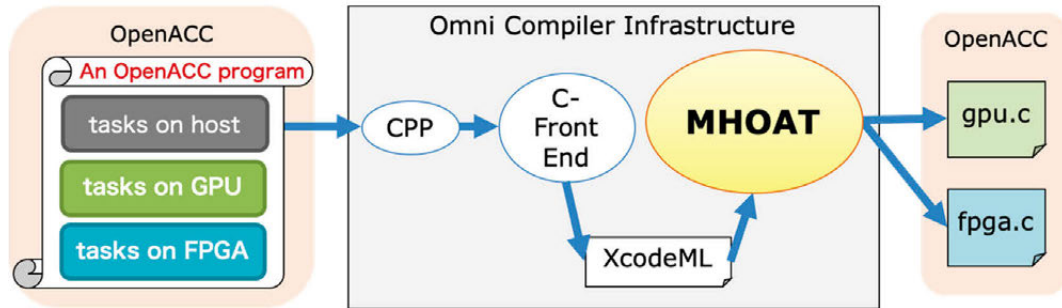


図 1 MHOAT の処理フロー

機能及び基本性能評価として、以下のような複合演算加速プログラムを OpenACC で記述した。

- GPU 上で行列・行列乗算を行う。
- それで生成された行列とベクトルの乗算を行う。
- それで生成されたベクトルを FPGA に転送し、これを固定ベクトルとする CG 法（共役勾配法）による反復行列解法を FPGA 上で行う。
- 最終結果を CPU に戻す。

なお、今年度の MHOAT 実装では、FPGA と GPU の間で DMA 転送を行う機能の組み込みまでは行えず、GPU と FPGA のデータ転送は CPU を介して間接的にを行っている。

図 2 に従来の CUDA+OpenCL で両デバイスのプログラムを書いた場合と、MHOAT を用いて OpenACC のみで記述した場合の行数 (a)と文字数(b)の比較を示す。

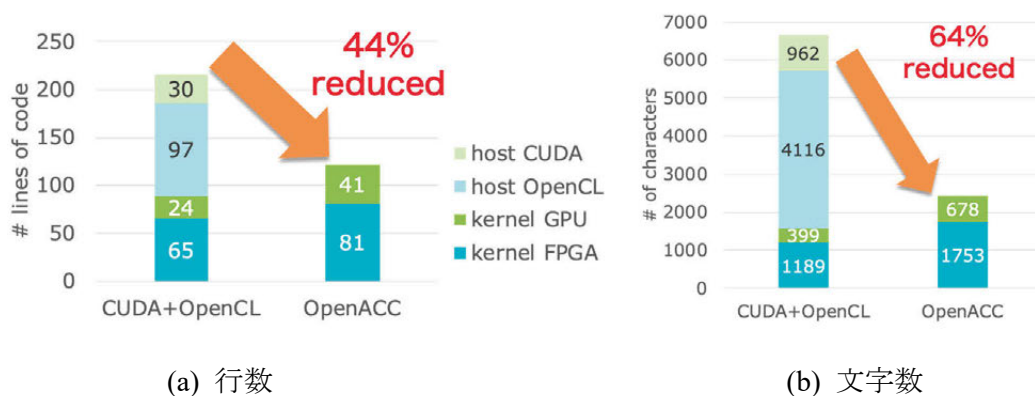


図 2 CUDA+OpenCL による従来の記述と MHOAT を用いた OpenACC のみによる記述の行数 (a)及び文字数(b)の差

図から明らかなように、MHOAT を用いた OpenACC のみによる統一的記述では、特にホストコード（CPU 上で動作するプログラム）の記述量が非常に少なくなり、ユーザのプログラミング労力を減らすことができている。また、複数言語を用いるプログラミングは、その習

得にも時間を要し、その複雑さゆえバグの混入の可能性も高い。この評価では MHOAT が多重複合演算加速環境における FPGA+GPU プログラミングを従来よりはるかに容易にすることが可能ということが示せた。

続いて性能評価である。上記実験で用いたコードから生成されたプログラムを、計算科学研究センターが運用する多重複合演算加速クラスタ Cygnus 上で評価した。Cygnus の GPU+FPGA 混載ノードには Intel Xeon Gold CPUx2 基, Intel Stratix10 FPGAx2 基, NVIDIA Tesla V100x4 基が搭載されているが、本実験では CPU, FPGA, GPU をそれぞれ 1 基ずつ用いて評価した。結果を図 3 に示す。

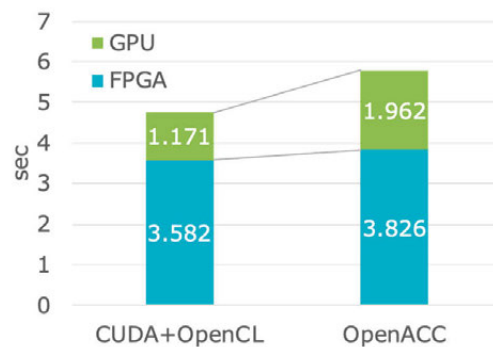


図 3 評価プログラムの実行時間：CUDA+OpenCL と MHOAT による OpenACC のみの比較

ここに示す通り、総演算時間では MHOAT 実行のほうが性能が低下した。GPU 部では約 1.7 倍、FPGA 部では約 1.07 倍、それぞれ実行時間が長くなってしまった。特に GPU については、OpenACC コンパイラの成熟度から考え、OpenACC コードの指示文記述に何らかの最適化が必要と考えられる。これは今後の課題であるが、先述の記述の容易さを総合的に考えれば、MHOAT の OpenACC のみによる環境の方がプログラムの生産性の点で優れていると考えられる。

これらの研究成果については情報処理学会第 169 回 HPC 研究会、同第 172 回 HPC 研究会にて発表済みである。

## 【2】気象アプリケーション City-LES の GPU 向け高速化（朴）

GPU と FPGA の融合による演算加速のアプリケーションの一つとして、本センター地球環境研究部門で開発中の都市気象モデルシミュレーション City-LES の GPU・FPGA 融合化を進めている。今年度は特に、これまで CUDA で開発してきたコードを全面的に OpenACC 化し、今後の OpenACC による統一的プログラミングへの準備を進めた。昨年度まで、CUDA による City-LES 実装を行ったが、CPU 上での実行がわずかに残り、全体の実行時間の約 85%が GPU 側に移植されたにも関わらず、CPU 部分が残っているため CPU と GPU の間のデータ転

送コストが全く無視できず、結果として全実行時間の約 50%がデータ転送時間であるということになっていた。

今年度は実計算ループにおける CPU 実行部分の全てを GPU に行わせることにしたが、それらの関数を個別に CUDA 化するためのコストは決して小さくない。また、全てのデータを GPU 側で管理するため、メモリ制御を容易に記述できる必要がある。そこで、実装を全面的に見直し、全てを OpenACC に書き直すことにした。OpenACC による記述では、CPU 上のホストコードと GPU 上のカーネルコードを個別に指定するのではなく、OpenACC の指示文で演算加速カーネル化する場所を指定するため、データの所在を容易に記述できるだけでなく、全データを GPU 上に確保し、例え並列性が低くても敢えてその部分を GPU で実行するようにプログラムすることが容易にできた。この、例え部分的な GPU 実行が CPU 実行より遅くても、データ転送時間を消去することができれば全体的に高い性能が得られるという、発想の転換が大きな性能向上につながった。

本センターにおける多重複合型演算加速スーパーコンピュータ Cygnus の最大 32 ノード (128 GPU) を用いて評価を行った。まず、単体ノード上の 2 台の GPU (NVIDIA Tesla V100) と 2 台の CPU (Intel Xeon Gold) を用い、CPU のみの実行、データ移動を伴う昨年度までの GPU 実装、OpenACC によってデータ移動をなくした GPU での実装を比較した。結果を図 4 に示す。ここに示された通り、データ移動を含んだ GPU コードでは CPU の 2 倍以上の性能が得られているものの、その実行時間の約 50%は GPU と CPU の間のデータ移動時間である。これが OpenACC 化によって全データを GPU に閉じ込めた結果、データ移動のある場合の約 2.8 倍の性能向上が得られ、最終的に CPU のみによる実行に比べ約 6.2 倍の性能向上が得られた。

さらに、最大 32 ノード、128 GPU を用いた性能評価結果を図 5 に示す。ここでは 1 ノード実行の場合を 1 とし、weak scaling, つまりノード当たりの問題サイズを一定にしたままノード数を増やして性能向上を評価した。GPU の結果は全て OpenACC のみによるものである。結果として、32 ノードの場合でも 1 ノード実行に比べ並列処理効率が 86%と高く保たれており、いずれのノード数でも CPU のみに比べ約 9 倍の性能が得られた。

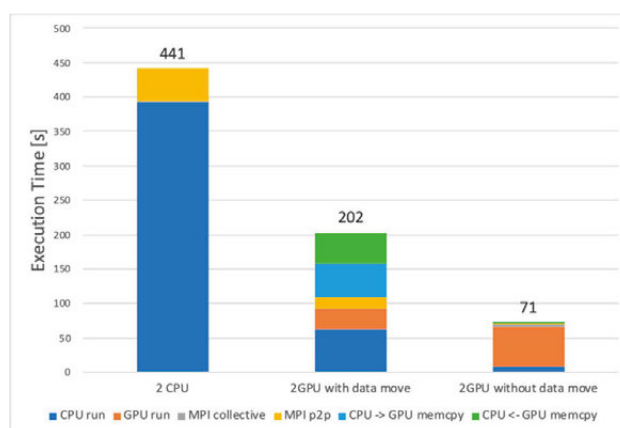


図 4 Cygnus の単体ノードにおける GPU・CPU 間データ通信削減の効果

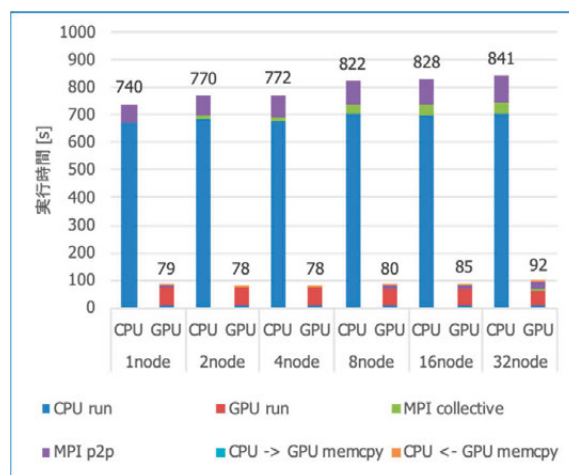


図5 Cygnus 32 ノードを用いた GPU 実装の weak scaling 性能向上

また、今回のフル OpenACC 実装によって、MHOAT 等の基盤を用いた GPU・FPGA 統一プログラミングを適用することが可能となった。今年度の研究では FPGA による OpenACC 化まで踏み込めなかったが、City-LES では単純なステンシル計算だけでなく、地表面の性質やビル形状、さらに日光の照射をレイトレーシング処理するなど、非常に詳細なシミュレーションとなっており、GPU の持つ SIMD 演算性能だけでは効率が非常に低下する可能性が高い。ここに FPGA を投入していくのが次年度以降の課題である。

これらの研究成果については情報処理学会第 170 回 HPC 研究会、同第 173 回 HPC 研究会にて発表済みである。

### 【3】 Arm SVE 命令を用いた FFT の実装および理研シミュレータによる性能評価（高橋）

「富岳」のプロセッサである A64FX に向けた FFT の実装を Arm SVE (Scalable Vector Extension) 命令を用いて行い、理研シミュレータにより性能評価を行った。

Arm SVE 実装の方針としては、Fortran で書かれた FFTE ライブラリのカーネルを、SPIRAL コードジェネレータで生成した SVE intrinsic 版の FFT カーネルで置き換えることにより高速化を図る。高い基数（例えば 16）の FFT カーネルを手でコーディングするのは多大な労力を必要とするが、SPIRAL では基数を入力するだけで FFT カーネルを自動で生成できる。Arm SVE 命令を用いて FFT カーネルを生成するにあたり、Vector Length Agnostic (VLA) プログラミングモデルを用いた。

SPIRAL は離散フーリエ変換 (DFT) などのデジタル信号処理に対して C 言語や Fortran の最適化したコードを自動生成するシステムである。Carnegie Mellon University の Franz Franchetti のグループで開発されている。ソースコードは <http://www.spiral.net/> から入手することが可能である。SPIRAL において変換の種類とサイズを指定すると、サイズに応じたア

ルゴリズムが生成される。このアルゴリズムは、より小さい演算の木 (rule tree) に分解され、ここでいくつかの生成可能な木からより性能の良いものを選択する。

FFT カーネルとして、今回は out-of-place の FFT アルゴリズムである Stockham FFT アルゴリズムを用いた。高い基数の FFT カーネルを積極的に用いることにより、メモリアクセス回数を減らすことができる。その一方で、高い基数の FFT カーネルは多くのテンポラリ変数を必要とするため、浮動小数点レジスタが不足する。FFTE を富士通 Fortran コンパイラでコンパイルした際に基数 2, 3 および 4 の FFT カーネルではソフトウェアパイプラインが適用されたが、基数 5 以上の FFT カーネルでは浮動小数点レジスタ数の不足によりソフトウェアパイプラインが適用されなかった。FFTE では基数 2, 3, 4, 5 および 8 の FFT カーネルを、SPIRAL では基数 2, 3, 4, 5, 6, 8, 10, 12 および 16 の FFT カーネルを用いた。SPIRAL が生成した基数 2 の FFT カーネルを図 6 に示す。

```
void dft2_sve_jk(float64_t *Y, float64_t *X,
                float64_t *TW1, int l1, int m1) {
    svfloat64x2_t s49, s52, svex2_3, svex2_4;
    int a104, a105;
    float64_t a106, a107;
    svbool_t pg1;
    svfloat64_t s50, s51, s53, s54, s55, s56;
    for (int j1 = 0; j1 < l1; j1++) {
        int k1 = 0;
        pg1 = svwhilelt_b64(k1, m1);
        do {
            a104 = k1 + j1 * m1;
            s49 = svld2_f64(pg1, X + 2 * a104);
            s50 = s49.v0;
            s51 = s49.v1;
            s52 = svld2_f64(pg1,
                           X + 2 * (a104 + l1 * m1));
            s53 = s52.v0;
            s54 = s52.v1;
            s55 = svsub_f64_x(pg1, s50, s53);
            s56 = svsub_f64_x(pg1, s51, s54);
            a105 = ((2)*(j1));
            a106 = TW1[a105];
            a107 = TW1[a105 + 1];
            svex2_3.v0 = svadd_f64_x(pg1, s50, s53);
            svex2_3.v1 = svadd_f64_x(pg1, s51, s54);
            svst2_f64(pg1, Y + 2 * (k1 + 2 * j * m1),
                     svex2_3);
            svex2_4.v0 = svnmmls_n_f64_x(pg1,
                                           svmul_n_f64_x(pg1, s56, a107), s55, a106);
            svex2_4.v1 = svmla_n_f64_x(pg1,
                                         svmul_n_f64_x(pg1, s56, a106), s55, a107);
            svst2_f64(pg1, Y + 2 * (k1 + (2 * j1 * m1) + m1),
                     svex2_4);
            k1 += svcntd();
            pg1 = svwhilelt_b64(k1, m1);
        } while(svptest_any(svprtrue_b64(), pg1));
    }
}
```

図 6 SPIRAL が生成した基数 2 の FFT カーネル

性能評価にあたっては、FFTE 6.0 (<http://www.ffte.jp/>) の一次元複素数 FFT ルーチン zfft1d を用いて、理研シミュレータにより A64FX の性能を測定した。 $n = 2 \sim 65536$  点の順方向 FFT を 10 回実行し、その平均の経過時間を測定した。 $n = 65536$  の場合のワーキングセットサイズは 3MiB であり、2 次キャッシュに収まる。 $n$  点 FFT の演算回数は  $5n \log_2 n$  として MFlops 値を算出した。A64FX のそれぞれ 1 スレッドを用いた。コンパイラは Fujitsu C/C++/Fortran compiler 4.0.0 20190701 および Arm C/C++/Fortran compiler 19.1 を使い、コンパイラオプションとして、”-Kfast,restp=all” (Fujitsu) , ”-Ofast -march=armv8-a+sve” (Arm) を用いた。Arm Fortran コンパイラで生成したバイナリが理研シミュレータで実行できなかったため、FFT カーネル



のみを Arm コンパイラでコンパイルして、それ以外のルーチンを富士通コンパイラでコンパイルしてバイナリを生成した。

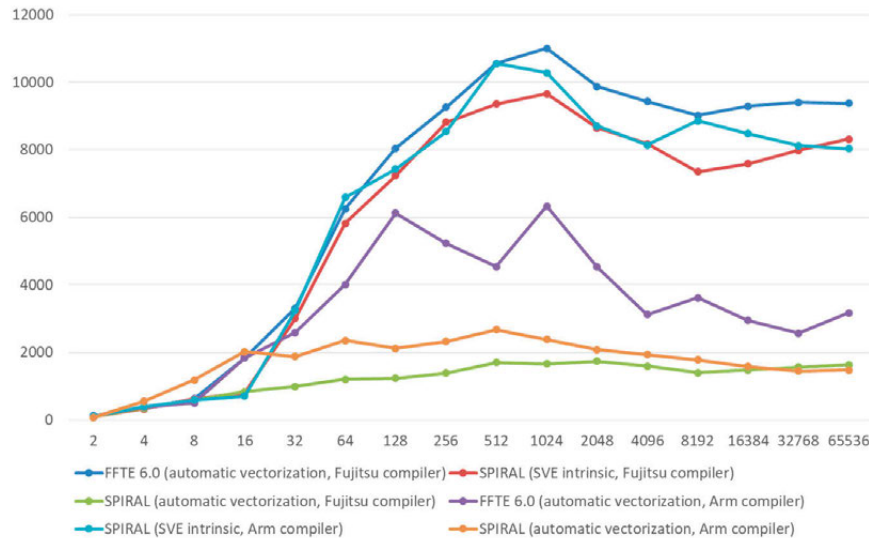


図 7 power-of-two FFT の性能（理研シミュレータ）

理研シミュレータを用いて power-of-two FFT の性能を測定した結果を図 7 に示す。グラフの横軸はデータサイズであり、縦軸は演算性能 (MFlops) である。富士通 C コンパイラを用いた場合でも、Arm C コンパイラを用いた場合でも、SPIRAL (SVE intrinsic) は SPIRAL (automatic vectorization) よりも高速である。富士通 C コンパイラを用いた場合、 $n = 256$ において SPIRAL (SVE intrinsic) は SPIRAL (automatic vectorization) よりも約 6.33 倍高速である。さらに Arm C コンパイラを用いた場合、 $n = 32768$ において SPIRAL (SVE intrinsic) は SPIRAL (automatic vectorization) よりも約 5.62 倍高速である。これらの結果から、SPIRAL により intrinsic を用いた明示的なベクトル化は効果的であることが分かる。

富士通 C/fortran コンパイラを用いた場合、FFTE (automatic vectorization) は SPIRAL (SVE intrinsic) よりも高速である。一方で Arm コンパイラを用いた場合、SPIRAL (SVE intrinsic) は  $n = 16$ を除いて FFTE (automatic vectorization) よりも高速である。特に  $n = 32768$ において SPIRAL (SVE intrinsic) は FFTE (automatic vectorization) よりも約 3.16 倍高速である。富士通 Fortran コンパイラでコンパイルした FFTE は Arm Fortran コンパイラでコンパイルした場合よりも高速である。一方で Arm C コンパイラでコンパイルした SPIRAL (SVE intrinsic) は  $n = 8, 16, 256, 4096, 65536$ を除いて富士通 C コンパイラでコンパイルした場合よりも高速である。したがって、SPIRAL (SVE intrinsic) に対しては富士通 C コンパイラよりも Arm C コンパイラの最適化が有効に働いたと考えられる。

SPIRAL コードジェネレータで生成した FFT カーネルの性能は、Fortran で記述した FFTE の FFT カーネルとほぼ同じ性能になった。富士通コンパイラと Arm コンパイラでは挙動がかなり異なることも分かった。具体的には、Fortran では富士通コンパイラが、C では Arm コンパイラが高速である。今後は複数スレッドによる実行を行う予定である。

#### 【4】AVX-512IFMA を用いた多倍長整数乗算の高速化（高橋）

乗算は最も基本的な四則演算の一つである。また 64bit を超えた精度の数を多倍長数といい、多倍長整数乗算はソフトウェアで解決する問題である。この演算は公開鍵暗号システムや数式処理システムに応用される。乗算においてキャリーの発生は課題の一つであり、これに対応するためオペランドの 1 ワードの bit 数を減らす表現（reduced-radix 表現）手法を用いた。また近年では Intel から Cannon Lake プロセッサが出荷されたことにより AVX-512 Integer Fused Multiply-Add (IFMA) 命令が利用可能になった。さらに高速な乗算アルゴリズムの一つに Karatsuba 法がある。

関連研究として、reduced-radix 表現と AVX-512 命令を用いた多倍長整数乗算の高速化を行った研究がある。[Keliris and M. Maniatakos 2014]では AVX-512 Foundation (F) を使用し Intel Software Development Emulator (SDE) で命令数を評価した結果、GNU Multiple Precision Arithmetic Library (GMP) に対し 4096bit どうしの乗算で約 1.45 倍性能向上した。[Gueron and Krasnov 2016]では AVX-512 IFMA を用いて実装し命令数のみの性能評価を行った結果、4096bit どうしの乗算で AVX-512IFMA により、GMP に対し約 8 倍の性能向上が得られている。また[Edamatsu and Takahashi 2018]では AVX-512F を使用して Xeon Phi プロセッサにおける実行時間の評価を行った結果、4096bit どうしの乗算で GMP に対し約 2.3 倍の性能向上が得られている。

---

##### Algorithm 1 BasecaseMultiply

---

**Input:**  $A = \sum_{i=0}^{m-1} a_i \beta^i, B = \sum_{j=0}^{n-1} b_j \beta^j$

**Output:**  $C = AB := \sum_{k=0}^{m+n-1} c_k \beta^k$

```

1:  $C \leftarrow A \cdot b_0$ 
2: for  $j \leftarrow 1$  to  $n - 1$  do
3:    $C \leftarrow C + \beta^j (A \cdot b_j)$ 
4: end for
5: return  $C$ .
```

---

本研究では、多倍長整数を符号なし 64bit 整数型配列で表現する。64bit どうしの加算は最大で 65bit になり、キャリーが発生する可能性があるため余分な処理が追加される。そこで、乗算前に 1 ワードあたりの bit 数を 52bit に減らした表現（reduced-radix 表現）に変換する。52bit である理由は、AVX-512IFMA は浮動小数点数演算の仮数部を利用した整数の積和演算を行うため、オペランドは 64bit のうち 52bit のみを使用されるためである。これにより 52bit

どうしの加算となり、53bit 目以降をキャリー蓄積の空間として利用する。蓄積したキャリーは乗算の後でまとめて処理する。

---

**Algorithm 2** KaratsubaMultiply

---

**Input:**  $A = \sum_{i=0}^{n-1} a_i \beta^i, B = \sum_{j=0}^{n-1} b_j \beta^j$   
**Output:**  $C = AB := \sum_{k=0}^{2n-1} c_k \beta^k$

```

1: if  $n \leq n_0$  then
2:   return BasecaseMultiply( $A, B$ )
3: end if
4:  $k \leftarrow \lceil n/2 \rceil$ 
5:  $(A_0, B_0) := (A, B) \bmod \beta^k$ 
6:  $(A_1, B_1) := \lfloor (A, B) / \beta^k \rfloor$ 
7:  $(A_2, B_2) := (A_0 - A_1, B_0 - B_1)$ 
8:  $C_0 \leftarrow \text{KaratsubaMultiply}(A_0, B_0)$ 
9:  $C_1 \leftarrow \text{KaratsubaMultiply}(A_1, B_1)$ 
10:  $C_2 \leftarrow \text{KaratsubaMultiply}(A_2, B_2)$ 
11: return  $C := C_0 + (C_0 + C_1 - C_2)\beta^k + C_1\beta^{2k}$ .
```

---

本研究では Karatsuba 法 (Algorithm 2) による実装を行った。Algorithm 1 は Karatsuba 法でも用いられる筆算法である。ワード数  $n$  の乗算の計算量について、筆算法と Karatsuba 法はそれぞれ  $O(n^2)$  と  $O(n^{\log_2 3}) \approx O(n^{1.585})$  である。本研究では Algorithm 2 の 7, 11 行目には AVX-512F, 2 行目の筆算法には AVX-512IFMA 命令を用いる。

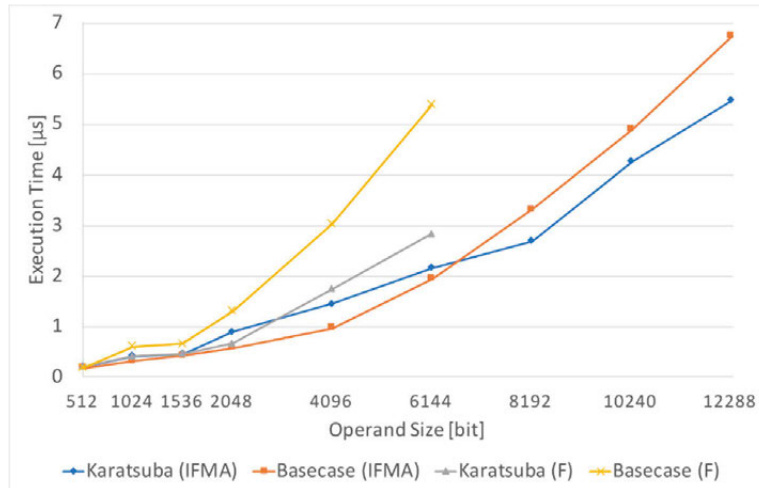


図 8 筆算法と Karatsuba 法との実行時間の比較



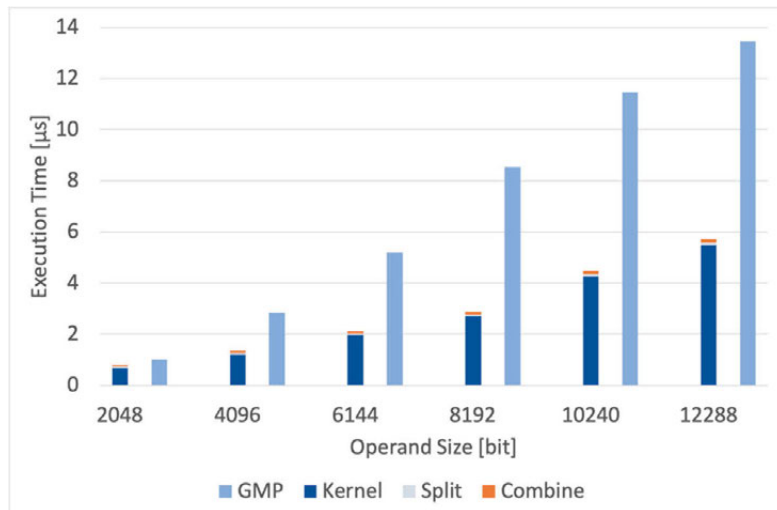


図 9 GMP と本研究の実装の実行時間

図 8 は筆算法と Karatsuba 法に AVX-512F と AVX-512IFMA を適用した 4 種類の多倍長整数乗算の実行時間を示している。オペランドが 512bit の場合はいずれもほぼ同等の実行時間であるが、6144bit までは AVX-512IFM による筆算法が、それ以降のサイズでは AVX-512IFMA による Karatsuba 法が最も速い結果が得られたため、AVX-512IFMA 命令は AVX-512F 命令よりも高速に乗算を処理することが示された。また図 9 は本研究の実装と GMP との実行時間の比較を示している。図の結果から、7168bit を境に筆算法から Karatsuba 法へと切り替える実装を行った。グラフからすべてのサイズで GMP よりも高速に乗算を処理することが示された。本研究は GMP に対し最大で約 2.97 倍の性能向上が得られている。

#### 【5】ノードローカルバーストバッファの研究（建部）

スーパーコンピュータにおける、演算性能とストレージ性能のギャップを解消するため、計算ノードに不揮発性メモリ、NVMe SSD などの高速なストレージをもつ階層的なストレージの研究が急務となっている。ノードローカルストレージは、計算ノードのメモリと同様に、計算ノードが割り当てられている間しか利用することができない。そのため、本研究では、ジョブの起動時に、即座に計算ノードのローカルストレージを用いた並列ファイルシステムを構築して、バーストバッファとして利用することを検討している。バーストバッファシステムは、当初、バースト的なデータ書き込みに対応するための一時的なバッファとして研究開発がすすめられたが、近年はキャッシュ的利用、一時データ領域としての利用のほか、In transit データ解析のための利用など様々な用途に広がってきている。そのため、一般的なファイルシステムのインターフェースを持つことは、より広範囲の利用が可能となり大きなメリットとなる。ノードローカルバーストバッファの研究開発にあたり、これまで研究開発を進めてきた Gfarm ファイルシステムをベースとして行った。Gfarm ファイルシステムは、もともと

計算ノードのローカルストレージを用いた並列ファイルシステムであり、ノードローカルストレージの局所性を利用する特徴を持っている。この Gfarm ファイルシステムを、高速な不揮発性メモリ、NVMe SSD に対して用いるためには、遠隔ファイルアクセスの高速化が求められる。その問題を解決するために、これまでの通信プロトコルに対し上位互換となるように RDMA を用いた通信プロトコルの設計を行った。また、メタデータ性能を高速化するため、メタデータの冗長性と性能のトレードオフについて評価を行った。

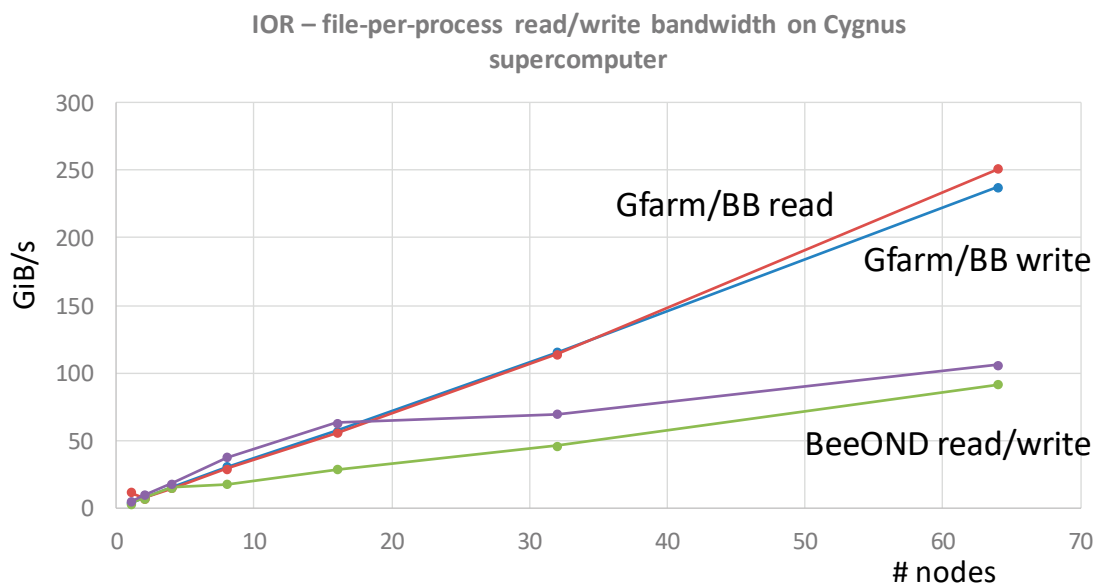


図 10 並列ファイルアクセス性能

図 10 に Cygnus スーパーコンピュータにおける並列ファイルアクセス性能を示す。Gfarm/BB は本研究で実装したバーストバッファシステムである。ノード数を増加させると性能が向上していることが分かる。BeeOND は、同様のシステムであるが、ノード当たりの性能が低いことが分かる。Gfarm/BB はノードローカルストレージの局所性を考慮して書き込みを行っているのに対し、BeeOND は複数のストレージにストライピングして書き込んでいるため、この性能差となっている。本成果は、論文誌 *Journal of Computer Science and Technology* において公表した。

#### 【6】極端気象予測を拓くビッグデータ機械学習基盤の研究（建部）

豪雨・突風・高温などの極端気象は人類に甚大な被害をもたらすが、その予測は極端気象に関する膨大な知識が必要である。本研究では、その知識を効率的に生成する機械学習基盤の構築を目的とする。これまで、大規模な観測データを用いた深層学習を進めるための準備として、2006 年から 2018 年までの全国合成レーダ GPV と、JAMSTEC から提供された可降

水量のデータを用い、機械学習のためのデータの準備を行った。これにより、可降水量の急な変化による降雨などの学習を目指している。大規模データにより学習を行う場合、大規模入力データの読込性能がボトルネックとなる。並列ファイルシステムの数多くの小規模データに対し、多数の計算ノードが一斉にランダムにアクセスするためである。従来は、その性能低下を避けるため、あらかじめノードローカルストレージにデータをステージングしておき、そのデータを用いて学習を行う方法がとられている。しかしながら、大規模入力データの場合はこのステージング時間が問題となる。例えば、学習時間が 75 秒で完了するものの、ステージング時間は 10 分ほどかかるという報告もある。本研究では、このステージング時間を短縮、隠蔽するため、並列ファイルシステムのデータをノードローカル SSD にプリフェッチする方法を提案した。これまでは、読込データはランダムに読込まれるためプリフェッチは難しいと考えられていたが、分散機械学習フレームワークにプリフェッチ機構を組込むことによりこの問題の解決を図った。筑波大学の Cygnus スーパーコンピュータにおいて評価を行い、プリフェッチを効果的に行うことにより、ノードローカル SSD にあらかじめステージングしておいたときとほぼ変わらない性能で大規模データの深層学習を行うことが可能であることを示した。

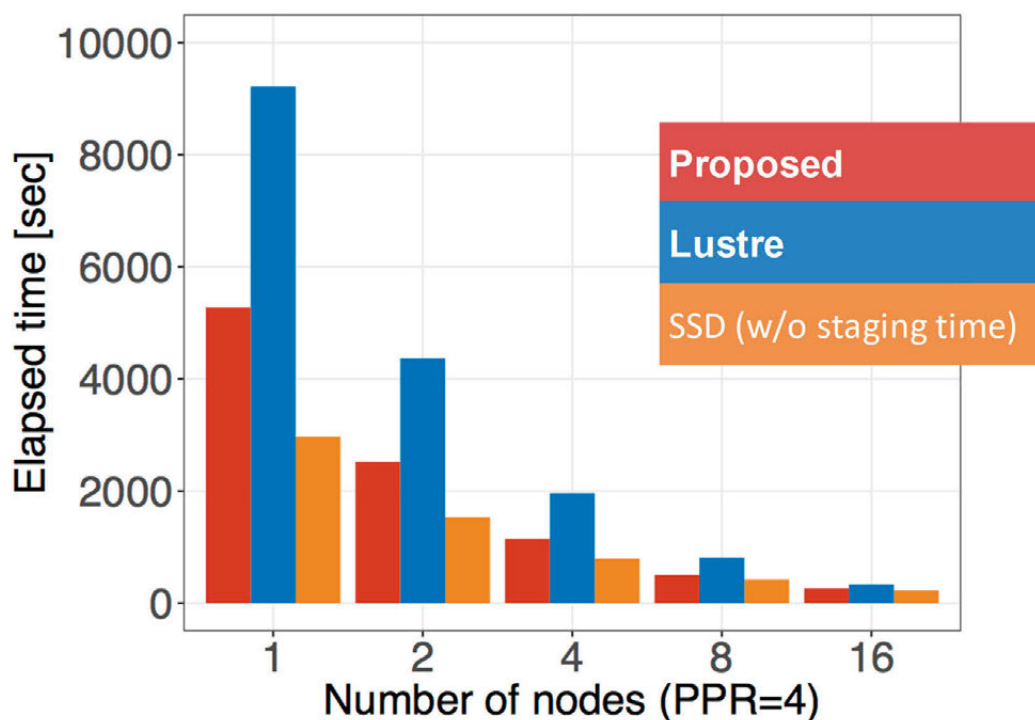


図 11 Cygnus スーパーコンピュータによるプリフェッチの性能

図 11 に Cygnus スーパーコンピュータにおける評価結果を示す。SSD は、あらかじめステージングを行ったときの処理時間で、この処理時間はプリフェッチ処理が完全に隠蔽されたと

きの最高値を示している。本プリフェッチを用いることにより、並列ファイルシステムから読込むときに比べ、1 ノードで 1.74 倍、16 ノードで 1.26 倍高速に処理することが可能となった。これにより、大規模データの深層学習において読込データのボトルネックを解消することができると考えられる。本成果は国際会議 6th IEEE/ACM International Conference on Big Data Computing, Applications and Technologies (BDCAT 2019)において発表した。

## 【7】大規模メタゲノムデータ解析の研究（建部）

メタゲノム解析は環境サンプルなどから抽出したゲノムを網羅的に解析するものであり、特定のゲノムの培養が難しいケースに対しても解析が可能となる。シーケンサの処理能力の向上により、クエリデータ、参照データベースの双方のデータ量が増えている。これにより、メモリ量、演算速度の問題により、1 ノードでの処理ができなくなってきた。この問題を解決するために、これまでクエリデータを分割して分散解析する方法が提案されている。しかしながら、参照データベースのデータ量の増加により、参照データベースについても分割することが必要となっている。本研究では、クエリデータと参照データベースの両方を分割し、分散データ解析する手法を提案する。両データを分割することにより、分散データ解析した結果の集計処理が複雑となるが、本研究では Pwrake ワークフローシステムを用いることにより解決した。また、Gfarm/BB により、ノードローカルストレージを効率的に用いることで大規模処理時においても、I/O 性能がオーバーヘッドとならないこと、演算性能がスケールすることを確かめた。

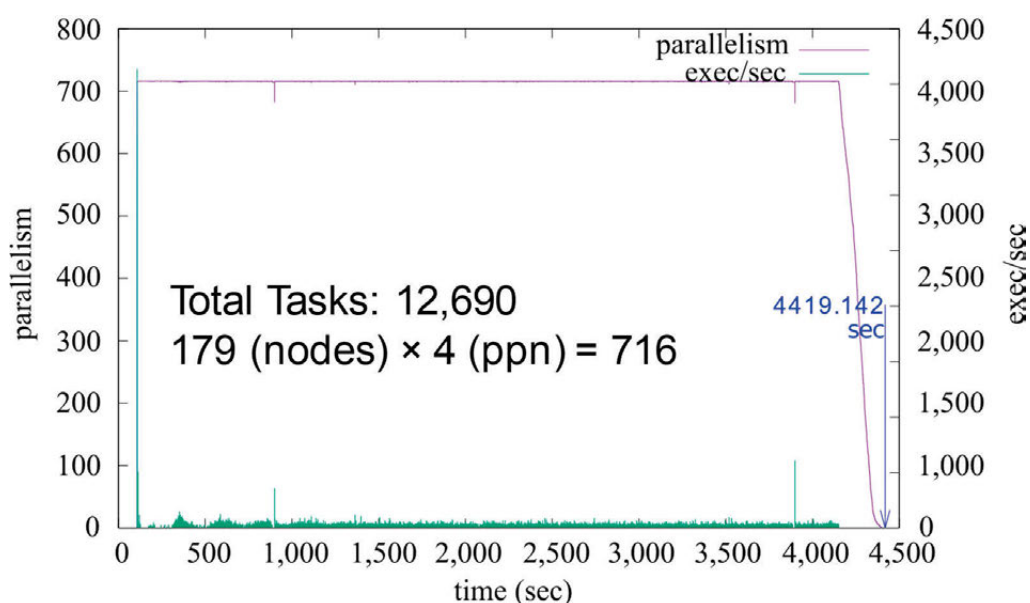


図 12 Tsubame3.0 による大規模実行の様様

図 12 に東京工業大学のスーパーコンピュータ TSUBAME3.0 の 180 ノードを用いた大規模実行の様態を示す。1 ノードは Gfarm/BB のメタデータサーバ, Pwrake ワークフローシステムのマスターサーバとして用い, 残りの 179 ノードで演算を行っている。各ノードに GPU が 4 枚あるため, 各ノードでは 4 プロセスを実行している。この実行の様態は最も時間を費やすアライメントプロセスを示しているが, 実行開始から利用可能な計算ノードをフルに使っていることが分かる。62 GB のデータベースと 71 GB のクエリデータのメタゲノム解析を 180 ノード用いて前処理, 後処理を合わせて 2 時間弱で実行することが可能であった。本規模は我々が知る限りで最大のメタゲノム解析である。本成果は国際会議 Third IEEE International Workshop on Benchmarking, Performance Tuning and Optimization for Big Data Applications (BPOD 2019)において発表した。

#### 【8】In transit 気象データ解析の研究 (建部)

筑波大学計算科学研究センターの気象グループは City-LES 気象 LES モデルシミュレーションコードを開発している。City-LES は超高解像度の LES シミュレーションを行うため, さまざまなデータ解析が可能であるが, この研究では動的モード分解を行うことにより, 乱流構造の解析を行う。動的モード分解は, 時系列データのモード分解を行うものであり, 時系列データを高速に格納し, データ解析時に高速に読み込むことが必要となる。そのために, 本研究では Oakforest-PACS スーパーコンピュータのバーストバッファシステム IME の利用を検討した。IME は, 演算性能とストレージ性能の性能ギャップを埋めるため, 並列ファイルシステムと演算ノードの間のストレージ階層として導入されたものである。

図 13 に City-LES の書き込み性能を示す。本グラフは計算ノード数を増やしたときの書き込み性能を示している。下の二本の線は並列ファイルシステムに書き込みを行った場合である。1 ストライプの場合と 128 ストライプの場合が示されているが, 128 ストライプの場合でも 10 GB/s ほどで頭打ちとなっている。一方, IME を用いた場合, 256 ノードを用いた場合でも性能向上し, 60 GB/s ほどの性能を達成している。読み込みについては, 複数の時系列データを読み込むことが必要となるが, 多次元配列のデータ分散が書き込みプロセスと読み込みプロセスで異なることが問題となる。それぞれの読み込みプロセスが必要なデータを直接読み込むと, 細切れとなり読み込み性能は劣化してしまう。これを解決するために, 2 フェーズで読み込みを行い, 読み込みは最も性能が良くなるデータ分散で読み込みを行い, その後ノード間で必要なデータ転送を行うようにした。これにより読み込み性能を改善することができた。本手法は, 従来は 1 ファイルについて行われていたが, 本研究ではそれを複数ファイルに応用した。本成果は国際会議 6th IEEE/ACM International Conference on Big Data Computing, Applications and Technologies (BDCAT 2019)において発表した。

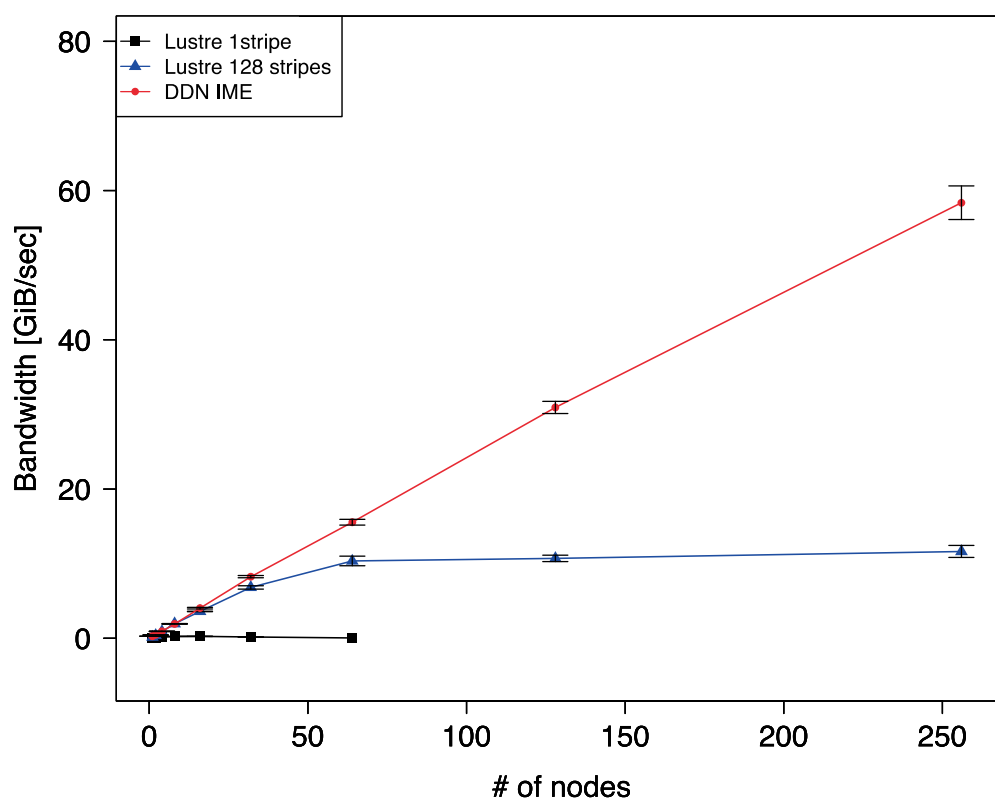


図 13 City-LES の書き込み性能

### 【9】分散ファイルシステム及びグリッド・クラウド技術に関する研究（建部）

文部科学省が進める革新的ハイパフォーマンズコンピューティングインフラ（HPCI）の HPCI 共用ストレージ，素粒子物理学データ共有システム JLDG のシステムソフトウェアとしても利用される Gfarm ファイルシステムの研究開発を行った。

本年度は，フェイルオーバー機能の高度化，暗号化ファイルシステム対応を行った。

Gfarm ファイルシステムは，メタデータ，ファイルデータが冗長化されており，単一障害についてはフェイルオーバーにより隠蔽することが可能である。メタデータについては，マスターメタデータサーバと複数のスレーブメタデータサーバが動作しており，マスターメタデータサーバに障害が発生した時，各メタデータサーバのコミットログを確認し，最も新しいログをコミットしているサーバがマスターメタデータサーバに昇格する。この時，障害が発生したメタデータサーバのコミットログが参照できないと最新かどうかの確認ができないままフェイルオーバーを行うこととなる。この場合，最悪ケースではコミット済みのログが失われてしまうこととなる。このケースについて，確認が取れるまでは読込オンリーファイルシステムとして動作するように改修を行った。これにより，コミットログの確認が取れるまでの間も安全にフェイルオーバーが行えるようになった。

暗号化ファイルシステムの対応については、EncFS と組み合わせることにより Gfarm ファイルシステムに暗号化されたデータの格納を行う。このとき、EncFS はマルチスレッドでアクセスするが、Gfarm ライブラリはマルチスレッドセーフではないため逐次的にしか動作することができない。そのため、マルチスレッドセーフとなるように改修を行った。これにより、マルチスレッドプログラムからのファイルアクセスが高速となった。

これらの成果はまだリリースされていないが、まもなくリリースを予定している。

## 【10】ブロッククリロフ部分空間反復法の近似解精度向上に関する研究（多田野）

正則な  $n$  次行列  $A$  と  $L$  本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式：

$$AX = B \quad (1)$$

は、素粒子物理学分野における物理量計算や、疎行列に対する固有値解法の内部問題等で現れる。同方程式の求解速度、近似解精度はアプリケーションに対して大きな影響を及ぼすため、両面に優れた数値解法の開発が必要となる。連立一次方程式 (1) に対する効率的な数値解法として、ブロッククリロフ部分空間反復法がある。同法は複数の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式を同時に解くことができ、クリロフ部分空間反復法と比較して少ない反復回数で解が得られることがある。その結果として、より高速な求解が可能となる。しかしながら、近似解精度の面では、右辺ベクトル数  $L$  が多いと精度劣化が発生し、高精度の近似解が得られないことがある。我々はこれまで、ブロッククリロフ部分空間反復法の「積型」と呼ばれる解法群に注目し、Block BiCGGR 法や Block GWBiCGSTAB 法などの高精度近似解の生成が可能な解法を構築してきた。令和元年度は、残差の収束性に優れた GPBiCG 法を複数右辺ベクトル版に拡張した Block GPBiCG 法を構築するとともに、生成される近似解の精度改善に関する改良を行った。

連立一次方程式 (1) の第  $(k+1)$  番目の近似解を  $X_{k+1}$  とすると対応する残差行列  $R_{k+1}$  は

$$R_{k+1} = B - AX_{k+1} \quad (2)$$

となる。 $X_{k+1}$  が真の解であるとき、 $R_{k+1}$  はゼロ行列となる。Block GPBiCG 法では、 $X_{k+1}$  と  $R_{k+1}$  は以下の漸化式で求められる。

$$X_{k+1} = X_k + P_k \alpha_k + Z_k, \quad (3)$$

$$R_{k+1} = R_k - (AP_k) \alpha_k - \eta_k Y_k - \zeta_k (AT_k). \quad (4)$$

ここで、 $P_k, Z_k, Y_k, T_k$  は  $n \times L$  補助行列、 $\alpha_k$  は  $L$  次行列、 $\zeta_k, \eta_k$  はスカラーパラメータである。Block GPBiCG 法においては、パラメータ  $\zeta_k, \eta_k$  は残差行列のフロベニウスノルム  $\|R_{k+1}\|_F$  が最小になるように決められる。また、 $\eta_k = 0$  と固定して  $\|R_{k+1}\|_F$  が最小になるように  $\zeta_k$  を決定すると、Block BiCGSTAB 法に帰着する。関係式 (2) と漸化式 (3), (4) より、 $AZ_k = \eta_k Y_k + \zeta_k (AT_k)$  の関係が導かれる。

ここで、記号 $\langle \cdot \rangle$ は数値的に計算された誤差を含んだ行列を表すとする。真の残差行列  $B - A\langle X_{k+1} \rangle$  と漸化式で計算された残差行列  $\langle R_{k+1} \rangle$  の差を表す誤差行列を  $E_{k+1}$  とし、

$$E_{k+1} = B - A\langle X_{k+1} \rangle - \langle R_{k+1} \rangle \quad (5)$$

とする。丸め誤差のない正確な演算では、 $E_{k+1}$  はゼロ行列となる。式 (5) より、不等式：

$$\|E_{k+1}\| - \|\langle R_{k+1} \rangle\| \leq \|B - A\langle X_{k+1} \rangle\| \leq \|E_{k+1}\| + \|\langle R_{k+1} \rangle\|$$

が得られ、 $\|\langle R_{k+1} \rangle\|$  が十分小さくなったとしても  $\|B - A\langle X_{k+1} \rangle\| \approx \|E_{k+1}\|$  となり、真の残差行列は  $E_{k+1}$  の影響を受ける。ここでは、注目する誤差を「 $n \times L$  行列と  $L$  次行列の積で発生する丸め誤差」に限定し、それ以外の演算で発生する誤差は無視できると仮定する。このとき、誤差行列  $E_{k+1}$  は以下で表される。

$$\begin{aligned} E_{k+1} &= \sum_{i=0}^n (E_i^{(Y)} + E_i^{(P)}), \\ E_i^{(Y)} &\equiv \langle \eta_i Y_i \rangle + \langle \zeta_i (AT_i) \rangle - A\langle Z_i \rangle, \\ E_i^{(P)} &\equiv \langle (AP_i) \alpha_i \rangle - A\langle P_i \alpha_i \rangle. \end{aligned}$$

したがって、行列  $E_i^{(Y)}$  と  $E_i^{(P)}$  の影響を抑えることができれば誤差行列  $E_{k+1}$  の影響を抑えることができ、結果として近似解の精度改善につながる。

数値計算を行っている以上、丸め誤差は必ず発生し、これを完全になくすことは困難を極める。そこで本研究では、現在注目している「 $n \times L$  行列と  $L$  次行列の積で発生する丸め誤差」の発生は許容するが、行列  $E_i^{(Y)}$ 、 $E_i^{(P)}$  に及ぼす影響を極力小さくするように、漸化式の再構築を行った。行列  $E_i^{(Y)}$ 、 $E_i^{(P)}$  の影響を低減するアプローチをそれぞれ、提案手法 1、提案手法 2 と呼ぶ。これらの手法を組み込んだ方法を Modified Block GPBiCG 法と名付けた。ここでは漸化式の再構築に関する詳細は割愛するが、現在用いている誤差に関する仮定の下では、提案手法を用いることで行列  $E_i^{(Y)}$  と  $E_i^{(P)}$  はゼロ行列となる。また、ブロッククリロフ部分空間反復法では、右辺ベクトル数が増加すると残差行列の収束性が悪くなるため、これを緩和するために Modified Block GPBiCG 法に対して残差行列の正規直交化を組み込んだ手法も併せて開発した。この手法を Modified Block GPBiCGrQ 法と名付けた。また、パラメータ  $\eta_k$  を 0 に固定した Modified Block BiCGSTAB 法、及び Modified Block BiCGSTABrQ 法も併せて開発した。

数値実験によって、提案手法の有効性を確認する。テスト問題として、最適化問題において現れる行列 majorbasis を係数行列にもつ連立一次方程式を用いた。同方程式のサイズ  $n$  は 160,000、非零要素数は 1,750,416 である。右辺項  $B$  は乱数で設定し、ベクトル数  $L$  は 30 とした。実験環境は、CPU: Intel Xeon E5-2620v3 2.4GHz (6 cores)  $\times$  2、メモリ: 64GiB DDR4 2133MHz、コンパイラ: Intel Fortran 19.0.0、コンパイルオプション: -qopenmp -axCORE-AVX2 であり、OpenMP を用いて 12 スレッド並列で計算した。



図 14 に、Block GPBiCG 法と Block BiCGSTAB 法における、漸化式で計算された相対残差ノルム ( $\|R_k\|_F / \|B\|_F$ )、真の相対残差ノルム ( $\|B - AX_k\|_F / \|B\|_F$ )、及び誤差行列の相対ノルムの ( $\|E_k\|_F / \|B\|_F$ ,  $\|E_k^{(Y)}\|_F / \|B\|_F$ ,  $\|E_k^{(P)}\|_F / \|B\|_F$ ) 変化を示す。図 14(a) に示すよう

に、Block GPBiCG 法では行列  $E_k^{(Y)}$ ,  $E_k^{(P)}$  の相対ノルムがともに大きい値になっており、その影響で誤差行列  $E_k$  の相対ノルムも大きくなっている。漸化式の相対残差ノルムは減少しているが、真の相対残差ノルムは途中で停滞している。一方、Block BiCGSTAB 法においては、行列  $E_k^{(Y)}$  の影響は小さいが、 $E_k^{(P)}$  の影響により誤差行列  $E_k$  の相対ノルムが大きくなり、その影響で相対残差ノルムが反復途中で停滞している。

図 15 に、提案手法を適用した場合の Block GPBiCG 法、Block BiCGSTAB 法における漸化式で計算された相対残差ノルム、真の相対残差ノルム、及び誤差行列の相対ノルムの変化を示す。図 15 (a) に示すように、提案手法 1 を適用することで行列  $E_k^{(Y)}$  の影響を抑えることができる。同様に、図 15 (b) に示すように提案手法 2 を適用することにより、行列  $E_k^{(P)}$  の影響を低減できる。しかしながら、誤差行列  $E_k$  に影響を及ぼす要因が残っているため、いずれの場合も真の相対残差ノルムは反復途中で停滞している。一方、図 15 (c) に示すように Block GPBiCG 法に対して提案手法 1 と 2 の両方を適用することで、真の相対残差ノルムを十分小さくすることができた。また、Block BiCGSTAB 法では行列  $E_k^{(P)}$  が強く影響していたが、図 15 (d) に示すように、提案手法 2 を適用することで誤差行列  $E_k$  の影響を低減することができた。

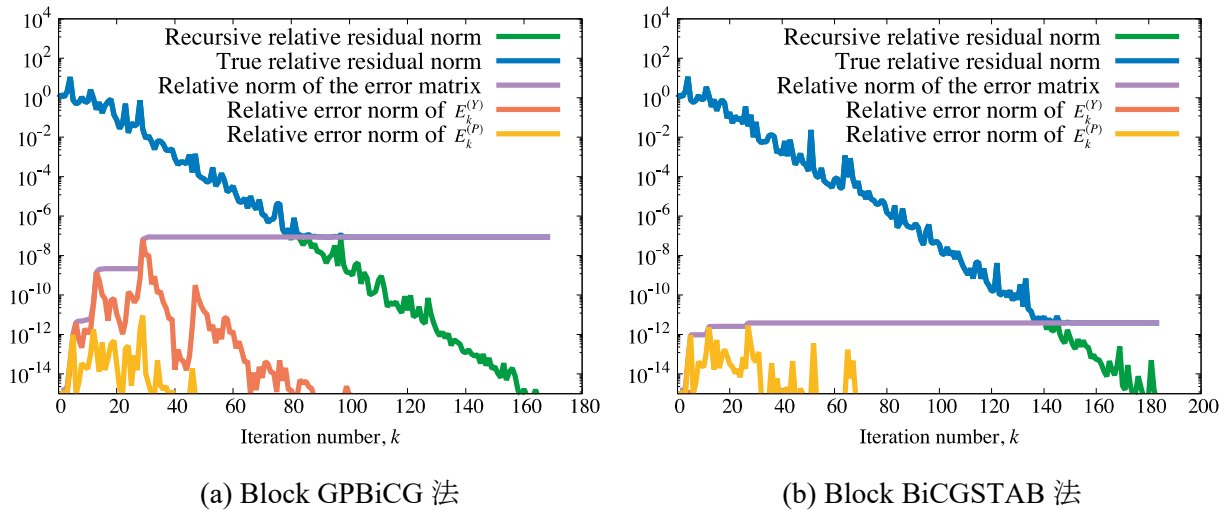
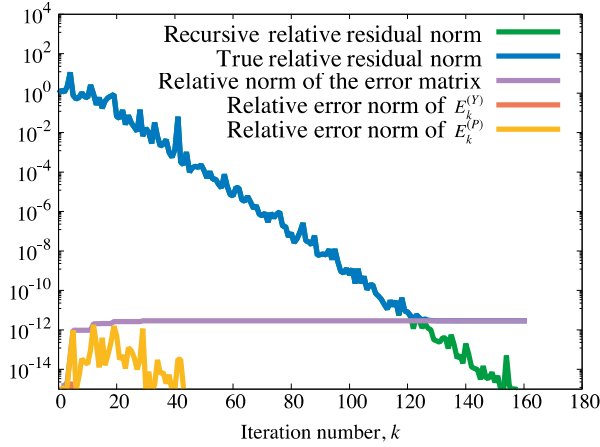


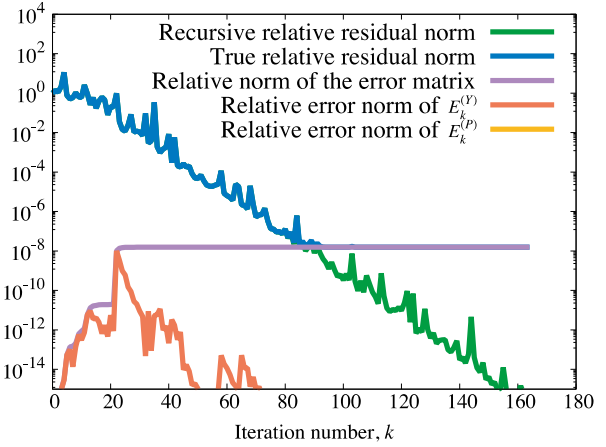
図 14 漸化式で計算された相対残差ノルム、真の相対残差ノルム、及び誤差行列の相対ノルムの変化

次に、右辺ベクトル数  $L$  を変化させたときの真の相対残差ノルム、反復回数、及び右辺ベクトル 1 本あたりの求解時間の変化を示す。図 16 (a) に示すように、提案手法を適用しない

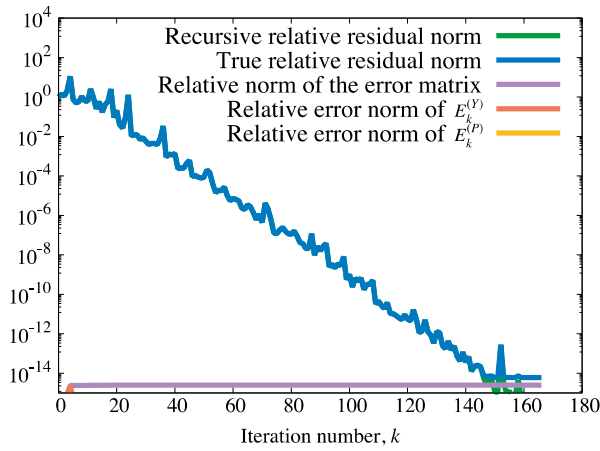
場合は右辺ベクトル数の増加にしたがって真の相対残差ノルムが増加する傾向にあるが、提案手法を適用することで増加を抑えることができた。また、図 16(b),(c) に示すように、右辺ベクトル数の増加に伴って、求解に要した反復回数、及び右辺ベクトル 1 本あたりの求解時間は減少傾向にあった。



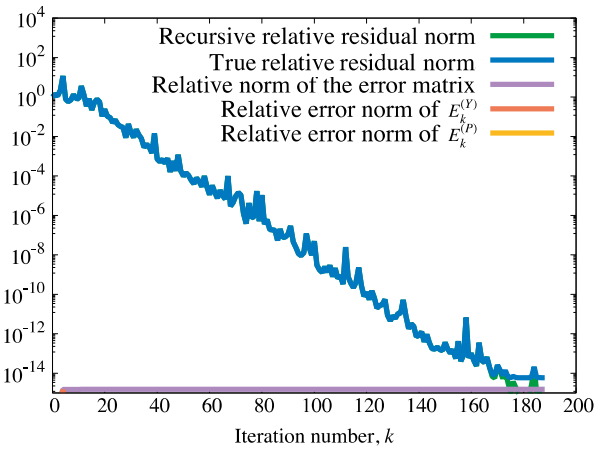
(a) Block GPBiCG 法 + 提案手法 1



(b) Block GPBiCG 法 + 提案手法 2

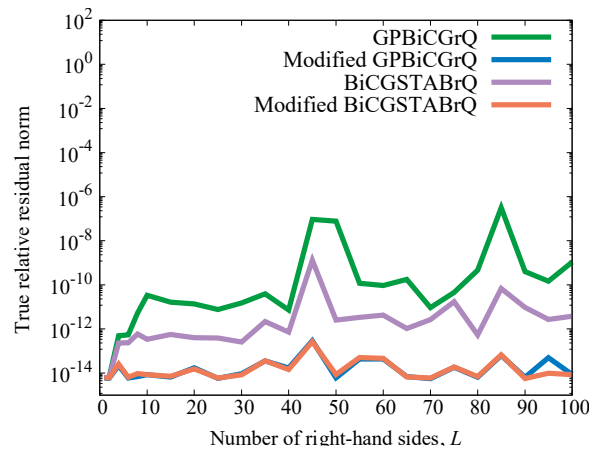


(c) Block GPBiCG 法 + 提案手法 1,2

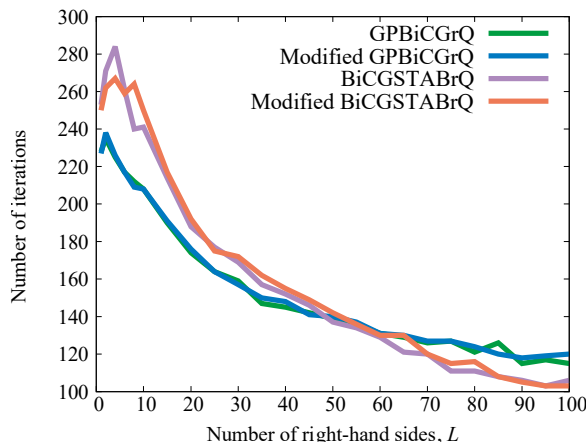


(d) Block BiCGSTAB 法 + 提案手法 2

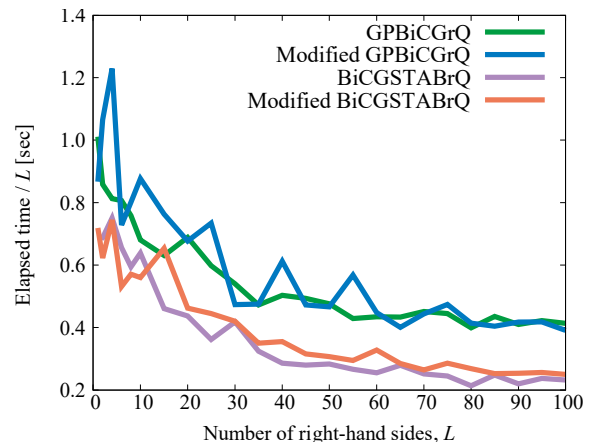
図 15 提案手法を適用した場合の漸化式で計算された相対残差ノルム, 真の相対残差ノルム, 及び誤差行列の相対ノルムの変化



(a) 真の相対残差ノルムの変化



(b) 反復回数の変化



(c) 右辺ベクトル 1 本あたりの求解時間

 図 16 右辺ベクトル数  $L$  の変化が真の相対残差ノルム，反復回数，右辺ベクトル 1 本あたりの求解時間に与える影響

#### 【11】GPU・FPGA 連携による宇宙輻射輸送コードの演算加速 (小林, 藤田, 朴)

GPU・FPGA 複合演算加速が必要とされる理由は，複数の物理モデルや複数の同時発生する物理現象を含むシミュレーションであるマルチフィジックスアプリケーションに対して有効と睨んでいるためである。マルチフィジックスでは，シミュレーション内に様々な特性の演算が出現するので，GPU だけでは演算加速が困難な場合がある。そのため，GPU だけでは対応しきれない特性の演算の加速に FPGA を利用することで，アプリケーション全体の性能向上を狙う。

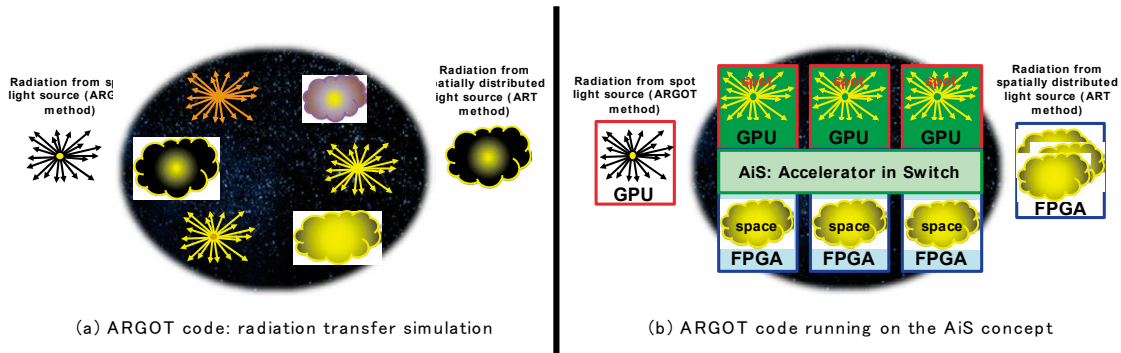


図 17 (a) 宇宙輻射輸送コード ARGOT の概観. (b) GPU・FPGA 連携による ARGOT コードの演算加速

本研究では、マルチフィジックスの例である、宇宙輻射輸送シミュレーションコード Accelerated Radiative transfer on Grids using Oct-Tree (ARGOT) を対象にする。ARGOT は本センターで開発されている宇宙輻射輸送を解くプログラムであり、図 17 (a) に示すように、点光源と空間に分散した光源の 2 種類の輻射輸送問題を含む。なお、点光源からの輻射輸送の計算を ARGOT コードにおける ARGOT 法、空間に広がる光源からの輻射輸送の計算を ARGOT コードにおける ART 法と呼ぶ。ここで重要なのは、ART 法は ARGOT プログラムの中で 90%以上の計算時間を占めるアルゴリズムであり、本研究では ART 法の演算をこれまでに開発してきた FPGA カーネルを用いて加速させる。また、ARGOT 法の演算には既に ARGOT プログラムに実装されている GPU カーネルを用いることで、図 17 (b) に示すように主要演算部分を GPU と FPGA に適材適所的に機能分散して ARGOT コードを最適化する。

図 18 に CPU 実装、GPU 実装、FPGA 実装の性能比較を示す。ARGOT(CPU) / ART(CPU) は ARGOT 法と ART 法がどちらも CPU 実装、ARGOT(GPU)/ART(GPU) はどちらも GPU 実装、ARGOT(GPU)/ART(FPGA) は ARGOT 法が GPU 実装、ART 法が FPGA 実装であることを表す。また、w/ DMA, wo/ DMA はデバイス間 DMA を用いているか、用いていないか、をそれぞれ表す。CPU 実装は C 言語ベースであり、OpenMP を用いたスレッド並列処理が適用されている。本研究では、単一の Xeon CPU (14 コア) を利用しており、1 コア 1 スレッドのマッピングでプログラムを実行した。GPU 実装は、CPU 実装をベースとしており、コードは CUDA で記述されている。

ARGOT 法と ART 法をどちらも CPU で実行した場合、すなわち ARGOT(CPU)/ART(CPU) を 1 としたときの ARGOT コードの実行速度向上比を図 16 に示す。ARGOT(GPU)/ART(GPU) に注目すると、メッシュサイズ  $16^3$  と  $32^3$  における速度向上は、それぞれ 1.18 倍、2.19 倍である。これは、P100 GPU にとってこれらのメッシュサイズが小さすぎるため、3,584 CUDA Core に対して十分な演算の並列度が得られないことに起因している。そのため、メッシュサイズ

が大きくなるにつれて、ARGOT(GPU)/ART(GPU)の性能は向上し、メッシュサイズ  $128^3$  においては、ARGOT(CPU)/ART(CPU) の 18.4 倍の性能となる。

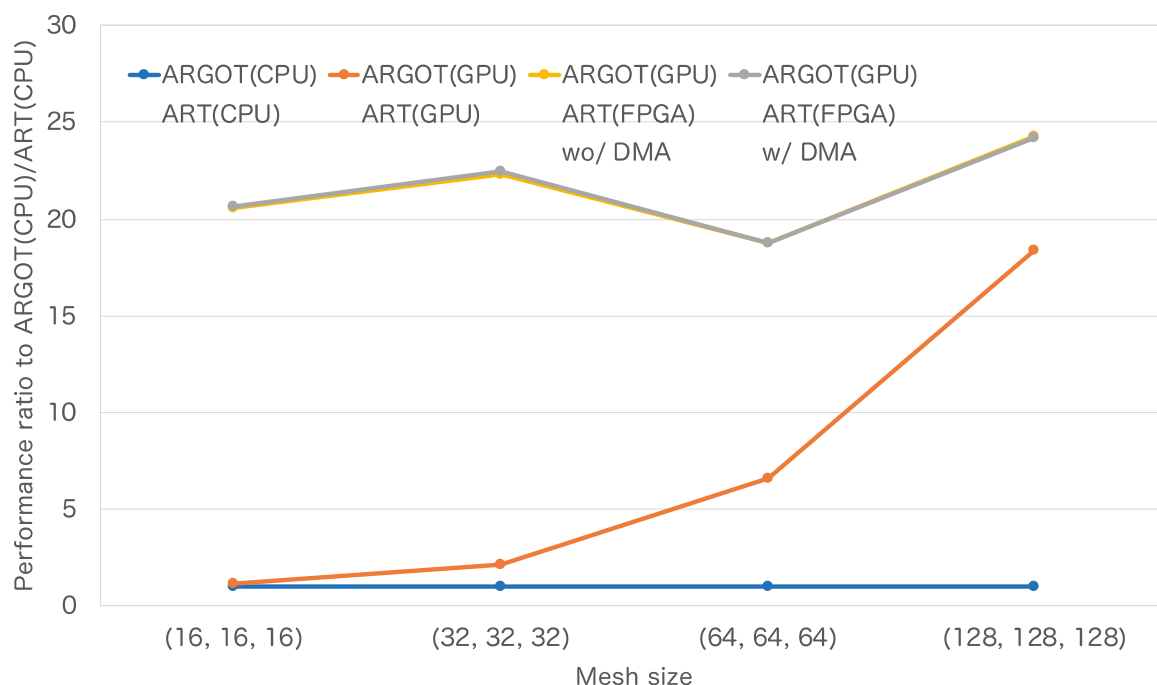


図 18 ARGOT 法と ART 法をどちらも CPU で実行した場合を 1 としたときの ARGOT コードの実行速度向上比

これに対し、ARGOT(GPU)/ART(FPGA) は、デバイス間 DMA の有無によらず、どの問題サイズであっても常に GPU 実装より優れていることが分かる。DMA の有無によって性能差がほとんど生じないのは、ARGOT コード中の GPU--FPGA 間通信が全体の処理の 1%程度であるためである。先行研究で報告されている通り、FPGA 版 ART は空間並列だけでなくパイプラインによって時間方向にも並列計算を行う。そのため、問題サイズが小さい場合であっても性能を発揮でき、その場合、GPU を大幅に凌駕する性能を持つことを示した。

## 【12】OpenCL 対応 FPGA 間通信機能による GPU・FPGA 複合型演算加速 (小林, 藤田, 朴)

GPU や FPGA といった異なる種類の計算デバイスがノード内に混在するような複雑なプラットフォーム上では、各デバイスで実行される演算をどのようにプログラミングし、全デバイスを協調動作させるかが重要な課題となる。これまでに我々は、GPU デバイスのグローバルメモリと FPGA デバイスの外部メモリ間で CPU を介さずにデータ転送を実現する機能を、PCIe DMA 転送用の IP (Intellectual Property) コアを用いて FPGA 上に実装し、その機能を FPGA ベンダーの提供する OpenCL ツールチェーンの仕組みと Verilog HDL とを活用することによ

って制御する手法を提案している。その GPU-FPGA 間 DMA 転送技術に加え、我々は OpenCL から制御可能な FPGA 間通信技術も開発しており、本研究ではこれらの技術を融合し、複数ノード上における GPU-FPGA 間連携を実現した。

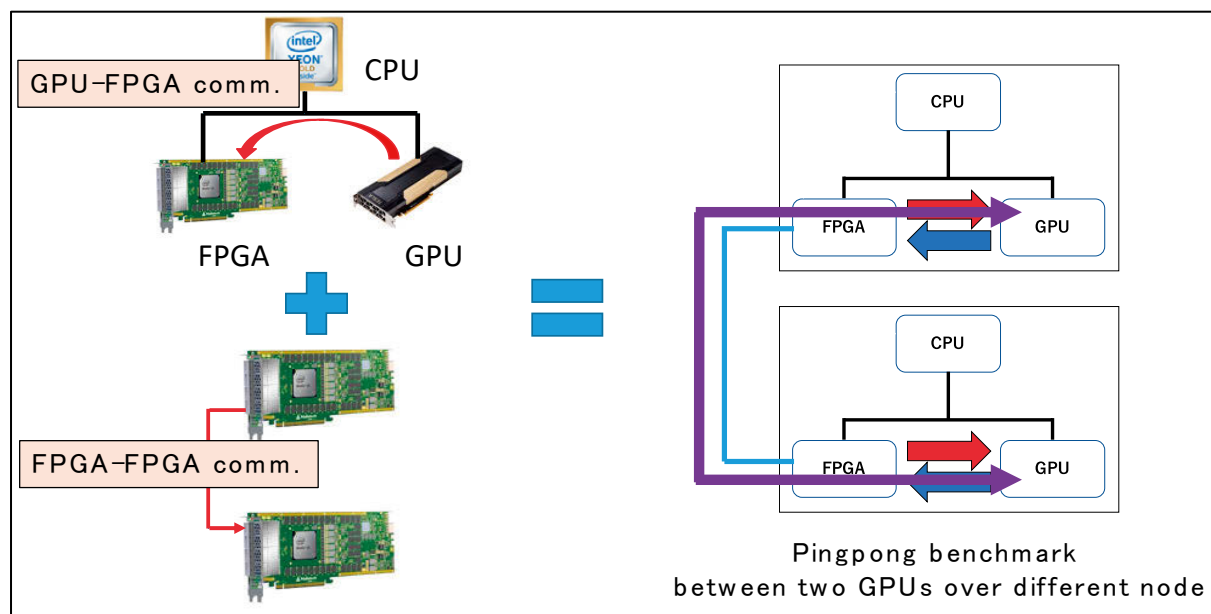


図 19 OpenCL 対応 GPU-FPGA 間通信技術と FPGA-FPGA 間通信技術との融合

複数ノード上における GPU-FPGA 間連携が正しく実現できているかを検証するために、図 19 に示すような pingpong ベンチマークを行った。この pingpong ベンチマークでは、初期データはノード 0 の GPU メモリに `cudaMemcpy` によって書き込まれ、それは FPGA を介することによって、ノード 1 の GPU に送信される。その後、ノード 1 の GPU で受信したデータは、FPGA を経由してノード 0 の GPU に返信される。これを実現するために、ノード 0 の FPGA では、初期データを送信するカーネル `Kernel ping` とノード 1 から送信されたデータを受信する `Kernel pong` が起動しており、ノード 1 の FPGA では、ノード 0 からのデータを受信して送り返すカーネル `Kernel reply` が起動している。なお、起動するカーネルは、MPI の rank に応じて選択している。

図 20 に 4 バイト通信時におけるノードを跨いだ GPU 同士の pingpong ベンチマークにおける通信レイテンシを示す。レイテンシの実測値は  $5.04 \mu\text{sec}$  であり、理論値は  $3.02 \mu\text{sec}$  である。なお、理論値は先行研究の結果をベースとしている。このため、理論性能と比べて  $2.02 \mu\text{sec}$  余分にかかっていることが分かる。しかしこれは、現在の実装が最適化されていないことに大きく依存している。



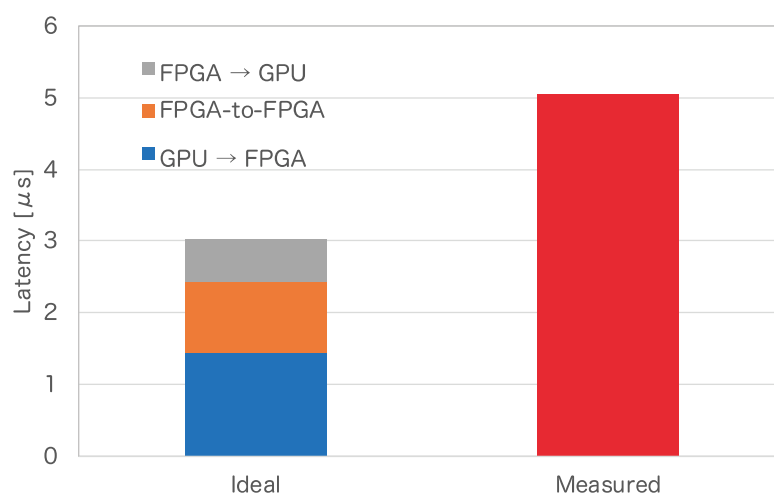


図 20 ノードを跨いだ GPU 同士の pingpong ベンチマークにおける通信レイテンシ

ここで重要なことは、我々が提案した手法により、GPU と FPGA が異なるノード上で協調して動作することが可能になったことである。これは、FPGA についての深い知識や多大な実装労力を必要とせず、GPU・FPGA 中心のアプリケーションコードを実装できることを意味する。今回の評価結果をもとに、異なるノード上で複数の GPU と FPGA 上で動作する HPC アプリケーションを実装し、その性能を評価することが今後の課題である。

### 【13】 OpenCL による FPGA 上の演算と通信を融合した並列処理システムの開発(藤田, 小林, 朴)

近年、Field Programmable Gate Array (FPGA)が高性能計算の分野で注目されているが、絶対的な演算性能は他の演算加速装置と比べて弱く、適用できる計算が少ないという問題がある。我々は FPGA が持つ強力な通信機構に注目しており、他の演算加速装置はこの特性を有しない FPGA に固有のものである。従来の FPGA 開発においては、ハードウェア記述言語 (HDL) を用いて低レベルな記述をしなければならず、開発コストが高いという問題があった。この問題は、ソフトウェアで用いられる言語 (C, C++, OpenCL 等) を用いてハードウェアを記述できる高位合成 (HLS) 技術の発展により解決されつつある。科学技術計算を記述することは HLS を用いて実現できるが、通信機構を扱うことは容易ではない。そこで、我々は、OpenCL から通信機構を扱えるフレームワーク Communication Integrated Reconfigurable CompUting System (CIRCUS)の研究開発を行っている。

本センターでは 1 ノードあたり 2 FPGA ボードを搭載するスーパーコンピュータ Cygnus を運用しており、本研究では CIRCUS 通信フレームワークを Cygnus 上に実装し性能評価を行った。評価結果を下図に示す。この評価は Cygnus に搭載されている FPGA ボードを最大 8 枚用いたものであり、1-hop が隣接する FPGA 間通信、2-hops が隣接の隣接 FPGA 間通

信を意味し、最大で 7-hops までの評価となる。最大スループットは 90.2Gbps, 最小レイテンシは 500ns を達成した。また, CIRCUS はルーターを内蔵しており隣接していない FPGA 間で通信が行える。その際の 1-hop あたりの追加レイテンシは約 250ns という結果が得られた。今後は, CIRCUS 通信を実際の高性能計算アプリへ追加し, 複数の FPGA を用いた並列計算を実施していきたいと考えている。

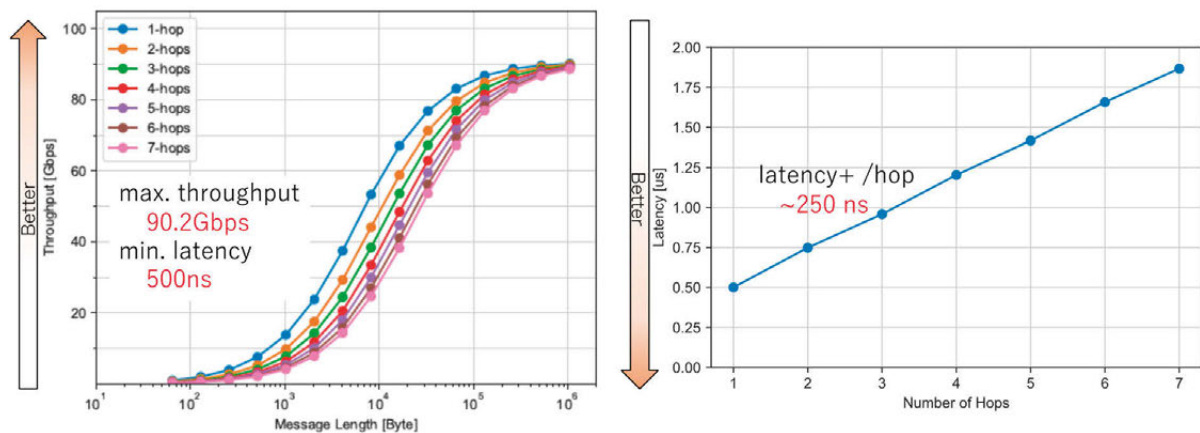


図 21 CIRCUS 通信のスループット (左), 通信レイテンシ (右) の評価結果.

#### 4. 教育

学生の指導状況 (学生氏名, 学位の種類, 論文名)

1. 辻大亮, 修士 (工学), 都市気象コード City-LES の GPU クラスタによる高速化, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士業論文, 令和 2 年 3 月 (指導: 朴泰祐)
2. 綱島隆太, 修士 (工学), GPU・FPGA 協調プログラミング環境に関する研究, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士業論文, 令和 2 年 3 月 (指導: 朴泰祐)
3. 中道安祐未, 修士 (工学), GPU・FPGA 複合演算加速による宇宙物理コードの高速化, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士業論文, 令和 2 年 3 月 (指導: 朴泰祐)
4. 枝松拓弥, 修士 (工学), AVX-512 命令を用いた多倍長整数乗算の高速化, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士業論文, 令和 2 年 3 月 (指導: 高橋大介)
5. 辻祥太, 修士 (工学), メニーコアプロセッサにおける行列転置の実装と評価, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士業論文, 令和 2 年 3 月 (指導: 高橋大介)
6. 堀江悠樹, 修士 (工学), 分散合意手法 Raft を用いたトランザクション処理の実装と評価, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 令和 2 年 3 月 (指導教員: 建部修見)



7. 河合祐輔, 修士 (工学), 高次元データの本質的な次元推定の高速化と性能評価, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 令和2年3月 (指導教員: 建部修見)
8. 北澤昂大, 修士 (工学), クラウドストレージによる階層型ストレージシステムの研究, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 令和2年3月 (指導教員: 建部修見)
9. 町田健太, 修士 (工学), 大規模データに対するメタゲノム解析システムの研究, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 令和2年3月 (指導教員: 建部修見)
10. 澤田一樹, 修士 (工学), 分散バーストバッファの I/O 性能に関する研究, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 令和2年3月 (指導教員: 建部修見)
11. 芹沢和洋, 修士 (工学), 大規模機械学習の高速化に関する研究, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 令和2年3月 (指導教員: 建部修見)
12. 田村駿弥, 修士 (工学), 空間索引木 R-tree の並列挿入手法に関する研究, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 令和2年3月 (指導教員: 建部修見)
13. 田辺敬之, 修士 (工学), トランザクション処理における並行性制御法の評価, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 令和2年3月 (指導教員: 建部修見)
14. 佐藤拓人, 修士 (工学), 気象学大規模乱流構造解析ワークフローに関する研究, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 令和2年3月 (指導教員: 建部修見)
15. 西野裕貴, 学士 (工学), 光・電子融合第一原理アプリケーションの GPU による高速化, 筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 令和2年3月 (指導: 朴泰祐)
16. 渡邊孔英, 学士 (工学), 演算加速装置による生命科学向け分子動力学法の高速度化, 筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 令和2年3月 (指導: 朴泰祐)
17. 柏野隆太, 学士 (工学), 大規模高性能計算のための FPGA 間通信技術に関する研究, 筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 令和2年3月 (指導: 小林諒平)
18. NAM WOON, 学士 (工学), Smoothing filter を用いた Screen Space Ambient Occlusion への適用, 筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 令和2年3月 (指導: 高橋大介)
19. 杉崎行優, 学士 (工学), Fast Computation of the Exact Number of Magic Series with an Improved Montgomery Multiplication Algorithm (改良版モンゴメリ乗算アルゴリズムを用いた魔法列の正確かつ高速な数え上げ), 筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 令和2年3月 (指導: 高橋大介)

20. 倉本健，学士（工学），分散深層学習におけるデータ読込性能の評価，筑波大学情報学群情報科学類卒業論文，令和2年3月（指導教員：建部修見）
21. 石川翔大，学士（工学），ブロッククリロフ部分空間反復法による鞍点型連立一次方程式の求解高速化，筑波大学情報学群情報科学類卒業研究論文，令和2年3月（指導：多田野寛人）

## 5. 受賞，外部資金，知的財産権等

### 受賞

1. SCA2020, Taisuke Boku, Asia HPC Leadership Award, Feb. 26th, 2020.

### 外部資金

1. 文部科学省高性能汎用計算機高度利用事業費補助金 朴泰祐（代表），H29～33年度，32,580千円（R01年度），「次世代演算通信融合型スーパーコンピュータの開発」
2. 科学研究費補助金基盤研究（B）（一般），朴泰祐（代表），H30～32年度，5,500千円（R01年度），「再構成可能システムとGPUによる複合型高性能計算プラットフォーム」
3. 理化学研究所受託研究，朴泰祐（代表），H27～H32年度，6,600千円（R01年度），「ポスト京の並列プログラミング環境およびネットワークに関する研究」
4. 科学研究費補助金基盤研究（C），高橋大介（代表），H31～R3年度，1,040千円（H31年度），「エクサスケールシステムにおける高速フーリエ変換のアルゴリズムに関する研究」
5. 科学研究費補助金 基盤研究(B)（一般），建部修見（代表），H29～H31年度，7,930千円，「極端気象予測を拓くビッグデータ機械学習基盤の研究」
6. NEDO，建部修見（分担），H30～H32年度，9,531千円，「実社会の事象をリアルタイム処理可能な次世代データ処理基盤技術の研究開発」
7. 共同研究（富士通研究所），建部修見（代表），H31年度，3,630千円，「大量データ管理に向けたストレージシステム」
8. 科学研究費補助金若手研究，小林諒平（代表），H31～H32年度，2,470千円（R01年度），「FPGAを用いた超高速ハードウェアソーティングアルゴリズムの開発」

### 知的財産権

（該当なし）

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

1. 藤田典久, 小林諒平, 山口佳樹, 朴泰祐, 吉川耕司, 安部牧人, 梅村雅之, 宇宙輻射輸送コードにおける OpenCL による FPGA 演算加速最適化, 情報処理学会論文誌トランザクション コンピューティングシステム (ACS), 12 巻, 3 号, pp.64-75, 2019.
2. Daisuke Takahashi and Franz Franchetti, “FFTE on SVE: SPIRAL-Generated Kernels”, Proc. International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2020), pp. 114-122 (2020).
3. Daisuke Takahashi, “On the computation and verification of  $\pi$  using BBP-type formulas”, The Ramanujan Journal, Vol. 51, No. 1, pp. 177-186 (2020).
4. Daisuke Takahashi, “Implementation of Parallel 3-D Real FFT with 2-D Decomposition on Intel Xeon Phi Clusters”, Proc. 13th International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics (PPAM 2019), Part I, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 12043, pp. 151-161, Springer (2020).
5. Takuya Edamatsu and Daisuke Takahashi, “Accelerating Large Integer Multiplication Using Intel AVX-512IFMA”, Proc. 19th International Conference on Algorithms and Architectures for Parallel Processing (ICA3PP 2019), Part I, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 11944, pp. 60-74, Springer (2020).
6. Samar Aseeri, Benson K. Muite, and Daisuke Takahashi, “Reproducibility in Benchmarking Parallel Fast Fourier Transform based Applications”, Companion of the 2019 ACM/SPEC International Conference on Performance Engineering (ICPE'19), pp. 5-8 (2019). (vision paper)
7. Yasuhiro Nakamura, Hideyuki Kawashima, Osamu Tatebe, "Integration of TicToc Concurrency Control Protocol with Parallel Write Ahead Logging Protocol", International Journal of Networking and Computing, Vol.9, No.2, pp.339-353, doi: 10.15803/ijnc.9.2\_339, 2019
8. Harunobu Daikoku, Hideyuki Kawashima, and Osamu Tatebe, "Skew-Aware Collective Communication for MapReduce Shuffling", IEICE Transactions on Information and Systems, Vol.E102-D, No.12, pp.2389-2399, doi: 10.1587/transinf.2019PAP0019, 2019
9. Takuto Sato, Osamu Tatebe, Hiroyuki Kusaka, "In-situ data analysis system for high resolution meteorological large eddy simulation model", Proceedings of the 6th IEEE/ACM International Conference on Big Data Computing, Applications and Technologies, pp.155-158, doi: 10.1145/3365109.3368769, 2019

10. Kazuhiro Serizawa, Osamu Tatebe, "Accelerating Machine Learning I/O by overlapping data staging and mini-batch generations", Proceedings of the 6th IEEE/ACM International Conference on Big Data Computing, Applications and Technologies, pp.31-34, doi: 10.1145/3365109.3368768, 2019
11. Kenta Machida, Osamu Tatebe, "GHOSTZ PW/GF: Distributed Parallel Homology Search System for Large-scale Metagenomic Analysis", Proceedings of the Third IEEE International Workshop on Benchmarking, Performance Tuning and Optimization for Big Data Applications (BPOD 2019), pp.3492-3700, doi: 10.1109/BigData47090.2019.9006499, 2019
12. Osamu Tatebe, Shukuko Moriwake, Yoshihiro Oyama, "Gfarm/BB - Gfarm file system for node-local burst buffer", Journal of Computer Science and Technology, Vol.35, Issue 1, pp.61-71, doi: 10.1007/s11390-020-9803-z, 2020
13. Kohei Hiraga, Osamu Tatebe, Hideyuki Kawashima, "Scalable Distributed Metadata Server Based on Nonblocking Transactions", Journal of Universal Computer Science, Vol.26, Issue 1, pp.89-106, 2020
14. Hiroto Tadano, Development of the Block BiCGGR2 method for linear systems with multiple right-hand sides, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, Vol. 36, No. 2, pp. 563—577, 2019.
15. Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, Yoshiki Yamaguchi, Ayumi Nakamichi, Taisuke Boku: OpenCL-enabled GPU-FPGA Accelerated Computing with Inter-FPGA Communication, (short paper), IXPUG Workshop at HPC Asia 2020, pp.17-20, January 2020
16. Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, Yoshiki Yamaguchi, Ayumi Nakamichi and Taisuke Boku: GPU-FPGA Heterogeneous Computing with OpenCL-enabled Direct Memory Access, 2019 IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium Workshops (IPDPSW)/pp.489-498, 2019-07
17. Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Yoshiki Yamaguchi, Taisuke Boku, Parallel Processing on FPGA Combining Computation and Communication in OpenCL Programming, Proceedings of 2019 IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium Workshops, pp.479-488, 2019.

## B) 査読無し論文

1. 辻大亮, 多田野寛人, 朴泰祐, 池田亮作, 佐藤拓人, 日下博幸, "都市気象コード City-LES の並列 GPU 実装の最適化と性能評価", 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンズコンピューティング(HPC), 2019-HPC-170(5), pp.1-9, 2019 年 7 月.

2. 辻大亮, 朴泰祐, 池田亮作, 佐藤拓人, 多田野寛人, 日下博幸, "都市気象コード City-LES の OpenACC による並列 GPU 実装とデータ転送最適化", 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスクンピューティング (HPC) , 2020-HPC-173(22), pp.1-8, 2020 年 3 月.
3. 綱島 隆太, 小林 諒平, 藤田 典久, 中道 安祐未, 朴 泰祐, " GPU-FPGA 協調プログラミングを実現するコンパイラの開発", 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスクンピューティング (HPC) , 2019-HPC-172(11), pp.1-10, 2019 年 12 月.
4. 渡部裕, 李珍泌, 佐野健太郎, 朴泰祐, 佐藤三久, "ストリーム計算による最適化を併用する FPGA 向け OpenMP コンパイラの試作", 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスクンピューティング(HPC), 2019-HPC-170(3), pp.1-8, 2019 年 7 月.
5. 綱島隆太, 小林諒平, 藤田典久, 中道安祐未, 朴泰祐, "GPU-FPGA 協調計算を記述するためのプログラミング環境に関する研究", 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスクンピューティング(HPC), 2019-HPC-169(10), pp.1-9, 2019 年 5 月.
6. 渡部裕, 李珍泌, 朴泰祐, 佐藤三久, "演算加速機構を対象とするタスク並列ランタイムにおけるデータ移動最適化", 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスクンピューティング (HPC) , 2020-HPC-173(11), pp.1-9, 2020 年 3 月.
7. 枝松拓弥, 高橋大介, "AVX-512IFMA を用いた多倍長整数乗算の高速化", 日本応用数理学会 2019 年度年会講演予稿集, 2 pages, 2019.
8. 高橋大介, "Xeon Phi クラスタにおける二次元分割を用いた並列三次元実数 FFT の実現と評価", 日本応用数理学会 2019 年度年会講演予稿集, 2 pages, 2019.
9. 芹沢 和洋, 建部 修見, 大規模機械学習訓練における I/O 性能の高速化, 研究報告ハイパフォーマンスクンピューティング (HPC) , 2019-HPC-170 (9), 12 pages, 2019 年 7 月
10. 北澤 昂大, 建部 修見, Gfarm とクラウドストレージによる階層型ストレージシステムの研究, 研究報告ハイパフォーマンスクンピューティング (HPC) , 2019-HPC-170(25), 7 pages, 2019 年 7 月
11. 町田 健太, 建部 修見, 大規模ゲノムデータに対する分散並列相同性検索システムの提案, 研究報告ハイパフォーマンスクンピューティング (HPC) , 2019-HPC-170 (31), 9 pages, 2019 年 7 月
12. 高橋 宗史, 建部 修見, 分散オブジェクトストレージ Ceph のための Spark ストレージアダプタの設計, 研究報告ハイパフォーマンスクンピューティング (HPC) , 2019-HPC-171 (1), 8 pages, 2019 年 9 月

13. 畑中 智之, 建部 修見, ユーザ権限における Docker オーケストレーションの構築と撤去, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), 2019-HPC-171 (3), 6 pages, 2019 年 9 月
14. 町田 健太, 建部 修見, 分散並列相同性検索システム GHOSTZ PW/GF の大規模環境における評価, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), 2019-HPC-172(2), 9 pages, 2019 年 12 月
15. 澤田 一樹, 建部 修見, 分散バーストバッファが持つ I/O の性能評価, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), 2019-HPC-172(20), 6 pages, 2019 年 12 月
16. 小林 諒平, 藤田 典久, 中道 安祐未, 山口 佳樹, 朴 泰祐, 吉川 耕司, 安部 牧人, 梅村, 雅之, GPU・FPGA 複合演算加速による宇宙輻射輸送コード ARGOT の性能評価, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) 2020-HPC-173(8) 1 - 11 2020 年 3 月
17. 小林 諒平, 藤田 典久, 中道 安祐未, 山口 佳樹, 朴 泰祐, 吉川 耕司, 安部 牧人, 梅村, 雅之, OpenCL 対応 GPU・FPGA デバイス間連携機構による宇宙輻射輸送コードの演算加速, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) 2019-HPC-172(8) 1 - 9 2019 年 12 月
18. 小林 諒平, 藤田 典久, 山口 佳樹, 中道 安祐未, 朴 泰祐, OpenCL 対応 FPGA 間通信機能による GPU・FPGA 複合型演算加速, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) 2019-HPC-170(5) 1 - 9 2019 年 7 月
19. 中道 安祐未, 藤田 典久, 小林 諒平, 朴 泰祐, 吉川 耕司, 梅村 雅之, GPU・FPGA 複合演算加速による輻射流体シミュレーションコード ARGOT の実装, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) 2019-HPC-170(22) 1 - 5 2019 年 7 月
20. 藤田 典久, 小林 諒平, 山口 佳樹, 上野 知洋, 佐野 健太郎, 朴 泰祐, スーパーコンピュータ Cygnus 上における FPGA 間パイプライン通信の性能評価, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), 2020-HPC-173, pp.1-11, 2020.
21. 藤田 典久, 小林 諒平, 山口 佳樹, 朴 泰祐, 再構成可能なハードウェアを用いた演算と通信を融合する手法の提案と性能評価, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), 2020-HPC-171, pp.1-9, 2019.

## (2) 国際会議発表

### A) 招待講演

1. Taisuke Boku, “Japanese Supercomputer Development and Hybrid Accelerated Supercomputing”, HPC-AI Advisory Council, Perth, Australia, Aug. 27th, 2019.

2. Taisuke Boku, “Next Generation Accelerated Supercomputing: Cygnus System at University of Tsukuba”, AHeDD2019/IPAB2019, Kawasaki, Nov. 29th, 2019.
3. Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, Yoshiki Yamaguchi, Taisuke Boku, Kohji Yoshikawa, Masayuki Umemura: Cygnus: GPU + FPGA accelerated supercomputing platform, 1st International Workshop on Reconfigurable High Performance Computing (ReHPC'2019), Sep. 13th, 2019.

## B) 一般講演

1. Daisuke Takahashi and Franz Franchetti, “FFTE on SVE: SPIRAL-Generated Kernels”, Proc. International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2020), ACROS Fukuoka, Fukuoka, Japan, January 16, 2020.
2. Takuya Edamatsu and Daisuke Takahashi, “Accelerating Large Integer Multiplication Using Intel AVX-512IFMA”, 19th International Conference on Algorithms and Architectures for Parallel Processing (ICA3PP 2019), Deakin Downtown, Melbourne, Australia, December 9, 2019.
3. Daisuke Takahashi, “Implementation of Parallel 3-D Real FFT with 2-D Decomposition on Intel Xeon Phi Clusters”, 13th International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics (PPAM 2019), Bialystok University of Technology, Bialystok, Poland, September 11, 2019.
4. Samar Aseeri, Benson K. Muite, and Daisuke Takahashi, “Reproducibility in Benchmarking Parallel Fast Fourier Transform based Applications”, 2019 ACM/SPEC International Conference on Performance Engineering (ICPE'19), Indian Institute of Technology, Bombay, Mumbai, India, April 9, 2019.
5. Osamu Tatebe, “Bridging a gap between computing and storage”, France-Japan-Germany trilateral workshop: Convergence of HPC and Data Science for Future Extreme Scale Intelligent Applications, Tokyo, November 7, 2019
6. Hiroki Ohtsuji, Erika Hayashi, Naoto Fukumoto, Eiji Yoshida, Takuya Okamoto, Takeru Kuramoto, Osamu Tatebe, “Mitigating the Impact of Tail Latency of Storage Systems on Scalable Deep Learning”, 4th International Parallel Data Systems Workshop (PDSW 2019), Work-in-Progress session, Denver, November 18, 2019
7. Kazuhiro Serizawa, Osamu Tatebe, "Accelerating Machine Learning I/O by overlapping data staging and mini-batch generations", 6th IEEE/ACM International Conference on Big Data Computing, Applications and Technologies, New Zealand, December 3, 2019

8. Takuto Sato, Osamu Tatebe, Hiroyuki Kusaka, "In-situ data analysis system for high resolution meteorological large eddy simulation model", 6th IEEE/ACM International Conference on Big Data Computing, Applications and Technologies, Auckland, New Zealand, December 5, 2019
9. Kenta Machida, Osamu Tatebe, "GHOSTZ PW/GF: Distributed Parallel Homology Search System for Large-scale Metagenomic Analysis", Third IEEE International Workshop on Benchmarking, Performance Tuning and Optimization for Big Data Applications (BPOD 2019), Los Angeles, December 11, 2019
10. Hiroto Tadano, Performance evaluation of the Block GWBiCGSTAB method with dynamic grouping strategy, International Conference on Simulation Technology (JSST2019), Miyazaki, Japan, Nov. 2019.
11. Ayumu Saitoh, Yuji Hirabuki, Hiroto Tadano, Teruou Takayama, Atsushi Kamitani, Volumetric 3D reconstruction based on tomographic image data: acceleration by Global ICCG method, International Conference on Simulation Technology (JSST2019), Miyazaki, Japan, Nov. 2019.
12. Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, Yoshiki Yamaguchi, Ayumi Nakamichi, Taisuke Boku: OpenCL-enabled GPU-FPGA Accelerated Computing with Inter-FPGA Communication, IXPUG Workshop at HPC Asia 2020 2020 年 1 月 17 日
13. Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, Yoshiki Yamaguchi, Ayumi Nakamichi and Taisuke Boku: GPU-FPGA Heterogeneous Computing with OpenCL-enabled Direct Memory Access, The Ninth International Workshop on Accelerators and Hybrid Exascale Systems (AsHES), May 20th, 2019
14. Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Yoshiki Yamaguchi, Taisuke Boku, Parallel Processing on FPGA Combining Computation and Communication in OpenCL Programming, Proceedings of 2019 IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium Workshops, The Ninth International Workshop on Accelerators and Hybrid Exascale Systems (AsHES), May 20th, 2019.

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

1. 朴泰祐, FPGA を中心とした新しい演算加速クラスタソリューション, Intel FPGA Technology Day, Tokyo, 2019 年 11 月 26 日

#### B) その他の発表



1. 中道 安祐未, 藤田 典久, 小林 諒平, 朴 泰祐, 吉川 耕司, 梅村 雅之, GPU・FPGA 複合演算加速による輻射流体シミュレーションコード ARGOT の実装, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) 2019-HPC-170(22) 1 - 5 2019 年 7 月
2. 辻大亮, 多田野寛人, 朴泰祐, 池田亮作, 佐藤拓人, 日下博幸, "都市気象コード City-LES の並列 GPU 実装の最適化と性能評価", 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC), 2019-HPC-170(5), pp.1-9, 2019 年 7 月.
3. 辻大亮, 朴泰祐, 池田亮作, 佐藤拓人, 多田野寛人, 日下博幸, "都市気象コード City-LES の OpenACC による並列 GPU 実装とデータ転送最適化", 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) , 2020-HPC-173(22), pp.1-8, 2020 年 3 月.
4. 綱島 隆太, 小林 諒平, 藤田 典久, 中道 安祐未, 朴 泰祐, "GPU-FPGA 協調プログラミングを実現するコンパイラの開発", 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) , 2019-HPC-172(11), pp.1-10, 2019 年 12 月.
5. 渡部裕, 李珍泌, 佐野健太郎, 朴泰祐, 佐藤三久, "ストリーム計算による最適化を併用する FPGA 向け OpenMP コンパイラの試作", 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC), 2019-HPC-170(3), pp.1-8, 2019 年 7 月.
6. 綱島隆太, 小林諒平, 藤田典久, 中道安祐未, 朴泰祐, "GPU-FPGA 協調計算を記述するためのプログラミング環境に関する研究", 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC), 2019-HPC-169(10), pp.1-9, 2019 年 5 月.
7. 渡部裕, 李珍泌, 朴泰祐, 佐藤三久, "演算加速機構を対象とするタスク並列ランタイムにおけるデータ移動最適化", 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) , 2020-HPC-173(11), pp.1-9, 2020 年 3 月.
8. 枝松拓弥, 高橋大介, "AVX-512IFMA を用いた多倍長整数乗算の高速化", 日本応用数理学会 2019 年度年会, 東京, 2019 年 9 月 5 日.
9. 高橋大介, "Xeon Phi クラスタにおける二次元分割を用いた並列三次元実数 FFT の実現と評価", 日本応用数理学会 2019 年度年会, 東京, 2019 年 9 月 3 日.
10. 芹沢 和洋, 建部 修見, 大規模機械学習訓練における I/O 性能の高速化, 情報処理学会 HPC 研究会, 北海道, 2019 年 7 月 24 日
11. 北澤 昂大, 建部 修見, Gfarm とクラウドストレージによる階層型ストレージシステムの研究, 情報処理学会 HPC 研究会, 北海道, 2019 年 7 月 25 日
12. 町田 健太, 建部 修見, 大規模ゲノムデータに対する分散並列相同性検索システムの提案, 情報処理学会 HPC 研究会, 北海道, 2019 年 7 月 26 日
13. 高橋 宗史, 建部 修見, 分散オブジェクトストレージ Ceph のための Spark ストレージアダプタの設計, 情報処理学会 HPC 研究会, 東京, 2019 年 9 月 20 日

14. 畑中 智之, 建部 修見, ユーザ権限における Docker オーケストレーションの構築と撤去, 情報処理学会 HPC 研究会, 東京, 2019 年 9 月 20 日
15. 建部修見, OFP のファイルシステムと高速ファイルキャッシュシステム, 第 3 回 OFP 利活用報告会「OFP 徹底利活用入門」, 千葉, 2019 年 10 月 11 日
16. 建部修見, Gfarm ファイルシステムの概要と最新機能, Gfarm シンポジウム, 東京, 2019 年 10 月 25 日
17. 町田 健太, 建部 修見, 分散並列相同性検索システム GHOSTZ PW/GF の大規模環境における評価, 第 172 回 HPC 研究発表会, 沖縄, 2019 年 12 月 18 日
18. 澤田 一樹, 建部 修見, 分散バーストバッファが持つ I/O の性能評価, 第 172 回 HPC 研究発表会, 沖縄, 2019 年 12 月 19 日
19. 建部修見, Gfarm ファイルシステムの最新機能, Gfarm ワークショップ 2020, 宮崎, 2020 年 2 月 7 日
20. 多田野 寛人, Block GWBiCGSTAB 法における漸化式動的グループ化の性能評価, 2019 年並列／分散／協調処理に関する『北見』サマー・ワークショップ (SWoPP2019), 北見市民会館, 2019 年 7 月.
21. 倉本 亮世, 多田野 寛人, ブロック積型反復解法の近似解精度劣化の原因解析と高精度化, 日本応用数理学会 2019 年度年会, 東京大学駒場 I キャンパス, 2019 年 9 月.
22. 多田野 寛人, 漸化式動的グループ化による Block GWBiCGSTAB 法の収束性・近似解精度改善, 日本応用数理学会 2019 年度年会, 東京大学駒場 I キャンパス, 2019 年 9 月.
23. 多田野 寛人, Saddle Point Problem に関する一考察と高速解法への展望, 【非線形問題の解法と可視化に関する研究会】2019 年度第 1 回研究会, 自然科学研究機構核融合科学研究所, 2019 年 9 月.
24. 小林 諒平, 藤田 典久, 中道 安祐未, 山口 佳樹, 朴 泰祐, 吉川 耕司, 安部 牧人, 梅村, 雅之, GPU・FPGA 複合演算加速による宇宙輻射輸送コード ARGOT の性能評価, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) 2020-HPC-173(8) 1 - 11 2020 年 3 月
25. 小林 諒平, 藤田 典久, 中道 安祐未, 山口 佳樹, 朴 泰祐, 吉川 耕司, 安部 牧人, 梅村, 雅之, OpenCL 対応 GPU・FPGA デバイス間連携機構による宇宙輻射輸送コードの演算加速, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) 2019-HPC-172(8) 1 - 9 2019 年 12 月
26. 小林 諒平, 藤田 典久, 山口 佳樹, 中道 安祐未, 朴 泰祐, OpenCL 対応 FPGA 間通信機能による GPU・FPGA 複合型演算加速, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) 2019-HPC-170(5) 1 - 9 2019 年 7 月

27. 藤田 典久, 小林 諒平, 山口 佳樹, 上野 知洋, 佐野 健太郎, 朴 泰祐, スーパーコンピュータ Cygnus 上における FPGA 間パイプライン通信の性能評価, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), 2020-HPC-173, pp.1-11, 2020.
28. 藤田 典久, 小林 諒平, 山口 佳樹, 朴 泰祐, 再構成可能なハードウェアを用いた演算と通信を融合する手法の提案と性能評価, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), 2020-HPC-171, pp.1-9, 2019.

#### (4) 著書, 解説記事等

1. Daisuke Takahashi, “Fast Fourier Transform Algorithms for Parallel Computers”, Springer (2019).
2. Daisuke Takahashi, “Fast Fourier Transform in Large-Scale Systems”, Masaaki Geshi (Ed.), The Art of High Performance Computing for Computational Science, Vol. 1, Springer, pp. 137-168 (2019).

### 7. 異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等

#### 異分野間連携（センター内外）

- ・ 量子物性研究部門と光電子相互作用における第一原理計算のアプリケーション開発と「富岳」を始めとする各種スーパーコンピュータへの実装に関する共同研究を実施
- ・ 地球環境研究部門と City-LES コードの GPU 化, 及び大規模データ解析に関する共同研究を実施
- ・ 素粒子物理研究部門と Japan Lattice Data Grid (JLDG) の構築、運用に関して連携
- ・ 計算情報学研究部門（データ基盤分野）とデータベース処理の FPGA 化に関する共同研究を実施

#### 産学官連携

#### 国際連携・国際活動

- ・ 米国アルゴンヌ国立研究所と FPGA の並列処理応用と通信技術, 及びストレージシステムに関する共同研究を実施
- ・ 米国オークリッジ国立研究所と FPGA 向け OpenACC 複合コンパイラ, 及びバーストバッファシステムに関する共同研究を実施
- ・ フランス CNRS 及びドイツ・アーヘン工科大学とエラーフリーMPI を用いた PGAS 言語実装に関する共同研究を実施 (SPPEXA)

## 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

- ・ 国際会議 ICPP2019 (48th International Conference on Parallel Processing), Kyoto, Aug. 5th-8th, 2019
- ・ XcalableMP ワークショップ, 東京, 2019 年 11 月 5 日
- ・ ISC2019 (2019 International Supercomputing Conference, Frankfurt, 16th-20th Jun. 2019) における Workshop "Using FPGAs to Accelerating HPC and Data Analytics on Intel-Based Systems"
- ・ SC19 (2019 International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, Denver, 17th-22nd Nov. 2019) における BoF "Reconfigurable/FPGA Clusters for High Performance Computing"
- ・ SC19 (2019 International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, Denver, 17th-22nd Nov. 2019) における Panel Discussion "Reconfigurable Computing in HPC: Success Stories Today and Future?"
- ・ Gfarm シンポジウム 2019, 東京, 2019 年 10 月 25 日
- ・ Gfarm ワークショップ 2020, 宮崎, 2020 年 2 月 7 日

## 9. 管理・運営

組織運営や支援業務の委員・役員の実績

1. 朴泰祐：筑波大学情報環境委員会委員
2. 朴泰祐：筑波大学システム情報系人事委員会委員
3. 朴泰祐：理化学研究所客員主管研究員
4. 朴泰祐：HPCI 連携サービス委員会委員長
5. 朴泰祐：HPCI コンソーシアム理事
6. 朴泰祐：PC クラスタコンソーシアム理事
7. 朴泰祐：学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）運営委員
8. 高橋大介：筑波大学情報環境機構学術情報メディアセンター運営委員会委員
9. 高橋大介：理化学研究所客員主管研究員
10. 高橋大介：HPCI 利用研究課題審査委員会レビューアー
11. 高橋大介：HPCI 連携サービス運営・作業部会委員
12. 高橋大介：学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）課題審査委員
13. 建部修見：HPCI 共用ストレージ運用部会副部長
14. 建部修見：HPCI 連携サービス運営・作業部会委員
15. 建部修見：理化学研究所客員主管研究員

16. 建部修見：情報通信研究機構協力研究員
17. 建部修見：HPCI 利用研究課題審査委員会レビューアー
18. 建部修見：東京工業大学学術国際情報センター共同利用専門委員
19. 建部修見：特定非営利団体つくば OSS 技術支援センター理事長

## 10. 社会貢献・国際貢献

1. Taisuke Boku: Steering Committee Chair, International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPCAsia)
2. Taisuke Boku: General Chair, 48th International Conference on Parallel Processing (ICPP2020)
3. Taisuke Boku: Steering Committee Member, Intel eXtreme Performance Users Group (IXPUG)
4. Taisuke Boku: Scientific Committee Member, Supercomputing Frontier Europe 2020
5. Taisuke Boku: Organizing Chair, IXPUG Workshop HPCAsia 2020
6. Taisuke Boku: Committee Member, SC19 Panel Committee
7. Taisuke Boku: Organizing Committee Member, IXPUG Workshop ISC 2019
8. Taisuke Boku: Program Committee Member, SC19
9. Daisuke Takahashi: The 14th International Workshop on Automatic Performance Tuning (iWAPT 2019) Program Committee Member
10. Daisuke Takahashi: The International Conference on Computational Science (ICCS 2019) Program Committee Member
11. Daisuke Takahashi: ISC High Performance 2019 (ISC 2019) Research Poster Committee Member
12. Daisuke Takahashi: Benchmarking in the Data Center in Conjunction with International Conference on High Performance Computing in Asia Pacific Region (HPC Asia 2019) Organizing Committee Member
13. Daisuke Takahashi: IEEE 13th International Symposium on Embedded Multicore SoCs (MCSoc-19) Program Committee Member
14. Daisuke Takahashi: The 19th International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2019) Publicity Committee Member
15. Daisuke Takahashi: Special Session on Auto-Tuning for Multicore and GPU (ATMG) in Conjunction with IEEE 13th International Symposium on Embedded Multicore SoCs (MCSoc-19) Program Committee Member
16. Daisuke Takahashi: The 4th International Workshop on GPU Computing and AI (GCA'19) in Conjunction with 7th International Symposium on Computing and Networking (CANDAR'19) Program Committee Member

17. Daisuke Takahashi: The 7th International Workshop on Computer Systems and Architectures (CSA'19) in Conjunction with 7th International Symposium on Computing and Networking (CANDAR'19) Program Committee Member
18. Daisuke Takahashi: The 17th IEEE International Symposium on Parallel and Distributed Processing with Applications (IEEE ISPA 2019) Program Committee Member
19. 高橋大介: 電子情報通信学会／情報処理学会 第 18 回情報科学技術フォーラム (FIT2019) 担当委員
20. 高橋大介: 情報処理学会 2019 年度論文賞選定ワーキンググループ (ジャーナル) 委員
21. 高橋大介: 情報処理学会論文誌ジャーナル／JIP 編集委員会委員
22. 高橋大介: 情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会運営委員
23. Osamu Tatebe: IEEE/ACM International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC19)
24. Osamu Tatebe: Program Committee, IEEE/ACM International Symposium on Cluster, Cloud and Grid Computing (CCGrid 2019)
25. Osamu Tatebe: Program Committee, IEEE International Conference on Cluster Computing (Cluster 2019)
26. Osamu Tatebe: Program Committee, International Supercomputing Conference 2019
27. Osamu Tatebe: Program Committee, 4th International Parallel Data Systems Workshop (PDSW 2019)
28. 建部修見: 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム編集委員長
29. Hiroto Tadano: The 38<sup>th</sup> JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2019): Publication Co-Chair
30. Hiroto Tadano: 48<sup>th</sup> International Conference on Parallel Processing (ICPP2019): Deputy Chair
31. 多田野寛人: 日本応用数理学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会 運営委員
32. 多田野寛人: 情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会 運営委員
33. 多田野寛人: 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム 編集委員
34. 多田野寛人: 日本応用数理学会 2019 年度研究部会連合発表会 実行委員
35. Ryohei Kobayashi: Program Committee, International Conference on Field-Programmable Technology (FPT'19)
36. Ryohei Kobayashi: Program Committee, 7th International Workshop on Computer Systems and Architectures (CSA'19) held in conjunction with CANDAR'19
37. Ryohei Kobayashi: Publicity Chair, The 48th International Conference on Parallel Processing (ICPP 2019)

- 38. Ryohei Kobayashi: Program Committee, IEEE Symposium on Low-Power and High-Speed Chips and Systems (COOL Chips 22)
- 39. 小林諒平: xSIG 2019 プログラム委員
- 40. 小林諒平: SWoPP2019 実行委員 (コンピュータシステム研究会担当幹事)
- 41. 小林諒平: 電子情報通信学会リコンフィギャラブルシステム研究会専門委員
- 42. 小林諒平: 電子情報通信学会コンピュータシステム研究会専門委員

## 11. その他

海外長期滞在, フィールドワークなど

- 1. 藤田 典久: 2020/02/24-2020/03/07, 米国 Argonne National Laboratory へのマンスリーサバティカルを実施.

## VIII. 計算情報学研究部門

### VIII-1. データ基盤分野

#### 1. メンバー

|     |                           |
|-----|---------------------------|
| 教授  | 北川 博之、天竺 俊之               |
| 助教  | 塩川 浩昭、堀江 和正               |
| 研究員 | 太田 玲央、宮本 隆典               |
| 学生  | 大学院生 22 名、学類生 6 名、研究生 1 名 |

#### 2. 概要

計算科学において、大規模データの管理や活用は極めて重要な課題となっている。計算情報学研究部門データ基盤分野は、データ工学関連分野の研究開発を担当している。具体的には、異種データベースや多様な情報源を統合的に扱うための情報統合基盤技術、データ中に埋もれた知識や規則を発見するためのデータマイニング・知識発見技術、インターネット環境において様々なデータを統一的に扱うための RDF・知識ベース・LOD 関連技術等の研究を継続して行っている。また、国際睡眠医科学統合機構（IIS）等との連携を通じて、計算科学の各分野における応用的な研究を推進している。

特に、今年度は国際共同研究プロジェクトである情報通信研究機構（平成 28 年度～令和元年度）「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 6 月に終了し、日欧合同の評価委員による最終評価を受けたが、評価結果は極めて高いものであった。これまでのビッグデータ研究の成果を実社会適用することを主眼とする本プロジェクトでこのような成功をおさめることができたのは、国内外共同研究機関との協力の大きな賜物と言える。また、国際睡眠医科学統合機構（IIS）等と連携した睡眠分析に関しても、文部科学省・地域イノベーション・エコシステム形成プログラム（平成 28 年度～令和元年度）による支援が今年度で終了し、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）等の新たな外部研究資金をもとに研究を進展させている。特に、ヒトを対象とした実用的な研究成果を目指してステップを着実に進めている。その中では、昨年度評価で言及のあった知財権の獲得の可能性も含めた検討を行っている。

#### 3. 研究成果

##### 【1】情報統合基盤技術

##### (1) 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



ICT の進展により，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が生成されている．シークエンスデータ分析における基本操作として，行パターンマッチングがある．行パターンマッチングは行シークエンスが与えられた時，目的とするパターンにマッチする行サブシークエンス（パターンオカレンス）を発見する操作である．リレーショナルデータベースにおける行パターンマッチングを行うための `MATCH_RECOGNIZE` 句（SQL/RPR）が 2016 年に SQL に導入された．今日では，大規模データを扱うシステムとしてリレーショナルデータベース以外に，MapReduce や Spark 等様々なものがある．それらのシステムでは，Hive や Spark SQL を用いることで，SQL 風にデータ操作を記述することが可能であり，それらにおいても将来行パターンマッチングが導入されることが容易に想像できる．しかしながら，行パターンマッチングはその処理コストが高い点が問題であり，そのコスト削減は重要な課題である．

本研究においては，行パターンマッチングの処理コストを削減するための 2 つの方法を提案した．いずれも，行パターンマッチングを行う前にフィルタリング処理を実行し，パターンマッチング結果に貢献しない無駄な行を削減することで，行パターンマッチングのコストを削減するものである．1 つ目の方法は，`MATCH_RECOGNIZE` 句の条件に基づき，パターンオカレンスを 1 つも生成しないシークエンスを削減する手法で，シークエンスフィルタリングと呼ぶ．もう 1 つの方法は，同様に `MATCH_RECOGNIZE` 句の条件に基づき，シークエンス中で結果に貢献しない行を削除する手法で，行フィルタリングと呼ぶ．本研究では，Spark SQL に `MATCH_RECOGNIZE` 句を導入した状況を想定し，上記の 1 つのフィルタリング手法を組み込んだ処理システムを Spark 上で実装し，実験によりその有効性を確認した．

特に，今年度はこれまでの研究成果を論文発表したのに加え，リレーショナル DBMS へも対象を拡張し，PostgreSQL における実装と評価を行った．また，リレーショナル DBMS や Spark のいずれに対しても適用可能なコストモデルを構築し，処理コストに基づく最適なフィルタリング手法の選択を可能とした．

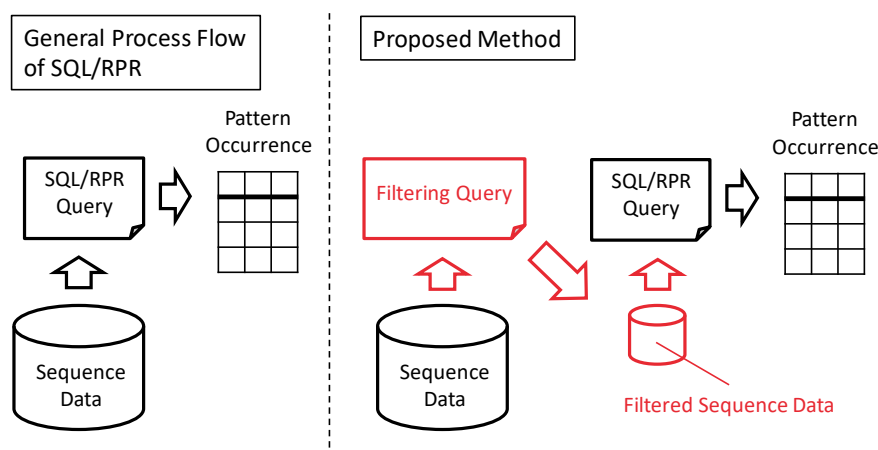


図1 フィルタリング処理による行パターンマッチングの効率化

## (2) シークエンス OLAP のための行パターンマッチング

シーケンス OLAP(Online Analytical Processing)は、シーケンスデータに対する OLAP 手法の一つである。シーケンス OLAP はシーケンスデータから与えたパターンのオカレンス(パターンオカレンス)を抽出し、通常の OLAP と同様の OLAP 操作 (drill-down, roll-up 等) やパターン OLAP 操作 (pattern-drill-down, pattern-roll-up 等) を行う。パターン OLAP 操作はシーケンス OLAP 固有のもので、複数パターンの階層構造をたどる操作となる。シーケンスデータがリレーショナルデータベースに行シーケンスとして格納される場合、対象パターンに対するパターンオカレンスとなる行サブシーケンスを発見する行パターンマッチングが必要となる。

パターン OLAP 操作を可能とするためには、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すると共に、それらのパターンオカレンス間の親子関係の抽出も必要となる。通常、リレーショナルデータベース上での行パターンマッチングには、リレーション全体のスキャンという高コストの処理が必要である。複数のパターンに対して個別にこの処理を実行するのは非効率的であり、階層関係にある複数のパターンに対する行パターンマッチングを同時に効率よく実行することが望まれる。

上記の通り、SQL では行パターンマッチングを記述するための MATCH\_RECOGNIZE 句が導入されたが、これは1つのパターンのみを対象とする。本研究では、MATCH\_RECOGNIZE 句を拡張して階層関係にある複数のパターンを記述可能な MULTI\_MATCH\_RECOGNIZE 句を導入し、その効率的な実現方法を提案した。具体的には、シーケンス OLAP をサポートするためのパターン階層を定式化し、SP-NFA (Shared Prefix Nondeterministic Finite Automaton)を用いた複数パターンマッチングの同時処理とパターンオカレンス間の親子関係の抽出を実現するアルゴリズムを提案した。

特に、今年度は提案手法を PostgreSQL 上で実装し、ベースライン手法との実験評価によりその有効性を示すと共に、査読付き国際会議論文としてこれまでの研究成果を論文発表といった進展があった。

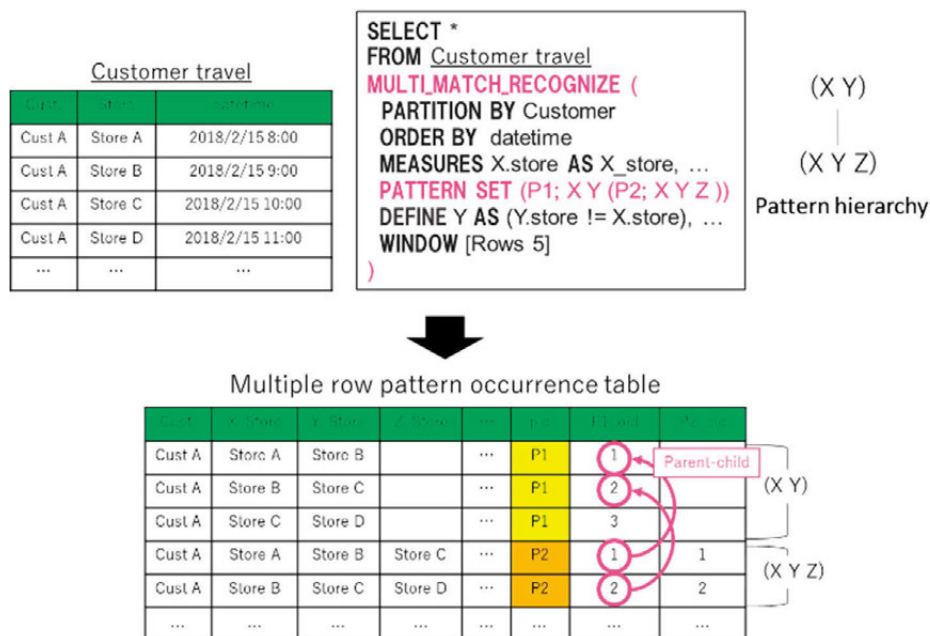


図 2 MULTI\_MATCH\_RECOGNIZE による複数行パターンマッチング

## 【2】データマイニング・知識発見技術

### (1) 大規模グラフ分析の高速化

本年度は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を開発した。グラフクラスタリングはグラフデータから互いに密な接続を持ったノード集合（クラスタ）を発見するための基本的なデータマイニング手法である。特に、近年開発された **CorMod** 法は高い精度でクラスタを検出できることが知られているが、大規模なグラフデータに対して膨大な計算時間を要する。

この問題を解決するために、本研究は **CorMod** 法の高速化を実現する新たなアルゴリズム **gScarf** 法を提案した。我々はある 2 つの部分グラフが同型であるならば、それらのクラスタリング結果はかならず同一になるという性質を発見した。この性質に基づき、**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（以降、**LRM-gain caching** 法と呼ぶ）。これにより、**gScarf** 法は同型な部分グラフに対するクラスタリング処理を省き、処理全体の高速化を図る。

本研究の貢献点は提案アルゴリズムの高速性と高精度性にある。図 3 に実世界のグラフデータに対するクラスタリング実行時間の比較結果を示す。提案手法 **gScarf** 法は近年提案され

たグラフクラスタリングと比較して高速であることが確認できる．また，本研究の実験では 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確認した．加えて，提案手法の時間計算量はエッジ数に対して概ね線形となることを理論的に示した．同様に，提案手法のクラスタリング精度は先行手法 CorMod 法と同程度になることを実験により示した．この結果は，提案手法は LRM-gain Caching によって大幅な計算削減を行うが，計算削減による精度低下は発生しないことを示唆している．本研究で開発した手法は既存のグラフクラスタリング手法とは異なり，ユーザが事前指定するパラメータを必要としない．すなわち，従来技術より容易なクラスタリング処理をユーザに提供することが可能である．

本研究の成果は 2019 年 8 月に開催された人工知能分野のトップ会議である IJCAI 2019 で発表を行った．

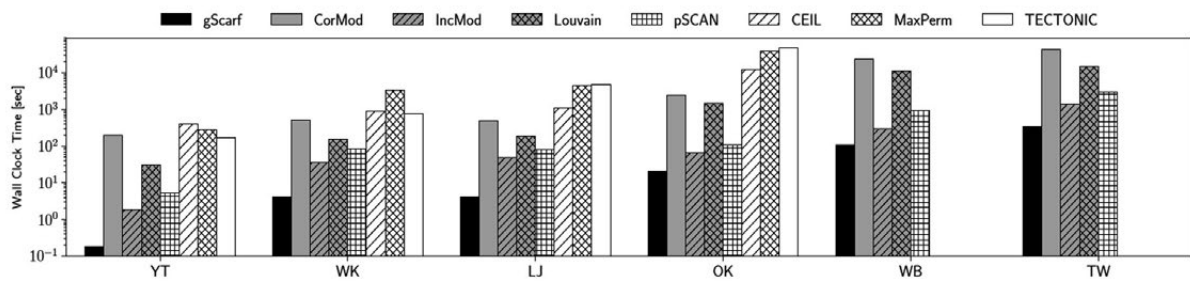


図 3 実行時間の比較

## (2) 確率的な制約を考慮した非負値行列分解

非負値行列分解 (non-negative matrix factorization; NMF) は所与の行列をよりランクの低い二つの行列の積として近似するアルゴリズムであり，文書やグラフに対するクラスタリングなど幅広い応用で用いられている．NMF では確率的な事象を扱う応用が少なくない．例えば，文書データを例にとると，各単語が文書に出現する確率を行列として表現し，それに対して NMF を適用することで，検出されたトピックと単語，あるいはトピックと文書の関係を確率的に記述することができる．ところが，既存の NMF 手法の多くでは，確率的な制約（非負で最大値が 1.0，合計すると 1.0 など）が考慮されておらず，既存の研究では，得られた行列に対してスケーリング等の後処理を適用することで，疑似的に確率的な制約を満たすよう調整を行なうことが多かった．

本研究では，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た．また提案手法について，その計算コストが（確率的な制約を考慮しない）従来のアルゴリズムと同等であることを理論的に示した．さらに提案手法を一般化し 4 種類のモードに対する確率的行列分解のアルゴリズムを提案し

た．PMF の有効性を示すためにグラフにおけるコミュニティ検出およびトピックの検出の問題（図 4）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た．

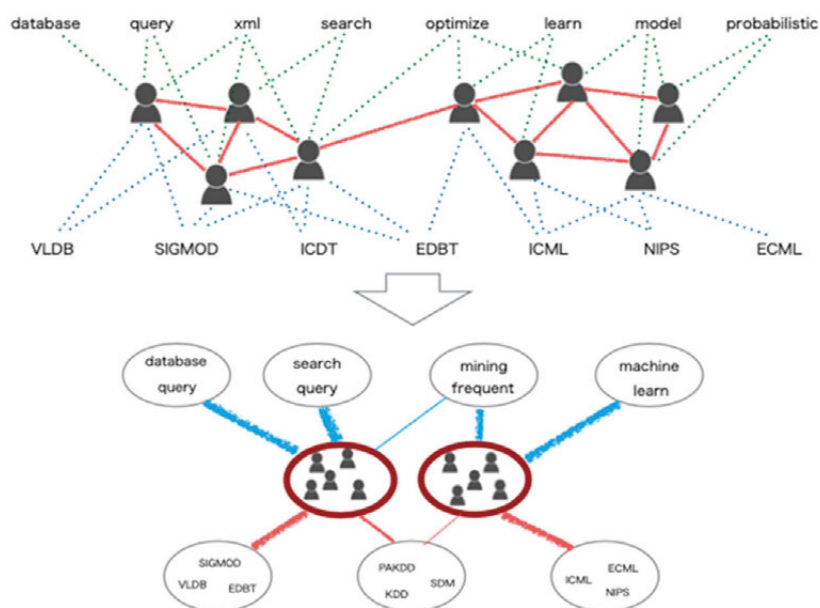


図 4 グラフからのコミュニティおよびトピック検出

### (3) FPGA を用いたグラフに対する正規パス問合せの高速化

正規パス問合せ（regular-path query; RPQ）は，与えられたラベル付きグラフにおいて，ユーザが指定した正規パスにマッチする経路をたどることで到達可能な始点および終点のペアを全て列挙する問合せであり，大規模グラフからのデータ抽出に用いられる．大規模なグラフに対する RPQ の処理は高コストであり，その高速化が望まれている．本研究では，FPGA を用いた RPQ の高速化に取り組んだ．

FPGA は任意の論理回路をプログラミングによって実装できるデバイスであり，任意の処理に特化した演算パイプラインをデバイス上に構成できるため，パイプライン化が効果的な処理では CPU や GPU に比べて高い性能を得ることが可能である．本研究では，RPQ 処理を複数のステージに分割し，それらのステージを並列に実行するための演算パイプラインを FPGA 上に実装した（図 5）．また，実験として性能調査を行い，結果として小規模なデータセットで比較手法に比べ最大で約 23.6 倍の高速化，大規模なデータセットで一部の問合せにおいて約 3.14～4.61 倍の高速化を実現した．

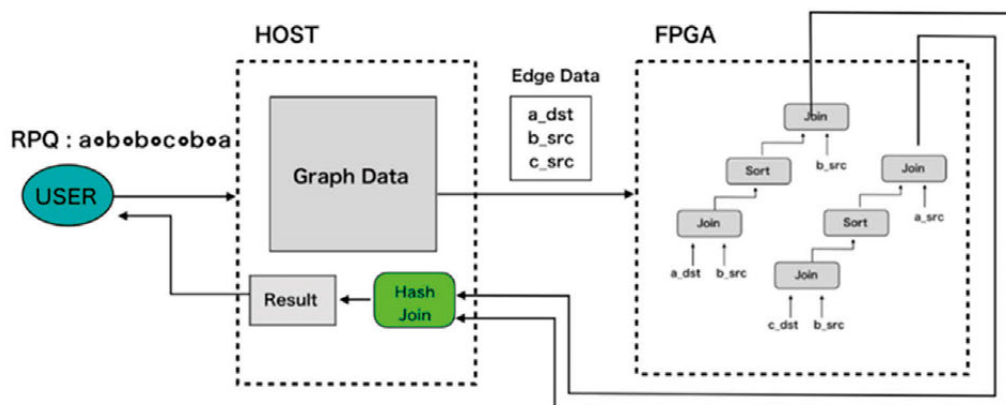


図 5 RPGA を用いた正規パス問合せ処理

### 【3】 RDF・知識ベース・LOD

#### (1) 知識ベースに対する単純質問応答

近年, DBpedia に代表されるように, 汎用の知識を知識ベースとして蓄積し, 各種応用に利用する試みが注目されている. 知識ベースは一般に知識グラフと呼ばれるグラフ構造で表現されるため, 知識グラフから必要な情報を抽出するためにはグラフに対する問合せが必要となる. しかしながら, 一般に知識グラフに対する問合せを適切に書くことは困難であり, 簡便な問合せ方法が求められる.

上記の背景に基づき, 本研究では知識ベースに対する単純質問応答 (simple question answering) 手法を研究した. ユーザは自然文で問合せを行なうと, その回答にふさわしい知識ベース中のトリプルが返される. 既存の手法では複雑な構成の深層学習モデルに基づいたエンド・ツー・エンドの手法が多く, モデル学習のコストが大きい上に, 性能分析が難しいという問題があった.

これに対して本研究では, 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を提案した. 各ステップについては複数のシンプルな手法を組み合わせ, その性能を網羅的に調査した. その結果, 比較的単純な手法を組み合わせることも最新の手法と遜色ない精度を達成できることを示した (表 1) .

表 1 検索精度の比較：表の上部はエンティティリンキングおよび関係予測に異なる手法を組合せた場合の精度，下部は最新の比較手法の精度を示しており，双方向 LSTM および双方向 GRU を組合せることで既存手法と同等の精度を達成している．

| Entity            | Relation         | Accuracy     |
|-------------------|------------------|--------------|
| <b>BiLSTM</b>     | <b>BiGRU</b>     | <b>74.64</b> |
| BiLSTM            | CNN              | 74.63        |
| BiLSTM            | BiLSTM           | 74.59        |
| BiGRU             | BiGRU            | 74.54        |
| BiGRU             | CNN              | 73.92        |
| CRF               | CNN              | 73.42        |
| <b>CRF</b>        | <b>BiGRU</b>     | <b>73.39</b> |
| CRF               | BiLSTM           | 73.34        |
| Model             | Description      | Accuracy     |
| Yin et al. 2016   | Max-pooling      | 76.4         |
| Dai et al. 2016   | Probabilistic    | 75.7         |
| Lukovnikov 2017   | Neural embedding | 71.2         |
| Golub and He 2016 | Character-based  | 70.9         |
| Bodes et al. 2015 | Memory network   | 62.7         |

#### 【4】データベース応用・データサイエンス

##### (1) 生体信号解析に基づく睡眠ステージ分析

一般に，マウスの睡眠は覚醒・ノンレム睡眠・レム睡眠の 3 ステージに分類できる．マウスの生体信号を元に，その睡眠ステージを決定する「睡眠ステージ判定」は，睡眠の基礎研究において必須の調査となっている．しかしながらこの調査は技師が生体信号を目視で確認するもので，非常に多くの時間と専門知識が必要になる．

この問題を解決すべく，これまでにも様々な睡眠ステージの自動判定手法が提案されている．しかし，これらの手法は睡眠研究で利用できるほどの判定精度を達成できていない．特に実際の研究ではよく見られる，ノイズの含まれた生体信号を適切に処理することができなかった．

本研究では，筑波大学国際統合睡眠医科学研究機構（WPI-IIIIS）と連携し，MC-SleepNet と呼ばれる新しい自動判定手法を開発した．本手法は，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ている．自動的に判定に有用な特徴量を発見・抽出できる CNN の採用により，ノイズの影響を受けにくい特徴量の獲得に成功した．また，LSTM を導入することで対象とする信号の前後を考慮したステージ判定を実現した．ノイズが多く判定が困難なケースであっても，前後のステージ状態から適切なステージ割り当てを実現できる．通常，深層学習モデルの学習には多くのサンプル



ルを必要とするが、本研究では WPI-IIIIS との連携により、マウス 4000 匹分のデータを提供いただくことで解決している。

評価実験では、MC-SleepNet 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、睡眠研究に必要とされる 95%をクリアした。また、ノイズの含まれる生体信号についても判定精度は 95%を達成しており、実際の睡眠研究において利用可能な手法と言える。

本研究の成果は国際ジャーナルで論文発表すると共に、プレスリリースを行った。

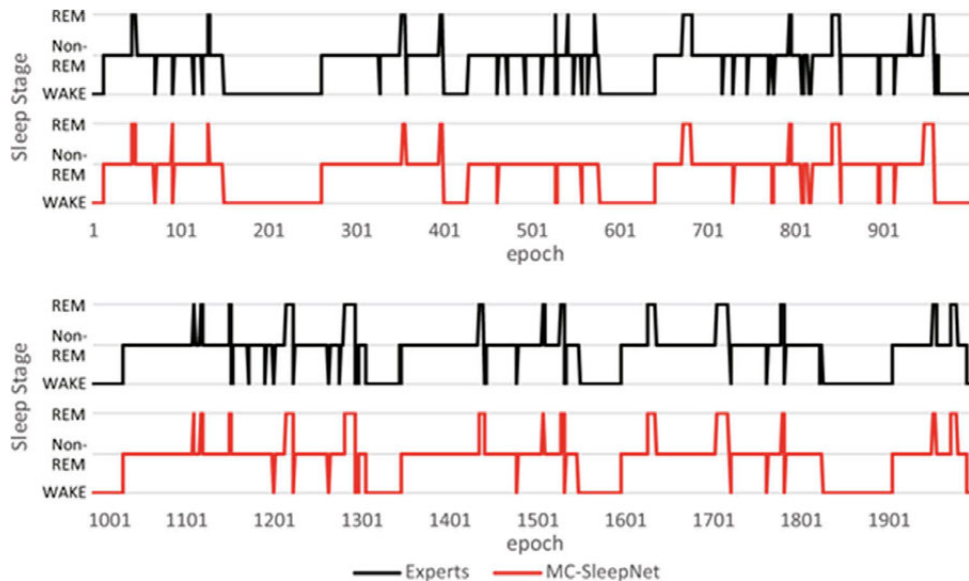


図 6 MC-SleepNet によるステージ判定の例

## (2) 生体信号のノイズ除去

MC-SleepNet が高いノイズ耐性を獲得したという事実から、深層学習を用いることで、ノイズと生体信号の分離、ひいてはノイズ除去を実現できると考えた。これまでも音声信号向けのノイズ除去モデルは開発されているものの、これらの手法では真信号とノイズ入り信号のペアを学習サンプルとして必要としている。真信号とノイズを別々に計測できる音声信号には適用できたものの、生体信号では適用困難な手法だった。一般に敵対的学習を行うモデルは、入出力の対応関係を保証できないが、本研究では、ノイズは真信号に対して十分小さいという仮定を設定した。なるべく元の信号を維持したままクリアな信号に変換するように学習を行うことで、ノイズ除去に適した深層学習モデルを獲得した。開発したモデル NR-GAN は、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た。



### (3) IoT クッションと機会学習によるユーザの着座姿勢推定

現代社会において多くの人は椅子の上で座位で過ごしているが、長時間椅子の上で不適切な姿勢を取ることによる健康被害が世界的に注目されている。本研究では、複数の圧力センサーを内蔵したクッションを椅子に装着し、圧力センサーの値をリアルタイムでモニタリングすることによって利用者の着座姿勢を推定し、スマートフォンを通じて適切なフィードバックを与えることで、ユーザの姿勢を正しく矯正する手法について研究した（図 7）。

そのために、リアルタイムなセンサストリームに対して、機械学習手法を適用することで、98.93% の精度での着座姿勢の推定を可能にした。また、体形の異なるユーザに対して精度の高い推定を可能にするためには、ユーザの BMI 値を特徴量に組み入れることが有効であることを明らかにした。さらに、単なる着座姿勢に加えて、姿勢変更を伴うストレッチポーズの推定にも取り組み、高い精度での推定が可能であることを示した。

本研究の成果は、AI 分野のトップ会議である IJCAI2019 で論文発表を行った。

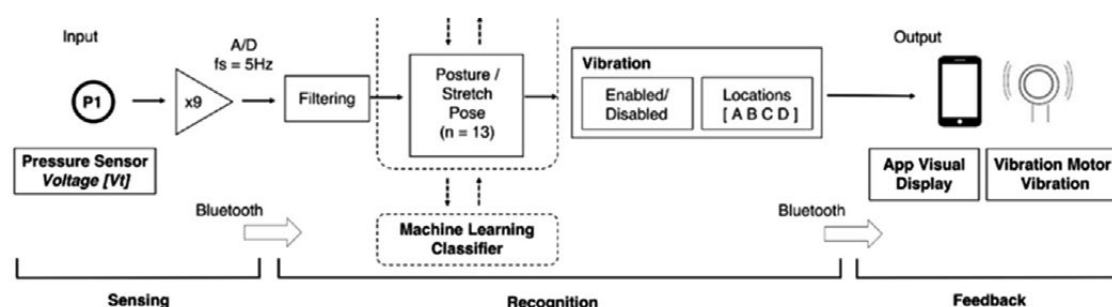


図 7 システムの概要

## 4. 教育

学生の指導状況（学生氏名、学位の種類、論文名）

<博士（工学）>

### 1. 伊藤 寛祥

A Study on Non-negative Matrix Factorization under Probability Constraints

### 2. 中挾 晃介

時系列データに対するパターンマッチングと予測に関する研究

<修士（工学）>

### 1. 小栗 大輝

オブジェクトのクラスタリングによる属性改良手法の高速化

### 2. 鈴木 裕亮

On-the-Fly Plan Switching with an Unfixed Set of Expensive Data Operators

3. 住谷 雄樹

深層学習を用いたマウス EEG のノイズ削減

4. 林 真史

Incentive Design for the Development of Selective AI for Human and Machine Data Processing

5. 堀川 聡

クラウドソースされた特徴に基づく Learn-to-Enumerate 手法の分析評価

6. 宮本 達朗

メンションの出現位置に着目した Salient Entity Linking 手法

7. 山崎 耕太郎

大規模グラフに対する効率的なランクベースクラスタリング

8. 米内 裕史

構文木とコールグラフの統合的な埋め込みに基づくメソッド名推定手法

9. Carina Miwa Yoshimura

Topic-aware Scheme for Collecting Local Tweets

10. Katia Bourahmoune

Application of Machine Learning for Active Human Sitting Posture Recognition using an IoT Cushion

<学士（情報科学，情報工学）>

1. 荻野 夏樹

Semantic Image Synthesis における線画を用いた複雑な物体の写実的画像生成転移学習を用いた複数の SNS における年齢推定手法

2. 菅波 柊也

GPU によるサブグラフ数え上げの高速化に関する研究

3. 中野 茉里香

テキストを含む構造化データに対する知識ベースを用いた OLAP 分析

4. 柳澤 隼也

1 対全ノードに対する s-t 信頼性の高速推定

5. 山田 真也

コンテンツ解析を含む大規模データ分析処理に対するトレーサビリティの研究

集中講義など

該当なし

## 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

### 受賞

(賞の名称、受賞者名、タイトル、年月日)

1. Proceedings of 4th International Conference on Biomedical Imaging, Signal Processing (ICBSP2019) Best Presentation Award : Yuki Sumiya, Kazumasa Horie, Hiroaki Shiokawa, Hiroyuki Kitagawa, "NR-GAN: Noise Reduction GAN for Mice Electroencephalogram Signals", Nagoya, Japan, October 17 -19 2019.
2. 情報処理学会コンピュータサイエンス領域功績賞：北川 博之 2019 年 10 月
3. 情報処理学会第 82 回全国大会学生奨励賞：柳澤 隼也，塩川 浩昭，“層化抽出法を用いた 1 対全ノードに対する s-t 信頼性推定の高速化”，2020/3/5-3/7.
4. システム情報工学研究科長表彰：伊藤 寛祥，2020 年 3 月 25 日
5. システム情報工学研究科長表彰：山崎 耕太郎，2020 年 3 月 25 日
6. コンピュータサイエンス専攻長表彰，住谷 雄樹，2020 年 3 月 25 日
7. コンピュータサイエンス専攻長表彰，Katia Bourahmoune，2020 年 3 月 25 日

### 外部資金 (名称、氏名、代表・分担の別、採択年度、金額、課題名)

受託研究：情報通信研究機構（平成 28 年度～令和元年度）

研究課題：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

研究分担者：北川 博之（研究代表者 NTT 東日本）

全年度直接経費：25,694 千円 (R1 年度直接経費：2,954,546 円)

受託研究：文部科学省・地域イノベーション・エコシステム形成プログラム（平成 28 年度～令和元年度）

研究課題：つくばイノベーション・エコシステムの構築（医療・先進技術シーズを用いた超スマート社会の創成事業）

研究分担者：北川 博之（研究代表者 TGI）

全年度直接経費：48,653 千円 (R1 年度直接経費：9,300 千円)

共同研究：民間企業共同研究（平成 30 年 4 月 1 日～令和元年 3 月 31 日）

研究課題：データエンジニアリングの知見の応用によるログ及び資産情報の処理の高速化・軽量化・高度化

研究代表者：北川 博之

直接経費：3,000 千円

科研費：新学術領域研究（平成 27 年度～令和元年度）

研究課題：超ストレス環境・宇宙を見据えた新規睡眠覚醒制御手法の開発

研究分担者：北川 博之（研究代表者：長瀬 博）

全年度直接経費：7,350 千円（R1 年度直接経費：500 千円）

科研費：基盤研究 B（令和元年度～令和 4 年度）

研究課題：高水準仮想化機能を持つ Augmented リアルビッグデータ利活用基盤の構築

研究代表者：北川 博之

全年度直接経費：13,200 千円（R1 年度直接経費：3,800 千円）

科研費：挑戦的研究（萌芽）（令和元年 6 月 28 日～令和 2 年度）

研究課題：深層学習による個人特性を反映した生体データの自動生成

研究代表者：北川 博之

全年度直接経費：4,900 千円（R1 年度直接経費：3,500 千円）

受託研究：科学技術振興機構・未来社会創造事業（令和元年 11 月 1 日～令和 2 年度）

研究課題：睡眠脳波を指標とする睡眠と運動の自己管理による健康寿命延伸

研究分担者：北川 博之（研究代表者：柳沢 正史）

全年度直接経費：3,500 千円（R1 年度直接経費：1,000 千円）

共同研究：民間企業共同研究（令和元年 10 月 1 日～令和 2 年度）

研究課題：睡眠障害の自動診断システム及び睡眠障害の予防・改善・治療システムの研究開発

研究代表者：北川 博之

全年度直接経費：12,000 千円（R1 年度直接経費：8,000 千円）

受託研究：科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業 ACT-I 「情報と未来」（令和元年度～令和 2 年度）

研究課題：Data Skewness を捉えた超高速・省メモリな大規模データ処理

研究代表者：塩川 浩昭

全年度直接経費：20,000 千円（R1 年度直接経費：10,000 千円）

科研費：若手研究（平成 30 年度～令和 2 年度）

研究課題：超並列計算環境における大規模グラフの実時間問合せ処理

研究代表者：塩川 浩昭

全年度直接経費：3,200 千円 (R1 年度直接経費：900 千円)

科研費：若手研究 (令和元年度～令和3年度)

研究課題：敵対的生成ネットワークを用いたノイズ除去手法の開発と生体信号への応用

研究代表者：堀江 和正

全年度直接経費：3,300 千円 (R1 年度直接経費：1,700 千円)

## 知的財産権

(種別、氏名、課題名、年月日)

該当なし

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

<学術雑誌論文>

1. Hiroyoshi Ito, Takahiro Komamizu, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "Detecting Communities and Correlated Attribute Clusters on Multi-Attributed Graphs", IEICE Transactions on Information and Systems, VOL.E102-D, NO.4, pp.810-820, APRIL 2019.
2. Hiroaki Shiokawa, Tomohiro Matsushita, Hiroyuki Kitagawa, "Fast Affinity Propagation by Cell-based Indexing", Journal of Data Intelligence, Vol.1, No.1, pp.55-74, April 2019.
3. Kazuha Ashino, Kenta Sugano, Toshiyuki Amagasa, and Bei-Wen Ying, "Predicting the Decision Making Chemicals Used for Bacterial Growth", Scientific Reports, Vol. 9, No. 7251, May 2019.
4. Masato Yamabe, Kazumasa Horie, Hiroaki Shiokawa, Hiromasa Funato, Masashi Yanagisawa and Hiroyuki Kitagawa, "MC-SleepNet: Large-scale Sleep Stage Scoring in Mice by Deep Neural Networks", Scientific Reports, Vol. 9, No. 15793, Oct. 2019. (Impact Factor 4.011)
5. Hiroaki Shiokawa, Yasunori Futamura, "Efficient Vector Partitioning Algorithm for Modularity-based Graph Clustering", Journal of Data Intelligence, Vol.1, No.2, pp.101-123, June 2019.
6. Kotaro Yamazaki, Tomoki Sato, Hiroaki Shiokawa, Hiroyuki Kitagawa, "Fast and Parallel Ranking-based Clustering for Heterogeneous Graphs", Journal of Data Intelligence, Vol.1, No.2, pp.137-158, June 2019.

7. Savong Bou, Hiroyuki Kitagawa, and Toshiyuki Amagasa, "L-BiX: Incremental Sliding-Window Aggregation over Data Streams Using Linear Bidirectional Aggregating Indexes", Knowledge and Information Systems, Springer. (Impact Factor 2.397) (to appear)

**B) 査読無し論文**

該当なし

**(2) 国際会議発表**

**A) 招待講演**

1. Hiroyuki Kitagawa, "Big Data Analytics and Management: Perspectives from Big Sequence Data Analysis and Research Projects in Japan", The 36th CCF National Database Conference (NDBC2019) (Keynote Talk) Jinan, China, October 13, 2019.

**B) 一般講演**

< 査読付き国際会議論文 >

1. Yuyang Dong, Hanxiong Chen, Hiroyuki Kitagawa, "Continuous Search on Dynamic Spatial Keyword Objects", Proceedings of. 35th IEEE International Conference on Data Engineering (ICDE 2019) (Short Paper), pp. 1578-1581, Macau SAR, China, April 2019.
2. Hiroaki Shiokawa, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "Scaling Fine-grained Modularity Clustering for Massive Graphs", Proceedings of the 28th International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI2019), Macao, China, August 2019 (Acceptance rate 13.67 %).
3. Katia Bourahmoune, Toshiyuki Amagasa, "AI-powered Posture Training: Application of Machine Learning in Sitting Posture Recognition Using the LifeChair Smart Cushion", Proceedings of the 28th International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI2019), Macao, China, August 2019 (Acceptance rate 13.67 %).
4. Kento Miura, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "Accelerating Regular Path Queries using FPGA", Tenth International Workshop on Accelerating Analytics and Data Management Systems Using Modern Processor and Storage Architectures, in conjunction with VLDB (ADMS2019), Los Angeles, United States, August 26, 2019.
5. Yuya Nasu, Hiroyuki Kitagawa, Kosuke Nakabasami, "Efficient Row Pattern Matching using Pattern Hierarchies for Sequence OLAP", Proceedings of. 21st International Conference on Big Data Analytics and Knowledge Discovery (DaWak2019), pp. 89-104, Linz, Austria, August 26 - 29 2019 (Acceptance rate 20 %).

6. Kosuke Nakabasami, Hiroyuki Kitagawa, and Yuya Nasu, "Optimization of Row Pattern Matching over Sequence Data in Spark SQL", Proceedings of 30th International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA2019), pp. 3-17, Linz, Austria, August 26th - 29th 2019.
7. Happy Buzaaba, Toshiyuki Amagasa, "A modular approach for efficient simple question answering over knowledge base", Proceedings of 30th International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA2019), pp. 237-246, Linz, Austria, August 26 -29 2019.
8. Yuki Sumiya, Kazumasa Horie, Hiroaki Shiokawa, Hiroyuki Kitagawa, "NR-GAN: Noise Reduction GAN for Mice Electroencephalogram Signals", Proceedings of 4th International Conference on Biomedical Imaging, Signal Processing (ICBSP 2019), pp. 94-101, Nagoya, Japan, October 17 -19 2019.
9. Shohei Matsugu, Hiroaki Shiokawa, Hiroyuki Kitagawa, "Flexible Community Search Algorithm on Attributed Graphs", Proceedings of the 21st International Conference on Information Integration and Web-based Applications and Services (iiWAS2019), pp. 103-109, Munich, Germany, December 2019 (Acceptance rate 48 %).
10. Kotaro Yamazaki, Shohei Matsugu, Hiroaki Shiokawa, Hiroyuki Kitagawa, "Fast RankClus Algorithm via Dynamic Rank Score Tracking on Bi-type Information Networks", Proceedings of the 21st International Conference on Information Integration and Web-based Applications and Services (iiWAS2019), pp. 110-117, Munich, Germany, December 2019 (Acceptance rate 48 %).
11. Shintaro Kurimoto, Yasuhiro Hayase, Hiroshi Yonai, Hiroyoshi Ito, Hiroyuki Kitagawa, "Class Name Recommendation based on Graph Embedding of Program Elements", Proceedings of the 26th Asia-Pacific Software Engineering Conference (APSEC2019), pp. 498-505, Putrajaya, Malaysia, December 2-5 2019 (Acceptance rate 34.7 %).
12. Hiroshi Yonai, Yasuhiro Hayase, Hiroyuki Kitagawa, "Mercem: Method Name Recommendation Based on Call Graph Embedding", Proceedings of the 26th Asia-Pacific Software Engineering Conference (APSEC2019), pp. 134-141, Putrajaya, Malaysia, December 2-5 2019 (Acceptance rate 34.7 %).
13. Natsuki Ogino, Kazumasa Horie, and Hiroyuki Kitagawa, "Semantic Image Synthesis of Complicated Objects using Line-drawing", Proceedings of. 2020 RISP International Workshop on Nonlinear Circuits, Communications and Signal Processing (NCSP'20), No. 1PM1-1-3, pp. 373 - 376, Honolulu, Hawaii, February 28 - March 2, 2020.
14. Masafumi Hayashi, Masaki Kobayashi, Masaki Matsubara, Toshiyuki Amagasa, Atsuyuki Morishima, "Incentive Design for Crowdsourced Development of Selective AI for Human and Machine Data Processing: A Case Study," The 3rd IEEE Workshop on Human-in-the-loop

Methods and Human Machine Collaboration in BigData (IEEE HMDData 2019) co-located with IEEE Bigdata 2019, pp. 4596-4601, Los Angeles, USA. Dec. 9, 2019.

<査読付き国際会議論文（ポスター）>

1. Mirai Niki, Yoshiki Yamaguchi and Toshiyuki Amagasa, "FPGA-based SPARQL query acceleration," Asia Pacific Conference on Robot IoT System Development and Platform (APRIS 2019), 2 pages, Thailand, Nov. 1-4, 2019.

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

該当なし

#### B) その他の発表

<査読付き学会発表>

1. 森健史, 大久保梨思子, 植田泰士, 片平真史, 天笠俊之, "宇宙機関連異種テキストデータからの知識発見の試み", 第 12 回 Web とデータベースに関するフォーラム (WebDB フォーラム 2019), 工学院大学 (東京), 2019 年 9 月 8 日~9 日 (月) .

<学会発表>

1. 大久保梨思子, 倉林翔, 森健史, 波平晃佑, 植田泰士, 片平真史, 天笠俊之, "宇宙機関連テキストデータの分散表現モデルの比較手法の検討", 第 15 回テキストアナリティクス・シンポジウム, フューチャー株式会社 (東京), 2019 年 9 月 27 日~28 日.
2. 真次彰平, 塩川浩昭, 北川博之, "属性付きコミュニティ検索におけるビームサーチの高速化", 第 12 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2020), D1-4, 2020 年 3 月 2 日~3 月 4 日.
3. 柳澤隼也, 塩川浩昭, "1 対全ノードに対する s-t 信頼性の高速推定", 第 12 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2020), D2-2, 2020 年 3 月 2 日~3 月 4 日.
4. 菅波柊也, 天笠俊之, 北川博之, "GPU による 5 ノードサブグラフ数え上げの高速化", 第 12 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2020), H3-2, 2020 年 3 月 2 日~3 月 4 日.
5. 住谷雄樹, 堀江和正, 北川博之, "マウス睡眠ステージ判定課題における深層学習を用いたノイズの分析", 第 12 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2020), A4-4, 2020 年 3 月 2 日~3 月 4 日.



6. Carina Miwa Yoshimura (University of Tsukuba), Hiroyuki Kitagawa (University of Tsukuba), "Topic-aware Scheme for Collecting Local Tweets", 第 12 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2020), C5-2, 2020 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
7. 阿曾太郎, 天笠俊之, 北川博之, "知識ベースに対するプロパティ指向のファセット検索システムに関する研究", 第 12 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2020), D5-3, 2020 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
8. Kotaro Yamazaki, Shohei Matsugu, Hiroaki Shiokawa, Hiroyuki Kitagawa, "Fast and Parallel RankClus Algorithm based on Dynamic Rank Score Tracking", 第 12 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2020), D5-4, 2020 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
9. 中野茉莉香, 天笠俊之, 北川博之, "テキストを含む構造化データに対する知識ベースを用いた OLAP 分析", 第 12 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2020), E5-1, 2020 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
10. 宮本隆典, 堀江和正, 北川博之, "可聴音を用いた透過法計測による屋内での人体検知", 第 12 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2020), J6-5, 2020 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
11. 江畑拓哉, 堀江和正, 北川博之, "Flow-base モデルを用いた文のスタイル変換", 第 12 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2020), F7-1, 2020 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
12. 塩川浩昭, 天笠俊之, 北川博之, "基調構造を利用したグラフクラスタリングの高速化", 第 12 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2020), H7-5, 2020 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
13. 菅波柊也, 天笠俊之, 北川博之, "GPU を用いた 5 ノードサブグラフ数え上げの高速化", 情報処理学会第 82 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2020), 2020 年 3 月 5 日～3 月 7 日.
14. 中野茉莉香, 阿曾太郎, 天笠俊之, 北川博之, "テキストを含む構造化データに対する知識ベースを用いた OLAP 分析", 情報処理学会第 82 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2020), 2020 年 3 月 5 日～3 月 7 日.
15. 柳澤隼也, 塩川浩昭, "層化抽出法を用いた 1 対全ノードに対する s-t 信頼性推定の高速化", 情報処理学会第 82 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2020), 2020 年 3 月 5 日～3 月 7 日.
16. 山田真也, 天笠俊之, 北川博之, "コンテンツ解析を含む大規模データ分析処理に対するトレサビリティ", 情報処理学会第 82 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2020), 2020 年 3 月 5 日～3 月 7 日.
17. 石河純輝, 塩川浩昭, 福井和宏, "部分空間法を用いたグラフ構造の表現学習法の提案", 第 39 回情報論的学習理論と機械学習研究会 (IBISML), 2020 年 3 月 10 日.

<プレスリリース>

1. 天笠俊之, "細菌の増殖に決定的な影響を及ぼす化学物質をビッグデータ解析で予測", 2019 年 5 月 23 日.
2. 北川博之, 堀江和正, "睡眠ステージを自動的に判定する手法を開発 ～マウス 4,200 匹の睡眠時生体信号を学習・解析～", プレスリリース, 2019 年 11 月 5 日.

(4) 著書、解説記事等

1. Salman Ahmed Shaikh, Kousuke Nakabasami, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "Multidimensional Analysis of Big Data", in "Emerging Perspectives in Big Data Warehousing" (David Tanian and Wenny Rahayu (Eds.)), IGI Global, pp. 198-224, 2019.
2. 北川博之, "VLDB2020 への道 (その 4)", DBSJ Newsletter, 2019 年 10 月.

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

- 地球環境研究部門との連携：気象庁気象予報データベース「GPV/JMA アーカイブ」(<http://gpvjma.ccs.jpcc.jp>) の開発, 管理, 運用.
- 素粒子物理研究部門との連携：Japan Lattice Data Grid (JLDG), International Lattice Data Grid (ILDG) の運営.
- 国際統合睡眠医科学研究機構 (IIS) との連携：マウスとヒトの脳波／筋電図データを利用した睡眠ステージの自動判定アルゴリズム・ソフトウェアの研究開発.
- 宇宙物理研究部門および東京大学宇宙線研究所との連携：深層学習を用いた遠方銀河画像の自動判別
- 国際連携：情報通信研究機構（平成 28 年度～令和元年度）「研究課題：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」
- 国際連携：Prof. John Wang (Griffith University, Australia)を招聘し共同研究（2019 年 11 月～12 月）

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

天笠俊之教授

- 学外
  - Workshop co-chair: 2nd International workshop on big data, cloud, and IoT technologies for smart cities (IWBigDataCity 2020) in conjunction with IEEE BigComp 2020, Busan, Korea, February 19, 2020.

- Tutorial co-chair: The 7th IEEE International Conference on Big Data and Smart Computing (IEEE BigComp 2020), Busan, South Korea, February 19-22, 2020.

## 9. 管理・運営

北川博之教授

- 学外
  - 日本データベース学会監事
- 学内
  - 計算科学研究センター：計算情報学研究部門主任
  - 人工知能科学センター：人工知能基盤研究部門長
  - 情報科学類：広報企画委員会委員
  - コンピュータサイエンス専攻：国際交流委員会委員
  - ヒューマニクス学位プログラム：運営委員会オブザーバ

天笠俊之教授

- 学外
  - JAXA 内研究確認会アドバイザー
- 学内
  - 筑波大学情報ガバナンス基盤室長
  - 筑波大学附属図書館オープンアクセス専門委員
  - 計算科学研究センター：ビッグデータ・AI 連携推進室長
  - 情報科学類・コンピュータサイエンス専攻：国際交流委員会委員長

塩川浩昭准教授

- 学外
  - 該当なし.
- 学内
  - 計算科学研究センター：セキュリティ委員会委員
  - 情報科学類：カリキュラム委員会委員，企画広報委員会委員，クラス担任
  - コンピュータサイエンス専攻：広報委員会委員，企画委員会委員

堀江和正助教

- 学外
  - 該当なし.
- 学内
  - 情報科学類：カリキュラム委員会委員

- ヒューマニクス学位プログラム：準備委員会委員，広報委員会副委員長，運営委員会委員

## 10. 社会貢献・国際貢献

北川博之教授

- 国際委員等
  - 国際ジャーナル編集委員：IEEE Transactions on Big Data, World Wide Web Journal
  - 国際会議運営委員：VLDB2020 組織委員長，Chair of KJDB Working Group, DASFAA Steering Committee Member Emeritus
- 国内委員等
  - 日本学会会議連携会員
  - （独）科学技術振興機構・戦略的創造研究推進事業「ビッグデータ統合利活用のための次世代基盤技術の創出・体系化」領域アドバイザー

天笠俊之教授

- 国際委員等
  - プログラム委員：IEEE ICDE 2020, DaWaK2019, iiWAS2019, IDEAS2019, EDBT2020（デモ）
- 国内委員等
  - 情報処理学会データベースシステム研究会（DBS）幹事

塩川浩昭助教

- 国際委員等
  - 国際ジャーナル編集委員：IEICE Transactions on Information and Systems
  - 国際会議プログラム委員：IJCAI2019, AAI2019, PAKDD2019, BigComp2019, ICSC2019, IWBIGDataCity2019, xSIG2019
- 国内委員等
  - 電子情報通信学会 データ工学研究会 (DE)，幹事補佐，会計幹事（兼任）
  - 電子情報通信学会 2019 総合大会 プログラム編成委員
  - 第 11 回 Web とデータベースに関する (WebDB Forum 2018)，Web 広報委員長
  - 第 11 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2019)，財務委員長
  - 日本データベース学会 電子広報委員会編集委員

堀江和正助教

- 国際委員等
  - 該当なし.

- 国内委員等
  - 該当なし.

## 11. その他

海外長期滞在、フィールドワークなど

該当なし

## VIII-2. 計算メディア分野

### 1. メンバー

|    |                        |
|----|------------------------|
| 教授 | 亀田 能成                  |
| 教授 | 北原 格                   |
| 助教 | 宍戸 英彦                  |
| 学生 | 大学院生 25名、学類生 4名、研究生 3名 |

### 2. 概要

当グループが属する計算情報学研究部門は、「中長期的観点から計算科学の研究を抜本的に発展させる斬新な方法の開拓研究を行う部門」として、人間社会とその環境を主な対象とする新しい計算科学の枠組みを創成し、その基盤を確立することを目標として研究活動を推進している。

純粋なデータ処理の効率や速度が求められる通常のスーパーコンピュータ分野とは違い、人間に纏わる情報を処理対象とする計算科学では、情報処理の時間軸を人間に合わせることに必須である。そのために、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）を対象とした研究を進めている。それによって得られる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。また、これまでの計算メディアの取り組みを発展させる形で、北原格教授が本センターの計算メディカルサイエンス事業に関わることになった。なお、計算メディカルサイエンス事業を主とする研究成果についてはここでは取り上げない。

科研費（基盤研究B・代表：亀田）では、視覚障がい者ナビゲーションを想定した歩行経路中の現在位置推定方法と、視覚障がい者の歩き方の特性に合わせた指示H Iについて研究成果を挙げた。また、科研費（萌芽・代表：亀田）では、VR空間の特性を最大限活用した視覚的探索活動の計測と解析の研究に取り組み始めた。科研費（基盤研究B・代表：北原）では、深層学習を適用することにより、多視点全方位画像から高品質な自由視点映像生成手法を考案した。JST CREST Social Imaging（代表：システム情報系 鈴木健嗣）では、任意形状の3次元物体を投影面とすることが可能なプロジェクションマッピング方式を実現した。JST CREST Cyborg Crowd（代表：図書館情報メディア系 森嶋厚行）では、開口合成レーダ（SAR）画像と可視光画像間の対応点探索の高精度化に関する研究に取り組んだ。

下記に、外部予算による研究計画の進捗について簡潔に示す。これらからも、計算メディア研究の学際性を感じて頂けよう。

- 科研費・基盤(B)「経路撮影に基づく歩行者・パーソナルモビリティナビゲーション基盤の構築」代表：亀田能成（研究分担者：北原）
  - 歩行位置推定について、2手法の同時利用を系統的に実現することで精度向上を図ることができた。また、ターンバイターンという視覚障がい者の歩き方特性に合わせた指示H Iをデザインし、実証実験まで行った。
- 科研費・挑戦的研究(萌芽)「プレッシャーコントロール下でのスポーツスキル獲得の効果解明」代表：亀田能成
  - 視覚的探索活動に研究の焦点を当て、サッカーでプレッシャーがかかる状況で視覚的探索活動とサッカー経験がどのような相関を有するかを明らかにすることができた。成果の一部は 3.の「2つの異なるアプリケーション分野における視覚的探索活動の計測と解析」を参照。
- 科研費・基盤研究(B)「日本版シェアードスペースのためのデザインシステム構築」代表：山本早里（研究分担者：亀田）
  - シェアードスペースにおける歩行者などのリスク計量化が、VR空間技術を用いてできることを示し、その技術共有を進めた。
- 科研費・基盤研究(B)「歩行中の視覚障害者の外界知覚と地理知識」代表：喜多伸一（研究分担者：亀田）
  - 視覚障がい者の誘導のためのヒューマンインタフェースについて、システム特性とユーザ特性の両方を勘案して指示を理解してもらえる方法について研究協力を行った。
- 科研費・基盤研究(B)「解説型ウェブページの分かり易さ・見易さの自動評定とそれを用いたページ推薦システム」代表：宇津呂武仁（研究分担者：亀田）
  - 見易さの自動評定における、画像処理と画像認識技術の導入方法について研究議論を行った。
- 科研費・基盤(B)「不特定人称視点映像を用いたコミュニケーション型教示映像メディア」代表者：北原格（研究分担者：亀田）
  - 研究成果の詳細は 3.の「3次元画像処理と敵対的生成ネットワークを用いた全方位多視点画像閲覧法」参照。
- JST CREST 研究領域「人間と調和した創造的協働を実現する知的情報処理システムの構築」研究総括：ATR 萩田紀博、「ソーシャル・イメージング：創造的活動促進と社会性形成支援」代表：鈴木健嗣（研究分担者：北原）

- 研究成果の詳細は 3.の「大規模空間における投影型拡張現実のためのプロジェクトキャリブレーション法」を参照.
- JST CREST 研究領域「人間と調和した創造的協働を実現する知的情報処理システムの構築」研究総括：ATR 萩田紀博，「Cyborg Crowd：柔軟でスケーラブルな人と機械の知力集約」代表：森嶋厚行（研究分担者：北原）
  - 研究成果の詳細は 3.の「敵対的生成ネットワークを用いた SAR 衛星画像と光学衛星画像の対応点探索法」を参照.
- 科研費・基盤研究(A)「強震動と液状化の複合作用を受けるライフラインネットワークの被害推定システムの開発」(2016-2019 年度)代表者：庄司学（研究分担者：北原）
  - 被災地の強震動と液状化の複合作用を受けたライフラインネットワークの AR 提示システムを目的として，ドローンで撮影した空撮映像から 3 次元被災マップ生成システムを構築し，3 次元マップを GIS サーバで共有する被害調査プラットフォームを実現した.
- 科研費・基盤研究(B)「アンコール遺跡群における予防的保存に資する劣化・変形・環境観測システムの構築」(2016-2019 年度)代表者：川村洋平（研究分担者：北原）
  - アンコール遺跡群における予防的保存を目的に，多数のユーザから寄せられた映像情報を統合し，様々な視点からの観測を可能とする提示方式を実現した.
- 科研費・基盤研究(B)「柔軟臓器の形状推定と術前モデルへの実時間位置合わせを行う肝手術ナビゲーション開発」(2018-2021 年度)代表者：大城幸雄（研究分担者：北原）
  - 肝臓手術のバーチャルナビゲーションシステムの実現を目指し，腹腔鏡映像から内蔵の 3 次元形状復元に関する研究に取り組んだ.
- 科研費・基盤研究(A)「人と移動体が混在する空間における外向け HMI 開発・評価基盤技術」(2019-2022 年度)代表者：矢野博明（研究分担者：北原）
  - 歩車混在空間において歩行者や移動体が自身の情報を発信する外向きヒューマンマシンインタフェースを VR/AR 技術を用いて構築する研究に取り組んだ.
- 委託研究・平成 30 年度 Society 5.0 実現化研究拠点支援事業ライフデザイン・イノベーション研究拠点(iLDi) グランドチャレンジ「マルチモーダル観測に基づくスポーツ選手の内面情報分析」代表者：北原格（研究分担者：宍戸）
  - 深層学習に代表される人工知能技術を用いて，映像・音声・位置センサなどのパッシブセンサによって観測される外的情報と生体・加速度などの装着型センサによって観測される内的情報の因果関係を学習し，その学習結果に基づいてパッシブセンサによる観測情報から観測対象の内面情報を推定することを目的とした研究に取り組んだ.



- 共同研究・日本電気株式会社「動的環境におけるカメラキャリブレーション」代表者：北原格
  - 歩行者が行き交う動的環境における複数カメラの効率的キャリブレーションの実現を目的とした研究に取り組み、人物の移動情報を手がかりとしたカメラパラメータ推定法を考案した。
- 共同研究・株式会社日立製作所「固定カメラと移動カメラによる三次元計測結果統合」代表者：北原格（研究分担者：宍戸）
  - 非整地屋外環境において、複数の単眼固定カメラと移動車載カメラで撮影した画像から、移動カメラの位置姿勢推定および撮影環境の3次元形状復元を行う研究に取り組んだ。
- 科研費・若手研究「文化遺産建造物の3次元復元における時系列変化の可視化」代表者：宍戸英彦
  - 50～100年前の画像と現在の文化遺産建造物の画像群を用いて、昔の写真のカメラの位置姿勢推定を目的とする研究に取り組んだ。そのための基礎研究として、50～100年前に撮影された文化遺産建造物の画像と現在の画像とのマッチング精度を向上させる手法を提案した。文化遺産建造物の模様部において経年による劣化や破損、あるいは改築・改変によって同じ位置に原型と異なる画像特徴が検出され、勾配強度を手がかりとしたマッチング処理精度が低下する問題があった。また、対称性を多く有する建造物に顕著に見られる誤対応問題が存在し、これらの問題に対して、自己符号化器と Guided Matching 手法を適用することで解決を図った。

2018 年度報告で評価を頂いていた外部・国際交流については 2019 年度にさらに促進を予定していた。具体的には、下記【6】の南オーストラリア大学との意見交換の他、2019 年度も1か月程度北原格教授が海外で研究活動を行う予定であった。しかし、後の 7.でも述べるように、2020 年初頭の社会情勢のため、残念ながら延期となった。

次節では研究成果の幾つかについて述べる。

### 3. 研究成果

#### 【1】2つの異なるアプリケーション分野における視覚的探索活動の計測と解析

視覚的探索活動は、仮想空間における人間の行動を調査する重要な問題の1つである。我々は、微小重力環境で働くべき宇宙飛行士と、広いフィールドで活動を行うサッカー選手

の両方で視覚スキル獲得のための研究に取り組んできた。視覚メディアとしての技術基盤は同じでありながら、異なるフィールドに研究展開を行うことで、視覚的探索活動に必須な根源的要因に迫ろうとしている。

[サッカー]本研究プロジェクトでは、プレイヤーとコーチの両方がアクティブビジュアル探索的活動パターン(AVEA)を測定できるバーチャルリアリティ(VR)システムを提案した。このシステムの主な目的は、プレッシャーのかかる状況下でサッカー選手の「ゲームを読む」能力を分析できるようにすることである。ヘッドマウントディスプレイ(HMD)技術とヘッドトラッキング機能を利用することで、ユーザーはゲーム内の状況を没入的に体験する。本研究では、数多く考えられるサッカーのシナリオの中から、視覚的探索活動が特に重要となるシナリオを取り上げて研究を行った。ユーザーはボールキープをしている状態で、ライバル選手からのプレッシャーを受けながらパス決定を下すというミッションを課される。ここでは、視覚情報に基づいて迅速な意思決定を余儀なくされる。HMD のモーショントラッキングデータを抽出することにより、ユーザーの視差方向を、その周りの 3 つのゾーンで分割する。被験者実験においてはポジションを含む経歴を慎重に審査した上で、10 人を対象に実施した。AVEA の性能と現在の関係を分析するため、セッション後に IPQ アンケートを適用して、サッカーの経験と AVEA との関係を調べた。

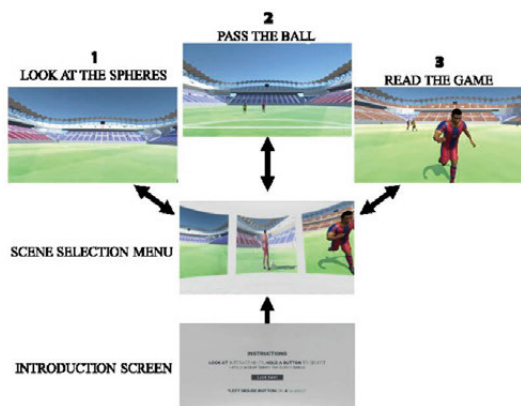


図 1. VR 空間における AVEA 計測

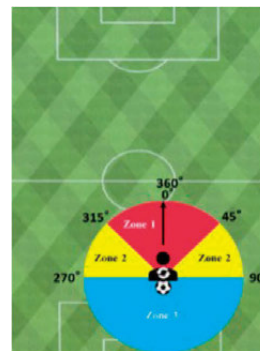


図 2. AVEA 評価のための3ゾーン

[微小重力環境]本研究プロジェクトでは、1G と比較した微小重力環境におけるヒト視覚探索活動(VEA)を探った。小型飛行機による放物線飛行は、宇宙飛行士用訓練なしで微小重力を体験できる唯一の方法であり、各微小重力継続時間は 20 秒未満である。このような異常な条件下で、被験者は宇宙遊泳状態という状況のもと、離れたところにある国際宇宙ステーションを速やかに発見するというミッションが課される。実験は、2つの異なる姿勢位置で行った。興味深いことに、被験者は以前の非 VR での放物線飛行と比較して、VR シミュレーションを経験している間に微小重力関連の乗り物酔いの大幅な減少を申告した。



図 3. 放物線飛行中の実験の様子

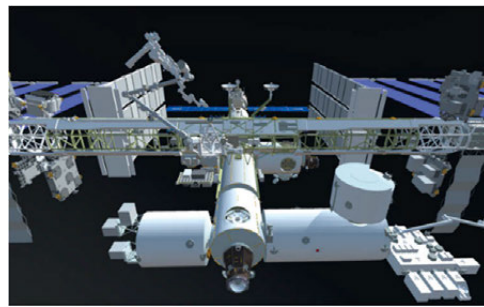


図 4. 探索対象の宇宙ステーション

## 【2】 3次元画像処理と敵対的生成ネットワークを用いた全方位多視点画像閲覧法

3次元画像処理とGAN（敵対的生成ネットワーク）を用いた全方位多視点画像閲覧方式を提案した．Structure from Motion 処理によって，全方位多視点画像からカメラパラメータと撮影空間の3次元情報を推定し，デプス情報に基づく任意視点画像レンダリング処理によって自由視点画像を生成することにより滑らかな視点移動を実現した．さらに，GANを用いた深層学習により自由視点画像の画質を改善し，高品質な全方位多視点画像閲覧を実現している．

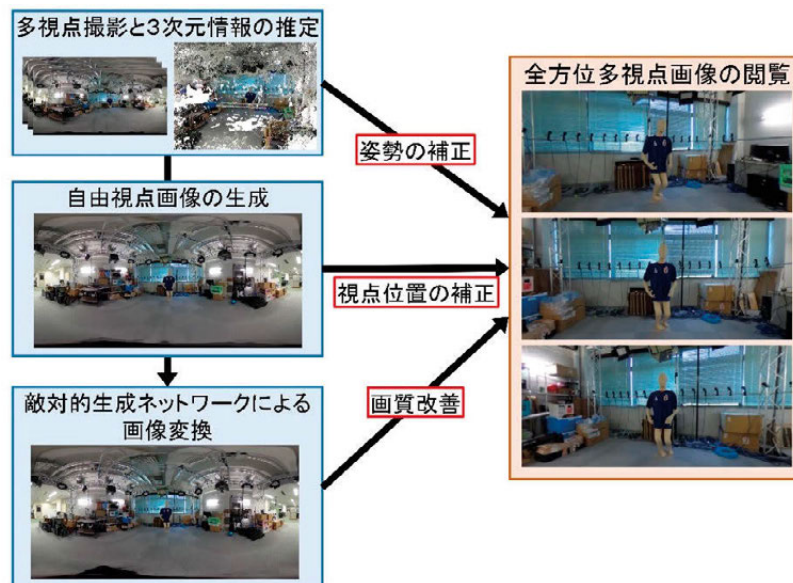


図 5. 全方位多視点画像閲覧法の概要

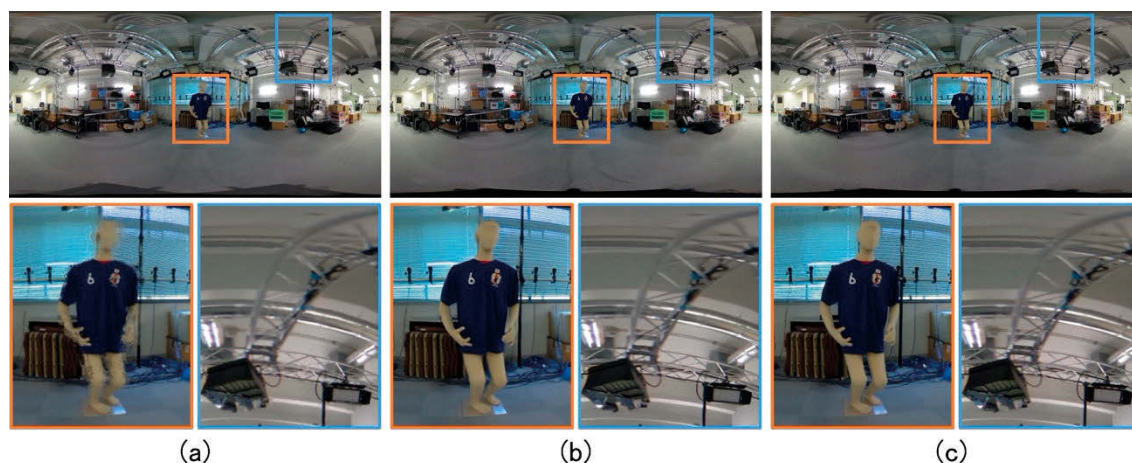


図 6. 実験結果の一例（上）とその拡大図（下）(a)：全方位自由視点画像（画質改善手法適用前）  
(b)：全方位自由視点画像（画質改善手法適用後） (c)：撮影画像（正解画像）

### 【3】大規模空間における投影型拡張現実のためのプロジェクタキャリブレーション法

投影型拡張現実(AR)システムを構築においてプロジェクタ・カメラシステム(PROCAMS)のキャリブレーションは重要な課題である．従来の PROCAMS のキャリブレーション方法では，オクルージョンと深度誤差のトレードオフを考慮してカメラの設置位置を慎重に検討する必要があるため，セットアップに多大な労力と時間を要していた．本研究では，モバイルカメラを用いることで，簡易かつ高精度な PROCAMS のキャリブレーション手法を考案した．空間的に符号化された構造パターン光 (SL) を投影することにより，カメラのフレーム毎に SL のデコードを行い，多視点から観測した SL パターンを統合することにより，投影面の 3 次元形状推定とプロジェクタと被写体の幾何学的関係を推定する．

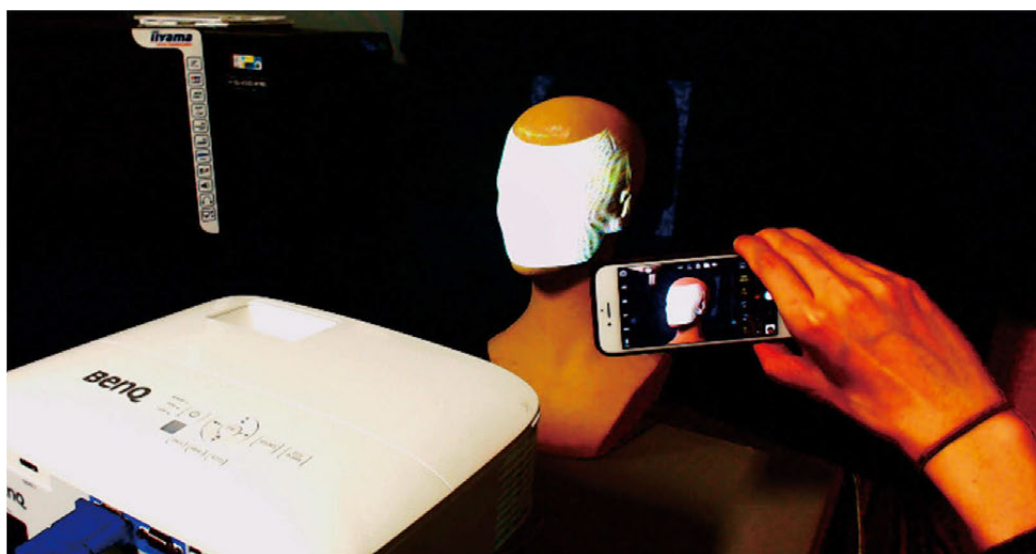


図 7. 大規模空間における投影型拡張現実のためのプロジェクタキャリブレーション法



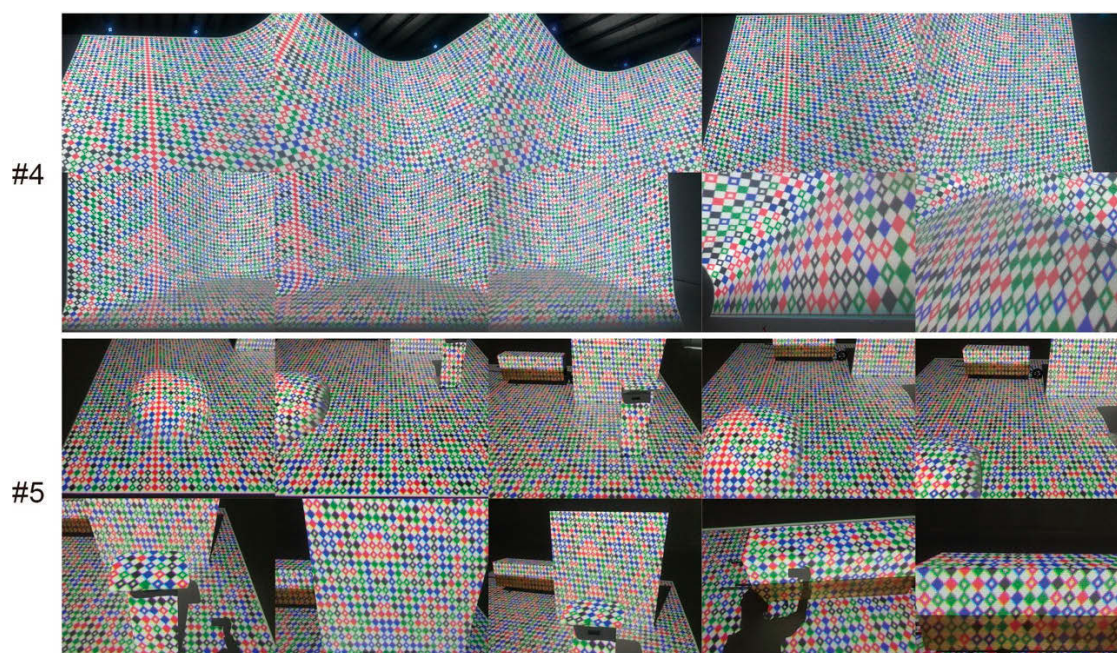


図 8. 大規模空間におけるプロジェクタ・カメラシステム（PROCAMS）のキャリブレーション実験の様子

#### 【4】敵対的生成ネットワークを用いた SAR 衛星画像と光学衛星画像の対応点探索法

合成開口レーダー（SAR）衛星画像と光学衛星画像といった観測モダルの異なる画像間の対応点探索法を提案する．画像の局所特徴ベースの対応点探索アルゴリズムを用いて SAR 画像と光学画像の画像レジストレーション（幾何学的なレジストレーション）を行う．対応点探索アルゴリズムでは，対応する位置で共通の画像特徴が取得されていることが前提とされるが，SAR 画像と光学画像では画像特徴が大きく異なる．本稿では，敵対的生成ネットワーク（GAN）を用いて，片方の画像の見え方をもう一方の画像の見え方に変換することにより，この問題を解決する手法を提案する．定量的評価を実施し，提案手法によって SAR 画像と光学画像の正確な対応点探索が実現できることを確認する．

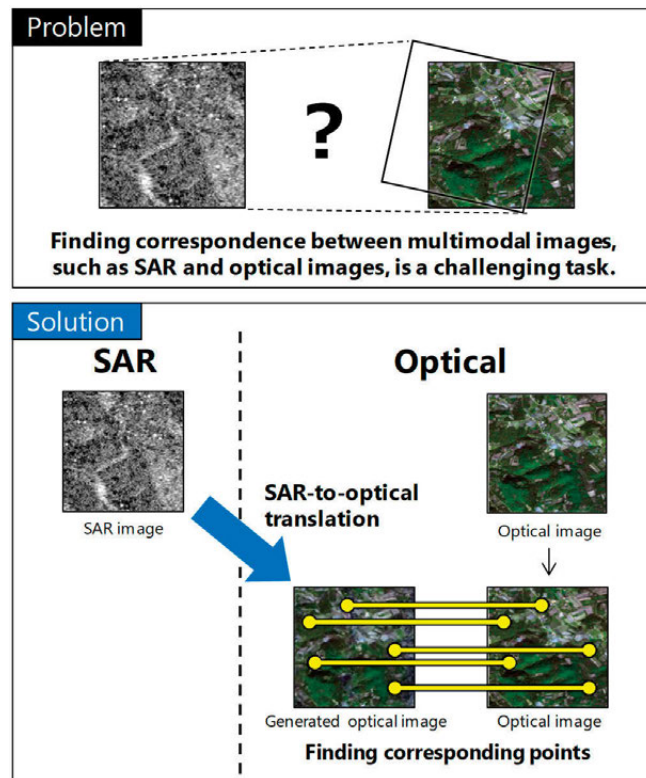


図 9. SAR と光学の画像間の対応点探索手法の概要. 対応点探索の前処理ステップとして GAN を使用し, マルチモーダル画像のレジストレーションを実現する.

#### 【5】文化遺産建造物の 3 次元復元における時系列変化の可視化

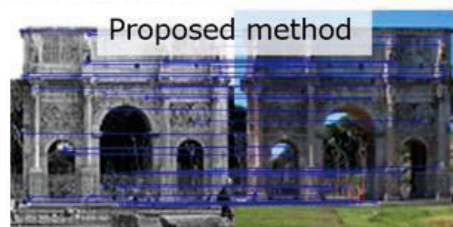
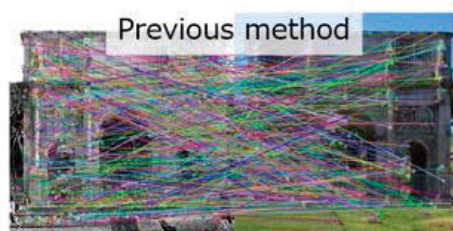
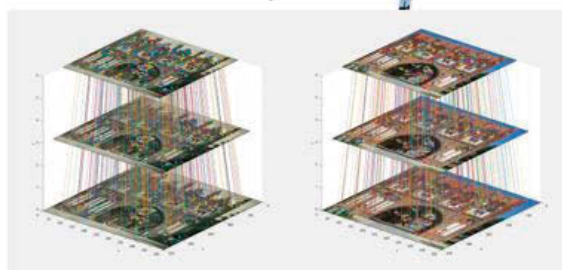
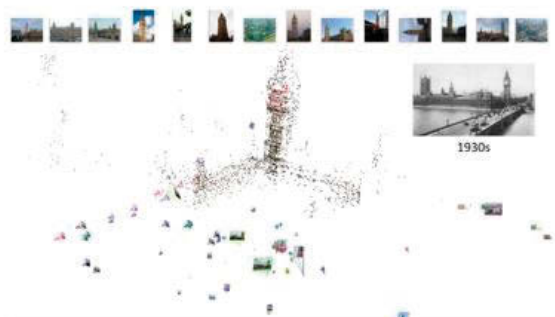
本研究では, 自己符号化器 (オートエンコーダ) と Guided Matching 手法を利用することで, 建造物の経年による劣化や破損, あるいは改築・改変によって同じ位置に原型と異なる画像特徴が検出される問題を排除する. Guided Matching 手法によって得られた正対応を再探索することで, 建造物の対称性に由来する誤対応問題を解決した. 提案手法の有効性を示すために, 文化遺産建造物の画像データセットを用いて, 提案手法を適用した. イラスト, 絵画などのキャプチャ画像に対しても提案手法は良好な画像マッチングを実現した. また, 建造物の大きさ, 構造などが異なる幅広いデータセットに有効であることを確認した. 次に, 既存手法との比較実験を実施した. 既存手法では, A-KAZE 特徴量を使用し, KNN (K-Nearest Neighbor algorithm) マッチング手法を文化遺産建造物の画像データセットに適用した. KNN は, 探索空間から最近傍のラベルを K 個選択し, 多数決でクラスラベルを割り当てるアルゴリズムである. 従来手法では, 画像特徴の誤対応が多いことから, レリーフなどの模様における勾配強度のマッチングが取れない問題や, 建造物に対称性がある場合に多くの誤対応が存在する問題を解決できていない. 一方で提案手法は, 自己符号化器を適用すると, 門や柱などの建造物を構成する勾配強度の強い FAST 特徴量が取得できることを示している. さらに, Guided Matching 手法から勾配強度の強い正対応を求め, その情報を活用して画像中の正



対応を再探索する手法は、建造物に対称性がある場合に発生する誤対応の問題においても良好に画像マッチングできることを示している。

## Research on 3D reconstruction of cultural heritage buildings

Matching images between 50 to 100 years ago and current heritage buildings



Proposal of image matching method using Autoencoder

Image matching method using Autoencoder (experimental result)

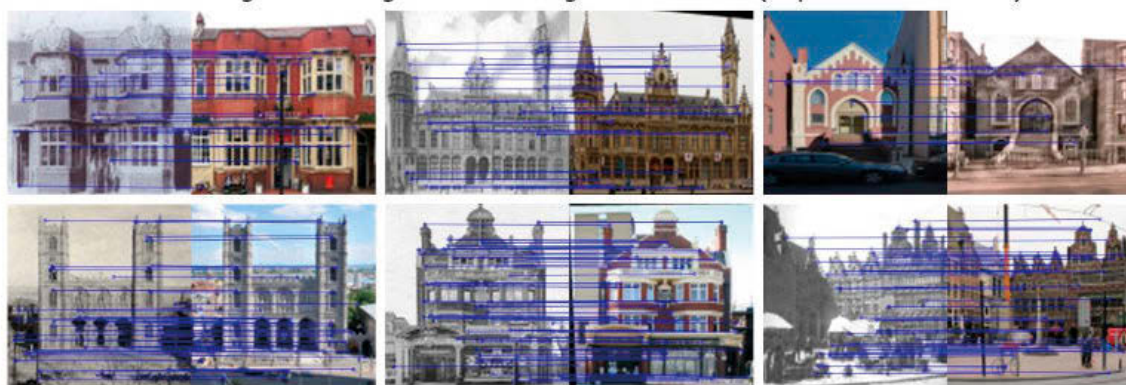


図 10. 上段：自己符号化器と Guided Matching 手法を用いた画像重畳手法，下段：提案手法による画像マッチング結果

## 【6】南オーストラリア大学 Bruce H. Thomas 教授との研究交流

2020 年 2 月 17 日から 18 日に渡って、VR から HI の研究にかけて著名な南オーストラリア大学(University of South Australia) Bruce H. Thomas 教授を計算メディアグループに招き、丸 2 日間に渡って精力的に今後の研究交流の可能性について意見交換を行った。こちらからの研

究紹介の幾つかは研究親和性が高く、継続的に意見交換し、研究を発展させて行くことで合意した。

#### 4. 教育

学生の指導状況

|             |        |                                                                          |
|-------------|--------|--------------------------------------------------------------------------|
| 謝 淳         | 博士(工学) | Projector Calibration for Spatial Augmented Reality in Large-Scale Space |
| 今井 美里       | 修士(工学) | 全方位映像 VR を利用したスポーツ動作解析手法                                                 |
| 小河原 洸貴      | 修士(工学) | 視覚障がい者に向けたターンバイターンナビゲーションインタフェース                                         |
| 小林 洸陽       | 修士(工学) | 空撮画像処理とクラウドソーシングを用いた被災状況マップ生成法                                           |
| 竹内 音        | 修士(工学) | 3次元画像処理と敵対的生成ネットワークによる全方位多視点画像閲覧方式                                       |
| 野原 直翔       | 修士(工学) | 投手正面から撮影した映像中での肘位置に注目した投球フォーム分析                                          |
| 前川凌佑        | 修士(工学) | 腹腔鏡映像情報に基づく3次元臓器モデル生成手法                                                  |
| 山崎 康平       | 修士(工学) | 類似画像検索とSLAMの同時利用による歩行者位置推定                                               |
| 吉田 駿        | 修士(工学) | 反射光の偏光特性を利用した空中像と地面映像の同時提示方式                                             |
| QIU XINYI   | 修士(工学) | テキストと多視点映像の連動によるインタラクティブ電子書籍                                             |
| ZHANG WEIYI | 修士(工学) | 路面におけるパーソナルトランスポートの安全領域可視化に関する研究                                         |
| 大西 衝        | 学士(工学) | ヒヤリハット事例の仮想立ち合いにおける注視点を用いた安心感評価                                          |
| 中泉 安貴       | 学士(工学) | 広域観測映像からの白杖使用者の検出と位置推定                                                   |
| 上田 樹        | 学士(工学) | 深層学習による運動予測を用いた遠隔操作映像の時間補償                                               |
| 吉野 航平       | 学士(工学) | 3次元点群を用いた深層学習による発破ずりの粒度分布推定手法                                            |



集中講義など

北原格, 放送大学 面接授業, 「専門科目: スポーツ映像とその映像処理」

## 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

### 受賞

1. DIA2020 研究奨励賞、前川 凌佑, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 坂本 堪亮, 大城 幸雄, 北原 格、単眼腹腔鏡映像からの3次元臓器モデル生成手法、2020年3月.
2. MVE 賞、大西 衝, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成、ヒヤリハット事例の仮想立ち合いにおける注視点を用いた安心感評価、2020年3月.
3. ITS 奨励発表賞、小河原 洸貴, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成、類似画像検索における歩行位置推定能力の実地検証、2020年1月.
4. 筑波大学 2019 BEST FACULTY MEMBER、北原 格、2020年2月.

### 外部資金

1. 科研費・基盤(B)「経路撮影に基づく歩行者・パーソナルモビリティナビゲーション基盤の構築」(2017-2020年度) 代表者: 亀田能成 全年度直接経費: 1250万円 (2019年度直接経費: 320万円)
2. 科研費・挑戦的研究(萌芽)「プレッシャーコントロール下でのスポーツスキル獲得の効果解明」(2019-2021年度) 代表者: 亀田能成 全年度直接経費: 470万円 (2019年度直接経費: 180万円)
3. 科研費・基盤(B)「不特定人称視点映像を用いたコミュニケーション型教示映像メディア」(2017-2020年度) 代表者: 北原格 全年度直接経費: 1350万円 (2019年度直接経費: 250万円)
4. 科研費・若手研究「文化遺産建造物の3次元復元における時系列変化の可視化」(2019-2020年度) 代表者: 宍戸英彦 全年度直接経費: 330万円 (2019年度直接経費: 150万円)
5. 科研費・基盤(B)「日本版シェアードスペースのためのデザインシステム構築」(2018-2020年度) 代表者: 山本早里(研究分担者: 亀田) 全年度直接経費: 1320万円 (2019年度直接経費: 490万円、分担 60万円)
6. 科研費・基盤(B)「歩行中の視覚障害者の外界知覚と地理知識」(2018-2020年度) 代表者: 喜多伸一(研究分担者: 亀田) 全年度直接経費: 1330万円 (2019年度直接経費: 410万円、分担 50万円)

7. 科研費・基盤(B)「解説型ウェブページの分かり易さ・見易さの自動評定とそれを用いたページ推薦システム」(2019-2021 年度) 代表者：宇津呂武仁(研究分担者：亀田)  
全年度直接経費：1330 万円 (2019 年度直接経費：430 万円、分担 10 万円)
8. 科研費・基盤(A)「強震動と液状化の複合作用を受けるライフラインネットワークの被害推定システムの開発」 (2016-2019 年度) 代表者：庄司学(研究分担者：北原) 全年度直接経費：1330 万円 (2019 年度直接経費：430 万円、分担 10 万円)
9. 科研費・基盤(B)「アンコール遺跡群における予防的保存に資する劣化・変形・環境観測システムの構築」 (2016-2019 年度) 代表者：川村洋平(研究分担者：北原) 全年度直接経費：1230 万円 (2019 年度直接経費：140 万円、分担 10 万円)
10. 科研費・基盤(B)「柔軟臓器の形状推定と術前モデルへの実時間位置合わせを行う肝手術ナビゲーション開発」(2018-2021 年度) 代表者：大城幸雄(研究分担者：北原) 全年度直接経費：1310 万円 (2019 年度直接経費：420 万円、分担 50 万円)
11. 科研費・基盤(A)「人と移動体が混在する空間における外向け HMI 開発・評価基盤技術」(2019-2021 年度) 代表者：矢野博明(研究分担者：北原) 全年度直接経費：3360 万円 (2019 年度直接経費：1700 万円、分担 400 万円)
12. JST CREST 研究領域「人間と調和した創造的協働を実現する知的情報処理システムの構築」研究総括：ATR 萩田紀博、「Cyborg Crowd：柔軟でスケーラブルな人と機械の知力集約」(2016.12-2022.3) 代表：森嶋厚行 (研究分担者：北原) 全年度直接経費：6200 万円 (2019 年度直接経費：1200 万円)
13. JST CREST 研究領域「人間と調和した創造的協働を実現する知的情報処理システムの構築」研究総括：ATR 萩田紀博、「ソーシャル・イメージング：創造的活動促進と社会性形成支援」(2014.10-2020.3) 代表：鈴木健嗣 (研究分担者：北原) 全年度直接経費：600 万円 (2019 年度直接経費：100 万円)
14. 受託研究・大阪大学 Society 5.0 実現化研究拠点支援事業「マルチモーダル観測に基づくスポーツ選手の内面情報分析」(2018-2019 年度) 代表者：北原格 全年度直接経費：1050 万円 (2019 年度直接経費：350 万円)
15. 共同研究・日本電気株式会社「動的環境におけるカメラキャリブレーション」代表者：北原格 2019 年度直接経費：100 万円
16. 共同研究・株式会社日立製作所「固定カメラと移動カメラによる三次元計測結果統合」代表者：北原格 2019 年度直接経費：366.6 万円

## 知的財産権

該当なし

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

1. Cesar Daniel Rojas Ferrer, Hidehiko Shishido, Itaru Kitahara, and Yoshinari Kameda, “Read-The-Game: System for Skill-Based Visual Exploratory Activity Assessment with a Full Body Virtual Reality Soccer Simulation”, PLoS ONE, vol.15, no.3, pp.1-29, 2020/3/17.  
(DOI: [10.3169/mta.8.70](https://doi.org/10.3169/mta.8.70))
2. Hidehiko Shishido and Itaru Kitahara, “Calibration of Multiple Sparsely Distributed Cameras Using a Mobile Camera”, Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part P: Journal of Sports Engineering and Technology, vol.234, no.1, pp.37-48, 2019/9/18.  
(DOI: [10.1177/1754337119874276](https://doi.org/10.1177/1754337119874276))
3. Hidehiko Shishido, Aoi Harazaki, Yoshinari Kameda, and Itaru Kiahara, “Smooth Switching Method for Asynchronous Multiple Viewpoint Videos Using Frame Interpolation”, Journal of Visual Communication and Image Representation, vol.62, pp.68-76, 2019/7/1.  
(DOI: [10.1016/j.jvcir.2019.04.010](https://doi.org/10.1016/j.jvcir.2019.04.010))

#### B) 査読無し論文

1. 川村 洋平, 池田 啓, 宍戸 英彦, 河崎 衣美, 北原 格, 丸太 寛之, 里 知樹, 松井 敏也, “バイヨン寺院における予防的保全に資する劣化・変形・環境観測システムの構築”, 考古学ジャーナル 2020 年 1 月号, no.736, pp.29-34, 2020 年 1 月 23 日.
2. 宍戸 英彦, 河崎 衣美, 川村 洋平, 松井 敏也, 北原 格, “アンコール遺跡群における地衣類の時系列変化画像の重畳” 考古学ジャーナル 2019 年 9 月号, no.730, pp.29-33, 2019 年 8 月 24 日.

### (2) 国際会議発表

#### A) 招待講演

#### B) 一般講演

1. Oto Takeuchi, Hidehiko Shishido, Yoshinari Kameda, and Hansung Kim, “Image-Quality Improvement of Omnidirectional Free-Viewpoint Images by Generative Adversarial Network”, 15th International Conference on Computer Vision Theory and Applications (VISAPP2020), pp.299-306, 2020/2, Valetta, Malta.  
(DOI: [10.5220/0008959802990306](https://doi.org/10.5220/0008959802990306))

2. Naoto Nohara, Hidehiko Shishido, Itaru Kitahara, and Yoshinari Kameda, “Pitching Form Evaluation Based on Elbow Position by a Monocular Camera”, International Workshop on Advanced Image Technology(IWAIT2020), 6 pages, 2020/1, Yogyakarta, Indonesia.
3. Kohei Yamasaki, Hidehiko Shishido, Itaru Kitahara, and Yoshinari Kameda, “Evaluation for Harmonic Location Estimation System of Image Retrieval and Slam”, International Workshop on Advanced Image Technology(IWAIT2020), 6 pages, 2020/1, Yogyakarta, Indonesia.
4. Hidehiko Shishido, Hansung Kim, and Itaru Kitahara, “Super Long Interval Time-Lapse Image Generation for Proactive Preservation of Cultural Heritage Using Crowdsourcing”, The 3rd IEEE Workshop on Human-in-the-loop Methods and Human Machine Collaboration in BigData (IEEE HMDData 2019), pp.4632-4637, 2019/12, Los Angeles, USA.  
(DOI: [10.1109/BigData47090.2019.9006399](https://doi.org/10.1109/BigData47090.2019.9006399))
5. Brian Bino Sinaice, Yohei Kawamura, Jaewon Kim, Natsuo Okada, Itaru Kitahara, and Hyong Doo Jang, “Application of Deep Learning Approaches in Igneous Rock Hyperspectral Imaging”, Proceedings of the 28th International Symposium on Mine Planning and Equipment Selection (MPES 2019), pp.228-235, 2019/12, Perth, Australia.  
(DOI: [10.1007/978-3-030-33954-8\\_2](https://doi.org/10.1007/978-3-030-33954-8_2))
6. Zedrick Paul Tungol, Yohei Kawamura, Itaru Kitahara, and Hyong Doo Jang, “Development of a Remote Rock Fragmentation Size Distribution Measurement System for Surface Mines Using 3D Photogrammetry”, 10th International Conference on Explosives and Blasting (ICEB2019), pp.153-162, 2019/10, Chengdu, China.
7. Hidehiko Shishido, Wanzhi Zha, Hyong Doo Jang, Yohei Kawamura, Yoshinari Kameda, and Itaru Kitahara, “Clustering Method of 3D Point Cloud of Muck-Pile Based on Connectivity of Adjacent Surface”, 2019 IEEE 8th Global Conference on Consumer Electronics (GCCE 2019), pp.796-800, 2019/10, Osaka, Japan.
8. Chun Xie, Hidehiko Shishido, Yoshinari Kameda, and Itaru Kitahara, “A Projector Calibration Method Using a Mobile Camera for Projection Mapping System”, 2019 IEEE International Symposium on Mixed and Augmented Reality Adjunct (ISMAR-Adjunct), pp.249-250, 2019/10, Beijing, China.  
(DOI: [10.1109/ISMAR-Adjunct.2019.00-33](https://doi.org/10.1109/ISMAR-Adjunct.2019.00-33))
9. Hisatoshi Toriya, Ashraf Dewan, and Itaru Kitahara, “Sar2opt: Image Alignment Between Multi-Modal Images Using Generative Adversarial Networks”, IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS2019), 4 pages, 2019/7, Yokohama, Japan.  
(DOI: [10.1109/IGARSS.2019.8898605](https://doi.org/10.1109/IGARSS.2019.8898605))

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

1. 宍戸 英彦, “スポーツ映像処理を競技現場へ活用するためには”, 第 108 回オーディオビジュアル複合情報処理研究発表会, 2020 年 2 月.
2. 宍戸 英彦, “スポーツ映像処理における現場活用の可能性”, 映像情報メディア学会冬季大会, 2019 年 12 月.

#### B) その他の発表

1. 武田 隆雅, 小林 洸陽, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, “3 次元点群に対する機械学習を用いた形状変形判定法”, 情報処理学会研究報告 CVIM, vol.2020-CVIM-221, no.34, pp.1-7, 2020 年 3 月.
2. 前川 凌佑, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 坂本 堪亮, 大城 幸雄, 北原 格, “単眼腹腔鏡映像からの 3 次元臓器モデル生成手法”動的画像処理実用化ワークショップ講演論文集 (DIA2020), 8 pages, 2020 年 3 月.
3. 大西 衝, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, “ヒヤリハット事例の仮想立ち合いにおける注視点を用いた安心感評価”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.119, no.457, pp. 251-256, 2020 年 3 月.
4. 小河原 洸貴, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, “視覚障がい者向けターンバイターンナビゲーションにあわせた音振動提示”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.119, no.457, pp. 245-250, 2020 年 3 月.
5. 梁 梓龍, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, “Visual SLAM に基づく室内での移動と手の誘導への支援”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.119, no.457, pp. 209-213, 2020 年 3 月.
6. 野原 直翔, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, “投手正面から撮影した映像中での投球動作初期の分析”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.119, no.457, pp. 193-197, 2020 年 3 月.
7. 今井 美里, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, “HMD を用いたスポーツ動作情報の視覚フィードバック方法”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.119, no.457, pp. 177-182, 2020 年 3 月.
8. 小林 洸陽, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, “空撮画像処理とクラウドソーシングを用いた被災状況マップ生成手法”, 情報処理学会研究報告 CVIM, vol.2020-CVIM-220, no.32, pp.1-6, 2020 年 1 月.

9. 石川 菜由子, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, “機械学習による競泳映像からの泳者頭部位置推定の試み”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.119, no.386, pp.101-106, 2020 年 1 月.
10. 田村 優, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, “アクティブパターンの複合現実感型表示を用いた歩行者への情報提示”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.119, no.386, pp.25-30, 2020 年 1 月.
11. 鳥屋 剛毅, Dewan Ashraf, 北原 格, “敵対的生成ネットワークを用いた SAR 衛星画像と光学衛星画像の対応点探索法”, 情報処理学会研究報告 CVIM, vol.2020-CVIM-220, no.2, pp.1-6, 2020 年 1 月.
12. 竹内 音, 宍戸 英彦, 亀田 能成, Kim Hansung, 北原 格, “3 次元画像処理と敵対的生成ネットワークを用いた全方位多視点画像閲覧法”, 情報処理学会研究報告 CVIM, vol.2020-CVIM-220, no.1, pp.1-6, 2020 年 1 月.
13. 野原 直翔, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, “肘位置に注目した投球フォーム分析の精度評価”, HCG シンポジウム 2019, 4 pages, 2019 年 12 月.
14. 中泉 安貴, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, “広域観測カメラによる視覚障がい者検出”, HCG シンポジウム 2019, 5 pages, 2019 年 12 月.
15. 石川 晋也, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, “視覚探索トレーニングのためのバスケットボール VR シミュレータ”, HCG シンポジウム 2019, 4 pages, 2019 年 12 月.
16. 中村 将太朗, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, “ウェアラブルカメラからの点字ブロックの種別と位置の推定”, HCG シンポジウム 2019, 4 pages, 2019 年 12 月.
17. 小河原 洸貴, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, “ターンバイターン方式ナビゲーションに適した音と振動によるインタフェース”, HCG シンポジウム 2019, 5 pages, 2019 年 12 月.
18. 宍戸 英彦, “3 次元人物追跡を応用した手術支援の可能性と課題”, 計算メディカルサイエンス事業部発足キックオフシンポジウム, 2019 年 12 月.
19. Hidehiko Shishido, “Proactive Preservation Activities of Cultural Heritage by Crowdsourcing”, 2019 CCS-EPCC Workshop, 2019 年 12 月.
20. 北原 格, 宍戸 英彦, 吹田 真士, “マルチモーダル観測に基づくスポーツ選手の内面情報分析”, 文部科学省 Society 5.0 実現化研究拠点支援事業 ライフデザイン・イノベーション研究拠点(iLDi) 「国際シンポジウム」, 2019 年 11 月.
21. 山崎 康平, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, “類似画像検索と SLAM による協調的位置推定システムの性能評価”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, 6 pages, 2019 年 10 月.

22. 上田 樹, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, “深層学習を用いたテレプレゼンス映像の伝送遅延補償法の検討”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.119, no.222, pp.65-70, 2019 年 10 月.
23. Qiu Xinyi, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 坂本 竜基, 北原 格, “多視点映像を用いたインタラクティブ電子書籍による立体芸術鑑賞方式”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.119, no.222, pp.15-19, 2019 年 10 月.
24. Hidehiko Shishido, “Proactive Preservation Activities of Cultural Heritage by Crowdsourcing”, CREST 知的情報処理 2019 年度領域会議, 2019 年 10 月.
25. 松原 尚利, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, “多視点カメラ配置検討のための VR インタフェース”, 日本バーチャルリアリティ学会第 24 回大会論文集, 4 pages, 2019 年 9 月.
26. 前川 凌佑, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 坂本 堪亮, 大城 幸雄, 北原 格, “腹腔鏡映像レジストレーションのための深層学習によるワンショットデプスマップの生成”, 情報処理学会 研究報告-CVIM, vol.218, no.24, pp.1-8, 2019 年 9 月.
27. 蛭田 雄也, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, “鏡面反射領域を用いた一人称視点映像生成法”, 第 18 回情報科学技術フォーラム, pp.133-134, 2019 年 9 月.
28. 武田 隆雅, 小林 洸陽, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, “多視点画像から復元した 3 次元形状に基づく建築物の倒壊判定法”, 第 18 回情報科学技術フォーラム, pp.131-132, 2019 年 9 月.
29. 竹内 音, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, “敵対的生成ネットワークによる全方位自由視点画像の画質改善手法”, 第 22 回画像の認識・理解シンポジウム (MIRU2019), 4 pages, 2019 年 7 月.
30. 宍戸 英彦, Kim Hansung, 北原 格, “文化遺産建造物における自己符号化器を活用した撮影時期の異なる画像マッチング手法”, 第 22 回画像の認識・理解シンポジウム (MIRU2019), 4 pages, 2019 年 7 月.
31. 宍戸 英彦, 北原 格, “疎に配置した多視点カメラのキャリブレーションを用いたスポーツ選手の 3 次元位置推定”映像情報メディア学会スポーツ情報処理次元研究会技術報告, vol.ITE-43, no.14, pp.15-18, 2019 年 6 月.
32. 池田 啓, 川村 洋平, 横倉 潤, 宍戸 英彦, 河崎 衣美, 伊藤 豊, 北原 格, 丸太 寛之, 里 知樹, 松井 敏也, “ICT を活用した予防保全のためのアンコール遺跡群バイヨン寺院を対象としたモニタリングシステムの開発”, 日本文化財科学会第 36 回大会発表要旨集, 2 pages, 2019 年 6 月.

33. 山崎 康平, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, “類似画像検索と SLAM の協調的位置推定における負荷分散法”, 情報処理学会 研究報告－ITS, vol.2019-DPS-179, no.30, pp.1-5, 2019 年 5 月.
34. 小河原 洗貴, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, “類似画像検索における歩行位置推定能力の実地検証”, 情報処理学会 研究報告－ITS, vol.2019-ITS-77, no.19, pp.1-2, 2019 年 5 月.
35. 坂村 祐希, 富田 瑛智, 宍戸 英彦, 水浪 田鶴, 井上 和哉, 亀田 能成, 原田 悦子, 北原 格, “拡張現実を用いた自動走行車両搭乗者の安心感の向上”, 情報処理学会 研究報告－ITS, vol.2019-ITS-77, no.3, pp.1-8, 2019 年 5 月.
36. 宍戸 英彦, “マーカレス 3 次元関節位置情報に基づく心拍推定に関する研究”, 第 3 回 AIP チャレンジ成果報告会, 2019 年 4 月.

#### (4) 著書、解説記事等

##### A) 解説記事

1. 亀田 能成, “視覚障がい者の外出のための歩行者ナビゲーション支援技術の研究”, 福祉のまちづくり研究, vol.22, no.1, pp.40-42, 2020 年 3 月 15 日.

#### 7. 異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等

##### 異分野間連携（センター内外）

本年度から、北原格教授が計算メディカルサイエンス事業内でも研究活動を行うことになった。また、この関係で、本学内のサイバニクス研究センターにも籍を置き、3DCGバーチャル手術を始めとする様々な連携研究推進進めて行く予定である。（研究活動の詳細については別章記載）

##### 産学官連携

該当なし

##### 国際連携・国際活動

北原格教授がイギリスの University of Surrey と締結した MoU に基づき共同研究を推進し、国際会議論文 2 件・その他の発表 1 件を発表した。

同じく、オーストラリアの Curtin University と締結した MoU により共同研究を継続実施し、国際会議発表を 4 件発表した。



北原格教授は、2020年3月にマンスリーサバティカル事業によりアメリカ合衆国の Carnegie Mellon University を訪問し、共同研究の可能性を議論する予定であった。本件は残念ながら新型コロナウイルス感染症拡大リスクの高まりの影響により延期となった。

## 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

該当なし

## 9. 管理・運営

亀田 能成

エンパワーメント情報学プログラム運営委員会委員

エンパワーメント情報学プログラム学生委員会委員長

エンパワーメント情報学プログラムカリキュラム委員会委員長

システム情報工学研究科知能機能システム専攻 広報委員会委員長

全学新学期対応タスクフォース委員 (COVID-19に伴う対応)

北原 格

ヒューマニクス学位プログラム運営委員会委員

ヒューマニクス学位プログラム入試委員会副委員長

エンパワーメント情報学プログラム入試委員会委員

知能機能システム専攻学務・カリキュラム委員会委員

宍戸 英彦

システム情報工学研究科知能機能システム専攻 広報委員会委員

## 10. 社会貢献・国際貢献

亀田 能成

電子情報通信学会 メディアエクスペリエンス・仮想環境基礎 研究会 委員

電子情報通信学会 サイバーワールド 時限研究専門委員会 委員

北原 格

日本バーチャルリアリティ学会 SIG-MR 研究会 副委員長

情報処理学会コンピュータビジョンとイメージメディア研究会 委員

映像情報メディア学会スポーツ情報処理時限研究会 (SIP)幹事

## 11. その他

亀田 能成

人工知能科学センターでも研究に従事（プロジェクト研究部門モビリティ分野）.

北原 格

筑波大学サイバニクス研究センターでも研究に従事.