



筑波大学 計算科学研究センター

〒305-8577 茨城県つくば市天王台 1-1-1

TEL 029-853-6487, 6488

FAX 029-853-6406

<https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/>

Center for Computational Sciences,
University of Tsukuba

Annual Report FY2020



筑波大学

University of Tsukuba

筑波大学 計算科学研究センター

令和2年度

年次報告書

Center for Computational Sciences,
University of Tsukuba

Annual Report FY2020

筑波大学 計算科学研究センター

令和2年度 年次報告書

筑波大学 計算科学研究センター

令和3年9月



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 令和二年度の活動状況	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 令和二年度の活動方針	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	10
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	14
I. 素粒子物理研究部門	14
II. 宇宙物理研究部門	36
III. 原子核物理研究部門	65
IV. 量子物性研究部門	79
V. 生命科学研究部門	101
V-1. 生命機能情報分野	101
V-2. 分子進化分野	119
VI. 地球環境研究部門	134
VII. 高性能計算システム研究部門	154
VIII. 計算情報学研究部門	191
VIII-1. データ基盤分野	191
VIII-2. 計算メディア分野	216

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、2020年に設立29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、我々が過去30年近くに渡って進めてきたコ・デザインコンセプトに基づく高性能計算システムとその応用に関する研究を継続しました。

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。2020年度には、2018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整えました。また、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～中期間柔軟に招聘する中期招聘制度も継続し、海外の主要研究拠点との双方向の研究交流を通じ、世界レベルの国際共同研究とそれに基づく成果を上げるべく努力してきました。

ところが、年度開始直前から始まったいわゆる COVID-19、世界規模の新型コロナウイルス感染症パンデミックという未曾有の大問題に直面し、これらの海外主要研究機関の研究者との物理的交流が困難となりました。そして、センターからの教員・研究者の海外派遣も、海外からの研究者の招聘も物理的に実現できない事態となりました。しかし、幸いにも COVID-19 下でオンライン会議システムや情報共有システムの開発・普及が飛躍的に発展し、結果的にむしろ今まで以上にコンスタントにテレビ会議などを通じて共同研究を推進することができました。センターでも年度開始前から、全ての教員がテレビ会議をスムーズに行えるライセンス付与などの環境を整えて対応した結果、COVID-19 による国際共同研究への影響を最小限に抑えることができました。

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

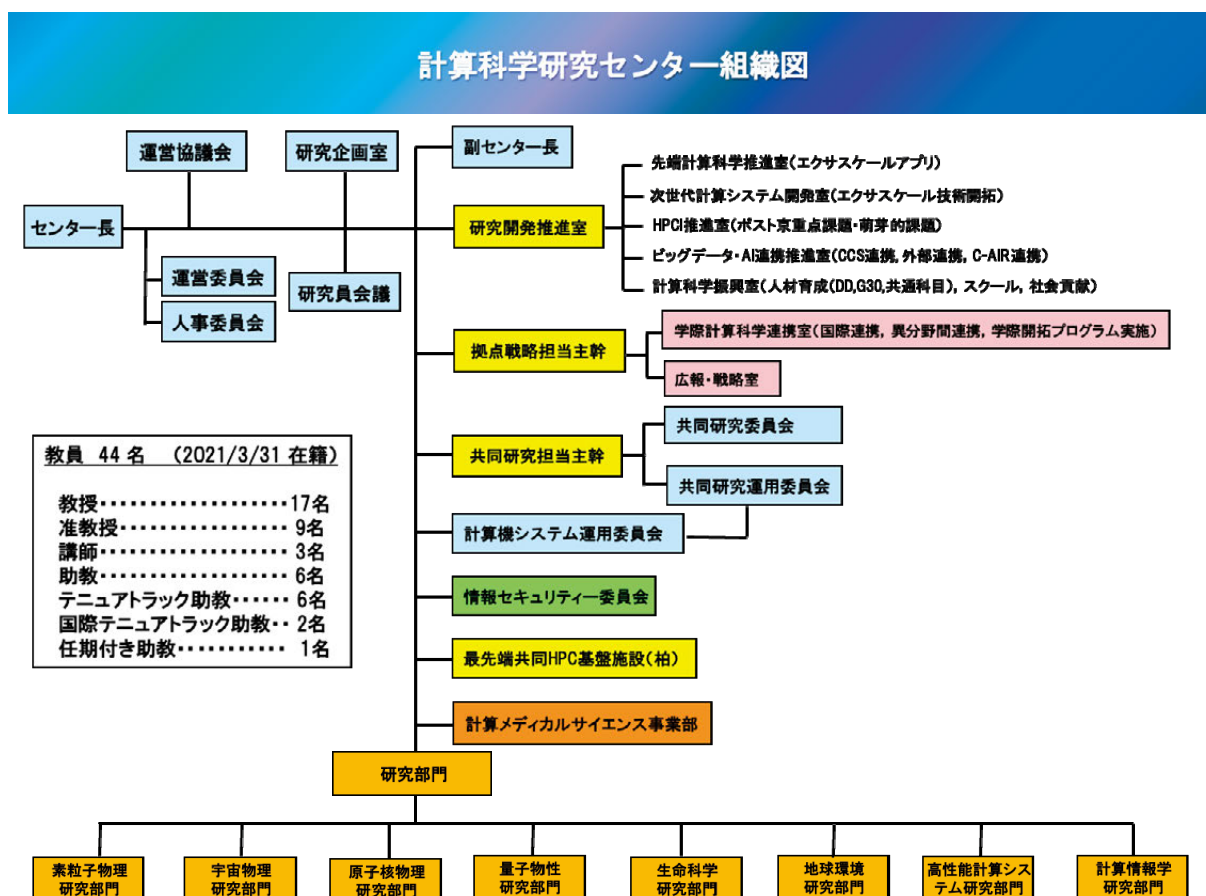
し、GPU と FPGA を組み合わせて相補的に利用することを世界で初めて実用化した画期的な多重複合型演算加速システムを実現、運用開始しました。

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、高性能計算システム、計算情報学の 8 つの研究部門があり、44 名の専任教員が従事している他、研究員 27 名が在籍しています。また、国際連携として、英国エジンバラ大学、米国ローレンスバークレー国立研究所を始めとする海外 13 機関と MOU を締結するとともに、37 機関（北米 15、欧州 13、アジア・オセアニア 9）と国際共同研究連携を行っています。この他に異分野間連携として、「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。また、「計算メディカルサイエンス推進事業部」では、計算生体分子医科学、睡眠ビッグデータ解析・自動診断、3DCG バーチャル手術、計算光バイオイメージングによる医学分野との連携を継続し、医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。大きな国際交流イベントとしては、エジンバラ大学とローレンスバークレー国立研究所とそれぞれ行っている毎年定例の国際ワークショップも開催しました。これらは COVID-19 下でのテレビ会議方式となりましたが、いつも通りの実りある議論ができ、新しい共同研究の礎も築くことができました。また、韓国 KISTI との日韓 HPC ウィンタースクールも予定していましたが、これは両国学生の物理的な交流も大きな目的となっているため残念ながら COVID-19 の終息までは延期となっています。

本小冊子は、2020 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。

2021 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 田浦 健次郎 (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
- 共同研究員 金谷 和至（特命教授）、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
- 研究員 高水 裕一、安部 牧人、福島 肇、朝比奈 雄太、
井上 茂樹、小川拓未、菊田 智史
- 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	山田 俊介、竹内 嵩、廣川 祐太、Arqum Hashmi、金谷 和至
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、原嶋 庸介
研究員	三嶋 謙二、鬼頭（西岡） 宏任、Kowit Hengphasatporn、満田祐樹 森田 陸離、宮川 晃一
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、今井 優真
共同研究員	植田 宏昭（教授）、中村 祐輔（特任助教）

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、額田 彰
助教	多田野 寛人、小林 諒平、藤田 典久
研究員	平賀 弘平
客員准教授	埴 敏博（東京大学）
共同研究員	安永 守利（教授）、和田 耕一（教授）、櫻井 鉄也（教授）、 山口 佳樹（准教授）、今倉 暁（准教授）

計算情報学研究部門

データ基盤分野

教授	北川 博之（部門主任）、天笠 俊之
准教授	塩川 浩昭
助教	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	宍戸 英彦
共同研究員	白川 友紀

2 令和二年度の活動状況

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、2020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、1992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1996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、2004年（平成16年）の国立大学法人化の節目に改組し、部門を拡充して、素粒子宇宙研究部門、物質生命研究部門、地球生物環境研究部門、超高速計算システム研究部門、計算情報学研究部門の5部門からなる**計算科学研究センター**が発足しました。

その後、2006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2007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。2011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、2008年には、当センターと東京大学情報基盤センター、京都大学学術情報メディアセンター間で、T2K（Tsukuba-Tokyo-Kyoto）オープンスーパーコンピュータアライアンスを結成し、それぞれの大学のスーパーコンピュータの共同仕様を策定し、筑波大ではT2K-Tsukubaを調達しました。これは筑波大学としては初めて超並列クラスタ型スーパーコンピュータを導入すると同時に、筑波大学として初めて米国メーカーによるスーパーコンピュータの導入ということにもなりました。クラスタ型計算機はその後のHA-PACSを経てメニーコア型超並列クラスタCOMAの開発・導入へとつながりました。

この流れを受け、2013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、2016 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、2021 年 3 月末において 44 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、2010 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、2016 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。さらに、学内においてトップレベルの研究を行う格付けである「世界級研究拠点 (R1)」と位置付けられ、2020 年度からは世界トップレベル研究形成拠点にも認定されています。さらに、2020 年 2 月に行われた、6 年に 1 度の海外有識者による外部評価の評価結果が 2020 年 9 月にまとめられ、その間のセンターの研究活動が世界レベルの成果をあげており、今後の活動にも期待するという評価を頂きました。

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 令和二年度の活動方針

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推進事業部」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, 2.5PFLOPS) を計算資源として、プロジェクト共同研究を公募し、「学際共同研究プログラム」を実施する。本プログラムは①大規模計算によって可能となる計算科学を推進する「重点課題推進プログラム」、②異分野連携・共同研究を支援する「学際開拓プログラム」からなり、学際計算科学の共同研究を推進する。公募する分野は、Particle Physics, Astrophysics, Nuclear Physics, Material Science, Chemistry, Life Science, Global Environment, Biology, Numerical Analysis, HPC System, Computational Informatics の 11 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へもメーリングリストを活用して行う。

また、今後のセンターの国際研究拠点化を視野に入れつつ、大型化する学際共同利用申請の処理と円滑なプログラムの運用のため、申請・審査・採択通知・プロジェクト管理等を統合的に処理するよう電子化し、処理システム自体の英語化を 2019 年度に続いて継続する。

■ 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。今年度は、表 1 のように計 83 題の研究プロジェクトを採択し共同研究を実施した。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 165 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、参加状況を表 3 に示す。

表1 各分野における学際共同利用プログラム・プロジェクト採択数

分野	全体	採択件数	
		OFP利用	Cygnus利用
Particle Physics	14	14	11
Astrophysics	10	10	4
Nuclear Physics	11	10	5
Material Science	15	15	6
Chemistry	1	0	1
Life Science	6	2	4
Global Environment	4	4	2
Biology	3	3	2
Numerical Analysis	5	2	4
HPC System	9	4	8
Computational Informatics	5	0	5
合計	83	64	52

表2 共同利用・共同研究拠点の成果として発表された論文の総数

区分	令和2年度		うち国際学術誌掲載論文数
化学	32	(8)	32 (8)
材料科学	6	(1)	6 (1)
物理学	70	(14)	70 (14)
計算機&数学	31	(3)	29 (2)
工学	8	(2)	7 (2)
環境&地球科学	12	(3)	9 (2)
臨床医学	0	(0)	0 (0)
基礎生命科学	6	(0)	6 (0)
人文社会系	0	(0)	0 (0)
合計	165	(31)	159 (29)

※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および一般利用の参加状況

稼働状況	Cygnus		Oakforest-PACS	
使用者の所属機関	年間使用人数(のべ)		年間使用人数(のべ)	
		共同利用者数		共同利用者数
学内(法人内)	53,616	37,418	44,873	33,367
国立大学	19,032	19,032	25,140	25,140
公立大学	273	273	271	271
私立大学	4,068	4,068	3,806	3,806
大学共同利用機関法人	2,748	2,748	5,998	5,998
独立行政法人等公的研究機関	9,703	9,703	5,747	5,747
民間機関	550	550	1,843	1,843
外国機関	4,378	4,378	3,543	3,543
その他	2,275	2,275	1,332	1,332
合計	96,643	80,445	92,553	81,047

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 Centre）との合同ワークショップ及び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を、それぞれ2021年3月に行った。当初予定では両拠点からの主要研究者の来訪を受け、本センターで開催する計画であったが、COVID-19の影響により、今年度については共にテレビ会議形式での開催となった。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 COVID-19 の影響で当面延期となった。

ナショナル・フラッグシップ・スーパーコンピュータ「富岳」を用いた研究については、2020年度より開始された「富岳」成果創出加速プログラムにおける「シミュレーションで探る基礎科学：素粒子の基本法則から元素の生成まで」「宇宙の構造形成と進化から惑星表層環境変動までの統一的描画の構築」「省エネルギー次世代半導体デバイス開発のための量子論マルチシミュレーション」の3課題にそれぞれ共同研究機関として参加し、「富岳」を用いた最先端の計算科学研究を推進した。

さらに、医学分野との連携により、計算科学による医療技術の開拓を目的とした、「計算メディカルサイエンス推進事業部」において、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知の発見・統合・創造シンポジウム」の名の下に、センターの活動と先進的計算科学及び高性能計算に関するシンポジウムを、学際共同利用中間発表会を兼ねて開催してきた。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。2020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、COVID-19の影響によりプログラムを1日に短縮し、全ての講演セッション及び学際共同利用プログラムの成果発表を中心としたポスター発表を、Zoomを用いたオンライン会議形式で行った。結果として合計216人と、過去最大の参加者を集める実りあるシンポジウムとなった。

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。2020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、2016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、医理工連携を目指す「計算メディカルサイエンス推進事業部」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、金谷 和至（共同研究員、数理物質系特命教授）
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 8 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「富岳」に次ぐ性能を有する)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、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、2020 年度から重点課題・萌芽的課題の成果創出フェーズである成果創出加速プログラムが 3 年間実施される。また、それと並行して 2020 年度は「富岳」の早期利用課題の募集が行われ、2021 年度以降には一般利用が開始される予定である。

なお、2020 年度は新型コロナウイルス COVID-19 の世界的な感染拡大により、ほぼすべての国際会議や国内学会・研究会がオンライン開催あるいは中止となった。また、日々の研究活動においてもオンラインでの議論・会議が強く推奨されるなど、研究遂行に大きな制約が生じた。

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「富岳」に次ぐ性能を有する。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。また、「富岳」の早期利用課題制度を利用して「富岳」向けのプログラムの最適化を行い、「富岳」を用いた本格計算の準備が整った。

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おける物理量計算は“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。

ゲージ配位は異なる格子間隔 3 点 ($a=0.085\text{fm}$, 0.065fm , 0.045fm) において生成し、系統誤差となる格子間隔依存性を取り除くために連続極限 ($a \rightarrow 0$) を取る。2019 年度までに(格子間隔, 格子サイズ)=(0.085fm , 128^4)、(0.065fm , 160^4) のゲージ配位生成は完了しており、現在は(格子間隔, 格子サイズ)=(0.045fm , 256^4)での物理点シミュレーションに注力している。また、並行してこれまで生成した格子サイズ 128^4 と 160^4 のゲージ配位を用いて、以下に説明するような物理量計算を行っている。

【2】 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、新谷)

賀数研究員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 1 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 B-1)。2020 年度には、この計算よりも格子間隔を小さくした計算を実行し、以前の結果と一致する中間結果 (赤四角) を得た。この結果には一部の系統誤差の見積りが含まれていないため、誤差が以前の結果よりも小さくなっている。

これらの結果は 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 (水色帯) 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、有限格子間隔起因の系統誤差を取り除くために、異なる格子間隔で得られた結果を用いて連続極限への外挿を実行する計画である。また、さらに小さな格子間隔のゲージ配位が今年度中に生成される予定であるため、そのゲージ配位を用いた計算も予定している。

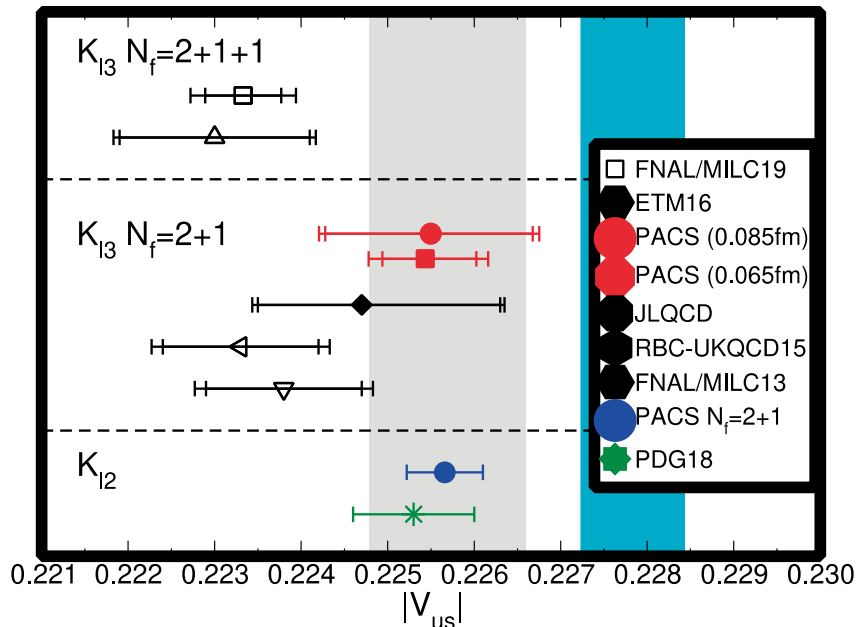


図 1: $|V_{us}|$ の比較。灰色帯と水色帯は CKM 行列のユニタリー性から求まる標準理論の予測。

【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、山崎は、広島大学石川健一准教授、東北大学佐々木勝一准教授、理研計算科学研究センター青木保道チームリーダー、新谷栄悟研究員、東北大学大学院生塚本夏基氏、辻竜太郎氏とともに、PACS Collaboration において、現実的クォーク質量直上で核子形状因子計算を行った。2020 年度は格子間隔 $a=0.065\text{fm}$ での形状因子計算を進めるとともに、核子スカラー電荷と核子テンソル電荷(研究論文 B-2)に加え、核子構造関数に関する物理量に対する繰り込み計算を実行した。

また、現実的クォーク質量直上での形状因子計算結果(研究論文 A-2)で明らかになった荷電半径計算に含まれる系統誤差の原因を探るため、異なる格子間隔を用いた計算による有限格子間隔系統誤差の調査を行っている。また、これまでとは異なる観点から計算を実行するため、新しい荷電半径計算方法の開発も行っている。

【4】 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 π 中間子質量 0.5GeV と 0.3GeV のクォーク質量を用いたものであり、物理点(π 中間子質量 0.14GeV 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 π 中間子質量 0.146GeV 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。

一方、現実よりも重い π 中間子を用いた他グループの計算からは束縛状態を観測できないという問題が報告されている。この計算には 2 体核子散乱を考慮した計算になってはいるが、束縛エネルギー計算で問題となるのは核子励起状態散乱の寄与と考えられる。今後、この状態を考慮した計算方法を開発し、束縛エネルギーに含まれる、それら状態の系統誤差を見積もる予定である。

【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。京都大学滑川特任助教と山崎は 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や、相互作用領域外に設定した境界上の波動関数から散乱位相差が得られることを議論した(研究論文 B-3)。

【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。谷口、金谷らは、改良 Wilson 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。2020 年度も、QCD の相構造やクォーク物質の熱力学的諸性質の研究を推進した。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。

[6-1] Gradient flow に基づく SFtX 法を用いた有限温度 QCD の研究

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、従来の方法では、5 種類の演

算子の非自明なくりこみと混合を非摂動論的に決定するという、複雑なくりこみ操作を行わなければ意味のある評価が出来なかった。

谷口、金谷らは、九州大学鈴木博教授、大阪大学北澤正清助教、新潟大学江尻信司准教授、広島大学梅田貴士准教授らと、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、これら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。Gradient flow とは、仮想的な時間パラメータ t (flow-time)を導入して、作用の勾配で与えられる発展方程式(フロー方程式)により場の量を変形させる理論的手法である。この発展方程式は一種の拡散方程式になっており、 $t>0$ までフローさせた結果は、元の場の量を $\sqrt{8t}$ の物理的領域で平準化(smeared)させたものと解釈することができる。さらに、フローさせた場で作る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ことが、Lüscher と Weisz により証明された。

SFtX 法は、Gradient flow 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。連続理論で何らかの物理量を非摂動論的に評価しようとする、通常は、その物理量を格子理論で定義し、格子上で評価された値を連続極限まで外挿($a \rightarrow 0$)するが、数値的なくりこみに加えて、格子上で重要な対称性が壊されている場合にはそれによる不要な演算子との混合を数値的に除去する必要がある、十分な精度を出すためにはしばしば重い計算となる。SFtX 法では、フローさせた演算子が有限であることを利用して、対応する演算子を格子上で計算することにより、くりこみ操作や混合の除去無しに直接評価する。ただし、フローさせた演算子は求める物理量そのものではないので、格子の結果を、連続極限($a \rightarrow 0$)とフロー時間ゼロ極限($t \rightarrow 0$)に 2 重外挿する。

SFtX はどんな物理量にも使うことができるので、格子化で並進対称性が陽に壊されるためにこれまで扱いが難しかったエネルギー運動量テンソルの格子計算に、最初に応用された。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。

我々は、動的クォークを含む QCD への応用の第一段階として、2016-2017 年度に u, d クォークが現実よりやや重い場合の $N_f=2+1$ QCD の研究を実行した。エネルギー運動量テンソルの対角成分から計算した状態方程式が、従来の方法による結果を良く再現することを示し、さらに、カイラル感受率の disconnected 部分がクロスオーバー温度でピークを示すことを Wilson 型クォークとして初めて示した。また、位相感受率を、グルー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、ここでシミュレーションした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。

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、 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、及び、SFtX法の更なる改良に向けた研究を推進している。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系統的に遂行している。2020年度には、以下の研究成果が得られた。

SFtX法の改良

SFtX法では、格子上で測った $t>0$ でのフローさせた演算子の結果を、連続極限($a\rightarrow 0$)とフロー時間ゼロ極限($t\rightarrow 0$)に2重外挿する。ここで、 $t/a^2\sim 0$ 領域は格子化誤差が大きいので、それを避けながら2重外挿する必要がある。従って、格子が粗い、もしくは格子化誤差が大きい演算子の場合には、外挿に必要な線形領域が不明確になる可能性がある。これらの場合にSFtX法を応用するためには、なんらかの改善が要求される。研究論文A-3では、マッチング係数におけるくりこみスケールと摂動高次項の効果を研究した。

マッチング係数とは、フローさせた演算子と求めるくりこまれた物理量とを結びつける係数である。SFtX法では、物理量を、格子上で測った $t>0$ でのフローさせた演算子にマッチング係数を掛けたものを組み合わせてあらわし、その2重外挿を実行する。マッチング係数は、QCDを含む漸近自由な理論では、 t が大きくなければ摂動計算することができる。SFtX法では、摂動であらかじめわかっている t 依存性をマッチング係数に取り込むことで、 $t\rightarrow 0$ 外挿が滑らかになるように改良している。実際、我々の u, d クォークが重い $N_f=2+1$ QCDの研究(格子間隔0.07fm)では、マッチング係数のおかげで、 $t\rightarrow 0$ 外挿を数値的に可能とする線形領域が実現した。他方、現実のクォーク質量での $N_f=2+1$ QCDの研究(格子間隔0.09fm)や、 u, d クォークが重い $N_f=2+1$ QCDで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明確ではなくなるという現象を経験した。

マッチング係数を摂動計算するときのくりこみスケール μ は、摂動展開が破綻しない限り、どんな値を取っても良く、 $t\rightarrow 0$ 極限の最終的な物理量は μ のとりかたに依存しないはずである。通常 μ としては、フローさせた演算子の自然なスケールの一つである、フローによるsmearingスケール $\mu_d=1/(\sqrt{8}t)$ が採用されてきた。上に述べたように、 μ_d と同程度ならば、原理的にどんな μ をとっても良いはずである。しかし実際は、摂動展開を有限次で切っているため、摂動展開の質は、 μ をどう取るかで影響を受ける。特に、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。 $\mu_d=1/(\sqrt{8}t)$ 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。

研究論文 A-3 では、Harlander らが最近の摂動の高次計算で提案した $\mu_0 = 1/\sqrt{(2e^{\gamma_E}t)}$ (γ_E はオイラー数) の効果を調べた。数値的には $\mu_0 \approx 1.5 \mu_d$ なので、 μ_0 スケールは、摂動領域をより大きな t まで拡大し、 t が大きな領域で $t \rightarrow 0$ 外挿のシグナルを改善してくれる可能性がある。

図 2 に、 u, d クォークが現実より重い $N_f=2+1$ QCD におけるエントロピー密度(左図)と ud クォークのカイラル感受率(右図)の $t \rightarrow 0$ 外挿を示す。緑が μ_d スケール、青が μ_0 スケールの結果である。 $t \rightarrow 0$ 極限の結果はどちらもコンシステントだが、 μ_0 スケールにより線形シグナルが改善されていることがわかる。現実のクォーク質量での $N_f=2+1$ QCD での試験研究で、 μ_d スケールでは $t \rightarrow 0$ 外挿が不定な場合でも、 μ_0 スケールにより線形シグナルが劇的に改善され、SFtX 法の安定性と適用範囲が大きく改善されることを確認した。

研究論文 A-3 では、マッチング係数における 2 ループ項の効果や、2 ループ計算で使われた運動方程式の影響も研究したが、我々の研究している $N_f=2+1$ QCD では SFtX 法の改良には大きくは寄与しないらしいことがわかったので、ここでは省略する。

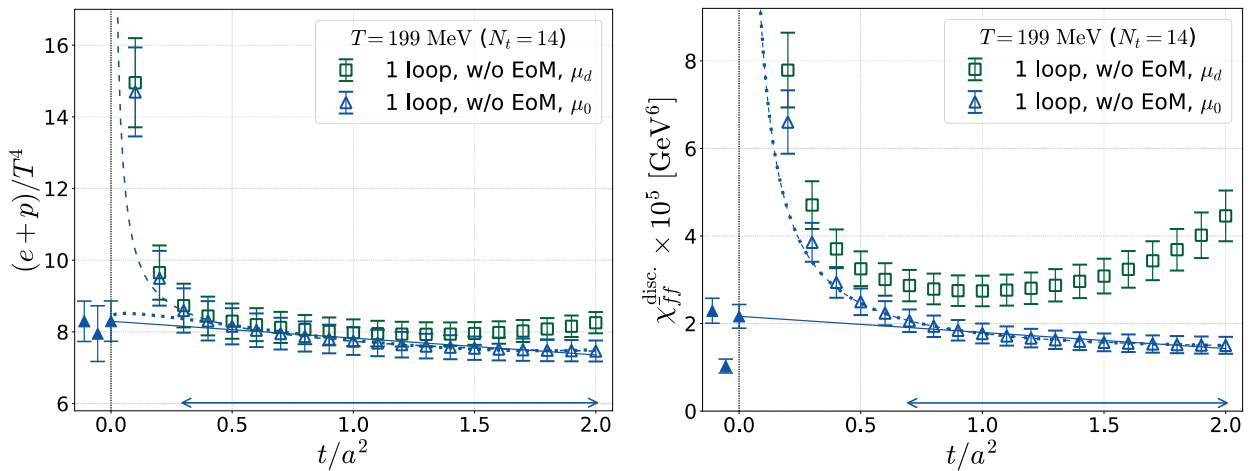


図 2: マッチング係数におけるくりこみスケールの効果。 ud クォークが重い $N_f=2+1$ QCD でのエントロピー密度(左図)と ud クォークのカイラル感受率(右図)。横軸はフロー時間で、直線(点線、ダッシュ線)は、 μ_0 スケールを用いた $t \rightarrow 0$ 線形外挿(非線形外挿、linear+log 外挿)で、下の矢印がフィット領域。 $t \sim 0$ 近傍のシンボルは、右から、線形外挿、非線形外挿、linear+log 外挿によるエントロピー密度(左図)と ud クォークのカイラル感受率(右図)の外挿結果(研究論文 A-3)。

クエンチ QCD の潜熱と SFtX 法における 2 重外挿の順序依存性の研究

研究論文 A-5 では、SFtX 法を応用して、クエンチ QCD ($SU(3)$ Yang-Mills 理論)の有限温度 1 次相転移点における潜熱と圧力ギャップ Δp を研究した。1 次相転移点では、共存する 2 相の動的平衡から $\Delta p = 0$ となるはずで、その数値的確認は結果の信頼性の良い指標とされてきた。

また、クエンチ QCD では様々な格子間隔を系統的に計算できるので、上で議論した、 $a \rightarrow 0$ と $t \rightarrow 0$ の 2 重外挿における極限操作の順番の問題を試験した。SFtX 法における $a \rightarrow 0$ と $t \rightarrow 0$ の 2 重外挿では、格子化誤差が大きい $t/a^2 \sim 0$ 領域のデータを取り除いて外挿する必要がある。そして、この $t/a^2 \sim 0$ 領域の格子化誤差が正しく取り除かれているならば、2 つの外挿の順序によらず同じ結果が得られると期待される。

研究論文 A-5 では、3 つの格子間隔 ($N_t=8, 12, 16$ に対応する $a=1/(N_t T_c)$)、2 つの空間体積 ($N_s/N_t=6, 8$ に対応する $V=(aN_s)^3=(N_s/N_t)^3/T_c^3$) でクエンチ QCD シミュレーションを実行し、我々が開発した再重み付け法とヒストグラム法を組み合わせた手法を使って臨界点 $T=T_c$ に調整した。そして、臨界点直上で、SFtX 法を使って臨界点における潜熱と Δp を測定した。

図 3 の左図に、 μ_0 スケールを使った潜熱と圧力ギャップ Δp の結果を示す。この図から、(a) $a \rightarrow 0$ と $t \rightarrow 0$ の極限操作の順番を変えても結果が一致すること、および、(b) Δp がゼロとコンシステントであることが確認される。これにより、連続極限における潜熱を精密で信頼性が高く測定することに成功した。同時に、図 3 の右図に示したように、潜熱の結果に空間体積依存性確認されるので、より大きな空間体積での追試が望まれる。

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

これらの研究を発展させ、クォーク質量を現実のクォーク質量(物理点)に調整した $N_f=2+1$ QCD の熱力学研究を推進している。ゼロ温度配位として PACS-CS Collaboration が生成したものを活用し、それと同じ格子間隔 $a=0.09\text{fm}$ で有限温度シミュレーションを実行している。物理点の配位生成には大きな計算が要求されるので、様々な計算機資源を動員して系統的な大規模シミュレーションを系統的に遂行している。この物理点シミュレーションでも、上で紹介した SFtX 法の改良が重要な役割を果たすと期待される。

これまでに得た様々な物理量の挙動から、 $T=122\text{--}146\text{MeV}$ が相転移温度近傍の臨界領域にあることが示唆されるが、まだ統計が十分ではなく、明確な結論を得るためには $T \leq 146\text{MeV}$ の低温領域で更なる統計が必要である。我々の Wilson 型クォークによる相転移温度は、スタガード型クォークによる先行結果より低い可能性があるが、相転移温度の精密な評価は実験的・現象論的にも重要である。現在そのための低温領域の配位生成を集中的に進めており、その中間結果を各種会議で報告した(国際会議発表 3, 国内学会・研究会発表 4, 10, 11, 13, 14, 15)。

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ている(国内学会・研究会発表 2)。

また、SFtX 法を 2 点関数に拡大して、カイラル感受率の connected 部分と $U(1)_A$ 感受率の評価を行った。 u, d クォークが重い $N_f=2+1$ QCD では、カイラル感受率の disconnected 部分と違って、connected 部分や全カイラル感受率は QCD 相転移にそれほど敏感では無いことがわかった。これは u, d クォークが重いことによる影響と考えられるので、 u, d クォークを物理点まで軽くした $N_f=2+1$ QCD でも検証する必要がある。また、 $U(1)_A$ 感受率の結果から、QCD 相転移温度では $U(1)_A$ 対称性がまだ回復していないことを示唆する中間結果を得た(国内学会・研究会発表 5, 17)。

[6-2] SFtX 法によるゼロ温度カイラル物理量の研究

SFtX 法により、通常の方法では格子化に伴う対称性の破れのために評価が難しい物理量も直接非摂動的に評価できる可能性が拓かれた。有限温度の物理量だけでなく、ゼロ温度物理量にも、格子による非摂動的評価が望まれる物理量は多く存在する。

谷口、鈴木遊、金谷は、九州大学鈴木博教授と共同で、SFtX 法のゼロ温度物理量への応用として、 B 中間子バグパラメータ B_K を SFtX 法で計算するために必要なマッチング係数の摂動計算を行った。 B_K は、CP 対称性の破れを K_0-K_0bar 振動実験から抽出する上で鍵となる量で、その非摂動的評価は極めて重要であるが、格子上のカイラル対称性の破れのために通常の方法では複雑なくりこみと混合の解消が要求される。我々は、SFtX 法をクォーク 4 点関数の評価に拡張して、 B_K などの評価に必要なマッチング係数を計算した(研究論文 A-4)。

【7】 Wilson 型クォークを用いた 2+1 フレーバー有限温度 QCD における臨界終線の研究

(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おり、特に二次相転移となる臨界終点、あるいはこれが連なった臨界終線の位置を決定することが非常に重要である。実際、特に 3 フレーバーの場合について臨界終点の位置を決定するため、格子 QCD に基づく様々な計算が行われてきた。しかしながら、これまでの研究から臨界終点の位置は格子化誤差の影響を強く受けることが分かってきており、異なるフェルミオン作用を用いた計算結果の間で一貫性のある結果が未だに得られていないなど多くの課題が存在し、より信頼できる連続極限の結果を得ることが求められている。

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、2+1 フレーバー QCD の臨界終点の位置を、0(a) 改良された Wilson 型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。本年度はまず、時間方向格子サイズ(N_t)を 6 に固定し、以前の研究で調べた $SU(3)$ 対称点の近傍からより広いパラメータ領域へと計算を拡張した(研究論文 B-5)。その結果、図 4 に示すような臨界終線を得た。ただし $N_t=8$ 及び 10 の結果は、 $SU(3)$

対称点における N_T 依存性をもとに $N_T=6$ の結果を外挿したものである。現在、より正確な結果を得るため、 $N_T=8$ の計算を遂行中である。

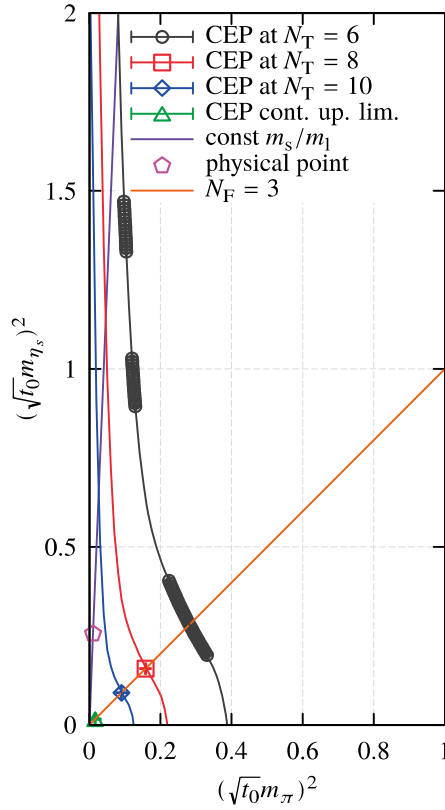


図 4: 2+1 フレーバーQCD における臨界終線。CEP は Critical End Point (臨界終点) を表す。

【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り、QCD 臨界点の探索等を目的として理論・実験両方の側面から様々な研究が行われている。

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 の相構造に関する研究を行った(研究論文 A-6)。本研究ではクォーク化学ポテンシャルに対する Taylor 展開を用いて有限密度の効果を取り入れる手法を採用し、化学ポテンシャルの 8 次のオーダーまで展開係数の計算を行った。これによりバリオン数揺らぎについて 6 次のキュムラントまで計算することが可能となった。また、この結果を STAR 実験で得られた陽子数揺らぎについてのキュムラントの結果と比較したところ、3 次及び 4 次のキュムラント(歪度及び尖度)に関して、実験結果は若干大きいもののほぼ我々の計算結果と同様の振る舞いをする事が分かった(図 5)。このことから、クォーク・グルーオン・プラズマが再びハドロンに冷え固まる温度(freeze-out 温度)は QCD のクロスオーバーが起こる

温度(pseudo-critical 温度)の近傍にあり、恐らくより低いところにあると予想された。さらに、5 次及び 6 次のキュムラントについても同様の比較を行ったが、我々の計算結果から実験結果と同様の振る舞いを得ることはできなかった。その理由としては、Taylor 展開のより高次の効果を取り入れる必要があることが考えられる。

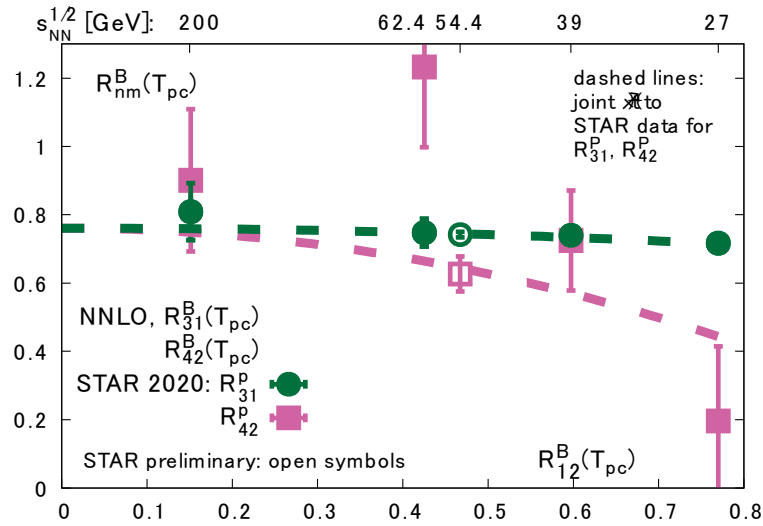


図 5: バリオン数揺らぎのキュムラントの格子 QCD 計算結果と陽子数揺らぎのキュムラントの STAR 実験結果の比較。

【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することでクォーコニウムスペクトル関数を計算した。これまでの計算ではまず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を行い、そしてこれを輸送ピークを持つベクターチャネルのスペクトル関数へと拡張した。今年度はさらにベクターチャネルの相関関数に含まれる輸送の凡その寄与を見積り、チャームクォークに対する抗力係数がボトムクォークのそれよりも大きいという予想を得た(研究論文 B-7)。

【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、解決すべき長年の課題がそのまま残されていることも事実である。最も重要な課題は、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である。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 - 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きた。萌芽的課題は 2019 年度末で終了したが、2020 年度以降は科学研究費基盤(A)を新たな資金として研究の発展を図っている。

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、 θ 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。

2020 年度における課題(i)~(iv)のうち、特に課題(ii)において大きな進展があった。一般的に、テンソル繰り込み群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、これまでテンソル繰り込み群の主な応用例は 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、2019 年にわれわれが行った 4 次元イジングモデルの計算のみであった(論文発表済)。われわれは、まず Anisotropic TRG(ATRG)コードを並列化し、4 次元有限密度複素スカラー理論における Silver Blaze 現象の確認に成功した。図 6(左)は粒子数密度(n)の化学ポテンシャル μ 依存性を 4 次元体積を変化させながらプロットしたものである。 $\langle n \rangle$ はある化学ポテンシャル μ_c の値までゼロのままであるが、 $\mu_c \approx 0.65$ を越えると突然増加し始めることがわかる(Silver Blaze 現象)。なお、平均場近似では、 $\mu_{MF} \approx 0.7$ と予想されている。このモデルは複素作用問題の典型例であり、テンソル繰り込み群が複素作用問題・符号問題を解決していること

がわかる(研究論文 A-8)。このモデルは、複素 Langevin 法や Lefscetz-thimble 法でも計算されているが、いずれも $O(10^4)$ 程度の格子体積でしか成功しておらず、ゼロ温度・熱力学極限とは程遠い。4 次元有限密度複素スカラー理論の計算に成功した後、われわれは並列版 ATRG コードをグラスマン数化し、4 次元有限密度 Nambu–Jona-Lasinio モデルの極低温・高密度領域におけるカイラル相転移を調べた。図 6(右)はオーダーパラメータであるカイラル凝縮 $\langle\chi\chi\rangle$ の化学ポテンシャル μ 依存性を表している。 $\mu \approx 3.0$ において $\langle\chi\chi\rangle$ の有限の値からゼロへの不連続な変化が確認できるため、カイラル対称性の回復が一次相転移で起きていることがわかる(研究論文 A-9)。

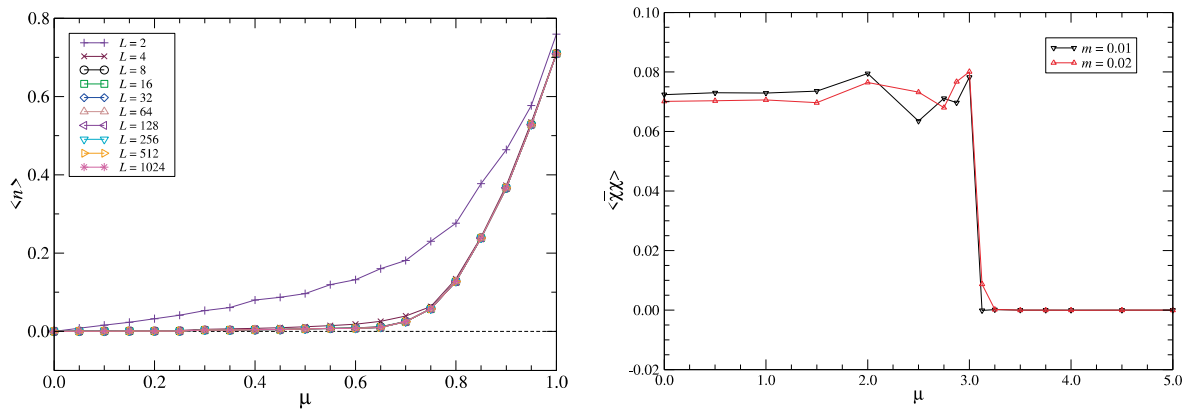


図 6: (左)4 次元有限密度複素スカラー理論における粒子数密度 $\langle n \rangle$ の化学ポテンシャル μ 依存性。(右)4 次元有限密度 Nambu–Jona-Lasinio モデルにおけるカイラル凝縮 $\langle\chi\chi\rangle$ の化学ポテンシャル μ 依存性。 m はフェルミオンの質量を表す。

【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理研計算科学研究センター 青木保道チームリーダーらと共に、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。2020 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及び、8 フレーバー理論から得られる S パラメータ計算を行った。

【12】 有限サイズスケーリングによるコンフォーマル対称性の検証の研究（吉江）

コンフォーマル対称性は、素粒子標準模型を超える理論の構築に重要な働きをする、と考えられており、場の理論の非摂動的定式化である格子場理論とその数値シミュレーションによって、多フレーバ QCD などのコンフォーマル理論の候補が調べられている。数値シミュレーションは有限サイズの格子で行われるので、コンフォーマル対称性は厳密には成り立たず、格子サイズの有限性に起因する相構造が現れる。この『有限の IR cutoff を持つコンフォーマル理論の相構造』の研究は、この 10 年ほどの間に大きく進展し、繰り込み群の帰結である『格子サイズに対する相関関数のスケーリング則』を調べて理論が(体積無限大で)コンフォーマル対称性を持つ(赤外固定点が存在すること)か否かを判別できるようになってきた。

これらの一連の研究は、素粒子物理にとって興味深い、多フレーバ QCD に対して行われたものであるが、同様な議論が、別の(遙かに簡単な)系でも成り立つことが示されれば、上述の論理構造に穴がないことの傍証となる。この目的で、吉江と三好は、2 次元 Ising 場理論のコンフォーマル対称性を有限体積スケーリングに基づき調べた。2 次元 Ising 模型は、相関距離無限大の critical surface 上では、コンフォーマル対称性を持つ場の理論が実現している、と考えられている。実際、隣接相互作用のみを持つ Ising 模型は Onsager の critical point でコンフォーマル対称性を持つことが解析的に示されている。我々は、まず、critical point 上でいくつかの格子サイズでの相関関数を数値的に求め、期待されるスケーリング則が成り立っていることを確かめた。最近接と次に近接するスピン間の相互作用を含む Ising 模型で critical point の知られている幾つかを選んで、同様な計算を行い、近接作用の場合と同様のスケーリング則が成り立っていることを示したが、critical surface 上の赤外固定点の位置に関する情報は、統計不足の為、得られなかった。これらの結果は、三好の修士論文に纏めている。Critical Surface 上の有限サイズスケーリングの方法は、繰り込み群の beta 関数(繰り込み群のフロー)や gamma 関数を決める方法を含んでおり、コンフォーマル理論の研究手段として有用なものになり得る。その方向での研究を計画中である。

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

JLDG(Japan Lattice Data Grid)は、計算素粒子物理研究者の為のデータグリッドであり、国内 7 拠点で SINET5 VPN で結んだネットワークにより、拠点のファイルサーバを統合した単一のファイルシステムを運用している。JLDG は、研究者が研究グループ内で日々のデータを共有する、複数のスパコンでデータ生成・解析を分担する、基礎データを ILDG(International Data Grid)の枠組みで世界の研究者に公開する、等に利用されている。本学計算科学研究センターが代表を務める、拠点代表やユーザー代表から構成される JLDG 管理者グループが運用の一切を行っている。2008 年に実運用を開始して以来 12 年経過した現在、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:『理化学研究所計算科学研究センター(RCCS)』拠点の立ち上げ完了。HPCI 最大の計算資源である富岳のクライアントで JLDG ファイルシステムをマウントし、データ転送を並列に行える様になった。
- (b) 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が完了した。JLDG ファイルシステムを Cygnus フロントエンドでマウント利用可能である。
- (c) 格子 QCD アンサンブルの DOI 登録の枠組みが完成し、PACS-CS Collaboration 提供の 6 アンサンブルに DOI が付与された。
- (d) 管理用サーバの OS を EOL を迎えた CentOS6 から。CentOS7/8 へ更新した。
- (e) 筑波大キャンパスネットワークのセキュリティゾーン化の一環として、センターより提供された『外部レベル相当ネットワーク』の一つのサブネットへの機器移転を行った。その際、センターの運用するファイアウォールシステムに登録するファイアウォールルールを検討し、システムのセキュリティレベル向上を図った。

4.教育

[修士論文]

- 1. 井元 航希
「テンソル繰り込み群を用いた $O(3)$ 非線形シグマモデルの解析」
- 2. 三好 拓己
「有限体積スケーリングによる 2 次元イジング場理論のコンフォーマル対称性の検証」

[博士論文]

- 1. 馬場 惇
「Measurement of Chiral Susceptibility in Lattice QCD with Wilson Fermion using Gradient Flow」

5.受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

- 1. 日本物理学会学生優秀発表賞(素粒子論領域)
秋山 進一郎
「テンソル繰り込み群による 3+1 次元有限密度 Nambu-Jona-Lasinio 模型の研究」

2020 年 9 月

外部資金

1. 藏増嘉伸（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(A)、令和 2 年度採択、「テンソルネットワーク法による計算物理学の新展開」、10,300 千円
2. 金谷和至（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(C)、平成 31 年度採択、「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」、1,200 千円
3. 金谷和至（分担）、科学研究費補助金・基盤研究(B)、令和 2 年度採択、「有限温度 QCD における物理量の決定へ向けて」、100 千円
4. 谷口裕介（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(C)、平成 30 年度採択、「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」、700 千円
5. 山崎剛（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(B)、平成 31 年度採択、「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」、3,400 千円
6. 山崎剛（代表）、二国間交流事業(共同研究・セミナー)、令和 2 年度採択、「真空および媒質中での格子 QCD によるハドロン測定の新しい可能性」、2,375 千円、
7. 浮田尚哉（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(C)、令和 2 年度採択、「機械学習を取り入れた格子 QCD による超精密物理量測定のための計算手法の開発と実践」、1,200 千円

知的財産権

6.研究業績

A) 研究論文

A) 査読付き論文

1. PACS Collaboration: J. Kakazu, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yamazaki, and T. Yoshié, “ K_{l3} form factors at the physical point on $(10.9\text{fm})^3$ volume”, Phys. Rev. D101 (2020) no.9, ref.094504.
2. PACS Collaboration: E. Shintani, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, S. Sasaki, and T. Yamazaki, “Erratum: Nucleon form factors and root-mean-square radii on a $(10.8\text{fm})^4$ lattice at the physical point”, Phys. Rev. D102 (2020) no.1, ref.019902.
3. WHOT-QCD Collaboration: Yusuke Taniguchi, Shinji Ejiri, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Hiroshi Suzuki, and Takashi Umeda, “ $N_f=2+1$ QCD thermodynamics with gradient flow using two-loop matching coefficients”, Phys. Rev. D102 (2020) no.1, ref.014510.

4. Asobu Suzuki, Yusuke Taniguchi, Hiroshi Suzuki, and Kazuyuki Kanaya, “Four quark operators for kaon bag parameter with gradient flow”, Phys. Rev. D102 (2020) no.3, ref.034508
5. Mizuki Shirogane, Shinji Ejiri, Ryo Iwami, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Hiroshi Suzuki, Yusuke Taniguchi, and Takashi Umeda, “Latent heat and pressure gap at the first order deconfining phase transition of SU(3) Yang-Mills theory using the small flow-time expansion method”, Prog. Theor. Exp. Phys. 2021 (2021) ref.013B08.
6. HotQCD Collaboration: A. Bazavov, D. Bollweg, H.-T. Ding, P. Enns, J. Goswami, P. Hegde, O. Kaczmarek, F. Karsch, R. Larsen, Swagato Mukherjee, H. Ohno, P. Petreczky, C. Schmidt, S. Sharma, and P. Steinbrecher, “Skewness, kurtosis, and the fifth and sixth order cumulants of net baryon-number distributions from lattice QCD confront high-statistics STAR data”, Phys. Rev. D101 (2020) no.7, ref.074502.
7. Y. Kuramashi and Y. Yoshimura, “Tensor renormalization group study of two-dimensional U(1) lattice gauge theory with a θ term”, JHEP 2004 (2020) ref.089.
8. S. Akiyama, D. Kadoh, Y. Kuramashi, T. Yamashita, and Y. Yoshimura, “Tensor renormalization group approach to four-dimensional complex ϕ^4 theory at finite density”, JHEP 2009 (2020) 177.
9. S. Akiyama, Y. Kuramashi, T. Yamashita, and Y. Yoshimura, “Restoration of chiral symmetry in cold and dense Nambu-Jona-Lasinio model with tensor renormalization group”, JHEP 2101 (2021) 121.

B) 査読無し論文

1. PACS Collaboration: J. Kakazu, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yamazaki, and T. Yoshié, “ K_{13} form factors in $N_f=2+1$ QCD at physical point on large volume”, PoS(LATTICE2019) (2020) ref.186, pp.1-7.
2. PACS Collaboration: Natsuki Tsukamoto, Yasumichi Aoki, Ken-ichi Ishikawa, Yoshinobu Kuramashi, Shoichi Sasaki, and Takeshi Yamazaki, “Nucleon isovector couplings from 2+1 flavor lattice QCD at the physical point”, PoS(LATTICE2019) (2020) ref.132, pp.1-7.
3. 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.
4. PACS Collaboration: Y. Aoki, Y. Kuramashi, E. Shintani, and N. Tsukamoto, “Proton decay matrix elements with physical quark masses”, PoS(LATTICE2019) (2020) ref.141, pp.1-7.

5. Y. Nakamura, Y. Kuramashi, H. Ohno, and S. Takeda, “Critical endpoint in the continuum limit and critical endline at $N_T=6$ of the finite temperature phase transition of QCD with clover fermions”, PoS(LATTICE2019) (2020) ref.053, pp.1-7.
6. HotQCD Collaboration: Heng-Tong Ding, Prasad Hegde, Olaf Kaczmarek, Frithjof Karsch, Anirban Lahiri, Sheng-Tai Li, Swagato Mukherjee, Hiroshi Ohno, Peter Petreczky, Christian Schmidt, and Patrick Steinbrecher, “The chiral phase transition temperature in (2+1)-flavor QCD”, 18th International Conference on Hadron Spectroscopy and Structure, pp.672-677.
7. 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”, PoS(LATTICE2019) (2020) ref.207, pp.1-7.
8. 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, pp.1-7.

B) 国際会議発表

A) 招待講演

1. H. Ohno 「In meedium properties of heavy quarks on the lattice」, Extreme Nonequilibrium QCD (Online, Oct. 5-9, 2020).

B) 一般講演

1. R. Tsuji, Y. Aoki, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, S. Sasaki, E. Shintani, and T. Yamazaki 「Nucleon structure at physical point from 2+1 flavor Lattice QCD」, Asia-Pacific Symposium for Lattice Field Theory (APLAT2020) (Online, Aug. 4-7, 2020).
2. S. Akiyama, D. Kadoh, Y. Kuramashi, T. Yamashita, and Y. Yoshimura 「Tensor renormalization group approach to four-dimensional complex ϕ^4 theory at finite density」, Asia-Pacific Symposium for Lattice Field Theory (APLAT2020) (Online, Aug. 4-7, 2020).
3. Kazuyuki Kanaya 「Thermodynamic observables in (2+1)-flavor QCD applying the gradient-flow method」, CCS 12th international symposium 2020 on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (CCS, Tsukuba, Japan (online), Oct. 6, 2020).
4. R. Tsuji, Y. Aoki, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, S. Sasaki, E. Shintani, and T. Yamazaki 「Nucleon structure with 2+1 flavor lattice QCD at physical quark mass」, International School for Strangeness Nuclear Physics (SNP school 2020) (J- PARC, Tokai, Dec. 2-5, 2020).

5. Shininchiyo Akiyama 「Restoration of chiral symmetry in cold and dense Nambu-Jona-Lasinio model with tensor renormalization group」, KEK Theory Workshop 2020 (Online, Dec. 15-18, 2020).
6. Shininchiyo Akiyama 「Restoration of chiral symmetry in cold and dense Nambu-Jona-Lasinio model with tensor renormalization group」, YITP workshop on Quantum Computing for quantum field theories (Online, Jan. 5-8, 2021).

C) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 辻竜太郎, 青木保道, 石川健一, 藏増嘉伸, 佐々木勝一, 新谷栄吾, 山崎剛 「格子場の理論に基づく核子構造研究」, 日本のスピノ物理学の展望 (島根 (online), 2021 年 2 月 23-24 日).

B) その他の発表

1. 金谷和至 「Thermodynamics of 2+1 flavor QCD with the SFtX method based on the gradient flow」, 理化学研究所計算科学研究センター(R-CCS)セミナー (理化学研究所, 神戸市, 兵庫県 (online), 2020 年 5 月 20 日).
2. 谷口裕介, 金谷和至 (Y. Taniguchi, K. Kanaya, A. Baba, S. Ejiri, M. Kitazawa, H. Suzuki, T. Umeda) 「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 12 回拠点シンポジウム (THE GRAND HALL, 品川区, 東京都 (online), 2020 年 7 月 9 日).
3. 鈴木博 (Hiroshi Suzuki, Kazuyuki Kanaya, Yusuke Taniguchi, Shinji Ejiri, Takashi Umeda, Masakiyo Kitazawa) 「有限温度量子色力学のダイナミクス」, 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(JHPCN)第 12 回拠点シンポジウム(THE GRAND HALL, 品川区, 東京都 (online), 2020 年 7 月 9 日).
4. 金谷和至 「Improvement of the SFtX method based on the gradient flow in the study of finite temperature $N_f=2+1$ QCD」, 熱場の量子論とその応用 2020(TFQT 2020) (KEK, Tsukuba, Japan (online), 2020 年 8 月 24 日-26 日).
5. 馬場惇 「SFtX 法を用いたカイラル感受率の測定」, 熱場の量子論とその応用 2020(TFQT 2020) (KEK, Tsukuba, Japan (online), 2020 年 8 月 24 日-26 日).
6. 秋山進一郎 「テンソル繰り込み群による 4 次元有限密度複素スカラー場の理論の研究」, 熱場の量子論とその応用 2020(TFQT 2020) (KEK, Tsukuba, Japan (online), 2020 年 8 月 24 日-26 日).

7. 秋山進一郎「テンソル繰り込み群による 4 次元有限密度複素スカラー場の理論の研究」, 素粒子若手オンライン研究会 2020 (Online, 2020 年 8 月 26 日-28 日).
8. 辻竜太郎, 青木保道, 石川健一, 藏増嘉伸, 佐々木勝一, 新谷栄吾, 山崎剛「物理点 2+1 フレーバー格子 QCD による核子構造研究」, 日本物理学会 2020 年秋季大会 (筑波大学, つくば市, 茨城県 (online), 2020 年 9 月 14 日-17 日).
9. 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, 「SFtX 法を用いたカイラル感受率の測定」, 日本物理学会 2020 年秋季大会 (筑波大学, つくば市, 茨城県 (online), 2020 年 9 月 14 日-17 日).
10. 金谷和至, 梅田貴士, 江尻信司, 北沢正清, 鈴木博, 谷口裕介「Improvement of the SFtX method based on the gradient flow in the study of finite temperature $N_f=2+1$ QCD」, 日本物理学会 2020 年秋季大会 (筑波大学, つくば市, 茨城県 (online), 2020 年 9 月 14 日-17 日).
11. 鈴木博, 梅田貴士, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 鈴木遊, 谷口裕介, 馬場 惇「Small Flow time eXpansion(SFtX)法による 2+1 フレーバーQCD の熱力学」, 日本物理学会 2020 年秋季大会 (筑波大学, つくば市, 茨城県 (online), 2020 年 9 月 14 日-17 日).
12. 秋山進一郎, 藏増嘉伸, 山下巧, 吉村友佑「テンソル繰り込み群による 3+1 次元有限密度 Nambu–Jona-Lasinio 模型の研究」, 本物理学会 2020 年秋季大会 (筑波大学, つくば市, 茨城県 (online), 2020 年 9 月 14 日-17 日).
13. 谷口裕介, 金谷和至「勾配流法を用いたクォーク・グルオンプラズマの物性的研究」, 第 7 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会 (THE GRAND HALL, 品川区, 東京都 (online), 2020 年 10 月 30 日).
14. 鈴木博, 金谷和至, 谷口裕介, 江尻信司, 梅田貴士, 北澤正清, 馬場惇「ウィルソンフェルミオンに基づいた有限温度量子色力学の研究」, 第 7 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会 (THE GRAND HALL, 品川区, 東京都 (online), 2020 年 10 月 30 日).
15. 金谷和至「Gradient flow に基づく SFtX 法による物理点 QCD の熱力学特性の研究」, 大阪大学サイバーメディアセンター2020 年度公募型利用制度成果報告会 (大阪大学吹田キャンパス, 茨木市, 大阪府 (online), 2021 年 3 月 10 日).
16. 辻竜太郎, 青木保道, 石川健一, 藏増嘉伸, 佐々木勝一, 新谷栄吾, 山崎剛「核子内クォークの担う運動量及びヘリシティ割合の物理点格子 QCD 計算」, 日本物理学会第 76 回年次大会 (Online, 2021 年 3 月 12 日-15 日).

17. 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「SFtX法を用いた Wilson fermion の下でのカイラル感受率の測定」, 日本物理学会第 76 回年次大会 (Online, 2021 年 3 月 12 日-15 日).
18. 江尻信司, 白銀瑞樹, 石見涼, 金谷和至, 北沢正清, 鈴木博, 谷口裕介, 梅田貴士「Small flow-time expansion 法による SU(3)格子ゲージ理論の一次相転移点における潜熱と圧力差」, 日本物理学会第 76 回年次大会 (Online, 2021 年 3 月 12 日-15 日).
19. 秋山進一郎, 藏増嘉伸, 吉村友佑「4 次元 ϕ^4 理論のテンソル繰り込み群による解析」, 日本物理学会第 76 回年次大会 (Online, 2021 年 3 月 12 日-15 日).

D) 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

1. International Lattice Data Grid (ILDG)
<http://ildg.sasr.edu.au/Plone>
2. 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

なし

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
該当なし

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	
研究員	高水 裕一	(CCS)
	福島 肇	(科研費若手研究 A)
	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)
	小川 拓未	(富岳サブ課題 C)
	菊田 智史	(科研費基盤研究 A)

学生 大学院生 8 名

学類生 6 名

研究生 2 名

2. 概要

本年度、当グループは、ブラックホール周囲の磁場構造解明に向けた一般相対論的偏光輻射輸送計算、超巨大ブラックホールからのラインフォース型円盤風の構造と起源の研究、超高光度 X 線パルサーで観測される X 線パルスの起源の研究、暗黒物質サブハローと M31 恒星ストリームとの相互作用、冬眠するブラックホール、Dark Matter Sub-halo 同士の衝突頻度、ダークマターサブハロー衝突によるダークマター欠乏銀河の形成過程、遠方銀河のスターバーストと金属輝線放射の関係、星団形成における輻射流体力学過程の研究、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、キラル有機分子の鏡像異性体過剰を引き起こす紫外線円偏光波生成の研究（宇宙生命計算科学連携）、原始惑星系円盤乱流中のダスト成長過程の研究（宇宙生命計算科学連携）、時間依存輻射輸送計算による生体光イメージングの理論モデル構築（計算メディカルサイエンス事業部：計算光バイオイメージング）、スーパーコンピュータ富岳を用いた宇宙大規模構造におけるニュートリノの数値シミュレーション、一般相対論的輻射磁気流体力学計算コード INAZUMA の開発を行った。

3. 研究成果

【1】ブラックホール周囲の磁場構造解明に向けた一般相対論的偏光輻射輸送計算

事象の地平線望遠鏡（EHT）が撮影した M87 ブラックホールの壮大な画像は、ブラックホール研究に新たな時代をもたらした。次の課題の一つは、中心のブラックホール（BH）近傍の磁場構造を解明することである。そのためには偏光観測が必要である。なぜなら、電波放射はシンクロトロンプロセスによって生成されるので、偏光特性はジェット基底部の磁場構造を鮮明に反映すると考えられるからである。このような観点から、我々は M87 の降着流と流出流の一般相対論的磁気流体力学（GR-MHD）シミュレーションデータに基づいて、偏光の一般相対論的放射伝達計算を行い、地平線スケールの直線偏光と円偏光のイメージを得た（図 1）。その結果、ジェット基底部と降着流内部からの直線偏光成分は、BH 周辺の磁化されたプラズマを通過する際にファラデー回転を受けるため、BH のスピンの敏感に反応することがわかった。EHT による 1.3mm の強度画像と、サブミリ波アレイによる 1.3mm の偏光度と回転測定値（RM）を比較すると、スピンパラメータが $a=0.9$ のモデルが、 $a=0.5$ や 0.99 のモデルよりも観測結果に近いことがわかった。また、低温モデルでは、円偏光マップに明確なリング状のイメージが現れる。これは、直線偏光した放射光がファラデー変換されて生じたものである。この現象は、放射領域に揃った磁場が存在する場合にのみ生じるため、高温円盤モデルでは明確な像は見られない。今回の偏光シミュレーション画像と、今後の EHT による偏光観測や他の VLBI 観測との比較を通じて、磁場の構成を明らかにすることが可能である。

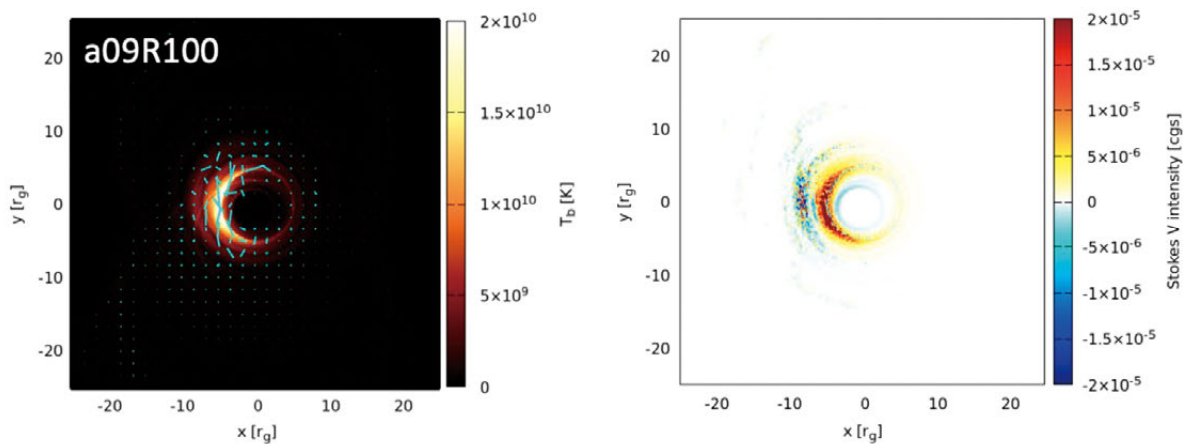


図 1 一般相対論的偏光輻射輸送計算で得られた撮像イメージと直線偏光分布（左）および円偏光分布（右）

【2】超巨大ブラックホールからのラインフォース型円盤風の構造と起源の研究

最近の X 線観測結果から、超巨大ブラックホールからの超高速アウトフロー (Ultra Fast Outflows と呼ばれる) は、ホスト銀河に大きな影響を与えるほどのエネルギーを持つと予想されているが、その発生および加速メカニズムはよくわかっていない。本研究では、2 次元輻射流体力学シミュレーションを行い、ラインフォース駆動円盤風の質量噴出率とパワーを計算する。そのため、円盤風の質量噴出率に対応して、噴出領域より内側の質量降着率を減少させる新しい計算手法を開発した。これによって円盤の内側領域からの紫外線が弱くなるため、降着率を減少を考慮しない従来のシミュレーションに比べて、円盤風のパワーが減少することがわかった。我々のシミュレーションで再現されたライン駆動型円盤風は非常に強力であり、1 億から 100 億太陽質量のブラックホールにエディントン限界の 50 から 90% でガスが降着する場合、円盤に供給された質量の約半分が風で放出されることがわかった。超巨大ブラックホールの成長速度はこの円盤風の発生により低下することが判明した。

【3】超高光度 X 線パルサーで観測される X 線パルスの起源の研究

Kawashima et al. (2016) によるシミュレーション結果に基づいて、磁軸が回転軸とずれている磁化した中性子星 (NS) への超臨界降着柱の Pulsed Fraction (PF) を計算した。具体的には、シュヴァルツシルト時空における光の測地線方程式を解き、光線の軌道を求めた。また、重力赤方偏移と降着柱におけるガスの落下運動によるドップラー効果も考慮に入れた。観測された光度は、恒星質量ブラックホールのエディントン輝度を超えており、NS の自転による降着柱の歳差運動によって周期的に変化する。そのため、パルス状の発光が観測されることになる。PF は、観測者の見込み角と回転軸から測った磁軸の角度が近いほど大きくなる傾向がある。我々のモデルでは、PF は最大で 50% 程度となり、超高光度 X 線パルサー (ULXP) の観測結果とおおよそ一致する。本研究により、ULXP を NS への超臨界降着で説明可能であることがわかった。

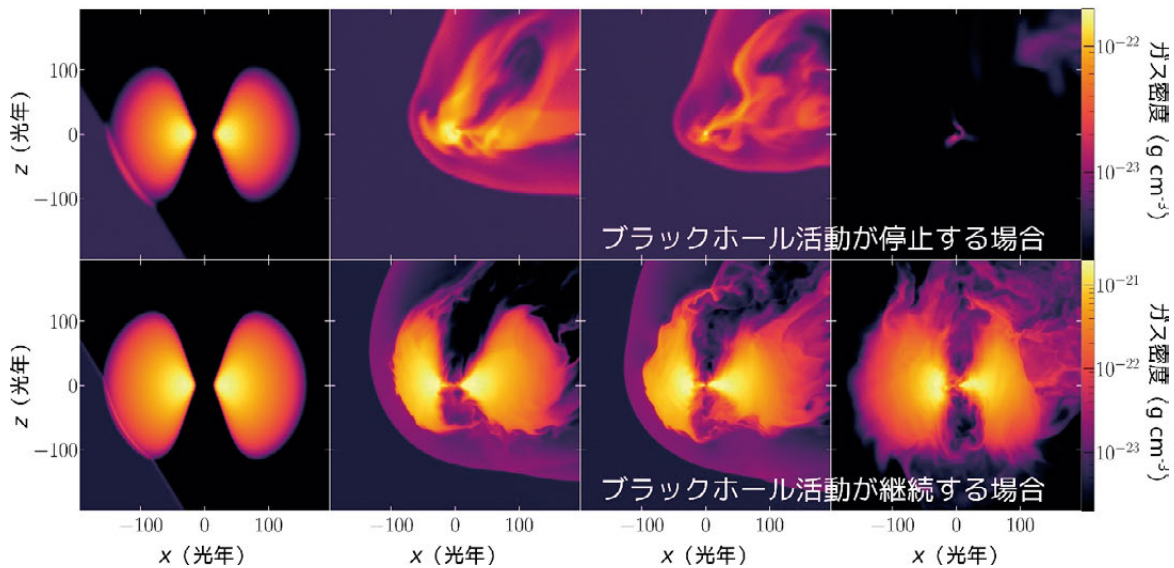
【4】暗黒物質サブハローと M31 恒星ストリームの相互作用

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)。本研究では、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を示した。さらに、衝突位置と衝突角度、ストリームの運動方向等のパラメータによってはストリーム自身

が並行する二本の細長いストリームに分裂する現象が発生する事を見出した。M31 のハロー領域で観測されているステラーストリームでは、複数のストリームがほぼ平行に位置する場合が複数発見されているが、その生成メカニズムとしての可能性について解析を進めた。

【5】冬眠するブラックホール

宇宙には太陽質量の 100 万倍を超える大質量ブラックホールが遍く存在する。ごく一部の
大質量ブラックホールは落ち込む物質をエネルギー源にして明るく輝き、激しい活動性を示すが、そのほとんどは銀河の中心でひっそりと佇んでいる。しかし、こうしたブラックホールの活動と休眠の間の状態変化をつかさどるメカニズムは、未だ完全には解明されていない。



我々は、Oakforest-PACS 等のスーパーコンピュータを駆使し、銀河衝突と銀河中心ブラックホールの活動性の関係を詳細に調べた。これまで、銀河衝突で銀河中心ブラックホールは激しく活動すると信じられてきた。衝突によって銀河円盤の物質が中心に落下し、ブラックホールに落ち込むことでその活動が活性化するのである。しかし、銀河衝突が中心で起こった場合には事態は全く異なる。矢が正鵠を射ぬくがごとく、中心に衝突した銀河がブラックホール周辺のガスを持ち去ってしまい、エネルギー源を失ったブラックホールは活動を停止し、静かに眠りにつくのである。最近の観測によって、銀河中心ブラックホールの活動が急停止した兆候を示す新種族の天体群も見つかっており、本研究が明らかにしたブラックホール活動性の休眠メカニズムとの関連について検討をはじめた。

【6】Dark Matter Sub-halo 同士の衝突頻度

コールドダークマターモデルを基礎とした銀河形成シナリオで葉、銀河系ほどの大きさを持った銀河に付随する矮小銀河の総数に関する理論予測が、実際の観測と大きく食い違っている、いわゆる Missing Satellite Problem が未解決問題として指摘されている。この解決案として、観測が不可能なほどに暗い sub-halo (Dark Satellite) の存在が考えら

れており、先行研究からこの Dark Satellite の存在を観測可能な Bright Satellite との衝突から間接的に示せる可能性が示唆された。本研究では、宇宙論的 N 体シミュレーションの 1 つである Phi-1 (Ishiyama et al. 2015) の結果を用いて、Milky Way サイズの Host 銀河に付随した (Bright, Dark を含む) sub-halo 同士の二体衝突の頻度を、Host 銀河が時間進化する系の中で詳細に調べた。その結果、宇宙年齢の間に sub-halo 同士の正面衝突が数回以上、また弱い相互作用は少なくとも数千回は生じていることを突き止め、矮小銀河の観測を通して Dark Satellite の存在を観測的に見極める可能性を示した。

【7】ダークマターサブハロー衝突によるダークマター欠乏銀河の形成過程

銀河形成の標準模型であるコールドダークマターによる階層的構造形成論では、銀河には恒星質量の約 100 倍以上のダークマターが存在していると考えられている。しかし、楕円銀河 NGC1052 に付随する衛星銀河 NGC1052-DF2 が、理論的に予測されるダークマター質量の 1/400 程度しかないダークマター欠乏銀河であることが発表された (van Dokkum et al. 2018)。また、その近傍の NGC1052-DF4 もダークマター欠乏銀河であることが確認された (van Dokkum et al. 2019)、さらには、HI リッチな 6 つの UDGs (Mancera Piña et al. 2019) や、バリオンが支配的な 19 個の矮小銀河 (Guo et al. 2020) が報告されている。このような銀河が存在することは、現在のコールドダークマターを基本にした標準銀河形成論では非常に困難であり、それらの形成シナリオを検討する必要がある。我々は、ガスとダークマターの物理的性質の違いに着目し、ガスを含んだダークマターサブハロー同士の衝突によってダークマター欠乏銀河が形成される可能性を調査している。一次元流体モデルを用いた解析によって、通常の矮小銀河が形成される衝突速度条件とダークマター欠乏銀河が形成される衝突速度条件を見出した。更に、この解析モデルを発展させ、3 次元銀河形成シミュレーションを実行することにより、その正当性について検証を行った。

【8】遠方銀河のスターバーストと金属輝線放射の関係

近年の観測により、遠方銀河が多数観測されている。それらは主に、アルマ望遠鏡による炭素や酸素の輝線検出によって同定が行われている。同時に、これら金属輝線は星間ガスの状態に強く依存するため、銀河内のガスの状態、星形成を明らかにするための強力な研究手法として注目されている。しかしながら、銀河の星形成、ガスの構造と金属輝線の定量的な関係性は明らかになっていない。我々は宇宙論的流体計算と輻射輸送計算を組み合わせる事で、初代銀河の物理状態と金属輝線の間関係を明らかにした。結果として、スターバーストの初期フェイズでは星形成領域付近の酸素ガスが電離され [OIII] 輝線が明るくなり、その後フィードバックによってガスが排出されると、相対的に炭素の [CII] 輝線が明るくなることを示した。この関係は最近のアルマ観測による遠方銀河の酸素、炭素輝線比を見事に再現している (Arata, Yajima, Nagamine, Khochfar, Abe, 2020, MNRAS, 498, 5541)。ま

た、星形成ガス内の高密度領域では CO 分子が形成され、冷却の際に輝線を放射する。この CO 分子輝線は、星形成の材料となる水素分子と関係しているため、星形成の材料を探る上で重要視されている。しかし、CO 分子と水素分子の間の定量的な関係性に不定性があり、長年問題となっていた。我々はシミュレーションで得られたモデル銀河に対してサブグリットモデルの星間ガス多相モデルを作成し、観測の CO 光度関数を再現する事に成功した。この計算をもとにして CO 分子と水素分子量の関係性を銀河の物理量の関数としてモデル化を行った (Inoue, Yoshida, Yajima, 2020, MNRAS, 498, 5960)。このように、銀河の物理状態とアルマ望遠鏡の観測データを結ぶモデルを大規模な数値シミュレーションにより構築をする事が出来た。

【9】星団形成における輻射流体力学過程の研究

分子雲内の星団形成は宇宙全体や銀河の星形成史を決める重要なプロセスである。しかしながら、星団形成は非一様なガスの構造における輻射フィードバックを考慮する必要があることから、その複雑さのために未だ理解が進んでいない。我々は適合格子法を使った輻射流体シミュレーションにより、分子雲から分子雲コアまでを同時に分解して星団形成過程を調べた。結果として、脱出速度が電離ガスの音速を大きく下回るような分子雲では、数%のガスが星に変わった段階で輻射フィードバックによってガス雲が破壊されることが分かった。一方で、コンパクトな大質量ガス雲では輻射フィードバックが効かず、数十%のガスが星へと変わり、高密度星団が形成されることが分かった。また、これらの輻射フィードバックの効果は、金属量にも依存し、金属量が大きい場合には、フィラメント構造のダストの減光により星形成効率が大きくなることを示した (Fukushima, Yajima, Sugimura, Hosokawa, Omukai, Matsumoto, 2020, MNRAS, 497, 3830)。

【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。2020 年度は、CDM の初期条件をより second order lagrangian perturbation theory (2LPT) という精度の高いものに改良し、富岳を用いて様々なニュートリノ質量について多くの realization の数値シミュレーション結果を得た。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。また、これまでの研究で採用されてきた N 体シミュレーションと Vlasov シミュレーションを同じ初期条件から始めて結果を詳細に比較することによって、N 体シミュレーションと Vlasov シミュレーションの数値シミュレーションとしての性質の違いや長所・短所を系統的に調査した。

【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、次世代の大型電波干渉計である Square Kilometre Array や ngVLA などの観測によって温度が 10^6 K 程度の WHIM の検出が可能であることを示した。更に、現在までに X 線観測で吸収線が同定されている WHIM についてその観測可能性を調査し、これらの WHIM についても X 線の観測で用いられているのと同じ背景天体のスペクトル中に窒素イオンの超微細構造遷移の吸収線を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:

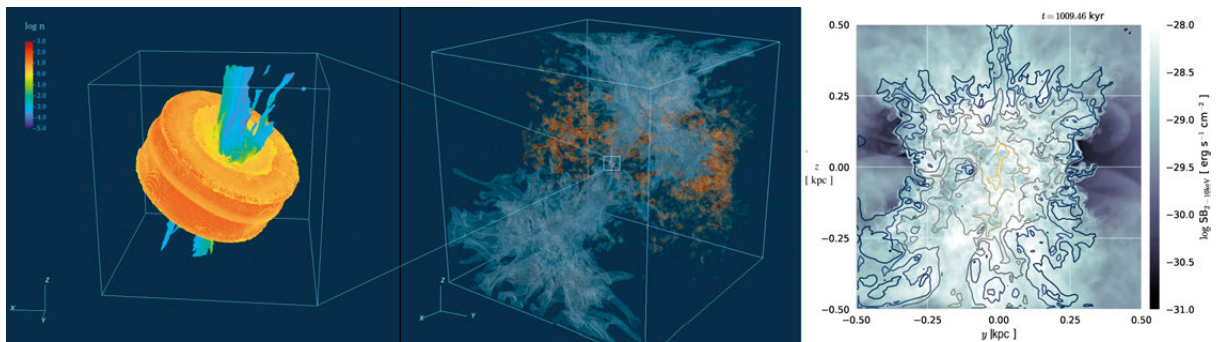


図 2 Left and middle: Volume renderings of a simulation of the Milky Way AGN jet emerging from the circumnuclear disc (left) and propagating into the interstellar medium of the Milky Way disc (middle). Right: Predicted hard X-ray surface brightness (colormap) and radio surface brightness (contours).

1. constructed models of the putative Milky Way AGN jet that is thought to have inflated the FERMI bubbles (See Fig. 2). We identify vestiges of the interaction of the jets with the circumnuclear disc as well as clouds on ~ 100 pc scales. We have constructed the first models to reproduce the new MeerKAT radio data and eROSITA X-ray data of the inner regions of the FERMI bubble. (Preliminary results presented at the 43rd COSPAR Scientific Assembly, G. N. Cecil, A. Y. Wagner, et al.);
2. obtained new, spatially resolved [CI]1-0, [CI]2-1, CO(7-6), and dust continuum observations of 4C41.17 at $z = 3.8$, one of the best candidates of jet-triggered star formation at high redshift. The gas mass, densities and star-formation rates found are comparable to those in other populations of massive, dusty star-forming galaxies in this redshift range, suggesting that the jet does not currently enhance the efficiency with which stars form from the gas. This is consistent with expectations from our simulations, where radio jets may facilitate the onset of star formation in galaxies without boosting its efficiency over longer timescales, in particular after the jet has broken out of the interstellar medium, as is the case in 4C 41.17. (Nesvadba et al., including Wagner, 2020);
3. performed, using optical integral field spectroscopy, an analysis of the ISM conditions in Minkowski's object ($z = 0.0189$), a peculiar star-forming dwarf galaxy located in the path of a radio jet from the galaxy NGC 541. We confirmed the young age of the stellar population that suggest that Minkowski's object was formed from a recent interaction with the jet. With our new data and our understanding of jet-cloud interactions, we invalidate several formation mechanisms previously proposed in the literature, while proposing two new, more detailed, scenarios. (Zovaro et al., including Wagner, 2020)

【13】キラル有機分子の鏡像異性体過剰を引き起こす紫外線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」を継続して行い、以下の二つの成果を得た。これにより、星形成領域には、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高円偏光波が存在することを明らかにした。

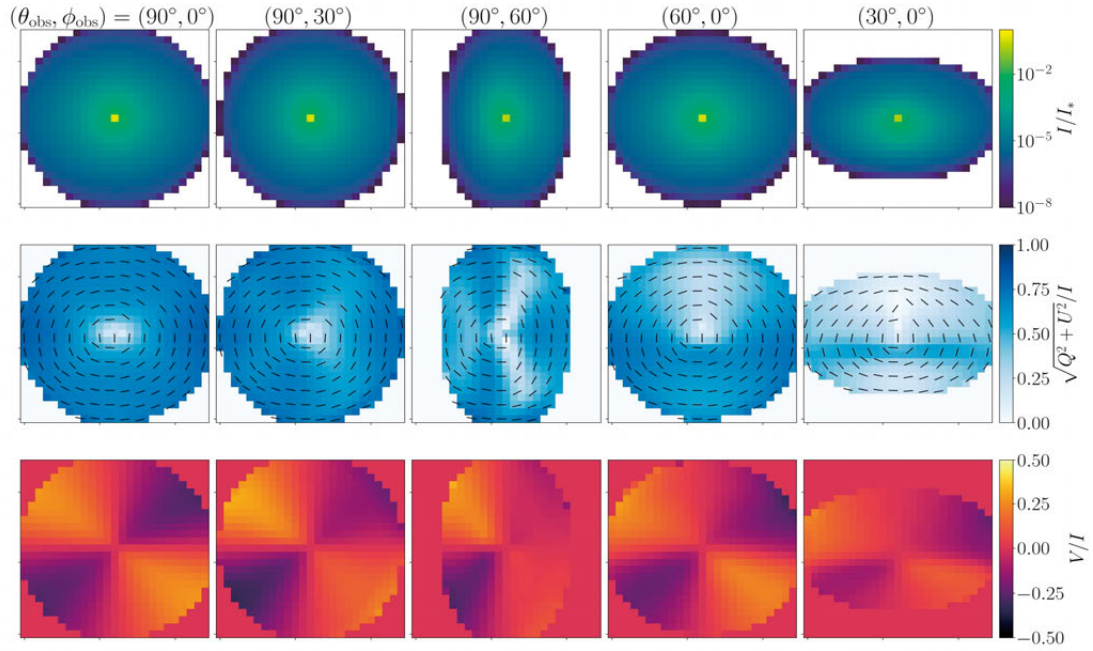


図 3 紫外線波長における輝度（上図）と線偏光度（中図），円偏光度（下図）。ダストシエルは yz 平面上にある。各図は左から観測者が $(\theta_{\text{obs}}, \phi_{\text{obs}}) = (90, 0), (90, 30), (90, 60), (60, 0), (30, 0)$ にいる場合を示す。

(1-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拡張

扁球ダスト粒子による散乱過程における偏光波生成について計算する、モンテカルロ輻射輸送計算コードの開発を継続して行った。特に、任意の位置に観測者がいる場合に対応できるように計算コードの拡張を行った。これにより、円偏光波生成における光源や散乱体の配置に対する依存性を調べる事が可能となった。

(1-b) 星形成領域の紫外線波長における高円偏光波生成について

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、宇宙空間における円偏光波は近赤外線波長でのみ観測されており、紫外線波長で存在するかは謎であった。これを解明するために、開発したコードを使用し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エルを配置し、ダストサイズがMRN分布となる場合について調べた。図3に示すように、赤外線波長で観測されている、円偏光波の四重極構造が紫外線波長でも同様に見られることを示した。また、この四重極構造については、どの位置にいる観測者からも確認できることも示した。円偏光度についてはダスト粒子からの後方散乱が卓越する角度において、より上昇することが明らかとなった。この際、円偏光度は30%まで到達する。前回の研究より、今回用い

た MRN 分布のダスト粒子では、近赤外線波長においては数 % 程度の円偏光波しか生成することができない。このことから、近赤外線観測では円偏光波が確認されていない星形成領域でも、紫外線波長においては高円偏光波が存在していることを示した。

【14】原始惑星系円盤乱流中のダスト成長過程の研究（宇宙生命計算科学連携）

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。まず、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、圧縮性乱流場の統計的な準定常性を向上させ、信頼性の高い比較を可能にした。圧縮性乱流場の計算の結果得られた速度 divergence 分布関数は、マッハ数が大きくなるにつれて速度 divergence の裾野が広がると共に、レイノルズ数が増大によっても裾野は広がっていくことが分かった。また、マッハ数が 1 を超える弱い衝撃波領域が現れ、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することが明らかとなった。そして、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結果、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した。よって、これまで行われてきた、非圧縮の取り扱いは、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。これらの結果は、論文としてまとめられ、出版された (Sakurai et al. 2021, ApJ, 911, 140)

【15】時間依存輻射輸送計算による生体光イメージングの理論モデル構築（計算メディカルサイエンス事業部：計算光バイオイメージング）

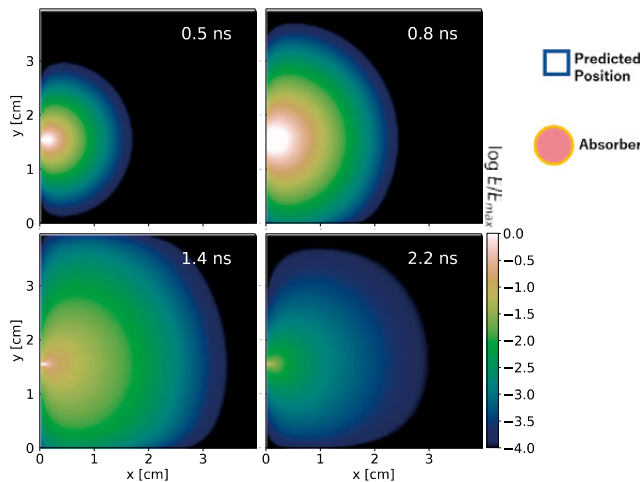


図 4 生体模擬物質ファントムへの近赤外光パルス照射のシミュレーション。色は光のエネルギー密度を示している。

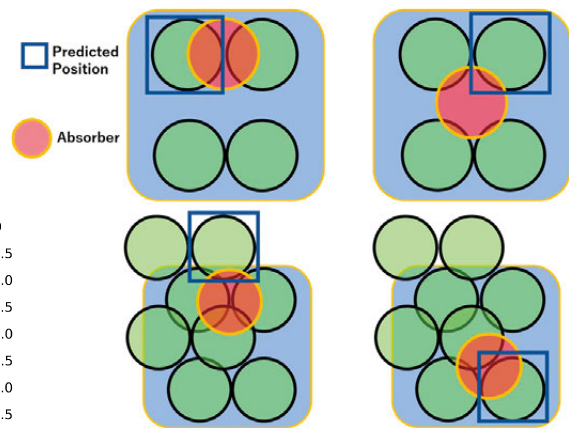


図 5 機械学習による吸収体の位置の判定テスト。赤丸が教師データとして与えていない位置の吸収体位置。四角が判定結果。

波長 700-1000 ナノメートルの近赤外光は、X 線 CT や MRI に次ぐ新たな医療診断法として注目されている。しかしながら、近赤外光は生体内を散乱しながら複雑な経路で伝播していくため、診断には輻射輸送シミュレーションによる光伝播のモデルがあらかじめ必要となる。特に、生体光イメージングではピコ秒オーダーの高時間分解能、強い非等方散乱、反射、屈折の効果を取り入れる必要がある。我々は、これらの効果を全て導入した新しい輻射輸送計算コード TRINITY を開発した (Yajima, Abe, Umemura, Takamizu, Hoshi, JQSRT 誌に投稿中)。この計算コードを用いてポリウレタン製の生体模擬物質ファントムに対する光パルス照射実験を比較したところ、見事に検出波形を再現する事に成功した (図 4)。また、輻射輸送シミュレーションのモデルと光計測を繋ぐ逆問題解析として、TensorFlow を用いて機械学習によるモデルを構築した。学習は、シミュレーションデータに人工的なノイズを付加し、教師データとして用いている。結果として、教師データとして与えていない位置に異常部位を置いたとしても、90% 以上の高い判定制度で異常部位の位置を正解出来る事を示した (図 5, Takamizu, Umemura, Yajima, Abe, Hoshi, Medical Physics 誌へ投稿中)。今後はこれらの輻射輸送シミュレーション、機械学習のモデルをベースにして、甲状腺、脳などのより複雑な構造での計算に挑戦する。

【16】スーパーコンピュータ富岳を用いた宇宙大規模構造におけるニュートリノの数値シミュレーション

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、宇宙大規模構造におけるニュートリノの力学的影響を計算する N 体シミュレーションと

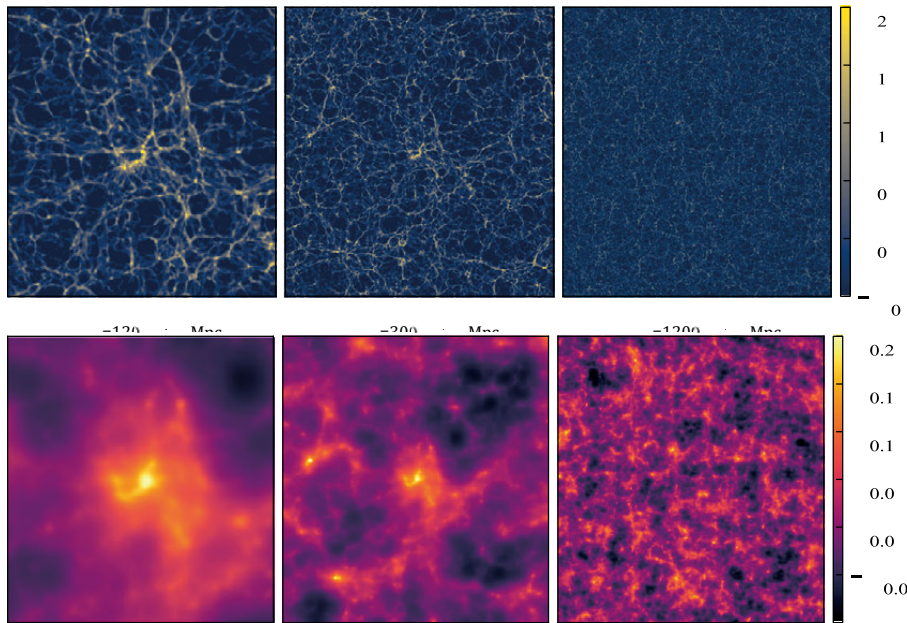


図 6 富岳で実行した世界最大規模の Vlasov シミュレーションで得られた、
CDM(上段)とニュートリノ (下段) の密度分布。

Vlasov シミュレーションのハイブリッドコードの最適化を行った。昨年度は、富岳の約 27000 ノードのシステムにおいて最適化を行ったが、本年度は富岳の全システムである約 150000 ノードを使った最適化を実施し、重力計算における高速フーリエ変換や MPI 通信の改良を行うことで、strong scaling で 85%、weak scaling で 70% という高い並列化効率を達成した。また、この最適化によって得られたコードで富岳の約半分の 75000 ノードを用いて世界最大規模の Vlasov シミュレーションを実現することに成功した。(図 6)

【17】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必要な、一般相対論的輻射磁気流体力学 (GRRMHD) 計算は、そのほとんどが M1-closure 法と呼ばれる近似法に基づいて輻射場を解いている。この方法では、非一様性が激しい場合や、光学的厚みが 1 程度の状況で正しい輻射場を計算できないことが知られている。降着円盤の回転軸付近に輻射が到達しにくいということも示されており、より正確な GR-RMHD 計算が要求されている。そこで本研究では、輻射ボルツマン方程式を解くことで、輻射 intensity の角度分布からエ

ディンテ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り、円盤の回転軸付近の輻射場も正しく解けるようになった。実際のブラックホール周囲の降着円盤への適用が今後の予定である。

4. 教育

【学位論文】

<修士論文>

1. 和間雄司
ISM における AGN ジェット駆動による乱流
2. 山本剛大
星間ガスの多相構造と塊状分布を考慮した AGN モレキュラーアウトフロー形成過程の探索
3. 倉西嶺人
相対論的輻射流体計算による相対論ジェットの終端速度の光学的厚み依存性評価
4. 大滝恒輝
ダークマターサブハロー衝突によるダークマター欠乏銀河の形成過程
5. 井上壮大
一般相対論的輻射輸送・輻射磁気流体力学計算による超臨界中性子星降着流の構造の解明
6. 内海碧人
一般相対論的輻射磁気流体シミュレーションによるカー・ブラックホール周りの超臨界降着円盤の解明
7. 高橋幹弥
Ray-tracing 法に基づく一般相対論的輻射輸送コードの開発

<学士論文>

1. 須永泰聖
Galactic Chemical Evolution and Habitable Zone
2. 田中駿次
銀河系衛星銀河の潮汐効果
3. 人見拓也
一般相対論的輻射輸送計算によるブラックホールへ落下するガスの放射特性の研究
4. 山本昌平
原始惑星系円盤における乱流とダスト成長

5. 坂和孝英

星形成領域における酸化プロピレンのキラリティ生成過程

6. 益川洋武

アミノ酸ホモキラリティに関わる星間円偏光の生成

【集中講義】

1. 大須賀健. 計算物理学特別講義 IV「降着円盤理論と輻射流体力学の基礎」, 千葉大学大学院. Dec. 11-12, 2020.

5. 受賞・外部資金・知的財産権等

【外部資金】

<代表者>

- 基盤研究 (A) (一般) H31 年度～R5 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」
(R2 年度 930 万円／全体 3460 万円)
- 基盤研究 (C) (一般) H30 年度～R2 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」
(R2 年度 110 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」
(R2 度 70 万円／全体 260 万円)
- 基盤研究 (C) (一般) R2 年度～R5 年度: 森正夫
「ダークサテライトは存在するか?—コールドダークマターモデルにおける諸問題の解明」
(R2 度 100 万円／全体 330 万円)
- 若手研究 (A) H29 年度～R2 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」
(R2 年度 360 万円／全体 1400 万円)
- 新学術領域研究 (研究領域提案型) R2 年度～R3 年度: 矢島秀伸
「輻射流体計算で解き明かす初期宇宙の高密度星団形成」
(R2 年度 190 万円／全体 370 万円)
- ALMA 共同科学研究事業 (区分 A) H31 年度～R3 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」

(R2 年度 100 万円／全体 300 万円)

- ・ 若手研究 H30 年度～R3 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」

(R2 年度 50 万円／全体 200 万円)

<分担者>

- ・ 基盤研究 (B) (一般) R2 年度～R3 年度：梅村雅之 (代表者：石原卓)

「乱流の大規模直接数値計算から探る原始惑星系円盤のダスト成長の新シナリオ」

(R2 年度分担金 10 万円／分担金全体 40 万円)

- ・ 高性能汎用計算機高度利用事業, R2 年度～R4 年度：大須賀健 (代表者：牧野淳一郎)

「富岳」成果創出加速プログラム「宇宙の構造形成と進化から惑星表層環境変動までの統一的描像の構築」 (サブ課題 C ブラックホールと超新星爆発における高エネルギー天体現象の解明)

(R2 年度 527 万円／分担金全体 898 万円)

- ・ 基盤研究 (A) (一般) H29 年度～R3 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」

(R3 年度分担金 30 万円／分担金全体 195 万円)

- ・ 高性能汎用計算機高度利用事業, R2 年度～R4 年度：吉川耕司 (代表者：牧野淳一郎)

「富岳」成果創出加速プログラム「宇宙の構造形成と進化から惑星表層環境変動までの統一的描像の構築」 (サブ課題 A 大規模数値計算と大型観測データのシナジーによる宇宙の進化史の解明)

(R3 年度 24 万円／分担金全体 894 万円)

- ・ 基盤研究 (A) H29 年度～R2 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」

(R2 年度分担金 66 万円／分担金全体 280 万円)

- ・ 基盤研究 (A) H30 年度～R4 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」 (R2 年度

分担金 5 万円／分担金全体 40 万円)

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. N. P. H. Nesvadba, G. V. Bicknell, D. Mukherjee, and A. Y. Wagner. “Gas, dust, and star formation in the positive AGN feedback candidate 4C 41.17 at $z = 3.8$ ”. *A&A* 639, L13 (July 2020), p. L13. doi: 10.1051/0004-6361/202038269.

2. Takashi Kojima, Masami Ouchi, Michael Rauch, Yoshiaki Ono, Kimihiko Nakajima, et al. “Extremely Metal-poor Representatives Explored by the Subaru Survey (EMPRESS). I. A Successful Machinelearning Selection of Metal-poor Galaxies and the Discovery of a Galaxy with $M^* < 10^6 M$ and $0.016 Z$ ”. *ApJ* 898.2, 142 (Aug. 2020), p. 142. doi: 10.3847/1538-4357/aba047. arXiv: 1910.08559[astro-ph.GA].
3. Taichi Igarashi, Yoshiaki Kato, Hiroyuki R. Takahashi, Ken Ohsuga, Yosuke Matsumoto, et al. “Radiation Magnetohydrodynamic Simulations of Sub-Eddington Accretion Flows in AGNs: Origin of Soft X-Ray Excess and Rapid Time Variabilities”. *ApJ* 902.2, 103 (Oct. 2020), p. 103. doi: 10.3847/1538-4357/abb592.
4. Kohji Yoshikawa, Satoshi Tanaka, Naoki Yoshida, and Shun Saito. “Cosmological Vlasov—Poisson Simulations of Structure Formation with Relic Neutrinos: Nonlinear Clustering and the Neutrino Mass”. *ApJ* 904.2, 159 (Dec. 2020), p. 159. doi: 10.3847/1538-4357/abbd46. arXiv: 2010.00248 [astroph.CO].
5. Yuta Tarumi, Naoki Yoshida, and Shigeki Inoue. “R-process enrichment in ultrafaint dwarf galaxies”. *MNRAS* 494.1 (Mar. 2020), pp. 120–128. doi: 10.1093/mnras/staa720. arXiv: 2002.06913[astroph.GA].
6. Yuexing Li, Ming F. Gu, Hidenobu Yajima, Qirong Zhu, and Moupiya Maji. “ART²: a 3D parallel multiwavelength radiative transfer code for continuum and atomic and molecular lines”. *MNRAS* 494.2 (May 2020), pp. 1919–1935. doi: 10.1093/mnras/staa733. arXiv: 2001.11146[astro-ph.GA].
7. Ryota Tomaru, Chris Done, Ken Ohsuga, Hirokazu Odaka, and Tadayuki Takahashi. “The thermalradiative wind in low-mass X-ray binary H1743-322 - II. Iron line predictions from Monte Carlo radiation transfer”. *MNRAS* 494.3 (Apr. 2020), pp. 3413–3421. doi: 10.1093/mnras/staa961. arXiv: 1911.01660[astro-ph.HE].
8. Mariko Nomura, Ken Ohsuga, and Chris Done. “Line-driven disc wind in near-Eddington active galactic nuclei: decrease of mass accretion rate due to powerful outflow”. *MNRAS* 494.3 (Apr. 2020), pp. 3616–3626. doi: 10.1093/mnras/staa948.
9. Hajime Fukushima, Hidenobu Yajima, and Masayuki Umemura. “High circular polarization of nearinfrared light induced by micron-sized dust grains”. *MNRAS* 496.3 (June 2020), pp. 2762–2767. doi: 10.1093/mnras/staa1718. arXiv: 2006.06370[astro-ph.GA].
10. Hajime Fukushima, Takashi Hosokawa, Gen Chiaki, Kazuyuki Omukai, Naoki Yoshida, et al. “Formation of massive stars under protostellar radiation feedback: very metal-poor stars”. *MNRAS* 497.1 (July 2020), pp. 829–845. doi: 10.1093/mnras/staa1994. arXiv: 2004.02364[astro-ph.GA].

11. Hajime Fukushima, Hidenobu Yajima, Kazuyuki Sugimura, Takashi Hosokawa, Kazuyuki Omukai, et al. “Star cluster formation and cloud dispersal by radiative feedback: dependence on metallicity and compactness”. *MNRAS* 497.3 (Aug. 2020), pp. 3830–3845. doi: 10.1093/mnras/staa2062. arXiv: 2005.13401[astro-ph.GA].
12. Ryota Tomaru, Chris Done, Ken Ohsuga, Hirokazu Odaka, and Tadayuki Takahashi. “The thermalradiative wind in the neutron star low-mass X-ray binary GX 13 + 1”. *MNRAS* 497.4 (Aug. 2020), pp. 4970–4980. doi: 10.1093/mnras/staa2254. arXiv: 2007.14607[astro-ph.HE].
13. Shohei Arata, Hidenobu Yajima, Kentaro Nagamine, Makito Abe, and Sadegh Khochfar. “Starbursting [O III] emitters and quiescent [C II] emitters in the reionization era”. *MNRAS* 498.4 (Nov. 2020), pp. 5541–5556. doi: 10.1093/mnras/staa2809. arXiv: 2001.01853[astro-ph.GA].
14. Shigeki Inoue, Naoki Yoshida, and Hidenobu Yajima. “The CO universe: modelling CO emission and H₂ abundance in cosmological galaxy formation simulations”. *MNRAS* 498.4 (Sept. 2020), pp. 5960–5971. doi: 10.1093/mnras/staa2744. arXiv: 2008.12484[astro-ph.GA].
15. W. E. Banda-Barragán, M. Brüggen, C. Federrath, A. Y. Wagner, E. Scannapieco, et al. “Shockmulticloud interactions in galactic outflows - I. Cloud layers with lognormal density distributions”. *MNRAS* 499.2 (Sept. 2020), pp. 2173–2195. doi: 10.1093/mnras/staa2904.
16. Henry R. M. Zovaro, Robert Sharp, Nicole P. H. Nesvadba, Lisa Kewley, Alexander Y. Wagner, et al. “Unravelling the enigmatic ISM conditions in Minkowski’s object”. *MNRAS* 499.4 (Oct. 2020), pp. 4940–4960. doi: 10.1093/mnras/staa3121. arXiv: 2010.03139[astro-ph.GA].
17. Yuh Tsunetoe, Shin Mineshige, Ken Ohsuga, Tomohisa Kawashima, and Kazunori Akiyama. “Polarization imaging of M 87 jets by general relativistic radiative transfer calculation based on GRMHD simulations”. *PASJ* 72.2, 32 (Apr. 2020), p. 32. doi: 10.1093/pasj/psaa008. arXiv: 2002.00954[astro-ph.HE].
18. Akihiro Inoue, Ken Ohsuga, and Tomohisa Kawashima. “Pulsed fraction of super-critical column accretion flows on to neutron stars: Modeling of ultraluminous X-ray pulsars”. *PASJ* 72.2, 34 (Apr. 2020), p. 34. doi: 10.1093/pasj/psaa010. arXiv: 2003.07569[astro-ph.HE].
19. Yohei Miki, Masao Mori, and Toshihiro Kawaguchi. “Destruction of the central black hole gas reservoir through head-on galaxy collisions”. *Nature Astronomy* 5 (Jan. 2021). doi: 10.1038/s41550-02001286-9. arXiv: 2012.05700v1[astro-ph.GA].
20. Hidenobu Mitsuhashi Ikki et al. incl. Yajima. “FIR-luminous [C II] Emitters in the ALMA-SCUBA-2 COSMOS Survey (AS2COSMOS): The Nature of Submillimeter Galaxies in a 10 Comoving Megaparsecscale Structure at $z \sim 4.6$ ”. *MNRAS* 907.2 (Feb. 2021), p. 122. doi: 10.1038/s41550-020-01286-9.

21. Misaki Mizumoto, Mariko Nomura, Chris Done, Ken Ohsuga, and Hirokazu Odaka. “UV line-driven disc wind as the origin of UltraFast Outflows in AGN”. *MNRAS* 503.1 (May 2021), pp. 1442–1458. doi: 10.1093/mnras/staa3282. arXiv: 2003.01137.
22. Akio K. Inoue, Satoshi Yamanaka, Masami Ouchi, Ikuru Iwata, Kazuhiro Shimasaku, et al. “CHORUS. I. Cosmic HydrOgen Reionization Unveiled with Subaru: Overview”. *PASJ* 72.6 (Dec. 2020), p. 101. doi:10.1093/pasj/psaa100.
23. Yuta Asahina, Hiroyuki R Takahashi, and Ken Ohsuga. “A Numerical Scheme for General Relativistic Radiation Magnetohydrodynamics Based on Solving a Grid-based Boltzmann Equation”. en. *ApJ* 901.2 (Sept. 2020), p. 96. issn: 0004-637X. doi: 10.3847/1538-4357/abaf51. url: <https://iopscience.iop.org/article/10.3847/1538-4357/abaf51/meta>.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. 菊田智史. “Lyman-alpha halos of Lyman-alpha emitters across environments at $z=2.84$ ”. Subaru Users Meeting FY2020 (オンライン, Mar. 3–5, 2021). url: <https://subarutelescope.org/Science/SubaruUM/SubaruUM2020/index.html>.
2. 大須賀健. “Numerical simulations of super-critical accretion flows and accretion columns”. European Astronomical Society Annual Meeting 2020 (virtual meeting, June 29–July 3, 2020).
3. H. R. Takahashi, K. Ohsuga, T. Kawashima, N. Nomura, Y. Asahina, et al. “Relativistic radiation magnetohydrodynamic simulations of accretion disks”. Black Hole Astrophysics with VLBI: Multi-Wavelength and Multi-Messenger Era (Online, Jan. 18–20, 2021).

B) 一般講演

1. 朝比奈 雄太. “GR-RMHD simulations of black hole accretion flows”. 12th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (オンライン開催, Oct. 6, 2020).
2. Yuta Asahina, Hiroyuki R. Takahashi, and Ken Ohsuga. “GRRMHD simulations of black hole accretion flows solving Boltzmann equation”. Black Hole Astrophysics with VLBI: Multi-Wavelength and MultiMessenger Era (Online, Jan. 18–20, 2021).
3. 森正夫. “Formation of local galaxies”. 12th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (オンライン開催, Oct. 6, 2020).

4. 井上壮大, 大須賀健, and 川島朋尚. “Pulsed fraction of super-critical column accretion flows on to neutron stars: Modeling of ultraluminous X-ray pulsars”. European Astronomical Society Annual Meeting 2020 (virtual meeting, June 29–July 3, 2020).
5. 大須賀健. “Structure Formation in the Universe using Radiation Hydrodynamic Simulations”. 12th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (オンライン開催, Oct. 6, 2020).
6. A. Utsumi, K. Ohsuga, H.R. Takahashi, and Y. Asahina. “General relativistic radiation magnetohydrodynamics simulations of super-critical accretion disks around Kerr black holes”. Black Hole Astrophysics with VLBI: Multi-Wavelength and Multi-Messenger Era (Online, Jan. 18–20, 2021).
7. T. Kawashima, K. Ohsuga, and H. R. Takahashi. “A general-relativistic, multi-wavelength study of accretion flows and relativistic jets”. Black Hole Astrophysics with VLBI: Multi-Wavelength and Multi-Messenger Era (Online, Jan. 18–20, 2021).
8. T. Igarashi, Y. Kato, H. R. Takahashi, K. Ohsuga, Y. Matsumoto, et al. “Radiation magnetohydrodynamic simulations of black hole accretion flows during hard-to-soft state transitions”. Black Hole Astrophysics with VLBI: Multi-Wavelength and Multi-Messenger Era (Online, Jan. 18–20, 2021).
9. M. Nomura, K. Omukai, and K. Ohsuga. “Radiation hydrodynamic simulations of line-driven disk winds: Metallicity dependence and SMBH growth”. Black Hole Astrophysics with VLBI: Multi-Wavelength and Multi-Messenger Era (Online, Jan. 18–20, 2021).
10. M. Takahashi, K. Ohsuga, R. Takahashi, T. Ogawa, and M. Umemura. “Development of general relativistic radiative transfer code based on ray-tracing”. Black Hole Astrophysics with VLBI: Multi-Wavelength and Multi-Messenger Era (Online, Jan. 18–20, 2021).
11. A. Inoue, K. Ohsuga, H. R. Takahashi, and Y. Asahina. “General relativistic radiation-MHD simulations of supercritical accretion flows and outflows around magnetized neutron stars”. Black Hole Astrophysics with VLBI: Multi-Wavelength and Multi-Messenger Era (Online, Jan. 18–20, 2021).
12. 井上茂樹, 松尾宏, 吉田直紀, 矢島秀伸, and 森脇可奈. “A method to constrain black hole models using ratios of line emission”. Galaxy Evolution Workshop 2020 (オンライン, Feb. 2–5, 2021).
13. 矢島 秀伸. “Time-dependent radiative transfer for in-vivo bioimaging”. 12th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (オンライン開催, Oct. 6, 2020).

14. 矢島秀伸 and 福島肇. “Radiation-hydrodynamic simulations of star clusters in GMCs”. Gravitational wave physics and astronomy: Genesis 4th annual symposium (オンライン, Feb. 22–24, 2021).
15. 吉川 耕司. “Performance Evaluation of Electron Dynamics Simulation in Supercomputer Fugaku”. 12th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (オンライン開催, Oct. 6, 2020).

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 菊田智史. “淡く広がった天体の撮像データ解析について”. 2020 年度光赤天連シンポジウム「データ解析の新展開 2020」(オンライン開催, Sept. 14-17, 2020).
2. 井上茂樹. “あえて銀河を分解しない輝線研究とその理論モデル + (時間があれば) 少し磁場の話”. 国立天文台研究集会「(サブ) ミリ波単一鏡の革新で挑む, 天文学の未解決問題」(オンライン, Mar. 29-31, 2021).
3. 矢島秀伸. “銀河形成シミュレーションのブレイクスルーと今後の展開”. 第 33 回理論懇シンポジウム (オンライン, Dec. 23-25, 2020).

B) その他の発表

1. 朝比奈雄太, 高橋博之, and 大須賀健. “輻射輸送方程式を解く一般相対論的輻射磁気流体コード INAZUMA によるブラックホール降着流計算”. 第 33 回理論懇シンポジウム (オンライン, Dec. 23-25, 2020).
2. 朝比奈雄太, 高橋博之, and 大須賀健. “一般相対論的輻射磁気流体コード INAZUMA を用いたブラックホール降着流シミュレーション”. CfCA ユーザーミーティング (オンライン, Jan. 19-20, 2021).
3. 朝比奈雄太, 高橋博之, and 大須賀健. “GR-RMHD コード INAZUMA によるブラックホール降着流シミュレーション”. ブラックホール降着流ミニ研究報告会 (オンライン, Mar. 1-2, 2021).
4. 朝比奈雄太, 高橋博之, and 大須賀健. “一般相対論的輻射磁気流体コード INAZUMA によるブラックホール降着流シミュレーション”. 多波長・時間軸天文学の時代の FORCE ～広帯域 X 線で迫るコンパクト天体の世界～ (オンライン, Mar. 4-5, 2021).
5. 朝比奈雄太, 高橋博之, and 大須賀健. “輻射輸送方程式を解く GR-RMHD コード INAZUMA によるブラックホール降着流シミュレーション”. 日本天文学会 2021 年春季年会 (オンライン, Mar. 16-19, 2021).

6. 阿左美進也, 安部牧人, and 梅村雅之. “原始ガス雲の進化における $\text{Ly } \alpha$ 輻射の水素分子抑制効果について”. 日本天文学会秋季年会 (弘前大学, オンライン開催, Sept. 8-10, 2020).
7. 阿左美進也, 安部牧人, and 梅村雅之. “1 次元球対称計算を用いた原始ガス雲進化に対する $\text{Ly } \alpha$ 輻射 の効果について”. 初代星初代銀河研究会 2020 (東北大学, Online, Nov. 16-18, 2020).
8. 阿左美進也, 安部牧人, and 梅村雅之. “ $\text{Ly } \alpha$ 輻射による原始ガス雲中での水素分子形成抑制効果の質量依存性”. 日本天文学会 2021 年春季年会 (オンライン, Mar. 16-19, 2021).
9. Hajime Fukushima, Hidenobu Yajima, and Masayuki Umemura. “Radiation transfer simulation of circular polarization at the NIR/UV wavelengths”. JpGU-AGU Joint Meeting 2020 (オンライン会議, July 16, 2020).
10. 福島肇, 矢島秀伸, 杉村和幸, 細川隆史, 大向一行, et al. “星団形成における輻射フィードバックについて”. 日本天文学会秋季年会 (弘前大学, オンライン開催, Sept. 8-10, 2020).
11. 福島肇 and 矢島秀伸. “輻射流体シミュレーションによる星団形成”. 天体形成研究会 2020 (筑波大学, Online, Nov. 6-7, 2020).
12. 福島肇 and 矢島秀伸. “モーメント法による輻射流体シミュレーションを用いた低金属量星団形成”. 初代星初代銀河研究会 2020 (東北大学, Online, Nov. 16-18, 2020).
13. 福島肇 and 矢島秀伸. “星団形成における輻射フィードバックについて”. 分子雲から原始星誕生までを追う 新時代の星形成モデル構築に向けて (オンライン開催, Dec. 1-3, 2020). url: <https://tok339.wixsite.com/clouds2protostars20>.
14. 福島肇 and 矢島秀伸. “星団形成における輻射フィードバック”. 第 33 回 理論懇シンポジウム (オンライン, Dec. 23-25, 2020).
15. 福島肇 and 矢島秀伸. “輻射流体シミュレーションによる星団形成に関する研究”. CfCA ユーザーミーティング (オンライン, Jan. 19-20, 2021).
16. 福島肇 and 矢島秀伸. “輻射流体シミュレーションによる星団形成に関する研究”. CfCA ユーザーズミーティング (オンライン, Jan. 19-20, 2021).
17. 福島肇 and 矢島秀伸. “モーメント法を用いた輻射流体シミュレーションによる星団形成の解明”. 日本天文学会 2021 年春季年会 (オンライン, Mar. 16-19, 2021).
18. 井上茂樹, 吉田直紀, and 矢島秀伸. “The CO universe: Modelling CO emission and H_2 abundance in cosmological galaxy formation simulations”. Nobeyama Science Workshop 2020 (オンライン開催, Sept. 15-16, 2020).

url: <https://sites.google.com/keio.jp/nobeyama-science-workshop2020/%E3%83%9B%E3%83%BC%E3%83%A0?authuser=0>.

19. 井上茂樹, 吉田直紀, and 矢島秀伸. “宇宙論的シミュレーションを用いた CO 分子輝線疑似観測”. 日本天文学会秋季年会 (弘前大学, オンライン開催, Sept. 8-10, 2020).
20. 菊田智史. “HSC と ALMA で探る $z=2.84$ 原始銀河団での銀河形成”. 銀河・銀河間ガス研究会 2020(オンライン開催, Aug. 3-5, 2020).
21. 菊田智史. “Ly-alpha halos around LAEs at $z=2.84$ across environments”. 日本天文学会秋季年会 (弘前大学, オンライン開催, Sept. 8-10, 2020).
22. 倉西嶺人. “相対論的輻射流体計算による相対論ジェットの終端速度の光学的厚み依存性の研究”. 天体形成研究会 2020 (筑波大学, Online, Nov. 6-7, 2020).
23. 益川洋武. “アミノ酸ホモキラリティに関わる星間円偏光の生成”. 天体形成研究会 2020 (筑波大学, Online, Nov. 6-7, 2020).
24. 五十嵐朱夏, 森正夫, and 新田伸也. “遷音速アウトフローモデルによる高赤方偏移星形成銀河の mass loading factor の推定”. 銀河・銀河間ガス研究会 2020 (オンライン開催, Aug. 3-5, 2020).
25. 大滝恒輝 and 森正夫. “ダークマター欠乏銀河の形成シミュレーション”. 銀河・銀河間ガス研究会 2020(オンライン開催, Aug. 3-5, 2020).
26. 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シミュレーション”. 日本流体力学会年会 (山口大学, オンライン開催, Sept. 18-20, 2020).
27. 五十嵐朱夏, 森正夫, and 新田伸也. “遷音速銀河風モデルによる星間ガス流出量の推定”. 日本流体力学会年会 (山口大学, オンライン開催, Sept. 18-20, 2020).
28. 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: 衝突速度依存性について”. 日本天文学会秋季年会 (弘前大学, オンライン開催, Sept. 8-10, 2020).
29. 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: 質量依存性について”. 天体形成研究会 2020 (筑波大学, Online, Nov. 6-7, 2020).
30. 田中駿次 and 森正夫. “天の川銀河衝突シミュレーションに向けて”. 天体形成研究会 2020 (筑波大学, Online, Nov. 6-7, 2020).
31. 須永泰聖 and 森正夫. “Galactic Habitable Zone について”. 天体形成研究会 2020 (筑波大学, Online, Nov. 6-7, 2020).
32. 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形成の解析”. 初代星初代銀河研究会 2020(東北大学, Online, Nov. 16-18, 2020).

33. 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シナリオ”. 第 33 回 理論懇シンポジウム (オンライン, Dec. 23-25, 2020).
34. 数野優大 and 森正夫. “Milky Way like な銀河に付随する Dark Matter Sub-halo の衝突頻度”. 第 33 回理論懇シンポジウム (オンライン, Dec. 23-25, 2020).
35. 大滝恒輝 and 森正夫. “ダークマターサブハロー衝突による ダークマター欠乏銀河の形成過程”. 日本天文学会 2021 年春季年会 (オンライン, Mar. 16-19, 2021).
36. 五十嵐太一, 松元亮治, 加藤成晃, 高橋博之, 松本洋介, et al. “Changing Look AGN における軟 X 線放射領域の輻射磁気流体シミュレーション”. 日本天文学会秋季年会 (弘前大学, オンライン開催, Sept. 8-10, 2020).
37. 朝比奈雄太, 高橋博之, and 大須賀健. “ブラックホール降着流の一般相対論的輻射磁気流体計算: 質量降着率依存性”. 日本天文学会秋季年会 (弘前大学, オンライン開催, Sept. 8-10, 2020).
38. 井上壮大, 大須賀健, 高橋博之, and 朝比奈雄太. “超臨界中性子星降着流の降着率依存性および磁場強度依存性の研究”. 日本天文学会秋季年会 (弘前大学, オンライン開催, Sept. 8-10, 2020).
39. 内海碧人, 大須賀健, 高橋博之, and 朝比奈雄太. “一般相対論的輻射磁気流体力学シミュレーションによるカー・ブラックホール周りの超臨界降着流の研究”. 日本天文学会秋季年会 (弘前大学, オンライン開催, Sept. 8-10, 2020).
40. 水本岬希, 野村真理子, Chris Done, 大須賀健, and 小高裕和. “XRISM observations of a UV line driven disc wind in AGN”. 日本天文学会秋季年会 (弘前大学, オンライン開催, Sept. 8-10, 2020).
41. 恒任優, 嶺重慎, 大須賀健, 川島朋尚, and 秋山和徳. “輻射輸送シミュレーションの新地平 EHT 偏波イメージ予測で探る磁場構造”. 日本天文学会秋季年会 (弘前大学, オンライン開催, Sept. 8-10, 2020).
42. 尾形絵梨花, 大須賀健, and 矢島秀伸. “Super-Eddington 天体に対する dusty-gas の Hoyle-Lyttleton 降着過程”. 日本天文学会秋季年会 (弘前大学, オンライン開催, Sept. 8-10, 2020).
43. 内海碧人, 大須賀健, 高橋博之, and 朝比奈雄太. “カー・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力学シミュレーション”. 天体形成研究会 2020 (筑波大学, Online, Nov. 6-7, 2020).
44. 武者野拓也, 大須賀健, 矢島秀伸, and 小川拓未. “ライマンアルファ光子の輻射圧を考慮した輻射流体力学シミュレーションに向けて”. 天体形成研究会 2020 (筑波大学, Online, Nov. 6-7, 2020).

45. 高橋幹弥, 大須賀健, 高橋芳太, 梅村雅之, and 小川拓未. “ブラックホール周囲の測地線に基づく一般相対論的輻射輸送コードの開発”. 天体形成研究会 2020 (筑波大学, Online, Nov. 6-7, 2020).
46. 井上壮大, 大須賀健, 高橋博之, and 朝比奈雄太. “超臨界中性子星降着流の一般相対論的輻射磁気流体力学シミュレーション”. 天体形成研究会 2020 (筑波大学, Online, Nov. 6-7, 2020).
47. 尾形絵梨花, 大須賀健, and 矢島秀伸. “Super-Eddington 天体に対する dusty-gas の Hoyle-Lyttleton 降着過程”. 天体形成研究会 2020 (筑波大学, Online, Nov. 6-7, 2020).
48. 高橋幹弥, 大須賀健, 高橋芳太, 梅村雅之, and 小川拓未. “Ray-tracing 法に基づく一般相対論的輻射輸送コードの開発”. 第 33 回理論懇シンポジウム (オンライン, Dec. 23-25, 2020).
49. 井上壮大, 大須賀健, 高橋博之, and 朝比奈雄太. “超臨界中性子星降着流の一般相対論的輻射磁気流体力学シミュレーション ～アウトフローの磁気圏半径依存性について～”. 第 33 回 理論懇シンポジウム (オンライン, Dec. 23-25, 2020).
50. 武者野拓也, 大須賀健, 矢島秀伸, and 小川拓未. “Ly α 光子の輻射圧を考慮したガス降着シミュレーションに向けて”. 第 33 回理論懇シンポジウム (オンライン, Dec. 23-25, 2020).
51. 尾形絵梨花, 大須賀健, and 矢島秀伸. “dusty-gas 中で浮遊するブラックホールの成長過程の解明に向けて”. 「富岳で加速する素粒子・原子核・宇宙・惑星」シンポジウム (オンライン, Jan. 28-29, 2021).
52. 小川拓未, 大須賀健, and 嶺重慎. “一般相対論的ボルツマン輻射輸送計算による X 線フレアの研究”. 「富岳で加速する素粒子・原子核・宇宙・惑星」シンポジウム (オンライン, Jan. 28-29, 2021).
53. 川島朋尚, 秋山和徳, 大須賀健, and 他. “一般相対論的・多波長輻射輸送コード RAIKOU で探るブラックホール時空および降着流・噴出流構造”. ブラックホール降着流ミニ研究報告会 (オンライン, Mar. 1-2, 2021).
54. 井上壮大, 大須賀健, 高橋博之, and 朝比奈雄太. “一般相対論的輻射磁気流体力学計算による ULX パルサーの構造の解明; アウトフローの構造と起源について”. 多波長・時間軸天文学の時代の FORCE ～広帯域 X 線で迫るコンパクト天体の世界～ (オンライン, Mar. 4-5, 2021).
55. 内海碧人, 大須賀健, 高橋博之, and 朝比奈雄太. “一般相対論的輻射磁気流体シミュレーションによる超臨界降着円盤のブラックホールスピン依存性の研究”. 多波

- 長・時間軸天文学の時代の FORCE ～広帯域 X 線で迫るコンパクト天体の世界～（オンライン, Mar. 4-5, 2021）.
56. 小川拓未, 大須賀健, and 嶺重慎. “一般相対論的ボルツマン輻射輸送による超臨界降着流の輻射スペクトル計算”. 多波長・時間軸天文学の時代の FORCE ～広帯域 X 線で迫るコンパクト天体の世界～（オンライン, Mar. 4-5, 2021）.
 57. 高橋幹弥, 大須賀健, 高橋芳太, 小川拓未, and 梅村雅之. “Ray-tracing 法に基づく、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 2021 年春季年会（オンライン, Mar. 16-19, 2021）.
 58. 内海碧人, 大須賀健, 高橋博之, and 朝比奈雄太. “一般相対論的輻射磁気流体計算を用いたカー・ブラックホールへの超臨界降着の研究”. 日本天文学会 2021 年春季年会（オンライン, Mar. 16-19, 2021）.
 59. 井上壮大, 大須賀健, 高橋博之, and 朝比奈雄太. “超臨界磁化中性子星降着流のアウトフロー；構造と起源の磁気圏半径依存性について”. 日本天文学会 2021 年春季年会（オンライン, Mar. 16-19, 2021）.
 60. 尾形絵梨花, 大須賀健, and 矢島秀伸. “Super-Eddington 天体に対する dusty-gas の Hoyle-Lyttleton 降着：角度依存性と定常構造”. 日本天文学会 2021 年春季年会（オンライン, Mar. 16-19, 2021）.
 61. 小川拓未, 大須賀健, 牧野芳弘, and 嶺重慎. “一般相対論的ボルツマン輻射輸送による超臨界降着流の輻射スペクトル計算”. 日本天文学会 2021 年春季年会（オンライン, Mar. 16-19, 2021）.
 62. 五十嵐太一, 松元亮治, 加藤成晃, 高橋博之, 松本洋介, et al. “AGN における準周期的な短時間変動の 3 次元大局的輻射磁気流体シミュレーション”. 日本天文学会 2021 年春季年会（オンライン, Mar. 16-19, 2021）.
 63. 内海碧人, 大須賀健, 高橋博之, and 朝比奈雄太. “General relativistic radiation magnetohydrodynamics simulations of super-critical accretion disks around kerr black holes”. CfCA ユーザーズミーティング（オンライン, Jan. 19-20, 2021）.
 64. 内海碧人, 大須賀健, 高橋博之, and 朝比奈雄太. “一般相対論的輻射磁気流体力学シミュレーションによる超臨界降着円盤のブラックホールスピン依存性の研究”. 第 33 回 理論懇シンポジウム（オンライン, Dec. 23-25, 2020）.
 65. 尾形絵梨花, 大須賀健, and 矢島秀伸. “Super-Eddington 天体に対する dusty-gas の Hoyle-Lyttleton 降着過程”. 第 33 回理論懇シンポジウム（オンライン, Dec. 23-25, 2020）.

66. 小川拓未, 大須賀健, and 嶺重慎. “Study of Comptonized X-ray Spectra of Super-Eddington Accretor with Boltzmann Radiation”. 第 33 回理論懇シンポジウム (オンライン, Dec. 23-25, 2020).
67. 大須賀健. “サブ課題 C 状況報告”. 富岳計算宇宙惑星・計算資源利用に関する課題内ワークショップ (神戸大学/オンライン会議, June 5, 2020).
68. 坂和孝英. “星形成領域における酸化プロピレンのキラリティ生成過程”. 天体形成研究会 2020 (筑波大学, Online, Nov. 6-7, 2020).
69. 井上茂樹, 吉田直紀, and Lars Hernquist. “Fragmentation of ring galaxies”. 天体形成研究会 2020 (筑波大学, Online, Nov. 6-7, 2020).
70. 井上茂樹, 松尾宏, 吉田直紀, and 矢島秀伸. “[OIII] 輝線比によるブラックホール理論モデルへの制限”. 初代星初代銀河研究会 2020 (東北大学, Online, Nov. 16-18, 2020).
71. 井上茂樹, 吉田直紀, and 矢島秀伸. “The CO universe: modelling CO emission and H₂ abundance in cosmological galaxy formation simulations”. 分子雲から原始星誕生までを追う 新時代の星形成モデル構築に向けて (オンライン開催, Dec. 1-3, 2020). url: <https://tok339.wixsite.com/clouds2protostars20>.
72. 井上茂樹 and 矢島秀伸. “Modelling line emission of galaxies: Connecting cosmological simulations with ALMA”. ALMA Grant Fellow Symposium 2020 (オンライン開催, Dec. 8-15, 2020). url: https://researchers.alma-telescope.jp/e/event/2020/alma_grant_fellow_symposium_2020.html.
73. 井上茂樹, 松尾宏, 吉田直紀, 矢島秀伸, and 森脇可奈. “高赤方偏移銀河の [OIII] 輝線比で探るブラックホールによる星形成抑止効果”. ALMA 高周波バンドを用いた星形成研究を考える 2021 (オンライン, Mar. 2, 2021).
74. 井上茂樹, 松尾宏, 吉田直紀, 矢島秀伸, and 森脇可奈. “[OIII] 輝線比によるブラックホール理論モデルへの制限”. 日本天文学会 2021 年春季年会 (オンライン, Mar. 16-19, 2021).
75. 曾我健太 and 梅村雅之. “高赤方偏移銀河の Ly α 表面輝度に対する多重 AGN の影響”. 日本天文学会秋季年会 (弘前大学, オンライン開催, Sept. 8-10, 2020).
76. 高水裕一, 梅村雅之, 矢島秀伸, 安部牧人, and 星詳子. “多次元時系列データの機械学習分類によるガン細胞位置の検出手法開発”. 日本光学会年次学術会議 2020 (Online 開催, Nov. 14-17, 2020).
77. 石原卓, 森中宏樹, 奥住聡, and 梅村雅之. “原始惑星系円盤の高レイノルズ数乱流中でのダスト成長”. 日本天文学会 2021 年春季年会 (オンライン, Mar. 16-19, 2021).

78. 和間雄司. “ISM における AGN ジェットによる乱流駆動”. 天体形成研究会 2020 (筑波大学, Online, Nov. 6-7, 2020).
79. 山本昌平. “原始惑星系円盤における乱流とダスト成長”. 天体形成研究会 2020 (筑波大学, Online, Nov. 6-7, 2020).
80. 吉川耕司. “Vlasov-Poisson Simulation of Cosmological Relic Neutrinos on FUGAKU”. 「富岳で加速する素粒子・原子核・宇宙・惑星」シンポジウム (オンライン, Jan. 28-29, 2021).
81. 吉川耕司. “富岳による宇宙論的ニュートリノの Vlasov シミュレーション”. 日本天文学会 2021 年 春季年会 (オンライン, Mar. 16-19, 2021).

(4) 著書・解説記事等

A) 著書

1. 高水裕一. 時間は逆戻りするのか. 講談社ブルーバックス, July 2020.

B) 記事

1. 森正夫. “銀河同士の大衝突”. *Newton* 別冊宇宙の終わり. ニュートンプレス, Jan. 2021. Chap. 5, pp. 94-103.

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

8. シンポジウム・研究会・スクール等の開催実績

1. 牧野淳一郎, 藤井通子, 富田賢吾, 大須賀健, and 草野完也. 研究会開催: 日本天文学会 2021 年春季年会企画セッション「富岳時代のシミュレーション天文学」(オンライン開催, Mar. 16-17, 2021).
2. 大須賀健, 長尾透, 秦和弘, 矢島秀伸, and 梅村雅之. 研究会開催: 日本天文学会 2020 年秋季年会企画セッション「超巨大ブラックホール研究の新展開: 初撮像から形成進化の全貌解明へ」(弘前大学, オンライン開催, Sept. 9-10, 2020).

3. 宇宙物理理論研究室 M1. 研究会開催：天体形成研究会 2020（筑波大学，オンライン開催，Nov. 6-7, 2020）.

url:<https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2020/11/06/tentaikaisei/>.

4. 梅村雅之，矢島秀伸，長谷川賢二，大内正巳，井上昭雄，et al. 研究会開催：「銀河・銀河間ガス研究会 2020」（オンライン開催，Aug. 3-7, 2020）.
5. 矢島秀伸（SOC）. 研究会開催（国際会議）：「Galaxy Evolution Workshop 2020」（オンライン（ホスト：台湾中央研究院），Feb. 2-5, 2021）.
6. 梅村雅之. 研究会開催：初代星初代銀河研究会 2020（東北大学，オンライン開催，Nov. 16-18, 2020）. url:
<https://sites.google.com/view/fsfg2020/%E3%83%9B%E3%83%BC%E3%83%A0-home?authuser=0>.
7. 福島肇. 分子雲から原始星誕生までを追う 新時代の星形成モデル構築に向けて（オンライン開催）. url: <https://tok339.wixsite.com/clouds2protostars20>.
8. 井上茂樹（SOC）. 研究会開催（国内会議）：国立天文台研究集会「(サブ) ミリ波単一鏡の革新で挑む，天文学の未解決問題」（オンライン，Mar. 29-31, 2021）.

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 計算メディカルサイエンス事業部長
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
プラズマ研究センター 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

計算科学研究センター 共同研究委員会委員

- 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. 大須賀健. コメント掲載, 読売新聞朝刊, ノーベル物理学賞について. Oct. 18, 2020.
2. 大須賀健. コメント掲載, 日経新聞電子版, ノーベル物理学賞について. Oct. 7, 2020.
3. 大須賀健. 日本天文学会代議員.
4. 高水裕一. 朝日カルチャーセンター講演「時間は逆戻りするのか1 量子力学の不思議な世界」. Jan. 23, 2021.
5. 梅村雅之. 釧路市こども遊学館開館 15 周年記念イベント, 天文講演会「宇宙の旅」, オンライン. Aug. 9, 2020.
6. 梅村雅之. 日本天文学会会長.
7. 梅村雅之. 日本天文学会欧文研究報告編集顧問.

11. その他

とくになし

III. 原子核物理研究部門

1. メンバー

教授	中務 孝、矢花一浩（量子物性部門兼務）
講師	橋本幸男
助教	日野原伸生
研究員	温凱、Bharat Kumar (2020.4 転出)
学生	大学院生 5 名、学類生 1 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。これらに関して、大型科研費等の中でこれまで主に他機関の研究者等との協力を行なってきたが、今後はセンター内の部門を超えた協力関係の構築にも努力したい。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を行ってきた。これに関連した JST-ImPACT プロジェクトは 2018 年度で終了しているが、今後も核データの公開と更新を続けて行く予定である。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] 中性子星クラスト構造に対する有限温度平均場アプローチの開発（柏葉（D3）、中務）

対凝縮による核子超流動性を考慮した有限温度ハートレー・フォック・ボゴリューボフ（HFB）計算を、離散化した 3 次元座標空間を基底に取るソルバーの開発を実施した。昨年

度までに、大次元行列の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、その有効性を確かめた。今年度は、このアプローチにおいて必要な代数方程式の解法や、最終的に収束した密度における準粒子状態を求める方法などにさらに改良を施した。シフト法の利用により、多数の異なる複素エネルギー点での代数方程式を一度に解くことができるが、ここにも複数のアルゴリズムを試すことで、COCR (Conjugate Orthogonal Conjugate Residual) 法を採用した。

中性子星の内殻（インナー・クラスト）に対する計算を実行した。この計算により、fcc 相を出発点として中性子の化学ポテンシャルを大きくしていくと、その構造が変化し、穴の空いた板状の原子核（スイス・チーズのような構造）が出現することが予言された。計算によって出現した構造を図 1 に示す。

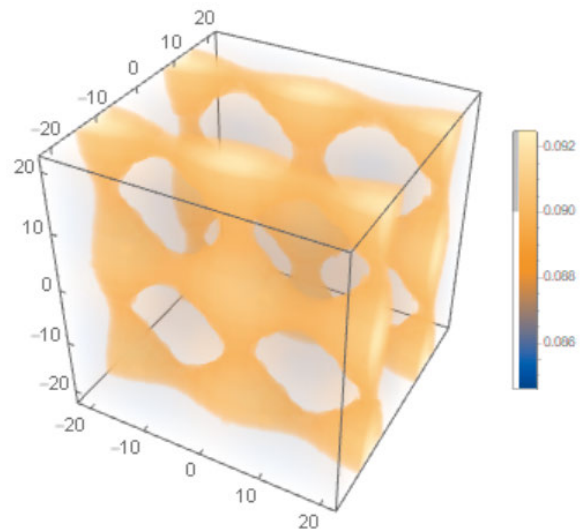


図 1 中性子化学ポテンシャルを $\mu_n = 10 \text{ MeV}$ とした場合の構造。温度 $T = 300 \text{ keV}$ 、計算に用いたセルの大きさは $(45 \text{ fm})^3$ 。

[2] ^{136}Nd 核の高スピン状態における八重極相関 (C. Petrache (サクレー)、中務)

^{136}Nd の高スピン状態の研究が実験的に進められ、特に近年フィンランド・ユバスキラにおけるガンマ線検出器 JUROGAM II を用いた研究により詳細な分光学的研究が実行された。最新の実験データは、大きな角運動量をもつ高スピン状態において、負パリティの回転バンドが正パリティのバンドに遷移することが明らかにされた。通常高スピンにおいては、電気四重極遷移強度が大きいためにバンド内遷移が圧倒的に優勢であり、別のバンドに崩壊することは異常な振る舞いと言える。この実験データを理解するため、回転殻模型に基づく乱雑位相近似計算を実行した。原子核の回転を早めると、八重極相関の強さは一旦小さくなるが、回転角速度が $\omega = 400 \text{ keV}$ を超えると、再び強くなることが計算で示された。これは、基底バンドが構造を変化させて s バンドと呼ばれるバンドに変化することに伴っている (図 2)。この計算結果は、実験で観測された高スピンでのバンド間遷移が、回転にアシストされた八重極相関に起因するという可能性を示唆している。周辺核を含めた広い領域での実験的・理論的研究を現在進めている。

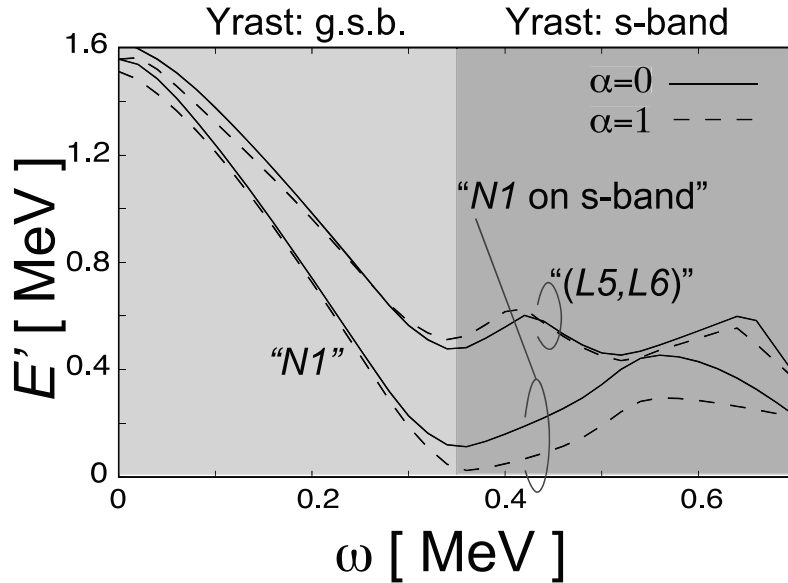


図 2 イラスト・バンド上の八重極振動状態に関する回転殻模型＋準粒子乱雑位相近似計算の結果。回転角速度が $\omega = 0.35$ MeV 付近でイラスト・バンドが構造変化を起こし、振動励起状態の集団性が回復することを示唆している。

[3] ベータ崩壊への pn 対相関効果の解析（阿部（M2）、日野原、中務）

対相関は、核内核子がペアを作ることによってエネルギーを下げる相関であり、通常は同種粒子対（陽子対、中性子対）を考える。しかし、陽子と中性子がほぼ同数の原子核では、これに加えて陽子と中性子が対を作る相関も重要となる。また、r 過程、rp 過程などの元素合成過程において重要な役割を果たすベータ崩壊は、原子核の中性子数・陽子数とその偶奇性を変えることから、対相関はベータ崩壊の性質に影響することが考えられる。本研究では、so(8)模型と呼ばれる模型を用いて、この影響を解析した。アイソスカラー型・アイソベクトル型のすべての s 波対相関を厳密に考慮するモデルとなっている。これまで、中性子数が陽子数よりも大きな原子核では、アイソスカラー型対相関の影響は小さいと考えられてきたが、この解析により、ベータ崩壊に主要な成分であるガモフ・テラー遷移は、アイソスカラー型対相関の強さに敏感であり、その強度を強めることが分かった。

[4] C12 と O20 の衝突におけるポテンシャルエネルギーと超流動性（橋本、晏（北京師範大））

今年度は、炭素 ^{12}C と酸素 ^{20}O の衝突におけるポテンシャルエネルギーについて超流動性の効果を調べる方法を開発してきた。昨年度から開発している密度依存 TDHFB の方法（DCTDHFB）を実際に炭素 ^{12}C と酸素 ^{20}O の融合過程に適用してふたつの原子核の間のポテンシャルエネルギーを求め、特に、対相関テンソルがポテンシャルエネルギーに引き起こす影響を調べてきた。図 3 では、TDHFB による衝突過程での密度変化を再現する “density constrained” のポテンシャル曲線と密度変化を初期状態に固定した “frozen density” のポテン

シャル曲線がほぼ同じ形で表現されている。一方、対相関テンソルも考慮した場合 “density + pairing constrained” の曲線は、距離が 9 fm 以下で浅くなる傾向が見える。今後の計算精度の向上によりポテンシャル曲線を明確にしていく。

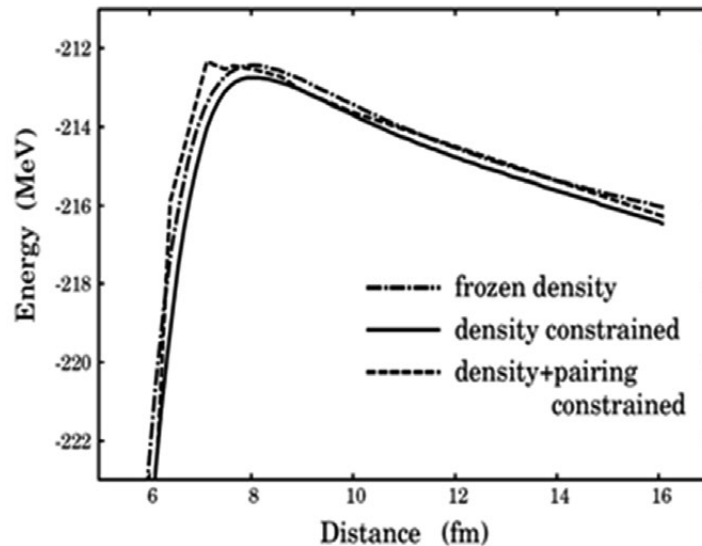


図3 炭素 ^{12}C と酸素 ^{20}O の TDHFB 計算におけるポテンシャル曲線。一点鎖線は固定密度の参照線、実線は TDHFB の密度分布を用いたポテンシャル曲線、破線は対テンソルの効果を入れた場合のポテンシャル曲線。

[5] KIDS 密度汎関数を用いた変形核の計算 (Gil (高麗大), 日野原、Hyun (大邱大), 吉田 (京都大))

核物質の性質を表現できるように低エネルギー少数核子系有効理論に基づいて開発された原子核密度汎関数 KIDS (Korea:IBS-Daegu-Sungkyunkwan) では核物質のほか、球形核についてその有効性が示されてきた。KIDS 密度汎関数を軸対称変形の記述が可能な原子核密度汎関数法計算コード HFBTHO に実装し、 $^{60-160}\text{Nd}$ 同位体の計算を行った。束縛エネルギー、半径、2 中性子分離エネルギー、四重極変形などを系統的に分析し、他の密度汎関数と同程度の精度で変形核も含めてこれらの基底状態での実験データを再現・予言できることを示した。また図 4 のように束縛エネルギーの実験との差は中性子過剰核側に行くにつれて大きくなるが、対称エネルギーの slope parameter の値を変えることによって、実験データとの差の同位体依存性を小さくすることができることを示した。本研究は日中韓フォーサイト事業「21 世紀の原子核物理学」の一環として韓国との共同研究によって進められた。

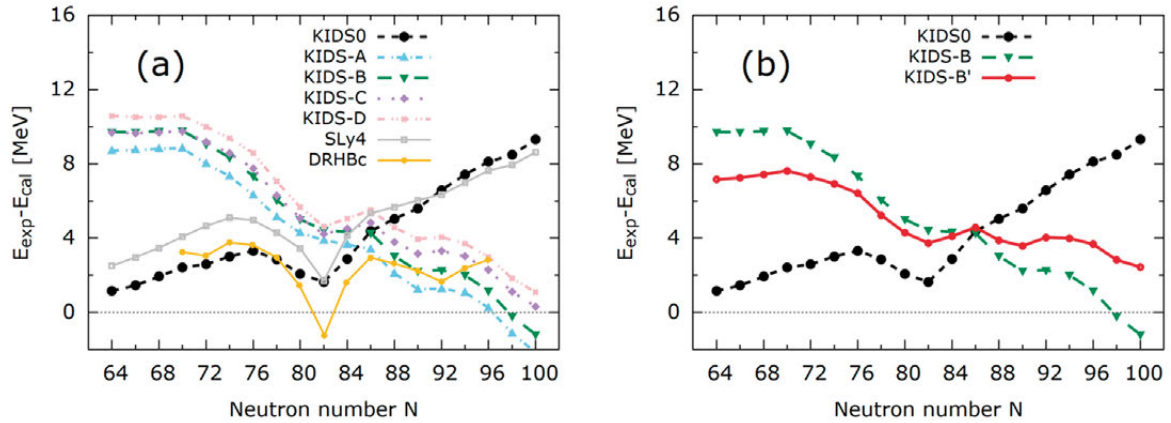


図4 Nd 同位体の基底状態エネルギーの実験値と理論値の差の同位体依存性。KIDS0 の他に核物質の状態方程式パラメータを変えた計算結果も示す。

[6] ニュートリノを2つ放出する二重ベータ崩壊原子核行列要素の有限振幅法による効率的な計算（日野原）

ニュートリノレス二重ベータ崩壊の原子核行列要素の値の精密な評価はマヨラナニュートリノの有効質量を導出する上で重要であるが、この行列要素はアイソスカラー型の中性子—陽子対相関によって強く抑制されるため、この相関の相互作用定数を決定する必要がある。ニュートリノを2つ放出する二重ベータ崩壊は豊富に実験データがあり、ニュートリノの質量と関係するニュートリノレス二重ベータ崩壊と同様にアイソスカラー型の中性子—陽子対相関によって抑制されるため、アイソスカラー型の相互作用の決定に向け、有限振幅法によ

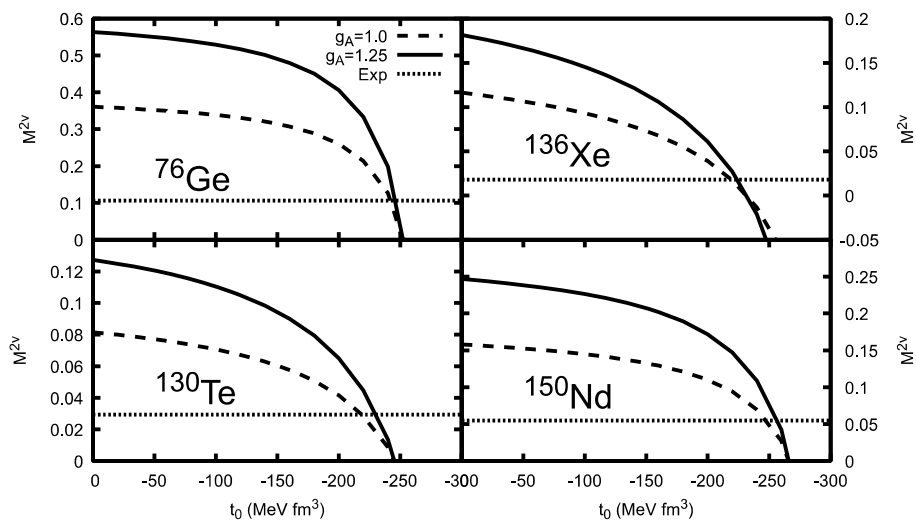


図5 ^{76}Ge , ^{130}Te , ^{136}Xe , ^{150}Nd のニュートリノを2つ放出する二重ベータ崩壊原子核行列要素のアイソスカラー対相関強度依存性。有限振幅法による計算。

って求めた応答関数の二重複素積分によってこの原子核行列要素を効率よく計算する手法の実装を行っている。今年度は現実的なサイズの一粒子模型空間での計算のためのコードの並列化、収束性のよい積分経路の設定および離散化の方法を実装し、 ^{76}Ge , ^{130}Te , ^{136}Xe , ^{150}Nd の二重ベータ崩壊での原子核行列要素の中性子—陽子対相関依存性の先行研究との比較を行った。

[7] Calculation of the microscopically derived collective inertial masses for nuclear reactions in the presence of time-odd mean-field potential and pairing interaction (Wen)

Collective inertial mass coefficients with respect to translational, relative, and rotational motions are microscopically calculated, based on the adiabatic self-consistent collective coordinate (ASCC) method. The impact of the time-odd component of the mean-field potential on the inertial masses are investigated. The results are compared with those calculated with other methods, such as the cranking formulae. The inertial masses based on the ASCC method reproduce the exact total nuclear mass for the translational motion as well as the expected asymptotic values for the relative and rotational motions, regardless of the existence of the time-odd component. On the other hand, the cranking formulae fail to do so when the time-odd components are present. The astrophysical S-factors are calculated with different inertial masses and compared with the conventional results.

At the same time, I was applying the Adiabatic Self-consistent Collective Coordinate (ASCC) method to Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) States, in order to calculate the optimal collective motion path, as well as the collective inertial mass parameters in the presence of pairing interaction, preliminary results have been obtained.

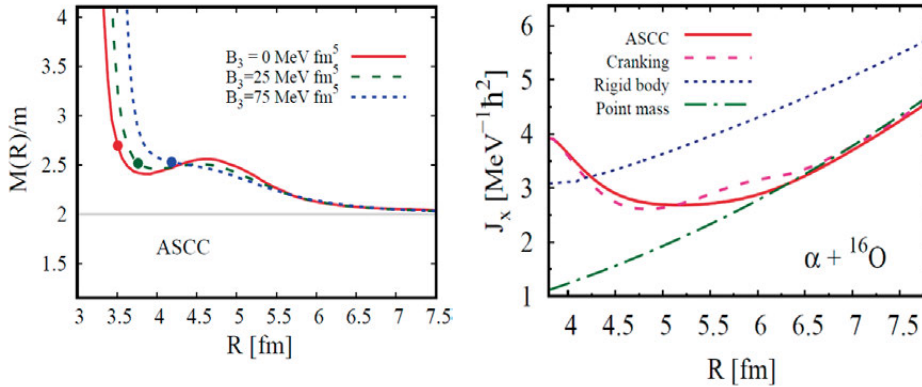


図6 (Left panel) Inertial mass $M(R)$ of relative motion for the reaction $\alpha + \alpha$ as a function of the relative distance R , in the presence of time-odd mean-fields with different strength. (Right panel) Rotational moments of inertias calculated in different ways as a function of relative distance R , for the system $\alpha + ^{16}\text{O}$.

[8] Warm dense matter and cooling of supernovae remnants (Kumar (HBNI), Das (HBNI), Biswal (Xiamen Univ), Kumar (CCS/NIT Rourkela), S.K. Patra (HBNI))

I recently worked with my colleague on “Investigation of the thermal effects on the nuclear matter.” This paper aims to explore the thermal properties of dense matter and the cooling mechanism of supernovae remnants through the direct Urca process. We used RMF formalism as the basic ingredient to obtain the EoS for warm dense matter and the newly born proto-neutron star. The acquired EoS has been used further to explore the various nuclear matter properties. We also extend our calculations to study neutrino emissivity (see Figure 7), responsible for cooling the newly born dense star via the direct Urca process.

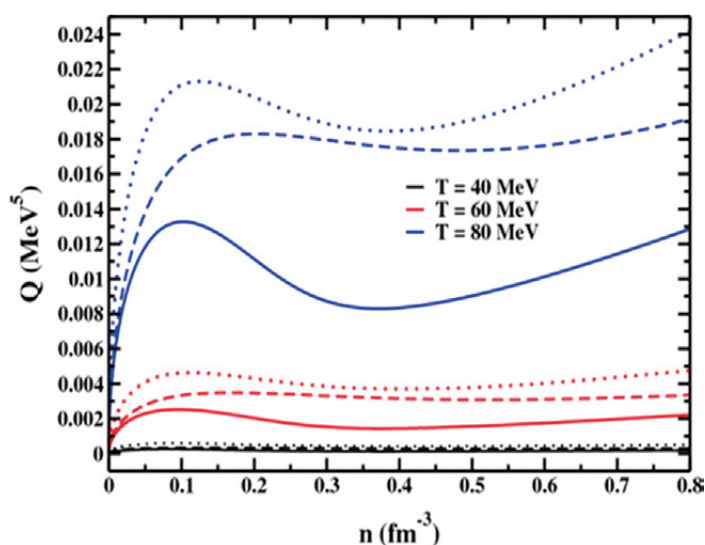


図 7 Neutrino emissivity at different temperatures as a function of nucleon density.

4.教育

学位

1. 阿部克 修士（理学）
ベータ崩壊強度における p-n 対相関の効果
2. 杉浦大航 修士（理学）
1次元周期ポテンシャル模型による高次高調波発生の分析

集中講義など

1. T. Nakatsukasa, “Multi-facet properties of nuclei” (Dec. 1), “Basic concepts of nuclear energy density functional theories” (Dec. 4), Lectures at Peking University, Beijing, China (Online), December 1 & 4, 2020.

5.受賞、外部資金、知的財産権等

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（2020 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（2020 年度直接経費：1,200,000 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. 日本学術振興会科学研究費・基盤研究(C)、日野原 伸生、代表、2020–2023 年、前年度直接経費：3,300,000 円（2020 年度直接経費：900,000 円）、「原子核密度汎関数理論による中性子過剰不安定核の対相関の研究」.
4. 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「地下から解き明かす宇宙の歴史と物質の進化」)(公募研究)、日野原 伸生、代表、2020–2021 年、全年度直接経費：1,800,000 円（2020 年度直接経費：900,000 円）、「有限振幅法を用いた原子核密度汎関数理論による二重ベータ崩壊行列要素計算」.
5. 日本学術振興会科学研究費・国際共同研究加速基金(国際共同研究強化(A))、日野原 伸生、代表、2020–2022 年、全年度直接経費：6,300,000 円、「中性子-陽子対密度汎関数の最適化」.
6. 日本学術振興会科学研究費・若手研究、温 凱、代表、2020–2023 年、全年度直接経費：2,300,000 円（2020 年度直接経費：500,000 円）、「Macroscopic Nuclear Dynamics with Microscopic Foundations」.

6.研究業績

(1) 研究論文

A. 査読付き論文

1. Y. Kashiwaba, T. Nakatsukasa, “Coordinate-space solver for finite-temperature Hartree-Fock-Bogoliubov calculations using the shifted Krylov method”, Phys. Rev. C **101**, 045804 (2020).
2. C.M. Petrache, N. Minkov, T. Nakatsukasa, B. F. Lv, A. Astier, E. Dupont, K. K. Zheng, P. Greenlees, H. Badran, T. Calverley, D. M. Cox, T. Grahn, J. Hilton, R. Julin, S. Juutinen, J. Konki, J. Pakarinen, P. Papadakis, J. Partanen, P. Rahkila, P. Ruotsalainen, M. Sandzelius, J. Saren, C. Scholey, J. Sorri, S. Stolze, J. Uusitalo, B. Cederwall, A. Ertoprak, H. Liu, S. Guo, M. L. Liu, J. G. Wang, X. H. Zhou, I. Kuti, J. Timár, A. Tucholski, J. Srebrny, and C. Andreoiu et al., “Signatures of moderately enhanced octupole correlations at high spin in ^{136}Nd ”, Phys. Rev. C **102**, 014311 (2020).

3. K. Washiyama, N. Hinohara, and T. Nakatsukasa, “Finite-amplitude method for collective inertia in spontaneous fission”, *Phys. Rev. C* **103**, 014306 (2021).
4. T. Nakatsukasa, Y. Kashiwaba, F. Ni, K. Washiyama, K. Wen, N. Hinohara, “Nuclear structure and reaction with quantum shape fluctuation”, *JPS Conf. Proc.* **32**, 010024 (2020).
5. 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* **495**, 4893–4903 (2020).
6. Y. Hashimoto, “Friction coefficient in reaction $^{20}\text{O}+^{20}\text{O}$ by Gogny-TDHFB method”, *INFORMATION* **23**, 233-245 (2020).
7. J. Ha, T. Sumikama, F. Browne, N. Hinohara, A. M. Bruce, S. Choi, I. Nishizuka, S. Nishimura, P. Doornenbal, G. Lorusso, P.-A. Söderström, H. Watanabe, R. Daido, Z. Patel, S. Rice, L. Sinclair, J. Wu, Z. Y. Xu, A. Yagi, H. Baba, N. Chiga, R. Carroll, F. Didierjean, Y. Fang, N. Fukuda, G. Gey, E. Ideguchi, N. Inabe, T. Isobe, D. Kameda, I. Kojouharov, N. Kurz, T. Kubo, S. Lalkovski, Z. Li, R. Lozeva, H. Nishibata, A. Odahara, Zs. Podolyák, P. H. Regan, O. J. Roberts, H. Sakurai, H. Schaffner, G. S. Simpson, H. Suzuki, H. Takeda, M. Tanaka, J. Taprogge, V. Werner, and O. Wieland, “Shape evolution of neutron-rich $^{106,108,110}\text{Mo}$ isotopes in the triaxial degree of freedom”, *Phys. Rev. C* **101**, 044311 (2020) (Editors' Suggestion).
8. Y. Shi, N. Hinohara, and B. Schuetrumpf, “Implementation of nuclear time-dependent density-functional theory and its application to the nuclear isovector electric dipole resonance”, *Phys. Rev. C* **102**, 044325 (2020).
9. A. Kumar, H.C. Das, S.K. Biswal, B. Kumar, S.K. Patra, “Warm dense matter and cooling of supernovae remnants”, *Eur. Phys. J. C* **80**, 775 (2020).
10. 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”, *J. Phys. G* **47** (2020) 095202.
11. G. Scamps, C. Simenel, “Effect of octupole correlations on fission of light nuclei”, *JPS Conf. Proc.* **32**, 010007 (2020).
12. S. Ayik and K. Sekizawa, “Kinetic energy dissipation and fluctuations in strongly-damped heavy-ion collisions within the stochastic mean-field approach”, *Phys. Rev. C* **102**, 064619 (2020).
13. K. Sekizawa and S. Ayik, “Quantal diffusion approach for multinucleon transfer processes in the $^{58,64}\text{Ni}+^{208}\text{Pb}$ reactions: Toward the production of unknown neutron-rich nuclei”, *Phys. Rev. C* **102**, 014620 (2020).
14. H.M. Albers, J. Khuyagbaatar, D.J. Hinde, I.P. Carter, K.J. Cook, M. Dasgupta, Ch.E. Düllmann, K. Eberhardt, D.Y. Jeung, S. Kalkal, B. Kindler, N.R. Lobanov, B. Lommel, C.

Mokry, E. Prasad, D.C. Rafferty, J. Runke, K. Sekizawa, C. Sengupta, C. Simenel, E.C. Simpson, J.F. Smith, P. Thörle-Pospiech, N. Trautmann, K. Vo-Phuoc, J. Walshe, E. Williams, and A. Yakushev, “Zeptosecond contact times for element $Z=120$ synthesis”, Phys. Lett. B **808**, 135626 (2020).

15. K. Washiyama and K. Sekizawa, “TDHF and a macroscopic aspect of low-energy nuclear reactions”, Front. Phys. **8**, 93 (2020).

B. 査読無し論文

なし

(2) 国際会議発表

A. 招待講演

1. K. Yoshida, “Collaborative works on nuclear masses and beta-decay rates toward A3 nuclear-data LIBrary (A3LIB)”, JSPS/NRF/NSFC A3 Foresight Program “Nuclear Physics in the 21st Century” Joint Annual Meeting, Huizhou, Guangzhou, China and Online, Nov. 18 - 19, 2020.
2. K. Yoshida, “The A3LIB program: Microscopic nuclear data for r-process”, KEK workshop on Beta decay, r-process, and related weak-interaction processes, Online, Feb. 19, 2021.

B. 一般講演

1. T. Nakatsukasa, “Quantum dynamics in nuclei and neutron stars”, 12th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba, Japan, October 6, 2020 [代理発表：日野原].
2. N. Hinohara, “Calculation of double-beta decay nuclear matrix elements using QRPA”, 12th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba, Japan, October 6, 2020.

(3) 国内学会・研究会発表

A. 招待講演

1. 日野原伸生、「ニュートリノレス二重ベータ崩壊原子核行列要素計算の現状」、ニュートリノを伴わない二重ベータ崩壊とその周辺、オンライン、2021年2月12、15日(チュートリアル講演).
2. 日野原伸生、「Effect of pairing and deformation on nuclear charge distribution」、ELPH研究会 C028「電子散乱による原子核研究—原子核の電荷密度・陽子・中性子の分布と半径—」、オンライン、2021年3月18、19日.

3. K. Yoshida, “Charge-exchange dipole modes of excitation in neutron-rich nuclei”, RCNP Colloquium / RCNP NEWS Colloquium, Online, Sep. 25, 2020.
4. 吉田賢市、「原子核密度汎関数法の進展：不安定核の集団的・一粒子的運動」KEK 理論センター研究会「原子核・ハドロン物理 2020」、2020 年 10 月 9 日.
5. 吉田賢市、「Resonant collective modes of excitation」、RCNP 研究会「原子核における多様な共鳴現象とそれを探る核反応機構」、2021 年 1 月 18 - 20 日.
6. 関澤一之、「フェルミ粒子系超流動ダイナミクスの数値シミュレーション」、第 76 回日本物理学会年次大会 素粒子論領域・理論核物理領域合同シンポジウム「富岳・ポスト富岳時代の素粒子原子核物理学」、オンライン、2021 年 3 月 12 日.
7. 関澤一之、「時間依存密度汎関数法による原子核ダイナミクスの研究：最近の進展」、KEK 理論センターオンラインミーティング、2020 年 9 月 29 日.

B. その他の発表

1. 中務孝、「Microscopic collective inertial masses in nuclear reaction」、第 3 回クラスター階層領域研究会、オンライン、2020 年 5 月 18 日.
2. 中務孝、「原子核および中性子星における超流動ダイナミクス」、第 7 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会、～「京」から「富岳」へ 新しい HPCI 時代に向けて～、オンライン、2020 年 11 月 29 - 30 日（ポスター発表）.
3. 日野原伸生、「有限振幅法を用いた原子核密度汎関数理論による二重ベータ崩壊行列要素計算」、第 2 回新学術「地下宇宙」領域研究会、オンライン、2020 年 6 月 2 - 3 日.
4. 日野原伸生、「2 ニュートリノ二重ベータ崩壊原子核行列要素を用いたアイソスカラー型対相関結合定数の決定」、日本物理学会 2020 年秋季大会、オンライン、2020 年 9 月 14 - 17 日.
5. 日野原伸生、「原子核密度汎関数法による対振動・対移行反応の記述」、日本物理学会第 76 回年次大会、オンライン、2021 年 3 月 12 - 15 日.
6. 吉田賢市、「Functional-renormalization group for superconducting DFT and the exact form of Kohn--Sham potential」、日本物理学会 2020 年秋季大会、オンライン、2020 年 9 月 14 - 17 日.
7. 吉田賢市、「Charge-exchange dipole excitations: roles of deformation and neutron excess」、日本物理学会第 76 回年次大会、オンライン、2021 年 3 月 12 - 15 日.
8. 関澤一之, G. Wlazłowski, and P. Magierski、「不安定核生成の予言へ向けた時間依存密度汎関数法の拡張とその応用」、第 7 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究

課題成果報告会 ～「京」から「富岳」へ 新しい HPCI 時代に向けて～、オンライン、2020 年 10 月 30 日 (ポスター発表).

9. K. Sekizawa, A. Barresi, A.E. Makowski, B. Tüzemen, M.C. Barton, S. Jin, P. Magierski, G. Wlazłowski, A. Bulgac, K.J. Roche, D.Z. Pęcak, M.J. Tylutki, K. Kobuszewski, I. Stetcu, I. Abdurrahman, G. Scamps, and J. Grineviciute, 「Superfluid Dynamics within Time-Dependent Density Functional Theory」、第 7 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会 ～「京」から「富岳」へ 新しい HPCI 時代に向けて～、オンライン、2020 年 10 月 30 日 (ポスター発表).
10. 関澤一之、小林空高、松尾正之、「時間依存バンド理論による中性子星内殻スラブ相における反エンタレンメント効果」、日本物理学会 2020 年秋季大会、オンライン、2020 年 9 月 14 日.

(4) 著書、解説記事等

1. 橋本幸男、「Quantum Theory of Many-Particle Systems, Nuclear Models」、La Toccata (ラ・トッカータ)、日本物理学会誌 Vol. 75、No.11、pp.709-710 (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)

1. 量子物性部門との密度汎関数理論計算手法に関する協力
特に今年度は Thomas-Fermi 近似計算に関する協力を実施.
2. ニュートリノレス二重ベータ崩壊実験に関する素粒子理論、素粒子・原子核実験分野との連携.

産学官連携

国際連携・国際活動

1. 日中韓フォーサイト事業「21 世紀の原子核物理」2019-2023 (中務).
2. 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).
3. 韓国・高麗大・大邱大と KIDS 密度汎関数を用いた変形核計算の共同研究を日中韓フォーサイト事業「21 世紀の原子核物理」の一環として実施 (日野原).

8.シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. Organizing committee for 12th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba (Online), Japan Oct. 6, 2020 (中務 [Chair]、日野原).

2. Chair of organizing committee for RIBF Users Meeting 2020, Online, Sep. 8-10, 2020 (日野原) .
3. 研究会「ニュートリノを伴わない二重ベータ崩壊とその周辺」を開催、2021 年 2 月 12,15 日(オンライン) (日野原) .

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

理工学群物理学類 学務委員・カリキュラム委員長

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

京都大学基礎物理学研究所・運営協議会委員

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

素粒子論奨学会運営委員・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 (Chair: 2020 年 4 月 - 2022 年 3 月)

日本物理学会理論核物理領域運営委員 (2020 年 10 月 - 2021 年 9 月)

11.その他

海外長期滞在、フィールドワークなど

なし

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
研究員	山田 篤志、山田 俊介、竹内 嵩、廣川 祐太 (~2020.9)、 Arqum Hashmi (~2020.4)、金谷 和至
学生	大学院生 2 名、学類生 2 名
教授	日野 健一 (学内共同研究員、物質工学域) 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、原子分子光科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機構解明、および銅酸化物超伝導体を量子ビットとした量子コンピューターの実現を目指した理論的解明を行っている。

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。SALMON は計算機科学者との協力のもと、来年度より本格稼働が始まる富岳を含む様々なプラットフォームで最適化されている。

国内外の研究機関との共同研究も、特にアト秒科学を始めとして活発に進めている。また佐藤助教は国際テニユアトラック助教としてマックスプランク物質構造動力学研究所に長期滞在し、研究を進めている。

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、佐藤、山田（篤）、竹内、山田（俊）、廣川、朴)

パルス光と物質の相互作用を、物質科学の第一原理計算法の一つである時間依存密度汎関数理論(TDDFT)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 2017 年 6 月に v.0 を公開、同年 11 月に v.1 を公開したが、この時点では、筑波大と分子研で開発を行ってきたコードが内部に共存するものであった。2020 年 7 月に、v.2 を公開した。このバージョンで、コード内部は全面的に書き直され、孤立系(分子・ナノ粒子)から周期系(結晶)まで統一的に扱えるものとなった。これにより、少なくともこの先数年間は安定して SALMON を維持発展させる基盤を整えられた。

2021 年度より、世界一位の能力を持つ「富岳」の稼働が始まるが、SALMON はすでに富岳への対応を十分と進めており、2019 年度末の段階で 10,000 原子を超える物質とパルス光の相互作用の計算が可能であることを示している。また SALMON は、過去に GPU 対応していた時期があったが現在の v.2 は GPU を利用することができない。そこで本年度、コードの維持発展が容易な OpenACC を用いた GPU 化に取り組み、時間発展計算の基本部分に関する GPU 化が完了した。来年度さらに、基底状態計算、スピン軌道力を含んだ計算、及び MPI と GPU を用いたハイブリッドな並列加速計算が可能となるよう、コードの改良を進める計画である。

SALMON の利用促進に向けた取り組みとして、ウェブページの改修を行うとともに利用方法に関するビデオを作成し、YouTube に掲載した。SALMON を普及する活動として、9 月と 3 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 2 月には高度情報科学技術研究機構のサポートのもと大阪大学のスーパーコンピュータを用いてハンズオンチュートリアルを実施した。

【2】グラファイトの非線形光応答(矢花、植本(神戸大工))

グラファイトの単層膜であるグラフェンは光科学の分野でも様々な応用が期待されているが、その可飽和吸収特性はモード同期レーザー素子としてすでにデバイス応用がなされている。またグラファイトを用いた炭素繊維は軽量で高強度な材料となるが加工が難しく、高強度レーザーを用いたレーザー加工が有効である。このような高強度パルスレーザーとグラファイト薄膜(グラフェン多層膜)の相互作用を原子レベルから理解するため、SALMON を用いた解析を行い、その結果を論文に発表した。この研究は、神戸大学の研究者、及び炭素材料の加工や可飽和吸収の応用に関する実験を行っている IHI 社の研究者と共同で行った。

図1に、様々な電場強度とパルス長を持つパルス電場をグラファイトの単位セルに印加した時に起こる電子励起エネルギーを示している。電場強度が $0.01\text{V}/\text{\AA}$ から $1\text{V}/\text{\AA}$ に至る間では、電場から電子へのエネルギー移行がパルス長を長くしても増加しないことがわかる。このようにして、SALMON を用いた第一原理計算により、グラファイトで可飽和吸収が起こる条件を非経験的に特定することに成功した。さらに光電磁場の伝搬と電子ダイナミクスを同時に解き進める計算方法を用いることで、可飽和吸収が起きる際にパルス光が内部まで強度を失わずに到達する様子を示した。このような知見は、炭素素材のレーザー加工の初期過程を理解する上で有益な情報を与えている。

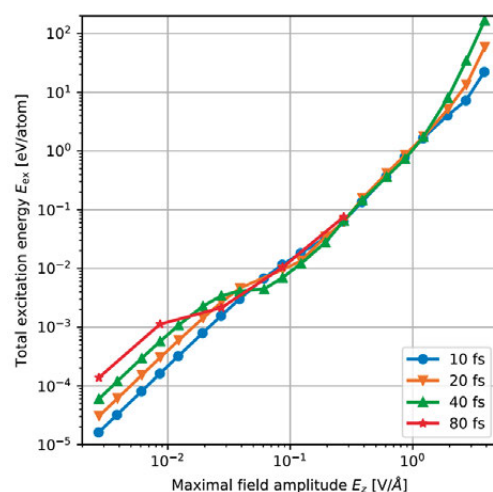


図 1: グラファイト単位セルにパルス

【3】時間依存密度汎関数理論における金属の光応答に対する電子-格子相互作用の影響(山田(篤)、矢花)

TDDFT を用いたこれまでの研究の多くはバンドギャップのある誘電体の光応答であったが、今度はアルミニウム金属に対する研究に着手し、最初の段階としてまず弱い光を用いた線形応答による誘電関数を検討した。通常は完全な結晶構造の系にデルタ関数型の電場を与えて起こる電子ダイナミクスから誘電関数を得るが、金属の $\omega = 0$ eV 周辺の広い幅のスペクトルを再現することができない。金属内の古典電子モデル等によればこれは電子とイオンの衝突に由来しており、誘電関数の再現のためにはその効果を取り入れる必要がある。図 2 に示されているように、温度効果としてイオン配置を結晶構造からランダムに変位させたスーパーセルの系の計算を行うと、 $\omega = 0$ 周辺の幅が再現できることが得られた。結晶構造からのランダムな変位によりバンド間遷移のエネルギーがシフトした不均一広がりによる幅広いスペクトルを再現したためである。これにより TDDFT における電子-格子の相互作用の理解が深まり、その光応答への影響を検証することができた。バンドギャップのある系や光励起後の伝導帯電子に対する計算が進行中であり、これらの比較から電子-格子相互作用の基礎的な議論を展開した。

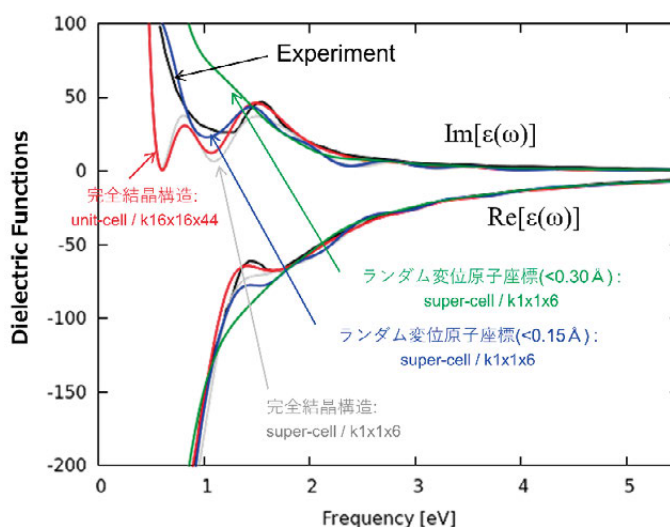


図 2: TDDFT に原子位置の変位（温度効果）を取り入れて計算したアルミニウムの誘電関数

【4】Maxwell+分極力場 MD 法を用いた瞬間誘導ラマン散乱誘起テラヘルツ波発生の解析(山田(篤))

昨年度は、Maxwell 方程式と TDDFT 法とをマルチスケール法の枠組みで融合した SALMON 独自の計算手法のアイデアを、分子科学分野で広く用いられている分子シミュレーションへと技術転用して構築した Maxwell+分極力場 MD 法の開発を行った。これは分子力場ポテンシャルモデルに基づくいわゆる古典 MD(分子動力学)法と Maxwell 方程式(光)とを統合したシミュレーションであり、静電場に対する分子上の電荷分布の再配置(電子分極)を記述することのできる分極力場を応用することにより実現した。今年度は本手法を、有機分子結晶(5,6-dichloro-2-methylbenzimidazole, DCMBI)を用いた瞬間誘導ラマン散

乱（ISRS）誘起のテラヘルツ波発生へと適用し、その分光プロセスの解析を行った。第一原理計算に比べて計算コストが圧倒的に安価であるため、複雑な系に対しテラヘルツ分光のようなピコ秒を超える分光測定の記事が可能になった。本シミュレーションにより、可視光パルスで誘起されるラマン活性のコヒーレントフォノンの発生、赤外活性の分子振動からのテラヘルツ波放射、位相整合条件を満たしたテラヘルツ波の増幅といった一連のプロセスを詳細に記述するとともに、テラヘルツ放射を特徴づける分子運動を明らかにした。これらの解析を通じ本計算手法のテラヘルツ分光での有効性を実証した。

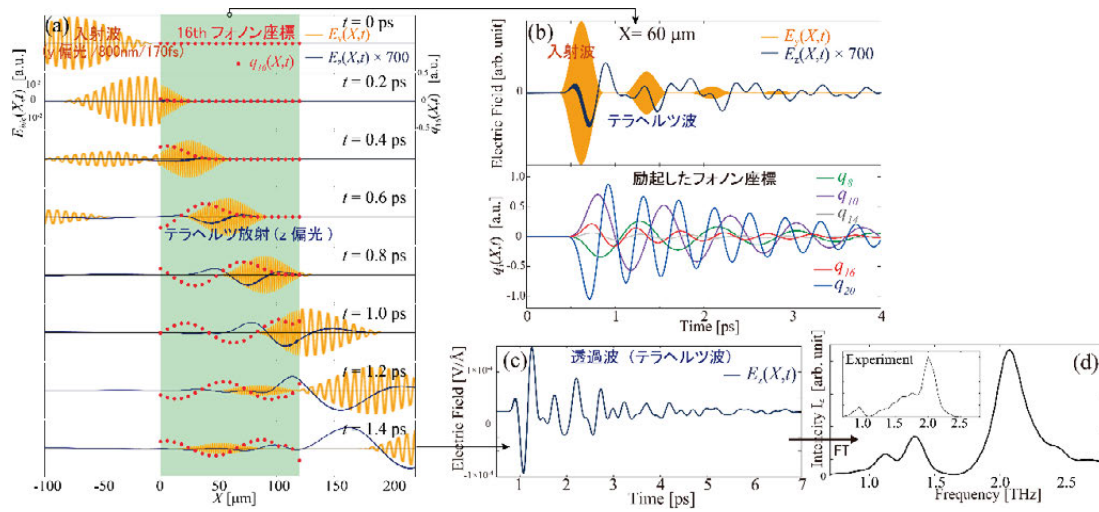


図 3: 誘起テラヘルツ波発生実験のシミュレーション結果: (a) 近赤外入射パルス、テラヘルツ放射波、16 番目のフォノン座標、(b) $X=60\mu\text{m}$ における電場および励起したフォノン座標、(c) 透過波（テラヘルツ波）、(d) (c)のスペクトル（挿入図は実験測定データ）

【5】ナノ薄膜における高次高調波発生の一原理計算（山田（俊）、矢花）

高次高調波発生は、高強度パルス光と物質の相互作用で最も興味深い非線形現象であり、アト秒科学の創生など基礎科学を進展させるとともに、コンパクトな X 線源などへの応用が期待されている。最近 10 年間は、すでに多くの研究がなされている気相物質（原子や分子）に加え、固体や 2 次元薄膜など凝縮系からの高次高調波発生に高い関心が持たれている。高密度な物質である固体からは、高強度な高次高調波の発生が期待されるが、どのような厚さの物質からどの程度の強度の高次高調波が発生するのか、また透過波と反射波に含まれる高次高調波はどのように違うのかといった基本的な性質すら良く理解されていないのが現状である。

我々は SALMON を用いて、最も単純な物質であるシリコンの薄膜からの高次高調波

発生（HHG）の膜厚依存性、特に高次高調波を最大化する膜厚を調べた。³⁾薄膜に高強度パルス光を照射した際に観測される反射波及び透過波に含まれる高次高調波は、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 HHG 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電子状態の表面効果による HHG の変調が顕著になると考えられる。そこで我々は、電子系の表面効果と光伝搬の効果を統一的に記述可能な微視的 Maxwell-TDDFT 法を用いて Si 薄膜の HHG に関する第一原理計算を行った。さらに、表面電子状態の効果や光伝搬の効果を探るため、巨視的 Maxwell-TDDFT 法、Maxwell 方程式に対する 2 次元近似の方法などを用い、結果を比較した。図 4 に、反射波・透過波に含まれる 3 次から 9 次の高次高調波成分の膜厚依存性を示した。表面効果が重要となる膜厚の小さい領域では微視的 Maxwell-TDDFT 法（赤）、膜厚の大きい領域では表面効果を見捨てた巨視的 Maxwell-TDDFT 法（青）を用いている。この膜厚依存性は線形領域での透過率と概ね相関しており、前面・裏面における基本波の強度が反射・透過 HHG の強度を決定していることが明らかになった。また、高次高調波を最大化する膜厚は概ね 2 から 15nm 程度であり、Maxwell 方程式を 2 次元近似する理論を用いて、この高次高調波の強度が最大となる膜厚を、バルク伝導率の値から理解することに成功した。

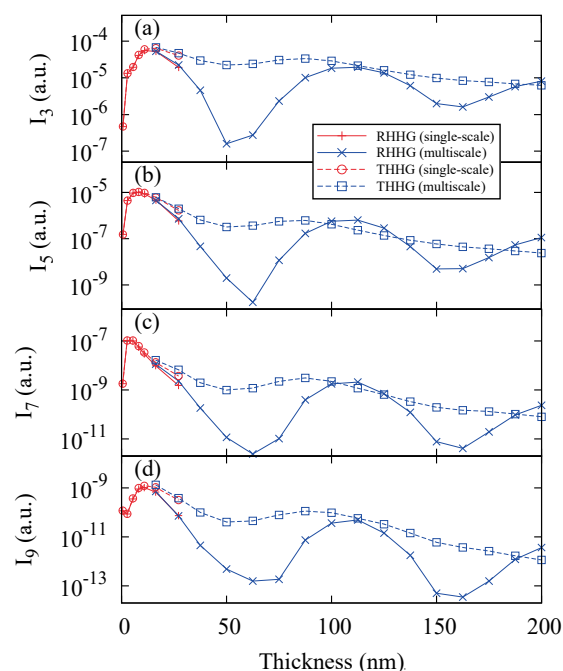


図 4: シリコン薄膜に 1.5eV のパルス光を照射した時に反射波・透過波に発生する高次高調波の膜厚依存性。

【6】アト秒過渡吸収分光における結晶対称性に関する研究（山田（俊）、矢花）

多くの固体におけるアト秒過渡吸収分光ではポンプ光の2倍の振動数に対応する信号が観測されるが、一部の固体ではその他の振動数も確認されている。本研究ではアト秒過渡吸収分光で観測される振動と結晶対称性の関係を明らかにするために、理論的解析と第一原理計算による検証を行った。固体におけるポンプ光照射下の伝導率テンソルを解析した結果、波動関数の結晶対称性に対する依存性が伝導率の振動特性を決定することが明らかになった。特に反転対称性または鏡映対称性を持つ結晶では2倍の振動数となることが予測され、多くの実験結果と整合している。また、N 回回転対称な結晶では円偏光のポンプ光に対して N 倍の振動数の信号が予想されることがわかった。実際にポンプ・プローブ実験を模擬した第一原理計算を 4H-SiC 結晶に対して実施したところ、理論的予測を裏付ける結果が得られた。

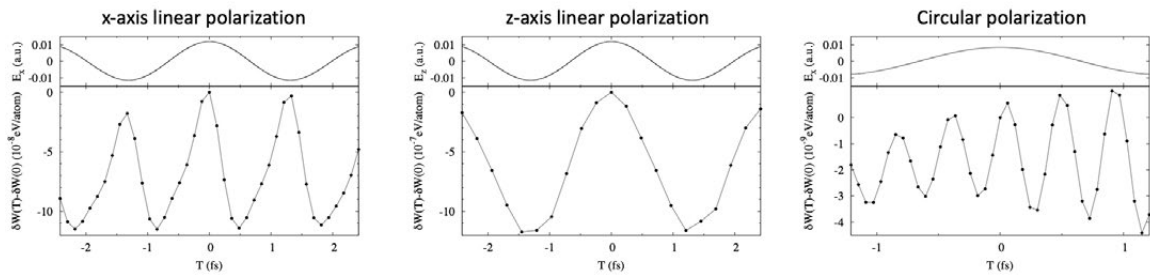


図 5: 4H-SiC における過渡吸収（プローブ光の吸収エネルギー）の第一原理計算。左から順に鏡映対称の場合（直線偏光）、対称性の無い軸の場合（直線偏光）、6 回回転対称の場合（円偏光）に対応している。

【7】サブ nm ギャップを持つプラズモニックメタ表面の非線形光学応答（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。メタ表面を構成する金属ナノ粒子間の距離(ギャップ)を縮めることで、光はギャップに局在して増強し、より特異な光物性を発現する。特にこの 2-3 年、実験系で自己組織化により 1nm 以下(サブ nm)のギャップを持つメタ表面が作成され、高い非線形光学応答の発現から基礎科学的にも応用的にも注目を集めている。しかし一方、このようなサブ nm の空間スケールでは量子力学的効果が顕著に

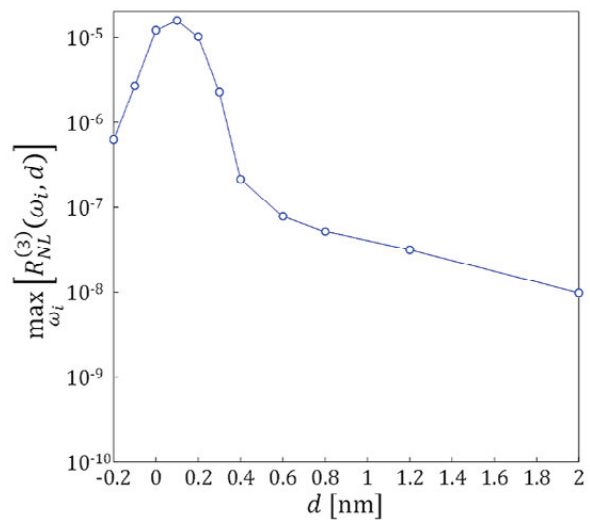


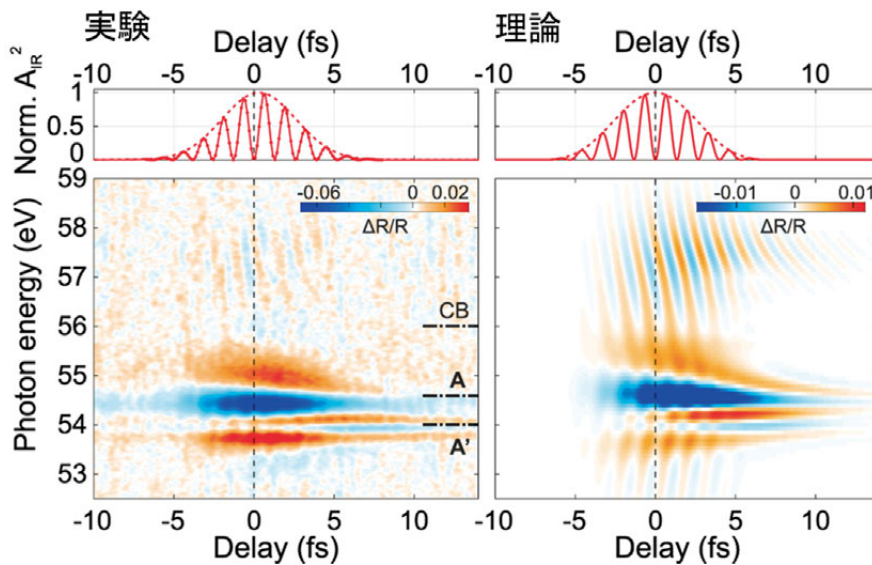
図 6: サブ nm ギャップを持つメタ表面の 3 次非線形反射率

表れ、古典電磁気学だけにに基づく従来の理論計算が破綻する。そのため、サブ nm のギャップを持つメタ表面に対する理論研究は難航しており、その発現する光物性については上記の一部の実験により氷山の一角が明らかにされたのみだった。

そこで我々は SALMON を用い、量子力学的効果がメタ表面の非線形光学応答に及ぼす影響を明らかにした。図 6 では、横軸はギャップ d 、縦軸は 3 次の非線形反射率 $R_{NL}^{(3)}$ を示す。この図より、 $R_{NL}^{(3)}$ はギャップ 0.6nm までは単調増加することが分かる。この増加傾向は、ギャップでの強い光増強に起因するものであり、実験系の先行研究とも定性的に一致する。一方、ギャップ 0.4nm 未満の領域では、 $R_{NL}^{(3)}$ は急激に上昇し、特にピークとなるギャップ 0.1nm では 0.6nm に比べ約千倍高い $R_{NL}^{(3)}$ が得られている。ここでの増加傾向は、ギャップでの光増強だけでは説明できず、金属ナノ粒子間を流れるトンネル電流が持つ高い非線形性に起因する。このような高い非線形効果は、光情報素子の高効率化に役立つため、応用面において大いに期待できる。本成果は国際誌 Scientific Reports 誌に掲載された。

【8】光が誘起する超高速励起子ダイナミクスの理論的解析(佐藤)

我々は、光が固体物質中に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、ミラノ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が固体 MgF_2 に誘起する超高速な励起子のダイナミクスについて調べた。実験では、アト秒過渡反射分光と呼ばれる時間分解分光手法を固体 MgF_2 に適用することで、赤外フェムト秒レーザーが引き起こす反射スペクトルの変化を調べた。実験によって得られた過渡反射スペクトルを図 7(左部)に示した。赤外フェムト秒レーザーが固体 MgF_2 の励起子ピーク(55eV)近傍で超高速に反射スペクトルを変調していることが明らかとなった。さらに、この過渡反射スペクトルを Wannier-Mott 模型に基づく量子ダイナミクス計算により解析したところ(図 1 右部)、光が誘起する励起子ダイナミクスにおいて、(i)励起子の離散エネルギー構造(原子的描像)に由来する比較的遅いフェムト秒の光学応答と(ii)電子-正孔の連続エネルギー構造(固体的描像)に由来するに速いアト秒の光学応答が共存していることが明らかとなった。本研究により明らかとなった励起子ダイナミクスにおける「原子的な描像」と「固体的な描像」の共存は、励起子を光制御するための新しい方法論を示唆するものであり、超高速光物性制御技術の基盤となるものである。本共同研究の成果は、論文”Unravelling the intertwined atomic and bulk nature of localised excitons by attosecond spectroscopy”として Nature Communications 誌より発表された。



Created by modifying “Nat. Commun.12, 1021 (2021)” (Licenced under CC BY 4.0)

図 7: 固体 MgF2 に対するアト秒過渡反射スペクトル。実験に用いられたフェムト秒パルスと誘起された反射スペクトル変化(左図)、及び理論計算結果(右図)が示されている。

【9】 グラフェンからの高次高調波発生 of 理論的解析 (佐藤)

近年、極限的な非線形光学現象として固体からの高次高調波発生が大きな注目を集めている。高調波発生は、光が物質に照射された際に入射した光の光子エネルギーの整数倍のエネルギーを持った光が放出される現象であり、高強度領域においては極限的な光のアップコンバージョン過程として新奇な光源開発の観点から精力的に研究が進められている。本研究では、固体からの高次高調波発生 of 微視的機構を解明するため、中赤外楕円偏光照射下においてグラフェンから発生する高調波を量子マスター方程式に基づく電子ダイナミクス計算により解析した。図 8(a)に、シミュレーションによって得られた 7 次高調波の発生強度の照射光楕円率依存性を示した。その結果、先行研究の実験[N. Yoshikawa, et al., Science 365, 736 (2017)]で報告されている楕円偏光による高調波発生 of 増強を再現することが出来た。さらに理論計算に基づく微視的な解析を行うことで、楕円偏光が引き起こすバンド内遷移とバンド間遷移が非線形に結合することで高次高調波発生 of 増強されていることが明らかとなった。また、グラフェンの化学ポテンシャルを変調することで、バンド内遷移・バンド間遷移の結合によって生じる非線形過程の干渉を制御し、高次高調波発生 of さらに増強できる可能性を理論的に示した(図 8(b))。本研究成果は、固体高次高調波発生 of 微視的機構の理解を発展させるとともに、その新たな増強機構を提案するものである。本共同研究の成果は、論文”High-order harmonic generation in graphene: Nonlinear coupling of intraband and interband transitions”として Physical Review B 誌より発表された。

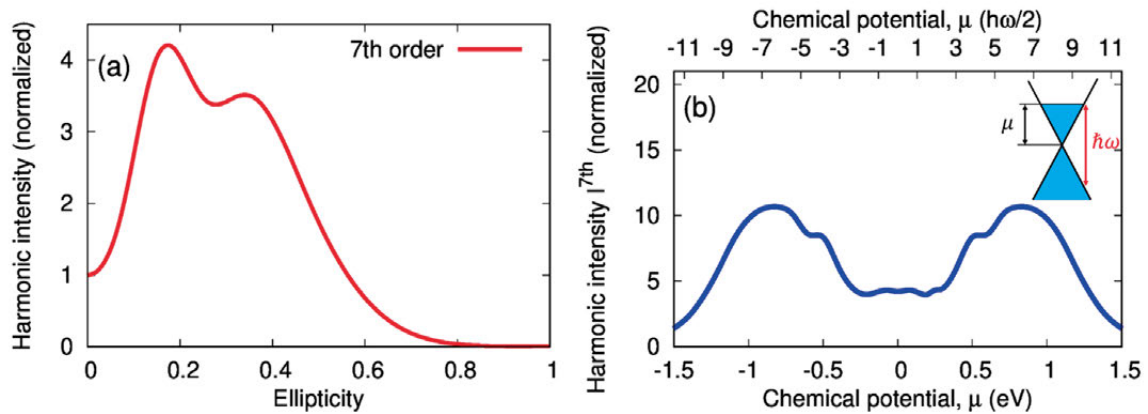


図 8: (a) グラフェンから発生する 7 次高調波強度の励起光楕円率依存性。(b) グラフェンから派生する 7 次高調波の化学ポテンシャル依存性。

【10】銅酸化物高温超伝導の機構解明から新しい超伝導度理論へ（小泉）

1986 年に発見された銅酸化物超伝導は現在の超伝導の標準理論では説明できず、現在もその機構解明が物理学の大問題の一つとして君臨している。銅酸化物超伝導を説明するためには、標準理論を超える理論が必要であるが、これまで問題がないとされてきた標準理論にも、実は、実験と大きな齟齬があることが明らかになってきた。それは、“磁場中で起こる可逆な超伝導-常伝導転移が標準理論では説明できない”という点と“回転している超伝導体内に存在する磁場から求められる電子の質量が自由粒子の質量であるのに対し、標準理論では固体内の有効質量になってしまう”という点である。この 2 つの齟齬は、我々が、銅酸化物超伝導の理論として構築した新しい超伝導理論により解決されることを示した[EPL 131, 37001 (2020); J. Supercond. Nov. Magn. <https://doi.org/10.1007/s10948-021-05827-9>]。

【11】新しい超伝導理論による粒子数を保存するボゴリューボフ・ドジャンヌ方程式の定式化と計算方法の開発（小泉）

新しい超伝導理論は、ベリー接続を超伝導で現れる位相変数とする理論である。現在の標準理論は粒子数を保存しない定式化が必要であるが、この理論では、粒子数を保存する定式化が可能である。この理論は、現在の標準理論を含み、その欠点を克服し、銅酸化物高温超伝導を解明する可能性のある理論である。その理論についてのレビューを発表した[J. Mod.

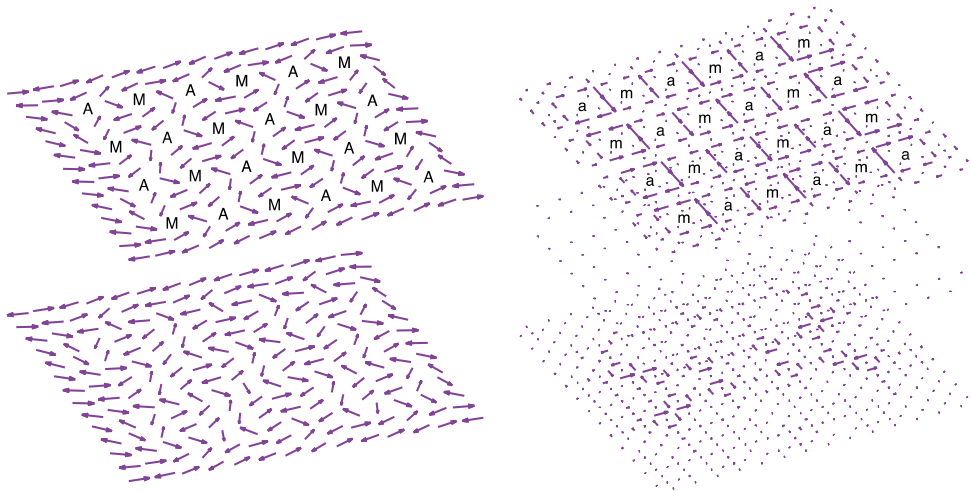


図 9: (左) 銅酸化物に対するバルク-表面 2 層モデルのスピンの図。上がバルク層で下が表面層。表面層のスピンはバルク層に比べて、かなり小さいが、規格化して見やすくしてある。

(右) 2 層モデルのスピントループ誘起ループ電流の図。2 層をつなぐ方向にも電流が生じる。

Phys. B 34, 2030001(2020)]. また、その理論に基づき、粒子数を保存するボゴリューボフ・ドジャンヌ方程式の定式化と計算方法を開発、および計算プログラムの作成を行った。以下にその計算例を示す（図 9）。今後、これを利用し、銅酸化物超伝導の機構解明を進める。

【12】スピントループ誘起ループ電流量子ビットの外部電流による制御（小泉、石川）

銅酸化物高温超伝導体にはナノサイズのループ電流、“スピントループ誘起ループ電流”が CuO_2 面に存在している。このループ電流を量子ビットとする量子コンピューターの実現を目指している。我々は、このループ電流の量子状態は外部電流を使って制御が可能であるという結果を得た。そして、この状態変化を Landau-Zener の非断熱遷移の理論を利用し制御することにより、量子ビットとして使える可能性を見出した。以下にその計算例を示す（図 10）。今後、量子ビットの読み出しを加えていく予定である。

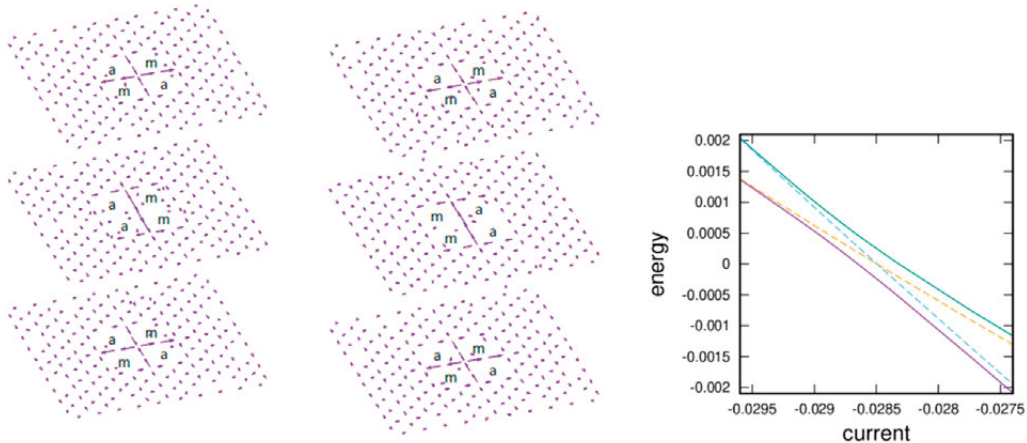


図 10: 3 層モデルで、2 層目のループ電流を量子ビットとして使用。“a”，“m”は、ループ電流の巻数がそれぞれ+1, -1 であることを示している。外部電流により左にある 2 つの状態間の非断熱遷移がおこる。

【13】 強レーザー場における Ar 原子異常な励起過程の研究（全）

強レーザー場中に原子の励起確率はレーザー強度が強くなると、大きくなるのは一般的な理解である。最近の実験で異常な励起過程（励起確率は左図のように、振動している）を観測された。この現象は従来よく使われている強レーザー場の近似で、解釈できないである。その現象解明のために、我々は数値計算で、その現象を再現した（図 11）。さらに、

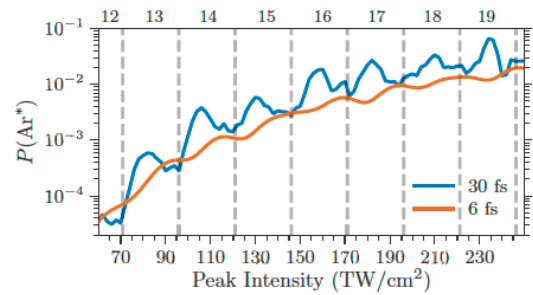


図 11: 全励起確率と強度の関係

最終励起状態を詳しく分析すると、Stark エネルギーの shift による、多光子共鳴の起用を明らかになった。短パルス(6fs)の場合は、レーザー光子エネルギーの分散が幅広いために、多光子共鳴の成分が小さいので、多光子共鳴の起用も少ないためである。計算結果は実験グループと国際共同研究の成果として、Phys. Rev. A に発表した。[Phys. Rev. A 101, 053402 (2020).]

【14】 強レーザー場における原子電離過程中的非双極子効果の研究（全）

強レーザー場における原子電離過程は従来、双極子の近似で説明することができるが、最近、実験で、非双極子の効果も観測された。具体的には図 12 のように、双極子の近似では、レーザー進行方向とその逆方向の光電子の運動量分布が同じである。非双極子を考慮すると、この対称性が破れてしまう。光電子の運動量分布はレーザー進行方向の方が、大きくなっている。計算結果は国際共同研究の成果として、Phys. Rev. Lett. に発表した。[Phys. Rev. Lett. **125**, 073202 (2020).]

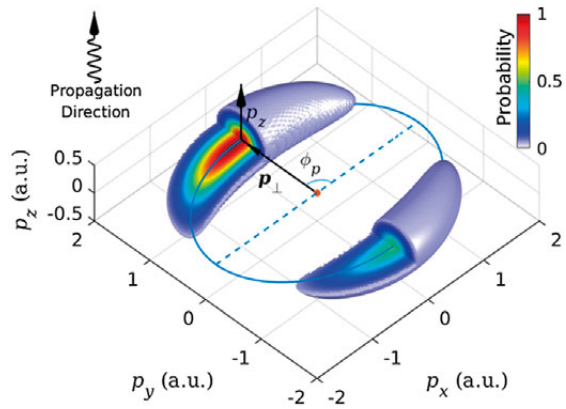


図 12: 楕円偏光強レーザー場の光電子運動量の分布。

【15】 トポロジカル物質におけるレーザー誘起状態の研究（前島）

2次元量子井戸系におけるレーザー誘起トポロジカル状態制御について数値的解析を行った。2次元トポロジカル絶縁体として知られる量子井戸 HgTe/CdTe の電子状態を記述する理

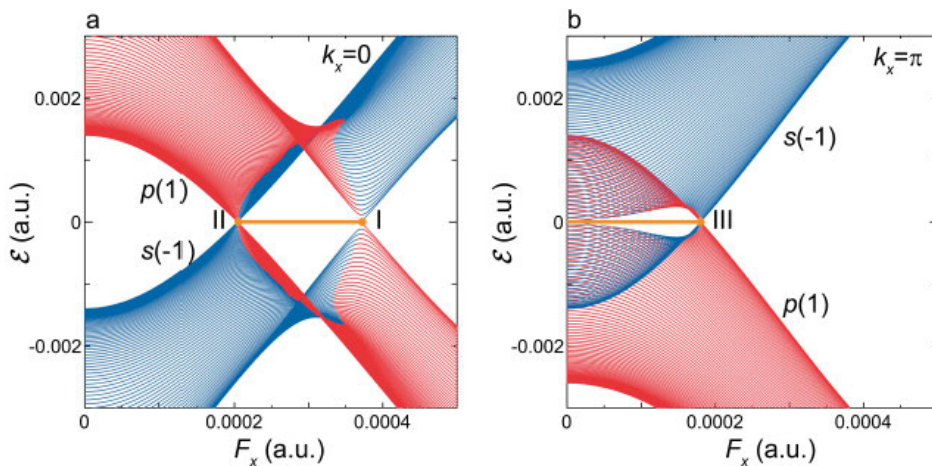


図 13: (a)波数 $k_x=0$ および(b)波数 $k_x=\pi$ におけるフロケバンドのレーザー電場 F_x 依存性

論模型である BHZ 模型に CW レーザーを照射した場合の電子状態・バンド構造をフーリエ・フロケ展開に基づく数値対角化により解析した。その結果、トポロジカルに自明な通常の絶縁体にレーザーを照射しレーザー強度を増加させるとフロケバンド間の準位交差が生じる領域ではレーザー誘起フロケトポロジカル絶縁体状態およびギャップレスなエッジ状態が現れることを見出した(図 13a,b)。また特定のレーザー強度ではギャップが消滅したフロケデ

イラック半金属状態となることも分かった。加えてエッジ状態が出現する波数領域はブリリアンゾーン中の分極分布の zero contour の存在する領域と一致することが分かったほか、さらに同系にスピン軌道相互作用スピン軌道相互作用を導入した模型でも同様の性質が維持されることを示した。

4. 教育

張 博源（博士）Creation of Floquet Dirac semimetals in laser-driven semiconductor quantum wells

石岡 大樹（修士（工学））スピン渦誘起電流モデルによるモンテカルロ法を用いた多層の銅酸化物超伝導体の研究

杉浦 大航（修士（理学））1次元周期ポテンシャル模型による高次高調波発生の分析

松下 宗永（卒業論文）2次元フロケットポロジカル状態に対する Sz 非保存型摂動効果：エッジ状態の解析

永野 史華（卒業論文）2次元フロケットポロジカル状態に対する Sz 非保存型摂動効果：チャーン数の解析

守尾 直輝（卒業論文）銅酸化物高温超伝導体の ARPES スペクトルの理論研究：フェルミアーークとキンク

小杉 怜（卒業論文）銅酸化物高温超伝導体に関する理論研究：フェルミアーークとフェルミポケットについて

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

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（2020 年度直接経費：35,260 千円）
2. 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（2020 年度直接経費：2,170 千円）
3. 共同研究経費、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、2019-2020 年度、全年度直接経費：3,659 千円（2020 年度直接経費：2,750 千円）
4. 科研費基盤（B）「第一原理計算が拓く多元的な極限ナノフォトニクス」、矢花一浩、2020-2023 年度、全年度直接経費：13,400 千円（2020 年度直接経費：4,600 千円）

5. 科研費基盤 (C) 「分光測定を再現する Maxwell 方程式と融合した分子動力学マルチスケール法の開発」、山田篤志、代表、2019–2023 年度、全年度直接経費：2,100 千円 (2020 年度直接経費：400 千円)
6. 科研費若手、佐藤駿丞、代表、2020-2023 年度、全年度直接経費：3,300 千円 (2020 年度直接経費：1,300 千円)

知的財産権

1. 情報処理装置、設計システム、設計方法及びプログラム 2021/2/25 出願 吉田智大、矢花一浩、竹内嵩

6. 研究業績

A) 研究論文

A) 査読付き論文

1. Takashi Takeuchi, Kazuhiro Yabana, "Extremely large third-order nonlinear optical effects caused by electron transport in quantum plasmonic metasurfaces with subnanometer gaps", Scientific Report **10**, 21270 (2020).
2. Shuta Kitade, Atsushi Yamada, Ikki Morichika, Kazuhiro Yabana, Satoshi Ashihara, "Nonlinear Shift in Phonon-Polariton Dispersion on a SiC Surface", ACS Photonics **8**, 152 (2020).
3. Shunsuke Yamada, Kazuhiro Yabana, "Symmetry properties of attosecond transient absorption spectroscopy in crystalline dielectrics", Physical Review **B101**, 165128 (2020).
4. Bárbara Buades, Antonio Picón, Emma Berger, Iker León, Nicola Di Palo, Seth L. Cousin, Caterina Cocchi, Eric Pellegrin, Javier Herrero Martin, Samuel Mañas-Valero, Eugenio Coronado, Thomas Danz, Claudia Drax, Mitsuharu Uemoto, Kazuhiro Yabana, Martin Schultze, Simon Wall, Michael Zürch, Jens Biegert, "Attosecond state-resolved carrier motion in quantum materials probed by soft x-ray XANES", Applied Physical Review **8**, 11408 (2021).
5. Atsushi Yamada, Kazuhiro Yabana, "Modulation of probe signal in coherent phonon detection revisited: Analytical and first-principles computational analyses", Physical Review **B101**, 214313 (2020).
6. M. Uemoto, S. Kurata, N. Kawaguchi, K. Yabana, "First-principles study of ultrafast and nonlinear optical properties of graphite thin films", Physical Review **B103**, 085433 (2021).

7. Atsushi Yamada, "Multiscale simulation of terahertz radiation process in benzimidazole crystal by impulsive stimulated Raman scattering", *The Journal of Chemical Physics* **153**, 244506 (2020).
8. Srijana Bhandari, Atsushi Yamada, Austin Hoskins, Jameson Payne, Huseyin Aksu, Barry D. Dunietz, "Achieving Predictive Description of Negative Differential Resistance in Molecular Junctions Using a Range - Separated Hybrid Functional", *Advanced Theory and Simulations* **4**, 200016 (2020).
9. H. Koizumi, "Possible Occurrence of Superconductivity by the π -flux Dirac String Formation Due to Spin-Twisting Itinerant Motion of Electrons", *Symmetry* **12**, 776 (2020).
10. H. Koizumi, "Reversible superconducting-normal phase transition in a magnetic field and the existence of topologically protected loop currents that appear and disappear without Joule heating", *EPL* **131**, 37001 (2020).
11. H. Koizumi, "London moment, London's superpotential, Nambu-Goldstone mode, and Berry connection from many-body wave functions", *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* (2021) .
12. T. Pauly, A. Bondy, K. R. Hamilton, N. Douguet, X. M. Tong, D. Chetty, and K. Bartschat, "Ellipticity Dependence of Excitation and Ionization of Argon Atoms by Short-Pulse Infrared Radiation", *Physical Review A* **102**, 013116:1-6 (2020).
13. H. C. Ni, S. Brennecke, X. Gao, P. L. He, S. Donsa, I. Brezinova, F. He, J. Wu, M. Lein, X.M. Tong, and J. Burgdorfer, "Theory of Subcycle Linear Momentum Transfer in Strong-Field Tunneling Ionization", *Physical Review Letters* **125**, 073202:1-7 (2020).
14. G.S. Boltaev, R.A. Ganeev, N. A. Abbasi, M. Iqbal, V.V. Kim, H. Al-Harmi, X.M. Tong, and A.S. Alnaser, "Routes to Control Cooper Minimum in High Order Harmonics Generated in Argon Gas", *New Journal of Physics* **22**, 083031:1-9 (2020).
15. D. Chetty, R. D. Glover, B. A. deHarak, X. M. Tong, H. Xu, T. Pauly, N. Smith, K. R. Hamilton, K. Bartschat, J. P. Ziegler, N. Douguet, A. N. Luiten, P. S. Light, I. V. Litvinyuk, and R. T. Sang, "Observation of dynamic Stark resonances in strong-field excitation", *Physical Review A* **101**, 053402 (2020).
16. W.C. Jiang, X.M. Tong, R. Pazourek, S. Nagele, and J. Burgdorfer, "Theory of bound state coherences generated by optical attosecond pulses", *Physical Review A* **101**, 053435 (2020).
17. B. Zhang, N. Maeshima, K. Hino, "Edge states of Floquet-Dirac semimetal in a laser-driven semiconductor quantum-well", *Scientific Reports* **11**, 2952 (2021).

18. Chang-Ming Wang, Nicolas Tancogne-Dejean, Massimo Altarelli, Angel Rubio, and Shunsuke A. Sato, "Role of electron scattering on the high-order harmonic generation from solids", *Physical Review Research* **2**, 033333 (2020).
19. Jiaojian Shi, Edoardo Baldini, Simone Latini, Shunsuke A. Sato, Yaqing Zhang, Brandt C. Pein, Pin-Chun Shen, Jing Kong, Angel Rubio, Nuh Gedik, and Keith A. Nelson, "Room Temperature Terahertz Electroabsorption Modulation by Excitons in Monolayer Transition Metal Dichalcogenides", *Nano Lett* **20**, 5214 (2020).
20. S. A. Sato, U. De Giovannini, S. Aeschlimann, I. Gierz, H. Hübener and A. Rubio, "Floquet states in dissipative open quantum systems", *Journal of Physics B* **53**, 225601 (2020).
21. Yasuyuki Sanari, Hideki Hirori, Tomoko Aharen, Hirokazu Tahara, Yasushi Shinohara, Kenichi L. Ishikawa, Tomohito Otobe, Peiyu Xia, Nobuhisa Ishii, Jiro Itatani, Shunsuke A. Sato, Yoshihiko Kanemitsu, "Role of virtual band population for high harmonic generation in solids", *Physical Review B* **102**, 041125(R) (2020).
22. Umberto De Giovannini, Hannes Hübener, Shunsuke A. Sato, Angel Rubio, "Direct measurement of electron-phonon coupling with time-resolved ARPES", *Physical Review Letter* **125**, 136401 (2020).
23. Dongbin Shin, Shunsuke A. Sato, Hannes Hübener, Umberto De Giovannini, Noejung Park, Angel Rubio, "Dynamical amplification of electric polarization through nonlinear phononics in 2D SnTe", *npj Computational Materials* **6**, 182 (2020).
24. M. Nuske, L. Broers, B. Schulte, G. Jotzu, S. A. Sato, A. Cavalleri, A. Rubio, J. W. McIver, L. Mathey, "Floquet dynamics in light-driven solids", *Physical Review Research* **2**, 043408 (2020).
25. Shunsuke A. Sato, "First-principles calculations for attosecond electron dynamics in solids", *Computational Materials Science*. **194**, 110274 (2020).
26. Shunsuke A. Sato, Hideki Hirori, Yasuyuki Sanari, Yoshihiko Kanemitsu, Angel Rubio, "High-order harmonic generation in graphene: nonlinear coupling of intra and interband transitions", *Physical Review B* **103**, L041408 (2021).
27. Matteo Lucchini, Shunsuke A. Sato, Giacinto D. Lucarelli, Bruno Moio, Giacomo Inzani, Rocío Borrego-Varillas, Fabio Frassetto, Luca Poletto, Hannes Hübener, Umberto De Giovannini, Angel Rubio, Mauro Nisoli, "Unravelling the intertwined atomic and bulk nature of localised excitons by attosecond spectroscopy", *Nature Communications* **12**, 1021 (2021).

28. Kevin Lively, Guillermo Albareda, Shunsuke A. Sato, Aaron Kelly, Angel Rubio, "Simulating Vibronic Spectra without Born-Oppenheimer Surfaces", *The Journal of Physical chemistry Letters* **12**, 3074–3081 (2021).
29. Wandong Yu, Cong-Zhang Gao, Shunsuke A. Sato, Alberto Castro, Angel Rubio, Baoren Wei, "Single and double charge transfer in the Ne^{2++}He collision within time-dependent density-functional theory", *Physical Review A* **103**, 032816 (2021).

B) 査読無し論文

1. S. Yamada, K. Yabana, "Determining the optimum thickness for high harmonic generation from nanoscale thin films: an ab initio computational study", submitted
2. H. Koizumi, A. Ishikawa, "Theory of supercurrent in superconductors", submitted.
3. Dongbin Shin, Simone Latini, Christian Schäfer, Shunsuke A. Sato, Umberto De Giovannini, Hannes Hübener, Angel Rubio, "The quantum paraelectric phase of SrTiO_3 from first principles", submitted.
4. Simone Latini, Dongbin Shin, Shunsuke A. Sato, Christian Schäfer, Umberto De Giovannini, Hannes Hübener, Angel Rubio, "The Ferroelectric Photo-Groundstate of SrTiO_3 : Cavity Materials Engineering", submitted.
5. S. Aeschlimann, S. A. Sato, R. Krause, M. Chávez-Cervantes, U. De Giovannini, H. Hübener, S. Forti, C. Coletti, K. Hanff, K. Rossnagel, A. Rubio, I. Gierz, "On the survival of Floquet-Bloch states in the presence of scattering", submitted.
6. S. A. Sato, A. Rubio, "Nonlinear electric conductivity and light-induced charge transport in graphene", submitted.
7. Kazuhiro Yabana, Atsushi Yamada, Yuta Hirokawa, Shunsuke Yamada, Masashi Noda, Mitsuharu Uemoto, Taisuke Boku, "Large-scale ab initio simulation of light-matter interaction at the atomic scale in Fugaku", submitted

B) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Kazuhiro Yabana, "Performance Evaluation of Electron Dynamics Simulation in Supercomputer Fugaku", 12th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (2020-10/6)
2. Kazuhiro Yabana, "Multi-scale Simulation Method for Ultrafast Electron-Ion Dynamics in Dielectrics", 2020 SSRL/LCLS Users Meeting (2020-10/6)

3. Shunsuke A. Sato, "Real space and real time electron dynamics simulations for attosecond physics in solids", APS March Meeting 2021 (2021-3/16)

B) 一般講演

1. R.T. Sang, D. Chetty, R.G. Glover, B.A. deHarak, X.M. Tong, H.Xu, K Bartschat, N. Douguet, A.N. Luiten, P.S. Light, I.V. Litvinyuk, "Observation of dynamic Stark resonances in strong-field excitation", 51st Annual Meeting of the APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics, Portland, Oregon (online), (2020-6/1-5).
2. C.T.B. Chu, X.M. Tong, S.I. Chu, "Exploration of the Circularly Polarized Attosecond Pulse Generation Mechanisms by Polarization Gating", 51st Annual Meeting of the APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics, Portland, Oregon (online), (2020-6/1-5)
3. P. Ranitovic, C. Hogle, L. Martin, X.M. Tong, K. Ueda, T Miteva, L Cederbaum, H Kapteyn and M Murnane, "Laser-Enabled Control of Interatomic-Coulomb-Decay Dynamics", the 22nd International Conference on Ultrafast Phenomena, (online), (2020-11/16-19)
4. Atsushi Yamada, "Maxwell + Polarizable MD multi-scale simulation for vibrational spectroscopy", 16th, March (2021) APS March Meeting 2021 (online), (2021-3)
5. S. Yamada, K. Yabana, "The most efficient thickness of Si nano film for high-harmonic generation", APS March Meeting 2021, (online), (2021-3)
6. T. Takeuchi, K. Yabana, "Optical properties of plasmonic metasurface with sub-nm gaps - Extremely large third-order nonlinear optical effects caused by electron transports ", APS March Meeting 2021, (online), (2021-3)
7. T. Takeuchi, K. Yabana, "Nonlinear Optical Responses of Plasmonic Meatsurface with Sub-nm Gaps Calculated by TDDFT with Jellium Model", IEEE Photonics Conference, (online), (2020-9)
8. T. Takeuchi, K. Yabana, "Huge 3rd-order Nonlinearity in Plasmonic Metasurface with Sub-nm Gap - Theoretical investigation based on TDDFT with Jellium Model", The 16th international conference on Near-field Optics, Nanophotonics & Related Techniques, (online), (2020-8)
9. Yabana Kazuhiro, Hirokawa Yuta, Yamada Atsushi, Yamada Shunsuke, Noda Masashi, Uemoto Mitsuharu, Boku Taisuke, "Large-Scale Ab Initio Calculation of Ultrafast Dynamics in Thin-Film Dielectrics", The 22nd International Conference on Ultrafast Phenomena, (online), (2020/11/17)

10. Shunsuke Yamada, Kazuhiro Yabana, "Symmetry aspects of attosecond transient absorption spectroscopy in a dielectric crystal", Tu4A.39, The 22nd International Conference on Ultrafast Phenomena, (online), (2020-11/17)

C) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

B) その他の発表

1. 奥村拓馬, 東俊行, D.A. Bennett, P. Caradonna, H.I. Chiu, W.B. Doriese, M.S. Durkin, J.W. Fowler, J.D. Gard, 橋本直, 早川亮大, G.C. Hilton, 一戸悠人, P. Indelicato, 磯部忠昭, 神田聡太郎, 加藤太治, 桂川美穂, 河村成肇, 木野康志, 峰海里, 三宅康博, K.M. Morgan, 二宮和彦, 野田博文, G.C. O'Neil, 岡田信二, 奥津賢一, 大澤崇人, N. Paul, C.D. Reintsema, D.R. Schmidt, 下村浩一郎, P. Strasser, 須田博貴, D.S. Swetz, 高橋忠幸, 武田伸一郎, 竹下聡史, 竜野秀行, X.M. Tong, 上野恭裕, J.N. Ullom, 渡辺伸, 山田真也, "超伝導検出器による金属内ミュオンからの電子特性 X 線の観測", 10pA1-9 日本物理学会秋季大会 (2020-9/8-11)
2. 山田俊介, 矢花一浩, "半導体ナノ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 2020 年秋季大会, オンライン開催, 11pE1-2, (2020-9/9-11)
3. 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ディラック半金属状態", 日本物理学会 2020 年秋季大会, オンライン開催 (2020-9/9-11)
4. 佐藤駿丞, "固体におけるアト秒電子ダイナミクスの理論的研究", 日本物理学会第 2020 年秋季大会, オンライン開催, (2020-9/9-11)
5. 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", 日本物理学会第 2020 年秋季大会, オンライン開催, (2020-9/8-11)
6. 奥村拓馬, 東俊行, D.A. Bennett, P. Caradonna, H.I. Chiu, W.B. Doriese, M.S. Durkin, J.W. Fowler, J.D. Gard, 橋本直, 早川亮大, G.C. Hilton, 一戸悠人, P. Indelicato, 磯部忠昭, 神田聡太郎, 加藤太治, 桂川美穂, 河村成肇, 木野康志, 峰海里, 三宅康博, K.M. Morgan, 二宮和彦, 野田博文, G.C. O'Neil, 岡田信二, 奥津賢一, 大澤崇人, N. Paul, C.D. Reintsema, D.R. Schmidt, 下村浩一郎, P. Strasser, 須田博貴, D.S. Swetz, 高橋忠幸, 武田伸一郎, 竹下聡史, 竜野秀行, X.M. Tong, 上野恭裕, J.N. Ullom, 渡辺伸, 山田真也, "超伝導検出器による金属内ミュオン原子から放出される電子特性 X 線の高分解能分光", 日本原子衝突学会第 45 回年会 (2020-12/8-10)
7. 竹内嵩, 矢花一浩, "ナノ金属球で構成されたメタ表面における 3 次非線形光学効果の増強機構", CREST「次世代フォトニクス」第 5 回領域会議, オンライン開催, (2020-12)

8. 山田篤志, "Maxwell+ 分極力場 MD マルチスケールシミュレーションによる DCMBI 結晶の瞬間誘導ラマン散乱誘起テラヘルツ波発生プロセス", 日本化学学会 第 101 春季年会, オンライン開催, (2021-3)
9. 山田篤志, "Maxwell+ MD マルチスケールシミュレーションによる DCMBI 結晶の瞬間誘導ラマン散乱誘起テラヘルツ波発生プロセス", 日本物理学会第 76 回年次大会, オンライン開催, (2021-3)
10. 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 ―電子輸送に基づく非線形性の増強―", 第 81 回応用物理学会秋季学術講演会, オンライン開催, (2020-9)
11. 山田篤志, "Maxwell+ MD マルチスケールシミュレーションを用いた DCMBI 結晶の瞬間誘導ラマン散乱誘起テラヘルツ波発生過程", 第 34 回分子シミュレーション討論会, オンライン開催, (2020-12/15)
12. 佐藤駿丞, P. Tang, M. A. Sentef, U. De Giovannini, H. Hübener, A. Rubio, “グラフェンにおける光誘起異常 Hall 効果の理論的研究”, 日本物理学会第 76 回年次大会, オンライン開催 (2021-3)

(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. 光科学第一原理ソフトウェア SALMON の開発にあたり、高性能計算システム研究部門の朴教授、額田教授と研究協力を行っている（矢花、他）。
2. 2020 年度 TIA 連携プログラム探索推進事業「かけはし」採択プロジェクト“有機無機スピンエレクトロニクス TIA 連携研究”（代表者：数理物質系, 丸本一弘准教授）の一員として研究協力を行なっている（前島）。

産学官連携

1. 株式会社住友金属鉱山と、SALMON を用いたメタ表面の光応答に関する共同研究を行った（矢花）。

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、マックスプランク量子光学研究所、アリゾナ大学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レーザーによる物質の励起過程に関する共同研究を、ボルドー大学、オーストラリア国立大学の理論研究者と実施している。
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に関する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行っているが、今年度はコロナ禍のため活動が休止していた。
4. 非平衡量子ダイナミクスに関し、マックスプランク物質構造ダイナミクス研究所の理論グループと共同研究を行っている(佐藤)。
5. アト秒科学に関し、チューリッヒ工科大の実験グループと共同研究を行っている(佐藤)。
6. アト秒科学に関し、ミラノ工科大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

9.管理・運営

矢花：副センター長、センター長特別補佐、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室長、共同研究委員会委員、量子物性研究部門長、物理学域運営委員

10.社会貢献・国際貢献

矢花：令和2年度テニュアトラック普及・定着事業委員会委員
卓越研究員事業委員会委員

(プレスリリース)

1. 佐藤駿丞, "東大・京大など、 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbCl}_3$ 単結晶にレーザーパルス照射した際広い波長範囲の光が発生する機構を解明", 日経電子版 (2020/7)
2. 佐藤駿丞, "光と固体の量子力学的な相互作用による新たな光の発生機構を解明-高次高調波光の発生機構の解明に向けた新たな知見", 筑波大学他プレスリリース (2020/7/29)
3. 小泉裕康, "なぜ、超伝導電流は電気抵抗なしで消えるのか? ～磁場中での超伝導-常伝導相転移を説明する新理論～ (2020.12.18 EPL's top 10 most discussed and shared research from 2020 選出) (2020/8/22) 筑波大学広報誌 TSUKU COMM からの研究成果発信
4. 佐藤駿丞, "光が引き起こす励起子のダイナミクスには二つの時間スケールが共存する", TSUKU COMM, vol. 51 (2021/4)

11.その他

とくになし

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
助教	原嶋 庸介 (2021 年 1 月着任)
研究員	三嶋 謙二 (CCS)
研究員	鬼頭-西岡 宏任 (JST-PRESTO) (2020 年 10 月より神戸大学准教授)
研究員	満田 祐樹 (JSPS 特別研究員) (2021 年 4 月より大阪府立大助教)
研究員	Kowit Hengphasatporn (AMED)
研究員	森田 陸離 (CCS)
研究員	宮川 晃一 (新学術領域) (2020 年 10 月着任)
学生	大学院生 5 名 (数理解物質科学研究科後期課程 1 名 (社会人)、前期課程 6 名) 学類生 2 名 (物理学類)、4 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2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】金属タンパク質の酵素反応機構の解明、【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】生体内電子移動反応解析手法の開発、【6】宇宙生命連携、【7】マテリアルズインフォマティクス (企業連携)、【8】機械学習 (異常検知) と分散型分子動力学計算を援用した生体分子レアイベントサンプリング法の開発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)、および国内のスパコンを利用した。また、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、Hengphasatporn、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ことを可能にする Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics (PaCS-MD) および Outlier Flooding (OFLOOD) 法を適用し、その抽出を試みた。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見なして、まず PaCS-MD により透過経路を抽出した。その経路に対して、OFLOOD 法によりより広い空間の探索を行い、PaCS-MD の構造サンプリングを補強した。また、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適用し、膜透過の自由エネルギー計算を実行した。自由エネルギープロファイルにより、テストに用いた分子の膜透過には複数の反応経路があることが見出された。

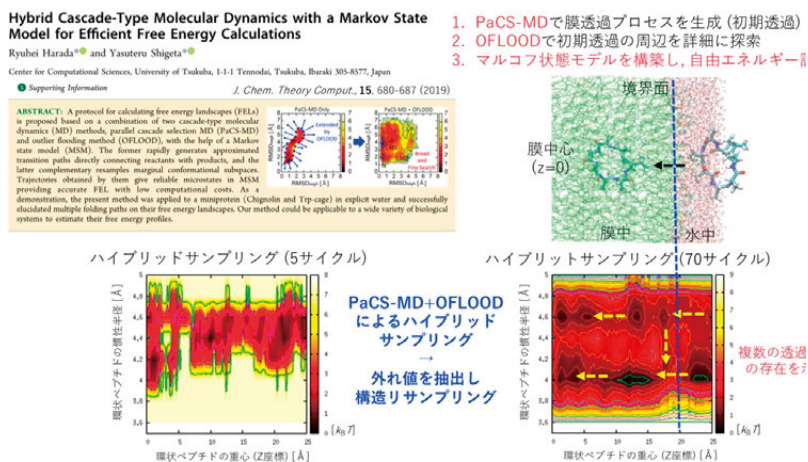


図 1: PaCS-MD+OFLOOD 法に基づく膜透過プロセス抽出

【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、三嶋、宮川)

本研究では大規模電子状態計算（量子化学計算(QM)及び量子古典混合計算法(QM/MM)）を用いて、生体系で重要な働きを担っている系(1)光合成、(2)銅アミン酸化酵素について理論的解明を行う。(1)光合成については、光捕集タンパク質である C-フィコシアニンについての理論解析を進めた。新学術領域高速分子動画像 A01 計画班の梅名泰史先生との共同研究体制により、光励起後の初期構造変化について理論研究を進めた(BCSJ2020)。銅アミン酸化酵素については、大阪医科大学の村川武史先生、阪大産研の岡島俊英先生との共同研究により、高分解能結晶構造解析結果について理論的検証を行い、反応に重要なプロトンの状態や構造揺らぎについて、実験と理論の両アプローチによる解明を進めた(PNAS2020, RSC Adv. 2020)。理論研究により水素や電子の違い 1 つだけでも明確に区別することができた。

単量体サルコシンオキシダーゼ(MSOX)における反応機構については、理論研究で大きな進展が得られた。MSOX はサルコシン(*N*-methylglycine)やアミノ酸を酸化的に分解する役目を担っており、微生物の代謝作用に深く関わっている。様々なアミン酸化酵素の中でも、活性中心にフラビンを持つ MSOX は古くから知られており、産業利用もなされているが、反応機構については不明な点が多かった。特にこれまで、3つの反応機構、(1)single electron transfer(SET), (2)polar, (3)hydride transfer (HT)が提唱されてきたが、基質によって異なる反応機構が妥当とされてきており、その分類も明確ではなかった。以前の我々の QM/MM 計算では、サルコシン基質については HT に類似した HACET 機構であることを明らかにしたが(PCCP2017)、今回、シクロプロピルグリシン(CPG)基質について検討したところ、最有力とされていた SET 機構ではなく、polar 機構である事を解き明かした(PCCP2020)。反応サイクルにおけるエネルギープロファイルを全て解明したのみならず、反応中間体の可視紫外吸収スペクトルも良く帰属することができたので、本理論解析結果は間違い無い。現在、他の重要な酵素系についても共同研究を実施している。個々の酵素系の反応機構を解明する事のみならず、多くの酵素に当てはまる普遍的ルールを見出し、人工触媒の設計まで理論的検討を進展させる。

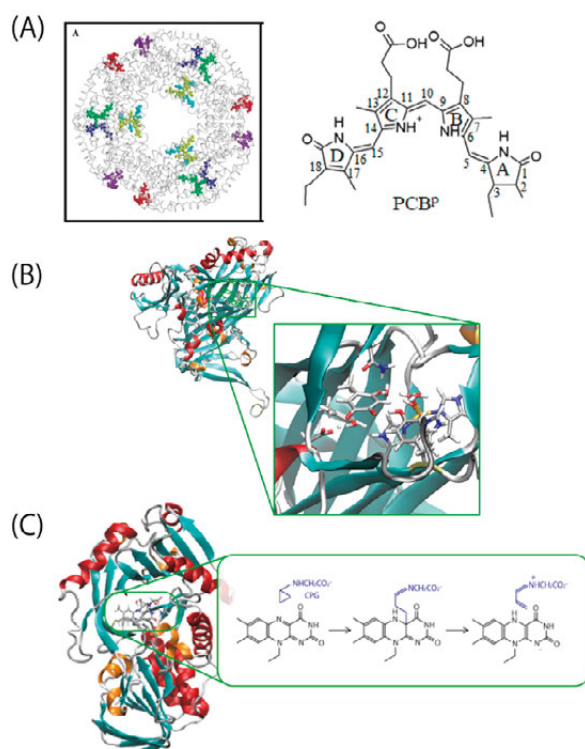


図2 (A)光合成の光捕集を担う C-フィコシアニンにおける光吸収特性、(B)銅含有アミノ酸化酵素のプロトン化状態と構造変化、(C)サルコシンオキシダーゼの反応機構解明。

【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。

これまでに DFTB-MD シミュレーションが正しく統計量を得られる理論であることを示すために、エネルギー保存性の検証を行ってきた。量子化学計算では MD シミュレーションで必要な力として、Hellmann-Feynman 力に加えて Pulay 力がある。この Pulay 力をより正確に求めることによってメタノール 64 分子の計算では、500 ps の間エネルギーを保存させることが示された。しかし、時間刻みを 1.0 fs より大きくするとエネルギーは保存しなくなり、拘束手法などを合わせて用いる必要があることが分かった。

さらに DFTB のパラメーター作成も行った。DFTB のパラメーターは中性の分子を基本として作られており、イオンではあまりよい結果を得られないことが知られている。量子化学計算に基づく MD シミュレーションでは化学反応を取り扱うことが可能であるが、その際に分子からイオンになることも多くこれまでのパラメーターでは取り扱いが不十分である。そこでイオンを取り扱うために、1 つの原子に対して 2 つのパラメーターを用意することで原子とイオンを同時に扱うことを試みた。最初の段階として、酸素アニオンに対してパラメーターを作成する手続きを行い、基底となる関数の作成を行った。図 3 に結果を示す。最外殻の 2p 軌道が原子核に近い側の密度が減り、より遠方まで広がっていることがわかる。この軌道の広がりを利用して、酸素アニオンの電子状態をより正確に行うことができるようになると思われる。

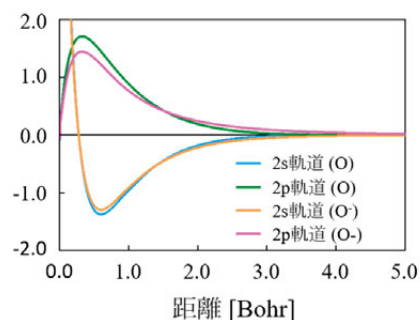
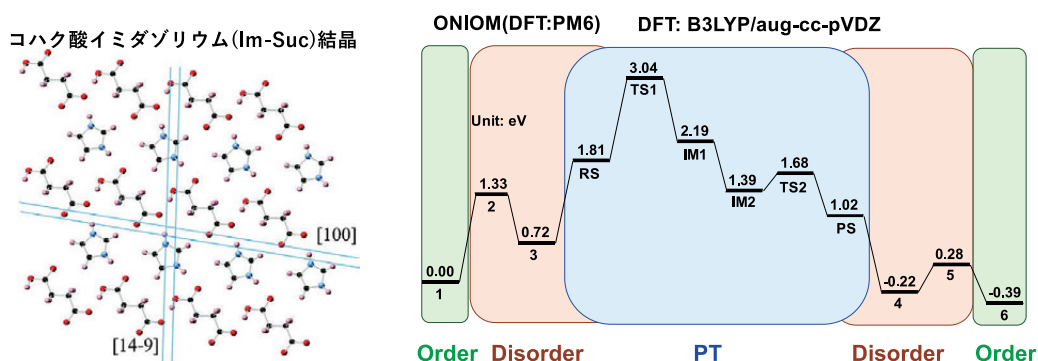


図 3. 酸素原子と酸素アニオンの波動関数

【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)を含む酸塩基高分子複合体(PVPA-xIm)と水素結合性有機結晶(Im-Suc)を取り上げて、その伝導機構の解明に向けた理論解析を行った。分子動力学計算により PVPA-xIm 中の水素結合構造や Im の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。その成果は論文として採択された(Y. Hori, et al., *Chem. Lett.*, 50, 17 (2021); *J. Comp. Chem., Jpn.*, accepted.). また、Im-Suc の結晶構造を用いて、Im の分子運動と分子間プロトン移動(PT)のポテンシャルエネルギーを量子化学計算により求め、プロトン伝導機構について議論した。計算により、Im の PT と分子運動のカップリングによりプロトン伝導が生じることが明らかとなった(図 4)。



[100]軸方向で高いプロトン伝導性を示す 分子間プロトン移動とImの回転運動の結合によりプロトン伝導が発現

図 4(左) コハク酸イミダゾールの結晶構造と(右)プロトン移動反応ダイアグラム

【5】生体内電子移動反応解析手法の開発（鬼頭）

生体内の電子移動(ET)反応は、タンパク質中を電子が長距離トンネル移動することで起こっていることが分かっている。しかし、電子トンネル移動を媒介するタンパク質環境の役割については、未だ明らかになっていない点が多い。その理論研究における課題として、巨大分子であるタンパク質の電子状態を高精度に解く必要性が挙げられる。本研究では、フラグメント分子軌道(FMO)法を用いてタンパク質中の ET 経路を高精度かつ低計算コストで解析する手法の開発を行った。

FMO を用いた ET 計算の性能の妥当性を、Ru 修飾アズリン誘導体のモデルとして、ポリグリシンリンカーによって共有結合的に架橋されたルテニウム

(Ru)と銅(Cu)錯体間の正孔移動のリンカー伸長依存性を検討した。図 5 に、電子移動反応に関わる T1 銅のサイト付近のドナー軌道 ($\text{Cu}(3d_{x^2-y^2})$ と $\text{S}_{\text{Cys}}(3p)$ の $d-\pi$ 混成軌道)、および、Ru のアクセプター軌道 (3つのほぼ縮退する t_{2z} 軌道)を示した。また、サイトエネルギー、 $|T_{\text{DA}}|$ 値も示した。この3つの軌道では、エネルギー的に最も高い t_{2z} 軌道 ($4d_{x^2-y^2}$) が最も大きな $|T_{\text{DA}}|$ 値を示す。これらの結果はより計算負荷の大きな GMH 法をよく再現しており、FMO によって遷移金属を含む巨大タンパク質における電子移動解析を行う上で、極めて有力な計算手法を確立することに成功した。

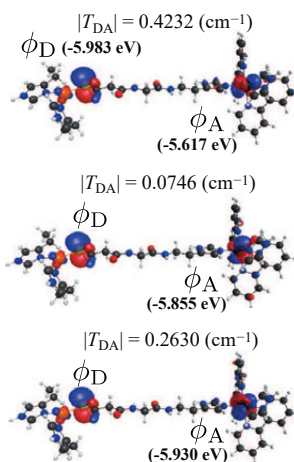


図 5 電子移動に関わる局在軌道と電子カップリングの値

【6】宇宙生命連携（堀、庄司、重田）

生命体の基本分子であるアミノ酸は、実験室で作成すると左巻き(L 型)と右巻き(D 型)が同量生成されるが、地上の生命のアミノ酸は基本的に L 型しか使われていない。これはアミノ酸のホモキラリティと呼ばれており、その発生機構として「宇宙空間での円偏光波による不斉分解」や「キラル増幅過程による異性体過剰生成」が提案されている。

これまでに「いて座 B2 分子雲」で酸化プロピレン($c\text{-C}_3\text{H}_6\text{O}$)というキラル有機分子が星間空間で初めて観測された(*Science*, **352**, 1449 (2016).)。そこで本研究では、円偏光波による不斉分解のシナリオの探求するために、 $c\text{-C}_3\text{H}_6\text{O}$ の生成過程およびその円偏光吸収特性を量子化学計算により調べた。種々の $c\text{-C}_3\text{H}_6\text{O}$ の生成経路を予測し、ポテンシャルエネルギーによる解析からその妥当性を検証した。計算により、エネルギー的に妥当な 2 つの生成経路が明らかとなった。

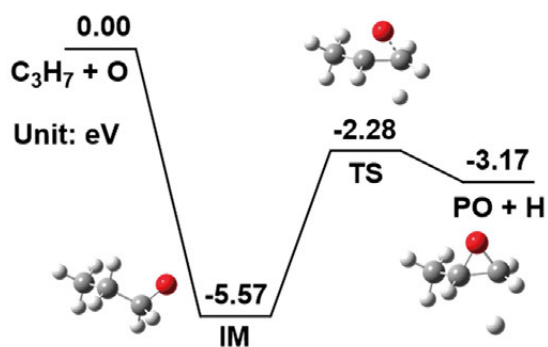


図 6-1: A computed potential energy profile for the formation of propylene oxide by CCSD(T)/6-311++G(d,p) level of theory after the optimization by B3LYP/6-311++G(d,p) level of theory.

その 1 つの生成経路のポテンシャルエネルギーダイアグラムを図 6-1 に示す。さらに、 $c\text{-C}_3\text{H}_6\text{O}$ とその生成過程における前駆体に対する円偏光吸収スペクトル解析から、星形成領域における強い輝線放射である $\text{Ly } \alpha$ 波長(121.6 nm)付近の円偏光に対して、特徴的な吸収特性を示した。したがって、右巻きまたは左巻きのどちらか一方の円偏光領域において、 $c\text{-C}_3\text{H}_6\text{O}$ が異性体過剰を形成する可能性が示唆された。

次に、アミノ酸のキラル増幅機構について注目した。アミノ酸のキラル増幅機構として分晶の結晶成長が提案されている(*Chem. Rev.*, **120**, 4660 (2020).)。そこで本研究では、ラセミ結晶を形成するアラニン(Ala)と分晶を形成するアスパラギン酸(Asp)を取り上げ、各分子クラスターの安定構造とそのエネルギーを量子化学計算により求め、キラル認識の違いについて考察した。Ala と Asp に対して、L-体のみとラセミ体からなる 4 量体クラスターの構造とエネルギーを比較すると、Asp 4 量

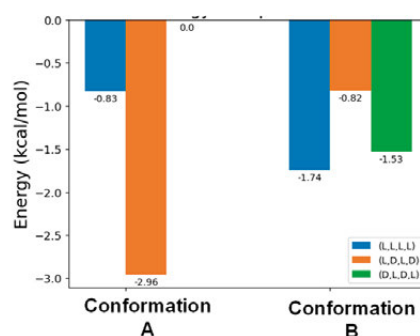


図 6-2: Asp 四量体の各クラスター構造の相対エネルギー

体では L-体クラスターとラセミ体クラスターでエネルギーに有意差が現れた(図 6-2)。各構造を比較すると、Ala と Asp では水素結合の形成様式に違いが見られた。したがって、水素結合の数や強さの差による安定性の違いが分晶とラセミ結晶形成のメカニズムに関与することが示唆された。

【7】マテリアルズインフォマティクスによる半導体組成解析（原嶋、重田）

Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor(MOSFET)はスイッチング素子などに利用される、特に重要な半導体デバイスの 1 つである。MOSFET では半導体の上に酸化絶縁膜が乗せられ、そこにさらに金属電極が接続されている。この酸化絶縁膜および金属電極がゲートとして働き、ここにかかる電圧によってチャネルを流れる電流の ON と OFF が切り替わる

(図 7-a)。MOSFET の性能は酸化絶縁膜に高い誘電率を持つ化合物を用いることで向上する。 HfO_2 および ZrO_2 は高誘電率酸化膜の候補として注目されているが、単斜晶 (monoclinic)、正方晶 (tetragonal)、立方晶 (cubic) など、温度に応じていくつかの結晶構造をとり (図 7-b)、構造によって誘電率が異なるため、その構造の制御が重要な課題となっている。本研究では HfO_2 に不純物 Si を添加した系および ZrO_2 に不純物 Y を添加した系のエネルギーを第一原理計算から求め、構造安定性に対する不純物の効果を調べた。不純物は様々な配置を取るため、超格子中で取りうる各々の不純物配置のエネルギーを計算し、もっとも安定な不純物配置を抽出した。正方晶と単斜晶構造でエネルギーを比較した結果、 HfO_2 中の Si と ZrO_2 中の Y で共に単斜晶構造が安定であることを示した。一方で、不純物濃度を上げると正方晶構造が安定に近づく傾向があることがわかった (図 7-c)。正方晶構造は単斜晶構造より誘電率が高いと予想されているので、これらの不純物が酸化絶縁膜の性能向上に有効である可能性を示唆している。

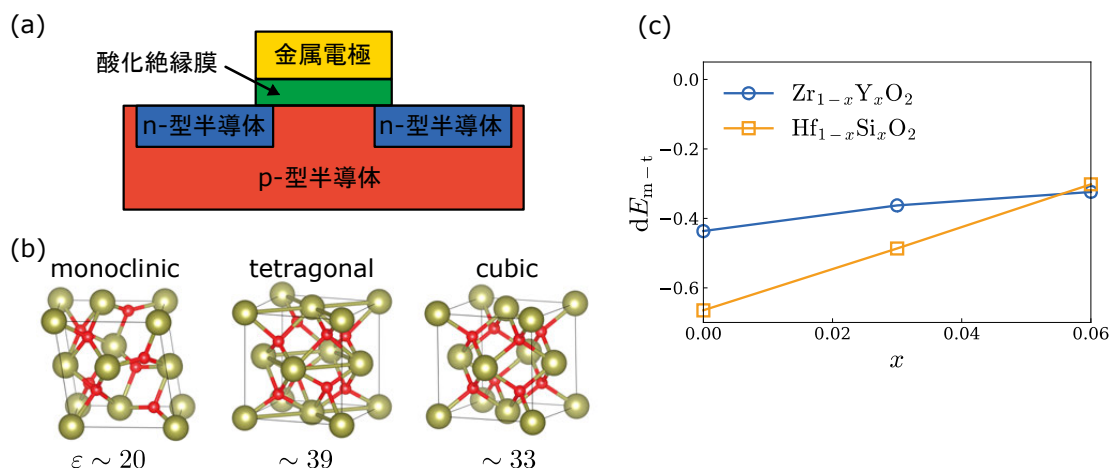


図 7: (a) MOSFET の模式図。(b) HfO_2 の結晶構造の種類とそれぞれの誘電率。(c) 単斜晶と正方晶のエネルギー差の計算結果。横軸は添加した不純物濃度。 ZrO_2 には Y を、 HfO_2 には Si を添加している。

【8】異常検知に基づくレアイベントサンプリング法の開発 (原田、重田)

生体機能を解明するうえで、構造変化の抽出は不可欠である。例えば、フォールディングやアロステリック転移は機能に関係する構造変化であり、マイクロ秒以上の長時間スケールで稀に観測される「レアイベント」である。分子動力学計算 (MD) はフェムト秒スケールの時

間分解能で構造変化を追跡できるが機能発現の時間スケールに到達困難であり、レアイベントを抽出できない。以上より、機能と密接に関係しているレアイベントを抽出する構造変化予測法の開発が望まれている。本研究では、独自開発によるレアイベントサンプリング法の代表例である nt-PaCS-

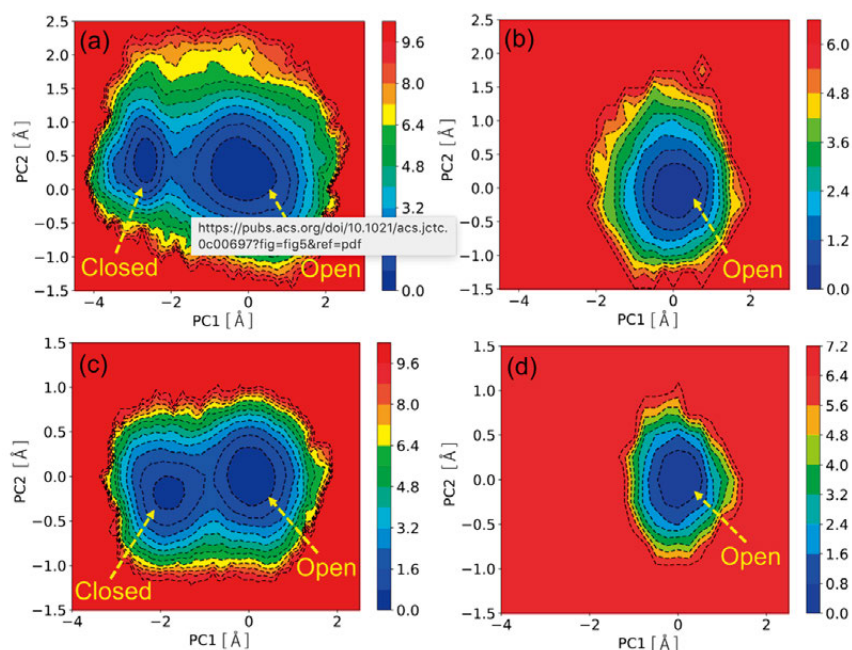


図 8: ad-PaCS-MD に基づき計算した自由エネルギー地形

(a,c) ad-PaCS-MD (b,d)通常の MD

MD を拡張し、出発構造の周囲に存在する準安定構造に向かい構造変化する遷移経路の自動予測に挑戦し、タンパク質の機能解析を進めた。

nt-PaCS-MD は遷移確率が高い初期構造を選択し、短時間 MD を繰り返すことで、遷移先の構造が未知の場合でも遷移経路を予測することができる。しかし、遷移確率が高い重要な初期構造をどうやって特定するかが問題となる。そこで、より汎用的な選択指標を提案した。選択指標の定義にあたり、「構造変化のし易さ」と「構造の異常さ」を機械学習 (異常検知) により対応付け、異常度が高い構造を特定する。その後、nt-PaCS-MD の構造探索サイクルとして「異常度が高い構造 = 遷移確率が高い構造」から短時間 MD を再開する。以上より、nt-PaCS-MD を拡張させ、異常度が高い構造から短時間 MD を繰り返すことで構造遷移を誘起し、構造変化を自動的に予測する anomaly detection PaCS-MD (ad-PaCS-MD)を開発した。異常検知は正常データを事前に学習させておき、入力データの中に異常データが含まれているかを検知するアルゴリズムである。本研究では、入力データとして 構造の距離マップを採用した。距離マップはタンパク質の残基間距離を成分とする行列 (画像データ) であり、ターゲットに依存せず一意的に定義できるため、入力データとして最適である。準備計算として、対象とする出発構造から通常の MD を実行し構造生成後、距離マップを作成し、正常な画像データとして学習させ、異常検知システムを構築する。異常検知システムは、出発構造の近傍構造が示す距離マップと比較し異常度が高い (周囲の準安定構造に向かい遷移し易い) 距離マップを示す異常構造を特定できる。ad-PaCS-MD の各サイクルで異常度の高い構造を特定・

選択し、短時間 MD を再開するサイクルを繰り返すことで、周囲に存在する準安定構造へ自動的に構造遷移させる。

ad-PaCS-MD の性能評価として準安定構造と遷移経路が既に明らかになっているタンパク質に適用し、準安定構造間の構造遷移を予測できるか確認することで有用性を検証した。最初に、タンパク質の大規模ドメイン運動を予測可能か検証した。具体的には、先行研究で既に適用経験のあるタンパク質 (加水分解酵素 T4 リゾチーム・マルトース結合型タンパク質) をターゲットに採用し、Open-Closed 構造遷移を予測可能か検証した。両ターゲット構造に関して遷移先の構造を参照することなく Open-Closed 構造変化を予測することができ、マルコフ状態モデルと合わせた自由エネルギー計算により遷移経路が妥当であることを確かめた。また、計算コストにしてナノ秒オーダーで大規模構造変化を捉えることに成功した。(図 8)

4. 教育

<卒業研究発表>

(物理学類)

工藤玄己 「DNA メチル基転移酵素阻害剤のアイソフォーム選択性の解明」

丸澤賢司 「MPS 法と赤血球ばねモデルを用いた二次元赤血球膜運動シミュレーション」

渡辺七都稀 「L-アミノ酸キラル増幅機構の理論的探究」

(生物学類)

芦田星 「ヒストンシャペロン yNap1 の核外輸送機構への計算科学的アプローチ」

今村彩子 「シナプス足場タンパク質 PSD-95 の局在を調節するメカニズムの計算科学的
研究」

保田拓範 「分子動力学計算で解明する維持メチル化酵素 DNMT1 の活性化メカニズム」

<修士修了研究発表>

(物理学専攻)

柳 昂輝 「環状ジペプチドの溶媒和自由エネルギー計算から見る膜透過性評価」

青柳 司 「分子動力学法を用いた C 末端結合タンパク質(CtBP2) の分子機構解析」

<集中講義>

1. 重田育照、「生物物理学」、4th Sep. 2020、秋田大学大学院工学研究科.
2. 重田育照、「物質基礎科学特殊講義 IV、IX」、21st -26th Jan. 2021、東京大学大学院総合文化研究科.

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 2020 年 12 月 23 日、優秀発表者賞 受賞（ポスター発表）「銅含有アミン酸化酵素のプロトン化状態についての QM/MM 解析」、庄司光男、村川武志、重田育照、林秀行、岡島俊英、量子生命科学会 第二回大会
2. 2020 年 12 月 23 日、優秀発表者賞 受賞（ポスター発表）「酸化型[NiFe]ヒドロゲナーゼの活性中心についての理論的研究」、堀優太、石川航平、庄司光男、重田育照、量子生命科学会 第二回大会
3. 2020 年 10 月 26 日、令和二年度 筑波大学若手教員奨励賞、原田隆平
4. 2021 年 3 月 25 日、令和二年度 筑波大学学長表彰、保田拓範
5. 2021 年 3 月 25 日、令和二年度 筑波大学茗溪会賞、今村彩子
6. 2021 年 3 月 25 日、令和二年度 筑波大学理工学群長賞、丸澤賢司
7. 2021 年 3 月 25 日、令和二年度 筑波大学物理学類長賞、渡辺七都稀

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」公募研究、重田育照、「生体ハイドロジェノミクスの理論解析」(H31-R02)
2. 新学術領域研究「生命金属科学」公募研究、重田育照、「生命金属動体解明のための量子生体エネルギー論」(R02-R03)
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」公募研究、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」(R02-R03)
4. さきがけ(科学技術振興機構; JST) 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」(H31-R03)
5. さきがけ(科学技術振興機構; JST)、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-R02)
6. 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」(H31-R03)
7. 基盤共同研究課題/物質・デバイス領域共同研究拠点、堀 優太(代表)、「プロトン移動共役型スピン転移反応の理論的解析」(R02)
8. 公益財団法人マツダ財団、第 36 回マツダ研究助成、堀 優太(代表)、「無水プロトン伝導材料設計に向けた計算化学による機能解析」(R02-R03)

(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-R02）
2. CREST「自在配列」、重田育照（研究分担者）「3D ドメインスワッピングを利用したタンパク質の自在配列と機能化」 廣田俊（研究代表者）、（R02-R07）
3. 光・量子飛躍フラッグシッププログラム（Q-LEAP）、重田育照（研究分担者）「量子生命技術の創製と医学・生命科学の革新」、（研究代表者）馬場嘉信、（R02-R12）
4. 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）（R01-R05）
5. 東京エレクトロデバイスとの共同研究、重田育照（研究分担者）、櫻井鉄也（研究代表者）（R02-R04（予定））

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. S. Fujimura, K. Mio, M. Kuramochi, H. Sekiguchi, K. Ikezaki, M. Mio, Y. Shigeta, T. Kubo, Y.C. Sasaki, "Agonist and antagonist diverted twisting motions of single TRPV1 channel", *Journal of Physical Chemistry B (Front Cover)* **124**(51), 11617-11624 (2020). DOI:[10.1021/acs.jpcb.0c08250](https://doi.org/10.1021/acs.jpcb.0c08250)
2. Y. Hori, T. Suetake, Y. Shigeta, T. Iida, M. Mizuno, "Molecular Motions of Imidazole in Poly(vinylphosphonic acid)-imidazole Composites Investigated by Molecular Dynamics Simulations", *Chemistry Letters* **50**, 17-20 (2021). DOI:[10.1246/cl.200635](https://doi.org/10.1246/cl.200635)
3. R. Morita, Y. Shigeta, R. Harada, "Random Rearrangements of Water Molecules in Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics Enhance Structural Explorations of Proteins", *Bulletin of Chemical Society of Japan* **94**, 97-105 (2021). DOI:[10.1246/bcsj.20200174](https://doi.org/10.1246/bcsj.20200174)
4. K. Mishima, M. Shoji, Y. Umena, M. Boero, Y. Shigeta, "Roles of the Side-Chain Interactions of C-Phycocyanin Chromophores in the Excited States", *Bulletin of Chemical Society of Japan*, **93**(12), 1509-1519 (2020). DOI:[10.1246/bcsj.20200187](https://doi.org/10.1246/bcsj.20200187)
5. M. Shoji, T. Murakawa, M. Boero, Y. Shigeta, H. Hayashi, K. Tanizawa, T. Okajima, "Unique Protonation State of the Active Site Aspartate and Topaquinone in Copper Amine Oxidase", *RSC Advances*, **10**, 38631-38639 (2020) DOI:[10.1039/D0RA06365G](https://doi.org/10.1039/D0RA06365G)
6. R. Harada, K. Yamaguchi, Y. Shigeta, "Enhanced Conformational Sampling Method Based on Anomaly Detection Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics: ad-PaCS-MD", *Journal of Chemical Theory and Computation* **16**(10), 6716-6725 (2020). DOI:[10.1021/acs.jctc.0c00697](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.0c00697)
7. R. Morita, K. Nakano, Y. Shigeta, R. Harada, "The Molecular Mechanism on the Actin-Binding Domain of the Alpha-Actinin Ain1 Studied by Molecular Dynamics Simulations and

- Mutagenesis Experiments”, *Journal of Physical Chemistry B* **124**(39), 8495-8503 (2020). DOI:[10.1021/acs.jpcc.0c04623](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c04623)
8. S. Boonyasuppayakorn, T. Saelee, P. Visitchanakun, A. Leelahavanichkul, K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, T. N. T. Huynh, J. J. H. Chu, T. Rungrotmongkol, W. Chavasiri, “Dibromopinocembrin and dibromopinostrobin are potential anti-dengue leads with mild animal toxicity”, *Molecules* **25**(18), 4154 (2020). DOI:[10.3390/molecules25184154](https://doi.org/10.3390/molecules25184154)
 9. H. Kitoh-Nishioka, Y. Shigeta, K. Ando, "Tunneling Matrix Element and Tunneling Pathways of Protein Electron Transfer Calculated with a Fragment Molecular Orbital Method", *Journal of Chemical Physics* (**invited article**), **153**, 104104 (2020). DOI:[10.1063/5.0018423](https://doi.org/10.1063/5.0018423)
 10. Y. Haketa, M. Miyasue, Y. Kobayashi, R. Sato, Y. Shigeta, N. Yasuda, N. Tamai, H. Maeda, "Self-Associating Curved π -Electronic Systems with Electron-Donating and Hydrogen-Bonding Properties", *Journal of the American Chemical Society*, **142** (38), 16420–16428 (2020). DOI:[10.1021/jacs.0c07751](https://doi.org/10.1021/jacs.0c07751)
 11. T. Yasuda, Y. Shigeta, R. Harada, "Efficient Conformational Sampling of Collective Motions of Proteins with Principal Component Analysis Based Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics", *Journal of Chemical Information and Modeling*, **60**(8), 4021-4029 (2020). DOI:[10.1021/acs.jcim.0c00580](https://doi.org/10.1021/acs.jcim.0c00580)
 12. M. Shoji, K. Abe, M. Boero, Y. Shigeta, Y. Nishiya, "Reaction Mechanism of N-cyclopropylglycine Oxidation by Monomeric Sarcosine Oxidase", *Physical Chemistry Chemical Physics*, **22**, 16552-16561 (2020). DOI:[10.1039/D0CP01679A](https://doi.org/10.1039/D0CP01679A)
 13. Y. Mitsuta, Y. Shigeta, "Analytical Method Using a Scaled Hypersphere Search for High-Dimensional Metadynamics Simulations", *Journal of Chemical Theory and Computation* **16**(6), 3869-3878 (2020). DOI:[10.1021/acs.jctc.0c00010](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.0c00010)
 14. Y. Ito, M. Kayanuma, Y. Shigeta, J. Fujita, Y. Tanabe, "Understanding of detection mechanisms of hydrogen molecule on three-dimensional bicontinuous nanoporous reduced graphene oxide", *Materials* **13**(10), E2259(12 pages) (2020). DOI:[10.3390/ma13102259](https://doi.org/10.3390/ma13102259)
 15. T. Yasuda, Y. Shigeta, R. Harada, “The Dynamics of S-adenosyl-methionine and S-adenosyl-homo-cysteine in Mouse Dnmt1 is Driven from their Structural Flexibilities”, *Chemistry Letters* **49** (7), 785-788 (2020). DOI:[10.1246/cl.200223](https://doi.org/10.1246/cl.200223)
 16. H. Aida, Y. Shigeta, R. Harada, "Regenerations of Initial Velocities in Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics (PaCS-MD) Enhance the Conformational Transitions of Proteins", *Chemistry Letters* **49** (7), 798-801 (2020). DOI:[10.1246/cl.200196](https://doi.org/10.1246/cl.200196)
 17. T. Murakawa, K. Kurihara, M. Shoji, C. Shibasaki, T. Sunami, T. Tamada, N. Yano, T. Yamada, K. Kusaka, M. Suzuki, Y. Shigeta, R. Kuroki, H. Hayashi, T. Yano, K. Tanizawa, M. Adachi, and T. Okajima, "Neutron crystallography of copper amine oxidase reveals a keto form cofactor and proton sharing", *Proceedings of National Academy of Science U.S.A.* **117**, 10818-10824 (2020). DOI:[10.1073/pnas.1922538117](https://doi.org/10.1073/pnas.1922538117)
 18. B. Nutho, P. Mahalapbutr, K. Hengphasatporn, N.C. Pattarangoon, N. Simanon, Y. Shigeta, S. Hannongbua, T. Rungrotmongkol, "Why are lopinavir and ritonavir effective against the newly emerged Coronavirus 2019?: Atomistic insights into the inhibitory mechanisms", *Biochemistry*, **59**(18), 1769-1779 (2020). DOI:[10.1021/acs.biochem.0c00160](https://doi.org/10.1021/acs.biochem.0c00160)
 19. 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 Method for Predicting Compounds against Dengue Virus-Infected Cell", *Molecules* **25**, 1883 (18pages) (2020). DOI:[10.3390/molecules25081883](https://doi.org/10.3390/molecules25081883)
 20. 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* (**front cover**) **2**, 1561–1568 (2020). DOI:[10.1021/acsapm.9b01222](https://doi.org/10.1021/acsapm.9b01222)
 21. V. Sladek, R. Harada, Y. Shigeta, “Protein Dynamics and Folding Degree”, *Journal of Chemical Information and Modeling* **60**(3), 1559-1567 (2020). DOI:[10.1021/acs.jcim.9b00942](https://doi.org/10.1021/acs.jcim.9b00942)

22. T. Takahashi, R. Harada, Y. Shigeta, "Distribution of Counter Ions in Negatively-charged Lipid/Water/Air Interface: Molecular Dynamics Study", *Chemistry Letters* **49** (4), 361-363(2020). DOI:10.1246/cl.200043
23. 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), 307-310 (2020). DOI:10.1246/cl.190946
24. 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). DOI:10.1039/c9cp05879f
25. H. Kitoh-Nishioka, Y. Shigeta, S. Ito, A. Kimura, "Excitonic Couplings in Helicobacterial Type I Homodimeric Reaction Center", *J. Physical Chemistry B*, **124**, 389-403 (2020). DOI:10.1021/acs.jpcb.9b11290
26. K. Hengphasatporn, A. Garon, P. Wolschann, T. Langer, Y. Shigeta, T. Nguyen Thanh Huynh, W. Chavasiri, T. Saelee, S. Boonyasuppayakorn, T. Rungrotmongkol, "Multiple Virtual Screening Strategies for the Discovery of Novel Compounds Active Against Dengue Virus: A Hit Identification Study", *Scientia Pharmaceutica* **88**(1), 2 (19 pages) (2020). DOI:10.3390/scipharm88010002
27. 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", *Journal of Biochemistry*, **167**, 357-364 (2020). DOI: 10.1093/jb/mvz100
28. T. Nakanishi, Y. Hori, S. Wu, H. Sato, A. Okazawa, N. Kojima, Y. Horie, H. Okajima, A. Sakamoto, Y. Shiota, K. Yoshizawa, O. Sato, "Three-Step Spin State Transition and Hysteretic Proton Transfer in the Crystal of an Iron(II) Hydrazone Complex", *Angewandte Chemie International Edition*, **59**, 14781-14787 (2020). DOI: 10.1002/anie.202006763

B) 査読無し論文

なし

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

M. Shoji, "Recent Progress in the Reaction Mechanism of Water-Splitting in Photosystem II", 70th Conference of Japan Society of Coordination Chemistry, Online 開催, 2020/9/28.

B) 一般講演

なし

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 重田育照, "Covid-19 関連タンパク質に対する統合的インシリコリポジショニング", HPCI オープンセミナー「スーパーコンピュータと COVID-19」, Jan. 19th 2021, Online 開催.

2. 重田育照, "Covid-19 関連タンパク質に対する統合的インシリコリポジショニング", 第9回 JCAHPC セミナー (第4回 OFP 利用活用報告会) 「人類と地球を守るスーパーコンピューティング」, Oct. 15th 2020, Online 開催.
3. 重田育照, 日本生化学会大会、シンポジウム「学際研究で切り拓く脂質とアミノ酸のメタボダイナミズム」、Sep. 15th 2020、Online 開催.
4. 庄司光男、今日から使えるガウシアン(Gaussian), CSJ 化学フェスタ, 2020/10/22.
5. 庄司光男、”QM/MM で見えてきた酵素反応の特徴”、高速分子動画領域会議、兵庫県、淡路市、淡路夢舞台国際会議場, 2020/10/20.
6. 庄司光男、”サルコシンオキシダーゼにおけるシクロプロピルグリシンの反応機構についての理論的解明”、第93回日本生化学会年会, 2020/9/14, Online 開催.
7. 庄司光男、構造探索手法(GLAS)による酵素反応機構の解明、シンポジウム化学反応経路探索のニューフロンティア 2020, 2020/9/13, Online 開催.

B) その他の発表

1. 保田拓範, 重田育照, 原田隆平, “The Analyses of Dynamic Properties of Dnmt1 and Cofactors Based on All-atom Molecular Dynamics Simulations”, 第20回 日本蛋白質科学会 年会 (ポスター発表)
2. 會田勇斗, 重田育照, 原田隆平, “Development of de novo Method for Searching Protein-Ligands Binding Pathway: Ligand-Docking Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics (ld-PaCS-MD)”, 第20回 日本蛋白質科学会 年会 (ポスター発表)
3. Takunori Yasuda, Yasuteru Shigeta, Ryuhei Harada, “Theoretical Analyses on Dynamic Properties of DNA methyltransferase 1 and its Cofactors Based on All-atom Molecular Dynamics Simulations”, 第58回 日本生物物理学会 年会 (ポスター発表)
4. Hayato Aida, Yasuteru Shigeta, Ryuhei Harada, “A Development of Ligand Docking Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics (ld-PaCS MD) and its Applications”, 第58回 日本生物物理学会 年会 (ポスター発表)
5. 原田隆平, 山口孝太, 重田育照, “PaCS-MD と異常検知を援用したレアイベントサンプリング法の開発”, 第34回 分子シミュレーション討論会 (ポスター発表)
6. 森田陸離, 重田育照, 原田隆平, “モーフィングを利用してタンパク質の構造遷移を効率よく評価する”, 第34回 分子シミュレーション討論会 (ポスター発表)
7. 會田勇斗, 重田育照, 原田隆平, “ld-PaCS-MD : PaCS-MD に基づくタンパク質-リガンド結合経路探索”, 第34回 分子シミュレーション討論会 (ポスター発表)

8. 保田拓範, 森田陸離, 重田育照, 原田隆平, “マルチウオーカーの再配置に基づく効率的なタンパク質構造サンプリング法の開発”, 第 34 回 分子シミュレーション討論会 (ポスター発表)
9. 堀優太, 石川航平, 庄司光男, 重田育照, “酸化型[NiFe]ヒドロゲナーゼの活性中心についての理論的研究”, 量子生命科学会 第二回大会 (ポスター発表)
10. 堀優太, 末武鋭也, 井田朋智, 水野元博, 重田育照, “分子動力学計算によるプロトン伝導性 PVPA-xIm 複合体の局所構造と分子ダイナミクス”, 日本化学会 第 101 春季年会 (口頭発表)
11. 堀優太, 末武鋭也, 井田朋智, 水野元博, 重田育照, “プロトン伝導性 PVPA-xIm 複合体の分子ダイナミクス”, 日本コンピュータ化学会 2020 年秋季年会 (口頭発表)

(4) 著書、解説記事等

1. H. Kitoh-Nishioka, R. Sato, Y. Shigeta, K. Ando, “Liner Combination of Molecular Orbitals of Fragments (FMO-LCMO) Method: Its Application to Charge Transfer Studies”, pp. 391-405, in *Recent advances of the fragment molecular orbital method Subtitle: Enhanced performance and applicability*, Ed. Y. Mochizuki, S. Tanaka, and K. Fukuzawa, Springer Japan (2021).
2. T. Tokiwa, S. Nakano, H. Tokiwa, Y. Shigeta, “AnalysisFMO toolkit: PyMOL plugin module to 3D-visualize interaction energies in protein (3D-VIEP) generated by fragment molecular orbital calculation”, pp. 357-370, in *Recent advances of the fragment molecular orbital method Subtitle: Enhanced performance and applicability*, Ed. Y. Mochizuki, S. Tanaka, and K. Fukuzawa, Springer Japan (2021).
3. H. Kitoh-Nishioka, H. Umeda, Y. Shigeta, “Open-Architecture Program of Fragment Molecular Orbital Method for Massive Parallel Computing (OpenFMO) with GPU Acceleration”, pp. 77-90, in *Recent advances of the fragment molecular orbital method Subtitle: Enhanced performance and applicability*, Ed. Y. Mochizuki, S. Tanaka, and K. Fukuzawa, Springer Japan (2021).
4. Y. Hori, T. Abe, “Theoretical Approach to Homogeneous Catalyst of Methane Hydroxylation: Collaboration with Computation and Experiment”, In *Direct Hydroxylation of Methane: Interplay Between Theory and Experiment*, Ed. K. Yoshizawa, Springer, (2020).
5. 堀 優太, 塩田 淑仁, 吉澤 一成, 「(15 章) 計算化学が先導する酵素触媒反応の設計」 CSJ カレントレビュー (37)、高機能性金属錯体が拓く触媒科学—革新的分子変換反応の創出をめざして、日本化学会編、化学同人 (2020 年 4 月刊行)
6. 庄司光男、量子化学計算ビギナーズガイド, 環境技術, 49(6), 45-49, 2020/10/20.

7. 庄司光男、フリーソフトで始める分子モデリング、Amazon Kindle direct publishing, 2020/4/28.

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. 量子科学技術開発機構（QST）との共同研究
2. 東京エレクトロンデバイスとの共同研究

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 庄司光男、「30 年後の夢をかなえる理論化学」、第 101 回日本化学会, Online 開催, 2021/03/21
2. Mitsuo Shoji、12th CCS international Symposium, Session 5 (Life Science, Chemistry) convenor, Online 開催, 2020/10/6.
3. 庄司光男、久保稔、第 58 回生物物理学会、シンポジウム：1S-1 生体機能の分子動画を撮像する革新的アプローチ、高速分子動画共催, Online 開催, 2020/9/16.

9. 管理・運営

重田育照

筑波大学経営改革会議委員、教学デザイン室員、チュートリアル教育タスクフォース委員、理工学群総合政策室会議委員、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生命科学研究部門長、計算科学研究センター広報戦略室室長、拡大物理学専攻運営委員会委員、物理学域理論生命物理グループ長

原田隆平

筑波大学先導的研究者体験プログラム（ARE）運営委員

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（2019-2022）

- ・大阪大学 大学院基礎工学研究科 招聘教授 (2015-)
- ・ポスト K 課題 7 コデザイン WG 主査 (2018-2021)
- ・生物物理学会代議員 (2018-2020)
- ・日本化学会 理論化学・情報化学・計算法学ディビジョンレポート 幹事 (2019-)
- ・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)

原田隆平

- ・分子シミュレーション学会 学会誌「アンサンブル」編集委員 (2020-)

庄司光男

- ・理論化学会 学会誌「フロンティア」編集委員 (2020-)

11. その他

なし

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～9月30日；10月1日付けで山口大学に転出）
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 3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、タンパク質の進化過程で一次配列（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

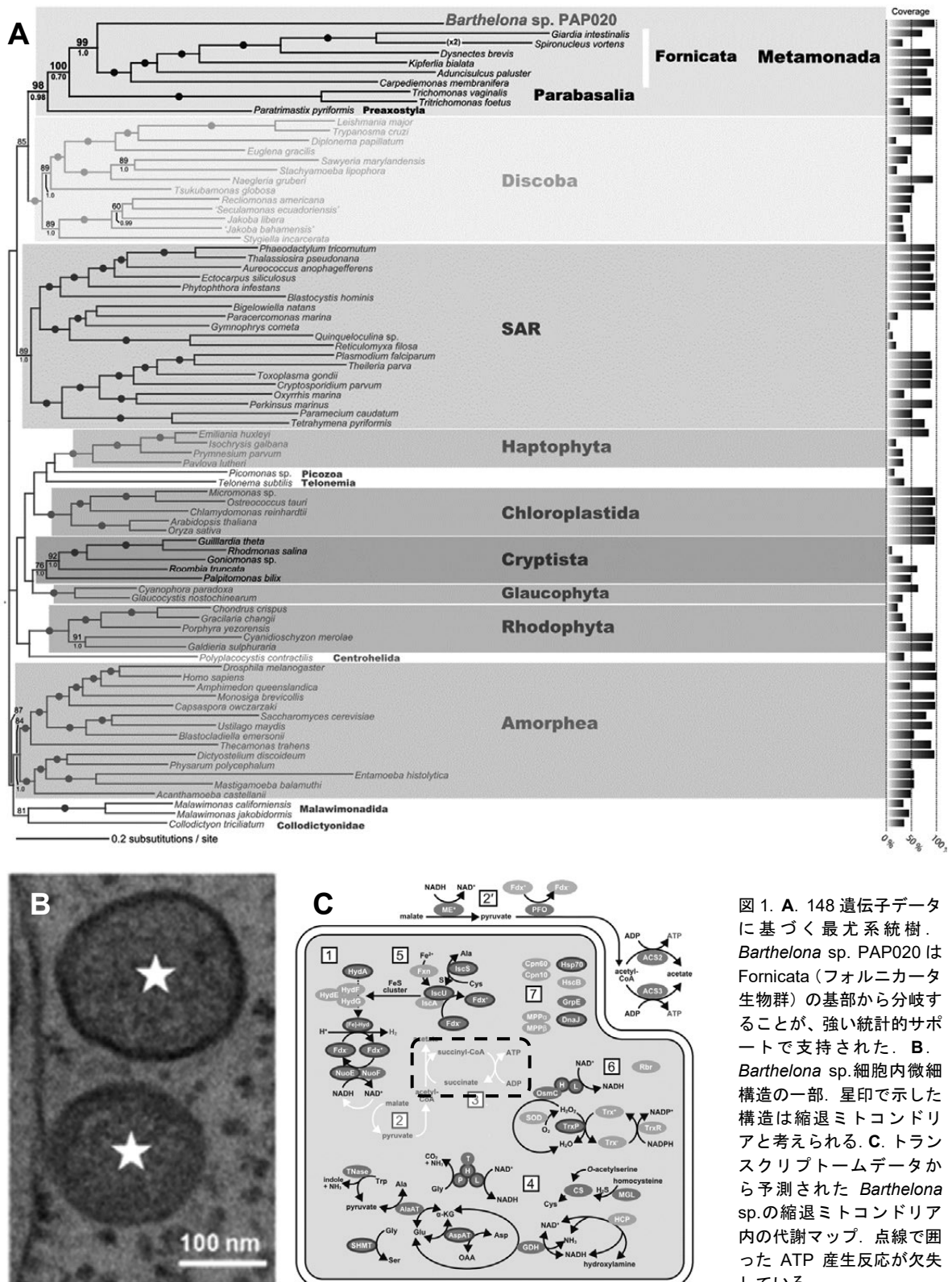
[1] 新奇真核微生物の系統的位置の検討

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*Palpitomoea bilix* の系統的位置の解明（Kamikawa et al. 2014 *Genome Biol Evol* 6:306-315; Yabuki et al. 2014 *Sci Rep* 4:4641）、③キネトプラスト類内部の系統関係の解明（Yazaki et al. 2016 *Genes Genet*

Syst 92:35-42)、④フォルニカータ生物群内部の系統関係の解明 (Leger et al. 2017 *Nat Ecol Evol* 1:0092)、⑤“CRuMs クレード”の提案 (Brown et al. 2018 *Genome Biol Evol* 10:427-433)、⑥渦鞭毛藻内部系統関係の解明 (Sarai et al. 2020 *Proc Nat Acad Sci USA* 117:5364-5375)、⑦真核微生物バルセロナ類 (PAP020 株を含む) の系統的位置の解明 (Yazaki et al. 2020 *Proc R Sci B* 287:20201538)、⑧アピコンプレクサ門グレガリン類内部系統関係の解明を行った (Yazaki et al. 2021 *Parasitol Internat* in press)。SRT308 株 (2016 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)。2018-2019 年度では 338 遺伝子データの系統解析により *Microheliella maris* が本生物がクリプチスタ生物群の基部に位置すること、*M. maris* とクリプチスタ生物が一次植物類と近縁関係にあることが明らかになったが、これらの結果について現在論文を執筆中である。

148 遺伝子データに基づく *Barthelona* sp. PAP020 の系統的位置の検討

我々は、これまで光学顕微鏡による研究の対象にしかなかったバルセロナ類の系統的位置を検討した。まず、バルセロナ類を地理的に離れた複数地点から単離し 5 つの培養株を確立した。そのうちの 1 株である PAP020 株から網羅的転写物データを取得し、大規模分子系統解析を行った。その結果、PAP020 株はフォルニカータ類の基部から分岐することが高い統計的支持のもと推測された。この結果は 2015 年度年次報告書に報告した結果と同一であるが、図 1A に最終的な 148 遺伝子データに基づく Phylogenomic 解析の結果を示した。また投稿論文ではトランスクリプトームデータに基づき、PAP020 株の縮退ミトコンドリア (mitochondrion-related organelle/MRO) の代謝機能を推測した。バルセロナ類の電子顕微鏡観察によると、細胞内に MRO が認められた (図 1B)。そこで転写物データを基に PAP020 株 MRO に局在する代謝経路を予測したところ、この MRO 内部にはピルビン酸の合成する malic enzyme/ME とそれに続く基質レベルのリン酸化による ATP 産生に必要な酵素 (acetate:succinate CoA transferase/ASCT および succinyl-CoA synthase/SCS) をコードする転写物が検出できなかった (図 1C)。従ってバルセロナ類は MRO で ATP 産生を二次的に失い、細胞質に局在する酵素が産生する ATP に依存していると考えられる。一方、細胞質中で ATP 合成を行う acetyl-CoA synthase/ACS が 2 種類発見された。これらの知見を総合し、フォルニカータ生物群の進化において、MRO における基質レベルのリン酸化は独立に少なくとも 2 回欠失したと提唱した。上記の研究はカナダ Dalhousie 大学の Alastair G. B. Simpson 教授の研究グループとの共同研究である。



73 遺伝子データに基づく節足動物に感染するグレガリン類の系統的位置の検討と縮退色素体の進化

アピコンプレクサ門に所属する大多数の生物種は寄生性であり、その一部はヒト・家畜に深刻な病原性をもつため盛んに研究されてきた。一方アピコンプレクサ門は二次的な光合成の欠失とそれに伴う進化の研究対象となってきた。真核生物大系統と生活様式に基づく、現存するアピコンプレクサ生物は光合成能力を失った色素体をもつ共通祖先をもつと推測されている。アピコンプレクサ生物はヒトや家畜をふくむ脊椎動物だけではなく無脊椎動物にも感染するが、公衆衛生的・産業的重要性が低い後者に対する研究は遅れている。グレガリン類は系統的に広い無脊椎動物に感染するアピコンプレクサ生物であり、近年の研究により一部のグレガリン類には非光合成性色素体が存在すると考えられている。本研究では 3 種の節足動物、すなわちセスジアカムカデ、キシヤヤスデおよびヤケヤスデの消化管中からグレガリン様細胞（GLO）を単離し、トランスクリプトーム解析を行った（図 2）。



図 2. 左から、セスジアカムカデ、キシヤヤスデ、ヤケヤスデの消化管中から単離されたグレガリン様生物。スケールバーは 50 μm 。

3 種の GLO についてトランスクリプトーム解析を行い、それらのデータをもとに 73 遺伝子データから構成される Phylogenomic アライメントを作成した。この Phylogenomic アライメントを最尤法とベイズ法により系統解析したところ、3 種の GLO はともにグレガリン、とくに eugregarines であることが明らかとなった（図 3A）。長野県で採集されたキシヤヤスデに感染していたグレガリンと、パラオ共和国で採集されたヤケヤスデに感染していたグレガリンは互いに最も近縁と推測された。一方ムカデ感染性グレガリンと 2 種のヤスデ感染性グレガリンは系統的に近縁とはならなかった。

グレガリンをふくむアピコンプレクサ生物は非光合成性色素体をもつ共通祖先をもつと考えられる。実際、これまで研究されたグレガリンの一部では色素体が残存していると提案されており、その根拠の 1 つはグレガリンのトランスクリプトームデータ中に検出された葉緑体で働くと考えられる代謝系酵素遺伝子である。通常光合成性色素体をもつ真核生物では、色素体で働く各種タンパク質の大多数は核ゲノムにコードされている。これらの色素体関連タンパク質は核ゲノムから転写され細胞質で翻訳された後、細胞質から葉緑体に輸送される。このような核ゲノムコード色素体局在タンパク質は、光合成のほかにイソプレノイド合成、ヘム合成、脂肪酸合成にかかわることが知られている。アピコンプレクサ生物のうちマラリア原虫やトキソプラズマ原虫の研究により、これらの生物が持つ色素体は光合成能を失っているが、イソプレノイド合成、ヘム合成、脂肪酸合成能力を保持していることが分かっている。

る。従って、あるグレガリンから色素体に局在するイソプレノイド合成、ヘム合成、脂肪酸合成に関連する酵素遺伝子が検出された場合、その細胞内に非光合成性色素体が存在する可能性が高い。本研究で取得した 3 種の GLO のトランスクリプトームデータを精査したところ、ムカデ感染性グレガリンのトランスクリプトームデータから、イソプレノイド合成に必要な 3 つ酵素遺伝子とヘム合成に必要な 1 つの酵素遺伝子を検出した。このデータに基づき、我々はムカデ感染性グレガリンには非光合成性色素体が残存しており、この構造体内で少なくともヘムとイソプレノイド合成を行っている結論付けた。一方、2 種のヤスデ感染性グレガリンからは色素体関連遺伝子が一切検出できなかった。色素体関連遺伝子が検出されないグレガリンには色素体構造自体が欠失したとすると、グレガリン類の進化の過程で色素体構造の欠失が少なくとも 3 回起こったと考えられる (図 3B)。

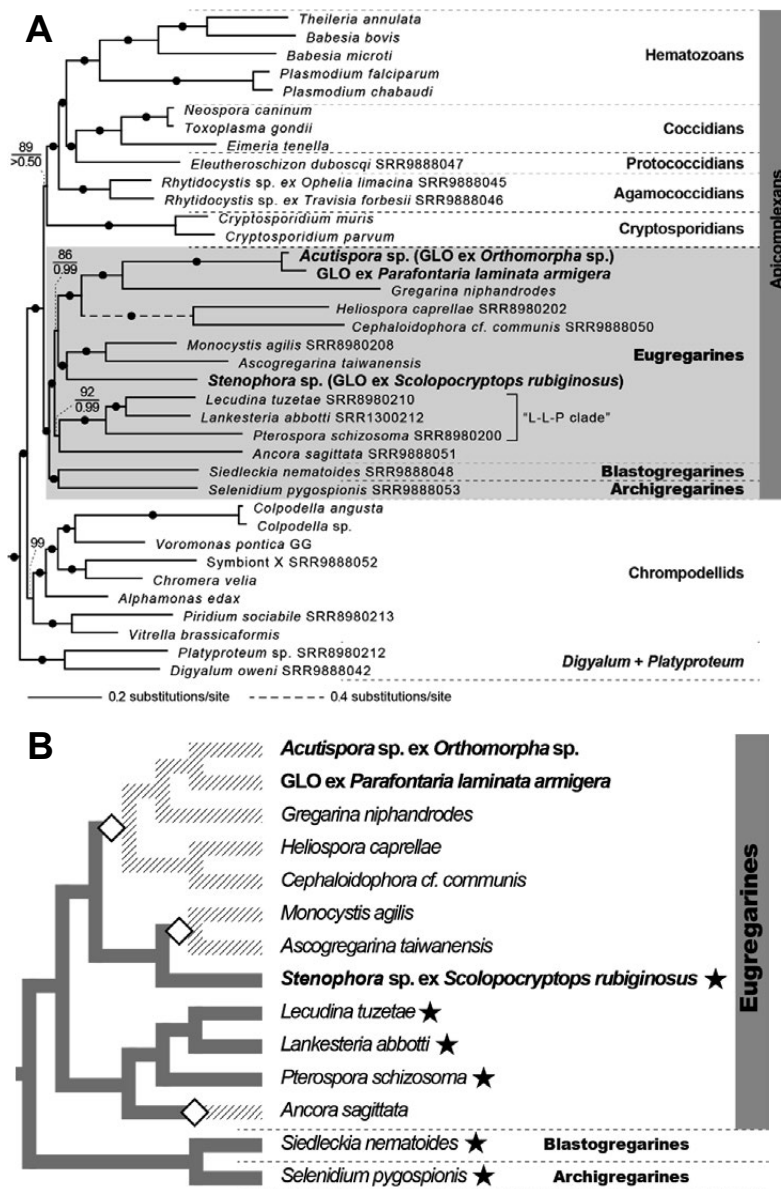


図 3. A. 73 遺伝子アライメントから推測されたアピコンプレクサ生物の系統関係。グレガリンクレードは灰色でシェードしてある。セスジアカムカデ感染性グレガリンは *Stenophora* sp., ヤケヤスデ感染性グレガリンは *Acutispora* sp.として記載されている。キシヤスデ感染性グレガリンは *GLO ex. Parafontaria lamina armigera* である。枝上の黒丸は最尤法ブートストラップ値 100%, ベイズ事後確率 1.0 でサポートされたことを示す。B. グレガリンにおける非光合成性色素体の分布と 2 次的欠失。グレガリンの系統関係は 73 遺伝子データに基づく (A 参照)。非光合成性色素体をもつと考えられる種は★で示した。非光合成性色素体はグレガリンの共通祖先から★で示した非光合成性色素体をもつ種へ垂直的に伝播したと考えられる。一方、図中で◇で示した色素体構造の欠失が、少なくとも独立に 3 回起こったと考えられる。

[2] 各種トランスクリプトーム・ゲノム解析

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)。また、京都大学・神川龍馬博士を中心に、非光合成化した珪藻の色素体ゲノム解読を進めてきた (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)。並行して国立科学博物館・谷藤吾郎博士と共同で、非光合成化したクリプト藻の色素体ゲノムの解読を行った (Tanifuji et al. 2020 *Genome Biol Evol* 12:3926-3937)。

渦鞭毛藻 MRD-151 株および TRD-132 株の色素体ゲノムの解読は完了している (2015 年、2016 年年次報告書参照) が、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。諸所の事情によりこの論文の執筆が遅れているため、当該渦鞭毛藻2種の色素体ゲノムに関する論文の執筆にも遅れが出ている。2018 年度からは第4の緑色渦鞭毛藻 *Oxytoxum* sp. SG-436 株の色素体ゲノムおよびヌクレオモルフゲノム (共生ペディオ藻の痕跡核) の解読を開始したが、本年度はヌクレオモルフゲノムに関して予備的なデータを取得できたので報告する。

緑色渦鞭毛藻 *Oxytoxum* sp. SG-436 株に共生した緑藻の痕跡核ゲノム

クリプト藻とクロララクニオン藻の色素体に付随する共生藻痕跡核 (ヌクレオモルフ) は、真核藻類が細胞内共生において細胞小器官として宿主細胞に統合される進化過程を解明する上で貴重なモデルとして研究されてきた。クリプト藻およびクロララクニオン藻の色素体およびヌクレオモルフの起源となった共生藻はそれぞれ紅藻と緑藻であるが、独立した2系統のヌクレオモルフゲノムには共通した縮退的特徴が知られている。一方、我々は2020年に新たに2種の渦鞭毛藻 (MRD-151 株および TRD-132 株) がヌクレオモルフをもつことを報告した (Sarai et al. 2020 *Proc Nat Acad Sci USA* 117:5364-5375; ; 2019 年度年次報告書参照)。光合成性の渦鞭毛藻は紅藻の2次共生に由来する色素体を持つが、渦鞭毛藻 MRD-151 株および TRD-132 株では緑藻の特定の系統を細胞内共生させることで色素体を獲得し、祖先型色素体を置換したと考えられている。しかし、それら2種のヌクレオモルフゲノムの塩基配列情報は未知である。

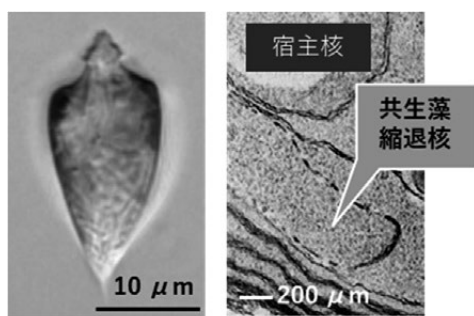


図4. 左: SG-436 株の細胞像. 右: SG-436 株の細胞内微細構造. 葉緑体と同一区画に、縮退核構造が残存する. 写真提供: 高橋和也 (東京大)

渦鞭毛藻 MRD-151 株および TRD-132 株とは別に、同じく渦鞭毛藻 *Oxytoxum* sp. SG-436 株の細胞内にも透過型電子顕微鏡観察により色素体とヌクレオモルフを含む細胞内区画が確認された（東京大学・岩滝光儀・高橋和也博士未発表データ；図 4）。そこで本研究では *Oxytoxum* sp. SG-436 株を対象に DNA-seq データを行い、ヌクレオモルフゲノム配列の探索を行った。

ヌクレオモルフ #	Length(bp)	GC(%)
77	339,308	32.34
519	55,849	33.17
131	223,372	32.19
335	91,832	32.23
89	303,233	32.14
118	236,434	31.98
129	225,255	32.65
282	108,030	31.48
592	37,978	32.23

表 1. 渦鞭毛藻 *Oxytoxum* sp. SG-436 株の DNA-seq データから選抜されたヌクレオモルフゲノム断片候補。

本株の色素体遺伝子の系統解析の結果、現在の葉緑体の起源となった共生藻は緑藻であることが明らかとなっている（岩滝・高橋博士未発表データ）。そこで、本株の DNA-seq データから復元したゲノムスキュッフォールドから既知の緑藻配列と相同性の高い遺伝子をコードするヌクレオモルフゲノム断片候補を選抜した。最終的に選抜された 9 本のゲノムスキュッフォールドは全て GC 含量が~32%と低く、多数のスプライソソーマルイントロンが検出された（表 1）。取得したヌクレオモルフゲノム断片候補のうち、

最長のゲノム断片（~339 Kb）についてアノテーションを行ったところ（図 5）、158 のタンパク質コード領域（ORFs）が同定され、機能が推測できたものはそのうち 102 個であった。また、イントロンが本ゲノム断片（~339kb）において約 1300 個同定された。機能が推測されたタンパク質遺伝子の中には、これまでに解析されたクリプト藻やクロララクニオン藻のヌクレオモルフゲノムには発見されなかった光合成に直接関与する光化学系 I サブユニットや集光アンテナタンパク質の遺伝子が同定された。また、9 本のゲノムスキュッフォールドの合計は 1.3 Mb となった。*Oxytoxum* sp. SG-436 株のヌクレオモルフゲノムが今回取得した 9 本のゲノムスキュッフォールドで完全にカバーされているとは考え難いが、その合計長は既知のヌクレオモルフゲノム（~1 Mb）を超えている。従ってクリプト藻・クロララクニオン藻のヌクレオモルフゲノムと比べ、*Oxytoxum* sp. SG-436 株のヌクレオモルフではゲノム縮退が進んでいないと解釈できる。

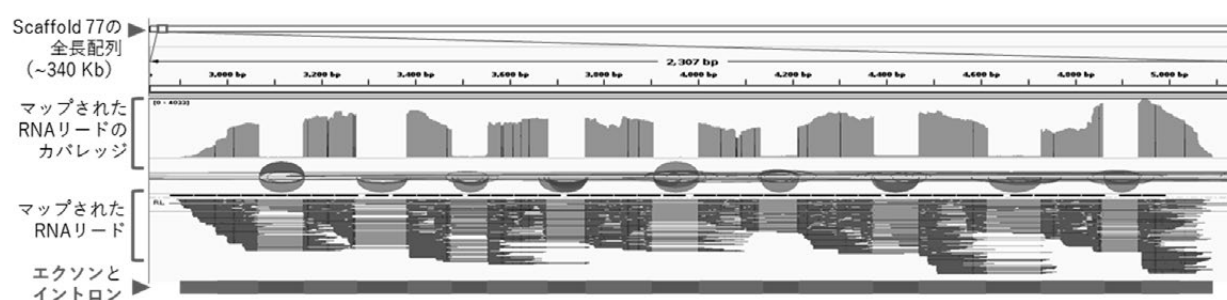


図 5. 約 340Kb のゲノム断片（スキュッフォールド 77）上に 158 遺伝子を発見し、その中に合計約 1,300 個のイントロンを同定した。上手で詳細を模式的に示した領域は、全長 340 Kb のスキュッフォールド 77 の N 末端にあたる約 5 Kb の領域である。

今後ヌクレオモルフゲノム断片と考えられる残り 8 本のゲノムスキュッフォールドの解析を行う。

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; Nishimura et al. 2020 *Front Ecol Evol* 8:140)。

2019 年度年次報告書で報告した通り、*Microheliella maris* はクリプスタ生物群に極めて近縁であり、海洋研究開発機構・矢吹彬憲博士と共同で *M. maris* の Mt ゲノムを解読した。*M. maris* の Mt ゲノムについては、Phylogenomic 解析結果と合わせて英文論文として投稿する。

Mt ゲノム解析だけではなく、我々は Mt ゲノムを複製する DNA ポリメラーゼ (Mt 局在 DNAPs) についても、その多様性と起源について解析を開始した。本報告書では 2020 年度に英文論文として発表した Mt 局在 DNAPs に関する成果について報告する。

ユーグレノゾア生物群におけるミトコンドリア局在 DNA ポリメラーゼの多様性と進化

ミトコンドリアは細胞内共生した細菌が細胞小器官として真核細胞に統合されたため、独自の細菌型ゲノムを保持している。しかし、これまでに解析された Mt ゲノムには、DNA 複製や修復のためのタンパク質をコードする遺伝子はほとんど発見されておらず、核ゲノムコードのタンパク質が Mt ゲノムを維持している。ミトコンドリアプロテオームには多様な進化の起源を持つタンパク質が数多く含まれており、核ゲノムにコードされた Mt ゲノム維持機構についても、遺伝子水平伝播等の影響があると予想できる。

これまでに真核生物の間で複数のタイプの Mt 局在 DNAP が確認されているが、その正確な起源はまだ明らかにされていない。トリパノソーマ原虫 (*Trypanosoma brucei*) では、細菌 DNA ポリメラーゼ I (PolI) に関連する 4 種類の DNAP (PolIA、PolIB、PolIC、PolID) がミトコンドリアに局在していることが実験的に示された。これらのトリパノソーマ原虫の Mt 局在 DNAP は、ヒトや酵母の Mt 局在 DNAP である Poly、多様な真核生物で発見されている Mt 局在 DNAP である POP とは、進化的に近縁ではない。しかし、トリパノソーマ原虫をふくむキネトプラスト綱、キネトプラスト綱とともにユーグレノゾア生物群を構成するディプロネマ綱、ユーグレナ綱においてどのような種類の DNAP が Mt ゲノムの維持に使用されているのか十分に理解されているとは言えなかった。本研究では、ユーグレノゾア生物群を構成するキネトプラスト綱、ディプロネマ綱、ユーグレナ綱において Mt 局在 DNAP を探索した。その結果、①PolIA はユーグレノゾア生物群全体に分布していること、②PolIB、PolIC、PolID はキネトプラスト綱に限定的に分布しており、系統的には互いに関連していること、③PolIBCD と密接な関係にある新しいタイプの Mt 局在 DNAP (PolI-Perk1/2, PolI-dipl) がキネトプラスト綱の初期分岐系統とディプロネマ綱に存在すること、④ユーグレナ綱では進化的

に異なるタイプの POP が発見された。本研究の成果は、チェコ共和国のチャールズ大学 Vladimír Hampl 博士の研究グループと共同研究であり、*Pathogens* 誌に公開された (Harada et al. 2020 *Pathogens* 9:257)。

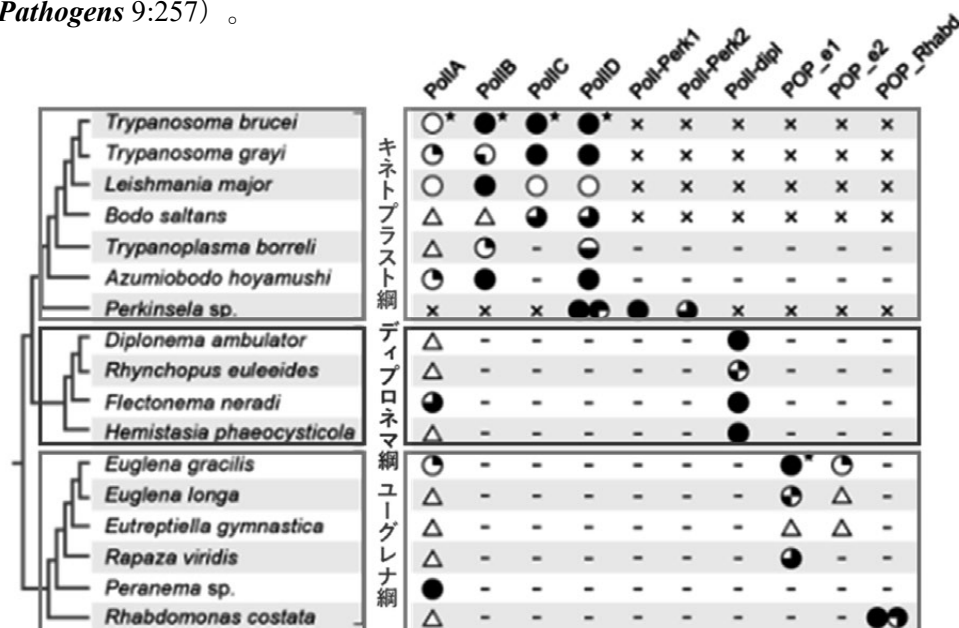


図6. ユーグレノゾア生物群を構成するキネトプラスト綱、ディプロネマ綱、ユーグレナ綱における Mt 局在 DNAP のレパートリー。各 Mt 局在 DNAP の有無は丸/三角で示した。ダッシュはトランスクリプトームデータで検出されなかった場合、×はゲノムデータで検出されない場合を示す。図中の生物種の系統関係は Yazaki et al. 2016 *Genes Genet Syst* 92:35-42 を参考に作成した。ユーグレノゾア生物群構成する3つの綱多様化に伴い、Mt 局在 DNAP のレパートリーが段階的に変遷していることがわかる。

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、② *Glissandra* sp. SRT312 株、③ SRT706 株、④有孔虫 *Ammonia berccarii*、⑤放散虫 (*Didymocystis tetrathulumus* と *Acanthodesmia viniculata*)、⑥ *Fabomonas* sp. SRT902 株

[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

翻訳終結因子 eRF1 C 末端ドメインの部分欠失のタンパク質立体構造への影響の検証

翻訳終結因子 eRF1 は、リボソーム A 位の終止コドン認識し、tRNA と新生ポリペプチド間の結合を加水分解することで翻訳を終結させるタンパク質である。真核生物間で eRF1 のアミノ酸配列は高度に保存されているが、微胞子虫類 eRF1 には C 末端ドメインに比較的大きな部分的欠失が見られる (図7)。また古細菌の翻訳終結因子 aRF1 の一部にも、微胞子虫タンパクと相同な部分的欠失が発見できる。翻訳終結因子 eRF1/aRF1 の C 末端ドメインで繰り返し起こった部分的欠失は、機能的にも立体構造的にも中立である可能性が高

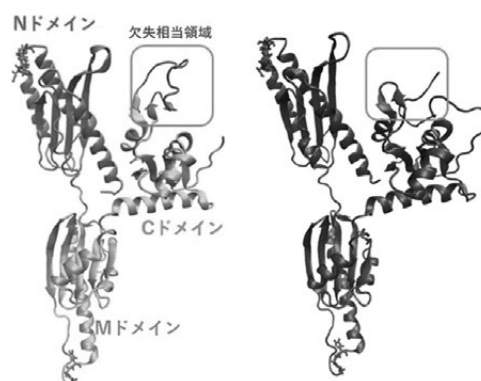


図7. eRF1 の立体構造、左：酵母 eRF1. 右：微胞子虫 eRF1 (モデル)。囲った部分が微胞子虫タンパクにおける C 末端ドメインの部分的欠失相当領域である。

い。この仮説を検証するため、eRF1 を構成する各アミノ酸の保存性の検証と分子動力学シミュレーションによる立体構造の安定性を検証した。本研究は、生命機能情報分野・重田教授、栢沼助教（現・産総研）との共同研究である。

まず系統的に広範な真核生物（ただし微胞子虫類以外）の eRF1 アミノ酸配列を選び、分子系統解析用アライメントを作成した。このアライメントを用いてアミノ酸座位毎の置換速度を推測した（図 8）。微胞子虫 eRF1 以外は C 末端ドメインに部分的欠失がないので、この部分の置換速度は推測可能である。胞子虫 eRF1 の部分的欠失相当領域の置換速度とその他の領域の置換速度を比較したところ、前者の置換速度が有意に高いことが判明した。これは C 末端ドメインの部分的欠失領域に対する機能的制約が低いことを示している。

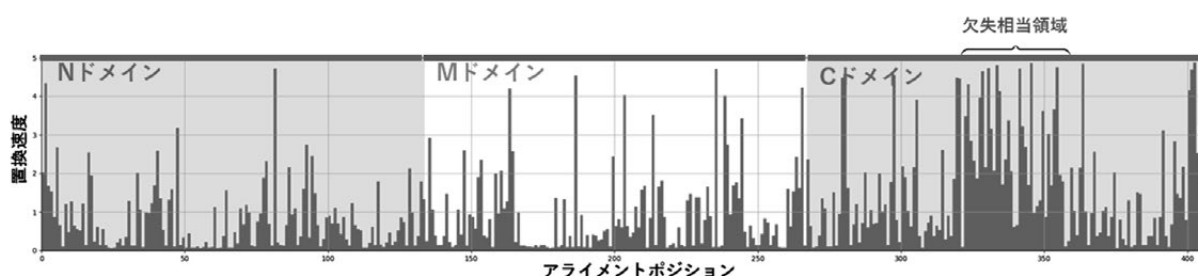


図 8. eRF1 のアライメント座位毎の置換速度の立体構造、微胞子虫 eRF1 の部分的欠失相当部位には置換速度が高い座位が集まっている。

C 末端ドメインに部分的欠失をもつ eRF1 の立体構造安定性を検証するため、酵母 eRF1 立体構造をもとに微胞子虫 eRF1 の立体構造モデルを作成し、分子動力学シミュレーションを 100 ナノ秒間行ったが、分子全体での RMSD 値は高かった。一方 eRF1 を構成する N 末端ドメイン、中間 (M) ドメイン、C 末端ドメイン毎の RMSD 値は低く、ドメイン毎の立体構造は安定していると考えられる。立体構造的安定性について eRF1 分子全体とドメイン毎で矛盾があるが、eRF1 が球状タンパクではないため 3 つのドメイン間の位置が安定しないことが原因であろう。従って C 末端ドメインにおける部分的欠失は、微胞子虫 eRF1 タンパクの機能に対して中立的であると推測できる。この研究を英文論文として投稿するため、現在も解析を引き続き行っている。

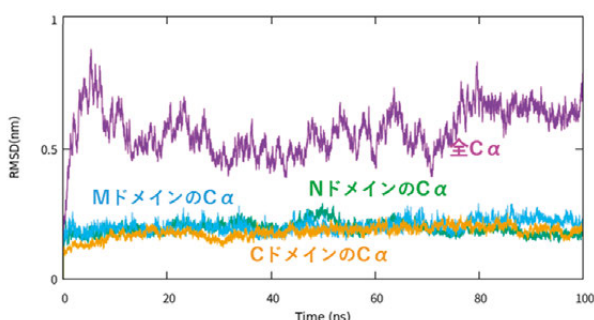


図 9. eRF1 タンパク (C 末端ドメインに部分的欠失あり) の分子動力学シミュレーションの結果、各ドメインの RMSD 値は安定しているが、全タンパクから計算された RMSD 値は高く、変動も大きい。

昨年度報告した CysN タンパクの全原子分子動力学シミュレーションについては、生命科学部門生命機能情報分野・原田隆平准教授と引き続き英文論文として投稿するために共同研究を続けている。

4.教育

岸田雄真, 学士 (理学), 論文名: *Kipferlia bialata* におけるミトコンドリア関連オルガネラ候補タンパク質の局在解析

平田皓大, 学士 (理学), 論文名: サンゴ共生性褐虫藻の新規培養株の確立

若島朋幸, 学士 (理学), 論文名: 嫌気性真核微生物 *Dysnectes brevis* の縮退型ミトコンドリアのプロテオーム解析

岩本亮介, 修士 (理学), 自由生活性フォルニカータ鞭毛虫 *Kipferlia bialata* のミトコンドリア関連オルガネラのプロテオーム解析

川久保卓志, 修士 (理学), 緑色渦鞭毛藻 *Oxytoxum* sp. SG-436 株における共生藻痕跡核ゲノム配列の探索と解析

原田亮, 修士 (理学), Inventories and origins of mitochondrion-localized family A DNA polymerases in Euglenozoa

田村嘉孝, 修士 (教育学), メタモナス生物群における嫌氣的 ATP 合成に関わる酵素の分子進化

集中講義など

なし

5.受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 筑波大学大学院生命環境科学研究科 研究科長賞, 原田亮, 2021 年 3 月 25 日
2. 筑波大学大学院生命環境科学研究科生物科学専攻 専攻長賞, 岩本亮介, 2021 年 3 月 25 日
3. 筑波大学大学院生命環境科学研究科生物科学専攻 専攻長賞, 川久保卓志, 2021 年 3 月 25 日
4. 筑波大学大学院生命環境科学研究科生物科学専攻 専攻長賞, 原田亮, 2021 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)

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 (2020 年度直接経費 4,500 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（2020 年度直接経費 4,200 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（2020 年度直接経費 2,000 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（2020 年度直接経費 4,700 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（2020 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（2020 年度直接経費 400 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）

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. Harada R, Inagaki Y. Phage origin of mitochondrion-localized family A DNA polymerases in kinetoplastids and diplomonads. 2021 *Genome Biology and Evolution* 13(2):evab003
2. Omori Y, Saeki A, Wada S, Inagaki Y, Hama T. Experimental analysis of diurnal variations in humic-like fluorescent dissolved organic matter in surface seawater. 2020 *Frontiers in Marine Science* 7:589064
3. 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 predicted to generate no ATP. 2020 *Proceedings of the Royal Society B: Biological Sciences* 287(1934):20201538

4. Nakayama T, Takahashi K, Kamikawa R, Iwataki M, Inagaki Y, Tanifuji G. Putative genome features of the relic green alga-derived nuclei in the dinoflagellates and the future perspectives as model organisms. 2020 *Communicative & Integrative Biology* 13(1):84-88
5. Nishimura Y, Kume K, Sonehara K, Tanifuji G, Shiratori T, Ishida K, Hashimoto T, Inagaki Y, Ohkuma M. Mitochondrial genomes of *Hemiarma marina* and *Leucocryptos marina* revised the evolution of cytochrome *c* maturation in Cryptista. 2020 *Frontiers in Ecology and Evolution* 8:140
6. Harada R, Hirakawa Y, Yabuki A, Kashiya Y, Maruyama M, Onuma R, Soukal P, Miyagishima S, Hampl V, Tanifuji G, Inagaki Y. Inventory and evolution of mitochondrion-localized family A DNA polymerases in Euglenozoa. 2020 *Pathogens* 9(4):257.

B) 査読無し論文

1. Harada R, Inagaki Y. Phage origin of mitochondrion-localized family A DNA polymerases in kinetoplastids and diplomonads. 2020 *bioRxiv* doi: 10.1101/2020.09.26.314351

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

なし

B) 一般講演

1. Yoshiyuki Ishitani, Erika Ujiie, Caterina Ciacci, Frontalini Fabrizio, Yuji Inagaki. Time-course analysis of gene expression of a benthic protist during exposure to titanium dioxide nanoscale particles. JpGU-AGU Joint Meeting 2020, Jul. 12-16, 2020, オンライン開催

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 原田亮, 中野賢太郎, 矢吹彬憲, 白鳥峻志, Ensoo Kim, 稲垣祐司. 新奇ミトコンドリア局在 DNA ポリメラーゼは新たな真核生物高次系統群を示唆するか? 第 17 回原生生物・寄生虫・進化セミナー, May 29, 2020, オンライン開催

B) その他の発表

1. 中山卓郎, 野村真未, 高野義人, 柴小菊, 稲葉一男, 谷藤吾朗, 稲垣祐司, 河田雅圭. 外洋性ディノフィシス目渦鞭毛藻 2 種に見られる共生シアノバクテリアのゲノム解析. 日本植物学会第 84 回大会, Sep 19-21, 2020, オンライン開催

2. 吉永真理, 稲垣祐司. 真核生物における SMC タンパク質ファミリーの多様化と二次的欠失. 日本共生生物学会第 4 回大会, Oct 30-Nov 1, 2020, オンライン開催
3. 原田亮, 稲垣祐司. キネトプラスチダ類及びディプロネマ類に特異的なミトコンドリア局在 DNA ポリメラーゼはファージ起源である. 日本共生生物学会第 4 回大会, Oct 30-Nov 1, 2020, オンライン開催

(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、オルガネラ DNA ポリメラーゼの進化
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） 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）
特任助教	中村 祐輔（学内共同研究員）
研究員	山上 晃央、今井 優真
学生	大学院生 23 名、学類生 10 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。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。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、ベトナム国家大学ハノイ自然科学大学、ハノイ科学技術大学、ベルギー王立気象研究所、アリゾナ州立大学都市気候研究センターと連携協定を結んでいる。また、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継続している。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行っていることになる。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、ウェザーニューズを始め、竹中工務店、パシフィックコンサルタンツなど民間企業との共同研究がある。また、先方の都合により報告書には記載できないが、建築系の著名な研究所との共同研究も実施している。建築系の企業との共同研究は、気象学分野の大学の研究室としてはユニークである。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、天笠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。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ロンビア校と共同研究を継続している。

3.研究成果

[1] 都市街区気象 LES モデルの開発

地球環境研究部門の中核的研究課題として、前年度に引き続き都市街区気象 LES モデルの開発を行っている。令和2年度は、これまで開発してきた都市街区気象 LES モデルを、都市内の熱環境悪化に対する適応策を定量的に評価するツールとして用いるため、ドライ型ミストの効果モデル内に取り入れる改良を行った。過去に、ハードコーディングでこの機能を搭載したことはあったが、ユーザがドライミストの設置場所やミストと噴霧量を自由に設定できるように改良した。また、これまで不十分であったミスト効果の検証も行った。この機能を用いて試験的に行った実験では、取り入れる前と比べて観測によって得られた局所的な低温域の再現性を向上させることができた（図1）。（日下）

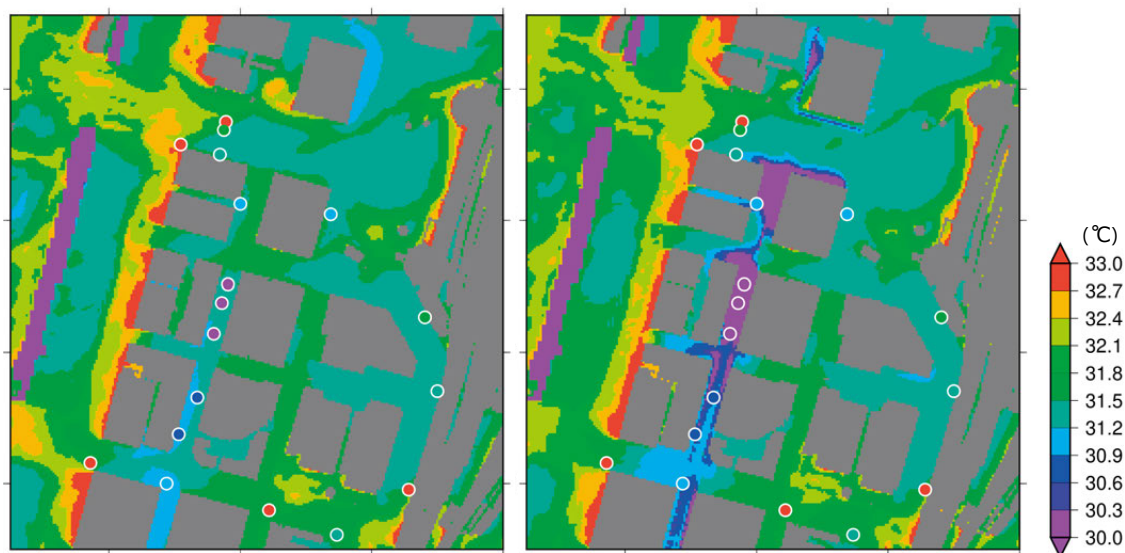


図1：東京駅・丸の内周辺の気温分布。モデル出力値に観測値をシンボルで重ねている。色の凡例はモデル，観測値で共通。左：ドライミスト未設置時，右：ドライミスト設置時。

[2] 熱中症救急搬送者数予測モデルの開発

熱中症患者数の増加に伴い、現在、熱中症救急搬送者数の輸送が重要となりつつある。そこで、新たに翌日の熱中症救急搬送者数予測モデルを開発した。広く利用されている一般化線型モデル（GLM）、一般化加法モデル（GAM）、サポートベクターマシン（SVM）、ランダムフォレスト（RF）の4種類の手法それぞれを用いた場合の予測モデルの相互比較を行い、それぞれの手法を用いた場合の予測精度を比較した。さらには、予測モデル（統計モデルベース）の説明変数として広く利用されている日最高気温（V1）、日最高WBGT（V2）、温熱四要素（気温、湿度、日射量、風速）（V3）、温熱四要素に積算日数を加えた5要素（V4）、温熱四要素に前日搬送者数を加えた5要素（V5）、積算日数と前日搬送者数を加えた6要素（V6）を用いた場合それぞれの予測精度を比較した。その結果、GAMをベースに予測モデルを作成

し、説明変数として V6 を用いたモデルが最も予測精度が高く、広く利用されている予測モデル（GLM+V1 もしくは GLM+V2）に比べて、10 年間の平均誤差で見た場合に 50% 程度の精度向上が認められた（図 2）。また、積算日数と前日搬送者数の情報を用いることで、短期の暑熱順化を考慮することができるようになり、一般的な予測モデルで見られる初夏の過小評価や晩夏の過大評価を大幅に軽減できることも分かった。（日下）

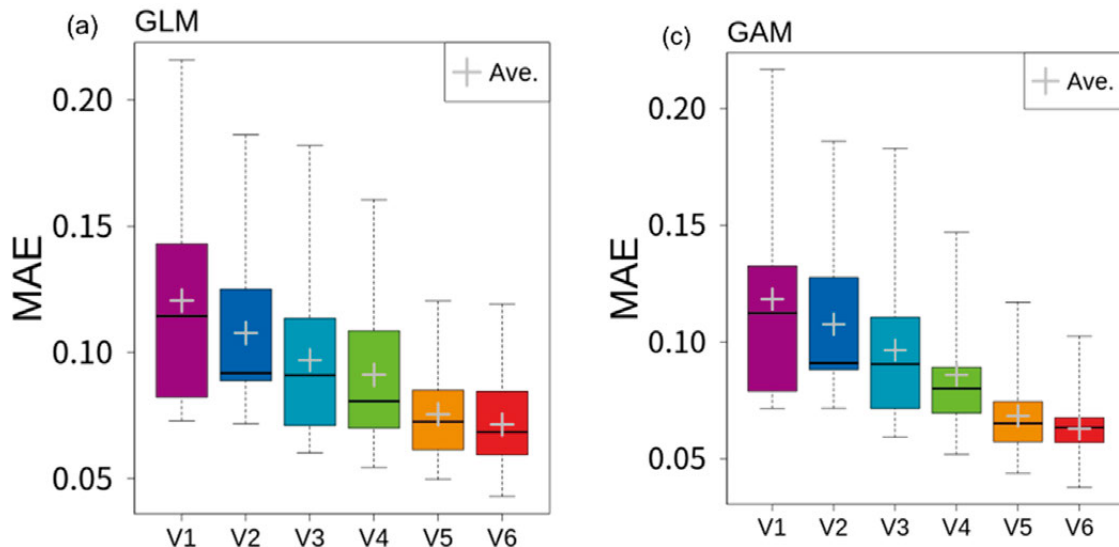


図 2：翌日の熱中症救急搬送者数予測モデルの精度。左が GLM を用い場合、右が GAM を用いた場合。V1 から V6 はそれぞれ本文中の説明変数を意味する。

[3] 気圧配置型分類のための類似度比較

気象学・気候学分野では、気圧配置型を日本海低気圧型、冬型、夏型のように分類し、それぞれの気圧配置型と特定の気象現象を結びつける解析がしばしば行われる。この分類に際して、類似度が利用されるが、その計算手法が分類の精度に影響を与えられている。より高精度な気圧配置を分類するため、相関係数や structural similarity, average Hash といった 5 つの類似度計算法の精度を相互比較した。この際、多数の教師データを用いてそれぞれの類似度の精度を統計的に比較した。比較の結果、水平気圧勾配を考慮する S1-score と画像の構造的な類似性を考慮する structural similarity が高精度であると分かった（図 3）。また、類似度によって重視する要素が異なる可能性も示唆された。この研究は、特に理想的でない教師データを使った分類を行うような場合でもよく機能する類似度を選択するための参考になる研究と言える。

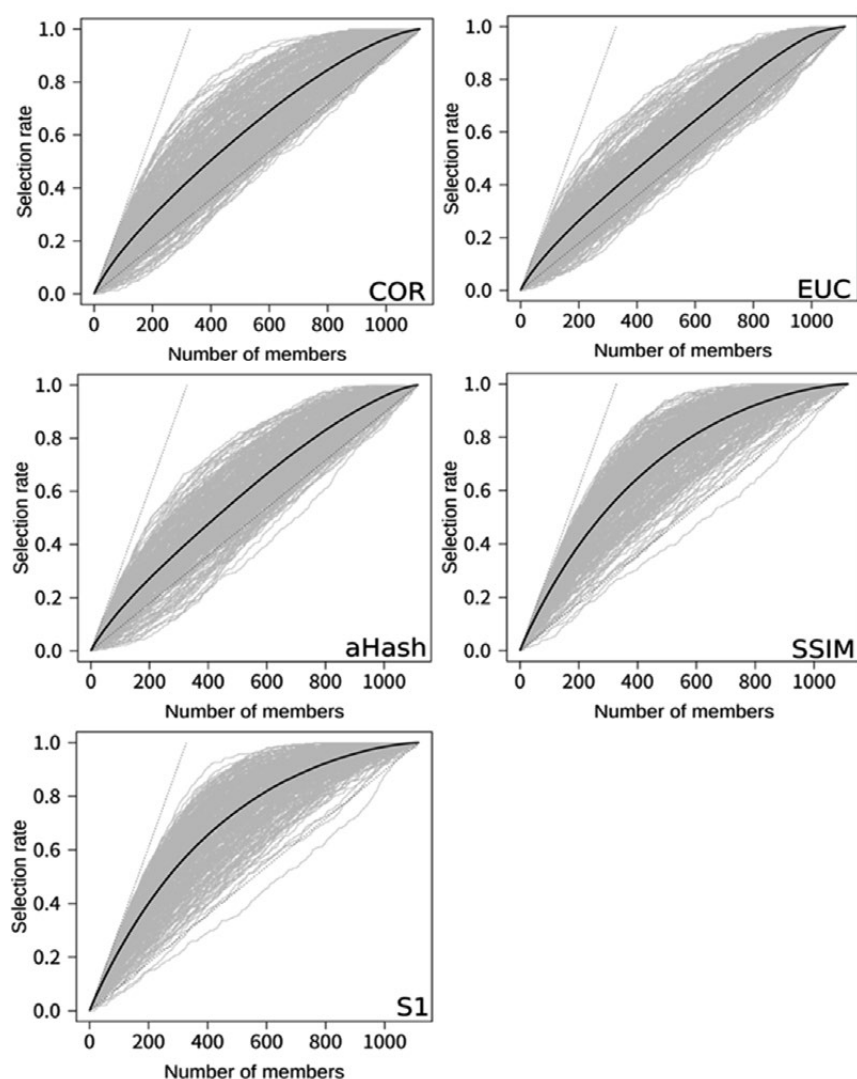


図3 各類似度の抽出率の推移。

黒実線は全教師の平均。灰実線はそれぞれの教師データの推移。

【4】 3次元ノーマルモード展開を用いた重力波伝播の理論的研究

気候変動研究では、1000年前の中世の温暖期や200年前の小氷期の原因として太陽活動の長期的変化が候補にあげられている。太陽活動の強化は電離層のオーロラオーバルを活性化し、ジュール熱により大気を加熱する。Prikryl(2016:2018)では、大気重力波の下方伝播により、その影響が微弱ながら対流圏の天候の変化に現れるという。本研究では、気候変動研究の一環として、熱圏から対流圏に伝播する重力波の理論解について研究を行った。球座標系のプリミティブ方程式を解析的鉛直構造関数と Hough 関数で 3D スペクトル化し、静止大気中の微小振幅擾乱の 3D ノーマルモード線形解として解析的に時間変化を求めた。

はじめに、初期値として北緯 30 度、高度 0km を中心に、幅 20 度と高さ 7.5km の $\cos$ 波として軸対称なジオポテンシャルを置き、地衡風調節による重力波の鉛直伝播を図 1 左に再現した。群速度の上方伝播と位相速度の下方伝播が確認できた。次に、オーロラオーバルを想定して下部熱圏の北緯 60 度にジオポテンシャルの初期値を置くと、群速度は下方に伝播し、位相速度が上方に伝播する重力波の構造が見られた（図 4 右）。下端境界条件により、高度 10km 付近に節構造が見られることから、重力波伝播により、静的安定度に微弱ながらも変化が生じ、対流圏の対流活動に影響を及ぼし得ることが確認された。（萩原・田中）

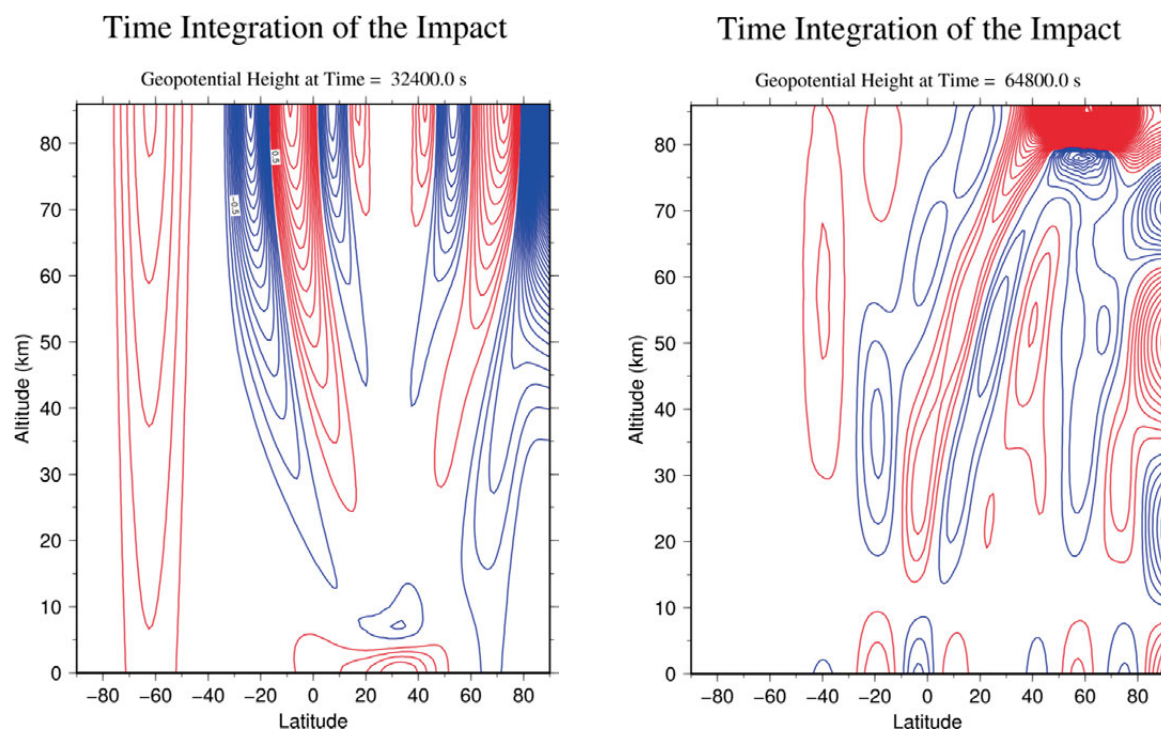


図 4 熱圏と対流圏を繋ぐ重力波の鉛直伝播の線形理論解

[5] 火山灰追跡モデル PUFF とリアルタイム MP レーダーシステムの結合

Tanaka(1994)が開発したリアルタイム火山灰追跡 PUFF モデルに、桜島火山研究センターの MP レーダーシステムによるリアルタイム観測データを同化し、より信頼性の高い火山灰追跡システムを構築した。これまでは、桜島周辺の地震計や傾斜計を用いた火山灰噴出率のリアルタイム推定を PUFF モデルの初期値に用いたシステムが構築されていたが(Tanaka and Iguchi 2019)、初期値の推定には経験則による不確かさが残っていた。このシステムに X バンド MP レーダー観測値を同化することで、モデル予測の信頼性を飛躍的に向上させることができる。

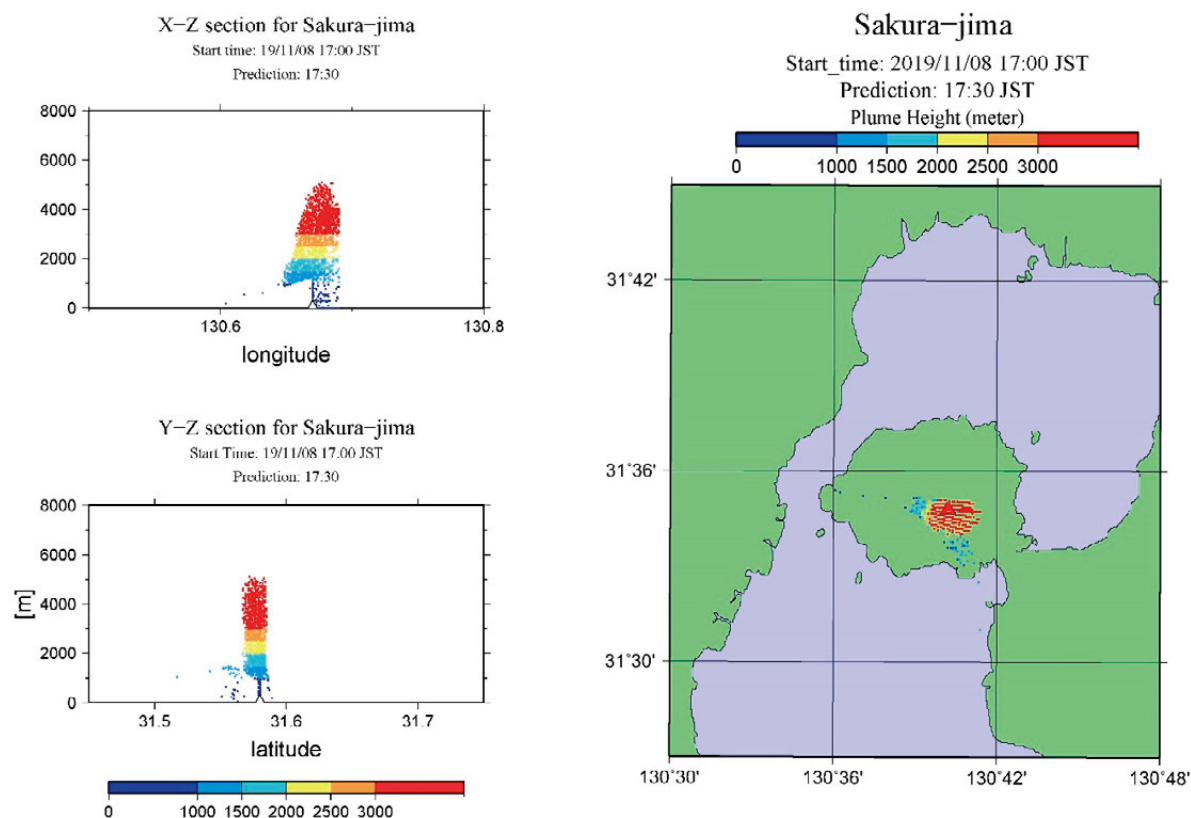


図5 PUFF モデル予測に MP レーダー観測を同化した火山灰拡散予測

PUFF モデルは空気塊のトラジェクトリーを計算するラグランジュモデルであるが、正確な風の 3 次元データと火山噴火の際の正確な噴出率のデータ、そして噴煙の 3 次元的な実測が重要である。図 5 は PUFF モデルによる予測値に MP レーダーの実測を同化した直後の噴煙の水平分布と鉛直分布である。モデルでは火口上に円柱状に散布された噴煙が、MP レーダーの観測値により分布が改善されている。このように実測に裏付けされた噴煙の拡散予測の信頼性は飛躍的に向上したと言える。図 6 は噴煙の実測値のデータ同化により改善された PUFF モデルによる降灰分布の推定値である。世界的に最も観測網が充実している桜島火山の地震計や傾斜計、降灰量観測のデータを統合した新システムは、世界的にも初めての試みであり、今後のさらなる研究成果が期待される。（田中）

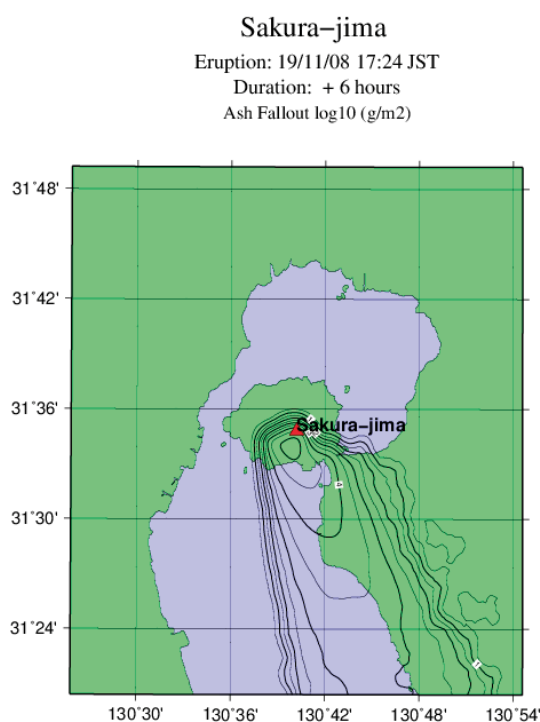
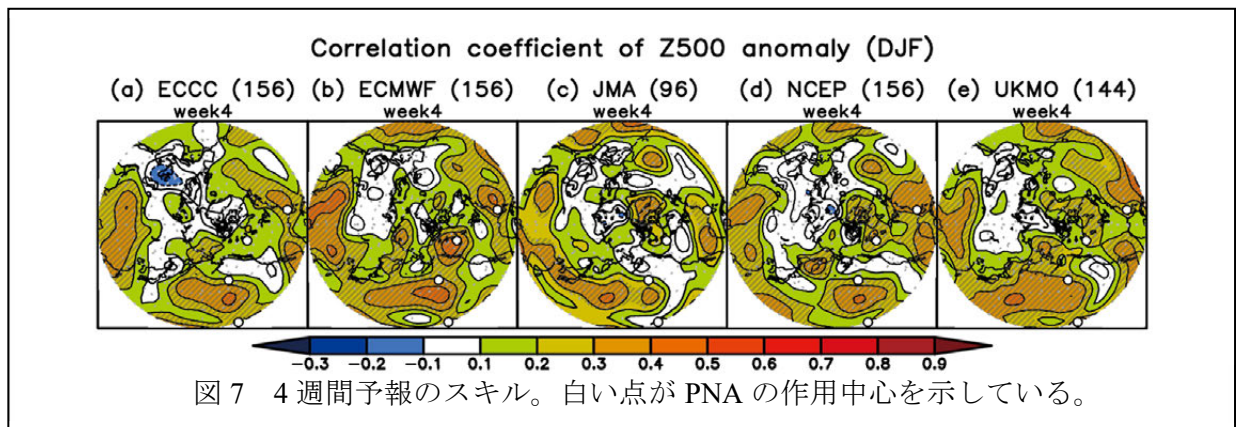


図6 PUFF モデル予測に MP レーダー観測を同化した火山灰拡散予測

[6] S2S 時間スケールにおける冬季北半球週平均大気変動の予測スキルおよびテレコネクションパターンとの関係

S2S 時間スケール（2 週間から 2 ヶ月程度）の数値天気予報は、中期予報（～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、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、冬季北半球における週平均大気変動の予測可能性を調査した。予測スキルは北極域および地中海から徐々に低下した。その一方で、3, 4 週間予測でも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 7)。また、エルニーニョ時には、PNA の位相と振幅の 2-4 週間予報のスキルが、NAO の位相の 3-4 週間予報のスキルが高くなることが示された。一方、ラニーニャ時にも予測の改善は見られたが、エルニーニョ時ほど顕著ではなかった。さらに、S2S 時間スケールの予測を改善するには、ENSO に伴う赤道の予測ではなく、中緯度のジェットのパイアスを修正する必要があることが示唆された。

本研究は、Geophysical Research Letter で論文として発表し、気象学会秋季大会、American Geophysical Union fall meeting において発表した。



[7] 北極域における予測精度急低下（forecast bust）と夏季の循環場との関係

数値天気予報における予測精度急低下事例を forecast bust と呼ぶ。本研究では、主要な5つの数値予報センターの現業中期アンサンブル予報データを用いて、北極域における forecast bust の統計的な特徴と、夏季の bust と循環場の関係について調べた。北極域での bust の年間の発生頻度は、2008年では予報の7-13%であったが徐々に減少し、2012年以降は2-6%程度であった。また、月別頻度では、5月と夏季（7-9月）に多く（~6-7%）、冬季（12-3月）は少なかった（~4%）。また、夏季の北極域の循環場を5つのパターンに分類し、bust の発生頻度との関係を調べたところ、初期場が北極低気圧（AC）パターンとグリーンランドブロッキング（GB）パターンの時に、bust が起こりやすいことが示された（図8）。また、GBパターンからの bust は近年減少しているが、ACパターンからの bust は減少傾向が見られないことが示された。

本研究の結果は、Atmospheric Science Letters に論文として発表された。

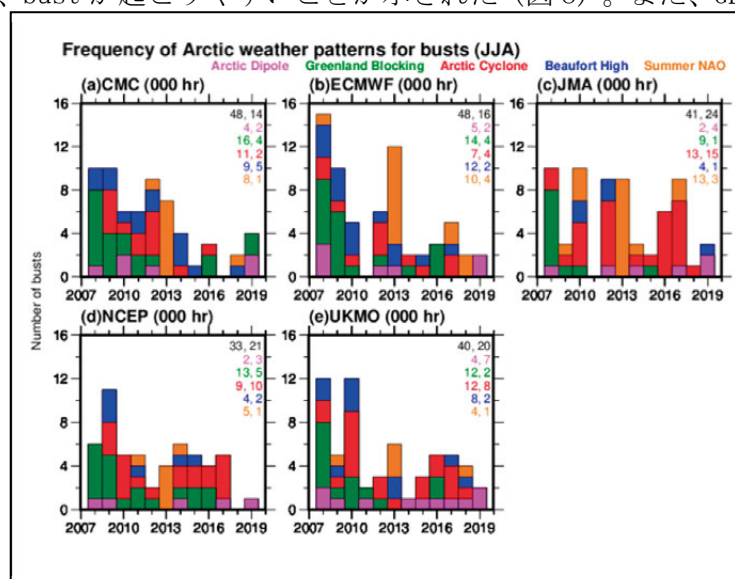


図8 各数値予報センターの、年毎の夏季の forecast bust の発生数と発生の初期パターン。

[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)

カールスルーエ工科大(KIT, ドイツ)のChristian Grams 博士の研究グループと以下の2つのテーマに関して国際共同研究を行っている。本来は相互滞在型の共同研究であるが本年度については、オンライン会議を定期的に行うことで共同研究を継続した。

(1) アジア域の天候レジームと極端降水との関係に関する研究

先行研究で特定済みの日本を中心とするアジア域での5つの天候レジーム(モンスーン型、Western Pacific 型、高気圧型、低気圧型、西谷型)と日本の5領域(気象庁気候情報課が現業で利用する西日本、東日本太平洋側、東日本日本海側、北日本太平洋側、北日本日本海側の5区分)での極端降水の関係について調査している。地域により、極端降水に寄与する天候レジームが異なっていることが分かった。力学的な考察を行った後、結果を国際誌に投稿する予定である。

(2) 天候レジームの季節間(S2S)予報におけるバイアス補正方法に関する研究

数値予報モデルはそれぞれ固有のバイアスを持っており、S2S 時間スケールではそのバイアスが顕著に現れる(図9)。そのため、S2S 予報データのバイアス補正方法について検討した。3つのバイアス補正方法として、再解析データ気候値を用いた Z500 偏差を用いた天候レジームを計算する方法(non calibration)、モデル気候値(各モデルの再予報データから計算)による Z500 偏差を用いて天候レジームを計算する方法(standard calibration)、再解析データ気候値から再予報データの天候レジーム予報を計算した後にその頻度のバイアスを補正する方法(flow-dependent calibration)の3つを比較した。KIT のグループがヨーロッパ域の天候レジームを、筑波大のグループが東アジア域の天候レジームを担当した。その結果、予測精度の違いはどちらの領域でも補正方法に依存しないことが示された。一方で、天候レジームの頻度に関しては、non calibration より standard calibration で予測が改善されることが示された。また、flow-dependent calibration では standard calibration よりさらに改善したものの、その違いは大きくなかった。

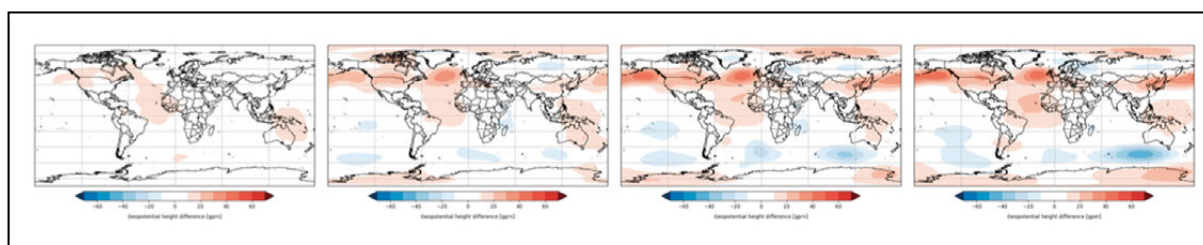


図9 1/1, 4/2, 7/1, 10/2 を初期日(左から)とする再予報データから計算した気候値(30日予報)と再解析から計算した気候値との差(モデルー再解析)。

[9] 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。新たに利用可能となった季節予報データ（6ヶ月先まで）についても、予報表示サイト（Copernicus Museum）の立ち上げを開始し、今後プロダクトを充実させていく予定である。

[10] VLES モデルの開発

Very Large Eddy Simulation (VLES)は、大きな渦を直接解く百～数百メートルメッシュ解像度のモデル系のことである。しかし、VLES は都市気象に使うとき、サブグリッドスケールであるビル等の効果を直接解けないため、その都市効果をどのようにパラメタライズ化するかはまだ課題として残っている。モデルのサブグリッド都市効果は大きく分けると2つある。一つ目はビル等の都市構造による大気の摩擦等の力学的効果である。二つ目は都市キャノピー層内の放射過程や人工的排熱等の熱的效果である。本研究は、CCS の既存の City- LES モデルをベースに、都市構造による力学的・熱的なサブグリッド効果を VLES に導入する方法を考案し、実装することを目的としている。まず、2020 年度の成果として、力学的効果を導入・実装した。具体的に、ビル等からの空気摩擦は力学的な基本方程式に空気抵抗項として追加した。空気抵抗項を計算するために、サブグリッドスケールのビルや道路等の都市形態が使われる。そして、モデルに実装した結果、ビルの存在によって、都市キャノピー内の平均風速が空気抵抗項が実装されていない場合より、減衰したことが確認された（図 10）。(Doan)

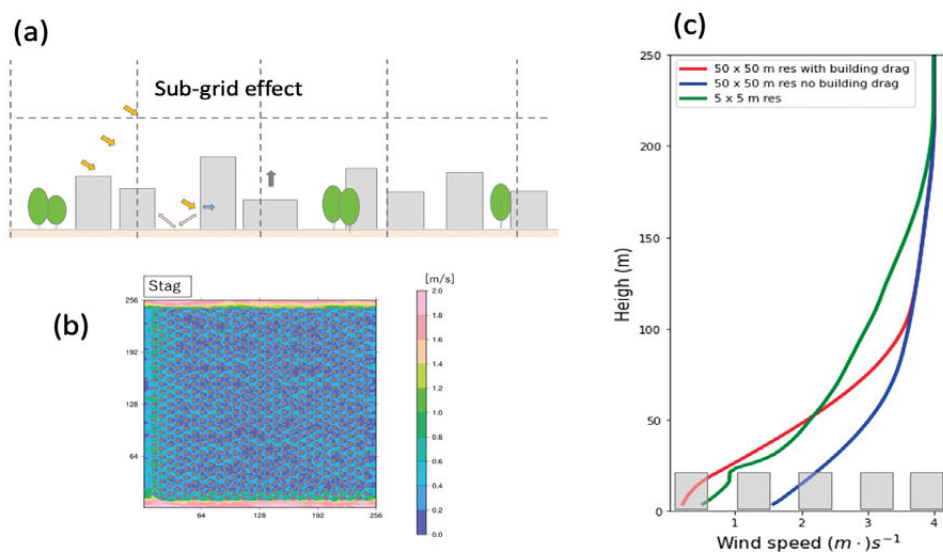


図 10 VLES モデルの概要。ビルディングのバルク効果を反映させるため、LES に多層キャノピーモデルを導入する。

[11] 熱帯都市における降水

都市域で発生する降水のメカニズムについては、まだ十分に理解されないことが多い。特に、対流性降水が支配的な熱帯地域での都市降水についての研究事例が少ない。本研究は、赤道直下の熱帯都市であるシンガポールにおける降水への都市影響を数値モデルを用いて調べそのメカニズムを明らかにする。具体的に、シンガポール気候研究所（CCRS）と UK の Met Office 共同で開発された 300m 解像度の天気予報システム uSINGV を用いて、インターモンスーン期間である 11 月を対象とし、都市影響の感動実験を行った。本研究が明らかにしたのは、シンガポールと北部とマレー半島の南端に位置する Johor Baru 都市圏付近で発生する午後の降水の「ホットスポット」は都市影響との関連性が強い。午後遅くから夕方にかけての総降水量の 20～30% が都市効果によるもので、熱帯都市の強い都市効果があることが明らかになった。降水量が増加した理由としては、都市ヒートアイランド現象による対流の活発化、摩擦収束の増加、強い海風による境界層水分の流入の増加、海風前線の海側への移動などが考えられる。本研究の成果は UK の王立気象学会の Quaterly Journal 誌に発表した。（Doan）

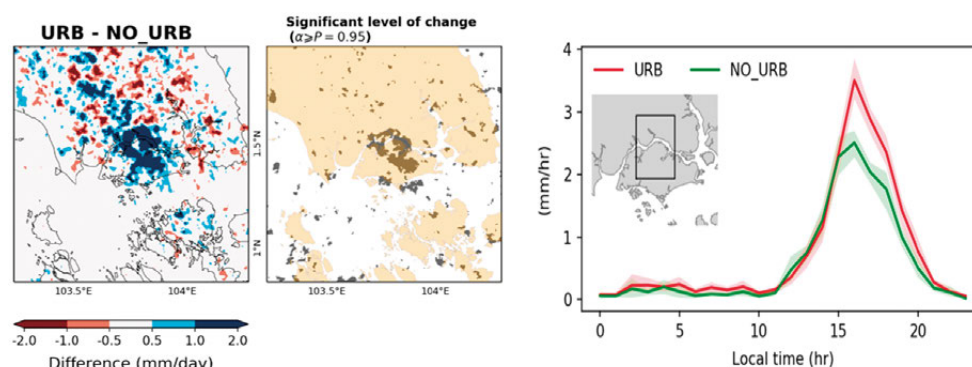


図 11 熱帯都市であるシンガポールでの都市化による降水への影響。数値計算結果は都市効果が都市域の降水の 20～30% 増加することを示した。

[12] 気候研究用の新しい自己組織化マップの開発

本研究は気候研究用の新しい自己組織化マップアルゴリズム（Structural SOM または S-SOM と名付ける）を提案する。S-SOM の特徴は、時空間構造を持つ入力データを扱えることである。具体的には、ベストマッチングユニット (BMU) の検索スキームに従来のユークリッド距離 (ED) の代わり、構造的類似指数 (S-SIM) を導入した。S-SIM を用いることで、ED では不可能な、高・低気圧の位置などの空間的な相関関係を考慮することが可能となる。新しいアルゴリズムの精度検証として、ERA-Interim 海面気圧データを用いて、日本周辺の天気パターンを分類を試した。その結果、S-SOM は ED-SOM や COR-SOM（ユークリッド距離やピア

ソン相関係数を用いた SOM) より、クラスタリング質とトポロジー保存の 2 つの点で優れていることがわかった。本研究の成果は欧州地球科学連合 (EGU) の Geoscientific Model Development 誌に発表した。(Doan)

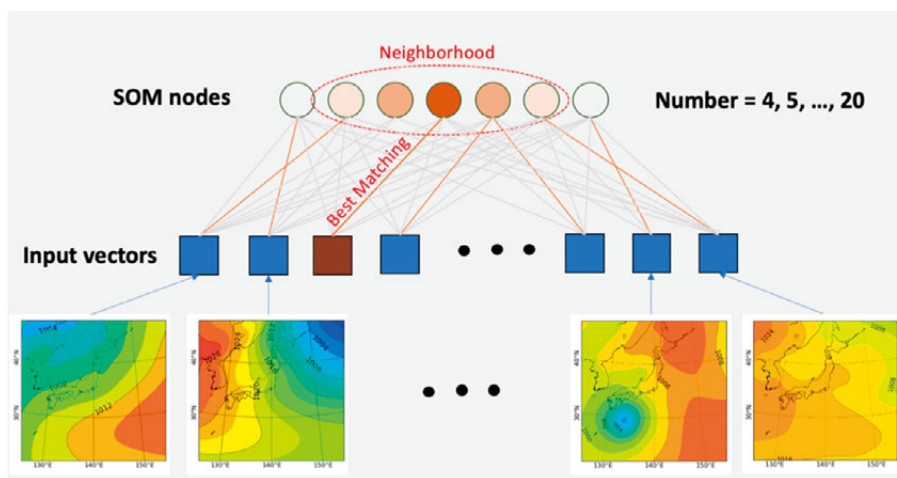


図 12 自己組織化マップアルゴリズムの概念図

4.教育

指導学生 (日下)

D3 (地球) : 浅野裕樹、佐藤拓人、佐藤亮吾

D2 (地球) : 中村真悟、畔上泰彦

M2 (地球) : 池田貴史、五木田夏実、大津佑介

M2 (教育) : 石田理沙

M1 (地球) : 小野寺平、小林峻、鎌田碧、杉谷大樹、西場慧

B4 (地球) : 駒崎寛和、高田菜月、石川里桜

指導学生 (田中)

D1 (地球) : 松信匠

M2 (地球) : 石山涼太、豊岡大地、縄司瑛太、伊藤駿、熊谷怜皇、栗花卓也

B4 (地球) : 赤見彰一、五木田麗奈、岩田美佳、亀田遼

指導学生 (松枝)

M1 (地球) : 毛利亮、大貫航太郎

B4 (地球) : 古賀太暁、黒川里帆、佐久間耀

B1 (地球) : 50 名 (学生名省略、クラス担任)

集中講義など

放送大学放送講師・地球科学客員教授 次期放送分のスタジオ収録（田中）

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. The Helmut E. Landsberg Award, American Meteorological Society, Hiroyuki Kusaka, For advancements in urban canopy modeling, adopted by international research communities, and pioneering contributions to downscaling past, current, and future urban climates, 2021 年 1 月（日下）
2. 第 59 回日本生気象学会大会優秀発表賞、中村慎吾、日下博幸、佐藤亮吾、将来気候下における熱中症搬送者数の増加が地域の救急医療体制へ与える影響、2020 年 11 月 29 日（日下）

外部資金

1. 環境研究総合推進費、日下博幸、分担、2019 年～2021 年度、全年度直接経費：30,000,000 円（2020 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. 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 年～2022 年度、全年度直接経費：未定（2020 年度直接経費：900,000 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）
3. 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 年～2022 年度、全年度直接経費：未定（2020 年度直接経費：780,000 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）
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、2018 年～2020 年度、全年度直接経費：1,550,000 円（2020 年度直接経費：300,000 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）
5. 共同研究(株式会社ウェザーニューズ)、日下博幸、代表、2017 年～2020 年 8 月、1,095,000 円（2017 年 9 月～2020 年 8 月：1,100,000 円）、（日下）
6. 共同研究(株式会社竹中工務店)、日下博幸、代表、2017 年～2020 年度、全年度直接経費：3,133,200 円（2020 年度直接経費：550,000 円）、（日下）
7. 共同研究(パシフィックコンサルタンツ株式会社)、日下博幸、代表、2020 年度（日下）

8. 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（2020 年度直接経費：1,000,000 円）、北極大気の予測精度向上に関する研究（山上）
9. 独立行政法人日本学術振興会科学研究費補助金、ドアン・グアン・ヴァン、分担、2019 年～2022 年度、全年度直接経費：未定（2020 年度直接経費：900,000 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（Doan）

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. Hamdi, R., H. Kusaka, QV., Doan, et al., 2020: The State-of-the-Art of Urban Climate Change Modeling and Observations. *Earth Systems and Environment*, 4, 631–646.
2. Doan, Q. V., H. Kusaka, T. Sato, and F. Chen, 2020: A structural self-organizing map (S-SOM) algorithm for weather typing. *Geoscientific Model Development*, 14,2097-2111.
3. Garratt, J., J. Wilczak, A. Holtslag, H. P., Schmid, A. Grachev, A. Beljaars, T. Foken, F. Chen, C. Fairall, B. Hicks, H. Kusaka, A. Martilli, V. Masson, M. Mauder, S. Oncley, M. Rotach and M. Tjernström, 2020: Commentaries on Top-Cited Boundary-Layer Meteorology Articles. *Boundary-Layer Meteorology*, 177(2), 169-188.
4. Sato, T., H. Kusaka, and H. Hino, 2020: Quantitative assessment of the contribution of meteorological variables to the prediction of the number of heat stroke patients for Tokyo. *SOLA*, 16, 104–108.
5. Tanaka, H.L., Nakamichi, H., and Iguchi, M. 2020: PUFF Model Prediction of Volcanic Ash Plume Dispersal for Sakurajima Using MP Radar Observation, *Atmosphere*, MDPI, 2020, 11(11), 1240 <https://doi.org/10.3390/atmos11111240>
6. Hagiwara, M. and H. L. Tanaka, 2020: A Theoretical Analysis of the Atmospheric Gravity Wave that Connects the Thermosphere and the Troposphere, *Tsukuba Geoenvironmental Sciences*, 16, 1-14, <http://doi.org/10.15068/00162379>
7. Yamagami, A., and M. Matsueda, 2020: Subseasonal forecast skill for weekly mean atmospheric variability over the Northern Hemisphere in winter and its relationship to midlatitude teleconnections. *Geophysical Research Letters*, 47, doi:10.1029/2020GL088508.

8. Yamagami, A., and M. Matsueda, 2021: Statistical characteristics of Arctic forecast busts and their relationship to Arctic weather patterns in summer. Atmospheric Science Letters, in press. doi:10.1002/asl.1038.
9. Jie Wang, Fei Chen, Q. V., Doan, Youpeng Xu, 2021: Exploring the effect of urbanization on hourly extreme rainfall over Yangtze River Delta of China. Urban Climate, 36, 100781-100781 doi:10.1016/j.uclim.2021.100781
10. Doan, Q. V., A., Dipankar, A., Simón-Moral, C. Sanchez, P., Venkatraman, M., Roth, and X. Y., Huang, 2020: Urban induced modifications to the diurnal cycle of rainfall over a tropical city. Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, 147(735),1189-1201.
11. Nguyen T. H., T., Nagashima and Q.V., Doan, 2020: Air quality modeling study on the controlling factors of fine particulate matter (PM2.5) in Hanoi: A case study in December 2010. Atmosphere, 11(7), 733.
12. Dung Phung, Thong Nguyen-Huy, Ngoc Nguyen Tran, Dang Ngoc Tran, Quang-Van Doan, Son Nghiem, Nga Huy Nguyen, Trung Hieu Nguyen and Trude Bennett, 2021: Hydropower Dams, River Drought and Health Effects: A Detection and Attribution Study in the Lower Mekong Delta Region. Climate Risk Management, 32(100280). Doi: <https://doi.org/10.1016/j.crm.2021.100280>

B. 査読無し論文

1. 田中博, 2020: 「温暖化将来予測はあくまで仮説」副題: CO2 の影響範囲見極めを, 月刊エネルギーフォーラム 2020 年 5 月号 p98-99.

(2) 国際会議発表

A. 招待講演

特になし

B. 一般講演

1. Yamagami, A., and M. Matsueda, 2020: Forecast skill for wintertime atmospheric variability over the Northern Hemisphere and its relationship to mid-latitude teleconnections. American Geophysical Union fall meeting, 1-17 December, Online, 2020
2. Quang-Van Doan, Fei Chen, Hiroyuki Kusaka and Jie Wang, 2020: Linkage between urbanization and the change in extreme precipitation over the Tokyo metropolitan area, Japan. AGU Fall Meeting, Online, 2020/12

3. Lidia Lazarova Vitanova, Shinji Yamamura, Hiroyuki Kusaka and Quang-Van Doan, 2020: Numerical evaluation system for improving the environmental value and reducing an environmental load of Transit-Oriented Development. AGU Fall Meeting, Online, 2020/12
4. Thanh Hung Nguyen, Tatsuya Nagashima and Quang-Van Doan, 2020: A high-resolution emission inventory for air quality modeling studies in Hanoi, Vietnam in 2017. AGU Fall Meeting, Online, 2020/12
5. Jie Wang, Fei Chen, Quang-Van Doan, Youpeng Xu, 2020: Using High-resolution Satellite Precipitation Products to Explore the Effect of Urbanization on Heavy Rainfall over Yangtze River Delta of China. AGU Fall Meeting, Online, 2020/12
6. Sato, R., H. Kusaka and T. Sato, 2020: Developing prediction model of number of heat stroke patients and future prediction of heat stroke risk in Japan. AGU Fall Meeting, Online. 2020/12/15

(3) 国内学会・研究会発表

A. 招待講演

1. 日下博幸: 2020. For advancements in urban canopy modeling, adopted by international communities, and pioneering contributions to downscaling past, current, and future urban climate. 第 72 回気候影響利用研究会, 21 November, 2020, Online.
2. 日下博幸、ドアングアンヴァン、リディアビタノバ、中村真悟、ロナルドエストケ: 2020. アジアのメガシティの都市気候、日本地理学会 2020 年秋季学術大会、2020/11/07、オンライン
3. 日下博幸、西暁史、柿沼亜衣、ドアングアンヴァン、小野寺平、遠藤周平: 2020. フェーン昇温の主要なタイプは、本当に熱力学理論タイプなのか?、日本地理学会 2020 年秋季学術大会、2020/10/18、オンライン
4. Quang-Van Doan, Anurag Dipankar, Andres Simon-Moral, 2020: シンガポールの都市化が同地域の対流性降水に及ぼす影響、日本地理学会 2020 年秋季学術大会、2020/10/18、オンライン

B. その他の発表

1. 中村真悟、日下博幸、佐藤亮吾, 2020: 将来気候下における熱中症搬送者数の増加が地域の救急医療体制へ与える影響、第 59 回日本生気象学会大会、オンライン、2020/11/28
2. 池田貴史、日下博幸, 2020: 暑熱順化を考慮した日々の熱中症搬送者数予測モデルの開発、第 59 回日本生気象学会大会、オンライン、2020/11/28

3. 日下博幸, 佐藤亮吾, 佐藤拓人, 2020: 都市構造が都市内部の暑熱環境に与える影響の調査, CSIS DAYS 2020 : 全国共同利用研究発表大会, オンライン, 2020/11/20
4. 大津佑介, 日下博幸, 2020: タイ・バンコクの都市化が降水に与える影響, 日本地理学会 2020 年秋季学術大会, オンライン, 2020/11/14
5. 佐藤亮吾, 日下博幸, 佐藤拓人, 2020: 将来気候下における日本全国市区町村別の熱中症リスクマップの作成, 日本地理学会 2020 年秋季学術大会, オンライン, 2020/11/14
6. 池田貴史, 日下博幸, 2020: 暑熱順化を考慮した日々の熱中症搬送者数予測, 日本地理学会 2020 年秋季学術大会, オンライン, 2020/11/14
7. 中村真悟, 日下博幸, 佐藤亮吾, 2020: 温暖化に伴う熱中症搬送者数の増加が地域救急医療体制へ与える負荷, 日本地理学会 2020 年秋季学術大会, オンライン, 2020/11/14
8. 浅野裕樹, 日下博幸, 金子竜也, 横山仁, 2020: つくば市で発生した放射霧に対するヒートアイランド現象の効果, 日本地理学会 2020 年秋季学術大会, オンライン, 2020/11/14
9. 畔上泰彦, 今西美音子, 藤原邦彦, 日下博幸, 2020: 夏季街区内の微気候が歩行者経路選択に与える影響, 日本気象学会 2020 年度秋季大会, オンライン, 2020/10/28
10. 山上晃央, 松枝未遠, 2020: S2S 時間スケールにおける北半球冬季の週平均場の予測可能性とテレコネクションとの関係. 日本気象学会 2020 年度秋季大会, 2020/10/28-30, オンライン.
11. Quang-Van Doan, 日下博幸, 佐藤拓人, Fei Chen, 2020: 気象パターン分類用の新しい自己組織化マップアルゴリズム S-SOM の開発, 日本気象学会 2020 年度秋季大会, オンライン, 2020/10
12. 佐藤亮吾, 日下博幸, 佐藤拓人, 2020: 日本全国の各市区町村別を対象とした熱中症救急搬送者数予測の将来予測, 日本気象学会 2020 年度秋季大会, オンライン, 2020/10/28
13. 佐藤拓人, 日下博幸, 2020: 気圧配置分類に有効な類似度計算法の調査, 日本気象学会 2020 年度秋季大会, オンライン, 2020/10/28
14. 浅野裕樹, 金子竜也, 横山仁, 日下博幸, 2020: つくば市におけるヒートアイランド現象が放射霧に与える影響, 日本気象学会 2020 年度秋季大会, オンライン, 2020/10/28
15. 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, 日本気象学会 2020 年度春季大会, 神奈川, 2020/05/19
16. 佐藤亮吾, 佐藤拓人, 日下博幸, 清水麻未, 荒木貴光, 2020: 地域性・季節性・年齢を考慮した熱中症救急搬送者数予測モデルの開発, 日本気象学会 2020 年度春季大会, 神奈川, 2020/05/19

17. 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, 日本気象学会 2020 年度春季大会, 神奈川, 2020/05/19
18. 佐藤拓人, 日下博幸, 2020: 気圧配置分類における類似度計算法の相互比較, 日本気象学会 2020 年度春季大会, 神奈川, 2020/05/19

(4) 著書、解説記事等

1. Tanaka, H.L. and Žagar, N. 2020: 3D Modal Variability and Energy Transformations on the Sphere. In: Žagar N., Tribbia J. (eds) Modal View of Atmospheric Variability. Mathematics of Planet Earth, vol 8. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-60963-4_4.
2. Tanaka, H.L. 2020a: Generalization of Baroclinic Instability and Rossby Wave Saturation Theory. In: Žagar N., Tribbia J. (eds) Modal View of Atmospheric Variability. Mathematics of Planet Earth, vol 8. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-60963-4_5.
3. Tanaka, H.L. 2020b: Applications to Predictions and Climate Studies. In: Žagar N., Tribbia J. (eds) Modal View of Atmospheric Variability. Mathematics of Planet Earth, vol 8. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-60963-4_6.
4. 天野一男・田中博他編 2021: 地学基礎、実教出版（文部科学省検定済み教科書、高等学校理科用）200pp.
5. 田中博・伊賀啓太 2021: 改訂版 はじめての気象学、放送大学教材、放送大学教育振興会、NHK 出版、258pp

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・Doan）
- ・ 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. 株式会社パシフィックコンサルタンツとの共同研究（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 (目下)
2. ハノイ科学技術大学 (USTH) と本センター間の協定 (目下)
3. アリゾナ州立大学 (UCRC) と本センター間の協定 (目下)
4. 日越大学 (VNU) (ベトナム) との連携 (目下)
5. アジア工科大学院 (Asian Institute of Technology) (タイ) との連携 (目下)
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 (目下)
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. 米国ミズリー大学コロンビア校との部局間協定 ブロッキングと異常気象の研究 (田中)
9. ハンブルグ大学 (ドイツ) との共同研究、大気ノーマルモードの応用研究 (田中)
10. National Center for Atmospheric Research (USA) との連携 (Doan)
11. Centre for Climate Research Singapore (Singapore) との連携 (Doan)
12. National University Singapore (Singapore) との連携 (Doan)
13. University of Calcutta (India) との連携 (Doan)
14. University of Texas at Austin (USA) との連携 (Doan)
15. Vietnam National University (Vietnam) との連携 (Doan)
16. Ho Chi Minh City Medicine and Pharmacy University (Vietnam) との連携 (Doan)
17. Griffith University (Australia) との連携 (Doan)

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 国際学会セッションの共同主催者 American Geoscience Union Fall meeting (2020 年 12 月) (Doan)
2. アメリカ気象学会 (AMS) 都市環境部会 (BUE) 定例 Webinar の主催 (2020 年 11 月、2021 年 2 月) (Doan)

9. 管理・運営

特になし

10.社会貢献・国際貢献

1. 東京都環境影響評価審議会委員 (目下)
2. 熱中症予防声かけプロジェクト実行委員 (目下)
3. 日本学術会議自然地理学環境防災小委員会委員 (目下)
4. 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 (目下)
5. 東京都環境影響評価審議会 委員 (目下)
6. 日本ヒートアイランド学会 理事 (目下)
7. 気候影響・利用研究会 幹事 (目下)
8. 一般財団法人日本海事協会 NEDO 洋上風況調査手法の確立に関する技術委員会委員 (目下)
9. 日本地理学会地理学評論 Ser.A 編集委員会委員 (目下)
10. 環境省気候変動適応における広域アクションプラン策定事業全国アドバイザー (目下)
11. 環境省気候変動適応における広域アクションプラン策定事業評価委員 (目下)
12. 日本気象学会 山本賞候補者推薦委員会委員 (目下)
13. 気象庁異常気象分析作業部会 委員 (松枝)
14. 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)
15. アメリカ気象学会(AMS) 都市環境部会 (BUE) 委員(任期 2020 年 1 月～2023 年 1 月)
(Doan)
16. NHK E テレ (2020 年 10 月 11 日)
「サイエンスゼロ」に目下教授が出演。都市街区気象 LES モデルの紹介。
17. NHK 水戸 (2020 年 11 月 6 日)
「サイエンスゼロ」 (目下)
18. 中日新聞 朝刊 (2020 年 8 月 18 日)
浜松での日本最高気温記録 41.1℃の解説。 (目下)
19. 時事通信 (2020 年 8 月 17 日)
浜松での日本最高気温記録 41.1℃の解説。 (目下)
20. NHK (2021 年 1 月 9 日)
目下教授が取材を受けた内容が「NHK スペシャル」内で紹介された。

11.その他

とくになし

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, 額田 彰

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

研究員 平賀 弘平

学生 大学院生 12 名、学類生 6 名

学内共同研究員

安永 守利, 和田 耕一, 櫻井 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)

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、ストレージシステム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
- 高速ストレージシステムと並列 I/O の性能及び拡張性の向上
- ノードローカルストレージを用いたシステムソフトウェアの研究
- 機械学習、ビッグデータサイエンスにおけるストレージ性能の向上
- 大規模データ解析アプリケーション、深層学習フレームワークの高速化
- 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を行っているのが現状である。

一方、我々は Cygnus をプラットフォームとする CHARM(Cooperative Heterogeneous Acceleration with Reconfigurable Multidevices, 再構成可能な多重複合型演算加速デバイスによる高性能計算)の研究の一環として、複数の性質の異なる演算加速装置、すなわち GPU と FPGA を統一的にプログラミング可能なシステムの開発を続けており、この言語フレームワークを CAMP (Cooperative Acceleration by Multi-device Programming)と呼んでいる。現在の CAMP のターゲットは OpenACC で GPU と FPGA の両アクセラレータを単一のプログラム中でアクセスできるようにすることで、1つの OpenACC ベースのソースコード中でプログラマが directive によってどの部分をどのアクセラレータにオフロードするかを指定することで、CHARM 向けの実行コードとランタイムシステムを実現する。しかし、FPGA 用の商用の OpenACC コンパイラは現状では存在しないため、米国 ORNL (Oak Ridge National Laboratory)の FTG (Future Technology Group)が開発を進めている研究用コンパイラである OpenARC を用いる。同グループとの国際共同研究により OpenACC 向けの CAMP を実現するトランスレータである MHOAT (Multi-Hybrid OpenACC Translator)を開発中である。図 1 に MHOAT の処理の概念図を示す。

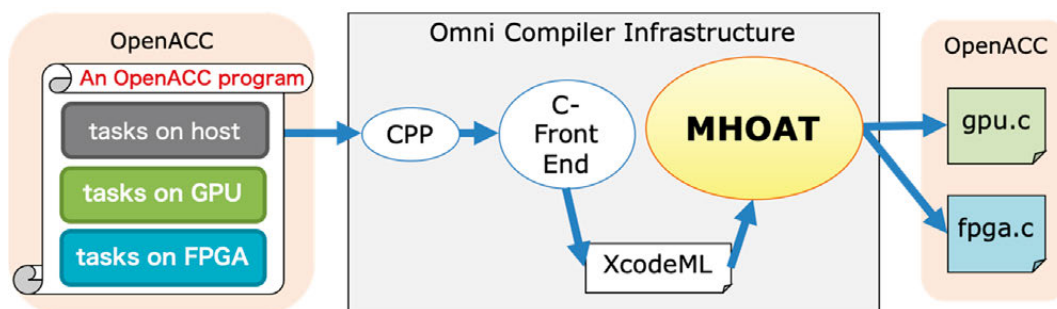


図 1 MHOAT の処理フロー

MHOAT によって FPGA と GPU という 2 種類のデバイス用に分離された OpenACC コードは、それぞれのバックエンドコンパイラ (GPU: PGI Compiler, FPGA: OpenARC) によってオブジェクトが生成され、最終的に gcc によるリンクを経て、1 つのホストプログラムから FPGA と GPU の各デバイス用カーネルプログラムを起動可能なオブジェクトが完成する。

2019 年度の研究では、GPU で行列計算 (matrix-matrix multiply) を行い、その結果生成された行列を係数行列とする連立一次方程式の求解を FPGA 上で CG 法で行うというテストコードを MHOAT によって処理し、PGI Compiler と OpenARC をそれぞれ呼び出して全体を連携する処理が可能であることを示した。2020 年度の研究では、MHOAT をより高度な実用的プログラムに適用可能とするため、プロトタイプで問題となっていたいくつかの問題に取り組んだ。主要な改造は、FPGA にオフロードされる部分について、そのままコードを書き込むことができず、オフロードのための directive ("`#pragma acc kernels`" 等) の直後に、処理コードを閉じ込めた関数を一旦書き、その関数の中で実際の処理を書く必要があったこと、関数内で必ず特定のヘッダを include しなければいけなかったこと等である。これらの主要因は、FPGA 用のバックエンドコンパイラとして用いている OpenARC の作りの問題で、ユーザプログラムのコードは C 言語なのに対し、そこから生成される OpenCL (Intel 社の FPGA 用の高位合成言語は OpenCL が標準である) プログラムは C++ に準拠しているという複雑な特性を持っていることによる。この問題は ORNL のグループと協議しているが、解決が困難で現在も検討中である。

また、昨年度までの簡単なテストコードに加え、本格的なアプリケーションコードを対象とするため、本センターの宇宙物理学研究部門・梅村教授のグループと共同で開発している CHARM 向けの宇宙初期天体シミュレーションコード ARGOT の移植を進めている。ARGOT は本研究部門の小林助教を中心とする研究により、CHARM による GPU と FPGA の組み合わせにより、最大で GPU のみの計算に比べ 17 倍もの高速化が可能であることが示されている。よって、MHOAT でこのコードがコンパイルでき、そのコードが十分な効率で実行可能となれば CHARM コンセプトの有効性を示す重要な例となる。本研究も現在継続中である。

2020 年度の成果として、MHOAT に関する査読付き論文を国際会議 HLPP2020 において発表した[2]。また、その基本となる研究を 2019 年度に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において発表した成果が認められ、2020 年度の情報処理学会 CS 領域奨励賞が授与された。

[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の日下教授グループで開発中の都市気象モデルシミュレーション City-LES の

GPU 化を進めている。2019 年度までの研究で、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、単純な力学過程に基づく流体コードを主とする部分について Cygnus 上で最大 32 ノード(128GPU, NVIDIA Tesla V100)を用いて加速化し、weak scaling において CPU のみの場合の約 9 倍の性能、strong scaling においても約 6 倍の性能が得られていた。

2020 年度の研究では、その性能をさらに向上させ、また対象をこれまでの単純なモデル(建物なし、地表植生なし)ではなく、複雑構造の建物、植生、さらに太陽の移動に伴う太陽光の移動に対応した、完全な City-LES のフルモデルを GPU 化する研究を行った。昨年度の研究成果により、CUDA ではなく OpenACC のみで記述しても、少なくとも NVIDIA Tesla V100 GPU では速度はほとんど低下しないことと、特定のカーネルが CPU から大きく速度向上していない場合でも、そのカーネルを CPU に残すことで CPU・GPU 間のデータ転送時間の方がボトルネックとなり、返って性能が低下することがわかっており、このコンセプトの下で詳細モデルの GPU 化を進めた。

まず、昨年度の研究において少数の CUDA カーネルが積み残されていたので、これを完全に OpenACC 化した。その上で、複雑な建物構造に対応するため、空間メッシュの計算が単純モデルでは 2 次精度の中央差分だったものを 5 次精度の風上差分とし、これを GPU 化した。対応する関数は advection と呼ばれるカーネルで、その基本的なループ構造は単純で、OpenACC による GPU 化に非常にうまく対応した。結果として、advection カーネルの GPU 実行性能は CPU 実装に比べ 20.6 倍に高速化された。実測は、Cygnus の 1 ノード上で 4 つの MPI プロセスを走らせて行った。CPU 版はノード上の 24 のコアを MPI プロセスに均等分割し、プロセス当たり 6 スレッドで実行した。GPU 版は各 MPI プロセスに GPU を 1 つずつ割り当てた。従って、この性能向上は Cygnus で同一のリソース(計算ノード)を用いた場合に得られる結果である。性能向上の結果を図 2 (左)に示す。結果は 200 タイムステップの時間発展における所要時間である。

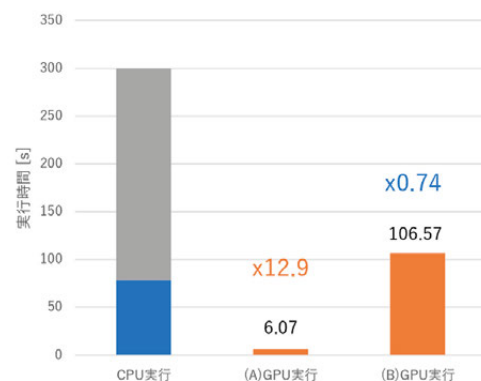
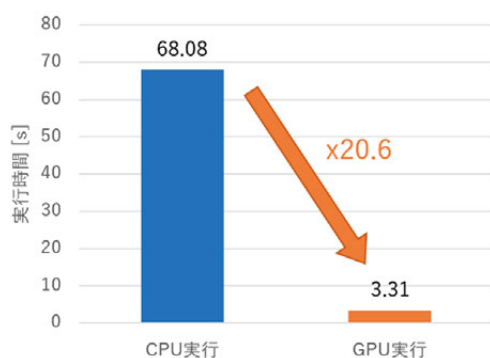


図2 (左) advection カーネルの GPU 化による性能向上, (右) surface_driver カーネルの GPU 化による性能向上 (中央は人工排熱なし, 右は人工排熱ありのデータによる)

次に, 太陽光の移動に伴うレイトレーシング処理を含むカーネルである surface_driver の GPU 化を行った。このカーネルの基本ループでは配列への reduction 処理が発生するため, ループ内に一時的なスカラー変数を設け, この処理低下を回避した (なお OpenACC 2.7 以降では reduction の対象として配列を扱えるようになったため, この工夫は不要になった)。さらに, ループ内にデータ依存性が一部存在するため, その部分はやむを得ず逐次実行 directive ("!\$acc loop seq") を含め, 結果の正しさを保証している。これらを踏まえて GPU 化を行った結果, 人工排熱を考慮しないデータでは GPU 版の性能は CPU 版の 6.07 倍に高速化された。一方, 人工排熱を考慮したデータでは, GPU 版の性能は CPU 版の 0.74 倍となり, 速度が低下してしまった (図2 (右))。しかし, GPU 版が CPU 版よりも少し性能が低い場合でも, そのカーネルを CPU に残した方が返ってデータ転送オーバーヘッドを招いて性能が逆転するというケースを昨年度にも経験しており, surface_driver でもその場合のデータ転送時間を測定した結果, 予想通りカーネルの実行時間を遥かに上回る時間 (200 回の時間反復で GPU 実行時間の 2 倍以上, 図2 (左) の灰色部分) がかることがわかった。従って, いずれの場合でも GPU でカーネルを実行し, その前後の GPU 上のカーネルとの間で GPU メモリを共有したままの方が総合的な性能が高いことがわかった。

以上の GPU 化の結果, City-LES 全体での速度向上は, CPU のみの実行に比べ, advection 及び surface_driver を CPU 側に残した場合では 1.49 倍に留まるが, 両カーネルとも GPU 化した場合は 4.3 倍に高速化されることがわかった。これらの性能向上を図3 に示す (中央は両カーネルを CPU に残した場合, 右端は全てを GPU 化した場合)。今年度の研究成果は国際会議 ISPDC2020 において査読付き論文として発表された[1]。

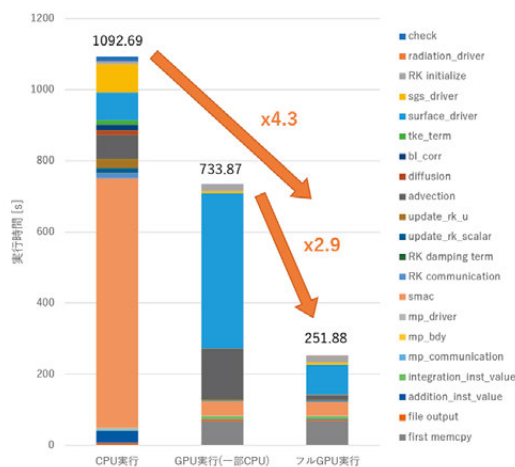


図3 City-LES の詳細モデル対応コードの完全 GPU 化による性能向上

[3] 二次元分割を用いた並列三次元 FFT における計算と通信のオーバーラップの自動チューニング (高橋)

高速 Fourier 変換 (fast Fourier transform、以下 FFT) は、科学技術計算において今日広く用いられているアルゴリズムである。並列三次元 FFT においては、三つの次元 (x 、 y および z 軸) のうちの一つの次元のみ (例えば z 軸) のみを分割した場合、 z 軸におけるデータ数は MPI プロセス数以上となる必要があり、問題サイズに制約が生じることになる。この問題に対処する方法として、二次元分割を用いた並列三次元 FFT が提案されている。しかし、OpenMP による通信スレッドを導入した計算と通信のオーバーラップを用いた二次元分割による並列三次元 FFT の自動チューニングはまだ提案されていないのが現状である。

そこで、二次元分割を用いた並列三次元 FFT における計算と通信のオーバーラップを自動チューニングし性能評価を行った結果について述べる。

データ数 N を $N = N_1 \times N_2 \times N_3$ とし、MPI プロセスが $P \times Q$ の二次元にマッピングされるとする。 $P \times Q$ 個の MPI プロセスを持つ分散メモリ型並列計算機では、三次元配列 $x(N_1, N_2, N_3)$ は二番目の N_2 次元と三番目の N_3 次元に沿って分散される。 N_2 が P で割り切れ、 N_3 も Q で割り切れる場合、 $N_1 \times (N_2/P) \times (N_3/Q)$ 個のデータが各 MPI プロセスに分散される。図 4 は、 y 軸と z 軸の初期データを二次元分割した並列三次元 FFT を示している。

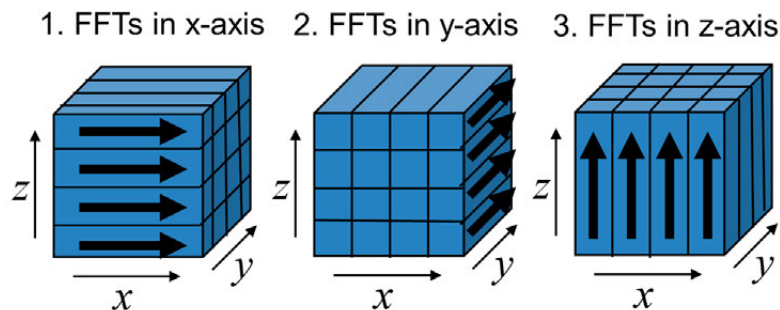


図 4 二次元分割を用いた場合の並列三次元 FFT

計算と通信のオーバーラップには、MPI 非同期通信が広く使われているが、OpenMP による通信スレッドを導入した計算と通信のオーバーラップ手法が提案されているため、これを用いた。

図 5 は、パイプライン化された計算と通信のオーバーラップを示している。図 5 において、NDIV は計算と通信のオーバーラップの分割数である。

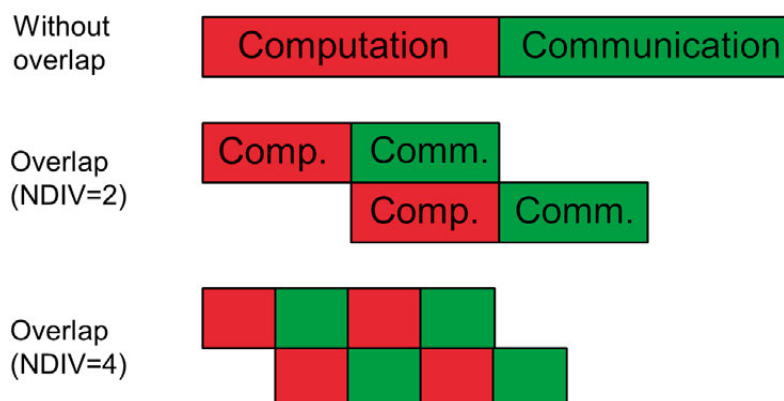


図 5 パイプライン化された計算と通信のオーバーラップ

二次元分割を用いた並列三次元 FFT の計算量と通信量のオーバーラップを自動チューニングする手法を提案する。自動チューニングは 3 つのステップで構成されている。(1) MPI プロセスグリッド ($P \times Q$) の選択、(2) 計算と通信のオーバーラップの分割数 NDIV の選択、(3) ブロックサイズ NB の選択。

通常、MPI プロセスの総数が $P \times Q$ となるような P と Q は $P \approx Q \approx \sqrt{PQ}$ となるように選択する。 P と Q の全ての組み合わせを検索することで、最適な P と Q の組み合わせを調べることができる。MPI プロセス数 $P \times Q$ が 2 のべき乗の場合、 P と Q の全ての組み合わせを調べたとしても、探索空間は $\log_2(PQ) + 1$ となる。

また、計算と通信のオーバーラップの分割数を増やすと、オーバーラップ率も高くなる。一方で、メッセージサイズを小さくすると、全対全通信の性能が低下する。このように、オーバーラップ率と全対全通信の性能はトレードオフの関係にある。

オリジナルの FFTE 7.1alpha のデフォルトのオーバーラップパラメータは NDIV=4 である。今回の実装では、オーバーラップパラメータ NDIV を 1、2、4、8、16 の間で変化させている。

オリジナルの FFTE 7.1alpha のデフォルトのブロッキングパラメータは NB=32 である。最適なブロックサイズは問題サイズに依存する可能性があるが、ブロックサイズ NB も変化させることができる。今回の実装では、NB を 8、16、32、64 の間で変化させている。

性能評価にあたっては、FFTE 7.1alpha (オーバーラップなし)、FFTE 7.1alpha (オーバーラップあり、NDIV=4)、FFTE 7.1alpha に自動チューニング (AT) を行ったもの、および FFTW 3.3.9 と性能を比較した。測定に際しては、weak scaling と strong scaling における経過時間を測定した。なお、FFT の計算は倍精度複素数で行い、三角関数のテーブルはあらかじめ作り置きとしている。入力と出力では同じデータ分散を使用した。FFTW では、“measure” planner を使用した。Xeon Phi クラスタとして、最先端共同 HPC 基盤施設 (JCAHPC) に設置されている Oakforest-PACS (8208 ノード) の 1~2048 ノードを用いた。コンパイラは FFTE に対しては Intel Fortran Compiler version 19.0.5.281 を、FFTW に対しては Intel C Compiler version

19.0.5.281 を用いた。コンパイルオプションは-O3 -xMIC-AVX512 -qopenmp を指定した。MPI ライブラリは Intel MPI 2019.5.281 を用いた。各ノードあたりの MPI プロセス数は 4、各 MPI プロセスあたりのスレッド数は 17 に設定し、環境変数 KMP_AFFINITY=balanced を設定して flat/quadrant モードで MCDRAM のみを用いて実行した。 $N = 2^m$ 点 FFT の GFlops 値は $5N \log_2 N$ より算出している。

並列三次元 FFT の weak scaling 性能 ($N = 256 \times 512 \times 512 \times \text{MPI プロセス数}$) を図 6 に示す。図 6 に示すように、自動チューニングを用いた FFTE 7.1alpha が最も高速であることが分かる。

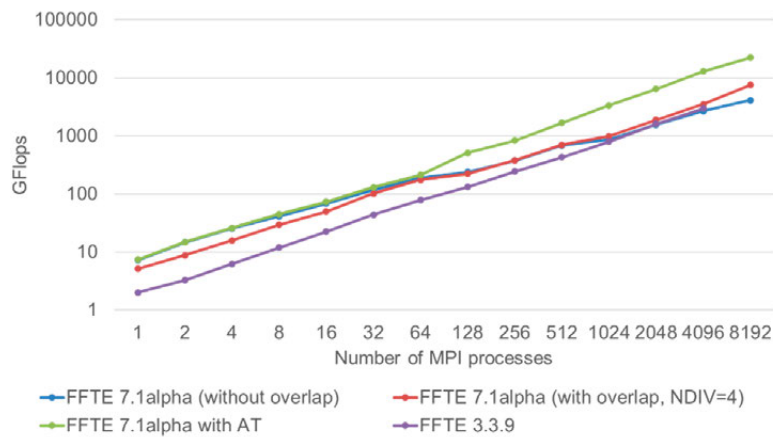


図 6 並列三次元 FFT の weak scaling 性能 ($N = 256 \times 512 \times 512 \times \text{MPI プロセス数}$)

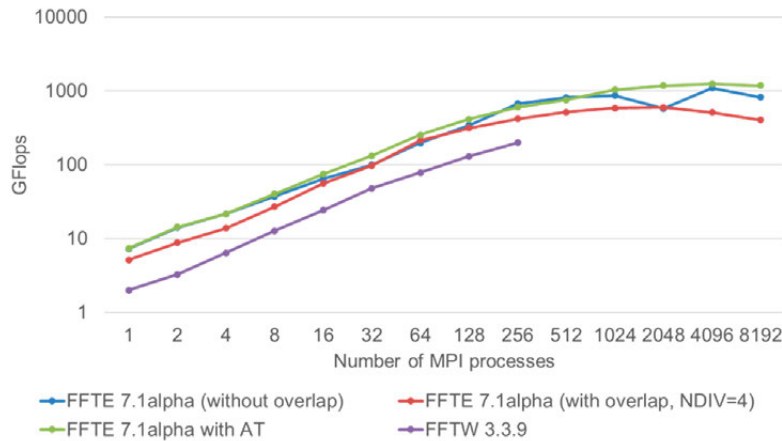


図 7 並列三次元 FFT の strong scaling 性能 ($N = 256 \times 512 \times 512$)

並列三次元 FFT の strong scaling 性能 ($N = 256 \times 512 \times 512$) を図 7 に示す。図 7 から分かるように、MPI プロセスが 256 および 512 の場合を除き、自動チューニングを用いた FFTE 7.1alpha は FFTE 7.1alpha (オーバーラップなし) よりも高速である。

[4] Intel AVX-512IFMA 命令を用いた複数の Montgomery 乗算の高速化（高橋）

乗算剰余演算は計算機代数や暗号などの分野で広く用いられている演算の一つである。Montgomery 乗算を用いることで時間の掛かる除算を実質的に行うことなく、乗算、加減算およびシフト演算のみで乗算剰余演算を行うことができることが知られている。Intel Advanced Vector Extensions 512（Intel AVX-512）は 512 ビットのベクトル命令セットである。ベクトル命令を用いる Montgomery 乗算アルゴリズムや、Intel AVX-512IFMA（Integer Fused Multiply-Add）を用いた高速な二乗剰余演算が提案されている。複数の Montgomery 乗算については、Intel Streaming SIMD Extensions 2（Intel SSE2）命令を用いた実装や Cell プロセッサにおける実装が提案されているが、Intel AVX-512IFMA 命令を用いた実装は知られていない。

Montgomery 乗算は通常数百ビット以上の整数に対して行われるが、本研究では 52 ビット以下の場合を考える。このようなビット数に対する複数の Montgomery 乗算は、モジュラー高速 Fourier 変換（FFT）アルゴリズムで用いられている。

Algorithm 1 修正 Montgomery 乗算アルゴリズム

Input: A, B, N such that $0 \leq A, B < N$, $\beta > N$, $\text{gcd}(\beta, N) = 1$, $\mu = -N^{-1} \bmod \beta$
Output: $C = AB\beta^{-1} \bmod N$ such that $0 \leq C < N$

```

1:  $C \leftarrow AB \bmod \beta$ 
2:  $q \leftarrow \mu C \bmod \beta$ 
3:  $C \leftarrow \lfloor AB/\beta \rfloor + \lfloor qN/\beta \rfloor$ 
4: if  $q \neq 0$  then
5:    $C \leftarrow C + 1$ 
6: if  $C \geq N$  then
7:    $C \leftarrow C - N$ 
8: return  $C$ .
```

Intel AVX-512IFMA 命令セットは、52 ビットの符号なし整数の乗算を行い、104 ビットの中間結果の下半分と上半分をそれぞれ生成する `vpmadd52luq` および `vpmadd52huq` 命令をサポートする。これらの下半分と上半分は 64 ビットのアキュムレータに加算される。Algorithm 1 に修正 Montgomery 乗算アルゴリズムを示す。Montgomery 乗算のオペランドが 52 ビット以下の場合、Intel AVX-512IFMA 命令を用いると Algorithm 1 において $\beta = 2^{52}$ とすることができる。Algorithm 1 の 1 行目において、 AB を β で割った余りは `vpmadd52luq` 命令を用いて AB の下位 52 ビットとして計算する。2 行目において、 μC を β で割った余りは `vpmadd52luq` 命令を用いて μC の下位 52 ビットとして計算する。3 行目において、 AB と qN の上位 52 ビットは `vpmadd52huq` 命令を用いて計算する。4 行目と 5 行目における $q \neq 0$ の場合の条件付き増分 $C + 1$ は、最小値演算と符号なし整数値 q と C の加算 $C + \min(q, 1)$ で置き換えることができる。この最小値演算 $\min(q, 1)$ は、`vpminuq` 命令を用いて行う。Algorithm 1 の 6 行目と 7 行目の条件付き減算も、符号なし整数のラップアラウンドを用いると `vpminuq` 命令を用いて実行することができる。

Intel AVX-512 組み込み関数を用いたベクトル化された 52 ビット整数の複数の Montgomery 乗算を図 8 に示す。このプログラムでは、Intel AVX-512 組み込み関数 `_mm512_madd52lo_epu64()`、`_mm512_madd52hi_epu64()`、および `_mm512_min_epu64()` は、それぞれ `vpmadd52luq`、`vpmadd52huq`、および `vpminuq` 命令に対応している。このプログラムは、ベクトル長 VLEN が 8 で割り切れると仮定している。もし VLEN が 8 で割り切れない場合、剰余ループを実行する必要がある。

```
#include <stdint.h>
#include <immintrin.h>

void vmulmod52(uint64_t *c, uint64_t *a, uint64_t *b, uint64_t *N, uint64_t *mu)
/*  c[:] = (a[:] * b[:] * 2^-52) mod N[:]. */
  We need mu[:] = -N[:]^-1 mod 2^52. */
{
  __m512i q, t;
  int i;

  for (i = 0; i < VLEN; i += 8) {
    t = _mm512_madd52lo_epu64(_mm512_set1_epi64(0), _mm512_load_epi64(&a[i]),
                              _mm512_load_epi64(&b[i]));
    q = _mm512_madd52lo_epu64(_mm512_set1_epi64(0), t, _mm512_load_epi64(&mu[i]));
    t = _mm512_madd52hi_epu64(_mm512_min_epu64(q, _mm512_set1_epi64(1)), q,
                              _mm512_load_epi64(&N[i]));
    t = _mm512_madd52hi_epu64(t, _mm512_load_epi64(&a[i]), _mm512_load_epi64(&b[i]));
    _mm512_store_epi64(&c[i], _mm512_min_epu64(t, _mm512_sub_epi64(t,
                              _mm512_load_epi64(&N[i]))));
  }
}
```

図 8 Intel AVX-512 組み込み関数を用いたベクトル化された 52 ビット整数の複数の Montgomery 乗算

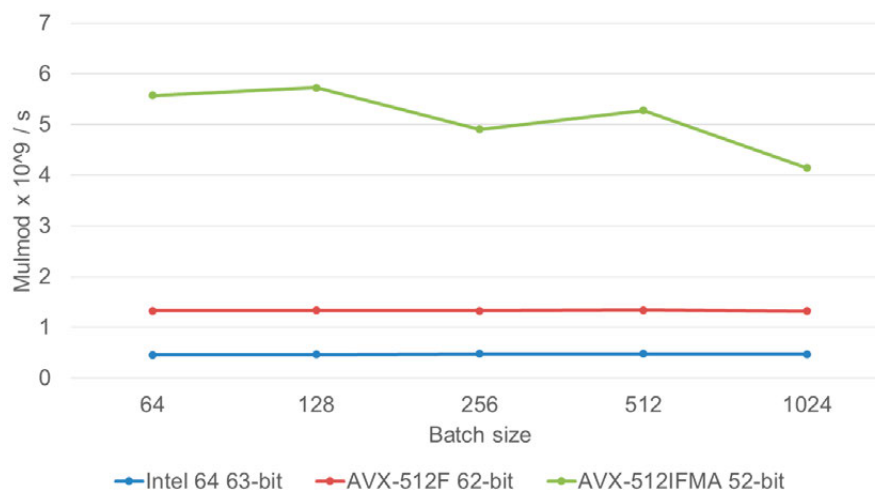


図 9 さまざまな命令セットを用いた複数の Montgomery 乗算の性能

性能評価にあたっては、Intel AVX-512IFMA 命令を用いた複数の 52 ビット Montgomery 乗算、Intel AVX-512F (Foundation) 命令を用いた複数の 62 ビット Montgomery 乗算、および Intel 64 命令を用いた複数の 63 ビット Montgomery 乗算の性能の比較を行った。

Montgomery 乗算 $C = AB\beta^{-1} \bmod N$ の計算において、 N は 1 から $2^{52} - 1$ の範囲の奇数の乱数であり、 A と B は、 $0 \leq A, B < N$ の範囲の乱数である。バッチサイズを 64 から 1024 に変化させて Montgomery 乗算を 100 万回実行し、その平均の経過時間から 1 秒あたりの Montgomery 乗算回数 (Mulmod $\times 10^9/s$) を算出した。

評価環境として、Intel Core i3-8121U の 1 コア、1 スレッドを用いた。コンパイラは Intel C compiler 190.5.281 を使い、コンパイルオプションは `icc -O3 -xCANNONLAKE` を用いた。

Intel 64、Intel AVX-512F、および Intel AVX-512IFMA 命令を用いた複数の Montgomery 乗算の性能を図 9 に示す。図 9 からバッチサイズが 128 の場合、Intel AVX-512IFMA を用いた提案した実装は、Intel Core i3-8121U プロセッサにおいて Intel 64 および Intel AVX-512F 命令を用いた実装と比較して、それぞれ約 12.22 倍および約 4.30 倍高速であることが分かる。

[5] ノードローカルストレージを活用する MPI-IO の研究 (建部)

MPI-IO は HPC アプリケーションにおいて標準的に利用される並列 I/O インターフェースである。並列プロセスからの並列 I/O に用いられる。一方、並列ファイルシステムに対するアクセス性能はアクセスパターンにより変わり、特によく利用される単一共有ファイル (single shared file) パターンでは性能が低下することが知られている。単一共有ファイルパターンとは、並列プロセスが単一のファイルにアクセスするパターンである。本研究では、この単一共有ファイルパターンにおいて、ノードローカルストレージを活用してストレージ性能を向上するための研究を行う。

ノードローカルストレージは、計算ノードのローカルストレージである。ジョブが投入され、計算ノードが割当てられ、ジョブの実行が開始してから終了するまでしか利用することはできない。これまで、ローカルストレージは、プロセス毎ファイル (file per process) パターンに対し、単純な write back cache として利用される例はある。また、単一共有ファイルでは、計算ノードのローカルストレージにより構成されるアドホック分散ファイルシステムである BurstFS, BeeOND, Gfarm/BB, GekkoFS を用いた例がある。ただし、BeeOND や GekkoFS などストライピングにより分散させるファイルシステムでは書込み性能をあまり向上させることはできない。BurstFS は並列書込みに特化したファイルシステムであり、読込性能を犠牲にしている。Gfarm/BB では、単一共有ファイルは 1 ノードに格納されるためスケラビリティの問題がある。本研究では、これらの問題に対し MPI-IO 層での解決を図り、NS-MPI の提案を行うものである。Gfarm/BB は、ファイル作成についてはノードローカルストレージに直接書き込む特性を持っている。そのため、プロセス毎ファイルの場合は非常に高い性能を発

揮する。一方で、単一共有ファイルの場合はファイルを分割しないため全プロセスが同一ファイルをアクセスすることとなり性能が低下する。この特性を利用し、NS-MPI においてファイル分割を行うことで、単一共有ファイルへのアクセスに対し、プロセス毎ファイルのアクセス性能を実現することを目指す。

これを実現するため、NS-MPI では **sparse segments** という新しいファイルフォーマットを提案した。**Sparse segments** は、単一共有ファイルを分割したものであり、分割したファイルはスパースファイルとなっている。スパースファイルとは、データを書き込んだ領域にはデータが存在し、書き込んでいないところは穴 (hole) と呼ばれる領域となるファイルである。穴の部分を読み込むと 0 を読むこととなる。スパースファイルでは穴の部分は保持されないためストレージ容量は節約される。NS-MPI では、単一共有ファイルへのアクセスに対し、各プロセスが **sparse segments** フォーマットのファイルとしてアクセスする。書き込みについては、各プロセスが各自のスパースファイルへの書き込みとなるため、プロセス毎ファイルへの書き込みと同様の性能を実現することが可能となる。読み込みについては、どのスパースファイルに書き込まれたか調べる必要があるが、書き込み時に書き込んだ範囲を管理しておき、そのデータを用いることにより調べる。これらの設計に基づき、NS-MPI の実装を行い、東工大の TSUBAME3.0 スーパーコンピュータにより評価を行った。

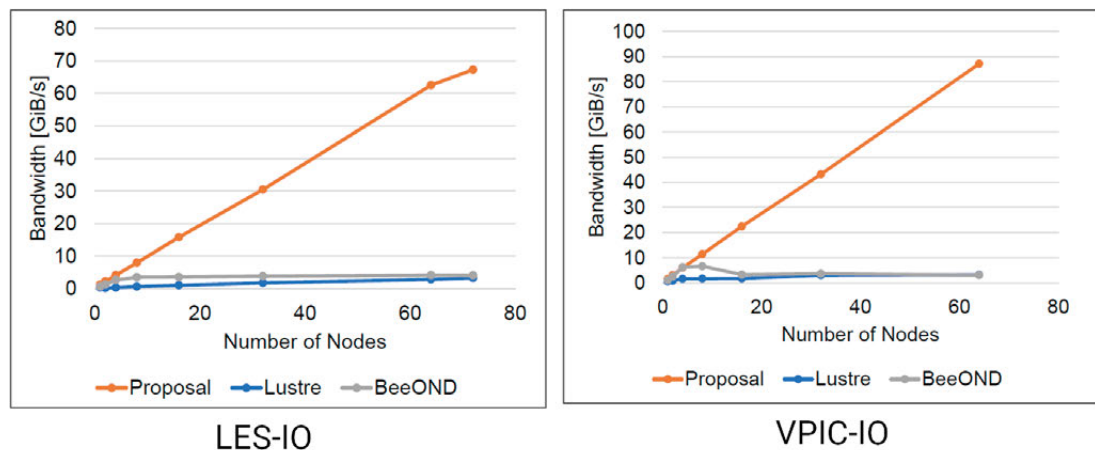


図 10 LES-IO と VPIC-IO における提案手法 (NS-MPI) と Lustre、BeeOND との性能比較

アプリケーションベンチマークである LES-IO と VPIC-IO における評価結果を図 10 に示す。この図は、計算ノード数を増やしたときのストレージ性能を示している。従来の BeeOND を用いた手法では、計算ノード数が増加しても性能は頭打ちとなるが、提案手法ではスケラブルに性能が向上していることが分かる。なお、Lustre はノードローカルストレージを用いず、直接並列ファイルシステムをアクセスしたときの性能である。

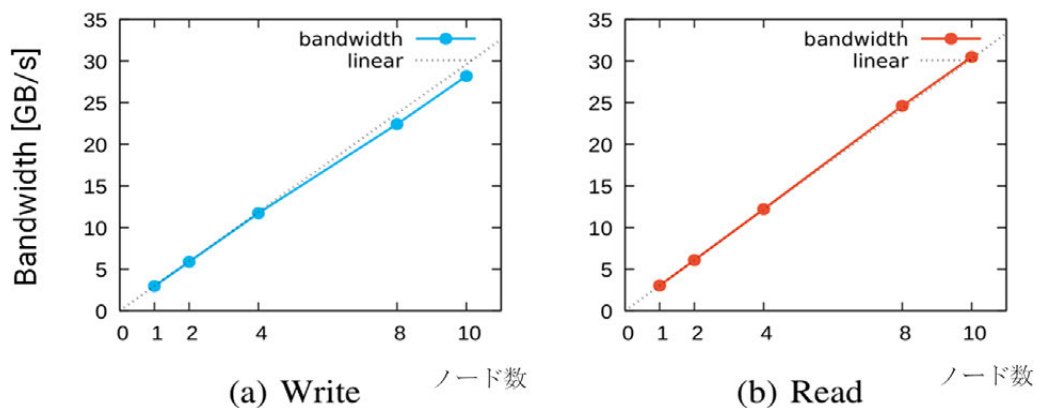


図 11 IOR による単一共有ファイルへの書込、読込性能

図 11 にベンチマーク IOR における単一共有ファイルへの書込、読込性能を示す。この性能評価は筑波大学の Cygnus スーパーコンピュータで行った。書込みだけではなく、読込みについても計算ノード数に比例して性能が向上していることが分かる。本成果は IEEE International Workshop on High-Performance Storage および、6th IEEE International Conference on Data Science and Systems (DSS)において発表を行った。

[6] 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 ノードでの処理が難しくなってきた。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。ところが、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きた。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を図った。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示した。

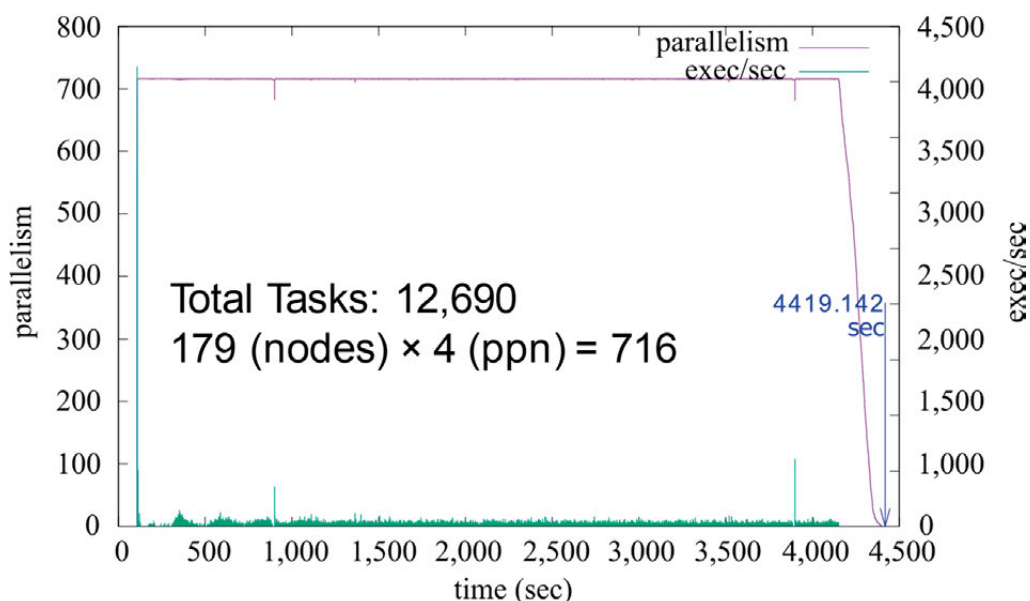


図 12 Tsubame3.0 による大規模実行の様様

図 12 に東工大の Tsubame3.0 スーパーコンピュータの 180 ノードを用いた大規模実行の様様を示す。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。この実行の様様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。本成果は情報処理学会論文誌コンピューティングシステム(ACS)において発表した。

[7] 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、オブジェクトストレージインターフェース対応を行った。

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。一方、Gfarm ファイルシステムはファイルシステムのインターフェースを提供しているため、ファイルを延々とオープンし続けることが可能であり、フェイルオーバの前後に、異なる複数のユーザが同一ファイルに書き込みを行うなど、競合する操作が行われたときに複数のバージョンのファイルが作成されてしまう問題があった。本問題が生じるのは、フェイルオーバによってファイルのオープン状態が失われてしまうためである。そのため、スレーブサーバに対し、ファイルのオープン状態についても情報を共有するように改修を行った。これにより、フェイルオーバが行われてもファイルオープンの状態が引き継がれるようになり、問題を解決することができた。

オブジェクトストレージインターフェースについては、Society 5.0、IoT など重要度が増している。そのため、デファクトスタンダードとなっているアマゾンウェブサービス (AWS) において用いられている S3 互換のインターフェースに対応するため、概念設計、詳細設計を行った。

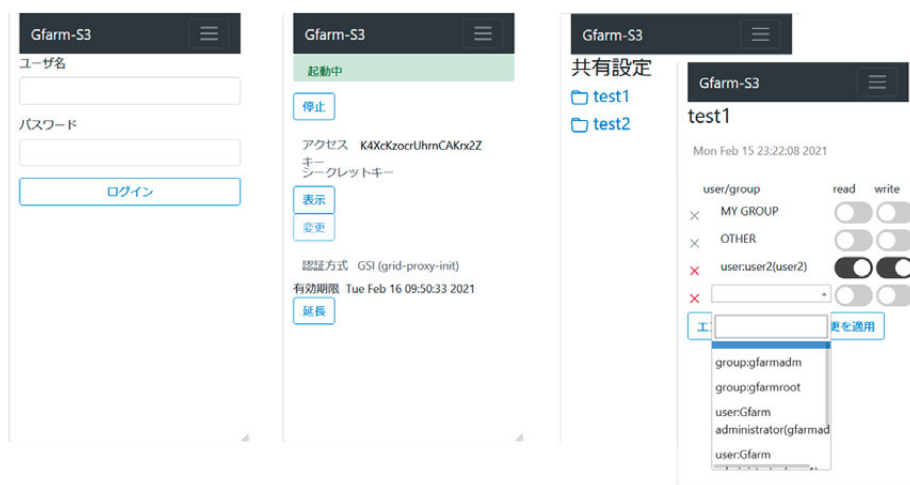


図 13 Gfarm の S3 インターフェースにおける管理画面の例

図 13 に S3 インターフェースを用いるための管理画面を示す。これらはスマートフォンからも利用可能となっている。まず、ユーザ名とパスワードによりログインする。その後、S3 サーバの起動を行い、S3 サーバのアクセスに必要なアクセスキーとシークレットキーを確認することができる。データは複数ユーザ、グループで共有することができ、一番右の図は共有設定を行うためのページの例である。本成果については Gfarm ワークショップにおいて発表した。

[8] CUDA アプリケーションのチェックポイントに関する研究（額田）

GPU (Graphics Processing Unit)はもともと画像処理用に多数の演算器を搭載するアクセラレータであるが、汎用計算にも用いることができるプログラマビリティを備えている。そのコストパフォーマンスや電力効率の高さで注目され、今や多くのスパコンで採用されている。GPUによりアプリケーションが高速化されてきたが、その結果としてより大規模な計算を行うようになり、実行時間はむしろ長くなる場合も多い。スパコンなどの共用システムでは通常ユーザ間で利用機会が公平になるようにするために実行時間制限がある。この制限を超えるような実行を行いたい場合には、後から再開できるように実行の途中でアプリケーションの状態をファイル等に保存するチェックポイントという技術が使用される。

CPU のみを使用するアプリケーションのチェックポイント技術は確立されており、代表的な BLCR や DMTCP といったソフトウェアはアプリケーションを一切修正することなくチェックポイントを実現できる。これらは基本的に CPU のメモリ上のデータを保存しているが、GPU の状態は CPU のメモリ上にはないため GPU アプリケーションに対応していない。そこでチェックポイント処理に入る前後で、GPU の状態を CPU のメモリに回収して一緒に保存する前処理と、GPU の状態を復元する後処理を追加することによって GPU アプリケーションにも対応できるように拡張する NVCR を提案する。

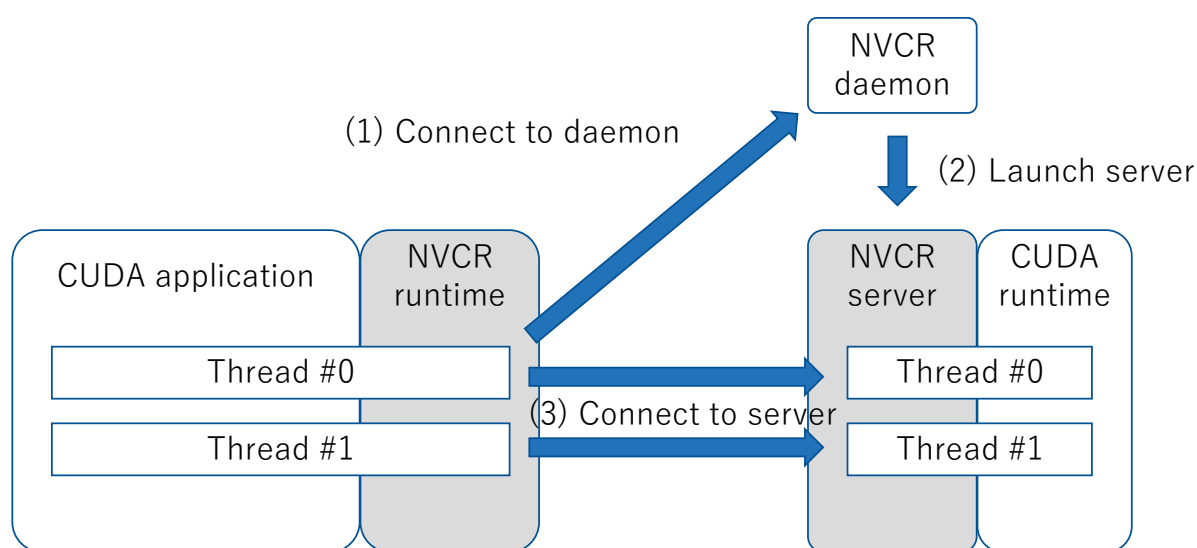


図 14 複数のプロセスで実装される NVCR の全体像

図 14 に NVCR の全体像を示す。左側にある GPU アプリケーションのプロセスに加えて、NVCR サーバと NVCR デーモンで構成される。NVCR では GPU アプリケーションは NVCR サーバ経由で GPU にアクセスする。NVIDIA が提供する CUDA ランタイムライブラリは GPU の初期化を 2 回以上行うことを想定しておらず、このためチェックポイントファイルからの再開時に GPU の初期化が行われないという問題がある。これを回避するために GPU へのア

クセスを行う使い捨ての NVCR サーバのプロセスを導入し、再開時には別のサーバプロセスを起動しなおす方式を採用する。

GPU アプリケーションは CUDA ランタイムライブラリで実装される専用の API 関数を用いて GPU を制御する。GPU アプリケーションに読み込ませる NVCR ランタイムライブラリはこれらの API 関数の呼び出しを全て NVCR サーバに伝達すると同時にモニタリングして、チェックポイントの前処理で保存すべき GPU 側のリソースの情報、及び実行を再開するときに GPU 側のリソースを再現するために必要な情報の収集を行う。

NVCR のランタイムライブラリが割り込むことによって追加のプロセス間通信が必要になり実行時間増加が懸念される。しかし GPU を操作する API 関数ではそもそも GPU という外部デバイスとの通信が必要である。CPU と GPU の間でデータのコピーを行う際にも GPU アプリケーションと NVCR サーバの間でプロセス間共有メモリを活用することによりコピー回数を増加させないことが可能である。GPU による高速化が大きく期待できるアプリケーションにおいては API 関数の遅延の影響を受けにくくホスト CPU との通信も少ない傾向にあり、NVCR による実行時間オーバーヘッドは限定的であると言える。

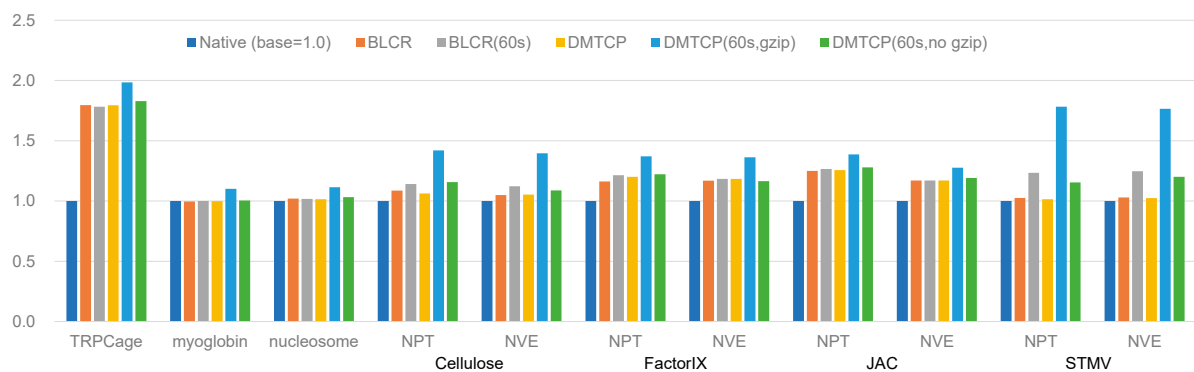


図 15 Amber による NVCR の実行時間オーバーヘッド評価

図 15 は分子動力学シミュレーションソフトウェア Amber18 によるシミュレーション実行時間のオーバーヘッドの評価である。NVCR を使用しない場合を 1.0 とする相対的な実行時間を示している。Amber Benchmark Suite のデータを利用しているが、分子のサイズによってオーバーヘッドに差が出ている。TRPCage や FactorIX、JAC などは分子が小さく、GPU での実行時間が短くなり、結果として非常に高い頻度で API 関数の呼び出しが行われるため NVCR による API 関数の転送のオーバーヘッドが大きくなっている。水色は DMTCP をベースとして 60 秒間隔でチェックポイントを行い、出力ファイルを gzip で圧縮するモードであるが、特に gzip で圧縮する処理に時間がかかっている。極端にストレージが遅い環境を除いては無圧縮でファイルを保存する方が早いと考えられる。いずれにしても 60 秒に 1 回という極端なチェックポイント間隔でもこの程度のオーバーヘッドで抑えられており、十分に現実的であると言える。

[9] 鞍点型連立一次方程式に対するブロック構造を利用した高速数値解法の構築（多田野）

本研究では、鞍点型と呼ばれる連立一次方程式：

$$\hat{A}\hat{x} \equiv \begin{bmatrix} A & B \\ C^T & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix} \equiv \hat{b}$$

を高速に解く数値解法の構築を目的とする。ここで、 A は正則な n 次非対称行列、 B, C は $n \times m$ フルランク行列、 O は m 次零行列、 x, f は n 次元ベクトル、 y, g は m 次元ベクトルである。鞍点型連立一次方程式は、偏微分方程式の初期値・境界値問題に対するメッシュレス離散化法、構造解析、流体計算などの分野において現れ、その求解時間は多くの割合を占める。したがって、同方程式の高速数値解法は必要不可欠である。連立一次方程式に対する有力な数値解法として、ガウスの消去法や LU 分解法などの直接法が知られているが、問題サイズが大規模な場合は多くの計算量とメモリ量が必要となるため、適用は難しい。そのため、大規模問題に対してはクリロフ部分空間反復法などの反復法による求解をせざるを得ない。

鞍点型連立一次方程式に対する反復法による単純な求解アプローチとして、クリロフ部分空間反復法をそのまま適用することが考えられる。しかしながら、行列 B, C の列数 m が多い場合は、行列 A が良条件であったとしても係数行列 $\hat{A}$ は悪条件になることがあり、クリロフ部分空間反復法の残差の収束性が悪化する。GMRES 法のような頑健な方法では求解は比較的良い収束性を示すものの、同法は長い漸化式を用いる解法であるため多くの計算量とメモリ量を必要とする。BiCGSTAB 法のような短い漸化式に基づく反復法では、残差の収束性が悪く求解は困難である。そのため、短い漸化式に基づく解法でも求解が可能となるアプローチが必要である。

我々は鞍点型連立一次方程式をそのまま解くのではなく、同方程式のブロック構造を用いた求解手法を構築した。鞍点型連立一次方程式を変形すると、解ベクトル x, y は以下のように与えられる。

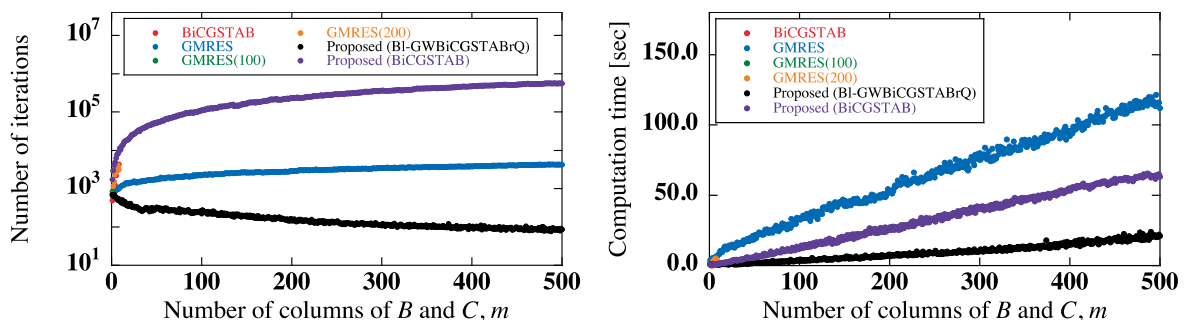
$$\begin{cases} x = A^{-1}f - A^{-1}By, \\ y = (C^T A^{-1}B)^{-1}(C^T A^{-1}f - g). \end{cases}$$

ここで、 $U \equiv A^{-1}B$, $v \equiv A^{-1}f$ と定義し、さらに $\tilde{X} \equiv [U \ v]$, $\tilde{B} \equiv [B \ f]$ とおくと、行列 U とベクトル v は複数右辺ベクトルをもつ連立一次方程式 $A\tilde{X} = \tilde{B}$ を解くことによって得られる。これを解いて得られた行列 U , ベクトル v を用いることで鞍点型連立一次方程式の解が求められる。提案アプローチにおける計算の主要部は、複数右辺連立一次方程式 $A\tilde{X} = \tilde{B}$ の求解である。同方程式の係数行列は A であるため、行列 A が良条件である場合はその性質を活かすことができ、短い漸化式に基づく反復法でも求解できる可能性がある。また、複数右辺連立一次方程式に対する反復法であるブロッククリロフ部分空間反復法は複数本の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よりも少ない反復回数で求解できることがあ

る。よって本研究では、提案アプローチ内で現れる複数右辺連立一次方程式の求解法としてブロッククリロフ部分空間反復法を適用し、その効果を検証する。

数値実験によって提案アプローチの有効性を検証する。テスト問題として、行列 A には SuiteSparse Matrix Collection で公開されている行列 `epb2` (行列サイズ: 25,228, 非零要素数: 175,027), 行列 B, C は乱数で与え、 B と C の列数 m を変化させて実験を行った。実験環境として筑波大学計算科学研究センターのスーパーコンピュータ「Cygnus」の1ノード (CPU: Intel Xeon Gold 6126 2.6GHz (12 cores)×2, コンパイラ: Intel Fortran ver. 19.0.5, コンパイルオプション: `-qopenmp -axCORE-AVX512`) を用いた。また、計算は OpenMP を用いて 24 スレッド並列で行った。

従来アプローチでは鞍点型連立一次方程式に対して、クリロフ部分空間反復法の一つである BiCGSTAB 法, GMRES 法, 及びリスタート付き GMRES 法 (GMRES(100), GMRES(200)) を適用した。提案アプローチでは、内部で現れる複数右辺連立一次方程式 $A\tilde{X} = \tilde{B}$ に対して、ブロッククリロフ部分空間反復法の一つである Block GWBiCGSTABrQ 法を適用した場合と、BiCGSTAB 法を各右辺ベクトルに対して逐次的に適用した場合を比較した。図 16 に行列 B, C の列数 m を変化させたときの反復回数と計算時間の変化を示す。なお、各反復法において残差が収束条件を満たさなかったケースについては、グラフから除外した。図 16(a)に示すように、従来アプローチにおいては GMRES 法以外の反復法は大半の m において残差が収束条件を満たさなかった。GMRES 法では全ての m に対して残差が収束条件を満たしたものの、 m が増加するにしたがって反復回数が増加する傾向がみられた。一方、提案アプローチにおいては、 m が大きくなっても残差が収束条件を満たしていることがわかる。特に、複数右辺連立一次方程式の解法に Block GWBiCGSTABrQ 法を用いた場合は、 m の増加に伴って反復回数が減少していることがわかる。これはブロッククリロフ部分空間反復法の特長の一つであり、この性質が提案アプローチに対してうまく合致していることを示している。また、図 16(b)に示すように、提案アプローチの計算時間は従来アプローチで GMRES 法を用いた場合よりも高速であった。特に、内部問題の複数右辺連立一次方程式にブロッククリロフ部分空間反復法を適用することで、より高速に求解できることを確認した。この研究成果は、国際会議 CEFC 2020 にて発表した。



(a) 反復回数の変化

(b) 計算時間の変化

図 16 行列 B , C の列数 m の変化に対する反復回数と計算時間の変化**[10] 3次元モデル画像再構成問題で現れる鞍点型連立一次方程式の求解高速化（多田野）**

複数枚の断層画像から 3 次元オブジェクトを再構成する問題を、3 次元モデル画像再構成問題と呼ぶ。同問題では、各断層画像ごとに 2 次元補間関数を決定し、断層画像間の線形補間を行うことで 3 次元ボリユーメトリックデータを作成する。2 次元補間関数の作成に拡張 CSRBF 法と呼ばれる手法を用いると、その結合係数を決定するために以下の連立一次方程式を解く必要がある。

$$\hat{A}\hat{X} \equiv \begin{bmatrix} A & C \\ C^T & O_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F \\ O_{3,K} \end{bmatrix} \equiv \hat{B}.$$

ここで、 A は実対称疎行列、 C は n 行 3 列行列、 X , F は n 行 K 列行列、 Y は 3 行 K 列行列、 O_3 , 及び $O_{3,K}$ はそれぞれ 3 次零行列、3 行 K 列零行列である。 K は断層画像の枚数である。行列 F の要素は断層画像の画素値によって決定される。この連立一次方程式は係数行列 $\hat{A}$ が実対称行列の鞍点型連立一次方程式であり、この求解に多くの時間を要するため、高速求解手法が必要である。

本研究では、この鞍点型連立一次方程式の求解に、前述の提案アプローチを用いて高速化を図った。数値実験によりその性能を評価する。数値実験には、カイコガ脳断層画像 127 枚の 3 次元画像再構成問題で現れる鞍点型連立一次方程式を用いた。行列 A のサイズは 262,144, $K = 127$ である。拡張 CSRBF 法にはサポート半径 R と呼ばれるパラメータがあり、このパラメータによって行列 A の非零要素数が変化する。数値実験は、CPU: Intel Xeon E5-2620 v3 2.4GHz (6 cores) $\times$ 2, コンパイラ: Intel Fortran ver. 19.0.0 を搭載した計算機上で行い、OpenMP で 12 スレッド並列で計算した。反復法として、ブロッククリロフ部分空間反復法の一つである Block CGrQ 法、及び不完全コレスキー分解前処理付き Block CGrQ 法 (Block ICCGrQ 法) を用いた。従来のアプローチでは鞍点型連立一次方程式にそのまま両手法を適用し、提案アプローチでは内部問題として現れる複数右辺連立一次方程式に対して両手法を適用した。図 17 に CSRBF 法のサポート半径 R を変化させたときの従来アプローチと提案アプローチの計算時間変化を示す。提案アプローチを用いることにより、Block CGrQ 法、Block ICCGrQ 法の両方において計算時間が減少した。前処理と提案アプローチの両方を用いることで、従来アプローチよりも鞍点型連立一次方程式を高速に求解できることを確認した。特に $R = 0.02$ の場合は、提案アプローチで Block ICCGrQ 法を用いたときの計算時間は、従来アプローチで Block CGrQ 法を用いた場合の約 1/4 であった。本研究の研究成果は、日本応用数理学会をはじめとした学会、研究会において発表済みである。

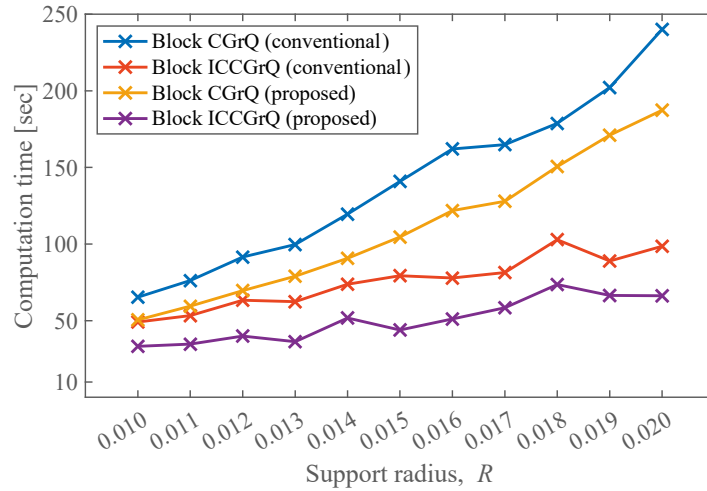


図 17 サポート半径 R を変化させたときの 3 次元モデル画像再構成問題で現れる連立一次方程式の求解時間変化

[11] 宇宙輻射輸送コードの GPU・FPGA 複合演算加速（朴，小林，藤田）

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。

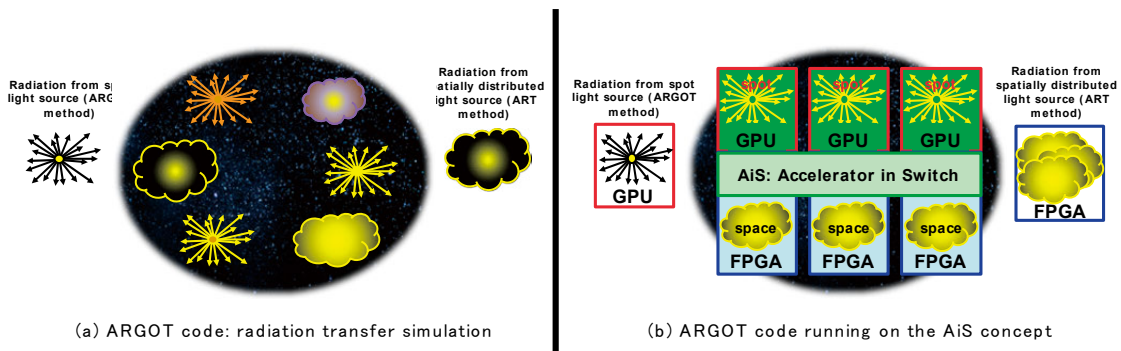


図 18 (a) 宇宙輻射輸送コード ARGOT の概観. (b) GPU・FPGA 連携による ARGOT コードの演算加速

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 は計算科学研究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 18 (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 18 (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。

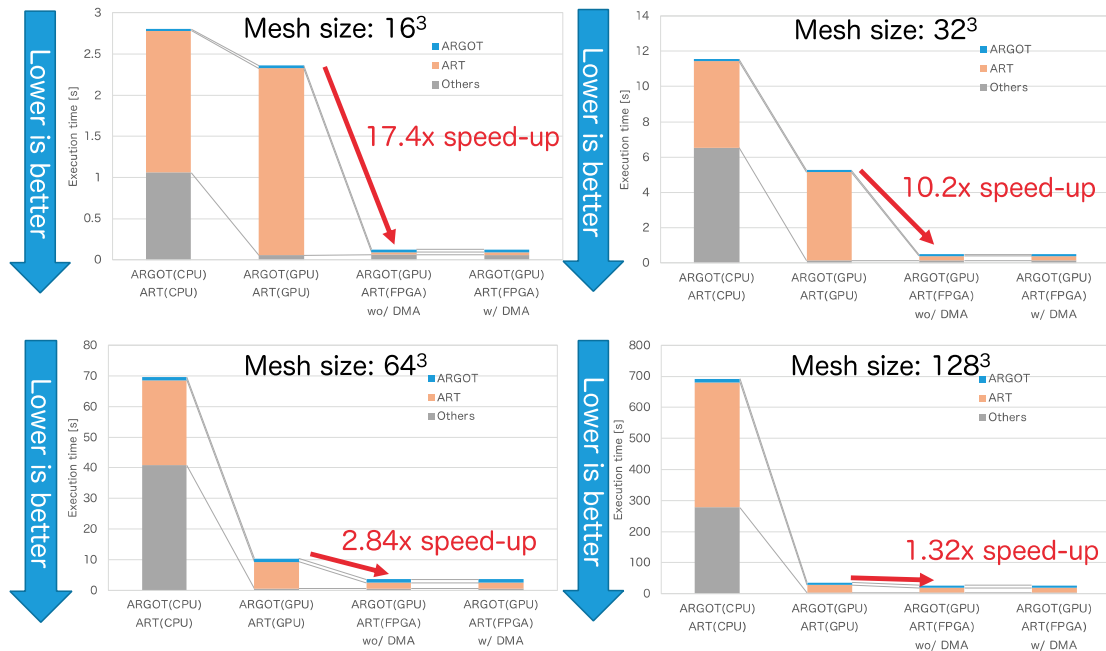


図 19 メッシュサイズに応じた ARGOT コードの性能比較

図 19 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。本稿では、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。

図に示されているように、GPU を使用したとしても ART 法は ARGOT コードの支配的な処理であることが分かる。特に、メッシュサイズ 16^3 と 32^3 の場合は、P100 GPU にとって問題サイズが小さすぎることから、3,584 CUDA Core に対して十分な演算の並列度が得られず、その傾向が顕著である。

これに対して 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ている。

本研究の成果は国際会議 ASAP2020[12]及情報処理学会論文誌[11]に査読付論文として発表された。

[12] 宇宙輻射輸送コード ARGOT の OpenACC による GPU 実装 (小林, 藤田, 朴)

現在における GPU・FPGA 複合演算加速は CUDA + OpenCL の混合プログラミングで実現しているが、このようなマルチリンガルプログラミングモデルはプログラマに多大な負担を強いる。そのため、GPU-FPGA 連携のためのよりユーザビリティの高いプログラミング環境が必要とされる。これを実現するために、我々は指示文ベースのプログラミングモデルである OpenACC に着目しており、現在、我々と理化学研究所計算科学研究センター及び米国 Oak Ridge National Laboratory 間で、両演算デバイスを OpenACC による統一的記述によって利用可能にするプログラミング環境に関する共同研究を実施している。これらの背景を踏まえ、この研究では、ユーザビリティの高い GPU-FPGA 連携の実現を見据えた予備評価として、ARGOT コードを OpenACC で実装し、OpenMP ベースの CPU 実装と CUDA ベースの GPU 実装との性能評価を行った。

OpenACC は GPU やメニーコアアクセラレータ向けのプログラムを容易に記述することを目的とした並列プログラミング言語規格である。C/C++や Fortran で記述されたプログラムに対し、OpenMP のようなコンパイラ指示文 `#pragma` を挿入することによって、アクセラレータにオフロードすべきプログラムのホットスポットをコンパイラに明示することができる。本研究では、OpenMP ベースの CPU 実装を参考に、GPU にオフロードすべき並列領域の指定を行った。すなわち、`#pragma omp parallel for` の箇所を `#pragma acc parallel loop` に置換し、並列領域における関数呼び出しは `#pragma acc route seq` にて OpenACC 化した。また、CPU と GPU 間のデータ転送は CUDA 版と等価になるように実装した。初期化時に `#pragma acc enter data copyin()` にて主要データを GPU メモリに常駐させ、CPU で実行しなければならない処理

(例：ログ書き出し) のみ `#pragma acc update host()` を使用し、必要なデータを GPU から CPU に転送させた。

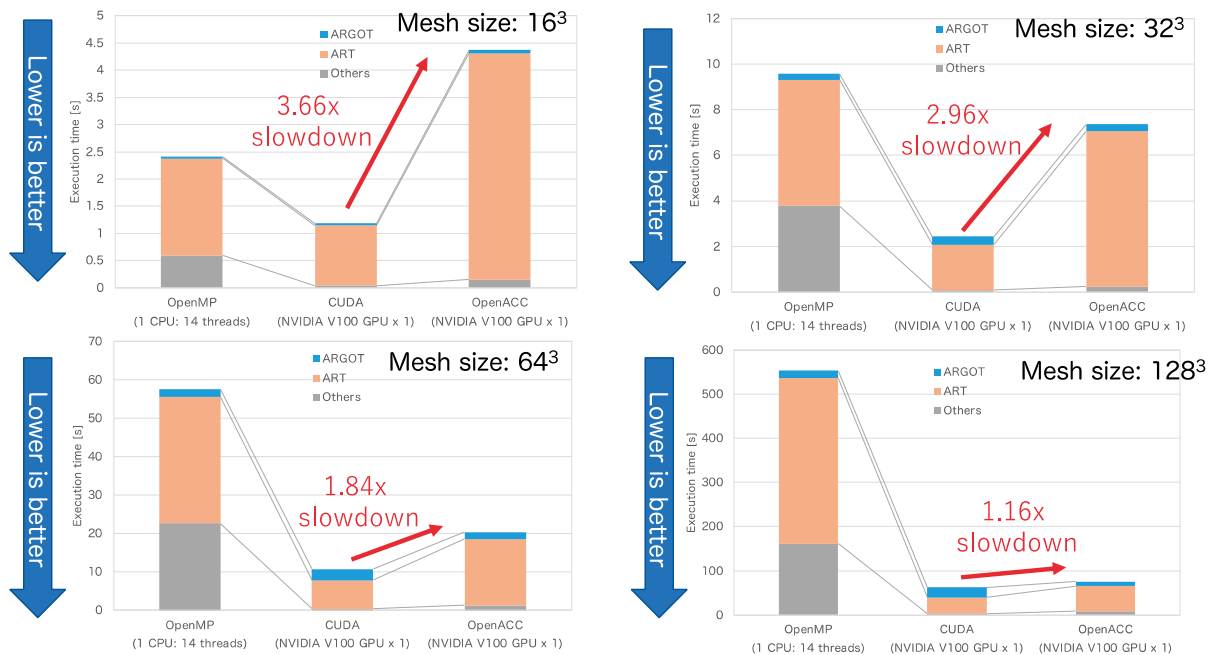


図 20 OpenMP, CUDA, OpenACC 実装による ARGOT コードの性能比較

図 20 に OpenMP, CUDA, OpenACC 実装による ARGOT コードの性能比較を示す。Others は各メッシュの化学反応と輻射熱・輻射冷却を計算するルーチンであり、各メッシュにおけるこれらの計算は独立であるため、CUDA および OpenACC 実装に非常に良く適合している。ARGOT 法については、メッシュサイズが大きくなるほど、CUDA 版の性能劣化が目立った。これは、CUDA 実装では、メモリサイズの小さい過去の GPU デバイスを使用していた影響から `cudahostalloc` での pinned メモリの確保・解放をイテレーション毎に実行していたため、今後は初期化時に必要なデータを一度で確保するように実装を変更する必要があることが分かった。そして、ART 法では、小さいメッシュサイズでの OpenACC 版の性能は CUDA 版の 25% であり、大きいメッシュサイズの場合は CUDA 版の 86% の性能を示した。現在、この原因を NVIDIA のプロファイリングツールを用いて調査中である。

[13] 宇宙輻射輸送コードの並列 FPGA 化 (藤田, 小林, 朴)

我々はこれまでの研究で、早期宇宙の問題を輻射輸送計算で解決する Authentic Radiative Transfer (ART) 法を Intel Arria 10 向けに最適化を行っていた。本論文では、最新の Intel FPGA である Intel Stratix 10 向けに ART 法の最適化を行い、GPU 実装と複数ノードを用いて実行して性能比較を行う。我々は、OpenCL 上から FPGA が持つ複数の光リンクを用いて並列計算を行うためのフレームワークとして、Communication Integrated Reconfigurable CompUting System

(CIRCUS)というシステムを研究開発しており、本研究ではこれを ART 法に適用して並列計算を行うものである。なお、本研究で扱うプログラムは、CIRCUS を用いた初めての実アプリケーションを用いた並列計算の実現である。

FPGA 実装は、GPU 実装と比べて、1 ノード時 x4.54, 2 ノード時 x8.41, 4 ノード時 x10.64 の高速化を達成した。FPGA 間通信には前述した CIRUCS を使い、GPU 間通信には InfiniBand HDR100 ネットワークを用いて性能評価を行ったものである。FPGA 実装は 1 ノード時と 4 ノード時を比べて 94.2%の並列化効率を達成した。この効率は、CIRCUS が提供する低レイテンシで高スループットなパイプライン通信によって達成できたと考えている。

本研究の成果は国際ワークショップ H2RC2020(SC2020 内)[15]及び情報処理学会 ACS 論文誌[16]において査読付論文として発表された。

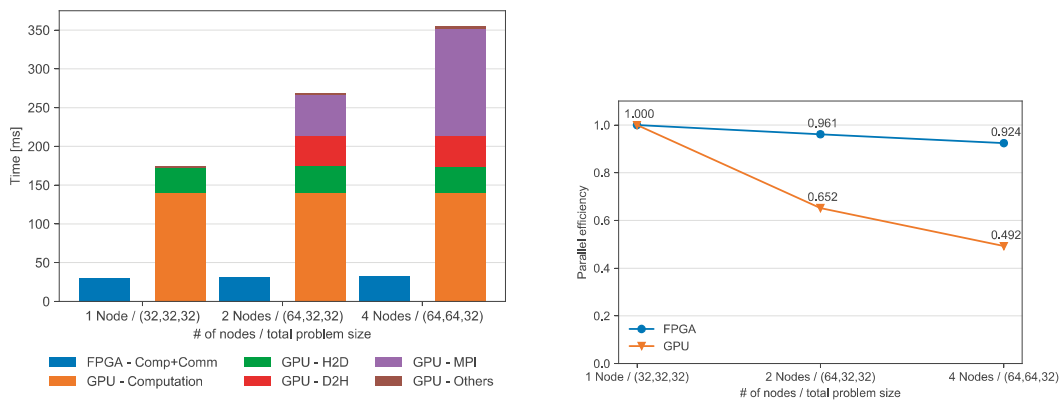


図 21 GPU と FPGA の性能比較。左は計算時間の比較、
右は 1 ノード実行を基準とした並列化効率を表す。

4. 教育

学生の指導状況

1. 佐藤駿一，修士（工学），GPU における SELL 形式疎行列ベクトル積の実装と性能評価，筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文，令和 3 年 3 月（指導：高橋大介）
2. 原山昶幸，修士（工学），オーバー・アンダーフローを抑えた高精度かつ高速な 2 ノルム計算手法，筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文，令和 3 年 3 月（指導：高橋大介）
3. 杉原航平，修士（工学），ノードローカルバーストバッファのための並列 I/O 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 3 年 3 月（指導教員：建部修見）

4. 高橋宗史，修士（工学），大規模データ処理のための分散オブジェクトストレージコネクタに関する研究，筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文，令和 3 年 3 月（指導教員：建部修見）
5. 畑中智之，修士（工学），HPC におけるコンテナ利用に関する研究，筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文，令和 3 年 3 月（指導教員：建部修見）
6. 菊池航平，学士（工学），地域気象シミュレーション City-LES の詳細モデル GPU 化に関する研究，筑波大学情報学群情報科学類卒業論文，令和 3 年 3 月（指導：朴泰祐）
7. 巨嶋和樹，学士（工学），DAOS ファイルシステムの性能評価，筑波大学情報学群情報科学類卒業論文，令和 3 年 3 月（指導教員：建部修見）
8. 笠井大暉，学士（工学），分散キャッシュファイルシステムの設計，筑波大学情報学群情報科学類卒業論文，令和 3 年 3 月（指導教員：建部修見）
9. 河西優作，学士（工学），Persistent Memory を活用した Deep Learning フレームワークの研究，筑波大学情報学群情報科学類卒業論文，令和 3 年 3 月（指導教員：建部修見）
10. 菅沼夏樹，学士（工学），並列計算環境における複数右辺連立一次方程式の反復解法の高速化に関する研究，筑波大学情報学群情報科学類卒業研究論文，令和 3 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. 朴泰祐，情報処理学会 CS 領域功績賞，2021 年 3 月 15 日

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），2017～2021 年度，全年度直接経費 92,192 千円（2020 年度直接経費 23,994 千円），「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），2018～2020 年度，全年度直接経費 13,300 千円（2020 年度直接経費 4,700 千円），「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），2015～2020 年度，全年度直接経費 38,000 千円（2020 年度直接経費 5,000 千円），「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, 1,300 千円 (R2 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. 文部科学省委託研究, 建部修見 (分担), R2 年度, 34,100 千円, HPCI の運営 (HPCI 共用ストレージ用大規模分散ファイルシステムの機能整備等)
6. NEDO, 建部修見 (分担), H30~R3 年度, 4,394 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), R2 年度, 3,960 千円, Machine Learning アプリケーション向け高速データ供給技術の研究
8. 科学研究費助成事業 (学術研究助成基金助成金) (若手研究), 額田彰 (代表), R2~R3 年度, 1,700 千円 (R2 年度), 「GPU アプリケーションに対するシステムレベルのチェックポイント技術の確立」
9. 科学研究費補助金基盤研究 (C), 多田野寛人 (代表), R2~R4 年度, 2,080 千円 (R2 年度), 「鞍点型連立一次方程式に対する階層並列型高速数値解法の開発」
10. 科研費 若手研究, 小林諒平 (代表), 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, 総計 3,380 千円 (期間: 2019 ~ 2020), 年度毎の配分金額 (2019: 2,470 千円, 2020: 910 千円)

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. Daisuke Tsuji, Taisuke Boku, Ryosaku Ikeda, Takuto Sato, Hiroto Tadano, Hiroyuki Kusaka, "Parallelized GPU Code of City-Level Large Eddy Simulation", Proc. of ISPDC2020, Warsaw (virtual), 8 pages, Jul. 7th, 2020.
2. Ryuta Tsunashima, Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, Taisuke Boku, Seyong Lee, Jeffrey S. Vetter, Hitoshi Murai, Masahiro Nakao, Mitsuhisa Sato, "OpenACC unified programming environment for GPU and FPGA multi-hybrid acceleration", Proc. of HLPP2020, Porto (virtual), 20 pages, Jul. 8th, 2020.
3. Ryuta Kashino, Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, Taisuke Boku, "Performance Evaluation of OpenCL-Enabled Inter-FPGA Optical Link Communication Framework CIRCUS and SMI", Proc. Of HPC Asia 2021, Jeju Island (virtual), 10 pages, Jan. 20th, 2021.

4. Kazuhiko Komatsu, Ayumu Gomi, Ryusuke Egawa, Daisuke Takahashi, Reiji Suda, and Hiroyuki Takizawa, "Xevolver: A code transformation framework for separation of system-awareness from application codes", *Concurrency and Computation: Practice and Experience*, Vol. 32, No. 7, e5577, 2020.
5. Daisuke Takahashi, "Fast Multiple Montgomery Multiplications Using Intel AVX-512IFMA Instructions", *Proc. 20th International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2020)*, Part V, *Lecture Notes in Computer Science*, Vol. 12253, pp. 655-663, Springer, 2020. (short paper)
6. Yukimasa Sugizaki and Daisuke Takahashi, "Fast Computation of the Exact Number of Magic Series with an Improved Montgomery Multiplication Algorithm", *Proc. 20th International Conference on Algorithms and Architectures for Parallel Processing (ICA3PP 2020)*, Part II, *Lecture Notes in Computer Science*, Vol. 12453, pp. 365-382, Springer, 2020.
7. Kohei Sugihara, Osamu Tatebe, "Design of Locality-aware MPI-IO for Scalable Shared File Write Performance", *Proceedings of the IEEE International Workshop on High-Performance Storage*, pp. 1080-1089, doi: 10.1109/IPDPSW50202.2020.00179, 2020
8. 町田健太, 建部修見, 大規模メタゲノムデータに対する分散並列相同性検索システム GHOSTZ PW/GF の提案, *情報処理学会論文誌コンピューティングシステム(ACS)*, Vol. 13, No. 2, pp. 13-27, 2020 年 9 月
9. Takayuki Tanabe, Takashi Hoshino, Hideyuki Kawashima, Osamu Tatebe, "An Analysis of Consistency Control Protocols for In-Memory Databases with CCBench", *Proceedings of the VLDB Endowment*, Vol. 13, No. 13, pp. 3531-3544, doi: 10.14778/3424573.3424575, 2020
10. Kohei Sugihara, Osamu Tatebe, "Design of Direct Read from Sparse Segments in MPI-IO", *Proceedings of the 6th IEEE International Conference on Data Science and Systems (DSS)*, pp. 1308-1315, doi: 10.1109/HPCC-SmartCity-DSS50907.2020.00168, 2020
11. 倉本亮世, 多田野寛人, 複数右辺ベクトルを持つ線型方程式に対するブロック積型反復解法の近似解高精度化, *日本応用数理学会論文誌*, Vol. 30, No. 4, pp. 290-319, 2020.
12. Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, Yoshiki Yamaguchi, Taisuke Boku, Kohji Yoshikawa, Makito Abe, Masayuki Umemura, "Multi-Hybrid Accelerated Simulation by GPU and FPGA on Radiative Transfer Simulation in Astrophysics", *IPSJ Journal of Information Processing*/28/pp.1073-1089, 2020-12
13. Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, Yoshiki Yamaguchi, Taisuke Boku, Kohji Yoshikawa, Makito Abe, Masayuki Umemura, "Accelerating Radiative Transfer Simulation with GPU-

FPGA Cooperative Computation", 2020 IEEE 31st International Conference on Application-specific Systems, Architectures and Processors (ASAP)/pp.9-16, 2020-07

14. Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Yoshiki Yamaguchi, Tomohiro Ueno, Kentaro Sano, Taisuke Boku, "Performance Evaluation of Pipelined Communication Combined with Computation in OpenCL Programming on FPGA", Proc. of AsHES2020 (Int. Workshop on Accelerators and Hybrid Exascale Systems) in IPDPS 2020, New Orleans (virtual), 10 pages, May 18th, 2020.
15. Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Yoshiki Yamaguchi, Taisuke Boku, Kohji Yoshikawa, Makito Abe, Masayuki Umemura, "OpenCL-enabled Parallel Raytracing for Astrophysical Application on Multiple FPGAs with Optical Links", 2020 IEEE/ACM International Workshop on Heterogeneous High-performance Reconfigurable Computing (H2RC), 2020, pp. 48-55, doi: 10.1109/H2RC51942.2020.00011.
16. 藤田典久, 小林諒平, 山口佳樹, 上野知洋, 佐野健太郎, 朴泰祐, OpenCL プログラミングを用いた並列 FPGA 処理システムの性能評価, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS) , 13 巻 3 号, pp. 13-28, 2020.

B) 査読無し論文

1. Naruya Kitai, Daisuke Takahasi, Franz Franchetti, Takahiro Katagiri, Satoshi Ohshima, and Toru Nagai, "Adaptation of A64 Scalable Vector Extension for Spiral", 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) , 2021-HPC-178(9), 6 pages, 2021 年 3 月
2. 原山赳幸, 工藤周平, 椋木大地, 今村俊幸, 高橋大介, オーバー・アンダーフローを抑えた高精度かつ高速な 2 ノルム計算手法, 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-177(8), 9 pages, 2020 年 12 月
3. 杉崎行優, 高橋大介, NVIDIA Volta GPU における浮動小数点演算を用いた剰余乗算の高速化, 日本応用数理学会 2020 年度年会講演予稿集, 2 pages, 2020 年 9 月
4. 高橋大介, Intel AVX-512IFMA 命令を用いた複数の Montgomery 乗算の高速化, 日本応用数理学会 2020 年度年会講演予稿集, 2 pages, 2020 年 9 月
5. 畑中智之, 建部修見, Cygnus 上での Docker Rootless Mode の利用の検討, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) , Vol. 2020-HPC-175, No. 24, pp. 1-6, 2020 年 7 月
6. 高橋宗史, 建部修見, ストレージコネクタ spark-ceph-connector の書き込み性能の改善, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) , Vol. 2020-HPC-176, No. 8, pp. 1-12, 2020 年 9 月

7. 巨島和樹, 建部修見, DAOS ファイルシステムの性能評価, 研究報告ハイパフォーマン
スコンピューティング (HPC) , Vol. 2021-HPC-178, No. 23, pp. 1-9, 2021 年 3 月
8. 建部修見, CHFS: コンシステントハッシュファイルシステムの設計, 研究報告ハイパ
フォーマンスコンピューティング (HPC) , Vol. 2021-HPC-178, No. 22, pp. 1-8, 2021 年
3 月
9. 小林諒平, 藤田典久, 朴泰祐, OpenACC と OpenCL の混合記述による GPU-FPGA デバ
イス間連携, 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-
177(12) 1 - 7 2020 年 12 月
10. 小林諒平, 藤田典久, 山口佳樹, 朴泰祐, 吉川耕司, 安部牧人, 梅村雅之, 宇宙幅射輸
送コード ARGOT の OpenACC による GPU 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) 2020-HPC-175(7) 1 - 7, 2020 年 7 月
11. 小林諒平, 藤田典久, 山口佳樹, 朴泰祐, 吉川耕司, 安部牧人, 梅村雅之, 再構成可能
システムと GPU による多重複合型演算加速, 計算工学講演会論文集 Proceedings of
the Conference on Computational Engineering and Science / 日本計算工学会 編 25, 2020
年 6 月
12. 柏野隆太, 小林諒平, 藤田典久, 朴泰祐, "OpenCL 対応 FPGA 間光リンク接続フレー
ムワーク CIRCUS と SMI の性能評価", 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), 2020-HPC-175(16), pp.1-8, 2020 年 7 月 31 日.
13. Fan Ruochong, Ao Yun, Yamaguchi Yoshiki, Boku Taisuke, "A study of an FPGA-based
cluster computing with high-speed serial links", 電子情報通信学会信学技報, CPSY2020-
11, DC2020-11, pp.1-7, 2020 年 7 月 31 日.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Taisuke Boku, "Multi-Hetero Accelerated Supercomputing ~System, Programming and
Applications~", Keynote at AsHES2020 (in IPDPS2020), New Orleans (virtual), May 18th,
2020.
2. Taisuke Boku, "University of Tsukuba's Accelerated Computing with GPU+FPGA", Int.
Workshop ADAC9 (virtual), Sep. 17th, 2020.

B) 一般講演

1. Daisuke Tsuji, Taisuke Boku, Ryosaku Ikeda, Takuto Sato, Hiroto Tadano, Hiroyuki Kusaka,
"Parallelized GPU Code of City-Level Large Eddy Simulation", Proc. of ISPDC2020, Warsaw
(virtual), Jul. 7th, 2020.

2. Ryuta Tsunashima, Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, Taisuke Boku, Seyong Lee, Jeffrey S. Vetter, Hitoshi Murai, Masahiro Nakao, Mitsuhisa Sato, "OpenACC unified programming environment for GPU and FPGA multi-hybrid acceleration", Proc. of HLPP2020, Porto (virtual), Jul. 8th, 2020.
3. Ryuta Kashino, Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, Taisuke Boku, "Performance Evaluation of OpenCL-Enabled Inter-FPGA Optical Link Communication Framework CIRCUS and SMI", Proc. Of HPC Asia 2021, Jeju Island (virtual), Jan. 20th, 2021.
4. Daisuke Takahashi, "Automatic Tuning of Computation-Communication Overlap for Parallel 3-D FFT with 2-D Decomposition", SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE21), Fort Worth, TX, USA (Virtual Conference), March 4, 2021.
5. Daisuke Takahashi, "Fast Multiple Montgomery Multiplications Using Intel AVX-512IFMA Instructions", 20th International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2020), Cagliari, Italy (Virtual Conference), July 2, 2020.
6. Yukimasa Sugizaki and Daisuke Takahashi, "Fast Computation of the Exact Number of Magic Series with an Improved Montgomery Multiplication Algorithm", Proc. 20th International Conference on Algorithms and Architectures for Parallel Processing (ICA3PP 2020), New York, NY, USA (Virtual Conference), October 4, 2020.
7. Kohei Sugihara, Osamu Tatebe, "Design of Locality-aware MPI-IO for Scalable Shared File Write Performance", IEEE International Workshop on High-Performance Storage, New Orleans, LA, USA (Virtual conference), May 2020
8. Kohei Sugihara, Osamu Tatebe, "Design of Direct Read from Sparse Segments in MPI-IO", 6th IEEE International Conference on Data Science and Systems (DSS), Yanuca Island, Cuvu, Fiji (Virtual conference), 2020
9. Hiroto Tadano, Shota Ishikawa, "A numerical study on the acceleration of solution of saddle point problems by using Block Krylov subspace methods", 19th Biennial IEEE Conference on Electromagnetic Field Computation (CEFC 2020), Virtual Conference, Nov. 2020.
10. Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, Yoshiki Yamaguchi, Taisuke Boku, Kohji Yoshikawa, Makito Abe, Masayuki Umemura, "Accelerating Radiative Transfer Simulation with GPU-FPGA Cooperative Computation", 2020 IEEE 31st International Conference on Application-specific Systems, Architectures and Processors (ASAP), 2020 年 7 月 7 日
11. Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Yoshiki Yamaguchi, Tomohiro Ueno, Kentaro Sano, Taisuke Boku, "Performance Evaluation of Pipelined Communication Combined with Computation in OpenCL Programming on FPGA", Proc. of AsHES2020 (Int. Workshop on

Accelerators and Hybrid Exascale Systems) in IPDPS 2020, New Orleans (virtual), 10 pages, May 18th, 2020.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. Taisuke Boku, "HPC for AI & AI for HPC ~time to meet together~", Keynote at HPC-AI Advisory Council Japan, Jan. 26th, 2021.

B) その他の発表

1. Naruya Kitai, Daisuke Takahashi, Franz Franchetti, Takahiro Katagiri, Satoshi Ohshima, and Toru Nagai, "Adaptation of A64 Scalable Vector Extension for Spiral", 情報処理学会第 178 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, オンライン, 2021 年 3 月 15 日.
2. 原山赳幸, 工藤周平, 椋木大地, 今村俊幸, 高橋大介, “オーバー・アンダーフローを抑えた高精度かつ高速な 2 ノルム計算手法”, 情報処理学会第 177 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, オンライン, 2020 年 12 月 21 日.
3. 杉崎行優, 高橋大介, “NVIDIA Volta GPU における浮動小数点演算を用いた剰余乗算の高速化”, 日本応用数理学会 2020 年度年会, オンライン, 2020 年 9 月 10 日.
4. 高橋大介, “Intel AVX-512IFMA 命令を用いた複数の Montgomery 乗算の高速化”, 日本応用数理学会 2020 年度年会, オンライン開催, 2020 年 9 月 8 日.
5. 畑中智之, 建部修見, Cygnus 上での Docker Rootless Mode の利用の検討, 情報処理学会 HPC 研究会, オンライン, 2020 年 7 月
6. 高橋宗史, 建部修見, ストレージコネクタ spark-ceph-connector の書き込み性能の改善, 情報処理学会 HPC 研究会, オンライン, 2020 年 9 月
7. 巨島和樹, 建部修見, DAOS ファイルシステムの性能評価, 情報処理学会 HPC 研究会, オンライン, 2021 年 3 月
8. 建部修見, CHFS: コンシステントハッシュファイルシステムの設計, 情報処理学会 HPC 研究会, オンライン, 2021 年 3 月
9. 石川翔大, 多田野寛人, 齋藤歩, 3 次元モデル再構成問題に現れる鞍点型連立一次方程式に対する前処理付き反復法の開発, 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 第 30 回研究会, オンライン, 2020 年 12 月.
10. 石川翔大, 多田野寛人, 齋藤歩, 3 次元モデル再構成問題に現れる鞍点型連立一次方程式に対する前処理付き反復法の性能評価, 日本応用数理学会 第 17 回研究部会連合発表会, オンライン, 2021 年 3 月.

11. 石川翔大, 多田野寛人, 齋藤歩, 3次元モデル再構成問題に現れる鞍点型連立一次方程式の求解高速化, 【非線形問題の解法と可視化に関する研究会】2020年度第1回研究会, オンライン, 2021年3月.
12. 小林諒平, 藤田典久, 朴泰祐, OpenACC と OpenCL の混合記述による GPU-FPGA デバイス間連携, 第177回ハイパフォーマンスクンピューティング研究発表会, 2020年12月21日
13. 小林諒平, 藤田典久, 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 ARGOT の OpenACC による GPU 実装, 第175回ハイパフォーマンスクンピューティング研究発表会 (SWoPP2020), 2020年7月30日
14. 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, 第173/174回ハイパフォーマンスクンピューティング研究発表会, 2020年5月12日
15. 柏野隆太, 小林諒平, 藤田典久, 朴泰祐, "OpenCL 対応 FPGA 間光リンク接続フレームワーク CIRCUS と SMI の性能評価", 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-175(16), pp.1-8, 2020年7月31日.
16. Fan Ruochong, Ao Yun, Yamaguchi Yoshiki, Boku Taisuke, "A study of an FPGA-based cluster computing with high-speed serial links", 電子情報通信学会信学技報, CPSY2020-11, DC2020-11, pp.1-7, 2020年7月31日.
17. 藤田典久, 小林諒平, 山口佳樹, 朴泰祐, HBM2 メモリを持つ FPGA ボードの性能評価, 研究報告ハイパフォーマンスクンピューティング (HPC) , 2021-HPC-178(6), pp.1-8, 2021年3月
18. 藤田典久, 小林諒平, 山口佳樹, 上野知洋, 佐野健太郎, 朴泰祐, 高位合成を用いた FPGA 間通信機構の設計と性能評価, 計算工学講演会論文集, 2020年6月
19. 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クンピューティング (HPC) , 2020-HPC-175(8), pp.1-8, 2020年7月

(4) 著書、解説記事等

該当なし

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（センター内外）

- 「地域気象コード City-LES の GPU 化に関する研究」計算科学研究センター・地球環境研究部門・日下グループとの共同研究

- 「初期天体形成シミュレーションにおける GPU+FPGA 連携プログラミング及び実行に関する研究」計算科学研究センター・宇宙物理研究部門・梅村グループとの共同研究
- 素粒子物理研究部門と Japan Lattice Data Grid (JLDG) の構築、運用に関する連携
- 量子物性研究部門と SALMON2 の OpenACC による GPU 化に関する連携

産学官連携

該当なし

国際連携・国際活動

- "Research on Multi-Hybrid Accelerated Supercomputing with GPU and FPGA cooperation", International Collaboration with ORNL (PI: Jeff Vetter) under DOE-MEXT Exascale Computing Collaboration (朴)
- アルゴンヌ国立研究所とストレージシステムについて共同研究を行っている。
- オークリッジ国立研究所とバーストバッファシステムについて共同研究を行っている。

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

- 朴泰祐, 実行委員長, FPGA for HPC Workshop (科学研究費基盤研究(B)「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」終了ワークショップ), virtual, 2021年2月26日.
- Gfarm シンポジウム 2020, 東京, 2020年10月9日
- Gfarm ワークショップ 2021, オンライン, 2021年3月5日
- GPU オンラインキャンプ, オンライン開催, 2020年9月9日～11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：理化学研究所客員主管研究員
3. 朴泰祐：HPCI コンソーシアム理事長
4. 朴泰祐：PC クラスタコンソーシアム理事
5. 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
6. 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
7. 高橋大介：理化学研究所客員主管研究員
8. 高橋大介：HPCI 利用研究課題審査委員会レビューアー
9. 高橋大介：HPCI 連携サービス運営・作業部会委員

10. 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
11. 建部修見：HPCI 共用ストレージ運用部会副部会長
12. 建部修見：HPCI 連携サービス運営・作業部会委員
13. 建部修見：理化学研究所客員主管研究員
14. 建部修見：情報通信研究機構協力研究員
15. 建部修見：HPCI 利用研究課題審査委員会レビューアー
16. 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
17. 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
18. 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
19. 小林諒平：計算科学研究センター計算機システム運用委員会委員

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 Co-Chair, IEEE International Conference on Cluster Computing 2020 (Cluster2020)
3. Taisuke Boku: Steering Committee Member, IEEE Cluster
4. Taisuke Boku: Steering Committee Member, International Conference on Parallel Processing
5. Taisuke Boku: Steering Committee Member, Intel eXtreme Performance Users Group (IXPUG)
6. Taisuke Boku: Scientific Committee Member, Supercomputing Frontier Europe 2021
7. Taisuke Boku: Organizing Chair, IXPUG Workshop HPCAsia 2021
8. Daisuke Takahashi: The 20th International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2020) Publicity Committee Member
9. Daisuke Takahashi: 2020 IEEE International Conference on Cluster Computing (Cluster 2020) Program Committee Member
10. Daisuke Takahashi: The 15th International Workshop on Automatic Performance Tuning (iWAPT 2020) Program Committee Member
11. Daisuke Takahashi: The International Conference on Computational Science (ICCS 2020) Program Committee Member
12. Daisuke Takahashi: The 23rd IEEE International Conference on Computational Science and Engineering (CSE 2020) Program Committee Member
13. Daisuke Takahashi: The 19th International Symposium on Parallel and Distributed Computing (ISPDC 2020) Program Committee Member

14. Daisuke Takahashi: The 18th IEEE International Symposium on Parallel and Distributed Processing with Applications (IEEE ISPA 2020) Program Committee Member
15. 高橋大介: 電子情報通信学会／情報処理学会 第19回情報科学技術フォーラム (FIT2020) 担当委員
16. 高橋大介: 情報処理学会 2020年度論文賞選定ワーキンググループ (ジャーナル) 委員
17. 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
18. 高橋大介: 情報処理学会ハイパフォーマンส์コンピューティング研究会幹事
19. Osamu Tatebe: Program Committee, IEEE/ACM International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC20)
20. Osamu Tatebe: Program Committee, ACM International Symposium on High Performance Distributed Computing (HPDC 2020)
21. Osamu Tatebe: Program Committee, IEEE/ACM International Symposium on Cluster, Cloud and Grid Computing (CCGrid 2020)
22. Osamu Tatebe: Program Area Chair, IEEE International Conference on Cluster Computing (Cluster 2020)
23. Akira Nukada: Program Committee Member, 49th International Conference on Parallel Processing (ICPP 2020)
24. Hiroto Tadano: Publication Co-Chair, The 39th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST 2020)
25. 多田野寛人: 日本シミュレーション学会「非線形現象の高性能数値解析技術研究委員会」副委員長
26. 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
27. 多田野寛人: 情報処理学会ハイパフォーマンส์コンピューティング研究会 運営委員
28. 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
29. Ryohei Kobayashi: Program Committee, SC20
30. Ryohei Kobayashi: Program Committee, CANDAR'20
31. Ryohei Kobayashi: Program Committee, 8th International Workshop on Computer Systems and Architectures (CSA'20) held in conjunction with CANDAR'20
32. Ryohei Kobayashi: Registration Chair, IEEE Cluster 2020
33. Ryohei Kobayashi: Program Committee, IEEE Symposium on Low-Power and High-Speed Chips and Systems (COOL Chips 23)
34. 小林諒平: xSIG 2020 プログラム委員
35. 小林諒平: SWoPP2020 組織委員

- 36. 小林諒平：SWoPP2020 実行委員 (コンピュータシステム研究会担当幹事)
- 37. 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
- 38. 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

該当なし

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、天笠 俊之
准教授	塩川 浩昭
助教	堀江 和正
研究員	太田 玲央、宮本 隆典
学生	大学院生 23 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合的に扱うための 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。

今年度は、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）に加えて、JST 戦略的創造研究推進事業「さきがけ」（令和 2 年 12 月～令和 7 年度）、NEDO（令和 2 年度～令和 3 年度）等の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。

3. 研究成果

[1] 情報統合基盤技術

(1) ストリーム処理と OLAP の統合：StreamingCube

リアルタイムでのデータ取得の一般化に伴い、それらのデータを連続的に配信するストリーム形態のデータが急増している。ストリームを効率的に処理するため、これまで様々なストリーム処理エンジン(SPE)が開発されてきた。一方、ストリームとして配信されるデータが複数の属性から構成される多次元データである場合も多く、利用者が様々な次元の組合せに基づいてそのデータを分析したいというニーズがある。データベース分野においては、多次元データに対する複数次元に基づくデータ分析の代表的手法として、Online Analytical Processing (OLAP)がある。OLAP 分析をデータストリームに対しても同様に適用するための研究が、これまでにいくつか行われているが、SPE と既存の OLAP ツールを組み合わせるア

アプローチが一般的である。しかし、組合せによるアプローチでは、システム構成の複雑化、処理のオーバーヘッド等の問題が生じる。

本研究では、SPE 内において従来のストリーム処理に加えて OLAP 処理も実行可能とすることを目的に、SPE 内部に組み込むための OLAP 処理用基本演算子として新たに cubify を考案した。また、cubify をストリーム処理に導入することで、従来のストリーム処理とストリームに対する OLAP をシームレスに統合可能な OLAP 対応ストリーム処理エンジン StreamingCube を開発した。ストリーム処理では、処理効率化のため、既に計算済の分析結果を新たに到着したデータに基づき更新することで最新の分析結果を得る差分計算が広く用いられている。一方、ストリーム OLAP においても、様々な次元の組合せに対して計算された分析結果を新たな到着データに基づき差分更新することで、OLAP 処理の効率化が実現できる。StreamingCube では、従来のストリーム処理用演算子と cubify に差分処理計算を統一的に適用することで、処理の効率化を実現している。

図 1 に StreamingCube における処理ワークフローの例を示す. 従来のストリーム処理演算子である window, select, join 等と, ストリーム OLAP 用の cubify を, この例のように自由に組み合わせることが可能である.

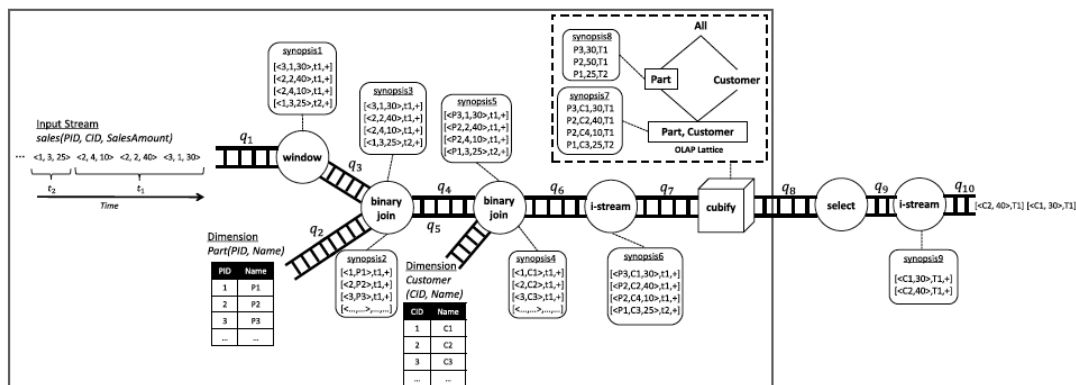


図 1 StreamingCube における処理ワークフローの例

本研究では、StreamingCube のプロトタイプを実装し、SPE と OLAP 分析ツールを組み合わせた従来システムと処理性能の比較実験を行った。図 2 は処理スループットの測定結果である。横軸は OLAP 処理の負荷を表す。具体的には、cubify 演算子内部において最新の計算結果を絶えず保持し続ける OLAP の分析結果ノード数であり、ノード数が増加する程 OLAP 処理の負荷が重くなる。縦軸は入力ストリームの処理スループットを示す。いずれの場合においても、従来システムに対する StreamingCube の優位性が示されている。

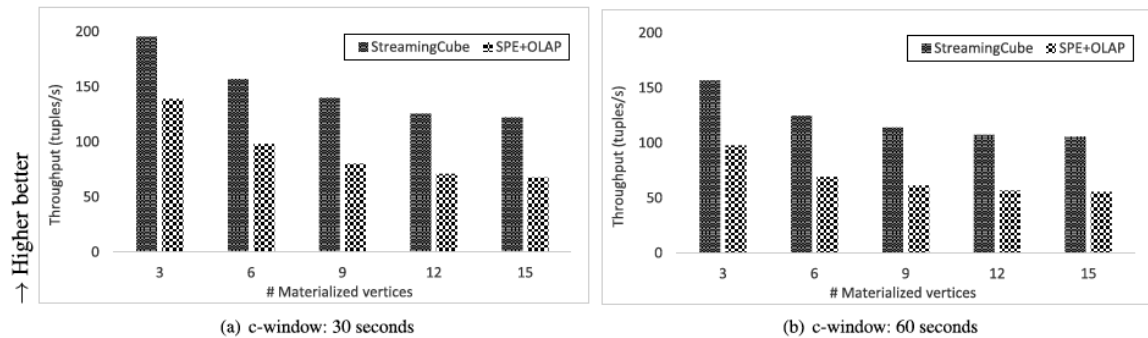


図2 StreamingCube と従来手法の処理スループット比較

(2) 移動オブジェクトに対する空間キーワード検索

GPS 搭載モバイルデバイスや SNS の普及に伴い、人々の移動に対応した様々なロケーションベースのサービスが出現している。移動オブジェクトの重要な性質として、その位置や興味は時々刻々と変化することがある。例えば、人々がその時々興味や関心に関わる情報を SNS 等で発信しながら位置を移動することは、今日日常茶飯事である。本研究では、このような位置と興味は動的に変化する移動オブジェクトに対する空間キーワード検索の手法を新たに開発した。具体的には、位置とキーワード群を併せもつ移動オブジェクト群、同じく位置とキーワード群を併せもつクエリ群を考える。ここで、移動オブジェクト群の位置とキーワード群は時間的に変化するが、クエリの位置とキーワード群は変化しないものとする。また、ある移動オブジェクトとあるクエリの適合度は、その位置間の空間的距離とキーワード群間の類似度の重み付き和で計算されるものとする。このような前提のもと、各クエリに対して適合度が高いトップ k 件の移動オブジェクトを継続的に求める問題に対する効率的方法を考案した。様々な人々を移動オブジェクト（キーワードはその利用者の興味に対応した直近の Tweet 等に含まれる語）、店舗をクエリ（キーワードは店舗のサービスに関連した語）に対応させると、この問題は各店舗が提供するサービスに興味がある近隣の潜在的顧客をリアルタイムで継続的に探索する問題に相当する（図 3）。位置やキーワードに関わる検索手法

はこれまで数多く研究されてきたが、本研究が対象とするこのような問題を直接対象とする手法はこれまで提案されていない。

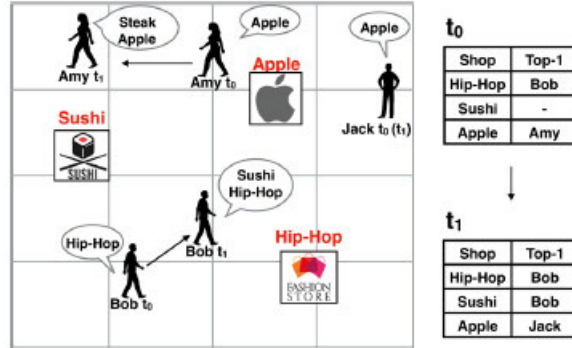


図 3 本研究における空間キーワード検索

図 4 は本研究の提案手法の枠組みを示す。Receiver は移動オブジェクトの状態変化（位置やキーワードの変化）を受信する。Affected Query Finder は、その状態変化によりトップ k 件中の検索結果が変化し得るクエリを識別する。Top- k Refiller は、それらのクエリに対して状態変化後の正しい検索結果を求めるための処理を行う。このような枠組みで効率的に検索結果を得るため、新たな索引構造やデータ構造を導入し、それを用いたアルゴリズムを開発した。図 4 は Affected Query Finder のための索引構造であり、これにより状態変化が影響し得るクエリを高速に絞り込むことが可能である。

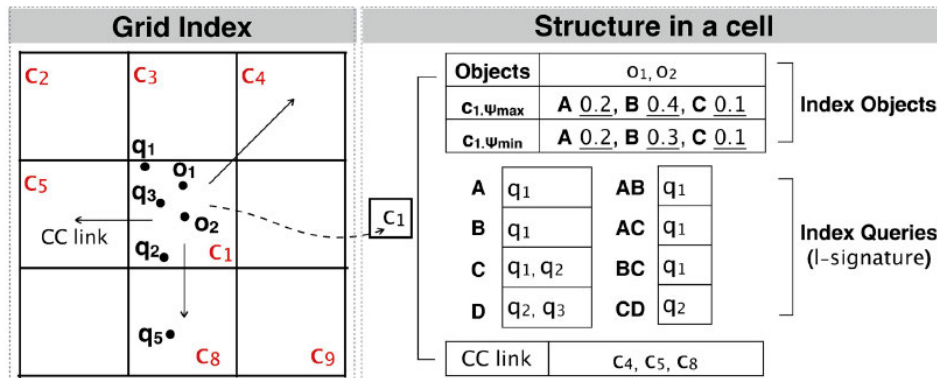
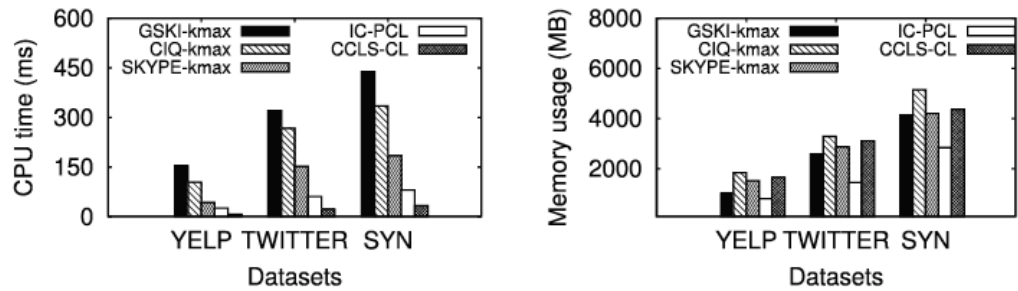


図 4 Affected Query Finder のための索引構造

提案手法の有効性を評価するため、実データを用いて考え得る既存手法の組合せとの実験評価を行った。図 5 は、平均検索処理時間とメモリ使用量を比べた結果であり、提案手法 (CCLS-CL) の有効性が示されている。



(a) Average processing time. (b) Memory consumption.

図 5 提案手法と既存手法の実験評価

(3) 空間ストリーム処理基盤：GeoFlink

位置情報や地理情報等の空間データは、実社会におけるデータ活用において極めて重要な役割を占めている。モバイルコンピューティングや空間センシング技術等の進展に伴い、実時間で取得される空間データストリーム処理の重要性が増加している。スケーラブルなストリーム処理のための基盤システムがこれまで複数実用化されているが、空間データストリームに特化した機能を有するものはこれまでにない。Apache Flink は、ストリームとバッチ処理の両者に対応可能な代表的なビッグデータ処理のためのオープンソースシステムであるが、空間データを直接サポートする機能は有しない。空間データをサポートするスケーラブルなビッグデータ処理基盤としては、GeoSpark, Spatial Hadoop 等があるが、静的なバッチワークロードのみを対象としており、空間データストリームをサポートしていない。

このような課題に対応するため、本研究では、Apache Flink を拡張して空間データストリームを処理可能な GeoFlink を開発した。GeoFlink は、空間データ型のオブジェクトをサポートし、クラスタノードによる並列処理によりスケーラブルな空間ストリーム処理を実現する。また、グリッド構造を用いた空間索引をシステム内部で用いることで、不要な距離計算等を大幅に削減し、効率的な処理を可能としている。GeoFlink のアーキテクチャを図 6 に示す。Spatial Stream Layer では入力ストリームを空間データ型に変換すると共に、空間索引との対応付けを行う。Spatial Query Processing Layer は、それらの情報を活用しながら、範囲検索 (Range), k 近傍検索 (KNN), 空間結合 (Join) 等の処理を実行する。

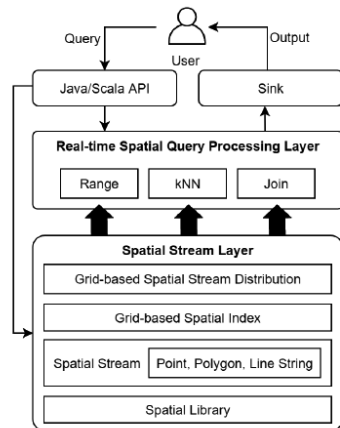


図 6 GeoFlink のアーキテクチャ

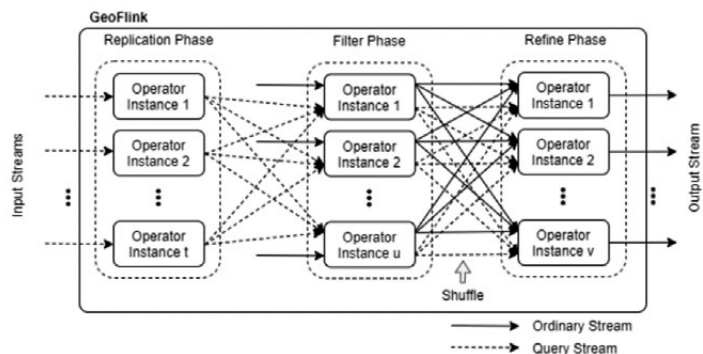


図 7 結合処理のフロー

図 7 は複数クラスターノードを用いた 2 つの空間ストリームに対する空間結合処理の流れを示す。空間結合とは、2 つのストリーム中の点のうち一定距離内のペアを連続的に検出する処理であり、2 つのオブジェクトが接近している状況をリアルタイムで検出する。空間索引を用いたフィルタリングにより結合条件を満たす可能性がある空間データペアの絞りこみを行い、さらに真に距離計算が必要な場合だけ距離を計算することで、効率的な結合処理を実現している。図 8 は空間索引を用いた場合と用いない場合の処理性能の実験比較であり、空間索引によるフィルタリングの有効性が実験的にも確認できる。

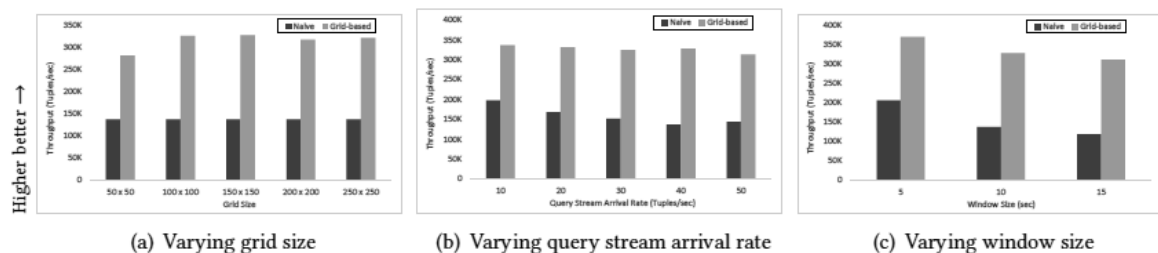


図 8 空間索引の有効性検証

[2] データマイニング・知識発見技術

(関連研究費：科研費 若手研究, JST ACT-I 加速フェーズ, JST さきがけ)

(1) 大規模データ処理の高速化

● Affinity Propagation の高速化

Affinity Propagation は多次元データを含む多様なデータオブジェクトを対象としたクラスタリングアルゴリズムである。最適解に対して非常に性能の良い近似解を求めることがで

きる性質が知られており、幅広い領域で利用されている手法である。しかしながら、クラスタの検出には全点对計算を必要とするため膨大な計算時間を必要とする。本研究では Data Skewness とその決定性を利用することで、必要最低限のデータのみ計算するようにアルゴリズムを設計した。本研究の提案手法 ScaleAP は数百万件程度のデータセットに対して、ジュライ技術よりも精度を劣化させず 100 倍以上高速な処理を可能とした。

図 9 は提案手法と代表的な最先端手法との実行時間ならびに精度の比較結果を示したものである。精度の比較では、それぞれのアルゴリズムが出力した結果が Affinity Propagation とどれだけ一致しているかについて F 値を用いて比較している。この結果からもわかるように提案手法 ScaleAP は既存手法よりも 100 倍程度高速であるが、Affinity Propagation と同じクラスタリング結果を出力可能である。これに対して既存手法は提案手法よりも低速であり、多くの場合、近似解のみを出力する。これらの結果からも本研究が主眼をおいている Data Skewness を捉えた高速化アプローチは全点对計算を必要とするデータ処理にも応用できる可能性が示唆されたと考える。

本研究の成果は 2021 年 2 月に開催された人工知能分野のトップ会議である AAAI 2021 で発表を行った。

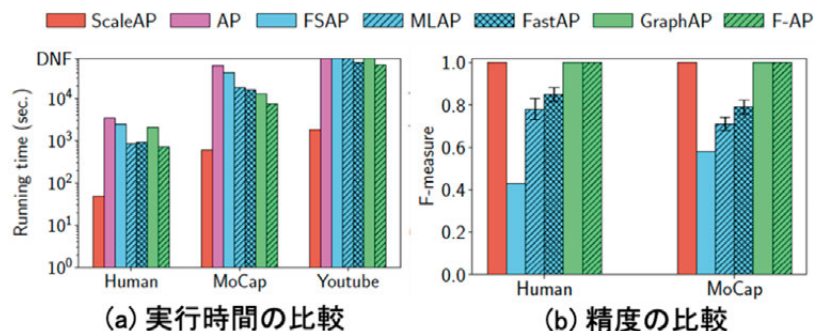


図 9 ScaleAP の性能比較

● 分散グラフクラスタリングのスケーラビリティ向上

本研究では次数比の偏りを用いた効率的な分散グラフクラスタリング DSCAN を開発した。一般的に分散グラフ処理では計算機間で同期処理を必要とする。この同期処理は一般的に大きな処理時間を要することから、同期処理を可能な限り削減することが重要な課題となる。

本研究では実世界のグラフデータが持つエッジには、エッジの両端のノードが持つ次数に大きな偏りが存在することに着眼した。エッジの次数の偏りが極端に大きい場合、本研究で対象とするクラスタリング手法はクラスタを形成することはできないため、同期が不要なエッジであると考えられる。提案手法 DSCAN では次数比の偏りを捉えることで同期不要なエッジを特定することで不要な同期処理を削減し、効率的な分散グラフクラスタリングを実現する。

図 10 に DSCAN の実行時間の比較を示す．図 10 の DSCAN-16 ならびに CASS-16 は 16 台の計算機を用いて分散並列処理した際の実行時間，DSCAN-1 ならびに CASS-1 は 1 台の計算機を用いて処理した際の実行時間を表している．この結果からも，代表的な既存手法よりも数十倍から数百倍程度高速な処理を実現している．また，既存の分散処理手法（CASS-1，CASS-16）で処理できなかった clueweb データセットも数十秒程度で処理可能となっている．また図 11 にスケーラビリティを比較した結果を示す．図 11 では 1 台の計算機で実行した際の計算速度に対する性能向上率を示している．DSCAN（w/o pruning）は通信コスト削減を行わない場合の DSCAN である．この結果からも，提案法は既存法よりも良いスケーラビリティを示していることが確認できる．

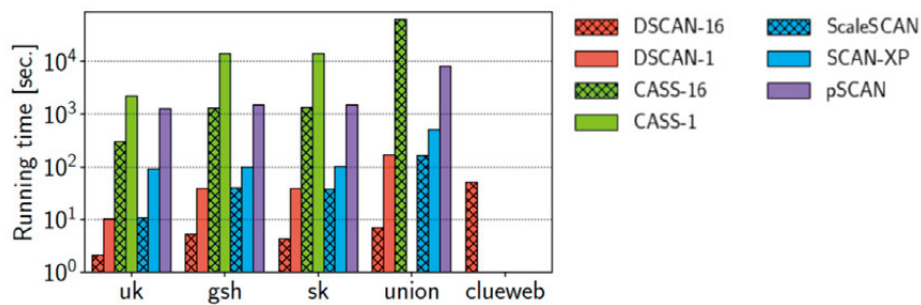


図 10 実行時間の比較

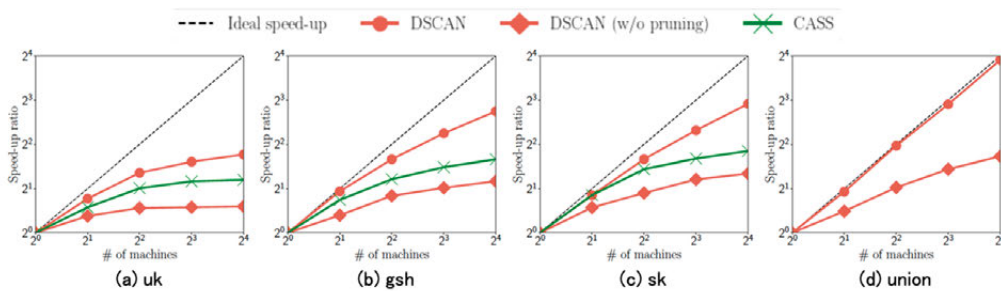


図 11 スケーラビリティの比較

(2) GPU による 5 ノードサブグラフ数え上げの高速化

サブグラフ数え上げは，対象となるグラフに対して，特定の（数ノードからなる）グラフ（パターンと呼ばれる）がサブグラフとして出現する回数を求める問題である．本研究では，パターンのサイズに上限を設定し，サイズが上限となるあらゆるパターンに対して数え上げを行なう問題に取り組んだ．このサブグラフ数え上げは，グラフ分析の基本的な手法の一つであり，グラフの特徴を計算する手法の一つとして，バイオ情報学等の分野で利用されている．これまで厳密解を求める実用的なアルゴリズムは 4 ノードまでが上限であったが，Pinar らによる ESCAPE が，5 ノードサブグラフ数え上げに対してはじめて実用的なアルゴリズムを提案した．しかしながら GPU による処理の並列化は考慮されていなかった．

そこで本研究では、この問題に対して ESCAPE をベースとして、GPU による並列化を適用し高速化を行なった。具体的には、ESCAPE が提案しているグラフの有向グラフへの変換およびパターン分割による数え上げのアプローチを踏襲しつつ、並列化が容易な分割パターンの数え上げの部分を GPU 上で並列に実行する手法を開発した。特に、GPU 上でのメモリ効率の良いデータ構造を利用したグラフの表現（図 12 (a) および (b)）を適用するとともに、必要に応じてエッジを逆に辿るためのデータを保持したり（図 12 (c)）、分割パターンのためのデータ構造を導入（図 12 (d)）することで効率の良い処理を実現した。その結果、ESCAPE に対して 5 ノードサブグラフ数え上げにおいて 4 倍から 10 倍の高速化を実現した。

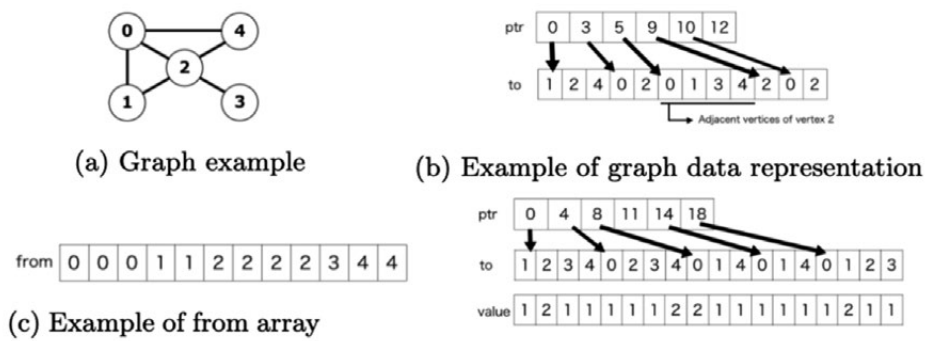


図 12 GPU 上のグラフ表現

(3) グラフにおける距離問合せのためのハイブリッド索引

本研究は中期招聘による国際共同研究の成果である。

グラフにおける 2 頂点を問合せとして与えたとき、その超転換の最短距離を答える問題を距離問合せといい、地理情報システムやソーシャルメディア分析など数多くの応用において広く用いられている基本的な処理である。本研究ではそのための索引として新たな手法を提案した。具体的には、既存手法である PLL (pruned landmark labeling) に対して、最小頂点被覆によってランドマーク数を削減可能であることを示した。さらに、実世界のグラフの特徴に注目、辺の密度が高いコア部分には PLL を適用し、辺の密度が低いそれ以外の木構造部分にはより単純な距離索引を適用するハイブリッド索引を提案した（図 13）。実データを用いた実験により、提案手法は既存手法に比べて、索引のサイズを大幅に削減することに成功しつつ、距離問合せを高速に実行できることを示した。

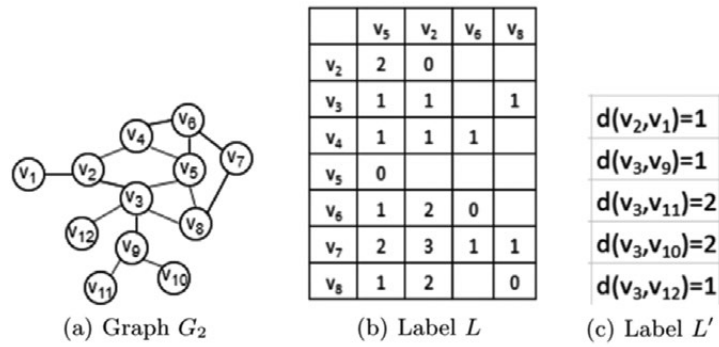


図 13 距離問合せのためのハイブリッド索引

[3] RDF・知識ベース・LOD

(1) 知識ベースに対する Q&A

近年、DBpedia に代表される知識ベースが注目され、一般の知識が機械処理可能なフォーマットで蓄積、各種応用に利用されている．このような知識ベースに対する質問応答（QA）タスクに対して、近年では深層学習モデルを利用したエンド・ツー・エンドの手法が数多く提案されている．ところが、これらの手法はモデル学習に多くの時間が必要なうえ、パフォーマンスに問題がある場合、処理のどの部分に問題があるかどうかを分析するのが困難である．

このため本研究では、処理を以下の部分処理：1) エンティティ検出、2) エンティティリンクング、3) 関係予測、に分割するとともに、各ステップについては単純なニューラルネットワーク、あるいは、ニューラルネットワーク以外のシンプルなモデルを適用する修法を提案した．これにより学習時間の短縮が可能となるだけでなく、パフォーマンスに問題がある場合の問題点の発見が容易になることが期待される．提案手法の評価を実験的行なった結果、比較的単純な手法を組み合わせることで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 質問応答における問合せ精度の比較.

Entity detection	Relation prediction	Accuracy (%)	R@2	R@3
BiLSTM	BiGRU	74.64 [[79.9]]	80.93	82.75
BiLSTM	CNN's	74.63	80.85	82.75
CRF	CNN	73.42	79.45.	81.3
CRF's	BiGRU	73.39	79.46	81.28
CRF's	BiLSTM	73.34	79.36	81.16
CRF's	LR(W2Vec+1-Hot)	70.1	77.07	79.08
CRF's	LR(TF-IDF)	68.4	...	...
Previous work				
Model	Description	Accuracy		
Yin et al. 2016	Max-pooling	76.4		
Dai et al. 2016	Probabilistic	75.7		
Xiao et al. 2019	Embedding based	75.4		
Lukovnikov 2017	Neural embedding	71.2		
Golub and He 2016	Character-based	70.9		
Bodes et al. 2015	Memory network	62.7		

(2) 知識ベースに対するエンティティ感の関係に着目したファセット検索

知識ベースが普及するとともに、多様な情報が知識ベース上にグラフ形式で蓄積されることが予想される．一般に知識ベースは RDF (resource description framework) フォーマットで記述されるが、基本的には機械処理することが前提であり、人間が利用する場合の可読性は必ずしも高くない．とはいえ、データのメンテナンスや必要なデータの抽出など、RDF を人間が直接利用する場面は少なくなく、必要な情報を RDF から取得するためのインタフェースは重要である．

これまで RDF を対象とした検索インタフェースは数多く研究されてきたが、それらは主に、データ中の対象物 (エンティティ) に関するものがほとんどであった．その一方で、RDF を扱う差異には、エンティティ間の関係 (例えば、宇宙関連のプロジェクトにおいて「宇宙飛行士」と「プロジェクト」の関係など) は重要であるにも関わらず、これまでエンティティ間の関係を検索できるようなシステムはほとんど見られない．

そこで本研究では、知識ベース中のエンティティ間の関係に着目した検索インタフェースを開発した．提案手法 (RelFacet) はファセット検索をベースにしており、従来のファセットに加えて「関係ファセット」を提案しているところに特徴がある．関係ファセットは、エンティティ間の関係を、それがどのようなエンティティと共起するかによってクラスタリングされる．各クラスが関係ファセットにおける各値となり、利用者は興味のあるエンティティおよびそれと関連の強い関係に対話的にブラウズすることで、所望のデータを検索することができる (図 14)．評価実験により、提案手法は関係に関連した情報の探索により適していることを被験者実験を含む実験で示した．

RelFacet

Keyword: on ☐ Subject ☒ Object **A) Keyword query**

Subject Type: Predicate Type: Object Type: **B) Transition Markers**

****Search Condition**** **C) Intension**

Keyword: "Tsukuba" on "Object"

Subject Type: [-] Predicate Type: [-] Object Type: [-]

Matching Triples: 14 (Showing Top 14 records)

No.	Subject	Predicate	Object
0	University of Tsukuba	city	Tsukuba
1	National Institute for Materials Science	city	Tsukuba
2	National Institute for Environmental Studies	city	Tsukuba
3	Institute for Comparative Research in Human and Social	city	Tsukuba
4	Tsukuba Gakuin University	city	Tsukuba, Ibaraki
5	National Agriculture and Food Research Organization	campus	Tsukuba, Ibaraki
6	Kochi University	type	List of national universities in Japan
7	Daiichiro Sato	almaMater	University of Tsukuba
8	Institute for Comparative Research in Human and Social	affiliation	University of Tsukuba
9	University of Tsukuba	homepage	http://www.tsukuba.ac.jp/english/
10	Tokyo Kasei-Gakuin Junior College	#differentFrom	Tokyo Kasei-Gakuin University
11	National University Corporation Tsukuba University of Tech	homepage	http://www.tsukuba-tech.ac.jp/en/index.php
12	Institute for Comparative Research in Human and Social	homepage	http://icrhs.tsukuba.ac.jp/en/
13	Masatoshi Shima	almaMater	Tsukuba University

D) Extension

図 14 RelFacet のインターフェース

[4] データベース応用・データサイエンス

(1) 睡眠臨床向け睡眠ステージ自動判定手法の開発

一般に、ヒトの睡眠はノンレム睡眠やレム睡眠といった 5 つのステージ（状態）から構成される。脳波や眼電位といった生体信号から、被験者・患者のステージを判定する「睡眠ステージ判定」は、睡眠臨床における必須検査の一つとなっている。本検査には多くの時間と専門知識を必要とすることから、これまでも多くの自動判定システムが開発されているものの、病院等における利用には至っていない。

その理由としては、判定精度と手法の信頼性・実用性の両立が達成できていない点が挙げられる。近年の研究では、深層学習技術を用いることで高精度のステージ判定が達成できることが示されているが、ブラックボックスであり判定理由を提示できないことから、医師・技師からの信頼を獲得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-IIIS）と連携、新しい自動判定手法を **Sleep-CAM** を開発した。本手法は、判定精度を高めるために深層ニューラルネットを採用しているものの、その構造決定には既存の手动判定の知見が多く利用されており、手动判定の手順をモデルで再現することを重視している。また、**Class Activation Mapping** を基に開発した判定理由の提示機構を有しており、提案手法が判定時にどの部分を重視したのかが簡単に確認できる。これにより手法が手动判定に近い基準で判定を行っていることが明らかになった。また、医師・技師によるダブルチェックの労力削減につながった。これらの機構・機能は彼らの信用獲得において非常に有効であると思われる。

精度評価においては、技師との判定一致率 87.8%を達成（技師間一致率は 82.0%），技師とほぼ同レベルの自動ステージ判定を実現した．判定の詳細（図 15）を見ると，細かいステージの変化に対応できていない部分もあるが，全体の傾向は一致しており臨床においても利用できると思われる．

判定理由提示では，各ステージに固有の脳波形（特徴波形）に着目して判定を行っていることが分かった．図 16 は，ステージ N2（ノンレム睡眠の 1 つ）時の脳波と判定時の注目点を示している．ステージ N2 に固有の K 複合波（矢印部分）に注目しており，医師・技師と同じ基準を用いた判定を行っていることが明らかになった．

本研究の成果は国際ジャーナルに投稿中である．また，より簡易な家庭用脳波計向けの睡眠ステージ判定手法を開発中，21 年度中に論文を投稿・公表する予定である．

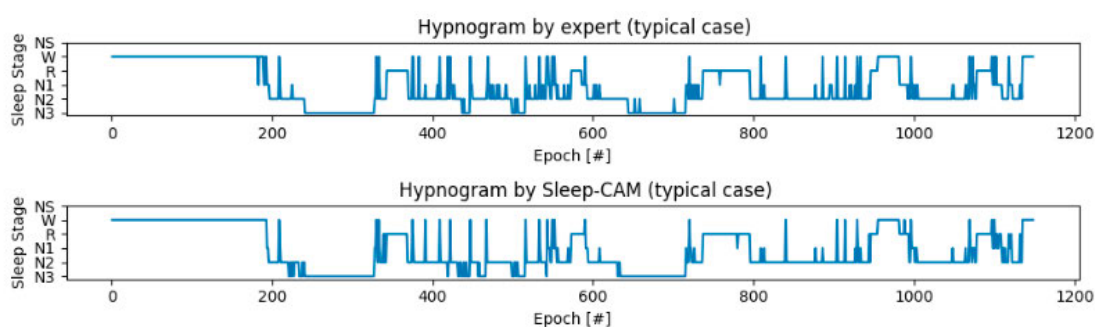


図 15 医師・技師と提案手法によるステージ判定結果の比較

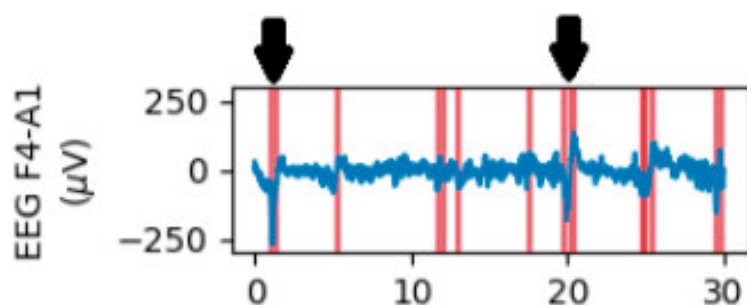


図 16 判定理由提示の例（ステージ N2）．青い線が脳波，赤い背景が判定時の着目区間を示している．黒い矢印で示された鋭波は K 複合と呼ばれ，ステージ N2 を判定する際の有力な証拠の一つである．

(2) 宇宙機開発における文書からの知識抽出

- 異種テキストの相関を利用した潜在的な知識の抽出

宇宙航空研究開発機構 (JAXA) において開発される宇宙機では、開発の間の期間が長く（十年以上）技術者の技術の伝承が重要な課題となっている。また、宇宙機はいったん発射されると直接的なメンテナンスができないため、クリティカルな障害を避けるため事前の設計レビューを見落としなく行なうことが求められる。

本研究では、宇宙機の設計レビューにおいてレビューを実施する際レビューの支援を目的として、JAXA 内で蓄積された宇宙機に関連する異なる文書群（仕様書および不具合記録）の関連付けを行なう手法を開発した。両者は共通する語彙が極めて少なく、また、対象となる宇宙機が適切にカテゴリ訳されていないなど、単純な手法で関連付けを行なうことは極めて困難である。そこで本研究では、図 17 に示すようなニューラルネットワークによって、文書間の関連を学習し、学習したモデルによる推論を行なう。実データを使った実験により、提案手法はベースライン手法に比べて高い精度で関連付けを行なうことができることを確認した。

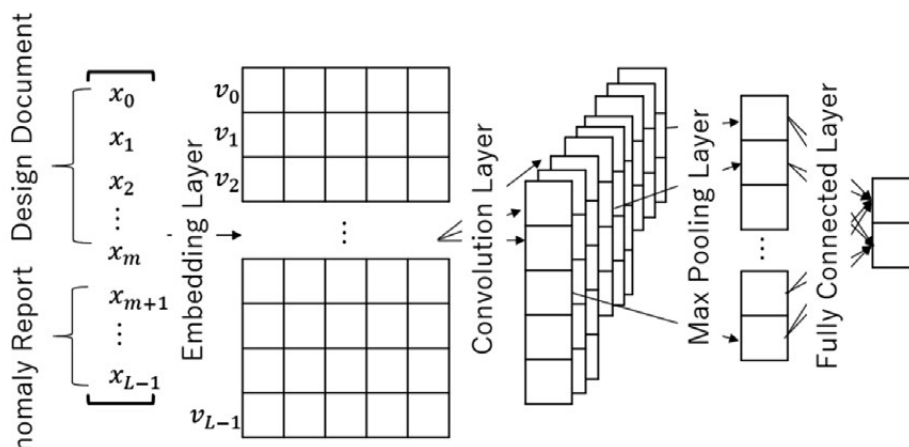


図 17 提案モデル

● レビューにおいて仕様の「抜け」の発見支援

宇宙機開発においては、仕様上の抜けなどのミスを事前のレビューにおいて極力排除することが極めて重要であるものの、レビューにおいてはレビューの経験や知識が極めて重要な役割を果たす。そこで本研究では、非エキスパートを対象に、レビューにおける「抜け」の発見の支援を目的とした情報提供のための手法を提案した。具体的には、仕様書の項目に関連した過去の不具合情報を「観点」として提示することで、仕様書の抜けの発見を支援する。実験による評価によって、提案手法の有効性を評価した。

4.教育

学生の指導状況（学生氏名、学位の種類、論文名）

< 修士（工学） >

1. 阿曾 太郎
知識ベースを活用した探索的な情報検索に関する研究
2. 江畑 拓哉
AutoEncoder に基づく半教師あり和文スタイル変換
3. 真次 彰平
Efficient Attributed Community Search for Large-scale Graph(大規模グラフに対する効率的な属性付きコミュニティ検索)
4. 三浦 賢人
FPGA を用いたラベル付きグラフに対する正規パス問合せアクセラレータ
5. Evaldo Borba
3D Model Generation from Single-Image View using Adversarial Training and Latent Space Representation(敵対的学習と潜在空間表現を用いた単一画像ビューからの三次元モデル生成)

< 学士 (情報科学, 情報工学) >

1. 大森 雄基
バンディットアルゴリズムを利用した特定地域ユーザからの特定トピックに関するツイートの収集
2. 小久保 柚真
複数の類似度を考慮した木構造データに対する類似部分木検索
3. 萬場 大登
プログラム要素の関係グラフと識別子名との深層学習に基づくクラス名推薦
4. 対比地 恭平
GPU を用いた直積量子化による近似 k 最近傍検索の高速化
5. 高島 聡
Random Forest による眼球指標からの覚醒度合いの推定
6. 小林 瑞季
グラフ k 最近傍検索のための高速な索引構築に関する研究

集中講義など

情報理工学位プログラム「フロンティアインフォマティクス特論 A/B」世話人 (天笠)

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

2. 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(DEIM2020), 優秀論文賞: 塩川浩昭, "基調構造を利用したグラフクラスタリングの高速化", 2020 年 6 月 1 日.
3. 日本データベース学会, 上林奨励賞: 塩川浩昭, 2020 年 6 月 26 日.
4. ソフトウェア品質シンポジウム 2020 (SQiP2020), SQiP Best Paper Effective Award: 天笠俊之, "自然言語処理による情報検索を用いた故障発想支援の提案", 2020 年 9 月 10 ~11 日.
5. 筑波大学 2020 BEST FACULTY MEMBER: 天笠俊之, 2021 年 2 月 15 日.
6. 第 13 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2021), 学生プレゼンテーション賞: 柳澤隼也, 塩川浩昭, "グラフ構造に基づく信頼性クエリの高速度推定", 2021 年 3 月 1 日~3 月 3 日.
7. 第 13 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2021), 学生プレゼンテーション賞: 真次彰平, 塩川浩昭, "高速な最大 k-Plex 探索アルゴリズムの提案", 2021 年 3 月 1 日~3 月 3 日.
8. 第 13 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2021), 学生プレゼンテーション賞: 山田真也, 北川博之, 天笠俊之, "複合的データ解析を伴う分析処理に対するトレーサビリティの研究", 2021 年 3 月 1 日~3 月 3 日.
9. 第 207 回ソフトウェア工学研究発表会(SIGSE2021), 学生研究賞: 山中仁斗, 天笠俊之, "メソッド抽出リファクタリング推薦手法に対するメソッド名予測を用いた精度改善の試み", 2021 年 3 月 1 日~3 月 2 日.
10. 情報処理学会第 83 回全国大会, 学生奨励賞: 大森雄基, 北川博之, 天笠俊之, "バンディットアルゴリズムとメンション関係を利用した特定トピックに関する特定の地域のツイートの収集", 2021 年 3 月 18 日~3 月 20 日.
11. 情報処理学会第 83 回全国大会, 学生奨励賞: 小林瑞季, 真次彰平, 塩川浩昭, "グラフ k 近傍検索のための高速な索引構築手法の提案", 2021 年 3 月 18 日~3 月 20 日.
12. 情報処理学会第 83 回全国大会, 学生奨励賞: 小久保柚真, 天笠俊之, 北川博之, "複数の類似度を考慮した木構造データに対する類似部分木検索", 2021 年 3 月 18 日~3 月 20 日.
13. 情報処理学会第 83 回全国大会, 学生奨励賞: 高島聡, 堀江和正, "ランダムフォレストによる眼球指標からの覚醒度合いの推定", 2021 年 3 月 18 日~3 月 20 日.

外部資金

7. 受託研究: 民間企業共同研究 (令和元年 10 月 1 日~令和 3 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：19,083,333 円 (R2 年度直接経費：12,000 千円)

8. 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 3 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：5,000 千円 (R2 年度直接経費：2,500 千円)

9. 共同研究：民間企業共同研究（令和 2 年 4 月 1 日～令和 3 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 SKYSEA Client View の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

10. 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 (R2 年度直接経費：3,300 千円)

11. 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 (R2 年度直接経費：1,400 千円)

12. 受託研究：新エネルギー・産業技術総合開発機構（令和 2 年 7 月 16 日～令和 4 年 1 月 31 日）

研究課題：多粒度ストリームにおける StreamOps 技術の開発

研究代表者：天笠 俊之

全年度契約金額：21,953 千円（R2 年度直接経費：9,910 千円）

13. 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 (R2 年度直接経費：10,000 千円)

14. 受託研究：科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業（さきがけ）「IoT が拓く未来」（令和 2 年 11 月 1 日～令和 4 年度）

研究課題：超高速な多モーダル IoT データ統合処理基盤

研究代表者：塩川 浩昭

全年度直接経費：40,000 千円 (R2 年度直接経費：5,000 千円)

15. 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 (R2 年度直接経費：1,000 千円)

16. 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 (R2 年度直接経費：700 千円)

知的財産権

8. 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. Salman Ahmed Shaikh and Hiroyuki Kitagawa, "StreamingCube: Seamless Integration of Stream Processing and OLAP Analysis", IEEE Access, Vol. 8, pp. 104632-104649, June 2020.
2. Kotaro Yamazaki, Shohei Matsugu, Hiroaki Shiokawa, Hiroyuki Kitagawa, "Fast and Parallel RankClus Algorithm based on Dynamic Rank Score Tracking", Journal of Information Processing (Transaction of Databases), Vol. 28, pp. 453-461, July 2020.
3. Yuyang Dong, Chuan Xiao, Hanxiong Chen, Jefferey Xu Yu, Kunihiro Takeoka, Masafumi Oyamada, and Hiroyuki Kitagawa, "Continuous Top-k Spatial-Keyword Search on Dynamic Objects", The VLDB Journal, Springer, Vol. 30, pp. 141-161, September 2020.
4. Shohei Matsugu, Hiroaki Shiokawa, Hiroyuki Kitagawa, "Fast Algorithm for Attributed Community Search ", Journal of Information Processing, Vol. 29, pp. 188-196, January 2021.

5. Happy Buzaaba, Toshiyuki Amagasa, "Question Answering Over Knowledge Base: A Scheme for Integrating Subject and the Identified Relation to Answer Simple Questions", SN Computer Science, Vol. 2, Article 25, 13 pages, January 2021.
6. 中挾晃介, 北川博之, "シーケンスデータに対する行パターンマッチングの効率化", 情報処理学会論文誌, Vol. 62, No. 1, pp. 302-320, 2021 年 1 月.
7. Savon Bou, Hiroyuki Kitagawa, and Toshiyuki Amagasa, "CPiX: Real-Time Analytics over Out-of-Order Data Streams by Incremental Sliding-Window Aggregation", IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 12 pages, Online, January 2021.

B) 査読無し論文

該当なし

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. 北川博之, "Computing as a Science を担うデータベース研究", 情報処理学会コンピュータサイエンス領域功績賞受賞記念講演, 情報処理学会第 171 回データベースシステム研究会・情報処理学会第 140 回情報基礎とアクセス技術研究会・電子情報通信学会データ工学会合同研究会（オンライン開催）, 2020 年 9 月 5 日.

B) 一般講演

< 査読付き国際会議論文 >

1. Kenji Mori, Naoko Okubo, Yasushi Ueda, Masafumi Katahira, Toshiyuki Amagasa, Supporting viewpoints to review the lack of requirements in space systems with machine learning, Proc. IEEE/ACM 15th International Symposium on Software Engineering for Adaptive and Self-Managing Systems (SEAMS 2020), pp. 38-44, June 29-July 3, 2020.
2. Hiroaki Shiokawa, Tomokatsu Takahashi, "DSCAN: Distributed Structural Graph Clustering for Billion-edge Graphs", Proc. 31st International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA2020), pp. 38-54, September 14-17, 2020.
3. Shohei Matsugu, Hiroaki Shiokawa, Hiroyuki Kitagawa, "Fast and Accurate Community Search Algorithm for Attributed Graphs", Proc. 31st International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA2020), pp. 233-249, September 14-17, 2020.
4. Junya Yanagisawa, Hiroaki Shiokawa, "Fast One-to-Many Reliability Estimation for Uncertain Graphs", Proc. 31st International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA2020), pp. 106-121, September 14-17, 2020.

5. Shuya Suganami, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "Accelerating all 5-vertex subgraphs counting using GPUs", Proc. 31st International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA2020), pp. 55-70, September 14-17, 2020.
6. Salman Ahmed Shaikh, Komal Mariam, Hiroyuki Kitagawa, and Kyoung-Sook Kim, "GeoFlink: A Distributed and Scalable Framework for the Real-time Processing of Spatial Streams", Proc. 29th ACM International Conference on Information and Knowledge Management (CIKM2020), pp. 3149-3156, October 19-23, 2020.
7. Junhu Wang, Shikha Anirban, Toshiyuki Amagasa, Hiroaki Shiokawa, Zhiguo Gong, Md. Saiful Islam, "A Hybrid Index for Distance Queries", Proc. International Conference on Web Information Systems Engineering (WISE 2020), pp. 227-241, October 20-23, 2020.
8. Taro Aso, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "Relation-oriented faceted search method for knowledge bases", Proc. 22nd International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services (iiWAS2020), pp. 192-199, November 30-December 2, 2020.
9. Hiroaki Shiokawa, "Scalable Affinity Propagation for Massive Datasets", Proc. 35th AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI2021), Virtual Conference, February 2021.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 北川博之, "Computing as a Science を担うデータベース研究", 情報処理学会コンピュータサイエンス領域功績賞受賞記念講演, 情報処理学会第 171 回データベースシステム研究会・情報処理学会第 140 回情報基礎とアクセス技術研究会・電子情報通信学会データ工学研究会合同研究会 (オンライン開催), 2020 年 9 月 5 日.

B) その他の発表

<学会発表>

1. 小林瑞季, 真次彰平, 塩川浩昭, "グラフに対する効率的な k 最近傍検索のための索引構築手法", 第13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 2021), A11-1, 2021 年 3 月 1 日～3 月 3 日.
2. 平方俊行, 天笠俊之, "分散 RDF ストリーム処理システムにおける複数フィルタリング最適化", 第13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 2021), A11-2, 2021 年 3 月 1 日～3 月 3 日.

3. 柳澤隼也, 塩川浩昭, "グラフ構造に基づく信頼性クエリ的高速推定", 第 13 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 2021), A13-1, 2021 年 3 月 1 日～3 月 3 日.
4. 中野茉莉香, 天笠俊之, "複数の知識ベースおよびテキストを横断した問合せ", 第 13 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 2021), A13-5, 2021 年 3 月 1 日～3 月 3 日.
5. 真次彰平, 塩川浩昭, "高速な最大 k-Plex 探索アルゴリズムの提案", 第 13 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 2021), A24-1, 2021 年 3 月 1 日～3 月 3 日.
6. 湯川皓太, 天笠俊之, "Product Quantization を用いた近似 k 最近傍探索の高速化", 第 13 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 2021), A25-4, 2021 年 3 月 1 日～3 月 3 日.
7. 三浦賢人, 天笠俊之, 北川博之, "FPGA を用いたラベル付きグラフに対する正規パス問合せアクセラレータの改良", 第 13 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 2021), B13-3, 2021 年 3 月 1 日～3 月 3 日.
8. 菅波柊也, 天笠俊之, 塩川浩昭, 北川博之, "GPU 並列 5 ノードサブグラフカウンティング手法の改良", 第 13 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 2021), B13-4, 2021 年 3 月 1 日～3 月 3 日.
9. 山田真也, 北川博之, 天笠俊之, "複合的データ解析を伴う分析処理に対するトレーサビリティの研究", 第 13 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 2021), B21-1, 2021 年 3 月 1 日～3 月 3 日.
10. Evaldo Borba, 天笠俊之, "3D Model Generation from Single-Image View using Adversarial Training and Latent Space Representation", 第 13 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 2021), E24-4, 2021 年 3 月 1 日～3 月 3 日.
11. 阿曾太郎, 天笠俊之, 北川博之, "知識ベースを活用した探索的な文書検索", 第 13 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 2021), F31-3, 2021 年 3 月 1 日～3 月 3 日.
12. 石原詢大, 渡辺知恵美, 天笠俊之, "Volume-Hiding 暗号マルチマップにおけるデータ量秘匿を可能にする挿入の実現", 第 13 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 2021), G33-1, 2021 年 3 月 1 日～3 月 3 日.
13. 山中仁斗, 早瀬康裕, 天笠俊之, "メソッド抽出リファクタリング推薦手法に対するメソッド名予測を用いた精度改善の試み", 第 207 回ソフトウェア工学研究発表会 (SIGSE 2021), 2021 年 3 月 1 日～3 月 2 日.

14. 萬場大登, 早瀬康裕, 天笠俊之, 北川博之, "オブジェクト指向プログラムの要素関係グラフを用いたクラス名の end-to-end 学習", 情報処理学会第83回全国大会 (IPSJ 全国大会 2021), 4K-01, 2021 年 3 月 18 日～3 月 20 日.
15. 大森雄基, 北川博之, 天笠俊之, "バンディットアルゴリズムとメンション関係を利用した特定トピックに関する特定の地域のツイートの収集", 情報処理学会第83回全国大会 (IPSJ 全国大会 2021), 6L-03, 2021 年 3 月 18 日～3 月 20 日.
16. 小林瑞季, 真次彰平, 塩川浩昭, "グラフ k 近傍検索のための高速な索引構築手法の提案", 情報処理学会第83回全国大会 (IPSJ 全国大会 2021), 5L-05, 2021 年 3 月 18 日～3 月 20 日.
17. 対比地恭平, 天笠俊之, "GPU による直積量子化を用いた近似 k 近傍探索の高速化", 情報処理学会第83回全国大会 (IPSJ 全国大会 2021), 4L-05, 2021 年 3 月 18 日～3 月 20 日.
18. 小久保柚真, 天笠俊之, 北川博之, "複数の類似度を考慮した木構造データに対する類似部分木検索", 情報処理学会第83回全国大会 (IPSJ 全国大会 2021), 4L-02, 2021 年 3 月 18 日～3 月 20 日.
19. 高島聡, 阿部高志, 堀江和正, "ランダムフォレストによる眼球指標からの覚醒度合いの推定", 情報処理学会第83回全国大会 (IPSJ 全国大会 2021), 4Q-02, 2021 年 3 月 18 日～3 月 20 日.

(4) 著書、解説記事等

該当なし

7.異分野間連携・産学官連携・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.hpcc.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 (IIIS) 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.

8.シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

北川博之教授

- 学外

- KJDB Working Group Chair: The 15th Korea-Japan (Japan-Korea) Database Workshop (KJDB2020), Yeosu, Korea, November 20-22, 2020, Online.

天笠俊之教授

● 学外

- 波平晃佑, 梅田浩貴, 大久保梨思子, 植田泰士, 片平真史, 森崎修司, 天笠俊之, "自然言語処理による情報検索を用いた故障発想支援の提案", ソフトウェア品質シンポジウム 2020 (SQiP2020), B2-1, オンライン, 2020 年 9 月 10-11 日.

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
- 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

- 日本データベース学会理事

● 学内

- 筑波大学情報ガバナンス基盤室長
- 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・情報理工学位プログラム: 国際交流委員会委員長
- 情報理工学位プログラム: デュアルディグリー推進室室長
-

塩川浩昭准教授

● 学外

- 国立情報学研究所 グローバルサイエンスキャンプ 2020 年度「情報科学の達人」メンター

● 学内

- 計算科学研究センター: セキュリティ委員会委員, 共同研究委員会委員
- 情報科学類: カリキュラム委員会委員, クラス担任, 心青会担当委員

- 情報理工学位プログラム：ダブルディグリープログラム推進室室員，入試オンライン化 WG 委員
- ヒューマニクス学位プログラム：学生支援委員会委員

堀江和正助教

- 学外
 - 該当なし.
- 学内
 - 情報科学類：広報委員会委員
 - 情報理工学位プログラム：インターンシップ委員会委員
 - ヒューマニクス学位プログラム：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，KJDB Working Group Chair, DASFAA Steering Committee Member Emeritus
- 国内委員等
 - 日本学術会議連携会員

天笠俊之教授

- 国際委員等
 - プログラム委員：DaWaK2020, iiWAS2020, IDEAS2020, 他
- 国内委員等
 - 情報処理学会データベースシステム研究会（SIG-DBS）主査

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
 - 国際会議運営委員：VLDB2020 Proceedings Co-chair
 - 国際会議プログラム委員：IJCAI2020, AAI2021, PAKDD2021, DASFAA2021
- 国内委員等
 - 電子情報通信学会 データ工学研究会 (DE) 専門委員
 - 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

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	宋戸 英彦
学生	大学院生 26 名, 学類生 5 名, 研究生 0 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、北原格教授は本センターの計算メディカルサイエンス事業における 3DCG バーチャル手術の研究を率いている。

科研費（基盤研究 B・代表・亀田）では、視覚障がい者をはじめとするヒトのモビリティを知的に支援する研究の集大成を目指して本年度研究を進めた。科研費（基盤研究 B・代表：北原）では、自由視点画像をテキスト情報が連動する電子メディアの実現に関する研究を推進した。JST CREST Cyborg Crowd（代表：図書館情報メディア系 森嶋厚行）では、衛星画像と地上撮影画像の高精度重畳法に関する研究に取り組んだ。科研費（基盤研究 B・代表：東京医大 大城幸雄（分担：北原））では、腹腔鏡映像から内臓の 3 次元形状を復元する手法を考案した。

- 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）
 - 詳細は後の【1】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）
 - ・ 詳細は後の【2】参照.
- 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）
 - ・ 詳細は後の【3】参照.
- 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.
- 共同研究・日本電気株式会社「多視点カメラ映像による 3D 姿勢・行動データの構築技術の検証」代表者：北原格
 - ・ 人物の姿勢・行動認識用データセットを構築の課題検証と，姿勢推定精度の向上を目的とした研究に取り組んだ.
- 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の高精度化」代表者：北原格（研究分担者：宍戸）
 - ・ 非整地屋外環境において，移動ステレオカメラの位置姿勢推定および撮影環境の 3 次元形状復元を行った結果を複数の単眼固定カメラと統合する研究を実施した.
- 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」（宍戸）
 - ・ 画像間の対応点情報と 3 次元形状情報を組み合わせることで，撮影位置・タイミングの異なる複数画像の映像品質を保持しつつ正確に重畳する手法を提案する．本研究では，背景，日照条件，撮影カメラの位置姿勢の変動といった，画像重畳処理を妨げる問題の解決に取り組む．応用事例としてアンコールトム・バイヨン寺院の柱の上で繁殖する地衣類の観察を支援する重畳映像を生成した.
- 科研費・基盤研究(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，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結果を学会発表の形で纏めた（詳細は後の【5】参照）．また，高精細な位置誘導手法についても研究成果を得ている.
- 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を、バイオメディカル情報に基づいて解析する方法について研究を着手した（詳細は後の【6】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 空間技術を用いて実現する方法を研究発表した。
- 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考慮して指示を出す方法について、研究を進めることができた。成果の一部はプロトタイプシステムに還元できた。
- 科研費・基盤研究(B)「解説型ウェブページの分かり易さ・見易さの自動評価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）
 - ・ コンピュータビジョン的な側面から、見易さの自動評価方法について検討を進めた。

3.研究成果

[1] 自由視点画像をテキスト情報が連動する電子メディア

多視点映像と文章が連動するインタラクティブな電子書籍を考案し、立体芸術を対象とした閲覧方式を提案した。ハイライトやポインティングなど説明文への操作によって多視点画像の視点を切替えたり、多視点画像の観察視点切替え操作によって説明文を強調表示したりというように、多視点映像と説明文が相互に作用する閲覧機能を有するインタラクティブ電子書籍を実現した。提案手法の実証実験として、立体芸術を対象としたバレットタイム映像の撮影実験を実施し、撮影した多視点映像を提案手法へ適用した結果、実用可能な多視点映像と文章が連動する電子書籍を生成できることを確認した。

研究をまとめた論文「Interactive e-Book Linking Text and Multi-View Video」が 2020 IEEE 9th Global Conference on Consumer Electronics (GCCE 2020) に採択されるとともに、提案手法を応用した Remote Museum Explorer が筑波大学「大学『知』活用プログラム」に採択され、実際の展示物を対象とした社会実装へと展開が進んでいる。

https://www.osi.tsukuba.ac.jp/fight_covid19_interview/kitahara/

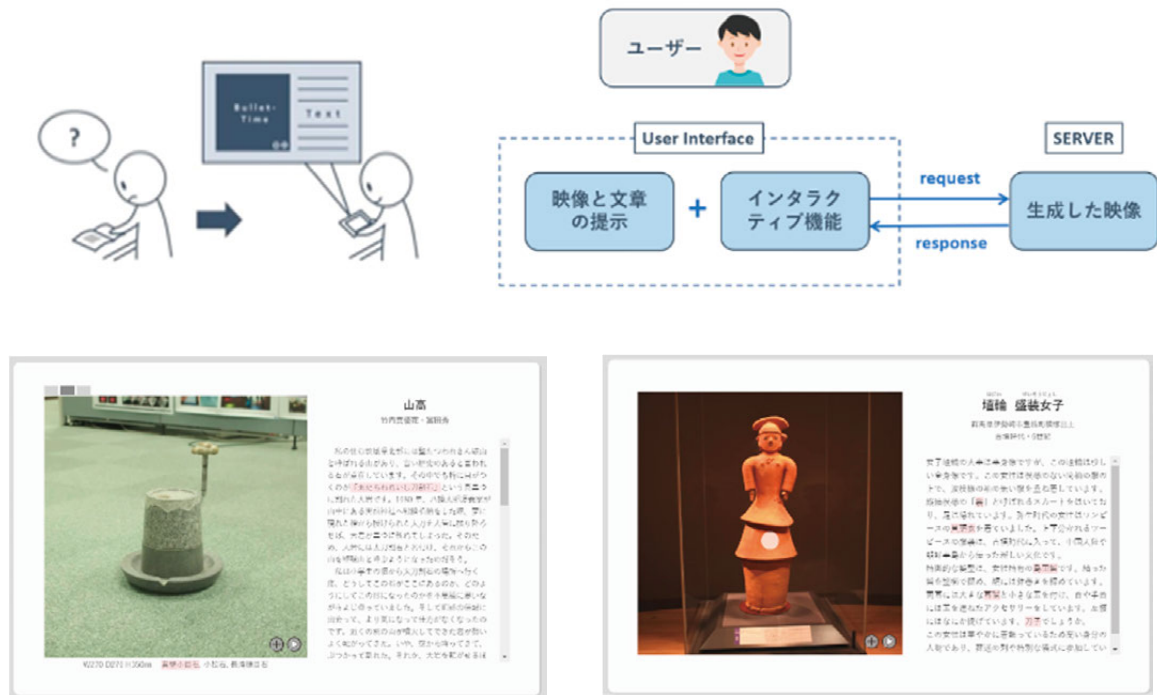
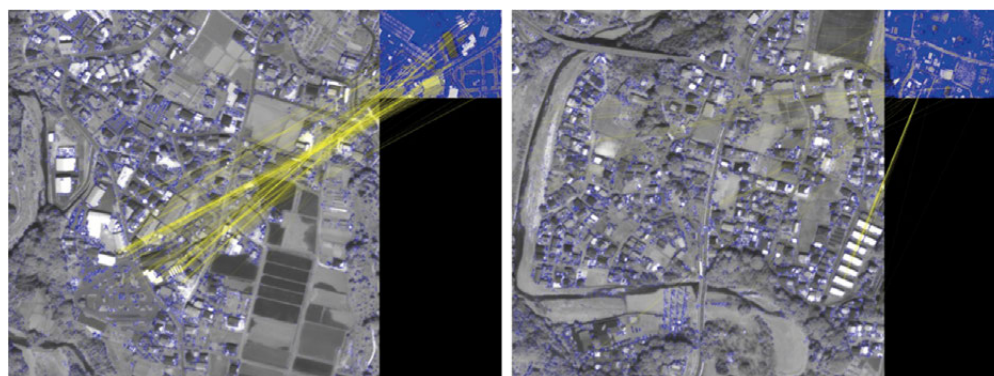
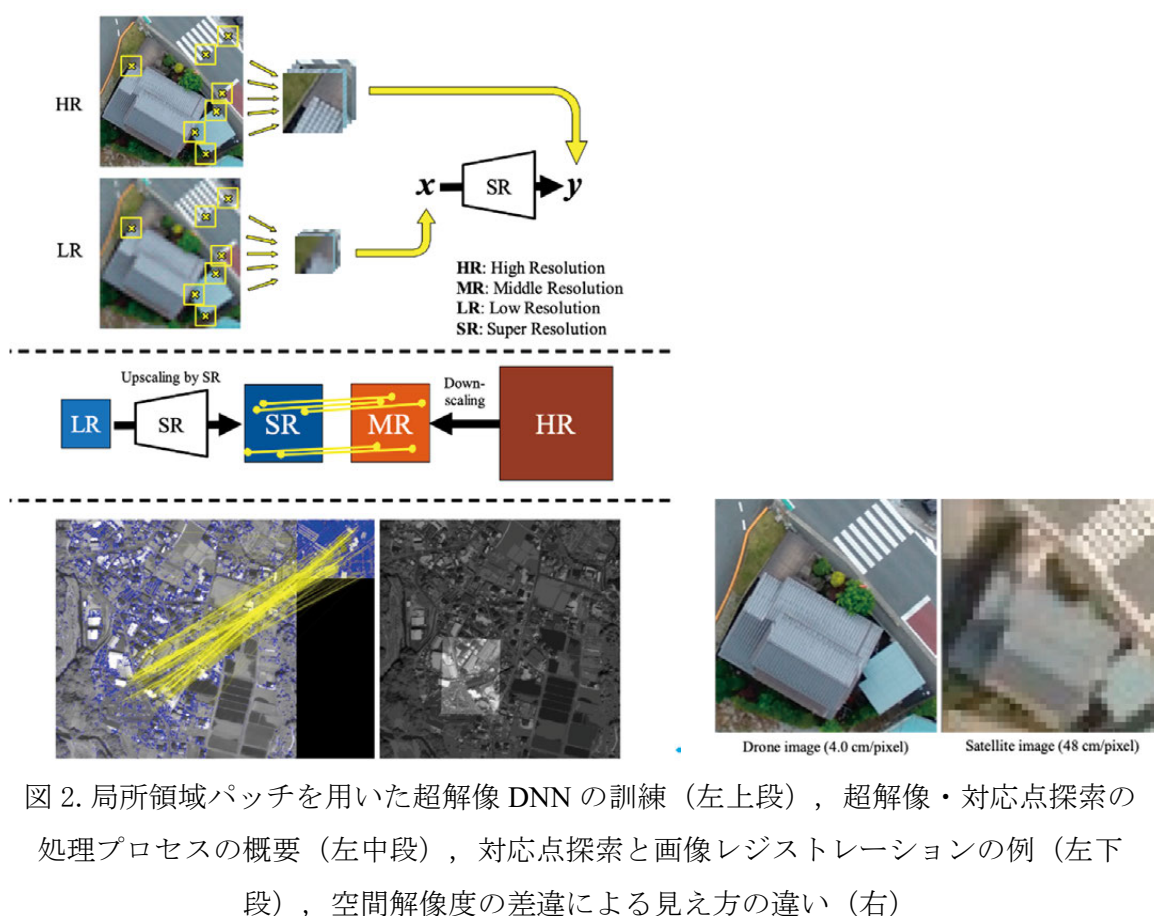


図 1. 自由視点画像をテキスト情報が連動する電子メディア

[2] 衛星画像と地上撮影画像の高精度重畳法

ドローン画像と衛星画像など、撮影高度の違いによって空間解像度が大きく異なる画像間での対応点探索を高精度に実現する手法を考案した。画像間の空間分解能の差への対策として、低解像度の画像に対してはアーティファクトの影響を受けない程度に超解像処理を施し、高解像度の画像に対しては撮影画像の情報を損なわない程度にダウンサンプリング処理を施すことにより、2枚の画像の空間解像度の差を軽減した上で、スケール変化に不変な画像特徴量を用いた対応点探索を実行する。定量評価実験を通じて、2枚の画像の空間解像度に12倍の差がある場合、超解像処理によって差を4～6倍程度に軽減することで高精度な対応点探索処理が実現可能であることを確認した。

研究を取りまとめた論文「Adaptive Image Scaling for Corresponding Points Matching between Images with Differing Spatial Resolutions」はIEEE Workshop on Human-in-the-Loop Methods and Future of Work in BigData (IEEE HMDData)に採択され高い評価を得ている。



[3] 腹腔鏡映像から内臓の 3 次元形状復元法

単眼腹腔鏡映像から，AR 手術ナビゲーションシステムなどでの使用に資する，密な 3 次元点群によって構成される 3 次元臓器モデルを生成する手法を考案した．深層学習（GAN）を用いて腹腔鏡画像から生成したデプス情報と，3 次元復元手法（SfM: Shape from Motion）によって推定した疎な 3 次元点群を統合し，臓器全体の形状が高密度で復元された 3 次元モデ

ルを獲得する．従来の 3 次元点群高密度化手法と比較実験の結果から，高密度かつ分布が均一な 3 次元点群の生成が可能であることを示した．腹腔鏡とデータ収集用撮影装置のドメイン適合処理，および，学習データの増強によって，より高い精度の 3 次元臓器モデル生成が可能であることがわかった．

研究を取りまとめた論文は，動的画像処理実利用化ワークショップ(DIA2020)，および，International Forums on Medical Imaging in Asia (IFMIA2021)において Best Paper Award を受賞するなど高い評価を得ている．

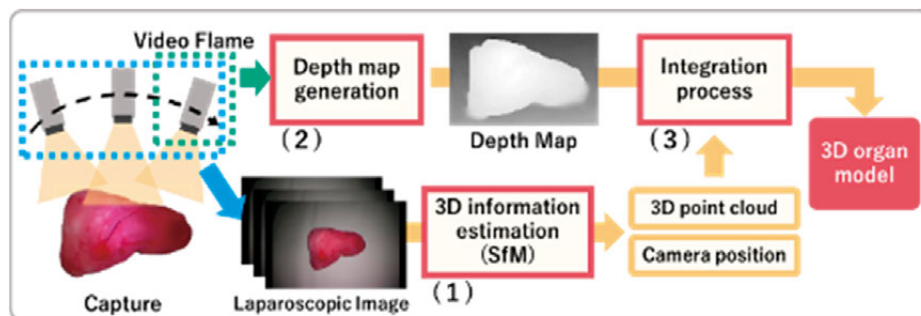


図 4. 腹腔鏡映像から内臓の 3 次元形状復元法

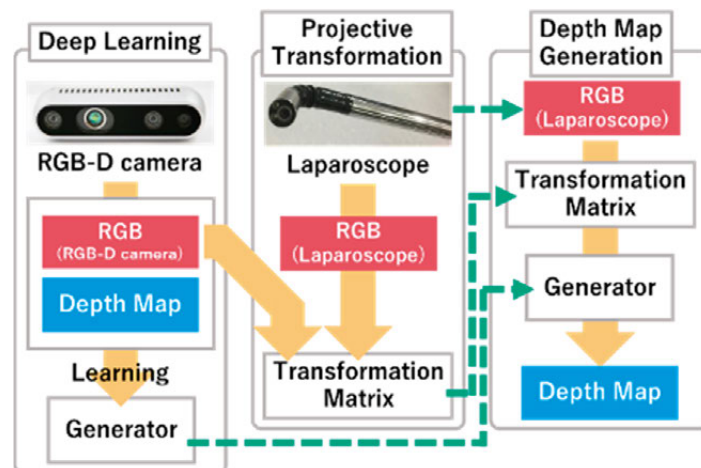


図 5. 深層学習（GAN）を用いた腹腔鏡画像からのデプス情報推定法

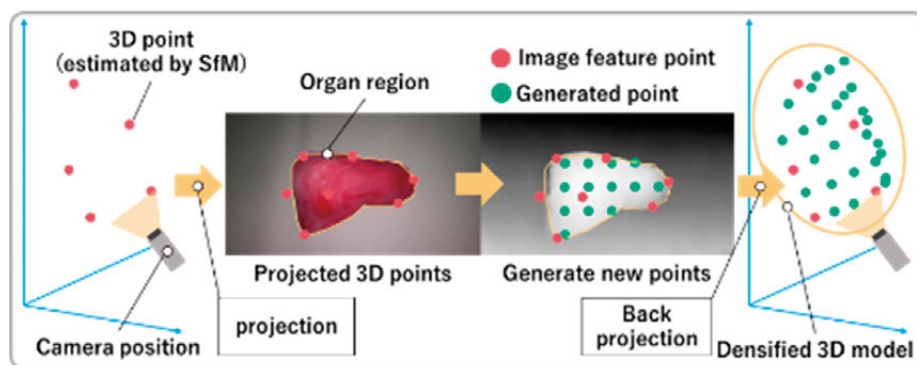


図 6. 深層学習（GAN）を用いて腹腔鏡画像から生成したデプス情報と 3 次元復元手法（SfM: Shape from Motion）によって推定した疎な 3 次元点群の統合

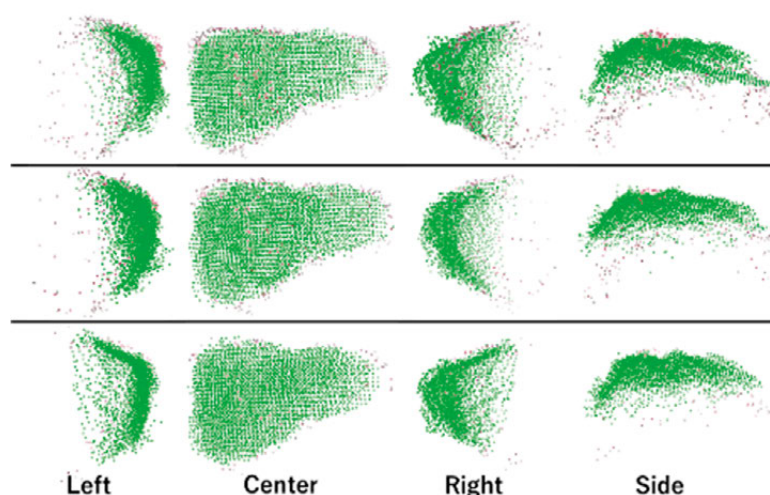


図 7. 提案手法を用いた 3 次元点群の高密度化処理の結果（赤点：SfM によって復元された点群，緑点：提案手法によって追加された点群）

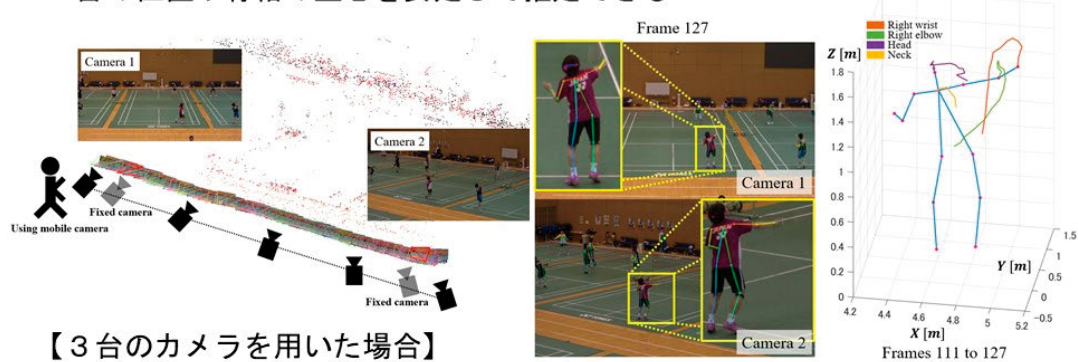
[4] マーカレス 3 次元骨格位置推定のためのカメラキャリブレーション手法とバドミントン競技映像処理への実践

スポーツ科学の研究では、モーションキャプチャシステムによって抽出された選手動作の研究が盛んに行われており、マーカレスな選手位置情報の計測が期待されている。本研究では、2 視点のカメラから撮影された画像情報を利用したマーカレス 3 次元骨格位置を推定する手法を提案した。従来の 3 次元位置を推定するためのカメラ校正手法では、多くの労力を必要とする強校正や推定精度が画像間の対応精度に依存する弱校正手法がある。本研究では、強校正の問題と疎に配置されたカメラの校正が困難である弱校正の問題を疎に配置されたカメラ間を補完する画像を用いた校正によって解決した。提案手法を応用することでバドミントン選手の 3 次元骨格位置推定を実現した。バドミントン競技への実践として、複数の体育

館での検証を実施し、バドミントン競技特性の活用法や、カメラ配置の検討、体育館の揺れの問題提起、競技指導者などの現場の声、マーカレス骨格推定手法を用いたパフォーマンス分析における懸念を考察した。2台のカメラを用いた場合、首の位置や骨格の重心を安定して推定できることから選手位置 1 か所の移動速度やフットワークの軌跡を用いた分析に活用できる。一方で、3台のカメラを用いた場合、全身の骨格位置を安定して推定できることから、選手の全身の骨格位置におけるバイオメカニクスと動作分析に活用できる。このように、カメラ配置が可能な台数に応じて推定されたデータを分析の種類毎に使い分けることが可能である。

【2台のカメラを用いた場合】

- 首の位置や骨格の重心を安定して推定できる



【3台のカメラを用いた場合】

- 全身の骨格位置を安定して推定できる

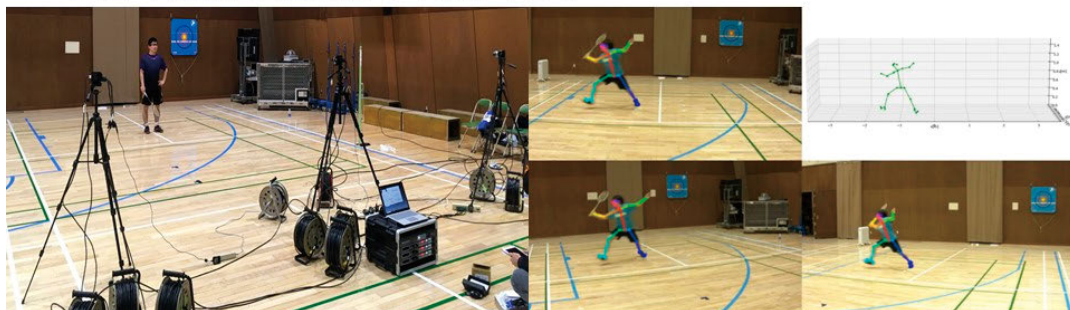


図 8.

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

我々は、視覚障がい者のためのナビゲーションを研究している。視覚障がい者のターンバイターンナビゲーションを支援するために、音と振動を利用した新しいインタフェースを提案している。提案するインタフェースでは、目標とする経路を直線部分と方向転換のポイントに分ける。音と振動によるナビゲーションの指示は、視覚障がい者の歩行に対して最小限かつ十分な手がかりを与えるように注意深く設計されている。下図に示すように、位置推定はコンピュータビジョンに基づいて行い、道なり歩行では計画経路から逸れないように指示が行われる。方向転換は音と振動の組み合わせで正しい方向への誘導が実現されている。本

提案に基づいて予備的なシステムを構築し、視覚障がい者を対象とした被験者実験を行った。その結果、我々の提案した手法は視覚障がい者にとって有用であることがわかった。

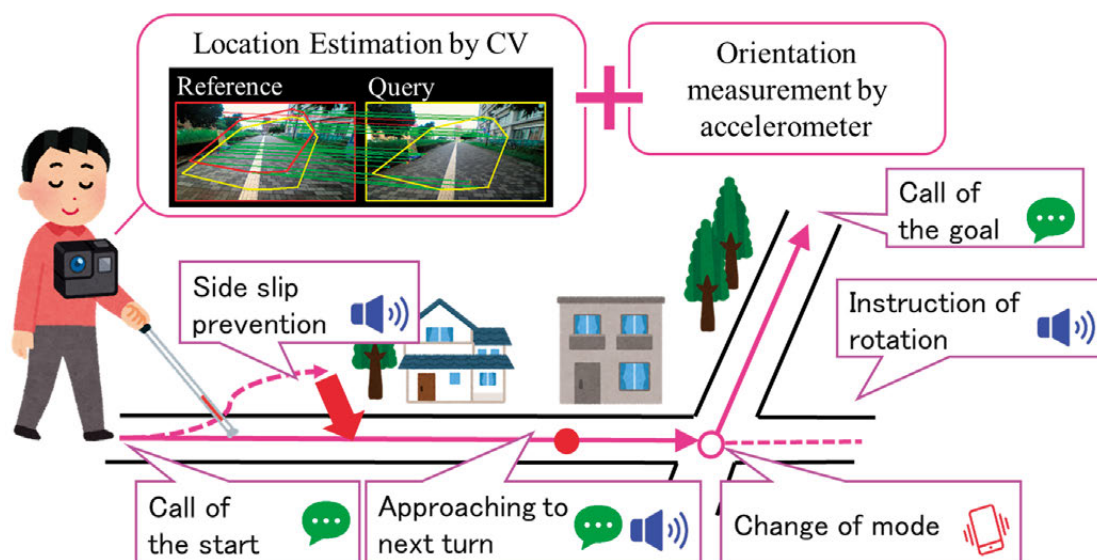


図 9. Turn-By-Turn ナビゲーションの情報

[6] 脳波を用いた HMD-VR におけるアクションの主観的評価のための新しい検証手法

バーチャルリアリティにおける行動や反応を主観的に評価するための新しい検証手法について研究を新たに開始した。研究ドメインとしては VR における被験者の行動分析を取り上げている。ヘッドトラッキング機能付き HMD では、ユーザは部屋の大きさ程度の範囲で移動して行動することができ、その際の頭の位置や動きの推定、視線の追跡などによって、ユーザの体験を測定することができる。一方で、多くの場合、VR 体験の総合的な主観評価は、体験が終わった後に行われる。我々は、脳波やそこから得られる指標をリアルタイムに測定できる新しいバイオメディカル情報解析法に取り組んでいる。視線追跡型および頭部追跡型の HMD をプロトタイプシステムに組み込んで試験をすることに成功した。VR で状況が提示されたときの視線追跡結果と脳波解析をすることで、被験者が状況に応じた注意を払って対象物を見ているか、さらには、その人の心の中の注意度を指標化することができる。これにより主観評価のスコアの信頼性を検証することができるようになると考えている。提案する方法を、スポーツ行動分析と交通安全評価の 2 つのアプリケーションで展開し、主観的評価の検証のための有望なアプローチとなりうることを確認した。

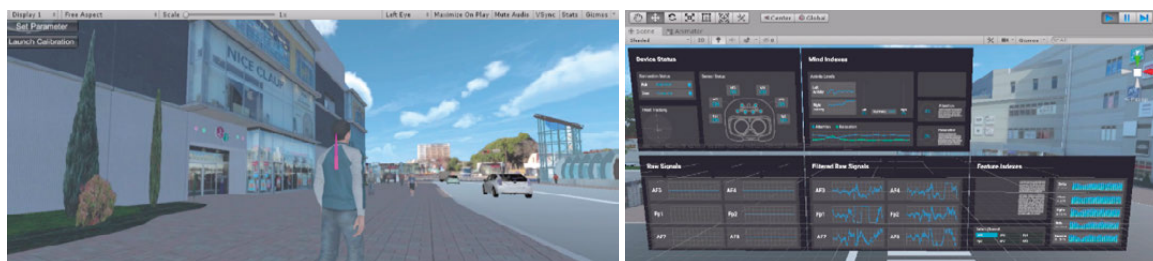


図 10.交通安全評価における HMD での VR 体験のバイオメディカル情報

4.教育

学生の指導状況

鳥屋 剛毅	博士(工学)	地理情報システムの時空間分解能向上のための異高度撮影画像間の対応点探索法
中野 学	博士(工学)	Perspective-n-Point 問題とその派生問題に対する安定かつ高速な解法に関する研究
Rojas Ferrer César Daniel	博士(工学)	READ-THE-GAME skill assessment with a full body immersive VR soccer simulation
石川 晋也	修士(工学)	VR シミュレーションを用いたバスケットボール時の視覚探索運動の定量化
石川 茉由子	修士(工学)	競泳画像のカテゴリ分類を用いた泳者位置推定とストローク分析
武田 隆雅	修士(工学)	深層学習を用いた多視点画像から復元した三次元点群の形状誤差軽減法
田村 優	修士(工学)	アクティブパターンを用いた歩行者向け方向提示
中村 将太郎	修士(工学)	モバイルデバイスによる点字ブロックの認識とその最短距離推定
蛭田 雄也	修士(工学)	複数の球面鏡像からの任意視点映像生成法
松原 尚利	修士(工学)	大規模空間における多視点カメラ配置計画のための VR インタフェース
山崎 陸	修士(工学)	協調 SLAM におけるフレーム単位での統合環境地図の構築手法
梁 梓龍	修士(工学)	AR を用いた手のひらサイズの目標物体への段階的誘導方法

Zhang Haihan	修士(工学)	Dynamic Dense Mapping in Large Scale Spaces by Integrating RGB-D and Aerial Multi-View Images
--------------	--------	---

飯田 雄介	学士(工学)	HMD を用いたサッカーのフリースペース認知における視覚探索行動の解析
大木 郁登	学士(工学)	歩行の安全確保に向けたバー型障害物の検出
木村 文哉	学士(工学)	ビデオテクスチャと投影マッピングによる生命感のある自由視点映像の生成手法
吉川 優依	学士(工学)	バドミントン映像における骨格位置を用いたショット検出
Shrestha Pragyan	学士(工学)	Tomographic Reconstruction of Bone from Multi-View X-Ray Images Using Planar Markers

5.受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 2020 Student Award at School of Integrative and Global Majors (SIGMA), Rojas Ferrer César Daniel, 2021.2.
2. 優秀修士論文賞(知能機能システム専攻), 松原 尚利, 2021.2.
3. A Best Oral Paper of International Forum on Medical Imaging in Asia (IFMIA) 2021, Ryosuke Maekawa, Hidehiko Shishido, and Yoshinari Kameda, A Dense 3D Organ Modeling from a Laparoscopic Video, 2021.1.

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（2020 年度直接経費：250 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（2020 年度直接経費：150 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（2020 年度直接経費：280 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：宋戸英彦 全年度直接経費：330万円（2020年度直接経費：180万円）
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（2020年度直接経費：370万円，分担40万円）
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（2020年度直接経費：420万円，分担60万円）
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（2020年度直接経費：450万円，分担10万円）
8. 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（2020年度直接経費：250万円，分担30万円）
9. 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（2020年度直接経費：1030万円，分担100万円）
10. 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）全年度直接経費：6200万円（2020年度直接経費：1200万円）
11. 共同研究・日本電気株式会社「多視点カメラ映像による3D姿勢・行動データ構築技術の検証」代表者：北原格 2020年度直接経費：916,667円
12. 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 2020年度183.3万円

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. 宍戸 英彦, 北原 格, “マーカレス 3 次元骨格位置推定のためのカメラキャリブレーション手法とバドミントン競技映像処理への実践”, 情報処理学会トランザクション デジタルプラクティス, vol.1, no.1, pp.8-19, 2020/10/15.
2. Chun Xie, Hidehiko Shishido, Yoshinari Kameda, and Itaru Kitahara, “Geometric Calibration of Projector Using a Mobile Camera for Spatial Augmented Reality”, Transactions of the Virtual Reality Society of Japan, vol.25, no.2, pp.138-147, 2020/6/30.
(DOI: 10.18974/tvrsj.25.2_138)
3. Hidehiko Shishido, Emi Kawasaki, Youhei Kawamura, Toshiya Matsui, and Itaru Kitahara, “Accurate Overlapping Method of Ultra-Long Interval Time-Lapse Images for World Heritage Site Investigation”, ACM Journal on Computing and Cultural Heritage, vol.13, no.2, 18 pages, 2020/5.
(DOI: 10.1145/3373357)
4. Hidehiko Shishido, Yosuke Okada, Yoshinari Kameda, Masaaki Koido, and Itaru Kitahara, “Method of Multiview Video Switching for Soccer Game Analysis in Large Scale Space”, ITE Transactions on Media Technology and Applications, vol.8, no.2, pp.70-80, 2020/4/1.
(DOI: 10.3169/mta.8.70)

A) 査読無し論文

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

B) 一般講演

1. Ryosuke Maekawa, Hidehiko Shishido, Yoshinari Kameda, and Itaru Kitahara, “A Dense 3D Organ Modeling from a Laparoscopic Video”, International Forum on Medical Imaging in Asia (IFMIA) 2021, 6 pages, 2021/1, Taipei, Taiwan (online).
2. Yui Yoshikawa, Hidehiko Shishido, Masashi Suita, Yoshinari Kameda, and Itaru Kitahara, “Shot Detection Using Skeleton Position in Badminton Videos”, International Workshop on Advanced Image Technology (IWAIT)2021, 6 pages, 2021/1, online meeting.
(DOI: 10.1117/12.2590407)
3. Yoshinari Kameda, Cesar Daniel Rojas Ferrer, Sho Ohnishi, and Hidehiko Shishido, “A New Verification Approach for Subjective Evaluation of Actions in HMD-VR with EEG”, International Workshop on Advanced Image Technology (IWAIT)2021, 4 pages, 2021/1, online meeting.

(DOI: 10.1117/12.2590801)

4. Yasutaka Nakaizumi, Hidehiko Shishido, and Yoshinari Kameda, “Video Dividing Method for High-Resolution Video Regardless of People”, International Workshop on Advanced Image Technology (IWAIT)2021, 6 pages, 2021/1, online meeting.
(DOI: [10.1117/12.2590798](https://doi.org/10.1117/12.2590798))
5. Koki Ogahara, Hidehiko Shishido, Itaru Kitahara, and Yoshinari Kameda, “Information Display Design on Turn-By-Turn Navigation for Visually Impaired People”, International Workshop on Advanced Image Technology (IWAIT)2021, 6 pages, 2021/1, online meeting.
(DOI: [10.1117/12.2590797](https://doi.org/10.1117/12.2590797))
6. Hisatoshi Toriya, Ashraf Dewan, and Itaru Kitahara, “Adaptive Image Scaling for Corresponding Points Matching Between Images with Differing Spatial Resolutions”, IEEE Workshop on Human-in-the-Loop Methods and Future of Work in BigData (IEEE HMDData), 8 pages, 2020/12, Atlanta, USA (online).
(DOI: [10.1109/BigData50022.2020.9377754](https://doi.org/10.1109/BigData50022.2020.9377754))
7. Xinyi Qiu, Hidehiko Shishido, Ryuuki Sakamoto, and Itaru Kitahara, “Interactive E-Book Linking Text and Multi-View Video”, 2020 IEEE 9th Global Conference on Consumer Electronics (GCCE 2020), pp.526-530, 2020/10, Kobe, Japan.
(DOI: [10.1109/GCCE50665.2020.9291752](https://doi.org/10.1109/GCCE50665.2020.9291752))
8. Naoto Matsubara, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, “VR Interface for Designing Multi-View-Camera Layout in a Large-Scale Space”, Augmented Reality, Virtual Reality, and Computer Graphics, pp.130-140, 2020/9, Otranto, Italy (online).
(DOI: [10.1007/978-3-030-58465-8_9](https://doi.org/10.1007/978-3-030-58465-8_9))

(2) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

B) その他の発表

1. 夏 雪, 北原 格, 宍戸 英彦, 松井 敏也, “三次元形状復元とプロジェクションマッピングを組み合わせた多視点画像撮影支援方式”, 情報処理学会第 83 回全国大会, vol.4, pp.99-100, 2021 年 3 月.
2. 木村 文哉, 宍戸 英彦, 北原 格, “ビデオテクスチャと投影マッピングによる自由視点映像生成”, 情報処理学会第 83 回全国大会, vol.2, pp.171-172, 2021 年 3 月.
3. 王 英豪, 宍戸 英彦, 橋本 真治, 小田 竜也, 北原 格, “外科手術支援を目的とした多視点映像撮影システム”, 情報処理学会第 83 回全国大会, vol.2, pp.175-176, 2021 年 3 月.

4. 吉川 優依, 宍戸 英彦, 吹田 真士, 亀田 能成, 北原 格, “バドミントン競技映像における骨格位置情報を用いたショット検出”, 日本バドミントン学会 第 4 回学会大会, 1 page, 2021 年 3 月.
5. Zhang Haihan, 宍戸 英彦, 北原 格, “3D Dynamic Scene Generation for Advanced Driver Assistance System by Integrating RGB-D and Aerial Multi-View Images”, 動的画像処理実用化ワークショップ講演論文集(DIA2021), pp.165-172, 2021 年 3 月.
6. 田村 優, 宍戸 英彦, 亀田 能成, “アクティブパターンにおける視線追跡機能を用いた検証手法”, HCG シンポジウム 2020, 4 pages, 2020 年 12 月.
7. 岡本 香, 宍戸 英彦, 亀田 能成, “VR 体育館内の照明器具からのグレア構成法”, HCG シンポジウム 2020, 5 pages, 2020 年 12 月.
8. 中村 将太郎, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 自走式ロボット組み込みのための点字ブロック認識手法”, HCG シンポジウム 2020, 5 pages, 2020 年 12 月.
9. 梁 梓龍, 宍戸 英彦, 亀田 能成, “室内誘導における拡張現実を用いた手の誘導方法”, HCG シンポジウム 2020, 4 pages, 2020 年 12 月.
10. 大西 衝, 宍戸 英彦, 亀田 能成, “VR 交通環境体験時の前頭葉脳波を用いた安心感評価”, 第 18 回 ITS シンポジウム 2020, 6 pages, 2020 年 12 月.
11. 松原 尚利, 宍戸 英彦, 北原 格, “大規模空間における多視点カメラ配置計画のための VR インタフェースの検討”, 日本バーチャルリアリティ学会 第 61 回複合現実感研究会, 6 pages, 2020 年 10 月.
12. 鳥屋 剛毅, Dewan Ashraf, 北原 格, “空間解像度が異なる画像間の対応点探索を目的とした局所領域の超解像処理”, 日本バーチャルリアリティ学会 第 61 回複合現実感研究会, 6 pages, 2020 年 10 月.
13. 蛭田 雄也, 宍戸 英彦, 北原 格, “複数の曲面鏡像からの自由視点映像生成法”, 日本バーチャルリアリティ学会 第 61 回複合現実感研究会, 6 pages, 2020 年 10 月.
14. 亀田 能成, Zhang Weiyi, 大西 衝, “パーソナルトランスポーターに対する安心感醸成とその評価への試み”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.120, no.190, pp. 13-16, 2020 年 10 月.
15. 吉川 優依, 宍戸 英彦, 吹田 真士, 亀田 能成, 北原 格, “バドミントン競技映像における骨格位置を用いたショット検出”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.120, no.190, pp. 1-6, 2020 年 10 月.
16. 上田 樹, 宍戸 英彦, 北原 格, “深層学習による 3 次元運動予測を用いた遠隔操作映像の時間補償”, 情報処理学会研究報告 CVIM, vol.2020-CVIM-222, no.39, pp.1-8, 2020 年 5 月.

17. 吉野 航平, 宍戸 英彦, 北原 格, 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法, 情報処理学会研究報告 CVIM, vol.2020-CVIM-222, no.31, pp.1-8, 2020 年 5 月.

(4) 著書、解説記事等

A) 解説記事

1. 宍戸 英彦, Hansung Kim, 北原 格, “文化遺産建造物を対象とした撮影時期の異なる画像マッチング手法”, 日本工業出版 画像ラボ, vol.31, no.7, pp.50-56, 2020/7/1.

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

亀田能成教授が中心となって、計算科学研究センター、イスラエルの Holon Institute of Technology, およびアゼルバイジャンの Azerbaijan Medical University, およびイスラエルの Innovative Technologies Group 社との4者間で MoU を締結した。これにより VR 応用におけるバイオメディカル情報解析の研究進捗を目指す。

北原格教授がオーストラリアの Curtin University と締結した MoU により共同研究を継続実施し、国際会議論文1件・その他の発表1件を発表した。

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 学務カリキュラム委員会 委員長

知能機能システム学位プログラム 学務カリキュラム委員会 副委員長

全学教育戦略会議オブザーバ

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

知能機能システム学位プログラム・エンパワーメント情報学 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(MVE) 顧問

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(CW) 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(CVIM) 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

宍戸 英彦

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(CVIM) 委員

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(MVE) 委員

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。