

Center for Computational Sciences,
University of Tsukuba
Annual Report FY2021

筑波大学 計算科学研究センター
令和 3 年度 年次報告書



筑波大学

計算科学研究センター

Center for Computational Sciences

目次

まえがき	2
1 センター組織と構成員	4
2 令和三年度の活動状況	8
2.1 計算科学研究センターの次のステップに向けて	8
2.2 令和三年度の活動方針	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	14
2.6 今後のあり方	14
3 各研究部門の報告	15
I. 素粒子物理研究部門	15
II. 宇宙物理研究部門	39
III. 原子核物理研究部門	77
IV. 量子物性研究部門	86
V. 生命科学研究部門	106
V-1. 生命機能情報分野	106
V-2. 分子進化分野	125
VI. 地球環境研究部門	139
VII. 高性能計算システム研究部門	160
VIII. 計算情報学研究部門	205
VIII-1. データ基盤分野	205
VIII-2. 計算メディア分野	230

まえがき

筑波大学計算科学研究センター（以下、センター）は、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。2021年度には、2018年度から開始したセンター独自のマンスリーサバティカル制度（センターの教員・研究員を数週間～数ヶ月単位で海外派遣）を広く活用し、本学が提供する一般のサバティカル制度より柔軟で利用しやすい形での海外派遣を通じて、海外主要研究拠点との共同研究をより密に行う環境を整備してきました。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。

ところが、2020年度開始直前から始まったいわゆる COVID-19、世界規模の新型コロナウイルス感染症パンデミックという未曾有の大問題に直面し、これらの海外主要研究機関の研究者との物理的交流が困難となりました。そして、センターからの教員・研究者の海外派遣も、海外からの研究者の招聘も物理的に実現できない事態となりました。しかし、幸いにも COVID-19 下でオンライン会議システムや情報共有システムの開発・普及が飛躍的に発展し、結果的にむしろ今まで以上にコンスタントにテレビ会議などを通じて共同研究を推進することができました。センターでも年度開始前から、全ての教員が Zoom によるテレビ会議をスムーズに行えるライセンス付与などの環境を整えて対応した結果、COVID-19 による国際共同研究への影響を最小限に抑えることができました。2021年度からは大学側が全教員への Zoom ライセンス配布が行われたため、センターでは主要教員のみにライセンス付与を絞りましたが、引き続きテレビ会議を中心とした研究活動は活発に行われています。

センターでは、科学諸分野と計算機科学分野の協働・融合を軸とした「学際計算科学」を推進し、超高速計算機システム技術の開発を行うと共に、科学の諸領域における超高速シミュレーションおよび大規模データ解析や情報技術の革新的な応用方法の研究を行う、コ・デザインと呼ばれる研究手法を続けていますが、このコンセプトは現在の超高性能・超大規模コンピュータ開発の礎となっています。2019年度からは第10世代のセンター独自コンセプト

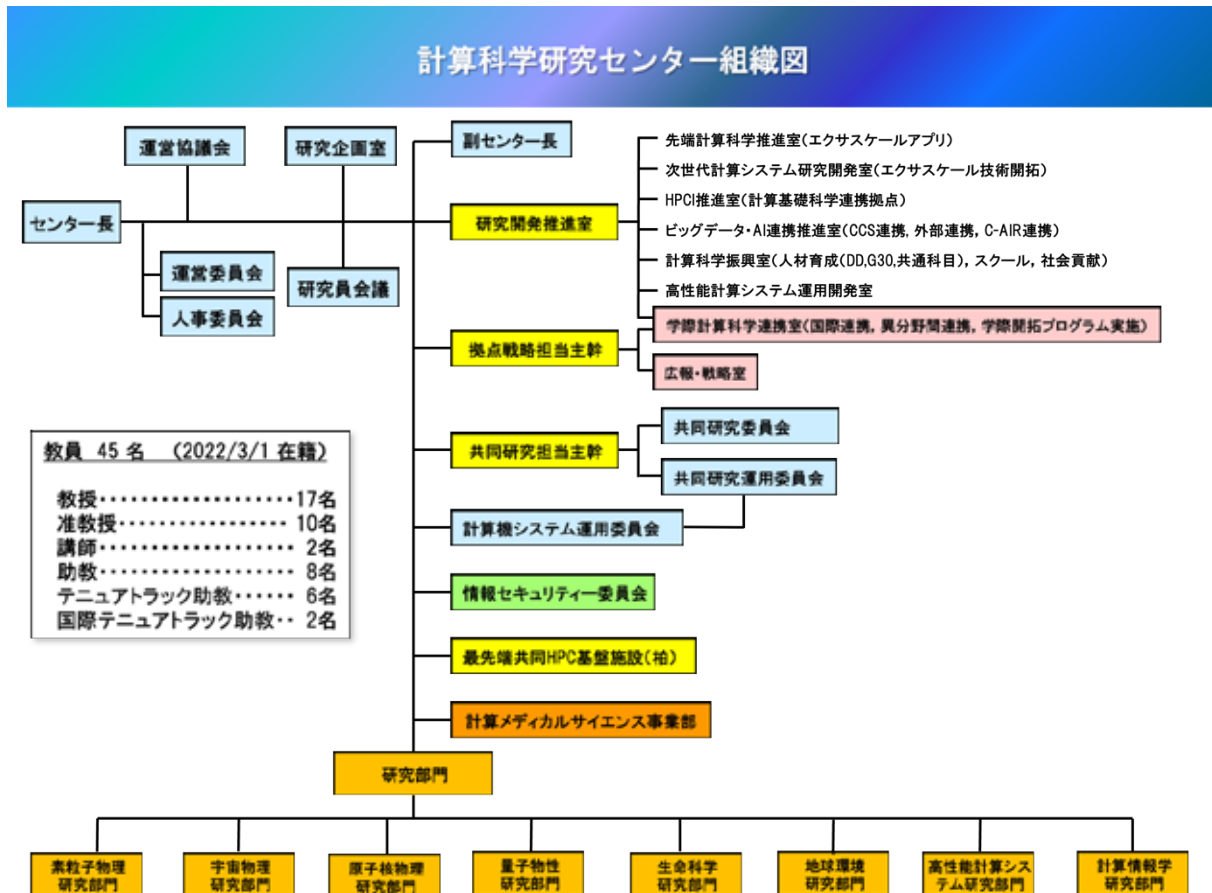
トによるコ・デザインに基づくスーパーコンピュータである Cygnus (PACS-X)の運用を開始し、GPU と FPGA を組み合わせて相補的に利用することを世界で初めて実用化した画期的な多重複合型演算加速システムを実現、運用開始しました。

センターには、素粒子物理、宇宙物理、原子核物理、量子物性、生命科学、地球環境、高性能計算システム、計算情報学の 8 つの研究部門があり、45 名の専任教員が従事している他、研究員 27 名が在籍しています。また、国際連携として、英国エジンバラ大学、米国ローレンスバークレー国立研究所を始めとする海外 13 機関と MOU を締結するとともに、37 機関（北米 15、欧州 13、アジア・オセアニア 9）と国際共同研究連携を行っています。この他に異分野間連携として、「計算基礎科学連携拠点」、「宇宙生命計算科学連携拠点」を行っています。また、「計算メディカルサイエンス事業部」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。大きな国際交流イベントとしては、エジンバラ大学とローレンスバークレー国立研究所とそれぞれ行っている毎年定例の国際ワークショップも開催しました。これらは COVID-19 下でのテレビ会議方式となりましたが、いつも通りの実りある議論ができ、新しい共同研究の礎も築くことができました。また、韓国 KISTI との日韓 HPC ウィンタースクールについては、両国学生の交流が大きな目的であったことから COVID-19 の影響で 2 年間延期となっていました。2022 年度からは再開する見込みです。

本小冊子は、2021 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。

2022 年 6 月吉日
計算科学研究センター長
朴 泰祐

1 センター組織と構成員



組織人員・教員一覧リスト

センター長	朴 泰祐
副センター長	矢花 一浩
運営協議会	委員長 田浦 健次郎 (東京大学)
運営委員会	委員長 朴 泰祐
人事委員会	委員長 朴 泰祐
研究企画室	室長 朴 泰祐
研究員会議	議長 朴 泰祐
研究開発推進室	
・ 先端計算科学推進室	室長 矢花 一浩
・ 次世代計算システム研究開発室	室長 朴 泰祐
・ HPCI 推進室	室長 藏増 嘉伸
・ ビッグデータ・AI 連携推進室	室長 天笠 俊之
・ 学際計算科学連携室	室長 稲垣 祐司

• 計算科学振興室	室長 高橋 大介
• 高性能計算システム運用開発室	室長 建部 修見
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 健次郎（東京大学） 副施設長 朴 泰祐
計算メディカルサイエンス事業部	事業部長 梅村 雅之

研究部門 （共同研究員は学内のみ記載）

素粒子物理研究部門

教授	藏増 嘉伸（部門主任）
准教授	吉江 友照、石塚 成人、谷口 裕介
助教	大野 浩史
研究員	浮田 尚哉、吉村 友佑、新谷 栄悟
共同研究員	金谷 和至（特命教授）、山崎 剛（准教授）

宇宙物理研究部門

教授	梅村 雅之（部門主任）、大須賀 健
准教授	森 正夫、矢島 秀伸、吉川 耕司
助教	Wagner, Alexander
研究員	高水 裕一、安部 牧人、福島 肇、朝比奈 雄太、 小川 拓未、菊田 智史、井上 茂樹、荻原 大樹
客員准教授	中里 直人（会津大学）

原子核物理研究部門

教授	中務 孝（部門主任）、矢花 一浩
講師	橋本 幸男
助教	日野原 伸生
研究員	温凱

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 曉民
講師	前島 展也
助教	佐藤 駿丞、萩原 聡
主任研究員	山田 篤志
研究員	山田 俊介、竹内 嵩、黒川 文彰 金谷 和至
客員教授	小野 倫也（神戸大学）
共同研究員	日野 健一（教授）、岡田 晋（教授）

生命科学研究部門

生命機能情報分野

教授	重田 育照（部門主任）
准教授	原田 隆平
助教	庄司 光男、堀 優太、原嶋 庸介、西澤 宏晃
研究員	三嶋 謙二、Kowit Hengphasatporn、森田 陸離、 宮川 晃一、下山 充紘
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
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	今井 優真、佐藤 拓人
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）

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
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	穴戸 英彦
研究員	鳥屋 剛毅、謝淳

2 令和三年度の活動状況

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、2021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に、インターネット環境を最大限に利用した研究を継続しました。

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であると同時に、筑波大学として初めて米国メーカーによるスーパーコンピュ

ータの導入ということにもなりました。クラスタ型計算機はその後の HA-PACS を経てメニーコア型超並列クラスタ COMA の開発・導入へとつながりました。

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

さらに、2021 年度末には共同利用・共同研究拠点として、第 3 期中期目標・中期計画期間における評価が行われましたが、我々のこの 6 年間の研究及び教育における活動、全世界を対象とする国際協力・共同研究活動、数々の学術的成果が認められ、文部科学省より S 評価を頂くことができました。なお、理科系共同利用・共同研究期間として、文部科学省第 3 期中期目標・中期計画期間において S 評価を受けた拠点は全国で 3 つしかなく、我々の拠点がそのうちの 1 つであるということは、我々の研究力と拠点運営力を同省に高く評価して頂いたものと自負しております。これを励みに、より一層の努力を続けて参りたいと思います。

また、2021 年度より研究開発推進活動の強化のため、新たに**高性能計算システム運用開発室**を立ち上げました。従来、センターではスーパーコンピュータの設計開発・調達・運用を計算機システム運用委員会を中心として行ってきましたが、我々がコデザインを中核とするシステム開発を自ら行うという独自性に鑑み、これらを研究開発推進室の活動の一つとして位置づけることにしたものです。今後、次世代の高性能計算システムの研究開発と、これを具現化するスーパーコンピュータの開発に一層の拍車がかかるものと期待しています。

以上のよう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 令和三年度の活動方針

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

2.3 共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」の活動状況

■ 実施計画

大規模メニーコア型システム Oakforest-PACS (8,208 ノード, 25 PFLOPS)、多重複合型演算加速クラスタ Cygnus (PACS-X) (81 ノード, 2.5 PFLOPS) を計算資源として、プロジェクト共同研究を公募し、「学際共同研究プログラム」を実施する。本プログラムは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・共同研究に関する情報発信は、本センターHP の他、各研究分野の研究者コミュニティ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

東京大学情報基盤センターと共同設置した「最先端共同 HPC 基盤施設」において、2016 年度に導入し運用を開始したメニーコア型大規模スーパーコンピュータシステム Oakforest-PACS は運用 5 年目に入り安定した稼働率とユーザ利用率を記録した。なお、当初の運用計画に従い、同システムは 2021 年度末（2022 年 3 月末）をもって運用期間を終了し、システムは滞りなく停止された。Particle Physics, Astrophysics, Nuclear Physics, Material Science, Chemistry, Life Science, Global Environment, Biology, Numerical Analysis, HPC System, Computational Informatics の 11 分野で、計 56 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 251 件を発表した。各分野における学際共同利用プログラムのプロジェクト採択数を表 1 に、学際共同利用プログラムを含む共同利用・共同研究による成果発表論文数を表 2 に、参加状況を表 3 に示す。

表 1 各分野における学際共同利用プログラム・プロジェクト採択数

分野	全体	採択件数	
		OFP利用	Cygnus利用
Particle Physics	13	13	9
Astrophysics	9	9	4
Nuclear Physics	12	11	5
Material Science	13	12	8
Chemistry	0	0	0
Life Science	7	1	6
Global Environment	4	4	2
Biology	3	2	2
Numerical Analysis	2	1	2
HPC System	7	3	7
Computational Informatics	4	0	4
合計	74	56	49

表 2 共同利用・共同研究拠点の成果として発表された論文の総数

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

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

表3 学際共同利用プログラムおよび一般利用の参加状況

稼働状況	Cygnus	Oakforest-PACS
使用者の所属	年間利用者数	年間利用者数
学内（法人内）	170	142
国立大学	85	100
公立大学	0	1
私立大学	29	10
大学共同利用機関法人	7	12
独立行政法人等公的研究機関	22	17
民間機関	6	12
外国機関	14	4
その他	18	4
合計	351	302

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及び米国ローレンスバークレー国立研究所（LBNL: Lawrence Berkeley National Laboratory）との合同ワークショップを、それぞれ2021年3月に行った。当初予定では両拠点からの主要研究者の来訪を受け、本センターで開催する計画であったが、COVID-19の影響により、昨年度に引き続きテレビ会議（Zoom）形式での開催となった。また、同じく例年2月に開催している韓国 KISTI との Japan-Korea HPC Winter School 及び合同ワークショップについては、学生及び若手研究者の直接的な対面での交流が主目的であることから、昨年度に引き続き COVID-19 の影響で休止となった。なお、本活動については2022年度に再開することで KISTI と合意している。

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

さらに、医学分野との連携により、計算科学による医療技術の開拓を目的とした、「計算メディカルサイエンス事業部」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おり、2021 年度もこれを継続したが、COVID-19 の影響によりプログラムを 1 日に短縮し、全ての講演セッション及び学際共同利用プログラムの成果発表を中心としたポスター発表を、Zoom を用いたオンライン会議形式で行った。結果として合計 248 人と、過去最大の参加者を集める実りあるシンポジウムとなった。

今後、世界トップレベルの国際的研究拠点を目指す上で、様々なイベントやプログラムの英語化は重要なステップである。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事業部」における共同研究は、医学分野との連携基盤を作るものであり、将来は産業界との連携へと発展していく。今後、これらセンターのもつ学際性と人材育成によって、機能強化・特色化を加速し、国際的なハブ拠点へと発展させる。これらの活動全てについて、世界トップレベルの国際研究拠点に向けた発展を目指し、活性化と成果の創出を目指す。

3 各研究部門の報告

I. 素粒子物理研究部門

1. メンバー

教授	藏増 嘉伸、金谷 和至（共同研究員、数理物質系特命教授）
准教授	石塚 成人、谷口 裕介、吉江 友照、山崎 剛（共同研究員、数理物質系）
助教	大野 浩史
研究員	浮田 尚哉、新谷 栄悟、吉村 友佑
学生	大学院生 6 名

2. 概要

当部門では、数理物質系との密接な連携のもと、格子 QCD の大型シミュレーション研究を推進している。2020 年度に引き続き、2021 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」の一般利用や Oakforest-PACS(OFP)の学際共同利用を用いた大型プロジェクト研究を推進した。OFP は 2016 年秋から JCAHPC(最先端共同 HPC 基盤施設:筑波大学と東京大学両機関の教職員が中心となり設計するスーパーコンピュータシステムを設置し、最先端の大規模高性能計算基盤を構築・運営するための組織)において運用され、HPC(High Performance Computing)向けとしては「富岳」に次ぐ性能を有していたが、2021 年度末で稼働を停止した。今後は、OFP の後継機が設置されるまでの間、「富岳」とともに、JCAHPC において新たに運用を開始した Wisteria(「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する)を用いてプロジェクトを継続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、2021 年度も新型コロナウイルス COVID-19 の世界的な感染拡大が継続し、大半の国際会議や国内学会・研究会がオンライン開催となった。また、日々の研究活動においてもオンラインでの議論・会議が強く推奨されるなど、研究遂行に大きな制約が生じた。

3. 研究成果

[1] PACS Collaboration による「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）

2020 年度に引き続き、2021 年度も PACS Collaboration に基づく共同研究体制のもと、「富岳」の一般利用や OFP 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。「富岳」向けのプログラム最適化は、2020 年度の早期利用課題制度を利用して既に完了しており、2021 年度は本格計算を開始した。

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おける物理量計算は“テーラーメイド”であると評されている。これは、目的とする物理量計算に応じて、適当と思われる物理パラメータ(クォーク質量や空間体積など)を選んでシミュレーションすることを意味している。この場合、例えば、同じゲージ配位を用いた計算であっても、ある物理量に対しては良く実験値と合うが、他の物理量に関しては実験値を再現しないということが起こりうる。「富岳」や OFP を用いたプロジェクトでは、複数の格子間隔において物理点直上で $(10\text{fm})^3$ 超の大空間体積を持つシミュレーションを行うことによって、上記 2 つの課題を克服した計算を実現する。

ゲージ配位は異なる格子間隔 3 点($a=0.085\text{fm}, 0.063\text{fm}, 0.043\text{fm}$)において生成し、系統誤差となる格子間隔依存性を取り除くために連続極限($a \rightarrow 0$)を取る。既に(格子間隔, 格子サイズ)=($0.085\text{fm}, 128^4$)、($0.063\text{fm}, 160^4$)のゲージ配位生成は完了しており、現在は(格子間隔, 格子サイズ)=($0.043\text{fm}, 256^4$)での物理点シミュレーションに注力している。並行してこれまで生成した格子サイズ 128^4 と 160^4 のゲージ配位を用いて、以下に説明するような物理量計算を行うとともに、 256^4 のゲージ配位を用いたテスト計算を開始した。

[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 において現実的クォーク質量での 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 $|V_{ud}|$ 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 $|V_{us}|$ の値も大きく動いた(図 1 の水色帯)。

2020 年度までの格子間隔 0.085fm の計算から得られた $|V_{us}|$ (中抜き赤丸) は、これまでの多くの計算結果 (K_{l3} $N_f=2+1+1$, $N_f=2+1$) と異なり、 K 中間子レプトニック崩壊から決定される $|V_{us}|$ (青丸、緑星) と一致する結果であった。しかし、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 年度は格子間隔 0.063fm の計算を重点的に行い、2 つの格子間隔の計算結果から連続極限の $|V_{us}|$ 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。

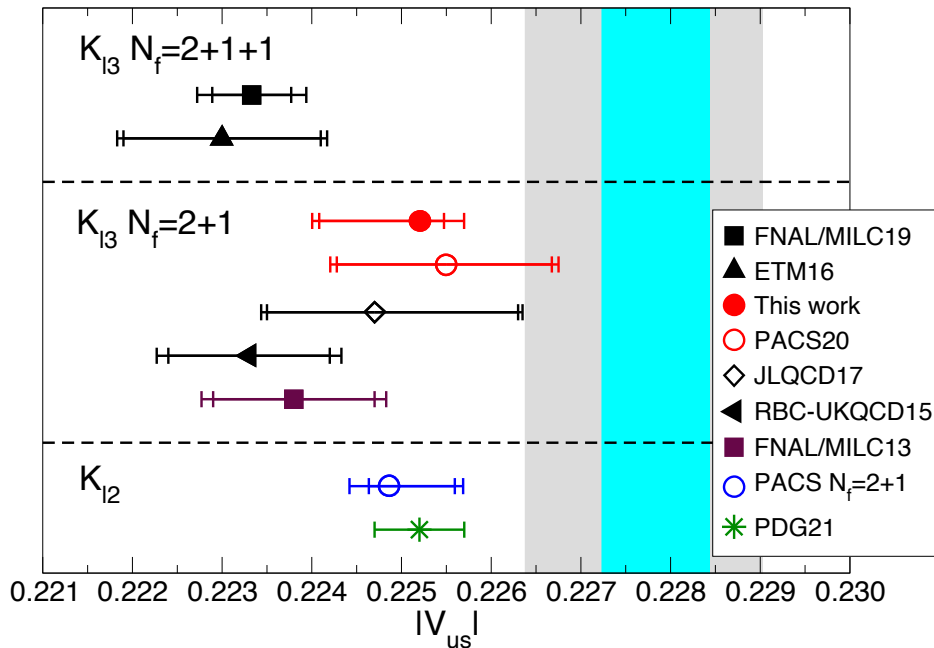


図 1: $|V_{us}|$ の比較。灰色帯と水色帯は CKM 行列のユニタリー性から求まる標準理論の予測。

[3] 現格子 QCD を用いた核子構造研究 (蔵増、山崎、新谷)

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

蔵増、山崎、新谷は、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、東北大学大学院生 辻竜太郎氏と共に、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 $a=0.085\text{fm}$ 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 年度は格子間隔 $a=0.063\text{fm}$ での形状因子計算を進めるとともに、

核子スカラー電荷と核子テンソル電荷(研究論文 B-[2])に加え核子構造関数に関する物理量計算(研究論文 B-[3])を実行した。

また、これまでとは異なる観点から計算を実行するため、新しい荷電半径計算方法の開発研究を行い、荷電半径などの形状因子の運動量移行微分で定義される物理量を、形状因子のフィットを介さずに、直接計算する方法の試験計算を行った(研究論文 A-[1])。

[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 年に形状因子の微分を直接計算する方法が提案された。この方法を詳しく調べた結果、無視できない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機能することを確認した。

[5] 格子 QCD によるクォークを自由度とした原子核の直接構成 (蔵増、山崎)

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

一方、現実よりも重い π 中間子を用いた他グループの計算からは束縛状態を観測できないという問題が報告されている。この計算には 2 体核子散乱を考慮した計算になってはいるが、束縛エネルギー計算で問題となるのは核子励起状態散乱の寄与と考えられる。今後、この状

態を考慮した計算方法を開発し、束縛エネルギーに含まれる、それら状態の系統誤差を見積もる予定である。

[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と考えられるクォーク・グルオン・プラズマ状態から通常のハドロン物質への相転移前後のクォーク物質の様々な熱力学的性質は、初期宇宙の物質進化や物質創成メカニズムの解明において重要である。本質的に非摂動的な問題であり、格子 QCD による QCD 第一原理からの大規模シミュレーションが不可欠である。谷口、金谷らは、改良 Wilson 型格子クォークを用いた有限温度・有限密度 QCD のシミュレーション研究を行っており、QCD の相構造やクォーク物質の熱力学特性を引き出すために、2021 年度も、有限温度・有限密度格子 QCD の研究と、そのための技術開発を進めた。

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

有限温度・有限密度 QCD のシミュレーション研究の多くは、計算量が少ないスタガード型格子クォークを用いて行われているが、連続極限で QCD を再現することが証明されていないという本質的問題を孕んでいる。我々は、理論的基礎が確立している Wilson 型格子クォークを用いて QCD 相転移近傍の温度でクォーク物質がどのような熱力学特性を示すかの大規模シミュレーション研究を推進している。Wilson 型クォークは、連続極限の正しさが保証されている反面、有限の格子上ではカイラル対称性を陽に壊しているため、カイラル対称性に関わる物理量に関して格子化誤差が大きく、それを取り除いて物理量を計算するために膨大な計算資源が要求されるという困難があった。また、並進対称性に伴う保存カレントとして定義されるエネルギー運動量テンソルは系の力学特性を調べる上で基本的な観測量だが(例えば、対角成分はエネルギー密度や圧力などの情報を含み、2 点相関関数から様々な粘性率が導かれる)、格子上では連続な並進対称性が陽に壊されているため、従来の方法では、5 種類の演算子の非自明な繰り込みと混合を非摂動的に決定するという、複雑な繰り込み操作を行わなければ意味のある評価が出来なかった。

谷口、金谷らは、九州大学 鈴木博教授、大阪大学 北澤正清助教、新潟大学 江尻信司准教授、広島大学 梅田貴士准教授らと、Gradient flow(勾配流)に基づいて鈴木博らにより開発された SFtX 法(small flow-time expansion method)を応用して、これらの課題を克服した大きなブレークスルーを目指している。Gradient flow とは、仮想的な時間パラメータ t (flow-time)を導入して、作用の勾配で与えられる発展方程式(フロー方程式)により場の量を変形させる理論的手法である。この発展方程式は一種の拡散方程式になっており、 $t>0$ までフローさせた結果は、元の場の量を $\sqrt{8t}$ の物理的領域で平準化(smear)させたものと解釈することができる。さら

に、フローさせた場で作る演算子が紫外発散も同一点特異性も持たないという目覚ましい特性を持っていることが、Lüscher と Weisz により証明された。

SFtX 法は、Gradient flow のこの有限性を活用して、連続極限の繰り込まれた物理量に対応する量を格子上で評価する一般的な計算方法である。連続理論で何らかの物理量を非摂動論的に評価しようとする、通常は、その物理量を格子理論で定義し、格子上で評価された値を連続極限まで外挿($a \rightarrow 0$)するが、数値的な繰り込みに加えて、格子上で重要な対称性が壊されている場合にはそれによる不要な演算子との混合を数値的に除去する必要がある、十分な精度を出すためにはしばしば重い計算となる。SFtX 法では、フローさせた演算子が有限であることを利用して、対応する演算子を格子上で計算することにより、繰り込み操作や混合の除去無しに直接評価する。ただし、フローさせた演算子は求める物理量そのものではないので、格子の結果を、連続極限($a \rightarrow 0$)とフロー時間ゼロ極限($t \rightarrow 0$)に 2 重外挿する。

SFtX はどんな物理量にも使うことができるので、格子化で並進対称性が陽に壊されるためにこれまで扱いが難しかったエネルギー運動量テンソルの格子計算に、最初に応用された。我々は、SFtX 法が並進対称性の破れだけでなく、Wilson 型クォークによるカイラルの破れの困難にも有効であることに着目し、2+1 フレーバーの動的なクォークを含む現実的 QCD に SFtX 法を応用した一連の研究を推進している。

我々は、動的クォークを含む QCD への応用の第一段階として、2016～2017 年度に u, d クォークが現実よりやや重い場合の $N_f=2+1$ QCD の研究を実行した。エネルギー運動量テンソルの対角成分から計算した状態方程式が、従来の方法による結果を良く再現することを示し、さらに、カイラル感受率の disconnected 部分がクロスオーバー温度でピークを示すことを Wilson 型クォークとして初めて示した。また、位相感受率を、グルオンを用いた定義式と、それを、連続理論のカイラル関係式を用いてクォークを用いて表し直した評価式の両方で計算し、有限の格子間隔でも両者が極めてよく一致することを示した。通常の計算方法でスタガード型クォークを用いた研究では、ここでシミュレーションした程度の格子間隔では両者は 2 桁も違っており、SFtX 法が物理的に信頼できる結果を得る上で極めて有用であることをあらわしている。

この、クォークが現実よりやや重い場合の QCD の研究を発展させ、現実のクォーク質量(物理点)での $N_f=2+1$ QCD の熱力学研究や、 u, d クォークが重い場合に格子間隔を変えたシミュレーションなどを進めている。その過程で、格子が粗い場合などには SFtX 法をさらに改良する必要があることが判明したので、マッチング係数の繰り込みスケール依存性などを研究し、繰り込みスケールを適切に選ぶことで SFtX 法を大きく改善できることを示した。

[6-2] SFtX 法を用いた物理点 $N_f=2+1$ QCD の熱力学研究

上記の改良を取り入れた物理点 $N_f=2+1$ QCD の有限温度シミュレーションを、格子間隔 $a=0.08995(40)\text{fm}$ の場合に集中して推進している。SFtX 法により、物理量の観測に関しては計算時間の大きな削減ができたが、物理点や格子間隔が細かい格子の配位生成には膨大な計算が要求され、様々な計算機資源を動員して大規模シミュレーションを系統的に遂行している。

約 $120\sim 300\text{MeV}$ 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、2020 年度までの測定から、相転移温度が 150MeV 以下であることを示唆する中間結果を得た。ただし、相転移温度近傍や低温領域での統計量は十分なものでは無かったため、2021 年度には、相転移温度の下限を確定するために、相転移温度近傍や低温領域の統計を大きく増強するシミュレーションを、HPCI や CCS 学際共同利用などの計算機資源を投入して推進した。その解析を現在進めている(図 2、国内学会発表[18])。

我々の Wilson 型クォークによる相転移温度は、スタガード型クォークによる先行結果より低い可能性があるが、相転移温度の精密な評価は実験的・現象論的にも重要である。

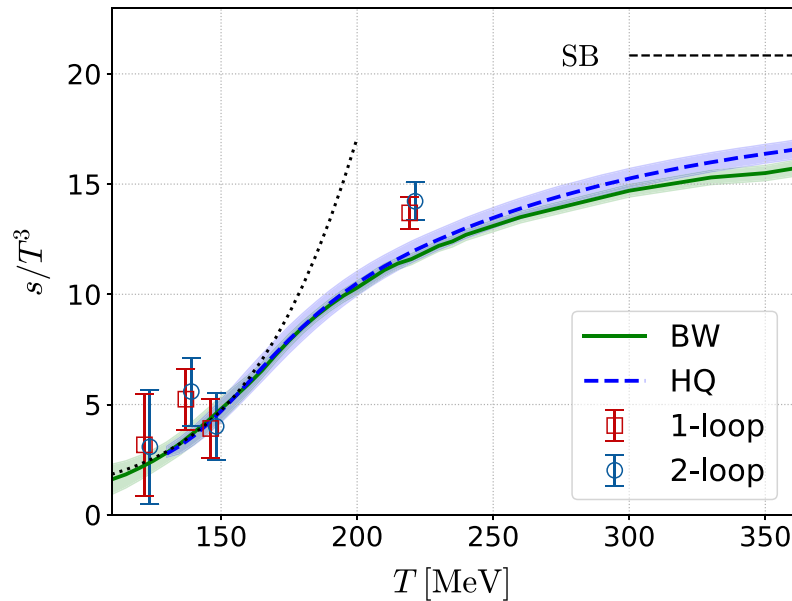


図 2: SFtX 法を用いた物理点 $N_f=2+1$ QCD の有限温度シミュレーション。低温領域($T=122, 137\text{MeV}$)の統計を改善したエントロピー密度。Budapest-Wuppertal Collaboration と HotQCD Collaboration による、先行結果(通常の方法を採用し、スタガード型クォークを用いている)との比較(国内学会発表 B-[18]で示した中間結果)。この後に統計はさらに改善されている。

[6-3] クエンチ QCD の潜熱と SFtX 法における 2 重外挿の順序依存性の研究

クォークが重い極限に相当する $SU(3)$ ゲージ理論の潜熱を研究し、SFtX 法の様々な手法による結果が連続極限で一致することを示すことにより数値的方法論としての正しさと実用性を確認した(研究論文 B-[5])。

昨年度に発表した論文 M. Shirogane, et al., “Latent heat and pressure gap at the first order deconfining phase transition of SU(3) Yang-Mills theory using the small flow-time expansion method”, Prog. Theor. Exp. Phys. 2021, 013B08 (2021), DOI:10.1093/ptep/ptaa184 では、SFtX 法を応用して、クエンチ QCD(SU(3) Yang-Mills 理論)の有限温度 1 次相転移点における潜熱と圧力ギャップ Δp を研究した。SFtX 法の様々な手法による結果が連続極限で一致することが確認され、SFtX 法の正しさと実用性が示された。2020 年度はコロナ禍により格子場の理論国際会議が中止されたが、代替となる成果発表(国際会議発表 B-[4])およびそのプロシーディングス(研究論文 B-[5])が公表されている。

1 次相転移点では、共存する 2 相の動的平衡から $\Delta p=0$ となるはずで、その数値的確認は結果の信頼性の良い指標とされてきた。また、クエンチ QCD では様々な格子間隔を系統的に計算できるので、上で議論した、 $a \rightarrow 0$ と $t \rightarrow 0$ の 2 重外挿における極限操作の順番の問題を試験した。SFtX 法における $a \rightarrow 0$ と $t \rightarrow 0$ の 2 重外挿では、格子化誤差が大きい $t/a^2 \sim 0$ 領域のデータを取り除いて外挿する必要がある。そして、この $t/a^2 \sim 0$ 領域の格子化誤差が正しく取り除かれているならば、2 つの外挿の順序によらず同じ結果が得られると期待される。

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

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

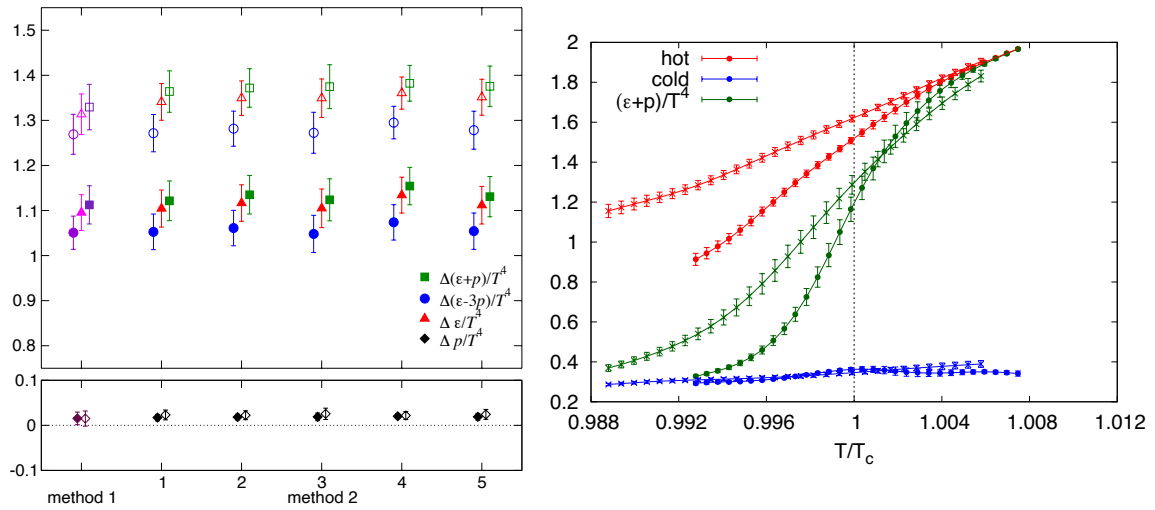


図 3: クエンチ近似 QCD の潜熱と圧力ギャップに関して $a \rightarrow 0$ と $t \rightarrow 0$ の 2 重外挿を行った最終結果。(左図) $t \rightarrow 0$ を先に実行する”method 1”と $a \rightarrow 0$ を先に実行する”method 2”の結果の比較 (method 2 では、さらに $t \rightarrow 0$ 外挿のフィット・レンジをいくつか比較)。Filled symbols はアスペクト比 $N_s/N_t=8$ 、open symbols は $N_s/N_t=6$ に相当する空間体積での結果。(右図) $N_t=8$ 格子におけるエントロピー密度のヒステリシス。空間体積が小さい $N_s/N_t=6$ 格子(細いシンボル)と空間体積が大きい $N_s/N_t=8$ 格子(太いシンボル)の比較(研究論文 B-[5])。

[7] クォークが重い QCD の臨界クォーク質量 (金谷、谷口)

クォークが重い極限の QCD は、有限温度相転移が 1 次なので、クォーク質量を無限大から下げていくと、有限温度相転移は連続的なクロスオーバーに変化する。両者の境界である臨界点の研究は、クォーク質量が軽い領域における臨界点研究の雛形として興味を持たれている。

[7-1] 臨界点における臨界スケーリングの研究

我々は、クォークが重い場合の 2+1 フレーバー QCD の臨界点を、再重み付け法と SFtX 法で研究して、臨界スケーリングが従来採用されているより大きな空間体積で実現することを示した。

図 4 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、 $LT=N_s/N_t$ は系の空間体積に対応するパラメータである。期待する臨界スケーリングが実現していれば、Binder cumulant は臨界点で系の空間体積によらず一定値になるはずである。図 4 より、 $LT=N_s/N_t$ が十分大きければ、臨界スケーリングが高い精度で実現することがわかる。また、臨界スケーリングを用いることにより、熱力学極限における臨界点の値を高精度で測定することも可能になった(研究論文 A-[3])。

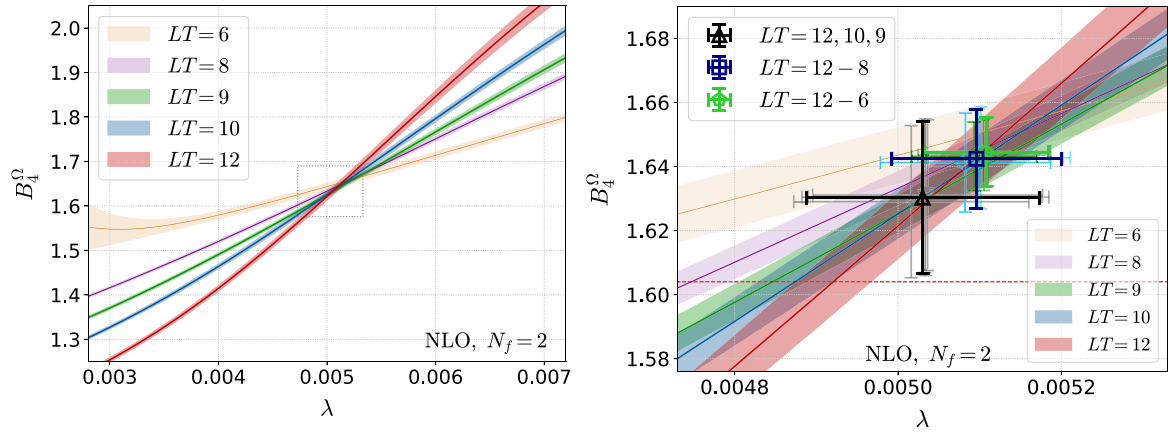


図 4: クォークが重い場合の 2+1 フレーバー QCD における、臨界点近傍の Binder cumulant のクォーク質量依存性。 $\lambda=64N_cN_f\kappa^4$ はクォーク質量をコントロールするホッピング・パラメータ κ の関数で、クォークが軽くなると大きくなる。LT= N_s/N_t は格子のアスペクト比で、温度がほぼ一定の場合は、格子の空間サイズ L に比例する。右図は、左図の交点周辺を拡大したもの(研究論文 A-[3])。

[7-2] ホッピング・パラメータ展開の収束性の研究

前記の研究では、クォークが重い場合の効率の良いシミュレーション方法として、ホッピング・パラメータ展開を用いた。QCD の臨界点の決定に関するホッピング・パラメータ展開の有効性を確認するために、研究論文 A-[2]では、臨界点の近傍におけるホッピング・パラメータ展開の高次項の効果と収束性を研究した。さらにホッピング・パラメータ展開の十分な高次までをとりいれたシミュレーションを実現する手法を開発した。

まず、ホッピング・パラメータ展開の収束性が最も悪い、リンク変数(ゲージ場)がすべて単位行列の場合に展開項を 100 次項まで準解析的に計算し、ホッピング・パラメータ κ に関する収束半径を、ダランベールとコーシー・アダマールの 2 種類の収束判定方法で評価した。その結果、図 5 の左図に示したように、展開次数 n を大きくした極限で、クォーク質量がゼロの場合に相当する $\kappa=1/8$ に収束することを示した。同時に、ホッピング・パラメータ展開を有限次で止めた場合の誤差評価を行い、低次のホッピング・パラメータ展開を用いた上記の臨界点の評価は、 $N_t=4$ の格子までは十分信頼できることを確認した。また、 $N_t=6$ 以上の格子では、ホッピング・パラメータ展開のより高次の項まで取り入れる必要があることを示した。

この結果を受けて、ホッピング・パラメータ展開の高次項の効果を取り入れる方法を研究した。 $32^3 \times 6$ および $32^3 \times 8$ 格子でシミュレーションを実行し、 $n=20$ までの展開項を評価した。図 5 の中央図と右図に、 $32^3 \times 8$ 格子の臨界点近傍のシミュレーションで実測された、12 次と 20 次のポリアコフ・ループ項と最低次のポリアコフ・ループ項($\text{Re}\Omega$)の分布を示す。すべての場合に、ポリアコフ・ループ項は、十分な高次まで、最低次項と強い線形の相関があることが確認される。最低次項のみを取り入れたモンテカルロ・シミュレーションは高い効率で実

行できるので、ここで実測した比例係数を使って最低次項の係数を調整することにより、ホッピング・パラメータ展開の 20 次までの効果を有効的に取り入れたモンテカルロ・シミュレーションが、フル QCD シミュレーションよりも遥かに低コストで実行可能である(図 5、研究論文 A-[2])。

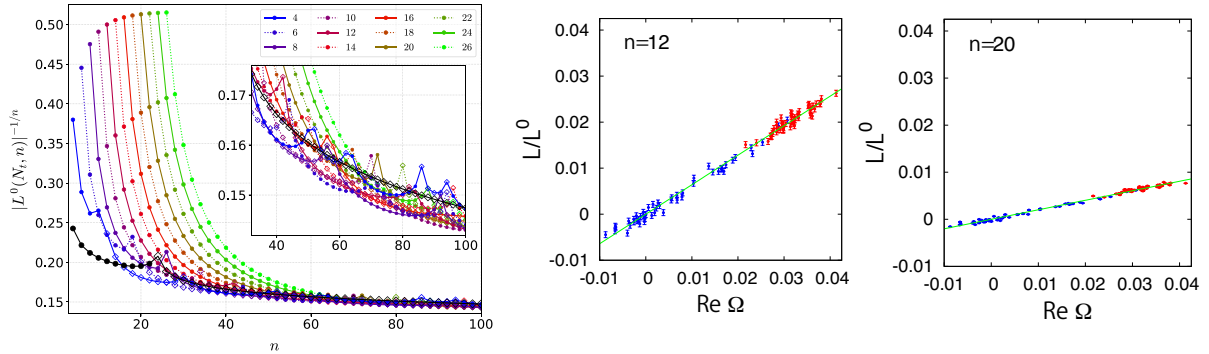


図 5: クォークが重い QCD におけるホッピング・パラメータ展開の収束性と改良手法の研究。(左図)収束性が最も悪い、リンク変数がすべて単位行列の場合に、コーシー・アダマールの収束半径を展開次数 n の関数として示したもの。黒はホッピング・パラメータ展開におけるウィルソン・ループ項で、色付きのシンボルはポリアコフ・ループ項を、様々な N_t について表したもの。図中の図は、 $n=32-100$ の領域の拡大図。(中央図・右図) $32^3 \times 8$ 格子で実測された、12 次と 20 次のポリアコフ・ループ項と最低次のポリアコフ・ループ項($\text{Re } \Omega$)の分布。縦軸は、リンク変数がすべて単位行列の場合の値で規格化している。青は $\beta=6.0320$ 、赤は $\beta=6.0660$ で、いずれも臨界点近傍(研究論文 A-[2])。

[8] 2+1 および 4 フレーバー QCD の臨界終点の探索 (蔵増、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。

大野と蔵増は、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。本年度の研究成果としては、まず、 $O(a)$ 改良された Wilson 型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、これまでよりも格子間隔の小さい、時間方向格子サイズ $N_t=8$ での計算を進めた。その結果、1 次相転移を示すいくつかのパラメータを特定することができた。次に、4 フレーバーQCD の計算では、 $O(a)$ 改良された Wilson 型フェルミオン作用を用いた $N_t=10$ 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(図 6)。これらの結果は、国際会議「Lattice 2021」等で発表した。さらに、4 フレーバーQCD の計算では、フェルミオン作用依存性を調査するため、スタaggerド作用を用いた計算も開始し、 $N_t=4$ および 6 についての結果を得ることができた。また、本研究室博士前期課程所属の羅梟氏は、この計算結果を修士論文にまとめ、学位を取得した。

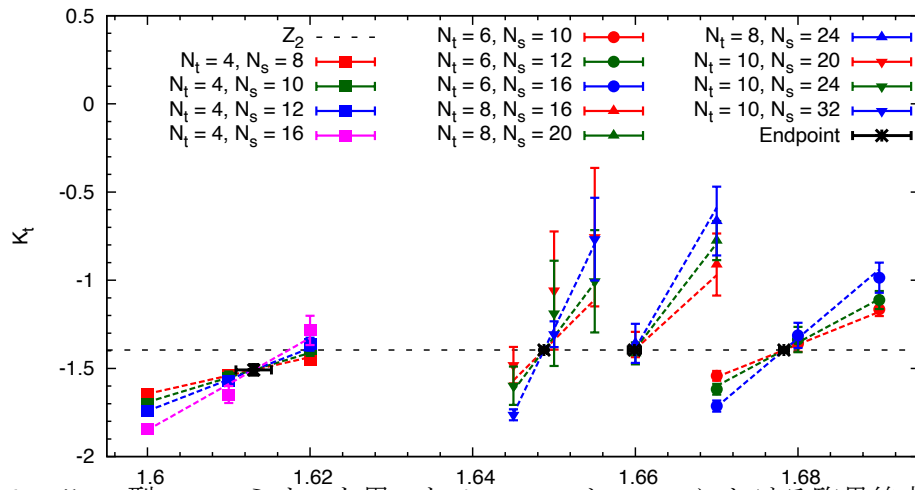


図 6: Wilson 型フェルミオンを用いた 4 フレーバーQCD における臨界終点。

[9] クォーコニウムスペクトル関数の研究 (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必要がある不可欠である。その際、クォーコニウムのスペクトル関数が重要な役割を果たす。なぜならば、スペクトル関数は高温媒質中でのクォーコニウムの振る舞いや重クォーク輸送に関する情報をすべて含んでいるからである。一方、クォーコニウムのスペクトル関数を計算することは一般に困難であることが知られている。格子 QCD に基づく第一原理計算では、クォーコニウムの相関関数を直接計算することができるが、スペクトル関数は相関関数から間接的にのみ得られる。しかしながら、この計算は ill-posed な問題であり、解くことが非常に困

難であることが知られている。従って、より信頼できるスペクトル関数を計算するために様々な方法が試みられている。

大野は、中国華中師範大の Heng-Tong Ding 教授、独国 Bielefeld 大の Olaf Kaczmarek 博士らとともに、クエンチ近似を用いた大規模な格子 QCD シミュレーションにより、連続極限におけるクォークonium 相関関数を計算し、これを摂動論的モデルにフィットすることでクォークonium スペクトル関数を計算した(研究論文 A-[4])。本研究では、以前の研究で行った擬スカラーチャネルに対する計算を拡張子、輸送ピークを持つベクターチャネルのスペクトル関数を計算した。その結果、チャーモニウムのスペクトル関数については相転移温度以上で束縛状態に対応するピークが無くても格子 QCD のデータを説明できるのに対し、ボトモニウムについては少なくとも調べた温度の範囲では束縛状態のピークが必要であることが分かった。また、輸送ピークについての解析から重クォーク拡散係数も推定し、先行研究との比較を行った(図 7)。

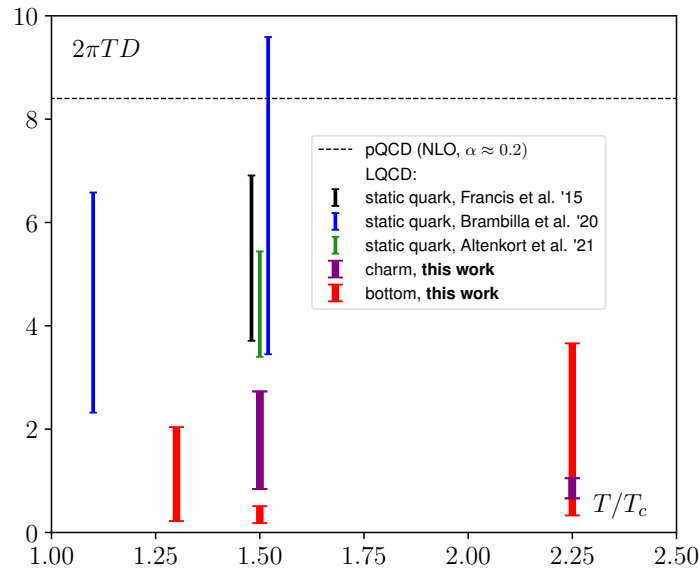


図 7: 重クォーク拡散係数の推定値。

[10] テンソルネットワーク形式に基づく格子ゲージ理論の研究 (蔵増)

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。

2021 年度は、上記課題(i)~(v)のうち、特に課題(v)に関して以下に述べるような大きな進展があった。その前に、まず、2020 年度の重要な成果として、われわれは TRG 法を用いて 4 次元有限密度南部-Jona-Lasinio(NJL)モデルの極低温高密度領域における一次相転移の実証に成功した(論文発表済)。このモデルは符号問題を内包しているため、従来のモンテカルロ法では解析が困難であったが、TRG 法により世界で初めて一次相転移の存在を明らかにした。この研究は有限密度 QCD の相転移解析へ向けての重要なマイルストーンであるが、もう一つの重要な意義も存在する。実は、素粒子物理学における NJL モデルは物性物理学における Hubbard モデルとほぼ同じ形の経路積分表式で表されるため、NJL モデルにおける TRG 法の成功により、TRG 法による Hubbard モデルの相構造解析への道が開かれた。Hubbard モデルは強相関電子系の単純化されたモデルであり、金属-絶縁体転移や高温超伝導などの理論的本質を含んでいると考えられているが、符号問題のために数値的解析が困難なことが知られている。2021 年度は、まず、(1+1)次元 Hubbard モデルにおける金属-絶縁体転移の計算を行い、Bethe 仮説に基づいて理論的に予想されている臨界化学ポテンシャルの値を再現することに成功した(研究論文 A-[6])。その後、(2+1)次元 Hubbard モデルの金属-絶縁体転移の計算を行い、(2+1)次元でも(1+1)次元の場合と同様に、有限のクーロンポテンシャル $U(>0)$ において、金属-絶縁体転移が起きることを示した(研究論文 A-[7])。図 8(左)は、 $D_{\text{cut}}=80$ で $U=8$ における電子密度 (n)を化学ポテンシャル μ の関数としてプロットしたものである。 $\mu=U/2=4$ が half-filling 状態

であるが、 $2 \leq \mu \leq 6$ の領域において $\langle n \rangle = 1$ の plateau が形成されていることから、絶縁体状態であることがわかる。また、 $\mu \leq -4$ 、 $\mu \geq 12$ も絶縁体状態であることが見てとれる。格子サイズは $(N_x, N_y) = (2^{12}, 2^{24}), (2^8, 2^{20})$ の 2 種類であるが、格子間隔 $(a, \epsilon) = (1, 10^{-4})$ を用いて物理的スケールに変換すれば $(L, \beta = 1/T) = (4096, 1677.7216), (256, 104.8576)$ となり大体積で極低温であることがわかる。両者の結果が一致していることから、熱力学極限かつゼロ温度の結果と見做すことができる。図 8(右)は、 $6.0 \leq \mu \leq 8.0$ の領域において μ の刻み幅を細かくし、電子密度 $\langle n \rangle$ の $D_{\text{cut}} (= D)$ 依存性を調べたものであるが、ほとんど D_{cut} 依存性がないことがわかる。曲線は μ と $D_{\text{cut}} (= D)$ に関する global fit を表しており、これにより $D_{\text{cut}} = \infty$ における臨界化学ポテンシャル μ_c を決定することができる。他のクーロンポテンシャル $U=80, 2$ でも同様の計算を行い、いずれの場合も $\mu_c > U/2$ で金属-絶縁体転移が起きていることが示された。

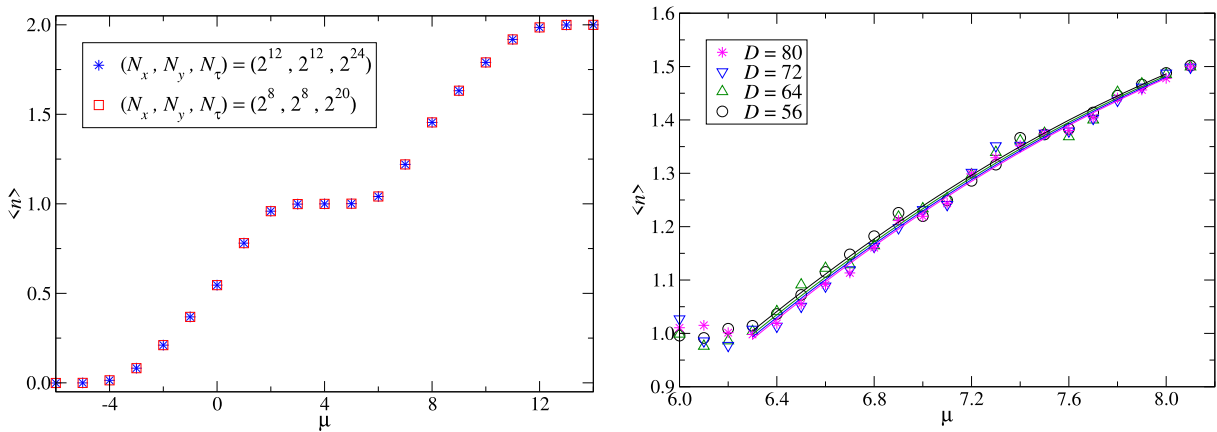


図 8: (左) $U=8$ における電子密度 $\langle n \rangle$ を化学ポテンシャル μ の関数としてプロットしたもの。 $D_{\text{cut}}=80$ で格子サイズは $(N_x=N_y, N_t) = (2^{12}, 2^{14})$ (青) と $(2^8, 2^{20})$ (赤) の 2 種類。(右) $6.0 \leq \mu \leq 8.0$ の領域において左図よりも μ の解像度を上げて電子密度 $\langle n \rangle$ を計算した結果。曲線は μ と $D_{\text{cut}} (= D)$ に関する global fit の結果を表す(研究論文 A-[7])。

[11] 素粒子標準模型を超えた理論の探索 (山崎)

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

これまでの 4、8、12 フレーバー SU(3) ゲージ理論の研究から、8 フレーバー理論がそれら条件を満たす可能性があることを示唆した。2021 年度はフレーバー 1 重項スカラー中間子及び

フレーバー1 重項擬スカラー中間子の質量について、4、8、12 フレーバー理論の比較及び、8 フレーバー理論から得られる S パラメータ計算を行った。

[12] 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、国内の主要な計算素粒子物理研究 8 拠点に分散配置されたファイルサーバを NII SINET6 VPN で結び、グリッドファイルシステムソフトウェア Gfarm で束ねた分散ファイルシステムであり、複数拠点のスパコンを用いた研究を推進する国内の主要な研究グループが、膨大な研究データの統一的管理・共有の為にストレージシステムとして、利用している。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、本センターからは、藏増、吉江、大野が参加している。

JLDG は、2008 年に実運用を開始して以来 14 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に作業に主軸を移している。2021 年度は、日常のメンテナンス・ユーザ対応・システム障害対応等の日常業務以外に、本センターに設置している JLDG 管理システムのセキュリティ向上作業を実施した。具体的には、

- 管理サーバ専用ネットワーク構築と計算科学研究センター独自の Firewall 導入及びセキュリティイベント監視(外部委託)(本学のネットワークのセキュリティゾーン化の一部として実施)
- アクセス元 IP・オープンポート制限強化(サーバ毎に、必要最小限)
- 管理サーバ間通信用プライベートネットワーク新設
- プロキシ・リバースプロキシの利用
- 脆弱性対応:学術情報メディアセンター実施の検査への対応と管理グループ独自の検査(サーバ新設、設定の大きな変更時)の実施
- OS・ソフトウェアの更新: CentOS6,8 の EOS 対策
- JLDG グリッド証明書用 CA/RA 再構築と、全ユーザの証明書更新
- 仮想組織管理、システム監視(Zabbix)、gfarm MDS 更新

である。一つ一つは、特別なセキュリティ向上策ではないが、管理機器の機能と保守作業に支障が生じないという条件の下で、高いセキュリティレベルを実現できたと考えている。

ILDG(International Lattice Data Grid)は、JLDG を含む同種の 5 つの地域レベルのデータグリッドを、QCD の基礎データに限って世界の研究者が相互に利用する目的で相互運用する為のプロジェクトである。2007 年に運用を開始し、世界の研究者に利用されてきたが、2016 年頃から運用の継続かに支障が生じるようになった。ベースとして利用しているミドルウェアの更新にあわせたシステムソフトウェアの更新に困難が生じたこと、基礎データ公開の為に準

備作業のコストが高いこと、利用登録手順が複雑であること、などが理由である。これらの困難を解消し、ILDG プロジェクトを再活性化する為、ILDG の 2 つのワーキンググループ世話人の呼びかけで、国際ミーティングが開催され、ILDG の最高意思決定機関である ILDG board ミーティングの開催準備を行った。ILDG プロジェクトには、本センターからは、藏増が ILDG board 日本代表として、吉江が Metadata ワーキンググループ世話人として参加している。2022 年 4 月 14 日に開催された board meeting にて、ワーキンググループが提案した方針が承認され、プロジェクトの再活性化への作業が開始された。

4. 教育

[修士論文]

1. 佐藤 航平

「格子 QCD による形状因子の計算法に関する基礎研究と π 中間子荷電半径の計算」

2. 羅 梟

「Naive staggered fermion 及び plaquette gauge action を用いた 4 flavor QCD の有限温度相転移に関する研究」

[博士論文]

1. 秋山 進一郎

「Tensor renormalization group approach to higher-dimensional lattice field theories」

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 筑波大学 学長表彰

秋山 進一郎

2022 年 3 月

外部資金

3. 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」、12,300 千円
4. 金谷和至（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(C)、平成31年度採択、「グラジエントフローによるクォーク・ハドロン物質の熱力学特性」、1,100 千円
5. 金谷和至（分担）、科学研究費補助金・基盤研究(B)、令和2年度採択、「有限温度 QCD における物理量の決定へ向けて」、100 千円
6. 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」、3,700 千円
7. 浮田尚哉（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(C)、令和2年度採択、「機械学習を取り入れた格子 QCD による超精密物理量測定のための計算手法の開発と実践」、1,200 千円
8. 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

知的財産権

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. PACS Collaboration: Ken-ichi Ishikawa, Yoshinobu Kuramashi, Shoichi Sasaki, Eigo Shintani, Takeshi Yamazaki, “Calculation of derivative of nucleon form factors in $N_f=2+1$ lattice QCD at $M_\pi=138\text{MeV}$ on a $(5.5\text{fm})^3$ volume”, Phys. Rev. D 104 (2021) No.7, ref.074514, pp.1-20.
2. Naoki Wakabayashi, Shinji Ejiri, Kazuyuki Kanaya, and Masakiyo Kitazawa, “Scope and convergence of the hopping parameter expansion in finite temperature QCD with heavy quarks around the critical point”, Prog. Theor. Exp. Phys. 2022 (2022) ref.033B05, pp.1-27 (2022).
3. Atsushi Kiyohara, Masakiyo Kitazawa, Shinji Ejiri, and Kazuyuki Kanaya, “Finite-size scaling around the critical point in the heavy quark region of QCD”, Phys. Rev. D 104 (2021) No.11, ref.114509, pp.1-17.
4. H.-T. Ding, O. Kaczmarek, A. L. Lorenz, H. Ohno, H. Sandmeyer, and H.-T. Shu, “Charm and beauty in the deconfined plasma from quenched lattice QCD”, Phys. Rev. D 104 (2021) No.11, ref.114508, pp.1-15.

5. S. Akiyama, Y. Kuramashi, and Y. Yoshimura, “Phase transition of four- dimensional lattice ϕ^4 theory with tensor renormalization group”, Phys. Rev. D 104 (2021) No.3, ref.034507, pp.1-7.
6. S. Akiyama and Y. Kuramashi, “Tensor renormalization group approach to (1+1)-dimensional Hubbard model”, Phys. Rev. D 104 (2021) No.1, ref.014504, pp.1-8.
7. S. Akiyama, Y. Kuramashi, and T. Yamashita, “Metal insulator transition in the (2+1)-dimensional Hubbard model with the tensor renormalization group”, Prog. Theor. Exp. Phys. 2022 (2022) No.2, ref.023101, pp.1-9.
8. 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.

B) 査読無し論文

1. PACS Collaboration: T. Yamazaki, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, and T. Yoshié, “Calculation of kaon semileptonic form factor with the PACS10 configuration”, PoS(LATTICE2021) (2022) ref.563, pp.1-9, in press
2. 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”, SPIN2021, pp.1-5, in press.
3. PACS Collaboration: Ryutaro Tsuji, Yasumichi Aoki, Ken-ichi Ishikawa, Yoshinobu Kuramashi, Shoichi Sasaki, Eigo Shintani, and Takeshi Yamazaki, “The lower moments of nucleon structure functions in lattice QCD with physical quark masses”, PoS(LATTICE2021) (2022) ref.504, pp.1-9, in press.
4. Yutaro Akahoshi, Sinya Aoki, Tatsumi Aoyama, Issaku Kanamori, Kazuyuki Kanaya, Hideo Matsufuru, Yusuke Namekawa, Hidekatsu Nemura, and Yusuke Taniguchi, “General purpose lattice QCD code set Bridge++ 2.0 for high performance computing”, J. Phys.: Conf. Ser. 2207 (2022) ref.012053, pp.1-6.
5. Kazuyuki Kanaya, Mizuki Shirogane, Shinji Ejiri, Ryo Iwami, Masakiyo Kitazawa, Hiroshi Suzuki, Yusuke Taniguchi, and Takashi Umeda, “Latent heat and pressure gap at the first-order deconfining phase transition of SU(3) Yang- Mills theory using the small flow-time expansion method”, PoS (LATTICE 2021) (2022) ref.064, pp.1-9, in press.
6. S. Akiyama, Y. Kuramashi, and Y. Yoshimura, “Quantum Field Theories with Tensor Renormalization Group”, arXiv:2111.04240[hep-lat].

7. 青木保道, 青山龍美, Ed Bennett, 倉知昌史, 益川敏英, 三浦光太郎, 長井敬一, 大木洋, Enrico Rinaldi, 柴田章博, 山脇幸一, 山崎剛, “素粒子質量起源の理論探索”, HPCI Research Report (2021) 6, pp.44-50.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Y. Kuramashi, 「Application of tensor renormalization group to Nambu–Jona-Lasinio model and Hubbard model」, International Workshop on Tensor Networks in Many Body and Lattice Field (Tsung-Dao Lee Institute, Shanghai Jiao Tong University, China (online), July 26-30 2021).
2. S. Takeda, Y. Kuramashi, H. Ohno, Y. Nakamura, 「Study of QCD critical end-point using Wilson-type fermions」, YITP workshop QCD phase diagram and lattice QCD (Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto (online), Oct. 25-29, 2021).
3. Y. Kuramashi, 「Application of tensor renormalization group to Quantum Field Theories」, DWQ@25: The event marks the passage of twenty-five years since the first numerical simulations with Domain Wall Quarks (DWQ) (Brookhaven National Laboratory, NY, USA (online), Dec. 13-17 2021).
4. S. Akiyama, 「Tensor renormalization group approach to higher-dimensional lattice field theories」, Tensor Network States: Algorithms and Applications (TNSAA) 2021-2022 (Online, Jan. 17-21 2022).

B) 一般講演

1. H.-T. Shu, H.-T. Ding, O. Kaczmarek, R. Larsen, A. L. Lorenz, H. Ohno, H. Sandmeyer, and S. Mukherjee, 「Quarkonia and heavy quark diffusion in the hot gluonic medium」, The 19th International Conference on Strangeness in Quark Matter (SQM 2021) (Online, May 17-22, 2021).
2. T. Yamazaki, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, and T. Yoshié for PACS Collaboration, 「Calculation of kaon semileptonic form factor with the PACS10 configuration」, The 38th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2021) (Massachusetts Institute of Technology, MA, USA (online), July 26-30, 2021).
3. R. Tsuji, Y. Aoki, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, S. Sasaki, E. Shintani, and T. Yamazaki, 「The lower moments of nucleon structure functions in lattice QCD with physical quark masses」,

- The 38th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2021) (Massachusetts Institute of Technology, MA, USA (online), July 26-30, 2021).
4. Kazuyuki Kanaya, Mizuki Shirogane, Shinji Ejiri, Ryo Iwami, Masakiyo Kitazawa, Hiroshi Suzuki, Yusuke Taniguchi, and Takashi Umeda, 「Latent heat and pressure gap at the first-order deconfining phase transition of SU(3) Yang-Mills theory using the small flow-time expansion method」, The 38th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2021) (Massachusetts Institute of Technology, MA, USA (online), July 26-30, 2021).
 5. H. Ohno, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, and S. Takeda, 「Critical endpoints in (2+1)- and 4-flavor QCD with Wilson-Clover fermions」, The 38th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2021) (Massachusetts Institute of Technology, MA, USA (online), July 26-30, 2021).
 6. Y. Kuramashi, S. Akiyama, T. Yamashita, and Y. Yoshimura, 「Restoration of chiral symmetry in cold and dense Nambu–Jona-Lasinio model with tensor renormalization group」, The 38th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2021) (Massachusetts Institute of Technology, MA, USA (online), July 26-30, 2021).
 7. S. Akiyama and Y. Kuramashi, 「Tensor renormalization group approach to (1+1)-dimensional Hubbard model」, The 38th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2021) (Massachusetts Institute of Technology, MA, USA (online), July 26-30, 2021).
 8. H.-T. Shu, H.-T. Ding, O. Kaczmarek, R. Larsen, A. L. Lorenz, H. Ohno, H. Sandmeyer, and S. Mukherjee, 「Quarkonia and heavy quark diffusion in the hot gluonic medium」, A Virtual Tribute to Quark Confinement and the Hadron Spectrum 2021 (Online, Aug. 2-6, 2021).
 9. Kazuyuki Kanaya, S. Ejiri, R. Iwami, M. Kitazawa, M. Shirogane, H. Suzuki, Y. Taniguchi, and T. Umeda, 「Thermodynamics of 2+1 flavor QCD with the gradient-flow」, CCS 13th international symposium 2021 on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (CCS, Tsukuba (online), Oct. 8, 2021).
 10. R. Tsuji, Y. Aoki, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, S. Sasaki, E. Shintani, and T. Yamazaki, 「Nucleon isovector tensor charge from lattice QCD with physical light quarks」, The 24th International Spin Symposium (Matsue, Shimane (online) Oct. 18- 22, 2021).
 11. S. Akiyama, 「Restoration of chiral symmetry in cold and dense Nambu–Jona-Lasinio model with tensor renormalization group」, YITP workshop QCD phase diagram and lattice QCD (Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto (online), Oct. 25-29, 2021).
 12. R. Tsuji, Y. Aoki, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, S. Sasaki, E. Shintani, and T. Yamazaki, 「High-precision calculation of nucleon structure using HPC」, The 4th R-CCS International

Symposium The Supercomputer Fugaku: Simulation, Big data and AI supporting Society 5.0 (R-CCS, Kobe (online), February 7-8, 2022).

13. H. Ohno, 「Quarkonium spectral functions from lattice QCD」, 2022 CCS-EPCC Workshop (CCS, Tsukuba (online), Mar. 30-31, 2022).

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 藏増嘉伸, 「Physics explored by master-field simulation in lattice QCD」, 日本物理学会第 77 回年次大会シンポジウム「Challenges and opportunities in large-scale lattice QCD computations and target physics」(岡山大学-岡山理科大学, 岡山 (online), 2022 年 3 月 15 日-19 日).
2. 秋山進一郎, 「Tensor renormalization group approach to higher-dimensional lattice field theories」, 量子多体計算のフロンティア (大阪大学, 大阪 (online), 2022 年 3 月 28 日-29 日).

B) その他の発表

1. 北沢正清, 江尻信司, 金谷和至, 柳原良亮, 白銀瑞樹, 若林直輝, 「格子量子色力学に基づく初期宇宙の諸性質の精密数値解析」, 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(JHPCN)第 13 回拠点シンポジウム (Online, 2021 年 7 月 8 日-9 日).
2. 佐藤航平, 「格子 QCD による BSM の探索とモデルに依存しない手法による形状因子の直接微分計算」, 原子核三者若手夏の学校 2021 (Online, 2021 年 8 月 6 日-10 日).
3. 鈴木遊, 谷口裕介, 鈴木博, 金谷和至, 「Four quark operators for kaon bag parameter with gradient flow」, KEK 理論センター研究会「熱場の量子論とその応用」(KEK, つくば (online), 2021 年 8 月 30 日-9 月 1 日).
4. 秋山進一郎「Tensor renormalization group approach to (1+1)-dimensional Hubbard model」, KEK 理論センター研究会「熱場の量子論とその応用」(KEK, つくば (online), 2021 年 8 月 30 日-9 月 1 日).
5. 山崎剛, 石川健一, 藏増嘉伸, 佐々木勝一, 新谷栄悟 for PACS Collaboration, 「物理点近傍での 2+1 フレーバーQCD による核子形状因子の直接微分計算」, 日本物理学会 2021 年秋季大会(素核宇)(神戸大学, 神戸 (online), 2021 年 9 月 14 日-17 日).
6. 辻竜太郎, 青木保道, 石川健一, 藏増嘉伸, 佐々木勝一, 新谷栄悟, 山崎剛, 「核子軸性電荷及びテンソル、スカラー荷の物理点格子 QCD 計算」, 日本物理学会 2021 年秋季大会(素核宇)(神戸大学, 神戸 (online), 2021 年 9 月 14 日-17 日).

7. 北沢正清, 清原淳史, 江尻信司, 金谷和至, 「重クォーク領域の臨界点周辺における有限サイズスケーリングの精密測定」, 日本物理学会 2021 年秋季大会(素核宇) (神戸大学, 神戸 (online), 2021 年 9 月 14 日-17 日).
8. 鈴木遊, 谷口裕介, 鈴木博, 金谷和至, 「Four quark operators for kaon bag parameter with gradient flow」, 日本物理学会 2021 年秋季大会(素核宇)(神戸大学, 神戸 (online), 2021 年 9 月 14 日-17 日).
9. 秋山進一郎, 藏増嘉伸, 「テンソル繰り込み群による 1+1 次元 Hubbard 模型の研究」, 日本物理学会 2021 年秋季大会(素核宇) (神戸大学, 神戸 (online), 2021 年 9 月 14 日-17 日).
10. 山崎剛, 藏増嘉伸, 中村宜文, 石川健一, 浮田尚哉, 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 8 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会 (THE GRAND HALL, 東京都品川区 (online), 2021 年 10 月 28-29 日).
11. 山崎剛, 藏増嘉伸, 浮田尚哉, 新谷栄悟, 滑川裕介, 「Master field 格子 QCD による標準理論を超える物理の探索」, 第 8 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会 (THE GRAND HALL, 東京都品川区 (online), 2021 年 10 月 28-29 日).
12. 谷口裕介, 金谷和至, 「勾配流法を用いた $N_f=2+1$ QCD のエネルギー運動量 テンソルの研究」, 第 8 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会 (THE GRAND HALL, 東京都品川区 (online), 2021 年 10 月 28-29 日).
13. 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, 「PACS10 配位を用いた K 中間子セミレプトニック崩壊形状因子計算」, 日本物理学会第 77 回年次大会 (岡山大学-岡山理科大学, 岡山 (online), 2022 年 3 月 15 日-19 日).
14. 辻竜太郎, 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 による核子構造の計算」, 日本物理学会第 77 回年次大会 (岡山大学-岡山理科大学, 岡山 (online), 2022 年 3 月 15 日-19 日).
15. 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臨界点決定のためのホッピングパラメタ展開の収束性」, 日本物理学会第 77 回年次大会 (岡山大学-岡山理科大学, 岡山 (online), 2022 年 3 月 15 日-19 日).
16. 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 谷口裕介, 鈴木博, 梅田貴士, 「SFtX 法による $N_f=2+1$ フレーバー QCD の熱力学量」, 日本物理学会第 77 回年次大会 (岡山大学-岡山理科大学, 岡山 (online), 2022 年 3 月 15 日-19 日).

17. 秋山進一郎, 藏増嘉伸, 山下巧, 「Metal-insulator transition in (2+1)-dimensional Hubbard model with tensor renormalization group」, 日本物理学会第 77 回年次大会 (岡山大学-岡山理科大学, 岡山 (online), 2022 年 3 月 15 日-19 日).

(4) 著書、解説記事等

1. 藏増嘉伸, 「テンソルネットワークと場の理論」, 数理科学 2022 年 2 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/>

産学官連携

国際連携・国際活動

International Lattice Data Grid (ILDG)

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

Japan Lattice Data Grid (JLDG)

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

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

9. 管理・運営

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

10. 社会貢献・国際貢献

1. 山崎剛、計算科学ロードマップ執筆者

11. その他

海外長期滞在、フィールドワークなど

II. 宇宙物理研究部門

1. メンバー

教授	梅村 雅之	
教授	大須賀 健	
准教授	森 正夫	
准教授	矢島 秀伸	
准教授	吉川 耕司	
助教	Wagner Alexander	
研究員	高水 裕一	(CCS)
	安部 牧人	(計算メディカルサイエンス)
	福島 肇	(科研費若手研究 A)
	朝比奈 雄太	(CCS)
	井上 茂樹	(ALMA 共同科学研究事業)
	小川 拓未	(富岳サブ課題 C)
	菊田 智史	(科研費基盤研究 A)
	荻原 大樹	(学振研究員 DC2)
学生	大学院生 24 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、一般相対論的ボツルマン輻射輸送計算を用いた超臨界降着流の X 線時間変動の研究、星間空間を浮遊するブラックホールへのガス降着の研究、キラル有機分子の鏡像異性体過剰を引き起こす紫外線円偏光波生成の研究、ライマン α 光の円偏光生成とホモキラリティ問題、原始惑星系円盤における乱流とダスト成長、暗黒物質サブハローと M31 恒星ストリームの相互作用、Dark Matter Sub-halo の力学進化、ダークマターサブハロー衝突によるダークマター欠乏銀河の形成過程、原始銀河団形成シミュレーション、生体光拡散トモグラフィーの数値的研究、スーパーコンピュータ富岳を用いた宇宙大規模構造におけるニュートリノの数値シミュレーション、宇宙大規模構造形成に対するニュートリノの力学的影響、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] ブラックホール超臨界降着流の大局構造の研究

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。特に、エディントン光度を超えるほどの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。超臨界降着流は、光学的にも幾何学的にも厚く、また、輻射圧で加速された強力なアウトフローが発生するという特徴があり、輻射流体力学シミュレーションで盛んに調べられてきたが、大局的な構造はまだわかっていない。本研究で、計算領域を大幅に拡張した輻射流体力学シミュレーションを実施したところ、超臨界降着流は、降着円盤、遠方に到達するアウトフロー (pure outflow)、途中で円盤に落下するアウトフロー (failed outflow) の 3 成分から構成されることがわかった。比較的ブラックホール近傍から吹き出したアウトフローは、強力な輻射力で加速されて pure outflow となるが、比較的遠方から噴出したガスは、効率的な輻射加速を受けることができず、failed outflow となる。また、アウトフローがほぼ発生しない領域がブラックホールのごく近傍に現れることもわかった。さらに、放出される運動エネルギーと輻射エネルギーの比を求めたところ、いくつかの超高光度 X 線源の観測結果と合致することがわかった。この結果は、超高光度 X 線源のエネルギー源が、恒星質量ブラックホール周囲の超臨界降着流であるという説をサポートするものである。

[2] 一般相対論的ボツル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

超臨界降着流は、極めて高光度でコンパクトな天体のエネルギー源であると考えられている。本研究では、超臨界降着流の観測的性質を調べるため、シュワルツシルト時空におけるボツルマン輻射輸送計算コードを新たに開発した。このコードは、従来のコードでは正しく扱うことができなかった多重逆コンプトン散乱を精密に扱えることが特徴である。多重逆コンプトン散乱は、超臨界降着流から生じるアウトフロー領域で頻繁に起こることが予想されるため、その実装が重要課題されていた。計算の結果、超臨界降着流は、高温低密度プラズマに満たされた funnel 領域 (回転軸から 30 度程度の広がり) と、それを取り囲む比較的低温で光学的に厚い領域から構成されるため、face-on に近いほど高エネルギー X 線が観測されやすいことがわかった。特に、数十キロ電子ボルトの高エネルギー光子は、視野角が 30 度以下の観測者だけが検出できる。これは、シミュレーションによる過去のスペクトル研究と整合的である。さらに、ブラックホール近傍で発生したフレアによってスペクトルがどのように変化するかを調べ、光子のエネルギーが大きくなるほど変化の振幅が大きくなること、高エネルギー光子が低エネルギー光子よりも早く変動することを発見した。

[3] 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

銀河の中心には超巨大ブラックホールが存在するが、その形成メカニズムはよくわかっていない。星間空間を浮遊する中質量ブラックホールへのガス降着が、有力な仮説のひとつである。そこで本研究では、降着円盤をまといつつ星間空間を浮遊するブラックホールへの、ホイール・リットルトン降着について調べた。具体的には、ダストの吸収によって減衰する輻射力を考慮した運動方程式を解くことで、中心天体の周囲の定常構造を明らかにした。その結果、光学的厚さが増すと質量降着率が増加する傾向があることを発見した。また、降着円盤の光度がダストガスのエディントン光度を超えても、ダストの吸収による減衰で輻射力が弱くなり、ガスが降着できることもわかった。エディントン比（円盤の光度/エディントン光度）が 3.0 の円盤に対して、典型的光学的厚みが 1.0 のガスが回転軸方向から流入する場合、ガス降着は妨げられてしまうが、典型的光学的厚みが 3.3 の場合、ホイール・リットルトン降着率の約 93 %でガスが降着する。一方、円盤面方向の輻射は弱いため、円盤面に近い方向からのガスが流れ込む場合、円盤の光度によらず降着が妨げられないことがわかった。

[4] ライマン α 光の円偏光生成とホモキラリティ問題（宇宙生命計算科学連携）

アミノ酸には互いに鏡像異性体である L 型と D 型が存在し、実験ではこの L 型と D 型が等量生成される。しかし、生物の利用するアミノ酸の 99% は L 型となっており、この理由は長年明らかにされていない。これまでの研究で、水素ライマン α 線の円偏光をアミノ酸に照射することで、L 型と D 型の吸収率の差により、どちらかが選択的に破壊される可能性が示されている。円偏光は、磁場によって整列したダスト粒子に光が散乱することで生成すると考えられる。初期銀河系の星形成領域で多くのライマン α 波長の光が生成され、整列されたダストで散乱されれば、ライマン α の強い円偏光を生成できる可能性がある。本研究では、ライマン円偏光の生成のダストサイズ依存性を調べるために、先行研究と同様のコードを用い、3種類のサイズのダストに対する円偏光生成を計算した。ダストのサイズは 0.01, 0.05, 0.10 μm の3種類を仮定した。その結果、ダストサイズが 0.01 μm のときにライマン α の円偏光度が 20% ほどとなり、最も強い円偏光を生成するということが分かった。この結果により、長波長近似が成り立つような場合に、高い円偏光度を達成できるということが分かった。

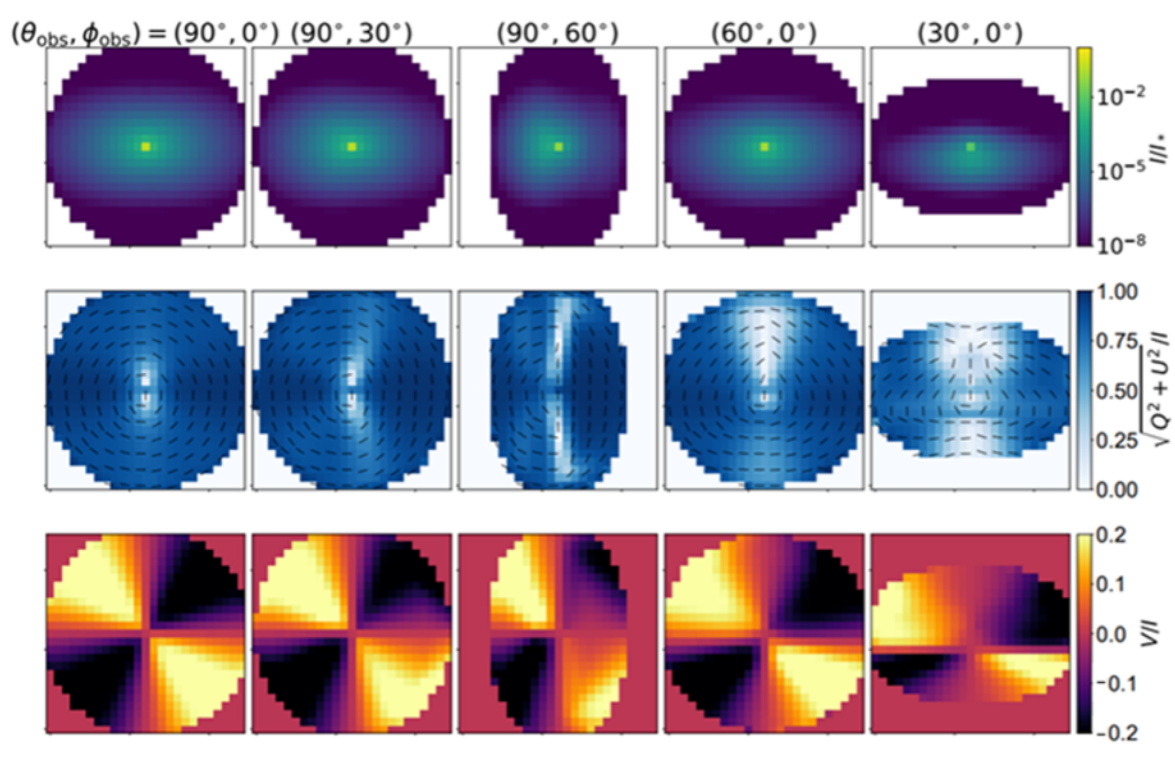


図 1: ライマン α 波長における輝度（上図）と線偏光度（中図），円偏光度（下図）。整列ダストは yz 平面上に分布している。各図は左から観測者が $(\theta_{\text{obs}}, \phi_{\text{obs}}) = (90^\circ, 0^\circ), (90^\circ, 30^\circ), (90^\circ, 60^\circ), (60^\circ, 0^\circ), (30^\circ, 0^\circ)$ にいる場合を示す。円偏光度は 20% 近くなり，四重極構造が見られる。

[5] 原始惑星系円盤における乱流とダスト成長（宇宙生命計算科学連携）

太陽系形成の標準モデルによると，原始惑星系円盤の中でダストが付着成長し微惑星へと成長したと考えられている。しかし，ガスとの摩擦によりダストは最短 100 年で中心星に落ちてしまうという「中心星落下問題」，限界速度以上で衝突したダストは跳ね返りや破壊が起きってしまうという「衝突破壊問題」という 2 つの問題が指摘されている。これらの問題を解決するメカニズムとして中心星に落下する粒子の風上風下の原理を利用したストリーミング不安定が注目されている。この不安定を有効にするためには，ダストがセンチサイズの石ころ（ペブル）に成長していること，ダスト-ガス比が数倍になっていることが必要である。本研究では，乱流中でダストが中心星に落下しながらもストリーミング不安定が有効になる大きさまでダストを成長させることができるかという問題を調べた。数値計算は，乱流場を非圧縮ナビエ-ストークス方程式で扱いフーリエスペクトル法で解き， 256^3 個のダスト（慣性粒子）をランダムにまき，乱流場中での運動をルンゲクッタ法で計算した。初期速度は中心星方向を想定した一方向のみ与えた。この初期速度は流体の速度に対して相対的に設定しているため，乱流の強さによって，またストークス数（St 数）によって中心星への落下時間

も異なるので St 数別に、初期速度を変えてシミュレーションを行った。結果として、中心星方向の速度は指数関数的に減少し、同 St 数において初期速度が異なる場合でもその減少率はほぼ一致した。また他方向の速度と比較して、中心星方向の速度の非等方性は、初期速度が小さい方が速く小さくなった。St 数別に比較すると、St 数の大きい方がゆっくり速度減少し、非等方性の低下にもより時間がかかった。さらに、粒子の衝突率を求めると、速度の非等方性が大きい状態にも関わらず、早くに衝突率が上昇した。以上の結果より、速度が他方向の数十倍程度まで落ちると十分な衝突数を獲得できることが分かった。よって、初期速度が大きい場合でも短い時間で十分な衝突数を獲得できる速度になり、ストリーミング不安定につながり得ることが分かった。

[6] 暗黒物質サブハローと M31 恒星ストリームの相互作用

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、今から約 800 億年程度昔に起こった衛星銀河との衝突で形成されたと考えられている (Fardal et al. 2007; Mori & Rich 2008)。また、この衝突に伴う力学的な加熱がディスクに与える影響と現在のディスクの厚さの制限から、 $10^{10} M_{\odot}$ を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 ($\sim 10^{11} M_{\odot}$) 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、ディスク加熱によりディスクの厚さが増大し、現在の観測と矛盾すると考えられる (Mori & Rich 2008)。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ている。本研究では M31 のバルジとディスク、衛星銀河を粒子で表現したモデルで衝突の N 体シミュレーションを行った結果、解析結果の予想通り M31 銀河ディスクが完全に破壊されてしまうことを示した。つまり、Block et al. (2006) で主張されているような大質量衛星銀河の衝突モデルとは、矛盾する結果が得られたことになる。

[7] Dark Matter Sub-halo の力学進化

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った。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。それにより、ホストハローの潮汐力による剥ぎ取りの効果と最大回転速度の進化を定量的に示すことができた。また、これらのサブハローの質量密度分布を Navarro-Frenk-White 質量密度関数でフィットした際の中心集中度のパラメータとビリアル質量の関係を求め、その近似式を求めた結果、先行研究の Ishiyama & Ando (2020) 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。

[8] ダークマターサブハロー衝突によるダークマター欠乏銀河の形成過程

銀河形成の標準模型であるコールドダークマターによる階層的構造形成論では、銀河には恒星質量の約 100 倍以上のダークマターが存在していると考えられている。しかし、楕円銀河 NGC1052 に付随する衛星銀河 NGC1052-DF2 や NGC1052-DF4 が、理論的に予測されるダークマター質量の $1/400$ 程度しかないダークマター欠乏銀河であることが発表された (van Dokkum et al. 2018, 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では非常に困難であり、それらの形成シナリオを検討する必要がある。我々はガスとダークマターの物理的性質の違いに着目し、ガスを含んだダークマターサブハロー同士の衝突によってダークマター欠乏銀河が形成される可能性を調査している。一次元流体モデル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。本研究ではこれまでのモデルを発展させ、サブハローの金属量の違いによる効果を調査した。その結果、金属量 $Z = 10^{-3} Z_{\odot}$ のガスを含む質量 $10^9 M_{\odot}$ 同士のサブハロー衝突シミュレーションでは、 $Z=0$ の衝突に比べ星形成効率が上昇し、ダークマター欠乏銀河の形成過程に影響を与えることがわかった。

[9] 原始銀河団形成シミュレーション

近年の広域銀河サーベイ観測によって、初期宇宙において銀河が密集している高密度領域が続々と発見された。これらは最終的に銀河団へと進化すると考えられていることから、原始銀河団と呼ばれている。原始銀河団では、爆発的な星形成銀河や超巨大ブラックホールなど多様な天体が形成されていることが分かっている。しかしながら、宇宙の高密度領域で銀河進化がどのように進むのかは分かっていない。そこで、我々は原始銀河団シミュレーションプロジェクト FOREVER22 を立ち上げ、原始銀河団とその領域での銀河形成・進化について調べた。結果として、原始銀河団は大規模なフィラメント構造の交点で形成され、大量のガス降着によって爆発的な星形成が誘起されていることが分かった（図参照）。また、このような大質量銀河では星の光の大半が星間ダストに吸収されるため、銀河は赤外線で明るく輝き、そのフラックスは近年のアルマ望遠鏡による観測結果を見事に再現する事が分かった (Yajima et al, 2022, MNRAS, 509, 4037)。そして、大質量銀河ではその重力ポテンシャルの深さから、星やブラックホールからのフィードバックに打ち勝ってガスが銀河中心へと流入するため、ブラックホール質量が 1 億太陽質量以上の超巨大ブラックホールへと成長することを示した。

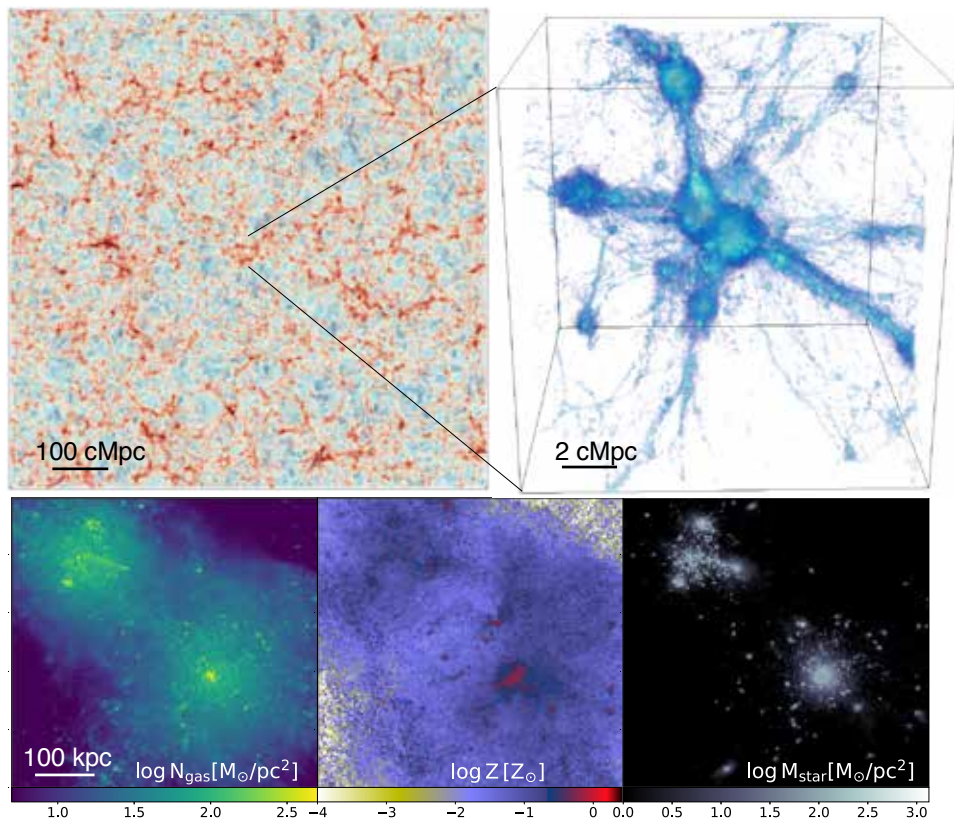


図 2: 赤方偏移 3 におけるダークマターの大域的分布（左上）と原始銀河団周囲のガス分布（右上）。下段のパネルはそれぞれメンバーの大質量銀河のガス（左），重元素（中），星（右）の分布である。

[10] 生体光拡散トモグラフィーの数値的研究（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）

波長 700-1000 ナノメートルの近赤外光を使った拡散トモグラフィーは、非侵襲かつ被曝が無い安全な医療診断技術として期待されている。しかしながら、近赤外光は生体内を散乱しながら複雑な経路で伝播していくため、診断には輻射輸送シミュレーションによる光伝播のモデルがあらかじめ必要となる。特に、生体光イメージングではピコ秒オーダーの高時間分解能、強い非等方散乱、反射、屈折の効果を取り入れる必要がある。我々は、これらの効果を全て導入した新しい輻射輸送計算コード TRINITY を開発し、生体模擬物質ファントムに対する光パルス照射実験と比較研究を行った（Yajima, Abe, Umemura, Takamizu, Hoshi, 2022, JQSRT, 277, 107948）。結果として、波形が計測データと一致する事を確認した。また、空気層がある場合の数値実験も行い、境界の反射・屈折、光速の違いによる周囲の媒質よりも早い光伝播などについて再現する事に成功した（図 3）。

このような数値シミュレーションを用いた診断を臨床応用へと発展させるためには、機械学習などによる逆問題解析が有用と考えられる。しかしながら、生体光イメージングでは教師データとして使用出来る臨床データがほとんど無い。そのため、輻射輸送シミュレーションにより、模擬計測データを作成する必要がある。その際に、多数のパラメータについてシミュレーションを行う必要がある事から、高速高精度な輻射輸送計算コードが必要となる。行い、輻射輸送の全ての部分を GPU 上で計算可能にした。これらの改良により、精度を保ったまま 10 倍以上の加速を実現する事が出来た（Abe, Yajima, Umemura, et al. 投稿準備中）。我々はまず Wavelet 法を導入する事で、場所により輻射場の角度分解能を自動的に変化させるアルゴリズムを開発した。また、計算コードの GPU 化を行い、輻射輸送の全ての部分を GPU 上で計算可能にした。これらの改良により、精度を保ったまま 10 倍以上の加速を実現する事が出来た（Abe, Yajima, Umemura, et al. 投稿準備中）。

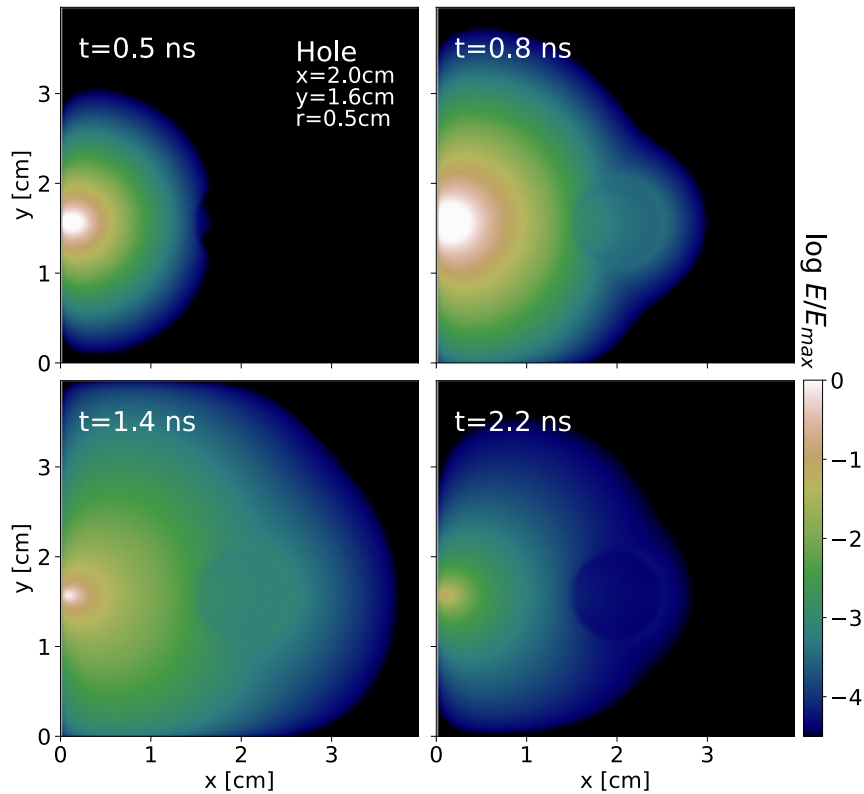


図 3: 生体模擬物質ファントムへの近赤外光パルス照射のシミュレーション。中心に空気層を置いている。色は光のエネルギー密度を示している。

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

スーパーコンピュータ京の後継機として開発されたスーパーコンピュータ富岳において、宇宙大規模構造におけるニュートリノの力学的影響を計算する N 体シミュレーションと Vlasov シミュレーションのハイブリッドコードの最適化を行った。

本年度は富岳の全システムである約 150000 ノードを使った最適化を実施し、重力計算における高速フーリエ変換や MPI 通信の改良を行うことで、strong scaling で 82–93%, weak scaling で 82–91% という高い並列化効率を達成した。また、この最適化によって得られたコードで富岳の全システムを用いた世界最大規模の Vlasov シミュレーションを実現することに成功した (図 4)。この数値シミュレーションは中国の Tianhe-2 スーパーコンピュータで行われたこれまでで世界最大のニュートリノの N 体シミュレーションと同等の計算領域と空間分解能をもつものであるが、我々の数値シミュレーションでは従来の N 体シミュレーションのようなショットノイズが発生することなく従来の 10 分の 1 程度の短い時間でシ

ミュレーションを終えることが出来た。この成果をまとめた論文は、2021 年の ACM Gordon-Bell Prize のファイナリストに選ばれた。

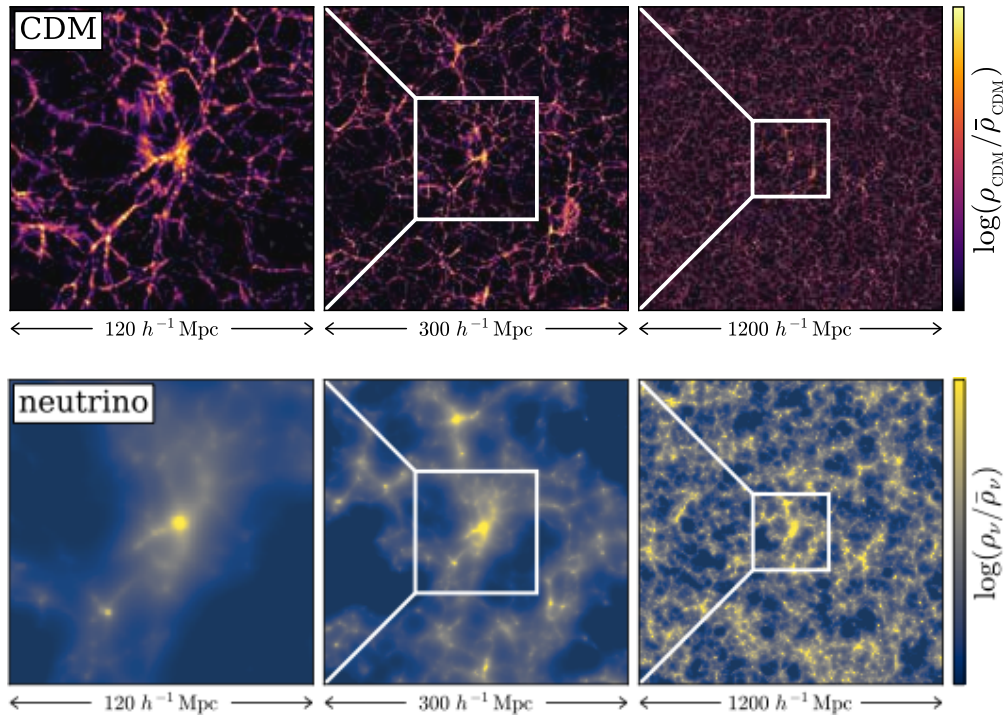


図 4: 富岳の全システムを用いて実行した世界最大規模の Vlasov シミュレーションで得られた、CDM(上段) とニュートリノ (下段) の密度分布。

[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やニュートリノ航跡などのニュートリノ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解くことで数値シミュレーションで調べた。

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

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

1. studied the interstellar medium in the late-stage gas-rich galaxy merger NGC 6240 using a suite of emission-line maps at very high resolution from the Hubble Space Telescope, Keck with Adaptive Optics, and the Atacama Large Millimeter/sub-millimeter Array (ALMA). NGC 6240 hosts a superwind driven by intense star formation and possibly two active nuclei; the outflows produce bubbles and filaments seen in shock tracers from warm molecular gas to optical mildly ionized gas and hot highly ionized plasma (see Fig. 5). In the most distinct bubble, we discovered that the molecular clouds are partly shielded and survive all the explosive activity. The data in this work have provided in depth interpretations of how multi-phase galactic gas is affected in galaxy collisions and the AGN feedback and star formation mergers trigger. The results are summarized in Medling et al. incl. Wagner 2021, ApJ 923 2 160;
2. discovered a spatially resolved, massive molecular outflow, carrying 75% of the gas in the central region of the host galaxy of an AGN hosting a radio jet, B2 0258+35. The outflow coincides spatially with the radio jet 540 pc offset from the core, unambiguously pointing to the jet as the driver of this phenomenon. The modest luminosity of the radio source confirms predictions of our simulations that jets of low-luminosity radio sources carry enough power to drive such outflows and significantly affect nuclear gas reservoirs in their host galaxies. Figures 6a and 6b show the black hole jet interacting with the gaseous disc and dispersing the gas in the central nuclear region of the galaxy. Sources such as B2 0258+35 comprise the majority of the radio AGN population and represent an important mechanism of the co-evolution of black holes and galaxies. These results were published in Nature Astronomy, with our simulation results used as the cover illustration of the issue (Murthy, S., Morganti, R., Wagner, A. Y. et al. 2022, Nature Astronomy, 6, 488 – 495);
3. constructed models of the putative Milky Way AGN jet that is thought to have inflated the FERMI bubbles. We identify vestiges of the interaction of the jets with the circumnuclear disc as well as

clouds on ~ 100 pc scales. We have constructed the first models to reproduce the new MeerKAT radio data and eROSITA X-ray data of the inner regions of the FERMI bubble (see Fig. 7). These results have been published in a very detailed Astrophysical Journal paper (G. N. Cecil, A. Y. Wagner, et al. 2021, ApJ, 922, 2). The results provide predictions for the properties of the central supermassive black hole of our galaxy (Sgr A*) inferred from recent Event Horizon Telescope observations, in particular the black hole spin axis orientation;

4. established how AGN jet driven turbulence in gas-rich disc galaxies modify the star-formation rate in the disc. The statistical theory of star-formation is built around the statistical properties of the turbulent molecular clouds in which stars form. We applied this statistical theory of star-formation to the turbulent discs of our simulated radio-galaxies and found that the effect of the modification of turbulence by the jets on star formation is complicated but non-negligible. Depending on the orientation of the jet, star-formation can be slightly suppressed or slightly enhanced compared to the case without jets. This is the first quantitative study of feedback by AGN-driven turbulence, which may prove to be a new mode of AGN feedback, important in the majority of intermediate and low-mass galaxies which tend not to harbour powerful AGN. These results were published in Mandal, A. et al, incl. Wagner, A. Y., 2021, MNRAS, 508, 4, 4738.

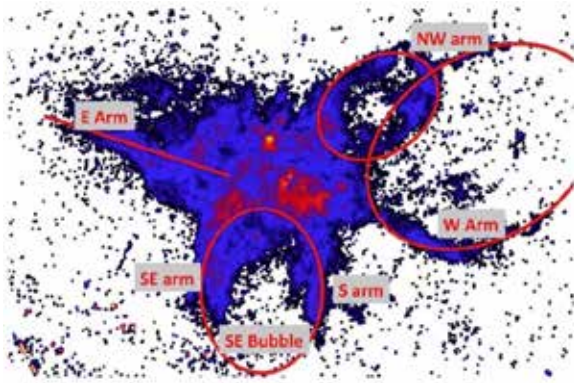


図 5: Map of $H\alpha+[NII]$ of NGC 6240 with schematic identification of the filamentary and bubble features which have been created by the merger event and the subsequent AGN outbursts. The multiphase data shed light on the gas dynamics ensuing the violent collision and AGN feedback.

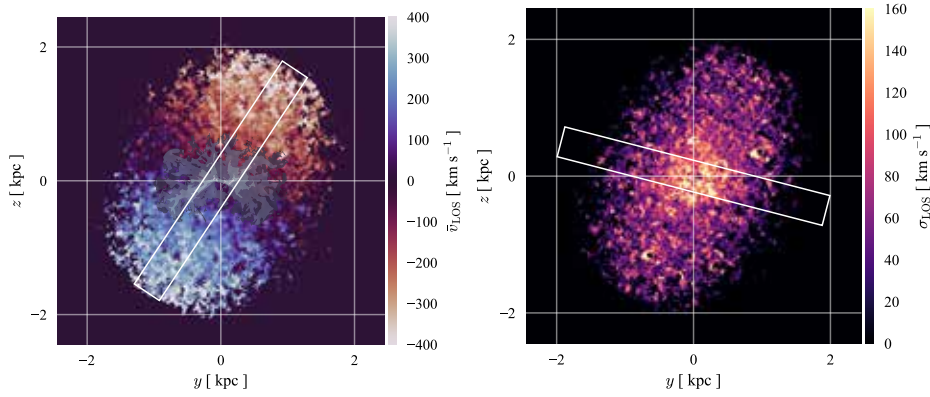


図 6: Simulated velocity maps resulting from jet-interstellar-medium interactions of the gaseous disc in the galaxy B2 0258+35. Left: Line-of-sight velocity map (colormap) with the radio emission from the jet in greyscale filled contours. Right: Velocity dispersion of the gas in the disc (colormap)

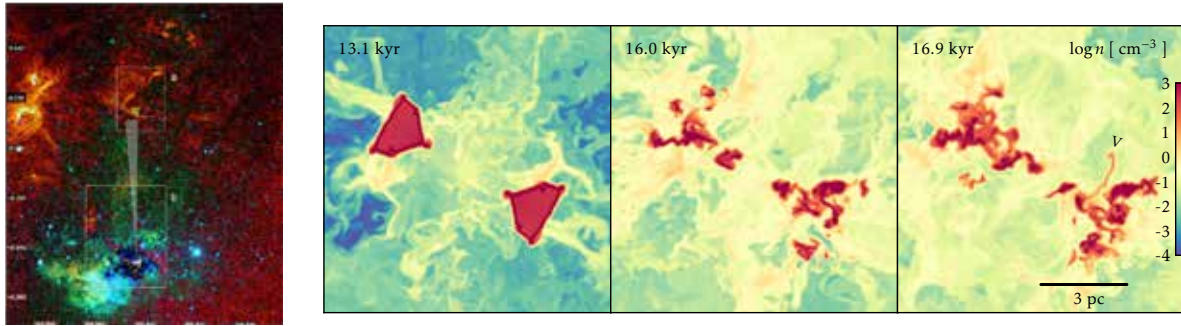


図 7: Observational and simulation results from our hunt for signatures of the Milky Way's putative central black hole jets. Left: Superposition of multiwavelength observational evidence of jet-ISM interactions in the Milky Way of our galaxy. The cone shows our inferred jet orientation. Right: Simulations of the remnants of the putative Milky Way jet that has interacted with the circum-nuclear disc. The jet slowly ablates gas from the circum-nuclear disc and creates a highly turbulent environment. In cases where the disc is clumpy, the gas fragments due to thermal instability and forms dense filaments. Some of the features of the interactions may explain anomalous features seen in ALMA observations of the circum-nuclear disc.

[14] 星団形成における輻射流体力学過程の研究

分子雲内の星団形成は、宇宙全体や銀河の星形成史を決める重要なプロセスである。また、大部分の星は星団の一員として誕生することから、星団形成は星形成過程においても重要である。しかし、星団形成については非一様なガス構造における大質量星の輻射フィードバックを考慮する必要があることから、輻射流体シミュレーションを用いた研究が必要となる。我々は、適合格子細分化法を採用した流体コードに、M1-closure 法による輻射輸送計算を実

装することにより、星団形成用の輻射流体シミュレーションコードを新たに開発した。このコードを用いて、星団形成について以下のことを明らかにした。

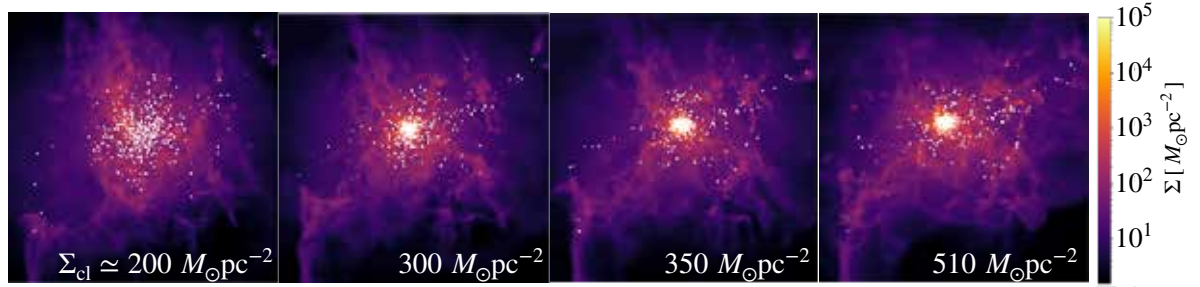


図 8: 星団の性質と星形成雲の面密度の関係。各図はガスの面密度、白点は星粒子の位置を示す。星形成雲がコンパクトな場合 (雲面密度が $\Sigma_{cl} > 300 M_{\odot} pc^{-2}$ となる場合)、高星密度星団が形成される。

1. YMC 形成条件の導出

大質量星団は太陽質量の 10 万倍以上の総質量を持つ星団である。観測から大質量星団には、その誕生時から星密度が異なる 2 つの種類の星団があることが知られている。一つは、Young massive star cluster (YMC) と呼ばれ、星密度が $10^3 M_{\odot} pc^{-3}$ を超える。銀河系内に存在する古い大質量星団である球状星団も、この YMC が残存した星団だと考えられている。もう一つは、Leaky star cluster (LSC) と呼ばれる星密度が低い星団である。シミュレーションから、雲が十分コンパクトであり、星団からの重力が大質量星からの電離フィードバックに打ち勝つと、星団へのガス供給が継続し、YMC が形成可能であることが判明した (図 8 参照)。また、雲がコンパクトではない場合には、電離領域によるガス蒸発が効率的に働き、星密度の低い LSC が形成されることを示した。さらに、解析的モデルを構築し、ガス雲の面密度について YMC の形成条件を導出し、数値計算をうまく再現することにも成功した。(Fukushima, Yajima, 2021, MNRAS, 506, 5512)

2. FUV フィードバック効果

大質量星からは電離領域を形成する極紫外線光 (EUV) の他にも、低エネルギーである遠紫外線光 (FUV) も放出される。FUV 光は HI ガスに吸収されないために、水素分子の光解離やダスト粒子における光電効果を介して、電離領域の外側の広大な領域において、ガスを加熱することが可能である。本研究では、星団形成における FUV 光による星形成の抑制について調べた。結果として、ガスの面密度が $\Sigma < 25 M_{\odot} pc^{-2}$ とガス雲がコンパクトではない、もしくはガスの乱流の運動エネルギーが雲の重力エネルギーより十分大きい場合に、FUV 光は星形成抑制に有効であることを示した。しかし、よりコンパクトな雲では、FUV 光は有効ではなく、EUV 光による電離フィードバックの方が重要であることも示した。(Fukushima, Yajima, 2022, MNRAS, 511, 3346)

4. 教育

【学位論文】

<博士論文>

1. 阿左美 進也

Suppression of H₂ formation due to Ly α feedback in early cosmological objects

<修士論文>

1. 佐藤 大樹

光音響波伝播シミュレーションと機械学習によるヒト頭部の血管分布解析

2. 尾形 絵梨花

Hoyle-Lyttleton accretion on to black hole accretion disks with super-Eddington luminosity for dusty gas

3. 武者野 拓也

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

<学士論文>

1. 田中 怜

AMR 法を用いた銀河ホットハローにおける AGN フィードバックサイクルの流体シミュレーション

2. 新井 聡一

ダストに覆われた円盤銀河の星形成の研究

3. 岩本 歩夢

原始惑星系円盤における乱流とダスト成長

4. 内田 雄揮

銀河団中の非熱的電子による Sunyaev-Zel'dovich 効果

5. 古谷田 和真

Riemann 問題の解析

6. 杉原 和斗

銀河衝突で探るダークマターハローの非球対称質量分布

7. 島田 悠愛

突発的超臨界降着現象の研究

8. 竹田 麟太郎

特殊相対性理論的光子拡散の研究

9. 竹林 晃大

コンプトン散乱を考慮した偏光 X 線の輻射輸送計算

10. 古賀 実

ライマン α 光の円偏光生成とホモキラリティ問題

集中講義

1. 大須賀健. 物理学特別講義 C「輻射流体力学の基礎とコンパクト天体への降着流の物理」, 広島大学. 11/11, 11/18, 11/25.

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 梅村 雅之, 石原 卓. 日本シミュレーション学会ベストオーサー賞, 「宇宙物理におけるナビエ・ストークス方程式の直接数値計算 —原始惑星系円盤乱流中のダスト成長—」, シミュレーション, 39-2, 101 (2020). Aug. 24, 2021. Url: https://www.jsst.jp/jsst_info/award/R03winner.html.

外部資金

<代表者>

1. 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」
(R3 年度 810 万円／全体 3460 万円)
2. 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」
(R3 年度 420 万円／全体 3130 万円)
3. 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」
(R3 年度 100 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」
(R3 年度 641 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」

(R3 年度 680 万円／全体 3210 万円)

6. 新学術領域研究（研究領域提案型）R2 年度～R3 年度：矢島秀伸

「輻射流体計算で解き明かす初期宇宙の高密度星団形成」

(R3 年度 180 万円／全体 370 万円)

7. ALMA 共同科学研究事業（区分 A）H31 年度～R3 年度：矢島秀伸

「ALMA 観測と数値シミュレーションの融合で解き明かす大規模構造，原始銀河団サブミリ波銀河の階層的構造」

(R3 年度 100 万円／全体 300 万円 + 研究員雇用経費 3 年)

8. 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」

(R3 年度 90 万円／全体 1150 万円)

9. 基盤研究 (C)（一般）R1 年度～R3 年度：Wagner Alexander

「Interstellar Turbulence by Supermassive Black-Hole Jets, Winds, and Radiation」

(R3 年度 90 万円／全体 260 万円)

10. 若手研究 H30 年度～R3 年度：朝比奈雄太

「宇宙ジェットの加速・収束・相互作用の統一的な数値実験による全容の解明」

(R3 年度 50 万円／全体 200 万円)

<分担者>

1. 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」

(R3 年度分担金 10 万円／分担金全体 40 万円)

2. 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」

(R3 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」

(R3 年度分担金 20 万円／分担金全体 40 万円)

4. 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现象の解明）

(R3 年度 425 万円／分担金全体 1004 万円)

5. 基盤研究 (A) (一般) H29 年度～R3 年度：大須賀健（代表者：大向一行）
「理論シミュレーションで解明する巨大ブラックホールの起源」
(R3 年度分担金 30 万円／分担金全体 195 万円)
6. 高性能汎用計算機高度利用事業, R2 年度～R4 年度：吉川耕司（代表者：牧野淳一郎）
「富岳」成果創出加速プログラム「宇宙の構造形成と進化から惑星表層環境変動までの統一的描像の構築」（サブ課題 A 大規模数値計算と大型観測データのシナジーによる宇宙の進化史の解明）
(R3 年度 24 万円／分担金全体 894 万円)
7. 基盤研究 (A) H30 年度～R4 年度：矢島秀伸（代表者：児玉忠恭）「銀河形成の加と減速を司る物理過程の実証的解明」
(R3 年度分担金 10 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」
(R3 年度分担金 5 万円／分担金全体 77 万円)
9. 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)

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. Rhythm Shimakawa, Masayuki Tanaka, Satoshi Kikuta, and Masao Hayashi. “H α emission in the outskirts of galaxies at $z = 0.4$ ”. Publications of the Astronomical Society of Japan 74 (Feb. 2022). psab127, pp. 318–325. issn: 0004-6264. doi: 10.1093/pasj/psab127. eprint: <https://academic.oup.com/pasj/advance-article-pdf/doi/10.1093/pasj/psab127/42892943/psab127.pdf>.
2. Kohji Yoshikawa, Satoshi Tanaka, and Naoki Yoshida. “A 400 Trillion-Grid Vlasov Simulation on Fugaku Supercomputer: Large-Scale Distribution of Cosmic Relic Neutrinos in a Six-Dimensional Phase Space”. Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (Nov. 2021), pp. 1–11. doi: 10.1145/3458817.3487401. url: <https://doi.org/10.1145/3458817.3487401>.
3. Yoshiaki Ono, Ryohei Itoh, Takatoshi Shibuya, Masami Ouchi, Yuichi Harikane, et al. “SILVERRUSH X: Machine Learning-aided Selection of 9318 LAEs at $z = 2.2, 3.3, 4.9, 5.7$,

- 6.6, and 7.0 from the HSC SSP and CHORUS Survey Data”. *ApJ* 911.2, 78 (Apr. 2021), p. 78. doi: 10.3847/1538-4357/abea15. arXiv: 2104.02177[astro-ph.GA].
4. Yoshiki Sakurai, Takashi Ishihara, Hitomi Furuya, Masayuki Umemura, and Kenji Shiraishi. “Effects of the Compressibility of Turbulence on the Dust Coagulation Process in Protoplanetary Disks”. *ApJ* 911.2, 140 (Apr. 2021), p. 140. doi: 10.3847/1538-4357/abe9ba.
5. Takashi Kojima, Masami Ouchi, Michael Rauch, Yoshiaki Ono, incl. Masayuki Umemura, et al. “EMPRESS. II. Highly Fe-enriched Metal-poor Galaxies with ~ 1.0 (Fe/O) $_{\odot}$ and 0.02 (O/H): Possible Traces of Supermassive (>300 M) Stars in Early Galaxies”. *ApJ* 913.1, 22 (May 2021), p. 22. doi: 10.3847/1538-4357/abec3d. arXiv: 2006.03831[astro-ph.GA].
6. Anne M. Medling, Lisa J. Kewley, Daniela Calzetti, George C. Privon, incl. Alexander Y. Wagner, et al. “Tracing the Ionization Structure of the Shocked Filaments of NGC 6240”. *ApJ* 923.2, 160 (Dec. 2021), p. 160. doi: 10.3847/1538-4357/ac2ebb. arXiv: 2111.01025[astro-ph.GA].
7. Misaaki Mizumoto, Mariko Nomura, Chris Done, Ken Ohsuga, and Hirokazu Odaka. “UV line-driven disc wind as the origin of UltraFast Outflows in AGN”. *MNRAS* 503.1 (May 2021), pp. 1442–1458. doi: 10.1093/mnras/staa3282. arXiv: 2003.01137[astro-ph.HE].
8. Yuta Tarumi, Takuma Suda, Freeke van de Voort, Shigeki Inoue, Naoki Yoshida, et al. “s-process enrichment of ultrafaint dwarf galaxies”. *MNRAS* 505.3 (Aug. 2021), pp. 3755–3766. doi: 10.1093/mnras/stab1487. arXiv: 2009.10096[astro-ph.GA].
9. Shigeki Inoue, Toshinobu Takagi, Atsushi Miyazaki, Erin Mentuch Cooper, Fumi Egusa, et al. “Instability analysis for spiral arms of local galaxies: M51, NGC 3627, and NGC 628”. *MNRAS* 506.1 (Sept. 2021). incl. Yajima, H., pp. 84–97. doi: 10.1093/mnras/stab1729. arXiv: 2103.12130[astro-ph.GA].
10. Hajime Fukushima and Hidenobu Yajima. “Radiation hydrodynamics simulations of massive star cluster formation in giant molecular clouds”. *MNRAS* 506.4 (Oct. 2021), pp. 5512–5539. doi: 10.1093/mnras/stab2099. arXiv: 2104.10892[astro-ph.GA].
11. Mariko Nomura, Kazuyuki Omukai, and Ken Ohsuga. “Radiation hydrodynamics simulations of linedriven AGN disc winds: metallicity dependence and black hole growth”. *MNRAS* 507.1 (Oct. 2021), pp. 904–913. doi: 10.1093/mnras/stab2214. arXiv: 2107.14256[astro-ph.GA].
12. Shigeki Inoue, Naoki Yoshida, and Lars Hernquist. “Fragmentation of ring galaxies and transformation to clumpy galaxies”. *MNRAS* 507.4 (Nov. 2021), pp. 6140–6147. doi: 10.1093/mnras/stab2527. arXiv: 2103.09873.
13. Ankush Mandal, Dipanjan Mukherjee, Christoph Federrath, Nicole P. H. Nesvadba, Alexander Y. Wagner, et al. “Impact of relativistic jets on the star formation rate: a turbulence-

- regulated framework”. MNRAS 508.4 (Dec. 2021), pp. 4738–4757. doi: 10.1093/mnras/stab2822. arXiv: 2109.13654[astro-ph.GA].
14. Takaaki Kitaki, Shin Mineshige, Ken Ohsuga, and Tomohisa Kawashima. “The origins and impact of outflow from super-Eddington flow”. PASJ 73.2 (Apr. 2021), pp. 450–466. doi: 10.1093/pasj/psab011.
 15. Takumi Ogawa, Ken Ohsuga, Yoshihiro Makino, and Shin Mineshige. “Variability of Comptonized Xray spectra of a super-Eddington accretor: Approach using Boltzmann radiation transport”. PASJ 73.3 (June 2021), pp. 701–715. doi: 10.1093/pasj/psab031.
 16. Yuh Tsunetoe, Shin Mineshige, Ken Ohsuga, Tomohisa Kawashima, and Kazunori Akiyama. “Polarization images of accretion flow around supermassive black holes: Imprints of toroidal field structure”. PASJ 73.4 (Aug. 2021), pp. 912–928. doi: 10.1093/pasj/psab054. arXiv: 2012.05243[astro-ph.HE].
 17. Erika Ogata, Ken Ohsuga, and Hidenobu Yajima. “Hoyle-Lyttleton accretion on to black hole accretion disks with super-Eddington luminosity for dusty gas”. PASJ 73.4 (Aug. 2021), pp. 929–942. doi: 10.1093/pasj/psab055.
 18. Keisuke Sato, Yusuke Miyamoto, Nario Kuno, Dragan Salak, Alexander Y. Wagner, et al. “Relating gas dynamics to star formation in the central region of the barred spiral galaxy NGC 613”. PASJ 73.4 (Aug. 2021), pp. 1019–1035. doi: 10.1093/pasj/psab060.
 19. Yoshiki Matsuoka, Kazushi Iwasawa, Masafusa Onoue, Takuma Izumi, incl. Satoshi Kikuta, et al. “Subaru High-z Exploration of Low-luminosity Quasars (SHELLQs). XVI. 69 New Quasars at $5.8 < z < 7.0$ ”. ApJS 259.1, 18 (Mar. 2022), p. 18. doi: 10.3847/1538-4365/ac3d31. arXiv: 2111.12766[astro-ph.GA].
 20. Tomoaki Ishiyama, Kohji Yoshikawa, and Ataru Tanikawa. “High Performance Gravitational N-Body Simulations on Supercomputer Fugaku”. International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (Jan. 2022), pp. 10–17. doi: 10.1145/3492805.3492816. url: <https://doi.org/10.1145/3492805.3492816>.
 21. 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].
 22. Hajime Fukushima and Hidenobu Yajima. “Far and extreme UV radiation feedback in molecular clouds and its influence on the mass and size of star clusters”. MNRAS 511.3 (Apr. 2022), pp. 3346–3364. doi: 10.1093/mnras/stac244. arXiv: 2201.09995[astro-ph.GA].

23. M. Abe, H. Yajima, S. Khochfar, C. Dalla Vecchia, and K. Omukai. “Formation of the first galaxies in the aftermath of the first supernovae”. *MNRAS* 508.3 (Dec. 2021), pp. 3226–3238. doi: 10.1093/mnras/stab2637. arXiv: 2105.02612[astro-ph.GA].
24. Gerald Cecil, Alexander Y Wagner, Joss Bland-Hawthorn, Geoffrey V Bicknell, and Dipanjan Mukherjee. “Tracing the Milky Way’s Vestigial Nuclear Jet”. en. *ApJ* 922.2 (Dec. 2021), p. 254. issn: 0004-637X. doi: 10.3847/1538-4357/ac224f.
url: <https://iopscience.iop.org/article/10.3847/15384357/ac224f/meta>.
25. Dipanjan Mukherjee, Geoffrey V Bicknell, and Alexander Y Wagner. “Resolved simulations of jet–ISM interaction: Implications for gas dynamics and star formation”. en. *Astron. Nachr.* 342 (Nov. 2021), pp. 1140–1145. issn: 0004-6337, 1521-3994. doi: 10.1002/asna.20210061.
url: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/asna.20210061>.
26. W. E. Banda-Barragán, M. Brüggen, V. Heesen, E. Scannapieco, incl. A. Y. Wagner, et al. “Shockmulticloud interactions in galactic outflows - II. Radiative fractal clouds and cold gas thermodynamics”. *MNRAS* 506.4 (Oct. 2021), pp. 5658–5680. doi: 10.1093/mnras/stab1884. arXiv: 2011.05240[astro-ph.GA].
27. N. P. H. Nesvadba, A. Y. Wagner, D. Mukherjee, A. Mandal, R. M. J. Janssen, et al. “Jet-driven AGN feedback on molecular gas and low star-formation efficiency in a massive local spiral galaxy with a bright X-ray halo”. *A&A* 654, A8 (Oct. 2021), A8. doi: 10.1051/0004-6361/202140544. arXiv: 2103.12816[astro-ph.GA].
28. Hidenobu Yajima, Makito Abe, Sadegh Khochfar, Kentaro Nagamine, Akio K. Inoue, et al. “FOREVER22: galaxy formation in protocluster regions”. *MNRAS* 509.3 (Jan. 2022), pp. 4037–4057. doi: 10.1093/mnras/stab3092. arXiv: 2011.11663[astro-ph.GA].
29. H. Yajima, M. Abe, M. Umemura, Y. Takamizu, and Y. Hoshi. “TRINITY: a three-dimensional radiative transfer code for in-vivo bioimaging”. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 277 (Oct. 2021), p. 107948. doi: 10.1016/j.jqsrt.2021.107948.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. H. Yajima, M. Abe, M. Umemura, Y. Takamizu, and Y. Hoshi. “TRINITY: a three-dimensional radiative transfer code for in-vivo bioimaging”. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 277 (Oct. 2021), p. 107948. doi: 10.1016/j.jqsrt.2021.107948.
2. K. Ohsuga, A. Inoue, A. Utsumi, T. Ogawa, Y. Asahina, et al. “Numerical Simulations of Accretion Flows and Outflows around Black Holes/Neutron Stars”. *European Astronomical*

Annuual Meeting SS3 :Black holes under the magnifying glass of XRISM and Athena (Online, June 28–July 2, 2021).

3. Dipanjan Mukherjee, Alexander Wagner, Geoffrey Bicknell, and Nicole Nesvadba. “Simulating the jetISM interaction in GPS & CSS galaxies”. 6th Workshop on Compact Steep Spectrum and GHz-Peaked Spectrum Radio Sources (Toruń, Poland, Online, May 10–14, 2021). url: <http://cssgps2020.umk.pl/>.
4. H. Yajima. “Cosmological simulations of massive galaxies in protocluster regions”. Sino-French Workshop on Confronting Simulations with Observations of High-redshift Galaxies and (Proto)Clusters (Nanjing University (hybrid), Nov. 14–16, 2021).
5. K. Yoshikawa. “A 400 trillion-grid Vlasov simulation on Fugaku supercomputer: large-scale distribution of cosmic relic neutrinos in a six-dimensional phase space”. SC21:the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (America’s Center, St Louis (hybrid), Nov. 15–19, 2021).

B) 一般講演

1. Tomoaki Ishiyama, Kohji Yoshikawa, and Ataru Tanikawa. “High Performance Gravitational N-Body Simulations on Supercomputer Fugaku”. HPC Asia 2022 (online, Jan. 12–14, 2022).
2. Yuta Asahina. “General-relativistic radiation-magnetohydrodynamics simulations of black hole accretion flows based on solving the radiative transfer equation”. 13th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (Online, Oct. 8, 2021). url: <https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/sympo20211008en/>.
3. Hajime Fukushima and Hidenobu Yajima. “Conditions for massive star cluster formation in lowmetallicity environments”. Gravitational wave physics and astronomy: Genesis, Area workshop 2022 Winter (Online, Jan. 24, 2022).
4. K. Otaki and M. Mori. “The formation of dark matter deficient galaxies through galaxy collisions”. Conference on Computational Physics (Online/Coventry University, Aug. 1–5, 2021).
5. Masao Mori. “Evolution of the local galaxies”. 13th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (Online, Oct. 8, 2021). url: <https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/sympo20211008en/>.
6. Koki Otaki and Masao Mori. “Dark matter subhalo collisions and formation of dark-matter-deficient galaxies”. Kashiwa Dark Matter symposium 2021 (Online, Nov. 29, 2021).

7. Yuka Kaneda, Yudai Kazuno, Koki Otaki, and Masao Mori. “Evolution of the sub galactic dark matter halos in the cosmological context (Best Poster Award)”. Kashiwa Dark Matter symposium 2021 (Online, Nov. 29, 2021).
8. Taiki Ogihara, Takumi Ogawa, and Kenji Toma. “Matter density distribution of AGN jets”. Polarized Radiation near Supermassive Black Holes (online, May 10–13, 2021). url: <https://pets.princeton.edu/programs/current/polarized-radiation-near-supermassive-black-holes/141>.
9. Taiki Ogihara, Tomohisa Kawashima, and Ken Ohsuga. “Constructing synthetic images of GRMHD models for AGN jets by applying the general relativistic radiative transfer code RAIKOU”. East Asia AGN workshop 2021 (online, Oct. 11–13, 2021). url: <http://eaagn2021.csp.escience.cn/dct/page/1>.
10. Taiki Ogihara, Tomohisa Kawashima, and Ken Ohsuga. “Constructing synthetic images of GRMHD models for AGN jets by applying the general relativistic radiative transfer code RAIKOU”. From Vision to Instrument: Designing the Next-Generation EHT to Transform Black Hole Science (Online, Nov. 1–5, 2021). url: <https://www.ngeht.org/ngeht-meeting-november-2021>.
11. Y. Tsunetoe, S. Mineshige, K. Ohsuga, T. Kawashima, and K. Akiyama. “Linear and Circular Polarization Images around Black Holes: Imprints of the Jet-driving Magnetic Fields”. Polarized Radiation near Supermassive Black Holes (online, May 10–13, 2021).
12. Y. Tsunetoe, S. Mineshige, K. Ohsuga, T. Kawashima, and K. Akiyama. “Linear and Circular Polarization Images near Black Holes: Imprints of the Magnetic Fields Structure”. Sixteenth Marcel Grossmann Meeting - MG16 (online, July 5–10, 2021).
13. M. Mizumoto, M. Nomura, K. Ohsuga, C. Done, and H. Odaka. “UV line driven wind simulation and UFOs”. Black Hole Disc Wind conference (Online/Durham Univ. Sept. 6–9, 2021).
14. M. Nomura, K. Ohuga, C. Done, and K. Omukai. “Radiation hydrodynamics simulations of line-driven disk wind”. Black Hole Disc Wind conference (Online/Durham Univ. Sept. 6–9, 2021).
15. K. Ohsuga, A. Inoue, A. Utsumi, H.R.Takahashi, T. Kawashima, et al. “Numerical simulations of disk wind around black holes”. Black Hole Disc Wind conference (Online/Durham Univ. Sept. 6–9, 2021).
16. Q. B. Arnau, C. Done, C. Lacy, M. Nomura, and K. Ohsuga. “Line-driving winds: dependence on black hole properties”. Black Hole Disc Wind conference (Online/Durham Univ. Sept. 6–9, 2021).

17. Ken Ohsuga. “Structure Formation in the Universe using Radiation Hydrodynamic Simulations”. 13th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (Online, Oct. 8, 2021). url: <https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/sympo20211008en/>.
18. A. Utsumi, K. Ohsuga, H.R.Takahashi, and Y. Asahina. “Black hole spin dependence of supercritical accretion disks via general relativistic radiative magnetohydrodynamic simulations”. Black Hole Astrophysics with VLBI 2022 (Online/ICRR, Feb. 7–9, 2022).
19. Y. Tsunetoe, S. Mineshige, T. Kawashima, K. Ohsuga, K. Akiyama, et al. “Linear and Circular Polarization Images and the Jet-Disk Structure in M87”. Black Hole Astrophysics with VLBI 2022 (Online/ICRR, Feb. 7–9, 2022).
20. T. Kawashima, K. Ohsuga, H.R. Takahashi, and T. Hitomi. “Time dependent and multi-wavelength radiative properties of accretion flows and relativistic jets”. Black Hole Astrophysics with VLBI 2022 (Online/ICRR, Feb. 7–9, 2022).
21. I.B.Lasaga, S. Mineshige, K. Ohsuga, T. Kawashima, and T. Kitaki. “Study on the outflow impact of SMBH seed at high-z through radiation hydrodynamic (RHD) simulations”. Black Hole Astrophysics with VLBI 2022 (Online/ICRR, Feb. 7–9, 2022).
22. T. Ogiwara, T. Kawashima, and K. Ohsuga. “Constructing synthetic images of general relativistic magnetohydrodynamic models for AGN jets by applying the general relativistic radiative transfer code RAIKOU”. Black Hole Astrophysics with VLBI 2022 (Online/ICRR, Feb. 7–9, 2022).
23. Alexander Y. Wagner, R. Morganti, D. Mukherjee, T. Osterloo, and G. Bicknell. “Probing jet-ISM interactions and the physics of AGN feedback in the radio galaxy IC 5063 with source-tailored hydrodynamic simulations”. IAU Symposium 362 “The predictive power of computational astrophysics as a discovery tool” (Online, Nov. 8–12, 2021). url: <http://iaus362.astro.unistra.fr/IAUS362.html>.
24. Hidenobu Yajima. “Radiative transfer simulations and machine learning for in-vivo bioimaging”. 13th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (Online, Oct. 8, 2021). url: <https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/sympo20211008en/>.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 福島肇. “星団形成における輻射フィードバック”. 様々なスケールの衝突流による誘発的星形成～大質量星から超大質量星団まで～ (オンライン, July 7–9, 2021).

2. 福島肇, 矢島秀伸. “低金属量星団形成”. 初代星・初代銀河研究会 2021 (東北大学 (東京分室), 京都大学 (東京分室), オンライン, Feb. 16–18, 2022).
3. 高橋博之, 大須賀健, 川島朋尚, 朝比奈雄太, 内海碧人, et al. “超臨界降着流の一般相対論的輻射磁気流体シミュレーション”. W50/SS433 研究会 (オンライン, May 18, 2021).
4. 高橋博之, 大須賀健, 川島朋尚, 朝比奈雄太, 内海碧人, et al. “ブラックホール降着円盤の数値シミュレーション ; 研究の今後と発展”. ブラックホールジェット・降着円盤・円盤風研究会 2022 (Online, Jan. 24–25, 2022).
5. 川島朋尚, 秋山和徳, 大須賀健, 紀基樹, 高橋博之, et al. “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と観測的特徴”. 「自然科学における階層と全体」シンポジウム (Online, Jan. 6–7, 2022).
6. 大須賀健, 高橋博之, 川島朋尚, 野村真理子, 朝比奈雄太, et al. “ブラックホール降着流・噴出流の研究～これまでの成果と今後の課題～”. 高エネルギー現象で探る宇宙の多様性I (東京大学宇宙線研/Online, Oct. 18–19, 2021). url: <https://www.icrr.u-tokyo.ac.jp/hea/conference211018.html/>.
7. 梅村雅之. “SMBH 形成に関する理論的課題：埋もれた AGN の役割について”. 第 5 回 FORCE 研究会「埋もれた AGN の宇宙論的進化」(Online, Dec. 3, 2021). url: <http://www.cc.miyazaki-u.ac.jp/force/index.php/buriedagn2021>.
8. Alexander Y. Wagner. “Mechanical AGN feedback: radio-mode IGM and kpc-scale ISM interactions”. ALMA workshop 2021 ”Cold outflows near and far: crossroads of our current understanding” (Online, Nov. 1–2, 2021). url: <https://sites.google.com/view/coldoutflows2021>.
9. 矢島秀伸. “初期宇宙の銀河形成：フィードバックと金属分布について”. 金属欠乏宇宙 2021 (Online, Sept. 27–30, 2021).
10. 矢島秀伸. “初期宇宙の銀河の活発な星形成：その内的要因と外内的要因について”. 銀河星形成研究会 2021 (Galactic Star Formation 2021) (Online, Dec. 2, 2021). url: <https://sites.google.com/view/galsf2021>.
11. 吉川耕司. “富岳における無衝突自己重力系の Vlasov シミュレーション”. 電子情報通信学会 第 15 回アクセラレーション技術発表討論会「富岳による高度科学技術計算」(オンライン, Sept. 2–2, 2021).
12. 吉川耕司. “富岳による宇宙論的ニュートリノの Vlasov シミュレーション”. 第 4 回 HPCI コンソーシアムシンポジウム (Online, Oct. 28, 2021).

B) その他の発表

1. 安部牧人, 矢島秀伸, 梅村雅之, 高水裕一, and 星詳子. “生体光イメージングに向けた大規模輻射輸送数値計算コードの開発: 球面 wavelet 変換を用いた高速化”. 日本光学会年次学術講演会 2021 (オリンピックセンター, ハイブリッド開催, Oct. 26–29, 2021). url: <https://opt-j.com/opj2021/>.
2. 朝比奈雄太. “ジェットと星間水素ガス相互作用による Westerlund2 星団方向の分子雲形成シミュレーション”. Japan SKA Consortium Science Strategy Workshop 2021 (オンライン, July 12, 2021–July 14, 2020).
3. 朝比奈雄太, 大須賀健, and 高橋博之. “一般相対論的輻射磁気流体コード INAZUMA を用いたブラックホール降着流シミュレーションによるスピン依存性”. 日本天文学会秋季年会 (オンライン, Sept. 13–15, 2021).
4. 朝比奈雄太, 高橋博之, and 大須賀健. “輻射輸送方程式を解く一般相対論的磁気流体コード INAZUMA によるブラックホール降着流計算”. ブラックホールジェット・降着円盤・円盤風研究会 2022 (Online, Jan. 24–25, 2022).
5. 福島肇, 矢島秀伸, and 梅村雅之. “Circular polarization induced by aligned dust grains at UV wavelength”. JpGU-AGU Joint Meeting 2020 (オンライン, May 30–June 6, 2021).
6. 福島肇. “Radiation hydrodynamics simulations of young massive star cluster formation”. 新学術領域重力波物理学・天文学：創世記 A03 班夏の会合 (オンライン, July 19, 2021–July 20, 2020).
7. 福島肇. “低金属量環境における大質量星団形成”. 金属欠乏宇宙 2021 (オンライン, Sept. 27–30, 2021).
8. 福島肇. “輻射流体シミュレーションによる大質量星団形成”. 銀河星形成研究会 2021 (Galactic Star Formation 2021) (Online, Dec. 2, 2021).
url: <https://sites.google.com/view/galsf2021>.
9. 福島肇. “星団形成における輻射フィードバックの金属量依存性”. 低金属量環境下における星・惑星形成 (Online, Dec. 6–8, 2021). url: <https://tok339.wixsite.com/low-metallicity-2021>.
10. 福島肇, 井上茂樹, and 矢島秀伸. “低金属量銀河円盤シミュレーション”. 第34回理論懇シンポジウム (Online, Dec. 22–24, 2021).
url: <https://sites.google.com/view/rironkon2021/>.
11. 福島肇 and 矢島秀伸. “星団形成における EUV/FUV 輻射フィードバック”. 日本天文学会秋季年会 (オンライン, Sept. 13–15, 2021).
12. 福島肇 and 矢島秀伸. “星団形成における初期密度分布の影響”. 2021(令和 3) 年度国立天文台 CfCA ユーザーズミーティング (Online, Jan. 18–19, 2022).

13. 福島肇 and 矢島秀伸. “Cloud-in-cloud simulations of star cluster formation”. 日本天文学会 2022 年春季年会 (オンライン, Mar. 2–5, 2022).
14. 猪口睦子, 細川隆史, 嶺重慎, and 福島肇. “大質量星団形成時の観測的特徴”. 日本天文学会 2022 年春季年会 (オンライン, Mar. 2–5, 2022).
15. 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近傍での輻射流体計算”. 日本天文学会 2022 年春季年会 (オンライン, Mar. 2–5, 2022).
16. 大滝恒輝 and 森正夫. “ダークマター欠乏銀河形成条件の解析”. 銀河・銀河間ガス研究会 2021 (オンライン, Aug. 16–20, 2021).
url: [https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ domestic/ja/2021/08/16/galaxy-igm/](https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/domestic/ja/2021/08/16/galaxy-igm/).
17. 梅村雅之. “多重 AGN の理論的意義”. 多重 AGN サイエンスワークショップ (オンライン, July 30, 2021).
18. 菊田智史. “多重 AGN 観測レビュー”. 多重 AGN サイエンスワークショップ (オンライン, July 30, 2021).
19. 大須賀健. “BH 降着円盤とジェットと円盤風”. 多重 AGN サイエンスワークショップ (オンライン, July 30, 2021).
20. Alexander Wagner. “Kpc-scale AGN Feedback”. 多重 AGN サイエンスワークショップ (オンライン, July 30, 2021).
21. 矢島秀伸. “原始銀河団領域におけるマルチスケール多重 AGN”. 多重 AGN サイエンスワークショップ (オンライン, July 30, 2021).
22. 曾我健太. “多重 AGN による宇宙再電離に対する影響”. 多重 AGN サイエンスワークショップ (オンライン, July 30, 2021).
23. 大滝恒輝 and 森正夫. “ダークマターサブハローの衝突過程と銀河進化の解析”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021).
url: [https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ ja/2021/10/22/tentaikeisei/](https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2021/10/22/tentaikeisei/).
24. 数野優大, 大滝恒輝, and 森正夫. “低質量ダークマターサブハローの成長過程”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021). U
rl: [https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ ja/2021/10/22/tentaikeisei/](https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2021/10/22/tentaikeisei/).
25. 杉原和斗 and 森正夫. “銀河衝突とダークマターハロー”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021).
url: [https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2021/10/22/ tentaikeisei/](https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2021/10/22/tentaikeisei/).
26. 古谷田和真 and 森正夫. “Athena++ を使った銀河進化計算”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021).
url: [https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2021/10/22/ tentaikeisei/](https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2021/10/22/tentaikeisei/).

27. 大滝恒輝 and 森正夫. “The formation of dark-matter-deficient galaxies through dark matter subhalo”. 第34回理論懇シンポジウム (Online, Dec. 22–24, 2021).
url: <https://sites.google.com/view/rironkon2021/>.
28. 金田優香, 数野優大, 大滝恒輝, and 森正夫. “高分解能宇宙論的 N 体シミュレーションにおけるサブハローの進化”. 第34回理論懇シンポジウム (Online, Dec. 22–24, 2021). url: <https://sites.google.com/view/rironkon2021/>.
29. 田中駿次 and 森正夫. “銀河系衛星銀河の潮汐破壊による質量損失と近点距離の関係”. 第34回理論懇シンポジウム (Online, Dec. 22–24, 2021). url: <https://sites.google.com/view/rironkon2021/>.
30. 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：金属量依存性について”. 日本天文学会秋季年会 (オンライン, Sept. 13–15, 2021).
31. 数野優大, 森正夫, and 大滝恒輝. “低質量ダークマターハローの成長過程について”. 日本天文学会秋季年会 (オンライン, Sept. 13–15, 2021).
32. 大滝恒輝 and 森正夫. “ダークマター欠乏銀河形成の流体力学モデル”. 日本流体力学会年会 (オンライン, Sept. 21–23, 2021).
33. 大滝恒輝 and 森正夫. “銀河衝突とガスの熱力学進化”. 日本天文学会 2022 年春季年会 (オンライン, Mar. 2–5, 2022).
34. 数野優大, 大滝恒輝, 金田優香, and 森正夫. “ダークマターサブハローの力学進化過程”. 日本天文学会 年春季年会 (オンライン, Mar. 2–5, 2022).
35. 金田優香, 数野優大, 大滝恒輝, and 森正夫. “ダークマターサブハローの力学進化と近傍銀河・銀河団観測との比較”. 日本天文学会 2022 年春季年会 (オンライン, Mar. 2–5, 2022).
36. 堀田彩水 and 森正夫. “銀河衝突によるアンドロメダ銀河の力学進化”. 日本天文学会 2022 年春季年会 (オンライン, Mar. 2–5, 2022).
37. 田中駿次 and 森正夫. “銀河系衛星銀河の潮汐破壊による質量損失と近点距離の関係”. 日本天文学会 年春季年会 (オンライン, Mar. 2–5, 2022).
38. 荻原大樹, 川島朋尚, and 大須賀健. “Constructing synthetic images of GRMHD models for AGN jets by applying the general relativistic radiative transfer code RAIKOU”. 高エネルギー宇宙物理学研究会 2021 (Online, Nov. 24–26, 2021). url: <https://sites.google.com/view/highenergyastrophys2021/>.
39. 荻原大樹, 川島朋尚, and 大須賀健. “Constructing synthetic images of GRMHD models for AGN jets by applying the general relativistic radiative transfer code RAIKOU”. 第34回理論懇シンポジウム (Online, Dec. 22–24, 2021).
url: <https://sites.google.com/view/rironkon2021/>.

40. 荻原大樹, 川島朋尚, and 大須賀健. “Constructing synthetic images of GRMHD models for AGN jets by applying the general relativistic radiative transfer code RAIKOU”. ブラックホールジェット・降着円盤・円盤風研究会 2022 (Online, Jan. 24–25, 2022).
41. 川島朋尚, 浅野勝晃, 大須賀健, and 高橋博之. “多波長・マルチメッセンジャー・ブラックホール天文学: ブラックホールシャドウから高エネルギーニュートリノまで”. 高エネルギー現象で探る宇宙の多様性I (東京大学宇宙線研/Online, Oct. 18–19, 2021). url: <https://www.icrr.utokyo.ac.jp/hea/conference211018.html/>.
42. 尾形絵梨花, 大須賀健, 矢島秀伸, and 福島肇. “Super-Eddington 天体に対する dusty-gas での HoyleLyttleton 降着”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021). url: <https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2021/10/22/tentaikesei/>.
43. 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”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021). url: <https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2021/10/22/tentaikesei/>.
44. 竹田麟太郎, 大須賀健, 高橋芳太, and 梅村雅之. “特殊相対性理論の効果を考慮した光子の拡散問題”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021). url: <https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2021/10/22/tentaikesei/>.
45. 島田悠愛 and 大須賀健. “一般相対論的輻射磁気流体計算で探るブラックホールへの突発的超臨界降着”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021). url: <https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2021/10/22/tentaikesei/>.
46. 竹林晃大 and 大須賀健. “X 線偏向を考慮した輻射輸送計算コードの開発”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021). url: <https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2021/10/22/tentaikesei/>.
47. 川島朋尚, 浅野勝晃, 大須賀健, and 高橋博之. “一般相対論的磁気流体場における多波長輻射・ニュートリノ輸送計算”. 高エネルギー宇宙物理学研究会 2021 (Online, Nov. 24–26, 2021). url: <https://sites.google.com/view/highenergyastrophys2021/>.
48. 高橋幹弥, 大須賀健, 高橋芳太, 小川拓未, 梅村雅之, et al. “測地線に沿った空間 3 次元一般相対論的輻射輸送コードの開発”. 第 3 4 回理論懇シンポジウム (Online, Dec. 22–24, 2021). url: <https://sites.google.com/view/rironkon2021/>.
49. 内海碧人, 大須賀健, 高橋博之, and 朝比奈雄太. “一般相対論的輻射磁気流体力学シミュレーションで探る超臨界降着円盤”. 第 3 4 回理論懇シンポジウム (Online, Dec. 22–24, 2021). url: <https://sites.google.com/view/rironkon2021/>.

50. 尾形絵梨花, 大須賀健, 矢島秀伸, and 福島肇. “Dusty-gas 内を浮遊するブラックホールへのガス降着過程 ; 超エディントン円盤の傾きと非軸対称構造”. 第34回理論懇シンポジウム (Online, Dec. 22–24, 2021).
url: <https://sites.google.com/view/rironkon2021/>.
51. 朝比奈雄太, 高橋博之, and 大須賀健. “GR-RMHD コード INAZUMA によるブラックホール降着円盤シミュレーション : スピン依存性”. 第34回理論懇シンポジウム (Online, Dec. 22–24, 2021). url: <https://sites.google.com/view/rironkon2021/>.
52. 川島朋尚, 秋山和徳, 大須賀健, 紀基樹, 高橋博之, et al. “一般相対論的輻射輸送計算で探るブラックホール降着流・ジェットの観測的特徴 : 現状と今後の展望”. 超巨大ブラックホール研究会 : その実態・影響・起源の全貌解明に向けて (Online, Dec. 27–28, 2021). url: <https://astrophysics.jp/SMBH>.
53. 大須賀健. “Overview: ブラックホール降着・噴出流の研究目的と計画”. 超巨大ブラックホール研究会 : その実態・影響・起源の全貌解明に向けて (Online, Dec. 27–28, 2021). url: <https://astrophysics.jp/SMBH>.
54. 野村真理子, 大須賀健, C.Done, and 大向一行. “銀河中心核でのアウトフロー : ブラックホール進化への影響”. 超巨大ブラックホール研究会 : その実態・影響・起源の全貌解明に向けて (Online, Dec. 27–28, 2021). url: <https://astrophysics.jp/SMBH>.
55. 川島朋尚, 大須賀健, and 高橋博之. “厳密な時間依存型の多波長・一般相対論的輻射輸送計算で探るブラックホールシャドウおよびスペクトルの時間変動”. 日本天文学会秋季年会 (オンライン, Sept. 13–15, 2021).
56. 五十嵐太一, 松元亮治, 加藤成晃, 高橋博之, 松本洋介, et al. “巨大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: 熱不安定性による軟 X 線放射領域の振動”. 日本天文学会秋季年会 (オンライン, Sept. 13–15, 2021).
57. 芳岡尚悟, 嶺重慎, Ignacio Botella Lasaga, 大須賀健, 川島朋尚, et al. “大局的輻射流体計算による超臨界降着流からのアウトフローの構造解明”. 日本天文学会秋季年会 (オンライン, Sept. 13–15, 2021).
58. I. B. Lasaga, T. Kitaki, S. Mineshige, K. Ohsuga, and T. Kawashima. “Study on the outflow impact of SMBH seed at high-z through radiation hydro- dynamic (RHD) simulations”. 日本天文学会秋季年会 (オンライン, Sept. 13–15, 2021).
59. 高橋幹弥, 大須賀健, 高橋芳太, 小川拓未, and 梅村雅之. “測地線に沿った時間依存型一般相対論的輻射輸送コードの開発”. 日本天文学会秋季年会 (オンライン, Sept. 13–15, 2021).

60. 尾形絵梨花, 大須賀健, 矢島秀伸, and 福島肇. “Super-Eddington 天体に対する dusty-gas の Hoyle-Lyttleton 降着: 円盤面の傾きによる非軸対称性について”. 日本天文学会秋季年会 (オンライン, Sept. 13–15, 2021).
61. 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”. 日本天文学会秋季年会 (オンライン, Sept. 13–15, 2021).
62. 小川拓未, 朝比奈雄太, 大須賀健, and 高橋博之. “Boltzmann 法によるカー・ブラックホール近傍の輻射輸送”. 日本天文学会秋季年会 (オンライン, Sept. 13–15, 2021).
63. 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によるアウトフロー; 駆動機構とその温度について”. 日本天文学会秋季年会 (オンライン, Sept. 13–15, 2021).
64. 井上壮大, 大須賀健, 高橋博之, 朝比奈雄太, and 川島朋尚. “磁化中性子星への超臨界降着流によるアウトフロー; 駆動機構とその温度について”. 中性子星研究会 (オンライン, Aug. 10–12, 2021).
65. 五十嵐太一, 加藤成晃, 高橋博之, 大須賀健, 松本洋介, et al. “活動銀河中心核における軟 X 線放射領域振動の輻射磁気流体数値実験”. 日本流体力学会年会 (オンライン, Sept. 21–23, 2021).
66. 尾形絵梨花, 大須賀健, 福島肇, and 矢島秀伸. “Dusty-gas 内を浮遊するブラックホール降着円盤への Bondi-Hoyle-Lyttleton 降着過程”. ブラックホールジェット・降着円盤・円盤風研究会 2022 (Online, Jan. 24–25, 2022).
67. 内海碧人, 大須賀健, 高橋博之, and 朝比奈雄太. “一般相対論的輻射磁気流体力学シミュレーションで探る超臨界降着円盤のブラックホールスピン依存性”. ブラックホールジェット・降着円盤・円盤風研究会 (Online, Jan. 24–25, 2022).
68. 武者野拓也, 小川拓未, 大須賀健, 矢島秀伸, and 大向一行. “ブラックホール超臨界降着流中の $\text{Ly}\alpha$ 輻射力の計算”. ブラックホールジェット・降着円盤・円盤風研究会 2022 (Online, Jan. 24–25, 2022).
69. 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によるアウトフローについて”. ブラックホールジェット・降着円盤・円盤風研究会 2022 (Online, Jan. 24–25, 2022).
70. 川島朋久, 大須賀健, 高橋博之, and 人見拓也. “ブラックホール降着流・相対論的ジェットの多波長輻射特性と時間変動”. ブラックホールジェット・降着円盤・円盤風研究会 2022 (Online, Jan. 24–25, 2022).

71. 恒任優, 嶺重真, 川島朋尚, 大須賀健, 秋山和徳, et al. “ブラックホール付近の偏光画像から探る、活動銀河核 M87 におけるジェット・円盤構造”. ブラックホールジェット・降着円盤・円盤風研究会 2022 (Online, Jan. 24–25, 2022).
72. 芳岡尚悟, 嶺重真, 大須賀健, 川島朋尚, and 北木孝明. “超臨界降着流からの大局的アウトフロー構造と輻射特性”. ブラックホールジェット・降着円盤・円盤風研究会 2022 (Online, Jan. 24–25, 2022).
73. 五十嵐太一, 高橋博之, 加藤成晃, 大須賀健, 松本洋介, et al. “サブエディントン降着する活動銀河核の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 2022 (Online, Jan. 24–25, 2022).
74. 内海碧人, 大須賀健, 高橋博之, and 朝比奈雄太. “一般相対論的輻射磁気流体計算を用いたカー・ブラックホール周りの超臨界降着流の研究”. 2021(令和 3) 年度国立天文台 CfCA ユーザーズミーティング (Online, Jan. 18–19, 2022).
75. 尾形絵梨花, 大須賀健, 福島肇, and 矢島秀伸. “3次元輻射流体力学計算で探るブラックホール降着円盤への Bondi-Hoyle-Lyttleton 過程”. 日本天文学会 2022 年春季年会 (オンライン, Mar. 2–5, 2022).
76. 内海碧人, 大須賀健, 高橋博之, and 朝比奈雄太. “一般相対論的輻射磁気流体計算で探る、カー・ブラックホール周りの超臨界降着円盤”. 日本天文学会 2022 年春季年会 (オンライン, Mar. 2–5, 2022).
77. 芳岡尚悟, 嶺重真, 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の特性”. 日本天文学会 2022 年春季年会 (オンライン, Mar. 2–5, 2022).
78. 高橋芳太, 梅村雅之, 大須賀健, and 朝比奈雄太. “相対論的流体中での因果律を保った光子多重散乱効果”. 日本天文学会 2022 年春季年会 (オンライン, Mar. 2–5, 2022).
79. 五十嵐太一, 松元亮治, 加藤成晃, 高橋博之, 松本洋介, et al. “逆コンプトン散乱による冷却を考慮したセイファート銀河における軟 X 線放射領域の輻射磁気流体シミュレーション”. 日本天文学会 2022 年春季年会 (オンライン, Mar. 2–5, 2022).
80. 荻原大樹, 川島朋尚, and 大須賀健. “Constructing synthetic images of GRMHD models for AGN jets by applying the general relativistic radiative transfer code RAIKOU”. 日本天文学会 2022 年春季年会 (オンライン, Mar. 2–5, 2022).
81. 川島朋尚, 大須賀健, 高橋博之, and 人見 拓也. “歳差運動するブラックホール降着流と相対論的ジェットの放射特性”. 日本天文学会 2022 年春季年会 (オンライン, Mar. 2–5, 2022).
82. 恒任優, 嶺重真, 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、活動銀河核 M87 のジェット・円盤構造”. 日本天文学会 2022 年春季年会 (オンライン, Mar. 2–5, 2022).

83. 小川拓未, 朝比奈雄太, 大須賀健, 高橋博之, and 川島朋尚. “Boltzmann 輻射輸送による Compton 冷却を考慮した RIAF 円盤の電子温度計算”. 日本天文学会 2022 年春季年会 (オンライン, Mar. 2–5, 2022).
84. 内海碧人, 大須賀健, 高橋博之, and 朝比奈雄太. “一般相対論的輻射磁気流体力学シミュレーションで探る超臨界降着円盤のブラックホールスピン依存性”. ブラックホール磁気圏研究会 2022 (大阪市立大/オンライン, Mar. 8–10, 2022).
85. 高橋幹弥, 大須賀健, 高橋芳太, 小川拓未, 梅村雅之, et al. “測地線に沿った一般相対論的輻射輸送コードの開発と適用”. ブラックホール磁気圏研究会 2022 (大阪市立大/オンライン, Mar. 8–10, 2022).
86. 高橋芳太, 梅村雅之, 大須賀健, and 朝比奈雄太. “相対論的流体中での因果律を保った光子多重散乱効果”. ブラックホール磁気圏研究会 2022 (大阪市立大/オンライン, Mar. 8–10, 2022).
87. 川島朋尚, 大須賀健, 高橋博之, 人見拓也, and 浅野勝晃. “巨大ブラックホール降着流・噴出流の一般相対論的輻射および高エネルギーニュートリノ輸送計算”. ブラックホール降着流ミニ研究報告会 (千葉大学/オンライン, Mar. 28, 2022).
88. 五十嵐太一, 松元亮治, 加藤成晃, 高橋博之, 松本洋介, et al. “コンプトン冷却を考慮した活動銀河中心核降着流の輻射磁気流体シミュレーション”. ブラックホール降着流ミニ研究報告会 (千葉大学/オンライン, Mar. 28, 2022).
89. 大村匠, 町田真美, 松本洋介, 大須賀健, and 松元亮治. “CANS+ によるジェット伝播の高空間分解能二温度磁気流体数値シミュレーション”. Japan Geoscience Union Meeting 2021 (オンライン, May 31–June 5, 2021).
90. 井上茂樹, 高木俊暢, 宮崎敦, Erin Mentuch Cooper, 江草英実, et al. “Instability analysis for spiral arms of local galaxies”. 日本天文学会秋季年会 (オンライン, Sept. 13–15, 2021).
91. 高水裕一, 梅村雅之, 矢島秀伸, 安部牧人, and 星詳子. “深層学習によるガン細胞位置と形状の判定手法”. 日本光学会年次学術講演会 2021 (オリンピックセンター, ハイブリッド開催, Oct. 26–29, 2021). url: <https://opt-j.com/opj2021/>.
92. 阿左美進也 and 梅村雅之. “Ly α 輻射による原始ガス雲中での水素分子形成抑制効果”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021).
url: <https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2021/10/22/tentaikaisei/>.
93. 古賀実 and 梅村雅之. “ライマン α 光の円偏光生成とホモキラリティ問題”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021).
url: <https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2021/10/22/tentaikaisei/>.
94. 岩本歩夢 and 梅村雅之. “原始惑星系円盤における乱流とダスト成長”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021).

- url: <https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2021/10/22/tentaikaisei/>.
95. Alexander Wagner, Yuji Wama, Ankush Mandal, Christoph Federrath, and Dipanjan Mukherjee. “Exploring the regulation of star-formation through AGN-jet-driven turbulence”. 銀河星形成研究会 2021 (Galactic Star Formation 2021) (Online, Dec. 2, 2021). url: <https://sites.google.com/view/galsf2021>.
96. Alexander Wagner. “Galaxy-scale AGN Feedback”. 超巨大ブラックホール研究会：その実態・影響・起源の全貌解明に向けて (Online, Dec. 27–28, 2021). url: <https://astrophysics.jp/SMBH>.
97. 新井聡一, 矢島秀伸, and 福島肇. “スターバースト銀河における星形成について”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021). url: <https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2021/10/22/tentaikaisei/>.
98. 秋葉健志 and 矢島秀伸. “21cm signal simulation during the EoR”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021). url: <https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2021/10/22/tentaikaisei/>.
99. 佐藤大樹 and 矢島秀伸. “光音響波伝搬シミュレーションと機械学習によるヒト頭部の血管分布解析”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021). url: <https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2021/10/22/tentaikaisei/>.
100. 矢島秀伸, 安部牧人, 梅村雅之, 高水裕一, and 星詳子. “生体光イメージングに向けた大規模輻射輸送数値計算コードの開発”. 日本光学会年次学術講演会 2021 (オンラインピックセンター, ハイブリッド開催, Oct. 26–29, 2021). url: <https://opt-j.com/opj2021/>.
101. 矢島秀伸. “高精度輻射輸送計算と機械学習との融合による近赤外光トモグラフィ-現状とこれから-”. 計算メディカルサイエンスワークショップ (オンライン, Sept. 6, 2021).
102. 吉川耕司. “宇宙大規模構造形成における宇宙論的ニュートリノの数値シミュレーション”. 筑波大学 宇宙史研究センター 成果報告会 (online, Nov. 26–26, 2021).
103. 内田 雄揮 and 吉川耕司. “銀河団中の非熱的電子によるスニヤエフ・ゼルドビッチ効果”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021). url: <https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2021/10/22/tentaikaisei/>.

(4) 著書、解説記事等

A) 著書

1. 大須賀健 (監修). 世界一やさしいブラックホールの話. 宝島社, Apr. 2021.
2. 大須賀 健. ブラックホール 暗黒天体をのぞいてみたら. 角川ソフィア文庫, 2022.
3. 高水裕一. 宇宙人と出会う前に読む本. 講談社ブルーバックス, July 2021.

4. 高水裕一. 物理学者、SF 映画にハマる. 光文社新書, Oct. 2021.

B) 記事

1. 森正夫. “天体時代の終わり”. Newton ライト 2.0 宇宙の終わり. ニュートンプレス, June 2021.
2. 森正夫. “銀河の衝突と進化”. 別冊 銀河のすべて 改訂第 3 版. ニュートンエクスプレス, Nov. 2021. Chap. 4.

7. 異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等

異分野間連携（センター内外）

- 高性能計算システム研究部門と輻射輸送シミュレーションコードの開発において連携
- 生命科学研究部門生命機能情報分野との宇宙生命連携（CAB）
- 計算メディカルサイエンス事業部における連携

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. Ken Ohsuga. ブラックホールジェット・降着円盤・円盤風研究会 2022 (Online, Jan. 24–25, 2022).
2. Alexander Wagner. 13th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (オンライン, Oct. 8, 2021). url: <https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/sympo20211008en/>.
3. Hidenobu Yajima. 国際研究会開催：「Galaxy Evolution Workshop 2021」 (Online, Feb. 7–10, 2022).
4. 梅村雅之, 矢島秀伸, and Wagner Alexander. 銀河・銀河間ガス研究会 Galaxy-IGM workshop 2021 (Online, Aug. 16–20, 2021). url: <https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/domestic/ja/2021/08/16/galaxy-igm/>.
5. 梅村雅之 and 菊田智史. 多重 AGN サイエンスワークショップ (Online, July 30, 2021). url: <https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/domestic/ja/2021/07/30/magn/>.
6. 梅村雅之. 計算メディカルサイエンス ワークショップ 2021 (Online, Sept. 7, 2021).
7. Masayuki Ummeura, Ken Ohsuga, and Hidenobu Yajima. 超巨大ブラックホール研究会：その実態・影響・起源の全貌解明に向けて (Online, Dec. 27–28, 2021). url: <https://astrophysics.jp/SMBH>.
8. 宇宙物理理論研究室 M1 の学生. 天体形成研究会 2021 (オンライン, Oct. 22–23, 2021).

9. 管理・運営

組織運営や支援業務の委員・役員の実績

- 梅村雅之

学内

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 人事委員会委員

計算科学研究センター 宇宙物理研究部門主任

計算科学研究センター 運営協議会委員

計算科学研究センター 研究企画室委員

物理学域 運営委員会委員

物理学域 宇宙物理理論グループ長

学外

日本天文学会会長

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

- 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 共同利用委員会委員

物理学域 運営委員会委員

物理学域 カリキュラム委員会委員

プラズマ研究センター 運営委員会委員

総合学域群 第二類担任

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

- 森正夫

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

- 吉川耕司

計算科学研究センター 計算機運用委員会委員

計算科学研究センター 先端計算科学推進室委員

10. 社会貢献・国際貢献

1. 大須賀健. 愛媛大学宇宙進化研究センター講演会「ブラックホールの謎に迫る」. Dec. 11, 2021.
2. 大須賀健. ジャポニカ学習帳宇宙編, 漢字ドリル, コラム「もしブラックホールに吸い込まれたら」の監修.
3. 大須賀健. コメント掲載, 読売新聞, ブラックホールの面積増大定理について. July 13, 2021.
4. 大須賀健. テレビ出演 (2019/12/13 放送分の再使用), NHK BS4K ” コズミックフロントオメガ” 第 4 回ブラックホール. Mar. 25, 2022.
5. Wagner Alexander. Astronomers for Planet Earth アジア代表.
6. 高水裕一. 朝日カルチャー出版記念講演「宇宙人と出会う前に読む本」, 宇宙論を解説. Dec. 18, 2021.
7. 高水裕一. ラジオ出演 77.8 ZIP-FM「CULTURE RADIO via TOKYO」, 著書を紹介. Dec. 18, 2021.
8. 高水裕一. 読売新聞, 特集記事「宙を仰ぐ人々ー宇宙」にてコメント掲載, 宇宙と SF 映画についてコメント, 著書の紹介. Jan. 13, 2022.
9. 高水裕一. ネット番組出演, 「シネバカちゃん」, <https://azzurri-fm.com/>, 宇宙と SF 映画についてコメント, 著書の紹介. Jan. 20, 2022.
10. 高水裕一. テレビ出演, テレビ東京 ” 探求の階段”, 著書, 光バイオ研究の紹介. May 13, 2021.
11. 高水裕一. 早稲田大学高等学院講演会, オンライン. May 18, 2021.
12. 高水裕一. ラジオ出演, TBS ラジオ “あした話したくなるラジオ”, 著書を紹介. Aug. 6, 2021.
13. 高水裕一. 共同通信取材, 神奈川新聞, 山陰中央新聞, 茨城新聞ほか掲載, 著書紹介と光バイオの紹介. Aug. 23, 2021.
14. 高水裕一. ラジオ出演, 文化放送 “シャングリラ”, 著書紹介と 光バイオの紹介. Sept. 12, 2021.
15. 高水裕一. 朝日カルチャーセンター講演「時間は逆戻りするのか3 宇宙時間と逆行する! 生命の時間」. Mar. 27, 2021.
16. Wagner Alexander. ぐんま国際アカデミーの職業インタビュー. Jan. 13, 2022.

III. 原子核物理研究部門

1. メンバー

教授	中務 孝、矢花一浩（量子物性研究部門兼務）
講師	橋本幸男
助教	日野原伸生
研究員	温凱
学生	大学院生 4 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。しかしながら、自己無撞着解に到達するまでに反復計算を要するため、ハミルトニアンの対角化を何度も行う必要があり、球対称

性 (spherical symmetry) などを仮定することで対角化次元を大幅に削減した計算がほとんどである。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、ハミルトニアンを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、その有効性を確かめた。行列・ベクトル積だけの演算で、有限温度平均場状態を決定することができ、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。また、分散メモリ型の並列計算にも向いている点が長所としてあげられる。短所としては、フェルミ・ディラック関数が階段関数になるゼロ温度の系を直接計算できない点があるが、フェルミ面にギャップがある場合には十分に低温にすることで実質ゼロ温度の計算ができ、ギャップがない場合でも有限温度からの外挿を利用するなど、この問題を回避することはできる。数千～数万核子に対する計算が必要となるような、有限温度中性子星クラストの自己無撞着計算などに威力を発揮できると期待している。

[2] ゲルマニウム核の 3 次元回転運動 (橋本)

原子核の形は、多くの場合球形よりも楕円体型に変形することはよく知られている。その回転スペクトルから内部構造の変化を理解する研究の歴史は長い。回転運動は、楕円体の主軸まわりの一様な運動として考えるのが簡単であるが、量子力学的には、回転軸が楕円体の主軸から離れて傾いている場合も考えられる。このような、原子核のより一般的な回転運動である“斜交軸回転運動”を、時間依存 Hartree-Fock-Bogoliubov (TDHFB) 法で記述することを考える。そのために、天頂角と方位角による原子核のエネルギーと内部構造の変化を Gogny HFB 法によって計算することから始めた。対象は三軸非対称性 (triaxial) の基底状態が期待されるゲルマニウム核同位体とした。図 1 (左) の例はゲルマニウム 64 について、三軸非対称の基底状態から主軸 x 軸、 y 軸、 z 軸それぞれのまわりにクランキング計算を行い角運動量ごとのエネルギーの変化を表す。同様に図 1 (右) では、角運動量 $J = 4.0$ と $J = 8.8$ の場合に、回転軸を y 軸から x 軸に傾けた時のエネルギーの変化を表す。エネルギー変化の曲線にポケットが見られれば、安定な三次元的回転運動が期待できるが、この時点ではまだポケットを見つけるには至っていない。

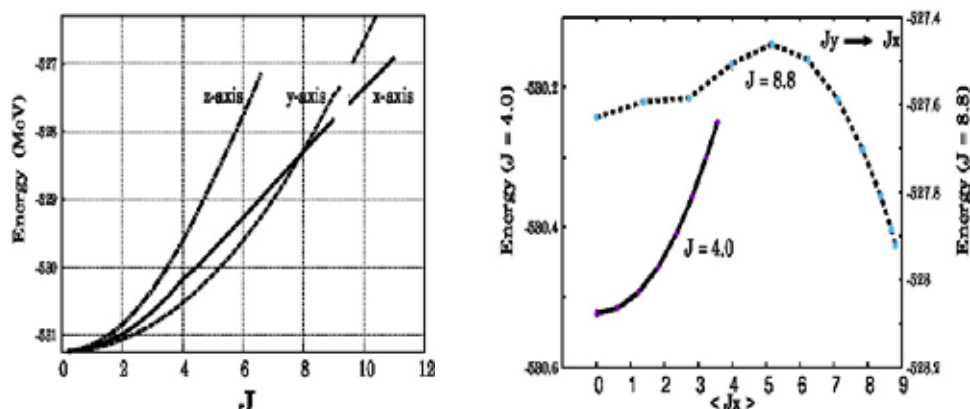


図1 (左図) ゲルマニウム ^{64}Ge のx軸、y軸、z軸まわりのクランキングによるエネルギー変化。(右図) 回転軸をy軸からx軸に傾けた時のエネルギー変化(角運動量が $J = 4.0$ と $J = 8.8$ の場合)。

[3] ニュートリノを2つ放出する二重ベータ崩壊原子核行列要素の大域的な計算(日野原、Engel (ノースカロライナ大))

ニュートリノを2つ放出する二重ベータ ($2\nu\beta\beta$) 崩壊は半減期が測定されているため、ニュートリノレス二重ベータ崩壊の原子核行列要素を計算する際に用いられる中性子-陽子間の有効相互作用を決定するために使われてきた。ベータ崩壊やガモフ・テラー巨大共鳴、スピン双極子巨大共鳴などの二重ベータ崩壊の半減期以外の荷電交換過程を再現するように大域的に決定された原子核密度汎関数を用いて、有限振幅法によって $2\nu\beta\beta$ 崩壊の原子核行列要素を、半減期が測定されている11種類の同位体について計算した。用いた原子核密度汎関

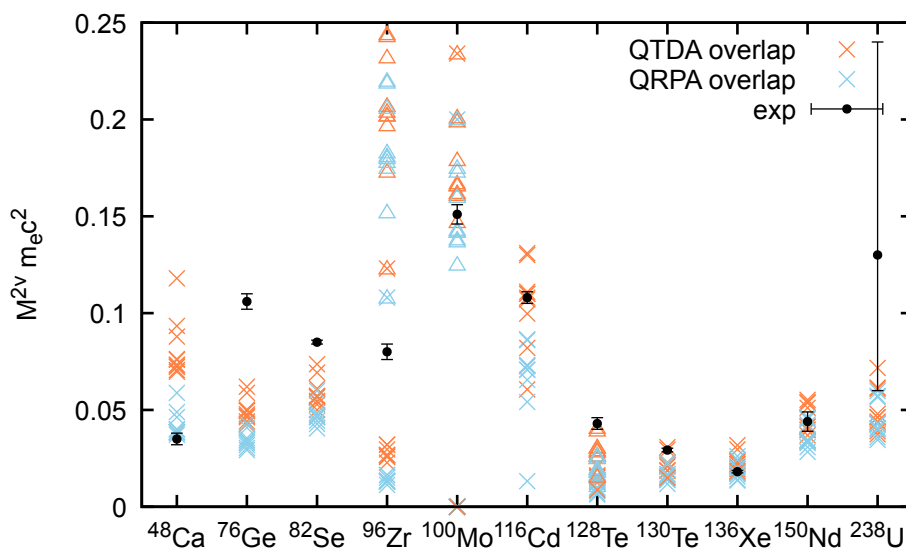


図2: 原子核密度汎関数による $2\nu\beta\beta$ 崩壊の原子核行列要素の値と実験の半減期から導出された値との比較。

数の結合定数は $2\nu\beta\beta$ 崩壊の半減期を合わせるように決定されていないにも関わらず、半減期から導出された原子核行列要素値をよく再現することができた。一部の同位体では実験値と計算値の間にずれが見られるため、 $2\nu\beta\beta$ 崩壊の半減期を用いることで今後さらに原子核密度汎関数を改良することができると考えられる。また、半減期が未測定だがエネルギー的に $2\nu\beta\beta$ 崩壊が可能な 27 種類の同位体についても原子核行列要素値の予言を行った。

[4] 混合基底を用いた 3 次元 Skyrme Hartree-Fock-Bogoliubov 計算コード開発 (Shi (ハルビン工業大)、日野原)

軸対称性を課さない 3 次元 Skyrme Hartree-Fock-Bogoliubov 方程式を効率的に解くため、 z 方向は有限差分基底、 x, y 方向には調和振動子基底を用いた混合基底による計算コードの開発を行った。対相関がない場合の球形核 (^{16}O , ^{208}Pb)、軸対称変形核 (^{24}Mg)、非軸対称変形核 (^{64}Ge)、また対相関を含んだ球形核 (^{120}Sn)、軸対称変形核 (^{34}Mg)、非軸対称変形核 (^{110}Mo) について 3 次元調和振動子基底コードとの結果のベンチマークを行い、非常によい一致を得た。また、調和振動子基底では計算が困難である、大きく一方向に変形した ^{240}Pu 核の核分裂経路上での核分裂アイソマーや第一、第二核分裂障壁付近の状態の計算を行い、開発したコードの有用性を示した。

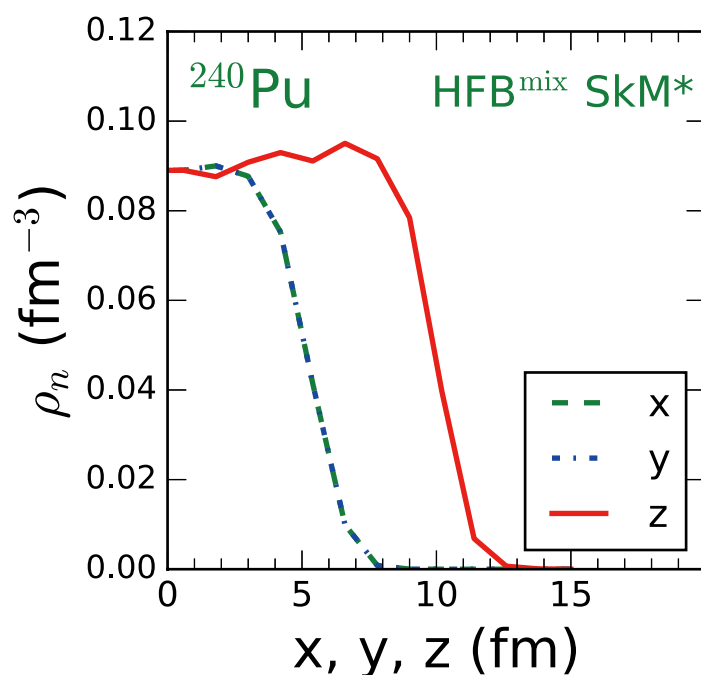


図 3: 混合基底 HFB で計算した ^{240}Pu 核分裂アイソマーの密度分布

[5] Microscopic collective inertial masses for nuclear reaction in the presence of nucleonic effective mass (Wen、中務)

In order to understand the microscopic mechanism of nuclear fusion/fission reactions, we calculated the collective inertial mass coefficients with respect to translational, relative, and rotational motions for nuclei, along the collective reaction path self-consistently determined, based on the adiabatic self-consistent collective coordinate (ASCC) method. The impact of the time-odd component of the mean-field potential on the inertial masses is investigated. The results are compared with those calculated with the cranking formulas.

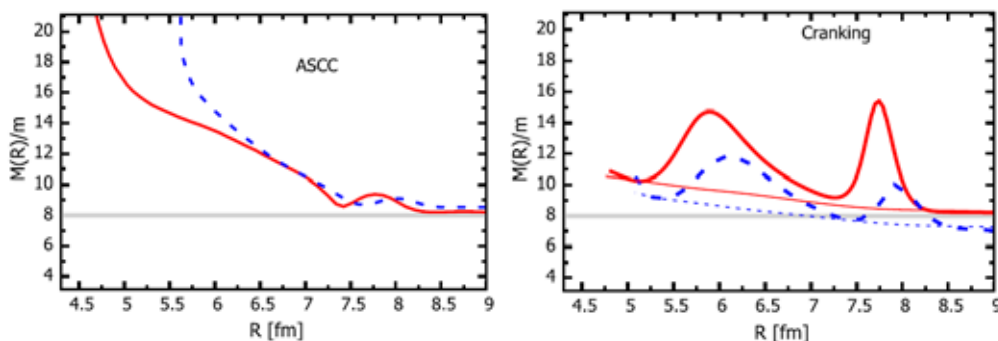


図 4 : Inertial mass $M(R)$ for the reaction $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$ as a function of the relative distance R . The left panel shows the results of the ASCC method, and the right panel shows those of the perturbative (thinner curves) and Nonperturbative (thicker curves) cranking formulas. Solid (red) and dashed (blue) lines indicate those of $B_3=0$ and 75MeV fm^5 , respectively.

The inertial masses based on the ASCC method reproduce the exact total nuclear mass for the translational motion as well as the exact reduced masses as the asymptotic values for the relative and rotational motions. In contrast, the cranking formulas fail to do so. This is due to the fact that the (local) Galilean invariance is properly restored in the ASCC method but violated in the cranking formulas. A model Hamiltonian for low-energy nuclear reaction is constructed with the microscopically derived potentials and inertial masses. The astrophysical S factors are calculated, which indicates the importance of microscopic calculation of proper inertial masses.

[6] Adiabatic self-consistent nuclear dynamics with superfluidity (Wen、日野原、中務)

Pairing interactions among the nucleons always play important roles and bring in many interesting features to the nuclei. To understand how this superfluid property could change the microscopic dynamics of nuclear fusion/fission reactions, we launched a new study to investigate the adiabatic self-consistent collective coordinate (ASCC) in the presence of pairing interactions. The ASCC method is being applied to the Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) model, where the introduction of quasiparticle concept could give us a more realistic picture of low-energy nuclear dynamics. Based on our knowledge and experience of the ASCC method, upon the HFBTHO code, we have translated “particle” to

“quasiparticle” from the theoretical point of view. We are gradually making progress, and soon a new picture of nuclear fusion/fission dynamics is to be revealed.

4. 教育

学位

1. 尾崎翔太 修士（理学）

クォークの分子動力学における相対論的效果の導入

集中講義など

1. T. Nakatsukasa, “Nuclear dynamics and energy density functional theories”, Online lectures, Lanzhou University, Lanzhou, China, March 30-April 1, 2022.

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

外部資金

1. 日本学術振興会科学研究費・基盤研究(B)、中務 孝、代表、2018–2021 年、全年度直接経費：13,200,000 円（2021 年度直接経費：800,000 円）、「密度汎関数超並列ソルバの開発と原子核から中性子星までの統一的高精度計算」.
2. 日本学術振興会科学研究費・新学術領域研究(研究領域提案型：研究領域「量子クラスターで読み解く物質の階層構造」)(公募研究)、中務 孝、代表、2019–2020 年、全年度直接経費：2,300,000 円（2021 年度直接経費（繰越）：1,200,000 円）、「量子クラスター出現機構と低エネルギー核反応の非経験的記述」.
3. 日本学術振興会科学研究費・基盤研究(C)、日野原 伸生、代表、2020–2023 年、前年度直接経費：3,300,000 円（2021 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」.
4. 日本学術振興会科学研究費・新学術領域研究(研究領域提案型：研究領域「地下から解き明かす宇宙の歴史と物質の進化」)(公募研究)、日野原 伸生、代表、2020–2021 年、全年度直接経費：1,800,000 円（2021 年度直接経費：900,000 円）、「有限振幅法を用いた原子核密度汎関数理論による二重ベータ崩壊行列要素計算」.
5. 日本学術振興会科学研究費・国際共同研究加速基金(国際共同研究強化(A))、日野原 伸生、代表、2020–2022 年、全年度直接経費：6,300,000 円、「中性子-陽子対密度汎関数の最適化」.
6. 日本学術振興会科学研究費・若手研究、温 凱、代表、2020–2023 年、全年度直接経費：2,300,000 円（2021 年度直接経費：500,000 円）、「Macroscopic Nuclear Dynamics with Microscopic Foundations」.

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. T. Nakatsukasa, “Self-consistent energy density functional approaches to the crust of neutron stars”, EPJ Web Conf. 260, 11041 (2022).
2. K. Wen and T. Nakatsukasa, “Microscopic collective inertial masses for nuclear reaction in the presence of nucleonic effective mass”, Phys. Rev. C 105, 034603 (2022).
3. Y. Hashimoto, “Isospin equilibration in reaction $20\text{O} + 34\text{Mg}$ by Gogny-TDHFB method”, INFORMATION 24, 189 – 196 (2021).
4. K. Hossain, K. Kobuszewski, M.M. Forbes, P. Magierski, K. Sekizawa (共同研究員), and G. Wlazłowski, “Rotating quantum turbulence in the unitary Fermi gas”, Phys. Rev. A 105, 013304 (2022).

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. T. Nakatsukasa, “Computational nuclear data for various applications”, 2022 LBNL/CSA-Tsukuba/CCS Collaboration Meeting, Online, March 23-24, 2022.

B) 一般講演

1. T. Nakatsukasa, “Self-consistent energy density functional approaches to the crust of neutron stars”, 16th International Symposium on Nuclei in the Cosmos (NIC-XVI), Online, September 21-25, 2021 (Poster).
2. T. Nakatsukasa, “Cluster formation and dynamics in low-energy nuclear reaction”, 13th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Online, October 8, 2021.
3. N. Hinohara, “Systematic calculation of two-neutrino double-beta decay nuclear matrix elements with the finite-amplitude method of nuclear density functional theory”, 13th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Online, October 8, 2021.
4. K. Wen, “Adiabatic self-consistent collective coordinate (ASCC) path in nuclear fusion reactions”, Workshop on “Cluster phenomena in knockout and astrophysical reactions”, Online, October 14-15, 2021.

C) セミナー等

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 中務孝、「パルサー・グリッチ機構解明に向けた有限温度非一様核物質と大規模並列計算」、京都大学原子核理論研究室コロキウム、京大理学部物理学教室+Zoom、2021年12月17日.
2. 日野原伸生、「 $2\nu\beta\beta$ 崩壊原子核行列要素の原子核密度汎関数理論による計算」、新学術「地下宇宙」2021年領域研究会、オンライン、2021年5月19–21日.

B) その他の発表

1. 中務孝、「フェルミ演算子展開法による中性子星クラスト計算」、日本物理学会 2021年秋季大会、オンライン、2021年9月14–17日.
2. 中務孝、「原子核および中性子星における超流動ダイナミクス」、第8回HPCIシステム利用研究課題成果報告会、オンライン、2021年10月28–29日(ポスター発表).
3. 中務孝、日野原伸生、「核内における局所的アルファ粒子生成指標」、日本物理学会第77回年次大会、オンライン、2022年3月15–19日.
4. 日野原伸生、「有限振幅法による2ニュートリノ二重ベータ崩壊原子核行列要素の系統的計算」、日本物理学会 2021年秋季大会、オンライン、2021年9月14–17日.
5. 日野原伸生、「対回転慣性モーメントの全核種計算」、日本物理学会第77回年次大会、オンライン、2022年3月15–19日.
6. 鷺山広平、日野原伸生、中務孝、「密度汎関数法による四重極集団ハミルトニアン of 集団慣性質量の記述」、日本物理学会 2021年秋季大会、オンライン、2021年9月14–17日.
7. 鷺山広平、日野原伸生、中務孝、「FAM-QRPA に基づく四重極集団模型による遷移領域核の記述」、日本物理学会第77回年次大会、オンライン、2022年3月15–19日.
8. 飯田崇史、伏見賢一、吉野将生、鎌田圭、細川佳志、中島恭平、日野原伸生、水越慧太、「PIKACHU 実験による Gd-160 の二重ベータ崩壊探索」、日本物理学会第77回年次大会、オンライン、2022年3月15–19日.
9. 吉野将生、飯田崇史、鎌田圭、伏見賢一、細川佳志、中島恭平、日野原伸生、水越慧太、吉川彰、「GAGG、HR-GAGG、GFAG シンチレータにおける波形弁別性能の比較分析」、第69回応用物理学会春季学術講演会、青山学院大学相模原キャンパス+オンライン、2022年3月22–26日.

7. 異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等

異分野間連携（センター内外）

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

国際連携・国際活動

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

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

該当無し

9. 管理・運営

中務 孝

計算科学研究センター 原子核物理研究部門 部門主任

計算科学研究センター 運営委員会委員

計算科学研究センター 人事委員会委員

計算科学研究センター 運営協議会委員

計算科学研究センター 共同研究担当主幹

計算科学研究センター 共同研究委員会および共同研究運用委員会 委員長

計算科学研究センター 学際計算科学連携室員

計算科学研究センター 情報セキュリティ委員

数理物質系物理学域 運営委員会委員

理工学群物理学類 学務委員・カリキュラム委員長

全学教育課程委員会委員

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

HPCI コンソーシアム機関代表

日野原伸生

計算科学研究センター 先端計算科学推進室員

計算科学研究センター 情報セキュリティ委員

10. 社会貢献・国際貢献

中務 孝

Editor for 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

素粒子論奨学会運営委員・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

核理論委員会委員

日野原伸生

RIBF-UEC 委員 (Chair: 2020 年 4 月 – 2022 年 3 月)

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

11. その他

該当無し

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、全 暁民
講師	前島 展也
助教	佐藤 駿丞、萩原 聡 (2021. 11～)
研究員	山田 篤志、山田 俊介、竹内 嵩、萩原 聡 (～2021. 10)、 黒田 文彬 (2021. 11～)、金谷 和至
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。本年度より大谷実教授が着任し、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がスタートした。今後、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を展開して行きたいと考えている。当部門は、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、および銅酸化物超伝導体を量子ビットとした量子コンピューターの実現を目指した理論的解明を行っている。

これらの研究に加えて、独自の計算コード開発も行っている。時間依存密度汎関数理論 (TDDFT) に基づき光と物質の相互作用を記述する汎用の第一原理光科学ソフトウェアとして SALMON を開発し、ウェブサイト <http://salmon-tddft.jp> において公開している。また電気化学反応に有効なシミュレーション法として、有効遮蔽媒質(ESM)法に基づく第一原理計算コードの開発を進めており、汎用ソフトウェアである Quantum Espresso にコードを提供するとともに、その普及のため多くの企業研究者が参加するコンソーシアムを運営している。

3. 研究成果

[1] 光と物質の相互作用を記述する第一原理計算ソフトウェア SALMON の開発（矢花、佐藤、山田（篤）、竹内、山田（俊）、額田）

第一原理計算法の一つである TDDFT に基づき、パルス光と物質の相互作用を記述する汎用のソフトウェア SALMON (Scalable Ab initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience) の開発を進めている。SALMON は 2017 年 6 月に v.0 を公開し、2020 年 7 月に、v.2 を公開した。このバージョンで、コード内部は整理され、少なくともこの先数年間は安定して SALMON を維持発展させる基盤が整えられている。本年度は、SALMON の開発を主要な課題とする CREST 研究の中心部分が終了する 2022 年 3 月末に、v.2.1 を公開した。このバージョンでは、スピン軌道相互作用の利用が可能となるとともに、OpenACC を用いた GPU 化が実装された。

また SALMON は「富岳」への対応も進めてきたが、その試用段階において全系の 1/6 を用いることにより、10,000 原子を超える物質とパルス光の相互作用の計算が可能であることを実証した。その論文 (Y. Hirokawa et.al, Int. J. High Performance Computing Applications 36, 182 (2022)) の出版に合わせて、2022 年 1 月 6 日に筑波大学、神戸大学、科学技術振興機構が共同でプレスリリースを行った。

SALMON の利用促進に向けた取り組みとして、SALMON により可能となる計算例や利用方法に関するビデオを多数作成し、YouTube に掲載している。SALMON を普及する活動として、2021 年 9 月と 2022 年 3 月に大阪大学が主催するコンピュテーショナル・マテリアルズ・デザインワークショップにおいて、また 2022 年 1 月には高度情報科学技術研究機構のサポートのもと京都大学のスーパーコンピュータを用いて、ハンズオンチュートリアルを実施した。

これまで SALMON の開発は、筑波大学の CREST プロジェクトメンバーが中心となり行ってきたが、そのプロジェクトの中心部分が本年度末で終了することに伴い、今後は国内の様々な機関に所属する約 10 名の研究者からなる開発者ミーティングを定期的を開催し、開発その他の活動を行う予定である。

[2] 量子流体模型に基づくプラズモニクスの記述（竹内、矢花）

金属ナノ粒子の光応答では表面プラズモンが重要な役割を果たす。この応答は古典電磁気学により記述することが可能であるが、最近は古典論では記述できない量子効果として、ナノ粒子の表面における電子染み出しの効果や、複数のナノ粒子が接近した時に生じるトンネル電流の効果などが大きな関心を集めている。そのような量子効果を記述するのに、TDDFT を用いた記述が有効であるが、TDDFT の計算は物質に含まれる電子数に対応する軌道を用意することから、計算量が物質のサイズの 2 乗に比例し、サイズの大きいナノ粒子に対して計算を行うことが困難であった。このような事情のため、TDDFT に対する半古典近似とみなせる量子流体模型(QHT)が発展してきた。しかし QHT では、流体方程式を電子密度

が非常に小さい領域で正確に解くことが難しく、これまでは線形応答に対する計算がほとんどであった。

本研究はそのような困難を克服する方策として、QHT の基礎方程式と 1 軌道の時間依存シュレディンガー方程式の等価性に着目し、新たな数値解法を提案した。この方法を用いることで、非線形応答を何ら問題なく調べることが可能になった (T. Takeuchi et.al, Optics Exp. 30, 11572 (2022))。図 1 に、直径が 4.3nm のナノ粒子に対する QHT と TDDFT の非線形光応答の計算結果の比較を示している。(a)では単一のパルスに対する計算の結果を、横軸にパルスに含まれる振動数成分をとり比較した結果を示しており、(b)では多数のパルスに対する計算の結果を、系に加えたパルスの平均振動数に対する 3 次の非線形応答の比較として示している。いずれの場合も、QHT において電子染み出しを適切に記述すると、非線形応答が TDDFT にほぼ一致することを示している。

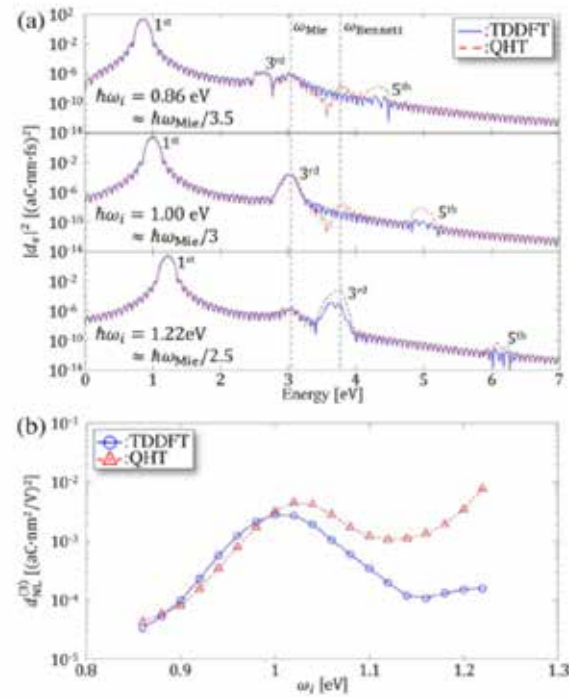


図 1: QHT と TDDFT を用いたナノ粒子の非線形光応答の比較。

[3] 遷移金属ダイカルコゲナイドの非線形光応答 (Hashmi, 乙部 (関西光科学研究所)、矢花、山田 (俊)、山田 (篤))

SALMON において、軌道関数をスピンの非共線的(noncollinear)となる配位を記述できるよう拡張し、スピン軌道力を導入した。これを用いた最初の応用として、バレー自由度に関心が持たれる遷移金属ダイカルコゲナイド(TMCD)の典型的な物質である WSe₂ 単原子層の非線形光応答を調べた (A. Hashmi et.al, Phys. Rev. B105, 115403 (2022))。スピン軌道力を含めた計算は、計算量が極めて大き

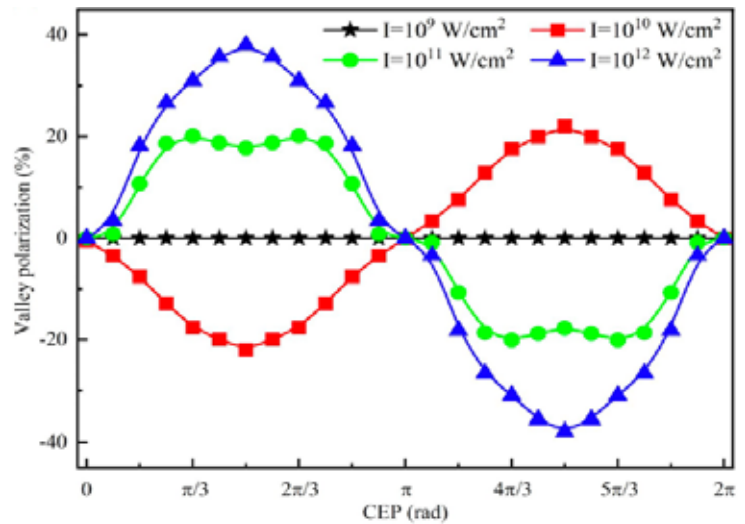


図 2: WSe₂ 単原子層に高強度な直線偏光の単一サイクルパルスを加えたときの、K・K' バレー励起の非対称性を、横軸にキャリアエンベロープ位相 (CEP)

くなる。2021 年度から本格的に稼働したスーパーコンピュータ「富岳」を用いることで、研究を順調に進展させることが可能になった。

TMCD は円偏光パルスを用いて、 K, K' バレーのどちらかを選択的に励起できることが知られている。本研究では高強度なシングルサイクルの直接偏光パルスを用いて、非線形励起過程によりバレーを選択的に励起できることを示した。図 2 は、横軸をシングルサイクルパルスのキャリアエンベロープ位相(CEP)にとり、いくつかの光強度に対してバレー非対称性を示したものである。バレー非対称性は CEP に敏感に依存し、また光の強度によって符号が変化している。 k 空間における励起したキャリアの分布を調べると、節を持つ構造が見出された。この節の存在は、massive Dirac 模型を用い、Landau-Zener 近似で遷移を評価する際に現れる Stuckelberg 干渉として理解できることを示した。

[4] 固体からの高次高調波発生と位相緩和効果 (D. Freeman, A. Kheifets (オーストラリア国立大)、山田 (俊)、山田 (篤)、矢花)

固体からの高次高調波発生、特に原子配置の熱的揺らぎに伴う位相緩和効果に関し、オーストラリア国立大学の理論グループと共同研究を行い、論文を投稿中である(D. Freeman et.al, arXiv:2109.07693)。図 3 に、結晶のイオン配置に熱的な揺らぎが加わった場合の計算例を示す。この計算は、乱雑な揺らぎを考慮するため、512 原子からなる単位セルを用いた電子ダイナミクス計算を行っている。左上の図は、揺らぎのない場合の電流を示すが、パルスの後半(100 fs 以降)には非線形効果に起因する複雑な振動が現れている。一方、熱的な揺らぎを考慮した左下に示す電流では、位相緩和が考慮されたことにより電流に現れる乱雑な信号が軽減されていることがわかる。右側に示すスペクトルを見ると、揺らぎのない場合の方が(右上)高次まで明瞭なシグナルが見られるが、一方で揺らぎを考慮した場合(右下)には、40 次を超える高次の信号は消失するが、20 次程度までの低次の信号は、揺らぎのない場合よりもシャープになっている。このよう

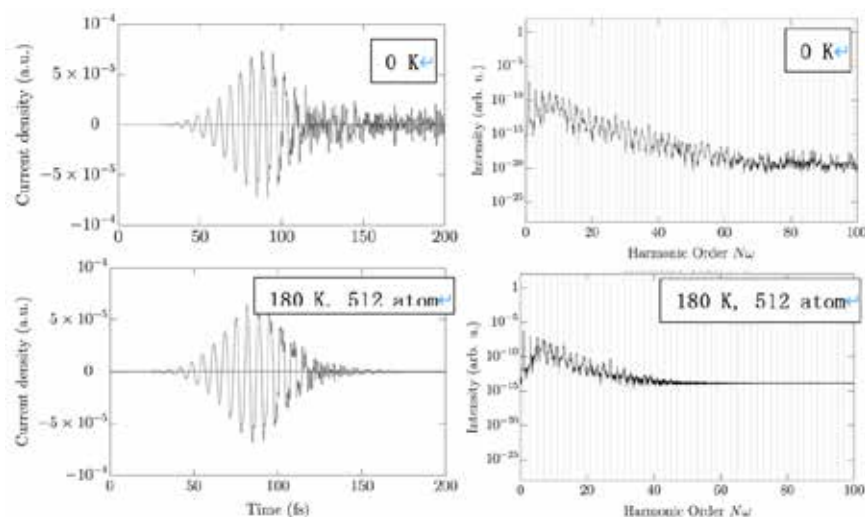


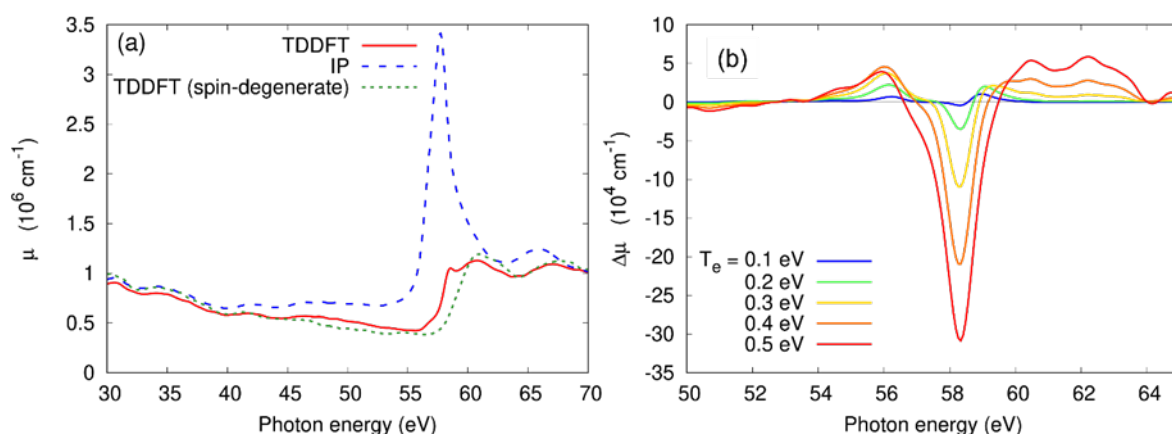
図 3: シリコン結晶にパルス電場を加えた時の電流（左）とスペクトル（右）。上は完全結晶(0K)の場合。下は512原子の単位セルで180Kに相当する熱揺らぎを加えた原子配置の場合。

子ダイナミクス計算を行っている。左上の図は、揺らぎのない場合の電流を示すが、パルスの後半(100 fs 以降)には非線形効果に起因する複雑な振動が現れている。一方、熱的な揺らぎを考慮した左下に示す電流では、位相緩和が考慮されたことにより電流に現れる乱雑な信号が軽減されていることがわかる。右側に示すスペクトルを見ると、揺らぎのない場合の方が(右上)高次まで明瞭なシグナルが見られるが、一方で揺らぎを考慮した場合(右下)には、40 次を超える高次の信号は消失するが、20 次程度までの低次の信号は、揺らぎのない場合よりもシャープになっている。このよう

に、多数の原子を含む単位セルを考え、熱的な揺らぎのある原子配置を考慮することにより、位相緩和の効果を実量的に分析することが可能になった。

[5] アト秒過渡吸収分光の第一原理計算と磁性体への応用（佐藤）

本研究では、高強度な光によって励起された磁性体の光学応答がどのように変調されるのかを、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解析した。図 4(a)に TDDFT 計算により得られた固体 Co の吸収スペクトルを示す(赤線)。さらに、局所電場効果を見放した独立粒子近似(IP)計算により得られた吸収スペクトルを青線、スピン自由度を縮退させた TDDFT 計算により得られた吸収スペクトルを緑線で示した。いずれの結果においても、57eV 付近で吸光度の急峻な上昇が確認される。これは、Co の内殻 3p 軌道からフェルミ面への電子励起に起因する吸収端を反映している。本研究では、レーザー励起された固体の性質を調べるために、レーザー光によって電子系が加熱され有限電子温度状態が実現されることを仮定し、吸収スペクトルの電子温度依存性を調べた。図 4(b)に、TDDFT 計算によって得られた固体 Co の吸収スペクトル変化を示した。電子温度の上昇に伴い、吸収端付近で吸光度の急激な現象が確認できる。第一原理計算に基づく微視的な解析を進めたところ、観測された吸光度の減少は、レーザー加熱によって固体の磁性が消失し、内殻準位の交換分裂が減少することに起因していることが明らかとなった。この研究で明らかとなった光励起された磁性体の磁気応答と光学応答の関係を応用することで、光が駆動する磁性・スピンドYNAMICS を過渡吸収分光を通じて調べることが可能となる。本研究成果は、論文” First-principles calculations for transient absorption of laser-excited magnetic materials” として Electronic Structure 誌より発表された。



Created by modifying “Electron. Struct. 4 014007 (2022)” (Licenced under CC BY 4.0)

図 4: (a)第一原理計算により得られた固体 Co の吸収スペクトル。(b)電子温度上昇に伴う固体 Co の吸収スペクトル変化。

[6] THz 光が駆動するグラフェン内の非線形電子ダイナミクスの理論的解析（佐藤）

近年のレーザー技術の発展により、高強度 THz 光とグラフェンの非線形相互作用に関する研究が精力的に進められており、高強度 THz 光が誘起する透過率上昇や高次高調波発生などの極限的な非線形光学現象が盛んに調べられている。本研究では、このような極限的な非線形現象の微視的機構を解明するため、緩和の効果を取り入れた量子マスター方程式により、THz 光が誘起するグラフェン内の電子ダイナミクスを解析した。グラフェン内における電子の散乱時間は THz 電場の時間スケールより短いため、THz 光を用いる代わりに定常電場の元でのグラフェンの伝導特性を調べた。定電場 E_0 の下でグラフェンに流れる電流 J を求め、その比から実効的な伝導度 $\sigma = J/E_0$ を評価した。その結果を図 5 に示す。図 5 には異なる化学ポテンシャルに対する結果が示されており、いずれの場合も印加する電場強度の上昇によって伝導度が減少していることが確認できる。また、化学ポテンシャルが比較的小さい場合、さらに高強度の電場を印加することで、伝導度が上昇に転じることが分かった。グラフェンにおける非線形伝導の微視的起源を解析したところ、高強度電場印加によって熱的キャリア、あるいはドーパされたキャリアの大部分が Brillouin zone 内で大きく移動し、伝導性を担うキャリアが枯渇することによって伝導度が低下していることが明らかとなった。また、より強電場領域においては、Zener トンネル現象により価電子帯から伝導帯へ励起キャリアが供給されることで、伝導度が再び上昇に転じることが分かった。本研究成果は、グラフェンにおける THz 誘起非線形電子ダイナミクス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” Nonlinear electric conductivity and THz-induced charge transport in graphene”として New Journal of Physics 誌から発表された。

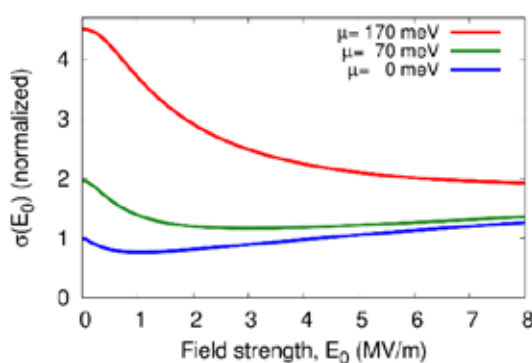


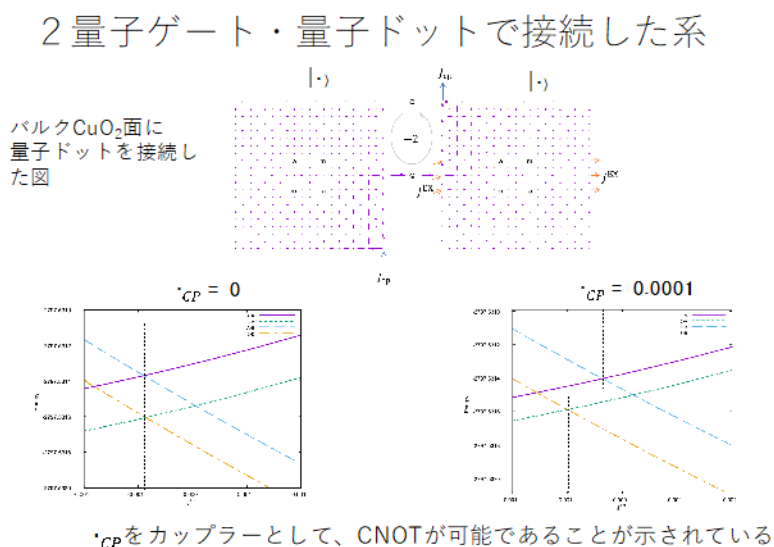
図 5: グラフェンにおける非線形電気伝導度の電場依存性。異なる化学ポテンシャル μ に対する結果が示されている。

[7] 非自明なベリー接続に基づく新しい超伝導の理論（小泉）

電子に対する多体波動関数から、ベリー接続が計算できる。そして、このベリー接続が非自明な時に、電流が存在する基底状態が実現可能であることをこれまでの研究で明らかにしてきた。このような基底状態をもつ状態が超伝導状態であるとする新しい超伝導理論を構築している。この超伝導状態を記述するために、粒子数を保存するボゴリューボフ=ド・ジャンヌの方程式を作り、計算を行った (H. Koizumi, A. Ishikawa, J. Supercond. Nov. Magn. 34 (2795-2808), 2021)。また、アンドレーフ反射の問題やジョセフソン効果の問題に適用した (H. Koizumi, J. Supercond. Nov. Magn. (2017-2029), 2021)。さらに、ロンドンモーメントの問題にも適用し、これまで、実験と矛盾のあった超伝導電流キャリアの質量について、正しい値を得ることができた。そして、ロンドンが超伝導状態に存在すると考えた‘Superpotential’や南部陽一郎が超伝導状態に存在すると考えた‘Nambu-Goldstone モード’を非自明なベリー接続と関連づけ論じた (H. Koizumi, J. Supercond. Nov. Magn. 34 (1361-1370), 2021)。

[8] スピン渦誘起ループ電流量子ビット（小泉）

銅酸化物高温超伝導体にその存在が予言されている“スピン渦誘起ループ電流”を量子コンピュータの情報単位‘量子ビット’として使用する可能性について理論的に考察した。この量子ビットでは、外部電流によりランダウ=ゼーマン遷移を利用した量子ビットの制御が可能であり、また、量子ビットのカップリングも外部電流を使って可能であることを、銅酸化物の CuO_2 面をスタックしたモデルと CuO_2 面のブロックを量子ドットとで繋げた系についてシミュレーションにより示した (H. Koizumi, A. Ishikawa, J. Supercond. Nov. Magn. (2022). <https://doi.org/10.1007/s10948-022-06184-x>)。



[9] ミュオン原子形成過程の解明（全）

負ミュオンが金属の鉄の中に打ち込まれると、図1のように負ミュオンと鉄原子核で構成されるミュオン鉄原子が生成される。今回、国際共同研究グループは宇宙 X 線観測などに向けて開発されてきた TES を大強度陽子加速器施設 J-PARC 物質・生命科学実験施設 MLF に持ち込み、ミュオン鉄原子から放出される電子特性 X 線を精密測定した。TES 検出器の高いエネルギー分解能により、ミュオン鉄原子による電子特性 X 線のエネルギースペクトルが、1 本の鋭いピークではなく、幅広い非対称な構造を持つことが分かった。また、理論計算と実験と比べて、このスペクトル構造からミュオン原子形成過程における負ミュオン・束縛電子のフェムト秒ダイナミクスの解明に成功した。本研究は、科学雑誌『Physical Review Letters』の Editors' Suggestion に選ばれた。「Physical Review Letters 127, 053001 (2021).」

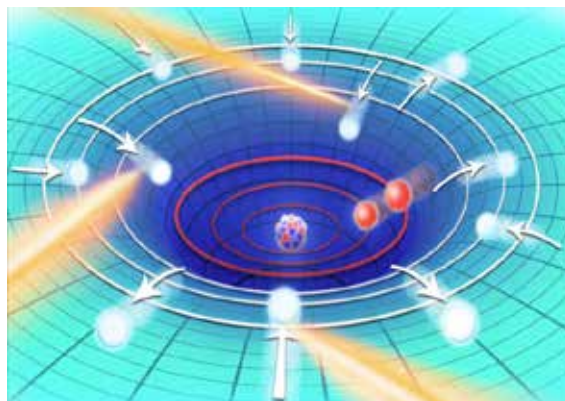


図6 ミュオン原子脱励起過程のダイナミクス

る電子特性 X 線のエネルギースペクトルが、1 本の鋭いピークではなく、幅広い非対称な構造を持つことが分かった。また、理論計算と実験と比べて、このスペクトル構造からミュオン原子形成過程における負ミュオン・束縛電子のフェムト秒ダイナミクスの解明に成功した。本研究は、科学雑誌『Physical Review Letters』の Editors' Suggestion に選ばれた。「Physical Review Letters 127, 053001 (2021).」

[10] 強レーザー場における原子電離中異常な光電子運動量分布の解明（全）

強レーザー場における原子電離過程を実験と理論研究を行った。非双極子の影響でレーザー伝播方向の電子運動量が図7中の赤線になることを実験で確認した。単純なモデルでディップ構造が再現できないために、我々が使っているモデルポテンシャルを使用した理論的予測は実験とよく一致している。詳しく分析すると、実験で観察されたディップ構造は原子核による光電子の後方散乱の起因である。本研究は、科学雑誌『Physical Review Letters』の Editors' Suggestion に選ばれた。「Physical Review Letters 128, 023301 (2022).」

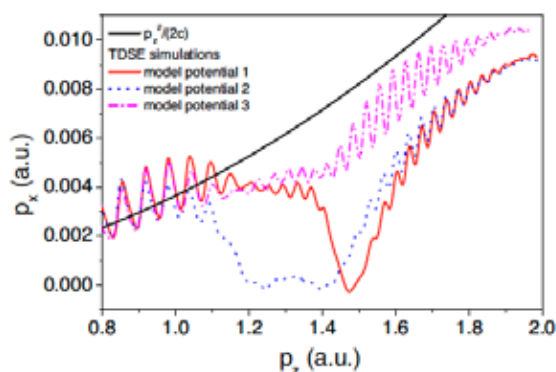


図7 レーザー進行方向の光電子運動量分布

[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光学伝導度を厳密対角化などにより数値的に調べ、本来は電荷励起状態を観測する量である光学伝導度にスピン励起状態起源のスペクトルピークが現れることを見出した。更に光学伝導度計算で重要となる電流演算子に対する解析および電荷動的構造因子との比較検討を行った結果、

空間依存ポテンシャルが波数 $K=(\pi,\pi)$ を有する 2 本足梯子において、梯子の rung 方向に対する光学伝導度 σ_y によってスピン $S=1$ の準粒子 (triplon) を 2 つ含む 2-triplon 状態と呼ばれる連続準位帯の 1 重項状態を観測できること、一方、梯子の leg 方向に対する光学伝導度 σ_x によって triplon を 3 つ含む 3-triplon 連続準位帯の 1 重項状態を観測できることを見出した(図 8)。

[12] レーザー誘起 3 次元フロケディラック・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た結果、直線偏光レーザー照射下では複数のフロケバンドが縮重した結果として、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。加えて円偏光レーザー照射下では、前述のフロケディラック半金属の up 電子と down 電子の縮重が解けた結果として、フロケワイル半金属状態が出現することが分かった(図 9)。更にフロケワイル半金属における Γ -Z line 上のワイル点はレーザー強度の増大と共に Γ 点へと近づき、ある臨界電場強度で消滅することを示した。

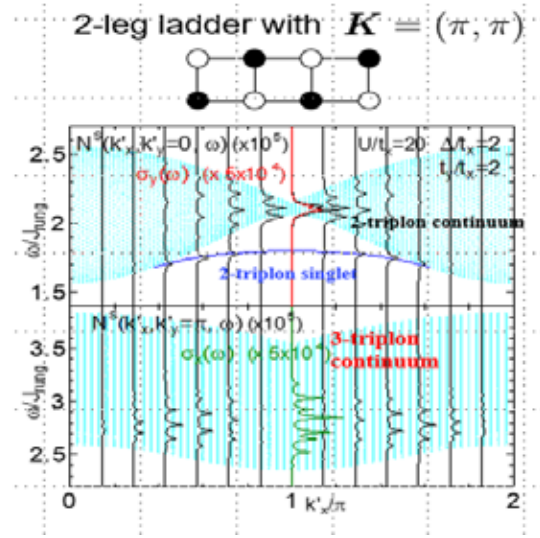


図 8: (上) 波数 $K=(\pi,\pi)$ を有する 2 本足梯子模型 (下) 同梯子模型における電荷動的構造因子 $N(k,\omega)$ と光学伝導度 $\sigma_\gamma(k,\omega)$ ($\gamma=x$ or y)。

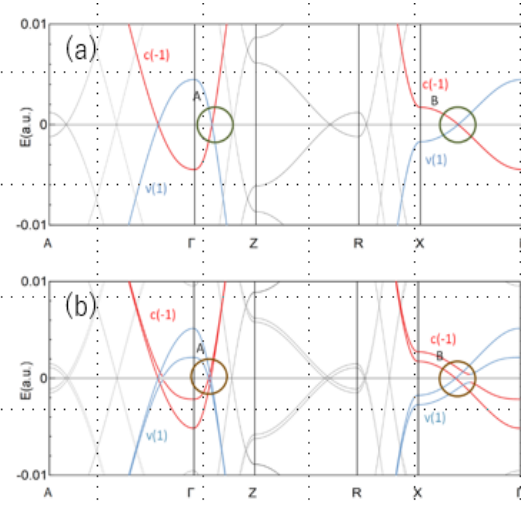


図 9: (a) 直線偏光レーザー照射における分散曲線(緑丸にディラック点), (b) 円偏光レーザー照射における分散曲線(茶丸にワイル点)。

[13] 3D-RISM 法による粘土鉱物の層間カチオンの水和・吸着構造の研究（大谷、萩原、黒田）

粘土鉱物は、古代より人類の身の回りの生活を支えてきた重要な材料の一つであるが、現代においても、陶磁器や化粧品、イオン交換剤など多くのものに利用されている。特に、最近では、蓄電池の電極保護剤として期待されるなど注目を集めている。本研究では、典型的な粘土鉱物である、モンモリロナイト(MMT)とバイデライト(BEI)に対して、層間カチオンである Na^+ の水和構造と母材への吸着構造の研究を行った。計算には、密度汎関数(DFT)法と古典溶液理論(3D-RISM)を組み合わせたハイブリッド手法を用いて、粘土鉱物とカチオンには DFT を適用し電子状態を正確に考慮し、層間の水には 3D-RISM を適用し溶媒分布を効率よく計算した（図 10(a)）。層間の水分子数を変えて含水比を計算し、3D-RISM で実験の含水比を再現することを確認したのちに、層間カチオン(Na^+)の吸着位に対する電子状態と水和構造の変化を解析した。電子状態はカチオン位置には大きく依存しないが、図 10(b)に示すように、水和構造は大きく変化し、カチオン位置が層間の中心付近の場合には、外圏錯体を構成するが、母材に吸着した場合には内圏錯体を構成することが明らかになった。

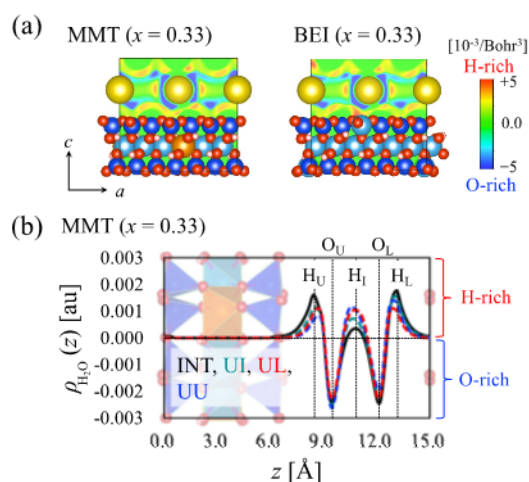


図 10 : (a) MMT と BEI の構造モデルと層間の水分布。(b) ac 面内の水分子の分布の平均値 (上)。カチオン周りの水分子の分布の模式図 (下)

4. 教育

- ・石川 亜留都（修士） スピン渦誘起ループ電流量子ビットの理論的研究:電流によるゲート操作と量子ドットを利用した状態の読み出し
- ・酒井 貴義（修士） 2次元フロケットポロジカル絶縁体の非自明表面状態の理論的解析
- ・近藤 拓海（卒業論文） 3層モデルにおける銅酸化物超伝導体の理論研究：電子対ギャップの平均場とスピンモーメントの平均場を用いた2種の計算方法
- ・田中 迪（卒業論文） 2次元フロケットポロジカル状態のエッジ状態に対する sp 軌道間ホッピング効果
- ・松本 祐介（卒業論文） 2次元フロケットポロジカル状態におけるエッジ状態と分極の関係
- ・防村 春樹（卒業論文） 3次元フロケワイル半金属のバンド構造に対するレーザー強度の影響

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

該当なし

外部資金

1. JST CREST「光・電子融合第一原理計算ソフトウェアの開発と応用」、矢花一浩、代表、2016-2021 年度、全年度直接経費：177,500 千円（2021 年度直接経費：32,540 千円）
2. Q-LEAP 先端レーザーイノベーション拠点 「次世代アト秒レーザー光源と先端計測技術の開発」、矢花一浩、分担、2018-2027 年度、全年度直接経費：22,727 千円（2021 年度直接経費：2,320 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：3,400 千円）
4. 科研費基盤（C）「分光測定を再現する Maxwell 方程式と融合した分子動力学マルチスケール法の開発」、山田篤志、代表、2019－2023 年度、全年度直接経費：2,100 千円（2021 年度直接経費：610 千円）
5. 科研費「サブ nm ギャップを持つメタ表面の量子効果」、竹内嵩、（2021 年度直接経費：1000 千円）
6. 科研費若手、佐藤駿丞、代表、2020-2023 年度、全年度直接経費：3,300 千円（2021 年度直接経費：600 千円）、「光による電子構造制御の第一原理計算」
7. 科研費基盤(B)、佐藤駿丞、分担、2021-2024 年度、全年度直接経費：17,030 千円（2021 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」
8. 科研費基盤(S)、大谷、分担、2020-2025 年度、全年度直接経費：15,000 千円（2021 年度直接経費：5,000 千円）、「孤立分子・孤立軌道の特異性に 基づく蓄電材料機能の革新」
9. 「富岳」成果 創出 加速プログラム、大谷、分担、2020-2024 年度、全年度直接経費：18,000 千円（2021 年度直接経費：6,000 千円）、「次世代二次電池・燃料電池開発 による ET 革命に向けた計算・データ材料科学研究」
10. NEDO 超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト、大谷、分担、2021 年度、全年度直接経費：3,000 千円（2021 年度直接経費：3,000 千円）

知的財産権

該当なし

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. S. Yamada and K. Yabana, “Determining the optimum thickness for high harmonic generation from nanoscale thin films: An ab initio computational study”, *Phys. Rev. B* 103, 155426 (2021).
2. Y. Hirokawa, A. Yamada, S. Yamada, M. Noda, M. Uemoto, T. Boku, K. Yabana, “Large-scale ab initio simulation of light-matter interaction at the atomic scale in Fugaku”, *The International Journal of High Performance Computing Applications*, 36, 182–197 (2022).
3. Guillaume Duchateau, Atsushi Yamada and Kazuhiro Yabana, “Electron dynamics in α -quartz bulk induced by two-color 10-femtosecond laser pulses”, *Phys. Rev. A* 105, 165128 (2022).
4. Atsushi Yamada, “Classical Electronic and Molecular Dynamics Simulation for Optical Response of Metal System”, *J. Chem. Phys.*, 155, 174118 (2021).
5. E. Epifanovsky, A. Yamada, et. al, “Software for the frontiers of quantum chemistry: An overview of developments in the Q-Chem 5 package”, *J. Chem. Phys.* 155, 084801 (2021).
6. S. Bhandaari, S. Sarkar, A. Schubert, A. Yamada, J. Payne, M. Ptaszek, E. Geva, B.D. Dunietz, “Intersystem crossing in tetrapyrrolic macrocycles. A first-principles analysis”, *J. Phys. Chem. C* 125, 13493 (2021).
7. T. Takeuchi, K. Yabana, “Numerical scheme for nonlinear optical response of metallic nanostructure: Quantum hydrodynamics theory solved by adopting effective Schrödinger equation”, *Optics Express* 30, 11572-11587 (2022).
8. A. Hashmi, S. Yamada, A. Yamada, K. Yabana, T. Otobe, “Nonlinear dynamics of electromagnetic field and valley polarization in WSe2 monolayer”, *Appl. Phys. Lett.* 120, 051108 (2022).
9. A. Hashmi, S. Yamada, A. Yamada, K. Yabana, T. Otobe, “Valley polarization control in WSe2 monolayer by a single-cycle laser pulse”, *Phys. Rev. B* 105, 115403 (2022).
10. Dandan Hui, Husain Alqattan, Shunsuke Yamada, Vladimir Pervak, Kazuhiro Yabana, Mohammed Th. Hassan, “Attosecond electron motion control in dielectric”, *Nature Photonics* 16, 33–37 (2022)
11. D. Freeman, S. Yamada, A. Yamada, K. Yabana, Anatoli Kheifets, “High order harmonic generation in semiconductors driven at near- and mid-IR wavelengths”, arXiv:2109.07693.
12. Kuo Zhong, Wei Yu, Yovan de Coene, Atsushi Yamada, Olga Krylychkina, Stijn Jooen, Olivier Deschaume, Carmen Bartic and Koen Clays, “Dual photonic bandgap hollow sphere colloidal photonic crystals for real-time fluorescence enhancement in living cells”, *Biosens. Bioelectron.* 194, 113577 (2021).

13. S. Hagiwara, C. Hu, S. Nishihara, and M. Otani, “Bias-dependent diffusion of a H₂O molecule on metal surfaces by the firstprinciples method under the grand-canonical ensemble”, *Phys. Rev. Mater.* 5, 065001-1-19 (2021).
14. T. Okumura, T. Azuma, D.A. Bennett, P. Caradonna, I. Chiu, W.B. Doriese, M.S. Durkin, J.W. Fowler, J.D. Gard, T. Hashimoto, R. Hayakawa, G.C. Hilton, Y. Ichinohe, P. Indelicato, T. Isobe, S. Kanda, D. Kato, M. Katsuragawa, N. Kawamura, Y. Kino, M.K. Kubo, K. Mine, Y. Miyake, K.M. Morgan, K. Ninomiya, H. Noda, G.C. O’Neil, S. Okada, K. Okutsu, T. Osawa, N. Paul, C.D. Reintsema, D.R. Schmidt, K. Shimomura, P. Strasser, H. Suda, D.S. Swetz, T. Takahashi, S. Takeda, S. Takeshita, M. Tampo, H. Tatsuno, X.M. Tong, Y. Ueno, J.N. Ullom, S. Watanabe, and S. Yamada, “De-excitation dynamics of muonic atoms revealed by high precision spectroscopy of electronic K x rays using superconducting transition-edge sensor microcalorimeters”, *Phys. Rev. Lett.* 127, 053001:1-7 (2021).
15. D. Chetty, R.D. Glover, X.M. Tong, B.A. deHarak, H. Xu, N. Haram, K. Bartschat, A.J. Palmer, A.N. Luiten, P.S. Light, I.V. Litvinyuk, and R.T. Sang, “Carrier-Envelope-Phase Dependent Strong-Field Excitation”, *Phys. Rev. Lett.* 128, 173201 (2022).
16. K. Lin, S. Brennecke, H.C. Ni, X. Chen, A. Hartung, D. Trabert, K. Fehre, J. Rist, X.M. Tong, J. Burgdorfer, L.P.H. Schmidt, M.S. Schoffler, T. Jahnke, M. Kunitski, F. He, M. Lein, S. Eckart, and R. Dorner, “Magnetic-field effect in high-order above-threshold ionization”, *Phys. Rev. Lett.* 128, 023301:1-6 (2022).
17. H. Koizumi, A. Ishikawa, “Berry connection from many-body wave functions and superconductivity: Calculations by the particle number conserving Bogoliubov-de Gennes equations”, *J. Supercond. Nov. Magn.* 34(11), 2795-2808
18. H. Koizumi, “Superconductivity by Berry Connection from Many-body Wave Functions: Revisit to Andreev–Saint-James Reflection and Josephson Effect”, *J. Supercond. Nov. Magn.* 10.1007/s10948-021-05905-y
19. H. Koizumi, “London Moment, London’s Superpotential, Nambu-Goldstone Mode, and Berry Connection from Many-Body Wave Functions”, *J. Supercond. Nov. Magn.* 34 (1361-1370), 2021.
20. H. Koizumi, A. Ishikawa, “Spin-vortex-induced Loop Current Qubits: Gate Control and Readout Using External Current Feeding”, *J. Supercond. Nov. Magn.* (2022).
<https://doi.org/10.1007/s10948-022-06184-x>
21. S.A. Sato, “First-principles calculations for attosecond electron dynamics in solids”, *Comput. Mater. Sci.* 194, 110274 (2021)

22. S. Aeschlimann, S.A. Sato, R. Krause, M. Chávez-Cervantes, U. De Giovannini, H. Hübener, S. Forti, C. Coletti, K. Hanff, K. Rossnagel, A. Rubio, I. Gierz, “Survival of Floquet–Bloch States in the Presence of Scattering”, *Nano Lett.* 21, 5028 (2021).
23. S.A. Sato, A. Rubio, “Nonlinear electric conductivity and THz-induced charge transport in graphene”, *New J. Phys.* 23, 063047 (2021).
24. S. Latini, D. Shin, S.A. Sato, C. Schäfer, U. De Giovannini, H. Hübener, A. Rubio, “The ferroelectric photo ground state of SrTiO₃: Cavity materials engineering”, *PNAS* 118 e2105618118 (2021).
25. D. Shin, S. Latini, C. Schäfer, S.A. Sato, U. De Giovannini, H. Hübener, A. Rubio, “Quantum paraelectric phase of SrTiO₃ from first principles”, *Phys. Rev. B* 104, L060103 (2021).
26. G. Albareda, K. Lively, S.A. Sato, A. Kelly, A. Rubio, “Conditional Wave Function Theory: A Unified Treatment of Molecular Structure and Nonadiabatic Dynamics”, *J. Chem. Theory Comput.* 17, 7321 (2021).
27. S.A. Sato, “Two-step Brillouin zone sampling for efficient computation of electron dynamics in solids”, *J. Phys.: Condens. Matter* 34, 095903 (2021).
28. U. De Giovannini, S. A.Sato, H. Hübener, A. Rubio, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* “First-principles modelling for time-resolved ARPES under different pump–probe conditions”, *Spectrosc. Relat. Phenom.* 254, 147152 (2021).
29. S.A. Sato, “First-principles calculations for transient absorption of laser-excited magnetic materials”, *Electronic Structure*, Volume 4, Number 1(2022).
30. 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”, *Phys. Rev. Mater.* 6, 025001 (2022).
31. J. Haruyama, S. Takagi, K. Shimoda, I. Watanabe, S. Sodeyama, T. Ikeshoji, and M. Otani, “Thermodynamic analysis of Li-intercalated graphite by first-principles calculations with vibrational and configurational contributions”, *Journal of Physical Chemistry C* 15, 27891 (2021).
32. 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 (2022).

B) 査読無し論文

1. 山田篤志, 「光・分子動力学統合の計算化学の開発: 金属の光応答を記述する分子シミュレーション」, The Molecular Simulation Society of Japan[分子シミュレーション学会誌] アンサンブル, vol.24, No.1, 39-44 (2022)

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Kazuhiro Yabana, “Ab initio description of ultrafast dynamics in solids”, CLEO Europe, Online, Jun. 21 (2021)
2. Atsushi Yamada and Kazuhiro Yabana, “Electron and Phonon Dynamics in Nonlinear Optics by Multiscale First-Principles Simulation”, International Conference: Advanced Laser Technologies, Online, Sep. 7 (2021)
3. Kazuhiro Yabana, “Time-dependent density functional theory for extremely nonlinear optics”, International Conference: Advanced Laser Technologies, Online, Sep. 7 (2021)
4. Kazuhiro Yabana, “Real-time TDDFT coupled with Maxwell equations for light-propagation through thin films”, Theory days on New computational methods for electron dynamics Toulouse+Online Nov. 24-26, 2021
5. Kazuhiro Yabana, “Ab Initio Simulations of Ultrafast Phenomena in Solids: State of the Art and Challenges”, First Int. Conf. on Scientific Opportunities with Advanced Attosecond Lasers Dongguan, China and online Jan. 15-18, 2022
6. Atsushi Yamada, “First-principles calculations of initial stage of laser damage”, The 22nd International Symposium on Laser Precision Microfabrication (LPM2021), online, June 8 to June 11, (2021)
7. Shunsuke A. Sato, “Theoretical study on attosecond electron dynamics in solids”, 2021 P-COE Workshop, Augst 19, 2021; DGIST Korea/Online

B) 一般講演

1. T. Takeuchi and K. Yabana, “Large Third-Order Nonlinear Optical Effect Induced by Plasmonic Metasurface with Sub-nm Gaps”, EG-P.9, CLEO/Europe-EQEC 2021, online, Jun. 25, 2021.
2. S. Yamada and K. Yabana, “First-principles calculations for determining the thickness to maximize HHG efficiency of laser-irradiated nano films”, CG-P.21, CLEO/Europe-EQEC 2021, online, Jun. 24, 2021.

3. Atsushi Yamada "Terahertz generation spectroscopy by Maxwell + MD multiscale simulation", CCSSymposium, online, Oct.8(2022-10)
4. H. Ni, S. Brennecke, X. Gao, P.L. He, S. Sonza, I. Brezinova, F. He, J. Wu, M. Lein, X.M. Tong and J. Burgdorfer, "Noadiabatic Subcycle Linear Momentum Transfer in Tunneling Ionization", 32nd International Conference on photonic, electronic and atomic collision, July 20-23, 2021(online).
5. T. Okumura, T. Azuma, D.A. Bennet, P. Caradonna, I. Chiu, W.B. Doriese, M.S. Durkin, J.W. Fowler, J.D. Gard, T. Hashimoto, R. Hayakawa, G.C. Hilton, Y. Ichinohe, P. Indelicato, T. Isobe, S. Kanda, D. Kato, M. Katsuragawa, N. Kawamura, Y. Kino, K.M. Kubo, K. Mine, Y. Miyake, K.M. Morgan, K. Ninomiya, H. Noda, G.C. O'Neil, S. Okada, K. Okutsu, T. Osawa, N. Paul, C.D. Reintsema, D.R. Schmidt, K. Shimomura, P. Strasser, H. Suda, D.S. Swetz, T. Takahashi, S. Takeda, S. Takeshita, M. Tampo, H. Tatsuno, X.M. Tong, Y. Ueno, J.N. Ullom, S. Watanabe, and S. Yamada, "High resolution measurement of electronic K x rays from muonic atoms in metal", 32nd International Conference on photonic, electronic and atomic collision, July 20-23, 2021(online).
6. XM Tong, "Exchange-correlation functional with self-interaction corrections for many-atom systems", 32nd International Conference on photonic, electronic and atomic collision, July 20-23, 2021(online).
7. B. Yilmaz, I. Alpaslan, M. Otani, T. Ishihara, T. Akbay, "Computational investigation of Li-ion adsorption on charged graphene", 240th ECS meeting, online, October 10, 2021.
8. I. Alpaslan, B. Yilmaz, M. Otani, T. Ishihara, T. Akbay, "computational investigation of electric field driven Lithium intercalation into bilayer graphene", 240th ECS meeting, online, October 10, 2021
9. S. Hagiwara and M. Otani, "Bias-dependent H₂O-monomer diffusion on metal surfaces through the ab initio density functional theory calculations", Materials Research Meeting 2021, online, December 13, 2021.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 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」レーザー学会東京支部セミナー 東海大学+オンライン 2021 年 12 月 17 日
2. 大谷実、「第一原理計算と溶液理論の融合による電気化学反応シミュレーション：電池材料や腐食への応用」、第 78 回固体イオニクス研究会、オンライン、2021 年 7 月 28 日

B) その他の発表

1. 山田篤志、「Maxwell+ 分極力場 MD マルチスケールシミュレーションの開発と DCMBI 結晶の瞬間誘導ラマン散乱誘起テラヘルツ波発生プロセスの解析」、第 23 回理論化学討論会、オンライン、2021 年 5 月
2. 山田篤志、矢花一浩、「低-高強度短パルス光照射に対する金属・半導体・絶縁体の光学応答変化の第一原理計算に基づく解析」、日本物理学会、オンライン、2021 年 9 月 23 日
3. 山田篤志、「電子の古典的運動を取り入れた金属力場モデルの開発：分子シミュレーションによる金属ナノ粒子の光吸収とエネルギー緩和」、第 15 回分子科学討論会、オンライン、2021 年 9 月 20 日
4. D. Freeman、山田俊介、山田篤志、A. Kheifets、矢花一浩、「半導体からの高次高調波発生の第一原理計算：パルス形状・原子配置依存性に関する分析」、日本物理学会 2021 年秋季大会（オンライン）、2021 年 9 月 23 日
5. 竹内嵩、矢花一浩、「金属ナノ構造の非線形光学応答解析 —有効 Schrödinger 方程式に基づく数値解析法の開発—」、第 82 回応用物理学会秋季学術講演会（オンライン）、2021 年 9 月 12 日
6. 山田篤志、「自由電子の古典的運動を組み込んだ金属力場モデルの開発：水溶液中ナノ粒子の光吸収とエネルギー緩和」溶液化学シンポジウム、オンライン、2021 年 10 月 29 日
7. 山田篤志、「金属内自由電子の古典ダイナミクスを組み込んだ分子シミュレーションの開発：水溶液中ナノ粒子の光吸収とエネルギー緩和」、分子シミュレーション討論会、岡山大学、2021 年 12 月 1 日
8. 山田篤志、「金属内自由電子の古典的運動方程式を組み込んだ分子シミュレーションの開発：水溶液中ナノ粒子の光吸収とエネルギー緩和」、日本化学会第 102 春季年会、オンライン、2022 年 3 月 24 日
9. 吉田智大、竹内嵩、矢花一浩、「ランダムメタ表面の光学応答の FDTD 法に基づく解析」、第 69 回応用物理学会春季学術講演会、オンライン、2022 年 3 月 24 日
10. 張潤南、前島展也、日野健一、「フロケットポロジカル半金属におけるレーザー誘起ディラック分散とワイルノード II」、日本物理学会 2021 年秋季大会、オンライン開催)
11. 前島展也、日野健一、「サイト依存ポテンシャル下の $S=1/2$ スピン梯子系における多トリプル状態」、日本物理学会 2021 年秋季大会、オンライン開催)
12. 張潤南、前島展也、日野健一、「レーザー誘起バンド間共鳴遷移によるフロケットポロジカル半金属物質の創成および表面状態の解析」、日本物理学会第 77 回年次大会、オンライン開催)

13. 前島展也, 日野健一, “サイト依存ポテンシャル下の $S=1/2$ スピン梯子系における多トリプロン状態 II”, 日本物理学会第 77 回年次大会, オンライン開催)
14. 小泉裕康, “ロンドンモーメントに現れる電子の質量とベリー接続”, 日本物理学会 第 76 回年次大会(オンライン, 3.12-15)
15. 石川亜留都, 小泉裕康, “スピン渦誘起ループ電流量子ビット: 電流によるゲート操作シミュレーション”, 日本物理学会 第 76 回年次大会(オンライン, 3.12-15)
16. 守尾直輝, 石川亜留都, 小泉裕康, “銅酸化物高温超伝導対の表面バルク 2 層モデルを使った ARPES シミュレーション” 日本物理学会 2021 年秋季大会 (オンライン, 9/20-13)
17. 石川亜留都, 小泉裕康, “スピン渦誘起ループ電流量子ビット: 量子ドットの利用” 日本物理学会 2021 年秋季大会 (オンライン, 9/20-13)
18. 小泉裕康, “粒子数を保存するボゴリューボフ変換による超伝導理論: アンドレーフ反射 とジョセフソン効果についての考察” 日本物理学会 2021 年秋季大会 (オンライン, 9/20-13)
19. 佐藤駿丞, M. Lucchini, G.D. Lucarelli, B. Moio, G. Luca Dolso, G. Inzani, R. Borrego-Varillas, F. Frassetto, L. Poletto, H. Hübener, U. De Giovannini, M. Nisoli, A. Rubio, 「固体 MgF_2 におけるアト秒励起子ダイナミクスの理論的解析」, 日本物理学会第 2021 年秋季大会(オンライン), 2021 年 9 月 23 日
20. Shunsuke A. Sato, 「Theoretical study on nonlinear transport in graphene under optical-driving and dissipation」, 日本物理学会第 77 回年次大会(オンライン), 2022 年 3 月 19 日
21. 佐藤駿丞, 「レーザー励起された磁性体の過渡光学応答第一原理計算」, 日本物理学会第 77 回年次大会(オンライン), 2022 年 3 月 15 日
22. 萩原聡, 「3D-RISM 法による粘土鉱物の層間カチオンの水和・吸着構造の研究」, 「富岳」成果創出加速プログラム 富岳」電池課題 第 2 回公開シンポジウム (成果報告会), 2022 年 3 月 11 日
23. 黒田文彬, 深澤太郎, 三宅隆「クラスター展開法による fcc Ni の遍歴磁性へのアプローチ」, 日本物理学会第 77 回年次大会, オンライン開催, 2022 年 3 月 16 日

(4) 著書、解説記事等

1. K. Yabana, T. Takeuchi, M. Uemoto, A. Yamada, S. Yamada, “Ab initio computational approach for nanophotonics based on time-dependent density functional theory”, Progress in Nanophotonics 6, pp 103-133, (2021), Springer International Publishing
2. 萩原聡、大谷実 (2021). 第 I 編 第一章 第一原理計算による電池固液界面の理論計算, 森分博紀 (監修), AI・MI・計算科学を活用した蓄電池研究開発動向 R&D Trends

on Batteries Materials and Devices using AI/ML/Computational Science, (株) シーエムシー・リサーチ, pp. 3-14, ISBN 978-4-910581-05-7.

7. 異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等

異分野間連携（センター内外）

1. 光科学第一原理ソフトウェア SALMON の開発にあたり、高性能計算システム研究部門の朴教授、額田教授と研究協力を行っている(矢花、他)。
2. 自然言語フォーラムを主宰し、量子コンピュータのキラーアプリとして自然言語処理と生成文法としての自然言語に関する情報交換、勉強会を月一回行っている(小泉)。1月31日第2回定期ミーティングで「量子論、論理、計算科学」、2月28日第3回定期ミーティングで「量子情報、自然言語処理、普遍文法」という講演を行った。

産学官連携

1. 矢花：株式会社住友金属鉱山と、SALMON を用いたメタ表面の光応答に関する学術指導を行った。
2. 大谷：クニミネ株式会社に対し、粘土鉱物の第一原理計算に関する学術指導を行い、学術論文を共同で出版した。
3. 大谷：トヨタ自動車株式会社と有機高分子の金属表面上での電気化学酸化反応制御に関する共同研究をおこなった。
4. 大谷：第日本塗料株式会社と金属材料の腐食に関する共同研究をおこなった。
5. 大谷：一般社団法人電気化学界面シミュレーションコンソーシアムの代表理事を務め、運営を行った。
6. 大谷：東京大学物性研究所のソフトウェア開発・高度化プロジェクトに採択され、当部門で開発している ESM-RISM 法の高度化・高速化を行った。
7. 矢花：量子科学技術研究開発研究機構関西光科学研究所の研究者と、JST-CREST 研究に基づき SALMON の開発と応用に関わる共同研究を行った。

国際連携・国際活動

1. 矢花：アト秒光科学に関し、グラーツ工科大学、マックスプランク量子光学研究所、アリゾナ大学の実験グループと共同研究を行っている。
2. 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の理論研究者と実施している。

3. 矢花：H2020-MSCA-RISE(欧州の国際交流プロジェクト)による光と物質の相互作用に関する理論と計算に関わる国際ネットワーク形成プロジェクト ATLANTIC に基づく国際共同研究を行っているが、今年度はコロナ禍のため活動が休止していた。

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. SALMON の利用に関するチュートリアルを、大阪大学コンピューショナル・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、京都大学学術メディア総合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

1. 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：筑波大学全学計算機システム3D サテライトの管理
3. 前島：（学内）応用理工学類2年クラス担任、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（後期）世話人

10. 社会貢献・国際貢献

1. 矢花一浩（プレスリリース）、“「富岳」を用いた1万超の原子を含むナノ物質の超高速光応答シミュレーションに成功”、筑波大学、神戸大学、科学技術振興機構（2022.1.6）

11. その他

特になし

V. 生命科学研究部門

V-1. 生命機能情報分野

1. メンバー

教授	重田 育照
准教授	原田 隆平
助教	庄司 光男
助教	堀 優太
助教	原嶋 庸介
研究員	Kowit Hengphasatporn (AMED)
研究員	三嶋 謙二、森田 陸離、下山充紘 (CCS)
研究員	宮川 晃一 (新学術領域)
学生	大学院生 7名 (数理物質科学研究科後期課程 1名 (社会人)、前期課程 6名) 学類生 2名 (物理学類)

2. 概要

生命機能情報分野では、生体内で重要な働きをしている生体分子に注目し、その機能を分子構造、電子状態レベルからより詳細に解明することを目的としている。令和3年度は、【1】タンパク質立体構造サンプリング計算手法の開発、【2】光化学系IIの酸素発生中心(OEC)におけるS3状態の高精度計算による解析、【3】無水プロトン伝導物質中の伝導機構の解明に向けた理論解析、【4】高誘電率酸化物の不純物添加による結晶構造制御、【5】SARS-CoV-2に対するドラッグディスカバリー、【6】分子動力学計算によるメタロチオネインの構造多様性解析、【7】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、【8】星間空間におけるアミノ酸のホモキラリテー起源の理論解明、などの研究を大きく進展させることができた。これらの研究では、計算科学研究センターのスパコン (Cygnus)、および国内のスパコンを利用した。また、筑波大学内外の研究グループと共同研究し、新しい研究にも積極的に取り組んだ。

3. 研究成果

[1] タンパク質立体構造サンプリング計算手法の開発 (原田、重田)

生体内において、タンパク質は動的な物質として存在しており、その構造ゆらぎが生命機能を果たす上で重要である。つまり、タンパク質が取りうる立体構造やダイナミクスを調べることは生命機能の理解に直結する。全原子分子動力学計算 (MD: molecular dynamics simulation) は、生体分子を構成する原子について古典力学に基づきニュートンの運動方程式を繰り返し数値積分することで、その時間発展を追跡することができる。このように、MDはタンパク質や核酸をはじめとする生体分子のダイナミクスを追跡する上で強力な研究手段で

ある。しかしながら、MD を用いてタンパク質のとりうる立体構造を過不足なく探索することは非常に困難である。なぜなら、MD で追跡可能な時間スケールはタンパク質が機能を果たす時間スケールよりも遥かに短いためである。この問題を解決するために、ハードウェアおよびソフトウェア開発に加え、様々な計算手法が提案されてきた。ハードウェア面では MD 専用の計算機の開発が行われ、ソフトウェア面では様々な改良型 MD の開発が行われてきた。Parallel Cascade Selection MD (PaCS-MD) は拡張型 MD の一例であり、長時間 MD に代えて複数の短時間 MD を繰り返し実行することでタンパク質の長時間ダイナミクスを効率的に抽出する。具体的には構造変化する確率が高い初期構造をランキングし、短時間 MD を繰り返す。このサイクルを繰り返すことで、始構造と終構造の二構造間の遷移経路を効率的に探索することができる。PaCS-MD を効率的に実行するためには、構造ランキングに使用する指標（反応座標）を適切に選択しなければならないが、その選択は極めて難しく、対象とする系に依存して構造探索に影響を与えるという問題がこれまで指摘されてきた。しかしながら、反応座標が探索効率に与える影響の定量的な評価や、対象の系に依存しない反応座標の検討については不明な点が多かった。そこで本研究では、これらの問題を解決するため PaCS-MD に改良を加えることで、効率的にタンパク質の立体構造を探索する手法 (Ino-PaCS-MD, JCTC2021) を開発した。

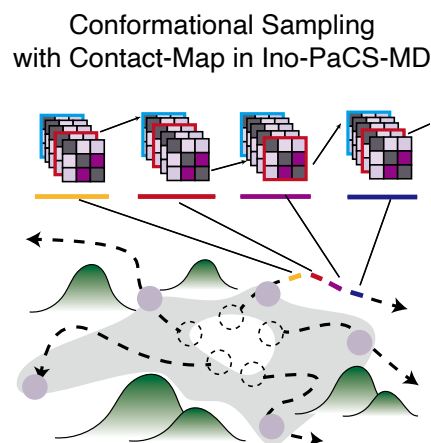


図 1: Ino-PaCS-MD の設計思

[2] 光化学系 II の酸素発生中心(OEC)における S3 状態の高精度計算による解析（庄司、三嶋、宮川）

天然光合成の水分解反応は光化学系 II の酸素発生中心 (OEC) において行われ (図 2a)、太陽光エネルギーを利用して水分子から電子とプロトンが取り出され、その結果として酸素分子が放出される。本反応は、OEC に存在する CaMn_4O_5 クラスタで触媒され、Kok サイクルと呼ばれる 5 段階のステップ ($\text{S}_0 \sim \text{S}_4$) を経て進行する。2011 年の高分解能の XRD による構造の発見からその反応過程の解明に向けた研究が行われているが、中間体間の相対エネルギーなどの定量的な評価には結合クラスター (CC) 法のような DFT を超えた精密な計算が可能となる手法が必要である。本研究では、これまで行ってきた解析結果に基づいて CaMn_4O_5 クラスタのコア構造に対して S3 状態の水挿入後の異性体間の相対安定性についてのそれぞれ DFT と DFT を超えた手法の一つである DLPNO-CC 法を用いた構造異性体間の相対安定性について比較検討を行った (Chem. Phys. Lett., 793, 139439 (2022))。DFT、CC 法両方の結果で O(6)原子が OH 基でその OH 基が Mn1 と Ca とに配位しているグルタミン酸 189

に水素結合を形成している構造が安定（図 2b）であると示された一方、Oxo 状態や Peroxo 状態の相対安定性が DFT と DLPNO-CC 法で全く異なる傾向が示され、S3 状態から S0 状態に至る O-O 結合形成段階において CC 法のような post-DFT の手法が特に重要となると考えられる。また、HF 成分の異なる 3 つの DFT の結果を初期解に用いた DLPNO-CC 法の結果では HF パラメータに依存しない結果が得られ（図 2c）中間体間の相対安定性だけでなく反応過程の評価にも有効な手段となると考えられる。今回の結果をふまえて現在、水素結合ネットワークを考慮した巨大系に対する精密計算を行っている。

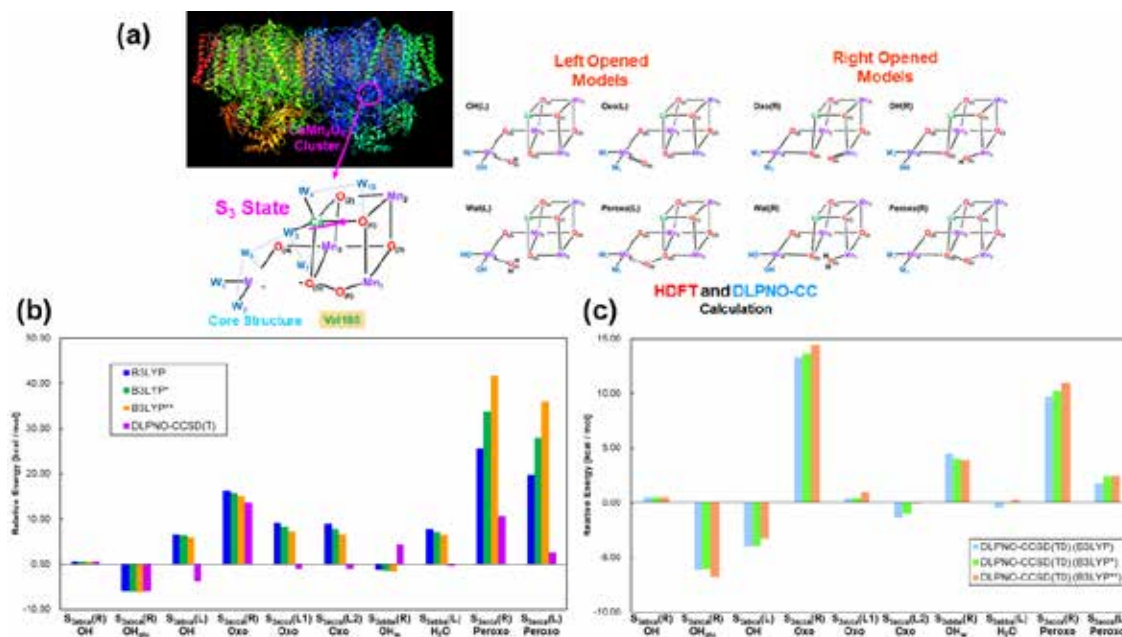


図 2 (a) PSII の OEC における CaMn4O6 クラスターの S3 状態の計算モデルと(b),(c)相対エネルギーの手法による比較。

[3] 無水プロトン伝導物質中の伝導機構の解明に向けた理論解析（堀、重田）

無水のプロトン伝導物質は、100℃以上の温度領域でプロトン伝導性を示すため、固体燃料電池の次世代電解質材料として注目されている。コハク酸イミダゾリウム(Im-Suc)は無水の有機結晶であり、イミダゾール(Im)とコハク酸(Suc)が作る二次元の水素結合上をプロトンが伝導し、127℃で $1 \times 10^{-3} \text{ S m}^{-1}$ のプロトン伝導度を示す。高性能なプロトン伝導物質を設計するためには、その伝導メカニズムを理解することが重要である。

本研究では、Im-Suc 中のプロトン伝導機構の解明を目指し、量子化学計算によって Im-Suc 中の水素結合構造、プロトン移動、分子運動を結びつけるためにポテンシャルエネルギーダイアグラムを構築した。

図3に量子化学計算によって得られた Im と Suc 間の分子間プロトン移動と Im の回転運動による、隣接する Im 間のプロトン輸送過程を仮定したポテンシャルエネルギーダイアグラムの結果を示す。図3の結果から、隣接する Im 間のプロトン輸送過程における構造変化は、まず Im が回転して隣接する Suc へプロトンを渡し、続いて Suc から隣接する Im へプロトンが移り、再び Im 分子が回転する。したがって、このプロセスが繰り返し起こることにより、プロトンが結晶内を伝導していくと予想され、プロトン移動と Im の回転運動がカップリングすることによりプロトン伝導が促進することが示唆された。また、隣接する Im 間のプロトン輸送過程における律速は、Im と Suc 間のプロトン移動過程であることがわかった。したがって、プロトン伝導度を向上させるためには、プロトンのドナーとアクセプターの強さを調整し、プロトン移動の活性化エネルギーを下げるということが重要であることが予想される。

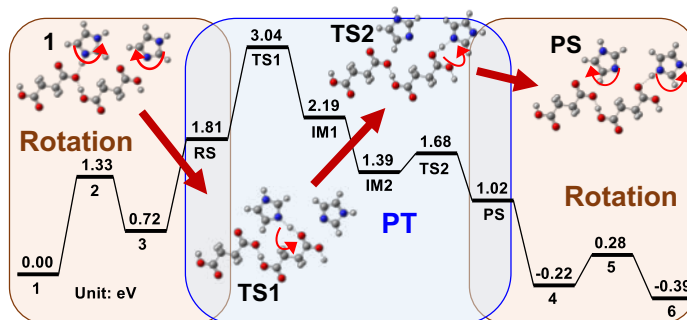


図3 分子回転と2つのプロトン移動遷移状態を含む、隣接する Im へのプロトン移動のポテンシャルエネルギー図を計算したもの。

[4] 高誘電率酸化物の不純物添加による結晶構造制御（原嶋、重田）

Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor(MOSFET)はスイッチング素子などに利用される、特に重要な半導体デバイスの1つである。MOSFETでは半導体の上に酸化絶縁膜を積層し、そこにさらに金属電極を接触させている。この酸化絶縁膜および金属電極がゲートとして働き、ここにかかる電圧によってチャネルを流れる電流のONとOFFが切り替わる。MOSFETの性能は酸化絶縁膜に高い誘電率を持つ化合物を用いることで向上する。HfO₂やZrO₂は高誘電率酸化膜の候補として注目されているが、いくつかの結晶構造をとり、構造によって誘電率が異なるため、その構造の制御が重要な課題となっている。本研究では不純物添加による結晶構造の制御に着目した。不純物添加による安定性への寄与は(i)生成エネルギーに加えて、(ii)不純物配置のエントロピーと(iii)格子振動モードの変化が考えられる。(i)+(ii)および(i)+(iii)はこれまで通常の第一原理計算を使った解析でもよく研究されているが、(ii)と(iii)を同時に考慮するのは難しい。そこで我々はこれらを同時に考慮した自由エネルギーを定

式化し、 HfO_2 に対する Si 置換の場合に適用した。Si の置換量は 6.25% である。図 1 は tetragonal 構造と monoclinic 構造のそれぞれで計算した自由エネルギーの差をとったものである。Si を 6.25% 置換した場合、0K では monoclinic が安定だが、室温程度まで昇温すると tetragonal 構造が安定化する。この結果は、ターゲットの温度(室温)において、高誘電率な tetragonal 構造を実現させるための重要な示唆を与え、また、基本的に 0K の系を対象にしている第一原理計算のみでは得られない帰結である。

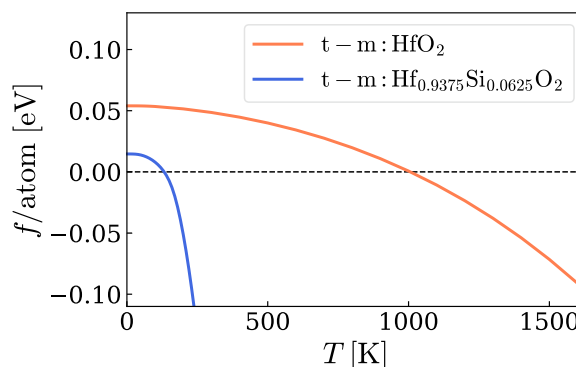


図 4: Tetragonal 構造と monoclinic 構造のそれぞれで計算した自由エネルギーの差を温度に対してプロットしたもの。正值は monoclinic、負値は tetragonal が安定であることを意味する。自由エネルギーには不純物配置と格子振動の自由度が考慮されている。

[5] SARS-CoV-2 に対するドラッグディスカバリー (Hengphasatporn、重田)

Since the crystal structure of SARS-CoV-2 main protease in complex with baicalein is available in the protein Data Bank, the antiviral activity inhibition of halogenated compound has been reported. This study would like to evaluate the inhibitory effect against SARS-CoV-2. The brominated baicalein screened from the FMO-based technique has been proposed as a promising antiviral that can inhibit 3CL pro. Significant interaction stabilized this compound in the binding site is the halogen-hydrogen interaction disclosed by FMO-RIMP2/PCM and the single-point calculation at the M06-2X/def2TZVPP/PCM level, which could describe the enzymatic reaction, catalytic rate constant, and crucial residues in a more accurate way. Besides, brominated baicalein did not demonstrate significant toxicity in either in vitro or in vivo studies. These results suggested that the brominated baicalein could be further developed into novel SARS-CoV-2 protease inhibitors.

We explored using the fluorescent probe 8-anilino-naphthalene-1-sulfonate (ANS) as an alternative assay for inhibitor identification. Fluorescence enhancement upon binding of ANS to 3CLPro was observed, and this interaction was competitive with a peptide substrate. The utility of ANS-based competitive binding assay to identify 3CLPro inhibitors was demonstrated with the flavonoid natural products baicalein and rutin. The molecular nature of ANS and rutin interaction with 3CLPro was explored with molecular modeling. Our results suggested that ANS could be employed in a competitive binding assay to facilitate the identification of novel SARS-CoV-2 antiviral compounds.

The use of chemical-tagged also can elucidate the possible target by tracking the location of cellular fluorescent. The anti-dengue activity of Apigenin has been reported, but the compound's target is unknown. Thus, this active compound is tagged by alkyne that will emit the fluorescent when this

compound binding to the target protein. However, according to the cellular fluorescent study, many proteins are located in the same area. Therefore, the computational target identification using molecular docking and simulation elucidated the possible target of Apigenin that could be the viral protein and also cellular targets.

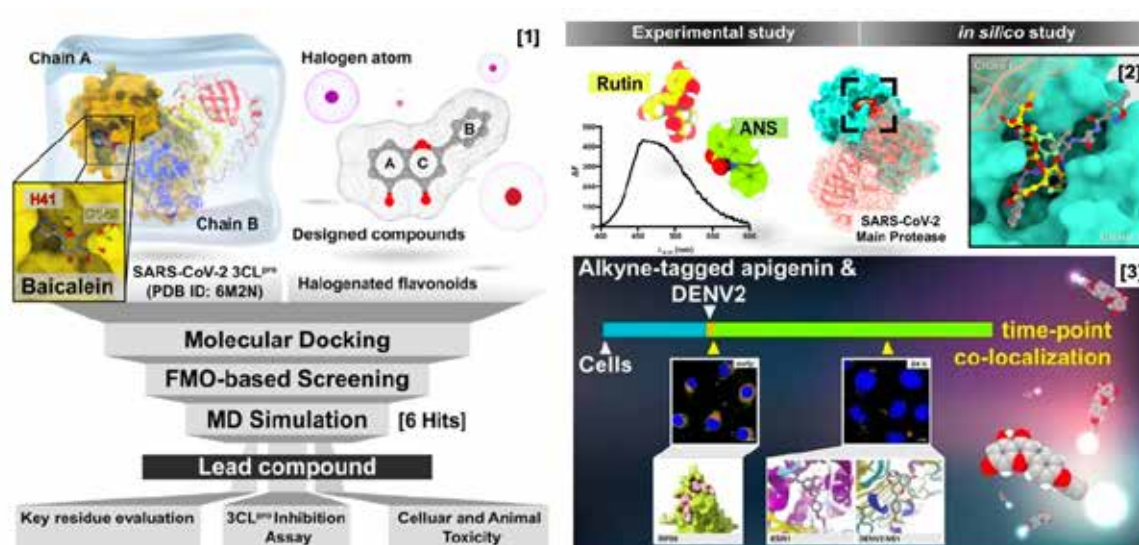


図5 薬剤スクリーニングのプロトコル、SARS-CoV-2 メインプロテアーゼに対する実験・計算研究結果、および、デング熱関連酵素に関する実験・計算結果

[6] 分子動力学計算によるメタロチオネインの構造多様性解析（森田、重田、原田）

金属結合タンパク質であるメタロチオネイン (MT) は(1)金属の貯蔵、(2)有害金属の解毒、(3)抗酸化作用にはたらく。本研究では分子動力学計算 (MD) を用いて異なる環境における MT の多様な構造をサンプリングした。得られた構造群を階層的クラスタリングによって分類することで主要な構造を取得した。まず、亜鉛イオンを豊富に含む条件では MT は NMR 構造に類似した球状の構造を取った。NMR 構造と異なる点としては、複数の短い α ヘリックスを形成した点である。NMR 構造では 3 個の金属イオンを配位しているが、MD における金属の結合数は平均で 1.55 個であった。MT は 9 個のシステイン残基を持つが、そのうち 2 番目、3 番目のシステインによく結合が見られた。次に、亜鉛イオンを含まない条件では伸展した β シート構造が主要に見られた。この構造は実験的に報告されておらず新規の構造であり、金属イオンに対する応答性に関わることが予想される。また、亜鉛イオンの代わりにナトリウムイオンを豊富に含む条件では同様に伸展した β シート構造を取った。このことから塩濃度による影響ではなく金属イオンが存在することが重要であると考えられる。また、亜鉛イオンによく結合したシステインをチオール基 (SH 基) とするだけで球状の構造をとった。この結果からこれらのシステインがキャップされることが構造形成に重要であることが示唆され

る。今後の展開としてはよりサイズの大きい柔軟なタンパク質についても構造計算に取り組むことが期待される。

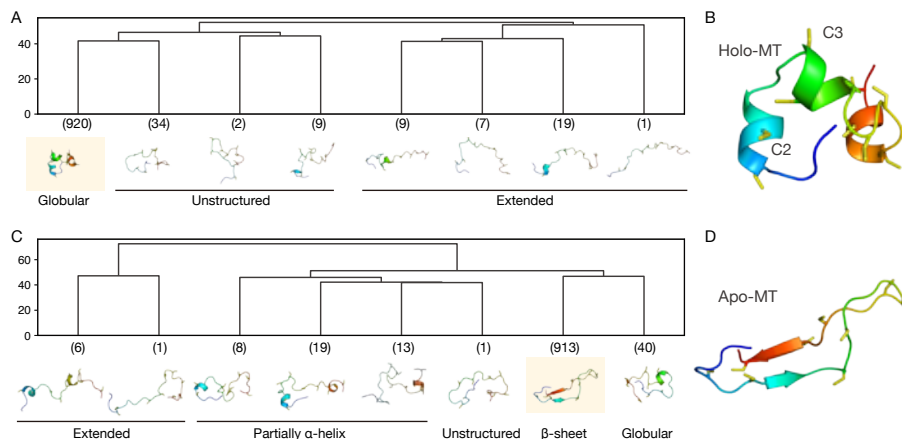


図 6 MD 計算によって得られたメタロチオネインの構造クラスタリング (A(ホロ体), C(アポ体)) および代表構造 (B(ホロ体), D(アポ体))

[7] 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、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。

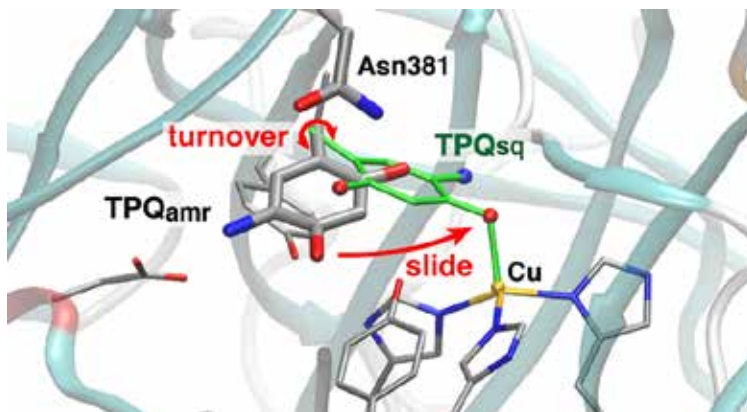


図 7. CAO のセミキノンラジカル生成における大きな TPQsq の構造変化

[8] 星間空間におけるアミノ酸のホモキラリテー起源の理論解明（堀、庄司、重田）

生体を構成するキラルなアミノ酸は、星間空間で生成される可能性が十分にあるが未だ直接観測されるに至っていない。星間空間における希薄な空間での分子検出は極めて難しいと考えられるが、はやぶさ2のサンプルリターンのように、隕石を直接採取して精密地上分析ができる時代が到来している。星間空間でのアミノ酸のホモキラリテー化が成されれば、生命誕生時のL体アミノ酸の起源となる可能性がある。アミノ酸のホモキラリテー起源を分子物性の観点から紐解くことを試みた。Minimum Energy Principleによれば、異性体間の相対安定性を評価することで分子の安定性を定量化することができる。本法則を用いることで、アラニン及び全てのアラニン前駆体の安定性を評価した。その結果、アミノニトリル前駆体（2-アミノプロパンニトリル）が最安定種であることを第一原理計算により示すことができた。今度は光吸収特性についての高精度計算で評価し、論文化を進める。

4. 教育

＜卒業研究発表＞

（物理学類）

1. 佐藤綾香、「高電位鉄硫黄タンパク質の活性中心の構造と電子状態についての理論的解析」
2. ハツ井俊希、「機械学習ポテンシャルの生成とその応用」

＜修士修了研究発表＞

（物理学専攻）

1. 高岡健太、「分子動力学法を用いた 環状ペプチドの膜透過過程における 溶媒和自由エネルギーの評価」
2. 吉岡耕作、「計算を用いた Protein Arginine Deiminase 4 選択的阻害剤の結合の解析」

（生物学専攻）

1. 曾田勇斗、「天然変性タンパク質の配列機能相関を記述する新規計算手法」
2. 保田拓範、「タンパク質の立体構造を効率的に探索する分子シミュレーション手法の開発」

＜博士修了研究発表＞

1. 高橋輝行、「Computational studies of effects of surface charge on biomembrane and membrane permeability of molecules」

＜集中講義＞

1. 重田育照、「生物物理学」、8th Sep. 2021、秋田大学大学院工学研究科.

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 原田隆平、令和3年度 科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞
2. 原田隆平、令和3年度 筑波大学 若手教員特別奨励賞
3. 森田陸離、新学術領域研究「生命金属科学」領域会議 第4回地方巡業（東京）若手優秀研究発表賞、2021年7月3日
4. 庄司光男、量子生命科学会第3回大会講演賞、「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」、2021年9月16日

外部資金

（研究代表）

1. 新学術領域研究「生命金属科学」公募研究、重田育照、「生命金属動体解明のための量子生体エネルギー論」（R02-R03）
2. LG Japan との共同研究、重田育照（研究代表）、原嶋庸介（研究分担）（R03-R04）
3. 基盤研究(C)、「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」原田隆平（代表）、(R03-R05)
4. 新学術領域研究「光合成分子機構の学理解明と時空間制御による革新的光一物質変換系の創製」公募研究、庄司光男、「光化学系II酸素発生中心における再活性化機構についての理論的解明」（R02-R03）
5. さきがけ（日本学術振興機構）庄司光男、「生体内量子多体系における特異的化学反応の機構解明」（H31-R03）
6. 若手研究、堀 優太、「理論計算に基づく酸塩基複合体中のプロトン伝導機構の解明」（H31-R03）
7. 物質・デバイス領域共同研究拠点/基盤共同研究課題、堀優太、「プロトン移動を伴う機能性材料開発のための電子状態解析」（R03）、11万円
8. 公益財団法人マツダ財団、第36回マツダ研究助成、堀 優太（代表）、「無水プロトン伝導材料設計に向けた計算化学による機能解析」（R02-R03）
9. 学術変革領域研究(A)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」（R03-R04）
10. 新学術領域研究（研究領域提案型）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」（R03-R04）
11. 群馬大学生体調節研究所「内分泌・代謝学共同研究拠点」共同研究公募、森田陸離（R03）

(分担研究)

1. CREST「自在配列」、重田育照（研究分担者）「3D ドメインスワッピングを利用したタンパク質の自在配列と機能化」 廣田俊（研究代表者）、（R02-R07）
2. 光・量子飛躍フラッグシッププログラム（Q-LEAP）、重田育照（研究分担者）「量子生命技術の創製と医学・生命科学の革新」、（研究代表者）馬場嘉信、（R02-R12）
3. AMED「難治療性実用化事業」、重田育照（研究分担者）「チトクロム C オキシダーゼを標的としたミトコンドリア病の新規治療薬開発」、（研究代表者）新谷泰範、（R03-R05）
4. 新学術領域研究(研究領域提案型)「高速分子動画」、庄司光男（研究分担者）、「時分割実験のための多様な反応誘起システムの開発」南後 恵理子（研究代表者）（R01-R05）
5. 東京エレクトロンとの共同研究、重田育照（研究分担者）、櫻井鉄也（研究代表者）（R02-R04（予定））

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. K. Hengphasatporn, P. Wilasluck, P. Deetanya, K. Wangkanont, W. Chavasiri, P. Visitchanakun, A. Leelahavanichkul, W. Paunrat, S. Boonyasuppayakorn, T. Rungrotmongkol, S. Hannongbua, Y. Shigeta, “Halogenated baicalein as a promising antiviral agent toward SARS-CoV-2 main protease”, *Journal of Chemical Information and Modeling*, 62(6), 1498–1509 (2022). DOI: 10.1021/acs.jcim.1c01304, March 4, 2022, IF: 4.956
2. H. Aida, Y. Shigeta, R. Harada, “Ligand-binding Path Sampling Based on Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics: Id-PaCS-MD”, *Materials* 15, 1490 (16 pages) (2022). DOI: 10.3390/ma15041490, 2022 Feb 17, IF: 3.623
3. Z. Li, Y. Yang, T. Xu, Y. Shigeta, M. Paterson, H. Fruchtl, T. van Mourik, S. Kirk, S. Jenkins, “Next Generation QTAIM for the Design of Emitters Exhibiting Thermally-Activated Delayed Fluorescence (TADF) with Laser Irradiation”, *Journal of Computational Chemistry*, 40(3), 206-214 (2022). DOI:10.1002/jcc.26783, 2022 Jan 30, IF: 3.376
4. T. Aoyagi, R. Yoshino, Y. Mitsuta, R. Morita, R. Harada, Y. Shigeta*, ”Integrated in silico studies on the role of nicotinamide adenine dinucleotide (NADH) binding in activating C-terminal binding protein 2 (CtBP2)”, *Chemistry Letters*, 51(1), 1-4 (2022). DOI:10.1246/cl.210548, 2022 Jan 1, IF: 1.291

5. T. Yasuda, R. Morita, Y. Shigeta, R. Harada, “Histone H3 Inhibits Ubiquitin-Ubiquitin Intermolecular Interactions to Enhance Binding for DNA Methyl Transferase 1”, *Journal of Molecular Biology*, 434(2), 167371 (2022). DOI:10.1016/j.jmb.2021.167371, 2022 Jan 30, IF: 5.469
6. S. Ashida, R. Morita, Y. Shigeta, R. Harada, “Phosphorylation in the Accessory Domain of Yeast Histone Chaperone Exposes the Nuclear Export Sequence”, *Proteins* 90, 317-321 (2022). DOI: 10.22541/au.161550022.24032527/v1, February 2022, IF: 3.123
7. R. Fujiki, T. Matsui, Y. Shigeta, H. Nakano, N. Yoshida, “Recent developments of computational methods for pKa pre-diction based on electronic structure theory with solvation models”, *Multidisciplinary Scientific Journal* 4(4), 849-864 (2021). DOI:10.3390/j4040058, 10 December 2021, IF:Not available
8. V. Sladek, R. Harada, Y. Shigeta, “Residue Folding Degree - Relationship to Secondary Structure Categories and use as Collective Variable”, *International Journal of Molecular Sciences*, 22(23), 13042 (2021). DOI:10.3390/ijms222313042, 2 December 2021, IF: 5.924
9. H. Shimoyama, Y. Shigeta*, “A Free Energy Landscape Analysis of Calmodulin Obtained from an NMR-data Utilized Multi-scale Divide-and-conquer Molecular Dynamics Simulation”, *Life*, 11(11), 1241 (2021). DOI:10.3390/ life11111241, 16 November 2021, IF: 3.817
10. C. Xie, H. Shimoyama, M. Yamanaka, S. Nagao, H. Komori, N. Shibata, Y. Higuchi, Y. Shigeta*, S. Hirota*, “Structural and theoretical study on designing myoglobin to a domain-swapped dimer with an increased hydrogen bonding network at the hinge region”, *RSC Advances*, 11, 37604-37611 (2021). DOI:10.1039/d1ra06888a, 23 Nov 2021, IF: 3.119
11. K. Henghasatporn, B. Kaewmalai, S. Jansongsaeng, V.N. Badavath, T. Saelee, T. Chokmahasarn, T. Khotavivattana, Y. Shigeta, T. Rungrotmongkol, S. Boonyasuppayakorn, “Alkyne-tagged apigenin, a chemical tool to navigate potential targets of flavonoid anti-dengue leads”, *Molecules*, 26(22), 6967 (2021). DOI:10.3390/molecules26226967, 18 November 2021, IF: 4.412
12. R. Morita, Y. Shigeta, R. Harada, “Structural Variations of Metallothionein with or without Zinc Ions Elucidated by All-Atom Molecular Dynamics Simulations”, *Journal of Physical Chemistry B*, 125(46), 12712–12717 (2021). DOI:10.1021/acs.jpcb.1c07928, November 11, 2021, IF: 2.958
13. K. Yanagi, Y. Mitsuta, K. Takaoka, T. Takahashi, K. Hengphasatporn, R. Harada, Y. Shigeta*, “Solubility and Membrane Permeability of Cyclic Dipeptides Approximately Estimated by Quantum Chemistry and Molecular Dynamics Simulations”, *Chemistry Letters*, 50(12), 1964-1967 (2021). DOI: 10.1246/cl.210488, Dec 1, 2021, IF: 1.291

14. S. Dekura, Y. Sunairi, K. Okamoto, F. Takeiri, G. Kobayashi, Y. Hori, Y. Shigeta, H. Mori, "Effects of mechanical grinding on the phase behavior and anhydrous proton conductivity of imidazolium hydrogen succinate single crystals", *Solid State Ionics*, 372, 115775 (2021). DOI: 10.1016/j.ssi.2021.115775, 19 October 2021, IF: 3.785
15. R. Morita, Y. Shigeta, R. Harada, "Post-string Method: Estimation of Minimal Free Energy Path", *Chemical Physics Letters*, 782, 139003(2021). DOI: 10.1016/j.cplett.2021.139003, 6 September 2021, IF: 2.328
16. H. Aida, R. Morita, Y. Shigeta, R. Harada, "Different Ligand-Binding Abilities Between Heterodimer of Medaka Fish Taste Receptor Type 1 Essential for Discriminating Taste Substances", *Physical Chemistry Chemical Physics* 23, 20398-20405 (2021). DOI: 10.1039/D1CP02876F, 20 Aug 2021, IF: 3.676
17. T. Yasuda, R. Morita, Y. Shigeta, R. Harada, "Independent Non-targeted Parallel Cascade Molecular Dynamics (Ino-PaCS-MD) to Enhance Conformational Sampling of Proteins", *Journal of Chemical Theory and Computation*, 17(9), 5933-5943 (2021). DOI: 10.1021/acs.jctc.1c00558, August 19, 2021, IF: 6.006
18. Z. Li, X. Nie, T. Xu, Y. Yang, H. Früchtl, T. van Mourik, S. R. Kirk, T. R. Paterson, Y. Shigeta, S. Jenkins, "Control of Chirality, Bond flexing and Anharmonicity in an Electric Field", *International Journal of Quantum Chemistry* 2021, e26793 (2021). DOI:10.22541/au.162400988.85572499/v1, 15 Nov 2021, IF: 2.444
19. K. Mishima, M. Shoji, Y. Umena, M. Boero, Y. Shigeta, "Estimation of the relative contributions to the electronic energy transfer rates based on Förster theory: The case of C-phycocyanin chromophores", *Biophysics and Physicobiology*, 18, 196-214 (2021). DOI:10.2142/biophysico.bppb-v18.021, July 30, 2021, IF: Not available
20. Y. Saeki, M. Kayanuma, A. Nitta, Y. Shigeta, I. Kawamura, T. Nakagawa, T. Ubukata, Y. Yokoyama, "On-Demand Chirality Transfer of Human Serum Albumin to Bis(thiophen-2yl) hexafluorocyclopentenes through Their Photochromic Ring Closure", *Journal of Organic Chemistry (supplemental cover)*, 86(18), 12549–12558 (2021). DOI:10.1021/acs.joc.1c00849, July 29, 2021, IF: 4.354
21. T. Xu, X. Nie, Y. Yang, H. Früchtl, T. van Mourik, S. R. Kirk, Y. Shigeta, S. Jenkins, "Chirality without Stereoisomers: Insight from the Helical Response of Bond Electrons", *ChemPhysChem* 22(19), 1989-1995(2021). DOI:10.1002/cphc.202100397, October 5, 2021, IF: 3.102
22. H. Yamagishi, M. Tsunoda, K. Iwai, K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, H. Sato, Y. Yamamoto, "Solvophobicity-directed Assembly into Microporous Molecular Crystal", *Communications*

- Chemistry, 4, Article number: 122 (2021). DOI:10.1038/s42004-021-00561-8 , 20 August 2021, IF: 6.581
23. T. Takahashi, T. Matsui, K. Hengphasatporn, Y. Shigeta*, “A Practical Prediction of LogPo/w through Semiempirical Electronic Structure Calculations with Dielectric Continuum Model”, Bulletin of Chemical Society of Japan, 94(7), 1807-1814 (2021). DOI: 10.1246/bcsj.20210035, July 1, 2021, IF: 5.488
 24. V. Sladek, Y. Yamamoto, R. Harada, M. Shoji, Y. Shigeta, “pyProGA - A PyMOL plugin for protein residue network analysis”, PlosOne, 16(7), e0255167 (17 pages) (2021). DOI: 10.1371/journal.pone.0255167, July 30, 2021, IF: 3.240
 25. T. Ikawa, Y. Yamamoto, A. Heguri, Y. Fukumoto, T. Murakami, A. Takagi, H. Aoyama, Y. Shigeta, H. Tokiwa, S. Akai, “London-Dispersion-Controlled Regioselective (2+2) Cyclodimerizations of Benzyne: Application to the Synthesis of Helical Biphenylenes”, Journal of the American Chemical Society (cover), 143(29), 10853-10859 (2021). DOI:10.1021/jacs.1c05434, July 1, 2021, IF: 15.419
 26. Y. Sasano, H. Tanaka, Y. Haketa, Y. Kobayashi, Y. Ishibashi, T. Morimoto, R. Sato, Y. Shigeta, N. Yasuda, T. Asahi, H. Maeda, “Ion-Pairing π -Electronic Systems: Ordered Arrangement and Non-covalent Interactions of Negatively Charged Porphyrins”, Chemical Science (inside cover), 12, 9645-9657 (2021). DOI:10.1039/D1SC02260A, 14 Jun 2021, IF: 9.825
 27. P. Deetanya, K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, T. Rungrotmongkol, K. Wangkanont, “Interaction of 8-Anilinonaphthalene-1-Sulfonate with SARS-CoV-2 Main Protease and Its Application as a Fluorescent Probe for Inhibitor Identification”, Computational and Structural Biotechnology Journal, 19, 3364-3371 (2021). DOI: 10.1016/j.csbj.2021.05.053, 11 June 2021, IF: 7.271
 28. Y. Hori, Y. Sunairi, S. Dekura, T. Ida, M. Mizuno, H. Mori, Y. Shigeta, “A Proton Conduction Mechanism for Anhydrous Imidazolium Hydrogen Succinate: Relationship between Proton Conduction and Local structures and Molecular Dynamics”, The Journal of Physical Chemistry Letters (inside cover) 12(22), 5390-5394 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpclett.1c01280, June 3, 2021, IF: 6.475
 29. R. Morita, Y. Shigeta, R. Harada, "Comprehensive Predictions of the Secondary Structures for Comparative Analysis in Different Species", Journal of Structural Biology, 213(2), 1077355 (2021). DOI:10.1016/j.jsb.2021.107735, 28 April 2021, IF: 2.867
 30. A. Kimura, H. Kitoh-Nishioka, Y. Shigeta, S. Ito, "Comparison of Light Harvesting Mechanisms of Photosynthetic Type-I Reaction Centers of Heliobacteria with Photosystem I.

- Pigments Site Energy Distribution and Exciton States", *Journal of Physical Chemistry B*, 125(15), 3727-3738 (2021). DOI:0.1021/acs.jpcc.0c09400, April 9, 2021, IF: 2.958
31. T. Fukazawa, H. Akai, Y. Harashima, T. Miyake, "First-principles investigation of Nd(Fe,M) 12 (M=K--Br) and Nd(Fe,Cr,Co,Ni,Ge,As)12: Possible enhancers of Curie temperature for NdFe12 magnetic compounds", *Acta Mater.* 226, 117597 (2022). March, 2022, IF: 8.203
32. Y. Harashima, T. Mano, K. Slevin, and T. Ohtsuki, "Analysis of Kohn-Sham Eigenfunctions Using a Convolutional Neural Network in Simulations of the Metal-insulator Transition in Doped Semiconductors", *J. Phys. Soc. Jpn.* 90, 094001 (2021). August 18, 2021, IF: 2.480
33. T. Miyake, Y. Harashima, T. Fukazawa, H. Akai, "Understanding and optimization of hard magnetic compounds from first principles", *Sci. Tech. Adv. Mater.* 22, 543 (2021). September 15 2021, IF: 8.090
34. K. Miyagawa, M. Shoji, H. Isobe, T. Kawakami, T. Nakajima, K. Yamaguchi, "DLPNO coupled cluster and hybrid DFT calculations. Proton transfer coupled spin transitions of the CaMn4Ox cluster in OEC of PSII", *Chemical Physics Letter* 790, 139357 (2022). DOI: 10.1016/j.cplett.2022.139357, IF: 2.328
35. K. Miyagawa, M. Shoji, H. Isobe, T. Kawakami, T. Nakajima, K. Yamaguchi, "Relative energies among S3 intermediates in the photosystem II revealed by DLPNO coupled cluster and hybrid DFT calculations. Possible pathways of water insertion in the S2 to S3 transition", *Chemical Physics Letter* 793, 139439 (2022). DOI: 10.1016/j.cplett.2022.139439, IF: 2.328

B) 査読無し論文

なし

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Y. Shigeta, "Computational Studies on Interaction between Viral Proteins and Small Molecules/Protein", 10th International Conference on Chemical and Biological Sciences, Tokyo University of Science, Feb. 28th-March 2nd (2022).
2. Y. Shigeta, "Computational Studies on Structure-Function of Metalloenzymes", The Fourth Asian Workshop for Experiment and Theory in Quantum Beam Molecular Science Sakura Science, Ibaraki University (Online 開催), November 11th 2021, Ibaraki Japan.
3. Y. Shigeta, "Theoretical Studies on Membrane Permeability", 24th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE24), Kasetsart University (Online 開催), April 28-30 2021, Thailand.

4. Y. Harashima, "First principles study on dislocation and impurity complexes in GaN", The 2nd International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation, 2022.01.20.

B) 一般講演

1. M. Shoji, QM/MM study of the large conformational change of quinone cofactor during the catalytic cycle of bacterial copper amine oxidases, 2022 LBNL/CSA - Tsukuba/CCS Collaboration Meeting, online (oral), 2022/3/24.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 重田育照, “計算化学を用いた生体機能解析と創薬への展開”, CAMM フォーラム, November 5th 2021, Online 開催.
2. 重田育照, “計算化学と実験の協働による金属タンパク質の構造・機能解析”, October 26th-28th 2021, CBI2021 第2回量子構造生命科学研究所シンポジウム, 第25回 FMO 研究会『金属タンパク質解析における構造生物学と量子化学計算の融合』, Online 開催.
3. 重田育照, “タンパク質の構造機能-相関に対する計算科学的研究～応用篇～”, 生命金属科学 夏の合宿, September 4th-6th 2021, ルスツリゾート.
4. 重田育照, “統合的インシリコシミュレーションによる薬物-タンパク質動体解析”, 計算を中心としたバイオ分野の筑波大-KEK 連携セミナー, August 6th 2021, Online 開催.
5. 重田育照, “第一原理 QM/MM 計算による電子・プロトン移動解析”, 第10回高速分子動画オンラインセミナー Jun. 22nd 2021, Online 開催.
6. 重田育照, “計算科学に基づく金属タンパク質動態の理論解析”, 第21回日本蛋白質科学会, シンポジウム New frontier in biometal science, Jun. 16th-18th 2021, Online 開催 (招待講演)
7. 重田育照, "Covid-19 関連タンパク質に対する統合的インシリコリポジショニング", 新学術領域「高速分子動画」Web セミナー 「構造生物学・化学・計算科学を融合させたウイルス・パンデミックに対する取り組み」, Apr. 2nd 2021, Online 開催.
8. 原田隆平, ペプチドの膜透過性を評価する分子シミュレーション技術の創出, 原田隆平, CBI 学会 (情報計算化学生物学会) 2021 年度大会 フォーカストセッション「ペプチド創薬を指向した計算科学の最前線」 2021 年 10 月

9. 堀優太、堀優太、出倉駿、井田朋智、水野元博、森初果、重田育照、“量子化学計算による有機結晶中のプロトン伝導機構の理論解析”、第 15 回物性科学領域横断研究会(領域合同研究会)、オンライン、2021 年 11 月

B) その他の発表

1. 堀優太、出倉駿、井田朋智、水野元博、森初果、重田育照、“量子化学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機構解析”、日本化学会第 102 春季年会(2022)、オンライン、2022 年 3 月
2. 中西匠、堀優太、塩田淑仁、吉澤一成、佐藤治、“プロトン結合スピン転移錯体における熱誘起三状態変換”、第 15 回分子科学討論会、オンライン、2021 年 9 月
3. 堀優太、出倉駿、井田朋智、水野元博、森初果、重田育照、“コハク酸イミダゾリウム結晶中のプロトン伝導機構の理論的解析”、第 15 回分子科学討論会、オンライン、2021 年 9 月
4. 分子動力学計算で解明するメタロチオネインの構造多様性、森田陸離、重田育照、原田隆平、新学術領域研究「生命金属科学」領域会議 第 4 回地方巡業(東京) 2021 年 7 月
5. 庄司光男、村川武志、重田育照、林秀行、岡島俊英、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についての理論的解明、第 23 回理論化学討論会、online (poster), 2021/5/14.
6. 庄司光男、村川武志、重田育照、林秀行、岡島俊英、銅含有アミン酸化酵素のプロトン化状態についての QM/MM 解析、第 47 回生体分子科学討論会、online (poster), 2021/6/4.
7. 庄司光男、村川武志、重田育照、林秀行、岡島俊英、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、量子生命科学会第 3 回大会、online (口頭)、2021/9/16 (講演賞受賞).
8. 庄司光男、三嶋謙二、宮川晃一、堀優太、重田育照、GLAS 法による分子構造及び化学反応経路の探索、日本コンピュータ化学会 2021 年秋季年会、online (ポスター), 2021/11/2.
9. 庄司光男、村川武志、重田育照、林秀行、岡島俊英、銅アミン酸化酵素におけるドパキノン補酵素のコンフォメーション制御機構、量子生命科学先端フォーラム 2021 冬の研究会、online (ポスター), 2021/12/17.

(4) 著書、解説記事等

1. 重田育照, “2021 秋季年会を終えて”, Journal of Computer Chemistry Japan, 20(4) A51 (2022).
2. 宮川晃一, “分子動力学計算によるグアニンバルジ DNA に結合する小分子に関する理論的研究”, アンサンブル, 23, 143-147 (2021). DOI: 10.11436/mssj.23.143
3. K. Yamaguchi, K. Miyagawa, H. Isobe, M. Shoji, T. Kawakami, S. Yamanaka, “Isolobal and isospin analogy between organic and inorganic open-shell molecules—Application to oxygenation reactions by active oxygen and oxy-radicals and water oxidation in the native and artificial photosynthesis” pp. 425-564, in Advances in Quantum Chemistry, Volume 84, Ed. E.J. Brändas, Elsevier, (2021). DOI: 10.1016/bs.aiq.2021.10.001. 8 December 2021.
4. K. Yamaguchi, S. Yamanaka, H. Isobe, M. Shoji, T. Kawakami, K. Miyagawa, “Mechanism of Water Oxidation in Photosynthesis Elucidated by Interplay Between Experiment and Theory” pp. 39-80, in Photosynthesis: Molecular Approaches to Solar Energy Conversion. Advances in Photosynthesis and Respiration (Including Bioenergy and Related Processes), vol 47, Ed. J.-R. Shen, K. Satoh, S.I. Allakhverdiev. Springer, Cham. (2021). DOI: 10.1007/978-3-030-67407-6_2. September 2021.

7. 異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等

異分野間連携（センター内外）

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

産学官連携

1. 量子科学技術開発機構（QST）との共同研究
2. 東京エレクトロンとの共同研究
3. LG Japan との共同研究
4. 第一三共ノバーレ R&D 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

該当なし

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、総合智教育推進委員会委員、学群共通科目部会長、教育戦略会議オブザーバー、

学群教育会議オブザーバー、計算科学研究センター運営委員会委員、人事委員会委員、生命科学研究部門長、広報戦略室室長、拡大物理学専攻運営委員会委員

原田隆平

筑波大学先導的研究者体験プログラム (ARE) 運営委員
筑波大学大学院 理工情報生命学術院 生命地球科学研究群 生物学学位プログラム
早期修了委員
筑波大学 計算科学研究センター 一般利用委員会

10. 社会貢献・国際貢献

重田育照

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-)
理論化学会幹事 (2021-)
分子科学会プログラム委員 (2016-)
日本コンピュータ化学会役員 (2021-)
量子生命科学会評議員 (2021-)
NISTEP 専門調査員 (2020-)
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-)
日本コンピュータ化学会 2021 年度 秋季年会 実行委員長

原田隆平

東京大学 物性研究所附属物質設計評価施設 スーパーコンピュータ共同利用課題審査委員会委員
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
第 10 回 茨城県高校生科学研究発表会 審査員
日本コンピュータ化学会 2021 年度 秋季年会 実行委員
American Chemical Society Journal of Chemical Information and Modeling (ACS, JCIM)
Editorial Advisory Board

庄司光男

日本コンピュータ化学会 2021 年度 秋季年会 実行委員
理論化学会 学会誌「フロンティア」編集委員 (2020-)

堀優太

日本コンピュータ化学会 2021 年度 秋季年会 実行委員
日本生物物理学会 分野別専門委員 (2021-)

原嶋庸介

日本コンピュータ化学会 2021 年度 秋季年会 実行委員
ISWGPDs 2022 Program Committee

11. その他

1. 共同プレスリリース(筑波大学、金沢大学)、「有機固体電解質中のプロトン伝導メカニズムを解明～高効率な燃料電池の設計指針に～」 (2021 年 6 月 8 日)
2. 日本生物物理学会、「複雑な生体内の酵素触媒反応を分子レベルで理解する」『C-18:

酵素機能（生物物理のテーマ）』（2022 年 3 月）

<https://www.biophys.jp/highschool/C-18.html>

V-2. 分子進化分野

1. メンバー

教授	稲垣祐司、橋本哲男（共同研究員、生命環境系）
助教	中山卓郎
学生	大学院生 6名（後期課程1名、前期課程在学5名）、学類生 0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った (現在追加実験データを取得中)。また 2021 年度の学際共同利用プログラムでは、340 遺伝子データの系統解析により未記載真核微生物 SRT706 株の系統的位置を検討した。

***Microheliella maris* をふくむ解析による一次植物類の最近縁系統の同定**

系統的所属が不明な真核微生物の 1 つである *Microheliella maris* は Heliozoa 門の一員とみなされていたが、これまでに発表された大規模系統解析ではこの生物がどのような真核生物系統に近縁となるか不明であった。本研究では 319 遺伝子から構成されるアラインメントを系統解析し、*M. maris* が真核生物の主要系統 Cryptista の基部から分岐することを明らかにし、Cryptista に *M. maris* を加えた単系統群を Pancryptista と呼称すること提案した。さらに本解析では一次植物類の単系統性と一次植物類と Pancryptista の姉妹関係が頑健に復元され、CAM クレードと呼称することを提案した。これまで、一次植物の単系統性は分子系統解析により安定に復元されず、大きな議論の的となっていた。一次植物類の単系統性を頑健に復元した本解析と、同じ系統関係を復元できなかった過去の解析とは“何が違っていたのか”を検証した。まず、過去の解析では入っていなかった *M. maris* を含む複数の初期分岐系統 (例えば紅藻類の原始系統である Rhodelphidia) を除いた解析を行ったところ、一次植物類は単系統にならないあるいはなりにくい傾向があることが確認できた。これは *M. maris* や Rhodelphidia が持つ系統シグナルが、一次植物類の単系統性を復元するために重要であることを示している。次に、本来単系統である一次植物類がなぜ単系統を復元されにくかったのか、その要因を解明するために遺伝子数と含まれる生物種が異なる複数のデータセットを作成し解析した。その結果、*M. maris* や Rhodelphidia を含まないアラインメントデータを解析する場合、Cryptista の一系統であるクリプト藻類と紅藻類との姉妹群関係が誤って復元される傾向があり、このクリプト藻遺伝子配列が持つシグナルが、これまでの大規模分子系統解析において一次植物類の単系統の復元を妨げていた可能性が高いことが示唆された。

A

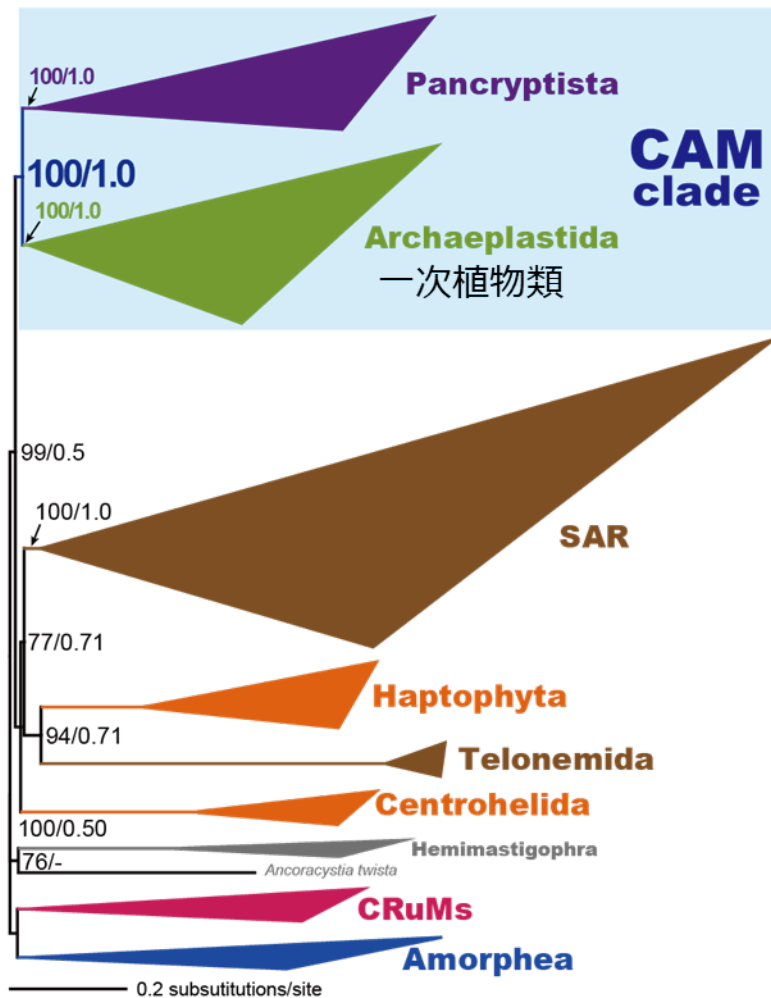
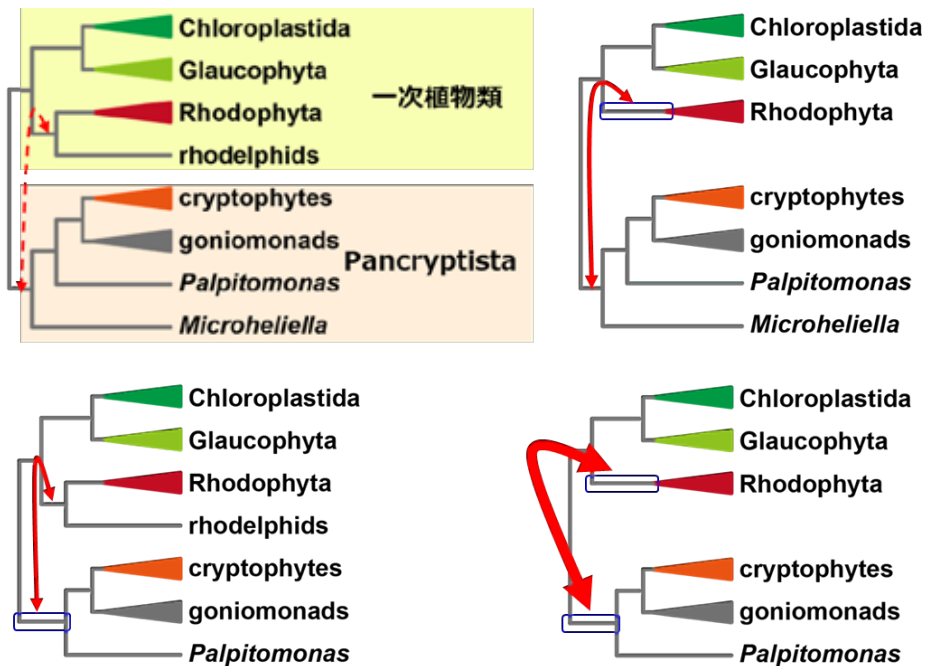


図 1. A 319 遺伝子系統解析により復元された Pancryptista と一次植物類の姉妹群関係。この姉妹群関係 (CAM クレード) は最尤法ブートストラップ値 100% およびベイズ法事後確率 1.0 により支持された。

B Rodelphids および Microheliella が Pancryptista と一次植物類の姉妹群関係に与える影響の模式図。Rhodelphis と Microheliella がふくまれた解析では、一次植物類と Pancryptista が単系統となる (左上)。Rhodelphis あるいは Microheliella を解析から除くと、紅藻類 (Rhodophyta) と Pancryptista が誤って「引き寄せ」あうアーティファクト (赤矢印) が生じる (右上 & 左下)。Rhodelphis と Microheliella を解析から除くと、紅藻類と Pancryptista 間のアーティファクト (太い赤矢印) が増幅される (右下)。

B



340 遺伝子データに基づく未記載真核微生物 SRT706 株の系統的位置の検討

我々のグループは大規模系統解析とは独立に、我々は系統的に広範な真核生物系統を対象にしたミトコンドリア DNA の複製・修復にかかわる DNA ポリメラーゼ（ミトコンドリア局在 DNAP）の研究を行ってきた（Harada et al. 2020 *Pathogens* 9:257; Harada & Inagaki 2021 *Genome Biol Evol* 13:eval003）。これまでの研究により異なる複数タイプのミトコンドリア局在 DNAP が発見され、真核生物の系統ごとに異なるタイプのミトコンドリア局在 DNAP を使用していることが判明している。また未発表データであるが、ユーグレノゾアを除くディスコバ生物群、アンキロモナス類、マラウイモナス類は、共通してこれまで報告されていないタイプの DNA ポリメラーゼを持ち、それをミトコンドリア DNA の複製・修復に使用していることが判明した（heterotrophic eukaryote-specific mitochondrion-localized DNA polymerase/heMP と仮称）。このデータは、アンキロモナス類、マラウイモナス類およびディスコバ生物群は、heMP をミトコンドリア局在 DNAP として使用する共通祖先から進化したこと、すなわち上記 3 系統はこれまで見過ごされてきた「スーパーグループ」を形成する可能性を示している。

これまで実施してきた大規模系統解析とミトコンドリア局在 DNAP の探索と並行し、我々は未記載真核微生物 SRT706 株の RNA-seq データを取得・解析した。標準的な系統解析マーカーである小サブユニットリボソーム RNA 配列による系統解析では、SRT706 株の系統的位置は確定できなかった（未発表データ）。興味深いことに、SRT706 株 RNA-seq データ中に heMP

A



B

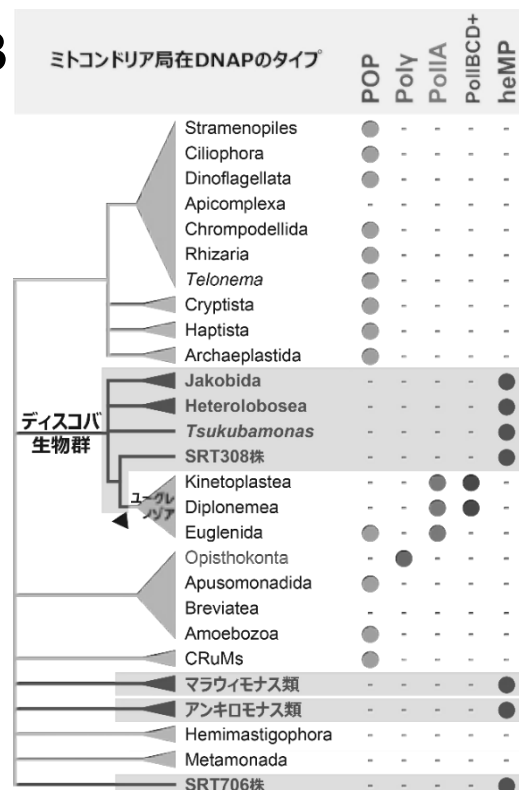


図 2. A 未記載真核微生物 SRT706 株の光学顕微鏡写真。写真提供 白鳥峻志博士（筑波大学）

B 真核生物におけるミトコンドリア局在 DNAP の分布。図の左側に示した系統樹は、主要グループ間の系統関係を模式的に示す。系統樹の右側の丸はミトコンドリア局在 DNAP のタイプを示す。ダッシュは特定のタイプが存在しない／検出されないことを示す。ユーグレノゾアを除くディスコバ生物群、マラウイモナス類、アンキロモナス類に加え、未記載真核微生物 SRT706 株もミトコンドリア局在 DNAP として heMP を使用する。ユーグレノゾアはディスコバ生物群にふくまれるが、heMP とは異なるミトコンドリア局在 DNAP を使用している。これはユーグレノゾアの共通祖先が未記載真核微生物 SRT308 株と分岐後（矢頭でハイライトした部分）、ミトコンドリア局在 DNAP が異なるタイプに置換されたと考えられる。

をコードする転写物を同定したが、既知タイプのミトコンドリア局在 DNAP は検出できなかった。従って、SRT706 株は、アンキロモナス類、マラウィモナス類、ディスコバ生物群のいずれかに近縁となる可能性が高い。そこで、SRT706 株からのデータを追加した 340 遺伝子データを最尤法による系統解析を行い、heMP を保持するアンキロモナス類、マラウィモナス類、ディスコバ生物群のうちいずれと SRT706 株が近縁かを推測した。まだ最終的な解析結果は出ていないが、図 2 に 340 遺伝子データにもとづく最尤系統解析結果を示した。その結果、SRT706 株はマラウィモナス類の基部から分岐し、この系統関係はウルトラファストブートストラップ値 99% で支持された。従って、自然環境にはこれまで見過ごされてきたマラウィモナス類と近縁な SRT706 株をふくむ生物群が存在ことを示唆する。

本解析の結果は M. Eliáš 博士（Ostrava 大学・チェコ共和国）との共同で進めているオルガネラ DNA ポリメラーゼの多様性と進化についての研究の一部であり、全体の研究成果は 2022 年度中に英文投稿論文として投稿することを目指す。

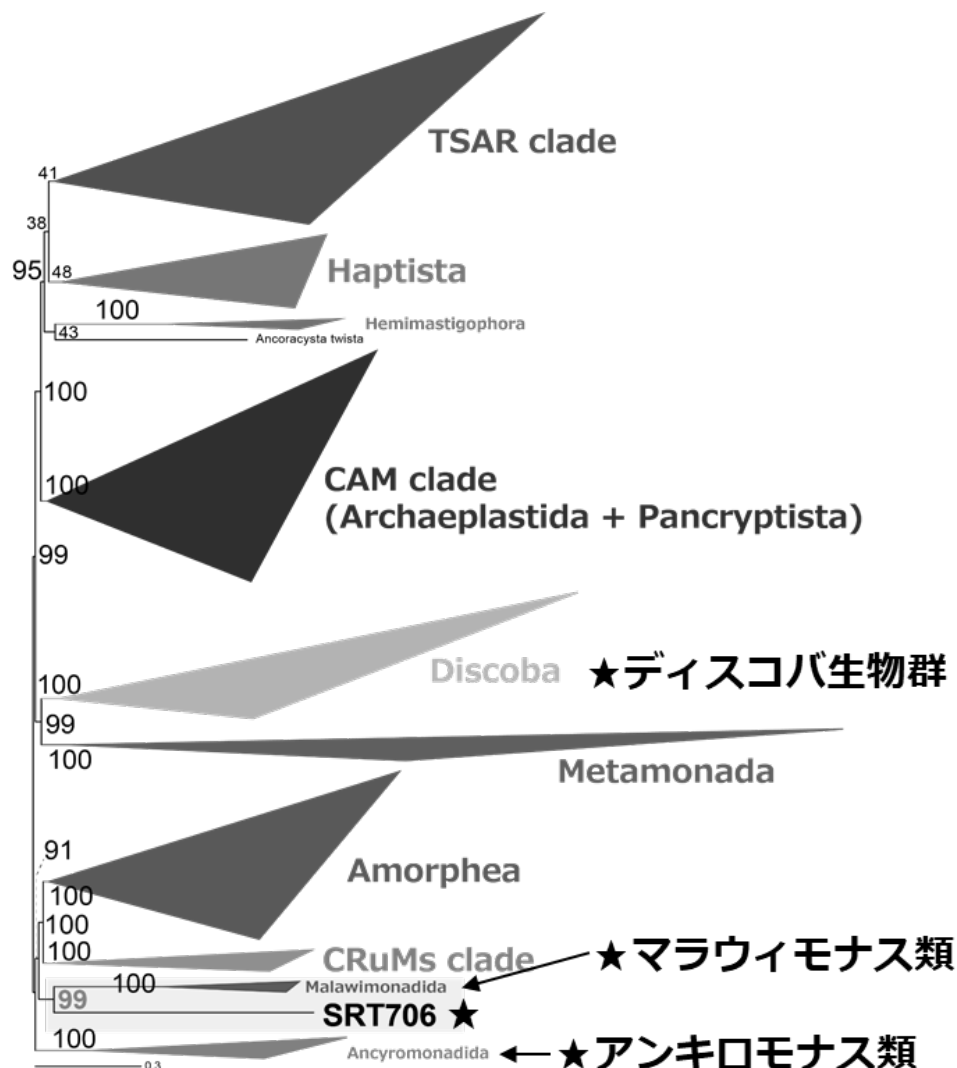


図 3. 340 遺伝子データから推測された未記載真核微生物 SRT706 株の系統的位置。真核生物の主要クレードは三角形で示した。各分岐に示した数値は IQ-TREE プログラムによる ultra-fast ブートストラップ (UFBP) 値である。SRT706 株はマラウィモナス類の基部から分岐し、この関係は UFBP = 99% で支持された。星印でハイライトした系統はミトコンドリア局在 DNAP として heMP を共通して持つ系統である。

[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

我々はこれまで *Dinophysis* 目渦鞭毛藻類に外部共生するシアノバクテリアについての研究を行ってきた (Nakayama et al. 2019 *Proc Nat Acad Sci USA* 116:15973-15978)。その中で海洋渦鞭毛藻 *Ornithocercus magnificus* の共生シアノバクテリア (OmCyn) が、*Synechococcus*/*Prochlorococcus* グループに含まれ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。本報告では *O. magnificus* とは異なる渦鞭毛藻種である *Histioneis depressa* に共生するシアノバクテリアのゲノム解析によって明らかになった知見を報告する。

Histioneis depressa に共生するシアノバクテリア HdCynA のゲノム解析

Histioneis 属渦鞭毛藻は *Ornithocercus* 属と同様に *Dinophysis* 目に分類され、シアノバクテリアを細胞外に共生させる点も共通している。*Histioneis* 属渦鞭毛藻に共生するシアノバクテリアについては顕微鏡観察による形態的な研究は行われていたものの、OmCyn で実施されたような分子データに基づく詳細な研究は行われて来なかった。*Histioneis* 属渦鞭毛藻の共生シアノバクテリアにおいて、*Ornithocercus* 属渦鞭毛藻共生シアノバクテリアと大きく異なる点

は、形態的特徴が著しく異なる 2 つのタイプのシアノバクテリアが一つの渦鞭毛藻細胞に共生することである。そのうちの 1 つのタイプについては、OmCyn に認められない窒素固定能が存在する可能性が示唆されていた (Foster et al. 2006 *J Phycol* 42:453–463)。我々は同タイプの共生シアノバクテリアを海洋サンプル中に発見した *Histioneis depressa* より分離し、高精度なドラフトゲノムを取得することに成功した。

H. depressa のシアノバクテリア共生体 (以下 HdCynA) のゲノムサイズは 5.38 Mbp と推定され、6,064 のタンパク質がコードされていることが予想された。複数のオーソログタンパク質を連結したデータセットを用いた系統解析によって、HdCynA は OmCyn とは全く異なる系統のシアノバクテリアである *Crocospaera* 属に近縁であることが明らかとなった (図 4)。また近縁なシアノバクテリアとの詳細な系統関係について *nifH* 遺伝子を用いて解析を行った

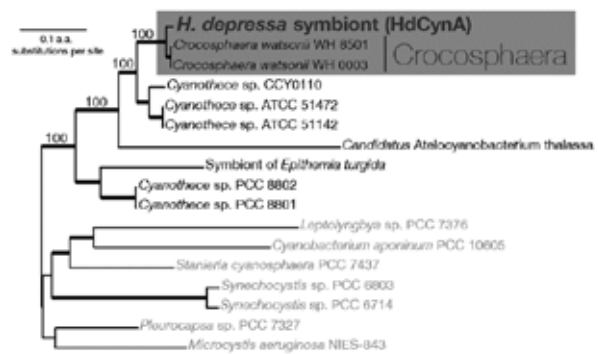


図 4. 33 タンパク質配列データセットから推定された HdCynA の系統的位置 LG+C60+F+G モデルに基づく最尤法によって推定された。各分岐に示すのは non-parametric bootstrap 値. HdCynA は *Crocospaera* 属シアノバクテリアと単系統を形成する。

結果、自由生活性の *Crocospaera watsonii* 種と遺伝的にごく近縁であることも示された（図 5）。この点においても自由生活種と遺伝的に離れている OmCyn と対象的である。

HdCynA のゲノムにコードされるタンパク質を精査したところ、窒素固定を行う酵素であるニトロゲナーゼのサブユニットタンパク質がすべてコードされていることが明らかとなり、HdCynA は *H. depressa* の共生チャンバーの中で窒素固定を行っていることがゲノムレベルで支持された。また、HdCynA のゲノムには OmCyn で見られたようなゲノム縮小は見られなかった。近縁な自由生活性のシアノバクテリアとのタンパク質レパートリーの比較では OmCyn が近縁な *Synechococcus* 属シアノバクテリアと比較してタンパク質レパートリーの減少が確認されるのに対し、HdCynA では近縁な自由生活性シアノバクテリアと同程度のレパートリーを保持していることが明らかとなった。

Tara Oceans プロジェクト（Sunagawa et al. 2015 *Science* 348:1261359）による海洋メタゲノムデータを用いて HdCynA がどのように環境中に存在しているかを解析した。細胞サイズ画分毎のメタゲノムデータから HdCynA のゲノムに一致する配列を検索したところ、確認された HdCynA 類似配列のうち約 90%がシアノバクテリアサイズ（ $<5\mu\text{m}$ ）の画分から検出された。この出現パターンは自由生活性の *Crocospaera* 属シアノバクテリアと類似しており、宿主である *H. depressa* の核コードリボソーム小サブユニット RNA 遺伝子類似配列の類似パターンとは一致しなかった。

以上の結果から HdCynA と *H. depressa* の共生関係について下記の考察が可能である。分子系統解析の結果から HdCynA は自由生活性のシアノバクテリアと遺伝的にごく近縁であり、それらと比較してゲノム縮退などの特徴は見られなかった。これらのことから HdCynA と *H. depressa* の共生関係は *O. magnificus* と OmCyn との共生関係と比較して、比較的最近に成立したものであると推定できる。細胞画分ごとのメタゲノムデータを用いた出現パターン解析では HdCynA は宿主である *H. depressa* と異なる画分に多く出現することが示唆された。これは HdCynA の多くが環境中で自由生活を行っていることを支持する結果である。しかしながら HdCynA が近縁な自由生活性シアノバクテリア種と遺伝的にごく近縁であることを踏まえる

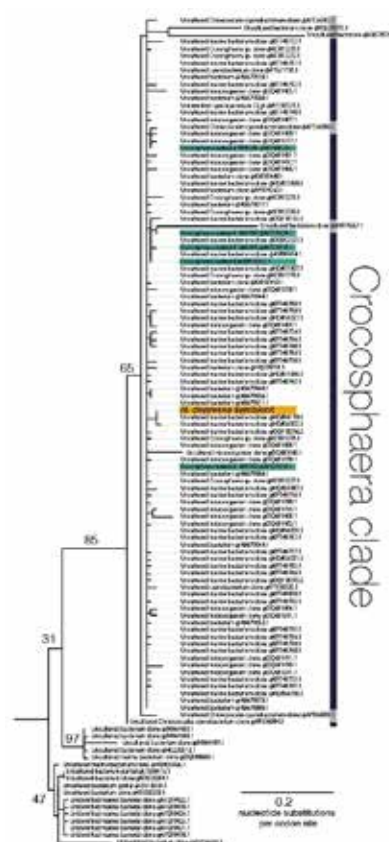


図 5. *nifH* 遺伝子コドンデータセットに基づく HdCynA と自由生活性シアノバクテリアの系統関係。MGK+F3X4+R3 モデルに基づく最尤法によって推定された。各分岐に示すのは non-parametric bootstrap 値。黄色で示される配列が HdCynA、青緑で示される配列は自由生活性と確認されている *Crocospaera* 属シアノバクテリアを示す。

と、HdCynA 以外の自由生活性シアノバクテリア配列を誤検出している可能性も残されているため、この点についてはさらなる解析と慎重な議論が必要である。

さらに本解析によって *Histioneis depressa* と *O. magnificus* には全く別の系統のシアノバクテリアが共生することが明確に示された。この結果は *Dinophysis* 目渦鞭毛藻においてシアノバクテリアとの共生関係の構築が複数生じたことを示している。現在、*Histioneis* 属渦鞭毛藻における HdCynA とは異なるタイプのシアノバクテリアについてゲノム研究を進めており、*Dinophysis* 目渦鞭毛藻とシアノバクテリアとの共生関係の多様性理解がさらに深まるものと期待される。今後 C. de Vargas 博士 (CNRS/ロスコフ海洋研究所・フランス) と協力し、*Tara Oceans* プロジェクト (Sunagawa et al. 2015 *Science* 348:1261359) による海洋メタゲノムデータと参照することにより HdCynA の海洋環境中での分布等を精査し、英文投稿論文の作成を目指す。

色素体ゲノム解析

我々は、これまでに 3 種の渦鞭毛藻、*Lepidodinium chlorophorum*、未記載渦鞭毛藻 2 種 (MRD-151 株および TRD-132 株) の色素体 (葉緑体) ゲノム配列を決定した (Kamikawa et al. 2015 *Genome Biol Evol* 7:1133-1140 ; H27 年度年次報告書 ; H28 年度年次報告書)。また、京都大学・神川龍馬博士を中心に、非光合成化した珪藻の色素体ゲノム解読を進めてきた (Kamikawa et al. 2015 *Phycol Res* 63:19-28; Kamikawa et al. 2015 *Mol Biol Evol* 32:2598-2604; Kamikawa et al. 2017 *Mol Biol Evol* 34:2355-2366)。並行して国立科学博物館・谷藤吾郎博士と共同で、非光合成化したクリプト藻の色素体ゲノムの解読を行った (Tanifuji et al. 2020 *Genome Biol Evol* 12:3926-3937)。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、現在も解析を継続している。

本年度の報告書ではすでに年次報告書では報告済みである渦鞭毛藻 MGD 株 (MRD-151 株) および TGD 株 (TRD-132 株) の色素体ゲノムの解読は完了していた (2015 年、2016 年年次報告書参照)。これらの葉緑体ゲノムについて査読付き英文論文を作成し、*Frontiers in Plant Science* 誌に投稿中である。この論文作成時に判明した新しい知見について報告する。

緑色渦鞭毛藻 MGD および TGD 株の色素体遺伝子転写物に対する RNA エディティング

我々のこれまでの研究により、渦鞭毛藻 *Lepidodinium chlorophorum*、未記載 2 株 (MGD 株、TGD 株) は緑藻の一系統であるペディノ藻、特にペディノモナス属に属する種 (あるいはペディノモナスにごく近縁な種) を細胞内共生させオルガネラ化したことが分かっている (Sarai et al. 2020 *Proc Nat Acad Sci USA* 117:5364-5375)。緑色渦鞭毛藻 3 種の色素体となった共生緑藻は極めて近縁だと考えられる一方、宿主系統は互いに近縁とはならなかった。従って、ペディノモナス属緑藻の細胞内共生とそれに続く色素体化が渦鞭毛藻の進化中で独立に起こったと考えざるを得ない。緑色渦鞭毛藻 3 系統による独立したオルガネラ化の過程で、元々同

一あるいは極めて近縁ペディノモナス属緑藻の色素体ゲノムはどんな進化をとげたのか興味深い。これまでに *L. chlorophorum* 色素体ゲノムは解読され (Kamikawa et al. 2015 *Genome Biol Evol* 7:1133-1140)、MGD 株と TGD 株の色素体ゲノムもすでに解読済みであったが論文としては発表していなかった (2015 年、2016 年年次報告書参照)。TGD 株・MGD 株色素体ゲノムをアノテーションし、ペディノ藻葉緑体および *L. chlorophorum* 色素体ゲノムと比較した。この過程で、緑色渦鞭毛藻 3 種の色素体ゲノムからの遺伝子転写物 (メッセンジャー RNA) は転写後編集 (RNA エディティング) を受けることが判明した。*L. chlorophorum*、TGD 株、MGD 株それぞれでは、色素体遺伝子転写物中で合計 188 か所、177 か所、18 か所で塩基置換型 RNA エディティングを同定した (図 6; 星印でハイライトした遺伝子)。また TGD 株の *psaA* 遺伝子転写物では塩基置換型に加え塩基挿入型 RNA エディティングも発見した (図 6 左; ジグザグ線で表示した)。

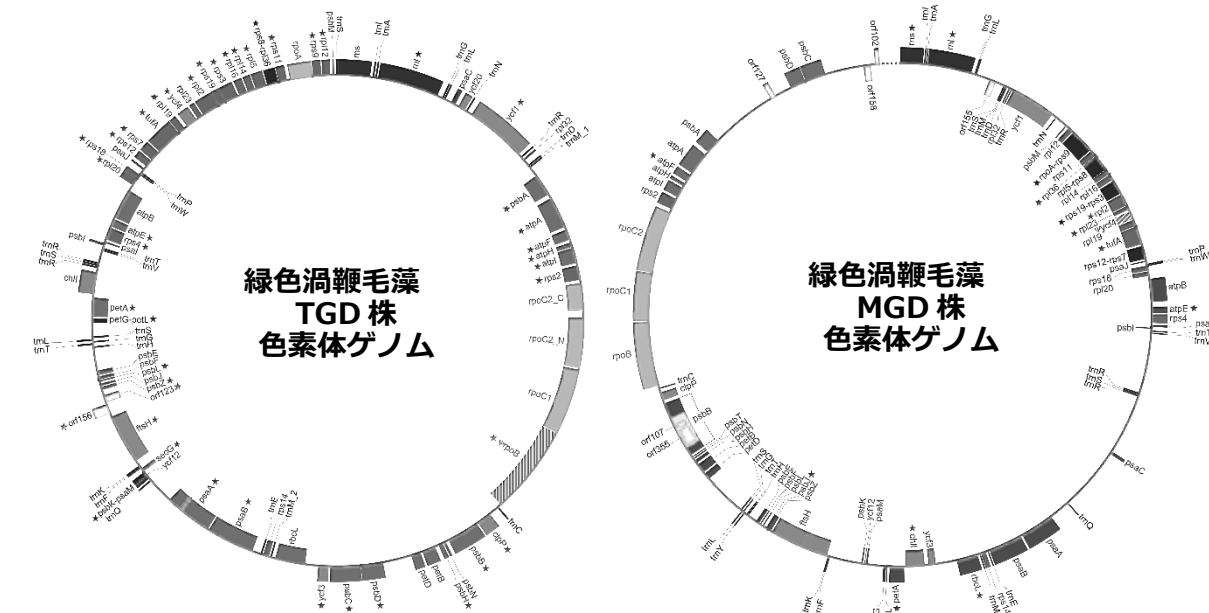


図 6. 緑色渦鞭毛藻 TGD 株 (左) および MGD 株 (右) の色素体ゲノムマップ. 転写物が塩基置換型 RNA エディティングを受ける遺伝子は星印で示した. TGD 株の *psaA* 遺伝子転写物で発見された塩基挿入型 RNA エディティングはジグザグ線で示した (左の図中の時計盤でいうと 7 時周辺) .

塩基置換型 RNA エディティングの「方向性」と頻度を比較すると、*L. chlorophorum* と TGD 株は RNA エディティングの頻度とアデニンからグアニン (A→G) への変換とウラシルからシトシンへの変換 (U→C) の塩基置換が大多数を占めている点で互いに類似している。一方、MGD 株は他 2 種の緑色渦鞭毛藻とは大きく異なり、A→G 型置換は検出できるが、U→C 型置換は検出できなかった。前述の *L. chlorophorum* と TGD 株における塩基置換型 RNA エディティングの「方向性」は、大多数の渦鞭毛藻の色素体 (ペリディニン型色素体) 遺伝子の転写物に見られる RNA エディティングの「方向性」と類似している。従って、*L. chlorophorum* と TGD 株で発見された塩基置換型 RNA エディティングは、ペディノ藻の細胞内共生以前に使用していたペリディニン型葉緑体で使われていた RNA エディティング機構を流用したと推

測することができる。一方 MGD 株においてどのような分子機構が RNA エディティングを行っているのかは不明である。

ミトコンドリアゲノム解析

我々は、これまで系統的に広範なミトコンドリア (Mt) ゲノムを解読し、真核生物進化における Mt ゲノムの構造、遺伝子組成、可動性イントロンの進化について研究を行ってきた (Masuda et al. 2011 *Harmful Algae* 10:130-137; Nishimura et al. 2012 *PLOS ONE* 7:e37307; Kamikawa et al. 2014 *Genome Biol Evol* 2:306-315; Nishimura et al. 2014 *Mob Genet Elements* 4:e29384; Takeuchi et al. 2015 *PLOS ONE* 10:e000132030; Nishimura et al. 2016 *Genome Biol Evol* 8:3090-3098; Nishimura et al. 2019 *Sci Rep* 9:4850; Nishimura et al. 2020 *Front Ecol Evol* 8:140)。クリプスタ生物群の基部から分岐した *Microheliella maris* の Mt ゲノムを解読した (2020 年度年次報告書) がこの結果については英文論文を現在執筆中であり、来年度の年次報告書で報告する。

Mt ゲノム解析にくわえ、我々は Mt ゲノムを複製する DNA ポリメラーゼ (Mt 局在 DNAPs) の多様性と起源について研究を進めている (2020 年度年次報告書)。本報告書では 2021 年度に英文論文として発表した Mt 局在 DNAPs に関する成果について報告する。

ミトコンドリア局在 DNA ポリメラーゼ PolIBCD+はウィルス DNAP 起源である

共生細菌由来オルガネラであるが、ミトコンドリアプロテオームの大部分は様々な進化的起源をもつタンパク質から構成されている。進化的起源の異なる複数種類の Mt 局在 DNAP が同定されているが、何れも α プロテオバクテリアがもつ DNAP とは近縁性を示さない。したがってミトコンドリアの起源となった α プロテオバクテリアが使用していた DNAP は現在のミトコンドリアでは使用されていないと考えられる。しかし、各種のミトコンドリア局在 DNAP がいつ、どのように確立したのか解明されていない。

キネトプラスト綱とディプロネマ綱に属する生物では、単一 DNAP 分子から分岐した複数種類のミトコンドリア局在 DNAP が存在する (これ以降 PolIBCD+と総称する)。我々は細菌類とウィルスの DNAP のサンプリングを充実させた系統解析を行い、PolIBCD+とある特定の

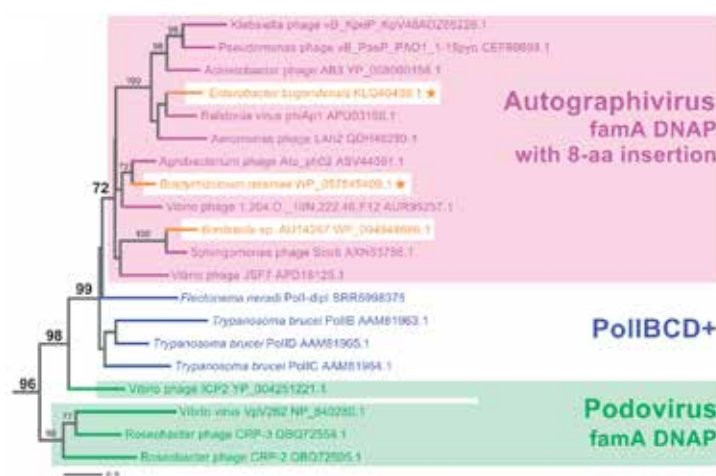


図 7. キネトプラスト綱とディプロネマ綱に所属する真核生物がもつ Mt 局在 DNAP (PolIBCD+) と一部のウィルスがもつ DNAP との系統関係。最尤法をもちいた系統解析では、PolIBCD+は Autographiviridae の DNAP と強い近縁性を示した。各分岐に示した数値は IQ-TREE プログラムによるブートストラップ値を示す。

ファージがもつ DNAP との間に高い近縁性を発見した。この結果は、キネトプラスト綱とデ
ィプロネマ綱の共通祖先はファージから DNAP を水平的に獲得し、Mt 局在 DNAP に改変し
たことを示唆する (Harada et al. 2021 *Genome Biol Evol* 13: evab003)。

次年度以降、以下の真核微生物の Mt ゲノム解読を予定している: ①新奇真核微生物 SRT605
株、② *Glissandra* sp. SRT312 株、③ SRT706 株、④有孔虫 *Ammonia berccarii*、⑤放散虫
(*Didymocystis tetrathulumus* と *Acanthodesmia viniculata*)、⑤ *Fabomonas* sp. SRT902 株

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

2020 年度報告した CysN タンパクの全原子分子動力学シミュレーション、2021 年度報告し
た翻訳終結因子 eRF1 C 末端ドメインの部分欠失のタンパク質立体構造への影響 (ともに生命
科学研究部門生命機能情報分野との共同研究) については英文論文の作成を目指し、解析を
行った。

4. 教育

- 吉永真理, 修士 (理学), Diversity and Evolution of SMC Proteins in Archaea and Eukaryota.
- 星 康貴, 修士 (教育学), メタモナス生物群における嫌氣的 ATP 合成に関わる酵素
の分子進化

集中講義など

なし

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 令和 3 年度 日本植物学会奨励賞, 中山卓郎, 2021 年 9 月 18 日

外部資金

1. 科学研究費補助金 基盤研究 (B), 稲垣祐司 (代表), 2019-2023 年度, 交付額: 全
年度直接経費 13,100 千円 (2021 年度直接経費 3,400 千円), ミトコンドリア DNA ポ
リメラーゼの多様性と進化の全容解明 (課題番号 19H03280)
2. 科学研究費補助金 国際共同研究加速基金 (国際共同研究強化(B)), 稲垣祐司 (代
表), 2018-2023 年度, 交付額: 全年度直接経費 13,700 千円 (2021 年度直接経費 3,900
千円), 海洋原生生物に共生する細菌多様性の実態解明 (課題番号 18KK0203)
3. 科学研究費補助金 基盤研究 (B), 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 4,100 千円), 海洋微生物多様性の盲
点一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）
5. 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 3,100 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 2,300 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）

知的財産権

なし

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. Yazaki E, Yabuki A, Imaizumi A, Kume K, Hashimoto T, Inagaki Y. The closest relative of Archaeplastida is revealed by phylogenomic analyses that include *Microheliella maris*. 2022 Open Biology in press
2. Yoshinaga M, Inagaki Y. Ubiquity and origins of structure maintenance of chromosomes (SMC) proteins in eukaryotes. 2021 Genome Biology and Evolution 13(12):evab256.
3. Yuyama I, Ugawa N, Hashimoto T. Transcriptome analysis of *Durusdinium* associated with the transition from free-living to symbiotic. 2021 Microorganisms 9(8):1560
4. Kanamori S, Cádiz A, Diaz L, Ishii Y, Nakayama T, Kawata M. Detection of genes positively selected in Cuban Anolis lizards that naturally inhabit hot and open areas and currently thrive in urban areas. 2021 Ecology and Evolution 11(4):1719-1728
5. Kawachi M, Nakayama T, Kayama M, Nomura M, Miyashita H, Bojo O, Rhodes L, Sym S, Pianaar RN, Porbert I, Inouye I, Kamikawa R. Rappemonads are haptophyte phytoplankton. 2021 Current Biology 31(11):2395-2303

B) 査読無し論文

1. Yazaki E, Yabuki A, Imaizumi A, Kume K, Hashimoto T, Inagaki Y. Phylogenomics invokes the clade housing Cryptista, Archaeplastida, and *Microheliella maris*. 2021 bioRxiv doi: 10.1101/2021.08.29.458128
2. Kamikawa R, Mochizuki T, Sakamoto M, Tanizawa Y, Nakayama T, 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, Ishida K, Miyashita H, Henrissat B, Lombard V, Win J, Kamoun S, Kashiyama Y, Mayama S, Miyagishima S, Tanifuji G, Mock T, Nakamura Y. 2021 Genome evolution of a non-parasitic secondary heterotroph, the diatom *Nitzschia putrida*. bioRxiv doi: 10.1101/2021.01.24.427197

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

なし

B) 一般講演

なし

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

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

B) その他の発表

1. 中山卓郎, 野村真未, 高野義人, 柴小菊, 稲葉一男, 谷藤吾朗, 稲垣祐司, 河田雅圭. 外洋性ディノフィシス目渦鞭毛藻 2 種に見られる共生シアノバクテリアのゲノム解析. 日本植物学会第 84 回大会, Sep 19-21, 2020, オンライン開催
2. 吉永真理, 稲垣祐司. 真核生物における SMC タンパク質ファミリーの多様化と二次的欠失. 日本共生生物学会第 4 回大会, Oct 30-Nov 1, 2020, オンライン開催
3. 原田亮, 稲垣祐司. キネトプラスチダ類及びディプロネマ類に特異的なミトコンドリア局在 DNA ポリメラーゼはファージ起源である. 日本共生生物学会第 4 回大会, Oct 30-Nov 1, 2020, オンライン開催

(4) 著書、解説記事等

なし

7. 異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等

異分野間連携

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

産学官連携

なし

国際連携・国際活動等

1. A. J. Roger 博士および A. G. B. Simpson 博士（ダルハウジー大・カナダ）との共同研究：メタモナス生物群の系統関係と嫌気性ミトコンドリア機能の解析
2. E. Kim 博士（アメリカ自然史博物館・アメリカ合衆国）との共同研究：カタブレファリス類のミトコンドリアゲノム解析, ユーグレノゾア基部から分岐する新奇系統に関する研究
3. M. Eliáš 博士（Ostrava 大学・チェコ共和国）等との共同研究：ヘテロロボサ類の系統関係と嫌気性ミトコンドリア機能の進化、オルガネラ DNA ポリメラーゼの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

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

なし

9. 管理・運営

稲垣祐司：生命環境科学研究科教務委員、生物科学専攻カリキュラム委員、計算科学研究センター運営委員、計算科学研究センター人事委員、計算科学研究センター共同研究委員、計算科学研究センター学際計算科学連携室室長

10. 社会貢献・国際貢献

なし

11. その他

なし

VI. 地球環境研究部門

1. メンバー

教授	日下 博幸、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 23 名、学類生 7 名

2. 概要

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

地域規模の気候の研究は、日下教授・ドアン助教のグループが取り組んでいる。プロジェクトとしては、環境省環境研究総合推進費の一環としての「気候変動に伴う都市災害への適応」や科研費の「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。推進費では北海道大学、京都大学と共同で、将来の都市気候予測、特にフェーンによる災害レベルの高温予測とその影響評価に関する研究を行っている。このほかの国内連携として、気象庁気象研究所、農研機構の研究者が代表の科研費に参画している。国際連携としては、ベトナム国家大学ハノイ自然科学大学、ハノイ科学技術大学、ベルギー王立気象研究所、アリゾナ州立大学都市気候研究センターと連携協定を結んでいる。また、アメリカ大気研究センターとも国際テニユアトラック事業を継続している。アジアと欧米を代表する都市気候研究拠点と共同研究を行っていることになる。このグループのユニークな社会貢献として、筑波山神社と共同で筑波山頂の気象観測所を運営しており、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気象研究所・国立環境研究所との共同研究プロジェクトに発展している。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、HPC 部門の朴教授グループとの LES の GPU 化に関する共同研究、天笠教授グループとの機械学習に関する共同研究がある。

地球規模の気象研究は、田中教授・松枝助教のグループが取り組んでいる。田中教授のプロジェクトとして、科研費の「ロスビー波の碎波と飽和による地衡風乱流理論の構築」がある。国際連携としては、アラスカ大学国際北極圏研究センターと協定を続けており、インドネシア気候・気象・地球物理庁や米国ミズリー大学コ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] 都市街区気象 LES モデルの改良とその応用（日下）

都市街区気象 LES モデル「City-LES」を改良した。具体的には、建物データをゼンリンから PLATEAU へ変更し、その変換モジュールを作成し、モデル内でのミスト散布効果、日除け効果、初期値などの計算方法の向上に努めた。それらの有用性を明らかにするために、東京・丸の内で行った現地気象観測データを用いて精度検証を実施した。その結果、地上気温や WBGT の予測精度が 2020 年度の結果よりも向上した（図 1）。具体的には昨年度予測を外していた地点も合うようになった。また、日除けを設置する実験では、陰ができることで地表温度が低下し、それに伴い気温や暑さ指数が低下する様子が確認できた。2021 年度の改良により、特定の街区にミスト散布や日除けを設置するといった具体的な気候変動適応策の効果検証が可能となった。実際、熊谷市・新潟市が実際に将来導入を検討している気候変動適応策をモデル内で再現し、その効果を検証した。

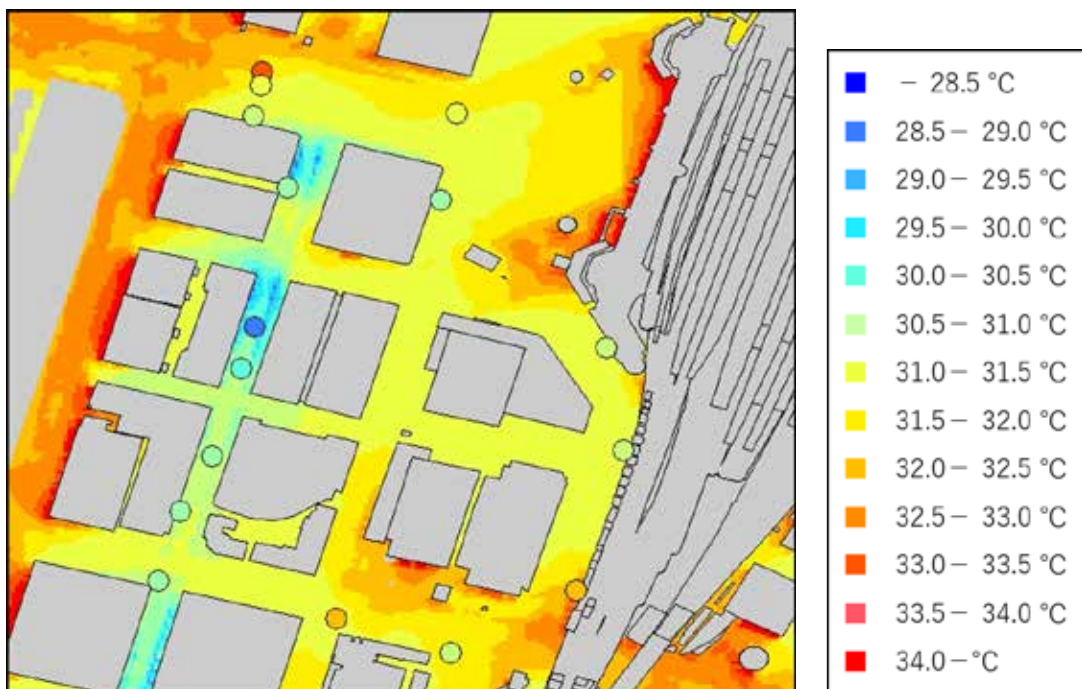


図 1： City-LES にミスト散布機能を追加し、現地気象観測データと比較した結果。背景の色が LES の結果、丸の色が観測結果。

[2] 学習・仕事のパフォーマンスに対する暑熱リスク評価（日下）

夏季、日本のオフィスワーカーや学生は空調の効いた室内と暑さの厳しい屋外を行き来することが多く、厳しい暑さから室内に戻った時に仕事や学習のパフォーマンスが低下する可能性がある。そこで、多数の被験者に屋外の歩行とその後の簡単な2桁の足し算テストを行ってもらい、暑い屋外での短時間歩行が直後のパフォーマンスに与える影響を実証的に明らかにした（図2）。この被験者実験の結果、熱中症嚴重警戒日に屋外を15分歩行するだけで、直後の簡単な足し算テストですら正答率が歩行前と比較して有意に低下したことが明らかになった。特に、睡眠不足（睡眠時間5時間未満）の男性被験者でパフォーマンスの低下が顕著に見られた。これらの結果は、日本におけるオフィスワーカーや学生の仕事・学習効率を維持・向上させるために役立つ情報となることが期待される。



図2： 被験者実験および気象観測の様子。(a)被験者が屋外を歩行または屋外で椅子に座っている様子。(b)被験者が室内で算術テストを受けている様子。いずれの写真も2016年8月に撮影されたものである。

[3] 熱中症対策としての日傘・藤棚の有効性の検証（日下）

夏季の炎天下で歩行者が受ける熱ストレスを緩和する方策として、街路樹やドライミストの設置、日傘・帽子の使用などが考えられるが、それぞれの熱ストレス緩和効果を比較検証した研究はない。そこで、街路樹・日傘・ドライミスト散布の熱ストレス緩和効果を野外での気象観測を用いて明らかにした。その結果、図3のように街路樹と日傘は日射を遮ることにより、暑さ指数(WBGT)に基づく熱中症リスクを1段階下げることができた。一方、ミスト散布はある程度の風速以上ではミストが風に流されるため熱ストレス緩和効果が小さいことも明らかになった。

歩行者以外でも、運動会やイベントなどの際に学校の校庭や公園で熱中症になる人も少なくない。運動会などでは日除けとしてテントが広く利用されており、また校庭や公園には藤棚をはじめとした蔓性植物による日除けもあるが、これらの熱ストレス緩和効果は十分に検証されていない。そこで、藤棚の下・テントの下・直射日光の下で気象要素の観測および被

験者を用いた整理測定を行い、藤棚の熱ストレス緩和効果がテントよりも大きいことを明らかにした。藤棚は日射をほとんど遮り、かつ葉面の温度が高くならなかった一方、テントはテント表面の温度が上昇してしまったため、結果として気象要素・被験者へのアンケートの双方から藤棚の涼しさが示された。

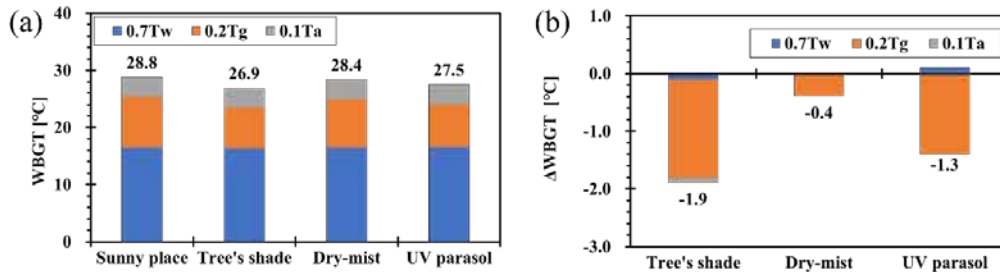


図 3： 夏の晴天日に実施した暑さ指数観測の結果。(a)左から日向・街路樹下・ミスト散布下・日傘下での暑さ指数、(b)左から街路樹・ミスト散布・街路樹・日傘による暑さ指数緩和効果。

[4] VLES モデルの開発 (Doan)

VLES は Very Large Eddy Simulation を意味している。VLES が大きな渦を直接解く百～数百メートルメッシュ解像度の気象モデル体系のことであり、今後天気予報や街区レベルの都市気候研究に大きく期待される。しかし、実都市をシミュレーションのするとき、VLES がビル等の都市構造を直接解けないため、都市構造のバルク効果をパラメタライズ化する必要がある。一方、近年、都市観測手法の発達による都市の特微量のビッグデータ集積が進んでいる。このような Urban Informatics 分野の成立・発展が従来の都市物理モデリングに貢献することが期待される。本研究は、最先端な都市形状のデータと機械学習手法を活かし、都市物理モデルの最適化を目的としている。具体的に、現在 CCS の City-LES をベースに、都市形態、人口は熱等のパターンと都市キャノピー層内の放射収支、運動量の減衰・再分配のパラメタライズ手法を開発している。

[5] 都市降水の気候変動 (Doan)

気候変動下での都市規模の極端降水の変化を特定することは、都市の持続発展にとって重要である。本研究は、中緯度都市の東京と熱帯都市のシンガポールを対象とし、温暖化による極端降水の長期変化を研究する。気候計算のために高解像度の領域気候モデルを使用する力学的なダウンスケーリング手法を採用した。結果の不確実性を減らすために、複数の気候変動シナリオ (RCP8.5 と RCP4.5) を考慮した。計算結果から、温暖化によって、将来の都市の極端降水が頻度と強度の両方で大幅に強化することがわかった (図 4)。本研究は、極端降水の変化の体制を「extreme gets more extreme」(EGME) という新しい用語を提唱した。EGME

の物理的な原因についても対流有効位置エネルギー（CAPE）と対流抑制（CIN）を着目し、説明した。今後には都市災害計画にとって、気候変動の平均場の議論が不十分であり、EGME についての考慮が大事であることを示した。

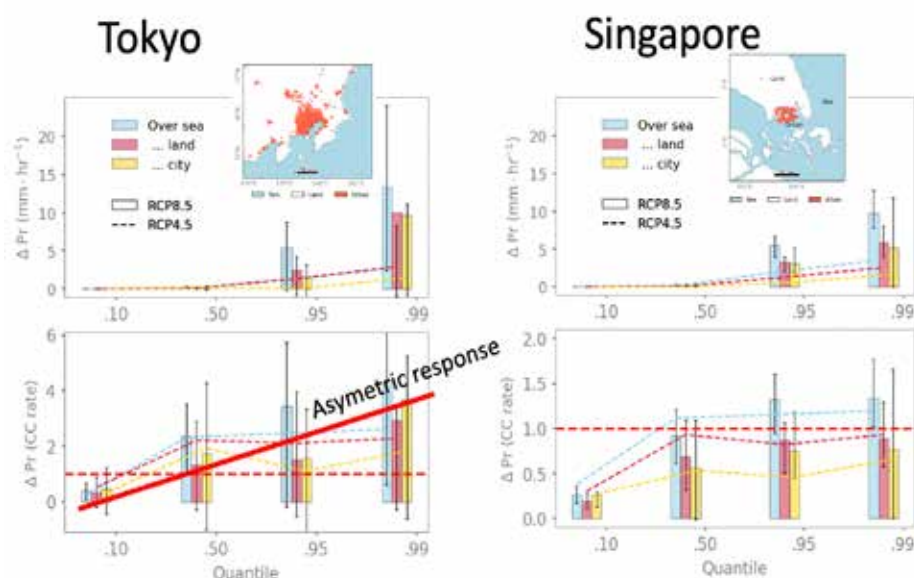


図 4： 地球温暖化に対する都市降水（Pr）の応答。横軸は Pr の Quantile を示し、縦軸は降水の変化量を示す。上の図は変化量の絶対値、下の図は変化量の Clausius-Clapeyron rescaling 量（ $7\% \text{ K}^{-1}$ ）を示す。

[6] 気候研究用の新しい自己組織化マップの開発 (Doan)

近年、地球科学分野のデータ集積が劇的に進んでおり、物理法則に基づく研究からデータを直接マイニングするパラダイムにシフトすることが予測される。データマイニング手法の中、クラスタリング手の 1 つである **k-means** は、気候システムのパターン検出に使用される。**k-means** は距離メトリックに基づいてパターン認識を行う。一方、気候科学では「構造的」のあるデータタイプ（つまり時間と空間の順序を持つデータ）が支配的である。本研究は、(i) 「構造的」のあるデータを対応できる **S k-means** という新しいアルゴリズムと (ii) 情報エントロピーの概念に基づくクラスタリング不確実性評価フレームワーク (CUEF) を提唱する (図 5)。新しいアルゴリズムを検証するために複数の気候分類テスト問題を用いた。本来のアルゴリズムに対し **S k-means** の優位を **Silhouette** 解析で明らかになった。

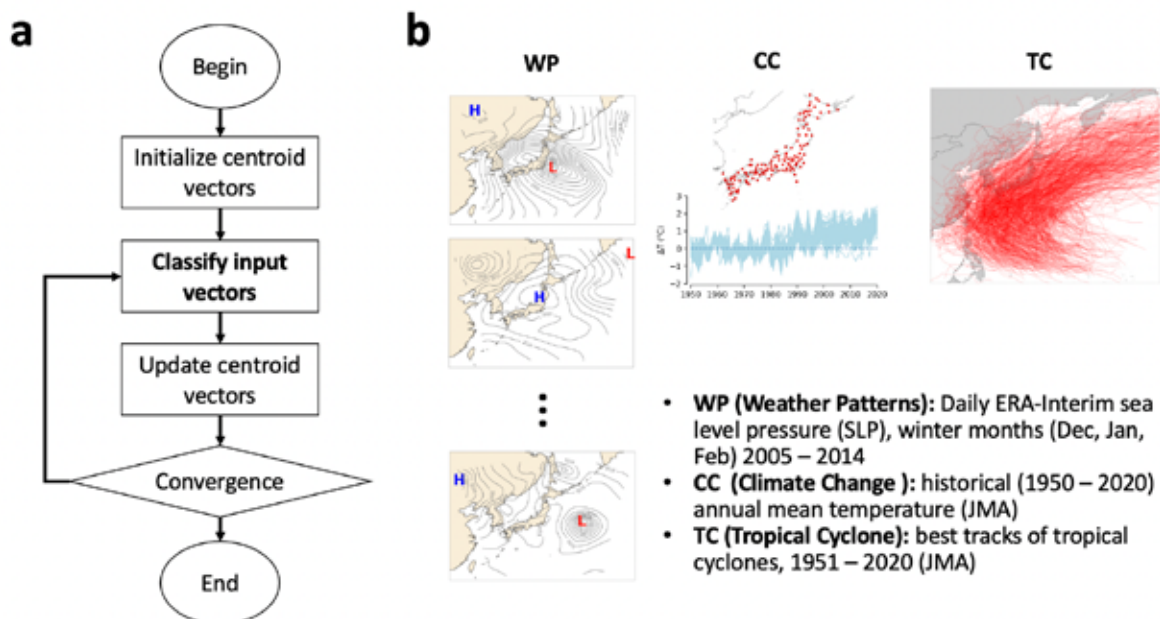


図 5： k-means アルゴリズムと 3 つの検証問題の概念図。WP は天気パターン問題、CC は長期気候変動分類問題、TC は台風のベストトラックデータの分類問題。

[7] 粒子フィルターによる火山灰追跡モデル PUFF と MP レーダーデータの同化実験（田中）

火山灰粒子の運動をラグランジュ的に追跡する PUFF モデルは、航空安全を目的として Tanaka (1991)により開発されたモデルであり、火口から数百キロの範囲への輸送拡散を予測するモデルである。この PUFF モデルに桜島周辺の地震計や傾斜計からリアルタイムで算出される噴出率と噴煙高度を組み合わせることで、噴火開始時刻に噴出率と噴煙高度を自動入力する PUFF モデル予測システムが開発された(Tanaka and Iguchi 2019)。

しかし、地震計等による噴煙高度の推定には大きな誤差が含まれる。そこで、Tanaka et al. (2020)では MP レーダーデータによる噴煙の 3 次元的な分布の実測を PUFF モデルの数値予測に同化する試みがなされた。そこでは PUFF モデルを用いた噴煙予測の分布に、同時刻に MP レーダーで観測された噴煙粒子を足し 2 で割るような最も原始的なデータ同化が取り入れられた。この手法では、背景風に誤差がある場合に両者が分離して重ならないという問題が生じる。

そこで今年度は、火山灰輸送拡散モデル PUFF に、MP レーダーの観測データを同化する新たな手法として「粒子フィルター」によるデータ同化手法が開発された。対象とした事例は 2020 年 6 月 4 日 02:59 JST の桜島噴火であり、30dBz 以上の反射強度のデータが用いられた。図 6 (左) は MP レーダーから得られた噴煙の鉛直断面に PUFF モデル予測データを単純に重ねたものである。先行研究で行ったような予測と観測を足して 2 で割るような簡単な同化で

は、東西断面のように両者が重なっている場合は良いが、南北断面のように全く重ならない場合には問題となる。図 6 (左) はモデル予測 (火口から線状に延びる線) と MP レーダー観測 (半島付け根の塊) を重ねたもので、両者は全く重ならない。そこで、先行研究で初めて導入された同化手法に、最新の粒子フィルターを応用した結果が図 2 に示されている。この手法では観測粒子は残し、モデル粒子に対しては尤度計算を行い、尤度の低い粒子を削除する代わりに尤度の高い領域に新たな粒子を再生産するという粒子フィルターのアルゴリズムを導入した。図 7 (左) は粒子フィルターを用いてデータ同化を行った後の鉛直分布、図 7 (右) は火山灰の水平分布である。観測とモデル予測の両方の情報が反映された結果となっていることが分かる。モデル予測が現地観測と合わない事例は火山灰噴煙予測には頻繁に見られるようである。その際にも、予測と観測の両方の特徴を反映した粒子フィルターは有効な同化手法と言える。(Tanaka et al. 2022, submitted to JDR.)

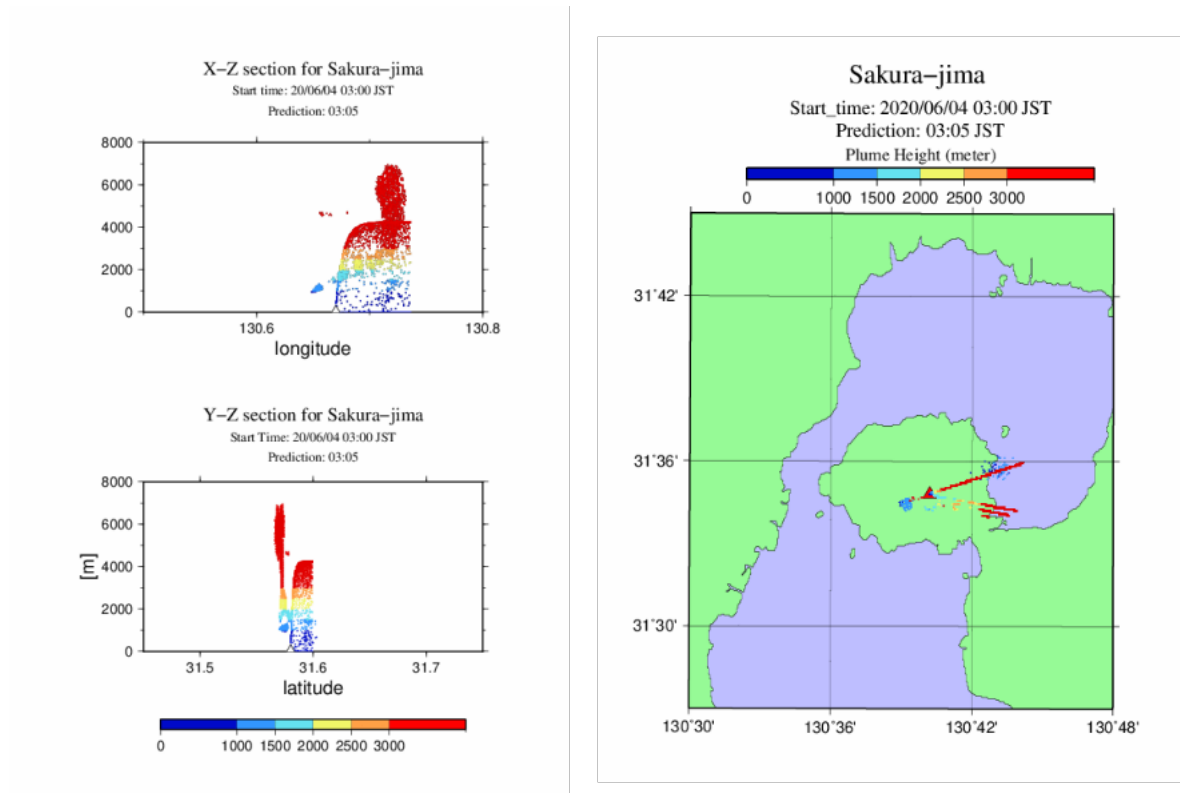


図 6 : 2020 年 6 月 4 日 02:59 JST の桜島噴火の東西(X-Z)南北(Y-Z)断面と水平分布(X-Y)。MP レーダーの観測値に PUFF モデル予測を重ねた先行研究のデータ同化の例。

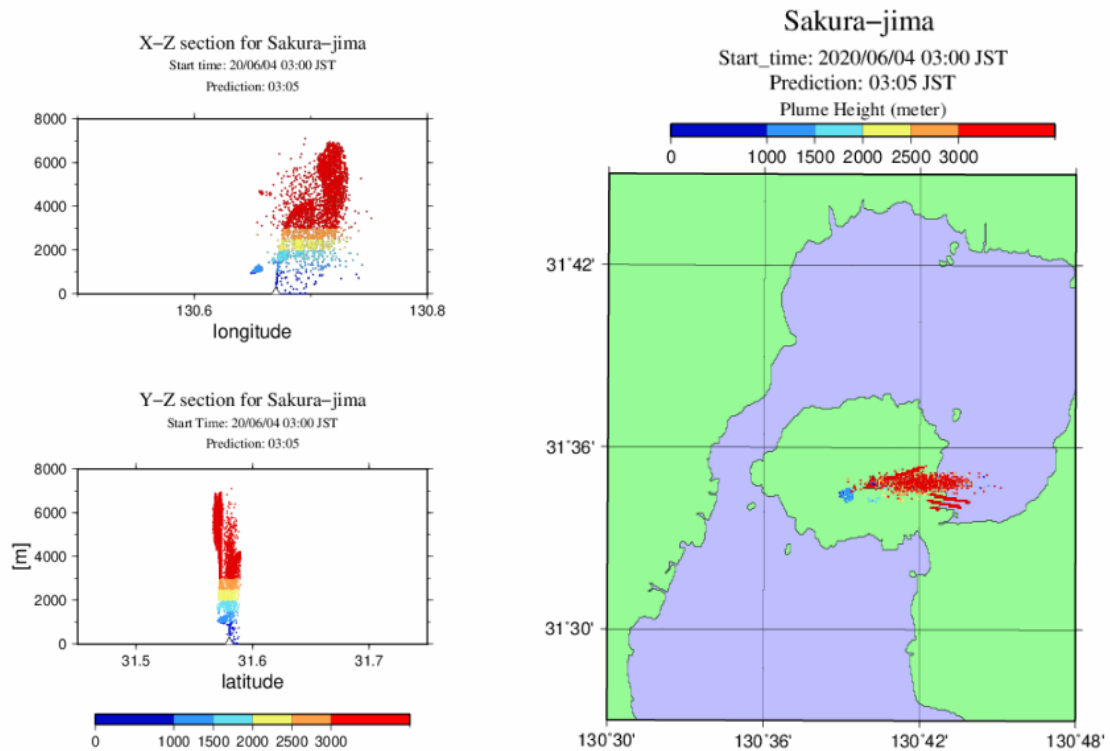


図 7： 2020 年 6 月 4 日 02:59 JST の桜島噴火の東西(X-Z)南北(Y-Z)断面と水平分布(X-Y)。粒子フィルターで PUFF モデル予測に MP レーダーの観測値を同化した例。

[8] 北米域における予報精度急低下事例(bust)に関する研究（松枝）

数値予報技術や計算科学分野等の発達により数値予報の精度は昔に比べ格段に向上した。しかし、それでもなお毎日一貫した精度で予報を行うことは難しく、予報精度の急低下(bust)がしばしば起こる。bust の発生要因は詳しく分かっていないため、その原因解明は重要である。本研究では bust が発生した際の大気場の特徴を明らかにすることを目的とした。アンサンブル予報 (TIGGE) データによる解析から、2009/10 年以降の冬季には平均して約 7.7 日/冬で bust が発生したことが分かった。500hPa ジオポテンシャル高度 (Z500) 偏差の主成分を基に、bust 発生時の大気場について調査したところ、空間スケールの大きいモードの振幅が小さい時に bust が多く発生している事が分かった。このことから、空間スケールの小さいモードを数値モデルで適切に予測することが bust 発生頻度の低下に重要であることが示唆された。

[9] オーストラリア熱波の分類とその予測可能性（松枝）

オーストラリアにおける熱波を対象に、地上観測データ、および、週間アンサンブル予報 (TIGGE) のデータを用いて、その分類と予測可能性について解析を行った。初めに、オーストラリアにおける熱波をより客観的に定義するために、欧州熱波の既存研究での手法を改

良した独自の教師なし機械学習を用いて、西部、南西部、メルボルン、シドニー、北東部、北西部の 6 つの熱波パターンに分類した（図 8）。合成解析と統計解析により、分類した熱波が、準停滞性ロスビー波、Antarctic Oscillation (AAO)、ENSO (El Niño–Southern Oscillation)、Madden–Julian Oscillation (MJO) などの季節（内）振動に関連していることを明らかにした。さらに、TIGGE データを用いて分類した熱波の予報精度検証から、中緯度域での熱波の方が熱帯域での熱波よりも予報精度が高く、特に、7.5 日予報でシドニー型熱波の予報精度が最も高く、3.5 日予報において北西部の熱波の予報精度が最も低いことが示された。

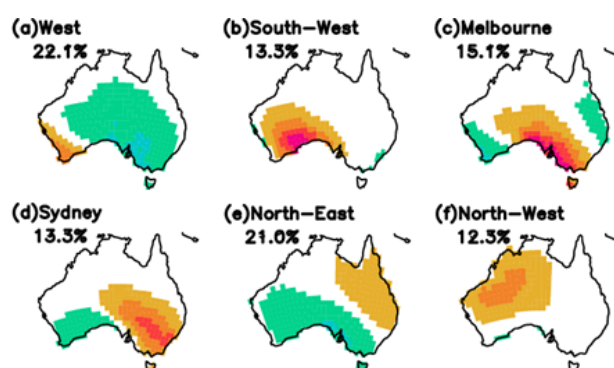


図 8： 本研究の手法により特定された熱波パターン。

[10] 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（松枝）

冬季北太平洋域（北緯 10 度–80 度、東経 120 度–西経 60 度）の 300hPa 面東西風（U300）偏差を 8 つの Jet レジーム（Jet Extension(1), Jet Extension(2), Jet Retraction(3), Jet Retraction(4), Poleward shift(5), Poleward shift(6), Equatorward shift(7), Equatorward shift(8)）に分類したのち、これらレジームと日本–北米間の航跡（日本航空株式会社提供）の関係、およびレジームの予測可能性を再解析データ（ERA5）、イタリア・ドイツ・欧州（ECMWF）・フランス（METFR）・イギリスの Copernicus 季節予報データを用いて調査した。

北太平洋中部での飛行緯度偏差に対する U300 偏差の線型回帰図から、東京発北米行きの便は平年よりも偏西風が強い領域を、北米発東京行きの便は平年よりも偏西風が弱い領域を選択的に飛行していることが確認できた。また、北米西海岸着便と北米東海岸発便の航跡は偏西風の東西伸縮に、北米西海岸発便と北米東海岸着便の航跡は偏西風の南北変動に関連が高いことが分かった。確率予報の精度は、Jet Retraction(5)が最も高く、Jet Extension(1)が最も低かった。METFR を除く全てのモデルは、6 ヶ月前からであっても Jet Retraction(5)確率予報がその気候値予報に勝っていた。一方、Jet Extension(1)確率予報は、ECMWF を除き、1 ヶ月前からであってもその気候値予報に及ばなかった。また、予報対象月が El Niño の場合、La Niña の場合よりも精度が高い傾向にあり、El Niño の発生が北太平洋上の偏西風の予測可能性

の向上に大きく寄与していることが分かった。これらの結果から、燃油調達等の長期的な策定に季節予報が利用できる可能性が示唆された。

[11] オーストラリアにおける森林火災予測への気象予報データの適用（松枝）

高温や乾燥などの気象的要因により近年激化しているオーストラリアの森林火災に対し、気象要素を説明変数とした Fire Weather Index (FWI) を基にして、森林火災発生の確率予測を試み、その精度評価を行った。解析では、1ヶ月 (S2S) アンサンブル予報データを使用し、各モデルによる FWI の気候学的閾値を基にした森林火災発生の確率予測を構築した。ECMWF、および、3つのセンターによるグランドアンサンブルの予報精度が高く、特に南東沿岸部において、23日前から気候値予測より高い精度を示すことを明らかにした（図9）。この結果から、本研究の気候学的閾値に基づく確率論的予測が、オーストラリア南東沿岸部における森林火災の発生を約3週間前から検出する有用なツールとなりうることが示唆された。

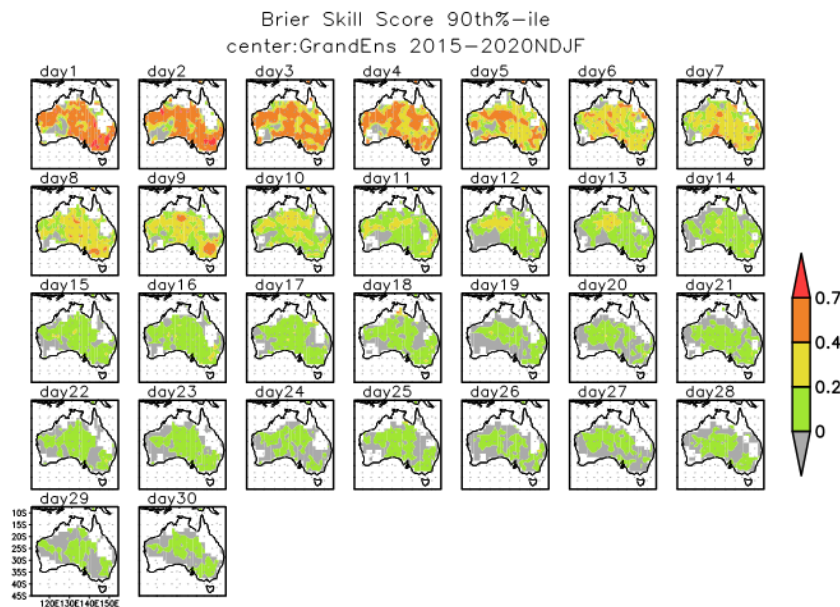


図9： カナダ、欧州、米国によるグランドアンサンブル予報を用いた FWI 確率予報のブライアスキルスコア(BSS)。BSS $\leq$ 0は予報として価値がない(気候学的発生頻度に基づく予報と同等かそれ以下)。

[12] 準リアルタイムアンサンブル予報プロダクトページの運営（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

指導学生（日下）

- D3（地球）：浅野裕樹、中村真悟、畔上泰彦
D1（地球）：鈴木信康、静居竜大、Lingbo Xue、Thisara Sathsara
M2（地球）：小野寺平、小林峻、鎌田碧、杉谷大樹、西場慧
M1（地球）：駒崎寛和、高田菜月、工藤達貴
B4（地球）：大友啓嗣、軽辺凌太、児玉朋子、近内翔

指導学生（田中）

- M1（地球）：赤見彰一、五木田麗奈、亀田遼
B4（地球）：石井蒼真

指導学生（松枝）

- M2（地球）：毛利亮、大貫航太郎
M1（地球）：黒川理帆、古賀太暁、佐久間耀
B4（地球）：田中拓海、八巻俊則

集中講義など

放送大学放送講師・地球科学客員教授 追加企画（田中）

つくば SKIP アカデミー講師 小中学生向けの気象学の授業（日下）

日越大学講師 気候変動コースの授業「気候学の基礎」「気候モデリング」（日下）

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. CISIDAYS 2021 優秀共同研究発表賞、日下博幸・佐藤拓人・中村慎吾・中村祐輔・軽辺凌太、都市構造が都市内部の暑熱環境に与える影響の調査（その2）ドライミストの効果、2021 年 11 月
2. 令和3年度若手教員奨励賞、Doan Quang Van, 2021 年 12 月
3. Best Faculty Member 2022、日下博幸、2022 年 2 月
4. 8th annual IFIP international conference on network and parallel computing (IFIP NPC) Best papers, Koei Watanabe, Kohei Kikuchi, Taisuke Boku, Takuto Sato, Hiroyuki Kusaka, 2021: High resolution of city-level climate simulation by GPU with multi-physical phenomena. 2021/11

外部資金

1. 環境研究総合推進費、日下博幸、分担、2019 年～2021 年度、全年度直接経費：30,000,000 円（2021 年度直接経費：10,000,000 円）、気候変動に伴う都市災害への適応（日下）
2. 独立行政法人日本学術振興会科学研究費補助金、日下博幸、分担、2019 年～2022 年度、全年度直接経費：未定（2021 年度直接経費：750,000 円）、基盤研究(A)統合粒子モデル開発による水物質を介した気象変化と環境汚染の相乗効果の解明（日下）
3. 独立行政法人日本学術振興会科学研究費補助金、日下博幸、分担、2019 年～2022 年度、全年度直接経費：未定（2021 年度直接経費：1,040,000 円）、基盤研究(B)領域気象モデルを活用した農地動態の広域熱環境への影響評価（日下）
4. 独立行政法人日本学術振興会科学研究費補助金、日下博幸、代表、2021 年～2023 年度、全年度直接経費：1,900,000 円（2021 年度直接経費：500,000 円）、基盤研究(C)都市街区 LES モデルの改良とその応用（日下）
5. 共同研究(株式会社日建設計総合研究所)、日下博幸、代表、2020 年～2021 年 7 月、研究費・題目は非公開（日下）
6. 共同研究(株式会社竹中工務店)、日下博幸、代表、2021 年度直接経費：研究費は非公開、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（日下）
7. 共同研究(パシフィックコンサルタンツ株式会社)、日下博幸、代表、2021 年度、研究費・題目は非公開（日下）
8. 日本地理学会・吉野正敏研究助成金、ドアングアンヴァン、2022 年 3 月、250,000 円
9. 独立行政法人日本学術振興会科学研究費補助金、ドアングアンヴァン、代表、2021 年度、1,100,000 円、（若手研究）熱帯での対流性降水への都市化の効果に関する研究 (Doan)
10. 独立行政法人日本学術振興会科学研究費補助金、ドアングアンヴァン、分担、2021 年度直接経費：750,000 円、基盤研究(A)統合粒子モデル開発による水物質を介した気象変化と環境汚染の相乗効果の解明 (Doan)
11. 共同研究(株式会社日建設計総合研究所)、ドアングアンヴァン、代表、2021 年度直接経費：1,000,000 円、東京首都圏における新型コロナウイルスなど公衆衛生が都市環境に及ぼす影響に関する研究 (Doan)

知的財産権

該当なし

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. Kusaka, H., A., Nishi, A., Kakinuma, Q.-V., Doan, T., Onodera, S., Endo, 2021: Japan's south foehn on the Toyama Plain: Dynamical or thermodynamical mechanisms? *International Journal of Climatology*, 41, 1-18.
2. Vitanova, L. L., H. Kusaka, Q.-V. Doan, S. Subasinghe, 2021: How urban growth changes the heat island effect and human thermal sensations over the last 100 years and towards the future in a European city? *Meteorological Applications*, 28, e2019.
3. Sato, T., H. Kusaka, 2021: Statistical Intercomparison of Similarity Metrics in Sea Level Pressure Pattern Classification. *Journal of the Meteorological Society of Japan*, 99, 993-1001.
4. Asano, Y., H. Kusaka, 2021: Numerical simulation study of the effects of foehn winds on white head incidences in Yamagata Prefecture, Japan. *Meteorological Applications*, 28, e2042.
5. Ikeda, T., H. Kusaka, 2021: Development of Models for Predicting the Number of Patients with Heatstroke on the Next Day Considering Heat Acclimatization. *Journal of the Meteorological Society of Japan*, 99, 1395-1412.
6. Kusaka, H., Y. Asano, R. Kimura, 2022: Wisteria trellises and tents as tools for improved thermal comfort and heat stress mitigation: meteorological, physiological, and psychological analyses considering the relaxation effect of greenery. *Meteorological Applications*, 28, e2046.
7. Watanabe, K., K. Kikuchi, T. Boku, T. Sato, H. Kusaka, 2022: High resolution of city-level climate simulation by GPU with multi-physical phenomena. *Lecture Notes in Computer Science*, 13152, 3-15.
8. Negishi, M., H. Kusaka, 2021: Development of statistical and machine learning models to predict the occurrence of radiation fog in Japan. *Meteorological Applications*, 28, e2048.
9. Asano, Y., Y. Nakamura, H. Kusaka, 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.
10. Doan Q.-V., F. Chen, H. Kusaka, A. Dipankar, A. Khan, R. Hamdi, M. Roth, D. Niyogi, 2022: Increased risk of extreme precipitation over an urban agglomeration with future global warming. *Earth's Future*, e2021EF002563.
11. Vu Dinh, Q., Q.-V. Doan, T. Ngo-Duc, V. Nguyen Dinh, N. Dinh Duc, 2022: Offshore wind resource in the context of global climate change over a tropical area. *Applied Energy*, 308, 118369.

12. Khan, A., L. Carlosena, J. Feng, S. Khorat, R. Khatun, Q.-V. Doan, M. Santamouris, 2022: Optically modulated passive broadband daytime radiative cooling materials can cool cities in summer and heat cities in winter. *Sustainability*, 14, 1110.
13. Feng, J., A. Khan, Q.-V. Doan, K. Gao, M. Santamouris, 2021: The heat mitigation potential and climatic impact of super-cool broadband radiative coolers on a city scale. *Cell Reports Physical Science*, 2, 100485.
14. Khan, A., L. Carlosena, S. Khorat, R. Khatun, Q.-V. Doan, J. Feng, M. Santamouris, 2021: On the winter overcooling penalty of super cool photonic materials in cities. *Solar Energy Advances*, 1, 100009.
15. Simón-Moral, A., A. Dipankar, Q.-V. Doan, C. Sanchez, M. Roth, E. Becker, X.-Y. Huang, 2021: Urban intensification of convective rainfall over the Singapore - Johor Bahru region. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 147, 3665-3680.
16. Tran, D. A., M. Tsujimura, N. T. Ha, V. T. Nguyen, D. V. Binh, T. D. Dang, Q.-V. Doan, D. T. Bui, T. Anh Ngoc, L. V. Phu, P. T. B. Thuc, T. D. Pham, 2021: Evaluating the predictive power of different machine learning algorithms for groundwater salinity prediction of multi-layer coastal aquifers in the Mekong Delta, Vietnam. *Ecological Indicators*, 127, 107790.
17. Tran, D. A., M. Tsujimura, H. V. Pham, T. V. Nguyen, L. H. Ho, P. Le Vo, K. Q. Ha, T. D. Dang, D. Van Binh, Q.-V. Doan, 2021: Intensified salinity intrusion in coastal aquifers due to groundwater overextraction: a case study in the Mekong Delta, Vietnam. *Environmental Science and Pollution Research*, 29, 8996-9010.
18. Khan, A., S. Khorat, R. Khatun, Q.-V. Doan, U. S. Nair, D. Niyogi, 2021: Variable impact of COVID-19 lockdown on air quality across 91 Indian cities. *Earth Interactions*, 1, 1-51.
19. Ishiyama, R., H. L. Tanaka, 2021: Analysis of vorticity budget for a developing extraordinary Arctic Cyclone in August 2016. *SOLA*, 17, 117-120.
20. Akasofu, S., H. L. Tanaka, 2021: On the importance of the natural components in climate change study: Temperature rise in the study of climate change. *MedCrave, Physics & Astronomy International Journal*, 5, Issue 2.
21. Yamagami, A., M. Matsueda, 2021: Statistical characteristics of Arctic forecast busts and their relationship to Arctic weather patterns in summer. *Atmospheric Science Letters*, 22, e1038.
22. Nakanowatari, N., J. Xie, L. Bertino, M. Matsueda, A. Yamagami, J. Inoue, 2022: Ensemble forecast experiments of summertime sea ice in the Arctic Ocean using the TOPAZ4 ice-ocean data assimilation system. *Environmental Research*, 209, 112769.

B) 査読無し論文

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Mio Matsueda, 2021: Flow-dependent predictability of wintertime Euro-Atlantic weather regimes in medium-range forecasts. Atmospheric Blocking Workshop, 2021/09, online

B) 一般講演

1. Shingo Nakamura, Ryogo Sato, Hiroyuki Kusaka, Takuto Sato, 2021: Prediction of the number of heatstroke patients under near future climate scenarios considering short-term and long-term heat acclimatization in Japan. International congress of biometeorology, 2021/09, online
2. Koei Watanabe, Kohei Kikuchi, Taisuke Boku, Takuto Sato, Hiroyuki Kusaka, 2021: High resolution of city-level climate simulation by GPU with multi-physical phenomena. 18th annual IFIP international conference on network and parallel computing (IFIP NPC), 2022/11, online
3. Yuki Asano, Hiroyuki Kusaka, Tatsuya Kaneko, Hitoshi Yokoyama, 2021: The Impact of Urban Heat Island on the Radiation Fog Formation and Development in Tsukuba city, Japan. AOGS 18th Annual Meeting, 2021/08, online
4. Yuki Asano, Hiroyuki Kusaka, 2021: Numerical simulation study of the effects of foehn winds on white head incidences in Yamagata prefecture, Japan. 13th Japan-China-Korea International Postgraduate Academic Symposium, 2021/09, online
5. Hiroyuki Kusaka, Quang-Van Doan, Shingo Nakamura, Lidia Lazarova Vitanova, Ronald Estoque, 2021: The Impact of Urbanization in Southeast Asia on the Local Climate Over the Last 100 Years: Numerical Study with Regional Climate WRF Model. AOGS 2021 18th Annual Meeting, 2021/08, online
6. Thanh Hung Nguyen, Tatsuya Nagashima, Quang-Van Doan, 2021: A High-resolution Emission Inventory of Air Pollutants for Air Quality Modelling Studies in Hanoi, Vietnam for 2017. AOGS 2021 18th Annual Meeting, 2021/08, online
7. Shinji Yamamura, Lidia Lazarova Vitanova, Hiroyuki Kusaka, Quang-Van Doan, 2021: Transit-Oriented Development: Concept for Improving the Environmental Value and Reducing the Environmental Load. AOGS 2021 18th Annual Meeting, 2021/08, online

8. Shinji Yamamura, Lidia Lazarova Vitanova, Quang-Van Doan, 2021: Transit-Oriented Urban Development for improving the human health and reducing the environmental load. International Conference on Urban Health, 2021/07, online
9. Quang Van Doan, Fei Chen, Hiroyuki Kusaka, 2021: Change in extreme precipitation characteristics in urban areas under global warming. AGU Fall Meeting 2021, 2021/12, online
10. Quang Van Doan, Srivatsan Vijayaraghavan, Ngoc Son Nguyen, 2021: Sea breeze change and heat-related risk in urban environment under global warming. AGU Fall Meeting 2021, 2021/12, online
11. Lidia Lazarova Vitanova, Shinji Yamamura, Quang Van Doan, 2021: Study on multiple impacts of COVID-19 pandemic on the urban environment in Tokyo metropolitan area. AGU Fall Meeting 2021, 2021/12, online
12. Quang-Van Doan, Fei Chen, Hiroyuki Kusaka, Jie Wang, Mizuno Kajino, Tetsuya Takemi, 2021: Global Warming and Extreme Precipitation in a Mega City: A Case Study of Tokyo, Japan. AOGS 2021 18th Annual Meeting, 2021/08, online
13. Quang-Van Doan, Fei Chen, Hiroyuki Kusaka, Ansar Khan, Anurag Dipankar, Rafiq Hamdi, Akhilesh Gupta, Dev Niyogi, 2021: Response of Extreme Convective Rainfall in a Tropical City to the Future Warming Climate. AOGS 2021 18th Annual Meeting, 2021/08, online
14. Lidia Lazarova Vitanova, Shinji Yamamura, Hiroyuki Kusaka, Quang-Van Doan, 2021: Numerical Study of the Railway-Associated Urban Development on the Thermal Environment at the Neighborhood Scale. AOGS 2021 18th Annual Meeting, 2021/08, online

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 日下博幸: 2021. アメリカ気象学会 The Helmut E. Landsberg Award 受賞記念講演. 日本ヒートアイランド学会プライムセミナー, 2021/7/9, オンライン
2. 日下博幸: 2021. 気象気候モデルの情報 WRF の紹介. 第3回気候変動適応リスク情報システムのプロトタイピング検討会, 2021/9/14, オンライン
3. 日下博幸: 2021. 風の吹く仕組み、身近な風の特徴などについて. 大気環境学会臭気環境分科会, 2021/9/14, オンライン
4. 日下博幸: 2021. 都市のヒートアイランド現象の真実とその将来予測. 電気学会神奈川支所(2021年度電気電子情報特別講義), 2021/12/13, オンライン

B) その他の発表

1. 日下博幸, 池田亮作, 佐藤拓人, 飯塚悟, 朴泰祐, 佐藤亮吾, 2021: 都市街区気象 LES モデルによる東京駅周辺の暑熱環境予測. 第 73 回気候影響・利用研究会, 2021/04, オンライン
2. 佐藤拓人, 日下博幸, 2021: 都市内の流れの乱流長さスケールと建物の代表パラメータとの関係の調査. 第 32 回非静力学モデルに関するワークショップ, 2021/10, オンライン
3. 日下博幸, 佐藤拓人, 中村真悟, 中村祐輔, 軽辺凌太, 2021: 都市構造が都市内部の暑熱環境に与える影響の調査 (その 2) ドライミストの効果, CSIS days 2021, 2021/11, オンライン
4. 佐藤拓人, 日下博幸, 2021: 都市内の流れの乱流長さスケールを支配する都市パラメータの調査. 気象学会 2021 年秋季大会, 2021/12, オンライン
5. 佐藤拓人, 日下博幸, 2021: 都市内の流れの乱流長さスケールの精度向上に向けた支配パラメータの調査. 第 35 回数値流体力学シンポジウム, 2021/12, オンライン
6. 渡邊孔英, 菊池航平, 朴泰祐, 佐藤拓人, ドアングアンヴァン, 日下博幸, 2022: 都市気象シミュレーション City-LES の OpenACC による完全 GPU 化と並列性能評価, 第 183 回情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会, 2022/03, オンライン
7. 日下博幸, 今井優真, 小林大樹, 小林峻, ドアングアンヴァン, Ngo-Duc Thanh, 2022: チュオンソン山脈フェーンがベトナム北中部の高温に与える影響, 日本地理学会 2022 年春季学術大会, 2022/03, オンライン
8. 浅野裕樹, 日下博幸, 稲津將, 2021: d4PDF を用いた関東平野での着雪および降雪の将来変化, 日本気象学会 2021 年度秋季大会, 2021/12, オンライン
9. 浅野裕樹, 日下博幸, 2022: 白穂に対するフェーンの影響: 高解像度気象モデルを用いた数値シミュレーション研究, 日本農業気象会 2022 年全国大会, 2022/03, オンライン
10. 浅野裕樹, 日下博幸, 2022: 山形県で発生した白穂に対するフェーンの影響, 日本地理学会 2022 年春季学術大会, 2022/03, オンライン
11. 小林峻, 日下博幸, ドアングアンヴァン 2022: ナイジェリア・ラゴスの都市化が極端降水に与える影響, 日本地理学会, 2022/03, オンライン
12. 畔上泰彦, 田中英之, ドアングアンヴァン, 日下博幸 2021: 2019 年 19 号台風を対象とした現在気候と将来気候下での数値実験, 日本風工学会 2021 年度年次大会, 2021/05/27, オンライン

13. 畔上泰彦, 田中英之, ドアングアンヴァン, 日下博幸 2021: 2019 年 19 号台風を対象とした現在気候と将来気候下での強風及び建物面の風荷重に関する解析, 2021 年度日本建築学会大会 (東海), 2021/09/07, オンライン
14. 鎌田碧, 日下博幸 2022: 都市街区気象 LES モデルを使用したオフィス街と住宅街の暑熱要因比較解析, 日本地理学会, 2022/03, オンライン
15. 小野寺平, 日下博幸 2022: 高時間・空間分解能での独自地上観測から判明した清川だしの吹走範囲, 日本地理学会, 2022/03, オンライン
16. 北出拓海, 釜江陽一, 松枝未遠 2021: 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, 日本気象学会 2021 年度秋季大会, 2021/12, 三重

(4) 著書、解説記事等

1. 田中博, 2021: 気候危機の真相. 杉山大志編, エネルギーフォーラム (株) Kindle Cloud Reader (amazon.co.jp).
2. 田中博, 2021: 真鍋淑郎氏のノーベル賞受賞に寄せて 今後の地球温暖化研究への懸念と提言. エネルギーフォーラム 2021 年 11 月号.
3. 共同執筆 (田中博), 2022: 自然災害科学・防災の百科事典. 丸善出版, ISBN: 978-4-621-30664-2.

7. 異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等

異分野間連携 (センター内外)

- ・ CCS 内: HPC 研究部門と都市街区気象 LES モデルの開発 (日下・Doan)
- ・ CCS 内: 計算情報学研究部門と気候データマイニング・クラスタリング手法の開発 (Doan・日下)
- ・ CCS 外: 農業分野 (農研機構) と水田の気候緩和効果に関する共同研究 (日下)
- ・ CCS 外: 情報通信分野 (情報通信機構) と雲のリアルタイム画像解析に関する共同研究 (日下)
- ・ 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 (田中博)

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 (Asian Institute of Technology) (タイ) との連携 (日下)
6. ベルギー王立気象研究所 (Royal Meteorological Institute, Belgium) (ベルギー) と本センター間の協定 (日下)
7. アラスカ大学フェアバンクス校、国際北極圏研究センター(IARC)との大学間協定 (田中)
8. 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

- ・ 国際学会セッションの主催者、American Geophysical Union Fall meeting (2021 年 12 月) (Doan)
- ・ 国際学会セッションの主催者、Asia Oceania Geosciences Society Annual meeting (2021 年 8 月) (Doan)

- ・自然地理学オンラインセミナー（2021年4月～2022年3月）（日下）
- ・日越大学講師（2021年4月～2022年3月）（日下）

9. 管理・運営（委員長など主なもののみ）

- ・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）
3. 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)委員（任期 2020年1月～2023年1月）（Doan）

11. その他

1. NHK ラジオ第一に電話出演（2021年5月20日）全国放送、NHK ラジオ R1「武内陶子のごごカフェ」5/20 内の企画「ローカル」。日本全国の気候と局地風を解説（日下）

2. 産経新聞（2021 年 6 月 8 日朝刊）、日本経済新聞（2021 年 6 月 7 日夕刊）、毎日新聞（2021 年 6 月 11 日夕刊）など新聞 38 紙、オンラインニュース 45 件で研究成果紹介。日本のフェーン現象の主要メカニズムについての研究成果の紹介（日下）
3. 東京大学海洋アライアンス連携研究機構 HP にて研究成果紹介（2021 年 6 月 2 日公開）「フェーン現象の「常識」は常識ではなかった」（日下）
4. NHK「首都圏ナビ」Web リポートで研究成果紹介（2021 年 8 月 30 日）NHK HP、「熱中症患者あふれる将来の東京 気候変動は社会的弱者に被害集中」（日下）
5. NHK NEWS おはよう日本に出演（2021 年 9 月 16 日）翌日の熱中症搬送者数予測モデルの紹介と将来の熱中症搬送者数に関する予測結果について。（日下）
6. 信濃毎日新聞にて研究成果紹介（2021 年 9 月 20 日）長野県を対象とした将来の熱中症搬送者

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 13 名、学類生 7 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 (理化学研究所),

松岡 聡 (理化学研究所), 中島 浩 (京都大学),

天野 英晴 (慶應義塾大学), 後藤 仁志 (豊橋技術科学大学),

関口 智嗣 (産業技術総合研究所), 中尾 昌広 (理化学研究所),

佐野 健太郎 (理化学研究所), 川島 英之 (慶應義塾大学),

田中 昌宏 (慶應義塾大学)

2. 概要

本研究部門では, 高性能計算システムアーキテクチャ, 並列プログラミング環境, GPU 利用技術, FPGA 利用技術, 並列数値処理の高速化研究, 分散システムソフトウェア, ストレージシステム等の研究を行っている。

今年度の研究としては以下のテーマを主に行った。

- GPU 及び FPGA の協調計算に関する研究
- GPU による都市気象コードの高速化 (地球環境研究部門との共同研究)
- 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
- 機械学習, ビッグデータサイエンスにおけるストレージ性能の向上
- 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
- 鞍点型連立一次方程式に対する階層並列型数値解法の並列実装と性能評価, 及び 3 次元画像再構成問題への応用
- 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)

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

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

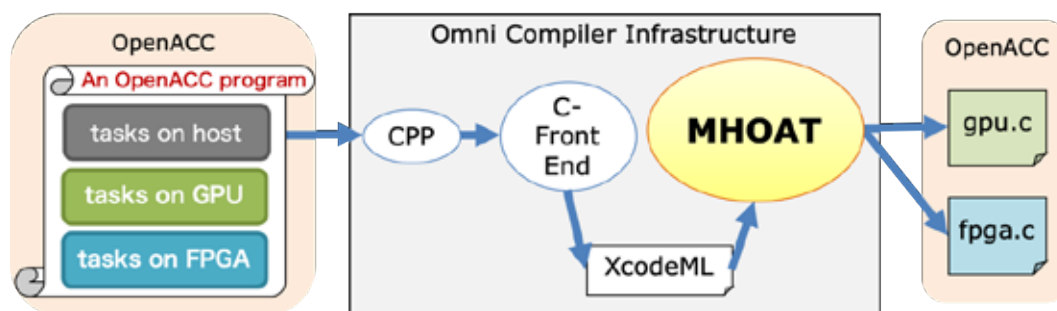


図 1 MHOAT の処理フロー

令和 3 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

ドとしてコンパイルできるように MHOAT の改良を行った。これまで MHOAT は簡単なサンプルコードを対象に実装と性能評価を行ってきたが、ARGOT のような実アプリケーションコードを対象とした実装実験を行うことで同システムの有用性を示した。

ARGOT コードに FPGA または GPU への計算オフローディングを行うが、従来の研究により、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デバイスを分けることで性能が大幅に向上することは昨年度までの研究で明らかになっている。今年度はいよいよ ARGOT コード全体を MHOAT でコンパイルし、これに成功した。この過程において、ORNL の OpenARC コンパイラの細かい不整合について開発者と議論し対応してもらった。さらに、元コードの一部については FPGA 実行に適合するよう、修正を行った。本来であれば、可能な限りコードの本体部分の修正は行うべきではないが、現在の実装上の制限のワークアラウンドとして行っている。

現状では、同コードのコンパイルが可能となり、計算結果は CPU 版及び GPU 版と比べ、数%の誤差が生じることがわかった。この誤差が FPGA 上における数値計算誤差（演算の一部は厳密に IEEE 浮動小数点処理に準拠していない）によるものか、MHOAT の何らかのバグによるものかは現在検証中である。また、MHOAT の開発において高位言語からの FPGA コンパイルは必須であるが、Cygnus に搭載されている Intel Stratix10 のような高性能向け大規模 FPGA に ART 法のような実コードを実装する場合、コンパイル時間が 10 時間以上かかってしまう。FPGA の最終的な回路イメージ (Bit Stream) の生成は論理合成だけでなく、チップ内でのワイヤリングやフロアプランの最適化を行う必要があり、これはコンパイラによってヒューリスティックに行われるため、膨大な時間がかかることはこの研究分野では常識となっている。しかし、MHOAT のような複雑なシステムの開発では研究の turn around time があまりに長くなってしまい進捗効率の大きな妨げとなる。そこで、Intel SDK に含まれているエミュレータモードを活用する。エミュレータモードは FPGA 上の動作をホスト CPU 上で仮想的に実行するもので、実際の FPGA へのオフローディングは行われない。しかし、CPU 上でのソフトウェア処理のため、Bit Stream 生成の手間が省け、コンパイル時間は数分程度と大幅に短縮される。ただし、あくまでエミュレートのため、機能検証はできるがタイミング検証はできない。

我々は MHOAT の出力としてバックエンドコンパイラに渡される OpenACC コードに対し、GPU オフロード部分は OpenACC 対応した NVIDIA HPC コンパイラにそのまま渡し、FPGA オフロード部分を OpenARC でコンパイルする際にこのエミュレーションモードでコンパイルするという処理を組み合わせることに成功した。これにより ARGOT コードが MHOAT で処理できることが実証できたが、Bit Stream による FPGA 上での検証と性能評価は今後の喫緊の課題となっている。

[2] GPU による都市気象シミュレーションの高速化（朴，日下（地球環境研究部門））

本センターの地球環境研究部門・日下博之教授のグループとの共同研究により、彼らの CPU 版 City-LES コードを GPU によって高速化する研究を継続している。令和 3 年度をこの共同研究の最終年度と位置づけ、これまでの集大成としての GPU 化研究を行った。

City-LES は元々、FORTRAN で記述された MPI 並列コードであり、以前の我々との共同研究でこれを OpenMP スレッド並列化したものが使われている。本研究はこれを OpenACC で書き換え、GPU へのオフローディングを行うことで処理性能を飛躍的に向上させようとする試みである。昨年度までの研究で、コードの大部分は OpenACC 化され、その部分部分においては 10 倍以上の高速化が達成されていたが、計算時間としては極めて小さい複数の関数が CPU 上に残っていた。しかし、少しでも CPU 上に関数が残っていると、GPU 化された関数とのデータ参照において両デバイス間通信が発生し、この部分が CPU 上の関数の処理時間を上回ってしまい、Strong Scaling における並列処理性能の妨げとなっていた。また、コード中でポアソン方程式の求解を行うが、この部分は解の収束性を高めるために Multi-Grid 法で実装されている。これまでこの部分の GPU 化は処理の複雑さから保留されていたが、今年度の研究ではこちらも GPU 化し、結果としてコード全体の完全 GPU 化を実現した。

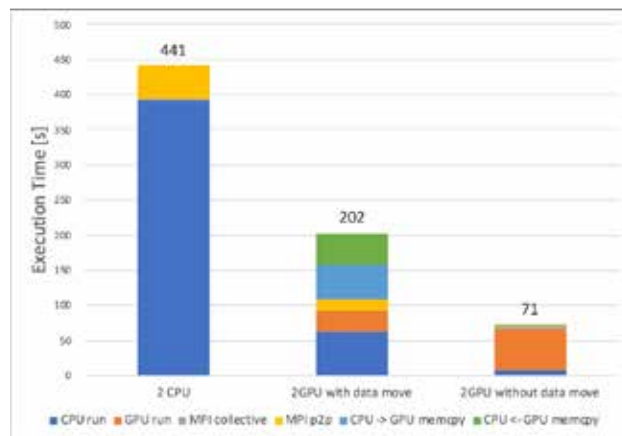


図 2 City-LES の 2CPU 及び 2GPU における性能向上とデータ転送オーバーヘッド削減による実行時間短縮の様子

図 2 に Cygnus 単体ノードにおける CPU 版から GPU 版、さらにそこから CPU・GPU 間データ転送が除かれた場合の実行時間短縮の例を示す。全処理を GPU 化することで、大幅な処理時間の短縮が図られていることがわかる。実行時間の短い微小関数は並列性が低いことが多いため、場合によっては GPU オフローディングにより CPU よりも実行時間が長くなることもある。しかし、ここに示すようにデータ転送時間のオーバーヘッドの方が多いことで、結果的に総合性能は向上する。

今年度の研究では、さらに GPU 上のメモリ管理についても最適化を行った。これまで、GPU 版の City-LES ではメモリ確保のオーバーヘッドを削減するために、一度確保したデータを GPU デバイス上に定常的に残していたが、これは我々が期待していた効果を与えておらず、サブルーチンの呼び出し毎にメモリが動的に確保・解放されていることがわかった（図 3）。この部分を改良し、一度確保した配列を使い回すようにコードを変更した結果、当該部分を含む処理が Cygnus の 4 ノード実行で約 30%まで短縮された（図 4）。

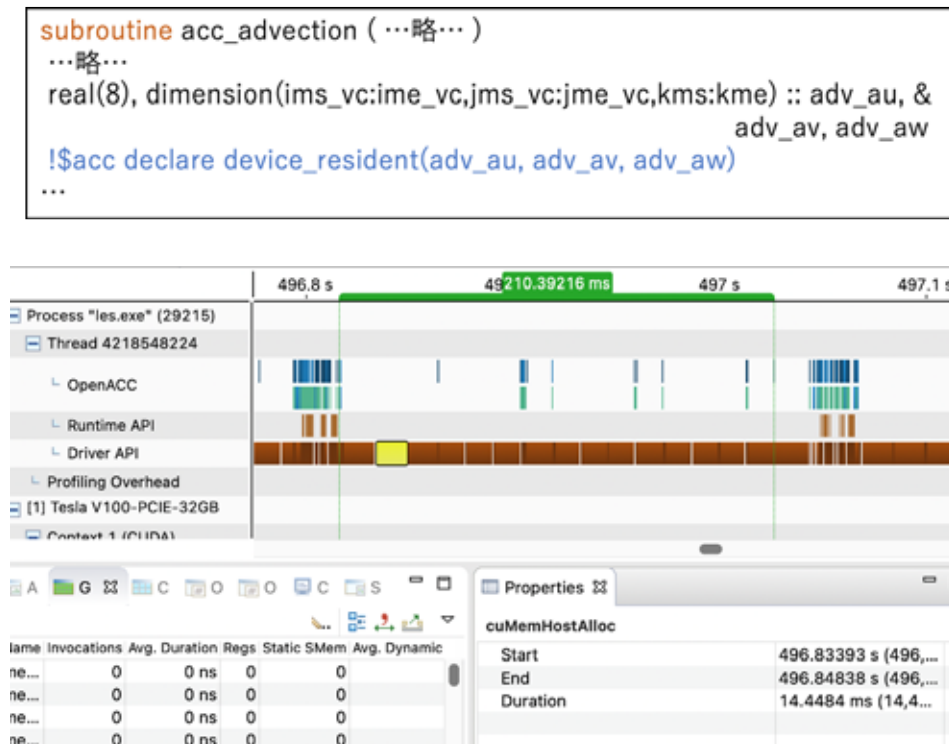


図 3 GPU 上でメモリの静的確保が動的アロケート/フリーを引き起こしてしまう様子

これらの改善により、総合的な GPU 版の性能は CPU 版に比べ最大で 22.5 倍の高速化を達成した。両者の性能差は利用するノード数に依存するが、Strong Scaling においては Cygnus の 4 ノード実行時（16 GPU 対 8 CPU）が最も速度向上が顕著であった。しかし、並列化効率が低下する 32 ノード実行時（128GPU 対 64CPU）でも性能差は 11.2 倍で、GPU 版の優位性が証明された。両バージョンの性能比較と、GPU 版の Strong Scaling 並列性能について図 5 に示す。

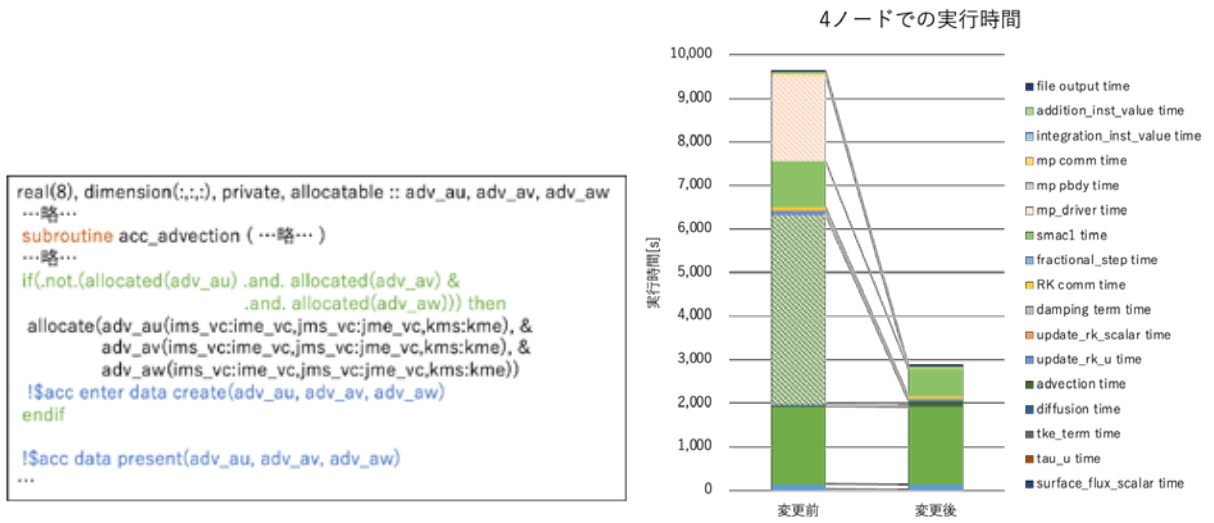


図4 メモリ管理方法を変更し配列を使い回すことによる速度向上

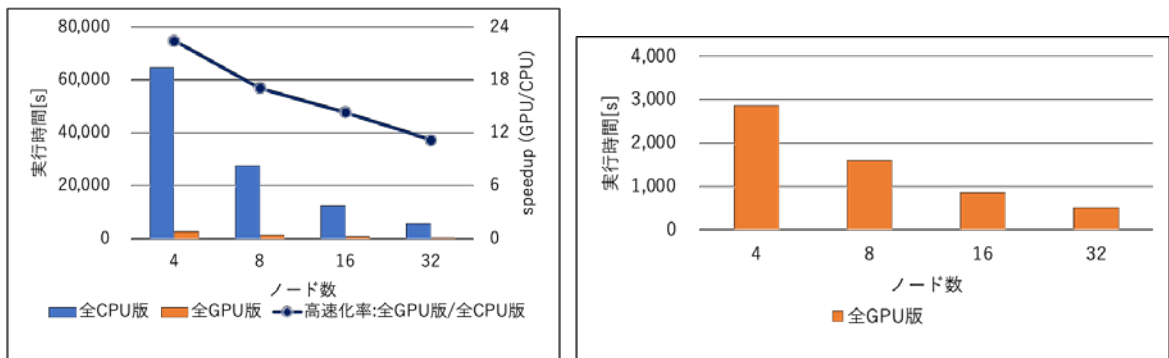


図5 Cygnus (4ノード～32ノード) 上での Strong Scaling 性能：CPU 版対 GPU 版の速度差と GPU 版の並列化効率 (左) と GPU 版の実行時間 (右)

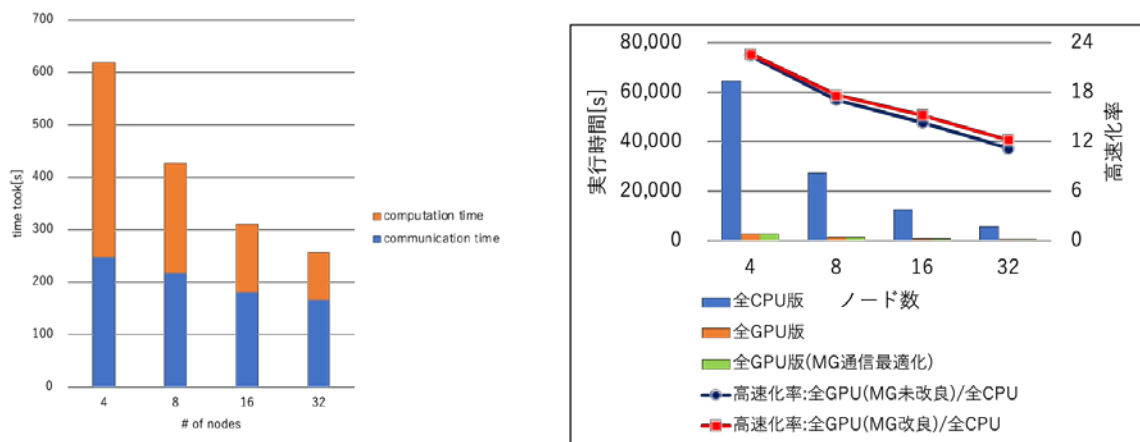


図6 GPU 版の Strong Scaling 実行における並列通信オーバーヘッド (左) と Multi-Grid 法の通信アルゴリズム改善による性能向上 (右)

さらに、最終的な性能チューニングとして、ポアソン方程式の求解における Multi-Grid 法処理の GPU 化を行った。これまでの実装では、図 6 (左) に示すように、Strong Scaling では通信処理が明らかなボトルネックになっていた。主要因が Multi-Grid 法の GPU 化における通信時間であることが判明し、いくつかのアルゴリズム改良を行ったが、劇的な性能向上には至らなかったが、最も並列処理効率が悪かった 32 ノードの場合、元々 11.2 倍だった CPU 版との性能差が 12.2 倍に向上した。

完全 GPU 化と性能チューニングにより、例えば東京駅周辺の気象モデルである TOKYO2020 の Cygnus 上の 32 ノード実行について、従来の CPU 版では 154 時間かかったジョブが 8.7 時間に短縮される。Cygnus の運用規定では 1 ジョブの最大連続実行時間は 24 時間に制限されている。これまではジョブを 24 時間未満で打ち切り、暫定結果をファイル出力し、次の実行でこれを読み戻す処理を続けていたが、ジョブ実行が 24 時間未満となり、そのプロセスが不要となった。スーパーコンピュータの利用効率としてもこの差は極めて大きい。これらの研究成果は国際会議 NPC2021 及び情報処理学会第 183 回 HPC 研究会にて発表した。

本共同研究は令和 3 年度で終了し、完成した GPU 版 City-LES を今後は地球環境研究部門で実際の計算に用いていく予定である。

[3] 数論変換の高速化 (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、Intel Advanced Vector Extensions 512 (AVX-512) 命令を用いて NTT カーネルをベクトル化すると共に、OpenMP を用いて NTT を並列化して性能評価を行った。

n 点 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。

$$y(k) = \sum_{j=0}^{n-1} x(j) \omega_n^{jk} \bmod p, \quad 0 \leq k \leq n-1$$

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 $O(n^2)$ 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 7 に示す。

Algorithm 1 Stockham radix-2 NTT algorithm

Input: $n = 2^q$, $X_0(j) = x(j)$, $0 \leq j \leq n-1$, and ω_n is the primitive n -th root of unity.

Output: $y(k) = X_q(k) = \sum_{j=0}^{n-1} x(j)\omega_n^{jk} \bmod p$, $0 \leq k \leq n-1$

```

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
5:     for  $k$  from 0 to  $m-1$  do
6:        $c_0 \leftarrow X_{t-1}(k+jm)$ 
7:        $c_1 \leftarrow X_{t-1}(k+jm+lm)$ 
8:        $X_t(k+2jm) \leftarrow (c_0 + c_1) \bmod p$ 
9:        $X_t(k+2jm+m) \leftarrow \omega_n^{jm}(c_0 - c_1) \bmod p$ 
10:    end for
11:  end for
12:   $l \leftarrow l/2$ 
13:   $m \leftarrow 2m$ 
14: end for

```

図 7 基数 2 の Stockham NTT アルゴリズム

NTT の計算では、剰余乗算が計算時間の大半を占めている。Montgomery 乗算を用いることで時間の掛かる除算を実質的に行うことなく、乗算、加減算およびシフト演算のみで剰余乗算を行えることが知られている。

図 7 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。 $0 \leq a, b < N$ の場合の剰余加算 $c = (a + b) \bmod N$ は、加算 $c = a + b$ と、 $c \geq N$ の場合の条件付き減算 $c - N$ に置き換えることができる。このような条件付き減算は分岐を伴うが、符号なし整数値 c および N に対する 2 の補数のラップアラウンド演算による最小値演算 $\min(c, c - N)$ に置き換えることにより、分岐を回避することができる。Intel AVX-512F (Foundation) 命令セットでは、64 ビット符号なし整数の最小値演算に対する `vpmínuq` 命令がサポートされている。

Intel AVX-512IFMA (Integer Fused Multiply-Add) 命令セットは、Cannon Lake、Ice Lake、および Tiger Lake マイクロアーキテクチャでサポートされている。Intel AVX-512IFMA 命令セットは、52 ビットの符号なし整数の乗算を行い、104 ビットの間中結果の下位と上位をそれぞれ生成する `vpmadd52luq` 命令と `vpmadd52huq` 命令をサポートしている。これらの下位と上位の値は 64 ビットアキュムレータに加算される。このような演算は C 言語ではサポートされていないため、Intel AVX-512IFMA 命令を用いるには、Intel AVX-512 の組み込み関数を用いるか、インラインアセンブラを用いる必要がある。

Algorithm 2 Modified Montgomery multiplication algorithm

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

Output: $C = AB\beta^{-1} \bmod N$ such that $0 \leq C < N$

```

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

図 8 修正 Montgomery 乗算アルゴリズム

乗算の上半分を計算する命令を持つプロセッサでは、図 8 に示す修正 Montgomery 乗算アルゴリズムが効率的である。このアルゴリズムで $\beta = 2^{52}$ とすると、3 行目で 52 ビット整数の加算が行われるが、`vpmadd52huq` 命令は 64 ビット整数の加算を行えるので、オーバーフローは発生しない。

```

__m512i _mm512_mulmod52_epu64(__m512i a, __m512i b, __m512i N, __m512i mu)
/* Compute (a * b * 2^-52) mod N. We need mu = -N^-1 mod 2^52. */
{
    __m512i c, q, t;

    t = _mm512_madd52lo_epu64(_mm512_set1_epi64(0), a, b);
    q = _mm512_madd52lo_epu64(_mm512_set1_epi64(0), t, mu);
    t = _mm512_madd52hi_epu64(_mm512_min_epu64(q, _mm512_set1_epi64(1)),
                              q, N);
    t = _mm512_madd52hi_epu64(t, a, b);
    c = _mm512_min_epu64(t, _mm512_sub_epu64(t, N));

    return c;
}
```

図 9 Intel AVX-512 組み込み関数を用いたパックド 52 ビット整数の Montgomery 乗算

図 9 に、Intel AVX-512 組み込み関数を用いたパックド 52 ビット整数の Montgomery 乗算を示す。`_mm512_set1_epi64()`、`_mm512_madd52lo_epu64()`、`_mm512_min_epu64()`、`_mm512_madd52hi_epu64()` および `_mm512_sub_epu64()` は、それぞれ `vpbroadcastq`、`vpmadd52luq`、`vpm512uq`、`vpmadd52huq` および `vpsubq` 命令に対応する。

また、six-step FFT アルゴリズムと呼ばれる手法は NTT にも適用可能であるので、OpenMP を用いて six-step NTT を並列化した。

性能評価として、以下の4つの実装の性能を Intel Xeon Platinum 8368 (Ice Lake 2.4 GHz、38 コア、76 スレッド) を用いて比較した。

- ・提案する実装 (AVX-512F)、modulus は 62 ビット
- ・提案する実装 (AVX-512IFMA)、modulus は 52 ビット
- ・Intel HEXL 1.2.4 (AVX-512DQ)、modulus は 62 ビット
- ・Intel HEXL 1.2.4 (AVX-512IFMA)、modulus は 50 ビット

提案する実装を 1~76 スレッドで実行した。順方向 NTT の経過時間が 1 秒を超えるまで繰り返し回数を 2 倍にし、平均経過時間を計測した。ひねり係数のテーブルは事前に用意した。

Intel HEXL は並列実行をサポートしていないため、シングルスレッドで実行した。

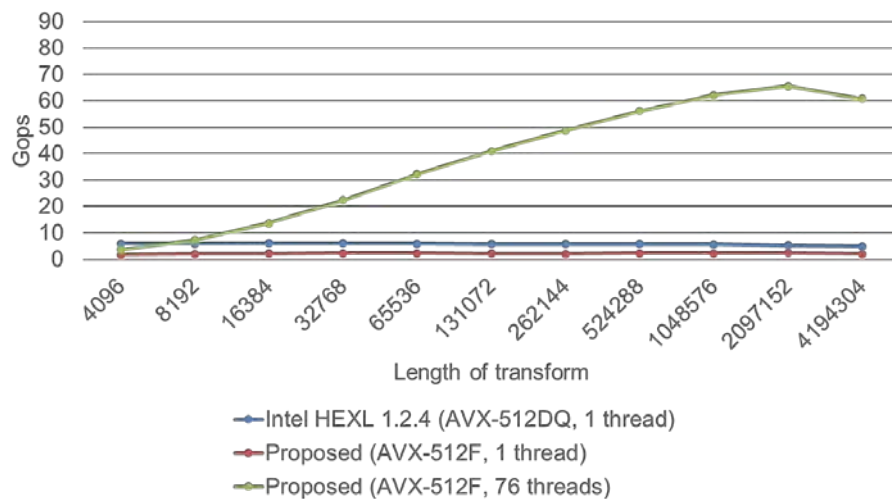


図 10 Intel AVX-512F または AVX-512DQ 命令を用いた NTT の性能 (Intel Xeon Platinum 8368, 38 コア)

図 10 は、Intel AVX-512F または AVX-512DQ 命令を用いた NTT の性能を示している。図 10 に示すように、提案する実装 (AVX-512F) はシングルスレッド実行において、Intel HEXL (AVX-512DQ) よりも遅いことが分かる。Six-step NTT は並列化に適しているが、3 回の行列転置が必要であり、この行列転置のオーバーヘッドが Intel HEXL より遅い理由であると考えられる。この性能評価で用いた Intel Xeon Platinum 8368 プロセッサは 57MB の L3 キャッシュを備えているため、最大で 2^{21} 点 NTT が L3 キャッシュに収まる。キャッシュブロッキングを用いた six-step NTT はキャッシュにデータが収まらない場合に有効であるが、Intel HEXL は 2^{22} 点 NTT までしか実行できなかったため、提案する実装の優位性が発揮されなかった可能性がある。

Intel HEXL (AVX-512DQ) が提案する実装 (AVX-512F) よりも高速なもう一つの理由は、Intel HEXL (AVX-512DQ) が Intel AVX-512DQ (Doubleword and Quadword) 命令セットでサ

ポートされている `vpmullq` 命令を用いて 64 ビット×64 ビット→64 ビットの整数乗算を行っているためである。提案する実装 (AVX-512F) は、76 スレッドで $n \geq 2^{13}$ の場合、Intel HEXL (AVX-512DQ) より高速に実行される。

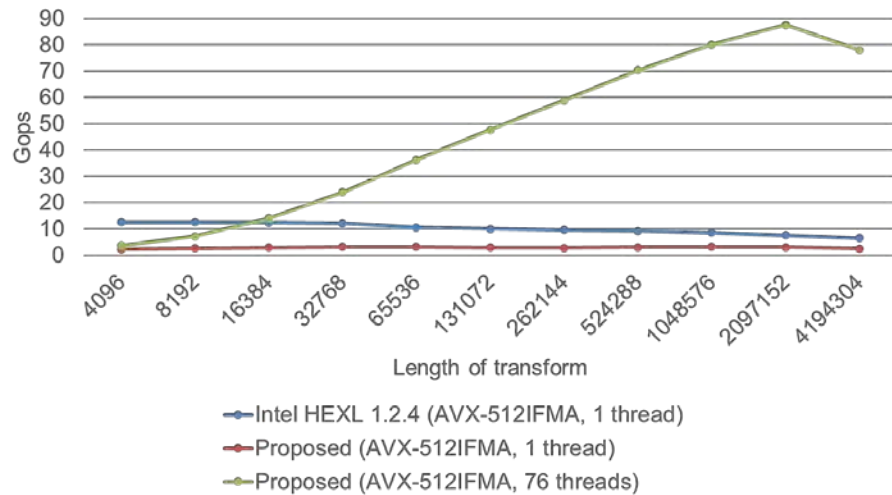


図 11 Intel AVX-512IFMA 命令を用いた NTT の性能 (Intel Xeon Platinum 8368, 38 コア)

図 11 は、Intel AVX-512IFMA 命令を用いた NTT の性能を示している。図 11 に示すように、提案する実装 (AVX-512IFMA) はシングルスレッド実行において、Intel HEXL (AVX-512IFMA) よりも遅いことが分かる。提案する実装 (AVX-512IFMA) は、76 スレッド、 $n \geq 2^{14}$ で Intel HEXL (AVX-512IFMA) より高速に実行される。

図 10 と図 11 を比較すると、提案する実装 (AVX-512IFMA) はシングルスレッド実行時および 76 スレッド実行時に、提案する実装 (AVX-512F) よりも高速に実行された。これは、提案する実装 (AVX-512IFMA) が Intel AVX-512F 命令を用いて複数の Montgomery 乗算を行うため、より少ない命令数で実行できるためである。ただし、modulus のサイズは提案する実装 (AVX-512F) が 62 ビットであるのに対し、提案する実装 (AVX-512IFMA) では 52 ビットに削減されている。

[4] 数学定数に対する二進 BBP 型公式の計算における Montgomery 乗算の使用 (高橋)

π のような数学定数の n 桁目の数字だけを計算することは、最初の n 桁をすべて計算するよりも簡単ではないと広く信じられていた。ところが、1995 年に発見された BBP (Bailey–Borwein–Plouffe) 型公式により、いくつかの超越数の n 桁目の数字だけをさまざまな基数で計算できることが示された。BBP 型公式は数百桁以上の多倍長精度演算が不要 (128 ビット程度の精度で十分) であり、容易に実装できる。またメモリをほとんど必要としないという特徴がある。

$\log 2$ に対する BBP 型公式は以下の式で表される。

$$\log 2 = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k2^k}$$

2 進数で $n+1$ ビット目から始まる $\log 2$ の数ビットを計算することを考える。これは $\{2^n \log 2\}$ (ここで $\{x\} \equiv x - [x]$ とする) を求めることと等価になることから、以下の式が得られる。

$$\{2^n \log 2\} = \left\{ \left(\sum_{k=1}^n \frac{2^{n-k}}{k} \right) + \sum_{k=n+1}^{\infty} \frac{2^{n-k}}{k} \right\} = \left\{ \left(\sum_{k=1}^n \frac{2^{n-k} \bmod k}{k} \right) + \sum_{k=n+1}^{\infty} \frac{2^{n-k}}{k} \right\}$$

この式の 1 番目の総和における分数の分子において、 2^{n-k} を $2^{n-k} \bmod k$ に置き換えることができるのは、小数部分だけを計算すればよいためである。2 番目の総和については、分数の値が機械イプシロン以下になるまで高々数十項を計算すればよい。

この BBP 型公式の計算において最も時間を要するのは、べき剰余 $2^{n-k} \bmod k$ である。べき剰余計算はバイナリ法と Montgomery 乗算を用いることで効率的に行えることが知られている。Montgomery 乗算を 2 進数で計算する場合、剰余計算の法 (modulus) は奇数でなければならない。しかし、1 番目の総和において分数の分母 k が偶数である場合、べき剰余 $2^{n-k} \bmod k$ の法 k も偶数になるため、Montgomery 乗算を直接用いることができない。そこで、 $\{2^n \log 2\}$ を計算する式を以下のように変形する。

$$\begin{aligned} \{2^n \log 2\} = & \left\{ \sum_{k=1}^{n-\lfloor \log_2 n \rfloor} \frac{2^{n-k-\text{ntz}(k)} \bmod D(k)}{D(k)} \right\} + \left\{ \sum_{\substack{k=n-\lfloor \log_2 n \rfloor+1 \\ n-k-\text{ntz}(k) \geq 0}}^n \frac{2^{n-k-\text{ntz}(k)} \bmod D(k)}{D(k)} \right\} \\ & + \left\{ \sum_{\substack{k=n-\lfloor \log_2 n \rfloor+1 \\ n-k-\text{ntz}(k) < 0}}^{\infty} \frac{2^{n-k-\text{ntz}(k)}}{D(k)} \right\} \end{aligned}$$

ここで、 $D(k) = k/2^{\text{ntz}(k)}$ 、 $\text{ntz}(k)$ は k の最下位ビットから連続する 0 のビット数 (Number of Trailing Zero、以下 NTZ) である。 $D(k)$ は必ず奇数になることから、Montgomery 乗算を用いてべき剰余計算を行うことができる。多くのプロセッサは NTZ を求めるビットスキャン命令を持っているので、そのようなプロセッサでは $\text{ntz}(k)$ を高速に求めることができる。

BBP 型公式の一般形は以下の記法で表すことができることが知られている。

$$P(s, b, m, A) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{b^k} \sum_{j=1}^m \frac{a_j}{(mk + j)^s}$$

ここで、 b 、および m は整数であり、 $A = (a_1, a_2, \dots, a_m)$ は整数のベクトルである。次数は s であり、基数は b である。この記法を用いると、 π および $\log 2$ に対する BBP 型公式は以下のように簡潔に表すことができる。

$$\pi = P(1, 16, 8, (4, 0, 0, -2, -1, -1, 0, 0))$$

$$\log 2 = \frac{1}{2} P(1, 2, 1, (1))$$

b 進数で $n+1$ 桁目から始まる $P(s, b, m, A)$ の数値は以下のようにして計算することができる。

$$\begin{aligned} \{b^n P(s, b, m, A)\} &= \left\{ \sum_{j=1}^m a_j \left\{ \left(\sum_{k=0}^n \frac{b^{n-k}}{(mk+j)^s} \right) + \sum_{k=n+1}^{\infty} \frac{b^{n-k}}{(mk+j)^s} \right\} \right\} \\ &= \left\{ \sum_{j=1}^m a_j \left\{ \left(\sum_{k=0}^n \frac{b^{n-k} \bmod (mk+j)^s}{(mk+j)^s} \right) + \sum_{k=n+1}^{\infty} \frac{b^{n-k}}{(mk+j)^s} \right\} \right\} \end{aligned}$$

この式は、 $b = 2^c$ とすると以下のように変形できる。

$$\begin{aligned} \{b^n P(s, b, m, A)\} &= \left\{ \sum_{j=1}^m a_j \left\{ \sum_{k=0}^{\lfloor (cn - \lfloor \log_2(mn+j)^s \rfloor)/c \rfloor} \frac{2^{c(n-k) - \text{ntz}((mk+j)^s)} \bmod D((mk+j)^s)}{D((mk+j)^s)} \right\} \right. \\ &\quad + \left\{ \sum_{\substack{k=\lfloor (cn - \lfloor \log_2(mn+j)^s \rfloor)/c \rfloor + 1 \\ c(n-k) - \text{ntz}((mk+j)^s) \geq 0}}^n \frac{2^{c(n-k) - \text{ntz}((mk+j)^s)} \bmod D((mk+j)^s)}{D((mk+j)^s)} \right\} \\ &\quad \left. + \sum_{\substack{k=\lfloor (cn - \lfloor \log_2(mn+j)^s \rfloor)/c \rfloor + 1 \\ c(n-k) - \text{ntz}((mk+j)^s) < 0}}^{\infty} \frac{2^{c(n-k) - \text{ntz}((mk+j)^s)}}{D((mk+j)^s)} \right\} \end{aligned}$$

性能評価として、 π および $\log 2$ に対する BBP 型公式を計算する際に、Montgomery 乗算を用いた提案手法と Montgomery 乗算を用いない従来手法の実行時間を比較した。

表 1 π の 16 進 10^{10} 桁目計算の実行時間 (秒)

	従来手法	提案手法
Intel Core i3-8121U	2806.30	2213.19
Intel Xeon Gold 6230	1600.20	372.36

表 1 は、Intel Core i3-8121U と Intel Xeon Gold 6230 で π の 16 進 10^{10} 桁目を計算するのに必要な実行時間を示している。提案手法は従来手法に比べて Intel Core i3-8121U で約 1.27 倍、Intel Xeon Gold 6230 で約 4.30 倍高速であることが分かる。提案手法が従来手法よりも高速である理由としては、提案手法がべき剰余計算を行う際に Montgomery 乗算を用いているためであると考えられる。また、Intel Core i3-8121U では、Intel Xeon Gold 6230 よりも提案手法と従来手法の性能差が小さくなっているが、これは Intel Core i3-8121U が整数除算命令に要するサイクル数が少なくなっているためである。

表 2 $\log 2$ の 16 進 10^{10} 桁目計算の実行時間 (秒)

	従来手法	提案手法
Intel Core i3-8121U	2844.10	2234.79
Intel Xeon Gold 6230	1466.95	374.63

表 2 は、Intel Core i3-8121U と Intel Xeon Gold 6230 で $\log 2$ の 16 進 10^{10} 桁目を計算するのに必要な実行時間を示している。提案手法は従来手法に比べて Intel Core i3-8121U で約 1.27 倍、Intel Xeon Gold 6230 で約 3.92 倍高速であることが分かる。

[5] ストレージシステムの研究 (建部)

スーパーコンピュータの計算ノードの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 の設計を行った。アドホック並列分散ファイルシステムとは、計算ノードが割り当てられている間に計算ノードのローカルストレージを用いて一時的に構成される並列分散ファイルシステムである。並列ファイルシステムにおけるストレージ性能のボトルネックの解消を目的としている。

計算ノードのストレージシステムには NVMe SSD に加え不揮発性メモリも用いられる。不揮発性メモリは NVMe SSD と異なり、バイト単位でのアクセスが可能であり、従来のブロックデバイスを想定したファイルシステム等を用いたアクセスでは性能を活用することができない。本研究においては、不揮発性データ構造を用いたデータ管理を用い、具体的にはインメモリ不揮発性キーバリューストアを活用したストレージシステムの設計を行った。複数ノードの不揮発性メモリを用いて分散キーバリューストアを構成する。通信については、スーパーコンピュータの高速ネットワークを活用するため RDMA を用いる。分散キーバリューストアについては、ノードの増減時にデータ転送を最小化するためにコンシステントハッシングを用いる。

分散キーバリューストア上に並列分散ファイルシステムを構成するための設計を行った。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。HPC においては大規模ファイルの並列アクセスにおける性能向上が必須であるため、ファイルはチャンクで分割し分散させる。既存研究では GekkoFS が最も近いが、GekkoFS は NVMe SSD を想定し、ファイルデータはファイルシステムで管理し、メタデータは RocksDB で管理している。一方、CHFS では不揮発性メモリの性能を活用するためインメモリ不揮発性キーバリューストアをベースとした設計となっている。また、GekkoFS ではデータ分散はモジュラハッシングを用い、ノードの増減については考慮していない。

CHFS を Mochi-Margo を用いて実装した。Mochi-Margo は HPC 用の RPC ライブラリであり、InfiniBand 等の高速ネットワークを活用することが可能である。

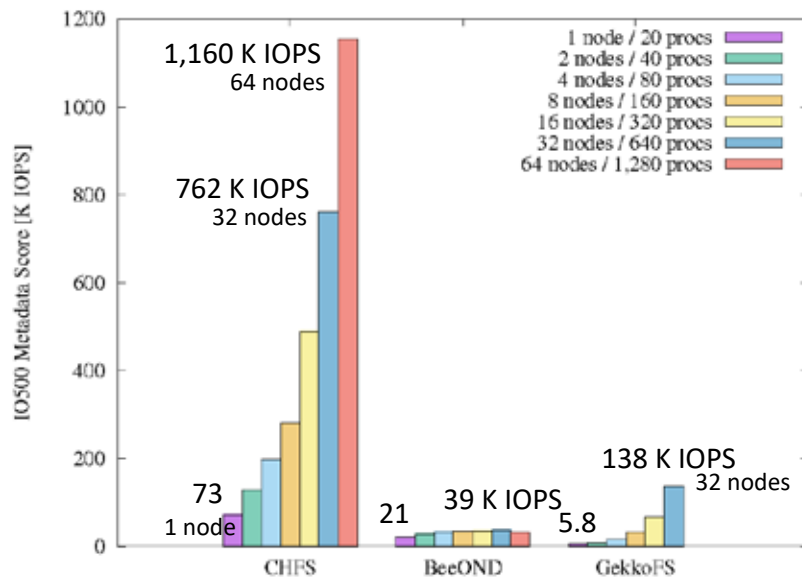


図 12 Cygnus における IO500 メタデータベンチマークの性能

図 12 に Cygnus を用いた IO500 メタデータベンチマークの CHFS の性能を示す。ノード数を 1 ノードから 64 ノードまで増やしていきメタデータ性能を計測した。IO500 メタデータベンチマークは 8 種類のメタデータアクセスパターンの性能の幾何平均である。ノード数を増加させるとメタデータ性能が向上していることがわかる。また既存システムである BeeOND と GekkoFS との性能の比較を行った。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い。GekkoFS の性能は向上するが CHFS と比較すると性能差は 5.5 倍であった。なお、本研究成果は ACM 国際会議 HPC Asia において発表を行った。

[6] 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ズコンピューティングインフラ（HPCI）の HPCI 共用ストレージ、素粒子物理学データ共有システム JLDG のシステムソフトウェアとしても利用される Gfarm ファイルシステムの研究開発を行った。

HPCI 共用ストレージにおいて、北海道大学、東北大学から東京大学のストレージ機器に書込みを行うとたまに性能が悪くなる問題が発生した。ネットワーク、ストレージ等の調査を行った結果、東京大学内の特定のストレージ機器について問題発生頻度が高くなるものの、根本的な原因を突き止めるまでには至らなかった。そのため、Gfarm ファイルシステム側でのワークアラウンドにおいて対応を図った。ワークアラウンドでは、極端にデータ転送性能が落ちた場合に、敢えて通信を切断し、再接続して転送を行うように改修した。再接続すると転送性能が改善することがあるためである。このときの問題は、極端にデータ転送性能が落ちたことをどのように検知するかである。まず、一定時間における平均通信量を計測し、平均通信量が極端に低下したときに判定することを試みたが、平均通信量は安定しておらず、検知が難しいことが判明した。そのため、別の方法を模索した。結果、データ送信を行う send システムコールのタイムアウトで検出することが適当であることが分かった。タイムアウトの時間については設定ファイルで指定可能となるよう Gfarm ファイルシステムの改修を行った。本機能については、2021 年 4 月にソフトウェアリリースを行った。HPCI の各資源提供機関において更新後のソフトウェアを用いてファイル転送を行った結果、以前のような時々転送が遅くなる問題は発生しなくなった。

また、Society 5.0、IoT など需要の高いオブジェクトストレージインターフェース (I/F) の対応のための研究開発を進めた。オープンソースのオブジェクトストレージサーバとしては MinIO がよく利用されている。MinIO のストレージインターフェースとして Gfarm を利用できるように設計、実装をすすめた。HPCI 共用ストレージでは myproxy を用いており、オブジェクトストレージサーバへの login 時に代理証明書を myproxy-server から取得する。サイズの大きいファイルはクライアントがファイルを分割して送付することとなるが、分割ファイルの送信、分割ファイルの結合、一時ファイルへの改名などの操作についてそれぞれ性能改善の余地があることが判明した。分割ファイルの送信については、分割したファイルを複数の通信ストリームを用いて並列転送することにより性能改善を図った。分割ファイルの結合については、分割されたファイルを結合しながら HPCI 共用ストレージに格納可能なように新しいコマンドを新設した。一時ファイルへの改名については、従来は 2 回行われていたがこれを 1 回に削減した。これらの改善を図ることによりアップロード性能が改善した。また、オブジェクトインターフェースを提供するサーバの導入を簡便にするため、コンテナ化を実施した。これにより、設定ファイルと CA の証明書、ユーザの対応表を準備してコンテナを作

成、起動することで導入が可能となった。成果は <https://github.com/oss-tsukuba/gfarm-s3-minio-web> で公開している。

海外の共同研究者が HPCI 共用ストレージに対して高速にデータ書込み、読込を行うため、GridFTP プラグインの整備を行った。GridFTP は標準となっている長距離高速転送プロトコルである。これにより、欧州などからの高速なデータ転送が可能となった。成果は <https://github.com/oss-tsukuba/gfarm-gridftp-dsi> で公開している。

GSI のサポート終了に伴う次期セキュリティに対する対応として、暗号通信の標準である TLS (Transport Layer Security) を HPCI 共用ストレージで用いるための概念設計、詳細設計を進め、基本的な実装を行った。さらに、現在 HPCI で用いている代理証明書をクライアント証明書として利用するための機能、信頼する中間認証局を指定するための機能等の実装を進めた。これにより、HPCI、JLDG において現在用いている代理証明書を利用して Gfarm ファイルシステムを安全にアクセスすることが可能となった。信頼する中間認証局を指定できるようにすることにより、信頼できない中間認証局が発行した信頼できない証明書を排除することが可能となる。

また、認証機構についての開発を行った。現在、HPCI 作業部会コアメンバー会議では認証方式は、OAuth2 が第一候補、Kerberos が第二候補となっている。本年度の開発においては、OAuth2 への対応を主としつつ、Kerberos の対応も行った。OAuth2 への対応として SASL の OAuth モジュールを用いる方法について検討を行い、試作を進めた。まず Gfarm ファイルシステムにおいて SASL を用いた認証の仕組みの設計を行い、SASL の OAuth モジュールにおいて指定した Keycloak に対しトークンの検証を依頼する仕組みについて設計を行った。また OAuth2 のトークンをコマンドラインで安全に取得、更新するための機構について検討を行い、試作を進めた。

本成果については Gfarm ワークショップにおいて発表した。

[7] マルチ GPU システム向けの Allreduce 処理の最適化 (額田)

現在スパコンやクラウドの多くの計算ノードは NVIDIA GPU を搭載し、HPC 及び AI 分野の高速化に用いられている。深層学習ではその長い学習時間を短縮するため複数の GPU を用いる分散学習が盛んに行われている。よく用いられるデータ分散型においては GPU 間での Allreduce 処理が高速化のために特に重要である。

NVIDIA GPU は Pascal 世代以降で NV-Link という高速ネットワークをサポートし、GPU 間を直接、あるいはスイッチ経由で低レイテンシかつ高バンド幅で接続することが可能となった。これにより複数の GPU を利用する処理の効率が向上し、Allreduce の通信も高速化された。

ノード内の複数 GPU 間の Allreduce 処理をさらに高速化するために、GPU 間を直接接続する NV-Link に加えて CPU を経由する PCI-Express によるネットワークを併用するハイブリッドアルゴリズムを提案する。GPU 間のデータ転送に関しては現状最短経路のみを使用するような実装になっているため、CPU を経由するためには一度 CPU のメモリに明示的に転送する必要がある。CPU 経由の場合には 2 段階の転送となるため PCI-Express の双方向のバンド幅を有効活用するために複数回の転送に分割してオーバーラップさせる。

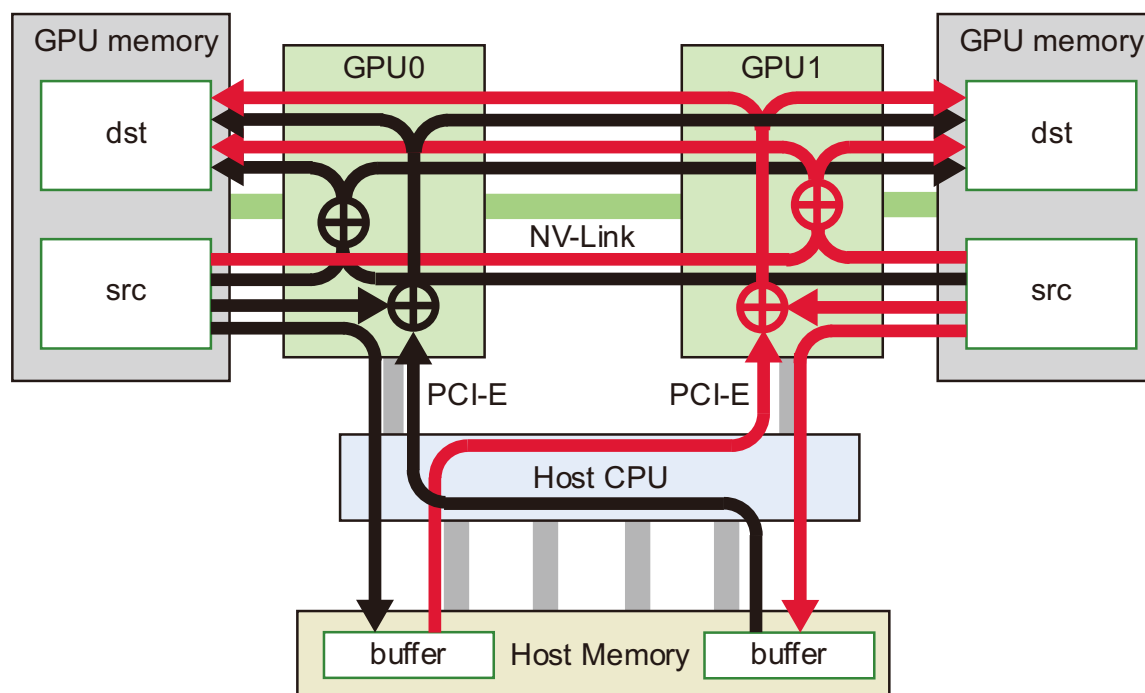


図 13 NV-Link と PCI-Express を併用するハイブリッド Allreduce アルゴリズム

Allreduce を行う配列データのサイズに合わせて最適なパラメータを選択しなければならない。NV-Link 側で処理する割合、CPU 経由通信の分割数に加えて、NV-Link 経由及び CPU 経由の 2 種類の Allreduce カーネルが同時に実行されるため、それらの優先度をスレッド数の設定により調整する。

ハイブリッドアルゴリズムに最適なパラメータを選択した上で、NVIDIA の提供する NCCL ライブラリ及び NV-Link だけを使用するアルゴリズムとの性能比較を行った。データサイズが小さい場合には CPU 経由の 2 段階転送の効率が低く、NV-Link だけを利用する方が高速である。一定以上のデータサイズになると CPU 経由の転送についてもバンド幅相応の転送速度が得られ、NV-Link だけの場合や NCCL よりも最大 19% の速度向上を実現している。

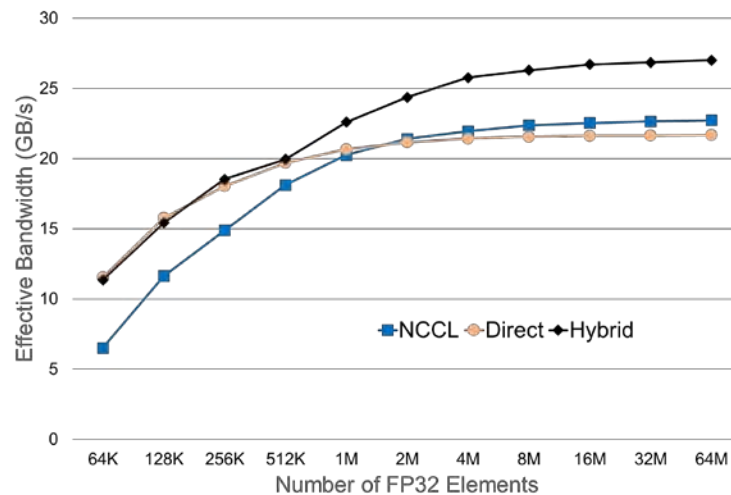


図 14 ハイブリッドアルゴリズムと既存手法との性能比較

[8] 遊休 GPU を利用するホスト・デバイス間通信の高速化（額田）

GPU 搭載スパコンの多くは複数の GPU を搭載する計算ノードを採用している。複数の GPU 及び複数の計算ノードを利用する大規模アプリケーションが実行される一方で、GPU を 1 基のみ利用するアプリケーションも依然として多いのが現状である。このように GPU を 1 基しか利用しない理由は様々で、複数 GPU を利用するプログラミングの難しさによることもあるが、並列性やクリティカルセクションなどの事情により GPU を 1 基だけ利用した方が高速に実行できる場合もある。このように計算ノードの GPU が 1 基しか利用されない場合に生じる遊休 GPU を有効活用する手法を提案する。

GPU アプリケーション自体には変更を加えない前提とすると、GPU 側での計算は引き続き GPU 1 基で実行する。そこでしばしば GPU アプリケーションの性能上のボトルネックとなるホスト・デバイス間通信の高速化に遊休 GPU を利用する。これには複数の経路を併用することによって CPU と計算に利用する GPU 間のネットワークバンド幅を向上させる必要があり、計算ノードの構成として各 GPU と CPU の間に独立した PCI-Express 等の接続があり、また GPU 間が NV-Link で接続されていることが条件となる。

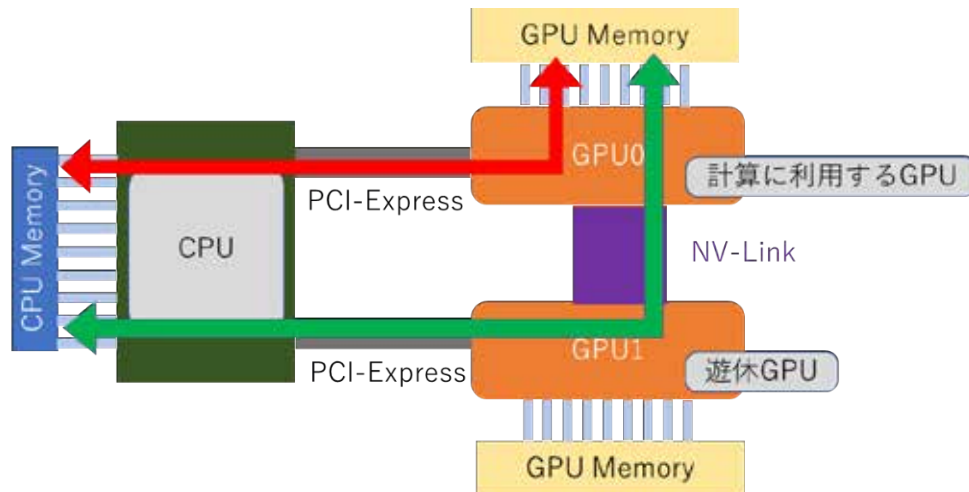
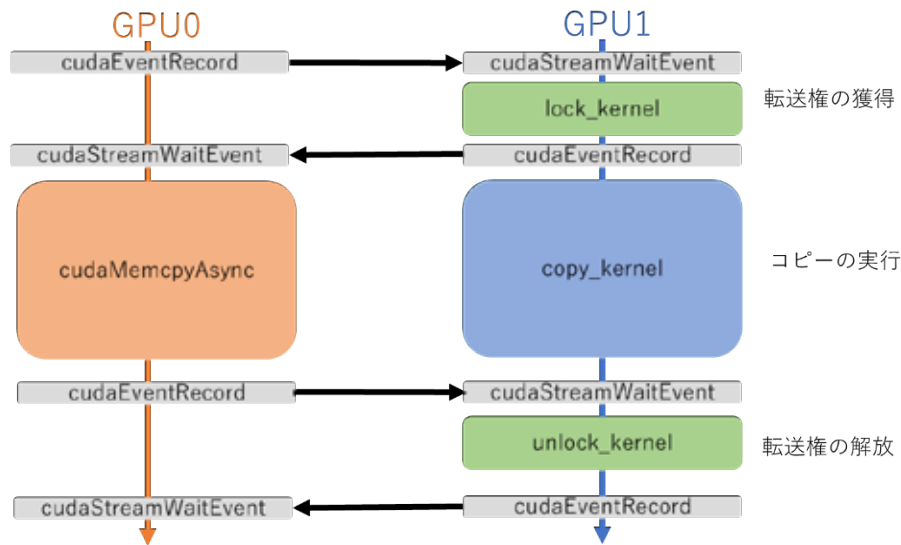


図 15 想定する複数 GPU 搭載ノードの構成

CUDA ではホスト・デバイス間転送に `cudaMemcpy()` などの API 関数を用いる。そこでアプリケーションがこの関数を呼び出した場合に複数のパスを併用して転送を行うように関数を上書きする方法を採用する。この方法では `LD_PRELOAD` 環境変数で専用ライブラリをロードするだけでアプリケーションのバイナリはそのまま用いることができる。

2 つのパスがある場合に提案手法ではそれぞれのパスは半分のサイズ of データ転送を担当する。直行する GPU0 については `cudaMemcpy()` 関数をそのまま呼び出すことで実現できるが、GPU1 経由の迂回ルートの場合は容易ではない。 `cudaMemcpy()` 関数を用いる場合には自動的に送受信バッファの場所を判定し、CPU と GPU0 の間の転送を GPU1 で行おうとしても GPU0 が転送を行ってしまい、複数のパスの併用という提案手法に用いることはできない。そこで代替手段として GPU で実行するカーネルによってこの転送を実現する。GPU0 は DMA コントローラで実行し、GPU1 はカーネルによって実行することになる。両 GPU で同じタイミングで転送が行われるようにするため GPU1 上のカーネルでの排他制御を採用し、各転送方向について同時に 1 ペアだけ転送を行うように制限する。

図 16 排他制御を用いる提案手法の `cudaMemcpyAsync()`関数の実行内容

ホスト・デバイス間で双方向転送を行う場合の提案手法の効果を評価した。データサイズが小さい場合にはもともとバンド幅ネックではなく、提案手法ではさらに2基のGPUを制御して同期をとるためのオーバーヘッドがあり転送速度は改善しない。`cudaMemcpy`の転送アルゴリズムがサイズによって切り替わるためグラフが滑らかにならないが、1MBあたりで提案手法が上回り、サイズが十分大きくなれば複数のパスを併用するバンド幅向上の効果が発揮され、2倍近い転送速度が実現される。

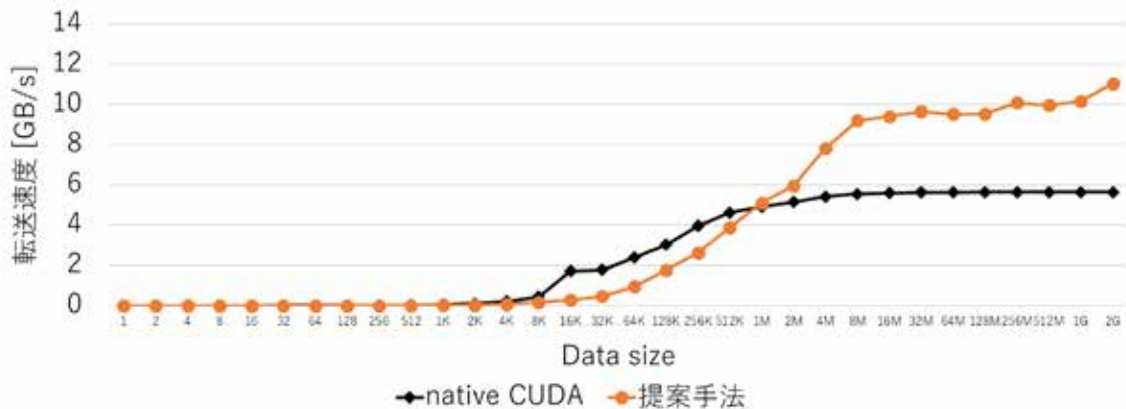


図 17 双方向転送時の提案手法による転送速度向上

[9] 鞍点型連立一次方程式に対する階層並列型数値解法の並列実装と性能評価（多田野）

鞍点型と呼ばれる連立一次方程式：

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

は偏微分方程式の初期値・境界値問題に対するメッシュレス離散化法，構造解析，流体計算などの分野に現れ，求解に多くの計算時間を占める．ここで， A は n 次正則行列， B, C は $n \times m$ フルランク行列， O は m 次零行列， $\mathbf{x}, \mathbf{f}$ は n 次元ベクトル， $\mathbf{y}, \mathbf{g}$ は m 次元ベクトルである．同方程式が大規模である場合は反復法による求解をせざるを得ないが，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求解に非常に多くの反復回数を要したり，求解ができないことがある．

我々はこの鞍点型連立一次方程式をそのまま解くのではなく，同方程式のブロック構造を利用して問題を変形し，複数次右辺連立一次方程式の求解を経由して解く手法を構築した（以下，提案法と呼ぶ）．鞍点型連立一次方程式の解ベクトル $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ は以下のように表される．

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

ここで， $U \equiv A^{-1}B, \mathbf{v} \equiv A^{-1}\mathbf{f}$ と定義し，さらに $\tilde{X} \equiv [U \ \mathbf{v}]$, $\tilde{B} \equiv [B \ \mathbf{f}]$ とおくと，行列 U とベクトル $\mathbf{v}$ は複数次右辺連立一次方程式 $A\tilde{X} = \tilde{B}$ を解くことにより得られる．得られた解を用いることで，鞍点型連立一次方程式の解ベクトル $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ を求めることができる．提案法における計算の主要部は，この複数次右辺連立一次方程式の求解部分である．この部分を高速化することにより，提案法全体の求解高速化を達成することができる．

複数次右辺連立一次方程式の右辺項 $\tilde{B}$ は互いに独立であるため，これらを分割することで並列に求解が可能となる．行列 $\tilde{X}, \tilde{B}$ を以下のように分割する．

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

ここで， $\tilde{X}^{(j)}, \tilde{B}^{(j)}$ ($j = 0, 1, \dots, P-1$) は $n \times (m/P)$ 行列である．このように分割することで，以下の複数次右辺連立一次方程式が得られる．

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

これらは互いに独立に求解が可能であるため，第 j 番目の方程式 $A\tilde{X}^{(j)} = \tilde{B}^{(j)}$ を第 j 番目の MPI プロセスに割り当てて求解を行う．さらに，各 MPI プロセスに割り当てられた複数次右辺連立一次方程式も OpenMP を用いて並列求解することが可能である．したがって，提案法は階層型の並列性をもつ解法である．複数次右辺連立一次方程式に対する有力な反復法として，ブロッククリロフ部分空間反復法がある．ブロッククリロフ部分空間反復法は，クリロフ部分空間反復法よりも少ない反復回数で求解できる可能性がある手法であり，同法を用いることでより高速な求解が期待できる．

数値実験により，提案法の並列性能を検証する．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 torso3（行列サイズ $n : 259,156$ ，非零要素数 $: 4,429,042$ ）を用い，行列 B, C の列数 m は 3,000 とし要素は乱数で設定した．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．計算ノードの CPU は Intel Xeon Gold 6126 2.6GHz (12 cores) $\times 2$ ，コンパイラは Intel Fortran ver.

19.1.3, MPI ライブラリは OpenMPI ver. 4.0.3 であり, コンパイルオプション `-axCORE-AVX512 -align array64byte` を用いた. ハイブリッド並列を用い, 各 CPU に MPI プロセスを割り付け, 分割された連立一次方程式を求解した. CPU 内部では OpenMP を用いて並列化を行った. 各連立一次方程式はブロッククリロフ部分空間反復法の 1 つである Block GWBICGSTABrQ 法で求解し, 前処理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, 前処理行列計算は全計算ノードを用いて並列計算した.

図 18 に, 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. 1 ノードあたり 2MPI プロセスが実行されているため, 分割された各連立一次方程式の右辺ベクトル数は $m = 3,000/(2N)$ となる. $N = 1$ の場合, 求解に要した時間は 358.7 秒であった. 一方, $N = 2$ の場合は 124.5 秒であり, 1 ノードを基準した場合の速度向上率は 2.88 であった. また, $N = 32$ の場合の計算時間は 10.2 秒であり, 1 ノード基準の速度向上率は 35.2 であった. 複数右辺連立一次方程式の求解にブロッククリロフ部分空間反復法を用いており, 同法の 1 反復あたりの計算量は右辺ベクトル数の二乗に比例する. そのため, $N = 1$ の場合の計算時間が突出して長くなり, ノード数を上回る速度向上率が得られたと考えられる. 以上より, 提案法は並列計算環境と親和性があり, 高い並列性能を示すことが確認された. この研究成果は, 国際会議 JSST2021 にて発表した.

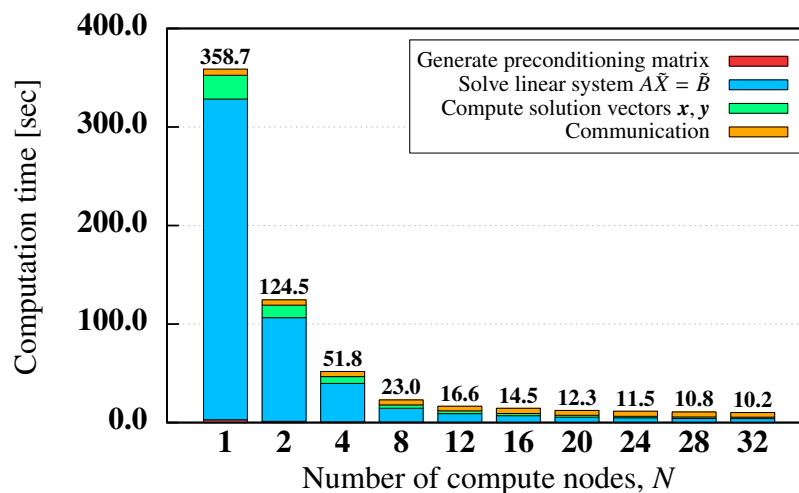


図 18 ノード数 N の変化に対する鞍点型連立一次方程式の求解時間変化

[10] 3 次元画像再構成問題で現れる鞍点型連立一次方程式の求解高速化 (多田野)

複数枚の断層画像を用いて 3 次元オブジェクトを再構成する問題を, 3 次元画像再構成問題と呼ぶ. 同問題に対する手法として, 拡張 CSRBF 法と呼ばれる方法がある. 同法では, 各

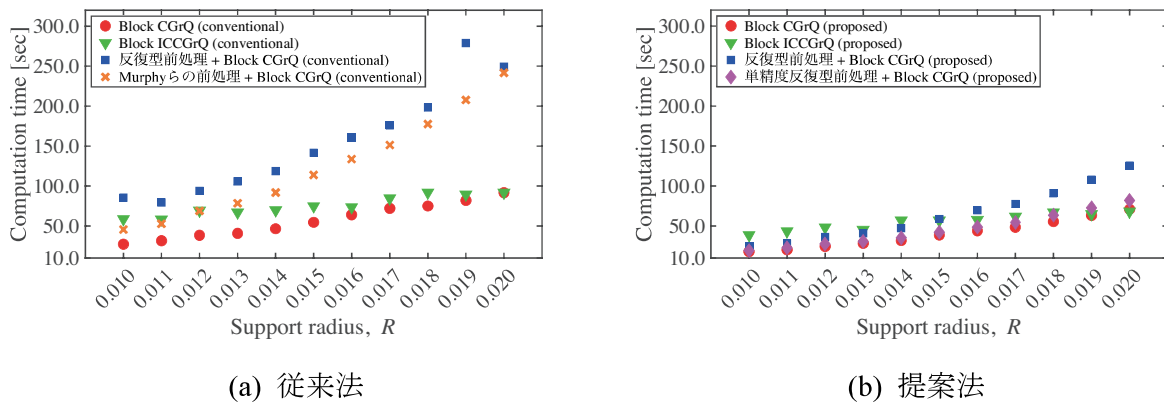
断層画像ごとに 2 次元補間関数を決定し、断層画像間の線形補間を行うことで 3 次元画像を再構成する。同法における 2 次元補間関数を決定するために、以下の鞍点型連立一次方程式を解く必要がある。

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

ここで、 A は n 次実対称行列、 C は $n \times 3$ 行列、 X, F は $n \times K$ 行列、 Y は $3 \times K$ 行列、 O_3 及び $O_{3,K}$ はそれぞれ 3 次零行列、 $3 \times K$ 零行列である。 K は断層画像の枚数を表し、行列 F の要素は断層画像の画素値によって決定される。拡張 CSRBF 法ではこの鞍点型連立一次方程式の求解に多くの計算時間を要するため、高速求解手法が必要である。そこで本研究では、前述の提案法をこの鞍点型連立一次方程式に適用し、高速化を図った。

数値実験により、拡張 CSRBF 法で現れる鞍点型連立一次方程式に対する提案法の有効性を検証する。数値実験では、カイコガ脳断層画像 127 枚の 3 次元画像再構成問題で現れる鞍点型連立一次方程式を扱った。行列 A のサイズは 262,144、 $K = 127$ である。拡張 CSRBF 法にはサポート半径 R と呼ばれるパラメータがあり、このパラメータによって行列 A の非零要素数が増える。数値実験には、筑波大学計算科学研究センターのスーパーコンピュータ「Cygnus」の 1 ノードを用いた。ノード内では OpenMP を用いて並列化し、24 スレッド並列計算した。コンパイラとして Intel Fortran ver. 19.1.0、コンパイルオプションは `-qopenmp -O3 -axCORE-AVX512 -heap-arrays` を用いた。反復法として、ブロッククリロフ部分空間反復法の一つである Block CGrQ 法を用いた。また、前処理法として不完全コレスキー分解前処理、Global CG 法による反復型前処理、鞍点型連立一次方程式に対する Murphy らの前処理法（従来法のみ）を用いた。提案法においては、反復型前処理を単精度で実行した場合も併せて性能評価を行った。

図 19 に、サポート半径 R の変化に対する鞍点型連立一次方程式の従来法と提案法の求解時間変化を示す。従来法では各前処理法ごとに計算時間のばらつきが見られ、反復型前処理と Murphy らの前処理を用いた場合は多くの時間を要する傾向にあった。また、提案法を用いることにより、従来法よりも高速に鞍点型連立一次方程式を求解することができた。本研究の成果は、日本応用数理学会 2021 年度年会において発表済みである。

図 19 サポート半径 R の変化に対する鞍点型連立一次方程式の求解時間変化

[11] Intel oneAPI を用いた GPU・FPGA 複合型演算加速（朴，小林，藤田）

Intel oneAPI とは、Intel 社により提唱されたクロスアーキテクチャプログラミングフレームワークである。SYCL をベースにした DPC++ による単一言語プラットフォームを提供し、複数のデバイス間における連携プログラミングが可能である。本研究ではまず始めに、従来は GPU のための CUDA プログラムと FPGA のための OpenCL プログラムを完全に分離してコンパイルしていたものを、oneAPI 環境で統合コンパイル・実行する環境を構築した。この環境を用いた GPU・FPGA 連携プログラミングの概要を図 20 に示す。

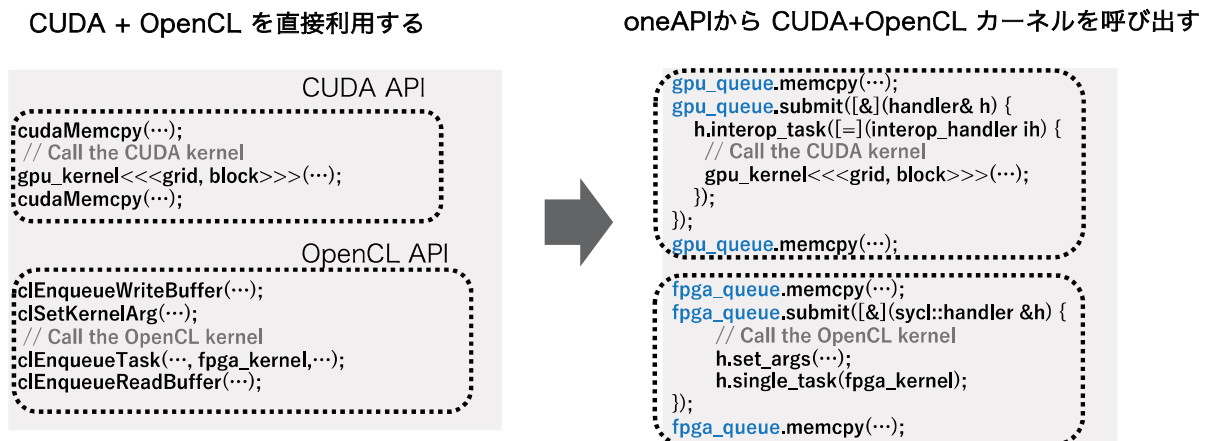


図 20 Intel oneAPI を用いた GPU・FPGA 連携プログラミングの概要

本研究では、既存の CUDA や OpenCL によるプログラム部分コードを組み合わせるためのフレームワークとして oneAPI を用いている。図に示すように、oneAPI から呼び出す計算カーネルの中身は CUDA や OpenCL で実装されており、それを oneAPI の Queue によって統一的に管理することに成功している。これにより、CUDA で記述された GPU 実装のコードや OpenCL で記述された FPGA 実装のコードを DPC++ に書き直すことなく、oneAPI の枠組みで利用・連携できることが明らかとなった。

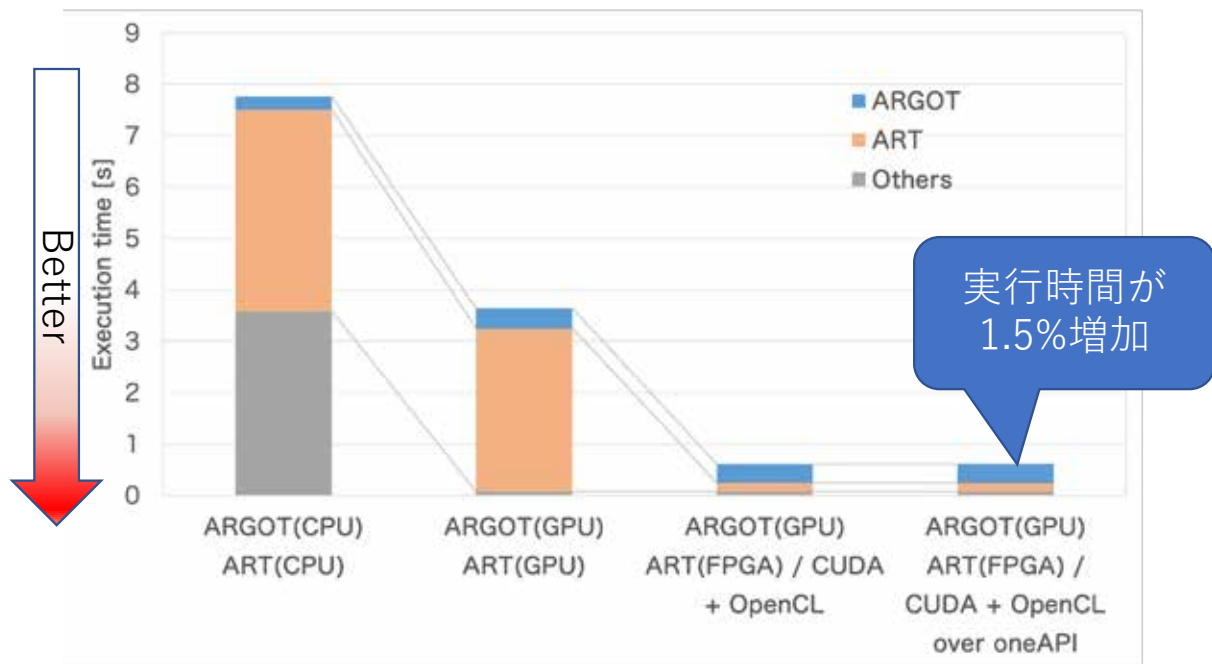


図 21 問題サイズ 32^3 における CPU, GPU, FPGA を利用した 各実装における ARGOT コード性能評価

このことを踏まえて、本研究では、これまでに CUDA と OpenCL で実装された GPU-FPGA 版 ARGOT コードを oneAPI の枠組み実行し、そのアプリケーション性能を評価した。その結果を図 21 に示す。評価には Intel Xeon Gold 6242 CPU を 1 台、PCIe カード型 NVIDIA Tesla V100 GPU を 1 台、Intel FPGA PAC D5005 を 1 台使用した。図の ARGOT(CPU)/ART(CPU) は ARGOT 法と ART 法がどちらも CPU 実装、ARGOT(GPU)/ART(GPU) はどちらも GPU 実装、ARGOT(GPU)/ART(FPGA) は ARGOT 法が GPU 実装、ART 法が FPGA 実装であることを表す。CPU 実装は C 言語ベースであり、OpenMP を用いたスレッド並列処理が適用されている。本研究では、単一の Xeon CPU (16 コア) を利用しており、1 コア 1 スレッドのマッピングでプログラムを実行した。GPU 実装は、CPU 実装をベースとしており、コードは CUDA で記述されている。問題サイズは 32^3 とした。

図に示されているように、GPU を使用したとしても ART 法は ARGOT コードの支配的な処理であることが分かる。これは、ART 法のアルゴリズムはベクトル長が部分的に縮小したり、メモリへのアクセスがランダムとなりキャッシュヒット率を低下させるなど SIMD-like なアーキテクチャに不向きな性質を孕んでいるためである。また、 32^3 の問題サイズでは、5,120 個の CUDA コアを十分に利用するための並列性が不足していることも性能が低い要因として挙げられる。一方、ART 法を FPGA にオフロードすると、FPGA に実装されたパイプラインハードウェアによって ART 法の演算加速が実現されていることが分かる。今回の評価における問題サイズが 32^3 の場合、FPGA 実装版 ART は、GPU 実装版 ART と比較して 18.7 倍の性能向上を達成した。そして、CUDA+OpenCL による実装と oneAPI 実装を比較したところ、

oneAPI 実装の実行時間が 1.5% だけ増加した。つまり、oneAPI の枠組みで CUDA カーネル・OpenCL カーネルを呼び出し、制御するオーバーヘッドは無視できるくらい小さく、CUDA+OpenCL で実装した GPU・FPGA 連携アプリケーションとほぼ同等の性能が得られることが明らかとなった。

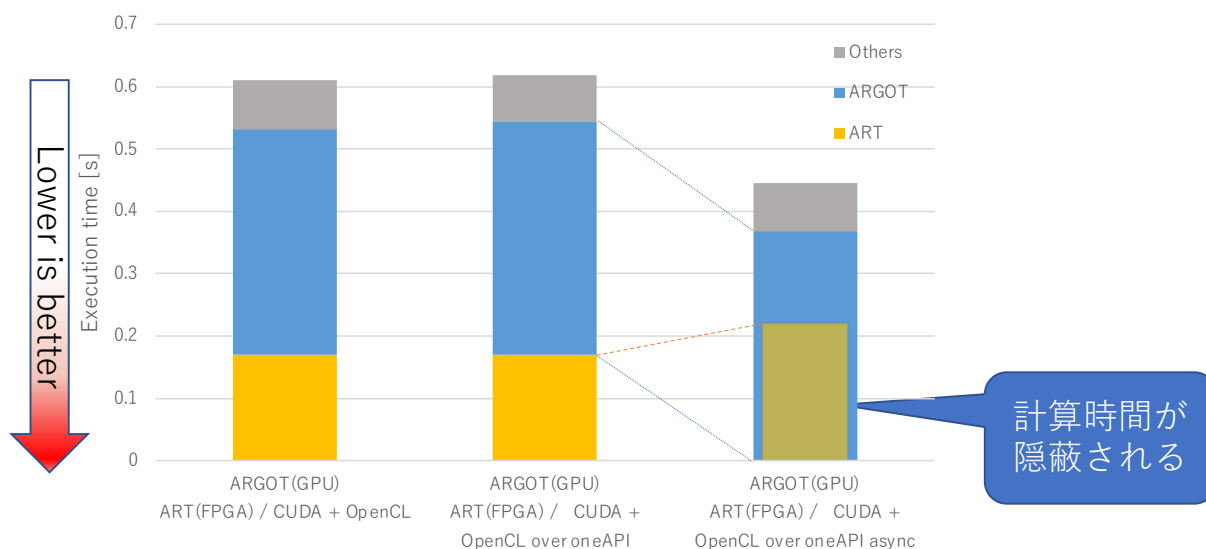


図 22 ARGOT 法および ART 法の非同期実行時の性能評価

ARGOT コードにおける ARGOT 法および ART 法は非同期に実行可能であり、その性能評価結果を図 22 に示す。ARGOT 法および ART 法の非同期実行は、それぞれの演算を担当する CUDA カーネル・OpenCL カーネルのインターフェースとなっている各 Queue を操作する OpenMP スレッドを生成し、並列実行することで実現できる。図に示すように、ART 法の実行時間が ARGOT 法の実行時間で隠蔽されており、全体として GPU 実行 (ARGOT 法) と FPGA 実行 (ART 法) を逐次的に処理する場合に比べ 1.38 倍の高速化を実現した。

[12] OpenACC+MPI による宇宙輻射輸送コード ARGOT の多ノード並列化 (朴, 小林, 藤田)

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

て、ARGOT コードを OpenACC で実装し、OpenMP ベースの CPU 実装と CUDA ベースの GPU 実装との性能評価を行った。

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

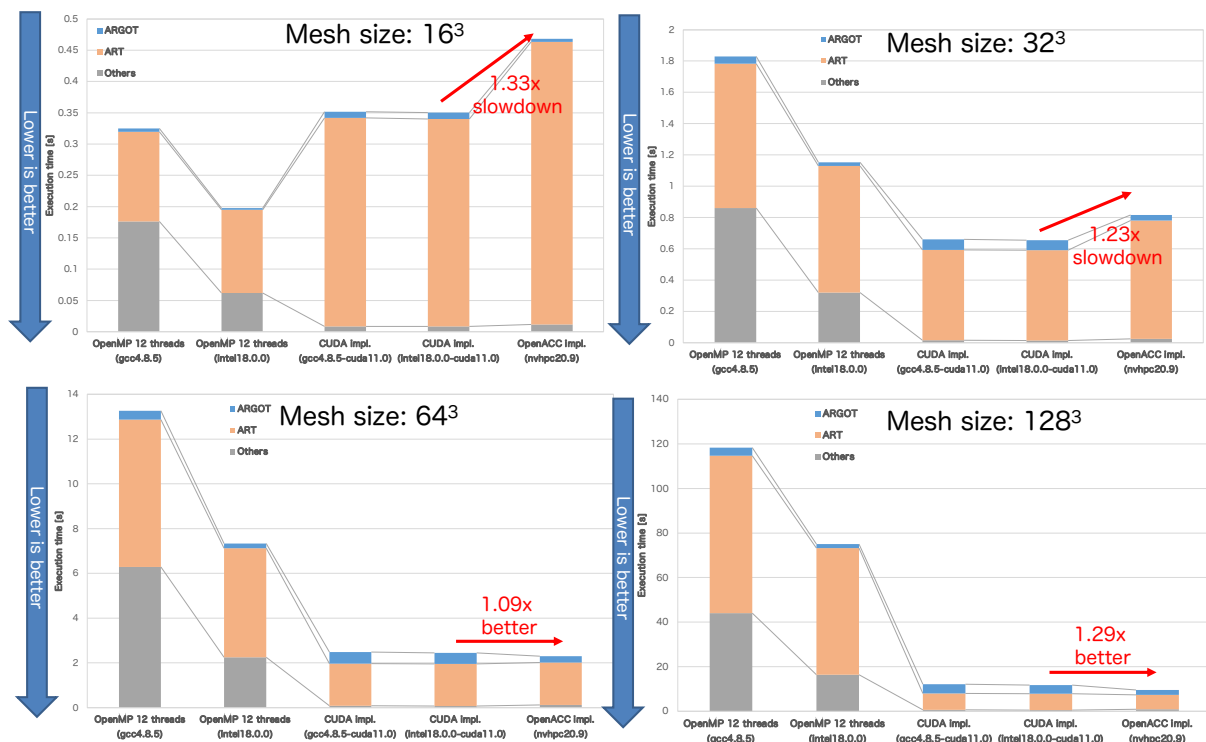


図 23 1 GPU を使用した OpenACC 実装の性能評価

OpenACC 化した ARGOT コードの性能を OpenMP ベースの CPU 実装および CUDA ベースの GPU 実装と比較した結果を図 23 に示す。性能比較には、Intel Xeon Gold 6126 CPU を 1 台、PCIe カード型 NVIDIA Tesla V100 GPU を 1 台使用し、問題サイズは 16^3 から 128^3 までとした。CUDA 実装と OpenACC 実装を比較すると、問題サイズが大きくなるにつれて OpenACC 実装の性能が CUDA 実装を最大 20%程度上回ることが確認された。ただし、CUDA 実装の ARGOT 法では pinned メモリを繰り返し確保するコードが含まれていたため、この

影響によるところが大きい。従って、この `pinned` メモリを初期化時に 1 度だけ確保する方針に変更すれば、CUDA 実装と OpenACC 実装の性能は等価になることが予想される。逆に、問題サイズが小さい場合では、OpenACC 実装の性能は CUDA 実装の 70 % から 80% 程度となり、これは OpenACC 実装の ART 法の性能が CUDA 実装の ART 法に及んでいないことに起因している。性能が及ばない原因を調査するために、ART 法のコア演算部分のループにおけるコンパイラメッセージを確認したところ、`Complex loop carried dependence of ...` と表示されており、コンパイラがデータ独立であることを上手く解析できていないことが分かった。また、 16^3 や 32^3 の問題サイズでは、5,120 個の CUDA コアを十分に利用するための並列性が不足しているため、コンパイラの解析能力による影響をより受けたと解釈している。

次に、OpenACC 版 ARGOT コードを MPI を用いてマルチノード・マルチ GPU 化し、強スケリングの条件下で ARGOT コードの性能を評価した。本研究では、図 24 に示すように 1 つの MPI プロセスに 1 つの GPU を割り当てるアプローチを採用している。

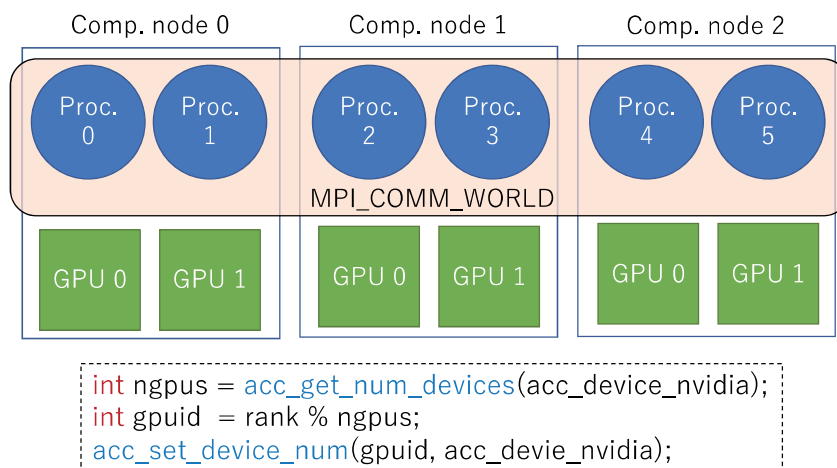


図 24 マルチノード・マルチ GPU 化けの方針 (1 GPU / MPI プロセス)

性能評価のプラットフォームとして、筑波大学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を用いる。*Cygnus* は、アクセラレータとして GPU のみを搭載した *Deneb* ノードと GPU および FPGA を搭載した *Albireo* ノードの 2 種類の計算ノードから構成されており、今回における性能評価では 2 台の *Deneb* ノード (8 GPU) を使用した。評価に用いる問題サイズは 128^3 とし、それを 1 から 8 プロセス (GPU 数) で並列実行した場合に要するシミュレーション時間を CUDA 実装と OpenACC 実装とで比較評価した。その結果を図 25 に示す。問題空間は 2 プロセスの場合は x 方向に沿って 2 分割、4 プロセスの場合は x および y 方向に沿って 2 分割、8 プロセスの場合は x, y, z 方向に沿って 2 分割されている。1 プロセスの場合における、CUDA 実装と OpenACC 実装における性能差の原因は、上述した ARGOT 法の `pinned` メモリの確保方法によるものである。そのため、

プロセス数を多くすると、プロセスあたりの問題サイズが 64^3 に近づき、CUDA 実装と OpenACC 実装の性能差は小さくなる。

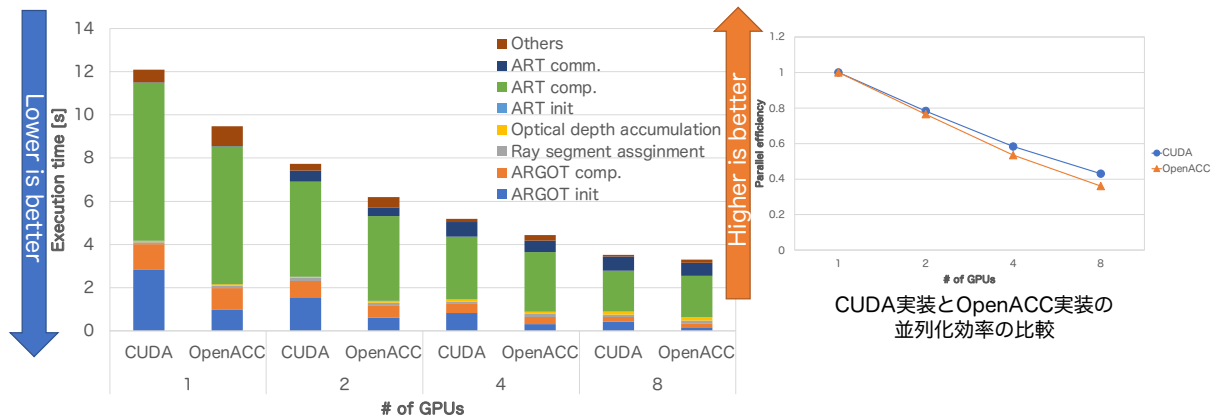


図 25 問題サイズが 128^3 の ARGOT コードを最大 8 プロセス (8 GPU) で並列実行した場合の性能比較

CUDA 実装および OpenACC 実装の並列化効率を比較すると、両者の差は数パーセント程度であるため、MPI+OpenACC 実装であっても、MPI+CUDA 実装と同等のノード並列化が実現できている。しかし、CUDA 実装においても並列化効率は 4 割程度であるため、現在、並列化効率が低下する要因について調査中である。

[13] OpenCL プログラミングによる FPGA 実装のためのソーティングライブラリ (朴, 小林, 藤田)

FPGA (Field-programmable Gate Array) は、その柔軟性により、アプリケーションに特化した計算パイプラインやデータ供給システムを構築できるため、高性能計算の研究において大きな注目を集めている。この柔軟性に加え、FPGA アプリケーションを OpenCL で開発するためのツールチェーンが FPGA ベンダーから提供されており、プログラミングに必要な労力が軽減されている。しかし、OpenCL ベースの開発手法では抽象度が高いため、きめ細かな性能チューニングを行うことが難しいという弊害がある。この問題を解決する手段の一つとしては、FPGA にオフロードする実アプリケーションに頻出する汎用の計算カーネルを FPGA 向けに最適化し、ユーザーに IP コアやライブラリの形で提供することが挙げられる。

本研究では、基本的な算術演算であるソートを対象とし、FPGA 用 OpenCL プログラミングモデルで利用可能なソーティングライブラリを開発した。図 26 に示すように、開発したソーティングライブラリでは、ソート処理を実行するためのハードウェアエンジンがハードウェア記述言語 (HDL) で実装されており、それを OpenCL カーネルコードから関数として呼び出している。これにより、アプリケーション開発者は OpenCL の抽象度に留まりながら、RTL でチューニングされたソート機能を利用できる。

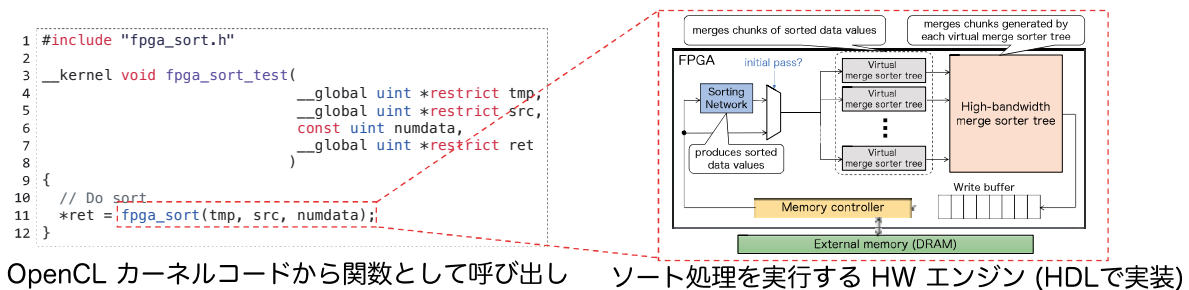


図 26 FPGA 用 OpenCL プログラミングモデルで利用可能なソーティングライブラリ

表 3 高位合成向けのマージソート ([14]: Kastner, R., Matai, J. and Neuendorffer, S.: Parallel Programming for FPGAs, ArXiv e-prints (2018).) との比較結果. レコード数は 2^{29}

Integer										
	ALMs	(%)	Registers	(%)	M20Ks	(%)	DSPs	(%)	fmax [MHz]	Throughput [MB/s]
Our sorting library	76,644	8%	219,000	6%	350	3%	2	0.03%	380.66	118
The merge sort [14]	23,642	3%	48,755	1%	147	1%	0	0%	352.6	0.32

Floating point										
	ALMs	(%)	Registers	(%)	M20Ks	(%)	DSPs	(%)	fmax [MHz]	Throughput [MB/s]
Our sorting library	79,543	9%	229,761	6%	350	3%	2	0.03%	380.66	116
The merge sort [14]	18,263	2%	50,962	1%	147	1%	0	0%	351.0	0.32

表 3 に FPGA 用 OpenCL プログラミングモデル向けに再実装したマージソートとの比較結果を示す. 我々のソートライブラリは再実装したマージソートに比べて少なくとも 2 倍のハードウェア資源を消費する一方, その動作周波数は 1.08 倍であり, ソートのスループットはソート性能は 3 桁向上する. 動作周波数に差がそれほどないにも関わらず, ソートのスループットが 3 桁以上も違うのは, 開発したソーティングエンジンが高度にパイプライン化されたアーキテクチャであるためである. ソートするデータが浮動小数点の場合でも, FPGA 上にパイプラインを構築しているため, 整数の場合とほぼ同じ性能を実現できる. 整数の場合と比較してスループットが 1.7%低下したのは, 浮動小数型のデータを比較可能な整数型データに変換・復元するためのハードウェアモジュールを含むパイプラインを埋めるためのオーバーヘッドが原因である. これらのモジュールが含まれるため, ハードウェアリソースの使用量が約 1 %増加している.

本研究で得られた成果を論文以外の形で積極的に普及していくために, 成果物であるソーティングエンジンおよびその OpenCL ライブラリのソースコードを Github にオープンソースとして公開している (https://github.com/ac2-prod/fpga_sort).

[14] HBM2 搭載する FPGA のためのメモリシステムに関する研究(藤田, 小林, 朴)

我々は Field Programmable Gate Array (FPGA) を HPC 分野で演算加速装置として用いる研究を行っており, 早期宇宙の問題を輻射輸送計算の高速化や, 複数の FPGA における並列計

算を FPGA 自身が持つ光リンクを用いて実現した。しかしながら、FPGA が持つ外部メモリ帯域は、HPC 分野で用いられる他のアクセラレータと比べて低く、HPC アプリケーションに対して FPGA を用いる際のボトルネックとなることが多く、FPGA 利用を進める上での障壁となることが多い。

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 2 つの主要コンポーネントがあり、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。

図 27 に提案するシステムの概要図および性能評価の結果を示す。本研究は本年度より開始したものであるため、システムが期待通りに動作するか検証をするためのプロトタイプ実装を行った。プロトタイプ実装であるため、FPGA が持つ 32 チャンネルの内 2 チャンネルを利用できるものであり、理論ピークに対して 71% の性能が得られた。HBM2 とキャッシュ間の転送制御のオーバーヘッドが大きく、それによって性能が低下していることがわかっており、最適化および全 32 チャンネルを利用できる実装を行うことが今後の課題である。

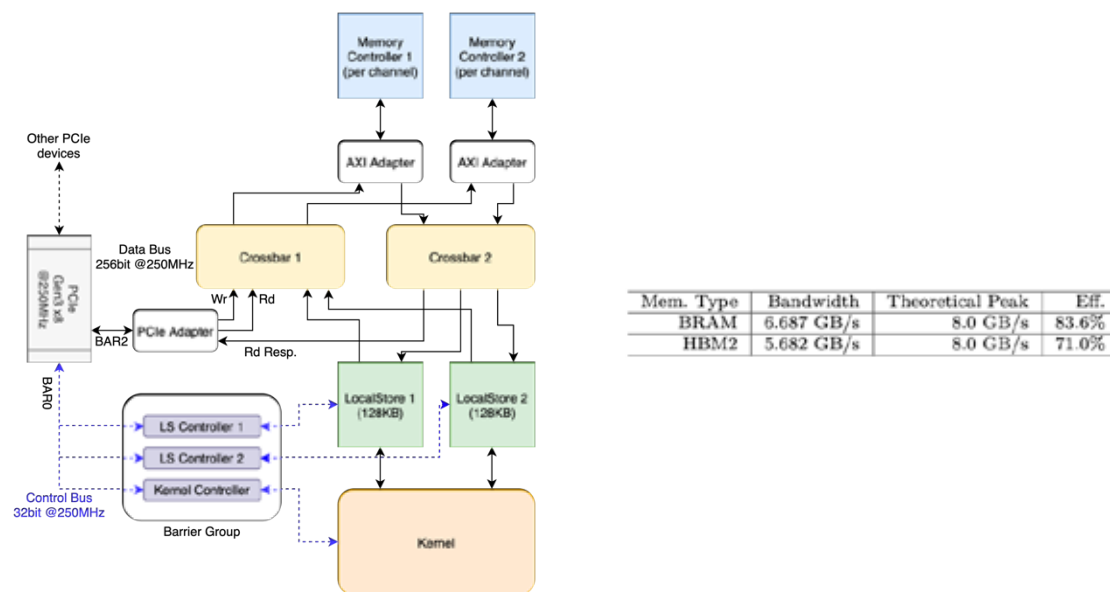


図 27 提案するメモリシステムの概要図（左）および性能評価結果（右）。

4. 教育

学生の指導状況

1. 柏野隆太，修士（工学），GPU・FPGA 複合型演算加速システムにおけるプログラミングと性能評価，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4年3月（指導：朴泰祐）
2. 渡邊 孔英，修士（工学），都市気象シミュレーションコードのOpenACCによる並列GPU化と性能評価，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4年3月（指導：朴泰祐）
3. 杉崎行優，修士（工学），A fast algorithm and its implementation for computing the number of magic series，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4年3月（指導：高橋大介）
4. 倉本健，修士（工学），不揮発性メモリの揮発性利用に関する研究，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4年3月（指導教員：建部修見）
5. 石川翔大，修士（工学），画像再構成問題に現れる鞍点型連立一次方程式に対する高速求解手法の構築，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4年3月（指導：多田野寛人）。
6. 山口博將，学士（情報科学），ルジャンドル予想の 2^{32} 以下の数値的検証，筑波大学情報学群情報科学類卒業論文，令和4年3月（指導：高橋大介）

7. 木下嵩裕, 学士 (情報工学), 不揮発性メモリにおける高速トランザクションシステムの検討, 筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 令和4年3月 (指導教員: 建部修見)
8. 小山創平, 学士 (情報科学), グラフニューラルネットワークにおける分散学習システムの設計, 筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 令和4年3月 (指導教員: 建部修見)
9. CHOI YEON KYU, 学士 (情報工学), レイトレーシング用ハードウェア RT コアの汎用計算利用の研究, 筑波大学情報学群情報科学類卒業研究論文, 令和4年3月 (指導: 額田彰)
10. 佐野由佳, 学士 (情報工学), アクセラレータ間の相互接続を考慮した GPU・FPGA 複合型演算加速と性能評価, 筑波大学情報学群情報科学類卒業研究論文, 令和4年3月 (指導: 小林諒平)

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. IEEE Cluster 2021 Outstanding Service Award, 高橋大介, 2021年9月10日
2. 情報処理学会 論文編集貢献賞, 建部修見, 2021年5月11日
3. 情報処理学会 山下研究記念賞, 藤田典久, 小林諒平, 山口佳樹, 上野知洋, 佐野健太郎, 朴泰祐「スーパーコンピュータ Cygnus 上における FPGA 間パイプライン通信の性能評価」, 2021年.

外部資金

1. 文部科学省・高性能汎用計算機高度利用事業, 朴泰祐 (代表), H29～R3 年度, 23,649 千円 (R3 年度), 「次世代演算通信融合型スーパーコンピュータの開発」
2. 科学研究費補助金基盤研究 (A), 朴泰祐 (代表), H3～R6 年度, 11,700 千円 (R3 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」
3. 科学研究費補助金基盤研究 (C), 高橋大介 (代表), H31～R3 年度, 1,170 千円 (R3 年度), 「エクサスケールシステムにおける高速フーリエ変換のアルゴリズムに関する研究」
4. 文部科学省委託研究, 建部修見, 分担, R3 年度, 62,700 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)
5. NEDO, 建部修見, 分担, H30～R5 年度, 5,865 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

6. 共同研究（富士通研究所），建部修見，代表，R3 年度，3,960 千円，Machine Learning アプリケーション向け高速データ供給技術の研究
7. 科学研究費補助金若手研究、額田彰（代表）、R2～R3 年度、1,600 千円（R3 年度）、
「GPU アプリケーションに対するシステムレベルのチェックポイント技術の確立」
8. 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（R3 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」
9. 科学研究費補助金基盤研究 (A)、小林 諒平（分担）、2021～2024 年度、500 千円(2021 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」

知的財産権

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. Kazuki Furukawa, Tomoya Yokono, Yoshiki Yamaguchi, Kohji Yoshikawa, Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Taisuke Boku, Masayuki Umemura, "An Efficient RTL Buffering Scheme for an FPGA-Accelerated Simulation of Diffuse Radiative Transfer", Proc. of FPT'21, Auckland (virtual), Dec. 2021.
2. Koei Watanabe, Kohei Kikuchi, Taisuke Boku, Takuto Sato, Hiroyuki Kusaka, "High Resolution of City-Level Climate Simulation by GPU with Multi-Physical Phenomena", Proc. of NPC2021, Paris (virtual), Nov. 2021.
3. Takeyuki Harayama, Shuhei Kudo, Daichi Mukunoki, Toshiyuki Imamura, and Daisuke Takahashi, "A Rapid Euclidean Norm Calculation Algorithm that Reduces Overflow and Underflow", Proc. 21st International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2021), Part I, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 12949, pp. 95-110, Springer, 2021.
4. Naruya Kitai, Daisuke Takahashi, Franz Franchetti, Takahiro Katagiri, Satoshi Ohshima, and Toru Nagai, "An Auto-tuning with Adaptation of A64 Scalable Vector Extension for SPIRAL", Proc. 2021 IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium Workshops (IPDPSW 2021), The 16th International Workshop on Automatic Performance Tuning (iWAPT 2021), pp. 789-797, 2021.
5. Osamu Tatebe, Kazuki Obata, Kohei Hiraga, Hiroki Ohtsuji, "CHFS: Parallel Consistent Hashing File System for Node-local Persistent Memory", Proceedings of the ACM

- International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2022), pp.115-124, 10.1145/3492805.3492807, 2022.
6. Adrián P. Diéguez, Margarita Amor, Ramón Doallo, Akira Nukada, Satoshi Matsuoka. "Efficient High-Precision Integer Multiplication on the GPU", International Journal of High Performance Computing Applications, SAGE Publications, Mar. 2022.
 7. Hiroto Tadano and Shota Ishikawa, "An efficient approach for saddle point problems using block structure", Journal of Advanced Simulation in Science and Engineering, Vol. 8, No. 1, pp. 114-127, 2021.
 8. Hiroto Tadano and Shota Ishikawa, "Accuracy improvement of approximate solutions generated by the method for solving saddle point problems using block structure", Proceedings of biennial IEEE Conference on Electromagnetic Field Computation (CEFC 2020), 4 pages.
 9. Ryuta Kashino, Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, and Taisuke Boku, "Multi-hetero Acceleration by GPU and FPGA for Astrophysics Simulation on oneAPI Environment", HPCAsia2022: International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region, pp.84-93, 2022-01
 10. Ryohei Kobayashi, Kento Miura, Norihisa Fujita, Taisuke Boku, and Toshiyuki Amagasa, "A Sorting Library for FPGA Implementation in OpenCL Programming", Proceedings of the 11th International Symposium on Highly Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies (HEART '21)./(10)/pp.1-6, 2021-06
 11. Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Yoshiki Yamaguchi and Taisuke Boku, "HBM2 Memory System for HPC Applications on an FPGA," 2021 IEEE International Conference on Cluster Computing (CLUSTER), 2021, pp. 783-786, doi: 10.1109/Cluster48925.2021.00116. (Short Paper)
 12. Kazuki Furukawa, Ryohei Kobayashi, Tomoya Yokono, Norihisa Fujita, Yoshiki Yamaguchi, Taisuke Boku, Kohji Yoshikawa and Masayuki Umemura, "An efficient RTL buffering scheme for an FPGA-accelerated simulation of diffuse radiative transfer," 2021 International Conference on Field-Programmable Technology (ICFPT), 2021, pp. 1-9, doi: 10.1109/ICFPT52863.2021.9609944.

B) 査読無し論文

1. 渡邊孔英, 菊池航平, 朴泰祐, 佐藤拓人, ドアングアンヴァン, 日下博幸, "都市気象シミュレーション City-LES の OpenACC による完全 GPU 化と並列性能評価", 研究報告ハイパフォーマンズコンピューティング (HPC) , 2022-HPC-183(6), 1-8, 2022 年 3 月.

2. 綱島隆太, 小林諒平, 藤田典久, 朴泰祐, Seyong Lee, Jeffrey S. Vetter, 村井均, 中尾昌広, 辻美和子, 佐藤三久, "OpenACC による宇宙物理シミュレーションの GPU+FPGA 協調計算の実装", 研究報告ハイパフォーマンส์コンピューティング (HPC) , 2022-HPC-183(11), 1-9, 2022 年 3 月.
3. 高橋大介, “二次元分割を用いた並列三次元 FFT における計算と通信のオーバーラップの自動チューニング”, 日本応用数理学会 2021 年度年会講演予稿集, 2 pages, 2021 年 9 月
4. 平賀弘平, 建部修見, 計算ノード上の不揮発性メモリを用いた MPI-IO バーストバッファの設計, 研究報告ハイパフォーマンส์コンピューティング (HPC) , Vol. 2022-HPC-183, No. 24, pp. 1-9, 2022 年 3 月
5. 建部修見, 計算ノードの不揮発性メモリを用いたキャッシュファイルシステムの設計, 研究報告ハイパフォーマンส์コンピューティング (HPC) , Vol. 2022-HPC-183, No. 8, pp. 1-9, 2022 年 3 月
6. 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 クラスタを用いた宇宙輻射輸送コード ARGOT の OpenACC 実装と性能評価”, 研究報告ハイパフォーマンส์コンピューティング (HPC) /2022-HPC-183(17)/pp.1-8, 2022-03
7. 小林諒平, 三浦賢人, 藤田典久, 朴泰祐, 天笠俊之, “FPGA 向け浮動小数点数型ソートライブラリの提案と実装”, IEICE-CPSY2021-8/IEICE-121(116)/pp.43-48, 2021-07
8. 小林諒平, 三浦賢人, 藤田典久, 朴泰祐, 天笠俊之, “コンパクション処理を活用した正規パス問合わせアクセラレータの FPGA 実装”, IEICE-RECONF2021-12/IEICE-121(59)/pp.62-67, 2021-06
9. 藤田典久, 小林諒平, 山口佳樹, 朴泰祐, “HBM2 搭載 FPGA をのための Addressable Cache を用いた HPC 向けメモリシステムの性能評価”, 研究報告ハイパフォーマンส์コンピューティング (HPC) , 2021-HPC-183(9), 2022/03.
10. 藤田典久, 小林諒平, 山口佳樹, 朴泰祐, “FPGA における HPC アプリケーション向け HBM2 メモリシステムの提案と実装”, 研究報告ハイパフォーマンส์コンピューティング (HPC) , 2021-HPC-180(17), 2021/07.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Taisuke Boku, “Multi-Hetero Accelerated Computing - System and Applications –“, Mini Symposium “Targeting Future Exascale and Extreme Heterogeneity Era”, in SIAMPP22, online, Feb 26th, 2022.

2. Taisuke Boku, “Successful FPGA Programming Methods and Tools for HPC”, BoF at SC21, St. Louis, Nov. 16th, 2021.
3. Taisuke Boku, “Multi-Hybrid Acceleration for Multi-Physical Simulation”, Int. Workshop WSSSP2021, Sendai, Dec. 13th, 2021.
4. Taisuke Boku, “Data Science and AI by Big Memory Supercomputer”, Int. Workshop DRBSD7-2021, in conjunction with SC21, St. Louis, Nov. 14th, 2021.
5. Taisuke Boku, “OpenACC Unified Programming Environment for GPU and FPGA Multi-Hybrid Acceleration”, OpenACC Summit 2021, Sep. 14th, 2021.
6. Taisuke Boku, “FPGA-centric multi-hybrid acceleration for HPC applications -Preparing for Extreme Heterogeneity in High Performance Computing-”, ISC21, on-line, Jul. 1st, 2021.
7. Taisuke Boku, “Successful FPGA Programming”, Birds of Feather, ISC21, on-line, Jun. 30th, 2021.
8. Taisuke Boku, “FPGAs for HPC: Open Challenges for Infrastructure and System Operation - FPGA & GPU: compensate with each other toward perfect HPC hardware solution-”, Int. Symp. HEART2021, on-line, Jun. 21st, 2021.

B) 一般講演

1. Kazuki Furukawa, Tomoya Yokono, Yoshiki Yamaguchi, Kohji Yoshikawa, Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Taisuke Boku, Masayuki Umemura, " An Efficient RTL Buffering Scheme for an FPGA-Accelerated Simulation of Diffuse Radiative Transfer", FPT'21, Auckland (virtual), Dec. 2021.
2. Koei Watanabe, Kohei Kikuchi, Taisuke Boku, Takuto Sato, Hiroyuki Kusaka, "High Resolution of City-Level Climate Simulation by GPU with Multi-Physical Phenomena", NPC2021, Paris (virtual), Nov. 2021.
3. Daisuke Takahashi, “Parallel Implementation of FFT in a Finite Field”, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP22), Seattle, WA, USA (Virtual Conference), February 26, 2022.
4. Takeyuki Harayama, Shuhei Kudo, Daichi Mukunoki, Toshiyuki Imamura, and Daisuke Takahashi, “A Rapid Euclidean Norm Calculation Algorithm that Reduces Overflow and Underflow”, The 21st International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2021), Cagliari, Italy (Virtual Conference), September 13, 2021.
5. Naruya Kitai, Daisuke Takahashi, Franz Franchetti, Takahiro Katagiri, Satoshi Ohshima, and Toru Nagai, “An Auto-tuning with Adaptation of A64 Scalable Vector Extension for SPIRAL”,

- The 16th International Workshop on Automatic Performance Tuning (iWAPT 2021), Portland, OR, USA (Virtual Conference), May 21, 2021.
6. Osamu Tatebe, Kazuki Obata, Kohei Hiraga, Hiroki Ohtsuji, "CHFS: Parallel Consistent Hashing File System for Node-local Persistent Memory", ACM International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2022), Virtual event, January 2022.
 7. Akira Nukada, "Performance Optimization of Allreduce Operation for Multi-GPU Systems", The Fifth IEEE International Workshop on Benchmarking, Performance Tuning and Optimization for Big Data Applications (BPOD 2021), IEEE, pp. 3107-3112, Dec. 2021.
 8. Hiroto Tadano, "Parallel implementation of the approach for solving saddle point problems using block structure", The 40th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST 2021), Virtual Conference, Sep. 2021.
 9. Taiga Yamashita, Taku Itoh, and Hiroto Tadano, "A parallelization strategy for incomplete decomposition-based preconditioning for solving linear systems", The 40th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST 2021), Virtual Conference, Sep. 2021.
 10. Ryuta Kashino, Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, and Taisuke Boku, "Multi-hetero Acceleration by GPU and FPGA for Astrophysics Simulation on oneAPI Environment", HPCAsia2022: International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region, January 13, 2022
 11. Ryohei Kobayashi, Kento Miura, Norihisa Fujita, Taisuke Boku, and Toshiyuki Amagasa, "A Sorting Library for FPGA Implementation in OpenCL Programming", The 11th International Symposium on Highly Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies (HEART '21), June 21, 2021
 12. Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Yoshiki Yamaguchi and Taisuke Boku, "HBM2 Memory System for HPC Applications on an FPGA," 2021 IEEE International Conference on Cluster Computing (CLUSTER), 2021, pp. 783-786, doi: 10.1109/Cluster48925.2021.00116. (Short Paper)
 13. Kazuki Furukawa, Ryohei Kobayashi, Tomoya Yokono, Norihisa Fujita, Yoshiki Yamaguchi, Taisuke Boku, Kohji Yoshikawa and Masayuki Umemura, "An efficient RTL buffering scheme for an FPGA-accelerated simulation of diffuse radiative transfer," 2021 International Conference on Field-Programmable Technology (ICFPT), 2021, pp. 1-9, doi: 10.1109/ICFPT52863.2021.9609944.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 朴泰祐, 「『富岳』を含む HPCI 資源を用いた計算科学に対する期待」, 「富岳」成果創出加速プログラム物質・材料課題合同研究会, オンライン, 2021 年 12 月 9 日.
2. 朴泰祐, 「oneAPI による FPGA と GPU の複合演算加速アプリケーション実行」, Intel FPGA Technology Day, オンライン, 2021 年 12 月.
3. 朴泰祐, 「筑波大学計算科学研究センターにおける PC クラスターのあゆみ」, PC クラスタシンポジウム 2021, オンライン, 2021 年 12 月 8 日.
4. 朴泰祐, 「アカデミアの HPC におけるクラウド利用 (または可能性)」, HPC in Cloud ワークショップ, on-line, 2021 年 5 月 19 日.

B) その他の発表

1. 渡邊孔英, 菊池航平, 朴泰祐, 佐藤拓人, ドアングアンヴァン, 日下博幸, "都市気象シミュレーション City-LES の OpenACC による完全 GPU 化と並列性能評価", 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, オンライン, 2022 年 3 月.
2. 綱島隆太, 小林諒平, 藤田典久, 朴泰祐, Seyong Lee, Jeffrey S. Vetter, 村井均, 中尾昌広, 辻美和子, 佐藤三久, "OpenACC による宇宙物理シミュレーションの GPU+FPGA 協調計算の実装", 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, オンライン, 2022 年 3 月.
3. 高橋大介, “二次元分割を用いた並列三次元 FFT における計算と通信のオーバーラップの自動チューニング”, 日本応用数理学会 2021 年度年会, オンライン開催, 2021 年 9 月 7 日.
4. 平賀弘平, 建部修見, 計算ノード上の不揮発性メモリを用いた MPI-IO バーストバッファの設計, 情報処理学会 HPC 研究会, オンライン, 2022 年 3 月
5. 建部修見, 計算ノードの不揮発性メモリを用いたキャッシュファイルシステムの設計, 情報処理学会 HPC 研究会, オンライン, 2022 年 3 月
6. 立木佑弥, 額田彰, 遊休 GPU を利用したホスト・デバイス間通信の高速化, 情報処理学会研究報告, Vol. 2022-HPC-183, No. 4, 2022 年 3 月.
7. Akira Nukada, “Hybrid Allreduce Algorithm for On-node Multi-GPU Systems using both NV-Link and PCI-Express Networks”, NVIDIA GTC 2022, Poster, Online, Mar. 2022.
8. 多田野寛人, 倉本亮世, Group-wise 更新による Block GPBiCG 法の近似解精度改善, 日本応用数理学会 2021 年度年会, オンライン, 2021 年 9 月.

9. 石川翔大, 多田野寛人, 齋藤歩, 画像再構成問題で現れる鞍点型連立一次方程式に対するブロック構造を利用した前処理の適用と性能評価, 日本応用数理学会 2021 年度年会, 2021 年 9 月.
10. 小林諒平, 藤田典久, 山口佳樹, 朴泰祐, 吉川耕司, 安部牧人, 梅村雅之, “GPU クラスタを用いた宇宙輻射輸送コード ARGOT の OpenACC 実装と性能評価”, 第 183 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 年 3 月 18 日
11. 小林諒平, 三浦賢人, 藤田典久, 朴泰祐, 天笠俊之, “FPGA 向け浮動小数点数型ソーティングライブラリの提案と実装”, SWoPP2021: 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, 2021 年 7 月 21 日
12. 小林諒平, 三浦賢人, 藤田典久, 朴泰祐, 天笠俊之, “コンパクション処理を活用した正規パス問合わせアクセラレータの FPGA 実装”, 2021 年 6 月リコンフィギャブルシステム研究会, 2021 年 6 月 9 日
13. 藤田典久, 小林諒平, 山口佳樹, 朴泰祐, “HBM2 搭載 FPGA のための Addressable Cache を用いた HPC 向けメモリシステムの性能評価”, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), 2021-HPC-183(9), 2022/03.
14. 藤田典久, 小林諒平, 山口佳樹, 朴泰祐, “FPGA における HPC アプリケーション向け HBM2 メモリシステムの提案と実装”, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), 2021-HPC-180(17), 2021/07.

(4) 著書、解説記事等

1. 今村俊幸, 荻田武史, 尾崎克久, 片桐孝洋, 須田礼仁, 高橋大介, 滝沢寛之, 中島研吾: ソフトウェア自動チューニング—科学技術計算のためのコード最適化技術—, 森北出版, 320 pages, 2021 年 9 月

7. 異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等

異分野間連携（センター内外）

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

- 量子物性研究部門と SALMON2 の OpenACC による GPU 化に関する連携

産学官連携

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
- FPGA 間通信システムに関する共同研究をドイツ・パダボーン大学と実施
- Cygnus における GPU・FPGA 協調 MD 計算に関する共同研究を米国ボストン大学と実施

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

- International Workshop on FPGA for HPC Cluster 2021, 組織委員長, IEEE Cluster2021 併設ワークショップ (オンライン), 2021 年 9 月 7 日
- Gfarm シンポジウム 2021, 東京 (ハイブリッド), 2021 年 10 月 29 日
- Gfarm ワークショップ 2022, 那覇 (ハイブリッド), 2022 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：HPCI コンソーシアム理事長
4. 朴泰祐：PC クラスタコンソーシアム理事
5. 朴泰祐：学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN) 運営委員
6. 朴泰祐：「富岳」成果創出加速課題領域総括
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. 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
10. 高橋大介：理化学研究所客員主管研究員
11. 高橋大介：HPCI 利用研究課題審査委員会レビューアー
12. 高橋大介：HPCI 連携サービス運営・作業部会委員
13. 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
14. 建部修見：HPCI セキュリティインシデント即応委員会委員
15. 建部修見：HPCI 連携サービス運営・作業部会委員

16. 建部修見：HPCI 利用研究課題審査委員会レビューアー
17. 建部修見：情報通信研究機構協力研究員
18. 建部修見：東京工業大学学術国際情報センター共同利用専門委員
19. 建部修見：特定非営利団体つくば OSS 技術支援センター理事長
20. 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
21. 小林諒平：計算科学研究センター計算機システム運用委員会委員

10. 社会貢献・国際貢献

1. Taisuke Boku: Steering Committee Chair, International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPCAsia)
2. Taisuke Boku: Steering Committee Member, IEEE Cluster
3. Taisuke Boku: Steering Committee Member, International Conference on Parallel Processing
4. Taisuke Boku: Scientific Committee Member, Supercomputing Frontier Europe 2021
5. Taisuke Boku: Program Vice Co-Chair of CCGrid2022
6. Daisuke Takahashi: International Conference on High Performance Computing in Asia Pacific Region (HPC Asia 2022) Proceedings Chair
7. Daisuke Takahashi: Special Session on Auto-Tuning for Multicore and GPU (ATMG) in Conjunction with IEEE 14th International Symposium on Embedded Multicore SoCs (MCSoc-21) Program Committee Member
8. Daisuke Takahashi: 8th International Workshop on Large-scale HPC Application Modernization (LHAM 2021) in Conjunction with 9th International Symposium on Computing and Networking (CANDAR'21) Program Committee Member
9. Daisuke Takahashi: The 21st International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2021) Publicity Committee Member
10. Daisuke Takahashi: 2021 IEEE International Conference on Cluster Computing (Cluster 2021) Program Committee Member
11. Daisuke Takahashi: The 20th International Symposium on Parallel and Distributed Computing (ISPD 2021) Program Committee Member
12. Daisuke Takahashi: The International Conference on Computational Science (ICCS 2021) Program Committee Member
13. Daisuke Takahashi: The 16th International Workshop on Automatic Performance Tuning (iWAPT 2021) Program Committee Member
14. 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幹事
15. 高橋大介：情報処理学会論文誌査読委員

16. 高橋大介：電子情報通信学会／情報処理学会 第 20 回情報科学技術フォーラム (FIT2021) 担当委員
17. Osamu Tatebe: Technical Papers Track Chair, IEEE/ACM International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC21)
18. Osamu Tatebe: Program Committee, ACM International Symposium on High Performance Distributed Computing (HPDC 2021)
19. Osamu Tatebe: Program Committee, IEEE/ACM International Symposium on Cluster, Cloud and Grid Computing (CCGrid 2021)
20. Osamu Tatebe: Publicity Co-chair and Program Committee, IEEE International Conference on Cluster Computing (Cluster 2021)
21. Osamu Tatebe, Program Committee, International Supercomputing Conference 2021
22. Osamu Tatebe: Program Committee, ACM International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2022)
23. Hiroto Tadano: Publication Co-Chair, The 40th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST 2021)
24. 多田野寛人：日本シミュレーション学会「非線形現象の高性能数値解析技術研究委員会」 副委員長
25. 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
26. Hiroto Tadano: Local Scientific Program Committee, 10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 2023)
27. 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
28. 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
29. 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
30. 小林諒平：電子情報通信学会 英文論文誌編集委員
31. 小林諒平：電子情報通信学会 ISS ソサイエティ誌編集委員
32. 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
33. 小林諒平：SWoPP 2021 実行委員 (コンピュータシステム研究会)
34. 小林諒平：SWoPP 2021 組織委員 (副組織委員長)
35. 小林諒平：xSIG 2021 プログラム委員
36. Ryohei Kobayashi：HPCAsia2022 Digital Chair
37. Ryohei Kobayashi：HEART2021 Publication Chair
38. Ryohei Kobayashi：HPCFPGA2021 Organizing Deputy Co-Chairs
39. Ryohei Kobayashi：HPCFPGA2021 Program Committee Member

- 40. Ryohei Kobayashi : FTAC 2021 Program Committee Member
- 41. Ryohei Kobayashi : CANDAR 2021 Program Committee Member
- 42. Ryohei Kobayashi : CANDAR 2021 CSA workshop Program Committee Member
- 43. Ryohei Kobayashi : COOL Chips 24 Program Committee Member

11. その他

海外長期滞在、フィールドワークなど

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、宮本 隆典
共同研究員	北川 博之
学生	大学院生 29 名、学類生 6 名

2. 概要

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

今年度は、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) 等の外部研究資金をもとに研究を進展させるとともに、計算メディカルサイエンス事業をはじめとして、センターの他部門と連携した研究を積極的に推進した。

3. 研究成果

[1] 情報統合基盤技術

(関連研究費：科研費 基盤研究(B)，NEDO)

(1) 高次元データストリームに対する効率的な外れ値検出：VOA*

外れ値検出は、他のデータとは大きく異なる特徴を有するデータポイントを発見するデータマイニングタスクである。最近では、リアルタイム性を有するストリームデータ等の増加や多様化に伴い、データストリームに対する外れ値検出の重要性が高まっている。従来の代表的な外れ値検出手法は、特徴空間におけるポイント間の距離や密度をベースにしているが、これらの手法は高次元空間では、次元の呪いのためにうまく機能しないことが指摘されている。

高次元データに対するより安定した外れ値検出方法として、角度ベース外れ値検出 (ABOD) が 2008 年に提案された。これは、特徴空間中のあるポイント p を考えた時、他のポイント対 q, r に対して pq と pr がなす角度を考える。全てのポイント対 q, r に対してこの角度を計算しその分散を基に p の外れ値度合いを測るものである。クラスターに含まれるポイント (p_2) に対する角度の分散は、クラスターの境界 (p_3) または外れ値 (p_1) のポイントに対する角度の分散よりも、広がり大きい傾向があることが期待できる (図 1)。具体的な角度ベース外れ値検出手法としてはいくつかの種類があるが、その一つとして、2012 年に Pham らによって提案された、距離による重み付けを行わず純粋に角度の分散値のみを外れ値検出に用いる VOA 手法がある。VOA は静的なデータ集合を対象としているが、本研究では、ストリームデータにそれを適用可能とし、差分計算によって動的なストリームに対して外れ値検出を効率的に行う VOA* を提案した。

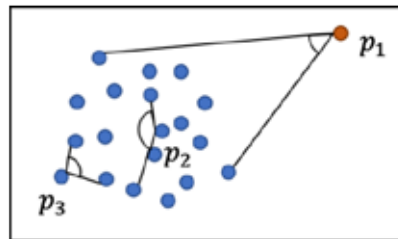


図 1. 角度ベース外れ値検出手法

VOA*は、ストリームデータに対する固定長の移動窓内のポイントを対象とし、窓内の外れ値ポイントを、窓の移動のたびに更新して検出する。時刻 t における窓内のポイント p を考えた時、外れ値度 $VOA_t(p)$ は、窓内の他の全ての対 q, r に対して pq, pr がなす角度の分散値を計算したものである。 $VOA_t(p)$ が小さい程、外れ値の可能性が高くなる。本研究では、外れ値度の閾値 τ が与えられた場合を想定し、 τ 以下の $VOA_t(p)$ をもつポイントを外れ値として検出する問題を対象とする。時間が経過し窓が移動した場合、新たなポイントが窓に加わり、古いポイントが窓から除去される。したがって、窓内のポイント p の $VOA_t(p)$ は、 t が変化するたびに变化し得る。単純な移動窓に基づく計算では、窓が移動するたびに $VOA_t(p)$ の計算を窓内の全ての p に対して繰り返す必要があるが、移動前と移動後の計算には重なりが多く、単純な計算は冗長性が非常に大きい。

VOA*は効率的な差分計算を実現するために、2つの独自のアイデアを導入した。1点目は、窓が移動した後に各ポイント p が取り得る $VOA_t(p)$ の上下限値を、窓移動前の $VOA_t(p)$ に基づき比較的 low コストの計算で導出する方法を、空間幾何学的な考察によって示したことである。これによって、 $VOA_t(p)$ の厳密な計算なし、上下限値のみを用いて外れ値か否かの判定が可能となる場合が多く発生する。すなわち、上限値が τ 以下であればその時点で外れ値であることが判明する。また、下限値が τ を超える場合は外れ値でないことが厳密計算なしに判明する。したがって、厳密な $VOA_t(p)$ の計算が必要なのは、上限値が τ を超え、下限値が τ 以下で

ある場合のみになる．これによって，コストの大きい厳密計算が大幅に削減可能である．2 つ目のアイデアは， $VOA_t(p)$ の厳密な計算が必要であることが分かった際に，この厳密計算を前回 p に対して厳密計算を行った後に生じた窓内のポイントの追加・削除履歴に戻づいて差分計算により効率的に行うことである． p の $VOA_t(p)$ の変化に影響を与えるポイントの追加，削除は多くの場合それ程多くはないため，全ての 2 点の対 q, r を対象に改めて $VOA_t(p)$ を再計算するよりも，この方法の方が厳密値の計算も効率化できる．

VOA^* の実行時効率を評価するために，人工データセットとリアルデータセットで実験を行った．窓が移動するたびに VOA を全て再計算する $NaiveVOA$ ，上下限值に基づくプルーニングは行わず毎回差分計算による厳密計算を用いて行う $IncrementalVOA$ ，上下限值に基づく厳密計算のプルーニングのみを実行する $SimpleVOA$ との性能比較を行った．窓の移動時には，1 ポイントが追加，1 ポイントが除去されるものとし，追加されたポイントと削除されたポイントの位置の差を変更した場合の実行時への影響を考慮した処理時間の測定結果を図 2 に示す． VOA^* は，特に，削除されたポイントと追加されたポイントの間の差が小さい場合に他の方法よりうまく機能する．これは，多くのポイントに対する $VOA_t(p)$ の厳密計算が上下限值を用いたプルーニングにより不要となり，かつ残った少数のポイントの $VOA_t(p)$ が窓に対する追加・削除履歴を使用して差分計算で更新されるためである．ただし，削除されたポイントと追加されたポイントの間の差が大きくなると， VOA^* の性能は $IncrementalVOA$ に近づいてくる．さらに，UCI 機械学習リポジトリから公開されている高次元リアルデータセットで VOA^* の実行時性能をテストした．図 3 に示すように， VOA^* はすべてのリアルデータセットで $IncrementalVOA$ よりも 2 倍程度優れた処理性能を示した．なお，本実験では， $SimpleVOA$ と $NaiveVOA$ は性能が低いため含まれていない．

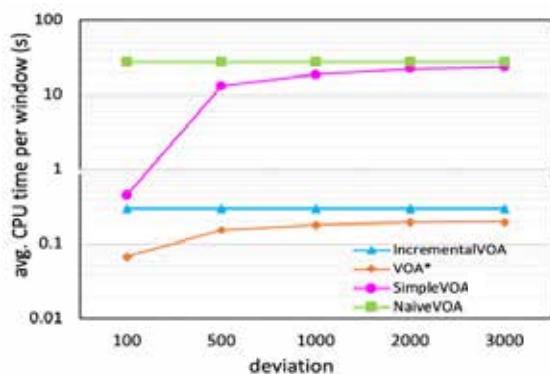


図 2. 追加・削除ポイントの差を変化させた際の性能評価

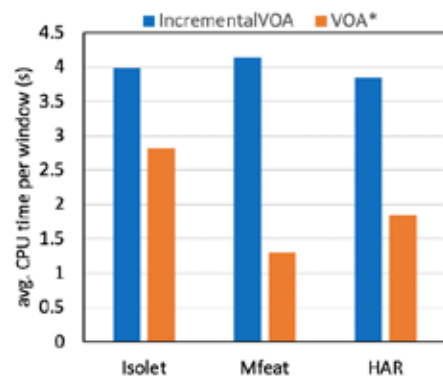


図 3. リアルデータセットによる性能評価

(2) 拡張来歴：複合的データ分析処理に対するトレーサビリティ基盤

データ分析技術の普及に伴い、実社会では様々なデータが蓄積・分析され、その結果を意思決定に活用することが広く行われている。その際、意思決定の信頼性を高めるために、導出された分析結果がどのような根拠で導出されたかを示すトレーサビリティが重要である。トレーサビリティを保証するために、これまで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。しかし近年のデータ分析には、コンテンツデータ処理や AI 処理を活用した、判断ロジックが非常に複雑な処理を伴う複合的データ解析をしばしば伴うという特徴がある。こうした複合的データ分析処理に対して、従来のデータ来歴を用いて元になった入力データを提示するだけでは、その入力データから複合的データ解析がどのような根拠で分析結果を導出したのかは説明できないという問題がある。このことを踏まえ本研究では、従来のデータ来歴だけでなく複合的データ解析の判断根拠も併せて提示する拡張来歴（図 4）を提案した。

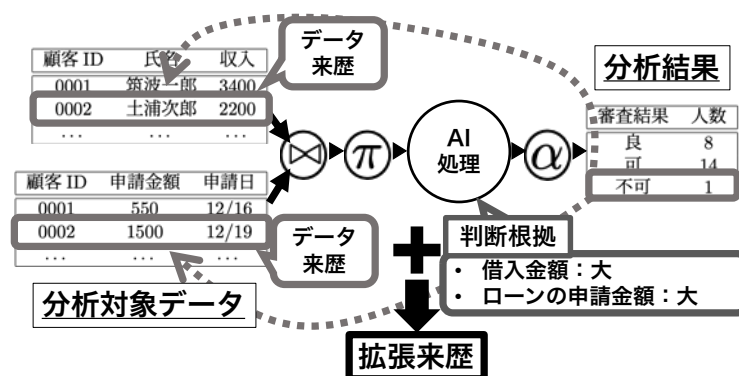


図 4. 複合的データ分析処理における拡張来歴

はじめに複合的データ解析をモデル化する Function オペレータを提案し、それをリレーショナルモデルに組み込むことで複合的データ分析処理のモデル化を行った。そしてモデル化された分析処理を対象に、先行研究の Tracing Query という来歴を求める逆クエリを活用し、分析処理の実行後に指定された分析結果の拡張来歴をピンポイントに導出する基本的手法を提案した。

さらに効率的な拡張来歴の導出方法についても以下の通り検討を行なった。提案手法で使用する Tracing Query は、分析結果と入力データで共通する属性の値をキーとして元になった入力データを追跡する。そのため図 4 のように分析結果と入力データで共通する属性が存在しない場合は、分析処理の中間結果を経由して来歴を求める必要があり、そのため拡張来歴を導出するためには分析処理の中間結果が必要である。中間結果を作成する際、単純には (1) Tracing Query 実行時に必要な中間結果を分析処理の再実行によって作成するアプローチである Rerun, (2) 分析処理の実行時にあらかじめ全ての中間結果をストアしておくアプローチである Full Materialization (Full) の 2 つの方法が存在する。しかし、前者には分析処理を再実行

するため拡張来歴導出に時間がかかるという問題点があり、後者には全ての中間結果をストアするためのストレージコストが発生するという問題点がある。そこで「複合的データ解析の実行コストは他のリレーショナル演算子の実行コストより多くの場合遥かに大きいため、複合的データ解析を実行する Function オペレータの再実行を避けられれば十分に処理時間の短縮が見込める」というアイデアに基づき、分析処理実行時には Function オペレータ出力にあたる中間結果のみあらかじめストアし、その他の中間結果は後から再計算によって作成することで導出時間とストレージコストのトレードオフを図る Function Materialization (FM)を提案した。

評価実験では PostgreSQL 上に実装した拡張来歴導出システムを用いて、複合的データ分析処理に含まれる Function オペレータの処理コストの差が拡張来歴導出処理時間に与える影響を検証した。図 5 は拡張来歴導出にかかった時間を表したグラフで、横軸は拡張来歴導出を行う対象のデータセットサイズを示している。図 5(左) が処理コストの軽い Function オペレータを含む分析処理の場合に対応しており、図 5(右) が処理コストの重い Function オペレータを含む場合に対応している。実験から Function オペレータの処理コストが重い時ほど Function Materialization が拡張来歴導出処理時間の短縮に有効に作用することが示された。さらに本実験で Function Materialization は Full Materialization と比較して約 91%ストアするタプル数を削減することに成功しており、ストレージコストの面でも Function Materialization が有効であることを示した。

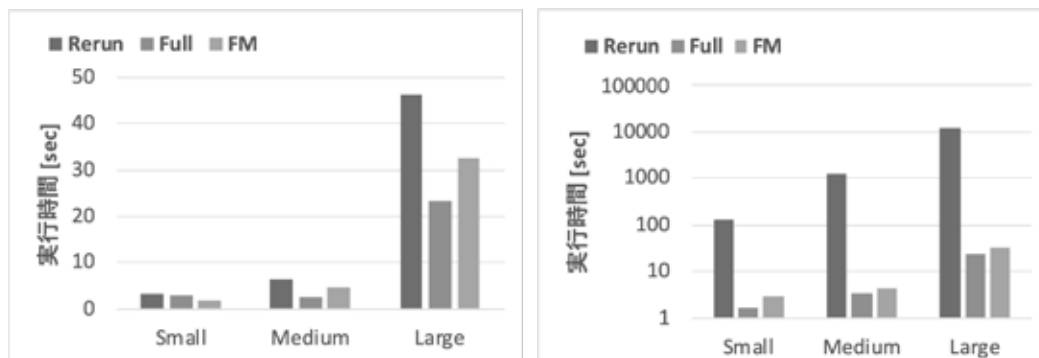


図 5. 拡張来歴導出時間の比較

[2] データマイニング・知識技術

(関連研究費：科研費 若手研究, JST さきがけ, NEDO)

(1) Fast ObjectRank for Large Knowledge Databases

知識ベースに格納された情報の活用は AI や機械学習モデルを構築するうえで重要な要素技術である。しかし、ObjectRank に代表される知識ベースに対する検索アルゴリズムは膨大な計算コストを必要とするため大規模なデータを扱うことが難しい。本研究では知識ベースにおける類似検索の高速化手法 SchemaRank を開発した。SchemaRank は知識ベースのスキーマ情報から、属性間のモチーフ構造を捉えることで検索処理コストを削減できることを理論的に示した。本論文では、SchemaRank は 3,660 万件規模の知識ベースにおいて、最先端の手法と比較して 100 倍程度高速に検索できることを確認した。

表 1 は提案手法 SchemaRank と最先端手法の実行時間を比較したものである。表中の N/A は検索を実行できなかったものを示している。また、Skewed と Uniform はそれぞれスキーマの種類、Pre-comp. は事前計算を必要とする手法の事前計算実行時間を示している。表 X から明らかなように、提案手法 SchemaRank はいずれの設定においても事前計算を必要とせず、著しく高速な検索処理を実現している事がわかる。また、図 6 では、知識ベース処理で標準的に利用される ObjectRank の検索結果に対する平均適合率を示している。この結果からも SchemaRank は ObjectRank と同一精度を維持していることが確認できる。

本研究の成果は Semantic Web 分野のトップ会議である ISWC2021 に採択された。日本の学術期間からの同会議への採択は約 10 年ぶりである。

表 1. 実行時間の比較

Methods	Skewed	Uniform	Pre-comp.
SchemaRank ($k=10^2$)	134 (± 0.195) sec.	169 (± 0.106) sec.	—
SchemaRank ($k=10^3$)	168 (± 0.173) sec.	241 (± 0.122) sec.	—
ObjectRank	>24 hours	>24 hours	—
BinRank	N/A	N/A	>24 hours
LORank	>24 hours	>24 hours	—
SimMat ($k=10^2$)	N/A	N/A	>24 hours
SimMat ($k=10^3$)	N/A	N/A	>24 hours
FORank ($k=10^2$)	2,209 (± 1.008) sec.	2,677 (± 1.066) sec.	—
FORank ($k=10^3$)	2,431 (± 1.912) sec.	3,137 (± 1.903) sec.	—

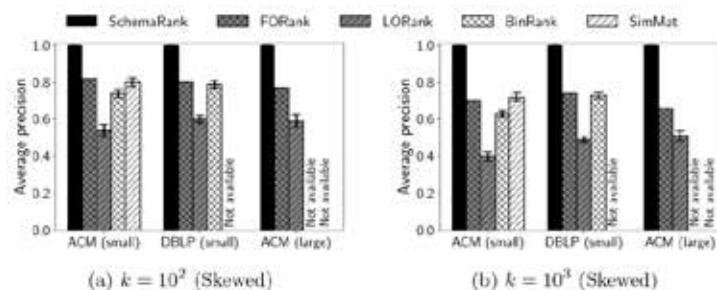


図 6. 検索精度（平均適合率）の比較

(2) Fast Indexing Algorithm for Efficient kNN Queries on Complex Networks

本研究では複雑ネットワークにおいて高速に k 最近傍検索を行うための索引構築手法を提案した。グラフデータに対する最近傍検索手法を高速化するためにこれまで多数の索引構築手法が提案されているが、その多くは道路ネットワークなどの平面グラフを対象としたものである。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特性があることから、平面グラフを対象とした索引構築手法を用いたとしても、(1)索引構築に膨大な計算時間が必要となる、(2)構築した索引を用いたとしても k 最近傍検索をあまり高速化できないという問題点が生じる。本研究では複雑ネットワークに含まれる基調構造・モチーフ構造を事前抽出し、それらに対して個別の索引を構築することで、複雑ネットワークに対する索引構築と索引を用いた k 最近傍検索の高速化を実現する。本論文の提案手法は約 2,200 万エッジから構成される複雑ネットワークに対する索引構築を 5 秒未満、 k 最近傍検索時間を 0.5 秒程度にまで高速化することに成功した。

図 7 において提案手法 (Proposed method) の索引構築時間と k 最近傍検索時間を最先端手法 (G-Tree, ILBR) と比較した結果を示す。図中の空欄となっている箇所は 1 時間以内に処理が終わらなかったことを示している。また、図中の CAL, NY, FLA, および TV は平面グラフであり、それ以外は複雑ネットワークである。これらの結果から明らかな通り、提案手法はいずれのデータセットにおいても比較手法よりも高速な索引構築と k 最近傍検索を実現していることがわかる。具体的には、索引構築において提案手法は最先端手法と比較して最大で 18,074 倍高速である。また、 k 最近傍検索においては、提案手法は最先端手法と比較して最大で 146 倍高速である。また、平面グラフと複雑ネットワークにおける提案手法の高速化率を比較すると、複雑ネットワークにおいて提案手法は大幅な高速化を達成している。これは上述した通り、複雑ネットワークに含まれている基調構造・モチーフ構造を利用することが効果的であることを示唆している結果である。基調構造・モチーフ構造を活用する高速化アプローチは我々が昨年度に発見した新たなアプローチであるが、本研究の結果からも同アプローチの汎用的な有効性が示唆されていると考える。

本研究の成果はグラフ分析に関する国際会議 ASONAM2021 にて発表を行った。

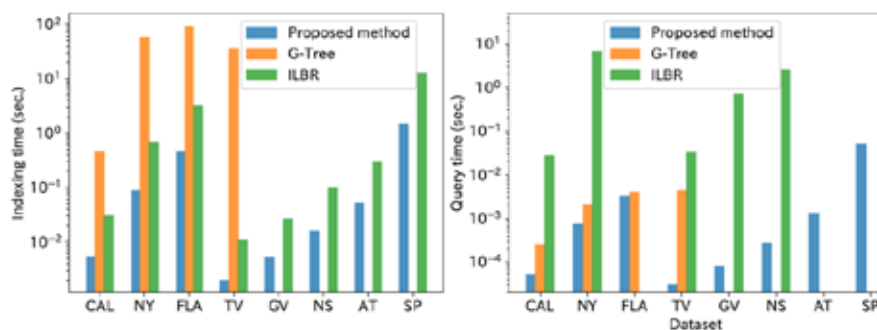


図 7. 索引構築時間の比較（左図）と k 最近傍検索時間の比較（右図）

(3) GPU による 5 ノードサブグラフのオービット数え上げの高速化

サブグラフ数え上げは、対象となるグラフに対して、特定の（数ノードからなる）グラフ（パターンと呼ばれる）がサブグラフとして出現する回数を求める問題である．さらに、サブグラフの出現回数だけではなく、サブグラフにおける頂点の種類（次数及び他の頂点との接続関係）を数え上げるオービット数え上げは、サブグラフ数え上げより詳細な統計情報を得ることができることから、研究が進んでいる．その一方で大規模なグラフに対してサイズ 5 のオービット数え上げを行うには多大な計算コストを要する．

このため本研究では、GPU を利用した高速なオービット数え上げ手法を提案した．基本的には、サイズ 5 のオービット数え上げを提案した EVOKE をベースに、これを GPU による並列計算により高速化した．EVOKE は、5 ノードサブグラフ数え上げの手法である ESCAPE をベースとしているため、それを GPU 並列化した過去の提案手法をベースに、GPU による並列化を行った．具体的には、グラフの有向グラフへの変換およびパターン分割による数え上げのアプローチを踏襲しつつ、並列化が容易な分割パターンの数え上げの部分を GPU 上で並列に実行する手法を開発した．さらに、GPU 上での並列処理における書き込み競合を避けるため、各スレッドにおける出力サイズの推定を行うことで、処理効率を改善している（図 8）．多くの実データを利用した評価実験を行い、提案手法（表 2. 列 Proposal）は、CPU 版の EVOKE に対して最大 16 倍の高速化を実現していることを確認した．

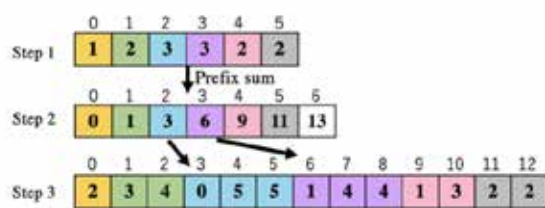


図 8. スレッド書き込み量推定

Dataset	V	E	T	EVOKE	P-EVOKE	Proposal
ca-AstroPh	18.7K	396K	135K	18.1	7.99	4.68
soc-brightkite	56.7K	426K	494K	9.11	4.26	2.12
soc-lastfm	1.19M	9.04M	3.95M	298	202	22.0
soc-pokec-relationships	1.63M	22.3M	32.6M	2.57K	2.12K	159
soc-flixster	2.52M	15.8M	7.90M	298	208	37.7
web-wiki-ch-internal	1.93M	8.5M	18.2M	2.00K	1.31K	136.0
web-ludong	1.98M	14.43M	21.6M	4.04K	1.67K	819
web-baidu-baike	2.14M	17.01M	25.2M	4.80K	2.87K	303
tech-as-skitter	1.69M	28.8M	28.8M	2.34K	1.03K	253
wiki-en-cat	1.85M	7.59M	2.54K	54.9	34.7	6.79
wiki-Talk	2.39M	9.32M	9.20M	1.47K	809.4	95.1
com-amazon	335K	1.85M	667K	4.66	2.44	1.21
com-youtube	1.13M	5.97M	3.06M	192.6	102	21.1
socfb-B-anon	2.94M	41.9M	52.0M	3.27K	2.58K	205

表 2. 実験結果

(4) SVD-Updating による動的データベースに対する近似 k-最近傍検索の高速化

多くのアプリケーションにおいて、データはベクトルで表現され、あるクエリベクトルに対して近傍に位置する k 件のデータベクトルを列挙する k-最近傍検索は、単なるデータベース検索に止まらず、機械学習モデルにおける計算にも利用される基本的な処理である．ビッグデータを扱う際には、ベクトルデータ自身の次元数とデータ数に応じた格納容量が必要となる一方で、k-最近傍検索においては正確な距離計算は必ずしも必要でなく、異なるベクトル間の相対的な距離が正しければ、正しいランキングの結果が得られるという特徴がある．このため、ベクトル及び距離計算を近似することで、性能を極端に落とさず格納コストを下

げるとともに、処理時間を短縮する近似 k -最近某検索が用いられる。また、ベクトルの近似には、ベクトルを複数の部分ベクトルに分割した上で、異なる部分ベクトルの重心が張る直交空間によってベクトルの距離を近似する「直積量子化」がよく利用される。ところが、データの追加などでデータベースが動的に更新される場合、直積量子化の過程で近似ベクトルの計算のために生成したコードブックが最新のデータを反映できず、当初の性能を維持できないという問題があった。

この問題に対して本研究では、動的データベースに対する直積量子化手法である Online Product Quantization (OPQ) を高速化する手法を提案した。OPQ では、最適なコードブックを学習するため、データの追加のたびに全データに対して特異値分解を適用し最適な回転行列を計算するとともに、それを元にコードブックを更新する必要がある。このため提案手法では、追加データのみを利用することで、データ全体にアクセスすることなく特異値分解を行う SVD-Updating を適用した。その結果、精度を保ちつつ、実行時間を改善することに成功した。図 9 は実データを利用した実験結果の図である。上段は上位 20 件の再現度 (Recall@20)，下段は実行時間を示している。また、列は異なるデータセットに対応する。提案手法 (SVD-updating) は、ナイーブな直積量子化 (pq) と Online PQ (opq) の中有間の性能を保ちつつ、大幅な実行時間の削減を実現している。

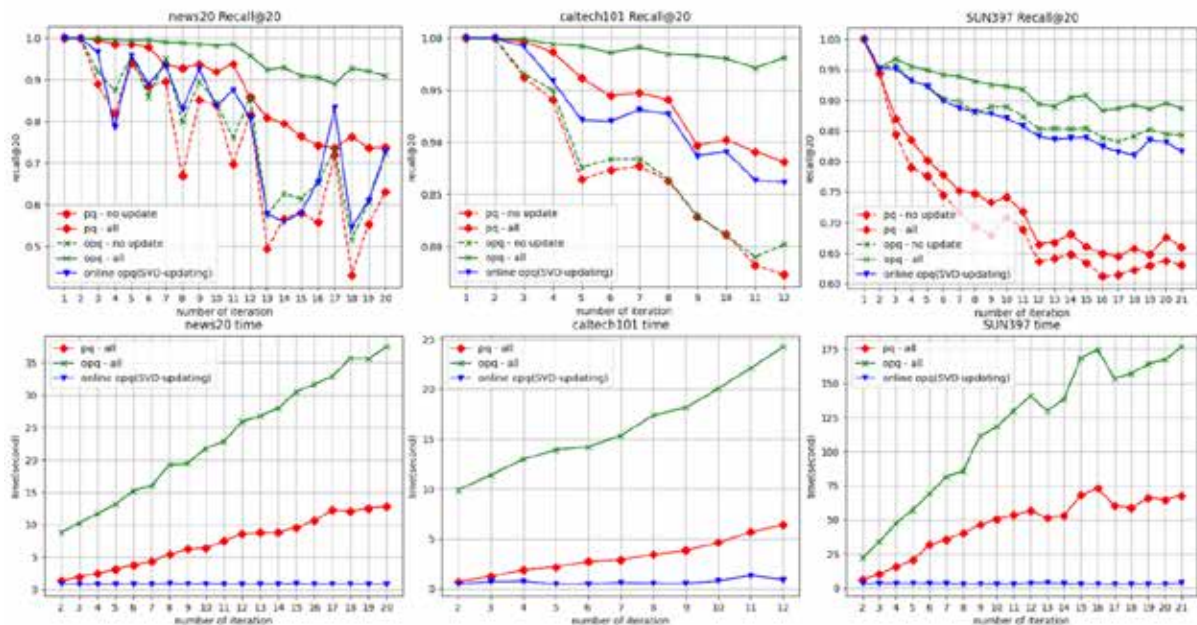


図 9. SVD-Updating を利用した直積量子化手法の性能評価

[3] RDF・知識ベース・LOD

(関連研究費：NEDO)

(1) 知識ベースを利用した高機能なテキスト検索手法

近年、一般の知識を機械処理可能な形式で蓄積した知識ベースが注目され、DBpedia や WikiData など大規模なデータが多く応用で利用されている。大規模知識ベースは、多くの実世界におけるエンティティに関する情報が含まれており有用である一方、最新の情報や著名でないエンティティに関する情報に対するカバー率は低いという問題を持つ。この一方で、テキストから、そこに含まれるエンティティやエンティティに対する言及を検出し、知識ベースを生成する「知識ベース抽出」の技術が研究されている。これを利用することで、任意のテキストからそこで言及されている知識を構造化データとして抽出することができる。これと知識ベースを連携することができれば、テキストに含まれるエンティティに対して、テキストに言及されていない情報やエンティティ間の関係を利用したより高度な検索が可能となる。

以上問題に対して、本研究では知識ベースを利用したテキスト検索手法を提案した。テキストとして、一般的な電子メールを想定したメタデータモデルを開発するとともに（図 10）、テキストに含まれるエンティティやエンティティ同士の関係を利用した問合せを行うための Query-by-Example に基づく検索インタフェースを開発した。さらに評価実験により、提案手法によって、従来では困難だったエンティティおよびエンティティ間の関係に関する問合せを高精度に実行できることを確認した。

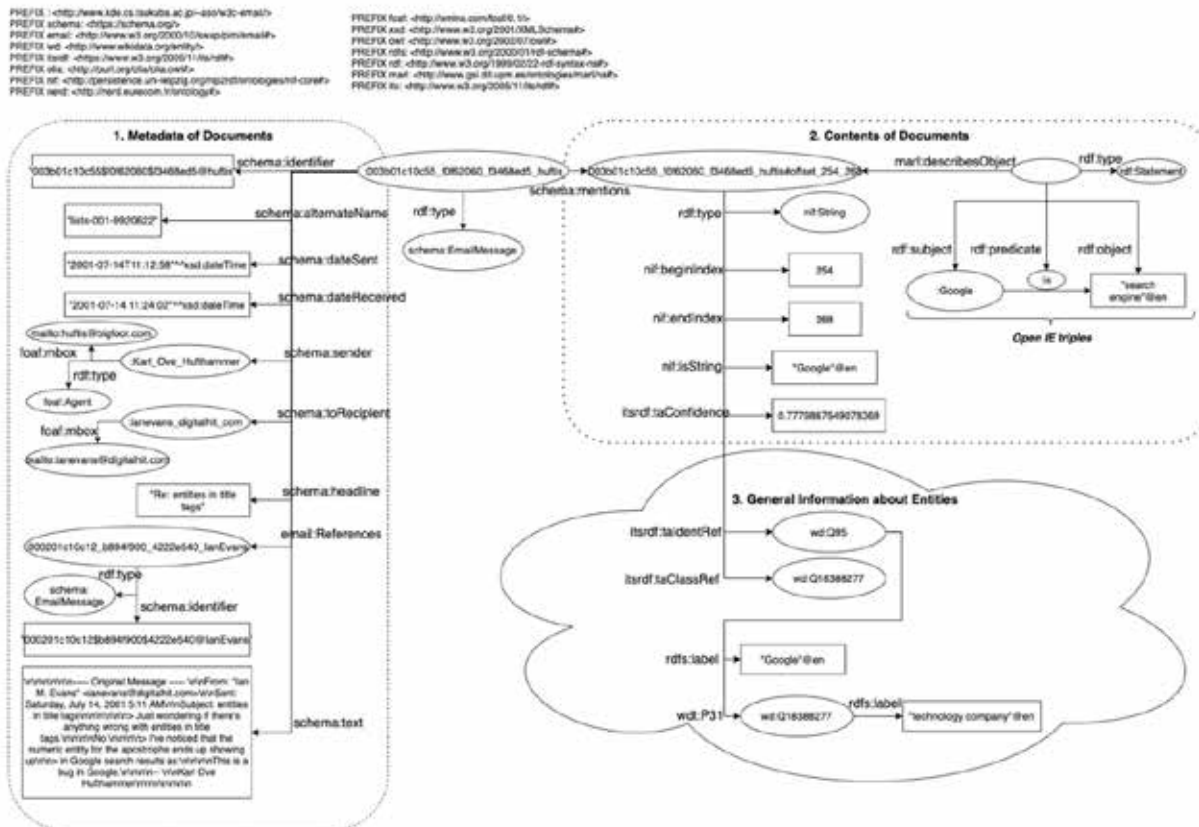


図 10. 提案する文書検索のためのメタデータモデル

(2) 低次元ベクトルへの埋め込みを用いた効率の良い知識ベースに対する QA 手法

知識ベースとは、一般的な知識を機械処理可能なデータ構造を用いて蓄積したものである。近年の AI 技術の進展とともに、さまざまな実サービスにおいて利用されるとともに、機械学習の教師データの情報源としても利用されるようになった。とりわけ、知識ベースに対して、ユーザが必要とする質問に対して適切な回答を返す質問応答 (question answering; QA) は知識ベースを利用するために最も基本的かつ重要なタスクである。

QA に対するアプローチとして、近年、分散表現学数を用いた手法が多く研究されている。具体的には、教師データに含まれる質問文と回答のペアに対して、質問文と回答が正解であればそれらのベクトルの距離が近く、そうでない場合は遠くなるようにベクトル表現を学習し、質問応答の処理の際には、質問文からベクトルを生成し、その周辺の回答ベクトルに対応する回答を答えるというものである。近年の分散表現学習の進展とともに、多くの手法が提案されているが、そのモデルは大規模なものであり、学習及び質問応答の処理に多大なコストを要することが問題であった。

この問題に対し、本研究ではベクトルを低次元空間に圧縮することで、質問応答の精度を大きく損なうことなく、学習及び質問応答の処理コストを大幅に改善する手法を提案している (図 11)。提案手法では、質問及び回答それぞれに対してオートエンコーダにより低次元ベクトル表現を学習する。InsuranceQA データセットを利用した評価実験の結果、提案手法

(Non-linear AE 及び Linear AE) は、精度をやや失うものの、実行時間を大幅に削減できることを確認した (表 3)。

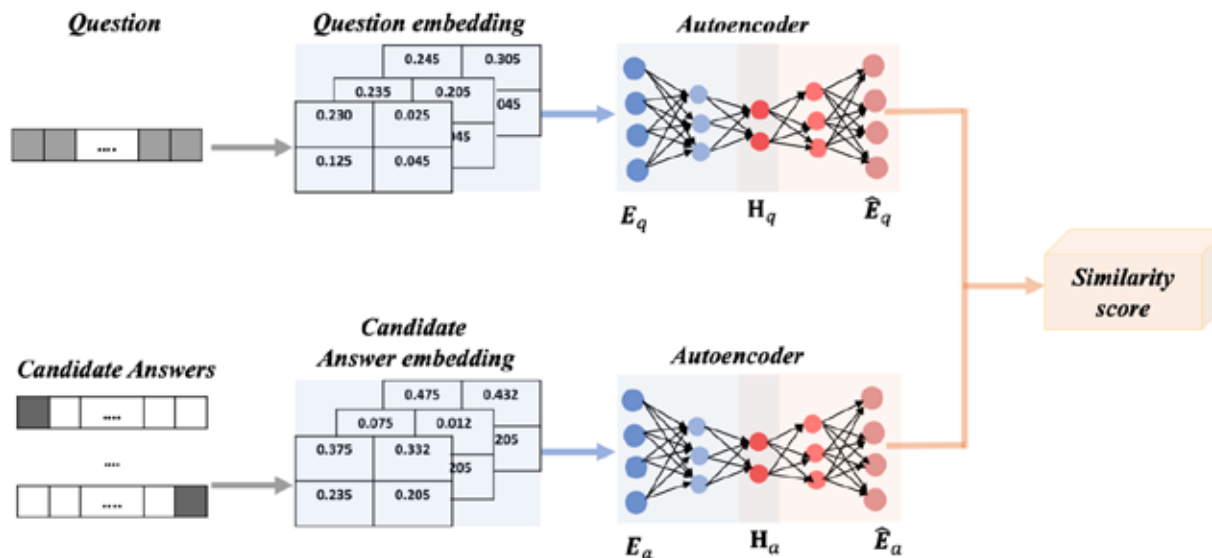


図 11. 知識ベースに対する質問応答のモデル

表 3. 実験結果

QA Model set up	Accuracy		Time (minutes) for 100 Epochs
	Train	Val	
Word2Vec	0.932 ± 0.077	0.923 ± 0.076	122.42 ± 0.38
Non-Linear AE	0.902 ± 0.066	0.895 ± 0.071	97.35 ± 0.17
Linear AE	0.797 ± 0.079	0.690 ± 0.077	97.02 ± 0.15

[4] データベース応用・データサイエンス

(関連研究費：科研費 若手研究, 挑戦的研究 (萌芽) など)

(1) Biological signal recognition and processing based on Deep learning technology

生体信号からの睡眠ステージ (睡眠状態・レム睡眠等) の判定は、睡眠の診断における必須検査の一つである。しかしながら、生体信号を目で確認することから、医師・技師の労力が大きいという問題を有している。これまでに、睡眠ステージの自動判定手法は提案されているものの、判定の理由を提示することができず、医師・技師の信頼獲得、臨床の現場における普及には至らなかった。

本研究では、判定理由の提示を大きな要件の一つとし、睡眠ステージ判定を自動的に行う新しい深層学習モデル Sleep-CAM の開発と判定理由の解析を行っている。開発に際しては、Class Activation Mapping (CAM) と呼ばれる深層学習向けの理由提示手法に着目した。この手法では、各時刻における各ステージらしさを表すマップを計算、時間軸方向に集約することで最尤の睡眠ステージを求めることで、どの区間が判定に有用だったかを簡単に示すことができる。(図 12)。

図 13 は、判定理由となった区間と特徴波（医師・技師がステージを判定する際に判定の根拠とする生体信号波形）との関連を示しており、判定の根拠として有効とされた区間ほど、特徴波が多く出現していることを示している。この結果は、提案手法技師と同じ波形に基づいて判定していることを示唆しており、従来よりも信頼のおける手法といえるだろう。

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-IIIIS）との共同研究として、Scientific Reports に投稿中である。

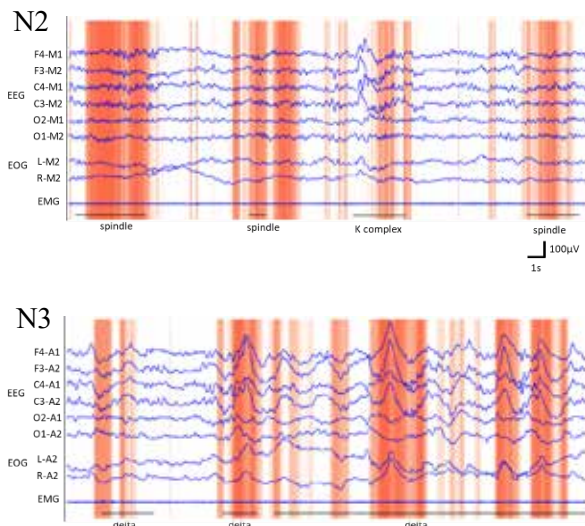


図 12. 判定理由提示の例，判定理由区間（オレンジ背景）に特徴波が重複

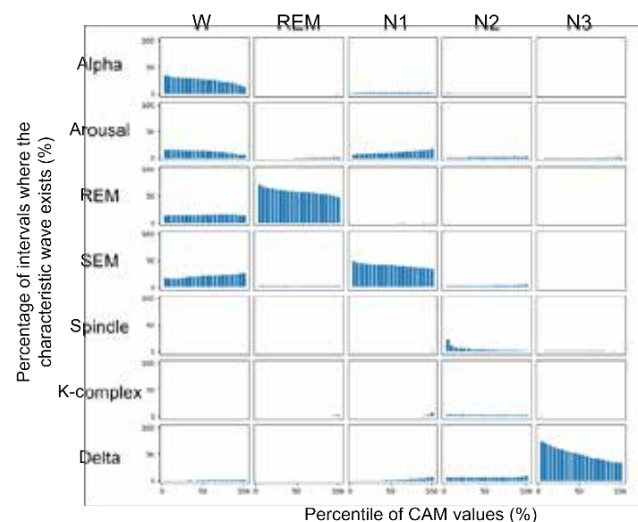


図 13. 判定理由区間と特徴波の関係
注目度が大きい区間に特徴波がより存在

(2) 信頼できる実行環境 TEE を用いた暗号マルチマップにおけるデータ量秘匿可能な挿入法

近年、クラウドコンピューティング環境が一般化し、個人情報を含むさまざまなデータがクラウドサービス上に格納されている。その一方で、プライベート情報の流出は大きな社会問題となっており、クラウドサービス上のプライベート情報をいかにして保護するかは重要な課題である。そのため、暗号化データベースに関する研究開発が活発に行われている。ところが、単にデータを暗号化するだけでは十分なセキュリティを確保できず、セキュリティ上の脅威があることが指摘されている。その一つがデータ量の漏洩である。データ量の漏洩

とは、攻撃者がクエリ結果のサイズ（データ量）を取得し、その結果、データベースや問合せに関連する情報が明らかになるというセキュリティ上の脅威である。

この問題に対し、Sarvar らは、データ量を秘匿した暗号化マルチマップへの検索手法を提案した。ここでマルチマップとは、同一のキーに対して複数のバリューを格納可能なキーバリューストアを指す。彼らの手法は、データ量を管理するハッシュテーブルに Cuckoo ハッシュを用いるとともに、差分プライバシーを適用することで、データ量の秘匿を実現した。しかしながら、データの追加には対応していない。

そこで本研究では、データ量を秘匿した暗号化マルチマップにおいてデータ挿入を実現する手法を提案した。データ挿入後もデータ量を秘匿するためには、挿入後もデータ量に付与されているノイズが差分プライバシーを保証している必要がある。さらに、データ量の秘匿だけでなく、挿入箇所の秘匿も必要となる。このため、局所差分プライバシーを利用して、データの挿入に応じてノイズを混入する。また、挿入箇所の秘匿のため、最新のプロセッサでサポートされている信頼できる実行環境（trusted execution environment; TEE）を利用する（図 14）。実データ及び人工データを用いた評価実験を行い、実験環境において 1 レコードの挿入に 50 ms を要することを確認した。これは TEE を用いない前の手法に比べて 12 倍高速であり、実用的な規模のデータに対して適用が可能であることを確認した。

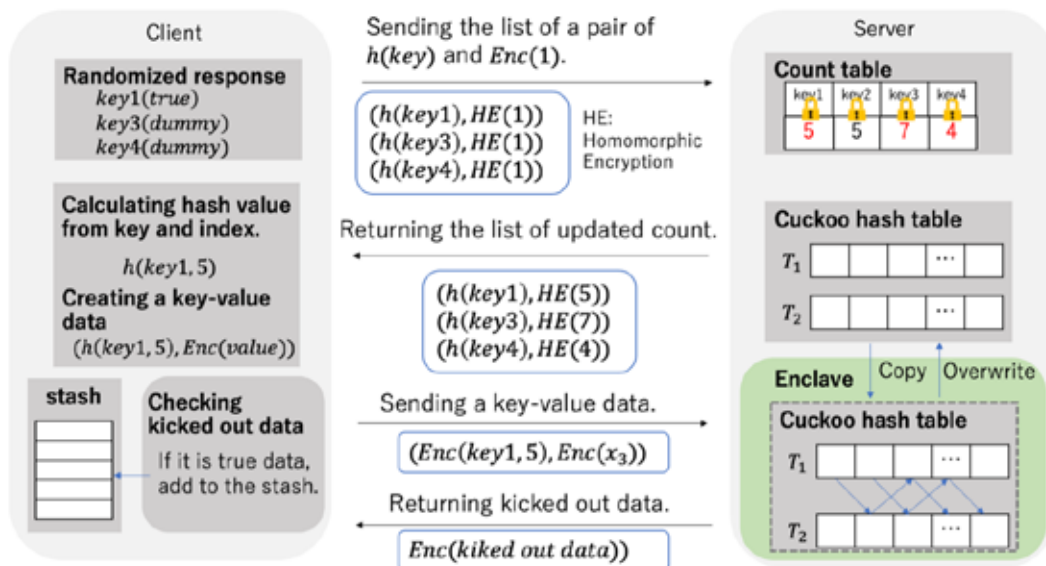


図 14. TEE を用いた挿入可能な暗号化マルチマップ

4. 教育

学生の指導状況（学生氏名、学位の種類、論文名）

<修士（工学）>

1. 石原 詢大

信頼できる実行環境を用いた暗号化マルチマップにおける挿入の実現

2. 菅波 柊也

GPU-Accelerated Counting Methods for 5-vertex Subgraphs (GPU を用いた 5 ノードサブグラフ数え上げ手法の高速化)

3. 中野 茉里香

複数知識ベース及びテキストに対する横断的問合せ

4. 平方 俊行

分散 RDF ストリーム処理システムにおけるフィルタリング処理効率化

5. 山田 真也

Traceability of Data Analysis Including Complex UDF Processing (複合的 UDF 処理を伴う分析処理に対するトレーサビリティ)

6. 山中 仁斗

リファクタリング前後のコードの一貫性に着目したメソッド抽出

7. 湯川 皓太

距離空間におけるデータ分析の効率化

8. Teklu Aregawi Gidey

Generating RDF Metadata from Twitter Streams

9. 大倉 真一希

知識グラフにおける更新エンティティの予測

< 学士 (情報科学, 情報工学) >

1. 大宮 直樹

深層学習を用いた睡眠ステージ判定のための脳波データスタイル変換

2. 八木 隆一

DNA データベースに対する Top-k 検索の高速化に関する研究

3. 直井 悠馬

グラフデータベースに対する高速な相関問合せに関する研究

4. 佐藤 祥吾

RDF マッピング言語 RML を用いた異種データ統合システム

5. 永崎 遼太

プログラム文の間の依存関係を利用したメソッド名推薦

6. 溝谷 祐大

oneAPI を用いた FPGA 上のグラフ探索アルゴリズムの実装と評価

集中講義など

1. システム情報工学研究群情報理工学位プログラム 博士前期課程「フロンティアインフォマティクス特論 A」及び「フロンティアインフォマティクス特論 B」世話人

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. Future of Information and Communications Conference (FICC) 2021, Best Paper Award : Hayata Takagi, Hanxiong Chen, Kazutaka Furuse, and Hiroyuki Kitagawa, "Aggregate Nearest Neighborhood Queries", April 2021.
2. 情報処理学会データベースシステム研究会 第 173 回研究会, 学生奨励賞: 大倉 真一希, 天笠 俊之, “知識グラフにおける更新可能性が高いエンティティの検出”, 2021 年 9 月 16 日～17 日.
3. 情報処理学会 2021 年度山下記念研究賞: 山中 仁斗, 早瀬 康裕, 天笠 俊之, "メソッド抽出リファクタリング推薦手法に対するメソッド名予測を用いた精度改善の試み", 2021 年 9 月 30 日.
4. 筑波大学 2021 年度 BEST FACULTY MEMBER: 塩川浩昭
5. 第 14 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2021), 学生プレゼンテーション賞: 中野茉里香, 天笠俊之, "複数の知識ベースに対するキーワード検索", 2022 年 2 月 27 日～3 月 2 日.
6. 第 14 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2021), 学生プレゼンテーション賞: 真次彰平, 塩川浩昭, "ウェッジ分割を用いた大規模グラフの要約手法", 2022 年 2 月 27 日～3 月 2 日.
7. 第 14 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2021), 学生プレゼンテーション賞: 湯川皓太, 天笠俊之, "BLOCK-OPTICS: 密度ベースクラスタリング手法 OPTICS の高速化", 2022 年 2 月 27 日～3 月 2 日.
8. 第 14 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2021), 学生プレゼンテーション賞: Hina Suzuki, Hanxiong Chen, Kazutaka Furuse, Toshiyuki Amagasa, "A Study on Dense Nearest Neighborhood Query", 2022 年 2 月 27 日～3 月 2 日.
9. 第 14 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2021), 学生プレゼンテーション賞: 小久保柚真, 天笠俊之, "フォグコンピューティングにおける RDF 推論処理の動的な負荷分散", 2022 年 2 月 27 日～3 月 2 日.
10. 情報処理学会第 84 回全国大会, 学生奨励賞: 直井悠馬, 真次彰平, 塩川浩昭, "タンパク質データベースにおける高速な相関問合せ手法の提案", 2022 年 3 月 3 日～3 月 5 日.

11. 情報処理学会第 84 回全国大会, 学生奨励賞: 八木隆一, 塩川浩昭, "DNA データベースに対する効率的な編集類似結合アルゴリズム", 2022 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
12. 情報処理学会第 84 回全国大会, 学生奨励賞: 佐藤祥吾, 天笠俊之, "知識ベースを対象とした異種データ統合", 2022 年 3 月 3 日～3 月 5 日.

外部資金

1. 受託研究: 民間企業共同研究 (令和元年 10 月 1 日～令和 4 年度)
研究課題: 睡眠障害の自動診断システム及び睡眠障害の予防・改善・治療システムの研究開発
研究代表者: 天笠 俊之
全年度直接経費: 26,166,333 円 (R3 年度直接経費: 7,083,333 円)
2. 受託研究: 科学技術振興機構・未来社会創造事業 (令和元年 11 月 1 日～令和 3 年度)
研究課題: 睡眠脳波を指標とする睡眠と運動の自己管理による健康寿命延伸
研究分担者: 天笠 俊之 (研究代表者: 柳沢 正史)
全年度直接経費: 5,000 千円 (R3 年度直接経費: 1,500 千円)
3. 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 7 年 2 月 28 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: 48,557 千円 (R3 年度直接経費: 9,180 千円)
4. 共同研究: 民間企業共同研究 (令和 3 年 4 月 1 日～令和 4 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: 1,500 千円
5. 受託研究: 民間企業共同研究 (令和 3 年 4 月 1 日～令和 4 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. 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 5 年度)
研究課題: 超高速な多モーダル IoT データ統合処理基盤
研究代表者: 塩川 浩昭
全年度直接経費: 40,000 千円 (R3 年度直接経費: 10,920 千円)

7. 科研費：若手研究（平成30年度～令和3年度）

研究課題：超並列計算環境における大規模グラフの実時間問合せ処理

研究代表者：塩川 浩昭

全年度直接経費：3,200 千円（R3 年度期間延長分：2,205,504 円）

8. 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（R3 年度直接経費：90 千円）

9. 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（R3 年度直接経費：3,200 千円）

10. 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

R3 年度直接経費：7,075 千円

11. 共同研究：民間企業共同研究（令和3年4月1日～令和4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：1,500 千円

知的財産権

該当なし

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

< 学術雑誌論文 >

1. Taro Aso, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "A System for Relation-Oriented Faceted Search over Knowledge Bases", International Journal of Web Information Systems, Vol. 17, No. 6, pp.698-713, July 2021.

2. Salman Ahmed Shaikh, Hiroyuki Kitagawa, Akiyoshi Matono, Komal Mariam, and Kyoung-Sook Kim, "GeoFlink: An Efficient and Scalable Spatial Data Stream Management System", IEEE Access, Vol. 10, pp. 24909-24935, February 2022.

B) 査読無し論文

該当なし

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

該当なし

B) 一般講演

< 査読付き国際会議論文 >

1. Hayata Takagi, Hanxiong Chen, Kazutaka Furuse, and Hiroyuki Kitagawa, "Aggregate Nearest Neighborhood Queries", Proc. Future of Information and Communications Conference (FICC) 2021, April 2021.
2. Yasuyuki Kato, Hanxiong Chen, Kazutaka Furuse, and Hiroyuki Kitagawa, "Unifying Spatial Keyword Indexing in Continuous Search on Dynamic Objects", Proc. Future of Information and Communications Conference (FICC) 2021, April 2021.
3. Vijdan Khaliq and Hiroyuki Kitagawa, "VOA*: Fast Angle-Based Outlier Detection Over High-Dimensional Data Streams", Proc. 25th Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (PAKDD2021), pp. 44-52, May 11-14, 2021.
4. Ryohei Kobayashi, Kento Miura, Norihisa Fujita, Taisuke Boku, Toshiyuki Amagasa, "A Sorting Library for FPGA Implementation in OpenCL Programming," Proc. 11th International Symposium on Highly Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies (HEART 2021), Article No. 1, pp. 1-6, June 21-23, 2021.
5. Shunta Ishihara, Chiemi Watanabe, Toshiyuki Amagasa, "Supporting Insertion in Encrypted Multi-Maps with Volume Hiding", The 5th IEEE International Workshop on Big Data and IoT Security in Smart Computing (BITS2021), pp.264-269, August 23rd, 2021.
6. Carina Miwa Yoshimura and Hiroyuki Kitagawa, "TLV-Bandit: Bandit Method for Collecting Topic-related Local Tweets", Proc. IEEE 4th International Conference on Multimedia Information Processing and Retrieval (MIPR2021), pp. 56-62, September 8-10, 2021. Tokyo, Japan.

7. Masaya Yamada, Hiroyuki Kitagawa, Toshiyuki Amagasa, Akiyoshi Matono, "Augmented Lineage: Traceability of Data Analysis Including Complex UDFs", In Proceedings of the 32nd International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA2021) , pp. 65-77, September 27-30, 2021.
8. Shuya Suganami and Toshiyuki Amagasa, "GPU-accelerated vertex orbit counting for 5-vertex subgraphs", In Proceedings of the 32nd International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA2021) , pp. 205-217, September 27-30, 2021.
9. Kota Yukawa and Toshiyuki Amagasa, "Online Optimized Product Quantization for Dynamic Database using SVD-Updating", In Proceedings of the 32nd International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA2021) , pp. 273-284, September 27-30, 2021.
10. Hiroaki Shiokawa, "Fast ObjectRank for Large Knowledge Databases," In Proceedings of the 20th International Semantic Web Conference (ISWC2021), Virtual Conference, October 2021.
11. Hina Suzuki, Hanxiong Chen, Kazutaka Furuse, and Toshiyuki Amagasa, "Dense Nearest Neighborhood Query", 4th International Conference on Intelligent Technologies and Applications (INTAP 2021), Online (Grimstad, Norway), Oct. 11-13, 2021.
12. Suomi Kobayashi, Shohei Matsugu, Hiroaki Shiokawa, "Fast Indexing Algorithm for Efficient kNN Query on Complex Networks," In Proceedings of the 2021 IEEE/ACM International Conference on Advances in Social Networks Analysis and Mining (ASONAM2021), Virtual Conference, November 2021.
13. Happy Buzaaba, Toshiyuki Amagasa, "A Scheme for Efficient Question Answering with Low Dimension Reconstructed Embeddings", In Proceedings of the 23rd International Conference on Information Integration and Web Intelligence (iiWAS2021), November 29 - December 1, 2021.
14. Taro Aso, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "A Method for Searching Documents using Knowledge Bases", In Proceedings of the 23rd International Conference on Information Integration and Web Intelligence (iiWAS2021), November 29 - December 1, 2021.
15. Toshiyuki Hirakata, Toshiyuki Amagasa, "A Dynamic Load-balancing Method for Distributed RDF Stream Processing Systems", In Proceedings of the 23rd International Conference on Information Integration and Web Intelligence (iiWAS2021), November 29 - December 1, 2021. (short paper)
16. Marika Nakano, Toshiyuki Amagasa, "Query Processing over Multiple Knowledge Bases and Text Documents", In Proceedings of the 23rd International Conference on Information

Integration and Web Intelligence (iiWAS2021), November 29 - December 1, 2021. (short paper)

17. Shunta Ishihara, Chiemi Watanabe, Toshiyuki Amagasa, "Supporting Insertion in an Encrypted Multi-Maps with Volume Hiding using Trusted Execution Environment," DOLAP 2022: The 23rd International Workshop on Design, Optimization, Languages and Analytical Processing of Big Data (DOLAP) co-located with EDBT/ICDT 2021, pp. 61-70, Virtual Conference (Nicosia, Cyprus), March 23, 2021.

(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>

1. 小林 諒平, 三浦賢人, 藤田典久, 朴泰祐, 天笠俊之, "コンパクション処理を活用した正規パス間合わせアクセラレータの FPGA 実装", IEICE-RECONF2021-12/ IEICE-121(59), pp. 62-67, 2021 年 6 月 9 日.
2. 小林 諒平, 三浦賢人, 藤田典久, 朴泰祐, 天笠俊之, "FPGA 向け浮動小数点数型ソーティングライブラリの提案と実装", IEICE-CPSY2021-8/ IEICE-121(116) pp. 43-48, 2021 年 7 月 21 日.
3. Teklu Aregawi Gidey, Toshiyuki Amagasa, "Generating RDF Metadata from Twitter Streams", 研究報告ドキュメントコミュニケーション(DC), 2021-DC-121(7), pp. 1-8, 2021 年 7 月 8 日.
4. 大倉 真一希, 天笠 俊之, "知識グラフにおける更新可能性が高いエンティティの検出", 研究報告データベースシステム(DBS), 2021-DBS-173(9), pp. 1-6, 2021 年 9 月 9 日.
5. 対比地 恭平, 天笠 俊之, "GPU を用いた高次元データにおける逆 k-最近傍検索の高速化", 研究報告データベースシステム(DBS), 2021-DBS-174(7), pp. 1-6, 2021 年 12 月 20 日.
6. 宮本隆典, 太田玲央, 堀江和正, 天笠俊之, 北川博之, "相互相関法による足音を用いた歩幅推定システムの基礎的検討", 第 14 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 2022), A31-1, 2022 年 2 月 27 日～3 月 2 日.
7. 此島魁二, 陳漢雄, 天笠俊之, 古瀬一隆, "属性改良問題の高速化に対する検討", 第 14 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 2022), C41-3, 2022 年 2 月 27 日～3 月 2 日.

8. 大倉真一希, 天笠俊之, "知識グラフにおける更新エンティティの予測", 第 14 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 2022), G23-4, 2022 年 2 月 27 日～3 月 2 日.
9. 中野茉莉香, 天笠俊之, "複数の知識ベースに対するキーワード検索", 第 14 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 2022), G33-3, 2022 年 2 月 27 日～3 月 2 日.
10. 大森雄基, 北川博之, 天笠俊之, "ユーザ定義関数を利用した知識ベースと外部情報源の統合利用手法", 第 14 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 2022), G33-4, 2022 年 2 月 27 日～3 月 2 日.
11. 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相関問合せ手法の高速化", 第 14 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 2022), G34-1, 2022 年 2 月 27 日～3 月 2 日.
12. 真次彰平, 塩川浩昭, "ウェッジ分割を用いた大規模グラフの要約手法", 第 14 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 2022), G34-2, 2022 年 2 月 27 日～3 月 2 日.
13. 高島聡, 堀江和正, 阿部高志, 北川博之, "Random Forest によるマイクロサックードが不要な眼球指標からの覚醒度合い判定手法の開発", 第 14 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 2022), H23-3, 2022 年 2 月 27 日～3 月 2 日.
14. 湯川皓太, 天笠俊之, "BLOCK-OPTICS : 密度ベースクラスタリング手法 OPTICS の高速化", 第 14 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 2022), H34-3, 2022 年 2 月 27 日～3 月 2 日.
15. 小出智士, 河野圭祐, 塩川浩昭, 天笠俊之, "グラフ編集距離に基づく部分グラフ探索", 第 14 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 2022), I44-1, 2022 年 2 月 27 日～3 月 2 日.
16. 河野圭祐, 小出智士, 塩川浩昭, 天笠俊之, "結晶構造を対象としたグラフニューラルネットワークにおけるグラフ識別性能の限界", 第 14 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 2022), I44-4, 2022 年 2 月 27 日～3 月 2 日.
17. 山田真也, 北川博之, 天笠俊之, 的野晃整, "複合的データ分析処理に対する拡張来歴導出手法と性能評価", 第 14 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 2022), J21-4, 2022 年 2 月 27 日～3 月 2 日.
18. Hina Suzuki, Hanxiong Chen, Kazutaka Furuse, Toshiyuki Amagasa, "A Study on Dense Nearest Neighborhood Query", 第 14 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 2022), J23-2, 2022 年 2 月 27 日～3 月 2 日.

19. 石原詢大, 渡辺知恵美, 天笠俊之, "信頼できる実行環境 TEE を用いた暗号マルチマップにおけるデータ量秘匿可能な挿入法", 第 14 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 2022), J43-3, 2022 年 2 月 27 日～3 月 2 日.
20. 小久保柚真, 天笠俊之, "フォグコンピューティングにおける RDF 推論処理の動的な負荷分散", 第 14 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 2022), K21-2, 2022 年 2 月 27 日～3 月 2 日.
21. 対比地恭平, 天笠俊之, "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手法の改善", 第 14 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 2022), K24-1, 2022 年 2 月 27 日～3 月 2 日.
22. 大宮直樹, 堀江和正, 北川博之, "深層学習を用いた睡眠ステージ判定のための脳波信号スタイル変換", ニューロコンピューティング研究会 (NC), NC2021-66, 2022 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
23. 直井悠馬, 真次彰平, 塩川浩昭, "タンパク質データベースにおける高速な相関問合せ手法の提案", 情報処理学会第 84 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2022), 1N-04, 2022 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
24. 八木隆一, 塩川浩昭, "DNA データベースに対する効率的な編集類似結合アルゴリズム", 情報処理学会第 84 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2022), 2N-04, 2022 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
25. 大森雄基, 北川博之, 天笠俊之, "知識ベースと外部情報源の統合利用環境", 情報処理学会第 84 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2022), 2N-05, 2022 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
26. 佐藤祥吾, 天笠俊之, "知識ベースを対象とした異種データ統合", 情報処理学会第 84 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2022), 2N-07, 2022 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
27. 溝谷祐大, 天笠俊之, "FPGA を利用したグラフ幅優先探索の高速化", 情報処理学会第 84 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2022), 7K-02, 2022 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
28. 萬場 大登, 早瀬 康裕, 天笠 俊之, "オブジェクト指向プログラムの要素関係とメソッドの構文木を併用したクラス名推薦", 研究報告ソフトウェア工学 (SE), 2022-SE-210(13), pp. 1-6, 2022 年 3 月 4 日.

(4) 著書、解説記事等

該当なし

7. 異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等

- 地球環境研究部門との連携：気象庁気象予報データベース「GPV/JMA アーカイブ」(<http://gpvjma.ccs.hpcc.jp>) の開発, 管理, 運用.

- 素粒子物理研究部門との連携：Japan Lattice Data Grid（JLDG）、International Lattice Data Grid（ILDG）の運営.
- 計算メディカルサイエンス事業 睡眠ビッグデータ
- 国際統合睡眠医科学研究機構（IIIS）との連携：マウスとヒトの脳波／筋電図データを利用した睡眠ステージの自動判定アルゴリズム・ソフトウェアの研究開発.

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

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
 - 情報科学類・情報理工学位プログラム：国際交流委員会委員長
 - 情報理工学位プログラム：デュアルディグリー推進室室長

塩川浩昭准教授

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

堀江和正助教

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

10. 社会貢献・国際貢献

天笠俊之教授

- 国際委員等
 - プログラム委員：DASFAA2021, DaWaK2021, iiWAS2021, IDEAS2021, 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, AAI2021, PAKDD2021, DASFAA2021
- 国内委員等
 - 電子情報通信学会 データ工学研究会（DE）専門委員
 - 日本データベース学会 電子広報委員会編集委員

堀江和正助教

- 国際委員等
 - 該当なし.
- 国内委員等
 - 該当なし.

11. その他

海外長期滞在、フィールドワークなど

該当なし

VIII-2. 計算メディア分野

1. メンバー

教授	亀田 能成
教授	北原 格
助教	宍戸 英彦
研究員	謝 淳
学生	大学院生 31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、グローバルに広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ーテーションの新しい枠組みを提案している。また、これまでの計算メディアの取り組みを発展させる形で、北原格教授は本センターの計算メディカルサイエンス事業における 3D Surgical Vision の研究を率いている。

本年度は、学際領域として、情報学とスポーツ学との交点であるスポーツ映像解析について研究を推進することを目標にしてきた。結果として大規模空間におけるスポーツ映像解析に関する研究では、次節に上げるような様々な研究成果を上げることができた。行動計測技術の先端的な研究成果を上げることで、スポーツパフォーマンス分析への応用展開が可能になりつつある。これらの研究では、スポーツ学の研究者と協力して研究を進めている。

また、街の中にいる人間に対する知的支援として、カメラによる定位技術のための基礎的研究の発展（発表した国際会議で受賞）と、視覚障がい者に対する見守り技術とナビゲーション方法について研究を進捗させることができた。

視覚メディアを主眼に置いた学際研究での研究展開も順調であり、医療機関との共同研究のもと、3D Surgical Vision の基礎技術の一つを確立した。また、ダンスを例として映像加工の新展開や、世界的にも前例のない形でのクラウドソーシングとの相乗効果による遺跡記録利用の新形態を提案することができた。

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、査読付国際会議論文 1 件を発表した。また、本センターとオーストラリアの Curtin University と締結した MoU により実施した共同研究から、国際会議論文 2 件その他の発表 2 件に至った。

3. 研究成果

[1] フレーム単位での統合環境協調型 SLAM における地図構築手法

我々は、2つのカメラヘッドを自由に動かして、統合的で一貫性のある環境マップをビデオフレームごとに構築する独自の手法 TWIN HEAD SLAM を提案する。複数のカメラによる視覚的 SLAM は協調的 SLAM と呼ばれる。構築された統合環境マップは、即時に、各カメラに個別に取り付けられた2つのトラッキングモジュールで共有される。本研究の貢献は、両カメラでの入力のビデオフレームごとに非同期に統合環境マップを更新することを、計算量最小で実現できることである。このことは、今一つのカメラで得られた重要な情報を、もう一方のカメラのトラッキングモジュールで即座に利用することができることを意味する。我々は提案手法 OpenVSLAM をもとに実装し、2台のカメラからの映像入力を用いて、一貫性のある統一環境マップが作成できることを示した。2台のカメラのローカライゼーションモジュールはそのマップを利用して定位する。

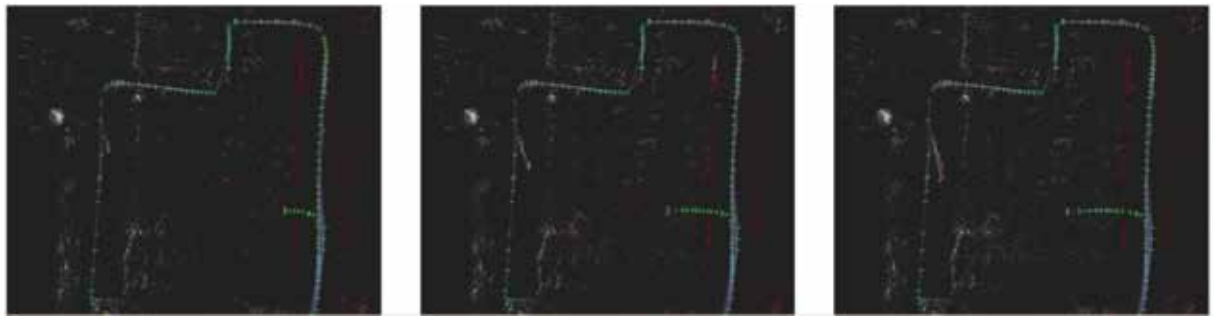
提案手法の実装システムを実行したときの様子を下図に示す。黄色のピラミッドと紫色のピラミッドは、それぞれ異なるカメラで推定されたカメラ位置に対応する。緑色のピラミッドはカメラの最新位置を示している。点群は統合環境マップにおける三次元特徴点である。



OpenVSAM から導入した検証用映像データの様子を下図に示す。カメラ2台が同じ建物内で離れて移動している。



システムの動作結果を下図に示す。オレンジ色のキーピラミッドはカメラ 1、緑のピラミッドはカメラ 2、カメラ 1 のローカルマップは赤い点、統合環境マップは白い点に対応する。2 台のカメラが同じ区間を通ることで、一貫性のある統合された 1 つの環境地図が自動的に得られる。2 台のカメラは、もう 1 台のカメラの位置に関係なく、自由に空間を行き来する。トラッキングのためのローカルマップは、グローバルマップの一部であり、グローバルマップは統一環境マップとしてフレームごとに更新される。このため、本手法では、これまでの手法では必要とされたグローバルマップの更新を不要とし、計算量最小化に成功している。



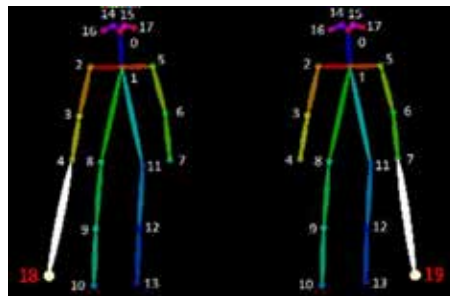
本手法は、国際会議 International Workshop on Advanced Imaging Technology (IWAIT) 2022 において Best Paper Award の一つとして表彰された。

[2] 白杖を用いた人体骨格による視覚障がい者の姿勢推定

視覚障がい者は、白杖を使って危険を回避している。本研究では、白杖を使う視覚障がい者を画像から認識するにあたって、白杖が対象者の腕の延長とみなす方法を提案する。これにより、白杖使用中の歩行者の姿勢を安定して推定することに成功した。これによって、視覚障がい者の歩行の様子を推察することができる。

提案手法では、既存の人体姿勢推定手法である OpenPose を拡張し、白杖を持つ人の姿勢を推定する。ここでは、白杖を人体骨格モデルの一部として組み込んでいる。白杖を持つ視覚障がい者の画像データベースを構築し、拡張人体骨格モデルのネットワーク学習を行った。右利きと左利きの歩行者を分けて学習させる必要があるため、学習画像から白杖を持つ手の左右を判別する方法を開発した。姿勢推定の結果から、白杖の動きを解析することができる。我々は、白杖の角度に着目し、その揺れ頻度を分析する。実験を通して、本システムが白杖を持った人間の姿勢と白杖の振れ幅を正しく推定できることを確認した。

次図で番号 18 と番号 19 が拡張骨格で追加された体の一部である。これが白杖に相当する。利き手が左右のどちらかであることから、モデルは二種類用意している。



推定結果の例を下図に示す。



一続きの映像で拡張骨格モデルにより姿勢推定を行い、そこから白杖の人体に対する相対的な動きを解析することで、白杖の仕様状況を推測することができる。下図では、対象者が一定の周期で白杖を振りながら歩いていることがわかる。これにより、対象者の歩行が順調に推移していると見なすことができる。本研究については、国際会議 IWAIT2022 の他、国内シンポジウム、国内研究会にて成果発表をした。

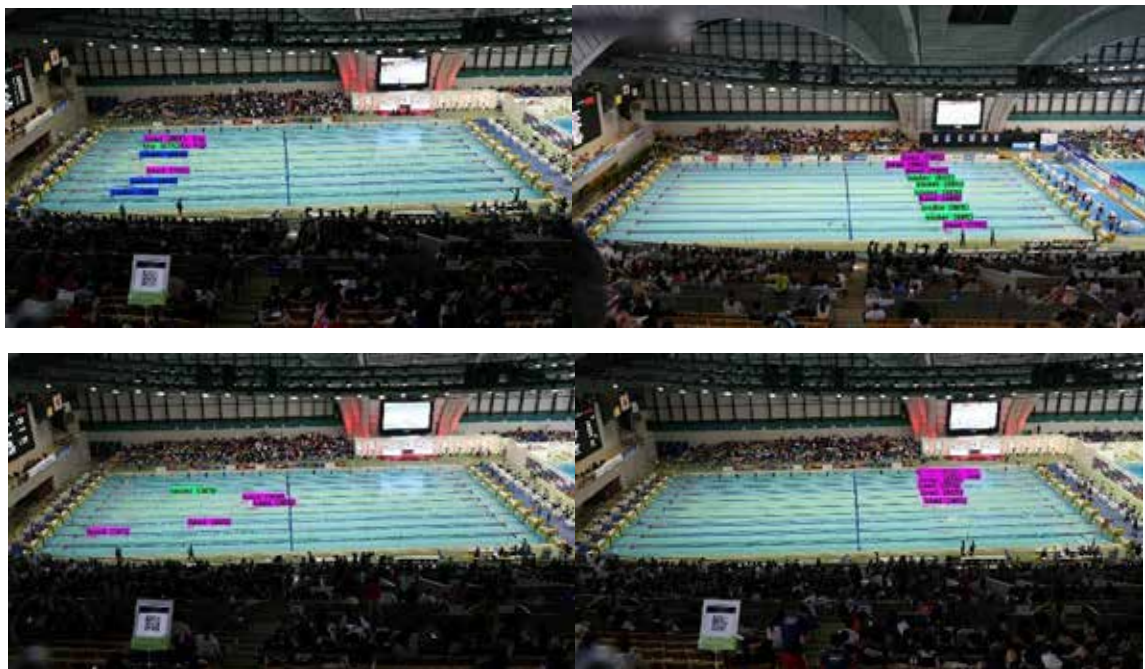


[3] 頭部認識による水泳選手の位置推定とストローク解析

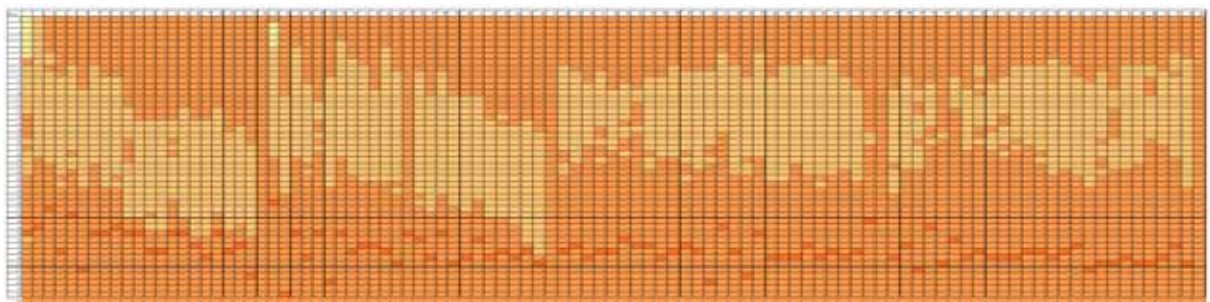
競泳の分野では、公式戦でのパフォーマンス調査が重要であり、パフォーマンスの向上に役立つ。我々は、公式戦の広視野映像から水泳選手の位置推定を行う研究を行っている。課題は、水しぶきや複雑な光の反射により、水泳選手がカメラから隠れる可能性があることである。これらの問題を解決するために、実試合における水泳選手の頭部の専用データセットを用意した。映像資料については、日本水泳連盟の協力を得ている。我々は YOLOv3 の学習を行い、学習後の YOLOv3 によって 48.1% mAP で頭部を検出することに成功した。また、位置推定に加え、水面上と水面下の 2 つのヘッドクラスを検出することで、時間経過に伴うス

トロークの状態を調査することを新たに可能とした。競泳競技で参加全選手の位置を継続的に追跡し、かつ各泳法の状態推定まで画像認識のみで可能とした研究としては、世界最先端レベルの成果であるといえる。

下図は泳者の位置と状態の推定を行った一例である。左上がバタフライ、右上が平泳ぎ、左下が背泳、右下が自由形である。状態推定としては頭部が水面上か水面下かを区別することができることから、時間経過を追うことでストローク解析も可能となっている。

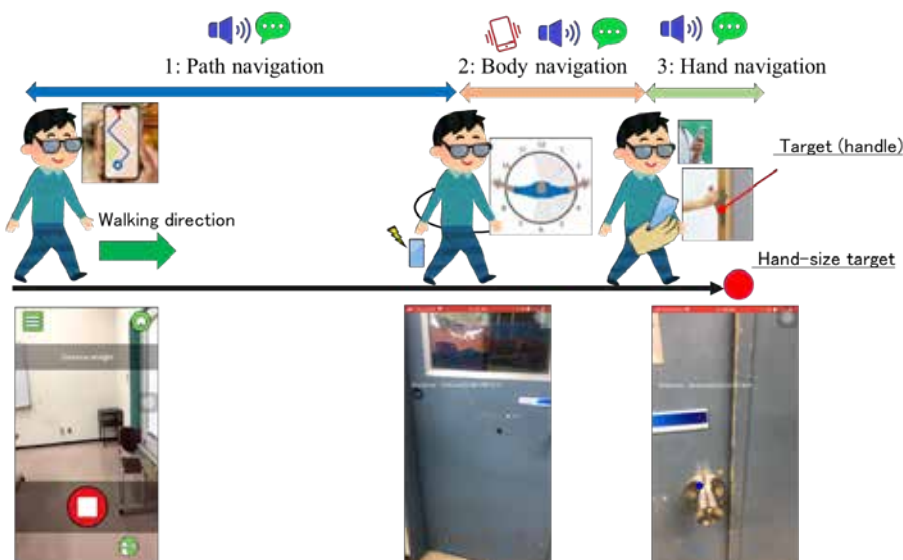


200メートルバタフライでのストローク解析の例を示す。各セルが映像1フレームに相当する。縦一列のセルの上端から濃いオレンジ色のセルまでが1ストロークに相当する。左から右へ向かって競技開始時からのストローク数となる。薄いオレンジ色は頭部が水面上にある状態を示している。本研究については国際会議 IWAIT2022 で発表を行った。

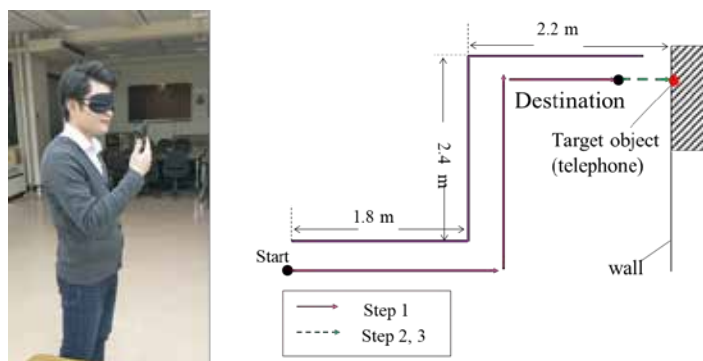


[4] 視覚障害者のための手のひらサイズの物体への3段階ナビゲーション

視覚障害者のために、音声ガイドを用いた手のひらサイズの目標物への3段階ナビゲーション法を提案した。提案手法の利点は、カメラ付きウェアラブルデバイスを用いることで、視覚障害者が触るべき対象物まで到達できることである。本提案方式では、事前に映像の軌跡を設定するだけで、視覚に基づく事前登録が可能であるため、屋内のあらゆる状況に適用できる。ナビゲーションは、経路ナビゲーション、ボディナビゲーション、ハンドナビゲーションの3つのステージに分解される。歩行ステージについては、先行研究の成果であるClewアプリを利用する。続く2つのステージではARアンカーを導入する。ARアンカーは、あらかじめ対象物に登録しておく。音によるガイダンスで手のひらサイズの分解能でターゲットに到達できるよう、適切な音声ガイダンスを用意している。ステージの切り替えは、振動で通知する。

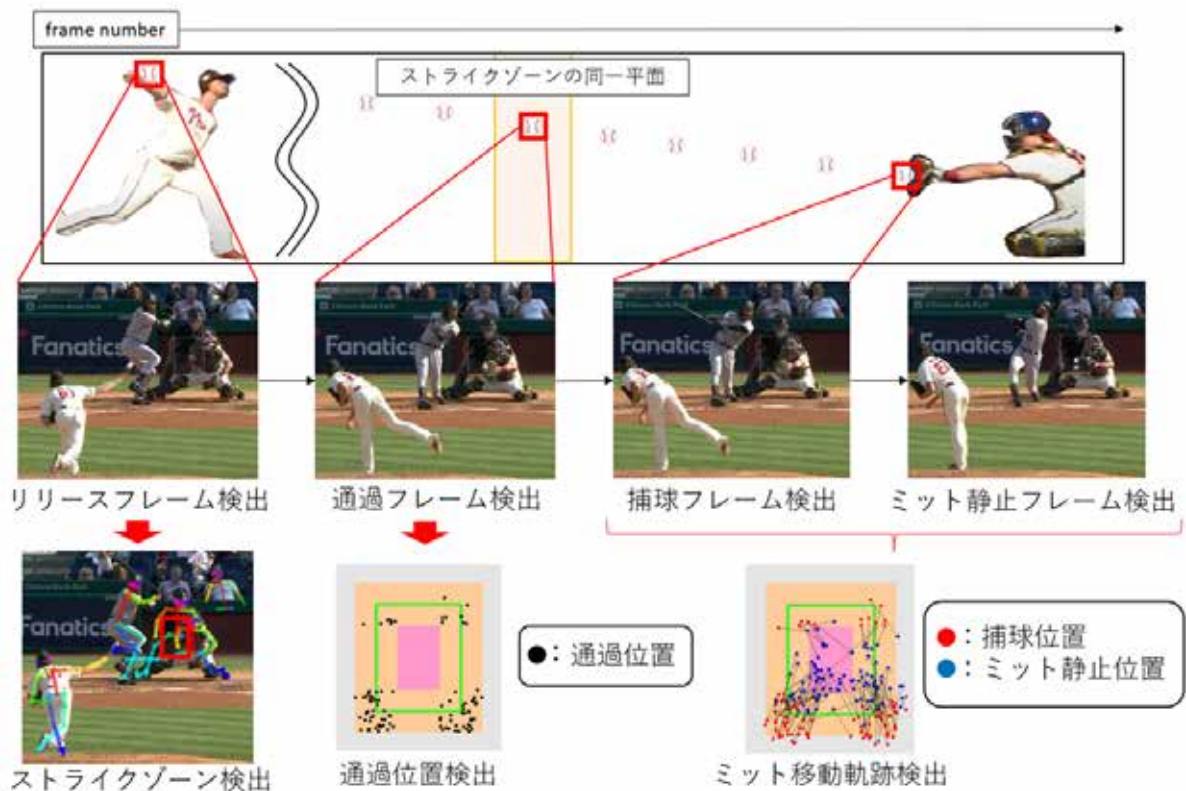


スマートフォンを用いた評価実験を行った結果、提案手法により、5m離れた位置から手のひらサイズの目標物までユーザを誘導できることが確認できた。研究成果をIWAIT2022で発表した。



[5] 野球映像を用いた捕手のフレーミング技術におけるミット移動軌跡検出

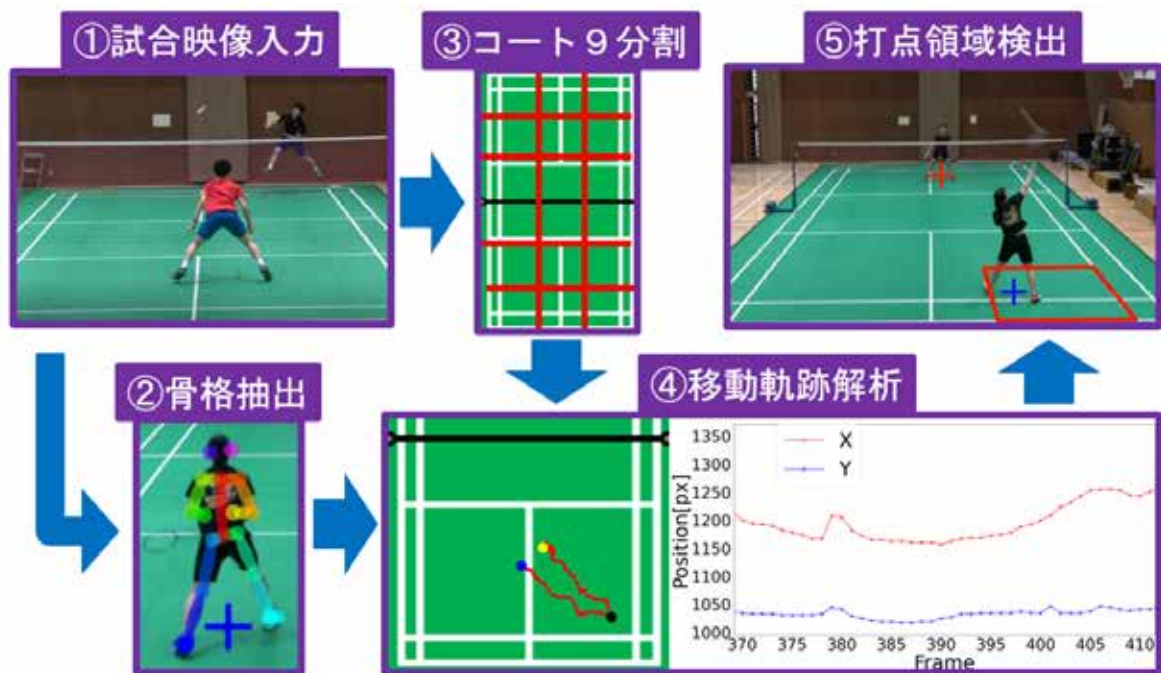
本研究では、異分野間連携として広島大学総合科学部・人間社会科学研究科スポーツバイオメカニクス研究室と共同研究を実施した。本研究では打者が投球を見逃した映像からフレーミング中の捕手のミット移動軌跡を検出する手法を提案した。提案手法では、物体検出手法を用いて野球ボールが投手から離れたフレームをリリースフレームとして検出した。リリースフレームに骨格推定手法を適用することで、フレーミング評価に不可欠な各映像に対応するストライクゾーンを検出した。検出された野球ボールの最終フレームを捕球フレーム、捕球フレームの野球ボール位置を捕球位置として検出した。物体検出手法を用いて捕手のミットを追跡し、前後 0.1 [s]のミット移動距離が最小となるフレームをミット静止フレーム、ミット静止フレームのミット位置をミット静止位置として検出した。実証実験の結果、リリースフレーム検出、ストライクゾーン検出は高精度であった。また、検出した捕球位置とミット静止位置を用いてフレーミング中のミット移動軌跡を可視化した。



野球映像を用いた捕手のフレーミング技術におけるミット移動軌跡検出手法の概要：検出したフレーミング中のミット移動軌跡の可視化によって、ミットを 10～25 [cm]（野球ボール約 1～3 個分）動かすことがフレーミングに効果的であることがわかった。

[6] バドミントン映像におけるフットワーク軌跡を用いた打点領域の検出

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、バドミントン競技映像に対する選手のフットワーク軌跡を用いた打点領域の検出手法を提案した。バドミントンシングルスでは通常、自陣コートの中央付近をベースとし、自身がショットを放った後は、ベースに戻り相手選手の打球に備えるフットワーク特性がある。“ベースから任意の地点に移動したのちベースに戻る”という移動軌跡の中で、任意の地点はショットが放たれた地点である。提案手法では、選手のフットワーク軌跡を解析し、“ベースから任意の地点に移動したのちベースに戻る”という動きからヒットタイミングを検出した。ヒットタイミングにおける選手位置が含まれる9分割領域を打点領域と定義し、打点領域の検出を試みた。実証実験の結果、コート手前の選手の検出精度（F 値）は約 86%、コート奥の選手の検出精度（F 値）は約 71%であった。以上より選手のフットワーク軌跡から打点領域を検出できることを確認した。



フットワーク軌跡に着目した打点領域検出手法の概要: コート手前の選手の再現率は 76.3%、適合率は 98.4%であり、提案手法は高い精度であることを確認した。

[7] ダンスと場景を連動させた映像生成手法の開発

新型コロナウイルス感染症（COVID-19）の影響によりダンサーがパフォーマンスを披露する場は、ステージからメディアへと変化している。そのレジリエンスな教育として、高校生のダンス部を応援するために、2020 年よりテレビ局の企画の一つとして「ダンス ONE プロジェクト」が実施された。我々は、ダンス ONE プロジェクトに参加する高校生の撮影および

動画制作をサポートする形で協力し、IT の活用体験を向上させることを目的とした。そこで、コンピュータビジョンの最先端技術を活用した映像生成手法を提案する。研究協力校ダンス部の高校生とコンセプト作りや撮影作業などに取り組み、音源のビート検出手法とオブジェクト検出アルゴリズムを活用したダンスと場景を連動させた映像生成手法を提案する。信号機の色を映像処理によって拡張し、場景とダンスが一体化しているような効果を狙い、違和感のない映像を生成する。動画編集の難しさを解決するためにカット割りとズーム設定の自動処理を提案する。ダンス ONE プロジェクトを通して、高校探求学習科目「総合的な探究の時間」と同様の取り組みを部活動の一環とし、新たな教育モデルを提案する。「総合的な探究の時間」に向けて、高校生に対しソフトウェアを用いた動画編集方法とコンピュータビジョン技術を活用した映像生成手法について講義した。IT の活用体験の向上に関する意向調査では、ダンス ONE プロジェクトと本研究活動を通して参加者の IT の活用体験が向上したことを確認した。以上より、研究に協力いただいた高等学校へ社会活動を実施した。



ビートに合わせて変化させた信号機のパターン提示：アンケート結果より、生徒全員が高揚感に対して効果があり、違和感がないと感じていることを確認した。「信号機の色が変わった前と後の動画を並べて見た時に、変わった後の方が明るく楽しげなようにみえた」というコメントや「実は信号機の色が変わっていたことは知らなかった」など、高校生の要求を満たすような高揚感があり、かつ違和感のない映像生成が実現されていることを確認した。

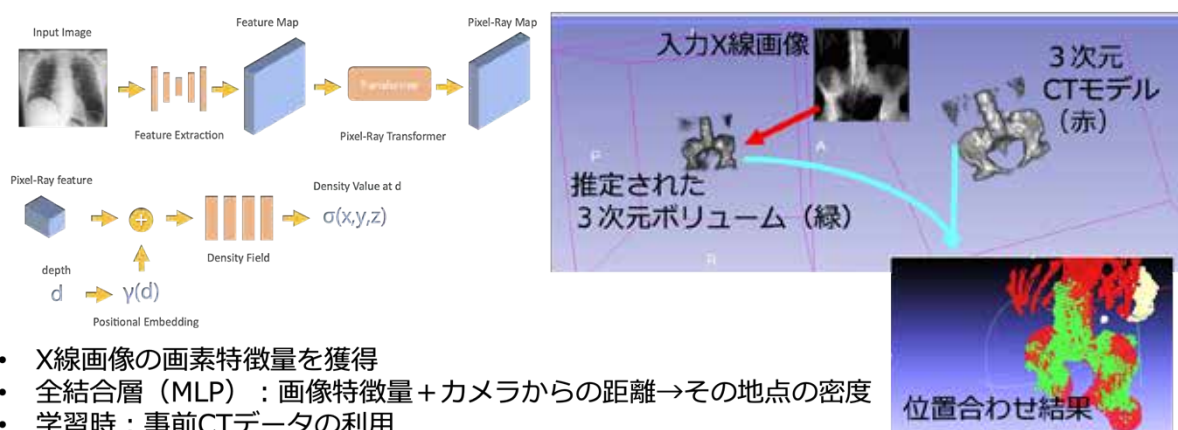
[8] X 線画像と 3 次元 CT モデルの位置合わせ

計算メディカルサイエンス（3D Surgical Vision グループ）として、整形外科手術を対象とした視覚支援法に関する研究を実施した。単眼 X 線画像と 3 次元 CT モデルをマーカなどの明示的な手がかりを用いずに重ね合わせる手法を考案した。下図左に示すように、ニューラルボリューム表現を用いて、単眼 X 線画像から被写体となる骨の 3 次元ボリュームを推定する深層ネットワークを学習する。3 次元点群の位置合わせ処理（ICP（Iterative Closest Point）アルゴリズム）を用いて、推定ボリュームと CT ボリュームを重ね合わせた結果を下図右に示す。術前に取得した CT モデルに基づく施術計画を術中に撮影した X 線透視画像上に重畳することによって処置の出来を視覚的に確認すると同時に、X 線透視撮影装置の位置姿勢（カメラパラメータ）を推定する。本研究は、東京医科大学茨城医療センターの整形外科医・吉井雄一准教授、医療機器メーカーの株式会社 LEXI と、手術現場での実利用を目的として共同で実施した成果である。国際会議 LifeTech2022 において口頭発表を行った。

（用途）整形の術前計画（CTモデル）と術中状況（X線画像）を照合→作業の確認

（目的）単眼X線画像と3次元CTモデルの位置合わせ（重ね合わせ）

（特徴）深層学習による密度ボリューム（X線の減衰率）推定ネットワークの構築



[9] 大規模なアスリートのパフォーマンス計測

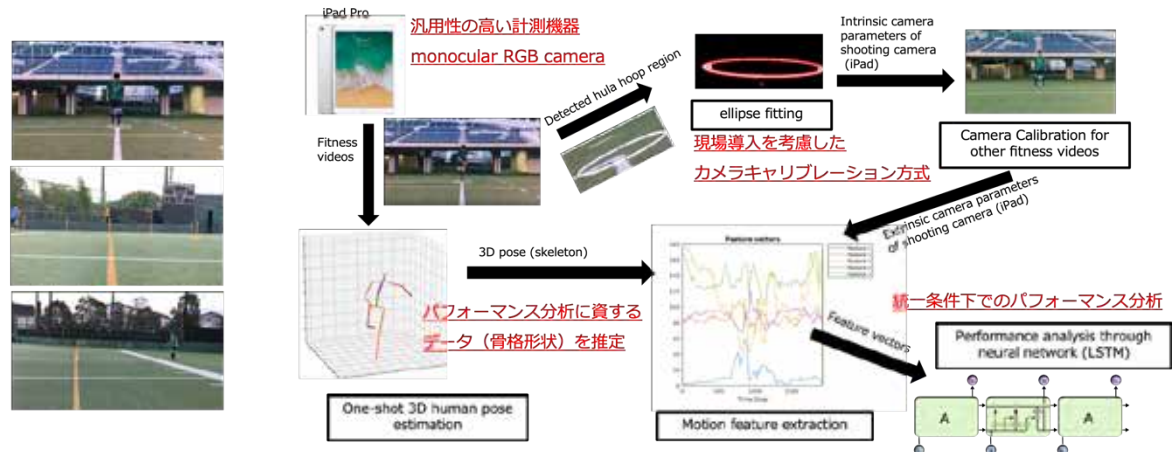
筑波大学体育系谷川聡准教授と共同で、全国各所に存在する多数のアスリートのパフォーマンスを統一的に分析するための計測方式について研究した。スポーツ現場で多用される

iPad 1 台で、垂直跳び、30m スプリント、方向転換の規定運動を撮影する。カメラの設置状態の違いによる見え方の差異を補正するために、形状が既知の物体を撮影しカメラの位置姿勢を推定する。本研究では、現場での入手しやすさを考慮しフラフープを採用する。深層学習によって RGB 画像から被写体の 3 次元骨格情報を復元する処理を撮影映像に適用し、アスリートの時系列 3 次元姿勢情報を取得する。LSTM (Long Short Term Memory) ネットワークを用いて時系列パターンから、被写体のパフォーマンスを推定する。同一競技に取り組むジュニアからシニアそしてエリートまでのアスリートを継続的に計測することにより、長期的な育成計画や怪我の防止などに効果を発揮することが期待できる。以上をまとめた研究成果を映像情報メディア学会 2021 年冬季大会にて発表した。

(用途) 全国の多様なアスリート (ジュニア～シニア・エリート) のフィジカル管理

(目的) 単眼映像からアスリートのパフォーマンスを計測

(特徴) 同一条件下での計測プラットフォーム構築、計測データの深層学習

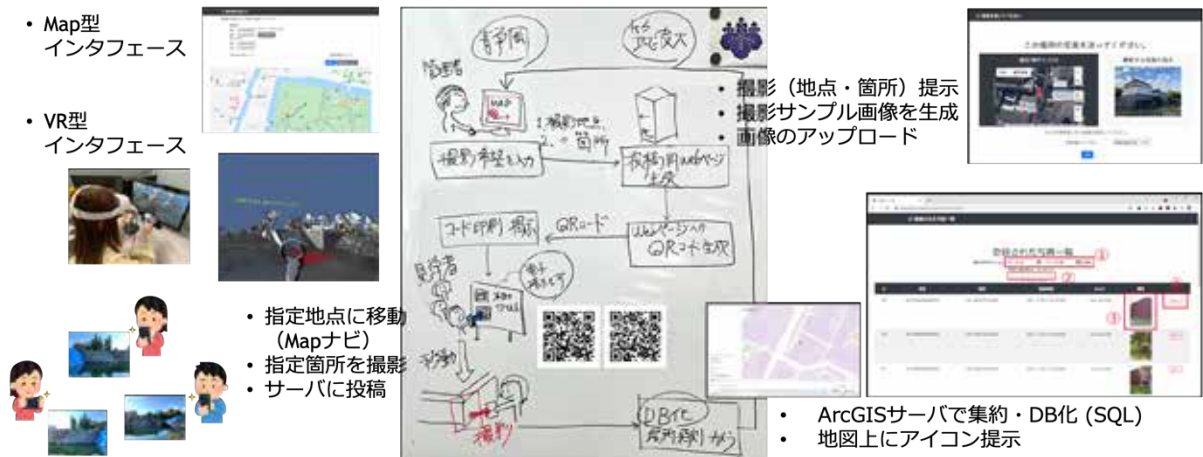


[10] 収集型 Crowd Sourcing による文化財観測

文化財の保存活動支援を目的とした研究を実施した。文化財の経年劣化を防ぐためには、長期かつ頻度の高い観察が求められる。画像撮影はその一つの手段である。一方で、世界各地に点在する文化財を網羅的に観察するためには膨大な人手が必要となるため現実的とはいえない。本研究では、文化財を訪れる多数の見学者を観測リソースとして活用するアーカイビングプラットフォームを考案した。文化財管理者は、ドローンなどを用いて事前に生成した文化財の 3 次元モデルを用いて、観測が必要な箇所とその撮影地点を VR 型インタフェースで指示する (日常生活で馴染みの深い Map 型インタフェースも開発した)。その指示情報に基づき、撮影リクエスト Web サイトと、そのサイトへのリンクが埋め込まれた QR コードが生成される。QR コードは文化財の案内板に掲示され、掲示を見て興味を持った見学者が指示に従って画像の撮影と提出を行う。撮影された画像データは管理者の DB に蓄積され、文

化財の保存活動計画の参考情報として活用される。本方式は、静岡市公園課と協議を重ね考案されたものであり、公園来場者を対象とした実証実験を計画中である。以上をまとめた研究成果を日本バーチャルリアリティ学会 第64回複合現実感研究会にて発表した。

(用途) 世界各地に点在する文化財の長期かつ頻繁な画像データ収集
 (目的) 見学者を観測リソースとする文化財アーカイビングプラットフォーム
 (特徴) 「3次元モデリング→VR遠隔指示→収集型CS→画像DB構築」ループ

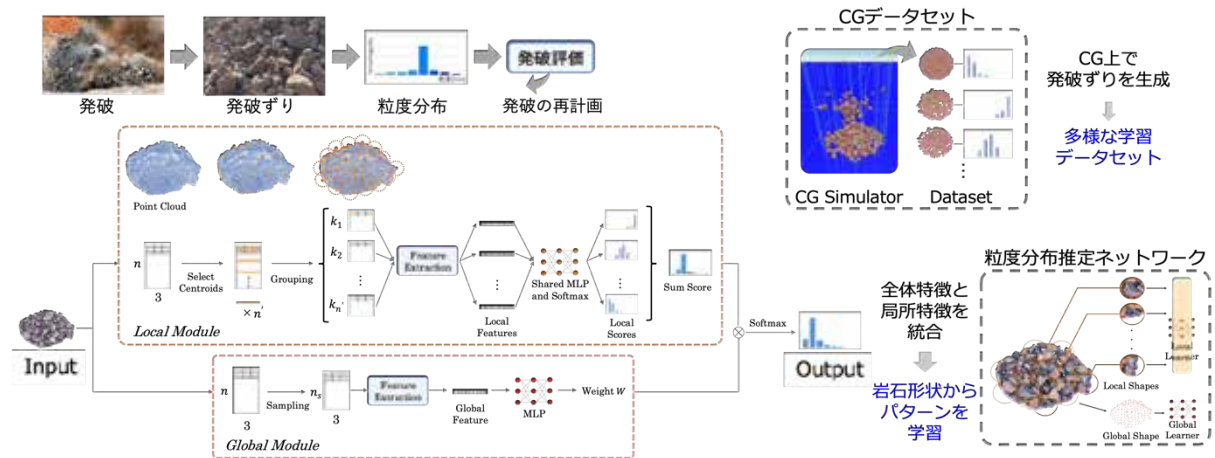


[11] 発破岩石群の3次元粒度分布推定

3次元画像処理を用いて採掘現場の発破作業を効率化する研究に取り組んだ。発破の結果生み出される岩石群は発破ずりと呼ばれる。その発破ずりに含まれる岩のサイズの分布を粒度分布という。従来研究では、発破ずりを撮影した多視点画像から3次元点群を生成し、その形状特徴から粒度分布を計測する手法が多かったが、3次元点群復元誤差や岩石形状の多様性などの原因により十分な計測精度が実現されたとは言い難かった。本研究では、深層学習を用いて3次元点群からその粒度分布を推定することにより、上述した問題を解消する。

深層学習の推定精度を向上させるためには、信頼性の高かつ様々な条件を網羅した学習データが必要である。本研究では、CGデータから多様で正確な学習セットを生成し、それを用いて深層ネットワークをトレーニングする。本方式は、オーストラリア・Curtin大学、秋田大学、北海道大学の資源工学研究者との共同研究によって考案されたものであり、採掘現場への導入への期待が高まっている。以上をまとめた研究成果を国際会議 The 9th International Conference on Materials Engineering for Resources (ICMR2021)にて口頭発表した。

(用途) 採掘現場の発破作業の効率化 (発破工学へのフィードバック)
 (目的) 発破ずりの3次元粒度分布推定の高精度化
 (特徴) 岩石形状に適した深層ネットワーク、CGを用いた学習データセット構築



4. 教育

学生の指導状況

坂村 祐希	博士(工学)	拡張現実型情報提示を用いた自動走行車両の搭乗シミュレータに関する研究
Dmitry Patashov	博士(工学)	A Study on Processing and Analysis of Biomedical Temporal-Quasiperiodic Information using Statistical and non-Stationary Methods
大西 衝	修士(工学)	前頭葉脳波ベータ周波数帯に着目した VR 交通環境体験時の安心感評価
中泉 安貴	修士(工学)	広域撮影映像からの白杖使用者の状態推定
上田 樹	修士(工学)	人物運動予測のための骨格動作特徴の時空間的な集約法
吉野 航平	修士(工学)	発破ずりの粒度分布推定のための3次元点群に基づく深層学習
Tan Peng	修士(工学)	Performance analysis of athletes based on 3D pose estimation from a monocular RGB video
岡本 香	修士(工学)	バドミントン競技におけるシャトルを見る際の眩しさの要因評価
Xia Xue	修士(工学)	文化財のデジタルアーカイビングのための VR インタフェースを用いた撮影指示に基づく画像情報収集方式
Dong Siqi	修士(工学)	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

- 宇津呂 雄生 学士(工学) 相撲における骨格情報を用いた決まり手分類
- 川田 洸希 学士(工学) 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
- 坂井 甚太 学士(工学) 映像作品のカメラワーク推定のためのカメラと被写体の位置姿勢推定
- 島田 和輝 学士(工学) 自動走行車両搭乗者の予備動作喚起を目的とした映像の生成と提示
- 菅野 大和 学士(工学) 野球映像を用いた捕手のフレーミング技術におけるミット移動軌跡検出
- 田中 直樹 学士(工学) バドミントン映像におけるフットワーク軌跡を用いた打点領域の検出

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. Best Paper Award of The International Workshop on Advanced Image Technology, Riku Yamasaki, Hidehiko Shishido, and Yoshinari Kameda, A Frame-By-Frame Integrated Environment Map Building Method in Cooperative Slam, 2022/1.
2. Silver Prize, Excellent Paper Awards for oral presentations, GCCE 2021, Yinghao Wang, Chun Xie, Hidehiko Shishido, Shinji Hashimoto, Tatsuya Oda, and Itaru Kitahara, A Surgical Bullet-Time Video Capturing System Depending on Surgical Situation, 2021/10.
3. FIT 奨励賞, 第 20 回情報科学技術フォーラム, 董 思齊, 宍戸 英彦, 北原 格, 被写体の対称性を利用したスケッチ形状の補正手法, 2021/8.
4. MIRU 学生奨励賞, 上田 樹, 宍戸 英彦, 北原 格, 連動する骨格動作の表現に適した時空間特徴の学習による人物運動予測法, 2021/7.

外部資金

1. 科研費・基盤(B) 「生体と行動の計測に基づく VR 体験の主観評価安定化」(2021-2024 年度) 代表者: 亀田能成(研究分担者: 宍戸英彦) 全年度直接経費: 960 万円 (2021 年度直接経費: 240 万円)
2. 科研費・挑戦的研究(萌芽) 「プレッシャーコントロール下でのスポーツスキル獲得の効果解明」(2019-2021 年度) 代表者: 亀田能成 全年度直接経費: 470 万円 (2021 年度直接経費: 140 万円)

3. 科研費・基盤(B)「解説型ウェブページの分かり易さ・見易さの自動評定とそれを用いたページ推薦システム」(2019-2021 年度) 代表者：宇津呂武仁(研究分担者：亀田) 全年度直接経費：1330 万円 (2021 年度直接経費：450 万円、分担 20 万円)
4. 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 (2021 年度直接経費：490 万円、分担 140 万円)
5. 科研費・基盤(B)「柔軟臓器の形状推定と術前モデルへの実時間位置合わせを行う肝手術ナビゲーション開発」(2018-2021 年度)代表者：大城幸雄(研究分担者：北原) 全年度直接経費：1310 万円 (2021 年度直接経費：330 万円、分担 30 万円)
6. 科研費・基盤(A)「人と移動体が混在する空間における外向け HMI 開発・評価基盤技術」(2019-2021 年度)代表者：矢野博明(研究分担者：北原) 全年度直接経費：3360 万円 (2021 年度直接経費：630 万円、分担 80 万円)
7. 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 (2021 年度直接経費：410 万円、分担 190 万円)
8. JST CREST 研究領域「人間と調和した創造的協働を実現する知的情報処理システムの構築」研究総括：ATR 萩田紀博、「Cyborg Crowd：柔軟でスケーラブルな人と機械の知力集約」代表：森嶋厚行(研究分担者：北原) 全年度直接経費：6200 万円 (2021 年度直接経費：1200 万円)
9. JST CREST AIP チャレンジ「マーカレス 3 次元関節位置に基づくバドミントンショット情報の可視化」代表：宍戸英彦 2021 年度：100 万円
10. 共同研究・株式会社日立製作所「外界認識のための三次元構造理解」代表者：北原 格 2021 年度 183.3 万円
11. 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 (2021 年度直接経費：120 万円)

知的財産権

1. 森嶋 厚行, 北原 格 他, シールと ICT をつないだ避難状況把握装置, 2022 年 6 月 28 日

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. 坂村 祐希, 富田 瑛智, 宍戸 英彦, 水浪 田鶴, 井上 和哉, 亀田 能成, 原田 悦子, 北原 格, “自動走行車両の進行方向提示と搭乗者の安心感の関係性調査”, 情報処理学会論文誌, vol.63, no.1, pp.152-162, 2022/1/15. (DOI: 10.20729/00215723)
2. Yuki Sakamura, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, “Multi-View Stereo Based on Omnidirectional Epipolar Geometry”, Trans on IEVC, vol.9, no.2, pp.41-49, 2021/12/1.
3. Zedrick Paul L. Tungol, Hisatoshi Toriya, Narihiro Owada, Itaru Kitahara, Fumiaki Inagaki, Mahdi Saadat, Hyong Doo Jang, and Youhei Kawamura, “Model Scaling in Smartphone GNSS-Aided Photogrammetry for Fragmentation Size Distribution Estimation”, MDPI Minerals, vol.11, no.12, 17pages, 2021/11/23. (DOI: 10.3390/min11121301)
4. Hisatoshi Toriya, Narihiro Owada, Mahdi Saadat, Fumiaki Inagaki, Ashraf Dewan, Youhei Kawamura, and Itaru Kitahara, “Mutual Superimposing of SAR and Ground-Level Shooting Images Mediated by Intermediate Multi-Altitude Images”, Elsevier Array, vol.12, no.100102, 13pages, 2021/10/15. (DOI: 10.1016/j.array.2021.100102)
5. Hidehiko Shishido, Koyo Kobayashi, Yoshinari Kameda, and Itaru Kitahara, “Method to Generate Building Damage Maps by Combining Aerial Image Processing and Crowdsourcing”, Journal of Disaster Research, vol.16, no.5, pp.827-839, 2021/8/1.
6. Fumiya Kimura, Yutaka Ito, Toshiya Matsui, Hidehiko Shishido, Itaru Kitahara, Youhei Kawamura, and Atsuyuki Morishima, “Tourist Participation in the Preservation of World Heritage a Study at Bayon Temple in Cambodia”, Journal of Cultural Heritage, vol.50, pp.163-170, 2021/6/7.

B) 査読無し論文

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

B) 一般講演

1. Pragyan Shrestha, Itaru Kitahara, Hidehiko Shishido, Yuich Yoshii, and Chun Xie, “3D Reconstruction of Bone from Multi-View X-Ray Images Using Planar Markers”, 2022 IEEE 4th Global Conference on Life Sciences and Technologies (LifeTech), pp.193-197, 2022/3, Osaka and online meeting, Japan. (DOI: 10.111LifeTech53646.2022.9754765)

2. Zilong Liang, Hidehiko Shishido, and Yoshinari Kameda, “Three-Stage Navigation to Hand Size Object for Visually Impaired”, International Workshop on Advanced Image Technology (IWAIT)2022, 147, 2022/1, Hong Kong and online. (DOI: 10.1117/12.2626172)
3. Mayuko Ishikawa, Hidehiko Shishido, and Yoshinari Kameda, “Swimmer Position Estimation and Stroke Analysis Based on Head Recognition”, International Workshop on Advanced Image Technology (IWAIT)2022, 148, 2022/1, Hong Kong and online. (DOI: 10.1117/12.2626170)
4. Riku Yamasaki, Hidehiko Shishido, and Yoshinari Kameda, “A Frame-By-Frame Integrated Environment Map Building Method in Cooperative Slam”, International Workshop on Advanced Image Technology (IWAIT)2022, 149, 2022/1, Hong Kong and online. (DOI: 10.1117/12.2626168)
5. Yasutaka Nakaizumi, Hidehiko Shishido, and Yoshinari Kameda, “Posture Estimation for the Visually Impaired People Using Human Skeleton with a White Cane”, International Workshop on Advanced Image Technology (IWAIT)2022, 1 page, 2022/1 Hong Kong and online. (DOI: 10.1117/12.2625878)
6. Bashir Ahmad Jalali, Taeyoo Na, Hirokazu Furuki, Itaru Kitahara, and Youhei Kawamura, “Landslide Hazard Mapping Using Gis and Gans at Central Parts of Badakhshan Province, Afghanistan”, The 13th Asian Regional Conference (ARC13) of International Association for Engineering Geology and the Environment (IAEG), 1page, 2021/11, online meeting.
7. Yuta Mizunuma, Itaru Kitahara, and Yoshihiro Kuroda, “ConvLstm Based Estimation Method of Incision Trajectory with Electric Knife by Connecting Restored Thermal Sources”, the 43rd Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC2021), pp.3485-3489, 2021/11, online meeting. (DOI: 10.1109/EMBC46164.2021.9629819)
8. Pragyan Shrestha, Chun Xie, Hidehiko Shishido, Yuichi Yoshii, and Itaru Kitahara, “3D Reconstruction of Bone Structure from Multi-View X-Ray Images Using Planar Markers”, the 43rd Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC2021), p.5288, 2021/11, online meeting.
9. Taiga Sato, Kohei Yoshino, Hisatoshi Toriya, Jang Hyongdoo, Itaru Kitahara, and Youhei Kawamura, “Construction of Training Data in the Computational Domain and Deep Learning Identification Trials for Estimation of Fragmentation in Blast Muckpiles”, The Ninth International Conference on Materials Engineering for Resources (ICMR2021), 2 pages, 2021/10, online meeting.
10. Bashir Ahmad Jalali, Taeyoo Na, Hisatoshi Toriya, Itaru Kitahara, and Youhei Kawamura, “Parametric Study on Landslides Using Frequency Ratio Model and Gis in Central Parts of

- Badakhshan Province, Afghanistan”, The Ninth International Conference on Materials Engineering for Resources (ICMR2021), 2 pages, 2021/10, online meeting.
11. Kohei Yoshino, Taiga Sato, Hisatoshi Toriya, Hidehiko Shishido, Jang Hyongdoo, Youhei Kawamura, and Itaru Kitahara, “An Estimation Method of Fragmentation in Blast Muckpiles Using Deep Learning with Hierarchical Feature Extraction for 3D Point Cloud”, The Ninth International Conference on Materials Engineering for Resources (ICMR2021), 2 pages, 2021/10, online meeting.
 12. Ikuma Uchida, Atom Scott, Hidehiko Shishido, and Yoshinari Kameda, “Automated Offside Detection by Spatio-Temporal Analysis of Football Videos”, 4th International ACM Workshop on Multimedia Content Analysis in Sports (ACM MMSports 2021), pp.17-24, 2021/10, Chengdo and online, China. (DOI: 10.1145/3475722.3482796)
 13. Takenobu Kiyama, Takamasa Takeda, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, “A Dnn-Based Refining Method for 3D Point Cloud Reconstructed from Multi-View Images”, 2021 IEEE 10th Global Conference on Consumer Electronics, pp.654-658, 2021/10, Kyoto and online, Japan. (DOI: 10.1109/GCCE53005.2021.9621952)
 14. Haihan Zhang, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, “Superimpose of 3D Dynamic Objects on a Static Environment for Driver Assistance System”, 2021 IEEE 10th Global Conference on Consumer Electronics (GCCE 2021), pp.556-560, 2021/10, Kyoto and online, Japan. (DOI: 10.1109/GCCE53005.2021.9622079)
 15. Yinghao Wang, Chun Xie, Hidehiko Shishido, Shinji Hashimoto, Tatsuya Oda, and Itaru Kitahara, “A Surgical Bullet-Time Video Capturing System Depending on Surgical Situation”, 2021 IEEE 10th Global Conference on Consumer Electronics (GCCE 2021), pp.650-653, 2021/10, Kyoto and online, Japan. (DOI: 10.1109/GCCE53005.2021.9622047)
 16. Yuya Hiruta, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, “One Shot 3D Reconstruction by Observing Multiple Spherical Mirrors”, 2021 IEEE 10th Global Conference on Consumer Electronics (GCCE 2021), pp.659-663, 2021/10, Kyoto and online, Japan. (DOI: 10.1109/GCCE53005.2021.9621989)
 17. Ikuma Uchida, Atom Scott, Yoshinari Kameda, and Keiichi Zempo, “Wearable Device for Evaluation of Players' Interaction on Voice Coaching on Football Field”, 2021 IEEE 10th Global Conference on Consumer Electronics (GCCE 2021), 4 pages, 2021/10, Kyoto and online, Japan. (DOI: 10.1109/GCCE53005.2021.9622067)
 18. Yuki Sakamura, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, “Multi-View Stereo Based on Omnidirectional Epipolar Geometry”, The 7th IEEEJ International Conference on Image Electronics and Visual Computing (IEVC 2021), 4 pages, 2021/9, online meeting.

19. Fumiya Kimura, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, “Lively Free-Viewpoint Video Generation Using Video Textures”, The 7th IEEE International Conference on Image Electronics and Visual Computing (IEVC 2021), 4 pages, 2021/9, online meeting.
20. Yuki Sakamura, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, “Multi-View Stereo Based on Omnidirectional Projective Geometry”, Asia Pacific Workshop on Mixed and Augmented Reality (APMAR2021), 8 pages, 2021/4, Daejeon, Korea (online).
21. Haihan Zhang, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, “3D Dynamic Objects Localization in a Static Environment for Advanced Driver Assistance System”, Asia Pacific Workshop on Mixed and Augmented Reality (APMAR2021), 8 pages, 2021/4, Daejeon, Korea (online).
22. Yuya Hiruta, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, “Depth Estimation from Multiple Spherical Mirror Regions in a Single Image”, Asia Pacific Workshop on Mixed and Augmented Reality (APMAR2021), 8 pages, 2021/4, Daejeon, Korea (online).
23. Qiaoge Li, Hidehiko Shishido, and Itaru Kitahara, “An Investigation to Determine the Impact on the Image Quality of Omnidirectional Free-Viewpoint Images by Reconstructed 3D Point Cloud”, Asia Pacific Workshop on Mixed and Augmented Reality (APMAR2021), 2 pages, 2021/4, Daejeon, Korea (online).
24. Dmitry Patashov, Yakir Menahem, Yoshinari Kameda, Dmitry Goldstein, and Michael Balberg, “Fnrirs Artifact Removal Using Selective Source Separation”, The Optical Society of America: Optics in the Life Sciences Congress 2021, 2 pages (Poster), 2021/4, online meeting.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 北原 格, “自由視点映像によるスポーツ観戦”, 2022 年電子情報通信学会総合大会, 2022/3.
2. 北原 格, “多視点画像情報に基づく高速かつ高品質な自由視点コンテンツの生成と閲覧”, 映像情報メディア学会 2021 年冬季大会, 2021/12.
3. 北原 格, “多視点スポーツ映像処理”, 映像情報メディア学会関西支部講演会『未来を切り拓く世界最先端映像技術』, 2021/10.
4. 北原 格, “複合現実感提示による搭乗者の視覚支援”, 自動車技術会第 1 回情報通信メディア部門委員会, 2021/4.

B) その他の発表

1. 石川 晋也, 宍戸 英彦, 吉田 健司, 亀田 能成, “VR シミュレーションによるバスケットボール時の視覚探索運動の定量化”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.121, no.423, pp.284-289, 2022/3.
2. 大西 衝, 宍戸 英彦, 亀田 能成, “前頭葉脳波ベータ周波数帯に着目した VR 交通環境体験時の安心感評価”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.121, no.423, pp.278-283, 2022/3.
3. 岡本 香, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 吹田 真士, “バドミントン競技におけるシャトルを見る際の眩しさの要因評価”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.121, no.423, pp.84-89, 2022/3.
4. 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手法”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.121, no.423, pp.49-54, 2022/3.
5. 中泉 安貴, 宍戸 英彦, 亀田 能成, “映像からの視覚障がい者に対する白杖の動き推定”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.121, no.423, pp.43-48, 2022/3.
6. 大木 郁登, 宍戸 英彦, 亀田 能成, “手持ちのスマートフォンによる歩行者の自由歩行時における進行方向推定”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.121, no.423, pp.39-42, 2022/3.
7. 岡本 香, 亀田 能成, 宍戸 英彦, 吹田 真士, “バドミントン競技における見上げ動作時の眩しさの要因評価”, 日本バドミントン学会第 5 回学会大会, 1page, 2022/3.
8. 田中 直樹, 宍戸 英彦, 吹田 真士, 亀田 能成, 北原 格, “バドミントン競技映像におけるフットワーク軌跡を用いた打点領域の検出”, 日本バドミントン学会第 5 回学会大会, 1page, 2022/3.
9. 蛭田 雄也, 北原 格, 宍戸 英彦, “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の検討”, 情報処理学会第 84 回全国大会, vol.2, pp.151-152, 2022/3.
10. 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提示方式”, 情報処理学会第 84 回全国大会, vol.3, pp.71-72, 2022/3.
11. 坂井 甚太, 宍戸 英彦, 北原 格, “3 次元形状復元と人物追跡を用いた単眼映像コンテンツのカメラワーク推定に関する検討”, 情報処理学会第 84 回全国大会, vol.1, pp.515-516, 2022/3.

12. 佐川 加奈, 宍戸 英彦, 吹田 真士, 北原 格, “単眼バドミントン競技映像における選手の骨格情報に基づく反応時間の計測”, 情報処理学会第 84 回全国大会, vol.2, pp.583-584, 2022/3.
13. 坂村 祐希, 宍戸 英彦, 北原 格, “全方位画像のエピポーラ幾何に基づく三次元再構成”, 電子情報通信学会 技術研究報告 ITS, vol.121, no.373, pp. 196-201, 2022/2.
14. 上田 樹, 福原 吉博, 片岡 裕雄, 相澤 宏旭, 宍戸 英彦, 北原 格, “NeDDF: 距離場と密度場を互惠的に制約する 3 次元形状表現”, 日本バーチャルリアリティ学会 第 65 回複合現実感研究会, vol.2022-CVIM-228, no.19, 6 pages, 2022/1.
15. 菅野 大和, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, “フレーミング技術における捕手動作の映像解析”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.121, no.349, pp. 1-6, 2022/1.
16. 逸見 勲, 宍戸 英彦, 北原 格, “ステージ上での立ち位置に応じたカメラワーク生成手法”, 映像情報メディア学会 2021 年冬季大会, 2 pages, 2021/12.
17. 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検討”, 映像情報メディア学会 2021 年冬季大会, 2 pages, 2021/12.
18. 譚 鵬, 宍戸 英彦, 谷川 聡, 北原 格, “単眼 RGB フィットネスチェック映像からの 3 次元動作データの取得”, 映像情報メディア学会 2021 年冬季大会, 2 pages, 2021/12.
19. 古府 侑樹, 宍戸 英彦, 亀田 能成, “滑りやすい歩行領域の画像からの深層学習による検出”, HCG シンポジウム 2021, 6 pages, 2021/12.
20. 夏 雪, 宍戸 英彦, 松井 敏也, 北原 格, “投影型 AR と 3D フォトグラメトリの統合による文化財保護のための撮影地点指示”, 日本バーチャルリアリティ学会 第 64 回複合現実感研究会, vol.2021-EC-61, no.13, 6 pages, 2021/10.
21. 田中 直樹, 宍戸 英彦, 吹田 真士, 亀田 能成, 北原 格, “バドミントン映像処理におけるフットワーク移動軌跡を用いた打点位置とショット方向の検出手法”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.121, no.221, pp. 7-12, 2021/10.
22. 董 思齊, 宍戸 英彦, 北原 格, “被写体の対称性を利用したスケッチ形状の補正手法”, 第 20 回情報科学技術フォーラム, pp.133-136, 2021/8.
23. 田中 直樹, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, 吹田 真士, “バドミントン映像におけるフットワーク軌跡を用いたショット検出手法”, 第 20 回情報科学技術フォーラム, pp.171-172, 2021/8.
24. 菅野 大和, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, “野球の捕手のフレーミング技術定量評価における映像の自動抽出”, 第 20 回情報科学技術フォーラム, pp.169-170, 2021/8.
25. 上田 樹, 宍戸 英彦, 北原 格, “連動する骨格動作の表現に適した時空間特徴の学習による人物運動予測法”, 第 24 回画像の認識・理解シンポジウム (MIRU2021), 4 pages, 2021/7.

26. 大木 郁登, 宍戸 英彦, 亀田 能成, “歩行の安全確保に向けた単眼 RGB 画像からのバー型障害物検出”, 電子情報通信学会 技術研究報告 WIT, vol.121, no.52, pp.48-53, 2021/6.
27. 飯田 雄介, 宍戸 英彦, 亀田 能成, “HMD を用いたサッカーのフリースペース認知における視覚探索行動の解析”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.121, no.53, pp.25-30, 2021/6.

(4) 著書、解説記事等

A) 解説記事

1. 宍戸 英彦, 北原 格, “バドミントン競技映像処理における現場活用の可能性”, 日本工業出版 画像ラボ, vol.32, no.4, pp.13-18, 2021/4/10.

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）

該当なし

産学官連携

1. 産学連携：日立製作所との共同研究（代表：北原）

「外界認識のための三次元構造理解」

屋内外の比較的整備された環境の認識、および、その結果に基づく作業支援を目的として、複数の手段によって観測した環境の三次元情報を統合し三次元マップを生成する研究調査を実施した。筑波大学においては、ドローンで撮影した空撮映像からの三次元情報取得、および、地上を走行する車両に取り付けた車載カメラの映像からの三次元情報取得の検証と課題抽出を行った。また、両者が復元した三次元情報の統合による動的三次元マップ生成に向けた取得データの補完・補間技術に関する研究を実施した。

2. 学官連携：茨城県産業技術イノベーションセンター笠間陶芸大学校との共同研究（代表：北原）

「自由視点画像メディアを用いた遠隔展示技術の研究開発」

自由視点画像技術を用いた遠隔展示技術の実現に向けた研究を実施した。茨城県産業技術イノベーションセンターが所有する立体造形物の多視点画像データセットの構築、多視点画像から生成される自由視点画像コンテンツを活用した展示方式に関する検証を同センターと共同で実施した。立体造形物を対象とした遠隔展示技術の創出を目的として、笠間陶芸大学校のギャラリー展示作品の多視点画像撮影実験を実施した。コンピュ

ータビジョン（3次元画像処理）技術を用いて計算機内部で撮影画像を統合することで自由視点画像を生成し提示した。自由視点画像に基づいて立体造形物を効果的に鑑賞するインタフェースの検証と課題抽出を行った。

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 により共同研究を継続実施し、査読付国際会議発表1件を発表した。

北原格教授がオーストラリアの Curtin University と締結した MoU により共同研究を継続実施し、査読付国際会議発表2件・その他の発表2件を発表した。

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

該当なし

9. 管理・運営

亀田 能成

エンパワーメント情報学プログラム 運営委員会 委員
エンパワーメント情報学プログラム 学務カリキュラム委員会 委員長
知能機能システム学位プログラム 学務カリキュラム委員会 副委員長
全学教育戦略会議 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 副委員長
情報処理学会 コンピュータビジョンとイメージメディア研究会(CVIM) 委員
映像情報メディア学会スポーツ情報処理時限研究会(SIP) 幹事

宍戸 英彦

情報処理学会 コンピュータビジョンとイメージメディア研究会(CVIM) 委員
電子情報通信学会 メディアエクスペリエンス・仮想環境基礎 研究会(MVE) 委員
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

University of Tsukuba



筑波大学 計算科学研究センター

〒305-8577 茨城県つくば市天王台 1-1-1

TEL 029-853-6487, 6488

FAX 029-853-6406

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

Center for Computational Sciences,
University of Tsukuba

Annual Report FY2021

