Center for Computational Sciences, University of Tsukuba Annual Report FY2022

놂

筑波大学計算科学研究センター 令和4年度年次報告書



_{筑波大学} **計算科学研究センター** Center for Computational Sciences

NEC

6

SiSPO

目次

まえがき	2
1 センター組織と構成員	4
2 令和四年度の活動状況	
2.1 計算科学研究センターの次のステップに向けて	8
2.2 令和五年度の活動方針	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	
2.6 今後のあり方	
3 各研究部門の報告	
I. 素粒子物理研究部門	
Ⅱ.宇宙物理研究部門	
III. 原子核物理研究部門	75
Ⅳ. 量子物性研究部門	
Ⅴ. 生命科学研究部門	111
Ⅴ-1. 生命機能情報分野	111
Ⅴ-2. 分子進化分野	136
Ⅵ. 地球環境研究部門	151
VII. 高性能計算システム研究部門	171
VIII. 計算情報学研究部門	208
VIII-1. データ基盤分野	208
VIII-2. 計算情報学研究部門	

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。2022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 の影響も徐々に収まり, 国際会議等も対面を含むハイブリッド形式に移行し 始めました。本センターでは COVID-19 当初の 2020 年から全ての教員に Zoom ライセンスを 与え、インターネットを最大限に生かした研究及び交流の継続を図って来ましたが、2022年 度中頃からは海外渡航・海外からの研究者の招聘も復活し始めました。

センターでは、科学諸分野と計算機科学分野の協働・融合を軸とした「学際計算科学」を 推進し、超高速計算機システム技術の開発を行うと共に、科学の諸領域における超高速シミ ュレーションおよび大規模データ解析や情報技術の革新的な応用方法の研究を行う、コ・デ ザインと呼ばれる研究手法を続けていますが、このコンセプトは現在の超高性能・超大規模 コンピュータ開発の礎となっています。2019 年度からは第 10 世代のセンター独自コンセプ トによるコ・デザインに基づくスーパーコンピュータである Cygnus (PACS-X)の運用を開始 し、GPU と FPGA を組み合わせて相補的に利用することを世界で初めて実用化した画期的な 多重複合型演算加速システムを実現、運用開始しました。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。

-2-

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、常勤教員43名、兼務教員1名、非 常勤教員3名が従事している他、常勤研究員21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15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、2022年度からは産学連携研究体制を大きく推進する母体として計 算科学社会実装推進室を新設し、センターにおける企業との共同研究をサポートしつつ、さ らにその枠を広げるための共同研究の進め方のノウハウや、企業への技術展開を推進する体 制を構築しています。

大きな国際交流イベントとしては、エジンバラ大学とローレンスバークレー国立研究所と それぞれ行っている毎年定例の国際ワークショップも開催しました。2021 年度までは COVID-19 の影響により Zoom によるリモート会議でしたが、2022 年度 12 月には 3 年ぶりに エジンバラ大学を訪問し、一部はリモートでしたが基本的に対面による合同ワークショップ を開催し、国際共同研究推進への新たなステップとしました。なお、ローレンスバークレー 国立研究所に関しても 2023 年度からは対面会議に移行しました。さらに、やはり COVID-19 の影響で中断していた韓国 KISTI との日韓 HPC ウィンタースクールも 2023 年 2 月に再開し、 本センターにて対面形式で実施しました。ただし、まだ韓国から学生に訪問してもらうのは まだ早いとの双方の判断から、韓国側の学生は Zoom によるリモート参加、日本側は講師及 び学生が現地参加というハイブリッド形式で行いましたが、これに続く CCS と KISTI の合同 ワークショップは対面で行うことができました。以上のように、今後は COVID-19 を乗り越 え、より一層の海外との連携交流活動が復活する見込みです。

本小冊子は,2022 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。

> 2023 年7月吉日 計算科学研究センター長 朴 泰祐

-3 -

1センター組織と構成員



組織人員・教員一覧リスト

センタ	一長	朴 泰祥	右		
副セン	ター長	矢花 -	一浩		
運営協	議会	委員長	田涧	甫 健次朗	(東京大学)
運営委	員会	委員長	朴	泰祐	
人事委	員会	委員長	朴	泰祐	
研究企	画室	委員長	朴	泰祐	
研究員	会議	議長	朴	泰祐	
研究開	発推進室				
•	先端計算科学推進室		室長	矢花 一	浩
•	次世代計算システム研究開	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	ف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
• 社会実装推進室	室長 大谷 実
拠点戦略担当主幹	重田 育照
共同研究担当主幹	中務 孝
· 共同研究委員会	委員長 中務 孝
· 共同研究運用委員会	委員長 中務 孝
計算機システム運用委員会	委員長 建部 修見
情報セキュリティ委員会	委員長 朴 泰祐
最先端共同 HPC 基盤施設	施設長 田浦 健次朗 (東京大学)
	副施設長 朴 泰祐

研究部門 (共同研究員は学内のみ記載)

素粒子物理研究部門

教授	藏増	嘉伸	(部門)	主任)		
准教授	石塚	成人、	谷口	裕介、	吉江	友照
助教	大野	浩史				
研究員	浮田	尚哉、	新谷	栄悟、	吉村	友佑
学内共同研究員	金谷	和至	(教授)	、山	﨑 剛	(准教授)

宇宙物理研究部門

教授	梅村 雅之、大須賀 健(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
研究員	高水 裕一、安部 牧人、朝比奈 雄太、桐原 崇亘
	小川 拓未、諸隈 佳菜、菊田 智史、阿佐美 進也
客員准教授	中里 直人(会津大学)

原子核物理研究部門

教授	中務 孝(部門主任)、矢花 一浩
准教授	清水 則孝
助教	日野原 伸生
研究員	温 凱、角田 佑介、鷲山 広平

量子物性研究部門

教授	矢花 一浩(部門主任)、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
研究員	黒田 文彰、Sri Kasi Matta (学振外国人特別研究員)
客員教授	小野 倫也(神戸大学)
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(部門主任)
准教授	原田 隆平
助教	庄司 光男、堀 優太、Kowit Hengphasatporn
研究員	三嶋 謙二、森田 陸離、宮川 晃一、下山 充紘、松井 昌冬、
	宗井 陽平、Mrinal Kanti Si、藤木 涼
学内共同研究員	広川 貴次(教授)、吉野 龍之介(助教)

分子進化分野

教授	稲垣 祐司	(分野リーダー)
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(部門主任)、田中 博
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(部門主任)、高橋 大介、建部 修見、額田 彰
助教	多田野 寛人、小林 諒平、藤田 典久
研究員	平賀 弘平
客員教授	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 (橋本 武彦)
研究員	太田 玲央、宮本 隆典
学内共同研究員	北川 博之(教授)

計算メディア分野

教授	亀田 能成	(部門主任)	`	北原	格
助教	宍戸 英彦				
研究員	謝 淳				

2 令和四年度の活動状況

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、2022 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 2022 年度は学会活動等も徐々に復活し、一部 の活動を対面で行うことができました。

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)。

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, 2022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。

2022 年度からの新しい活動として,研究開発推進室の一つとして計算科学社会実装推進室 を立ち上げました。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令和五年度の活動方針

文部科学省共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」として、計算機シ ステムの開発・運用、並びにこれを用いた学際計算科学の研究を推進する。「最先端共同 HPC 基盤施設」においては、東京大学との協働によりスーパーコンピュータ Oakforest-PACS を運 用し、幅広い分野の学術研究に供し、計算科学の発展に資する。また、2019 年 4 月より運用 を開始した第 10 世代の PACS システムである Cygnus (PACS-X)を活用し、コ・デザインのコ ンセプトに基づく理工連携研究を強力に推進する。さらに、「計算基礎科学連携拠点」「宇宙 生命計算科学連携拠点」「計算メディカルサイエンス推進事業部」を中心に、異分野間連携 を強化する。国際共同研究拠点化に向けた研究体制の構築も継続して進める。さらに、次世 代の計算科学とデータ科学・AI を先導する新たな挑戦的プラットフォームとして、第 11 世 代の PACS システムである Pegasus (PACS-XI)を開発し、試験運用を開始する。

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。

「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 73 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 239 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。

分野	採択件数
Particle Physics	13
Astrophysics	7
Nuclear Physics	9
Material Science	14
Chemistry	1
Life Science	10
Global environment	3
Biology	2
Numerical analysis	3
HPC systems	6
Computational informatics	5
合計	73

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

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	4年度	うち国際学術誌掲載論 文数		
化学	25	(4)	25	(4)	
材料科学	1	(0)	1	(0)	
物理学	105	(16)	104	(16)	
計算機&数学	41	(6)	41	(6)	
工学	31	(13)	30	(13)	
環境&地球科学	17	(8)	16	(7)	
臨床医学	3	(1)	3	(1)	
基礎生命科学	16	(1)	15	(1)	
人文社会系	0	(0)	0	(0)	
合計	239	(49)	235	(48)	

※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

	探択状況 公募型			実施状況									
				新規分		継続分			合計				
年度	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
R4	96	96	100	1	32	0	0	64	0	1	96	0	1

表3 共同利用・共同研究課題の採択状況及び実施状況

2.4国際連携と異分野融合

国際連携として、英国エジンバラ大学(EPCC: Edinburgh Parallel Computing Center)との合 同ワークショップを 2022 年 12 月に 3 年ぶりに同センターにおいて現地対面開催し、一部の 研究者はネットワークを用いたハイブリッド形式で参加した。米国ローレンスバークレー国 立研究所(LBNL: Lawrence Berkeley National Laboratory)との合同ワークショップは COVID-19 の影響により 2021 年度と同様にテレビ会議(Zoom)を用いて行った。なお、こちらの合 同ワークショップも 2023 年度以降は対面開催を復活させる予定である。

さらに、これまで COVID-19 の影響により中断していた韓国 KISTI との Japan-Korea HPC Winter School 及び合同ワークショップを3年ぶりに再開し、2022年2月に本センターにおい て対面での交流を復活させた。ただし、韓国の学生をスクールに招聘するのはまだ時期尚早 という判断から、彼らについては Zoom によるオンライン参加とし、これに日本側学生及び KISTI の若手研究者らが本センターで現地参加した。2日間のスクールに続き、半日の合同ワ ークショップを行い、双方の研究の紹介と関連分野についての議論を行った。

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, 2020年度より開始された「富岳」成果創出加速プログラムにおける「シミュレーションで探 る基礎科学:素粒子の基本法則から元素の生成まで」「宇宙の構造形成と進化から惑星表層 環境変動までの統一的描画の構築」「省エネルギー次世代半導体デバイス開発のための量子 論マルチシミュレーション」の3課題にそれぞれ共同研究機関として参加し,「富岳」を用 いた最先端の計算科学研究を推進してきたが,2022年度をもって第一期の成果創出加速プロ グラムが終了したのに伴い,これらの研究課題も終了した。なお,2023年度からは第三期の 同プログラムの課題として本センターの宇宙物理研究部門を中心とする新しい課題が採択さ れ,開始する予定である。

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,2020・2021年度の 2年間は COVID-19の影響によりプログラムを1日に短縮し,講演セッション及び学際共同 利用プログラムの成果発表を中心とするポスター発表の全てを Zoom によるオンラインセッ ションとしていた。

しかし,2022 年度は COVID-19 の状況が改善され,多くの国際会議が対面とオンラインの ハイブリッドに移行していることに鑑み,かつ本年度は計算物理学研究センターの発足から 30 周年という記念すべき年であることも考慮し,2日間に渡る対面を原則としたハイブリッ ド開催を実現した。結果として合計200人の参加者を集める実りあるシンポジウムとなり, 初日のプログラム終了後には3年ぶりの懇親会も盛況の中で開催することができた。

今後,世界トップレベルの国際的研究拠点を目指す上で,様々なイベントやプログラムの 英語化は重要なステップである。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、新たに発足した 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	藏增 嘉伸、金谷 和至(学内共同研究員、数理物質系特命教授)
准教授	石塚 成人、谷口 裕介、吉江 友照、
	山﨑 剛(学内共同研究員、数理物質系)
助教	大野 浩史
研究員	浮田 尚哉、新谷 栄悟、吉村 友佑
学生	大学院生 5名、学類生 6名

2022 年7月22日、谷口裕介准教授が病気療養中のところ永眠いたしました。生前は、活発な研究活動や熱心な学生指導で部門をもり立てていただきました。在りし日の元気な 姿を偲びつつ、謹んでご冥福をお祈りしたいと思います。

2. 概要

当部門では、数理物質系との密接な連携のもと、格子 OCD の大型シミュレーション研究を 推進している。2021 年度に引き続き、本年度も筑波大学を中心とした PACS Collaboration に 基づく共同研究体制のもと、「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大型プロジェクト研究を推進した。2023年度以降は、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)を中心に、プロジェクトを継 続していく予定である。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)の後継機が 2024 年度中に導入される計画であり、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 の構築・整備を推進した。

なお、2022 年度は新型コロナウィルス COVID-19 の感染予防に注意しながら、少しずつ国際会議や国内学会・研究会が対面あるいはハイブリッド形式の開催へと移行した。また、日々

の大学活動においても対面での授業が推奨されるなど、ポストコロナ時代への歩みが進んで いる。

3. 研究成果

[1] PACS Collaboration による「富岳」および Oakforest-PACS を用いた大規模シミュレ ーション (藏増、石塚、谷口、山崎、吉江、浮田、新谷)

2021 年度に引き続き、2022 度も PACS Collaboration に基づく共同研究体制のもと、「富岳」 の一般利用や JCAHPC の Wisteria-Odyssey の学際共同利用を用いて物理点における 2+1 フレ ーバーQCD の大規模シミュレーションを推進した。

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

ゲージ配位は異なる格子間隔3点(a=0.085fm,0.063fm,0.043fm)において生成し、系統誤差と なる格子間隔依存性を取り除くために連続極限(a \rightarrow 0)を取る。既に(格子間隔,格子サイズ)=(0.085fm,128⁴)、(0.063fm,160⁴)のゲージ配位生成は完了しており、今年度は(格子間隔,格 子サイズ)=(0.043fm,256⁴)での物理点シミュレーションがほぼ完了した。また、並行してこれ まで生成した格子サイズ128⁴と160⁴のゲージ配位を用いて、以下に説明するような物理量計 算を行っている。

[2] 現実的クォーク質量を用いた K 中間子セミレプトニック崩壊形状因子計算 (藏増、 石塚、谷口、山崎、吉江、浮田、新谷)

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 V_{us}の決定を行った。この物理量はクォークの世代間混合を表す行列である CKM 行 列の行列要素のうち、アップクォークとストレンジクォークの混合の度合いを表す量である。 この行列は標準理論においてユニタリー性を持つので、ユニタリー性の確認を行うことで標 準理論を超える物理の検証を行うことができる。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の水色帯)。

我々の2020 年度までの格子間隔 0.085fm の計算から得られた|Vus|(塗りつぶし赤四角)は、 これまでの多くの計算結果(Kus: Nr=2+1+1, Nr=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|(青丸、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、2021 年 度から格子間隔 0.065fm の計算を重点的に行い(研究論文[A]-2, [B]-4, 10)、2 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)。有限格子間隔に起因する系統誤 差の一部は取り除くことができたが、2 つの格子間隔のみの結果からでは、格子間隔依存性を 精密に決定することが難しく、結果にはまだ大きな不定性が残っている。今後、さらに小さ な格子間隔のゲージ配位を用いた計算によりこの不定性を小さくし、標準理論を超える物理 の検証を行っていく。



図 1: |Vus|の比較。赤丸印は我々の最新の結果(研究論文[A]-2)、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。灰色帯と水色帯は CKM 行列のユニタリー性から求まる標準理論の予測。

[3] 現格子 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。

蔵増、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
計算を進める(研究論文[B]-3)とともに、核子スカラー電荷と核子テンソル電荷(研究論文[A]-1,
[B]-1,2)に加え核子構造関数に関係する物理量計算を実行した。

[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、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た。さらに、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**]-6)。

[5] 有限体積効果を抑えた格子 QCD+QED 計算方法(山崎)

近年の格子 QCD 計算では、強い相互作用に加え電磁気相互作用を取り入れた計算も実行さ れるようになった。しかし、このような計算には大きな有限体積効果が現れることが知られ ている。この電磁気相互作用に起因する有限体積効果を抑制する方法が近年提案され、実際 の格子 QCD 計算により実験値を再現する荷電パイ中間子と中性パイ中間子質量差が計算さ れた。大学院生福地、佐藤と、山崎は、この新しい方法を物理的なモデルを仮定したデータ に適用し、単純に積分を有限和で置き換えた計算と比較し、有限体積効果が抑えられている ことを確認した。また、この方法で本来は現れないと考えられるパラメータ依存性が小さい ながら残る可能性を指摘し、その原因の考察も行った。

[6] 改良 Wilson 型クォークを用いた格子 QCD シミュレーションによる有限温度・有限密度 QCD の研究(金谷、谷口)

ビッグバン直後に実現したクォーク・グルオン・プラズマ状態から通常のハドロン物質への相転移前後のクォーク物質の様々な熱力学的性質は、初期宇宙の物質進化や物質創成メカ ニズムの解明において重要である。また、それを地上で実現させる高エネルギー重イオン衝 突実験も精力的に推進されている。本質的に非摂動的な問題であり、格子 QCD による QCD 第一原理からの大規模シミュレーションが不可欠である。

有限温度・有限密度 QCD のシミュレーション研究の多くは、計算量が少ないスタガード型 格子クォークを用いて行われているが、連続極限で QCD を再現することが証明されていない という本質的問題を孕んでいる。我々は、理論的基礎が確立している Wilson 型格子クォーク を用いて QCD 相転移近傍の温度でクォーク物質がどのような熱力学特性を示すかの大規模 シミュレーション研究を推進している。

[6-1] クォークが重い QCD の臨界クォーク質量

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。

先行研究ではアスペクト比 LT=N_s/N_t(温度 T がほぼ一定のとき、空間サイズL に比例する) で 4~7 の領域が研究されたが、臨界点の位置などについて、格子間隔依存性だけでなく、空 間サイズ依存性も大きいことがわかっている。連続極限を議論するためには、まず空間サイ ズ無限大(熱力学極限)への外挿が必要である。そのための最も有力な方法は、Binder cumulant を用いた臨界スケーリングである。そこで、金谷は、新潟大学江尻信司准教授、大阪大学北 澤正清助教(現:京都大学基礎物理学研究所講師)、九州大学鈴木博教授らと、大きな空間サイ ズでの臨界スケーリング研究を開始した。大格子で高統計を実現するために、重いクォーク の効果をホッピングパラメータ展開(HPE)で取り入れた。 我々は、昨年度の研究(A. Kiyohara, M. Kitazawa, S. Ejiri, K. Kanaya, Phys. Rev. D104, 1144509 (2021))で、N=4 格子でアスペクト比 12 までの臨界スケーリングを研究した。図2に、ポリ アコフ・ループに関する Binder cumulant の結果を示す。横軸はクォーク質量をコントロール するパラメータである。Binder cumulant は最低次の有限空間サイズ効果を打ち消すように作 られており、有限空間サイズ効果が最低次で表されるくらい小さければ、Binder cumulant は 臨界点で系の空間サイズによらず一定値になるはずである。図より、空間サイズ依存性を取 り除くためにはアスペクト比9以上が要求されることがわかった。また、交点の位置から、 熱力学極限における臨界点を先行研究よりはるかに高い精度で決定することも可能になった。

並行して、昨年度の論文(N. Wakabayashi, S. Ejiri, K. Kanaya, M. Kitazawa, Prog. Theor. Exp. Phys. 2022, 033B05 (2022)) で HPE の信頼性を研究し、Nt = 4 の臨界点近傍までなら上記研究 で採用した低次の HPE で十分だが、連続極限に向けて N_tを大きくすると、より高次まで取 り入れる必要があることを示した。さらに、計算時間をほとんど増やすことなく HPE の高次 までの効果を有効的に取り入れる手法も開発した。



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。N_t=4 格子の結果。 λ =64N₆N_f κ^4 はクォーク質量をコントロールするホッピング・パラ メータ κ の関数で、クォークが軽くなると大きくなる。LT=N_s/N_t は格子のアスペクト比で、温 度がほぼ一定の場合は、格子の空間サイズLに比例する。右図は、左図の交点周辺を拡大した もの(A. Kiyohara et al., Phys. Rev. D104, 1144509 (2021))。

[6-2] N_t=6 格子による研究

現在、上記 Nt=4 の研究を拡大し、我々で開発した HPE の高次までの効果を有効的に取り 入れる手法を応用して、より連続極限に近い Nt=6 格子、Nt=8 格子のシミュレーションを進 めている。中間結果を国際会議等で発表した(研究論文[B]-5)。

図3に、 $N_t=4$ の図2に対応する $N_t=6$ の中間結果を示す。アスペクト比6,7の結果は $N_t=4$ 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。その原因として、空間サイズ が小さい格子では、オーダーパラメータの分布が、クォークが重い極限における Z(3)スピン の性質を残しており、それが Z(2)臨界スケーリングからのずれをもたらしていることが考え られる。他方、アスペクト比 10以上の大きな空間サイズの結果は、誤差の範囲内で一致して いるが、空間サイズとともに多少左に移動する傾向も示している。これは、オーダーパラメ ータにエネルギー的変数がいくらか混入していることに由来している可能性がある。これら を解明するために、より精密な解析を進めている。

並行して、N_t=8のシミュレーションも行っている。N_t=4,6の結果と合わせて、連続極限に 向けての傾向がまた、我々の手法は容易に有限密度の場合に拡張できるので、その方向にも 研究を展開している。



図 3: 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 格子による結果 (国内学会 26)。

[6-3] Gradient flow に基づく SFtX 法を用いた有限温度 QCD の研究

Wilson 型クォークは、連続極限の正しさが保証されている反面、有限の格子上ではカイラ ル対称性を陽に壊しているため、カイラル対称性に関わる物理量に関して格子化誤差が大き い。また、並進対称性に伴う保存カレントとして定義されるエネルギー運動量テンソルは基 本的な物理量だが、格子上では連続な並進対称性が陽に壊されているため、従来の方法では、 5 種類の演算子の非自明なくりこみと混合を非摂動論的に解消しなければ意味のある評価が 出来なかった。

谷口、金谷は、九州大学鈴木博教授、大阪大学北澤正清助教(現:京都大学基礎物理学研究 所講師)、新潟大学江尻信司准教授、梅田貴士准教授らと、Gradient flow(勾配流)に基づく SFtX 法(small flow-time expansion method)を応用して、これらの課題を克服した研究を推進している。 Gradient flow は、仮想的な時間パラメータを導入して、場の量を変形させる理論的手法で、 フローさせた場で作る演算子が紫外発散も同一点特異性も持たないという目覚ましい特性を 持っている。鈴木博らが開発した SFtX 法では、フローさせた演算子が有限であることを利用 して、くりこみ操作や混合の除去無しに、連続極限のくりこまれた物理量に対応する量を格 子上で直接評価する。SFtX は、エネルギー運動量テンソルの格子計算に最初に応用され、有 用であることが示された。

我々は、SFtX 法が並進対称性の破れだけでなく、Wilson 型クォークによるカイラルの破れ にも有効であることに着目し、2+1 フレーバーの動的な Wilson 型クォークを含む QCD に SFtX 法を応用した一連の研究を推進している。その第一段階として、u,dクォークが現実よ りやや重い場合の N_f=2+1 QCD の研究を実行した。エネルギー運動量テンソルの対角成分か ら計算した状態方程式が、従来の方法による結果を良く再現することを示し、さらに、カイ ラル感受率がクロスオーバー温度でピークを示すことを Wilson 型クォークとして初めて示し た。また、位相感受率を、グルオンを用いた定義式と、クォークを用いて表し直した評価式 の両方で計算し、有限の格子間隔でも両者が極めてよく一致することを示した。我々はさら に、マッチング係数のくりこみスケールを適切に選ぶことで SFtX 法における外挿の安定性を 大きく改善できることを示した。

[6-4] 物理点(2+1)-flavor QCD の熱力学

u,dクォークが現実よりやや重い場合に SFtX 法が有力であることを受けて、現実のクォーク質量(物理点)における N_f=2+1 有限温度 QCD の研究を、SFtX 法を使って推進している。 SFtX 法により、物理量の観測に関しては計算時間を大きく削減できているが、クォークが軽い物理点での配位生成には膨大な計算が要求され、大規模シミュレーションを系統的に遂行する必要がある。

物理点研究の第一段階として、まず、格子間隔 a=0.08995(40)fm の場合に集中して研究して いる。PACS-CS Collaboration のゼロ温度物理点配位を利用した固定格子間隔法で、122–544 MeV の温度範囲でエネルギー運動量テンソルやカイラル感受率の測定を進めた。2022 年度ま でに有限温度配位についてはある程度統計が蓄積され、相転移温度が 150 MeV 以下であるこ とを示唆する中間結果を得た。この相転移温度は、スタガード型クォークによる先行結果よ り低い可能性があるが、相転移温度の精密な評価は実験的・現象論的にも重要である。

しかし、この解析の結果、熱力学量のくりこみで必要なゼロ温度配位の統計が不十分であ る可能性も示唆された。これは、SFtX 法で測定する物理量が空間的に広がっていることに対 応して、自己相関時間が長くなってしまったためと思われる。そこで、2022 年度には、PACS-CS 配位に加えて、ゼロ温度配位生成を開始した。自己相関時間が長いことが確認されたため、 現在もシミュレーションを継続している。

[7] 2+1 および 4 フレーバーQCD の臨界終点の探索(藏増、大野)

QCD の有限温度相転移の次数は、クォークのフレーバー数及び質量に依存して変化すると 考えられている。例えば3フレーバーの場合、クォーク質量が0の極限では1次相転移にな ると予想され、質量を大きくしていくと2次相転移となる点を経てクロスオーバーになると 予想されている。この1次相転移が終わり2次相転移となる点を臨界終点と呼び、その位置 を特定することは、QCDの相構造を理解する上で非常に重要である。しかしながら、格子 QCD 計算に基づく先行研究により、臨界終点の位置はフェルミオン作用の種類や連続極限の取り 方に強く依存するという結果が得られており、最終的な結論は未だ得られてない。このこと は、臨界終点の位置が格子化誤差の影響を強く受けることを示唆しており、フェルミオン作 用依存性のより詳細な理解と、より正確な連続極限への計算が求められている。

大野と藏増は、理化学研究所の中村宜文氏と金沢大学の武田真滋准教授らと共に、格子 QCDに基づく数値計算により、2+1 および4フレーバーQCDにおける臨界終点(線)の探索を 行った。2022年度の研究成果としては、まず、O(a)改良されたウィルソンフェルミオン作用 を用いた 2+1フレーバーQCDの計算について、時間方向格子サイズ Nr=8 での計算を、複数 の空間体積で進めた。その結果、1次相転移点に対応するパラメータの範囲を絞り込むことが できた。次に、4フレーバーQCDの計算では、O(a)改良されたウィルソンフェルミオン作用 を用いた Nr=10の計算を推進し、臨界終点の位置を特定することができた。そして、この Nr=10 の結果と、これまで得られた Nr=4, 6, 8の結果を用いて、臨界温度(図4左)および臨界擬スカ ラー中間子質量(図4右)に対する連続極限への外挿を行った。その結果、連続極限における4 フレーバーQCDの臨界温度は、3フレーバーQCDのものと非常に近いことが分かった。一方、 連続極限における4フレーバーQCDの臨界擬スカラー中間子質量は、3フレーバーのものよ りも大きいことが分かった。ただし、臨界温度の連続極限への収束性は非常によい一方で、 臨界擬スカラー中間子質量については格子間隔依存性が大きく、より信頼できる連続極限の 結果を得るためには、より小さい格子間隔でのシミュレーションが必要であることが示唆さ れた。



図 4: (左)3 フレーバーおよび 4 フレーバーQCD の臨界温度とその連続極限。(右)3 フレーバー および 4 フレーバーQCD の臨界擬スカラー中間子質量とその連続極限。

[8] 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(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、クォーコニウムのあペクトル関数を計 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法の開発を開始した。2022 年度は、 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調べた。そして得られた結果をもとに、改良や調整 すべき点について議論した。今後は、テストデータを用いた改良・調整に目途が付き次第、 実際のクォーコニウムのデータに対する解析に移る予定である。

[9] 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)

格子 QCD 計算では、近年の計算機能力の向上や新規アルゴリズムの開発・改良の結果、自 然界の u、d、s クォーク質量上でのシミュレーションや、更には軽原子核の束縛エネルギー 計算までもが可能となりつつある。その一方で、解決すべき長年の課題がそのまま残されて いることも事実である。最も重要な課題は、フェルミオン系を扱う際の負符号問題および複 素作用を持つ系のシミュレーションである。これらは、軽いクォークのダイナミクス、Strong CP 問題、有限密度 QCD、格子 SUSY の研究において避けて通れない問題である。われわれ は、近年物性物理分野で提案されたテンソルネットワーク形式に基づく分配関数の数値計算 手法を格子ゲージ理論へ応用し、モンテカルロ法に起因する負符号問題および複素作用問題 を解決し、これまでの格子 QCD 計算が成し得なかった新たな物理研究の開拓を目指してい る。なお、本研究課題は、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題における 萌芽的課題「基礎科学のフロンティア-極限への挑戦」の一つとして、本グループが分担機 関として参画し、テンソルネットワーク法の素粒子物理学への応用に取り組んできた。萌芽 的課題は 2019 年度末で終了したが、2020 年度以降は科学研究費基盤(A)を新たな資金として 研究の発展を図っている。

2014年、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)の清水特別研究員 は、テンソル繰り込み群をグラスマン数も扱えるように拡張し(グラスマンテンソル繰り込み 群)、世界で初めてフェルミオン入りのゲージ理論への応用に成功した。具体的には、グラス マンテンソル繰り込み群を用いて、θ項が有る場合と無い場合の1フレーバーの2次元格子 Schwinger モデル(2次元格子 QED)における相構造を調べた(論文発表済)。この研究により、 グラスマンテンソル繰り込み群が、現在の格子 QCD 計算が抱える負符号問題や複素作用問 題を解決していることを示すことに成功した。今後は、最終目標である4次元 QCD への応用 に向け、(i)非可換ゲージ理論への拡張、(ii)高次元モデルへの応用、(iii)物理量計算のための手 法開発、(iv)興味深い低次元素粒子論モデルへの応用、(v)物性物理学における強相関電子系へ の応用、という5つの課題に取り組む。

2022 年度は、上記課題(i)~(v)のうち、特に課題(i)に関連して大きな進展があった。われわれは、テンソル繰り込み群を用いて(3+1)次元 Z_2 ゲージヒッグスモデルの臨界終点の決定に成功した。図 5(左)は、(3+1)次元 Z_2 ゲージヒッグスモデルのμ=1(μは化学ポテンシャルを表す)において、リンク変数の期待値(L)をパラメータβ(逆ゲージ結合定数)とη(ゲージ不変なスピン-スピン結合定数)の関数としてプロットしたものである。(L)の跳びは一次相転移を表しているが、その跳びが消失する点が臨界終点となる。図 5(右)は、臨界終点を決定するために、リンク変数の期待値の跳び Δ (L)をパラメータβとηの関数として fit し、 Δ (L)=0となる臨界終点(β_c, η_c)=(0.3053(2), 0.1595(3))を外挿で求めたものである。同様の計算を μ =0,2でも実行し、それぞれの臨界終点を決定することに成功した。また、ベンチマークテストとして(2+1)次元のゼロ密度の Z_2 ゲージヒッグスモデルの臨界終点を計算し、他の計算手法で得られた高精度結果との一致を確認した。本研究は、テンソル繰り込み群を4次元ゲージ理論に適用した最初の成功例であり、将来の有限密度QCDの相構造解析に向けた重要な布石となる成果である。

-26-



図 5: (左) μ =1 におけるリンク変数の期待値(L)を 0.306 $\leq \beta \leq 0.311$ の範囲で η の関数と してプロットしたもの。D_{out}=48 で格子サイズは V=32⁴。(右) リンク変数の期待値の跳び Δ (L)を パラメータ $\beta \geq \eta$ の関数として fit したもの(研究論文[A]-3)。

[10] 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。2022 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検討、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。

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

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 8 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 VPN 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っており、本学物理学域からは、藏増、吉江、 大野が参加している。なお、管理グループの代表は 2022 年 6 月より、吉江に代わり大野が務めることとなった。

JLDG は、2008 年に実運用を開始して以来 15 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。2022 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。

- 管理サーバの更新: CentOS6,8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。
- Pegasus におけるクライアント機能導入作業: 2023 年1月から運用が開始された筑波大 CCS 拠点の新スパコン Pegasus に、JLDG クライアント機能を導入するための作業を開 始した。
- 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、格子 QCD 研究に関する国際会議「Lattice 2022」において plenary talk を行った他、同会議でワークショップを開催した。これにより、ILDG の再活性化を周知すると共に、今後の ILDG のあり方についての議論を深めた。なお、この活動は、吉江が著者の一人となっている会議録(研究論文[B]-8)にまとめられた。

4. 教育

[修士論文]

1. 福地 幸太

「有限体積効果を抑えたハドロン質量の QCD+QED 計算手法」

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 第9回成果報告会における HPCI 利用研究課題優秀成果賞、山崎剛(代表)、藏増嘉伸、 石塚成人、浮田尚哉、新谷栄悟、他4名「2+1 フレーバー格子 QCD master field を用 いた標準理論を超える物理の探索」 2022 年 10 月 2. 第9回成果報告会における HPCI 利用研究課題優秀成果賞、藏増嘉伸(代表)、秋山進 一郎、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の研究」2022 年 10 月

外部資金

- 1. 藏増嘉伸(代表)、科学研究費補助金・基盤研究(A)、令和2年度採択、「テンソルネットワーク法による計算物理学の新展開」、11,900千円
- 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」、11,200千円
- 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」、800千円
- 4. 山崎剛(代表)、科学研究費補助金・基盤研究(B)、平成 31 年度採択、「強い相互作用 の第一原理計算による軽ハドロン形状因子の総合理解」、3,800 千円
- 5. 浮田尚哉(代表)、科学研究費補助金・基盤研究(C)、令和2年度採択、「機械学習を取り入れた格子 QCD による超精密物理量測定のための計算手法の開発と実践」、900 千円
- 6. 新谷栄悟(代表)、科学研究費補助金・新学術領域研究(公募)、令和3年度採択、「陽 子寿命の理論予想に関わる行列要素の格子 QCD 計算」、900 千円

6. 研究業績

(1)研究論文

A) 査読付き論文

- PACS Collaboration: Ryutaro Tsuji, Natsuki Tsukamoto, Yasumichi Aoki, Ken-ichi Ishikawa, Yoshinobu Kuramashi, Shoichi Sasaki, Eigo Shintani, and Takeshi Yamazaki, "Nucleon isovector couplings in Nf=2+1 lattice QCD at the physical point", Phys. Rev. D 106 (2022) No.9, ref.094505, pp.1-25.
- PACS Collaboration: K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, and T. Yamazaki, T. Yoshié, "K13 form factors at the physical point: Toward the continuum limit", Phys. Rev. D 106 (2022) No.9, ref.094501, pp.1-25.
- 3. S. Akiyama and Y. Kuramashi, "Tensor renormalization group study of (3+1)-dimensional Z2 gauge-Higgs model at finite density", JHEP 2205 (2022) ref.102, pp.1-20.
- 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 (2023) No.9, ref.094509, pp.1-7.

B) 査読無し論文

- PACS Collaboration: Ryutaro Tsuji, Yasumichi Aoki, Ken-ichi Ishikawa, Yoshinobu Kuramashi, Shoichi Sasaki, Eigo Shintani, and Takeshi Yamazaki, "Nucleon isovector tensor charge from lattice QCD with physical light quarks", JPS Conference Proceedings 37 (2022) ref.020202, pp.1-5.
- PACS Collaboration: Ryutaro Tsuji, Yasumichi Aoki, Ken-ichi Ishikawa, Yoshinobu Kuramashi, Shoichi Sasaki, Eigo Shintani, and Takeshi Yamazaki, "Nucleon scalar and tensor couplings from lattice QCD at the physical point", EPJ Web of Conferences 274 (2022) ref.06009, pp.1-8.
- PACS Collaboration: Ryutaro Tsuji, Yasumichi Aoki, Ken-ichi Ishikawa, Yoshinobu Kuramashi, Shoichi Sasaki, Eigo Shintani, and Takeshi Yamazaki, "Towards the continuum limit of nucleon form factors at the physical point using lattice QCD", Proceedings of Science (LATTICE2022) (2023) ref.127, pp.1-9.
- PACS Collaboration: T. Yamazaki, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, and T. Yoshié, "Momentum transfer dependence of kaon semileptonic form factor on (10 fm)⁴ at the physical point", Proceedings of Science (LATTICE2022) (2023) ref.425, pp.1-9.
- Kazuyuki Kanaya, Ryo Ashikawa, Shinji Ejiri, Masakiyo Kitazawa, Hiroshi Suzuki, and Naoki Wakabayashi, "Phase structure and critical point in heavy-quark QCD", Proceedings of Science (LATTICE2022) (2023) ref.177, pp.1-9.
- PACS Collaboration: Kohei Sato, Hiromasa Watanabe, Takeshi Yamazaki, "Calculation of the pion charge radius from an improved model-independent method", Proceedings of Science (LATTICE2022) (2023) ref.122, pp.1-9.
- Tatsumi Aoyama, Issaku Kanamori, Kazuyuki Kanaya, Hideo Matsufuru, and Yusuke Namekawa, "Bridge++ 2.0: Benchmark results on supercomputer Fugaku", Proceedings of Science (LATTICE2022) (2023) ref.284, pp.1-9.
- F. Karsch, H. Simma, and T. Yoshié, "The International Lattice Data Grid -- towards FAIR data", Proceedings of Science (LATTICE2022) (2023) ref.244, pp.1-16.
- G. Bali, R. Bignell, A. Francis, S. Gottlieb, R. Gupta, I. Kanamori, B. Kostrzewa, A. Kotov, Y. Kuramashi, R. Mawhinney, C. Schmidt, W. Söldner, and P. Sun, "Lattice gauge ensembles and data management", Proceedings of Science (LATTICE2022) (2023) ref.203, pp.1-23.
- 10. PACS Collaboration: T. Yamazaki, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, and T. Yoshié, "Kaon semileptonic form factors at the

physical quark masses on large volumes in $N_f=2+1$ lattice QCD", Journal of Physics: Conference Series 2446 (2023) 1, ref.012007, pp.1-5.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

- T. Yamazaki, 「Challenges and progress in multi-nucleon calculations with Lattice QCD」, Next-Generation Computing for Low-Energy Nuclear Physics: from Machine Learning to Quantum Computing (IQuS, University of Washington, Seattle, USA, Aug. 15-19, 2022).
- T. Yamazaki, 「PACS10 project」, Challenges and opportunities in Lattice QCD simulations and related fields (R-CCS, Riken, Kobe, Feb. 15-17, 2023).

B)一般講演

- R. Tsuji, Y. Aoki, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, S. Sasaki, E. Shintani, T. Yamazaki, 「Nucleon scalar and tensor couplings from lattice QCD at the physical point」, XVth Quark Confinement and the Hadron Spectrum (University of Stavanger, Norway, Aug. 1-6, 2022).
- Kazuyuki Kanaya, Ryo Ashikawa, Shinji Ejiri, Masakiyo Kitazawa, Hiroshi Suzuki, Naoki Wakabayashi, 「Phase structure and critical point in heavyquark QCD at finite temperature」, The 39th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2022) (Bonn, Germany, Aug. 8-13, 2022).
- Hideo Matsufuru, Issaku Kanamori, Kazuyuki Hideo Matsufuru, Issaku Kanamori, Kazuyuki Kanaya, Tatsumi Aoyama, Yusuke Namekawa, 「Bridge++ 2.0: Benchmark results on supercomputer Fugaku」, The 39th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2022) (Bonn, Germany, Aug. 8-13, 2022).
- Y. Kuramashi for PACS Collaboration, 「Gauge Ensembles from PACS Collaboration」, The 39th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2022) (Bonn, Germany, Aug. 8-13, 2022).
- 5. T. Yamazaki, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yoshié for PACS Collaboration, 「Momentum transfer dependence of kaon semileptonic form factor on (10 fm)⁴ at the physical point」, The 39th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2022) (Bonn, Germany, Aug. 8-13, 2022).
- K. Sato, H. Watanabe, T. Yamazaki, 「Calculation of the pion charge radius from an improved model-independent method」, The 39th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2022) (Bonn, Germany, Aug. 8-13, 2022).

- R. Tsuji, Y. Aoki, K.-I. Ishikawa, Y. KuramashiR. Tsuji, Y. Aoki, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, S. Sasaki, E. Shintani, T. Yamazaki, <sup>[Towards the continuum limit of nucleon form factors at the physical point using lattice QCD], The 39th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2022) (Bonn, Germany, Aug. 8-13, 2022).
 </sup>
- Kazuyuki Kanaya, Ryo Ashikawa, Shinji Ejiri, Masakiyo Kitazawa, Hiroshi Suzuki, and Naoki Wakabayashi, [[]Critical point in heavy-quark QCD at finite temperature], Tsukuba Global Science Week (TGSW2022) (Univ. of Tsukuba, Tsukuba, Japan (online), Sep. 27, 2022).
- 9. 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), The 30th Anniversary Symposium of the Center for Computational Sciences at the University of Tsukuba: 14th international symposium 2022 on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (Epochal Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Japan, Oct. 13-14, 2022).
- 10. H. Nemura, Y. Akahoshi, T. Aoyama, I. Kanamori, K. Kanaya, H. Matsufuru, Y. Namekawa, 「Implementation of Lattice QCD common code to large scale parallel supercomputer with manycore and GPU architecture」(ポスター発表), The 30th Anniversary Symposium of the Center for Computational Sciences at the University of Tsukuba: 14th international symposium 2022 on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (Epocal Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Japan, Oct. 13-14, 2022).
- 11. T. Yamazaki, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, N. Ukita, H. Watanabe, 「Search for physics beyond the standard model from 2+1 Flavor Lattice QCD with the physical quark masses」 (ポスター発表), The 30th Anniversary Symposium of the Center for Computational Sciences at the University of Tsukuba: 14th international symposium 2022 on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (Epocal Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Japan, Oct. 13-14, 2022).
- 12. K. Sato, H. WatanabeK. Sato, H. Watanabe, T. Yamazaki,「Calculation of the pion charge radius from an improved model-independent method」(ポスター発表), The 30th Anniversary Symposium of the Center for Computational Sciences at the University of Tsukuba: 14th international symposium 2022 on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (Epocal Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Japan, Oct. 13-14, 2022).

- Masakiyo Kitazawa, Ashikawa Ryo, Shinji Ejiri, Kazuyuki Kanaya, Hiroshi Suzuki, Naoki Wakabayashi, [「]Lattice study of the critical point in heavy quark QCD」, Workshop on Critical Point and Onset of Deconfinement (CPOD2022) (Switzerland (online), Nov. 22-Dec. 2, 2022).
- 14. Tatsumi Aoyama, Issaku Kanamori, Kazuyuki Kanaya, Hideo Matsufuru, Yusuke Namekawa and Keigo Nitadori, 「Benchmark result of Lattice QCD code set Bridge++ 2.0 on Fugaku」, The 5th R-CCS International Symposium "Fugaku and Beyond: Simulation, BigData and AI in the Exascale Era" (R-CCS, RIKEN, Kobe, Japan (hybrid), Feb. 6-7, 2023).
- 15. R. Tsuji, Y. Aoki, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, S. Sasaki, E. Shintani, T. Yamazaki, 「Precision computation of nucleon structure from lattice QCD with all-mode-averaging」(ポ スター発表), The 5th R-CCS International Symposium "Fugaku and Beyond: Simulation, BigData and AI in the Exascale Era" (R-CCS, RIKEN, Kobe, Japan (hybrid), Feb. 6-7, 2023).
- 16. R. Tsuji, Y. Aoki, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, S. Sasaki, E. Shintani, T. Yamazaki, 「Precision computation of nucleon scalar and tensor couplings at the physical point」(ポス ター発表), Challenges and opportunities in Lattice QCD simulations and related fields (R-CCS, Riken, Kobe, Feb. 15-17, 2023).
- 17. X. Luo and Y. Kuramashi,「Tensor renormalization group approach to (1+1)-dimensional SU(2) principal chiral model at finite density」(ポスター発表), Challenges and opportunities in Lattice QCD simulations and related fields (R-CCS, Riken, Kobe, Feb. 15-17, 2023).

(3) 国内学会·研究会発表

A) 招待講演

- 山崎剛, 藏増嘉伸, 石塚成人, 浮田尚哉, 新谷栄悟, 石川健一, 滑川裕介, 中村宜文, 渡辺展正, 「2+1 フレーバー格子 QCD master field を用いた標準理論を超える物理の探 索」, 第 9 回 HPCI システム利用研究課題成果報告会(Online, 2022 年 10 月 27 日-28 日).
- 大野浩史,「Japan Lattice Data Grid」,第25回共同利用機関におけるセキュリティー ワークショップ(滋賀医科大学,大津(online),2022年12月13日).
- 大野浩史,「格子 QCD 計算でひも解く高エネルギー重イオン衝突の物理」,日本物理 学会 2023 年春季大会一般シンポジウム講演(Online, 2023 年 3 月 22-25 日).

B)その他の発表

 佐藤航平,渡辺展正,山崎剛,「改良されたモデルに依存しない方法による形状因子の 計算」,原子核三者若手夏の学校 2022(Online, 2022 年 8 月 6 日-9 日).

- 山崎剛,石川健一,石塚成人,藏増嘉伸,中村宜文,滑川裕介,谷口裕介,浮田尚哉, 吉江友照 for PACS Collaboration,「格子 QCD を用いた K 中間子セミレプトニック崩 壊位相積分計算」,日本物理学会2022年秋季大会(岡山理科大学岡山キャンパス,2022 年9月6日-8日).
- 3. 佐藤航平,渡辺展正,山崎剛,「改良されたモデルに依存しない方法によるパイ中間子 電荷半径計算」,日本物理学会 2022 年秋季大会(岡山理科大学岡山キャンパス,2022 年9月6日-8日).
- 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,「核子形状因子の物理点格子 QCD 計算」,日本物理学会2022年秋季大会(岡山理科大学岡山キャンパス,2022年9月6日-8日).
- 5. 芦川涼,北沢正清,江尻信司,金谷和至,「重クォーク QCD 臨界点の N_t=6 における格 子数値解析」,日本物理学会 2022 年秋季大会(岡山理科大学岡山キャンパス,2022 年 9月6日-8日).
- 6. 羅梟, 藏増嘉伸,「テンソル繰り込み群の SU(2)×SU(2) principal chiral model への応用」,日本物理学会 2022 年秋季大会(岡山理科大学岡山キャンパス,2022 年9月6日 -8日).
- 7. 芦川涼,北沢正清,江尻信司,金谷和至,「重クォーク QCD 臨界点の格子数値解析: 微小格子間隔かつ大体積での解析」,熱場の量子論とその応用 2022 (TFQT 2022) (京 都大学基礎物理学研究所,京都,2022 年 9 月 20 日-22 日).
- 江尻信司,金谷和至,北沢正清,若林直輝,「重クォーク領域における有限密度格子 QCD の臨界点決定のためのホッピングパラメータ展開」,熱場の量子論とその応用 2022(TFQT 2022)(京都大学基礎物理学研究所,京都,2022 年 9 月 20 日-22 日).
- 9. Kazuyuki Kanaya, Shinji Ejiri, Masakiyo Kitazawa, Hiroshi Suzuki, Takashi Umeda, 「Gradient flow による物理点 QCD の熱力学」, 第9 回 HPCI システム利用研究課題 成果報告会(Online, 2022 年 10 月 27 日-28 日).
- 佐藤航平,渡辺展正,山崎剛,「改良されたモデルに依存しないパイ中間子電荷半径の 解析」(ポスター発表),計算物理春の学校 2023(沖縄県市町村自治会館,沖縄,2023 年 3月15日).
- 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,「物理点 格子QCD に基づく核子軸性形状因子の研究」,日本物理学会2023年春季大会(Online, 2023年3月22-25日).
- 佐藤航平,渡辺展正,山崎剛,「パイ中間子電荷半径のモデルに依存しない解析と系統 誤差の評価」,日本物理学会2023年春季大会(Online, 2023年3月22-25日).
- 13. 芦川涼, 北沢正清, 江尻信司, 金谷和至, 「Nt=6 における重クォーク QCD 臨界点の 精密測定」, 日本物理学会 2023 年春季大会(Online, 2023 年 3 月 22-25 日).
- 14. 江尻信司, 芦川涼, 金谷和至, 北沢正清,「有限温度格子 QCD の重クォーク領域での 一次相転移の終点の化学ポテンシャル依存性」,日本物理学会 2023 年春季大会 (Online, 2023 年 3 月 22-25 日).

(4) 著書、解説記事等

 - 藏増嘉伸,「テンソルネットワークがつなぐ素粒子物理学と物性物理学」,数理科学 2023年1月号,サイエンス社

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/

国際連携·国際活動

- 1. International Lattice Data Grid (ILDG)
- 2. http://ildg.sasr.edu.au/Plone
- 3. Japan Lattice Data Grid (JLDG)
- 4. 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

- 「計算物理春の学校 2023」
 沖縄県市町村自治会館,那覇(ハイブリッド),2023 年 3 月 13 日-15 日 参加国数: 5,参加者数(内対面参加): 369 (155)
 世話人:大久保毅(東京大学),大野浩史(筑波大学),柏浩司(福岡工業大学),川久保亮 (QunaSys),品岡寛(埼玉大学),下川統久朗(OIST),田中章詞(RIKEN AIP/iTHEMS),富 谷昭夫(大阪国際工科専門職大学 IPUT Osaka),永井佑紀(JAEA),二村保徳(筑波大学), 水上渉(大阪大学),和田健太朗(QunaSys)
 ウェブページ:https://hohno0223.github.io/comp_phys_spring_school2023/ Youtube チャンネル: https://www.youtube.com/@comp_phys_spring_school2023
 「物理屋のための機械学習講義」
- 対面/オンライン開催,2023 年 1 月 12 日・26 日(全 2 回) 登録者数: 191 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), 二村保徳(筑波大)

ウェブページ: https://akio-tomiya.github.io/lectures4mlphys/

Youtube チャンネル: https://www.youtube.com/@lectures4mlphys

9. 管理·運営

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

10. 社会貢献·国際貢献

- 1. 藏增嘉伸、ILDG board member
- 2. 大野浩史、JLDG 管理グループ代表(前任者:吉江友照)

II. 宇宙物理研究部門

1. メンバー

教授	梅村 雅之, 大須賀 健,
准教授	森 正夫, 矢島 秀伸, 吉川 耕司
助教	Wagner Alexander, 福島 肇
研究員	高水 裕一(CCS), 安部 牧人(計算メディカルサイエンス),
	朝比奈 雄太 (科研費基盤研究 A), 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),
	菊田 智史(科研費基盤研究 A), 阿左美 進也(創発的研究支援事業)
学生	大学院生 28 名
学類生	10 名
研究生	1 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 a 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,AGN feedback: The interactions of AGN radiation, jets and winds with the host galaxy,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] カー・ブラックホール周囲の超臨界降着流の研究

活動銀河核やX線連星といったコンパクトな高エネエルギー天体のエネルギー源は、ブラ ックホールへのガス降着流であると考えられている。中でも、エディントン光度を超える光 度を示す天体には、超臨界降着流が存在すると予想される。超臨界降着流の研究は、自転し ていないブラックホール(シュヴァルツシルトブラックホール)を中心に行われてきたが、 ブラックホールが回転している場合(カー・ブラックホール)についてはまだよく調べられ ていない。そこで本研究では、カー・ブラックホール周囲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を実施した。その結果、ブラックホールが高速に自転する ほど、エネルギー変換効率(降着するガスの質量エネルギーに対する解放されるエネルギー の割合)が大きくなることがわかった。また、自転していないブラックホールの場合、エネ ルギーは主に輻射で解放されるのに対し、高速に自転するブラックホールの場合はポインテ ィングフラックスによるエネルギー解放が支配的であることがわかった。これは、磁場を介 してブラックホールの自転エネルギーを引き抜くブランドフォード・ナエック効果が働いて いることの傍証である。また、放射強度とジェットパワーの比較から、一部の超高光度 X線 源に、高速に自転するカー・ブラックホールが存在する可能性があることがわかった。

[2] 円編偏光と直線偏光によるブラックホール周辺プラズマの電子温度の研究

イベント・ホライズン・テレスコープによるブラックホールの撮像観測により,ブラック ホールの存在はもとより,ブラックホール周辺の物質や磁場の構造が徐々にわかりつつある。 しかし,プラズマ中の電子温度は,シンクロトロン放射やコンプトン散乱を介して輻射スペ クトルや撮像イメージに直接影響を及ぼすにもかかわらず,まだよくわかっていない。そこ で本研究では,一般相対論的磁気流体計算のデータをもとに電波領域での一般相対論的偏光 輻射輸送計算を実施し,ブラックホール周囲の直線偏光分布および円偏光分布を求めた。そ の結果,直線偏光は主に観測者に近づくジェットの下流から,円偏光は反対側のジェットで 強く観測されることがわかった。直線偏光は広い範囲で生じるものの,低温円盤部を通過す る際にファラデー回転を受けることで非偏光になるため,ファラデー回転を受けにくいジェ ットの下流部が主たる発生源となる。一方,円偏光は,反対方向のジェットで生成された放 射が,ブラックホール周囲の高温領域でファラデー変換を受けることで生じる。こうして直 線偏光と円偏光の分離が起こり,また,この分離は電子温度分布に依存することがわかった。

[3] 降着円盤の一般相対論的輻射磁気流体力学シミュレーション;変動エディントン因子 法と M1 法の比較

ブラックホール周囲の降着円盤の研究においては、一般相対論的輻射磁気流体力学シミュ レーションが必須である(極めて光度の小さい円盤を除く)。一般相対論的輻射磁気流体力 学計算は計算量が膨大であるため、輻射の0次モーメント式と1次モーメント式を解く M1 近似が広く使われてきた。しかし、M1法は光学的に薄く輻射場が非等方な場合は正しい解を 得ることが難しいため、より正確に輻射場を求めるためには輻射輸送方程式を直に解く手法 が必要である。そこで本研究では、輻射輸送方程式を解いてエディントン因子を求める変動 エディトン因子法によるシミュレーションを実施し、より正確な解を求めると同時に M1法 の結果との比較を行った。その結果、どちらの方法を用いても、ブラックホール周囲の降着 円盤とそこから発生するアウトフローを再現することは可能であるが、円盤の回転軸付近の 輻射分布が大きく異なることがわかった。M1法では円盤に垂直な方向に強く輻射エネルギ ーが流れるのに対し、変動エディトン因子法では比較的等方な輻射場になることがわかった。 M1法では、円盤の鉛直方向から見た光度が非現実的に大きくなり、また、ジェット内部の構 造が正確に解けないことになる。この結果、ブラックホール周囲の降着円盤やアウトフロー を正確に調べるためには、変動エディトン因子法を用いることが望ましいことがわかった。

[4] 一般相対論的輻射輸送計コード"CARTOON"の開発

ブラックホール周囲の光の伝搬を高い精度で解くための一般相対論的輻射輸送計コード 「CARTOON(Calculation code of Authentic Radiative Transfer based On phOton Number conservation in curved space-time)」を新規に開発することに成功した。このコードでは、ブラ ックホール周囲の曲がった測地線に沿って一般相対論的輻射輸送方程式を解く。光子数保存 が保証されるアルゴリズムを用いている。ZAMO 系と流体静止系における等方かつコヒーレ ント散乱を実装している。数値拡散が小さく、また、エネルギー保存も保証されるという特 徴もある。ブラックホール時空における波面伝播のテスト計算を実施したところ、波面の位 置が解析解と一致し、光子数は波面が事象の地平面に到達するまで一定であることが確認で きた。また、ブラックホールシャドウを再現することにも成功した。

[5] Lya 円偏光波生成とキラル有機分子の鏡像異性体過剰問題(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。これまでのモ ンテカルロ輻射輸送計算を用いた結果から,水素ライマンαでは円偏光度で10%を超える高 円偏光波が生成されることがわかってきた。星間空間でのダスト分布モデルの一つである MRN 分布 (個数密度がダスト半径 ad に対して, αad^{-3.5} となる分布)を仮定しているが,そ の中でどのサイズのダスト粒子が高円偏光波生成に寄与しているかを調べた。これによると, 最も円偏光波生成に寄与するダストサイズは,長波長近似が成り立つ上限サイズに近い ~ 0.025 μm であり,それより大きいサイズのダスト粒子の散乱光では,ダストサイズが大きく なるごとに,円偏光度は振動しながら正負の値をとり,絶対値は0へと漸近することがわか った。また,扁球ダスト粒子における1回の光散乱による円偏光度を,長波長近似のもとで 解析的に導出し,散乱角及び,光の進行方向とダスト粒子の短軸がなす角についての依存性 を導出した。この結果と比べることで,~0.025 μm のサイズのダスト粒子における散乱光の 円偏光度は,長波長近似の値と近い値をとることがわかった (Fukushima, Yajima, Umemmura, MNRAS へ投稿中)。



[6] 原始惑星系円盤における乱流中のダスト成長(宇宙生命計算科学連携)

図 1: 成長粒子数の時間変化(m は初期質量)。付着成長した粒子がさらに加速的に 成長することがわかる。

原始惑星系円盤は、新しく形成された恒星の周りを周回する円盤であり、ガスと固体微粒 子(ダスト)から形成される。原始惑星系円盤標準モデルにおいて、初期にはサブミクロン サイズのダストが合体成長を繰り返すことによって、惑星が誕生したとされる。しかしなが ら、ガスは非線形性(レイノルズ数)の大きい強乱流状態になっていることが知られており、

乱流によって加速させられたダストの相対速度が大きくなる。そのため、衝突時に跳ね返り や破壊が起きやすく、岩石ダストはミリメーターサイズ以上に成長できないという未解決問 題がある (Ormel & Cuzzi. 2013)。さらに、ガスは中心星周りをサブケプラー速度で周回して いるため、ダストはガスとの速度差による抵抗を受け、角運動量を失い、最短100年で中心 星に落下してしまう問題がある (Adachi et al. 1976)。そのため、ダストが中心星に落下するよ りも短期間で微惑星まで成長する必要がある。その解決策として、乱流渦から弾き出された 粒子が渦度の小さい場所に集まる(乱流クラスタリングと呼ばれる)ことで付着成長が進む というメカニズムが研究されている (Pan et al. 2011)。実際,先行研究で,乱流の直接数値計 算に基づく慣性粒子の運動をシミュレーションした結果、粒子の相対速度分布関数がこれま での理論的予測よりも数倍小さく、その分布は Gaussian 型ではなく、Stretched-exponential 型 になり、付着率が上がることが分かっている (Ishihara et al. 2018)。本研究では、4096³ 個の格 子点を用いて、ナビエストークス方程式の直接数値計算を行うことにより、高レイノルズ数 乱流 (Re = 36500) を再現し, 数種類の慣性粒子それぞれ 2048³ 個の運動のシミュレーション を行なった。その結果、エンストロフィーの高い領域では、粒子数や付着数が少なく、エン ストロフィーが低い領域の中には付着数が多い領域が存在し、乱流クラスタリング効果が確 認できた。また、粒子密度は最大で平均の数十倍となることが分かった。さらに、Re=16100 の乱流中において、同じ大きさに設定された 1024³ 個の慣性粒子の運動を計算し、付着合体 することによりそのサイズや慣性を大きくするシミュレーションを行なった結果、大きく成 長した粒子ほどその増加率が高く、エンストロフィーの小さい領域で形成される傾向がある ことが分かった。これらの結果より、乱流クラスタリングによって、渦度の小さい穏やかな 領域で、ダストは衝突合体し、大きくなった粒子が小さいサイズの粒子を取り込み、さらに 大きな粒子を加速的に形成することが分かった。

[7] M31 ハローの恒星ストリームと銀河円盤のリング構造との関係

近年の精密観測によりアンドロメダ銀河 (M31) 周辺には, 過去の衛星銀河との相互作用の 痕跡が多数発見されてきており,特に,ハローの Andromeda Giant Southern Stream(AGSS) や ディスクの2重リング構造といった銀河衝突の痕跡と見られる構造が観測と理論両面から詳 細に調べられている。AGSS は M31 の中心から 100 kpc 以上にも渡って細長く分布する巨大 構造で,過去の銀河衝突の痕跡であると考えられている。しかしながら,その形成について は,大質量銀河同士の衝突だと考える Major merger 説 (Hammer 2018) と小質量銀河の衝突 だと考える Minor merger 説の二つの対立仮説が唱えられており,未だ決着がついていない。 本研究では,銀河衝突に伴う力学的な加熱がディスクに与える影響を詳細に調べ,現在のデ ィスクの厚さを再現するための条件を求めた。その結果,10¹⁰*M_sun*を大きく超えるような大 質量の衛星銀河の衝突の可能性は低いことが示された。 また,Block et al.(2006) は,M31 にガスとダストでできた 2 重リング構造を発見し,衛星 銀河の M32 が 200 億年程度前に head-on 衝突してその構造ができたことを主張している。し かし,彼らは衝突した当時の M32 の質量は M31 の全質量の 10 分の 1 程度 (~10¹¹M_sun) だ と結論づけているが,このような大質量の銀河が衝突した場合,上で見たようにディスクの 厚さが増大し,現在の観測と矛盾する。そこで我々は小質量の衛星銀河の衝突により AGSS と 2 重リング構造の関連性について N 体/SPH シミュレーションによって調べた。その結果, 定説とされる ~10¹¹M_sun よりも一桁小さな ~10¹⁰M_sun 程度の衛星銀河が,M31 の中心付 近を繰り返し衝突する事で観測を上手く再現できることを見出した。

[8] ダークマターハローの力学進化と内部構造

コールドダークマターモデルにおける階層的構造形成において,矮小銀河程度の低質量ダ ークマターハローはその銀河形成におけるビルディングブロックとして重要な役割を果たし, その進化史を調査することはダークマターの性質を知るための鍵となる。

本年度は、質量範囲が 100 万から 100 億太陽質量程度にある矮小銀河サイズのダークマタ ーハローの力学進化と質量進化を、最新の超高分解能宇宙論的 N 体シミュレーションのデー タ解析を行い、その力学進化と内部構造について詳細に調べた。ここでは、27 個の銀河系サ イズのホストダークマターハローの重力ポテンシャルに束縛された総数 30 万個のダークマ ターサブハローのデータを抽出し、サブハローの最大回転速度とその位置の進化の様子を統 計的に解析した。更に、各ハローの内部構造の指標として中心集中度のパラメータとハロー のヴィリアル質量との関係を調べた。その結果、先行研究の Ishiyama and Ando (2020)で提案 された *c* - *M* 関係の表式が今回の結果と矛盾がない事が分かった。さらに、ここで得られた 理論予言と矮小銀河から銀河団の観測データを比較・検討し、その妥当性を議論した。分光 観測による銀河の回転曲線や速度分散のデータ、銀河群・銀河団の高温ガスから X 線観測デ ータ及び銀河団の重力レンズ効果から求めたダークマターハローの質量分布のデータ等、7 桁 にも及ぶ質量範囲でコールドダークマターモデルの予言が、観測を矛盾なく説明できること を明らかにした。更に、ハロー内部の構造がカスプ形状であるのか、コア形状であるのかと いった違いを観測的に見極めるために必要となる観測分解能について、理論的立場から議論 した。

[9] Formation of dark-matter-deficient galaxies and dark-matter-dominated galaxies

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。本研究ではガスとダーク マターの物理的性質の違いに着目し、ガスを含んだダークマターサブハロー同士の衝突によ ってダークマター欠乏銀河が形成される物理的条件を調査した。一次元流体モデルによる解 析からダークマター欠乏銀河やダークマターを多く含む銀河が形成される衝突速度の条件を 見出し、三次元銀河形成シミュレーションからダークマター欠乏銀河が形成されることを示 した。そして、そのような衝突が発生する頻度を解析的に求める事に成功した。その結果, Milky Way 程度の質量の銀河に付随するダークマターハロー同士の衝突は、約1億年に一度 程は少なくとも発生する事が見出された。

[10] 初期宇宙における大質量銀河の形成と星形成メカニズムの研究

近年のジェームズウェッブ宇宙望遠鏡による観測により、赤方偏移8を超える初期宇宙の 銀河が数多く発見された。これら初代銀河の中には、星形成率、星質量が非常に大きいもの や、すでに広がったガス円盤を持つものなどが発見されている。しかしながら、初代銀河の 星形成過程や形態の進化に関しては良く分かっていない。我々は、宇宙大規模構造における 高密度領域に着目し、宇宙論的輻射流体計算を行った。特に、ダークマターミニハローと大 質量銀河を同時に分解可能な計算を行う事で、ミニハロー内の種族 III 星の形成、超新星爆発 による周囲の重元素汚染、そして大質量銀河内での低金属星形成過程までを一貫して計算す る事に成功した。結果として、我々の計算のモデル銀河は、ジェームズウェッブ宇宙望遠鏡 で発見された赤方偏移 10-14 の銀河の星形成率と星質量をよく再現する事が分かった。一方 で、赤方偏移約16で発見されている銀河は現在の計算で再現する事が難しく、星形成率、星 質量ともに、1桁以上シミュレーションでは小さい事が分かった。これは、シミュレーショ ンでは再現出来ていないスターバースト機構や活動銀河核の存在など、新たなメカニズムが 潜んでいる可能性を示唆している。加えて、星種族の遷移過程についても解析を行った。結 果として,銀河の星質量が大きくなるにつれ種族 III 星の質量割合は減少していき,それらに はべき乗の関係があることが分かった。また、観測されているような星質量が10⁷⁻⁸乗太陽質 量の銀河でも、観測された紫外線の一部は種族 III 星によるものであることを示唆した。これ らの結果は現在 MNRAS 誌に投稿中である(Yajima et al. 2023, arXiv:2211.12970)。

[11] 輻射輸送計算と機械学習による生体光イメージング研究(計算メディカルサイエンス 事業部:計算光バイオイメージング)

頭部をモデルにした輻射輸送計算と光音響波計算を行った。計算設定としては頭部を頭蓋 骨とそれ以外に分けて脳内を一様媒質とした。その中で2次元グリッドを考え,血管(強い 吸収体)を配置し,光パルス照射に対する反応を調べた。まず,輻射輸送計算によって,頭部 の光吸収マップを作成し,音響波の発生に関して分布を得た。その後,CIP 法による波動方 程式の計算により,音波の伝播について計算を行った。結果として,音波は頭蓋骨で反射・ 屈折をしながら,一部の音波は頭皮まで伝わり検出可能である事が分かった。そして,その 音波の時間分解シグナルから機械学習を行い,血管位置の解析モデルを作成した。結果とし て,複数の血管,異なる大きさの血管に関しても,多くの表層位置において90パーセント以 上の確率で判定可能である事を示した。輻射輸送計算,音波計算を高精度に頭部に適用した 計算例はこれまで無い。したがって,我々の結果は光音響が頭部血管イメージングに適応可 能である事を示した重要な例である。

また,我々が開発した輻射輸送計算コード TRINITY を改良し,球面 wavelet を用いて自動 的に角度分解能を調整出来るようにした。輻射輸送計算においては,散乱過程において角度 に関するループ計算がボトルネックとなる。しかしながら,光イメージングにおいては,入 射光が細いレーザーパルス光であることと,強い前方散乱を伴う非等方散乱が起きるため高 い角度分解能が求められる。一方で,深部にいくにつれ輻射場は等方に近づいていき高い角 度分解能は必要となくなっていく。そこで,球面 wavelet を用いて,各グリッド点における輻 射場の非等方性の度合いにより角度分解能のレベルを自動的に変化させる計算コードを開発 した。これにより,計算精度を落とさずに計算速度を3倍以上速める事に成功した。

[12] 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。

また,ニュートリノ質量固有値の縮退が解けている場合にニュートリノの質量階層の情報 が宇宙大規模構造にどのように反映されるかを,質量毎に複数のニュートリノの分布関数を



☑ 2: Location, morphology, and kinematics of shock-ionized gas produced by powerful jets propagating through the clumpy interstellar medium of a forming, gas-rich galaxy. From left to right: volume render and sketch of the system; [OIII] surface brightness; [OIII] line-of-sight velocity shift; [OIII] velocity dispersion down-sampled to resolution typical for VLT observations. The right three panels are viewed along a line of sight parallel to the mid-plane of the galaxy.

解くことで、数値シミュレーションで調べた。その結果,銀河団スケールの10¹⁵ Msun 程度の 質量を持つダークマターハローの質量関数にニュートリノの質量階層の違いが大きく反映さ れ,将来の観測計画によってニュートリノ質量階層が峻別できる可能性があることを見出し た。

[13] Self-Interacting Dark Matter (SIDM) の Boltzmann シミュレーション

宇宙の構造形成における標準的なダークマターモデルであるコールドダークマターモデル の問題点を解決するための手段として、ダークマター同士の衝突・散乱を考慮した自己相互 作用ダークマター (self-Interacting Dark Matter:SIDM) モデルが有力な候補として考えられて いる。SIDM モデルでは、ダークマターに相対速度に依存した散乱断面積を持たせることでダ ークマターハローの質量に応じてその密度プロファイルが観測に合うようになるが、既存の N 体シミュレーションでは速度空間のサンプリングが不十分なために散乱・衝突の効果を正 確に取り入れた計算をすることが出来ていない。

そこで、我々のグループで従来から取り組んできたダークマターの分布関数を有限体積法 に基づいて Boltzmann 方程式に従って時間発展させるシミュレーション手法を SIDM の数値 シミュレーションに適用することを計画している。本年度は、その計画の第一歩としてダー クマターの分布関数から Boltzmann 方程式の衝突項を数値的に計算する手法の開発とその高 速化を行った。特に、GPU を用いた高速化に着手し従来にはない新しい並列計算手法を開発 することで大幅な高速化を達成した。



 \boxtimes 3: Comparison of ionization mechanisms: photoionization by the central AGN versus collisional ionization through shocks driven into galactic gas by jets. Left: in all of our simulations A to E, collisional ionization through shocks dominates the ionization mechanism of atomic gas. Right: the ionizing photons can pass through holes and cavities in the interstellar medium created by the jet, casting ionization shadows into the halo of the galaxy.

[14] AGN feedback: The interactions of AGN radiation, jets and winds with the host galaxy

The supermassive black holes in the centers of galaxies accrete gas and launch jets and fast winds, or emit bright radiation. The jets, winds, and radiation may impact the gas in host galaxy on scales ranging from fractions of parsecs to hundreds of kiloparsec. This cycle of matter and energy affects the evolution of galaxies and is termed the ``feedback cycle of galaxy formation". It leads to a regulated history of star-formation, evidenced through the luminosity functions of galaxies, and to the co-evolution of the central supermassive black hole and the galaxy, evidenced through the scaling relations such as the Magorrian relation. We are pursuing a numerically intensive project running 3-dimensional relativistic hydrodynamic and radiation-hydrodynamic simulations with multiphase gas aimed at elucidating the physics of the mass and energy transfer in the feedback cycle and the effects of jets, winds, and radiation on star-formation and black hole accretion. In recent work we:

1. modelled the observable signatures of jet-ISM interaction and investigated the line emission and gas kinematics in jet-impacted discs and halos of gas (Meenakshi et al 2022b and see Fig.2 above). The analysis revealed intriguing observational signatures which have already been seen in recent observations and which are informing observational astronomers in the acquisition and interpretation of new data. We found:

(a) strong dispersion (~ 800 km s⁻¹) in ionized gas along and at large distances perpendicular to the jet;

(b) strong distortion of gas rotation curves; and

(c) that jet-galactic-disc geometry can be constrained from IFU data of ionized gas outflows and radio data of jet.

2. We investigated the relative contribution of two ionization mechanisms of the interstellar gas by AGN: photo-ionization by the radiation field produced by the AGN and collisional ionization in shocks driven into the interstellar gas by the AGN jets. In almost all cases, even for weak jets, photoionization is subdominant and line emission from ionized gas is due to shocks driven by the jet (Meenakshi et al. 2022a and see Fig. 3 above).

3. We have performed an in-depth comparison of our highest resolution simulations with LINER radio galaxy NGC1167, the Teacup galaxy, and the giant radio galaxy J2345-0449 to gain insight in to the astrophysical consequences of the interactions between the radio jet and the interstellar medium in the galaxy. This work employed our new simulations of galactic scale low-power jets in massive galaxies, a combination thought to occur frequently in galaxies, but difficult to model as the interaction times are very long.

(a) Our simulations of jet – ISM interactions explain the overall morphology and spectra of the X-ray emission in NGC1167 observed with NuSTAR and Chandra (Fabbiano et al. 2022).

(b) We observed and modeled how the central molecular region of NGC 1167 is cleared by a trapped jet and a strong molecular outflow accelerated by jet is generated (Murthy et al. 2022).

(c) Feedback perpendicular to the disc is particularly strong also in the Teacup galaxy, which ex hibits enhanced T32/T21 temperatures (first time ever discovered) and velocity dispersions in regions away from the jet axis, but where the jet can stream out and release its pressure, as predicted in our simulations (Audibert et al. 2023).

(d) We obtained VLT/MUSE optical imaging spectroscopic data of J2345-0449 that provided spatially resolved line diagnostics, revealing globally reduced star-formation by a factor of 10 due to jet-induced turbulence. High electron density regions coincide with sites of young stars and star-formation embedded in a galactic disc of low-star-formation gas, very much like the complex star-formation distribution and history predicted by our models of jet-driven turbulence in the ISM (Drevet-Mullard et al. 2023).

[15] Top-heavy IMF 下における球状星団形成条件

球状星団は,百億年以上前に誕生した大質量・高密度星団であり,遠方であるためその形 成過程は未解明となっている。しかし,宇宙望遠鏡JWSTによる高赤方偏移銀河の観測が進 み,その形成現場の直接観測が進みはじめている。一方,理論研究においては,球状星団の ような高密度星団を形成するためには,星団の母体となる星形成雲が非常にコンパクトであ る必要があることが判明しつつある。これは,星団中に誕生する大質量星がその周囲に電離 領域を形成し、その内部の高温ガスによる熱圧で星形成雲が容易に破壊されるためである。 また、観測から、大質量星団の形成領域ではより大質量星が多く誕生する top-heavy IMF (初 期星質量分布関数) である可能性が指摘されており、その場合は単位質量あたりの電離光子 放出率も上昇することから、球状星団に相当する星団の形成がより困難となることが予想さ れる。そこで、輻射流体シミュレーションを行うことで、top-heavy IMF の場合にどれくらい コンパクトな星形成雲であれば、球状星団に匹敵する大質量・高密度星団の形成が可能であ るかを調べた (図 4)。結果として、通常の IMF から top-heavy IMF になると、球状星団形成 に必要な星形成雲のコンパクト度合いを示す雲面密度が、800 M_sun pc⁻² から 1500 - 2000 M_sun pc⁻² へ増加することがわかった。この条件を満たす星形成雲は、近傍宇宙では銀河系 よりもはるかに星形成が活発な銀河にしか存在しない。このため、球状星団も JWST で発見 された、高赤方偏移銀河において星形成が活発な銀河で誕生した可能性が高いと言える (MNRAS へ投稿中, arXiv: 2303.12405)。



図 4: 星団形成の様子(ガスの面密度 800 M の場合)。各図はガスの空間分布を示す。 白点は星粒子の位置を示す。上下の図は、top-heavy と通常の IMF の場合を示す。

4. 教育

【学位論文】

<修士論文>

- 秋葉 健志 原始銀河団領域における 21cm 線シグナルの研究
- 牧野 和太 銀河とブラックホールの共進化におけるブラックホール初期質量の影響
- 阿部 紗里 輻射輸送計算による初期宇宙の銀河のサブミリ波特性の研究

4. 植松 正揮

ラインフォース駆動型円盤風の噴出によるブラックホール降着円盤の時間変化の研究

5. 大野 翔大

一般相対論的輻射磁気流体力学計算による亜臨界降着円盤の内縁構造とブラックホ ールスピンの研究

6. 金田 優香

ダークマターハローのスケーリング則とカスプ-コア遷移

- 7. 田中 駿次 銀河系衛星銀河の潮汐破壊過程における解析モデルの構築とN体シミュレーション による数値実験
- 8. 人見 拓也

一般相対論的輻射輸送計算による歳差運動する低光度降着円盤の輻射スペクトルの 特性

9. 堀田 彩水

アンドロメダ銀河の力学進化とステラーストリームの形成過程

10. 河原 昌平

原始惑星系円盤における乱流中のダスト成長

11. Oerd Xhemollari

The formation of population III-dominated galaxies under the influence of UV background radiation

<学士論文>

- 市村一晟
 生体内における近赤外線円偏光波の輸送過程の研究
- 伊藤 圭汰
 M31 に衝突した矮小銀河の潮汐進化
- 上野 航介
 機械学習を用いたエディントンテンソルの推定について
- 4. 黒田 裕太郎

数値流体シミュレーションによるラインフォース駆動型円盤風の研究

- 近藤 謙成
 機械学習による生体光イメージングの逆問題解析
- 6. 佐藤 翔

3次元特殊相対論的流体シミュレーションにおける巨大ブラックホールジェットに よる AGN トーラスの進化

7. 佐藤 創太

Galaxy collisions and formation of parallel stellar streams

8. 松本 凜

星団中における大質量星形成への輻射フィードバックの影響

9. 湯浅 拓宏

Reformulation of Density-Independent Smoothed Particle Hydrodynamics with Riemann Solver: Godunov DISPH

10. 山菅 昇太郎

Boltzmann シミュレーションにおける衝突項計算の GPU を用いた高速化

集中講義

- 大須賀健.集中講義「物理学特論 V:輻射輸送・輻射流体力学の基礎とブラックホール 降着・噴出流の物理」,新潟大学.Jan. 18–20, 2023.
- 2. 梅村雅之.集中講義「計算物理学特別講義 IV」,千葉大学.千葉大学理工系非常勤講 師. Aug. 30–31, 2022.
- 3. 矢島秀伸. 集中講義「Theoretical Astronomy, Advanced Course IV: Structure Formation and Galaxy Evolution in the Universe」, 東京大学. Jan. 18–20, 2023.

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 大須賀健

第 27 回 日本天文学会 林忠四郎賞 Mar. 15, 2023.

受賞対象項目 "コンパクト天体周囲の降着流と噴出流の先駆的シミュレーション 研究"

2. 矢島秀伸

筑波大学 Best Faculty Member 2022 Feb. 20, 2023.

外部資金

<代表者>

基盤研究 (A) (一般) H31 年度~R5 年度:梅村雅之
 「多重 AGN の統合研究で紐解く超巨大ブラックホールの起源」
 (R4 年度 810 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」

(R4 年度 780 万円/全体 3130 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」

(R4 度 80 万円/全体 330 万円)

- 4. 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」 (R4 年度 958 万円/全体 5000 万円)
- 5. 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」
 (R4 年度 680 万円/全体 3210 万円)
- 6. アストロバイオロジーセンタープロジェクト研究 R4 年度:矢島秀伸
 「計算アストロバイオロジー: 有機分子に対する円偏光と偏極ミュオンの影響」
 (R4 年度 170 万円/全体 170 万円)
- 7. 基盤研究 (C) (一般) R1 年度~R4 年度: Wagner Alexander
 「Interstellar Turbulence by Supermassive Black-Hole Jets, Winds, and Radiation」
 (R4 度 90 万円/全体 260 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」
 (R4 年度 450 万円/全体 1150 万円)
- 9. 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」
 (R4 年度 100 万円/全体 290 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」
 (R4 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」
 (R4 年度分担金 10 万円/分担金全体 40 万円)

- 3. 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」
 (R4 年度分担金 20 万円/分担金全体 80 万円)
- 4. 基盤研究 (B) R2 年度~R5 年度:梅村雅之(代表者:石原卓)
 「乱流の大規模直接数値計算から探る原始惑星系円盤のダスト成長の新シナリオ」
 (R3 年度分担金 10 万円/分担金全体 40 万円)
- 5. 高性能汎用計算機高度利用事業, R2 年度~R4 年度:大須賀健(代表者:牧野淳一郎)

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

(R4 年度 22.5 万円/分担金全体 975 万円)

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

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

(R4 年度 20 万円/分担金全体 894 万円)

- 7. 基盤研究 (A) H30 年度~R4 年度: 矢島秀伸(代表者: 児玉忠恭)
 「銀河形成の加速と減速を司る物理過程の実証的解明」
 (R4 年度分担金 5 万円/分担金全体 40 万円)
- 8. 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」
 (R4 年度分担金 20 万円/分担金全体 77 万円)
- 9. 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」

(R4 年度分担金 50 万円/分担金全体 250 万円)

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. Yuta Asahina and Ken Ohsuga. "General Relativistic Radiation Magnetohydrodynamics Sim ulations of Black Hole Accretion Disks: Comparison of Methods Based on Variable Eddington

Tensor and Based on M1 Closure". *ApJ* 929.1, 93 (Apr. 2022), p. 93. doi: 10.3847/1538-4357/ac5d37.

- Yuh Tsunetoe, Shin Mineshige, Tomohisa Kawashima, Ken Ohsuga, Kazunori Akiyama, et al. "Investigating the Disk-Jet Structure in M87 through Flux Separation in the Linear and Circular Polarization Images". *ApJ* 931.1, 25 (May 2022), p. 25. doi: 10.3847/1538-4357/ac66dd. arXiv: 2202.12904 [astro-ph.HE].
- Aoto Utsumi, Ken Ohsuga, Hiroyuki R. Takahashi, and Yuta Asahina. "Component of Energy Flow from Supercritical Accretion Disks Around Rotating Stellar Mass Black Holes". *ApJ* 935.1, 26 (Aug. 2022), p. 26. doi: 10 . 3847 / 1538 - 4357 / ac7eb8. arXiv: 2207 . 02560 [astro ph.HE].
- G. Fabbiano, A. Paggi, R. Morganti, M. Baloković, incl. A. Wagner, et al. "Jet-ISM Interaction in NGC 1167/B2 0258+35, an LINER with an AGN Past". *ApJ* 938.2, 105 (Oct. 2022), p. 105. doi: 10.3847/1538-4357/ac8ff8. arXiv: 2209.02549 [astro-ph.GA].
- Mitsuo Shoji, Natsuki Watanabe, Yuta Hori, Kenji Furuya, Masayuki Umemura, et al. "Com prehensive Search of Stable Isomers of Alanine and Alanine Precursors in Prebiotic Syntheses". *Astrobiology* 22.9 (Sept. 2022), pp. 1129–1142. doi: 10.1089/ast.2022.0011.
- Yuh Tsunetoe, Shin Mineshige, Tomohisa Kawashima, Ken Ohsuga, Kazunori Akiyama, et al. "Diverse Polarimetric Features of AGN Jets from Various Viewing Angles: Towards a Unified View". *Galaxies* 10.5 (Oct. 2022), p. 103. doi: 10.3390/galaxies10050103. arXiv: 2210. 12162 [astro-ph.HE].
- Moun Meenakshi, Dipanjan Mukherjee, Alexander Y. Wagner, Nicole P. H. Nesvadba, Raffaella Morganti, et al. "The extent of ionization in simulations of radio-loud AGNs impacting kpc gas discs". MNRAS 511.2 (Apr. 2022), pp. 1622–1636. doi: 10.1093 / mnras / stac167. arXiv: 2201.06797 [astro-ph.GA].
- Qirong Zhu, Yuexing Li, Yiting Li, Moupiya Maji, Hidenobu Yajima, et al. "The formation of the first quasars: the black hole seeds, accretion, and feedback models". *MNRAS* 514.4 (Aug. 2022), pp. 5583–5606. doi: 10.1093/mnras/stac1556.
- Mikiya M. Takahashi, Ken Ohsuga, Rohta Takahashi, Takumi Ogawa, Masayuki Umemura, et al. "3D photon conserving code for time-dependent general relativistic radiative transfer: CAR TOON". *MNRAS* 517.3 (Dec. 2022), pp. 3711–3722. doi: 10.1093/mnras/stac2822. arXiv: 2210.00686 [astro-ph.HE].
- Ignacio Botella, Shin Mineshige, Takaaki Kitaki, Ken Ohsuga, and Tomohisa Kawashima.
 "Structure of the super-Eddington outflow and its impact on the cosmological scale". *PASJ* 74.2 (Apr. 2022), pp. 384–397. doi: 10.1093/pasj/psac001. arXiv: 2202.13805 [astro-ph.GA].

- Shogo Yoshioka, Shin Mineshige, Ken Ohsuga, Tomohisa Kawashima, and Takaaki Kitaki. "Large-scale outflow structure and radiation properties of super-Eddington flow: Dependence on the accretion rates". *PASJ* 74.6 (Dec. 2022), pp. 1378–1395. doi: 10.1093/pasj/psac076. arXiv: 2209.01427 [astro-ph.HE].
- Arnau Quera-Bofarull, Chris Done, Cedric G. Lacey, Mariko Nomura, and Ken Ohsuga.
 "QWIND3: UV line-driven accretion disc wind models for AGN feedback". *MNRAS* 518.2 (Jan. 2023), pp. 2693–2711. doi: 10.1093/mnras/stac3171.
- Koki Otaki and Masao Mori. "Study of galaxy collisions and thermodynamic evolution of gas using the Exact Integration scheme". *Lecture Notes in Computer Science* 13378 (Aug. 2022), pp. 373–387. doi: https://doi.org/10.1007/978-3-031-10562-3_27.
- Yuichi. Takamizu, Masayuki Umemura, Hidenobu Yajima, Makito Abe, and Yoko Hoshi.
 "Deep Learning of Diffuse Optical Tomography Based on Time-Domain Radiative Transfer Equation". *Applied Sciences* 24.12511 (Dec. 2022), pp. 1–14. doi: https://doi.org/10.3390/app122412511.
- Suma Murthy, Raffaella Morganti, Alexander Y. Wagner, Tom Oosterloo, Pierre Guillard, et al. "Cold gas removal from the centre of a galaxy by a low-luminosity jet". *Nature Astronomy* 6 (Feb. 2022), pp. 488–495. doi: 10.1038/s41550-021-01596-6. arXiv: 2202.05222 [astro ph.GA].
- Moun Meenakshi, Dipanjan Mukherjee, Alexander Y. Wagner, Nicole P. H. Nesvadba, Geoffrey V. Bicknell, et al. "Modelling observable signatures of jet-ISM interaction: thermal emission and gas kinematics". *MNRAS* 516.1 (Oct. 2022), pp. 766–786. doi: 10.1093/mnras/stac2251. arXiv: 2203.10251 [astro-ph.GA].
- A. Audibert, C. Ramos Almeida, S. García-Burillo, F. Combes, M. Bischetti, et al. "Jetinduced molecular gas excitation and turbulence in the Teacup". A&A 671, L12 (Mar. 2023), p. L12. doi: 10.1051/0004-6361/202345964. arXiv: 2302.13884 [astro-ph.GA].
- Hayato Shimabukuro, Kenji Hasegawa, Akira Kuchinomachi, Hidenobu Yajima, and Shintaro Yoshiura. "Exploring the cosmic dawn and epoch of reionization with the 21 cm line". *PASJ* 75 (Feb. 2023), S1–S32. doi: 10.1093/pasj/psac042. arXiv: 2303.07594 [astro-ph.CO].
- Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, Yoshiki Yamaguchi, Taisuke Boku, Kohji Yoshikawa, et al. "GPU FPGA-Accelerated Radiative Transfer Simulation with Inter-FPGA Communication". *HPC Asia '23* (Mar. 2023), pp. 117–125. doi: 10.1145/3578178.3578231.
- 20. Akinori Matsumoto, Masami Ouchi, Kimihiko Nakajima, Masahiro Kawasaki, Kai Murai, et al. "EMPRESS. VIII. A New Determination of Primordial He Abundance with Extremely Metal poor Galaxies: A Suggestion of the Lepton Asymmetry and Implications for the Hubble

Tension". *ApJ* 941.2, 167 (Dec. 2022), p. 167. doi: 10.3847/1538-4357/ac9ea1. arXiv: 2203.09617 [astro-ph.CO].

Yuta Hori, Honami Nakamura, Takahide Sakawa, Natsuki Watanabe, Megumi Kayanuma, et al. "Theoretical Investigation into a Possibility of Formation of Propylene Oxide Homochirality in Space". *Astrobiology* 22.11 (Nov. 2022), pp. 1330–1336. doi: 10.1089/ast.2022.0005.

B) 査読なし論文

 Taichi Igarashi, Yosuke Matsumoto, Ryoji Matsumoto, Yoshiaki Kato, incl. Ken Ohsuga, et al. "Radiation Magnetohydrodynamic Simulations of sub-Eddington accretion flows in AGN". Vol. 44. July 2022, p. 2284.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

- T. Kawashima, K. Asano, K. Ohsuga, and H.R. Takahashi. "Images, Radiation and Neutrino Spectra of Black Hole Accretion Flows Computed by GRRT Code RAIKOU". The 15th Asia Pacific Physics Conference (APPC15) (Online, Aug. 21–26, 2022).
- M. Nomura, K. Ohsuga, Chris Done, Kazuyuki Omukai, M. Mizumoto, et al. "Radiation hydrodynamics simulations of AGN winds: comparison with observations and impact on SMBH growth". 9th East Asian Numerical Astrophysics Meeting (EANAM9) (Tenbusu Naha, Okinawa, Japan, Sept. 26–30, 2022). url: https://hpc.imit.chiba-u.jp/eanam9/.
- T. Kawashima, K. Ohsuga, and H.R. Takahashi. "Images and Spectra of Black hole Accretion Flows Computed by GRRT Code RAIKOU". 6th Asia Pacific Conference on Plasma Physics (AAPPS-DPP 2022) (Online, Oct. 9–14, 2022).
- Y. Tsunetoe, S. Mineshige, T. Kawashima, K. Ohsuga, K. Akiyama, et al. "Polarized Radiative Transfer: Linking the Images and Magnetic Fields around Black Holes". Black hole astrophysics with VLBI 2023 (Online/NAOJ, Feb. 6–8, 2023).
- 5. 矢島秀伸. "FOREVER22: the first bright galaxies with population III stars and comparisons with JWST data". NECO JWST workshop (Online, Dec. 14–14, 2022).

B) 一般講演

 Makito Abe. "CGM/IGM properties around massive galaxies in protocluster regions". France Japan Galaxy Formation Workshop (The University of Tokyo, Tokyo, Japan, Nov. 16–17, 2022).

- Yuta Asahina. "Simulations of black hole accretion flows using GR-RMHD code INAZUMA". The 30th Anniversary Symposium of the Center for Computational Sciences at the University of Tsukuba (Epochal Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Japan, Oct. 13–14, 2022). url: https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/sympo20221013en/.
- 3. Hajime Fukushima. "RHD simulation of young massive star cluster formation". France-Japan Galaxy Formation Workshop (The University of Tokyo, Tokyo, Japan, Nov. 16–17, 2022).
- H. Fukushima and H. Yajima. "Radiation Hydrodynamics Simulations of Extremely Metal-Poor Galaxies". Early Disk-Galaxy Formation from JWST to the Milky Way (Kuala Lumpur, Malaysia, Feb. 6–10, 2023).
- 5. Takanobu Kirihara. "Merger Conditions of Population III protostar binaries". Symposium on Gravitational wave physics and astronomy: Genesis (online, Apr. 25–29, 2022).
- Takanobu Kirihara. "Migration of a massive black hole in a disk galaxy". France-Japan Galaxy Formation Workshop (The University of Tokyo, Tokyo, Japan, Nov. 16–17, 2022).
- K. Otaki and M. Mori. "Study of galaxy collisions and thermodynamic evolution of gas using the Exact Integration scheme". The 22nd International Conference on Computational Science and Its Applications (Malaga, Spain, July 4–7, 2022).
- Koki Otaki and Masao Mori. "Study of collision frequency between dark matter subhalos in a host galaxy". Conference on Computational Physics (University of Texas at Austin / On-line, Aug. 1–4, 2022).
- Masao Mori, Yuka Kaneda, Yudai Kazuno, and Koki Otaki. "Evolution of dark matter subhalos with an effect of tidal stripping from the growing Milky-Way-like host halo". IAU General Assembly, Division Meeting: Interstellar Matter and Local Universe (Busan, Korea / On-line, Aug. 5–8, 2022).
- Ayami Hotta, Masao Mori, and Koki Otaki. "Formation of the Andromeda Giant Southern Stream and the 10 kpc ring in the Andromeda galaxy". IAU General Assembly, Division Meeting: Interstellar Matter and Local Universe (Busan, Korea / On-line, Aug. 5–8, 2022).
- Koki Otaki and Masao Mori. "Bifurcation between the formation of dark-matter-dominated galaxies and dark-matter-deficient galaxies via dark matter subhalo collisions". IAU Symposium 373: Resolving the Rise and Fall of Star Formation in Galaxies (Busan, Korea / On-line, Aug. 9– 11, 2022).
- Koki Otaki and Masao Mori. "Physical conditions for collision-induced formation of galaxies".
 9th East Asian Numerical Astrophysics Meeting (EANAM9) (Tenbusu Naha, Okinawa, Japan, Sept. 26–30, 2022). url: https://hpc.imit.chiba-u.jp/eanam9/.

- Masao Mori. "Galaxy Collisions and Evolution of Galaxies". The 30th Anniversary Symposium of the Center for Computational Sciences at the University of Tsukuba (Epochal Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Japan, Oct. 13–14, 2022). url: https://hpc.imit.chiba u.jp/eanam9/.
- 14. Yuka Kaneda, Koki Otaki, and Masao Mori. "The effect of the cusp-to-core transformation on universal scaling relations of dark matter haloes". KASHIWA DARK MATTER SYMPOSIUM 2022 (Kashiwa Campus, The University of Tokyo and online, Nov. 29, 2022). url: https://2022.kashiwa-darkmatter-symposia.org/.
- Koki Otaki and Masao Mori. "Galaxy Collisions and Formation of Dwarf Galaxies". KASHIWA DARK MATTER SYMPOSIUM 2022 (Kashiwa Campus, The University of Tokyo and online, Nov. 29, 2022). url: https://2022.kashiwa-darkmatter-symposia.org/.
- K. Otaki and M. Mori. "Physical Conditions for Collision-Induced Formation of Galaxies". EARLY DISK-GALAXY FORMATION FROM JWST TO THE MILKY WAY (Kuala Lumpur, Malaysia, Feb. 6–10, 2023).
- Y. Kaneda, K. Otaki, and M. Mori. "The Evolution and Scaling Relations of Dark Matter Haloes". EARLY DISK-GALAXY FORMATION FROM JWST TO THE MILKY WAY (Kuala Lumpur, Malaysia, Feb. 6–10, 2023).
- M. Mori, A. Hotta, K. Otaki, and T. Kirihara. "Formation of the Andromeda Giant Southern Stream and the ring structures in the Andromeda Galaxy". Dynamical Masses of Local Group Galaxies (Potsdam, Mar. 20–24, 2023).
- Y. Kaneda, K. Otaki, and M. Mori. "Dynamical evolution of the sub-galactic dark matter halos and the effect of the cusp-to-core transformation". Dynamical Masses of Local Group Galaxies (Potsdam, Mar. 20–24, 2023).
- 20. Oerd Xhemollari. "The Formation of Pop III Star Clusters under UV radiation". France-Japan Galaxy Formation Workshop (The University of Tokyo, Tokyo, Japan, Nov. 16–17, 2022).
- Y. Tsunetoe, S. Mineshige, T. Kawashima, K. Ohsuga, K. Akiyama, et al. "The Jet-Disk Structure in M87: Flux Separation in the Linear and Circular Polarization Image". Assembling the ngEHT (Granada, Spain, June 22–25, 2022).
- Y. Tsunetoe, S. Mineshige, T. Kawashima, K. Ohsuga, K. Akiyama, et al. "Investigation of the Jet-Disk Structure in M87: Flux Separation in the Linear and Circular Polarization Images". European Astronomical Society Annual Meeting 2022 (Valencia, Spain, June 27–July 1, 2022).

- T. Igarashi, Y. Kato, H. R. Takahashi, K. Ohsuga, Y. Matsumoto, et al. "Radiation Magnetohydrodynamic Simulations of sub-Eddington accretion flows in AGN". COSPAR 2022-44th Scientific Assembly (Athens, Greece, July 16–24, 2022).
- R. Matsumoto, T. Igarashi, Y. Kato, H. R. Takahashi, K. Ohsuga, et al. "Enhanced Activity of Black Hole Accretion Flows during Hard-to-Soft State Transition". IAU General Assembly (Busan, Korea / On-line, Aug. 2–11, 2022).
- R. Matsumoto, T. Igarashi, H. R. Takahashi, K. Ohsuga, and Y. Matsumoto. "Global Three dimensional Radiation Magnetohydrodynamic Simulations of Changing Look Active Galactic Nuclei". 33rd IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2022) (Texas, USA / Online, Aug. 1–4, 2022).
- T. Mushano, T. Ogawa, K. Ohsuga, H. Yajima, and K. Omukai. "Impacts of Lyman-alpha radiation force on the super-Eddington accretion flow onto massive black holes". 9th East Asian Numerical Astrophysics Meeting (EANAM9) (Tenbusu Naha, Okinawa, Japan, Sept. 26–30, 2022). url: https://hpc.imit.chiba-u.jp/eanam9/.
- A. Utsumi, K.Ohsuga, H. R. Takahashi, and Y. Asahina. "General relativistic radiation-MHD simulations of supercritical accretion around rotating black holes". 9th East Asian Numerical Astrophysics Meeting (EANAM9) (Tenbusu Naha, Okinawa, Japan, Sept. 26–30, 2022). url: https://hpc.imit.chiba-u.jp/eanam9/.
- A. Inoue, K. Ohsuga, H. R. Takahashi, and Y. Asahina. "General relativistic radiation-MHD simulations of super-Eddington accretion flows and powerful outflows around neutron stars with dipole magnetic fields". 9th East Asian Numerical Astrophysics Meeting (EANAM9) (Tenbusu Naha, Okinawa, Japan, Sept. 26–30, 2022). url: https://hpc.imit.chiba-u.jp/eanam9/.
- E. Ogata, K. Ohsuga, H. Fukushima, and H. Yajima. "Formation of Supermassive Black Holes through Gas Accretion on Moving Black Holes". 9th East Asian Numerical Astrophysics Meeting (EANAM9) (Tenbusu Naha, Okinawa, Japan, Sept. 26–30, 2022). url: https://hpc.imit. chiba-u.jp/eanam9/.
- M. Takahashi, K. Ohsuga, R. Takahashi, M. T. Ogawa, Umemura, et al. "Development of Novel General Relativistic Radiative Transfer Code; CARTOON". 9th East Asian Numerical Astro physics Meeting (EANAM9) (Tenbusu Naha, Okinawa, Japan, Sept. 26–30, 2022). url: https://hpc.imit.chiba-u.jp/eanam9/.
- 31. Ken Ohsuga. "Structure Formation in the Universe using Radiation Transfer and Radiation Hydrodynamics Simulations". The 30th Anniversary Symposium of the Center for Computational Sciences at the University of Tsukuba (Epochal Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Japan, Oct. 13–14, 2022).

url: https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/sympo20221013en/.

- T. Kawashima, K. Ohsuga, H.R., Takahashi, and K. Asano. "Computations of images, pho ton and neutrino spectra using a general relativistic radiative transfer code RAIKOU". 9th East Asian Numerical Astrophysics Meeting (EANAM9) (Tenbusu Naha, Okinawa, Japan, Sept. 26–30, 2022). url: https://hpc.imit.chiba-u.jp/eanam9/.
- 33. Y. Tsunetoe, S. Mineshige, T. Kawashima, K. Ohsuga, K. Akiyama, et al. "Investigating Jet Disk Structure through Linear and Circular Polarization Images". IAU symposium 375 - the Multimessenger Chakra of Blazar Jets (Kathmandu, Nepal, Dec. 5–9, 2022).
- 34. A. Inoue, K. Ohsuga, H. R. Takahashi, and Y. Asahina. "General relativistic magneto hydrodynamic simulations of super-Eddington accretion flows and powerful outflows around neutron stars with dipole magnetic fields". Magnetism & Accretion (Cape Town, South Africa, Jan. 16–19, 2023).
- A. Inoue, K. Ohsuga, H. R. Takahashi, and Y. Asahina. "General relativistic radiation-MHD simulations of super-Eddington accretion flows onto neutron stars: spin-up rate of ULX pulsars". Black hole astrophysics with VLBI 2023 (Online/NAOJ, Feb. 6–8, 2023).
- M. Takahashi, K. Ohsuga, and T. Kawashima. "Time variation of the crescent shaped shadow and the measurement of the black hole spin in M87". Black hole astrophysics with VLBI 2023 (Online/NAOJ, Feb. 6–8, 2023).
- T. Kawashima, T. Hitomi, K. Ohsuga, and H.R. Takahashi. "Lense-Thirring precession of accretion flows and relativistic jets". Black hole astrophysics with VLBI 2023 (Online/NAOJ, Feb. 6– 8, 2023).
- Kenta Soga. "Coevolution of Protogalaxies and AGNs during the Cosmic Reionization Era". France-Japan Galaxy Formation Workshop (The University of Tokyo, Tokyo, Japan, Nov. 16– 17, 2022).
- Gerald Cecil, Pei-Ying Hsieh, Alexander Y. Wagner, and Haoyang (Cyrus) Liu. "The Milky Way's Vestigial Nuclear Jet: Traced with Molecules and X-rays, Modeled with Simulations".
 240th American Astronomical Society Meeting (Pasadena Convention Center, Pasadena, California, June 12–16, 2022). url: https://aas.org/meetings/aas240/.
- 40. Alexander Y. Wagner. "Insights into the AGN feedback process using special-relativistic hydro dynamical simulations of jet-ISM interactions". 9th East Asian Numerical Astrophysics Meeting (EANAM9) (Tenbusu Naha, Okinawa, Japan, Sept. 26–30, 2022). url: https://hpc.imit. chiba-u.jp/eanam9/.
- 41. Alexander Wagner. "The extreme physics of galaxy evolution: CFD simulations of relativistic jets and radiation interacting with highly compressible astrophysical gases". EPCC-CCS

Workshop 2022 (EPCC, The University of Edinburgh, and online, Dec. 14–15, 2022). url: https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/2022-epcc-ccs-wsj/.

- 42. Hidenobu Yajima. "Formation of the first massive star clusters in the first galaxies". Symposium on Gravitational wave physics and astronomy: Genesis (online, Apr. 25–29, 2022).
- 43. Hidenobu Yajima. "Development of in-vivo optical tomography by combining radiative transfer calculations and machine learning". The 30th Anniversary Symposium of the Center for Computational Sciences at the University of Tsukuba (Epochal Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Japan, Oct. 13–14, 2022). url: https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/sympo20221013en/.
- 44. Takeshi Akiba, Hidenobu Yajima, and Makito Abe. "21-cm signal around protoclusters". 9th East Asian Numerical Astrophysics Meeting (EANAM9) (Tenbusu Naha, Okinawa, Japan, Sept. 26–30, 2022). url: https://hpc.imit.chiba-u.jp/eanam9/.
- 45. Hidenobu Yajima. "FOREVER22 simulation project". France-Japan Galaxy Formation Workshop (The University of Tokyo, Tokyo, Japan, Nov. 16–17, 2022).
- 46. H. Yajima, M. Abe, and H. Fukushima. "Formation of the First Massive Galaxies in Cosmolog ical Simulations and Their Observational Properties". Early Disk-Galaxy Formation from JWST to the Milky Way (Kuala Lumpur, Malaysia, Feb. 6–10, 2023).
- H. Yajima, M. Abe, and H. Fukushima. "Cosmological Simulations of the First Galaxy Formation and Comparisons with JWST data". 9th Galaxy Evolution Workshop (Kyoto, Japan, Feb. 20–23, 2023).
- O. Xhemollari, H. Yajima, and M. Abe. "The Formation of Population III Star-Dominated Galax ies Under the Influence of the UV Background Radiation". 9th Galaxy Evolution Workshop (Kyoto, Japan, Feb. 20–23, 2023).
- 49. Kohji Yoshikawa. "Vlasov Simulation of Cosmic Relic Neutrinos in the Large-scale Structure on Supercomputer Fugaku". 2022 CCS-EPCC Workshop (online, Mar. 30–31, 2022).
- Kohji Yoshikawa. "Vlasov Simulation of Cosmic Relic Neutrinos on Supercomputer Fugaku".
 2022 LBNL/CSA Tsukuba/CCS Collaboration Meeting (online, Mar. 23–24, 2022).

(3) 国内学会·研究会発表

A) 招待講演

 朝比奈雄太,大須賀健,高橋博之,内海碧人,井上壮大,et al. ``輻射磁気流体力学計算 によるブラックホール近傍のプラズマ降着流・噴出流のダイナミクス". 第 152 回 地球 電磁気・地球惑星圏学会 総会・講演会 (相模原市立産業会館/神奈川,Nov. 4-7, 2022).

- 大須賀健, 高橋博之, 川島朋尚, 野村真理子, 北木孝明, et al. "ブラックホール降着 円盤およびガス噴出流の理論; これまでの進展と今後の課題". 銀河・銀河間ガス 研 究会 2022 (釧路ロイヤルインホテル / オンライン, Aug. 8–12, 2022). url: https: //www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/domestic/ja/2022/08/08/galaxy igm/.
- 矢島秀伸. "甲状腺癌診断に向けたヒト頸部の高精度輻射輸送シミュレーション". 日本 光学会生体ひかりイメージング産学連携専門委員会キックオフシンポジウム (静岡大 学浜松キャンパス, ハイブリッド開催, July 2, 2022).
- 吉川耕司."宇宙論的構造形成シミュレーションの SIMD 命令による高速化".「富岳」 成果創出加速プログラム研究交流会 (オンライン, Mar. 7–8, 2023).

B)その他の発表

- 安部牧人, 矢島秀伸, and 梅村雅之. "球面 wavelet 変換による 3 次元輻射輸送計算の高速化". Optics and Photonics Japan, 2022 (栃木県総合文化会館, Nov. 13–16, 2022).
- 秋葉健志. "原始銀河団領域の星形成活動と 21cm シグナルの関係". 銀河・銀河間ガ ス研究会 2022 (釧路ロイヤルインホテル / オンライン, Aug. 8–12, 2022). url: https: //www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/domestic/ja/2022/08/08/galaxy igm/.
- 朝比奈雄太 and 大須賀健. "歳差運動する超臨界降着円盤の一般相対論的輻射磁気流体計算". 第 35 回理論懇シンポジウム (コラッセふくしま/オンライン, Dec. 21–23, 2022). url: https://sites.google.com/view/rironkon2022/.
- 4. 朝比奈雄太 and 大須賀健. "大局的な降着円盤計算に向けた Adaptive Time Stepping 法の実装". CfCA ユーザーズミーティング (国立天文台/オンライン, Jan. 26–27, 2023).
- 朝比奈雄太 and 大須賀健. "歳差運動す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". ブラックホールジェット・降着円盤・円盤風研究会 2023 (東北大 学/オンライン, Mar. 1–2, 2023).
- 朝比奈雄太 and 大須賀健. "歳差運動する超臨界降着円盤の光度変動". 日本天文学 会春季年会 (立教大学/オンライン, Mar. 13–16, 2023).
- 福島肇 and 矢島秀伸. "初代銀河における星団形成シミュレーション". 初代星・初代 銀河研究会 2022 (徳島大学, Nov. 10–12, 2022).
- 8. 福島肇. "輻射流体シミュレーションによる星団形成の研究". マゼラン雲 ALMA ラ ージプログラム検討会 (九州大学/オンライン, June 22–23, 2022).
- 9. 福島肇, 矢島秀伸, and 安部牧人. "初代銀河における星団形成シミュレーション". 日本天文学会秋季年会(新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).

- 10. 木村和貴, 細川隆史, 杉村和幸, and 福島肇. "初代星形成における大質量原始星輻射 流体計算に向けて". 日本天文学会秋季年会 (新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13– 15, 2022).
- 11. 福島肇. "輻射流体シミュレーション: 星団形成". cfca スパコンリプレイスに向けた 仕様検討会 (オンライン, Oct. 12, 2022).
- 木村和貴,細川隆史,杉村和幸, and 福島肇. "3 次元高解像度輻射流体計算による SMS の内部構造".初代星・初代銀河研究会 2022 (徳島大学, Nov. 10–12, 2022).
- 13. 細川隆史, 猪口睦子, 福島肇, and 嶺重慎. "Observational Signatures of forming Young Massive Clusters". 初代星・初代銀河研究会 2022 (徳島大学, Nov. 10–12, 2022).
- 松本凛 and 福島肇. "大質量星形成過程における降着条件". 天体形成研究会 2022 (筑波大学/online, Nov. 4–5, 2022).
- 15. 福島肇, 矢島秀伸, and 梅村雅之. "宇宙空間における紫外線 (Lyα)円偏光波生成". 計 算アストロバイオロジー (筑波大学/online, Nov. 10–11, 2022).
- 木村和貴,細川隆史,杉村和幸, and 福島肇. "初期宇宙の超大質量形成における原始 星構造". 第 35 回理論懇シンポジウム (コラッセふくしま/オンライン, Dec. 21–23, 2022). url: https://sites.google.com/view/rironkon2022/.
- 福島肇, 矢島秀伸, and 安部牧人. "初代銀河における星団形成シミュレーション". 第 35 回理論懇シンポジウム (コラッセふくしま/オンライン, Dec. 21–23, 2022). url: https://sites.google.com/view/rironkon2022/.
- 福島肇,安部牧人, and 矢島秀伸. "初代銀河における星団形成シミュレーション:初 期質量関数の導出". CfCA ユーザーズミーティング (国立天文台/オンライン, Jan. 26-27, 2023).
- 福島肇, 安部牧人, and 矢島秀伸. "初代銀河における星団形成シミュレーション:初 期質量関数の導出".日本天文学会春季年会 (立教大学/オンライン, Mar. 13–16, 2023).
- 猪口睦子,細川隆史,嶺重慎,福島肇,矢島秀伸, et al. "Young Massive Cluster 形成時の観測的特徴: 連続光 spectrum と高密度 HII 領域". 日本天文学会春季年会 (立教 大学/オンライン, Mar. 13–16, 2023).
- 21. 木村和貴, 細川隆史, 杉村和幸, and 福島肇. "宇宙初期の超大質量星形成における原始星構造について". 日本天文学会春季年会 (立教大学/オンライン, Mar. 13–16, 2023).
- 海澤智幸, 久野成夫, ZHAI Guangyuan, 福島肇, 齋藤弘雄, et al. "天の川銀河のペルセ ウス腕における分子雲進化の研究". 日本天文学会春季年会 (立教大学/オンライン, Mar. 13–16, 2023).
- 23. 金田優香,数野優大,大滝恒輝, and 森正夫. ``ダークマターハローの Scaling Relation". 銀河・銀河間ガス研究会 2022 (釧路ロイヤルインホテル / オンライン,

Aug. 8–12, 2022). url: https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/domestic/ja/2022/08/ 08/galaxy-igm/.

- 24. 桐原崇亘. "恒星ストリーム形成の理論研究". 銀河考古学研究会 2022 (東北大学 (青葉山キャンパス), Sept. 8–9, 2022).
- 相原崇亘, 須佐元, 細川隆史, and 衣川智弥. "初代星原始星連星の合体条件". 第 35
 回理論懇シンポジウム (コラッセふくしま/オンライン, Dec. 21–23, 2022). url: https://sites.google.com/view/rironkon2022/.
- 26. 桐原崇亘, 須佐元, 細川隆史, and 衣川智弥. "近接初代星原始星連星の合体条件". 日本天文学会春季年会 (立教大学/オンライン, Mar. 13–16, 2023).
- 小上樹,石垣美歩,千葉柾司,小宮山裕, incl. 桐原崇亘, et al. "すばる望遠鏡/HSC による深観測で探る NGC5466 広域分布".日本天文学会春季年会 (立教大学/オンライン, Mar. 13–16, 2023).
- 大滝恒輝 and 森正夫."大質量銀河に付随するダークマターサブハロー同士の衝突頻度の解析". 日本天文学会 2022 年秋季年会(新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 29. 堀田彩水, 森正夫, and 大滝恒輝. "Andromeda Giant Southern Stream の形成過程と progenitor の起源". 日本天文学会 2022 年秋季年会 (新潟大学 (五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 30. 田中駿次 and 森正夫. "銀河系衛星銀河の軌道運動と潮汐効果". 日本天文学会 2022 年秋季年会 (新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 金田優香, 数野優大, 大滝恒輝, and 森正夫. "ダークマターハローの c-M relation と 観測との比較". 日本天文学会 2022 年秋季年会 (新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 32. 湯浅拓宏 and 森正夫. "Density-Independent SPH 法及び Godunov SPH 法への Integral Approach の適用とその性能". 日本天文学会 2022 年秋季年会 (新潟大学(五 +嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 33. 金田優香, 数野優大, 大滝恒輝, and 森正夫. "ダークマターハローのスケーリングと カスプコア遷移". 天体形成研究会 2022 (筑波大学/online, Nov. 4–5, 2022).
- 34. 佐藤創太 and 森正夫. "galaxy collision と stellar streams の形成". 天体形成研究会 2022 (筑波大学/online, Nov. 4–5, 2022).
- 35. 伊藤圭太 and 森正夫. "中心ブラックホールを持つ矮小銀河の潮汐進化". 天体形成 研究会 2022 (筑波大学/online, Nov. 4–5, 2022).
- 田中駿次 and 森正夫. "銀河系衛星銀河の軌道運動と潮汐効果による質量損失". 天体形成研究会 2022 (筑波大学/online, Nov. 4–5, 2022).

- 大滝恒輝 and 高橋大介 and 森正夫. "GPU を用いた SPH 法の高速化". 天体形成研究会 2022 (筑波大学/online, Nov. 4–5, 2022).
- 38. 湯浅拓宏 and 森正夫. "Riemann solver を用いた Density-Independent Smoothed Particle Hydrodynamics(DISPH) の再構成,Godunov DISPH 法について". 天体形成研 究会 2022 (筑波大学/online, Nov. 4–5, 2022).
- 39. 堀田彩水 and 森正夫 and 大滝恒輝. "アンドロメダ銀河の力学進化と Andromeda Giant Southern Stream の形成過程". 天体形成研究会 2022 (筑波大学/online, Nov. 4–5, 2022).
- 40. 大滝恒輝 and 森正夫. "Milky Way-like ホストハローにおけるダークマターサブハロ
 一同士の衝突頻度". 第 35 回理論懇シンポジウム (コラッセふくしま/オンライン,
 Dec. 21–23, 2022). url: https://sites.google.com/view/rironkon2022/.
- 41. 金田優香, 大滝恒輝, and 森正夫. "ダークマターハローのカスプ-コア遷移とスケーリング則". 第 35 回理論懇シンポジウム (コラッセふくしま/オンライン, Dec. 21–23, 2022). url: https://sites.google.com/view/rironkon2022/.
- 42. 森正夫 and 堀田彩水 and 大滝恒輝. "Galaxy Collisions and Dynamical Evolution of the Andromeda Galaxy". 日本天文学会春季年会 (立教大学/オンライン, Mar. 13–16, 2023).
- 3. 湯浅拓宏 and 森正夫. "改良版 Balsara Switch を用いた、SPH 法の持つ空間ゼロ次誤 差が誘発する偽 Kelvin-Helmholtz 不安定の抑制". 日本天文学会春季年会 (立教大学 /オンライン, Mar. 13–16, 2023).
- 44. 金田優香, 大滝恒輝, and 森正夫. "ダークマターハローの scaling relation の起源とカスプ-コア遷移". 日本天文学会春季年会 (立教大学/オンライン, Mar. 13–16, 2023).
- 45. 大滝恒輝 and 森正夫. "銀河衝突によるダークマター欠乏銀河の形成:フィードバックモデル依存性について". 日本天文学会春季年会 (立教大学/オンライン, Mar. 13–16, 2023).
- 46. 武者野拓也,小川拓未,大須賀健,矢島秀伸, and 大向一行. "超臨界ブラックホール 降着流におけるライマンアルファ輝線の輻射力の計算". 銀河・銀河間ガス研究会
 2022 (釧路 ロイヤルインホテル / オンライン, Aug. 8–12, 2022). url: https://www2.ccs.tsukuba. ac.jp/Astro/conferences/domestic/ja/2022/08/08/galaxy-igm/.
- 47. 尾形絵梨花,大須賀健,福島肇, and 矢島秀伸. "Dusty-gas 中を浮遊する中質量ブラックホールの降着成長過程:ダストの昇華と非等方輻射の影響".銀河・銀河間ガス研究会 2022 (釧路ロイヤルインホテル / オンライン, Aug. 8–12, 2022). url: https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/domestic/ja/2022/08/08/galaxy igm/.
- 48. 小川拓未,朝比奈雄太,大須賀健,髙橋博之, and 川島朋尚. "ボルツマン輻射輸送に よるコンプトン冷却を考慮した輻射非効率降着流の電子温度計算". 第 35 回理論懇

シンポジウム (コラッセふくしま/オンライン, Dec. 21–23, 2022). url: https://sites.google. com/view/rironkon2022/.

- 49. 高橋労太,梅村雅之,大須賀健,朝比奈雄太,竹田麟太郎, et al. "相対論的流体中から 放出された光子の多重散乱効果". 日本天文学会 2022 年秋季年会 (新潟大学(五十嵐 キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 50. 五十嵐太一,高橋博之,大須賀健,松本洋介, and 松元 亮治. "コンプトン冷却された ブラックホール降着流の輻射磁気流体シミュレーション". 日本天文学会 2022 年秋 季年会(新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 51. 芳岡尚悟, 嶺重慎, 大須賀健, 川島朋尚, and 北木孝明. "超臨界降着流からのアウトフロー; 運動学的光度の質量降着率依存性とその起源". 日本天文学会 2022 年秋季年会(新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 52. 川島朋尚, 大須賀健, and 高橋博之. "将来の X 線干渉計観測に向けた X 線ブラックホールシャドウ予測". 日本天文学会 2022 年秋季年会 (新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 53. 恒任優, 嶺重慎, 川島朋尚, 大須賀健, 秋山和徳, et al. "銀河系中心 SgrA*の偏光画像 から探る磁場構造、および活動銀河核ジェット駆動機構解明へのシナジー". 日本天 文学会 2022 年秋季年会 (新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 54. 川島朋尚, 大須賀健, and 高橋博之. "ブラックホール降着流の観測的特徴:一般相対 論的磁気流体シミュレーション・データに基づく一般相対論的輻射輸送計算". 日本 流体力学会年会 (京都大学, Sept. 27–29, 2022).
- 55. 尾形絵梨花, 大須賀健, 福島肇, and 矢島秀伸. "Dusty-gas 中を浮遊する種ブラックホ ールの降着成長過程; ダスト昇華と非等方輻射場の影響". 初代星・初代銀河研究会 2022(徳島大学, Nov. 10–12, 2022).
- 56. 人見拓也,川島朋尚,荻原大樹,髙橋博之, and 大須賀健. "一般相対論的輻射輸送計 算による歳差運動する低光度降着円盤の輻射スペクトルの特性". 天体形成研究会 2022 (筑波大学/online, Nov. 4–5, 2022).
- 57. 大野翔大, 大須賀健, 高橋博之, 朝比奈雄太, and 内海碧人. "一般相対論的輻射磁気 流体シミュレーションによる降着円盤の最内縁付近の調査". 天体形成研究会 2022 (筑波 大学/online, Nov. 4–5, 2022).
- 58. 植松正揮, 大須賀健, and 福島肇. "ラインフォース駆動型円盤風の噴出によるブラックホール降着円盤の時間変化の研究". 天体形成研究会 2022 (筑波大学/online, Nov. 4-5, 2022).
- 59. 黒田裕太郎 and 大須賀健. "Line Force 駆動型円盤風の解明に向けた 1 次元流体計算". 天体形成研究会 2022 (筑波大学/online, Nov. 4–5, 2022).

- 60. 上野航介 and 大須賀健. "機械学習によるエディントンテンソルの推測に向けて". 天体形成研究会 2022 (筑波大学/online, Nov. 4–5, 2022).
- 大須賀健. "BH 降着円盤シミュレーションの現状と今後".「富岳で加速する素粒子・ 原子核・宇宙・惑星」シンポジウム (神戸大学/オンライン, Dec. 12–13, 2022).
- 62. 内海碧人,大須賀健,高橋博之, and 朝比奈雄太. "カー・ブラックホール周りの超臨
 界降着円盤からのエネルギー解放;超高光度 X 線源との比較". 第 35 回理論懇シンポジウム (コラッセふくしま/オンライン, Dec. 21–23, 2022).
 url: https://sites.google.com/ view/rironkon2022/.
- 63. 尾形絵梨花,大須賀健,福島肇, and 矢島秀伸. "Dusty-gas 中を漂う中質量ブラックホールへのガス降着過程:非等方輻射とダスト昇華の効果".第 35 回理論懇シンポジウム (コラッセふくしま/オンライン, Dec. 21–23, 2022). url: https://sites.google.com/view/rironkon2022/.
- 64. 島田悠愛, 大須賀健, 髙橋博之, and 朝比奈雄太. "突発的超臨界降着現象における降 着衝撃波の研究". 第 35 回理論懇シンポジウム (コラッセふくしま/オンライン, Dec. 21-23, 2022). url: https://sites.google.com/view/rironkon2022/.
- 65. 高橋幹弥,大須賀健,高橋労太,小川拓未,梅村雅之, et al. "光子数保存を保証する空間3次元一般相対論的輻射輸送コードの開発".第35回理論懇シンポジウム (コラッセふくしま/オンライン, Dec. 21–23, 2022). url: https://sites.google.com/view/rironkon2022/.
- 66. 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偏光 X 線の輻射輸送計算コードの開発". 第 35 回理論懇シンポジウム (コラッセふくしま/オンライン, Dec. 21–23, 2022). url: https://sites.google.com/view/rironkon2022/.
- 67. 井上壮大, 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高光度 X 線パルサーのスピンアップレート". 第 35 回 理論懇シンポジウム (コラッセふくしま/オンライン, Dec. 21–23, 2022). url: https: //sites.google.com/view/rironkon2022/.
- 68. 恒任優,嶺重慎,川島朋尚,大須賀健,秋山和徳, et al. "直線偏光・円偏光画像から探る、超大質量ブラックホールの円盤ージェット構造". 第 35 回理論懇シンポジウム (コラッセふくしま/オンライン, Dec. 21–23, 2022). url: https://sites.google.com/view/ rironkon2022/.
- 69. 五十嵐太一,高橋博之,大須賀健,松本洋介, and 松元 亮治. "活動銀河核における軟 X 線放射領域の輻射磁気流体シミュレーション". 第 35 回理論懇シンポジウム (コ ラッセふくしま/オンライン, Dec. 21–23, 2022). url: https://sites.google.com/view/ rironkon2022/.

- 70. 尾形絵梨花,大須賀健,福島肇, and 矢島秀伸. "Bondi-Hoyle-Lyttleton 機構による種 ブラックホールの成長過程:輻射場の非等方性とダスト昇華の影響". CfCA ユーザ ーズミーティング (国立天文台/オンライン, Jan. 26–27, 2023).
- 71. 井上壮大,大須賀健,高橋博之, 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". CfCA ユーザーズミーティング (国立天文台/オンライン, Jan. 26–27, 2023).
- 72. 尾形絵梨花,大須賀健,福島肇, and 矢島秀伸. "Dusty-gas 中を浮遊する種ブラックホール降着円盤への降着過程:ダスト昇華と非等方輻射場の影響". ブラックホールジェット・降着円盤・円盤風研究会 2023 (東北大学/オンライン, Mar. 1–2, 2023).
- 73. 大野翔大,大須賀健,高橋博之,朝比奈雄太, and 内海碧人. "一般相対論的輻射磁気 流体力学計算による亜臨界降着円盤の内縁構造とブラックホールスピンの研究". ブ ラックホールジェット・降着円盤・円盤風研究会 2023 (東北大学/オンライン, Mar. 1– 2, 2023).
- 74. 内海碧人,大須賀健,高橋博之, and 朝比奈雄太. "カー・ブラックホール周りにおける Magnetically Arrested Supercritical Disk の一般相対論的輻射磁気流体シミュレーション". ブラックホールジェット・降着円盤・円盤風研究会 2023 (東北大学/オンライン, Mar. 1–2, 2023).
- 75. 井上壮大,大須賀健,高橋博之, and 朝比奈雄太. "磁化した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". ブラックホールジェット・ 降着円盤・円盤風研究会 2023 (東北大学/オンライン, Mar. 1–2, 2023).
- 76. 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偏光 X 線の輻射輸送計算コードの開発". ブラックホールジェット・降着円盤・円盤風研究会 2023 (東北大学/オンライン, Mar. 1–2, 2023).
- 77. 島田悠愛, 大須賀健, 髙橋博之, and 朝比奈雄太. "突発的超臨界降着現象における降 着衝撃波の研究". ブラックホールジェット・降着円盤・円盤風研究会 2023 (東北大 学/オンライン, Mar. 1–2, 2023).
- 78. 芳岡尚悟, 嶺重慎, 大須賀健, 川島朋尚, and 北木孝明. "大局的輻射流体計算で探る、 超臨界降着流のアウトフローと運動学的光度". ブラックホールジェット・降着円盤・ 円盤風研究会 2023 (東北大学/オンライン, Mar. 1–2, 2023).
- 79. 川島朋尚, 大須賀健, and 高橋博之. "Lense-Thirring 歳差を伴う降着流・相対論的ジェ ットの多波長放射特性". ブラックホールジェット・降着円盤・円盤風研究会 2023 (東 北 大学/オンライン, Mar. 1–2, 2023).

- 都丸亮太, Chris Done, 高橋忠幸, 小高裕和, 大須賀健, et al. "X 線連星における熱・放射駆動型円盤風". ブラックホールジェット・降着円盤・円盤風研究会 2023 (東北大学/オ ンライン, Mar. 1–2, 2023).
- 五十嵐太一,高橋博之,大須賀健,松本洋介, and 松元亮治. "Changing Look AGN に おける軟 X 線放射領域の輻射磁気流体モデル". ブラックホールジェット・降着円 盤・円盤風研究会 2023 (東北大学/オンライン, Mar. 1–2, 2023).
- 高橋幹弥,大須賀健, and 川島朋尚. "M87 における三日月状シャドウの時間変動と ブラックホールスピンの測定". ブラックホールジェット・降着円盤・円盤風研究会 2023 (東北大学/オンライン, Mar. 1–2, 2023).
- 高橋幹弥,大須賀健, and 川島朋尚. "M87 における三日月状シャドウの時間変動と ブラックホールスピンの測定". 日本天文学会春季年会 (立教大学/オンライン, Mar. 13–16, 2023).
- 84. 内海碧人,大須賀健,高橋博之, and 朝比奈雄太. "カー・ブラックホール周りにおける Magnetically Arrested Supercritical Disk の一般相対論的輻射磁気流体シミュレーション". 日本天文学会春季年会 (立教大学/オンライン, Mar. 13–16, 2023).
- 85. 大野翔大,大須賀健,高橋博之,朝比奈雄太, and 内海碧人. "一般相対論的輻射磁気 流体力学計算による亜臨界降着円盤の内縁構造とブラックホールスピンの研究".日 本天文学会春季年会 (立教大学/オンライン, Mar. 13–16, 2023).
- 86. 尾形絵梨花,大須賀健,福島肇, and 矢島秀伸. "Dusty-gas 内を漂う種ブラックホールの
 の Bondi-Hoyle-Lyttleton 降着:円盤 shadow 角依存性".日本天文学会春季年会(立教大学/オンライン, Mar. 13–16, 2023).
- 87. 島田悠愛, 大須賀健, 髙橋博之, and 朝比奈雄太. "突発的超臨界降着流の一般相対論 的輻射磁気流体計算:降着構造と衝撃波について". 日本天文学会春季年会 (立教大 学/オ ンライン, Mar. 13–16, 2023).
- 88. 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偏光 X 線の輻射輸送計算コードの開発 II". 日本天文学会春季年会 (立教大学/オンライン, Mar. 13–16, 2023).
- 89. 野村真理子 and 大須賀健. "超臨界降着流から噴出するラインフォース駆動型円盤 風". 日本天文学会春季年会 (立教大学/オンライン, Mar. 13–16, 2023).
- 90. 芳岡尚悟, 嶺重慎, 大須賀健, 川島朋尚, and 北木孝明. "大質量ブラックホールへの 超臨界降着流と大局的アウトフロー構造". 日本天文学会春季年会 (立教大学/オンラ イン, Mar. 13–16, 2023).
- 91. Oerd Xhemollari. "The Formation of Pop III Star Clusters under UV radiation". 日本天文学会 2022 年秋季年会 (新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).

- 92. 河原昌平. "原始惑星系円盤における乱流とダスト成長". 日本天文学会 2022 年秋季 年会 (新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 93. 井上壮大,大須賀健,高橋博之, and 朝比奈雄太. "一般相対論的輻射磁気流体力学シ ミュレーションによる超高光度 X 線パルサーのスピンアップレート". 日本天文学 会 2022 年秋季年会 (新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 94. 朝比奈雄太 and 大須賀健. "回転軸が傾いた降着円盤の一般相対論的輻射磁気流体 シミュレーション". 日本天文学会 2022 年秋季年会 (新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 95. 尾形絵梨花, 大須賀健, 福島肇, and 矢島秀伸. "3次元輻射流体計算で探る Dusty-gas 中を浮遊する中質量ブラックホールの降着成長過程:ダストの昇華と非等方輻射の 影響". 日本天文学会 2022 年秋季年会 (新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 96. 大野翔大, 大須賀健, 高橋博之, 朝比奈雄太, and 内海碧人. "一般相対論的輻射磁気 流体シミュレーションによる降着円盤の最内縁構造の調査". 日本天文学会 2022 年 秋季年会 (新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 97. 内海碧人,大須賀健,高橋博之, and 朝比奈雄太. "カー・ブラックホール周りの超臨 界降着円盤からのエネルギー解放;超高光度 X 線源との比較". 日本天文学会 2022 年秋季年会 (新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 98. 小川拓未,朝比奈雄太,大須賀健,高橋博之, and 川島朋尚. "ボルツマン輻射輸送に よるコンプトン冷却を考慮した輻射非効率降着流の電子温度計算".日本天文学会 2022 年秋季年会 (新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 99. 武者野拓也,小川拓未,大須賀健,矢島秀伸, and 大向一行. "超臨界降着流における ライマンアルファ輝線の輻射力:2 光子放射の効果".日本天文学会 2022 年秋季年 会(新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 100. 竹田麟太郎, 大須賀健, 高橋労太, and 梅村雅之. "相対論的流体中から放出された光子の多重散乱効果; 数値計算によるアプローチ". 日本天文学会 2022 年秋季年会 (新潟大学 (五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 101. 人見拓也,川島朋尚,荻原大樹,高橋博之, and 大須賀健. "歳差運動するブラックホール降着円盤の観測的性質の解明". 日本天文学会 2022 年秋季年会 (新潟大学(五 +嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 102. 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偏光 X 線輻射輸送 計算コードの開発". 日本天文学会 2022 年秋季年会 (新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).

- 103.島田悠愛,大須賀健,高橋博之, and 朝比奈雄太. "突発的超臨界降着現象における輻射性衝撃波の研究".日本天文学会 2022 年秋季年会 (新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 104.秋葉健志. "原始銀河団領域の星形成活動と 21cm シグナルの関係". 日本天文学会 2022 年秋季年会 (新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 105. 矢島秀伸. "原始銀河団シミュレーション: 超遠方サブミリ波銀河の形成について". 日本天文学会 2022 年秋季年会 (新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).
- 106. 佐藤翔 and Alexander Wagner. "巨大ブラックホールジェットによる AGN トーラスの進化". 天体形成研究会 2022 (筑波大学/online, Nov. 4–5, 2022).
- 107. Oerd Xhemollari. "The Formation of Pop III Star Clusters under UV radiation". 銀河・銀河 間 ガス研究会 2022 (釧路ロイヤルインホテル / オンライン, Aug. 8–12, 2022). url: https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/domestic/ja/2022/08/08/galaxy igm/.
- 108. 矢島秀伸, 福島肇, and 梅村雅之. "初期宇宙の銀河形成と星間紫外線円偏光". 計算ア ストロバイオロジー (筑波大学/online, Nov. 10–11, 2022).
- 109. 矢島秀伸, 安部牧人, and 梅村雅之. "甲状腺がんの近赤外線診断に向けた高精度輻射 輸送シミュレーション". Optics and Photonics Japan, 2022 (栃木県総合文化会館, Nov. 13–16, 2022).
- 110. Oerd Xhemollari, 矢島秀伸, and 安部牧人. "The Formation of Pop III Star Clusters under UV radiation". 日本天文学会春季年会 (立教大学/オンライン, Mar. 13–16, 2023).
- 111. 矢島秀伸,福島肇, and 梅村雅之. "輻射輸送計算による星間紫外線円偏光場のモデル 化とキラル分子への影響". 第 11 回宇宙における生命ワークショップ (国立天文台, Feb. 17–18, 2023).
- 112.田中賢,吉川耕司,吉田直紀, and 齊藤俊. "宇宙論的 VLASOV シミュレーションで 探るニュートリノの性質: N-body シミュレーションとの比較". 日本天文学会 2022 年秋季年会(新潟大学(五十嵐キャンパス), Sept. 13–15, 2022).

(4) 著書·解説記事等

- A) 著書(章)
- 中村文隆 鶴剛 長田哲也 藤沢健太 梅村雅之 and 福江 純. 放射素過程の基礎. 日本評論社, Nov. 2022, pp. 1–376.
- 福江純,和田桂一, and 梅村雅之. 宇宙流体力学の基礎 [改訂版]. 日本評論社, Oct.
 2022, pp. 1–416.
7. 異分野間連携·産学官連携·国際連携·国際活動等

 A. Wagner. EPCC-CCS Workshop 2022, The University of Edinburgh. Dec. 14, 2011–Dec. 15, 2022. url: https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/2022-epcc-ccs-wsj/.

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
- 2. 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)
- 3. 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. 梅村雅之, 矢島秀伸 (Chair), 福島肇, 重田育照, 庄司光男, et al. 研究会開催:「計算 アスト ロバイオロジー 2022」(筑波大学/online, Nov. 10–11, 2022).
- 矢島秀伸 (Chair),梅村雅之, and Alexander Wagner.研究会開催:「Galaxy-IGM Workshop 2022」(釧路ロイヤルインホテル / オンライン, Aug. 8–12, 2022). url: https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/domestic/ja/2022/08/08/galaxy-igm/.
- 3. 森正夫. 研究会開催: "Local galaxy Workshop" (東北大学, Dec. 13, 2022).
- 4. 大須賀健. 研究会開催:「ブラックホールジェット・降着円盤・円盤風研究会 2023」 (東北大学, Mar. 1–2, 2023).
- 5. 宇宙物理研究部門 M1. 研究会開催:「天体形成研究会 2022」(筑波大学ワークショ ッ プ室/online, Nov. 4-5, 2022).
- 6. 矢島秀伸. 国際会議開催:「9th Galaxy Evolution Workshop」(京都大学, Feb. 20-23, 2023).

9. 管理·運営

組織運営や支援業務の委員・役員の実績

1. 梅村雅之

【学内】

大学執行役員(研究人材キャリアデザイン担当) URA 研究戦略推進室 室長 若手研究者育成支援室(世界で活躍できる研究者戦略育成事業)室長 計算科学研究センター 計算メディカルサイエンス事業部長 計算科学研究センター 運営委員会委員 計算科学研究センター 運営協議会委員 計算科学研究センター 研究企画室委員 物理学域 運営委員会委員

【学外】

日本天文学会欧文研究報告編集顧問 一般社団法人リサーチ・アドミニストレーション協議会 URA 質保証事業 WG 委員

2. 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 2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「宇宙の構造形成と進化から惑星表層環境 変動までの統一的描像の構築」副代表 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

3. 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

4. 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

【学外】

国立天文台すばる観測時間割当委員会委員

5. 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. 森正夫. ニュートン別冊「宇宙の終わり」監修. Dec. 17, 2022.
- 森正夫. 銀河の衝突 そして進化. プレミア保存版 銀河のすべて (Newton プレミア 保存版シリーズ) 協力.
- 3. 大須賀健. コメント掲載, NHK NEWS web, 天の川銀河の巨大ブラックホールの撮像 について. May 13, 2022.
- 4. 大須賀健. コメント掲載, 日経新聞電子版, 天の川銀河の巨大ブラックホールの撮像 について. May 13, 2022.
- 5. 大須賀健. テレビ出演, NHK ニュース, 天の川銀河の巨大ブラックホールの撮像に ついてインタビューを録画放送. May 13, 2022.
- 大須賀健. 雑誌記事執筆, "計算で作る宇宙「ブラックホール」", 科学 2022 年 6 月 号. June 1, 2022.
- 7. 大須賀健. 秋田県立本荘高等学校創立百二十周年記念式典 記念講演「最新のブラック ホール天文学」. Oct. 8, 2022.
- 8. 大須賀健. 一般講演,「ブラックホールと一般相対性理論」,朝日カルチャーセンター 横浜. Feb. 25, 2023.
- 9. 大須賀健. 英語教科書編集協力, いいずな書店「New Rays II」"10 章 Physics Goes A Long Way". Mar. 2, 2023.
- 10. Alexander Wagner. ``*FEATURE: Space burials not just science fiction as celestial partings take off*". 共同通信英語版特集記事 (コメント). Mar. 6, 2023. url: https://english. kyodonews.net/news/2023/03/d00bc746d3b3-feature-space-burials-not-just science-fiction-as-celestial-partings-take-off.html.
- 11. 矢島秀伸. 読売新聞オンライン- 挑む科学の現場から-「医学と宇宙物理学、異色のコ ラボで安全な画像診断を目指す」取材. Dec. 14, 2022.

11. その他

- 大須賀 健. 令和 5 年度「富岳」成果創出加速プログラム採択 ``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:大須賀健).
- 大須賀 健. 令和 5 年度「富岳」一般利用課題採択 ``一般相対論的輻射磁気流体計算 で解明するブラッ クホール降着円盤と準周期振動"(代表:大須賀健).
- A. Y. Wagner. Cover image selected for Nature Astronomy, Volume 6, Issue 4, "Cold circum nuclear gas rides the jet stream". Apr. 10, 2022. url: https://www.nature.com/natastron/ volumes/6/issues/4.

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	温 凱、角田 佑介、鷲山 広平
学生	大学院生 3名、学類生 3名

2. 概要

本部門では、核子(陽子・中性子)の多体系である原子核や中性子星の構造・反応・応答な どの多核子量子ダイナミクスの研究を推進している。安定線(ハイゼンベルグの谷)から離 れた放射性アイソトープの原子核の構造と反応、エキゾチックな励起状態の性質、様々な集 団運動の発現機構など、未解決の謎の解明に取り組んでいる。原子核の研究は、フェルミ粒 子の量子多体系計算という観点で、物質科学や光科学、冷却原子系の物理と密接なつながり をもつ。また、クォーク・グルーオンのダイナミクスを記述する格子 QCD に基づく核力の計 算、軽い原子核の直接計算などが進展する中、素粒子物理学との連携も重要性が増している。 ニュートリノの解明に向けたニュートリノレス二重ベータ崩壊の観測実験や、素粒子標準模 型のテストに関わる実験などにも原子核理論の精密計算が不可欠とされている。また、元素 の起源や星の構造、中性子星の誕生にも関わる爆発的天体現象にも原子核の性質は深く関わ り、宇宙物理学とも密接に関係している。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] フェルミ演算子展開による有限温度密度汎関数計算のコード開発(中務)

原子核に対する有限温度平均場理論に基づく計算は、高励起状態の記述や準位密度の計算 などに応用されてきた。通常この計算の手続きは、まず一体演算子である平均場ハミルトニ アンの固有状態・固有エネルギー(1粒子エネルギー)を求め、その1粒子エネルギーのフェ ルミ・ディラック分布関数を重みとした一体密度を計算し、ハミルトニアンを再構築するこ とを反復することで、自己無撞着に状態を決定する。本研究では、フェルミ・ディラック分 布関数を有限次の多項式展開する方法を用いるこ とで、ハミルトニアンの有限回の演算によって密度 を直接構築する手法を核子多体系に初めて適用し た。数値的に負荷が大きい行列対角化を避けること ができる。図1は、3次元座標格子点で密度を表現 し計算された²⁴Mg核の(自由)エネルギーである。 ゼロ温度では三軸非対称な形と軸対称な形がエネ ルギー極小点として存在しており、三軸非対称形 の方が2MeVほどエネルギーが低い。しかしなが ら温度T = 500 keV くらいで三軸非対称形は姿を



図 1. ²⁴Mg の(自由) エネルギーと運動 エネルギー。内部の図は、低温部分を拡 大。

消し、T = 2.9 MeV では球形に転移し、さらにT = 6.5 MeV で原子核は溶けて一様核物質に 転移する。有限温度中性子星クラストの自己無撞着計算にも応用し、その有用性を示した。

[2] 角運動量射影法における Lebedev 求積法の導入(清水、角田)

原子核構造計算に現れる角運動量射影法の改良をおこなった。モンテカルロ殻模型計算法 や生成座標法など、多くの核構造計算手法には、角運動量射影におけるオイラー角の三重積 分が現れ、計算上のボトルネックとなる。この三重積分はオイラー角を離散化して、台形則 とガウス-ルジャンドル求積法をくみあわせたサンプル点を多数用意し、各点ごとの値を合計 することによって数値的に求める。本研究では Lebedev 求積法を導入することにより、旧来 手法と比べて理論的には 2/3 のサンプル点で同じ計算精度を達成できることを示した。(N.



Shimizu and Y. Tsunoda, Comput. Phys. Commun. **283**, 108583 (2023).)

図 2. 角運動量射影の計算精度。pf 殻模型 空間の鉄 57 原子核の 1/2-状態を例にとり、 ハートリーフォック計算による波動関数の 角運動量射影を求めた。上図はエネルギー 期待値の数値誤差、下図は角運動量期待値 の数値誤差を示す。横軸は求積法における サンプル点数。提案手法(赤丸:Lebedev+T) が、旧来手法(青三角:T+GL+T)より少ない点 数で同程度の計算誤差を達成している。

角運動量射影の計算量はサンプル点数にほぼ比例するので、理論的には計算量を 33%削減 できることになる。図2にベンチマークテストによる提案手法と旧来手法の比較を示す。

[3] ネオジム、サマリウム同位体の「形の相転移」とニュートリノレス二重ベータ崩壊核

行列要素(角田、清水)

進粒子真空殼模型法 を用いた大規模殻模型 計算によってネオジ ム、サマリウム同位体 の核構造研究をおこな った。これらの同位体 は、中性子数を増やし ていくと、球形から軸 対称プロレート変形に 遷移していくと考えら れている。この遷移の 中間領域は平均場近似 が適しておらず、配位 混合をとりこんだ記述 が望ましい。特にネオ ジム 150 はニュートリ



図 3. ネオジム同位体、サマリウム同位体の第一、第二2+励起状態、
 第一、第二4+励起状態、第二0+励起状態。(a) 励起エネルギー
 (b) E2 遷移確率(c) 四重極能率を示す。横軸は中性子数。

ノレス二重ベータ崩壊の探索実験に用いられている核種であり、この核行列要素を求めるこ とも重要な課題である。

図3に、ネオジム同位体、サマリウム同位体の計算結果を示す。比較のために実験値もシンボル(丸、三角、誤差棒)で示してある。励起エネルギー、E2遷移確率、四重極能率ともに理論値が実験値を良く再現している。球形から軸対称変形への遷移の中間的な状態である ネオジム150とサマリウム150の基底状態は、二つの変形度が異なるプロレート状態が配位 混合している特異な状態であることを示した。ネオジム150のニュートリノレス二重ベータ 崩壊の核行列要素を求め、短距離相関の形に依存するがおおよそ4.0であることを示した。ま た、前述の二つの変形状態の混合が核行列要素を大きくする効果をもつことを示した。これ らの議論をまとめ、論文投稿をおこなった。(https://arxiv.org/abs/2304.11780)

[4] 大規模殻模型計算を基にした多様な共同研究の推進(清水)

九州産業大の金子和也氏等との共同研究を進め、PMMU 相互作用と HFB+GCM 法を組み合わせた殻模型計算によって、質量数 130 領域の原子核における核構造計算を行った。中性子数変化に伴う急激な励起エネルギーの低下や E2 電磁遷移の増加が、主殻を超えた Quasi SU(3)と呼ばれる一粒子軌道対の間の四重極相互作用によって説明できることを明らかにしてきた。

この Quasi SU(3)機構は、中性子数がN = 72からN = 76の Te, Xe, Ba 同位体においてもガンマ ソフトや非軸対称変形を引き起こす重要な要因になっていることを示した。相互作用するボ ゾン模型との関係について調べ、Quasi SU(3)機構の役割を明らかにした。

また、これまでの殻模型計算による研究成果をもとに、実験研究グループとの共同研究を 進め、¹²⁶Xe と¹²⁸Xe の非軸対称変形状態や、リン・硫黄同位体のベータ崩壊、中性子過剰チ タン・バナジウム同位体の質量、²⁹Ne の核構造について共著論文を発表した。

[5] 中性子星の観測結果に基づいた原子核密度汎関数を用いた全核種計算(Gil(高麗 大)、日野原、Hyun(大邱大)、吉田(大阪大))

中性子星の観測 データと無矛盾に 構成された原子核 密度汎関数である Korea-IBS-Daegu-SKKU(KIDS)汎関数 を用いてこれまで に一様核物質や球 形核、Nd変形同位体 が計算されたが、汎 関数の性能を評価 するため、軸対称変 形が記述可能な調 和振動子基底コード



HFBTHOを用いてドリップラインまでの全偶々核の質量、半径、四重極変形の計算を行った。 束縛エネルギーと荷電半径の実験値との平均二乗偏差は 4.5-5.1 MeV と 0.03-0.04 fm 程度で あり、標準的な他の原子核密度汎関数と同程度であった。特に、汎関数のパラメータを決定 する際に変形核の情報を用いていないにも関わらず、開殻での変形の発達を記述することが できた。また、中性子ドリップラインの位置は軽い質量の中性子星の構造を特徴づけるη_τパ ラメータと相関していることが明らかとなった。

[6] ⁸Be, ¹²C, ¹⁶O のαクラスター運動を記述する集団模型の構築(金田(京都大)、日野 原)

¹²C や ¹⁶O の生成座標法を用いた計算では*α* – *α*間の距離を生成座標法とした大振幅集団運動として励起状態が記述される。このようなクラスター運動を記述する集団模型を、微視的 クラスター模型の norm kernel やエネルギーの期待値を用いることで構築した。また、クラス ター模型の座標を複素数とすることによりダイナミクスの効果を取り入れ、集団質量を求め た。求まった集団波動関数や、エネルギー、半径などで生成座標法とよく一致する結果を得 た。



図 5. 集団模型と生成座標法による¹²C と¹⁶0のエネルギーの比較。

[7] Calculation of the Collective Inertial Mass Along the Nuclear Fusion/Fission Path (温)

We are working on determining the optimal collective reaction path for nucleus-nucleus fusion/fission reactions, based on the adiabatic self-consistent collective coordinate (ASCC) method. Using an iterative method, where we combine the constrained Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) method and the finite amplitude method, the ASCC coupled equations are solved. First, it is applied to the simplest reaction system, $\alpha + \alpha \rightarrow {}^{8}$ Be, where we aim at extracting the collective inertial mass along the collective motion path. Since we are theoretically interested in the impact of pairing interaction on the collective inertial mass, artificially we enhanced the pairing strength so that the nuclear state of 8 Be is no longer the Hartree-Fock (HF) state but the HFB state. We obtained an interesting phase transition from HF states to HFB states along the reaction path $\alpha + \alpha \rightarrow {}^{8}$ Be, which is reflected by the obtained inertial mass parameter as a function of the distance between the two alpha's as shown in the figure.

 \boxtimes 6. Inertial mass in units of the nucleon's mass m for the collective path of $\alpha + \alpha \leftrightarrow {}^{8}Be$, as a function of the relative distance R. The pairing strength is artificially enhanced by 2.1 times for theoretical interest.



[8] ニッケル 78 近傍の中性子過剰核の殻模型計算(角田、清水)

ニッケル 78 付近の中性子過剰核は、元素合成の r 過程にかかわる核種である。r 過程の研 究への応用を目指して、モンテカルロ殻模型法によるニッケル 78 周辺の原子核構造の計算を 行った。模型空間として pf 殻と sdg 殻の 2 主殻を用い、偶偶核や奇核の励起エネルギーの実 験値を再現できるように有効相互作用の調整を行った。下図は偶偶核の 2⁺、4⁺状態の励起エ ネルギーの実験値(点)と計算値(線)の比較であり、実験値を概ね再現している。また、r 過程 にかかわる現象の一つであるベータ崩壊の半減期の予備的計算を 3 つの偶偶核に対して行い、 実験値に近い計算値が得られた。





[9] 5次元四重極集団模型における集団慣性質量の評価(鷲山、日野原、中務)

低エネルギー状態に複数の四重極変形状態が現れる原子核は、平均場近似を超えて複数の 変形状態を統一的に記述する5次元四重極集団模型を用いて記述される。先行研究で広く用 いられてきた密度汎関数法+クランキング近似(PC)法による集団慣性質量の評価を超えて、 本研究では集団運動の動的効果を考慮した密度汎関数法+局所乱雑位相近似(QRPA)法によ り集団慣性質量を評価した。集団運動の動的効果を考慮したことにより、QRPA 法による集 団慣性質量が従来の PC 法の慣性質量より増大することが分かった。この QRPA 法の慣性質



図 8.⁷⁶Kr における(左図)四重極変形β,γ平面上での QRPA 法及び PC 法による 慣性質量の比、(右図)低励起スペクトルと換算遷移確率 B(E2)値。

量を用いて⁷⁶Krの低励起状態のエネルギーと準位間の換算遷移確率を評価し、実験データに 近い値が得られた。

[10] 中性子数28近傍の中性子過剰核における変形の揺らぎ(鷲山、吉田(大阪大))

中性子数N = 28近傍の中性子過剰な不安定核では、魔法数の性質が破れ、四重極変形やその揺らぎが発達している。本研究ではN = 28近傍のMg, Si, S に対して、非軸対称な四重極変形(γ 変形)のダイナミクスを5次元四重極集団模型を用いて調べた。特に ^{42}Mg , ^{44}S , ^{46}S など四重極変形度 β , γ 平面上のポテンシャルが平坦な原子核の2番目の 0⁺ 準位に着目しエネルギー比 ($E(0_2^+)/E(2_1^+)$)と換算遷移確率を調べた結果、 β , γ 依存性を考慮したクランキング質量では原子核ごとに大きく変化する一方、定数近似した慣性質量を用いた場合はあまり違いが現れないことが分かった。N = 28近傍の中性子過剰核の記述には β , γ 平面上のポテンシャルだけではなく慣性質量が重要な役割を演じることを明らかにした。

4. 教育

学位

- 小澤泰河 修士(理学)
 フェルミ演算子展開法を用いた有限温度非一様核物質の研究
- 土田 真大 修士(理学)
 バンド計算に基づく中性子超流動密度計算
- 吉永 孝太 修士(理学)
 電荷密度モーメントの精密測定に向けた理論解析
- 4. 金井 敦哉 学士(理学)
 二重ベータ崩壊の位相空間因子計算に向けた Dirac 方程式による電子波動関数の数 値的導出
- 5. 萩原 健太 学士(理学) 原子核の変形と中性子ドリップラインに対するクーロン相互作用の効果
- 5. 類家 千怜 学士(理学)
 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考察

集中講義など

- T. Nakatsukasa, "Nuclear dynamics and energy density functional theories", Online lectures, Lanzhou University, China, March 30-April 1, 2022.
- 清水 則孝、集中講義「殻模型による原子核構造論」、北海道大学理学院、2023 年1 月 11 – 13 日.

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

- 1. ベストプレゼンテーション賞(理工学群物理学類卒業論文)、類家千怜、2023年3月.
- 2. 物理学学位プログラムリーダー賞、吉永孝太、2023年3月.

外部資金

- 日本学術振興会科学研究費・基盤研究(B)、中務 孝、代表、2018-2021 年、全年度直接経費:13,200,000 円(2022 年度直接経費(繰越):4,050,000 円)「密度汎関数超並列ソルバの開発と原子核から中性子星までの統一的高精度計算」.
- 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」の一部として KEKからの受託研究、「核構造とr過程」、清水 則孝、2020-2022 年度、(2022 年 度:10,912,000 円).
- 日本学術振興会科学研究費・基盤研究(C)(一般)、清水 則孝、分担、2020 2023 年、 全年度直接経費: 2,300,000 円(2022 年度直接経費: 600,000 円)、「大規模殻模型計 算による元素合成素過程の微視的記述」.
- 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、(2022年度直接経費:700,000円)、「二重ベー 夕崩壊・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、(2022 年度直接経費:800,000 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. 日本学術振興会科研研究費・国際共同研究加速基金(国際共同研究強化(A))、日野原 伸生、代表、2020-2022 年、全年度直接経費:6,300,000 円、「中性子一陽子対密度 汎関数の最適化」.
- 日本学術振興会科学研究費・若手研究、温 凱、代表、2020-2023 年、全年度直接経費:2,300,000 円(2022 年度直接経費:900,000 円)、「Macroscopic Nuclear Dynamics with Microscopic Foundations」.

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. T. Nakatsukasa, "Fermi operator method for nuclei and inhomogeneous matter with a nuclear energy density functional", Phys. Rev. C **107**, 015802 (2023) [Editors' suggestion].

- S. Kisyov, C. Y. Wu, J. Henderson, A. Gade, K. Kaneko, Y. Sun, N. Shimizu, T. Mizusaki, D. Rhodes, S. Biswas, A. Chester, M. Devlin, P. Farris, A. M. Hill, J. Li, E. Rubino, and D. Weisshaar, "Structure of ^{126,128}Xe studied in Coulomb excitation measurements", Phys. Rev. C 106, 034311 (2022).
- 3. N. Shimizu, "Recent Progress of Shell-Model Calculations, Monte Carlo Shell Model, and Quasi-Particle Vacua Shell Model", Physics **2022**, 4, 1081 1093 (2022).
- 4. C. Yuan, M. Liu, N. Shimizu, Zs. Podolyák, T. Suzuki, T. Otsuka, and Z. Liu, "Shell-model study on spectroscopic properties in the region "south" of ²⁰⁸Pb", Phys. Rev. C **106**, 044314 (2022) (清水、東大所属による論文出版).
- N. Shimizu and Y. Tsunoda, "SO(3) quadratures in angular-momentum projection", Comp. Phys. Commun. 283, 108583 (2023).
- V. Tripathi, S. Bhattacharya, E. Rubino, C. Benetti, J. F. Perello, S. L. Tabor, S. N. Liddick, P. C. Bender, M. P. Carpenter, J. J. Carroll, A. Chester, C. J. Chiara, K. Childers, B. R. Clark, B. P. Crider, J. T. Harke, B. Longfellow, R. S. Lubna, S. Luitel, T. H. Ogunbeku, A. L. Richard, S. Saha, N. Shimizu, O. A. Shehu, Y. Utsuno, R. Unz, Y. Xiao, S. Yoshida, and Yiyi Zhu, "β⁻ decay of exotic P and S isotopes with neutron number near 28", Phys. Rev. C 106, 064314 (2022).
- S. Iimura, M. Rosenbusch, A. Takamine, Y. Tsunoda, M. Wada, S. Chen, D. S. Hou, W. Xian, H. Ishiyama, S. Yan, P. Schury, H. Crawford, P. Doornenbal, Y. Hirayama, Y. Ito, S. Kimura, T. Koiwai, T. M. Kojima, H. Koura, J. Lee, J. Liu, S. Michimasa, H. Miyatake, J. Y. Moon, S. Naimi, S. Nishimura, T. Niwase, A. Odahara, T. Otsuka, S. Paschalis, M. Petri, N. Shimizu, T. Sonoda, D. Suzuki, Y. X. Watanabe, K. Wimmer, and H. Wollnik, "Study of the N = 32 and N = 34 Shell Gap for Ti and V by the First High-Precision Multireflection Time-of-Flight Mass Measurements at BigRIPS-SLOWRI", Phys. Rev. Lett. 130, 012501 (2023).
- K. Kaneko, Y. Sun, N. Shimizu, and T. Mizusaki, "Quasi-SU(3) Coupling Induced Oblate-Prolate Shape Phase Transition in the Casten Triangle", Phys. Rev. Lett. 130, 052501 (2023).
- A. Revel, J. Wu, H. Iwasaki, J. Ash, D. Bazin, B.A. Brown, J. Chen, R. Elder, P. Farris, A. Gade, M. Grinder, N. Kobayashi, J. Li, B. Longfellow, T. Mijatović, J. Pereira, A. Poves, A. Sanchez, N. Shimizu, M. Spieker, Y. Utsuno, and D. Weisshaar, "Large collectivity in ²⁹Ne at the boundary of the island of inversion", Phys. Lett. B 838, 137704 (2023).
- 10. N. Hinohara and J. Engel, "Global calculation of two-neutrino double-β decay with the finite amplitude method in nuclear density functional theory", Phys. Rev. C **105**, 044314 (2022).

- H. Gil, N. Hinohara, C. H. Hyun, and K. Yoshida, "KIDS density functional for deformed nuclei: Examples of the even-even Nd isotopes", Journal of the Korean Physical Society 81, 113 - 120 (2022).
- Y. Kanada-En'yo and N. Hinohara, "Collective model for cluster motion in ⁸Be, ¹²C, and ¹⁶O systems based on microscopic 2α, 3α, and 4α models", Phys. Rev. C **106**, 054312 (2022).
- D. Little, A. D. Ayangeakaa, R. V. F. Janssens, S. Zhu, Y. Tsunoda, T. Otsuka, B. A. Brown, M. P. Carpenter, A. Gade, D. Rhodes, C. R. Hoffman, F. G. Kondev, T. Lauritsen, D. Seweryniak, J. Wu, J. Henderson, C. Y. Wu, P. Chowdhury, P. C. Bender, A. M. Forney, and W. B. Walters, "Multi-step Coulomb excitation of ⁶⁴Ni: Shape coexistence and nature of lowspin excitations", Phys. Rev. C 106, 044313 (2022).
- J. A. Lay, A. Vitturi, L. Fortunato, Y. Tsunoda, T. Togashi, and T. Otsuka, "Two-particle transfer processes as a signature of shape phase transition in Zirconium isotopes", Phys. Lett. B 838, 137719 (2023).

B) 査読無し論文

なし

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

- T. Nakatsukasa, "Mass parameters for nuclear reaction models and nucleonic effective mass", YIPQS long-term workshop "Mean-field and Cluster Dynamics in Nuclear Systems 2022 (MCD2022)", Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto Univ., Kyoto, Japan, May 9-June 17, 2022.
- 2. T. Nakatsukasa, "Alpha-particle distribution in nuclei", Shapes and Symmetries in Nuclei: from Experiment to Theory (SSNET'22)", Orsay, France, May 30-June 3, 2022 (オンライン).
- T. Nakatsukasa, "Requantized TDDFT on collective subspace", Recent Progress of Many-Body Theories XXI (RPMBT-21), Chapel Hill, NC, USA, September 12-16, 2022.
- T. Nakatsukasa, "Requantizing the time-dependent density functional dynamics", YITP Workshop "Fundamentals in density functional theory (DFT2022)", Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto Univ., Kyoto, Japan, December 7-20, 2022.
- N. Shimizu, "Shell model studies towards astrophysical applications", YIPQS long-term workshop "Mean-field and Cluster Dynamics in Nuclear Systems 2022 (MCD2022)", Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto Univ., Kyoto, Japan, June 13, 2022.

- N. Shimizu, "Shell model and Machine Learning", RIKEN Nishina Center mini workshop "Combining Nuclear Theory and Machine Learning for fundamental studies and applications", RIBF building, RIKEN Nishina Center, RIKEN, Wako, Saitama, Japan, November 29-30, 2022.
- N. Shimizu, "Recent progress of shell-model calculations and quadrupole collective states", International Symposium on Nuclear Spectroscopy for Extreme Quantum Systems (NUSPEQ2023), Numazu, Japan, March 7-9, 2023.
- 8. N. Hinohara, "Global analysis of nuclear pairing rotation", Physics of RI: Recent progress and perspectives, RIKEN Nishina Center, Wako, Japan, May 30-June 1, 2022.
- 9. N. Hinohara, "Current status and future perspective of nuclear structure calculation for nuclear matrix element of neutrinoless double-beta decay", Unraveling the History of the Universe and Matter Evolution with Underground Physics (UGAP2022), Tokyo University of Science, Noda, Japan, June 13-15, 2022 (オンライン).
- N. Hinohara, "Recent progress in nuclear DFT", YITP Workshop "Fundamentals in density functional theory (DFT2022)", Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto Univ., Kyoto, Japan, December 7-20, 2022.
- Y. Tsunoda, "Structure of medium-mass nuclei studied by Monte Carlo shell model and quasiparticle vacua shell model calculations", YIPQS long-term workshop "Mean-field and Cluster Dynamics in Nuclear Systems 2022 (MCD2022)", Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto Univ., Kyoto, Japan, June 3, 2022.
- Y. Tsunoda, "Recent studies on the shape evolution of medium-heavy nuclei and their impacts", 6th Topical Workshops on Modern Aspects in Nuclear Structure, Bormio, Italy, February 6-11, 2023.

B) 一般講演

- N. Hinohara, "Role of neutron pairing in alpha-knockout amplitude", International Symposium on Nuclear Spectroscopy for Extreme Quantum Systems (NUSPEQ2023), Numazu, Japan, March 7-9, 2023.
- K. Wen, "Collective coordinate and collective mass in nuclear reactions", YITP Workshop "Fundamentals in density functional theory (DFT2022)", Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto, Japan, December 7-20, 2022.
- K. Wen, "Collective inertial masses in nuclear reactions", International Symposium on Nuclear Spectroscopy for Extreme Quantum Systems (NUSPEQ2023), Numazu, Japan, March 7-9, 2023.

- K. Washiyama, "Collective inertia in spontaneous fission and large-amplitude collective motion", YIPQS long-term workshop "Mean-field and Cluster Dynamics in Nuclear Systems 2022 (MCD2022)", Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto Univ., Kyoto, Japan, May 9-June 17, 2022.
- K. Washiyama, "Large-amplitude collective dynamics with collective Hamiltonian derived from nuclear DFT + local QRPA", YITP Workshop "Fundamentals in density functional theory (DFT2022)", Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto, Japan, December 7-20, 2022.

C)ポスター

- T. Nakatsukasa, "Fermi operator expansion method for non-uniform nuclear matter", The 30th Anniversary Symposium of the Center for Computational Sciences at the University of Tsukuba, Tsukuba, Japan, October 13-14, 2022.
- T. Nakatsukasa, N. Hinohara, "Local alpha strength functions in nuclei", International Symposium on Nuclear Spectroscopy for Extreme Quantum Systems (NUSPEQ2023), Numazu, Japan, March 7-9, 2023.
- N. Shimizu, "Quadrupole collective states by large-scale shell-model calculations", The 30th Anniversary Symposium of the Center for Computational Sciences at the University of Tsukuba, Tsukuba, Japan, October 13-14, 2022.
- 4. N. Hinohara, "Systematic calculation of double-beta decay and double electron capture nuclear matrix elements with the finite amplitude method", The 30th Anniversary Symposium of the Center for Computational Sciences at the University of Tsukuba, Tsukuba, Japan, October 13-14, 2022.
- N. Hinohara, "Role of neutron pairing in alpha-knockout amplitude of Sn isotopes", International symposium on Clustering as a Window on the Hierarchical Structure of Quantum Systems (CLUSHIQ2022), Sendai International Center, Sendai, Japan, October 31-November 3, 2022.
- C. Ruike, N. Hinohara, T. Nakatsukasa, "Moments of inertia of pairing rotation calculated with BCS model for the pairing Hamiltonian", International Symposium on Nuclear Spectroscopy for Extreme Quantum Systems (NUSPEQ2023), Numazu, Japan, March 7-9, 2023.
- K. Hagihara, N. Hinohara, T. Nakatsukasa, "Effect of the Coulomb interaction on nuclear deformation and drip lines", International Symposium on Nuclear Spectroscopy for Extreme Quantum Systems (NUSPEQ2023), Numazu, Japan, March 7-9, 2023.

- K. Yoshinaga, N. Hinohara, T. Nakatsukasa, "Radial moments of charge density distributions in stable and unstable nuclei", International Symposium on Nuclear Spectroscopy for Extreme Quantum Systems (NUSPEQ2023), Numazu, Japan, March 7-9, 2023.
- (3) 国内学会·研究会発表
- A) 招待講演
- 中務 孝、「Topics in shape and high-K isomers」、研究会「反応断面積研究の新しい展望」、理化学研究所、2022 年 11 月 9 日.
- 2. 清水 則孝、「殻模型と対相関」、RCNP 研究会「微視的系と巨視的系における核子 対凝縮相」、大阪大学核物理研究センター、2022 年 9 月 26 日.
- 3. 清水 則孝、「準粒子真空殻模型によるネオジム 150 のニュートリノレス二重ベータ 崩壊核行列要素」、二重ベータ崩壊核行列要素実験理論合同研究会、大阪大学核物理 研究センター、2022 年 10 月 3 日.
- 4. 清水 則孝、「原子核殻模型計算による統計的性質」,研究会「中性子捕獲反応で迫る宇宙の元素合成」、東京大学本郷キャンパス、2023 年 2 月 9 10 日.
- 5. 日野原 伸生、「ノックアウト反応遷移振幅の平均場理論による評価」、おのころ戸 隠夏合宿、JA 長野県ビル、2022 年 7 月 29 – 30 日.
- 6. 日野原 伸生、「0vββ 崩壊半減期の原子核構造計算の現状と展望」、日本物理学会 2022 年秋季大会共催シンポジウム「地下から解き明かす宇宙の歴史と物質の進化」、オン ライン、2022 年 9 月 10 日.
- 日野原 伸生、「核子対凝縮に伴う南部ゴールドストーンモードとその観測量」、RCNP 研究会「微視的系と巨視的系における核子対凝縮相」、大阪大学核物理研究センタ ー、2022年9月26-28日.
- 8. 日野原伸生、「二重ベータ崩壊核行列要素と中性子一陽子対相関」、二重ベータ崩壊核行列要素に関する実験理論合同研究会、大阪大学核物理研究センター、2022年10月3-4日.
- 9. 鷲山 広平、「密度汎関数法に基づく自発核分裂の記述」、理研 RIBF ミニワークショップ「理論と実験で拓く中性子過剰核の核分裂」、理研和光キャンパス、2023 年2月16-17日.

B)一般講演

 清水 則孝、「大規模殻模型計算 I:基礎」、光核反応スクール、レクチャー、大阪大 学豊中キャンパス、2022 年 7 月 19 日.

- 2. 清水 則孝、角田 佑介、「角運動量射影におけるガウス型求積法」、日本物理学会 2022 年秋季大会、岡山理科大学、2022 年 9 月 6 - 8 日.
- 3. 日野原 伸生、「平均場理論によるアルファノックアウト反応の遷移振幅の計算」、 RCNP 研究会「原子核反応研究の最近の話題と展望」、大阪大学核物理研究センター、 2022 年 7 月 8 - 9 日.
- 日野原伸生、中務孝「α粒子遷移振幅への対相関の影響」、日本物理学会2022年 秋季大会、岡山理科大学、2022年9月6-8日.
- 5. 日野原 伸生、"Nuclear Structure calculation for double-beta decay"、GPPU Seminar、東 北大学宇宙創成物理学共同大学院、2022 年 11 月 22 日.
- 6. 日野原 伸生、大石 知広、吉田 賢市、「有限核での同種粒子間スピン三重項対凝縮 の分析」、日本物理学会 2023 年春季大会、オンライン、2023 年 3 月 22 - 25 日.
- 7. 角田 佑介、清水 則孝、大塚 孝治、「モンテカルロ殻模型による N=50 近傍の核構 造の研究」、日本物理学会 2022 年秋季大会、岡山理科大学、2022 年 9 月 6 - 8 日.
- 8. 角田 佑介、「モンテカルロ殻模型計算による r 過程核の研究」、「富岳で加速する 素粒子・原子核・宇宙・惑星」シンポジウム、神戸大学、2022 年 12 月 12、13 日.
- 9. 角田 佑介、清水 則孝、大塚 孝治「モンテカルロ殻模型による N=50 近傍の核構造の研究」、日本物理学会 2023 年春季大会、オンライン、2023 年 3 月 22 25 日.
- 10. 鷲山 広平、吉田 賢市「中性子数 28 近傍の中性子過剰核における変形揺らぎと非軸 対称ダイナミクス」、日本物理学会 2022 年秋季大会、岡山理科大学、2022 年 9 月 6
 - 8 日.
- 11. 鷲山 広平、「原子核集団運動における集団慣性と対相関」、RCNP 研究会「微視的 系と巨視的系における核子対凝縮相」、大阪大学核物理研究センター、2022 年 9 月 26-28 日.
- 12. 鷲山 広平、「四重極集団模型による質量数80近傍核の変形共存現象の記述」、日本物理学会2023年春季大会、オンライン、2023年3月22-25日.
- C)ポスター発表
- 角田 佑介、「モンテカルロ殻模型とその発展的手法による原子核の形状の研究」、 第2回「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会、オンライン、2023 年 3 月 7 - 8 日.
- D) その他
- 日野原 伸生、「流れるスピン」(パネルディスカッション・パネラー)、第4回若手放 談会:エキゾチック核物理の将来、理研神戸・融合連携イノベーション推進棟、2023

年3月15-17日.

(4) 著書、解説記事等

 中務 孝、「原子核の観点から見る量子多体系:有限系における量子現象」、数理科 学 第 60 巻 12 号、特集「量子多体系の物理と数理」(サイエンス社)、pp.36-43 (2022).

7. 異分野間連携·産学官連携·国際連携·国際活動等

異分野間連携(センター内外)

- ・量子物性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.

国際連携・国際活動

- 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」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 オーサイト事業「21世紀の原子核物理」の一環として実施(日野原).
- 3. 理研 RIBF、ミシガン州立大学 NSCL でおこなわれた加速器実験の国際共同研究に参加(清水、角田)

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

- 1. International Advisory Committee for YIPQS long-term workshop "Mean-field and Cluster Dynamics in Nuclear Systems 2022 (MCD2022)", Kyoto, Japan, May 9-June 17, 2022 (中務).
- 2. Organizing Committee, "Physics of RI: Recent progress and perspectives", Wako, Japan, May 30-June 1, 2022 (中務).
- 3. International Advisory Committee for RPMBT-XXI, Chapel Hill, September 15, 2022 (中務).
- 4. Organizing committee for The 30th Anniversary Symposium of the Center for Computational Sciences at the University of Tsukuba, Tsukuba, Japan, October 13-14, 2022 (中務、日野原).
- 5. International Advisory Committee and selection committee for Best Young Speaker Award for Topical Workshops on Modern Aspects of Nuclear Structure, Bormio, Italy, February 6-11, 2023 (中務).

- Organizing committee for YIPQS long-term workshop, "Mean field and Cluster Dynamics in Nuclear Systems 2022 (MCD2022)", Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto Univ., Kyoto, Japan, May 9-June 17, 2022 (日野原).
- 7. 「二重ベータ崩壊核行列要素に関する実験理論合同研究会」、大阪大学核物理研究 センター、2022 年 10 月 3-4 日、世話人(日野原).

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 進営協議会委員 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 理工学群連営委員会委員 ダイバーシティ・アクセシビリティ担当教員 HPCI コンソーシアム機関代表

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

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 JAEA タンデム専門委員会委員 JAEA-ASRC 国際評価委員会委員 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 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

清水則孝

理研仁科センター RI Beam Factory User Executive Committee 委員 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

理研仁科センター RI Beam Factory User Executive Committee 委員

11. その他

1. 中務、YouTube 動画「原子核の形はどのように決まるのか?」(制作:広報戦略室)

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	
研究員	黒田 文彬	
学振外国人特別研究員 Sri Kasi Matta (2022.8.24~)		
学生	大学院生 2名、学類生 1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。具体的には、光と物質の相互作用に関係した研究に特色 を有している。時間依存密度汎関数理論に基づく固体中の電子ダイナミクスや光応答の計算、 時間依存シュレディンガー方程式に基づく原子や分子と光の相互作用、強相関電子系の光応 答など、多様な物質を対象とした光物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、銅酸化物超伝導体を量子ビットとした量子コン ピュータの実現を目指した理論的解明、および表面や界面における電気化学反応に対する第 一原理計算に基づく研究を行っている。

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)法に基づく第一原理計算 コードの開発を進めており、蓄電池や燃料電池、触媒・腐食現象など、実社会と強く結びつ いた研究への応用を目指して、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。

3. 研究成果

[1] 誘電率補正 RISM (DRISM) 法導入による ESM-RISM の改良(大谷)

二次電池や燃料電池、電気化学触媒などの電気化学性能の向上には、電極と電解液の界面 (電気化学界面) で発現する電気化学的特性の理論的理解と予測が必要である。電荷中性電 位や電気二重層キャパシタンスなどに代表される電気化学的特性は電気化学界面を構成する 材料やバイアス電圧などの環境パラメータに依存するため、電気化学界面における物理現象 の詳細を理解するためには網羅的研究が不可欠である。このため、我々は有効遮蔽媒体法 (ESM)を用いた密度汎関数法と参照相互作用サイトモデル(RISM)を組み合わせた ESM-RISM 法を開発し、電気化学界面反応シミュレーションをおこなっている。ESM-RISM では電 極表面と反応物を量子力学的理論で、溶媒和系を古典溶液理論で扱っており、電気化学界面 における電気二重層形成を自然に記述することが可能である。しかし、通常の RISM 理論で は、双極子溶媒分子を持つ溶液の誘電率を過小評価するという問題があることが知られてい る。本研究では、誘電率補正した RISM (DRISM) を ESM-RISM に導入することにより、こ の問題の改善を試みた。まず、バルクの NaCl 水溶液について、活量係数の塩濃度依存性を計 算した。従来の RISM の結果(図 1(a)XRISM)では実験結果と比較して活量係数を過小評価 しているが、DRISM では実験をよく再現することを確かめた。次に電極と電解液の界面にお いて、電荷中性電位(図1(b))や電気二重層キャパシタンス(図1(c))を計算し、DRISMの 結果が従来の RISM の結果(XRISM)を改善することを確認した。界面の電気化学特性の予測 性能が改善することにより、電極皮膜の形成機構や電気化学触媒の機能発現理由に対する理 論解析などへの応用が期待される。



[2] Li イオン電池正極材料 LiCoO2 の充放電過程における構造変化解析: クラスター展開 法とベイズ最適化による複合アプローチ(大谷)

現在、多くの情報端末機器に用いられている Li イオン電池は、電気自動車の電源や蓄電シ ステムへのさらなる応用が期待される。Li イオン電池には典型的な正極材料として LiCoO₂ (LCO)が使われているが、現在のLi イオン電池では、理想的な理論容量の約半分しか使用

されていない。この理由の一つとして、高充電時におけるLi_{1-x}CoO₂の不安定性に起因した酸 素脱離を伴う構造変化が挙げられる。したがって、充放電時のLi及びOイオンの脱離による 結晶構造変化の理解は LCO 電極の性能改善にとって重要である。我々は、Lil₁xCoO_{2-v} (0≦x≦ 1,0≦y≤1/2)の安定構造を、密度汎関数法(DFT)による数値計算に基づき探索した(図2(a), (b))。構造探索にはクラスター展開(CE)とベイズ最適化(BO)を組み合わせた CE+BO 法を用 いた。Li_{1-x}CoO₂に対する構造探索の結果から熱力学凸包を構築し、得られた安定構造の自由 エネルギーが実験の充放電曲線を再現することを確認した(図 2(c))。さらに、凸包の解析か ら、Co2O3などの準安定構造が存在することがわかった。これは、秩序化した O イオンの空 孔サイトと格子緩和によるものと解釈される。この結果をLCO 電極を使った充放電サイクル と照らし合わせると、これらの準安定構造は高充電時に酸素発生を伴う結晶構造変化により 現れることが示唆される(図2(b)(d))。加えて、CE+BO法で用いる目的変数の選択による 最適化効率の違いを調べた。本研究では目的変数に新しく相安定性の指標である凸包距離を 用いており(BO2)、先行研究では形成エネルギーを目的変数に用いている (BO1)。BO1 と BO2 で熱力学凸包を構築するために必要な DFT 計算の回数を比較した結果、本研究で提案してい る BO2 を用いることで DFT 計算の回数を従来法と比較して大幅に削減することが可能であ ることがわかった。本手法は一般性の高い手法であることから、電池材料探索のみならず磁 性材料や合金材料などの探索にも有効であると考えられる。



図 2. Li-Co-O の Convex hull 図: (a) た O K, (b) た 300 K, LiCoO₂の充放電曲線: (a) た O K, (b). た 300 K. (e) Convex hull 構築に必要な DFT 計算の回数

[3] 斜方入射する高強度パルス光と物質の相互作用を記述するマルチスケール第一原理計 算(植本(神戸大)、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。しか しこれまで、そのような斜方入射する高強度パルス光の伝搬を記述する理論と計算法は、発展していなかった。我々は論文(M. Uemoto, K. Yabana, Opt. 30, 23664(2022))において、第一原理計算の基づく計算法を提案し、シリコン薄膜に対する斜方入射を例として計算の結果を示した。



理論の枠組みでは、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る。これにより、これまで開発を行ってきた垂直入射 の場合から計算コストはそれほど増大することなく、斜方入射の非線形伝搬に対する計算が 可能になる。ただしp偏光での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、そのまま偏微分方程式を解くと数値的なノイズが発生する。そのため、物 質表面を平滑化する手法を導入することで克服した。

[4] 固体からの高次高調波発生に対する伝搬効果(山田俊介、乙部智仁(関西光科学研究

所)、D. Freeman, A. Kheifets(オーストラリア国立大)、矢花)

固体にパルス光を照射して起こる高次高調波発生は、基礎的な興味に加え可視赤外光を入射 して深紫外から軟 X 線を得るデバイスの原理として高く注目されている。本研究では、時間 依存密度汎関数理論に基づく電子ダイナミクス計算と、パルス光の伝搬を記述するマクスウ ェル方程式をマルチスケールで結合した枠組みを用いて、シリコン薄膜から放出される高次 高調波に対して生成と伝搬の効果を調べた(S. Yamada et.al,Phys. Rev. B107, 035132 (2022))。そ の結果、反射高調波が膜厚によらないのに対し透過高調波は著しく減衰し、1 μm 程度の薄 膜では表面から発生する高次波と裏面から発生する低次波が高次高調波に混在して現れるこ とを明らかにした。これらの結果は、高次高調波発生を用いた固体光デバイスを設計する上 で、基本的な知見を与えるものである。

図4に、計算の概略を示す。(a)は計算方法を示し ている。 (b)と(c)は、厚さ $3 \mu m$ のシリコン(Si)薄膜 をパルス光が伝搬する典型的な計算例を示してい る。パルス強度が 5 x 10¹² W/cm² の強い入射パルス の場合の、反射パルスと透過パルスのフーリエスペ クトルを(c)の挿入図に示す。反射波・透過波とも高 次高調波が含まれていることが分かる。透過波のス ペクトルで、およそ 20eV の振動数でシグナルが消 失していることが見出される。これは、20eV以下の シグナルは薄膜の裏面から発生し、20eV以上のシグ ナルは薄膜の表面から発生するというメカニズムの 差に起因する。このような知見は、電子ダイナミク ス計算と光伝搬を、マルチスケール手法を用いて連 結することで初めて得られたものであり、固体から の高次高調波発生デバイスを設計する上で有用な情 報を提供するものである。

[5] 磁性体に対するアト秒過渡吸収分光の第一原理 計算とスピンダイナミクスの解析(佐藤)

本研究では、時間依存密度汎関数理論(TDDFT)に基づ く第一原理計算により、フェムト秒(10⁻¹⁵秒)レーザー照 射によって磁性体の光学応答がどのように変化するの かを微視的に解析した。レーザー照射下における磁性





体の光学特性を解析するため、我々はポンプ光とプローブ光と呼ばれる二つの光パルスの下 での電子ダイナミクスを計算し、一つ目のポンプ光によって変調された磁性体の光学応答を 二つ目のプローブ光によって調べるポンプ・プローブ分光計算を採用した。このようなポン プ・プローブ計算をポンプ光とプローブ光の間の時間差(Time delay)を変えながら繰り返し実 行することで、光が駆動する電子ダイナミクスを反映した過渡光学応答を時間領域で解析で きる。

右図 5(a)には、フェムト秒レーザー照射下におけるによって固体コバルトの吸光度の変化 Δμがポンプ光とプローブ光の時間差(Time delay)の関数として示されている。また、右図(b)に はこの計算で用いたポンプ光の時間波形を示した。この計算の結果、フェムト秒レーザー照 射によって固体コバルトの吸光度が 58eV 付近で鋭く減少することが分かった。さらに微視 的な電子密度ダイナミクスを解析したところ、光励起によって majority-spin の電子と minority-



spin の電子の密度がコバルト原子の周りで局所的に増減することで吸収端のシフトが起こっ

ていることを明らかにした。この知見を 応用することで、光が駆動するスピンダ イナミクスをアト秒の時間分解能で元 素選択的に測定することが可能である。 本研究成果は、現在、論文投稿準備中で ある。

図 5. (a) 第一原理計算によって得られ た固体コバルトの過渡吸収スペクトル。 (b) ポンプ光電場の時間波形。

[6] THz 領域におけるグラフェンからの高次高調波発生に関する理論的研究(佐藤)

近年、光物性物理分野では固体からの高次高調波発生に関する研究が盛んにおこなわれて いる。本研究では、THz 領域におけるグラフェンからの高次高調波発生に注目し、その発生 機構を微視的な電子ダイナミクス計算により解明することを試みた。我々は、強束縛近似に 基づく電子系のハミルトニアンを用いて量子マスター方程式を解くことで、緩和効果を取り 入れた量子ダイナミクス計算を実行し、THz 電場がグラフェン内に駆動する電子ダイナミク ス解析した。

右図6にはTHz電場の下での電子ダイナミクス計算により得られた高調波スペクトルが示されている。照射した電場のエネルギー(1.24 meV)の奇数倍のエネルギーを持った光がグラフェンから放射されている様子が示されている。また、図には異なる化学ポテンシャルに対す

る計算結果が示されており、高調波発生が 化学ポテンシャルのシフトによって増強さ れている様子が確認できる。さらに微視的 な占有数分布の解析を行ったところ、THz電 場のもので形成される非平衡定常状態が高 次高調波発生において重要な役割を果たし ていることが明らかとなった。本研究成果 は、THz 領域における高次高調波発生の基 礎的理解を発展させるものである。この研 究は、Max-Planck研究所(ハンブルク)との共

同研究であり、論文" この研究は、Max-Planck 研究 所(ハンブルク)との共同研究であり、論文" Terahertz-



2 図 6. グラフェンから放射される高調 放スペクトル

induced high-order harmonic generation and nonlinear charge transport in graphene"として Physical Review B 誌から発表された。

[7] 銅酸化物高温超伝導機構解明に関する研究(小泉)

銅酸化物超伝導体の機構解明に向けて、表面とバルクの両方の CuO₂ 面を持つモデルを使い、 角度分解光電子分光法によるエネルギー分散の測定結果と走査型トンネル顯微鏡による局所 状態密度の測定結果をシミュレートするプログラムを作成し、計算を行った。その結果、概 ね実験と一致する結果を得た(図 7 参照)。計算結果は、銅酸化物の表面ではスモールポー ランの生成が抑制され、スピン渦がほとんどできていないことを示していると考える。また、 バルクには安定なスピン渦とスピン渦誘起ループ電流が存在していても矛盾がなく、その他 の実験結果から、ナノサイズのループ電流が存在することは疑いがないので、スピン渦誘起 ループ電流がその候補であることを示している。



図 7. 銅酸化物超伝導体に対する角度分解光電子分光法により観測されたエネルギー分散、走査型トンネル顯微鏡により観測された局所状態密度のシミュレーション。a, d, g: フェルミーエネルギー近傍の角度分解光電子分光スペクトル強度。b, e, h: $(0, 0) - (\pi, \pi)$ にそった、光電子のスペクトル。c, c, i:走査型トンネル顯微鏡による局所状態密度のシミュレーション。ホール濃度が上から下に行くに従い、 $(a, b, c) \rightarrow (d, e, f) \rightarrow (g, h, i) \rightarrow と増加している。$

銅酸化物超伝導体は、現在の超伝導の標準理論では説明できないが、我々は、標準理論を 超え、銅酸化物超伝導も説明する新しい超伝導理論の構築を行ってきている。その結果、多 体波動関数から生じる非自明なベリー接続を使うと、現在の超伝導理論で一般的に用いられ ている、粒子数を保存しない理論的な枠組み、を、、粒子数を保存する理論的枠組み、に変更が 可能であることを以前示すことができた。本年ではさらに、この多体波動関数から生じる非 自明なベリー接続が、ディラックによって無視して良いとされた、、シュレディンガー方程式 に現れる U(1)位相の自由度、となることを示した。今後この位相は、量子力学の基礎理論の中 に組み込まれていくものと考えられる。そして、それは、超伝導電流、電磁誘導による起電 力、その他の原因による起電力の生成の統一的な記述に利用されていく可能性がある。

[8] 銅酸化物高温超伝導体を量子ビットとした量子コンピューターに関する研究(小泉)

銅酸化物に存在すると理論的に予想されているナノサイズのループ電流、"スピン渦誘起 ループ電流"の実験的個別検出に向け、電流の作る磁場をシミュレーションするプログラム を作成した。今後、実験家と協力して、"スピン渦誘起ループ電流"の個別検出を行ってい き、量子ビットへの応用に繋げていきたい。

[9] 強レーザーで原子励起状態の制御(仝)

我々は、数サイクルパルスのキャリアエンベロープ位相(CEP)が原子励起過程に果たす役 割について、Griffith大学の実験と共同研究を行った。我々は、多光子領域とトンネル領域の 間に位置する 50—300 TW/cm²の強度範囲における CEP の関数としての Ar 原子の励起率に焦 点を当てた。時間依存シュレディンガー方程式(TDSE)の解に基づく数値シミュレーションに より、原子の束縛状態が強度と CEP の両方に非常に敏感であることを右図のように示す。強 度に対する感受性のため、CEP の効果は実験内で大きく減少するが、それでも良い一致が得 られる。このように、TDSE の結果を実験で検証することは、励起プロセスをコヒーレントに 制御するために、精密に調整されたレーザー光束の使用を促す原理証明となる。また、計算

結果を詳細に解析したところ、 CEP に依存する束縛状態の確率 が著しく変化していることが確 認され、これは多光子領域からト ンネル領域への遷移に起因して いると考えられる。本研究は国際 共同研究結果として、科学雑誌



『Physical Review Letters 128, 173201 (2022)』に発表した。

[10] X 線偏光で捉えた特異な量子干渉効果(全)

 Pb^{78+} 原子イオンにおける二電子再結合は本 質的に無極性 $J_{1/2} \rightarrow J_{1/2}$ の遷移であるが、強く偏 光することを実験的に示した。この予期せぬ偏 光は、放射性再結合との量子干渉によるもので あることが我々の計算で示された。この干渉効 果は、非対称な共鳴プロファイルについて研究 されているが、偏光について研究されたことは ない。本研究では、偏光に対する効果は、非対称 性をもたらすものとは異なる部分波から生じ得



ることを示し、小さな干渉を示唆するほぼ対称的な共鳴であっても、予期せぬ大きな偏光を もたらすことを示した。本研究の成果は科学誌『Physical Review Letters 130, 113001 (2023)』 に掲載されました。

[11]2本足イオン性ハバード梯子模型におけるスピン励起状態(前島)

低次元強相関電子系の理論模型の一種である2本足イ オン性ハバード梯子模型の動的電荷構造因子や光学伝 導度を厳密対角化などにより数値的・解析的に調べた。 特に,解析的手法であるボンド演算子法を動的電荷構造 因子スペクトルの計算に応用し、空間依存ポテンシャル が波数 K=(π,0)を有する2本足梯子における結果が厳密 対角化の計算結果をよく再現することを確認した。ま た、実験的にも実現されているランダムポテンシャル下 の系では2トリプロン状態の連続準位、2トリプロン束縛準 位、3トリプロン連続準位からの寄与が重なったスペクトル が観測されることを見出した(図 10)。



図 10. ランダムポテンシャル下 における2本足梯子模型の光学伝 導度口_x(口)。

[12] レーザー誘起 3 次元フロケーディラック・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 を導入した場合のフロケ状態を厳密対角化によって 調べ、フロケ-ディラック半金属と呼ばれるトポロジ カルに非自明な特徴を持つ半金属状態が現れること を見出した。更に円偏光レーザー照射下で実現する フロケ-ワイル半金属状態では up 電子と down 電子 に対する光-電子相互作用の違いから表面状態の分 散曲線に差異,および表面磁化が出現することを示 した(図 11)。



図 11. (上) 円偏光レーザー照射下に おける表面状態の分散曲線。左が upspin, 右が down-spin 電子。(下) 円 偏光レーザー照射下における表面磁 化(横軸は時間)。

4. 教育

- 守尾 直輝(修士(工学)) 銅酸化物高温超伝導体の理論研究:スピン渦誘起ループ 電流のパターンと磁場のシミュレーション
- 2. 張 潤南(博士論文) Creation of Floquet-Weyl semimetals and induced magnetization by optically resonant excitation
- 3. 萩野 遼(修士論文)原子系における高強度円偏光レーザーによる逆ファラデー効 果
- 4. 筬島 俊樹(卒業論文)レーザー誘起フロケノーダルライン半金属相の擬エネルギ ーバンド構造
- 5. 笠原 杏太(卒業論文) フロケワイル半金属相における逆ファラデー効果
- 6. 苅込 剛琉(卒業論文)フロケワイル半金属のバンド構造のレーザー周波数依存性
- 7. 後閑 湧志(卒業論文) ディラック半金属 Cd3As2 のバンド構造の 8 バンド模型に よる解析
- 8. 山口 仁誠(卒業論文)ディラック半金属 Cd3As2 におけるディラック点近傍のバンド構造の解析
- 9. 玄 政彦(卒業論文)Pd 表面の水分子吸着構造と仕事関数の第一原理計算

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

外部資金

- 1. JST CREST「光・電子融合第一原理計算ソフトウェアの開発と応用」、矢花一浩、代表、2016-2022 年度、全年度直接経費: 177,500 千円(2022 年度直接経費: 2,000 千円)
- Q-LEAP 先端レーザーイノベーション拠点 「次世代アト秒レーザー光源と先端計測 技術の開発」、矢花一浩、分担、2018-2027 年度、全年度直接経費: 22,727 千円(2022 年度直接経費: 2,403 千円)
- 3. 科研費基盤(B)「第一原理計算が拓く多元的な極限ナノフォトニクス」、矢花一浩、 2020-2023 年度、全年度直接経費:13,400 千円(2021 年度直接経費:2,700 千円)
- 4. 科研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 千円 (2022 年度直接経費:800 千円)
- 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(2022 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. 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(2022 年 度直接経費:3,000 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」
- 基盤研究 C、全 暁民、代表、令和4年、2730 千円/(総額: 4160 千円)、 "Coherent Control of Atomic Excitation in Strong Fields"

6. 研究業績

(1)研究論文

A) 査読付き論文

- D. Freeman, A. Kheifets, S. Yamada, A. Yamada, K. Yabana, "High-order harmonic generation in semiconductors driven at near- and mid-infrared wavelengths", Phys. Rev. B106, 075202 (2022).
- 2. S. Yamada, T. Otobe, D. Freeman, A. Kheifets, K. Yabana, "Propagation effects in high-harmonic generation from dielectric thin films", Phys. Rev. B107, 035132 (2023).
- 3. T. Takeuchi, K. Yabana, "Electron spill-out effect on third-order optical nonlinearity of metallic nanostructure", Phys. Rev. A106, 063517 (2022).
- 4. M. Uemoto, K. Yabana, "First-principles method for nonlinear light propagation at oblique incidence", Optics Express 30, 23664 (2022).
- 5. G. Duchateau A. Yamada, K. Yabana, "Electron dynamics in alpha-quartz induced by twocolor 10-femtosecond laser pulses", Phys. Rev. B105, 165128 (2022).

- B. Yilmaz, M. Otani, T. Ishihara, and T. Akbay, "First-Principles Investigation of Charged Germa Graphene as a Novel Cathode Material for Dual-Carbon Batteries", Chem Sus Chem, 16, 4, e202201639 (2022-12)
- S. Hagiwara, S. Nishihara, F. Kuroda, and M. Otani, "Development of dielectrically consistent reference interaction site model combined with the density functional theory towards electrochemical interface simulations", Phys. Rev. Mater. 6, 093802 (2022).
- Yasuhiro Oishi, Hirotsugu Ogi, Satoshi Hagiwara, Minoru Otani, and Koichi Kusakabe, "Theoretical analysis on the stability of 1-pyrenebutanoic acid, succinimidyl ester adsorbed on graphene", ACS Omega7, 35, 31120–31125. (2022,)
- S. Hagiwara, J. Haruyama, M. Otani, Y. Umemura, T. Takeuchi, and H. Sakaebe, "Theoretical Consideration of Side Reactions between the VS4 Electrode and Carbonate Solvents in Lithium–metal Polysulfide Batteries", Electrochemistry,90(10), 107002 (2022).
- T. Shimada, N. Takenaka, Y. Ando, M. Otani, M. Okubo, and A. Yamada, "Relationship between Electric Double-Layer Structure of MXene Electrode and Its Surface Functional Groups", Chemistry of Materials, 34, 2069-2075(2022)
- S. Hagiwara, Y. Ando, Y. Goto, S. Shinoki, and M. Otani, "Electronic, adsorption, and hydration structures of water-contained Na-montmorillonite and Na-beidellite through the first-principles method combined with the classical solution theory", Physical Review Materials 6, 025001-1-9 (2022)
- 12. Linghui Li, Satoshi Hagiwara, Cheng Jiang, Haruki Kusaka, Norinobu Watanabe, Takeshi Fujita, Masashi Miyakawa, Takashi Taniguchi, Fumiaki Kuroda, Minoru Otani and Takahiro Kondo, "Boron mono sulfide as a promising high performance metal free electrocat alyst", Nature Communication. submitted
- 13. Fumiaki Kuroda, Satoshi Hagiwara, and Minoru Otani, "Structural changes in the lithium cobalt dioxide electrode: A combined approach with cluster expansion and Bayesian optimization", npj Computational Materials. submitted
- 14. Taisuke Hasegawa, Satoshi Hagiwara, Minoru Otani, and Satoshi Maeda, "A combined simulation method of SC-AFIR and ESM-RISM toward the systematic exploration of elementary reactions and the construction of a reaction path network at solid-liquid interface", Journal of Physical Chemistry Letter. submitted
- 15. 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, 113001:1-6 (2023).

- X.M. Tong, D Kato, T Okumura, S Okada, and T Azuma, "Electronic K x rays emitted from muonicatoms: an application of relativistic density functional theory", Phys. Rev. A 107, 012804(2023).
- D Chetty, RD Glover, X.M. Tong, BA deHarak, H Xu, N Haram, K Bartschat, AJ Palmer, AN Luiten, PS Light, IV Litvinyuk, and RT Sang, "Carrier-Envelope-Phase Dependent Strong-Field Excitation", Phys. Rev. Lett. 128, 173201 (2022).
- H. Koizumi, "Schrödinger representation of quantum mechanics, Berry connection, and superconductivity", PHYSICS LETTERS A 450, 03759601 (2022).
- H. Koizumi, N. Morio, A. Ishikawa, T. kondo, "Study of Cuprate Superconductivity Using the Particle Number Conserving Bogoliubov-de Gennes Equations: ARPES and STS Images From Surface Plus Bulk Layers Model ", JOURNAL OF SUPERCONDUCTIVITY AND NOVEL MAGNETISM 35, 2370 (2022).
- H. Koizumi and A. Ishikawa, "Spin-vortex-induced Loop Current Qubits: Gate Control and Readout Using External Current Feeding", J Supercond Nov Magn 35, 1337-1352(2022).
- H. Koizumi, N. Morio, A.Ishikawa, T. Kondo, "Study of Cuprate Superconductivity Using the Particle Number Conserving Bogoliubov - de Gennes Equations: ARPES and STS Images From Surface Plus Bulk Layers Model", J. Supercond. Nov. Magn. 35, 2357 (2022).
- 22. H. Koizumi, "Schrödinger representation of quantum mechanics, Berry connection, and superconductivity", Phys. Lett. A 450, 128367 (2022).
- H. Koizumi, "Supercurrent and electromotive force generations by the Berry connection from many-body wave functions", J. Phys. A: Math. Theor. 56 185301(2023)
- 24. R. Zhang, K. Hino, and N. Maeshima "Floquet-Weyl semimetals generated by an optically resonant interband-transition", Phys. Rev. B **106**, 085206 (2022)
- Mahmut Sait Okyay, Shunsuke A. Sato, Kun Woo Kim, Binghai Yan, Hosub Jin, Noejung Park, "Second harmonic Hall responses of insulators as a probe of Berry curvature dipole", Commun.Phys. 5, 303 (2022)
- K. Nakagawa, H. Hirori, S.A. Sato, H. Tahara, F. Sekiguchi, G. Yumoto, M. Saruyama, R. Sato, T. Teranishi, Y. Kanemitsu, "Size-controlled quantum dots reveal the impact of intraband transitionson high-order harmonic generation in solids", Nature Physics, 18, 874 (2022)
- A. Niedermayr, M. Volkov, S. A. Sato, N. Hartmann, Z. Schumacher, S. Neb, A. Rubio, L. Gallmann, U. Keller, "Few-Femtosecond Dynamics of Free-Free Opacity in Optically Heated Metals", Phys. Rev. X 12, 021045 (2022)

- 28. Wenwen Mao, Angel Rubio, Shunsuke A. Sato, "Terahertz-induced high-order harmonic generation and nonlinear charge transport in graphene", Phys. Rev. B 106, 024313 (2022)
- 29. Ofer Neufeld, Wenwen Mao, Hannes Hübener, Nicolas Tancogne-Dejean, Shunsuke A. Sato,Umberto De Giovannini, Angel Rubio, "Time- and angle-resolved photoelectron spectroscopy of strong-field light-dressed solids: Prevalence of the adiabatic band picture", Phys. Rev. Research 4, 033101 (2022)
- Dongbin Shin, Simone Latini, Christian Schäfer, Shunsuke A. Sato, Edoardo Baldini, Umberto DeGiovannini, Hannes Hübener, Angel Rubio, "Simulating Terahertz Field-Induced Ferroelectricityin Quantum Paraelectric SrTiO3", Phys. Rev. Lett. 129, 167401 (2022)
- Wan-Dong Yu, Hao Liang, Cong-Zhang Gao, Shunsuke A. Sato, Bao-Ren Wei, Alberto Castro, Angel Rubio, Liang-You Peng, "Charge transfer in ultrafast isomerization of acetylene ions", Phys. Rev. A 106, 033111 (2022)
- Alberto Castro, Umberto De Giovannini, Shunsuke A. Sato, Hannes Hübener, Angel Rubio, "Floquet engineering the band structure of materials with optimal control theory", Phys. Rev. Research 4, 033213 (2022)
- 33. Matteo Lucchini, Fabio Medeghini, Yingxuan Wu, Federico Vismarra, Rocío Borrego-Varillas, Aurora Crego, Fabio Frassetto, Luca Poletto, Shunsuke A. Sato, Hannes Hübener, Umberto De Giovannini, Angel Rubio, Nisoli, "Controlling Floquet states on ultrashort time scales", Nat. Commun. 13, 7103 (2022)
- Alberto Castro, Shunsuke A. Sato, "Floquet engineering non-equilibrium steady states", Phys. Rev. Lett. submitted.
- Alberto Castro, Umberto De Giovannini, Shunsuke A. Sato, Hannes Hübener, Angel Rubio,
 "Floquet engineering with quantum optimal control theory", New J. Phys. 25 043023(2023)
- Gian Luca Dolso, Bruno Moio, Giacomo Inzani, Nicola Di Palo, <u>Shunsuke A. Sato</u>, Rocío Borrego-Varillas, Mauro Nisoli, Matteo Lucchini, "Reconstruction of ultrafast exciton dynamics with a phase-retrieval algorithm", Optics Express 30, 12248 (2022)
- B) 査読無し論文

なし

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

- M. Otani, "Study of corrosion at metal and water interfaces using DFT and the classical liquid theory hybrid simulations", Electrified solid/water interfaces – theory meets experiment, Ringberg, Germany, May 15-18, 2022, online
- K. Yabana, "First-principles calculations of ultrafast dynamics in solids", 15th Asia Pacific Physics Conf.(APPC15), Aug.21-16, 2022, online.
- 3. K. Yabana, "Maxwell-TDDFT simulation for high-field propagation dynamics", Optics Incubator on On-Chip High-Field Nanophotonics, July 6-8, 2022, Washington DC, USA.
- 4. Kazuhiro Yabana, "TDDFT for extreme optics: nonlinearity and nonlocality", 9th Workshop on TDDFT, Oct. 25-27, 2022, Benasque, Spain.
- Kazuhiro Yabana, "Time-dependent density functional theory for extreme nonlinear optics", 23rd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, Oct. 31-Nov. 2, 2022, online.
- 6. Kazuhiro Yabana, "Propagation effect in high harmonic generation from thin films", Theory days on ultrafast processes in molecules and clusters, Nov. 23-25, 2022, online.
- Kazuhiro Yabana, "Time dependent density functional theory in real time: Linear and nonlinear optical response", 3rd APCTP-KIAS Electronic Structure Calculations Winter School, Invited lecture, Jan. 17-20, 2023, online.
- Kazuhiro Yabana, "Propagation and energy transfer of intense and ultrashort laser pulse in solids: First-principles computational approach", SPIE Photonics West, LAMON XXVIII, Jan. 28-Feb. 2, 2023, San Francisco, USA.
- 9. Shunsuke A. Sato, "Application of TDDFT to recent attosecond experiments", 9th Time-Dependent Density-Functional Theory: Prospects and Applications, Benasque, Spain, October
- Shunsuke A. Sato, "Application of real-time TDDFT simulation to nonlinear and nonequilibrium electron dynamics in matter", Fundamentals in density functional theory, December 7-22, 2022, Kyoto University
- H. Koizumi, "Jahn-Teller Effect, Berry Phase, and Superconductivity", Spontaneous Symmetry Breaking and Jahn-Teller Effects, The Institute of Chemistry and the Academy of Science of Moldova, (online, Feb. 10, 2023).

B)一般講演

 K. Yabana, "Development and applications of SALMON - First-principles computations in optical science -", 2022 EPCC-CCS Workshop, Univ. Edinburgh and online, 2022.12.15
- 2. M. Otani, "Study of corrosion at metal and water interfaces using DFT and the classical liquid theory hybrid simulations", Workshop: "Electrified solid/water interfaces theory meets experiment", Düsseldorf Germany (on-line), May 15-18, 2022.
- 3. H. Koizumi, "Schrödinger representation of quantum mechanics, Berry connection, and superconductivity", Novel Quantum States in Condensed Matter, (Tokyo, Japan, Nov. 8, 2022).
- H. Koizumi, "Schrödinger representation of quantum mechanics, Berry connection, and superconductivity", 2nd International symposium on trans-scale quantum sciences Novel Quantum States in Condensed Matter 2022 (Tokyo, Japan, Nov. 10, 2022).
- 5. H. Koizumi, "U(1) phase neglected by Dirac and superconductivity: the particle number conserving Bogoliubov-de Gennes equations applied for calculations of spectroscopic properties of cuprate superconductivity", Integrated Spectroscopy for Strong Electron Correlation-Theory, Computation and Experiment 2022 (Tokyo, Japan, Dec. 8, 2022).
- Shunsuke A. Sato, "Real-time TDDFT for extremely nonlinear and ultrafast phenomena", 9th Time-Dependent Density-Functional Theory: Prospects and Applications, Benasque, Spain, October 18-28, 2022.

(3) 国内学会·研究会発表

A) 招待講演

- 5. 矢花一浩、「高強度パルス光の伝搬とエネルギー移行の第一原理計算」レーザー学会第43回年次大会、ウインクあいち、2023年1月18-20日
- 2. 矢花一浩、「フェムト秒レーザーから物質へのエネルギー移行の第一原理計算」第5 回天田財団レーザプロセッシング助成研究成果発表会、2022年4月20日
- 3. 矢花一浩、「フェムト秒レーザーから物質へのエネルギー移行過程に対する第一原 理計算」電気学会全国大会、名古屋大学、2023 年 3 月 15-17 日
- 大谷 実、「密度汎関数法と溶液論のハイブリッド法を用いた電気二重層キャパシ タの電極界面シミュレーション」2022 年電気化学秋季大会 招待講演
- 5. 大谷 実、「電気化学界面における化学反応路探索」化学反応路探索のニューフロン ティア 招待講演

B)その他の発表

矢花一浩、「先端の光科学のための第一原理計算ソフトウエア SALMON の開発と応用」第35期 CAMM フォーラム本例会 オンライン講演、2022 年4月1日

- 矢花一浩、「フェムト・アト秒スケールの実時間第一原理計算」、第67回物性若手 夏の学校講義 オンライン、2022年8月3-5日
- 3. 矢花一浩、「ここまで来た物質科学の GPU 活用」、CMSF 勉強会 "プログラム高度 化最前線と今後の課題共有"、オンライン、2022 年 9 月 16 日
- 4. 矢花一浩、「高次高調波発生と光伝搬ダイナミクス」、Q-LEAP 第 21 回 ATTO 懇談 会、東大理・化学本館、2022 年 9 月 28 日
- 5. 矢花一浩、「光科学のための第一原理計算ソフトウェア SALMON の開発とその GPU
 化」、GPU UNITE オンライン、2022 年 10 月 7 日
- 5. 矢花一浩、「フェムト秒レーザー初期過程のための理論と計算」、日本光学会冬季講習会、講師、オンライン、2023 年1月26日
- 大谷実、「固液界面における 電気化学反応シミュレーション技術の 開発と応用」第
 130 回触媒討論会 特別講演
- 8. 大谷実、「電解液界面における構造及び化学反応解析と富岳を用いたシミュレーション技術の社会実装」、「富岳」電池課題 第3回公開シンポジウム、1月5日(NIMS)
- 9. 大谷実、「電気化学界面シミュレーション技術の発展と産学連携」@金沢商工会議所 理論化学討論会 (5/18)
- 10. 黒田 文彬、萩原 聡、大谷 実、「Liイオン電池正極材料 LiCoO2 の充放電過程における構造変化に関する研究:クラスター展開とベイズ最適化の複合的アプローチ」 日本物理学会 2022 年秋季大会 口頭発表
- 11. 大谷実、本山裕一、萩原聡、吉見一慶「ESM-RISM法を実装した Quantum ESPRESSO の高度化」日本物理学会 2022 年秋季大会 ポスター発表
- 12. 萩原聡、安藤康伸、後藤佑太、 篠木進、 大谷実、「密度汎関数法+古典溶液理論 による層状粘土鉱物のカチオン吸着構造と水和構造の研究」日本物理学会 2022 年秋 季大会 口頭発表
- 13. 萩原 聡、「原子層鉱物の機能開拓に向けた計算・計測連携研究会」@筑波大学計算 科学研究センター 会議室 B(5/17)
- 14. 萩原 聡、「量子・古典融合理論と 反応経路自動探索法を組み合わせた電気化学界 面シミュレーション手法の開発」、「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会 2023-3
- 15. 小泉裕康、「ディラックが無視した U(1)位相とベリー接続、粒子数を保存するボゴ
 リューボフ=ド・ジャンヌ方程式」、第70回日本物理学会2023年3月春季大会、
 オンライン2023年3月22-25日.
- 16. 小泉裕康、自然言語処理の量子情報理論、自然言語フォーラム第6回会合 5月23日 講演:法政大学 雪田修一「モノイド圏と言語処理」

- 17. 守尾直輝、小泉裕康、「銅酸化物超伝導体のバルクに存在するスピン渦誘起ループ電流のパターンと地場のシミュレーション」、第70回日本物理学会2023年春季大会、オンライン2023年3月22-25日.
- 18. 張潤南、 前島展也、日野健一、「光共鳴励起によるフロケワイル半金属相の創成と 制御」 日本物理学会 2022 年秋季大会、東京工業大学、 2022 年 9 月 15 日
- 19. 佐藤駿丞、第一原理電子ダイナミクス計算による光誘起超高速現象の微視的解析」 物質設計評価施設(MDCL)セミナー 東京大学物性研究所 2022-10
- 20. 佐藤駿丞、「強レーザー電場下におけるアト秒電子ダイナミクスの第一原理的解析 (シンポジウム講演)」、第70回 応用物理学会春季学術講演会、上智大学、2023-3
- 21. 佐藤駿丞、「光誘起非平衡電子ダイナミクスの第一原理計算(シンポジウム講演)」、
 第70回 日本物理学会 2023 年3 春季大会、オンライン

7. 異分野間連携·産学官連携·国際連携·国際活動等

国際連携・国際活動

- 矢花:時間依存密度汎関数理論を用いたレーザーによる物質の励起過程に関する共同研究を、ボルドー大学、オーストラリア国立大学、インド工科大学ボンベイ校の理論研究者と実施している。
- 小泉:国際共同研究推進プログラム(筑波大学) エラー訂正を備えた量子コンピュ ータ用トポロジカルに保護されたループ電流量子ビットの開発 (Development of topologically protected loop current qubits for fault- tolerant quantum computers)

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

- 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。また、高度情報科学技術研究機構の支援のもと、名古屋大学情報基盤セ ンターにおいてハンズオンチュートリアルを実施した。
- 9. 管理·運営

組織運営や支援業務の委員・役員の実績

- 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、運営協議会委員、先端計算科学推進室室長、共同研究委員会委員、量子物性研究部門長など。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など。
- 2. 小泉: (学内) 筑波大学全学計算機システム 3D サテライト管理

3. 前島: (学内) 応用理工学類 e ラーニング委員、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

10. 社会貢献·国際貢献

2022 年 4 月から科学雑誌 The European Physical Journal D の Associate Editor に務めている。 (全)

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(数理物質系)
准教授	原田 隆平(生命環境系)
助教	庄司 光男(数理物質系)、堀 優太(数理物質系)
	Kowit Hengphasatporn (生命環境系)
研究員	三嶋 謙二、森田 陸離、宮川 晃一、下山 紘充、松井 正冬、
	宗井陽平、Mrinal Kanti Si、藤木 涼
学生	大学院生 5名、学類生 1名
教授	広川 貴次(学内共同研究員、医学医療系)
助教	吉野 龍之介(学内共同研究員、医学医療系)

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。令和四年度は、[1] 薬剤の膜透過プロセス抽出を可能にする計算手法の開発、【2】ロドプシンの構造変化に関す る理論的解明、【3】光捕集蛋白質における効率的エネルギー移動についての理論的解析、【4】 銅含有アミン酸化酵素におけるセミキノンラジカル生成機構の理論解明、【5】金属タンパク 質の構造と電子状態の解析、【6】宇宙生命連携、【7】MnBi 系磁性材料のマテリアルズイン フォマティクス、【8】3次元ドメインスワッピング現象の解析、【9】First-Principles studies of enhanced dielectric response in tetragonal and monoclinic ZrO₂ with Te substitution、【10】 Computational study for drug discovery and design research など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)、および国内のスパコンを利用 した。また、筑波大学内外の研究グループと共同研究し、新しい研究にも積極的に取り組ん だ。

3. 研究成果

[1] 薬剤の膜透過プロセス抽出を可能にする計算手法の開発(原田、森田、重田)

生体膜を介して生体外から生体内へ化合物を取り込み、疾患原因となる標的分子を活性阻害 するプロセスにおいて膜透過性の評価は重要である。分子動力学計算(MD)は、膜透過に伴 う化合物の構造変化を詳細に追跡できるが、現実的な計算コストで膜透過を抽出することは 難しい。何故ならば、膜透過に要する時間スケールと比較して MD が追跡可能な時間スケー ルが極めて短いからである。通常の MD が到達不可能な時間スケールで誘起される生命現象 は生物学的レアイベントとみなされ、膜透過プロセスも該当する。到達時間スケールの限界 による探索不足を打破するため,、構造サンプリング法が提案されてきた。本研究では、これ まで開発を進めてきた構造サンプリング法(レアイベントサンプリング法)から、 Parallel Cascade Selection MD (PaCS-MD) と Outlier Flooding Method (OFLOOD)を併用したハイブリ ッドサンプリング法に基づき、膜透過プロセスを抽出した。[R. Harada, R. Morita, Y. Shigeta, J. Chem. Inf. Model. (2023)] また、生成されるトラジェクトリを利用して膜透過に伴う自由エネ

ルギープロファイルと膜透過係数を見 積もり、膜透過性を議論した。

本手法の妥当性を検証するため、先 行研究で調べられている4つの化合物 (図1: DOM,LBT,LOP,DSP)に対し て脂質二重膜における膜透過プロセス を抽出した。さらに,膜透過に伴う自 由エネルギープロファイル及び膜透過 係数を計算し、実験値との相関関係を 調べた。図2は、PaCS-MDを適用して 抽出した4つの化合物の膜透過プロセ スを示す。図2が示すように、サイク ルが進むにつれて化合物の重心座標

(zcom)が小さくなっていき、脂質二重 膜の上方から下方へ化合物が膜透過し ていく様子がわかる。次に、PaCS-MD により生成した初期膜透過プロセスをも とにOFLOODを適用して広域的な構造空 間を探索した。ここで、zcomに追加して化 合物の膜表面に対する配向を記述する変 数(Δz)を考慮し、2次元構造空間を定義 した。最終的に、探索した2次元構造空間 から代表構造を選択し、OFLOOD により プロダクションランを実行した。図3は、





図 2. PaCS-MD を適用して抽出した化合物の膜透過プ ロセス



長時間 MD により生成されたトラジェクトリからマルコフ状態モデルを構築して計算した 2 次元構造空間における化合物の膜透過に関する自由エネルギープロファイルであり、化合物 が膜透過する経路を考察できる。より定量的な膜透過性評価として、化合物に対して構築し たマルコフ状態の固有値から膜透過係数を算出したところ、化合物に対する膜透過係数の計 算値と実験値との相関プロット(R²~0.89)であった。結論として、定量的な一致は難しいものの、定性的に高い相関を示すことが確認できた。以上より、本手法を適用することで化合物の膜透過に伴う自由エネルギープロファイル及び膜透過係数を定性的に算出できる。計算値の定量的な議論に関しては、計算の精度向上を目指すことで将来的に改善していく予定である。

[2] ロドプシンの構造変化に関する理論的解明(宮川、庄司、重田)

ロドプシンは光受容体の膜蛋白質であり、ヘリックスが7回膜貫通の構造を持ち蛋白質中 の発色団のレチナールが光を吸収しその異性化により機能を果たす。ヘリオロドプシンは、 通常のロドプシンと同様に7回膜貫通膜の構造を持ち中心部にレチナールを持つものの、ア ミノ酸配列が全く異なり、膜内での配向が逆転した構造となっていることが発見された。 (Shihoya et al. Nature, 2019)しかしながら機能がほとんど判明していないため、機能解明に向け た様々な取り組みが行われている中、ヘリオロドプシンに亜鉛イオンのみが特異的に結合し、 ヘリックスの構造が変化することが明らかとなった(Hashimoto et al., J. Phys. Chem. Lett., 2020)。 本研究では、名古屋工業大学の神取教授の研究室との共同研究により亜鉛の特異的な結合に よるヘリオロドプシンの構造の変化を、野生型と亜鉛が結合したヘリオロドプシンについて MD シミュレーションによる結果と実験結果との比較することで解析を行った。計算にはへ リオロドプシンの X 線構造(PDB ID: 6IS6)を用い、亜鉛の結合した状態は実験結果を考慮し、 150番目のグルタミン酸残基に亜鉛が結合した状態を用いた。シミュレーションの結果、膜貫 通ヘリックス(TM)のうち亜鉛が結合した E150 残基の含まれる TM4 と TM5 において構造が 変化していることが示唆された(図 4A)。特にヘリックス構造の分布について見ると、亜鉛が 結合した場合では、TM4 のαヘリックスの分布(図 4B)、および TM4 と TM5 の間の 3-10 ヘ リックスの分布(図 4C)が減少するという結果となり、実験と整合性のある結果が得られた。 また図 4D、E に示したように E150 への亜鉛の結合により E150、R105、E227 残基間の塩橋 部分の変化が起こり、それらの残基が含まれる TM1-TM3、TM7 間の水素結合ネットワーク の形も変化し、水分子の出入りも確認された。



図 4. (A)野生型のヘリオロドプシ ンと亜鉛が結合した状態の代表構 造の比較、(B) α ヘリックス構造と (C) 3-10 ヘリックス構造の分布、(D) 野生型での E150 周り水素結合ネッ トワークと(E)亜鉛の結合した場合 の変化の様子。

[3] 光捕集蛋白質における効率的エネルギー移動についての理論的解析(三嶋)

光捕集蛋白質 C-フィコシアニン(C-PC)は高効率 に励起エネルギー移動(EET)を起こし、光エネルギー を反応中心に長距離移動させている。その時系列を 解析するため、励起エネルギー移動ダイナミックス を実施し、EET になんの因子が最も寄与しているか 理論的に検討した。その結果、色素分子の配置が重 要であることが示された。自然系では色素分子は3 回回転対称性を持って積層している。この配列順序 を変更し、EET 速度を算出したところ、自然配列の





EET 速度が最も速いことを示した。これらの研究から、C-PC では最も効率的に EET を起こ すように色素分子位置が制御されていることを理論的に示した(図 5)。

[4] 銅含有アミン酸化酵素におけるセミキノンラジカル生成機構の理論解明(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 から銅中心に 一電子移動することにより、TPQ はセミキノンラジカル(TPQsq)になる。TPQsq 生成で大きな 構造変化を伴うことが結晶構造解析から示唆されており(図6)、本反応は、古典的な酵素 反応、鍵と鍵穴モデル、のような活性中心が固定されている系とは異なり、動的な描像を与 える新しい酵素系となっている。また、二液混合法による時分割結晶構造解析に適する極め て稀な酵素反応系であり、動的構造解析が劇的に進展すると期待される。この非古典的な酵 素反応の仕組みについて量子古典混合計算により、詳細な反応機構を解明し、実験結果を再 現する結果が得られた。論文は RSC Chem Sci に掲載された。



図 6. CAO のセミキノンラジカル生成に伴う大きな TPQ_{sq}の構造変化

[5] 金属タンパク質の構造と電子状態の解析(堀)

高電位鉄硫黄タンパク質(HiPIP)は、光合成電子伝達系ではたらく電子運搬タンパク質で、 活性中心にキュバン型の[4Fe-4S]クラスターを持っている。HiPIPと同様に活性中心に[4Fe-4S] 構造を持つタンパク質としてフェレドキシン(Fd)があるが、HiPIP は Fd に比べて極めて酸化 還元電位が高い。この原因として、[4Fe-4S]クラスター周辺の構造が要因であることが指摘さ れている。したがって、クラスター周辺のアミノ酸は[4Fe-4S]の電子状態に影響を与えること が予想される。そこで本研究では、[4Fe-4S]クラスター周辺の環境を考慮した計算モデルを構 築することにより、第一原理計算により、[4Fe-4S]クラスターの幾何学的・電子的構造とその 周辺アミノ酸から受ける影響を検討した。

X線結晶構造解析から得られた還元状態の HiPIP 構造を用いて、モデル I(原子数:56)とモ デル II(原子数:283)の2つのモデルを構築した。考えられるスピン状態の中から、開設一重 項状態に対応する12通りのスピン配置を考えた。計算には Gaussian 16を用い、密度汎関数 法の汎関数に B3LYP、基底関数に 6-31G*を使用した。また自然結合軌道(NBO)解析を行い、 各自然軌道の自然スピン密度、自然電荷を算出した。

12 通りの初期スピン配置に対して構造最適化を行ったところ、4 通りの初期スピン配置に ついて行った計算がエネルギー的に安定な構造・電子状態に収束した。得られた構造に対し て、NBO 解析を行ったところ、Fe1-Fe2 および Fe3-Fe4 でスピンの非局在化が観測された(図 7)。また、軌道エネルギーの解析から HiPIP の酸化還元反応は Fe1-Fe2 の面上で起こる可能 性があることがわかった。[4Fe-4S]クラスター周辺のアミノ酸を考慮した場合と考慮しない場 合の安定構造の計算結果を比較した結果、HiPIP ではその周辺のアミノ酸が[4Fe-4S]クラスタ ーの幾何学的・電子的構造を安定化していることが示された。タンパク質の機能を理解する ためには、その周辺環境を考慮することが重要であることが明らかとなった。HiPIP と Fd な どの金属タンパク質の電子状態の違いを詳細に理解するためには、単純なクラスターだけで なく周辺アミノ酸を考慮した電子状態計算が必須であると言える。



図 7. Natural bond orbitals formed by Fe3-Fe4 and Fe1-Fe2 (A: Fe3-Fe4 bond orbital in model I, B: Fe3-Fe4 bond orbital in model II, C: Fe1-Fe2 bond orbital

[6] 宇宙生命連携(堀、庄司、重田)

生命体の構成要素分子であるアミノ酸は、化学的に合成すると左手型(L型)と右手型(D型) が同量生成されるが、地上の生命はL型アミノ酸のみで構成されている。このアミノ酸のホ モキラリティ化は、生命誕生の初期過程において必須な選択であり、その分子機構として「星 間空間の円偏光による不斉分解」及び「キラリティ増幅」が関わると考えられるが、具体的 な分子機構は未解明であった。前者の不斉分解では、アミノ酸の円偏光吸収特性(円二色性 吸収(CD)スペクトル)が重要な指標となるが、光の高いエネルギー領域では実験的測定が十 分になされていなかった。さらに、非天然アミノ酸であるイソバリンは、CDスペクトルが他 のアミノ酸の CD に比べると反転しており、アミノ酸共通のホモキラリティ化の機構は解決 していなかった。そのため、アミノ酸の CD スペクトルを量子化学計算で求めることで、ア ミノ酸のホモキラル問題の解決を試みた。

最安定構造を独自考案の構造探索法(RS法)で求め、高精度量子化学計算で CD スペクトル を求めたところ、低いエネルギー領域の CD スペクトルは実験値と良い一致が見られること を示した。イソバリンでは CD スペクトルが反転する傾向が見られ、アミノ酸化学種ではホ モキラリティを説明できないことが明確になった。そのため、アミノ酸前駆体において、同 様の CD スペクトル計算を行ったところ、アミノニトリル前駆体において CD スペクトルの 符号が共通する領域が 10-11 eV に存在することが明らかになった。この結果より、アミノニ トリルがホモキラリティ獲得に主な寄与を与えていたと考えられる。また、10.2 eV は銀河形 成初期において Lyα として強く放射されるピーキーな光であり、この円偏光化された光によ り、D型が光分解し、L型が過剰になったシナリオ (図 8) が考えられる。本研究成果は、論 文内容をプレスリリースした。

次に、アミノ酸のキラル増幅機構について注目した。アミノ酸のキラル増幅機構として Viedma 熟成が提案されている(*J. Am. Chem. Soc.*, 130, 15274 (2008))。Viedma 熟成のキープロ セスとしてアミノ酸のラセミ化反応がある。しかしその反応機構の詳細については明らかで はない。そこで本研究では、アラニン (Ala) とアスパラギン酸 (Asp) を取り上げ、それぞれ のラセミ化反応の反応経路を密度汎関数理論(DFT)を用いて調べた。計算により、Ala と Asp のラセミ化反応経路において、ともに 10 個の反応中間体と 5 個の遷移状態が見つかった。得 られたポテンシャルエネルギープロファイルを比較すると、得られた Ala と Asp のラセミ化 反応の反応機構について大きな差はないことがわかった。また、どちらも最も活性化エネル ギーの高いプロセスは脱水反応であり、60 kcal mol⁻¹ を超える。一方で、ラセミ化が起こる反 応ステップでは、Ala と Asp の場合でそれぞれ活性化エネルギーが 30.8 kcal mol⁻¹ と 31.3 kcal mol⁻¹ となった。脱水反応では、反応周辺の水分子を考慮して計算を行うと、活性化エネルギ ーが大きく下がり、Ala と Asp の場合でそれぞれ 47.2 kcal mol⁻¹ と 46.9 kcal mol⁻¹ になった。こ れは、実験が 80-100 ℃で熱しながら行われたことから、妥当な活性化エネルギーであると 考えられる。以上より、アミノ酸のラセミ化反応は水分子が触媒することが DFT 計算により 明らかとなった。



図 8. アミノ酸の前生物的 L 体過剰生成機構概略図: ①銀河中心から円偏化されたライマン アルファ線が放射されることで、ダスト粒子上のアミノニトリル前駆体は選択的光分解反応 を起こし、②L 型のアミノニトリル前駆体が増加する(D 体のアミノニトリル前駆体がより減 少する)。③ダスト粒子が集積し、小惑星となり温度が上昇すると、 アミノニトリル前駆体は キラリティを保ったままアミノ酸に加水分解される。④小惑星間の衝突により、軌道が変わ り、地球に落下した小天体(隕石)により、地上にアミノ酸の L 型過剰がもたらされる。

[7] MnBi 系磁性材料のマテリアルズインフォマティクス(松井、重田)

MnBi は高温における磁気一次相転移を示す数少ない磁性材料として古くから知られてい る。現在、クリーンエネルギー化の社会的要請のもと、モータおよび発電機の高効率化に不 可欠な材料として高性能永久磁石の需要が拡大しているが、主流である Nd-Fe-B 系磁石は産 出量の少ない希土類資源の供給不安に悩まされている。本研究の対象である MnBi はその代 替永久磁石として期待されており、この系に対する高磁性新規化合物の設計指針を構築・達 成することは社会的に広い波及効果が期待できる。本研究では、周期系に対する第一原理計 算を用いて、MnBi 元素置換系の安定構造、および電子状態を求め、そのスピン構造変化から 磁化率や磁気異方性効果を計算し、様々なドーパントの効果を検証した。NiAs 構造 MnBi(図 9)の置換系において最適化格子定数・スピン状態の第一原理計算を行い、磁化・置換系生成 エネルギーを求めた(図 10)。Mn 置換では磁化向上は見られず、15,16 族元素(ニクトゲン, カルコゲン)による Bi 置換が、磁化向上・生成エネルギー的に有望であった。MnBi の磁気 異方性効果(MAE)の温度変化をスピン軌道相互作用を取り込んだ第一原理計算により求め た。Kuz'min 式による補正を導入することで、スピン軸が低温での結晶 ab 面内から高温での c 軸方向に変化し、500 K 程度でピークを持つ構造が良く再現できた(図 11)。ただし、実験 値と比べて過小評価の傾向があった。これらの計算データ・知見を活用し、NAIST 原嶋助教 との共同研究により、データ同化手法を用いて Cr-Sb ドープ系の各組成での磁化の温度変化 予測を行った。これにより、所望磁化・キュリー温度を与える最適組成の予測が可能となった。





☑ 11. Temperature dependence of magnetic anisotropic effect of MnBi.

[8] 3次元ドメインスワッピング現象の解析 (下山, 重田)

機能的蛋白質を人工的に設計する試みは 20 年以上試みられてきているが、意図した構造を 形成する蛋白質の設計はできても、意図した機能を果たす蛋白質の設計にはいまだに成功し ていない。そこで本研究では、生来機能的である蛋白質を組み合わせることで意図した機能 を果たす高次複合体を設計する技術の確立を目指して研究を行った。生体内での蛋白質の構 造は、温度や圧力といった熱力学的パラメータに応じた、自由エネルギー的安定構造である とされる(アンフィンセンのドグマ)。従って機能的高次複合体の形成に貢献する相互作用 などを特定するためには自由エネルギー解析が有効である。本年度の研究では電気伝導蛋白 質であるシトクロム *c* (Cyt *c*)の二量体形成を MD で再現した。

Cyt c の2量体形成は3次元ドメインスワッピング現象(3D-DS)と呼ばれる、同種タンパク 質が互いの構造の一部を入れ替えることで複合体を行う現象を通して実現できることが実験 的に知られている(図 12, S. Hirota *et al.*, PNAS, 2010)。3D-DS 現象は蛋白質の部分的無秩序 化/再秩序化(unfolding/refolding)、および、蛋白質同士の結合/解離が含まれるため比較的時 間スケールの長い現象になる。



図 12. Cyt cの 3D-DS 現象の概念図。それぞれ (a) 単量体構造、 (b) 部分的無秩序構造、 (c) b が 結合した構造、 (d) 3D-DS 構造。S. Hirota *et al.*, PNAS, 2010 より改編して抜粋。

この様な長時間スケールを扱うために、構造対称性に基づいた近似的アミノ酸間相互作用 モデル(図 13, Symmetrized Go-like model, Yang *et al.*, PNAS, 2004)を用いた。本モデルではアミ ノ酸一つを1つの質点として扱っている。また 3D-DS 現象を起こすためにはドメインをつな ぐループ部分(図 12 で紐状の部分)の柔軟性が重要になる。そこでループ部分の結合角・二 面角相互作用と構造形成傾向の関係を明らかにするため、相互作用を 100%, 50%, 25%, 12.5%,



図 13. (a) Symmetrized Go-like
 model の概念図。鎖 A のアミノ酸
 (i, j)が相互作用する場合、鎖 A と B
 を跨いだ場合にも(i, j)に同様の相
 互作用が成立すると考える。(b)本研
 究における相互作用のマップ。赤い
 点は「単量体構造」から相互作用パ
 ラメータが得られるアミノ酸の組み
 合わせであり、青い点は対称性から
 推定された相互作用を示している。

0%と弱めて MD を行った。またサンプリング効率を上げるために拡張アンサンブル法を用いた。なおこれらの方法は2量体に限らず高次複合体にも応用することができる点が重要である。

本研究の結果、Cyt c の 3D-DS 構造を理論的に再現することに成功した(図 14a)。構造から2本の鎖が互いの一部を交換し合っている様子が確認できる。また鎖AとB各々の実験構造に対する RMSD に対して分布図を作成し、3D-DS 構造の形成傾向を調べた。3D-DS 構造は鎖AとBの RMSD が 15Å以下の領域に対応し、分布は左下と右上の2つの部分に分かれていた。ループ部分の相互作用が25%から12.5%へと変化させた際に、最も大きく3D-DS 構造が形成される確率が変化することがわかった(図 14b)。



図 14. (a) MD で得られた 3D-DS 構造。(b) ループ部分の相互作用の強さと確立分布の関係。横軸、および縦軸は鎖 A, B それぞれの実験構造に対する RMSD であり、両者の RMSD が 15Å を切った部分のサンプルが 3D-DS 構造に対応している。

[9] First-Principles studies of enhanced dielectric response in tetragonal and monoclinic ZrO_2 with Te substitution (Mrinal, Shigeta)

We determine the dielectric response of tetragonal and monoclinic zirconia (ZrO₂) with TeO₂ doping at various concentration using first-principles density functional theory calculations based on pseudopotentials and a plane wave basis. The TeO_2 is highly stable structure, and it can exist as tetragonal and orthorhombic crystal structure. We find a significantly enhance dielectric response in zirconia with Te doping with lower concentration. The dielectric constant increases from 36.5 to 82 for tetragonal ZrO₂ and monoclinic 21 to 38. We have calculated the dielectric constant of ZrO₂ with PBE and PBE with U corrections which shows that the dielectric constant with PBE with U correction (U = 2 eV) is good agreement the experiment results. Further, we have applied same methods for calculating dielectric constant of doped ZrO₂. The band gap of both phase of ZrO₂ have been examined using PBE with numbers of U correction to determine the experimental band gap which shows band gap of tetragonal and monoclinic ZrO_2 is ~ 5.3 eV. This band gap is similar to the PBE0 method (5.43 eV) and experimental value of 5.5 eV. The Te doped tetragonal and monoclinic ZrO₂ shows the insulation properties after ~6% and ~3 % Te doping. Tellurium doping with smaller concentration in ZrO₂ increases the dielectric constant as well as showing the insulating properties which suggests that they can be used as good Gate oxide for transistor with low leakage current.

Table 1. Dielectric constant	(ϵ^0) of Te doped	tetragonal and	monoclinic ZrO2 with	concentration
of 3.1%, 6.2%, 12.5% and 25%	%			

	PBE (ZrO ₂))	PBE+U (2 eV) (ZrO ₂)		
Te doj	Te doped Tetragonal Mo		Tetragonal	1 Monoclinic	
ZrO_2	ZrO_2	ZrO_2	ZrO_2	ZrO_2	
0 %	42.94	21.27	36.56	18.57	
3.1 %	73.8	-	62.52	-	
6.2%	85.37	27.95	80.80	32.64	
12.5%	82.00	25.00	76.81	38.37	
		4 3 2-			
Band struc	ture of tetragonal Z	ZrO ₂ Bi	and structure of	Te-doped tetra	

[10] Computational study for drug discovery and design research (Kowit Hengphasatporn, Yasueru Shigeta)

We focused on antiviral research by searching for potential antiviral agents against SAR-CoV 2 and Dengue viruses. For the SAR-CoV 2, natural compounds from mangosteen, and Piperine have been elucidated for the antiviral activity towards SAR-CoV 2 3CL protease. LB-PaCS-MD/FMO helped sample the ligand/binding conformations, which is necessary for accurately predicting complex structures and binding affinities using quantum mechanics (QM)-based calculations. The pocket shape analysis indicated that the LB-PaCS-MD could generate a suitable complex structure based on the given ligand by modifying the residue selection. A ligand interacted with the protein receptor, and the binding event could improve the program prediction accuracy. Thus, LB-PaCS-MD/FMO can be utilized to generate a customized binding conformation for potent compounds and increase the binding score accuracy, which is necessary for discovering and developing drugs (Fig.15). New N-containing xanthone analogs of α -mangostin were synthesized via one-pot Smiles rearrangement. These showed several bioactivities. For compound 2, this gave potent SARS-CoV-2 main protease inhibition by suppressing 3CL protease activity approximately threefold better than that of 1. The fragment molecular orbital method (FMO–RIMP2/PCM) indicated the improved binding interaction of 2 in the 3CL active site regarding an additional ether moiety.



Figure 15 (A) Work flow for LB-PaCS-MD/FMO technique and (B) the summary of flavone analogs as a potential inhibitor for Dengue virus.

For the Dengue virus, we have done the flavone analogs as a potential inhibitor for Dengue virus. The tri-ester 5d and di-ester 5e exhibited low toxicity against normal cells, and exceptional DENV2 inhibition with the EC50 as low as 70 and 68 nM, respectively, which is over 300-fold more active

compared to the original baicalein reference. The viral targets for these potent flavone analogs were predicted to be NS5 MTase and NS5 RdRp, as suggested by the likelihood ratios from the molecular docking study. The great binding interaction energy of 8-bromobaicalein (5f) confirms the anti-dengue activity at atomistic level.

We have also worked on anticancer research. JAKs and EGFR are nonreceptor protein tyrosine kinases that play a role in a broad range of cell signaling related to cancer. Thus, inhibition of both JAKs and EGFR can be a potent strategy to reduce the risk of these diseases. The pharmacophore models built based on the commercial drug tofacitinib and the JAK2/3 proteins derived from MD trajectories were employed to search for a dual potent JAK2/3 inhibitor by a pharmacophore-based virtual screening of 54 derivatives. Twelve selected compounds from the virtual screening procedure were then tested for their inhibitory potency against both JAKs in the kinase assay. Similar to EGFR, we designed sulfonylated Indeno[1,2-c]quinoline derivatives as potent EGFR-TK inhibitors using the integrated QM and MM calculation. The efficacy and cytotoxicity of potent compounds are evaluated by in vitro assay.

4. 教育

学位論文

(1)卒業研究発表

- 松岡大河 「ポリフェノール類の酸化還元電位の予測のための計算方法の検討」
 (2)修士修了研究発表
- 工藤玄己 「共溶媒分子動力学シミュレーションを用いたタンパク質相互作用ペプチ ドの構造活性相関解析」
- 2. 渡辺七都稀 「隕石中におけるアミノ酸鏡像異性体の不斉増幅機構についての理論的 研究」

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

- 優秀講演賞 受賞、「光合成水分解酸素発生における Mnの自然選択の理由」、庄司 光男、量子生命科学会 第4回大会、2022 年 5 月 26 日。
- 優秀ポスター賞 受賞、アミノ酸ホモキラリティ起源を紐解く結晶形成過程についての量子化学研究、渡辺 七都稀、量子生命科学会 第4回大会、2022年5月27日。
- Best Poster Award at the 2nd International Symposium "Hydrogenomics", Yuta Hori、2022 年5月19日。
- 構造活性相関シンポジウム 優秀発表賞(SAR Presentation Award) 日本薬学会 構造 活性相関部会、原田隆平、2022 年 11 月 11 日。

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. さきがけ(科学技術振興機構; JST) 庄司光男、「生体内量子多体系における特異的化 学反応の機構解明」(R01-R04)
- 3. 新学術領域研究「ハイドロジェノミクス」公募研究、堀 優太、「水素活性と輸送に 立脚した生体内ハイドロジェノミクスの理論展開」(R3-R4)
- 4. 学術変革領域研究(A)「次世代アストロケミストリー」公募研究、堀 優太、「星間空間におけるアミノ酸ホモキラリティー生成過程の量子化学的探求」(R3-R4)
- 5. 公益財団法人マツダ財団、第36回マツダ研究助成、堀優太(代表)、「無水プロトン伝導材料設計に向けた計算化学による機能解析」(R3-R4)
- 6. 日本学術振興会 基盤研究(C)、原田隆平、「分子動力学計算と機械学習を援用してタンパク質の構造変化を予測する」(R3-R5)
- 7. 公益財団法人 三島海雲記念財団 学術研究奨励金、原田隆平、「分子シミュレーションに基づくヒト由来味覚受容体の味物質認識メカニズムの解明」(R4-R5)
- 8. 公益財団法人 住友財団 基礎科学研究助成、原田隆平、「中分子環状ペプチドの生体 膜透過プロセスを抽出・評価する計算技術の開発」(R4-R5)
- 9. 公益財団法人 日揮・実吉奨学会 研究助成制度、原田隆平、「生物学的相分離を予 測・体系化する分子シミュレーション技術の開発と応用」(R4-R6)
- 公益財団法人 日立財団 倉田奨励金、原田隆平、「先端インシリコ創薬技術で実現する化合物のフレキシブルドッキングと結合ポケットのテーラーメイドデザイン」(R4-R6)
- 11. 群馬大学生体調節研究所「内分泌・代謝学共同研究拠点」通常課題、森田陸離、「プリン 生合成を制御する細胞内構造体プリノソームの形成機構と役割の解明」(R4-R5)
- 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-R5)

(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)
- 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. 東京エレクトロンデバイスとの共同研究、重田育照(研究分担者)、櫻井鉄也(研究 代表者) (R02-R04)
- 4. 新学術領域研究(研究領域提案型)「高速分子動画」、庄司光男(研究分担者)、「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)
- 5. 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)、宮下治(研究代表者)(R04-R08)
- 6. 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)
- 7. 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)

6. 研究業績

(1) 研究論文

- A) 査読付き論文
- D. Lian, Y. Shigeta, Y. Takano, "Evaluation of an Appropriate Standard Hydrogen Electrode Potential for Computing Redox Potentials of Catechins with Density Functional Theory", Chemistry Letters, 51(7), 673-677 (2022).
- T. Motoyama, Y. Yamamoto, C. Ishida, F. Hasebe, Y. Shigeta, S. Ito, S. Nakano, "Reaction Mechanism of Ancestral l-Lys alpha-Oxidase from Caulobacter Species Studied by Biochemical, Structural, and Computational Analysis", ACS Omega, 7, 44407-44419 (2022).
- A. Uedono, N. Takahashi, R. Hasunuma, Y. Harashima, Y. Shigeta, Z. Ni, H. Matsui, A. Notake, A. Kubo, T. Moriya, K. Michishio, N. Oshima, S. Ishibashi, "Vacancy-type defects in TiN/ZrO₂/TiN capacitors probed by monoenergetic positron beams", Thin Solid Films, 762, 139557 (8 pages) (2022).
- Y. Mitsuta, T. Asada, Y. Shigeta, "Calculation of Permeation Coefficients of Small Molecules Through Lipid Bilayers Using Free Energy Reaction Network Analysis with An Explicit treatment for Internal Rotations", Physical Chemistry Chemical Physics, 24, 26070–26082 (2022).
- Y. Yamamoto, S. Nakano, Y. Shigeta, "Development interaction analysis of proteins based on machine learning method and application to Src tyrosine kinase", Bulletin of the Chemical Society of Japan, 96(1), 42-47 (2023).

- R. Wansri, A.C.K. Lin, J. Pengon, S. Kamchonwongpaisan, Nitipol Srimongkolpithak, P. Wilasluck, P. Deetanya, K. Wangkanont, K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, J. Liangsakul, T. Chuanasa, T. Rungrotmongkol, S. Chamni, "Semi-synthesis of N-Aryl Amide Analogs of Piperine from Piper nigram and In-vitro Evaluation of Anti-trypanosomal, Anti-malarial, and anti-SARS-CoV-2 Main Protease Activities", Molecules, 27, 2841 (2022).
- H. Aida, Y. Shigeta, R. Harada, "The Role of ATP in Solubilizing RNA-binding Protein Fused in Sarcoma", Prot. Struct. Funct. Bioinformat., 90(8), 1606-1612 (2022). DOI:10.1002/prot.26240
- T. Yasuda, R. Morita, Y. Shigeta, R. Harada, "The Structural Validation by G-factor Regulates Boost Potentials Employed in Conformational Sampling of Proteins", J. Chem. Inf. Model., 62(14), 3442-3452 (2022). DOI:10.1021/acs.jcim.2c00573
- T. Taketomi, T. Yasuda, R. Morita, J. Kim, Y. Shigeta, C. Eroglu, R. Harada, F. Tsuruta, "Autism-Associated Mutation in Hevin Induces Endoplasmic Reticulum Stress Through Structural Instability", Sci. Rep., 12, 11891 (2022). DOI:10.1038/s41598-022-15784-5
- K. Hengphasatporn, R. Harada, P. Wilasluck, P. Deetanya, E. R. Sukandar, W. C., A. Suroengrit, S. Boonyasuppayakorn, T. Rungrotmongkol, K. Wangkanont, Y. Shigeta, "Promising SARS-CoV-2 Main Protease Inhibitor Ligand-Binding Modes Evaluated Using LB-PaCS-MD/FMO", Sci. Rep., 12, 17984 (2022). DOI:10.1038/s41598-022-22703-1
- Y. Nishida, S. Yanagisawa, R. Morita, H. Shigematsu, K. Shinzawa-Itoh, H. Yuki, S. Ogasawara, K. Shimuta, T. Iwamoto, C. Nakabayashi, W. Matsumura, H. Kato, T. Nagao, T. Qaqorh, Y. Takahashi, S. Yamazaki, K. Kamiya, R. Harada, N. Mizuno, H. Takahashi, Y. Akeda, M. Ohnishi, T. Kumasaka, T. Murata, K. Muramoto, T. Tosha, Y. Shiro, T. Honma, Y. Shigeta, M. Kubo, S. Takashima, Y. Shintani, "Identifying Antibiotics based on Structural Differences in the Conserved Allostery from Mitochondrial Heme-copper Oxidases", Nat. Commun., 13, 7591 (2022). DOI:10.1038/s41467-022-35600-y
- T. Yasuda, R. Morita, Y. Shigeta, R. Harada, "Protein Structure Validation Derives a Smart Conformational Search in a Physically Relevant Configurational Subspace", J. Chem. Inf. Model., 62(23), 6217-6227 (2022). DOI:10.1021/acs.jcim.2c01173
- M. Shoji, T. Murakawa, S. Nakanishi, M. Boero, Y. Shigeta, H. Hayashi, T. Okajima, "Molecular mechanism of a large conformational change of the quinone cofactor in the semiquinone intermediate of bacterial copper amine oxidase", Chemical Science, 13(36), 10923-10938 (2022). open access, DOI:10.1039/D2SC01356H

- M. Shoji, N. Watanabe, Y. Hori, K. Furuya, M. Umemura, M. Boero, Y. Shigeta, "Comprehensive Search of Stable Isomers of Alanine and Alanine Precursors in Prebiotic Syntheses", Astrobiology, 22(9), 1129-1142 (2022). open access, DOI:10.1089/ast.2022.0011
- S. Nagatomo, M. Shoji, T. Terada, K. Nakatani, Y. Shigeta, S. Hirota, S. Yanagisawa, M. Kubo, T. Kitagawa, M. Nagai, M. Ohki, S.-Y. Park, N. Shibayama,"Heme-bound tyrosine vibrations in hemoglobin M: Resonance Raman, crystallography, and DFT calculation", Biophysical Journal, 121(14), 2767-2780 (2022). DOI:10.1016/j.bpj.2022.06.012
- Y. Hori, H. Nakamura, T. Sakawa, N. Watanabe, M. Kayanuma, M. Shoji, M. Umemura, Y. Shigeta, "Theoretical Investigation into a Possibility of Formation of Propylene Oxide Homochirality in Space", Astrobiology, 22(11), 1330–1336 (2022). DOI: 10.1089/ast.2022.0005
- 17. 渡辺 七都稀, 庄司 光男, 堀 優太, 重田 育照, "有機分子触媒を用いたアミノ酸ラセミ化反応の理論的研究", J. Comp. Chem., Jpn., 21(4) 80–81 (2022). DOI: 10.2477/jccj.2023-0004
- 宗井 陽平,堀 優太, Kowit Hengphasatporn,原田 隆平,重田 育照,"4hydroxyphenylpyruvate dioxygenase (HPPD)における金属活性中心の力場パラメータの 構築とその評価", J. Comp. Chem., Jpn., 21(4) 82–84 (2022). DOI: 10.2477/jccj.2023-0003
- Y. Hori, A. Sato, Y. Shigeta, "Theoretical Characterization of the Electronic and Spin Structures for Iron–Sulfur Cubane in Reduced High-Potential Iron–Sulfur Proteins Using Density Functional Theory", J. Comp. Chem., Jpn., 21(4) 77–79 (2022). DOI: 10.2477/jccj.2023-0008
- K. Sanachai, P. Mahalapbutr, K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, S. Seetaha, L. Tabtimmai, T. Langer, P. Wolschann, T. Kittikool, S. Yotphan, K. Choowongkomon, T. Rungrotmongkol, Thanyada, "Pharmacophore-Based Virtual Screening and Experimental Validation of Pyrazolone-derived Inhibitors toward Janus Kinases", ACS Omega, 7(37), 33548–33559 (2022).
- T. Aizawa, M. Kawaura, T. Kajitanib, K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, S. Yagai, "Supramolecular polymerization of thiobarbituric acid naphthalene dye", Chemical Communications 58 (2022) 9365-9368.
- R. Harada, R. Morita, Y. Shigeta, "Free-energy Profiles for Membrane Permeation of Compounds Calculated Using Rare-Event Sampling Methods", J. Chem. Inf. Model., 63(1), 259-269 (2023). DOI:10.1021/acs.jcim.2c01097

- R. Morita, Y. Shigeta, R. Harada, "Efficient Screening of Protein-Ligand Complexes in Lipid Bilayers Using LoCoMock Score", J. Comput. Aided Mol. Des., 37, 217-225 (2023). DOI:10.1007/s10822-023-00502-8
- M. Hashimoto, K. Miyagawa, M. Singh, K. Katayama, M. Shoji, Y. Furutani, Y. Shigeta, H. Kandori, "Specific zinc binding to heliorhodopsin", Physical Chemistry Chemical Physics, 25, 3535-3543 (2023). DOI:10.1039/D2CP04718G
- 25. K. Mishima, M. Shoji, Y. Umena, Y. Shigeta, "Biological advantage of the arrangements of C-phycocyanin chromophores in phycobilisome from the electronic energy transfer viewpoint", Bulletin of the Chemical Society of Japan, 96(4), 381-393 (2023). open access, DOI:10.1246/bcsj.20220334
- 26. M. Shoji, K. Kitazawa, A. Sato, N. Watanabe, M. Boero, Y. Shigeta, M. Umemura, "Enantiomeric Excesses of Aminonitrile Precursors Determine the Homochirality of Amino Acids", The Journal of Physical Chemistry Letters, 14(13), 3243-3248(2023). open access, DOI:10.1021/acs.jpclett.2c03862
- A. Sato, Y. Hori, Y. Shigeta, "Characterization of the Geometrical and Electronic Structures of the Active Site and its Effects on the Surrounding Environment in Reduced High-Potential Iron–Sulfur Proteins Investigated by the Density Functional Theory Approach", Inorg. Chem., 62(5), 2040–2048 (2023). DOI: 10.1021/acs.inorgchem.2c03617
- H. Shimoyama and Y. Shigeta, "Molecular Dynamics Study of 3-Dimensional Domain Swapping Process of Cytochrome c", J. Comp. Chem. Jpn., accepted.
- S. Sugiura, T. Kubo, Y. Haketa, Y. Hori, Y. Shigeta, H. Sakai, T. Hasobe, H. Maeda, "Deprotonation-Induced and Ion-Pairing-Modulated Diradical Properties of Partially Conjugated Pyrrole-Quinone Conjunction", J. Am. Chem. Soc., in press (2023). DOI: 10.1021/jacs.3c01025
- N. Loeanurit, T. Tuong, K. Nguyen, V. Vibulakhaophan, K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, S. Ho, J. Chu, T. Rungrotmongkol, W. Chavasiri, S. Boonyasuppayakorn, "Lichen-derived diffractaic acid inhibited dengue virus replication in a cell-based system", Molecules, 28(3), 974 (2023).
- N. Pyae, A. Maiuthed, W. Phongsopitanun, B. Ouengwanarat, W. Sukma, N. Srimongkolpithak, J. Pengon, R. Rattanajak, S. Kamchonwongpaisan, Z. Ei, P. Chunhacha, P. Wilasluck, P. Deetanya, K. Wangkanont, K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, T. Rungrotmongkol, S. Chamni, "N-Containing α-Mangostin Analogs via Smiles Rearrangement as the Promising Cytotoxic, Antitrypanosomal, and SARS-CoV-2 Main Protease Inhibitory Agents", Molecules, 28(3), 1104 (2023).

- S. Boonyasuppayakorn, T. Saelee, T.N.T. Huynh, K. Hengphasatporn, N. Loeanurit, V. Cao, P. Siripitakpong, P. Kaur, J.J.H. Chu, C. Tunghirun, O. Choksupmanee, S. Chimnaronk, Y. Shigeta, T. Rungrotmongkol, W. Chavasiri, "8-bromobaicalein targets flaviviral RNAdependent RNA polymerase of dengue and Zika viruses", Scientific Reports, 13(1), 4891 (2023).
- A. Patigo, K. Hengphasatporn, V. Cao, W. Paunrat, N. Vijara, T. Chokmahasarn, P.Maitarad, T. Rungrotmongkol, Y. Shigeta, S. Boonyasuppayakorn, T. Khotavivattana, "Design, Synthesis, in vitro, in vivo, and in silico Studies of Flavone Analogs towards Anti-Dengue Activity", Scientific Reports,12(1), 21646 (2023).
- P. Ounjai, K. Boonthaworn, K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, W. Chavasiri, T. Rungrotmongkol, "In Silico Screening of Chalcones and Flavonoids as Potential Inhibitors against Yellow Head Virus 3C-like Protease", PeerJ (2023) 11:e15086.
- S. Negoro, N. Shibata, D. Kato, Y. Tanaka, K. Yasuhira, K. Nagai, S. Oshima, Y. Furuno, R. Yokoyama, K. Miyazaki, M. Takeo, K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, Y.-H. Lee, J. Michener, S. Chen, Y. Higuchi, FEBS Journal (2023). DOI:10.1111/febs.16755.
- 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 (2023) DOI: 10.1021/acsomega.3c01195.
- B) 査読無し論文

なし

(2) 国際会議発表

A)招待講演

- Y. Shigeta, "Computational studies on the structures and functions of metalloproteins", 10th Asian Biological Inorganic Chemistry Conference (AsBIC), Kobe, Japan, Nov. 28th-Dec. 3rd (2022) (invited)
- Y. Shigeta, "Integrated drug discovery simulations for Covid-19 main protease", Bioinformatics in Torun, Nicolas Copernicus University, Torun, Poland, June 23rd-25th (2022).
- Y. Shigeta, "Integrated in silico drug modeling for viral proteins", 25th International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP-XXV), Nicolas Copernicus University, Torun, Poland, June 19th-24th (2022).

- Y. Shigeta, Triplet-Triplet Annihilation Up-conversion Processes of 9,10-diphenylanthracene in solution and solid phases", Materials Science, Engineering and Technology Singapore, Amara Singapore Hotel, Sep. 7th-9th (2022).
- Y. Shigeta, "Theoretical analysis on 3D domain-swapped artificial proteins", Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON) 2023, Mae Fah Luang University, Thailand, Jan. 20th-21st (2023).
- K. Hengphasatporn, "Ligand-Binding Mode Evaluation of Potential SARS-CoV-2 Main Protease Inhibitors: LB-PaCS-MD/FMO method" The 25th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE), Department of Physics, Khon Kaen University, Khon Kaen, Thailand, on-line, 2022/6/10, oral.
- M. Shoji, "Natural selection of the Mn cluster in the photosynthetic water oxidation", Satellite Meeting to 18th International Congress on Photosynthesis Research (WOX-ICPR2022), University of Otago, Dunedin, New Zealand, on-line, 2022/8/7, oral.
- M. Shoji, "QM/MM-MD study of the role of valine 185 in the oxygen-evolving complex of photosystem II", 60th Annual Meeting of BSJ, on line2022/9/30, oral.
- M. Shoji, "A Large Conformational Change of the Quinone Cofactor in Bacterial Copper Amine Oxidase", ICPAC Kota Kinabalu 2022, on-line, 2022/11/25, oral.
- M. Shoji, "Unique reaction mechanism of copper amine oxidase revealed by theoretical QM/MM and experimental approaches", CCS-KISTI workshop, CCS, U.Tsukuba, 2023/2/22, oral.
- Y. Hori, "Computational Chemical Approaches to the Microscopic Mechanism of Anhydrous Proton Conduction Materials", Asia Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry APATCC-10, Quy Nhon (Vietnam), 2023/2/22.

B) 一般講演

- Y. Shigeta, "QM/MM studies on structure and function of metalloenzymes", International Symposium in Chemistry, Chiang Mai University, Nov. 7th (2022).
- 2. R. Morita, Y. Shigeta, R. Harada, "Molecular Dynamics Simulation Reveals Structural Variations of Metallothionein with or without Zinc Ions", The 8th International Symposium on Metallomics, 2022/7/12.
- K. Hengphasatporn, R. Harada, Y. Shigeta "Evaluation of the Potent SARS-CoV-2 Main Protease Inhibitors using LB-PaCS-MD/FMO Technique", The 60th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, 2022/9/30.

- M. Shoji, "Theoretical insights into the molecular mechanisms of dynamical biochemical reactions", Molecular Movies International Symposium 2022, Riken Yokohama, 2022/5/13, oral+poster.
- M. Shoji, K. Miyagawa, H. Isobe, Y. Shigeta, K. Yamaguchi, "QM/MM study of the role of valine 185 in the oxygen-evolving center of photosystem II", 18th International Congress on Photosynthesis Research (ICPR2022), Dunedin, New Zealand, 2022/8/4, on-line, poster.
- 6. K. Miyagawa, M. Shoji, T. Kawakami, H. Isobe, K. Yamaguchi, and Y. Shigeta, Relative stability and electronic states in the S1 state of the CaMn4O5 cluster of the OEC of the PSII by DFT and DLPNO-CC calculations, International Congress on Photosynthesis Research 2022, 2022 Jul. 31st ~ Aug. 5th, Hybrid at the Dunedin Centre, New Zealand, online (Poster)
- 7. K. Miyagawa, M. Shoji, T. Kawakami, K. Yamaguchi, and Y. Shigeta, Exchange Coupling Calculations for M-O-M Systems by Coupled Cluster Method, The 73rd Yamada Conference, Oct. 8th~11th, 2022, 東北大学片平さくらホール, 仙台市青葉区 (Poster)
- H. Shimoyama, Y. Shigeta, "3 Dimensional Domain Swapping (3D-DS) Studied by Advanced Molecular Dynamics Simulation", The 60th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan 2022/9/29. (poster)

(3) 国内学会·研究会発表

A) 招待講演

- 1. 庄司光男, 銅含有アミン酸化酵素におけるトパキノン補酵素の構造変化機構, 第 22 回日本蛋白質科学会年会, つくば国際会議場, 2022/6/8.
- 庄司光男、GLAS アルゴリズムによる酵素反応機構の理論解明:新規反応経路探索手 法の開発と適用、物性研短期研究会「理論タンパク質物性科学の最前線:理論と実験 との密な協働」,東大物性研,2022/7/27,口頭発表.
- 3. 庄司光男, アミノ酸ホモキラリティ起源についての電子状態探査, 計算アストロバ イオロジー2022, CCS, 2022/11/10, 口頭発表.
- 5. 堀優太、重田育照、理論計算による生体内水素機能メカニズムの解明、第 32 回日本 MRS 年次大会、2022 年 12 月 5 日、横浜.
- 6. 堀優太、水素機能性物質・タンパク質のための計算化学によるアプローチ、ハイドロ ジェノミクス第9回若手育成スクール、2022年9月26日、分子研

- K. Hengphasatporn, "Computer-Aided Drug Design (CADD) for Antiviral Research", AMED e-ASIA/JSPS KAKENHI/JSPS Bilateral Programs/TIA KAKEHASHI Joint Symposium, 北 海道大学,函館, 2023/3/8,口頭発表.
- 8. K. Hengphasatporn, "Halogenated compound as a promising antiviral using FMO calculation", 凝縮系の理論化学 2023, 沖縄, 2023/3/10, 口頭発表.
- K. Hengphasatporn, "Exploring Antiviral Drug Discovery through Computational Calculations and Fragment Molecular Orbital (FMO) Method", CCS – LBNL Collaborative Workshop 2023, 2023/4/13, □ 頭発表.

B)その他の発表

- 原田隆平、森田陸離、重田育照、"化合物の膜透過プロセスを紐解く自由エネルギー 計算手法の開発"、第 50 回 構造活性相関シンポジウム、口頭発表、2022 年 11 月 11 日、オンライン
- 森田陸離、重田育照、原田隆平、"脂質二重膜を考慮した膜タンパク質に対するドッキング手法の開発、第50回構造活性相関シンポジウム、ロ頭発表、2022年11月11日、オンライン
- 3. 高橋輝行、Kowit Hengphasatporn、原田隆平、重田育照、中分子の膜透過性に対する 計算手法の検討、口頭発表、日本コンピューター化学会 2022 年 秋季年会 2022 年 11月 27日、信州大学
- 4. 保田拓範、森田陸離、重田育照、原田隆平、Enhanced Sampling における構造妥当性の評価は外部バイアスを適切に制御する、ポスター発表、第 36 回 分子シミュレーション討論会 2022 年 12 月 5 日、オンライン
- 5. 庄司光男、宮川晃一、三嶋謙二、堀優太、重田育照、光合成水分解酸素発生における Mnの自然選択の理由、量子生命科学会第4回大会、神戸大学,2022/5/26, ロ頭発表.
- 渡辺七都稀、庄司光男、堀優太、重田育照、アミノ酸ホモキラリティ起源を紐解く結 晶形成過程についての量子化学研究、量子生命科学会第4回大会、神戸大学、 2022/5/27、ポスター.
- 三嶋謙二,梅名泰史, Mauro Boero,重田育照,庄司光男、光合成励起電子エネルギー 移動効率とフィコビリソーム構造周期性との相関関係、量子生命科学会第4回大会、 神戸大学、2022/5/27,ポスター.
- E司光男, 酵素反応の QM/MM 解析、スーパーコンピュータワークショップ 2022「複 雑電子状態の理論・計算科学」, on-line, 2023/1/17, ポスター.

- 堀優太,重田育照,"第一原理計算によるコハク酸イミダゾリウム結晶中のプロトン 伝導異方性の解析",日本化学会 第103 春季年会(2023),口頭発表,2023 年3月24日, 千葉
- 10. 堀優太,重田育照,"理論計算による生体内水素機能メカニズムの解明",第32回日本 MRS 年次大会,口頭発表,2022 年12月5日,横浜
- 11. 堀優太, 佐藤綾香, 重田育照, "高電位鉄硫黄タンパク質の電子状態と周辺アミノ酸からの影響", 日本コンピュータ化学会 2022 年秋季年会, 口頭発表, 2022 年 11 月 26日, 信州大学
- 12. 宗井陽平, 堀優太, Kowit Hengphasatporn, 原田隆平, 重田育照, "分子動力学計算に基づくシロイヌナズナおよびエンバク HPPD-メソトリオン複合体の結合挙動解析", 日本コンピュータ化学会 2022 年秋季年会, 口頭, 2022 年 11 月 26 日, 信州大学
- 13. 渡辺七都稀, 庄司光男, 堀優太, 重田育照, "有機分子触媒を用いたアミノ酸ラセミ化反応の理論的研究",日本コンピュータ化学会2022年秋季年会,口頭発表, 2022年11月26日, 信州大学
- 14. 井田朋智,小島穂夏,堀優太,"化学反応ネットワークと機械学習による生成物および 反応経路予測の可能性",第45回ケモインフォマティクス討論会,口頭発表,2022年
 11月18日,九州大学筑紫キャンパス
- 15. 堀優太, "酸化プロピレンホモキラリティー発生の理論的予測", "計算アストロバイオ ロジー2022", 口頭発表, 2022 年 11 月 10 日, 筑波大学計算科学研究センター
- 16. 佐藤綾香, 堀優太, 重田育照, "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からの影響の理論解析", 第 16 回分子科学討論会、口頭発表, 2022 年 9 月 19 日, 横浜
- 17. 堀優太, 佐藤綾香, 重田育照, "高電位鉄硫黄タンパク質の[4Fe-4S]活性中心の構造と 電子状態についての理論的解析", 第22回日本蛋白質科学会年会, ロ頭発表, 2022年 6月8日, つくば
- 堀優太,重田育照, Theoretical characterization of the active site and its formation pathway in oxidized [NiFe]-hydrogenase, 第 60 回 日本生物物理学会年会,ポスター発表, 2022 年 9 月 28 日,函館
- 19. 佐藤綾香, 堀優太, 重田育照, 高電位鉄硫黄タンパク質のクラスター周辺の構造が及 ぼす影響と電子状態についての理論的解析, 物性研短期研究会、理論タンパク質物性 科学の最前線:理論と実験との密な協働, ポスター発表, 2022 年 7 月 27 日, 東大物性 研

- 20. 堀優太,重田育照,酸化型[Ni-Fe]ヒドロゲナーゼの活性中心についての理論的研究, 物性研短期研究会、理論タンパク質物性科学の最前線:理論と実験との密な協働,ポ スター発表,2022 年 7 月 27 日,東大物性研
- 21. 佐藤綾香, 堀優太, 重田育照,高電位鉄硫黄タンパク質の鉄硫黄クラスター周辺の構造と電子状態についての理論的解析, 量子生命科学会第4回大会, ポスター発表, 2022年5月26日, オンライン
- 22. 堀優太,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的研究,第24回理論化学討論会,ポスター発表,5月20日,金沢
- 23. 宮川晃一,川上貴資,庄司光男,磯部寛,山口兆,重田育照,光化学系 II における酸素発生中心の S1 状態での中間体構造の DFT と CC 法による解析,量子生命科学会第4回大会,2022 年5月26日~27日,神戸大学百年記念館六甲ホール (口頭発表)
- 24. 宮川晃一,川上貴資,庄司光男,磯部寛,山口兆,重田育照,光化学系 II における酸素発生中心のS1状態でのプロトンシフト異性体間の電子状態と相対安定性の理論的 解析,第48回生体分子科学討論会,2022年6月30日~7月1日,とりぎん文化会館 (口頭発表)
- 25. K. Miyagawa, T. Kawakami, M. Shoji, H. Isobe, K. Yamaguchi, and Y. Shigeta, DFT and DLPNO-CC calculation of relative stability and electronic states in the S2 state of the CaMn4O5 cluster of the OEC of the PSII, 第60回 生物物理学会年会, 2022年9月28日 ~9月30日, 函館アリーナ・函館市民会館 (ポスター)
- 26. Y. Okamoto, T. Yasuda, R. Morita, Y. Shigeta, R. Harada, "A Computational Study on the Half-Site Activity Mechanism of Homodimeric Tyrosyl tRNA Synthetase", 第 60 回 生物 物理学会年会, 2022 年 9 月 28 日 ~ 9 月 30 日, 函館アリーナ・函館市民会館 (ポスタ –)
- 27. R. Morita, Y. Shigeta, R. Harada, "LogP-corrected Membrane Docking Score Screens Protein-Ligand-Membrane Complexes", 第 60 回 生物物理学会年会, 2022 年 9 月 28 日 ~ 9 月 30 日, 函館アリーナ・函館市民会館 (ポスター)
- 28. T. Yasuda, R. Morita, Y. Shigeta, R. Harada, "Structural Validation by the G-factor Properly Regulates Boost Potentials Imposed in Conformational Sampling of Proteins", 第 60 回 生 物物理学会年会, 2022 年 9 月 28 日 ~ 9 月 30 日, 函館アリーナ・函館市民会館 (ポス ター)
- 29. 宮川晃一, 庄司光男, 川上貴資, 山口 兆, 重田育照, クロムダイマーおよび二核錯体の理論的研究, 日本コンピュータ化学会 2022 年秋季年会 in 長野, 23 年 11 月 25 日~27 日, 信州大学 長野キャンパス (ポスター)

- 30. K. Hengphasatporn, T. Rungrotmongkol, Y. Shigeta, Evaluation of brominated baicalein as a promising SARs-CoV-2 Mpro Inhibitor,物性研短期研究会「理論タンパク質物性科学の 最前線:理論と実験との密な協働」,東大物性研,2022/7/27.(ポスター)
- 31. 下山 紘充, 重田 育照, "AAM と CGM のハイブリッドシミュレーションによる構造活性相関の研究", 第 16 回分子科学討論会, 9/22. (口頭)
- 32. 下山紘充, 重田 育照, "二次元 SWL 法による蛋白質複合体サンプリングの研究", 日本物理学会・秋季大会, 9/13. (口頭)

(4) 著書、解説記事等

庄司光男, 銅含有アミン酸化酵素における非古典的酵素反応機構、理論化学会誌フロンティア, 17(5), 29-34 (2023), published 2023/1/31.

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

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

 世話人:梅村雅之、矢島秀伸 (Chair)、福島肇、重田育照、庄司光男、堀優太、高橋 淳一、計算アストロバイオロジー2022 開催, CCS (WorkShopRoom), 2022/11/10-11.

9. 管理·運営

重田育照

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

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-)

原田隆平

分子シミュレーション学会 学会誌「アンサンブル」編集委員(2020-)

庄司光男

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(2020-2022)

V-2. 分子進化分野

1. メンバー

教授	稲垣 祐司、橋本 哲男(学内共同研究員、生命環境系)
助教	中山 卓郎
学生	大学院生 5名(後期課程1名、前期課程在学4名)、学類生 4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(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)。SRT308 株(2016 年度年次 報告書参照)については、新たに発見された近縁種のデータを追加し投稿論文を執筆するこ とになり、追加実験データを取得中である。340 遺伝子データの系統解析によりマラウィモナ ス類に近縁であることが明らかとなった未記載真核微生物 SRT706 株については(2022 年度 年次報告書参照)、Dalhousie 大学(カナダ)の Alastair G. B. Simpson 教授と Andrew J. Roger 教授の実験データと合わせて論文作成を行うことになった。

一次植物類を構成する3つのサブクレード間の系統関係の検証

|我々の詳細な検証(2022年度年次報告参照; Yazaki et al. 2022 Open Biol 12:210376) によっ て、一次植物類(Archaeplastida)が単系統であり、パンクリプチスタ(Pancryptista)と姉妹群 関係にあることには結論が出たと考えられる。ところが、Archaeplastida 内部の系統関係には 不明点がある。色素体タンパク質に基づく分子系統解析では、灰色藻類が最初に分岐したと 推測されることが多い。これらのデータは、Archaeplastida を構成する緑色植物類、紅藻類、 灰色藻類のうち、灰色藻類が最も原始的であることを示唆する。一方、これまでに実施され た核ゲノムコードタンパク質に基づく大規模分子系統解析のほとんどでは Archaeplastida 内 部で紅藻類が最初に分岐したと推測されている。従って、Archaeplastida 最原始系統群が何か、 なぜ色素体タンパク質と核ゲノムコードタンパク質に基づく解析結果で分岐順序が異なるの かについて十分理解されているとは言えない。こうした背景を踏まえ、本研究では Archaeplastida の3 つのサブグループ間の系統関係について詳細に検討することを目的とし、 暫定的に 220 タンパク質配列から構成されるアライメントデータの作成と予備的な大規模分 子系統解析を行なった。この解析では Yazaki et al. (2022)のアライメントデータにふくまれ る Archaeplastida の種数を 13 種から 45 種に増やし、主に Archaeplastida および Pancryptista か ら構成される 57 種類の真核生物からサンプリングした 157 タンパク質(合計 48,729 アミノ 酸座位)を解析した結果を報告する。

157 タンパク質アライメントを最尤法により解析したところ、Archaeplastida は単系統を形成し、最尤法によるブートストラップ値 (MLBP) 100%で支持された (図 1A)。Archaeplastida クレード中では緑色植物類 (Viridiplantae) と灰色藻類 (Glaucophyta) が姉妹群となり、MLBP =100%で支持された (図 1A)。紅藻類 (Rhodophyta) は非光合成系統であるロデルフィス類 (Rhodelphidia) とピコゾア類 (Picozoa) とともに、MLBP =100%で"Rhodophyta⁺⁺"クレード を形成した。従って、この解析では Rhodophyta⁺⁺クレードが Archaeplastida 内で最初に分岐し たと解釈できる (図 1A)。興味深いことに、ML 系統樹 (Tree 1) と、ML 系統樹を改変して

Viridiplantae と Rhodophyta⁺⁺が姉妹群となる系統樹(Glaucophyta が初期分岐となる; Tree 2) あるいは Glaucophyta と Rhodophyta⁺⁺が姉妹群となる系統樹(Viridiplantae が初期分岐となる; Tree 3) と比較し、有意な対数尤度差があるかどうかを AU 検定したところ、Tree 1 と Tree 2 の間では対数尤度差は 48.915、*p* 値は 0.0817 となり、有意水準 0.05 でも棄却出来なかった(図 1B)。従って AU 検定の結果は、Archaeplastida クレード内で Glaucophyta が初期分岐となる 可能性を棄却できなかった。



図 1. A 220 タンパク質配列に基づ く Archaeplastida の 3 つのサブク レード間の系統関係. 緑色植物類 (Viridiplantae) と灰色藻類 (Glaucophyta)は互いに近縁とな り,紅藻類(Rhodophyta)と紅藻類 に近縁な非光合成系統 (RhodelphidiaとPicozoa)から構 成されるクレードが最も初期に分 岐したと推測された. これらの系統 関係は最尤法ブートストラップ値 100%で支持された. 三角形で示し たクレード内の数字は, 各クレード を構成する生物種数を示す.

B. Archaeplastida の3つのサブク レード間の系統関係に対する仮説 検定. Tree 1 は最尤系統樹であり, 紅藻とそれに近縁な非光合成系統 (R⁺⁺)から構成されるクレードが 初期分岐となる系統樹である. Tree 2 は灰色藻(G)が, Tree 3 では緑 色植物類(V)が初期系統となる系 統樹である. 外群は"O"と表記して ある.最尤系統樹 Tree 1 と Tree2/3 の対数尤度差と AU 検定の AU 検定 の p 値は, それぞれ表の 2 行目と 3 行目に記載した.

Tree 1 の樹形と枝長を鑑みると(図 1A)、復元された Viridiplantae と Glaucophyta とがロン グブランチアトラクションによるアーティファクト(LBA アーティファクト)により誤って 近縁と推測された可能性がある。もしこの作業仮説が正しければ、Rhodophytaの基部から分 岐する Rhodelphidia と Picozoa を解析から削除し、Rhodophyta に至る枝長を長くした場合、 Archaeplastida クレードの初期分岐が Rhodophyta⁺⁺クレードから Glaucophyta (あるいは Viridiplantae) に変わる可能性がある。そこでまず、Picozoa をアライメントデータから Picozoa を排除し、上記 Trees 1-3 をもちいた AU 検定を繰り返した。Picozoa を排除することで Rhodophyta と Rhodelphida を含む"Rhodophyta⁺"クレードに至る枝は若干長くなるため、AU 検 定において Tree 1 の Tree 2 に対する優位性が変化する可能性がある。実際、注目した 2 樹形 間の対数尤度差はわずか 3.6738、第二の AU 検定では Tree 2 に対する p 値は 0.465 であった。 従って、Picozoaを排除した後ではRhodophyta⁺クレードが初期分岐となる Tree 1 と Glaucophyta が初期分岐となる Tree 2 間に有意な対数尤度差はないと解釈できる。Picozoa に加え Rhodelphida もアライメントデータから排除した場合、Rhodophyta に至る枝はさらに長くなり、 Tree 1 と Tree 2 の対数尤度差はより大きく変化する可能性がある。予想通り、第三の AU 検 定では Tree 2 の対数尤度は Tree 1 の対数尤度よりも大きくなった。以上の結果は、 Archaeplastida クレード内部では Viridiplantae が Glaucophyta あるいは Rhodophyta/Rhodophyta⁺⁺ のうち枝の長い方と姉妹群となることを示し、今回解析した 157 タンパク質アライメントに は Archaeplastida クレード内の 3 つのサブクレード間の系統関係を正確に復元することは難 しいことを示唆した。

Α	Picozoaのみを解析から排除			В	PicozoaとRhodelphidaを解析から排除		
AU検定 を行っ た樹形	Tree 1	Tree 2	Tree 3	AU検定 を行っ た樹形	Tree 1	Tree 2	Tree 3
対数 尤度差	NA	3.6738	80.237	対数 尤度差	49.593	NA	114.46
p值	NA	0.465	0.000604	p值	0.0828	NA	0.00133

図 2. 紅藻類に近縁な非光合成系統を排除したデータに基づく Archaeplastida の 3 つのサブ クレード間の系統関係に対する仮説検定. A. Picozoa のみを排除した AU 検定. B. Picozoa と Rhodelphidia を排除した AU 検定. Tree 1 は紅藻と Rhodelphidia をふくむクレード (R⁺) あ るいは紅藻 (R) が初期分岐となる系統樹である. Tree 2 は灰色藻 (G) が, Tree 3 では緑色植 物類 (V) が初期系統となる系統樹である. 最尤系統樹とその他の対立系統樹間の対数尤度差と AU 検定の p 値は, それぞれ表の 2 行目と 3 行目に記載した. その他のサブクレードの表記は 図 1B と同じである. Picozoa のみを排除し検定(A)では Tree 1 が最尤系統樹, Picozoa と Rhodelphidia を排除した検定(B)では Tree 2 が最尤系統樹となった.

今回は 157 タンパク質から構成されたアライメントデータを使用した。今後より多数のタ ンパク質配列をふくむアライメントデータを作成し、最尤系統樹において、Archaeplastida ク レード内の 3 つのサブクレード間の系統関係がどのように推測されるのかをさらに厳密に検 討する予定である。

[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シアノバクテリアのゲノム解析

シアノバクテリアは地球生態系を下支えする重要な一次生産者の一つである。その生態学 的な重要性から、シアノバクテリアの多様性は非常に詳細に調査されてきた。しかしながら、 従来の解析では認識されてこなかった系統のシアノバクテリアが、渦鞭毛藻などの原生生物 との共生関係の中から見つかってきている。このような例は年々報告されつつあり、海洋に 生息するシアノバクテリアの真の多様性を理解するためには、他の生物と共生するシアノバ クテリアのさらなる調査が必要であることが示唆される。

Dinophysis 目渦鞭毛藻は葉緑体を二次的に失った従属栄養性の系統である。そのうち、貧栄 養な海域に分布する Ornithocercus や Histioneis, Parahistioneis, Amphisolenia, Citharistes といっ た属はシアノバクテリアと共生関係を結んでいることが知られる。我々はこれら Dinophysis 目の渦鞭毛藻類に共生するシアノバクテリアの多様性や特徴について研究を進めている。こ れまでの研究の中で海洋渦鞭毛藻 Ornithocercus magnificus の共生シアノバクテリア(OmCyn) が、海洋シアノバクテリアにおける新規系統であることを突き止めた。さらに O. magnificus と OmCyn の共生関係は非常に強固であり、海洋環境中において OmCyn は単独で生育するこ とはないと予想された。また OmCyn には共生関係への適応の結果と見られるゲノム縮退が 確認されている。

本年度、我々は Ornithocercus 属とは異なる Dinophysis 目渦鞭毛藻 Citharistes regius に共生 するシアノバクテリア(以降 CregCyn と記す)のゲノムを解析したためこの結果について報 告する。我々は静岡県下田沖の海水サンプル中から Citharistes regius の個体を発見し、そこに 共生するシアノバクテリアのゲノムを完全に解読することに成功した。このゲノムは 1.94 Mbp の一つの環状染色体によって構成されていることが明らかとなり、それに加えて約 17 Kbp のプラスミドの存在も示唆された。

143 タンパク質遺伝子を用いた多遺伝子系統解析を実施したところ、CregCyn は既に明らか となっている Ornithocercus magnificus の共生シアノバクテリア OmCyn の系統と同様に海洋 Synechococcus 属シアノバクテリアに属する系統であるものの、その内部系統において互いに 明らかに異なる系統であることが明らかとなった。この結果は OmCyn と CregCyn がそれぞ れ独立に渦鞭毛藻と共生関係を築いたことを示している。



図 3. *Citharistes regius* 共 **生シアノバクテリア**(CregCyn) **の系統解析及び存在様式の推定** (A) 143 のタンパク質アミノ酸 配列を用いた最尤系統樹. 太い 枝はブートストラップ値 100 を 示す. CregCyn (二重矢頭) は 0mCyn (矢頭) とは異なる系統で あることが示された. (B) サイ ズ画分ごとのメタゲノムを用い た存在量推定. CregCyn は 0mCyn 同様, 宿主渦鞭毛藻と常に共生 していると予想される.

次に、自然環境下における CregCyn と宿主との相互作用を検証するため、世界中の海洋に おけるメタゲノム解析を行った Tara Oceans のデータを用いて出現パターンの解析を行った。 自由生活性のピコシアノバクテリアおよび OmCyn そして CregCyn のゲノム配列に対して、 幅広い海洋に散在する 57 の Tara Oceans サンプリングステーションから得られた、連続的な サイズ画分 (0.8–5µm, 5–20µm, 20–180µm and 180–2,000µm) のメタゲノムショートリードをマ ッピングしたところ、自由生活性のピコシアノバクテリアのゲノムに対応するリードのほと んどは最も小さなサイズ画分 (0.8–5µm) から得られた。この結果はピコシアノバクテリアの 細胞サイズが直径 2µm に満たないことを踏まえると必然的である。これに対して 2 つの渦鞭 毛藻に共生するシアノバクテリアのゲノムには、このサイズ画分から対応するリードはほと んど得られなかった。CregCyn ゲノムおよび OmCyn ゲノムに相同な配列は 20-180µm のサイ ズ画分から最も多く得られた。20-180µm は渦鞭毛藻等の真核微生物に対応するか区分である ため、Nakayama et al. (2019) が論じるようにこの出現パターンはこれらの共生シアノバク テリアが自然環境下でそれぞれの宿主細胞と常時物理的に強く結びついていると考えること ができ、CregCyn も OmCyn と同様に環境中で自由生活を行うことはせず、宿主の世代を越え 活を行うことはせず、宿主の世代を越えて垂直に遺伝するものであることが示唆される。 OmCyn ゲノムに対応するリードが 20–180µm のサイズ画分に集中しているのに対し、CregCyn ゲノムのリードが 5–20µm のサイズ画分にも検出されたのは、宿主渦鞭毛藻のサイズに起因 すると考えられる。Ornithocercus magnificus の細胞サイズは 75–115µm 程度であるが、今回実 際にゲノム増幅に用いた Citharistes regius の細胞の大きさは、楕円形の細胞の最も長い軸にお いても 40–50µm である。

系統的に独立であるという示唆が得られた一方で、CregCyn と OmCyn には同様のゲノム縮 小が確認された。先行研究で OmCyn は自由生活生の Picocyanobacteria ゲノムに対して縮小し たゲノムを持つことが示されていたが、本研究で行った比較ゲノム解析では CregCyn も OmCyn と同程度の、コンパクトな規模のタンパク質レパートリーを持つことが明らかとなっ た。他の subcluster5.1 の自由生活生 Synechococcus のタンパク質レパートリーは 2,000-2,400 の 範囲に分布するのに対して、2 つの共生体のそれはいずれも 1,500 強であり、近縁な自由生活 生 Synechococcus の 1/4-1/3 程度しか保持していなかった。これは自由生活生バクテリアにお いて最も小さなゲノムを持つと言われる Prochlorococcus のゲノムと比較しても少ないレパー トリーである。2 つの共生体が独立に獲得されたことを踏まえるとこのタンパク質レパート リーの縮小も独立に起きたと考えられる。それぞれのタンパク質グループを、その系統的な



図 4. シアノバクテリアゲノ ムにコードされるタンパク質 レパートリーの比較 CregCyn (二重矢頭)のタンパ ク質レパートリーは OmCyn (矢頭)のそれと同程度に縮 小している.

保存の程度を基準に'core proteins', 'Picocyanobacterial ancestral proteins'および'Accessory proteins'に分け、それぞれのゲノムのタンパク質レパートリーを精査したところ、CregCyn の タンパク質レパートリーに見られる減少はやはり OmCyn のそれと同じ傾向を持っており、 タンパク質の減少はほぼ全て Picocyanobacterial ancestral proteins および Accessory proteins の区 分のタンパク質において起きていることが明らかとなった。

CregCyn および OmCyn の分子系統解析結果は、この2つのシアノバクテリアが明らかに異なる系統であることを示すのに加えて、それぞれの宿主との共生成立時期についても示唆を与えるものである。OmCyn は subcluster5.1 の基部から分岐する系統であり、現在までにこの
系統には自由生活性種が含まれていることを支持するデータは得られていない。これまでの 自由生活性種を前提とした海洋 picocyanobacteria の網羅的な多様性解析において OmCyn が発 見されてこなかったことを踏まえると、OmCyn の系統はすべて真核生物との共生関係にある と予想でき、OmCyn と渦鞭毛藻共生関係の成立は海洋 Synechococcus の多様化が始まる前に 遡る可能性がある。一方で、CregCyn は海洋性 Synechococcus の subcluster5.1 clade IV の種と 単系統を形成するため、少なくともこの共生シアノバクテリアは現在見られる海洋 Synechococcus の多様性が生じた以降に共生関係を結んだものと予想できる。

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の葉緑体ゲノムの解読を試みた。解析対象とし た種は、Kareina mikimotoi LMK17、Karenia selliformis MoKr600、Karenia papillionacea NGDr675、 Karenia longicanalis AmKr650、Takayama helix AmTk649、Takayama cf. xiamenensis NGTk657、 Karlodinium zhouanum clade 1 LKaK135、Karlodinium decipiens clade3 HrKl653、Karlodinium australe clade2 LKaK136、Karlodinium ballantinum の 10 種である。そのうち T. xiamenensis と Karlodinium ballantinum については完全解読に成功したと考えられる。今後これらのデータは、 2023 年度から始まるチェコ共和国科学アカデミー・Hehenberger 博士との二国階共同事業共 同研究の一環として解析する。

ミトコンドリアゲノム解析

我々は、これまで系統的に広範なミトコンドリア(Mt)ゲノムを解読し、真核生物進化に おける Mt ゲノムの構造、遺伝子組成、可動性イントロンの進化について研究を行ってきた

(Masuda et al. 2011 *Harmful Algae* 10:130-137; Nishimura et al. 2012 *PLOS ONE* 7:e37307; Kamikawa et al. 2014 *Genome Biol Evol* 2:306-315; Nishimura et al. 2014 *Mob Genet Elements* 4:e29384; Takeuchi et al. 2015 *PLOS ONE* 10:e000132030; Nishimura et al. 2016 *Genome Biol Evol* 8:3090-3098; Nishimura et al. 2019 *Sci Rep* 9:4850; Nishimura et al. 2020 *Front Ecol Evol* 8:140) 。

クリプチスタ生物群の基部から分岐した *Microheliella maris* の Mt ゲノムを解読し、*Front Ecol Evol* 誌(2022 10:1030570)に出版された。本稿ではその詳細を報告する。

Microheliella maris ミトコンドリアゲノムにコードされる遺伝子レパートリー

ミトコンドリアゲノムは多様 性に富むが、どのようにその多様 性が確立したのかは十分に解明 されていない。これは真核生物の 多様性の大部分を占める単細胞 生物種の Mt ゲノムに対する研究 が少ないためである。クリプチス タはクリプト藻、ゴニオモナス 類、カタブレファリス類および Palpitomonas bilix から構成され る。本研究では、最近クリプチス タの基部から分岐することが判 明した M. maris の Mt ゲノムを決 定した。*M. maris* Mt ゲノムは 61.2 Kbp の環状ゲノムである。この Mt ゲノムは 12.9 Kbp の逆位反復配 列をふくみ、53個のタンパク質遺



図 5. *Microheliella maris* **の** Mt ゲノムマップ. タンパク 質遺伝子は濃い灰色, リボソーム RNA 遺伝子は薄い灰色, tRNA 遺伝子は線で示した.

伝子をコードしている。*M. maris* Mt ゲノムにコードされるタンパク質遺伝子数は、これまで に解読された一次植物類 (Archaeplastida)、クリプチスタ (Cryptista)、ハプチスタ (Haptista)、 SAR 等から構成される Diaphoretickes の Mt ゲノム中で最大である。

これまでに解読されている Diaphoretickes の Mt ゲノムデータと本研究で解読した *M. maris* Mt ゲノムにコードされるタンパク質レパートリーを比較したところ、共通祖先のもっていた Mt ゲノムにコードされていたタンパク質が段階的に減少してきたと推測できる。 Diaphoretickes の共通祖先では 56 タンパク質遺伝子が Mt ゲノムにコードされており(図 6 中 の①)、*M. maris、*クリプチスタ、一次植物類(Archaeplastida)から構成される CAM クレードの共通祖先では 1 遺伝子の欠失が起こったはずである(図 6 中の②)。*M. maris* とクリプチスタの共通祖先が一次植物類の共通祖先と分岐後、前者では遺伝子欠失が起こらなかったが、後者で 7 遺伝子の欠失が起こったと予想される(図 6 中の③および④)。最終的に *M. maris* がクリプチスタの共通祖先と分岐後、それぞれ 2 遺伝子と 8 遺伝子の欠失が起こったと推測された(図 6 中の⑤および⑤)。



図 6. Diaphoretickes における Mt ゲ ノムにコードされるタンパク質のレパ ートリーの変化. 回は Diaphoretickes の 共通祖先, 回は CAM クレードの共通祖 先、回は一次植物類 (Archaeplastida)の 共通祖先, 回は *M. maris* とクリプチスタ (Cryptista)の共通祖先, 回はクリプチ スタの共通祖先を示す. それぞれの共通 祖先で, 予想される Mt ゲノムにコード される身ンパク質数と欠失したと予測 される遺伝子を四角内に示した. 窗に付 随する四角内には *M. maris* の Mt ゲノム にコードされるタンパク質数と、 *M. maris* がクリプチスタの共通祖先と分岐 した後に欠失した遺伝子を示した.

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、②Glissandra sp. SRT312 株、③有孔虫 Ammonia berccarii、④放散虫(Didymocyrtis tetrathulumus と Acanthodesmia viniculata)

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

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 eRF1C 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. 岸田雄真,修士(理学),嫌気微好気性の自由生活性鞭毛虫 Kipferlia bialata におけるミトコンドリア関連オルガネラ候補タンパク質の局在解析.
- 2. 若島朋幸,修士(理学),嫌気微好気性の自由生活性鞭毛虫 Dysnectes brevis におけるミトコンドリア関連オルガネラのプロテオーム解析.
- 3. 厳翼,修士(理学),寄生性の祖先から自由生活性に転じたディプロモナス類におけ る自由生活関連タンパク質の探索.
- 4. 小金丸利隆,修士(理学),嫌気微好気性の寄生虫トリコモナスのアシル Co 合成酵素様タンパク質の特徴づけ.
- 5. 磯貝龍邑,学士(理学),大規模分子系統解析による Archaeplastida 内部系統関係の 再評価.
- 6. 番場浩平,学士(理学),Form I/T型ルビスコに関連する新規タンパク質群の発見.
- 7. 宮本知世,学士(理学),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.
- 8. 浅賀巧匠,学士(理学), Histioneis 属渦鞭毛藻に共生するシアノバクテリアのゲノ ム解析および系統解析.

集中講義など

- 1. 中山卓郎: 計算科学リテラシー(集中講義,科目番号: 0AH0206)
- 2. 中山卓郎: Computational Science Literacy (集中講義, 科目番号: 0AH0207)
- 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

- 令和4年度科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞,中山卓郎,2022年4月 20日
- 2. 令和4年度筑波大学若手教員特別奨励賞(筑波大学),中山卓郎,2022年4月20日

外部資金

- 科学研究費補助金 基盤研究(B),稲垣祐司(代表),2019-2022 年度,交付額: 全年度直接経費 13,100 千円(2022 年度直接経費 2,300 千円),ミトコンドリア DNA ポリメラーゼの多様性と進化の全容解明(課題番号 19H03280)
- 科学研究費補助金 国際共同研究加速基金(国際共同研究強化(B)),稲垣祐司(代表),2018-2022年度,交付額:全年度直接経費13,700千円(2022年度直接経費1,800 千円),海洋原生生物に共生する細菌多様性の実態解明(課題番号18KK0203)

- 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(2021 年度直接経費 3,120 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 国際共同研究加速基金(国際共同研究強化(B)),橋本哲男(代表),2019-2022 年度,交付額:全年度直接経費 18,330 千円(2020 年度直接経費 2,200 千円),フォルニカータ生物群におけるミトコンドリア関連オルガネラの機能進化の解明(課題番号 19KK0185)
- 科学研究費補助金 基盤研究(B),中山卓郎(分担),2019-2024 年度,交付額: 全年度直接経費 13,300 千円(2021 年度直接経費 2,200 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)
- 6. 科学研究費補助金 挑戦的研究(萌芽),中山卓郎(分担),2021-2023年度,交付額:全年度直接経費4,900千円(2021年度直接経費2,600千円),非光合成生物の産生する光毒性色素の機能と地理的分布の解明(課題番号21K19303)

6. 研究業績

- (1) 研究論文
- A) 査読付き論文
- Ishitani Y, Caterina C, Ujiie Y, Tame A, Tiboni M, Tanifuji G, <u>Inagaki Y</u>, Frontalini F. 2023 Fascinating strategies of marine benthic organisms to cope with emerging pollutant: Titanium dioxide nanoparticles. *Environmental Pollution* in press.
- Yuyama I, Kume K, Tamura T, <u>Inagaki Y</u>, <u>Hashimoto T</u>. Draft genome sequence of *Aduncisulcus paluster*, a free-living microaerophilic eukaryote belonging to Fornicata. 2023 *Microbiology Resource Announcements* 12(2):30053922.
- Yazaki E, Yabuki A, Nishimura Y, Shiratori T, <u>Hashimoto T</u>, <u>Inagaki Y</u>. *Microheliella maris* possesses the most gene-rich mitochondrial genome in Diaphoretickes. 2022 Frontiers in Ecology and Evolution 10:30570.
- 矢崎裕規,矢吹彬憲,<u>稲垣祐司</u>. *Microheliella maris* が繋ぐクリプチスタと一次植物の絆. 藻類 The Japanese Journal of Phycology 70:191-196.
- Yoshinaga M, <u>Nakayama T, Inagaki Y</u>. A novel structural maintenance of chromosomes (SMC)-related protein family specific to Archaea. 2022 *Frontiers in Microbiology* 13:913088.
- Matsuo E, Morita K, <u>Nakayama T</u>, Yazaki E, Takahashi K, Sarai C, Iwataki M, <u>Inagaki Y</u>. Comparative plastid genomics of green-colored dinoflagellates unveils parallel genome compaction and RNA editing. 2022 *Frontiers in Plant Science* 13:91543.

- Yazaki E, Yabuki A, Imaizumi A, Kume K, <u>Hashimoto T</u>, <u>Inagaki Y</u>. The closest relative of Archaeplastida is revealed by phylogenomic analyses that include *Microheliella maris*. 2022 *Open Biology* 12:210376.
- Kamikawa R, Mochizuki T, Sakamoto M, Tanizawa Y, <u>Nakayama T</u>, Onuma R, Cenci U, Moog D, Speak S, Sarkozi K, Toseland A, van Oosterhout C, Oyama K, Kato M, Kume K, Kayama M, Azuma T, Ishii K, Miyashita H, Henrissat B, Lombard V, Win J, Kamoun S, Kashiyama Y, Mayama S, Miyagishima S, Tanifuji G, Mock T, Nakamura Y. Genome evolution of a nonparasitic secondary heterotroph, the diatom *Nitzschia putrida*. 2022 *Science Advances* 8(17):eabi5075.

B) 査読無し論文

なし

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

- <u>Yuji Inagaki</u>. Serial secondary and serial tertiary endosymbioses in dinoflagellates. ICG Seminar, Mar. 21, 2023, Dalhousie University, Halifax, Canada.
- 2. <u>Yuji Inagaki</u>. Recent progress in resolving the diversity and evolution of deep eukaryotic phylogeny. Jan. 20, 2023, ISEP2023 On-line, On-line.

B) 一般講演

- Yuji Inagaki. A factor that hinders the accurate phylogenetic inferences: The monophyly of Archaeplastida as a case study. EPCC-CCS Joint Workshop, Dec. 14-15, 2022, University of Edinburgh, Edinburgh, UK.
- Ryo Harada, <u>Yuji Inagaki</u>. Endosymbiotic origin of the DNA polymerase localized in euglenid plastids. 2nd Annual International Congress of Euglenoids, Nov. 77-10, 2022, On-line.
- <u>Yuji Inagaki</u>, <u>Takuro Nakayama</u>, Takashi Kawakubo, Eriko Matsuo, Kazauya Takahashi, Mitsumori Iwataki. Nucleomorph genomes of green-colored dinoflagellates. 21st Symposium of the International Society of Endocytobiology, Jul. 19-22, 2022, University of South Bohemia, České Budějovice, Czech Republic.

(3) 国内学会·研究会発表

A) 招待講演

- 稲垣祐司. 真核生物の大系統:最近の研究成果から見る多様性の広がり、まとまり、 今後の展望. 第92回寄生虫学会大会サテライトシンポジウム 第17回原生生物・寄 生虫・進化セミナー, March 29, 2023,石川県 金沢市 金沢歌劇座.
- 2. 中山卓郎. 現在進行中の細胞内共生進化を観察する:配列データから得た進化のス ナップショット. 第25回デジタル進化生物セミナー, September 1, 2022, オンライ ン.

B)その他の発表

- 厳翼,久米慶太郎,阿部一貴,矢崎裕規,小松崎洋志,谷藤吾朗,神川龍馬,稲垣祐 司,橋本哲男.寄生性の祖先から自由生活性に転じたディプロモナス類における自 由生活関連タンパク質の探索.第92回寄生虫学会大会,Mar 30-31,2020,石川県 金 沢市 金沢歌劇座
- 原田亮, Marek Eliáš, 稲垣祐司. ユーグレナ類はピラミモナス緑藻由来の色素体局在 DNA ポリメラーゼをもつ. 第 81 回日本寄生虫学会東日本支部大会・日本共生生物 学会第6回大会, Oct. 1-2, 2022, 東京都 文京区 東京医科歯科大学キャンパス
- 3. 原田亮, Marek Eliáš, 中野健太郎, 白鳥隆志, 矢吹彬憲, Eunsoo Kim, 石田健一郎, 稲垣祐司. キネトプラスチダ類及びディプロネマ類に特異的なミトコンドリア局在 DNA ポリメラーゼはファージ起源である. 第81回日本寄生虫学会東日本支部大会・ 日本共生生物学会第6回大会, Oct. 1-2, 2022, 東京都 文京区 東京医科歯科大学キャ ンパス
- 4. 中山卓郎. 栽培される共生体: 海洋渦鞭毛藻とシアノバクテリアの共生関係. 日本植物学会第 86 回大会 企画シンポジウム, Sep. 17, 2022, 京都府 京都市 京都府立大学
- 5. 野村真未,中山卓郎,中村桂一郎,太田啓介. 栽培される共生体:海洋渦鞭毛藻とシ アノバクテリアの共生関係. 日本植物学会第86回大会 企画シンポジウム, Sep. 17, 2022, 京都府 京都市 京都府立大学
- 原田亮,稲垣祐司.アピコンプレクサとその近縁系統におけるミトコンドリア局在 DNAポリメラーゼの多様性と起源の解明.第91回日本寄生虫学会,May 28-29,2022, 北海道 十勝市 とかちプラザ

(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

- 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
- 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

国際連携・国際活動等

- A. J. Roger 博士および A. G. B. Simpson 博士 (ダルハウジー大・カナダ) との共同研究:メタモナス生物群の系統関係と嫌気性ミトコンドリア機能の解析
- 2. E. Kim 博士(アメリカ自然史博物館・アメリカ合衆国)との共同研究:カタブレフ アリス類のミトコンドリアゲノム解析,ユーグレノゾア基部から分岐する新奇系統 に関する研究
- 3. M. Eliáš 博士(Ostrava 大学・チェコ共和国)等との共同研究: ヘテロロボサ類の系統 関係と嫌気性ミトコンドリア機能の進化、オルガネラ DNA ポリメラーゼの多様性に 関する研究
- 4. C. de Vargas 博士 (CNRS/ロスコフ海洋研究所・フランス)との共同研究:海洋原生 生物に共生する細菌多様性の実態解明
- 5. 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

中山卓郎: シンポジウムオーガナイザー. 共生したら葉緑体になった件,ならなかった件: 細胞生態学的視点から見た光合成微生物の個性と生存戦略.日本植物学会第86回大会,Sep. 17,2022,京都府京都市京都府立大学

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

VI. 地球環境研究部門

1. メンバー

教授	日下 博幸、田中 博、
	植田 宏昭(学内共同研究員)
助教	松枝 未遠、ドアン グアン ヴアン
特任助教	中村 祐輔(学内共同研究員)
研究員	佐藤 拓人、今井 優真
学生	大学院生 25 名、学類生 10 名

2. 概要

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

地域規模の気候の研究は、日下教授・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」、「熱帯の対流性降 水への都市化の効果に関する研究」がある。このほかの国内連携として、気象庁気象研究所、 農研機構の研究者が代表の科研費に参画している。国際連携としては、ベトナム国家大学ハ ノイ自然科学大学、ハノイ科学技術大学、ベルギー王立気象研究所、アリゾナ州立大学都市 気候研究センターと連携協定を結んでいる。また、アメリカ大気研究センターとも国際テニ ュアトラック事業を継続している。アジアと欧米を代表する都市気候研究拠点と共同研究を 行っていることになる。このグループのユニークな社会貢献として、筑波山神社と共同で筑 波山頂の気象観測所を運営しており、関東唯一の孤立峰という環境を活かして霧やエアロゾ ル・雲相互作用に関する研究を進めている。この成果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期間共同研究に貢献し、令和5年度から雲物理過程と エアロゾルの関係を調査する大型プロジェクト(科研費基盤研究 S、代表梶野瑞王教授(気象研 究所)、分担日下教授)の発足に貢献した。この科研費では、筑波山の気象観測をさらに拡充し ていく予定である。産学連携として、民間建築・設計・再エネ企業との共同研究がある。建築 系の企業との共同研究は、気象学分野の大学の研究室としてはユニークである。CCS 内での 連携としては、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、吉川准教授グループとの3 次元放射モデルの開発に関する研究がある。

地球規模の気象研究は、田中教授・松枝助教のグループが取り組んでいる。田中教授の国 際連携としては、アラスカ大学国際北極圏研究センターと協定を続けており、インドネシア 気候・気象・地球物理庁や米国ミズリー大学コロンビア校と共同研究を継続している。松枝 助教は、2週間先、1ヶ月先、3ヶ月先までを対象とする世界各国の現業アンサンブル予報(そ れぞれ TIGGE、S2S、Copernicus)データを利用し、予測可能性研究や関連分野への利用可能性 に関する研究を行った。

3. 研究成果

[1] 都市気象 LES モデルの改良とその応用

都市気象モデル「City-LES」の境界条件部により幅広い実験が行えるようにするための改良 を施した。LES モデルは自身が解像できる空間スケールの乱れを直接解像するという特性を 持つため、流入境界において平均的な場と乱れの両方が必要となる。CFD 分野と気象分野の 両方で様々な乱れ生成手法が開発されてきたが、昼間の対流が活発な境界層内でも利用可能 な方法はほとんどなく、またそういった場における各手法の特徴もあまり整理されていなか った。そこで、CFD 分野でよく用いられる領域内の乱れを再利用する手法を昼間の境界層に も適用可能なように拡張した。またこの拡張手法を含む複数の流入乱れ生成法を City-LES に 実装し、理想化した都市上にできる対流境界層の数値シミュレーションを行うことで各手法 の特徴を整理した。拡張手法は、既存の乱数を基に診断的に乱れ成分を作る方法より風上境 界近くからもっともらしい乱れを生成することができた(図1、R-R)。また、CFD 分野と気 象分野で開発された手法の乱れ生成の性能を相互に比較したところ、両者とも十分な助走距 離をとることで乱れ生成を達成できるが、その助走距離には差があることがわかった(図1、 DF と CPM)。



図 1. 対流境界層下層における鉛直風速の水平断面図。PER、UNI、R-R、DF、CPM はそれぞれ周 期境界の場合、乱れ成分の代わりに一様乱数を与えた場合、提案手法を用いた場合、CFD で開 発された手法を用いた場合、気象分野で開発された手法を用いた場合の結果

[2] 都市内の乱流長さスケールに関する研究

気象モデルでは、乱流による運動量や熱の輸送過程をモデル化して表現する。この際、こ の乱流モデルの精度は、乱流の長さスケールの推定精度に大きく依存している。特に都市街 区内やその上空では、建物によって流れが変形され活発に乱れが生成されていることから、 乱流による輸送を精度よく算出することが重要である。しかし、都市街区周辺の乱流長さス ケールがどのような都市の幾何的パラメータ(建物高さや道路の幅)で説明できるかはいまだ 議論がなされている。本研究では、センターで開発している都市気象 LES モデル City-LES を 活用し、様々な幾何的パラメータの理想化都市における数値シミュレーションを実施し、都 市街区内の乱流長さスケールを推定した。そのデータベースをもとに、都市の幾何的パラメ ータと乱流長さスケールの関係を調査した。その結果、都市の乱流長さスケールは建物高さ や道路幅単体では説明できず、建物高さ、道路幅、街区長さの組み合わせによって決まることが示唆された。



図 2. City-LES を用いて推定した乱流長さスケール

[3] 東南アジア(ジャカルタ)を対象とした都市降水の研究

今日まで、都市研究の研究は数多く行われているが、その研究のほとんどはアメリカや中 国、日本の大都市を対象としたものであり、熱帯地域の都市降水の研究はほとんどない。イ ンドネシアのジャカルタは、東南アジア最大の都市であり、今後もさらなる発展が予想され ている。そこで、本研究では、ジャカルタの都市化が熱帯地方の対流性降水(いわゆるスコー ル)に及ぼす影響を、WRFを用いた数値実験によって調査した。その結果、過去80年間のジ ャカルタの都市化が同地域に午後に発生する対流性降水を強化し、降水量を増加させてきた ことが示唆された。



図 3. (a) 2010 年代のジャカルタの土地利用、(b) 1930 年代のジャカルタの土地利用、(c) 1930 年代から 2010 年代にかけての顕熱の変化、(d) 1930 年代から 2010 年代にかけての降水 量の変化、(e) 1930 年代、2010 年代の降水量の日変化

[4] 東南アジア(ベトナム)を対象としたフェーン現象の研究

フェーン現象の研究のほとんどは、アルプス山脈、ロッキー山脈、アンデス山脈、日本の 中部産学であり、熱帯地域で起こるフェーン現象の研究はほとんどない。ベトナムのチュオ ンソン山脈はフェーンが起こりやすい理想的な山脈形状である。そこで、ベトナムのチュオ ンソン山脈から吹いてくるフェーン(いわゆるラオス風)のメカニズムを、WRF を用いた数値 実験によって調査した。その結果、熱帯モンスーン地域のフェーンのタイプは、熱力学フェ ーンであるというイメージがあったが、実際には主として力学フェーンであることが明らか になった。



図 4. (a) 対象領域における気温の観測値、(b) 数値シミュレーションによって得られた対象 領域における気温、(c) 研究対象領域の地形、(d) 流れに沿ったエネルギー収支

[5] 高解像度モデルを用いた地域気候変動の研究

地球規模の気候変動は、人類にとって最も重要な問題である。気候変動リスクの特定、適応・緩和策の策定のためには、気候変動の地域規模の情報が極めて重要である。一方、現在

の気候変動の予測・理解には不確実性があり、気候予測モデルは粗い解像度で行われること が多い。本研究では、最先端技術である対流許容地域気候モデルWRFを用いて地域気候変動 のメカニズムを明らかにする。具体的に、長期気候変動がもたらした非対称温暖化現象を着 目した。研究対象地域は、日本の関東地方と熱帯地方に位置するマレーシア半島の一部など、 複数の地域を選定した。その結果、日中の気温変動は、予想に沿わない、昼夜を通じて非一 様に温暖化するという興味深い知見が得られた。つまり、気候変動の影響で夜間の気温が昼 間の気温よりも大きく上昇し、温度の日較差(Diurnal Temperature Range - DTR)が小さくな ることがわかった。本研究では、DTR の減少をもたらす物理的なメカニズムとして温暖化気 候のもとでの雲量の増加が原因である可能性を示した。雲量が増加すると、日中の日射量が 減少し、気温上昇の原因となる顕熱フラックスが減少し、日最高気温が「under-warming」す ることがわかった。DTR の減少は、局地的な大気循環、植物の成長、さらには人間や動物の 代謝などに影響する示唆を与える。以上の研究成果は、Geophysical Research Letters (AGU)に 掲載された。



図 5. 非対称温暖化現象。日最低気温の温暖化率が日最高気温より高い。関東平野(KP)とマ ライシア半島(MP)の計算結果。

[6] 気候データマイニングの手法の開発・応用

気候ビッグデータの時代では、知識獲得の本来の手法からデータマイニングへのパラダイ ムシフトが期待される。しかし、データマイニング技術を如何に気候研究分野に効果的に融 合するかは難しい問題である。クラスタリングはデータマイニングの代表的な手法であり、 データからパターンを抽出する手法である。一方、気候データは時系列、天気図などの時空 間的な特徴を持ち、クラスタリング技術を適応させることが課題となっている。本研究では、 k-means のクラスタリング手法に構造的類似性 (Structural Similarity)の概念を取り入れる ことで、クラスタリングのパフォーマンスを上げた。クラスタリング手法における不確実性 を測定する方法 (Clustering Uncertainty Evaluation-CUE)を提案した。CUE は、データサイエ ンスの Adjust Mutual Information の技術を利用し、クラスタリング結果間の不一致を測定し可 視化する。提案した手法は、Geoscientific Model Development (EGU)誌に掲載された。



図 6. Structural k means と Clustering uncertainty evaluation (CUE) フレームワークの 概念図 (Doan et al.、2023、GMD)

[7] 天候レジームの予測可能性

天候レジームとは、再帰性・持続性のある大気の流れのことである。これが長期間持続す ることで、周辺領域に熱波、寒波、豪雨などの異常気象をもたらすため、レジーム間遷移も 含めてそれらを正確に予測することは重要である。冬季豪州周辺域、および、冬季東アジア 域のレジームを対象に、ERA5、および、カナダ気象局 (CMC)、欧州中期予報センター(ECMWF)、 気象庁 (JMA)、米国環境予測センター(NCEP)、英国気象局(UKMO)の中期アンサンブル予報 データにより解析を行った。冬季豪州周辺域では 5 つのレジームが特定され、卓越するレジ ーム間遷移やレジームサーキットがみられたが、モデルが共通して特定のレジーム遷移や持 続頻度に大きなバイアスを持つことがわかった。特に、南半球の特徴とも言えるスパイラル ジェットとダブルジェットの 2 つのレジームの持続に特に大きなバイアスが見られた。また、 冬季東アジア域については、5 つのレジームのうち低温に関するレジームの予測について注 目した。日本域の低温に関係するレジームは、冬型の気圧配置(WM)と Western Pacific (負位 相、WP)であるが、低気圧が日本列島上空を通過した後に WM/WP に戻るタイミング(遷移)の 予測、および、WM/WP 持続の予測をモデルが共通して不得意としていることがわかった。

[8] 2022 年夏季欧州熱波の予測可能性

2022年夏季、熱波が 欧州西部を襲った。特 に、英国の Coningsby では、観測開始史上初 の 40℃超えとなる 40.3℃を記録した。特 に高温となったフラ ンス(6月18日)と英国 (7月19日)において、 ERA5を用いて熱波ピ ーク時の大気場の特 徴を調査した。また、 熱波の予測可能性を CMC、ECMWF、JMA、 NCEP、UKMOの中期



アンサンブル予報データを用いて調査した。アフリカ北部にあった高気圧が発達し、北へ張 り出すことにより欧州西部を覆い、これに伴いアフリカから暖気が流入したことで、フラン スと英国では記録的な熱波となった。フランスでの熱波は英国での熱波よりも予測精度が高 く、ピークの1周間前からでも十分予測可能であった。英国での熱波は、5-6日前からようや く予測可能となったが、これは高気圧の北への張り出しの位置と強さの予測が難しかったた めである。モデルは、高気圧の張り出しを実況よりも西側に弱く予測していた。

[9] 台風、および、台風の温低化の予測可能性

台風の予測可能性に関する研究では、中緯度トラフが台風の予測与える影響の評価、および、2018年台風 24号(TRAMI)の進路予報について解析を行った。前者では、ECMWF、JMA、 NCEP、UKMOの中期アンサンブル予報データを用いて、2021年の6-10月に発生した台風事 例に対し、台風ー中緯度トラフ間の距離と台風進路の予報誤差の関係を調べた。その結果、 台風北西の中緯度トラフと台風の距離が近いほど、台風進路の予報誤差が大きくなる傾向が あることがわかった。また、後者のTRAMIの進路予測に関する研究でも、上層トラフの位置 や張り出しの強弱が進路に大きく影響を与えていることが分かり、トラフ予測の不確実性が 台風進路予測の不確実性につながっていることが分かった。

温低化に関する研究では、2019 年 9-10 月に北西太平洋域で温低化(ET)した 4 事例の台風 (FAXAI、HAGIBIS、LINGLING、MITAG)を対象として、低気圧位相空間(CPS)にアンサンブ ル予報データを適用することで、ET の有無や ET 完了のタイミングの予報精度を検証した。 事例による予報精度の差が大きく、台風そのものの予測以上に、温低化の予測が難しいこと が示唆された。

[10] Copernicus 季節予報データを用いた東京のサクラ開花日の確率予報

サクラに対する人々の関心は非常に高 く、観光資源としての価値も高いため、開 花日を正しく予測することは非常に重要 と言える。丸岡・伊藤(2009、MI09)は、青 野・小元(1990)が提唱したチルユニット法 と温度変換日数法を組み合わせた開花日 推定モデルを改良し、半休眠打破期を考慮 したソメイヨシノの開花日推定モデル (MI09 モデル)を作成した(入力は地上気温 のみ)。MI09 モデルに、ドイツ(DWD)、(b) フランス(METFR)、(c)欧州(ECMWF)の季 節アンサンブル予報を適用することで、東 京のサクラ開花日の確率予報を行った(図 は 2023 年 2 月 1 日を初期日とするグラン



ドアンサンブルによる開花確率)。10-12 月初期月の予測は、そのリードタイムの長さゆえに 有益なものとはならないことが分かった。一方、1月以降初期月の予測は、3月にかけて精度 が向上し、特に実況開花日が早い年ほど3月初期月の予測精度が高くなることが分かった。

[11] 準リアルタイムアンサンブル予報プロダクトページ(TIGGE/S2S/Copernicus

Museums)の運営(松枝)

世界各国の気象庁の現業アンサンブル予報をもとにした 3 つの準リアルタイム予報プロダクト website (2 週間先までを対象とする TIGGE Museum、1 ヶ月先までを対象とする S2S Museum、3 ヶ月先までを対象とする Copernicus Museum)の運営を引き続き行った。今年度は主に、データセットの仕様変更への対応と、Copernicus Museum のプロダクトの充実を行った。

4. 教育

学生一覧

日下研究室(21名):

D3浅野裕樹

D2静居竜大、鈴木信康、Thisara Sathsara、Xue Lingbo

D1Magnaye Angela, Sharifah Faridah

M2駒崎寛和、工藤達貴、高田菜月

M1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

B4高畠亮、沼田智帆、松山理歩、八木碧月

田中研究室(5名):

M2赤見彰一、五木田麗奈、亀田遼

B4安倍啓貴、杉本寛典

松枝研究室(9名):

M2黒川理帆、古賀太暁、佐久間耀

M1田中拓海、八巻俊則

B4浅賀結月、遠藤南月、仲尾次晴空、藤巻春翔

B258 名(学生名省略, クラス担任)

(計 35 名、うち大学院生 25 名、学類生 10 名)

集中講義など

1. 名桜大学学長講座「大学と人生」(松枝)

5. 受賞、外部資金、知的財産権等 受賞

 Top Cited Article 2021-2022, Meteorological Applications, Yuki Asano and Hiroyuki Kusaka, "Numerical simulation study of the effects of foehn winds on white head incidences in Yamagata Prefecture, Japan", 2023/02/22

- Top Downloaded Article, Meteorological Applications, Yuki Asano and Hiroyuki Kusaka, "Numerical simulation study of the effects of foehn winds on white head incidences in Yamagata Prefecture, Japan",2023/03/30
- Top Downloaded Article, International Journal of Climatology, Hiroyuki Kusaka, Akifumi Nishi, Ai Kakinuma, Quang-Van Doan, Taira Onodera, and Shuhei Endo, "Japan's south foehn on the Toyama Plain: Dynamical or thermodynamical mechanisms?", 2023/03/30
- 4. CSIS DAYS 2022 優秀共同研究発表賞, 佐藤拓人・日下博幸・中村祐輔, "建物データの精度が LES モデルによる暑熱環境評価の精度に及ぼす影響の調査", 2022/11/19

外部資金

- 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,300万円,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
- 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
- 株式会社竹中工務店技術研究所 共同研究, 日下博幸(代表),2022年4月~2023年4月、80万円,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
- 日本学術振興会 科学研究費助成事業 基盤研究(A), 日下博幸(分担)・Quang-Van Doan(分担), 2019年4月~2023年3月, 1066万円, 統合粒子モデル開発による水 物質を介した気象変化と環境汚染の相乗効果の解明
- 5. 日本学術振興会 科学研究費助成事業 若手研究, <u>Quang-Van Doan (代表)</u>, 2020 年 4月~, 90 万円
- 株式会社日建設計総合研究所 共同研究, Quang-Van Doan (代表), 2022 年 5 月~, 120 万円
- 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),2021年
 12月~2022年12月,300万円,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
- 8. 日本学術振興会 科学研究費助成事業 基盤研究(C), <u>日下博幸(代表)</u>・Quang-Van <u>Doan(分担)</u>, 2021年4月~2024年3月, 247万円,都市街区LESモデルの改良と その応用
- 9. 独立行政法人日本学術振興会・科学研究費助成事業・若手研究, Doan Quang Van (代<u>表)</u>、2022 年度、900,000 円、熱帯での対流性降水への都市化の効果に関する研究

10. 日建設計総合研究所共同研究、<u>Doan Quang Van(代表)</u>, 2021 年度, 1200,000 円, 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発

6. 研究業績

- (1) 研究論文
- A) 査読付き論文
- Gu, Y., <u>H. Kusaka, Q.-V. Doan</u>, 2023: An advection fog event response to future climate forcing in the 2030s–2080s: a case study for Shanghai. Frontiers of Earth Science
- Nishi, A., <u>H. Kusaka</u>, 2023: Future changes of the extreme high-temperature events influenced by foehn winds in Niigata, Japan. Atmospheric Science Letters, 24(2)
- <u>Doan, Q.-V.</u>, S. Kobayashi, <u>H. Kusaka</u>, F. Chen, C. He, D. Niyogi, 2022: Tracking Urban Footprint on Extreme Precipitation in an African Megacity. Journal of Applied Meteorology and Climatology, 62(2), 209-226
- 4. Nishi A., <u>H. Kusaka</u>, S. Nakamura, Mesoscale and local-scale climatology of extreme temperature events in Niigata, Japan, International Journal of Climatology. 42(16), 9897-9908
- 5. <u>Doan, Q.-V.</u>, F. Chen, <u>H. Kusaka</u>, J. Wang, M. Kajino, T. Takemi, 2022: Identifying a new normal in extreme precipitation at a city scale under warmer climate regimes: A case study of the Tokyo metropolitan area, Japan. Journal of Geophysical Research: Atmospheres
- <u>Doan, Q.-V.</u>, F. Chen, Y. Asano, Y. Gu, A. Nishi, <u>H. Kusaka</u>, D. Niyogi, 2022: Causes for asymmetric warming of sub - diurnal temperature responding to global warming. Geophysical Research Letters
- Okada, M., K. Yamaguchi, R. Kodama, N. Ogasawara, H. Kato, <u>Q.-V. Doan</u>, N. N. Ishizaki, <u>H. Kusaka</u>, 2022: Development of a wind power ramp forecasting system via meteorological pattern analysis. Wind Energy, 25(11), 1900-1916
- Sato, R., <u>H. Kusaka</u>, 2022: Climatological study of airflow channelling in relation to surface geostrophic wind, Meteorological Applications, 29(4), e2082
- Kakimoto, M., Y. Shiga, H., Shin, R. Ikeda, <u>H. Kusaka</u>, Quantile mapping correction of analog ensemble forecast for solar irradiance, Solar Energy, 237, 253-263
- Yamada, S., <u>H. Kusaka</u>, 2022: Spatial Structure and Formation Mechanism of Local Winds "Suzuka-oroshi" at the Foothills of Suzuka Mountains, Japan. Journal of the Meteorological Society of Japan, 100(5), 751-766
- <u>Kusaka, H</u>. Y. Nakamura, Y. Asano, 2022: UV Parasol, Dry-Mist Spraying, and Street Trees as Tools for Heat Stress Mitigation. Journal of the Meteorological Society of Japan, 100(4), 677-685

- Nakamura, S. <u>H. Kusaka</u>, R. Sato, T. Sato, 2022: Heatstroke Risk Projection in Japan under Current and Near Future Climates. Journal of the Meteorological Society of Japan, 100(4), 597-615
- Magnusson, L., D. Ackerley, Y. Bouteloup, J.-H. Chen, J. Doyle, P. Earnshaw, Y. C. Kwon, M. Koeher, S. T. K Lan, Y.-J. Li, <u>M. Matsueda</u>, T. Matsunobu, R. McTaggart-Cowan, A. Reinecke, M. Yamaguchi, and L. Zhou, 2022: Skill of medium-range forecast models using the same initial conditions. Bulletin of the American Meteorological Society, 103, 2050-2068
- 14. <u>Doan, Q.-V.</u>, F. Chen, <u>H. Kusaka</u>, A. Dipankar, 2022: Increased Risk of Extreme Precipitation over an Urban Agglomeration with Future Global Warming. Earth's Future
- Nguyen, V. T., <u>Q.-V. Doan</u>, N. N. Tran, L. T. M. Luong, P. M. Chinh, 2022: The protective effect of green space on heat-related respiratory hospitalization among children under 5 years of age in Hanoi, Vietnam, Environmental Science and Pollution Research,
- Wang, J., S. Miao, <u>Q.-V. Doan</u>, F. Chen, R. Abolafia Rosenzweig, L. Yang, G. Zhang, Y. Zhang, J. Dou, Y. Xu, 2022: Quantifying the impacts of high resolution urban information on the urban thermal environment. Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 128(6)
- 17. Thang Nguyen Van, Mau Nguyen Dang, <u>Van Doan Quang</u>, Tuan Bui Minh, Khiem Mai Van, Kham Duong Van, Thuy Tran Thanh, Duong Trinh Hoang, Tam Tran Thi, Quyen Nguyen Huu, Thai Luong Xuan, Hien Tran Duy, 2023: Orographic Effect and the Opposite Trend of Rainfall in Central Vietnam. Advances in Meteorology, 1-12
- Asano, Y., Y. Nakamura, <u>H. Kusaka</u>, A. Suzuki-Parker, S. Aiba, 2022: Effect of walking in heat-stressful outdoor environments in an urban setting on cognitive performance indoors. Building and Environment, 213, 108893
- 19. 畔上泰彦,大竹和夫,田中英之,<u>日下博幸</u>,2022:地球温暖化が日本列島上陸時の台 風の性状に及ぼす影響に関する研究.風工学研究論文集,27,126-133
- B) 査読無し論文
- <u>日下博幸</u>, 2023: 筑波大学計算科学研究センター日下研究室の紹介. 日本風力エネル ギー学会誌, 46(4), 732-737

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

 Asano, Y., M. Tonouchi, <u>H. Kusaka</u>, 2023: Climate projection considering urbanization for 2045 Jakarta, Open Seminar: Climate Projection Data Downscaling and its Utilization, Climate Projection Data Downscaling and its Utilization. 2023/3, Badan Meteorologi, Klimatologi, dan Geofisika, Jakarta, Indonasia

2. <u>Kusaka, H.</u>, 2023: Climate change at Asian mega cities, Climate Projection Data Downscaling and its Utilization. 2023/3, Badan Meteorologi, Klimatologi, dan Geofisika, Jakarta, Indonasia

B) 一般講演

- Kudo, T., H. Kusaka, 2022: Climatology and mechanism of blowing of the Obonai-dashi wind, The 14th Japan-China-Korea International postgraduate academic forum, 2022/09/, Online
- 2. Kusaka, H. R. Ikeda, T. Sato, T. Boku, S. Iizuka, 2022: New version of the city-scale large eddy simulation model (City-LES) to propose better adaptation strategies for the uncomfortable thermal environments, IGU 国際地理学会議 2022 (UGI-IGU 2022), 2022/07, Online
- 3. Asano, Y., H. Kusaka, 2022: Numerical simulation study of foehn winds that severely damaged rice plants in Japan, American Meteorological Society 2022, 2022/06, Online
- Asano, Y., Y. Nakamura, A. Suzuku-Parker, S. Aiba, H. Kusaka, Was cognitive performance indoors affected by a short walk in heat-stressful outdoor environments in an urban setting? Japan Geoscience Union Meeting 2022, 2022/05, Online
- Doan Q.-V., H. Kusaka, L. Vitanova, R. Estoque, T. H. Nguyen, F. Chen, 2022: Uncertainties in Urban Climate Downscaling Associated with Future Urbanization, AOGS 2022 Annual Meeting, 2022/08, Singapore
- Nguyen, T. H., T. Nagashima, Q.-V. Doan, 2022: Source Contribution and Future Simulations of PM2.5 in Hanoi, Vietnam, AOGS 2022 Annual Meeting, 2022/08, Singapore
- Vitanova L. L., S. Yamamura, Q.-V. Doan, 2022: Potential Installation of Solar Panels for Dissemination of Wide Carbon-neutral Area in Kanto Region, Japan, AOGS 2022 Annual Meeting, 2022/08, Singapore
- Doan Q.-V., S. Kobayashi, H. Kusaka, F. Chen, C. He, D. Niyogi, 2022: Urban Footprint on Extreme Precipitation in Lagos, Nigeria, AOGS 2022 Annual Meeting, 2022/08, Singapore

(3) 国内学会·研究会発表

A) 招待講演

- <u>日下博幸</u>, 2023:都市気候に関する最新の知見:研究最前線と6つの誤解.地球の教 室 2023,2023/03.東北大学,仙台,宮城県
- 2. 日下博幸, 2023:都市の暑熱環境問題とその対策.日本学術会議 in つくば, 2023/02, つくば, 茨城県

- 日下博幸,2023:気象予測モデルの進歩と農業気象分野での活用に向けた展望.令和 4年度果樹茶業研究会,2023/01、オンライン
- 4. 日下博幸, 2022: 身近な気象の誤解と真実. 日本気象予報士学生会, 2022/09, オンラ イン
- 5. 日下博幸, 2022: ヒートアイランドと温暖化:ヒートアイランド対策と暑さ対策は違うのか? 日本気象学会夏季大学, 2022/08, オンライン
- 6. 日下博幸, 2022: 酷暑のメカニズムを気候学の立場から問直す. 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, 2022/04, オンライン

B)その他の発表

- 浅野裕樹,日下博幸,2023:山越え気流に対する山脈の幅の効果,2023年日本地理学 会春季学術大会,2023/03,東京都立大学
- 2. 鈴木信康,日下博幸,2023:東海〜関東で発生する地形性収束線の形成域と地形効果, 2023年日本地理学会春季学術大会,2023/03,東京都立大学
- 工藤達貴,日下博幸,2023:田沢湖東岸で吹く生保内だしの気候学的研究,2023年日本地理学会春季学術大会,2023/03,東京都立大学
- 佐藤拓人,日下博幸,2022:対流境界層を対象とした Large-eddy simulation のための流 入境界条件の相互比較,第 24 回非静力学モデルに関するワークショップ,2022/12, 筑波大学
- 5. 日下博幸, 佐藤拓人, 池田亮作, 2022: 都市気象 LES モデル(City-LES)の精度検証, 第 24 回非静力学モデルに関するワークショップ, 2022/12, 筑波大学
- 6. 浅野裕樹,日下博幸,2022:山脈の幅がおろし風に及ぼす影響,第24回非静力学モデルに関するワークショップ,2022/12,筑波大学
- 7. 鈴木信康,日下博幸,2022: 東海〜関東で発生する収束線の地形効果,第24回非静力 学モデルに関するワークショップ,2022/12,筑波大学
- 8. 工藤達貴, 日下博幸, 2022: 生保内だしの吹走メカニズム, 日本気象学会 2022 年秋季 大会, 2022/10, オンライン
- 9. 浅野裕樹,中村祐輔,鈴木パーカー明日香,相場祥平,2022:日下博幸短時間屋外歩 行が屋内での仕事・学習能力に及ぼす影響:都市街区を想定した被験者実験,2022年 日本地理学会秋季学術大会,2022/09,オンライン
- 鈴木信康,日下博幸,2022:東海〜関東で発生する積雲列に対する地形効果,2022 年 日本地理学会秋季学術大会,2022/09,オンライン
- 11. 日下博幸, 2022:都市と晴天積雲,日本地理学会都市気候環境研究会, 2022/09,オン ライン

- 12. 佐藤拓人,日下博幸,2022:対流境界層を対象とした LES のための流入境界条件の検討,第1回都市極端気象シンポジウム(第18回台風研究会),2022/09,京都大学
- 13. 日下博幸, 佐藤拓人, 池田亮作, 朴泰祐, 飯塚悟, 2022: 筑波大学で開発した都市街区 気象 LES(City-LES)の精度検証, 第1回都市極端気象シンポジウム(第18回台風研 究会), 2022/09, 京都大学
- 14. 浅野裕樹,中村祐輔,鈴木パーカー明日香,相場祥平,日下博幸,2022:炎天下の都市 街区での短時間屋外歩行が仕事・学習能力に及ぼす影響,第1回都市極端気象シンポ ジウム(第18回台風研究会),2022/09,京都大学
- 15. 畔上泰彦,大竹和夫,田中英之,日下博幸,2022:温暖化時の台風が建物やまちに与える影響に関する研究,第1回都市極端気象シンポジウム(第18回台風研究会),2022/09,京都大学
- 16. 畔上泰彦,今西美音子,藤原邦彦,日下博幸,2022:夏季街区内の微気候が歩行者の 経路選択に与える影響の調査,2022年度日本建築学会大会学術講演会,2022/09,オン ライン
- 北出拓海,釜江陽一,松枝未遠,2022:極東域におけるブロッキング高気圧を伴う熱 波の地球温暖化による変化,異常気象研究会2022・第10回観測システム・予測可能 性研究連絡会,2022/12,オンライン
- 18. 田中拓海,松枝未遠,2022:北太平洋偏西風レジームの予測可能性と航空分野での利 用可能性に関する研究,第17回航空気象研究会,2023/02,オンライン
- 19. 秋田県仙北市で吹く生保内だしの気候学的特徴と吹走メカニズム,第76回気候影響・利用研究会/気候コロキウム(共同開催),2022/04, オンライン
- 20. 八巻俊則, 浅賀結月, 田中拓海, 松枝未遠, 2023: 季節アンサンブル予報による東京 のサクラ開花予測, 日本農業気象学会, 2023/03, 山口
- (4) 著書、解説記事等
- 日下博幸(分担執筆),加藤央之,岡田牧,2023:再生可能エネルギーの気象学,日本気 象学会,208pp
- 2. 日下博幸(分担執筆), 2023: 地理学辞典, 丸善出版, 844pp
- Mukul Tewari, Zhihua Wang, Dan Chen, Quang-Van Doan, Hiroyuki Kusaka, Prathap Ramamurthy, Pallav Ray, 2022: Extreme Weather Forecasting
- 4. 日下博幸(分担執筆), 原政之, 2022: 図説 世界の気候自転, 朝倉書店, 430pp
- 5. 荒井良雄, 茅根創, 日下博幸(分担執筆), 鈴木厚志, 藤井正, 帝国書院, 新詳高等地図, 帝国書院, 191pp

7. 異分野間連携·産学官連携·国際連携·国際活動等

異分野間連携(センター内外)

- ・ CCS 内:高性能計算システム研究部門と都市街区気象 LES モデルの開発(日下・Doan)
- ・ CCS 内:計算情報学研究分野と気候データマイニング・クラスタリング手法の開発 (日下・Doan)
- ・ CCS 外:農業分野(農研機構)と水田の機構緩和効果に関する共同研究(日下)
- ・ CCS 外:情報通信分野(情報通信機構)と雲のリアルタイム画像解析に関する共同研究 (日下)
- ・ CCS 外:地球環境分野(気象研究所)と4次元同化に関する共同研究(田中)

産学官連携

- ・ 建築工学分野(竹中工務店)との共同研究(日下)
- 建築工学分野(日建設計総合研究所)との共同研究 (Doan)
- ・ 再エネ分野(ユーラスエナジー)との共同研究(日下)
- ・ (財)日本気象協会への季節予報に関する技術サポート (松枝)

国際連携·国際活動

- 1. ベトナム国家大学ハノイ自然科学大学(VUN/HUS)と本センター間の協定(日下)
- 2. ハノイ科学技術大学(USTH)と本センター間の協定(日下)
- 3. アリゾナ州立大学(UCRC)と本センター間の協定(日下)
- 4. 日越大学(VNU, ベトナム)との連携 (日下)
- 5. アジア工科大学院(Asia Institute of Technology, タイ)との連携(日下)
- 6. ベルギー王立気象研究所(Royal Meteorological Institute, Belgium, ベルギー)と本セン ター間の協定 (日下)
- 7. アラスカ大学フェアバンクス校 国際北極圏研究センター(IARC)との大学間協定 (田中)
- 8. 米国ミズリー大学コロンビア校との部局間協定 ブロッキングと異常気象の研究 (田 中)
- 9. ハンブルグ大学(ドイツ)との共同研究 大気ノーマルモードの応用研究 (田中)
- 10. Karlsruhe Institute for Technology (KIT, Germany)との連携 (松枝)
- 11. European Centre for Medium-Range Weather Forecasts (ECMWF)との連携 (松枝)
- 12. University of Oxford (UK)との連携(松枝)
- 13. The Institute of Atmospheric Sciences and Climate (CNR-ISAC, Italy)との連携(松枝)
- 14. University of Colorado Boulder (USA)との連携(松枝)

- 15. National Center for Atmospheric Research (USA)との連携 (Doan)
- 16. Centre for Climate Research Singapore (Singapore)との連携 (Doan)
- 17. National University Singapore (Singapore)との連携 (Doan)
- 18. University of Calcutta (India)との連携 (Doan)
- 19. University of Texas at Austin (USA)との連携 (Doan)
- 20. Vietnam National University (Vietnam)との連携 (Doan)
- 21. Ho Chi Minh City Medicine and Pharmacy University (Vietnam)との連携 (Doan)
- 22. Griffith University (Australia)との連携 (Doan)
- 23. University New South Wales (Australia)との連携 (Doan)
- 24. Thuyloi University (Vietnam)との連携 (Doan)

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

- 1. 第1回都市極端気象シンポジウム(第18回台風研究会), 幹事 (2022年9月)(日下)
- 2. 第24回非静力学モデルに関するワークショップ,事務局 (2022年12月)(日下)
- 3. 国際学会セッションの主催者、American Geophysical Union Fall meeting (2022 年 12 月) (Doan)
- 4. 国際学会の開催委員、International Association for Urban Climate Virtual Poster Conference (2022 年 9 月) (Doan)
- 5. 国際学会セッションの主催者、Asia Oceania Geosciences Society Annual meeting (2022 年8月) (Doan)

9. 管理·運営

- ・ 全学教育課程委員(日下)
- ・ 地球学類カリキュラム委員長(日下)
- ・ 地球科学学位プログラム広報委員長(日下)
- ・ 地球学類クラス担任 (松枝)

10. 社会貢献·国際貢献

- 1. 東京都 環境影響評価審議会委員(日下)
- 2. 熱中症予防声かけプロジェクト 実行委員(日下)
- 環境省・気象庁 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)
- 4. 日本学術会議 自然地理学環境防災小委員会委員 (日下)
- 5. 筑波山の山頂にて気象観測を行う筑波山プロジェクトの主導(日下)

- 6. 日本ヒートアイランド学会理事(日下)
- 7. 気候影響・利用研究会 幹事 (日下)
- 8. 一般財団法人日本海事協会 NEDO 洋上風況調査手法の確立に関する技術委員会委員 (日下)
- 9. 日本地理学会 地理学評論 Ser. A 編集委員会委員 (日下)
- 10. 環境省 気候変動適応における広域アクションプラン策定事業全国アドバイザー (日下)
- 11. 環境省 気候変動適応における広域アクションプラン策定事業評価委員(日下)
- 12. 日本気象学会 正野賞候補者推薦委員会委員 (日下)
- 13. 気象庁 異常気象分析作業部会 委員 (松枝)
- 14. 世界気象機関 (WMO) 大気科学委員会 (CAS) 予測可能性・力学過程およびアンサン ブル予報に関する作業部会 (PDEF) 委員 (松枝)
- 15. アメリカ気象学会 (AMS) 都市環境部会 (BUE) 理事 (任期 2020 年 1 月 2024 年 1 月) (Doan)

VII. 高性能計算システム研究部門

1. メンバー

教授	朴 泰祐, 高橋 大介, 建部 修見, 額田 彰,
	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
研究員	平賀 弘平
学生	大学院生 14名、学類生 7名、研究生 2名
学内共同研究員	

安永 守利, 櫻井 鉄也, 山口 佳樹, 今倉 暁 (以上, システム情報系)

学外共同研究員

小柳 義夫(RIST),石川 裕(国立情報学研究所), 松岡 聡(理化学研究所),天野 英晴(慶應義塾大学), 後藤 仁志(豊橋技術科学大学),関口 智嗣(産業技術総合研究所), 中尾 昌広(理化学研究所),佐野 健太郎(理化学研究所), 川島 英之(慶應義塾大学),田中 昌宏(慶應義塾大学)

2. 概要

本研究部門では、高性能計算システムアーキテクチャ、並列プログラミング環境、GPU利 用技術、FPGA利用技術、並列数値処理の高速化研究、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などの研究を行っている。

今年度の研究としては以下のテーマを主に行った。

- 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
- メニーコアプロセッサにおける数値計算ライブラリの開発及び性能評価
- ノードローカルストレージを用いたシステムソフトウェアの研究開発
- Gfarm ファイルシステムの研究開発
- GPUにおけるデバイス間接続ネットワークの有効活用に関する研究
- 統一的なプログラミングモデルによる GPU-FPGA 連携の実現のための実践的検討
- FPGA向け実アプリケーションの開発に資するライブラリの開発

3. 研究成果

[1] OpenACC による GPU・FPGA 協調プログラミング(朴,小林,藤田)

我々の研究チームで近年注力しているテーマが 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であり、このコンセプトを CHARM (Cooperative Heterogeneous Acceleration with Reconfigurable Multidevices)と呼んでいる。計算科学研究センターで運用中の Cygnus スーパーコンピュータはその一部が CHARM コンセプトの実証実験に充てられてい るように、センターとして重要な研究テーマと捉え、アプリケーション分野との共同研究も 活発に行なっている。

研究の一環として、OpenACC による GPU・FPGA 複合プログラミング環境の研究を行って いるが、本テーマ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) との共同研究により進めている。

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。

CHARM コンセプトに基づくプログラミング環境を CAMP (Cooperative Accelerating by Multidevice Programming)と呼ぶ。従来の CAMP の一つの実装は, GPU については CUDA で, FPGA については OpenCL で個別にプログラミングし, それらを連結可能とすることで最終 バイナリコードを実現したり, これを Intel oneAPI 環境で実装するような研究を行ってきた が, これをよりスマートな単一プラットフォーム, すなわち OpenACC だけで記述可能にす る。このため, OpenACC の directive を拡張し, 演算をオフロードする際のターゲットデバイ ス (GPU または FPGA) を指定可能とし, メタコンパイラによってコードを分解した上で指 定されたデバイスのためのバックエンドコンパイラに与え, 最終的な部分コードをリンクし て実行バイナリを生成するというアプローチを取る。このメタコンパイラを MHOAT (Multi-Hetero OpenACC Translater)と呼んでいる。

MHOAT から呼ばれる GPU 及び FPGA 向けの OpenACC バックエンドコンパイラには PGI GPU Compiler と OpenARC をそれぞれ用いる。OpenARC は ORNL が開発を進めている研究 用コンパイラである。また, MHOAT のパーザ部分と変換されたソースコードの出力には我々 と R-CCS で共同開発している Omni Compiler フレームワークを用いる。図に MHOAT の処理 の概念図を示す。



図 1. MHOAT の処理フロー

令和4年度の研究では、本センターの宇宙物理学研究部門・梅村教授のグループと共同で 開発している宇宙初期天体シミュレーションコード ARGOT を MHOAT のターゲットコード とし、一部手作業によるコード最適化を行い、CHARM コンセプトによる実アプリケーショ ンの GPU・FPGA 協調計算の有効性を示した。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。



Domain Decomposition + Intel Channel for multi-FPGA expansion

図 2. 複数カーネルによる ART 法の実装イメージ

MHOAT 向けに OpenACC 記述された ARGOT コードは,特に FPGA 向けに特別な最適化 を施している。まず,FPGA 内の演算回路を最大限に活かすために,空間分割によって FPGA

内で並列に動作するセル構造を構築し、これを複数のカーネルに振り分ける(今回の実装で は8カーネル)ことで、空間並列性を向上させる。これらのカーネル間は MPI 並列のような 通信が必要となるが、Intel FPGA 向けの OpenCL 処理系に実装されている channel 機能を用い ることでこれを効率的に実装している。OpenARC は Intel FPGA 向けに実装されており、この channel 機能を OpenACC の拡張機能として用いることができる。マルチカーネル化した ARGOT コードのイメージを図に示す。ただし、現在の OpenARC は channel の標準的なデフ オルト設定のみをサポートしているため、この部分は MHOAT によるトランスレーションの 後で部分的なパッチを当て、問題を回避している。また、FPGA 上の reduction 演算でどうし てもパイプラインピッチが延びてしまう部分があり、こちらについては一部の関数を Verilog HDL で記述している。MHOAT はこのように部分的に低レベル言語記述されたコードも取り 扱うことができる。

これらの最適化の結果, MHOAT による ARGOT コード実装は, i) GPU のみによる CUDA 実装, ii) GPU のみによる OpenACC 実装, iii) GPU (CUDA)と FPGA (OpenCL)によるナイーブ な実装, i) GPU と FPGA を OpenACC で統一記述した MHOAT 実装, の中で最速であった。 特に, GPU 部分を OpenACC 実行したことで CUDA 実装よりも ARGOT 法の効率が良くなっ たことに加え, ART 法の OpenACC (MHOAT+OpenARC)による FPGA 実装が, 従来の OpenCL による実装とほぼ同じ速度で実行できたことが高速化につながった。図 3 にこれらの速度比 較を示す(問題サイズ: 32x32x32, GPU=NVIDIA V100, FPGA=Intel Stratix10)。

この結果により, MHOAT が OpenACC のみで実アプリケーションが記述でき, かつ CHARM コンセプトに基づく適材適所的な GPU と FPGA の割当により GPU だけの場合に比べ極めて 高性能(最大で 9.9 倍)を実現できることがわかった。

これらの研究成果は国際会議 International Workshop on HPC by Heterogeneous Hardware (H3) in ISC2023 で発表予定である。



図 3. MHOAT による ARGOT コードの GPU+FPGA 実装の性能評価

[2] FPGA 向け OpenACC コンパイラのための性能最適化

GPU・FPGA により協調計算を進めるに当たり、MHOAT では米国 ORNL で開発中の研究 用コンパイラ OpenARC を FPGA 向け OpenACC コンパイラとしてバックエンドに使用してい るが、今後の最適化やノード間並列化、さらに藤田らが中心に開発している FPGA 間通信シ ステム CIRCUS 等への対応を容易にするために、我々独自の FPGA をターゲットにした OpenACC コンパイラの開発を進めている。これは理化学研究所計算科学研究センターとの共 同研究で、ベースとなるプラットフォームとして、これまで共同開発してきた Omni Compiler のツールキットを利用する。また、Omni Compiler には過去に OpenACC と GPU 向け OpenCL に変換する実装が行われているため、これを利用して FPGA 向け実装を進めている。

令和4年度の研究では主として科学技術計算に出てくる典型的なベクトル処理(行列積、 ベクトル内積、リダクション等)をFPGAの高位合成によって記述・コンパイルする際の最 適化について予備評価した。Omni CompilerによってOpenACCコードをOpenCL化するので、 その出力すべき OpenCL コードのイメージを Intel OpenCL SDK for FPGA でコンパイルし、実 機測定して評価した。

FPGA は基本的にループ処理をパイプライン化するため、単一ループを処理しただけでは パイプラインが1つ生成されるだけで、クロック周期によって性能が頭打ちになってしまう。 そこで、複数のパイプラインの並列動作、すなわち空間並列性の増強によって性能を向上さ せる。単純なループであれば、unrolling を行うことで1ループ内に複数のデータ並列を記述 すればその数だけパイプラインが生成できる。しかし、FPGA の外付け DRAM は GPU 搭載 の HBM 等に比べバンド幅が低いため、無闇にパイプラインを増やしてもデータ転送がボト ルネックになる。そこで、FPGA チップ内に回路として実装される SRAM (Intel 用語では Block RAM=BRAM) を addressable cache として用い、バンド幅を増強する手法を試した。しかし、 Intel OpenCL コンパイラでは、BRAM のバンド幅を増強する手法を試した。しかし、 ると BRAM が複製され、そこにデータが分配されるという最適化が自動的に行われることが 判明した。このため、unroll 数が増えると性能は向上するが BRAM 容量が圧迫されるという トレードオフが存在する。典型的なベクトル加算処理において、ループの unroll 数と BRAM 容量、さらに回路合成時の動作周波数のパラメータサーチを行い、最適な組み合わせを検討 した。

単純なループ unrolling だけでは空間並列性の限界があり、BRAM を圧迫するだけでなく、 動作周波数も低下する傾向にあることがわかったので、さらにマルチカーネルによる空間並 列性の向上も検討した。複数の演算カーネルを同一 FPGA 上に並べ、非同期に並行動作させ ることで空間並列性を向上させる。これは、MPI による並列プロセス実行に似ており、デー タの共有も FPGA カーネル間で行う。Intel OpenCL SDK for FPGA は channel によるカーネル 間通信が提供されるため、カーネル間通信にこれを用いることで分散されたデータの共有時 のオーバヘッドが低減できる。

最終的にカーネル内のループ unrolling とマルチカーネルによる空間並列性の向上により、 演算性能がどの程度高まり、BRAM 容量や動作周波数とのトレードオフがどうなるかについ て総合的に評価するため、CG 法による疎行列連立一次方程式解法をベンチマークとして評価 した。結果を図に示す。行列サイズは 3000x3000、非零要素率は 4%で、FPGA ボードは Cygnus に搭載されているのと同じ Intel Stratix10 搭載の BittWare 520N を用いた。



図 4. ループ unrolling とマルチカーネルの併用による CG 法ベンチマーク性能評価

この評価では、マルチカーネルによる空間並列性向上は相対的に小さく、ループ unrolling による効果はカーネル数が増えると減少するという結果になった。ループ unrolling はカーネ ル数が1の時に最も効果的で、unroll 数にほぼ比例して性能が向上した。丸カーネルに効果が なかった理由の一つは、カーネル数の増加に伴い動作周波数が大きく低下したことにある。 一方、unroll 数を増やした時に BRAM 使用率が大きく増えてしまうことは確認された。そこ で、トレードオフの関係の指標として、BRAM 使用率 1%当たりの性能を比較してみた。結果 を図に示す。結果から、やはりマルチカーネルは BRAM 使用率を抑えるためには効果的であ り、BRAM 使用率当たりの最高性能はカーネル数 2、unroll 数 4 の場合に得られた。今後の OpenACC からの OpenCL カーネル生成において、これらの知見を自動最適化に組み入れる検 討を進める。また、CG 法のような典型的処理だけでなく、より複雑な演算における空間並列 性向上手法についても検討を進める予定である。

これらの研究結果は情報処理学会 HPC 研究会 2023-HPC-188(22)において発表された。



図 5. マルチカーネルとループ unroll の併用時の BRAM 使用率 1%当たりの性能

[3] 数論変換の並列化(高橋)

高速 Fourier 変換(fast Fourier transform、以下 FFT)は、現在科学技術計算において広く用いられているアルゴリズムである。FFT は複素数や実数を用いて計算されることが多いが、 これらの変換は環や体でも計算できることが知られている。このような変換は、数論変換

(number-theoretic transform、以下 NTT) と呼ばれる。NTT は準同型暗号、多項式乗算、多倍 長精度乗算などに利用されている。本研究では、Arm Scalable Vector Extension (SVE) 命令を 用いて NTT カーネルをベクトル化すると共に、MPI と OpenMP を用いて NTT を並列化して 性能評価を行った。

 $n \leq \text{NTT}$ は $\mathbf{F}_p = \mathbf{Z}/p\mathbf{Z}$ (pは素数) において以下のように表すことができる。

$$y(k) = \sum_{j=0}^{n-1} x(j) \omega_n^{jk} \mod p, \qquad 0 \le k \le n-1$$

ここで、 ω_n は1の原始n乗根である。

n点 NTT を直接計算するとO(n²)の演算回数を必要とするが、FFT と同様のアルゴリズムを 適用することで、演算回数をO(n log n)に削減することが可能である。Out-of-place FFT アルゴ リズムとして知られる Stockham FFT アルゴリズムを基数 2 の NTT に適用したアルゴリズム を図に示す。

Algorithm 1 Stockham radix-2 NTT algorithm **Input:** $n = 2^q$, $X_0(j) = x(j)$, $0 \le j \le n-1$, and ω_n is the primitive *n*-th root of unity. **Output:** $y(k) = X_q(k) = \sum_{i=0}^{n-1} x(i) \omega_n^{jk} \mod p, \ 0 \le k \le n-1$ 1: $l \leftarrow n/2$ 2: $m \leftarrow 1$ 3: for t from 1 to q do 4: for j from 0 to l - 1 do for k from 0 to m-1 do 5: $c_0 \leftarrow X_{t-1}(k+jm)$ 6: 7: $c_1 \leftarrow X_{t-1}(k+jm+lm)$ 8: $X_t(k+2jm) \leftarrow (c_0+c_1) \mod p$ $X_t(k+2jm+m) \leftarrow \omega_n^{jm}(c_0-c_1) \mod p$ 9: 10: end for 11: end for 12: $l \leftarrow l/2$ 13: $m \leftarrow 2m$ 14: end for

図 6. 基数 2 の Stockham NTT アルゴリズム

図のアルゴリズムの8行目と9行目には、剰余加算、剰余減算、剰余乗算が含まれている。 $0 \le a, b < N$ の場合の剰余加算 $c = (a + b) \mod N$ は、加算c = a + bと、 $c \ge N$ の場合の条件付 き減算c - Nに置き換えることができる。剰余乗算は Montgomery 乗算や Shoup 乗算を用いる ことで時間の掛かる除算を実質的に行うことなく、乗算、加減算およびシフト演算のみで行 えることが知られている。Shoup 乗算アルゴリズムを図に示す。図のアルゴリズムにおいて、 β が2のべき乗であるとき、1行目の $AB \epsilon \beta$ で割った切り捨て商は右シフトにより、2行目の $(AB - qN)\epsilon\beta$ で割った余りはビットマスクにより計算することができる。

Algorithm 2 Shoup's modular multiplication algorithm

Input: A, B, N such that $0 \le A, B < N, N < \beta/2$ precomputed $B' = \lfloor B\beta/N \rfloor$ Output: $C = AB \mod N$ 1: $q \leftarrow \lfloor AB'/\beta \rfloor$ 2: $C \leftarrow (AB - qN) \mod \beta$ 3: if $C \ge N$ then 4: $C \leftarrow C - N$ 5: return C.

図 7. Shoup 乗算アルゴリズム

n点 NTT において $n = n_1 \times n_2$ と分解できる場合には、six-step FFT アルゴリズムと呼ばれる 手法を NTT に適用することができる。Six-step NTT アルゴリズムは以下のようになる。

Step 1: $n_1 \times n_2$ 行列を $n_2 \times n_1$ 行列に転置

Step 2: n_1 組の n_2 点 multicolumn NTT
Step 3: ひねり係数 $(\omega_n^{j_1k_2})$ のmod pでの剰余乗算

Step 4: $n_2 \times n_1$ 行列を $n_1 \times n_2$ 行列に転置

Step 5: n_2 組の n_1 点 multicolumn NTT

Step 6: $n_1 \times n_2$ 行列を $n_2 \times n_1$ 行列に転置

ここで、Step 1、4 および 6 における行列の転置は MPI の全対全通信(MPI_Alltoall)を用 いて実装することができる。また、複数の Shoup 乗算を Arm SVE 命令を用いて SIMD 化を行 うとともに、Step 2、5 の multicolumn NTT に対して MPI と OpenMP を用いて並列化を行っ た。

性能評価として、63 ビットの modulus を持つ six-step NTT の実装の性能を Fujitsu PRIMEHPC FX1000 で測定した。各 MPI プロセスは 12 コア 12 スレッド、つまり 1 ノードあたり 4MPI プロセスを用いている。



図 8. 並列 NTT の性能 (Fujitsu PRIMEHPC FX1000、4 MPI /ノード、N = 2²⁶×MPI プロセス 数)

図は、並列NTTの性能を示している。MPIプロセス数を4から8に増やしたときの性能向上が小さいのは、ノード内で4つのMPIプロセスが通信しているからである。4096 MPIプロセスで2³⁸点NTTを計算した場合、実行時間の約80%が全対全通信で占められている。Fujitsu PRIME HPC FX1000 は、6次元トーラスネットワークである Tofu interconnect D を採用しているが、ノード数が増えると最大ホップ数も増え、全対全通信の通信バンド幅が小さくなる。性能評価の結果、提案する並列NTTの実装は Fujitsu PRIMEHPC FX1000(1024 ノード、4096 MPI プロセス)において4831 Gopsの性能を示した。

[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 の設計を行ってきた。CHFS では、計算ノードのロ 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。Cygnus を用いて性能評価を行ったとこ ろ、ノード数を増加させると I/O バンド幅およびメタデータ性能が向上することが分かった。 また、BeeOND と GekkoFS との性能比較を行った。BeeOND ではノード数を増やしてもメタ データ性能はあまり向上しなかった。GekkoFS についてはノード数を増やすと性能は向上す るものの、CHFS のほうがメタデータ性能は 5.5 倍高かった。

CHFS は並列ファイルシステムとは別のファイルシステムであるため、利用者が並列ファ イルシステムとの間で必要なファイルのコピーを行う必要がある。この操作はステージング と呼ばれるが、しばしばファイルやディレクトリの指定誤りにより問題が起こる。この問題 を解決するため、CHFS にキャッシングファイルシステムの機能を追加するための設計を行 った。キャッシングファイルシステムは、並列ファイルシステムと同じ名前空間をもち、並 列ファイルシステムとの間のファイルコピーはシステムが自動的に行う。しかしながら、こ れまでキャッシングファイルシステムではメタデータ性能が低くなる問題があった。メタデ ータは並列ファイルシステムで管理するため、純粋にオーバヘッドが増えるためである。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キャッシ ングファイルシステムの間の一貫性を緩めることを考える。ここで以下の仮定をおいた。

1. 入力ファイルは、ジョブ実行中は変更されない

2. ジョブによるファイル、ディレクトリ作成は必ず成功する

3. 既存ファイルを更新するときにはその前に読込む

4. 並列ファイルシステムへの更新はジョブ終了時までに行われる

これらの仮定はバッチキューイングシステムを利用する場合,暗黙に行われている仮定で ある。ただし,実行状況等を実時間で知りたい場合はキャッシングファイルシステムを用い ず,並列ファイルシステムに直接書き込む必要がある。これらの仮定をおくと,並列ファイ ルシステムとの一貫性のチェックを大幅に削減することが可能となる。読込については,キ ャッシングファイルシステムになければ,並列ファイルシステムを参照する必要があるが, すでにキャッシングファイルシステムに存在すれば並列ファイルシステムを参照する必要は ない。書込みについては,キャッシングファイルシステムに書込み,並列ファイルシステム を参照する必要はない。これらの仮定のもと,CHFSにキャッシングファイルシステムの機能 を追加するため,メタデータにダーティフラグとキャッシュフラグを追加し,キャッシュ機 能,フラッシュ機能の設計を行った。



図 9. Cygnus 48 ノードにおけるメタデータ性能

図に Cygnus 48 ノードを用いた時のメタデータ性能の評価結果を示す。MD-E は各プロセス がそれぞれ異なるディレクトリに 0 バイトのファイルを作成,メタデータ取得,消去する操 作を表し、グラフは 1 秒あたりの操作数を示す。MD-H は各プロセスが同一のディレクトリ に 47.008 バイトのファイルを作成,メタデータ取得,参照,消去する操作である。FIND は作 成したファイルのなかから特定のファイルを検索する操作である。評価対象は、キャッシュ 機能を持たない CHFS,今回設計したキャッシュ機能を含む CHFS/Cache,キャッシュ 機能を持たない CHFS,今回設計したキャッシュ機能を含む CHFS/Cache,キャッシュ 機能を持たない BeeOND,並列ファイルシステム Lustre である。まず、CHFS と CHFS/Cache の比較 では FIND を除きほとんどメタデータ性能が変わっていないことが分かった。これにより, 当初の目的であるキャッシングファイルシステムにおけるメタデータ性能の低下が解決した。 また,BeeOND との比較により、CHFS/Cache の性能が高いことが分かった。Lustre との比較 により、CHFS/Cache を用いることにより Lustre の性能を大幅に改善可能であることが分かっ た。これらの成果は、国際ワークショップ ESSA において発表した。今後、さまざまなアプ リケーションベンチマークによる評価により研究開発を進め、Pegasus 等のスーパコンピュー タに導入する予定である。

[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 共用ストレージにおいて, ネットワークトラヒックが高くなるとネットワークの性能 が落ち, 接続が切断される状況が続いていた。本件については, ネットワークの調査を進め るとともに, Gfarm のパラメータの調整により対応を進めた。具体的には, ネットワークが切 断される頻度が高く, 3 PB/月のペースで書き込まれるデータの東西拠点間の複製作成が間に 合わない状態であった。そのため, 並列作成の並列度を 400 から 1,000 に上げる対応を行っ た。並列度を上げた状態で、状況を観察したところ、ネットワークエラーがさらに増えるこ とはなく、複製作成が間に合うようになった。今回は Gfarm のパラメータ調整により解決し たが、引き続きネットワークの調査は必要となる。

また、クラウドストレージのオープンソースプラットフォームとして普及している Nextcloud に対し、外部ストレージとして Gfarm を利用可能とする開発を進めた。これにより Nextcloud の使いやすいインターフェースを用いて、Gfarm のアクセスが可能となる。開発に おいて問題となるのはユーザ証明書をどのように取得するかであるが、ここについては myproxy サーバから証明書を取得することで解決を図った。また、証明書の有効期限が切れ た場合は自動的に myproxy サーバから証明書を取得しなおす機能も追加し、myproxy サーバ の証明書を更新し続けることにより、Nextcloud から切れ目のないアクセスを続けることが可 能となった。本システムは <u>https://github.com/oss-tsukuba/nextcloud-gfarm</u>において公開すると ともに、筑波大学のスーパコンピュータ Pegasus システムにも導入され、実運用されている。

GSIのサポート終了に伴う次期セキュリティ対応として,OAuth2のトークンを用いた認 証を行うための設計,開発を進めた。昨年度の開発においては、トークンの有効性検証に Keycloak サーバを利用していたが、その方式ではユーザ数、地理的分散に対しスケーラブル ではないため Gfarm サーバにおいて有効性検証を行うよう設計,開発を行った。また、トー クンの有効期限は短く,自動更新が必須となる。その仕組みとして jwt-agent の設計を進めた。 jwt-agent はオープンソースで開発が進められている oidc-agent と同等の機能を持ち、トーク ンの更新を行うが、oidc-agent は更新のためリフレッシュトークンも保持するのに対し、jwtagent ではそのトークンは保持しない。リフレッシュトークンは jwt-server が暗号化した形で 保持し、セキュリティリスクを軽減することができる。jwt-agent は <u>https://github.com/oss-</u> tsukuba/jwt-agent において公開している。

[6] DO CONCURRENT による OpenSWPC の GPU 化(額田)

既存の CPU 向けアプリケーションを GPU で高速化するためには基本的に GPU 用にプログ ラムを修正する必要がある。この修正は単純作業ではなく、ある程度の GPU に関する基礎知 識を持っていなければならないが、使用する言語によってその負担は大きく変動する。CUDA、 OpenCL、hip のような言語を使用すれば GPU の細粒度並列実行など全ての機能を活用するこ とができ、より広範な計算の高速化が可能となる一方で、プログラムを大幅に修正する必要 がある。OpenACC や OpenMP target はよりハードルが低く、既存の CPU 用コードに指示詞 (ディレクティブ)を挿入することで GPU 用コードを生成するため、一つのコードで CPU 用と GPU 用の両方に使用できコード管理も容易である。近年新たに追加された方法に DO CONCURRENT というものがある。これは Fortran 2008 で追加された標準並列化構文で、 NVIDIA のコンパイラがこのループ部分について GPU コードを生成することができる。コン パイラオプションの切り替えによって CPU 用と GPU 用の両方のバイナリを生成できること になる。さらに DO CONCURRENT は既存の DO ループに非常に近い構文であるため GPU 用 のプログラムを作成するために必要な知識が非常に少ないという利点がある。そこで地震波 の伝播シミュレーションコード OpenSWPC を対象に、アプリケーション全体を DO CONCURRENT を用いて GPU 化した。OpenSWPC は OpenMP+MPI のハイブリッド並列化で 実装されており、既に多くの CPU ベースのシステムで動作実績がある。OpenMP で並列化さ れている多くの DO ループの内、GPU で実行させるループについて DO CONCURRENT に書 き換える。OpenSWPC の場合は時間ステップに関するメインループの内側が対象となる。

OpenSWPC は3次元シミュレーションであり、各次元方向のループで構成される3重ルー プが多い。CPU 向けの OpenMP 並列化では一番外側のループのみ並列化を行っている。CPU のコア数はそれほど多くないためこれで十分であるが、GPU の場合はけた違いのコア数とな るため3重ループをまとめて並列化する必要がある。

DO CONCURRENT は関数呼び出しについて pure function に限定するという Fortran 2008 の 制約があり、さらに GPU 用のコード生成を行う場合には一切の関数呼び出しができないとい うコンパイラの実装による制限がある。このため関数をインライン展開する必要がある。 OpenSWPC には2種類の関数呼び出しがあるが、一方は完全にインライン展開を行い、もう 一方はマクロ展開で対応した。この辺りは今後のコンパイラの対応に期待したい。

DO CONCURRENT (I=1:N) X(I)=V(I)*V(I) END DO

GPU プログラムを煩雑にしている要因の一つは CPU のメモリの他に GPU が専用の高速メ モリを搭載していることであり、GPU 側の計算で必要なデータを適宜転送する必要がある。 DO CONCURRENT では言語としてこの転送を記載する必要がなく、また指定することも不 可能である。上記のような DO CONCURRENT ループではループ内で使用されている変数に ついて必要な転送を行うコードがコンパイラによって生成される。X(1:N)、V(1:N)などの配列 が使用されているが、これらが動的に確保された ALLOCATABLE 変数であれば GPU 用コー ドの場合に Unified Memory という CPU メモリと GPU メモリの間をオンデマンドにページ単 位で移動する種類のメモリとして確保される。これは CPU からも GPU からもアクセス可能 であり、GPU からのみアクセスを続けることによって GPU メモリ上にある状況を保つこと ができる。一方で ALLOCATABLE ではない固定長などの配列である場合には CPU メモリと して確保され、DO CONCURRENT ループに入るたびにデータの転送が行われ、この転送がボ トルネックとなりやすいため ALLOCATABLE 変数に変更する。 CPU・GPU間転送を減らすために不可欠な Unified Memory であるが、一方で問題点もある。 MPI でノード間データ転送を行う場合にその送受信バッファが Unified Memory の場合に通信 性能が低下する。CPU と GPU の間をオンデマンドに移動してしまうメモリ領域であるため ネットワークデバイスに転送操作をオフロードさせることができず、一度 CPU メモリ上のバ ッファを経由するという実装になる。特に GPU 間で直接通信する GPUDirect RDMA と比較 すると通信性能の低下は著しい。

real,device,allocatable :: sbuf(:)

!\$acc data deviceptr(sbuf)
do concurrent (k=kbeg:kend)
 sbuf(k) = vx(k)
end do
!\$acc end data
call MPI_Isend(sbuf,...)

この問題を回避する方法は現状 DO CONCURRENT の機能だけでは不可能であるため、上 記のように CUDA Fortran と OpenACC の機能と利用する。まず通信バッファについて CUDA Fortran の機能で device 属性を付加する。これによって allocate で確保した際に Device Memory だけが確保される。次のループでこの送信用バッファにデータを書き込んでいるが、ここで sbuf がデバイス側のアドレスになっていることを伝えるために OpenACC の data ディレクテ ィブを使用している。MPI_Isend ではそのまま sbuf を渡しているが、CUDA-aware の MPI ラ イブラリは関数内で自動的にデバイス側のアドレスであることを判別して GPUDirect RDMA を使用する。



これまで述べた最適化を行った GPU コードを用いて性能評価を行った。データは関東エリ アを範囲とする小田原地震のシミュレーションを使った Strong Scaling の評価となる。Pegasus の最大 64 ノードを使用し、各ノードは NVIDIA H100 Tensor Core GPU と Intel Xeon Platinum 8468 (Sapphire Rapids, 48 コア)を1 基ずつ搭載する。kernel_*,absorb_*のメインのステンシル計 算部分は GPU 数の増加に従って短くなっている。global_comm_*の通信部分に関してはノー ド数の増加に従って通信方向が増えるため単調ではないが 16GPU 以上では短くなっていく。 比較用に CPU 用コードを 64 ノードで実行した場合を一番右に示しているが、8GPU に近い 実行時間となっており、1GPU が約 7CPU に相当する演算性能を達成していると考えられる。

[7] 鞍点型連立一次方程式に対する階層並列型数値解法の GPU による高速化(多田野)

鞍点型と呼ばれる連立一次方程式:

$\begin{bmatrix} A & B \\ C^{\mathrm{T}} & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{bmatrix}$

は構造解析,非圧縮流体解析,偏微分方程式に対するメッシュレス離散化法などで現れ,求 解高速化が必要とされている.ここで,Aは正則なn次疎行列,B,Cはn×m列フルランク 行列,Oはm次零行列であり,x,fはn次元ベクトル,y,gはm次元ベクトルである.鞍点 型連立一次方程式の問題サイズが大規模である場合は,クリロフ部分空間反復法などの反復 法による求解を余儀なくされる.しかしながら,行列B,Cの列数mが多い場合は,行列Aが 良条件であったとしてもクリロフ部分空間反復法の収束性が悪化し,求解に多くの反復回数 を要したり求解不能になることもある.我々はこの状況を打破するために,同方程式のブロ ック構造を利用した数値解法(以下,提案法)を開発した.提案法における計算の主要部は, 行列Aと複数の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式の求解である.この連立一次方程式の複 数右辺ベクトルは互いに依存関係がないため,少数の右辺ベクトルをもつ複数の連立一次方 程式に分割することができる.分割された複数の連立一次方程式は同時求解が可能であり, 各連立一次方程式も並列に求解可能であることから,提案法は階層型の並列性をもつ.本研 究では,提案法の高速化を図るために GPU を用いた実装を行い,その性能評価を行った.

以下では提案法について簡単に述べる. 鞍点型連立一次方程式の解ベクトル x, y は以下のように記述される.

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

ここで、行列 $U \ge (A - 1) + v \ge A^{-1}B$, $v \equiv A^{-1}f \ge E$ 義し、さらに $\hat{X} \equiv [U v]$, $\hat{B} \equiv [B f] \ge E$ 義することで、複数右辺ベクトルをもつ連立一次方程式 $A\hat{X} = \hat{B}$ が得られる. この連立一次方程式を解き解行列 \hat{X} を求めることにより、鞍点型連立一次方程式の解ベクト ルを計算することができる.この複数右辺連立一次方程式の係数行列はAであり、行列B, Cの列数 m の増加は係数行列には影響を及ぼさない.そのため、複数右辺連立一次方程式は鞍 点型連立一次方程式よりも収束性の観点から反復法での求解が容易である.なお、この複数 右辺連立一次方程式の求解部分が提案法の主要計算部となる.この部分を高速化することに より、提案法の高速化も可能となる.

次に,提案法の並列化と GPU 化について述べる.複数右辺連立一次方程式 $A\hat{X} = \hat{B}$ の右辺 行列 \hat{B} を構成する列ベクトルは互いに依存関係がないため,分割が可能である.これらを分 割して得られた複数の連立一次方程式は同時求解が可能であり,分割された各連立一次方程 式も並列求解が可能である.よって,提案法は階層型の並列性をもつ.行列 $\hat{X} \ge \hat{B}$ を

 $\hat{X} = [\hat{X}^{(0)}, \hat{X}^{(1)}, \dots, \hat{X}^{(P-1)}], \hat{B} = [\hat{B}^{(0)}, \hat{B}^{(1)}, \dots, \hat{B}^{(P-1)}]$

と分割する. ここで, Pは MPI プロセス数とし, $\hat{X}^{(j)}, \hat{B}^{(j)}$ (j = 0, 1, ..., P - 1) は $n \times s$ 行列で ある. 但し, $s \equiv (m+1)/P$ である(簡単のため, m+1はPで割り切れるとする). このよ うに分割することにより, P個の複数右辺連立一次方程式が得られる.

$$A\hat{X}^{(j)} = \hat{B}^{(j)}, j = 0, 1, \dots, P - 1.$$

実装の方針として、第 *j* 番目の連立一次方程式 $A\hat{X}^{(j)} = \hat{B}^{(j)}$ に対して、第 *j* 番目の MPI プロセスを割り当てる.また、各 MPI プロセスに対して GPU を 1 基割り当て、GPU で複数右辺連立一次方程式の求解を行う.なお、複数右辺連立一次方程式の求解には、ブロッククリロフ部分空間反復法を適用する.ブロッククリロフ部分空間反復法の特長として、複数本の解ベクトルを同時に計算できること、及び右辺ベクトル数の増加に伴い反復回数が減少する傾向があることが挙げられる.ブロッククリロフ部分空間反復法で必要となる計算カーネルは、

1) 疎行列・密行列積 : Y = AX

2) ブロック AXPY 計算: Y = Xa

3) ブロック内積計算: β = X^TY

4) s 次係数行列とs 本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式の求解

である.ここで、Aはn次疎行列、X,Yは $n \times s$ 密行列、 α,β はs次密行列である.GPUにお けるこれらの計算の実行には、NVIDIA CUDA ライブラリを用いる.1)には cuSPARSE ライ ブラリの関数 cusparseSpMM を用いる.2),3)の計算には cuBLAS ライブラリの関数 cublasDgemmを用いる.また,4)には cuSOLVER ライブラリの関数 cusolverDnDgetrf、 及び cusolverDnDgetrs を用いる.GPUでの連立一次方程式の求解完了後に、得られた解 行列 $\hat{X}^{(j)}$ が host 側に転送される.その後、行列 $C \geq \hat{X}$ は行方向に分割され各 MPI プロセス に分散される.鞍点型連立一次方程式の解ベクトルの計算には、行列 $C^{T}U$ とベクトル $C^{T}v$ が 必要となるが、これらの部分和は各 GPU で計算され、MPI_Reduce により第 0MPI プロセス に縮約される.現時点の実装では、解ベクトルyを求めるための連立一次方程式の求解は第 0MPI プロセスの GPU でのみ行っている.同方程式の求解後、ベクトルyを全プロセスに送 信し、解ベクトルxを全プロセスの GPU で並列に計算する.

数値実験を通して提案法の性能評価を行う. テスト行列として,行列Aには SuiteSparse Matrix Collection で公開されている行列 atmosmodl (行列サイズ n: 1,489,752,非零要素数: 10,319,760)を用い,行列B,Cの列数mは3,000とした.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」を用いた.各計算ノードには,CPUとして Intel Xeon Gold 6126 (12 cores)が2基,GPUとして NVIDIA Tesla V100が4基搭載されている. コンパイラは nvfortran ver. 22.3.0, MPI ライブラリは OpenMPI ver. 4.1.2 を用いた.各計算ノードには GPUが4基搭載されているため,ノード内には MPI プロセスを4 つ立ち上げ,各 MPI プロセスに GPUを1基割り当てた.また,各 MPI プロセス内は OpenMP を用いて並列化を行い,OpenMP のスレッド数は6とした.各連立一次方程式の求解には,ブロッククリロフ部分空間反復法の1 つである Block GWBiCGSTABrQ 法を用いた.前処理法として近似逆行列前処理を用いた.前処理行列は全ての連立一次方程式で共通であるため,前処理行列は全計算ノードの CPU を用いて並列計算した.

図に計算ノード数 N の変化に対する鞍点型連立一次方程式の求解時間変化を示す.計算ノード内の MPI プロセス数は 4 であるため,全プロセス数は P = 4N となる.図(a)に示すよう に,CPU のみで計算を行った場合は,複数右辺連立一次方程式 $A\hat{X} = \hat{B}$ の求解時間が全体の 時間の大半を占めている.一方,図(b)に示すように,GPU を用いることで複数右辺連立一次 方程式の求解時間を大幅に短縮することができ,それに伴い鞍点型連立一次方程式の求解も 高速化することができた.特に N = 4 の場合は GPU を用いることにより,鞍点型連立一次方程式の求解時間が CPU 版と比較して約 12 倍高速になった.以上より,提案法は GPU を搭載 した並列計算環境に対しても高い親和性があることが確認された.



(a) CPU のみで計算した場合(挿入図は 0~170 秒の拡大図)



(b) GPU を用いた場合(挿入図は 0~72 秒の拡大図)

図 10. 計算ノード数 Nの変化に対する鞍点型連立一次方程式の求解時間の変化

[8] GPU・FPGA 複合型演算加速クラスタを用いた宇宙輻射輸送コード ARGOT の多ノー ド並列化 (小林,藤田,朴)

高い演算性能とメモリバンド幅を有する GPU (Graphics Processing Unit) に演算通信性能に 優れている FPGA (Field Programmable Gate Array) を連携させ、双方を相補的に利用する GPU-FPGA 複合システムに関する研究を推進している. そのターゲットアプリケーションである 宇宙輻射輸送コード ARGOT の演算加速は、GPU と FPGA の両方を搭載した 1 つのノード を使用し、1 つの CPU プロセスが GPU と FPGA でそれぞれ動作する CUDA と OpenCL カーネルを呼び出して制御することによって成されてきた.



図 11. GPU・FPGA 連携 ARGOT コードの多ノード並列化の概観

本研究では、その実装を MPI および FPGA 間通信技術である CIRCUS (Communication Integrated Reconfigurable CompUting System)を用いて複数ノードで動作するように拡張した. 図に GPU・FPGA 連携 ARGOT コードの多ノード並列化の概観を示す. すべての計算ノード に GPU と FPGA が搭載され、各ノードに割り当てられた MPI プロセスによって、両タイプ のデバイスが制御される. スーパーコンピュータ Cygnus を用いて実装する場合、ARGOT コード内で GPU が不得手とする演算カーネルである ART 法は光リンクで接続された FPGA 間 で並列実行され、残りの演算全ては MPI プログラミングモデルを用いて複数の GPU 上で並 列化される.



図 12. 弱スケーリングの条件における GPU 実装の ARGOT コードと GPU・FPGA 連携 ARGOT コー ドの性能比較

現在の FPGA 実装では, 問題サイズが 32³までしか扱えないため, 1 ノードあたり 32³の問 題サイズを割り当て, 弱スケーリングの条件で GPU 実装の ARGOT コードと GPU・FPGA 連 携 ARGOT コードの性能を比較した. 図に評価結果を示す. なお, 今回の評価では, 最大2ノ ードを使用し、2 つのノードにおける問題サイズの合計は 64×32×32 とした.1 ノードにお ける ARGOT コードの性能にまず着目すると, GPU 実装では ART 法の実行時間が ARGOT コ ード全体において支配的であることが分かる. その ART 法を FPGA にオフロードすることに よって, ARGOT コードの実行時間は 0.89 秒から 0.13 秒に短縮され, GPU のみの実行に比べ て 6.8 倍の高速化を達成した. これは FPGA に実装された ART アクセラレータは、パイプラ イン並列および空間並列性を活用して、ART 法の実効性能を最大化しているためである.そ して、ARGOT コードを2ノードで実行すると、GPU 実装の場合は並列 ART 法の MPI 通信 に要する時間が ARGOT コードの総実行時間の半分を占めていることが分かる.一方、ART 法を2ノードのマルチ FPGA で実行した場合は、オーバーヘッドを殆ど生じさせずにその通 信処理を実行でき,その結果 ARGOT コードの実行時間は 0.16 秒に短縮されている.これは, 通信と計算を融合したパイプラインが CIRCUS によって構築されたことにより、すべての ART 演算と両ノードの FPGA における FPGA 間通信は完全に同時に実行され、パイプライン が充填されれば、64×32×32の問題サイズを対象とした ART 法はほぼ 100%の効率で実行さ れるためである. つまり, 2 ノード実行によって得られた 12.8 倍の性能向上は, ART 法の演 算実効性能の最大化に,細粒度データ転送の効率化の効果が上乗せされたものである.ただ し,2つのノードの結果には最大10⁻¹の相対誤差があり,その原因については現在調査中であ る.

[9] 並列 FPGA 環境における集団通信に関する研究(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、CIRCUS は1対1の通信しかサポートしておらず、MPI (Message Passing Interface) がサポートしているような HPC アプリケーションで広く利用されている集団通信は実装さ れていない. CIRCUS を使った高性能計算 FPGA アプリケーションを実装することを考える と、このような集団通信の機能なしに実装することは難しく、CIRCUS の集団通信対応が強 く求められる.本研究では、集団通信の一つである Allreduce の実装と性能評価を行う. Allreduce は反復法の収束判定や機械学習で用いられており、重要な集団通信の一つである.

CIRCUS における Allreduce 通信は、木構造を用いるアルゴリズムを用いて実装する.図(左) にあるように、Reduce カーネルと Broadcast カーネルを FPGA 上に実装する. Reduce カーネ ルは、葉にあたる FPGA からデータを集約し、根にある FPGA に送るカーネルである. Boardcast カーネルは Allreduce 計算結果を全ての FPGA に木構造に従って配るカーネルである.図(右) に性能評価の結果を示す.最大で 64.6Gbps の性能が得られた.最大で 100Gbps の通信が行え ることを考えると,この性能は十分であるとは言い難い.現状,64KB までしか性能を計測出 来ておらず,メッセージ長が短いことが性能低下の原因の一つであると考えられる.しかし ながら,CIRCUS はフロー制御がなく,少量ある受信バッファがあふれるとデータが消失し てしまう.そのため,メッセージ長を長くすると Allreduce 通信が安定しないという問題を抱 えている.加えて,この問題を緩和するために追加している処理に由来するオーバーヘッド があり,性能を制限していることが明らかとなった.フロー制御がないため,必ず受信を担 当するカーネルが先に起動するように制御して全体を実行する必要があり,本来ならば不要 な処理が含まれてしまう.

今後の課題として、フロー制御がないことを補うために、通信プロトコルの変更を検討し ている.現在の実装では、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.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.



図 13. (左) All reduce 実装の概要 (右) 性能評価結果

[10] HBM2 搭載 FPGA における高性能計算向けメモリシステムに関する研究(藤田、小林、朴)

近年 FPGA ベンダーより広帯域なメモリである High Bandwidth Memory 2(HBM2)が搭載 されている FPGA ボードがリリースされつつある. Intel FPGA においては, HBM2 を用いる ことで最大 512GB/s の外部メモリ帯域を利用できる. HBM2 は比較的低速のメモリを多数束 ねたアーキテクチャであり,全てのメモリチャンネルに同時アクセスしなければ,その高い 理論ピーク性能を得ることが出来ない. HBM2 は他の演算加速装置でも利用されており,特 に高性能な Graphics Processing Unit (GPU) に搭載されている. GPU においては,高性能なキ ャッシュや内部メモリネットワークを土台として,多数のコアによる並列アクセスが行われ, HBM2 の高い性能を引き出している.しかしながら,FPGA には HBM2 を扱うためのそのような(固定機能としての)専用メモリシステムが実装されていない.このようなメモリシステムを用いず,複雑なメモリアクセスを行うことが一般的である HPC アプリケーションを実装することは困難であり,HBM2 搭載 FPGA 向けかつ HPC アプリケーション向けメモリシステムが求められている.これらのシステムは,再構成可能な回路要素を用いて FPGA 内に実装しなければならない.

本研究では、この問題を解決するために、HBM2 搭載 FPGA 向けかつ HPC アプリケーショ ン向けメモリシステムの提案と実装を行う.提案するシステムは図 14(左)にあるように 2 つの主要コンポーネントから構成される.メモリアクセスの柔軟性を担保し複数のメモリチ ャンネルを効率よく扱うためのクロスバと、FPGA に内蔵されているメモリ(Block RAM: BRAM)を用いるキャッシュ(Addressable Cache)から構成される.また、アプリケーション の開発には、ソフトウェアで用いられている C 言語や C++言語を用いて FPGA ハードウェア を開発できる高位合成(High-Level Synthesis: HLS)を前提として設計を行っている.

HBM2 とキャッシュ間データ転送は Direct Memory Access Controller (DMAC)を用いて行われる. そして, DMAC の制御は, RISC-V をベースに簡略化した独自プロセッサを用いて制御する. どこのデータをどこにいつ転送するかは, RISC-V 命令を用いたソフトウェアとして表される. このような設計方式を採用することにより,専用設計のハードウェアがもつ高い性能と,ソフトウェアが持つ高い柔軟性を両立できる. また,異なるアプリケーションに本システムを適用する際でも,メモリシステムは同じ設計を使い回すことができる.

図(右)に性能評価の結果を示す.最大で102GB/sの性能が得られた.本実験では8チャ ネル分の実装を行っており,理論ピーク性能は102.4GB/sであるため,期待通り動作してい ることがわかる.今後の課題としては,FPGAがもつ全チャンネル(32)に対する実装を行う ことと,実際のアプリケーションで性能評価を行うことがあげられる.全チャンネル実装に 対しては,クロスバがボトルネックとなり動作周波数が維持できないことが問題であること がわかっており,多段ネットワークなど複雑度が対数オーダーとなるネットワークを用いる ことでこの問題を解決できないか検討を進めている.



図 14. (左)提案システムの概要図。(右)バンド幅性能評価結果

4. 教育

- 枝松拓弥,博士(工学), A Study of High Performance Multiple-Precision Integer Multiplication and Division Using SIMD Instructions (SIMD 命令による高性能な多倍長 整数の乗算と除算についての研究),筑波大学大学院理工情報生命学術院システム 情報工学研究群博士論文,令和5年3月(指導:高橋大介)
- 菊池航平,修士(工学),並列 FPGA 環境における集団通信に関する研究,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5年3月(指導: 朴泰祐)
- Nam Woon,修士(工学),四元数に基づくヒューマノイドアニメーションの深層学習の比較と評価,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5年3月(指導:高橋大介)
- 大滝恒輝,修士(工学),銀河形成向け流体力学シミュレーションのGPU実装と性能評価,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5年3月(指導:高橋大介)
- 5. 巨畠和樹,修士(工学),HPCにおける一時ストレージとその応用に関する研究, 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5年3 月(指導:建部修見)
- 6. 笠井大暉,修士(工学),ノードローカルストレージを利用する一時分散キャッシュ ファイルシステムの設計と実装,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5年3月(指導:建部修見)

- 立木 佑弥,修士(工学),遊休 GPU を利用したホスト・デバイス間通信の高速化, 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5年3 月(指導:額田彰)
- 8. 菅沼夏樹,修士(工学),多数の右辺ベクトルを持つ連立一次方程式に対する反復解 法の高速化に関する研究,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5年3月(指導:多田野寛人)
- 9. 市塚勇正,学士(情報工学),数独パズルにおける複数解の個数計算,筑波大学情報 学群情報科学類卒業論文,令和5年3月(指導:高橋大介)
- 10. 鈴木貴裕,学士(情報工学), reduced-radix 表現の Toom-Cook 乗算への適用, 筑波 大学情報学群情報科学類卒業論文,令和5年3月(指導:高橋大介)
- 11. 長橋朋也,学士(情報科学),スライドパズルにおけるゼロ認識パターンデータベースの OpenMP を用いた並列構築,筑波大学情報学群情報科学類卒業論文,令和5年3月(指導:高橋大介)
- 12. 丸山泰史,学士(情報工学),差分プライバシー保証のための汎用プログラミングフレームワークの設計,筑波大学情報学群情報科学類卒業論文,令和5年3月(指導: 建部修見)
- 13. 伊能一翔,学士(情報工学),GPU による行列積計算を対象とする自動チューニン グの研究,筑波大学情報学群情報科学類卒業論文,令和5年3月(指導:額田彰)
- 14. 関拓己,学士(情報科学),総和計算による GPU の性能解析,筑波大学情報学群情 報科学類卒業論文,令和5年3月(指導:額田彰)
- 15. 齋藤颯人,学士(情報工学),Group-wise 更新付き Block Krylov 部分空間反復法に おける漸化式の可変的グループ化による性能改善,筑波大学情報学群情報科学類卒 業論文,令和5年3月(指導:多田野寛人)
- 16. 北爪開人,学士(情報工学),高性能並列 FPGA 環境における通信高度化に関する 研究,筑波大学情報学群情報科学類卒業論文,令和5年3月(指導:藤田典久,朴泰 祐,小林諒平)

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

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(R4 年度), 「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 (C), 高橋大介(代表), R4~R6 年度, 1,170 千円(R4 年度), 「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」

- 3. 文部科学省委託研究,高橋大介(分担),R4年度,4,000千円,次世代計算基盤に係 る調査研究
- 4. 科学研究費基盤研究(A),建部修見(代表),R4~R8年度,7,250千円,次世代ストレージアーキテクチャの研究
- 5. 文部科学省委託研究,建部修見(分担),R4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)
- 6. NEDO, 建部修見(分担), H30~R4 年度, 6,128 千円, 実社会の事象をリアルタイ ム処理可能な次世代データ処理基盤技術の研究開発
- 科学研究費補助金基盤研究 (C),多田野寛人(代表),R2~R4 年度,1,040 千円(R4 年度),「鞍点型連立一次方程式に対する階層並列型高速数値解法の開発」
- 科学研究費補助金若手研究,小林諒平(代表),2022~2024 年度,3,250 千円(2022 年度),「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

- Riadh Ben Abdelhamid, Yoshiki Yamaguchi, Taisuke Boku, "A scalable many-core overlay architecture on an HBM2-enabled multi-die FPGA", ACM Transactions on Reconfigurable Technology and Systems, Vol. 16, Issue 1, No:15, pp. 1-33, June 2022.
- Taisuke Boku, Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Osamu Tatebe, "Cygnus World First Multihybrid Accelerated Cluster with GPU and FPGA Coupling", Proc. of Int. Workshop on Deployment and Use of Accelerators (DUAC2022), Aug. 2022.
- Takuya Edamatsu and Daisuke Takahashi, "Fast Multiple-Precision Integer Division Using Intel AVX-512", IEEE Transactions on Emerging Topics in Computing, Vol. 11, No. 1, pp. 224-236, 2023.
- Daisuke Takahashi, "On the use of Montgomery multiplication in the computation of binary BBP-type formulas for mathematical constants", The Ramanujan Journal, Vol. 59, No. 1, pp. 211-219, 2022.
- Yukimasa Sugizaki and Daisuke Takahashi, "A Fast Algorithm for Computing the Number of Magic Series", Annals of Combinatorics, Vol. 26, No. 2, pp. 511-532, 2022.
- Takuya Edamatsu and Daisuke Takahashi, "Efficient Large Integer Multiplication with Arm SVE Instructions", Proc. International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2023), pp. 9-17, 2023.

- Daisuke Takahashi, "An Implementation of Parallel Number-Theoretic Transform Using Intel AVX-512 Instructions", Proc. 24th International Workshop on Computer Algebra in Scientific Computing (CASC 2022), Lecture Notes in Computer Science, Vol. 13366, pp. 318-332, Springer, 2022.
- Osamu Tatebe, Hiroki Ohtsuji, "Caching Support for CHFS Node-local Persistent Memory File System", Proceedings of 3rd Workshop on Extreme-Scale Storage and Analysis (ESSA 2022), pp.1103-1110, 10.1109/IPDPSW55747.2022.00182, 2022
- Sohei Koyama, Osamu Tatebe, "Scalable Data Parallel Distributed Training for Graph Neural Networks", Proceedings of Workshop on AI for Datacenter Optimization (ADOPT'22), pp.699-707, 10.1109/IPDPSW55747.2022.00121, 2022
- Yuya Tatsugi, Akira Nukada, "Accelerating Data Transfer between Host and Device using Idle GPU", GPGPU '22: Proceedings of the 14th Workshop on General Purpose Processing Using GPU, Article No. 2, pp. 1-6, ACM, New York, Apr. 2022.
- Adrián P. Diéguez, Margarita Amor, Ramón Doallo, Akira Nukada, Satoshi Matsuoka. "Efficient High-Precision Integer Multiplication on the GPU", The International Journal of High Performance Computing Applications, SAGE Publications, vol. 36, no. 3, pp. 356-369, May 2022.
- Shota Ishikawa, Hiroto Tadano, and Ayumu Saitoh, "Application and performance evaluation of a method using block structures for saddle point problems appearing in image reconstruction problems", JSIAM Letters, Vol. 14, pp. 114-118, 2022.
- Hiroki Nakano, Hiroto Tadano, Norikazu Todoroki, and Toru Sakai, "The Haldane Gap of the S=1 Heisenberg Antiferromagnetic Chain", Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 91, No. 7, pp. 074701-1-074701-5, 2022.
- Hiroto Tadano, "Implementation of a hierarchical parallel solver for saddle point problems on a GPU cluster", Proc. of The 41st JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2022), pp. 220-223, 2022.
- 15. Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, Yoshiki Yamaguchi, Taisuke Boku, Kohji Yoshikawa, Makito Abe, and Masayuki Umemura, "Accelerating Radiative Transfer Simulation on NVIDIA GPUs with OpenACC", PDCAT 2022: Parallel and Distributed Computing, Applications and Technologies, Lecture Notes in Computer Science, vol 13798, pp.344-358, 2023-04.
- Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, Yoshiki Yamaguchi, Taisuke Boku, Kohji Yoshikawa, Makito Abe, Masayuki Umemura, "GPU–FPGA-accelerated Radiative Transfer Simulation

with Inter-FPGA Communication", In Proceedings of the International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia '23), pp.117–125, 2023-02.

- Yoshiyuki Morie, Yasutaka Wada, Ryohei Kobayashi, Ryuichi Sakamoto, "Data Transfer API and its Performance Model for Rank-Level Approximate Computing on HPC Systems", International Journal of Networking and Computing Vol.13, No.1, pp. 48-61, 2023-01.
- Kento Miura, Ryohei Kobayashi, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, Norihisa Fujita, Taisuke Boku, "An FPGA-based Accelerator for Regular Path Queries over Edge-labeled Graphs", 2022 IEEE International Conference on Big Data (Big Data), pp. 415-422, 2023-01.
- Taisuke Boku, Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Osamu Tatebe, "Cygnus World First Multihybrid Accelerated Cluster with GPU and FPGA Coupling", In Workshop Proceedings of the 51st International Conference on Parallel Processing (ICPP Workshops '22), Article 8, pp.1–8, 2023-01.
- Ryohei Kobayashi, Kento Miura, Norihisa Fujita, Taisuke Boku, Toshiyuki Amagasa, "An Open-source FPGA Library for Data Sorting", IPSJ Journal of Information Processing 30, pp.766-777, 2022-10.
- Yoshiyuki Morie, Yasutaka Wada, Ryohei Kobayashi, Ryuichi Sakamoto, "Performance Evaluation of Data Transfer API for Rank Level Approximate Computing on HPC Systems", 2022 IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium Workshops (IPDPSW), pp.445-448 2022-08.
- 22. Yuka Sano, Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, Taisuke Boku, "Performance Evaluation on GPU-FPGA Accelerated Computing Considering Interconnections between Accelerators", The Proceedings of the 12th International Symposium on Highly Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies (HEART 2022), pp.10-16 2022-06.
- 23. Kohei Kikuchi, Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Taisuke Boku, "Implementation and Performance Evaluation of Collective Communications Using CIRCUS on Multiple FPGAs", In proceedings of the International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific 2023 (HPC Asia '23), pp. 15-23, Feb. 2023. doi: https://doi.org/10.1145/3581576.3581602.
- Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Yoshiki Yamaguchi, Taisuke Boku, "Implementation and Performance Evaluation of Memory System using Addressable Cache for HPC Applications on HBM2 equipped FPGAs," Proceedings of 20th International Workshop for Algorithms, Models, and Tools for Parallel Computing on Heterogeneous Platforms (HeteroPar 2022), pp. 121-132, 2023. doi: https://doi.org/10.1007/978-3-031-31209-0_9.

- B) 査読無し論文
- 山口博將,高橋大介, "ルジャンドル予想の数値的検証",情報処理学会第85回全 国大会講演論文集,2 pages, 2023 年 3 月.
- 高橋大介, "数学定数に対する 2 進 BBP 型公式の計算における Montgomery 乗算の 使用について",日本応用数理学会 2022 年度年会講演予稿集, 2 pages, 2022 年 9 月.
- 3. 高橋大介, "Intel AVX-512IFMA 命令を用いた並列数論変換の実現と評価",日本応 用数理学会 2022 年度年会講演予稿集, 2 pages, 2022 年 9 月.
- 4. 巨畠和樹, 建部修見, 不揮発性メモリを用いた分散オブジェクトストレージの設計, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC), Vol. 2022-HPC-184, No.
 3, pp. 1-10, 2022 年 5 月.
- 5. 巨畠和樹,小山創平,平賀弘平,建部修見,HPC 環境を想定した探索的データ解析 におけるノードローカルストレージの利用の検討,研究報告ハイパフォーマンスコ ンピューティング(HPC), Vol. 2022-HPC-185, No. 19, pp. 1-8, 2022 年 7 月.
- 建部修見、CHFS アドホック並列分散ファイルシステムのアクセス性能の評価、研究 報告ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC), Vol. 2022-HPC-185, No. 31, pp. 1-6, 2022 年 7 月.
- 平賀弘平,建部修見,MPI-IO/CHFS:ノードローカル不揮発性メモリを活用するアドホック分散ファイルシステムのための MPI-IO 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. 2022-HPC-185, No. 33, pp. 1-9, 2022 年7月.
- 8. 笠井大暉, 建部修見, 分散キャッシュファイルシステムの設計と実装, 研究報告ハイ パフォーマンスコンピューティング(HPC), Vol. 2022-HPC-186, No. 6, pp. 1-6, 2022年9月.
- 9. 勢見達将,額田彰.「DO CONCURRENT 構文による OpenSWPC の GPU 化」,情報処理学会研究報告, Vol. 2023-HPC-188, No. 19, pp. 1-7, 2023 年 3 月.
- 10. 中野博生, 轟木義一, 多田野寛人, 坂井徹, "富岳を用いた量子スピン系の大規模並 列数値対角化計算の現状", 日本物理学会 2022 年秋季大会講演概要集, 1 page, 2022 年9月.
- 多田野寛人、"GPU クラスタにおける鞍点型連立一次方程式に対する階層並列型解 法の実装と性能評価",日本応用数理学会 2022 年度年会講演予稿集,2 pages, 2022 年 9月.
- 12. 菅沼夏樹,多田野寛人, "複数右辺連立一次方程式に対するブロック・グローバル混 合型反復法の構築と性能評価",日本応用数理学会 2022 年度年会講演予稿集,2 pages, 2022 年 9 月.

- 13. 溝谷祐大,小林諒平,藤田典久,朴泰祐,天笠俊之, "FPGA 間通信フレームワーク CIRCUS を利用した複数 FPGA によるグラフ幅優先探索の提案",第15回データエ 学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2023), 2a-7-5, 2023-03.
- 14. 佐野由佳,小林諒平,藤田典久,朴泰祐,佐藤三久,"FPGA 高位合成における演算性 能向上のための空間並列性記述に関する研究",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-188(22)/pp.1-10, 2023-03.
- 15. 小林諒平,藤田典久,山口佳樹,朴泰祐,吉川耕司,安部牧人,梅村雅之,"GPU・FPGA 複合型演算加速クラスタを用いた宇宙輻射輸送コード ARGOT の多ノード並列化", 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC) / 2022-HPC-185(1)/pp.1-6, 2022-07.
- 16. 瀬口知洋,中井榛希,山口佳樹,藤田典久,小林諒平,朴泰祐,"並列化に伴うデータ 空間の分割とそれによるアクセスパターンの変化がもたらすHBMの振る舞い調査", IEICE-CPSY2022-15, IEICE-122(133) pp.83-88 2022-07.
- 佐野由佳,小林諒平,藤田典久,朴泰祐,"ノードを跨いだ GPU・FPGA 複合型演算加速による宇宙物理シミュレーションの実装と評価",研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC)/2022-HPC-184(6)/pp.1-7, 2022-05.
- 菊池航平,藤田典久,小林諒平,朴泰祐,"並列 FPGA 環境における通信システム CIRCUS を用いた集団通信の実装と性能評価",研究報告ハイパフォーマンスコンピ ューティング(HPC),2022-HPC-187,8 pages,2022.
- 19. 佐野由佳,小林諒平,藤田典久,朴泰祐,佐藤三久,"FPGA 高位合成における演算性 能向上のための空間並列性記述に関する研究",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-188(22),10 pages,2023.

(2) 国際会議発表

A)招待講演

- Taisuke Boku, "How FPGA can compensate with High Performance Computing ?", Keynote, Int. Conf. FPT2022, Hong Kong, Dec. 2022.
- 2. Taisuke Boku, "Multi-Hetero Accelerated Computing Challenge toward Extreme Heterogeneity", Int. Workshop ExHET2022 (in PPoPP2022), on-line, Apr. 2022.
- 3. Taisuke Boku, "How FPGA can contribute to HPC ?", VLSI-DAT2022 Symposium, Taipei, Apr. 2022.
- Taisuke Boku, "HPC/BD/AI Supported by Big Memory Supercomputer", Int. Workshop EC2-2022, Warsaw, May 2022.

- Taisuke Boku, "Cygnus-BD: the Big Memory Supercomputer for HPC, Big Data and AI", 2022 MVAPICH Users Group Workshop, Columbus, Aug. 2022.
- Osamu Tatebe, "Persistent Memory Supercomputer Pegasus for Data-driven and AI-driven Science", IXPUG Workshop at HPC Asia 2023, Feb. 2023.
- Ryohei Kobayashi, "OpenACC-Enabled GPU-FPGA Accelerated Computing for Astrophysics Simulation", OpenACC and Hackathons Asia-Pacific Summit 2022, 2022-08-23.

B) 一般講演

- Taisuke Boku, "Cygnus World First Multihybrid Accelerated Cluster with GPU and FPGA Coupling", Proc. of Int. Workshop on Deployment and Use of Accelerators (DUAC2022), online, Aug. 2022.
- Daisuke Takahashi, "Implementation of Parallel Number-Theoretic Transform on Manycore Clusters", SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE23), Amsterdam, The Netherlands, Feb. 2023.
- Takuya Edamatsu and Daisuke Takahashi, "Efficient Large Integer Multiplication with Arm SVE Instructions", International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2023), Singapore, Feb. 2023.
- Daisuke Takahashi, "An Implementation of Parallel Number-Theoretic Transform Using Intel AVX-512 Instructions", 24th International Workshop on Computer Algebra in Scientific Computing (CASC 2022), Gebze, Turkey, (Virtual Conference), Aug. 2022.
- Osamu Tatebe, Hiroki Ohtsuji, "Caching Support for CHFS Node-local Persistent Memory File System", 3rd Workshop on Extreme-Scale Storage and Analysis (ESSA 2022), Virtual event, Jun. 2022.
- Sohei Koyama, Osamu Tatebe, "Scalable Data Parallel Distributed Training for Graph Neural Networks", Workshop on AI for Datacenter Optimization (ADOPT'22), Virtual event, May 2022.
- Tatsumasa Seimi, Akira Nukada, "GPU Acceleration of OpenSWPC using DO CONCURRENT", GPU Technology Conference 2023 Spring, Poster, Online, Mar. 2023.
- Hiroto Tadano, "Implementation of a hierarchical parallel solver for saddle point problems on a GPU cluster", The 41st JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2022), Virtual Conference, Sep. 2022.
- 9. Ryohei Kobayashi , Norihisa Fujita, Yoshiki Yamaguchi, Taisuke Boku, Kohji Yoshikawa, Makito Abe, Masayuki Umemura, "GPU–FPGA-accelerated Radiative Transfer Simulation

with Inter-FPGA Communication", HPC Asia '23: International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region, 2023-03.

- Kento Miura, Ryohei Kobayashi, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, Norihisa Fujita, Taisuke Boku, "An FPGA-based Accelerator for Regular Path Queries over Edge-labeled Graphs", 2022 IEEE International Conference on Big Data (Big Data), 2022-12.
- 11. Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, Yoshiki Yamaguchi, Taisuke Boku, Kohji Yoshikawa, Makito Abe, and Masayuki Umemura, "Accelerating Radiative Transfer Simulation on NVIDIA GPUs with OpenACC", PDCAT 2022: Parallel and Distributed Computing, Applications and Technologies, Lecture Notes in Computer Science, 2022-12.
- Yuka Sano, Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, Taisuke Boku, "Performance Evaluation on GPU-FPGA Accelerated Computing Considering Interconnections between Accelerators", HEART2022: International Symposium on Highly-Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies, 2022-06.
- Yoshiyuki Morie, Yasutaka Wada, Ryohei Kobayashi, Ryuichi Sakamoto, "Performance Evaluation of Data Transfer API for Rank Level Approximate Computing on HPC Systems", 24th Workshop on Advances in Parallel and Distributed Computational Models 2022-05.
- 14. Kohei Kikuchi, Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Taisuke Boku, "Implementation and Performance Evaluation of Collective Communications Using CIRCUS on Multiple FPGAs", the International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific 2023 (HPC Asia '23), Feb. 2023.
- 15. Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Yoshiki Yamaguchi, Taisuke Boku, "Implementation and Performance Evaluation of Memory System using Addressable Cache for HPC Applications on HBM2 equipped FPGAs," 20th International Workshop for Algorithms, Models, and Tools for Parallel Computing on Heterogeneous Platforms (HeteroPar 2022), Aug. 2022.
- (3) 国内学会·研究会発表
- A) 招待講演
- 1. 朴泰祐, "NVIDIA H100 を搭載した最新スーパーコンピュータ Pegasus が拓く HPC&AI", NVIDIA GTC2022 Japan, on-line, 2023 年 3 月.
- 朴泰祐, "GPU・FPGA 複合計算による次世代 HPC/AI 加速技術", PC クラスタワーク ショップ(FPGA), on-line, 2022 年 5 月.
- 朴泰祐, "oneAPI による GPU+FPGA マルチヘテロ環境プログラミングとアプリケーション実行", PC クラスタワークショップ(OSS Programming), 2022 年 4 月.

B)その他の発表

- 1. 山口博將,高橋大介, "ルジャンドル予想の数値的検証",情報処理学会第85回全国大会,東京,2023年3月.
- 高橋大介, "数学定数に対する 2 進 BBP 型公式の計算における Montgomery 乗算の 使用について",日本応用数理学会 2022 年度年会,オンライン開催,2022 年 9 月.
- 3. 高橋大介, "Intel AVX-512IFMA 命令を用いた並列数論変換の実現と評価",日本応 用数理学会 2022 年度年会,オンライン開催,2022 年 9 月.
- 4. 巨畠和樹, 建部修見, 不揮発性メモリを用いた分散オブジェクトストレージの設計, 情報処理学会 HPC 研究会, オンライン, 2022 年 5 月.
- 5. 巨畠和樹,小山創平,平賀弘平,建部修見,HPC 環境を想定した探索的データ解析 におけるノードローカルストレージの利用の検討,情報処理学会HPC研究会,下関, 2022 年 7 月.
- 6. 建部修見, CHFS アドホック並列分散ファイルシステムのアクセス性能の評価, 情報 処理学会 HPC 研究会, 下関, 2022 年 7 月.
- 平賀弘平,建部修見,MPI-IO/CHFS:ノードローカル不揮発性メモリを活用するアドホック分散ファイルシステムのための MPI-IO の設計.情報処理学会 HPC 研究会, 下関,2022年7月.
- 8. 笠井大暉, 建部修見, 分散キャッシュファイルシステムの設計と実装, 情報処理学会 HPC 研究会, 神戸, 2022 年 9 月.
- 建部修見, Gfarm ファイルシステムの最新機能, Gfarm/実用アプリ・シンポジウム, 2022 年 10 月.
- 10. 建部修見, Pegasus ビッグメモリスーパコンピュータではじまるこれからのデータ科 学・ビッグデータ AI, Gfarm/実用アプリ・シンポジウム, 2022 年 10 月.
- 11. 建部修見, Pegasus ビッグメモリスーパコンピュータではじまるこれからのデータ科 学・ビッグデータ AI, 第 22 回 PC クラスタシンポジウム, 2022 年 12 月.
- 12. 建部修見, Pegasus ビッグメモリスーパコンピュータではじまるこれからの HPC、ビ ッグデータ、超大規模 AI, JLUG 2022, 2022 年 12 月.
- 13. 建部修見, Gfarm ファイルシステムの最新機能, Gfarm ワークショップ, 2023 年 2 月.
- 14. 中野博生, 轟木義一, 多田野寛人, 坂井徹, "富岳を用いた量子スピン系の大規模並 列数値対角化計算の現状", 日本物理学会 2022 年秋季大会, 東京工業大学大岡山キ ャンパス, 2022 年9月.
- 15. 多田野寛人, "GPU クラスタにおける鞍点型連立一次方程式に対する階層並列型解 法の実装と性能評価",日本応用数理学会 2022 年度年会,オンライン,2022 年 9 月.

- 16. 菅沼夏樹,多田野寛人, "複数右辺連立一次方程式に対するブロック・グローバル混 合型反復法の構築と性能評価",日本応用数理学会 2022 年度年会,オンライン,2022 年9月.
- 17. 多田野寛人、"鞍点型連立一次方程式に対する階層並列型数値解法の GPU による高速化"、【非線形問題の高性能解法と可視化技術に関する研究会】2022 年度第1回研究会、日本大学津田沼キャンパス、2023 年3月.
- 第藤颯人,多田野寛人, "漸化式の可変的グループ化による Block GWBiCGSTAB 法 の性能改善",【非線形問題の高性能解法と可視化技術に関する研究会】2022 年度第 1回研究会,日本大学津田沼キャンパス,2023 年 3 月.
- 19. 溝谷祐大,小林諒平,藤田典久,朴泰祐,天笠俊之, "FPGA 間通信フレームワーク CIRCUS を利用した複数 FPGA によるグラフ幅優先探索の提案",第15回データエ 学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2023), 2a-7-5, 2023-03.
- 20. 佐野由佳,小林諒平,藤田典久,朴泰祐,佐藤三久, "FPGA 高位合成における演算性 能向上のための空間並列性記述に関する研究",第188回ハイパフォーマンスコンピ ューティング研究発表会,2023-03.
- 21. 小林諒平,藤田典久,山口佳樹,朴泰祐,吉川耕司,安部牧人,梅村雅之,"GPU・FPGA 複合型演算加速クラスタを用いた宇宙輻射輸送コード ARGOT の多ノード並列化", 第 185 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会,2022-07.
- 22. 瀬口知洋,中井榛希,山口佳樹,藤田典久,小林諒平,朴泰祐,"並列化に伴うデータ 空間の分割とそれによるアクセスパターンの変化がもたらすHBMの振る舞い調査", SWoPP2022: 並列/分散/協調システムとディペンダブルコンピューティングおよ び一般 2022-07.
- 23. 佐野由佳,小林諒平,藤田典久,朴泰祐,"ノードを跨いだ GPU・FPGA 複合型演算加 速による宇宙物理シミュレーションの実装と評価",第184 回ハイパフォーマンスコ ンピューティング研究発表会,2022-05.
- 24. 菊池航平,藤田典久,小林諒平,朴泰祐,"並列 FPGA 環境における通信システム CIRCUS を用いた集団通信の実装と性能評価",第187回ハイパフォーマンスコンピ ューティング研究発表会,2022-12.

(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)

- 「初期天体形成シミュレーションにおける GPU+FPGA 連携プログラミング及び実行 に関する研究」計算科学研究センター・宇宙物理研究部門・梅村グループとの共同研究
- 素粒子物理研究部門と Japan Lattice Data Grid (JLDG)の構築,運用に関して連携を行っている。
- 「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」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)・天笠グループとの共同研究

国際連携・国際活動

- GPU・FPGA 協調プログラミングシステム MHOAT の開発において米国 Oak Ridge National Laboratory と共同研究
- 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、主に米国アルゴンヌ国立研究所と共同研究を行っている。

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

- Gfarm/実用アプリ・シンポジウム 2022, 東京(ハイブリッド), 2022 年 10 月 28 日
- Gfarm ワークショップ 2023, 長崎 (ハイブリッド), 2023 年 2 月 10 日

9. 管理·運営

組織運営や支援業務の委員・役員の実績

- 1. 朴泰祐:筑波大学情報環境委員会委員
- 2. 朴泰祐:理化学研究所客員主管研究員
- 3. 朴泰祐: PC クラスタコンソーシアム理事
- 4. 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
- 5. 朴泰祐:「富岳」成果創出加速課題領域総括
- 6. 朴泰祐:「次世代計算基盤に関する調査研究」Program Director
- 7. 朴泰祐: HPCI 計画推進委員会委員
- 8. 朴泰祐:「富岳」課題推進委員会委員
- 9. 朴泰祐: HPCI 連携サービス委員会委員
- 10. 高橋大介: 筑波大学情報環境機構学術情報メディアセンター運営委員会委員
- 11. 高橋大介:理化学研究所客員主管研究員
- 12. 高橋大介: HPCI 利用研究課題審査委員会レビューアー

- 13. 高橋大介: HPCI 連携サービス運営・作業部会委員
- 14. 高橋大介:学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(JHPCN)課題審査委員
- 15. 建部修見: HPCI セキュリティインシデント即応委員会委員
- 16. 建部修見: HPCI 連携サービス運営・作業部会委員
- 17. 建部修見: HPCI 利用研究課題審査委員会レビューアー
- 18. 建部修見:情報通信研究機構協力研究員
- 19. 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
- 20. 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
- 21. 多田野寛人:日本シミュレーション学会 理事
- 22. 小林諒平:理化学研究所計算科学研究センター客員研究員
- 23. 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
- 24. 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
- 25. 藤田典久:理化学研究所計算科学研究センター客員研究員
- 26. 藤田典久: 文部科学省研究振興局技術参与

10. 社会貢献·国際貢献

- 1. Taisuke Boku: Steering Committee Chair, International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPCAsia)
- 2. Taisuke Boku: Steering Committee Member, IEEE Cluster
- 3. Taisuke Boku: Steering Committee Member, International Conference on Parallel Processing
- 4. Taisuke Boku: 2022 ACM Gordon Bell Prize Committee Vice Chair
- 5. Taisuke Boku: Program Committee Member, 2022 International Conference on Parallel Processing
- 6. Daisuke Takahashi: The International Journal of High Performance Computing Applications Editor
- 7. Daisuke Takahashi: The 17th International Workshop on Automatic Performance Tuning (iWAPT 2022) Program Committee Member
- Daisuke Takahashi: The 22nd International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2022) Publicity Committee Member
- Daisuke Takahashi: The International Conference on Computational Science (ICCS 2022) Program Committee Member
- 10. Daisuke Takahashi: The 36th IEEE International Parallel & Distributed Processing Symposium (IPDPS 2022) Program Committee Member

- Daisuke Takahashi: 9th International Workshop on Large-scale HPC Application Modernization (LHAM 2022) in Conjunction with 10th International Symposium on Computing and Networking (CANDAR'22) Program Committee Member
- 12. Daisuke Takahashi: The 20th IEEE International Symposium on Parallel and Distributed Processing with Applications (IEEE ISPA 2022) Program Committee Member
- 13. Daisuke Takahashi: 24th IEEE International Conference on High Performance Computing and Communications (HPCC-2022) Program Committee Member
- 14. 高橋大介:情報処理学会論文誌査読委員
- 15. 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
- 16. Osamu Tatebe: Program Committee, IEEE/ACM International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC22)
- Osamu Tatebe: Program Committee, 36th IEEE International Parallel & Distributed Processing Symposium (IPDPS)
- Osamu Tatebe: Program Committee, IEEE/ACM International Symposium on Cluster, Cloud and Grid Computing (CCGrid 2022)
- 19. Osamu Tatebe, Program Committee, International Supercomputing Conference 2022
- 20. Osamu Tatebe: Workshop Chair, 3rd Workshop on Extreme-Scale Storage and Analysis (ESSA 2022)
- Hiroto Tadano: Publication Co-Chair, The 41st JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST 2022)
- 22. 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
- 23. 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
- 24. Hiroto Tadano: Local Scientific Program Committee, 10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 2023)
- 25. 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 幹事補佐
- 26. 小林諒平:電子情報通信学会 コンピュータシステム研究会専門委員
- 27. 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
- 28. 小林諒平:電子情報通信学会 英文論文誌編集委員
- 29. 小林諒平:電子情報通信学会 ISS ソサイエティ誌編集委員
- 30. 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
- 31. 小林諒平: SWoPP 2022 組織委員長
- 32. 小林諒平: xSIG 2022 プログラム委員

- 33. Ryohei Kobayashi : HPCAsia2023 Proceedings Chair
- 34. Ryohei Kobayashi : HEART2022 Publication Chair
- 35. Ryohei Kobayashi : FPL2022 Publicity Co-chair
- 36. Ryohei Kobayashi : FPL2022 Program Committee Member
- 37. Ryohei Kobayashi : CANDAR 2022 Program Committee Member
- 38. Ryohei Kobayashi : CANDAR 2022 CSA workshop Program Committee Member
- 39. Ryohei Kobayashi : COOL Chips 25 Program Committee Vice Chair
- 40. 藤田典久:電子情報通信学会コンピュータシステム研究会専門委員
- 41. 藤田典久:電子情報通信学会論文誌コンピューティングシステム編集委員
- 42. Norihisa Fujita: Program Committee, The 23rd International Conference on Parallel and Distributed Computing, Applications and Technologies (PDCAT'22)
- 43. Norihisa Fujita: Program Committee, Auto-Tuning for Multicore and GPU 2022 (ATMG2022)

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	太田 玲央	
学内共同研究員	北川 博之(国際睡眠医科学統合機構	教授)
学生	大学院生 31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,外部資金として JST 戦略的創造研究推進事業「さきがけ」(令和2年12月~令和7年度),NEDO(令和2年度~令和6年度)に加えて,JST CREST「基礎理論とシステム基盤技術の融合による Society 5.0 のための基盤ソフトウェアの創出」領域の新規課題「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)が採択された.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

(1) 静的データを用いた複合的データ分析処理に対するトレーサビリティ基盤

膨大かつ多様なデータを対象とした分析処理においては、分析結果がどのようにして導出 されたかを示し、分析結果の信頼性を高めるトレーサビリティの確保が重要である.これま でトレーサビリティを保証するために、分析結果の元になった入力データを提示するデータ 来歴が研究されてきた.しかし AI 処理等の判断ロジックが非常に複雑な処理を伴う近年のデ ータ分析(複合的データ分析処理)に対しては、単に元になった入力データを提示するだけ では、分析結果の導出根拠を十分に説明することができないという問題がある. 本研究においては、この問題に 対応するために従来のデータ来歴 に加えて、AI 処理等における判断 根拠も導出可能な拡張来歴

 (Augmented Lineage)の概念を提案した(図1).また,関係データ モデルでモデル化可能な複合的デ
 ータ分析処理に対して拡張来歴を
 導出するためのアルゴリズムを定



図1. 拡張来歴の概要図

式化すると共に, 実際の RDBMS 処理において拡張来歴を導出するための 3 つの手法 (Rerun, Function Materialization, Full Materialization)の比較検討を行った.

特に、今年度は、拡張来歴導出アルゴリズムの改善を行なった.拡張来歴導出には先行研 究の Tracing Query と呼ばれる逆クエリを活用している.Tracing Query は分析結果と入力デー タの共通する属性値を手掛かりに来歴を特定するため、分析結果に入力データの属性が直接 含まれない場合には、分析処理の中間結果を経由して来歴を求める必要がある.そのために 分析処理のクエリ木をいくつかの部分木(セグメント)に分割する必要があり、以前は分割 時にクエリ木を変形する必要があった.しかし今回、クエリ木を変形せずにセグメントに分 割する手法を提案した.これにより、クエリ木がオプティマイザ等によって既に最適化され ている場合に、クエリ木と競合しない拡張来歴導出を実現する枠組みとなった.

また、多様な分析処理を対象とする性能評価を行った.具体的には、RDBMSのベンチマー クとして広く知られている TPC-H をベースに作成した評価実験を新たに行った.そのために TPC-H のベンチマークスキーマに AI 処理の対象となる追加の属性を追加する拡張を行い、 ベンチマーククエリに顔認識またはテキスト感情分類を行う AI 処理を追加した.図2は拡張 来歴導出に要した時間を示している. 横軸は実験クエリを表しており、それぞれ Rerun, Function Materialization (FM), Full Materialization (Full) の3つに基づいた導出時間を示してい る.ここで、Rerun は中間結果を求めるために問合せの一部を再実行する方式であり、Full は 問合せ実行時にその中間結果を全て保存する方式である.これらが比較的自明な方式である のに対し、FM は高コストの AI 処理の再実行を避けるため一部の中間結果だけを保存する本 研究独自の方式である.全体の傾向として、分析処理の実行コストのうち AI 処理に大きな処 理コストが発生している場合、特に FM が有効であることを確認できる.最善の場合として Q9 の FM では、全ての中間結果を再実行で再導出する Rerun と比べて 12.8 倍高速に拡張来歴 が導出でき、全ての中間結果を予め保存する Full と比べて 99.6%ストレージコストの削減が できることが示された.





(2) 複合的ストリーム処理に対するトレーサビリティ基盤

近年センサや IoT 機器等から多様なリアルタイムデータが生成されており、それらに対す る AI 処理等を含めた複合的ストリーム処理も一般化しつつある.そのため、リアルタイムな 複合的ストリーム分析処理に対する拡張来歴導出も重要である.リアルタイム分析を行うス トリーム処理は、分析対象が無限長のデータシーケンスであることや、分析処理のオペレー タの状態が刻々と変化する特徴があるため、(1)の枠組みをストリーム処理に直接適用するこ とはできない.そこで、ストリーム処理において来歴を導出する GeneaLog をベースに拡張来 歴を導出する枠組みを提案した.

GeneaLog は大きく 3 つのアイデアからなる.(i) 分析処理中の生成される全てのデータに 対して,元になったデータを指すためのポインタ領域を追加し,(ii) 分析処理の各オペレータ で出力タプルのポインタ領域に入力タプルをセットする.(iii) 最後に分析結果の来歴は分析 結果からポインタを再帰的に辿ることで導出する.

これを踏まえ3点拡張を行った.(i) 全てのデータに判断根拠データへのポインタをさらに 追加.(ii) オペレータでAI 処理等の判断根拠が必要な処理を行った場合,分析結果の判断根 拠ポインタに判断根拠データをセット.(iii) 分析結果からポインタを辿る場合は入力タプル へのポインタだけでなく判断根拠ポインタも併せて辿る.以上3つの拡張を行うことでスト リーム処理に対して拡張来歴を導出する枠組みを提案した.また,それを実装したプロトタ イプシステムを, Apache Flink ならびに GeneaLog をベースに開発した.

プロトタイプシステムを用いた実験では、Amazon レビューデータをベースに作成した2種類の分析処理を用いて、拡張来歴導出のとき発生するオーバヘッドをレイテンシとスループットの2つの指標で評価した.図3の左はレイテンシ、右はスループットを示す.BaselineとLineageは来歴導出なしの場合と通常のデータ来歴のみ導出する場合を指しており、SALが本研究が提案する拡張来歴を導出する手法である.この結果では、分析処理中のAI処理の実行コストが大きい場合はSALにおけるオーバヘッドの割合が小さくなる傾向が認められた.実

用的な AI 処理は多くの場合高コストであることが想定される.したがって,本手法により AI 処理を伴う複合的ストリーム分析処理に対して拡張来歴を導出した場合でも,通常処理に対 するオーバヘッドの割合は小さいことが示唆される.



図 3. Amazon レビューデータを用いた評価実験結果

(3) 分散ストリーム処理のフォールトトレランスのための部分スナップショット方式

分散ストリーム処理システム (DSPS) は、複数のノードが連携して大量のストリームデー タを継続的にリアルタイム処理する. DSPS では、一部ノードに障害が生じた際は、速やかに 障害回復を行って継続的に到着するデータの処理を再開することが求められる. さらに、障 害に対する回復処理を行った際でも、全ての入力ストリームデータを欠損も重複もなく一度 だけ処理する Exactly-Once を保証する障害回復が望まれる. 今日、多くの実用的 DSPS では、 これを実現するためにグローバルチェックポイントによる方式を採用している. この方式で は、分散システムの一貫性を有する内部状態(グローバルスナップショット)をグローバル チェックポイント処理により定期的に取得・保存し、障害発生時にはシステム全体を直近の グローバルスナップショットに戻した上で、その時点の入力ストリームから再実行する手法 がとられている. しかし、この方法では障害発生時に全ノードのリスタートが必要であり、 大きなオーバヘッドが障害回復時には生じる.

本研究では、DSPS におけるチェックポイントの対象をより狭い範囲に限定し、障害発生 時に一部ノードのリスタートのみでシステム全体の回復処理を実現する部分スナップショッ トスキーム(RegSnap)を提案した.また、RegSnap を代表的な DSPS である Apache Flink 上 で実装し、その実現可能性と有効性を確認した.

一般に、ストリームアプリケーションは、ソースからシンクに至るオペレータ群をノード とする有向非巡回グラフとしてモデル化される. RegSnap のスナップショット領域 (SR) は、 以下の図 4 に示すような部分グラフとして定義できる. すなわち、直感的には全オペレータ からなるグラフのいずれかの下流部分に相当する部分グラフであり、この例のようにスナッ プショット領域が入れ子になっても良い. グローバルチェックポイントでは、チェックポイ ントバリアがソースから下流オペレータに向けて順次流れることで、チェックポイント処理 が行われる. RegSnap では、グローバルチェックポイントに加えて、スナップショット領域ご とに特化した部分チェックポイントが定期的に取られる.部分チェックポイント処理では, スナップショット領域の最も上流に位置するイニシエータからチェックポイントバリアが下 流に向けて流れることで領域内に特化したスナップショットが保存される.また,部分チェ ックポイント開始時以降にイニシエータに到着したインフライトデータは全てログに記録さ れる.



図4. スナップショット領域(左:論理レベル,右:物理レベル)

RegSnap における障害回復処理では、障害が生じたオペレータを含む最小のスナップショ ット領域を特定し、その内部のオペレータの状態を部分スナップショットを用いて復元する と共に、インフライトログ中のデータをイニシエータに再送することでスナップショット領 域の回復処理を行う.スナップショット領域の回復処理が終了した後は、システム全体での 処理が再開される.なお、障害が上流オペレータで発生し、それを含むスナップショット領 域がない場合は、通常と同様にグローバルチェックポイントによる障害回復が行われる.

本研究では、Flink上のプロトタイプシステムを用いた性能評価を行った.評価には標準ベ ンチマーク Nexmark 中のクエリ q4 と q5 を含む 4 つのクエリを選択した.図5 はグロー バルチェックポイントと部分チェックポイントにおけるチェックポイント処理時間とスナッ プショットサイズを比較したものである.スナップショット領域が狭い場合は、処理時間も サイズも小さくなっていることが確認できる.表1 は障害回復処理に必要な時間を比較した ものである.スナップショット領域が小さい場合は、障害回復処理時間も縮小できているこ とが確認できる.このように、RegSnap では、定義されたスナップショット領域のサイズの割 合に応じて、チェックポイント処理時間と回復処理時間を短縮できることが確認できた.な お、結合などの高コストなステートフルオペレータは、性能に大きな影響を与えるので、ス ナップショット領域の選択に当たっては、オペレータの性質にも留意する必要がある.



図 5. チェックポイント処理時間とスナップショットサイズ(左:q4,右:q5)

表1 障害回復処理

	Average of recovery time (ms)			
Query	Global	Recovery of	Recovery of	
	Recovery	SR_1	SR_2	
q4	156.2	143.4	18.0	
q5	79.2	75.8	52.8	

(4) InTrans: Fast Incremental Transformer for Time Series Data Prediction

時系列データの予測(TF)は、自然災害防止システム、天気予報、交通管制システムなど、 多くのアプリケーションで役立つため広く研究されている.多くの既存の予測モデルは、短 いシーケンスの予測においてうまく機能する傾向があることが知られている.ただし、長い シーケンスの時系列を扱うと、パフォーマンスが大幅に低下する.最近では、この方向性に ついてより多くの研究が行われており、Informer は現在最も高性能な予測モデルである.

TFでは、通常、予測は連続的に行われる.たとえば、天気予報システムは、2 分ごとに次の 24 時間の天気を予測する.そのため、通常はスライディング ウィンドウを使用して作成 されるトレーニング/テスト サンプル間で、入力と出力の両方が重複している場合が多くある.入力と出力の両方が、定義されたスライドに従って、あるトレーニング/テスト サンプル から別のサンプルに重複している.本論文では、トレーニング/テスト サンプルが互いに重複 している TF に焦点を当てる.

Informer の主な欠点は、段階的に学習できないことである.本研究では、InTrans と呼ばれ る差分計算に基づく Transformer を提案し、Informer のトレーニング/予測時間を短縮するこ とで上記のボトルネックに対処する. InTrans は、必要なパラメーターのみを計算および更新 することにより、時系列データから段階的に学習/予測できる.本論文の貢献は(1)入力/出力 の両方の位置,時間,および値を差分埋め込みメカニズム,と (2)Query, Key,および Value を差分計算する自己注意メカニズムである.具体的なコンセプトを図6に示す.

Informer と比較した場合の InTrans の計算量は(1) O(S) vs O(L): 位置的および時間的埋め込み, (2) O(S+k-1) vs O(L): Value の埋め込み, と(3) O(S+k-1) vs O(L): 自己注意メカニズムでの Query/Key/Value の計算である. なおLは入力の長さ, k は kernel のサイズ, とS は slide サイズである. 実験の結果により, InTrans は, Informer と比較して,同じ予測精度を達成しながら,学習/予測時間を約 26% 短縮できることが示された(図7).



図 6. 提案する InTrans の概要



図7.入力/出力長を増やした場合のテスト時間(秒)

(5) 事前学習済み文脈埋め込みモデルを用いた実体マッチングのためのブロッキング手法

実体マッチングとは、商品や人物など、実世界の実体に対応するレコード集合が二つ与え られたとき、同じ実体を参照しているレコード同士をマッチさせる処理である.同じ対象に
関するデータを格納する異なるテーブル同士の統合や、同一のテーブルにおける重複レコー ドの検出など、多くの応用で利用されている.実体マッチングをナイーブに処理しようとす ると、サイズが m および n のテーブルに対してm×n回のレコード比較が必要であり、大き なサイズのテーブルを処理する際に問題となる.これに対して、類似したレコード同士をテ ーブル内であらかじめグループ化しておき、類似したグループの間だけでレコード同士の比 較を行うことによって、比較回数を大幅に削減するプロック化手法が広く用いられている. ブロック化では、正解としてマッチするレコード同士をいかに精度良く同じブロックに割り 当てるかが課題であり、これまでに教師ありの手法、教師なしの手法を含め多くの手法が提 案されてきた.

本研究では、高精度なブロック化を実現するために、近年広く用いられるようになった事 前学習済み言語モデル (PrLM)を用いたレコードの埋め込み表現に加え、類似レコードのブ ロック化のために、埋込ベクトルから構成される k 最近傍グラフ上のクラスタリングを用い る手法を提案した (図 8).提案手法では、入力テーブルの各レコードの属性を連結して単一 文字列に変換したのち、PrLM によってベクトル空間に埋め込む.その際、対照学習 (Contrastive Learning)を適用することで埋め込みベクトルを計算する.得られたベクトル表現は高次元で あるため、必要に応じて次元削減を行なった後、各レコードを頂点とするグラフに変換する. その際、頂点から最も近傍にある k 個の頂点に対して変を作成することで、k 最近傍グラフを 構成する. 彫られたグラフに対して、モジュラリティ最小化などのクラスタリングを適用す ることで、類似したレコードからなるブロックを作成する.



図8. 提案するブロック化手法の概要

提案手法の有効性を評価するため、4 種類のデータセットを用いた評価実験を行った.その うち図9は iTunes データセットと Amazon データセットのマッチングを行なった際の実行時 間および精度(F-measure)を示している.実験では、異なる PrLM(method 列)に対して複 数のグラフクラスタリングアルゴリズム(algorithm 列)を組み合わせた手法と,対照学習を と入れた提案手法(SimCSE)を比較している.その結果から,提案手法はトータルの処理時 間を抑えつつ,最も良い精度を実現していることが示された.

method	$algo_{best}$	emb'_{sec}	$\mathbf{b}\mathbf{k}_{sec}$	$total_{sec}$	F1
R-BERT	l'vian	91.8	461.8	553.6	85.2
DeBERTa	l'vian	311.2	557.2	868.4	89.2
RoBERTa	l'vian	253.6	58.1	311.7	89.7
BART	l'vian	324.0	433.6	757.6	91.7
RNN	birch	2329.8	dnf	dnf	dnf
SimCSE	l'vian	64.5	160.9	225.4	92.8
R-BERT _d	l'den	127.7	328.2	455.9	56.2
$DeBERTa_d$	l'den	470.0	607.8	1077.8	56.4
RoBERTad	l'vian	391.5	368.2	759.7	64.0
$BART_d$	l'den	642.9	347.5	990.4	68.0
$SimCSE_d$	l'den	125.8	164.4	290.2	89.7

図 9. 実験結果

[2] データマイニング・知識発見技術

(1) 静的データ・ストリームデータに対するクラスタ境界点検出

データセットにおける境界点(Boundary point)とは、密なクラスタの境界領域に位置する 点のことである.クラスタ中の中心に近い位置にある点は一般性をもった典型的データであ り、コアポイント(Core point)と呼ばれる.一方、クラスタから遠く離れた点は外れ値(Outlier) を表す.境界点は、外れ値とは言えないもののコアポイントとは少し外れた境界的な性質の データとなる.データ応用では、境界点の検出が有用なケースが存在する.例えば、健康状 態を表すデータでは、境界データは疾病を発症するには至っていないものの、そのリスクが 高まっている被験者を表す可能性がある.

これまでも境界点検出の研究は行われてきたが,既存の手法には多くの問題点がある.例 えば,一部の手法では境界点と外れ値を十分区別することができない.したがって,境界点 検出の精度は,データセット内の外れ値の存在によって影響を受ける.また,一部の手法は, データセット内の外れ値に関する知識がないと決定が難しいパラメタを含む.

本研究では、これらの問題を解決する新たな境界点検出手法である Boundary Point Factor 手法(BPF)を提案した. BPF では、Gravity と Local Outlier Factor (LOF)を組み合わせて BPF スコアを各点に対して計算し、そのスコアの高い点を境界点として検出する. Gravity は、対象点からその k 最近傍点方向の単位ベクトルの平均ベクトル長として計算される0から1までの間の値を取る値であり、k 最近傍点が特定の方向に偏って存在する場合に1 に近い値を、全方向に満遍なく存在する場合に0 に近い値を取る. LOF は良く知られた密度ベースの外れ

値検出手法であり、外れ値は大きな LOF スコアを取る一方、それ以外の点は1に比較的近い

値を取るという性質を有する. 点 p の Gravity ス コア G(p), LOF スコア LOF(p)を用いて, BPF スコ アは, BPF(p)=G(p)/LOF(p)により求められる. 図 10 に示すように,境界点 p, コア点 q,外れ値 r と すると,G(p)>G(q)ならびに LOF(p),LOF(q)<< LOF(r)が成り立つ可能性が高いため, BPF(p)>BPF(q), BPF(r)となり,境界点 p の BPF ス コアが高くなることが期待される.



StaticBPF は,静的データセット内の全データに 対して BPF スコアを計算し,上位 m 個の境界点

図 10. 境界点、コアポイント、外れ値

を検出するアルゴリズムである.k 最近傍を効率的に探索する索引を使用しない場合, StaticBPF の計算量はデータ件数 n に対して O(n²)である.図 11 は,StaticBPF の検出精度 を,既存手法である BORDER,BorderShift,BRIM,BPDAD と比較した結果である.検出さ れた境界点を赤色で示している.表2 は定量的精度比較の結果である.これらの結果は, StaticBPF が既存方法と比較してより効果的に境界点を検出できることを示している.



図 11. 2 次元データを用いた各手法の比較

表 2	各手法の定量的性能比較
1 2	

Method	Parameter	Prec	Rec	F1	ROC	\mathbf{PR}
Static BPF	k = 200	0.79	0.79	0.79	0.97	0.71
BPDAD	# boundaries = 915	0.33	0.53	0.4	_	_
BRIM	eps = 0.094	0.53	0.53	0.53	0.78	0.59
BORDER	k = 100	0.69	0.69	0.69	0.95	0.55
BorderShift	$k=100, \lambda_1=3461, \lambda_2=4028$	0.66	0.66	0.66	0.93	0.69

本研究では、さらにストリームに対して境界点検出を行う StreamBPF を開発した. StreamBPF はストリーム上のスライディングウィンドウ内の境界点検出を継続的に行うもの で、グリッド構造を用いた k 最近傍計算と、ウィンドウがスライドした際の差分計算を組み 合わせることで、ウィンドウ内の全ての点の BPF スコアを効率的に計算可能である.前者に おいては、グリッド構造を使用し、ウィンドウ内の全てのポイントをセルにグループ化する ことで、ウィンドウ内のすべての点のペアごとに距離を単純に計算するよりも、k 最近傍を効 率的に計算可能である.後者においては、ウィンドウのスライドによる新たな点の到着や期 限切れによる点の削除によって Gravity スコアや LOF スコアが影響を受ける点を特定し、そ れらの点の BPF スコアを効率的に更新する.図12(a)(b)は、合成データを用いて最近傍数 (k)とスライドサイズ(w)を変更した場合の処理時間の変化を、StreamBPF、StaticBPFを 繰返すナイーブな方式、差分計算のみを用いた方式(IncBPF)、グリッド構造のみを用いた 方式(GridBPF)と比較したものである.図12(c)(d)は、処理時間を実データで評価したもの である.グリッド構造と差分計算を併用することで、比較手法と比べて StreamBPF は優れた 処理性能を示している.



図 12. StreamBPF の性能評価

(2) Indexing Complex Networks for Fast Attributed kNN Queries

2021年度から引き続き、本研究ではネットワーク上のデータに対して高速に k 最近傍検索 を行うための索引構築手法を提案した.ネットワーク上のデータに対してこれまで多数の索 引構築手法が提案されているが、その多くは属性を考慮しておらず、平面グラフを対象とし たものである.一方で、実世界で多く観測される複雑ネットワークは平面グラフとは異なり エッジ同士の交差を多く含む構造特性があるとともに、ネットワーク上のノードが複数の属 性を有する.(例えば、MaaSにより構築されるネットワークを考えた場合、各ノードはその 行動履歴に伴い複雑にリンクする.また、各ノードはユーザや移動体を表すことから、ユー ザの性質を示す属性をもつことが自然である.)その結果として、従来の索引構築手法は実 践的なデータに置いて索引構築に膨大な計算時間が必要となり、 k 最近傍検索を高速化でき ない.

本研究では多モーダルな属性を持った複雑ネットワークに対して,効率的な k 最近傍検索 を実現するための索引構築手法を提案した 1). 提案手法 BAG-index では,複雑ネットワーク に含まれる基調構造を抽出し,それぞれの基調構造に対して属性索引と基調構造索引を構築 する. 属性索引と基調構造索引は,それぞれ複雑ネットワークの構造を考慮することで検索 に必要な情報を0(1)時間で見つけることができる.図13(左)は提案手法と既存手法の検索時間の比較を行ったものである.図中のCT+BAGが提案手法,CT+Naïveは我々が2021年度に開発した手法を拡張したもの,CT+G-Treeは最先端手法を示している.また,24時間以内に計算が終了しないものについては図から除外している.この結果からも明らかなように,提案手法は既存手法と比較して100~1,000倍高速な検索処理を実現している.また,本研究の提案するBAG-indexは基調構造を捉えることで,索引構築時間も既存手法と比べて大幅に高速である.図13(右)に索引構築時間の比較結果を示す.この図からわかるように,提案手法CT+BAGは最先端手法CT+G-Treeと比較して,20,000倍程度高速である.



(3) Fast Top-k Similar Sequence Search on DNA Databases

文字列の類似度や相関に関する研究は、データベース分野や生命情報科学分野等において 基本的な問題であり、データクリーニングやゲノムシーケンスアセンブリングなどに数多く 採用されている.例えば、地球上のいかなる生物の DNA も A, C, G, T の 4 文字で構成さ れる文字列として表すことができ、生物学的に近い種は似たような DNA シーケンスとなる 可能性がある.そのため DNA シーケンスの類似度や相関に関する問題は文字列処理と同等 の問題として考えることができる.本研究では DNA シーケンス集合を対象とした類似検索 手法について考える.これはユーザからクエリ DNA シーケンスシーケンスが与えられたと き、DNA シーケンス集合の中から類似度の高い部分文字列を列挙する問題である.DNA シ ーケンスに対する類似度評価には文字列編集距離を利用することが一般的である.しかしな がら、生命科学分野で用いられる DNA シーケンスのシーケンス長は1億個以上の要素から 構成されることが多い.そのため、既存の高速な編集距離計算手法を用いても膨大な計算時 間を要する問題がある.

本研究では約百万件の DNA シーケンス集合の中からクエリ文字列に対して編集距離が小 さいk個の部分系列を高速に列挙する手法を開発した.上述の通り, DNA シーケンス長が大 きい場合,類似度評価に用いる編集距離計算に大きな計算時間を必要とする.本研究ではこの問題を解決するために,編集距離の分割計算手法を提案し,近似編集距離を高速に求める ことを可能とした.本研究が開発した類似検索手法では,この近似編集距離に基づいて,検 索結果として不適切な DNA シーケンスを効率的に除外することができる.その結果として, 実際の DNA シーケンス集合において最大で4倍程度高速な検索処理を実現した.表3では 検索件数kを 500~2,000 件に変化させた場合の提案手法の再現率を示している(1.00 に近い ほど,高い精度の検索結果を意味する.)この結果からも明らかなように,提案手法は近似 編集距離を用いるものの,高い精度で検索を実行可能であることを確認した.

表3 検索結果の再現率

Datasets	k = 500	k = 1,000	k = 1,500	k=2,000
dataset 1	1.000	1.000	0.950	0.926
dataset 2	0.998	0.993	0.934	0.913
dataset 3	0.998	0.987	0.932	0.910

(4) PR-MVI: Efficient Missing Value Imputation over Data Streams by 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. 永続的に保存されたデータに対して、多くのアルゴリズ ム (距離尤度最大化 (DLM) など) が提案されていった. 既存手法はデータ ストリームの処 理に使用できるが、データ ストリームの分布がトレーニング データとは異なる場合、パフ オーマンスが低下する. 一部の既存手法 (自己回帰統合移動平均 (ARIMA) など) はデータ ストリームを処理できるが、カテゴリ データは処理できない.

具体的なコンセプトを図 14 に示す. 過去の信頼できるトレーニング データ (R) とデータ ストリームからの最新のデータのセット (W) は相互に補完的である. 具体的には, W は, データ ストリームの動作が R の動作からシフトしたことを予測モデルに指示するのに役立 つ. 逆に, R は, 基本的でありながら永続的な知識を予測モデルに提供し, 学習がデータ ストリームの動作のノイズや一時的な変化によって過度に影響されるのを防ぐことができる. さらに, DLM は数値データとカテゴリ データの両方をサポートできるため, DLM は R と W の両方から学習できるように拡張されている.

この論文では、過去のトレーニングと同様のおよび/または異なる分布を持つ数値データ ストリームとカテゴリ データ ストリームの両方に対して、「PR-MVI」と呼ばれる、距離尤 度による欠損属性値補完のための過去および最近の隣接ベースのアプローチを提案する. さ まざまなデータセットに対する広範な実験により、PR-MVI が既存手法よりもデータ ストリ ームから欠落している属性値をより適切に補完することが示される. PR-MVI は、時間の経 過とともに動的に変化するデータ ストリームに対して ARIMA より約 13%, DLM より約 45% 優れている. 過去のトレーニング データと同様の分布を持つデータ ストリームの場合, PR-MVI は DLM と同等のパフォーマンスを実現し, ARIMA よりも大幅に優れたパフォー マンスを実現する (図 15).



図 14. 既存の手法と PR-MVI の概要. 各ノードは各レコードを表し, R は過去の学習データを 表し,Wはデータストリームからの最新の完全なレコードのセットを表す.薄茶色のノードは, 対応する手法の学習には使用されない



(5) 低リソース言語を対象とした大規模言語モデルを用いた固有表現識別

テキスト処理において,文章中に埋め込まれた個人名や組織名などの「固有表現」を識別 することは,検索や分析など様々なタスクに応用が可能であるため重要な処理として認識さ れている.その方式には様々なものがあるが,近年では,精度の高さから,機械学習を用い た手法が注目されている.この手法では,教師データとして自然文に対応する単語列及び固 有表現ラベル(人名,組織名など)を与え,入力された単語列に対してそれぞれの固有表現 ラベルを出力するよう機械学習モデルを学習させる.このときモデルの精度及び汎化性能を 向上させるためには、大規模な教師データが必要となる.英語や日本語など、このような言語リソースが潤沢な言語に対して、地球上の多くの言語は、このような言語リソースが十分 整備されているとは言えず、これらへの対応が望まれている.

本研究では、主にエチオピア(アフリカ)周辺で使用され、900万人以上の話者を持つ低リ ソースの一つである Tigrinya を対象に、固有表現識別のためのデータセットを作成するとと もに、BERT ベースの言語モデルである RoBERTa を元に Tigrinya 向けに訓練した言語モデル である TigRoBERTa を提案した.データセット作成においては、Tigrinya 話者によって 5,645 文を人手でラベル付けした.



図 16. TigRoBERTa 言語モデル

図 16 に、提案する TigRoBERTa 言語モデルの概要を示す.通常の RoBERTa 同様、マスク 付き言語モデルを利用し、Web から取得した 430 万文を使って言語モデルを学習した. さら に、自作の固有表現識別データセットを使ったファインチューニングを適用することで、目 的のタスクに用いることができる機械学習モデルを訓練することができる.本研究では、固 有表現識別に加え、品詞推定タスクのためのモデルも生成している. さらに、データセット の規模を補うため、半教師ありによるデータセットの拡張にも取り組んでいる. すなわち、 ー旦生成したモデルによってラベルの付与されていないデータセットにラベルを付与する. この時、モデル予測の確信度が一定以上のデータを教師データとして加えることで、データ セットを拡張する.

	Dataset	Precision	Recall	F1score
Supervised (Fine-tune TigRoBERTa)	V1	80	82	81
	V1 & V2	83	86	<u>84</u>
	$\mathcal{T} = 0.85$	80	79	80
Semi-supervised learning	$\mathcal{T} = 0.90$	81	79	80
	T = 0.95	80	81	<u>81</u>

図 17. TigRoBERTa の評価実験(固有表現識別)

提案手法の有効性を示すために評価実験を行っている.図17では、サイズの異なる教師デ ータ(V1のみ、V!+V2)での精度比較の結果、より大規模なデータセットを使うことで精度 が向上することが確認された.その一方で,半教師あり学習による精度向上については明確 な精度向上は見られなかった.

[3] RDF・知識ベース・LOD

(1) フォグ環境における RDF 推論の銅的負荷分散

デバイスやセンサーの発展とともに、実世界における様々なものをネットワークに接続し、 リアルタイムに情報を取得することのできる IoT やサイバーフィジカルシステム (CPS) が注 目されている.これらのネットワークでは、大量のセンサーが接続されているため、データ を集約するサーバーに負荷が集中するという問題がある.この問題に対応するため、サーバ ーとジーデバイスの間で 中間的な集約を行うフォグノードを導入したアーキテクチャが注 目されている.これによって、データ量や通信トラヒックの削減が期待できるが、ノードの 移動や通信量の変化に伴って、フォグノード間の負荷分散をどのように行うかが重要となる.

一方,エッジデバイスの性能向上に伴い,これらの上で機械学習モデルを用いた推論な どより高度な処理を行うことが可能になっている.この時より意味的なデータを扱うことが 求められる. RDF (Resource Description Framework)は、このような意味的なデータを表現す るとともに、意味的処理を行うことも可能であり、近年 IoT デバイスなどでも広く用いられ るようになっている.ただし、これまでフォグ環境における RDF 推論処理の負荷分散に関す る研究はほとんど行われていない.

このため本研究では、フォグ環境における RDF 推論を対象とした動的負荷分散手法を提案 している.図18に提案システムの概要を示す.RDF 推論はルールベースの単純なものを想定 し、フォグあるいはクラウドによって処理が可能である.フォグノードでは CPU 付加を常時 モニタリングしており、負荷が一定以上になると、RDF 推論ルールの一部をクラウドにオフ ロードすることによって負荷の均衡化を図る.



図 18. フォグ環境における RDF 推論の動的負荷分散

提案手法の有効性を検証するために評価実験を行った.実験では、スマートシティをシミ ュレートしたベンチマークによって生成された大気観測データに対して、RDF ルールによる 推論を行った.その際、フォグの負荷や IoT ノードあるいはフォグノードの数を変化させた 時のレイテンシの違いを観測した.図 19 は、フォグノードの付加を変化させた時の、クラウ ドおよびフォグでのユーザ通知時間(レイテンシ)の変化を表している.左はルールを固定 した場合であり、負荷の増加とともにフォグでの通知時間が増加している.その一方、提案 手法では、負荷に応じて推論ルールをクラウドにアウトソースすることによって処理時間が 減少している.クラウドの処理能力には余裕があるため、通知時間の増加はフォグに比べて 少ない.



図 19. 評価実験(ユーザ通知時間の変化

(2) ラベル付きグラフにおける正規パス問合せのための FPGA アクセラレータ

近年,モノの間の関連を表現したデータ構造であるグラフが注目されている.例えば,ソ ーシャルネットワークにおけるユーザ間の関係や,タンパク質間の相互作用ネットワークな どが代表的な例である.グラフの中でも,辺にラベルが付与されたものをラベル付きグラフ と呼び,多くの応用で利用されている.与えられたラベル付きグラフに対して,特定の辺を いくつか通って到達することのできる頂点対を列挙する処理は,グラフから特定の情報を抽 出する上で有用性が高い.特に,正規表現を使ってラベルのパターンを指定する処理を,正 規パス問合せと言う.正規パス問合せの処理では,任意の頂点から幅優先探索を行うととも に,各探索で得られるパスが問合せで与えられた正規表現にマッチするかどうかを全てチェ ックする必要がある.このため規模の大きなグラフに対して実用的な処理性能を実現するた めには,並列処理などを組み合わせる必要がある.

本研究では、ラベル付きグラフに対する正規パス問合せを高速に実行するために、FPGA (field-programmable grid array)上のアクセラレータを開発した.FPGA,任意論理回路をソフ トウェアで実現できるデバイスであり、近年高性能化が進んでいる.本研究では、FPGA上で 正規パス問合せを実行するために、グラフデータを隣接リスト形式で FPGA 上に読み込み、 複数スレッドで並列に幅優先探索を実行する.その際,探索される頂点までのパスが問合せ にマッチするかどうかを,非決定性有限オートマトン(NFA)を用いてチェックする.FPGA 上でNFAを実現するため,図20に示す方法を用いた.具体的には,正規表現をラベル(Tokens), 状態とラベルの対応(Triggers),状態遷移(State Transition)の三つのテープルで表現,管理 する.



図 20. FPGA 上の NFA の実装 (*a* ∪ *b*) ∘ *b* ∘ *c*

さらに、FPGA上でグラフの幅優先探索を並列で実行するため、フロンティアを用いた幅優 先探索アルゴリズムを拡張した(図21).通常のフロンティアでは一次元の配列によって各 頂点が探索済みであるかどうかを管理するが、提案手法ではこれを二次元に拡張し、各頂点 がNFAのどの状態にあるかを管理する.さらに、各セルの値をビット列とする.ビット列は それぞれの位置が検索スレッドに対応しており、これにより複数スレッドでの幅優先探索お よびNFAによるマッチング処理を並列に行うことを可能にする.図では2並列の検索処理の 例を示しており、実際は現在のフロンティアを参照しつつ、次のステップのフロンティアを 作成し、これを交互に行うことで処理を進める.なお、フロンティアのサイズはグラフの頂 点数に比例して増加するため、大規模なグラフを処理するためには、高速な BRAM には収ま らない.その一方で、フロンティアは多くの要素が空であるため極めてスパースである.こ のため、フロンティアを圧縮した上でより容量の大きいデバイスメモリに置く方法について も検討した.



図 21. 拡張したフロンティアによる並列なグラフ探索

提案手法の有効性を検証するため,評価実験を実施した.Advogato データセットを用いて, 正規パス問合せのパス長を変化させた時の実行時間を比較した(図 22,縦軸は対数スケール). 比較手法は,索引ベースの Path Index とグラフデータベース Neo4j である.比較手法が,パス の長さに応じて大幅に処理時間が長くなっているのに対して,提案手法ではほぼ一定の処理 時間となっている.また,並列度を上げることによって,より高速な検索が達成できること を確認した.



図 22. 正規パス問合せの処理時間

[4] データベース応用・データサイエンス

(1) An ensemble method for improving robustness against the electrode contact problems in automated sleep stage scoring

睡眠の臨床・診断を効率化すべく,深層学習を中心に様々な自動睡眠ステージ判定手法が 提案されている.私たちの研究グループが以前より開発していた,判定理由の提示機構を含 むステージ判定手法 Sleep-CAM も本年度論文化し, Scientific Report より報告している.

2022 年度は、Sleep-CAM を含む睡眠ステージ自動判定手法の頑健性の向上に取り組んだ. ステージ判定の判定精度は、電極の接触不良に由来するノイズに強く影響され、時には 50% 近く精度が低下する例も確認している. 医師・技師の負担を考えると、どのような計測記録 に対しても高精度で判定が行えることが望ましい.

本研究では、小モデルのアンサンブルを用いることでこの問題の解決を図った.具体的な コンセプトを図*に示す.本手法では、一般的なアンサンブルとは異なり、各小モデルは異 なる信号を入力とし、その多数決をもって最終的なステージを決定している.ある電極が接 触不良を起こした場合(図23ではFp2)、その電極を利用しない小モデルのみで多数決を取 る.これにより接触不良の電極を「無視」することができる.本研究では、電極の接触抵抗を 計測し、これを基に接触不良を起こしている電極を判断している.

図 24 は、M2 が接触不良を起こしている計測記録に対しステージ判定を行った際のヒプノ グラムである.提案手法を導入することで、M2 が接触不良を起こしていても判定が W(覚 醒)に偏らず、適切なステージ判定を行っていることが分かる.また、アンサンブルの効果 としてノイズのない領域においても判定精度が改善していた.

本研究の成果は筑波大学国際統合睡眠医科学研究機構(WPI-IIIS)との共同研究として, PLOS Digital Health に投稿中である.



図 23. 提案するノイズ対策手法のコンセプト



図 24. M2 接触不良を含む生体信号に対するステージ判定結果(A) 技師による判定, (B) 対策 を行わない場合, (C) 提案手法を導入した場合.

(2) Owro: A Novel Robot for Sitting Posture Training Based on Adaptive Human Robot Interaction (天笠)

現代は多くの人がオフィスワークを始め、生活時間のほとんどを椅子に座って過ごしてお り、それに伴う健康被害が世界的に問題となっている.着座姿勢を正しいものにすることに より、このような健康被害を未然に防ぐことができる.この目的のために、我々は圧力セン サを内蔵した IoT クッション (LifeChair)を開発した.これを椅子の上にセットすることで、 利用者の着座姿勢をリアルタイムにモニタリング、機械学習を用いた着座位置を推定すると ともに、スマートフォンを利用したフィードバックを行うことで、正しい着座位置への修正 を可能にした.

本研究ではこれを受け、ロボットを用いた利用者へのフィードバックについて検討した. 開発したロボット(Owro)を図 25 に示す. Owro は卓上設置型のロボットであり、LED によって異なる表情を示すことができる.利用者の着座姿勢が正しい時には喜びの表情,姿勢が 悪い時には悲しみの表情を示すことで,利用者の正しい姿勢への矯正を実現する. Owroの有効性を評価するために,評価実験を行なった(図26).実験では,被験者に前半30分はOwroによるフィードバックなし,後半30分はフィードバックありで作業をしてもらい,正しい着座姿勢でいた時間を比較した.その結果,Owroによるフィードバックにより,より正しい着座姿勢が実現できることが示された.

Sitting Posture	Owro State	Owro Emotion and Action
Upright	Нарру	Up-turned eyes on the LED Matrix
Slouching	Sad	Down-turned eyes on the LED Matrix
Prolonged sitting	Tired	Flat line on the LED Matrix



図 25. インタフェースロボット Owro



図 26. 0wro を利用した被験者実験の結果

4. 教育

<修士(工学)>

1. 大森 雄基

エンティティリンキング機能を有する知識ベースと外部情報源の統合利用環境

2. 原田 亮

ゲノムアノテーションのためのアテンションベース Bi-LSTM を用いたエンドツーエ ンドなスプライス座位予測手法 (A scheme for end-to-end prediction of splice sites using attention-based Bi-LSTM for genome annotation) 3. 萬塲 大登

メソッド構文木の埋め込みを利用したグラフニューラルネットワークによるクラス 名推薦 (Class Name Recommendation with Graph Neural Networks Using Embedding of Method AST)

- 4. 小久保 柚真 フォグコンピューティングにおける RDF 推論処理の動的負荷分散
- 5. 小林 瑞季 雑ネットワークに対するk最近傍検索のための高速な索引構築手法
- 柳澤 隼也
 不確実グラフにおける信頼性の高速推定
- 高島 聡
 機械学習による眼球指標を用いた客観的覚醒度合い推定手法の開発
- 対比地 恭平
 GPUを用いた高次元データに対する逆k最近傍検索の高速化

<学士(情報科学,情報工学)>

- 安田 裕真
 多次元時系列データに対する高速な類似部分シーケンス問合せ
- 山崎 昂輔
 SparkSQL による効率的な SPARQL 問合せ処理のためのデータ分割
- 山田 空 エポック内の時系列情報に着目した睡眠ステージ自動判定の精度向上とエポックフ リー化
- 4. 小倉 勇大 ステートメント間の依存関係を入力とした Transformer に基づくメソッド名推定
- 5. 受賞, 外部資金, 知的財産権等

受賞

- 情報処理学会第85回全国大会,学生奨励賞:川上隼, Bou Savong,天笠俊之,"データストリームに対する効率的な複数連続的集約アルゴリズム", 2023年3月2日~3月4日.
- 2. 情報処理学会第85回全国大会,学生奨励賞:山崎昂輔,"異種知識グラフに対する効率 的な問合せ処理のためのデータ分割手法",2023年3月2日~3月4日.

- 情報処理学会第85回全国大会,学生奨励賞:小倉勇大,早瀬康裕,天笠俊之,"PDG上の経路集合を入力とした二段階の Transformer によるメソッド名推定",2023年3月2日~3月4日.
- 1. 情報処理学会第85回全国大会,学生奨励賞:高根沢光輔,"BERT-NERによるテンプレート分類とPatent-Tokenizerを用いた和文特許文章の文章生成",2023年3月2日~3月4日.
- 5. 第 15 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 2023),学生プレ ゼンテーション賞: Hiroto Mamba, Yasuhiro Hayase, Toshiyuki Amagasa, "Utilizing Abstract Syntax Tree Embedding to Improve the Quality of GNN-based Class Name Estimation", 2023 年 3 月 5 日~3 月 9 日.
- 6. 第 15 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 2023),学生プレ ゼンテーション賞: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", 2023 年 3 月 5 日~3 月 9 日.
- 第15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 2023),学生プレ ゼンテーション賞:直井悠馬,真次彰平,塩川浩昭,"グラフデータベースに対する高速 高精度な相関問合せ",2023年3月5日~3月9日.

外部資金

 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31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 全年度直接経費:32,705,128円(R4年度直接経費:7,083,333円)
 受託研究:新エネルギー・産業技術総合開発機構(令和2年7月16日~令和5年3 月31日) 研究課題:多粒度ストリームにおける StreamOps 技術の開発 研究代表者:天笠 俊之

全年度契約金額: 30,821 千円 (R4 年度直接経費: 7,712 千円)

 3. 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

全年度契約金額: 27,950千円(R4年度直接経費: 4,500千円)

- 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
 直接経費:3,150千円
- 5. 共同研究:民間企業共同研究(令和4年5月12日~令和5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
 直接経費:1,250千円
- 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 (R4年度直接経費:3,200千円)
- 7. 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 (R4 年度直接経費:13,500 千円)
- 8. 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 (R4年度直接経費:600千円)
- 9. 科研費:若手研究(令和元年度~令和4年度)
 研究課題:敵対的生成ネットワークを用いたノイズ除去手法の開発と生体信号への応用
 研究代表者:堀江 和正
 全年度直接経費:3,300千円(R4年度期間延長分:1,807,950円)
- 10. 科研費:基盤研究 B (令和元年度~令和4年度)
 研究課題:高水準仮想化機能を持つ Augmented リアルビッグデータ利活用基盤の構築
 研究代表者:北川 博之
 全年度直接経費:13,200 千円 (R4 年度直接経費:2,900 千円)
- 11. 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 (R4 年度直接経費:1,500 千円)

- 12. 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)
 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
 R4年度直接経費: 650千円
- 13. 共同研究:民間企業共同研究(令和4年4月1日~令和5年3月31日)
 研究課題:モビリティイノベーションの社会応用と未来社会工学研究
 研究分担者:北川 博之
 R4年度直接経費:7,000千円
- 14. 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
 直接経費:3,150千円
- 6. 研究業績
 - (1) 研究論文
 - A) 査読付き論文

<学術雑誌論文>

- Suomi Kobayashi, Shohei Matsugu, Hiroaki Shiokawa, "Indexing Complex Networks for Fast Attributed kNN Queries", Social Network Analysis and Mining, Vol.12, No.82, pp.21 pages, Jul. 2022.
- Katia Bourahmoune, Karlos Ishac, Toshiyuki Amagasa, "Intelligent Posture Training: Machine-Learning-Powered Human Sitting Posture Recognition Based on a Pressure-Sensing IoT Cushion", Sensors, Vol. 22, No. 14, Article No. 5337, Jul. 2022.
- Kazumasa Horie, Leo Ota, Ryusuke Miyamoto, Takashi Abe, Yoko Suzuki, Fusae Kawana, Toshio Kokubo, Masashi Yanagisawa, and Hiroyuki Kitagawa, "Automated sleep stage scoring employing a reasoning mechanism and evaluation of its explainability", Scientific Reports, Vol. 12, Article number 12799, Jul. 2022.
- Kota Yukawa, Toshiyuki Amagasa, "Online Optimized Product Quantization for ANN Queries over Dynamic Database using SVD-Updating", Trans. Large Scale Data Knowl. Centered Syst., Vol. 52, pp. 86-102, Sep. 2022.

- Ryohei Kobayashi, Kento Miura, Norihisa Fujita, Taisuke Boku, and Toshiyuki Amagasa, "An Open-source FPGA Library for Data Sorting", Journal of Information Processing, Vol.30, pp.766-777, Oct. 2022.
- Savong Bou, Hiroyuki Kitagawa, Toshiyuki Amagasa, "CPiX: Real-Time Analytics Over Out-of-Order Data Streams by Incremental Sliding-Window Aggregation", IEEE Trans, Knowl, Data Eng, Vol. 34, No. 11, pp. 5239-5250, Nov. 2022.
- Hailemariam Mehari Yohannes, Toshiyuki Amagasa, "A method of named entity recognition for Tigrinya", ACM SIGAPP Applied Computing Review (SIGAPP), Vol. 22, Issue 3, pp 56-68, Nov. 2022.
- Masaya Yamada, Hiroyuki Kitagawa, Toshiyuki Amagasa, Akiyoshi Matono, "Augmented Lineage: Traceability of Data Analysis Including Complex UDF Processing", The VLDB Journal, Springer, Nov. 2022.
- John Bosco Mugeni, Toshiyuki Amagasa, "A Graph-Based Blocking Approach for Entity Matching Using Contrastively Learned Embeddings", ACM SIGAPP Applied Computing Review, Vol. 22, Issue 4, pp 37-46, Feb. 2023.
- Vijdan Khalique, Hiroyuki Kitagawa, and Toshiyuki Amagasa, "BPF: A Novel Cluster Boundary Points Detection Method for Static and Streaming Data", Knowledge and Information Systems, Springer, Mar. 2023.

B) 査読無し論文

該当なし

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

 Hiroyuki Kitagawa, "Big Sequence Data Analysis: From Stream Processing Technology to Applications in Sleep Medicine", The 23rd IEEE International Conference on Information Reuse and Integration for Data Science (IRI2022) (Keynote Talk), Online, Aug. 9, 2022.

B) 一般講演

<査読付き国際会議論文>

 John Bosco Mugeni, Toshiyuki Amagasa, "A graph-based blocking approach for entity matching using pre-trained contextual embedding models", The 37th ACM/SIGAPP Symposium on Applied Computing, April 2022 (SAC 2022), pp. 357-364, Virtual Conference, Apr.25-29, 2022.

- Hailemariam Mehari Yohannes, Toshiyuki Amagasa, "Named-entity recognition for a lowresource language using pre-trained language model", The 37th ACM/SIGAPP Symposium on Applied Computing, April 2022 (SAC 2022), pp. 837-844, Virtual Conference, Apr. 25-29, 2022.
- Vijdan Khalique and Hiroyuki Kitagawa, "BPF: An Effective Cluster Boundary Points Detection Technique", Proc. 33rd International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2022), Part I, pp. 404-416, Vienna, Austria, Aug. 22-24, 2022.
- Savong Bou, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "InTrans: Fast Incremental Transformer for Time Series Data Prediction", Proc. 33rd International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2022), Part II, pp. 47-61, Vienna, Austria, Aug. 22-24, 2022.
- Kota Yukawa, Toshiyuki Amagasa, "BLOCK-OPTICS: An Efficient Density-Based Clustering Based on OPTICS", Proc. 33rd International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2022), Part II, pp. 291-296, Vienna, Austria, Aug. 22-24, 2022.
- Kyohei Tsuihiji, Toshiyuki Amagasa, "GPU-Accelerated Reverse K-Nearest Neighbor Search for High-Dimensional Data", The 11th Int'l Workshop on Advances in Data Engineering and Mobile Computing (DEMoC-2022) in conjunction with NBiS 2022, pp. 279-288, Virtual Conference, Sep. 7, 2022.
- Salman Ahmed Shaikh, Hiroyuki Kitagawa, Akiyoshi Matono, Kyoung-Sook Kim, "TStream: A Framework for Real-time and Scalable Trajectory Stream Processing and Analysis", Proc. 30th ACM SIGSPATIAL International Conference on Advances in Geographic Information Systems 2022 (ACM SIGSPATIAL 2022), Seattle, Washington, Nov. 1-4, 2022.
- Ryuichi Yagi, Hiroaki Shiokawa, "Fast Top-k Similar Sequence Search on DNA Databases", Proc. 24th International Conference on Information Integration and Web Intelligence (iiWAS2022), pp. 145-150, Virtual Conference, Nov. 28-30, 2022.
- Suomi Kobayashi, Shohei Matsugu, Hiroaki Shiokawa, "Tree-based Graph Indexing for Fast kNN Queries", Proc. 24th International Conference on Information Integration and Web Intelligence (iiWAS2022), pp. 195-207, Virtual Conference, Nov. 28-30, 2022.
- Masaya Yamada, Hiroyuki Kitagawa, Salman Ahmed Shaikh, Toshiyuki Amagasa, Akiyoshi Matono, "Streaming Augmented Lineage: Traceability of Complex Stream Data Analysis", Proc. 24th International Conference on Information Integration and Web Intelligence (iiWAS2022), pp. 224-236, Virtual Conference, Nov. 28-30, 2022.
- 11. Savong Bou, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, Salman Ahmed Shaikh, Akiyoshi Matono, "PR-MVI: Efficient Missing Value Imputation over Data Streams by Distance

Likelihood", Proc. 24th International Conference on Information Integration and Web Intelligence (iiWAS2022), pp. 338-351, Virtual Conference, Nov. 28-30, 2022.

- Mehari Yohannes Hailemariam, Toshiyuki Amagasa, "A Scheme for News Article Classification in a Low-Resource Language", Proc. 24th International Conference on Information Integration and Web Intelligence (iiWAS2022), pp. 519-530, Virtual Conference, Nov. 28-30, 2022.
- Kento Miura, Ryohei Kobayashi, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, Norihisa Fujita, and Taisuke Boku, "An FPGA-based Accelerator for Regular Path Queries over Edge-labeled Graphs", Proc. 2022 IEEE International Conference on Big Data (IEEE BigData2022), Osaka, Japan, December 17 – Dec. 20, 2022
- 14. Takdir, Hiroyuki Kitagawa, and Toshiyuki Amagasa, "Region-based Sub-Snapshot (RegSnap): Enhanced Fault Tolerance in Distributed Stream Processing with Partial Snapshot", Proc. 7th Workshop on Real-time Stream Analytics, Stream Mining, CER/CEP & Stream Data Management in Big Data, Co-located with 2022 IEEE International Conference on Big Data (IEEE BigData2022), pp. 3374-3382, Osaka, Japan, Dec. 17, 2022.
- 15. Katia Bourahmoune, Karlos Ishac, Marc Carmichael, and Toshiyuki Amagasa, "Owro: A Novel Robot for Sitting Posture Training Based on Adaptive Human Robot Interaction", The 6th IEEE Workshop on Human-in-the-Loop Methods and Future of Work in BigData (IEEE HMData 2022) co-located with IEEE Bigdata 2022, pp. 3986-3991, Osaka, Japan, Dec. 17, 2022.
- Hailemariam Mehari Yohannes and Toshiyuki Amagasa, "Long Text Classification using Pretrained Language Model for a Low-resource Language", ICICT2023, Mar. 24-26, 2023.
- Yuma Kokubo and Toshiyuki Amagasa, "Dynamic Load Balancing of RDF Reasoning in Fog-Computing Environments", SAC 2023, Mar. 27-31, 2023.

(3) 国内学会·研究会発表

A) 招待講演

該当なし

B)その他の発表

<学会発表>

 川上隼, Bou Savong, 天笠俊之, "データストリームに対する効率的な複数連続的集 約アルゴリズム", 情報処理学会第 85 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2023), 電気通信大 学(東京都), 1N-06, 2023 年 3 月 2 日~3 月 4 日.

- 2. 安田裕真,塩川浩昭,"多次元時系列データに対する高速なモチーフ問合せ手法の提案",情報処理学会第85回全国大会 (IPSJ 全国大会 2023),電気通信大学(東京都), 1N-07,2023 年 3 月 2 日~3 月 4 日.
- 山崎昂輔, "異種知識グラフに対する効率的な問合せ処理のためのデータ分割手法", 情報処理学会第85回全国大会 (IPSJ 全国大会 2023), 電気通信大学(東京都), 2N-01, 2023 年3月2日~3月4日.
- 小倉勇大,早瀬康裕,天笠俊之, "PDG 上の経路集合を入力とした二段階の Transformer によるメソッド名推定",情報処理学会第85回全国大会 (IPSJ 全国大会 2023),電気通信大学(東京都),6K-04,2023年3月2日~3月4日.
- 5. 高根沢光輔, "BERT-NER によるテンプレート分類と Patent-Tokenizer を用いた和文 特許文章の文章生成", 情報処理学会第 85 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2023), 電気通 信大学 (東京都), 6V-01, 2023 年 3 月 2 日~3 月 4 日.
- 高根沢光輔, 堀江和正, 天笠俊之, "BERT-NER によるテンプレート分類と, 未知語を 考慮した Patent-Tokenizer による和文特許文章の文章生成", 第 15 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 2023), Short paper, 1a-7-2, 2023 年 3 月 5 日~3 月 9 日.
- Hiroto Mamba, Yasuhiro Hayase, Toshiyuki Amagasa, "Utilizing Abstract Syntax Tree Embedding to Improve the Quality of GNN-based Class Name Estimation", 第15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 2023), 1b-9-4, 2023 年3月5日 ~3月9日.
- 大森雄基,北川博之,天笠俊之,"エンティティリンキング機能を有する知識ベースと 外部情報源の統合利用手法",第 15 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 2023), 2a-6-1, 2023 年 3 月 5 日~3 月 9 日.
- 9. 佐藤祥吾,天笠俊之,"SPARQLを対象としたクエリ書き換えによる異種データ統合", 第 15 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 2023), 2a-6-4, 2023 年 3 月 5 日~3 月 9 日.
- 対比地恭平,天笠俊之,"特徴選択を用いた高次元データに対する逆 k 最近傍検索の 高速化",第 15 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 2023), 2a-7-4,2023 年 3 月 5 日~3 月 9 日.
- 11. 溝谷祐大,小林諒平,藤田典久,朴泰祐,天笠俊之,"FPGA 間通信フレームワーク CIRCUS を利用した複数 FPGA によるグラフ幅優先探索の提案",第15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 2023), Short paper, 2a-7-5, 2023 年 3 月 5 日~3 月 9 日.

- 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",第15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 2023), 2a-8-1, 2023 年3月5日~3月9日.
- 小久保柚真,天笠俊之,"フォグの負荷及び通信状況を考慮したコストに基づく推論 処理の動的負荷分散",第15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 2023), 2a-8-3, 2023 年3月5日~3月9日.
- 14. 安田裕真,塩川浩昭,"多次元時系列データに対する類似部分シーケンス問合せの高速化",第 15 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 2023), Short paper, 2b-2-5, 2023 年 3 月 5 日~3 月 9 日.
- 八木隆一, 直井悠馬, 塩川浩昭, "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", 第15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 2023), Short paper, 2b-3-4, 2023 年 3 月 5 日~3 月 9 日.
- 16. 直井悠馬, 真次彰平, 塩川浩昭, "グラフデータベースに対する高速高精度な相関問合 せ", 第15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 2023), 2b-4-4, 2023 年 3 月 5 日~3 月 9 日.
- 17. 真次彰平,藤原靖宏,塩川浩昭,"グラフ集約に基づく高速な最大 k-plex 探索",第15
 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 2023), 2b-6-2, 2023 年 3月5日~3月9日.
- 小林瑞季,真次彰平,塩川浩昭,"動的グラフにおけるk最近傍探索のための索引更新 手法の提案",第15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 2023), 2b-6-4, 2023年3月5日~3月9日.
- 19. 大宮直樹, 堀江和正, 北川博之, "睡眠ステージ判定のためのスタイル変換に基づく脳 波信号のノイズ・個人差除去", 第15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 2023), Short paper, 5a-4-4, 2023 年3月5日~3月9日.
- 20. 山田空, 堀江和正, 北川博之, "特徴波の発生タイミングを考慮したモデルによる睡眠 ステージ判定精度の向上とエポックフリーなステージ判定", 第 15 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 2023), Short paper, 5a-4-5, 2023 年 3 月 5 日~3 月 9 日.
- 国生泰資,山田空,堀江和正,阿部高志,北川博之,"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設計",第 15 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 2023), Short paper, 5a-7-4, 2023 年 3 月 5 日~3 月 9 日.

(4) 著書, 解説記事等

 波多野賢治 編著,天笠俊之 著,鈴木優 著,宮崎純 著,楠和馬 著,「テキストデー タマネジメント 前処理から分析へ」,テキストアナリティクス 第4巻,岩波書店, ISBN 9784000298995,2022年12月9日.

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

該当なし

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
 - ▶ 筑波大学情報ガバナンス基盤室長
 - ▶ 計算科学研究センター:ビッグデータ・AI連携推進室長
 - ▶ 情報理工学位プログラム:デュアルディグリー推進室室長

塩川浩昭准教授

- 学外
 - 国立情報学研究所 グローバルサイエンスキャンプ 2020年度「情報科学の達人」
 メンター
- 学内
 - ▶ 計算科学研究センター:セキュリティ委員会委員,共同研究委員会委員
 - ▶ 情報科学類:カリキュラム委員会委員、クラス担任、心青会担当委員
 - ▶ 情報理工学位プログラム:ダブルディグリープログラム推進室室員、入試オン ライン化 WG 委員

▶ ヒューマニクス学位プログラム:学生支援委員会委員 堀江和正助教

- 学外
 - ▶ 該当なし
- 学内
 - ▶ 情報科学類:広報委員会委員
 - ▶ 情報理工学位プログラム:インターンシップ委員会委員
 - ▶ ヒューマニクス学位プログラム:広報委員会副委員長,運営委員会委員

10. 社会貢献·国際貢献

天笠俊之教授

● 国際委員等

▶ プログラム委員: DEXA2022, iiWAS2022, IDEAS2022, 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

VIII-2. 計算情報学研究部門

1. メンバー

教授	亀田 能成、北原 格
助教	宍戸 英彦
研究員	謝 淳
学生	大学院生 36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)、スポーツ学、Surgical vision を 含む医療応用、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。また、その学会発表において、国際会議で5件、国内シン ポジウムで1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。

共同研究も多方面に広がりをもちつつあり、次節で上げている研究のうち、4件は共同研 究プロジェクトとしての成果である。文献リストにあるように、国際交流による国際共著論 文・学会発表も増えつつある。

研究活動の広がりとして、本センターとイスラエルの Holon Institute of Technology 他で締結 した MoU により実施している共同研究に関連して、査読付雑誌論文1件を発表した。また、 オーストラリアの Curtin University、イギリス University of Southampton との国際共同研究か ら、査読付き国際会議論文3件、査読付き雑誌論文1件の発表に至った。

3. 研究成果

[1] モバイルデバイスによる点字ブロックの認識と最寄りの点字ブロックへの誘導

本研究では、視覚障害者が点字ブロックの存在を見つけられない状況において、画像認識 技術に基づき、最短の点字ブロックに誘導する方法を実現することに成功した。まず、独自 の画像データセットを用いて、深層学習ネットワーク SSD を用いた点字ブロックの検出方法 を用意する。様々な種類の点字ブロッや規格外の点字ブロックは、屋内と屋外の風化によっ て見え方が異なる(図:点字ブロックのデータベース)。提案手法はそれらに対応することがで きる。次に、検出方法を、カメラの高さの違いに対応できるようにする。人の身長や一般的 なロボットで撮影した点字ブロックの画像で学習データセットを構築することで、高さの異 なるカメラでの検出を実現した。実証実験として、モバイル端末のカメラを用いた点字ブロ ックのリアルタイム認識を実現した。このために、SSD ネットワークに軽量ディープラーニ ングネットワークである MobileNet を組み込んだ。その実行環境のもとで、点字ブロックの 向きと最短距離を推定する方法も提案した(図:点字ブロックの方向推定)。これにより、モバ イル端末単体でも視覚障害者の街歩き支援が可能であることを示すことに成功した。本研究 については、成果までまとめて、2023 年1月開催の IWAIT2023 国際会議で発表した。(Shotaro Nakamura, Hidehiko Shishido, and Yoshinari Kameda, "Braille Bock Detection at Shortest Distance by Mobile Devices," International Workshop on Advanced Image Technology(IWAIT) 2023.)



点字ブロックデータベースの構築 ブロック種別のアノテーション

図:点字ブロックのデータベース



JIS 規格外の点字ブロック認識結果路面上の直線推定

図:点字ブロックの方向推定

[2] 慣性センサのみからの歩行者の次歩推定

視覚障害者の歩行において、次の一歩を、実際に足が地面に着く前に予測できれば、高度 で安全・安心な歩行支援が可能になる。本研究では、地面に触れる一歩と次歩と定義する。

本研究では、歩行者に持たせたスマートフォンの IMU を用いた次ステップ着地位置予測の 実現方法について提案する(図:次歩推定)。

研究上の挑戦の一つは、スマートフォンが必ずしも体にしっかりと装着されているとは限 らないとする点である。IMUのみによる次ステップ予測は不良設定問題であると考えられる。 本研究では、人の歩行の揺れにはパターンがあるであろうことに着目した。そのことから、 IMUの出力、次のステップの位置、スマートフォンの位置の組からなる学習データセットを 作成し、次のステップの着地位置予測を実現した。本研究については、成果までまとめて、 2023年1月開催のIWAIT2023国際会議で発表した。(Ikuto Ohki, Hidehiko Shishido, and Yoshinari Kameda, "Study of Next-Step Prediction Method Using Smartphone IMU," International Workshop on Advanced Image Technology(IWAIT) 2023.)



図:次歩推定

[3] ニューラル場を用いた多視点画像による光の屈折表現の学習

本研究では、透明な媒質による光の屈折が発生している状況を仮定し、任意のカメラ位置から見た視点の合成、すなわち新規視点合成を実現する手法を提案する(図:新規視点合成)。





新規視点合成

図:新規視点合成

新規視点合成の結果は多視点画像のみからニューラルネットワークの学習アルゴリズムを 用いて計算される。この研究では、透明媒質の境界面の扱いが異なる二通りの手法を提案し ている。そのうちの一方の手法では新規視点合成の映像再現精度が高いことが特徴である。 もう一方の手法では、透明媒質の境界面をも明示的に推定可能することができる。

光の屈折とは、光が媒質の境界を越える際に屈折率に応じてその進行方向を変える現象を 指す。この現象は、水やガラスのような我々の身近な透明媒質の表面でも発生する。従来の 多視点画像による3次元再構成の手法である Structure from Motion, Visual SLAM, Multi-view Stereo では、基本的に直線光路を仮定したモデル化が行われており、透明媒質により光が屈 折する状況ではその仮定に反することから再構成が困難になることがわかっている。

2020 年に NeRF という深層学習に基づく新規視点合成のためのシーン表現が提案された。 NeRF でも直線光路を仮定したレンダリングによりシーン表現が学習される。このため従来の 3次元再構成と同じく光が屈折する状況にこの手法を適用することは問題となる。

本研究では、 光の屈折発生下での多視点画像のみを利用した NeRF によるシーン表現の 獲得を目的とする。このときに、光路の屈折を、屈折ではなく、オフセット場というアイデ アを導入するのが本研究の着想のユニークな点である(図;オフセット場)。このように表 現することで、NeRF ネットワークに接続する形でオフセット場ネットワークを用意すること ができ、効果的な学習が可能となる(図:ネットワーク構成)。本研究の成果については、 2022 年 11 月の ICIP2022 国際会議で発表した。また、その前での国内発表では、MIRU2022 という国内最大規模の画像処理認識シンポジウムで、研究を進めていた学生が若手奨励賞を 受賞した。 (Taku Fujitomi, Ken Sakurada, Ryuhei Hamaguchi, Hidehiko Shishido, Masaki Onishi, and Yoshinari Kameda, "Light Bending Neural Radiance Fields for Transparent Medium," The 29th IEEE International Conference on Image Processing (IEEE ICIP2022), 2022. 藤冨 卓, 櫻田 健, 濱 口 竜平, 宍戸 英彦, 大西 正輝, 亀田 能成, "直線光路を表現可能な Neural Radiance Fields," MIRU 学生奨励賞, 2022.)



図:オフセット場



図:ネットワーク構成

[4] 野球映像を用いた外野手のフライ性打球に対する移動軌跡の可視化

本研究では、異分野間連携として広島大学総合科学部・人間社会科学研究科スポーツバイ オメカニクス研究室と共同研究を実施した。本研究では、野球競技において外野手の守備範 囲を定量的に評価することを目的とし、映像から選手の移動軌跡を検出する手法を提案した。 具体的には、野球映像中の特定の選手を識別し、SIFTを用いた特徴点のマッチングにより画 角変化のホモグラフィを推定することで、選手の移動軌跡を可視化した。特徴点は外野フェ ンスやスタンドの広告の文字や構造物の部分で多く検出され、画素値の変化に乏しいフィー ルドの領域では特徴点の検出数は少なかった。十分な特徴点の抽出が行えない場合において は、ホモグラフィの推定に大きな誤差が生じるが、大半の動画については十分な特徴点が取 得できることを確認した。また、ホモグラフィ推定から選手の移動軌跡を算出することによ り、提案手法の有効性を確認した。2023 年 1 月開催の国際会議 IWAIT2023 で発表し、Best Paper Award を受賞した。(Shunzo Yamagishi, Hidehiko Shishido, Yoshinari Kameda, Itaru Kitahara, "Visualization Method of Movement Trajectory in Outfielder's Fly Ball Catching Technique using Baseball Video," International Workshop on Advanced Image Technology (IWAIT) 2023)



(左)選手位置の描画(画角の変化補正なし) (中央) Homography によって画角変化を修正 (右)選手位置の描画画角の変化補正あり)

[5] サッカー競技映像における選手位置情報を用いたピッチ上のスペース推定

本研究では、サッカーの競技俯瞰映像からスペースを推定し、映像上に描画する手法を提 案した。提案手法では物体検出によって映像上の選手を検出し、色情報を用いたチーム分類 を行った。混合ガウス分布を用いることで選手の優勢領域を算出し、推定したスペース情報 を可視化した。提案した可視化手法は、混合ガウス分布を用いることで選手個々人の守備領 域だけでなく、複数人の守備選手が密集した状況におけるスペースを表現できることが分か った。図に示すように、守備の優勢領域を可視化することで、スペースの位置や大きさは直 感的な観察を可能とする。同様に守備の優勢領域が可視化された提示は新たな視点による分 析が期待できる。例えば、赤の領域が大きいほど相手が密集したブロック守備を行なってい る状況であり、ピッチ幅を最大限に活用した大きなボールの展開が有効であるという戦略を 立てることができる。赤い領域が小さいほど相手のブロックがコンパクトではない状況であ り、守備ブロックの内部から攻略することが最適解であるという戦略を立てることができる。 混合ガウス分布を用いることは、相手の選手間の結びつきの強さを評価することができる。 選手1人につき1つのガウス分布が存在するが、選手同士の結びつきが強いとガウス分布は 結合される。したがって、ガウス分布の結合に着目することで、相手の守備の偏りの観点に おいても分析できること分かった。2023年2月開催の情報処理学会オーディオビジュアル複 合情報処理研究会(AVM)で発表した。(金侑輝, 宍戸英彦, 亀田能成, 北原格, "サッカー競 技映像における選手位置情報を用いたスペース推定", 第120回オーディオビジュアル複合情 報処理研究会(AVM))



選手位置情報を用いて混合ガウス分布に基づく守備選手の優勢領域からスペースを推定

[6] 多視点映像に基づく外科手術支援(計算メディカルサイエンス:筑波大学病院)

外科手術の現場では深刻な人材不足が問題視されており、若手外科医教育の重要性が増加 している。若手医師の教育では、手術映像から学ぶことは多いが、従来の撮影法には課題が 存在する。無影灯からの撮影では、医師の頭や腕が遮蔽になることが多く、手技の技能継承 に重要な手元がうまく見えない状況が発生する。本研究では、外科医と共同で外科手術現場 に導入可能な多視点撮影システムを構築した。複数台のカメラを円周上に配置し、それらの カメラを適切に切り替えることで遮蔽問題を回避し、良質な教育映像コンテンツの収集を可 能とする。筑波大学病院外科手術室での臨床実験を実施し、遮蔽問題に対する撮影手法の効 果を確認した。2023 年 5 月開催の電子情報通信学会医用画像研究会(MI)での発表を予定し ている。(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", 医用画像研究会(MI))



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

X 線画像から3次元点群と画像上の対応点を推定し、 CT モデルとの位置合わせを行う方 法を考案した。従来手法では3次元 CT モデルから3次元の仮想透視画像を生成し、 X 線画 像との類似度を用いて投影姿勢の最適化を行うが、類似度として用いられる相互相関や相互 情報量は、適切な投影姿勢の初期値を必要とする上に真値から大きく離れていると局所解に 陥りやすいという問題が存在した。本研究では、X 線画像から3次元点群の復元と画像上の 対応点を推定し、与えられた3次元 CT モデルとの位置合わせを行うことで初期値に依存し ない全自動のレジストレーションパイプラインを実現した。 2023 年 1 月開催の国際会議 IFMIA2023 で発表し、Best Presentation Award を受賞した。(Pragyan Shrestha, Xie Chun, Hidehiko Shishido, Yuichi Yoshii, Itaru Kitahara, "X-Ray to CT Registration Using Scene Coordinate Regression Network", International Forums on Medical Imaging in Asia (IFMIA2023))



[8] 車載映像からの周辺環境の3次元情報推定(産学連携:日立製作所)

深層学習とステレオ視によって復元した奥行き情報を互いの弱点を補い合う形で統合する ことにより、推定精度向上を目的とした手法を考案した。深層学習による推定処理では単眼 画像からシーンの奥行き情報を推定可能だが、学習時と異なる観測がなされた場合に推定精 度が低下する。ステレオ視は、事前学習を要さないが、正確な対応情報が得難い領域で推定 精度が低下する。両者の推定信頼度に基づいて互いの端緒を補う統合法を実現し、その性能 を確認した。 2023 年 3 月開催の電子情報通信学会メディアエクスペリエンス・バーチャル 環境基礎研究会(MVE)で発表した。(村田実広, 宍戸英彦, 遠藤健, 北原格, "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))



[9] 3次元身体動作データによる製造作業評価(産学連携:東京エレクトロン)

半導体生産現場における器具(石英リング)の拭き取り作業を対象とした作業効率推定に 関する研究を実施した。3次元モーションキャプチャによって取得した上半身の拭き取り動 作から、その動作によって成される拭き取り率を深層学習によって推定する。3次元身体モ ーションデータは RGB-D カメラを用いて獲得し、拭き取り率は、粒子が付着した石英リング の紫外線照射画像から推定した。2023年3月開催の電子情報通信学会メディアエクスペリエ ンス・バーチャル環境基礎研究会(MVE)で発表した。(Takehiro Nagata, Li-Wei Cheng, Hidehiko Shishido, Hyejin Kim, Chanya Mahapun, Naoki Yoshii, Tsuyoshi Moriya, Itaru Kitahara, "Wiped-Rate Estimation for Semiconductor Manufacturing Using DNN Based on 3D Body Tracking, 電子情 報通信学会 技術研究報告(MVE))



3D body tracking Wiped rate calculation Wiped rate estimation

[10] 被写体の対称性を利用した透視投影に基づくスケッチの形状補正

三次元のスケッチ画像を3次元モデルに変換できれば、デザイナは直感的に自分の作品を 確認し、改善可能となる。しかし、デザイナはスケッチを描く時に必ずしも厳密に透視投影 関係に従うとは限らず、被写体ある程度変形してしまうことが多く、そのような画像を直接 に三次元復元すると精度が低くなる問題が存在する。本研究では、被写体の対称性を利用し 手描きスケッチの形状を透視投影に従うように自動補正する手法を提案した。

本研究成果は、2022 年 10 月開催の 2022 IEEE 11th Global Conference on Consumer Electronics (GCCE 2022)で発表した。(Chun Xie, Siqi Dong, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, A Sketch Correction Method for Symmetric Structures Based on Two-Point Perspective, 2022 IEEE 11th Global Conference on Consumer Electronics (GCCE 2022))



[11] 文化財のデジタルアーカイビングのための画像情報収集方式

本研究は文化財の有意義なデジタル情報の収集と利用を目的として、クラウドソーシング、 3次元画像処理技術、及び VR インタフェースを用いて専門家が見学者に撮影指示をする方 法を提案した。専門家が VR 空間で3次元形状復元されたモデルに指示をし、その地点情報 と見本画像を QR コードで文化財現場にいる見学者に渡す。見学者が指示を受け、クラウド ソーシングシステムを通して撮影画像をアップロードし、既存の三次元データと統合する。 VR 空間内で3Dモデルのテクスチャマッピングを行い、最新の文化財情報の確認が可能にな る。本研究成果は、2022年10月開催の2022IEEE11th Global Conference on Consumer Electronics (GCCE 2022)で発表した。(Chun Xie, Xue Xia, Hidehiko Shishido, Toshiya Matsui, and Itaru Kitahara, A VR Assisted Image Gathering Method for Digital Archiving of Cultural Properties, 2022 IEEE 11th Global Conference on Consumer Electronics (GCCE 2022))


[12] 投影型拡張現実を用いた腹腔鏡手術支援システム

切開創を微小に抑えられる腹腔鏡手術が普及しつつあるが、習得の難しさや作業効率低下 の課題が残っている。その原因の一つが既存のモニタを用いた情報提示である。映像を観察 する視点と手術の様子を撮影するカメラの位置が離れていることや、カメラ視野が狭いこと によって、術野付近での空間認識が難しいという問題が生じている。本研究は、腹腔鏡映像 と投影型拡張現実技術を利用し、腹部体表を透視して腹腔内が直接見えるような観察法を実 現した。本研究成果は、2022 年 9 日本バーチャルリアリティ学会第 27 回大会で発表した。 (謝 淳, 宍戸 英彦, 北口 大地, 小田 竜也, 北原 格, 投影型拡張現実を用いた腹腔鏡手術支 援システムの構築, 日本バーチャルリアリティ学会第 27 回大会論文集)



4. 教育

- LI Qiaoge 博士(人間情報学) Light Field Generation Methods Using Multiple Omnidirectional Cameras
- 飯田 雄介 修士(工学) ヘッドマウンドディスプレイを用いたサッカープレー体 験時の認知に対する脳波特性解析
- 3. 大木 郁登 修士(工学) スマートフォンの完成センサを用いた次歩推定
- 4. 木村 文哉 修士(人間情報学) ニューラル場表現と表情類似度に基づく 4 次元ポ ートレート生成
- 5. Pragyan SHRESTHA 修士(人間情報学) A Registration Method for X-Ray Image and CT-Scan Model of Bone Using Scene Coordinate Regression
- 6. 吉川 優依 修士(工学) ダンスと場景を連動させた映像生成手法
- 7. 内田 郁真 修士(工学) 固定視点サッカー映像からのオフサイド検出
- 8. 古府 侑樹 修士(工学) 偏光反射特性に基づく水溜り領域の自動アノテーション手法
- 9. 藤冨 卓 修士(工学) ニューラル場を用いた多視点画像による光の屈折表現の学習
- 10. 逸見 勲 修士(工学) パフォーマンス撮影のための演者立ち位置に応じたカメラ ワーク生成法
- 11. 木山 傑將 修士(工学) 自己注意機構を用いた空撮多視点画像から復元した三次元 点群の欠損補完法
- 12. 佐川 加奈 修士(工学) 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
- QIN Jingwen 修士(工学) A Multiple-Fiberscope Camera System to Generate 3D Borehole Models
- 14. XIANG Zhizheng 修士(人間情報学) A Stylized Free-Viewpoint Video Generation Based on Neural Ratiance Field
- 15. ZHANG Luoxi 修士(人間情報学) A 3D Model Generation Method of a Shooting Scene From a Single Snapshot
- 16. 田山悠人 学士(工学) VR 交通環境での驚き体験に対する脳波解析
- 17. 寺内翔英 学士(工学) 白杖歩行におけるカメラ映像からの白杖動作の定量化手法
- 18. 高月崚太郎 学士(工学) 開腹手術における遮蔽問題の解決に向けた多視点撮影シ ステム構築とカメラ間の視点補完
- 19. 藤井航 学士(工学) 自由視点映像を用いた疑似光軸一致型プロカムシステムの構築

- 20. 山岸峻造 学士(工学) 野球映像を用いた外野手のフライ性打球に対する移動軌跡の 可視化
- 21. 金侑輝 学士(工学) サッカー競技映像における選手位置情報を用いたピッチ上の スペース推定

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

- 1. MIRU 学生奨励賞, 藤富 卓, 櫻田 健, 濱口 竜平, 宍戸 英彦, 大西 正輝, 亀田 能成, "非直線光路を表現可能な Neural Radiance Fields," 2022/7.
- The best presentation award at Asia Pacific Workshop on Mixed and Augmented Reality (APMAR2022), Zhizheng Xiang, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, "Transparent Ink Wash Style for Free-Viewpoint Video Generation," 2022/12.
- The best short paper award at Asia Pacific Workshop on Mixed and Augmented Reality (APMAR2022), Yu Tamura, Hidehiko Shishido, and Yoshinari Kameda, "Evaluation of Active Patterns on Direction Instruction for Pedestrians," 2022/12.
- 4. The Best Paper at International Workshop on Advanced Image Technology(IWAIT) 2023, Fumiya Kimura, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, "4D Portrait Generation Based on Neural Radiance Field and Facial Expression Similarity," 2023/1.
- The Best Paper at International Workshop on Advanced Image Technology(IWAIT) 2023, Shunzo Yamagishi, Hidehiko Shishido, Yoshinari Kameda, and Itaru Kitahara, "Visualization Method of Movement Trajectory in Outfielder's Fly Ball Catching Technique Using Baseball Video," 2023/1.
- 6. The Best Paper at International Forum on Medical Imaging in Asia (IFMIA) 2023, The Best Paper at International Forum on Medical Imaging in Asia (IFMIA) 2023, Pragyan Shrestha, Chun Xie, Hidehiko Shishido, Yuichi Yoshii, and Itaru Kitahara, "X-Ray to CT Registration Using Scene Coordinate Regression Network," 2023/1.

外部資金

- 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(研究分担者: 宍戸英彦) 全年度直接経費: 960 万円(2022 年 度直接経費: 240 万円)
- 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(2022 年度 直接経費: 200 万円)

- 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(2022 年度直接経費:430万円、分担 120 万円)
- 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(2022 年度直接経費:260 万円、分担 80 万円)
- 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(2022 年度直接経費:240 万円、分担 30 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、宍戸、 謝)全年度直接経費:1460万円(2022 年度直接経費:450万円、分担 200万円)
- 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埋設管路の地震損傷を 推定するアルゴリズムの開発」(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(2022 年度直接経費: 760 万円、分担 100 万円)
- 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、宍戸、謝)全年度:17980万円(2022年度:1804 万円、分担 470万円)
- 9. 2022 年度 ARIHHP 戦略的連携強化プロジェクト「単眼バドミントン映像を用いた ショット推定手法の開発と試合形式におけるラリー戦術分析」代表: 宍戸英彦 2022 年度: 66.5 万円
- 10. 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:高橋英幸(研究分 担者:北原、宍戸、謝) 全年度:25000万円(2022年度:5000万円、分担 500万円)
- 11. 共同研究・株式会社日立製作所「自動運転の実現に向けた三次元計測の高精度化」代表者:北原格 2022 年度 183.3 万円
- 12. 共同研究・東京エレクトロン「マテリアルインフォマティクス、連携学習等」代表者:北原格 2022 年度 316 万円
- 科研費・研究活動スタート支援「投影型拡張現実を用いた腹腔鏡手術支援システムの構築」(2021-2024 年度)代表者: 謝淳 全年度直接経費: 240 万円(2022 年度直接経費: 120 万円)

知的財産権

特許, 伊藤 誠, 亀田 能成, 高鳥 光, シミュレータ、サーバ、評価システム、評価プログラム、及び評価方法, 2022 年 10 月 24 日.

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

- Akira Ikumi, Yuichi Yoshii, Yuta Iwahashi, Satoshi Sashida, Pragyan Shrestha, Chun Xie, Itaru Kitahara, and Tomoo Ishii, "Comparison of 3D Bone Position Estimation Using Qr Code and Metal Bead Markers", MDPI diagnostics, vol.13, no.6, ID-1141, 2023/03/16. (DOI: 10.3390/diagnostics13061141)
- Masashi Tsukamoto, Yagiang Wei, Takashuke Nagai, Itaru Kitahara, Koji Takeuchi, and Junichi Yamamoto, "Promoting Visual Perspective-Taking Skills in an Adolescent with Autism and Intellectual Disabilities Using Multi-View Videos: A Pilot Case Study", Journal of Developmental and Physical Disabilities, 2023/03/10. (DOI: 10.1007/s10882-023-09897-6)
- Pragyan Shrestha, Chun Xie, Hidehiko Shishido, Yuichi Yoshii, and Itaru Kitahara, "3D Reconstruction of Wrist Bones from C-Arm Fluoroscopy Using Planar Markers", MDPI Diagnostics, vol.13, no.2, 12 pages, 2023/1/16. (DOI: 10.3390/diagnostics13020330)
- 吉川 優依, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, "ダンスと場景を連動させた映像生成の 提案とダンス ONE プロジェクトへの実践", 情報処理学会 トランザクションデジタ ルプラクティス, vol.4, no.1, pp. 10-20, 2023/1/15.
- Yuichi Yoshii, Yuta Iwahashi, Satoshi Sashida, Pragyan Shrestha, Hidehiko Shishido, Itaru Kitahara, and Tomoo Ishii, "An Experimental Study of a 3D Bone Position Estimation System Based on Fluoroscopic Images", MDPI Diagnostics, vol.12, no.9, 2237, 2022/9/16. (DOI: 10.3390/diagnostics12092237)
- Dmitry Patashov, Yakir Menahem, Guy Gurevitch, Yoshinari Kameda, Dmitry Goldstein, and Michal Balberg, "Fnirs: Non-Stationary Preprocessing Methods", Biomedical Signal Processing and Control, vol.79, no.1, 15 pages, 2022/8/24. (DOI: 10.1016/j.bspc.2022.104110)
- Hisatoshi Toriya, Zedrick Paul L. Tungol, Hajime Ikeda, Narihiro Owada, Hyong D. Jang, Tsuyoshi Adachi, Itaru Kitahara, and Youhei Kawamura, "Fragmentation Size Distribution Measurement by Gnss-Aided Photogrammetry at Real Mine Site", MDPI Mining, vol.2, no.3, pp.438-448, 2022/6/24. (DOI: 10.3390/mining2030023)
- Itsuki Ueda, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, "Spatio-Temporal Aggregation of Skeletal Motion Features for Human Motion Prediction", Elsevier Array, vol.15, no.100212, 10 pages, 2022/6/23. (DOI: 10.1016/j.array.2022.100212)

- Qiaoge Li, Oto Takeuchi, Hidehiko Shishido, Yoshinari Kameda, Hansung Kim, and Itaru Kitahara, "Generative Image Quality Improvement in Omnidirectional Free-Viewpoint Images and Assessments", Trans on IEVC, vol.10, no.1, pp.107-119, 2022/6/16. (DOI: 10.11371/tievciieej.10.1 107)
- Hisatoshi Toriya, Dewan Ashraf, Hajime Ikeda, Narihiro Owada, Mahdi Saadat, Fumiaki Inagaki, Youhei Kawamura, and Itaru Kitahara, "Use of a Dnn-Based Image Translator with Edge Enhancement Technique to Estimate Correspondence Between Sar and Optical Images", MDPI Applied Sciences, vol.12, no.9, 16 pages, 2022/4/20. (DOI: 10.3390/app12094159)
- 11. Kohei Yoshino, Taiga Sato, Hisatoshi Toriya, Hidehiko Shishido, Jang Hyongdoo, Youhei Kawamura, and Itaru Kitahara, "Estimation Method of Fragmentation in Blast Muckpiles Using Deep Learning Based on 3D Point Clouds", International Journal of the Society of Materials Engineering for Resources, vol.25, no.1, pp.78-84, 2022/4/1.

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

- Misato Imai, Hidehiko Shishido, Itaru Kitahara, and Yoshinari Kameda, "A Visual Feedback Method of Motion Information on Alpine Skiing Experience in Head Mounted Display", International Workshop on Advanced Image Technology(IWAIT) 2023, 6 pages, 2023/1, Jeju and online, Korea. (DOI: https://doi.org/10.1117/12.2666665)
- Shotaro Nakamura, Hidehiko Shishido, and Yoshinari Kameda, "Braille Bock Detection at Shortest Distance by Mobile Devices", International Workshop on Advanced Image Technology(IWAIT) 2023, 6 pages, 2023/1, Jeju and online, Korea. (DOI: 10.1117/12.2666662)
- Ikuto Ohki, Hidehiko Shishido, and Yoshinari Kameda, "A Study of Next-Step Prediction Method Using Smartphone IMU", International Workshop on Advanced Image Technology(IWAIT) 2023, 6 pages, 2023/1, Jeju and online, Korea. (DOI: 10.1117/12.2666988)

- Fumiya Kimura, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, "4D Portrait Generation Based on Neural Radiance Field and Facial Expression Similarity", International Workshop on Advanced Image Technology(IWAIT) 2023, 6 pages, 2023/1, Jeju and online, Korea. (DOI: 10.1117/12.2666565)
- Yui Yoshikawa, Hidehiko Shishido, Yoshinari Kameda, and Itaru Kitahara, "Evaluation of a Video Generation Method Linking Dance and Scenes", International Workshop on Advanced Image Technology(IWAIT) 2023, 6 pages, 2023/1, Jeju and online, Korea. (DOI: 10.1117/12.2666428)
- Shunzo Yamagishi, Hidehiko Shishido, Yoshinari Kameda, and Itaru Kitahara, "Visualization Method of Movement Trajectory in Outfielder's Fly Ball Catching Technique Using Baseball Video", International Workshop on Advanced Image Technology(IWAIT) 2023, 6 pages, 2023/1, Jeju and online, Korea. (DOI: 10.1117/12.2666494)
- Jingwen Qin, Hisatoshi Toriya, Hidehiko Shishido, Youhei Kawamura, and Itaru Kitahara, "An Image-Capturing System to Generate 3D Borehole Models Using Multiple Fiberscope Cameras", International Workshop on Advanced Image Technology(IWAIT) 2023, 6 pages, 2023/1, Jeju and online, Korea. (DOI: 10.1117/12.2665982)
- Pragyan Shrestha, Chun Xie, Hidehiko Shishido, Yuichi Yoshii, and Itaru Kitahara, "X-Ray to Ct Registration Using Scene Coordinate Regression Network", International Forum on Medical Imaging in Asia (IFMIA) 2023, 1 page, 2023/1, Jeju and online, Korea.
- Itsuki Ueda, Yoshihiro Fukuhara, Hirokatsu Kataoka, Hiroaki Aizawa, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, "Neddf: Reciprocally Constrained Field for Distance and Density", Asia Pacific Workshop on Mixed and Augmented Reality (APMAR2022), P11, a full paper, 2022/12, Yokohama and online, Japan. (DOI: 10.48550/arXiv.2207.14455)
- Qiaoge Li, Itsuki Ueda, Chun Xie, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, "Omnivoxel: A Fast and Precise Reconstruction Method of Omnidirectional Neural Radiance Field", Asia Pacific Workshop on Mixed and Augmented Reality (APMAR2022), 2022/12, Yokohama and online, Japan. (DOI: 10.48550/arXiv.2208.06335)
- Chun Xie, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, "A Laparoscopic Surgery Support System Using Spatial Augmented Reality", Asia Pacific Workshop on Mixed and Augmented Reality (APMAR2022), 2022/12, Yokohama and online, Japan.
- Yu Tamura, Hidehiko Shishido, and Yoshinari Kameda, "Evaluation of Active Patterns on Direction Instruction for Pedestrians", Asia Pacific Workshop on Mixed and Augmented Reality (APMAR2022), 5 pages, 2022/12, Yokohama and online, Japan.

- Zhizheng Xiang, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, "Transparent Ink Wash Style for Free-Viewpoint Video Generation", Asia Pacific Workshop on Mixed and Augmented Reality (APMAR2022), 7 pages, 2022/12, Yokohama and online, Japan. (DOI: 10.48550/arXiv.2208.06335)
- Junyi Shen, Itaru Kitahara, Shinichi Koyama, and Qiaoge Li, "Size Does Matter: An Experimental Study of Anxiety in Virtual Realit", 28th ACM Symposium on Virtual Reality Software and Technology, pp.73:1-73:2, 2022/11, Tsukuba and online meeting, Japan. (DOI: 10.1145/3562939.3565683)
- Nicholas Schwier, Masayuki Masu, and Yoshinari Kameda, "The Impact of Artistic Imageson Human Eye Gaze Behavior", 63rd Annual Meeting of the Psychonomic Society, 2022/11, Boston and online meeting, USA.
- Itsuki Ueda, Yoshihiro Fukuhara, Hirokatsu Kataoka, Hiroaki Aizawa, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, "Neural Density-Distance Fields", European Conference on Conputer Vision(ECCV) 2022, 18 pages, 2022/10, Tel Aviv and online meeting, Israel. (DOI: 10.48550/arXiv.2207.14455)
- Taku Fujitomi, Ken Sakurada, Ryuhei Hamaguchi, Hidehiko Shishido, Masaki Onishi, and Yoshinari Kameda, "Light Bending Neural Radiance Fields for Transparent Medium", The 29th IEEE International Conference on Image Processing (IEEE ICIP2022), pp.2142-2146, 2022/10, Bordeaux and online meeting, France. (DOI: 10.1109/ICIP46576.2022.9897642)
- Qiaoge Li, Zhenghang Cui, Itaru Kitahara, and Ryusuke Sagawa, "Precise Gymnastic Scoring from TV Playback", 2022 IEEE 11th Global Conference on Consumer Electronics (GCCE 2022), pp. 412-415, 2022/10, Osaka and online meeting, Japan. (DOI: 10.1109/GCCE56475.2022.10014208)
- Qiaoge Li, Itsuki Ueda, Chun Xie, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, "Omnivoxel: A Fast and Precise Reconstruction Method of Omnidirectional Neural Radiance Field", 2022 IEEE 11th Global Conference on Consumer Electronics (GCCE 2022), pp. 367-371, 2022/10, Osaka and online meeting, Japan. (DOI: 10.1109/GCCE56475.2022.10014054)
- Chun Xie, Siqi Dong, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, "A Sketch Correction Method for Symmetric Structures Based on Two-Point Perspective", 2022 IEEE 11th Global Conference on Consumer Electronics (GCCE 2022), pp. 377-380, 2022/10, Osaka and online meeting, Japan. (DOI: 10.1109/GCCE56475.2022.10014276)
- 21. Chun Xie, Xue Xia, Hidehiko Shishido, Toshiya Matsui, and Itaru Kitahara, "A VR Assisted Image Gathering Method for Digital Archiving of Cultural Properties", 2022 IEEE 11th

Global Conference on Consumer Electronics (GCCE 2022), pp. 152-155, 2022/10, Osaka and online meeting, Japan. (DOI: 10.1109/GCCE56475.2022.10014128)

- 22. Yamato Kanno, Hidehiko Shishido, Masahiro Shinya, Yoshinari Kameda, and Itaru Kitahara, "Detection of Mitt Movement Trajectory in Catcher Framing Using Baseball Video", 2022 IEEE 11th Global Conference on Consumer Electronics (GCCE 2022), pp. 139-143, 2022/10, Osaka and online meeting, Japan. (DOI: 10.1109/GCCE56475.2022.10014147)
- Naoki Tanaka, Hidehiko Shishido, Masashi Suita, Takeshi Nishijima, Yoshinari Kameda, and Itaru Kitahara, "Detection of Hitting Point Area Using Footwork Trajectory in Badminton Video", 2022 IEEE 11th Global Conference on Consumer Electronics (GCCE 2022), pp. 74-78, 2022/10, Osaka and online meeting, Japan. (DOI: 10.1109/GCCE56475.2022.10014402)
- Kazuki Shimada, Taishi Sawabe, Hidehiko Shishido, Masayuki Kanbara, and Itaru Kitahara,
 "Video Generation Unconsciously Evoking Pre-Motion to Passengers in Automated Vehicles",
 2nd International Workshop on Comfort Intelligence with AR for Autonomous
 Vehicle(Workshop well be held in conjunction with ISMAR2022), pp.342-347, 2022/10,
 Singapore and online meeting, Singapore. (DOI: 10.1109/ISMAR-Adjunct57072.2022.00075)
- 25. Atom Scott, Ikuma Uchida, Masaki Onishi, Yoshinari Kameda, Kazuhiro Fukui, and Keisuke Fujii, "Soccertrack: A Dataset and Tracking Algorithm for Soccer with Fish-Eye and Drone Videos", 8th International Workshop on Computer Vision in Sports (CVsports) at CVPR 2022, pp.3569-3579, 2022/6, Lousiana, USA.
- Dmitry Patashov, Yakir Menahem, Yoshinari Kameda, Dmitry Goldstein, and Michal Balberg, "Preprocessing Fnirs Data Using the Cumulative Curve Fitting Approximation Algorithm", Biophotonics Congress: Biomedical Optics, 2 pages, 2022/4, online and Florida, USA. (DOI: 10.1364/BRAIN.2022.BM2C.7)

(3) 国内学会·研究会発表

- A) 招待講演
- 宍戸 英彦, "コンピュータビジョンによる計測技術及びスポーツデータサイエンス への応用", 情報処理学会 研究報告 AVM, 2023/2, 那覇.
- 2. 北原 格, "多視点画像データの利活用によるスマートマイニングの発展", 2022 年度 北海道資源・素材フォーラム「スマートマイニング for the future」, 2022/12, 札幌と オンライン.

- B)その他の発表
- 村田 実広, 宍戸 英彦, 遠藤 健, 北原 格, "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.122, no.440, pp. 321-326, 2023/3, 那覇.
- 木山 傑將, 宍戸 英彦, 北原 格, "空撮多視点画像から復元した三次元点群に対する 自己注意機構を用いた欠損領域補完法",電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.122, no.440, pp. 278-283, 2023/3, 那覇.
- 田 潤宇, 宍戸 英彦, 亀田 能成, "RGB-D 画像に基づく 2 人の協調行動のレベル推定", 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.122, no.440, pp. 254-259, 2023/3, 那覇.
- 宇津呂 雄生, 宍戸 英彦, 亀田 能成, "相撲映像に対するまわしのキーポイント検出 を利用した決まり手分類",電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.122, no.440, pp. 247-253, 2023/3, 那覇.
- Nagata Takahiro, Cheng Li-Wei, Shishido Hidehiko, Kim Hyejin, Yoshii Naoki, Morita Tsuyoshi, Kitahara Itaru, "Wiped-Rate Estimation for Semiconductor Manufacturing Using DNN Based on 3D Body Tracking", 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.120, no.440, pp. 235-240, 2023/3, 那覇.
- 6. 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",電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.120, no.440, pp. 229-234, 2023/3, 那覇.
- 7. 譚 鵬, 宍戸 英彦, 谷川 聡, 北原 格, "単眼 RGB 画像からの3次元姿勢推定に基づ く陸上競技選手のジャンプ能力におけるスプリントパフォーマンスとの関係性",電 子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.120, no.440, pp. 162-167, 2023/3, 那覇.
- 8. 亀田 能成, "人工知能と仮想空間活用拡大期における大学教育の在り方の検討", 電子情報通信学会 サイバーワールド研究会, 2023/3, 筑波大学.
- 9. 金 侑輝, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, "サッカー競技映像における選手位置情報を用いたスペース推定", 情報処理学会研究報告 AVM, 6 pages, 2023/2, 那覇.
- 髙橋 響熙, 上田 樹, 宍戸 英彦, 北原 格, "NeDDF を用いた単眼 Visual SLAM", 日本バーチャルリアリティ学会 第 68 回複合現実感研究会, 6 pages, 2023/1, 奈良とオンライン.
- 11. 飯田 雄介, 宍戸 英彦, 亀田 能成, "HMD 装着時における体動が脳波計測に与える 影響の調査", HCG シンポジウム 2022, 6 pages, 2022/12, 高松とオンライン.
- 12. 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衝 突回避手法の検討", HCG シンポジウム 2022, 4 pages, 2022/12, 高松とオンライン.

- 13. 古府 侑樹, 宍戸 英彦, 亀田 能成, "歩行者視点からの偏光反射特性に基づく水溜り 領域の自動判別", HCG シンポジウム 2022, 8 pages, 2022/12, 高松とオンライン.
- 14. タン コウシン, 宍戸 英彦, 亀田 能成, "手足と視線探索の運動分析を行えるバスケットボール VR シミュレータ作成の取り組み", HCG シンポジウム 2022, 4 pages, 2022/12, 高松とオンライン.
- 15. 佐川 加奈, 宍戸 英彦, 吹田 真士, 北原 格, "骨格情報の短時間主成分に対する極 値探索に基づくバドミントン選手の反応時間推定法の検討",電子情報通信学会 技 術研究報告 CNR, pp.11-16, 2022/11, 那須とオンライン.
- 田中 直樹, 宍戸 英彦, 吹田 真士, 高橋 英幸, 亀田 能成, 北原 格, "バドミントン 選手移動軌跡の深層学習分類を用いた打点領域検出", 情報処理学会 研究報告 AVM, vol.2022-AVM-119, no.13, pp. 1-6, 2022/11, 名古屋工業大学とオンライン.
- 藤原 円央, 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手法", 情報処理学会 研究報告 AVM, vol.2022-AVM-119, no.12, pp. 1-5, 2022/11, 名古屋工業大学とオンライン.
- 吉川 優依, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, "ダンスと場景を連動させた映像生成 手法の評価", 情報処理学会 研究報告 AVM, vol.2022-AVM-119, no.11, pp. 1-5, 2022/11, 名古屋工業大学とオンライン.
- 新里 優太, 宍戸 英彦, 榎本 靖士, 亀田 能成, 北原 格, "陸上トラック競技におけ る選手骨格位置を用いた移動軌跡推定手法", 情報処理学会 研究報告 AVM, vol.2022-AVM-119, no.10, pp. 1-5, 2022/11, 名古屋工業大学とオンライン.
- 木村 文哉, 宍戸 英彦, 北原 格, "ニューラル場表現と表情類似度に基づく4次元ポートレート生成法",日本バーチャルリアリティ学会 第 66 回複合現実感研究会, vol.2022-EC-65, no.38, pp.1-6, 2022/10, 釧路とオンライン.
- 21. 逸見 勲, 宍戸 英彦, 北原 格, "パフォーマンス撮影のための演者立ち位置情報を基 にしたカメラ位置姿勢生成手法",日本バーチャルリアリティ学会 第66回複合現実 感研究会, vol.2022-EC-65, no.37, pp.1-5, 2022/10, 釧路とオンライン.
- 坂井 甚太, 宍戸 英彦, 北原 格, "映像作品のカメラワーク数値化に向けたカメラと 被写体の位置姿勢推定法", 日本バーチャルリアリティ学会 第66回複合現実感研究 会, vol.2022-EC-65, no.36, pp.1-6, 2022/10, 釧路とオンライン.
- 23. 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", 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.122, no.200, pp. 63-68, 2022/10, 釧路 とオンライン.

- 24. 川田 洸希, 宍戸 英彦, 亀田 能成, "方向指示のための視線反応型アクティブパター ンの検討", 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.122, no.200, pp. 18-23, 2022/10, 釧路とオンライン.
- 大木 郁登, 宍戸 英彦, 亀田 能成, "スマートフォンの IMU を用いた次歩推定方法の検討",電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.122, no.200, pp. 13-17, 2022/10, 釧路とオンライン.
- 26. 謝 淳, 宍戸 英彦, 北口 大地, 小田 竜也, 北原 格, "投影型拡張現実を用いた腹腔 鏡手術支援システムの構築", 日本バーチャルリアリティ学会第 27 回大会論文集, 4 pages, 2022/9, 札幌とオンライン.
- 27. 張 洛沙, 宍戸 英彦, 北原 格, "A 3D model generation of a shooting scene from a single snapshot",日本バーチャルリアリティ学会第 27 回大会論文集,4 pages, 2022/9, 札幌 とオンライン.
- 28. 菅野 大和, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, "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の球種別分析",第 21 回情報科学技術フォーラム, pp.169-170, 2022/9、横浜とオンライン.
- 29. 田中 直樹, 宍戸 英彦, 吹田 真士, 亀田 能成, 北原 格, "バドミントン選手移動軌 跡の機械学習分類を用いた打点領域検出", 第21回情報科学技術フォーラム, pp.261-262, 2022/9, 横浜とオンライン.
- 30. 宍戸 英彦, "コンピュータビジョンによる計測技術及びスポーツ科学への応用",電子情報通信学会メディアエクスペリエンス・バーチャル環境基礎研究会 (MVE),企画トークセッション,2022/9,東京とオンライン.
- 31. 山岸 峻造, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, "野球映像を用いた外野手の捕球技術 における移動軌跡の分析", 第21回情報科学技術フォーラム, pp.257-258, 2022/9, 横 浜とオンライン.
- 32. 向 志政, 宍戸 英彦, 北原 格, "A Method to Style Transfer for Free-Viewpoint Video Generation", 日本バーチャルリアリティ学会第 27 回大会論文集, 4 pages, 2022/9, 札 幌とオンライン.
- 33. 木山 傑將, 宍戸 英彦, 北原 格, "自己注意機構に基づく空撮多視点画像から復元した三次元点群の欠損補完法の検討", 日本バーチャルリアリティ学会第 27 回大会論 文集, 4 pages, 2022/9, 札幌とオンライン.
- 山岸 峻造, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, "野球映像を用いた外野手の移動軌跡 によるフライ性打球処理の可視化", 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.122, no.175, pp.32-37, 2022/9, 東京とオンライン.

- 35. Zhang Haihan, 鳥屋 剛毅, 宍戸 英彦, 北原 格, "空撮映像に基づく建物群三次元復 元と階層化点群補完", 第 50 回 画像電子学会年次大会 (学会創設 50 周年記念大 会), 4 pages, 2022/8, 知床とオンライン.
- 36. 蛭田 雄也, 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 系における奥行き推定法", 第 50 回 画像電子学会年次大会 (学会創設 50 周年記念 大会), 4 pages, 2022/8, 知床とオンライン.
- 37. Ueda Itsuki, Fukuhara Yoshihiro, Kataoka Hirokatsu, Aizawa Hiroaki, Shishido Hidehiko, Kitahara Itaru, "NeDDF: Neural Density-Distance Fields", 第25回画像の認識・理解シンポジウム (MIRU2022), 4 pages, 2022/7, 姫路とオンライン.
- 38. 蛭田 雄也, 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 系における奥行き推定",第 25 回画像の認識・理解シンポジウム(MIRU2022),4 pages, 2022/7, 姫路とオンライン.
- 39. Li Qiaoge, Ueda Itsuki, Xie Chun, Shishido Hidehiko, Kitahara Itaru, "OmniVoxel: a Fast Omnidirectional Neural Radiance Field Reconstruction Method", 第25回画像の認識・理解シンポジウム (MIRU2022), 4 pages, 2022/7, 姫路とオンライン.
- 40. 藤冨 卓, 櫻田 健, 濱口 竜平, 宍戸 英彦, 大西 正輝, 亀田 能成, "非直線光路を表現可能な Neural Radiance Fields", 第25回画像の認識・理解シンポジウム (MIRU2022), 4 pages, 2022/7, 姫路とオンライン.
- 41. セレスタ プラギャン, 謝 淳, 宍戸 英彦, 吉井 雄一, 北原 格, "3次元ボリューム 推定ネットワークを用いた X 線画像と CT ボリュームの位置合わせ手法", 電子情報 通信学会 技術研究報告 MI, pp. 61-65, 2022/7, 小樽とオンライン.
- 42. 島田 和輝, 澤邊 太志, 宍戸 英彦, 神原 誠之, 北原 格, "自動走行車両搭乗者の予 備動作喚起を目的とした映像生成", 電子情報通信学会 技術研究報告 CNR, pp. 6-11, 2022/7, 那覇とオンライン.

7. 異分野間連携·産学官連携·国際連携·国際活動等

産学官連携

・ 産学連携:日立製作所との共同研究(代表:北原)

「自動運転の実現に向けた三次元計測技術の研究」

屋外環境を複数台のカメラで撮影した画像群を入力とし,他のカメラと重複されて撮影さ れた領域を手がかりとしてそれ以外の全ての領域を高精度に推定する深層学習技術,および, 観測データの質を改善するための補完技術に関する研究を日立製作所と共同で実施した。筑 波大学においては,深層学習とステレオ視によって復元した奥行き情報を互いの弱点を補い 合う形で統合することにより,推定精度向上を目的とした手法を考案した。 ・ 産学連携:東京エレクトロンとの共同研究(代表:北原)

「人物行動観測技術に基づく半導体生産支援技術に関する研究開発」

半導体生産で使用する器具の拭き取り作業効率を推定する研究を東京エレクトロンと共同 で実施した。3次元モーションキャプチャによって取得した上半身の拭き取り動作から、そ の動作による拭き取り率を深層学習を用いて推定した。粒子が付着した石英リングに紫外線 を照射しながら撮影した画像から拭き取り率を自動的に算出する方法を実現した。

国際連携·国際活動

亀田能成教授が中心となって締結した、計算科学研究センター、イスラエルの Holon Institute of Technology、およびアゼルバイジャンの Azerbaijan Medical University、およびイスラエルの Innovative Technologies Group 社との4者間の MoU に関連する研究成果から,査読付き雑誌論 文1件が採択された。

北原格教授がオーストラリアの Curtin University、イギリス University of Southampton との 国際共同研究から、査読付き国際会議論文3件、査読付き雑誌論文1件の発表に至った。

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

電子情報通信学会サイバーワールド研究会を2023年3月2日に筑波大学計算科学研究セン ターのワークショップ室で開催した(現地幹事:亀田)。

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

宍戸 英彦

システム情報工学研究科知能機能システム専攻 広報委員会 委員 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 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

宍戸 英彦

情報処理学会 コンピュータビジョンとイメージメディア研究会(CVIM) 委員 電子情報通信学会 メディアエクスペリエンス・仮想環境基礎 研究会(MVE) 委員 日本バドミントン学会 研究推進委員 情報処理学会 第20回情報科学技術フォーラム 担当委員,プログラム委員

11. その他

亀田 能成

人工知能科学センターでも研究に従事(プロジェクト研究部門モビリティ分野)。

北原 格

筑波大学サイバニクス研究センターでも研究に従事。



筑波大学 計算科学研究センター

〒305-8577 茨城県つくば市天王台 1-1-1 TEL 029-853-6487, 6488 FAX 029-853-6406 https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/



Annual Report FY2022

