目次

まえがき ····· 2
1　センター組織と構成員 ····· 4
2　令和五年度の活動状況 ····· 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　令和六年度の活動方針 ····· 10
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 ····· 13
2.5　センターシンポジウム ····· 13
2.6　今後のあり方 ····· 13
3　各研究部門の報告 ····· 15
I.　素粒子物理研究部門 ····· 15
II.　宇宙物理研究部門 ····· 37
III.　原子核物理研究部門 ····· 68
IV.　量子物性研究部門 ····· 86
V.　生命科学研究部門 ····· 105
V-1.　生命機能情報分野 ····· 105
V-2.　分子進化分野 ····· 127
VI.　地球環境研究部門 ····· 143
VII.　高性能計算システム研究部門 ····· 156
VIII.　計算情報学研究部門 ····· 195
VIII-1.　データ基盤分野 ····· 195
VIII-2.　計算メディア分野 ····· 219

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，2021 年に設立 30 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，過去 30 年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本年も継続しました。

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。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備してきました。また，そのカウンタープログラムとして，海外拠点の研究者を同じように短期間〜中期間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。2023 年度はこれまで約 3 年間に渡り世界中に大きな活動制約を与えてきた COVID-19 の影響も完全に収まり，国際会議等も対面を基本としつつ、COVID-19 期間に培われたリモート会議技術を併用し，ハイブリッド形式にて実施しました。また，同様に中断していた海外渡航・海外からの研究者の招聘も通常に戻り活発化しています。

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。また，2022 年度からは最新鋭の GPU 及び CPU，そして革新的記憶システムである永続性メモリ（Persistent Memory）を全面的に採用したビッグメモリ・スーパーコンピュータ Pegasus (PACS-XI) を導入し，データサイエンスと AI 処理を中心に，HPC 技術と AI 技術の融合を目指す新しい計算科学の展開を開始しました。

センターには，素粒子物理，宇宙物理，原子核物理，量子物性，生命科学，地球環境，高性能計算機システム，計算情報学の 8 つの研究部門があり，44 名の専任教員が従事している他，

客員教員 3 名、常勤研究員 18 名、非常勤研究員 3 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 17 機関と MOU を締結するとともに，多数の海外研究機関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，3D Surgical Vision，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。さらに，2023 年度後半から文部科学省が新たに開始した「共同利用・共同研究システム形成事業〜学際領域展開ハブ形成プログラム〜」において，我々の提案課題「AI 時代における計算科学の社会実装を実現する学際ハブ拠点形成」が採択され（全国で 8 件），産学官連携による計算科学の社会実装のためのアプリケーション開発・共同研究を開始しました。この活動は 2022 年度に創設した計算科学社会実装推進室を中心に，関連する企業・国研・大学との緊密な共同研究を進めるもので，2024 年度からはエントリ・レベルのスーパーコンピュータ・ユーザを企業を中心に募り，利用の裾野を広げる事業も開始する予定です。

大きな国際交流イベントとしては，MOU に基づき継続している国際共同研究ワークショップとして，2023 年 4 月に米国ローレンスバークレー国立研究所と，また 2023 年 10 月に英国エジンバラ大学 EPCC と，それぞれ本センターに各機関の研究者を招いての対面開催（一部ハイブリッド）として実施しました。さらに韓国 KISTI との日韓 HPC ウィンタースクールについても，2024 年 2 月に韓国・ソウル市にて開催しました。COVID-19 の終息に伴い，今後も本センターの最大の強みである国際的研究力を一層強化していく所存です。

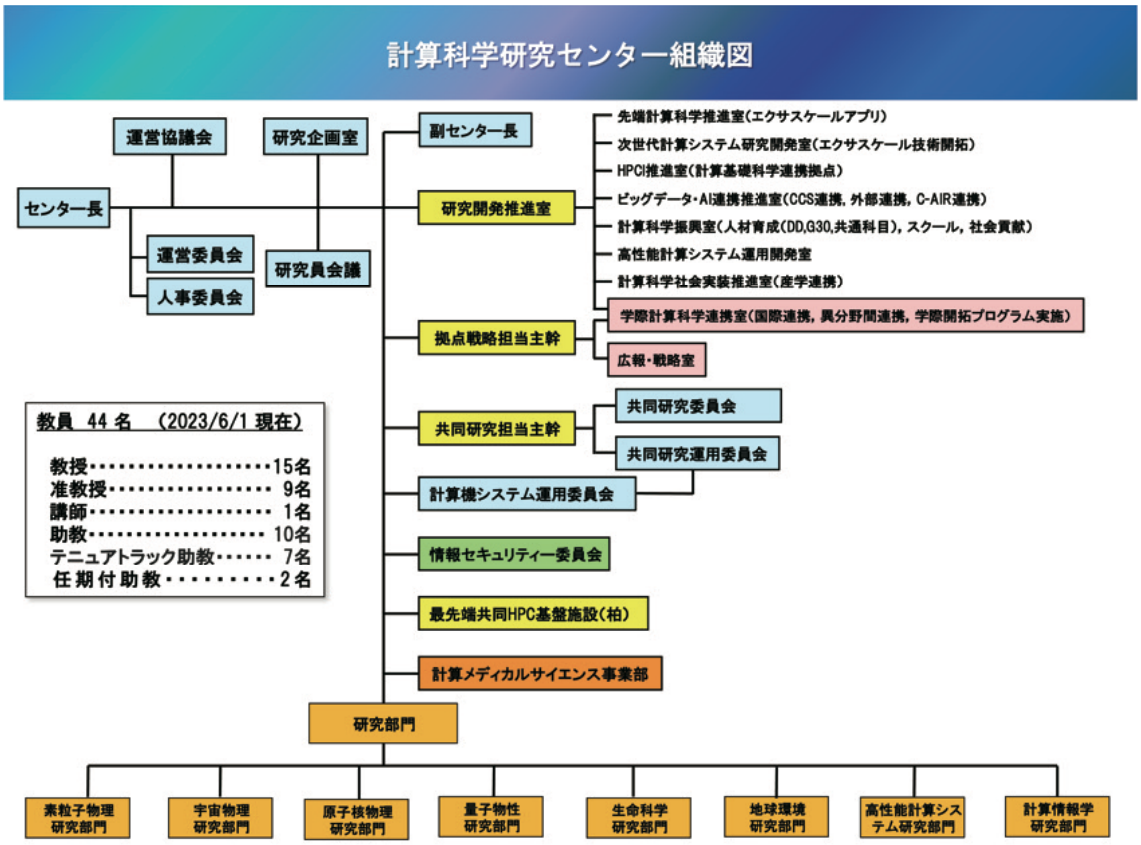
本小冊子は，2023 年度の計算科学研究センターの活動内容をまとめたものです。ご高覧いただければ幸甚に存じます。

2024 年 7 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



教員・研究職員等一覧

センター長		朴 泰祐
副センター長		矢花 一浩
副センター長		建部 修見
運営協議会	委員長	富田 浩文（理化学研究所計算科学研究センター）
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研究開発室　室長　朴 泰祐
- HPCI 推進室　室長　藏増 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　稲垣 祐司

- 計算科学振興室　室長　高橋 大介
- 高性能計算システム運用開発室　室長　建部 修見
- 計算科学社会実装推進室　室長　大谷 実

拠点戦略担当主幹　北原 格

- 広報・戦略室　室長　北原 格

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（研究部門主任）
准教授	石塚 成人
助教	秋山 進一郎、大野 浩史
研究員	新谷 栄悟、住本 尚之、吉江 友照
学内共同研究員	金谷 和至（特命教授）、山﨑 剛（准教授）

宇宙物理研究部門

教授	大須賀 健（研究部門主任）
准教授	森 正夫、矢島 秀伸、吉川 耕司
助教	Wagner Alexander、福島 肇、朝比奈 雄太
研究員	高水 裕一、桐原 崇亘、小川 拓未、諸隈 佳菜、恒任 優 、曽我 健太、小幡 真弓
客員准教授	中里 直人（会津大学）
学内共同研究員	梅村 雅之（特命教授）

原子核物理研究部門

教授	中務 孝（研究部門主任）、矢花 一浩
准教授	清水 則孝
助教	日野原 伸生
研究員	鷲山 広平、Anil Kumar

量子物性研究部門

教授	矢花 一浩、大谷 実（研究部門主任）
准教授	小泉 裕康、仝 暁民
講師	前島 展也
助教	佐藤 駿丞、萩原 聡
主任研究員	長谷川 太祐
研究員	黒田 文彬
客員教授	小野 倫也（神戸大学大学院工学研究科）
学内共同研究員	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（分野リーダー）、庄司 光男
准教授	原田 隆平
助教	堀 優太
助教	Kowit Hengphasatporn
研究員	森田 陸離、宮川 晃一、下山 紘充、松井 正冬、Mrinal Kanti Si、藤木 涼、Sirin Sittiwanichai
学内共同研究員	広川 貴次（教授）、吉野 龍ノ介（助教）

分子進化分野

教授	稲垣 祐司（研究部門主任）
助教	中山 卓郎
学内共同研究員	橋本 哲男（教授）

地球環境研究部門

教授	日下 博幸（研究部門主任）
助教	松枝 未遠、Doan Quang Van
研究員	佐藤 拓人、今井 優真
学内共同研究員	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（研究部門主任）、建部 修見、高橋 大介、額田 彰、
助教	多田野 寛人、小林 諒平、藤田 典久
主任研究員	前田 宗則

研究員	平賀 弘平
客員教授	塙 敏博（東京大学）
学内共同研究員	安永 守利（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	天笠 俊之（分野リーダー）
准教授	塩川 浩昭
助教	堀江 和正、Bou Savong
研究員	Vijdan Khalique
学内共同研究員	北川 博之（IIIS 教授）

計算メディア分野

教授	亀田 能成（研究部門主任）、北原 格
助教	謝 淳

2 令和五年度の活動状況

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，2023 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，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継続して行いました。また，2020 年から顕在化した COVID-19 下においても，自らの研究力と他機関との共同研究体制に大きな影響が出ないよう，インターネット環境を最大限に利用した研究を継続してきましたが，幸い 2023 年度は国内外の学会活動等もほぼ復活し，研究・交流活動を基本的に対面で行うことができました。 COVID-19 期間に培われたリモート会議技術も併用し，対面とオンラインを組み合わせたハイブリッド形式で交流を進め，従来以上の活性化が図られました。

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 名の振り替えと，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，超高速計算機システム研究部門，計算情報学研究部門の 5 部門からなる計算科学研究センターが発足しました。

その後，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，筑波大学では 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）。その後も JCAHPC 活動を平行して本センター独自のスーパーコンピュータ Cygnus（世界初の GPU+FPGA 混載システム，2019 年度稼働開始）及び Pegasus（世界初の GPU+ 不揮発性メモリ搭載システム，2023 年度本格稼働開始）という 2 台のシステムにより，GPU や FPGA のような演算加速デバイスを先進的に利用するコ・デザイン研究を推進しています。

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，2024 年 3 月末において 45 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。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，2021 年度末には文部科学省における第 3 期中期目標・中期計画期間の終了に伴う評価の結果，最高レベルの S 評価を受けることができました。なお，理系組織としての全国共同利用･共同研究機関の第 3 期期間においてS評価を受けた組織は3つに留まり, 本センターがそのうちの 1 となったことは，我々の研究力と組織運営能力について，文部科学省において高く評価されたものと受け止めています。

2023 年度からの新しい活動として, 同年度 10 月から開始された文部科学省プログラム「共同利用・共同研究システム形成事業～学際領域展開ハブ形成プログラム～」において，本センターの提案課題「AI 時代における計算科学の社会実装を実現する学際ハブ拠点形成」が採択され（全国で 8 件のみ），2022 年度に創設した計算科学社会実装推進室を中心とした，産官学の強力な連携による共同研究を開始しました。本センターの出発点は素粒子・宇宙等を中心とする計算基礎科学であり，これらの研究活動は変わらず活発に行われていますが，今

日では計算科学は社会生活にも大きな影響を与える重要な研究開発手法であり，実社会での問題に対する解決手法として重要な位置を占めつつあります。本センターでも産学連携体制を強化し，応用に近い研究分野を中心に企業との共同研究を活発に進めています。計算科学社会実装推進室は，これらの産学連携活動を取りまとめ，計算科学の社会実装の実例を積み上げ，社会に役立つ計算科学研究を先導するための体制作りを行っています。

最後に，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 令和六年度の活動方針

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同施設としての第二世代スーパーコンピュータである Miyabi を導入し，2025 年 1 月から稼働開始する予定である。Miyabi は最先端の GPU と CPU の両者を実装した NVIDIA 社製モジュールを，国内で最初に本格導入するスーパーコンピュータであり，「富岳」に続く HPCI 第二階層資源として最高性能となる見込みである。

GPU+FPGA 混載スーパーコンピュータである Cygnus は 2025 年 3 月に 6 年間の計画運用期間を終了するが、2023 年 4 月から本格稼働を開始した Pegasus は引き続き本センターの主力システムとして利用の拡大と最先端 GPU 及び不揮発性メモリを活用した研究及び共同利用を一層推進していく。

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と共に，2 年目に入った「AI 時代における計算科学の社会実装を実現する学際ハブ拠点形成」事業を計算科学社会実装推進室の下に事業部化し，産官学の緊密な共同研究を本格的に推進する。

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

本センターの所有する多重複合型演算加速クラスタ Cygnus (PACS-X)（81 ノード，2.5 PFLOPS）及びビッグメモリ・スーパーコンピュータ Pegasus (PACS-XI)（120 ノード, 6.5PFLOPS, さらに 2024 年度中に 30 ノードを追加予定），及び東京大学情報基盤センターが運用するメニーコア型汎用 CPU スーパーコンピュータ Wisteria-BDEC01/Odyssay の一部を借用し，これ

らを計算資源として，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。

また，東京大学情報基盤センターと共同運営する最先端共同 HPC 基盤施設（JCAHPC）において，最先端の GPU+CPU 一体化プロセッサである NVIDIA 社製の GH200 チップを利用した新スーパーコンピュータ Miyabi（GPU ノード 1120 台，CPU ノード 190 台，総演算性能 80.1PFLOPS）を 2025 年 1 月より稼働開始し，GPU を用いた HPC と AI の両面での研究を飛躍的に発展させていく。

「学際共同利用プログラム」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し電子化し，処理システム自体の英語化を継続する。

■ 実施状況

Particle Physics, Astrophysics, Nuclear Physics, Material Science, Chemistry, Life Science, Global Environment, Biology, Numerical Analysis, HPC System, Computational Informatics の 11 分野で，計 74 課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 247 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	採択件数
Particle Physics	10
Astrophysics	7
Nuclear Physics	8
Material Science	17
Chemistry	1
Life Science	10
Global environment	3
Biology	0
Numerical analysis	3
HPC systems	6
Computational Informatics	9
合計	74

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5年度		うち国際学術誌掲載論文数	
化学	36	(6)	34	(6)
材料科学	4	(1)	4	(1)
物理学	125	(19)	125	(19)
計算機＆数学	33	(10)	28	(9)
工学	24	(10)	23	(10)
環境＆地球科学	12	(5)	12	(5)
臨床医学	0	(0)	0	(0)
基礎生命科学	13	(1)	13	(1)
人文社会系	0	(0)	0	(0)
合計	247	(52)	239	(51)

※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　　共同利用・共同研究課題の採択状況及び実施状況

年度	採択状況				実施状況								
	公募型				新規分			継続分			合計		
	応募件数	採択件数	採択率(%)	うち国際共同研究	公募型実施件数	うち研究テーマ設定型	うち国際共同研究	公募型実施件数	うち研究テーマ設定型	うち国際共同研究	公募型実施件数	うち研究テーマ設定型	うち国際共同研究
R5	112	112	100	5	47	0	2	65	0	3	112	0	5

2.4 国際連携と異分野融合

国際連携として，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 4 年ぶりに本センターで対面開催し，一部の研究者はネットワークを用いたオンライン形式で参加した。また, 英国エジンバラ大学（EPCC: Edinburgh Parallel Computing Center）との合同ワークショップについても 2023 年 10 月に同じく本センターにおいて対面開催し，一部参加者はオンライン参加した。

さらに，前年度から復活した韓国 KISTI との Japan-Korea HPC Winter School 及び合同ワークショップも 4 年ぶりに韓国・ソウル市に出向く形で開催し，対面での教育及び若手研究者との交流を復活させた。合同ワークショップ 1 日，これに続いて 2 日間のスクールを開催し，双方の研究の紹介と関連分野についての議論，ならびにアプリケーション側の学生と研究者に対する教育を行った。

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,「富岳」成果創出加速プログラムにおける課題「シミュレーションと AI の融合で解明する宇宙の構造と進化」が本センターを PI として採択され，また課題「シミュレーションでせまる基礎科学：量子新時代へのアプローチ」も本センターを主要共同研究機関として採択された。

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ているが，COVID-19 の終焉に伴い, 2022 年度に続いて 2023 年度も対面を原則としたハイブリッド形式で開催した。結果として合計 129 人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。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は継続していく予定である。

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，医理工学連携を目指す「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。さらに，2023 年度に開始された「AI 時代における計算科学の社会実装を実現する学際ハブ拠点形成」プログラムは文部科学章概算要求に基づく合計 10 年間の長期プロジェクトであり，2022 年度に発足した計算科学社会実装推進室を中心として，特に応用研究に近い研究分野の研究と企業における社会実装の連携を進め，本センターにおける産学連携研究活動にも力を入れていく。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

I. 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、山﨑 剛（共同研究員、数理物質系准教授）
助教	秋山 進一郎、大野 浩史
研究員	新谷 栄悟、住本 尚之、吉江 友照
学生	大学院生 5 名、学類生 7 名

2. 概要

当部門では、数理物質系との密接な連携のもと、筑波大学を中心とした PACS Collaboration を組織して格子 QCD の大規模シミュレーション研究を推進している。本年度から新たに採択された「富岳」成果創出加速プログラム「超大規模格子 QCD による新物理探索と次世代計算に向けた AI 技術開発」(代表：山崎剛、2023 年度～ 2025 年度) を中心とした大型プロジェクト研究を遂行するとともに、2022 年度に引き続き、「富岳」の一般利用と筑波大学計算科学研究センターの学際共同利用プログラムを利用したプロジェクト研究も継続している。また、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) では、Oakforest-PACS(略称：OFP、2021 年度末に稼働停止) の後継機である Miyabi(約 80PFLOPS のピーク演算性能を持つ大規模 GPU クラスタ) が 2025 年度 1 月に稼働開始予定であり、それまでの間は JCAHPC において運用されている Wisteria-Odyssey(「富岳」と同じアーキテクチャで OFP と同程度の演算性能を有し、学際共同利用プログラムに供されている) を積極的に活用していく予定である。これと並行して、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、有限温度・有限密度 QCD 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 の運用・高度化を推進した。

なお、2023 年度は新型コロナウィルス COVID-19 の感染予防に注意を払いながらも、日々の研究活動や大学活動においてコロナ前の日常を取り戻したと言える状況 であった。

3. 研究成果

[1] PACS Collaboration による「富岳」や Wisteria-Odyssey を用いた大規模シミュレーション（藏増、石塚、山崎、浮田、新谷）

PACS Collaboration に基づく共同研究体制のもとに推進してきた物理点における格子 QCD

の大規模シミュレーションは、本年度から新たに採択された「富岳」成果創出加速プログラム「超大規模格子 QCD による新物理探索と次世代計算に向けた AI 技術開発」(代表:山崎剛、2023 年度〜 2025 年度) によって、大きく進展した。

過去 30 年以上にわたり、格子 QCD は主にハドロン単体の諸性質解明を目指して来た。現在の世界的な状況においては、2 つの大きな問題点が存在する。まず、物理点直上でのシミュレーションが可能になったことは事実だが、実際には物理点のみで物理量の評価を行えるほどの精度を得るレベルには至っていない。次に、現在の格子 QCD シミュレーションに置ける物理量計算は“テーラーメイド”であると評されている。これは、目的とする物理量計算に応じて、適当と思われる物理パラメータ (クォーク質量や空間体積など) を選んでシミュレーションすることを意味している。この場合、例えば、同じゲージ配位を用 いた計算であっても、ある物理量に対しては良く実験値と合うが、他の物理量に関しては実験値を再現しないということが起こりうる。「富岳」などの大型スーパーコンピュータ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 $(10\mathrm{fm})^3$ 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。2023 年度は、2+1 フレーバー QCD における最大格子サイズ (格子間隔 , 格子サイズ)=$(0.043\mathrm{fm},256^4)$ のゲージ配位生成が終了し、2+1+1 フレーバー QCD のゲージ配位生成を推進した。

2+1+1 フレーバー QCD のゲージ配位は、2+1 フレーバーの場合と同様に、異なる格子間隔 3 点 ($a \approx 0.08\mathrm{fm}, 0.06\mathrm{fm}, 0.04\mathrm{fm}$) 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 ($a \to 0$) を取る計画である。今年度の進捗状況は、最小格子サイズ 128^4($a \approx 0.08\mathrm{fm}$) のゲージ配位生成が完了、中間格子サイズ 168^4($a \approx 0.06\mathrm{fm}$) はゲージ配位生成中、最大格子サイズ 256^4($a \approx 0.04\mathrm{fm}$) はパラメータ調整中という段階である。また、並行して、これまで生成した 2+1 フレーバー QCD における格子サイズ 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、山崎、浮田）

山崎は PACS Collaboration において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 Vus 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。2018 年に |Vud| の値が更新されたことにより、ユニタリー性から見積もられる |Vus| の値も大きく動いた (図 1 の灰色帯)。

我々の 2022 年度に報告した格子間隔 2 点 (0.065fm,0.085fm) を使った計算から得られた |Vus|(赤四角) は、これまでの多くの計算結果 (K_{l3} N_f=2+1+1, N_f=2+1) より若干大きく、K 中

間子レプトニック崩壊から決定される |Vus|(紫丸、緑星) と一致する結果であった。しかし、結果には有限格子間隔に起因する系統誤差により大きな不定性がついていた。この不定性を取り除くため、2022 年度から格子間隔 0.042fm の計算を重点的に行い、3 つの格子間隔の計算結果から連続極限の |Vus| を見積もった (塗りつぶし赤丸)(研究論文 [B]-1)。今後、この結果の系統誤差を見積もり研究結果を論文としてまとめる予定である。

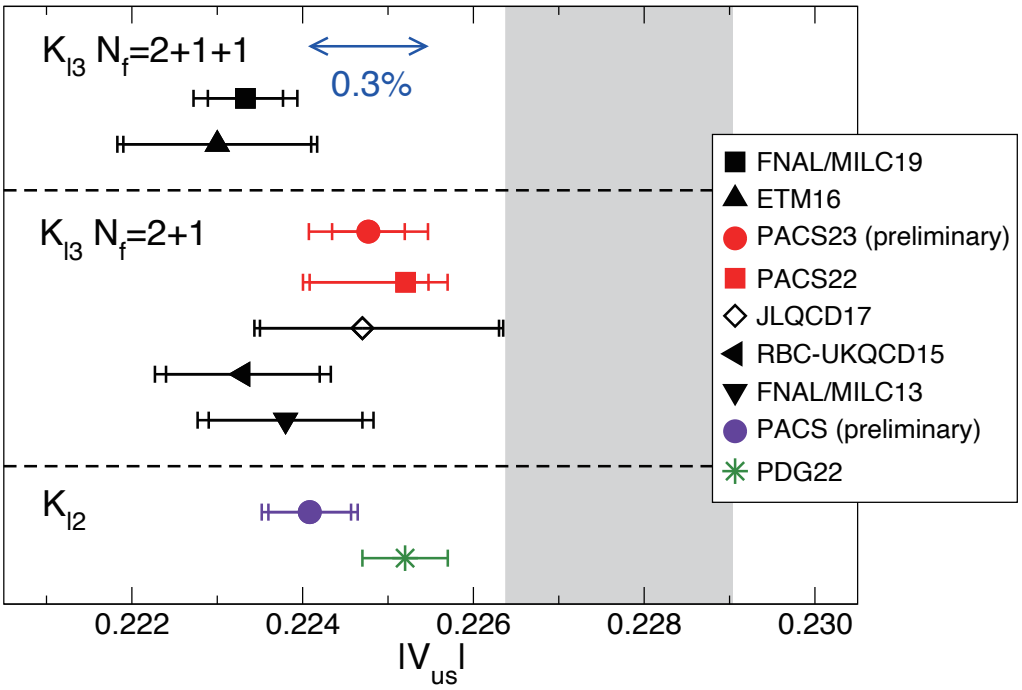


図 1:|Vus| の比較。赤丸印は我々の最新の結果 (研究論文 [B]-1)、赤四角印は我々の 2020 年の結果。水色帯と灰色帯は CKM 行列のユニタリー性から求まる標準理論の予測で、色の違いは用いた |Vud| の違い。

[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、核子構造に関係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、CCS・新谷栄悟研究員、東北大学大学院生・辻竜太朗氏と共に、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 年度の格子間隔 a=0.085fm での形状因子計算結果から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、2021 年度から継続してきた格子間隔 a=0.065fm での形状因子計算を継続し、その研究成果を論文としてまとめた (研究論文 [A]-1, [B]-3)。

[4] 中間子電磁的形状因子の直接微分計算法の開発研究（山崎）

大学院生佐藤と山崎は電磁的形状因子の原点の傾きで定義される荷電半径を格子 QCD 計算から直接計算する方法の開発研究を行った。一般的な荷電半径の計算では、電磁的形状因子を離散的な運動量移行で数点計算し、電磁的形状因子の運動量移行依存性に対し関数を仮定したフィットにより荷電半径を求めている。しかし、この計算方法ではフィット関数の選択による系統誤差が含ま れてしまう。荷電半径の精密決定のためには、このような系統誤差のない計算方法が望まれている。

2020 年に提案された形状因子の微分を直接計算する方法を詳しく調べた結果、無視できない大きさの有限体積効果が含まれる場合があることを確認した。その効果を抑制する改良された直接微分計算法を提案し、その方法を π 中間子質量 0.51GeV での格子 QCD 計算に適用し、実際の π 中間子荷電半径計算でこの方法が機能することを確認した (研究論文 [B]-2)。今後はこれらの方法を現実的クォーク質量、大体積のゲージ配位を用いて中間子荷電半径の精密計算を実施していく。

[5] クォークが重い QCD の臨界クォーク質量（金谷）

ビッグバン直後の高温高密度な宇宙は、クォークとグルーオンが核子から溶け出したクォーク・グルーオン・プラズマ (QGP) 状態にあったと予想されている。宇宙はその後膨張して温度と密度が下がり、量子色力学 (QCD) の有限温度・密度相転移を経て、核子などからなる現在の低温低密度状態になったと考えられている。従って、現在の宇宙を理解する上で、宇宙初期に実現したと考えられる QCD の有限温度･密度相転移の解明は重要である。金谷は、新潟大学・江尻信司准教授、京都大学基礎物理学研究所・北澤正清講師、九州大学・鈴木博教授らと、QCD の有限温度・密度相転移の性質を、格子 QCD シミュレーションにより研究した。

物理点 QCD の相転移はクロスオーバーであり、近傍の臨界点のスケーリングの影響を受けていると考えられている。臨界点は、クォーク質量が軽い側と重い側の両方に存在するが、近年の格子 QCD 研究により、2+1 フレーバー QCD の軽い側の臨界点が 3 フレーバー QCD のカイラル極限 (mu=md=ms=0) まで後退している可能性が高いことがわかって来た。従って、物理点のクロスオーバーに、重い側の臨界点も影響している可能性がある。クォークが重い極限の QCD は、クォークがデカップルして SU(3) Yang-Mills 理論となるが、そ の有限温度相転移は Z(3) 有効スピン系と同じユニバーサリティー・クラスに属する 1 次相転移である。クォーク質量を無限大から下げていくと、クォーク質量の逆数が Z(3) 有効スピン系に外部磁場として作用するため、この 1 次相転移はある臨界クォーク質量で連続的なクロスオーバーに変化する。この境界が、重い側の臨界点で、その近傍で Z(2) の臨界スケーリングが期待される。

金谷らは、昨年度までの研究で開発したホッピングパラメータ展開に基づく方法を採用し

て、大格子での高統計シミュレーションを遂行している。2022 年度までに実行した Nt=4 格子での臨界スケーリング研究を拡大して、2023 年度には、より連続極限に近づけた Nt=6 での研究を遂行し、Nt=8 のシミュレーションも開始した。

図 2 に Nt=6 格子におけるポリアコフ・ループのビンダー・キュムラントの結果を示す。系の空間サイズはアスペクト比 LT=Ns/Nt でコントロールする (臨界点探索では温度 T=1/(aNt) が臨界温度近傍でほぼ一定なので、LT は空間サイズ L=aNs に比例する。ここで Ns, Nt は空間方向 , 温度軸方向の格子サイズで、a は格子間隔)。臨界スケーリングが実現していれば、ビンダー・キュムラントは臨界点で空間サイズ依存性が無くなる。図から、アスペクト比 10 以上の大格子で臨界スケーリングが実現し、その交点から臨界点を高精度で決定できることがわかる。他方、アスペクト比 6,7 の結果は Nt=4 の場合より交点から大きくずれており、格子間隔が小さくなると空間サイズが小さい格子のデータがスケーリングからより大きく外れることがわかった (研究論文 [B]-4)。

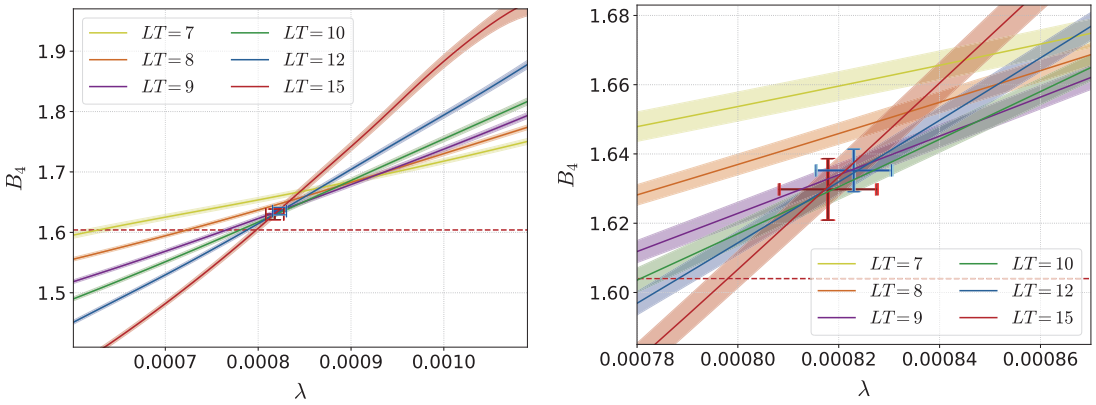


図 2：クォークが重い場合の 2+1 フレーバー QCD における、Binder cumulant のクォーク質量依存性。Nt=6 格子の結果。右図は、左図の交点 (相転移点) 付近の拡大図 (研究論文 [B]-4)。

Nt=8 の研究はまだ進行中だが、同様の中間結果を得ている。Nt を増やして連続極限を議論する場合、ホッピングパラメータで表された臨界点κ_cの変化を、物理量の変化に翻訳する必要がある。そこで、κ_cにおけるゼロ温度での擬スカラーメソンと相転移温度の比 m_{PS}/T_c を計算したところ、N_t=4,6,8 でそれぞれ m_{PS}/Tc=16.30(3),18.04(4),17.2(2) という暫定的結果を得た (国内学会 [B]-9)。これによると N_t 依存性 (格子間隔依存性) は小さいと思われるが、N_t をさらに大きくして、より連続極限に近づけた場合にも検証する必要がある。

以上では、2 フレーバー QCD の場合における臨界点の結果について説明してきたが、ホッピングパラメータ展開に基づく我々の方法は、任意のフレーバー数で、またクォーク質量が縮退していない場合でも、臨界点を求めることができる。さらに、我々の方法は有限密度にも容易に拡張できることを昨年度の研究で示した。フル QCD では非常にコストがかかるクォーク行列式の複素位相 の計算も、ホッピングパラメータ展開による方法では簡単に評価できる。

2+1 フレーバー QCD では、臨界点は (κ_{ud}, κ_s) 平面における一次相転移の境界線とる。N_t=4,6 格子でのデータを有限密度 (クォークの化学ポテンシャル μ がゼロでない場合) に拡張して物理量を評価した結果、少なくとも我々が解析した Nt の重クォーク領域の臨界点付近までは符号問題が深刻ではなく、再重み付け法により有限密度での臨界点を評価できることが分かった。それにより、図 3 に示すように、重クォーク QCD の一次相転移領域が、密度が高くなるにつれて小さくなることを定量的に示した (研究論文 [B]-5)。

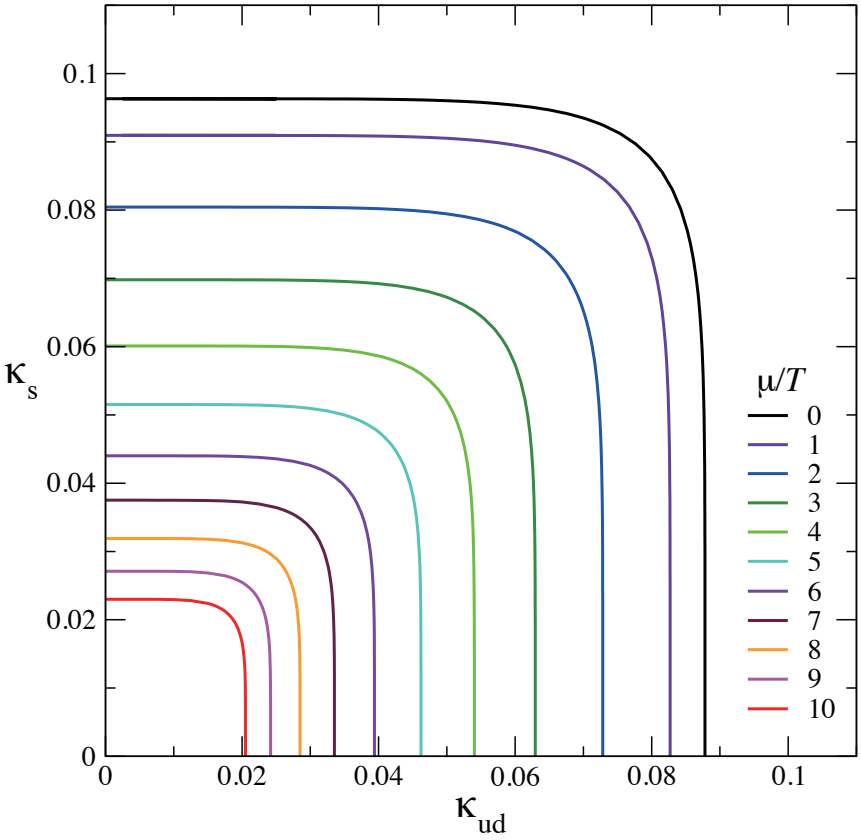


図 3：2+1 フレーバー有限密度 QCD における 1 次相転移領域の境界線の μ /T 依存性。Nt=6 格子での結果 (研究論文 [B]-5)。

これらと並行して、物理点における QCD 相転移近傍の熱力学量を、グラジエント・フローに基づく SFtX 法 (small flow-time expansion 法) により研究するプロジェクトも、引き続き推進している。

[6] パースモデリングを用いたクォーコニウムスペクトル関数の推定（大野）

クォーコニウムは、チャームやボトムといった重クォークとその反クォークの束縛状態である。RHIC や LHC で行われている重イオン衝突実験では、宇宙初期や中性子星内部等のような超高温・高密度環境で実現されると考えられている、クォーク・グルーオン・プラズマ (QGP) と呼ばれる状態を作り上げる実験が行われており、クォーコニウムは QGP の性質を調べるための重要なプローブの一つとなっている。また、実験結果を説明し、QGP の性質をよ

く理解するためには、クォーコニウムや重クォークの QGP 中での振る舞いを理論的に調べることが必要不可欠である。その際、クォーコニウムのスペクトル関数が重要な役割を果たす。なぜならば、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いるからである。一方、クォーコニウムのスペクトル関数を計算することは一般に困難であることが知られている。格子 QCD に基づく第一原理計算では、クォーコニウムの相関関数を直接計算することができるが、スペクトル関数は 相関関数から間接的にのみ得られる。しかしながら、この計算は ill-posed な問題であり、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。その中でもスパースモデリングは、少ない前提条件の下でスペクトル関数の推定を行うことができる手法として、近年注目を集めている。

大野は、大阪国際工科専門職大の富谷助教と気象大学校講師の高橋講師とともに、スパースモデリングを用いたクォーコニウムスペクトル関数の推定に関する研究を推進した。2023 年度は 2022 度に引き続き、手で与えたスペクトル関数から作成した様々なテストデータに対してスパースモデリングを適用し、どのような出力が得られるかを詳細に調べた。加えて、実際の格子 QCD 計算で得られた、臨界温度より低い温度におけるチャーモニウム相関関数のデータに対してもスパースモデリングを適用し、対応するスペクトル関数を推定した。 その結果、J/ Ψ粒子の質量付近で束縛状態を表すピーク構造を持ったスペクトル関数が得られることを確認した (図 4)。一方、最大エントロピー法を用いた先行研究と比較すると、幅の広いピークが得られることが分かった。この結果は、国際会議「Lattice 2023」や日本物理学会 2024 年春季大会等で発表し、「Lattice 2023」の会議録 (研究論文 [B]-6) にもまとめた。

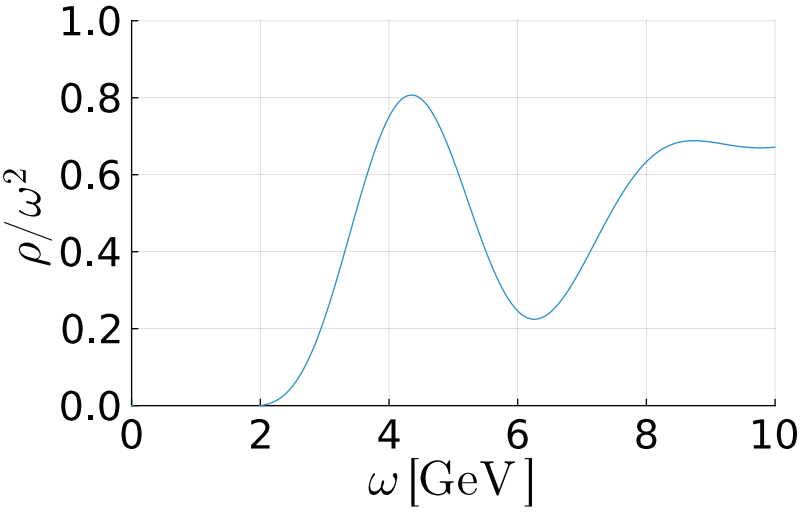


図 4：スパースモデリングにより得られたチャーモニウムのスペクトル関数。

[7] 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（藏増、秋山）

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、2007 年に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。

2014 年、藏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) の清水裕也特別研究員は、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。現在、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、(v) 物性物理学における強相関電子系への応用、という 5 つの課題に取り組んでいる。

2023 年度は、上記課題 (i) 〜 (v) のうち、課題 (iv) に関連して新たな展開があった。エンタングルメント・エントロピーは、量子多体系の量子的なもつれを測る定量的な指標として重要な物理量であるにもかかわらず、モンテカルロ法で直接計算することは難しい。場の理論におけるエンタングルメント・エントロピーの直接計算のためには、TRG 法において分配関数そのものが計算できる特性が本質的に重要である。藏増と博士後期課程 2 年の羅は、新たな計算手法を用いて、(1+1) 次元の O(3) 非線形シグマモデルのエンタングルメント・エントロピーを計算し、場の理論におけるエンタングルメント・エントロピーの非摂動計算の実証に成功した。図 5(左) は、エンタングルメント・エントロピーのサイズ依存性である。ここでは系全体の空間サイズを 2L とし、2 つに分割された領域のサイズを各々 L として周期的境界条件を課している。結合定数 β が大きくなるほど相関長 ξ が長くなる (例えば β =1.4 で ξ =6.9、β =1.7 で ξ =34.6) が、L が ξ よりも大きくなるとエンタングルメント・エントロピーが一定になっており，理論的に期待される振る舞い $S_A(L) \sim (c/3)\ln(\xi)$ と一致している。われわれは更に β 依存性からセントラルチャージを計算し、c=1.97(9) という値を得ている。図 5(右) は、エンタングルメント・エントロピー (n=1) と n 次 ($n \neq 1$) のレンニ・エントロピーとの比較である。まず、これまでのモンテカルロ計算では、エンタングルメント・エントロピーと 2 次のレンニ・エントロピーの値が近い ($S_A \approx S_A(2)$) ことが仮定されてきたが、実際には大きく異なることがわかる。また、$n \geqq 2$ のみのデータを使って n=1 の正しい外挿値を得ること

は難しいが、n=1/2 のデータも使った内挿によって n=1 の推定値が改善されている。

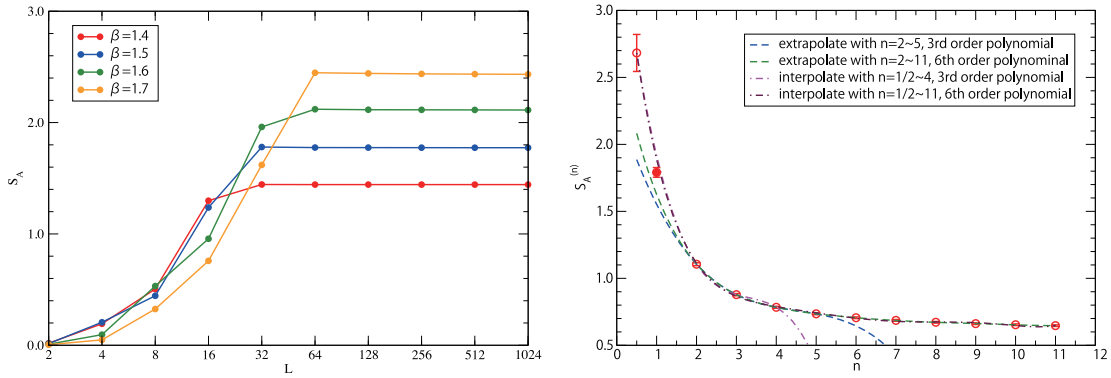


図 5：(左) エンタングルメント・エントロピーのサイズ依存性。β は結合定数を表す。(右) エンタングルメント・エントロピー (n=1) と n 次 (n ≠ 1) のレンニ・エントロピーの n 依存性 (研究論文 [A]-4)。

また、2023 年 6 月に秋山進一郎助教が本学 CCS に着任し、テンソルネットワーク法を用いた量子物理学の研究を活発に行っている。

まず、秋山は、フレーバー自由度を伴う格子フェルミオン系に対する新しい Grassmann テンソルネットワーク表現の構築に取り組んだ。フレーバー自由度を伴う格子理論では、素朴にテンソルネットワーク表現を構成すると、メモリコストがフレーバー数に関して指数関数的に増大する。この問題を解決するために、行列積分解を応用しフレーバー数を仮想的な次元とみなすことで、経路積分の Grassmann テンソルネットワーク表現を多層化する手法を提案した。この手法では必要なメモリコストがフレーバー数に関して線型にしか増大しない。この手法を 2 フレーバーおよび 3 フレーバー Wilson フェルミオンからなる Gross-Neveu 模型に応用し、その経路積分がボンド次元 4 の多層テンソルネットワークとして厳密に表現できることを見出した。さらに、多層テンソルネットワーク表現の構造を保つような粗視化手法も考案した。この手法を用いることで、有限密度領域のゼロ温度極限で発現する Silver Blaze 現象を再現することができた (図 6)。特に、多層化しない 2 次元的なテンソルネットワーク表現を直接粗視化する場合と比べ、半分以下のメモリコストでゼロ温度極限の物理量を計算できることが明らかになった (研究論文 [A]-5, 国内学会 [B]-25)。

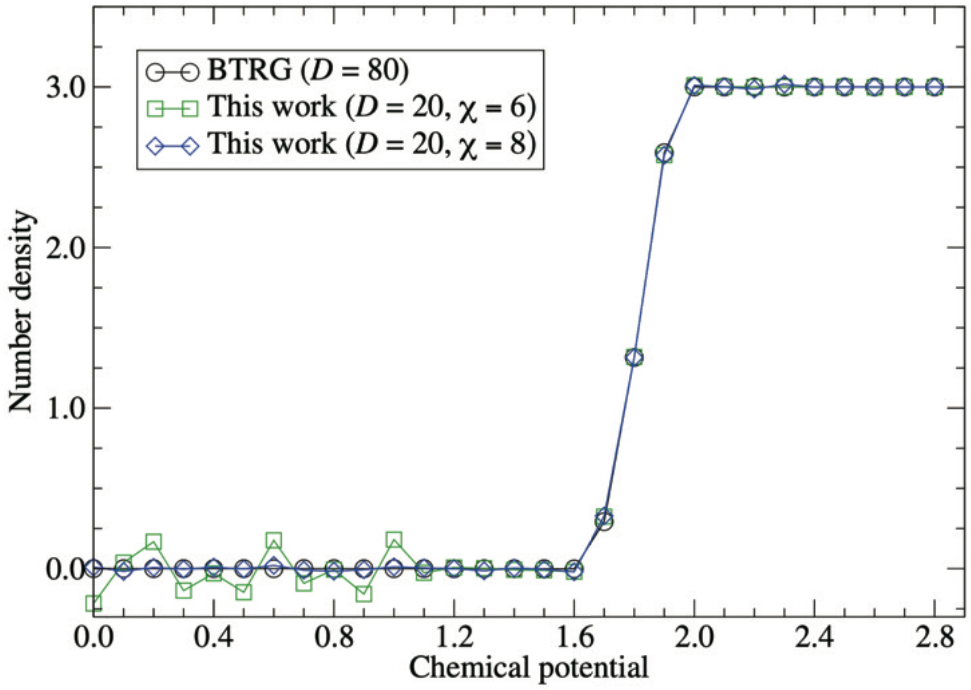


図 6：3 フレーバー Gross-Neuve-Wilson 模型の粒子数密度。

並行して、秋山は東京大学･藤堂眞治教授と同研究室 D2 の Ho Pai Kwok 氏と共に、2 カラー QCD に対する初期テンソルの圧縮手法を開発し、2 次元系への応用を進めた。本研究では、ランダムサンプリングによるゲージ場の離散化と Grassmann テンソルネットワーク形式を組み合わせることで初期テンソルを構成し、ネットワークのすべてのボンドのサイズを特異値分解によって事前に削減する手法を提案した。本手法により、初期テンソルのサイズ (全要素数) を 1000 分の 1 程度にまで削減することが可能になった。現在、圧縮されたテンソル表現に基づいて粒子数密度、フェルミオン凝縮、ダイクォーク凝縮を計算し、有限化学ポテンシャル、有限質量領域上での相構造を調べている。なお、本研究に関しては Ho Pai Kwok 氏が日本物理学会 2024 年春季大会にて研究発表を行なった (国内学会 [B]-24)。

さらに、秋山は、Jefferson lab の Raghav G. Jha 氏、Fermilab の Judah Unmuth-Yockey 氏と協力して、3 次元 SU(2) プリンシパルカイラル模型の経路積分をキャラクター展開によって離散化し、SU(2) 対称性を明白に保った表現形式に基づく TRG 計算に取り組んだ。非可換自由度の効率的な離散化は、テンソルネットワークによる古典計算だけでなく、量子計算の文脈においても近年様々な方法論が提案されている。本研究では、キャラクター展開の打ち切り次数が熱力学極限の物理量に与える影響を調べ、有限打ち切り次数下でも離散化前のモデルと同じユニバーサリティクラスが実現していることを確認した (図 7)。さらに、Triad TRG と Anisotropic TRG(ATRG) の 2 種類のアルゴリズムを用いた数値解析を行った。その結果、ATRG の方が一点関数の計算を安定して行えることが分かった。今後、高次元向けの TRG

アルゴリズムの改良を検討していく際の一つの指針となる知見が得られたと考えている。国際会議および国際ワークショップで本研究成果の発表も行なった (研究論文 [B]-7, 国際会議 [B]-21,[B]-8)。

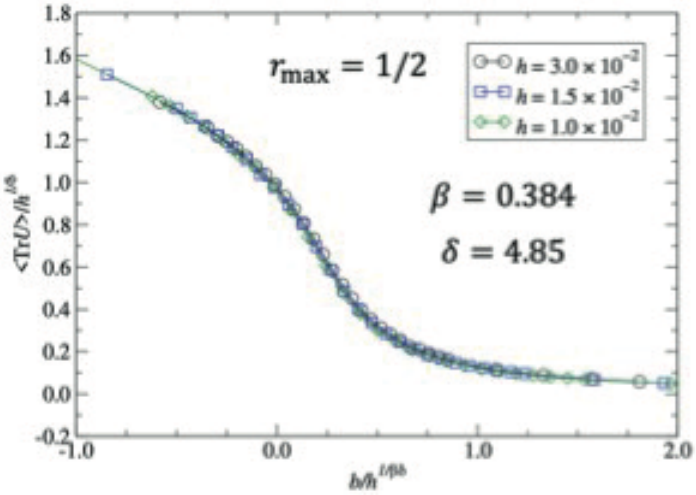


図 7：3 次元 SU(2) プリンシパルカイラル模型の磁化のスケーリング。

この他、秋山は格子フェルミオン系に対する bond-weighted TRG アルゴリズムの開発と応用も進め、国際会議等での成果発表と GitHub でのサンプルコードの公開も行った (研究論文 [B]-8, 国際会議 [B]-7, 国内学会 [B]-4)。また、開発したアルゴリズムに基づき、理研・菅野颯人氏、東工大・村上耕太郎氏、金沢大の武田真滋教授と共に、スタッガードフェルミオンを用いた 2 フレーバー Schwinger 模型の研究を遂行した。スタッガードフェルミオンを用いた Schwinger 模型の TRG 計算はすでに別のグループによる先行研究が存在するが、先行研究では世界線表現に基づくテンソルネットワーク表現が使われており、有限 θ 領域では熱力学極限の計算が極めて不安定になることが報告されていた。さらに、世界線表現では有限フェルミオン質量の導入が難しいというデメリットも存在した。そこで我々は、Grassmann テンソルネットワーク表現を用いることでこれらの問題を同時に解決することを試みた。その結果、2 π 周期性を明白に保ったまま、有限質量領域の熱力学極限計算に成功した。特に、摂動論が有効なフェルミオン質量の小さい領域と純 U(1) ゲージ理論に対応する重い質量領域の中間領域に着目し、トポロジカル電荷密度の振る舞いが質量によってどのように変化するのかを明らかにした。この成果は、菅野颯人氏が日本物理学会第 78 回年次大会にて報告し、現在論文を執筆中である (国内学会 [B]-12)。

[8] 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。2023 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 フレーバー理論の有効理論を用いた統一的な説明が可能かの調査、及び、8 フレーバー理論で得られた S パラメータデータからカイラル摂動論低エネルギー定数の見積もりを行った。

[9] 格子 QCD 研究用データグリッド ILDG/JLDG の運用（藏増、大野、吉江）

JLDG(Japan Lattice Data Grid) は、国内の格子 QCD 及び関連分野の研究者・研究グループが、QCD 配位等の貴重なデータを大域的かつ効率的に共有し、研究の促進と計算資源の有効活用を図る事を目的に構築されたデータグリッドである。現在 JLDG には、国内の主要な 7 つの計算素粒子物理研究拠点が参加しており、各拠点に置かれたファイルサーバは NII SINET6 上の VPN「HEPnet-J/sc」で接続されている。さらに、これらのファイルサーバは、グリッドファイルシステムソフトウェア Gfarm により束ねられており、ユーザは単一のファイルシステムのように利用することが可能である。JLDG の運用は、拠点の代表、研究グループ代表、及び本学の計算機工学者から構成される JLDG 管理者グループが行なっており、CCS からは、藏増、大野、吉江が参加している。なお、管理グループの代表は大野が務めている。

JLDG は、2008 年に実運用を開始して以来 16 年経過し、実用システムとして (一定の) 完成の域に達しており、ここ数年の管理者グループの活動は、システムの改良や機能追加から、安定運用や利便性向上の為の作業に主軸を移している。2023 年度は、メンテナンス・ユーザ対応・システム障害対応等の日常業務以外に、主に以下の活動を行った。

- 広島拠点の停止に伴う作業を行った。
- ファイルサーバの使用率の偏りを解消するためのリバランス作業を実施した。
- HEPnet-J/sc の運用体制変更に伴い、拠点間の新たな覚書の締結およびネットワーク構成の変更 (L3 ネットワークから L2 ネットワークへ) を行った。
- 管理サーバの更新：CentOS7 のサポート終了に対応するため、管理サーバの OS およびソフトウェアの更新を行った。
- ILDG(International Lattice Data Grid) に関する活動：ILDG は、世界の研究者が格子 QCD の基礎データを相互利用することを目的として運用されている国際的なデータグリッドで、JLDG を含む全世界の 5 つの地域グリッドによって構成されている。2007 年の運用開始以降、世界の多くの研究者に利用されてきたが、近年は様々な要因により運用継続が困難となっていた。この状況を打破するため、2022 年初頭より定期的なミー

ティングを開く等、プロジェクトの再活性化への作業が開始された。これに関連して、JLDG では、技術的な問題から停止していた ILDG への QCD 配位の公開を簡易的に再開した。また、ILDG 全体の活動として特筆するものとして、ハンズオンワークショップの開催、国際会議「Lattice 2023」における plenary talk 及び lunch discussion の開催が挙げられる。

4. 教育

[修士論文]

1. Choi Minjae

「ゲージ同変性を取り入れた機械学習による格子 QCD のディラック方程式への前処理」

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 第 10 回成果報告会における HPCI 利用研究課題優秀成果賞、佐々木勝一 (代表)、山崎剛、藏増嘉伸、浮田尚哉、新谷栄悟、他 3 名「格子 QCD を用いた素粒子原子核物理の精密計算」2023 年 10 月
2. 筑波大学 2023 年度 BEST FACULTY MEMBER、山崎剛

外部資金

1. 山崎剛 (代表)、「富岳」成果創出加速プログラム (標準課題)、令和 5 年度採択、「超大規模格子 QCD による新物理探索と次世代計算に向けた AI 技術開発」、26,841 千円
2. 大野浩史 (分担)、科学研究費補助金・学術変革領域研究 (A) (計画)、令和 4 年度採択、「計算物理学と機械学習の融合」、10,880 千円
3. 金谷和至 (代表)、科学研究費補助金・基盤研究 (C)、令和 4 年度採択、「グラジエントフローによる QCD 有限温度相転移の研究」、700 千円
4. 山崎剛 (代表)、科学研究費補助金・基盤研究 (B)、令和 5 年度採択、「素粒子標準模型を超える物理探索に向けた格子 QCD 精密化」、2,800 千円
5. 秋山進一郎 (代表)、科学研究費補助金・若手研究、令和 5 年度採択、「内部自由度に富んだ格子理論に対するテンソル繰り込み群法の開発と応用」、700 千円
6. 新谷栄悟 (代表)、科学研究費補助金・基盤研究 (C)、令和 5 年度採択、「格子 QCD を用いたミュー粒子 g − 2 の理論計算」、700 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. PACS Collaboration: Ryutaro Tsuji, Yasumichi Aoki, Ken-ichi Ishikawa, Yoshinobu Kuramashi, Shoichi Sasaki, Eigo Shintani, and Takeshi Yamazaki, “Nucleon form factors in Nf=2+1 lattice QCD at the physical point: finite lattice spacing effect on the root-mean-square radii” , Phys. Rev. D 109, No.9 (2024) ref.094505, pp.1-44.
2. S. Akiyama and Y. Kuramashi, “Critical endpoint of (3+1)-dimensional finite density Z3 gauge-Higgs model with tensor renormalization group” , JHEP 10 (2023) ref.077, pp.1-16.
3. X. Luo and Y. Kuramashi, “Tensor renormalization group approach to (1+1)-dimensional SU(2) principal chiral model at finite density” , Phys. Rev. D 107, No.9 (2023) ref.094509, pp.1-7.
4. X. Luo and Y. Kuramashi, “Entanglement and Rényi entropies of (1+1)-dimensional O(3) nonlinear sigma model with tensor renormalization group” , JHEP 03 (2024) ref.020, pp.1-14.
5. S. Akiyama, “Matrix product decomposition for two- and three-flavor Wilson fermions: Benchmark results in the lattice Gross-Neveu model at finite density” , Phys. Rev. D 108, No.3 (2023) ref.034514, pp.1-15.

B）査読無し論文

1. PACS Collaboration: T. Yamazaki, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yoshié, “|Vus| from kaon semileptonic form factor in Nf=2+1 QCD at the physical point on (10 fm)4” , Proceeding of Science (LATTICE2023) (2024) ref.276, pp.1-7.
2. Kohei Sato, HiromasaWatanabe, Takeshi Yamazaki, “Comparison with modelindependent and dependent analyses for pion charge radius” , Proceeding of Science (LATTICE2023) (2024) ref.312, pp.1-7.
3. PACS Collaboration: Ryutaro Tsuji, Yasumichi Aoki, Ken-ichi Ishikawa, Yoshinobu Kuramashi, Shoichi Sasaki, Eigo Shintani, Takeshi Yamazaki for PACS Collaboration, “Discretization effects on nucleon root-mean-square radii from lattice QCD at the physical point” , Proceeding of Science (LATTICE2023) (2024) ref.323, pp.1-7.
4. Masakiyo Kitazawa, Ryo Ashikawa, Shinji Ejiri, Kazuyuki Kanaya, Hiroto Sugawara, “Critical point in heavy-quark region of QCD on fine lattices” , Proceeding of Science (LATTICE2023) (2024) ref.190, pp.1-7.

5. Shinji Ejiri, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, “Chemical potential dependence of the endpoint of first-order phase transition in heavy-quark region of finite-temperature lattice QCD,” Proceeding of Science (LATTICE2023) (2024) ref.174, pp.1-7.
6. J. Takahashi, H. Ohno and A. Tomiya, “Sparse modeling approach to extract spectral functions with covariance of Euclidean-time correlators of lattice QCD” , Proceeding of Science (LATTICE2023) (2024) ref.028, pp.1-7.
7. S. Akiyama, R. G. Jha, J. Unmuth-Yockey, “Tensor renormalization group study of 3D principal chiral model” , Proceeding of Science (LATTICE2023) (2024) ref.355, pp.1-7.
8. S. Akiyama, “Implementation of bond-weighting method for the Grassmann tensor renormalization group” , Proceeding of Science (LATTICE2023) (2024) ref.370, pp.1-7.

（2）国際会議発表

A）招待講演

1. Takeshi Yamazaki,「Hadron form factors from PACS10 configurations」, Lattice QCD and Probes of New Physics (McKibbin Conference Center, NM, USA, Aug. 7-11, 2023).
2. S. Akiyama,「Tensor renormalization group approach to the four-dimensional lattice gauge theories」, Quantum Information, Quantum Matter and Quantum Gravity (QIMG2023) 4th week: ExU-YITP Workshop on Condensed Matter Physics and Quantum Information (YITP, Kyoto, Japan, Sep. 25–29, 2023).

B）一般講演

1. H. Ohno,「Lattice QCD studies on strong interaction matter under extreme conditions of temperature and/or density」, CCS LBNL CollaborativeWorkshop 2023 (CCS, University of Tsukuba, Tsukuba, Japan, Apr. 12-13, 2023).
2. T. Yamazaki, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yoshié for PACS Collaboration,「|Vus| from kaon semileptonic form factor in Nf=2+1 QCD at the physical point on (10 fm)4」, The 40th International Symposium on lattice field theory (Lattice 2023) (Fermi National Laboratory, IL, USA, Jul. 31-Aug. 4, 2023).
3. Kohei Sato, HiromasaWatanabe, Takeshi Yamazaki,「Comparison with modelindependent and dependent analyses for pion charge radius」, The 40th

International Symposium on lattice field theory (Lattice 2023) (Fermi National Laboratory, IL, USA, Jul. 31-Aug. 4, 2023).

4. R. Tsuji, Y. Aoki, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, S. Sasaki, E. Shintani, T. Yamazaki for PACS Collaboration,「Discretization effects on nucleon root-mean-square radii from lattice QCD at the physical point」, The 40th International Symposium on lattice field theory (Lattice 2023) (Fermi National Laboratory, IL, USA, Jul. 31-Aug. 4, 2023).
5. Shinji Ejiri, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa,「Chemical potential dependence of the endpoint of the first-order phase transition in the heavy-quark region of finite-temperature lattice QCD」, The 40th International Symposium on lattice field theory (Lattice 2023) (Fermi National Laboratory, IL, USA, Jul. 31-Aug. 4, 2023).
6. Masakiyo Kitazawa, R. Ashikawa, S. Ejiri, K. Kanaya,「Critical point in heavy-quark region of QCD on fine lattices」, The 40th International Symposium on lattice field theory (Lattice 2023) (Fermi National Laboratory, IL, USA, Jul. 31-Aug. 4, 2023).
7. S. Akiyama,「Bond-weighting method for the Grassmann tensor renormalization group」, The 40th International Symposium on lattice field theory (Lattice 2023) (Fermi National Laboratory, IL, USA, Jul. 31-Aug. 4, 2023).
8. J. Unmuth-Yockey, S. Akiyama, R. G. Jha,「Tensor renormalization group study of 3D principal chiral model」, The 40th International Symposium on lattice field theory (Lattice 2023) (Fermi National Laboratory, IL, USA, Jul. 31-Aug. 4, 2023).
9. J. Takahashi, H. Ohno and A. Tomiya,「Sparse modeling approach to extract spectral functions with covariance of Euclidean-time correlators of lattice QCD」, The 40th International Symposium on lattice field theory (Lattice 2023) (Fermi National Laboratory, IL, USA, Jul. 31-Aug. 4, 2023).
10. Tatsumi Aoyama, Issaku Kanamori, Kazuyuki Kanaya, Hideo Matsufuru, Yusuke Namekawa, Hidekatsu Nemura, Keigo Nitadori,「Multigrid Solver for Lattice QCD on GPU Machines」, The 34th IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2023) (Kobe International Conference Center, Kobe Port Island, Kobe, Japan, Aug. 4-8, 2023).
11. Naoya Ukita for PACS Collaboration,「Search for physics beyond the standard model from 2+1 +1 Flavor Lattice QCD with the Physical Quark Masses」(ポスター発表), CCS 15th international symposium 2023 on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (Epochal Tsukuba, Tsukuba, Japan, Oct. 2-3, 2023).
12. Kohei Sato, Hiromasa Watanabe, Takeshi Yamazaki,「Systematic error of model-independent method for pion charge radius」(ポスター発表), CCS 15th

international symposium 2023 on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (Epochal Tsukuba, Tsukuba, Japan, Oct. 2-3, 2023).

13. Kazuyuki Kanaya, Shinji Ejiri, Masakiyo Kitazawa, Hiroshi Suzuki, Takashi Umeda,「Thermodynamics of 2+1 flavor QCD with the gradient-flow」(ポスター発表), CCS 15th international symposium 2023 on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (Epochal Tsukuba, Tsukuba, Japan, Oct. 2-3, 2023).
14. H. Nemura, T. Aoyama, I. Kanamori, K. Kanaya, H. Matsufuru, Y. Namekawa, K. Nitadori,「Implementation of Lattice QCD common code to large scale parallel supercomputer with manycore and GPU architecture」(ポスター発表), CCS 15th international symposium 2023 on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (Epochal Tsukuba, Tsukuba, Japan, Oct. 2-3, 2023).
15. S. Akiyama, Y. Kuramashi, Xiao Luo, Y. Yoshimura,「Particle Physics with Tensor Network Scheme」(ポスター発表), CCS 15th international symposium 2023 on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (Epochal Tsukuba, Tsukuba, Japan, Oct. 2-3, 2023).
16. S. Akiyama,「Tensor network method for lattice field theory」, 2023 CCS-EPCC Workshop (CCS, University of Tsukuba, Tsukuba, Japan, Oct. 11-12, 2023).
17. Takeshi Yamazaki,「Calculations using PACS10 configuration」,Large-scale lattice QCD simulation and application of machine learning (CCS, University of Tsukuba, Tsukuba, Japan, Nov. 23-25, 2023).
18. Kohei Sato, Hiromasa Watanabe, Takeshi Yamazaki,「How to directly calculate pion charge radius without fitting」, Large-scale lattice QCD simulation and application of machine learning (CCS, University of Tsukuba, Tsukuba, Japan, Nov. 23-25, 2023).
19. Shinji Ejiri, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Hiroto Sugawara,「Phase structure of finite temperature and density lattice QCD in the heavy quark region」, Large-scale lattice QCD simulation and application of machine learning (CCS, University of Tsukuba, Tsukuba, Japan, Nov. 23-25, 2023).
20. S. Akiyama,「Tensor network approach for lattice field theories in particle physics 」(招待講演), 2024 KISTI-CCS Workshop (Yonsei University, Korea, Feb. 20, 2024).
21. S. Akiyama, R. G. Jha, J. Unmuth-Yockey,「Tensor network formulation of the three-dimensional SU(2) principal chiral model」(ポスター発表), SQAI-NCTS Workshop on Tensor Network and Quantum Embedding (The University of Tokyo, Tokyo,

Japan, Mar. 25-29, 2024).

（3）国内学会・研究会発表

A）招待講演

1. 秋山進一郎 ,「Tensor renormalization group approach to higher-dimensional quantum fields on a lattice」, 離散的手法による場と時空のダイナミクス 2023（筑波大学 , つくば市 , 茨城 , 2023 年 9 月 11 日 –14 日).
2. 山崎剛 ,「「富岳」、これからの利用と若手プロジェクト・リーダーによる先進アプリ課題への期待」（パネルディスカッション), 第 6 回 HPCI コンソーシアムシンポジウム (THE GRAND HALL, 品川 , 2023 年 10 月 25–26 日).
3. 藏増嘉伸 ,「テンソルネットワーク法の量子場理論への応用」, 日本物理学会 2024 年春季大会シンポジウム (Online, 2024 年 3 月 18 日 –21 日).

B）その他の発表

1. 秋山進一郎 ,「Critical endpoint of (3+1)-dimensional finite density Z3 gauge-Higgs model with tensor renormalization group」, 宇宙史研究センター 2023 年度第 1 回構成員会議・成果報告 (2023 年 6 月 27 日).
2. 大野浩史 , 高橋純一 , 富谷昭夫 ,「Sparse modeling approach to extract spectral functions from Euclidean time correlators of lattice QCD」, 第二回学術変革「学習物理学」A02 班研究交流会（東京大学石橋ホール , 東京 , 2023 年 8 月 10 日).
3. 菅原寛人, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清 ,「Nt=8 格子 QCD 計算による重クォーク領域の QCD 臨界点近傍での有限体積スケーリング」, 熱場の量子論とその応用 2023（TFQT 2023）(KEK, つくば市 , 茨城 , 2023 年 8 月 28 日 –30 日).
4. 秋山進一郎 ,「格子フェルミオン系に対するボンド重み付きテンソル繰り込み群」, 熱場の量子論とその応用 2023（TFQT 2023）(KEK, つくば市 , 茨城 , 2023 年 8 月 28 日 –30 日).
5. 浮田尚哉 , 石川健一 , 石塚成人 , 藏増嘉伸 , 中村宜文 , 滑川裕介 , 谷口裕介 , 山崎剛 , 吉江友照 for PACS Collaboration,「PACS10 配位を用いたハドロンの質量スペクトル計算」, 日本物理学会第 78 回年次大会（東北大学 , 仙台市 , 2023 年 9 月 16 日 –19 日).
6. 山崎剛 , 石川健一 , 石塚成人 , 藏増嘉伸 , 滑川裕介 , 谷口裕介 , 浮田尚哉 , 吉江友照 for PACS Collaboration,「格子サイズ 2564 PACS10 配位を用いた K 中間子セミレプトニック崩壊形状因子計算」, 日本物理学会第 78 回年次大会（東北大学 , 仙台市 , 宮城 , 2023 年 9 月 16 日 –19 日).
7. 佐藤航平 , 渡辺展正 , 山崎剛 ,「パイ中間子荷電半径のモデル依存・非依存な解析と比較」, 日本物理学会第 78 回年次大会（東北大学 , 仙台市 , 宮城 , 2023 年 9 月 16 日

–19 日).

8. 辻竜太朗 , 青木保道 , 石川健一 , 藏増嘉伸 , 佐々木勝一 , 新谷栄悟 , 山崎剛 for PACS Collaboration,「連続極限を目指した核子形状因子の物理点格子 QCD 計算」, 日本物理学会第 78 回年次大会 (東北大学 , 仙台市 , 宮城 , 2023 年 9 月 16 日 –19 日).
9. 菅原寛人, 江尻信司, 北沢正清, 金谷和至 ,「Nt=8 格子 QCD シミュレーションによる重クォーク領域の QCD 臨界点の測定」, 日本物理学会第 78 回年次大会 (東北大学 , 仙台市 , 宮城 , 2023 年 9 月 16 日 –19 日).
10. 青山龍美 , 金森逸作 , 金谷和至 , 松古栄夫 , 滑川裕介 , 根村英克 , 似鳥啓吾 ,「Multigrid solvers in general purpose lattice QCD code set Bridge++」, 日本物理学会第 78 回年次大会 (東北大学 , 仙台市 , 宮城 , 2023 年 9 月 16 日 –19 日).
11. 秋山進一郎 , 藏増嘉伸 ,「テンソル繰り込み群による (3+1) 次元有限密度 Z3 ゲージ・Higgs 模型の臨界終点の決定」, 日本物理学会第 78 回年次大会 (東北大学 , 仙台市 , 宮城 , 2023 年 9 月 16 日 –19 日).
12. 菅野颯人 , 秋山進一郎 , 村上耕太郎 , 武田真滋 ,「テンソル繰り込み群による 2 フレーバー Schwinger 模型の数値計算」, 日本物理学会第 78 回年次大会 (東北大学 , 仙台市 , 宮城 , 2023 年 9 月 16 日 –19 日).
13. 大野浩史 , 高橋純一 , 富谷昭夫 ,「スパースモデリングによる格子 QCD 相関関数からのスペクトル関数の推定」, 学術変革領域 (A)「学習物理学の創成」R5 年度領域会議 (東京大学小柴ホール , 東京 , 2023 年 9 月 27 日).
14. 浮田尚哉 for PACS Collaboration,「Master field 格子 QCD を用いた標準理論を超える物理の探索」(ポスター発表), 第 10 回「富岳」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 , 2023 年 10 月 25 日 –26 日).
15. 秋山進一郎 , 藏増嘉伸 , 吉村友佑 ,「テンソルネットワーク法を用いた素粒子物理学および物性物理学の研究」(ポスター発表), 第 10 回「富岳」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 , 2023 年 10 月 25 日 –26 日).
16. 秋 山 進 一 郎 ,「Tensor network approach toward (3+1)-dimensional lattice field theories 」, Tensor Network 2023(CCS, 筑波大学 , つくば市 , 茨城 , 2023 年 11 月 14 日 –16 日).
17. 山崎剛 ,「超大規模格子 QCD による新物理探索と次世代計算に向けた AI 技術開発」(ポスター発表), 第 3 回「富岳」成果創出加速プログラムシンポジウム「富岳百景」(Online, 2023 年 12 月 3 日).
18. 山崎剛 ,「『富岳』成果創出加速プログラム : プロジェクト紹介」,「成果創出加速」基礎科学合同シンポジウム (筑波大学東京キャンパス , 東京 , 2023 年 12 月 18 日 –20 日).
19. 山崎剛 ,「大規模格子 QCD 計算による標準模型を超えた物理探索」,「成果創出加速」

基礎科学合同シンポジウム (筑波大学東京キャンパス , 東京 , 2023 年 12 月 18 日 –20 日).

20. 佐藤航平 , 渡辺展正 , 山崎剛 ,「パイ中間子と K 中間子のモデルに依存しない荷電半径の計算」, 日本物理学会 2024 年春季大会 (Online, 2024 年 3 月 18 日 –21 日).
21. 菅原寛人, 江尻信司, 北沢正清, 金谷和至 ,「有限温度格子 QCD における重クォーク領域の臨界質量」, 日本物理学会 2024 年春季大会 (Online, 2024 年 3 月 18 日 –21 日).
22. 江尻信司, 北沢正清, 金谷和至 , 和田辰也 ,「有限温度・密度格子 QCD の重クォーク領域の臨界点付近における Lee-Yang ゼロ解析」, 日本物理学会 2024 年春季大会 (Online, 2024 年 3 月 18 日 –21 日).
23. 高橋純一 , 大野浩史 , 富谷昭夫 ,「有限温度における中間子相関関数の共分散を考慮したスパースモデリングによるスペクトル関数の計算」, 日本物理学会 2024 年春季大会 (Online, 2024 年 3 月 18 日 –21 日).
24. Ho Pai Kwok, 秋山進一郎, 藤堂眞治 ,「Grassmann Bond-weighted Tensor Renormalization Group Approach to Two-dimensional Two-color Staggered QCD」, 日本物理学会 2024 年春季大会 (Online, 2024 年 3 月 18 日 –21 日).
25. 秋山進一郎 ,「行列積分解を用いた多フレーバー格子フェルミオンの Grassmann テンソルネットワーク表現」, 日本物理学会 2024 年春季大会 (Online, 2024 年 3 月 18 日 –21 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

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

該当なし

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

1. 大野浩史 ,「物理屋のための機械学習講義」世話人
筑波大学東京キャンパス (ハイブリッド), 2023 年 5 月 9 日 , 6 月 29 日 , 11 月 21 日 , 12 月 4 日 , 2024 年 1 月 15 日 , 1 月 22 日 (全 6 回)
参加登録者数 : 530 人
世話人 : 大野浩史 (筑波大), 柏浩司 (福岡工業大), 富谷昭夫 (大阪国際工科専門職大学), 二村保徳 (筑波大), 住本尚之 (筑波大)
ウェブページ : https://akio-tomiya.github.io/lectures4mlphys/
Youtube channel: https://www.youtube.com/@lectures4mlphys

2. 山崎剛 ,「Large-scale lattice QCD simulation and application of machine learning」世話人
筑波大学計算科学研究センター (ハイブリッド), 2023 年 11 月 23 日 –25 日
参加登録者数 : 35 人 , 参加国数 : 5
主催 :「富岳」成果創出加速プログラム「超大規模格子 QCD による新物理探索と次世代計算に向けた AI 技術開発」
世話人 : 藏増嘉伸 (筑波大), 大野浩史 (筑波大), 富谷昭夫 (大阪国際工科専門職大学), 山崎剛 (筑波大)
ウェブページ : https://www-het.ph.tsukuba.ac.jp/ yamazaki/LQCD-ML2023/

3. 秋山進一郎 , 藏増嘉伸 ,「Tensor Network 2023」世話人
筑波大学計算科学研究センター (ハイブリッド), 2023 年 11 月 14 日 –16 日
参加登録者数 : 124 人
世話人 : 秋山進一郎 (筑波大), 藏増嘉伸 (筑波大), 武田真滋 (金沢大)
ウェブページ : https://akiyama-es.github.io/tn23.html

4. 山崎剛 ,「成果創出加速プログラム基礎科学 4 課題合同シンポジウム」世話人
筑波大学東京キャンパス (ハイブリッド), 2023 年 12 月 18 日 –20 日
参加登録者数 : 75 人
主催 : 計算基礎科学連携拠点 ,「富岳」成果創出加速プログラム基礎科学 4 課題
共催 : 筑波大学・計算科学研究センター , 高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所・理論センター
世話人 : 橋本省二 (KEK), 大須賀健 (筑波大学), 山崎剛 (筑波大学), 堀田英之 (名古屋大学)
ウェブページ : https://kds.kek.jp/event/48556/overview

5. 大野浩史 ,「計算物理春の学校 2024」世話人
沖縄県市町村自治会館 , 那覇 (ハイブリッド), 2024 年 3 月 11 日 –15 日
参加者数 (内対面参加): 251 人 (148 人)
世話人 : 松永響 (東京大学), 関祐二 (慶應大学), 石田哲郎 (神戸大学), 石田洋音 (埼玉大学), 柏村周平 (東京大学), 玉城良仁 (琉球大学), 服部和希 (慶応大学), 服部竜大 (東京工業大学), 吉村健太 (東京工業大学), 大久保毅 (東京大学), 大野浩史 (筑波大学), 品岡寛 (埼玉大学), 下川統久朗 (OIST), 富谷昭夫 (大阪国際工科専門職大学), 永井佑紀 (JAEA), 水上渉 (大阪大学)
ウェブページ : https://compphysspringschool2024.github.io/homepage2024/
Youtube channel: https://www.youtube.com/channel/UC7zQqYdH0qH4FPrhiutRAvQ

9. 管理・運営

1. 藏増嘉伸 : 運営委員会委員、運営協議会委員、研究倫理委員会委員長、
2. 大野浩史 : 共同研究運用委員会委員
3. 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

1. 藏増嘉 : ILDG board member
2. 大野浩 : JLDG 管理グループ代表
3. 大野浩史 : 日本物理学会素粒子論領域運営委員

11. その他

該当なし

II. 宇宙物理研究部門

1. メンバー

教授	大須賀 健
准教授	森 正夫
准教授	矢島 秀伸
准教授	吉川 耕司
助教	Wagner Alexander
助教	福島 肇
助教	朝比奈 雄太
研究員	高水 裕一（CCS）
	桐原 崇亘（科研費基盤研究 A）
	小川 拓未（科研費基盤研究 A）
	諸隈 佳菜（科研費基盤研究 A）
	恒任 優（科研費基盤研究 B）
	曽我 健太（創発的研究支援事業）
	小幡 真弓（「富岳」成果創出加速）
	学生 大学院生 25 名
	学類生 7 名

2. 概要

本年度，当グループは，ブラックホール超臨界降着流の大局構造の研究，一般相対論的ボルツマン輻射輸送計算を用いた超臨界降着流の X 線時間変動の研究，星間空間を浮遊するブラックホールへのガス降着の研究，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，ライマン α 光の円偏光生成とホモキラリティ問題，原始惑星系円盤における乱流とダスト成長，暗黒物質サブハローと M31 恒星ストリームの相互作用，Dark Matter Sub-halo の力学進化，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，原始銀河団形成シミュレーション，生体光拡散トモグラフィーの数値的研究，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，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，星団形成における輻射流体力学過程の研究，を行った。

3. 研究成果

[1] 一般相対論的多波長輻射輸送計コード “RAIKOU（来光）” の開発

ブラックホール周りの輻射スペクトルと撮像イメージは、ブラックホールの質量やスピンといった性質、さらにはブラックホール周囲のガスの分布や運動を知るための手かがりとなる。そこで、一般相対論的多波長輻射輸送計算コード “RAIKOU（来光）” を構築した。

RAIKOU はシンクロトロン放射 / 吸収、およびコンプトン / 逆コンプトン散乱が組み込まれており、熱的だけでなく非熱的電子によるプロセスも扱える。電波帯から超高エネルギーガンマ線に至る多波長スペクトルの計算が可能である。テスト計算を行った結果、EHT によって得られたブラックホールシャドーの電波撮像イメージの再現に成功し、将来の X 線干渉計ミッションで観測されるであろう X 線ブラックホールシャドーを予測することができた。

[2] 一般相対論的輻射磁気流体計算による超高光度 X 線パルサーの構造解明

超高光度 X 線パルサーは、磁化した中性子星への超臨界降着によって輝いていると考えられているが、その降着構造や磁場構造についてはまだよくわかっていない。そこでは本研究では、双極子磁場を持つ中性子星超臨界降着流の、一般相対論的輻射磁気流体力学シミュレーションを実施した。その結果、降着柱、降着円盤、アウトフローという構造が形成されることがわかった。このアウトフローは光学的に厚く、観測されている約一千万度の黒体放射の起源と考えられる。得られたモデルを銀河系内の超高光度 X 線源パルサー Swift J0243.6+6124 に適用したところ、観測結果（自転速度およびその変化率、黒体放射半径など）を再現するためには、降着率がエディントン限界の数百倍程度で、中性子の磁場強度は 3^{11}G から 4^{12}G の範囲である必要があることがわかった。この結果は、超高光度 X 線パルサーのエネルギー源が、磁化した中性子星への超臨界降着であることを強くサポートするものである。

[3] 一般相対論的磁気流体計算と電波観測によるブラックホールスピンの解明

電波銀河 M87 の中心に超大質量ブラックホールが存在することはイベントホライズンテレスコープによってブラックホールシャドーが撮像で明らかになった。この M87 のジェットは 100 年にわたって調べられてきたが、近年、ジェットの噴出方向が変わっている可能性が示唆された。ただし、その周期も方向が変わる要因もよくわかっていない。そこで本研究では 22 年間分の電波観測の結果を詳細に分析し、ジェットの方向が準周期的に変化していること、そしてその周期が約 11 年であることを明らかにした。さらに、一般相対論的磁気流体シミュレーションを実施したところ、周期的なジェットの方向の変化は、慣性系の引きずりによる降着円盤の歳差運動、いわゆる Lense-Thirring 効果で再現できることがわかった。これは M87 の超巨大ブラックホールが自転していることの強い証拠である。

[4] 中間質量ブラックホールへの Bondi-Hoyle-Lyttleton 降着過程の研究

超巨大ブラックホールはおよそ全ての銀河の中心に存在することがわかっているが、その形成過程は未解明である。本研究では、3 次元輻射流体力学シミュレーションを行い、星間ガス中をただよう中間質量ブラックホールへの Bondi-Hoyle-Lyttleton（BHL）降着過程を調べた。計算では、降着円盤からの非等方な輻射、および固体微粒子の昇華過程を考慮している。その結果、個数密度が $\sim 10^4 \mathrm{cm}^{-3}$ の場合、ガスは主に円盤面に沿った方向から BHL 降着率の

わずか 0.6% で降着することがわかった。この場合、ブラックホールはほぼ成長せずに星間空間をただようことになる。一方、より高密度なガスの場合（~ 10^6cm^{-3}）、ブラックホールは減速を受け、その後、降着率が増加して超巨大ブラックホールに成長できることがわかった。

[5] ダークマターサブハローの衝突頻度と矮小銀河の誘発的形成

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おり，膨大な観測結果がそれを示唆している。しかし，最近になって理論的に予測されるダークマター質量よりも圧倒的に少ない量しか持たないダークマター欠乏銀河が，近傍宇宙で多数発見されてきた (vanDokkum et al. 2018, 2019)。加えて，HI リッチな 6 つの UDGs (Mancera Pina 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の範疇では非常に困難であり，それらの形成シナリオを別途検討する必要がある。解析的モデルと数値シミュレーションを用いてダークマターサブハロー同士の衝突現象を調査した結果、衝突速度に応じてダークマターを大量に含む通常の銀河やダークマター欠乏銀河の形成経路があることを示すことに成功した。相対速度が小さい場合、二つのダークマターサブハローが合体し、ダークマターが豊富な通常の銀河が誕生することになる。一方、中程度の相対速度の場合には、二つのダークマターサブハローは互いに通過してしまう。しかし、ガス成分は衝突して衝突面で急激にガス密度が上昇するため、そこで爆発的な星形成を起こす事になった。そして最終的に、衝突面ではダークマターをほとんど含まないような銀河が誕生することを示した。我々は、これこそがダークマター欠乏銀河形成の重要な過程であると考えている。さらに、相対速度が十分に大きい場合は、衝突面で発生した衝撃波がガスの表面に到達することで生じるショック・ブレイクアウトによって、大部分のガスが系に束縛されることなく雲散霧消してしまうため、銀河が誕生できないことが示された。

[6] ダークマターハローのユニバーサルスケーリング

銀河をとりまくダークマターハローは、さまざまな観測パラメータ間で強い相関関係を示しており、「ダークマターハローのスケーリング関係」として知られている。しかし、その起源にはまだ未解明のままである。我々は、コールドダークマター模型に基づく宇宙論的 N 体シミュレーションから導かれるダークマターハローの中心集中度とダークマターハロー質量の相関関係（c-M 関係）を利用して、ダークマターハローの表面質量密度、最大回転速度、スケール半径などの他の物理量間の理論的なスケーリング関係を導き出した。そして、理論的なスケーリング関係とさまざまな質量スケールでの観測されたスケーリング関係を比較することにより、矮小銀河や通常の銀河で観測されるスケーリング関係がダークマターハローの c-M 関係に由来することが分かった。さらに、この理論的なスケーリング関係は、銀河団でも成

立することを予測した。さらに、我々はコールドダークマターハローで起こると考えられている「カスプからコアへの遷移」の影響を組み込んだ新しい理論的なスケーリング関係を提案した。カスプとは、ダークマターハローの中心部が非常に高密度で発散するような状態を指し、コアとは中心部がより平坦で広がった状態を指す。この遷移は、星形成や超新星爆発、その他のバリオン過程によるフィードバックメカニズムによって引き起こされると考えられており、ダークマターの分布が中心部でカスプ状から平坦なコア状に遷移すると考えられている。そして、我々は、ダークマターハローにおけるカスプからコアへの遷移プロセスの観測的な検証の可能性について検討した。

[7] Formation of the Andromeda Giant Southern Stream and Eastern Extent

近年の高精度な大規模イメージングと分光観測により、Andromeda Giant Southern Stream（AGSS）を含む M31 のハロー領域における重元素の空間分布が明らかになってきた。AGSS は中心から 100 kpc 以上にも渡って恒星が細長く分布する巨大な構造である。本研究では、progenitor の衝突前の重元素量の空間分布を仮定した N 体シミュレーションの結果を用いて、AGSS 内の重元素量の空間分布を調査した。M31 中心から AGSS の動径方向に沿った重元素の分布に関する解析を行った結果、動径方向に関しては金属量勾配は認められず、progenitor が元々持っていた金属量勾配の制限はつけられなかったが、平均金属量に関しては $[Fe/H] \simeq -0.5$ という制限をつけることができた。さらに、AGSS の方位角方向の金属量の空間分布について解析を行った結果、$[Fe/H] \simeq -0.5$ の条件を満たしつつ、観測によって示唆される AGSS の方位角方向の金属量分布の勾配が $\Delta[Fe/H] \sim -0.2$ 程度であることが分かった。また、この勾配を再現する progenitor の金属量勾配に制限をつけることができた。加えて、AGSS の奥行き空間への拡がりや視線方向速度、それらとの重元素量分布との対応を解析した結果、AGSS とは別に Eastern Extent に対応するような構造が見つかった。AGSS と Eastern Extent の関係性については、Fardalet al. (2008) や、Kirihara et al. (2017) で議論されているが、今回の解析によりこの 2 つの構造が同じ衝突現象で形成された可能性を強く示唆するという結果をみいだした。

[8] Godunov Density Independent Smoothed Particle Hydrodynamics 法の開発

SPH（Smoothed Particle Hydrodynamics）法は圧縮性流体を粒子法を用いて解く数値計算手法である。元々宇宙物理学分野で開発された手法だが、現在では宇宙物理シミュレーションだけではなく工学や医療、CG にも応用例がある。SPH 法では衝撃波を伴う流れを解くために、人口粘性という基礎方程式には表れない非物理的な項を導入する必要性があり、計算結果が人口粘性に大きく左右される場合がある事が本質的な問題とされている。Godunov

SPH(GSPH) 法は、SPH 法の相互作用計算の際に Riemann Solver(RS) を組み込んだ手法で、人工粘性を必要としないように SPH 法を改良したものである。さらに、SPH 法のデメリットとして、導出の際に密度が空間微分可能であると仮定しているため、物理的に密度不連続となる接触不連続面をうまく扱えずに非物理的な表面張力を発生させてしまうことが挙げられる。GSPH 法の場合でもこの問題は完全には解消されないことが我々の実験でわかっている。このデメリットへの対処法の一つとして、密度の代わりに圧力が空間微分可能であることを仮定している Density-Independent SPH(DISPH) 法が挙げられるが、依然として人工粘性項が必要である。そこで本研究では、DISPH 法に我々のオリジナルの方法で RS を組み込んだ Godunov Density-Independent SPH(GDISPH) 法を開発した。衝撃波管問題と圧力平衡問題と点源爆発を解かせ、その性能を調べた。結果、GDISPH 法が DISPH 法と同様に、接触不連続面の扱いが優れている事と、強い衝撃波も人口粘性項を導入する必要なく対処可能である事がわかった。

[9] 初期宇宙における大質量銀河の星形成及びアウトフロー研究

宇宙大規模構造における高密度領域では、大質量銀河が宇宙初期の段階で形成され激しい星形成、及び超巨大ブラックホールが形成されたと考えられている。しかしながら、これら星形成、超巨大ブラックホールは同時に激しいフィードバックを周囲のガスに与えるため、星やブラックホールの質量成長がどのように進んだのか、そして銀河の形態はどのように変化していったのかについては良くわかっていない。我々は大質量銀河が形成される原始銀河団領域に着目した宇宙論的輻射流体シミュレーションを実行し、星形成、超巨大ブラックホール形成とフィードバックの関係を調べた。結果として、フィードバックによるガスアウトフローの性質は銀河ハロー質量に強く依存する事が分かった。一方で星形成やブラックホールの活動性への依存性は小さい事を示した。ハロー質量が 10 の 12.5 乗太陽質量を超えるとアウトフローの効率が急激に下がり、大半のガスは噴水流として星形成領域へと戻ってくる事が分かった。それにより、星形成は長時間安定して進む。また、大質量銀河は銀河間空間へのガスや重元素の供給源としては効率が悪い事が分かった。

[10] 複数の異常部位判定を可能にする機械学習の研究

近赤外線による生体イメージングのためには、高精度な輻射輸送計算と機械学習などを用いた逆問題解析の組み合わせが重要である。これまでの研究で、癌や出血が一箇所だった場合に高精度に判定する解析システムを構築する事が出来た。一方、癌や出血は一箇所だけでなく複数箇所発生する場合がある。その際に、複数箇所の位置の組み合わせのパターンは膨大な数となってしまい、全てのパターンで輻射輸送計算を実行する事は困難である。そこで、一箇所の輻射輸送計算結果を教師データにしながらも、複数の出血、癌の位置判定が可能な機械学習の解析システムを開発した。具体的には、吸収シグナルから異常が一箇所の場

合のシグナルを差し引く際に輻射輸送の性質に合わせた工夫を行った。結果として、複数個、及び異なる大きさの異常部位があった場合にも高精度にそれらの位置を判定する事が可能となった。

[11] 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。

本年度は，ニュートリノのシミュレーション手法としてこれまで採用されてきた N 体シミュレーションと我々が初めて採用した Vlasov シミュレーションの計算精度・計算コストを含めた詳細な比較を行い，宇宙大規模構造の密度揺らぎのパワースペクトルを調べる手段としては従来の N 体シミュレーションでも十分な計算精度が得られるものの，ニュートリノの密度揺らぎのパワースペクトル・ニュートリノの速度統計・ニュートリノ航跡などのニュートリノに焦点を絞った物理量を調べるための数値シミュレーション手法としては N 体シミュレーションよりも Vlasov シミュレーションの方が格段に優れていることを確認した。

[12] 星団形成における星風による窒素過剰星形成条件

球状星団には、窒素を多く含むなど、散在星とは組成の異なる星が含まれており、それらは第二世代星と呼ばれる。球状星団において、第二世代星が星団の質量に占める割合は半分以上になることもあり、球状星団の形成機構と何らかの関係があることが推測されているが、その起源は未だ解明されていない。ところが近年、宇宙望遠鏡 JWST による高赤方偏移銀河の観測が進み，球状星団の形成現場の直接観測が進みはじめている。特に、GN-z11 に代表されるようなガス中に窒素を多く含む銀河や、球状星団に匹敵する星密度を持つクランプ構造が銀河円盤中に発見されている。このような、窒素過剰を引き起こす原因としては、星内部の水素燃焼における CNO サイクルにより生成された窒素過剰なガスが星間ガス中に供給されるシナリオが候補となっている。その発生源の天体としては、例えば Wolf-Rayet 星からの星風や超大質量星の形成などが考えられている。そこで、本研究では星風による重元素供給まで考慮した、星団形成についての輻射流体シミュレーションを行うことで、どのような星団であれば、窒素過剰なガスや星が誕生するかを調べた (図 1)。結果として、星風として放出されたガスが、星形成に再利用されるためには、星団の密度が非常に高くなる必要があることが判明した。そして、高密度星団の形成条件と、ガス雲と星風の時間スケールの比較を行うことで、$10^6\ M_0$ を超える星団でのみ、窒素過剰な星が誕生することを示した (PASJ へ投稿中 , arXiv:2404.10535)

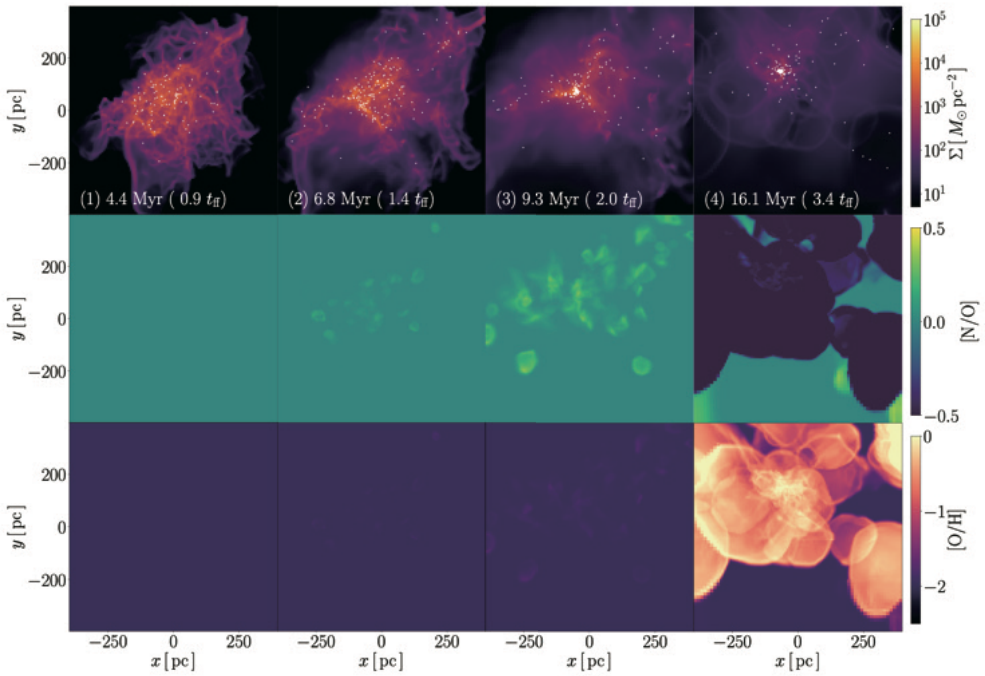


図 1: 星団形成の様子。各図はガスの空間分布と窒素と酸素、酸素と水素の比を示す。

[13] 星形成領域における Ly α円偏光波生成（宇宙生命計算科学連携）

アミノ酸には，鏡像異性体である L 型と D 型が存在し，実験においては等量が生成される。しかし，生命を構成するアミノ酸は L 型に限定されており，その理由は生命起源ともに，長年謎のままとなっている。その起源の候補として，先行研究において水素ライマン α 円偏光下の反応において, L 型もしくは D 型が選択的に生成される可能性が指摘されている。そこで，水素ライマン α 円偏光が宇宙空間でどれくらい存在するのか解明するために，星間空間中の磁場により整列したダスト粒子による光散乱について研究を進めている。これまでの研究では、ダスト粒子が等方向に整列した場合を仮定してきたが、実際の星形成領域では、ダスト粒子は磁場の方向に整列していると考えられている。また、磁場の方向もガスの運動により複雑な形状をしている。そこで、実際の星形成領域において、Ly α 円偏光波が生成されるかを検証するために、星形成についての輻射磁気流体シミュレーションから得られたガスや磁場分布について、輻射輸送計算を行った。この際、ダスト粒子は各点において磁場の方向に整列していると仮定した。結果として、Ly α 光の発生源となる電離領域の近傍領域では、様々な散乱角度の光子の寄与が含まれるために、低円偏光度となる。一方、電離領域から離れた領域では、散乱角度が限定されるために、先行研究と同様に 10% 超の高円偏光波が生成されることが判明した。

4. 教育

【学位論文】

＜博士論文＞

1. 井上 壮大
   General Relativistic Radiation MHD simulations of super-Eddington accretion flows and out- flows around a magnetized neutron star
2. 大滝恒輝
   Formation of Dwarf Galaxies Induced by Dark Matter Subhalo Collisions
3. 内海 碧人
   Investigating energy and mass flows in supercritical accretion disks around Kerr-black holes via general relativistic radiation MHD simulations
4. 高橋 幹弥
   Development of Time-dependent General Relativistic Radiation Transfer Code and Study on Black Hole Spin Estimation with Time-variable Radio Images

＜修士論文＞

1. 新井 聡一
   超高光度赤外線銀河からの輻射駆動ガスアウトフローの研究
2. 古谷田和真
   矮小銀河と銀河円盤の衝突における流体力学相互作用
3. 島田 悠愛
   一般相対論的輻射磁気流体力学シミュレーションに よる超臨界低角運動量降着流の研究
4. 竹田 麟太郎
   一様媒質中での散乱光子が作る 輻射強度分布の解析解
5. 竹林 晃大
   コンプトン散乱を考慮した一般相対論的偏光 X 線輻射輸送計算コードの開発～ブラックホール周辺構造の解明に向けて～
6. 田中 怜
   多層 ISM に対する AGN フィードバック効率の降着円盤風やジェットの内部マッハ数依存性
7. 仲野 友将
   大質量銀河の多重合体過程における多重 AGN 発現メカニズムの解明

＜学士論文＞

1. 瀬尾 明莉
   生体光イメージングに向けた高精度輻射輸送計算コードの開発
2. 竹内大晟
   銀河衝突と流体力学相互作用の研究に向けて
3. 波多野智
   Physics-informed Neural Networks を活用した ガスと輻射の相互作用の計算
4. 加藤杏実
   宇宙大規模構造における重力波の伝播
5. 東佑輝
   Meshless 法を用いた数値流体力学計算の SIMD 並列化による高速化

5. 受賞・外部資金・知的財産権等

【外部資金】

＜代表者＞

- 富岳成果創出加速プログラム R5 年度～ R7 年度：大須賀健
  「シミュレーションと AI の融合で解明する宇宙の構造と進化」
  （R5 年度 2065 万円／全体 6095 万円）
- JST 創発的研究支援事業 R3 年度～ R9 年度：矢島秀伸
  「宇宙物理輻射輸送計算で拓く新しい生体医用光学」
  （R5 年度 757 万円／全体 5000 万円）
- 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」
  （R5 年度 100 万円／全体 3460 万円）
- 基盤研究（A）（一般）R3 年度～ R7 年度：大須賀健
  「超大規模計算と超高精度観測で解き明かすブラックホールジェットの駆動機構と多様性」
  （R5 年度 730 万円／全体 3130 万円）
- 基盤研究（A）R3 年度～ R7 年度：矢島秀伸
  「高精度原始銀河団シミュレーションによる銀河形成と宇宙再電離研究の新展開」
  （R5 年度 630 万円／全体 3210 万円）
- 基盤研究（B）（一般）R3 年度～ R6 年度：吉川耕司「宇宙大規模構造からひも解く CDM
  パラダイムを超えたダークマター」
  （R5 年度 470 万円／全体 1150 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」
  (R5 度 50 万円／全体 330 万円)
- 基盤研究 (C) R5 年度～ R7 年度：朝比奈雄太
  「一般相対論的輻射磁気流体力学計算による歳差ジェットと周期的光度変動の解明」
  (R5 年度 70 万円／全体 210 万円)
- 若手研究 R4 年度～ R7 年度：桐原崇亘
  「重力多体シミュレーションで迫る恒星ストリームの形成過程」
  (R5 年度 90 万円／全体 290 万円)
- 若手研究 R5 年度～ R8 年度：福島肇
  「高赤方偏移銀河における球状星団形成過程の研究」
  (R5 年度 120 万円／全体 360 万円)
- アストロバイオロジーセンタープロジェクト研究 R5 年度：福島肇
  「星団形成シミュレーション : 円偏光波生成と原始惑星系円盤の光蒸発」
  (R5 年度 123 万円／全体 123 万円)

＜分担者＞

- 基盤研究 (B) R3 年度～ R6 年度：梅村雅之（代表者：高橋労太）
  「高精度一般相対論的輻射輸送で探る超巨大ブラックホールの時空構造と起源」
  (R5 年度分担金 10 万円／分担金全体 40 万円)
- 基盤研究 (B) R3 年度～ R6 年度：大須賀健（代表者：高橋労太）
  「高精度一般相対論的輻射輸送で探る超巨大ブラックホールの時空構造と起源」
  (R5 年度分担金 100 万円／分担金全体 130 万円)
- 基盤研究 (B) R3 年度～ R6 年度：朝比奈雄太（代表者：高橋労太）
  「高精度一般相対論的輻射輸送で探る超巨大ブラックホールの時空構造と起源」
  (R5 年度分担金 20 万円／分担金全体 80 万円)
- 基盤研究 (B) R3 年度～ R6 年度：矢島秀伸（代表者：伊王野大介）
  「超高分解能サブミリ波観測による大質量銀河の形成過程の解明」
  (R5 年度分担金 20 万円／分担金全体 77 万円)
- 基盤研究 (A) R4 年度～ R8 年度：矢島秀伸（代表者：大向一行）
  「宇宙初期の星団形成過程から解明する初代銀河の性質と巨大ブラックホールの起源」
  (R5 年度分担金 10 万円／分担金全体 250 万円)
- 富岳成果創出加速プログラム R5 年度～ R7 年度：吉川耕司（代表者：大須賀健）
  「シミュレーションと AI の融合で解明する宇宙の構造と進化」サブ課題 A-2「Vlasov

シミュレーションによる宇宙大規模構造に対するニュートリノの力学的影響」
（R5 年度 25 万円）

6. 研究業績

（1）研究論文

A）査読付き論文

1. Tomohisa Kawashima, Ken Ohsuga, and Hiroyuki R. Takahashi. “RAIKOU (来光): A General Relativistic, Multiwavelength Radiative Transfer Code” . *ApJ* 949.2, 101 (June 2023), p. 101. doi: 10.3847/1538-4357/acc94a. arXiv: 2108.05131 [astro-ph.HE].
2. Kazutaka Kimura, Takashi Hosokawa, Kazuyuki Sugimura, and Hajime Fukushima. “3D Radiation-hydrodynamic Simulations Resolving Interior of Rapidly Accreting Primordial Protostar” . *ApJ* 950.2, 184 (June 2023), p. 184. doi: 10.3847/1538-4357/acda8e. arXiv:2303.12100 [astro-ph.GA].
3. Dongsheng Sun, Ken Mawatari, Masami Ouchi, Yoshiaki Ono, Hidenobu Yajima, et al. “Cosmological-scale Ly α Forest Absorption around Galaxies and AGNs Probed with the HET- DEX and SDSS Spectroscopic Data” . *ApJ* 951.1, 25 (July 2023), p. 25. doi: 10.3847/1538- 4357/accf88. arXiv: 2301.05100 [astro-ph.GA].
4. Yoshiaki Ono, Yuichi Harikane, Masami Ouchi, Hidenobu Yajima, Makito Abe, et al. “Mor- phologies of Galaxies at z ≡ 9 Uncovered by JWST/NIRCam Imaging: Cosmic Size Evolution and an Identification of an Extremely Compact Bright Galaxy at z 12” . *ApJ* 951.1, 72 (July 2023), p. 72. doi: 10.3847/1538-4357/acd44a. arXiv: 2208.13582 [astro-ph.GA].
5. Yuki Isobe, Masami Ouchi, and et al. incl. Hidenobu Yajima. “EMPRESS. IX. Extremely Metal- poor Galaxies are Very Gas-rich Dispersion-dominated Systems: Will the James Webb Space Telescope Witness Gaseous Turbulent High-z Primordial Galaxies?” *ApJ* 951.2, 102 (July 2023),p. 102. doi: 10.3847/1538-4357/accc87. arXiv: 2206.04709 [astro-ph.GA].
6. Moka Nishigaki, Masami Ouchi, and et al. incl. Hidenobu Yajima. “EMPRESS. XI. SDSS and JWST Search for Local and z 4-5 Extremely Metal-poor Galaxies (EMPGs): Clustering and Chemical Properties of Local EMPGs” . *ApJ* 952.1, 11 (July 2023), p. 11. doi: 10.3847/1538- 4357/accf14. arXiv: 2302.03158 [astro-ph.GA].
7. Akihiro Inoue, Ken Ohsuga, Hiroyuki R. Takahashi, and Yuta Asahina. “Modeling of Thermal Emission from ULX Pulsar Swift J0243.6+6124 with General Relativistic Radiation MHD Simulations” . *ApJ* 952.1, 62 (July 2023), p. 62. doi: 10.3847/1538-4357/acd6ea.

8. Shogo B. Kobayashi, Hirofumi Noda, Teruaki Enoto, Tomohisa Kawashima, incl. Ken Ohsuga, et al. “Decomposing the Spectrum of Ultraluminous X-Ray Pulsar NGC 300 ULX-1” . *ApJ* 955.2, 124 (Oct. 2023), p. 124. doi: 10.3847/1538-4357/acf0bb. arXiv: 2309.11070 [astro- ph.HE].
9. Matteo Bachetti, Matthew J. Middleton, Ciro Pinto, Andrés Gúrpide, incl. Ken Ohsuga, et al. “The high energy X-ray probe (HEX-P): studying extreme accretion with ultraluminous X-ray sources” . *Frontiers in Astronomy and Space Sciences* 10, 1289432 (Nov. 2023), p. 1289432. doi: 10.3389/fspas.2023.1289432. arXiv: 2311.04733 [astro-ph.HE].
10. Hajime Fukushima and Hidenobu Yajima. “The formation of globular clusters with top-heavy initial mass functions” . *MNRAS* 524.1 (Sept. 2023), pp. 1422–1430. doi: 10.1093/mnras / stad1956. arXiv: 2303.12405 [astro-ph.GA].
11. Hajime Fukushima, Hidenobu Yajima, and Masayuki Umemura. “Generation of high circular po- larization of interstellar Lyman α radiation triggering biological homochirality” . *MNRAS* 524.2 (Sept. 2023), pp. 2114–2123. doi: 10.1093/mnras/stad1899. arXiv: 2306.12101.
12. Koki Otaki and Masao Mori. “Frequency of the dark matter subhalo collisions and bifurcation sequence arising formation of dwarf galaxies” . *MNRAS* 525.2 (Oct. 2023), pp. 2535–2552. doi: 10.1093/mnras/stad2432. arXiv: 2308.03737 [astro-ph.GA].
13. Hidenobu Yajima, Makito Abe, Hajime Fukushima, Yoshiaki Ono, Yuichi Harikane, et al. “FOR- EVER22: the first bright galaxies with Population III stars at redshifts z $\simeq$ 10-20 and comparisons with JWST data” . *MNRAS* 525.4 (Nov. 2023), pp. 4832–4839. doi: 10.1093/mnras/stad2497. arXiv: 2211.12970 [astro-ph.GA].
14. Naoki Harada, Hidenobu Yajima, and Makito Abe. “FOREVER22: gas and metal outflow from massive galaxies in protocluster regions” . *MNRAS* 525.4 (Nov. 2023), pp. 5868–5879. doi: 10. 1093/mnras/stad2660. arXiv: 2309.05307 [astro-ph.GA].
15. Mutsuko Inoguchi, Takashi Hosokawa, Hajime Fukushima, Kei E. I. Tanaka, Hidenobu Ya- jima, et al. “Observational signatures of forming young massive clusters: continuum emission from dense H II regions” . *MNRAS* 527.2 (Jan. 2024), pp. 3612–3623. doi: 10.1093/mnras/ stad3297. arXiv: 2305.19432 [astro-ph.GA].
16. Yuzhu Cui, Kazuhiro Hada, Tomohisa Kawashima, Motoki Kino, incl. Ken Ohsuga, et al. “Pre- cessing jet nozzle connecting to a spinning black hole in M87” . *Nature* 621.7980 (Sept. 2023),pp. 711–715. doi: 10.1038/s41586-023-06479-6. arXiv: 2310.09015 [astro-ph.HE].
17. Asuka Igarashi, Masao Mori, and Shin’ ya Nitta. “Transonic galactic wind model

including stellar feedbacks and application to outflows in high/low-*z* galaxies" . *PASJ* (Oct. 2023). doi: 10.1093/ pasj/psad065. arXiv: 2310.02780 [astro-ph.GA].

18. Yi Xu, Masami Ouchi, Yuki Isobe, and et al. incl. Hidenobu Yajima. "EMPRESS. XII. Statistics on the Dynamics and Gas Mass Fraction of Extremely Metal-poor Galaxies" . *ApJ* 961.1, 49 (Jan. 2024), p. 49. doi: 10.3847/1538-4357/ad06ab.
19. Erika Ogata, Ken Ohsuga, Hajime Fukushima, and Hidenobu Yajima. "Three-dimensional radiation hydrodynamics simulations of wandering intermediate-mass black holes considering the anisotropic radiation and dust sublimation" . *MNRAS*528.2 (Feb. 2024), pp. 2588–2599. doi: 10.1093/mnras/stae195. arXiv: 2402.00369 [astro-ph. GA].
20. Takuhiro Yuasa and Masao Mori. "Novel hydrodynamic schemes capturing shocks and contact discontinuities and comparison study with existing methods" . *New A* 109, 102208 (July 2024), p.102208. doi: 10.1016/j.newast.2024.102208.
21. M. Drevet Mulard, N. P. H. Nesvadba, M. Meenakshi, D. Mukherjee, A. Wagner, et al. "Star formation in a massive spiral galaxy with a radio-AGN" . *A&A* 676, A35 (Aug. 2023), A35. doi: 10.1051/0004-6361/202245173.
22. Takahiro Ohno, Kazuki Tokuda, and et al. incl. Hajime Fukushima. "An Unbiased CO Survey Toward the Northern Region of the Small Magellanic Cloud with the Atacama Compact Array. II. CO Cloud Catalog" . *ApJ* 949.2, 63 (June 2023), p. 63. doi: 10.3847/1538-4357/accadb. arXiv: 2304.00976 [astro-ph.GA].
23. Takanobu Kirihara, Hajime Susa, Takashi Hosokawa, and Tomoya Kinugawa. "Merger Condi- tions of Population III Protostar Binaries" . *ApJ* 950.2 (June 2023), p. 188. doi: 10.3847/1538- 4357/acd1e0. arXiv: 2305.06843 [astro-ph.SR].
24. R. Ura et al. incl. H. Yajima. "Detections of [C II] 158 μm and [O III] 88 μm in a Local Lyman Continuum Emitter, Mrk 54, and Its Implications to High-redshift ALMA Studies" . *ApJ* 948.1, 3 (May 2023), p. 3. doi: 10.3847/1538-4357/acc530. arXiv: 2303.11036 [astro-ph.GA].

B) 査読無し論文

1. Koki Otaki and Masao Mori. "Collision-induced formation of dark-matter-deficient galaxies" . *Proceedings of the International Astronomical Union* 373 (2023), pp. 147–150.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Yuta Asahina and Ken Ohsuga. "Global Radiation Magnetohydrodynamic Simulations

of Pre- cessing Disk around a Spinning Black Hole" . 7th Asia-Pacific Conference on Plasma Physics (Port Messe Nagoya, Japan, Nov. 12–17, 2023).

2. Kohji Yoshikawa. "Vlasov-Poisson Simulation of Self-grvitating Systems" . The 14th RESCEU symposium / From Large to Small Structures in the Universe (Koshiba Hall, the University of Tokyo, Japan, Oct. 30–Nov. 2, 2023).
3. K. Ohsuga, Y. Asahina, A. Utsumi, A. Inoue, and H.R.Takahashi. "GR-RMHD Simulations of Super-Eddington Flows" . New Frontiers in GRMHD Simulations of Accreting Black Holes (on- line, Apr. 3–6, 2023).
4. K. Ohsuga. "Radiation MHD simulations of super-/near-Eddington accretion flows and out- flows" . Astrophysical Black Holes: A Rapidly Moving Fiels (Hong Kong University, China, June 23–26, 2023).
5. K. Ohsuga, H.R.Takahashi, T. Kawashima, Y. Asahina, A. Utsumi, et al. "Radiation Magneto- hydrodynamics Simulations of Black Hole Accretion Flows and Outflows" . 34th IUPAP Conference on Computational Physics (Kobe International Conference Center, Kobe, Japan, Aug. 4–8, 2023).
6. K. Ohsuga, H.R.Takahashi, T. Kawashima, Y. Asahina, and A. Utsumi. "Numerical simulations of super-Eddington accretion flows" . 32nd Texas Symposium on Relativistic Astrophysics (Shanghai, China, Dec. 11–15, 2023).
7. Hidenobu Yajima. "Formation of the First Bright Galaxies with Pop III stars in Cosmological Simulations and Comparisons with JWST data" . Fake Light Workshop (Flatiron Institute, New York, USA, May 30–June 2, 2023).
8. Kohji Yoshikawa. "Vlasov simulation in 6-dimensional phase space for cosmological neutrinos and its application to astrophysical plasma" . 7th Asia-Pacific Conference on Plasma Physics (Port Messe Nagoya, Japan, Nov. 12–17, 2023).

B) 一般講演

1. Y. Asahina, K. Ueno, and K. Ohsuga. "Machine learning estimation of the Eddington tensor for the simulation of accretion disks around black holes" . Astro AI with Fugaku workshop (University of Tsukuba, Tokyo Campus, Japan, Sept. 11–12, 2023).
2. Y. Asahina. "General Relativistic Radiation MHD Simulations of Precessing Disk around a Spinning Black Hole" . 15th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (Epochal Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Japan, Oct. 2–3, 2023). url: https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/sympo20231002en/.
3. A. Inoue, K. Ohsuga, H. R. Takahashi, and Y. Asahina. "General Relativistic Radiation

MHD simulations of Super-Eddington accretion flows around a magnetized neutron star; modeling of the ULX Pulsars" . 7th Asia-Pacific Conference on Plasma Physics (Port Messe Nagoya, Japan, Nov. 12–17, 2023).

4. H. Fukushima and H. Yajima. "Conditions for young massive star cluster formation" . Protostars and Planets VII (Kyoto International Conference Center, Apr. 10–15, 2023).
5. Hajime Fukushima, Makito Abe, and Hidenobu Yajima. "Radiation hydrodynamics simulations of star cluster formation in high-z galaxies" . The Olympian Symposium, Star formation in the era of JWST (Paralia Katerini, Greece, May 29–June 2, 2023).
6. Takanobu Kirihara, Hidenobu Yajima, and Makito Abe. "Seed BH mass dependency on the BH mass to galactic stellar mass relation" . Osaka-CCA-Pisa mini-ILR workshop (Department of Earth and Space Science (ESS), Osaka University, Osaka, Japan, Nov. 14–15, 2023).
7. K. Otaki and M. Mori. "Study of bifurcation in the collision-induced galaxy formation" . 34th IUPAP Conference on Computational Physics (Kobe International Conference Center, Kobe, Japan, Aug. 4–8, 2023).
8. T. Yuasa and M. Mori. "Godunov DISPH: Density-Independent Smoothed Particle Hydrodynamics with Riemann Solver" . 34th IUPAP Conference on Computational Physics (Kobe Inter- national Conference Center, Kobe, Japan, Aug. 4–8, 2023).
9. M. Yamaguchi, M. Mori, A. Hotta, and K. Otaki. "Formation of the metal gradients in the Andromeda Giant Stellar Stream" . 34th IUPAP Conference on Computational Physics (Kobe Inter- national Conference Center, Kobe, Japan, Aug. 4–8, 2023).
10. Mias Yamaguchi, Masao Mori, Koki Otaki, and Takanobu Kirihara. "Formation of the Andromeda Giant Stellar Stream and the 10 kpc Ring in the Andromeda Galaxy" . 15th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (Epochal Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Japan, Oct. 2–3, 2023). url: https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/sympo20231002en/.
11. Koki Otaki and Masao Mori. "Dwarf galaxy formation induced by dark matter subhalo collisions" . Osaka-CCA-Pisa mini-ILR workshop (Department of Earth and Space Science (ESS), Osaka University, Osaka, Japan, Nov. 14–15, 2023).
12. Yuka Kaneda, Masao Mori, and Koki Otaki. "The origin of the constant central surface density of galactic dark matter halos and a new scaling relation for wide-scale objects" . Osaka-CCA-Pisa mini-ILR workshop (Department of Earth and Space Science (ESS), Osaka University, Osaka, Japan, Nov. 14–15, 2023).

13. Y. Kaneda, M. Masao, A. Burket, K. Otaki, and Y. Miki. “Formation of parallel stellar streams via bifurcation of a single stellar stream and its physical condition” . International Conference on Resolving Galaxy Ecosystems Across All Scales (Hong Kong, SAR China, Dec. 11–15, 2023).
14. M. Yamaguchi, M. Masao, A. Hotta, and K. Otaki. “Formation of the Andromeda giant stream and chemical evolution of the progenitor galaxy” . International Conference on Resolving Galaxy Ecosystems Across All Scales (Hong Kong, SAR China, Dec. 11–15, 2023).
15. M. Mori and S. Tanaka. “Influence of dark matter on the dynamical evolution of satellite galaxies associated with the Galaxy” . International Conference on Resolving Galaxy Ecosystems Across All Scales (Hong Kong, SAR China, Dec. 11–15, 2023).
16. Masao Mori, Ayami Hotta, Takanobu Kirihara, and Koki Otaki. “Galaxy collisions and the stellar streams in the Andromeda Galaxy” . Dark Matter in the Universe: The Present and Future of Galactic Archaeology and Near-field Cosmology (Matsushima Century Hotel, Miyagi, Japan, Mar. 1–3, 2024).
17. Misa Yamaguchi and Masao Mori Takanobu Kirihara. “Chemical evolution of the progenitor galaxy of the Andromeda Giant” . Dark Matter in the Universe: The Present and Future of Galactic Archaeology and Near-field Cosmology (Matsushima Century Hotel, Miyagi, Japan, Mar. 1–3, 2024).
18. Yuka Kaneda, Andreas Burkert, Yohei Miki, Koki Otaki, and Masao Mori. “Formation of parallel stellar streams via collision-induced bifurcation of a single stellar stream” . Dark Matter in the Universe: The Present and Future of Galactic Archaeology and Near-field Cosmology (Mat- sushima Century Hotel, Miyagi, Japan, Mar. 1–3, 2024).
19. E. Ogata, K. Ohsuga, H. Fukushima, and H. Yajima. “Evolution of seed black holes with accretion disks by Bondi-Hoyle-Lyttleton accretion”. ILR kickoff meeting (NAOJ, Japan, May 31–June 2, 2023).
20. S. B. Kobayashi, H. Noda, T. Enoto, T. Kawashima, A. Inoue, et al. “Unraveling the Accretion Flow Structure of Ultra-Luminous X-ray Pulsar NGC 300 ULX-1 with the C3PO Method” . THE X-RAY UNIVERSE 2023 (Athens, Greece, June 13–16, 2023).
21. A. Utsumi, K. Ohsuga, H. R. Takahashi, and Y. Asahina. “General relativistic radiation-MHD simulations of supercritical accretion disk around Kerr-black hole; From weak to strong magnetic field state of the disk” . Astrophysical Black Holes: A Rapidly Moving Fiels (Hong Kong University, China, June 23–26, 2023).
22. E. Ogata, K. Ohsuga, H. Fukushima, and H. Yajima. “Evolution of wandering intermediate-mass black holes in high-z galaxies with 3D radiation hydrodynamics

simulations” . Astrophysical Black Holes: A Rapidly Moving Fiels (Hong Kong University, China, June 23–26, 2023).

23. M. Takahashi, T. Kawashima, and K. Ohsuga. “Possibility of black hole spin estimation with time-variable “crescent-shaped” shadow in M87” . Astrophysical Black Holes: A Rapidly Moving Fiels (Hong Kong University, China, June 23–26, 2023).
24. E. Ogata, K. Ohsuga, H. Fukushima, and H. Yajima. “3D radiation hydrodynamics simulations of wandering black hole with accretion disk in the early universe” . 34th IUPAP Conference on Computational Physics (Kobe International Conference Center, Kobe, Japan, Aug. 4–8, 2023).
25. A. Inoue, K. Ohsuga, H. R. Takahashi, and Y. Asahina. “General Relativistic Radiation Magne- tohydrodynamical simulations of Super-Eddington Accretion Flows onto Magnetized Neutron Stars; Powerful Outflows and Thermal Emission” . 34th IUPAP Conference on Computational Physics (Kobe International Conference Center, Kobe, Japan, Aug. 4–8, 2023).
26. E. Ogata, K. Ohsuga, H. Fukushima, and H. Yajima. “Evolution of wandering seed black holes in early galaxies with 3D radiation hydrodynamics simulation” . East-Asia AGN Workshop 2023 (Kagoshima University, Kagoshima, Japan, Sept. 25–27, 2023).
27. K. Ohsuga. “Structure and Evolution of the Universe Unraveled by Fusion of Simulation and AI” . Astro AI with Fugaku workshop (University of Tsukuba, Tokyo Campus, Japan, Sept. 11– 12, 2023).
28. E. Ogata, K. Ohsuga, and H. Fukushima. “3D radiation hydrodynamics simulations of wandering seed black holes” . Black Holes on Broadway: The Next Generation of AGN Models in Galaxy Formation (Simons Foundation, USA, Dec. 4–7, 2023).
29. Kenta Soga. “Coevolution of protogalaxies and AGNs during the cosmic reionization era” . ILR kickoff meeting (NAOJ, Japan, May 31–June 2, 2023). url: https://sites.google.com/ view/kickoffmeeting2023ilr/home.
30. H. Yajima. “Radiative transfer simulations and machine learning for near-infrared imaging of the human head” . 15th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multi- disciplinary Computational Sciences (Epochal Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Japan, Oct. 2–3, 2023). url: https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/sympo20231002en/.
31. Hidenobu Yajima. “Dusty galaxies and Massive black holes in protocluster regions” . Osaka-CCA-Pisa mini-ILR workshop (Department of Earth and Space Science (ESS), Osaka University, Osaka, Japan, Nov. 14–15, 2023).

32. Hidenobu Yajima. “Cosmological simulations of the first galaxies with population III stars and their UV and Infrared properties” . Resolving the Extragalactic Universe with ALMA and JWST (Waseda University, Japan, Nov. 6–10, 2023).

（3）国内学会・研究会発表

A）招待講演

1. 朝比奈雄太 , 大須賀健 , 内海碧人 , 上野航介 , and 髙橋博之 . “ブラックホール降着円盤の数値シミュレーション” . 2023(令和 5) 年度 国立天文台 CfCA ユーザーズミーティング (国立天文台 , Jan. 29–30, 2024).
2. 朝比奈雄太 , 大須賀健 , 内海碧人 , 上野航介 , and 髙橋博之 . “ブラックホール降着円盤の数値シミュレーション” . ブラックホール大研究会 星質量から超巨大ブラックホールまで (御殿場高原 時之栖 , Feb. 28–Mar. 2, 2024).
3. 福島肇 and 矢島秀伸 . “星団形成におけるフィードバック過程” . 2023(令和 5) 年度 国立天文台 CfCA ユーザーズミーティング (国立天文台 , Jan. 29–30, 2024).
4. 大須賀健 , 髙橋博之 , 川島朋尚 , 朝比奈雄太 , 内海碧人 , et al. “降着円盤の輻射磁気流体シミュレーション ; これまでの成果と今後の発展” .【MHD2023】宇宙プラズマの活動性〜天体形成から高エネルギー現象まで〜 (千葉大学 , Aug. 21–23, 2023).
5. 大須賀健 , 髙橋博之 , 川島朋尚 , 朝比奈雄太 , 内海碧人 , et al. “シミュレーションによるブラックホール降着円盤理論の進展” . シミュレーション天文学のこれまでとこれから - ハードウェア・アプリケーション・サイエンス - (神戸大学 , Sept. 4–6, 2023).
6. 大須賀健 . “シミュレーションと AI の融合で解明する宇宙の構造と進化” . 第 6 回 HPCI コンソーシアムシンポジウム (品川グランドセントラルタワー , Oct. 25–25, 2023).
7. 野村真理子 , 大須賀健 , Chris Done, 大向一行 , 水本岬希 , et al. “AGN アウトフローと SMBH の進化” . 第 36 回理論懇シンポジウム (弘前大学 , Dec. 25–27, 2023).
8. 大須賀健 . “機械学習、観測、シミュレーションの融合による新たな天文学にむけて” . 日本天文学会 2024 年春季年会 (東京大学 , Mar. 11–15, 2024).
9. 野村真理子 , 大須賀健 , Chris Done, 大向一行 , 水本岬希 , et al. “AGN アウトフローの理論研究と SMBH の進化” . ブラックホール大研究会 星質量から超巨大ブラックホールまで (御殿場高原 時之栖 , Feb. 28–Mar. 2, 2024).
10. 矢島秀伸 . “超遠方銀河の形成過程 : 最新の理論と観測レビュー” . 初代星初代銀河研究会 2023 (北海道大学 , Nov. 20–22, 2023).
11. 吉川耕司 . “重力多体系の Vlasov シミュレーションとその先” . 2023 年度第 2 回計算科学フォーラム (オンライン , Mar. 22–22, 2024). url: https://hpcic-kkf.com/forum/2023/kkf_02/.

B） その他の発表

1. 朝比奈雄太 and 大須賀健 . “歳差運動する降着円盤の一般相対論的輻射磁気流体シミュレーション” . 山田研究会「宇宙における降着現象 〜活動性・多様性の源〜」(京都大学 / オンライン , June 2–5, 2023).
2. 朝比奈雄太 and 大須賀健 . “歳差運動する降着円盤の一般相対論的輻射磁気流体シミュレーション” .【MHD2023】宇宙プラズマの活動性〜天体形成から高エネルギー現象まで〜 (千葉大学 , Aug. 21–23, 2023).
3. 朝比奈雄太 and 大須賀健 . “強輻射場を考慮した歳差運動する降着円盤計算” . 宇宙天体形成史〜初代星から生命の起源まで〜 (筑波大学 , Sept. 2–2, 2023).
4. 朝比奈雄太 . “ブラックホール降着円盤の大局的・長時間計算に向けた Local Adaptive Time Stepping 法の実装” . 日本天文学会 2023 年秋季年会 (名古屋大学 , Sept. 20–22, 2023).
5. 朝比奈雄太 . “歳差運動する降着円盤の長時間計算に向けた Local Adaptive Time Stepping 法の実装” . 第３６回理論懇シンポジウム (弘前大学 , Dec. 25–27, 2023).
6. 朝比奈雄太 , 波多野智 , 大須賀健 , 矢島秀伸 , and 福島肇 . “Physics Informed Neural Network を用いた陰解法の初期値推定” . 日本天文学会 2024 年春季年会 (東京大学 , Mar. 11–15,2024).
7. 木村和貴 , 細川隆史 , 杉村和幸 , 福島肇 , and 大向一行 . “宇宙初期の超大質量星形成における星周円盤と原始星構造の共進化” . 日本天文学会 2023 年秋季年会 (名古屋大学 , Sept. 20–22, 2023).
8. 野崎信吾 , 福島肇 , and 町田正博 . “乱流中の異なる星形成環境での分子雲コアの形成・進化” . 日本天文学会 2023 年秋季年会 (名古屋大学 , Sept. 20–22, 2023).
9. 松本健 et al. incl. 福島肇 . “ALMA ACA による小マゼラン雲超広域 CO 探査 (4):N83/N84/N86 領域 12CO,13CO (J=2–1) 輝線データ解析” . 日本天文学会 2023 年秋季年会 (名古屋大学 , Sept. 20–22, 2023).
10. 福島肇 and 矢島秀伸 . “星団形成における星風の影響” . 初代星初代銀河研究会 (北海道大学 , Nov. 20–22, 2023).
11. 木村和貴 , 細川隆史 , 杉村和幸 , 福島肇 , and 大向一行 . “超大質量星形成における原始星構造と星周円盤の共進化” . 初代星初代銀河研究会 (北海道大学 , Nov. 20–22, 2023).
12. 福島肇 and 矢島秀伸 . “高赤方偏移銀河円盤シミュレーション” . 第３６回理論懇シンポジウム (弘前大学 , Dec. 25–27, 2023).
13. 松本凛 and 福島肇 . “原始惑星系円盤への外部輻射の影響” . 第３６回理論懇シンポジウム (弘前大学 , Dec. 25–27, 2023).
14. 福島肇 and 矢島秀伸 . “星風による金属量進化を考慮した銀河円盤シミュレーショ

ン”. 次世代のサブミリ波観測とシミュレーションの計画検討会（フォレスト箱根, Feb. 5–7,2024).

15. 福島肇, 矢島秀伸, and 梅村雅之. “星形成雲における ラインマンアルファ円偏光波生成”. 第 12 回宇宙における生命ワークショップ (TKP 秋葉原カンファレンスセンター, Feb. 16–17, 2024).
16. 福島肇 and 矢島秀伸. “高密度星団形成シミュレーション”. ブラックホール大研究会 ~星質量から超巨大ブラックホールまで ~（御殿場高原ホテル, Feb. 28–Mar. 2, 2024).
17. 福島肇 and 矢島秀伸. “大質量星団形成における星風による金属量進化”. 日本天文学会 2024 年春季年会（東京大学, Mar. 11–15, 2024).
18. 木村和貴, 細川隆史, 杉村和幸, 福島肇, and 大向一行. “超大質量星形成における星周円盤形成後の原始星進化過程”. 日本天文学会 2024 年春季年会（東京大学, Mar. 11–15, 2024).
19. 桐原崇亘, 矢島秀伸, and 安部牧人. “銀河とブラックホールの共進化過程における種ブラックホール質量の影響”. 日本天文学会 2023 年秋季年会（名古屋大学, Sept. 20–22, 2023).
20. 小上樹 et al. incl 桐原崇亘. “すばる望遠鏡 /HSC 深観測による M33 恒星ハローの探査”. 日本天文学会 2023 年秋季年会（名古屋大学, Sept. 20–22, 2023).
21. 桐原崇亘, 矢島秀伸, and 安部牧人. “Effect of seed black hole mass on the co-evolution process of galaxies and black holes”. Galaxy-IGM workshop（アクトシティ浜松, July 31–Aug. 4,2023).
22. 仲野友将, 矢島秀伸, and 桐原崇亘. “銀河衝突過程における多重 AGN 発現機構の解明”. Galaxy-IGM workshop（アクトシティ浜松, July 31–Aug. 4, 2023).
23. 桐原崇亘, 矢島秀伸, and 安部牧人. “銀河とブラックホールの共進化過程における種ブラックホール質量の影響”. 初代星初代銀河研究会（北海道大学, Nov. 20–22, 2023).
24. 桐原崇亘. “Merger Conditions of Population III Protostar Close Binaries”. 宇宙史研究センター 2023 年度第 2 回構成員会議・成果報告会（筑波大学, Dec. 18–18, 2023).
25. 桐原崇亘, 矢島秀伸, and 安部牧人. “銀河とブラックホールの共進化過程における種ブラックホール質量の影響”. 第 36 回理論懇シンポジウム（弘前大学, Dec. 25–27, 2023).
26. 桐原崇亘, 矢島秀伸, and 安部牧人. “銀河とブラックホールの共進化過程における種ブラックホール質量の影響”. ブラックホール大研究会 ~ 星質量から超巨大ブラックホールまで ~（御殿場高原ホテル, Feb. 28–Mar. 2, 2024).

27. 小上樹 et al. incl. 森正夫 and 桐原崇亘 . “The nature of M31/M33 stellar halos explored by Subaru/HSC & PFS survey” . 日本天文学会 2024 年春季年会 (東京大学 , Mar. 11–15, 2024).
28. 森正夫 , 堀田彩水 , 山口未沙 , 大滝恒輝 , and 桐原崇亘 . “Galaxy collisions and stellar streams in the Andromeda Galaxy: Once and future in Andromeda” . 日本天文学会 2024 年春季年会 (東京大学 , Mar. 11–15, 2024).
29. 山口未沙 , 森正夫 , and 桐原崇亘 . “Galaxy collisions and stellar streams in the Andromeda Galaxy: Chemical evolution of the progenitor galaxy of the Andromeda Giant Southern Stream” . 日本天文学会 2024 年春季年会 (東京大学 , Mar. 11–15, 2024).
30. Liang Yongming et al. incl. 矢島秀伸 and 桐原崇亘 . “Galaxy collisions and stellar streams in the Andromeda Galaxy: Once and future in Andromeda” . 日本天文学会 2024 年春季年会 (東京大学 , Mar. 11–15, 2024).
31. 大滝恒輝 and 森正夫 . “Dark Matter Subhalo 衝突と Missing Satellite 問題” . 日本天文学会 2023 年秋季年会 (名古屋大学 , Sept. 20–22, 2023).
32. 山口未沙 , 森正夫 , 堀田彩水 , and 大滝恒輝 . “Galaxy collisions and metal gradients of the Andromeda Giant Southern Stream” . 日本天文学会 2023 年秋季年会 (名古屋大学 , Sept. 20–22, 2023).
33. 金田優香 , 森正夫 , Andreas Burkert, and 三木洋平 . “Stellar stream の分裂可能性と parallel stellar streams の形成” . 日本天文学会 2023 年秋季年会 (名古屋大学 , Sept. 20–22, 2023).
34. 湯浅拓宏 and 森正夫 . “Godunov SPH 法の改良 : 接触不連続面での問題解決を目指して” . 日本流体力学会 2023 年会 (東京農工大学 , Sept. 20–22, 2023).
35. 大滝恒輝 and 森正夫 . “サブハロー衝突による誘発的矮小銀河形成シミュレーション” . シミュレーション天文学のこれまでとこれから (神戸大学 , Sept. 4–6, 2023).
36. 湯浅拓宏 and 森正夫 . “Godunov DISPH 法の詳細と性能及び SPH 法の拡張について” . シミュレーション天文学のこれまでとこれから (神戸大学 , Sept. 4–6, 2023).
37. 古谷田和真 and 森正夫 . “衛星銀河の衝突による銀河円盤ガスの流体力学不安定性の解析” . 天体形成研究会 (筑波大学 , Nov. 17–18, 2023).
38. 大滝恒輝 and 森正夫 . “ダークマターサブハロー衝突と誘発的矮小銀河形成” . 天体形成研究会 (筑波大学 , Nov. 17–18, 2023).
39. 山口未沙 and 森正夫 . “金属量から探る矮小銀河の Galactic Habitable Zone 銀河衝突を経験した銀河の化学進化を踏まえて ” . 天体形成研究会 (筑波大学 , Nov. 17–18, 2023).
40. 大滝恒輝 and 森正夫 . “ダークマターサブハロー衝突による誘発的矮小銀河形成” .

第３ ６回理論懇シンポジウム（弘前大学 , Dec. 25–27, 2023).

41. 金田優香 , 森正夫 , and 大滝恒輝 . “カスプ - コア遷移の効果を組み込んだダークマターハローのスケーリング則”. 第３６回理論懇シンポジウム（弘前大学 , Dec. 25–27, 2023).
42. 山口未沙 , 森正夫 , 堀田彩水 , and 大滝恒輝 . “Formation of the Andromeda Giant Southern Stream and chemical evolution of the progenitor galaxy”. 第３６回理論懇シンポジウム（弘前大学 , Dec. 25–27, 2023).
43. 古谷田和真 and 森正夫 . “矮小銀河と銀河円盤の衝突における流体力学相互作用”. 第３ ６回理論懇シンポジウム（弘前大学 , Dec. 25–27, 2023).
44. 金田優香 , Andreas Burkert, 大滝恒輝 , 三木洋平 , and 森正夫 . “Bifurcation of a stellar stream by a collision with a dark satellite or wandering black hole”. すばる PFS が拓く銀河・銀河系の形成進化：サテライトワークショップ（国立天文台 , Mar. 9–10, 2024).
45. 金田優香 , Andreas Burkert, 大滝恒輝 , 三木洋平 , and 森正夫 . “Bifurcation of a stellar stream by a collision with a dark satellite or wandering black hole”. 日本天文学会 2024 年春季年会（東京大学 , Mar. 11–15, 2024).
46. 仲野友将 , 矢島秀伸 , and 桐原崇亘 . “銀河衝突過程における多重 AGN 発現機構の解明”. 初代星初代銀河研究会（北海道大学 , Nov. 20–22, 2023).
47. 大須賀健 . “「富岳」成果創出加速プログラムの今後：シミュレーションと AI の融合で解明する宇宙の構造と進化”. 日本地球惑星科学連合 2023 年大会（幕張メッセ / オンライン , May 21–26, 2023).
48. 内海碧人 , 大須賀健 , 髙橋博之 , and 朝比奈雄太 . “カー・ブラックホール周りにおける超臨界降着円盤の一般相対論的輻射磁気流体シミュレーション”. 山田研究会「宇宙における降着現象 ～活動性・多様性の源～」（京都大学 / オンライン , June 2–5, 2023).
49. 尾形絵梨花 , 大須賀健 , 福島肇 , and 矢島秀伸 . “Dusty-gas 中での中質量ブラックホール降着円盤への Bondi-Hoyle-Lyttleton 降着過程”. 山田研究会「宇宙における降着現象 ～活動性・多様性の源～」（京都大学 / オンライン , June 2–5, 2023).
50. 井上壮大 , 大須賀健 , 髙橋博之 , and 朝比奈雄太 . “磁化中性子星への超臨界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”. 山田研究会「宇宙における降着現象～活動性・多様性の源～」（京都大学 / オンライン , June 2–5, 2023).
51. 高橋幹弥 , 川島朋尚 , and 大須賀健 . “M87 における三日月状シャドウによるブラックホールスピンの推定可能性”. 山田研究会「宇宙における降着現象～活動性・多様性の源～」（京都大学 / オンライン , June 2–5, 2023).
52. 五十嵐太一 , 高橋博之 , 大須賀健 , 松本洋介 , and 松元亮治 . “AGN 降着流における

状態遷移の輻射磁気流体モデル”. 山田研究会「宇宙における降着現象〜活動性・多様性の源〜」(京都大学 / オンライン , June 2–5, 2023).

53. 川島朋尚 , 大須賀健 , and 高橋博之 . “Lense-Thirring 歳差を伴う降着流および相対論的ジェットの多波長放射特性”. 山田研究会「宇宙における降着現象〜活動性・多様性の源〜」(京都大学 / オンライン , June 2–5, 2023).
54. 恒任優 , 嶺重慎 , 川島朋尚 , 大須賀健 , 秋山和徳 , et al. “偏光画像から探る超大質量ブラックホール降着円盤ージェットの磁場構造”. 山田研究会「宇宙における降着現象〜活動性・多様性の源〜」(京都大学 / オンライン , June 2–5, 2023).
55. 芳岡尚悟 , 嶺重慎 , 大須賀健 , 川島朋尚 , and 北木孝明 . “超臨界降着流の大局的アウトフロー構造と輻射特性”. 山田研究会「宇宙における降着現象 〜活動性・多様性の源〜」(京都大学 / オンライン , June 2–5, 2023).
56. 井上壮大 , 大須賀健 , 髙橋博之 , and 朝比奈雄太 . “双極子磁場を有する中性子星への超臨界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”.【MHD2023】宇宙プラズマの活動性〜天体形成から高エネルギー現象まで〜 (千葉大学 , Aug. 21–23, 2023).
57. 川島朋尚 , 大須賀健 , 高橋博之 , and 浅野勝晃 . “一般相対論的多波長輻射輸送計算そしてマルチメッセンジャー研究へ ”.【MHD2023】宇宙プラズマの活動性〜天体形成から高エネルギー現象まで〜 (千葉大学 , Aug. 21–23, 2023).
58. 井上壮大 , 大須賀健 , 髙橋博之 , and 朝比奈雄太 . “磁化中性子星への超臨界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”. 宇宙天体形成史〜初代星から生命の起源まで〜 (筑波大学 , Sept. 2–2, 2023).
59. 尾形絵梨花 , 大須賀健 , 福島肇 , and 矢島秀伸 . “Dusty-gas 中を漂う種 BH のガス降着過程：輻射場の非等方性”. 宇宙天体形成史〜初代星から生命の起源まで〜 (筑波大学 ,Sept. 2–2, 2023).
60. 高橋幹弥 , 川島朋尚 , and 大須賀健 . “時間変動する三日月状シャドウと輝度重心解析によるブラックホールスピンの推定”. 宇宙天体形成史〜初代星から生命の起源まで〜 (筑波大学 , Sept. 2–2, 2023).
61. 井上壮大 , 大須賀健 , 髙橋博之 , and 朝比奈雄太 . “磁化中性子星への超臨界降着流の一般相対論的輻射磁気流体力学計算”. 〜中性子星の観測と理論〜研究活性化ワークショップ 2023 (京都大学 , Sept. 6–8, 2023).
62. 尾形絵梨花 , 大須賀健 , 福島肇 , and 矢島秀伸 . “初期宇宙での Bondi-Hoyle-Lyttleton 降着機構による中質量ブラックホールの進化”. 日本天文学会 2023 年秋季年会 (名古屋大学 ,Sept. 20–22, 2023).
63. 竹林晃大 , 大須賀健 , and 川島朋尚 . “ブラックホール周囲の構造解明に向けたコンプトン散乱を考慮した一般相対論的偏光輻射輸送計算コードの開発”. 日本天文学会

2023 年秋季年会 (名古屋大学 , Sept. 20–22, 2023).

64. 高橋幹弥 , 川島朋尚 , and 大須賀健 . “時間変動する三日月状シャドウと輝度重心解析によるブラックホールスピンの推定” . 日本天文学会 2023 年秋季年会 (名古屋大学 ,Sept. 20–22, 2023).
65. 小林翔悟 , 野田博文 , 榎戸輝揚 , 川島朋尚 , 井上壮大 , et al. “ULX パルサー NGC 300 ULX-1 の X 線スペクトルを構成する放射成分の抽出” . 日本天文学会 2023 年秋季年会 (名古屋大学 , Sept. 20–22, 2023).
66. 川島朋尚 , 大須賀健 , and 高橋博之 . “Lense-Thirring 歳差を伴う降着流・ジェットからの多波長放射の時間変動解析” . 日本天文学会 2023 年秋季年会 (名古屋大学 , Sept. 20–22,2023).
67. 中澤知洋 and JEDI WG. “JEDI(仮) のミッションデザイン” . 日本天文学会 2023 年秋季年会 (名古屋大学 , Sept. 20–22, 2023).
68. 竹田麟太郎 , 大須賀健 , and 高橋労太 . “相対論的流体中の多重散乱光子が作る輻射強度分布の解析解” . 日本天文学会 2023 年秋季年会 (名古屋大学 , Sept. 20–22, 2023).
69. 芳岡尚悟 , 嶺重慎 , 大須賀健 , and 川島朋尚 . “大質量ブラックホールにおける超臨界降着流のアウトフローと輻射特性” . 日本天文学会 2023 年秋季年会 (名古屋大学 , Sept. 20–22, 2023).
70. 上野航介 , 朝比奈雄太 , 大須賀健 , 矢島秀伸 , and 福島肇 . “機械学習を用いたエディントンテンソルの推定” . 日本天文学会 2023 年秋季年会 (名古屋大学 , Sept. 20–22, 2023).
71. 島田悠愛 , 大須賀健 , 髙橋博之 , and 朝比奈雄太 . “低角運動量ガスの超臨界降着流における降着衝撃波の調査” . 日本天文学会 2023 年秋季年会 (名古屋大学 , Sept. 20–22, 2023).
72. 井上壮大 , 大須賀健 , 髙橋博之 , and 朝比奈雄太 . “磁化中性子星への超臨界降着流によるアウトフロー ; 噴出角度の四重極子磁場強度依存性について” . 日本天文学会 2023 年秋季年会 (名古屋大学 , Sept. 20–22, 2023).
73. 尾形絵梨花 , 大須賀健 , and 福島肇 . “遠方宇宙における超大質量ブラックホールの起源 : 浮遊する種ブラックホールの進化” . 初代星・初代銀河研究会 2023 (北海道大学 ,Nov. 20–22, 2023).
74. 高橋幹弥 , 川島朋尚 , and 大須賀健 . “観測イメージの時間変動を用いたブラックホールスピンの推定” . 天体形成研究会 (筑波大学 , Nov. 17–18, 2023).
75. 内海碧人 , 大須賀健 , 髙橋博之 , and 朝比奈雄太 . “カー・ブラックホール周りにおける超臨界降着円盤の一般相対論的輻射磁気流体シミュレーション エネルギー解放機構 とブラックホールスピンの進化 ” . 天体形成研究会 (筑波大学 , Nov. 17–18,

2023).

76. 井上壮大 , 大須賀健 , 髙橋博之 , and 朝比奈雄太 . “磁化中性子星への超臨界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 (筑波大学 , Nov. 17–18,2023).
77. 竹林晃大 , 大須賀健 , and 川島朋尚 . “コンプトン散乱を考慮した一般相対論的偏光輻射輸送計算コードの開発” . 天体形成研究会 (筑波大学 , Nov. 17–18, 2023).
78. 島田悠愛 , 大須賀健 , 髙橋博之 , and 朝比奈雄太 . “降着円盤を持たない超高光度 X 線源はあるのか ?: 低角運動量ガスによる超臨界降着流の一般相対論的輻射磁気流体計算” . 天体形成研究会 (筑波大学 , Nov. 17–18, 2023).
79. 竹田麟太郎 , 大須賀健 , and 高橋労太 . “相対的流体中での散乱光子が作る輻射強度分布の解析解” . 天体形成研究会 (筑波大学 , Nov. 17–18, 2023).
80. 黒田裕太郎 , 大須賀健 , 野村真理子 , and 渡會兼也 . “降着円盤の光度変動を考慮したラインフォース駆動型円盤風の研究” . 天体形成研究会 (筑波大学 , Nov. 17–18, 2023).
81. 大須賀健 . “シミュレーションと AI の融合で解明する宇宙の構造と進化” . 富岳成果創出加速基礎科学合同シンポジウム (筑波大学東京キャンパス , Dec. 18–20, 2023).
82. 高橋幹弥 , 川島朋尚 , and 大須賀健 . “時間変動する観測イメージを用いたブラックホールスピンの推定” . 第 36 回理論懇シンポジウム (弘前大学 , Dec. 25–27, 2023).
83. 尾形絵梨花 , 大須賀健 , and 福島肇 . “初期宇宙の dusty-gas 中を浮遊する種ブラックホールの進化” . 第 36 回理論懇シンポジウム (弘前大学 , Dec. 25–27, 2023).
84. 竹林晃大 , 大須賀健 , and 川島朋尚 . “ブラックホール周囲の構造解明に向けたコンプトン散乱を考慮した一般相対論的偏光輻射輸送計算コードの開発” . 第 36 回理論懇シンポジウム (弘前大学 , Dec. 25–27, 2023).
85. 竹田麟太郎 , 大須賀健 , and 高橋労太 . “相対論的流体中での散乱光子が作る輻射強度分布の解析解” . 第 36 回理論懇シンポジウム (弘前大学 , Dec. 25–27, 2023).
86. 上野航介 , 朝比奈雄太 , 大須賀健 , 矢島秀伸 , and 福島肇 . “機械学習を用いたエディントンテンソルの推定” . 第 36 回理論懇シンポジウム (弘前大学 , Dec. 25–27, 2023).
87. 黒田裕太郎 , 大須賀健 , and 野村真理子 . “降着円盤の光度変動を考慮したラインフォース駆動型円盤風の研究” . 第 36 回理論懇シンポジウム (弘前大学 , Dec. 25–27, 2023).
88. 小川拓未 , 大須賀健 , 高橋博之 , 朝比奈雄太 , and 川島朋尚 . “輻射非効率降着流中の電子・イオン温度に対する輻射冷却の影響調査” . 第 36 回理論懇シンポジウム (弘前大学 ,Dec. 25–27, 2023).
89. 井上壮大 , 大須賀健 , 髙橋博之 , and 朝比奈優太 . “超高光度 X 線パルサーの一般相

対論的輻射磁気流体力学 シミュレーション”. 第 36 回理論懇シンポジウム (弘前大学 , Dec. 25–27, 2023).

90. 尾形絵梨花 , 大須賀健 , and 福島肇 . “ 3 次元輻射流体計算で探る超大質量ブラックホールの起源：浮遊する種ブラックホールへの超臨界降着過程”. ブラックホール大研究会星質量から超巨大ブラックホールまで (御殿場高原 時之栖 , Feb. 28–Mar. 2, 2024).
91. 上野航介 , 朝比奈雄太 , 大須賀健 , 矢島秀伸 , and 福島肇 . “機械学習を用いたエディントンテンソルの推定”. ブラックホール大研究会 星質量から超巨大ブラックホールまで (御殿場高原 時之栖 , Feb. 28–Mar. 2, 2024).
92. 竹林晃大 , 大須賀健 , and 川島朋尚 . “相対論的ジェット中におけるコンプトン散乱を考慮した一般相対論的偏光輻射輸送計算”. ブラックホール大研究会 星質量から超巨大ブラックホールまで (御殿場高原 時之栖 , Feb. 28–Mar. 2, 2024).
93. 黒田裕太郎 , 大須賀健 , and 野村真理子 . “降着円盤の光度変動を考慮したラインフォース駆動型円盤風の研究”. ブラックホール大研究会 星質量から超巨大ブラックホールまで (御殿場高原 時之栖 , Feb. 28–Mar. 2, 2024).
94. 内海碧人 , 大須賀健 , 髙橋博之 , 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で探る、カー・ブラックホール周りにおける超臨界降着円盤のエネルギーと物質の流れ”. ブラックホール大研究会 星質量から超巨大ブラックホールまで (御殿場高原 時之栖 , Feb. 28–Mar. 2, 2024).
95. 高橋幹弥 , 川島朋尚 , and 大須賀健 . “時間変動する観測イメージを用いたブラックホールスピンの推定”. ブラックホール大研究会 星質量から超巨大ブラックホールまで (御殿場高原 時之栖 , Feb. 28–Mar. 2, 2024).
96. 小川拓未 , 朝比奈雄太 , 大須賀健 , 髙橋博之 , and 川島朋尚 . “放射冷却を考慮した 2 温度計算による輻射非効率円盤の温度構造の解明”. ブラックホール大研究会 星質量から超巨大ブラックホールまで (御殿場高原 時之栖 , Feb. 28–Mar. 2, 2024).
97. 井上壮大 , 大須賀健 , 髙橋博之 , and 朝比奈雄太 . “四重極子磁場を有する中性子星への超臨界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”. ブラックホール大研究会 星質量から超巨大ブラックホールまで (御殿場高原 時之栖 , Feb. 28–Mar. 2, 2024).
98. 恒任優 , 川島朋尚 , 大須賀健 , 嶺重慎 , Ramesh Narayan, et al. “偏光反転から探る、ブラックホール付近の非熱的電子”. ブラックホール大研究会 星質量から超巨大ブラックホールまで (御殿場高原 時之栖 , Feb. 28–Mar. 2, 2024).
99. 川島朋尚 , 大須賀健 , and 髙橋博之 . “レンズ - シリング歳差運動を伴うブラックホール降着流と相対論的ジェットの多波長放射特性”. ブラックホール大研究会 星質量から超巨大ブラックホールまで (御殿場高原 時之栖 , Feb. 28–Mar. 2, 2024).

100. 尾形絵梨花 , 大須賀健 , and 福島肇 . “ 3 次元輻射流体計算で探る種ブラックホールへの Bondi-Hoyle-Lyttleton 降着機構：非等方輻射場中での超臨界降着” . 2023(令和 5) 年度国立天文台 CfCA ユーザーズミーティング (国立天文台 , Jan. 29–30, 2024).
101. 内海碧人 , 大須賀健 , 髙橋博之 , and 朝比奈雄太 . “General relativistic radiation-MHD simu- lations of supercritical accretion disks around Kerr-black holes” . 2023(令和 5) 年度 国立天文台 CfCA ユーザーズミーティング (国立天文台 , Jan. 29–30, 2024).
102. 黒田裕太郎 , 大須賀健 , and 野村真理子 . “降着円盤の光度変動を考慮したラインフォース駆動型円盤風の研究”. 2023(令和 5) 年度 国立天文台 CfCA ユーザーズミーティング (国立天文台 , Jan. 29–30, 2024).
103. 上野航介 , 朝比奈雄太 , 大須賀健 , 矢島秀伸 , and 福島肇 . “機械学習を用いたエディントンテンソルの推定” . 2023(令和 5) 年度国立天文台 CfCA ユーザーズミーティング (国立天文台 , Jan. 29–30, 2024).
104. 川島朋尚 , 大須賀健 , and 高橋博之 . “Lense-Thirring 歳差運動を伴うブラックホール降着流と相対論的ジェットの多波長放射特性” . 2023(令和 5) 年度 国立天文台 CfCA ユーザーズミーティング (国立天文台 , Jan. 29–30, 2024).
105. 川島朋尚 , 大須賀健 , and 高橋博之 . “Lense-Thirring 歳差運動を伴うブラックホール降着流と相対論的ジェットの多波長放射特性” . ブラックホール磁気圏研究会 2024 (苫小牧市文化会館 , Mar. 26–28, 2024).
106. 中澤知洋 , JEDI ミッション検討チーム , and incl. 大須賀健 . “激変する宇宙をスクープする JEDI(仮称) のミッションデザイン” . 日本天文学会 2024 年春季年会 (東京大学 , Mar. 11–15, 2024).
107. 上野航介 , 朝比奈雄太 , 大須賀健 , 矢島秀伸 , and 福島肇 . “機械学習を用いたエディントンテンソルの推定” . 日本天文学会 2024 年春季年会 (東京大学 , Mar. 11–15, 2024).
108. 竹林晃大 , 大須賀健 , and 川島朋尚 . “相対論的ジェット中におけるコンプトン散乱を考慮した一般相対論的偏光輻射輸送計算” . 日本天文学会 2024 年春季年会 (東京大学 ,Mar. 11–15, 2024).
109. 島田悠愛 , 大須賀健 , 髙橋博之 , 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低角運動降着の研究” . 日本天文学会 2024 年春季年会 (東京大学 , Mar. 11–15, 2024).
110. 黒田裕太郎 , 大須賀健 , and 野村真理子 . “降着円盤の光度変動を考慮したラインフォース駆動型円盤風の研究” . 日本天文学会 2024 年春季年会 (東京大学 , Mar. 11–15, 2024).
111. 恒任優 , 川島朋尚 , 大須賀健 , and 嶺重慎 . “活動銀河核ジェット根元の偏光フリッ

プ・反転から探る非熱的電子”. 日本天文学会 2024 年春季年会 (東京大学 , Mar. 11–15, 2024).

112. 曽我健太 and 矢島秀伸 . “近赤外円偏光波によるがん診断へ向けた大規模数値シミュレーション”. Optics and Photonics Japan 2023 (北海道大学 , Nov. 27–29, 2023).

113. 矢島秀伸 . “種族 III 星が混在する初代銀河の形成過程”. 日本天文学会 2023 年秋季年会 (名古屋大学 , Sept. 20–22, 2023).

114. 矢島秀伸 , 安部牧人 , 曽我健太 , 梅村雅之 , and 星詳子 . “外傷性脳出血の AI 診断に向けた輻射輸送シミュレーションによるデータベースの構築”. Optics and Photonics Japan 2023 (北海道大学 , Nov. 27–29, 2023).

（4）著書・解説記事等

1. 松本倫明, 大須賀健, and 須佐元. 輻射電磁流体シミュレーションの基礎. 日本評論社, Jan. 2024, pp. 1–392.

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）】

- 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. 大須賀健 . 日本天文学会 2024 年春季年会企画セッション開催：「機械学習による天文学」(東京大学 , Mar. 11–12, 2024).
2. 朝比奈雄太 , 梅村雅之 , 大須賀健 , 小川拓未 , 小幡真弓 , et al. 研究会開催：「ブラックホール大研究会 ~ 星質量から超巨大ブラックホールまで ~」(御殿場高原ホテル , Feb. 28–Mar. 2, 2024).
3. K. Ohsuga. 研究会開催：「34th IUPAP Conference on Computational Physics」(Kobe Interna- tional Conference Center, Kobe, Japan, Aug. 4–7, 2023). url: https://ccp2023.jp.
4. 福島肇 . 研究会開催:「初代星・初代銀河研究会２０２３」(北海道大学 , クラーク会館 , Nov.20–22,2023). url: https://fukushimahj.github.io/FSFG2023/.
5. K. Ohsuga. 研究会開催：「Workshop: Astro AI with Fugaku」(Univ. of Tsukuba, Tokyo Campus, Japan, Sept. 11–12, 2023). url: https://cd3.ipmu.jp/fugakuAI/.
6. 大須賀健 . 研究会開催:「成果創出加速 基礎科学合同シンポジウム」(筑波大学東京キャ

ンパス , Dec. 18–20, 2023).

7. 矢島秀伸 . 研究会開催 (CCS 主催):「Galaxy-IGM workshop 2023」(浜松アクトシティ , July 31–Aug. 4, 2023).
8. 矢島秀伸 and 桐原崇亘 . 研究会開催 :「次世代のサブミリ波観測とシミュレーションの計画検討会」(計算科学研究センター主催) (フォレスト箱根 , Feb. 5–7, 2024).
9. 大須賀健 and 矢島秀伸 . 研究会開催 :「宇宙天体形成史〜初代星から生命の起源まで〜」(CCS ワークショップ室 , Sept. 2–2, 2023).

9. 管理・運営

【組織運営や支援業務の委員・役員の実績】

• 大須賀健

学内

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 共同利用委員会委員
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
プラズマ研究センター 運営委員会委員
理工学群物理学類 3 年担任
総合学域群 アカデミックアドバイザー

学外

日本天文学会代議員
計算基礎科学連携拠点 (JICFuS) 副拠点長
「富岳」成果創出加速プログラム「シミュレーションと AI の融合で解明する宇宙の構造と進化」代表
神戸大学大学院理学研究科付属惑星科学研究センター協力研究員

• 森正夫

人間総合科学学術院教育学 学位プログラム兼任
理工学群長候補者及び副学群長候補者意向調査管理委員 会委員長

• 矢島 秀伸

学内

物理学域 カリキュラム委員会委員

物理学域 博士論文評価委員会委員
物理学域 入試実施委員
理工学群物理学類 1 年担任
宇宙史研究センター 連携教員

学外
国立天文台すばる観測時間割当委員会委員

• 吉川耕司

学内
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
最先端共同 HPC 基盤施設スーパーコンピュータシステム 仕様策定委員会委員 総合科目 専門部会委員

学外
日本天文学会 欧文研究報告 編集委員

10. 社会貢献・国際貢献

1. 大須賀健 . 講演 , 学長を囲む会 , ブラックホールを解説 . Aug. 30, 2023.
2. 大須賀健 . 出前授業 , 新潟県立佐渡中等教育学校 ,「宇宙最大の謎 ブラックホールはどこまでわかったのか？」. July 26, 2023.
3. 大須賀健 . プレスリリース , Nature 論文 , 歳差運動する M87 ジェットの噴出口― 巨大ブラックホールの「自転」を示す新たな証拠 ―. Sept. 27, 2023.
4. 大須賀健 . コメント掲載 , 読売新聞 / オンライン , サイエンス誌掲載の論文について . Nov. 7, 2023.
5. 矢島秀伸 . 第 14 回天文宇宙の七夕講演会「スーパーコンピュータで紐解く宇宙の歴史」. July 8, 2023.

11. その他

1. 森正夫 . CCS Monthly sabbatical (March. 12-26, 2024). Seminar talks:
” Galaxy collisions and the stellar streams in the M31” at Max Planck Institute for extraterres- trial Physics on March 18;
” Galaxy Collisions and Activity of Massive Black Hole” at Astronomisches Rechen-Institut of Heidelberg University on March 20;
” Tidal destruction of the Galactic satellites” at University Observatory Munich on March 22. Mar. 12–26, 2024.

2. 井上壮大 . 物理学学位プログラム・リーダー賞（博士）. Mar. 25, 2024.
3. 竹田麟太郎 . 物理学学位プログラム・リーダー賞（修士）. Mar. 25, 2024.
4. 大須賀健 . 林忠四郎賞受賞記念記事執筆「シミュレーションとチームワークで挑むコンパクト天体周囲の降着流・噴出流」天文月報 2024 年 1 月号 . Dec. 20, 2023.

III. 原子核物理研究部門

1. メンバー

教授	中務 孝、矢花 一浩（量子物性研究部門兼務）
准教授	清水 則孝
助教	日野原 伸生
研究員	鷲山 広平、Anil Kumar
学生	大学院生　5 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。原子核は、地球上において、強い相互作用が支配する有限量子多体系として特異な系として存在しているが、宇宙においては、巨視的な原子核である中性子星が存在し、その構造と現象の関係を微視的なアプローチで解決することも、本部門における重要な研究テーマと位置付けている。

本部門のメンバーはこのような幅広い課題に取り組み、分野の枠を超えた研究を推進している。

3. 研究成果

[1] 局所α除去強度関数の密度汎関数計算（中務、日野原）

軽い原子核におけるクラスター構造の研究が広く行われているのに対して、重い原子核に対する研究は限られている。一方、原子核の崩壊様式として α 崩壊がよく知られているように、重い原子核においても核内に α 粒子の存在が強く示唆されている。系統的にこのような核内における α 粒子形成を定量化するため、局所 α 除去強度関数（Local α -removal strength function）$S_\alpha(\boldsymbol{r},E)$ を定義した。この $S_\alpha(\boldsymbol{r},E)$ は、核内の特定の場所 $\boldsymbol{r}$ で α 粒子を消去した際に残留核が励起エネルギー E に遷移する強度を与える。厳密な計算は困難であるが、密度汎関数法を用いて、平均場の再配置効果を無視する近似では非常に簡単に計算が可能である。こ

の手法を用いて、Sn のアイソトープにおける局所α除去強度関数を計算し、α ノックアウト反応の実験データと比較した。その結果、基底状態に遷移する強度は、核内で表面近傍にピークを持ち、対密度の大きさと強く相関していることが分かった。α粒子の出現を仮定せずに計算された結果と、実験データは良い一致を示している。

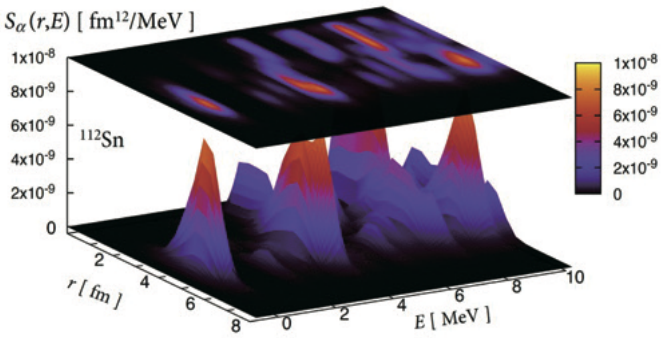


図 1: ^{112}Sn に対して計算された局所α除去強度関数

[2] フェルミ演算子展開法の HFB 理論への応用（中務）

2022 年度、原子核の有限温度密度汎関数計算に対するフェルミ演算子展開法の適用に成功したが、対密度を取り入れたハートレー・フォック・ボゴリューボフ（HFB）理論へ拡張するための理論的整備、数値計算の feasibility study を行った。HFB ハミルトニアンの固有状態（準粒子状態）には正エネルギー解と負エネルギー解が存在するため、単純な適用はうまく行かないと予想していたが、検討の結果、理論的にこの問題が解決可能であることを示した。また、その数値計算手法も、対密度がない場合の通常のフェルミ演算子展開法のハミルトニアンを HFB ハミルトニアンに単純に置き換えるだけで良いことも分かった。まずは 1 次元のテスト計算が進行中である。

[3] 液体ヘリウム系に対する密度汎関数計算（中務）

今年度からスタートした JST ERATO の関口三体核力プロジェクトにおいて、少数系厳密計算の結果を密度汎関数に取り入れる方法を検討することになっている。東北大学を中心とする少数系厳密計算グループでは、フェルミ粒子系である原子核を対象にする前に、比較的計算が簡単であるボソン系を対象にした計算を行うことになり、ヘリウム原子系の基底状態、および励起状態の計算が進行している。これに対応して、筑波大グループでは、ボソン系における密度汎関数計算の準備を行うことになり、適当な汎関数と相互作用のもと、グロス・ピタエフスキー方程式を解くことで対応することとした。ヘリウム原子系も、原子核のような自己束縛状態を形作ることが知られており、ヘリウム・ボールの計算を実行した。原子数を増加させるこ

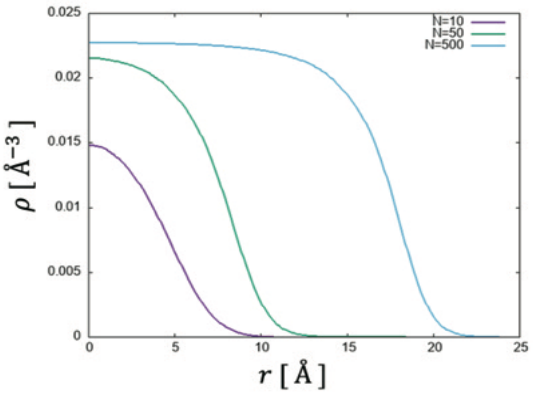


図 2: 束縛したヘリウム原子密度分布の粒子数依存性。原子数を 10, 50, 500 と変化。

とで半径が大きくなる飽和性の性質が見られる一方、中心付近の密度は変化しており、原子核とはやや違う性質も示しているようである。

[4] 殻模型計算によるカドミウム同位体の核構造（清水、宇都野（原研）、Srivastava(インド工科大学ルールキー校)）

カドミウム同位体奇核の$\frac{11}{2}^-$状態の四重極能率と磁気能率は、中性子数の変化にともない線形な変化をすることが実験結果から知られている。対を組んでいない中性子が$0h_{11/2}$軌道を占有し、球形核におけるセニオリティ近似がよく成り立つ単純な模型が成り立つ証拠ととらえられてきた。

我々は、大規模殻模型計算によりカドミウム同位体の構造を議論した。G 行列理論をもとにした殻模型有効相互作用を複数組み合わせて用いることにより、低励起スペクトルや四重極能率・磁気能率の実験値を再現することを確認した。殻模型波動関数を解析すると、セニオリティ近似はそれほど良く成り立っておらず、プロレート変形しており、中性子数変化にともなってK量子数が緩やかに変化していることを明らかにした。

[5] 中性子数 126,125 同中性子体のベータ崩壊（Kumar、清水、他）

太陽系の元素組成の質量数分布において、3 か所比較的大きな分布を示す箇所がある。これは、中性子星合体などの天体現象における元素合成 r 過程によって生じると考えられている。このうち、白金近傍の個所は第 3 ピークと呼ばれており、中性子過剰領域における中性子数$N = 126$魔法数の存在により理解される。r 過程では中性子捕獲とベータ崩壊の繰り返しにより重い核が生成されるので、中性子過剰領域の$N = 126,125$同中性子体のベータ崩壊半減期は重要な物理量であるが、いまだ加速器実験ではこのような核種を生成することができず、理論計算が必要とされている。我々は、富岳などのスパコンを用いた大規模殻模型計算によって、これら同中性子体のベータ崩壊半減期を計算した。ベータ崩壊には許容（GT）遷移と第一禁止（FF）遷移の両方の寄与を取り込んだ。安定核近傍領域（陽子数Zが 80 近傍）では第一禁止遷移が主な寄与となるが、陽子数を減らして中性子過剰領域に移ると、許容遷移が支配的になることを示した。さらに、従来の理論予測より半減期が短い可能性を示唆した（図 3）。

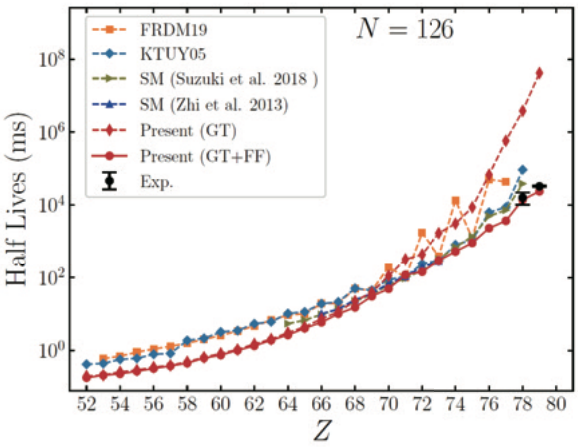


図 3: 中性子数 126 同中性子体のベータ崩壊半減期。横軸に陽子数、実験値（黒）、我々の計算結果（赤）、様々な先行研究結果が示されている。

[6] モンテカルロ殻模型コードの GPU 実装（清水）

殻模型に基づいた核構造計算手法のひとつであるモンテカルロ殻模型は、近年芯を仮定しない第一原理的な計算に応用され、重要性を増している。我々は、Pegasus スパコンの GPU である H100 向けに、モンテカルロ殻模型用の計算コードのボトルネック部分である角運動量射影ハミルトニアン行列要素計算のチューニング作業をおこなった。この部分の計算時間は、Pegasus スパコンの CPU（Xeon 48core）に比べて、最大で 9.3 分の 1 に短縮された。

[7] 有限原子核でのスピン三重項対相関（日野原、大石（理研）、吉田（大阪大））

核子対相関にはスピン一重項のものとスピン三重項のものがあり、スピン三重項対相関が有限原子核で対凝縮するのかは未解決問題であった。密度行列展開によってスピンカレント対密度がスピン三重項対凝縮の秩序変数となっていることを指摘し、この振る舞いを Ca 同位体および Sn 同位体の球形基底状態で分析した。通常用いられるスピン一重項の対密度汎関数によってスピン一重項の対凝縮のみならずスピン三重項の対凝縮が誘発されることを示した。これはスピン・軌道密度汎関数によるスピン軌道スプリッティングによるものであり、スピン・軌道密度汎関数がない場合はスピン三重項の対凝縮は誘発されない。また、スピン三重項の対密度汎関数を用いた場合は、スピン・軌道スプリッティングが誘発されるため、スピン一重項対凝縮も誘発されることを示した。このようにスピン・軌道スプリッティングがスピン一重項と三重項の対凝縮の共存に重要な役割を果たすことを明らかにした。

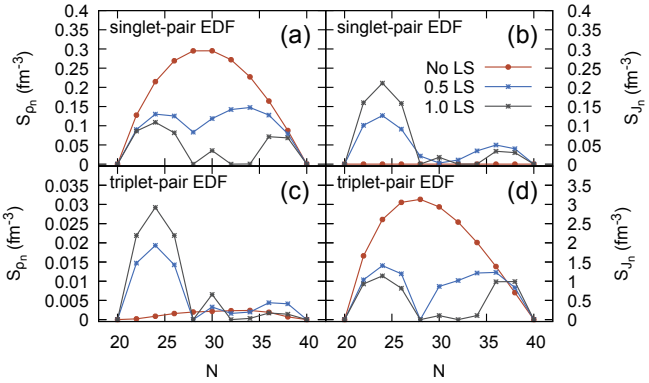


図 4: スピン一重項・三重項対密度汎関数による Ca 同位体での一重項・三重項対凝縮量。

[8] ガモフ・テラー強度とベータ崩壊への準粒子振動結合の効果（Liu、Engel（ノースカロライナ大）、日野原、Kortelainen（ユバスキュラ大））

中性子・陽子チャネルの準粒子乱雑位相近似 (pnQRPA) はガモフ・テラー巨大共鳴の強度分布やベータ崩壊半減期の計算に広く用いられているが、多準粒子励起への結合が理論に含まれておらず、巨大共鳴の共鳴幅の記述などが不十分であることが以前より知られている。準粒子とフォノン振動の結合を取り入れた定式化を行い、Skyrme 型密度汎関数を用いた pnQRPA 計算を中性子・陽子チャネルの有限振幅法を用いて行った。この計算は変形原子核のガモフ・テラー強度とベータ崩壊の計算に QRPA の近似を超えた相関を取り入れた初めての計算である。準粒子・振動結合により、巨大共鳴の強度分布の記述を大幅に改善し、アイソスカラー型中性子－陽子対相関を入れなくともベータ崩壊の半減期が短くなるという結果

を得た。pnQRPA を超えた相関を取り入れることにより、アイソスカラー型対相関の結合定数はこれまで pnQPRA で決定されてきたものとは大きく異なる可能性がある。

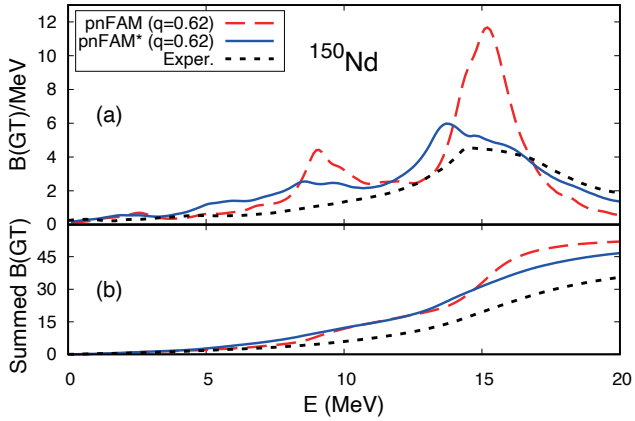


図 5: ^{150}Nd のガモフ・テラー強度。従来の pnQRPA 計算の結果（赤）、準粒子振動結合を入れた計算結果（青）、実験値（黒）の比較。

[9] 有限振幅法のエミュレータの開発（日野原、Zhang（ミシガン州立大学）、Engel（ノースカロライナ大））

有限振幅法は QRPA を反復法で効率的に解く方法である。QRPA 固有値解を求める際には複素エネルギー空間で一位の極となっている QRPA 固有値周りの周回積分を用いるため、積分経路の設定に必要な極の位置の推定に、多くの複素エネルギー点での有限振幅法の計算が必要となる。パラメータを含む固有値問題等のエミュレータである縮減基底法を用い、複素エネルギーをパラメータとして有限振幅法のエミュレータを構成した。任意の複素エネルギーでの有限振幅法の解は、予め求めたいくつかの複素エネルギー点での解の重ね合わせで書けると仮定し、その重みは Rayleigh-Ritz 法によって変分で求めた。このエミュレータを用いることで、QRPA 固有値解の計算速度の向上が 2 − 3 桁見込まれる。

[10] 改良した集団慣性による５次元四重極集団ハミルトニアン模型（鷲山、日野原、中務）

平均場近似を超えた大振幅集団運動に付随する原子核の形の揺らぎを記述するために、原子核密度汎関数に基づいた 5 次元四重極集団ハミルトニアンが広く用いられている。ただし、ハミルトニアンの集団慣性に、動的効果を無視したクランキング近似が用いられてきた。我々は、集団慣性を改良するために、集団慣性に動的効果を含める実用的手法「Skyrme 型密度汎関数法＋局所乱雑位相近似法」を開発した。四重極変形度 (β,γ) の関数として集団慣性とポテンシャルを計算し四重極集団ハミルトニアンを構築した。この手法を ^{110}Pd に応用し、この改良した集団慣性がクランキング近似によるものから大きく増加すること、改良した集団慣性を用いた結果が実験の低励起スペクトルを非常に良く再現することを示した。

[11] 原子核の非軸対称変形と巨大単極共鳴の進化（鷲山、江幡（埼玉大）、吉田（大阪大））

巨大共鳴は原子核における主要な集団励起モードである。プロレート型に軸対称変形した

原子核では、巨大単極共鳴のピークが二つに分かれ、低エネルギー側のピーク位置が巨大四重極共鳴の K=0 成分（K は角運動量の z 成分）のピーク位置に一致することが知られている。本研究では準粒子乱雑位相近似法を用いて巨大単極共鳴と巨大四重極共鳴の混合と軸対称を破る変形の度合いとの関係を調べた。図 6 に ^{100}Mo のアイソスカラー型単極 (ISM) および四重極 (ISQ) の強度関数を示した。非軸対称変形度 γ が増えるにつれ ($\gamma = 20^\circ, 30^\circ, 40^\circ$)、ISM の ω =15 MeV 近傍に新たなピークが出現・発達し、このピーク位置と ISQ, K=2 成分のピーク位置が一致した。これは、非軸対称変形の発達によって新たに発現した機構である。

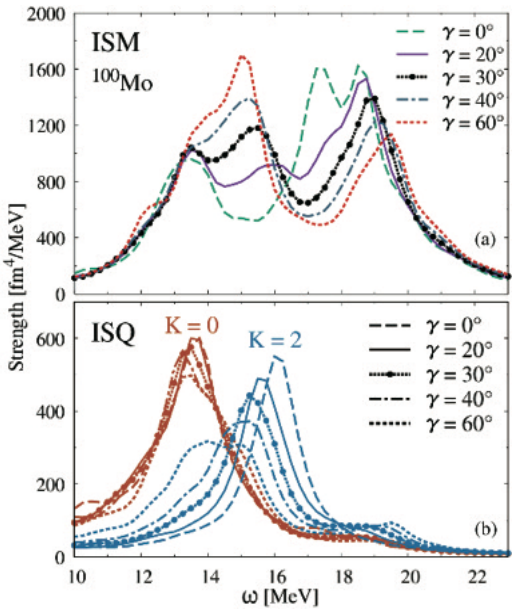


図 6: ^{100}Mo のそれぞれの非軸対称変形度 γ に対する ISM (上) 及び ISQ の K=0,2 強度関数 (下)。

4. 教育

集中講義など

1. 日野原 伸生、理学部物理集中講義「原子核密度汎関数理論による原子核構造とダイナミクス」、大阪公立大学、2023 年 10 月 23 – 25 日 .

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. C. Ruike, Gamma24 Jury Prize, The workshop on frontier nuclear studies with gamma-ray spectrometer arrays (gamma24), Minoh Campus, Osaka University, Minoh, Japan, March 26 – 28, 2024.

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、2023 – 2026 年、全年度直接経費：14,000,000 円（2023 年度直接経費：1,800,000 円）「非一様中性子星物質の物性とパルサー・グリッチ起源の解明」.
2. JST-ERATO「関口三体核力プロジェクト」(JPMJER2304) 量子多体精密計算グループ、中務 孝、清水 則孝、2023 年 10 月 – 2029 年 3 月 .
3. 富岳成果創出加速プログラム・「シミュレーションで探る基礎科学：量子新時代へのアプローチ」(JPMXP1020230411)、研究代表者：橋本 省二 (KEK)、連携機関代表者：清水 則孝、2023 – 2025 年度、(2023 年度：5,500,000 円) .
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、2022 – 2023 年、全年度直接経費：1,400,000 円、(2023 年度直接経費：700,000 円)、「二重ベータ崩壊・二重電子捕獲半減期の全核種精密計算」.

5. 日本学術振興会科学研究費・基盤研究 (C)(一般)、日野原 伸生、代表、2020 – 2023 年、全年度直接経費：3,300,000 円、(2023 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」.
6. 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 – 2023 年 (延長)、全年度直接経費：6,300,000 円、「中性子ー陽子対密度汎関数の最適化」.

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. Takashi Nakatsukasa and Nobuo Hinohara, “Local α -removal strength in the mean-field approximation” , Phys. Rev. C, **108**, 014318 (2023).
2. K. Yanase, N. Shimizu, K. Higashiyama, and N. Yoshinaga, “Correlations between nuclear Schiff moment and electromagnetic measurements” , Phys. Lett. B **841**, 137897 (2023).
3. Jinbei Chen, Menglan Liu, Cenxi Yuan, Shengli Chen, Noritaka Shimizu, Xiaodong Sun, Ruirui Xu, and Yuan Tian, “Shell-model-based investigation on level density of Xe and Ba isotopes” , Phys. Rev. C **107**, 054306 (2023).
4. Soumik Bhattacharya, Vandana Tripathi, E. Rubino, Samuel Ajayi, L. T. Baby, C. Benetti, R. S. Lubna, S. L. Tabor, J. Döring, Y. Utsuno, N. Shimizu, J. M. Almond, and G. Mukherjee, “Coexistence of single-particle and collective excitation in ^{61}Ni” , Phys. Rev. C **107**, 054311 (2023).
5. E. Kido, T. Inakura, M. Kimura, N. Kobayashi, S. Nagataki, N. Shimizu, A. Tamii, and Y. Utsuno, “Evaluations of uncertainties in simulations of propagation of ultrahigh-energy cosmic-ray nuclei derived from microscopic nuclear models” , Astropart. Phys. **152**, 102866 (2023).
6. S. Chen, F. Browne, P. Doornenbal, J. Lee, A. Obertelli, Y. Tsunoda, T. Otsuka, Y. Chazono, G. Hagen, J. D. Holt, G. R. Jansen, K. Ogata, N. Shimizu, Y. Utsuno, K. Yoshida, N.L. Achouri, H. Baba, D. Calvet, F. Château, N. Chiga, A. Corsi, M. L. Cortés, A. Delbart, J.-M. Gheller, A. Giganon, A. Gillibert, C. Hilaire, T. Isobe, T. Kobayashi, Y. Kubota, V. Lapoux, H. N. Liu, T. Motobayashi, I. Murray, H. Otsu, V. Panin, N. Paul, W. Rodriguez, H. Sakurai, M. Sasano, D. Steppenbeck, L. Stuhl,

Y. L. Sun, Y. Togano, T. Uesaka, K. Wimmer, K. Yoneda, O. Aktas, T. Aumann, L. X. Chung, F. Flavigny, S. Franchoo, I. Gasparic, R.-B. Gerst, J. Gibelin, K. I. Hahn, D. Kim, T. Koiwai, Y. Kondo, P. Koseoglou, C. Lehr, B. D. Linh, T. Lokotko, M. MacCormick, K. Moschner, T. Nakamura, S. Y. Park, D. Rossi, E. Sahin, P.-A. Söderström, D. Sohler, S. Takeuchi, H. Törnqvist, V. Vaquero, V. Wagner, S. Wang, V. Werner, X. Xu, H. Yamada, D. Yan, Z. Yang, M. Yasuda, and L. Zanetti, "Level Structures of ^{56,58}Ca cast doubt on a doubly magic ^{60}Ca" , Phys. Lett. B **843**, 138025 (2023).

7. H. Wang, M. Yasuda, Y. Kondo, T. Nakamura, J. A. Tostevin, K. Ogata, T. Otsuka, A. Poves, N. Shimizu, K. Yoshida, N. L. Achouri, H. Al Falou, L. Atar, T. Aumann, H. Baba, K. Boretzky, C. Caesar, D. Calvet, H. Chae, N. Chiga, A. Corsi, H. L. Crawford, F. Delaunay, A. Delbart, Q. Deshayes, Zs. Dombrádi, C. Douma, Z. Elekes, P. Fallon, I. Gašparić, J.-M. Gheller, J. Gibelin, A. Gillibert, M. N. Harakeh, A. Hirayama, C. R. Hoffman, M. Holl, A. Horvat, Á. Horváth, J.W. Hwang, T. Isobe, J. Kahlbow, N. Kalantar-Nayestanaki, S. Kawase, S. Kim, K. Kisamori, T. Kobayashi, D. Körper, S. Koyama, I. Kuti, V. Lapoux, S. Lindberg, F. M. Marqués, S. Masuoka, J. Mayer, K. Miki, T. Murakami, M. A. Najafi, K. Nakano, N. Nakatsuka, T. Nilsson, A. Obertelli, N. A. Orr, H. Otsu, T. Ozaki, V. Panin, S. Paschalis, A. Revel, D. Rossi, A. T. Saito, T. Saito, M. Sasano, H. Sato, Y. Satou, H. Scheit, F. Schindler, P. Schrock, M. Shikata, Y. Shimizu, H. Simon, D. Sohler, O. Sorlin, L. Stuhl, S. Takeuchi, M. Tanaka, M. Thoennessen, H. Törnqvist, Y. Togano, T. Tomai, J. Tscheuschner, J. Tsubota, T. Uesaka, Z. Yang, and K. Yoneda, "Intruder configurations in ^{29}Ne at the transition into the island of inversion: Detailed structure study of ^{28}Ne" , Phys. Lett. B **843**, 138038 (2023).
8. Y. Kondo, N.L. Achouri, H. Al Falou, L. Atar, T. Aumann, H. Baba, K. Boretzky, C. Caesar, D. Calvet, H. Chae, N. Chiga, A. Corsi, F. Delaunay, A. Delbart, Q. Deshayes, Zs. Dombrádi, C. A. Douma, A. Ekström, Z. Elekes, C. Forssén, I. Gašparić, J.-M. Gheller, J. Gibelin, A. Gillibert, G. Hagen, M. N. Harakeh, A. Hirayama, C. R. Hoffman, M. Holl, A. Horvat, Á. Horváth, J. W. Hwang, T. Isobe, W. G. Jiang, J. Kahlbow, N. Kalantar-Nayestanaki, S. Kawase, S. Kim, K. Kisamori, T. Kobayashi, D. Körper, S. Koyama, I. Kuti, V. Lapoux, S. Lindberg, F. M. Marqués, S. Masuoka, J. Mayer, K. Miki, T. Murakami, M. Najafi, T. Nakamura, K. Nakano, N. Nakatsuka, T. Nilsson, A. Obertelli, K. Ogata, F. de Oliveira Santos, N. A. Orr, H. Otsu, T. Otsuka, T. Ozaki, V. Panin, T. Papenbrock, S. Paschalis, A. Revel, D. Rossi, A. T. Saito, T. Y. Saito, M. Sasano, H. Sato, Y. Satou, H. Scheit, F. Schindler, P. Schrock,

M. Shikata, N. Shimizu, Y. Shimizu, H. Simon, D. Sohler, O. Sorlin, L. Stuhl, Z. H. Sun, S. Takeuchi, M. Tanaka, M. Thoennessen, H. Törnqvist, Y. Togano, T. Tomai, J. Tscheuschner, J. Tsubota, N. Tsunoda, T. Uesaka, Y. Utsuno, I. Vernon, H. Wang, Z. Yang, M. Yasuda, K. Yoneda, and S. Yoshida, "First observation of ^{28}O" , Nature **620**, 965 (2023).

9. A. Tamii, L. Pellegri, P.-A. Söderström, D. Allard, S. Goriely, T. Inakura, E. Khan, E. Kido, M. Kimura, E. Litvinova, S. Nagataki, P. von Neumann-Cosel, N. Pietralla, N. Shimizu, N. Tsoneva, Y. Utsuno, S. Adachi, P. Adsley, A. Bahini, D. Balabanski, B. Baret, J. A. C. Bekker, S. D. Binda, E. Boicu, A. Bracco, I. Brandherm, M. Brezeanu, J. W. Brummer, F. Camera, F. C. L. Crespi, R. Dalal, L. M. Donaldson, Y. Fujikawa, T. Furuno, H. Haoning, R. Higuchi, Y. Honda, A. Gavrilescu, A. Inoue, J. Isaak, H. Jivan, P. Jones, S. Jongile, O. Just, T. Kawabata, T. Khumalo, J. Kiener, J. Kleemann, N. Kobayashi, Y. Koshio, A. Kuşoğlu, K. C. W. Li, K. L. Malatji, R. E. Molaeng, H. Motoki, M. Murata, A. A. Netshiya, R. Neveling, R. Niina, S. Okamoto, S. Ota, O. Papst, E. Parizot, T. Petruse, M. S. Reen, P. Ring, K. Sakanashi, E. Sideras-Haddad, S. Siem, M. Spall, T. Suda, T. Sudo, Y. Taniguchi, V. Tatischeff, H. Utsunomiya, H. Wang, V. Werner, H. Wibowo, M. Wiedeking, O. Wieland, Y. Xu, and Z. H. Yang (PANDORA collaboration), "PANDORA Project for the study of photonuclear reactions below A=60" , Eur. Phys. J. A **59**, 208 (2023).
10. Toshio Suzuki and Noritaka Shimizu, "Neutrino-induced neutral- and charged-current reactions on ^{40}Ar" , Phys. Rev. C **108**, 014611 (2023).
11. Yusuke Tsunoda, Noritaka Shimizu, and Takaharu Otsuka, "Shape transition of Nd and Sm isotopes and the neutrinoless double-ß decay nuclear matrix element of ^{150}Nd" , Phys. Rev. C **108**, L021302 (2023).
12. Deepak Patel, Praveen C. Srivastava, and Noritaka Shimizu, "Systematic shell-model study of $^{98\text{-}130}$Cd isotopes and 8^+ isomeric states", Nucl. Phys. A **1039**, 122742 (2023).
13. T. Shizuma, M. Omer, T. Hayakawa, F. Minato, S. Matsuba, S. Miyamoto, N. Shimizu, and Y. Utsuno, "Parity assignment for low-lying dipole states in ^{58}Ni" , Phys. Rev. C **109**, 014302 (2024).
14. Deepak Patel, Praveen C. Srivastava, and Noritaka Shimizu, and Yutaka Utsuno, "Systematic shell-model study of $^{99\text{-}129}$Cd and isomers in neutron-rich $^{127\text{-}131}$In isotopes" , Phys. Rev. C **109**, 014310 (2024).
15. H. Utsunomiya, S. Goriely, M. Kimura, N. Shimizu, Y. Utsuno, G. M. Tveten, T. Renstrøm, T. Ari-izumi, and S. Miyamoto, "Photoneutron emission cross section for ^{13}C" , Phys. Rev. C **109**, 014617 (2024).

16. Samuel Ajayi, Vandana Tripathi, E. Rubino, Soumik Bhattacharya, L. T. Baby, R. S. Lubna, C. Benetti, Catur Wibisono, MacMillan B. Wheeler, S. L. Tabor, Yutaka Utsuno, Noritaka Shimizu, and J. M. Allmond, "Observation of collective modes of excitations in ^{59}Co, ^{59}Ni, and ^{61}Co and the influence of the $g_{9/2}$ orbital" , Phys. Rev. C **109**, 014305 (2024).
17. B. D. Linh, A. Corsi, A. Gillibert, A. Obertelli, P. Doornenbal, C. Barbieri, T. Duguet, M. Gómez-Ramos, J. D. Holt, B. S. Hu, T. Miyagi, A. M. Moro, P. Navrátil, K. Ogata, S. Péru, N. T. T. Phuc, N. Shimizu, V. Somà, Y. Utsuno, N. L. Achouri, H. Baba, F. Browne, D. Calvet, F. Château, S. Chen, N. Chiga, M. L. Cortés, A. Delbart, J.-M. Gheller, A. Giganon, C. Hilaire, T. Isobe, T. Kobayashi, Y. Kubota, V. Lapoux, H. N. Liu, T. Motobayashi, I. Murray, H. Otsu, V. Panin, N. Paul, W. Rodriguez, H. Sakurai, M. Sasano, D. Steppenbeck, L. Stuhl, Y. L. Sun, Y. Togano, T. Uesaka, K. Wimmer, K. Yoneda, O. Aktas, T. Aumann, L. X. Chung, F. Flavigny, S. Franchoo, I. Gašparić, R. B. Gerst, J. Gibelin, K. I. Hahn, N. T. Khai, D. Kim, T. Koiwai, Y. Kondo, P. Koseoglou, J. Lee, C. Lehr, T. Lokotko, M. MacCormick, K. Moschner, T. Nakamura, S. Y. Park, D. Rossi, E. Sahin, D. Sohler, P.-A. Söderström, S. Takeuchi, H. Törnqvist, V. Vaquero, V. Wagner, S. T. Wang, V. Werner, X. Xu, Y. Yamada, D. Yan, Z. Yang, M. Yasuda, and L. Zanetti, "Onset of collectivity for argon isotopes close to N=32" , Phys. Rev. C **109**, 034312 (2024).
18. Hana Gil, Nobuo Hinohara, Chang Ho Hyun, and Kenichi Yoshida, "Nuclear mass table in density functional approach inspired by neutron-star observation" , Phys. Rev. C **108**, 044316 (2023).
19. Nobuo Hinohara, Tomohiro Oishi, and Kenichi Yoshida, "Triplet-odd pairing in finite nuclear systems: Even-even singly closed nuclei" , Phys. Rev. C **109**, 034302 (2024).
20. Kouhei Washiyama and Kenichi Yoshida, "Triaxial-shape dynamics in the low-lying excited 0^+ state: Role of the collective mass" , Phys. Rev. C **108**, 014323 (2023).
21. Kouhei Washiyama, Shuichiro Ebata, and Kenichi Yoshida, "Evolution of the giant monopole resonance with triaxial deformation" , Phys. Rev. C **109**, 024317 (2024).

B) 査読無し論文

1. 類家 千怜、「BCS 理論を用いた原子核対回転に伴う慣性モーメントに関する研究」、原子核研究 **68**, Supplement 1 (2023 年夏の学校特集号), p. 35.
2. 金井 敦哉、「二重ベータ崩壊に向けた Dirac 方程式による電子波動関数の計算」、原子核研究 **68**, Supplement 1 (2023 年夏の学校特集号), p. 36.

（2）国際会議発表

A）招待講演

1. T. Nakatsukasa, “Nuclear deformation and stability” , CCS–LBNL Collaborative Workshop 2023, Tsukuba, Japan, April 12 – 13, 2023.
2. T. Nakatsukasa, “Transport properties of neutrons in neutron-star crust” , Workshop on Bridging the Gaps: Interdisciplinary collaborations in constraining the physics of finite nuclei, neutron stars and dark matter, July 3 – 7, 2023.
3. T. Nakatsukasa and N. Hinohara, “Local alpha strengths in the HF+BCS calculation” , Workshop on Nuclear Cluster Physics (WNCP2023), Osaka University, Toyonaka, Japan, Nov. 27 – 29, 2023.
4. T. Nakatsukasa, “Nuclear pairing and α particle formation” , Reimei workshop “Intersection of Nuclear Structure and Direct Reaction” , Tokai, Japan, February 28 – March 1, 2024.
5. N. Shimizu, K. Yanase, Y. Tsunoda, and T. Otsuka, “Shell-model studies of medium-heavy nuclei for the neutrinoless-double-beta-decay matrix element and the nuclear Schiff moment” , 6th Joint Meeting of the Nuclear Physics Divisions of the APS and the JPS (HAWAII2023), Waikoloa, HI, USA, November 26 – December 1, 2023.
6. N. Shimizu, Y. Utsuno, and S. Yoshida, “Large-scale shell-model study for beta-decay properties of neutron-rich nuclei” , 6th Joint Meeting of the Nuclear Physics Divisions of the APS and the JPS (HAWAII2023), Waikoloa, HI, USA, November 26 – December 1, 2023.
7. N. Hinohara, “Recent development and application of finite-amplitude method for QRPA” , DNA-OMEG Workshop on Nuclear structure, reaction and astrophysics, Pukyong National University, Busan, Korea, Nov. 9 – 11, 2023.
8. N. Hinohara, “Recent progress in the nuclear matrix element calculation using the finite-amplitude method for QRPA” , Theoretical and experimental approaches for nuclear matrix elements of double-beta decay, Research Center for Nuclear Physics, Osaka University, Ibaraki, Japan, Dec. 21 – 22, 2023.
9. N. Hinohara, “Collective phenomena related to neutron-proton pairing in the ground and excited states around N=Z” , Advancing physics at next RIBF (ADRIB24), RIKEN, Wako, Japan, January 23 – 24, 2024.
10. N. Hinohara, “Nuclear matrix element for double-beta decay within density functional theory” , Unraveling the History of the Universe and Matter Evolution with Underground Physics (UGAP2024), Tohoku University, Sendai, Japan, March 4 – 6, 2024.

11. K. Washiyama, “Coupling between the isoscalar giant monopole and quadrupole resonances in triaxially deformed nuclei” , RIKEN workshop “Giant monopole resonances and related topics” , RIKEN Nishina Center, Wako, Japan, May 18, 2023.
12. K. Washiyama, “Microscopic description of large-amplitude collective motion based on nuclear density functional theory” , New Frontiers in Nuclear Physics and Nuclear Astrophysics (NNPA2023), Antalya, Turkey, September 5 – 10, 2023.
13. K. Washiyama, “Collective Hamiltonian method for low-lying states in transitional nuclei” , RCNP Colloquium, Osaka University, Japan, November 1, 2023.
14. K. Washiyama, “Collective inertia and fission half-life in spontaneous fission” , DNA-OMEG Workshop on Nuclear structure, reaction and astrophysics, Pukyong National University, Busan, Korea, November 9 – 11, 2023.
15. K. Washiyama, “Shape coexistence/mixing phenomena in low-lying states: Role of the triaxial deformation and inertial function” , The workshop on frontier nuclear studies with gamma-ray spectrometer arrays (gamma24), Minoh Campus, Osaka University, Minoh, Japan, March 26 – 28, 2024.

B) 一般講演

1. T. Nakatsukasa, K. Hagihara, and N. Hinohara, “Quantum binding effect for nuclei at neutron dripline” , 34th Conference on Computational Physics (CCP2023), Kobe, Japan, August 4 – 8, 2023.
2. T. Nakatsukasa, K. Hagihara, and N. Hinohara, “Coulombic stabilization of nuclei at the neutron dripline” , International Symposium on Physics of Unstable Nuclei 2023, Phu Quoc Island, Vietnam, May 4 – 8, 2023.
3. T. Nakatsukasa and K. Wen, “Collective subspace requantization for sub-barrier fusion reactions” , International Conference on Heavy-Ion Collisions at near-barrier energies (FUSION23), Shizuoka, Japan, November 19 – 24, 2023.
4. N. Shimizu, Y. Tsunoda, and T. Otsuka, “Quasi-particle vacua shell model and shape phase transition of Nd isotopes” , 34th Conference on Computational Physics (CCP2023), Kobe, Japan, August 4 – 8, 2023.
5. N. Hinohara, “Reduced basis method for DFT linear response” , NUCLEI Annual Collaboration Meeting, University of Tennessee, Knoxville, TN, USA, July 24 – 26, 2023.
6. N. Hinohara, “Nuclear pairing and related phenomena in nuclear dynamics” , Theory Seminar, Facility for Rare Isotope Beams, Michigan State University, East Lansing, MI, USA, September 12, 2023.

7. N. Hinohara and T. Nakatsukasa, “Alpha-particle formation and nuclear pairing” , Workshop on Nuclear Cluster Physics (WNCP2023), Osaka University, Toyonaka, Japan, Nov. 27 – 29, 2023.
8. N. Hinohara, “Spin-triplet pairing in nuclear DFT” , RIKEN Symposium Second Workshop on Fundamentals in Density Functional Theory (DFT2024), RIKEN Kobe Campus, Kobe, Japan, February 20 – 22, 2024.
9. N. Hinohara, “Pairing rotation and pairing properties in ground states” , Reimei workshop “Intersection of Nuclear Structure and Direct Reaction” , Tokai, Japan, February 28 – March 1, 2024.
10. K. Washiyama, “Spontaneous fission with nuclear density functional theory” , The 6th workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model (Sado2023), Sado, Japan, September 28 – 30, 2023.
11. K. Washiyama, “Microscopic description of spontaneous fission in nuclear energy density functionals” , International Conference on Heavy-Ion Collisions at near-barrier energies (FUSION23), Shizuoka, Japan, November 19 – 24, 2023.
12. K. Washiyama, “Large-amplitude collective dynamics in low-lying states of transitional nuclei with collective Hamiltonian method” , Reimei workshop “Intersection of Nuclear Structure and Direct Reaction” , Tokai, Japan, February 28 – March 1, 2024.
13. A. Kumar, “Shell model studies in nuclear beta decay”, Reimei workshop “Intersection of Nuclear Structure and Direct Reaction” , Tokai, Japan, February 28 – March 1, 2024.
14. K. Yoshinaga, N. Hinohara, and T. Nakatsukasa “Calculation of radial moments of charge distribution compared to precision spectroscopy data” , A3F-CNS Summer School 2023, Wako, Japan, August 4 – 10, 2023.
15. K. Yoshinaga, “Calculation for radial moments of charge distribution” , The 6th workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model (Sado2023), Sado, Japan, September 28 – 30, 2023.
16. K. Yoshinaga, N. Hinohara, T. Nakatsukasa, and N. Shimizu, “Calculation of radial moments of charge distribution” , 6th Joint Meeting of the Nuclear Physics Divisions of the APS and the JPS (HAWAII2023), Waikoloa, HI, USA, November 26 – December 1, 2023.
17. C. Ruike and N. Hinohara, “Moments of inertia of pairing rotation within the BCS model for Sn and Ni isotopes” , A3F-CNS Summer School 2023, Wako, Japan, August 4 – 10, 2023.
18. A. Kanai and N. Hinohara, “Bound and scattering states of the electron

wavefunctions calculated with the Dirac equation for 0νββ" , A3F-CNS Summer School 2023, Wako, Japan, August 4 – 10, 2023.

C) ポスター

1. T. Nakatsukasa, "Local alpha strength functions in nuclei" , 15th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba, Japan, October 2 – 3, 2023.
2. T. Nakatsukasa and N. Hinohara, "Local alpha strength functions and alpha knockout reactions" , International Conference on Heavy-Ion Collisions at near-barrier energies (FUSION23), Shizuoka, Japan, November 19 – 24, 2023.
3. N. Shimizu, "Microscopic description of quadrupole collective states" , 15th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba, Japan, October 2 – 3, 2023.
4. N. Hinohara, S. Agbemava, K. Godbey, W. Nazarewicz, A. Ravlić, and J. Sadhukhan, "Local QRPA inertia for symmetric-asymmetric fission dynamics" , International Conference on Heavy-Ion Collisions at near-barrier energies (FUSION23), Shizuoka, Japan, November 19 – 24, 2023.
5. N. Hinohara, T. Oishi, and K. Yoshida, "Energy-weighted sum rule for multipole and spin-M1 transitions and ground-state properties" , The workshop on frontier nuclear studies with gamma-ray spectrometer arrays (gamma24), Minoh Campus, Osaka University, Minoh, Japan, March 26 – 28, 2024.
6. A. Kumar, "Shell model study of β^--decay properties of N = 126, 125 nuclei" , The workshop on frontier nuclear studies with gamma-ray spectrometer arrays (gamma24), Minoh Campus, Osaka University, Minoh, Japan, March 26 – 28, 2024.
7. K. Yoshinaga, T. Nakatsukasa, and N. Shimizu, "Shell model calculation using Gogny-type interactions" , The workshop on frontier nuclear studies with gamma-ray spectrometer arrays (gamma24), Minoh Campus, Osaka University, Minoh, Japan, March 26 – 28, 2024.
8. A. Kanai and N. Hinohara, "Toward a precise calculation of phase space factor in double beta decay" , Unraveling the History of the Universe and Matter Evolution with Underground Physics (UGAP2024), Tohoku University, Sendai, Japan, March 4 – 6, 2024.
9. C. Ruike, N. Hinohara, and T. Nakatsukasa, "Neutron pairing rotational moments of inertia in Ni, Sn, and Pb isotopes" , The workshop on frontier nuclear studies with gamma-ray spectrometer arrays (gamma24), Minoh Campus, Osaka University,

Minoh, Japan, March 26 – 28, 2024.

（3）国内学会・研究会発表

A）招待講演

1. 中務 孝、「原子核集団運動理論の発展と展望」、九州大学理論核物理研究会「現代核物理の拡がりと展望」、九州大学伊都キャンパス、2023 年 7 月 19 – 21 日 .
2. T. Nakatsukasa, “Pair dynamics in nuclei and nuclear matter” , RCNP Workshop on Microscopic approach from pair correlation to pair condensation, RCNP, Osaka University, Ibaraki, Japan, September 4 – 6, 2023.
3. 清水 則孝、「原子核構造計算」、富岳成果創出加速プログラムキックオフミーティング、慶応大学日吉キャンパス、2023 年 6 月 20 日 .
4. 日野原 伸生、「理論からみた RIBF で取得すべきデータ 1 」、TRIP-RIBF 実験キックオフミーティング、理化学研究所 (ハイブリッド)、2023 年 4 月 21 日 .
5. 日野原 伸生、「スピン三重項対相関と関連実験量」、原子核におけるスピン自由度の織り成すダイナミクス、大阪大学核物理研究センター、2023 年 12 月 11 – 13 日 .
6. 鷲山 広平、「密度汎関数法に基づく大振幅集団運動」、九州大学理論核物理研究会「現代核物理の拡がりと展望」、九州大学伊都キャンパス、2023 年 7 月 19 – 21 日 .
7. C. Ruike, “Neutron pairing rotation within the BCS model” , RCNP Workshop on Microscopic approach from pair correlation to pair condensation, RCNP, Osaka University, Ibaraki, Japan, September 4 – 6, 2023.

B）一般講演

1. 日野原 伸生、Xilin Zhang、Jonathan Engel、「有限振幅法のエミュレータ」、日本物理学会 2024 年春季大会、オンライン、2024 年 3 月 18 – 21 日 .
2. 鷲山 広平、江幡 修一郎、吉田 賢市、「非軸対称変形と巨大単極共鳴の進化」、日本物理学会 2024 年春季大会、オンライン、2024 年 3 月 18 – 21 日 .
3. 吉永 孝太、清水 則孝、中務 孝、「Gogny 有効相互作用を用いた殻模型計算」、日本物理学会 2024 年春季大会、オンライン、2024 年 3 月 18 – 21 日 .
4. 金井 敦哉、「二重ベータ崩壊に向けた Dirac 方程式による束縛・散乱状態の電子波動関数の計算」、第 69 回原子核三者若手夏の学校、国立オリンピック記念青少年総合センター、2023 年 8 月 17 – 21 日 .
5. 類家 千怜、「BCS 理論を用いた原子核対回転に伴う慣性モーメントに関する研究」、第 69 回原子核三者若手夏の学校、国立オリンピック記念青少年総合センター、2023 年 8 月 17 – 21 日 .
6. 類家 千怜、日野原 伸生、「対回転慣性モーメントの分析を通した中性子対相関に関

する考察」、日本物理学会 2024 年春季大会、オンライン、2024 年 3 月 18 – 21 日 .

C）ポスター発表

1. 類家 千怜、「原子核超流動に起因する対回転慣性モーメントの解析」、計算物理春の学校 2024、沖縄県市町村自治会館、2024 年 3 月 11 – 15 日 .

その他

（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（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、中性子星インナー・クラスト構造に関わるバンド計算の手法について、計算物性分野の知見に関して情報交換を実施 .
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・実験、原子核実験分野との連携 .

産学官連携

なし

国際連携・国際活動

1. 中国・浙江大と中性子星のクラスト構造・グリッチ起源に関する共同研究を日中韓フォーサイト事業「２１世紀の原子核物理学」の中で実施（中務）.
2. 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世紀の原子核物理学」の一般として実施（日野原）.

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

なし

9. 管理・運営

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
学群教育会議議員
理工学群物理学類長
理工学群運営委員会委員
理工学群共通数学検討委員
ダイバーシティ・アクセシビリティ担当教員
チュートリアル教育推進委員会委員

清水則孝

計算科学研究センター 共同研究委員会委員
計算科学研究センター 先端計算科学推進室員

日野原伸生

計算科学研究センター 情報セキュリティ委員
数理物質系情報環境委員会委員
自然系学類計算機委員会委員長

10. 社会貢献・国際貢献

中務 孝

Editor for European Physical Journal A
Editor for International Journal of Modern Physics E
西宮湯川記念賞選考委員会委員（2021・2022）委員長 (2023)
素粒子奨学会運営委員・中村誠太郎賞選考委員
HPCI システムの利用研究課題選定レビュアー
日本物理学会受賞候補等推薦委員会委員
日本物理学会若手奨励賞（理論核物理領域）選考委員
第 19 回日本物理学会 Jr. セッション（2023）審査委員
第 12 回茨城県高校生科学研究発表会審査委員
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
核理論委員会委員
日本原子力研究開発機構特定課題推進員研究業績評価会審査員
日本原子力研究開発機構先端基礎研究評価委員会委員

清水則孝

計算基礎科学連携拠点 運営委員会 委員
HPCI システムの利用研究課題選定レビュアー
埼玉大学　テニュア審査委員会　外部委員

日野原伸生

京都大学基礎物理学研究所共同利用運営委員会委員

11. その他

海外長期滞在、フィールドワークなど

1. 日野原、ミシガン州立大学、米国（国際共同研究加速基金（国際共同研究強化 (A)））、2023 年 4 月 – 10 月 .

IV. 量子物性研究部門

1. メンバー

教授	矢花　一浩、大谷　実
准教授	小泉　裕康、仝　暁民
講師	前島　展也
助教	佐藤　駿丞、萩原　聡
主任研究員	長谷川　太祐
研究員	黒田　文彬
学生	大学院生　6 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・材料科学や物性物理学、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。当部門は光と物質の相互作用に関係した研究や、化学電池、触媒・腐食現象など、実社会と強く結びつい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性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（TDDFT）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。また電気化学反応に有効なシミュレーション法として、有効遮蔽媒質 (ESM) 法と古典溶液理論 (RISM) を融合した ESM-RISM の開発を進めており、汎用ソフトウェアである Quantum ESPRESSO にコードを提供するとともに、その普及のため多くの企業研究者が参加するコンソーシアムを運営している。

また、今年度は学振外国人特別研究員として Sri Kasi Matta（〜 2023.8.23）、外国人受託研究員として王 軍平（煙台大学、准教授 , 2023.6.20 〜）の 2 名の受け入れを行なった。

3. 研究成果

[1] 菱形硫化ホウ素 / 水溶液界面における酸素発生反応機構の量子・古典融合理論による理論的解析（萩原、黒田、大谷）

環境負荷が小さい水の電気分解によって得られるエネルギーの蓄積・運用技術は、カーボンニュートラル社会の実現において重要なテーマである。近年、我々は、菱形硫化ホウ素 (r-BS) とグラフェンナノプレートを組み合わせた r-BS + G がアルカリ水溶液の電気分解において律速となる酸素発生反応 (OER) に対して高い効率を有する電極触媒となることを、筑波大学の実験グループとの共同から見出した。r-BS + G 電極触媒のさらなる高性能化を目指して、格子欠陥を有する r-BS/1M-KOH(aq) 界面に対して昨年度開発した誘電率補正した古典溶液理論と密度汎関数法を組み合わせた ESM-RISM 法を適用し、OER に対する活性サイトとその触媒機能の発現機構を解析した。

OER 反応過程における自由エネルギー変化を調べた結果（図 1(a)）、表面第一層と二層にホウ素欠をもつ r-BS/1M-KOH(aq) 界面 (V_{B1} および V_{B2}) が最も小さいエネルギー障壁を有することがわかった。OER の平衡電位 (E_{OER}) に対応するバイアスを印加したところ、V_{B2}（V_{B1}）には正（負）の電荷が誘起されることがわかった（図 1(b)）。これは、平衡電位において正に帯電する VB2 を有する界面の方が V_{B1} より静電引力によって OH^- イオンを引き付けやすいことを意味している。この関係は、図 1(c) に示す電極表面周囲のイオン密度分布によって確認することができる。アルカリ水溶液中の OER は水溶液中の OH^- イオンが反応のトリガーであることから、自由エネルギー障壁の低さに加えて、OH^- イオンを引き寄せやすい V_{B2} の方が OER に有利であると考えられる。また、バイアス印加時に導入される余剰電荷の符号は一般にゼロ電荷電位とターゲットとなる電位の相対関係によって決まる。したがって、本研究成果は、r-BS に限らず今後の電極触媒材料を設計する上で有用な知見を与えることが期待される。

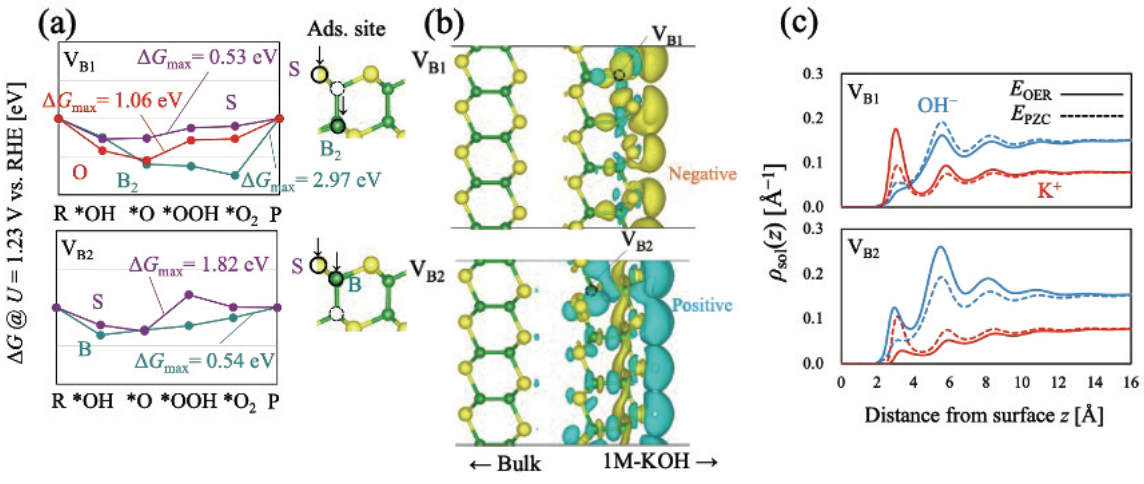


図 1 (a) OER 平衡電位 (U = 1.23 V vs. RHE) における反応経路に沿った自由エネルギー変化。(b) バイアス印加によって誘起された余剰電荷分布。(c) 1M-KOH 水溶液中のイオン密度分布。赤と青はそれぞれ K+ と OH–イオンの密度分布であり、実線と波線は、E_{OER} およびゼロ電荷電位 (E_{PZC}) おけるイオン分布をそれぞれ表す。

[2] 固液界面における化学反応経路自動探索手法の開発（長谷川、萩原、大谷）

固体表面と液体界面で構成される固液界面は、蓄電池、触媒や金属腐食などの機能発現が起こる反応場として知られている。したがって、これらを利用した技術の向上には、固液界面における化学反応および電荷移動過程の微視的理解が重要である。しかし、固液界面ではさまざまな反応が起こるため、その反応過程を計算科学的手法によって詳細に調べることは困難である。そこで、本研究では、古典溶液理論と密度汎関数理論を組み合わせることで効率よく固液界面の物性値を計算することが可能な ESM-RISM 法と人工力を利用することで様々な反応経路を探索する化学反応自動探索手法である AFIR 法を組み合わせることで、固液界面における化学反応経路自動探索手法の開発を行い、それを Cu(111)/1M-NaCl 水溶液界面における水分子の分解反応過程へ応用した。

まず、水の分解反応にける反応中間体を吸着サイトの違いも考慮しながら計算し、それらの過程を結ぶ反応経路を詳細に探索することで、global reaction map を構築した (図 2(a))。そして、最も活性化障壁が低い最小エネルギー経路 (MEP) における反応過程を決定した図 2(b)。その結果、反応が進行するために必要な活性化障壁の高さが、界面環境によって異なることがわかった。この違いは、反応中間体と遷移状態に対する水和効果の違いから説明することが可能である。その結果、固液界面では二通りの反応経路が競合しながら水の分解が起こることがわかった。さらに、反応物の電荷解析を行ったところ、反応が進行するにつれて比較的大きな電荷が Cu(111) 表面に移動することがわかった図 2(c)。この電荷移動量は、電気化学的な反応過程に見られる量と整合することから、Cu(111)/ 水溶液界面における水分解反応は、電極電位によって促進することが可能であると考えられる。今後は、開発した固液界面における化学反応経路自動探索手法に電位制御手法を組み合わせることで、電気化学反応経路自動探索手法の開発を行なっていく予定である。

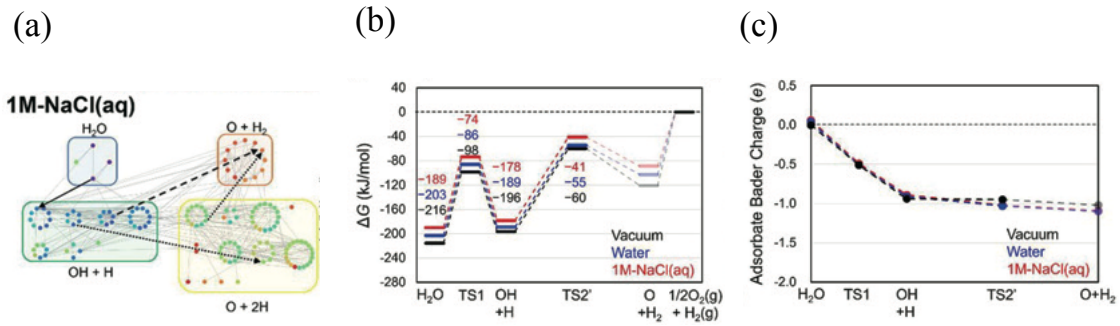


図 2 (a) Cu(111)/1M-NaCl(aq) 界面における global reaction map。H_2O, OH+H, O+2H, O+H_2 は始状態、反応中間体および終状態をそれぞれ表す。点は得られた構造を表し、線は反応経路を表す。 (b) 各構造の自由エネルギーダイアグラム。TS1 及び TS2' は遷移状態を表す。(c) 各構造における分子及び原子上の Bader 電荷。

[3] 高強度パルス光と物質の相互作用の系統的分析（矢花）

高強度超短パルスレーザーと物質の相互作用は、非線形な光応答や物質中での電子の超高速運動の解明など基礎科学の観点から興味が持たれるとともに、新奇な光デバイス原理の提案やレーザー加工初期過程の解明など、応用上も重要である。我々は、時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算により、光により生じる電子のダイナミクスを記述し、さらに電子の運動を光波の伝搬を記述するマクスウェル方程式と結合した枠組みを発展させて、高強度パルス光と物質の相互作用を調べている。

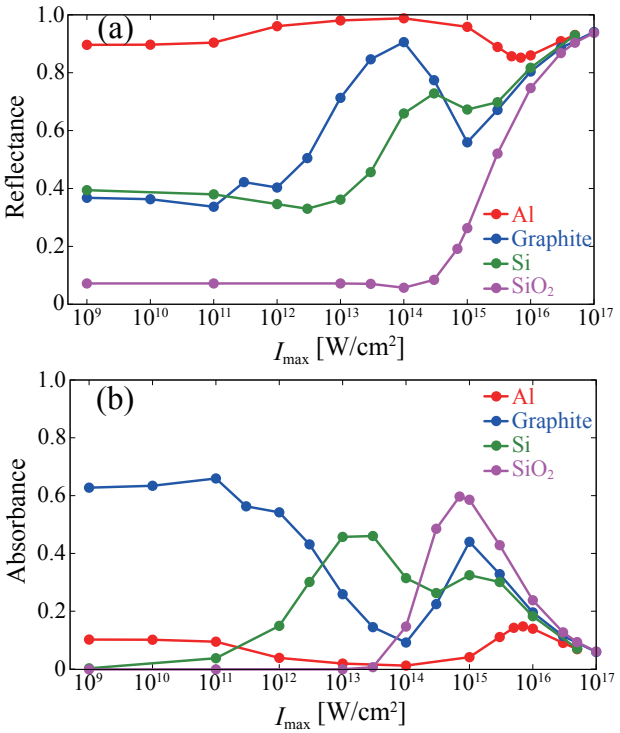


図 3：さまざまな物質からなる薄膜によるパルス光の反射率（上）と吸収率（下）を、パルス光の最大強度を横軸にとり示す。

本年度は、物質の非線形光応答に関する系統的な理解を得ることを目的として、金属 (Al)、半金属 (グラファイト)、半導体 (Si)、ワイドギャップ誘電体 (SiO2) の 4 つの物質からなる 50-200nm の厚さの薄膜に、様々な強度を持つ超短パルスレーザーが入射して起こる光伝搬の第一原理計算を行った。(A. Yamada, K. Yabana, arXiv:2401.13417)　計算は、我々のグループを中心に開発を続けているソフトウェア SALMON を用い、粗視化近似を取り入れたマルチスケール Maxwell-TDDFT 計算の枠組みで行った。

計算で得られた薄膜からの光の反射率と透過率を、入射パルスの最大強度を横軸にとり示した結果を図 3 に示す。弱い光の場合における誘電関数で記述される物質の個性を反映した光応答から、光電場が 1 原子単位に近い高強度の光で物質内の電子が瞬時に励起しプラズマ反射が主要となる場合まで、多様な非線形光応答を記述することに成功した。その過程で現れる、多光子吸収、可飽和吸収、有効誘電率が 0 を切ることによる反射の減少、電子が量子占有分布から古典ボルツマン分布に変化することによる吸収の変化など、多様な非線形メカニズムを明らかにした。

[4] 斜め入射するパルス光と物質の非線形相互作用を記述する計算方法の開発（矢花）

光が平坦な物質に斜方入射して起こる現象は、電磁気学の基本的な課題である。例えば p 偏光した光は、ある入射角（ブリュスター角）で無反射となる。また金属と誘電体の界面では、表面プラズモンとの結合が起こる。これらは線形光学における現象であるが、高強度パルス

光が入射し、非線形性が著しい場合にはどのような現象が起こるのかは興味深い。

昨年、平坦な物質への斜方入射が見かけ上 1 次元の波動方程式に類似した偏微分方程式で記述されることを用いた枠組みを構築したが、p 偏光入射では表面に分極電荷が発生するため電場が不連続となることに起因して、数値的なノイズが発生する困難があった。また、表面プラズモンポラリトンを記述しようとすると、真空領域でエバネッセント波が生じることから、数値的困難が生じることが判明した。そこで本年は、これらの困難を克服することを目標に研究を継続した。昨年度の枠組みではベクトルポテンシャルに対して方程式を立てており、その場合に表面での発散の困難が現れたが、代わりに電場と磁場に対する方程式を解くことで困難が解消できることがわかった。またエバネッセント波に伴う問題は、真空領域を誘電体＋金属からなる擬似的な誘電率が 1 にほぼ等しい物質と表すことで、一定の解決を得ることができた。これらの理論の発展により、線形領域で斜方入射が計算できることを確認した。図 4 に、クレッチマン配位における反射率の角度変化に現れる表面プラズモンに起因する反射の消失を示す。左は一定振動数を持つ連続波に対する解析的計算、右はパルス波に対する数値計算の結果である。数値計算は、パルスの長さにより反射消失の振る舞いが大きく変化しており、振動数に対する強い依存性を示唆している。今後マルチスケール Maxwell-TDDFT 計算法と組み合わせた実装と応用を計画している。

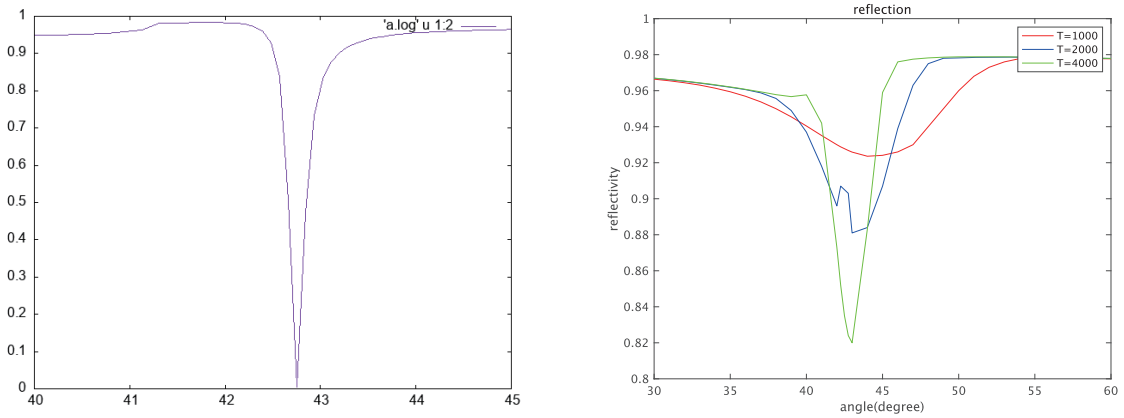


図 4: クレッチマン配位での光の反射率を、横軸を誘電体中の入射角にとり示す。左図は一定振動数の連続波に対する結果、右図はいくつかの時間長を持つパルス波に対する結果を示す。

[5] 遷移金属ダイカルコゲナイドに対するアト秒過渡吸収分光の第一原理的解析 (佐藤)

本研究では、時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算と先端のアト秒過渡吸収分光実験を組み合わせることで、２次元物質として近年注目を集めている遷移金属ダイカルコゲナイドの一種である $MoSe_2$ における光駆動アト秒電子ダイナミクスを調べた。図 5.(左) には第一原理計算の結果得られた基底状態の電子密度を示した。Mo 及び Se 原子付近に電子が局在している様子が確認できる。また、図 5.(右) には、レーザー励起後の電子密度変化を示した。Mo 原子上では極端な電子の局在化が見られるのに対し、Se 原子上では局在化が起

こていない。アト秒過渡吸収分光実験、及びその第一原理計算を行った結果、電子の局在化現象の有無に応じて、Mo 原子と Se 原子の内殻吸収端に、それぞれ電子局在化による多体効果、及び独立粒子描像に基づく占有変化に特有の光学等をアト秒の時間スケールで観測することに成功した。その結果、元素の特徴に応じて、原子スケールの局所的な電子のダイナミクスが物質の過渡的な光学応答を支配していることを明らかにした。この成果により、元素選択的に光による超高速な光学特性変調するための技術基盤を発展させた。この研究は、Max-Planck 研究所 (ハンブルク)、及びチューリッヒ工科大との国際共同研究であり、論文”Ultrafast electron localization and screening in a transition metal dichalcogenide”として Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 誌より出版された。

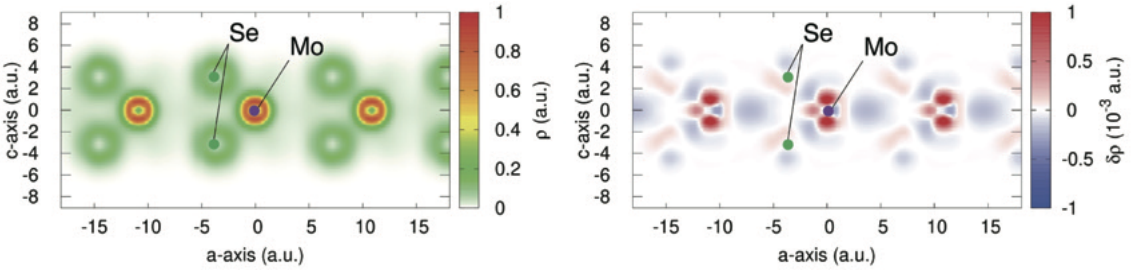


図 5. (左) 基底状態のおける MoSe2 の電子密度。(右) 光励起によって誘起される電子密度差。

[6] THz+MIR 光によるグラフェンからの高次高調波発生に関する研究 (佐藤)

本研究では、近年注目を集めている固体からの高次高調波発生の発生効率を向上することを目的とし、THz 光と中赤外 (MIR) 光の 2 色の光の光を照射することでグラフェンからの高次高調波発生が単色の場合と比べてどのように変化するのかを微視的電子ダイナミクス計算により調べた。図 6.(左) には、MIR 光に対する 7 次高調波発生強度を、2 色目の光出る THz 光の電場強度の関数として示している。赤線 (Para.) は THz 光と MIR 光の電場分極方向が並行な場合、青線 (Perp.) は垂直な場合の結果を示しており、いずれの場合も THz 光と MIR 光の非線形相互作用によって高調波強度が増大する様子が確認できる。これに対し、緑線 (Thermo.) は、THz 電場効果を電子温度上昇で近似した場合の結果を示しており、単純な電子温度上昇では高調波発生強度の増幅が起こらないことを示している。従来の研究では、THz 光がグラフェンに駆動する電子ダイナミクスを単純な電子温度の上昇で記述する熱力学的模型による解析が主流であったが、本研究では THz 光が物

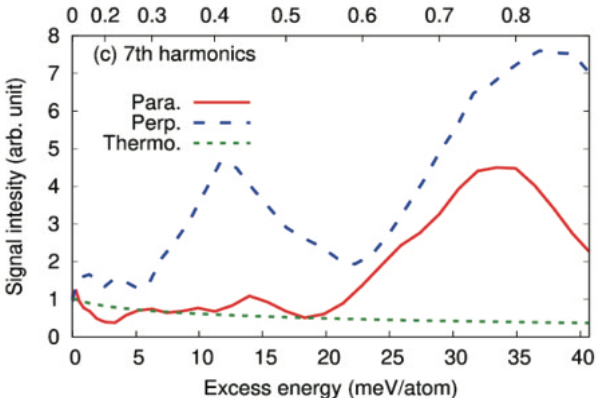


図 6. THz 光と MIR 光によって生じる 7 次高調波発生強度。

質内に駆動する電子ダイナミクスの非平衡性が、高次高調波発生現象において重要な役割を果たすことを明らかにした。本研究は、マックスプランク研究所 (ハンブルク) との共同研究であり、論文” Enhancement of high-order harmonic generation in graphene by mid-infrared and terahertz fields” として Physical Review B 誌から出版されている。

[7] 銅酸化物高温超伝導体のスピン渦誘起ループ電流から生じる磁場の計算（中山、王、小泉）

銅酸化物高温超伝導体にはナノサイズのループ電流が存在し、最適ドープの試料では、このループ電流の安定化温度が超伝導転移温度に一致することが知られている。そして、常伝導 - 超伝導の相転移の振る舞いもベレジンスキー＝コスタリッツ＝サウレス型でよく表され、超伝導にナノサイズ のループ電流が深く関わっていることが確実である。しかし、このループ電流がどのようなものであるかは、明らかになっていない。我々は、中性子散乱による時期励起スペクトルがスピン渦の存在を示唆し、EXAFS によるスモールポーラロンの存在が、スピン渦を安定化する芯を与えると考えられることから、多くの実験結果と整合性する

ループ電流として、`` スピン渦ループ電流” の存在を予言している。そして、この予言を確かめる為の検証実験として、ループ電流の作る磁場を測定することを提案している。

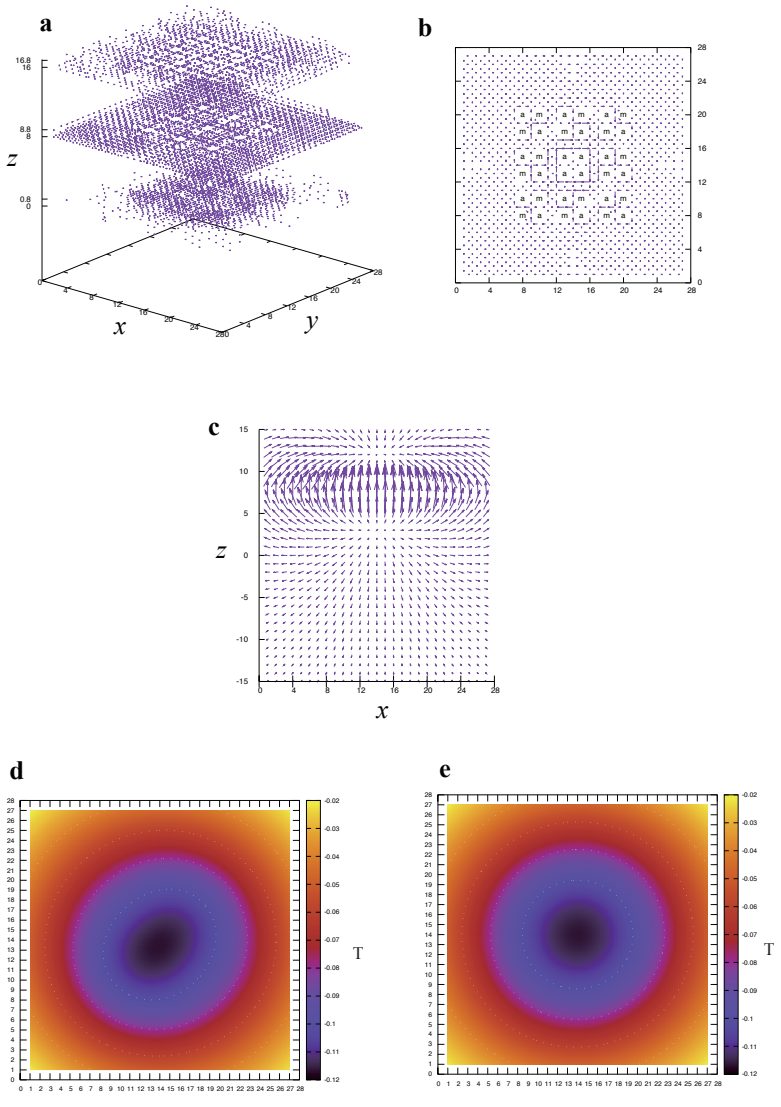


図 7. Bi2212 の CuO_2 2 重層が三層重なった系 (a) で、表面から二層目に (b) のような励起したループ電流が流れた場合の計算結果。磁場の断面図は (c) のようにない、表面付近の磁場分布は（d）のようになる。表面層の電流から生じる磁場の寄与を除いた磁場分布は、（e）のようになる。

ループ電流の励起状態を磁気パルスの印加で作り、その電流が作る磁場を表面近くで観測すれば、巻き数の異なるループ電流を生成することができ、観測される磁場は、ループ電流の巻き数の違いを反映したものになることが理論的に予言された。このことにより、スピン渦誘起ループ電流の存在の検証が可能であるという結論を得た。

[8] スピン渦誘起ループ電流を利用した量子ビット：２量子ビットからなる３ユニット系のシミュレーション （田谷、小泉）

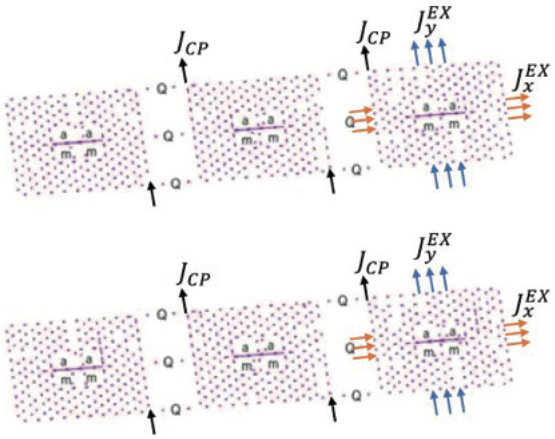


図 8. Bi2212 の CuO_2 ２重層が３つのユニットアイランドを形成した構造を持つナノ量子ビットアーキテクチャー。各アイランドには２量子ビット分の安定したループ電流状態が可能であり、アイランド間は量子ドットで結合されている。量子ドットを流れる電流を制御することにより、トフォリゲートなどが可能となる。

銅酸化物超伝導体に存在するナノサイズのループ電流は巻き数というトポロジカルな量子数を持ち、この巻き数は整数となり、低温では安定であると予想される。我々のこれまでの研究で、このループ電流は、外部電流によって、巻き数の違う状態に遷移させることができ、量子ビットとして使用可能であることが理論的に予想されることが示されている。これを“スピン渦誘起ループ電流量子ビット”と呼ぶ。このループ電流量子ビットのユニットとして、４つ組のループ電流（図 8 で aamm と表されているもの）を使ったものの利用を理論的に考察している。各ユニットは、安定性が高く、操作性も良い４つの量子状態からなり , ２量子ビットを表現できる。４つ組ループ電流量子ビットはアイランド化された試料に個別に存在し、アイランド間には、量子ドットが存在し結合されている。現在、３つのアイランドからなる系についてシミュレーションを行なっており、トフォリゲートという３量子ビットの重要な量子ゲートが簡単に達成できるという結果を得ている。

[9] 強相関物理系としての自然言語と量子コンピューターによる自然言語処理：プログラム lambeq の英語以外の言語への拡張（Hirankarn, Iqbal, 小泉）

自然言語処理は最近飛躍的に進歩し、ChatGPT などでは、分野によっては、人間を凌駕する、言語処理能力を示している。しかし、さらなる発展のためには、量子コンピューターを積極的に使用した処理が必要と考えられている。自然言語は数学的に見ると量子力学と類似の構造を持ち、強相関物理系と考えられる。これは、単語からなる文の意味が、単語各々の独立の意味から成り立っているのではなく、互いに強く影響しあって（強く相関して）文の

意味を作り出していることを考えれば、明らかである。現在、オックスフォード大学のグループにより作られた、lambeq という量子自然言語処理のためのソフトウェアが存在する。これはまだ、実験的な発展段階のソフトであり、また、英語以外の言語にはうまく対応していない。実際、量子コンピューターを使った自然言語処理には、確立した方法は存在しないが、すべての自然言語に共通する、チョムスキーの普遍文法に対応するものが存在し、量子コンピューターはそれを扱えると考えられている。また、我々の脳は量子コンピューターであると考える科学者（フォン・ノイマンもその一人である）は少なくなく、自然言語の理解には量子力学と量子コンピューターが必要であることは間違いない。我々は、現在 lambeq を英語以外の言語（日本語、ドイツ語、タイ語、マレーシア語）にも利用できるよう、拡張し、普遍文法的な自然言語処理を模索している。

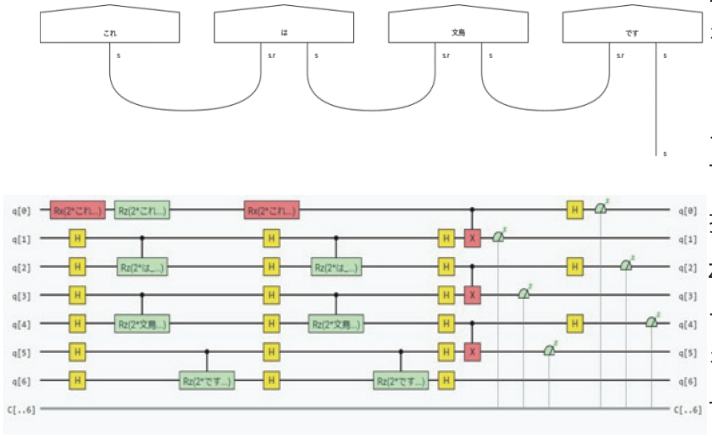


図 9. 上図）「これは文鳥です」という文章を４つのケットベクトルのテンソル積で表し、量子ビットに対応するワイヤーで繋いだストリング図。
下図）上記の構造の文に対し、パラメータを持つ x 軸の周りの回転（赤いボックス）と z 軸の周りの回転（緑のボックス）、そして、その他の量子ゲートを組み合わせ、量子回路を作る。パラメータは言語処理の目的に合わせて量子機械学習により最適化する。

[10] 銅酸化物高温超伝導機構解明への標準理論を超える新しい超伝導理論（小泉）

銅酸化物高温超伝導体は、1986 年に発見されたが、現在も多くの研究者が納得する理論的説明が存在しない。銅酸化物高温超伝導体の解明には、現在の標準理論である BCS 理論を包含するより一般的な超伝導理論が必要である。そのような理論をディラックが量子力学を現在の形に整備する際に無視した U(1) 位相を、ベリー位相の定式化を利用することにより、構築した（“Neglected U(1) phase in the Schrödinger representation of quantum mechanics and particle number conserving formalisms for superconductivity”、H. Koizumi, J. Phys. A: Math. Thero. 56 (2023) 455303）。さらに、この理論を適用することにより、ファラデーの電磁誘導起電力に対応するものが、無視した U(1) 位相より生じ、銅酸化物超伝導体で観測されている、ネルンスト効果を説明することを示した（“Supercurrent ans electromotive force generatons by the Berry connection from many-body wave functions”、H. Koizumi, J. Phys. A: Math. Thero. 56 (2023) 185301）。また、この理論に現れるローレンツ力以外の力は、第一種超伝導体が磁場中で起こすジュール熱なしの超伝導 - 常伝導転移を説明することを示した（“Reversible superconducting-normal phase

transition in a magnetic field: The energy-momentum balance including the velocity field of the Berry connection from many-body wave functions”、H. Koizumi, Phys. Scr. 99 (2024) 015952）。このジュール熱なしの相転移は、ローレンツ力だけでは説明できず、長い間説明されずにきた現象である。これが、新理論で説明できた訳である。

[11] Be 様高価イオンの二電子性再結合と放射再結合の干渉 （仝）

自由電子が Be 様高価イオンに捕獲されたときに放出される X 線の偏光について理論的に系統的な研究を行った。J=1/2 → J=1/2 遷移の二電子性再結合に着目し、その偏光は軸対称性のため偏光度がゼロであると予測された。二電子性再結合と放射再結合の干渉を含めると、電子エネルギーが共鳴エネルギーを越えると、図 10 のように、偏光度は劇的に変化する。われわれは、これまでの結果を広範な等電子系列に拡張し、低Zイオンでは、二電子状態の配置相互作用が大きく影響し、高Zイオンでは、Be-like イオンの基底状態の配置相互作用が重要な役割を果たすことを見いだした。本研究は国際共同研究結果として、科学雑誌『Physical Review A 107, 052801 (2023)』に発表した。

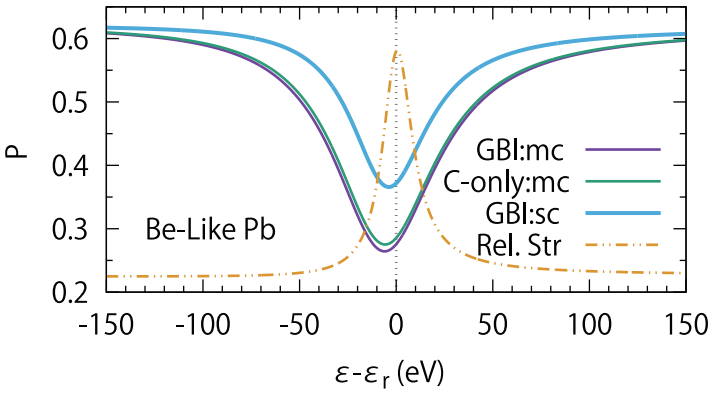


図 10：X 線の偏光度と電子エネルギーの関係

[12] 高次高調波発生のマルチスケールシミュレーション：ミクロからマクロへ （仝）

高強度レーザーパルス中のガスターゲットからの高次高調波発生 (HHG) を理論的に研究した。時間依存シュレディンガー方程式を単電子近似で解くことにより微視的高調波を求め、位相整合と自己吸収を伴う微視的高調波を 2 つのスケールで総和することにより巨視的高調波を求めた。ひとつはレーザー波長スケールで、伝播位相が変化してもレーザー強度は変化しない。もう 1 つは、レーザー強度と Gouy 位相シフトが変化するレーザービームウエストスケールである。Ar 原子を例にして、図 11 のように、巨視的な HHG エネルギー分布と発散を計算する。また、巨視的 HHG のガス圧力とガスジェットの位置依存性についても議論する。本研究は科学雑誌『Physical Review A 108, 023118 (2023)』に発表した。

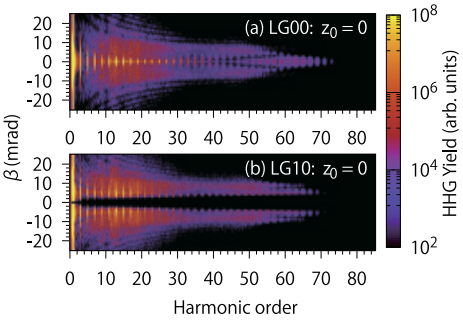


図 11: 巨視的高次高調波の空間発散と入射光の関係

[13] レーザー誘起３次元フロケワイル半金属（前島）

通常の絶縁体に高強度レーザーを照射した場合に発現するレーザー誘起フロケトポロジカル状態について数値的解析を行った。絶縁体を記述する理論模型である 3 次元 2 バンド模型に対してレーザー電場を導入した場合に出現するフロケワイル半金属特有の物性にについて数値対角化法によって調べた。特に、フロケ状態を形成する励起光の周波数およびピーク電場強度の変化に対するトポロジカル相転移の様子を誘電分極のパワースペクトルを数値計算することによって追跡した。その結果、フロケワイル半金属が発現するレーザー強度ではフロケバンドがギャップレスとなることに由来するドルーデ的な低エネルギーピーク構造が発現することを示した (図 12)。またこのピーク構造は自明絶縁体ならびにトポロジカル絶縁体に相転移する際消失することも確認できた。

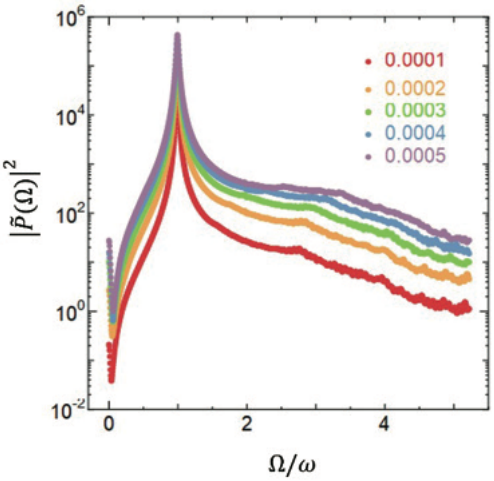


図 12：誘電分極のパワースペクトル $|P(\Omega)|^2$。右上の数値は照射レーザーの電場強度 (単位は a.u.)。

4. 教育

1. 防村　春樹（修士論文）　フロケワイル半金属における誘起双極子放射
2. 岡　　大介（卒業論文）　フロケワイル半金属のバンド構造のレーザー制御
3. 釆山　匠　（卒業論文）　レーザー駆動グラフェンのバンド構造の理論的解析
4. 内海　雄太（卒業論文）　ディラック半金属 Cd3As2 のバンド構造の理論的解析
5. 中山　陽貴　（ 卒業論文 ）　銅酸化物高温超伝導体におけるスピン渦誘起ループ電流による磁場の計算

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. HPCI ソフトウェア賞 [開発部門 奨励賞]、山田俊介 , 廣川祐太 , 飯田健二 , 佐藤駿丞 , 篠原康 , 竹内嵩 , 谷水城 , 植本光治、「SALMON（Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience)」、2023 年 5 月

外部資金

1. 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：22,727,000 円（2023 年度直接経費：2,472,000 円）

2. 日本学術振興会科学研究費･基盤研究 (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：13,400,000 円（2023 年度直接経費：2,700,000 円）
3. 日本学術振興会科学研究費・特別研究員奨励費「ペロブスカイト及び遷移金属ダイカルコゲナイドの超高速光物性に関する研究」、矢花一浩、2022-2023 年度、全年度直接経費：1,200,000 円（2023 年度直接経費：400,000 円）
4. 基盤研究 C、仝　暁民、代表、令和 5 年、520 千円 /(総額：4160 千円)、Coherent Control of Atomic Excitation in Strong Fields
5. 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（2023 年 度直接経費：700 千円)、「光による電子構造制御の第一原理計算」
6. 光科学技術研究振興財団 研究助成、佐藤駿丞、代表、2023 年度 , 直接経費 600 千円、「光駆動非平衡定常状態を利用した物性制御理論の構築」
7. 科研費基盤 (B)、佐藤駿丞、分担、2021-2024 年度、全年度直接経費:17,030 千円（2023 年 度直接経費：300 千円)、「THz メタマテリアル共振器によるフォノン強結合状態の実現と物性制御への応用」

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. S. Yamada, K. Yabana, T. Otobe, “Subcycle control of valley-selective excitations via the dynamical Franz-Keldysh effect in WSe2 monolayer” , Phys. Rev. B108, 035404 (2023).
2. A. Hashmi, S. Yamada, K. Yabana, T. Otobe, “Enhancement of valley-selective excitation by a linearly polarized two-color laser pulse” , Phys. Rev. B107, 235403 (2023).
3. A. Yamada, K. Yabana, “Interaction of intense ultrashort laser pulse with solid targets: A systematic analysis using first-principles calculations” , arXiv:2401.13417.
4. A. Mathew, S. Kruk, S. Yamada, K. Yabana, A. Kheifets, “Wide-bandgap optical materials for high-harmonics generation at the nanoscale” , arXiv.2402.00327.
5. N. Nakamura, N. Numadate, S. Oishi, X.M. Tong, X. Gao, D. Kato, H. Odaka, T. Takahashi, Y. Tsuzuki, Y. Uchida, H. Watanabe, S. Watanabe, and Hiroki Yoneda, “Strong Polarization of a J=1/2 to 1/2 Transition Arising from Unexpectedly Large

Quantum Interference” , Phys. Rev. Lett. 130, 113001 (2023).

6. X.M. Tong, X. Gao, D. Kato, and N. Nakamura, “Interference between dielectronic and radiative recombination of Be-like highly charged ions” , Phys. Rev. A 107, 052801:1-5 (2023).
7. X.M. Tong, “Multiscale simulation of high-order harmonic generation: From microscopic to macroscopic” , Phys. Rev. A 108, 023118:1-9 (2023).
8. H. Koizumi, “Reversible superconducting normal phase transition in a magnetic field: Theenergy momentum balance including the velocity field of the Berry connection from many body wave functions” , Phys ica Scripta 99 (2024) 015952. arXiv:2308.00912.
9. H. Koizumi, “Neglected U(1) phase in the Sc h r ödinger representation of quantum mechanics and particle number conserving formalisms for superconductivity ” , J. Phys. A: Math. Theor. 56(2923)455303 (2023) .
10. H. Koizumi, “Supercurrent and electromotive force generations by the Berry connection from many-body wave functions” , J. Phys. A: Math. Theor. 56, 185301 (2023).
11. H. Koizumi, H. Nakayama, H. Taya, “Calculations of magnetic field produced by spin-vortex-induced loop currents in Bi 2 Sr 2 Ca Cu 2 O 8+ δ thin films using the particle-number conserving Bogoliubov-de Gennes formalism” , arXiv:2403.15177.
12. H. Koizumi, “Gauge invariant quantization for circuits including Josephson junctions” , arXiv:2403.08188.
13. Runnan Zhang, Ken-ichi Hino, Nobuya Maeshima, Haruki Yogemura, Takeru Karikomi, “Laser induced surface magnetization in Floquet-Weyl semimetals” , Phys. Rev. B 108, 155308 (2023).
14. N. Maeshima and K. Hino, “Multi-triplon Excitations of Hubbard Ladders with Site-dependent Potentials” , accepted for publication in J. Phys. Soc. Jpn. (2024).
15. Linghui Li, Satoshi Hagiwara, Cheng Jiang, Haruki Kusaka, Norinobu Watanabe, Takeshi Fujita, Masashi Miyakawa, Takashi Taniguchi, Fumiaki Kuroda, Minoru Otani and Takahiro Kondo, “Boron monosulfide as an electrocatalyst for the oxygen evolution reaction” , Chemical Engineering Journal 471 144489 (2023).
16. Taisuke Hasegawa , Satoshi Hagiwara , Minoru Otani , and Satoshi Maeda, “A Combined Reaction Path Search and Hybrid Solvation Method for the Systematic Exploration of Elementary Reactions at the Solid Liquid Interface ” , The Journal of Physical Chemistry Letters 14 ,8796 (2023).
17. Fumiaki Kuroda, Satoshi Hagiwara, and Minoru Otani, “Structural changes in the

lithium cobalt dioxide electrode: A combined approach with cluster expansion and Bayesian optimization" , Physical Review Materials, 7 , 115402 (2023) .

18. Satoshi Hagiwara, Fumiaki Kuroda, Takahiro Kondo, and Minoru Otani, "Electrocatalytic mechanisms for an oxygen evolution reaction at arhombohedral boron monosulfide electrode/alkaline medium interface" , ACS Applied Materials and Interfaces , 15 , 50174 (2023)
19. U. Lin, M. R. Lai, M. Otani, T. Miyazaki, C. Jiang, "Solvent effects on anchoring ability of Ni2(dobpdc) to mitigate dissolution of lithium polysulfides in Li S batteries: A combined DFT and 3D RISM modeling s tudy" , Submitted to ACS Central Science.
20. Taisuke Hasegawa, "Nuclear quantum dynamics of three dimensional condensed phase systems by the constant uncertainty molecular dynamics" , The Journal of Physical Chemistry Letters 14 ,8043 8049 (2023)
21. Kevin Lively, Shunsuke A. Sato, Guillermo Albareda, Angel Rubio, Aaron Kelly, "Revealing ultrafast phonon mediated inter-valley scattering through transient absorption and high harmonic spectroscopies" , Phys. Rev. Research 6, 013069 (2024).
22. Wenwen Mao, Angel Rubio, Shunsuke A. Sato, "Enhancement of high order harmonic generation in graphene by mid infrared and terahertz fields" , Phys. Rev. B 109, 045421 (2024)
23. Fumiya Sekiguchi, Minoru Sakamoto, Kotaro Nakagawa, Hirokazu Tahara, Shunsuke A. Sato , Hideki Hirori, Yoshihiko "Enhancing high harmonic generation in GaAs by elliptically polarized light excitation" , Phys. Rev. B 108, 205201(2023)
24. Shunsuke Tanaka, Yuta Murotani, Shunsuke A. Sato, Tomohiro Fujimoto, Takuya Matsuda, Natsuki Kanda, Ryusuke Matsunaga, Jun Yoshinobu, "Frequency-resolved Microscopic Current Density Analysis of Linear and Nonlinear Optical Phenomena in Solids" , J. Phys. Soc. Jpn. 92, 094401 (2023).
25. S. Tanaka, Y. Murotani, Shunsuke A. Sato, T. Fujimoto, T. Matsuda, N. Kanda, R. Matsunaga, J. Yoshinobu, "Gapless detection of broadband terahertz pulses using a metal surface in air based on field- induced second-harmonic generation" , Appl. Phys. Lett. 122, 251101 (2023).
26. Alberto Castro, Shunsuke A. Sato, "Optimizing Floquet engineering for non-equilibrium steady states with gradient-based methods" , SciPost Phys. 15, 029 (2023).
27. M. Volkov, S. A. Sato, A. Niedermayr, A. Rubio, L. Gallmann, U. Keller, "Floquet-Bloch resonances in near-petahertz electroabsorption spectroscopy of SiO2" , Phys. Rev. B 107, 184304 (2023).

28. Hannes Hübener, Umberto De Giovannini, Shunsuke A. Sato, Angel Rubio, “Floquet band engineering in action”, Science Bulletin 68, 751 (2023).
29. Alberto Castro, Umberto De Giovannini, Shunsuke A. Sato, Hannes Huebener, Angel Rubio, “Floquet engineering with quantum optimal control theory”, New Journal of Physics, Volume 25, 043023（2023）
30. Z. Schumacher, S. A. Sato, S. Neb, A. Niedermayr, L. Gallmann, A. Rubio, U. Keller, “Ultrafast electron localization and screening in a transition metal dichalcogenide”, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 120, e2221725120 (2023).
31. Hideki Hirori, Shunsuke A. Sato, Yoshihiko Kanemitsu, “High-Order Harmonic Generation in Solids: The Role of Intraband Transitions in Extreme Nonlinear Optics”, J. Phys. Chem. Lett. 15, 2184 (2024).

B）査読無し論文

なし

（2）国際会議発表

A）招待講演

1. K. Yabana, “Propagation of extreme pulsed light: first-principles computational study”, 10th Int. Symp. on Ultrafast Dynamics & Ultrafast Bandgap Photonics, Hersonissos, Crete, Greece, June 5-9,2023.
2. K. Yabana, “Computational optical science at the atomic scale – First-principles approach –”, 34th IUPAP Conf. on Computational Physics (CCP2023), Kobe, Japan, Aug. 5-8, 2023.
3. K. Yabana, “International and Interdisciplinary Research My personal ex periences --”, TriSTAR Hamburg Forum for young researchers, online, Nov. 27-28, 2023.
4. K.Yabana, “Development of First Principles Computational Method for Nonlinear/ Nonlocal Nanophotonics”, 13th Int. Conf. on Advanced Materials and Devices Jeju, Korea, Dec. 4- 8, 2023.
5. T. Okumura,…,X.M. Tong et al., “High-resolution spectroscopy of electronic K x rays from muonic atoms using transition-edge sensor microcalorimeters”, XXXIII International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC 2023), Ottawa, Canada, July 25- August 1, 2023.
6. H. Koizumi, “Supercurrent and Electromotive Force Generations by the Berry Connection from Many-Body Wave Functions”, the 25th International Conference on the Jahn-Teller Effect ,Online, U of York, Toronto, Canada, May 15-18

7. Shunsuke A. Sato, “Ab-initio computation for attosecond electron dynamics in solids” , the XXXIII International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC 2023), Shaw Centre, Ottawa, Canada, July 25- August 1, 2023.
8. Shunsuke A. Sato, “Ab initio simulations of attosecond transient spectroscopy using time dependent density functional theory” Atto2Nano: modeling ultrafast dynamics across time scales in condensed matter” , CECAM HQ EPFL, Lausanne, Switzerland, September 26-29, 2023.
9. Shunsuke A. Sato, “First-principles electron dynamics simulations for light-induced electron dynamics in solids” , Optica High-brightness Congress 2024, Hotel Savoyen Vienna Vienna, Austria, March 12-14, 2024.

B）一般講演

1. A. Yamada, S. Yamada, K. Yabana, “Nonlinear Propagation of High-Intensity Pulsed Ligh First-principles Calculations-” , CLEO2023, San Jose, USA, May 5-12,2023.
2. K. Yabana, “Development and applications of SALMON – First-principles computations in optical science -” , 2023 CCS-LBNL Workshop, Univ. Tsukuba, Apr.13, 2023.
3. K. Yabana, “Computational Optical Science at the Atomic Scale – First-Principles Approach” , UQ SCMB Chemistry Seminar, Aug. 21, 2023 (online).
4. K. Yabana, “Time-Dependent Density Functional Theory for Extremely Nonlinear Optics” , HiLASE, Prague, Czch, Sep.18, 2023.
5. X.M. Tong, D. Kato, T. Okumura, S. Okada and T. Azuma, “Electronic K x rays emitted from muonic atoms: an application of density functional theory” , XXXIII International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC 2023), Ottawa, Canada, July 25- August 1, 2023.
6. D. Chetty, R.D. Glover, X.M. Tong, B.A. deHarak, H. Xu, N. Haram. K. Bartschat, A.J. Palmer, A.N. Luiten, P.S. Light, I.V. Litvinyuk, R. T. Sang, “Carrier-Envelope-Phase Effects for Multiphoton and Tunnel Excitation of Argon” , XXXIII International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC 2023), Ottawa, Canada, July 25- August 1, 2023.
7. Satoshi Hagiwara , Fumiaki Kuroda , Linghui Li , Takahiro Kondo, and Minoru Otani , “Oxygen evolution reaction at the rhombohedral boron mono sulfide electrode/ alkaline medium interface ” , CCP2023 34th IUPAP Conference on Computational Physics
8. M. Otani, “Study of electrochemical interfaces using DFT and the classical liquid

theory hybrid simulations” , 244th ECS Meeting Gothenburg, Sweden, Oct. 8-12, 2023.

9. F. Kuroda, S. Hagiwara, and M. Otani, “A combined approach with cluster expansion and Bayesian optimization: Structural changes in LiCoO2 electrode” , MRM 2023 (Advanced Materials Research Grand Meeting), K yoto、Dec.11-16.2023.
10. Shunsuke A. Sato, “Ab initio computation for attosecond electron dynamics in solids” , the XXXIII International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC 2023), Shaw Centre, Ot tawa, Canada, July 25-August 1, 2023.
11. Shunsuke A. Sato, “Limitations of time-dependent mean-field approximations to second-order nonlinear optical phenomena” , RIKEN Symposium Second Workshop on Fundamentals in Density Functional Theory (DFT2024), 20–22 February 2024, Auditorium, Integrated Innovation Building (IIB), RIKEN Kobe Campus

（3）国内学会・研究会発表

A）招待講演

1. 矢花一浩、「アト秒科学と電子ダイナミクス計算」、レーザー学会年次大会、日本未来科学館、2024 年 1 月 19 日
2. 佐藤駿丞、「固体中の光駆動非平衡電子ダイナミクスの第一原理計算」、非平衡固体物性の最前線、東京大学本郷キャンパス 2023 年 11 月 13-14 日
3. 佐藤駿丞、「実験と理論の比較から考察する固体高次高調波発生」、日本物理学会 2024 年春季大会、[オンライン開催 2024 年 03 月 18-21 日](シンポジウム講演)

B）その他の発表

1. 矢花一浩、「極限的パルス光とナノ物質の相互作用に対する第一原理計算」、第 10 回 HPCI システム利用研究課題成果報告会、品川グランドセントラルタワー、2023 年 10 月 25 日 -26 日
2. 奥村 拓馬、東 俊行 D.A. Bennett、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、小湊 菜央、三宅 康博、K.M. Morgan、野田 博文、G.C. O’ Neil、岡田 信二、奥津 賢一、大豆生田 創、大澤 崇人、N. Paul、C.D. Reintsema、佐藤 寿紀、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、反保 元伸、竜野 秀行、X.M. Tong、外山 裕一、J.N. Ullom、渡辺 伸、山田 真也、山下 琢磨、「超伝導転移端検出器で探るミュオンアルゴン多価イオンのダイナミクス」、日本原子衝突学会第 48 回年会、東京工業大学、大岡キャンパス、2023 年 11 月 25-26 日

3. 小泉裕康、「エラー訂正を備えた量子コンピューターの実現について」GIFT フォーラム、Zoom、主催：株式会社 IBJ、2023 年 6 月 23 日
4. 小泉裕康、「多体波動関数から生じるベリー接続に基づく超伝導理論 : ネルンスト効果と磁場中での超伝導ー常伝導相転移について」, 日本物理学会第 78 回年次大会 , 東北大学、2023 年 9 月 16-19 日
5. 田谷隼十、小泉裕康「銅酸化物超伝導体薄膜の量子ビットへの応用に関する理論」、日本物理学会第 78 回年次大会、東北大学、2023 年 9 月 16-19 日
6. 田谷隼十、小泉裕康、「スピン渦誘起ループ電流量子ビットによるトフォリゲートの実装に関する理論研究」、日本物理学会 2024 年春季大会、オンライン、2024 年 3 月 18-21 日
7. 小泉裕康、「ジョセフソン接合を使った量子ビットにおける Quasiparticle poisoning」、日本物理学会 2024 年春季大会、オンライン 2024 年 3 月 18-21 日
8. 大谷 実、「電気化学反応シミュレーション技術の開発」, 応用物理学会
9. 萩原聡、黒田文彬、Linghui Li、近藤剛弘、大谷実、「第一原理計算 古典溶液理論による 菱面体硫化ホウ素電極 アルカリ水溶液界面における酸素発生反応の研究」, 日本物理学会第 78 回年次大会
10. 大谷 実、「固液界面における酸化還元反応の第一原理的研究」2022 年度学際共同利用成果報告 ポスター発表 2023 年 10 月 23 日
11. 黒田 文彬、萩原 聡、大谷 実、「クラスター展開とベイズ最適化の複合的アプローチを用いた LiCoO2 の充放電過程における構造変化の研究」第 49 回固体イオニクス討論会、北海道大学、2023 年 11 月 15-17 日
12. 萩原 聡、第 3 回「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会
13. 佐藤駿丞、「第一原理電子ダイナミクス計算とアト秒光科学への応用」、オンライン物性理論セミナー , オンライン , 2023 年 4 月 25 日

（4）著書、解説記事等

1. H. Koizumi, (アメリカ数学会、Mathematical Review, レビュー記事) MR4583602 Lie, Seok Hyung; Jeong, Hyunseok Delocalized and dynamical catalytic randomness and information flow. Phys. Rev. A 107 (2023),042430.
2. H. Koizumi, (アメリカ数学会、Mathematical Review, レビュー記事) MR4620819 Li, Runze; Li, Dandan; Huang, Wei; Xu, Bingjie; Gao, Fei Tight bound on tilted CHSH inequality with measurement dependence. Phys. A 626 (2023), 129037.

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

1. 小泉 : GIFT フォーラム（6 月 23 日（金）Zoom、主催:株式会社 IBJ）において、「エラー訂正を備えた量子コンピューターの実現」について講演を行った。

国際連携・国際活動

矢花：オーストラリア国立大学の理論研究者と、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実施。マックスボルン研究所、インド工科大学ボンベイ校、蔚山科学技術大学の研究者が、それぞれ一カ月程度センターに滞在し、共同研究を実施。

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

矢花：SALMON の利用に関するチュートリアルを、大阪大学コンピュテーショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD) ワークショップにおいて、アドバンストコースとして年 2 回実施した。

9. 管理・運営

矢花:センター内の役職として、副センター長、センター長特別補佐、運営委員会委員、人事委員会委員、先端計算科学推進室室長、共同研究委員会委員。物理学域の役職として、運営委員会委員、物理学域だより編集委員。

前島：(学内) 物性・分子工学サブプログラム数理専攻セミナー（前期）世話人

小泉：(学内) 全学計算機システム　3D サテライト管理

10. 社会貢献・国際貢献

仝：科学雑誌 The European Physical Journal D の Associate Editor に務めている。

小泉：ヤーン = テラー効果に関する国際会議、Stirring committee 委員

11. その他

該当なし

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（数理物質科学研究科）
教授	庄司　光男（数理物質科学研究科）
准教授	原田　隆平（生命環境科学研究科）
助教	堀　優太（数理物質科学研究科）
助教	Kowit Hengphasatporn（生命環境科学研究科）
研究員	森田　陸離
研究員	宮川　晃一
研究員	下山　紘充
研究員	松井　正冬
研究員	Mrinal Kanti Si
研究員	藤木　涼
研究員	Sirin Sittiwanichai
学生	大学院生　8 名、学類生　3 名、研究生　1 名

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と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 5 年度は、【1】銅含有アミン酸化酵素におけるセミキノンラジカル状態の理論解明、【2】複合体構造を予測する計算手法の開発、【3】SOD1 タンパク質の Cys 酸化による構造変化の理論解析、【4】Computational study for drug discovery and design research、【5】3D-RISM 理論を用いた human-ZIP8 のイオン輸送に関する理論的研究、【6】膜タンパク質に対する創薬シミュレーション手法の開発、【7】Rational design of cyclopentadiene-based super- and hyperacids based on aromaticity、【8】宇宙生命連携についての研究を大きく進展させた。これらの研究では、計算科学研究センターのスパコン（Cygnus, Pegasus）、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、新しい研究に積極的に取り組んだ。

3. 研究成果

[1] 銅含有アミン酸化酵素におけるセミキノンラジカル状態の理論解明（庄司）

銅含有アミン酸化酵素 (CAO) は種々の生理活性アミン類の酸化的脱アミノ反応を触媒し、動植物や微生物に広く存在している。CAO は活性中心にトパキノン (TPQ) 補酵素と銅イオンを保持し、特異的活性を発現している。還元的半反応の最終過程において TPQ はセミキノン

ラジカル (TPQsq) 状態をとる。中性子構造解析を大阪医科薬科大の村川武史先生、大阪大学の岡島俊英先生らが、高分解能の中性子結晶構造解析に成功し、水素原子を含む原子位置が高分解能で決定された。本構造に対し、量子古典混合計算により、プロトン化状態の検証、セミキノンラジカルのスピン密度分布、UV-vis スペクトル帰属について理論解析を実施した (図 1)。

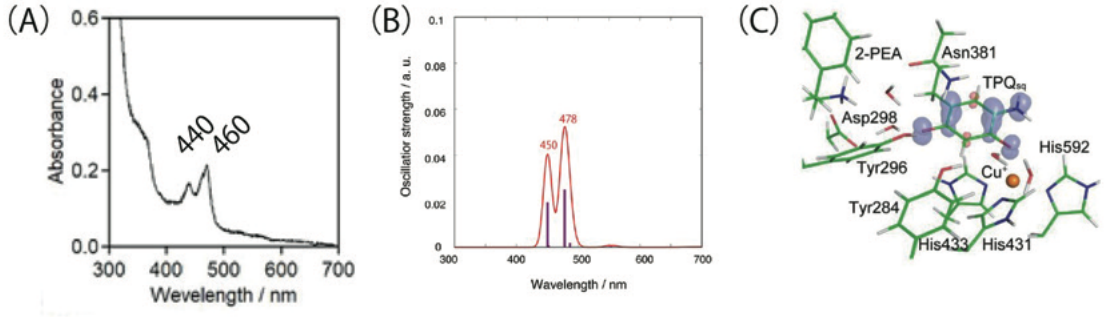


図 1. CAO セミキノンラジカル状態での (A)UV-vis スペクトル (実験) と TPQ-O2 位脱プロトン化状態での (B) UV-vis スペクトル (計算値)、(C) スピン密度分布。

[2] 複合体構造を予測する計算手法の開発（原田、Kowit、重田）

実験技術の進歩により、タンパク質と核酸（RNA）の複合体について全体構造ではないものの、部分構造が PDB に登録されはじめている。RNA と結合するタンパク質は、複数のドメイン構造がループ領域を介して連結したマルチドメイン構造を有している場合が多い。具体的には、ドメイン構造が RNA を掴むように結合して複合体を形成する。実験的には、ループ領域の揺らぎが大きいことから、複合体の全体構造の決定が難しいという課題を抱えている。ゆえに、揺らぎが小さい部分（ドメイン）構造のみが PDB に蓄積されている場合がほとんどである。以上の理由から、既存の実験（部分）構造を参照しただけでは複合体の全体構造の解明は難しく、新規技術の開発が必要である。そこで、新規技術が確立されれば、タンパク質と RNA の分子間相互作用を詳細に解析できるようになり、機能解析が進む。本研究では、構造決定で欠けている生体分子の動的情報を補うため、揺らぎを考慮したフレキシブルドッキングを実現し、タンパク質と RNA の複合体の全体構造を予測するモデリング技術を開発した（*Bull Chem. Soc. Jpn.*, **96**, 677-68, 2023）。課題として、生体分子の揺らぎは MD を活用してあらわに考慮できるものの、通常の MD が到達可能な時間スケールが複合体形成の時間スケールに遠く及ばない。そこで、我々のグループが独自に開発を進めている長時間ダイナミクス抽出法（*PaCS-MD, J. Chem. Phys.*, **139**, 035103, 2013) に基づき、複合体形成プロセスの抽出を試みた。PaCS-MD の適用にあたり、長時間ダイナミクス（現在の場合は複合体形成プロセス）の前（RNA 結合前）と後（RNA 結合後）の構造を指定しなければならない。そこで、RNA 結合前の構造を機械学習（AlphaFold2）に基づきアミノ酸配列から予測した。RNA 結合後の構造は、タンパク質と RNA が結合した実験（部分）構造を利用する。これら

の条件のもと、PaCS-MD に基づき個々の部分構造が実験構造へ遷移するのに有利な初期構造を選択しながら短時間 MD を繰り返し、合理的な複合体の全体構造へ近づけていく。PaCS-MD に基づく Protein-RNA フレキシブルドッキングの概略図を図 2 A に示す。

本手法の性能評価として、Protein-RNA の複合体が部分構造として実験的に決定されている「MUSASHI1-Protein（MSI1）」に適用し、複合体の全体構造を予測した。結果として、PaCS-MD に基づき複合体形成プロセスの抽出に成功し、MSI1 が有する 2 つのドメインで RNA を掴んでいる合理的な全体構造を予測できた。定量的な安定性評価として、図 2B に示すように既存の汎用的予測プログラム（Phyre2）から得られた全体構造と比較した。具体的には、両方法から生成された複合体構造に関し、タンパク質と RNA の結合自由エネルギーを MMGB/SA に基づき評価したところ、図 2B に示すように PaCS-MD で予測した複合体構造は Phyre2 と比較して安定な分子間相互作用エネルギーを示すことが分かった。以上の性能評価から、PaCS-MD はタンパク質と RNA の実験（部分）構造から複合体の全体構造を高精度に予測できることが分かった。

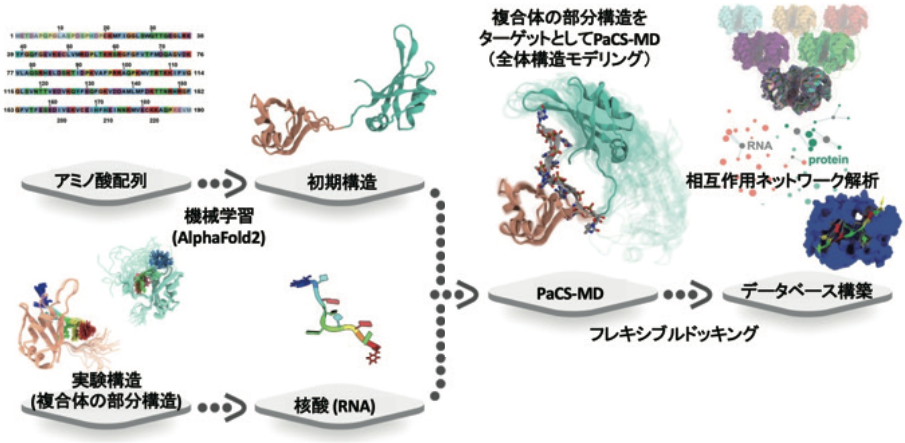


図 2A. PaCS-MD に基づく Protein-RNA フレキシブルドッキングの概念図。

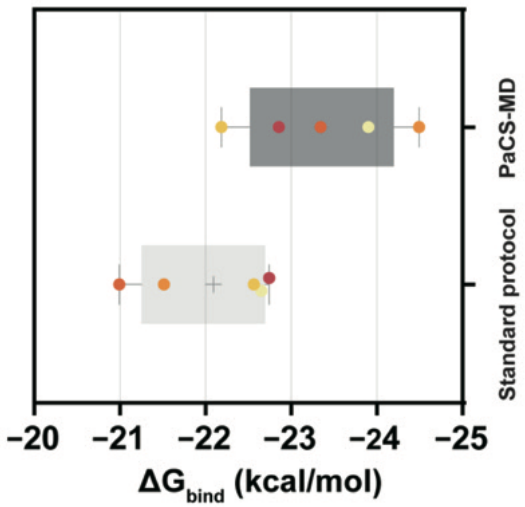


図 2B. MUSAHI1-Protein と RNA の結合自由エネルギー計算。PaCS-MD と Standard protocol（Phyre2）の性能評価。

今後の研究展開として、本手法を様々なタンパク質 -RNA ペアに適用しながら分子間相互作用を蓄積していくことで、データベースを構築していく。これにより、RNA を認識するために重要な相互作用を特徴づけることができるようになり、生体機能の制御に有用な Protein-RNA の相互作用パターンを推定できる。

[3] SOD1 タンパク質の Cys 酸化による構造変化の理論解析

スーパーオキシドディスムターゼ 1(SOD1) は、活性中心に Cu^{2+} と Zn^{2+} を保有するホモ二量体の金属タンパク質酵素であり (図 3)、活性酸素を酸素と過酸化水素に変換することにより、酸化ストレスから守る役目を果たしている。また、SOD1 は筋萎縮性側索硬化症 (ALS) として知られる神経変性疾患の原因としても知られており、特に、SOD1 のミスフォールディングや凝集化が ALS 発症の原因の一つとして考えられている。SOD1 は、酸化することにより Cu^{2+} と Zn^{2+} が活性中心から解離し、それによってミスフォールディングや凝集化が生じるのではないかと考えられている。よって本研究では、分子動力学 (MD) シミュレーションを用いて、SOD1 の酸化が Cu^{2+} と Zn^{2+} の解離やミスフォールディングに与える影響について調べた。

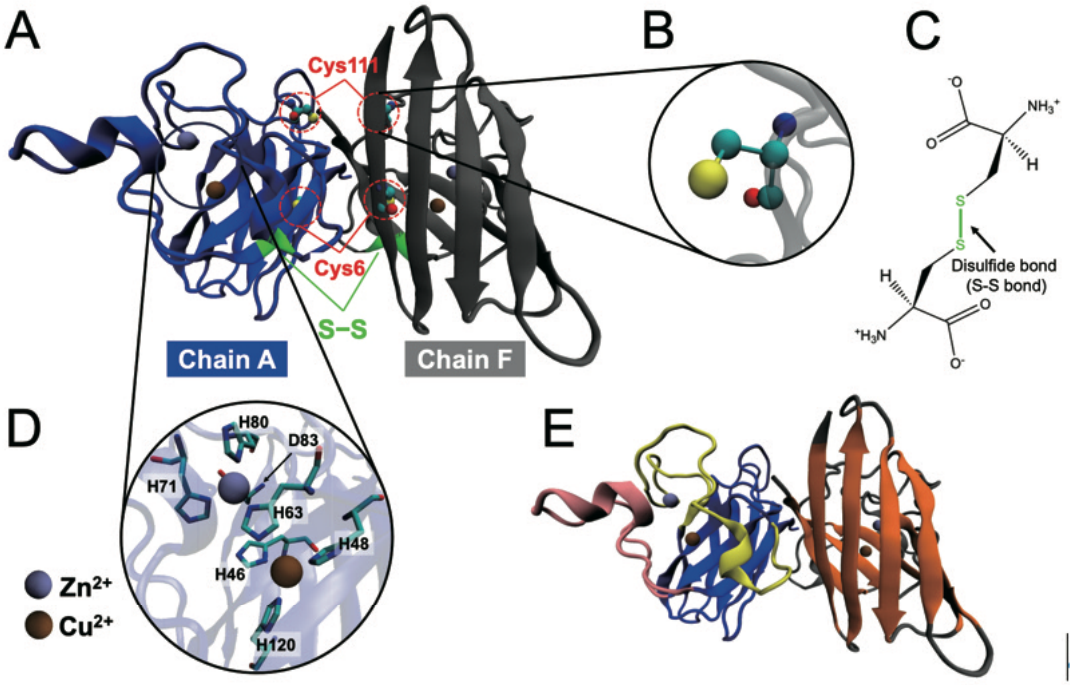


図 3 SOD1 タンパク質の構造。A: SOD1 の全体図。SOD1 は Chain A(青) と Chain F(灰) からなる。遊離している Cys は赤の破線で示し、S-S 結合をなす Cys は黄緑で示している。B: 遊離チオールの様子。チオール基 (-SH 基) の硫黄は他の残基と結合していない。C: ジスルフィド (S-S) 結合の様子。D: 金属配位の詳細。E: 主要なループ (Zn ループ : 黄、静電ループ : ピンク) と β - シート構造 (オレンジ)。

本研究では、SOD1 の 111 番目のシステイン残基 (Cys111) の酸化に注目し (図３)、Cys111 のチオール基が SO_2^- と SO_3^- に酸化された計算モデルについて MD シミュレーションを行った。平均二乗偏差 (RMSD) や平均二乗揺らぎ (RMSF) などの動的構造解析から、SOD1 内の静電ループ (図３E) が Cys111 の酸化や Cu^{2+} と Zn^{2+} の解離によって大きく影響を受け、構造揺らぎが大きくなることがわかった。SOD1 において、Zn^{2+} の結合は構造安定化に重要と考えられている、Zn^{2+} の解離は構造不安定化につながり、ミスフォールディングや凝集化を引き起こすと考えられている。よって、SOD1 の酸化による静電ループの不安定化が金属解離を引き起こし、SOD1 のミスフォールドを誘発し、凝集体形成に至るのではないかと考えられる。

[4] Computational study for drug discovery and design research (Kowit Hengphasatpoen, Sirin Sittiwanichai, R. Fujiki, Y. Shigeta)

Our research is dedicated to drug discovery and design, employing various computational tools such as molecular docking, molecular dynamics (MD) simulation, and machine learning (Fig.4). In our investigations, we applied molecular docking and fragment molecular orbital (FMO) calculations to assess the relationship between α -glucosidase inhibitory activity and 9-O-berberrubine carboxylates. FMO calculations revealed that compound 27 outperformed compound 29, which is attributed to the presence of a methyl group enhancing binding through hydrophobic interactions. Consequently, compound 27 shows promise as an AMPK activator, warranting further exploration for diabetes and diabetic nephropathy treatment. Moreover, we focused on 8-bromobaicalein, examining its potential as a dengue and Zika replication inhibitor in a cell-based system targeting flaviviral polymerase. Beyond its inhibitory effect on the SARs-CoV-2 virus, 8-bromobaicalein demonstrated potency against dengue and Zika viruses. Additionally, our predictions identified sulfonamide chalcone derivatives as potential dengue inhibitors. Initial screening of 27 sulfonamide chalcones via cell-based antiviral and cytotoxic assays highlighted SC27 as the most potent, inhibiting the SAM-binding site of NS5 methyltransferase, a target confirmed through computational and enzyme-based assays. For HIV protease inhibitors, this study explores novel antiretroviral therapies using machine learning. Ensemble models identify key substructures for drug development. Molecular docking guides the design of 160 darunavir analogs based on these substructures. High-scoring structures undergo 1D screening, considering beyond Lipinski’s rule of five and ADME predictions via the Combined Analog generator Tool (CAT). The approach aims to identify potential antiretroviral agents against HIV-1 proteases efficiently. This comprehensive approach underscores our commitment to advancing drug discovery and design through innovative computational methodologies.

Through collaboration with Prof. Shun Hirota (NAIST, Japan), we have elucidated the structural stability of antibodies in the dimeric (3D-DS) and tetrameric (#4VL) domain-swapping forms of

antibodies using hydrogen bonding analysis and 3D-RISM calculations (Fig.4). The computational results suggest that the instability of 3D-DS is in good agreement with experimental studies.

[5]　3D-RISM 理論を用いた human-ZIP8 のイオン輸送に関する理論的研究（藤木、Kowit、重田）

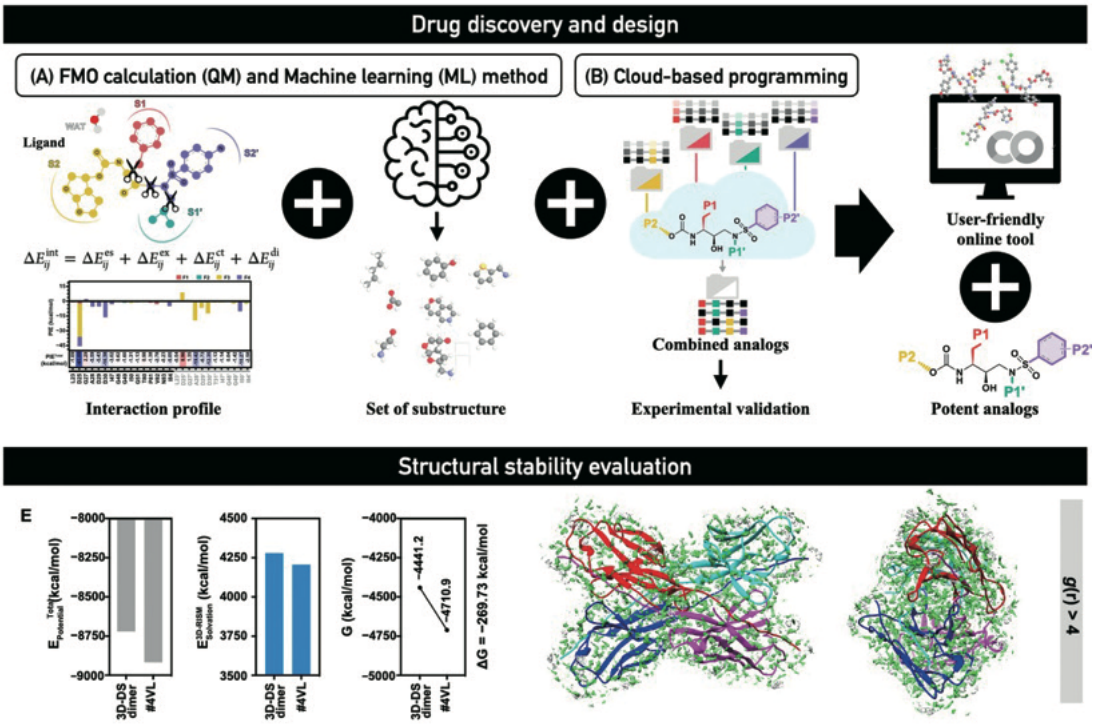


Fig.4 Our approach for the drug discovery and design using MD, ML, FMO, and docking. Structural stability of antibodies was performed by using FMO and 3D-RISM calculations.

本研究では人の体で亜鉛の輸送を行うタンパク質 human-ZIP8 に注目し、イオン輸送過程の理論的な解明を目的としている。ZIP ファミリーには 14 のメンバーが存在し、多くは主に人体での亜鉛のみの運搬に関わっているが、そのうち ZIP8 と ZIP14 は亜鉛だけでなくカドミウムやマンガンの運搬も行うことが知られている。しかし､その仕組みについては実験によって今も明らかにされていない。本研究は分子動力学（MD）シミュレーションと、金属イオンがどのように存在するか調査するために液体の統計力学理論の一つである 3D-RISM 理論を用いることで分子論に基づいた調査を行い、その仕組みを明らかにする。本年度はイオン輸送に重要な結合サイトの特定に取り組み、MD シミュレーションを実行することでイオン分布に関する知見を得ることができた。選択性フィルタである Q58 と E221 の双方を HIS に変えた変異体と Wild Type のそれぞれに対して MD シミュレーションを実行し、得られた構造について 3D-RISM 計算を実行した。その結果、イオン輸送経路の出口に当たる部分に存在するイオン結合ドメインが変異に対して安定的であり、その周囲の残基が変異に対応した構造変化を行うことが示唆された。特に出口付近の構造変化は顕著であり、これにより亜鉛イオ

ンが透過しやすくなることが予想された。3D-RISM 計算の結果も亜鉛イオンの分布が出口付近に集中したことから、この変異による相互作用の減少が亜鉛イオン輸送能の向上に寄与していると考えられる。これは先行研究の実験結果と一致しており、亜鉛の特徴的な選択性における重要な知見を得ることができた (図５)。

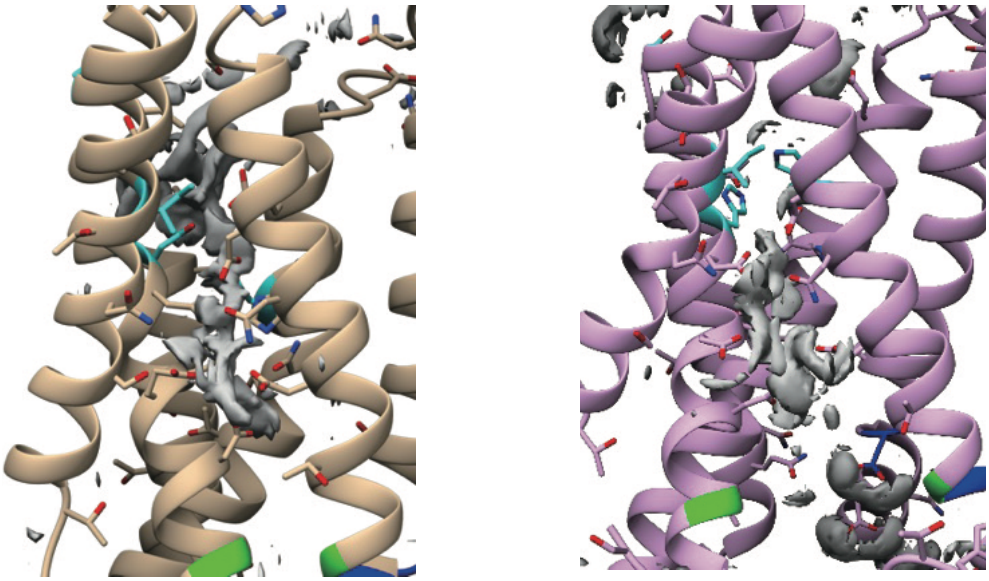


図５. 3D-RISM 計算によって得られた亜鉛イオンの分布。構造は 1 μs のシミュレーションにおける最終構造を用いた。ヘリックス間の距離が顕著に異なり、変異を加えたほうは輸送経路の出口に分布が集中している。(シアン：選択性フィルタドメイン、グリーン：輸送経路の出口に当たる残基)

[6] タンパク質に対する創薬シミュレーション手法の開発（森田・原田）

創薬において効率よく候補化合物を見つけるために、ドッキングシミュレーションが活用されてきた。ドッキングシミュレーションにおいては、標的とするタンパク質のポケットに化合物の形状および性質がうまくはまり込むかどうかを計算する。一方、膜タンパク質とよばれるタンパク質は細胞の内外を区切る脂質膜上に存在し、重要な機能を担う。例えば、細胞の内外での物質のやり取りや、シグナル分子を介した情報伝達を行う。その機能不全は疾患の原因となることも多く、創薬における重要なターゲットとなっている。しかし、従来のドッキングシミュレーションでは完全な水中にタンパク質が存在する状況を想定しているため、膜タンパク質に対して適切な計算を行うことができなかった。

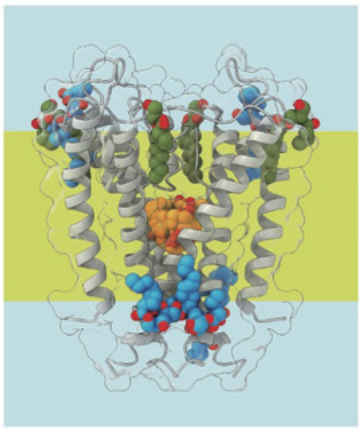


図 6 LoCoMock により得られたドッキングポーズと正解構造の比較。正解構造（緑)、従来のドッキングによる構造（オレンジ)、LoCoMock による推定構造（水色)。

そこで、本研究では脂質の存在位置と膜の疎水性をともに評価することで、ドッキングポーズの妥当性を補正するスコア（LoCoMock）を提案した。23 種類の既知の複合体について検証したところ、16 の複合体については従来のドッキングシミュレーションより正解に近いポーズを提案することに成功した (図 6)。需要の高い膜タンパク質をターゲットとした創薬が幅広く展開していくことが期待される。

[7] Rational design of cyclopentadiene-based super- and hyperacids based on aromaticity (Mrinal Kanti Si and Yasuteru Shigeta)

The design and synthesis of neutral organic superacids are of recent interest due to their vast applications in chemistry and material sciences like olefinic polymerization, isolation of highly reactive short-lived cations, etc. Cyclopentadiene behaves as a mild organic acid, producing a stable conjugate base by gaining aromaticity and conjugation after deprotonation. To stabilize conjugate bases of organic acids to show sueracidities and hyperacidities, we have considered aromatic phenyl substituents with cyclopentadiene (mono, di, and tri phenyl substituted cyclopentadiene and their cyano derivatives). The stable tri-substituted cyclopentadiene derivative shows the gas phase enthalpies of deprotonation (ΔH_{acid}) of 245 kcal/mol and 239 kcal/mol at DFT B3LYP and M06-2X respectively, with values in the range of hyperacidity. Some of the protonic tautomers of cyclopentadiene derivatives show hyperacidity, which shows the proton affinity values of 205 kcal/mol to 240 kcal/mol. Tri-phenyl substituted cyclopentadiene behaves as a moderate acid and becomes a superacid after replacing the phenyl with nitrobenzene, which is a stronger acid than H_2SO_4 (ΔH_{acid} = 298 kcal/mol). Calculated HOMA index and nuclear independent chemical shift (NICS) reveal that the stability of conjugate bases as well as acidities increases with increasing aromaticity of cyclopentadiene rings after deprotonation in all molecules.

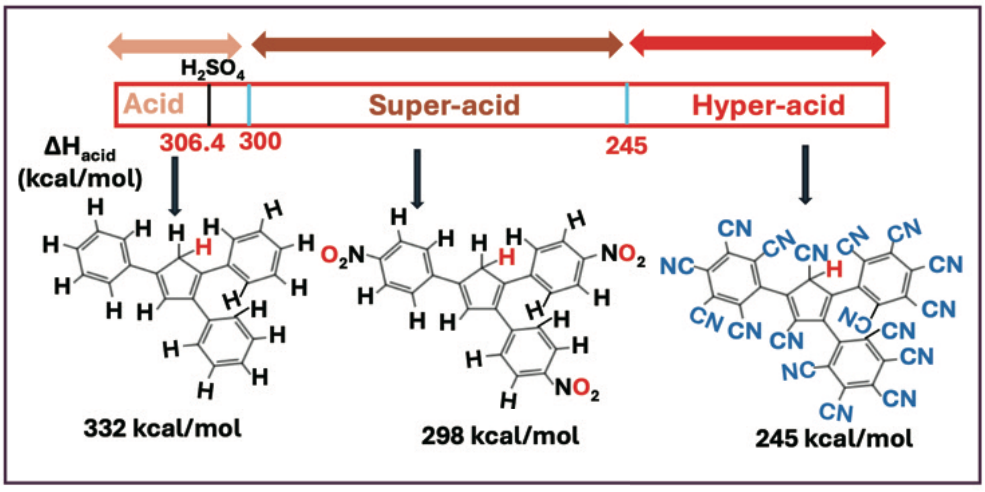


Fig.7 Structure of tri phenyl substituted cyclopentadiene derivatives and their enthalpies of deprotonation (ΔH_{acid})

[8] 宇宙生命連携（堀、庄司、重田）

生体を構成する分子であるアミノ酸はキラル分子であるが、地上生命はL型アミノ酸のみで主に構成され、L型アミノ酸を選択した理由については未だ十分に解明がなされていない。我々は、宇宙起源説で考えられる、星間空間での円偏光による不斉分解がどの程度関与しうるのかについて、アミノ酸の円偏光吸収特性（円二色性吸収 (CD) スペクトル）計算により、アミノ酸のホモキラル問題について取り組んだ。3種類のアミノ酸についてCDスペクトルをSAC-CI法を用いて計算したところ、10-11eV領域においてCDスペクトルが共通して大きく領域があることを見出した。銀河形成初期では10.2eVのLay-α線が強く放射されることから、Lay-αにより、アミノ酸のホモキラリティが発生した可能性について、異性体過剰率の新しい定式化により始めて理論的に示した (図 8)。アミノ酸のキラル増幅で重要となる、分子間相互作用を計算し、アラニンとイソバリンの両アミノ酸で、同一キラリティ分子 (homochiral dimer) の方が、異種キラリティ分子（heterochiral dimer）よりも、水中で安定化することを示した。興味深いことに、ガス中では、アミノ酸は中性イオン型を取り、カルボキシ基同士が分子間水素結合を形成するために、キラリティの差がでないが、水中では双イオン型を取ることで、カルボキシ基はアミノ基と側鎖や主鎖の水素原子と分子間相互作用を形成し、キラリティ認識がなされることが理論計算で示された。本機構は水質変性におけるアミノ酸の異性体過剰増幅に対する分子機構を示唆する結果と位置付けられる。

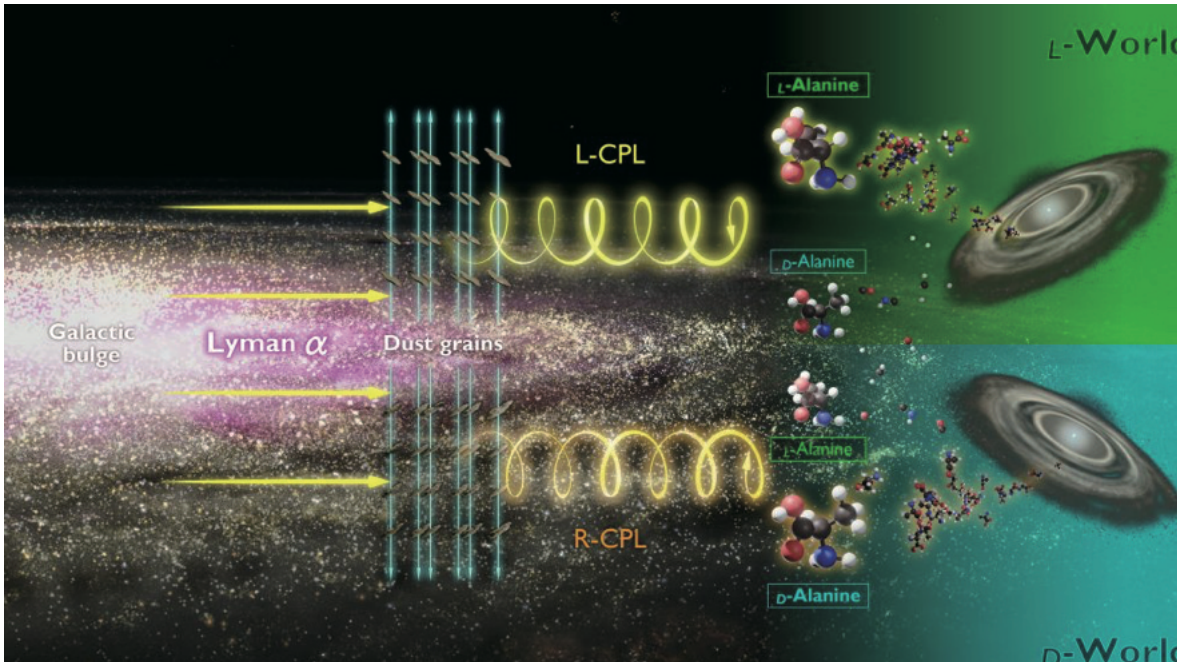


図 8. 銀河形成の初期段階で放射されるライマンα光がダスト散乱で円偏光化され、アミノ酸の選択的光分解を引き起こし、地上生命のアミノ酸のホモキラリティ（L体世界形成）の起源となった。

4. 教育

学位論文

(1) 卒業研究発表

1. 小野 陸「オートポイエーシスにおける生命システムと観察者との接点」
2. 唐澤　公平「超分子複合体 (ロゼット) の自己集合過程の理論的研究」

(2) 修士修了研究発表

1. 佐藤 綾香「SOD1 の Cys 酸化に伴う構造変化の理論的研究」
2. 俵屋 壮大郎「炭酸脱水酵素ナクレインのカルシウム結合機構の理論解析」

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 庄司光男、研究奨励賞受賞、量子化学計算を活用した複雑酵素反応および生体分子ホモキラリティ機構の解明、第 5 回量子生命科学会大会、大阪大学、2023/5/19.
2. 重田育照、第 8 回分子科学会国際学術賞「溶液および固体における光アップコンバージョン機構の理論解析」、分子科学会、2023/9/12

外部資金

(1) 研究代表

1. 新学術領域研究 (研究領域提案型)「生命金属科学」、重田育照、「加齢ミトコンドリア DNA 説における金属タンパク質動態に関する理論的研究」(R4-R5)
2. 日本曹達との共同研究事業「量子化学計算を用いた農薬特性の解析および各種シミュレーションを用いた材料特性の解析」、重田育照、期間 (R05.09-R06.08)、900 千円 (1 年間)
3. 公益財団法人豊田理化学研究所・豊田理研スカラー、堀優太、「理論化学による無水水素イオン伝導プロセス機構の解明および材料開発への理論提案」(R5)
4. 研究基盤支援プログラム (S タイプ)、Kowit Hengphasatporn、「リガンドタンパク質複合体構造探索のための新規計算手法の開発と創薬への応用」(R4-R6)
5. 科研費若手研究、森田陸離、「生体膜の両親媒効果を取り込んだドッキングシミュレーション手法の開発」(R5-R6)
6. 第 1 回 MOLSIS-CCG GRANT、森田陸離、「任意のタンパク質に蛍光能を付加する分子設計」(R4.10-R5.9)
7. 科研費研究スタートアップ支援、藤木涼、「液体の統計力学理論に基づく ZIP8 タンパク質のイオン輸送の理論的研究」(R5-R6)

(2) 分担研究

1. 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)
2. 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)
3. 公益財団法人豊田理化学研究所・豊田理研スカラー共同研究 Phase 1「植物空腹・指令シグナル分子の機能解明と 高機能性成長調整剤の開発」、重田育照（研究分担者)、(研究代表者）田畑亮（R5)
4. 学術振興会・科学研究費・基盤研究 B、重田育照（研究分担者)、(研究代表者）守屋俊夫、(R05-R07)
5. AMED「難治性疾患実用化事業」「チトクロムＣオキシダーゼを標的としたミトコンドリア病の新規治療薬開発」重田育照（研究分担者)、(研究代表者）新谷泰範、(R03-R05)
6. 東京エレクトロンとの共同研究事業、重田育照（研究分担者)、(研究代表者）伊藤雅英（R02-R06)
7. 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)、「分子シミュレーションによるタンパク質化学反応ダイナミクスの解明」宮下治（研究代表者）(R02-R05)
8. 特別推進研究「光合成における光誘導水分解反応機構及び光エネルギー利用機構の解明」、庄司光男（研究分担者)、沈建仁（研究代表者）(R04-R08)
9. 基盤研究（A)「XFEL-SFX による化学反応解明を目指した「反応追跡結晶」の構築」、庄司光男（研究分担者)、上野隆史（研究代表者）(R04-R07)
10. 学術変革領域研究（A）「G タンパク質の超硫黄化による新奇シグナル制御とその生理的意義の解明」、Kowit Hengphasatporn（研究分担者)、西田　基宏（研究代表者）(R04-R07)
11. 基盤研究（C)、森田陸離（研究分担者)、「アクチン細胞骨格の機能的品質と量を保障する分子機構の解明」、中野賢太郎（研究代表者）(R5-R8)
12. 基盤研究（C)、森田陸離（研究分担者)、「分子動力学計算とモデル生物で導き出す減数分裂開始機構の実態」、松田 真弥（研究代表者）(R5-R7)

知的財産権

なし

6. 研究業績

（1）研究論文

A）査読付き論文

1. Y.Kumagai, R.Takabe, T.Nakazono, M.Shoji*, H.Isobe, K.Yamaguchi, T.Misawa-Suzuki, H.Nagao, T.Wada*, “Water oxidation utilizing a ruthenium complex featuring a phenolic moiety inspired by the oxygen-evolving centre (OEC) of photosystem II” , Sustainable Energy & Fuels, 8, 905-913 (2024/3/7). DOI:10.1039/d3se01610b
2. Q.Chen, T.Yamada, K.Miyagawa, A.Murata, M.Shoji, K.Nakatani*,” A new small molecule DoNA binding to CAG repeat RNA” , Bioorganic & Medicinal Chemistry, 98, 117580, (2023/12/25). DOI:10.1016/j.bmc.2023.117580
3. T.Murakawa*, K.Kurihara, M.Shoji, N.Yano, K.Kusaka, Y.Kawano, M.Suzuki, Y.Shigeta, T.Yano, M.Adachi, K.Tanizawa, T.Okajima*, “Neutron Crystallography of a Semiquinone Radical Intermediate of Copper Amine Oxidase Reveals a Substrate-Assisted Conformational Change of the Peptidyl Quinone Cofactor” , ACS Catalysis, 13, 12403-12413(2023/9/7). 10.1021/acscatal.3c02629
4. A.Sato, M.Shoji*, N.Watanabe, M.Boero, Y.Shigeta, M.Umemura*, “Origin of Homochirality in Amino Acids Induced by Ly α Irradiation in the Early Stage of the Milky Way” , Astrobiology, 23(10), 1019-1026(2023/10/17). DOI:10.1089/ast.2022.0140
5. Yohei Munei, Kowit Hengphasatporn, Yuta Hori, Ryuhei Harada, Yasuteru Shigeta, “Determination of the Association between Mesotrione Sensitivity and Conformational Change of 4-Hydroxyphenylpyruvate Dioxygenase via Free-Energy Analyses” , Journal of Agricultural and Food Chemistry, 71(24),9528-9537 (2023 年 6 月). 10.1021/acs.jafc.3c01253
6. Yohei Munei, Yasuteru Shigeta, Ryuhei Harada, “A Variety of Initial Velocities in Restarting Molecular Dynamics Simulations Promotes Protein Transitions” , Chemistry Letters, 71(24),9528-9537 (2023 年 6 月). 10.1246/cl.230104
7. Nitchakan Darai, Kowit Hengphasatporn, Peter Wolschann, Michael T. Wolfinger, Yasuteru Shigeta, Thanyada Rungrotmongkol, Ryuhei Harada “A Structural Refinement Technique for Protein-RNA Complexes Using Combination of AI-based Modeling and Flexible Docking: A Study of Musashi-1 Protein” ,96(7), 677-685 (2023 年 7 月). 10.1246/bcsj.20230092
8. Nalinee Kongkaew, Kowit Hengphasatporn, Yuwanda Injongkol, Pitchayathida Mee-udorn, Liyi Shi, Panupong Mahalapbutr, Phornphimon Maitarad, Ryuhei Harada, Yasuteru Shigeta, Thanyada Rungrotmongkol, Alisa S. Vangnai “Design of Electron-Donating Group Substituted 2-PAM Analogs as Antidotes for Organophosphate

Insecticide Poisoning”, 13, 32266-32275 (2023 年 11 月). 10.1039/d3ra03087c

9. Takumi Nakanishi, Yuta Hori, Yasuteru Shigeta, Hiroyasu Sato, Shu-Qi Wu, Ryoji Kiyanagi, Koji Munakata, Takashi Ohhara, Osamu Sato, “Observation of proton-transfer-coupled spin transition by single-crystal neutron-diffraction measurement”, Physical Chemistry Chemical Physics, 25,12394–12400 (2023 年 4 月). 10.1039/D3CP00527E
10. Natsuki Watanabe, Mitsuo Shoji, Koichi Miyagawa, Yuta Hori, Mauro Boero, Masayuki Umemura, Yasuteru Shigeta, “Enantioselective Amino Acid interactions in Solution”, Physical Chemistry Chemical Physics, 25, 15023–15029 (2023 年 5 月). 10.1039/D3CP00278K
11. Natsuki Watanabe, Yuta Hori, Mitsuo Shoji, Mauro Boero, Yasuteru Shigeta, “Organocatalytic-Racemization Reaction Elucidation of Aspartic Acid by Density Functional Theory”, Chirality, 35(9), 645–651 (2023 年 4 月). 10.1002/chir.23573
12. Y. Munei, K. Hengphasatporn, Y. Hori, R. Harada, Y. Shigeta, “Determination of the Association between Mesotrione Sensitivity and Conformational Change of 4-Hydroxyphenylpyruvate Dioxygenase via Free-Energy Analyses”, Journal of Agricultural and Food Chemistry, 71(24), 9528–9537 (2023 年 6 月). 10.1021/acs.jafc.3c01253
13. Y. Kawabe, Y. Ito, Y. Hori, S. Kukunuri, F. Shiokawa, T. Nishiuchi, S. Jeong, K. Katagiri, Z. Xi, Z. Li, Y. Shigeta, Y. Takahashi,” 1T/1H-SnS2 Sheets for Electrochemical CO2 Reduction to Formate”, ACS Nano, 17(12),11318–11326(2023 年 6 月). 10.1021/acsnano.2c12627
14. T. Hiromoto, K. Nishikawa, S. Inoue, H. Ogata, Y. Hori, K. Kusaka, Y. Hirano, K. Kurihara, Y. Shigeta, T. Tamada. Y. Higuchi, “New insights into the oxidation process from neutron and X-ray crystal structures of an O2-sensitive [NiFe]-hydrogenase”, Chemical Science, 14(35),9306-9315(2023 年 8 月). 10.1039/D3SC02156D
15. T. Nakanishi, Y. Hori, Y. Shigeta, H. Sato, R. Kiyanagi, K. Munakata, T. Ohhara, A. Okazawa, R. Shimada, A. Sakamoto, O. Sato, “Development of an Iron(II) Complex Exhibiting Thermal- and Photo-induced Double Proton-transfer-coupled Spin Transition in a Short Hydrogen Bond”, Journal of the American Chemical Society, 145(35),19177–19181(2023 年 8 月). 10.1021/jacs.3c06323
16. Q. Liu, T. Zhang, Y. Ikemoto, Y. Shinozaki, G. Watanabe, Y. Hori, Y. Shigeta, T. Midorikawa, K. Harano, Y. Sagara, “Grinding-Induced Water Solubility Exhibited by Mechanochromic Luminescent Supramolecular Fibers”, Small (2023 年 3 月). 10.1002/smll.202400063

17. Rikuri Morita*, Yasuteru Shigeta, Ryuhei Harada*. Efficient Screening of Protein-Ligand Complexes in Lipid Bilayers Using LoCoMock Score. (2023) J. Comput. Aided Mol. Des., 37, 217-225
18. Raja Norazireen Raja Ahmad, Long-Teng Zhang † , Rikuri Morita † , Haruna Tani, Yong Wu, Takeshi Chujo, Akiko Ogawa, Ryuhei Harada, Yasuteru Shigeta, Kazuhito Tomizawa, Fan-Yan Wei*. (2023) Pathological mutations promote proteolysis of mitochondrial tRNA specific 2-thiouridylase 1 (MTU1) via mitochondrial caseinolytic peptidase (CLPP). Nucleic Acids Res.52(3), 1341-1358
19. Rikuri Morita*, Yasuteru Shigeta, Ryuhei Harada*. Latrunculin resistance mechanism of non-conventional actin NAP1 uncovered by molecular dynamics simulations. (2023) Cytoskeleton, 81(2), 143-150
20. Vu Nguyen, D., C. Muanprasat, S. Kaewin, K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, T. Rungrotmongkol and W. Chavasiri (2024). “Synthesis and biological evaluation of 2′ -hydroxychalcone derivatives as AMPK activators.” Bioorganic Chemistry, (2024).
21. Danova, K. Pattanapanyasat, K. Hengphasatporn*, Y. Shigeta, T. Rungrotmongkol, E. Hermawati, W. Chavasiri, “Unlocking E-arylidene Steroid Derivatives as Promising α -Glucosidase Inhibitors” ChemistrySelect, (2024).
22. H. Chuntakaruk, K. Hengphasatporn*, Y. Shigeta, C. Aonbangkhen, V. S. Lee, T. Khotavivattana, T. Rungrotmongkol, S. Hannongbua, “FMO-Guided Design of Darunavir Analogs as HIV-1Protease Inhibitors” Scientific Reports, (2024)
23. H. Chuntakaruk, K. Boonpalit, J. Kinchagawat, F. Nakarin, T. Khotavivattana*, C. Aonbangkhen, Y. Shigeta, K. Hengphasatporn*, S. Nutanong*, T. Rungrotmongkol*, S. Hannongbua*, Machine Learning-Guided Design of Potent Darunavir Analogs Targeting HIV-1 Proteases: A Computational Approach for Antiretroviral Drug Discovery, Journal of Computational Chemistry, (2023).
24. T. Sakai, T. Mashima, N. Kobayashi, H. Ogata, L. Duan, R. Fujiki, K. Hengphasatporn, T. Uda, Y. Shigeta, E. Hifumi, S. Hirota*, “Structural and Thermodynamic Insights into Antibody Light Chain Tetramer Formation through 3D Domain Swapping” , Nature Communications, (2023).
25. V. Cao, I. P. Sukanadi, N. Loeanurit, A. Suroengrit, W. Paunrat, V. Vibulakhaopan, K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, W. Chavasiri, S. Boonyasuppayakorn*, “A sulfonamide chalcone inhibited dengue virus with a potential target at the SAM-binding site of viral methyltransferase” , Antiviral Research, 220, 105753 (2023).
26. D.V. Nguyen, K. Hengphasatporn, A. Danova, F. Ryo, Y. Shigeta, T. Rungrotmongkol, W. Chavasiri*, “Structure – activity relationship between 9-O-berberubine carboxylate

derivatives and α -glucosidase inhibitory activity" , Scientific Reports, 13 (1), 18865 (2023).

27. V. Cao, N. Loeanurit, K. Hengphasatporn, R. Hairani, N. Wacharachaisurapol, N. Prompila, S. Wittayalertpanya, Y. Shigeta, T. Khotavivattana, W. Chavasiri, S. Boonyasuppayakorn*, "The 8-bromobaicalein alleviated chikungunya-induced musculoskeletal inflammation and reduced the viral load in healthy adult mice." , Emerging Microbes & Infections, 12 (2), 2270074 (2023).
28. P. Pojtanadithee, K. Hengphasatporn, A. Suroengrit, S. Boonyasuppayakorn, P. Wilasluck, P. Deetanya, K. Wangkanont, P. Sukanadi, W. Chavasiri , P. Wolschann, T. Langer, Y. Shigeta, P. Maitarad, K. Sanachai*, T. Rungrotmongkol*, "Identification of Promising Sulfonamide Chalcones as Inhibitors of SARS-CoV-2 3CLpro through Structure-Based Virtual Screening and Experimental Approaches" , Journal of Chemical Information and Modeling, 63(16), 5244-5258 (2023).
29. THT. Phan, K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, W. Xie, P. Maitarad, T Rungrotmongkol, W. Chavasiri*, "Designing Potent α -Glucosidase Inhibitors: A Synthesis and QSAR Modeling Approach for Biscoumarin Derivatives" , ACS Omega, 8(29), 26340-26350 (2023).
30. K. Hengphasatporn, T. Aiebchun, P. Mahalapbutr, A. Auepattanapong, O. Khaikate, J. Meesin, C. Kuhakarn, Y. Shigeta, K. choowongkomon, T. Rungrotmongkol*, "Sulfonylated Indeno[1,2‐c]quinoline Derivatives as Potent EGFR Tyrosine Kinase Inhibitors" , ACS Omega 8 (22), 19645-19655 (2023).
31. K. Boonthaworn, K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, W. Chavasiri, T. Rungrotmongkol*, P. Ounjai*, "In Silico Screening of Chalcones and Flavonoids as Potential Inhibitors against Yellow Head Virus 3C-like Protease" , PeerJ 11:e15086 (2023).

B）査読無し論文

なし

（2）国際会議発表

A）招待講演

1. Mitsuo Shoji, QM/MM study of the reaction mechanism of sesamin biosynthesis by cytochrome P450, ICCP450-JSSS, Granship, Shizuoka, 2023/9/28.
2. Mitsuo Shoji, Origin of homochirality of amino acids, ICPAC Bali 2023, The Petra Bali Resort & Villas, Bali, Indonecia, 2023/9/15.
3. Mitsuo Shoji, The reaction mechanism of bacterial copper amine oxidase: interplay

of theoretical QM/MM calculations and experimental methods, CJK-WTCC, Sungkyunkwan University (SKKU), Korea, 2023/6/21.

4. Ryuhei Harada, Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics for Sampling Rare Events of Proteins, The 26th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE 26), チュラロコン大学（タイ国）, 2023/7.
5. K. Hengphasatporn, Exploring Antiviral Drug Discovery through Computational Calculations and Fragment Molecular Orbital (FMO) Method, CCS–LBNL Collaborative Workshop 2023, CCS, U.Tsukuba, Tsukuba, Japan, 2023/4.
6. Yasuteru Shigeta, "Computational studies on inhibition mechanism of some metalloproteins, The 5th Conference of Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC), Sapporo, Sep. 4th-10th (2023).
7. Yasuteru Shigeta, "Theoretical studies on structures and functions of metalloproteins: Towards understanding of inhibition mechanism of CcO and HPPD" , 26th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE26), Jul. 20th-22nd (2023).

B) 一般講演

1. Mitsuo Shoji, "Overview of our research collaborations performed in the research area of molecular movies" , 高速分子動画国際シンポジウム２０２３、淡路夢舞台 , 2023/11/30-12/1.
2. Kowit Hengphasatporn, Lian Duan, Yasuteru Shigeta, "3D structure construction of cyclic peptide using Deep learning" , the 75th annual meeting of the Society for Biotechnology, 2023/9/3-5.
3. Dang Cao Thuy Linh Linda, Kunio Kawanishi, Yukari Okita, Yukihide Watanabe, Sachie Hashimoto, Kowit Hengphasatporn, Chiaki Nagai-Okatani, Mohammed Abdel-Aziz, Rie Shiratani, Thanasis Poullikkas, Nuriza Ulul Azmi, Hiroko Bando, Yasuteru Shigeta, Atsushi Kuno, and Mitsuyasu Kato, "Cancer-Specific Sialylation Of Glycoprotein Nonmetastatic Melanoma Protein B Interact With Tumor-Associated Macrophage in Triple-Negative Breast Carcinoma via Siglec-9 ", the 26th International Glycoconjugate Symposium, 2023/8/27-1, Taiwan
4. K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, "Synergistic Integration of FMO and MM Calculations: A Novel Approach for Unveiling Potent Antiviral Agents" , CU-UM Bilateral Seminar and Workshop, Malaysia, 2024/2/17-19.
5. Y. Hori, A. Sato, Y. Shigeta," Theoretical study for the active site in oxidized [NiFe]-hydrogenase" , The 5th conference of Theory and Applications of Computational

Chemistry (TACC2023), Hokkaido University, 2023/9/7.

（3）国内学会・研究会発表

A）招待講演

1. 庄司光男 , 理論化学会・レクチャーシリーズ #5 酵素反応機構と生命起源についての理論的探求 , Zoom, 2023/7/27.
2. 庄司光男 , 理論化学会・レクチャーシリーズ #5 酵素反応機構と生命起源についての理論的探求 , Zoom, 2023/7/28.
3. 庄司光男 , 招待講演、アミノ酸のホモキラリティ獲得機構から生命の起源を探る、東京理科大学、東京理科大学 , 2023/7/19.
4. 庄司光男 , 公開セミナー、アミノ酸のホモキラリティ獲得機構から生命の起源を探る、筑波大 , 2023/6/19
5. 庄司光男 , 量子化学計算を活用した複雑酵素反応および生体分子ホモキラリティ機構の解明、量子生命科学会第 5 回大会、大阪大学、2023/5/19.
6. 原田 隆平 , 次世代インシリコ創薬を開拓する新しい分子シミュレーション手法の開発・CBI 研究機構量子構造生命科学研究所シンポジウム , オンライン , 2023 年 9 月 .
7. 堀 優太 , 実験との連携による酵素触媒反応の機構解析と理論設計・化学反応経路探索のニューフロンティア , 大阪公立大学 2023・2023 年 9 月 11 日 .
8. 堀 優太 , 無水プロトン伝導物質の設計に向けた計算化学による伝導機構の理論解析・マテリアル・計測ハイブリッド研究センター若手フォーラム , 東北大学 , 2023 年 11 月 7 日 .
9. 堀 優太、佐藤 綾香、重田 育照 , 理論計算による金属タンパク質の構造・電子状態・機能の解析・凝縮系の理論化学 , 沖縄 , 2024 年 3 月 27 日 .
10. 重田 育照、“分子シミュレーションに基づく生体内分子の機能解析と創薬支援技術開発” , イノベーション人材育成セミナー , 東京大学大学院薬学系研究科附属創薬機構 , 東京大学 , 2023.08.30
11. 重田 育照、“計算構造生物物理学に基づく生命機能メカニズム解析” , 第 40 回分子病理学研究会クラークシンポジウム , 北海道大学 , 2023.07.14-15.

B）口頭発表

1. 堀 優太 , 実験との連携による計算化学の生体・物質系へのアプローチ・次世代若手研究者による応用計算・理論化学研究会 2023, 筑波大学 , 口頭発表 , 2023 年 7 月 .
2. 酒井隆裕，山口将平，真島剛史，小林直也，段練，藤木涼，Kowit Hengphasatporn，重田育照，緒方英明，一二三恵美，宇田泰三，廣田俊　ドメインスワッピングにより 4 量化する抗体軽鎖の会合挙動と X 線結晶構造・2 回抗体学会 , 鹿児島市 , 口頭発

表 , 2023 年 12 月 1-3　　.

3. 川西邦夫 , 渡邊幸秀 , 康徳東 , 堂本裕加子 , Kowit Hengphasatporn, 重田育照 , 広瀬雄二郎 , 徳楽清 , 多分野融合によるアミロイド類縁腎臓疾患のメカニズム解析 , 第 40 回分子病理学研究会クラークシンポジウム、北海道大学、口頭発表 , 2023 年 7 月 14-15.
4. 堀 優太、小倉 浩樹、出倉 駿、森 初果、重田 育照 , 第一原理計算を用いたプロトン伝導分子性結晶中のプロトン移動と分子運動の解析 , 日本化学会 第 104 春季年会 (2024), 千葉 , 口頭発表 , 2024 年 3 月 19 日 .
5. 原田隆平 , 森田陸離 , 重田育照 , 化合物の結合と膜透過プロセスを紐解くレアイベントサンプリング法の開発・本コンピューター化学会秋季年会 , 香川 , 口頭発表 , 2023 年 11 月 25 日 .

C）ポスター発表

1. Mitsuo Shoji, Overview of our research collaborations performed in the research area of molecular movies, 高速分子動画国際シンポジウム２０２３、2023/11/30 -12/1.
2. M.Shoji, M.Takeshi, Y.Hori, Y.Shigeta, H.Hayashi, T.Okajima, QM/MM Free energy simulation for the catalytic reaction of bacterial copper amine oxidase, The 61st Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, 2023/11/14.
3. Mitsuo Shoji, Quantum chemistry study of the origin of homochirality of amino acids, Poster (invited), 2023/6/21.
4. 庄司光男 , アミノ酸のホモキラリティはアミノニトリル前駆体の異性体過剰に起因する、量子生命科学会第 5 回大会、2023/5/18.
5. 庄司光男 , ”高速分子動画”領域で研究連携中の酵素反応の量子化学解析についての最近の進捗、令和 5 年度シンポジウム・領域会議、2023/5/10-11.
6. Yuta Hori, Yasuteru Shigeta, Characterization of the electronic and geometrical structures and the formation pathway in oxidized [NiFe]-hydrogenase, 17th International Congress of Quantum Chemistry, 2023/6.
7. Kowit Hengphasatporn, Nitchakan Darai, Peter Wolschann, Michael T. Wolfinger, Yasuteru Shigeta, Thanyada Rungrotmongkol, Ryuhei Harada, Combining AI-based Modeling and Flexible Docking for Efficient Refinement of Protein-RNA Complexes using PaCS-MD, The Protein Society - 37th Annual Symposium, 2023/7/12-17.
8. Kowit Hengphasatporn, Thanyada Rungrotmongkol, Supot Hannongbua, Yasuteru Shigeta, FMO-Guided Design of Darunavir Analogs as HIV-1 Protease Inhibitors, the 5th Congress of the Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2023), 2023/9/5-9　.

9. 佐藤綾香、堀優太、重田育照 , 高電位鉄硫黄タンパク質の活性中心の電子状態及び構造と周囲のアミノ酸からの影響の理論解析 , 量子生命科学会第 5 回大会 , 2023 年 5 月 .
10. 堀優太、佐藤綾香、重田育照 , 還元型高電位鉄硫黄タンパク質の鉄硫黄クラスターの電子状態と周囲のアミノ酸が与える影響 , 第 25 回理論化学討論会 , 2023 年 5 月 .
11. 堀優太、佐藤綾香、重田育照 , 酸化型 [NiFe] ヒドロゲナーゼの生成過程と活性中心の構造についての理論解析 , 量子生命科学会第 5 回大会 , 2023 年 5 月 .
12. Kowit Hengphasatporn, Warinthorn Chavasiri, Siwaporn Boonyasuppayakorn, Yasuteru Shigeta , Inhibition of Dengue Virus by a Sulfonamide Chalcone Targeting the SAM-Binding Site of Viral Methyltransferase,「硫黄生物学」第 3 回領域会議 , 2023/09/16-18.
13. Kowit Hengphasatporn, Thanyada Rungrotmongkol, Supot Hannongbua, Yasuteru Shigeta, Finding Potent HIV-1 Protease Inhibitors through FMO-Guided Drug Design, Chem-Bio Informatics Society(CBI) Annual Meeting 2023, 2023/10/23-25.
14. Kowit Hengphasatporn, Nitchakan Darai, Peter Wolschann, Michael T. Wolfinger, Yasuteru Shigeta, Thanyada Rungrotmongkol, Ryuhei Harada, Integrated AI-based Modeling and Flexible Docking for Protein-RNA Complexes Refinement, BSJ61, 2023/11/13-16.
15. Kowit Hengphasatporn, Thanyada Rungrotmongkol, 育 照 重 田 , Combining Quantum Mechanics and Machine Learning for Accelerated Drug Design Against HIV PR Inhibitors, SCCJ2023, 2023/11/24-26.
16. K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, Insights into molecular metabolism of herbicide-resistant CYP81As through molecular docking and MM/GBSA analysis・8th Edition of Global Congress on PLANT BIOLOGY AND BIOTECHNOLOGY, 2024/3/24-27.
17. T. Sakai, T. Mashima, N. Kobayashi, H. Ogata, L. Duan, R. Fujiki, K. Hengphasatporn, T. Uda, Y. Shigeta, E. Hifumi, S. Hirota, 4 量化する抗体軽鎖の会合挙動と 3D ドメインスワッピング構造の解明 , 日本化学会第 104 春季年会 , 2024 年 3 月 18-21.
18. DUAN LIAN, Convolutional Neural Network Model for Predictive Screening of Cyclic Peptides in Drug Design and Development, TACC2023, 2023/ 9/4 -9.
19. Ayaka Sato, Yuta Hori, Yasuteru Shigeta, Theoretical analysis of the electronic and geometrical structures of the active center of a high-potential iron-sulfur protein and its influence from surrounding amino acids, TACC2023, 2023/ 9/4-9.
20. 渡辺 七都稀 , 温度サイクルによる混合エナンチオマークラスター系の脱ラセミ化の理論研究・日本化学会秋季事業 第 13 回 CSJ 化学フェスタ 2023, 2023 年 10 月 17 日 -19 日 .

21. 佐藤綾香 , 藤木 涼 , 堀 優太 , Kowit Hengphasatporn, 重田 育照 , SOD1 の CYS 酸化に伴う構造変化の理論的研究・日本コンピュータ化学会 2023 秋季年会 , 2023 年 11 月 23 日 -11 月 26 日 .
22. 堀優太、佐藤綾香、重田育照 , Theoretical investigation into the electronic and geometrical structures for the oxidation tolerance of [NiFe]-hydrogenases, 第 61 回 日本生物物理学会年会 , 2023/11/14.
23. 堀優太、渡辺七都稀、庄司光男、重田育照 , 星間空間におけるホモキラリティー発生の理論的研究 , 第 17 回分子科学討論会 , 2023 年 9 月 12 日 .
24. Takunori Yasuda, Rikuri Morita, Yasuteru Shigeta, Ryuhei Harada , The Computational Study on the Secondary Structure Formation of Nascent Peptides Inside the Ribosome Tunnel, BSJ61, 2023/11/13-16.
25. Rikuri Morita, Yasuteru Shigeta, Ryuhei Harada, Enhanced Conformational Sampling Based on Structural Generation by the Inverse Transformation Using Principal Component Analysis, BSJ61, 2023/11/13-16.
26. 佐藤 紘歌 , 森田 陸離 , 重田 育照 , 原田 隆平 , 分子動力学計算で解明する TGF- β 受容体の多量体形成機序・第 46 回 日本分子生物学会年会・2023 年 12 月 6 日 .
27. 保田 拓範 , 森田 陸離 , 重田 育照 , 原田 隆平 , 新生ペプチド鎖のリボソームトンネルにおける 2 次構造形成に関する計算科学的研究 , 第 46 回 日本分子生物学会年会 , 2023 年 12 月 6 日 .
28. Ryo Fujiki, Kowit Hengphasatporn, Norio Yoshida, Yasuteru Shigeta,3D-RISM Theory for Biological System: QM and MM , TACC2023, 2023/ 9/4-9.
29. 藤木 涼、Kowit Hengphasatporn、重田 育照、液体の統計力学理論に基づく ZIP8 タンパク質の理論的研究、第 17 回分子科学討論会、2023 年 9 月 12 日 -9 月 15 日
30. 藤木 涼 , Kowit Hengphasatporn, 重田 育照 , 液体の統計力学理論を用いた hZIP8 の構造変化に関する理論的研究・日本コンピュータ化学会 2023 秋季年会 , 2023 年 11 月 23 日 -11 月 26 日 .

（4）著書、解説記事等

1. Y. Hori, K. Nishikawa, Y. Shigeta, Y. Higuchi, “Biological Enzymes and Hydrogenases” , Hydrogenomics: The Science of Fully Utilizing Hydrogen, S. Orimo, K. Fukutani, K. Fujita, Eds., 共立出版 , 2023.
2. 森田陸離、重田育照、原田隆平「脂質膜を考慮した膜タンパク質と化合物の複合体予測シミュレーション」日本生物物理学会 学会誌「生物物理」Vol. 64 No. 1(通巻 371 号)

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. TIA かけはし

国際連携・国際活動

該当なし

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 世話人：庄司光男、原田隆平、堀 優太、Hengphasatporn Kowit、藤木涼、重田研１０周年記念シンポジウム、筑波大学 計算科学研究センター ワークショップ室, 2024/3/16.
2. 世話人：堀優太、藤木涼、次世代若手研究者による応用計算・理論化学研究会 2023、筑波大学 総合研究棟 B 110 室、2023/7/25-26

9. 管理・運営

重田育照

筑波大学副学長・理事（研究）

庄司光男

計算科学研究センター運営委員会委員、物理学域理論生命物理グループ長

10. 社会貢献・国際貢献

重田育照

・量子科学技術研究開発機構（QST）客員研究員（2019-2022）
・大阪大学 大学院基礎工学研究科 招聘教授（2015-）
・日本化学会 理論化学・情報化学・計算化学ディビジョンレポート 幹事（2019-）

庄司光男

・理論化学会幹事（2022-2024）

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（2020-2024）

11. その他

1. 梅村雅之、庄司光男 , NHK ヒューマニエンス BS101 チャネル、(” 左と右” 生命を左右するミステリー）に一瞬出演、2024 年 1 月 9 日 18:00 放送回
2. 庄司光男 , 梅村雅之 , プレスリリース , アミノ酸のホモキラリティは天の川銀河系形成時のライマンアルファ光で形成された、2023/9/25
3. 村川武志、庄司光男 , プレスリリース , 中性子結晶構造解析によって酵素ラジカル反応中間体の詳細構造を初めて解明 - 酵素を効率的に働かせるための “手品のタネ明かし” - 、2023/9/20
4. 庄司光男 , 梅村雅之 , 筑波大学ポッドキャスト「研究室サイドストーリー」、#036 地球上の生命はどこからやってきた？計算で解き明かすアミノ酸と銀河形成の関係、研究紹介配信、2023/7/21
5. 堀優太、重田育照 , 共同プレスリリース (立命館大学、大阪大学、筑波大学、慶應義塾大学)・荷電 π 電子系が発現するジラジカル性をイオンペア形成によって制御～電子スピンを利用した電子・光機能材料の開発に期待～・2023 年 4 月 3 日
6. 堀優太、重田育照 , 共同プレスリリース（名古屋大学、金沢大学、筑波大学）・二酸化炭素の還元触媒について、構造と電気化学特性の関係をナノスケールで解明～副反応を抑えた二酸化炭素還元のための触媒開発に貢献～・2023 年 6 月 9 日

V-2. 分子進化分野

1. メンバー

教授	稲垣祐司
助教	中山卓郎
学生	大学院生　4 名（後期課程 1 名、前期課程在学 3 名）、学類生　1 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 *Palpitomoans 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*** 83:102364）、⑨ *Microheliella maris* の系統的位置の解明とメガ生物群 CAM クレードの提唱を行った（Yazaki et al. 2022 ***Open Biol*** 12:210376）。未記載真核微生物 SRT308 株（2016 年度年次報告書参照）および未記載真核微生物 SRT706 株については（2022 年度年次報告書参照）、矢吹彬憲博士（海洋研究開発機構）および Dalhousie 大学（カナダ）の Alastair G. B. Simpson 教授と Andrew J. Roger 教授との共同研究として解析が進んでおり、今後論文作成を行う予定である。まだ 2023 年度年次報告で報告した一次植物を構成する 3 つのサブクレード間の系統関係の検証は終了しており、磯貝龍邑氏（生命地球科学研究群生物学学位プログラム前期課程 1 年）を中心に投稿論文を取り纏めている。本稿では、原田ら（2024 ***Mol Biol Evol*** 41:msae014）で推測した 340 遺伝子データに基づく真核生物大系統と、それに基づくミトコンドリア局在 DNA ポリメラーゼ（DNAP）の初期進化についての考察を報告する。

真核生物大系統に基づくミトコンドリア局在 DNA ポリメラーゼの初期進化に関するシナリオの検討

これまでの研究により、ミトコンドリアに局在する DNAP は 7 タイプが知られている。多くの真核生物系統はミトコンドリア局在 DNAP として POP をもっている。オピストコンタに特異的なミトコンドリア局在 DNAP は Pol γ、アピコンプレクサ類とその近縁系統はミトコンドリア局在 DNAP として acPolA、ディスコバの一部であるユーグレノゾアは系統的に異なる 3 タイプのミトコンドリア局在 DNAP である PolIA、PolIBCD+、POP をもつ。今回我々が報告する新奇ミトコンドリア局在 DNAP である rdxPolA は、POP ほどではないが真核生物内で広い分布を示す。rdxPolA はユーグレノゾアを除くディスコバ、マラウィモナス類、アンキロモナス類から検出されたである。これら 3 系統はお互いに近縁でなく、色素体をもたない単細胞従属栄養系統である。ここには示さないが、rdxPolA とそれに近縁なファミリー A DNAP を用いた系統解析では rdxPolA は α プロテオバクテリアの PolI と近縁性を示した。これまでの研究では、rdxPolA 以外に α プロテオバクテリア PolI に明らかな起源をもつミトコンドリア局在 DNA ポリメラーゼは報告されていない。従って、rdxPolA はミトコンドリアの起源となった α プロテオバクテリア共生体がもっていた PolI の直系の子孫 DNAP であり、現存する真核生物の直近の共通祖先（Last Universal Common Ancestor/LECA）以前から受け継がれてきた祖先的ミトコンドリア局在 DNAP だと解釈することが可能である。

これまで知られているミトコンドリア局在 DNA ポリメラーゼのうち、進化的に互いに近縁とは考えにくい複数の系統に分布する DNAP は POP と rdxPolA の 2 種類だけである。そこで、真核生物の初期進化段階におけるミトコンドリア局在 DNAP の進化シナリオを考える。まず、真核生物において POP と rdxPolA がどのように分布しているかを把握するためには、rdxPolA をもつ系統（rdxPolA 系統）と POP をもつ系統（POP 系統）の正確な系統関係

を知る必要がある。近年、300 を超える遺伝子を用いた大規模分子系統解析は、真核生物を①ディアフォレティケス、②アモルフィアと CRuMs の姉妹群、③ディスコバ、④メタモナス類、⑤マラウィモナス類、⑥アンキロモナス類の 6 つの大きなクレードに収斂させてきた。これまでに判明したミトコンドリア局在 DNAP の分布から、6 系統のそれぞれの共通祖先がミトコンドリア局在 DNAP としてどの DNAP を用いていたか推測すると、ディスコバ、マラウィモナス類、アンキロモナス類は rdxPolA、ディアフォレティケスとアモルフィア＋ CRuMs は POP、メタモナス類はミトコンドリアゲノムを失っているためミトコンドリア局在 DNAP をもたないと考えられる。これらの 6 系統の系統関係は、使用する遺伝子や生物種が各解析で異なり議論の余地が残っている。従って、6 系統の近縁関係により現在の rdxPolA と POP の分布を説明する進化シナリオは 2 パターン考えられる。

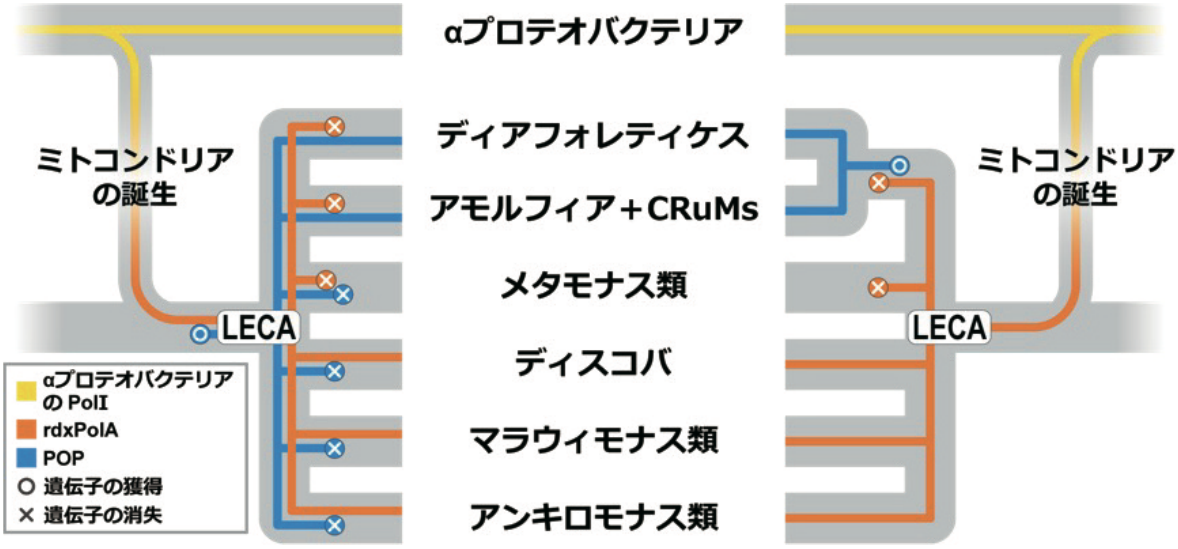


図 1. 主要なミトコンドリア局在 DNAP である POP と rdxPolA が，どのようにして現在の分布になったのかを示す 2 つのシナリオ．オレンジ，青，黄色の線はそれぞれ，rdxPolA, POP, αプロテオバクテリアの PolI の進化の軌跡を表す。（右）POP をもつ系統であるディアフォレティケスとアモルフィア＋ CRuMs が単系統になる場合，rdxPolA から POP への置換が一度起こったシンプルなシナリオが考えられる。（左）POP 系統と rdxPolA 系統が真核生物系統樹で混在している場合、真核生物の共通祖先である LECA の時点で rdxPolA と POP の両方が確立されており、系統ごとに消失が起こったと考えられる。

第 1 シナリオとして、rdxPolA 系統（ディスコバ、マラウィモナス類、アンキロモナス類）と POP 系統（ディアフォレティケスとアモルフィア＋ CRuMs）が真核生物系統樹上で混在せず、お互いに排他的な分布を示す場合が想定できる。この場合、rdxPolA と POP のどちらか一方が LECA に存在し、真核生物の進化の中でもう一方の DNAP への置換が一度だけ起こったと考えられる。例えば、POP 系統であるディアフォレティケスとアモルフィア＋ CRuMs が単系統を形成した場合のミトコンドリア局在 DNAP 進化シナリオは図 1 右のようになる。このシナリオではミトコンドリア共生体の PolI を起源とする rdxPolA が祖先的であると仮定

している。rdxPolA は、メタモナス類では消失し、ディアフォレティケスとアモルフィア＋CRuMs の共通祖先において POP に置換されたことで現在のミトコンドリア局在 DNAP の分布が成立する。

第 2 のシナリオとして、真核生物系統樹上で rdxPolA 系統と POP 系統がどちらも排他的に分布しない可能性を考えよう。rdxPolA と POP が真核生物の系統樹上で混在する場合、まず LECA では POP と rdxPolA が共存を仮定する必要がある。これは rdxPolA 系統と POP 系統のそれぞれの共通祖先が LECA まで、あるいは LECA に近い真核生物系統樹の枝まで遡るためである。その後の真核生物の進化において、系統ごとに 2 つの DNAP のうち片方が二次的に消失したということになる（図 1 左）。では実際の大規模系統解析において、rdxPolA 系統と POP 系統はどのように分布しているだろうか。我々は 340 遺伝子からなる真核生物系統解析用アライメントを作成し、最尤法により 6 つの系統間の系統関係を推測した。結果として得られた無根系統樹はメタモナス類の位置に関わらず、rdxPolA 系統もしくは POP 系統の単系統性を復元しなかった（図 2A）。

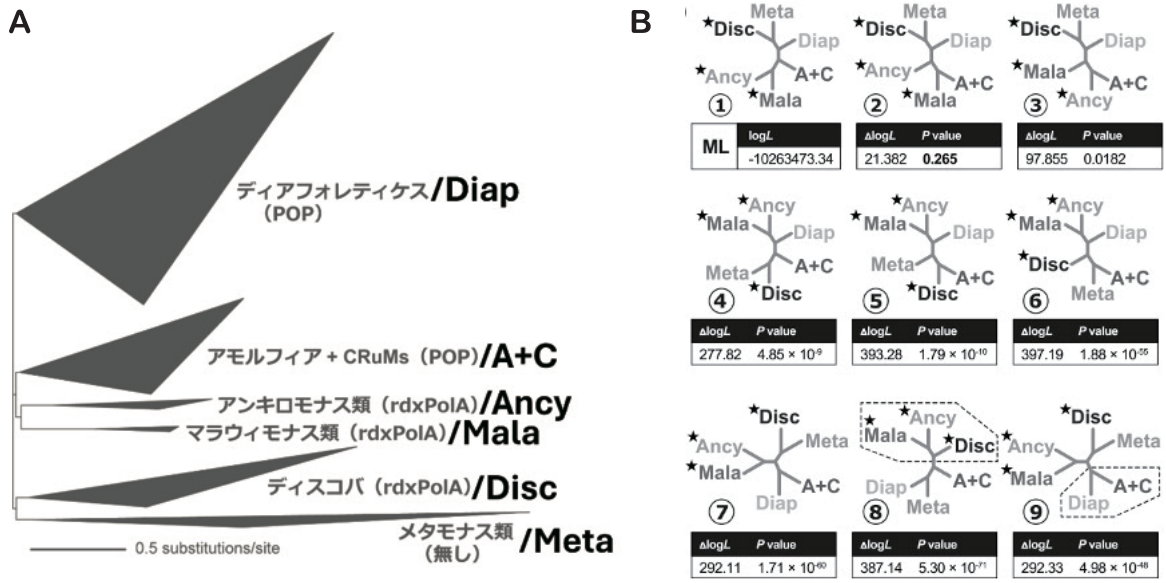


図 2. 真核生物の主要 6 系統間の系統関係．（A）97 生物種・116,499 アミノ酸残基から構成されるアライメントから復元した最尤系統樹．使用したアミノ酸置換モデルは LG+C60+F+G モデルである．注目した 6 つのクレードは三角形で簡易的に表示し、内部分岐は省略した．カッコ内はミトコンドリア局在 DNAP として rdxPolA か POP を使うかを示した．スラッシュの右は（B）で使用する各クレードの略号を示した．（B）AU 検定による 6 系統間の分岐関係の検討 . 樹形①は（A）で示した最尤系統樹．最尤系統樹では、★で示した rdxPolA 系統と POP 系統は排他的に分布しなかった．樹形①からアモルフィア＋ CRuMs を移動させて樹形②〜⑨を作成し、AU 検定を行った．樹形①との対数尤度差（Δ logL）および AU 検定の P 値（*P* value）は図中の表に示した．樹形⑧と⑨では、rdxPolA 系統と POP 系統が排他的に分布しているが、AU 検定では棄却された．

さらに、rdxPolA 系統または POP 系統が単系統になる樹形が復元される可能性を AU 検定

により検証した（図 2B）。樹形⑧と⑨は rdxPolA 系統と POP 系統が排他的に分布している樹形であるが、樹形①とここで注目した 2 つの樹形間に有意な対数尤度差がないという帰無仮説は棄却された。したがって、現時点では rdxPolA 系統と POP 系統はどちらも単系統を形成するとは考えにくい。この大規模系統解析結果をミトコンドリア局在 DNAP の進化へと演繹すると、LECA の時点で rdxPolA と POP の両方が存在し、真核生物の初期進化過程では rdxPolA と POP が混在していたという図 1A に示す第 2 のシナリオが支持される。

[2] 各種トランスクリプトーム・ゲノム解析

原生生物に共生するバクテリアのゲノム解析

自然環境において、多くの細菌が様々な真核生物と共生関係を築いている。こうした共生関係はそれら共生細菌の進化に影響しており、中でもゲノムに与える進化的影響は明確である。共生細菌の中にはゲノムサイズが 1Mbp 以下と極端に縮小したものも散見され、このように縮小した共生細菌ゲノムを調査することは、個々の共生メカニズムを理解する上で重要なだけでなく、細菌の生存に必要不可欠な遺伝子セットの同定や生物学的プロセスの根幹を理解するためのモデルとしても有用である。

上記のような基本原理を推測するためには、ゲノム減少起こした共生細菌を幅広く調べることが重要である。これまでの研究において、系統的に多様な共生細菌のゲノムが解析されてきたが、ほとんどの研究は動物を宿主とする共生細菌に焦点を当てたものである。一方、動物を含む多細胞系は真核生物の多様性全体のごく一部であり、単細胞真核生物がその大部分を占めていることが近年広く知られるようになった。単細胞真核生物にも共生細菌が遍在的に存在することが知られているが、単細胞真核生物における共生細菌の系統的およびゲノム的多様性については、動物に比べほとんど未解明である。

本年度において我々は、海洋渦鞭毛藻 *Citharistes regius* に共生する細菌群集から発見された 2 種類のプロテオバクテリアのゲノムを解析した。*Citharistes regius* はディノフィシス目に属する外洋性の渦鞭毛藻である。ディノフィシス目にはシアノバクテリアをはじめとする複数の細菌を共生させる種が複数知られており、*C. regius* もシアノバクテリアを主体とする共生細菌叢を持つことが示されていた。昨年度、我々は本種に共生するシアノバクテリアのゲノム解読を行い、本年度にその結果を報告した（Nakayama et al. 2024）。この研究の過程で、共生細菌叢を含む *C. regius* の細胞全体からの DNA 増幅を行い、単細胞メタゲノム配列を取得したが、その中にはシアノバクテリア以外のバクテリアゲノム配列が含まれていた。バクテリアゲノム配列は 2 種類存在し、いずれも完全な環状染色体が取得された。我々はこれらの染色体が由来するバクテリアをそれぞれ RS3、XS4 と呼称し、そのゲノム配列について詳細な解析を行った。

RS3 の染色体は 529 Kbp（GC 含有率 33%）であり、XS4 の染色体は 436 Kbp（GC 含有率 28%）であった。一般的なバクテリアの遺伝暗号を用いて予備的なアノテーションを行った

ところ、XS4 の染色体において、終止コドンによってタンパク質の読み枠が分断されるようなケースが散見された。そのため、XS4 については異なる遺伝暗号を利用している可能性が考えられた。これを踏まえ、RS3 と XS4 の染色体上のタンパク質をコードすると考えられる領域について、他のバクテリアの相同なタンパク質と比較することで、どのような遺伝暗号が用いられているかを推定した。まず、様々なバクテリアの相同タンパク質において同一のアミノ酸が使用されている座位について、RS3、XS4 上でどのコドンが利用されているのかを検出した。図 3 は RS3 および XS4 のゲノム配列中に見られるそれぞれのコドンについて、他のバクテリアのタンパク質の相同な位置に利用されているアミノ酸残基の割合をロゴプロットで表したものである。RS3 については通常のバクテリアにおいて利用される遺伝暗号によって翻訳した場合と齟齬のない結果であった。一方 SX4 では、通常終止コドンとして利用される UGA（ゲノム上では TGA）が、他のバクテリアにおいて保存的にトリプトファン（W）が見られる座位に位置することが示された。この結果は SX4 では UGA がトリプトファンをコードしていることを強く示唆している。このような例はマイコプラズマや節足動物の細胞内に共生する一部のバクテリアなど、ゲノムの GC 含有率が低い生物において同様に見られる。一般的なバクテリアにおいてにトリプトファンをコードするコドンは UGG のみであり、本来終止コドンである UGA がトリプトファンコードのコドンとして利用されるようになったのは、低 GC 含有率への選択圧がゲノムにかかったことに起因すると推定される。SX4 において、UGA コドン以外に通常の遺伝暗号と異なるコドンの存在は示唆されなかった。結果として、SX4 のゲノムにおける遺伝暗号はマイコプラズマにおいて利用されるものと同様であると考えられたため、SX4 の遺伝子構造アノテーションではマイコプラズマの遺伝暗号に従って遺伝子を予測した。

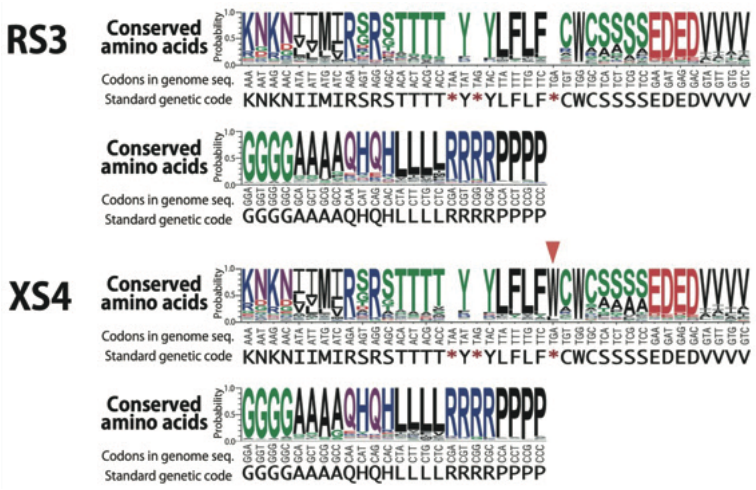


図 3. RS3, XS4 の遺伝暗号解析. RS3（上）、XS4（下）のゲノムに見られるコドンについて、他のバクテリアのタンパク質における相同な位置のアミノ酸の種類と割合を示す. XS4 において、通常終止コドンをコードする UGA コドン（ゲノム上では TGA）がトリプトファン（W）をコードしていることが示唆される（図中矢頭）.

遺伝子予測の結果、RS3 の染色体には 495、XS4 の染色体には 426 のタンパク質コード遺伝子が予測された（図 4）。また、rRNA 遺伝子はいずれの染色体にも 16S、23S、5S rRNA が 1 コピーずつ検出され、tRNA の数は RS3 染色体に 32、XS4 染色体に 31、さらにいずれにも 1 つの tmRNA 遺伝子が存在していた。これらの染色体以外にプラスミドなどの付加的な

ゲノム構成分子が存在している可能性は排除できないが、いずれの染色体にもリボソーム RNA 遺伝子、20 種類のアミノ酸に対応するトランスラファー RNA 遺伝子が一揃いあることが示されたことから、今回発見された環状染色体は RS3 および XS4 の完全ゲノムを表していると推定できる。一般的なバクテリアの環状染色体が数 Mbp であることを踏まえると、RS3 および XS4 のゲノムはいずれも非常に小さい。

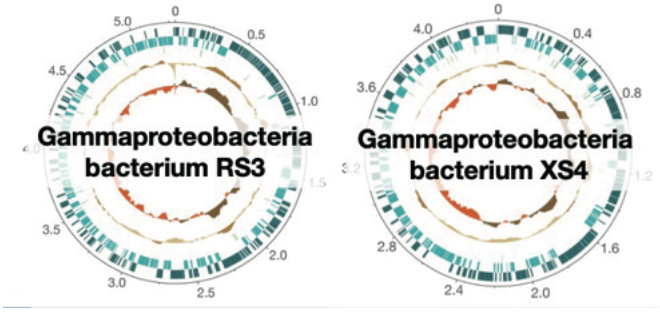


図 4. RS3, XS4 のゲノムマップ

次に、RS3 および XS4 のゲノム上にコードされるタンパク質配列のうち、多様なバクテリアの系統に保存される 105 タンパク質を用いて多遺伝子系統解析を行った。図 5 は解析によって得られた最尤系統樹を示す。この系統樹において、RS3 および XS4 はいずれも Fastidiosibacter 科のバクテリアと単系統群を形成することが強く示唆され、さらに RS3 および XS4 は互いに姉妹系統であることが示された。RS3 と XS4 によって構成される系統は、Fastidiosibacter 科に含まれる *Cysteiniphilum* 属、*Caedibacter* 属、*Fastidiosibacter* 属によって形成される単系統と姉妹系統であることが示されたが、本解析においてはそのいずれとも独立した系統であることが示唆された。

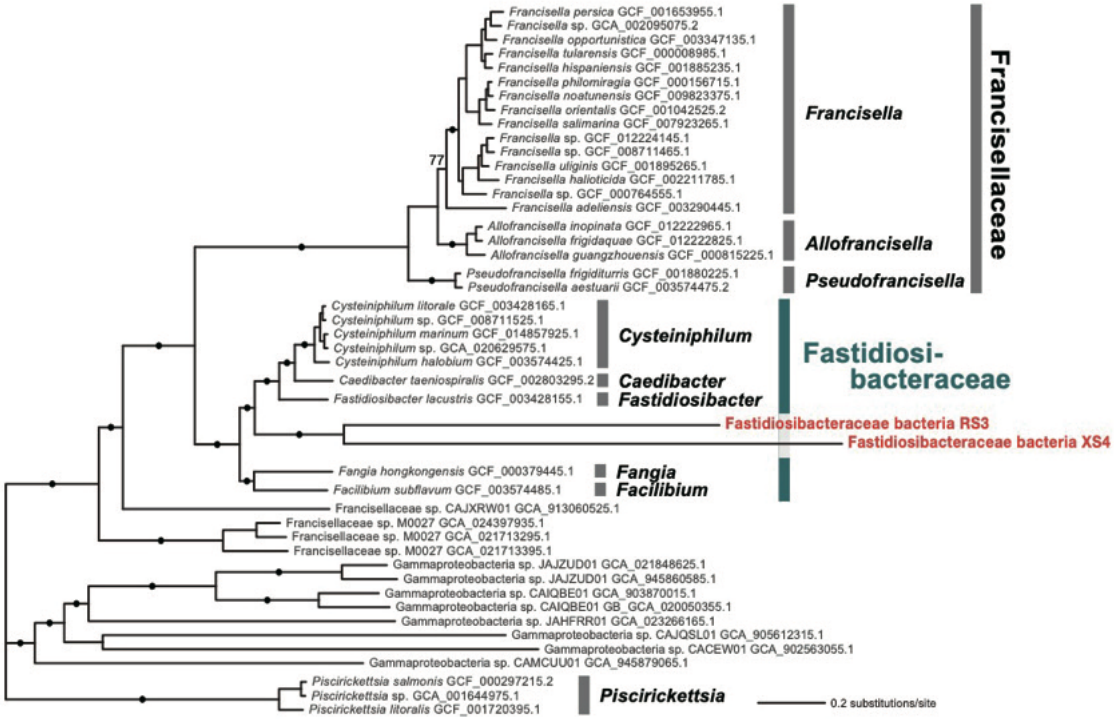


図 5. RS3 および XS4 に近縁なバクテリア系統の系統解析結果 .
46 生物種・105 タンパク質で構成されるアライメントから復元した最尤系統樹.

上記の解析によって明らかとなった系統関係を踏まえ、ゲノムサイズの比較を行ったとこ

ろ RS3 および XS4 の大幅なゲノム縮小進化が明らかとなった。図 6 は系統関係とともにそれぞれのバクテリアゲノムサイズおよび GC 含有率を比較した図である。Fastidiosibacter 科の系統において、最も基部近くで分岐している *Fangia* および *Facilibium* 属のゲノムはいずれも 3 Mbp 弱であり、さらに RS3−XS4 系統の姉妹系統群内に位置する *Cysteiniphilum* 属および *Fastidiosibacter* 属のゲノムサイズが 2-3 Mbp 程度の範囲にあることから、RS3 および XS4 の祖先系統のバクテリアは、少なくとも 2 Mbp 程度のサイズのゲノム配列を有していたと考えられる。それに対して RS3 および XS4 のゲノムサイズは 500 Kbp 前後であることから、進化の中でゲノムサイズが 1/4 以下に縮小したことが示唆された。

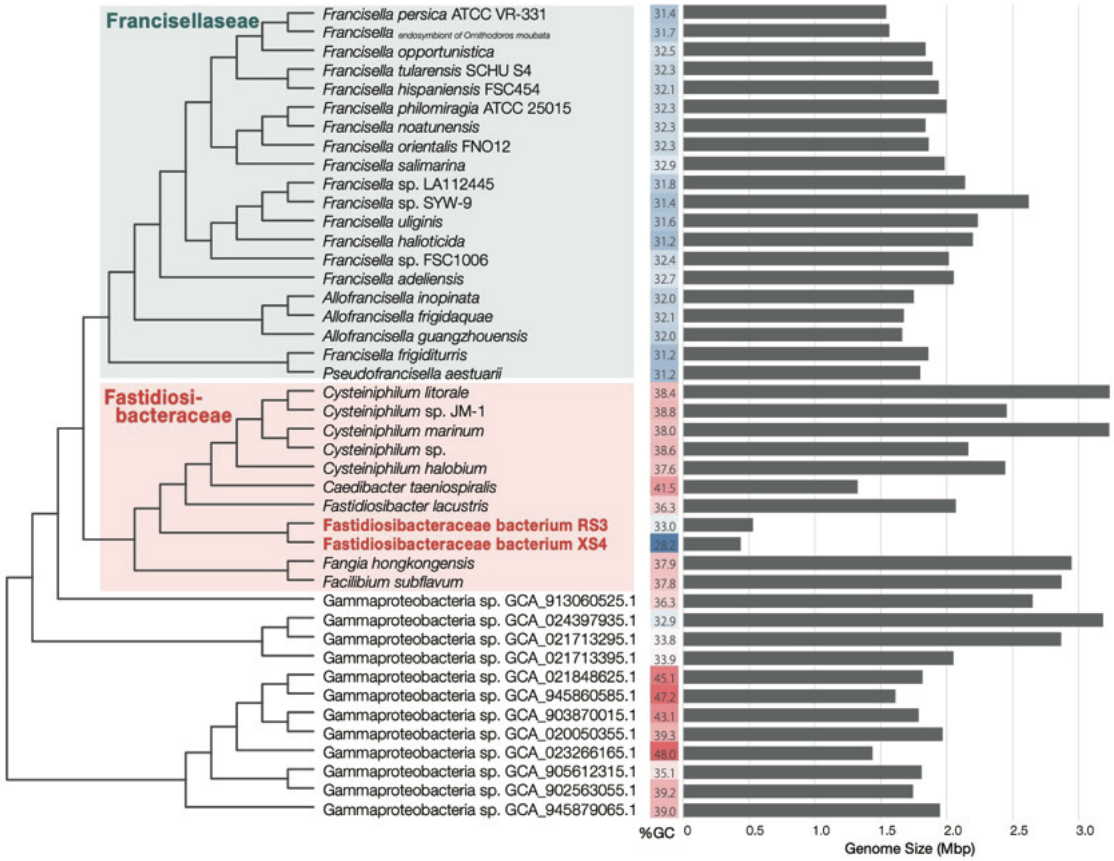


図 6. RS3 および XS4 に近縁なバクテリアとのゲノム比較．多遺伝子系統解析結果に基づく系統関係（左）とそれぞれのバクテリアに対応するゲノムの GC 含有率とゲノムサイズ（右）. RS3, XS4 のゲノムサイズは著しく小さい .

さらに RS3 および XS4 に共通する特徴として近縁な系統と比較して GC 含有率の低さが挙げられる。RS3 ゲノムの 33.04% という GC 含有率は、XS4 を除く他の Fastidiosibacter 科系統のバクテリアゲノムと比較して低い。XS4 ゲノムの GC 含有量 28.16% は、Fastidiosibacter 科系統の姉妹系統であり、低 GC 含有量をもつことが知られる Francisella 科のバクテリアのゲノムと比べてもさらに低い(図 6)。この RS3 と XS4 のゲノムに見られる GC 含有率の違いが、XS4 においてのみ UGA コドンがトリプトファンをコードするであろうことと強く関連していることが予想される。

さらに、RS3 および XS4 のゲノムから 2 つのバクテリアが有する代謝経路を予想し、その進化を類推した。いずれのバクテリアのゲノムにも近縁な系統のバクテリアと比べ非常に少ないタンパク質遺伝子数のみが確認され、代謝機能についてもゲノムサイズと同様に大幅な縮退が起きたものと考えられる。RS3、XS4 は単系統であり、失われたと考えられる代謝機能の大半が共通していることから、これらの代謝機能は 2 つの系統の共通祖先の段階で失われたと予想できる。2 つのバクテリアが共通して失った代謝機能は、共生性バクテリアにおいて普遍的に失われる輸送タンパク質や二成分制御系を含み、さらにアミノ酸合成経路、ピリミジン塩基合成経路、ペプチドグリカン合成経路が含まれることも明らかとなった。これらの経路によって合成される代謝産物はバクテリアの生育において不可欠なものであることから、これらの代謝産物の供給を宿主に依存していることが示唆された。SX4 においては、さらにプリン塩基合成経路やシキミ酸合成経路、リボフラビン合成経路といった RS3 において未だに保持される代謝経路も失われていることが示唆された。

本解析で明らかになった RS3 および SX4 のゲノムの特徴は、Fastidiosibacter 科におけるゲノム多様性の知見を押し広げるだけでなく、単細胞真核生物における共生細菌の系統的およびゲノム的多様性の理解に貢献するものである。

色素体ゲノム解析

我々は、これまでに 3 種の緑色渦鞭毛藻、*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；Matsuo et al. 2022 ***Front Plant Sci*** 13:918543）。 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、国立科学博物館・谷藤吾郎博士と共同でクリプト藻の色素体ゲノム解読を行った（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; Tanifuji et al. 2020 ***Genome Biol Evol*** 12:3926-3937）。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（共生ペディノ藻の痕跡核）の解読を開始した。また未記載渦鞭毛藻 TRD-132 株についてもヌクレオモルフゲノムの解読を目指し、シーケンス解析を開始した。2022 年度には、東京大学アジア生物資源環境研究センター・岩滝光儀博士と高橋和也博士との共同研究として、カレニア科渦鞭毛藻類 10 種の葉緑体ゲノムの解読を試み、そのうち 2 種（*Takayama* cf. *xiamenensis* NGTk657 および *Karlodinium ballantinum*）の色素体ゲノムを完全解読した（2023 年度年次報告書参照）。これらの色素体ゲノムデータは、2023 年度から始まったチェコ共和国科学アカデミー・Elisabeth Hehenberger 博士との二国階共同事業共同研究の一環として解析している。本稿では *K. balantinum* 葉緑体について詳細を報告したい。

光合成を行う渦鞭毛藻の大部分は、ペリディニンを含む葉緑体を持っている。興味深いことに、渦鞭毛藻の複数の系統はペリディニンを含まない葉緑体をもち、これらの「非典型的」葉緑体が渦鞭毛藻の複数の系統に存在することが知られている。これまでの研究により、渦

鞭毛藻が多様化したのち、系統的に多様な真核藻の細胞内共生を経て非典型的葉緑体が成立したことが明らかとなっている。これまで我々の研究対象としてきた緑色渦鞭毛藻類がもつ非典型的葉緑体はペディノモナス属緑藻が起源である。またカレニア科渦鞭毛藻類は、細胞内共生したハプト藻に由来する非典型的葉緑体をもつ。今のところハプト藻由来葉緑体は大多数のカレニ科渦鞭毛藻で確認されており、カレニア科渦鞭毛藻進化のごく初期にハプト藻由来葉緑体が獲得されたと考えられる。しかし我々は、カレニア科渦鞭毛藻が多様化したのち新たなハプト藻由来葉緑体が確立したと考えざるを得ないデータを取得した。我々は、カレニア科にふくまれる複数の属のうち *Karlodinium* 属の 1 種 *K. ballantinum* の葉緑体ゲノムの塩基配列を完全に決定したところ、自由生活性ハプト藻 *Emiliania huxleyi* の葉緑体ゲノムと極めて相同性が高いことが判明した。図 7A&B に *K. ballantinum* と *E. huxleyi* の葉緑体ゲノムの環状マップを示したが、遺伝子の並び順（シンテニー）は同一である。また比較した 2 つの葉緑体ゲノム間で塩基配列レベルの一致度は 99% 以上であった。上記の結果は、現在 *K. ballantinum* がもつ葉緑体は *E. huxleyi* あるいは *E. huxleyi* に近縁なハプト藻から獲得したものであると解釈できる。我々は、*K. ballantinum* において新しく確立したハプト藻由来葉緑体がどのような進化的背景をもつ渦鞭毛藻核コードタンパク質で維持されているかを推測するため、*K. ballantinum* の核コード遺伝子の転写物の網羅的シーケンスデータを解析している（チェコ共和国科学アカデミー・Elisabeth Hehenberger 博士との共同研究）。

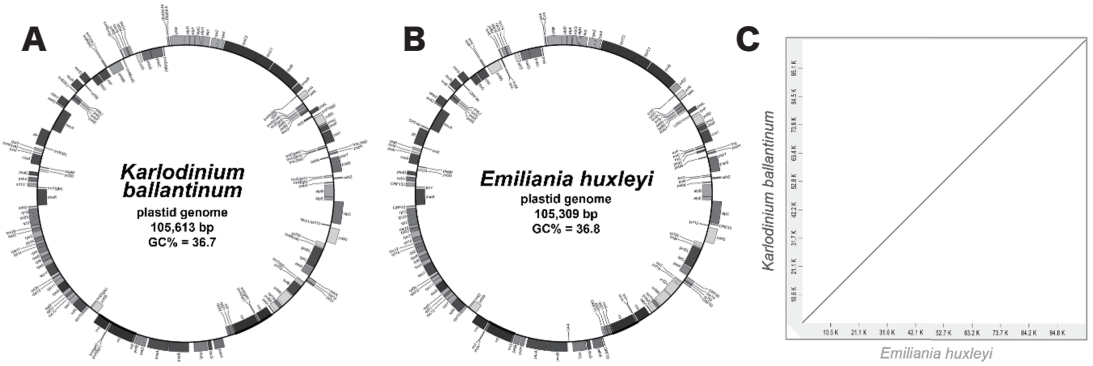


図 7. 渦鞭毛藻 *K. balantinum* とハプト藻 *E. huxleyi* の葉緑体ゲノム比較．（A）*K. balantinum* 葉緑体ゲノムマップ．（B）*E. huxleyi* 葉緑体ゲノムマップ．比較した 2 ゲノムの遺伝子の並び順は同一であることが分かる．（C）*K. balantinum* および *E. huxleyi* 葉緑体ゲノムの dot plot 解析結果．比較した 2 ゲノム間の塩基配列の相同性が極めて高いため，対角線が現れた．

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; Yazaki et al. 2022 ***Front Ecol Evol*** 10:1030570)。

本稿では詳細に触れないが、マラウィモナス類に近縁であることが判明した SRT706 株とアンキロモナス類 *Fabomonas* sp. SRT902 株の Mt ゲノムは解読済みである。次年度以降、以下の真核微生物の Mt ゲノム解読を予定している：①新奇真核微生物 SRT605 株、② *Glissandra* sp. SRT312 株、③有孔虫 *Ammonia berccarii*、④放散虫（*Didymocyrtis tetrathulumus* と *Acanthodesmia viniculata*）

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

2020 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、2021 年度報告した翻訳終結因子 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（ともに生命科学研究部門生命機能情報分野との共同研究）については英文論文の作成を目指し、解析を行った。

4. 教育

1. 原田亮，博士（理学），Diversity and Evolution of Organelle-localized DNA Polymerases.
2. 藤代彩花，学士（理学），光合成関連遺伝子から探る緑色渦鞭毛藻 TGD 株の共生藻痕跡核ゲノムの特徴.

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

なし

外部資金

1. 科学研究費補助金　基盤研究（B），稲垣祐司（代表），2023-2026 年度，交付額：全年度直接経費 14,100 千円（2023 年度直接経費 3,100 千円），真核生物のゲノムデータに混入している原核共生体ゲノムの体系的探索（課題番号 23H02535）
2. 日本学術振興会　学術国際交流事業　二国間交流事業　チェコとの共同研究，稲垣祐司(代表), 2023-2024 年度, 交付額:全年度直接経費 5,000 千円(2023 年度直接経費 2,500 千円)，3 次葉緑体をもつ渦鞭毛藻類における葉緑体進化（課題番号 BPI05044）
3. 科学研究費補助金　基盤研究（B），中山卓郎（代表），2020-2023 年度，交付額：全年度直接経費 13,600 千円（2023 年度直接経費 1,800 千円），海洋微生物多様性の盲点 ― 真核微生物に潜在する原核微生物叢の実態を探る（課題番号 20H03305）
4. 科学研究費補助金　基盤研究（B），中山卓郎（分担），2019-2023 年度，交付額：全年度直接経費 13,300 千円（2023 年度直接経費 1,400 千円），光合成補助色素フコキサ

ンチンの未知なる生合成系の解明とその誕生の謎を紐解く（課題番号 19H03274）

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, Hirakawa Y, Yabuki A, Kim E, Yazaki E, Kamikawa R, Nakano K, Eliáš M, Inagaki Y. Encyclopaedia of family A DNA polymerases localized in organelles: Evolutionary contribution of bacteria including the proto-mitochodrion. *Molecular Biology and Evolution* 41(2):msae014 DOI 10.1093/molbev/msae014
2. Harada R, Inagaki Y. Gleaning. Euglenozoa-specific DNA polymerases in public single-cell transcriptome data. *Protist* 174(6) 125997 2023 DOI 10.1016/j.protis.2023.125997
3. Kume K, Gen T, Abe K, Komatsuzaki H, Yazaki E, Tanifuji G, Kamikawa R, Inagaki Y, Hashimoto T. Transcriptome data sets of free-living diplomonads, *Treponema* sp, and *Hexamita* sp. *Microbiology Resource Announcements* 12(11):e0050623-e0050623 2023 DOI 10.1128/MRA.00506-23
4. Harada R, Kume K, Horie K, Nakayama T, Inagaki Y, Amagasa T. AtLASS: A scheme for end-to-end prediction of splice sites using attention-based bi-LSTM. *IPSJ Transactions on Bioinformatics* 16:20-27 2023 DOI 10.2197/ipsjtbio.16.20
5. Ishitani Y, Ciacci C, Ujiié Y, Tame A, Tiboni M, Tanifuji G, Inagaki Y, Frontalini F. Fascinating strategies of marine organisms to cope with coming pollutant: Titanium dioxide nanoparticles. *Environmental Pollution* 330:121538-121538 2023 DOI 10.1016/j.envpol.2023.121538
6. Sakamoto F, Kanamori S, Díaz Luis M, Cádiz A, Ishii Y, Yamaguchi K, Shigenobu S, Nakayama T, Makino T, Kawata M. Detection of evolutionary conserved and accelerated genomic regions related to adaptation to thermal niches in *Anolis* lizards. *Ecology and evolution* 14(3):e11117 2024 DOI 10.1002/ece3.11117
7. Mochizuki T, Sakamoto M, Tanizawa Y, Nakayama T, Tanifuji G, Kamikawa R, Nakamura Y. A practical assembly guideline for genomes with various levels of heterozygosity. *Briefings in Bioinformatics* 24(6):1-13 2023 DOI 10.1093/bib/bbad337
8. Nomura M, Ohta K, Nishigami Y, Nakayama T, Nakamura K, Tadakuma K, Galipon J. Three-dimensional architecture and assembly mechanism of the egg-shaped shell in testate amoeba *Paulinella micropora*. *Frontiers in Cell and Developmental Biology* 11:1232685 2023 DOI 10.3389/fcell.2023.1232685

B）査読無し論文

1. Nakayama T, Yabuki A, Nomura M, Shiba K, Inaba K, Inagaki Y. Convergent reductive evolution of cyanobacteria in symbiosis with Dinophysiales dinoflagellates. *bioRχiv* 2024 DOI 10.1101/2024.01.11.574452
2. 原田亮 , 稲垣祐司 . 遺伝子水平伝番が支配するオルガネラ局在ファミリー A DNA ポリメラーゼの進化 . *月刊　細胞* 55(6):33-36 2023

（2）国際会議発表

A）招待講演

なし

B）一般講演

1. Ryo Harada, Yoshihisa Hirakawa, Akinori Yabuki, Kim, Ensoo, Euki Yazaki, Ryoma Kamikawa, Kentaro Nakano, Marek Eliáš, Yuji Inagaki. Evolution and switching of mitochondrion-localized DNA polymerases in Euglenozoa. 3rd Annual International Congress on Euglenoids 2023. Jul.17–18, 2023, Euglena International Network. BIOCEV, Prague
2. Yuji Inagaki, Garry Benico, Kazuya Takahashi, Ryo, Harada, Inga Martinek, Kacper Maciszewski, Takuro Nakayama, Mitsunori Iwataki, Martin Kolisko, Elisabeth Hehenberger. Repeated haptophyte endosymbioses in the dinoflagellate family Kareniaceae. IX ECOP-ISOP joint meeting 2023, Jul.9-14, 2023, University of Vienna, Austria.
3. Ryu Isogai, Ryo, Harada, Takuro Nakayama, Yuji Inagaki. Impact of taxon sampling on the relationship among Rhodophyta, Glaucophyta, and Chloroplastida inferred from nuclear gene-based phylogenomic analyses. IX ECOP-ISOP joint meeting 2023. Jul.9-14,2023, University of Vienna, Austria.
4. Kazuya Takahashi, Takuro Nakayama, Yuji Inagaki, Elisabeth Hehenberger, Mitsunori Iwataki. A non-kareniacean dinoflagellate with a haptophyte-derived plastid indicates multiple tertiary endosymbioses. IX ECOP-ISOP joint meeting 2023. Jul.9-14, 2023, University of Vienna, Austria.
5. Ryo Harada, Yuji Inagaki. Has the DNA polymerase of the proto-mitochondrion been retained in Discoba, Malawimonadidae, and Ancyromonadida?: a novel mitochondrion-localized DNA polymerase with the phylogenetic affinity to the alpha-proteobacterial PolI. IX ECOP-ISOP joint meeting 2023. Jul.9-14,2023, University of Vienna, Austria.

（3）国内学会・研究会発表

A）招待講演

なし

B）その他の発表

1. 藤代彩花 , 磯貝龍邑 , 高橋和也 , 岩滝光儀 , 稲垣祐司 , 中山卓郎 . 光合成関連遺伝子に着目した緑色渦鞭毛藻 TGD 株のヌクレオモルフゲノムの解析． 日本藻類学会第 48 回大会 , Mar 22-23, 2024 兵庫県神戸市　神戸大学　六甲キャンパス
2. 久米慶太郎 , 若島朋幸 , 厳翼 , 岩本亮介 , 井上貴史 , 谷藤吾朗 , 神川龍馬 , 稲垣祐司 , 橋本哲男 . ディプロモナス類の寄生虫化に伴う遺伝子レパートリーの変化：近縁自由生活種とのオルソログ比較解析 . 第 93 回日本寄生虫学会大会 , Mar 9-10, 2024, 東京都文京区
3. 番場浩平 , 稲垣祐司 . I″ 型ルビスコの発見：I/I′ 型ルビスコに対する祖先的タンパク質群．日本共生生物学会第 7 回大会 , Nov 18-19, 2023, 京都府　京都市　京都大学
4. 上西慧莉紗 , 原田亮 , 吉永真理 , 稲垣祐司 . クレン古細菌における PCNA 複合体の進化．日本共生生物学会第 7 回大会 , Nov 18-19, 2023, 京都府京都市　京都大学
5. 磯貝龍邑 , 原田亮 , 中山卓郎 , 稲垣祐司 .　一次植物内部系統関係におけるタクソンサンプリングの影響：紅藻類と灰色藻類のどちらが初期分岐系統なのか？日本共生生物学会第 7 回大会 , Nov 18-19, 2023, 京都府京都市　京都大学
6. 宮本知世 , 矢吹彬憲 , 野村真未 , 柴小菊 , 稲葉一男 , 稲垣祐司 , 中山卓郎 . 細胞サイズ別環境 DNA を用いた共生性シアノバクテリアの探索．日本共生生物学会第 7 回大会 , Nov 18-19, 2023, 京都府京都市　京都大学
7. 加藤孝一朗 , 南波紀昭 , 稲垣祐司 , 中山剛 , 中山卓郎 .　寄生性ユーグレナ類 *Euglenaformis parasitica* における非光合成性葉緑体の存在とその機能 .　日本植物学会 第 87 回大会 , Sep 7-9, 2023, 北海道札幌市　北海道大学　札幌キャンパス
8. 原田亮 , 久米慶太郎 , 堀江和正 , 中山卓郎 , 稲垣祐司 , 天笠俊之 . AtLASS: A Scheme for end-to-end prediction of splice sites using attention-based bi-LSTM. 第 74 回バイオ情報学 (SIGBIO) 研究会 , Jun 29-Jul 1, 2023, 沖縄県国頭郡恩納村　沖縄科学技術大学院大学
9. 番場浩平 , 稲垣祐司 , 原田亮 , 中山卓郎 , 磯貝龍邑 .　最尤系統樹中の 2 分岐の信頼性に対する新たな評価手法．第 74 回バイオ情報学 (SIGBIO) 研究会 , Jun 29-Jul 1, 2023, 沖縄県国頭郡恩納村　沖縄科学技術大学院大学
10. 望月孝子 , 坂本美佳 , 谷澤靖洋 , 中山卓郎 , 谷藤吾朗 , 神川龍馬 , 中村保一 .　様々なヘテロ接合性レベルを持つゲノムで検証された実用的なアセンブリガイドライン . 日本育種学会 第 145 回講演会 , Mar 16-17, 2024, 東京都文京区　東京大学
11. 望月孝子 , 坂本美佳 , 谷澤靖洋 , 中山卓郎 , 谷藤吾朗 , 神川龍馬 , 中村保一 .　様々な

ヘテロ接合性レベルを持つゲノムで検証された実用的なアセンブリガイドライン . 第４６回日本分子生物学会年会 , Dec 7, 2023,　兵庫県神戸市　神戸ポートアイランド

（4）著書、解説記事等

1. 中山卓郎　原生生物学事典　朝倉書店　2023 年 5 月（ISBN:4254171811)

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. 筑波大学計算科学研究センター計算情報学研究部門データ基盤分野（天笠俊之教授）との共同研究：機械学習をもちいた真核生物ゲノム中のイントロン境界の予測

産学官連携

なし

国際連携・国際活動等

3. 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
4. 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
5. 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 ポリメラーゼの多様性に関する研究
6. Elisabeth Hehenberger よび Martin Kolisko 博士（Institute of Parasitology, Czech Academy of Sciences・チェコ共和国）との共同研究：３次葉緑体をもつ渦鞭毛藻類における葉緑体進化

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人事委員、計算科学研究センター共同研究委員，計算科学研究センター学際計算科学連携室室長

中山卓郎：なし

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
	植田 宏昭（学内共同研究員）
准教授	
講師	
助教	松枝未遠・ドアングアンヴァン
研究員	佐藤拓人・今井優真
	中村祐輔（学内共同研究員）
学生	大学院生 31 名、学類生 7 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・ドアン助教のグループが取り組んでいる。プロジェクトとしては、科研費の「都市街区気象 LES モデルの改良とその応用（代表・日下教授)」がある。このほか、環境省の環境研究総合推進費「全国主要都市に対する暑熱・強風・雪の気候変動脆弱性アトラスの作成（代表・稲津將北海道大学教授)」に日下教授が分担者として参画している。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。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がある。この取り組みは筑波大計算科学研究センター・気象庁気象研究所・国立環境研究所との 3 機関共同研究につながり、令和 5 年度から開始した雲物理過程とエアロゾルの関係を調査する科研費基盤研究 S(代表･気象研究所梶野瑞王主任研究官) の発足に貢献した。産学連携として、総合建設業や風力発電事業者との共同研究がある。CCS 内での連携としては､天笠教授グループとの機械学習に関する共同研究、北原教授グループとの孤立峰の上空にできる雲の位置や大きさの推定に関する共同研究がある。

地球規模の気象研究は、松枝助教のグループが取り組んでいる。CCS 内での連携として、天笠教授のグループと共同で､気象庁の GPV データや JRA55 長期再解析データの配信を行っている。

3. 研究成果

[1] 局地気象学の研究

日本の北陸地方は、その緯度の低さにも関わらず豪雪地帯となっており、世界的に見ても

極めてめずらしい。北陸地方の都市の中で、新潟市は降雪量が相対的に少ない。その主な理由として平野が大きく山岳から遠いことがあげられる。この他の理由として、佐渡島が雪をブロックしているといういわゆる「佐渡ブロック」が気象予報士などの間でしばしば話題になるが、この効果について本格的に調査した研究はなかった。日下研究室では、はじめに、過去 10 年間の気象レーダーデータを用いた統計解析を行い、降雪量の極小地域は、風向に依存すること、そして佐渡島の風下に出現する傾向にあることを明らかにした。さらには、気象モデル WRF を用いた数値実験により、佐渡島がある場合はない場合に比べて新潟の降雪量が少なくなることを明らかにした。この理由として、佐渡島が大陸からの寒気と雪雲をブロックすることで、佐渡の風下への雪と水蒸気移流を減少させること、風下の海上風を弱めることで海面から熱・水蒸気フラックスを減少させることも明らかにした。

日本の北陸地方はフェーン現象（昇温）の代表的な地域であると、高校地学・地理学の教科書などで紹介されている。世界のフェーン現象には、明確な時刻依存性を持つものも少なくない。日下研究室では、富山平野で過去 10 年間に発生したフェーン現象の統計解析により、この地方のフェーン現象は夜に起こる傾向にあることを明らかにした。この結果は、地元住民の実感と同じであった。さらには、気象モデル WRF を用いた数値シミュレーションによって、その典型事例のメカニズムを次の通りに明らかにした。日中は山岳域でも混合層が発達するため大気境界層の大気が中立に近くなり山岳波が発生しない。また、富山平野は海風に覆われている。日没後、大気が安定になることで山岳波が発生する。この時、風速・大気安定度・山の高さの 3 つの変数からなる無次元山の高さ（山岳フルード数の逆数）が山岳波の砕波条件を満たせば砕波が発生し、山岳斜面を下るおろし風が発生する。その後、海風の消滅に伴い、おろし風が平野まで達し、フェーン現象（昇温）が生まれる。

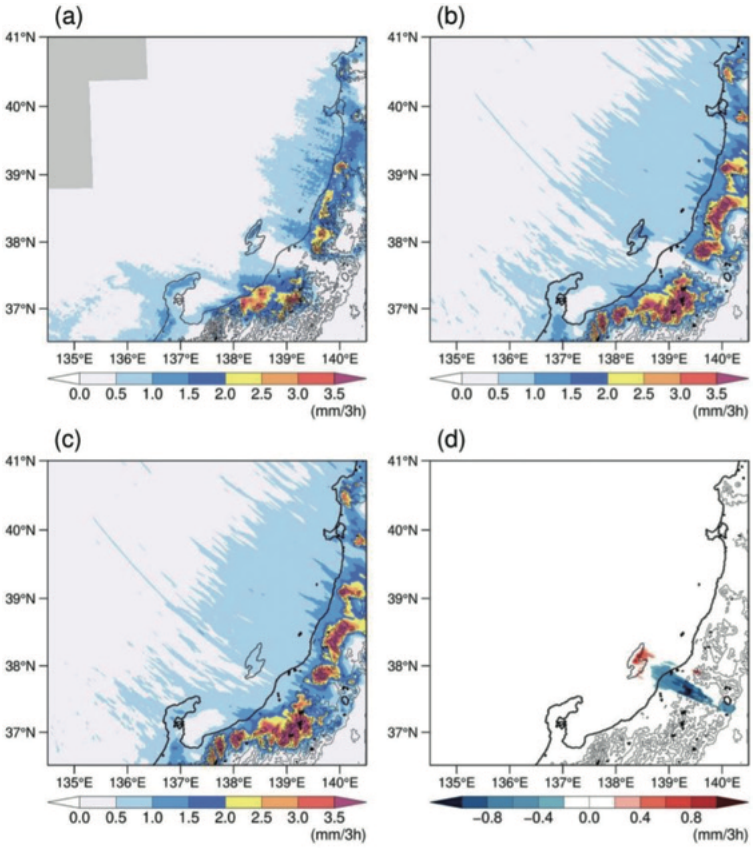


図 1. (a) 観測された降水量、(b) 佐渡島がある場合の計算結果、(c) 佐渡島がない場合の計算結果、(d) 佐渡島の雪陰効果（佐渡ブロックの効果 図 c-d)。いずれも典型 12 事例の平均値。
(Kusaka et al. 2023 より)

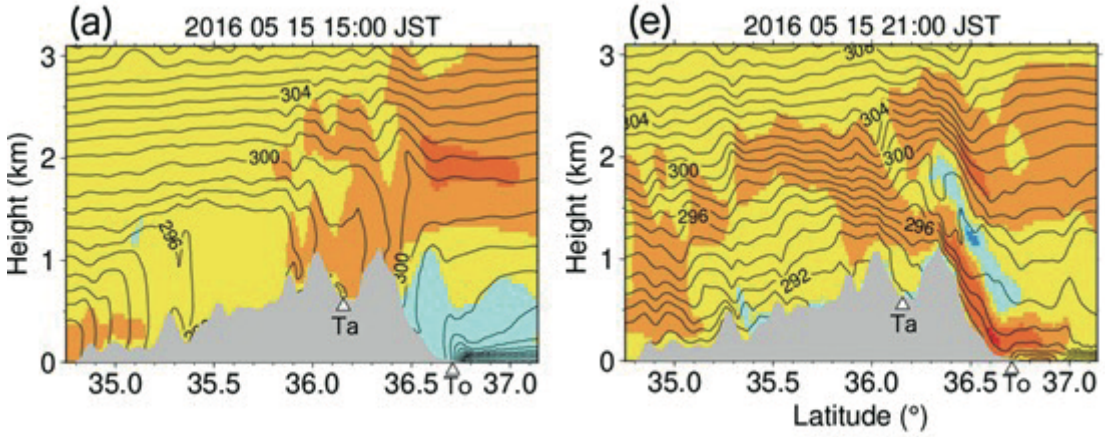


図 2. 気象モデル WRF で再現された富山フェーン．実線は濃尾平野から富山平野への鉛直断面図上の等温位線と風の南北風成分．暖色系が南風、寒色系が北風成分を意味する．(a) フェーン発生前の 2016 年 5 月 15 日 15 時，(b) フェーン発生中の同日 21 時．
(Kusaka et al. 2023 より)

[2] 都市気候学の研究

日本の真夏日や猛暑日に、都市街区内の歩行者は、大きな熱ストレスを受ける。日下研究室では竹中工務店と共同で「人は、待ち合わせ場所に徒歩で移動する際にその歩行ルートをどうやって決めているのか？」という問いに答えるための被験者実験を東京都日本橋地区で実施した。被験者には目的地まで自由に移動してもらい、交差点でルートを選択する際、その理由をつぶやき記録してもらった。歩行ルートとつぶやき記録を解析した結果、歩行ルートの選択の第一要因が日陰であることが分かった。これまで、熱ストレスを緩和するため、人は日陰を歩くと考えられてきたが、そのような実証実験はこれまで行われておらず、仮説の域をでていなかった。本研究ではこの仮説を被験者実験で検証したことになる。

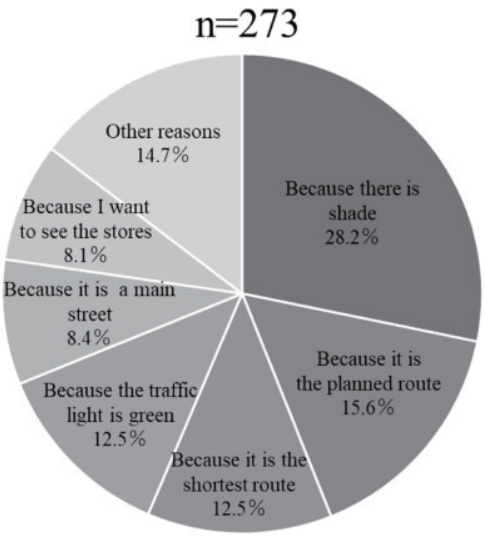


図 3. 都市街区での夏の歩行ルートの決定要因（Azegami et al. 2023）

[3] 高解像度の気象・気候データのダウンスケーリング

高解像の気象・気候データは、小さなスケールの大気現象を理解するためや、農業や都市機能などを効率的に稼働するための実用目的には不可欠である。高解像度の気象・気候データを推定するには、低解像度全球気候モデル（GCM）の結果からダウンスケーリングという手法が必要となる。気候ダウンスケーリングには主な二つのアプローチがある。一つは、地域気候モデル（RCM）を用いる力学的ダウンスケーリング手法である。もう一つのアプロー

チは、統計モデルを用いて大規模と地域的現象の関係をモデル化し、いわゆる統計的ダウンスケーリング方法である。両方のアプローチにはそれぞれ利点と欠点がある。

私たちは、新たなダウンスケーリングアプローチを提案する。これは地表面物理モデルのみを利用し、陸面におけるエネルギーバランスや気温、湿度、土壌条件などをシミュレートする方法である。Land surface physics-based downscaling (LSP-DS) と名づける。LSP-DS は、アメリカの NCAR が主導で開発されている Noah-MP 陸面モデルシステムを採用する。LSP-DS は適用が容易で、計算資源を力学的ダウンスケーリングに比べて求めない。東京における都市ヒートアイランドを再現するために LSP-DS の良い精度を検証した（図 4）。今後に LSP-DS を用いて現在世界各地の都市を対象とした気候ダウンスケーリングに使用している。手法を Github で公開して、CORDEX（ダウンスケーリング研究コミュニティ）などに普及させることを目指している。

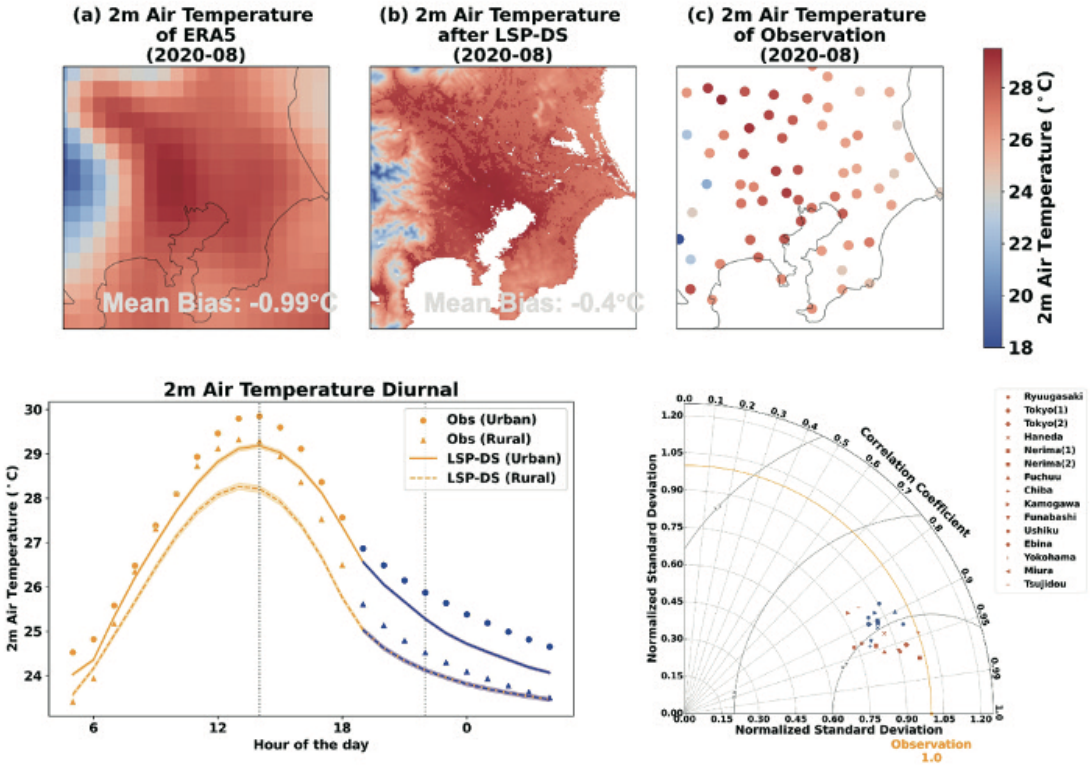


図４　LSP-DS を用いて、関東地方の気温を再現した。観測データと比較し、精度検証した（Xue et al., 2024）。

[4] AI データマイニング手法の応用

ビッグデータと機械学習の発展は、大気科学にも革新的な変化をもたらす。私たちは大気科学の改善に向けて機械学習の応用に取り組みを行っている。昨年度に、過去発表した S-SOM アルゴリズムの応用についての研究を行った。具体的に、King Abdullah University of Science and Technology 大学グループと共同で、アラビア半島における降水パターンと形成メ

カニズムを研究した（図 5)。また、ハノイ科学大学との協力により、モンスーンの発生を検出するための新しいアプローチとして S-SOM を使用した。モンスーンの発生の定義は非常に複雑な問題で、これまで経験的なアプローチで扱われることが多い。SOM をはじめ機械学習手法を用いてモンスーン発生を特定できる手法を提案できれば、大きいな発展に繋がることを期待する。

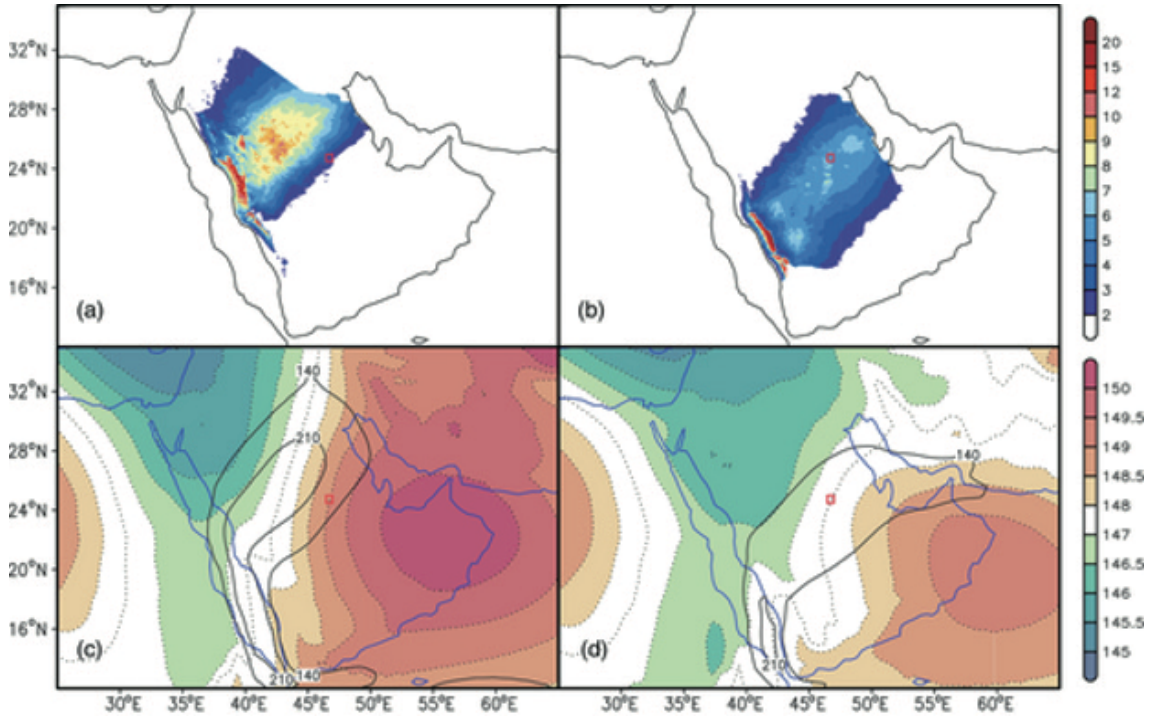


図 5：S-SOM によるアラビア半島における降水パターンと関連気象場の特定（ Luong et al., 2024) 。

4. 教育

日下研究室（29 名）：

D3	浅野裕樹、畔上泰彦、静居竜大、鈴木信康、Kandambige Thisara Lakshan Sathsara、Lingbo Xue、中村真悟
D2	Angela Monina Ticobay Magnaye、Sharifah Faridah Binti Syed Mahbar
D1	工藤達貴
M2	大友啓嗣、軽辺凌太、児玉朋子、近内翔、中井猛人、諸橋聡佳、山田絵理花
M1	安倍啓貴、井谷慧人、青田優希、大野哲弥、高田桃香、高畠亮、松山理歩、八木碧月、Bo Pang
B4	加藤愛佳、富山翔太、長谷部俊

松枝研究室（8 名）：

M2	田中拓海、八巻俊則
M1	浅賀結月、　仲尾次晴空、杉本寛典、藤巻春翔
B4	蒲生采侑、児島功洋、町田大成

ドアン研究室（1 名）：

B4	Nguyen Vinh Binh

東北大学理学研究科・集中講義　日下博幸
ベトナム国家大学日越大学・集中講義　日下博幸
新潟県立佐渡高校・特別講義　日下博幸
全国科学部連合地学分科会・講演　日下博幸
つくば SKIP アカデミー・講義　日下博幸

5.　受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 第 18 回日本ヒートアイランド学会全国大会ベストポスター賞、大友啓嗣・日下博幸、夏季の短時間強雨に対して都市が及ぼす影響の調査－東京を対象に観測と数値シミュレーションを用いて－、2023 年 9 月 10 日
2. 第 2 回年極端気象シンポジウム / 第 19 回台風研究会優秀発表賞、大友啓嗣･日下博幸、東京における夏季の短時間強雨に対する都市の影響、2023 年 9 月 14 日
3. 日本気象学会 2023 年度秋季大会松野賞、大友啓嗣、東京における夏季の短時間強雨に対する都市の影響、2023 年 10 月 23 日
4. 日本気象学会 2023 年度秋季大会松野賞、浅野裕樹、非静力学効果を考慮したおろし風の理論、2023 年 10 月 23 日
5. 第 62 回日本生気象学会大会学生発表コンテスト優秀賞、軽辺凌太、微気候モデル ENVI-met の検証、2023 年 11 月 16 日

外部資金

1. 株式会社ユーラスエナジーホールディングス　共同研究，日下博幸（代表），2023 年 1 月～ 2023 年 12 月，風力発電の風車高層化を見据えた風速の鉛直プロファイルの推定精度高度化
2. 財団法人気象業務支援センター　共同研究，日下博幸（代表），2022 年 4 月～ 2023 年 4 月，191 万円，インドネシア国気候変動対策能力強化プロジェクトフェーズ 2 における長期気候変動予測にかかる能力強化

3. 株式会社竹中工務店技術研究所　共同研究 , 日下博幸（代表）, 2023 年 5 月～ 2024 年 3 月, 気象分野のデータ同化技術の建築分野数値シミュレーション技術への適用に関する共同研究
4. 日本学術振興会　科学研究費助成事業　基盤研究 (S), 日下博幸（分担）, 2023 年 4 月～ 2028 年 3 月 , 1066 万円 , 2023 年度（2023 年 4 月～ 2024 年 3 月　939 万円）, 低高度孤立峰を利用した多角的観測に基づく非線形気象化学過程のシームレスな理解
5. 日本学術振興会　科学研究費助成事業　基盤研究 (C), 日下博幸（代表）, 2021 年 4 月～ 2024 年 3 月 , 247 万円 , 2023 年度（2023 年 4 月～ 2024 年 3 月　91 万円）, 都市街区 LES モデルの改良とその応用
6. 独立行政法人環境再生保全機構　環境研究総合推進費　日下博幸（分担）, 2023 年 4 月～ 2026 年 3 月 , 3120 万円 , 2023 年度 (2023 年 4 月～ 2024 年 3 月 1040 万円), 全国主要都市に対する暑熱・強風・雪の気候変動脆弱性アトラスの作成
7. 日建設計総合研究所 , 共同研究 , Doan Quang Van（分担）,2022 年 5 月～ 2023 年 4 月 , 関東地域におけるソーラーパネル設置のフィージビリティプラットフォームの開
8. Wellcome Trust, The University of Queensland, 共同研究 , Doan Quang Van（分担）, 2023 年 9 月～ 2028 年 9 月 , 9,112,020 円 , A user friendly digital prediction tool for dengue prevention

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. Kusaka H, Imai Y, Kobayashi H, Doan QV, Ngo-Duc T, 2024: Influence of Foehn Winds of Truong Son Mountains on the High Temperatures Observed in North-Central Vietnam during 31 May–5 June 2017, *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, Volume 63, 597–616
2. Amoatey P, Osborne N, Darssan D, Xu Z, Doan Q-V, Phung D, 2024: The effects of diurnal temperature range on mortality and emergency department presentations in Victoria state of Australia: A time-series analysis, *Environmental Research*, Volume 240, 1-20
3. Doan QV, Amagasa T, Pham T-H, Sato T, Chen F, Kusaka H. 2023. Structural k-means (S k-means) and clustering uncertainty evaluation framework (CUEF) for mining climate data. *Geoscientific Model Development*, Volume 16, 2215–2233.

4. Linh Tran NQ, Cam Hong Le HT, Pham CT, Nguyen XH, Tran ND, Thi Tran T-H, Nghiem S, Ly Luong TM, Bui V, Nguyen-Huy T, Doan Q-V, Dang KA, Thuong Do TH, Thi Ngo HK, Nguyen TV, Nguyen NH, Do MC, Ton TN, Thu Dang TA, Nguyen K, Tran XB, Thai P, Phung D., 2023: Climate change and human health in Vietnam: a systematic review and additional analyses on current impacts, future risk, and adaptation. *The Lancet Regional Health - Western Pacific*, Volume 40, 100943.
5. Nguyen D-M, Doan Q-V, Trinh HD, Nguyen T-H, Khanh DN, Phan DC, Tran T-T, Nguyen H-V, Bui T-M., 2023: Land Surface Physics-Based Downscaling Approach for Agricultural Meteorological Prediction: Applicability for Tropical-Monsoon Region, the Red River Delta, Vietnam. *Scientific Online Letters on the Atmosphere*, Volume 19, 298-306
6. Khan A, Carlosena L, Khorat S, Khatun R, Das D, Doan Q-V, Hamdi R, Aziz SM, Akbari H, Santamouris M, Niyogi D., 2023: Urban cooling potential and cost comparison of heat mitigation techniques for their impact on the lower atmosphere. *Computational Urban Science*, Volume 3, article number 26.
7. Nguyen TH, Nagashima T, Doan Q-V, Khan A, Niyogi D.,2023: Source apportionment of PM2.5 and the impact of future PM2.5 changes on human health in the monsoon-influenced humid subtropical climate. *Atmospheric Pollution Research*, Volume 14, 101777.
8. Azegami Y, Imanishi M, Fujiwara K, Kusaka H, 2023: Effects of solar radiation in the streets on pedestrian route choice in a city during the summer season. *Building and Environment*, Volume 235, 110250.
9. Sato T, Kusaka H, 2023: Applicability of methods for inflow turbulence generation 2 developed in a CFD field to the thermally driven convective 3 boundary layer simulations. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, Volume 62, 1783-1801.
10. Sato T, Kusaka H, 2023: Intercomparison of Synthetic Inflow Turbulence Generation Methods for Large-Eddy Simulation Models in Thermally Driven Convective Boundary Layer Simulations. *Scientific Online Letters on the Atmosphere*, Volume 19, 165-172.
11. Kusaka H, Suzuki N, Yabe M, Kobayashi H, 2023: The snow-shadow effect of Sado Island on Niigata City and the coastal plain. *Atmospheric Science Letters*, Volume 24, e1182.
12. Asano Y, Kusaka H, Inatsu M, 2023: Future projections of wet snow accretion and snowfall in Kanto Plain, Japan, using a large ensemble climate simulation. *Meteorological Applications*, Volume 30, e2162.

13. Kusaka H, Nishiba S, Asano Y. 2024: Why does Japan' s south foehn, "Jintsu-Oroshi" tend to onset during the night?: An investigation based on two case studies. *Journal of the Applied Meteorology and Climatology*, Volume 63, 263-282.
14. Sato T, Kusaka H, 2023: Investigation of a Geometric Parameter Corresponding to the Turbulent Length Scale Within an Urban Canopy Layer. *Boundary-Layer Meteorology*, Volume 189, 215-233.
15. Xu X, Maruyama A, Kusaka H, 2023: Improvements in the Land and Crop Modeling Over Flooded Rice Fields by Incorporating the Shallow Paddy Water. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, Volume 15, e2022MS003248.

B）査読無し論文

なし

（2）国際会議発表

A）招待講演

なし

B）一般講演

1. Doan QV et al., 2023: Fine-scale Climate Change Information to Assist Decision Making: The CORDEX SEA Urban Climate Initiative. Asia Oceania Geosciences Society Annual Meeting 2023, 31 August – 4 September 2023, Singapore
2. Xue L, Doan QV, Kusaka H, He C, Chen F, 2023: Performance Evaluation of a Land-surface-physics-based Downscaling Approach for Urban Thermal Environment Prediction. Asia Oceania Geosciences Society Annual Meeting 2023, 31 - 4 August 2023, Singapore
3. Chen F, He C, Doan QV, Niyogi D, 2023: Investigate Extreme Precipitation in Multiple Urban Systems. Asia Oceania Geosciences Society Annual Meeting 2023, 31 - 4 August 2023, Singapore
4. Chen F, He C, Doan QV, Niyogi D, Di L, 2024: Extreme Precipitation Trend in Multiple Urban Systems, 104th AMS Annual Meeting, 28 January -1 February 2024, Maryland, United States of America
5. Asano Y, Kusaka H, 2023: Numerical and theoretical study of the effects of mountain width on downslope winds. The 36th International Conference on Alpine Meteorology, 2023-06-19--2023-06-23, St. Gallen, Switzerland
6. Kudo T, Kusaka H, 2023: Climatological study on valuable local winds of Japan

“Obonai-dashi” The 36th International Conference on Alpine Meteorology, 2023-06-19--2023-06-23, St. Gallen, Switzerland

7. Kusaka H, Ikeda R, Iizuka S, Boku T, 2023: Development of the state of art city-scale Large Eddy Simulation model (City-LES) based on CFD and meteorological modeling approaches. The 11th International Conference on Urban Climate, 2023-08-28--2023-09-01, Sydney, Australia
8. Sato T, Kusaka H, 2023: Development of methods to generate inflow turbulence component applicable to the simulation of convective boundary layer over urban area. The 11th International Conference on Urban Climate, 2023-08-28--2023-09-01, Sydney, Australia
9. Magnaye A, Kusaka H, 2023: Sensitivity tests of WRF-UCM simulations of extreme heat events in Metro Manila. The 6th International Workshop on Nonhydrostatic Numerical Models, 2023-08-31--2023-09-02, Sapporo, Japan
10. Sato T, Kusaka H, Boku T, Tatebe O, 2023: Recent Development of City-Scale Large-Eddy Simulation model “City-LES.” T6th International Workshop on Nonhydrostatic Numerical Models, 2023-08-31--2023-09-02, Sapporo, Japan
11. Suzuki N, Kusaka H, Yabe M, Kobayashi H, 2023: Effect of “Sado Island Block” on Snowfalls in Niigata City and the coastal plain. The 6th International Workshop on Nonhydrostatic Numerical Models, 2023-08-31--2023-09-02, Sapporo, Japan
12. Kudo T, Kusaka H, 2023: The valuable local winds “Obonai-dashi” simulated by the WRF model・6th International Workshop on Nonhydrostatic Numerical Models, 2023-08-31--2023-09-02, Sapporo, Japan
13. Kusaka H, Nishiba S, Asano Y, 2023: Why does Japan’s south foehn, “Jintsu-Oroshi”, often blow at night? The 36th International Conference on Alpine Meteorology, 2023-06-19--2023-06-23, St. Gallen, Switzerland
14. Kusaka H, Ishida R, Imai Y, Ikeda T, Knievel JC, Bryan G, 2023: Winds make cap and Tsurushi clouds over Mt. Fuji grow up. The 36th International Conference on Alpine Meteorology, 2023-06-19--2023-06-23, St. Gallen, Switzerland
15. Kodama T, Kusaka H, 2023: Three types of clouds forming over the summit and downwind of a typical conical mountain, Mt. Fuji: a climatological study. The 36th International Conference on Alpine Meteorology, 2023-06-19--2023-06-23, St. Gallen, Switzerland
16. Abe H, Kusaka H, 2023: Spatial Distribution and Generation Mechanism of Local Winds ” Rokko-oroshi.” The 36th International Conference on Alpine Meteorology, 2023-06-19--2023-06-23, St. Gallen, Switzerland

17. Otomo K, Kusaka H, 2023: Urban Impact on Summertime Short-duration Heavy Rainfalls in Tokyo. The 11th International Conference on Urban Climate, 2023-08-28--2023-09-01, Sydney, Australia
18. Karube R, Kusaka H, 2023: Investigating climate-appropriate heat mitigation strategies. The 11th International Conference on Urban Climate, 2023-08-28--2023-09-01, Sydney, Australia

（3）国内学会・研究会発表

A）招待講演

1. 酷暑のメカニズムを気候学の立場から問い直す , 日本学術会議公開シンポジウム・第15 回防災学術連携シンポジウム , 2023-04-11, オンライン

B）その他の発表

（4）著書、解説記事等

1. 高校生の地理総合 , 帝国書院 , 2023-04

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）

- 高性能計算システム研究部門との連携：都市街区気象 LES モデルの高速化（日下）
- 計算メディア分野との連携：画像を用いた雲の位置と形状の特定（日下）
- 情報通信分野（情報通信機構）との連携：雲のリアルタイム観察（日下）

産学官連携

- 竹中工務店との共同研究 （日下）
- ユーラスエナジーとの共同研究（日下）

国際連携・国際活動

- ベトナム国家大学ハノイ自然科学大学 (VUN/HUS) と本センター間の協定（日下）
- ハノイ科学技術大学 (USTH) と本センター間の協定（日下）
- アリゾナ州立大学 (UCRC) と本センター間の協定（日下）
- 日越大学 (VNU, ベトナム）との連携（日下）
- アジア工科大学院 (Asia Institute of Technology, タイ）との連携（日下）
- ベルギー王立気象研究所 (Royal Meteorological Institute, Belgium, ベルギー）と本センター間の協定（日下）

- Karlsruhe Institute for Technology (KIT, Germany) との連携 (松枝)
- European Centre for Medium-Range Weather Forecasts (ECMWF) との連携 (松枝)
- University of Oxford (UK) との連携 (松枝)
- The Institute of Atmospheric Sciences and Climate (CNR-ISAC, Italy) との連携 (松枝)
- University of Colorado Boulder (USA) との連携 (松枝)
- National Center for Atmospheric Research (USA) との連携 (Doan)
- Centre for Climate Research Singapore (Singapore) との連携 (Doan)
- National University Singapore (Singapore) との連携 (Doan)
- University of Calcutta (India) との連携 (Doan)
- University of Texas at Austin (USA) との連携 (Doan)
- Vietnam National University (Vietnam) との連携 (Doan)
- Ho Chi Minh City Medicine and Pharmacy University (Vietnam) との連携 (Doan)
- Griffith University (Australia) との連携 (Doan)
- University New South Wales (Australia) との連携 (Doan)
- Thuyloi University (Vietnam) との連携 (Doan)
- King Abdullah University of Science and Technology (Saudi Arabia) 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

- Asia Oceania Geosciences Society Annual Meeting 2023 （Singapore）で、都市気候セッションを開催した（Doan）

9. 管理・運営

- 地球科学学位プログラム広報委員長（日下）
- 全学学生生活支援室員（日下）
- 自然系学類計算機委員（日下）
- 計算科学研究センター計算科学振興室員（日下）
- 計算科学研究センター倫理委員会委員（日下）
- 計算科学研究センター地球環境研究部門主任（日下）

10. 社会貢献・国際貢献

- 東京都 環境影響評価審議会委員 (日下)
- 環境省 熱中症予防対策に資する効果的な情報発信に関する検討会委員 (日下)
- 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 (日下)

- 熱中症予防声かけプロジェクト 実行委員（日下）
- 日本学術会議 自然地理学環境防災小委員会委員（日下）
- 日本ヒートアイランド学会 理事（日下）
- 気候影響・利用研究会 幹事（日下）
- 日本地理学会 地理学評論 編集委員（日下）
- 日本気象学会 正野賞候補者推薦委員（日下）
- 日本気象学会 講演企画委員（日下）
- 日本国環境省とアジア工科大学院（AIT）による Regional Training Workshop on Climate Adaptation Tools（5 月 29 日～ 31 日，バンコク）での講師　日下博幸
- アメリカ気象学会都市環境部会（Board on Urban Environment）委員（Doan）
- 世界気象気候（WMO）世界気候研究プログラム（WCRP）My Climate Risk 日本ハブ　代表（Doan）
- 世界気象気候（WMO）世界気候研究プログラム（WCRP）CORDEX　Southeast Asia　都市気候研究グループ　代表（Doan）

11. その他

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，建部 修見，高橋 大介，額田 彰， 塙 敏博（客員教授，東京大学）
助教	多田野 寛人，小林 諒平，藤田 典久
主任研究員	前田 宗則
研究員	平賀 弘平
学生	大学院生 16 名，学類生 4 名，研究生 1 名
学内共同研究員	安永 守利，櫻井 鉄也，山口 佳樹，今倉 暁（システム情報系）
学外共同研究員	小柳 義夫（RIST），石川 裕（国立情報学研究所）， 松岡 聡（理化学研究所），後藤 仁志（豊橋技術科学大学）， 佐野 健太郎（理化学研究所），中尾 昌広（理化学研究所）， 天野 英晴（慶応義塾大学），川島 英之（慶応義塾大学）， 田中 昌宏（慶応義塾大学）

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，ストレージシステム，並列入出力，分散システムソフトウェア，GPU・FPGA 利用技術，並列数値計算の高速化などの研究を行っている。今年度は以下の研究を行った。

- GPU 及び FPGA の協調計算に関する研究
- FPGA 向け OpenACC コンパイラの最適化に関する研究
- 超高速ストレージシステム・Gfarm ファイルシステムの研究開発
- 複数の整数除算の高速化
- 容易な GPU 化手法の検証と性能評価
- 高精度近似解を生成するブロッククリロフ部分空間反復法に関する研究
- グラフニューラルネットワークの学習精度と実行性能評価
- 並列 FPGA 環境における FPGA 間通信に関する研究
- 複数の演算加速装置を統一的に扱えるプログラミング環境に関する研究

3. 研究成果

[1] 多重複合型演算加速システムのプログラミングシステム（朴，小林，藤田）

以前より継続している GPU と FPGA というマルチ演算加速デバイスを用いた協調計算コンセプト CHARM (Cooperative Heterogeneous Acceleration with Reconfigurable Multidevices) の下，演算加速向けの単一プログラミング言語 OpenACC のみによるプログラミングを可能とする言語処理系 MHOAT (Multi-Hetero OpenACC Translator) を開発した。本研究は理化学研究所計

算科学研究センター（R-CCS）及び米国 Oak Ridge National Laboratory（ORNL）との共同研究によるものである。

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。CHARM コンセプトに基づく OpenACC によるプログラミングを行えるような処理系を開発し，アプリケーションユーザでも容易にプログラム開発が行え，実アプリケーションの高速化を実現することが本研究の目的である。MHOAT は一種の source-to-source コンパイラであり，プログラム内の独自拡張 directive により，演算加速デバイスオフロード部分をどのデバイスに割り当てるかをユーザが指定できる。指定に基づき，各デバイスに行わせるべきプログラム断片を生成し，各デバイスに対応するバックエンドコンパイラを呼び出して処理させ，最終的なバイナリ断片をリンクして単一のバイナリ及び FPGA にローディングする bit stream を生成する。バックエンドコンパイラには，GPU 部分は NVIDIA 社の nvhpc，FPGA 部分は ORNL の研究用コンパイラ OpenARC を用いる。

令和 5 年度の成果として，実アプリケーションである宇宙物理初期天体シミュレーションを行う ARGOT プログラムを MHOAT 向けの OpenACC コードとして記述し，これを MHOAT でコンパイル，最終的に多重複合型演算加速スーパーコンピュータ Cygnus の単一ノードで GPU と FPGA を併用して実行することに成功した。

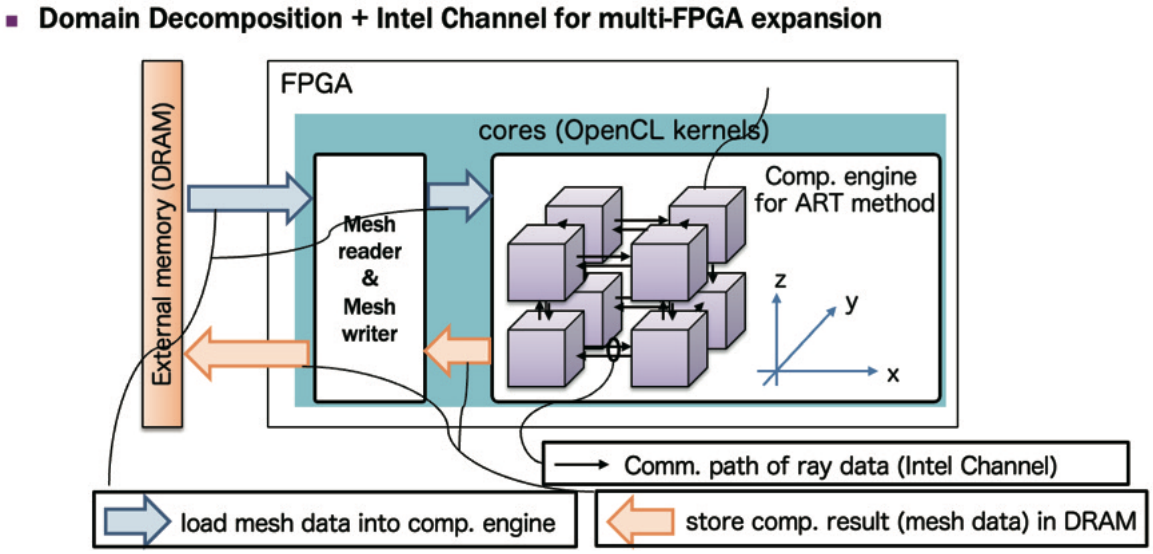


図 1 複数カーネルによる ART 法の実装イメージ

同コードの計算中核部分を成す 2 種類の演算である ARGOT 法と ART 法について，それぞれ GPU 及び FPGA で機能分散的に使用する。ARGOT 法の計算は基本的に 3 次元空間での重力ツリーコード計算に類似しており，GPU だけで十分高速化が可能である。一方，ART 法は

メモリアクセスがランダムになり，ベクトル演算のベクトル長が短くなる等，GPU に不向きな計算であり，実際に小規模問題を対象とした場合，CPU と比較してほとんど加速できないという問題があったが，FPGA ではこれを十分高速化できることがわかっている。

ART 法を，OpenACC を用いて FPGA に実装する場合，性能を上げるために FPGA 上で複数のカーネルを同時実行し，domain decomposition 手法によって空間分割した部分計算を各カーネルに実行させる。この様子を図 1 に示す。図では OpenCL kernels となっているが，これは MHOAT が FPGA 向けの OpenACC コードを処理する際，OpenARC コンパイラを用いて OpenACC コードを OpenCL に変換し，最終的に Intel FPGA SDK for OpenCL ツールを用いて FPGA のバイナリを生成するためである。従来研究ではこの ART 法計算を OpenCL で直接記述していたが，MHOAT によりユーザは OpenACC というより高いレベルで記述することが可能になった。また，このような domain decomposition された問題空間のデータ交換が必要になるが，ここには Intel Channel という FPGA kernel 間通信機能が用いられるが，MHOAT ではこれを使うような独自拡張も備えられている。

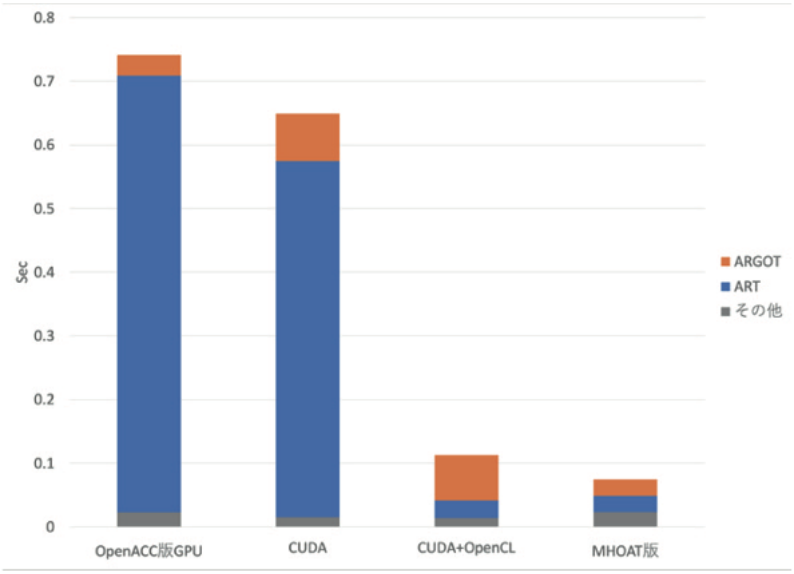


図 2 MHOAT による ARGOT コードの GPU+FPGA 実装の性能評価

図 2 に MHOAT による性能向上の様子を示す。評価したのは ARGOT コード全体の 1 タイムステップ実行時間で，全コードの OpenACC 版を GPU のみで実行した場合，同じく CUDA 版を GPU のみで実行した場合，CHARM コンセプトに基づく CUDA (GPU) + OpenCL (FPGA) を手作業で別にコーディングして実行した場合，OpenACC コードを MHOAT で処理し GPU+FPGA 実行した場合である。グラフより，MHOAT による実装が最も高速となっている。原理的には CUDA+OpenCL と同等になるはずであるが，ARGOT 法部分の GPU 実行性能において OpenACC 版の方が CUDA 版より高速であることからこのような結果となった。以上より，MHOAT による CHARM コンセプトのプログラム記述の有効性が，実アプリケーションである ARGOT への適用で証明された。

これらの研究成果は国際会議 International Workshop on HPC by Heterogeneous Hardware (H3) in ISC2023 及び情報処理学会 ACS 論文誌で発表済みである。

[2] FPGA 向け高性能 OpenACC コンパイラの開発（朴，小林，藤田）

前節で述べた CHARM コンセプトにおける GPU+FPGA 協調計算において，FPGA の処理は絶対性能において GPU よりも性能が劣ることは否めない。しかし，GPU が得意とする大規模な単純並列（データ並列）が適用できない場合は，ノード間通信が多発するケースでは FPGA の導入が効果的である。とはいえ，FPGA 自体の性能を HPC コードで十分引き出すことは必要であり，我々は理化学研究所計算科学研究センター（R-CCS）と共同でこの研究を進めている。この中で，高レベルな演算加速器向けプログラミングを可能とする OpenACC をターゲットに，FPGA の特性を活かすためのコーディングの工夫といくつかの機能拡張を独自 directive として実装した Omni OpenACC for FPGA compiler を開発している。同コンパイラは OpenACC コードを OpenCL に変換し，Intel FPGA SDK for OpenCL ツールによって最終的に FPGA 用の bit stream ファイルを生成し，同時にこれをコントロールするホスト CPU 用の C コードを生成する。

令和 5 年度の研究では，FPGA の持つ演算機能を最大限に利用するための空間並列性をいかに向上させるかに焦点を当て，ベクトル処理における loop unrolling と，domain decomposition と PGAS (Partitioned Global Address Space) の考え方に基づく kernel decomposition に関する研究を行った。空間並列性を増やすことは，1 クロック内での演算回数を増やすことになり，性能をダイレクトに向上させる。

Loop unrolling は一般的に用いられるベクトル処理高速化であり，コンパイラが生成する OpenCL には loop unrolling を指示する機能が備わっている。これを OpenACC レベルで利用するため，同様の directive を OpenACC 上で記述可能とした。また，reduction 演算が必要な場合に対し，中間変数を自動的に複製し，最後に reduction 演算を実行することで，FPGA の動作を円滑に行い，変数へのアクセスが性能ボトルネックとならないような最適化も行った。これにより，reduction 演算を伴う loop unrolling であっても FPGA 回路の Initiation Interval (II) が大きくならないようにでき，クロック速度に応じた性能が達成できる。しかし，loop unrolling を深くすると FPGA 上の Statick RAM である Block RAM (BRAM) の使用量が増大することがわかっており，これはある程度演算並列性が高まると BRAM へのアクセスがボトルネックとならないように Intel OpenCL コンパイラが自動的に BRAM

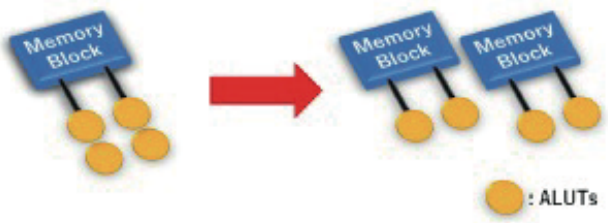


図 3 BRAM アクセスバンド幅向上のための
イメージコピー

の配列を複製し，バンド幅を向上させるためである（図 3 参照）。BRAM サイズには上限があり，DRAM のように FPGA 外で容量を増やすことができない。

そこで，kernel decomposition という独自手法を開発した。これは PGAS モデルの並列処理で domain decomposition を仮想配列上で行えることにヒントを得たものである。従来研究である Omni XcalableACC や UPS 等の PGAS 言語のスキームを OpenACC 内に取り入れ，単純なベクトルまたは行列計算を domain decomposition による複数カーネルに分散させ，これらを同時実行して空間並列性を向上させる手法である。必要なメモリを kernel に分散させ，その中で適度な loop unrolling を行うことにより，BRAM 容量を抑えつつ空間並列性を向上させることが可能となる。ただし，kernel decomposition を完全に自動で行うことは難しいため，Omni OpenACC for FPGA のプロトタイプコンパイラでは，XcalableACC で取り入れた分散配列に対する directive を取り入れ，kernel を一種の分散メモリノードと捉え，PGAS モデル向けの kernel 間通信や BRAM 間同期機能，配列参照インデックスの補助関数等を導入した。図 4 に kernel decomposition のイメージを示す。

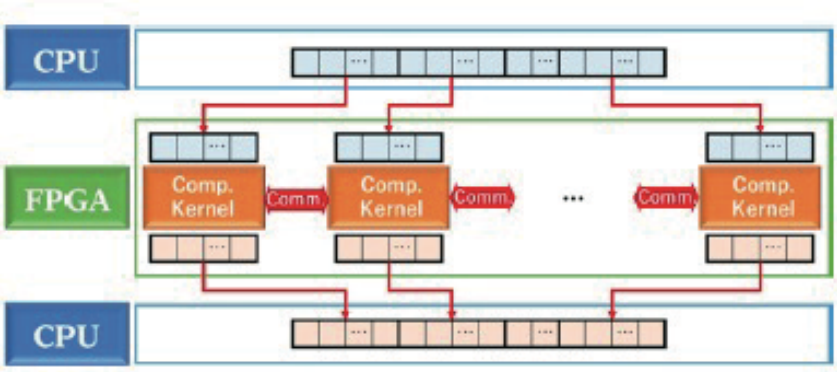


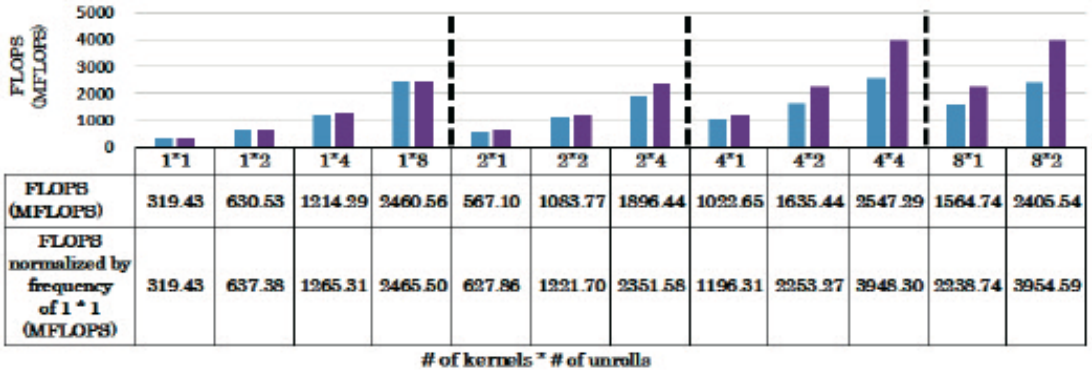
図 4 FPGA 内での kernel decomposition 手法による複数 kernel 同時実行

Omni OpenACC for FPGA プロトタイプコンパイラを用い，疎行列計算を CG 法で行うベンチマークコードをコンパイルし，Intel Straxi10 FPGA 上で評価した。結果を図 5 に示す。FLOPS は実際の性能を表し，図中では水色で示している。しかし，このように各種手法で FPGA 内の空間並列性を増すと，回路が複雑になり動作周波数が低下する。FPGA の動作周波数は回路合成を行う際にコンパイラにより決定されるため，これを手動によって直接高めることはできない。そこで,「仮に周波数が一定であったとしてどの程度空間並列性が向上し」性能が向上するか」を見るため，最も動作周波数が高い 1x1 の場合を基準に，性能を正規化してみたこれが normalized FLOPS で図中では紫色のバーで示している。結果として，4x4 または 8x2 という，空間並列性が 16 倍になったケースが normalized FLOPS ではほぼ同等の性能になるというリーズナブルな結果となった。しかし，動作周波数の低下により，実際の性能は空間並列性に線形には向上しないこともわかった。

一方，BRAM 使用量に着目すると，想定したように loop unrolling が深くなると BRAM 使用量が増えることが CG 法でも確認された。結果を図 6 に示す。例えば, 空間並列性が 8 の場合,

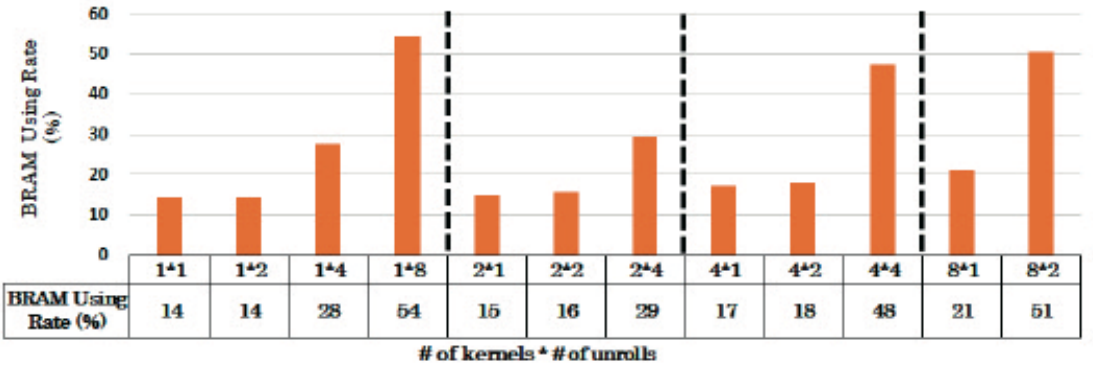
両手法の組み合わせとして 1x8，2x4，4x2 等が考えられる。図 5 ではこれらの 3 パターンの性能は少なくとも normalized FLOPS ではほぼ同等である。しかし，図 6 を見ると，BRAM 使用量は loop unrolling が浅いほど減っており，kernel decomposition によってメモリ使用量を削減しつつ性能を保つことが可能であることがわかった。さらに, OpenACC の directive という，ユーザにとって操作しやすい記述を変えるだけでこのような組み合わせを容易に試すことができ，性能チューニングとメモリ使用量限度というトレードオフを制御する機能が提供できたことも重要な成果である。

これらの結果は IEEE Cluster 2023 のポスター発表，及び HPC Asia 2024 のポスター発表でそれぞれ公開され，前者は最優秀学生ポスター賞にノミネートされた。また，現在これらの成果を国際会議向けに投稿中である。



	1*1	1*2	1*4	1*8	2*1	2*2	2*4	4*1	4*2	4*4	8*1	8*2
FLOPS (MFLOPS)	319.43	630.53	1214.29	2460.56	567.10	1083.77	1896.44	1022.65	1635.44	2547.29	1564.74	2405.54
FLOPS normalized by frequency of 1*1 (MFLOPS)	319.43	637.38	1265.31	2465.50	627.86	1221.70	2351.58	1196.31	2253.27	3948.30	2238.74	3954.59

図 5 Loop unrolling と kernel decomposition を組み合わせた CG 法の演算性能（m x n は kernel decomposition の kernel 分割数が m，loop unrolling の深さが n であることを表す）



	1*1	1*2	1*4	1*8	2*1	2*2	2*4	4*1	4*2	4*4	8*1	8*2
BRAM Using Rate (%)	14	14	28	54	15	16	29	17	18	48	21	51

図 6 CG 法における BRAM 使用量（m x n については性能評価の図と同じ）

[3] GPU+FPGA 複合計算向け oneAPI プログラミング（朴，小林，藤田）

Intel oneAPI は CPU を含むあらゆるプロセッサ向けに単一のコードでのプログラミングを可能とするフレームワークで，DPC++ 言語を基本とする。これは我々が進めている CHARM コンセプトに基づく GPU+FPGA 多重複合演算加速を実装する一つの理想的な環境と

考えられるが, 通常の oneAPI コンパイラ, ランタイム, ツールキットだけでは, 同一コードを, 複数のデバイスのうち「どれか 1 つ」に対してコンパイル・実行できるが，これらを混在させることは難しい。第三者より提供されている外部モジュールを導入し，コード断片のオフロード記述を修正することで対応できる。

しかし，oneAPI は誰でも Intel から正式な商用版を入手可能で，CHARM での使用法やモジュール拡張方法を公開することで適用可能であることから，その条件について整理し，実際に簡単なベクトル処理のようなトイプログラムを示すことでその適用性を評価した。令和 5 年度研究では，ベクトルに対する簡単な演算処理を行い，これを GPU 及び FPGA を併用するベンチマークコードとして記述し, Cygnus の単体ノード上で実行可能であることを示した。NVIDIA V100 GPU 及び Intel Stratix10 FPGA を用いた場合，カーネル部分の実行時間については妥当であったが，FPGA の起動部分に非常に時間がかかり，この原因究明と性能改善が今後の課題である。

本研究については HPC Asia 2024 内のワークショップ Intel eXtreme Performance Users Group (IXPUG) にて発表済みである。

[4] キャッシングファイルシステムの研究（建部）

これまでスーパーコンピュータの計算ノードのローカルストレージシステムを活用したアドホック並列分散ファイルシステム CHFS，および並列キャッシングファイルシステムに拡張した CHFS/Cache の研究開発を行ってきた。CHFS では, 計算ノードの不揮発性メモリ, ローカルストレージを用いて高並列な分散キーバリューストアを構築し，その上に高並列なファイルシステムの設計を行った。設計にあたり，ノード数に対するスケーラビリティを阻害する要因となる集中データ構造や逐次処理を避けた。これまでの評価により，高い性能と高いスケーラビリティを有することが示されている。CHFS/Cache では，この性能とスケーラビリティを損なうことなく，キャッシングファイルシステムの機能を持たせるための設計を行った。既存システムでは，並列ファイルシステムとの間で強い一貫性を維持するため，特に小さいファイルの処理に関して大きなオーバヘッドが生じていた。この問題を解決するため, 利用者にとって無理のない範囲で並列ファイルシステムとの間の一貫性の緩和について考察し，設計を行った。これまでの評価により，小さいファイルの書込みにおいて性能が低下しないこと，キャッシュされたファイルについては性能低下なく読込が可能であることを示した。

令和 5 年度についてはこの並列キャッシングファイルシステムの高度化を行った。並列キャッシングファイルシステムでは, 書込んだデータを並列ファイルシステムに書き戻す（フラッシュする）必要があるが，この処理を行っている間，既存システムでは並列キャッシングファイルシステムのアクセス性能が低下する問題があった。この問題の原因は, フラッシュ処理と並列キャッシングファイルシステムのアクセスにおいて計算ノード上のストレージア

クセスの競合と，ネットワークアクセスの競合が起こるためである。この問題を解決するため，I/O-aware フラッシング方式の提案を行った。I/O-aware フラッシング方式では，各キャッシングファイルシステムのサーバにおいてキャッシングファイルシステムのアクセス状況のモニタリングを行う。アクセスがなくなったら一定時間待ち，まだアクセスがないようであればフラッシュする。フラッシュ中に，アクセスが再開したらフラッシュを中断する。この方式は，各サーバがそれぞれフラッシュの判断を行うため，中央サーバが不要で，サーバ数が増えてもオーバヘッドが増えることはない。また，典型的なアプリケーションにおいては，計算フェーズと I/O フェーズが交互に現れることから，この方式により I/O を行わない計算フェーズにフラッシュ処理が行われることが期待される。この方式のための実装方式を示し，研究開発を進めている CHFS/Cache に実装した。

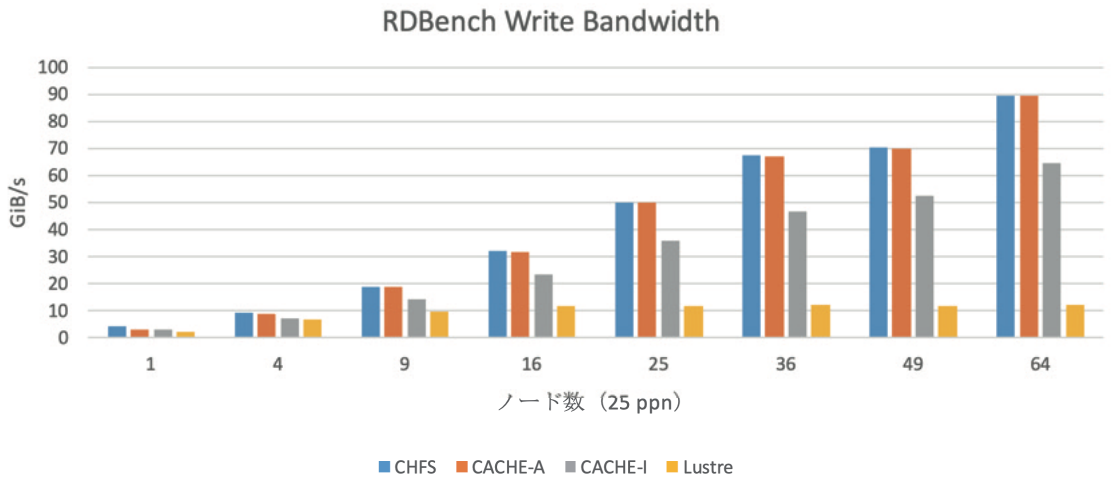


図 7 アプリケーションにおける書込み性能の評価

図 7 にアプリケーションベンチマークを用いた書込み性能を示す。実験は筑波大学のスーパーコンピュータ Pegasus を用い，各ノード 25 プロセスのウィークスケーリングの評価を実施した。Lustre は，直接並列ファイルシステムに書込んだ時の性能であるが，16 ノード以降は性能が向上していない。CHFS はフラッシュを行わない場合，CACHE-A は提案手法の I/O-aware フラッシング方式を用いた場合である。これらはノード数を増やすと性能が向上し，また CHFS と CACHE-A はほぼ同様の性能となっている。これにより I/O-aware フラッシング方式ではフラッシュにおける競合が回避できていることがわかる。一方，よく利用されるフラッシュ方式である書込んだ直後にフラッシュする方式の CACHE-I では競合により 30% ほどの性能低下となっている。これらの成果は国際ワークショップ REX-IO において発表した。

[5] 分散ファイルシステムおよびグリッド・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ス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。

HPCI 共用ストレージの第 2 期の運用が 5 年目となり，HDD 障害が増えてきた。HDD の単体障害であれば，RAID により自動的に復旧可能であるが，同一 HDD グループにおいて 3 台以上の HDD に障害は発生するとデータロストが発生してしまう。HPCI 共用ストレージの場合，西拠点と東拠点に少なくとも一つずつ複製を持っているため，仮にどちらかの複製がロストしたとしても Gfarm が自動的に復旧することが可能である。そのため, 運用 5 年目となって障害頻度がかなり上がってもデータロストは発生しなかった。ただし注意すべき点として，サイレントデータ障害が複数発生したことがあげられる。サイレントデータ障害は HDD 等でエラーを発生することなく，データが壊れている障害である。Gfarm では，すべてのデータについてダイジェスト（HPCI 共用ストレージでは MD5 ダイジェスト）を保持しており，書込み後一定時間たつと読み込んでそのダイジェストと比較を行う。この処理は書込みベリファイと呼ばれるが，今回はこの処理において複数のサイレントデータ障害が見つかった。いずれのケースにおいても正しい複製が存在しており，データロストには至らなかった。サイレントデータ障害が発生した場合においては，ストレージシステムにおける不具合が疑われるため，その調査を行った。結果，その直接の原因は解明できなかったが，予防保守などで対応を図った。早期のストレージシステムのハードウェアの更新が望まれる。

また，ネットワーク障害によるファイル作成時の複製作成失敗に伴う，再複製作成までの時間短縮を図った。HPCI 共用ストレージでは，西拠点と東拠点に少なくとも一つずつファイル複製を作成している。一方で，西拠点と東拠点の間のネットワークにおいてたまにファイル転送速度が大きく落ち，接続エラーになってしまうケースがある。その場合，そのファイルの複製を再び作成する必要があるが, その再作成の始動に時間がかかってしまうことがあった。本来この問題はネットワーク側で対処するべきものと考えるが，ネットワーク側の原因追及は難しくここ数年調査を続けているがまだ特定できていない。そのため，この問題を解決すべく Gfarm 側の機能強化を図った。当初は，並列複製作成コマンドに対し，機能拡張することを考えていたが，その方法より Gfarm のメタデータサーバにおいて複製作成に失敗したファイルを優先して再び複製作成する対応の方が，機能面，実装面において優れていることが判明したため，その機能整備を行った。これまでは複製作成に失敗したファイルはメタデータサーバの複製チェックプロセスにおいて複製を再作成していたが，とくに複製作成に失敗したファイルを優先的に作成しないため，結果として複製の再作成に時間がかかっていた。本機能は Gfarm バージョン 2.8.1 においてリリースされ，すでに HPCI 共用ストレージにおいて利用されている。

さらに，GSI のサポート終了に伴う次期セキュリティ基盤対応として，OAuth2 のトークンを用いた認証基盤の高度化を行った。具体的には，昨年度までの実装では，TLS クライアント証明書認証，また OAuth2 のトークンを用いた認証において，サーバ側，クライアント側のどちらか，あるいはその双方で認証に失敗すると接続が切断してしまい，その次の認証方

式を試さない問題があった。この問題を解決するために，それぞれのエラーケースにおける処理を適切にするよう機能整備を行った。成果は Gfarm バージョン 2.8.3 でリリースし，すでに HPCI において配備が完了している。また，昨年度までに OAuth2 のアクセストークンの有効期限を更新するためのサーバとして jwt-server を開発してきたが，このサーバが冗長構成をとることができず，障害が発生するとアクセストークンの更新ができなくなってしまう問題があった。そのため，jwt-server の冗長構成を可能とするよう開発を行った。成果は https://github.com/oss-tsukuba/jwt-server および https://github.com/oss-tsukuba/jwt-agent において公開しており，すでに HPCI において配備が完了している。

[6] 複数の整数除算の高速化（高橋）

整数除算は広く使われている算術演算であり，多くのアプリケーションに含まれている。一般的に，除算は加算，減算，および乗算よりも遅いことが知られている。このため，加算，減算，および乗算のみで除算を行うアルゴリズムが提案されている。特に，不変な整数による除算のアルゴリズムや，整数による除算のアルゴリズム，そして逆数を用いた除算が提案されている。さらに，倍精度浮動小数点演算を用いた 32 ビットおよび 64 ビットの整数除算も提案されている。

本研究では，被除数が不変であり，複数の除数が単調増加または単調減少する場合の複数の整数除算を考える。このような複数の整数除算は，整数を複数の法の Montgomery 表現に変換する際に現れる。

符号なし整数の除算は，商$q = \lfloor a/b \rfloor$と剰余$r = a - bq$ $(0 \le r < b)$で定義される。ここで被除数は a であり除数は b である。被除数が不変であり，複数の除数が単調増加または単調減少する場合の複数の整数除算において，被除数と除数がある条件を満たす場合，最初に除算によって商を 1 つだけ計算すれば，残りの商は以前に計算された商を最大 1 回補正することによって得られることを示す。

定理 1. 整数 $a \ge 0, b > 0$ および $c \ge 0$ を考える。もし $ca \le b(b+c)$ であれば

$$\left\lfloor \frac{a}{b} \right\rfloor < \left\lfloor \frac{a}{b+c} \right\rfloor + 2 \qquad (1)$$

証明 任意の実数 x について，$x - 1 < \lfloor x \rfloor \le x$が成り立つ。よって

$$\frac{a}{b} - 1 < \left\lfloor \frac{a}{b} \right\rfloor \le \frac{a}{b}, \qquad (2)$$

$$\frac{a}{b+c} + 1 < \left\lfloor \frac{a}{b+c} \right\rfloor + 2 \le \frac{a}{b+c} + 2 \qquad (3)$$

不等式 (2) と (3) より，不等式 (1) が成立するための条件 $a/b \le a/(b+c)+1$ は $ca \le b(b+c)$ となる。（証明終わり）

定理 1 より，a, b, および c が $ca \leq b(b+c)$ の条件を満たす場合，商$\lfloor a/b \rfloor$は商$\lfloor a/(b+c) \rfloor$ に対して最大 1 回の補正を加えることで得られる。したがって，定理 1 は除数が単調減少する際に適用できる。除数が単調増加する場合は，除数の順序を逆にすることで同様にして商を得ることができる。

Algorithm 1 Multiple integer divisions with an invariant dividend and monotonically increasing divisors

Input: $a \geq 0,\ b_0, b_1, \ldots, b_{n-1} > 0,\ b_i \leq b_{i+1}$ for $0 \leq i \leq n-2,\ ca \leq b_0(b_0+c)$, where $c = \max(b_{i+1} - b_i)$ for $0 \leq i \leq n-2$

Output: $q_i = \lfloor a/b_i \rfloor$ for $0 \leq i \leq n-1$, $r_i = a \bmod b_i$ for $0 \leq i \leq n-1$

1: $q_{n-1} \leftarrow \lfloor a/b_{n-1} \rfloor$
2: $r_{n-1} \leftarrow a - b_{n-1}q_{n-1}$
3: **for** i **from** $n-2$ **downto** 0 **do**
4: $\quad q_i \leftarrow q_{i+1}$
5: $\quad r_i \leftarrow a - b_i q_i$
6: $\quad$ **if** $r_i \geq b_i$ **then**
7: $\quad\quad q_i \leftarrow q_i + 1$
8: $\quad\quad r_i \leftarrow r_i - b_i$.

図 8 不変な被除数と単調増加する除数に対する複数の整数除算

不変な被除数と単調増加する除数に対する複数の整数除算のための提案アルゴリズムを図 8 の Algorithm 1 に示す。被除数 a，最小の除数 b_0，隣接する除数間の最大差 c について定理 1 の条件が満たされることがあらかじめ分かっていれば，Algorithm 1 を用いて複数の整数除算を効率的に計算することができる。

Algorithm 1 の 1 行目と 2 行目は，被除数 a と除数 b_{n-1} に対して，それぞれ商 q_{n-1} と剰余 r_{n-1} を計算する。4 行目では，以前に計算された商 q_{i+1} を近似商として用いる。5 行目では，剰余 r_i が被除数 a，除数 b_i，および商 q_i から求められる。剰余 r_i が除数 b_i 以上である場合，7 行目と 8 行目で商 q_i と剰余 r_i を補正する。

Algorithm 1 と同様にして，被除数が不変で単調減少する除数を持つ複数の整数除算に対するアルゴリズムを実現することができる。整数除算では，商や剰余だけを計算したい場合がある。このような場合，Algorithm 1 を修正して，必要な結果のみを出力することができる。

さらに，Algorithm 1 のベクトル化について考える。Algorithm 1 において，以前に計算された商を補正することによって次の商が得られるが，この処理はデータ依存性のためにベクトル化することができない。しかし，以前に計算された複数の商を同時に補正することで，このデータ依存性を解決し，処理をベクトル化することが可能になる。そのために，ベクトル長の倍数における除数の既に計算された商を近似商として用いる。したがって，Algorithm 1 における c の値は，ベクトル長の間隔における除数間の差の最大値となる。不変な被除数と単調増加する除数を持つ複数の 64 ビット符号なし整数除算をベクトル化した例を図 9 に示す。

```
void vdivinc64(uint64_t *q, uint64_t *r, uint64_t a, uint64_t *b, int n)
/*  Compute q[0:n] = floor(a / b[0:n]) and r[0:n] = a mod b[0:n].
    Requires a >= 0, b[0:n] > 0, b[i] <= b[i + 1] for 0 <= i <= n - 2
    and c * a <= b[0] * (b[0] + c),
    where c = max(b[i + VLEN] - b[i]) for 0 <= i <= n - VLEN - 1. */
{
  int i, j;

  for (i = n - 1; i >= n - VLEN; i--) {
    q[i] = a / b[i];
    r[i] = a - b[i] * q[i];
  }

  for (j = n - VLEN - 1; j >= 0; j -= VLEN) {
    for (i = j; i >= j - VLEN + 1; i--) {
      q[i] = q[i + VLEN];
      r[i] = a - b[i] * q[i];
      if (r[i] >= b[i]) {
        q[i]++;
        r[i] -= b[i];
      }
    }
  }
}
```

図 9 不変な被除数と単調増加する除数を持つ複数の 64 ビット符号なし整数除算をベクトル化した例

性能評価として，以下の 4 つの実装を用いて，複数の 64 ビット符号なし整数除算の実行時間を比較した。

1. Intel 64 アーキテクチャの 64 ビット符号なし整数除算命令 div を用いた実装
2. Intel 64 アーキテクチャ命令を用いた提案アルゴリズムの実装
3. Intel Short Vector Math Library（SVML）の packed 64 ビット符号なし整数除算を計算する組み込み関数 _mm512_div_epu64() を用いた実装
4. Intel Advanced Vector Extensions 512（AVX-512）命令を用いた提案アルゴリズムの実装

評価には以下の設定を用いた。64 ビット符号なし整数除算のバッチサイズ n は 128 から 1024 の間で変化させた。これらの場合，除数，商，剰余は L1 キャッシュに収まる。被除数 a は $[0,2^{64}\text{-}1]$ の範囲の乱数に設定される。

64 ビット符号なし整数除算の各バッチは 100 万回実行した。1 秒あたりの 64 ビット符号なし整数除算の回数（Mops）は，平均経過時間に基づいて計算した。

実行環境として，Intel Xeon Platinum 8368 プロセッサを用いた。今回の評価ではベクトル化に焦点を当てるため，シングルコア，シングルスレッドで性能を評価した。Intel

C Compiler（version 19.1.3.304）を使用した。コンパイラのオプションは icc -O3 -xCORE-AVX512 -qopt-zmm-usage=high を用いた。

表 1 不変な被除数と単調増加する除数に対する複数の 64 ビット符号なし整数除算の性能（Mops）

Batch size n	Intel 64	Proposed (Intel 64)	Intel SVML	Proposed (Intel AVX-512)
128	336.622	507.979	600.133	1110.869
256	338.892	503.765	604.713	1069.585
512	339.121	505.398	603.699	1068.396
1024	338.809	505.617	604.131	1065.383

表 1 は，不変な被除数と単調増加する除数に対する複数の 64 ビット符号なし整数除算の性能を示している。バッチサイズ n が 1024 の場合，提案アルゴリズムは，Intel Xeon Platinum 8368 プロセッサにおける Intel 64 アーキテクチャの 64 ビット符号なし整数除算命令および Intel SVML よりも，それぞれ約 1.49 倍および約 1.76 倍高速である。Intel Xeon Platinum 8368 プロセッサの Ice Lake マイクロアーキテクチャは，Skylake マイクロアーキテクチャなどの以前の Intel マイクロアーキテクチャと比較して，Intel 64 アーキテクチャ整数除算命令に必要なサイクル数が大幅に少ないため，Intel Xeon Platinum 8368 プロセッサでは，提案アルゴリズムと Intel 64 アーキテクチャの 64 ビット符号なし整数除算命令との性能差が小さくなっている。

[7] 容易な GPU 化手法の検証と性能評価（額田）

コストパフォーマンスや電力効率に優れる GPU を導入するスーパーコンピュータは増加し続け，現在では主流となっている。一方で各アプリケーションを GPU に対応するように改変する必要があり，このアプリの数だけある作業は膨大な人的コストを要する。NVIDIA 社製 GPU の場合では CUDA で実装されたコードが GPU の全ての機能を利用でき最高の性能を発揮できるのに対して，GPU で実行する部分を別のカーネル関数として抜き出す必要がある等プログラムに多くの修正を必要とする。より平易な方法として CPU 用のコードにディレクティブを挿入することによってコンパイラが GPU 用のコードを生成する OpenACC 等が導入され，GPU 化対象の計算部分がループ構文などで実装されている場合に非常に容易に GPU 化が可能である。昨年度に地震波の伝播シミュレーションコード OpenSWPC を do concurrent 構文での GPU 化を実施したが，Fortran 2008 の標準並列化構文である do concurrent で実装されたマルチスレッド実行用 CPU コードから一切の改変なしで GPU 用コードを生成することができる。特に allocatable 属性の配列には CPU と GPU の両方からアクセスできる managed

memory が割り当てられることにより自動的に CPU と GPU 間の転送が必要最低限の回数行われ，また明示的に転送を指定する必要がないことでコーディングの間違いも生じにくい。一方で managed memory も万全ではなく，特に CPU と GPU 間をページ単位で移動する性質から MPI などのネットワーク通信用のバッファメモリとしては適しておらず性能低下の原因となる。このため通信バッファだけは device memory を利用するために CUDA Fortran と OpenACC の機能を用いて対応する必要があった。

今年度は do concurrent による手法の他に OpenACC，OpenMP(target)，及び CUDA Fortran の各手法による実装を行い，それらのコーディングコスト及び性能評価を行った。いずれも MPI 通信のバッファには device memory を利用する。

まず OpenACC では device memory を利用するため managed memory は利用せずに実装する。このため CPU と GPU 間のデータ転送を手動で制御する必要がある。OpenSWPC ではメインループに入る箇所で GPU が参照する配列を全て GPU に転送するもので, 定期的にスナップショットを保存する処理以外ではデータを device memory に置き続けることが可能であり, またそうすることが性能向上のために必須である。このため managed memory を利用する場合と比べると CPU と GPU 間のデータ移動を全て把握する必要がある点でコード分析のコストが増加する。アプリケーションを実際に何度も実行することが許容される状況であれば実行された転送が行われなくなるようにディレクティブを追加していくことでも対応可能である。

OpenMP では GPU 等への対応に target ディレクティブを利用する。GPU を利用する時にも CPU 側での処理にもマルチスレッド並列を利用するような場合にも全て OpenMP で実装することができる。また NVIDIA 社製の GPU だけでなく AMD 社，Intel 社の GPU や他のアクセラレータデバイスへの対応できることを考えると今後期待が高まっている手法である。構文やディレクティブの名前等に差はあるが OpenACC で実装されている主要な機能は全て OpenMP target に実装されているため OpenACC とほぼ同等の移植コストになる。

do concurrent については既に述べた通り CPU 用のコードを do concurrent 構文で実装してあればそのまま利用でき，do ループやその OpenMP 並列化されたものから do concurrent 構文への修正も作業量は多いかもしれないが単純作業である。また MPI 化されたアプリケーションでは通信部分だけ device memory か host memory を利用するように対応しなければ通信性能が低下する。これには非常に僅かではあるが CUDA Fortran と OpenACC の知識を必要とする。

最後に CUDA Fortran による実装であるが，ここでは CUDA C/C++ のようにカーネルを関数として分離する方法ではなく，ディレクティブによって GPU カーネルを使用する方法を提案する。さらにコンパイル時に allocatable 属性の配列に対して managed memory を利用するオプションを追加することによって他の手法と同等の移植コストで実現可能である。データ転送を解析する必要がなく，通信部分について device memory を指定するだけで完了するため CUDA Fortran の機能だけを使用している。通信部分について CPU 用でも利用できるコード

は以下のように実装する。コンパイラで CUDA Fortran が有効化されている場合のみ **!@cuf** から始まる行が有効になり，**!@cuf kernel** ディレクティブで GPU カーネルが生成される。

```
real,allocatable :: sbuf(:)
!@cuf attributes(device) :: sbuf
!$cuf kernel do
do concurrent (k=kbeg:kend)
   sbuf(k) = vx(k)
end do

call MPI_Isend(sbuf,…)
```

OpenACC (ACC)，OpenMP (OMP)，do concurrent (STD)，CUDA Fortran (CUF) のそれぞれで実装したコードの性能を Pegasus で比較したものを図 10 に示す。4 GPU を必要とする小田原地震のデータを使用し，データサイズ固定で最大 64 GPU を使用する Strong scaling の評価である。OpenACC と OpenMP の実行時間はそれぞれ GPU 数によって変動はあるが，総じて大きな差はないと言える。do concurrent についてもそれに準ずる性能を実現しており，移植コストの低さを考慮すると十分に有力な候補となりうる。最後の CUDA Fortran だけ他より著しく性能が低くなっている。GPU カーネルの実行時間が伸びていて，他の手法より生成された GPU カーネルの使用レジスタ数が多くなっていることがこの性能低下の一因と考えられる。検証のため比較的簡単なコードを使用した場合にはレジスタ数及び性能に大きな差異は見られず，OpenSWPC のような複雑なカーネルを利用する場合にのみこの問題が露呈するようである。CUDA Fortran は移植コストの低さから有望な手法ではあるが，少なくとも現状では

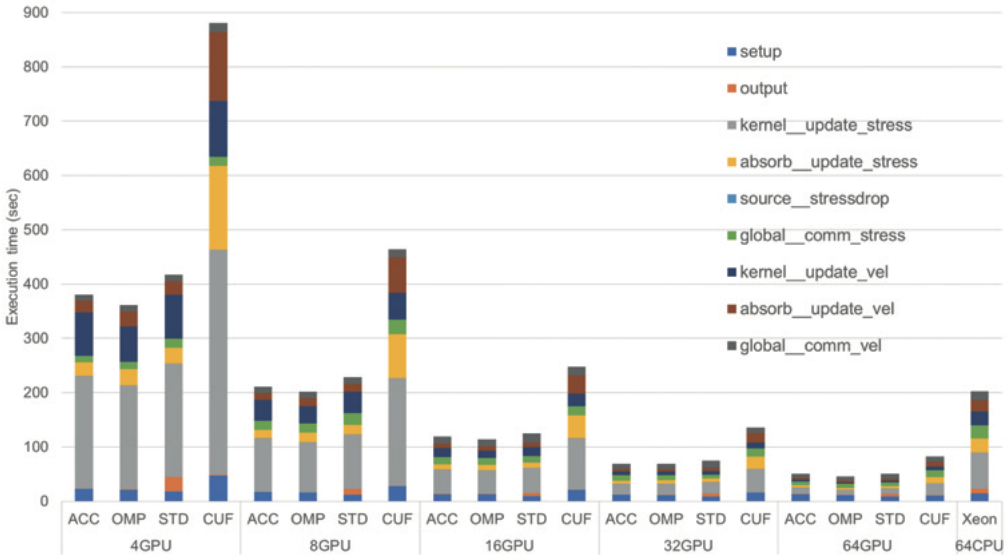


図 10 Pegasus 上での OpenSWPC の実行時間比較

GPU カーネルの性能に疑念があり今後のコンパイラの改善を期待する。図 10 の一番右は 64 ノードの Sapphire Rapids CPU のみを用いた場合である。およそ 8 GPU での性能に相当し，H100 GPU1 基あたり 8 CPU 分の性能を実現していることが分かる。

[8] 高精度近似解を生成するブロッククリロフ部分空間反復法に関する研究（多田野）

正則な n 次行列 A と L 本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式：

$$AX = B$$

は素粒子物理学分野の物理量計算，疎行列に対する固有値解法の内部問題，及び近年我々が研究を行っている鞍点型連立一次方程式に対する階層並列型数値解法の内部問題などにおいて現れる。同方程式の求解は計算時間の大きな割合を占め，得られた近似解の精度はアプリケーションの精度にも影響を及ぼすため，高速・高精度数値解法が必要とされている。同方程式に対する数値解法として，ブロッククリロフ部分空間反復法がある。同法は，右辺ベクトル数 L が増加すると求解に要する反復回数が減少する傾向がある一方で，得られる近似解精度が劣化する傾向がある。我々はこれまでの研究において，高精度近似解を生成できるブロッククリロフ部分空間反復法の開発を行ってきた。精度改善の手法として，1) 漸化式の再構築による誤差の抑制，2) Group-wise 更新と呼ばれる手法の適用による誤差の抑制，の 2 つに大別できる。近年我々は，2) の手法をブロッククリロフ部分空間反復法の一解法である Block BiCGSTAB 法に適用した Block GWBiCGSTAB 法を提案した。同法では s 回の反復における漸化式更新量をグループ化して精度劣化を引き起こす計算を回避することにより，高精度近似解を生成している。しかしながら，パラメータ s の与え方は解法の収束性，近似解精度に大きな影響を及ぼすとともに，係数行列 A によって最適な値が異なる。令和 5 年度は，収束性が優れた解法として知られている Block GPBiCG 法に対して Group-wise 更新手法を適用するとともに，グループ化周期を固定せず，解法内の情報を用いてグループ化周期を可変的に制御する手法を構築した。

複数右辺連立一次方程式 $AX = B$ の第 $(k+1)$ 番目の近似解を X_{k+1} とすると，残差行列 R_{k+1} は $R_{k+1} = B - AX_{k+1}$ と表される。X_{k+1} を用いて計算される残差行列は真の残差と呼ばれる。Block GPBiCG 法では，近似解 X_{k+1} と残差行列 R_{k+1} の更新量をそれぞれ ΔX_k, ΔR_k とすると，以下の漸化式で近似解と残差行列を計算できる。

$$X_{k+1} = X_k + \Delta X_k, \qquad \Delta X_k = P_k\,\alpha_k + Z_k,$$
$$R_{k+1} = R_k + \Delta R_k, \qquad \Delta R_k = -(AP_k)\alpha_k - \eta_k Y_k - \zeta_k (AT_k).$$

ここで，P_k, Z_k, Y_k, T_k は $n \times L$ 行列，α_k は $L \times L$ 行列，ζ_k, η_k はスカラーを表す。漸化式更新量 ΔX_k と ΔR_k の間には $-A$ 倍の関係：$\Delta R_k = -A\Delta X_k$ が成り立つが，有限精度の計算では誤差の影響によりこの関係式が崩れ，漸化式の残差行列と真の残差行列の間にギャップが生じる。

本研究では，Group-wise 更新手法を Block GPBiCG 法に適用することで誤差の影響の低減を図る。この手法を Block GWGPBiCG 法と名付けた。同法は外部反復と内部反復で構成さ

れ，内部反復において近似解の更新量がグループ化される。$\pi(m)$ を m 番目の外部反復開始時の反復番号，j を内部反復の反復番号とすると，反復番号 k は $k = \pi(m) + j$ と表される。近似解 $X_{\pi(m)+j+1}$ の漸化式は以下のように書き直される。

$$\begin{aligned} X_{\pi(m)+j+1} &= X_{\pi(m)+j} + P_{\pi(m)+j}\alpha_{\pi(m)+j} + Z_{\pi(m)+j} \\ &= X_0 + \sum_{i=\pi(0)}^{\pi(1)-1}(P_i\alpha_i + Z_i) + \cdots + \sum_{i=\pi(m-1)}^{\pi(m)-1}(P_i\alpha_i + Z_i) + \sum_{i=\pi(m)}^{\pi(m)+j}(P_i\alpha_i + Z_i). \end{aligned}$$

一方，残差行列 $R_{\pi(m)+j+1}$ の漸化式は以下のように書き直される。

$$R_{\pi(m)+j+1} = R_0 - A\left[\sum_{i=\pi(0)}^{\pi(1)-1}(P_i\alpha_i + Z_i)\right] - \cdots - A\left[\sum_{i=\pi(m-1)}^{\pi(m)-1}(P_i\alpha_i + Z_i)\right] - A\left[\sum_{i=\pi(m)}^{\pi(m)+j}(P_i\alpha_i + Z_i)\right].$$

上記のように本手法においては，グループ化された更新量に対して行列 A を乗じることにより，漸化式の残差行列と真の残差行列の間のギャップ低減を図っている。グループ化された更新量を表す $n \times L$ 補助行列：

$$V_{j+1}^{(m)} \equiv \sum_{i=\pi(m)}^{\pi(m)+j}(P_i\alpha_i + Z_i) = V_j^{(m)} + P_{\pi(m)+j}\alpha_{\pi(m)+j} + Z_{\pi(m)+j}$$

を導入すると，近似解 $X_{\pi(m)+j+1}$ と残差行列 $R_{\pi(m)+j+1}$ の漸化式は以下のように表される。

$$\begin{aligned} X_{\pi(m)+j+1} &= X_{\pi(m)} + V_{j+1}^{(m)}, \\ R_{\pi(m)+j+1} &= R_{\pi(m)} - AV_{j+1}^{(m)}. \end{aligned}$$

右辺ベクトル数 L が大きい場合は，数値的に不安定な状態に陥りやすく，残差の収束性が悪化する。この不安定性は残差行列に対して正規直交化を施すことで改善することが知られており，正規直交化の適用は実用上必要不可欠となっている。残差行列 R_k を $R_k = \acute{R}_k\xi_k$ と thin QR 分解する。ここで，$\acute{R}_k$ は $n \times L$ 列直交行列，ξ_k は L 次上三角行列である。この残差行列の関係式を全ての漸化式に適用して変形することで，数値的に安定なアルゴリズムが得られる。この手法を Block GWGPBiCGrQ 法と呼ぶ。同法の計算過程では，以下の thin QR 分解が実行される。

$$\acute{R}_{\pi(m)+j+1}\tau_{j+1}^{(m)} = \mathrm{qr}\left(\acute{R}_{\pi(m)} - A\acute{V}_{j+1}^{(m)}\right).$$

ここで，$n \times L$ 行列 $\acute{V}_{j+1}^{(m)}$ と L 次行列 $\tau_{j+1}^{(m)}$ はそれぞれ $\acute{V}_{j+1}^{(m)} \equiv V_{j+1}^{(m)}\xi_{\pi(m)}^{-1}$, $\tau_{j+1}^{(m)} \equiv \xi_{\pi(m)+j+1}\xi_{\pi(m)}^{-1}$ で定義される。また，$\mathrm{qr}(\cdot)$ は行列の thin QR 分解を表す。

Block GWGPBiCGrQ 法の内部反復の停止条件を設定する必要がある。単純な停止条件として，内部反復の最大反復回数を s 回に固定することが考えられる。これを固定グループ化と

呼ぶ。s はユーザが設定するパラメータであるが，この設定は解法の収束性や得られる近似解精度に大きな影響を及ぼす。具体的には，s を小さく設定すると収束性は良いものの得られる近似解精度が若干悪くなり，s を大きく設定すると近似解精度は向上するが収束性が悪化する傾向がある。本研究ではこの収束性の悪化について調査を行い，収束性が悪化するときは thin QR 分解で生じる行列 $\tau_j^{(m)}$ の条件数が増加する傾向にあることがわかった。したがって，行列 $\tau_j^{(m)}$ の条件数を内部反復の停止条件に利用することで，収束性の悪化を防ぐことができると考えられる。またこれまでの研究において，残差ノルムが大きい状態で内部反復が終了すると，近似解精度が悪化することがわかっている。本研究では，収束性と近似解精度の両方を改善するために，以下の内部反復の停止条件を提案した。

$$\textbf{If } \mathrm{cond}\left(\tau_{j+1}^{(m)}\right) \geq \theta \text{ and } \frac{\left\|R_{\pi(m)+j+1}\right\|_{\mathrm{F}}}{\left\|R_{\pi(m)}\right\|_{\mathrm{F}}} \leq 1, \textbf{then exit}$$

ここで，$\theta \geq 1$ は閾値であり，cond(·) は行列の条件数を表す。2 つ目の条件は，残差ノルムが反復開始時の残差ノルム以下になった場合のみ内部反復を停止することを保証している。上記停止条件を用いた場合は内部反復の反復回数が一定ではなくなるため，このグループ化手法を可変的グループ化と呼ぶ。Block GWGPBiCGrQ 法に対して固定グループ化，可変的グループ化を適用した手法をそれぞれ，Block GWGPBiCGrQ-FG 法，Block GWGPBiCGrQ-VG 法と名付けた。

数値実験によって提案手法の性能を評価する。係数行列 A として，SuiteSparse Matrix Collection で公開されている行列 torso3（サイズ n：259,156，非零要素数：4,429,042）と FEM_3D_thermal2（サイズ n：147,900，非零要素数：3,489,300）を用いた。右辺ベクトル数 L は 50 とし, 右辺項 B は乱数で与えた。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 ノードを用い，OpenMP を用いて 24 スレッド並列で計算した。Block GWGPBiCGrQ-FG 法のパラメータ s は s = 1, 2, …, 500 とし，Block GWGPBiCGrQ-VG 法のパラメータ θ は以下で設定した。

$$\theta = a \times 10^b \quad (a = 1.0, 2.0, \ldots, 9.0;\ b = 0, 1, \ldots, 9).$$

反復法の収束判定条件は相対残差ノルム $\| R_k \|_{\mathrm{F}} / \| B \|_{\mathrm{F}}$ が 10^{-15} 以下になった場合とした。なお，以下に示す図 11 〜図 13 では，収束判定条件が満たされた場合ケースのみをプロットした。

図 11 に Block GPBiCGrQ 法と Block GWGPBiCGrQ 型解法の反復回数を示す。Block GWGPBiCGrQ 型解法のパラメータが小さい場合は，Block GPBiCGrQ 法とほぼ同じ反復回数であった。しかしながら，パラメータを大きく反復回数が増加する傾向にあった。Block GWGPBiCGrQ-FG 法では，係数行列が異なると求解可能なパラメータ s の範囲が異なっている。一方 Block GWGPBiCGrQ-VG 法では，両係数行列においてパラメータ θ が 10^{-6} よりも小さい場合は反復回数がほぼ一定であった。したがって，可変的グループ化は固定グループ化よりも係数行列に対するパラメータ依存性が低いことがわかった。

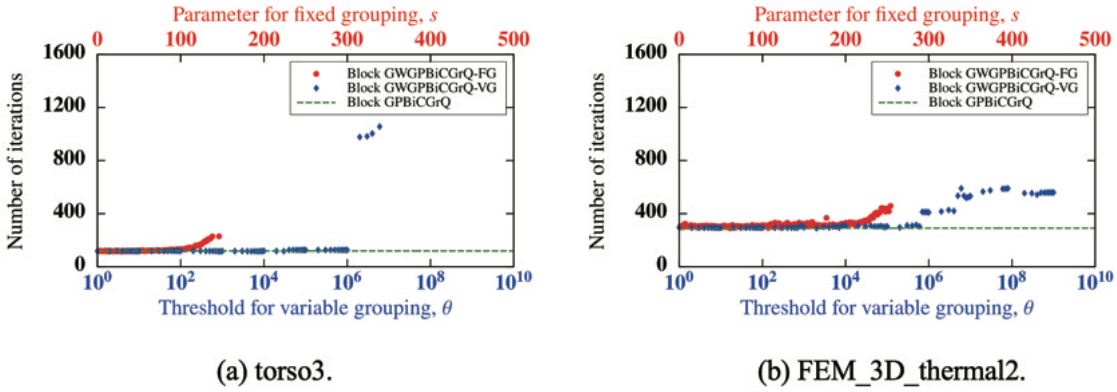


図 11 Block GPBiCGrQ 法と Block GWGPBiCGrQ 型解法の反復回数

図 12 に Block GPBiCGrQ 法と Block GWGPBiCGrQ 型解法の真の相対残差を示す。真の相対残差は $\| B - AX_k \|_F / \| B \|_F$ で与えられ，近似解 X_k の精度を評価する指標の 1 つである。同図に示すように，Block GWGPBiCGrQ 型解法は Block GPBiCGrQ 法よりも高精度の近似解を生成できていることがわかる。Block GWGPBiCGrQ-FG 法では，s が 1 に近づくにつれて真の相対残差が増加する傾向にある。これに対して，Block GWGPBiCGrQ-VG 法では収束判定条件が満たされた θ において，真の相対残差がほぼ一定であった。

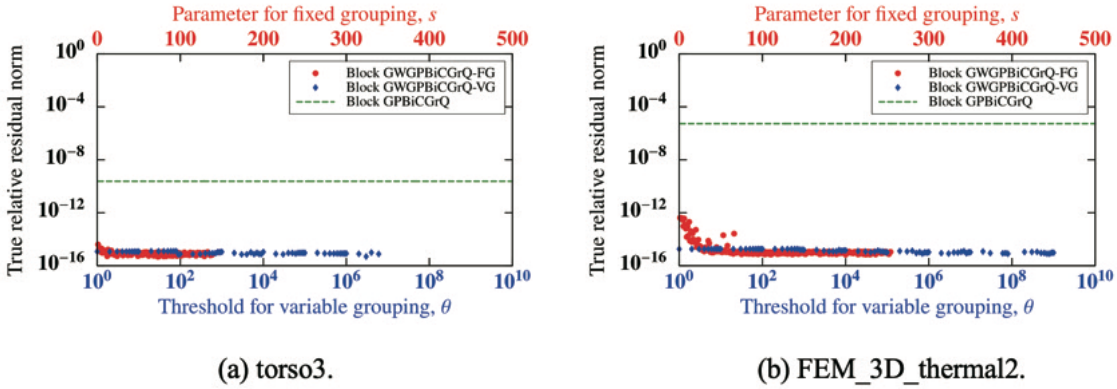


図 12 Block GPBiCGrQ 法と Block GWGPBiCGrQ 型解法の真の相対残差

図 13 に Block GPBiCGrQ 法と Block GWGPBiCGrQ 型解法の計算時間を示す。Block GWGPBiCGrQ 型解法はパラメータの値が大きくなると反復回数が増加するため，それに伴い計算時間も長くなっている。パラメータの値が小さい場合は，Block GWGPBiCGrQ 型解法の計算時間は Block GPBiCGrQ 法の計算時間とほぼ同じであった。Block GWGPBiCGrQ-VG 法では，内部反復の停止条件に行列 $\tau_j^{(m)}$ の条件数の計算が必要となる。この計算量は $O(L^2)$ であるため，右辺ベクトル数 L が少ない場合は計算時間への影響は少ない。このとき，同法の反復回数が Block GPBiCGrQ 法とほぼ同じである場合は，計算時間もほぼ同じになる。

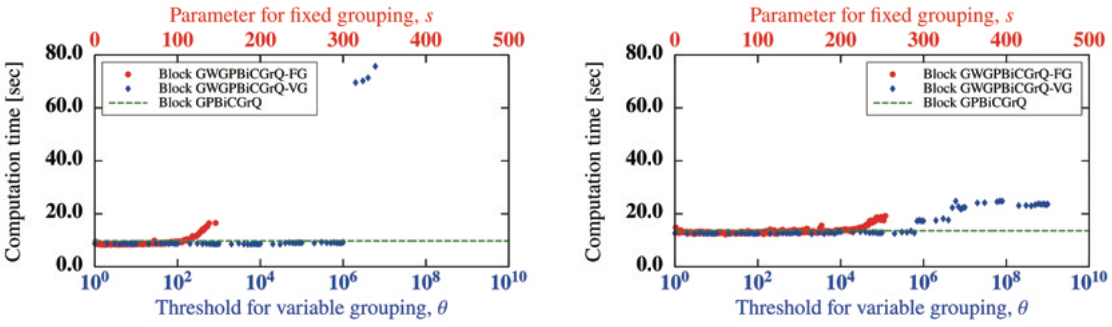


図 13 Block GPBiCGrQ 法と Block GWGPBiCGrQ 型解法の計算時間

[9] NVIDIA H100 GPU におけるグラフニューラルネットワークの学習精度と実行性能評価（小林，藤田，朴）

グラフ構造は，SNS，交通網，化合物の構造式，購買履歴などのありとあらゆるデータを表現できる非常に高い汎用性を持ち，この構造で表現されたデータを分析することによって，SNS 上のスパムボット検知，混雑予測，新薬の毒性予測，商品推薦といった様々な応用が可能になる。グラフ構造データを分析する手法として，近年の深層学習の発展に伴い，世界中の企業や研究機関が注目するグラフニューラルネットワーク (GNN) という技術が存在する。GNN は汎用性が高く，ノード分類，リンク予測，グラフ生成など，グラフに関するさまざまな問題の解決に使用することができる。この汎用性により，GNN はコンピュータビジョン，自然言語処理，推薦システムなど，様々な領域で強力なツールとなっている。その一方で，近年におけるデータの大規模化や機械学習アプリケーションの多様化から GNN の学習精度の向上および学習時間の短縮を実現する手法の確立が望まれている。

GNN はグラフ構造データを入力として取るが，画像認識で用いられるニューラルネットワークと同様に大量の行列積和演算を内包しているため，GNN のための演算加速装置としては GPU が用いられるのが一般的である。しかし，特定のグラフ構造やメモリアクセス要件の処理には限界があることが知られている。一方，GNN を加速させるハードウェアとして FPGA に注目した研究開発も注目を集めているが，動作周波数の低さが実行性能に少なからず影響を及ぼす可能性について報告されている。従って，我々は GPU と FPGA を適材適所的に活用することによって，GNN の学習精度の向上と学習時間の短縮を同時に実現することを目指す。その予備評価として NVIDIA 社が現在提供する最新型 GPU である NVIDIA H100 GPU を用いて実施した。

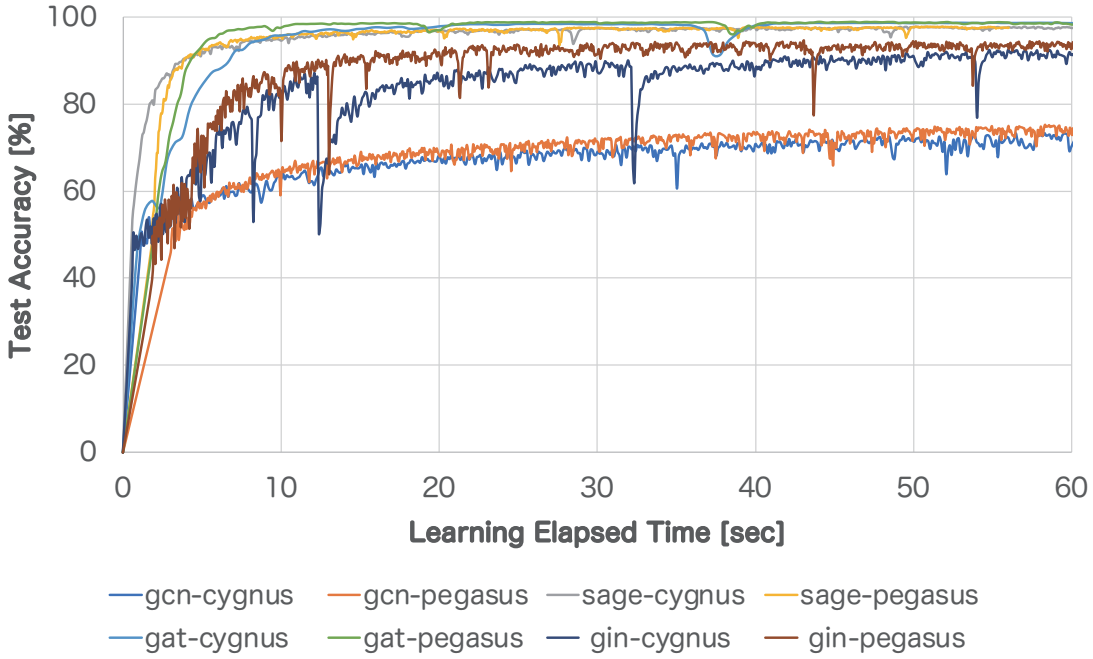


図 14　PPI データセットを学習する GNN モデルと実行プラットフォームに応じた学習時間とモデル制度の推移

NVIDIA V100 GPU (Cygnus)，H100 (Pegasus) をそれぞれ 1 台使用し，PPI データセットを学習する GNN モデルと実行プラットフォームに応じた学習時間とモデル精度の推移を評価した。図 14 にその結果を示す。性能評価では，エポック数の上限 1,000 と設定し，学習開始から 60 秒経過するまでのモデル精度をプロットした。なお，時間計測には PyTorch の torch.cuda.Event を使用した。

GCN モデルは最終的に 73 ~ 74% で推移している一方，GraphSAGE と GAT モデルは 95% 以上の精度を達成した。GCN はノードの全近傍を平均してノードの特徴を計算するため，全ての近傍ノードを同等に扱う。すなわち，中心のノードに近いノードも遠いノードも同様扱うが，中心のノードにより近いノードの情報は遠いノードの情報よりも重要である可能性が高く，全ての近傍を等しく扱うことは中心のノードの特徴計算において必ずしも最善の方法ではない可能性がある。さらに，本実験では GNN の層数は 3 であるため，遠いノードの情報を取り扱うのが難しいという問題もある。一方，GraphSAGE は各ノードの近傍を一定の数だけサンプリングして集約する挙動であるため，これにより各タンパク質の特徴がその近傍のタンパク質の特徴に基づいて更新され，全体のネットワーク構造を効果的に捉えることに成功していると考えられる。

GAT モデルでも高いモデル精度となったのは，Attention 機構が影響している。PPI データセットにおけるネットワークは生物学的な複雑性を持っており，各タンパク質（ノード）間の相互作用（エッジ）は一律ではなく，その強度や影響は大きく異なる場合がある。具体的には，あるタンパク質が他のタンパク質と強く相互作用している場合，そのタンパク質は

ネットワーク内で重要な役割を果たしている可能性が高く，GAT はこのような「強い」相互作用をより大きな Attention 係数で捉え，結果としてそのタンパク質の特性をより正確に表現している。これにより GAT は PPI ネットワークの複雑な特性を正確に捉え，最終的には GraphSAGE より高いモデル精度を達成しているが，エッジ数に比例した Attention 係数の計算オーバーヘッドの影響で学習時間の応じたモデル精度の向上は GraphSAGE よりも緩やかとなる。

GIN モデルの精度も学習時間が進むにつれて向上するが，GraphSAGE や GAT よりも精度の増減が多く見られ，全体的に不安定な推移を示した。GIN モデルは近傍ノードの特徴を集約する際に，グラフの構造を強く考慮するが，その際ノード間のエッジを考慮し，異なるエッジの重要度を自動的に学習する。これにより，ネットワーク全体のトポロジーをより正確に捉えることができるが，PPI データセットのような複雑なネットワークでは GIN モデルのこの能力が逆効果になる可能性がある。PPI データセットは複数のタンパク質間の相互作用を表すネットワークであり，一部の相互作用は非常に特異的（つまり，他の多くの相互作用とは異なる特性を持つ）である可能性がある。GIN モデルがこれらの特異的な相互作用を重要と判断し，それらに過度に重みを付けるとモデルはそれらの特異的な特性に過度に適合してしまい他の一般的な相互作用に対する予測精度が低下する恐れがある。また，これは GIN モデルが訓練データの特異的な特性に過度に適合してしまい，新しいデータ（テストデータ）に対する予測性能が低下, すなわち過学習してしまう傾向にもつながる。これらの影響によって，GIN モデルの精度が一部で下がってしまっている可能性がある。

学習時間については，NVIDIA H100 GPU 上で動作させた GNN モデルは，NVIDIA Tesla V100 GPU で動作させた場合と比較し，1.6 ~ 1.7 倍高速に学習を実行することが分かった。しかし，H100 GPU の演算性能は少なくとも V100 の 3 倍以上であるため，この実効性能は演算性能ではなくメモリバンド幅によって律速されている可能性がある。まだ PPI データセットのみでの実験であり，これはあくまで仮説の段階であるので，今後は異なるデータセットを使用して同様の実験を実施し，測定された性能の変動が一貫しているかどうかを確認していく。また，NVIDIA から提供されているプロファイラである Nsight Systems を用いて，GPU の実行時間・メモリ使用量・キャッシュ利用状況などの詳細な情報を収集して，上記の仮説を検証していくと共に，各 GNN モデルが GPU の性能をどの程度まで引き出せるのかを定量的に明らかにしていく。

[10] 並列 FPGA 環境における FPGA 間通信に関する研究（藤田，小林，朴）

筑波大学計算科学研究センターでは, 直接接続された複数 FPGA 上で利用可能な通信フレームワーク CIRCUS (Communication Integrated Reconfigurable CompUting System) を開発している。しかしながら，CIRCUS はフロー制御が実装されておらず，アプリケーションで通信バッファの残量を管理しなければバッファが溢れ，通信が消失するという制限がある。この制限の影

響により，これまでの研究で集団通信のような複雑な通信を CIRCUS 上に実装することが困難であることが明らかとなっていた。本年度は，この問題を解決するために CIRCUS の通信プロトコルの改善に取り組んだ。

現在の CIRCUS 実装では，Intel 社が提供する SerialLite III プロトコルを用いて FPGA 間通信を行っているが，これにフロー制御機能がないため，CIRCUS にフロー制御が実装できていない。この問題を解決するために，代替プロトコルとして，オープンソースの FPGA 間通信プロトコルである Kyokko を CIRCUS に組み込むことを検討しており，我々が対象としている FPGA ボードで動作するか，通信性能，フロー制御の機能について確認を進めている。

Kyokko はいくつかの FPGA ボードで動作確認がとられているが，Cygnus で用いている BittWare 520N FPGA ボードでの動作は対応出来ていない。また，100 Gbps 通信の環境での動作確認も十分ではない。本年度は，Kyokko の 520N ボードへの移植および 100 Gbps 環境で正常に動作するかの検証を行った。

Kyokko は FPGA ボードに依存しないプロトコル部と，FPGA ボードに依存する I/O 部が分離された設計がなされている。我々は 520N ボードに対応した I/O 部を実装し，Kyokko が 520N ボードで動作するように拡張を行った。また，100 Gbps 通信に対応するために，より高速なクロックを用いて Kyokko が動作できることを確認した。

1 枚の 520N ボードにある 1 番ポートと 2 番ポートをケーブルで接続し，ループバック構成を構成し，Kyokko を 520N ボードと組み合わせたときの性能を測定する。表 2 に測定結果を示す。物理層の転送速度である 100Gbps に対して，Kyokko 上で 99.9% のバンド幅を達成した。わずかに性能が低下しているのは，通信維持のために必要な制御用パケットが一定間隔で自動的に送信されるためである。表 3 にレイテンシ（通信遅延）の測定結果を示す。180ns という非常に低い通信遅延を達成した。通信機構が FPGA の回路に直結しているため，このような広帯域で低遅延な通信が実現できており，本結果は FPGA の通信性能が他の演算加速装置を凌駕していることを示している。高性能計算で用いられている他の演算加速装置（Graphics Processing Unit 等）は，演算に特化しており，通信機構は外部に追加する必要があり，一体化していないことによるオーバーヘッドが無視できない。

表 2 通信バンド幅の測定結果

バンド幅	99.985Gbps
効率	99.985%

表 3 レイテンシの測定結果

平均遅延（クロック）	71.0
平均遅延（ns）	181.8

[11] 複数の演算加速装置を統一的に扱えるプログラミング環境に関する研究 (藤田, 小林, 朴)

科学技術計算の分野ではスーパーコンピュータを用いて大規模な計算が行われているが，性能の向上に伴って消費電力も増大していることが問題となっており，単に性能が高いだけでなく，電力あたりの性能（Performance per watt）が高いことも重要視されている。電力問題を解決するために，演算加速装置（アクセラレータ）を搭載する計算機が広く用いられている。科学技術計算の分野では Graphics Processing Unit (GPU) が演算加速装置として広く用いられている。

一方で，演算加速装置の多様性が増しているという問題も存在する。現在，高性能計算で演算加速装置として用いられる GPU を開発している企業は，主に 3 社ある (AMD 社･Intel 社･NVIDIA 社)。一般的に，ユーザは複数のスーパーコンピュータや，手元の開発環境など様々な環境を横断して利用しているため，アプリケーションはどのような環境でも，効率よく動作することが求められている（性能可搬性)。しかしながら，従来の開発環境は単一の演算加速装置を対象としているため，複数の計算機間で性能を維持しつつアプリケーションを共有することが困難である。また，1 台の計算機に複数の演算加速装置が搭載されている場合もあり，性能可搬性を実現するには，複数の演算加速装置を扱えることも重要である。

本研究の目的は，複数の演算加速装置を統一的に扱えるプログラミング環境を実現することである。本目的を達成するためには，プログラミング言語面だけでなく，様々な演算加速装置を扱うためのソフトウェアの整備が求められる。我々が研究開発しているプログラミング言語「CHARM-SYCL」と，米国 Oak Ridge National Laboratory (ORNL) が研究開発している複数の演算加速装置環境 (Multi Heterogeneous) を扱えるランタイムフレームワーク「IRIS」を融合し，目的達成を目指す。

図 15 と図 16 はベクトル加算するベンチマークの評価結果である。図 15 は，CHARM-SYCL & IRIS で実装したものと，CUDA ネイティブで実装した場合を比べる性能評価である。CUDA で実装した物は Baseline と考えられるため，CHARM-SYCL&IRIS 実装と比べることでオーバーヘッドを測定できる。CHARM-SYCL と IRIS を使うことでランタイムのオーバーヘッドが発生するものの，最大で 6% の性能低下であり十分高速であることがわかる。図 16 は同じベンチマークを NVIDIA GPU と AMD GPU を 1 台ずつ搭載した計算機で実行したものである。NVIDIA のみ，AMD のみ，NVIDIA&AMD の 3 パターンの実行を実現できている。2 台用いた場合に性能が単純に和として増えていないが，これは，性能差を考慮せずに 2 台の GPU に同じだけの計算を割り振っているためであり妥当な結果といえる。これらの結果より，単一のアプリケーションコードで同種複数・異種複数どちらのケースも対応でき，プログラムの可搬性が実現できていることを示した。

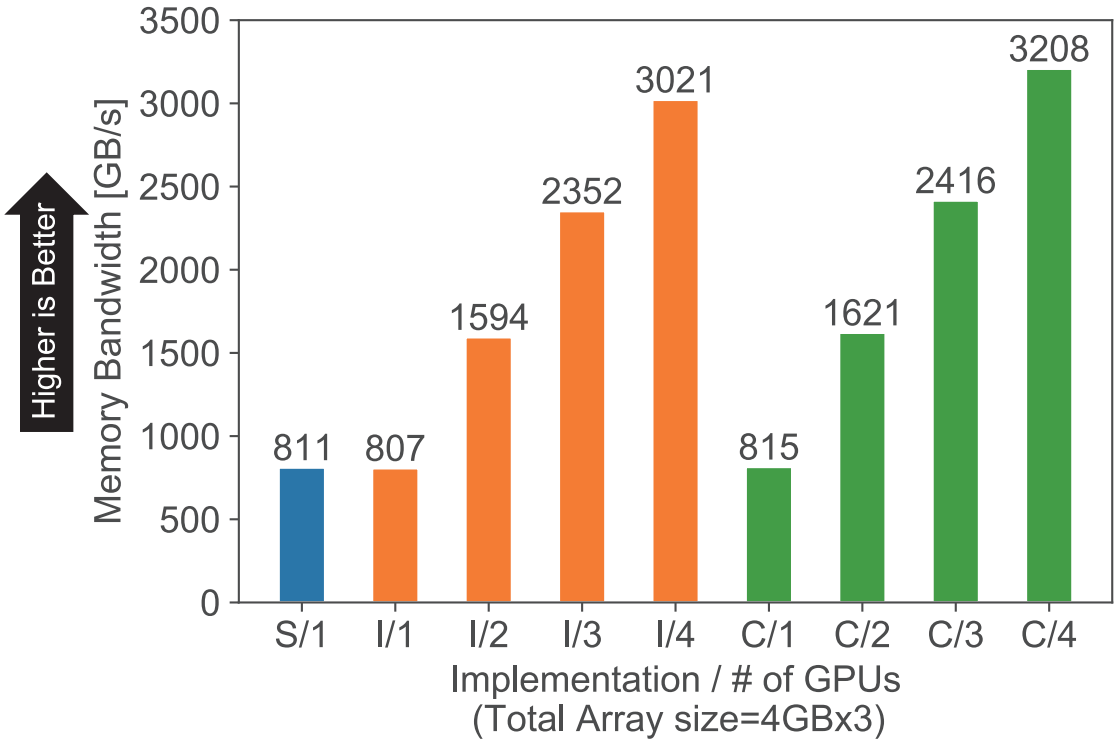


図 15 NVIDIA GPU を 1 ～ 4 台用いる場合の性能評価結果。S は CHARM-SYCL & Native Backend，I は CHARM-SYCL&IRIS Backend，C は CUDA 実装を表す。

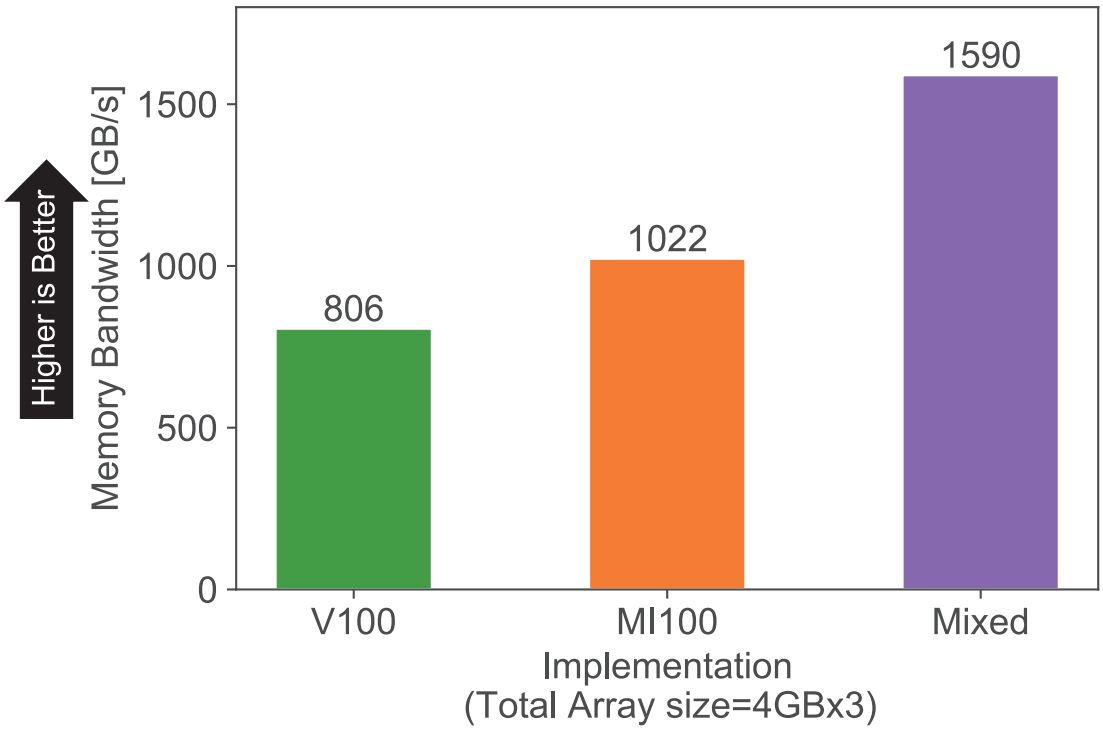


図 16 NVIDIA GPU と AMD GPU を組み合わせる場合の性能評価結果。V100 は NVIDIA V100 GPU を 1 台，MI100 は AMD MI100 GPU を 1 台，Mixed は V100 と MI100 を 1 台ずつ用いる場合を表す。

4. 教育

学生の指導状況

1. 佐野 由佳，修士（工学），高性能 FPGA 向け高位合成プログラミングにおける空間並列性向上手法，筑波大学大学院理工情報生命学術院システム情報工学研究群修士論文，令和 6 年 3 月（指導：朴泰祐）
2. 小山 創平，修士（工学），アドホックファイルシステムの設計と応用，筑波大学大学院理工情報生命学術院システム情報工学研究群修士論文，令和 6 年 3 月（指導：建部修見）
3. 木下 嵩裕，修士（工学），高レベル I/O ライブラリにおけるコンテキストによる高速化，筑波大学大学院理工情報生命学術院システム情報工学研究群修士論文，令和 6 年 3 月（指導：建部修見）
4. 山口 博將，修士（工学），GPU を用いたルジャンドル予想の数値的検証，筑波大学大学院理工情報生命学術院システム情報工学研究群修士論文，令和 6 年 3 月（指導：高橋大介）
5. 勢見 達将，修士（工学），DO CONCURRENT 構文によるシミュレーションコードの GPU 化，筑波大学大学院理工情報生命学術院システム情報工学研究群修士論文，令和 6 年 3 月（指導：額田彰）
6. 中野 将生，学士（情報工学），非同期通信ライブラリ async-ucx の性能評価，筑波大学情報学群情報科学類卒業論文，令和 6 年 3 月（指導：建部修見）
7. 川上 昌汰, 学士(情報科学), GPU における 8 倍精度浮動小数点数の高速フーリエ変換，筑波大学情報学群情報科学類卒業論文，令和 6 年 3 月（指導：高橋大介）
8. 田中 雅俊，学士（情報工学），高精度行列積計算によるブロッククリロフ部分空間反復法の近似解精度向上, 筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 令和 6 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. Daisuke Takahashi, 2023 Class of IEEE Computer Society Distinguished Contributors, 2024 年 2 月 18 日
2. Hiroto Tadano, JSST2023 Outstanding Presentation Award, Development and performance evaluation of the Block GPBiCGrQ method with variable grouping strategy, 2023 年 12 月 26 日

外部資金

1. 科学研究費補助金基盤研究 (A)，朴泰祐（代表），R3 〜 R6 年度，10,530 千円,「多重

複合演算加速機構を用いた次世代スーパーコンピューティング」

2. 科学研究費補助金基盤研究（A），建部修見（代表），R4 ～ R8 年度，3,650 千円，「次世代ストレージアーキテクチャの研究」
3. 文部科学省委託研究，建部修見（分担），R5 年度，54,450 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）」
4. NEDO，建部修見（分担），R5 ～ R7 年度，32,498 千円，「超分散コンピューティング環境における高性能ストレージ基盤技術」
5. 特別共同研究，建部修見（代表），R4 ～ R7 年度，31,667 千円，「スケーラブルなデータストア及び高速データ処理に関する共同研究事業」
6. 科学研究費補助金基盤研究 (C)，高橋大介（代表），R4 ～ R6 年度，1,430 千円，「メニーコア超並列クラスタにおける多倍長演算に関する研究」
7. 文部科学省委託研究，高橋大介，建部修見（分担），R5 年度，6,000 千円，「次世代計算基盤に係る調査研究」
8. 科学研究費補助金基盤研究 (C)，多田野寛人（代表），R5 ～ R7 年度，1,820 千円，「鞍点型連立一次方程式に対する高速・高精度階層並列型解法の開発」
9. JST 先端国際共同研究推進事業「次世代のための ASPIRE」，小林諒平（分担），R5~R8 年度，780 千円，「次世代の高効率計算基盤を実現する適応型データ圧縮ハードウェアの探求」
10. 科学研究費補助金基盤研究 (C)，小林諒平（分担），R5~R7 年度，80 千円，「多要素協調型 Approximate Computing 実現に向けた HPC アプリケーション解析手法」
11. 科学研究費補助金若手研究，小林諒平（代表），R4~R6 年度，520 千円，「GPU・FPGA 複合型グラフ構造データ分析基盤の創出」

6. 研究業績

（1）研究論文

A）査読付き論文

1. 綱島隆太，小林諒平，藤田典久，朴泰祐，Seyong Lee, Jeffrey S. Vetter, 村井均，中尾昌広，辻美和子，佐藤三久，“OpenACC 単一記述による GPU+FPGA 複合デバイス処理システム”，情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS), Vol. 16, No. 2, pp. 1-15, 2023 年 11 月
2. Wentao Liang, Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Taisuke Boku, “Using Intel oneAPI for Multi-hybrid Acceleration Programming with GPU and FPGA Coupling”, Proceedings of Int. Workshop on Intel Extreme Performance Group (IXPUG) 2024, in HPC Asia 2024, pp.69-76, Jan. 2024
3. Taisuke Boku, Ryuta Tsunashima, Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, Seyong Lee,

Jeffrey S. Vetter, Hitoshi Murai, Masahiro Nakao, Miwako Tsuji, Mitsuhisa Sato, “ OpenACC Unified Programming Environment for Multi-hybrid Acceleration with GPU and FPGA” , Proc. of Workshop on HPC on Heterogeneous Hardware (H3), in ISC2023, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 13999, pp. 662–674, 2023

4. Osamu Tatebe, Kohei Hiraga, Hiroki Ohtsuji, “I/O-Aware Flushing for HPC Caching Filesystem” , Proceedings of 3rd Workshop on Re-envisioning Extreme-Scale I/O for Emerging Hybrid HPC Workloads (REX-IO), pp. 11-17, 2023
5. Sohei Koyama, Kohei Hiraga, Osamu Tatebe, “Accelerating I/O in Distributed Data Processing Systems with Apache Arrow CHFS” , Proceedings of 3rd Workshop on Re-envisioning Extreme-Scale I/O for Emerging Hybrid HPC Workloads (REX-IO), pp. 1-4, 2023
6. Daisuke Takahashi, “Multiple Integer Divisions with an Invariant Dividend and Monotonically Increasing or Decreasing Divisors” , Proc. 23rd International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2023), Part II, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 13957, pp. 393-401, Springer, 2023
7. Akira Nukada, Taichiro Suzuki, Satoshi Matsuoka, “Efficient checkpoint/Restart of CUDA applications” , Parallel Computing, Vol. 116, No. 103018, 9 pages, Elsevier, Jul. 2023
8. Hiroto Tadano, “Implementation and performance evaluation of a hierarchical parallel solver for saddle point problems on a GPU cluster” , Journal of Advanced Simulation in Science and Engineering, Vol. 10, No. 1, pp. 116-131, 2023
9. 中野博生 , 轟木義一 , 多田野寛人 , “富岳における高プロセス並列ジョブのメモリ消費について” , 日本シミュレーション学会論文誌 , Vol. 15, No. 2, pp. 56-63, 2023
10. Hiroto Tadano, “Development and performance evaluation of the Block GPBiCGrQ method with variable grouping strategy” , Proc. of the 42nd JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2023), pp. 55-58, 2023
11. Hiroki Nakano, Hiroto Tadano, and Norikazu Todoroki, “Parallel calculations of the extremely large number of MPI processes in Fugaku” , Proc. of the 42nd JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2023), pp. 21-24, 2023
12. Hiroto Tadano, “Development and performance evaluation of the Block-product type iterative methods with the variable grouping strategy” , Journal of Advanced Simulation in Science and Engineering, Vol. 11, No. 1, pp. 32-53, 2024
13. Norihisa Fujita, Beau Johnston, Ryohei Kobayashi, Keita Teranishi, Seyong Lee, Taisuke Boku, Jeffrey S. Vetter, “CHARM-SYCL: New Unified Programming

Environment for Multiple Accelerator Types” , SC-W ‘23: Proceedings of the SC ‘23 Workshops of The International Conference on High Performance Computing, Network, Storage, and Analysis pp.1651-1661, 2023

B）査読無し論文

1. 小山 創平 , 平賀 弘平 , 建部 修見 , Apache Arrow CHFS によるビッグデータ処理の I/O 高速化 , 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング（HPC）, Vol. 2023-HPC-190, No. 5, pp. 1-11, 2023 年 8 月
2. 建部 修見 , 平賀 弘平 , 前田 宗則 , 藤田 典久 , 小林 諒平 , 額田 彰 , Pegasus ビッグメモリスーパコンピューターの性能評価 , 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング（HPC）, Vol. 2023-HPC-190, No. 7, pp. 1-12, 2023 年 8 月
3. 小山 創平 , 平賀 弘平 , 建部 修見 , FINCHFS: アドホック並列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. 2023-HPC-192, No. 7, pp. 1-8, 2023 年 12 月
4. 杉原 航平 , 建部 修見 , スパースセグメントを活用した局所性志向バーストバッファにおけるフラッシュ手法の検討 , 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング（HPC）, Vol. 2023-HPC-192, No. 14, pp. 1-9, 2023 年 12 月
5. 丸山 泰史 , 建部 修見 , NVMe SSD 環境における CHFS の設計最適化の検討 , 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング（HPC）, Vol. 2023-HPC-192, No. 30, pp. 1-4, 2023 年 12 月
6. 中野 将生 , 建部 修見 , Rust の UCX ラッパー async-ucx 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. 2023-HPC-192, No. 32, pp. 1-9, 2023 年 12 月
7. 平賀 弘平 , 建部 修見 , PMEMBB: 不揮発性メモリと MPI 片側通信を用いた MPI-IO バーストバッファの設計 , 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), Vol. 2024-HPC-193, No. 21, pp. 1-14, 2024 年 3 月
8. 木下 嵩裕 , 建部 修見 , CA VOL: HDF5 におけるコンテキストによる I/O 最適化 , 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング（HPC）, Vol. 2024-HPC-193, No. 22, pp. 1-8, 2024 年 3 月
9. 溝谷 祐大 , 小林 諒平 , 藤田 典久 , 朴 泰祐 , 天笠 俊之 , “ラベルの出現頻度に着目した FPGA を用いた正規パス問合せの提案” , 第 16 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM2024), pp. 1-8, 2024 年 2 月
10. Wentao Liang, Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Taisuke Boku, “Using Intel oneAPI for multi-hybrid acceleration programming with GPU and FPGA coupling” , 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング（HPC）, Vol. 2023-HPC-192, No. 16, pp.

1-7, 2023 年 12 月

11. 和田 康孝, 森江 善之, 小林 諒平, 坂本 龍一, “細粒度な Approximate Computing 適用に向けた演算精度変更による影響の評価”, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング（HPC）2023-HPC-191(13) pp.1-7, 2023 年 9 月
12. 森江 善之, 和田 康孝, 小林 諒平, 坂本 龍一, “Cast と通信の並列実行のための予備実験”, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング（HPC）, Vol. 2023-HPC-191, No. 14, pp. 1-6, 2023 年 9 月
13. 藤田 典久, 小林 諒平, Beau Johnston, Narasinga Rao Miniskar, Seyong Lee, Keita Teranishi, Jeffrer S. Vetter, 朴 泰祐, “SYCL に基づく複数の演算加速装置を統一的に扱えるプログラミング手法の提案”, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング（HPC）, Vol. 2023-HPC-190, No. 1, pp. 1-13, 2023 年 8 月
14. 小林 諒平, 藤田 典久, 朴 泰祐, 天笠 俊之, “NVIDIA H100 GPU におけるグラフニューラルネットワークの学習精度と実行性能評価”, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング（HPC）, Vol. 2023-HPC-190, No. 17, pp. 1-8, 2023 年 8 月
15. 古川 和輝, 山口 佳樹, 横野 智也, 吉川 耕司, 藤田 典久, 小林 諒平, 安倍 牧人, 朴 泰祐, 梅村 雅之, “輻射輸送シミュレーションのための FPGA と GPU によるスクラッチパッドメモリの効率と有効性の分析”, IEICE-RECONF2023-6 123(71), pp. 29-34, 2023 年 6 月
16. 北爪 開人, 藤田 典久, 小林 諒平, 朴 泰祐, “HPC 利用に向けた FPGA 間シリアル通信コントローラ Kyokko の Intel FPGA への実装”, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング（HPC）, Vol. 2023-HPC-189, No. 4, pp. 1-9, 2023 年 5 月

（2）国際会議発表

A）基調講演

1. Taisuke Boku, “Next-Gen Accleration with Multi-Hybrid Devices - Is GPU Enough?”, 2nd Workshop on Communication, I/O, and Storage at scale on next-generation platforms, ISC2023, Hamburg, May 2023

B）招待講演

1. Taisuke Boku, “New Challenge for HPC and AI by Big Memory (Data) Supercomputer Pegasus”, HPC-AI Advisory Council Japan, virtual, Apr. 19, 2023
2. Taisuke Boku, “Challenge on Extreme-Hetero Application Programming”, 2023 ACM/IEEE 8th International Workshop on Extreme Scale Programming Models and Middleware in SC23, Denver, Nov. 13, 2023
3. Taisuke Boku, “Programming on Extreme-Hetero HPC Systems”, Mini Symposium

on Vision of Today's and Future Programming Model, SIAM-PP24, Baltimore, Mar. 5, 2024

4. Osamu Tatebe, All Flash PFS of Oakforest-PACS II and HPCI Nation-Wide Storage System, DDN SCA24 Data, HPC and AI Summit, Sydney, Feb. 19, 2024
5. Ryohei Kobayashi, "Accelerating astrophysics simulation with GPUs and FPGAs" , ADAC (Accelerated Data Analytics and Computing Institute) ~ Applications Working Group Monthly Seminar ~, online, Jun. 2023

C) 一般講演

1. Wentao Liang, Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Taisuke Boku, "Using Intel oneAPI for Multi-hybrid Acceleration Programming with GPU and FPGA Coupling" , Int. Workshop on Intel Extreme Performance Group (IXPUG) 2024, in HPC Asia 2024, Nagoya, Jan. 2024
2. Taisuke Boku, Ryuta Tsunashima, Ryohei Kobayashi, Nrohisa Fujita, Seyong Lee, Jeffrey S. Vetter, Hitoshi Murai, Masahiro Nakao, Miwako Tsuji, Mitsuhisa Sato, " OpenACC Unified Programming Environment for Multi-hybrid Acceleration with GPU and FPGA" , Proc. of Workshop on HPC on Heterogeneous Hardware (H3), in ISC2023, Hamburg, May 25, 2023
3. Osamu Tatebe, Kohei Hiraga, Hiroki Ohtsuji, "I/O-Aware Flushing for HPC Caching Filesystem" , 3rd Workshop on Re-envisioning Extreme-Scale I/O for Emerging Hybrid HPC Workloads (REX-IO), Santa Fe, NM, Oct. 31, 2023
4. Sohei Koyama, Kohei Hiraga, Osamu Tatebe, "Accelerating I/O in Distributed Data Processing Systems with Apache Arrow CHFS" , 3rd Workshop on Re-envisioning Extreme-Scale I/O for Emerging Hybrid HPC Workloads (REX-IO), Santa Fe, NM, Oct. 31, 2023
5. Kohei Sugihara, Osamu Tatebe, Accelerate Stage-out in Single Shared Files from Node-local Burst-buffers, 8th International Parallel Data Systems Workshop Work-in-Progress Presentation, Denver, CO, Nov. 12, 2023
6. Daisuke Takahashi, "Implementation of Parallel Number-Theoretic Transform on GPU Clusters" , SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP24), Baltimore, MD, USA, Mar. 7, 2024
7. Daisuke Takahashi, "Multiple Integer Divisions with an Invariant Dividend" , 10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 2023), Tokyo, Japan, Aug. 21, 2023
8. Hiroto Tadano, "Development and performance evaluation of the Block GPBiCGrQ

method with variable grouping strategy" , The 42nd JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2023), Niigata, Japan, Aug. 2023

9. Hiroki Nakano, Hiroto Tadano, Norikazu Todoroki, "Parallel calculations of the extremely large number of MPI processes in Fugaku" , The 42nd JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2023), Niigata, Japan, Aug. 2023
10. Norihisa Fujita, Beau Johnston, Ryohei Kobayashi, Keita Teranishi, Seyong Lee, Taisuke Boku, Jeffrey S. Vetter, "CHARM-SYCL: New Unified Programming Environment for Multiple Accelerator Types" , RSDHA: 3rd Workshop on Redefining Scalability for Diversely Heterogeneous Architectures in conjection with SC' 23, Denver, CO, Nov. 2023

D) ポスター発表

1. Sohei Koyama, (Advisor) Kohei Hiraga, Osamu Tatebe, Fast Checkpointing of Large Language Models with TensorStore CHFS, The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis, ACM Student Research Competition Posters, Denver, CO, Nov. 14-16, 2023
2. Sohei Koyama, Kohei Hiraga, Osamu Tatebe, FINCHFS: Design of Ad-hoc File System for High-Performance Computing Workload, 22nd USENIX Conference on File and Storage Technologies (FAST), Work-in-Progress Report and Poster, Santa Clara, CA, Feb. 27-28, 2024
3. Yuka Sano, Taisuke Boku, Mitsuhisa Sato, Miwako Tsuji, Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, "Performance improvement by enhancing spatial parallelism on FPGA for HPC applications" , 2023 IEEE International Conference on Cluster Computing (CLUSTER), Poster, Santa Fe, NM, Oct. 2023
4. Yuka Sano, Taisuke Boku, Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Mitsuhisa Sato, Miwako Tsuji, "Enhancing spatial parallelism on loop structure for FPGA" , International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2024), Poster, Nagoya, Jan. 2024
5. Tatsumasa Seimi, Akira Nukada. "Performance Evaluation of OpenSWPC using Various GPU Programming Methods" , International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2024), Poster, Nagoya, Jan. 2024
6. Norihisa Fujita, Beau Johnston, Ryohei Kobayashi, Keita Teranishi, Seyong Lee, Taisuke Boku, Jeffrey S. Vetter, Unified Programming Environment for Multiple

Accelerator Types with Portability, The 6th R-CCS International Symposium, Kobe, Jan. 2024

（3）国内学会・研究会発表

A）招待講演

1. 小林 諒平 , “グラフニューラルネットワークにおける HPC 最前線” , 液体・ガラスへのデータ駆動アプローチ〜グラフニューラルネットワークとその周辺〜 , 神戸 , 2023 年 11 月

B）その他の発表

1. 小山 創平 , 平賀 弘平 , 建部 修見 , Apache Arrow CHFS によるビッグデータ処理の I/O 高速化 , 第 190 回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発表会 , 函館 , 2023 年 8 月
2. 建部 修見 , 平賀 弘平 , 前田 宗則 , 藤田 典久 , 小林 諒平 , 額田 彰 , Pegasus ビッグメモリスーパコンピューターの性能評価 , 第 190 回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発表会 , 函館 , 2023 年 8 月
3. 建部 修見 , Gfarm ファイルシステムの最新機能 , Gfarm シンポジウム , 秋葉原 , 2023 年 9 月
4. 建部 修見 , 次期フラグシップマシンのストレージシステム調査研究の中間報告 , Gfarm シンポジウム , 秋葉原 , 2023 年 9 月
5. 小山 創平 , 平賀 弘平 , 建部 修見 , FINCHFS: アドホック並列ファイルシステムの設計 , 第 192 回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発表会 , 沖縄 , 2023 年 12 月
6. 杉原 航平 , 建部 修見 , スパースセグメントを活用した局所性志向バーストバッファにおけるフラッシュ手法の検討 , 第 192 回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発表会 , 沖縄 , 2023 年 12 月
7. 丸山 泰史 , 建部 修見 , NVMe SSD 環境における CHFS の設計最適化の検討 , 第 192 回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発表会 , 沖縄 , 2023 年 12 月
8. 中野 将生 , 建部 修見 , Rust の UCX ラッパー async-ucx の性能評価 , 第 192 回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発表会 , 沖縄 , 2023 年 12 月
9. 平賀 弘平 , 建部 修見 , PMEMBB: 不揮発性メモリと MPI 片側通信を用いた MPI-IO バーストバッファの設計 , 第 193 回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発表会 , 札幌 , 2024 年 3 月

10. 木下 嵩裕, 建部 修見, CA VOL: HDF5 におけるコンテキストによる I/O 最適化, 第 193 回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発表会, 札幌, 2024 年 3 月
11. 中野 博生, 轟木 義一, 多田野 寛人, 坂井 徹, “富岳における大規模並列化による量子スピン系シミュレーション”, 日本物理学会 第 78 回年次大会, 2023 年 9 月
12. 多田野 寛人, “鞍点型連立一次方程式の階層並列型解法に対する漸化式動的グループ化反復法の適用と性能評価”, 日本応用数理学会 第 20 回研究部会連合発表会, 2024 年 3 月
13. 溝谷 祐大, 小林 諒平, 藤田 典久, 朴 泰祐, 天笠 俊之, “ラベルの出現頻度に着目した FPGA を用いた正規パス問合せの提案”, 第 16 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 2024), 2024 年 2 月
14. Wentao Liang, Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Taisuke Boku, “Using Intel oneAPI for multi-hybrid acceleration programming with GPU and FPGA coupling”, 第 247 回システム・アーキテクチャ・第 192 回ハイパフォーマンスコンピューティング合同研究発表会, 2023 年 12 月
15. 和田 康孝, 森江 善之, 小林 諒平, 坂本 龍一, “細粒度な Approximate Computing 適用に向けた演算精度変更による影響の評価”, 第 191 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, 2023 年 9 月
16. 森江 善之, 和田 康孝, 小林 諒平, 坂本 龍一, “Cast と通信の並列実行のための予備実験”, 第 191 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, 2023 年 9 月
17. 藤田 典久, 小林 諒平, Beau Johnston, Narasinga Rao Miniskar, Seyong Lee, Keita Teranishi, Jeffrer S. Vetter, 朴泰祐, “SYCL に基づく複数の演算加速装置を統一的に扱えるプログラミング手法の提案”, 第 190 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会（SWoPP2023）, 2023 年 8 月
18. 小林 諒平, 藤田 典久, 朴 泰祐, 天笠 俊之, “NVIDIA H100 GPU におけるグラフニューラルネットワークの学習精度と実行性能評価”, 第 190 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会（SWoPP2023）, 2023 年 8 月
19. 古川 和輝, 山口 佳樹, 横野 智也, 吉川 耕司, 藤田 典久, 小林 諒平, 安倍 牧人, 朴泰祐, 梅村 雅之, “輻射輸送シミュレーションのための FPGA と GPU によるスクラッチパッドメモリの効率と有効性の分析”, リコンフィギャラブルシステム研究会, 2023 年 6 月
20. 北爪 開人, 藤田 典久, 小林 諒平, 朴 泰祐, “HPC 利用に向けた FPGA 間シリアル通信コントローラ Kyokko の Intel FPGA への実装”, 第 189 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, 2023 年 5 月

（4）著書，解説記事等

1. 寒川光，高橋大介，有理算術演算―高精度数値計算のためのアルゴリズムとプログラミング―，森北出版，2023 年 9 月

7. 異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等

異分野間連携（センター内外）

– 宇宙物理研究部門との共同研究における GPU+FPGA 多重演算加速環境の初期天体シミュレーションコードの性能向上への適用
– 素粒子物理研究部門と共同で Japan Lattice Data Grid（JLDG）の構築，運用
– 計算情報学研究部門（データ基盤分野）との共同研究における FPGA を活用したグラフ処理アプリケーションの高速化に関する研究

産学官連携

– 学際ハブ拠点形成事業「AI 時代における計算科学の社会実装を実現する学際ハブ拠点形成」における生命科学シミュレーションコード Amber の高スループット実行に関する研究（アヘッド・バイオ・コンピューティング社との共同研究）

国際連携・国際活動

– Oak Ridge National Laboratory との GPU+FPGA 複合演算加速プログラミング環境に関する共同研究
– 米国エネルギー省と文部科学省が締結しているシステムソフトウェアに関する共同研究契約により，米国アルゴンヌ国立研究所とのストレージに関する共同研究

8. シンポジウム，研究会，スクール等の開催実績

– Gfarm シンポジウム 2023，東京（ハイブリッド），2023 年 9 月 8 日
– Gfarm ワークショップ 2024，沖縄，2024 年 1 月 29 日～ 30 日

9. 管理・運営

朴泰祐：情報環境委員会委員
朴泰祐：計算科学研究センターセンター長
朴泰祐：計算科学研究センター次世代計算機システム研究開発室室長
朴泰祐：計算科学研究センター高性能計算機システム研究部門主任
朴泰祐：計算科学研究センター次世代計算システム研究開発室室長
朴泰祐：計算科学研究センター HPCI 推進室室員
朴泰祐：計算科学研究センター情報セキュリティ委員会委員長

建部修見：情報環境企画室室員
建部修見：ネットワーク管理委員会委員
建部修見：情報セキュリティ技術小委員会委員
建部修見：基幹ネットワーク小委員会委員
建部修見：計算科学研究センター副センター長
建部修見：計算科学研究センター高性能計算システム運用開発室室長
建部修見：計算科学研究センター情報環境委員会部局技術責任者
建部修見：計算科学研究センター計算機システム運用委員会委員長
建部修見：計算科学研究センター次世代計算システム研究開発室室員
建部修見：計算科学研究センタービッグデータ・AI 連携推進室室員
建部修見：計算科学研究センター情報セキュリティ委員会委員
高橋大介：学術情報メディアセンター運営委員会委員
高橋大介：計算科学研究センター計算科学振興室長
高橋大介：計算科学研究センター先端計算科学推進室室員
高橋大介：計算科学研究センター次世代計算システム研究開発室室員
高橋大介：計算科学研究センター学際計算科学連携室室員
高橋大介：計算科学研究センター情報セキュリティ委員会委員
額田彰：計算科学研究センター先端計算科学推進室室員
額田彰：計算科学研究センター高性能計算システム運用開発室室員
多田野寛人：計算科学研究センター情報セキュリティ委員会委員
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
小林諒平：計算科学研究センター先端計算科学推進室室員
小林諒平：計算科学研究センター次世代計算システム研究開発室室員
小林諒平：計算科学研究センター高性能計算システム運用開発室室員
藤田典久：計算科学研究センター高性能計算システム運用開発室室員

10. 社会貢献・国際貢献

朴泰祐：理化学研究所客員主管研究員
朴泰祐：PC クラスタコンソーシアム理事
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
朴泰祐：「富岳」成果創出加速課題領域総括
朴泰祐：「次世代計算基盤に関する調査研究」Program Director
朴泰祐：HPCI 計画推進委員会委員
朴泰祐：「富岳」課題推進委員会委員
Taisuke Boku: Steering Committee Chair, International Conference on High

Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPCAsia)
Taisuke Boku: Steering Committee Member, IEEE Cluster
Taisuke Boku: Steering Committee Member, International Conference on Parallel Processing
Taisuke Boku: 2023 ACM Gordon Bell Prize Committee Chair
建部修見：HPCI セキュリティインシデント即応委員会委員
建部修見：HPCI 連携サービス運営・作業部会委員
建部修見：HPCI 利用研究課題審査委員会レビューアー
建部修見：理化学研究所客員研究員
建部修見：情報通信研究機構協力研究員
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
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
Osamu Tatebe: Poster Co-chair, IEEE/ACM International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC23)
Osamu Tatebe: Publicity Co-chair, IEEE International Conference on Cloud Computing (CLOUD 2023)
Osamu Tatebe: Program Committee, 10th IEEE/ACM International Conference on Big Data Computing, Applications and Technologies (BDCAT 2023)
Osamu Tatebe: Program Committee, IEEE International Conference on Cluster Computing (CLUSTER 2023)
Osamu Tatebe: Program Committee, 52nd International Conference on Parallel Processing (ICPP 2023)
Osamu Tatebe: Program Committee, ACM International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2023)
Osamu Tatebe: Program Committee, 8th International Parallel Data Systems Workshop (PDSW 2023)
Osamu Tatebe: Program Committee, 13th International Workshop on Advances in High-Performance Computational Earth Sciences: Applications & Frameworks (IHPCES 2023)
高橋大介：理化学研究所客員主管研究員
高橋大介：HPCI 利用研究課題審査委員会レビューアー
高橋大介：HPCI 連携サービス運営・作業部会委員
Daisuke Takahashi: Editor, The International Journal of High Performance Computing Applications
Daisuke Takahashi: Program Committee, The 18th International Workshop on Automatic Performance Tuning (iWAPT 2023)

Daisuke Takahashi: Program Committee, The International Conference on Computational Science (ICCS 2023)
Daisuke Takahashi: Publicity Committee, The 23rd International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2023)
Daisuke Takahashi: Program Committee, 52nd International Conference on Parallel Processing (ICPP 2023)
Daisuke Takahashi: The SIAM Activity Group on Supercomputing Career Prize (SIAG/SC Career Prize) and the SIAM Activity Group on Supercomputing Early Career Prize (SIAG/SC Early Career Prize) Joint Selection Committee Member
高橋大介：情報処理学会論文誌査読委員
高橋大介：情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会運営委員
多田野寛人：日本シミュレーション学会理事
Hiroto Tadano: Committe, The 42nd JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2023)
Hiroto Tadano: Local Scientific Program Committee, 10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM2023)
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」委員
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
小林諒平：理化学研究所客員研究員
小林諒平：電子情報通信学会コンピュータシステム研究専門委員会幹事
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
小林諒平：電子情報通信学会英文論文誌 D 編集委員
小林諒平：電子情報通信学会論文誌 Low-Power and High-Speed Chips 特集号編集幹事
小林諒平：電子情報通信学会論文誌 Forefront Computing 特集号編集幹事
小林諒平：電子情報通信学会論文誌 Forefront Computing 特集号編集委員
小林諒平：電子情報通信学会 ISS ソサイエティ誌編集幹事
小林諒平：電子情報通信学会 ISS ソサイエティ誌編集委員
小林諒平：情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会運営委員
小林諒平：アダプティブコンピューティング研究推進体　広報イベント WG 副グループ長
小林諒平：SWoPP 2023 組織委員
小林諒平：SWoPP 2023 実行委員（コンピュータシステム研究会）
小林諒平：xSIG 2023 プログラム委員

Ryohei Kobayashi：Proceedings Chair, FPT’ 23
Ryohei Kobayashi：Program Committee, FPT’ 23
Ryohei Kobayashi：Review Committee, Open Accelerated Computing Summit 2023
Ryohei Kobayashi：Poster Chair, IEEE RTCSA/NVMSA 2023
Ryohei Kobayashi：Program Committee, HEART2023
Ryohei Kobayashi：Program Committee, FPL2023
Ryohei Kobayashi：Program Committee, CANDAR 2023
Ryohei Kobayashi：Program Committee, CANDAR 2023 CSA workshop
Ryohei Kobayashi：Program Vice Chair, COOL Chips 26
藤田典久：情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会運営委員
藤田典久：情報処理学会論文誌コンピューティングシステム（ACS）編集委員
藤田典久：Publicity Chair, HPC Asia 2024
Norihisa Fujita: Program Vice Chair, Performance Optimization and Auto-Tuning of Software on Multicore/Manycore Systems (POAT2023)

11. その他

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	天笠　俊之
准教授	塩川　浩昭
助教	堀江　和正，Bou Savong（橋本 武彦）
研究員	Vijdan Khalique
共同研究員	北川　博之（IIIS 教授）
学生	大学院生 29 名、学類生 6 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さまざまなデータを統一的に扱うための RDF・知識ベース・LOD 関連技術等の研究を継続して行っている．また，国際睡眠医科学統合機構（IIIS）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．

今年度は外部資金として，科学研究費補助金（基盤研究（B），若手研究），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），JST CREST「検証可能なデータエコシステム」（令和 4 年 10 月～令和 9 年度）に加えて，新たに，科学研究費補助金（若手研究），JST AIP 加速研究（令和 5 年～令和 7 年度），NEDO「ポスト 5G 情報通信システム基盤強化研究開発事業」委託事業（令和 5 年度～令和 9 年度）が開始された．また従来通り，計算メディカルサイエンス事業をはじめとして，センターの他部門と連携した研究を積極的に推進した．

3. 研究成果

[1] 情報統合基盤技術

（関連研究費：科研費 若手研究，NEDO）

(1) Efficient Missing Value Imputation by Maximum Distance Likelihood.

データ ストリームで欠落している属性値を予測することは、多くのアプリケーションで分析結果の精度を高めるのに役立つ．既存のアルゴリズムは､学習と予測に使用されるレコード間の違いを無視する．精度は十分ではなく､さらに改善できる可能性がある．この論文では、(1) 最大化ベースのアプローチ (MP) と (2) 距離比ベースのアプローチ (DP) の 2 つのソリュー

ションを提案する．

MP と DP は、値が欠落している不完全なレコードが、パラメータの学習に使用されるレコードと可能な限り類似していることを保証する．MP と DP は、k 個の最近傍セット (k-NN) だけでなく、k 個の完全なレコードの可能なすべての組み合わせである k-Set から、可能なすべてのパラメーターを学習する．不完全なレコードの修復された候補に最も類似するレコードから学習されたパラメータが選択される．

パラメータを学習する際の 既存手法 DLM と提案手法の違いを図＊に示す。DLM (図 1) では、各レコードのパラメータはその k-NN セットから学習される．提案されたアプローチ（図2）では、各レコードのパラメータは k-Sets（）から学習される．k-Sets（）は、ターゲットレコードを除く k レコードの可能なすべての組み合わせだ。距離尤度を計算する際の DLM と提案されたアプローチの違いを図 2 に示す．

実験的には、MP と DP は既存のアプローチよりも大幅に優れている（図 3）．非類似性が顕著な場合、MP と DP の予測パフォーマンスは、DLM の予測パフォーマンスよりもそれぞれ約 18.25% と 15.01% 優れている．

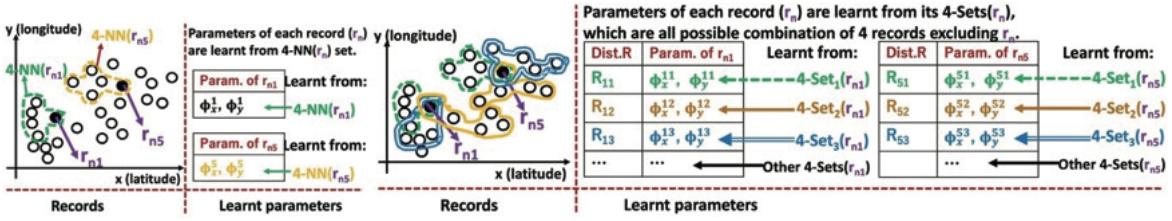


図 1. 各レコードのパラメータ学習の 既存手法 DLM と提案手法 (MP および DP) の違い

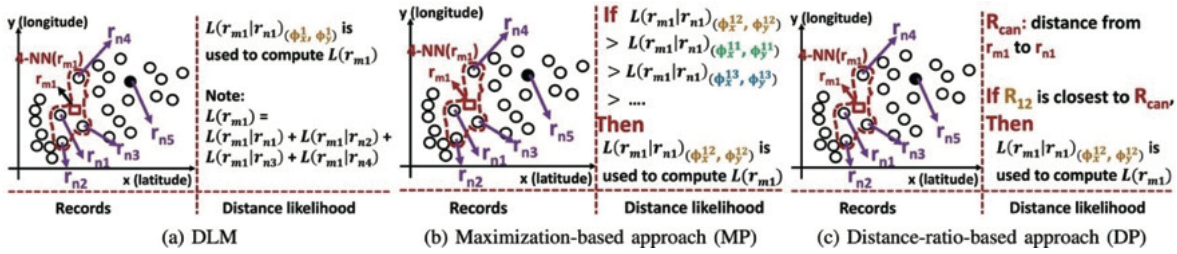


図 2. 距離尤度を計算する際の DLM と提案されたアプローチ (MP および DP) の違い

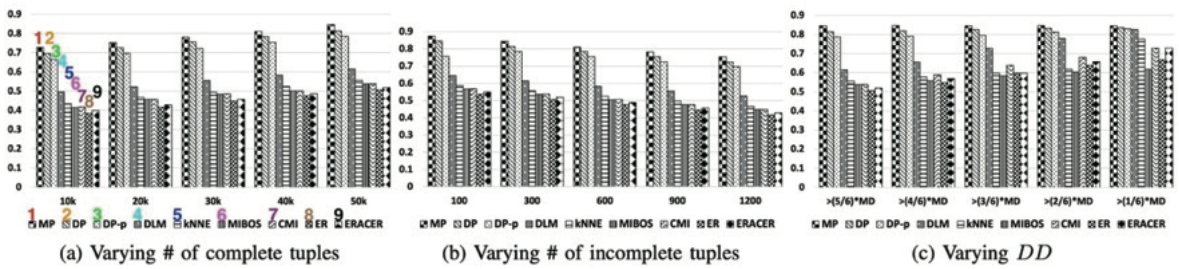


図 3. Adult データセット：提案手法 MP と DP と他の既存手法の予測精度

(2) TraPM: 移動軌跡ストリーム上のオンラインパターン照合のためのフレームワーク

GPS 対応デバイスの普及により，移動オブジェクトに関する大量の移動軌跡データが生成されている．これらを分析することで，移動パターンの発見や行動予測など多くの応用に利用することができる．このためには，大量の移動軌跡ストリームから，興味のあるパターンにマッチするものを高速に判定するパターン照合アルゴリズムが必要である．現在利用可能な分散ストリーム処理フレームワーク（Apache Flink や Storm など）は，パターン照合や複合イベント処理をサポートするものの，移動オブジェクトに特有の空間述語や近接性を考慮した記述をサポートしていない．

このため本研究では，移動軌跡に対するパターン照合のためのフレームワーク TraPM を提案する．空間述語処理を高速化するために，R 木およびグリッド索引を利用する．また，分散処理のためのデータ分割手法も提案し，その有効性を実験によって示している．

主要な貢献は以下の通りである．

- 移動軌跡ストリームに対するパターン照合のためのフレームワークを提案した．ポイントやイベントに加えて，近接空間オブジェクト（興味ポイントやエリアオブインタレスト）を考慮したパターン記述が可能である．
- SQL:2021 に基づく空間述語および関数をサポートし，これらを利用したパターン記述が可能である．これらの評価には R 木およびグリッド索引に基づく索引が利用可能であり，効率的なパターン照合を行うことができる．
- ライドシェアの軌跡データセットを使用して，提案フレームワークの有効性を実験により評価した．その結果，提案された索引ベースのアプローチがベースラインアプローチよりも高いスループットを達成することを確認した．特に，グリッド索引ベースの実装は，ベースラインの 4 倍，R 木ベースの実装はベースラインの 6 倍のスループットを達成した．

[2] データマイニング・知識発見技術

（関連研究費：JST さきがけ，JST AIP 加速研究，科研費 若手研究）

（1）Uncovering the Largest Community in Social Networks at Scale

大規模グラフの中から最大の k-plex を高速に検出する手法を開発した．最大 k-plex 探索（MPS）は，最大クリークの一般化として，ソーシャルネットワークにおける最大のコミュニティを見つけるために広く利用されている．MPS の計算は NP 困難であり，特に大規模なグラフに対しては非常に高い計算コストがかかる．近年, Gao らは分枝限定法による手法（BnB）を提案し，グラフ削減アルゴリズムを用いて最大 k-plex に含まれない可能性の高いノードを除去することで不要な探索を回避した．しかし，BnB も大規模なグラフを扱う際には，ノードの除去が不十分なため高い計算コストがかかる．そのため，いくつかの手法がヒューリスティックなグラフ枝刈り手法を導入しているが，これらもグラフ全体を繰り返しスキャンす

る必要があるため，大規模なグラフデータには適していない．例えば，最新手法では，グラフサイズを削減するのに $O(n^2)$ 時間（ただし，n はグラフのノード数）がかかる．そのため，効率的な MPS アルゴリズムの開発は依然として課題である．

本研究では，大規模な実世界のグラフデータに対して効率的な MPS アルゴリズムを開発することを目的とし，分枝統合法（BnM）を提案した．既存手法は不要なノードの特定に O(n^2) 時間を必要とするのに対し，BnM はグラフの基調構造を検出・統合していくことで，同様の処理を線形時間で実行可能とする．本研究では実世界の多くのグラフデータはスケールフリー性を持つため多くのノードが最大 k-plex に含まれないことを明らかにした．BnM はこれを利用して計算不要なノードを効率的に除去し，全ノードを繰り返し走査する冗長な作業を回避する．図 4 はより具体的な BnM の実行例を示している．(a) から (e) は順に最大 k-plex 探索の過程を示している．BnM は探索過程において (c) に示したような Fragile nodes と呼ばれるノード集合を動的に検出し，1 つのノードに集約していくことで MPS の探索空間を削減する．

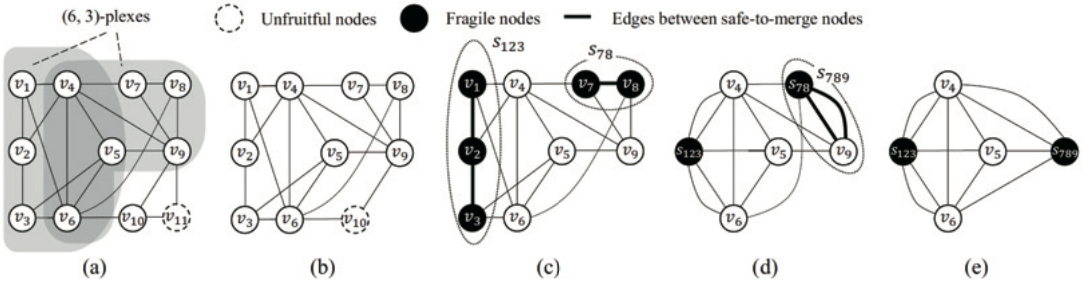


図 4. BnM の実行例

BnM は数千万件規模のデータを対象として，その最大 k-plex を最先端手法よりも最大で 2,300 倍程度高速に検出可能である．図 5 はノード数を変化させた際の計算時間の推移を比較した結果である．提案手法 BnM は他の最先端手法と比較したとき，大規模データに対しても十分に高速に最大 k-plex を検出することが出来ている．本研究の成果は難関国際会議 IJCAI2023 に採択された．

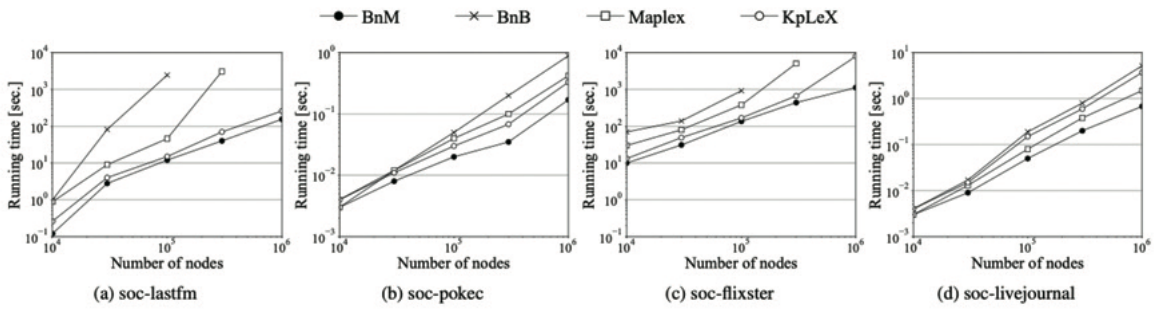


図 5. ノード数の変化に対する最大 k-plex 検出時間の推移

（2）Boosting Similar Compounds Searches via Correlated Subgraph Analysis

本研究は大規模な化合物データベースに対する類似検索技術を開発した．コンピュータ支援による薬剤設計は薬剤発見プロセスに大きく貢献しており，化合物データの指数関数的な増加に伴い，効率的なアルゴリズムの需要が高まっている．Ligand-based Virtual Screening（LBVS）は，化合物データベースから薬剤標的に結合する可能性の高い化合物を特定するための一般的な計算ステップであり, 構造活性相関（SAR）に基づいて化合物の特性を推測する．近年，グラフベースの類似性検索 GSS が LBVS において注目されており，グラフとしてモデル化されたクエリ化合物と類似した化合物を特定するための手法として利用されている．しかし, 既存の GSS 手法は類似性の評価に O(n^3) 時間（ただし n は化合物グラフの平均ノード数）を要することから大規模データベースへの適用が難しいという課題がある．また，既存の類似度指標はスケール不変性がなく，精度が化合物の大きさに影響を受けるため正確な SAR に基づいた検索が難しい．

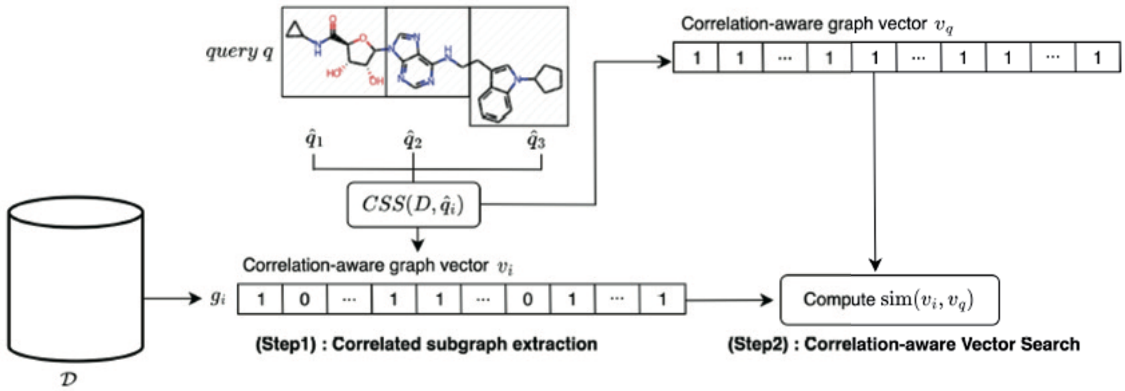


図 6. 相関グラフ解析を用いた類似化合物検索フレームワーク

本研究では，LBVS のための効率的かつ正確な類似化合物検索を実現するために，相関部分グラフ解析を導入した新しい検索手法を提案した．SAR に基づいた類似化合物は多くの化学構造を共有するため，その誘導部分グラフの出現傾向に強い正の相関がある．提案手法はこの性質を利用して，相関部分グラフの解析を類似化合物検索に応用する．各化合物を構成する部分グラフ構造の相関を測ることで，化合物サイズに依存せず SAR 類似性検索を実現する．具体的な提案手法の計算の流れを図 6 に示す．まず，クエリ化合物に対して，相関部分グラフ解析に基づいてデータベース内の相関部分グラフを導出する (Step 1)．次に，導出した相関部分グラフに基づいてデータベース内のグラフを特徴付けるグラフベクトルを定義し，これらを使用して，ベクトルベースの類似化合物検索を実行する (Step 2).

提案手法の有効性を確認するために，実際の化合物データベースを使用した評価を行った．図 7 に示す通り，精度評価において提案手法は最先端の GED ベース手法よりも高い精度を示

した．また，図 8 に示す検索時間に関する評価では，提案手法は最先端手法よりも 228.5 倍程度高速に検索できることを示している．特に，従来手法では 7200 秒以内に検索を完了できない場合 (図 5 の DNF) でも，提案手法は短時間で検索可能である．

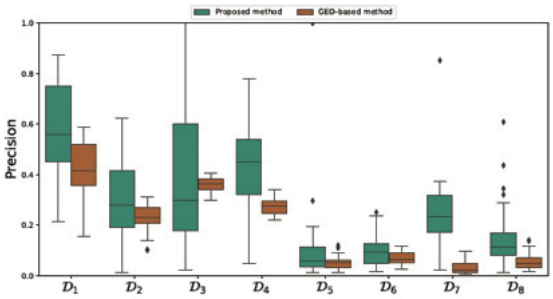


図 7. 検索精度（適合率）の比較

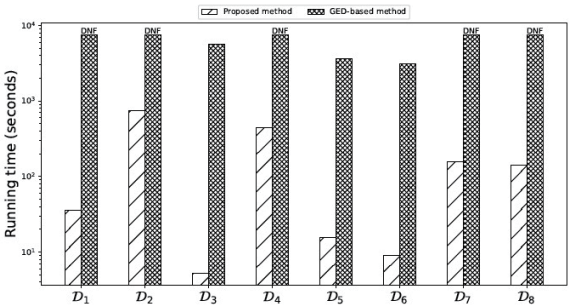


図 8. 検索時間の比較

(3) An Effective Graph-based Music Recommendation Algorithm for Automatic Playlist Continuation

音楽ストリーミングプラットフォームの進化に伴い，ユーザーが膨大な音楽トラックにアクセスできるようになった．この中で，自動プレイリスト継続（APC）は，ユーザーが新しい音楽トラックやアーティストを発見するための重要な機能となっている．主要なストリーミングプラットフォームでは，毎月のアクティブユーザー数が過去 10 年間で 3000 万人から 5 億人に増加しており，APC の重要性が増している．APC はユーザーの興味を満たす音楽トラックを推薦するための技術であるが，現実のプレイリストには複数の意図が含まれているため既存の推薦方法では効果的なトラックを見つけることが困難である．

本研究では，APC の精度を向上させるための新しい音楽推薦アルゴリズムを提案した．提案手法は，音楽トラック，プレイリスト，およびそれらのプロパティに基づく異種三部グラフを構築し，このグラフを用いてグラフ類似検索を行うことで推薦精度を向上させる．具体的には，以下の 3 つのステップから成る．まず，音楽トラックとプレイリストのセットから異種三部グラフを構築する（ステップ 1)．次に，クエリプレイリストのサブグラフを抽出し，重要なノードを強調する（ステップ 2)．最後に，バイアス付き PPR（個人化ページランク）を用いて推薦候補を生成する（ステップ 3)．提案手法では，異種三部グラフの構築により，音楽トラックとプレイリストの間の関係性をプロパティレベルで捉えることが可能となり，重要なエンティティを抽出することが可能となる．また，バイアス付き PPR を用いることで，クエリプレイリストから得られる重要なプロパティを強調し，不適切なプロパティを排除することができる．これにより，現実のプレイリストの多様な意図を効果的に捉えることができる．実験結果において実際の音楽ストリーミングサービスから取得したデータセットを用いて推薦精度の評価を行った．図 9 に示す通り，提案手法は評価指標 MAP および NDCG において，最先端の手法を大幅に上回る性能を示した．

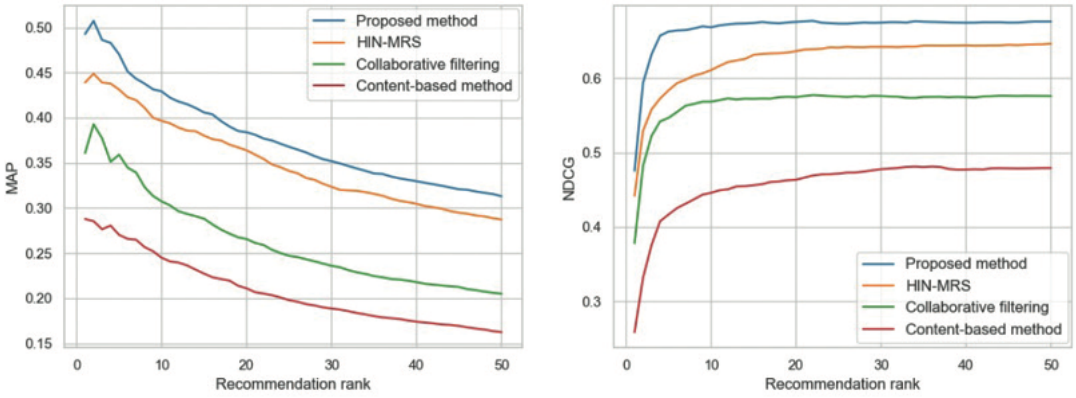


図 9. 推薦精度の比較（左図は MAP，右図は NDCG の結果である）

[3] RDF・知識ベース・LOD

（関連研究費：科研費 基盤研究（B），JST CREST，NEDO）

（1）マジックプロパティを用いた知識ベースと外部情報源の統合利用環境

近年，知識を構造化して保持する RDF 形式の知識ベースと，これに対する問合せ言語である SPARQL の利用環境が構築され，様々な知識処理において活用が進められつつある．しかし，知識の全てが知識ベースに集積されているわけではない．例えば，気象情報や交通機関の運行情報といった即時性が重要な情報は静的な集積という形式はそぐわない．また，専門的な知識などを提供する知識ベース以外の情報源も多い．このため，これらの情報を有効活用するためには，知識ベースと非知識ベースの外部情報源の連携利用が重要となる．

しかしながら，外部情報源は独自のアクセス方式やデータ形式を持つことも多い．このため，知識ベースと外部情報源を連携して利用することは，外部情報源の個別の特性に対応しつつ，知識ベースと外部情報源の両方から得られた結果を突き合わせるなど，極めて手間のかかる作業となっている．また，外部情報源からの獲得される情報をもとに知識ベースを利用する際には，外部情報源が示すオブジェクトが知識ベース中のどのエンティティを表しているかを判定することも必要となるが，これを人手で行うことは容易ではない．このような問題に対応するには，知識ベースと外部情報源を統合的に問合せが出来る環境の構築が重要となる．

これを受けて本研究では，知識ベースと外部情報源の両者を用いた情報活用の場面において，外部情報源をあたかも知識ベースと一体であるかのように扱える統合利用環境のアーキテクチャを提案した．これは，2 つの重要な特徴を持つ．第一の特徴は，外部情報源のアクセスに SPARQL のマジックプロパティを利用することである．SPARQL におけるマジックプロパティとはユーザ定義の述語であり、アプリケーション固有の計算処理を実装することを可能とする．例えば，知識ベース中にある人物の誕生日情報が記述されている場合，マジックプロパティとして誕生日から現在の年齢を計算する手続きを定義できる．これによって，そのマジックプロパティを呼び出すことで，知識ベースには直接記述がない年齢が，あたか

も知識ベースに記述されているように利用することが可能となる．本研究ではこのマジックプロパティを外部情報源のアクセスに利用し，SPARQL 問合せ中で外部情報源が持つ情報を利用する外部情報源述語 (ESP) を提案した．ESP は通常の述語と同様に，主語エンティティに目的語エンティティを結びつけるものであるが，それらの対応は外部情報源アクセスによって得られた情報によって決定される．ESP が加わることにより，知識ベースグラフは図 10 のように拡張されることとなる．本研究では，ESP によって拡張された知識ベースに対する SPARQL 問合せを処理するためのアルゴリズムを設計し，システムとして実装した．ESP の評価を行う上では，外部情報源から得られたオブジェクトに対応する目的語エンティティを割り当てるエンティティリンキングが必要となる．本研究の第二の特徴として，この問題に対して，問合せ駆動型オンデマンドエンティティリンキングを提案した．これは，SPARQL の中間問合せ結果をコンテキストとして使用し、問合せ処理中に外部情報源から取得した目的語エンティティに対して、知識ベース内の正しいエンティティを選択する。

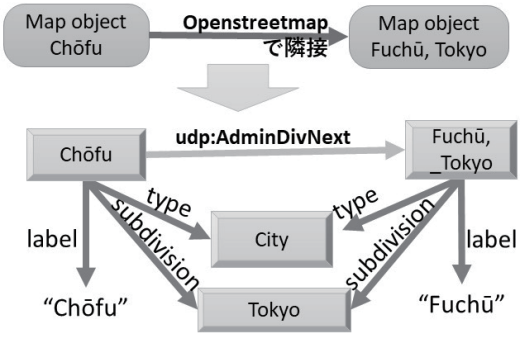


図 10.　拡張知識ベースグラフ

ESP を利用した拡張知識ベース問合せは，曖昧性を持つエンティティリンキング処理を含むため，本アーキテクチャのプロトタイプを用いて，提案アルゴリズムが生成する問合せ結果の精度を検証した．この結果，提案エンティティリンキング手法を組み込んだ問合せ処理が十分な精度で動作する事を確認した．また，提案エンティティリンキング手法が，コンテキストを用いない手法や，エンティティの全てのコンテキストを利用する方式，キーワード検索に基づく方式よりも優れていることを確認した（表 1 ）.

表 1　問合せ処理結果の F1 スコア

Entity Linking	F1
Proposed	**0.841±0.198**
NoCtx	0.831±0.221
NeighborCtx	0.775±0.310
ReturnCandidates	0.674±0.384
WikipediaEL	0.207±0.277

（2）AdapterEM: Adapter チューニングを適用した事前学習言語モデルによる一般化実体ティマッチング

実体マッチング（entity matching; EM）は，異なるレコード集合間で同じ実体に対応するレコードペアを列挙する問題であり，多くの応用で利用されている．特に近年では，従来通りの表形式ではなく，JSON などの半構造形式のデータも広まっており，これらを対象にした EM を一般化実体マッチング（generalized EM; GEM）と呼ぶ．事前学習済み言語モデル（PrLM）の普及とともに，PrLM を用いた EM あるいは GEM に関する手法が多く提案されている．

この手法における最も大きな課題の一つに学習コストがある．すなわち，学習のために

PrLM の膨大なパラメータを更新する必要があり，さらに，対象とするデータが変更するために，異なるデータで学習したモデルそのものを保存する必要がある．この問題に対応するため，アダプター（PrLM 内に追加される小規模なレイヤー）を使用することが考えられる．これにより PrLM のパラメータを固定したまま効率的に対照データへの適用が可能となる．

そこで本研究では，GEM のためのアダプターを使用した新しいファインチューニング手法 AdapterEM を提案した（図 11）．具体的には，特定のタスク用に最適化されたアダプター（(a) タスクアダプター），SNLI コーパスなどで事前学習されたアダプター（(b) 事前学習アダプター），トークンレベルの言語表現を捉えるためのアダプター（(c) 可逆アダプター）からなる構成である．評価実験の結果，計算資源が少ない環境下において，8 つのタスクのうち 7 つで，従来の PrLM よりも優れた性能を発揮した．さらに，すべての利用可能な学習データを使用する環境において，従来の方法と比較して大幅な性能向上を確認した．

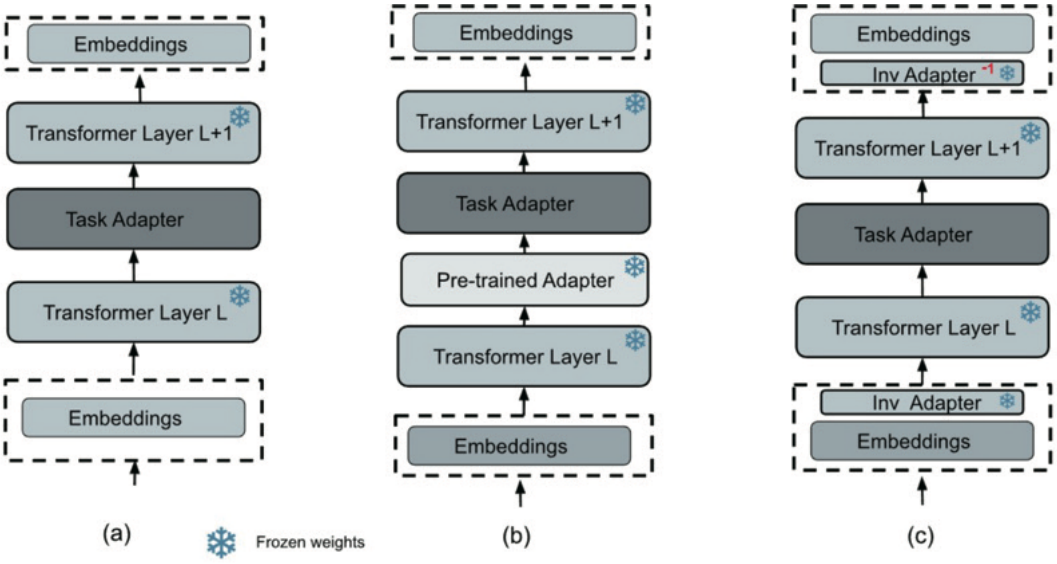


図 11. AdapterEM の構成.

（3）仮想知識ベースを利用した関係データ統合における URI マッピングのサポート

近年，オープンデータの利用が広がり，多くの応用で使用されている．これら利用する際には，オープンデータや従来のデータベースに保存されたデータなど，複数の情報源からのデータ統合が必要となる．仮想知識グラフ（virtual knowledge graph; VKG）は，関係データベース，CSV，XML などの非 RDF 情報ソースを RDF ビューとして統合するフレームワークであり，利用者は RDF ビューを物理的に実体化せずに，標準クエリ言語（SPARQL）を使用して仮想 RDF データをクエリできる．このシステムは，定義されたマッピング仕様に従ってユーザーが指定したクエリを非 SPARQL クエリ（例：SQL）に自動変換し，情報源からの部分的なクエリ結果を RDF 形式に変換して利用者に返す．

このとき，情報源におけるレコードの識別子を，適切な URI に変換することが重要である．ところが，既存の VKG システムでは単純な変換のみをサポートしており，利用者の異なるニー

ズに答えることができなかった.

そこで本研究では, VKG における識別子と URI のマッピングを利用者定期関数（URI 関数）として定義可能なシステムを提案した．情報源と RDF のマッピング記述の中に URI 関数を埋め込むとともに，その実装を与えることで，識別子の簡単な変換だけでなく，実体リンキングを用いた外部知識グラフへの関連付けなども可能になる．この際，マッピング結果を事前計算，あるいは，キャッシュすることで効率的な問合せ処理が可能となる．提案手法の実現可能性を評価するための一連の実験を実施した．結果として，提案手法が既存の方法と比較して優れた性能を示し，複雑な URI マッピングが必要な現実のアプリケーションに適していることが確認された.

[4] データベース応用・データサイエンス

（関連する研究費：科研費 基盤研究（B），若手研究）

（1）睡眠ステージ判定を対象としたエンコーダ・デコーダモデルによる脳波信号オーグメンテーション

医師・臨床検査技師の負担軽減を目的に，深層学習を用いた生体信号からの睡眠ステージ（睡眠状態，レム睡眠など）判定手法が開発されている．これらの手法は高い判定精度を有しているが，多くの学習サンプルを必要とする．学習サンプルが十分に獲得できない場合，例えば，ナルコレプシーのような珍しい睡眠障害患者を対象とした場合などでは，その性能を十分に発揮することができなかった.

そこで本研究では，睡眠時脳波向けのオーグメンテーション（サンプルの水増し手法）を開発することで，この問題の解決を図った．既存のオーグメンテーション手法とは異なり，ステージ判定の根拠となる波（特徴波）の波形をなるべく維持しつつ，元とは異なる生体信号の生成を目指している.

提案手法は，エンコーダ・デコーダモデルをベースとしている．元信号を潜在表現空間上に投射した後，一部の潜在表現を同一被験者・同一ステージの別の信号のものに置き換えることでオーグメンテーションを達成している．学習時には，潜在表現空間上で特徴波とその他の波形が分離するよう，特徴波が検出可能な既存のステージ判定モデルから得た情報を利用している.

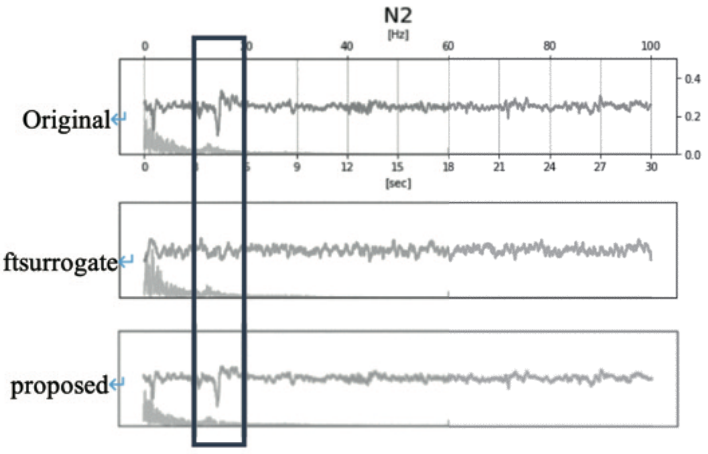


図 12. 生成した脳波サンプル，四角で囲われた K-complex が既存手法では消失している.

実験では，提案手法が従来手法と異なり特徴波を維持できることが確

認できた（図 12）．また，水増ししたサンプルをステージ判定モデルに学習させた場合，判定精度が 2 %以上改善できることが確認できた（図 13）．

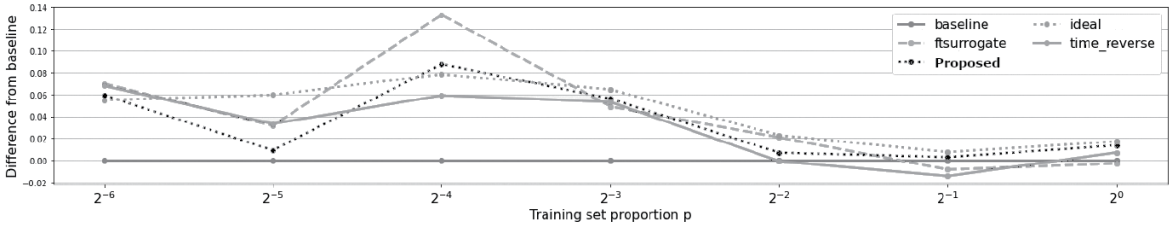


図 13. 各オーグメンテーション手法の判定精度改善，提案手法は実サンプルを追加した場合（ideal）と同等の判定精度改善効果がある．

（2）AtLASS: 注意機構ベース Bi-LSTM によるエンドツーエンドなスプライス座位予測

Eukaryotic のゲノムは遺伝子にコードされる領域エクソンおよびそれ以外のイントロンを含むため，ゲノムの注釈には，エクソンとイントロンの境界（スプライス部位と呼ぶ）を正確に特定する必要がある．この問題に対して，多くの先行研究では RNA をゲノムにマッピングした RNA-seq に基づいた注釈を行なっていた．ただしこの方法では，発現量が少ない，あるいは，発現していない遺伝子の注釈を得ることができない．そのため最近の多くの研究はニューラルネットワーク（NN）をはじめとする機械学習を利用することで，スプライス座位の予測を行っている．

本研究では，注意機構に基づく Bi-LSTM を用い，ゲノムおよび RNA-seq データからスプライス部位を予測モデルを学習する手法 AtLASS を提案する．より具体的には, RNA-seq データを元に二段階のトレーニングを実施し，ラベル不均衡問題に対処し，偽陽性を減少させる点に特徴がある．3 つの種のゲノムに対する実験では，提案手法の単独の性能において既存の手法と同等であることが示された，さらに提案手法と既存の手法の出力を組み合わせることでより良い精度を達成できることが示された．

4. 教育

＜博士（工学）＞

1. Vijdan Khalique

   A Study on Non-Core Point Detection in Static and Streaming Data

   （静的データ及びストリームデータに対する非コアポイント検出に関する研究）

2. 真次　彰平

   A Study on Efficient Pseudo-clique Extraction Methods for Large-scale Graph Analysis

   （大規模グラフ分析のための効率的な疑似クリーク抽出手法に関する研究）

3. Hailemariam Mehari Yohannes
A Study on Enhancing Text Processing using Pre-trained Language Models
（事前学習言語モデルを用いたテキスト処理の改良に関する研究）
4. 河野　圭祐
機械学習のための最適輸送理論に基づく非構造データ間距離
5. Luca Foppiano
Automated Extraction and Curation of Materials Information from Scientific Literature
（科学文献からの物性情報の自動抽出及びキュレーション）

＜修士（工学）＞
1. 佐藤　祥吾
ユーザ定義可能な URI マッピングを用いた仮想知識グラフによるデータ統合
2. 溝谷　祐大
ラベルの出現頻度に着目した FPGA による正規パス問合せの高速化
3. 直井　悠馬
グラフ相関問合せの高速化と化合物検索への応用
4. 八木　隆一
大規模 DNA データベースに対する効率的な相関問合せ手法の提案
5. 大宮　直樹
睡眠ステージ判定を対象としたエンコーダ・デコーダモデルによる脳波信号オーグメンテーション
6. 国生　泰資
リアルタイム性を考慮した自動睡眠ステージ判定システムの研究

＜学士（情報科学，情報工学）＞
1. 柴田 紘希
多様性と近接性を考慮した反実仮想説明列挙手法
2. 溝上 拓也
テキストと構造を考慮した木構造データに対する類似部分木検索手法
3. 牛尼 索造
データストリームに対する S-FINCH の効率化に関する研究
4. 伊藤　寿浩
グラフデータベースにおける DISTINCT 句を含む問合せ処理の高速化
5. 川畑　竜平
睡眠ステージ自動判定における患者の属性を踏まえた深層学習処理の切り替え機構の開

発

6. 松田　蒼唯
コード差分と課題追跡システム上の投稿を活用したコミットメッセージ生成

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 第 16 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 2024），学生 プレゼンテーション賞：伊藤 寿浩，塩川 浩昭，“グラフデータベースにおける Worst-case Optimal Join の最適化”，2024 年 2 月 28 日 ~3 月 1 日 .
2. 第 16 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 2024），学生プレゼンテーション賞：山﨑 昂輔，天笠 俊之，“SparkSQL による効率的な問合せ処理のためのワークロードに基づく RDF データ分割手法”，2024 年 2 月 28 日 ~3 月 1 日 .
3. 第 16 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 2024），学生プレゼンテーション賞：大宮 直樹，堀江 和正，北川 博之，“睡眠ステージ判定を対象としたエンコーダ・デコーダモデルによる脳波信号オーグメンテーション”，2024 年 2 月 28 日 ~3 月 1 日 .
4. 第 16 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 2024），株式会社日立製作所賞：八木 隆一，直井 悠馬，塩川 浩昭，“大規模 DNA データベースに対する Top-k 相関問合せ手法の提案”，2024 年 2 月 28 日 ~3 月 1 日 .
5. 第 16 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 2024），学生プレゼンテーション賞：安田 裕真，塩川 浩昭，“クエリ長に依存しない多次元時系列データに対する類似問合せ手法の提案”，2024 年 2 月 28 日 ~3 月 1 日 .
6. 情報処理学会第 86 回全国大会，学生奨励賞：伊藤 寿浩，塩川 浩昭，“プロパティグラフに対する DISTINCT 句を含む問合せ処理の高速化”, 2024 年 3 月 15 日 ~3 月 17 日 .
7. 情報処理学会第 86 回全国大会，学生奨励賞：柴田 紘希，天笠 俊之，塩川 浩昭，” 多様性と近接性を考慮した反実仮想説明列挙手法”，2024 年 3 月 15 日 ~3 月 17 日 .

外部資金

1. 受託研究：民間企業共同研究（令和元年 10 月 1 日～令和 6 年 3 月 3 1 日）
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：天笠　俊之
R5 年度直接経費：6,538,462 円
2. 受託研究:国立研究開発法人科学技術振興機構（令和 4 年 10 月 1 日～令和 6 年 3 月 31 日）
研究課題：データエコシステムのためのメタデータ管理およびスマート農業実証

研究代表者：天笠　俊之
R5 年度直接経費：1,7000 千円

3. 受託研究：国立研究開発法人産業技術総合研究所（令和 5 年 4 月 1 日～令和 7 年 10 月 19 日）
研究課題：超分散コンピューティング環境における高性能ストレージ基盤技術
研究担当者：天笠　俊之
R5 年度直接経費：9,999 千円
4. 共同研究：民間企業共同研究（令和 4 年 4 月 1 日～令和 6 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
研究代表者：天笠　俊之
R5 年度直接経費：直接経費：1,650 千円
5. 共同研究：民間企業共同研究（令和 4 年 5 月 12 日～令和 6 年 3 月 31 日）
研究課題：次世代データ解析基盤のためのグラフデータ解析技術に関する研究
研究代表者：天笠　俊之
R5 年度直接経費：1,153,846 円
6. 科研費：基盤 B （令和 4 年度～令和 7 年度）
研究課題：多粒度分散知識グラフ活用のための基盤技術に関する研究
研究代表者：天笠　俊之
全年度直接経費：12,800 千円（R5 年度直接経費：3,100 千円 ）
7. 科研費：基盤 B （令和 5 年度～令和 8 年度）
研究課題：真核生物ゲノムデータに混入している原核強制田ゲノムの体系的探索
研究分担者：天笠　俊之
全年度直接経費：18,330 千円（R5 年度直接経費：3,100 千円 分担金 : 100 千円 ）
8. 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 6 年 3 月 31 日 ）
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（R5 年度直接経費：13,580 千円 ）
9. 受託研究：科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業（AIP 加速課題）（令和 5 年 4 月 1 日～令和 7 年 3 月 31 日）
研究課題：超高速データサイエンス基盤におけるグラフ探索の研究
R5 年度直接経費：2,000 千円
10. 科研費：若手研究 （令和 4 年度～令和 7 年度）
研究課題：大規模科学データに対する高速問合せ処理

研究代表者：塩川　浩昭

全年度直接経費：3,600 千円（R5 年度直接経費：1,000 千円）

11. 科研費：若手研究（令和 5 年度～令和 6 年度）

研究課題：生体信号認識課題における被験者・計測状況を踏まえた真相学習処理の切替機構の開発

研究代表者：堀江　和正

全年度直接経費：3,300 千円（R5 年度直接経費：2,400 千円）

12. 科研費：若手研究（令和 5 年度～令和 8 年度）

研究課題：ディープラーニングによって強化されたストリーム処理システムに関する研究

研究代表者：橋本　武彦

全年度直接経費：3,700 千円（R5 年度直接経費：1,700 千円）

13. 科研費：基盤研究 B （令和 5 年度～令和 8 年度）

研究課題：パーベイシブトレーサビリティを実現する複合的ビッグデータ処理基盤

研究代表者：北川　博之

全年度直接経費：14,300 千円（R5 年度直接経費：4,200 千円）

14. 科研費：挑戦的研究（萌芽）(令和 4 年 6 月 30 日～令和 6 年度)

研究課題：睡眠センシングストリーム基盤を用いた睡眠時のリアルタイム情動推定

研究代表者：北川　博之

全年度直接経費：4,800 千円（R5 年度直接経費：1,800 千円）

15. 受託研究：AMED ムーンショット型研究開発事業（令和 3 年度～令和 7 年度）

研究課題：睡眠と冬眠：2 つの「眠り」の解明と操作が拓く新世代医療の展開

研究分担者：北川　博之

R5 年度直接経費：650 千円

16. 共同研究：民間企業共同研究（令和 3 年 4 月 1 日～令和 6 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度化

研究代表者：北川　博之

R5 年度直接経費：直接経費：1,650 千円

直接経費：3,150 千円

17. 共同研究：筑波大学未来社会工学開発研究センター（令和 5 年 4 月 1 日～令和 6 年 3 月 31 日）

研究担当者：北川　博之

R5 年度直接経費：500 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

＜学術雑誌論文＞

1. Dukundane Gashongore Prince, Savong Bou, “Fast Relevant Reature Selection Based On Markov Boundary Learning From Data Stream For Classification Tasks” , Journal of Information Processing, Vol. 31, pp. 321-331, 2023.
2. Quang-Van Doan, Toshiyuki Amagasa, Thanh-Ha Pham, Takuto Sato, Fei Chen, and Hiroyuki Kusaka, “Structural k-means (S k-means) and clustering uncertainty evaluation framework (CUEF) for mining climate data,” Geoscientific Model Development, Vol. 6, pp. 2215-2233, April 2023.
3. Vijdan Khalique, Hiroyuki Kitagawa, and Toshiyuki Amagasa, “BPF: A Novel Cluster Boundary Points Detection Method for Static and Streaming Data” , Knowledge and Information Systems, 65, pp. 2991-3022, July 2023.
4. Ryo Harada, Keitaro Kume, Kazumasa Horie, Takuro Nakayama, Yuji Inagaki, Toshiyuki Amagasa, “AtLASS: A Scheme for End-to-End Prediction of Splice Sites using Attention-based Bi-LSTM,” IPSJ Transactions on Bioinformatics, Vol. 16, pp. 20-27, 2023.
5. 真次 彰平 , 塩川 浩昭 , “ウェッジ分割を用いた大規模グラフの要約手法 ,” 電子情報通信学会論文誌 , Vol.J106-D, No.10, October 2023.
6. Savong Bou, Makoto Miwa, Yutaka Sasaki, “Two evaluations on Ontology-Style Relation annotations” , Computer Speech & Language, Vol. 84, 2023.
7. Sajal Debnath, Md. Manjur Ahmed, Samir Brahim Belhaouari, Toshiyuki Amagasa, Mostafijur Rahman, “Buffer-based adaptive fuzzy classifier,” Applied Intelligence, Vol. 53, No. 11, pp. 14448-14469, 2023.
8. Bohnishikha Halder, K. M. Azharul Hasan, Toshiyuki Amagasa, Md. Manjur Ahmed, “Autonomic active learning strategy using cluster-based ensemble classifier for concept drifts in imbalanced data stream,” Expert Systems, Vol. 231 No. 120578, 13 pages, 2023.
9. 山田 真也 , 北川 博之 , Salman Ahmed Shaikh, 天笠 俊之 , 的野 晃整 , “複合的ストリーム処理に対するトレーサビリティの研究” , 日本データベース学会 データドリブンスタディーズ , Vol. 2, Article No. 1, March 2023.

B）査読無し論文

該当なし

（2）国際会議発表

A）招待講演

該当なし

B）一般講演

＜査読付き国際会議論文＞

1. Savong Bou, Hiroyuki Kitagawa, Toshiyuki Amagasa, “CPiX: Real-Time Analytics over Out-of-Order Data Streams by Incremental Sliding-Window Aggregation” , Proc. 39th IEEE International Conference on Data Engineering (ICDE 2023), TKDE Poster Session Track, pp.3759-3760, Anaheim, California, USA, April 2023.
2. John Bosco Mugeni, Steve Lynden, Toshiyuki Amagasa and Akiyoshi Matono, “AdapterEM: Pre-trained Language Model Adaptation for Generalized Entity Matching using Adapter-tuning” , Proc. 27th International Database Engineering & Applications Symposium (IDEAS 2023), Heraklion, Crete, Greece, May 2023.
3. Shohei Matsugu, Yasuhiro Fujiwara, Hiroaki Shiokawa, “Uncovering the Largest Community in Social Networks at Scale” , Proc 32nd International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI2023), pp.2251-2260, Maco, China, August 2023.
4. Hailemariam Mehari Yohannes, Steven Lynden, Akiyoshi Matono, Toshiyuki Amagasa, “Self-Attention-based Data Augmentation Method for Text Classification” , Proc.15th International Conference on Machine Learning and Computing, September 2023.
5. Toshi-hiro Ito, Hiroaki Shiokawa, “An Effective Graph-based Music Recommendation Algorithm for Automatic Playlist Continuation” , Proc.2023 IEEE/ACM International Conference on Advances in Social Networks Analysis and Mining (ASONAM2023), pp.459-463, Marrakesh, Morocco, November 2023.
6. Kosuke Yamasaki, Toshiyuki Amagasa, “RDF Data Partitioning for Efficient SPARQL Query Processing with Spark SQL” , Proc. 25th International Conference on Information Integration and Web Intelligence (iiWAS2023), pp. 92-106, Bali, Indonesia, December 4-6, 2023.
7. Yuuki Ohmori, Hiroyuki Kitagawa, Toshiyuki Amagasa, Akiyoshi Matono, “Integration of Knowledge Bases and External Information Sources via Magic Properties and Query-driven Entity Linking” , Proc. 25th International Conference on Information

Integration and Web Intelligence (iiWAS2023), pp.309-324, Bali, Indonesia, December 4-6, 2023.

8. Ryuichi Yagi, Yuma Naoi, Hiroaki Shiokawa, “Fast Correlated DNA Subsequence Search via Graph-based Representation” , Proc. 25th International Conference on Information Integration and Web Intelligence (iiWAS2023), pp.339-347, Bali, Indonesia, December 4-6, 2023.
9. Shohei Matsugu, Hiroaki Shiokawa, “Efficient Maximum k-plex Search via Selective Branch-and-Bound,” The 25th International Conference on Information Integration and Web Intelligence (iiWAS2023), pp.348-357, Bali, Indonesia, December 4-6, 2023.
10. Yuma Naoi, Hiroaki Shiokawa, “Boosting Similar Compounds Searches via Correlated Subgraph Analysis” , Proc. 25th International Conference on Information Integration and Web Intelligence (iiWAS2023), pp. 464-477, Bali, Indonesia, December 4-6, 2023.
11. Yuma Yasuda, Hiroaki Shiokawa, “Efficient Similarity Searches for Multivariate Time Series: A Hash-based Approach” , Proc. 25th International Conference on Information Integration and Web Intelligence (iiWAS2023), pp.478-490, Bali, Indonesia, December 4-6, 2023.
12. Rina Trisminingsih, Salman Ahmed Shaikh, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, Akiyoshi Matono, “TraPM: A Framework for Online Pattern Matching over Trajectory Streams” , Proc.25th International Conference on Information Integration and Web Intelligence (iiWAS2023), pp. 510-525, Bali, Indonesia, December 4-6, 2023.
13. Shogo Sato, Tadashi Masuda, and Toshiyuki Amagasa, “Supporting Practical URI Mappings in Virtual Knowledge Graph-based Relational Data Integration,” The 2023 IEEE International Conference on Big Data (IEEE BigData 2023), pp.2958-2964, Sorrento, Italy, December 15th-18th 2023.
14. Md Abu Marjan and Toshiyuk AMAGASA, “CSER: Enhancing Cybersecurity Entity Recognition Through Multidimensional Feature Fusion” , The 2023 IEEE International Conference on Big Data (IEEE BigData 2023), pp.1214-1221, Sorrento, Italy, December 15th-18th 2023.
15. Savong Bou, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, Salman Ahmed Shaikh, Akiyoshi Matono, “Efficient Missing Value Imputation by Maximum Distance Likelihood” , The 2023 IEEE International Conference on Big Data (IEEE BigData 2023) , pp.331-338, Sorrento, Italy, December 15th-18th 2023.

（3）国内学会・研究会発表

A）招待講演

1. 北川 博之 , “深層学習を活用したヒト睡眠の自動解析” , 日本睡眠学会第 45 回定期学術集会・第 30 回日本時間生物学会学術大会 合同大会 , シンポジウム 8, JSSR-S8-3, 横浜 , 2023 年 9 月 .
2. 北川 博之 , “Database research: model-driven, data-driven, and beyond －データベース研究，あれから，これから－” , 第 16 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム（DEIM2024), 日本データベース学会功労賞受賞記念講演，2024 年 3 月 5 日 .

B）その他の発表

＜学会発表＞

1. 直井 悠馬 , 真次 彰平 , 塩川 浩昭 , “化合物グラフデータベースに対する高速・高精度な類似検索手法の提案” , 情報処理学会 研究報告データベースシステム（DBS), 2023-DBS-177(7), September 2023.
2. 八木 隆一 , 直井 悠馬 , 塩川 浩昭 , “大規模 DNA データベースに対する高速な相関問合せ手法の提案” , 情報処理学会 研究報告データベースシステム（DBS), 2023-DBS-177(9), September 2023.
3. 伊藤 寿浩 , 塩川 浩昭 , “プレイリストの自動継続機能に対するグラフに基づいた楽曲推薦アルゴリズムの提案” , 情報処理学会 研究報告データベースシステム（DBS), 2023-DBS-177(8), September 2023.
4. 津本紗希 , 川名ふさ江 , 堀江和正 , 正木みのり , 宮西和也 , 西田彗 , Jaehoon Seol, 富永杜絵 , 谷明洋 , 雨宮崇 , 樋江井哲郎 , 松原正樹 , 森嶋厚行 , 北川博之 , 柳沢正史 , “ChatGPT を用いた睡眠脳波検査データからの睡眠レポート自動生成に関する検討”, 日本睡眠学会第 45 回定期学術集会・第 30 回日本時間生物学会学術大会 合同大会 , 一般口演 , O6-002, 横浜 , 2023 年 9 月 .
5. 正木みのり , 津本紗希 , 谷明洋 , 富永杜絵 , 雨宮崇 , 樋江井哲郎 , Jaehoon Seol, 千葉滋 , 宮西和也 , 西田彗 , 川名ふさ江 , 堀江和正 , 神林崇 , 柳沢正史 , “睡眠遠隔医療をサポートする脳波 AI/IoT 技術の開発” , 日本睡眠学会第 45 回定期学術集会・第 30 回日本時間生物学会学術大会 合同大会 , ワークショップ 2, JSSR-W2-6, 横浜 , 2023 年 9 月 .
6. 伊藤 寿浩 , 塩川 浩昭 , “グラフデータベースにおける Worst-case Optimal Join の最適化” , 第 16 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 2024), T2-A-2-03, アクリエひめじ（兵庫県姫路市）, 2024 年 2 月 28 日 ~3 月 1 日（オンライン）, 2024 年 3 月 4 日 ~3 月 5 日（オンサイト）.
7. 山﨑 昂輔 , 天笠 俊之 , “ラベルの出現頻度に着目した FPGA を用いた正規パス問合せ

の提案”, 第 16 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 2024), T2-A-6-04, アクリエひめじ(兵庫県姫路市), 2024 年 2 月 28 日 ~3 月 1 日(オンライン), 2024 年 3 月 4 日 ~3 月 5 日（オンサイト）.

8. 大森 雄基, 北川 博之, 天笠 俊之, 的野 晃整, “ユーザ定義の述語とエンティティリンキングを利用した知識ベースと外部情報源の統合利用”, 第 16 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 2024), T2-A-8-03, アクリエひめじ（兵庫県姫路市）, 2024 年 2 月 28 日 ~3 月 1 日（オンライン）, 2024 年 3 月 4 日 ~3 月 5 日（オンサイト）.
9. 大宮 直樹, 堀江 和正, 北川 博之, “睡眠ステージ判定を対象としたエンコーダ・デコーダモデルによる脳波信号オーグメンテーション”, 第 16 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 2024), T5-A-5-01, アクリエひめじ（兵庫県姫路市), 2024 年 2 月 28 日 ~3 月 1 日（オンライン), 2024 年 3 月 4 日 ~3 月 5 日（オンサイト）.
10. 川畑 竜平, 堀江 和正, 北川 博之, “睡眠ステージ自動判定における睡眠時無呼吸症候群の重症度を踏まえた深層学習処理の切替機構の開発”, 第 16 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 2024), T5-A-5-02, アクリエひめじ（兵庫県姫路市）, 2024 年 2 月 28 日 ~3 月 1 日（オンライン）, 2024 年 3 月 4 日 ~3 月 5 日（オンサイト）.
11. 佐野 史弥, 国生 泰資, 堀江 和正, 古木 淳也, 鈴木 陽子, 阿部 高志, 北川 博之, “レム睡眠のリアルタイム自動検出に関する研究”, 第 16 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 2024), T5-A-6-02, アクリエひめじ（兵庫県姫路市), 2024 年 2 月 28 日 ~3 月 1 日(オンライン), 2024 年 3 月 4 日 ~3 月 5 日(オンサイト).
12. 国生 泰資, 堀江 和正, 鈴木 陽子, 阿部 高志, 北川 博之, “リアルタイム睡眠ステージ判定システムの開発と評価”, 第 16 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 2024), T5-A-6-03, アクリエひめじ（兵庫県姫路市）, 2024 年 2 月 28 日 ~3 月 1 日（オンライン）, 2024 年 3 月 4 日 ~3 月 5 日（オンサイト）.
13. 小倉 勇大, 天笠 俊之, “グラフ要約に基づく知識グラフ索引の提案”, 第 16 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 2024), T2-B-4-01, アクリエひめじ（兵庫県姫路市）, 2024 年 2 月 28 日 ~3 月 1 日（オンライン）, 2024 年 3 月 4 日 ~3 月 5 日（オンサイト）.
14. 直井 悠馬, 塩川 浩昭, 真次 彰平, “グラフ要約を用いた高速なグラフ相関問合せ”, 第 16 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 2024), T2-B-4-03, アクリエひめじ（兵庫県姫路市）, 2024 年 2 月 28 日 ~3 月 1 日（オンライン）, 2024 年 3 月 4 日 ~3 月 5 日（オンサイト）.
15. 八木 隆一, 直井 悠馬, 塩川 浩昭, “大規模 DNA データベースに対する Top-k 相

関問合せ手法の提案”, 第 16 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 2024), T2-B-5-04, アクリエひめじ（兵庫県姫路市）, 2024 年 2 月 28 日 ~3 月 1 日（オンライン）, 2024 年 3 月 4 日 ~3 月 5 日（オンサイト）.

16. 溝上 拓也, Bou Savong, 天笠 俊之, “テキスト及び構造に基づく効率的な類似部分木検索手法”, 第 16 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 2024), T2-B-5-05, アクリエひめじ（兵庫県姫路市）, 2024 年 2 月 28 日 ~3 月 1 日（オンライン）, 2024 年 3 月 4 日 ~3 月 5 日（オンサイト）.
17. 安田 裕真, 塩川 浩昭, “クエリ長に依存しない多次元時系列データに対する類似問合せ手法の提案”, 第 16 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 2024), T2-B-7-01, アクリエひめじ（兵庫県姫路市）, 2024 年 2 月 28 日 ~3 月 1 日（オンライン）, 2024 年 3 月 4 日 ~3 月 5 日（オンサイト）.
18. 川上 隼, Bou Savong, 天笠 俊之, “LSiX: ストリームデータに関する複数連続的集約”, 第 16 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 2024), T2-B-7-03, アクリエひめじ（兵庫県姫路市）, 2024 年 2 月 28 日 ~3 月 1 日（オンライン）, 2024 年 3 月 4 日 ~3 月 5 日（オンサイト）.
19. 牛尼 索造, 藤原 靖宏, 塩川 浩昭, “大規模データストリームに対する高速な S-FINCH クラスタリング”, 第 16 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 2024), T2-B-7-04, アクリエひめじ（兵庫県姫路市）, 2024 年 2 月 28 日 ~3 月 1 日（オンライン）, 2024 年 3 月 4 日 ~3 月 5 日（オンサイト）.
20. 松田 蒼唯, 早瀬 康裕, 天笠 俊之, “課題追跡システムにおける投稿された課題とその一連の返信を活用したコミットメッセージ生成”, 情報処理学会第 86 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2024), 神奈川大学 横浜キャンパス（神奈川県）, 1K-07, 2024 年 3 月 15 日 ~3 月 17 日 .
21. 溝上 拓也, 天笠 俊之, 橋本 武彦, “テキスト及び構造に基づいた類似部分木検索”, 情報処理学会第 86 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2024), 神奈川大学 横浜キャンパス (神奈川県）, 2M-06, 2024 年 3 月 15 日 ~3 月 17 日 .
22. 伊藤 寿浩, 塩川 浩昭, “プロパティグラフに対する DISTINCT 句を含む問合せ処理の高速化”, 情報処理学会第 86 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2024), 神奈川大学 横浜キャンパス（神奈川県）, 2M-07, 2024 年 3 月 15 日 ~3 月 17 日 .
23. 牛尼 索造, 藤原 靖宏, 塩川 浩昭, “空間索引を用いた S-FINCH の高速化”, 情報処理学会第 86 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2024), 神奈川大学 横浜キャンパス（神奈川県）, 2M-08, 2024 年 3 月 15 日 ~3 月 17 日 .
24. 川畑 竜平, 堀江 和正, 北川 博之, “睡眠ステージ自動判定における, 患者の年齢を踏まえた深層学習処理の切替機構の開発”, 情報処理学会第 86 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2024), 神奈川大学 横浜キャンパス（神奈川県）, 5ZJ-03, 2024 年 3 月 15 日

~3 月 17 日 .

25. 増田 颯天 , 塩川 浩昭 , 松井 勇佑 , “グラフ量子化による近似最近傍探索” , 情報処理学会第 86 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2024), 神奈川大学 横浜キャンパス（神奈川県）, 7K-04, 2024 年 3 月 15 日 ~3 月 17 日 .
26. 柴田 紘希 , 天笠 俊之 , 塩川 浩昭 , “多様性と近接性を考慮した反実仮想説明列挙手法” , 情報処理学会第 86 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2024), 神奈川大学 横浜キャンパス（神奈川県）, 7V-07, 2024 年 3 月 15 日 ~3 月 17 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.

– 計算メディカルサイエンス事業 睡眠ビッグデータ

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

– The 34th International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2023), Penang, Malaysia, August 28-30, 2023.（天笠・プログラム共同委員長）

9. 管理・運営

天笠俊之教授

学外

日本データベース学会理事

学内

筑波大学統合 IR 機構 副機構長

計算科学研究センター：ビッグデータ・AI 連携推進室長

計算科学研究センター：計算メディカルサイエンス推進事業部長

情報科学類：学生委員会委員長

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

天笠俊之教授

国際委員等

プログラム委員長：DEXA2022

プログラム委員：iiWAS2023, IDEAS2023, 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

情報処理学会論文誌データベース（TOD）共同編集委員長

塩川浩昭准教授

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, AAAI2021, 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、北原　格
助教	謝　　淳（2023.9 ～）
学生	大学院生 38 名、学類生 6 名

2. 概要

人間に纏わる情報を処理対象とする計算科学では、情報処理の空間表現と時間軸を人間に合わせることが必須である。そのために、グローバルに拡がる人間社会とそれを取り巻く環境とを対象として研究を進めている。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テーションの新しい枠組みを提案している。また、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 3D Surgical Vision の研究を率いている。

本年度は、学際領域として、福祉工学（視覚障害者支援）、スポーツ工学、Surgical vision を含む医療応用、その他新しい計算メディアに基づくユーザインタフェースの提案などを中心に、後の節に上げるような様々な研究成果を上げ、学会発表として社会に貢献することができた。これらの学会発表において、国際会議で 1 件、国内シンポジウムで 5 件の受賞を得られたことは、研究が評価されていることを示しているといえよう。

共同研究も前年度に引き続き多方面に広がりつつあり、今年度から謝淳助教が新たに Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL) とプロジェクト進行に関するヒューマンインタフェースデザインの研究議論を開始している。

産学連携に関しては、産業界に影響の大きい研究を産業界と共同研究していくよう活動中である。本年度は研究の黎明期として研究打ち合わせが主となる状況であった。

計算メディアをスポーツ界に展開していく取り組みは、以下の研究成果で挙げるように、研究レベルでは前年度よりさらに様々な分野で成果を得ることができた。これらの研究では当該スポーツでの一線の指導者と連携してインクルーシブデザインとなるよう留意している。また、本学体育系教員および本学ヒューマン・ハイ・パフォーマンス先端研究センター (ARIHHP) と連携しての研究展開が増えた。今後の課題としては、これらの成果を研究レベルからスポーツの場での実証などに繋げていくことが挙げられる。

3. 研究成果

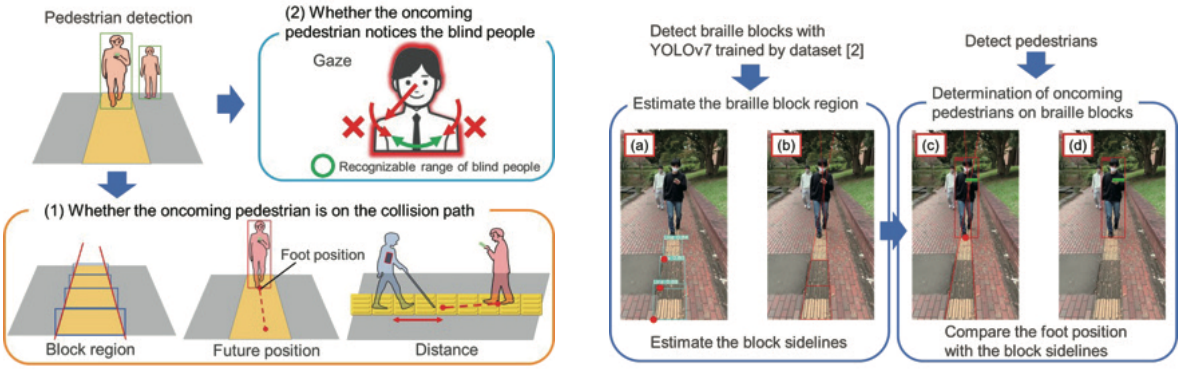
[1] 点字ブロック上での対向歩行者との衝突予測【亀田】

この研究の対象は、点字ブロックの上を歩く目の不自由な人々である。この研究は、点字ブロックの上を歩く視覚障害者を対象としている。スマートフォンを見ながら点字ブロック

を歩いている人がいる状況を想定している。視覚障害者はこのような対向歩行者と衝突する可能性がある。対向歩行者が視覚障害者に気づかない場合、衝突する可能性が高い。このような状況での衝突を予測する新しい方法について研究を進めた。

これまでに視覚障害者の安全な歩行支援を目的として、様々な障害物との衝突予測手法が提案されてきた。こうした手法では、衝突予測の対象は主に静止した障害物や運動を予測しやすい移動体であった。一方、対向歩行者は、衝突しうる直前まで相手の行動を観て行動を変える可能性がある。本研究での提案手法では、スマートフォン上のセンサを用いて衝突を予測する。衝突予測は四つの部分から構成される。その四つの部分とは点字ブロック上での対向歩行者の検出、距離推定、対向歩行者の歩行軌跡の予測、衝突予測判定である。

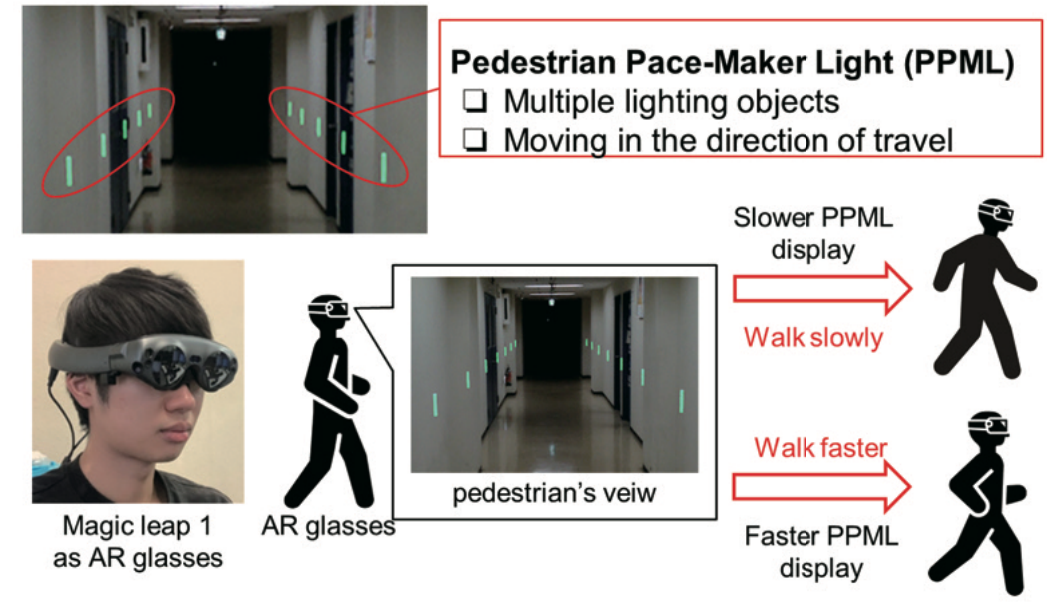
本研究成果を国際シンポジウム APMAR2023 で発表したところ、Best Paper Award を受賞した。

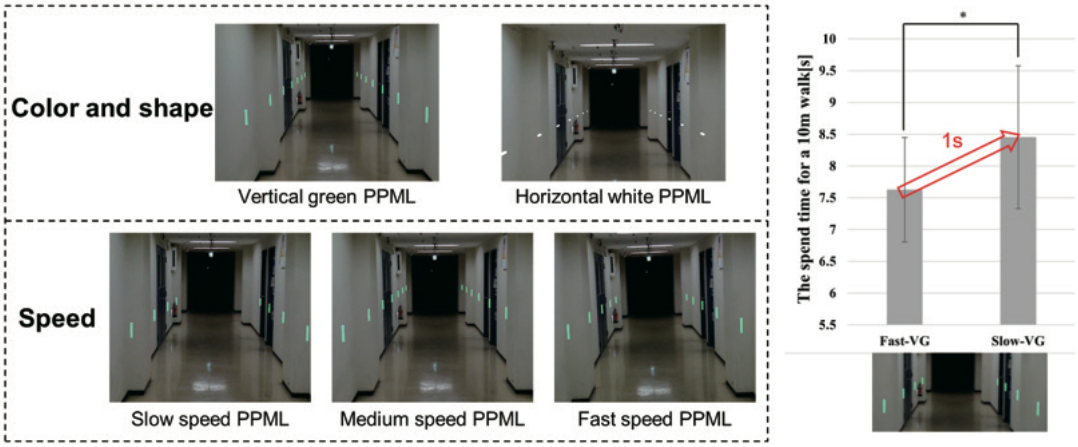


[2] 歩行者の歩行速度に影響を与える歩行者用ペースメーカーライト【亀田】

本研究では、視覚 AR を活用し、歩行者の歩行速度に影響を与える低注目度仮想物体を提示する手法を提案する。提案する低注目仮想物体を Pace-maker light（以下、PML）と呼ぶ。PML の利点は、視覚 AR を活用することで、歩行者の視界に PML が提示される状況において、歩行者が安全確保のために前方の視界を確保できることである。PML は、進行方向に流れる複数の仮想物体の集合である。PML は、歩行者に進行方向の自己運動感覚を知覚させるベクション効果を引き起こす。この自己運動感覚は PML の提示速度に依存し、PML の提示速度を調整することにより歩行速度に影響を与える。さらに、歩行者の視線中央領域には仮想物体を提示しない視線応答型 PML を提案し、歩行者の前方視界を常に確保することで、歩行時の安全性を向上させる。手法の検証として前方視認性の確保を考慮した PML と視線応答型 PML を用いて 3 回の実験を行った。実験により、PML は歩行速度に影響を与えることができることがわかった（図右下）。その結果、PML が提示されていても歩行者は前方視界を確保でき、周囲の状況を把握できていることがわかった。視線応答性 PML に対する注意度は低く、視線応答性 PML が提示されていても、PML が提示されている状態よりも前方視野

を明瞭に維持できることがわかった。本研究については国際シンポジウム APMAR2023 で成果を発表した。

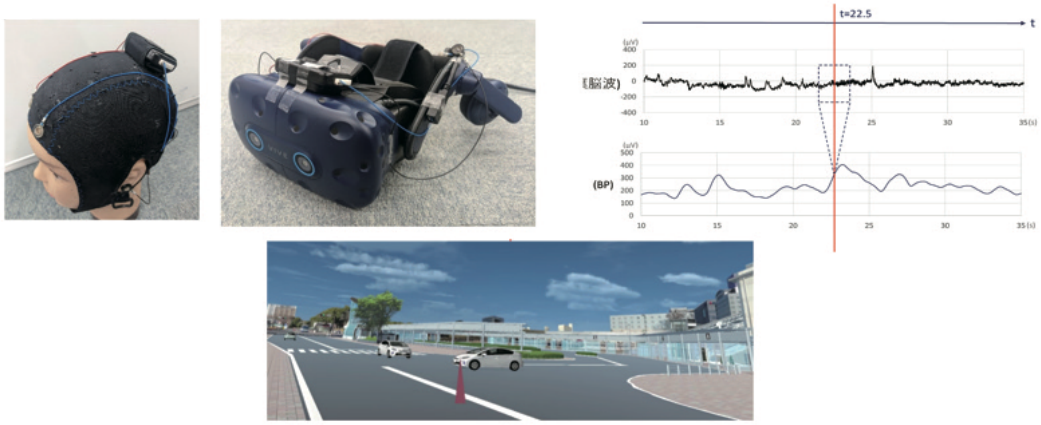




[3] VR 交通環境体験時の前頭部脳波β周波数帯域に着目した安心感の評価【亀田】

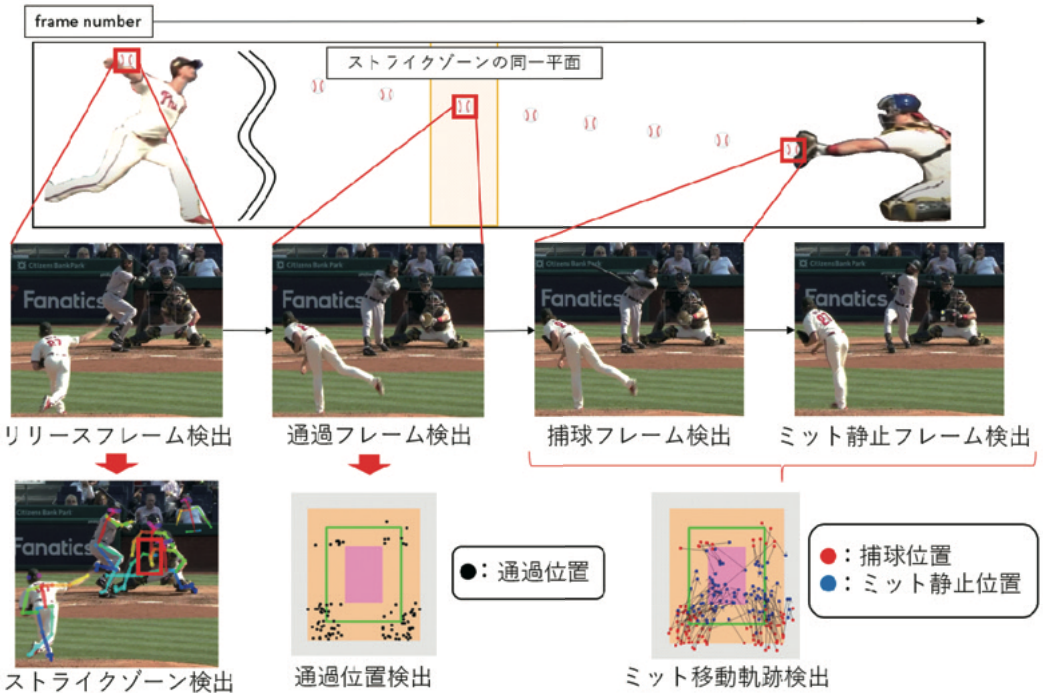
道路空間は歩行者にとって安全で安心して利用できるものでなければならない。本研究では、道路空間の動的変化に対する被験者の意識をリアルタイムに評価するため、前頭部脳波β周波数帯域パワー（BP）に着目する。BP を用いた安心感の評価手法を提案する。VR 交通環境体験時の前頭部脳波を計測し、道路状況の動的変化に対応するリアルタイム反応を解析・可視化するシステムを構築する。BP が主観的な安心感評価に関係するという仮説を立て、その検証のために注視実験と交通実験を行った。実験システムでは仮想空間中で走行する車両のどの部分を体験者が注視しているかどうかまで確認することができる（図下中の赤紫マーカーが注視点）。視線実験では、特定の物体を注視することで、閉眼リラックス状態に比べて BP が増加することが観察された。交通実験では、各交通環境の観察が閉眼リラックス状態に

比べて BP を増加させることが観察された。本研究成果については、2024 年 1 月の国際会議 IWAIT2024 において発表している。



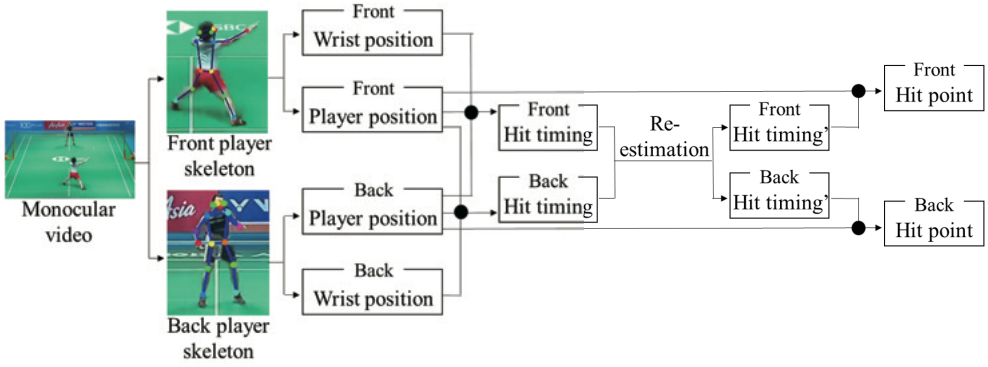
[4] 野球映像を用いた捕手のフレーミング技術におけるミット移動軌跡検出【北原】（計算スポーツ科学：筑波大 ARIHHP）

野球の捕手のフレーミング動作技術評価を目的として、キャッチャーミット移動軌跡を野球中継映像から自動推定する手法を提案している。打者の骨格情報に基づいたストライクゾーン推定と選手骨格の時系列データに基づく投球やミット静止のタイミング判別を組み合わせることにより、キャッチャーミットの移動軌跡を推定する。実証実験を通じて、提案手法によって戦術分析で求められる推定精度が実現されたことを確認している。本研究成果は、2024 年 1 月にマレーシア・ランカウイ島で開催された国際会議 IWAIT2024 において発表している。



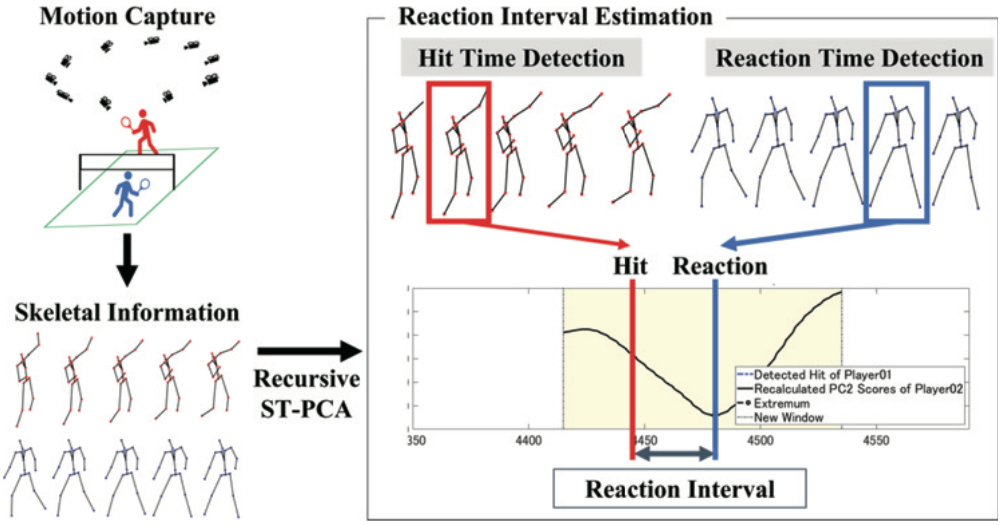
[5] バドミントン選手の移動軌跡と骨格情報に基づくショット情報の推定【北原】（計算スポーツ科学：筑波大 ARIHHP）

バドミントン選手の移動軌跡と骨格情報に基づくショット情報の推定手法を提案している。骨格情報から動作解析に有効な部位を選定し、その移動軌跡データから深層学習によるヒットタイミングおよび打点位置を推定している。実証実験を通じて、提案手法によってバドミントンの戦術分析で求められる推定精度が実現されたことを確認している。本研究成果は、2023 年 11 月にイタリア・ローマで開催された国際会議 icSPORTS2023 において発表している。



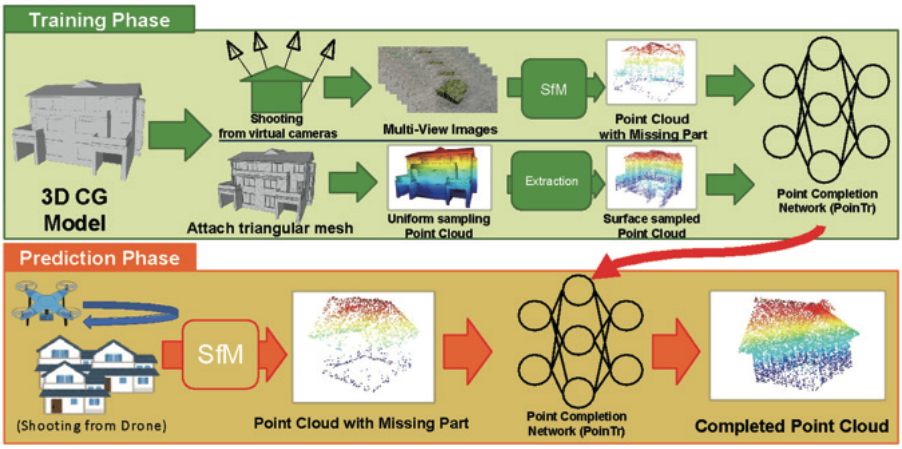
[6] 骨格情報の再帰的短時間主成分分析に基づくバドミントン選手の反応時間推定【北原】（計算スポーツ科学：筑波大 ARIHHP）

バドミントン競技中の選手の 3 次元骨格情報に対する再帰的短時間主成分分析を用いた反応時間推定手法を提案した。身体運動の粗密性を主成分毎に捉えることや、運動特徴の検出に適した探索時間窓を適応的に設定する手法を考案している。実証実験により提案手法によってヒット・反応時刻が検出可能なこと、提案手法で採用した再帰的短時間主成分分析が検出精度の向上に有効であることを確認している。本研究成果は、2023 年 11 月にイタリア・ローマで開催された国際会議 icSPORTS2023 において発表している。



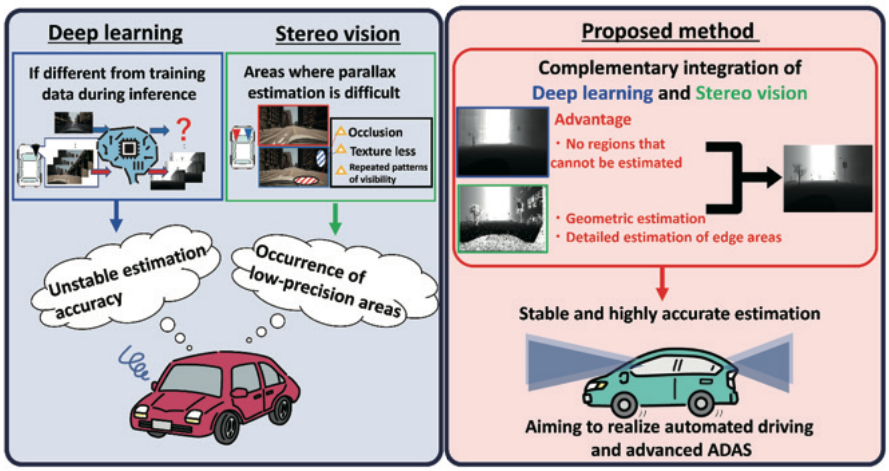
[7] Self-Attention 機構を用いた俯瞰撮影多視点映像から生成した３次元点群の補完【北原】（JST 共創の場：5D-MaaS 共創拠点）

空撮画像からの建物の三次元形状復元では上空からの観察が困難な領域の欠損が問題となる。本研究は自己注意機構に基づく三次元点群の補完法を提案している。建物の CG データを用いて学習した点群補完ネットワークをドローンで俯瞰撮影したデータに適用する実証実験を通じて、提案手法の有効性を確認している。本研究成果は、2023 年 7 月にアメリカ・パサデナで開催されたリモートセンシングに関する旗艦国際会議 IGARSS2023 において発表している。



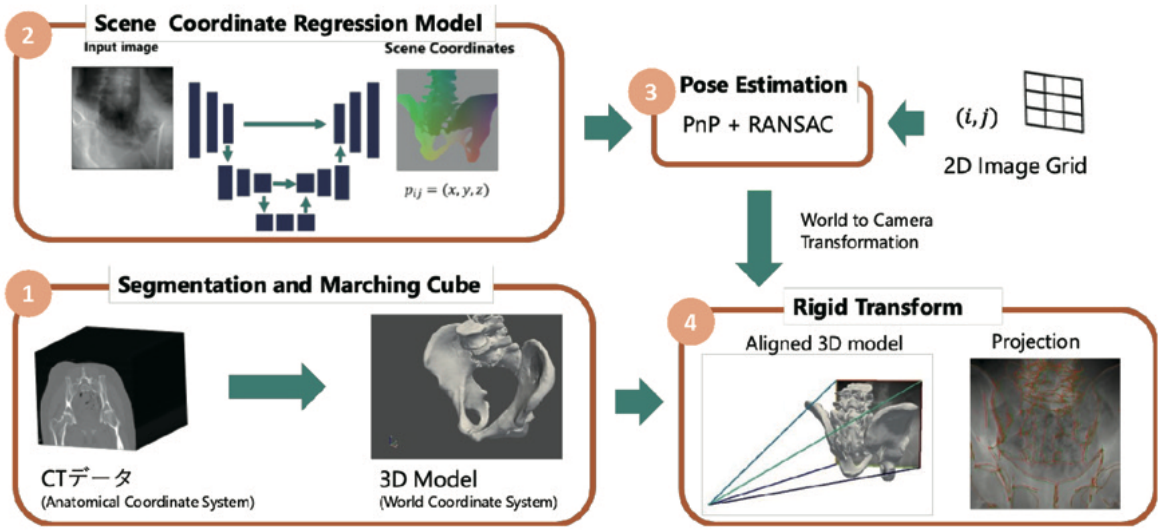
[8] 深層学習とステレオ視によって推定される奥行き情報の相補的統合【北原】（産学連携：日立製作所）

ステレオ視で推定した奥行き情報と深層学習によって単眼画像から推定した奥行き情報を、畳み込みオートエンコーダを用いて相補的に統合する手法を提案している。CG によって道路走行環境を構築し、そこで取得した車載ステレオ画像に基づいた定性・定量評価を通じて提案手法の有効性を検証した結果、深層学習とステレオ視による推定処理の特長を活かした奥行き情報の高精度化が実現されたことを確認している。本研究成果は、2024 年 1 月にマレーシア・ランカウイ島で開催された国際会議 IWAIT2024 において発表している。



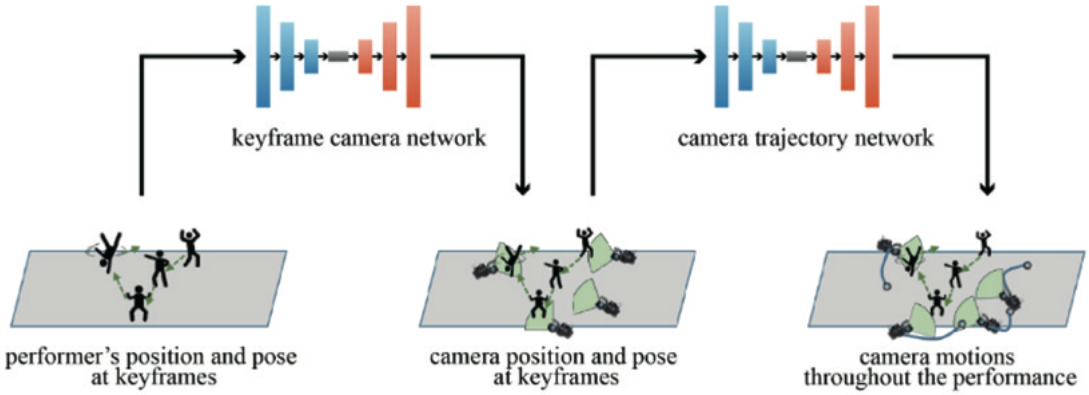
[9] X 線画像と３次元 CT モデルの位置合わせ【北原】（計算メディカルサイエンス：東京医科大）

手術中に撮影した X 線透視画像から深層学習を用いて被写体の 3 次元形状を推定し、推定形状と術前に撮影した 3 次元 CT モデルの重畳を介して、X 線透視画像と CT データの位置合わせを実現する手法を提案している。CG シミュレーションで生成した画像による学習結果を実写 X 線画像に適用する実証実験を実施することで、提案手法の有効性と汎用性を確認している。本研究成果は、2023 年 10 月にカナダ・バンクーバーで開催された医療画像に関する旗艦国際会議 MICCAI2023 において発表している。



[10] ライブ映像撮影におけるパフォーマー位置に基づいた自動カメラモーション生成【謝】

映画やドラマ制作とは異なり、ライブパフォーマンスでは撮影の機会が限られているため、カメラの動きを綿密に計画する必要がある。本研究で提案する方法は、ディープニューラルネットワークを用いてステージ上のパフォーマーの位置と向きに応じたカメラの位置と姿勢を学習し、再現することを目的としている。これにより、プロのカメラワークの暗黙知を模倣することができる。提案手法は二段階で展開される。最初に、ネットワークを用いてステージスクリプトに示されたパフォーマーの位置と向きに基づいてカメラの配置と姿勢を決定する。次に、第二のネットワークが、パフォーマンス中にパフォーマーの位置と向き、および最初のネットワークで決定されたカメラの配置と姿勢を考慮してライブカメラの動きを生成する。このネットワークのアーキテクチャには、入力データに相対位置表現を組み込むトランスフォーマーが含まれており、標準的なトランスフォーマーと比較してカメラの動きの特徴をより正確に学習できることを証明している。



4. 教育

1. 蛭田 雄也	博士 (人間情報学)	球面鏡と単眼カメラで構成される反射屈折撮像系における三次元シーン推定
2. ZHANG Haihan	博士 (人間情報学)	City-Scale 3D Scene Reconstruction by Using Collaborative Localization and Mapping between Aerial-Ground Views
3. 宇津呂 雄生	修士 (工学)	力士骨格表現に基づく相撲映像からの決まり手推定
4. 川田 洸希	修士 (工学)	歩行速度に影響を与えるペースメーカーライト
5. 坂井 甚太	修士 (工学)	時空間情報に基づく映像作品のカメラワーク推定
6. 島田 和輝	修士 (人間情報学)	車窓映像の透視投影変換による自動走行車両搭乗者の予備動作喚起法
7. 菅野 大和	修士 (工学)	野球競技における捕手の技術評価を目的としたフレーミング動作検出
8. 田中 直樹	修士 (工学)	バドミントン選手の移動軌跡と骨格情報に基づくショット情報の推定
9. 石井 智也	修士 (工学)	スマートフォンを利用した点字ブロック歩行時における対向歩行者との衝突予測
10. TAN Zichen	修士 (工学)	VR シミュレータによるバスケットボール選手の状況対応能力評価
11. 高橋 響熙	修士 (工学)	距離場と密度場を互恵的に制約するニューラル場表現を用いた単眼 SLAM
12. 長田 健宏	修士 (工学)	Estimation of Particle Wipe Ratio for Cleaning Processes in Semiconductor Manufacturing Using Deep Learnng and 3D Body Tracking
13. 村田 実広	修士 (工学)	深層学習とステレオ視によって推定される奥行き情報の相補的統合

14. 新里 優太	修士 (工学)	陸上トラック競技映像から獲得した選手骨格情報に基づくピッチ・ストライド推定
15. 藤原 円央	修士 (工学)	卓球競技映像における打法認識のための身体動作に基づく特徴量の獲得
16. TIAN Runyu	修士 (工学)	RGB-D 画像に基づく二人の協調行動認識
17. 黒田 堅仁	学士 (工学)	サッカー試合映像からの多重性のある戦術的行動の認識への取り組み
18. 宍戸 海	学士 (工学)	視点取得可能な実写映像に基づく没入型テレコミュニケーション方式
19. 島津 彩香	学士 (工学)	疑似二視点撮影映像からの人体骨格推定法
20. 渡邉 蒼真	学士 (工学)	ボクシング試合映像における骨格推定を用いたパンチ自動分類

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. Best Full Paper Award at The 15th Asia-Pacific Workshop on Mixed and Augmented Reality (APMAR2023), Tomoya Ishii, Hidehiko Shishido, and Yoshinari Kameda, “Collision Prediction with Oncoming Pedestrians on Braille Blocks”, 2023/8.
2. MVE 賞, 佐川 加奈, 宍戸 英彦, 吹田 真士, 北原 格, “骨格情報の再帰的短時間主成分分析に基づくバドミントン選手の反応時間推定法”, 2023/10.
3. MVE 賞, 宇津呂 雄生, 宍戸 英彦, 亀田 能成, “相撲映像からの骨格推定に基づく決まり手分類”, 2023/10.
4. CVIM 研究会奨励賞, 菅野 大和, 謝 淳, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, “投球映像から取得したミット移動軌跡に基づく捕手のフレーミング技術判定手法”, 2023/11.
5. CGVI 優秀研究発表賞, 蛭田 雄也, 謝 淳, 小田原 豊, 松尾 敬太, 川村 洋平, 北原 格, “全方位カメラと球面鏡で構成された反射屈折撮像系による推進管の 3 次元形状推定手法”, 2023/11.
6. ヒューマンコミュニケーショングループ（HCG）シンポジウム 2023 特集テーマセッション賞, 寺内 翔英, 亀田 能成 “単一カメラによる白杖歩行者の三次元姿勢推定”, 2023/12.

外部資金

1. 科研費・基盤 (B)「生体と行動の計測に基づく VR 体験の主観評価安定化」(2021-2024 年度) 代表者：亀田能成 全年度直接経費：960 万円（2023 年度直接経費：220 万円）
2. 科研費・挑戦的研究 (萌芽)「道具を使う人間行動に対する拡張骨格構造を用いた計

測と識別」(2022-2024 年度) 代表者：亀田能成 全年度直接経費：500 万円（2023 年度直接経費：150 万円）

3. 科研費・基盤 (B)「XR 自動走行プラットフォームを用いた搭乗者の快適性を向上する移動感覚制御」(2021-2023 年度) 代表者：神原誠之 (研究分担者：北原) 全年度直接経費：1240 万円（2023 年度直接経費：320 万円、分担 100 万円）
4. 科研費・基盤 (B)「情報化施工および情報化防災を加速する AI 岩盤・土壌自動評価システムの構築」(2022-2025 年度) 代表者：川村洋平 (研究分担者：北原) 全年度直接経費：1180 万円（2023 年度直接経費：280 万円、分担 80 万円）
5. 科研費・基盤 (C)「多視点カメラの AI 制御による開腹手術ナビゲーションシステム開発」(2022-2024 年度) 代表者：橋本真治 (研究分担者：北原）全年度直接経費：3100 万円（2023 年度直接経費：300 万円、分担 10 万円）
6. 科研費・国際共同研究強化 (B)「Mining4.0 時代における効率的な発破のためのデジタルツイン技術の共創」(2021-2024 年度) 代表者 : 川村洋平 (研究分担者 : 北原、謝）全年度直接経費：1460 万円（2023 年度直接経費：380 万円、分担 125 万円）
7. 科研費・挑戦的研究 (開拓)「道路路面の地盤変状の状態量から末梢系埋設管路の地震損傷を推定するアルゴリズム開発」(2022-2024 年度) 代表者 : 庄司学 (研究分担者 : 北原）全年度直接経費：1930 万円（2023 年度直接経費：610 万円、分担 80 万円）
8. 科研費・基盤 (A)「文化遺産アセットの効率的利活用を目指したミュージアム DX 技術の開発」(2023-2027 年度) 代表者：和田浩 (研究分担者：北原) 全年度直接経費：3560 万円（2023 年度直接経費：1120 万円、分担 70 万円）
9. 科研費・基盤 (B)「発達障害児の親のための VR 技術を活用したインターネットペアレントトレーニングの開発」(2023-2027 年度) 代表者 : 井上雅彦 (研究分担者 : 北原) 全年度直接経費：1080 万円（2023 年度直接経費：290 万円、分担 50 万円）
10. 科研費・基盤 (C)「移動式 X 線透視装置のための複合モダリティフュージョン技術の開発」(2023-2025 年度) 代表者 : 吉井雄一 (研究分担者 : 北原、謝) 全年度直接経費 : 360 万円（2023 年度直接経費：220 万円、分担 50 万円）
11. 科研費・基盤 (C)「フィジカルデータベース開発と実践を通じたコーチングシステムの構築」(2023-2025 年度) 代表者：谷川聡 (研究分担者：北原) 全年度直接経費：340 万円（2023 年度直接経費：160 万円、分担 5 万円）
12. 科研費・若手研究「拡張現実感を用いた空間認識力補完による腹腔鏡下手術支援方式」(2023-2024 年度) 代表者 : 謝淳 全年度直接経費 : 360 万円（2023 年度直接経費 : 180 万円）
13. JST SATREPS「地中熱利用による脱炭素型熱エネルギー供給システムの構築」代表者 : 稲垣文昭（研究分担者 : 北原、謝）全年度 : 17980 万円（2023 年度分担 475 万円）
14. スポーツ庁受託事業「先端的スポーツ医科学研究推進事業」代表者：髙橋英幸 (研

究分担者：北原、謝）全年度：25000 万円（2023 年度分担 460 万円）

15. 学術指導・株式会社日立製作所 代表者：北原格 2023 年度 100 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. Daichi Kitaguchi, Koichiro Kumano, Ryotaro Takatsuki, Chun Xie, Shinji Hashimoto, Yoshimasa Akashi, Itaru Kitahara, and Tatsuya Oda, “Free-Viewpoint Video in Open Surgery: Development of Surgical Arena 360” , Journal of Surgical Education, vol.81, no.3, pp. 326-329, 2024/1/26. (DOI: 10.1016/j.jsurg.2023.12.003)
2. Hajime Ikeda, Taiga Sato, Kohei Yoshino, Hisatoshi Toriya, Hyongdoo Jang, Tsuyoshi Adachi, Itaru Kitahara, and Youhei Kawamura, “Deep Learning-Based Estimation of Muckpile Fragmentation Using Simulated 3D Point Cloud Data” , Applied Sciences, vol.13, no.19, 19 pages, 2023/10/5. (DOI: 10.3390/app131910985)
3. Zhang Haihan, Chun Xie, Hisatosi Toriya, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, “Vehicle Localization in a Completed City-Scale 3D Scene Using Aerial Images and an On-Board Stereo Camera”, Remote Sensing, vol.5, no.15, 20 pages, 2023/8/4. (DOI: 10.3390/rs15153871)
4. 宍戸 英彦 , 吹田 真士 , 西島 壮 , 進矢 正宏 , 北原 格 , “マーカレス 3 次元動作分析システムを用いたバドミントン試合映像のストローク分析：競技レベルが異なる選手のスマッシュ動作の比較” , 日本バドミントン学会誌バドミントン研究 , e113-e121, 2023 年 8 月.
5. Yuya Hiruta, Chun Xie, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, “A 3D Estimation Method Using an Omnidirectional Camera and a Spherical Mirror” , Applied Sciences, vol.13, no.14, 17 pages, 2023/7/19.

B）査読無し論文

該当なし

（2）国際会議発表

A）招待講演

1. Itaru Kitahara, “Novel Viewpoint Synthesis in a Large-Scale Space for Live Free

Viewpoint Sports Broadcast" ,The 23rd International Conference on Electronics, Information, and Communication (ICEIC2024), 2024/1, Taipei, Taiwan.

B) 一般講演

1. Pragyan Shrestha, Chun Xie, Hidehiko Shishido, Yuichi Yoshii, and Itaru Kitahara, "2D-3D Registration Method for X-Ray Image Using 3D Reconstruction Based on Deep Neural Network" , The 8th IIEEJ International Conference on Image Electronics and Visual Computing (IEVC 2024), 4 pages, 2024/3, Tainan City, Taiwan.
2. Takehiro Nagata, Li-Wei Cheng, Chun Xie, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, "Estimating Wiped Rate of Cleaning Process in Semiconductor Manufacturing Using DNN and 3D Body Tracking" , The 8th IIEEJ International Conference on Image Electronics and Visual Computing (IEVC 2024), 4 pages, 2024/3, Tainan City, Taiwan.
3. Yuki Utsuro, Hidehiko Shishido, and Yoshinari Kameda, "Sumo Action Classification Using Mawashi Keypoints" , The 19th International Conference on Computer Vision Theory and Applications (VISAPP2024), vol.2, pp. 401-409, 2024/2, Rome, Italy.
4. Ryotaro Takatsuki, Chun Xie, Koichiro Kumano, Daichi Kitaguchi, Shinji Hashimoto, Tatsuya Oda, and Itaru Kitahara, "Construction of Multi-View Capturing System for Laparotomy" , The 23rd International Conference on Electronics, Information, and Communication (ICEIC 2024), 4 pages, 2024/1, Taipei, Taiwan.
5. Sho Ohnishi, Hidehiko Shishido, and Yoshinari Kameda, "Evaluation of the Sense of Security by Focusing on Frontal Eeg Beta Frequency Band on Experiencing VR Traffic Environment" , International Workshop on Advanced Image Technology (IWAIT) 2024, 6 pages, 2024/1, Langkawi, Malaysia. (DOI: 10.1117/12.3019052)
6. Yamato Kanno, Itaru Kitahara, Hidehiko Shishido, Yoshinari Kameda, and Chun Xie, "Estimation of Mitt Movement Trajectory in Catcher Framing from Baseball Video" , International Workshop on Advanced Image Technology (IWAIT) 2024, 6 pages, 2024/1, Langkawi, Malaysia. (DOI: 10.1117/12.3018717)
7. Mitsuhiro Murata, Chun Xie, Hidehiko Shishido, Takeshi Endo, and Itaru Kitahara, "Complementary Depth Integration Using Convolutional Autoencoder" , International Workshop on Advanced Image Technology (IWAIT) 2024, 6 pages, 2024/1, Langkawi, Malaysia. (DOI:10.1117/12.3018718)
8. Jinta Sakai, Chun Xie, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, "Camera Work Estimation from a Monocular Video Based on Optical Flow" , International Workshop on Advanced Image Technology (IWAIT) 2024, 6 pages, 2024/1, Langkawi, Malaysia. (DOI: 10.1117/12.3018893)

9. Yuya Hiruta, Chun Xie, Yutaka Odawara, Keita Matsuo, Yohei Kawamura, and Itaru Kitahara, “3D Reconstruction for Pipe-Shaped Object Using an Omnidirectional Camera and a Spherical Mirror” , International Workshop on Advanced Image Technology (IWAIT) 2024, 6 pages, 2024/1, Langkawi, Malaysia. (DOI: 10.1117/12.3018241)
10. Kana Sagawa, Hidehiko Shishido, Masashi Suita, and Itaru Kitahara, “Reaction Time Estimation Based on Recursive Short-Term Principal Component Analysis for Skeletal Information of Badminton Players” , 11th International Conference on Sport Sciences Research and Technology Support (icSPORTS2023), pp.15-22, 2023/11, Rome, Italy.
11. Naoki Tanaka, Hidehiko Shishido, Masashi Suita, Takeshi Nishijima, Yoshinari Kameda, and Itaru Kitahara, “Detection of Shot Information Using Footwork Trajectory and Skeletal Information of Badminton Players” , 11th International Conference on Sport Sciences Research and Technology Support (icSPORTS2023), pp.112-119, 2023/11, Rome, Italy.
12. Chun Xie, Isao Hemmi, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, “Camera Motion Generation Method Based on Performer’ s Position for Performance Filming” , 2023 IEEE 12th Global Conference on Consumer Electronics (GCCE 2023), pp.961-964, 2023/10, Nara and online, Japan. (DOI: 10.1109/GCCE59613.2023.10315539)
13. Pragyan Shrestha, Chun Xie, Hidehiko Shishido, Yuichi Yoshii, and Itaru Kitahara, “X-Ray to CT Rigid Registration Using Scene Coordinate Regression” , The 26th International Conference on Medical Image Computing and Computer Assisted Intervention (MICCAI 2023), pp.781-790, 2023/10, Vancouver, Canada. (DOI:10.1007/978-3-031-43999-5_74)
14. Hiroki Kawada, Hidehiko Shishido, and Yoshinari Kameda, “Pedestrian Pace-Maker Light of Affecting Walking Speed” , The 15th Asia-Pacific Workshop on Mixed and Augmented Reality (APMAR2023), 8 pages, 2023/8, Taipei and online, Taiwan.
15. Tomoya Ishii, Hidehiko Shishido, and Yoshinari Kameda, “Collision Prediction with Oncoming Pedestrians on Braille Blocks” , The 15th Asia-Pacific Workshop on Mixed and Augmented Reality (APMAR2023), 8 pages, 2023/8, Taipei and online, Taiwan.
16. Yuto Tayama and Yoshinari Kameda, “EEG Analysis for Surprise in VR Traffic Environment” , The 15th Asia-Pacific Workshop on Mixed and Augmented Reality (APMAR2023), 7 pages, 2023/8, Taipei and online, Taiwan.
17. Takenobu Kiyama, Chun Xie, Hidehiko Shishido, Itaru Kitahara, and Hisatoshi Toriya, “A Method for Completing Missing 3D Point Cloud Reconstructed from Aerial Multi-View Images Using Self-Attention Mechanism” , The 43rd International

Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS2023), pp.927-930, 2023/7, Pasadena, USA.

（3）国内学会・研究会発表

A）招待講演

1. Itsuki Ueda, Yoshihiro Hukuhara, Hirokatsu Kataoka, Hiroaki Aizawa, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, “NeDDF: Neural Density-Distance Fields [eccv 2022], “The 26th Meeting on Image Recognition and Understanding (MIRU2023), 2023/7, Hamamatsu and online, Japan.

B）その他の発表

1. 宇津呂 雄生 , 宍戸 英彦 , 亀田 能成 , “力士骨格の時系列表現に基づく決まり手分類”, 電子情報通信学会　技術研究報告 MVE, vol.123, no.433, pp. 229-234, 2024/3, 那覇 .
2. 渡邉 蒼真 , 亀田 能成 , “ボクシング試合映像における骨格推定を用いたパンチ自動分類”, 電子情報通信学会　技術研究報告 MVE, vol.123, no.433, pp. 224-228, 2024/3, 那覇 .
3. タン コウシン , 仲澤 翔大 , 吉田 健司 , 亀田 能成 , “ＶＲシミュレータによるバスケットボール選手の状況対応能力評価”, 電子情報通信学会　技術研究報告 MVE, vol.123, no.433, pp. 63-68, 2024/3, 那覇 .
4. 新里 優太 , 謝 淳 , 宍戸 英彦 , “陸上トラック競技映像から獲得した選手骨格情報に基づくピッチ・ストライド推定手法”, 電子情報通信学会　技術研究報告 MVE, vol.123, no.433, pp. 214-219, 2024/3, 那覇 .
5. 金 侑輝 , 謝 淳 , 宍戸 英彦 , 北原 格 , “サッカー選手の位置情報に基づくスペース推定およびプレー評価法の検討”, 電子情報通信学会　技術研究報告 MVE, vol.123, no.433, pp. 51-56, 2024/3, 那覇 .
6. 宍戸 海 , 謝 淳 , 井上 雅彦 , 北原 格 , “相手視点を取得可能な実写ベースの没入型テレコミュニケーション方式”, 電子情報通信学会　技術研究報告 MVE, vol.123, no.433, pp. 344-349, 2024/3, 那覇 .
7. 島津 彩香 , 謝 淳 , 谷川 聡 , 北原 格 , “疑似的に撮影した二視点映像からの人体骨格推定法”, 電子情報通信学会　技術研究報告 MVE, vol.123, no.433, pp. 35-40, 2024/3, 那覇 .
8. 田中 直樹 , 宍戸 英彦 , 吹田 真士 , 西島 壮 , 亀田 能成 , 北原 格 , “バドミントン選手の移動軌跡と骨格情報に基づくショット情報推定”, 日本バーチャルリアリティ学会第 72 回複合現実実感研究会 , 6 pages, 2024/1, 東京 .
9. 高橋 響熙 , 上田 樹 , 謝 淳 , 北原 格 , “NeDDF を用いた煙霧環境に適用可能なニュー

ラル場単眼 Visual SLAM”，日本バーチャルリアリティ学会第 72 回複合現実実感研究会 , 6 pages, 2024/1，東京 .

10. 藤原 円央 , 謝 淳 , 宍戸 英彦 , 亀田 能成 , 北原 格 , “卓球競技映像における深層学習を用いた打法認識の検討”，第 236 回コンピュータビジョンとイメージメディア（CVIM）研究会 , 8 pages, 2024/1，東京 .
11. 羽賀 勇人 , 亀田 能成 , “試合映像からの骨格推定に基づく柔道の技分類への取り組み”，ヒューマンコミュニケーショングループ (HCG) シンポジウム 2023, 4 pages, 2023/12，福岡とオンライン .
12. 寺内 翔英 , 亀田 能成 , “単一カメラによる白杖歩行者の三次元姿勢推定”，ヒューマンコミュニケーショングループ（HCG）シンポジウム 2023, 6 pages, 2023/12，福岡とオンライン .
13. 白茂 宇宙 , 亀田 能成 , “自転車部品と運転者の体との関係に基づく自転車運転者の行動分類の検討”，ヒューマンコミュニケーショングループ（HCG）シンポジウム 2023, 6 pages, 2023/12，福岡とオンライン .
14. 黒田 堅仁 , 内田 郁真 , 亀田 能成 , “サッカー試合映像からの多重性のある戦術的行動の認識への取り組み”，ヒューマンコミュニケーショングループ（HCG）シンポジウム 2023, 5 pages, 2023/12，福岡とオンライン .
15. 遠藤 雅也 , 亀田 能成 , “サッカーにおける拡張骨格を用いたドリブル評価の取り組み”，ヒューマンコミュニケーショングループ（HCG）シンポジウム 2023, 4 pages, 2023/12，福岡とオンライン .
16. 石井 智也 , 宍戸 英彦 , 亀田 能成 , “点字ブロック歩行時における対向歩行者との距離推定手法の検討”，ヒューマンコミュニケーショングループ（HCG）シンポジウム 2023, 6 pages, 2023/12, 福岡とオンライン .
17. 菅野 大和 , 謝 淳 , 宍戸 英彦 , 亀田 能成 , 北原 格 , “投球映像から取得したミット移動軌跡に基づく捕手のフレーミング技術判定手法”，情報処理学会研究報告 CVIM, vol.2023-CVIM-235, no.15, pp.1-6, 2023/11，鳥取 .
18. 蛭田 雄也 , 謝 淳 , 小田原 豊 , 松尾 敬太 , 川村 洋平 , 北原 格 , “全方位カメラと球面鏡で構成された反射屈折撮像系による推進管の 3 次元形状推定手法”，情報処理学会研究報告 CVIM, vol.2023-CVIM-235, no.12, pp.1-8, 2023/11，鳥取 .
19. 坂井 甚太 , 謝 淳 , 宍戸 英彦 , 北原 格 , “オプティカルフローに基づく単眼映像からのカメラワーク推定方法”，電子情報通信学会　技術研究報告 MVE, vol.123, no.228, pp. 52-57, 2023/10，室蘭.
20. 村田 実広 , 謝 淳 , 宍戸 英彦 , 遠藤 健 , 北原 格 , “Convolutional AutoEncoder を用いた深層学習とステレオ視の相補的統合による奥行き推定手法”，電子情報通信学会技術研究報告 MVE, vol.123, no.228, pp. 28-33, 2023/ 10，室蘭.

21. 島田 和輝 , 澤邊 大志 , 神原 誠之 , 北原 格 , “車窓映像の視点と画角の調整によって誘起されるベクション操作に関する検討”, 電子情報通信学会 技術研究報告 CNR, pp.1-6, 2023/8, 札幌とオンライン .
22. 遠藤 健 , 的野 春樹 , 北原 格 , “対象領域外の深度情報を利用した単眼カメラによる深度推定”, 第 26 回画像の認識・理解シンポジウム（MIRU2023）, 5 pages, 2023/7, 浜松とオンライン.
23. 髙橋 響熙 , 上田 樹 , 北原 格 , “距離場と密度場を互恵的に制約するニューラル場表現 NeDDF を用いた単眼 Visual SLAM”, 第 26 回画像の認識・理解シンポジウム（MIRU2023）, 5 pages, 2023/7, 浜松とオンライン.
24. 蛭田 雄也 , 謝 淳 , 宍戸 英彦 , 北原 格 , “全方位カメラと球面鏡で構成された反射屈折撮像系における 3 次元推定手法”, 第 26 回画像の認識・理解シンポジウム（MIRU2023）, 5 pages, 2023/7, 浜松とオンライン.
25. Itsuki Ueda, Naoya Chiba, Hirokatsu Kataoka, Hiroaki Aizawa, and Itaaru Kitahara, “Fast Learning of Reciprocally Constrained Fields for Density and Distance”, The 26th Meeting on Image Recognition and Understanding (MIRU2023), 5 pages, 2023/7, Hamamatsu and online, Japan.
26. スコット アトム , 内田 郁真 , 丁 寧 , 梅基 陸平 , Bunker Rory, 小林 蓮 , 小山 孟志 , 大西 正輝 , 亀田 能成 , 藤井 慶輔 , “複数スポーツの多物体追跡データセットの構築と競技間における汎用性の検証”, 2023 年度人工知能学会全国大会（第 37 回）, 4 pages, 2023/6, 熊本とオンライン .
27. 内田 郁真 , スコット アトム , 大西 正輝 , 藤井 慶輔 , 亀田 能成 , “深層学習による高速かつラベルフリーなサッカーシーン検索”, 2023 年度人工知能学会全国大会（第 37 回）, 3 pages, 2023/6, 熊本とオンライン .
28. 高月 崚太郎 , 謝 淳 , 熊野 皓一郎 , 北口 大地 , 橋本 真治 , 小田 竜也 , 北原 格 , “開腹手術を対象とした多視点撮影システムの構築”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MI, 6 pages, 2023/5, 名古屋.

（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）

1. スポーツ庁受託事業「先端的スポーツ医科学研究推進事業」（グループリーダー:北原、担当研究者：謝）
   先端的なスポーツ医・科学研究の推進と研究で得られた知見の実践活用を目的とし

て、筑波大学ヒューマン・ハイ・パフォーマンス先端研究センター（ARIHHP）が取り組む表記事業に、「マルチモーダル計測と深層学習（AI）を用いたパフォーマンス分析・フィードバック方法の開発」グループとして参画している。具体的には、①マルチモーダル・パフォーマンスビックデータの構築、②映像情報からのマルチモーダルデータ推定、③トップパフォーマンス下での戦術分析、④アスリートや指導者へのフィールドバックインタフェースの開発に取り組んでいる。今年度はバドミントンと野球を対象として、①および②の研究開発に取り組み、映像情報では直接的な観測が難しいシャトルヒット情報や試合展開、投球捕捉技術の検出・評価法を実現した。

産学官連携

1. 産学連携：日立製作所　学術指導（代表：北原）

ステレオ視による奥行き情報と単眼画像から深層学習で推定した奥行き情報を、畳み込みオートエンコーダを用いて、相補的に統合する手法を日立製作所と共同で考案した。筑波大学では、深層学習に耐えうる質と量を備えた道路走行映像データセットの作成、深層学習フレームワークの構築、定性・定量評価による提案手法の有効性の検証を担当した。撮影した範囲よりも広範囲の奥行き情報が推定できること、撮影条件の変化への頑健性が向上することと言った本技術の特性は、次世代車載センシングへの貢献が期待できるものである。

国際連携・国際活動

1. JST SATREPS「地中熱利用による脱炭素型熱エネルギー供給システムの構築」（グループリーダー：北原、担当研究者：謝）

タジキスタンの豊富な地下水資源に着目し、先端的 ICT による「先進乾燥地帯対応型地中熱ヒートポンプシステム（タジキスタンモデル）」の実現に向けたプロジェクトに、AI・VR 技術を用いたデモプラントの遠隔運用支援グループとして参画している。具体的には、現地（タジキスタン・ドゥシャンベ）の科学技術アカデミーに建設中のデモプラントのデジタルツイン構築、AR を用いた遠隔指示インタフェースに関する研究開発に取り組んでいる。

参考：https://www.akita-u.ac.jp/shigen/itag-satreps/ja/#outline

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 委員

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

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　委員長
映像情報メディア学会スポーツ情報処理研究会 (SIP) 幹事

11. その他

亀田 能成
人工知能科学センターでも研究に従事（プロジェクト研究部門モビリティ分野)。

北原 格
筑波大学サイバニクス研究センターでも研究に従事。