

Center for Computational Sciences,  
University of Tsukuba  
**Annual Report FY2017**

筑波大学 計算科学研究センター  
**平成 29 年度 年次報告書**



目次

まえがき .....	- 2 -
1 センター組織と構成員 .....	- 3 -
2 平成 29 年度の活動状況 .....	- 7 -
3 各研究部門の報告 .....	- 13 -
I. 素粒子物理研究部門 .....	- 13 -
II. 宇宙物理研究部門 .....	- 38 -
III. 原子核物理研究部門 .....	- 61 -
IV. 量子物性研究部門 .....	- 85 -
V. 生命科学研究部門 .....	- 104 -
V-1. 生命機能情報分野 .....	- 104 -
V-2. 分子進化分野 .....	- 121 -
VI. 地球環境研究部門 .....	- 136 -
VII. 高性能計算システム研究部門 .....	- 155 -
VIII. 計算情報学研究部門 .....	- 208 -
VIII-1. データ基盤分野 .....	- 208 -
VIII-2. 計算メディア分野 .....	- 236 -

## 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、2017年に設立25周年の節目の年を迎えました。これを記念し、設立25周年記念シンポジウム「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウムー計算科学の発展と将来ーを開催し、これまでの取り組みを総括すると共に、今後の計算科学の発展を展望しました。

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。

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および超高速ネットワーク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っています。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、37名の専任教員が従事している他、任期付助教4名、研究員25名がいます。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10機関とMOUを締結するとともに、37機関（北米15、欧州13、アジア・オセアニア9）と国際共同研究連携を行っています。異分野間連携として、ポスト「京」重点課題・萌芽的課題の推進や、「計算基礎科学連携拠点」、「宇宙生命計算科学連携拠点」を行っています。2017年には、「計算メディカルサイエンス推進事業」を創始し、計算生体分子医科学、睡眠ビッグデータ解析・自動診断、3DCGバーチャル手術、計算光バイオイメージングによる医学分野との連携を開始しました。

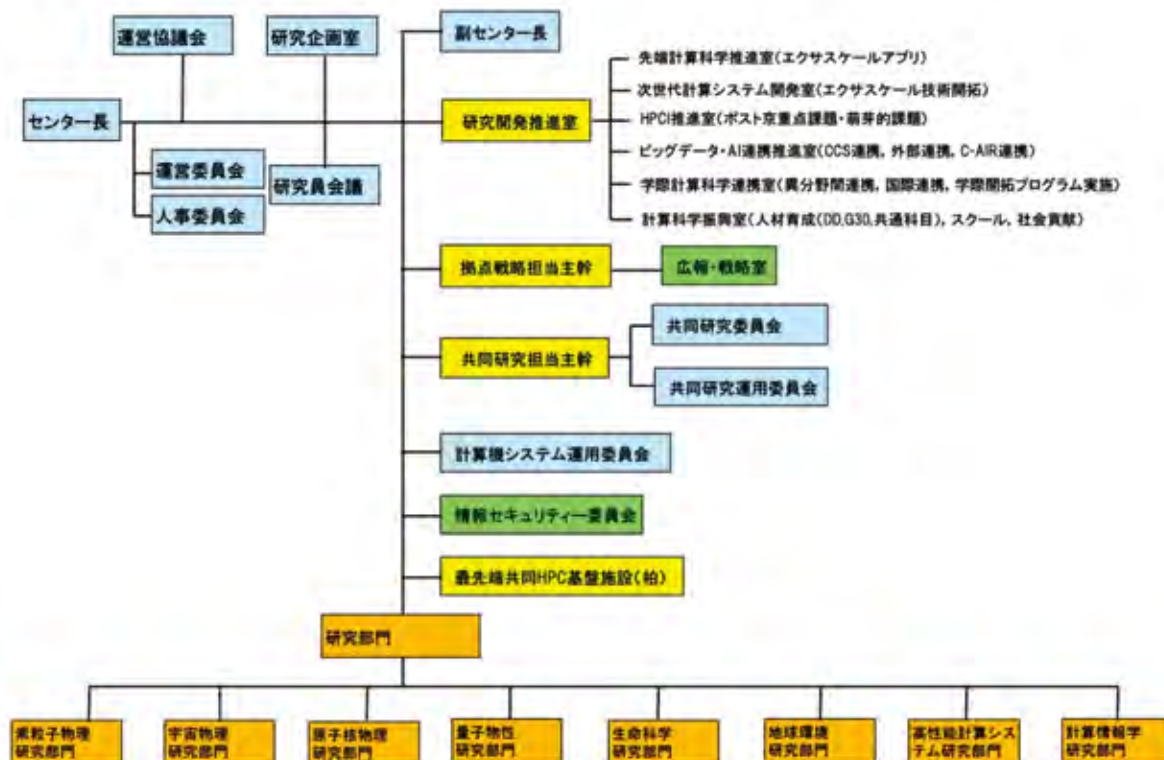
本小冊子は、平成29年度の計算科学研究センターの活動内容をまとめたものです。ご高覧いただければ幸甚に存じます。

平成30年6月吉日

計算科学研究センター長  
梅村 雅之

# 1 センター組織と構成員

計算科学研究センター組織図



## 組織人員・教員一覧リスト

センター長	梅村 雅之
副センター長	朴 泰祐
運営協議会	委員長 中村 宏 (東京大学)
運営委員会	委員長 梅村 雅之
人事委員会	委員長 梅村 雅之
研究企画室	室長 梅村 雅之
研究員会議	議長 梅村 雅之
研究開発推進室	
• 先端計算科学推進室	室長 矢花 一浩
• 次世代計算システム開発室	室長 朴 泰祐
• HPCI 推進室	室長 藏増 嘉伸
• ビッグデータ・AI 連携推進室	室長 北川 博之

- 学際計算科学連携室 室長 高橋 大介
  - 計算科学振興室 室長 北川 博之
- 拠点戦略担当主幹 梅村 雅之
- 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 朴 泰祐
- 情報セキュリティ委員会 委員長 梅村 雅之
- 最先端共同 HPC 基盤施設施設長 中村 宏 (東京大学) 副施設長 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、山下 巧
- 客員教授 青木 慎也 (京都大学)
- 共同研究員 金谷 和至 (教授)、山崎 剛 (准教授)

**宇宙物理研究部門**

- 教授 梅村 雅之 (部門主任)
- 准教授 森 正夫
- 講師 吉川 耕司
- 助教 Wagner, Alexander、古家 健次
- 研究員 三木 洋平、田中 賢、高水 裕一、安部 牧人、桐原 崇亘、五十嵐 朱夏 (数理物質科学研究科)
- 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 鷲山 広平、野村 昂亮、Guillaume Scamps

### 量子物性研究部門

教授	矢花 一浩 (部門主任)
准教授	小泉 裕康、全 暁民、小野 倫也
講師	前島 展也
研究員	植本 光治、山田 篤志、山田 俊介、Arqum Hashmi
客員准教授	押山 淳 (東京大学)
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)
助教	庄司 光男、栢沼 愛
研究員	佐藤 竜馬、原田 隆平、鬼頭 (西岡) 宏任、Bui Thi Kieu My
共同研究員	広川 貴次 (教授)

#### 分子進化分野

教授	稲垣 祐司 (分野リーダー)
研究員	石谷 佳之、矢崎 裕規 (生命環境系)
共同研究員	橋本 哲男 (教授)
特任助教	湯山 育子 (生命環境系)

### 地球環境研究部門

教授	田中 博 (部門主任)、日下 博幸
助教	松枝 未遠
研究員	池田 亮作、Doan Quang Van、山上 晃央
共同研究員	植田 宏昭 (教授)

### 高性能計算システム研究部門

教授	朴 泰祐 (部門主任)、高橋 大介、建部 修見
准教授	川島 英之
助教	多田野 寛人、小林 諒平
研究員	田中 昌宏、Mohamed Amin Jabri、藤田 典久
客員准教授	塙 敏博 (東京大学)
共同研究員	安永 守利 (教授)、和田 耕一 (教授)、櫻井 鉄也 (教授)、山口 佳樹 (准教授)、今倉 暁 (助教)

## 計算情報学研究部門

### データ基盤分野

教授	北川 博之（部門主任）、天竺 俊之
准教授	
助教	塩川 浩昭
研究員	Salman Ahmed Shaikh、駒水 孝裕、Savong Bou、堀江 和正

### 計算メディア分野

教授	亀田 能成（分野リーダー）
准教授	北原 格
助教	宍戸 英彦
共同研究員	白川 友紀（特命教授）

## 2 平成 29 年度の活動状況

### 2.1 計算科学研究センター25年の歩み

筑波大学計算科学研究センターは、2017年に設立25周年の節目の年を迎えました。これを記念し、設立25周年記念シンポジウム「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウムー計算科学の発展と将来ーを開催し、計算科学・計算機科学のフロンティア、分野間の連携を幅広く議論し、今後の発展を展望しました。



筑波大学計算科学研究センターは、1992年（平成4年）度に設置された**計算物理学研究センター**を前身とします。計算物理学研究センターは、岩崎洋一先生（後に初代センター長、筑波大学学長）が、平成4年に文部科学省の“学術の新しい展開のためのプログラム（通称新プロ）”に申請した“専用並列計算機による「場の物理」の研究”の採択を受けて設立されたものです。当初は、物理学系からの6名の振替えと純増で認められた4名の教員からなる組織で、センター独自の建物はありませんでした。そして、物理学計算の超高速化を目指したスーパーコンピュータ「CP-PACS」の開発予算が認められ、計算機棟設置が決まりました。その4年後の平成8年に、超並列計算機CP-PACSが完成し、スーパーコンピュータ・トップ500の世界第1位に登録されました。大学が主導したプロジェクトで、世界最高速のスーパーコンピュータを開発したのは我が国初の快挙でした。CP-PACSの完成は、物理学研究者と計算機工学の専門家の協働が実を結んだものであり、これは今でいう**コデザイン**の先駆けでも



ありました。センター設立と CP-PACS の開発に関わる大変な労苦と様々なエピソードは、センターホームページにも掲載している小冊子「超並列計算機 CP-PACS」に詳しく書かれていますので、是非ご笑覧ください。

計算物理学研究センターの時代は、研究分野としては、素粒子物理分野を主体とし宇宙物理分野が新設される形で始まりましたが、CP-PACS 完成後に共同利用による物性物理分野も加わりました。その後、ちょうど国立大学法人化の平成 16 年に改組し、部門を拡充して、素粒子宇宙研究部門、物質生命研究部門、地球生物環境研究部門、超高速計算システム研究部門、計算情報学研究部門の 5 部門からなる**計算科学研究センター**が発足しました。

その後、平成18年度から国立大学法人運営費交付金特別研究経費の交付を受けて、高性能超並列クラスター「PACS-CS」が開発されました。さらに平成19年には、重力演算加速器を融合させた新たなアーキテクチャHMCSを発展させ、特別推進研究に基づき、融合型並列計算機「宇宙シミュレータFIRST」が開発されました。平成23年には、特別研究経費の交付により、超並列演算加速器クラスター「HA-PACS」が製作されました。

また、平成 20 年には、当センターと東京大学情報基盤センター、京都大学学術情報メディアセンター間で、T2K オープンスーパーコンピュータアライアンスを結成し、それぞれの大学のスーパーコンピュータの共同仕様を策定し、筑波大では T2K-Tsukuba を調達しました。これは、センターのメニーコア型超並列計算機 COMA の導入につながりました。そして、この流れを受けて、平成 25 年に計算科学研究センターと東京大学情報基盤センターが、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)」を設置しました。そして、昨年 (平成 28 年) には、JCAHPC において新たなメニーコア型のスーパーコンピュータ Oakforest-PACS を導入し、我が国最高性能を達成しました。

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、34 名の専任教員を置く大センターへと発展しました。そして、研究開発推進室が設置され、各分野の研究のみならず、計算機工学分野との協働や異分野間連携が広く展開されるようになりました。計算科学研究センターは、平成 22 年度からは、文部科学省共同利用・共同研究拠点「**先端学際計算科学共同研究拠点**」に認定されました。学内では、研究大学強化促進事業の下で、**先端的研究型重点研究センター**の一つとして位置付けられ、重点的な機能強化が行われると共に、平成 28 年度には、予算執行や人事を独立しておこなう部局となりました。学術センターが独立した部局となるのは、筑波大学では初めてのことです。センターがここまで発展できたのは、文部科学省の多大なご支援、大学執行部の強いサポート、他大学・研究機関の多くの研究者の協力と支援、科学者と計算機工学者の協働ならびにセンター内の研究者の尽力の賜物であり、この場を借りて関係各位に心より御礼申し上げます。

## 2.2 平成 29 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、「計算基礎科学連携拠点」「宇宙生命計算科学連携拠点」「計算メディカルサイエンス推進事業」を中心に、異分野間連携を強化し、国際共同研究拠点化に向けた研究体制の構築を図る。

## 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), COMA (PACS-IX) (393 ノード, 1,001TFlops) 及び GPU 融合型システム HA-PACS/TCA (64 ノード, 364TFlops) 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」、③本センターが開発したプログラムやシステムを用いて研究を共同で推進する「共同研究推進プログラム」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、素粒子、宇宙、原子核、物質科学、生命、地球環境、生物、化学、超高速計算システム、計算情報学、数値解析の 11 分野である。共同研究プロジェクトの課題公募は年初めに受け付け、利用状況を勘案し年度後半に追加配分を検討する。

「学際共同研究プログラム」の実施においては、共同研究委員会と共同研究運用委員会を設置して審査を行う。共同研究委員会は、各分野について学外 2 名・学内 1 名からなり、応募課題についてピアレビューを行い、共同研究委員会は審査結果を受けて採否案を策定し、センター長がこれを決定する。共同利用・共同研究に関する情報発信は、本センターHP の他、各研究分野の研究者コミュニティのメーリングリストを活用して行う。

### ■ 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、昨年度導入し運用を開始したメニーコア型大規模スーパーコンピュータシステム Oakforest-PACS のストレージシステムが、11 月の IO-500 リストにおいて、世界最高性能システムとして認定された。学際共同利用プログラムにより、素粒子分野、宇宙分野、原子核分野、物質科学分野、生命分野、地球環境分野、生物分野、化学分野、超高速計算システム分野、計算情報学分野、数値解析分野で、計 61 課題の研究プロジェクトを採択し共同研究を実施した。重点課題についても、学際共同利用プログラムのプロジェクトとして実施した。これらの共同研究により、

学術論文 277 件を発表した。各分野におけるプロジェクト採択数を表 1 に、学際共同利用プログラムによる成果発表論文数を表 2 に、プログラムの参加状況を表 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

素粒子	宇宙	原子核	物質科学	化学	生命	地球環境	生物	HPCシ テム	計算情報 学	数値解析
12	9	6	10	1	5	4	3	6	1	4
計算機毎の採択数										
HA-PACS										
素粒子	宇宙	原子核	物質科学	化学	生命	地球環境	生物	HPCシ テム	計算情報 学	数値解析
7	4	1	3	0	2	1	1	2	0	1
COMA										
素粒子	宇宙	原子核	物質科学	化学	生命	地球環境	生物	HPCシ テム	計算情報 学	数値解析
9	5	6	8	1	4	3	2	4	1	3
Oakforest-PACS										
素粒子	宇宙	原子核	物質科学	化学	生命	地球環境	生物	HPCシ テム	計算情報 学	数値解析
11	7	2	9	0	0	3	3	5	1	2

表 2 学際共同利用プログラムによる成果として発表された論文の総数

区分	平成29年度	
	国内	うち国際学術誌掲載論文数
化学	38 (7)	37 (7)
材料科学	0 (0)	0 (0)
物理学	130 (25)	128 (25)
計算機&数学	64 (16)	57 (12)
工学	16 (2)	15 (1)
環境&地球科学	13 (3)	10 (3)
臨床医学	0 (0)	0 (0)
基礎生命科学	16 (3)	16 (3)
人文社会系	0 (0)	0 (0)
合計	277 (56)	263 (51)

\* 右側の ( ) 内の数字は、拠点に所属するもの（大学院生を含む）が、特に重要な役割・高い貢献（ファーストオーサー、コレスポンディングオーサー、ラストオーサー等）を果たしている論文（内数）

表 3 学際共同利用プログラムの参加状況

平成29年度									
区分	機関数	受入人数				延べ人数			
		外国人	若手研究者 (35歳以下)	大学院生	外国人	若手研究者 (35歳以下)	大学院生		
学内(法人内)	6	272 (17)	24 (3)	152 (11)	110 (8)	90488 (5,675)	8129 (1,080)	51784 (3,925)	37740 (2,845)
国立大学	16	125 (3)	0 (0)	58 (3)	39 (1)	42973 (1,095)	0 (0)	20592 (1,095)	13762 (365)
公立大学	1	2 (0)	0 (0)	1 (0)	0 (0)	641 (0)	0 (0)	350 (0)	0 (0)
私立大学	9	13 (2)	0 (0)	3 (1)	2 (0)	4481 (700)	0 (0)	932 (350)	582 (0)
大学共同利用機関法人	3	26 (0)	3 (0)	10 (0)	1 (0)	8752 (0)	1013 (0)	3404 (0)	365 (0)
独立行政法人等公的研究機関	3	42 (2)	3 (0)	14 (0)	0 (0)	14077 (689)	1054 (0)	4939 (0)	0 (0)
民間機関	4	9 (2)	0 (0)	3 (1)	0 (0)	1994 (466)	0 (0)	596 (116)	0 (0)
外国機関	18	35 (7)	29 (7)	17 (2)	8 (1)	12719 (2,555)	10544 (2,555)	6205 (730)	2920 (365)
その他	4	7 (0)	0 (0)	1 (0)	0 (0)	2451 (0)	0 (0)	365 (0)	0 (0)
計	64	531 (33)	59 (10)	259 (18)	160 (10)	178576 (11,180)	20740 (3635)	89167 (6216)	55369 (3575)

※下段 ( ) 内は女性の内数

## 2.4 国際連携と異分野融合

国際連携として、米国ローレンスバークレー国立研究所 (LBNL) との合同ワークショップを、4月に米国 LBNL で、3月に計算科学研究センターにて開催した。12月にはエジンバラ大学 (EPCC) において、計算科学研究センターと合同のワークショップを開催し、2月には、韓国 KISTI と計算科学研究センターにて、HPC Winter School とワークショップを開催し、国際的な活動を進めた。また、「計算基礎科学連携拠点」を基盤に、ポスト「京」重点課題⑨「宇宙の基本法則と進化の解明」の代表機関として連携研究を推進した。さらに、ポスト「京」重点課題⑦「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」のサブ課題 A「高性能半導体デバイス」、ならびにサブ課題 B「光・電子融合デバイス」の協力機関として研究を推進した。また、ポスト「京」萌芽的課題①「基礎科学のフロンティアー極限への挑戦」「基礎科学の挑戦ー複合マルチスケール問題を通した極限の探求」のサブ課題 D「量子力学の基礎と情報」を分担機関として推進した。ポスト「京」萌芽的課題③「太陽系外惑星 (第二の地球) の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明」では、「生命を育む惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明」のサブ課題 D「原始太陽系における物質進化と生命起源」を「宇宙生命計算科学連携拠点」の下で、分担機関として推進した。さらに、医学分野との連携により、計算

科学による医療技術の開拓を目的とした、「計算メディカルサイエンス推進事業」を創始し、本学において労働契約法の特例を適用するプロジェクトとしての認定を受けた。

## 2.5 今後のあり方

計算科学研究センターは、筑波大学の研究センター組織再編の下で、先端研究センター群の中の世界級研究拠点（R1）に位置付けられた。これにより、全学戦略枠の人員配置やプロジェクト予算の配分等を通じて重点的な機能強化が行われ、平成 28 年度より本学の独立した部局の一つとなり、大学の研究力強化に貢献している。計算科学研究センターは、計算機科学分野と科学諸分野が融合・連携して「学際計算科学」を推進し、我が国の計算科学の発展に資する高性能計算機の開発・運用を行っている。筑波大学の理念は、国、機関、学内組織などの境界を超えた教育研究のトランスボーダー化の加速であり、計算科学研究センターの役割は、計算科学を通じた学際融合と国際化の加速である。学際計算科学は、計算機工学と科学諸分野の融合だけでなく、科学の異分野間融合の高い可能性をもつものであり、当センターでは「計算」を共通軸とした共同研究が多く行われている。センターが推進する「宇宙生命計算科学連携」および「計算基礎科学連携」は、分野の境界を越えたグローバルな研究展開を実践できる拠点であり、既に様々な異分野間共同研究が進んでいる。また、今年度創始した「計算メディカルサイエンス推進事業」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。

### 3 各研究部門の報告

#### 1. 素粒子物理研究部門

##### 1. メンバー

教授	藏増 嘉伸、青木 愼也（客員研究員）、金谷 和至（共同研究員）
准教授	石塚 成人、谷口 裕介、吉江 友照、山崎 剛（共同研究員）
助教	大野 浩史（国際テニユアトラック）
研究員	浮田 尚哉、吉村 友佑、山下 巧
学生	大学院生 7 名、学類生 4 名

##### 2. 概要

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

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

### 3. 研究成果

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

(蔵増、石塚、谷口、山崎、吉江、浮田、滑川)

2016 年秋に JCAHPC において Oakforest-PACS (OFP) が導入され、稼働を開始した。OFP はピーク演算性能が 25PFlops であり、「京」コンピュータを抜いて 2017 年 4 月現在日本最速のスーパーコンピュータである。本年度は、PACS Collaboration に基づく共同研究体制のもと、OFP を用いて物理点における 2+1 フレーバー QCD の大規模シミュレーションを推進した。

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

2017 年度は、主に格子カットオフ $=2.33\text{GeV}$  で $(10\text{fm})^3$  超の空間体積を持つ 2+1 フレーバー QCD のゲージ配位生成を行った。より具体的には、物理点直上で(格子間隔, 格子サイズ) $= (0.085\text{fm}, 128^4)$  のゲージ配位を生成した。図 1 (左) は、格子サイズ  $128^4$  と  $64^4$  (現在世界の格子 QCD 計算で典型的に採用されている格子体積) の配位上で計算された  $\pi$  中間子の 2 点相関関数  $C_\pi(t)$  を用いて、それぞれについて時間  $t$  における  $\pi$  中間子の局所有効質量  $m_\pi^{\text{eff}}(t) = \ln(C_\pi(t)/C_\pi(t+1))$  をプロットしたものである。両者に差異が見えることから、明確な有限体積効果が存在することが見て取れる。また、図 1 (右) は、格子サイズ  $128^4$  と  $64^4$  の配位上で計算された  $\pi$  中間子崩壊定数を比較したものである。こちらについても明確な有限体積効果が存在することが確認できる。

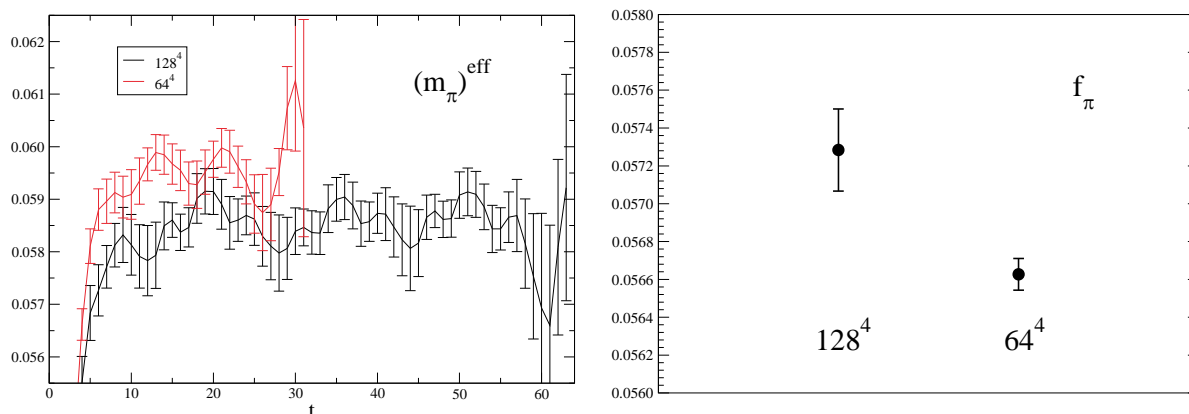


図 1: 格子サイズ  $128^4$  と  $64^4$  における  $\pi$  中間子局所有効質量 (左) と  $\pi$  中間子崩壊定数 (右)。両者ともに preliminary な結果。

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

藏増、山崎は理研計算科学研究機構 (AICS) の宇川副機構長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、近似を排したより現実世界に近い状況でのヘリウム原子核および 2 核子系の束縛エネルギー計算に成功した。この計算は  $\pi$  中間子質量  $0.5\text{GeV}$  と  $0.3\text{GeV}$  のクォーク質量を用いたものであり、物理点 ( $\pi$  中間子質量  $0.14\text{GeV}$  に相当) よりもかなり重いものを用いていた。この成果を踏まえ、「京」で生成された  $96^4$  格子サイズのゲージ配位を用いた物理点近傍での軽原子核束縛エネルギー計算を行なっている。統計誤差を抑えることが難しく、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おり、今後も統計誤差を小さくするための計算を続けていく。

また、これまでの計算に含まれる可能性のある励起状態からの系統誤差について、重いクォーク質量を用いた超高精度計算による調査を行った (研究論文 B-1)。図 2 には、指数型演算子とウォール型演算子を用いて計算した、二核子系有効エネルギー差 ( $\Delta E_{\text{NN}}^{\text{eff}} = E_{\text{NN}}^{\text{eff}} - 2m_{\text{N}}^{\text{eff}}$ ) を示した。 $E_{\text{NN}}^{\text{eff}}$  と  $m_{\text{N}}^{\text{eff}}$  は、それぞれ二核子有効エネルギーと核子有効質量である。異なる演算子の結果は小さな虚時間の領域では異なる値を取るが、正しい  $\Delta E_{\text{NN}}^{\text{eff}}$  を求めるためには、 $E_{\text{NN}}^{\text{eff}}$  と  $m_{\text{N}}^{\text{eff}}$  の両方が虚時間に依らなくなる領域を見なければならない。その領域が始まる虚時間は演算子に依存し、ウォール型演算子を用いると、一般に大きな虚時間が必要になる。図中にそれぞれの演算子でのその領域が始まる虚時間を縦破線で示した。この領域から決めた各々の演算子の結果は誤差の範囲内で一致した。この結果を踏まえると、これまでの計算



に用いた演算子は図の指数型演算子に対応するため、これまでの結果では励起状態の系統誤差は十分抑えられていたと考えられる。

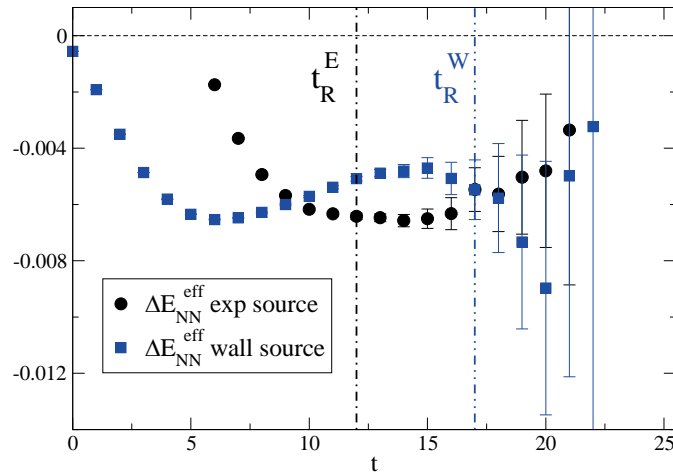


図 2: 指数型演算子 (exp source) とウォール型演算子 (wall source) を用いた有効二核子エネルギー ( $E_{NN}^{\text{eff}}$ )。横軸は虚時間。破線はそれぞれの演算子の結果が虚時間に依らなくなる領域が始まる虚時間  $t_R^0$  ( $O=E$  (指数型演算子)、 $W$  (ウォール型演算子)) を表す。

### 【3】 格子 QCD を用いた核子構造研究 (藏増、山崎)

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の研究が行なわれてきたが、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い。この実験値との不一致の主な原因は、計算に用いられたクォーク質量が現実のものよりも大きいためであると考えられている。

藏増、山崎は、広島大学 石川健一准教授、東北大学 佐々木勝一准教授、東北大学大学院生 塚本夏基氏、理研計算科学研究機構 (AICS) 宇川副機構長とともに、PACS Collaboration において、この原因を取り除いた計算である、現実のクォーク質量に極めて近いパラメータ ( $\pi$  中間子質量 145MeV) を用いた核子形状因子計算を行なった (研究論文 B-2)。図 3 は電氣的形状因子と軸性ベクトル形状因子の結果である。電氣的形状因子は小さな運動量移行の領域で実験値に良く一致した結果が得られている。これはクォーク質量が大きなこれまでの計算で得られなかった結果である。一方、軸性ベクトル形状因子は実験値とは大きく異なる結果になっており、この原因を明らかにしていくのが一つの大きな目標になる。この計算結果により、平成 28 年度実施課題における HPCI 利用研究課題優秀成果賞を受賞した。

現在、理研計算科学研究機構 (AICS) 新谷栄悟研究員を共同研究者に加え、さらに大きな体積を用いた現実的クォーク質量での計算を実行している。

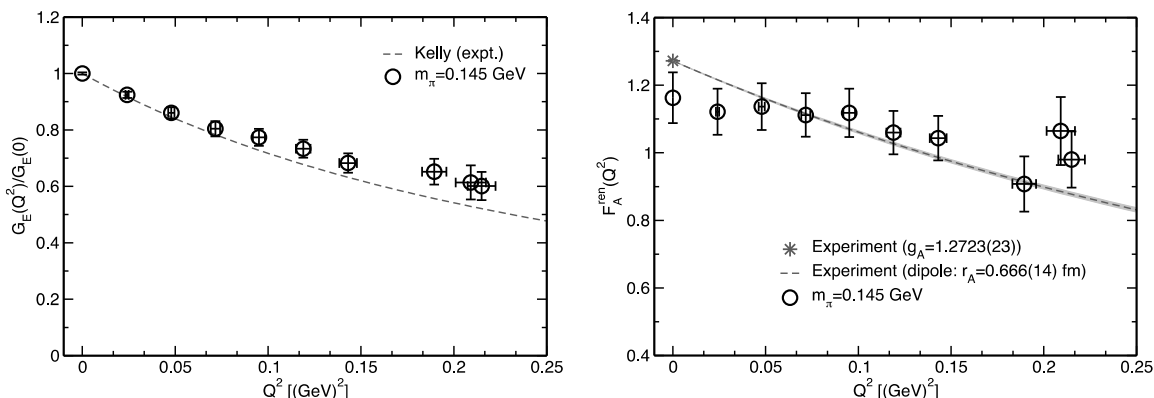


図 3：電磁的核子形状因子（左）と軸性ベクトル形状因子（右）。横軸は運動量移行、破線は実験値を表す。

#### 【4】 場の理論的相互作用範囲内の Bethe-Salpeter 波動関数（藏増、山崎）

場の理論で定義される二体粒子 Bethe-Salpeter 波動関数は、二体相互作用範囲外では、量子力学の二体波動関数と同じ形を取ることが知られている。そのことを用いて、多くの格子 QCD 散乱位相差計算で使われてきた有限体積法が導出されていた。

藏増、山崎は、相互作用範囲内の Bethe-Salpeter 波動関数と散乱位相差の関係を再検討し（研究論文 A-2）、散乱位相差を求めるために必要な量が何かを明確にした。さらに、量子力学的ポテンシャルを Bethe-Salpeter 波動関数で定義した際に、正しい散乱位相差を求めるための条件を明らかにし、ポテンシャルの展開について議論した。

#### 【5】 格子 QCD による相互作用範囲内の Bethe-Salpeter 波動関数を用いた散乱長計算

（藏増、山崎）

散乱長は、粒子間の相互作用を特徴づける基本的な物理量である。これまで、相互作用範囲外の Bethe-Salpeter 波動関数から導出された有限体積法により種々の散乱長が計算されてきた。

滑川、山崎は  $2\pi$  中間子系において、相互作用範囲外ではなく相互作用範囲内 Bethe-Salpeter 波動関数を用いて散乱振幅を決定した（研究論文 A-3）。得られた散乱振幅から散乱長を計算し、既存の手法で求められた結果との一致が確認できた。加えて、半オフシェル散乱振幅計算に世界で初めて成功した。

#### 【6】 格子 QCD を用いた $\pi$ 中間子形状因子の計算（山崎、賀数）

山崎は大学院生（博士後期課程 2 年）賀数とともに、PACS Collaboration において、現実のクォーク質量に極めて近いパラメータ（ $\pi$  中間子質量 145MeV）を用いた  $\pi$  中間子電磁形状因子の計算を行った。この形状因子からは  $\pi$  中間子の平均二乗荷電半径を見積もることができ、

$\pi$  中間子の構造を解明するためには非常に重要な物理量である。しかし、これまでの多くの  $\pi$  中間子電磁形状因子の計算では、現実よりも大きなクォーク質量を用いていたため、実験値を再現できていなかった。

この研究は昨年度からの継続研究であり、昨年度からは統計を増やし、2 次のカイラル摂動論公式を用いた解析などから平均二乗荷電半径の系統誤差を見積った。それらの系統誤差は統計誤差よりは十分小さく、最終的な平均二乗荷電半径の結果は実験値をよく再現した。今後、これらの研究成果を論文としてまとめつつ、更に大きな体積を用いた計算を行う予定である。

#### 【7】 Gradient flow を用いた Kaon B パラメーターの計算（谷口、鈴木）

Kaon B パラメーター  $B_K$  は K 中間子の  $K^0$ - $\bar{K}^0$  混合に対する QCD の寄与を抽出した量であり、QCD の非摂動的な効果が主として効いてくる量であるため格子上の数値計算による測定が必須となる量である。この  $B_K$  を Wilson fermion を用いて計算しようとする、カイラル対称性の破れからくる余計な演算子混合に邪魔されて精度の良い測定が困難となる事情があった。このカイラル対称性の破れからくる余計な演算子混合の問題に対する解決策として、gradient flow を用いる方法が有力視されている。Gradient flow は一種のくりこみ操作であり、あらゆる演算子に対して非常に簡単に実行することができる。Gradient flow の優れた点として flow を課した演算子には紫外発散が現れないという点が挙げられる。そのため格子上のいかなる対称性の破れにも悩まされることなく、連続極限を単純な操作として取るようになるのである。Gradient flow を課した演算子は繰り込まれた演算子を含む有限な量となっているのであるが、鈴木と谷口は研究の第一歩として gradient flow を課した 4 fermi 演算子から、高エネルギー物理学で一般的に用いられる MS-bar scheme で繰り込まれた演算子を取り出すための変換係数の計算を行なった。特に紫外発散が現れないという性質を調査する目的で、グルーオンに質量を導入した処方を採用し、変換係数の計算を行っている。

#### 【8】 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）

金谷、谷口らは、新潟大学 江尻信司准教授、広島大学 梅田貴士准教授、九州大学 鈴木博教授、大阪大学 北沢正清助教らとの共同研究で、有限温度・有限密度 QCD 相構造とクォーク物質の熱力学的諸性質を、改良ウィルソン型格子クォークを用いた格子 QCD シミュレーションにより研究し、エネルギー運動量テンソルから、圧力、エネルギー密度、エントロピー密度などの熱力学量を評価し、カイラル凝集や位相感受率から、カイラル相転移やアクシオン質量の評価を行った。

格子上ではエネルギー運動量テンソルを並進対称性に伴う保存カレントとして定義できない。これに起因して、格子 QCD によるエネルギー運動量テンソルの評価には、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求めなければならないという理論的・数値的な困難が存在している。本研究は、この非摂動的なくりこみの問題に関して、勾配流（グラジエントフロー）を用いて根本的な解決を図る点に特徴がある。Lüscher らにより提案された勾配流は格子上の物理量計算に様々な革新をもたらしているが、特に、共同研究者である鈴木らにより、これまで格子での計算や定義に大きな困難が伴っていた様々な物理量の非摂動的評価に新しい方法が提案された。この方法は、ウィルソン型クォーク作用で大きな困難となっていたカイラル凝集や位相感受率などの評価にも有効である。我々は鈴木らの方法を動的クォークを含む full QCD シミュレーションに世界で初めて適用して、クォーク物質の熱力学特性を研究している。

2017 年度は、2016 年度に開始したクォークが重い場合の  $NF=2+1$  QCD で最初の研究を完成させ、エネルギー運動量テンソルの一点関数やカイラル凝集、位相感受率に関して非常に良い結果を得た。この成果を受けて、次の段階の研究にむけて、 $NF=2+1$  QCD の物理点における研究を開始し、同時に、エネルギー運動量テンソルの 2 点関数から輸送係数などを引き出す研究も開始した。また、これまでに開発してきた多重点再重み付け法やヒストグラム法とグラジエントフロー法を組み合わせ、QCD のグルオン部分である  $SU(3)$  ゲージ理論における潜熱などの研究を進めた。

#### Gradient flow を用いた有限温度 (2+1)-flavor QCD の研究

##### a) クォークが重い場合

第一段階の研究として、2016 年に、 $s$  クォーク質量は現実の値に近いが  $u, d$  クォークは現実より重く ( $m_\pi/m_\rho \cong 0.63$ )、格子間隔が  $a \cong 0.07\text{fm}$  一つだけの場合について、固定格子間隔法による計算を開始した。2017 年度は、系統誤差評価などの一連の解析を行って、論文にまとめた。

我々の研究により、状態方程式の評価が動的クォークを含む場合でも精度良く遂行可能であることが示された。図 4 に状態方程式の最終結果を示す。赤丸がグラジエントフロー法による評価の結果で、黒三角は、同じ配位上で T-積分法を用いて評価した先行研究の結果である。 $T < 300\text{MeV}$  ( $N_t > 8$ ,  $N_t$  は温度軸方向の格子点の数) で従来の方法による結果をよく再現することが示された。他方、この格子間隔では、 $N_t$  が 8 程度より小さいと ( $T > 300\text{MeV}$ )、 $O(aT)$  の格子化誤差が大きく、両者が一致しなくなることもみてとれる。（研究論文 A-4）

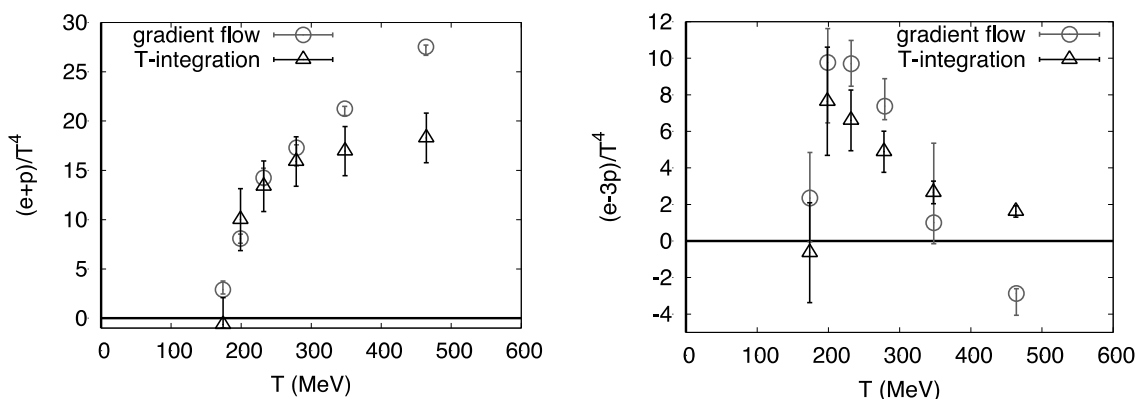


図 4：グラジエントフロー法による有限温度(2+1)-flavor QCD の状態方程式の研究。クォークが重い場合の結果。左図：エントロピー密度  $\varepsilon+p$ 。右図：トレース・アノマリ  $\varepsilon-3p$ 。赤丸がグラジエントフロー法による評価の結果で、黒三角は、同じ配位上で T-積分法を用いて評価した先行研究の結果。横軸は温度  $T$ 。（研究論文 A-4）

さらに、同じ有限温度配位を用いて、グラジエントフロー法を用いたカイラル凝集と位相感受率の評価も行った。格子 QCD ではこれらの物理量に複雑なくりこみが要求されるが、鈴木法を用いればくりこまれた量を直接評価可能となり、計算コストを大きく抑えられる可能性がある。図 5 の左図にカイラル感受率の結果を示す。我々は、カイラル感受率がクロスオーバー温度  $T \sim 190\text{MeV}$  でピークを示すことを示した。また、s クォークよりも、軽い  $ud$  クォークのカイラル感受率の方がより強い特異性をしめしており、これも理論的期待と一致する。格子上でカイラル対称性を陽に壊してしまうウィルソン型クォークでこれらが示されたのは初めてである。（研究論文 A-4）

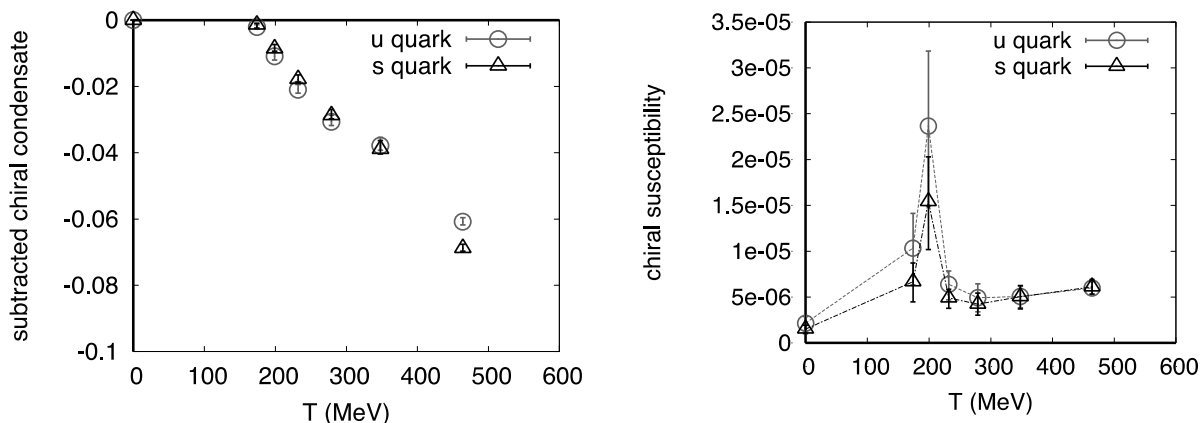


図 5：グラジエントフロー法による(2+1)-flavor QCD の熱力学特性の研究。クォークが重い場合の結果。左図：カイラル凝集。右図：カイラル感受率。赤丸は  $u,d$  クォーク、黒三角は  $s$  クォークのカイラル凝集/感受率。（研究論文 A-4）

Gradient flow を用いた有限温度 (2+1)-flavor QCD の研究

b) 現実のクォーク質量の場合

グラジエントフロー法による状態方程式の評価は、従来の方法で必要であった、非摂動的ベータ関数の評価などが不要で、全体的計算コストを大きく抑えられる可能性がある。この結果は、計算コストの高い物理点での評価を推進する上で、グラジエントフロー法が大きな役割を担うことを示唆している。クォークが重い場合にグラジエントフロー法が有効であるという前述の結果を受け、次の段階として、現実のクォーク質量での研究と格子間隔を変えたシミュレーションを開始し試験研究を行った。

PACS-CS Collaboration が生成した、改良ウイルソンクォークを用いた、格子間隔  $a \approx 0.09\text{fm}$  の  $32^3 \times 64$  格子のゼロ温度配位を利用し、固定格子間隔法で  $T \approx 160\text{-}550\text{MeV}$  ( $N_t = 14, 13, \dots, 4$ ) の温度を研究した。クォークが重い場合は  $T \approx 190\text{MeV}$  が臨界温度であったが、クォークが軽いのでより低温側にシフトすると予想される。しかし、この格子作用の場合の臨界温度はわかっていない。

まだ統計が十分ではないが、エネルギー運動量テンソルの 1 点関数やカイラル凝集について、クォークが重い場合とほぼ同様に有意な計算が可能であるという中間結果を得た。ただし、格子化誤差が大きい傾向があり、高統計と精密な系統誤差評価が必要である。クォーク質量が小さい効果に加え、格子間隔がやや粗いことが影響しているものと思われる。

状態方程式の中間結果を図 6 に示す。クォークが重い場合の経験から、 $T > 247\text{MeV}$  ( $N_t \leq 8$ ) では格子化誤差が大きいと予想される。クォークが重い場合と違って、同じ配位を用いた通常の方法による状態方程式の結果は無いが、改良スタガード型クォークを用いた連続極限の結果と比較すると、エントロピー密度はほぼ同じ値だが、トレース・アノマリは数倍大きくなっている。ただし、我々の結果はまだ連続極限が取られていないので、直接の比較はできない。

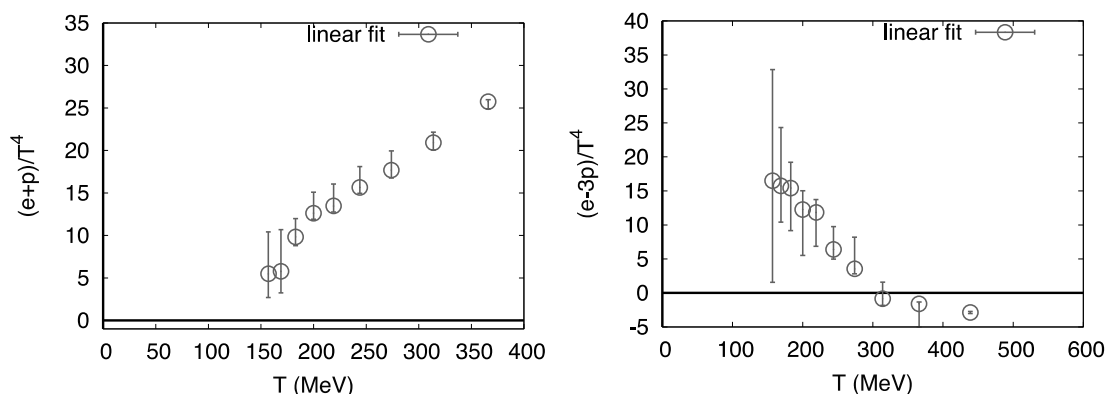


図 6：グラジエントフロー法による有限温度 (2+1)-flavor QCD の状態方程式の研究。現実のクォーク質量の結果。左図：エントロピー密度  $\varepsilon+p$ 。右図：トレース・アノマリ  $\varepsilon-3p$ 。横軸は温度  $T$ 。(研究論文 B-3)

カイラル凝集についての中間結果を図 7 に示す。左図は  $u, d$  クォークのカイラル凝集、右図は  $s$  クォークのカイラル凝集である。図 7 の左図に示したクォークが重い場合には、クォーク質量に対する依存性は小さかったが、 $u, d$  クォークの質量が下がると、軽いクォークのカイラル凝集の温度依存性が大きく変わることが見られる。 $s$  クォークのカイラル凝集から、 $T \sim 130-150 \text{ MeV}$  を臨界温度と考えると、そこで軽いクォークのカイラル凝集はかなり急激に変化すると思われる。これまでシミュレーションした範囲では低温側のデータが無いので明確な結論は難しいが、クォークが軽くなればなるほどカイラル相転移が際立つだろうという理論的期待と矛盾しない。また、ここで示唆される低い臨界温度は、改良スタガード型クォークを用いた連続極限の結果  $T \sim 150 \text{ MeV}$  と一致している。(研究論文 B-3)

現在、より低い温度を含む配位生成と解析を進めている。

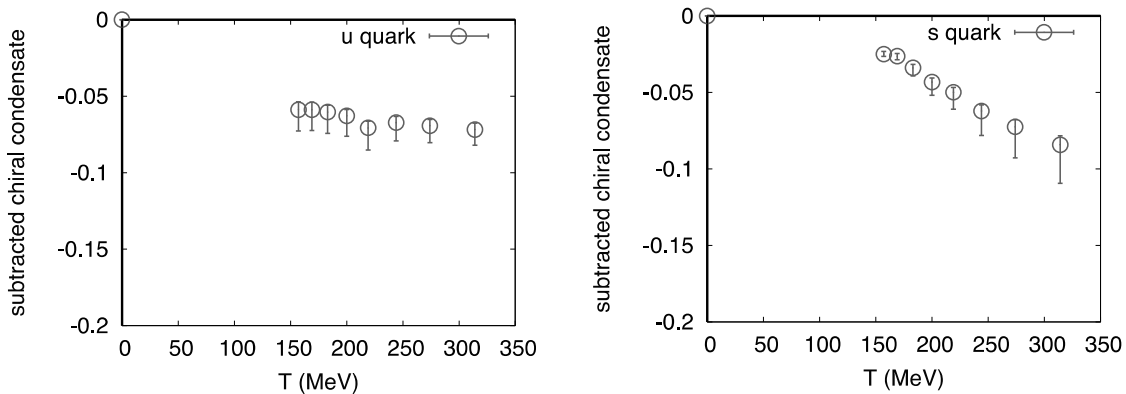


図 7: グラジエントフロー法による有限温度(2+1)-flavor QCD の状態方程式の研究。現実のクォーク質量の結果。左図:  $u, d$  クォークのカイラル凝集。右図:  $s$  クォークのカイラル凝集。横軸は温度  $T$ 。(研究論文 B-3)

#### Gradient flow を用いた輸送係数などの研究

グラジエントフローに基づく鈴木らの方法では、エネルギー運動量テンソルそのものを直接評価することができるので、その相関関数から、輸送係数など、状態方程式以外の様々な熱力学量も評価可能になる。そこで、研究の別の展開方向として、クォークが重い  $NF=2+1$  QCD の場合に、エネルギー運動量テンソルの 2 点関数の計算を開始した。

2 点関数では格子化誤差が 1 点関数より大きくなる傾向があり、現在の統計では明確な結論は難しいが、クエンチ近似 QCD の場合に FlowQCD Collaboration が行った先行研究と同様に、有望な結果をいくつか得た(図 8)。現在、統計の改善とともに、解析方法の改良を試みている。(研究論文 B-4)

我々の結果はまだ格子間隔 1 点で計算されただけであり、今後異なる格子間隔で同様の計算を行い、連続極限を取る必要がある。物理点での研究と並行して、格子間隔の違う点での研究も推進している。

また、フル QCD の研究と並行して、グラジエントフロー法を用いた SU(3)ゲージ理論の潜熱の研究も行い、中間結果を国際会議 Lattice 2017 等で報告した。

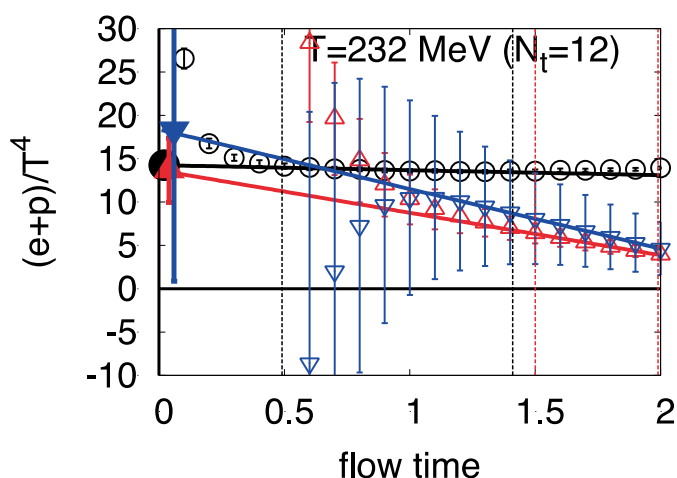


図 8 : グラジエントフロー法による有限温度(2+1)-flavor QCD のエントロピー密度の研究。クォークが重い場合の結果。黒丸はエネルギー運動量テンソルの一点関数から求めた結果（研究論文 A-4）。赤丸と青三角は異なる二点関数から線形応答関係式を用いて引き出したエントロピー密度。横軸はフロー時間  $t$ 。格子間隔依存性が取り除かれるフロー時間の極限  $t \rightarrow 0$  で、三つの結果が期待どおり一致することが見て取れる。（研究論文 B-4）

### 【9】 3、4 フレーバー有限温度 QCD における臨界終点（藏増、大野）

温度  $T$  とクォーク化学ポテンシャル  $\mu$  を関数とする QCD の相図を確定させることは、格子 QCD シミュレーションにおける最大の目標の一つである。藏増は、理研計算科学研究機構（AICS）の宇川副機構長、中村研究員、金沢大学 武田助教および米国アルゴンヌ国立研究所の Jin 研究員らとの共同研究のもと、 $O(a)$ 改良を施した Wilson-Clover クォーク作用と Iwasaki ゲージ作用を用いて、 $T$ 、 $\mu$ 、クォーク質量  $m_q$  のパラメータ空間における 3 フレーバー QCD の臨界終線の決定に取り組んできた。まず、最初のステップとして 2015 年に  $\mu=0$ （密度ゼロ）での 3 フレーバー QCD の臨界終点における  $\pi$  中間子質量 ( $m_{\pi,E}$ ) を決定した（論文発表済）。われわれが用いた方法は、尖度（kurtosis）交叉法と呼ばれる有限サイズスケリング解析手法の一種であり、一次相転移領域における物理量分布の尖度とクロスオーバー側の対応物が、異なる空間体積依存性を持つ性質を利用している。本研究において、世界で初めて 3 フレーバー QCD における臨界終点の決定に成功した。その後、 $m_{\pi,E}$  の精度向上を目指し、更に細かい格子間隔で計算を行った結果、連続極限において  $m_{\pi,E}$  の値が非常に小さい、あるいはゼロになる可能性を示唆する結果を得た（研究論文 A-5）。この結果は従来の理論予想とは異なっており、大変興味深い。現在、更に細かい格子間隔の計算を実行し、連続極限における  $m_{\pi,E}$  の値がゼロになる可能性の検証に取り組んでいる。また、並行して、大野と共に 4 フレーバー QCD における臨界終点の探索を開始した。理論的には、3、4 フレーバー QCD とともにクォー



ク質量  $m_q$  が小さな領域での一次相転移が予想されているため、4 フレーバーQCD での臨界終点の結果を理論予想と比較検討することによって、3 フレーバーQCD の結果に対する新たな理解が得られると考えられる。

**【10】 総バリオン数揺らぎとその高次キュムラントの計算（大野）**

総バリオン数揺らぎとその高次キュムラントは、QCD 臨界点を探索する上で重要な量である。実際、RHIC のビームエナジースキャン計画でも同様の量が測られ、特に、高次キュムラントで観測されている特徴的振る舞いの理論的理解が必要となっている。

大野は、Frithjof Karsch 氏を中心とする BNL-Bielefeld-CCNU Collaboration に参加し、2+1 フレーバーの Highly Improved Staggered Quark 作用を用いた格子 QCD シミュレーションを行い、これらの量の計算を行った（図 9）。その結果、現在実験的に到達しているビームエネルギーの範囲において、実験結果と同様の振る舞いが格子 QCD の理論計算でも得られることを示した（研究論文 A-6）。

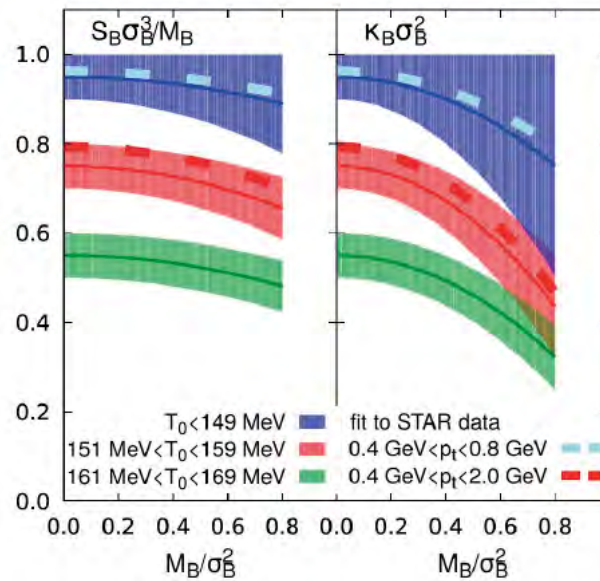


図 9：総バリオン数の歪度（左図）及び尖度（右図）。ゼロバリオン化学ポテンシャルにおけるクロスオーバー温度の違いを色の違いで示す。また、STAR Collaboration の実験から得られた結果を破線で示す。

**【11】 クォーコニウム相関関数及びスペクトル関数の計算（大野）**

クォークと反クォークの束縛状態であるクォーコニウムは、RHIC や LHC 等で行われている重イオン衝突実験において生成される、クォーク・グルオン・プラズマの性質を調べるための重要なプローブのひとつである。従って、高温媒質中のクォーコニウムの振る舞いを理論的に理解することは、実験結果を説明する上で必要不可欠である。

大野は、華中師範大の Heng-Tong Ding 教授、Bern 大の Mikko Laine 教授及び Bielefeld 大の Olaf Kaczmarek 氏らと共に、摂動論の手法等を用いて、擬スカラーチャンネルのクォークonium スペクトル関数を計算した（研究論文 A-7）。また、クエンチ近似を用いた大規模格子 QCD 計算を行い、世界で初めて連続極限におけるクォークonium 相関関数を計算し（研究論文 B-6,7）、上記摂動論の結果と比較した。そして、チャーモニウムに関しては臨界温度の 1.1 倍の温度で、既に束縛状態がなくてもよいことを示唆する結果を得た。一方、ボトモニウムに関しては少なくとも臨界温度の 1.5 倍の温度においても、束縛状態が存在することを示す結果が得られた（図 10）。

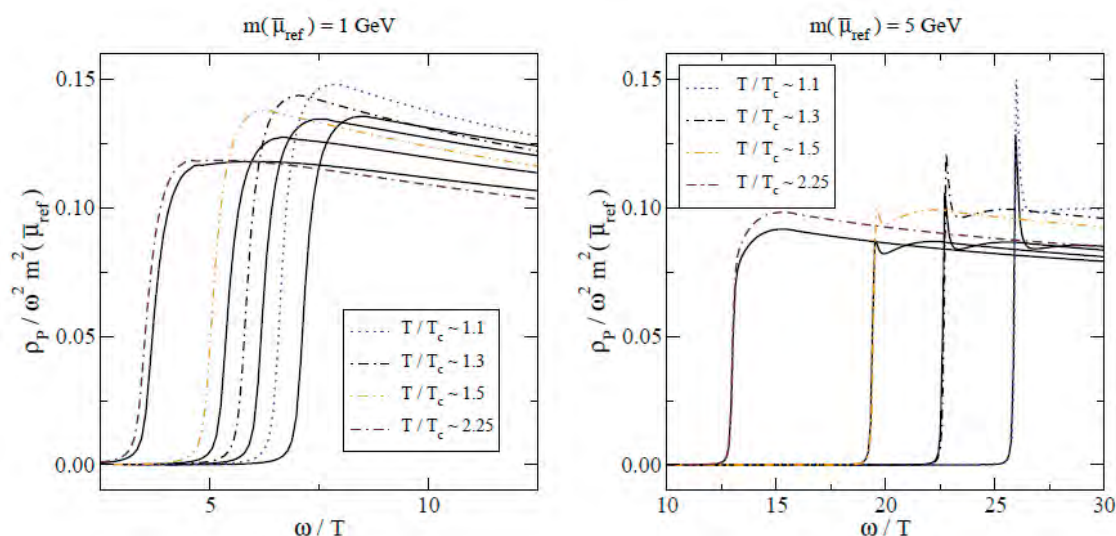


図 10 : チャーモニウム (左図) 及びボトモニウム (右図) スペクトル関数。摂動論の結果を実線、それを格子 QCD 計算で得られた相関関数を再現するように変更したものを破線で示す。

## 【12】 QCD のカイラル相転移の数値的研究 (吉江)

QCD のクォーク・グルーオン相 (高温相) の性質や、高温相からハドロン相 (低温相) への相転移の性質の解明は、初期宇宙の進化に係わる重要な課題である。今日まで多くの研究が行われてきているが、この有限温度相転移の次数についてさえ、結論が得られていない。WMFQCD Collaboration (岩崎 (筑波)、石川 (広島)、中山 (Kavli IPMU)、吉江) は、今日まで、多フレーバ QCD の相構造を、『繰り込み群に基づくスケーリング則を数値的に検証する』事によって調べてきた。昨年度から、同じ手法を用いて、 $N_f=2$  QCD のカイラル相転移の次数を調べている。

本研究では、まず、カイラル相転移が二次であると仮定して、体積の異なる格子上での相転移点での中間子伝搬関数のスケーリング則を導く。3 種の体積の異なる系を用いてスケーリング則が成り立っている事を数値的に示した。この事は、相転移次数が 2 次であることを強く示唆する (研究論文 A-8)。

次に、相転移に関わるカイラル  $SU(2) \times U(1)$  対称性が、相転移（の高温側）でどう回復しているかを、カイラル多重項の中間子伝搬関数を比較する事によって調べた。（技術的理由で、フレーバ 3 重項の中間子のみ調べた。）高温側では、 $SU(2)$  対称性が回復するだけでなく、量子補正によって破れている  $U(1)$  対称性も回復していると考えられるべき結果を得た（研究論文 A-9）。

高温側で  $U(1)$  対称性が実質的に回復する場合、多くの理論モデルで一次転移を導くので、上記のスケーリング則の成立と  $U(1)$  多重項の縮退を矛盾無く説明する事が課題である。

### 【13】 テンソルネットワーク形式に基づく格子ゲージ理論の研究（藏増、吉村）

格子 QCD 計算では、近年の計算機能力の向上や新規アルゴリズムの開発・改良の結果、自然界の  $u$ 、 $d$ 、 $s$  クォーク質量上でのシミュレーションや、更には軽原子核の束縛エネルギー計算までもが可能となりつつある。その一方で、解決すべき長年の課題がそのまま残されていることも事実である。最も重要な課題は、フェルミオン系を扱う際の負符号問題および複素作用を持つ系のシミュレーションである。これらは、軽いクォークのダイナミクス、Strong CP 問題、有限密度 QCD、格子 SUSY の研究において避けて通れない問題である。われわれは、近年物性物理分野で提案されたテンソルネットワーク形式に基づく分配関数の数値計算手法を格子ゲージ理論へ応用し、モンテカルロ法に起因する負符号問題および複素作用問題を解決し、これまでの格子 QCD 計算が成し得なかった新たな物理研究の開拓を目指している。なお、本研究課題は、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題における 4 つの萌芽的課題のうち、1 番目の課題である「基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦」に含まれており、本グループも分担機関として参加し、テンソルネットワーク法の素粒子物理学への応用に取り組んでいる。

2014 年、藏増と理研計算科学研究機構（AICS）の清水特別研究員は、テンソル繰り込み群をグラスマン数も扱えるように拡張し（グラスマンテンソル繰り込み群）、世界で初めてフェルミオン入りのゲージ理論への応用に成功した。具体的には、グラスマンテンソル繰り込み群を用いて、 $\theta$  項が有る場合と無い場合の 1 フレーバーの 2 次元格子 Schwinger モデル（2 次元格子 QED）における相構造を調べた（論文発表済）。この研究により、グラスマンテンソル繰り込み群が、現在の格子 QCD 計算が抱える負符号問題や複素作用問題を解決していることを示すことに成功した。今後は、最終目標である 4 次元 QCD への応用に向け、(i) 非可換ゲージ理論への拡張、(ii) 高次元モデルへの応用、(iii) 物理量計算のための手法開発、という 3 つの課題に取り組む必要がある。また、並行して、素粒子物理にとって興味深い低次元モデルの解析も行う。2017 年度の主要な研究成果は、2014 年に Schwinger モデルの解析に用いたアルゴリズムを改良し、より高度な解析手法を用いて 1 フレーバー Wilson フェルミオンを持つ 2 次元格子 Schwinger モデルの詳細な相構造解析を行ったことである（研究論文 A-10）。

図 11 (左) は、強結合極限 ( $g \rightarrow \infty$ ) における  $\langle P_{\text{odd}} \rangle$  (パリティ奇の部分空間への射影演算子の期待値) とセントラルチャージのフェルミオン質量依存性を表す。 $\langle P_{\text{odd}} \rangle$  の振る舞いから、 $-1.8 \leq m \leq -0.7$  の領域にパリティ対称性が破れている相が存在することがわかる。また、セントラルチャージの振る舞いから、 $m \approx -0.7$  で相転移が存在し、 $m \leq -1.8$  で BKT (Berezinskii-Kosterlitz-Thouless) 転移が存在することがわかる。なお、2014 年の研究ではカイラル感受率を用いた相構造解析を行っていたため、 $m \leq -1.8$  での BKT 転移を検知することはできなかった。図 11 (右) は、強結合極限 ( $g \rightarrow \infty$ ) と有限の結合定数  $g$  における解析結果と統合的に考察し得られた相図である。

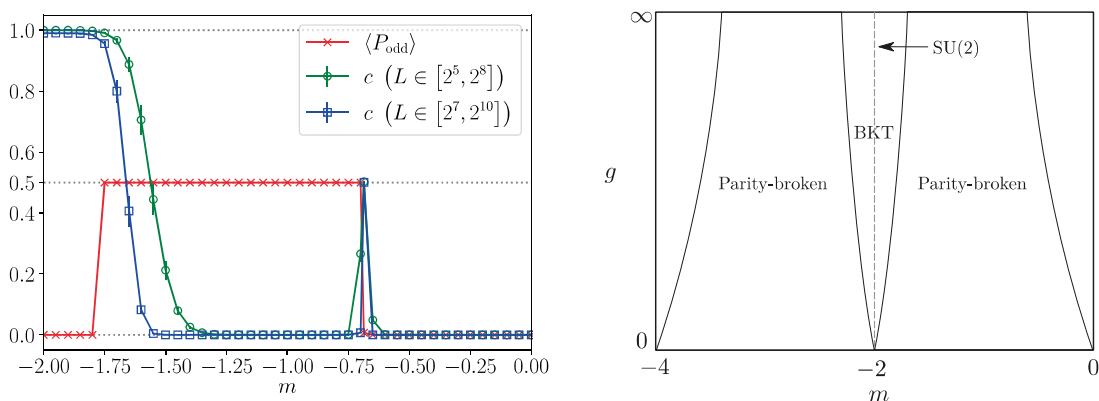


図 11 : (左) 強結合極限における  $\langle P_{\text{odd}} \rangle$  とセントラルチャージのフェルミオン質量依存性。(右) 解析結果に基づく相図。BKT は Berezinskii-Kosterlitz-Thouless 転移を表す。

#### 【14】 素粒子標準模型を超えた理論の探索 (山崎)

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

これまでの 4、8、12 フレーバー SU(3) ゲージ理論の研究から、8 フレーバー理論がそれら条件を満たす可能性があることを示唆した。今年度は、これまでよりも大きな体積、軽いフェルミオン質量のデータを含め、系統誤差を小さくした結果から得られた研究成果を論文としてまとめた (研究論文 A-13)。さらに、8、12 フレーバー理論の性質を調べるため、フレーバー 1 重項擬スカラー中間子の計算を行い、少ないフレーバー数の SU(3) ゲージ理論とは定性的に異なるフェルミオン質量依存性を示す結果が得られた (研究論文 B-9)。

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

JLDG (Japan Lattice Data Grid) は、国内の計算素粒子物理研究グループが日々の研究データを管理・共有する為のデータグリッドである。主システムは、国内の主要な格子 QCD 研究拠点 7 箇所に設置したファイルサーバを国立情報学研究所が提供する SINET VPN で接続し、グリッドファイルシステムソフトウェア Gfarm で束ねたファイルシステムである。JLDG はサブシステムとして、HPCI 共用ストレージとの連携システムと ILDG (International Lattice Data Grid) との接続システムを備えている。JLDG の運用は、各拠点の代表者、研究グループの代表者、システム開発者、管理運用支援の委託先の業者の担当者、をメンバーとする JLDG チームが行っており、筑波大からは、建部、天笠 (システム情報) と山崎、吉江が参加している。

JLDG は 2005 年に開発を開始し、2007 年に運用を開始した。現在、国内の複数の大きな研究グループが研究インフラとして使用している。JLDG は実用システムとして、一定の完成の域に達しており、数年前から、システムの改良や新機能の実装よりも、システムの増強・安定運用に主眼が移ってきている。

本年度は、ハードウェアの増強、ソフトウェアのバージョンアップ、障害対応等の定型的作業に加えて、JCAHPC に JLDG の拠点を設置する計画を立案し、ファイルサーバを設置した。次年度以降、同所のスーパーコンピュータ Oakforest-PACS に JLDG クライアント機能を導入する計画である。

**ILDG**

ILDG は 5 つの地域グリッドを、『格子 QCD 配位の国際規模での共有』を目的として相互運用する仕組みであり、JLDG は ILDG の日本の地域グリッドである。ILDG は 2007 年に運用を開始して以来、アンサンブルの記述言語の拡充、各地域グリッドでのシステム改良が行われてきたが、グリッドの相互運用の仕組みに変更はなく、実用システムとして研究者に利用されている。

ILDG には、「公開されている格子 QCD 配位アンサンブルの利用状況を把握する仕組みが無い」事が問題であった。論文の引用・被引用の記録とは別に、データの引用・被引用関係の記録を蓄積する目的で、ILDG に公開する QCD アンサンブルに DOI (Digital Object Identifier) 登録を行う事が提案され、米国地域グリッドでは、実施済である。

JLDG では、天笠、松古 (KEK)、吉江が中心となって、DOI 登録の体制面の検討と各関係機関との調整を行って、DOI 登録は JICFuS (計算基礎科学連携拠点) の活動として位置付けること、筑波大計算科学研究センターが、DOI 登録機関の会員となり、実際の登録業務とデータへのアクセスを保証する仕組みに責任を持つこととなった。

今年度は、DOI 登録に必要なソフトウェア回りの開発(登録フォーム、ILDG QCDml ensemble xml と補足情報からの landing page の生成)を完成させた。また、登録の規約や手続き(登録作業のフロー)についても検討を行い、JICFuS に提案する規約案がほぼ完成した。

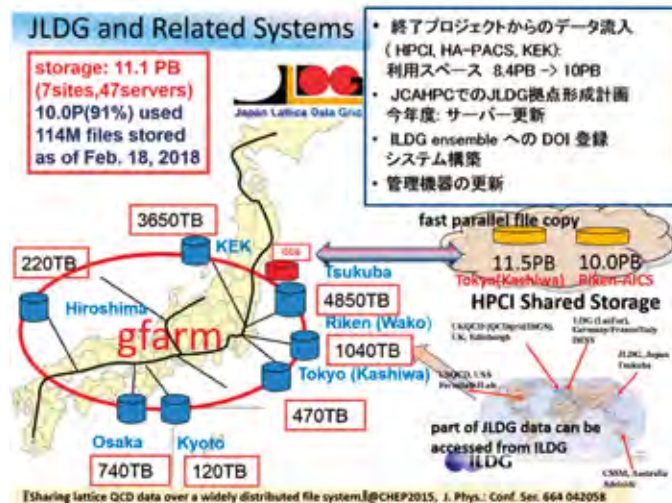


図 12 : JLDG の運用状況。2018 年 2 月時点。

#### [16] 格子 QCD 共通コード開発 (金谷、谷口、滑川、浮田)

昨年度に引き続き、格子 QCD 共通コード Bridge++の開発を進めた。格子 QCD 共通コード Bridge++は、QCD を含む格子ゲージ理論シミュレーションのための汎用コードセットである。様々な格子作用やアルゴリズムを適用可能で、ノート PC から超並列計算機まで幅広いアーキテクチャに対応している。2012 年 7 月に Bridge++ ver.1.0.0 を公開して以降、継続してコードの改善、拡張を行っている (<http://bridge.kek.jp/Lattice-code/>)。

本年度は、インデックス、IO、フェルミオン、ゲージ固定など種々クラスの改良および修正が行われた。加えて、新規スーパーコンピュータ向けコード対応がなされた。これらの変更を含めた Bridge++ ver.1.4.4 へのアップデートが 2017 年 11 月に実施された。また、共通コードを使用した研究論文が、今年度新たに 9 本追加された。通算 32 本の論文が共通コードを元に発表されている。共通コードはコミュニティコードとして重要な役割を果たしている。

## 4. 教育

### 学位論文

[修士論文]

1. 馬場 惇「Gradient flow による QCD の熱力学量の解析」

### 集中講義

1. 藏増嘉伸、神戸大学システム情報学研究科客員教授（2017年4月～2017年9月）  
「計算科学特論」（集中講義）を担当

## 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

### 受賞

1. 岩崎 洋一 前学長・筑波大学名誉教授:  
瑞宝重光章受章（2017年4月）、「教育研究功労」による。
2. 山崎 剛、藏増 嘉伸、浮田 尚哉、他2名:  
平成28年度実施課題におけるHPCI利用研究課題優秀成果賞（2017年11月）
3. 鈴木 遊:  
原子核三者若手夏の学校優秀賞（2017年8月）

### 外部資金

1. 青木慎也（代表）、一般受託研究、平成26年度採択、『ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発』重点課題9：宇宙の基本法則と進化の解明』、240,000千円
2. 金谷和至（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(C)、平成27年度採択、「有限温度・有限密度クォーク物質の物性と相構造」、900千円
3. 藏増嘉伸（分担）、一般受託研究、平成28年度採択、『ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発』萌芽的課題1：基礎科学のフロンティア－極限への挑戦（基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求）』、17,900千円
4. 藏増嘉伸（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(B)、平成27年度採択、「テンソルネットワーク形式による格子ゲージ理論の研究」、4,600千円
5. 石塚成人（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(B)、平成27年度採択、「格子QCDによるK中間子崩壊の直接的CP非保存パラメータの決定」、3,500千円
6. 山崎剛（代表）、科学研究費補助金・若手研究(A)、平成28年度採択、「量子色力学を基にした原子核構造の解明へ向けた基礎研究」、7,400千円
7. 浮田尚哉（代表）、科学研究費補助金、挑戦的萌芽研究、平成28年度採択、「格子数値計算による超対称性の自発的破れの解明」、1,000千円
8. 滑川裕介（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(C)、平成27年度採択、「格子量子色力学による新たなハドロン存在形態の解明」、910千円

### 知的財産権

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

1. Taisuke Boku, Ken-Ichi Ishikawa, Yoshinobu Kuramashi, and Lawrence Meadows, “Mixed Precision Solver Scalable to 16000 MPI Processes for Lattice Quantum Chromodynamics Simulations on the Oakforest-PACS System”, arXiv:1709.08785 [physics.comp-ph].
2. Takeshi Yamazaki and Yoshinobu Kuramashi, “Relation between scattering amplitude and Bethe-Salpeter wave function in quantum field theory”, Phys. Rev. D 96, No. 11 (2017) ref.114511.
3. Yusuke Namekawa and Takeshi Yamazaki, “Scattering amplitude from Bethe- Salpeter wave function inside the interaction range”, arXiv:1712.10141 [hep-lat].
4. Yusuke Taniguch, Shinji Ejiri, Ryo Iwami, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Hiroshi Suzuki, Takashi Umeda, and Naoki Wakabayashi (WHOT-QCD Collaboration), “Exploring  $N_f=2+1$  QCD thermodynamics from gradient flow”, Phys. Rev. D 96, No.1 (2017) ref.014509.
5. Xiao-Yong Jin, Yoshinobu Kuramashi, Yoshifumi Nakamura, Shinji Takeda, and Akira Ukawa, “Critical Point Phase Transition for Finite Temperature 3-Flavor QCD with Non-Perturbatively  $O(a)$ -Improved Wilson Fermions at  $N_t=10$ ”, Phys. Rev. D 96 (2017) ref.034523.
6. A. Bazavov, H.-T. Ding, P. Hegde, O. Kaczmarek, F. Karsch, E. Laermann, Swagato Mukherjee, H. Ohno, P. Petreczky, E. Rinaldi, H. Sandmeyer, C. Schmidt, Chris Schroeder, S. Sharma, W. Soeldner, R.A. Soltz, P. Steinbrecher, and P.M. Vranas [HotQCD Collaboration], “Skewness and kurtosis of net baryon-number distributions at small values of the baryon chemical potential”, Phys. Rev. D 96, no. 7 (2017) ref.074510.
7. Y. Burnier, H.-T. Ding, O. Kaczmarek, A.-L. Kruse, M. Laine, H. Ohno, and H. Sandmeyer, “Thermal quarkonium physics in the pseudoscalar channel”, JHEP 1711 (2017) ref.206.
8. K.-I. Ishikawa, Y. Iwasaki, Yu Nakayama, and T. Yoshié, “RG scaling relations at chiral phase transition in two-flavor QCD”, arXiv:1704.03134 [hep-lat].
9. K.-I. Ishikawa, Y. Iwasaki, Yu Nakayama, and T. Yoshié, “Nature of chiral phase transition in two-flavor QCD”, arXiv:1706.08872 [hep-lat].
10. Yuya Shmizu and Yoshinobu Kuramashi, “Berezinskii-Kosterlitz-Thouless Transition in Lattice Schwinger Model with One-Flavor of Wilson Fermion”, Phys. Rev. D 97 (2018) ref.034502.
11. Daisuke Kadoh, Yoshinobu Kuramashi, Yoshifumi Nakamura, Ryo Sakai, Shinji Takeda, and Yusuke Yoshimura, “Tensor Network Formulation for Two-Dimensional Lattice  $N=1$  Wess-Zumino Model”, JHEP 1803 (2018) ref.141.



12. Yusuke Yoshimura, Yoshinobu Kuramashi, Yoshifumi Nakamura, Ryo Sakai, and Shinji Takeda, “Calculation of Fermionic Green Functions with Grassmann Higher-Order Tensor Renormalization Group”, *Phys. Rev. D* 97 (2018) ref. 054511.
13. Yasumichi Aoki, Tatsumi Aoyama, Ed Bennett, Masafumi Kurachi, Toshihide Maskawa, Kohtaroh Miura, Kei-ichi Nagai, Hiroshi Ohki, Enrico Rinaldi, Akihiro Shibata, Koichi Yamawaki, and Takeshi Yamazaki (LatKMI Collaboration), “Light flavor-singlet scalars and walking signals in  $N_f=8$  QCD on the lattice”, *Phys. Rev. D* 96, No. 1 (2017) ref.014508.

## B) 査読無し論文

1. Takeshi Yamazaki, Ken-Ichi Ishikawa, Yoshinobu Kuramashi for PACS Collaboration, “Comparison of different source calculations in two-nucleon channel at large quark mass”, *EPJ Web Conf.* 175 (2018) ref.05019.
2. Natsuki Tsukamoto, Ken-Ichi Ishikawa, Yoshinobu Kuramashi, Shoichi Sasaki, and Takeshi Yamazaki for PACS Collaboration, “Nucleon structure from 2+1 flavor lattice QCD near the physical point”, *EPJ Web Conf.* 175 (2018) ref.06007.
3. Kazuyuki Kanaya, Shinji Ejiri, Ryo Iwami, Masakiyo Kitazawa, Hiroshi Suzuki, Yusuke Taniguchi, and Takashi Umeda [WHOT-QCD Collaboration], “Equation of state in (2+1)-flavor QCD at physical point with improved Wilson fermion action using gradient flow”, *EPJ Web of Conf.* 175 (2018) ref.07023.
4. Yusuke Taniguchi, Shinji Ejiri, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Asobu Suzuki, Hiroshi Suzuki, and Takashi Umeda, for the WHOT-QCD Collaboration, “Energy-momentum tensor correlation function in  $N_f=2+1$  full QCD at finite temperature”, *EPJ Web of Conf.* 175 (2018) ref.07013.
5. Xiao-Yong Jin, Yoshinobu Kuramashi, Yoshifumi Nakamura, Shinji Takeda, and Akira Ukawa, “Continuum Extrapolation of Critical Point for Finite Temperature QCD with  $N_f=3$ ”, arXiv:1710.08057 [hep-lat].
6. H.-T. Ding, O. Kaczmarek, A. I. Kruse, H. Ohno, and H. Sandmeyer, “Continuum extrapolation of quarkonium correlators at non-zero temperature”, *EPJ Web Conf.* 175 (2018) ref.07010.
7. H.-T. Ding, O. Kaczmarek, A. I. Kruse, S. Mukherjee, H. Ohno, H. Sandmeyer, and H.-T. Shu, “Thermal modifications of charmonia and bottomonia from spatial correlation functions”, *EPJ Web Conf.* 175 (2018) ref.07021.
8. R. Sakai, D. Kadoh, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, S. Takeda, and Y. Yoshimura, “Application of Tensor Network Method to Two-Dimensional Lattice  $N=1$  Wess-Zumino Model”, *EPJ Web Conf.* 175 (2018) ref.11019.

9. Yasumichi Aoki, Tatsumi Aoyama, Ed Bennett, Masafumi Kurachi, Toshihide Maskawa, Kohtaroh Miura, Kei-ichi Nagai, Hiroshi Ohki, Enrico Rinaldi, Akihiro Shibata, Koichi Yamawaki, and Takeshi Yamazaki (LatKMI Collaboration), “Flavor-singlet spectrum in multi-flavor QCD, EPJ Web Conf., 175 (2018) ref.08023.

## (2) 国際会議発表

### A) 招待講演

1. Takeshi Yamazaki for PACS Collaboration 「Binding energy of light nucleus from lattice QCD」 QCD Downunder 2017 (Novotel Cairns Oasis Resort, Australia, July 10-14, 2017).
2. H. Ohno 「Quarkonium spectral functions on the lattice」 Workshop on Heavy Flavor Production in High Energy Collisions (LBNL, Berkeley, USA, October 30-November 1, 2017).
3. Takeshi Yamazaki 「Relation between scattering amplitude and Bethe-Salpeter wave function in quantum field theory」 Multi-Hadron Systems from Lattice QCD (University of Washington, USA, February 5-9, 2018).
4. Yusuke Namekawa 「Scattering length from Bethe-Salpeter wave function inside the interaction range」 Multi-Hadron Systems from Lattice QCD (University of Washington, USA, February 5-9, 2018).

### B) 一般講演

1. Yoshinobu Kuramashi for PACS Collaboration 「A large scale simulation of 2+1 flavor lattice QCD」 The 35th International Symposium on lattice field theory (Lattice 2017) (Palacio de Congresos de Granada, Spain, June 19-24, 2017) .
2. Takeshi Yamazaki, Ken-ichi Ishikawa, and Yoshinobu Kuramashi for PACS Collaboration 「Comparison of different source calculations in two-nucleon channel at large quark mass」 The 35th International Symposium on lattice field theory (Lattice 2017) (Palacio de Congresos de Granada, Spain, June 19-24, 2017)
3. J. Kakazu, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yamazaki, and T. Yoshié for PACS Collaboration 「Electromagnetic pion form factor with strange quark mass reweighting in  $N_f=2+1$  lattice QCD」 The 35th International Symposium on lattice field theory (Lattice 2017) (Palacio de Congresos de Granada, Spain, June 19-24, 2017).
4. H. Ohno, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, and S. Takeda 「Critical endpoint of 4-flavor QCD with non-perturbatively  $O(a)$ -improved Wilson quarks」 , 35th International Symposium on Lattice

- Field Theory (Lattice 2017) (Palacio de Congresos de Granada, Granada, Spain, June 18-24, 2017).
5. A. Suzuki, and Y. Taniguchi 「Calculation of BK with Wilson fermion using gradient flow」 The 35th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2017) (Palacio de Congresos, Granada, Spain, June 18-24, 2017).
  6. Y. Taniguchi, M. Kitazawa, A. Suzuki, H. Suzuki, H. Umeda, S. Ejiri, and K. Kanaya 「Energy-momentum tensor correlation function in  $N_f=2+1$  full QCD at finite temperature」 The 35th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2017) (Palacio de Congresos de Granada, Granada, Spain, June 18-24, 2017).
  7. K. Kanaya, S. Ejiri, R. Iwami, M. Kitazawa, H. Suzuki, Y. Taniguchi, and T. Umeda 「Equation of state in  $(2+1)$ -flavor QCD at physical point with improved Wilson fermion action using gradient flow」 The 35th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2017) (Palacio de Congresos de Granada, Granada, Spain, June 18-24, 2017).
  8. K. Kanaya, S. Ejiri, R. Iwami, M. Kitazawa, H. Suzuki, Y. Taniguchi, and T. Umeda 「Thermodynamics of QCD at physical point with  $(2+1)$ -flavors of improved Wilson quarks using gradient flow」 The 15th International workshop on QCD in eXtreme conditions (XQCD 2017) (Univ. Pisa, Pisa, Italy, June 26-28, 2017).
  9. Y. Taniguchi, S. Ejiri, K. Kanaya, M. Kitazawa, A. Suzuki, H. Suzuki, and T. Umeda 「Energy-momentum tensor correlation function in  $N_f=2+1$  full QCD at finite temperature」 The 15th International workshop on QCD in eXtreme conditions (XQCD 2017) (Univ. Pisa, Pisa, Italy, June 26-28, 2017).
  10. H. Ohno, H.-T. Ding, O. Kaczmarek, Swagato Mukherjee, H. Sandmeyer, and H.-T. Shu 「Quarkonium spectral functions at finite temperature on large quenched lattices and towards the continuum limit」 The 15th International Conference on QCD in Extreme Conditions (XQCD 2017) (University of Pisa, Pisa, Italy, June 26-28, 2017).
  11. A. Suzuki and Y. Taniguchi 「Calculation of BK with Wilson fermion using gradient flow」 The 15th International Conference on QCD in Extreme Conditions (XQCD 2017) (University of Pisa, Pisa, Italy, June 26-28, 2017).
  12. J. Kakazu, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yamazaki, and T. Yoshié for PACS Collaboration 「Electromagnetic pion form factor at physical point from  $N_f=2+1$  QCD」 QCD Downunder 2017 (Novotel Cairns Oasis Resort, Australia, July 10-14, 2017).

13. A. Suzuki and Y. Taniguchi 「Calculation of decay constant using gradient flow, towards Kaon bag parameter」 QCD Downunder 2017, (Novotel Cairns Oasis Resort, Queensland, Australia, July 10-14, 2017).
14. H. Ohno, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, and S. Takeda 「Critical endpoint of 4-flavor QCD on the lattice」 Critical Point and Onset of Deconfinement 2017 (Stony Brook University, New York, USA, August 7-11, 2017).
15. Yusuke Taniguchi 「Energy-momentum tensor correlation function in  $N_f=2+1$  full QCD at finite temperature」 The international workshop “QCD at nonzero baryon density”(The National Research center “Kurchatov Institute”, Moscow, Russia, Oct. 2-4, 2017)
16. Yusuke Taniguchi 「Energy-momentum tensor correlation function in  $N_f=2+1$  full QCD at finite temperature」 CCS-EPCC Workshop (Center for Computational Sciences, University of Tsukuba, Tsukuba, Japan, Dec. 7-8, 2017).

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

1. 蔵増嘉伸 「テンソルネットワーク法の素粒子物理学への応用」, ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開シンポジウム (東北大学, 仙台, 2017 年 7 月 18 日).
2. 蔵増嘉伸 「Oakforest-PACS が切り拓く新たな格子 QCD シミュレーションの展開」, 計算科学研究センター設立 25 周年記念シンポジウム「計算科学の発展と将来」(つくば国際会議場, つくば, 2017 年 10 月 10-11 日).
3. 山崎剛 「格子量子色力学を用いた核子構造の研究」, 第 4 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会 (コクヨホール, 東京, 2017 年 11 月 2 日).
4. 滑川裕介 「Successful prediction to charmed single baryons and attempt on two-hadron by lattice QCD」, ヘビークォークハドロンとエキゾチックハドロン構造 (J-PARC, 東海村, 2018 年 3 月 5-7 日).
5. 蔵増嘉伸 「格子 QCD による陽子パズル解明のための理論的研究」, 日本物理学会第 73 回年次大会, 実験核物理領域-素粒子論領域-素粒子実験領域-理論核物理領域 合同シンポジウム「多様な手法によって解き明かす陽子のパズル」(東京理科大学, 野田, 2018 年 3 月 22-25 日).
6. 山崎剛 「格子 QCD における Bethe-Salpeter 波動関数を用いた散乱位相差の新しい計算方法」, 日本物理学会第 73 回年次大会 (東京理科大学, 野田, 2018 年 3 月 22 日-25 日).

## B) その他の発表

1. 鈴木遊, 谷口裕介 「Gradient Flow を用いた相関関数の計算」, 原子核三者若手夏の学校, (国立オリンピック記念青少年総合センター, 東京, 2017 年 8 月 21 日-26 日).
2. 金谷和至, 江尻信司, 石見涼, 北沢正清, 鈴木博, 谷口裕介, 梅田貴士 「グラジエントフローによる  $N_f=2+1$  QCD の状態方程式 - 物理点での評価に向けて」, 熱場の量子論とその応用 2017 (TQFT 2017) (基礎物理学研究所, 京都大学, 京都, 8.28-30, 2017).
3. 谷口裕介, 江尻信司, 石見涼, 金谷和至, 北沢正清, 鈴木遊, 鈴木博, 梅田貴士, 若林直輝 「Gradient flow で捉える  $N_f=2+1$  有限温度 QCD のエネルギー運動量テンソル相関関数」, 熱場の量子論とその応用 2017 (TQFT 2017) (基礎物理学研究所, 京都大学, 京都, 8.28-30, 2017).
4. 山崎剛, 藏増嘉伸, 石川健一, 佐々木勝一, 塚本夏基 for PACS Collaboration 「ウィルソフェルミオンを用いた物理点近傍での  $2+1$  フレーバー QCD による核子形状因子の計算」, 日本物理学会 2017 年秋季大会 (宇都宮大学, 宇都宮, 2017 年 9 月 12-15 日).
5. 鈴木遊, 谷口裕介 「Gradient Flow を用いた Wilson フェルミオンに対する  $B_K$  の計算」, 日本物理学会秋季大会 (宇都宮大学, 栃木, 2017 年 9 月 12 日-15 日).
6. 谷口裕介, 石見涼, 梅田貴士, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 鈴木博, 若林直輝 「Gradient flow で捉えるエネルギー運動量テンソル相関関数」, 日本物理学会秋季大会 (宇都宮大学, 宇都宮, 栃木, 9.12-15, 2017).
7. 山崎剛, 藏増嘉伸, 石川健一, 浮田尚哉, 中村宜文, 滑川裕介, 賀数淳平 「格子 QCD を用いた軽い原子核計算」, 計算科学研究センター設立 25 周年記念シンポジウム「計算科学の発展と将来」 (つくば国際会議場, つくば, 2017 年 10 月 10-11 日).
8. 山崎剛, 藏増嘉伸, 石川健一 「格子 QCD を用いた軽原子核の直接計算」, 第 4 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会 (コクヨホール, 東京, 2017 年 11 月 2 日).
9. 金谷和至, 石見涼, 梅田貴士, 江尻信司, 北沢正清, 鈴木博, 谷口裕介 「Gradient flow による  $(2+1)$ -flavor QCD 状態方程式 - 物理点での試験研究」, 日本物理学会第 73 回年次大会 (東京理科大, 野田, 千葉, 3.22-25, 2018).
10. 谷口裕介, 梅田貴士, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 下条昂礼, 鈴木博, 馬場惇 「 $N_f=2+1$  QCD における QGP 粘性係数の計算」, 日本物理学会第 73 回年次大会 (東京理科大, 野田, 千葉, 3.22-25, 2018).
11. 馬場惇, 梅田貴士, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 下条昂礼, 鈴木博, 谷口裕介 「エネルギー運動量テンソル相関関数を使った線形応答関係式のテスト」, 日本物理学会第 73 回年次大会 (東京理科大, 野田, 千葉, 3.22-25, 2018).

#### (4) 著書、解説記事等

#### 7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1. 計算基礎科学連携拠点  
<http://www.jicfus.jp/jp/>
2. 理化学研究所計算科学研究機構 (AICS)  
<http://www.aics.riken.jp/>
3. International Lattice Data Grid (ILDG)  
<http://ildg.sasr.edu.au/Plone>
4. 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

#### 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
准教授	森 正夫
講師	吉川 耕司
助教	古家 健次
助教	Wagner, Alexander
研究員	安部 牧人 (CCS)
	五十嵐 朱夏 (数理物質科学研究科)
	桐原 崇亘 (CCS)
	高水 裕一 (CCS)
	田中 賢 (ポスト京重点課題 9)
	三木 洋平 (CREST)
学生	大学院生 13 名, 学類生 6 名

### 2. 概要

本年度、当グループは、重力波観測を説明する多重ブラックホール合体の研究、初代星形成における再結合放射の影響、銀河間物質における初代星由来の重元素汚染の研究、冷たいダークマターハローにおけるカス-コア遷移の物理過程、アンドロメダ銀河のステラ-ハロー形成過程、冷たいダークマターハロー重力場中の遷音速銀河風加速過程、活動銀河核からの輻射・ジェット・銀河核風による母銀河へのフィードバック、宇宙論的 Vlasov-Poisson シミュレーションによる大規模構造における有質量ニュートリノの影響、泡宇宙の衝突現象による初期宇宙のインフレーションへの示唆、星形成領域の窒素同位体分別過程、星形成領域における窒素原子存在量の推定法の開発の研究を行った。また、宇宙生命計算科学連携として、星間有機分子生成の第一原理分子動力学計算、原始惑星系円盤乱流中のダスト成長と微惑星形成の研究を行った。計算コード開発としては、銀河の多成分力学平衡分布生成コード MAGI の開発、SPH 粒子データを用いたライマン  $\alpha$  輝線輻射輸送計算コードの開発、GPU を用いた  $N$  体計算コードの Pascal 向け性能最適化、高次精度移流スキームの開発、SPH 粒子データを用いた Lyman-alpha 輝線輻射輸送計算コードの開発、高精度流体シミュレーションコードの開発を進めた。

### 3. 研究成果

#### 【1】 重力波観測を説明する多重ブラックホール合体の研究

2016 年以降, aLIGO+aVIRGO による重力波観測により, 5 つのブラックホール合体イベントが検出されている (GW150914, GW151226, GW170104, GW170608, GW170814)。このうち, GW151226, GW170608 以外は,  $30 M_{\odot}$  ( $M_{\odot}$ は太陽質量) 以上の大質量ブラックホール・ペアの合体である。星の進化論に従えば, このような大質量ブラックホールは, 太陽組成の重元素量をもつ星の残骸としては考えづらく, 重元素量が少ないか重元素量が 0 の初代星の残骸である可能性がある。ブラックホール合体の理論は, これまで連星の進化の結果としてできた連ブラックホールが合体するというシナリオが中心的であった。連星進化の理論に従うと, 連ブラックホールのスピン軸は潮汐力の効果により同じ方向を向くことになるが, GW170104 のイベントで, スピンの軸方向のデータが初めて得られ, スピン軸が全く揃っていないことがわかった。これは, 連ブラックホールが連星の進化以外のプロセスでできたことを示唆する。我々は, 以前より, 多重ブラックホールの中で連ブラックホールが形成され, 最終的に重力波を放出して合体するという新たなシナリオを提唱し, 合体のための条件を理論的に解析してきた (Tagawa et al. 2015, 2016)。この解析では, 近点移動や重力波放出といった一般相対論的な効果をポストニュートニアンで扱い, ガスによる力学的摩擦やホイール・リットルトン降着を入れた。その結果,  $n \gtrsim 10^7 \text{cm}^{-3}$  の高いガス密度環境下で, 力学的摩擦が角運動量輸送に効果的に働いて, 連ブラックホールが形成され, これが最終的に重力波を放出して合体することを示した。我々は, このシナリオで, 重力波で検出された大質量ブラックホールの合体が説明できるか否かを調べるために, 初期のブラックホール質量と質量降着率をパラメータとしたモデル計算を行った。観測されている連ブラックホールの質量に合致する合体条件を求めた。その結果, ブラックホール多体系の広がり方が 1pc よりも小さく, ガス密度が  $n \gtrsim 10^6 \text{cm}^{-3}$  のとき, 力学的摩擦がブラック

ホールの 3 体相互作用を誘起し, その結果連ブラックホールが作られ重力波により合体に至ることがわかった。また, 合体までに降着するガス質量は, 数  $M_{\odot}$  であり, 初期のブラックホール質量は  $25M_{\odot}$  以上でなければならないことが分かった (右図)。さらに, このような多重ブラックホールの中でのブラックホール合体が起こりうる場所として, 銀河中心ガス円盤と, 銀河内の高密度分子雲コアを考えイベント・レートを見積もった結果, 前者で年間 1-2 イベント

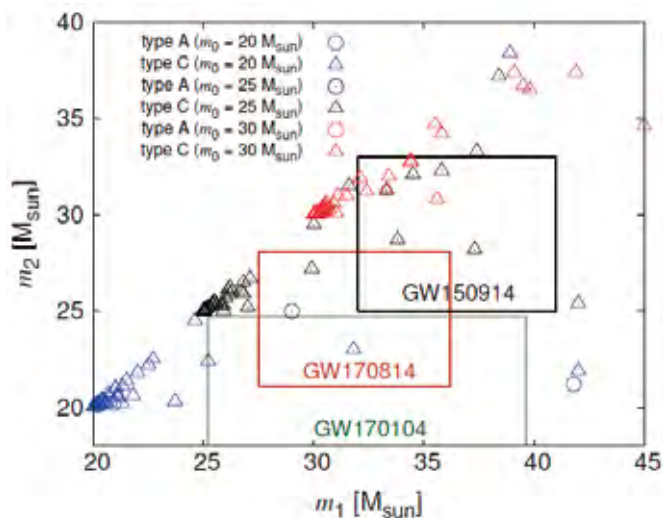


図 1 合体直前の 2 つのブラックホール質量



ント、後者では年間 0.02 イベントとなり、銀河中心ガス円盤での合体の可能性が高いことがわかった。この成果は、*Astrophysical Journal* に掲載された (Tagawa & Umemura 2018)。

## 【2】 初代星形成における再結合放射の影響

本研究では、GPU を用いて高速化した 3 次元輻射流体力学シミュレーションコード ARGOT を用いて、宇宙初期の初代星の形成過程について、これまでの研究ではほとんど取り扱われてこなかった電離領域からの水素の再結合放射がどのように影響するかに着目した研究を行った。一般に初代星形成領域に対して近傍の星などの他の放射源からの電離光子はその初代星形成を抑制すると考えられるが、再結合放射を考慮すると周囲のガスを電離させる一方で、加熱を起こさず、ガスの冷却と紫外線の遮蔽の役割を担う水素分子を増やす効果もある。このように再結合放射が初代星形成を促進・阻害する条件を様々な設定で網羅的に調べることが本研究の目的である。我々のグループが開発した再結合放射の効果を正しく取り入れることが可能なシミュレーションコード ARGOT を用いた計算の結果、再結合放射がある場合は周囲の中性領域を緩やかに電離させ、水素分子の自己遮蔽領域が形成され、再結合放射を考慮しない場合に比べ初代星の形成が促進される傾向があることを示した。今後はより現実的な条件、高解像度の数値シミュレーションを行うことで、再結合放射が初代形成性に与える影響を詳細に調べることで、再結合放射の影響をより一般的なケースに対して適用可能なモデル化を行うことを目指す。このようなモデル化は、宇宙論的なスケールでの初代星形成の数値シミュレーションに適用することで、宇宙再電離期の天体形成についてより現実的な予言を行うことが可能となり、近い将来観測が開始される中性水素の 21cm 線の観測と結びつけることが期待される。

## 【3】 銀河間物質における初代星由来の重元素汚染の研究

銀河間物質 (IGM) は、星形成・超新星爆発に伴うアウトフローにより組成が変化し、天体の形成進化の履歴を残すため重要な情報をもつ。我々は IGM の重元素汚染の起源に迫るなかで、とりわけ初代星由来の重元素汚染に注目した。初代星の形成過程については、輻射流体計算の手法を用いて精力的に研究されてきたが、初代星の痕跡を観測的に明らかにすることは未だ困難な状況である。本研究では初代星が超新星爆発を起こして放出したガスについて、背景光源のスペクトルに刻まれる吸収線の特徴について理論予測を行い、将来観測に活かすことを目標としている。Ishiyama et al. 2016 により、初代星が形成される  $10^6 M_{\odot}$  程度の質量をもつダークマターミニハローを解像する  $2048^3$  粒子を用いた宇宙論的  $N$  体シミュレーションが行われ、 $z > 10$  で初代星形成条件を満たすハローが抽出された。当データを用いて、初代星に特徴的な重元素組成で汚染される領域を設定することで、準解析的に初代星が放出した

重元素の空間分布を得た。 $z=3$  における物質の分布と初代星由来の重元素の分布を解析したところ、低密度領域にも初代星由来の重元素が存在していることがわかった。さらに、アウトフローガスのトレーサーとして、 $z=3$  で可視光域に入る OVI( $\lambda 103.2$  nm)と CIV( $\lambda=154.8$  nm)に注目し、得られた重元素の空間分布に対して擬似観測を実行した。吸収線スペクトルを描き、銀河と重元素による吸収との空間相関を調査した。

#### 【4】 Cold dark matter halo における cusp-core 遷移の物理過程

現在の標準的な構造形成理論である cold dark matter (CDM) モデルは宇宙の大規模構造の統計的性質を説明することに成功した反面、1Mpc 以下の小さなスケールの構造においていくつかの問題が指摘されている。dark matter halo (DMH) の中心質量密度は CDM 理論では、発散する cusp 構造を预言するが、観測的には中心質量密度が一定となる core 構造が多数発見されている。また、質量の中心集中度が高い DMH を持つ大質量衛星銀河が見つからない (Too-big-to-fail 問題) 等がある。本研究ではこれら二つの問題を、DMH とバリオンの力学的相互作用に起因した DMH の中心密度分布の進化過程に関わる問題として捉えて解析を行っている。活発な星形成活動が発生する以前の原始銀河の DMH は cusp 構造を持っているが、銀河形成期に発生する周期的な超新星爆発フィードバックによって core 構造へと遷移する、cusp-core 遷移過程の解析を行っている。特に、ガスの振動がランダウ共鳴を介してダークマターハローの中心部分を加熱する加熱効率と、DMH の密度分布の中心付近の冪の関係について解析をおこなっている。これまでは線形解析及び  $N$  体計算を用いた解析を行ってきたが、2017 年度は SCF 法を用いた大規模シミュレーションに着手し、Oakforest-PACS 上で動く計算コードの整備がほぼ完了した。

#### 【5】 アンドロメダ銀河のステラーハロー形成過程

近年、ハッブル宇宙望遠鏡やすばる望遠鏡に代表される大型望遠鏡を最大限活用した近傍宇宙の大規模探査により、現在も続く銀河進化の過程を垣間見ることができるようになってきた。近傍のアンドロメダ銀河においては、おびただしい数の暗い矮小銀河が発見されるとともに、それら矮小銀河の衝突によるものと思われるステラーストリームやステラーシェル、あるいは銀河円盤上で見られるリング構造等、銀河衝突の痕跡が続々と明らかにされてきている。本研究では、銀河衝突の重力多体計算及び流体力学計算による銀河衝突過程のみならず、アンドロメダ銀河に付随するダークマターハローの構造や、銀河円盤の構造、銀河ハロー中を徘徊するブラックホールの存在可能性について議論している。本年度は、アンドロメダ・ノースウェストストリームを生成した母天体の性質について大規模な数値シミュレーションを行い、幅広いパラメータサーベイを行って、その性質に制限をつけることに成功した。

その結果、母天体はこれまで考えられてきた球状星団のような軽い天体では観測を再現できないことが判明し、少なくとも  $10^7 M_{\odot}$  程度以上の質量をもつ矮小銀河であることが、示唆された。

#### 【6】 コールドダークマターハロー重力場中の遷音速銀河風加速過程

近年、観測技術の発達により、近傍星形成銀河でしか観測されていなかった銀河風速度が、スタッキング解析によって高赤方偏移星形成銀河でも観測可能になってきた。この銀河風によるガス流出量（質量流束）は、ダークマターハロー重力場と大質量星からのエネルギーの関係によって決まると考えられているが、詳しい加速過程などは明らかになっていない。そこで、銀河風速度などの観測値について、遷音速銀河風モデルを適用することで、質量流束やダークマターハロー質量を予想した。その結果、小質量銀河では、質量流束が減少するが、**Mass Loading Rate**（質量流束と星形成率との比）は増加することがわかった。これは、小質量銀河は、大質量銀河に比べて、銀河風による星形成抑制効果が大きいことを示している。また、小質量銀河では、星とダークマターハローの質量比が低下することがわかった。この傾向は、**Abundance Matching** など、他の手法による予測値とも一致している。さらに、赤方偏移ごとの比較を行うと、高赤方偏移銀河では、同じ銀河質量であっても **Mass Loading Rate** が低下することがわかった。これは、赤方偏移によって支配的な銀河風加速過程が異なる可能性を示している。

#### 【7】 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 coevolution of the central supermassive black hole and the galaxy, evidenced through the scaling relations such as the Magorrian relation. We are pursuing a numerically intensive project running 3-dimensional relativistic hydrodynamic and radiation-hydrodynamic simulations with multiphase gas aimed at elucidating the physics of the mass and energy transfer in the feedback cycle and the effects of jets, winds, and radiation on star-formation and black hole accretion. In recent work we have: 1) compared the feedback efficiency of jet-driven and radiation driven outflows and found that jets have a systematically higher feedback efficiency (Ciello, Bieri, Volonteri, Wagner, & Dubois 2018); 2)

produced a sophisticated 3-dimensional model of a relativistic jet interacting with the galactic disc of the iconic radio galaxy IC 5063, explaining the physics behind the dispersion and outflow of molecular gas (Mukherjee, Wagner, Bicknell, et al. 2018); 3) investigated four radio-loud NLS1 galaxies with extreme emission-line shifts, indicating radial outflow velocities of the ionized gas of up to 2450 km/s, and interpreted these in terms of a large scale jet-driven wind (Komossa, Xu, & Wagner 2018); 4) calculated the radio spectra from simulations of young and frustrated radio galaxies that explain the origin and transition gigahertz-peaked spectrum sources to compact steep spectrum sources in terms of the free-free absorption characteristics of the multiphase interstellar medium (Bicknell, Mukherjee, Wagner et al 2018).

#### 【8】 宇宙論的 Vlasov-Poisson シミュレーションによる大規模構造における有質量ニュートリノの影響

近年のニュートリノ振動の発見により、ニュートリノにも 0 ではない質量があることが示されており、宇宙の大規模構造形成においてニュートリノが力学的影響を与えることが示唆されている。しかしながら、ニュートリノの質量は小さく、速度分散が非常に大きいため従来の大規模構造形成計算で行われている  $N$  体シミュレーションでは、無衝突減衰の扱いが難しくモンテカルロサンプリングにより物理量にショットノイズが混在するなど数値的に正しくニュートリノの効果を取り入れることが困難であった。そこで我々のグループではそのような問題が原理的に発生しない 6 次元位相空間上での無衝突 Boltzmann 方程式 (Vlasov 方程式) を元に、高次精度宇宙論的 Vlasov-Poisson シミュレーションコードを開発し、有質量ニュートリノが大規模構造形成に及ぼす影響の計算を行った。この手法では速度分散が大きいニュートリノは Vlasov-Poisson シミュレーションで計算し、速度分散が非常に小さいコールドダークマターは  $N$  体シミュレーションで計算するハイブリッド計算を行う。二つの手法を組み合わせることにより、 $N$  体シミュレーションの高解像度の利点を活かしつつ、ニュートリノの力学的影響を精度よく取り入れた計算が可能となった。本研究の結果、ニュートリノの free streaming スケールより大きなスケールではコールドダークマターと同じ振る舞いで構造形成を行うが、小さいスケールではニュートリノの大きな速度分散により細かい構造がかき消されることが確認できた。また、速度分散の小さなニュートリノが選択的にコールドダークマターの重力ポテンシャルに落ち込むことが示された。今後は Vlasov シミュレーションで得られるニュートリノの速度成分や高次のモーメントから統計的な解析を行う。将来的には次世代の銀河サーベイ観測結果と比較し、より正確なニュートリノの質量を宇宙論の立場から予言することを目標とする。

**【9】 泡宇宙の衝突現象による初期宇宙のインフレーションへの示唆**

自然界には、様々な物理定数と呼ばれる基礎定数が存在し、全ての力の大きさなど物理法則の骨格を決めており、延いては我々の宇宙自体を特徴づけるパラメータであるとも言える。宇宙生成時に、これらの物理定数がランダムな値を取る機構が存在し、ある領域において我々の定数に近い値を取った場合にだけ、似たような宇宙の構造形成、延いては生物の発生が許されると考えることができる（人間原理）。泡宇宙は、このような背景物理に動機づけされた初期宇宙モデルであり、様々な真空期待値が存在する超弦理論的宇宙観においても重要である。実際、様々な宇宙定数を持った真空が多数生成され、それが泡宇宙となる。この様に、それぞれの泡宇宙が固有の宇宙項を持っていたとして、それらが衝突現象を起こすことで、一時的に衝突領域に本来の宇宙項の値とはオーダーの異なる加速膨張宇宙が実現することを数値計算で示した。まず簡単のため、数値的に 2 次元空間、つまり  $z$  方向には対称の円筒対称座標を用いて解析した。静止解である泡宇宙をアインシュタイン方程式を解いて、メトリックとスカラー場で作成した。それらに初速度を持たせて、原点付近で衝突させた。泡宇宙同士の衝突現象により、その領域でメトリックが急劇に増大し、一時的な加速膨張領域ができた。これは本来持っている宇宙項とは異なる有効場としてのインフラトンが生成される可能性を示唆したことになる。インフレーションが泡宇宙のダイナミクスにより生成されることが示されれば、インフラトンと宇宙項の関連を探る重要な手掛かりと成り得ると期待される。

**【10】 星形成領域の窒素同位体分別過程**

彗星氷などの太陽系形成初期の情報を保持すると考えられる物質（太陽系始原物質）は重水素に富むことが知られている。重水素濃縮には極低温環境が必要なため、太陽系始原物質は太陽系の母体となった分子雲で生成された物質を現在に至るまで保持しているのではないかと議論されている。実際に、星形成領域において重水素に富んだ分子は普遍的に観測されている。重水素に加え、太陽系始原物質は重窒素 ( $^{15}\text{N}$ ) にも富んでいる。例えば彗星氷中の  $\text{NH}_3$  や  $\text{HCN}$  は、元素存在度に比べ数倍程度  $^{15}\text{N}$  に富んでいる。一方で近年の分子雲コアの観測から、分子雲コア中の気相分子 ( $\text{N}_2\text{H}^+$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{HCN}$  など) には顕著な  $^{15}\text{N}$  濃縮は見られず、むしろ  $^{15}\text{N}$  に希釈した傾向を持つことが分かってきた。これは一見太陽系始原物質の分子雲起源説と矛盾するように見えるが、必ずしもそうではない。気相分子と氷分子が同じ同位体組成を持つとは限らないためである。

上の観測事実から、星（・惑星）形成領域において窒素同位体分別が起こることは明らかであるが、その機構についてはよく分かっていない。窒素同位体分別過程として (1) 同位体交換反応、(2)  $\text{N}_2$  の同位体選択的光解離の 2 つが提案されているが、いずれも分子雲コアの

観測結果を説明することは難しいと考えられてきた。我々は分子雲形成モデルにおいて  $^{15}\text{N}$  を含む化学反応ネットワークモデルの数値計算を行った。 $\text{N}_2$  の同位体選択的の光解離とダスト表面反応により分子雲の段階で気相と固相間で窒素同位体が分別され、気相は  $^{15}\text{N}$  に希釈し、固相（氷）は  $^{15}\text{N}$  に富むことが分かった。一度気相と固相間で窒素同位体が分別されると、この状態は氷の昇華が起こるまで保持されるため、分子雲コア気相分子の  $^{15}\text{N}$  の希釈、および惑星系の材料となりうる固体物質は  $^{15}\text{N}$  に富むことが説明できる。

### 【11】 星形成領域における窒素原子存在量の推定法の開発

窒素は、宇宙において 5 番目に豊富に存在する元素であり、生命にとって不可欠な元素である。星形成領域における窒素の研究は他の揮発性元素に比べて遅れており、窒素の主要存在形態（原子 or 分子 or 氷）すらよく分かっていない。その理由の一つは、窒素原子が星形成領域のような低温ガス中では直接観測が困難なためである。そこで本研究では、観測可能なアンモニア ( $\text{NH}_3$ ) の重水素濃縮度から窒素原子存在量を推定する理論的手法を開発した。また ALMA や VLA などの大型電波干渉計を用いた観測によって、現実的な観測時間で近傍の小質量星形成領域における窒素原子存在量を推定可能なことを示した。

### 【12】 星間有機分子生成の第一原理分子動力学計算（宇宙生命計算科学連携）

#### (1) 非ラジカル反応によるアミノ酸生成経路の解析

地球外環境下でのアミノ酸生成に関しては様々な反応経路が提唱されているが、我々は、アミノアセトニトリルからヒダントインが生成し（Bücherer-Bergs 反応）、ヒダントインが加水分解されてグリシンが生成する反応経路を、密度汎関数法（DFT）を用いて解析した。アミノアセトニトリルは星間雲で観測されており、また、ヒダントインも隕石から検出されているなど、ともに宇宙化学において重要な有機分子である。各反応ステップの反応障壁を計算して反応機構の詳細を明らかにし、また、触媒となる水分子の重要性を示した。しかし、反応障壁が高いことから、この反応が起こり得る環境として、隕石中など高温環境が考えられることを考察した。本研究の成果は *Chem. Phys. Lett.* に発表した。

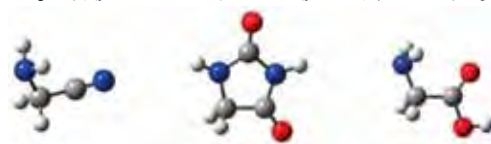


図2 アミノアセトニトリル、ヒダントイン、グリシンの構造

#### (2) ラジカル反応によるアミノ酸生成経路の解析

グリシンが生成する別の機構として、星間分子である  $\text{CH}_3\text{OH}$ ,  $\text{HCN}$ ,  $\text{NH}_3$  のラジカル反応による生成経路が提案されている。その中から、 $\text{NH} + \text{CH}_2\text{COOH}$ ,  $\text{NH}_2\text{CH}_2 + \text{COOH}$ ,  $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CO} + \text{OH}$  の 3 つの反応経路を DFT 法を用いて解析した。その結果、反応障壁が低い ( $\leq 7.75$

kJ/mol) 2つの反応経路を明らかにし、星間空間のように低温環境においてもグリシン生成が起こり得ることを示した。本研究の成果を *Mol. Astrophys.* に発表した。

### (3) 有機分子の光解離反応によるラジカル生成機構の解析

宇宙環境下においてラジカルが生成する主な反応機構の一つに、紫外線による光解離反応がある。本研究では、星間空間において重要な有機分子の一つであるメタノール ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ) の、気相中での光解離反応の機構を明らかにするため、時間依存 DFT (TD-DFT) により、励起状態ダイナミクスシミュレーションを行った。実験的に、水

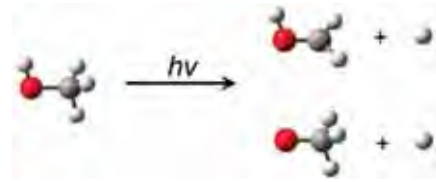


図3 光照射によるメタノールからの水素原子の解離反応

素原子が解離する場合 (図 3), C-H 結合の解離よりも O-H 結合の解離の方が起こり易いことが報告されているが、その理由として第一励起状態が重要であることが示された。

### (4) ダスト表面上でのラジカル反応の解析

ダスト表面上でのラジカル反応により生成した分子が、気相中に放出される機構に関して chemical desorption が提案されている。この機構を解析する為、シンプルな表面モデルとしてグラフェンを用い、HCO と H が反応して  $\text{CO} + \text{H}_2$  または  $\text{CH}_2\text{O}$  が生成する反応について Car-Parrinello dynamics シミュレーションを行った。シミュレーションには、CPMD という、材料研究の大規模シミュレーションに用いられているプログラムを利用した。その結果、表面に化学吸着している CHO が H 原子と反応する場合、 $\text{CO} + \text{H}_2$  または CHOH が生成するという結果が得られた。また、この反応により  $\text{CO} + \text{H}_2$  が生成する場合、CO は速やかにダスト表面から解離することが示された。

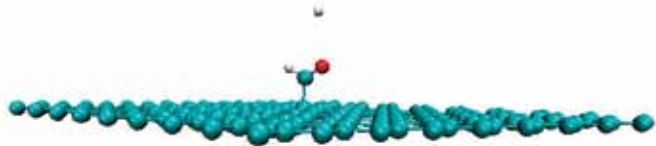


図4 グラフェン表面における CHO と H の反応

## 【13】 原始惑星系円盤乱流中のダスト成長と微惑星形成の研究 (宇宙生命計算科学連携)

(1) 非圧縮ナビエ・ストークス方程式の直接数値計算 (DNS) を用いてダスト粒子の運動を追跡し、ダスト粒子の衝突付着成長過程を理解するためのデータ解析を実施した。微惑星形成過程において未解決である衝突破壊問題にターゲットを絞り、慣性の大きい岩石ダスト粒子が原始惑星系円盤のガス乱流の影響 (乱流によるダスト粒子のクラスタリング, 図 5 参照) を受けどのように衝突付着しうるのか、衝突速度、衝突頻度、付着確率等の統計、および、それらのレイノルズ数 (乱流の非線形性の強さ) 依存性を数値シミュレーションによって調べた。その結果、粒子の制動時間が乱流中の慣性小領域の渦の時間スケールのオーダーにおいて、慣性の大きい岩石ダスト粒子の衝突付着確率は従来の理論に基づくものより高いことを明らかにした。また、ダスト粒子の慣性が大きいほど衝突付着に関する統計のレイノ

ルズ数依存性が弱いことを明らかにし、原始惑星系円盤の現実的な高レイノルズ数乱流中のダスト粒子の衝突付着成長の定量的な議論を可能にした (Ishihara et al. ApJ 2018)。

(2) 圧縮性乱流の高精度・高解像度な差分に基づく直接数値シミュレーションコードを開発し、計算結果のマッハ数 (圧縮性の強さ) 依存性を調べた。その結果、マッハ数が小さいときの結果 (乱流場の統計と粒子の統計) が非圧縮性乱流の結果と無矛盾であることを確認し、マッハ数が小さいときは、場の密度揺らぎや速度の発散等に顕著な変化があっても慣性の大きい粒子の衝突統計に大きな変化が生じないことを明らかにした。

(3) 粒子の付着成長シミュレーションのコード開発を行い、そのコードの高効率化を行った。その結果、格子点数  $2048^3$  の非圧縮性乱流 DNS 中で  $512^3$  個の岩石ダスト粒子の付着成長シミュレーションを実現した。得られたデータの解析により、乱流強度が強く粒子の限界付着速度が小さい (衝突破壊しやすい) 状況においても、大きく付着成長する粒子が存在することを明らかにした。

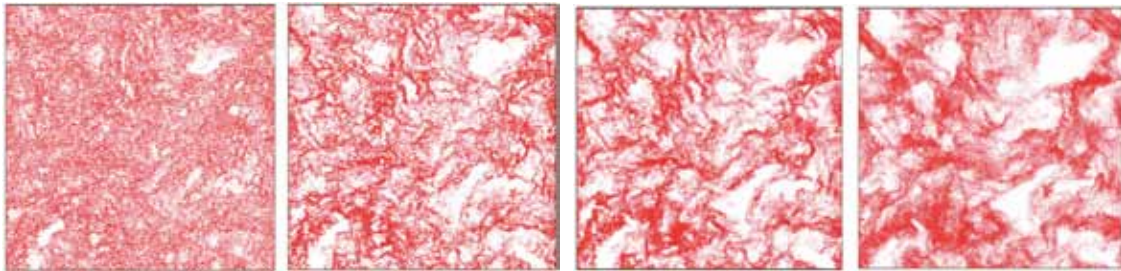


図 5 乱流の直接数値計算 (格子点数:  $2048^3$ , レイノルズ数: 16100) によって得られた慣性粒子 (左から  $St=0.01, 0.06, 0.12, 0.24$ ) のクラスタリング。 $St$  はストークス数 (粒子の制動時間をエネルギー保有渦のタイムスケールで規格化したもの)

#### 【14】 銀河の多成分力学平衡分布生成コード MAGI の開発

銀河どうしの衝突・合体や銀河円盤中の渦状腕の形成などの力学進化過程を詳細に調べるために、 $N$  体シミュレーションを用いた研究が精力的に進められている。こうした計算を行うためには適切な初期条件を生成する必要がある。しかしながら、一般に銀河はバルジ・ハロー・円盤からなる多成分系であり、これを力学平衡な粒子分布として表現することは容易ではなく、現在も初期条件の生成方法に関する研究が続けられている。特に、天の川銀河に代表される円盤銀河の多くは厚い円盤と薄い円盤の 2 成分の円盤成分を持つことが知られているため、複数の円盤成分を表現できることが望ましい。さらに、銀河の質量やサイズ、各成分の質量分布に対する依存性を調べるためには、これらを手軽に変更できることも重要であるが、こうした望ましい性質を全て備えた初期条件生成コードは存在しない。

そこで我々は、複数の球対称成分と軸対称成分を粒子系として表現する初期条件生成コード MAGI (MAny-component Galaxy Initializer) を開発した。球対称成分については、等方的な



速度分布を仮定し Eddington formula を用い分布関数を作成, この分布関数に従う粒子分布を生成することで, Burkert, Einasto, Hernquist, King, Moore, NFW, Plummer model などの多様なモデルやその重ね合わせを力学平衡な粒子分布として表現できる。また円盤成分については高さ方向に等温モデルを仮定し, potential - density pair を数値的に求めている。さらに, 厚さの異なる複数の円盤成分を持った粒子系を生成できるような実装になっている。生成された粒子分布の長時間の安定性についての数値実験を行ったところ, 長時間に渡る安定性も確認できた。以上の成果は Miki & Umemura (2018) として発表済みであり, またソースコードも公開している。

### 【15】 SPH 粒子データを用いた Lyman-alpha 輝線輻射輸送計算コードの開発

観測から得られる高赤方偏移 Lyman-alpha ( $\text{Ly}\alpha$ ) 輝線銀河 (Lyman-alpha emitters, LAEs) の特性を理論的に検証するためには, 流体力学計算によって得られた銀河モデルに対して  $\text{Ly}\alpha$  輝線の輻射輸送計算を行う必要がある。銀河形成シミュレーションでは, 粒子法の一つであり広いダイナミックレンジを取り扱うことができる SPH 法がよく用いられる。その一方で,  $\text{Ly}\alpha$  輻射輸送計算コードはこれまで mesh ベースで開発されている。このため, 従来手法では輻射輸送計算の際に SPH 計算データの mesh 割り当てが必要であり, 流体計算の解像度を損なう可能性があった。そこで本研究では, SPH 粒子を輻射輸送計算グリッドとして直接用いることで, SPH 計算の分解能で輻射輸送計算を行う meshfree の  $\text{Ly}\alpha$  輝線輻射輸送計算コードを開発した (SEURAT: SPH scheme Extended with UV line RAdiative Transfer, Abe et al. 2018)。テスト計算の結果, 本コードは一様ガス球からの  $\text{Ly}\alpha$  光子脱出スペクトル, dusty slab からの  $\text{Ly}\alpha$  光子脱出確率の解析解をよく再現することを示し, meshfree で  $\text{Ly}\alpha$  輝線輻射輸送を正しく解けることを確かめた。輻射流体力学計算で得られた高赤方偏移銀河モデルに対して本コードを適用した結果, 銀河内のガスの複雑な構造を反映し,  $\text{Ly}\alpha$  輝線の表面輝度分布や脱出光子スペクトルといった観測量は, 同一の銀河であっても観測する方向によって変わることが分かった。さらに, 従来の mesh ベースコードとの比較を行ったところ, mesh 割り当ての有無によってガスの速度構造に違いが生じるため, 脱出光子スペクトルの形が変わり得ることを示した。

### 【16】 GPU を用いた $N$ 体計算コードの Pascal 向け性能最適化

GPU 向けに最適化された  $N$  体計算コード GOTHIC (Gravitational Oct-Tree code accelerated by Hierarchical time step Controlling) を Pascal 世代の GPU 向けに最適化した。GOTHIC は GPU 向けに開発された重力ツリーコードであり, 階層化時間刻み法の採用に加えて自動最適化を用いた高速化がなされている。しかし, Miki & Umemura (2017) の研究において対象とさ

れた GPU の世代は Fermi, Kepler, Maxwell の 3 世代のみであり, 東京大学の Reedbush-H/L や東京工業大学の TSUBAME 3.0 といった最近導入されたスパコンに搭載されている Pascal 世代の GPU 向けの最適化は施されていなかった。本研究では Pascal 世代の GPU 向け最適化として, スレッドブロックあたりに割り当てるスレッド数などのコード内のパラメータを調整した。パラメータの調整については, Pre-PACS-X に搭載された NVIDIA Tesla P100 を用いた。NVIDIA Tesla P100 上での計算は, 今まで用いていた NVIDIA Tesla M2090, K20X, GeForce GTX TITAN X と比べて常に高速であり, 特に Fermi 世代の GPU である NVIDIA Tesla M2090 に比べて約 8 倍の高速化を達成した。この 8 倍という数字は両 GPU の単精度での理論ピーク性能比と丁度対応する数字であり, 理想的な高速化が達成できていることを示唆する。

#### 【17】 高次精度移流スキームの開発

Vlasov 方程式を直接数値シミュレーションする Vlasov シミュレーションでは 6 次元位相空間を離散化してメモリに載せるため, 一般的に大量の記憶容量が必要となり, 数値シミュレーションの分解能を向上させるためにメッシュ数を増やすことは現実的ではない。そこで, メッシュ数を増やすかわりに, 計算スキームの空間精度を向上させることで Vlasov シミュレーションの高精度化を達成することが必要である。Vlasov シミュレーションでは, 位相空間の各次元方向に 6 本の移流方程式を時間発展させるため, 空間高次精度の移流スキームを開発することが必要となる。また, Vlasov 方程式の物理的な要請として, 数値解の単調性・正值性を保証することが重要である。このような背景をもとに, 我々は, 空間 5 次精度及び 7 次精度で単調性・正值性を保証する高次精度移流スキームを開発した。また, 時間発展スキームについても従来から使われている TVD-Runge-Kutta スキームだけではなく, より計算コストが小さく高精度の semi-Lagrange スキームも採用することで, より Vlasov シミュレーションに適した移流スキームを開発した。物理的なアプリケーションとして今回開発した高次精度移流スキームを元に, 無衝突自己重力系では Poisson 方程式と組み合わせた Vlasov-Poisson シミュレーションコード, 無衝突プラズマ系では Maxwell 方程式と組み合わせた Vlasov-Maxwell シミュレーションコードを開発した。

#### 【18】 高精度流体シミュレーションコードの開発

銀河形成シミュレーションを始めとして, 宇宙物理の理論分野では Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法が流体計算に広く用いられている。しかしながら, SPH 法には流体の接触不連続面が上手く扱えないことや, 離散化された方程式が空間ゼロ次の誤差項を持つことといった欠点が知られている。これらは流体の不安定性を扱う上で大きな障害となりう

る問題であり、これまでに様々な解決策が提案されてきた。例えば、Riemann solver を SPH 粒子の相互作用計算に組み込む Godunov SPH (GSPH) 法によって、接触不連続面を適切に扱えることが報告されている (Inutsuka 2002; Cha et al. 2010)。GSPH 法は、通常の SPH 法で衝撃波を扱うために必要な人工粘性項を必要としないという長所も持っている。また、Garc 波を扱うために必要な人工粘性項(2012) によって開発された Integral Approach (IA) には、物理量の一階微分を新しい手法で計算することで離散化によって発生する数値粘性を抑制し、空間ゼロ次の誤差を小さくする効果があることが確認されている。我々は GSPH 法と IA を組み合わせることによって、人工的な散逸項を必要としない高精度の Lagrange スキームの開発を目指した。その際に、IA を使用したときに強い膨張波が発生する領域で内部エネルギーが過小評価されることと、それが GSPH 法とは関係無く、IA が本質的に抱える問題であることを発見した。この問題を改善するために、我々は IA での微分計算に使用していた行列に対して改良を加えた。その結果、膨張波領域の問題を解決できるようになっただけでなく。複数のテスト問題において元の IA より良い結果を示した。

#### 4. 教育

##### 【学位論文】

<博士論文>

なし

<修士論文>

1. 北澤 優也

星間分子の円偏光吸収特性から探るアミノ酸ホモキラリティ起源

2. 田沼 萌美

ダークマターハローのユニバーサルスケーリング則

3. 藤原 隆寛

Integral Approach を用いた新しい Godunov SPH 法の開発

4. 油井 夏城

再結合光子を考慮した初代星形成の輻射流体シミュレーション

<学士論文>

1. 曾我 健太

ライマン  $\alpha$  輝線天体における活動銀河核の寄与

2. 田崎 翼

銀河中心ガス円盤におけるブラックホールの力学進化：(1)円盤への捕獲条件

3. 竹澤 聞

銀河中心ガス円盤におけるブラックホールの力学進化：(2)円盤中の合体条件

4. 中村 帆南

星形成領域における有機分子生成過程の理論的研究

5. 日原 慧大

銀河形成初期の放射冷却過程における exact integration scheme の実装

6. 江本 直史

SIMD 命令による流体シミュレーションの高速化

## 5. 受賞, 外部資金, 知的財産権等

### 外部資金

(名称, 氏名, 代表・分担の別, 採択年度, 金額, 課題名)

<代表者>

■基盤研究 (B) (一般) H27 年度～H30 年度：梅村雅之

「一般相対論的輻射流体によるブラックホール超臨界降着流と超大質量星の研究」

(H29 年度 120 万円／全体 540 万円)

■科学技術試験研究委託事業, H28 年度～H32 年度：梅村雅之

「ポスト京で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発」萌芽の課題, 「太陽系外惑星 (第二の地球) の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明 (生命を育む惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明)」 (サブ課題 D 原始太陽系における物質進化と生命起源の探求)

(H29 年度 1,250 万円／全体 4,874 万円)

■基盤研究 (C) (一般) H26 年度～H29 年度：森正夫

「輻射流体シミュレーションによる銀河系統樹の構築」 (H29 年度 80 万円／全体 520 万円)

■若手研究 (B) H29 年度～H31 年度：古家健次

「星間雲から原始惑星系円盤に至る分子組成進化の理論的研究」

(H29 年度 100 万円)

<分担者>

■基盤研究 (A) (一般) H27 年度～H31 年度：梅村雅之 (代表者：大内正巳)

「すばる HSC と SDSS で探る宇宙論的スケールの物質循環」

(H28 年度分担金 2.5 万円／分担金全体 12.5 万円)

■基盤研究 (C) (一般) H28 年度～H31 年度：梅村雅之 (代表者：高橋労太)

「一般相対論的 ART 法による超巨大ブラックホール形成と成長過程の研究」

(H28 年度分担金 10 万円／分担金全体 20 万円)

■基盤研究 (A) (一般) H27 年度～H31 年度：森正夫 (代表者：大内正巳)

「すばる HSC と SDSS で探る宇宙論的スケールの物質循環」

(H29 年度分担金 40 万円／分担金全体 52.5 万円)

■挑戦的萌芽研究 (分担) H28 年度～H30 年度：古家健次 (代表者：相川祐理)

「計算科学によるアストロバイオロジーへの理論的挑戦」

(H29 年度 30 万円)

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

- 1) Ouchi, M. et al. (Umemura, M. and Mori, M.), 2018, “Exploration and Reionization Research Using Subaru HSC (SILVERRUSH). I. Program Strategy and Clustering Properties of  $\sim 2,000$  Ly $\alpha$  Emitters at  $z = 6-7$  over the  $0.3-0.5$  Gpc $^2$  Survey Area”, Publications of the Astronomical Society of Japan, 70, Issue SP1, id. S13
- 2) Igarashi, A., Mori, M., Nitta, S., 2017, “Polytropic transonic galactic outflows in a dark matter halo with a central black hole”, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 440, 2225
- 3) Hayashi, K., Ishiyama, T., Ogiya, G., Chiba, M., Inoue, S., and Mori, M., 2017, “Universal Dark Halo Scaling Relation for the Dwarf Spheroidal Satellites”, The Astrophysical Journal, 843, 97
- 4) Kirihara, T., Miki, Y., Mori, M., 2017, “The nature of the progenitor of the M31 North-western stream: globular clusters as milestones of its orbit”, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 469, 3390
- 5) Sakai, T., Yanagida, T., Furuya, K., Aikawa, Y., Sanhueza, P., Nami Sakai, N., Tomoya Hirota, T., Jackson, J. M., Yamamoto, S., 2018, “ALMA Observations of the IRDC Clump G34.43+00.24 MM3: Complex Organic and Deuterated Molecules”, The Astrophysical Journal, 857, 35

- 6) Tanaka, S., Yoshikawa, K., Minoshima, T., Yoshida, N., “Multi-Dimensional Vlasov-Poisson Simulations with High-Order Monotonicity and Positivity Preserving Schemes”, 2017, *The Astrophysical Journal*, 849, 76
- 7) Akamatsu, H., Fujita, Y., Akahori, T., Ishisaki, Y., Hayashida, K., Hoshino, A., Mernier, F., Yoshikawa, K., Sato, K., Kaastra, J.S., “Properties of the cosmological filament between two clusters: A possible detection of a large-scale accretion shock by Suzaku”, 2017, *Astronomy & Astrophysics*, 606, A1
- 8) Bordoloi, R., Heckman, T. M., Wagner A. Y., Norman, C. A., *The Formation and Physical Origin of Highly Ionized Cooling Gas*, 2017, *Astrophysical Journal*, 848, 122–137
- 9) Toba, Y., Bae, H.-J., Nagao, T., Woo, J-H., Wang, W-H., Wagner, A. Y., Sun, A-L., and Chang, Y-Y., “Ionized Gas Outflows in Infrared-Bright Dust-Obscured Galaxies Selected with WISE and SDSS”, 2017, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 850, 140, 16pp
- 10) Bicknell, G. V., Mukherjee, D., Wagner, A. Y., Nesvadba, N. P. H., Sutherland, S. R., “Relativistic jet feedback II: Relationship to gigahertz peak spectrum and compact steep spectrum radio galaxies” 2018, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 475, 3493–3501
- 11) Mukherjee, D., Wagner, A. Y., Bicknell, G. V., Morganti, R., Oosterloo, T., Nesvadba, N. P. H., Sutherland, S. R., 2018, “The jet-ISM interactions in IC 5063”, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 76, 1, p.80–95
- 12) Furuya, K., Persson, M. V., 2018, “Tracing the atomic nitrogen abundance in star-forming regions with ammonia deuteration”, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 476, 4994
- 13) Furuya, K., Aikawa, Y., 2018, “Depletion of heavy nitrogen in the cold gas of star-forming regions”, *The Astrophysical Journal*, 857, 105
- 14) Aikawa, Y., Furuya, K., Hincelin, U., Herbst, E., 2018, “Multiple paths of deuterium fractionation in protoplanetary disks”, *The Astrophysical Journal*, 855, 119
- 15) Shimonishi, T., Nakatani, N., Furuya, K., Hama, T., 2018, “Adsorption energy of carbon, nitrogen, and oxygen atoms on the low-temperature amorphous water ice: A systematic estimation from quantum chemistry calculations”, *The Astrophysical Journal*, 855, 27
- 16) Megumi Kayanuma; Kaori Kidachi; Mitsuo Shoji; Yu Komatsu; Akimasa Sato; Yasuteru Shigeta; Yuri Aikawa; Masayuki Umemura, 2017, "A theoretical study of the formation of glycine via hydantoin intermediate in outer space environment", *Chemical Physics Letters*, 687, 178-183
- 17) Takashi Ishihara, Naoki Kobayashi, Kei Enohata, Masayuki Umemura, Kenji Shiraishi, 2018, "Dust Coagulation Regulated by Turbulent Clustering in Protoplanetary Disks", *The Astrophysical Journal*, 854, 81, 16 pp

- 18) Akimasa Sato, Yuya Kitazawa, Toshiro Ochi, Mitsuo Shoji, Yu Komatsu, Megumi Kayanuma, Yuri Aikawa, Masayuki Umemura, Yasuteru Shigeta, 2018, “First-principles study of the glycine radical formations from common interstellar species”, *Molecular Astrophysics*, 10, 11-19
- 19) Abe, M., Yajima, H., “Suppression of globular cluster formation in metal-poor gas clouds by Lyman-alpha radiation feedback”, accepted for *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*
- 20) Miki, Y., Umemura, M., 2018, “MAGI: many component galaxy initializer”, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 475, 2269-2281
- 21) Abe, M., Suzuki, H., Hasegawa, K., Semelin, B., Yajima, H., Umemura, M., 2018, “SEURAT: SPH scheme extended with ultraviolet line radiative transfer”, accepted for *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*
- 22) Tagawa, H., Umemura, M., 2018, “Merger of multiple accreting black holes concordant with gravitational wave events”, *The Astrophysical Journal*, 856, 47, 6 pp
- 23) Inoue, Akio K.; Hasegawa, Kenji; Ishiyama, Tomoaki; Yajima, Hidenobu; Shimizu, Ikkoh; Umemura, Masayuki; Konno, Akira; Harikane, Yuichi; Shibuya, Takatoshi; Ouchi, Masami; Shimasaku, Kazuhiro; Ono, Yoshiaki; Kusakabe, Haruka; Higuchi, Ryo; Lee, Chien-Hsiu , 2018, “SILVERRUSH. VI. A simulation of Ly alpha emitters in the reionization epoch and a comparison with Subaru Hyper Suprime-Cam survey early data, submitted to *Publications of the Astronomical Society of Japan*
- 24) Cielo, S., Bieri, R., Volonteri, M., Wagner, A. Y., & Dubois, Y. 2018, “AGN Feedback Compared: Jets versus Radiation”, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* accepted
- 25) Komossa, S., Wu, D. W., & Wagner, A. Y, 2018 “Extreme Gaseous Outflows in Radio- Loud Narrow-Line Seyfert 1 Galaxies” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* submitted
- 26) Takamizu, Y., Chernoff, D., “Collisions of false vacuum bubbles in cylindrical symmetry”, submitted to *Journal of Cosmology and Astroparticle physics*
- 27) Loomis, R. A., Cleeves, L. I., Öberg, K. I., Aikawa, Y., Bergner, J., Furuya, K., Guzman, V. V., Walsh, C., “The Distribution and Excitation of CH<sub>3</sub>CN in a Solar Nebula Analog”, Accepted by *The Astrophysical Journal*

## B) 査読無し論文

- 1) Furuya, K., Isotopic fractionation in interstellar molecules, invited review to appear in “Astrochemistry VII – Through the Cosmos from Galaxies to Planets, *Proceedings of IAU Symposium* 332

- 2) Taquet, V., Furuya, K., Walsh, C., van Dishoeck, E. F., “On the origin of O<sub>2</sub> and other volatile species in comets”, appear in “Astrochemistry VII – Through the Cosmos from Galaxies to Planets, Proceedings of IAU Symposium 332

## (2) 国際会議発表

### A) 招待講演

- 1) Furuya, K., “Evolution of ices and deuteration in forming disks”, Disk formation workshop 2017, July 24-27, 2017, Leiden, Netherlands
- 2) Makito Abe, “Toward the FPGA acceleration of radiative transfer simulations in astrophysics”, CCS-EPCC Workshop, (December 7-8, 2017, University of Tsukuba, Tsukuba, Japan
- 3) Yoshikawa, K., “Vlasov-Poisson simulation of collisionless self-gravitating systems and its application to cosmological neutrinos in the large-scale structure of the universe”, Collisionless Boltzmann (Vlasov) Equation and Modeling of Self-Gravitating Systems and Plasmas, October 30-November 3, 2017, Marseille, France
- 4) Umemura, M., "Hybrid scheme for resonant line transfer", Inverse Problems and Medical Imaging, Feb. 13-16, 2018, University of Tokyo, Japan

### B) 一般講演

- 1) Furuya, K., “Exploring the main nitrogen reservoir in star-forming clouds with ammonia deuteration”, Symposium "Evolution of Molecules in Space", June 27-29, 2017, Hokkaido, Japan
- 2) Furuya, K., “<sup>15</sup>N fractionation mechanism in the ISM”, 2nd ISSI meeting “From qualitative to quantitative: Exploring the early solar system by connecting comet composition to protoplanetary disk models”, January 29-February 2, 2018, Bern, Switzerland
- 3) Umemura, M., Abe, M., Kuki, N., Czuprynski, K. “A Novel Hybrid Scheme for Ly $\alpha$  Line Transfer”, Tokyo Spring Cosmic Lyman-Alpha Workshop, March 27-30, 2018, Tokyo, Japan
- 4) Igarashi, A., “Transonic galactic outflows in starburst galaxies”, Tokyo Spring Cosmic Lyman-Alpha Workshop, March 27-30, 2018, Tokyo, Japan
- 5) Abe, M., Hasegawa, K., Yajima, H., Umemura, M., Inoue, A. “SEURAT: A meshfree Monte Carlo Lyman-alpha line transfer code on SPH for modeling high-z LAEs”, Tokyo Spring Cosmic Lyman-alpha Workshop, March 27-30, 2018, Tokyo, Japan

## (3) 国内学会・研究会発表

### A) 招待講演

- 1) 吉川耕司「6次元ブラソフソルバー：自己重力系と電磁プラズマ系」,ポスト「京」時代の天体形成シミュレーション研究会 (2017年6月26日, 名古屋大学, 名古屋)



- 2) 古家健次, 「原始惑星系円盤内の揮発性物質: 観測とモデル」, 基研研究会「原始惑星系円盤」(2017年7月10日-12日, 京都大学 基礎物理学研究所, 京都)
- 3) 吉川耕司「線形移流方程式・無衝突ボルツマン方程式の数値解法」, 宇宙磁気流体・プラズマシミュレーションサマーセミナー(2017年8月21日-25日, 千葉大学, 千葉)
- 4) Wagner Alexander「Radiation-driven quasar-mode feedback」, 「超巨大ブラックホール研究推進連絡」第5回ワークショップ(2018年1月8日~9日, 東北大学, 仙台)

## B) その他の発表

- 1) 安部牧人, SPH 粒子データを直接用いた Ly $\alpha$  輻射輸送計算コードの開発, 第4回銀河進化研究会, (2017年6月7~9日, 大阪大学, 大阪)
- 2) 三木洋平, 『銀河ハロー中を漂う中間質量ブラックホール探査』, 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 第9回 シンポジウム, ポスター(2017年7月13~14日, THE GRAND HALL, 品川, 東京)
- 3) 梅村 雅之, 「原始惑星系円盤乱流とダスト成長」, ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星アプリケーション開発状況共有ワークショップ(2017年8月12日, 神戸大学 CPS, 神戸)
- 4) 栢沼 愛, 「第一原理計算による星間分子の反応機構の解明」, ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星 アプリケーション開発状況共有ワークショップ(2017年8月12日, 神戸大学 CPS, 神戸)
- 5) 安部牧人, SEURAT コードを用いた高赤方偏移 LAE の輻射輸送計算, CHORUS+Galaxy+IGM 研究会, 東京理科大学長万部キャンパス, 2017年9月8~10日
- 6) 櫻井幹記, 古谷眸, 小林直樹, 岡本直也, 石原卓, 白石賢二, 梅村雅之, 「原始惑星系円盤乱流場中のダスト粒子運動: 非圧縮性乱流と圧縮性乱流の比較」, 日本天文学会 2017年秋季年会(2017年9月11日~13日, 北海道大学, 札幌)
- 7) 濱端航平, 石原卓, 白石賢二, 梅村雅之, 「乱流の直接数値計算を用いた原始惑星系円盤中の岩石ダストの衝突付着成長シミュレーション」, 日本天文学会 2017年秋季年会(2017年9月11日~13日, 北海道大学, 札幌)
- 8) 高橋芳太, 梅村雅之, 「相対論的流体における因果律を保った光子多重散乱の効果」, 日本天文学会 2017年秋季年会(2017年9月11日~13日, 北海道大学, 札幌)
- 9) 郷田直輝, 辻本拓司, 矢野太平, 上田暁俊, 宇都宮真, 鹿島伸悟, 間瀬一郎, 亀谷收, 浅利一善(国立天文台), 山田良透, 吉岡諭, 穂積俊輔, 梅村雅之, 西亮一, 浅田秀樹, 長島雅裕, 石村康生, 中須賀真一, 酒匂信匡, ほか JASMINE ワーキンググループ一同, 「Nano-JASMINE と小型 JASMINE の進捗概要」, 日本天文学会 2017年秋季年会(2017年9月11日~13日, 北海道大学, 札幌)

- 10) 松田有一, 伊王野大介, 川邊良平, 久保真理子, 中西康一郎, 太田耕司, 長尾透, 山田亨 (JAXA), 斎藤智樹, 林野友紀, 廿日出文洋, 加藤裕太, 河野孝太郎, 小野宜昭, 大内正己, 梅村雅之, 森正夫, 田村陽一, 谷口義明, 梅畑豪紀, 五十嵐創, 「アルマ望遠鏡による  $z=3$  巨大水素ガス天体のサブミリ連続波観測」, 日本天文学会 2017 年秋季年会 (2017 年 9 月 11 日~13 日, 北海道大学, 札幌)
- 11) 三木洋平, 梅村雅之, 「銀河の多成分力学平衡分布生成コード MAGI の開発」, 日本天文学会 2017 年秋季年会 (2017 年 9 月 11 日~13 日, 北海道大学, 札幌)
- 12) 安部牧人, 長谷川賢二, Benoit Semelin, 矢島秀伸, 梅村雅之, 「SPH 粒子データを直接利用した Lyman-alpha 輻射輸送計算コードの開発」, 日本天文学会 2017 年秋季年会 (2017 年 9 月 11 日~13 日, 北海道大学, 札幌)
- 13) 桐原崇亘, 梅村雅之, 森正夫, 長谷川賢二, 石山智明, 鈴木尚孝, 大内正己, 「低赤方偏移銀河間物質の観測による初代星起源金属汚染の検出可能性」, 日本天文学会 2017 年秋季年会 (2017 年 9 月 11 日~13 日, 北海道大学, 札幌)
- 14) 吉川耕司, 「Vlasov-Poisson シミュレーションによる宇宙大規模構造形成におけるニュートリノの力学的影響」, 日本天文学会 2017 年秋季年会 (2017 年 9 月 11 日~13 日, 北海道大学, 札幌)
- 15) 吉川耕司, 「Vlasov-Poisson simulation of cosmic neutrinos in the large-scale structure formation in the universe」, 研究会「天体形成論 ~過去・現在・未来~」 (2017 年 9 月 19 日~21 日, 筑波大学 大学会館ホール, つくば)
- 16) 古家健次, 「Astrochemical simulations」, 宇宙生命計算科学連携拠点第 3 回ワークショップ (2017 年 11 月 20 日~21 日, 筑波大学, つくば)
- 17) 五十嵐朱夏, 森正夫, 新田伸也, 「遷音速銀河風モデルと星形成銀河への応用」, 研究会「天体形成論 ~過去・現在・未来~」, (2017 年 9 月 19~21 日, 筑波大学, つくば)
- 18) 梅村雅之, 「宇宙物理学における輻射輸送計算の光診断学への適用」, 計算メディカルサイエンス・キックオフシンポジウム (2018 年 2 月 26 日, 筑波大学計算科学研究センター, つくば)
- 19) 郷田直輝, 辻本拓司, 矢野太平, 上田暁俊, 宇都宮真, 鹿島伸悟, 間瀬一郎, 亀谷收, 浅利一善, 山田良透, 吉岡諭, 穂積俊輔, 梅村雅之, 西亮一, 浅田秀樹, 長島雅裕, 石村康生, 中須賀真一, 酒匂信匡, ほか JASMINE ワーキンググループ一同, 「Nano-JASMINE と小型 JASMINE の全体的進捗」, 日本天文学会 2018 年春季年会 (2018 年 3 月 14~17 日, 千葉大学, 千葉)
- 20) 小島崇史, 大内正己, 林将央, 矢部清人, 梅村雅之, 天笠俊之, 北川博之, 他 10 名 (HSC project 251), 「HSC-SSP データと Deep Learning で探る極金属欠乏銀河」, 日本天文学会 2018 年春季年会 (2018 年 3 月 14~17 日, 千葉大学, 千葉)

- 21) 加藤裕太, 松田有一, 伊王野大介, 川邊良平, 久保真理子, 但木謙一, 田中壺, 中西康一郎, 太田耕司, 長尾透, 山田亨, 斎藤智樹, 林野友紀, 廿日出文洋, 河野孝太郎, 小野宜昭, 大内正己, 梅村雅之, 森正夫, 田村陽一, 谷口義明, 梅畑豪紀, 五十嵐創, 「アルマ望遠鏡による SSA22-LAB18 の CO(J=4-3) 輝線と 3 mm 連続波観測」, 日本天文学会 2018 年春季年会 (2018 年 3 月 14~17 日, 千葉大学, 千葉)
- 22) 五十嵐朱夏, 森正夫, 新田伸也, 「遷音速銀河風モデルと星形成銀河への応用」, 日本天文学会 2018 年春季年会 (2018 年 3 月 14~17 日, 千葉大学, 千葉)
- 23) 藤原隆寛, 森正夫, 「Integral Approach を用いた新しい Godunov SPH 法の開発」, 日本天文学会 2018 年春季年会 (2018 年 3 月 14~17 日, 千葉大学, 千葉)
- 24) 桐原崇亘, 三木洋平, 森正夫, 他, 「アンドロメダ銀河 North-Western ストリームの形成過程」, 日本天文学会 2018 年春季年会 (2018 年 3 月 14~17 日, 千葉大学, 千葉)
- 25) 小宮山裕, 千葉柁司, 田中幹人, 田中賢幸, 桐原崇亘, 三木洋平, 森正夫, 他, 「Hyper Suprime-Cam で探るアンドロメダ銀河の恒星ストリームとハロー構造」, 日本天文学会 2018 年春季年会 (2018 年 3 月 14~17 日, 千葉大学, 千葉)
- 26) 古家健次, 相川祐理「星形成領域における窒素同位体分別過程」, 日本天文学会 2018 年春季年会 (2018 年 3 月 14~17 日, 千葉大学, 千葉)
- 27) 安部牧人, 「背景紫外線輻射場によって制御される星団形成過程の 3 次元輻射流体力学による研究」, 東北大学天文学教室談話会 (2017 年 10 月 23 日, 東北大学, 仙台)
- 28) 安部牧人, 「輻射輸送・拡散方程式結合スキームによる Lyman-alpha line transfer の加速」, 初代星・初代銀河研究会 (2018 年 2 月 10~12 日, 広まちづくりセンター, 呉)

#### (4) 著書, 解説記事等

- 1) 森正夫, 「地球と生命, 宇宙の全歴史」, Newton 6 月号増刊, 2017 年 5 月 18 日
- 2) 古家健次, 「重水素比から探る, 星・惑星形成領域における水の生成と輸送」, 天文月報 2018 年 1 月号
- 3) 森正夫, 「銀河のすべて」, ニュートン別冊, 2017 年 12 月 18 日
- 4) 吉川耕司, 「宇宙空間に広がる素粒子の運動を探る - ブラソフ方程式の高精度シミュレーション」, academist Journal, 2018 年 1 月 4 日

#### 7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

- 1) LBNL/CRD - TSUKUBA/CCS Meeting, April 20-21, 2017, Lawrence Berkeley National Laboratory, USA, (April 20-21, 2017) (Miki)

- 2) “Recent Activities in CCS”, CCS-EPCC Workshop, University of Tsukuba, (December 7-8, 2017) (Umemura)
- 3) “Toward the FPGA acceleration of radiative transfer simulations in astrophysics”, CCS-EPCC Workshop, University of Tsukuba (December 7-8, 2016) (Abe)
- 4) “Vlasov simulations of collisionless self-gravitating systems and astrophysical plasmas”, CCS-EPCC Workshop, University of Tsukuba (December 7-8, 2016) (Yoshikawa)

## 8. シンポジウム, 研究会, スクール等の開催実績

- 1) 研究会開催「天体形成論 ～過去・現在・未来～」2017年9月19日(火)～21日(木), 筑波大学・大学会館ホール
- 2) 研究会開催「天体形成研究会」2017年10月13日(金), 14日(土), 筑波大学・計算科学研究センターワークショップ室
- 3) 研究会開催「宇宙生命計算科学連携拠点第3回ワークショップ」2017年11月20日(月), 21日(火), 筑波大学・計算科学研究センター会議室 A

## 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

#### 【本部】

教育研究評議会委員  
人事企画委員会委員  
任用部会委員  
研究推進会議委員  
情報環境委員会委員  
全学年俸制教員評価実施委員会委員

#### 【系・センター】

計算科学研究センター センター長  
計算科学研究センター 運営委員会委員長  
計算科学研究センター 人事委員会委員長  
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  
数理物質系人事委員会総会委員  
物理学域 運営委員会委員  
物理学域 宇宙物理理論グループ長

・森正夫

ハラスメント防止対策委員

アドミッションセンター専門委員

スポーツデー運営委員

カリキュラム委員会委員

物理学類 3 年担任

計算科学研究センター共同研究委員会学内委員

学際計算科学連携室室員

PPX2 システム調達仕様策定委員

**10. 社会貢献・国際貢献**

・梅村雅之

竹園東小学校講演会「宇宙の旅」, 2017 年 10 月 24 日

日本天文学会欧文研究報告編集顧問

国立天文台理論専門委員会委員長

**11. その他**

1) 海外長期滞在, 三木洋平, Institut d'Astrophysique de Paris, France, (April 26—May 16, 2017)

### III. 原子核物理研究部門

#### 1. メンバー

教授	中務 孝、矢花一浩（量子物性部門兼務）
講師	橋本幸男
助教	日野原伸生（国際テニユアトラック）
研究員	鷺山広平、野村昂亮（PD 学振：2017.10 転出）、Guillaume Scamps
学生	大学院生 5 名（うち特別研究学生 1 名）

#### 2. 概要

本部門では、核子（陽子・中性子）の多体系である原子核や中性子星の構造・反応・応答などの多核子量子ダイナミクスの研究を推進している。安定線（ハイゼンベルグの谷）から離れた放射性アイソトープの原子核の構造と反応、エキゾチックな励起状態の性質、様々な集団運動の発現機構など、未解決の謎の解明に取り組んでいる。原子核の研究は、フェルミ粒子の量子多体系計算という観点で、物質科学や光科学、冷却原子系の物理と密接なつながりをもつ。また、クォーク・グルーオンのダイナミクスを記述する格子 QCD に基づく核力の計算、軽い原子核の直接計算などが進展する中、素粒子物理学との連携も重要性が増している。ニュートリノの解明に向けたニュートリノレス二重ベータ崩壊の観測実験や、素粒子標準模型のテストに関わる実験などにも原子核理論の精密計算が不可欠とされている。また、元素の起源や星の構造、中性子星の誕生にも関わる爆発的天体現象にも原子核の性質は深く関わり、宇宙物理学とも密接に関係している。さらに、原子力工学分野や応用分野との連携が重要になってきており、本部門でも 2014 年から、原子炉の高レベル廃棄物の資源化・低減化を最終目的とする ImPACT プログラムに参加し、基礎データへの理論的サポートを行ってきている。本部門のメンバーは、このような幅広い課題に取り組み、分野の枠を超えた研究を推進している。

#### 3. 研究成果

##### 【1】 元素合成アルファ過程とサブバリア核融合反応に対する微視的アプローチ（温（サリ一太）、中務）

太陽よりもはるかに重い大質量星の内部では、ヘリウム原子核（アルファ粒子）を種としたアルファ過程と呼ばれる元素合成が進行すると考えられている。これらの過程は、クーロン相互作用で反発する原子核同士を融合させる反応であるが、クーロンポテンシャルの障壁

を量子トンネル効果ですり抜けることで核融合を実現させている。我々は、この問題に対する微視的アプローチとして、大振幅集団運動の理論である断熱自己無撞着集団座標法 (ASCC 法) を用いた手法を開発してきた。原子核一般を記述するエネルギー密度汎関数を出発点として、何

の仮定も置かず、低エネルギーの多核子反応ダイナミクスを記述する最適な反応経路を導出する。虚時間発展法と有限振幅法を

## 【2】 原子核形状の系統的計算 (江幡 (北大)、中務)

原子核の形を系統的に調査するため、エネルギー密度汎関数に BCS 理論を組み合わせた理論を 3 次元空間表示によって計算し、基底状態に現れる形状を予言した。完全自己無撞着・非制限の計算であり、全エネルギーを最小化することを条件として課した変分により、球形、軸対称性を持ったプロレート型・オブレート型変形、軸対称性を破った三軸非対称変形など、様々な形状が基底状態に出現した。特に核図表の上で、 $84 < N < 88$ 、 $54 < Z < 70$ の領域、 $130 < N < 136$ 、 $84 < Z < 92$ の領域にはパリティ対称性を自発的に破った八重極変形が現れることが示された。これらは実験データや過去の別の手法に基づく計算と矛盾しない結果である。今回は、これらに加えて、 $130 < N < 136$ 、 $60 < Z < 70$ といった中性子過剰領域にも八重極変形が現れることを予言した (図 2)。

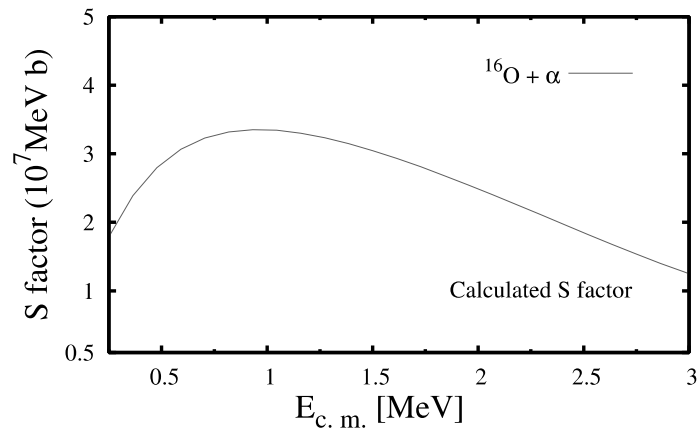


図 1:  $^{16}\text{O} + \alpha \rightarrow ^{20}\text{Ne}$  の核融合反応に対して計算された astrophysical S 因子。横軸は重心系での衝突エネルギーで単位は MeV。

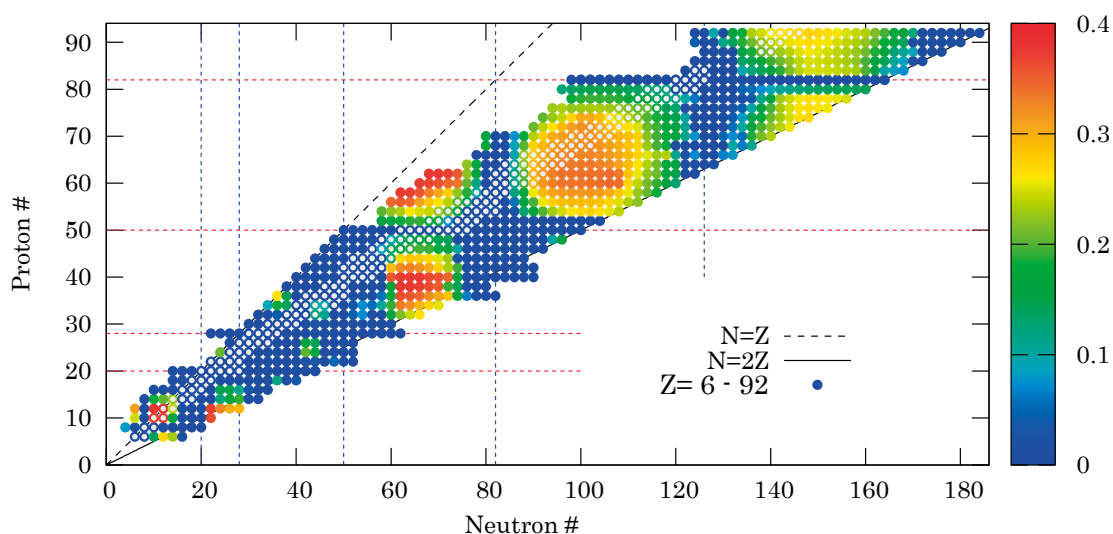


図 2: 原子核の四重極変形の度合いを表すパラメータ $\beta_2$ の大きさを核図表の上に色分けで図示したもの。青が球形を表し、赤は大きく変形した原子核を表している。白抜きで表示されたものは自然界に存在する安定核。

### 【3】 対振動状態における集団座標（倪（D2）、中務）

原子核の励起状態の中で、スピン・パリティが $0^+$ の状態にはその性質が解明されていない状態が多く存在する。その鍵を握っていると考えられる対相関の集団ダイナミクスを研究するため、これまで厳密解を求めることができる対相関模型（リチャードソン模型）を用いた研究を行ってきた。今年度は特に、集団模型の微視的導出とその量子化に関する研究を行った。対振動状態は、ゲージ対称性を破る秩序パラメータであるエネルギー・ギャップの大きさが揺らぐ（振動する）集団的状态であると解釈することができるが、現実的な原子核においては、比較的集団性が小さいため、通常正準量子化を用いた集団模型の量子化ではうまく記述できないことが多い。この問題点を解決することを目標に、時間依存ダイナミクスのフーリエ分解、経路積分法に基づく準古典量子化などを試みて、厳密解と比較した。この結果、経路積分に基づく準古典量子化法が、弱相関から強相関、関与する粒子数の多少に関わらず全ての領域において、厳密解と近い励起エネルギーおよび2粒子遷移確率を再現することを示した（図3）。現在、この手法の拡張と現実的な系への応用を進めている。



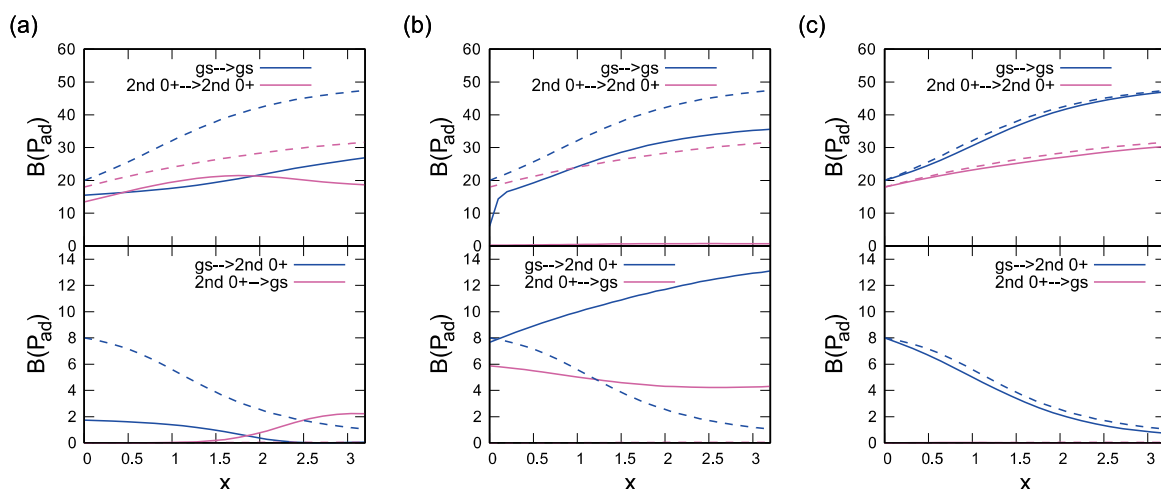


図3: 対相関モデルでの2粒子移行反応に関わる行列要素の計算 (粒子数が6から8への遷移)。集団ハミルトニアンの量子化法として、(a) 正準量子化法、(b) フーリエ分解法、(c) 経路積分準古典近似法を用いた結果を示す。点線が厳密計算の結果を示している。

#### 【4】 中性子星内殻における1次元周期構造と有効質量 (柏葉 (D1)、中務)

中性子星の内殻 (インナー・クラスト) と呼ばれる表面に近い領域では、中性子の海の中に原子核が周期的に配置された構造を取ると予想されている。中心に近づいていくと、やがて一様な核物質になると考えられるが、その直前には、パスタ相と呼ばれる奇妙な形の原子核が現れると考えられている。その中でも、スラブ相 (ラザーニャ相) と呼ばれる板状の原子核が現れる領域があると予想されており、昨年度、このスラブ相に対して、厳密な境界条件を考慮した完全自己無撞着な密度汎関数計算を実行することに成功した。固体物理で行われているバンド計算を、自己無撞着に核子自身が作り出した周期的ポテンシャルの中での核子 (陽子・中性子) の運動に応用したもので、自己無撞着な計算は世界初の成果である (図4)。様々な密度における計算を実行し、周期的ポテンシャルがもたらすブラッグ散乱の効果である巨視的な有効質量を求めた。その結果、内殻中で原子核からこぼれ落ちた中性子の一部は、原子核に引きずられており、有効質量が真空中の中性子質量に比べて5%から10%程度大きくなることが分かった。この有効質量の効果は、中性子星パルサーに観測されているグリッチの微視的メカニズムに関連して注目されている。特に、クラストに存在する超流動中性子の渦糸ダイナミクスに起源を求める解釈に対して、非常に大きな影響がある。

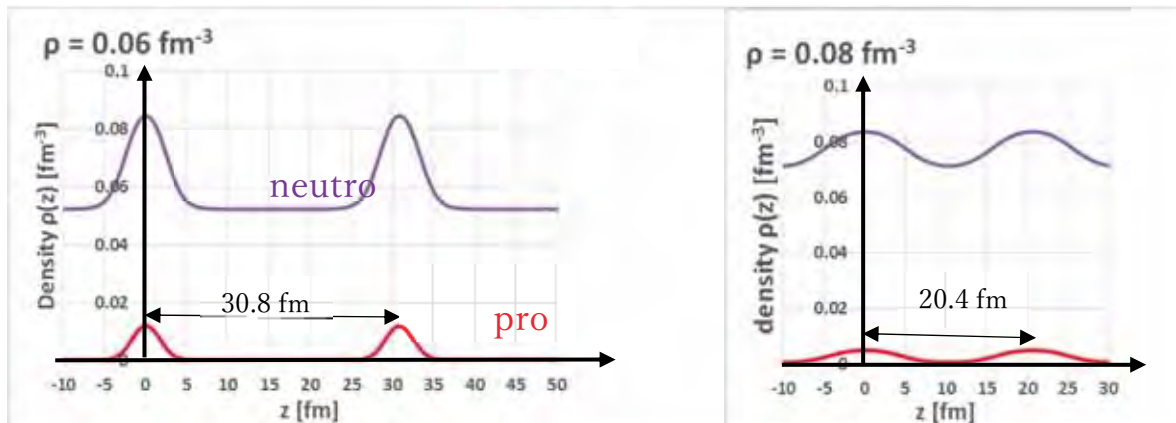


図 4: 中性子星インナー・クラストにおける板状の原子核が並んだスラブ相に対する密度汎関数バンド計算。左が平均核子密度  $\rho = 0.06 \text{ fm}^{-3}$ 、右が  $\rho = 0.08 \text{ fm}^{-3}$  に対する結果、中性子および陽子の密度分布を板に垂直な方向を  $z$  軸としてプロット。密度が大きくなることによってスラブ間隔が小さくなり、一様な核物質に近づいていることがわかる。

#### 【5】 5次元集団模型による解析と結合チャンネルへの拡張（八百板（M2）、中務）

ボーア・モッテルソンの 5 次元集団模型は、静的・動的な四重極変形と回転運動を記述できる模型として、原子核の低エネルギー・スペクトルに成功した模型である。様々なデータが近年蓄積されたことで、振動・回転の単純な描像では説明できない状態が多々あることが指摘されている。その中の一つが変形核におけるベータ振動状態である。E2 遷移強度の非対称性や核子対移行反応などのデータから、平衡変形周りの変形度の振動という伝統的解釈に疑問が投げかけられている。我々は 5 次元集団模型を用いて、ベータ振動状態の性質を精査した。その結果、形状揺らぎの大きな遷移領域においては、実験データの E2 強度の振る舞いは模型の予言と矛盾しないことを明らかにした。また、模型の拡張にも取り組み、5 次元空間ポテンシャルに多重シートが存在する場合を想定した結合チャンネル型の集団模型を開発し、簡単な場合を例に数値解析を実行した。その結果として、断熱・透熱型のダイナミクスを記述できることを確認した。

【6】 アイソスピン不変な原子核密度汎関数による中性子—陽子対相関（日野原、Sheikh（カシミア大）、Nazarewicz（ミシガン州立大））

核内の核子は基底状態ではクーパー対を形成し、対凝縮状態となっていることが多いが、中性子と陽子のフェルミエネルギーが異なることから、通常は同種粒子対が凝縮する。一方で陽子過剰不安定核のような中性子と陽子のフェルミエネルギーが近い場合においては中性子—陽子対が凝縮する可能性が議論されている。中性子—陽子対凝縮についてはこれまでは簡単な模型計算による議論のみであり、原子核密度汎関数法に中

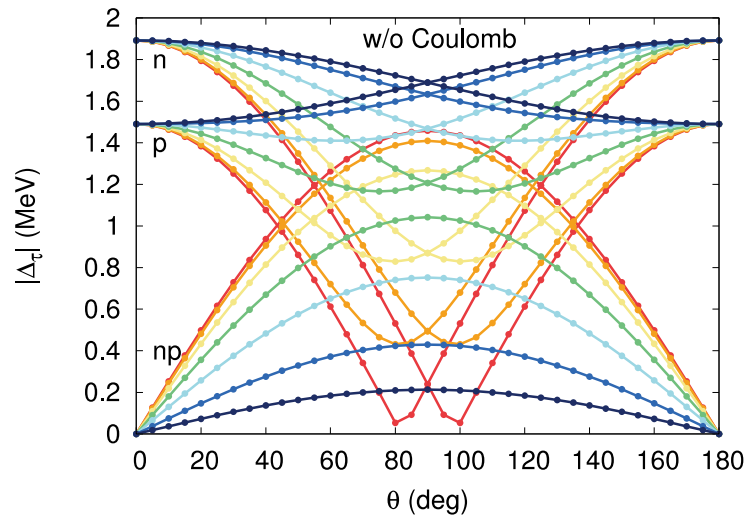


図 5:  $A = 48$ ,  $T = 4$ でのアイソバリック・アナログ状態での対ギャップのアイソスピン回転での変化。色は最高重み状態( $\theta = 0^\circ$ )での相対ゲージ角に対応する。

性子—陽子対密度汎関数を入れたような実際的なものはなかった。中性子と陽子をアイソスピンの固有状態とし、アイソスピン回転に対して不変な局所密度による汎関数の定式化を用いて、軸対称変形を扱える原子核密度汎関数計算コード HFBTHO への中性子—陽子対相関の実装を行った。これまでにアイソベクトル型の対相関（中性子対、陽子対、中性子—陽子対）の実装を完了した。アイソバリック・アナログ状態を、同種粒子対凝縮したアイソスピンの最高重み状態 ( $T = T_z$ ) からのアイソスピン空間での回転として表現したときに、3つのアイソベクトル型の対相関がどのように出現するのかを分析した（図 5）。 $T = T_z$ での中性子対相関、陽子対相関の相対ゲージ角のとり方にアイソベクトル型中性子—陽子対相関が強く依存するが、アイソスピン対称性のため異なった中性子—陽子対相関を持った解が無限に縮退することを示した。この縮退は、アイソスピン対称性を破る Coulomb 力の汎関数を加えることによって破れることも示した。続いて中性子—陽子対相関が存在する場合に中性子および陽子の化学ポテンシャルをラグランジュ未定乗数として決定できるようにコード開発を行った。これを用いることで陽子過剰核の基底状態での対凝縮の計算が実行可能となった。

**【7】 巨大共鳴のベンチマーク計算（日野原、Kortelainen（ユバスキュラ大）、Nazarewicz（ミシガン州立大））**

原子核密度汎関数の結合定数は既知の基底状態の実験データや核物質の性質と整合性を持つように現象論的に決定される。米国 UNEDF プロジェクトでは多くの原子核の束縛エネルギーや荷電半径などの実験データを用いた結合定数の最適化が行われた。しかしながらアイソベクトル有効質量などの一部の結合定数は、基底状態の実験データとあまり相関がなく最適化

できていない。励起状態の情報も用いることでこれらの基底状態量と相関が弱い結合定数も決定できる可能性がある。励起状態を代表する量としては、多重極巨大共鳴のピークエネルギーがあるが、まずは有限振幅法を用いて現在広く使われている原子核密度汎関数を用いたベンチマーク計算を、実験データが確立している二重閉殻  $^{40,48}\text{Ca}$ 、 $^{56}\text{Ni}$ 、 $^{90}\text{Zr}$ 、 $^{132}\text{Sn}$ 、 $^{208}\text{Pb}$  で行った（図 6）。特に、UNEDF2 汎関数は多くの Skyrme EDF には入っていないテンソル密度汎関数を含んでいるため、この場合の線形応答が計算できるように有限振幅法計算コードの拡張を行った。また、効率的に結合定数を決定するためには和則比によって巨大共鳴ピークエネルギーの評価を行うことが望まれるが、どの原子核のどのモードにおいて、実験データと和則比の対応がよいかの系統的な分析を行った。

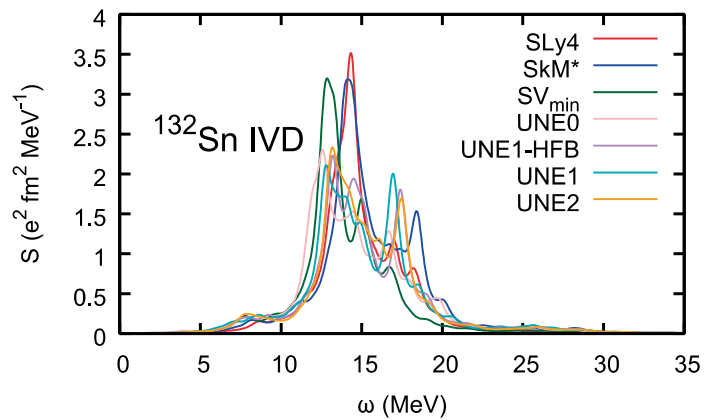


図 6: 様々な原子核密度汎関数を用いて計算した  $^{132}\text{Sn}$  のアイソベクトル双極子巨大共鳴の強度関数。

**【8】 二重ベータ崩壊原子核行列要素の精密計算に向けて（日野原、Engel（ノースカロライナ大））**

二重ベータ崩壊探索実験により電子ニュートリノの有効質量を決定するために必要な原子核行列要素の計算を、生成座標法を用いて行っている。これまでに pf 殻領域の軽い原子核 (Ti, Cr) での中性子-陽子対相関力による原子核行列要素の抑制を系統的に調べてきたが、実験が行われている  $^{48}\text{Ca} \rightarrow ^{48}\text{Ti}$  では始状態の重要な生成座標法の基底が二重閉殻となっており、これまでに基底間の重なり積分計算で用いてきた Neergård-Wüst の方法が使えない (Bogoliubov 変換に対応する行列の逆行列を計算する必要があるが、閉殻ではこの行列にゼロ固有値が存在するため)。Bogoliubov 変換の行列に Bloch-Messiah 分解を行うことで固有値を分離し、それらに非常に小さい値を加えることによってゼロ固有値の問題を回避するとい

う最近提唱された処方 (Gao et al., PLB (2014)) を実装し、この問題を回避することができた。現在  $^{48}\text{Ca}$  の原子核行列要素の計算を進めているが、中性子-陽子対相関力のみの場合では、殻模型計算から予想されるほど行列要素が抑制されないという計算結果を得ている。

また、原子核密度汎関数法を用いた二重ベータ崩壊の行列要素を計算するために、有限振幅法を用いた定式化を行った。準粒子乱雑位相近似による行列要素の計算では、大次元の行列対角化を行う必要があるが、有限振幅法を用いることによって、反復法によって複素エネルギーを用いた応答関数を計算し、これを二重複素積分することによって効率的に計算できることを示した。遷移演算子が簡単な二重 Gamow-Teller 遷移や 2 つのニュートリノを放出する二重ベータ崩壊原子核行列要素はこの方法によって効率的に計算することができることが期待される。

### 【9】 超流動原子核の衝突から融合に至る過程の分析 (橋本)

昨年度までの時間依存 Hartree-Fock-Bogoliubov (TDHFB) による超流動原子核同士の衝突のシミュレーション (酸素  $^{20}\text{O} + ^{20}\text{O}$ ) において、二つの原子核の接触から融合に至る比較的短い時間の間に対相関エネルギーが滑らかに減少するが完全にゼロにはならない、という現象がみられた。この相対距離の領域においては、巨視的な摩擦係数が急速に増大し相対運動から内部励起・核子運動へとエネルギーの流れが生まれることが考えられた。この状況にある TDHFB の波動関数の構造とエネルギーの流れの微視的な背景を理解するために、硫黄  $^{40}\text{S}$  を二つの  $^{20}\text{O}$  に断熱的に分裂させる過程を考え、その途中の波動関数を参照として融合過程にある TDHFB

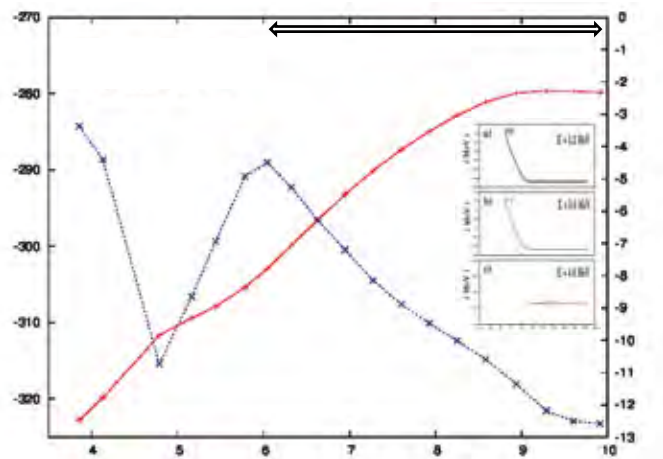


図 7: 硫黄  $^{40}\text{S}$  を 2 個の酸素  $^{20}\text{O}$  に分裂させる拘束条件付き HFB 計算。全エネルギー (赤線; 左スケール (MeV)) と対相関エネルギー (青線; 右スケール (MeV)) が分離距離 (fm) により変化する様子。挿入図は、酸素  $^{20}\text{O}$  同士の衝突における対相関エネルギーと相対距離の関係を TDHFB で計算したもの (3 種類の加速エネルギーについて)。

の波動関数を調べる方法をとった。対称分裂は  $z = 0$  平面の左右の“部分系”のそれぞれの重心の間の距離を拘束条件とする HFB 計算により実行した。図 7 には、重心間距離と全エネルギー・対相関エネルギーの関係を示した。図中の黒い矢印が酸素  $^{20}\text{O}$  核の衝突の時の接触から融合への重心間距離の変化範囲である。エネルギー・対相関エネルギーのカーブから、

相対距離が 6 fm 付近に構造変化による“障壁”があるように見える。今後は、これらの構造変化を TDHFB 軌道を用いて詳しく調べていく。

### 【10】 3次元空間上の有限振幅法の開発（鷲山、中務）

本研究の目的は、小規模数値計算で非軸対称超流動原子核の低励起状態の性質を密度汎関数法に基づく準粒子乱雑位相近似 (QPRA) 法で評価することである。質量数 100 前後の原子核では、低励起エネルギー領域で複数の変形状態が共存し、陽子数・中性子数の変化に伴い基底状態や低励起状態が急激な構造変化を示すことが知られている。このような原子核を大振幅集団運動の観点から理解するために我々は密度汎関数法による四重極集団模型の構築を目指している。その集団ハミルトニアンに現れる集団質量を密度汎関数法に基づく QPRA 法で評価するには非軸対称変形核に対する QRPA 計算が必要である。これ

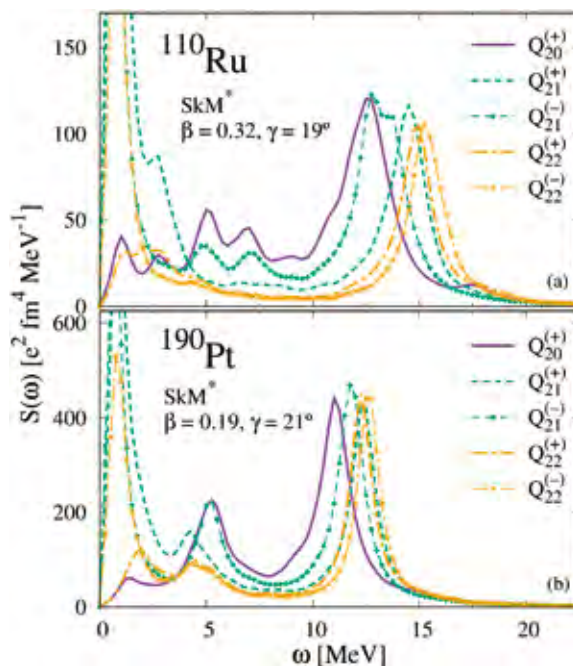


図 8: アイソスカラー型四重極 ( $Q_{2K}$ ) 外場に対する各  $K$  量子数に対する強度関数。

が大規模数値計算となるため、これまでの QRPA 計算は球形及び軸対称変形核への応用に限られてきた。近年、大規模数値計算の要因である大次元の QRPA 行列要素の計算とその対角化を回避して外場に対する原子核の線形応答を記述する有限振幅法 (FAM) が提案された。本研究では、昨年度に引き続き非軸対称変形を扱うための 3 次元空間 FAM-QRPA 計算の数値計算コードの開発を行なった。まず、先行研究の軸対称 FAM で得られた強度関数とのベンチマークを行ない本研究で開発したコードの妥当性を確認した。次に、非軸対称超流動原子核  $^{110}\text{Ru}$ 、 $^{190}\text{Pt}$  のアイソスカラー型四重極応答 ( $Q_{2K}$ ) に応用し、四重極演算子の  $K$  量子数に対する強度関数の分離とゼロエネルギー近傍での回転の spurious mode を得た (非軸対称核の 3 軸それぞれの周りでの回転)。さらに、比較的小規模の計算時間で非軸対称核の強度関数を得た (図 8)。

### 【11】 FAM-QRPA による回転の慣性モーメントの評価（鷲山、中務）

上述した FAM-QRPA 法を用いて集団ハミルトニアンの集団質量の評価を行なった。その際、角運動量演算子を外場とした FAM-QRPA のゼロエネルギーでの強度関数が回転に対す

る慣性モーメントに対応することを用いた。変形核の慣性モーメントを異なる二つの手法、FAM-QRPA 法と cranking HFB 法、で同一の慣性モーメントが得られたこと、先行研究の軸対称変形核 FAM-QRPA 計算との比較、により我々の計算の妥当性を確認した。次に、 $^{106,108}\text{Pd}$ 、 $^{80}\text{Se}$  等に対して各四重極変形度で拘束条件付の FAM-QRPA 計算を実行し、各変形度での慣性モーメントの評価を行なった。従来の密度汎関数法による四重極集団模型で用いられたクラッキング法による慣性モーメントに比べて有意な増加 (10-30%) が得られた。また、慣性モーメントの値が対相関のパラメータに強く依存することが分かった。

#### 【12】 重イオン散乱の微視的光学ポテンシャルの評価 (蓑茂 (阪大)、鷺山、緒方 (阪大))

核子当たり数十～数百 MeV の重イオン散乱では散乱系の光学ポテンシャルの評価が重要である。これまで巨視的な現象論的光学ポテンシャルが広く使われてきたが、近年は微視的畳み込み模型 (微視的模型で計算した散乱核の密度を有効相互作用で畳み込み光学ポテンシャルを構築する模型) が発展している。この模型は現象論的に決定するパラメータが無く、実験データが存在しない不安定核を用いた反応に適用できる。我々はそこで使われる近似 (多重散乱理論での反対称化因子および局所化の手法) を再評価した。畳み込み模型には、原子核の密度として Skyrme 型密度汎関数法を用い、有効相互作用として Melbourne g 行列を用いた。微視的模型における上記近似の妥当性を広い質量領域の核子-原子核散乱で調べた結果、核子当たり 25MeV 以上のエネルギー領域で良い近似であることを確認した。

この手法を基に、核図表の全領域の原子核に対して核子-原子核、原子核-原子核散乱の微視的光学ポテンシャル及び弾性散乱断面積を構築して、大阪大学核物理研究センターサーバー上で公開している。そこでは、入射核と標的核、入射エネルギーを指定すると微視的光学ポテンシャルと弾性散乱断面積や反応断面積が計算できる。現在、この操作をインタラクティブに行なえるウェブサイトを構築中である。

【13】 Gogny 力に基づいた IBM ハミルトニアンによる核構造計算（野村、Rodriguez-Guzman（クウェート大）、Robledo（マドリード自治大））

核子多体系の微視的理論である密度汎関数理論 DFT に基づいた相互作用するボソン模型 IBM の枠組みにおいて、原子核の集団励起を記述する研究を行った。特に、Gogny 型密度汎関数を用いた DFT 平均場計算から IBM ハミルトニアンを導き、不安定核ビームを用いた実験研究において重要な、中性子過剰 Ge、Se、Kr 同位体の分光学的性質を記述した（図 9）。核子数の変化に伴う原子核形状と励起状態の遷移、いわゆる量子相転移と、異なる変形状態の共存（変形共存）状態を系統的に調べ、それらを特徴付ける励起状態エネルギーや電磁遷移などの物理量を計算した。理論的予言も行い、将来の不安定核実験のための重要な指針となる。

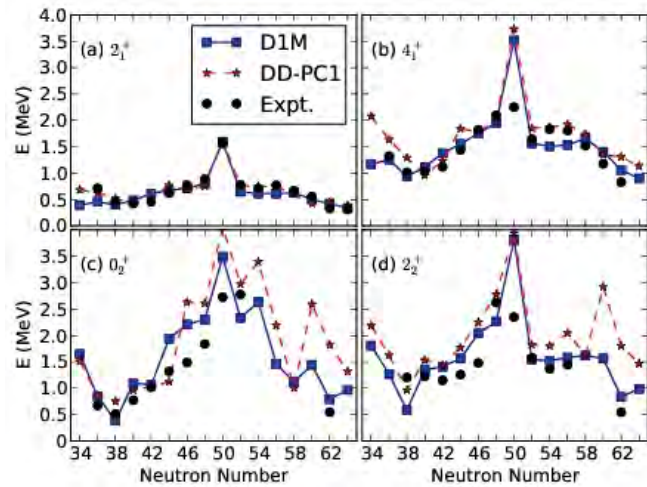


図 9: 偶偶核 Kr 同位体の励起スペクトル。

【14】 偶奇核の分光学的性質に関する研究（野村、Vretenar（ザグレブ大）、Niksic（ザグレブ大）、Rodriguez-Guzman（クウェート大）、Robledo（マドリード自治大））

上記の方法を偶奇核に拡張する研究にも取り組んだ。具体的には、偶偶核をコアとしてそれに単一核子の自由度を加え、両者間の相互作用を DFT 計算に基づいて決定する。今年度は、Ba、Xe などの、偶偶核コアが非軸対称変形した奇核の分光学的性質、特に量子相転移の秩序変数と考えられるいくつかの物理量の計算、および八重極変形の自由度を含んだ場合（中性子過剰 Ba 同位体）の分光学的計算に取り組んだ（図 10）。偶奇核構造の理解はベータ崩壊などの基本的な崩壊過程の記述にも不可欠である。近年、これらの分光学的性質に関する多くの実験データが生み出されている一方、それらの微視的かつ系統的な記述は、特に中重核領域では理論的に非常に困難である。本研究で開発した手法は、中重領域の偶奇核構造への有力なアプローチの一つといえる。



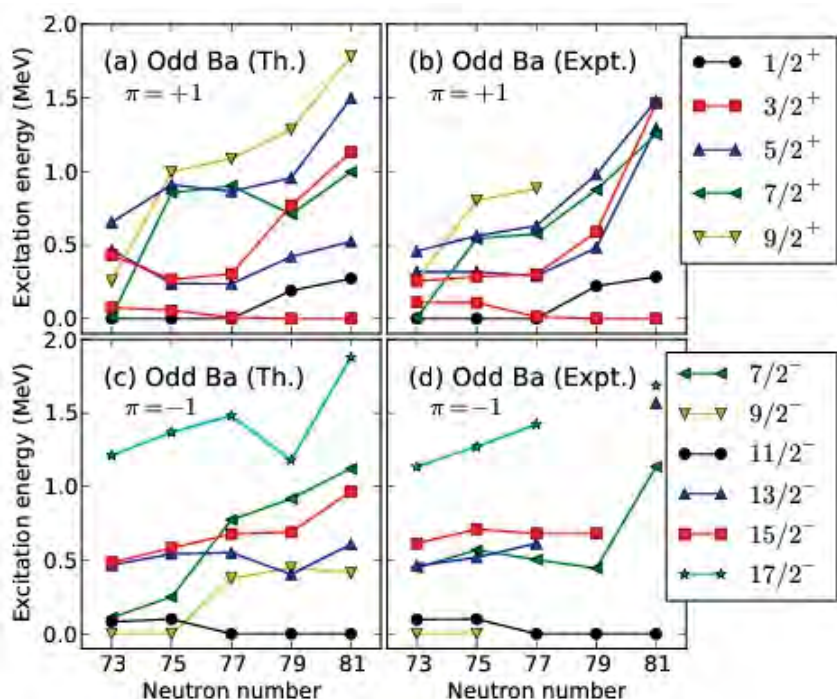


図 10: 偶奇核 Ba 同位体の励起スペクトル。

**【15】 相互作用するボソン模型におけるニュートリノレス二重ベータ崩壊と中性子陽子対 (Van Isacker (GANIL)、Engel (ノースカロライナ大)、野村)**

対相関基底を用いた殻模型空間からアイソスピン自由度を取り入れた相互作用するボソン模型空間への写像によって、*pf* 殻領域の原子核のボソンハミルトニアンと 2 重ベータ崩壊演算子を構築し、同崩壊過程の核行列要素を計算する研究を行った。特に、ボソン模型におけるアイソスカラー中性子陽子対の重要性を調べた。エネルギー準位の記述において中性子陽子対の効果は小さい一方、二重ベータ崩壊の行列要素の計算においては、(殻模型とコンシステントな結果を与えるという意味で) 重要な役割を持つことが分かった (図 11)。

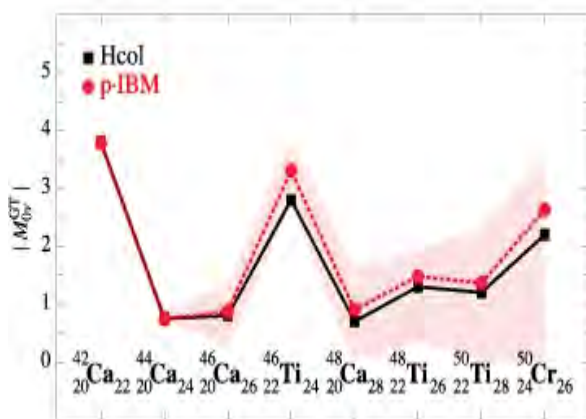


図 11: 殻模型計算 (Hcol) とアイソスカラー中性子陽子対を含んだ IBM 計算 (p-IBM) によるニュートリノレス二重ベータ崩壊のガモフテラー遷移行列要素。影の部分は理論的不定性を示す。

【16】 Pair transfer study (Scamps and Hashimoto)

A beyond mean-field technique has been developed to obtain the one- and two-neutron transfer probabilities in reactions between superfluid nuclei. This method includes the complicated calculation of overlaps between different HFB states after the evolution. This calculation improves the comprehension of the nuclear Josephson effect in realistic calculations and the mechanism of pair transfer (図12). This method has been tested in the reactions  $^{20}\text{O}+^{20}\text{O}$  and  $^{20}\text{O}+^{14}\text{O}$ .

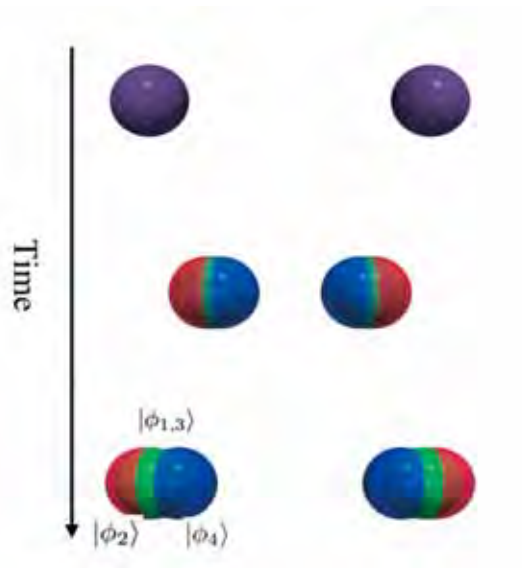


図 12: Transfer reaction  $^{20}\text{O}+^{20}\text{O}$ , at energy below the Coulomb barrier. We can see a splitting of the trajectory due to the different initial relative gauge.

【17】 Empirical evidence of the effect of the superfluidity on fusion reaction (Scamps)

In a previous study, we showed that in the reaction between superfluid nuclei the fusion barrier depends on the relative gauge angle. In that study, I investigated the proof of this effect by making a systematic analysis of the fusion barrier on 115 reactions. A new method has been developed to determine the width of the fusion barrier (図 13). The dependence of the width of the fusion barrier with respect to the superfluidity of the initial fragments show that the superfluidity enhance the fluctuations of the fusion barrier. That result is coherent with the effect that have been found with the TDHFB theory.

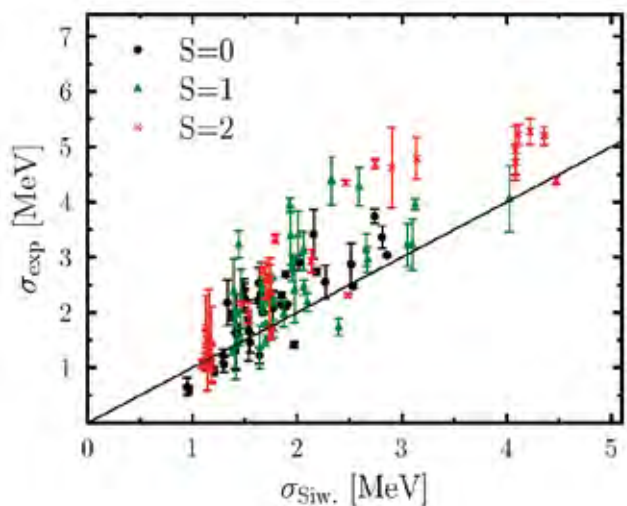


図 13: Comparison between the experimental width of the fusion barrier, with the result of the Siwek-Wilczynska model. The enhancement between the experimental value compared to the result of the model is expected to be due to the effect of the superfluidity for system with superfluidity ( $S = 1$  and  $2$ ).

【18】 Tensor effects in the relativistic Hartree-Fock theory (Wang (特別研究生)、Liang (理研)、Long (Lanzhou Univ.)、Zhao (Lanzhou Univ.) )

Tensor force is identified in the relativistic Hartree-Fock theory. It is found that all the meson-nucleon couplings, except the  $\sigma$ -scalar one, give rise to the tensor force. The effects of tensor force on various nuclear properties can now be investigated quantitatively, which allows fair and direct comparisons with the corresponding results in the non-relativistic framework. Especially, the tensor effects on nuclear binding energies and the evolutions of the  $Z, N = 8, 20,$  and  $28$  magic gaps are studied. The tensor contributions to the binding energies are shown to be tiny in general. The gaps at  $Z, N = 8$  and  $20$  are sensitive to the tensor force, but the one at  $Z, N = 28$  are not (図14) .

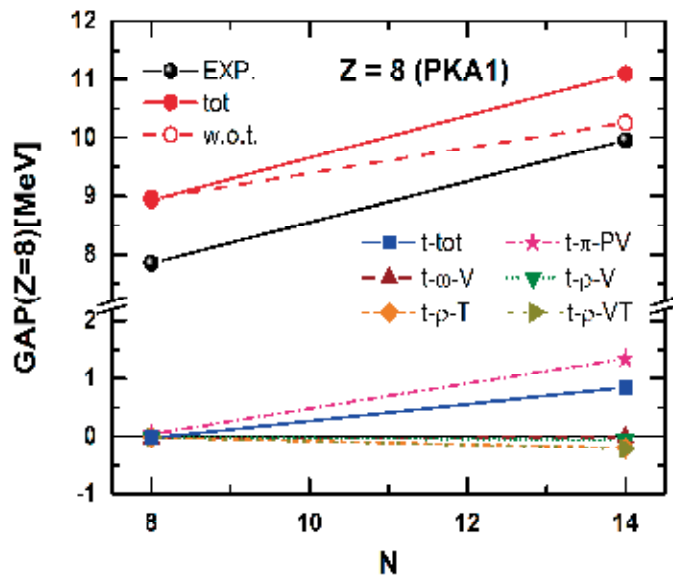


図 14: Proton gap  $Z = 8$  in the O isotopes and the contributions from the tensor force in each meson-nucleon coupling as a function of neutron number  $N$ , calculated with the RHF theory with the PKA1 effective interaction. The results with and without the tensor contributions are shown with filled and open circles, respectively. The total tensor contributions are shown with filled squares, while the contributions from each coupling are denoted with different symbols.

#### 4. 教育

1. 齊藤貴之、修士 (理学)、  
“拡張 Lagrange 未定乗数法をもちいた Hartree-Fock-Bogoliubov 法による原子核四重極・八重極変形の研究”
2. 八百板恭介、修士 (理学)、  
“5 次元四重極集団ハミルトニアンを用いた原子核低励起状態の解析”

## 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

### 外部資金

1. JST ImPACT 「核変換による高レベル放射性廃棄物の大幅な低減・資源化」、中務 孝、課題責任者、2014-2018 年、7,106,000 円 (H29 年度直接経費)、「核構造計算による核反応モデルの高精度化」
2. 日本学術振興会二国間協力事業 (JSPS-NSFC)、中務 孝、日本側代表、2017-2019 年、1,440,000 円 (H29 年度直接経費)、「r プロセスの謎解明に向けた核質量と寿命の研究」
3. 日本学術振興会科学研究費・若手研究 (B)、日野原伸生、代表、2016-2019 年、2017 年度直接経費 700,000 円、「中性子—陽子対相関・対凝縮の解明」
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「宇宙の歴史をひもとく地下素粒子原子核研究」) (公募研究)、日野原伸生、代表、2017-2018 年、2017 年度直接経費 1,000,000 円、「生成座標法による二重ベータ崩壊原子核行列要素の評価」

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

1. S. Ebata and T. Nakatsukasa, “Octupole deformation in the nuclear chart based on the 3D Skyrme Hartree-Fock plus BCS model”, *Phys. Scr.* **92**, 064005 (2017).
2. K. Wen and T. Nakatsukasa, “Adiabatic self-consistent collective path in nuclear fusion reactions”, *Phys. Rev. C* **96**, 014610 (2017).
3. P. Baczyk, J. Dobaczewski, M. Konieczka, W. Satula, T. Nakatsukasa, and K. Sato, “Isospin-symmetry breaking in masses of  $N \simeq Z$  nuclei”, *Phys. Lett. B* **778**, 178-183 (2018).
4. F. Ni and T. Nakatsukasa, “Comparative study of the requantization of the time-dependent mean field for the dynamics of nuclear pairing”, Accepted for *Physical Review C*, arXiv:1712.02954.
5. N. Hinohara, “Extending pairing energy density functional using pairing rotational moments of inertia”, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **45** (2018) 024004, Special Issue: emerging leaders [invited paper].
6. K. Washiyama and T. Nakatsukasa, “Multipole modes of excitation in triaxially deformed superfluid nuclei”, *Phys. Rev. C* **96**, 041304(R) (2017).
7. K. Washiyama, “Fusion hindrance in heavy systems with time-dependent Hartree-Fock”, *Proceedings of International Conference on Heavy-ion Collisions at Near-Barrier Energies FUSION17; EPJ Web of Conferences* **163**, 00064 (2017).

8. Y. Hirayama, M. Mukai, Y. X. Watanabe, M. Ahmed, S. C. Jeong, H. S. Jung, Y. Kakiguchi, S. Kanaya, S. Kimura, J. Y. Moon, T. Nakatsukasa, M. Oyaizu, J. H. Park, P. Schury, A. Taniguchi, M. Wada, K. Washiyama, H. Watanabe, and H. Miyatake, “In-gas-cell laser spectroscopy of the magnetic dipole moment of the N ~126 isotope  $^{199}\text{Pt}$ ”, *Phys. Rev. C* **96**, 014307 (2017).
9. K. Nomura, T. Niksic, and D. Vretenar, “Signature of octupole correlations in neutron-rich odd-mass barium isotopes”, *Phys. Rev. C* **97**, 024317 (2018).
10. K. Nomura, R. Rodriguez-Guzman, and L. M. Robledo, “Shape transitions in odd-mass  $\gamma$ -soft nuclei within the interacting boson-fermion model based on the Gogny energy density functional”, *Phys. Rev. C* **96**, 064316 (2017).
11. P. Van Isacker, J. Engel, and K. Nomura, “Neutron-proton pairing and double-beta decay in the interacting boson model”, *Phys. Rev. C* **96**, 064305 (2017).
12. K. Nomura, R. Rodriguez-Guzman, Y. M. Humadi, L. M. Robledo, and H. Abusara, “Structure of krypton isotopes within the interacting boson model derived from the Gogny energy density functional”, *Phys. Rev. C* **96**, 034310 (2017).
13. K. Nomura, R. Rodriguez-Guzman, and L. M. Robledo, “Description of odd-mass nuclei within the interacting boson-fermion model based on the Gogny energy density functional”, *Phys. Rev. C* **96**, 014314 (2017).
14. K. Nomura, T. Niksic, and D. Vretenar, “Shape-phase transitions in odd-mass  $\gamma$ -soft nuclei with mass  $A \sim 130$ ”, *Phys. Rev. C* **96**, 014304 (2017).
15. K. Nomura, R. Rodriguez-Guzman, and L. M. Robledo, “Structural evolution in germanium and selenium nuclei within the mapped interacting boson model based on the Gogny energy density functional”, *Phys. Rev. C* **95**, 064310 (2017).
16. G. Scamps and Y. Hashimoto, “Superfluid effects in collision between systems with small particle number”, *Proceeding Fusion 17*, EPJ Web Conf. **163**, 00049 (2017).
17. G. Scamps and Y. Hashimoto, “Transfer probabilities for the reactions  $^{14,20}\text{O}+^{20}\text{O}$  in terms of multiple time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov trajectories”, *Phys. Rev. C* **96**, 031602(R) (2017).
18. D. Regnier, D. Lacroix, G. Scamps, and Y. Hashimoto, “Microscopic description of pair transfer between two superfluid Fermi systems: combining phase-space averaging and combinatorial techniques”, *Phys. Rev. C* **97**, 034627 (2018).
19. G. Scamps, “Empirical evidence of the effect of superfluidity on the fusion barrier”, *Phys. Rev. C* **97**, 044611 (2018).

20. K. Wen and T. Nakatsukasa, “Nuclear reaction path and requantization of TDDFT”, JPS Conf. Proc. in press, arXiv:1802.03124.
21. K. Washiyama and T. Nakatsukasa, “Multipole Modes for Triaxially Deformed Superfluid Nuclei”, JPS Conf. Proc., in press, arXiv:1803.06828.
22. K. Nomura, R. Rodriguez-Guzman, and L. M. Robledo, “Prolate-to-oblate shape phase transitions in neutron-rich odd-mass nuclei”, Submitted to Phys. Rev. C, arXiv:1803.07802.
23. K. Nomura and J. Jolie, “Structure of even-even Cadmium isotopes from the beyond-mean-field interacting boson model”, Submitted to Phys. Rev. C, arXiv:1802.02348.

## (2) 国際会議発表

### A) 招待講演

1. T. Nakatsukasa, “Nuclear structure physics and time-dependent approaches”, Lecture in School cum collaboration meeting on nuclear structure and reaction, Kolkata, India, Jan. 1-22, 2018.
2. T. Nakatsukasa, “Nuclear structure physics in RIBF”, International symposium on RI beam physics in the 21st century: 10th anniversary of RIBF, Wako, Japan, Dec. 4-5, 2017.
3. T. Nakatsukasa, “Isospin symmetry breaking effect on nuclear mass”, KLFTP/CAS-BLTP/JINR Joint Workshop on Physics of Strong Interaction, Shenzhen, China, Nov. 26-Dec. 1, 2017.
4. T. Nakatsukasa, “Nuclear reaction path and requantization of TDDFT”, Ito international research center symposium “Perspectives of the physics of nuclear structure”, Tokyo, Japan, Nov. 1 - 4, 2017.
5. T. Nakatsukasa, “Quantization of mean-field dynamics”, Huzhou-CUSTIPEN workshop on Spectroscopy and reactions of exotic nuclei, Huzhou, China, Jul. 3 - 9, 2017.
6. T. Nakatsukasa, “Quantized TDDFT dynamics”, Interdisciplinary symposium on modern density functional theory, Wako, Japan, Jun. 19 - 23, 2017.
7. T. Nakatsukasa, “Collective coordinate, reaction path, and inertial mass in large-amplitude nuclear collective motion”, Probing fundamental interactions by low energy excitations - Advances in theoretical nuclear physics, Stockholm, Sweden, Jun. 5 - 9, 2017.
8. N. Hinohara, “Pairing Nambu-Goldstone modes in nuclei”, XXIV Nuclear Physics Workshop, Kazimierz Dolny, Poland, Sep. 20-24, 2017.
9. N. Hinohara, “Application of generator coordinate method with neutron-proton pairing amplitudes to nuclear matrix elements”, MEDEX'17 (Matrix Elements for the Double beta

decay EXperiments) meeting, National Technical Library, Prague, Czech Republic, May 29 - Jun. 2, 2017.

10. K. Washiyama, T. Nakatsukasa, “Excitation modes in triaxial superfluid nuclei with finite amplitude method QRPA”, KLFTP/CAS-BLTP/JINR Joint Workshop on Physics of Strong Interaction, Shenzhen, China, Nov. 27-30, 2017.
11. K. Nomura, “Beyond-mean-field boson-fermion model for odd nuclei”, IVth Topical Workshop on Modern Aspects in Nuclear Structure - The Many Facets of Nuclear Structure, Bormio, Italy, Feb. 19-25, 2018.
12. K. Nomura, “Beyond-mean-field boson-fermion model for odd nuclei”, Prospects on the microscopic description of odd mass nuclei and other multi-quasiparticle excitations with beyond-mean-field and related methods, ECT\*, Trento, Italy, Sep. 25-29, 2017.
13. K. Nomura, “Evolution of nuclear shapes in the microscopically-guided algebraic theory”, Probing fundamental interactions by low energy excitations - Advances in theoretical physics, Stockholm, Sweden, Jun. 5-9, 2017.
14. G. Scamps, “Restoration of symmetry in time-dependent calculations. Josephson effect study with the Gogny TDHFB calculation”, GANIL, Caen, France, Nov. 3, 2017.
15. G. Scamps, “How to interpret the effects of the gauge angle in nuclear reactions?”, Warsaw University of Technology, Warsaw, Poland, Nov. 15, 2017.
16. G. Scamps, “Study of the effect of the superfluidity on the fusion barrier”, KLFTP-BLTP workshop, Shenzhen China, Nov. 27-30, 2017.
17. G. Scamps, “Superfluidity in fusion reactions, from TDHFB calculation to experimental evidence”, Australian National University, Canberra Australia, Mar. 15, 2018.

## B) 一般講演

1. T. Nakatsukasa, “Isospin symmetry preserving energy density functional and its breaking effect on nuclear mass”, China-Japan collaboration workshop on “Nuclear mass and life for unravelling mysteries of r-process”, Tsukuba, Japan, Jun. 26-28, 2017.
2. N. Hinohara, “Pairing rotational modes and binding-energy differences of even-even nuclei”, IIRC symposium “Perspectives of the physics of nuclear structure”, Tokyo, Japan, Nov. 1-4, 2017.
3. N. Hinohara, “Pair condensation and Nambu-Goldstone modes in nuclei”, Workshop on Nuclear Cluster Physics 2017 (WNCP2017), Sapporo, Japan, Oct. 25-27, 2017.
4. N. Hinohara, “Neutron-proton pairing and double-beta decay nuclear matrix element”, Conference on Neutrino and Nuclear Physics (CNNP2017), Catania, Italy, Oct. 15-21, 2017.

5. N. Hinohara, “Extending pairing energy density functional using pairing rotational moments of inertia”, The International Symposium on Physics of Unstable Nuclei 2017 (ISPUN17), Halong City, Vietnam, Sep. 25-30, 2017.
6. N. Hinohara, “Generator coordinate method with neutron-proton pairing amplitudes for double-beta decay nuclear matrix elements”, XXXV Mazurian Lakes Conference on Physics, Piaski, Poland, Sep. 3-9, 2017.
7. N. Hinohara, “Binding energy differences of even-even nuclei as pairing indicators”, China-Japan collaboration workshop on "Nuclear mass and life for unravelling mysteries of r-process", Tsukuba, Japan, Jun. 26-29, 2017.
8. N. Hinohara, “Nuclear matrix elements from generator coordinate method”, INT Program INT-17-2a Neutrinoless Double-beta Decay, Seattle, WA, USA, Jun. 13-Jul. 14, 2017.
9. N. Hinohara, “Pairing energy density functional constrained using pairing rotational moments of inertia”, Probing fundamental interactions by low energy excitations -- Advances in theoretical nuclear physics, Stockholm, Sweden, Jun. 5-9, 2017.
10. K. Washiyama, T. Nakatsukasa, “Finite amplitude method for triaxially deformed superfluid nuclei”, Interdisciplinary symposium on modern density functional theory, Wako, Japan, Jun. 19-23, 2017.
11. K. Washiyama, “Quadrupole modes of excitation and moment of inertia in triaxially deformed superfluid nuclei”, 3rd workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model, Sado, Japan, Sep. 4-5, 2017.
12. K. Washiyama, T. Nakatsukasa, “Excitation modes of triaxial nuclei with finite amplitude method for QRPA”, ISPUN17, Halong, Vietnam, Sep. 25-30, 2017.
13. K. Washiyama, T. Nakatsukasa, “Multipole modes for triaxially deformed superfluid nuclei” (poster presentation), IIRC Symposium "Perspectives of the physics of nuclear structure", Tokyo, Japan, Nov. 1-4, 2017.
14. G. Scamps, “Transfer probabilities for the reactions  $14,200+200$  in terms of multiple Time-Dependent Hartree-Fock-Bogoliubov trajectories”, 3rd workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model, Sado, Japan, Sep. 4-5, 2017.
15. G. Scamps, “Restoration of symmetry in time-dependent calculations. Josephson effect study with the Gogny TDHFB calculation”, SSNET conference, Gif-sur-Yvette, France, Nov. 6-10, 2017.
16. F. Ni, T. Nakatsukasa, “Theoretical approach for large amplitude pairing dynamics”, The 16th CNS International Summer School, Saitama, Japan, Aug. 23-29, 2017.



17. F. Ni, T. Nakatsukasa, “Dynamics of nuclear pairing model”, China-Japan collaboration workshop on Nuclear mass and life for unravelling mysteries of r-process, Tsukuba, Japan, Jun. 26-28, 2017.
18. F. Ni, “Theoretical approach for pairing large amplitude motion”, 3rd workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model, Sado, Japan, Sep. 4-5, 2017.
19. Y. Kashiwaba, T. Nakatsukasa, “Self-consistent band calculation of inner crust of neutron star”, China-Japan collaboration workshop on “Nuclear mass and life for unravelling mysteries of r-process”, Tsukuba, Japan, Jun. 26-28, 2017.

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

1. 中務 孝、“時間依存平均場再量子化と核子集団ダイナミクス”、理研シンポジウム「非平衡物理の最前線」、理化学研究所、和光、2017年12月6-8日。
2. 日野原伸生、“原子核密度汎関数理論による原子核構造とダイナミクス”、市大ワークショップ「原子核のダイナミクスの現状と展望」～Highlights and Outlooks on Dynamics of Atomic Nuclei～、大阪市立大学、2018年2月19-20日。
3. 日野原伸生、“不安定核での変形、対相関による大振幅集団運動”、RIBF 理論若手放談会：エキゾチック核物理の広がり、理研神戸、2017年7月31日-8月2日。
4. 日野原伸生、“生成座標法による二重ベータ崩壊原子核行列要素の評価”、新学術領域「宇宙の歴史をひもとく地下素粒子原子核研究」2017年領域研究会、岡山大学、2017年5月21-23日。
5. 鷲山広平、“原子核の形の揺らぎと大振幅集団運動”、つばめラウンジセミナー、東京工業大学、2018年1月22日。
6. 鷲山広平、“低励起状態における原子核形状の揺らぎと大振幅集団運動”、市大ワークショップ「原子核のダイナミクスの現状と展望」、大阪市立大学、2018年2月19-20日。

#### B) その他の発表

1. 中務 孝、“中性子星クラストに対する自己無撞着バンド計算”、第6回「中性子星の核物質」研究会、理化学研究所、和光、2017年12月1-3日。
2. 中務 孝、“微視的理論を用いた断面積計算”、日本原子力学会 2017 秋の大会、北海道大学、札幌、2017年9月13-15日。
3. 中務 孝、“核構造計算による核反応モデルの高精度化”、ImPACT 藤田プログラム全体会議、JST 別館、東京、2017年10月4-5日。

4. 中務 孝、“核構造計算による核反応モデルの高精度化”、ImPACT 藤田プログラム全体会議、JST 別館、東京、2018 年 3 月 23–24 日.
5. 日野原伸生、“有限原子核基底状態でのゲージ対称性の破れ”、KEK 理論センター研究会『ハドロン・原子核物理の理論研究最前線 2017』、高エネルギー加速器研究機構素粒子原子核研究所 KEK 理論センター、2017 年 11 月 20–22 日.
6. 日野原伸生、“対回転の慣性モーメントを用いた対密度汎関数の精密化”、日本物理学会 2017 年秋季大会、宇都宮大学、2017 年 9 月 12–15 日.
7. 日野原伸生、“対相互作用の運動量依存項と関連する対相関観測量”、RCNP 研究会「核子・ストレンジネス多体系におけるクラスター現象」、大阪大学核物理研究センター、2017 年 8 月 3–5 日.
8. 橋本幸男、関沢一之、矢花一浩、“時間依存密度汎関数理論に基づく原子核ダイナミクスの研究”（ポスター）、第 4 回報告会（HPCI）、コクヨホール、2017 年 11 月 2 日.
9. 橋本幸男、“Gogny-TDHFB 法による 20O、34Mg + 20O の計算における対相関の効果”、日本物理学会第 73 回年次大会、東京理科大学野田キャンパス、2018 年 3 月 22–25 日.
10. 鷲山広平、“核構造模型の高精度化と核反応との橋渡し”、ImPACT-OEDO workshop2017、理研、2017 年 7 月 13–14 日.
11. 鷲山広平、“原子核の形の揺らぎと大振幅集団運動”、RIBF 理論若手放談会：エキゾチック核物理の広がり、理研神戸、2017 年 7 月 31 日–8 月 2 日.
12. 鷲山広平、中務 孝、“有限振幅法による 3 次元 QRPA と集団質量の計算に向けて”、日本物理学会秋季大会、宇都宮大学、2017 年 9 月 12–15 日.
13. 鷲山広平、“密度汎関数法による原子核大振幅集団運動の記述に向けて”、KEK 理論センター研究会『ハドロン・原子核物理の理論研究最前線 2017』、KEK、2017 年 11 月 20–22 日.
14. 鷲山広平、中務 孝、“3 次元 Skyrme-QRPA を用いた四重極集団ハミルトニアン慣性質量”、日本物理学会第 73 回年次大会、東京理科大学野田キャンパス、2018 年 3 月 22–25 日.
15. 倪 放、中務 孝、“自己無撞着な集団座標を用いた対振動状態の記述”、日本物理学会 2017 年秋季大会、宇都宮大学、2017 年 9 月 12–15 日.
16. 倪 放、中務 孝、“対相関による大振幅集団運動への理論的アプローチ”、RIBF 理論若手放談会：エキゾチック核物理の広がり、理研神戸、2017 年 7 月 31 日–8 月 2 日.

17. 柏葉 優、中務 孝、“3次元実空間基底を用いた Pasta 原子核の HFB 状態の計算手法”、新学術領域「中性子星核物質」理論班主催研究会 2018, 熱海ニューフジヤホテル, 2018 年 2 月 20–22 日。
18. 柏葉 優、中務 孝、“3次元実空間基底における HFB 方程式の解法”、日本物理学会第 73 回年次大会, 東京理科大学野田キャンパス, 2018 年 3 月 22–25 日。

## 7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

### 【国際連携】

1. ポーランド・ワルシャワ工科大学の原子核理論グループと共同で、実空間 TDHFB 計算 (中務)
2. フランス・IN2P3 の原子核物理グループと共同で、Nd 核の低励起スペクトルの研究 (中務)
3. 日本 JSPS-中国 NSFC 二国間協力事業「R プロセスの謎解明に向けた核質量と寿命の研究」 (日本側代表: 中務)
4. 米国・ノースカロライナ大学の Engel 教授と二重ベータ崩壊の原子核行列要素に関する共同研究 (日野原)。
5. 米国・ミシガン州立大学 Nazarewicz 教授およびフィンランド・ユバスキュラ大学の Kortelainen 研究員と原子核密度汎関数の諸問題に関する共同研究 (日野原)
6. 韓国・ソウル国立大学の大学院生 Ha 氏と理化学研究所における中性子過剰 Mo 原子核の  $\beta$ - $\gamma$  核分光実験に関する共同研究(日野原)
7. クロアチア・ザグレブ大学の Vretenar 教授と Niksic 教授との偶奇核の構造に関する共同研究 (野村)
8. スペイン・マドリッド自治大学 Robledo 教授およびクウェート・クウェート大学 Rodriguez-Guzman 教授との、形状相転移と変形共存、および偶奇核に関する共同研究 (野村)
9. ドイツ・ケルン大学の Jolie 教授とのカドミウム同位体構造に関する共同研究 (野村)
10. フランス・GANIL の Van Isacker 博士と米国・ノースカロライナ大学 Engel 教授との二重ベータ崩壊に関する共同研究 (野村)

## 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 国際会議 Recent Progress in Many-Body Theories (RPMBT-19) (Pohang, Korea, June 25-30, 2017)のプログラム委員を務めた (中務)。

2. 国際ワークショップ China-Japan collaboration workshop on nuclear mass and life for unravelling mysteries of r-process (Tsukuba, June 26-28, 2017)の組織委員長(中務),および組織委員(日野原)を務めた。
3. 国際会議 The 16th International Symposium on Capture Gamma-Ray Spectroscopy and Related Topics (CGS16) (Shanghai, China, September 18-22, 2017)のプログラム委員を務めた(中務)。
4. 筑波大学計算科学研究センター25周年記念シンポジウム「計算科学の発展と将来」(つくば国際会議場、2017年10月10-11日)の組織委員長を務めた(中務)。

## 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  
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  
数理物質系物理学域 運営委員会委員  
数理物質系物理学域 原子核理論グループ長  
数理物質系物理学域 理論グループ副議長

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

## 10. 社会貢献・国際貢献

中務 孝

Editor for Journal of Physical Society of Japan  
Editor for International Journal of Modern Physics E  
JAEA タンデム専門委員会委員  
JAEA 黎明研究評価委員会委員

高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所・運営会議議員

高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所・常置人事委員会委員

高エネルギー加速器研究機構大型シミュレーション研究推進委員会委員

計算基礎科学連携拠点運営委員（ポスト京重点課題 9）

中村誠太郎賞選考委員

中務 孝、橋本幸男、日野原伸生

筑波大学エクステンションプログラム FORTRAN 初級講座でマイクロ世界の物理学を学ぼう、2017 年 10 月 14－15 日

## 11. その他

### 海外長期滞在

#### 1. 野村昂亮

Faculty of Science, University of Zagreb, Croatia,

2017 年 4 月 15 日－2017 年 10 月 31 日

## IV. 量子物性研究部門

### 1. メンバー

教授	矢花 一浩
准教授	小野 倫也、小泉 裕康、全 暁民
講師	前島 展也
研究員	植本 光治、山田 篤志、山田 俊介、Arqum Hashmi
学生	大学院生 7 名、学類生 6 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) 押山 淳 (客員教授、東京大学大学院工学系研究科)

### 2. 概要

本部門は、計算物質科学のいくつかの分野にわたる研究を行っているが、特に光と物質の相互作用に関係した研究に特色を有している。時間依存密度汎関数理論に基づく固体中の電子ダイナミクスや光応答の計算、時間依存シュレディンガー方程式に基づく原子や分子と光の相互作用、強相関電子系の光応答など、多様な物質を対象とした光物質科学分野の計算科学研究を行っている。また、界面の伝導特性に対して、第一原理計算に基づく解析を進めており、SiC/SiO<sub>2</sub> 界面の原子構造の特定などを行った。強相関電子系では、銅酸化物高温超伝導の超伝導機構の解明に対して、スピン渦誘起ループ電流理論を軸に行っている。この研究の副産物として、ファラデーの電磁誘導の法則が 2 つの物理法則からなることの解明に成功した。

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

### 3. 研究成果

- 【1】 第一原理光科学ソフトウェア SALMON の開発**（矢花、植本、山田（篤）、山田（俊）、朴[高性能計算システム研究部門]、廣川[システム情報工学研究科]、信定、野田、竹内[分子科学研究所]）

我々のグループで独自に開発してきた、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計算を対象とする第一原理計算コード ARTED と、分子科学研究所に於いて開発されてきた、ナノ物質や分子中の電子ダイナミクス計算を対象とする時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算コード GCEED を統合し、SALMON (Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience) と命名した (図 1)。統合に際し、一般のユ



図 1: ソフトウェア SALMON のロゴ

ーザを含めたコード利用を容易とするため、Fortran の namelist 機能を用いた入力仕様とし、実行ファイルの生成では CMake を用いたコンパイルを行うなどの作業を行なった。SALMON のウェブサイト <http://salmon-tddft.jp> を開設し、コードのダウンロード、インストール及び実行方法の説明、計算例の紹介などを整備した。また、スパコンを用いたハンズオンを含む SALMON のチュートリアルを行い、コードの利用者を拡大する取り組みを行った。コード論文を執筆し、投稿した。

SALMON の開発においては、計算科学研究センターの朴グループと密接に協力し、主として大学院生の廣川氏の貢献により KNL プロセッサや GPU においても効率的に計算が可能となるようチューニングを行なった。

- 【2】 マクスウェル方程式と時間依存密度汎関数を統合したシミュレーション法の拡張**（矢花、植本、朴[高性能計算システム研究部門]、廣川[システム情報工学研究科]、佐藤[マックスプランク物質構造動力学研究所]）

マクスウェル方程式と時間依存密度汎関数理論に基づく電子ダイナミクス計算を多階層連結したシミュレーションに関し、これまでは一次元マクスウェル方程式（薄膜透過）での計算が行われてきたが、昨年度の研究では 2~3 次元系の任意形状物質による散乱問題へ拡張を試みた。我々は、マクロ系側のマクスウェル方程式のため、2・3 次元直交座標系および軸対称円柱座標系をもちいた時間領域有限差分法 (FDTD) のソルバーを作成し、ミクロ側 TDDFT コードとマルチスケール結合が可能ないように計算コード「SALMON/ARTED」への実装作業を行った。

昨年度 4 月にスーパーコンピュータ「Oakforest-PACS」の全系（~8000 ノード）を用いたマルチスケール計算の大規模実行を試みた。

①シリコン・グラファイト薄膜への軸対称なアジマス偏光ベクトルビーム入射。

②シリコンナノ球体・ナノギャップ構造による直線偏光ビーム入射。

①では、光渦によるレーザ加工の初期過程のシミュレーションとなる。②では、ナノ構造由来の焦点集光や光電場増強をもちいた電子励起のシミュレーションとなっている。これらの模式図を図 2 に示す。

現在は、薄膜にパルス光が斜方入射する場合の理論及び計算法について検討を進めている。斜め方向ビームの入射角度依存性の評価は、表面プラズモン・メタサーフェイスなど、近年注目を集めるターゲットの解析に不可欠である。

最近では、独マックスプランク量子光学研究所のアト秒分光実験グループとも共同研究をすすめているが、アト秒ストリーキング実験による実測データが我々のマルチスケール計算によりよく説明できることがわかっている。今後、斜方入射計算の実現により、実験等によく用いられるブリュースター角入射の取扱が可能となるため、共同研究のさらなる進展が期待される。

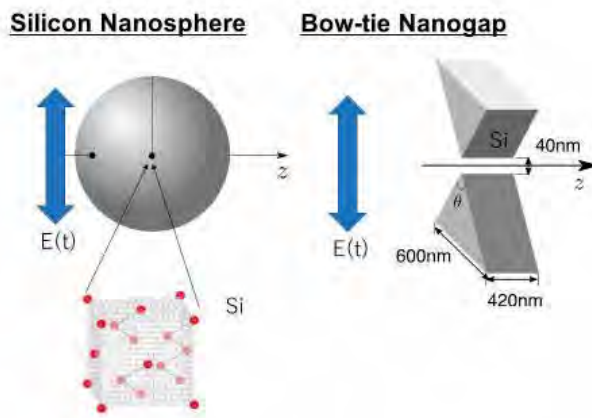


図 2：3 次元マルチスケール計算におけるモデル概要

### 【3】 薄膜・表面に特化した単一空間スケール上でのマクスウェル方程式と時間依存密度汎関数法の統合シミュレーション (山田(俊)、矢花)

2次元物質による高次高調波発生や、非熱的な金属レーザ加工の初期過程のシミュレーションは、理学・産業両面から興味ある研究テーマである。しかしながら、金属表面や極めて薄い薄膜、2次元物質等における光・電子相互作用を考える場合、相互作用領域が極端に狭いため、上記のように電子系と光電磁場の空間スケールを分離するマルチスケールの記述は適当でないと考えられる。そこで本研究では、単一の空間スケールを用いて電子系と電磁場を同時に時間発展させる新手法を開発した。本手法においては時間依存コーン・シャム方程式とマクスウェル方程式が同じ実空間グリッド上で表現され、スラブによる光パルスの反射・透過や電子励起と発光の過程を露わに記述することができる。現在計算コードの実装を完了し、シリコン薄膜や単純金属の薄膜等を対象として計算と解析を進めている。



#### 【4】 光電場+TDDFT+MD のシミュレーション研究に向けて、SALMON への原子核の古典分子動力学計算の機能追加（矢花、山田（篤））

これまでの SALMON は光照射に対する電子の速い応答を第一原理的に記述するソフトウェアであり原子核の自由度については凍結した近似を用いてきた。しかしながら、コヒーレントフォノンや光誘起相転移などフェムト秒の時間スケールで核の運動や構造変化が引き起こされる超高速ダイナミクスも光物性や光化学の分野において盛んに研究されており、このような現象も SALMON で扱えるようになれば大いに有効である。そこで本年度は、電子基底状態の *ab initio* 分子動力学 (MD) シミュレーション、および原子核の変位が比較的小さい場合に有効なエーレンフェスト法 (平均場法) による電子-核の相互作用を記述した MD シミュレーションを実装した (公開版 SALMON にも Trial 版のオプションとして実装)。

さらに、前述のマルチスケール法に MD 機能を実装したシミュレーション法の開発にも着手した。マルチスケール法ではポンプ-プローブ実験など、実験系をそのままシミュレーションで模倣して分光シグナルを直接的に再現できるため、光・電子・核の相互作用ダイナミクスによる複雑なプロセスの結果として得られるシグナルを詳細に検討するのに有効である。当グループでは、誘導ラマン効果とカップルしたコヒーレントフォノンのダイナミクスの記述 (図 3) と実験で得られている反射率変化を詳細に検討するための取り組みを図っている。

一方、光誘起相転移をシミュレーションで記述するための取り組みも行った。光誘起相転移では電子励起状態で構造が大きく変化するためエーレンフェスト法ではなくホッピングモデルに基づく電子-核の相互作用モデルの導入が必要である。このモデルを導入することにより、分子性結晶の励起ダイナミクスなどの記述にも幅が広がる。このようなシミュレーションを可能にするための検討として、クロコン酸結晶 (励起状態プロトン移動による高速分極反転を起こす系) に対してまずはエーレンフェスト法を用いた様々なテスト計算を行うことで、今後の SALMON に必要な計算モデルを議論した。

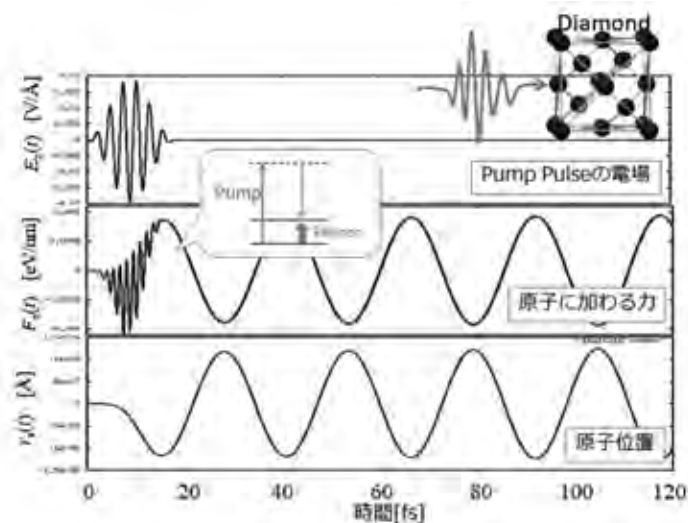


図 3 : 光電場+TDDFT+MD のシミュレーションにより得られたコヒーレントフォノン

**【5】 固体高次高調波発生における光伝搬効果 (I. Floss (ウィーン工科大学)、矢花、他)**

固体における高次高調波発生は、高強度パルス光を用いた新奇な光デバイス原理や、新たな X 線パルス線源を与えるものとして高い興味が持たれており、その発生メカニズムに関して活発な議論がなされている。固体中の高次高調波発生はバンド計算を取り入れた多様な電子ダイナミクス計算手法により記述が可能であるが、単純に計算すると原子の場合と異なり励起電子の波束が拡散しないために、実験で見られるようなクリアな高調波が得られないことが知られている。このため、非常に短い緩和時間を仮定した計算などが行われていた。本研究は、ウィーン工科大の大学院生である I. Floss 氏を中心になされ、固体中に発生した高次高調波が伝搬する効果を取り入れると、非常に短い緩和時間を仮定することなく、クリアな高調波が得られることを示したものであり、高次高調波の発生メカニズムに関して重要な指摘を行なったものである。

**【6】 内殻電子ダイナミクスの記述に向けた試み (矢花、他)**

現在活発に研究が進んであるアト秒科学では、アト秒パルス光により起こる内殻電子のダイナミクスを観測することで、サブフェムト秒の時間スケールで起こる物質中の電子ダイナミクスを調べている。これらの現象の解析では、アト秒パルス光により生じる内殻電子のダイナミクスを直接記述することが求められるが、空間的・エネルギー的に価電子と大きくスケールが異なるため、容易ではない。

内殻電子のダイナミクスを記述する方法として、我々は2通りの手法の検討を行っている。一つは、実空間の格子間隔を小さくすることで、現在の計算コードの範囲で記述を試みるものである。これは、マックスプランク物質構造動力学研究所の C.M. Wang 氏が中心となり共同研究を進めている。もう一つは、より小さい空間スケールの現象に適した原子基底関数を用いた記述であり、こちらは SIESTA コードをベースとして、C.D. Pemmaraju 氏を中心に共同研究を進めている。

**【7】 空間差分法に基づく第一原理電気伝導・伝導特性計算コード RSPACE の開発 (小野)**

波動関数接合法を用いた電気伝導計算法では、現実的な時間内で電極の一般化ブロッホ波を計算することは困難である。そのため、進行波と緩やかに減衰もしくは増大するエバネッセント波のみを計算する方法が用いられるが、透過率の計算精度が低下することが報告されている。本年度は、連分数を用いた伝導計算に用いる自己エネルギーの計算方法の開発と連分数の物理的な意味づけ、ならびに進行波と緩やかに減衰もしくは増大するエバネッセント波のみ精度劣化を引き起こすことなく透過率を計算する方法の開発を行った。

### 【8】 SiC-MOSFET 開発における界面電子状態シミュレーション（小野）

SiC/SiO<sub>2</sub> 界面はパワーデバイス用途で期待されているものの、キャリア移動度が低いことが実用化に向けた課題となっている。原因解明のために界面原子構造・電子状態とキャリア散乱機構の解明が必要であるが、SiC/SiO<sub>2</sub> 界面は Si/SiO<sub>2</sub> 界面よりも実験・計算データが少なく、原子構造の解明にも至っていない。本年度は、走査型透過電子顕微鏡（STEM）像を援用し、第一原理電子状態・伝導特性計算のモデルに用いる界面原子構造の探索を行った。まず、図 4(a)に示す実験で得られた STEM 像より、界面における原子層間隔を測定した。実験で得られたデータを用いて、界面における原子面の間隔を調べた。次に、候補となる SiO<sub>2</sub> の結晶多形の中から、SiC(0001)面に格子定数が概ね一致するものを選び出し、STEM 像との格子間隔の一致、界面の形成エネルギーを比較し、図 4(b)に示す原子構造を得た。STEM より、図 4(a)の D-D'部と E-E'部は原子構造が異なることが分かっている。これはそれぞれ図 4(b)の左側、右側に対応するものと考えられる。平成 30 年度は、この原子構造を用いて界面のキャリア移動特性評価を行う。

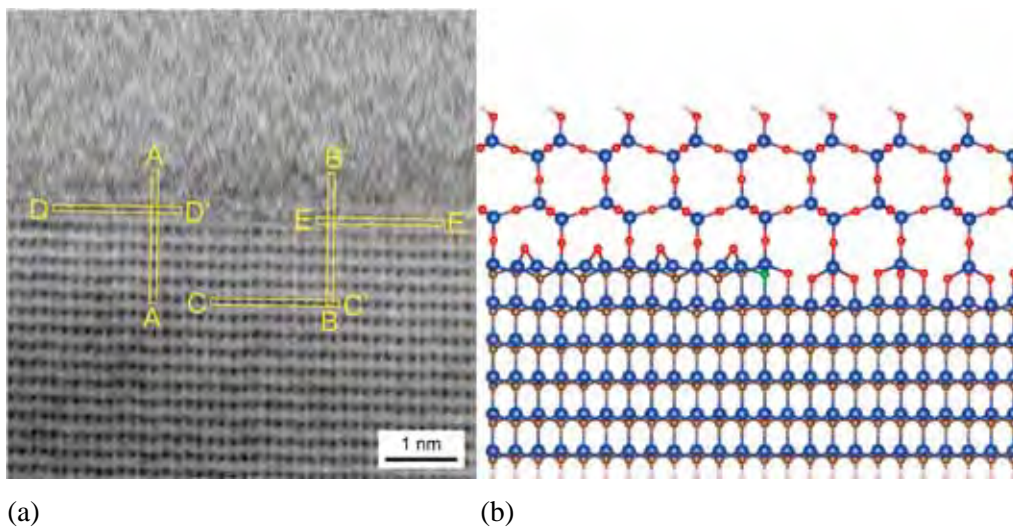


図 4： SiC/SiO<sub>2</sub> 界面の STEM 像(a)と第一原理計算により得られた界面原子構造(b)。青球は Si 原子、茶球は C 原子、赤球は O 原子、緑球は N 原子、白球は H 原子である。

【9】 銅酸化物超伝導体におけるラシュバ相互作用と密度波状態（小泉、若浦）

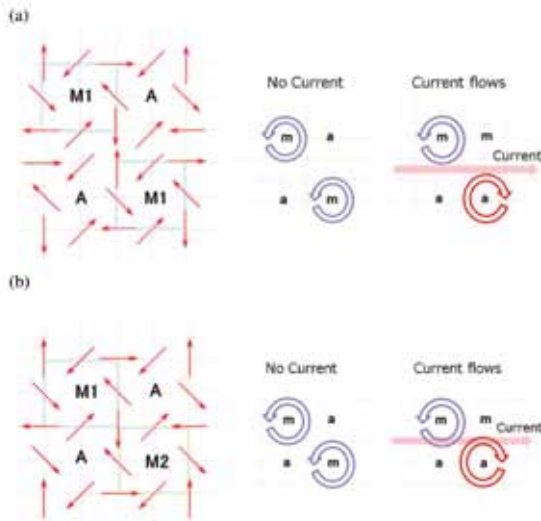


図 5: 銅酸化物  $\text{CuO}_2$  面に存在する 4 つのスピ  
ン渦とスピ  
ン渦誘起ループ電流。M1 と M2  
(A) は巻き数 1 (-1) のスピ  
ン渦を表す。m  
(a) は、巻き数 1 (-1) のループ電流を表す。  
(a) 図 ((b) 図) では、スピ  
ン渦は  $3 \times 4$  ( $3 \times 3$ )  
の長方形の頂点にある。

銅酸化物高温超伝導体の低ドーパ側、超伝導相の高温側に存在する擬ギャップ相に存在する密度波状態の起源について、ラシュバ相互作用に基づく説明を行った。ラシュバ相互作用は、ドーパしたホールと電荷供給層にあるドーパントの間にできた電場の  $\text{CuO}_2$  面に垂直な成分により、スピ  
ン渦誘起ループを担う電子のスピ  
ンとの相互作用により生じるとするモデルを用いた。

巨視的な電流が流れていない状況では、図 5 の (a) 図の状態が、電流が流れている状況では、(b) 図の状態がラシュバ相互作用により安定となる。したがって、巨視的な電流が流れることにより、スピ  
ン渦配置が変化し、整列する。これはホールの配列による密度波状態を作る。この磁場誘起密度波状態が、実験で磁場印加により発生する密度波状態と考えられる。

【10】 スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子コンピューター：surface code を実現するアーキテクチャーに関する研究（小泉、若浦）

スピン渦誘起ループ電流はトポロジカルに保護されている。スピン渦誘起ループ電流の方向を 2 準位として量子ビットを作ることができる。これまでの我々の研究で示されてきた。この 2 準位間のエネルギー差は、外部磁場や外部電流により変えることができる。また、量子ビット間の結合は外部電流の供給によりオン・オフが可能である。さらに準位間の遷移はレーザーの照射により可能である。従って、量子ゲートを実現するための量子状態の制御が可能である。現在、エラー訂正を備えた量子コンピューターの実現に向けて、どのような量子ビットを使い、どのようなアーキテクチャーを用いるかが重要な問題となっているが、スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとして利用した量子コンピューターはエラー訂正を備えた量子コンピューターの実現に適した系であることを理論的に議論した（図 6）。

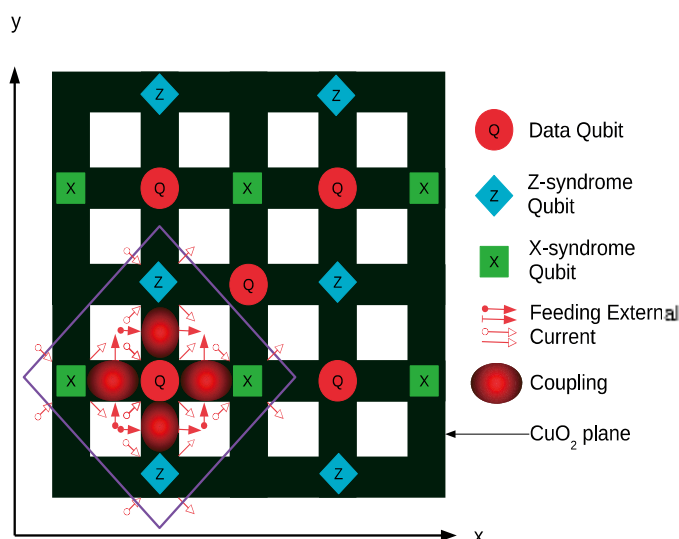


図 6：surface code を実現するスピン渦誘起ループ電流を量子ビットとする量子コンピューターのアーキテクチャー。各々の量子ビットは、4 つ組のスピン渦誘起ループ電流よりなる。Q はデータビットを表し、その周りをエラーのシンδροーム測定に利用する量子ビット X と Z が取り囲んである。量子ビット間の結合は、外部電流を供給することにより行う。図の左下に、外部電流供給により実現した、量子ビット間の結合を示してある。

【11】 ファラデーの電磁誘導の法則が 2 つの物理法則からなることの解明（小泉）

「ファラデーの電磁誘導の法則」による起電力生成は、マクスウェルの方程式を使って求める起電力生成と、ローレンツ力が原因として発生する起電力生成の、2 つからなる。つまり、2 つの異なる原理に対して同一の結果を与える。この誘導起電力を求める問題は高等学校の物理の教科書にも載っており、馴染み深い問題であるにもかかわらず、2 つの本質的に異なる方法で結果がなぜ一致するのか、これまで明らかにされていなかった（アインシュタインやファインマンなどの著名な物理学者も説明できなかった）。この問題を、電子の量子状態を表す波動関数の位相因子がもつ 2 重性、つまり、この位相因子が、1 つの見方では電子の導線に沿った方向のローレンツ力による並進運動を表し、もう 1 つの見方では電場を生む時間依存したゲージポテンシャルと見なせることを示すことにより説明した。つまり、古典電磁

気学で見られた 2 つの本質的に異なる方法での奇妙な一致は、電子の量子状態を表す波動関数の位相因子の 2 重性（並進運動とゲージポテンシャル）により繋がっていたのである。また、このことは、電磁場のゲージポテンシャルと荷電粒子の分離不可能な一体性を表していると考えられる。

### 【12】 中赤外線強レーザー場における Xe 原子多重電離過程の研究（トン）

最近開発した FFT により新しい時間依存密度汎関数計算方法で強レーザー場における原子多重電離過程を調べた。従来の実験結果と理論計算によって、レーザー強度を上げると、二重電離の割合も上がる。我々の計算結果によると、ある強度の領域でレーザー強度を下げると、二重電離の割合が右図のように上がる。この異常な現象をスペインの実験グループに報告して、実験でこの現象は確認された。本研究は国際共同研究の成果として、Physical Review A に発表した。

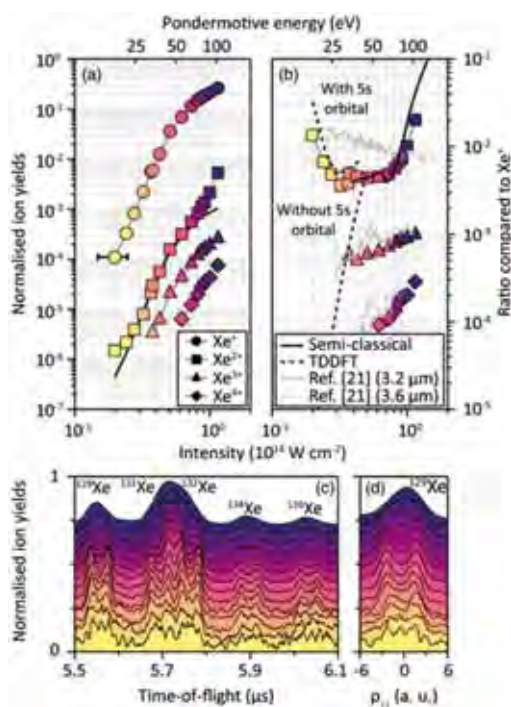


図 7：中赤外線強レーザー場における Xe 原子多重電離確率とレーザー強度の関係

### 【13】 2 色円偏光強レーザー場による原子電離メカニズムの解明（トン）

半古典物理の法則によって、2 色円偏光強レーザー場による原子電離確率は 2 色円偏光レーザーの偏光向に寄らずに、完全に同じである。量子力学の法則によって、我々の計算結果は 2 色レーザーの偏光が逆向きの場合は同じ偏光方向より電離確率が 10 倍大きくなる可能性があることを示した。先ず、我々の予測は正しいか、共同研究の実験グループに報告して、実験で確認された。次に、その大きな差の物理起因について、理論計算で、電離電子のエネルギーを分析して、原因を解明した。その原因は半古典力学には量子力学の選択ルールを考

慮しないことである。この研究結果は実験グループとの共同研究成果として *Physical Review A* に発表した。

#### 【14】 半導体・強相関電子系におけるレーザー誘起ダイナミクス（前島）

バルク Si 結晶にパルスレーザーを照射した場合に出現するコヒーレントフォノン状態とそれによるコヒーレント振動現象についてボゾン化法に基づく解析的・数値的方法により調べた。パルスレーザー照射により発生する光キャリアが形成するプラズモンと光学フォノンモードの周波数がほぼ一致するようにレーザーが照射された場合、両者の共鳴現象により不規則な振動現象が生じることを明らかにした。また、低次元強相関電子系の理論模型の一種であるイオン性ハバード模型の動的構造因子を厳密対角化などにより数値的に調べ、本来は電荷励起状態を観測する量である光学伝導度スペクトルにスピン励起状態のスペクトルピークが現れるという解析計算に基づく理論的予測が正しいことを数値的に確認し、更に現実の物質で重要となるパラメータ領域では、光学伝導度で観測される状態が、上記のスピン励起状態から徐々にドメイン壁的な状態へと変化していくことを示した。

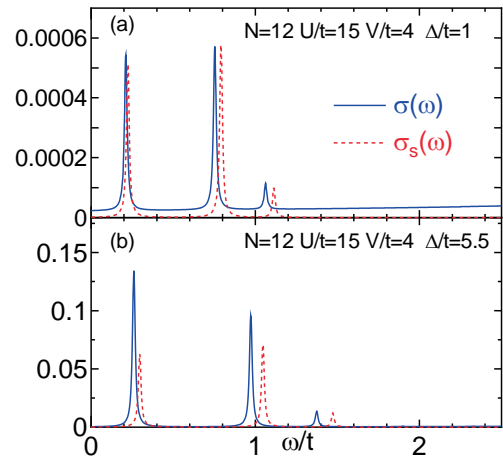


図 8: イオン性ハバード模型における光学伝導度スペクトル (青線) およびスピン励起からの寄与 (赤線)

## 4. 教育

### 博士論文

渡辺 陽平 Theoretical Study on Quantum Dynamics of Coherent Phonon Generation in the Early-Time Region

### 修士論文

高木 謙介 電子デバイス界面における欠陥起因の電子状態変化が伝導電子に及ぼす影響の第一原理計算による解析

张博源 HgTe/CdTe の量子井戸構造におけるフロケットポロジカル絶縁体の量子制御

### 卒業論文

種崎 智貴 実空間差分法に基づく一般化周期境界条件における Poisson 方程式ソルバの開発

中西 健太 グラフェン上に吸着した強磁性金属原子の電子状態

- 高橋 涼介 遺伝算法による二層スピン系 Honey Comb エネルギー構造の理論研究  
朴 善浩 6  $\mu\text{m}$  以上の中赤外線レーザーによる X-線レーザー生成の理論研究  
大塩 耕平 半導体量子井戸型トポロジカル絶縁体のエネルギーバンド解析  
山本玲於奈 4 面体上のハバード模型におけるレーザー誘起フロケ状態の解析  
柳松 聖吾 1 次元イオン性ハバード模型における低エネルギー励起状態の解析  
真鍋 大地 銅酸化物超伝導体の超伝導転移温度に対するスピン波励起の影響

### 集中講義

1. 矢花一浩、"超短パルス光と物質の相互作用を記述する第一原理計算－非熱レーザー加工のメカニズム解明に向けて"、光産業創生大学院大学特別講義 2017、光産業創生大学院大学、2017 年 6 月 14 日。
2. 矢花一浩、"計算機シミュレーションの発展 ～先端分野のシミュレーション手法開発と異分野連携の実践～"、東京大学大学院工学系研究科先進原子力特別講義第三、2017 年 10 月 3 日。
3. 矢花一浩、東京大学大学院理学研究科集中講義、物理化学特論 II、2017 年 12 月 7 日。
4. 小野倫也、東京工業大学理学院化学系

## 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

### 受賞

1. 筑波大学 BEST FACULTY MEMBER、矢花一浩、2018 年 2 月 19 日
2. アメリカ物理学会のフェロー、Xiao-Min Tong、2017 年 10 月 12 日

### 外部資金

1. 科研費基盤研究 (B) 「第一原理計算に基づく極限パルス光と物質の相互作用の解明」、矢花一浩、代表、2015-2018 年度、2,300 千円 (H29 年度直接経費)
2. ポスト京重点課題 7 「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」サブ課題 B 「光・電子融合デバイス」、矢花一浩、分担、2016-2032 年度、7,469 千円 (2017 年度直接経費)
3. 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、24,900 千円 (2017 年度直接経費)
4. 共同研究経費、株式会社 IHI、「時間依存第一原理解析によるフェムト秒レーザーと物質との相互作用に関する研究」、450 千円 (2017 年度直接経費)
5. 文部科学省、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発、小野倫也、分担、2017 年度 400 千円、「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」



6. 日本学術振興会、基盤研究 (B)、小野倫也、代表、2017 年、2,000 千円、「大規模第一原理スピン輸送シミュレーターの開発と革新的デバイス用界面構造の設計」
7. 民間企業、共同研究、小野倫也、900 千円
8. 日本学術振興会、研究拠点形成事業、小野倫也、分担、2016 年、400 千円、「半導体集積デバイス向け二次元電子・スピン材料研究拠点」
9. 日本学術振興会、基盤研究 (C)、全 暁民 (トン ショウミン)、代表、2017 年、650 千円、「2 色円偏光レーザー場における原子・分子電離過程の解明と制御」

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

1. I. Floss, C. Lemell, G. Wachter, V. Smejkal, S. A. Sato, X. M. Tong, K. Yabana, and J. Burgdörfer, "Ab initio multiscale simulation of high-order harmonic generation in solids", *Phys. Rev. A* **97**, 011401(R):1-5 (2018).
2. C.D. Pemmaraju, F.D. Vila, J.J. Kas, S.A. Sato, J.J. Rehr, K. Yabana, D. Prendergast, "Velocity-gauge real-time TDDFT within a numerical atomic orbital basis set", *Comp. Phys. Comm.* **226**, 30-38 (2018).
3. Yuta Hirokawa, Shunsuke A. Sato, Taisuke Boku, Kazuhiro Yabana, "Performance Evaluation of Large Scale Electron Dynamics Simulation under Many-core Cluster based on Knights Landing", *Proc. of the 1st International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPCAsia2018)*, Tokyo, Jan. 2018.
4. Masashi Noda, Shunsuke A Sato, Yuta Hirokawa, Mitsuharu Uemoto, Takashi Takeuchi, Shunsuke Yamada, Atsushi Yamada, Yasushi Shinohara, Maiku Yamaguchi, Kenji Iida, Isabella Floss, Tomohito Otobe, Kyung-Min Lee, Taisuke Boku, George F Bertsch, Katsuyuki Nobusada, Kazuhiro Yabana, "SALMON: Scable Ab-intio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience ", *arXiv:1804.01404*.
5. Yuta Hirokawa, Taisuke Boku, Mitsuharu Uemoto, Shunsuke A. Sato, and Kazuhiro Yabana, "Performance Optimization and Evaluation of Scalable Optoelectronics Application on Large Scale KNL Cluster", *in press*.
6. T. Morisaki, H. Wakaura, H. Koizumi, "Effect of Rashba Spin-Orbit Interaction on the Stability of Spin-Vortex-Induced Loop Current in Hole-Doped Cuprate Superconductors: A Scenario for the Appearance of Magnetic Field Enhanced Charge Order and Fermi Surface Reconstruction", *J. Phys. Soc. Jpn.* **86**, 104710 (2017).

7. Hiroyasu Koizumi, "Flux Rule, U(1) instanton, and superconductivity", *J. Supercond. Nov. Magn.* **30**, 3345–3349 (2017).
8. T.Morisaki, H. Wakaura, M. Abou Ghantous, H. Koizumi, "Response Current from Spin-Vortex-Induced Loop Current System to Feeding Current", *J. Phys. Soc. Jpn.* **86**, 074702 (2017).
9. H.Koizumi, "Origin of the U(1) field mass in superconductors", *Journal of Physics: Conference Series*, Vibronic Coupling and Electron-Phonon Interactions in Molecules and Crystals: XXIII International Symposium on the Jahn-Teller Effect, **833**, 012016 (2017).
10. H. Wakaura, H. Koizumi, "External current as a coupler between the spin- vortex-induced loop current qubits," *J. Phys. Commun.* **1** 055013 (2017).
11. M. G. Pullen, B. Wolter, X. Wang, X. M. Tong, M. Sclafani, M. Baudisch, H. Pires, C. D. Schröter, J. Ullrich, T. Pfeifer, R. Moshhammer, J. H. Eberly, and J. Biegert, "Transition from nonsequential to sequential double ionization in many-electron systems", *Phys. Rev. A* **96**, 033401:1-7 (2017).
12. H. Li, X.Gong, K. Lin, R. de Vivie-Riedle, X.M. Tong, J. Wu, and M.F. Kling, "Sub-cycle directional control of the dissociative ionization of H<sub>2</sub> in tailored femtosecond laser fields", *J. Phys. B: At. Mol. Opt.* **50**, 172001 (17pp) (2017).
13. C.A.Mancuso, K.M.Dorney, D.D.Hickstein, J.L.Chaloupka, X.M.Tong, J. L. Ellis, H.C. Kapteyn, and M.M.Murnane, "Observation of ionization enhancement in two-color circularly polarized laser fields", *Phys. Rev. A* **96**, 023402:1-10 (2017).
14. X. M. Tong, "A three-dimensional time-dependent Schrödinger equation solver: An application to hydrogen atoms in an elliptical laser field", *J. Phys. B: At. Mol. Opt.* **50**, 144004:1-6 (2017).
15. C.Khurmi, W.C.Wallace, S. Sainadh U, I. A. Ivanov, A.S. Kheifets, X. M. Tong, I. V. Litvinyuk, R. T. Sang, and D. Kielpinski, "Measuring laser carrier-envelope phase effects in the noble gases with an atomic hydrogen calibration standard", *Phys. Rev. A* **96**, 013404 (2017).
16. Kota Yokoi, Nobuya Maeshima, and Ken-ichi Hino, "Low-lying Photoexcited States of a One-Dimensional Ionic Extended Hubbard Model", *J. Phys. Soc. Jpn.* **86**, 104708 (2017).
17. Yohei Watanabe, Ken-ichi Hino, Muneaki Hase, and Nobuya Maeshima, " Irregular oscillatory patterns in the early-time region of coherent phonon generation in silicon", *Phys. Rev. B* **96**, 125204 (2017).

**B) 査読無し論文**

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Kazuhiro Yabana, "Ab-initio calculations for energy transfer from ultrafast laser pulse to dielectrics ", Ultrafast Bandgap Photonics II, SPIE Defence + Commercial Sensing, Anaheim, USA, Apr. 21, 2017
2. Kazuhiro Yabana, "First-principles description for initial stage of femtosecond laser processing", CLEO2017, San Jose, USA, May. 14, 2017
3. Kazuhiro Yabana, "Maxwell + TDDFT multiscale simulation for strong pulsed-light propagation in dielectrics", CECAM workshop on Bridging the Worlds of Electromagnetic and Quantum simulations, Tel Aviv, Israel, Jun.19, 2017
4. Kazuhiro Yabana, "Ab-initio simulation for dynamics of electrons and light electromagnetic fields in dielectrics" , NANO KOREA 2017 , Ilsan, Korea , Jul.12, 2017
5. Kazuhiro Yabana, "Real-time TDDFT simulation for interactions of ultrashort laser pulses with solids, coupling to Maxwell's equations", Telluride Science Research Center Workshop Excited States: Electronic structure and dynamics, Telluride, USA, Jul.17, 2017
6. Kazuhiro Yabana, "First-principles calculations for ultrafast energy transfer from laser to solids", SPIE Laser Damage, Boulder, USA, Sep.24,2017
7. Kazuhiro Yabana, "First-principles simulation for ultrafast optical dynamics in dielectrics", ITCPS2017: Inter-Institutional Meeting in Interdisciplinary Theoretical and Computational Physical Sciences, Tokyo, Japan, Oct.24,2017
8. Kazuhiro Yabana, "Ab-initio simulations for ultrafast electron dynamics in solids", Ultrafast dynamics and metastability, Washington DC, USA, Nov.13,2017
9. X. M. Tong, "A New FFT based TDDFT method for isolated systems in strong field", 2nd International Conference on Matter and Radiation at Extremes, Beijing, China, Jun.26-30, 2017
10. X. M. Tong, "Ionization of Atoms and Di-Atomic Molecules in Two Color Circularly Polarized Intense Laser Fields", The 10th Asian Symposium on Intense Laser Science, American University of Sharjah, United Arab Emirates, Mar.10~13, 2018
11. Ken-ichi Hino, Yohei Watanabe, Muneaki Hase, Nobuya Maeshima, "Quantum-Mechanical Effects Induced in Coherent Phonon Generation", EMN Meeting on Terahertz 2017, Honolulu, Hawaii, USA ,Apr.1-5, 2017

B) 一般講演

1. Mitsuharu Uemoto, Kazuhiro Yabana, "Maxwell+TDDFT multiscale method for light-matter interaction: light propagation in the microscopic semiconducting crystal", Interdisciplinary

- symposium on modern density functional theory (IDFT), Riken (Wako campus), Japan, Jun.19, 2017
2. Mitsuharu Uemoto, Shintaro Kurata, Norihito Kawaguchi, Kazuhiro Yabana, "First-principles calculations for saturable absorption in graphite", CLEO2017, San Jose, USA, May 14-19, 2017
  3. S. Iwase, Y. Futamura, A. Imakura, T. Sakurai, S. Tsukamoto, and T. Ono, "Contour Integral Method to Evaluate Self-Energy Matrices for Large-Scale Electron Transport Calculations", 18th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, minisymposium on 'Scalable Eigenvalue Computation', March 9, 2018, Tokyo, Japan
  4. T. Ono and S. Tsukamoto, "Improvement of accuracy of wave-function-matching technique for first-principles electron-transport calculation ", APS March Meeting 2018, March 5-9, 2018, Los Angeles, USA
  5. H. Wakaura, "Quantum Error Correction using spin-vortex induced loop currents as qubits", Adiabatic quantum computing conference 2017, GranTokyo South Tower, Tokyo, June 26-29, 2017
  6. H. Koizumi, "Proposal for spin-vortex-induced loop current quantum computer", Adiabatic quantum computing conference 2017, GranTokyo South Tower, Tokyo June 26-29, 2017
  7. X. M. Tong, "A new FFT based TDDFT method for an isolated system in strong field", Physical Chemistry Colloquium, Tohoku University, Sendai, Japan, 2017. Sept. 19-20, 2017
  8. I Floss, G Wachter, C Lemell, S Sato, X. M. Tong, K Yabana, J Burgdörfer, "Simulation of High Harmonic Generation in Solids", XXX International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Cairns, Australia, July 26-Aug. 1, 2017
  9. X. M. Tong, S Borbely, I Brezinova, F Lackner, S Nagele, J Feist, L Nagy, K Tokesi, N Toshima, J Burgdorfer, "Energy straggling cross section for antiproton-atom collisions", XXX International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Cairns, Australia, July 26-Aug. 1, 2017
  10. H. Ibrahim, S. Beaulieu, V. Wanie, T. Endo, B. Wales, X. M. Tong, M.S. Schuurman, J. Sanderson and F. Légaré, "Imaging and Controlling Proton Motion in Molecules", International Conference of Computational methods in sciences and engineering 2017, Thessaloniki, Greece, April 21-25, 2017

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

1. 矢花一浩、"フェルミ多粒子系ダイナミクスのシミュレーション"、「物質階層原理」第一回春合宿、御殿場高原ホテル、2017年5月12日
2. 矢花一浩、"量子（波動）ダイナミクスの第一原理計算と光科学フロンティアへの展開"、サイエンティフィック・システム研究会 HPC フォーラム 2017「計算科学の新たな可能性」、日本、2017年8月30日
3. 矢花一浩、"電子ダイナミクス第一原理計算と光科学への応用"、第31回コンピュータショナル・マテリアルズ・デザインワークショップ、大阪大学、2017年9月15日
4. 矢花一浩、"高強度パルス光と物質の相互作用—第一原理計算からのアプローチ—"、「光操作の最前線」量子エレクトロニクス研究会、上智大学軽井沢セミナーハウス、2017年12月14日
5. 小野倫也、"第一原理計算と高速計算機を用いた材料探索・デバイス設計"、情報機構セミナー、東京、2017年6月13日
6. X.M.Tong、"Giant Resonances in Atoms"、シンポジウム「原子過程科学の歩みと将来」、上智大学四谷キャンパス、2017年9月10日

#### **B) その他の発表**

1. Kazuhiro Yabana, "Real-time time-dependent density functional theory: Basics and applications", Surface Science Colloquium, Institute of Physics, Chinese Academy of Science, Beijing, China, Sep.11,2017
2. Kazuhiro Yabana, "Ab-initio simulation for attosecond spectroscopy in solids", CSRC seminar, Beijing, China, Sep.12,2017
3. Kazuhiro Yabana, "Ab-initio density functional simulation for nano-optics", CCS-EPCC Workshop, 筑波大学, Dec.7,2017
4. 矢花一浩、"高強度パルス光とナノ物質との相互作用の大規模シミュレーション"、第3回 CDMSI ポスト「京」重点課題（7）シンポジウム、東京大学伊藤謝恩ホール、2017年12月5日
5. 矢花一浩、"Ab-initio Density Functional Simulation for Nano-optics"、CCS-LBNL Collaborative Workshop、筑波大学、2018年3月5日
6. 植本光治、佐藤駿丞、廣川祐太、朴泰祐、矢花一浩、"ナノ構造体に対する高強度パルス光励起ダイナミクスの大規模計算"、第2回 CDMSI (ポスト「京」重点課題(7)) 研究会、東京大学、2017年12月5日
7. 植本光治、佐藤駿丞、廣川祐太、朴泰祐、矢花一浩、"半導体3次元ナノ構造の高強度光パルス伝搬に関する第一原理マルチスケール計算"、日本物理学会秋期大会、岩手大学、2017年9月21日

8. 植本光治、佐藤駿丞、廣川祐太、朴泰祐、矢花一浩、"半導体 3 次元ナノ構造の高強度光パルス伝搬に関する第一原理マルチスケール計算"、第 3 回 CDMSI (ポスト「京」重点課題 (7)) シンポジウム、東京大学、2017 年 7 月 11 日
9. 植本光治、佐藤駿丞、廣川祐太、朴泰祐、矢花一浩、"Maxwell+TDDFT マルチスケール第一原理計算 (III) ~ 3 次元ナノ構造と斜方向光入射 ~"、日本物理学会春季大会、東京理科大、2018 年 3 月 22 日
10. 山田篤志、Daniel Neuhauser、Renaud Vallée、"分子制御に基づく光伝搬経路スイッチと光電場増強の機能をもつナノ構造フォトニクスデバイスのシミュレーション開発"、第 65 回応用物理学会春季学術講演会、東京、2018 年 3 月 17 日
11. 山田篤志、矢花一浩、"光・電子融合第一原理シミュレーションソフトウェア SALMON の開発 ~ 光誘起相転移ダイナミクスの研究に向けて ~"、CREST 領域会議、東京、2017 年 12 月 21 日
12. 山田俊介、野田真史、信定克幸、矢花一浩、"高強度パルス光と金属表面の相互作用を記述する第一原理計算の試み"、日本物理学会第 73 回年次大会、東京理科大学野田キャンパス、2018 年 3 月 22 日
13. 小野倫也、"第一原理計算による窒化処理後の SiC/SiO<sub>2</sub> 界面構造探索価"、第 78 回応用物理学会秋季学術講演会、2017 年 9 月 5 日 ~ 8 日、福岡国際会議場
14. 高木謙介、小野倫也、"HfO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub> 界面における酸素空孔欠陥が及ぼすリーク電流の第一原理計算"、2017 年 9 月 5 日 ~ 8 日、福岡国際会議場
15. 岩瀬滋、二村保徳、今倉暁、櫻井鉄也、塚本茂、小野倫也、"周回積分法を用いた電極の自己エネルギーの計算方法の提案と第一原理伝導計算への応用"、日本物理学会第 73 回年次大会、2018 年 3 月 22 日 ~ 25 日、東京理科大学
16. 小泉裕康、"An effort toward fully fault-tolerant quantum computing", CCS-LBNL Workshop、筑波大学、2017 年 3 月 5 日 ~ 6 日
17. 小泉裕康、"U(1)インスタントン形成による超伝導の発現と電圧の量子化"、日本物理学会秋季大会、2017 年 9 月 21 日 - 24 日、岩手大学
18. 小泉裕康、"磁場誘起電荷秩序とフェルミ一面の再構成についての理論的考察"、高温超伝導フォーラム第 5 回会合、岩手大学理工学部テクノホール、2017 年 9 月 24 日
19. 小泉裕康、"Flux rule, U(1)インスタントン、超伝導"、日本物理学会第 73 回年次大会、2018 年 3 月 22 日 ~ 25 日、東京理科大学
20. 林田信明、渡辺陽平、日野健一、長谷宗明、前島展也、"半導体コヒーレントフォノン生成のパルスレーザー依存性"、日本物理学会 2017 年秋季大会 (岩手大) 2017 年 9 月 21 日 - 24 日

21. 出口泰資、前島展也、日野健一、"ジグザグハバード梯子模型のフロケ状態"、日本物理学会 2017 年秋季大会 (岩手大) 2017 年 9 月 21 日-24 日
22. 渡辺陽平、日野健一、長谷宗明、前島展也、"コヒーレントフォノン生成初期時間領域における異常振動型の発現"、日本物理学会 2017 年秋季大会 (岩手大) 2017 年 9 月 21 日-24 日
23. 前島展也、柳松聖吾、牟田純志、日野健一、"1 次元イオン性ハバード模型の動的構造因子"、日本物理学会 2017 年秋季大会 (岩手大) 2017 年 9 月 21 日-24 日

#### (4) 著書、解説記事等

### 7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1. ドイツマックスプランク量子光学研究所のアト秒科学実験グループと、高強度パルスレーザーと固体の相互作用に関する共同研究 (矢花)
2. オーストリアウィーン工科大学の理論グループと、電子ダイナミクスの計算科学的研究に関する共同研究 (矢花)
3. ドイツマックスプランク物質構造動力学研究所の理論グループと、電子ダイナミクスの計算科学的研究に関する共同研究 (矢花)

### 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 矢花 第一回 SALMON チュートリアルの実施、2017 年 11 月 24 日筑波大学計算科学研究センター(矢花)
2. 小野 2017 年 9 月大阪大学にて開催された CMD ワークショップのアドバンストコースで、本グループで開発している第一原理計算コード RSPACE のチュートリアルを行った。2018 年 2 月に大阪大学にて開催された CMD ワークショップのスパコンコースで、本グループで開発している第一原理計算コード RSPACE のチュートリアルを行った。

### 9. 管理・運営

1. 矢花 (センター内) 計算科学研究センター運営委員会委員、人事委員会委員、運営協議会委員、先端計算科学推進室長、共同研究委員会委員、量子物性研究部門長 (学内) 物理学域運営委員、筑波大学 50 年史編纂専門委員会委員、物理学類カリキュラム委員
2. 小泉 応用理工学類、入試実施委員 (副)、筑波大学全学計算機システム、3D サテライト管理

3. トン 中国事務所運営員会委員、筑波大学と中国科学技術大学の連絡員
4. 前島 計算科学研究センター共同利用委員会の一般利用委員会において、当センター大規模一般利用プログラムの申請受付などの業務を担当した。

## 10. 社会貢献・国際貢献

1. 矢花  
平成 29 年度テニユアトラック普及・定着事業委員会委員  
西宮湯川記念賞選考委員会委員長
2. 小野  
ポスト「京」プロジェクト重点課題 7 「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」の産学官連携担当として、ワークショップを開催した。
3. トン  
International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collision の国際運営員として、2017 年第 30 回国際会議に関する投稿論文の審査とプログラムの準備などを担当した。

## 11. その他

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				
助教	庄司 光男				
助教	栢沼 愛				
研究員	原田 隆平	鬼頭-西岡 宏任	佐藤 竜馬	Bui Thi Kieu My	
学生	大学院生 4 名、学類生 2 名				

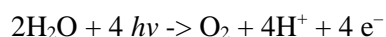
#### 2. 概要

生命機能情報分野では、生体内で重要な働きをしている蛋白質と核酸に注目し、その原子レベルでの特異的機能を理論的に解明することを目的としている。平成 29 年度は、光合成酸素発生中心 (PSII-OEC) の反応機構、宇宙空間におけるアミノ酸生成機構・アルコール分解機構、分子動力学シミュレーションによるナノキューブ形成機構、三重項-三重項消滅に基づくフォトン・アップコンバージョンの理論的研究、シングレットフィッション過程の理論研究、ナトリウム含有遷移金属酸化物の物性解明が大きく進展した。これらの研究では、センターのスーパーコンピュータ (HA-PACS、COMA) を利用している。センター内の共同研究として宇宙物理研究部門および高性能計算システム研究部門と連携し、Post K 萌芽的課題や CREST の研究課題を行なった。また、平成 27 年度より分子進化分野とも共同研究を続けている。

#### 3. 研究成果

##### 【1】 光合成酸素発生中心 (PSII-OEC) の反応機構

光合成は光エネルギーを化学エネルギーに効率的に変換するシステムであり、生命が約 3 億年かけて洗練させてきた優れた化学反応系である。光合成反応は巨大な蛋白質複合体体内で行われ、一連の化学反応：光捕集、電子伝達、ATP 生成と糖生成が行われる。電子伝達を担う光化学系 II では水を分解し、酸素分子を発生する以下の反応を触媒している。



この反応は化学的に安定な水から電子を引き抜いて (酸化して) いる事から分かるように、極めて難しいため、多くの反応制御がなされている。そのため、これらの反応機構を明らかにする事は、生化学的重要性のみならず人工光合成の有益な設計指針を与えるものと期待される。我々は、量子古典混合計算法 (QM/MM) を用いて、PSII-OEC の重要な反応中間体の

電子状態、及び反応機構について理論解析を実施した。具体的には、酸素-酸素結合形成がなされる  $S_3 \rightarrow S_0$  過程における、可能な反応機構を検討し、新たな O-O 結合形成反応経路を見つけた。本反応では、Mn クラスタから Yz ラジカルへの電子移動が O-O 結合形成の反応の引き金となる。これまでの機構と区別するため、Non-adiabatic one-electron transfer (NA-OET) 機構と命名して反応機構を詳細に調べた。他にも  $S_2$ 、 $S_3$  状態での  $Mn_4Ca$  クラスタの特長的構造変化について電子状態から理論解析を行った。

また、 $S_4 \rightarrow S_0$  過程の反応機構の解析及び、これまでの反応経路解析法を元に独自の自動経路探索法 (GLAS) を考案した。今後は、GLAS 法を PSII や他の酵素系に適用し、実証と改良を行っていく予定である。GLAS は Python プログラムで実装しているので、高い拡張性が有る。その為、並列化と種々のルーチン (構造最適化) の高速化を図る。京コンピュータや OFP、COMA での実行も今後実施していきたい。

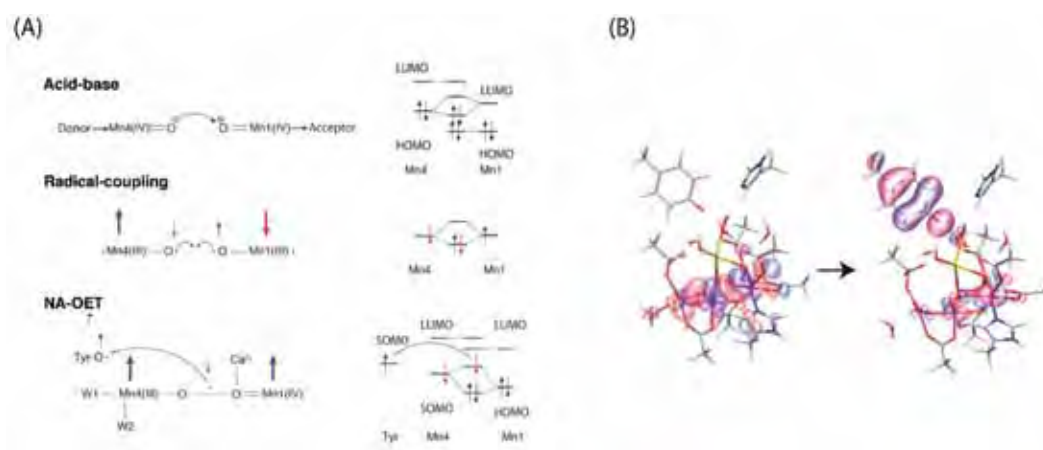


図 1 (A) PSII-OEC における 3 つの O-O 結合形成経路  
(B) NA-OET 機構における  $\beta$  電子の移動 (遷移状態近傍での  $\beta$  HOMO の変化)

## 【2】 宇宙空間におけるアミノ酸生成機構・アルコール分解機構

地球外環境下でのアミノ酸生成に関しては様々な反応経路が提唱されている。アミノアセトニトリルからヒダントインが生成し (Bücherer-Bergs 反応、図 2)、ヒダントインが加水分解されてグリシンが生成する反応経路を、密度汎関数法 (DFT) を用いて解析した。

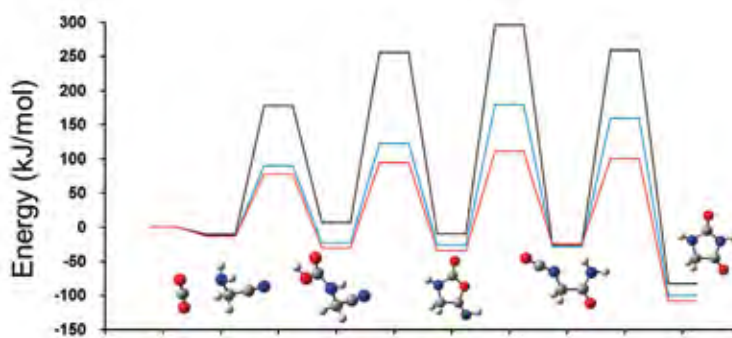


図 2 ヒダントインが形成する反応機構

アミノアセトニトリルは星間雲で観測されており、また、ヒダントインも隕石から検出

されているなど、ともに宇宙化学において重要な有機分子である。各反応ステップの反応障壁を計算して反応機構の詳細を明らかにし、また、触媒となる水分子を 2 個考慮した計算を行い比較することで、本反応（特にヒダントインの形成）において、触媒となる水分子が重要であることを示した。しかし、反応障壁の高さから、この反応は星間空間では起こらず、隕石中など高温環境で起こる反応であることが示された。

また、グリシンが生成する別の機構として、星間分子である  $\text{CH}_3\text{OH}$ 、 $\text{HCN}$ 、 $\text{NH}_3$  のラジカル反応による生成経路が提案されているが、その中から、 $\text{NH} + \text{CH}_2\text{COOH}$ 、 $\text{NH}_2\text{CH}_2 + \text{COOH}$ 、 $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CO} + \text{OH}$  の 3 つの反応経路を DFT 法を用いて解析した。その結果、反応障壁が低い ( $\leq 7.75 \text{ kJ/mol}$ ) 2 つの反応経路を明らかにし、星間空間のように低温環境においてもグリシン生成が起こり得ることを示した。

宇宙環境下においてラジカルが生成する主な反応機構の一つに、紫外線による光解離反応がある。星間空間において重要な有機分子の一つであるメタノール ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ) の、気相中での光解離反応の機構を明らかにするため、時間依存 DFT (TD-DFT) により、励起状態ダイナミクスシミュレーションを行った。実験的に、水素原子が解離する場合、C-H 結合の解離よりも O-H 結合の解離の方が起こり易いことが報告されているが、その理由として、第一励起状態が重要であることを示した。

### 【3】 分子動力学シミュレーションによるナノキューブ形成機構

生体分子に限らず有機分子も自己集合により凝集し、機能を有する分子集合体を形成する。自己集合過程において、単量体間の様々な相互作用を介して多量体を形成するそのメカニズムを解明することは、将来における機能性分子設計の貴重な設計指針となる。本年度は、有機分子が自己集合により形成する 6 量体の複合体構造であるナノキューブ (**16**)

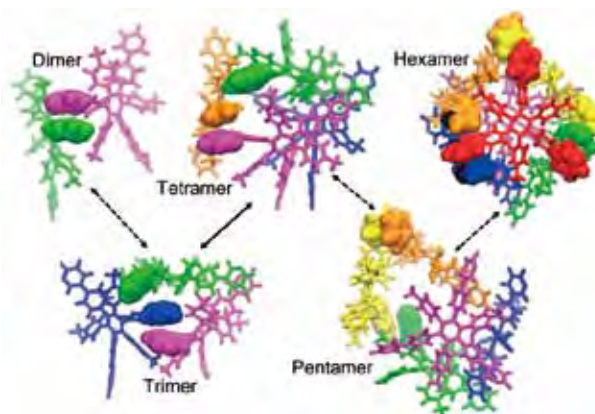


図 3 ナノキューブ (**16**) の解離過程

に着目し、その形成機構を分子動力学 (MD) シミュレーションにより解析した。計算科学的な問題として、ナノキューブが形成される時間スケールは MD シミュレーションで追跡可能な時間スケールとして遥に長時間スケールであり、通常の MD シミュレーションでは抽出することが極めて困難である。また、その形成機構は確率的であるため不確実性が常に伴うレアイベントであり、長時間の MD シミュレーションが実現したとしても、確実に抽出することが出来る保証がない。そこで、ナノキューブ形成機構を抽出するために、本来、生体分子の機能発現に関係する長時間の構造変化を抽出するために開発した構造探索法である

Structural dissimilarity sampling (SDS) を有機分子の自己集合過程に適用した。SDS は、お互いに構造類似性が低い初期構造を選択し、短時間の MD シミュレーションで構造探索を繰り返していくことで可能な限り重複を避けた効率的な構造探索を実現し、生体分子のレアイベントを抽出する目的で開発された。本研究では、ナノキューブ (6 量体) を初期構造とし、探索構造を多次元空間における高次元ベクトルとみなし、探索構造間の内積を定義することで構造類似性を表現した。具体的には、探索構造間の内積が小さい初期構造を再選択し、短時間 MD シミュレーションをリスタートしていくことで、ナノキューブ構造を逐次的に解離させることに成功した。具体的には、サイクルあたり 25 個の初期構造を探索構造間の内積を参照にして再選択し、初期構造あたり 100ps の短時間 MD シミュレーションをリスタートさせることで構造探索を繰り返した。

図 3 に SDS を適用することで得られたナノキューブの解離過程を示す。中間体状態として、5 量体、4 量体、3 量体、2 量体構造が存在し、各々の中間体構造において芳香族環のスタッキングやメチル基間の疎水性相互作用を介して準安定状態として安定的に存在していることが明らかになった。今後は、本研究により得られた詳細な解離機構の知見を機能性有機分子設計へ応用していく予定である。

#### 【4】 三重項-三重項消滅に基づくフォトン・アップコンバージョンの理論的研究

低エネルギーの光を高エネルギーの光に変換する技術としてフォトン・アップコンバージョン (UC) が知られている。近年、三重項-三重項消滅 (TTA) を利用した UC に注目が集まっている。現在、太陽光を利用した技術は多く開発されているがそれらの技術は太陽光に多く含まれている赤外・近赤外領域の光を利用できていない。そこで TTA-UC を用いて赤外・近赤外領域の光を可視・紫外領域の光へ変換することでこれまで以上の反応効率を実現できると期待されている。

本年度は、溶液系における 9,10-ジフェニルアントラセン (DPA) およびその誘導体 ( $C_n$ -sDPAs) に対して分子動力学 (MD) 計算および量子化学計算を用いてその反応機構を調べた。TTA は二つの三重項状態の分子が接近した際にそれぞれの分子から電子が移動することで反応が進行する。本研究では、それぞれの分子の二量体モデルに対してフラグメント分子軌道

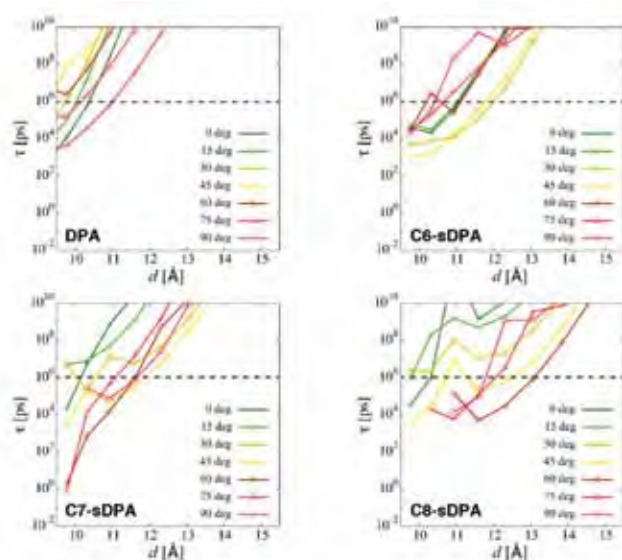


図 4 DPA および  $C_n$ -sDPAs の TTA における電子移動時間

(FMO) 法および FMO-linear combination of molecular orbitals (FMO-LCMO) 法を用いて電子の移動速度を算出した (図 4)。その結果、従来用いられている DPA よりも新たに提案された Cn-sDPAs のほうが電子移動時間が短いことがわかった。特に分子間距離が離れていてもある程度短い時間で電子が移動できることを示しており、この結果は反応効率の上昇を示唆している。また接近する際の分子配向の依存性についても DPA に比べて Cn-sDPAs は広い範囲で電子移動時間が短いこともわかった。実際、実験によって C7-sDPA が DPA よりも反応効率が高いことが報告されている。今後は溶液系では実用化することが困難であることから固体系の適用が考えられており、固体系における反応機構の解析および高効率を実現できる新たな誘導体を提案する予定である。

### 【5】 シングレットフィッシュン過程の理論研究

シングレットフィッシュン (SF) とは、一重項励起子が 2 つの三重項励起子に分裂する現象で、アセン分子結晶で観測される。この現象を利用すると、単一接合太陽電池の持つ約 34% の太陽エネルギー利用効率限界を、最大で約 46% まで改善できる可能性が理論的に示されている。そこで、より良いエネルギー変換効率を持つ太陽電池を分子スケールで設計するためには、SF の微視的メカニズムを理解することが重要になる。

本研究では、SF 反応速度の測定値と分子結晶構造データが存在する、9 種類のテトラセン/ペンタセンアトトラセン誘導体の分子結晶中の

SF 反応に対して、準透熱波動関数に基づくモデルハミルトニアンを構築し、その微視的メカニズムを第一原理的に調べた。代表的な透熱基底変換法として Nakamura & Truhlar の "fourfold-way" 法があるが、今回新たに ORMAS-CI 計算を利用した、より計算コストの低い透熱基底変換法を提案し、両者を比較・検討した。

まず、電荷移動励起状態 (CT) をヴァーチャルに介した超交換機構によって生成される、局在一重項励起状態 (FE) ともつれ合った三重項励起状態 (TT) の間の電子的相互作用 (SF 相互作用) を、完全活性空間 (CAS) -SCF レベルで計算した。その結果、SF 相互作用の計算値は、SF 反応速度の実験値の傾向を再現した。また、適用した二種類の透熱基底変換法は、ほぼ同様の結果を生み出した。次に、動的電子相関の影響を調べるために、擬縮退摂動理論 (XMCQDPT2) レベルで SF 相互作用を計算した。XMCQDPT2 は、CASSCF が CT 状態のエネルギーレベルを過少評価した場合に、結果を大きく改善することが分かった。

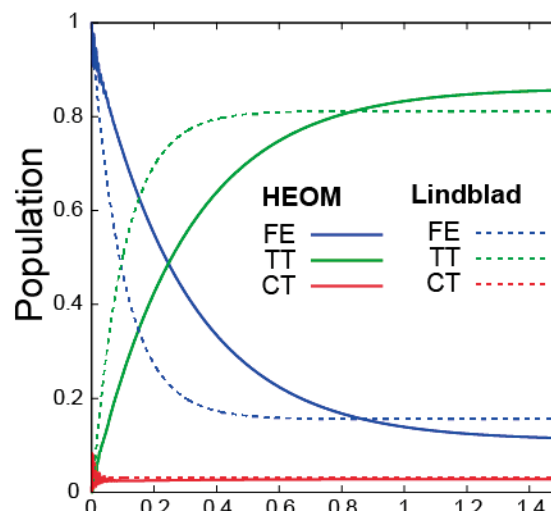


図 5 量子マスター方程式を用いた、ペンタセン二量体 SF の Population ダイナミクス

最後に構築したモデルハミルトニアンに量子マスター方程式を適用して、量子散逸効果を考慮した電子状態ダイナミクスシミュレーションを実行した。図 5 は、ペンタセン二量体に対して、マルコフ近似を用いた Lindblad マスター方程式と、非マルコフ効果を考慮した階層方程式 (HEOM) を用いた計算結果である。CT 状態をヴァーチャルに使うため、CT 状態に Population を持たず、FE/TT の Population が単一指数関数的に減少/増大する。また図 5 から、マルコフ近似を用いた Lindblad マスター方程式が、HEOM による SF 速度の見積もり約  $2.5\text{ps}^{-1}$  を、 $6.7\text{ps}^{-1}$  と過大評価することも分かる。

## 【6】 ナトリウム含有遷移金属酸化物の物性解析

電気自動車による長距離移動や、再生可能エネルギー源のメガワット貯蔵などの技術を確認するためには、高性能なバッテリーが必要となる。従来の Li イオン電荷キャリアに関しては、リチウム資源が希少かつ地球全体に不均一に分布することから、将来的に厳しい制約を受けることが考えられる。一方、Li の代替として Na イオンを用いることも有望であるが、多くの課題が山積している。例えば、Na は Li に比べてイオン半径が大きくイオン化ポテンシャルが小さいため、Na 系陰極ではエネルギー密度が低下する。したがって、Na イオンベースの陰極を Li レベルにするには、あらゆる性能向上メカニズムについて注意深く調整する必要がある。

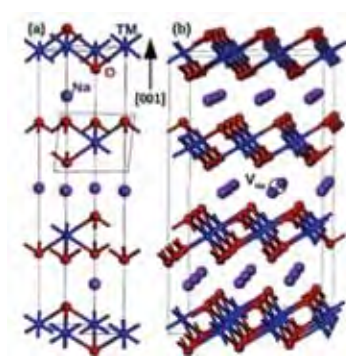


図 6 NaTMO<sub>3</sub> の構造

本研究では、右図の構造を持つ第 4 周期から第 5 周期の遷移金属 (TM) を含むナトリウム含有遷移金属酸化物 (NaTMO<sub>3</sub>) の密度汎関数計算法によるバンド計算を行い、酸化状態と還元状態のエネルギー差から電極電位を評価した。計算結果より、測定結果のある解に関してはその実測値をよく再現していることを示した。また、TM-O 結合のイオン性よりもむしろ、酸化に伴う TM 周りの酸素配位の歪みとそれに付随する磁気的な交換相互作用が、陰極電位を支配していることを明らかにした。本研究を通じて、従来のイオン化ポテンシャルに基づく物質設計指針に代わる、遷移金属の電子配置とその変化に基づく設計指針を提案した。

## 4. 教育

### 【卒業研究発表】

石川航平、「Cytochrome *c* dimer の構造安定性と物性に関する理論的研究」

佐藤雄太、「束縛条件下での構造最適化」

### 【修士課程修了】

喜屋武茜、「テルペンの生成機構の理論研究：ワインラクトン生成の立体選択性」

【博士課程修了】

佐藤皓允、「First-Principle Studies on the Origin of Amino Acid Chirality in Interstellar Space」

【講義】

庄司光男、計算物理学 2、物理学類専門科目、春 ABC

重田育照、計算物理学 3、物理学類専門科目、秋 ABC

重田育照・庄司光男、生物物理学 I、物理学類専門科目、秋 AB

重田育照、生物物理科学、物理学類専門科目、春 ABC

重田育照、物性理論 I、物理学専攻専門科目、春 ABC

## 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

### 受賞

1. 原田隆平、第 67 回日本化学会進歩賞（2018 年 3 月 21 日）
2. Y. Shigeta, "22<sup>nd</sup> QSCP (*Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology*) Promising Scientist Award", Centre de Mécanique Ondulatoire Appliquée (CMOA) (2017). Oct. 19<sup>th</sup> 2017.
3. R. Sato, R. Harada, Y. Shigeta, *4th Biophysics and Physicobiology Editors' Choice Award*. "Theoretical analyses on a flipping mechanism of UV-induced DNA damage", *Biophysics and Physicobiology* **13**, 311-319 (2016), The Biophysical Society of Japan (2017). 19<sup>th</sup> Jul. 2017

### 外部資金

【研究代表者】

1. 新学術領域研究「複合光応答」計画研究、重田育照（代表者）（平成 26～30 年度）  
「実験と理論の協奏的アプローチによる多重スピン励起子変換制御」
2. 若手研究（A）、庄司光男（研究代表者）（平成 29 年～31 年度）「光化学系 II 酸素発生中心における水分解反応の全反応経路解明」
3. 若手研究（A）、原田隆平（研究代表者）（平成 28 年～30 年度）「G タンパク質共役受容体におけるシグナル伝達機構の解明」

【分担研究者】

1. Post K 重点課題 7A、重田育照（代表者：押山淳 教授）（平成 28～31 年度）「高機能半導体デバイス」
2. 基盤研究（B）、庄司光男（代表者：岡島 俊英）（平成 28～31 年度）「酵素活性中心の構造変化とゆらぎにリンクする触媒反応遷移状態の制御機構」
3. 挑戦的萌芽研究、庄司光男（代表者：相川 祐理）（平成 28～31 年度）「計算科

学によるアストロバイオロジーへの理論的挑戦」

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

1. R. Harada, Y. Shigeta, "Self-Avoiding Conformational Sampling (SACS) Based on Histories of Past Conformational Searches", *Journal of Chemical Information and Modeling* **57**, 3070-3078 (2017). DOI: 10.1021/acs.jcim.7b00573.
2. M. Hada, S. Saito, S. Tanaka, R. Sato, M. Yoshimura, K. Mouri, K. Matsuo, M. Hara, Y. Hayashi, Y. Shigeta, S. Yamaguchi, K. Onda, R. J. D. Miller, "Structural monitoring of the onset of excited-state aromaticity in a liquid crystal phase", *Journal of the American Chemical Society* **139**, 15792–15800 (2017). DOI: 10.1021/jacs.7b08021
3. Y. Sasano, R. Sato, Y. Shigeta, N. Yasuda, H. Maeda, "H-aggregated  $\pi$ -systems based on disulfide-linked dimers of dipyrrolyldiketone boron complexes", *The Journal of Organic Chemistry* **82**, 11166–11172 (2017). DOI: 10.1021/acs.joc.7b02185
4. M. Kayanuma, K. Kidachi, M. Shoji, Y. Komatsu, A. Sato, Y. Shigeta, Y. Aikawa, M. Umemura, "A theoretical study of the formation of glycine via hydantoin intermediate in outer space environment", *Chemical Physics Letters* **687**, 178-183 (2017). DOI: 10.1016/j.cplett.2017.09.016
5. T. Matsui, Y. Shigeta, K. Morihashi, "Assessment of Methodology and Chemical Group Dependences in the calculation of the  $pK_a$  Value and Gibbs Energy of a Proton", *Journal of Chemical Theory and Computation* **13**, 4791-4803 (2017). DOI: 10.1021/acs.jctc.7b00587
6. H. Konishi, M. Matsubara, K. Mori, T. Tokiwa, S. Arulmozhiraja, Y. Yamamoto, Y. Ishikawa, H. Hashimoto, Y. Shigeta, H. Tokiwa, K. Manabe, "Controlling CO Generation: Mechanistic Insight into Weak-Base-Catalyzed Generation of Carbon Monoxide from Phenyl Formate and Its Application to Catalytic External-CO-Free Carbonylation at Room Temperature", *Advanced Synthesis & Catalysis*, **359**, 3592-3601(2017). DOI: 10.1002/adsc.201700751
7. R. Harada, Y. Shigeta, "An Assessment of Optimal Time Scale of Conformational Resampling in Parallel Cascade Molecular Dynamics", *Molecular Simulation* **44**, 206-212 (2017). DOI: 10.1080/08927022.2017.1362696
8. R. Harada, Y. Shigeta, "Dynamic Specification of Initial Structures in Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics (PaCS-MD) Efficiently Promotes Biologically Relevant Rare Events", *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, **90**, 1236-1243(2017). DOI: 10.1246/bcsj.20170177



9. R. Harada, Y. Shigeta, "Temperature-shuffled parallel cascade selection molecular dynamics accelerates the structural transitions of proteins", *Journal of Computational Chemistry (Rapid Communication)* **38**, 2671–2674 (2017). DOI: 10.1002/jcc.25060
10. H. Yotsuji, K. Higashiguchi, R. Sato, Y. Shigeta, K. Matsuda, "Phototransformative Supramolecular Assembly of Amphiphilic Diarylethenes Realized by the Combination of Photochromism and Lower Critical Solution Temperature Behavior", *Chemistry - A European Journal*, **23**, 15059-15066(2017). DOI: 10.1002/chem.201702202.
11. R. Harada, Y. Shigeta, "Structural Dissimilarity Sampling with Dynamically Self-Guiding Selection", *Journal of Computational Chemistry* **38**, 1921-1929(2017). DOI: 10.1002/jcc.24837
12. Y. Shigeta, R. Harada, R. Sato, H. Kitoh-Nishioka, T. K. M. Bui, A. Sato, A. Kyan, Y. Ishii, M. Kimatsuka, S. Yamasaki, M. Kayanuma, M. Shoji, "Classical Cumulant Dynamics for Statistical Chemical Physics", *Molecular Simulation* **43** (13-16), 1260-1268(2017). DOI: 10.1080/08927022.2017.1315770
13. Y. Kitagawa, M. Asaoka, Y. Natori, K. Miyagi, R. Teramoto, T. Matsui, Y. Shigeta, M. Okumura, M. Nakano, "Theoretical study on relationship between spin structure and electron conductivity of one-dimensional tri-nickel (II) complex", *Polyhedron* **136**, 125-131(2017). DOI: 10.1016/j.poly.2017.02.020
14. Y. Ujiie, W. Tanaka, K. Hanaoka, R. Harada, M. Kayanuma, M. Shoji, T. Murakawa, T. Ishida, Y. Shigeta, H. Hayashi, "Molecular Mechanism of the Reaction Specificity in Threonine Synthase: Importance of the Substrate Conformations", *Journal of Physical Chemistry B* **121**, 5536-5543(2017). DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b02932
15. J. Fujita, R. Harada, Y. Maeda, Y. Saito, E. Mizohata, T. Inoue, Y. Shigeta, H. Matsumura, "Identification of the key interactions in structural transition pathway of FtsZ from *Staphylococcus aureus*", *Journal of Structural Biology* **198**, 65-73 (2017). DOI: 10.1016/j.jsb.2017.04.008
16. Y. Kobayashi, H. Okajima, H. Sotome, T. Yanai, K. Mutoh, Y. Yoneda, Y. Shigeta, A. Sakamoto, H. Miyasaka, J. Abe, "Direct Observation of the Ultrafast Evolution of Open-Shell Biradical in Photochromic Radical Dimer", *Journal of the American Chemical Society* **139**, 6382-6389 (2017). DOI: 10.1021/jacs.7b01598
17. R. Sato, H. Kitoh-Nishioka, T. Yanai, Y. Shigeta, "Theoretical Analyses on Triplet-triplet Annihilation Process of 9,10-diphenylanthracene in Solution", *Chemistry Letters* **46**, 873-875 (2017). DOI: 10.1246/cl.170161

18. R. Harada, Y. Shigeta, "How does the number of initial structures affect the conformational sampling efficiency and quality in Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics (PaCS-MD)?", *Chemistry Letters* **46**, 862-865 (2017). DOI: 10.1246/cl.170207
19. R. Harada, Y. Shigeta, "Efficient conformational search based on Structural Dissimilarity Sampling: Applications to reproductions of structural transitions on Maltodextrin Binding Protein", *Journal of Chemical Theory and Computation* **13**, 1411-1423(2017). DOI: 10.1021/acs.jctc.6b01112
20. R. Yamakado, Y. Ashida, R. Sato, Y. Shigeta, N. Yasuda, H. Maeda, "Cooperatively Interlocked [2+1]-Type  $\pi$ -System-Anion Complexes", *Chemistry A European Journal*, **23**, 4160–4168 (2017). DOI: 10.1002/chem.201605765
21. R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, "Common folding processes of mini proteins: Partial formations of secondary structures initiate the immediate protein folding", *Journal of Computational Chemistry* **38 (Front Cover)**, 790-797(2017). DOI: 10.1002/jcc.24748
22. M. Shoji, H. Isobe, T. Nakajima, Y. Shigeta, M. Suga, F. Akita, J.-R. Shen, K. Yamaguchi, "Large-scale QM/MM calculations of the CaMn<sub>4</sub>O<sub>5</sub> cluster in the S<sub>3</sub> state of the oxygen evolving complex of photosystem II. Comparison between water-inserted and no water-inserted structures", *Faraday Discussions* **198**, 83-106 (2017). DOI: 10.1039/C6FD00230G
23. Y. Abe, M. Shoji, Y. Nishiya, H. Aiba, T. Kishimoto, K. Kitaura, "Reaction mechanism of sarcosine oxidase elucidated using FMO and QM/MM methods", *Physical Chemistry Chemical Physics* **19**, 9811-9822 (2017). DOI: 10.1039/C6CP08172J.
24. H. Kitoh-Nishioka, K. Welke, Y. Nishimoto, D. G. Fedorov, S. Irle "Multiscale Simulations on Charge Transport in Covalent Organic Frameworks Including Dynamics of Transfer Integrals from FMO-DFTB/LCMO", *The Journal of Physical Chemistry C*, **121**, 17712-17726 (2017). DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b05779

## B) 査読無し論文

1. Y. Imai, T. Yamamoto, Y. Okano, R. Sato, Y. Shigeta, "Molecular Dynamics Simulation of the Nano-scale Solutal Marangoni Convection", *Asean Journal of Chemical Engineering* **17**, 29-36 (2017).

## (2) 国際会議発表

### A) 招待講演

1. M. Kayanuma, M. Shoji, Y. Shigeta, "QM/MM Studies of the Reaction Mechanisms of Metalloenzymes", *International Congress on Pure & Applied Chemistry 2018 (ICPAC2018)*, Mar. 7<sup>th</sup>-10<sup>th</sup> 2018, Siem Reap, Cambodia.
2. Y. Shigeta, "Theoretical Analyses on Triplet-triplet Annihilation Processes of 9,10-diphenylanthracene and derivatives in solution", *8<sup>th</sup> Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 8)*, Dec. 15<sup>th</sup>-17<sup>th</sup> 2017, Mumbai, India.
3. Y. Shigeta, "An Enhanced Sampling Method for Searching Conformational Changes of Proteins and Supramolecules", *22<sup>nd</sup> International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP-XXII)*, Oct.16<sup>th</sup>-24<sup>th</sup> 2017 Hunan Province, P.R. China.
4. Y. Shigeta, "Triplet-triplet Annihilation Processes of 9,10-diphenylanthracene and derivatives in solution", *The 9<sup>th</sup> Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science*, Aug. 8<sup>th</sup>-11<sup>th</sup> 2017, Kuala Lumpur, Malaysia.
5. Y. Shigeta, "Simple conformational search methods for understanding biological functions", *10<sup>th</sup> China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture*, May 14<sup>th</sup>-17<sup>th</sup> 2017, Wuhan, China.

#### B) 一般講演

1. R. Sato, H. Kitoh-Nishioka, Y. Shigeta, "Theoretical Analyses on Triplet-triplet Annihilation Processes of 9,10-diphenylanthracene and derivatives in solution" (**Oral**), *28<sup>th</sup> International Conference on Photochemistry*, July 16<sup>th</sup>-21<sup>st</sup>, Strasbourg Convention + Exhibition Centre, Strasbourg, France.
2. Y. Shigeta, K. Okuno, R. Kishi, M. Nakano, "Theoretical Studies on Nonlinear Optical and Solvatochromism Switches of Diarylethenes" (**Oral**), *12<sup>th</sup> Phenics International Network Symposium*, University of Strasbourg, Strasbourg, France.
3. M. Shoji, Y. Kitazawa, A. Sato, Y. Shigeta, M. Umemura, "A quantum chemical study of the glycine formation reactions in interstellar medium" (**Oral**), *AstroBiology Center international workshop*, Mar. 21st-23rd 2017, Hiroshima University, Hiroshima, Japan.

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

1. Y. Shigeta, "Computational Studies on Tautomerism in Protein Environment", 第 55 回生物物理学会シンポジウム「タンパク質科学におけるケトエノール異性」、September 19<sup>th</sup>-21<sup>st</sup> 2017、熊本大学黒髭キャンパス、熊本。

2. 庄司光男, "星間空間におけるアミノ酸生成と光不斉化についての量子化学的探究", 天体形成論 ~過去・現在・未来~, Sep. 21<sup>st</sup> 2017, 筑波大学学生会館, つくば.
3. M. Shoji, S. Yamasaki, M. Kayanuma, Y. Shigeta, "Reaction mechanisms of iron-containing proteins elucidated using QM/MM calculations", *The 55th annual meeting of the biophysical Society of Japan*, Sep. 19<sup>th</sup> 2017, Kumamoto Univ., Kumamoto, Japan.
4. 原田隆平, "生物学的レアイベントを効率的に再現・予測する構造サンプリング手法の開発", 物性研究所スパコン共同利用 CCMS 合同研究会「計算物質科学の今と未来」Apr. 4<sup>th</sup> 2017, 東京大学, Kashiwa, Japan.
5. 原田隆平, "生物学的レアイベントを再現/予測する効率的構造サンプリング手法の開発", 新学術領域「柔らかな分子系」ワークショップ「若手研究者が描く分子理論の未来」Sep. 14<sup>th</sup> 2017, 東北大学, Sendai, Japan.
6. 原田隆平, "生物学的レアイベントを再現/予測する効率的構造サンプリング手法の開発", 第3回近電セミナー, Dec. 13<sup>th</sup> 2017, 電気通信大, Fuchu, Japan.
7. 鬼頭(西岡)宏任, "一重項励起子分裂の量子化学計算", 研究会「凝縮系の理論化学」, Mar. 13<sup>th</sup> 2018, 沖縄県青年会館, Naha, Japan.

## B) その他の発表

1. Y. Shigeta, "Simple conformational search methods for understanding biological functions: Application to conformational changes of GDP bound SaFitZ" (**Poster**), *Swedish-Japanese Workshop on Nano-Structure Science by Novel Light Sources*, Oct. 2<sup>nd</sup>-3<sup>rd</sup> Lund University, Lund, Sweden.
2. Bui Thi Kieu My, Y. Shigeta, J. Iwata, A. Oshiyama, "RSDFTによるGaN表面反応解析、およびRSCPMのGPU実装" (**Oral**), 第2回 CDMSI (ポスト「京」重点課題(7)) 研究会, July 11<sup>th</sup>-12<sup>th</sup> 2017, 東京大学, Tokyo, Japan.
3. Y. Shigeta, "理論と実験の協奏的アプローチによる複合スピン励起子変換制御" (**Oral, Poster**), 新学術領域研究「高次複合光応答」第2回領域会議, May 19<sup>th</sup>-20<sup>th</sup> 2017, 大阪大学, Toyonaka, Japan.
4. Y. Shigeta, "実空間密度汎関数法に基づくCar-Parrinello分子動力学法のGPGPU実装" (**Poster**), 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の今と未来」, Apr. 3<sup>rd</sup>-4<sup>th</sup> 2017, 東京大学, Kashiwa, Japan.
5. Y. Shigeta, "理論と実験の協奏的アプローチによる複合スピン励起子変換制御" (**Oral, Poster**), 新学術領域研究「高次複合光応答」第5回公開シンポジウム, Jan. 20<sup>th</sup>-21<sup>st</sup> 2017, 大阪大学, Toyonaka, Japan.

6. 庄司光男、村川武志、岡島俊英、重田育照、”銅含有アミン酸化酵素における触媒反応中のプロトン化状態についての理論的解明” (**Poster**), 第 17 回日本蛋白質科学会年会, Jun. 22<sup>nd</sup> 2017, 仙台国際センター, 仙台.
7. M. Shoji, H. Isobe, Y. Shigeta, T. Nakajima, J.-R. Shen, K. Yamaguchi, "Large-scale QM/MM study on the S1 state structures of the oxygen-evolving complex in photosystem II" (**Poster**), *The 67th Japan Society of Coordination Chemistry Symposium*, Sep. 18<sup>th</sup> 2017, Sapporo Hokkaido, Japan.
8. M. Shoji, H. Isobe, Y. Shigeta, T. Nakajima, K. Yamaguchi, "QM/MM study on the O<sub>2</sub> release mechanism of the oxygen-evolving complex in photosystem II" (**Oral**), *The 55th annual meeting of the biophysical Society of Japan*, Sep. 20<sup>th</sup> 2017, Kumamoto Univ., Kumamoto, Japan.
9. M. Shoji, H. Isobe, Y. Shigeta, T. Nakajima, K. Yamaguchi, "QM/MM study on a S<sub>4</sub> -> S<sub>0</sub> reaction of the Oxygen Evolving Complex in Photosystem II"(**Poster**), *Car-Parrinello Molecular Dynamics in 2017*, Oct. 19<sup>th</sup> 2017, Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Japan.
10. M. Kayanuma, M. Shoji, Y. Aikawa, M. Umemura, Y. Shigeta, "Surface Hopping Simulation on the Photodissociation of Methanol"(**Poster**), CPMD2017 Workshop, 2017. 10., Tsukuba (Japan),
11. M. Kayanuma, M. Shoji, Y. Aikawa, M. Umemura, Y. Shigeta, "Theoretical study on the photodissociation of methanol in the interstellar medium"(**Poster**), *28<sup>th</sup> International Conference on Photochemistry*, July 16<sup>th</sup>-21<sup>st</sup>, Strasbourg Convention + Exhibition Centre, Strasbourg, France.
12. 原田隆平、重田育照、"生物学的レイアイイベントを再現/予測するタンパク質構造サンプリング手法の開発" (**Poster**), 第17回日本蛋白質科学会年会, Jun. 22<sup>nd</sup> 2017, 仙台国際センター, Sendai, Japan.
13. 佐藤竜馬、重田育照、"Theoretical Analyses on Triplet-Triplet Annihilation Based Photon Upconversion Mechanism for Solution and Crystal States" (**Poster**)、第 5 回分子システム科学国際シンポジウム、Dec. 5<sup>th</sup>-6<sup>th</sup> 2017, 九州大学, Fukuoka, Japan.
14. 佐藤竜馬、原田隆平、重田育照、"光回復酵素と DASH 型クリプトクロムにおける紫外線損傷二本鎖 DNA の結合に寄与する因子の特定"(**Oral**), 第 55 回日本生物物理学会年会, Sep. 19<sup>th</sup>-21<sup>st</sup> 2017, 熊本大学, Kumamoto, Japan.
15. 佐藤竜馬、鬼頭-西岡宏任、鎌田賢司、柳井 毅、重田育照、"三重項-三重項消光によるフォトン・アップコンバージョンの高効率化に向けた反応機構の理論的解析" (**Oral**), 第 11 回分子科学討論会, Sep. 15<sup>th</sup>-18<sup>th</sup> 2017, 東北大学, Sendai, Japan.

16. 佐藤竜馬、重田育照、"9,10-ジフェニルアントラセン誘導体の三重項-三重項消滅に基づくフォトン・アップコンバージョンに関する理論的研究"**(Poster)**、第3回「高次複合光応答」若手の会、Sep. 11<sup>th</sup>-12<sup>th</sup>、晴海グランドホテル, Tokyo, Japan.
17. 佐藤竜馬、鬼頭-西岡宏任、鎌田賢司、溝黒登志子、柳井 毅、小林健二、重田育照、"9,10-ジフェニルアントラセン誘導体の三重項-三重項消光アップコンバージョン過程に対する理論的研究" **(Oral)**、2017 年光化学討論会、Sep. 4<sup>th</sup>-6<sup>th</sup> 2017, 東北大学, Sendai, Japan.
18. 佐藤竜馬、重田育照、「三重項-三重項消滅に基づくフォトン・アップコンバージョン機構の理論的解析」**(Oral, Poster)**、新学術領域研究「高次複合光応答分子システムの開拓と学理の構築」第2回領域会議・第6回若手セミナー, May 19<sup>th</sup>-20<sup>th</sup> 2017, 大阪大学, Toyonaka, Japan.
19. Kieu My Bui, Junichi Iwata, Atsushi Oshiyama, Yasuteru Shigeta; "First-principles analysis of ammonia adsorption and desorption on GaN surface"**(Poster)**, *The 20th Asian workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations*, Oct. 30<sup>th</sup> – Nov. 1<sup>st</sup>, Nanjing, China.
20. Kieu My Bui, Junichi Iwata, Atsushi Oshiyama, Yasuteru Shigeta; "First-principles analysis of ammonia adsorption and desorption on GaN surface"**(Poster)**, *The 3rd CDMSI Symposium: Creation of new functional Devices and high-performance Materials to Support next-generation Industries (CDMSI)*, Dec. 5<sup>th</sup>-6<sup>th</sup>, 2017, Tokyo, Japan.
21. 鬼頭宏任, "生体系と有機半導体における電荷移動現象の量子化学計算とシミュレーション", 神戸大学大学院システム情報学研究科セミナー, Dec. 27<sup>th</sup> 2017, 神戸大学.
22. 鬼頭宏任, "シングレットフィッションの理論解析手法の開発"**(Oral)**, 第一回プレ戦略研究会「次世代物質・デバイス戦略開発拠点」, Dec. 11<sup>th</sup> 2017, 筑波大学.
23. 鬼頭(西岡) 宏任, 佐藤竜馬, 重田育照, "CASSCF法を用いた一重項励起子分裂の電子相互作用計算"**(Oral)**, 第11回分子科学討論会, Sep. 15<sup>th</sup>-18<sup>th</sup> 2017, 東北大学 川内北キャンパス.
24. Hirotaka Kitoh-Nishioka, Kai Welke, Yosio Nishimoto, Dmitri G. Fedorov, and Stephan Irle, "Multiscale Simulations on Charge Transport in Covalent Organic Frameworks" **(Poster)**, *The 58th Sanibel Symposium*, Feb. 18th-23rd 2018, St. Simons Island, Georgia, USA.
25. Hirotaka Kitoh-Nishioka, Ryuma Sato, and Yasuteru Shigeta, "Study on Singlet Fission Using Model Hamiltonian Based on Quasi-Adiabatic CASSCF/MCQDPT2 Wave functions" **(Poster)**, *2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology (Workshop of Pre-Strategic Initiatives)* Mar. 8th-9th 2018, University of Tsukuba, Tsukuba, Japan.

26. S. Yamasaki, M. Shoji, Y. Shigeta, "A QM/MM study on the oxygen-binding structure of alternative oxidase"**(Poster)**, CPMD2017, Oct. 18<sup>th</sup>-20<sup>th</sup> 2017, Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Japan.
27. S. Yamasaki, M. Shoji, Y. Shigeta, "QM/MM study on the oxygen-binding structure of trypanosome alternative oxidase (TAO)"**(Poster)**, TGSW-IWP2017, Sep. 25<sup>th</sup>-27<sup>th</sup> 2017, Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Japan.
28. 山崎笙太郎、庄司光男、重田育照、"シアン耐性酸化酵素における酸素分子結合構造についての理論的研究"**(Oral)**, 第11回分子科学討論会, Sep. 15<sup>th</sup>-18<sup>th</sup> 2017, 東北大学, Sendai, Japan.
29. 木間塚政人、庄司光男、重田育照、"分子動力学法を用いた不凍タンパク質と水分子間の相互作用に関する理論研究"**(Poster)**、第11回分子科学討論会、Sep. 15th-18th,東北大学,Sendai, Japan
30. Masato Kimatsuka, Mitsuo Shoji, Yasuteru Shigeta, "Molecular Dynamics Studies on Interaction of Anti-Freeze Protein (AFP) with Water Molecules"**(Poster)** ,TGSW2017, Sep. 20th-22nd, EPOCAL TSUKUBA, Tsukuba, Japan
31. Masato Kimatsuka, Mitsuo Shoji, Yasuteru Shigeta, "Molecular Dynamics Studies on the effects of Anti-Freeze Protein(AFP) on ice growth"**(Poster)**,CPMD2017, Oct. 18th-20th, EPOCAL TSUKUBA, Tsukuba, Japan
32. Masato Kimatsuka, Mitsuo Shoji, Yasuteru Shigeta, "Molecular Dynamics Studies on growth of ice crystal bound by Anti-Freeze Protein"**(Poster)**, APCTCC8, Dec. 15th-17th, IIT, Mumbai, India
33. 喜屋武茜、栢沼愛、,庄司光男、重田育照、"ワインラクトンの立体選択的生成機構の理論研究"**(Poster)**,第31回分子シミュレーション討論会、Nov.29th-Dec.1st,金沢商工会議所,Kanazawa,Japan
34. 常盤恭樹、庄司光男、柴田直樹、樋口芳樹、片岡邦重、重田育照、美齊津文典、"QM/MM 法によるビリルビンオキシダーゼにおける構造変化と酸化還元電位に関する理論的研究"**(Oral)**、第7回日本生物物理学会関東支部会, Mar. 13th-14th 2018, 東京大学駒場, Tokyo, Japan.
35. Takaki Tokiwa, Mitsuo Shoji, Naoki Shibata, Yoshiki Higuchi, Kunishige Kataoka, Yasuteru Shigeta, and Fuminori Misaizu, "A Theoretical Study on the T1Cu Site in Bilirubin Oxidase (BOD): Relation between Structural Changes and Redox Potentials" **(Poster)**, The 58th Sanibel Symposium, Feb. 18th-23rd 2018, St. Simons Island, Georgia, USA.
36. Takaki Tokiwa, Mitsuo Shoji, Naoki Shibata, Yoshiki Higuchi, Kunishige Kataoka, Yasuteru Shigeta, and Fuminori Misaizu, "QM/MM Study on the T1 Cu site structures and the Redox

Potentials in Bilirubin Oxidase (BOD)" (**Poster**), CPMD2017 Workshop, Oct. 18th-20th 2017, EPOCHAL TSUKUBA, Tsukuba, Japan.

37. 常盤恭樹、庄司光男、柴田直樹、樋口芳樹、片岡邦重、重田育照、美齊津文典、"ビリルビンオキシダーゼの構造と酸化還元電位に関する理論的研究" (**Oral**), 第11回分子科学討論会, Sep. 15th-18th 2017, 東北大学, Sendai, Japan.

#### (4) 著書、解説記事等

1. 岩田潤一, 松下雄一郎, 澤田啓介, 重田育照, 押山 淳、「実空間差分法による大規模計算：半導体表面・ナノ構造への応用」、固体物理（特集号）**52**, 581-591 (**invited**) (2017).
2. T. Baba, K. Kamiya, Y. Shigeta, "Integrated Computational Studies on Mutational Effects of A Nylon-degrading Enzyme", *Quantum Systems in Physics, Chemistry, and Biology: Advances in Concepts and Applications*, Progress in Theoretical Chemistry and Physics Vol. **30**, 317-330, Springer (2017). DOI:10.1007/978-3-319-50255-7\_19.

#### 7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1. 宇宙・生命・物性分野間連携（宇宙生命）  
宇宙空間での L-アミノ酸生成に関する研究を物性・宇宙分野と連携して進展させた。
2. 生命情報・分子進化分野間連携  
伸長因子 EF-1 $\alpha$  の立体構造に関する理論的研究を分子進化分野と連携して進展させた。
3. 生命-高性能計算システム研究部門連携  
フラグメント分子軌道法に hybrid DFT の GPU 版を実装し、高性能計算システム研究部門と連携してプログラムの GPU 化対応を進展させた。

#### 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 研究会「レア・イベントの計算科学」、志賀基之、藤崎弘士、重田育照、森下徹也、君塚肇、Aug. 28<sup>th</sup>-30<sup>th</sup> 2017, 伊豆山研修センター。

#### 9. 管理・運営

重田育照

物理学類学務委員、広報委員、カリキュラム委員、FD 委員、全学教育会議委員  
計算科学研究センター運営委員会委員、人事委員会委員、生命科学研究部門長



## 10. 社会貢献・国際貢献

集中講義・海外の大学におけるセミナー

1. 重田育照、「反応量子化学」集中講義、2017 Dec. 10、立教大学大学院理学研究科.
2. 重田育照、「計算化学」集中講義、Nov. 27<sup>th</sup>-28<sup>th</sup> 2017、大阪市立大学大学院工学研究科.
3. Y. Shigeta, "A Simple Conformational Sampling Algorithm for Understanding Functions of Biomolecules", 11<sup>th</sup> Sep. 2017, Institute of Chemistry, Slovakia Academy of Science, Slovakia.
4. Y. Shigeta, "A Simple Conformational Sampling Algorithm for Understanding Functions of Biomolecules", Central European Institute of Technology (CEITEC), 8<sup>th</sup> Sep. 2017, Masaryk University, Czech.
5. 重田育照、「生物物理学」集中講義、Sep 1<sup>st</sup> 2017、秋田大学大学院工学研究科.
6. 重田育照、「計算医工学」集中講義、August 3<sup>rd</sup>-4<sup>th</sup>, 2017、広島市立大学大学院情報科学研究科.
7. 重田育照、「効率的な構造サンプリング手法の開発と生命機能の解析」、27<sup>th</sup> 2017、千葉大学理学研究科。「物性理論」集中講義、June 26<sup>th</sup>-27<sup>th</sup> 2017、千葉大学理学研究科.
8. Y. Shigeta, "Efficient Sampling Methods for Rare Event: Applications to Chemistry & Structural Biology", 18<sup>th</sup> April 2017, Department of Chemistry, Southern California University, USA.

## 11. その他

なし

## V-2. 分子進化分野

### 1. メンバー

教授	稲垣 祐司
研究員	石谷 佳之
教授	橋本 哲男 (共同研究員・生命環境系)
特任助教	湯山 育子 (生命環境系)
研究員	矢崎 裕規 (生命環境系)
学生	大学院生 4 名 (後期課程在学 2 名、前期課程在学 2 名)、学類生 2 名

### 2. 概要

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

**【1】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。

**【2】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。

**【3】分子系統解析の方法論研究**.....分子系統解析においては、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ことが知られている。これまでの方法論は単一遺伝子データに基づいて研究されてきたが、複数遺伝子から構成される大規模配列データを解析するための方法論の検討はそれほど進んでいない。また、現状では超並列計算機上で効率よく作動する解析プログラムも十分に普及しているとは言えない。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、方法論的研究と系統解析プログラムの並列化を行っている。

### 3. 研究成果

#### 【1】 新奇真核微生物の系統的位置の検討

H25 年度に、我々の研究グループが単離・同定し、正式に記載した *Tsukubamonas globosa* の大規模分子系統解析とミトコンドリアゲノムの完全解読結果を *Genome Biol Evol* 誌 (Kamikawa et al. 2014 *Genome Biol Evol* 6:306-315) に、H26 年度に *Palpitomonas bilix* の大規模分子系統解析の結果を *Sci Rep* 誌に (Yabuki et al. 2014 *Sci Rep* 4:4641)、H28 年度には大規模分子系統解析結果を基盤としてホヤ病原性寄生原虫 *Azumiobodo hoyamushi* をふくむキネトプラスト類中の生活様式の進化を発表した (Yazaki et al. 2016 *Genes Genet Syst* 92:35-42)。H29 年度には、嫌気性・微好気性真核微生物から構成されるフォルニカータ生物群内部の系統関係を 159 遺伝子データの系統解析により頑健に再構築するとともに、この生物群のミトコンドリア縮退過程を議論した論文を *Nat Ecol Evol* 誌に発表した (Leger et al. 2017 *Nat Ecol Evol* 1:0092)。さらに、系統的帰属不明な真核微生物 *Rigifila ramosa* については 351 遺伝子データに基づく系統解析を行い、その結果を *Genome Biol Evol* 誌に発表した (Brown et al. 2018 *Genome Biol Evol* 10:427-433)。今年度の報告では、主に *Rigifila* の系統的位置に関する報告を行う。また *Microheliella maris* および SRT605 株の系統的位置については継続して解析を進めているが、157 遺伝子データに基づく系統解析の結果を示し、結果と今後の解析における問題点について議論する。系統的位置が確定した真核微生物 PAP020 株 (H27 年度年次報告書参照) と SRT308 株 (H28 年度年次報告書参照) については現在投稿論文の取りまとめ中である。

#### ***Rigifila* はディフェレリア類とマンタモナス類と単系統群を構成する**

我々はこれまでの研究でその系統的位置を確定できなかった複数の真核微生物のうちコロディクチオン類、リジフィラ類 *Rigifila ramosa*、マンタモナス類 *Mantamonas plastica* について、大規模トランスクリプトームデータを取得し、それらのデータを含む大規模系統解析を行った。351 タンパク質データに基づく系統解析の結果、上記 3 系統は極めて強い統計的支持のもと単系統群 (CRuMs と命名) を形成し、我々はこの単系統群をこれまで認識されていなかった真核生物主要系統群の 1 つであると位置付けた (図 1: 破線囲み)。先行研究では、後生動物と菌類 (とその近縁な真核微生物) から構成されるオピストコンタ類 *Opisthokonta* は、ブレビアータ類 *Breviatea* とアプソモナス類 *Apusomonada* とともにアモルフィア群 *Amorphea* を形成すると提唱されている。これまでアンキロモナス類はアモルフィア群に最も近縁であると考えられてきたが、*R. ramosa* を解析データに加えた 351 タンパク質系統解析の結果は、アンキロモナス類ではなく CRuMs がアモルフィア群に最も近縁な系統であることを頑健に示した。これらの解析結果を統合すると、CRuMs、アンキロモナス類、マラウィモナス類は、それぞれ真核生物進化の初期段階で分岐した系統群のメンバーであると考えられる (図 1)。

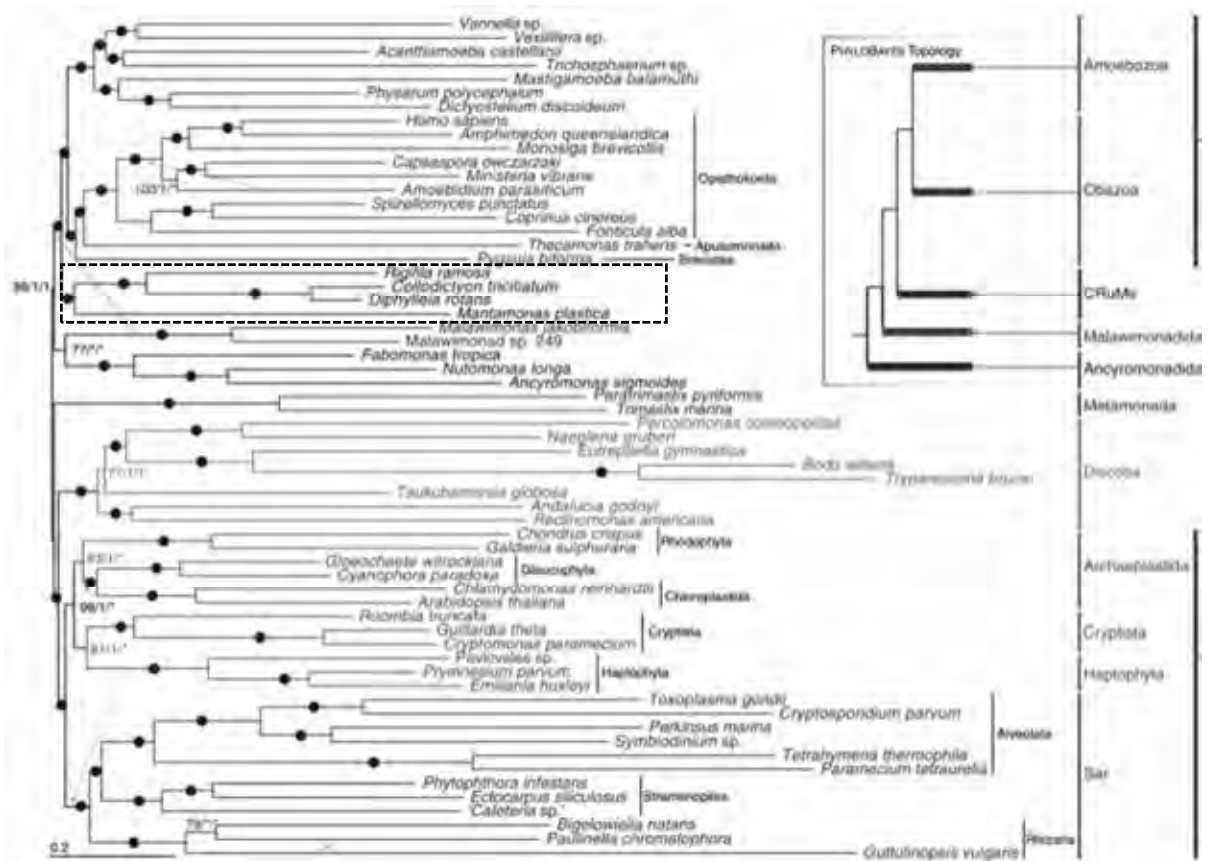


図 1. 351 遺伝子データに基づき推測された真核生物系統 (Brown et al. 2018). *Rigidia ramosa* はマンタモナス類 (*Mantamonas plastica*) とディフェレリア類 (*Colloidiyon triciatum* & *Diphylla rotans*) とともに頑健な単系統群 (CRuMs) を形成する。系統樹中の●は、最尤法ブートストラップ解析で 100%かつベイズ法の事後確率 1.0 で支持されたことを示す。

### ***Microheliella maris* および SRT605 株の系統的位置についての中間報告**

*Microheliella maris* は海産の“太陽虫”であり、形態的に有中心粒太陽虫との近縁性が示唆されている (図 2 中①参照: Yabuki et al. 2012 *Protist* 163:356-388)。しかしこれまで決定された遺伝子配列に基づく系統解析では、*M. maris* の系統的位置は確定することができなかった。H26 年度までに Illumina Hi-seq2000 によるトランスクリプトームデータを取得し、これまで系統解析を行ってきた (独立行政法人海洋研究開発機構・矢吹彬憲博士との共同研究)。H29 年度に行った 157 遺伝子データに基づく系統解析では、*M. maris* は、テロネマ類 *Telonema subtilis*、ピコゾア類 *Picomonas* sp. と単系統と推測されたが、その系統関係はブートストラップ解析では支持されなかった (図 2 中①参照)。*Telonema* と *Picomonas* sp. のトランスクリプトームデータは遺伝子カバレッジが極めて低い。このため今回解析した 157 遺伝子データでもミッシングデータの割合が極めて高く、解析結果に信頼を置くことが難しい。今後 *M. maris* の系統的位置を再検証するには、再度 *T. subtilis* と *Picomonas* sp. から量的にも質的にも良質な配列データを取得し直すとともに、157 遺伝子データよりも大きなサイズのアライメントデータを作成し、系統解析を行う必要がある。

SRT605 株 (図 2 中②参照) は、白鳥博士 (筑波大学・現海洋研究開発機構) により単離された新奇真核微生物である。H28 年度には SRT605 株からトランスクリプトームデータを取得した。H29 年度学際共同研究プロジェクト REALPHYL として 93 遺伝子データに基づく系統解析を行ったが、残念ながら SRT605 株の系統的 position は解明できなかった。H29 年度も引き続き解析を進め、157 遺伝子データを用いた系統解析を行った。この系統樹中ではアンキロモナス類 *Nutomonas longa* と姉妹群となったが、最尤法ブートストラップ法による支持は極めて低く、SRT605 株の系統的 position は依然不明である (図 2 中②参照)。今後より大きな解析データを用意し SRT605 株の系統的 position の確定を目指す。

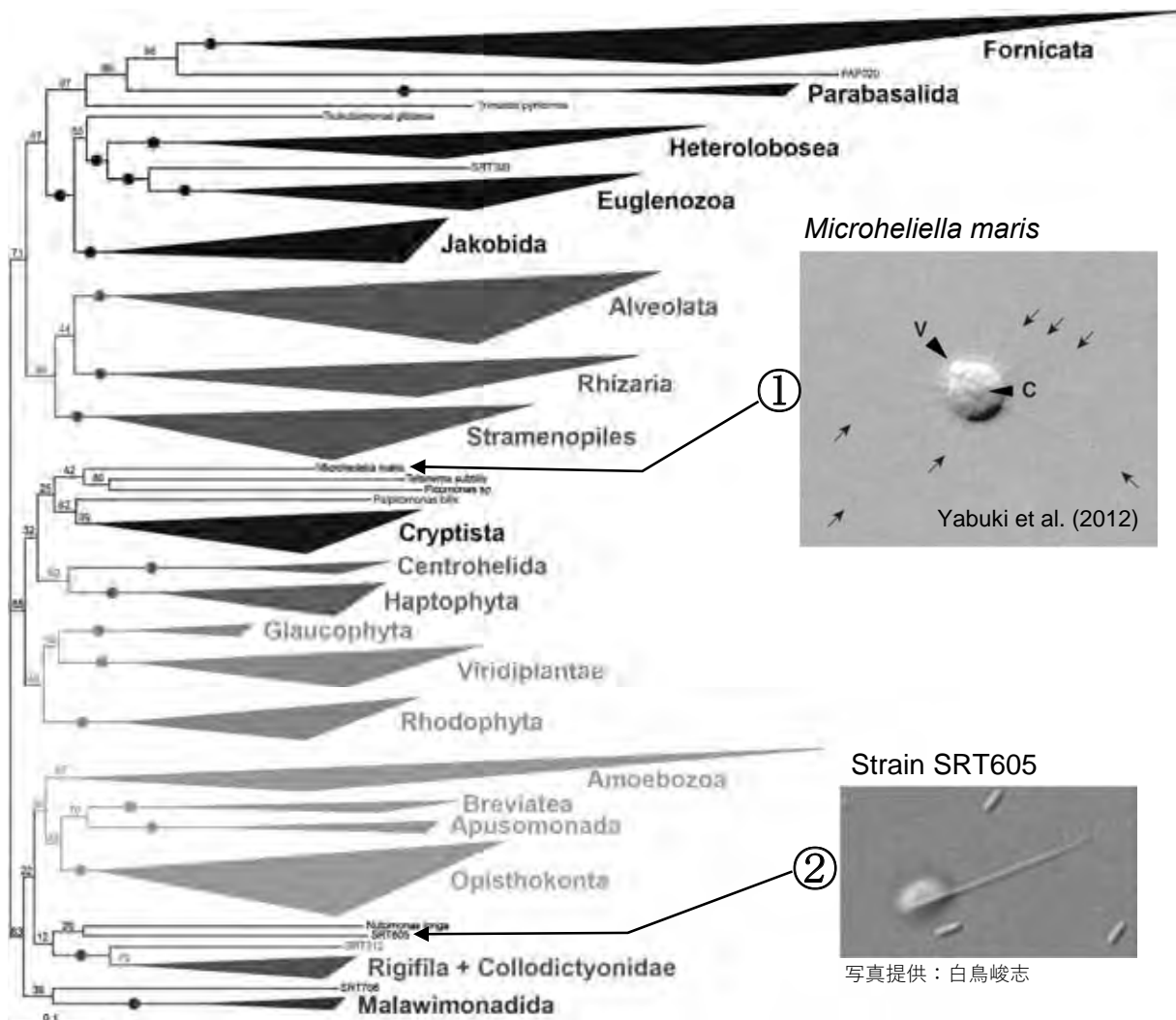


図 2. 157 遺伝子データに基づき推測された真核生物系統. 系統樹の推測とブートストラップ解析は IQ-TREE を用いた。アミノ酸置換は LG + Γ + F + C60 モデルを使用した。*Microheliella maris* は *Telonema subtilis* とピコゾア類 *Picomonas* sp. と単系統群を形成した。また、SRT605 株はアンキロモナス類 *Nutomonas longa* と姉妹群となった (②参照)。しかし、どちらの系統関係も最尤法ブートストラップ解析の支持は低かった。●は最尤法ブートストラップ解析の支持が 100% を示す。

## 【2】 各種トランスクリプトーム・ゲノム解析

### 光合成性真核微生物の色素体ゲノム解析

我々は渦鞭毛藻における葉緑体置換に伴う色素体ゲノム進化に興味を持ち、渦鞭毛藻の色素体ゲノム解読を行っている。多くの渦鞭毛藻は紅藻の二次共生によって獲得された色素体（ペリディニン色素体）をもつが、これまでの研究により 3 種の渦鞭毛藻、*Lepidodinium chlorophorum*、未記載渦鞭毛藻 2 種（MRD-151 株および TRD-132 株）では、祖先型のペリディニン色素体が、緑藻であるペディオ藻の三次共生に由来する緑藻型の色素体に置換されていることが判明している。上記 3 種は、互いに独立に細胞内共生させたペディオ藻を葉緑体化したと考えられる。従ってこれら 3 種の渦鞭毛藻細胞内のペディオ藻由来緑色葉緑体と自由生活性ペディオ藻葉緑体のゲノムを比較することで、渦鞭毛藻細胞内での共生とそれに引き続く葉緑体化過程における葉緑体ゲノム進化を検証することが可能である。

我々はこれまでに *L. chlorophorum* 色素体ゲノムを解読し論文として発表し（Kamikawa et al. 2015 *Genome Biol Evol* 7:1133-1140）、H27 年度年次報告書には MRD-151 株の色素体の全ゲノム配列を解読したことを報告した。H28 年度には TRD-132 株の色素体の全ゲノム配列を解読した（図 3）。これら 3 種の渦鞭毛藻細胞内のペディオ藻由来緑色葉緑体と自由生活性ペディオ藻葉緑体のゲノムを比較することで、渦鞭毛藻細胞内での共生とそれに引き続く葉緑体化過程における葉緑体ゲノム進化を検証することが可能である。

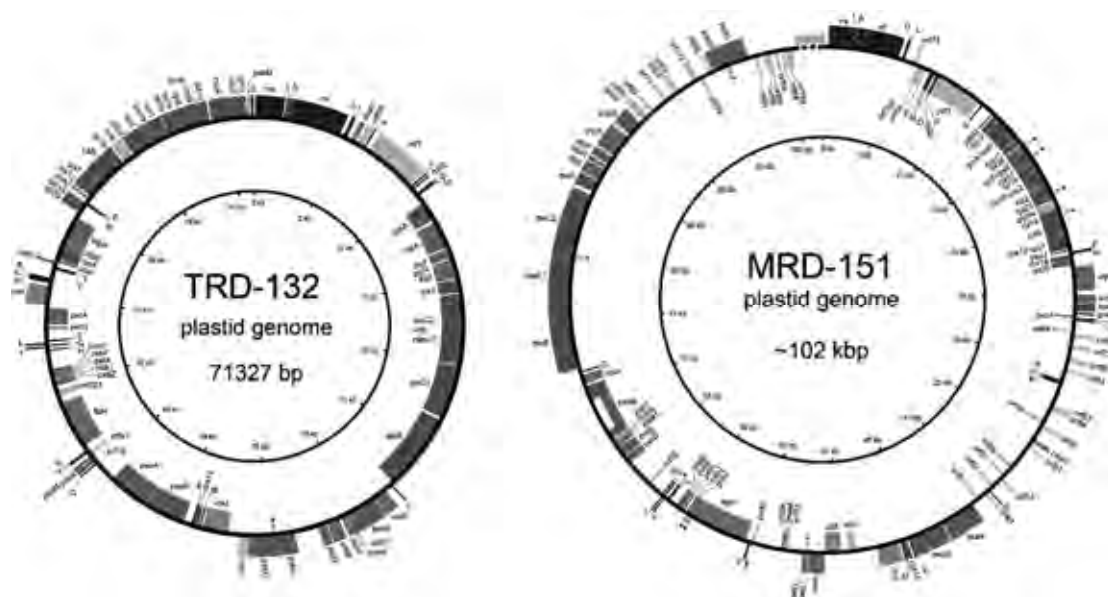


図 3. 未記載緑色渦鞭毛藻 MRD-151 株および TRD-132 株の色素体ゲノムマップ

H29 年度は 3 種の緑色渦鞭毛藻の色素体ゲノムとその起源となった自由生活性ペディオ藻 4 種の色素体ゲノムを比較した（表 1）。TRD-132 株と *L. chlorophorum* の色素体ゲノムは、自由生活性ペディオ藻色素体ゲノムに比べ、ゲノムサイズは明らかに縮小していることが判る。同様に機能が推測可能なタンパク質遺伝子数も、TRD-132 株/*L. chlorophorum* と自由生活性ペディオ藻の色素体ゲノム間で減少している。自由生活性ペディオ藻色素体ゲノムに比

べ TRD-132 株と *L. chlorophorum* の色素体ゲノムの縮小している原因は、タンパク質遺伝子数の減少に加え、逆位反復配列の消失、遺伝子と遺伝子の間の領域（非コード領域）の減少も貢献している。一方、MRD-151 株の色素体ゲノムは TRD-132 株と *L. chlorophorum* の色素体ゲノム同様に、逆位反復配列の消失、機能が推測可能なタンパク質遺伝子数の減少が起こっているが、ゲノム全体のサイズは縮小していない。これは非コード領域の割合が多くなっていることが原因である。つまり、TRD-132 株と *L. chlorophorum* の色素体ゲノムに比べ、MRD-151 株の色素体ゲノムでは遺伝子が相対的に疎らに配置されているのである。緑色渦鞭毛藻色素体ゲノムと自由生活性ペディノ藻色素体ゲノム間で最も特徴的な違いは、互いにオーバーラップした遺伝子ペアの数である。自由生活性ペディノ藻色素体ゲノムではオーバーラップした遺伝子ペアの数が 1~2 程度である一方、緑色渦鞭毛藻色素体ゲノムでは 10 ペア以上がオーバーラップしている。オーバーラップ遺伝子ペア数がなぜ緑色渦鞭毛藻色素体ゲノムで多いのか、その進化的意義は今のところ不明である。今後、緑色渦鞭毛藻とは独立に細胞内共生緑藻を色素体化したユーグレナ藻とクロララクニオン藻の色素体ゲノムと、それぞれの色素体の起源となった緑藻色素体ゲノムを比較することにより、細胞内共生緑藻の色素体ゲノム進化の一般性と独自性について検討する必要がある。

表 1. 自由生活性ペディノ藻 4 種 (*Pedinomonas minor*, *P. tuberculata*, *Marsupiomonas* sp. NIES-1824 & *Pedinophyceae* sp. YPF701) と 3 種の緑色渦鞭毛藻間での色素体ゲノムの比較

	自由生活性ペディノ藻 (4 種)	TRD-132 株	MRD-151 株	<i>Lepidodinium chlorophorum</i>
ゲノムサイズ (Kbp)	92~127	71.3	~102	66.2
GC 含量 (%)	33.4~40.3	34.8	34.6	34.6
非コード領域 (%)	24.0~33.8	17.9	37.3	13.3
機能が推測可能なタンパク質遺伝子数	73~75	67	66	57
構造 RNA 遺伝子数	30~31	29	30	29
イントロン数	0~8	0	1	3
逆位反復配列	あり	なし	なし	なし
偽遺伝子数	0	0	1	1
融合した遺伝子数	0	4	5	2
オーバーラップした遺伝子ペア数	1~2	11	10	11

### 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*; Kamikawa et al. 2014 *Genome Biol Evol*; Nishimura et al. 2014

*Mob Genet Elements*; Takeuchi et al. 2015 *PLOS ONE*; Nishimura et al. 2016 *Genome Biol Evol*)。今年度の報告書では、主に新奇真核微生物 SRT308 株の Mt ゲノムについて概要を報告する。

ユーグレノゾアは主にユーグレナ類、ディプロネマ類、キネトプラスト類から構成される。これら 3 系統毎に特徴的なミトコンドリア (Mt) ゲノム構造の進化が起こったと考えられるが、その過程は未解明であり、この生物群の Mt ゲノム構造多様化過程の解明にはその祖先的 Mt ゲノム構造の推測が重要である。新奇真核微生物 SRT308 株は、大規模系統解析によってユーグレノゾアクレード基部から分岐することが頑健に示された (H28 年度年次報告書参照)。我々は SRT308 株の Mt ゲノムがユーグレノゾア Mt ゲノムの祖先的特徴をもつ可能性があると考え、H29 年度に Mt ゲノムの解読を行った。その結果、SRT308 株 Mt ゲノムは約 61 キロ塩基長の環状分子であること、そこにコードされるタンパク質遺伝子組成は、ユーグレノゾア主要生物種の Mt ゲノムのタンパク質遺伝子組成の和集合に極めて近いことが判明した (図 4)。従って、SRT308 を含むユーグレノゾアの共通祖先は、少なくとも 19 個のタンパク質遺伝子を持つ環状 Mt ゲノムをもっていたと推測できる。一部のユーグレノゾア生物 Mt ゲノムからの転写物は、RNA 編集をうけゲノム DNA とは異なる塩基配列に変換される。そこで、今後、SRT308 株 Mt ゲノムからの転写物にも RNA 編集が起こるのかどうかを検討する必要がある。

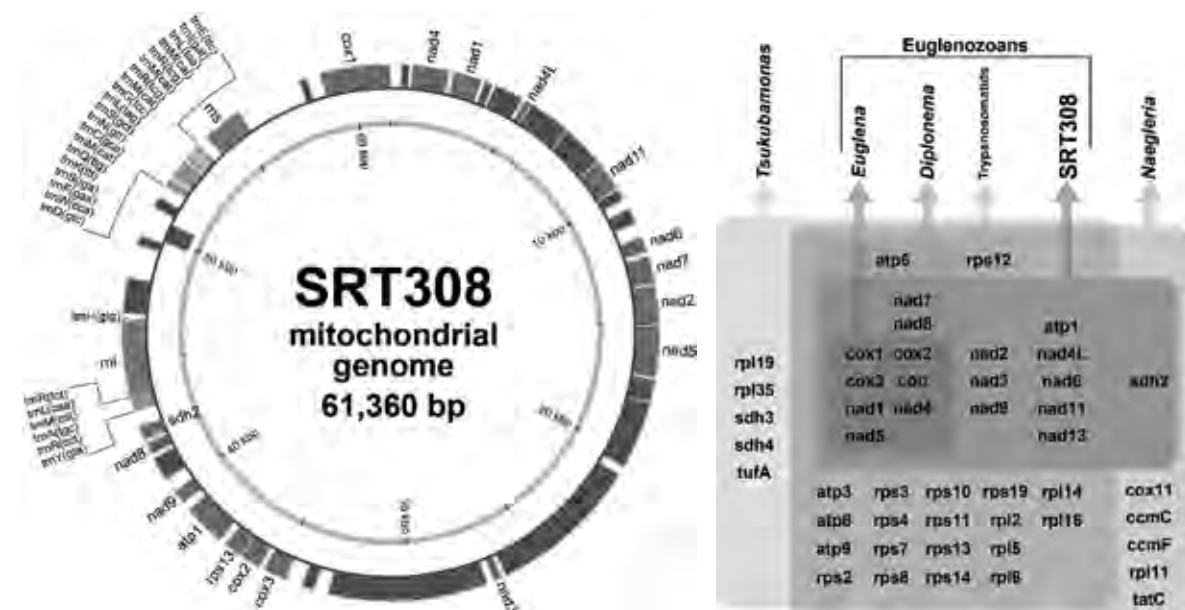


図 4. 新奇真核微生物 SRT308 株の Mt ゲノムマップ (左) とユーグレノゾア生物群及びその近縁種 (Tsukubamonas & Naegleria) における Mt ゲノムにコードされるタンパク質遺伝子のレパートリーを比較したベン図 (右)

SRT308 株の他、以下の真核微生物の Mt ゲノム解読を予定している：①クリプト藻に近縁な従属栄養性系統 *Hemiarma marina*、②新奇真核微生物 SRT605 株、③SRT312 株 (*Glissandra* sp.)、④SRT706 株、⑤有孔虫 *Ammonia berccari*、⑥放散虫 (*Didymocyrtis tetrathulumus* と *Acanthodesmia viniculata*)



## オピストコンタ類におけるオートファジー機構の進化

オートファジーは細胞内の物質循環に重要な機構であり、一般にすべての真核生物がこれを持つと考えられている。しかし、オートファジーの研究が進んでいるのは酵母やヒトなどのモデル生物種に限られており、オートファジーの普遍性の検証には非モデル生物種をふくめ真核生物界全体からの知見が十分であるとはいえない。本研究は、真核生物全体においてオートファジー機構がどのように進化してきたかを解明することを目指し、その第一段階として最もオートファジー研究の進む酵母やヒトを含むオピストコンタとその早期分岐系統におけるオートファジーの進化の理解を目指した。オートファジーに重要とされるタンパク質である Atg8 及びその働きに重要とされる関連タンパク質群に注目し、それらをコードする配列を研究対象生物種のトランスクリプトームデータ中に探索し、その結果をもとに対象生物種におけるオートファジーの普遍性についての議論を目指している。

相同性検索によって抽出したオートファジー関連タンパク質の候補配列を精査した結果、Microsporidia を除いたすべてのオピストコンタの生物種で、Atg8 およびその関連タンパク質ホモログ配列が検出され、さらにオピストコンタ早期分岐系統である Ancyromonadida、Apusomonadida、Breviatea の生物種においてもオートファジー関連タンパク質が検出された。このことからオピストコンタの内部系統のみならず、その早期分岐系統においても、オートファジーの機構が保存されていることが示唆された。また、オートファジー関連タンパク質ホモログ配列が検出されなかった Microsporidia に近縁な系統である Rozellosporidia に属する *Rozella allomycis* で Atg8、Atg7、Atg3、Atg12 のホモログをコードする配列が検出されたことから、Microsporidia の生物種では、Rozellosporidia との分岐後、その共通祖先において、Atg8 およびその関連タンパク質が失われた可能性が高い。

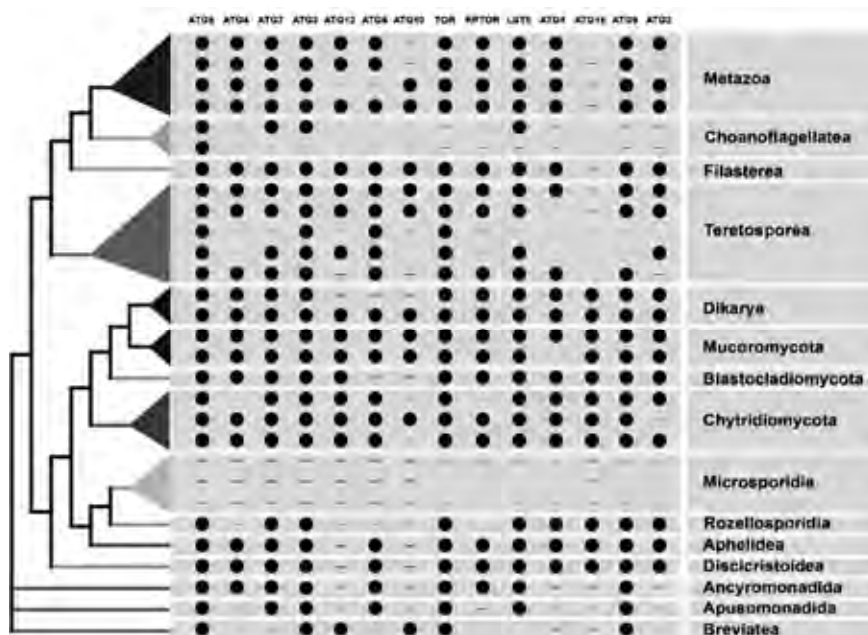


図 5. オピストコンタ類とその近縁系統におけるオートファジー関連タンパク質の保存性。●は該当する遺伝子（あるいは遺伝子転写物）が同定されたことを、ダッシュ（–）は同定されなかったこと示す。

### 【3】 分子系統解析の方法論研究

#### 大規模遺伝子配列データに基づく分子系統解析の GPU 並列化

近年における大規模分子系統解析では数百以上の系統および遺伝子数からなる巨大アライメントが頻繁に用いられている。そのような解析では「系統間における遺伝子配列進化プロセスの不均一性」を考慮し、系統間で異なる進化プロセスをそれぞれ独立したパラメータとして推測する置換モデル (Non-Homogeneous モデル) の適用が推奨される。しかし、Non-Homogeneous モデルでは推測すべきパラメータ数が遺伝子配列データの配列数・座位数に応じて飛躍的に上昇し、実験室レベルの計算機では系統樹推測に数十日もの時間を要する問題が生じる。そのため、Non-Homogeneous モデルに基づく高速な分子系統解析を可能にするプログラムの開発は進化生物学における重要な計算科学的課題である。

H29 年度は、学際共同研究・学際開拓プロジェクトとして計算科学研究センター・高性能計算システム研究部門と連携し、Non-Homogeneous モデルを実装した系統解析プログラム NHML および BppML を GPU 並列化の対象とした。これらの分子系統解析プログラムでは最尤法に基づく系統樹の尤度計算アルゴリズムを実装しており、同アルゴリズムでは遺伝子配列データの各座位における系統樹の尤度計算をスレッド化することで GPU による並列計算が実現可能である。それとともに上記のプログラムへ、以下の 2 点の実装を目指した：①GPU メモリに転送し、これらの座位における尤度計算を行う間に次の部分的な座位データを GPU メモリに新たに転送する「計算とデータ転送のオーバーラップ化」、②異なる座位の尤度計算の複数 GPU での同時並列化。本研究ではコードの生産性と性能の両立を考慮し、GPU クラスタ用の並列プログラミング言語として XcalableACC を実装に用いた。

## 4. 教育

### 1) 修士論文

- ・ 宮田凌佑 「多足類消化管に寄生するグレガリナ様寄生虫の系統学的位置と非光合成性色素体の探索」 (生命環境科学研究科生物科学専攻)

### 2) 卒業論文

- ・ 岩本亮介 「見せてもらおうか、縮退進化したミトコンドリアの性能とやらを」 (生命環境学群生物学類)
- ・ 上原忠晃 「オピストコンタ早期分岐系統におけるオートファジー関連遺伝子の網羅的探索」 (生命環境学群生物学類)

### 3) 集中講義

橋本哲男：「核酸・タンパク質配列データにもとづく生物進化の推測」

計算科学リテラシー (日・英) 2018 年 2 月

## 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

### 受賞

- 1) 松尾恵梨子（博士後期課程 3 年） ICOP2017 Holz-Conner Travel Award
- 2) 宮田凌佑（博士前期課程 2 年）筑波大学大学院生命環境科学研究科 専攻長表彰

### 外部資金

- 1) 科学研究費補助金基盤研究 (B), 橋本哲男 (代表) / 稲垣祐司 (分担), 2015-2017 年度, 交付額: 直接経費 3,700 千円, 間接経費 1,110 千円, 「新型分割イントロンのスプライシング機構と進化多様性の解明 (課題番号 15H04406)」
- 2) 科学研究費補助金基盤研究 (B) 海外学術, 橋本哲男 (代表) / 稲垣祐司 (分担), 2015-2017 年度, 交付額: 直接経費 2,500 千円, 間接経費 750 千円, 「嫌気環境に生育する真核微生物の多様性の解明 (課題番号 15H05231)」
- 3) 科学研究費補助金基盤研究 (B), 稲垣祐司 (代表), 2016-2018 年度, 交付額: 直接経費 4,500 千円, 間接経費 1,350 千円, 「渦鞭毛藻細胞内に発見された新たな共生体痕跡核ゲノムの解析 (課題番号 16H04826)」
- 4) 科学研究費補助金基盤研究 (B), 稲垣祐司 (分担) (代表・濱健夫), 2016-2018 年度, 交付額: 直接経費 3,300 千円, 間接経費 990 千円, 「海洋バクテリアの長期炭素隔離機能に対する海洋酸性化の影響評価 (課題番号 16H02967)」
- 5) 科学研究費補助金基盤研究 (B), 稲垣祐司 (分担) (代表・谷藤吾朗), 2017-2020 年度, 交付額: 直接経費 5,200 千円, 間接経費 1,560 千円, 「非光合成生物の光適応進化の全容解明 (17H03723)」
- 6) 科学研究費補助金基盤研究 (C), 石谷佳之 (代表), 2018-2020 年度, 交付額: 直接経費 2,000 千円, 間接経費 600 千円, 「大規模分岐年代推定－真核生物の誕生と進化を解き明かす！－ (課題番号 18K03820)」
- 7) 科学研究費補助金基盤研究 (B), 石谷佳之 (分担) (代表・氏家由利香), 2017-2019 年度, 交付額: 直接経費 7,100 千円, 間接経費 2,130 千円, 「有孔虫における殻形成機構の解明－石灰化のブラックボックスを開く－ (17H02978)」
- 8) 科学研究費補助金基盤研究 (C), 石谷佳之 (分担) (代表: 藤木 徹一), 2016-2018 年度, 交付額: 直接経費 1,500 千円, 間接経費 450 千円, 「原核藻類と原生動物の光共生に関する研究 (課題番号 16K00532)」
- 9) 科学研究費補助金若手研究 (B), 湯山育子 (代表), 2015-2017 年度, 交付額: 直接経費 1,100 千円, 間接経費 330 千円, 「造礁性サンゴにおける遺伝子ノックダウン技術の確立と応用 (課題番号 15K18744)」

## 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. Kamikawa R, Yazaki E, Tahara M, Sakura T, Matsuo E, Nagamune K, Hashimoto T, Inagaki Y. Fates of evolutionarily distinct, plastid-type glyceraldehyde 3-phosphate dehydrogenase genes in kareniacean dinoflagellates. 2018 *Journal of Eukaryotic Microbiology* in press.
2. Tanifuji G, Takabayashi S, Kume K, Takagi M, Nakayama T, Kamikawa R, Inagaki Y, Hashimoto T. The draft genome of *Kipferlia bialata* reveals reductive genome evolution in fornicate parasites. 2018 *PLOS One* 13(3): e0194487.
3. Záhonová K, Petrželková R, Valach M, Yazaki E, Tikhonenkov DV, Butenko A, Janouškovec J, Hrdá Š, Klimeš V, Burger G, Inagaki Y, Keeling PJ, Hampl V, Flegontov P, Yurchenko V, Eliáš M. Extensive molecular tinkering in the evolution of the membrane attachment mechanisms of the Rheb GTPase. 2018 *Scientific Reports* 8:5239.
4. Brown MB, Heiss A, Kamikawa R, Inagaki Y, Yabuki A, Tice AK, Shiratori T, Ishida K, Hashimoto T, Simpson AGB, Roger AJ. Phylogenomics places orphan protistan lineages in a novel candidate super-group. 2018 *Genome Biology and Evolution* 10(2):427-433.
5. Nakayama T, Inagaki Y. Genomic divergence within non-photosynthetic cyanobacterial endosymbionts in rhopalodiacean diatoms. 2017 *Scientific Reports* 7:13075.
6. Tanifuji G, Curtis BA, Cenci U, David V, Dean S, Fiala I, Flegontov P, Johnson-MacKinnon J, Kelly S, McPhee M, Moog D, Nakayama T, Tanifuji-Onodera N, Sibbald S, Inagaki Y, Hashimoto T, Gull K, Lukeš J, Archibald JM. Genome sequencing reveals metabolic and cellular interdependence in an amoeba-kinetoplastid symbiosis. 2017 *Scientific Reports* 7:111688.
7. Higuchi T, Shirai K, Mezaki T, Yuyama I. Temperature dependence of aragonite and calcite skeleton formation by a scleractinian coral in low mMg/Ca seawater. *Geology* 45:1087-1090.
8. Kamikawa R, Moog D, Zauner S, Tanifuji G, Ishida K, Miyashita H, Mayama S, Hashimoto T, Maier UG, Archibald JA, Inagaki Y. A non-photosynthetic diatom reveals early steps of reductive evolution in plastids. 2017 *Molecular Biology and Evolution* 34(9):2355-2366.
9. Leger MM, Kolisko M, Kamikawa R, Stairs CW, Kume K, Čepička I, Silberman JD, Andersson JO, Xu F, Yabuki A, Takishita K, Inagaki Y, Simpson AGB, Hashimoto T, Roger

AJ. Organelles that illuminate the origins of *Trichomonas* hydrogenosomes and *Giardia* mitosomes. 2017 *Nature Ecology & Evolution* 1(4):0092.

**B) 査読無し論文**

1. **Matsuo E, Inagaki Y.** Trends in reconstruction of three nucleus-encoded, plastid-localized pathways for the heme, chlorophyll *a* and isopentenyl diphosphate biosyntheses in two separate dinoflagellate lineages bearing non-canonical plastids. *PeerJ Preprints* 5:e3488v1.

**(2) 国際会議発表**

**A) 招待講演**

なし

**B) 一般講演**

1. **Ishitani Y\***. Molecular marker to identify radiolarian species –toward establishment of paleo-environmental proxy– 2017 年 12 月 11 日 –15 日 AGU Fall Meeting. New Orleans, USA.
2. **Ishitani Y\***, Ujiie Y, **Inagaki Y**, Takishita K. Sepciation and dispersal pattern of marine protists in the vertical dimension. 2017 年 10 月 22 日 –27 日 InterRad XV in Niigata 2017. Niigata University, Niigata, Japan.
3. **Yuyama I**, Identification of genes related to aragonite/calcite crystal growth in corals. 2017 年 10 月 9 –13 日. 14<sup>th</sup> International Symposium on Biomineralization. Tsukuba, Japan.
4. **Yazaki E\***, Shiratori T, **Kume K**, **Hashimoto T**, Ishida K, **Inagaki Y**. Mitochondrial genome of a protist branched at the base of Euglenozoa. 2017 年 9 月 8 日 –10 日 An SMBE Satellite Meeting, Mitochondrial Genomics and Evolution. Ein Gedi Kibbutz Hotel, En Gedi, Israel.
5. **Matsuo E\***, Takahashi K, Sarai C, Iwataki M, **Inagaki Y**. Contribution of chlorarachniophytes to the chlorophyll *a* synthesis in green-colored dinoflagellates. 2017 年 7 月 31 日 –8 月 4 日 15<sup>th</sup> International Congress of Protistology. Hotel Pyramida, Prague Czech Republic.
6. **Matsuo E**, Morita K, Tanifuji G, Nakayama T, Takahashi K, Sarai C, Iwataki M, **Inagaki Y\***. Parallel genome reduction in pedinophyte-derived plastids in green-colored dinoflagellates. 2017 年 7 月 31 日 –8 月 4 日 15<sup>th</sup> International Congress of Protistology. Hotel Pyramida, Prague Czech Republic.
7. Záhonová K\*, Petrželková R, **Yazaki E**, Nishimura Y, Valach M, Hrdá Š, Klimeš V, **Inagaki Y**, Burger G, Hampl V, Yurchenko V, Eliáš M. Molecular tinkering in the evolution of the membrane attachment mechanisms of the Rheb GTPase. 2017 年 7 月 31 日 –8 月 4 日 15<sup>th</sup> International Congress of Protistology. Hotel Pyramida, Prague Czech Republic.

8. **Yazaki E\***, Shiratori T, **Kume K**, **Hashimoto T**, Ishida K, **Inagaki Y**. A heterolobosean strain SRT213 and its mitochondrion-related organelle. 2017 年 7 月 31 日－8 月 4 日 15<sup>th</sup> International Congress of Protistology. Hotel Pyramida, Prague Czech Republic.
9. Shiratori T\*, **Yazaki E**, **Inagaki Y**, Ishida K. Morphology, ultrastructure and phylogeny of a new species of *Glissandra* (Protista incertae sedis). 2017 年 7 月 31 日－8 月 4 日 15<sup>th</sup> International Congress of Protistology. Hotel Pyramida, Prague Czech Republic.

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

1. **稲垣祐司\***. 真核生物系統をより広く、より深く. 2018 年 3 月 23 日 第 1 回原生生物進化生態研究会. 東北大学青葉山新キャンパス, 仙台市, 宮城県.
2. **松尾恵梨子\***, **稲垣祐司**. 葉緑体を置換した渦鞭毛藻におけるゲノム進化. 2018 年 2 月 20 日 東京大学本郷キャンパス, 文京区, 東京都.
3. **石谷佳之**. “いがい” と流されない海の原生生物. 2017 年 11 月 17 日－19 日 第 50 回日本原生生物学会・第 1 回日本共生生物学会合同大会 筑波大学, つくば, 茨城.

#### B) その他の発表

1. 中山卓郎\*, 高野義人, 野村真未, 柴小菊, 稲葉一男, **稲垣祐司**. 外洋性渦鞭毛藻 *Ornithocercus magnificus* に見られる共生シアノバクテリアのゲノム解析. 3 月 24 日－25 日 日本藻類学会第 42 回大会. 東北大学青葉山新キャンパス, 仙台市, 宮城県.
2. 西村祐貴\*, 白鳥峻志, 石田健一郎, **橋本哲男**, **稲垣祐司**, 大熊盛也. 有中心粒太陽虫類におけるミトコンドリアゲノムの解読. 2018 年 3 月 5 日－7 日 第 12 回ゲノム微生物学会. 京都大学桂キャンパス船井哲良記念講堂, 京都市, 京都府.
3. **湯山育子**. 造礁性サンゴ褐虫藻の細胞内共生に関する研究. 2017 年 11 月 23－26 日 第 20 回日本サンゴ礁学会. 東京工業大学大岡山キャンパス, 目黒区, 東京都
4. **矢崎裕規\***, 白鳥峻志, **久米慶太郎**, **橋本哲男**, 石田健一郎, **稲垣祐司**. ユーグレノゾア基部から分岐する新奇原生生物のミトコンドリアゲノム. 2017 年 11 月 17 日－19 日 第 50 回日本原生生物学会・第 1 回日本共生生物学会合同大会 筑波大学, つくば, 茨城.
5. **宮田凌佑\***, **松尾恵梨子**, 中山卓郎, 谷藤吾朗, 千頭康彦, 八畑謙介, **稲垣祐司**. 陸生節足動物消化管から単離されたグレガリナ様寄生虫の系統学的位置と非光合成性色素体の探索. 2017 年 11 月 17 日－19 日 第 50 回日本原生生物学会・第 1 回日本共生生物学会合同大会 筑波大学, つくば, 茨城.

6. 湯山育子. サンゴ褐虫藻の細胞内共生関係の破綻にはサンゴ免疫系の暴走が関係する. 2017 年 11 月 17 日-19 日 第 50 回日本原生生物学会・第 1 回日本共生生物学会合同大会 筑波大学, つくば, 茨城.
7. 松尾充啓\*, 渦端篤, 立川誠, 水口洋平, 野口英樹, 豊田敦, 藤山秋佐夫, 鈴木穰, 中山卓郎, 神川龍馬, 野村真未, 稲垣祐司, 石田健一郎, 小保方 潤一. 有殻アメーバのゲノム解読による一次細胞内共生進化の初期プロセスの解析. 2017 年 9 月 8 日-10 日 日本植物学会第 81 回大会. 東京理科大学野田キャンパス, 野田市, 千葉県.
8. 矢崎裕規\*, 白鳥峻志, 久米慶太郎, 橋本哲男, 石田健一郎, 稲垣祐司. 新奇ヘテロロボサ生物 SRT213 における縮退的ミトコンドリア機能の推測. 2017 年 8 月 24-26 日 日本進化学会第 19 回大会. 京都大学吉田キャンパス, 京都市, 京都府.
9. 宮田凌佑\*, 松尾恵梨子, 中山卓郎, 谷藤吾朗, 千頭康彦, 八畑謙介, 稲垣祐司. セシジアカムカデ消化管内寄生虫の網羅的 mRNA データに基づくアピコンプレクサの初期進化に関する一考察. 2017 年 8 月 24-26 日 日本進化学会第 19 回大会. 京都大学吉田キャンパス, 京都市, 京都府.
10. 湯山育子. サンゴ褐虫藻の細胞内共生関係成立・崩壊に関わる遺伝子の解析. 2017 年 6 月 19 日第 47 回つくば藻類プロティストフォーラム. 筑波大学, つくば市, 茨城県
11. 湯山育子. サンゴ褐虫藻の細胞内共生成立時に見られるダイナミックな遺伝子発現変動. 2017 年 6 月 3-4 日 第 19 回マリンバイオテクノロジー学会大会. 東北大学青葉台キャンパス, 仙台市, 宮城県.
12. 杉崎真\*, 神川龍馬, 稲垣祐司, 橋本哲男, 谷藤吾朗. ランブル鞭毛虫近縁種における分割イントロン (splintron) の探索: splintron の普遍性と成立機構の解明に向けて. 2017 年 5 月 28 日-29 日 第 86 回日本寄生虫学会大会. 北海道大学学術交流会館, 札幌市, 北海道.
13. 井上貴史, 谷藤吾朗, 神川龍馬, 久米慶太郎, 稲垣祐司, 橋本哲男\*. *Giardia* に近縁な自由生活性鞭毛虫 *Dysnectes brevis* の MRO 機能の推測. 2017 年 5 月 28 日-29 日 第 86 回日本寄生虫学会大会. 北海道大学学術交流会館, 札幌市, 北海道.

#### (4) 著書、解説記事等

なし

## 7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

- 1) A. J. Roger 博士 (Dalhousie 大・カナダ) および A. G. B. Simpson 博士 (Dalhousie 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 (American Museum of Natural History・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
- 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

## 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

- 1) 第 1 回原生生物進化生態研究会．開催場所：東北大学理学部，仙台，宮城県．日時：2018 年 3 月 21 日．オーガナイザー：稲垣祐司

## 9. 管理・運営

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

## 10. 社会貢献・国際貢献

- 1) 稲垣祐司：International Society for Evolutionary Protistology 会長 (2017-2018)
- 2) 稲垣祐司：さくらサイエンスプラン実習 (対象：マレーシア工科大学学生および大学院生) 2018 年 3 月 6-8 日

## 11. その他

- 1) パラオ共和国における生物採集調査 (山形大学グループと共同)，期間：2017 年 11 月 2-9 日，参加者：石谷、稲垣、矢崎
- 2) マレーシアにおける生物採集調査 (マレーシア工科大学と共同)，期間：2018 年 2 月 11-18 日，参加者：石谷、稲垣、矢崎



## VI. 地球環境研究部門

### 1. メンバー

教授	田中 博、日下 博幸、植田宏昭（共同研究員、生命環境系）
助教	松枝 未遠
研究員	山上 晃央、池田 亮作、Doan Quang Van
学生	大学院生 26 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、都市気候の研究と局地風の研究がある。都市気候の研究としては、文部科学省気候変動適応技術社会実装プログラム（SI-CAT）や、環境省地域適応コンソーシアム事業、東京都環境科学研究所との共同研究に参画し、日本全国および、さいたま市、東京都の熱中症搬送者数予測モデルの開発や、暑熱適応策に資する研究を行っている。また、東南アジアの将来気候予測プロジェクト（CORDEX-SEA）に参画し、ベトナム国家大学ハノイ自然科学大学やハノイ科学技術大学の研究者らと共同で、ベトナムの三大都市圏（ハノイ、ホーチミンシティ、ダナン）の気候の将来予測実験を行っている。また、これまで本センターで開発してきた都市街区気象 LES（City-LES）の実用化に向けた改良と、Oakforest-PACS への移植のための変更を行っている。局地風の研究としては、NEDO の電力系統出力変動対応技術研究開発事業に参画し、北日本と東日本を対象とした風力急変動現象の要因解明と予測手法の開発を行っている。また、内閣府の戦略的イノベーション創造プログラムに参画し、日本各地のフェーンメカニズムの解明を行っている。このほか、本センターの社会貢献事業として、筑波山での継続的な気象観測や、アジア諸国の研究者・技術者を対象とした地域の温暖化予測ソフトウェア「S8-SICAT ダウンスケーラ」の講習会などを実施している。また、ウェザーニューズおよび竹中工務店と共同研究を実施している。

地球環境学部門における活動のひとつとしては、北極振動と北極温暖化増幅の分析がある。大気場の主要な自然変動としての北極振動の観点からハイエイタスの原因を究明している。また、線形傾圧モデル（LBM）を用いて北極振動の特異固有解理論を発展させ、北極振動指数（AOI）の正負に伴う傾圧不安定解の構造変化を解析した。また、大気大循環のエネルギースペクトルの研究を推進している。地球規模の乱流エネルギースペクトルは、総観規模のエネルギーソースから大気境界層のエネルギーシンクへ向かうエネルギーとエンストロフィーカスケードにより、慣性小領域で波数の -3 乗則が形成されるが、傾圧不安定によるエネルギーソースの存在によりこの慣性小領域理論の仮定が成り立たない。これに代わる理論として、ロスビー波の飽和理論による乱流エネルギースペクトルの形成が新たに提唱されている。

さらに、地球環境部門における活動として、世界各国の気象庁により日々行われているアンサンブル予報データを用いた、数日から数ヶ月先までの大気現象を対象とした予測可能性研究がある。科研費・若手 B では、世界各地で起こる天候レジームとそれによりもたらされる異常気象の 1-2 週間先までの予測可能性を解析し、文科省・北極域研究推進 (ArCS) プロジェクトでは、1-2 ヶ月先までを対象とした熱帯から極域までの諸大気海洋現象の予測可能性についての解析を推進している。

### 3. 研究成果

#### 【1】 天候レジームとそれに関連する異常気象の予測可能性 (学術研究助成基金助成金若手研究 (B))

再帰的に起こり持続性のある大規模な大気の流れを「天候レジーム」と呼ぶ。天候レジームの再帰性・持続性により引き起こされる大気顕著現象 (熱波・寒波など) の予測可能性を、様々な時間スケールの現業アンサンブル予報データにより調査した。欧州冬季のレジームの予測可能性を世界各国の現業中期アンサンブル予報データ (TIGGE データ) により調査したところ、負位相の北大西洋振動 (NAO-) はその持続が長い (短い) ほど予測可能性が高い (低い) ことが分かった (投稿論文受理)。これは他のレジームには明瞭に見られない性質であり、予報開始時において NAO- が今後も持続するかどうかのシグナル (海洋などの境界条件等) を検出さえできれば、NAO- とそれにより欧州にもたらされる寒波の予測精度を事前に知り得ることを示している。

また、2017 年 12 月下旬にブロッキング現象 (北米域のレジームの 1 つ) の持続により米国・カナダで発生した寒波、および、2018 年 1 月下旬以降にユーラシア大陸からの寒気の吹き出し (アジア域のレジームの 1 つ) により日本付近で発生した寒波の予測可能性について調査した。米国・カナダの寒波は、ピークの 10-11 日程度前からであれば精度良く予測可能であったが、ピークの 12 日以上前からの予測では、ブロッキング現象が十分に発達せず、寒波の強さが過小評価されていた。日本付近の寒波については、1 月下旬の寒波は 15 日以上前から十分に予測可能であったが、2 月中旬以降の寒波は 10 日程度前からようやく予測可能となり、11 日以上前からだとむしろ温暖な天候を予測しているモデルが多かった。他の事例も含めて、今後より詳細に解析する予定である。

#### 【2】 現業数値予報モデルにおける夏季の北極低気圧の予測可能性研究 (北極域研究推進プロジェクト ArCS)

顕著な夏季の北極低気圧は、北極域の天候や波浪・海氷に大きく影響を及ぼすため、その正確な予測は北極海航路や北極航空路を選択する際に重要となる。2008-2016 年の夏季 (6-8 月) に発生した北極低気圧のうち、特に顕著なイベント (最盛期の中心気圧 980hPa 以下、中

心位置が  $70^{\circ}$  N 以北、上層の暖気核 (250hPa 高度の温度偏差の低気圧中心から 800km 平均) が 5K 以上) は 10 事例存在し、北極低気圧が 1 ヶ月近く持続する事例もあった (例えば、2008 年 6 月の事例、2016 年 8 月の事例など)。これらの顕著な 10 事例に対して、北極低気圧の最盛期における存在・中心気圧・中心位置が最先端の数値予報モデルでどの程度予測できていたかをアンサンブル予報データ (TIGGE、S2S) を用いて調査した (査読論文投稿)。解析の結果、最盛期における中心気圧 (図 1a) ・中心位置 (図 1b) の予測において、欧州中期予報センター (ECMWF) が最も精度が高いことが分かった。その予測精度は、平均的に他機関と 1 日程度の差 (つまり、ECMWF の 4 日予報の精度が他機関の 3 日予報の精度に相当) であった。北極低気圧の最盛期の中心気圧の予測精度は (図 1a)、6.5-4.5 日前からの予測では気象庁 (JMA、日本) と英国気象局 (UKMO) が最も低く、2.5-0.5 日前からの予測では米国環境予測センター (NCEP) が最も低かった。最盛期の位置の予測では (図 1b)、6.5-2.5 日前からの予測でカナダ気象局 (CMC) が最も精度が低く、1.5-0.5 日前からの予測では ECMWF 以外の機関は同程度の精度、0.5 日予測では ECMWF と JMA が最も高い精度を示した。ECMWF は各予報時間における北極低気圧の存在率 (北極低気圧が存在していたアンサンブルメンバーの割合、図 1c) でも他機関を大きく上回っていた (つまり、他機関は存在率が低い上に、存在していても中心気圧と位置の誤差が大きい)。6.5 日前からの予測では全ての機関が 8 割以下 (ECMWF 以外は 6-7 割) の存在率であり、6.5-5.5 日前からの予測では CMC と NCEP が ECMWF に次いで存在率が高く、UKMO、JMA が最も低かった。4.5 日前からの予測では、ECMWF の存在率は 9 割を超えているものの、それ以外の機関の存在率は 8 割 5 分程度であった。3.5 日前からの予測では、NCEP の存在率が他の機関と比べて少し低いものの、ようやく全ての機関で 9 割を超えた。これらより、北極低気圧そのものの発生 (または維持) の予測の改善が現時点での数値予報モデルの一番の課題であると言える。

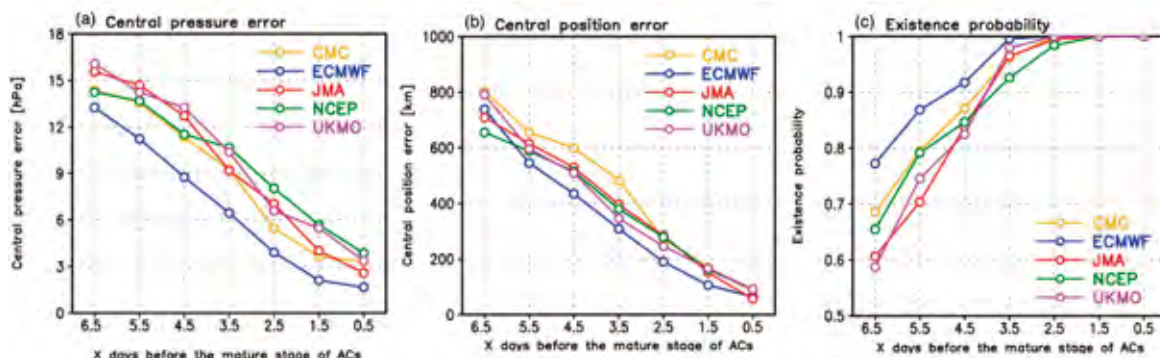


図 1 2008-2016 年夏季に発生した顕著な AC に対する (a) 中心気圧誤差、(b) 中心位置誤差、(c) 存在率の 10 事例平均。それぞれの線は異なる機関を示し (CMC (黄)、ECMWF (青)、JMA (赤)、NCEP (緑)、UKMO (紫))、横軸は最盛期までの日数を示す。解析値として ERA-Interim を用いた。

### 【3】 アンサンブル予報準リアルタイム表示 web サイトの管理運営（北極域研究推進プロジェクト ArCS）

季節内～季節（S2S）アンサンブル予報データを用いた準リアルタイム予報プロダクトページの管理・運営を行なった。具体的には、アンサンブル予報の仕様を変更したデータに対するコードの変更、再予報を用いたモデル気候値の作成、新規プロダクトの追加などを行なった。平成 29 年度には、北極域における地上風・降水量、海面更正気圧偏差（図 2）のプロダクトや、気象庁からリクエストのあった全球の流線関数・速度ポテンシャルのプロダクトなどを新たに追加し、内容の充実を図った。

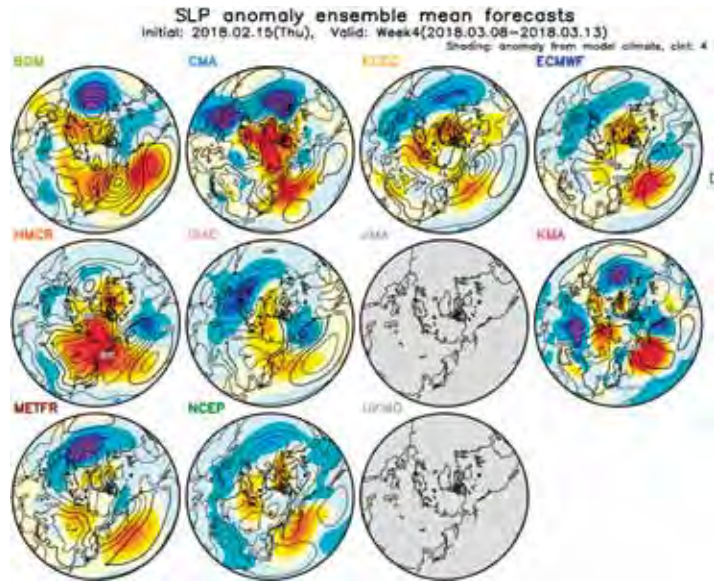


図 2 モデル気候値からの海面更正気圧偏差（アンサンブル平均）。2018 年 2 月 15 日を初期日とした 4 週目（3 月 8～13 日）の平均場。

#### 3.1 北極低気圧の平均構造（共同研究：東京大学AORI）

北極低気圧（Arctic cyclone）とは、北極海上を長期にわたり迷走する地上の低気圧のことである。一様な北極気団の中で低気圧性循環の渦を巻く北極低気圧は、温帯低気圧のような明瞭な前線を伴わず、むしろ熱帯低気圧の渦に近いスパイラル形状を持つことが多い。ただし、台風のような暖気核はなく、中心付近は対流圏で寒気核になっている（図 3）。一方で、250 hPa 付近を中心とした圏界面の上部に一貫した暖気核が見られる。相対渦度に注目すると、地上の正の渦度が鉛直方向に延びて 250 hPa まで一様に存在することが確かめられる。低気圧中心から半径 300 km の範囲で平均した相対渦度を、低気圧の移動に沿って追跡すると、低気圧性渦度が対流圏内で盛衰を繰り返しながらも約一月間持続するケースが見られた。湿度場には雲のスパイラル構造で湿った領域もあるが、低気圧中心は乾燥している。また、鉛直流を見ると対流圏内は上昇流であり、下部成層圏には一貫した下降流がある。以上のような事例と同様の特徴が、北極低気圧には共通してみられ、温帯低気圧とは異なる低気圧であることが分かる（Tanaka et al. 2012; Aizawa and Tanaka 2016）。

図 3 は、2008 年 6 月 10 日から 26 日の期間で SLP から判別した低気圧中心を追跡し、その原点の周りで軸対称平均をしたデータから作図した温位差（左）と相対渦度（右）の構造である。図中の太線は PV から推定した対流圏界面で、中心付近での垂れ下がりが明瞭である。

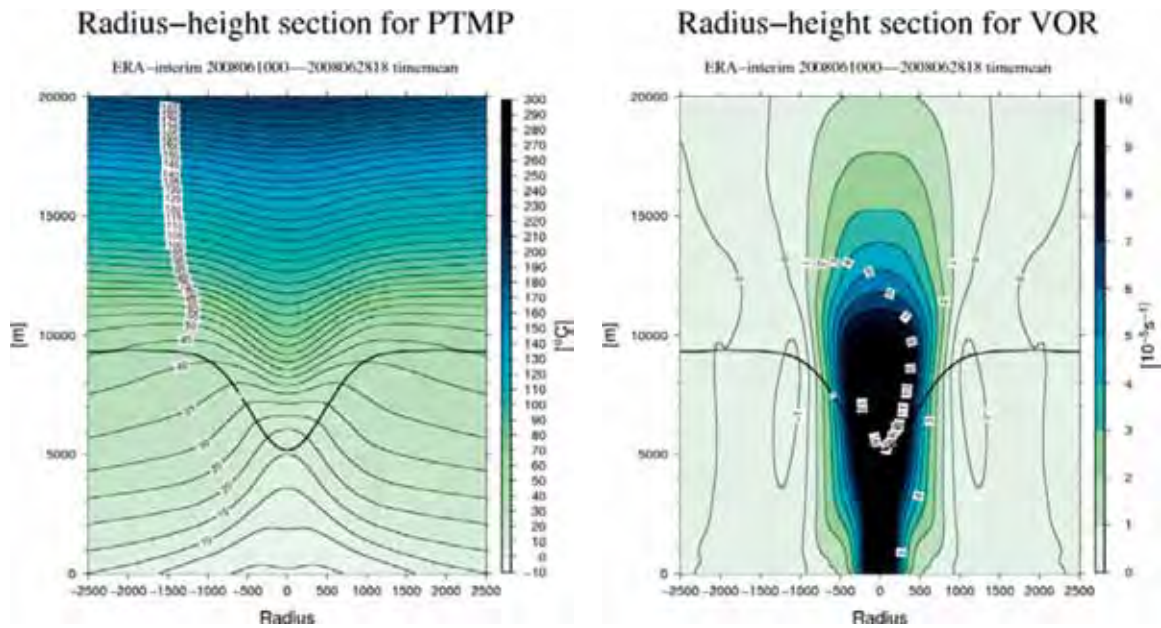


図 3 北極低気圧の鉛直構造。左は温位差、右は相対渦度、太実線は対流圏界面を示す。

温位の分布から低気圧中心の対流圏には寒気核があり、成層圏では暖気核になっている。相対渦度は地表から下部成層圏まで一貫して低気圧性の渦になっていて、圏界面付近で最も渦が強い。相対渦度が対流圏と成層圏とで結合し、順圧的構造を持つ事が北極低気圧の特徴である（佐々木 2017）。

### 3.2 北極低気圧の鉛直循環

図4は軸対称平均した北極低気圧に伴う鉛直運動をラグランジュ的に追跡した流跡線の分布である。赤線は上昇流、青線は下降流を示し、流跡線の始点にクロス、終点にドットが打ってある。平均流に対する流跡線なので、同一の質量の空気塊の流跡線とは異なる量である。期間平均した循環は、大気下層に収束があり、低気圧中心に上昇流が存在し、高度 10000 m で上空からの下降流と合流して発散場となり、上昇流は頭打ちとなって下降流に転じている。鉛直循環の水平半径は1000 km 以内で上昇流、その外側で下降流となっている。成層圏の暖気核の領域で下降流があり、断熱圧縮が生じている一方で、対流圏の寒気核の領域で

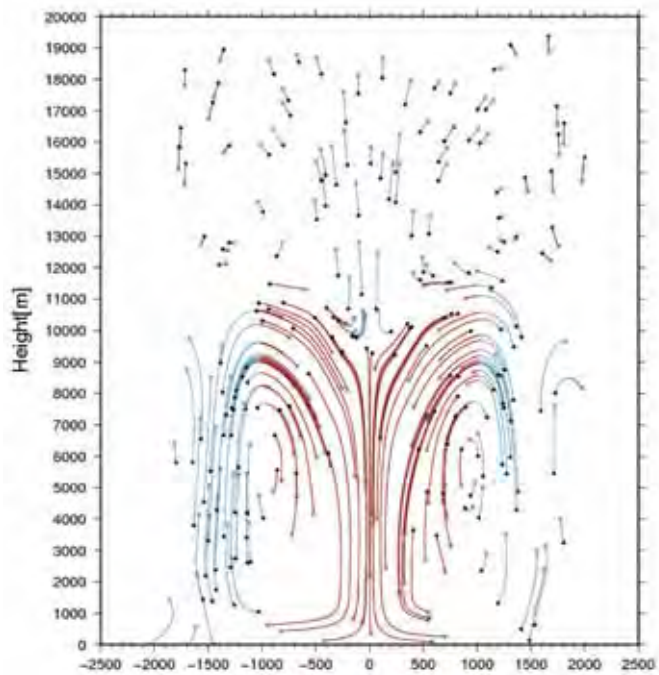


図 4 北極低気圧の鉛直循環をラグランジュ的に追跡した流跡線図。赤は上昇流域、青は下降流域を示す。

上昇気流があり、断熱膨張が生じている。強い安定成層に打ち勝って鉛直循環を維持する力学的な駆動力の説明が必要である。

### 3.3 北極低気圧の形成過程

図5は鉛直循環の発達初期に見られる構造の急変を示す2016年8月の事例である。左図の発達初期では鉛直循環の上昇流が下部成層圏にまで侵入しているが、この時点では温帯低気圧の構造に似て中心に暖気核があり、下部成層圏の暖気核の領域で上昇気流が発生している。この温帯低気圧的な構造が北極低気圧の構造に急変する際に、右図のように下部成層圏で下降流となり、その下降流が北極低気圧の半径1500 km 付近での下降流域に繋がっている。下部成層圏での上昇流が一気に下降流となり、断熱圧縮により下部成層圏の暖気核が形成される。この急変は、南から北上してきた温帯低気圧が北極低気圧化する際に発生している。

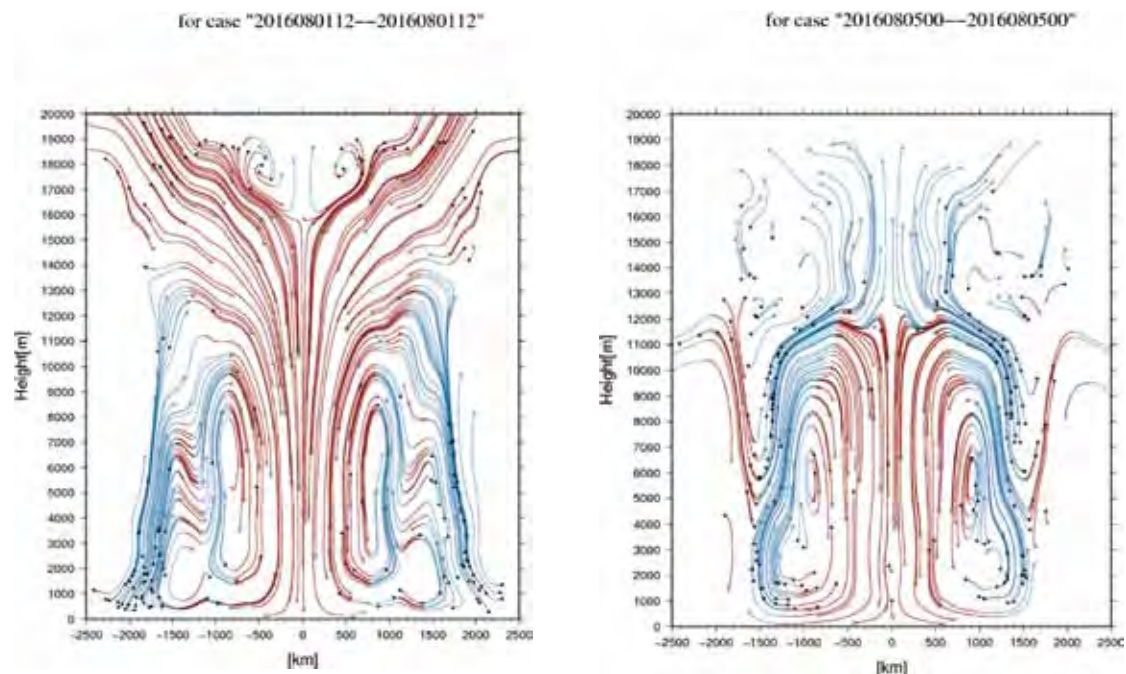


図5 北極低気圧の鉛直循環の変化。左は2016年8月1日、右は8月5日の循環で、温帯低気圧が北極低気圧化する際の変化を示す。

Yamagami et al (2017) では、北極低気圧に温帯低気圧が次々と合体することで、北極低気圧の渦が長期間維持されることが示された。ふたつの渦の合体により順圧構造の渦が強化され、下層でのエクマン収束が低気圧中心の上昇気流をもたらして、それが対流圏の寒気核を形成している。したがって、渦の合体による順圧渦度の供給が、北極低気圧の形成と維持の重要なプロセスになっている。今後はこの渦の合体に注目して、事例解析をさらに行うことが研究課題である。

#### 【4】 フェーンの研究（内閣府 SIP プロジェクト）

本センターの教員（日下）は、内閣府 SIP プロジェクト内での「フェーンの発生実態の解明とリスク情報の創出」課題に参画している。この研究の目的は、フェーンの発生地域における過去の気象統計や領域気象モデルでの数値シミュレーション結果をもとに、フェーンの発生パターンの類型化や発生頻度等の実態を明らかにすることである。今年度は、平成 28 年度に抽出したフェーン事例について、引き続き統計解析を行った。その結果、以下のことが明らかになった。(1) 富山で発生した過去 10 年間（2007-2016 年）の高温日におけるフェーン 177 事例のうち、典型的と思われるフェーンは 26 事例で、それらの発生時の天気図型は日本海低気圧+前線型が 16 事例、日本海低気圧型が 7 事例、台風型が 3 事例であった。(2) フェーン吹走時の風速に着目したところ、典型事例では秒速 10-11m の事例が最も多かった。

統計解析に加えて、典型的なフェーンのうち、特に明瞭な低気圧型フェーン 4 事例と高気圧型 4 事例を対象に数値シミュレーションを実施した。この結果と気象レーダーデータの解析結果から、低気圧型 4 事例と高気圧型 3 事例はいわゆる力学フェーンであり、残りの高気圧型 1 事例のみが山岳風上斜面で降水をもたらす熱力学フェーンであったことが推察された。

最後に、2016 年 12 月 22 日に糸魚川に大火をもたらしたフェーンの類似 9 事例を対象に領域気象モデル WRF による予測精度を確認した。水稻被害をもたらす高 FTP 日のフェーンを精度良く予測できることが確認できた（図 6）。

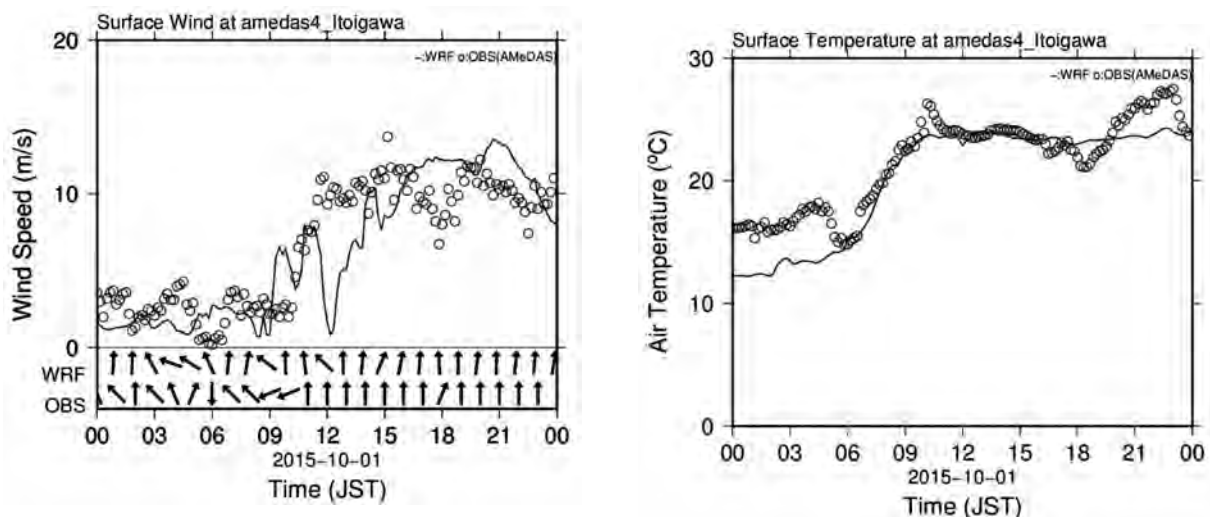


図 6 2015 年 10 月 1 日の高 FTP フェーン日の糸魚川におけるアメダス観測値と WRF 予測値。左の実線が WRF による風速、白丸がアメダス風速、上行のベクトルが WRF による風向、下行のベクトルがアメダス風向。右図の実線が WRF による気温、白丸がアメダス気温。

**【5】 熱中症予測の研究（環境省 SI-CAT プロジェクト）**

本センターの教員（日下）は、環境省 SI-CAT プロジェクトに参画している。本研究の目的は、自治体の温暖化適応策（特に暑さ対策）を実行した場合の将来の暑熱環境予測や、健康影響、暑さに対する適応策の効果を評価することである。今年度は、熱中症搬送者数予測モデルの改良とこのモデルを用いた熱中症搬送者数の将来予測を実施した。（1）はじめに、一般化線形モデル（リンク関数は対数関数）に基づき熱中症搬送者数予測式を提案し、この予測式で用いる説明変数として、日最高気温、日平均気温、日最高 WBGT、日平均 WBGT をそれぞれ選択した場合の精度検証を行った。その結果、日最高気温と日平均気温が同程度で、これらは日最高 WBGT や日平均 WBGT を用いた場合よりも予測精度が高いことが分かった。次に、予測期間を期間 1、2、3 の計 3 期間に分割し、それぞれの期間でパラメータフィッティングを実施した場合の予測精度の変化を検証した。期間分割した理由は、同じ気温でも、梅雨明け直後は熱中症搬送者数が多く、お盆後は少ないことが統計的に明らかであったためである。これは、暑さに対する人間の慣れや生活スタイルの適応によると考えられる。そこで、期間 2 の初日を「梅雨明け 1 週間後」に設定し、期間 3 の初日を「8 月 16 日以降で日最高気温が 3 日間連続で低下し、その合計が 2℃以上となった日」に設定した。その結果、期間分割なしモデルに比べて大幅な精度向上が認められた（図 7）。（2）次に、埼玉県で検証した熱中症搬送者数予測モデルを全国の都道府県に展開した。全国展開の際には、パラメータは都道府県毎に再設定した。実測値と比較検証した結果、全体的に精度は良好であることが分かった。（3）熱中症搬送者数予測モデルの全国展開と並行して、埼玉県における 65 歳以上の熱中症搬送者数の将来予測の事前検討を行った。その結果、1℃、1.5℃、2.0℃気温が上昇した場合、6 月～9 月までの 4 ヶ月間の埼玉県における熱中症搬送者数は、それぞれ、現在の 1.4 倍、1.7 倍、2.1 倍になると予測された。また、RCP8.5 シナリオ下では、（MIROC5 の全球気候予測結果に基づいた場合）2026-2050 年になると 2.3 倍になると予測された。



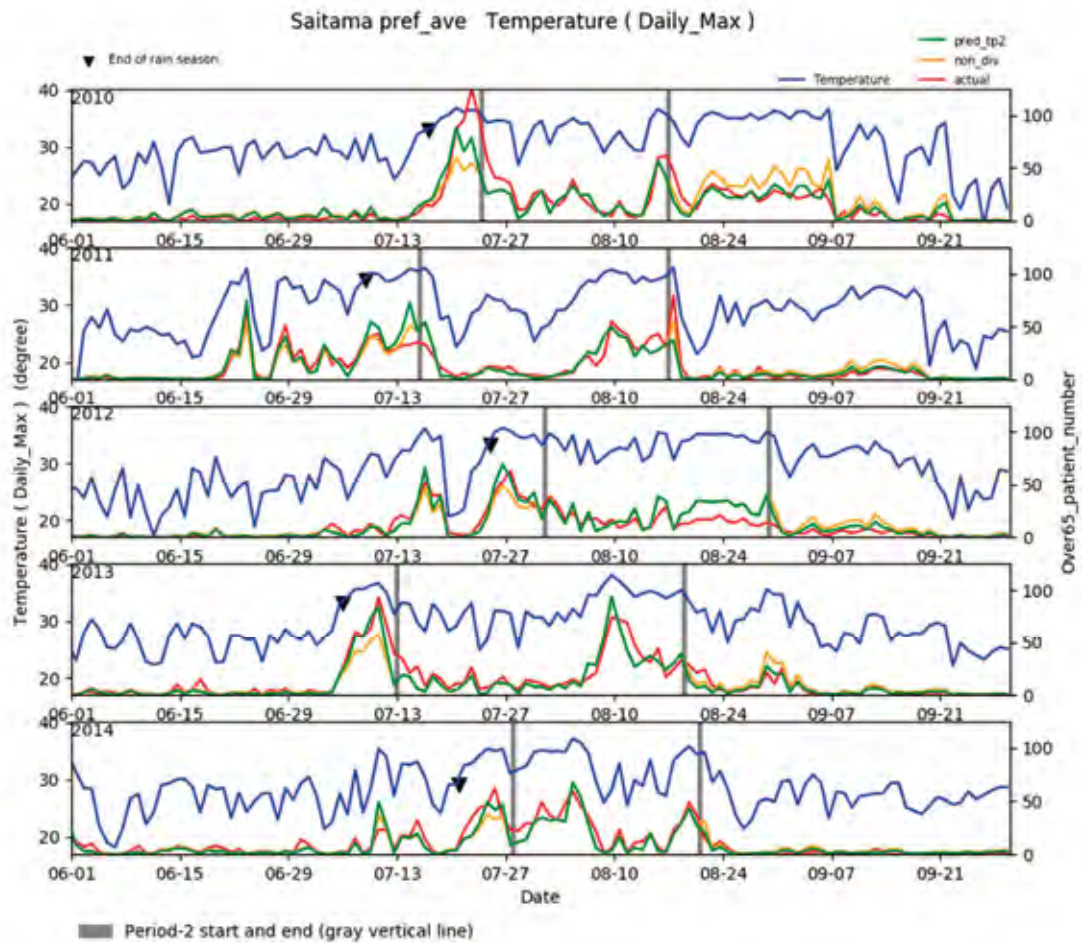


図 7 6～9 月までの日最高気温の埼玉県内平均値（青線）、埼玉県内での熱中症搬送者数の実測値（赤線）、基準モデルによって予測された埼玉県内での熱中症搬送者数（橙色線）、および、期間分割モデルによって予測された埼玉県内での熱中症搬送者数（緑色線）。青線上の黒い逆三角形は気象庁が定義した梅雨明け日を意味する。横軸は日、縦軸は気温および搬送者数。上から順に 2010 年、2011 年、2012 年、2013 年、2014 年の結果。

## 【6】 都市気候の研究（学際共同利用研究）

本センターの教員（日下）は、これまで文部科学省の RECCA プロジェクトや本センターの学際共同利用プロジェクトにおいて、独自の都市街区気象 LES モデル（City-LES）を開発してきた。これまでは、理想化シミュレーションを行ってきた。現在は、WRF のようなメソスケールの気象モデルとのネスティング（力学的ダウンスケーリング）による都心の詳細かつ現実的な気象シミュレーションを行っている。しかし、気象モデルと LES モデルの間には大きな違いがあり、それらが両者のネスティングをしばしば難しくする。たとえば、気象モデルは LES モデルと異なり、モデル内に乱流成分を持たないため、両者のネスティングの際には、LES の境界条件として適切な乱流成分を人工的に作成する必要がある。また、大気の状態

態が中立でない場合、境界付近で気象モデルと LES モデルの間の温度差に起因する重力波が発生するため、それを適切に制御しなければならない。今年度は、これらの問題を解決するために、はじめに、City-LES 用の新たな境界条件モジュールを開発した。次に、東京都品川区中心部を対象とした現実的な都市街区気象シミュレーションのテストを実施した（図 8、図 9）。いくつかのケースでは、WRF と City-LES のネスティングは良好に実施できたが、いくつかのケースでは、City-LES の結果に重力波の影響が残ってしまった。

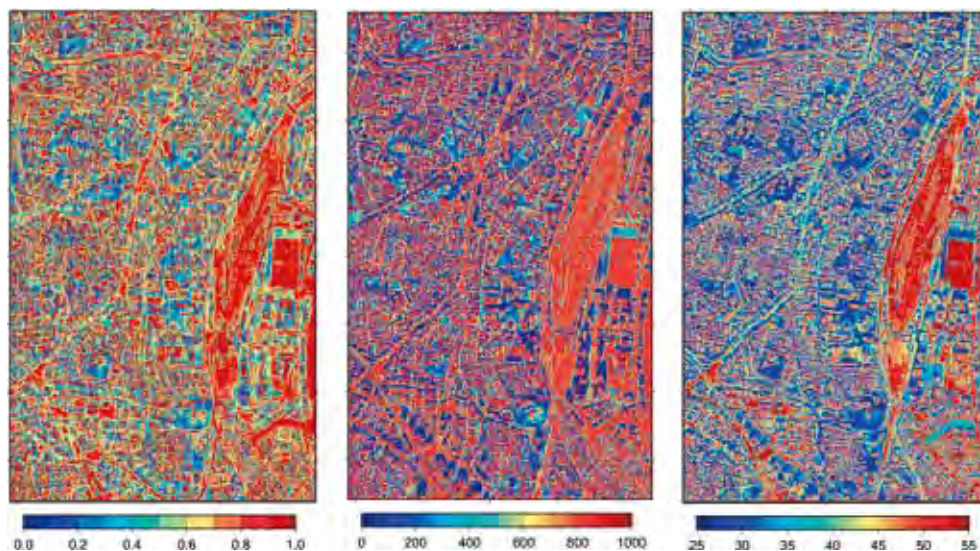


図 8 (左) City-LES で用いられた品川駅周辺の天空率、(中央) City-LES によって計算された短波放射、(右) City-LES によって計算された表面温度。



図 9 City-LES によって計算された実際の海風進入時の品川付近の気温分布。

本センターでは、都市気候計算用に改良した独自の WRF モデルを用いて、これまで様々な都市を対象とした力学的ダウンスケーリング実験を実施してきた。今年度は、ブルガリアの首都ソフィアを対象に、現在（2012 年、図 10c）、過去（1878 年、図 10b）、および人間活動以前（図 10a）の 3 時代の土地利用および人工排熱データを用いて、人間活動以前から産業革命後、現在までの土地利用変化が同地域の気候に与える影響を評価した。ここで、人間活動以前の土地利用には、潜在自然植生分布を用いた。現在気候の再現計算の結果（気温の日変化および水平分布）は、どの地点でも極めて良好であった（例えば、図 11）。

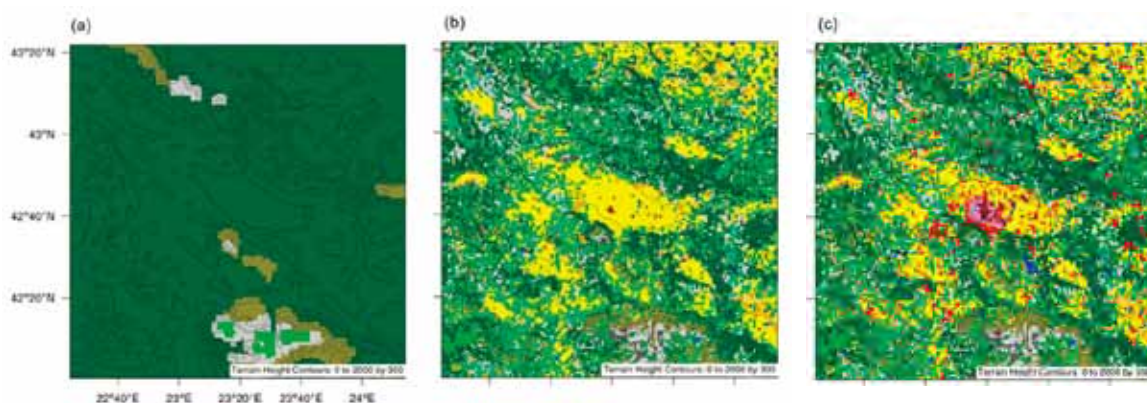


図 10 ソフィア周辺の土地利用図。左は潜在自然植生図、中央は 1878 年の土地利用図、右は 2012 年現在の土地利用図。赤色とピンク色が都市域を意味する。

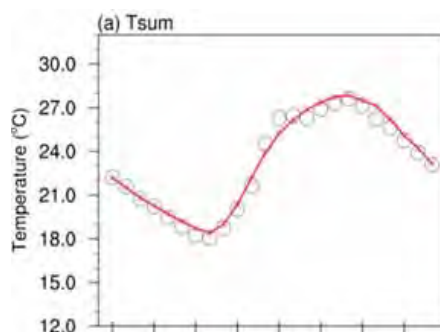


図 11 ソフィア中心部の気温。ただし、過去 3 年間（2011 年～2013 年）の 7 月平均値。白丸は観測値、赤線は WRF による計算結果。

図 12 は、土地利用変化の感度実験の結果である。実験結果からは、ソフィアの過去 100 年以上の都市化に伴う夜間の気温上昇が明瞭に認められた。この気温上昇に対して、土地利用変化の影響は最大で  $2.6^{\circ}\text{C}$  であり（寄与率は約 81%）、人工排熱の影響は  $0.6^{\circ}\text{C}$ （寄与率は約 19%）であることが分かった。また、人工排熱がほとんどなく、建物も非常にまばらな微小な都市化は、森林のキャノピー効果を抑制するため、むしろ夜間の気温をわずかに低下させることが示された。この逆効果については、興味深い。樹木と建物を直接解像でき、森林や

都市街区内の大気の流れや放射を 3 次元的に詳細に計算できる City-LES モデルなどを用いて再評価する意義があるだろう。

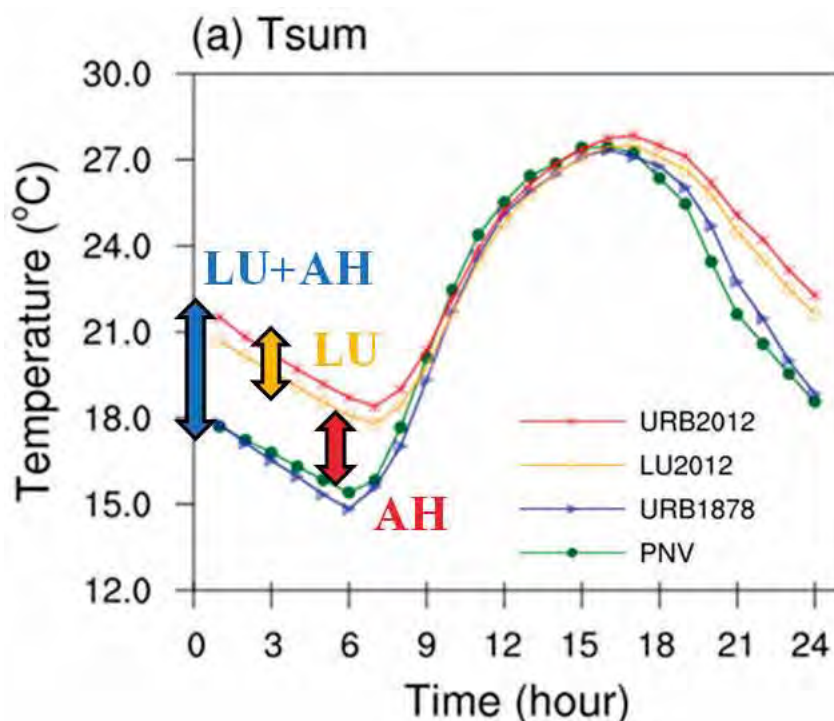


図 12 都市気候用 WRF によって計算されたソフィア中心部の 7 月の気温の日変化。赤実線は現在土地利用・人工排熱を用いた実験、黄色は現在土地利用を用いているが人工排熱は与えない実験、青色は 1878 年の現在土地利用・人工排熱を用いた実験、緑色は潜在自然植生土地利用を用いた実験の結果。

#### 4. 教育

指導学生（田中）

D 3（地球）：小柴厚

D 1（地球）：須長智洋

M 2（地球）：佐々木剛史、大塚崇晴

M 1（地球）：栗花卓弥、遠藤あずさ、岡崎晴菜

B 4（地球）：伊藤一輝、松信匠、盛大樹

指導学生（日下）

D 3（地球）：豊田良平、加藤隆之、西暁史、リディアビタノバ

D 2（地球）：今井優真

M2（地球）：浅野裕樹、佐藤拓人、中村好江、小柳拓真、木村竜平、松日楽達哉

M2（環境）：沖和宏

M1（地球）：山田駿介、遠藤周平、根岸もも子

M1（環境）：中島彩

B4（地球）：本橋洋介、前田知夏、小林大樹、谷川友音

## 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

### 受賞

筑波大学若手教員奨励賞、松枝未遠、顕著な業績による筑波大学研究力向上への貢献、2017年12月4日

### 外部資金

- ・日本学術振興会・学術研究助成基金助成金（若手研究（B））、松枝未遠、代表、2016－2018年度、3,510,000円、天候レジームに関連する大気顕著現象の予測可能性
- ・文部科学省・北極域研究推進プロジェクト（ArCS）、松枝未遠、分担、2015－2019年度、25,000,000円（分担金）、気象・海氷・波浪予測研究と北極航路支援情報の統合
- ・科研費基盤C、田中博、代表、2017-2019、3,400,000円、ロスビー波の砕波と飽和による地衡風乱流理論の構築
- ・国立研究開発法人 新エネルギー産業技術総合開発機構（NEDO）・電力系統出力変動対応技術研究開発事業、日下博幸、分担、2014-2018年度、163,421,000円（分担金）、電力系統出力変動対応技術研究開発／風力発電予測・制御高度化
- ・内閣府・戦略的イノベーション創造プログラム（SIP）、日下博幸、分担、2014-2018年度、12,180,000円（分担金）、フェーンの発生実態の解明とリスク情報の創出
- ・文部科学省・気候変動適応技術社会実装プログラム（SI-CAT）、日下博幸、サブ課題代表、2015-2019年度、19,994,000円、気候変動に関する分野別影響・適応策評価技術の開発（適応策評価のための暑熱環境と健康影響モデル開発）
- ・環境省・地域適応コンソーシアム事業、日下博幸、分担、2017-2019年度、10,220,000円（分担金）、熱中症リスクの評価手法の整理・構築

### 知的財産権

特になし

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. **Matsueda, M.** and T. N. Palmer, 2018: Estimates of flow-dependent predictability of wintertime Euro-Atlantic weather regimes in medium-range forecasts. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, doi:10.1002/qj.3265.
2. Uno, F., H. Ohtake, **M. Matsueda**, and Y. Yamada, 2018: A diagnostic for advance detection of forecast busts of regional surface solar radiation using multi-center grand ensemble forecasts. *Solar Energy*, 162, 196-204. doi10.1016/j.solener.2017.12.060.
3. **Yamagami, A.**, **M. Matsueda**, and **H.L. Tanaka**, 2018: Predictability of the 2012 Great Arctic Cyclone in medium-range ensemble forecasts. *Polar Science*, 15, 13-23. doi:10.1016/j.polar.2018.01.002.
4. **Yamagami, A.**, **M. Matsueda**, and **H. L. Tanaka**, 2017: Extreme Arctic Cyclone in August 2016, *Atmos. Sci. Lett.*, 18, 307–314. doi:10.1002/asl.757.
5. **Matsueda, M.** and H. Endo, 2017: The robustness of future changes in Northern Hemisphere blocking: a large ensemble projection with multiple sea surface temperature patterns, *Geophys. Res. Lett.*, 44, 5158–5166, doi: 10.1002/2017GL073336.
6. 鈴木パーカー明日香・**目下博幸**・渡来靖, 2018: 第3の台風カテゴリー「高温台風」の諸特性 —雨台風・風台風との比較—. *地球環境研究*, 20, 185-191.
7. Dang, T. N., **Doan, Q. V.**, **H. Kusaka**, X. T. Seposo, and Y. Honda, 2017: Green Space and Deaths Attributable to the Urban Heat Island Effect in Ho Chi Minh City. *A Publication of the American Public Health Association*, Online.
8. 富山一・田邊潔・茶谷聡・小林伸治・藤谷雄二・古山昭子・佐藤圭・伏見暁洋・近藤美則・菅田誠治・森野悠・早崎将光・小熊宏之・井出玲子・**目下博幸**・高見昭憲, 2017: 野焼き発生の時間分布調査および稲作残渣野焼きによる大気汚染物質排出量の日変動推計. *大気環境学会誌*, 52(4), 105-117.
9. Takane, Y., H. Kondo, **H. Kusaka**, J. Katagi, O. Nagafuchi, K. Nakazawa, H. Kaneyasu, and Y. Miyakami, 2017: Foehnlike wind with a traditional foehn effect plus dry-diabatic heating from the ground surface contributing to high temperatures at the end of a leeward area. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 56(7), 2067-2079.
10. **Kusaka, H.** and H. Fudeyasu, 2017: Review of Downslope Windstorms in Japan. *Wind & Structures*, 24(6), 637-656.

B) 査読無し論文

特になし

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Akasofu, S. I., and **H. L. Tanaka** 2018: On the natural component of climate change. ISAR-5: Fifth International Symposium on Arctic Research, January 15-18, 2018, Hitotsubashi Hall, Tokyo, Japan, S1-O01.
2. **Kusaka, H.**, 2018: Climate Change Downscaler Training Workshop, February 19-20, 2018, Asian Institute of Technology (AIT), Pathumthani, Thailand.

B) 一般講演

1. **Matsueda, M.**, 2018: Flow-dependent predictability of wintertime Euro-Atlantic weather regimes in medium-range forecasts. Workshop “Predicting the NAO: overconfident, underconfident, or just right?”. 20th Feb 2018, Oxford, UK.
2. **Yamagami, A.** and **M. Matsueda**, 2018: How well do operational forecasting systems predict summertime Arctic Cyclones? The 33rd International Symposium on the Okhotsk Sea & Polar Oceans 2018. 18th – 21st February, 2018, Mombetsu, Japan.
3. **Yamagami, A.**, **M. Matsueda**, and **H. L. Tanaka**, 2018: Medium-range forecast skill for Arctic Cyclones. Fifth International Symposium on Arctic Research, 15th – 18th January 2018, Tokyo, Japan.
4. **Matsueda, M.**, 2018: How well do medium-range ensemble forecasts simulate atmospheric blocking events? Fifth International Symposium on Arctic Research, 15th – 18th January 2018, Tokyo, Japan.
5. Subramanian A., D Lavers, **M. Matsueda**, F. Vitart, T. N. Palmer, and M. Ralph, 2018: Forecasting atmospheric rivers using an ensemble superparameterization approach. American Meteorological Society Annual Meeting. 7th – 11th January 2018, Austin, USA.
6. Subramanian A., D. Lavers, **M. Matsueda**, S. Shukla, D. Cayan, D. Waliser, and M. Ralph, 2017: Evaluating sub-seasonal skill in probabilistic forecasts of Atmospheric Rivers and associated extreme events. American Geophysical Union Fall Meeting. 11th – 15th December 2017, New Orleans, USA.
7. **Yamagami, A.**, **M. Matsueda**, and **H. L. Tanaka**, 2017: Predictability of Arctic Cyclones in medium-range ensemble forecasts. The Eighth Symposium on Polar Science, 4th – 8th December, 2017, Tachikawa, Japan.
8. **Yamagami, A.**, **M. Matsueda**, and **H. L. Tanaka**, 2017: Predictability of summertime Arctic Cyclones on medium-range timescales. NORPAN AORI-UoB Workshop on Cyclones and Air-Sea Interactions. 27th November, 2017, Kashiwa, Japan.

9. **Matsueda, M.**, and T. Nakazawa, 2017: Early warning products for severe weather events derived from operational medium-range ensemble forecasts. Conference on Predictability and Multi-Scale Prediction of High Impact Weather. 9th – 12th October, 2017, Landshut, Germany.
10. Uno, F., H. Ohtake, **M. Matsueda**, Y. Yamada, 2017: Detection of forecast busts on regional surface solar radiation using multi-center grand ensemble forecast. European Meteorological Society Annual Meeting: European Conference for Applied Meteorology and Climatology 2017. 4th – 8th September 2017, Dublin, Ireland.
11. Schiemann, R. M. –E. Demory, L. C. Shaffrey, J. Strachan, P. L. Vidale, M. S. Mizieliński, M. J. Roberts, **M. Matsueda**, M. F. Wehner, and T. Jung, 2017: The resolution sensitivity of Northern Hemisphere blocking in four 25-km atmospheric global circulation models. 5th WGNE workshop on systematic errors in weather and climate models. 19th – 23rd June, 2017, Montreal, Canada.
12. **Yamagami, A.**, **M. Matsueda**, and **H. L. Tanaka**, 2017: An extreme Arctic cyclone in August 2016 and its medium-range predictability. NORPAN Atmosphere-Ocean-Ice Interactions Workshop and Training. 5 – 10 June 2017, Bergen, Norway.
13. **Yamagami, A.**, **M. Matsueda**, and **H. L. Tanaka**, 2017: How predictable summer Arctic Cyclones in 2012 and 2016 were? JpGU-AGU Joint Meeting 2017. 20th – 25th May 2017, Makuhari, Japan.
14. Uno, F., H. Ohtake, **M. Matsueda**, Y. Yamada, 2017: Detection of forecast busts of regional surface solar radiation using ensemble spread with multi numerical weather prediction centers. JpGU-AGU Joint Meeting 2017. 20th – 25th May 2017, Makuhari, Japan.
15. **Matsueda, M.**, T. Nakazawa, and **A. Yamagami**, 2017: The TIGGE and S2S Museums - websites of ensemble forecast products -. 7<sup>th</sup> Verification Workshop. 8th – 11th May 2017, Berlin, Germany.
16. **Matsueda, M.**, and T. N. Palmer, 2017: Predictability of winter Pacific weather regimes and its connections with MJO on medium-range timescales. European Geoscience Union General Assembly 2017. 23rd – 28th April 2017, Vienna, Austria.
17. **Yamagami, A.**, **M. Matsueda**, and **H. L. Tanaka**, 2017: An extreme Arctic cyclone in August 2016 and its predictability on medium-range timescales. European Geoscience Union General Assembly 2017. 23rd – 28th April 2017, Vienna, Austria.
18. **Tanaka, H. L.**, and **K. Ito**, 2018: Multi-decadal variability in planetary albedo. Abstract, Fifth International Symposium on Arctic Research, January 15-18, 2018, Hitotsubashi Hall, Tokyo, Japan, S1-004.



19. **Kurihana, T. and H. L. Tanaka**, 2018: Analysis of cloud formation process for arctic cyclone in the non-hydrostatic icosahedral grid model. Abstract, Fifth International Symposium on Arctic Research, January 15-18, 2018, Hitotsubashi Hall, Tokyo, Japan, G01-O06.
20. **Yamagami, A., M. Matsueda, and H. L. Tanaka** 2018: Medium-range forecast skill for Arctic cyclone. Abstract, Fifth International Symposium on Arctic Research, January 15-18, 2018, Hitotsubashi Hall, Tokyo, Japan, S02-O10.

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

日下博幸, 2017: 領域気象モデルの発展と今後の課題—農業研究での利用可能性.  
日本農業気象学会 75 周年記念大会, 2018 年 3 月 15 日, 福岡.

#### B) その他の発表

1. 宇野史睦, 大竹秀明, 松枝未遠, 大関崇, 山田芳則, 2017: 複数の全球アンサンブル予報を用いた MSM 日射量予測値の大外し事例の検出. 日本気象学会 2017 年度秋季大会, 2017 年 10 月 30 日-11 月 2 日, 札幌.
2. 須長智洋, 田中博, 松枝未遠, 2017: 自己組織化マップ (SOM) とアンサンブルスプレッドによる相空間の可視化. 日本気象学会 2017 年度秋季大会, 2017 年 10 月 30 日-11 月 2 日, 札幌.
3. 中野渡拓也, 猪上淳, 佐藤和敏, Laurent Bertino, Jiping Zhang, 松枝未遠, 山上晃央, 杉村剛, 矢吹裕伯, 大塚夏彦, 2017: 東シベリア海の海氷短期予測における総観スケール大気擾乱の重要性. 日本気象学会 2017 年度秋季大会, 2017 年 10 月 30 日-11 月 2 日, 札幌.
4. Tetsuo Nakazawa and Mio Matsueda, 2017: Relationship between Meteorological Variables/Dust and the Number of Meningitis Cases in Burkina Faso. 日本気象学会 2017 年春季大会, 2017 年 5 月 25-28 日, 代々木.
5. 相場祥平, 鈴木パーカー 明日香, 日下博幸, 2017: 屋内外の温熱環境の違いが知的生産性に与える影響. 日本気象学会 2017 年度秋季大会, 2017 年 10 月 30 日-11 月 2 日, 札幌.

### (4) 著書、解説記事等

- ・高谷祐平, 中澤哲夫, 松枝未遠, 2017: 季節内から季節予測プロジェクト (Sub-seasonal to Seasonal Prediction Project) , 天気, 64(6), 51-56.

- ・ 田中博, 2017: 地球大気の科学. 現代地球科学入門シリーズ 3, 共立出版, 305 pp.
- ・ 日下博幸, 藤部文昭 (編集代表), 2018: 日本気候百科, 丸善出版, 516pp.
- ・ 日下博幸, 2018: 猛暑とフェーンのおくみ. 山川修治ほか (編), 気候変動の事典, 472pp.

## 7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

- ・ 世界気象機関 (WMO) 大気科学委員会 (CAS) 予測可能性・力学過程及びアンサンブル予報に関する作業部会 (PDEF) 委員 (松枝)
- ・ 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)
- ・ インドネシア気候・気象・地球物理庁との共同研究、SATREPS 火山灰追跡モデル (田中)
- ・ ミズリー大学コロンビア校との共同研究、ブロッキング現象、部局間協定 (田中)
- ・ ベトナム国家大学ハノイ自然科学大学 (VNU/HUS) と本センターの間での協定締結 (日下)
- ・ アジア工科大学 (AIT) での集中講義 (日下)
- ・ スリランカ国気象局での集中講義 (日下)

## 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

- ・ 第 5 回国際北極研究シンポジウム (ISAR-5)、主催: JCAR, 共催: CCS、参加者: 344 名、18 か国、海外講演者 2 名招聘、2018 年 1 月 15 日-18 日、一橋大学一橋講堂

## 9. 管理・運営

- ・ 学生生活支援室長・T-ACT 推進室長、副学長補佐、教育研究評議員 (田中)

## 10. 社会貢献・国際貢献

- ・ 日本気象予報士 CPD 制度、運営委員、認定委員 (田中)
- ・ 東京都環境影響評価審議会、委員 (日下)
- ・ オリンピック・パラリンピック暑熱環境測定等検討委員会、委員 (日下)
- ・ 熱中症予防声かけプロジェクト、実行委員 (日下)
- ・ 気象庁気候問題懇談会検討部会、委員 (日下)
- ・ 日本学術会議自然地理学環境防災小委員会、委員 (日下)
- ・ 清真学園高等学校清真スーパーセミナー、講演 (日下)

- ・茨城県高大連携事業、茨城県立緑丘高校生受け入れ（日下）
- ・筑波山神社筑波大学計算科学研究センター共同気象観測所の管理・運営（日下・振興室）

## 11. その他

- ・英国・オクスフォード大学物理学部長期滞在（松枝、国際テニユアトラック制度）
- ・アンサンブル予報準リアルタイム表示 web サイト（TIGGE Museum, S2S Museum）の管理・運営（松枝、山上）

## VII.高性能計算システム研究部門

### 1. メンバー

教授	朴 泰祐
教授	高橋 大介
教授	建部 修見
准教授	川島 英之
助教	多田野 寛人
助教	小林 諒平
研究員	田中 昌宏
研究員	Mohamed Amin Jabri
研究員	藤田 典久
学生	大学院生 13 名、学類生 12 名

### 2. 概要

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

### 3. 研究成果

#### 【1】 OpenCL から制御可能な FPGA 間高速イーサネット通信（朴、小林）

半導体微細加工技術の発展により、FPGA の演算および通信性能は飛躍的に向上し、高性能計算の分野への応用が期待されるようになった。FPGA の性能向上に加えて近年では、各 FPGA ベンダーが OpenCL ベースの開発環境を提供しており、設計者は従来よりも容易に開発を行うことが可能である。FPGA におけるこれらの技術革新は、設計者が一般的な開発環境を用いて、低レイテンシの通信を実行する回路に加えて、on-the-fly にオフロードされる CPU や GPU が不得手とする処理を実行する回路を FPGA 上に実装することによりアプリケーション全体の性能を向上させるという、図 1 に示すコンセプトの実現可能性を提示する。このコンセプトでは FPGA は単なる演算処理のオフローディングだけでなく、それ自体が持つ高速通信機能を積極的に使い、演算と通信を融合する回路を実装することで、これまででない柔軟で電力効率の高い HPC 向けプラットフォームを構築する。このコンセプトを AiS (Accelerator in Switch) と名付ける。

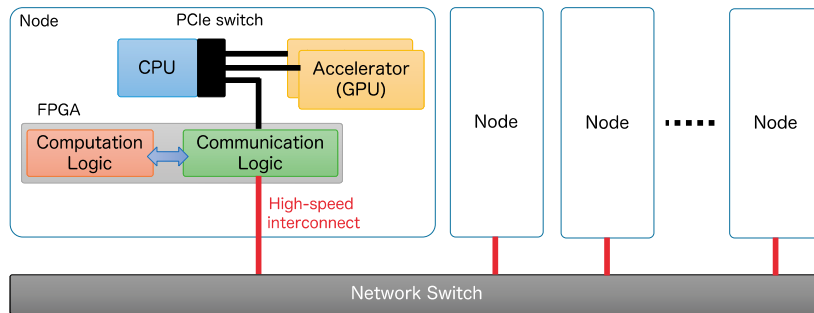


図 1 本研究が実現を目指すコンセプト AiS。低レイテンシの通信で支えられた並列処理が高速なインターコネクで接続された複数の FPGA 上で実行される。

本研究では、そのコンセプトを実現するための OpenCL から制御可能な FPGA 間高速イーサネット通信手法について提案する。FPGA ベンダーが提供している OpenCL ツールチェーンを活用し、FPGA の持つ高速通信リンクをユーザレベルから制御している。そして、ノード数は数十、数百とスケールさせることを前提としているため、通信の接続にはネットワークスイッチを利用する。このため、提案手法はイーサネット通信プロトコルをサポートしている。図 2 (a) にそのハードウェア実装と図 2 (b) に Ping-pong 通信用の OpenCL コードの一部を示す。

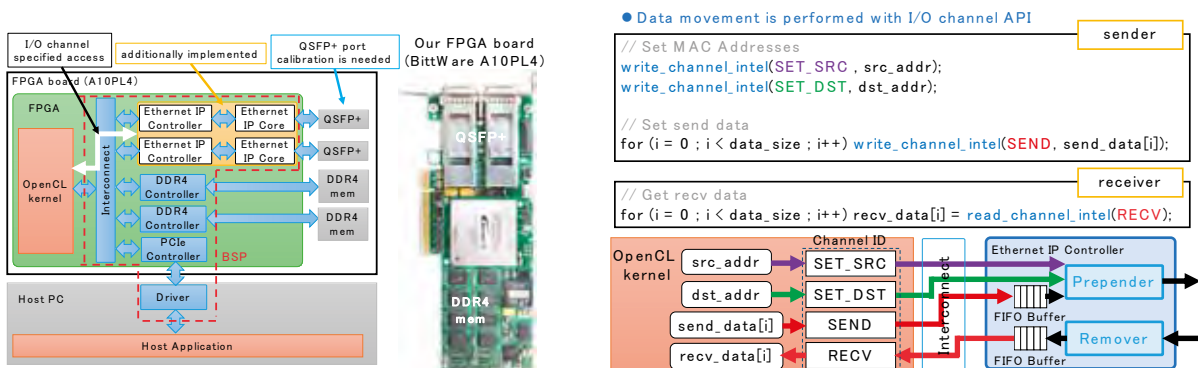


図 2 (a) ハードウェア実装の概略図

(b) Ping-pong 通信用の OpenCL コードの一部

FPGA で OpenCL プログラミングをするためには、Board Support Package (BSP) と呼ばれる、FPGA と FPGA ボードに搭載されている外部メモリなどのペリフェラルとの接続情報やホストの計算機との PCIe 通信のためのドライバなどを含む設定ファイルが必要であり、図 2 (a) の赤色の破線で囲まれた領域が BSP で提供される機能に相当する。本研究では、この BSP にイーサネット通信用のコントローラ (図 2 (a) の黄色のブロック) を組み入れることによって OpenCL からのイーサネット通信を実現している。そして、図 2 (b) に示すように、FPGA ベンダーが提供する OpenCL API (Intel FPGA SDK for OpenCL では I/O Channel API) を用いて、FPGA 間通信を実行する OpenCL カーネルコードを記述する。

AiS コンセプトに基づく一連の実証実験を行うため、計算科学研究センターに PPX (Pre-PACS-X) クラスタを導入した。PACS-X は第 10 世代の PACS システム開発計画であり、AiS コンセプトに基づく GPU と FPGA のハイブリッド演算加速装置を計算ノードに搭載する計画である。PPX は PACS-X の本格構築のために、予備実験や評価を行うためのミニクラスタである。H28 年度に 6 ノード、さらに H29 年度に 7 ノードを追加した計 13 ノードのシステムである。なお、第 1 期の 6 ノードには FPGA として Intel/Altera Arria10 を、第 2 期の 7 ノードには Xilinx Kintex をそれぞれ搭載しており、標準的に用いられる高性能 FPGA を比較実験できるように構成している。それ以外の要素は全ノードについて共通で、Intel Broadwell アーキテクチャの Xeon CPU を 2 ソケット、NVIDIA 社の Pascal アーキテクチャの Tesla P100 を 2 基ずつ、Mellanox InfiniBand EDR を 1 チャンネル、各ノードに搭載している。また、FPGA 間通信実験のために、Aria10 あるいは Kintex FPGA ボードに搭載される 2 本の QSFP+ (40Gbps) のリンクを束ねる 100Gbps Ethernet スイッチも備える。提案手法の有効性を評価するために、通信レイテンシ・バンド幅の観点における FPGA 間通信性能の比較実験 (図 3) を行った。

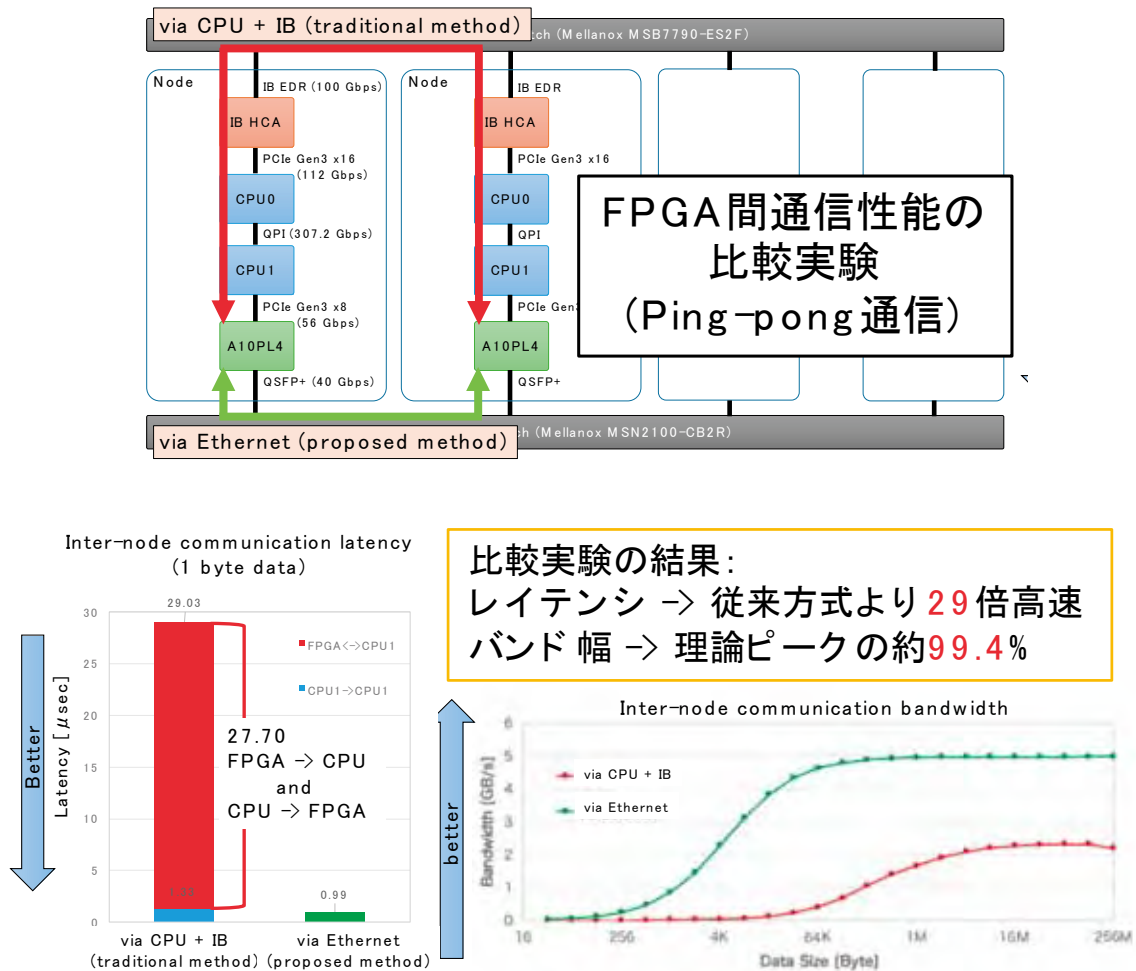


図 3 FPGA 間通信性能の比較実験

実験の結果、通信レイテンシは、CPU と InfiniBand を利用した従来方式より 29 倍優れており、InfiniBand における通信レイテンシとほぼ同程度であることが分かった。また、QSFP+の理論性能の 99.4%の通信バンド幅を達成しており、低レイテンシ通信によって通信バンド幅の立ち上がりが従来方式より優れていることが分かる。以上より、低レイテンシ・高バンド幅のイーサネット通信がユーザレベルから制御可能であることが定量的に確認された。

## 【2】 GPU・FPGA 連携システムの開発（朴、小林）

AiS コンセプトに基づく FPGA を用いた複合演算加速システムとして、FPGA と GPU を混載する演算ノードの実現が望まれる。これは、かつて HA-PACS/TCA の開発において実現した、PCIe 上に接続された GPU と FPGA を PCIe のパケット通信プロトコルを用いて通信させる技術と基本的に同じである。GPU と FPGA は、それぞれのメモリ（GPU の場合は global memory、FPGA の場合は DDR memory）を PCIe アドレス空間にマッピングすることで、PCIe バス上の DMA 機構を用いて双方のメモリ間でデータのコピーを行う。例えば、GPU のメモリ内容を FPGA にコピーする場合、CPU を介してソフトウェアで通信を行うと、GPU から CPU へのメモリコピーの後でその内容を CPU から FPGA にさらにコピーするという作業をプログラムで行わなければならない、GPU や FPGA の高速化に対する深刻な性能ボトルネックとなり得る。

H29 年度の研究において、FPGA 内の PCIe DMA ハードウェアを実装することで、GPU 上の global memory（PPX では NVIDIA P100 の HBM memory）と FPGA 上の DDR memory 間でデータ転送を実現する回路を Verilog HDL で構築し、その通信性能を評価した。この仕組みの様子を図 4 に示す。

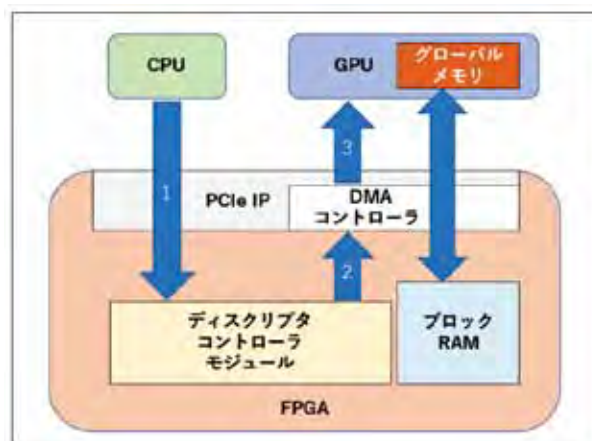


図 4 PPX ノードにおける GPU と FPGA 間の DMA 通信機構

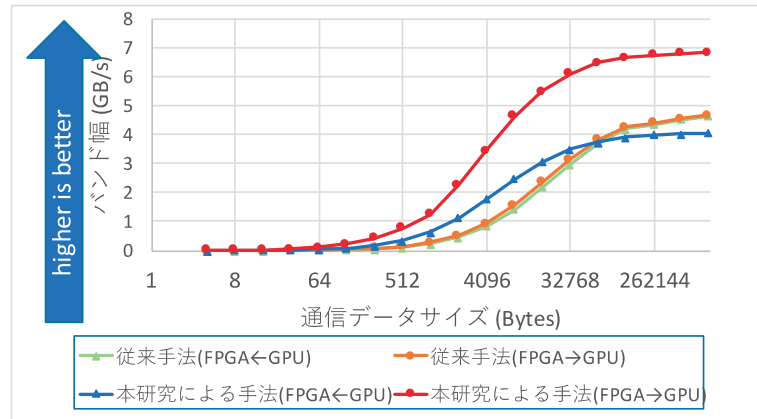


図 5 CPU 経由（従来手法）と FPGA-DMA による GPU と FPGA 間のデータコピー性能の差

PPX 上での DMA 転送の性能を図 5 に示す。ここでは CPU を介した従来手法と、本研究で開発した FPGA の DMA 転送を用いた GPU・FPGA 間直接転送の通信バンド幅の比較を示す。図から明らかなように、FPGA から GPU への通信では常に従来手法より性能が高く、最大で 2.3 倍の性能差、またデータ長が長い場合（256KB 以上）で約 1.4 倍の性能差が確認された。一方、GPU から FPGA への通信では 64KB データサイズまでは本研究の手法が勝っているが、これを超えると従来手法のほうが性能が良い結果となった。この理由は現在解析中であるが、特にデータサイズが小さくなる細粒度並列処理を行う場合、提案手法のほうが有利であることは確認された。

### 【3】 FPGA 上の高位合成による HPC アプリケーションの実装（朴、小林）

H29 年度で終了する JST-CREST における TCA (Tightly Coupled Accelerators) コンセプトを発展させ、FPGA により積極的にアプリケーションの一部をオフロードすると共に、引き続きネットワークインタフェース機能や GPU との連携機能を盛り込んだ新しいコンセプト AiS (Accelerator in Switch) の基盤研究として、FPGA 上での高レベル言語 OpenCL によるアプリケーション記述と、低レベル機能の Verilog HDL 記述を並行して行い、両者を融合した新しい FPGA プログラミングのフレームワークを構築する研究を推進した。本研究は計算科学研究センターにおける次期ハイブリッド演算加速クラスタの構築を目指す PACS-X 計画に引き継がれる重要な研究である。

H29 年度研究では、宇宙物理研究部門との共同研究の下、宇宙初期天体形成シミュレーションにおいて、重力と並ぶ重要な物理現象である輻射輸送現象の処理を FPGA オフローディングする研究を集中的に行った。ここで用いられるのは最も重い演算である ART 法の処理である。ART 法はその性質から、GPU による大規模並列処理に不向きであり、FPGA による演算加速が期待される。我々は各空間セルにおける多数の光線トラッキングをパイプライン処



理するアルゴリズムと、発生する処理をプールしておいて順次ワーカーに動的割付を行うアルゴリズムの 2 種類を FPGA 上に実装した。処理の都合上、前者は高レベル合成言語である OpenCL で、後者は低レベルハードウェア記述言語である Verilog HDL で実装した。また、処理系の制約により前者は Intel/Altera の Arria10 FPGA に、後者は Xilinx Kintex FPGA に実装した。両ハードウェアの論理回路規模、通信性能、テクノロジーはほぼ互角であり、性能差は実装手法によるものであると考えて良い。

まず、OpenCL による実装と最先端 GPU である NVIDIA Tesla P100 との性能を比較する。結果を図 6 に示す。横軸は問題サイズ、縦軸は単位時間当たりの処理メッシュ数を性能指標として示す。図からわかるように、CPU 実装はノード当たり最大 28 コア用いた場合でも FPGA と GPU には遠く及ばない。また問題サイズが小さい場合、FPGA の性能は GPU の 10 倍以上である。しかし、問題サイズが大きくなると、演算の大粒度化により GPU の並列処理効率が向上するのに対し、FPGA では論理回路内蔵の BRAM メモリにデータが乗り切らず、DDR メモリを用いることで性能が低下する。今後、BRAM をうまくキャッシュ的に利用しつつ、性能を向上させる工夫が必要である。

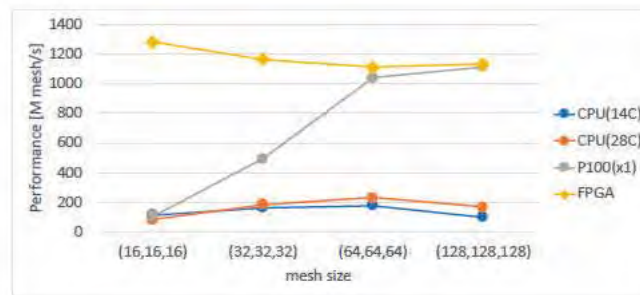


図 6 ART 法の FPGA 実装における性能と CPU 及び GPU による実装の性能比較

次に、OpenCL 実装と Verilog HDL 実装の性能比較を示す。図 7 は ART 法を Xilinx Kintex 上に Verilog HDL 実装した場合と Intel/Altera Arria10 FPGA に OpenCL 実装した場合の性能を、CPU における 1 コアでの地区実装性能を 1 として示したものである。参考のため、16 コアによるマルチスレッド実装の性能も示してある。ここからわかるように、両 FPGA 実装は CPU の逐次性能に比べ 100 倍～120 倍程度の性能向上、また CPU のマルチスレッド実装に比べても 10 倍以上の性能を達成している。しかし、両 FPGA 実装を比べると OpenCL 実装の方が 15%程度高速である。この差は主に、両実装を最終的に論理合成した結果としての動作周波数の差が影響している。Verilog HDL 実装が最大で 200.0 MHz であったのに対し、OpenCL 実装は 236.11 MHz まで伸びた。この結果は直感に反するものであり、現在 Verilog HDL 実装につ

いて性能チューニングを行っている。いずれにしても、FPGA へのオフローディングがこの問題に対して非常に有効に働くことが確認された。

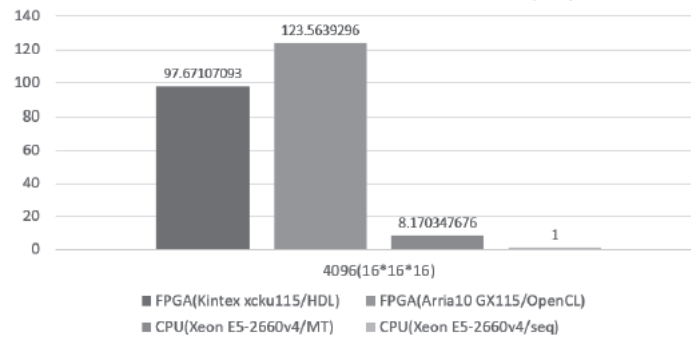


図 7 ART 法の OpenCL 実装と Verilog HDL 実装による比較 (CPU 逐次実装を 1 とする)

#### 【4】 メニーコアプロセッサ向けアプリケーション性能向上 (朴)

昨年度に継続し、CCS の矢花グループとの共同研究の下、同グループで開発中の物性第一原理計算コード ARTED (Ab initio Real Time Electron Dynamics simulator) のメニーコアプロセッサ向け性能最適化を行った。H29 年度は本格可動を開始した、JCAHPC における世界最大の KNL クラスタである OFP (Oakforest-PACS) の全ノードを利用した同コードの性能評価を実施し、極めて良好な weak scaling 及び strong scaling 性能を得ることができた。

OFP 上の計算ノードは Intel Xeon Phi (コード名 KNL: Knights Landing) が実装されており、従来のアクセラレータとしてのコプロセッサである Xeon Phi (コード名 KNC: Knights Corner) ではなく、self-bootable な CPU として動作する。このため、ノード間通信やメモリアクセスにおいて、KNC を用いていた COMA よりシンプルで効率的な処理が行えるだけでなく、KNC の約 3 倍の理論ピーク性能が実現され、大幅な性能向上が実現できる。しかし、基本的な性能チューニングは KNC とほとんど変わらないため、COMA 上で開発された KNC 向けの ARTED をほぼそのまま、OpenMP と MPI の呼び出し方を変更するだけで移植できる。図 8 に ARTED の最重要カーネル部分である、3 次元 25 点実空間ステンシル計算の主要部分コードを示す。ここでは non-temporal store の活用、512bit SIMD 命令の演算数と配置にフィットさせたデータ配列宣言、整数剰余演算を省くためのテーブル置き換え等の最適化を行っている。これらの結果、ステンシル計算カーネルでは KNL の理論ピーク性能の 25% の実効性能が達成された。

```

real(8), intent(in) :: B(0:NLz-1,0:Nly-1,0:Nlx-1)
complex(8),intent(in) :: E(0:NLz-1,0:Nly-1,0:Nlx-1)
complex(8),intent(out) :: F(0:NLz-1,0:Nly-1,0:Nlx-1)

#define IDX(dt) iz,iy,modx(ix+(dt)+NLx)
#define IDY(dt) iz,mody(iy+(dt)+Nly),ix
#define IDZ(dt) modz(iz+(dt)+NLz),iy,ix

do ix=0,NLx-1
do iy=0,Nly-1
!dir$ vector nontemporal(F)
do iz=0,NLz-1
v=0; w=0
! z-computation
v=v+Cz(1)*(E(IDZ(1))+E(IDZ(-1))) ...
w=w+Dz(1)*(E(IDZ(1))-E(IDZ(-1))) ...
! y-computation
! x-computation
F(iz,iy,ix) = B(iz,iy,ix)*E(iz,iy,ix) &
& + A *E(iz,iy,ix) &
& - 0.5d0*v - zI*w
end do
end do
end do

```

図 8 Xeon Phi 向けに最適化された 3 次元 25 点ステンシルコードのカーネル部分

また、KNL においては高バンド幅メモリである MC-DRAM (16GB/node) と低バンド幅メモリである DDR4 (96GB/node) をうまく利用することが必要であるが、ARTED コードは元来、ノード上の全データを一括してスキャンするのではなく、3 次元ステンシル計算に必要な部分コピーを計算バッファにコピーしてから処理するようになっている。このため、この計算バッファを MC-DRAM 上に確保することにより、ほとんど苦労せず flat mode における MC-DRAM の有効利用が可能である。他の多くのコードが flat mode への移植困難のため、効率の落ちる cache mode を用いているのに対し、性能を最大化することが可能となった。計算のワーキングセットが MC-DRAM の容量に収まる場合と、これを超える場合について、演算時間はリーズナブルであり FLOPS 値が落ちていない様子を図 9 に示す。

OFP 上ではその大規模並列性を活かし、波数空間での並列性を全計算ノードに展開した。ここで、各波数空間における 3 次元空間は比較的小さいため、これを複数ノードで並列する domain decomposition 法は用いない。これにより、ノード間通信コストを最小限にし、高い並列処理効率が望める。図 10 に、128 ノードまでの COMA 及び OFP における strong scaling 性能を示す。

もう一点、特筆すべき事項として、OFP の全ノード利用実験を通じて発見された重要な現象がある。KNL では一般的な Xeon CPU と同様、turbo boost mode が備わっており、プロセッサの電力消費目標を超えない範囲で瞬間的に動作周波数を向上させることができる。しかし、この boost 効果は演算コア単位で行われ、基本的に非同期である。また、多数の KNL プロセッサを用いる OFP のようなシステムでは各ノードの turbo boost も非同期に発生する。結果として、同一コードを同一データ量で処理しているにもかかわらず、その性能はノード毎にバラつくという現象が発生する。このことは、OFP を部分的に利用している状態ではあまり目立たないが、本研究のような全系利用では如実に現れることとなった。図 11 に、全系利用で

の ARTED 計算において、性能が最高のノードと最低のノードでの各部分処理の内訳を示す。ARTED では 1 つのハミルトニアン計算の中で数回の全系による MPI\_Allreduce 処理が発生し、ここで全ノードの同期が取られるため、結果として最低速度のノードが律速となり、システム性能が相対的に低下することになる。現時点でこの現象に対する有効な手法は見つかっておらず、プロセッサを提供する Intel 社との協議においても重要な懸案となっている。

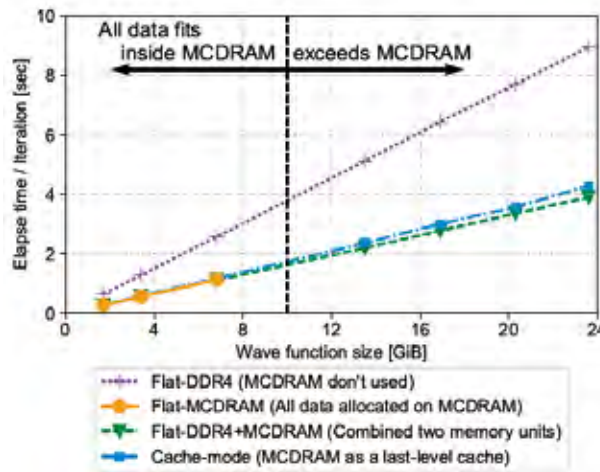


図 9 OFP の 1 ノード上で MC-DRAM 容量を超えるデータを扱う場合の処理時間 (MC-DRAM 容量内のデータ処理に比べ線形に増加するのみで FLOPS 値は低下していない)

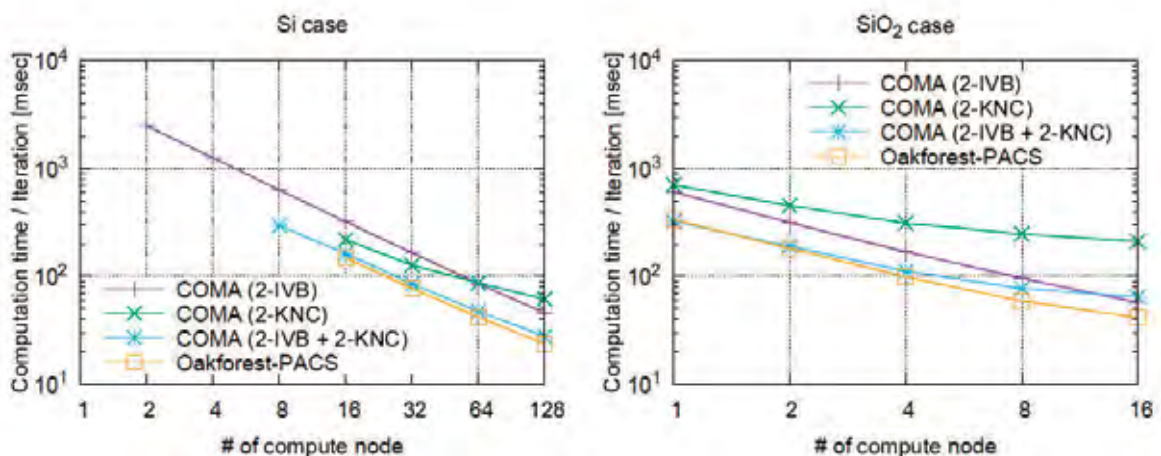


図 10 128 ノード及び 16 ノード (物質はそれぞれ Si 及び SiO<sub>2</sub>) 使用時の COMA (KNC) と OFP (KNL) の strong scaling 性能

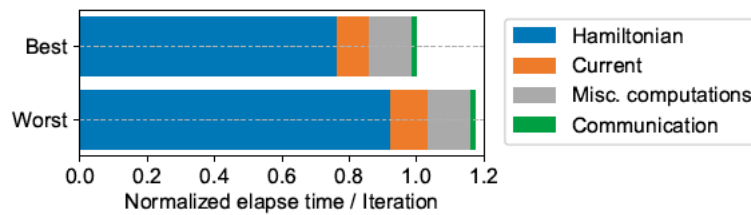


図 11 全系計算における turbo boost 状況に差により発生するノード間性能のバラつき

## 【5】 XcalableMP における動的タスク並列記述（朴）

XcalableMP（以下、XMP）は筑波大学計算科学研究センター（以下、CCS）で研究開発が開始され、その後理化学研究所計算科学研究機構（以下、AICS）に研究母体に移り、その後は AICS と CCS で共同研究が進められている、超並列記述向けディレクティブベース並列記述言語である。ユーザは並列実行プロセス配列のテンプレートに合わせ、各配列の分割と並列ループへの割り付けについて、元となる逐次コードに対して専用のディレクティブを追加することで比較的容易に超並列化を実現でき、さらにコード内で並列通信を意識することにより演算と通信の効率的実行についての性能チューニングが行える。

前年度より XMP におけるタスク並列処理における記述性及び性能の向上について研究を継続している。今年度は同処理系の実装について、OpenMP+MPI による実装と、ANL (Argonne National Laboratory) で開発されている Argobots を用いた実装を行い、さらに通信最適化として Send/Recv を用いた場合と Put/Get を用いた場合の比較評価を行った。

従来の OpenMP におけるタスク並列処理とフロー記述に MPI による通信同期を組み合わせることで、共有メモリと分散メモリを組み合わせたタスク処理の記述は理論的に可能である。しかし、その記述は複雑であり、単純なデータ並列に基づく OpenMP+MPI 記述以上に多くのバグを含む可能性を高め、プログラムの生産性も低下する。他方、単純なデータ並列では十分な並列性が生み出せず、複雑な分岐等を含むコードの大規模並列記述にはタスク記述は重要な要素である。XMP におけるタスク処理は、こういった背景の下、より簡潔な記述により適正なタスク並列処理を効率的に実現することを目標としている。これにより、ポスト京コンピュータで想定されるメニーコアアーキテクチャにおいて様々な手法でノード内並列性を向上させることにも大きく貢献すると考えられる。

```

#pragma xmp tasklet [clause, clause] ... ] [on { node-ref | template-ref } ]
  (structured-block)

#pragma xmp taskletwait [on { node-ref | template-ref } ]

#pragma xmp tasklets
  (structured-block)

where clause is :
  { in | out | inout } (variable, variable] ... )

```

図 12 XMP におけるタスク記述追加文法

図 12 に XMP におけるタスク並列記述の基本文法を示す。tasklet 指示文はスレッドレベルのタスクの定義を行い、on 節に示された条件に従って全てのあるいは特定のノード上でタスクを生成する。in、out、inout の 3 種類の節によりタスクフローの制御を行う。tasklets 指示文は tasklet 指示文で指定されたタスクを並列に実行する構文である。taskletwait 指示文はタスクによる特定の条件の成立を待ち同期を取る構文である。XMP におけるタスク並列処理の例を以下に示す。

```

int A[100]; /* Distributed array */
int B[25]; /* Local array */
#pragma xmp nodes P(4)
#pragma xmp template T(0:99)
#pragma xmp distribute T(block) onto P
#pragma xmp align A[i] with T(i)
/* ... */
#pragma xmp tasklet out(A[0:25], P(4)) on P(1)
taskA();

#pragma xmp tasklet in(A[0:25], P(1), B) on P(4)
taskB();

#pragma xmp taskletwait

```

図 13 XMP tasklet 指示文によるプログラミング例

昨年度の研究では、XMP におけるタスク構文の基本的なコンパイラ開発を行ったが、今年度はノード間通信の最適化を中心に、OpenMP+MPI 及び Argobots による実装と最適化を行った。さらに、XMP におけるグローバルビューモデルでもタスク並列を記述するために、gmove 及び reflect 指示文の機能拡張を行った。図 14 にこれらの機能拡張構文を示す。また、図 15 に tasklet reflect 構文を用いた記述例を示す。

```
#pragma xmp tasklet gmove [clause, clause] ... ] [on { node-ref | template-ref } ]
    (an assignment statement)

#pragma xmp tasklet reflect (array-name[, array-name] ... )
    [chunksizes (reflect-chunksizes[, reflect-chunksizes] ... ) ]

where clause is :
    {in | out | inout} (variable[, variable] ... )
```

図 14 グローバルビューモデルにおける gmove 及び reflect 構文のタスク処理対応

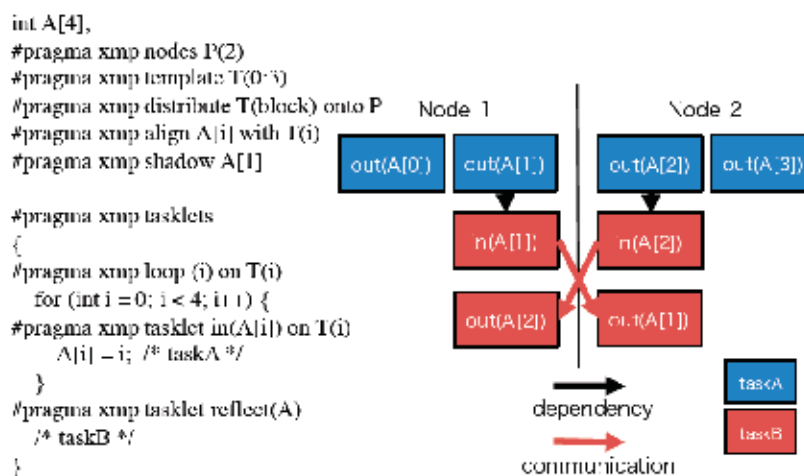


図 15 tasklet reflect 構文のコード例

XMP におけるタスク構文を OpenMP+MPI に変換する場合、各ノード内で多数のスレッドがタスク実行を行っている状況を想定し、MPI\_Isend、MPI\_Irecv、MPI\_Test を用いたノンブロッキング非同期通信によって処理を行うが、gmove 構文については全てのノードが処理への関与を判断できるため、MPI\_Send、MPI\_Recv による記述に置き換えが可能である。これらにノード内タスク処理を OpenMP タスク記述で追加することで実装する。一方、XMP のローカルビューモデルでは coarray アクセスを実現するために Send/Recv 系ではなく Put/Get 系での実装を行う。

OpenMP に代わるもう一つのスレッドレベルの並列タスク実装方法として、細粒度軽量スレッドライブラリである Argobots を用いる実装及び最適を行った。Argobots ではスレッドは Working Unit (WU) という単位で記述されるユーザレベルスレッドであり、これらは直接コアにマッピングされるのではなく、各コアが実行する Execution Stream (ES) がそのキューに積まれた WU をスケジューリング実行する。また、全てのコアが単一の ES を共有することも可能であり、XMP ではこのモデルを用いる。

以上の実装について、JCAHPC が運用する Oakforest-PACS (OFP) 及び筑波大学計算科学研究センターが運用する COMA 上で性能評価を行った。ここでは OFP の結果を示す。OFP は各ノードに Intel Xeon Phi (KNL: Knights Landing) プロセッサを用い、ノード間通信ネットワークに Intel OmniPath Architecture (OPA) を用いた超並列クラスタである。ベンチマークとしてブロックコレスキー分解とラプラスソルバを用いたが、ここでは前者の評価を示す。

まず MPI に Send/Recv 系を用い、OpenMP と Argobots でタスク並列実装を行った場合の評価を示す。ベースラインとなる評価は通常の並列ループによる実装で、これに OpenMP 及び Argobots を用いた場合のベースラインと最適化の結果、そして XMP グローバルビューによる結果を図 16 に示す。

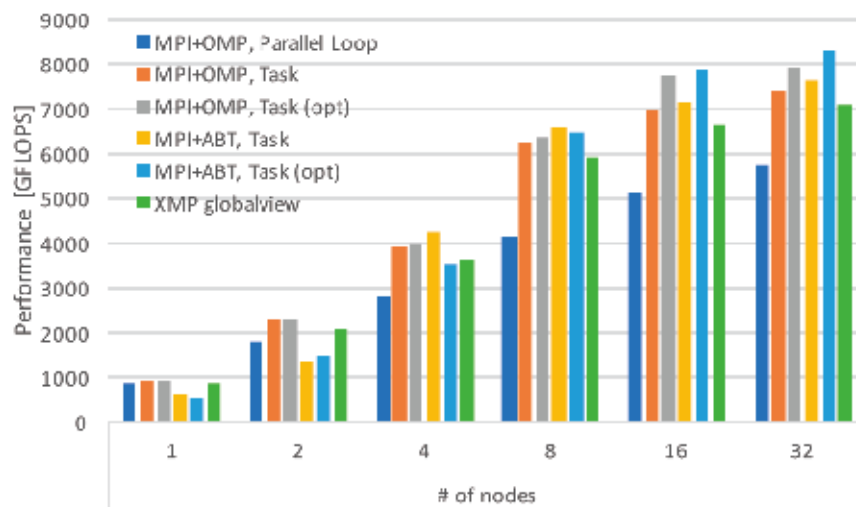


図 16 Send/Recv 系によるブロックコレスキー分解の実装と性能評価

MPI と組み合わせた OpenMP (OMP) または Argobots (ABT) 実装及びそれぞれの最適化実装を比較すると、ノード数が少ない場合は OpenMP が高速だがノード数の増加、すなわちタスク粒度が細くなるにつれ Argobots の性能が高くなるのがわかる。ベースラインとの比較で Argobots は最大で 34% の性能向上が見られた。Argobots 実装ではスレッドの yielding が頻繁に起こっていることが確認され、通信と演算のオーバーラップが効率的に行われ、タスク処理の効率が上がっていることがわかった。XMP のグローバルビューを用いたタスク並列 (XMP globalview) においては MPI+OpenMP に比べ 5% ほど性能が低下している。これは、XMP globalview の場合、ブロックコレスキー分解の処理の一部において、演算結果がローカルに残っている場合でも通信によってこれを求めることで通信オーバーヘッドが生じていることが確認されている。

続いて Put 系による実装の評価を示す。同じく OFP による性能評価を、同様にベースラインとなる並列ループ実装、OpenMP 及び Argobots によるタスク並列とその最適化結果について図 17 に示す。それぞれの実装の意味は図 16 と同じで、MPI 通信に Put 系を用いている。



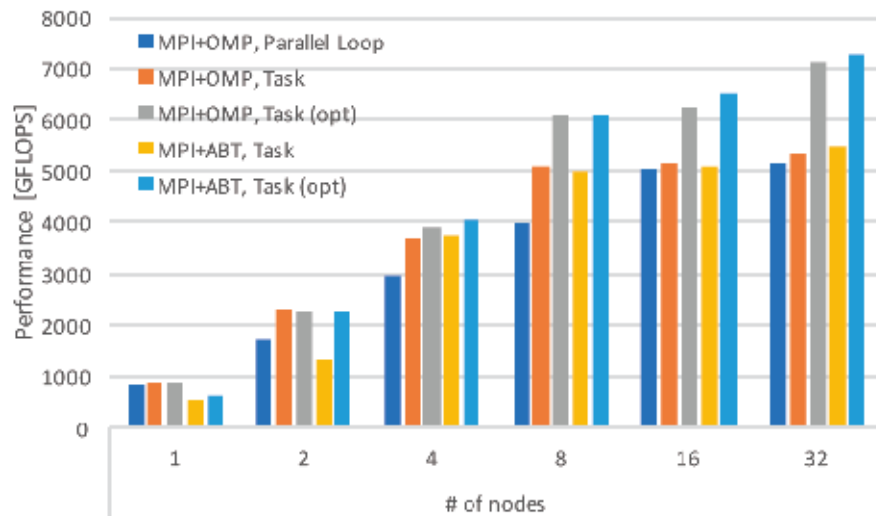


図 17 Put 系によるブロックコレスキー分解の実装と性能評価

この結果によると、OpenMP 及び Argobots とともに、タスク処理の通信最適化が効いており、性能が大きく向上しているが、OpenMP と Argobots の差はあまり大きくない。32 ノード並列の場合、ベースラインからは 32~33%の性能向上が達成できており、通信最適化の効果が大きいことがわかる。しかし、絶対性能としては、32 ノードにおける最高性能である MPI+Argobots において、Send/Recv 系による実装が Put 系実装をやや上回ることが確認されたが、その差は大きくない。

以上のように、本年度の研究では XMP におけるタスク並列処理を Argobots によって実装することで性能が大きく改善することがわかったが、タスク並列による XMP グローバルビュー記述をそのまま実行した場合は MPI+Argobots の場合に比べ、細部での通信時間隠蔽等の最適化が十分行えず、引き続き改良が必要であることがわかった。

## 【6】 大規模並列システム性能予測ツール SCAMP (朴)

ポスト京システムを含む次世代超並列計算システムにおける weak scaling 性能の予測は、strong scaling に比べ比較的容易と考えられがちだが、実際には問題規模の適切な設定、通信時間の増加、キャッシュヒット率等のデータアクセス特性の変化があり、必ずしも容易ではない。また、通信パターンの変化についてもシミュレーションを行う必要があり、単純な机上評価では大きな誤差を生む可能性がある。そこで、同一プログラム・同一問題サイズの並列処理プロファイルを利用して、より大規模なシステムでの性能予測を行う手法とこれに基づくツールとして開発しているのが SCAMP (Scalable MPI Profiler) である。図 18 にこのコンセプトを示す。

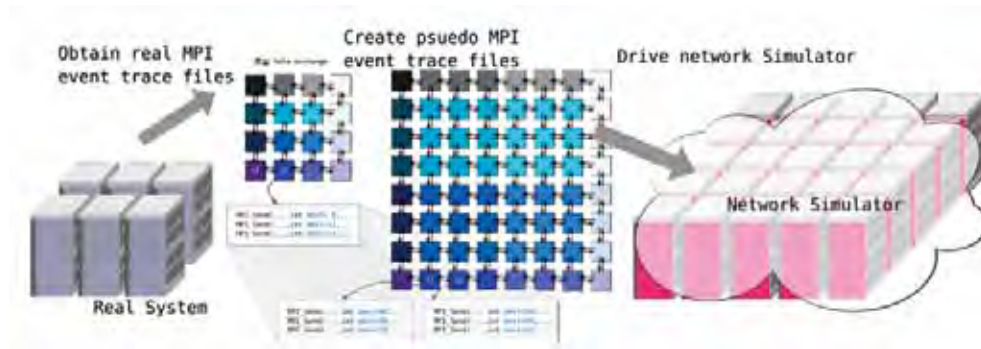


図 18 SCAMP における MPI プロファイルの「水増し」による大規模シミュレーション

本年度の研究では、昨年度までに概念設計を行った、現行実機での MPI プロファイルに対する「水増し」処理による仮想プロファイル作成作業において、LLVM-IR に基づく自動化作業を中心に研究を行った。SCAMP の基本的発想は、小規模システム（現行システム）における実 MPI プロファイルを、よりノード数の大きなシステムを想定した通信シミュレーションの対象となる仮想プロファイルに「水増し」することである。多くの典型的データ並列処理では、MPI 通信における通信相手やメッセージサイズが、総 MPI ランク数及び自 MPI プロセスのランク番号からの線形式で単純に表現可能な場合が多く、この点に着目するとこれらの並列 MPI コードでは「水増し」プロファイルにおける通信相手やメッセージ長を自動的に生成できると推測される。この仮定の下で LLVM によるコード解析から大規模システムのための仮想プロファイルを自動生成し、ネットワークシミュレータによって評価可能にする。図 19 に、MPI の実際の引数となる相手ランク番号から、バックトレースによって MPI の総ランク数と自プロセスランク番号に行き着く解析の様子を示す。

SCAMP ではこれらの水増しされたプロファイルを元に、Sandia National Laboratory によって開発された SST/Macro シミュレータを用いたネットワークシミュレーションを行い、次の世代の大規模システムにおける性能予測を行う。京コンピュータとポスト京コンピュータではほぼ形状の等しい ToFu ネットワーク及びその改良版を用いるが、このトポロジは SST/Macro で標準的に用意されており、評価が可能である。

```

define i32 @main(i32 %argc, i8** %argv) #0 {
entry:
...
%call11 = call @MPI_Comm_rank(..., i32* %myrank)
%call12 = call @MPI_Comm_size(..., i32* %nprocs)
%0 = load i32, @.data, align 4
%div = sdiv i32 1000, %0
store i32 %div, @.data, align 4
... alloc ...
// pi = (myrank-1+nprocs)%nprocs
%5 = load i32, @.data, align 4
%sub = sub i32 %5, 1
%6 = mul i32, %sub, %nprocs, align 4
%add0 = add i32 %5, %6
%7 = load i32, @.data, align 4
%rem = srem i32 %add0, %7
store i32 %rem, @.data, align 4
...
%i12 = load i32, @.data, align 4
%call11 = call @MPI_Send(i8* %i1,
i32 %i12(=pi), ..
...
}
    
```

図 19 MPI 引数からのバックトレースによる MPI 実行パラメータの特定

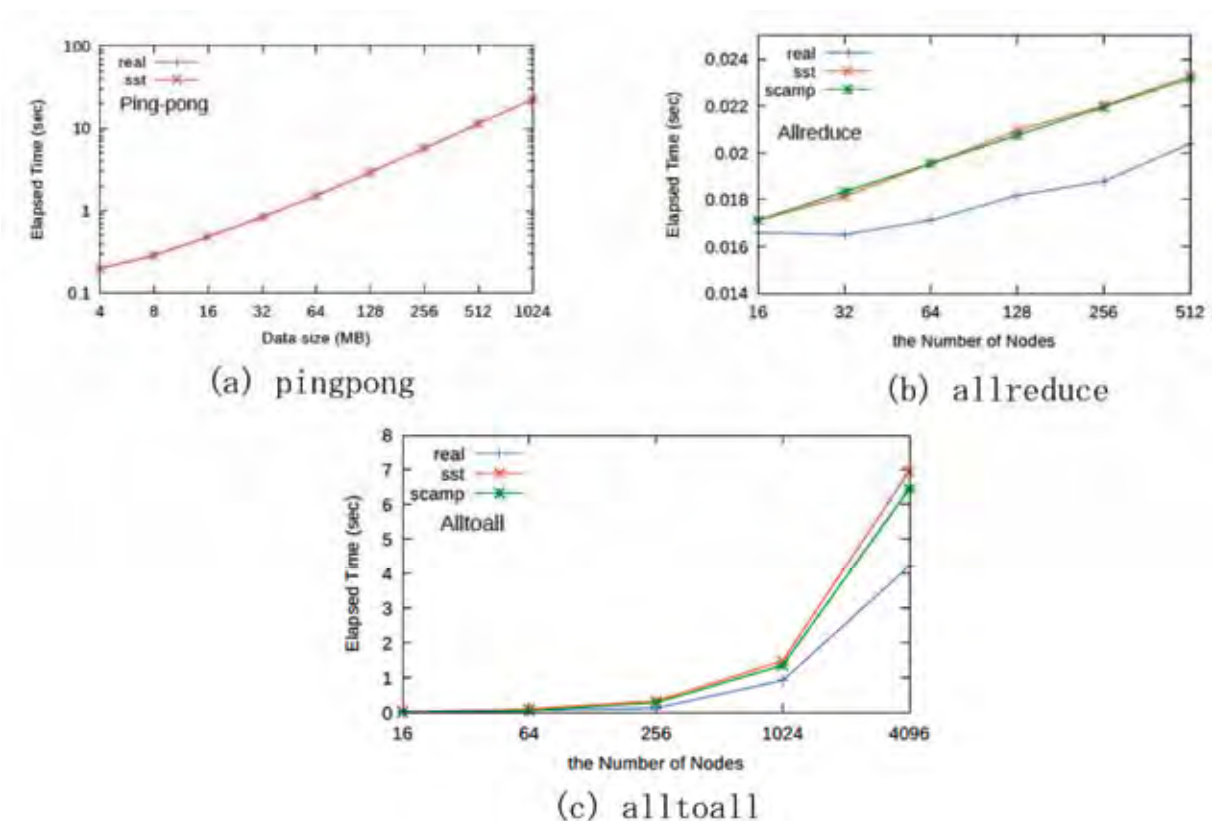


図 20 各種通信パターンにおける実機 (real)、SST/Macro (sst)、SCAMP (scamp)での予測実行時間

図 20 に pingpong、allreduce、alltoall という 3 種類の典型的通信を対象に、実機、SST/Macro、SCAMP による通信性能予測結果を示す。pingpong は 2 ノードによる一対一通信のため

SST/Macro の評価のみであるが、他の 2 種類は SCAMP による水増しプロファイラを用いた結果を示している。SST/Macro は手動による MPI パラメータの書き換え、SCAMP は自動化による書き換えである。allreduce 及び alltoall の両者で、実機での時間が SST/Macro 及び SCAMP によるシミュレーション時間を下回り、高速になっている。この誤差については現在解析中である。また、それと平行してステンシル計算や NPB-FT 等のベンチマークにおける評価を実施中である。

本年度の研究により、LLVM-IR により、SCAMP で想定している MPI ランク等のパラメータからの大規模システム用仮想プロファイルの自動生成が原理的に可能であることが確認された。今後、SST/Macro でのシミュレーション精度の向上と、より精度の高い strong scaling 予測のためにノード内処理時間の予測を組み合わせしていく予定である。

#### 【7】 Xeon Phi クラスタ上の並列 FFT における自動チューニング（高橋）

科学技術計算において広く用いられている高速 Fourier 変換 (fast Fourier transform、以下 FFT) の性能を改善するために、自動チューニングに関する研究を行った。平成 28 年度は並列 FFT において演算と通信をオーバーラップさせる際の通信隠蔽のパラメータを自動チューニングする手法について検討を行っていた。平成 29 年度はさらに全対全通信方式についても自動チューニングを行い、通信隠蔽と組み合わせることで性能向上を図った。

今回実現した並列一次元 FFT は six-step FFT と呼ばれるアルゴリズムに基づいている。分散メモリ型並列計算機において six-step FFT を実現するには、入力と出力をブロック分割した場合、全対全通信が 3 回行われることから、計算時間の大部分が全対全通信によって占められることになる。演算と通信をオーバーラップする手法としては、MPI の非同期通信を用いる方法が広く用いられているが、OpenMP を用いた通信用スレッドを導入する手法が Idomura らによって提案されている。この手法を応用することで、演算と通信を分割しパイプライン方式でオーバーラップさせることが可能である。

分散メモリ型並列計算機において並列一次元 FFT を自動チューニングするには、全体に関わる性能パラメータとして主に以下の 4 つが存在する。

- (1) 全対全通信方式
- (2) 通信メッセージサイズの分割数
- (3) 基底
- (4) ブロックサイズ

これらの性能パラメータを探索することで、並列一次元 FFT の性能をさらに向上させることが可能である。なお、(1)~(2)は MPI プロセス間通信に関するパラメータであり、(3)~(4)は MPI プロセス内の性能に関するパラメータである。今回は(1)~(2)に対して自動チューニングを適用した。

これまでに、MPI の集合通信を自動チューニングする研究が行われている。また、InfiniBand で接続されたマルチコアクラスタにおいて、全対全通信をノード内とノード間の 2 段階に分けて行うことで、性能を向上させる手法が Kumar らによって提案されている。この手法を  $P$  個の MPI プロセスが  $P = P_x \times P_y$  と分解できる一般的な場合に拡張した、「2 段階全対全通信アルゴリズム」は以下のようなになる。

ここで、 $N$  はすべての MPI プロセスにまたがる配列の要素数の合計であるとする。

- (1) 各 MPI プロセスにおいて、配列の添字の順序を  $(N/P^2, P_x, P_y)$  から  $(N/P^2, P_y, P_x)$  に入れ替えるようにコピーする。次に、 $P_x$  個の MPI プロセス間における全対全通信を  $P_y$  組行う。
- (2) 各 MPI プロセスにおいて、配列の添字の順序を  $(N/P^2, P_y, P_x)$  から  $(N/P^2, P_x, P_y)$  に入れ替えるようにコピーする。次に、 $P_y$  個の MPI プロセス間における全対全通信を  $P_x$  組行う。

この 2 段階全対全通信アルゴリズムでは、 $P_x$  個または  $P_y$  個の MPI プロセス間で全対全通信が 2 回行われるため、 $P$  個の MPI プロセス間で全対全通信を行う場合に比べて、トータルの通信量は 2 倍となる。ところが、全対全通信のスタートアップ時間は MPI プロセス数  $P$  に比例するため、 $N$  が比較的小さく、かつ MPI プロセス数  $P$  が大きい場合には、単純な全対全通信アルゴリズムに比べて 2 段階全対全通信アルゴリズムが有利になる場合がある。

そこで、 $P = P_x \times P_y$  となるような、すべての  $P_x$  と  $P_y$  の組み合わせについて探索を行うことによって、最適な  $P_x$  と  $P_y$  の組み合わせを調べることができる。なお、MPI プロセス数  $P$  が 2 のべきになる場合には、すべての  $P_x$  と  $P_y$  の組み合わせを試行したとしても、探索空間は  $\log_2 P$  となる。全対全通信の自動チューニング手法を図 21 に示す。

```

min_time = DBL_MAX;
for (i = 0; i <= log2(P); i++) {
    Px = 2i;
    Py = P/Px;
    MPI_Barrier(MPI_COMM_WORLD);
    start = MPI_Wtime();
    for (count = 0; count < ITER_NUM; count++) {
        if (Px == 1 || Py == 1)
            MPI_Alltoall(sendbuf, ..., recvbuf, ...);
        else
            Two-Step-Alltoall(sendbuf, ..., recvbuf, ..., Px, Py, ...);
    }
    MPI_Barrier(MPI_COMM_WORLD);

```

```

end = MPI_Wtime();
if (end - start < min_time) {
    min_time = end - start;
    Qx = Px;
    Qy = Py;
}
}
Px = Qx;
Py = Qy;

```

図 21 全対全通信の自動チューニング

性能評価にあたっては、並列 FFT ライブラリである FFTE 6.2alpha と、自動チューニング手法を FFTE 6.2alpha に適用したもの、そして FFTW 3.3.7 との性能比較を行った。 $N = 2^m$ の  $m$ を変化させて順方向 FFT を連続 10 回実行し、その平均の経過時間を測定した。なお、FFT の計算は倍精度複素数で行っている。

Xeon Phi クラスタとして、最先端共同 HPC 基盤施設 (JCAHPC) に設置されている Oakforest-PACS (8208 ノード) の 1024 ノードを用いた。FFTE に対しては、コンパイラは Intel Fortran compiler 18.0.1.163 を使い、コンパイルオプションは “mpiiifort -O3 -xMIC-AVX512 -qopenmp” を用いた。FFTW に対しては、コンパイラは Intel C compiler 18.0.1.163 を使い、コンパイルオプションは “mpiicc -O3 -xMIC-AVX512 -qopenmp” を用いた。MPI ライブラリは Intel MPI 2018.1.163 を用いた。各ノードあたりのスレッド数は 64、MPI プロセス数は 1 に設定し、環境変数 “KMP AFFINITY=compact” を設定して flat/quadrant モードで MCDRAM のみを用いて実行した。 $N = 2^m$  点 FFT の GFlops 値は  $5N \log_2 N$  より算出している。図 22 に並列一次元 FFT の性能を示す。図 22 から、通信隠蔽および全対全通信の自動チューニングの効果により FFTE 6.2alpha (no overlap)、FFTE 6.2alpha (NDIV=4) や FFTW 3.3.7 よりも FFTE 6.2alpha with AT の性能が高くなっていることが分かる。

図 23 に全対全通信の性能を示す。通信メッセージサイズが 16B～128KB の範囲で、2 段階全対全通信アルゴリズムが選択されており、自動チューニングを行った全対全通信が MPI\_Alltoall よりも通信バンド幅が高くなっていることが分かる。

並列一次元 FFT において、通信隠蔽と全対全通信の自動チューニングを組み合わせることで、性能をさらに向上させることができることを示した。

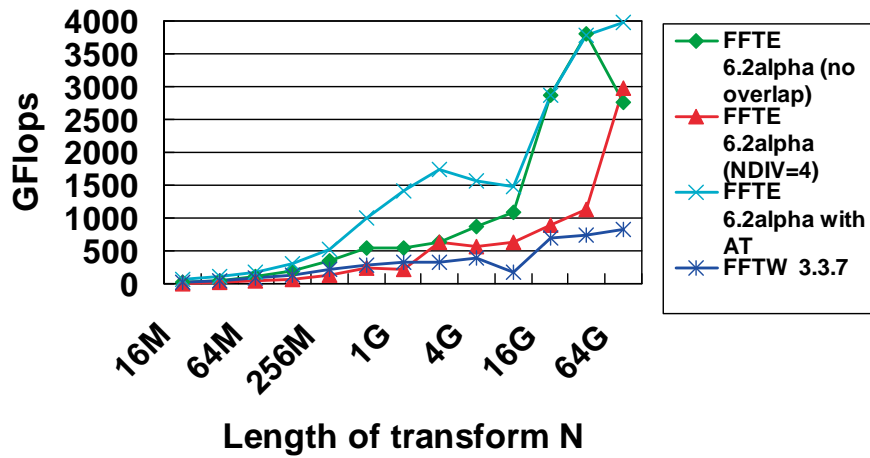


図 22 並列一次元 FFT の性能 (Oakforest-PACS、1024 ノード)

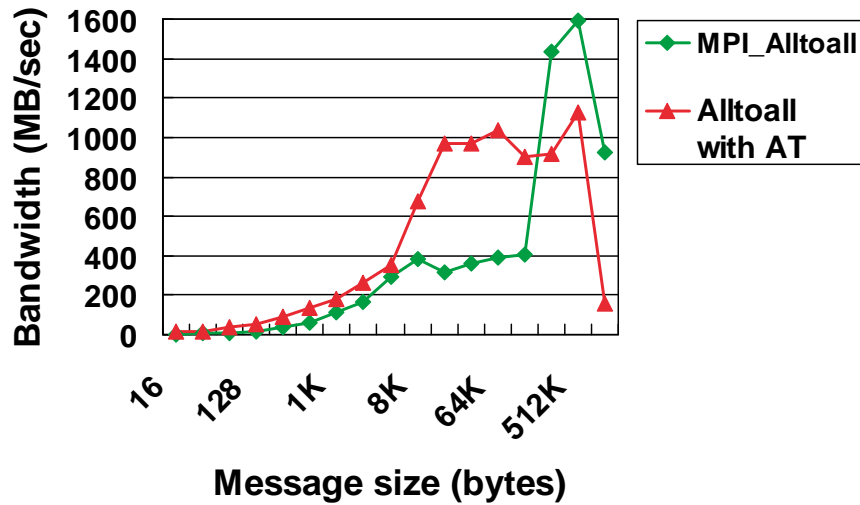


図 23 全対全通信の性能 (Oakforest-PACS、1024 ノード)

**【8】 Xeon Phi プロセッサにおける並列一次元実数 FFT の実現と評価 (高橋)**

FFT において入力データが実数である場合には、実数 FFT を用いると計算量および記憶領域を半分に減らすことができることが知られている。共有メモリ型並列計算機における並列実数 FFT として、FFTW や Intel MKL などが提案されている。本研究では、Xeon Phi プロセッサにおいて並列一次元実数 FFT を実現し性能評価を行った。

FFT は、離散 Fourier 変換 (discrete Fourier transform、以下 DFT) を高速に計算するアルゴリズムとして知られている。

$n$  点のデータに対する DFT は次式で定義される。

$$X_k = \sum_{j=0}^{n-1} x_j \omega_n^{jk}, \quad 0 \leq k \leq n-1 \quad (1)$$

ここで、 $\omega_n^{jk} = e^{-2\pi i jk/n}$ ,  $i = \sqrt{-1}$  である。

DFT の入力データが実数の場合、 $n/2$  点の複素数 DFT を用いて  $n$  点の実数 DFT を計算できることが知られている。具体的には、

$$x_j = r_{2j} + ir_{2j+1}, \quad 0 \leq j \leq n/2 - 1 \quad (2)$$

とおくと、以下のような実数 DFT が得られる。

$$R_k = X_k - \frac{1}{2}(X_k - \bar{X}_{n/2-k})(1 + i\omega_n^k) \quad (3)$$

$$\bar{R}_{n/2-k} = \bar{X}_{n/2-k} + \frac{1}{2}(X_k - \bar{X}_{n/2-k})(1 + i\omega_n^k), \quad 1 \leq k \leq n/4 - 1 \quad (4)$$

$$R_0 = \text{Re}(X_0) + \text{Im}(X_0)$$

$$R_{n/2} = \text{Re}(X_0) - \text{Im}(X_0), \quad R_{n/4} = X_{n/4}$$

six-step FFT アルゴリズムは並列処理に向いていることが知られているが、行列の転置が 3 回必要になる。図 24 に示すように行列の転置においてキャッシュブロッキングを行った場合、最内側のループのみを並列化すると、Xeon Phi 7250 における 68 コアの並列性を活用できない場合が存在する。具体的には、 $n = 2^{18}$  点複素数 FFT の場合に  $N1=N2=512$ 、ブロッキングサイズを  $NB=8$  とすると、最外側ループの反復回数は 64 回となるため、68 コアの並列性を活かすことができなくなる。

そこで、外側から 2 番目のループまでを OpenMP 3.0 の COLLAPSE(2) 指示行により並列化することで、並列性を  $64^2 = 4096$  に増やすことが可能になる。 $n$  点の実数データに対して  $n/2$  点の six-step FFT を計算することで  $n$  点の実数 FFT を実現した。

```

SUBROUTINE TRANSPOSE(X,Y,N1,N2)
  PARAMETER (NB=8)
  COMPLEX*16 X(N1,N2),Y(N2,N1)
  !$OMP PARALLEL DO COLLAPSE(2) PRIVATE(I,J,II)
  DO II=1,N1,NB
    DO JJ=1,N2,NB
      DO I=II,MIN(II+NB-1,N1)
        DO J=JJ,MIN(JJ+NB-1,N2)

```



```

        Y(J,I)=X(I,J)
      END DO
    END DO
  END DO
END DO

```

図 24 キャッシュブロッキングを行った行列の転置

In-cache FFT においては、基数 8 および 16 の FFT カーネルを組み合わせて使用した。基数 16 の FFT カーネルよりもメモリアクセス回数の多い、基数 8 の FFT カーネルを最大 3 ステップに抑えることにより、さらにメモリアクセスを削減することが可能である。Xeon Phi プロセッサの各コアは 32 個の zmm レジスタ (512 ビット) を持っているため、基数 16 の FFT カーネルにおいてもテンポラリ変数の多くをレジスタ上に保持することができる。

性能評価にあたっては、Xeon Phi における並列次元実数 FFT を実現した FFT ライブラリである FFTE (version 6.2alpha) と、FFTW (version 3.3.6-pl1)、そして Intel MKL (version 2017 Update 1) との性能比較を行った。FFTW および Intel MKL は AVX-512 命令をサポートしている。 $n = 2^m$  の  $m$  を変化させて順方向 FFT を連続 10 回実行し、その平均の経過時間を測定した。なお、FFT の計算は倍精度実数で行っている。

評価環境として、Intel Xeon Phi 7250 (MCDRAM 16GB+DDR4-2400 96GB、1.4GHz、68 core) を用いた。コンパイラは Intel Fortran compiler 17.0.1.132 を使い、コンパイルオプションは“ifort -O3 -xMIC-AVX512 -qopenmp”を用いた。Xeon Phi プロセッサあたりのスレッド数は 272 に設定し、環境変数“KMP AFFINITY=granularity=fine, balanced”を設定して flat/quadrant モードで MCDRAM のみを用いて実行した。

図 25 および図 26 に FFTE と FFTW、そして MKL の性能を示す。ここで、実行時間の単位は秒であり、 $n = 2^m$  点実数 FFT の計算量を  $2.5n \log_2 n$  として GFlops 値を算出している。図 25 および図 26 から、 $n = 2^{22}$ 、 $2^{24} \leq n \leq 2^{25}$  および  $n = 2^{29}$  において FFTE の方が MKL よりも高い性能を発揮していることが分かる。

six-step FFT アルゴリズムに出現する行列の転置において外側ループの並列性を高くすることで、高い性能を得ることができた。

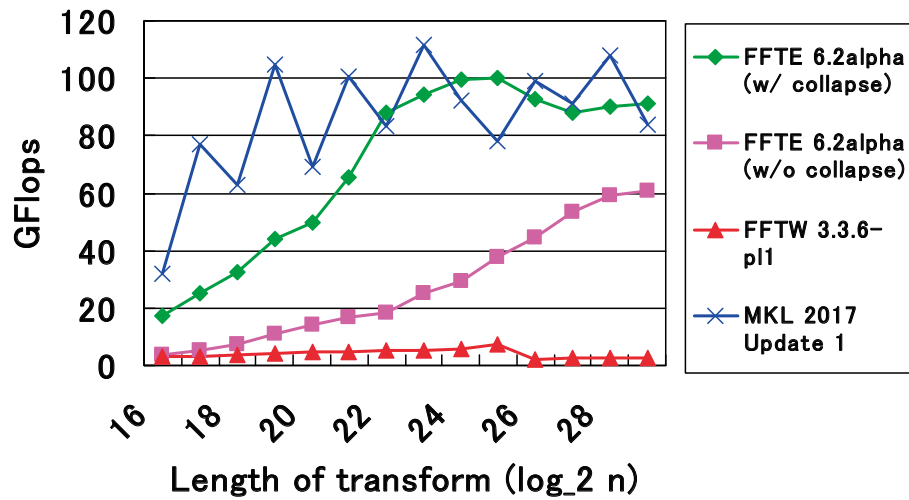


図 25 並列一次元実数 FFT の性能 (Xeon Phi 7250、272 スレッド)

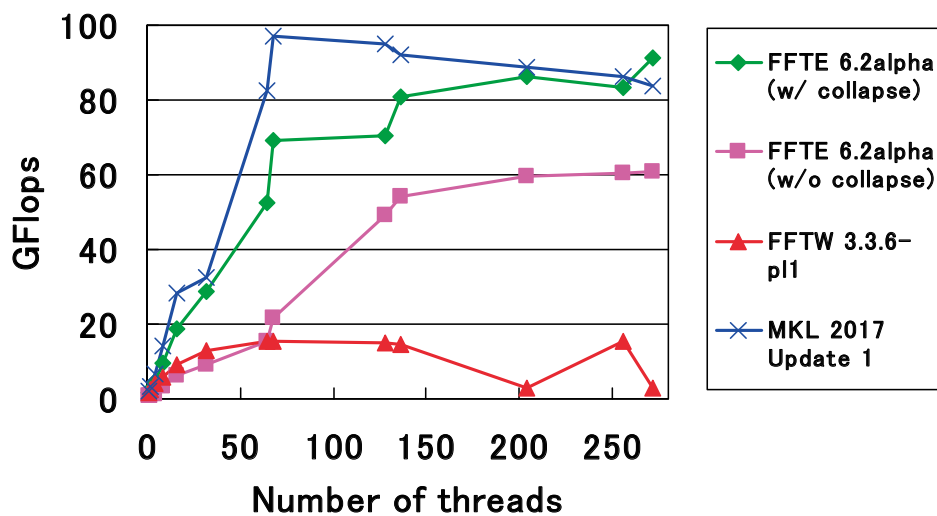


図 26 並列一次元実数 FFT の性能 (Xeon Phi 7250、 $n = 2^{29}$ )

**【9】 数学定数の特定の桁を計算する BBP 型公式の高速計算法 (高橋)**

$\pi$  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長がある。

BBP 公式は以下の式で表される。

$$\pi = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{16^k} \left( \frac{4}{8k+1} - \frac{2}{8k+4} - \frac{1}{8k+5} - \frac{1}{8k+6} \right) \quad (1)$$

16 進  $n+1$  桁目から始まる  $\pi$  の数桁を計算することを考える。これは  $\{16^n \pi\}$  (ここで  $\{x\} \equiv x - [x]$  とする) を求めることと等価になる。式(1)から以下の式が得られる。

$$\{16^n \pi\} = \{ \{16^n S(8, 1, 2)\} - \{16^n S(2, 1, -1)\} - \{16^n S(8, 5, 0)\} - \{16^n S(4, 3, -1)\} \} \quad (2)$$

ここで、

$$S(m, j, l) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2^l}{2^{4k}(mk+j)} \quad (3)$$

である。また以下の式が得られる。

$$\begin{aligned} \{16^n S(m, j, l)\} &= \left\{ \left( \sum_{k=0}^n \frac{2^{4(n-k)+l}}{mk+j} \right) + \sum_{k=n+1}^{\infty} \frac{2^{4(n-k)+l}}{mk+j} \right\} \\ &= \left\{ \left( \sum_{k=0}^n \frac{2^{4(n-k)+l} \bmod (mk+j)}{mk+j} \right) + \sum_{k=n+1}^{\infty} \frac{2^{4(n-k)+l}}{mk+j} \right\} \quad (4) \end{aligned}$$

式(4)の 1 番目の総和における分子において  $\bmod (mk+j)$  となっているのは、小数部分だけを計算すればよいためである。また、BBP 型公式のビット演算量は  $O(n \log n M(\log n))$  であることが知られている。ここで  $M(d)$  は  $d$  ビットの乗算の演算量である。

---

**Algorithm 1** 右向きバイナリ法

---

**Input:**  $a, e, N$  positive integers

**Output:**  $x = a^e \bmod N$

- 1: let  $(e_l e_{l-1} \cdots e_1 e_0)$  be the binary representation of  $e$ , with  $e_l = 1$
  - 2:  $x \leftarrow a$
  - 3: **for**  $i$  **from**  $l-1$  **downto**  $0$  **do**
  - 4:      $x \leftarrow x^2 \bmod N$
  - 5:     **if**  $e_i = 1$  **then**
  - 6:          $x \leftarrow ax \bmod N$
  - 7: **return**  $x$ .
-

BBP 型公式における主要な計算は、式(4)のべき剰余  $2^{4(n-k)+l} \bmod (mk + j)$  である。べき剰余を計算する右向きバイナリ法を Algorithm 1 に示す。式(4)のべき剰余  $2^{4(n-k)+l} \bmod (mk + j)$  は正確に計算する必要がある。IEEE 754 の 128 ビット浮動小数点演算を用いた場合、16 進桁数  $n$  の上限は  $(8n + 5)^2 < 2^{113}$  より  $n = \lfloor \sqrt{2} \cdot 2^{53} \rfloor - 1 \approx 1.27 \times 10^{16}$  となる。一方、64 ビット×64 ビット→128 ビットの符号なし整数演算を用いた場合、16 進桁数の上限は  $(8n + 5)^2 < 2^{128}$  より  $n = 2^{61} - 1 \approx 2.31 \times 10^{18}$  となる。本研究では、IEEE 754 の 128 ビット浮動小数点演算よりも一般的に高速である 64 ビット×64 ビット→128 ビットの符号なし整数演算をべき剰余の計算に用いた。

Algorithm 1 における乗算剰余  $x^2 \bmod N$  および  $ax \bmod N$  に対しては、Montgomery 乗算を用いることで時間の掛かる除算を実質的に行うことなく、乗算、加減算およびシフト演算のみで乗算剰余を計算することができる。

また、式(4)の各項の値の範囲は  $[0, 1)$  となるため、除算と総和の計算は固定小数点演算で行うことができる。式(4)の各項における除算を 128 ビットの精度で行う場合、192 ビットを 64 ビットで割る符号なし整数除算  $\lfloor (2^{128} \cdot x) / N \rfloor$  を行う必要がある。もし、剰余  $(2^{128} \cdot x) \bmod N$  の値が事前に分かっていたら、この除算は Jebelean によって提案された exact division アルゴリズムを用いることで高速に行うことができる。Algorithm 2 に exact division アルゴリズムに基づく 192 ビットを 64 ビットで割る符号なし整数除算を示す。4 行目の `umulh` 関数は 64 ビット×64 ビット→128 ビットの符号なし整数乗算の上位 64 ビットを返す。

---

**Algorithm 2** Exact division アルゴリズムに基づく 192 ビットを 64 ビットで割る符号なし整数除算

---

**Input:**  $x, N, r, \mu$  such that  $0 \leq x < N$ ,  $0 < N < 2^{64}$ ,  $2 \nmid N$ ,  $r = (2^{128} \cdot x) \bmod N$ ,

$$\mu = N^{-1} \bmod 2^{64}$$

**Output:**  $q = \lfloor (2^{128} \cdot x) / N \rfloor$

- 1: **if**  $r = 0$  **then**
  - 2:     **return** 0
  - 3:  $q_0 \leftarrow (-r \cdot \mu) \bmod 2^{64}$
  - 4:  $q_1 \leftarrow \{[(2^{64} - 1) - \text{umulh}(N, q_0)] \cdot \mu\} \bmod 2^{64}$
  - 5:  $q \leftarrow q_1 \cdot 2^{64} + q_0$
  - 6: **return**  $q$ .
- 

なお、式(4)の各項は独立であるため、複数のべき剰余と複数の整数除算に対して SIMD 化および並列化を行うことができる。式(4)において総和を計算する部分では、OpenMP の `reduction` 指示節を用いて並列化を行った。

性能評価にあたっては、提案手法に基づくプログラムと、Bailey によるプログラム (piqpr8.f、piqpr16.f) を用いて、BBP 公式による $\pi$ の 16 進 1000 万桁目の計算時間を比較した。提案手法では 128 ビット符号なし整数演算を用いており、SIMD 化を行った場合には 16 進桁数 $n$ の上限は $n \approx 5.76 \times 10^{17}$ 、SIMD 化を行わない場合には 16 進桁数 $n$ の上限は $n \approx 2.31 \times 10^{18}$ である。Bailey によるプログラム piqupr8.f では 64 ビット浮動小数点演算を用いており、16 進桁数 $n$ の上限は $n \approx 1.19 \times 10^7$ である。piqpr16.f では IEEE 754 の 128 ビット浮動小数点演算を用いており、16 進桁数 $n$ の上限は $n \approx 1.27 \times 10^{16}$ である。

評価環境として、Intel Xeon E5-2670 v3 (Haswell-EP 2.3GHz、12 コア) および Intel Xeon Phi 7250 (Knights Landing 1.4GHz、68 コア) を用いた。提案手法に基づくプログラムにおいては、コンパイラは Intel C compiler 17.0.1.132 を用い、コンパイルオプションは “icc -O3 -xHOST -qopenmp” を用いた。Bailey によるプログラムにおいては、コンパイラは Intel Fortran compiler 17.0.1.132、コンパイルオプションは “ifort -O3 -xHOST -free” を用い、SIMD 化および並列化は行われていない。Xeon Phi 7250 における環境変数は “KMP AFFINITY=granularity=fine, balanced” を設定して flat/quadrant モードで MCDRAM のみを用いて実行した。

表 1 BBP 公式による $\pi$ の 16 進 1000 万桁目の計算時間 (秒)

	Xeon E5- 2670 v3 1 コア (1 スレッド)	Xeon E5- 2670 v3 12 コア (24 スレッド)	Xeon Phi 7250 1 コア (1 スレッド)	Xeon Phi 7250 68 コア (272 スレッド)
提案手法 (SIMD 化あり)	4.099	0.305	4.328	0.192
提案手法 (SIMD 化なし)	6.847	0.423	23.568	0.375
piqpr8.f	25.781	N/A	96.053	N/A
piqpr16.f	440.833	N/A	1402.138	N/A

BBP 公式による $\pi$ の 16 進 1000 万桁目の計算時間を表 1 に示す。表 1 より Bailey によるプログラムよりも提案手法に基づくプログラムが高速であることが分かる。その主な理由としては、

- Bailey によるプログラムでは、べき剰余における剰余演算および級数の各項における除算を、64 ビット (piqpr8.f) または 128 ビット (piqpr16.f) 浮動小数点演算で行っている。

・提案手法に基づくプログラムでは、べき剰余における剰余演算を Montgomery 乗算で行うと共に、級数の各項における除算を exact division アルゴリズムに基づく 128 ビット符号なし整数除算で行っている。

が挙げられる。

また、提案手法において、SIMD 化による性能向上は Xeon E5-2670 v3 の 1 コア (1 スレッド) で約 1.67 倍、Xeon Phi 7250 の 1 コア (1 スレッド) で約 5.45 倍となった。SIMD 化なしの場合は 64 ビット×64 ビット→128 ビットの符号なし整数乗算命令 (x86\_64 の mul 命令) が使えるのに対して、SIMD 化ありの場合は 32 ビット×32 ビット→64 ビットの符号なし整数乗算命令 (AVX2 および AVX-512 の vpmuludq 命令) しか使えないのが主な理由である。

BBP 型公式における主要な計算である、べき剰余の計算を Montgomery 乗算で行うと共に、級数の各項における除算を exact division アルゴリズムに基づく 128 ビット符号なし整数除算で行うことで高速化した。また、複数のべき剰余と複数の整数除算に対して SIMD 化および並列化を行うことができることを示した。

#### 【10】 エクストリームビッグデータの基盤技術 (建部, 川島)

エクストリームビッグデータ (EBD) アプリケーションの実行に求められる、数万~数十万プロセスからの並列アクセスを想定した IOPS、プロセス数に比例した読込、書込アクセスバンド幅性能を目標として、分散オブジェクトストアの研究を行っている。本年度は、共同研究者である東京工業大学の秋山グループと、メタゲノムアプリケーションについてストレージシステム、実行時システムのコデザインを進めた。メタゲノムアプリケーションでは、シーケンシングの対象となるクエリデータサイズが大きくなることが想定されており、大規模な解析のためにはデータベースファイルだけではなく、クエリファイルも分割して処理することが求められている。一方で、スパコンの並列ファイルシステムをアクセスしながらのデータ解析は、ファイルアクセス性能がボトルネックとなり効率が悪いことが分かっている。この問題を解決するために、計算ノードのローカルストレージを利用するデータ解析を検討した。ローカルストレージを用いることにより、計算ノード数に応じたファイルアクセス性能を達成することができるため、ファイルアクセス性能のボトルネックを解消できると考えられる。メタゲノムアプリケーションでは、クエリファイル、データベースファイルのすべての組み合わせでシーケンシングを行う必要がある。クエリファイルを  $n$  分割、データベースファイルを  $m$  分割したとき、 $n \times m$  のシーケンシングが必要である。また、それぞれのシーケンシング処理は処理時間が均等ではない。ローカルストレージのデータ局所性を利用し、また負荷分散を均等にすることを目標に、Gfarm ファイルシステムと Pwrake ワークフローシステムを用いて、メタゲノムアプリケーションのワークフローの設計を行った。

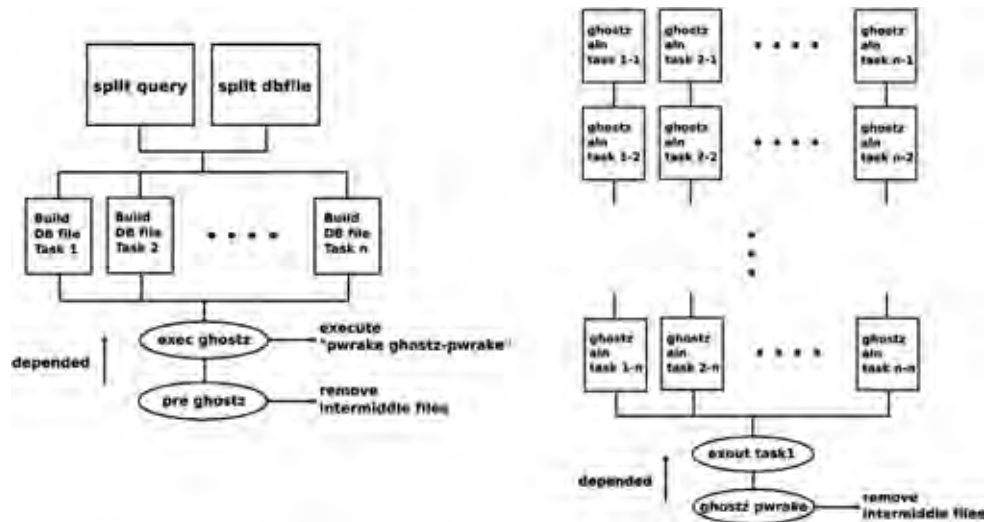


図 27 メタゲノムアプリケーションのワークフロー

図 27 に設計したワークフローを示す。左側はクエリファイルとデータベースファイルを分割して、データベースファイルをアプリケーションの入力形式に変換し、計算ノードのローカルストレージに格納するワークフローで、右側は分散して格納されたクエリファイルとデータベースファイルをシーケンシングするワークフローである。シーケンシングについてはタスクの依存関係はない。Pwrake ワークフローシステムを用いることにより、データの局所性を利用し、アイドルな計算ノードがないようにスケジューリングされる。シーケンシングでは入力ファイルが二つあるため、データの局所性の利用にはいくつかのパターンが考えられる。実験したところ、データベースファイルの局所性を優先した方が良かったため、Pwrake のワークフローにおいてデータベースファイルの局所性を優先させるようにした。

ワークフローのプロトタイプ実装を行い、7 ノードまで計算ノードを増やしていった時の実行時間を図 28 に示す。クエリファイルのサイズは 2 GB、データベースファイルのサイズは 5 GB である。

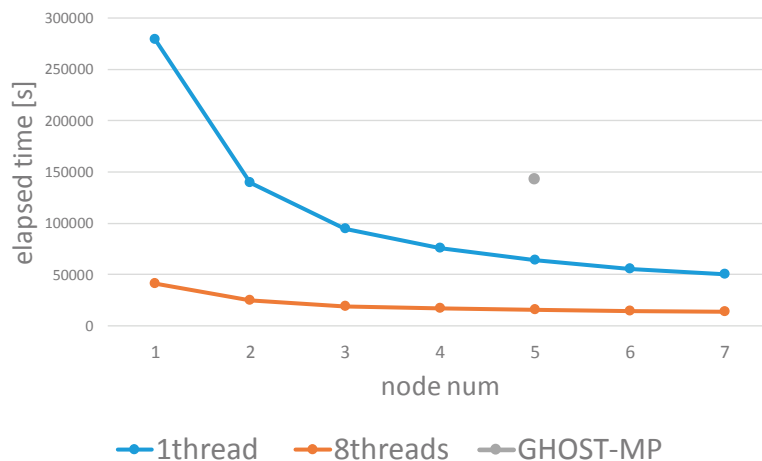


図 28 ノード数を変えた時のメタゲノムアプリケーションの実行時間

図 28 によるとノード数を増やすに従い、ほぼスケラブルな性能を示している。GHOST-MP は MPI を用いた並列プログラムであり、8 スレッド利用した場合は 8.8 倍の高速化を達成した。今後、より詳細に性能を調べてさらなる高速化を行う予定である。

また、計算ノードのストレージは NVMe SSD が利用されることが多くなった。NVMe SSD は、SAS、SATA の SSD および HDD に比べ性能が向上している。計算ノードのローカル NVMe SSD を用いて、メタゲノムアプリケーションなどをより高速に実行するための分散ファイルシステムの研究開発を行った。このとき、アクセス性能の向上とメタデータ性能の向上が課題となる。アクセス性能については InfiniBand の RDMA を利用し、メタデータ性能については冗長性、永続性を犠牲にすることで性能向上を図った。計算ノードのローカル NVMe SSD は、計算ノードがジョブに割り当てられ、実行中しか利用することができない。そのため、ジョブ実行中の一時的な利用しかできないため、永続性、冗長性は大きな問題とはならない。永続性をなくしたところ、メタデータ性能は 13.6 倍となった。また、ファイルシステムの構築、撤去時間も減らすことができ、構築に 0.31 秒、撤去に 0.19 秒であった。今後、より大規模な構成において評価を続け、アプリケーションによる評価を行っていく予定である。

#### 【11】 極端気象予測を拓くビッグデータ機械学習基盤の研究（建部、川島）

豪雨・突風・高温などの極端気象は人類に甚大な被害をもたらすが、その予測は極端気象に関する膨大な知識が必要である。本研究では、その知識を効率的に生成する機械学習基盤の構築を目的とする。平成 29 年度は、極端気象の分析手法について主に研究を進めた。極端気象として、まずフェーン現象をターゲットとし、過去の気象データを用い、典型的なフェーン日を正解として、機械学習を試みた。その結果、これまで経験則でフェーン日の条件とされていたことが、ほぼフェーン日の判定条件となっていることが分かった。さらに、機



機械学習ではフェーンらしさについて数値的に求めることも可能であり、定量的な評価の可能性も示した。今後は、得られた機械学習結果により、フェーン日の予測につなげていく。また、並列機械学習のため、R で記述されたエントロピー推定プログラムの MPI 並列化を行った。エントロピー推定には Simple Regression Entropy Estimator、Direct Regression Entropy Estimator、Entropy Estimator with Poisson noise structure Identity-link regression、Kernel Density Estimation の 4 種類を用いた。元データを全プロセスで保持する場合はほぼスケーラブルな性能向上を示したが、データを分散配置するとプロセス数を増やすと計算時間は減少するものの、通信時間が増大してしまい、計算時間と通信時間にはトレードオフがあることが分かった。これまでの逐次アルゴリズムは並列化効率が良くないため、今後、より効率的な並列実行が可能な並列アルゴリズムの研究を進める必要がある

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

文部科学省が進める革新的ハイパフォーマンスコンピューティングインフラ（HPCI）の HPCI 共用ストレージ、素粒子物理学データ共有システム JLDG のシステムソフトウェアとしても利用される Gfarm ファイルシステムの研究開発を行った。本年度は、データ移行支援、書込キャッシュストレージ支援、メタデータサーバのレスポンス改善を行った。データ移行支援では、運用中のストレージの移行を柔軟に行うために、さまざまな要求に応えるように機能拡張を行った。新規ストレージノードの導入にあたり、新規ストレージノードにはファイル複製のみ作成し、新規ファイルを作成したくないという要求があった。この要求を実現するため、仮想的に新規ストレージノードの負荷を上げ、新規ファイルが作成されないようにした上で、負荷が高くても複製は作成できるようなスイッチを準備した。また、ファイル移行は複製の場所指定により行うが、ファイル移行を一時的に停止したい要求があった。そのため、動的に複製の場所指定を有効・無効とするスイッチを動的に行えるようにした。また、ファイル移行の速度を調節するため、動的に最大並列複製作成数を調節できるようにした。書込キャッシュストレージ支援では、高速で信頼性の高いストレージを一時的な書込キャッシュとして利用するための機能拡張を行った。まず、書込キャッシュストレージに書込みを行うため、書込み先をキャッシュストレージに指定するか、それ以外のストレージの負荷を高くする。さらに、キャッシュストレージにファイルを保持する期間、キャッシュ容量を指定可能とした。メタデータサーバのレスポンス改善は、大量ファイル削除、大量ファイル複製作成、ファイル更新、複製場所指定時の複製チェック動作時などにおいて、メタデータサーバのレスポンスが悪くなり、たまに数秒～10 数秒となることがあることに対する改善である。問題を追及した結果、mutex ロック期間が長くなると、ロックの公平性がなくなることが原因であった。そのため、ロックを要求した順番にロックの確保を行う ticket lock を実装し、解決を図った。Ticket lock に変更したところ、メタデータサーバのレスポンスの悪化は生

じなくなった。これらの成果は平成 30 年 3 月 22 日にリリースした Gfarm バージョン 2.7.10 に含まれている。

### 【13】 高性能な MapReduce Shuffle に関する研究（川島、建部）

分散処理フレームワーク MapReduce における All-to-All 集団通信フェーズである shuffle に関して、“skew”と呼ばれる MapReduce 特有の load imbalance 問題に対処可能な手法の検討を行った。初めに shuffle に適した Point-to-Point 通信モデルに関して MPI との処理モデル等の違いを通して考察し、モデルの実装例としてネットワーク帯域を最大限活用可能な socket ベースの実装を提示した。次に上記の Point-to-Point 通信モデルを用いた All-to-All 通信の構成法に関して、skew 耐性の観点から議論した。本研究では shuffle 対象のデータ本体 (block) とそのメタ情報 (meta-block) を単一の All-to-All 通信で交換する CSA (Coupled Shuffle Architecture)、block と meta-block をそれぞれ別の All-to-All 通信によって交換する DSA (Decoupled Shuffle Architecture)、DSA において各プロセスの消費メモリサイズを考慮して block の配置を決定する DSA w/ SMS (Skew-aware Meta-Shuffle)、の 3 手法の提案及び比較を行った。CSA では Pairwise 方式、DSA では Naive 方式の All-to-All 通信アルゴリズムをそれぞれ block の shuffle に採用した。上記 3 手法の評価のため、本研究では独自 in-memory MapReduce 処理系を C/C++ で実装し、InfiniBand に代表される高性能インターコネクットの性能を最大限活用するため socket/verbs/ofi (libfabric) の 3 種類の通信方式に対応させた。評価実験では上記 3 手法を用いて skew 度合いを変えながら shuffle ワークロードを実行し、DSA w/ SMS 方式のみが極度の skew 状況下でも in-memory で shuffle を実行できることを確認した。また CSA、DSA の 2 手法の weak scaling 性能の比較を通して、skew 度合いに応じた両方式の挙動を詳細に調査した。その結果、低 skew 状況下ではネットワーク帯域をより有効に活用できる CSA 方式が優位となり、1024 プロセスでは DSA 比で 1.65 倍高速であった。また、高 skew 状況下では両手法共に straggler によって shuffle 全体の実行が律速されることが明らかになった。

### 【14】 高性能な並行性制御に関する研究（川島、建部）

トランザクション処理システムは並行性制御法とログ書き込み法から構成される。近年のいくつかの研究においては並行性制御法に着目し、その高性能化に取り組んだ例が存在する。トランザクション処理システムの要素技術として様々な選択肢が存在するため、課題の解決に当たって適した並行性制御法およびログ書き込み法を採用する必要がある。

メニーコア環境でトランザクション処理を高性能化するには、その並列化を高度化する必要がある。トランザクション処理ではデータオブジェクトへの更新アクセスにロックが必要であり、そのアクセス手法は悲観的手法と楽観的手法に分類される。悲観的手法はデータオ

ブジェクトへのアクセス毎にロックを獲得する一方、楽観的手法のロック獲得はコミット判定時のみに限られる。これにより近年の楽観的手法は悲観的手法に対して優位性を示している。楽観的手法にログ書き込み法を組み合わせるにはタイムスタンプ発行が必要になる。このタイムスタンプ発行に集中カウンタを用いると大幅な性能劣化が発現することが報告されている。本研究ではタイムスタンプの発行を非集中化して分散並列発行することで、優れた性能を示す楽観的手法 TicToc を対象に選定した。

ログ書き込み法にも様々な手法が存在する。NVRAM やフラッシュデバイスなどを前提とした passive group commit、P-WAL、SiloR がある。また、近年のトランザクションシステム研究では、NVRAM やフラッシュデバイスを前提とするものが多数ある。そのため、ログ書き込み法は NVRAM やフラッシュデバイスを対象とした手法を用いることが有用であると考えられる。これらの手法は並列ログ書き込み法という手法に分類される。並列ログ書き込み法とは、ログの永続化を複数のワーカースレッドが並列に行う方式であり、前述の passive group commit と P-WAL が該当する。そこでログ書き込み法には、並列ログ先行書き込み法である P-WAL を採用した。

TicToc と P-WAL を組み合わせた環境において、グループコミットにおける一括書き込みサイズ（トランザクション数）を変動させた場合の実験を行った。その結果、グループコミットにおける一括書き込みサイズが増える程、トランザクション処理性能が劣化していることが観察された。すなわち、近年のハードウェアならびに並行性制御法・ログ書き込み法の下では、グループコミットはトランザクション処理の敵となり得る知見を得た。

## 【15】 Block BiCGSTAB 型解法における近似解精度と数値的安定性の改善に関する研究

(多田野)

複数本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式の数値解法である、ブロッククリロフ部分空間反復法に関する研究を実施した。ブロッククリロフ部分空間反復法を用いることで、クリロフ部分空間反復法を用いた場合よりも少ない反復回数で同方程式の近似解が得られることがある。しかしながら、右辺ベクトル数が多い場合は、数値的不安定性の影響で残差ノルムの発散・停滞、及び近似解精度劣化が発生することがある。

今年度は、Block BiCGSTAB 型解法における近似解精度と数値的安定性の改善について研究を行った。Block BiCGSTAB 型解法の残差行列は、Block BiCG 法の残差行列と、安定化多項式と呼ばれる行列多項式の積で表される。漸化式の構築の仕方によって、Block BiCGSTAB 法と Block BiCGGR 法を導出できる。Block BiCGSTAB 法は右辺ベクトル数が増加すると得られる近似解精度が悪化する欠点がある。一方、Block BiCGGR 法は Block BiCGSTAB 法で起こり得る近似解精度劣化を抑えるように漸化式を構築した解法である。また、右辺ベクトル数が多い場合は両解法とも数値的不安定性の影響で、残差が発散、または停滞することがある。

反復過程で現れる残差行列の正規直交化を行うことで、この数値的不安定性を緩和することができる。図 29 に、残差行列の正規直交化を行ったときの Block BiCGSTAB 型解法の反復回数と真の相対残差の変化を示す。真の相対残差は近似解精度を検証する指標の一つで、この値が小さければ高精度の近似解が得られていることを示す。テスト問題として、格子量子色力学計算 (QCD) で現れる連立一次方程式を用いた。同方程式のサイズは 1,572,864, 非零要素数は 80,216,064 である。係数行列内に現れるパラメータ  $\kappa$  は 0.1358 とした。

図 29 (a) に示すように、右辺ベクトル数  $L$  が少ない場合は、両解法とも  $L$  の増加に伴って反復回数が減少した。しかしながら、Block BiCGGR 法では多数の右辺ベクトルをもつ場合は残差行列の正規直交化を行うだけでは数値的不安定性を解消できず、反復回数が増大することが分かった。また、図 29 (b) に示す真の相対残差に着目すると、Block BiCGGR 法では高精度の近似解が得られているが、Block BiCGSTAB 法では  $L$  の増加に伴い真の相対残差が大きくなっており、高精度近似解が得られていない。

Block BiCGGR 法において右辺ベクトル数が多い場合の振る舞いを調査した結果、反復過程で現れる小規模連立一次方程式の係数行列の条件数が非常に大きくなっていることが分かった。この小規模係数行列は反復過程で現れる矩形の補助行列から生成され、この補助行列を構成する列ベクトル間の線形独立性が失われると、小規模係数行列の条件数が増大する。そこで本研究では、Block BiCGSTAB 型解法の二解法において、残差行列の他に補助行列に対しても正規直交化を施すアルゴリズムを構築した。数値実験結果を図 30 に示す。

図 30 (a) に示すように、残差行列と補助行列の両方の正規直交化を行うことで、Block BiCGGR 法は右辺ベクトル数を増加させても反復回数が減少するようになった。また、Block BiCGSTAB 法では、補助行列の正規直交化を行うことで、真の相対残差を小さくすることができた。Block BiCGSTAB 法における近似解の精度劣化は、矩形の補助行列と小規模正方行列の積の計算で発生する誤差が原因であった。補助行列の正規直交化を行うことで、行列積計算で発生する誤差の拡大を抑えられたことが、近似解精度改善の要因である。

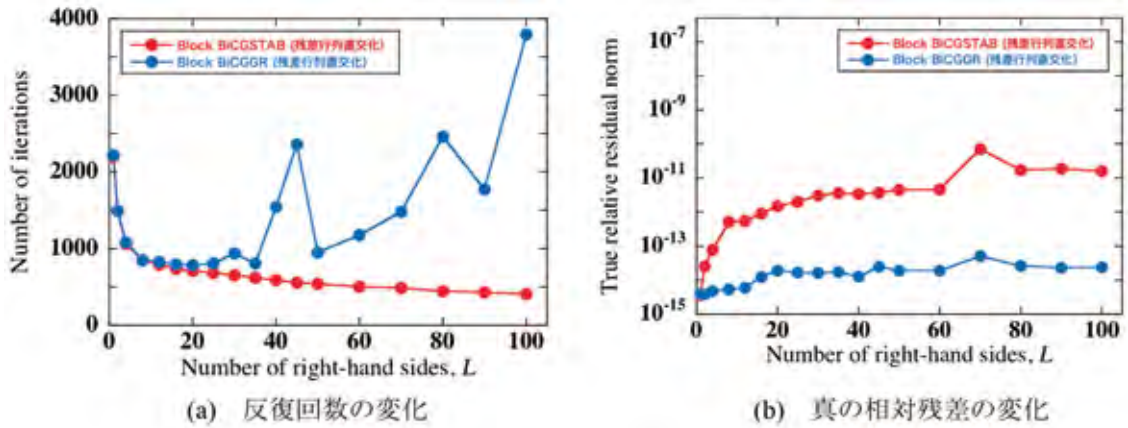


図 29 残差行列の正規直交化を組み込んだ Block BiCGSTAB 型解法の反復回数と真の相対残差の変化

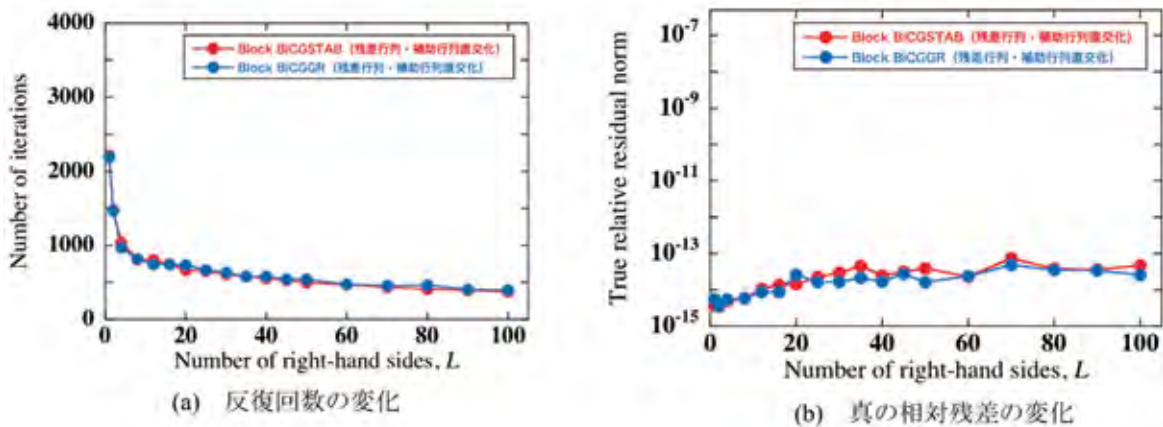


図 30 残差行列と補助行列の正規直交化を組み込んだ Block BiCGSTAB 型解法の反復回数と真の相対残差の変化

【16】 高収束かつ高精度近似解を生成するブロッククリロフ部分空間反復法の開発（多田野）

前項目で述べた Block BiCGSTAB 型解法では、近似解精度と数値的安定性を向上させるために、残差行列と補助行列の両方の正規直交化が必要であることが分かった。Block BiCGSTAB 型解法の安定化多項式のパラメータ数は 1 つであるが、本研究では 2 つのパラメータをもつ安定化多項式を導入し、高収束かつ高精度近似解が生成可能なブロッククリロフ部分空間反復法を構築した。この安定化多項式は、クリロフ部分空間反復法の一つである GPBiCG 法などでも用いられている。また、この提案法において、漸化式で求めた残差と真

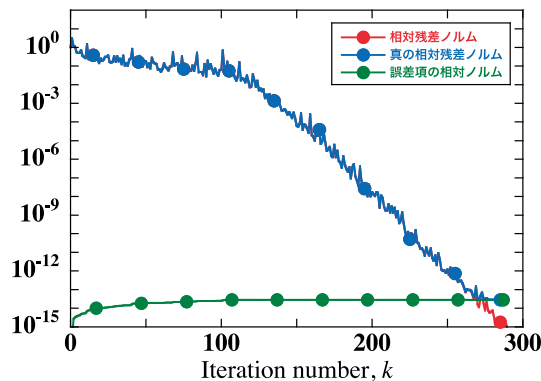


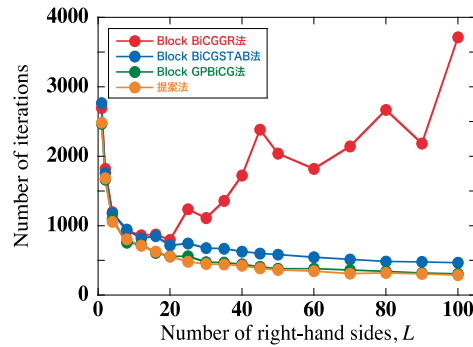
図 31 残差行列の正規直交化を組み込んだ提案法における相対残差ノルム、真の相対残差ノルム、及び誤差項の相対ノルムの履歴（右辺ベクトル数：100）

の残差の間に生じる誤差項の定式化を行った。提案法と同カテゴリに属する手法では、1 反復あたり 2 回の係数行列に関する積が必要であるが、提案法では高精度近似解を生成するために、1 反復あたり 3 回の係数行列に関する積が必要である。しかしながら、2 回分の積の計算は同時に実行することが可能であるため、計算時間の大幅な増加を抑えることができる。

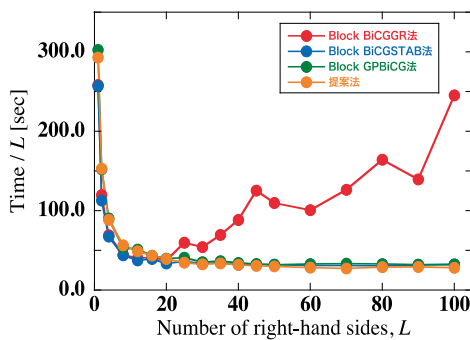
数値実験によって、提案手法の評価を行った。数値実験で用いたテスト問題は前項目と同じく格子 QCD 計算で得られる連立一次方程式で、係数行列のパラメータ  $\kappa$  は 0.1360 とした。実験環境は、CPU：Intel Xeon E5-2620 v3 2.4GHz×2、メモリ：64GByte、コンパイラ：gfortran ver. 5.4.0、コンパイルオプション：-O3 -fopenmp であり、OpenMP を用いて 12 スレッド並列で計算した。

図 31 に右辺ベクトル数が 100 本の場合の、残差行列の正規直交化を組み込んだ提案法の相対残差ノルム、真の相対残差ノルム、及び誤差項の相対ノルムの履歴を示す。相対残差ノルムは 290 回の反復で  $10^{-15}$  を下回り、反復を停止した。このときの真の相対残差の値は、 $2.9 \times 10^{-14}$  であり、相対残差ノルムとの開きはあるものの、高精度の近似解が得られた。また、このときの誤差項の相対ノルムの値も  $2.9 \times 10^{-14}$  であることから、本研究における誤差項の定式化で、誤差項が正しく表現できていることを確認した。

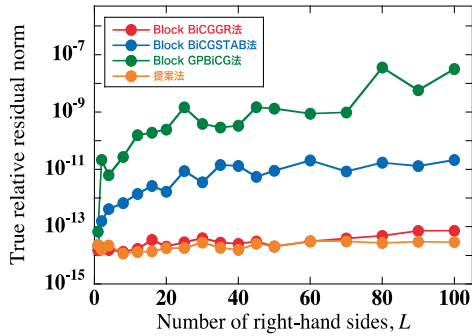
図 32 において、残差行列の正規直交化を組み込んだ Block BiCGGR 法、Block BiCGSTAB 法、Block GPBiCG 法、及び提案法について、反復回数、求解時間、真の相対残差の観点から比較を行う。図 32 (a) に示すように、Block BiCGGR 法を除いて、右辺ベクトル数の増加に伴い反復回数は減少する傾向が見られた。図 32 (b) に、右辺ベクトル数の変化に対する右辺ベクトル 1 本あたりの求解時間の変化を示す。提案法では 1 回反復あたり 3 回の係数行列に関する積が必要であるが、2 回分の積計算を同時に実行しているため、Block BiCGSTAB 法、Block GPBiCG 法と同程度の時間で求解することができた。図 32 (c) に、右辺ベクトル数の変化に対する真の相対残差の変化を示す。真の相対残差は提案法が最も小さい傾向にあり、



(a) 反復回数の変化



(b) 右辺ベクトル 1 本あたりの求解時間



(c) 真の相対残差の変化

図 32 残差行列の正規直交化を組み込んだ 4 つの手法における反復回数、求解時間、真の相対残差の変化

高精度近似解を生成することができた。一方、Block BiCGSTAB 法と Block GPBiCG 法の真の相対残差は右辺ベクトル数の増加に伴い、大きくなる傾向にあり、高精度近似解が得られていない。

以上の結果より、提案法では残差行列の正規直交化を行うだけで、Block GPBiCG 法と同程度の収束性を示すことが分かった。また、提案法は Block BiCGGR 法と同程度以上の精度をもつ近似解を生成できることを確認した。しかしながら、提案法においても近似解精度に影響を及ぼす誤差項が存在しているため、この影響をさらに小さくすることは今後の課題となる。

#### 【17】 差分圧縮を活用した FPGA ベースソーティングアクセラレータ (小林)

ソーティングはデータベースや画像処理、ゲノム解析など幅広い分野で利用される極めて重要な計算カーネルである。ソーティングの対象となるデータ量は、近年の目覚ましい IT 技術の進展に伴い爆発的に増大しており、その傾向は依然として続くことが予想される。そして、ここ数年の Internet of Things (IoT) 時代の台頭により、我々の至る所にコンピュータが適用されるようになってきている。このため、将来においては、そのデータ量の増加に対応し、

かつ組み込みコンピュータから高性能サーバといった様々なプラットフォームにおいて高い実効性能を提供しうるソーティング技術の確立が必要である。本研究では、ソーティングネットワークとマージソートツリーを組み合わせた FPGA ベースのソーティングアクセラレータを提案する。提案するアクセラレータは PCIe bus を介して接続される。ソーティングの対象となるデータはホスト PC から送信され、アクセラレータでソートされた後、ホスト PC に返却される。図 33 に提案するアクセラレータの概要を示す。

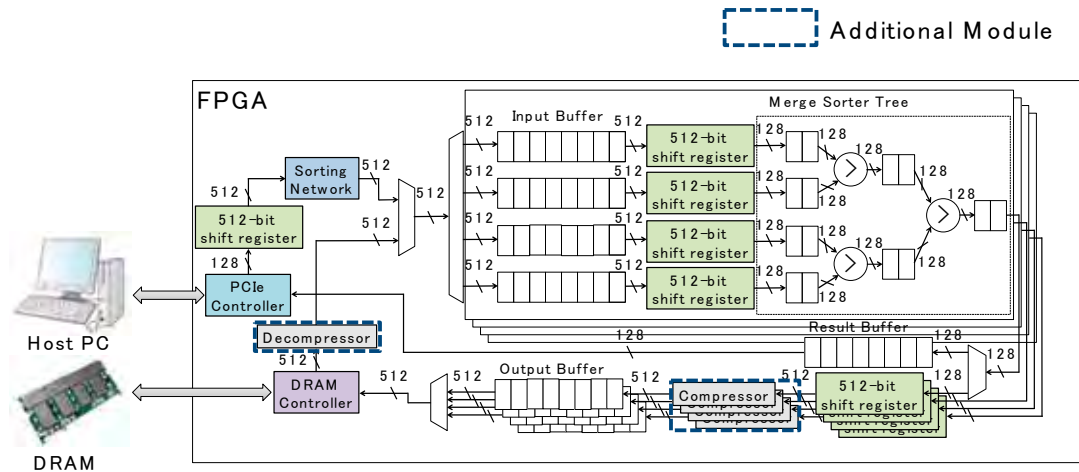


図 33 提案するソーティングアクセラレータの概要

このアクセラレータはマージソートツリーの葉の数などの構成パラメータを調節することで、ソーティング性能とハードウェアリソース使用量とを変化させた様々な構成にカスタマイズすることが可能である。そして、本研究では、アクセラレータの性能モデルも提案しているため、設計者はあらかじめソーティングアクセラレータの性能について試算でき、性能とハードウェアコストの観点から最適なソーティングアクセラレータを実装することができる。これが、本研究における第 1 の貢献である。

また、従来の FPGA ベースのソーティングアクセラレータではオフチップメモリ帯域によって、アクセラレータの動作効率が低減するという問題を抱えている。これに対処するために、本研究では、図 34 に示す差分圧縮アルゴリズムを活用したデータ圧縮手法を提案している。



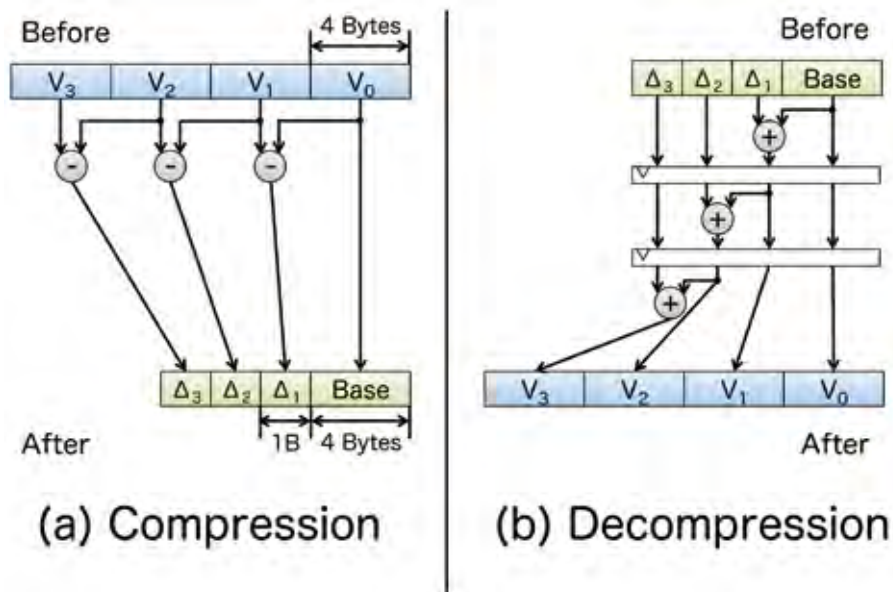


図 34 差分圧縮アルゴリズムを活用したデータ圧縮・展開手法

提案アクセラレータの動作が進行するにつれ、対象のデータセットは徐々にソートされていくため、要素間の差分が小さくなる。つまり、ソーティングが進行するにつれ、圧縮率は高くなり、その結果オフチップメモリ帯域を拡大するため、差分圧縮アルゴリズムとソーティングアクセラレータとの相性は非常に良い。提案した圧縮手法の効果を評価したところ、図 35 に示すようにハードウェアリソースをほぼ使用せずに動作効率を最大 54%改善し、アクセラレータの性能がメモリ帯域に制約される場合においては、提案するデータ圧縮手法が有効であることを明らかにしている。これが、本研究における第 2 の貢献である。

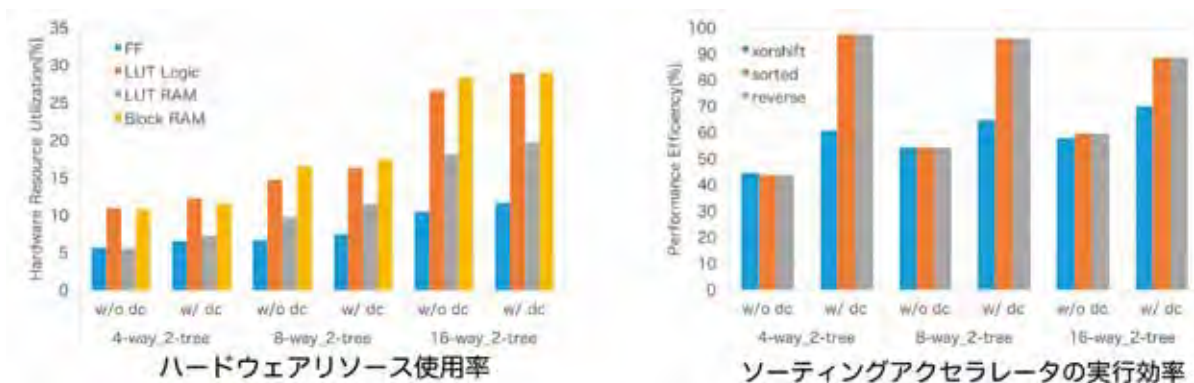


図 35 圧縮手法を適用した・適用しない場合におけるハードウェアリソース使用率とソーティングアクセラレータの動作効率

そして、全ての設計者が容易かつ自由に提案するアクセラレータを利用できるように、その RTL ソースコードをオープンソースにて公開している。高性能かつカスタマイズ可能であ

り、さらにメモリバンド幅について考慮しているオープンソースなソーティングアクセラレータはこれまでに存在していない。これが、本研究における第 3 の貢献である。

以上の貢献が認められ、本研究成果をまとめた論文が電子情報通信学会 情報・システムソサイエティ論文誌に採録された。

#### 4. 教育

##### 修士学位論文

1. 大島佑真, 修士 (工学), FPGA における高速データ通信機能を用いた高性能並列処理に関する研究, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 平成 30 年 3 月 (指導: 朴泰祐)
2. 五味歩武, 修士 (工学), Julia プログラムのコード変換による性能チューニングフレームワーク, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 平成 30 年 3 月 (指導: 高橋大介)
3. 大黒晴之, 修士 (工学), 高性能 MapReduce Shuffle 手法に関する研究, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 平成 30 年 3 月 (指導: 川島英之)
4. 村田直郁, 修士 (工学), 高性能トランザクション処理システムに関する研究, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 平成 30 年 3 月 (指導: 川島英之)
5. 瀧沢亮太, 修士 (工学), 分散計算による暗号化データ処理の高性能化に関する研究, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 平成 30 年 3 月 (指導: 川島英之)

##### 卒業論文

1. 枝松拓弥, 学士 (工学), SIMD 命令を用いた多倍長整数乗算の高速化, 筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 平成 30 年 3 月 (指導: 高橋大介)
2. 佐藤駿一, 学士 (工学), メニーコアプロセッサと GPU における疎行列ベクトル積の性能比較, 筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 平成 30 年 3 月 (指導: 高橋大介)
3. 河合祐輔, 学士 (工学), pbdMPI を用いたエントロピー推定プログラムの並列化と性能評価, 筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 平成 30 年 3 月 (指導教員: 建部修見)
4. 北澤昂大, 学士 (工学), クラウドストレージに関する性能評価と広域仮想ファイルシステムの設計, 筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 平成 30 年 3 月 (指導教員: 建部修見)

5. 町田健太, 学士 (工学), Pwrake/Gfarm による分散並列相同性検索システムの提案, 筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 平成 30 年 3 月 (指導教員: 建部修見)
6. 田村駿也, 学士 (工学), インメモリ B-link 木の設計と実装, 筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 平成 30 年 3 月 (指導: 川島英之)
7. 堀江悠樹, 学士 (工学), 耐ビザンチン障害性を持つ分散合意手法 PBFT の設計と実装, 筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 平成 30 年 3 月 (指導: 川島英之)
8. 田辺敬之, 学士 (工学), 多版法・楽観法・分散時刻印に基づく並行性制御法と並列ログ先行書込み法の結合, 筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 平成 30 年 3 月 (指導: 川島英之)
9. 倉本亮世, 学士 (工学), 複数右辺・複数シフトを持つ線形方程式に対する Shifted Block BiCGSTAB 法の近似解精度改善, 筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 平成 30 年 3 月 (指導: 多田野寛人)

### 集中講義

1. 計算科学のための高性能並列計算技術: 大学院共通科目

## 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

### 受賞

1. 大黒晴之, 川島英之, 建部修見, "大規模 MapReduce 実行環境向け Shuffle 通信の RDMA による高速化", The 1st. cross-disciplinary Workshop on Computing Systems, Infrastructures, and Programming (xSIG2017), Outstanding Presentation Award

### 外部資金

1. JST CREST 研究領域「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」, 研究課題名「ポストペタスケール時代に向けた演算加速機構・通信機構統合環境の研究開発」, H24~H29 年度, 23,710 千円(H29) (主たる研究者: 朴泰祐)
2. 文部科学省高性能汎用計算機高度利用事業費補助金 (次世代領域研究開発) 課題名「次世代演算通信融合型スーパーコンピュータの開発」, H29~H33 年度, 13,000 千円 (H29) (研究代表者: 朴泰祐)
3. 科学研究費補助金 基盤研究 (C)、高橋大介 (代表)、H28~30 年度、1,430 千円 (H28 年度)、「メニーコア超並列クラスタにおける有理数演算ライブラリに関する研究」

4. JST CREST 研究領域「ビッグデータ統合利活用のための次世代基盤技術の創出・体系化」, 「EBD: 次世代の年ヨッタバイト処理に向けたエクストリームビッグデータの基盤技術」, H25~H30 年度, 14,950 千円 (H29) (主たる共同研究者: 建部修見)
5. 基盤研究(B) (一般), 「極端気象予測を拓くビッグデータ機械学習基盤の研究」, H29 年度~H31 年度, 5,590 千円 (H29) (研究代表者: 建部修見)
6. JST CREST、川島英之 (共同研究者)、H26~30 年度、16,860 千円 (H29)、研究領域「科学的発見・社会的課題解決に向けた各分野のビッグデータ利活用推進のための次世代アプリケーション技術の創出・高度化」, 「広域撮像探査観測のビッグデータ分析による統計計算宇宙物理学」
7. 科学研究費補助金 基盤研究 (C)、川島英之 (代表)、H28~30 年度、910 千円 (H29 年度)、 「先進的デバイスの利活用による高性能データ基盤システムに関する研究」

## 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. Ryohei Kobayashi, Yuma Oobata, Norihisa Fujita, Yoshiki Yamaguchi, and Taisuke Boku, OpenCL-ready High Speed FPGA Network for Reconfigurable High Performance Computing, HPC Asia 2018 Proceedings of the International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region, pp.192-201, January 2018.
2. Masahiro Nakao, Hitoshi Murai, Hidetoshi Iwashita, Akihiro Tabuchi, Taisuke Boku and Mitsuhisa Sato: Implementing Lattice QCD Application with XcalableACC Language on Accelerated Cluster, Proc. of IEEE Cluster 2017, 9 pages, Hawaii, Sep. 8th, 2017.
3. Daisuke Takahashi, "An Implementation of Parallel 1-D Real FFT on Intel Xeon Phi Processors", Proc. 17th International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2017), Part I, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 10404, pp. 401-410, Springer International Publishing, 2017.
4. Hiroyuki Takizawa, Daichi Sato, Shoichi Hirasawa and Daisuke Takahashi, "A Customizable Auto-Tuning Scenario with User-defined Code Transformations", Proc. 2017 IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium Workshops (IPDPSW

- 2017), The 12th International Workshop on Automatic Performance Tuning (iWAPT 2017), pp. 1372-1378, 2017.
5. 村田直郁, 川島英之, 建部修見, RDMA の適用による RAMP トランザクション処理の高速化, 情報処理学会論文誌データベース (TOD) , Vol. 10, No. 2, pp. 19-30, 2017
  6. Fuyumasa Takatsu, Kohei Hiraga, Osamu Tatebe, “PPFS: A Scale-out Distributed File System for Post-petascale Systems”, Journal of Information Processing, Vol. 25, pp. 438-447, 2017 (DOI: 10.2197/ipsjip.25.438)
  7. Xieming Li, Osamu Tatebe, “Data-Aware Task Dispatching for Batch Queuing System”, IEEE Systems Journal, Vol. 11, Issue 2, pp. 889-897, 2017 (DOI: 10.1109/JSYST.2015.2471850)
  8. Ryota Takizawa, Hideyuki Kawashima, Ryuya Mitsuhashi and Osamu Tatebe, “Performing External Join Operator on PostgreSQL with Data Transfer Approach”, Proceedings of HPC Asia 2018, 7 pages, 2018
  9. Hiroto Tadano, Shusaku Saito, Akira Imakura, Accuracy Improvement of the Shifted Block BiCGGR Method for Linear Systems with Multiple Right-Hand Sides, Proc. International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2015), Lecuter Notes in Computational Science and Engineering, Vol. 117, pp. 171—185, 2017.
  10. Shimpei Sato, Ryohei Kobayashi and Kenji Kise: ArchHDL: A Novel Hardware RTL Modeling and High-speed Simulation Environment, IEICE Transactions on Information and Systems, Vol.E101-E, No.2, pp.344-353 (February 2018).
  11. Ryohei Kobayashi, and Kenji Kise: A High Performance FPGA-based Sorting Accelerator with a Data Compression Mechanism, IEICE Transactions on Information and Systems, Vol.E100-D, No.5, pp.1003-1015 (May 2017).

## B) 査読無し論文

1. 廣川祐太, 朴泰祐, 植本光治, 佐藤駿丞, 矢花一浩: 電子動力学シミュレーション ARTED の KNL システム Oakforest-PACS での全系性能評価, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) , 2017-HPC-160(20), 8 pages, 2017 年 7 月.
2. 松村和朗, 佐藤三久, 朴泰祐: フロー解析によるマルチ GPU 対応 OpenACC コンパイラ, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) , 2017-HPC-160(22), 8 pages, 2017 年 7 月.

3. 辻美和子, 李珍泌, 朴泰祐, 佐藤三久: 疑似 MPI トレースプロファイルを用いた通信性能推定手法 SCAMP のための疑似トレースファイル作成手法の検討, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) ,2017-HPC-161(14),1-10 (2017-09-12).
4. 中尾昌広, 村井均, 朴泰祐, 佐藤三久: Python と連携する PGAS 言語 XcalableMP のプログラミングモデル-Graph Order/degree 問題への適用-, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) ,2017-HPC-162(18),1-10 (2017-12-11) .
5. 廣川祐太, 朴泰祐, 植本光治, 佐藤駿丞, 矢花一浩: 電子動力学シミュレーションコードのメニーコアプロセッサと GPU における性能比較, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) ,2018-HPC-163(23),1-11 (2018-02-21) .
6. 高橋大介: 数学定数の特定の桁を計算する BBP 型公式の高速計算法, 日本応用数理学会 2017 年度年会講演予稿集, pp. 249-250, 2017.
7. 高橋大介: Xeon Phi プロセッサにおける並列一次元実数 FFT の実現と評価, 日本応用数理学会 2017 年度年会講演予稿集, pp. 149-150, 2017.
8. 高橋大介: Knights Landing クラスタにおける並列 FFT の自動チューニング, 2017 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム HPCS2017 論文集, pp. 1-2, 2017.
9. 高橋大介: Xeon Phi クラスタ上の並列 FFT における通信隠蔽の自動チューニング, 計算工学講演会論文集, Vol. 22, C-01-3, 2017.
10. 小林淳司, 建部修見, 並列離散イベントシミュレータを用いた分散メタデータサーバのベンチマーク, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) , 2017-HPC-160(26), 6 pages, 2017 年 7 月
11. 岩井厚樹, 建部修見, 同時複数タスク実行フレームワーク SMTEF を用いたメニータスク並列ベンチマークとその評価, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) , 2017-HPC-160(33), 5 pages, 2017 年 7 月
12. 建部修見, Burst Buffer のための Gfarm ファイルシステム, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) , 2017-HPC-161(2), 6 pages, 2017 年 9 月
13. 建部修見, Oakforest-PACS における IO-500 の評価, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) , 2017-HPC-162(6), 5 pages, 2017 年 12 月
14. 田中昌宏, 建部修見, 川島英之, すばる HSC パイプラインの Pwrake/Gfarm による高速化手法の提案, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) , 2017-HPC-162(9), 8 pages, 2017 年 12 月
15. 町田健太, 建部修見, Pwrake/Gfarm による分散並列相同性検索システムの提案, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) , 2017-HPC-162(10), 9 pages, 2017 年 12 月

16. 北澤昂大, 建部修見, Oracle Storage Cloud の性能評価と Gfarm ファイルシステムへの組み込みの検討, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) , 2017-HPC-162(11), 9 pages, 2017 年 12 月
17. 河合祐輔, 日野英逸, 建部修見, pbdMPI を用いたエンタロピー推定プログラムの並列化と性能評価, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) , 2018-HPC-163(13), 8 pages, 2018 年 3 月
18. 梶原 顕伍, 川島 英之, 建部 修見, Raft に基づく分散データベースにおけるデータ分割, 情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム (OS) ,2017-OS-141(20),pp. 1-6.
19. 中村 泰大, 川島 英之, 建部 修見, 並列 WAL を適用した TicToc の評価, 情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム (OS) ,2017-OS-141(3),1-6 (2017-07-19)
20. 渡辺 敬之, 川島 英之, 建部 修見, 並行実行木 Masstree における一括構築法の並列化, 情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム (OS) ,2017-OS-141(1),1-6 (2017-07-19)
21. 梶原 顕伍, 川島 英之, 建部 修見, Raft に基づく分散データベースの性能解析, 情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム (OS) ,2017-OS-140(15),1-9 (2017-05-09)
22. 横野 智也, 藤田 典久, 山口 佳樹, 大島 佑真, 小林 諒平, 朴 泰祐, 吉川 耕司, 安部 牧人, 梅村 雅之: 宇宙輻射輸送計算における HDL 設計と OpenCL 設計の比較,情報処理学会研究報告 2018-HPC-163, No.24, pp.1 - 8, March 2018
23. 藤田 典久, 小林 諒平, 山口 佳樹, 大島 佑真, 朴 泰祐, 吉川 耕司, 安部 牧人, 梅村 雅之: OpenCL を用いた FPGA による宇宙輻射輸送シミュレーションの演算加速, 情報処理学会研究報告 2017-HPC-161, No.12, pp.1 - 9 (September 2017)
24. 大島 佑真, 小林 諒平, 藤田 典久, 山口 佳樹, 朴 泰祐: OpenCL と Verilog HDL の混合記述による FPGA 間 Ethernet 接続,情報処理学会研究報告 2017-HPC-160, No. 5, pp.1 - 9 (July 2017)

## (2) 国際会議発表

### A) 招待講演

1. Taisuke Boku, “Oakforest-PACS (OFP): Japan’s Fastest Supercomputer”, 1<sup>st</sup> French-Japan-German Workshop on HPC, Tokyo, Apr. 5<sup>th</sup>, 2017.

2. Taisuke Boku, “Oakforest-PACS (OFP): Japan’s #1 System driven by KNL and OPA”, IXPUG Spring Conference 2018, Cambridge, Apr. 11<sup>th</sup>, 2017.
3. Taisuke Boku, “Interconnection and I/O System on Oakforest-PACS: World Largest KNL+OPA Cluster”, Int. Workshop on Exascale Communication (ExaComm’2018) at ISC2018, Frankfurt, Jun. 22<sup>nd</sup>, 2017.
4. Taisuke Boku, “Toward Highly Productive Parallel Programming on Large Scale Accelerated Computing”, Int. Workshop on Parallel Programming Models and Systems Software for High-End Computing (P2S2) 2017, at ICPP2017, Bristol, Aug. 14<sup>th</sup>, 2017.
5. Taisuke Boku, “AiS: New Paradigm of Parallel FPGA Computing”, International HPC Forum, Guangzhou, Sep. 20<sup>th</sup>, 2017.
6. Taisuke Boku, “Oakforest-PACS (OFP): Japan’s Fastest Supercomputer and its Applications”, 40<sup>th</sup> ORAP Forum, Paris, Oct. 19<sup>th</sup>, 2017.

#### **B) 一般講演**

1. Taisuke Boku, “Computation/Communication Offloading to FPGA with GPU”, 3<sup>rd</sup> International Workshop on FPGA for HPC, Tokyo, Mar. 13<sup>th</sup>, 2018.
2. Taisuke Boku, “XcalableACC: Highly Productive Accelerated Programming Language for Extreme-Scale Computing”, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP18), Tokyo, Mar. 9<sup>th</sup>, 2018.
3. Taisuke Boku, “Reconfigurable Computation and Interconnection by FPGA for HPC”, SC17 BoF on FPGA for HPC, Denver, Nov. 14<sup>th</sup>, 2017.
4. Daisuke Takahashi, “Implementation of Parallel 1-D Real FFT on Intel Xeon Phi Processors”, 2018 Conference on Advanced Topics and Auto Tuning in High-Performance and Scientific Computing (2018 ATAT in HPSC), National Cheng Kung University, Tainan, Taiwan, March 27, 2018.
5. Ayumu Gomi and Daisuke Takahashi, “A Programming Framework for Performance Tuning in Julia”, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP18), Waseda University, Tokyo, Japan, March 7, 2018.
6. Daisuke Takahashi, “Implementation of Parallel FFTs on Cluster of Intel Xeon Phi Processors”, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP18), Waseda University, Tokyo, Japan, March 7, 2018.
7. Daisuke Takahashi, “An Implementation of Parallel 1-D Real FFT on Intel Xeon Phi Processors”, The 17th International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2017), Trieste, Italy, July 4, 2017.



8. Hiroyuki Takizawa, Daichi Sato, Shoichi Hirasawa and Daisuke Takahashi, “A Customizable Auto-Tuning Scenario with User-defined Code Transformations”, The 12th International Workshop on Automatic Performance Tuning (iWAPT 2017), Orlando, Florida, USA, June 2, 2017.
9. Junji Kobayashi, Osamu Tatebe, “Simulation study of a distributed metadata server PPMDS”, 3rd Summer of CODES Workshop, Argonne, Jul. 11, 2017
10. Osamu Tatebe, “Simulation study of PPMDS metadata server using CODES”, Workshop on Japan-USA Collaboration for Extreme-scale System Software, Hawaii, Sep. 5, 2017
11. Osamu Tatebe, “System Software for Post-Petascale Data-Intensive Science”, JST/CREST International Symposium on Post Petascale System Software, Tokyo, Dec. 12, 2017
12. Osamu Tatebe, “Storage System of the Oakforest-PACS supercomputer”, CCS - LBNL Collaborative Workshop 2018, Tsukuba, Mar. 5, 2018
13. Osamu Tatebe, Junji Kobayashi, Atsuki Iwai, Misbah Mubarak, Rob Ross, “Codesign of Exascale Storage and Science Data Facilities”, 5th DOE/MEXT Workshop, Tokyo, Mar. 13, 2018
14. Hiroto Tadano, Stabilization of the Block BiCGGR method for linear systems with many right-hand sides, The 36<sup>th</sup> Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2017), Tokyo, Japan, Oct. 26, 2017.
15. Hiroto Tadano, Development of a numerical stable Block Krylov subspace method for generating high accuracy solutions, International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2018) Poster Session, Tsukuba, Japan, Mar. 5, 2018.
16. Hiroto Tadano, Convergence property and accuracy improvement of Block BiCGSTAB class solvers for linear systems with many right-hand sides, 18<sup>th</sup> SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP18) Poster Session, Tokyo, Mar. 8, 2018.
17. Ryohei Kobayashi: Scalable Inter-FPGA Direct Communication for Parallel FPGA Applications, 18th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, March 2018
18. Ryohei Kobayashi, Yuma Oobata, Norihisa Fujita, Yoshiki Yamaguchi, and Taisuke Boku, OpenCL-ready High Speed FPGA Network for Reconfigurable High Performance Computing, HPC Asia 2018, January 2018

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

1. 朴泰祐, “大規模・高性能計算システムの現状と今後”, IMPULSE コンソーシアム 2017, 東京, 2017 年 9 月 11 日.
2. 朴泰祐, “計算宇宙物理学と高性能計算技術のこれまでとこれから”, 天体形成論研究会, つくば, 2017 年 9 月 19 日.
3. 朴泰祐, “JCAHPC の新スーパーコンピュータ Oakforest-PACS ~ 1 年の運用を通してみた利用と成果~”, PC クラスタシンポジウム 2017, 東京, 2017 年 12 月 15 日.

## B) その他の発表

1. 横野 智也, 藤田 典久, 山口 佳樹, 大島 佑真, 小林 諒平, 朴 泰祐, 吉川 耕司, 安部 牧人, 梅村 雅之: 宇宙輻射輸送計算における HDL 設計と OpenCL 設計の比較, 第 163 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, 松山, 2018 年 3 月.
2. 藤田 典久, 小林 諒平, 山口 佳樹, 大島 佑真, 朴 泰祐, 吉川 耕司, 安部 牧人, 梅村 雅之: OpenCL を用いた FPGA による宇宙輻射輸送シミュレーションの演算加速, 第 161 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, 熊本, 2017 年 9 月.
3. 大島 佑真, 小林 諒平, 藤田 典久, 山口 佳樹, 朴 泰祐: OpenCL と Verilog HDL の混合記述による FPGA 間 Ethernet 接続, 第 160 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, 秋田, 2017 年 7 月.
4. 大島 佑真, 藤田 典久, 小林 諒平, 山口 佳樹, 朴 泰祐: 高位合成による FPGA の高性能計算へ適用, 2017 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム (ポスター発表), 神戸, 2017 年 6 月.
5. 辻美和子, 李珍泌, 朴泰祐, 佐藤三久: 疑似 MPI トレースプロファイルを用いた通信性能推定手法 SCAMP のための疑似トレースファイル作成手法の検討, 第 161 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, 函館, 2017 年 9 月.
6. 廣川祐太, 朴泰祐, 植本光治, 佐藤駿丞, 矢花一浩: 電子動力学シミュレーションコードのメニーコアプロセッサと GPU における性能比較, 第 163 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, 松山, 2018 年 2 月.
7. 中尾昌広, 村井均, 朴泰祐, 佐藤三久: Python と連携する PGAS 言語 XcalableMP のプログラミングモデル-Graph Order/degree 問題への適用-, 第 162 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, 熊本, 2017 年 12 月.
8. 高橋大介, “数学定数の特定の桁を計算する BBP 型公式の高速計算法”, 日本応用数学会 2017 年度年会, 東京, 2017 年 9 月 7 日.

9. 高橋大介, “Xeon Phi プロセッサにおける並列一次元実数 FFT の実現と評価”, 日本応用数理学会 2017 年度年会, 東京, 2017 年 9 月 6 日.
10. 高橋大介, “Knights Landing クラスタにおける並列 FFT の自動チューニング”, 2017 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム HPCS2017, 神戸, 2017 年 6 月 5 日.
11. 高橋大介, “Xeon Phi クラスタ上の並列 FFT における通信隠蔽の自動チューニング”, 第 22 回計算工学講演会, さいたま, 2017 年 5 月 31 日.
12. 小林淳司, 建部修見, 並列離散イベントシミュレータを用いた分散メタデータサーバのベンチマーク, 第 160 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, 秋田, 2017 年 7 月 27 日
13. 岩井厚樹, 建部修見, 同時複数タスク実行フレームワーク SMTEF を用いたメニータスク並列ベンチマークとその評価, 第 160 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, 秋田, 2017 年 7 月 28 日
14. 建部修見, Burst Buffer のための Gfarm ファイルシステム, 第 161 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, 函館, 2017 年 9 月 19 日
15. 建部修見, Oakforest-PACS における IO-500 の評価, 第 162 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, 熊本, 2017 年 12 月 18 日
16. 田中昌宏, 建部修見, 川島英之, すばる HSC パイプラインの Pwrake/Gfarm による高速化手法の提案, 第 162 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, 熊本, 2017 年 12 月 18 日
17. 町田健太, 建部修見, Pwrake/Gfarm による分散並列相同性検索システムの提案, 第 162 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, 熊本, 2017 年 12 月 18 日
18. 北澤昂大, 建部修見, Oracle Storage Cloud の性能評価と Gfarm ファイルシステムへの組み込みの検討, 第 162 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, 熊本, 2017 年 12 月 18 日
19. 建部修見, Gfarm ファイルシステムの概要と最新機能, Gfarm シンポジウム, 東京, 2017 年 12 月 22 日
20. 河合祐輔, 日野英逸, 建部修見, pbdMPI を用いたエントロピー推定プログラムの並列化と性能評価, 第 163 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, 松山, 2018 年 3 月 1 日
21. 建部修見, Gfarm ファイルシステムの概要と最新機能, Gfarm ワークショップ, 沖縄, 2018 年 3 月 2 日

22. 多田野寛人, “多数の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式に対する Block BiCGGR 法の数値的安定化について”, 2017 年度【非線形問題の解法に関する研究会】第 1 回非線形・可視化部門研究会, 自然科学研究機構核融合科学研究所, 2017 年 8 月 8 日.
23. 多田野寛人, “Block BiCGSTAB 型解法における数値的安定化と近似解の精度改善”, 2017 年度【非線形問題の解法に関する研究会】第 2 回非線形・可視化部門研究会, 自然科学研究機構核融合科学研究所, 2018 年 1 月 23 日.
24. 多田野寛人, “複数右辺ベクトルをもつ連立一次方程式に対する Block BiCGGR 法の近似解精度改善”, 日本応用数学会 2018 年研究部会連合発表会, 大阪大学吹田キャンパス, 2018 年 3 月 16 日.
25. 廣川祐太, 朴泰祐, 植本光治, 佐藤駿丞, 矢花一浩: 電子動力学シミュレーション ARTED の KNL システム Oakforest-PACS での全系性能評価, 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, 秋田, 2017 年 7 月.
26. 松村和朗, 佐藤三久, 朴泰祐: フロー解析によるマルチ GPU 対応 OpenACC コンパイラ, 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, 秋田, 2017 年 7 月.
27. 中村泰大, 並列 WAL を適用した TicToc の評価, 情報処理学会システムソフトウェアとオペレーティングシステム研究会
28. 梶原 颯伍, 川島 英之, 建部 修見, Raft に基づく分散データベースにおけるデータ分割, 情報処理学会システムソフトウェアとオペレーティング・システム研究会, 2017-OS-141(20), pp. 1-6.
29. 中村 泰大, 川島 英之, 建部 修見, 並列 WAL を適用した TicToc の評価, 情報処理学会システムソフトウェアとオペレーティング・システム研究会, 2017-OS-141(3), 1-6 (2017-07-19)
30. 渡辺 敬之, 川島 英之, 建部 修見, 並行実行木 Masstree における一括構築法の並列化, 情報処理学会システムソフトウェアとオペレーティング・システム研究会, 2017-OS-141(1), 1-6 (2017-07-19)
31. 梶原 颯伍, 川島 英之, 建部 修見, Raft に基づく分散データベースの性能解析, 情報処理学会システムソフトウェアとオペレーティング・システム研究会, 2017-OS-140(15), 1-9 (2017-05-09)

#### (4) 著書、解説記事等

(該当なし)

#### 7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

##### 国際連携

1. 朴泰祐、日独仏多国間共同研究 SPPEXA (German Priority Program on Software for Exascale Computing) 研究テーマ “MYX: MUST Correctness Checking for YML and XMP Programs”, 日本代表 PI.

## 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. SPPEXA Workshop Japan 2017 主催, 東京, 2017 年 4 月 6 日
2. XcalableMP Workshop 2017 共催, 東京, 2017 年 10 月 31 日
3. 3rd International Workshop on FPGA for HPC 主催, 東京, 2018 年 3 月 12 日
4. Gfarm シンポジウム 2017, 東京, 2017 年 12 月 22 日
5. Gfarm ワークショップ 2018, 沖縄, 2018 年 3 月 2 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：計算科学研究センター計算機システム運用委員会委員長
2. 朴泰祐：筑波大学システム情報系人事委員会委員
3. 朴泰祐：筑波大学情報環境機構企画室会議委員
4. 朴泰祐：筑波大学ネットワーク管理委員会委員
5. 朴泰祐：HPCI 連携サービス委員会委員
6. 朴泰祐：学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）運営委員会委員
7. 朴泰祐：理化学研究所客員主管研究員
8. 高橋大介：筑波大学情報環境機構学術情報メディアセンター運営委員会委員
9. 高橋大介：理化学研究所客員主管研究員
10. 高橋大介：HPCI 利用研究課題審査委員会レビューアー
11. 高橋大介：HPCI 連携サービス運営・作業部会委員
12. 高橋大介：学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）課題審査委員
13. 建部修見：HPCI 連携サービス運営・作業部会委員
14. 建部修見：理化学研究所客員主管研究員
15. 建部修見：情報通信研究機構協力研究員
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：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
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. 建部修見：SNIA 日本支部エクストリームストレージ研究会研究会長
21. 建部修見：情報処理学会論文誌コンピューティングシステム編集副委員長

22. 川島英之：産業技術研究所人工知能研究センター客員研究員

## 10. 社会貢献・国際貢献

1. Taisuke Boku: Steering Committee Chair, International Conference HPC Asia Series
2. Taisuke Boku: Organizing Committee Member, International Conference HPC Asia 2018
3. Taisuke Boku: Organizing Chair, 3rd International Workshop on FPGA for HPC
4. Taisuke Boku: Organizing Chair, SPPEXA Workshop Asia 2017
5. Taisuke Boku: Organizing Chair, IXPUG Workshop HPC Asia 2018
6. Taisuke Boku: Steering Committee Member, ISC2017
7. Taisuke Boku: Steering Committee Member, IXPUG
8. Taisuke Boku: Program Committee Member, ICPP2017
9. Taisuke Boku: Program Committee Member, IPDPS2017
10. Taisuke Boku: Program Committee Track Co-Chair, CCGrid2017
11. Taisuke Boku: Program Committee Member, NPC2017
12. Taisuke Boku: Program Committee Member, IXPUG Spring Conference 2018
13. Taisuke Boku: Program Committee Member, IWOMP2017
14. Daisuke Takahashi: Program Committee, The 15th IEEE International Symposium on Parallel and Distributed Processing with Applications (IEEE ISPA 2017)
15. Daisuke Takahashi: Program Committee, International Workshop on Legacy HPC Application Migration (LHAM 2017) in Conjunction with 5th International Symposium on Computing and Networking (CANDAR'17)
16. Daisuke Takahashi: Program Committee, The 2nd International Workshop on GPU Computing and Applications (GCA'17) in Conjunction with 5th International Symposium on Computing and Networking (CANDAR'17)
17. Daisuke Takahashi: Program Committee, International Conference on High Performance Computing in Asia Pacific Region (HPC Asia 2018)
18. Daisuke Takahashi: Program Committee, Special Session on High Performance Computing for Application Conference on High Performance Computing & Simulation (HPCS 2017)
19. Daisuke Takahashi: Publicity Committee, The 17th International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2017)
20. Daisuke Takahashi: Program Committee, The 11th International Conference on Frontier of Computer Science and Technology (FCST 2017)
21. Daisuke Takahashi: Program Committee, The International Conference on Computational Science (ICCS 2017)

22. Daisuke Takahashi: Program Committee, IEEE 11th International Symposium on Embedded Multicore SoCs (MCSoc-17)
23. Daisuke Takahashi: Program Committee, The 17th IEEE International Conference on Computer and Information technology (CIT 2017)
24. Daisuke Takahashi: Program Committee, The 12th International Workshop on Automatic Performance Tuning (iWAPT 2017)
25. 高橋大介：情報処理学会論文誌ジャーナル/JIP 編集委員会委員
26. 高橋大介：情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会運営委員
27. Osamu Tatebe: Program Chair, International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region
28. Osamu Tatebe: Program Track Chair, International Supercomputing Conference
29. Osamu Tatebe: Program Committee and Poster Vice Chair, IEEE/ACM International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC17)
30. Osamu Tatebe: Program Committee, IEEE/ACM International Symposium on Cluster, Cloud and Grid Computing (CCGrid 2017)
31. Osamu Tatebe: Program Committee, IEEE International Conference on Cluster Computing (Cluster 2017)
32. Osamu Tatebe: Program Committee, International Workshop on Advances in High-Performance Computational Earth Sciences: Applications & Frameworks (IHPCES 2017)
33. Hideyuki Kawashima: Program Track Co-Chair, International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPCAsia'18)
34. Hideyuki Kawashima: Program Committee, IEEE International Symposium on Embedded Multicore/Many-core Systems-on-Chip (MCSoc-17)
35. Hideyuki Kawashima: Program Committee, 2017 IEEE/WIC/ACM International Conference on Web Intelligence (WI'17)
36. Hideyuki Kawashima: Program Committee, 2017 IEEE International Conference on BigData.
37. 川島英之：プログラム副委員長、xSIG (cross-disciplinary workshop on computing Systems, Infrastructures, and programminG)
38. 川島英之：情報処理学会データベースシステム研究会運営委員
39. 川島英之：情報処理学会システムソフトウェアとオペレーティングシステム研究会運営委員
40. 川島英之：電子情報通信学会知的環境とセンサネットワーク研究会運営委員
41. 川島英之：情報処理学会論文誌データベース編集委員
42. 川島英之：電子情報通信学会論文誌査読委員

43. Hiroto Tadano: Local Committee, International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2018)
44. Hiroto Tadano: Publication Co-Chair, The 37<sup>th</sup> JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2018).
45. 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」研究部会幹事
46. 多田野寛人：日本応用数理学会 JSIAM Letters 編集委員
47. 多田野寛人：情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会運営委
48. 多田野寛人：情報処理学会論文誌コンピューティングシステム論文誌編集委員
49. Ryohei Kobayashi: Technical Program Committee, The Fifth International Symposium on Computing and Networking (CANDAR 2017), Track-2 (Architecture and Computer System)
50. 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
51. 小林諒平：電子情報通信学会コンピュータシステム研究会専門委員

## 11. その他

海外長期滞在、フィールドワークなど

(該当なし)



## VIII. 計算情報学研究部門

### VIII-1. データ基盤分野

#### 1. メンバー

教授	北川 博之
教授	天笠 俊之
助教	塩川 浩昭
研究員	Salman Ahmed Shaikh, 駒水 孝裕, Savong Bou, 堀江 和正
学生	大学院生 27 名、学類生 5 名、研究生 3 名

#### 2. 概要

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

#### 3. 研究成果

##### 【1】 情報統合基盤技術

（関連研究費：文科省／理研受託研究，NICT 受託研究）

##### (1) イベント駆動型スマートストリーム処理

センサー、移動体軌跡等のストリームの増加に伴い、これらを連続的に処理するストリーム処理の需要が高まっている。このため、連続的に到着するストリームデータを継続的に処理する連続問合せを実行する各種のストリーム処理エンジンが開発されてきた。ストリーム処理において重要な問合せの一つとして、イベント駆動型問合せがある。これは、連続的に到着する複数のストリームを入力として用いるが、指定された特定のストリームから到着するイベントの発生時にのみ問合せ結果を生成するものである。特定のイベントが発生した時のみ、その直前の状況をモニタリングするようなアプリケーションの問合せは、しばしばイベント駆動型問合せとなる。差分計算に基づく基本連続的問合せ処理スキームでは、イベントが発生しない状況でも、入力ストリーム中のタプルは問合せを処理するための演算子からなるパイプラインを下流方向に連続的に途中まで処理されるものの、最終的には問合せ結果

は生成されないことになる。すなわち、最終的な問合せ結果に寄与しない入力データの処理のため、システム負荷が増加し、システムリソースが浪費されることになる。この問題を解決するため、本研究では、イベント駆動型スマートストリーム処理スキームを開発した。提案スキームの基本的なアイデアは、新たなスマートウィンドウと呼ばれるウィンドウ演算子を導入し、イベントが発生していない間は、問合せ結果を生成するのに必要なウィンドウ長分の入力ストリームタプルをバッファリングするというものである。スマートウィンドウ内にバッファされたタプルがイベント発生前にウィンドウ長から外れて期限切れになると、それらはスマートウィンドウから直接削除されるため、下流演算子での無駄な処理を削減できる。問合せ結果を生成すべきイベントが発生した時は、バッファされたタプルはフラッシュされ、パイプラインの下流の演算子によって処理され、最終的な問合せ結果を生成する。

ストリーム処理エンジンにおいては、複数の連続問合せが与えられた際、それらに共通する処理を統合し処理コストを節約するため、問合せプランをマージし最適化を行う。本研究では、その考え方をイベント駆動型スマートストリーム処理スキームにも適用できるように拡張し、スマートウィンドウを用いた問合せプランが複数与えられた場合にも適用可能な問合せ最適化方式を開発した。

以上述べたイベント駆動型スマートストリーム処理については、これまでも継続的に研究開発を行ってきた。特に本年度は、イベント駆動型問合せを標準的な連続問合せ言語である CQL の枠組みの中に位置付けると共に、提案方式の完成度を上げ、さらに、既存システムとの比較を含めた詳細な性能評価等を行うことで、その有効性を検証した。

図 1.1 は、結合処理を含む問合せを対象に、提案方式を実装したシステムの処理性能を、他のストリーム処理エンジンである STREAM, Apache Spark SPE と比較したものであり、提案方式の有効性が示されている。図 1.2 は、提案複数問合せ最適化の有効性を示す実験結果である。

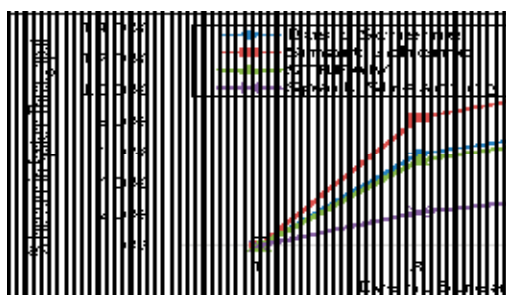


図 1.1 システム処理性能の比較

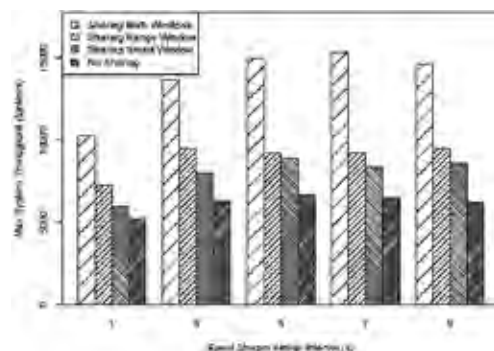


図 1.2 複数問合せ最適化の効果

## (2) StreamingCube : ストリーム処理とストリーム OLAP の統合

多くのストリームアプリケーションでは、最新の情報を利用して瞬時に意思決定を行うため、ストリームを継続的に分析する必要がある。多くの場合、ストリームデータ自身は多次

元で抽象度が低く、分析者は必要な知見を得るために、多次元的かつ多段階のインタラクティブなデータ分析を行いたいことが多い。オンライン分析処理 (OLAP) は、静的データを対象に、多次元的かつ多段階のインタラクティブなデータ分析のための手法として広く用いられている。ストリームデータを対象に OLAP を行う研究はいくつか行われているが、これまでは、ストリーム処理エンジンと OLAP のためのエンジンを結合することでストリームに対する OLAP を行うことが主流であった。複数のシステムを結合することは、複数のシステム間でデータを転送するためのコストやそれぞれのシステムでリソースの共有が十分できない上、複雑さにより保守コストが高くなる等の問題がある。

この問題に対し、本研究では、ストリーム処理とストリームに対する OLAP を統合したフレームワークである StreamingCube を提案し、その実装システムの研究開発を進めた。図 1.3 は、StreamingCube のアーキテクチャを示している。ストリーム処理とストリーム OLAP を統合したフレームワークの考え方は、ストリーム処理における差分計算と OLAP 処理における実体化ビューの差分メンテナンスに多くの共通点があるという考え方に立脚している。StreamingCube は差分計算に基づくデータ処理フレームワーク上に構築され、ストリーム処理とストリーム OLAP に共通の考え方に基づく差分処理を適用する。StreamingCube は、ストリーム処理のための通常の演算子をサポートする他、多次元階層に基づく OLAP 格子構造を維持しストリーム OLAP を実現するための cubify という演算子を導入している点に最大の特徴がある。これにより、StreamingCube は、ストリームに対する連続問合せと OLAP 問合せの 2 種類の間合せをサポートする。cubify が維持する OLAP 格子構造は一部のみを実体化して保持することが可能である。さらに、StreamingCube における連続的問合せで特徴的な点は、cubify 演算子で生成された格子構造の頂点をストリーム発生源として、さらに下流の演算子を用いたストリーム処理を行うことも可能にしている点である。

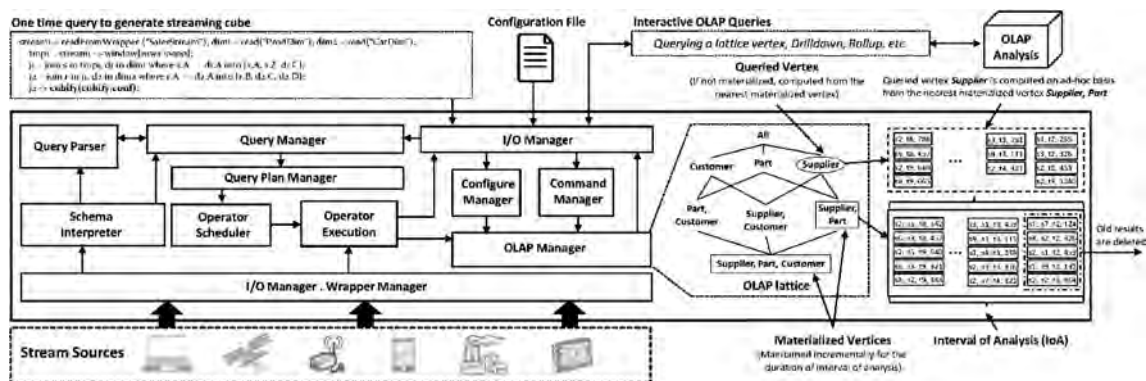


図 1.3 StreamingCube アーキテクチャ

今年度は、StreamingCube システムの初期バージョンを完成させ、性能評価等の様々な実験により提案フレームワークの有効性を検証すると共に、オープンソースとして公開した。図 1.4 は、StreamingCube の処理性能を、従来のストリーム処理エンジンと OLAP エンジンとを結合したシステムと比較した実験結果である。統合システムの優位性がこの結果からも示されている。

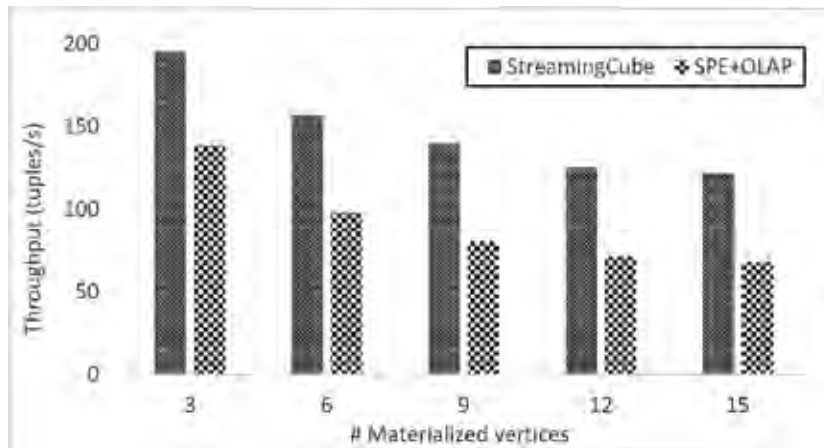


図 1.4 TPC-H データを用いた性能比較 (StreamingCube vs. SPE+OLAP)

## 【2】 データマイニング・知識発見技術

(関連研究費：文科省／理研受託研究，NICT 受託研究，科研費・研究活動スタート支援，JST ACT-I 委託研究，企業受託研究)

### (1) 大規模グラフ分析の高速化

大規模グラフに対する高速な分析手法の構築について、本年度は (1-A) 大規模なグラフに対する構造的クラスタリングの超並列化，ならびに、(1-B) 大規模なヘテロジニアスグラフを対象とした ObjectRank 解析の高速化に関する研究成果を得た。

#### (1-A) 大規模なグラフに対する構造的クラスタリングの超並列化

グラフクラスタリングはグラフの中に存在するコミュニティ構造を理解する上で重要な要素技術である。その中でも構造的類似度に基づくクラスタリング手法 SCAN は高い精度でクラスタを検出することが出来ることから幅広いアプリケーションで利用されている。しかしながら、SCAN はグラフに含まれる全てのノードとエッジに対して構造的類似度計算を行う必要があり、大規模なグラフを対象とした場合に計算量が爆発するという問題がある。この問題を解決するために、これまでいくつかの高速化手法が提案されてきたが、Web や SNS などの 1 億ノード規模の大規模なグラフは処理できないのが現状である。

この問題に対して、我々は前年度、計算科学研究センターが運用するスーパーコンピュータ COMA および Oakforest-PACS に搭載されている Intel Xeon Phi Co-processor を活用した SCAN の超並列化手法 SCAN-XP を開発した。しかしながら、SCAN-XP は 1 台の計算機のメモリに搭載できるサイズのグラフデータを対象としており、メモリ容量を超えるサイズのグ

ラフデータ（例えば、10 億ノード以上の規模のグラフデータ）に対しては高速に処理することが出来ない。

そこで本年度は、分散並列化によるスケーラブルな構造的グラフクラスタリング手法 DSCAN を開発した。DSCAN では、計算科学研究センターが運用するスーパーコンピュータ Oakforest-PACS に搭載されている複数台の Intel Xeon Phi Co-processor を同時に活用することにより、従来手法では対応できない規模のグラフデータに対するクラスタリングを実現する。一般的に分散並列化の際に生じる計算機間の通信コストを抑制するために、本手法では実世界に存在するグラフには次数分布の偏りや 3 部クリーク構造が頻出すると行った構造特性を持つことに着眼した計算の枝刈りやロードバランシングを行う。これにより、数十台の計算機を用いた場合においても、高い処理性能を達成することができる。また、各計算機においては、Intel Xeon Phi Co-processor の持つ多くの物理コアと 512 ビット SIMD 演算を最大限に活用するためのアルゴリズムの最適化を行っている。その結果、従来技術では処理できなかった 60 億ノード規模のグラフデータに対するクラスタリング分析を Oakforest-PACS を構成する計算機を 32 台活用することにより 20 秒程度で分析が可能とした。数十億ノード規模のグラフデータに対する構造的グラフクラスタリングを実現した手法は我々が知る限りまだ存在しておらず、本研究は世界初の成功事例であると考えている。

#### (1-B) 大規模なヘテロジニアスグラフを対象とした ObjectRank 解析の高速化

近年、ヘテロジニアスグラフと呼ばれるグラフ構造をより一般化したグラフモデルに対する分析技術の重要度が高くなってきている。ヘテロジニアスグラフでは、グラフを構成する各ノードやエッジが任意の属性を採ることができる。例えば図 2.1 は、論文の引用・共著・出版関係をヘテロジニアスグラフで表現した例である。各研究者の協力関係や論文とカンファレンスの出版関係、論文同士の引用関係など、様々な関係性をひとつのグラフ表現として表すことが出来ていることがわかる。

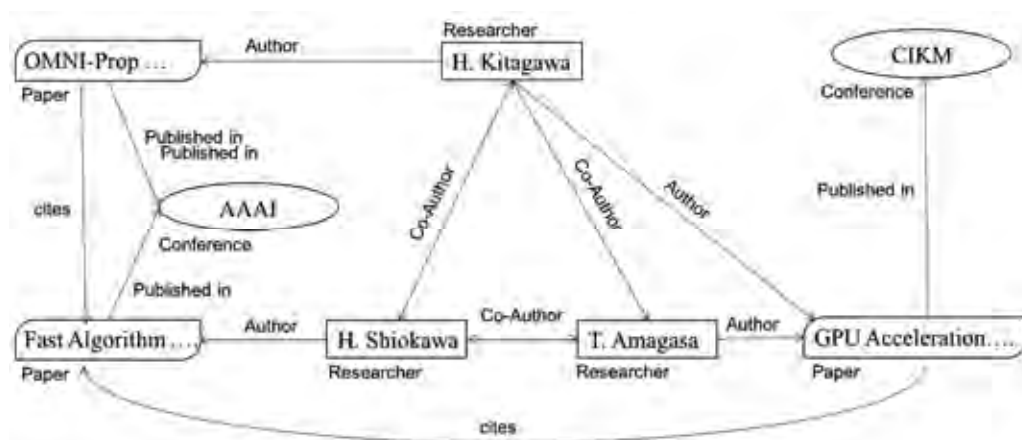


図 2.1 論文の引用・共著・出版関係を表すヘテロジニアスグラフの例

このようなヘテロジニアスグラフに対する分析技術のひとつとして ObjectRank 解析が挙げられる。ObjectRank 解析は、ユーザによって入力されたキーワードに対する重要度（関連度）をヘテロジニアスグラフの中で計算し、キーワードに対して重要性（関連性）の高いノードをユーザに返すランキング手法である。一般的に ObjectRank の計算は図 2.1 で示したようなヘテロジニアスグラフとユーザから与えられたクエリをそれぞれ疎行列およびベクトルとして表現し、疎行列・ベクトル積を冪乗法により解くことで、各ノードの重要性を示すスコア値を獲得する。しかしながら、ノード数  $N$ 、エッジ数  $M$ 、ヘテロジニアスグラフに含まれるキーワード数  $K$ 、冪乗法の反復回数を  $T$  とした時に、 $O(TK(N+M))$ となる。一般的なヘテロジニアスグラフを想定した場合、 $N$  ならびに  $M$ 、 $K$  は数百万から数億の規模となることから、ObjectRank には膨大な計算時間を要する。

そこで本研究では、ObjectRank に対する高速化計算手法 FORank を開発した。我々は各ノードの重要度を表すスコア値が冪乗法の反復回数を経て次第に収束する性質に着目し、各反復において各ノードが取り得るスコア値の上限値・下限値を理論的に導出した。この上限値・下限値は図 2.2 に示すように、反復計算回数の増加に併せて本来のスコア値へと収束する性質を持つ。提案手法ではこの性質を利用して、反復計算毎に各ノードの上限値・下限値を導出・比較し、スコア値でランク付けした際に上位  $k$  件になり得ないノードを計算から逐次的に枝刈りする手法を構築した。この手法により、提案手法 FORank は数百万ノード規模のヘテロジニアスグラフに対して、従来と同一のランキング結果を保ちつつ、その計算速度を 10 倍程度高速化することに成功した。

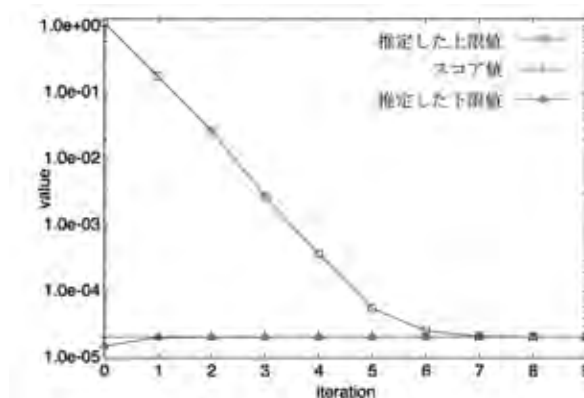


図 2.2 スコア値とその上限値・下限値の推移

## (2) GPU を用いたデータ解析の高速化

GPU コンピューティングは、本来グラフィックス処理を目的としたプロセッサである GPU (graphics processing unit) を、数値計算などの一般的な処理に用いる技術であり、高性能計算機やビッグデータ、あるいは機械学習処理の高速化の手段として近年広く普及している。GPU コンピューティングでは、通常は CPU で行われる計算負荷の高い処理を、GPU を用いて並列

処理することで全体の処理の高速化を図る。しかし、GPU の性能を引き出すためにはいくつかの技術的課題を解決する必要がある。今年度は、GPU を用いたビッグデータ処理の高速化を目的として、以下の研究に取り組んだ。

### (2-A) GPU を用いたラベル伝搬法によるグラフクラスタリングの高速化

与えられたグラフから密に接続した頂点の集合をクラスタとして抽出する技術であるグラフクラスタリングは、Web やソーシャルネットワークから生物学など、多種多様なグラフデータに対する応用が進んでいる。近年のビッグデータ分析の一般化に伴い、大規模なグラフに対する処理が強く求められている。Facebook の月間アクティブユーザ数は、2015 年 3 月時点で 14.4 億であると報告されている。このような巨大なグラフに対してクラスタリングを適用するためには、精度を保ちつつ高速な処理が可能なアルゴリズムを適用することが必要である。

ラベル伝搬法は、グラフの辺数に比例する計算量を持ち、他の多くのアルゴリズムより効率的である (図 2.3)。また、処理性能だけでなく、クラスタリング精度においても良い性能を示すという結果が報告されている。さらに、局所的な情報のみをもとにクラスタリング処理を行うため、並列化に適しているという利点もある。ただし各頂点の次数はばらつきが大きく、単純にデータを分割しただけでは高い性能を達成することができない。

そこで本研究では、GPU 上での負荷分散を考慮したラベル伝搬法の高速化を行なった。まず、ラベル伝搬法をベースに、アルゴリズムを GPU 上での高並列処理に適した形式へと変換する。これにより、各スレッドが行なう仕事量を均一化すると同時に、GPU に適した処理である、配列上の単純な操作のみでクラスタリング処理が可能となる。それに加えて、segmented sort や segmented reduce などの、次数の偏りが存在するデータにおいても効率的に並列処理が可能な演算を活用する。さらに、GPU に加えて CPU を同時に利用するアルゴリズムを開発し、更なる性能向上を図った。提案手法の有効性を、実世界のグラフデータと合成データを用いた評価実験によって行なった。その結果、処理性能においては、CPU による並列実装に対して 14.3 倍の高速化を達成した (図 2.4)。

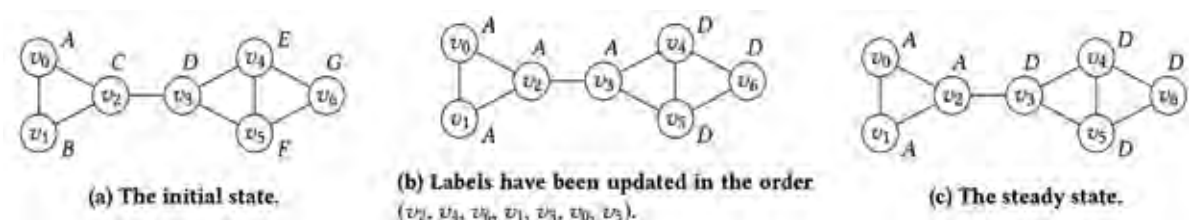


図 2.3 ラベル伝搬法

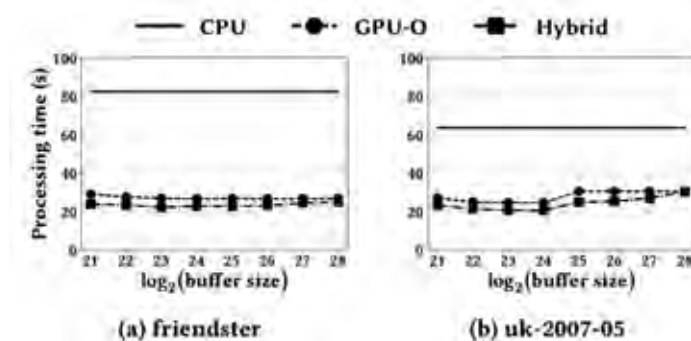


図 2.4 性能評価

## (2-B) 類似画像検索に基づいた位置推定の GPU による高速化

CPS や IoT の普及により、モバイルデバイスの位置情報を高精度に推定することが求められている。一般には GPS が用いられるが、衛星からの電波が受信できない環境では使えない、あるいは高い精度が得られないといった問題点があるため、あらかじめ撮影された位置情報付きの利用者の視点映像に対して、現在の画像をリアルタイムにマッチさせることによって、GPS を用いずに位置推定をする手法が研究されている（図 2.5）。

このようなアプリケーションにおいては、膨大なビデオ映像と位置情報が必要となるため、データベースはサーバー上で保持されることが想定される。位置推定の際には、まず歩行者が撮影したカメラ映像をクエリ画像としてサーバーに送信する。その後、サーバー上でデータベースとの照合を行い、得られた位置情報をユーザに送信する。このように、サーバー上でクエリを処理することにより、高速な処理が可能となりリアルタイムに位置情報を取得可能となる。類似画像検索では画像間の類似度計算に特徴ベクトルを用いる手法が主流である。特徴ベクトルは数千個程度のベクトルを用いて画像の特徴を表現する。類似画像検索はこれらのベクトルの比較により実現可能である。しかし、画像データベース全体では特徴ベクトル数が莫大となることに加え、特徴ベクトルが高次元であるため、検索には多大な処理コストを要する。

そこで、本研究では GPU を用いた類似画像検索による歩行者位置推定の高速化手法を提案した。本研究の基本的なアイデアは、1) GPU に適したデータ構造とアルゴリズムの提案、2) 特徴ベクトルの圧縮、3) 歩行者の空間局所性の利用、である。本研究の提案手法はデータベース構築とクエリ処理の二つの処理に大別できる。データベース構築では、効率的な検索のために事前処理可能な処理を行い、クエリ処理で実際に与えられたクエリ画像に基づき位置情報を推定する。

GPU 上での処理において、データの圧縮も重要であるため、特徴ベクトルの圧縮を行う。GPU 上で処理を行うためには、デバイスメモリにデータを格納しておく必要があるが、その容量はメインメモリと比較して低容量である。そのため、GPU に載せるデータの圧縮が重要となる。特徴ベクトルの圧縮方法は複数存在するが、本研究では並列処理に適した LSH



(locality sensitive hashing) を用いてデータの圧縮を行う。LSH は類似ベクトルを高確率で同一のハッシュ値に変換するハッシュ法であり、特に類似検索の高速化等に用いられる。提案手法では、データベース構築とクエリ処理において、それぞれ、画像データベースとクエリ画像の特徴ベクトル圧縮を行う。

本研究では、提案手法の性能を評価するために評価実験を行なった。LSH と GPU を用いることにより、複数の条件に対して一貫して高速な処理が可能であることを示した。図 2.6 は実験結果の一部であり、横軸  $W$  は LSH のパラメータ、縦軸は実行時間である。結果より、SIFT 特徴量をそのまま用いたナイーブな手法 (RS) に比べて、LSH を使った手法 (LC\*, LG\*) が高速であり、さらに GPU (LG\*) を使うことでさらなる高速化が達成されている。

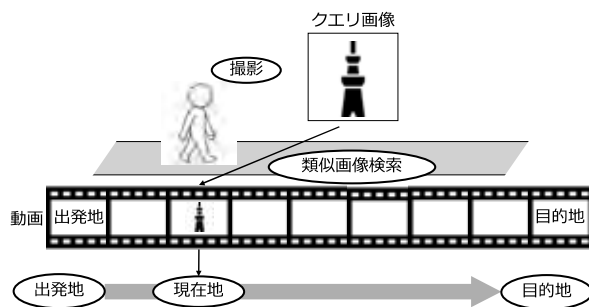


図 2.5 類似画像検索による位置素推定

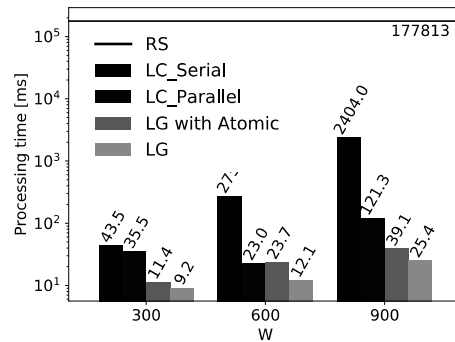


図 2.6 実データによる性能評価

### (3) 特定地域から発信されたツイート of 効率的収集

ソーシャルメディアデータに対するメタデータ推定に関する研究について述べる。近年、ソーシャルメディアを通じて多くの人々が多様な情報発信を行うようになった。Twitter は主要なサービスのひとつであり、ユーザはツイートと呼ばれる 140 文字以内の短文を投稿することができる。Twitter には携帯端末からも手軽にアクセスすることができるため、投稿されたツイートの中にはユーザの現在の状況や周囲での出来事など、ユーザの現在位置と深く結びついた情報が含まれていることも多い。そのため、特定の地域から発信されたツイートを収集することができれば、その地域に対するマーケティングやイベント検出や災害分析などに応用することが可能であると考えられる。

本研究では、限られた資源 (時間や API アクセス回数など) のみを用いて、指定された地域から発信されたツイート (投稿) をできるだけ多く収集する手法を提案した。特定の地域からのツイートを多く集めると、災害の検知や状況把握などが行えることは広く知られている。しかし、多くのツイートの発信地は非公開であるため、これらの目的を達成するためには発信地を推定することが重要である。

前年度までは、主にこの問題をバンディット問題としてモデル化することで、高い確率で特定地域からツイートを発信するユーザを発見 (探索)、高い確率を持つユーザからのツ

イートをできるだけ優先して収集する（活用） $\epsilon$ -greedy アルゴリズムを開発した。しかし、 $\epsilon$ -greedy アルゴリズムは新規フォローユーザをランダム探索する点がボトルネックとなり、収集時間の経過とともに探索効率が向上しないという問題が有ることが明らかとなった。そこで本年度は  $\epsilon$ -greedy アルゴリズムの改良した  $\epsilon$ - $\alpha$ -greedy アルゴリズムを提案した。

提案アルゴリズムは、Twitter においてフォロー関係のあるユーザ同士は現実世界においても行動範囲が近い可能性があるという仮説のもと、確率  $\alpha$  でユーザのフォロー情報を用いることで新規フォローユーザの探索を改善し、特定地域から発信されたツイートの収集の効率化を行う。

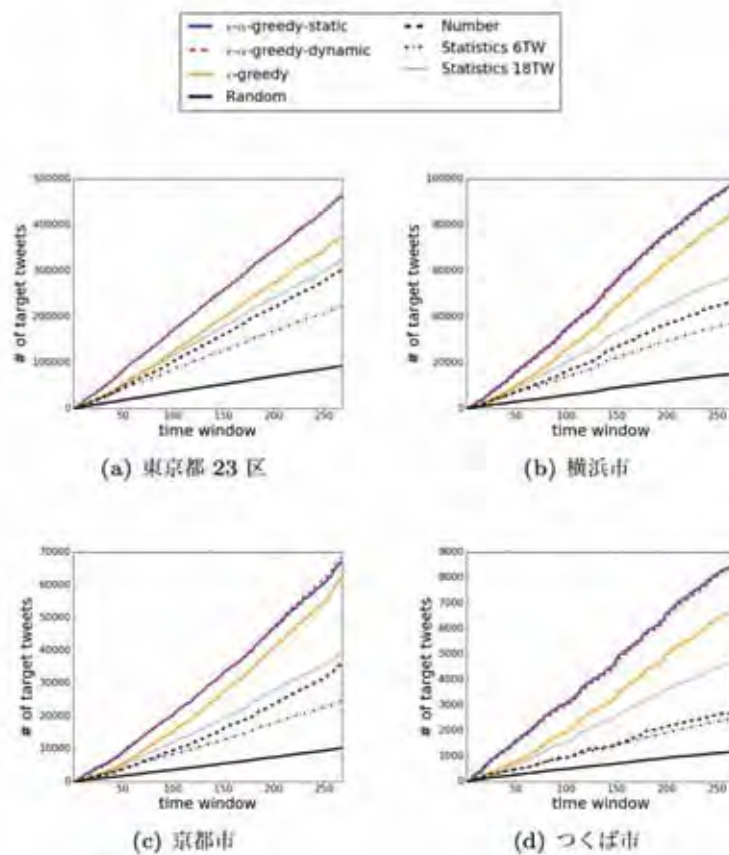


図 2.7 収集ツイート数の比較：提案手法は他の比較手法より多くの所望のツイートを収集できていることが分かる。縦軸は収集されたツイートの数を表す。

実施した評価実験について述べる。本実験では提案手法  $\epsilon$ - $\alpha$ -greedy アルゴリズムと先行研究  $\epsilon$ -greedy アルゴリズム、ならびにバンディットアルゴリズムを用いない手法とを比較した。実験結果を図 2.7 に示す。各グラフは異なる地域（東京、京都、横浜、つくば）における実験結果を表す。各線は各手法による結果を表し、縦軸が各手法によって最終的に収集された所望のツイートの数を表す。実験結果によると、すべての結果において、提案手法が最も多く

対象地域からのツイートを集めていけることが分かる。これは、確率  $\alpha$  により、ユーザのフォロー情報を用いることが有効であることを示している結果であると言える。

### 【3】 XML・Web プログラミング

(関連研究費：文科省／理研受託研究)

#### (1) LOD に対する ObjectRank を利用したキーワード検索

Linked Open Data (LOD) とは、相互にリンクされたオープンデータのネットワーク (Web of Open Data) を構築し、機械処理可能なデータを広く公開しようとする試みである。近年のデータ公開の流れと相まって、政府や企業等がデータを公開する手段として注目されている。LOD において、データは Resource Description Framework (RDF) によって記述され、URI により相互に参照される。また利用者は、クエリ言語 SPARQL を利用することで、問合せを行うことができる。今日 LOD は代表的な半構造データ情報源となりつつある。

しかしながら、SPARQL 問合せを記述するために、利用者は SPARQL 言語そのものを習得することが必要である。さらに、問合せ対象となる LOD データそのものの構造を知る必要がある。LOD データは一般に複雑なグラフ構造を持つため、複雑かつ巨大なデータの場合、特に後者は困難である。また、SPARQL の結果はランキングされていないため、重要度の高い結果を判別することが困難である。

この問題に対して、昨年度に引き続き、LOD に対するキーワード検索手法の開発を行なった (図 3.1)。関連研究において行われているような、RDF トリプルを単位とする検索ではなく、エンティティをベースとし、ObjectRank によるランキングを行う。さらに、ObjectRank におけるスキーマグラフのエッジ重みを適切に設定することを目的として、適合フィードバックに基づく手法を提案した。検索処理において、ユーザは検索キーワードを与え、システムはそれに基づきキーワードに適合するドキュメントを ObjectRank 値に基づいてユーザへ返却する。このとき、検索結果に対してユーザが検索意図に適合するドキュメントをシステムに対してフィードバックすることによって、検索意図に近いランキング結果となるようにスキーマグラフにおけるエッジの重みを調整する。

DBPedia データセットを使った実験による評価を行い、提案手法が適切なランキングおよびスキーマグラフにおけるエッジ重みの調整を行えることを確認した。図 3.2(a) にフィードバックを基にスキーマグラフを調整した時の検索精度改善の傾向を示す。図に示すように、フィードバック数が増えるほど検索精度が向上することが確認できた。また、図 3.2(b) に既存手法との比較を示す。図に示す FORK が本研究の提案手法であり、最も良い精度を示していることがわかる。これにより、本研究が有効な手段を提案したことを確認した。

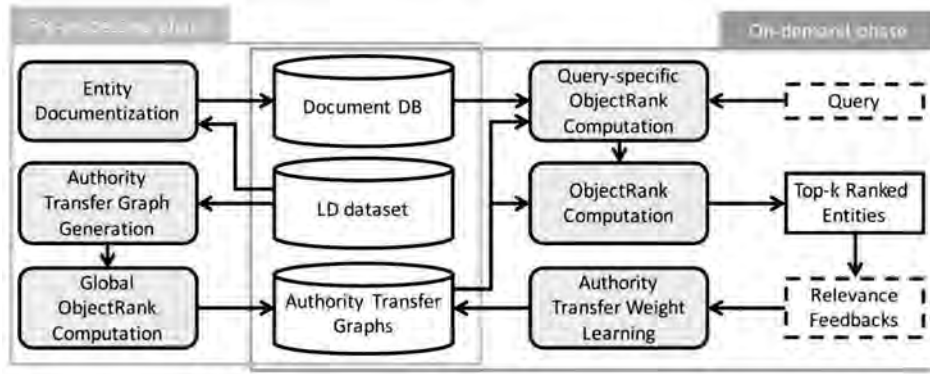
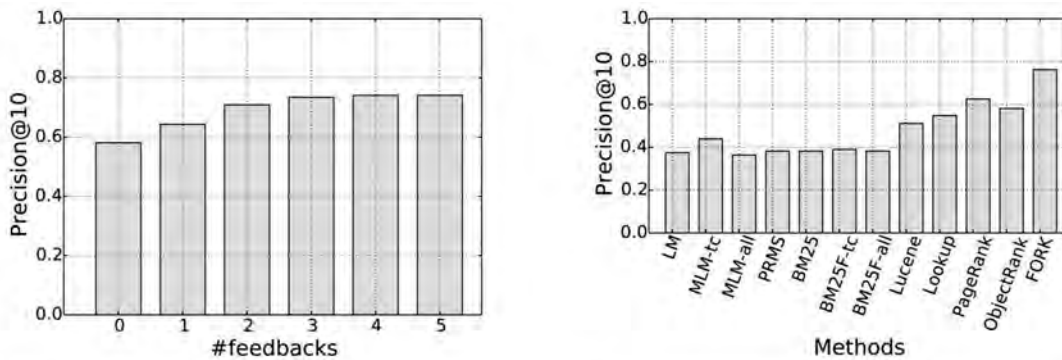


図 3.1 提案手法 FORK の概要



(a) Precision@10 over #feedbacks of ObjectRank-based ranking with FORK.

(b) Precision@10 for the ranking methods.

図 3.2 FORK の性能評価

## (2) 順序関係を考慮したログデータに対するジョイン処理

サービスの記録を電子的にログデータとして記録することが容易になり、ログデータを分析することでサービスの質の向上に役立つことが周知されてきた。これにより、様々なサービスでログデータを記録し、活用するニーズが増えてきた。ログデータを分析する際に、記録されている対象（人物など）のメタデータを同時に活用することでより高度な分析が期待できる。

しかしながら、対象とメタデータを結びつけることが容易でない場合がある。対象が移動体であるパターンで動いており、一定期間ごとに行動が記録されるような状況では、記録が取られたタイミングにおいて、メタデータのどの部分と対応付ければよいか自明でない。また、データの管理上、メタデータ中の順序が暗に示されていることがあり、機械的に順序を判別するのが困難な場合がある。加えて、上記対応付けを手で行うと大変な労力がかかるため、全部を手で行うことは非現実的である。

本研究では、一部の対応付けが行われたデータを利用し、対応付けに必要な情報を導出しジョイン処理を行う手法を提案した（図 3.3）。提案手法では、一部に対応付けが行われたデ

ータから、順序対応をする可能性のある属性対を発見する。その際に、すべての属性対を探索しないように枝刈り手法を提案することで計算の効率化を図った（図 3.4）。

藤沢市の協力で得たゴミ収集ログデータとゴミ収集車のメタデータを対象に実験を行い、結果として、すべてを人手でやる場合よりも 77%の効率化に成功した。この対応付けにより、ゴミデータの地域ごとの分析やゴミ収集車経路ごとのゴミ排出量分析などが可能となった。

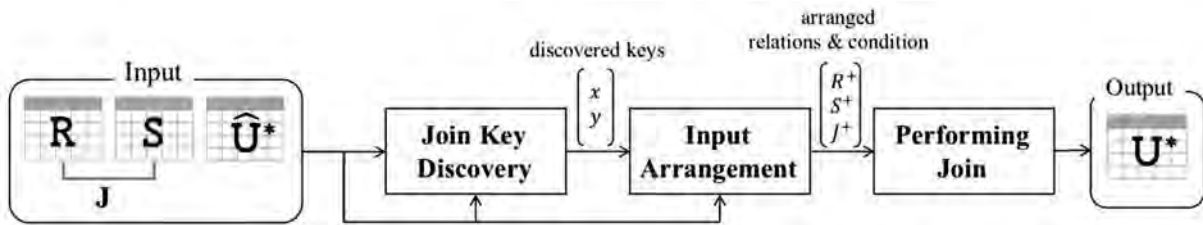


図 3.3 提案手法の概要

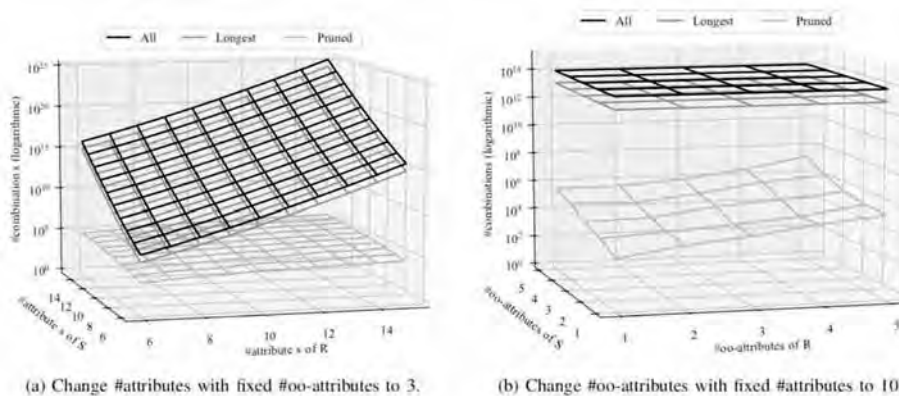


図 3.4 提案手法の性能評価：縦軸は対数スケールでの比較回数を示す。提案手法により比較回数が大幅に削減できる。

#### 【4】 科学分野におけるデータベース・機械学習応用

(関連研究費：文科省/TGI 受託研究, 科研費・新学術領域, 企業受託研究)

##### (1) 生体信号解析に基づく睡眠ステージ分析

睡眠は、役割や深さの異なる複数の睡眠ステージから構成されている。睡眠状態の解析や、睡眠障害の診断には、この睡眠ステージを生体信号から判定する必要がある。現在、臨床検査技師や医師がこの判定を行っているが、非常に大きな労力を要する。本研究では、この睡眠ステージ判定の効率化を目的とし、上記判定を自動的に行うアルゴリズム・ソフトウェアの開発に取り組んでいる。昨年度までの研究では、マウスの睡眠ステージ判定が主な対象であったが、本年度からはヒトの睡眠ステージ判定手法の開発に手を広げた。本報告では、ヒト睡眠ステージ判定に関して述べる。

一般的な技師による睡眠ステージ判定では、脳波や眼電位に含まれる特徴波形（各睡眠ステージに固有、もしくはステージの判定基準となる波形）の検出と、検出した特徴波形からの睡眠ステージの判定の2段階から成り立つ。本研究では、この技師の判定手順を模倣、再現しやすいモデルを作成、機械学習手法を用いてパラメータの最適化を行うことで、技師に近い睡眠ステージ判定が可能な手法を開発した。

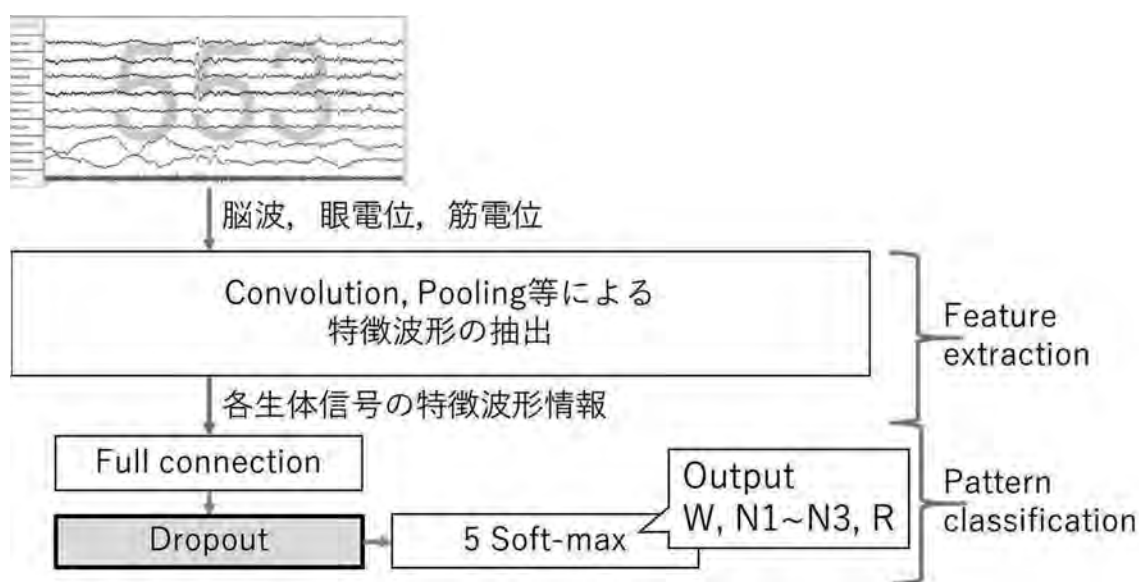


図 4.1 睡眠ステージ判定手法の概要

本睡眠ステージ判定手法は、「特徴量抽出部」と「パターン認識部」の2つから構成される（図 4.1）。入力された生体信号はまず特徴抽出部において、その種類ごとにステージ判定に有効な特徴量が抽出される。本手法では、この特徴抽出に Convolutional Neural Network を用いた。本ネットワークは、特定の周波数の波や特定の波形の検出が可能で、様々な特徴波形を取り扱う本課題に適した特徴抽出器である。この特徴抽出部で、技師と同様に特徴波形の検出を行っている。抽出された特徴量は、パターン認識部に入力される。パターン認識部は、特徴量と睡眠ステージの対応関係を学習、前者から後者の推定を行う。

提案手法の評価のために、被験者 16 名から得た睡眠時生体信号から、実際に睡眠ステージの判定を行った。提案手法の睡眠ステージ判定結果と技師の判定結果の一致率は約 87%であった。一般に、技師間の判定一致率は約 82%といわれており、本提案手法はこれを上回ることができた。以上のことから、本手法は技師の代替、もしくは補助として利用する十分な精度を有しており、睡眠ステージ判定の効率化の目的を十分に達成可能であると思われる。

平成 30 年度以降では、さらに判定一致率を高めるべく、時系列特徴の効果や生体信号別の特徴抽出方法について検討するとともに、ステージ判定基準の可視化や、判定システムとしての実装等、実応用性向上に向け取り組みたいと考えている。

## (2) GPV/JMA アーカイブ・JRA-55 アーカイブ

地球環境研究部門と共同で、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、および管理、運用を行っている(図 4.2)。GPV/JMA アーカイブは、気象庁が公開している気象予報グリッドデータ(GPV データ)を蓄積するとともに、外部登録ユーザへのデータを提供することを目的としている。GPV/JMA アーカイブで提供しているデータは、全球モデル、メソスケールモデル、リージョナルスケールモデル、週間アンサンブル、月間アンサンブル、季間アンサンブルの 6 種類である。



図 4.2 GPV/JMA アーカイブ

## (3) 格子 QCD データグリッド ILDG/JLDG

Japan Lattice Data Grid (JLDG), International Lattice Data Grid (ILDG) は、格子 QCD 配位データを共有するためのデータグリッドである。素粒子物理研究部門と連携し、JLDG/ILDG の運営に継続参画している。今年度は、システムの運用を継続するとともに、システムのセキュリティ対策およびデータセットに対する DOI 付与について検討を進めた。



図 4.3 QCDml ファセット検索

## 4. 教育

学生の指導状況(学生氏名、学位の種類、論文名)

<博士(工学)>

### 1. Mateus Silqueira Hickson Cruz

A Study on Efficient and Secure Set Similarity Joins

### 2. 小山田 昌史

Efficient Machine Learning on Relational Data

<修士(工学)>

### 1. 秋山 賢人

秘匿検索フレームワーク OSIT における検索効率化とデータ提供サービスへの応用

2. 草村 優太

GPU を用いた類似画像検索による歩行者位置推定の高速化

3. 熊井 克仁

ワークスキルと再割当ての低減を共に考慮したタスクストリームへのワーカ割り当て手法

4. 鈴木 陸也

表計算インターフェースを用いた複雑なクラウドソーシングプログラムの開発支援

5. 高橋 知克

メニーコアプロセッサを用いた構造的類似度に基づくグラフクラスタリングの高速化

6. 中川 真史

フォローを用いた特定地域から発信されたツイートの効率的な収集

7. 長城 沙樹

時系列文書に対する効率的なエンティティリンキング

8. 山下 雅弘

逆ランク検索による情報改良支援

9. 王 嵩

Enhancing Efficiency of High-Dimensional Aggregate Reverse Rank Query Processing

< 修士 (工学) : 特定課題研究 >

1. 後藤 修平

公共ビッグデータ利活用のための参加型センシングアプリケーションの開発  
ーデータ可視化アプリケーションによるデータ活用の検討ー

2. 坂元 亘

公共ビッグデータ利活用のための参加型センシングアプリケーションの開発  
ーシステムのポータビリティ実現ー

< 学士 (情報科学, 情報工学) >

1. 住谷 雄樹

GAN を用いた時系列データに対するノイズ除去手法

2. 中川遼太郎

予測分析機能を有する ストリーム OLAP システムの開発

3. 仁木 美来

RDF グラフに対するグラフ集約の高速化

4. 山崎 耕太郎



大規模グラフに対する RankClus の高速化に関する研究

5. 米内 裕史

メソッド呼び出し関係に基づくメソッド名の予測

集中講義など

該当なし

## 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

### 受賞

(賞の名称、受賞者名、タイトル、年月日)

1. Best Paper Award : Chihiro Sakazume, Hiroyuki Kitagawa, Toshiyuki Amagasa, "DIO: Efficient Interactive Outlier Analysis over Dynamic Datasets", 12th International Conference on Digital Information Management (ICDIM 2017), September 12-14, 2017.
2. 学生奨励賞: 秋山賢人, 渡辺知恵美, 北川博之, "暗号化データベースシステムにおけるクエリベースのデータ販売スキーム", 第 10 回 Web とデータベースに関するフォーラム (WebDB Forum 2017), 2017 年 9 月 20 日.
3. 学生奨励賞・企業賞 (Sansan 株式会社賞) : 高橋 知克, 塩川浩昭, 北川博之, "メニーコアプロセッサを用いた構造的類似度に基づくグラフクラスタリングの高速化", 第 10 回 Web とデータベースに関するフォーラム (WebDB Forum 2017), 2017 年 9 月 20 日.
4. 論文賞: 藤森 俊匡, 塩川 浩昭, 鬼塚 真, "分散グラフ処理におけるグラフ分割", 第 10 回 Web とデータベースに関するフォーラム (WebDB Forum 2017), 2017 年 9 月 20 日.
5. 筑波大学若手教員奨励賞: 塩川浩昭, 2017 年 12 月 4 日.
6. 優秀インタラクティブ賞: 伊藤 寛祥, 駒水 孝裕, 天笠 俊之, 北川 博之, "ノードがテキスト情報を持つ動的ネットワークにおけるノードと単語の分散表現学習", 第 10 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 2018), 2018 年 3 月 6 日.
7. 学生プレゼンテーション賞: 秋山 賢人, 渡辺 知恵美, 北川 博之, "秘匿検索フレームワーク OSIT を利用したデータ提供サービス", 第 10 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 2018), 2018 年 3 月 6 日.
8. 学生プレゼンテーション賞: 草村 優太, 天笠 俊之, 北川 博之, 小澤 佑介, "GPU を用いた類似画像検索による歩行者位置推定の高速化", 第 10 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 2018), 2018 年 3 月 6 日.
9. 学生プレゼンテーション賞・最優秀インタラクティブ賞: 長城 沙樹, 北川 博之, "時系列文書に対する効率的なエンティティリンキング", 第 10 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 2018), 2018 年 3 月 6 日.

10. 学生プレゼンテーション賞：佐藤 朋紀，塩川 浩昭，北川 博之，"選択的重要度先読みを用いた ObjectRank の高速化"，第 10 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 2018)，2018 年 3 月 6 日。

## 外部資金

(名称、氏名、代表・分担の別、採択年度、金額、課題名)

受託経費：文部科学省/理化学研究所 (平成 26 年度～平成 29 年度)

研究課題：実社会ビッグデータ利活用のためのデータ統合・解析技術の研究開発

研究代表者：北川 博之

平成 29 年度配分額：33,777 千円 (直接経費 30,707 千円：間接経費 3,070 千円)

受託経費：情報通信研究機構 (平成 28 年度～平成 31 年度)

研究課題：欧州との連携による公共ビッグデータの利活用基盤に関する研究開発

研究代表者：北川 博之

平成 29 年度配分額：10,250 千円(直接経費 9,318,182 円：間接経費 931,818 円)

受託経費：文部科学省/つくばグローバル・イノベーション推進機構 (平成 28 年度～平成 32 年度)

事業名称：＜イノベーションシステム整備事業＞地域イノベーション・エコシステム形成プログラム「つくばイノベーション・エコシステムの構築 (医療・先進技術シーズを用いた超スマート社会の創成事業)」

研究分担者：北川 博之

平成 29 年度配分額：15,000 千円

受託経費：国立研究開発法人日本医療研究開発機構(平成 29 年 1 月 27 日～平成 30 年 3 月 31 日)

事業名称：＜臨床研究等 ICT 基盤構築研究事業＞

研究課題：エビデンスの飛躍的創出を可能とする超高速・超学際次世代 NDB データ研究基盤構築に関する研究

研究分担者：北川 博之

平成 29 年度配分額：6,760 千円 (直接経費 5,200 千円：間接経費 1,560 千円)

研究種目：新学術領域 （平成 27 年度～平成 31 年度）

研究課題：超ストレス環境・宇宙を見据えた新規睡眠覚醒制御手法の開発

（研究代表者：長瀬 博）

研究分担者：北川 博之

平成 29 年度配分額：3,500 千円

研究種目：研究活動スタート支援 （平成 28 年度～平成 29 年度）

研究課題：大規模グラフの頻出部分構造を利用した高速な分析アルゴリズムの開発

研究代表者：塩川 浩昭

平成 29 年度配分額：2,990 千円（直接経費 2,300 千円：間接経費 330 千円）

受託経費：Sky 株式会社 （平成 29 年 4 月 1 日～平成 30 年 3 月 31 日）

研究課題：複合イベント処理や機械学習などの技術を利用し、SKYSEA Client View のログ  
及び資産情報から警告すべき状況の高速かつ柔軟な検出を実現する

研究代表者：北川 博之・天笠 俊之

平成 29 年度配分額：3,330 千円（直接経費 3,000 千円：間接経費 330 千円）

受託経費：エーザイ株式会社 （平成 29 年 6 月 1 日～平成 30 年 3 月 31 日）

研究課題：脳波、筋電データの深層学習に関する研究

研究代表者：北川 博之・塩川 浩昭

平成 29 年度配分額：2,200 千円（直接経費 2,000 千円：間接経費 200 千円）

受託経費：株式会社富士通研究所 （平成 29 年 6 月 23 日～平成 30 年 3 月 31 日）

研究課題：多様なデータの統合・活用のための基盤技術

研究代表者：北川 博之

平成 29 年度配分額：2,000 千円（直接経費 1,538,462 円：間接経費 461,538 円）

受託経費：科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業 ACT-I 「情報と未来」（平成 29 年  
10 月 1 日～平成 31 年 3 月 31 日）

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

研究代表者：塩川 浩昭

平成 29 年度配分額：1,950 千円（直接経費 1,500 千円：間接経費 450 千円）

受託経費：国立研究開発法人科学技術振興機構（平成 29 年 11 月 1 日～平成 30 年 3 月 31 日）

事業名称：＜未来社会創造事業＞

研究課題：サービスの自動合成および連携に関する技術課題と社会経済的インパクトに関する調査

研究代表者：天笠 俊之

平成 29 年度配分額：1,235 千円（直接経費 950 千円：間接経費 285 千円）

## 知的財産権

（種別、氏名、課題名、年月日）

該当なし

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

＜学術雑誌論文＞

1. Makoto Onizuka, Toshimasa Fujimori, Hiroaki Shiokawa, "Graph Partitioning for Distributed Graph Processing", Data Science and Engineering, Springer, 2017.
2. Yasuhiro Fujiwara, Makoto Nakatsuji, Hiroaki Shiokawa, Takeshi Mishima, Makoto Onizuka, "Fast Ad-hoc Search Algorithm for Personalized PageRank", IEICE Transactions, Vol.E 100-D, No.4, pp., April, 2017.
3. 高橋 知克, 塩川浩昭, 北川博之, "メニーコアプロセッサを用いた構造的類似度に基づくグラフクラスティングの高速化", 情報処理学会論文誌データベース (TOD76 テクニカルノート), Vol.10, No.4, pp.1-5, December, 2017.
4. 佐藤朋紀, 塩川浩昭, 山口祐人, 北川博之, "大規模グラフに対する ObjectRank の高速な近似 Top-k 検索", 情報処理学会論文誌データベース (TOD76 テクニカルノート), Vol.10, No.4, pp.11-15, December, 2017.
5. 秋山賢人, 渡辺知恵美, 北川博之, "暗号化データベースシステムにおけるクエリベースのデータ販売スキーム", 情報処理学会論文誌データベース (TOD76 テクニカルノート), Vol.10, No.4, pp.31-35, December, 2017.
6. 上田紗希, 山口祐人, 北川博之, "バンディットアルゴリズムを用いた特定地域から発信されたツイートの収集", 日本データベース学会和文論文誌, Vol.16, Article No.9, 2018 年 3 月.

7. 長裕敏, 塩川浩昭, 北川博之, "ストリーム処理とバッチ処理の統合と実行最適化", 日本データベース学会和文論文誌, Vol.16, Article No.11, 2018 年 3 月.

**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. Yuta Suzuki, Makito Sato, Hiroaki Shiokawa, Masashi Yanagisawa, Hiroyuki Kitagawa, "MASC: Automatic Sleep Stage Classification Based on Brain and Myoelectric Signals", Proc. 33rd IEEE International Conference on Data Engineering Workshops (ICDE Workshops 2017), pp. 1489-1496, San Diego, CA, USA, April 19-22, 2017.
2. Tomokatsu Takahashi, Hiroaki Shiokawa, Hiroyuki Kitagawa, "SCAN-XP: Parallel Structural Graph Clustering Algorithm on Intel Xeon Phi Coprocessors", Proc. 2nd ACM SIGMOD Workshop on Network Data Analytics (NDA 2017), pp. 6:1-6:7, Chicago, IL, USA, May 19, 2017.
3. Takahiro Komamizu, Yasuhiro Hayase, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "Exploring Identical Users on GitHub and Stack Overflow", Proc. 29th International Conference on Software Engineering and Knowledge Engineering (SEKE 2017), pp.584-589, Pittsburgh, USA, July 5-7, 2017.
4. Yuyang Dong, Hanxiong Chen, Kazutaka Furuse, Hiroyuki Kitagawa, "Efficient Processing of Aggregate Reverse Rank Queries", Proc. 28th International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2017) (Short Paper), pp.159-166, Lyon, France, August 28-31, 2017.
5. Takahito Kaiho, Wen-jie Lu, Toshiyuki Amagasa, Jun Sakuma, "Towards Privacy-preserving Record Linkage with Record-wise Linkage Policy", Proc. 28th International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2017), pp.233-248, Lyon, France, August 28-31, 2017 .
6. Chihiro Sakazume, Hiroyuki Kitagawa, Toshiyuki Amagasa, "DIO: Efficient Interactive Outlier Analysis over Dynamic Datasets", Proc. 12th International Conference on Digital Information Management (ICDIM 2017), pp. 234-241, Fukuoka, Japan, September 12-14, 2017.
7. Yusuke Kozawa, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "GPU-Accelerated Graph Clustering via Parallel Label Propagation", Proc. 26th ACM International Conference on

- Information and Knowledge Management (CIKM 2017), pp.567-576, Singapore, November 6-10, 2017 .
8. Saki Ueda, Yuto Yamaguchi, Hiroyuki Kitagawa, "Collecting Non-Geotagged Local Tweets via Bandit Algorithms", Proc. 26th ACM International Conference on Information and Knowledge Management (CIKM 2017) (Short Paper), pp.2331-2334, Singapore, November 6-10, 2017.
  9. Salman Ahmed Shaikh and Hiroyuki Kitagawa, "StreamingCube: A Unified Framework for Stream Processing and OLAP Analysis", Proc. 26th ACM International Conference on Information and Knowledge Management (CIKM 2017) (Demo Paper), pp. 2527-2530, Singapore, November 6-10, 2017.
  10. Takahiro Komamizu, Sayami Okumura, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "FORK: Feedback-aware ObjectRank-based Keyword Search over Linked Data", Proc. 13th Asia Information Retrieval Societies Conference (AIRS 2017), pp.58-70, Jeju island, Korea, November 22-24, 2017.
  11. Takahiro Komamizu, Toshiyuki Amagasa, Salman Ahmed Shaikh, Hiroaki Shiokawa, Hiroyuki Kitagawa, "SOLA: Stream OLAP-based Analytical Framework for Roadway Maintenance", Proc. International Workshop on Social and Big Data in Digital Ecosystems (SBDDE 2017), pp.35-42, Bangkok, Thailand, November 7-10, 2017 .
  12. Takahiro Komamizu, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "CROISSANT: Centralized Relational Interface for Web-scale SPARQL Endpoints", Proc. 19th International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services (iiWAS 2017) (Short Paper), pp.284-288, Salzburg, Austria, December 4-6, 2017.
  13. Saki Nagaki, Hiroyuki Kitagawa, "Recency-based Candidate Selection for Efficient Entity Linking", Proc. 19th International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services (iiWAS 2017) , pp.405-414, Salzburg, Austria, December 4-6, 2017.
  14. Kento Akiyama, Chisato Shinozuka, Chiemi Watanabe, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "An Index-based Secure Query Processing Scheme for Outsourced Databases", Proc. 19th International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services (iiWAS 2017) , pp.215-223, Salzburg, Austria, December 4-6, 2017.
  15. Mateus S. H. Cruz, Toshiyuki Amagasa, Chiemi Watanabe, Wenjie Lu and Hiroyuki Kitagawa, "Secure Similarity Joins Using Fully Homomorphic Encryption", Proc. 19th International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services (iiWAS 2017) , pp.224-233, Salzburg, Austria, December 4-6, 2017.
  16. Katsumi Kumai, Jianwei Zhang, Yuhki Shiraishi, Daisuke Wakatsuki, Hiroyuki Kitagawa, Atsuyuki Morishima, "Group Rotation Management in Real-Time Crowdsourcing",

- Proc. 19th International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services (iiWAS 2017) , pp.23-31, Salzburg, Austria, December 4-6, 2017.
17. Yuta Kusamura, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa and Yusuke Kozawa, "Efficient Content-based Image Retrieval for Position Estimation on GPU", Proc. the 15th International Conference on Advances in Mobile Computing & Multimedia (MoMM 2017) , pp.58-66, Salzburg, Austria, December 4-6, 2017.
  18. Salman Ahmed Shaikh and Hiroyuki Kitagawa, "Smart Distributed Query Execution over Data Streams", Proc. 2nd Workshop on Real-time and Stream Processing in Big Data, Co-located with the IEEE International Conference on Big Data, pp.2326-2331, Boston, MA, USA, December 2017.
  19. Takahiro Komamizu, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "Implicit Order Join: Joining Log Data with Property Data by Discovering Implicit Order-oriented Keys with Human Assistance", Proc. The First IEEE Workshop on Human-Machine Collaboration in BigData, co-located with IEEE Big Data 2017 (HMDData 2017), pp.4400-4406, Boston, MA, USA, December 11-14, 2017.
  20. Takahiro Komamizu, Jin Nakazawa, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, Hideyuki Tokuda, "Analytical Toolbox for Smart City Applications: Garbage Collection Log Use Case", Proc. 3rd International Workshop on Smart Cities: People, Technology, and Data, co-located with IEEE Big Data 2017 (IWSC 2017), pp.4105-4110, Boston, MA, USA, December 11-14, 2017
  21. Hiroyoshi Ito, Takahiro Komamizu, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "Network-Word Embedding for Dynamic Text Attributed Networks", Proc. Sixth International Workshop on Semantic Computing for Social Networks and Organization Science with Twelfth IEEE ICSC (SCSN 2018) , pp.334-339, Laguna Hills, USA, January 31-February 2, 2018 .
  22. Hiroyoshi Ito, Takahiro Komamizu, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "Community Detection and Correlated Attribute Cluster Analysis on Multi-Attributed Graphs", Proc. 2nd International Workshop on Data Analytics Solutions for Real-Life Applications with 21st EDBT/ICDT Joint Conference (DARLI-AP 2018), pp.2-9, Vienna, Austria, March 26-29, 2018.
  23. Shuta Nakamae, Wataru Sakamoto, Tetsuya Negishi, Shuhei Goto, Buntarou Shizuki, Chiemi Watanabe, and Toshiyuki Amagasa, "A Development of Participatory Sensing System for Foreign Visitors in PBL", 10th Asian Conference on Intelligent Information and Database Systems (ACIIDS 2018), pp.149-158, Dong Hoi City, Vietnam, March 19-21, 2018.

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

該当なし

## B) その他の発表

### <査読付国内論文>

1. 永野 真知, 早瀬 康裕, 駒水 孝裕, 北川 博之, "GitHub と Stack Overflow の開発者の活動記録を併用したリポジトリ推薦", ソフトウェアエンジニアリングシンポジウム 2017 (SES-2017), pp. 138-145, 2017 年 8 月 31 日-2017 年 9 月 1 日.

### <学会発表>

1. 秋山賢人, 渡辺知恵美, 北川博之, "暗号化データベースシステムにおけるクエリベースのデータ販売スキーム", 第 10 回 Web とデータベースに関するフォーラム (WebDB Forum 2017), 2017 年 9 月 18 日~9 月 20 日.
2. 高橋 知克, 塩川浩昭, 北川博之, "メニーコアプロセッサを用いた構造的類似度に基づくグラフクラスタリングの高速化", 第 10 回 Web とデータベースに関するフォーラム (WebDB Forum 2017), 2017 年 9 月 18 日~9 月 20 日.
3. 佐藤朋紀, 塩川浩昭, 山口祐人, 北川博之, "大規模グラフに対する ObjectRank の高速な近似 Top-k 検索", 第 10 回 Web とデータベースに関するフォーラム (WebDB Forum 2017), 2017 年 9 月 18 日~9 月 20 日.
4. 藤森 俊匡, 塩川 浩昭, 鬼塚 真, "分散グラフ処理におけるグラフ分割", 第 10 回 Web とデータベースに関するフォーラム (WebDB Forum 2017), 2017 年 9 月 18 日~9 月 20 日.
5. Shaikh Salman Ahmed, Kitagawa Hiroyuki, "Smart Distributed Query Execution for Event-driven Stream Processing", 第 10 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 2018), I3-1, 2018 年 3 月 4 日~3 月 6 日.
6. 伊藤 寛祥, 駒水 孝裕, 天笠 俊之, 北川 博之, 伊藤 寛祥, 駒水 孝裕, 天笠 俊之, 北川 博之, "ノードがテキスト情報を持つ動的ネットワークにおけるノードと単語の分散表現学習", 第 10 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 2018), A1-1, 2018 年 3 月 4 日~3 月 6 日.
7. 秋山 賢人, 渡辺 知恵美, 北川 博之, "秘匿検索フレームワーク OSIT を利用したデータ提供サービス", 第 10 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 2018), F7-1, 2018 年 3 月 4 日~3 月 6 日.
8. 草村 優太, 天笠 俊之, 北川 博之, 小澤 佑介, "GPU を用いた類似画像検索による歩行者位置推定の高速化", 第 10 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 2018), I2-5, 2018 年 3 月 4 日~3 月 6 日.
9. 高橋 知克, 塩川 浩昭, 北川 博之, "Intel Xeon Phi による SCAN クラスタリングの分散並列化", 第 10 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 2018), H6-1, 2018 年 3 月 4 日~3 月 6 日.



10. 長城 沙樹, 北川 博之, "時系列文書に対する効率的なエンティティリンキング", 第 10 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 2018), C1-6, 2018 年 3 月 4 日 ~3 月 6 日.
11. 中川 真史, 山口 祐人, 北川 博之, "フォローを用いた特定地域から発信されたツイート の効率的な収集", 第 10 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 2018), B3-3, 2018 年 3 月 4 日~3 月 6 日.
12. 佐藤 朋紀, 塩川 浩昭, 北川 博之, "選択的重要度先読みを用いた ObjectRank の高速化 ", 第 10 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 2018) , I7-5, 2018 年 3 月 4 日~3 月 6 日.
13. 菅野 健太, 天笠 俊之, 北川 博之, "メニーコアプロセッサを用いた大規模な集合間類似 結合の高速化", 第 10 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 2018), H6-2, 2018 年 3 月 4 日~3 月 6 日.
14. 那須 勇弥, 中挾 晃介, 北川 博之, "シーケンス OLAP におけるパターン拡張問合せ手 法の提案", 第 10 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 2018) , E1-5, 2018 年 3 月 4 日~3 月 6 日.
15. 松下 朋弘, 塩川 浩昭, 北川 博之, "セル分割による Affinity Propagation の高速化", 第 10 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 2018), F4-5, 2018 年 3 月 4 日~3 月 6 日.
16. 山部 剛士, 堀江 和正, 塩川 浩昭, 柳沢 正史, 北川 博之, "ディープラーニングによる 脳波/筋電データを用いたマウスの睡眠ステージ判定", 第 10 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 2018) , C3-5, 2018 年 3 月 4 日~3 月 6 日.
17. 住谷 雄樹, 堀江 和正, 塩川 浩昭, 北川 博之, "生体データ解析における GAN を用いた データ処理", 情報処理学会第 80 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2018), 2018 年 3 月 13 日~3 月 15 日.
18. 中川 遼太郎 塩川 浩昭 北川 博之, "予測分析を可能とするストリーム OLAP 分析フレ ームワーク", 情報処理学会第 80 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2018), 2018 年 3 月 13 日~3 月 15 日.
19. 仁木 美来, 天笠 俊之, 駒水 孝裕, 北川 博之, "グラフ集約に基づく RDF データに対す る OLAP 分析", 情報処理学会第 80 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2018) , 2018 年 3 月 13 日 ~3 月 15 日.
20. 山崎 耕太郎, 佐藤 朋紀, 塩川 浩昭, 北川 博之, "大規模グラフに対する逐次的なノー ドの枝刈りを用いた RankClus の高速化", 情報処理学会第 80 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2018), 2018 年 3 月 13 日~3 月 15 日.

21. 米内 裕史, 早瀬 康裕, 北川 博之, "コールグラフに基づくメソッド名の分散表現の獲得", 情報処理学会第 80 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2018), 2018 年 3 月 13 日~3 月 15 日.

#### (4) 著書、解説記事等

該当なし

#### 7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

- 地球環境研究部門との連携：気象庁気象予報データベース「GPV/JMA アーカイブ」(<http://gpvjma.ccs.hpcc.jp>) の開発, 管理, 運用.
- 素粒子物理研究部門との連携：Japan Lattice Data Grid (JLDG), International Lattice Data Grid (ILDG) の運営.
- 国際統合睡眠医科学研究機構 (IIS) との連携：マウスの脳波/筋電図データを利用した睡眠ステージの自動判定アルゴリズム・ソフトウェアの研究開発.
- 宇宙物理研究部門および東京大学宇宙線研究所との連携：深層学習を用いた遠方銀河画像の自動判別

#### 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

- Korea-Japan Database Workshop 2017 (KJDB 2017), 沖縄都ホテル(沖縄県那覇市), 2017 年 11 月 17 日 (金) ~11 月 20 日 (月).
- 第 10 回 Web とデータベースに関するフォーラム (WebDB フォーラム 2017), お茶の水女子大学 (東京都), 2017 年 9 月 18 日 (月) ~20 日 (水).

#### 9. 管理・運営

北川博之教授

- 学外
  - 日本データベース学会監事
- 学内
  - システム情報工学研究科：研究科長
  - 計算科学研究センター：計算情報学研究部門長, 計算科学振興室長, ビッグデータ・AI 連携推進室長

天笠俊之教授

- 学外

- 該当なし.
- 学内
  - 情報科学類計算機運用委員長
  - コンピュータサイエンス専攻カリキュラム委員長

塩川浩昭助教

- 学外
  - 該当なし.
- 学内
  - 該当なし.

## 10. 社会貢献・国際貢献

北川博之教授

- 国際委員等
  - 国際ジャーナル編集委員：World Wide Web Journal
  - 国際会議運営委員：Vice Chair of KJDB Working Group, IEEE Bigcomp 2019 共同プログラム委員長, DASFAA Steering Committee Member Emeritus
  - 国際会議プログラム委員：AAAI2018
- 国内委員等
  - 日本学術会議連携会員
  - (独) 科学技術振興機構・戦略的創造研究推進事業「ビッグデータ統合利活用のための次世代基盤技術の創出・体系化」領域アドバイザー

天笠俊之教授

- 国際委員等
  - ACM SIGMOD 日本支部 副支部長
  - 国際会議プログラム委員：SCI-2017, DaWaK2017, IDEAS2017, DEMoC-2017, FAB2017, WISE2017, iiWAS2017
- 国内委員等
  - 第 10 回 Web とデータベースに関するフォーラム (WebDB フォーラム 2017) 副実行委員長

塩川浩昭助教

- 国際委員等
  - 国際ジャーナル編集委員：IEICE Transactions on Information and Systems
  - 国際会議プログラム委員：IJCAI2018, PAKDD2018, ICSC2018
- 国内委員等

- 電子情報通信学会 データ工学研究会(DE), 幹事補佐, 会計幹事 (兼任)
- 第 10 回 Web とデータベースに関する (WebDB Forum 2017), Web 担当幹事
- 第 10 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2018), 財務委員長
- 日本データベース学会 電子広報委員会編集委員

## 11. その他

該当なし

## VIII-2. 計算メディア分野

### 1. メンバー

教授	亀田 能成
准教授	北原 格
助教	宍戸 英彦
学生	大学院生 15 名、学類生 5 名、研究生 2 名

### 2. 概要

当グループが属する計算情報学研究部門は、「中長期的観点から計算科学の研究を抜本的に発展させる斬新な方法の開拓研究を行う部門」として、2004 年度に発足した部門である。人間社会とその環境を主な対象とする新しい計算科学の枠組みを創成し、その基盤を確立することを目標として研究活動を推進している。

純粋なデータ処理の効率や速度が求められる通常のスーパーコンピュータ分野とは違い、人間に纏わる情報を処理対象とする計算科学では、情報処理の時間軸を人間に合わせることに必須である。そのために、グローバルに広がる人間社会とそれを取り巻く環境（生活空間や都市環境など）を対象とした研究を進めている。それによって得られる実観測データとシミュレーション結果とを融合させた情報を、人間に分かり易い形で提示し人間社会へフィードバックするために、計算メディアを仲立ちとするコンピューテーションの新しい枠組みを提案している。

具体的な取り組みとしては、“実世界の情報をセンシングする機能”、“多様な情報を処理する潤沢な計算機能”、“情報を選択・蓄積する大規模データベース機能”を、コンピュータネットワーク上で融合することにより大規模知能情報メディアをバックボーンとして実現していく。これを総称して実世界計算情報学と呼んでいる。そのバックボーン上で、先端的要素技術の研究開発と、ニーズに密着した応用システムの研究開発を並行して進めている。

現在本分野では下記に上げられるような研究プロジェクトを推進している。

- 科研費・基盤 (B) 「経路撮影に基づく歩行者・パーソナルモビリティナビゲーション基盤の構築」代表者：亀田能成
  - 研究成果の詳細は 3.の「視覚障がい者の屋外歩行支援に向けた事前撮影映像に基づく位置推定」を参照.
- JST 戦略的創造研究推進事業 (社会技術研究開発) 「多世代視覚障害者移動支援システムにおける画像技術の社会実装」代表者：産総研 関喜一 (研究担当者：亀田)

- 研究成果の詳細は 3.の「視覚障がい者の屋外歩行支援に向けた事前撮影映像に基づく位置推定」を参照. 元から掲げていた研究成果をほぼ挙げることに成功し, 11月に研究プロジェクトが終了した. 11月には兵庫県の岡本商店街にて実証実験を実施し, 我々の研究成果である事前記録撮影に基づく音声ナビゲーションや, 前方の安全確認を自動的に行って利用者に伝えるシステムの性能確認をした.
- 科研費・基盤研究 (A) 「体工連携によるスポーツ科学イノベーション」 (2015-2018 年度) 代表者: 高木英樹 (研究分担者: 亀田)
  - 競泳における位置推定手法の改良により, 選手の頭部位置推定だけでなく, ストローク数の分析が可能になる手法を研究開発した. また, サッカーにおける試合状況の理解を測るための新しい評価尺度を研究開発した.
- 科研費・基盤 (B) 「不特定人称視点映像を用いたコミュニケーション型教示映像メディア」代表者: 北原格
  - 研究成果の詳細は 3.の「フレーム補間処理を用いた非同期多視点映像の滑らかな切り換え手法」と「画像再構成処理を用いた疑似ドリーイン映像の生成手法」参照.
- 共同研究・2501 株式会社「多視点映像処理に基づく次世代映像メディアに関する研究開発」代表者: 北原格
- 学術指導 2501 株式会社「自由視点映像撮影・生成システムの実証実験における学術的知見・実践経験を活かした学術指導」 (北原)
  - 大規模空間における自由視点映像生成・提示技術をサッカー天皇杯 (1 回戦～決勝戦) と高円宮杯チャンピオンシップを撮影対象とした実証実験に適用し, オンサイト自由視点リプレイ提示の実現に成功した.
- JST CREST 研究領域「人間と調和した創造的協働を実現する知的情報処理システムの構築」研究総括: ATR 萩田紀博、「Cyborg Crowd: 柔軟でスケーラブルな人と機械の知力集約」代表: 森嶋厚行 (研究分担者: 北原)
  - 研究成果の詳細は 3.の「クラウドソーシングと 3次元復元技術による世界遺産の予防的保存」を参照
- JST CREST 研究領域「人間と調和した創造的協働を実現する知的情報処理システムの構築」研究総括: ATR 萩田紀博、「ソーシャル・イメージング: 創造的活動促進と社会性形成支援」代表: 鈴木健嗣 (研究分担者: 北原)
  - 発達障害児 (ASD) の教育支援への多視点映像提示方式の導入に関する研究に取り組んだ。現場のセラピストや保護者にとって使いやすいインタフェースの検討や、作業空間の様々な位置・角度からの観察を可能とする映像生成方式に関する研究に取り組んだ。

- 科研費・基盤研究 (A) 「強震動と液状化の複合作用を受けるライフラインネットワークの被害推定システムの開発」 (2016-2019 年度) 代表者: 庄司学 (研究分担者: 北原)
  - 被災地の強震動と液状化の複合作用を受けたライフラインネットワークの AR 提示システムを目的とした全方位映像情報を用いた VR 空間を実現した。
- 科研費・基盤研究 (B) 「アンコール遺跡群における予防的保存に資する劣化・変形・環境観測システムの構築」 (2016-2019 年度) 代表者: 川村洋平 (研究分担者: 北原)
  - アンコール遺跡群における予防的保存を目的に、多数のユーザから映像情報を募る収集型クラウドソーシングと、多数のユーザによる 3 次元物体状況認識を行う判定型クラウドソーシングを 3 次元情報復元処理で橋渡しするプラットフォーム構築を実現した。
- 科研費・若手研究 (B) 「人工知能を活用したスポーツ選手映像における関節位置の可視化」 (宍戸)
  - 研究成果の詳細は 3. の「疎に配置した多視点カメラのキャリブレーション手法」参照。
- JSPS CREST AIP チャレンジ「疎に配置した多視点カメラ映像における 3 次元骨格位置の推定手法」 (宍戸)
  - 疎に配置した多視点カメラのキャリブレーション手法を利用してバドミントン選手の 3 次元骨格位置の推定精度を検証した。また、バドミントン競技に適用するためのカメラ配置, 撮影方式を検証した。トップアスリーの撮影実験を実施し, 提案手法の有効性を確認した。

### 3. 研究成果

#### 【1】 歩行支援に向けた歩行可能領域の検出と音による提示 (亀田)

##### 研究の概要

視覚障がい者は、単独での歩行時、白杖を携帯することを義務付けられている。白杖は、直接接触させることで、障害物や段差等の有無を直感的に判断することができ、前方の安全確認の役割を担っている。しかし、白杖の検出可能な範囲は 1, 2 歩先までと狭い。そのため、それよりも遠くにある障害物や段差を検出することができない。また、路面上の窪みや排水溝などの穴の検出には、白杖は向いていないとされる。視覚障がい者でこうした穴を不安に思う人もいる[1]。こうした背景から、より広範囲に障害物や段差を検出し、視覚障がい者に提示する方法が望まれている。

本研究では、白杖と併用し、白杖よりも広範囲に、携帯可能で、屋内外において実時間で前方の安全確認を行い、その結果を音で提示するシステムを提案する。提案システムの使用で、視覚障がい者がより安心して、安全な単独歩行ができることを目標とする。

白杖の検出範囲は、約 1m であることから、提案システムは、これよりも広範囲での検出を行う。また提案システムは、白杖と併用できつつ、前方の安全確認を行える。安全確認の結果は、音で視覚障がい者に提示する。視覚障がい者は単独歩行時、環境音から周囲の状況を把握する必要があるため、これを阻害することなく提示する。そのために、骨伝導イヤフォンを用いて、周囲の環境音と重ならないようにピープ音を提示する。

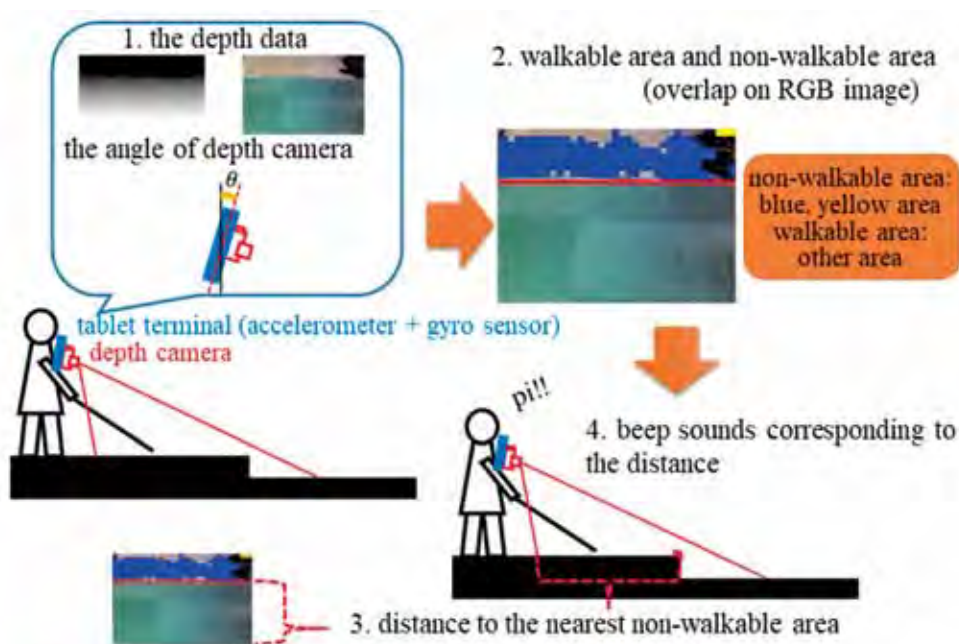


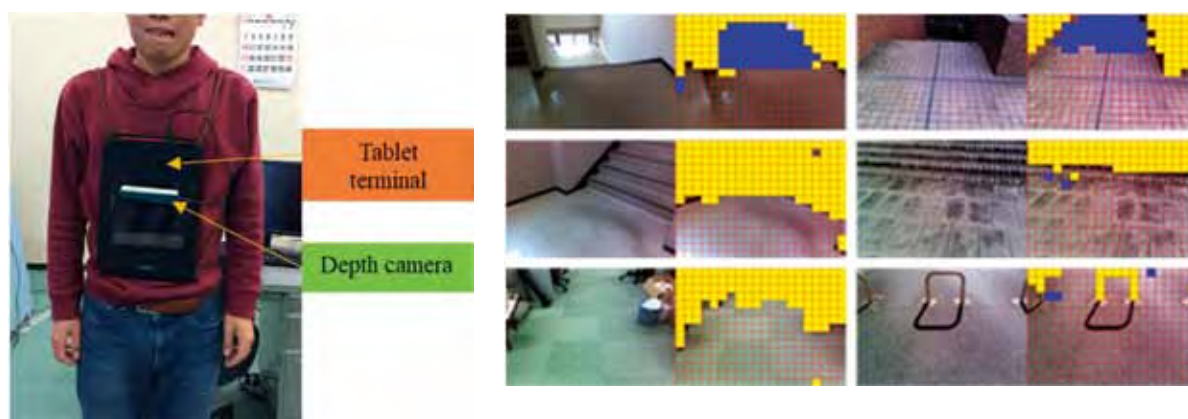
図 3-1-1 システム概要

本研究で使用するデバイスは、深度カメラと加速度センサー、ジャイロセンサーが内蔵されているタブレット端末である。本研究で用いる深度カメラは屋内外で使用可能な Intel 社の R-200、タブレット端末は Microsoft 社の Surface Pro 4 である。深度カメラ R-200 で深度画像を取得し、その深度画像を用いて、前方の安全確認を行う。R-200 が安定して深度画像を取得可能な範囲は前方約 3.3m 先までであることから、そこまでの安全確認ができることになる。本研究では、深度カメラと加速度センサー、ジャイロセンサーが内蔵されているタブレット端末を用いて、白杖よりも広範囲に歩行可能領域と非歩行可能領域を検出し、音により提示する方法を提案する。本研究における歩行可能領域とは、路面上の凹凸約 5cm 未満の緩い傾斜を含む水平面と定義する。障害物や段差等の歩行可能領域以外の領域を非歩行可能領域とする。深度カメラで深度画像を取得し、タブレット端末内の加速度センサーとジャイロセンサーで、タブレット端末の重力方向からの傾きを算出する。これら 2 つのセンサーを組み合わせることで、



前方約 3.3m 先までの歩行可能領域と非歩行可能領域を検出する。視覚障がい者から最も近い非歩行可能領域までの距離に応じたビープ音を提示する。提案システムを歩行中に携帯することにより、視覚障がい者は白杖の使用のみより安心して、安全な単独歩行ができるようになる。図 3-1-1 に提案手法の仕組みを簡単に示す。

実証実験結果



非歩行可能領域までの距離 d(m)	ビープ音周波数(Hz)	ビープ音間隔(ms)
$0 \leq d < 0.75$	1000	200
$0.75 \leq d < 1.50$	3000	300
$1.50 \leq d < 2.50$	5000	400
$2.50 \leq d < 3.30$	8000	500

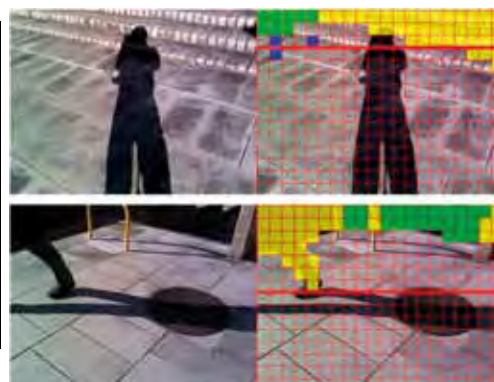


図 3-1-2 実験結果

提案手法を実際にシステムとして構築し、歩行可能領域が推定できることを確認した。図 3-1-2 上左はシステム装着の様子を示す。図 3-1-2 上右は、実行の様子を示す 6 組のサンプルであり、それぞれ左は可視光カメラでのシーンの撮影（この画像自身は処理には一切用いていない）と、それに重畳させた推定結果である。黄色は路面より上に出ていることを、青色は路面より下にくぼんでいることを、緑色は測定可能レンジ外であることを示している。このうち、利用者が一番近い歩行可能領域の端を推定して、そこまでの距離を求め（図 3-1-2 下右の赤太線）、それをビープ音の高さと間隔（図 3-1-2 左下の表）で提示する方法を提案した。実装したシステムを被験者に利用してもらい、評価実験を行った結果について、今後成果として発表していく予定である。

[1] 永松義博, “視覚障害者の外出行動における歩行行動特性に関する研究”, 造園雑誌, Vol.46, No.5, pp.77-80, 1982.

## 【2】 視覚障がい者の屋外歩行支援に向けた事前撮影映像に基づく位置推定 (亀田)

### 研究の概要

視覚障がい者にとってナビゲーションシステムは単独外出の有用な支援となる。普及しつつあるナビゲーションシステムの多くは健常者を対象としているため、視覚障がい者の利用に適しているとは言い難い。視覚障がい者の外出を支援する方法として、介助者による同行援助や盲導犬が挙げられる。同行援護は人員や財源などの制約から、通勤及び営業活動等の経済活動に係る外出や、通年かつ長期に渡る外出及び社会通念上適当でない外出は対象外とされている。盲導犬についても同様の制約により、絶対数が足りていない問題がある。視覚障がい者の単独外出を支援するシステムが望まれている。

視覚障がい者の利用に適したナビゲーションシステムの実現には、使用者である視覚障がい者の外出特性を考慮する必要がある。視覚障がい者が外出する際には、事前に計画された経路に沿った「認知地図」を元に移動する。認知地図とは環境音や白杖で触知した特徴などの情報を、空間での位置関係として記憶したものである。視覚障がい者は、外出時には聴覚や触覚の情報を手掛かりに、認知地図上での自分の位置と目的地までの経路を推定しながら歩行する。

ナビゲーションシステムに必要な要素として、位置推定手法及び誘導手法が挙げられる。視覚障がい者一人一人が望む経路でナビゲーションを行うためには、あらゆる経路に適用可能な位置推定手法が不可欠である。屋内外を問わず利用可能で、インフラの整備やネットワークの接続を必要とせず、スタンドアロンで動作する必要がある。これらの条件を満たす位置推定手法として、単眼カメラのみを用いた類似画像検索による手法を適用する。ナビゲーションシステムの誘導手法として、視覚情報を利用できない視覚障がい者は、音声通知のみによって導く必要がある。あらかじめ経路上の位置毎に音声を登録し、推定位置に応じた音声を再生することで情報を通知する。

本研究では、単眼カメラのみを用いた位置推定手法を拡張し、より高精度かつ頑健性の高い位置推定を実現する。また、認知地図と環境音を利用した移動に適した音声通知として、三次元音響提示手法を用いたナビゲーションシステムを提案する。

まず、単眼カメラのみを用いた類似画像検索による位置推定手法を簡単に説明する。経路上の同じ地点で撮影された画像は、見た目が類似するという性質を利用して位置推定を行う。計画された経路に沿って事前に映像を撮影するだけで、あらゆる経路に適用できる。画像処理や移動支援についての特別な知識を有さない者でも支援が可能である。類似画像検索には局所特徴量のマッチング数による、一般的な画像認識手法を用いる。画像から検出される局

所特徴量を増加させ、誤マッチングをフィルタリングにより棄却することで、より高精度な位置推定を実現する。また、時間帯や天候などの撮影環境が異なると、照明条件の変動により位置推定精度が低下する問題を解決する。複数の異なる環境下で撮影された経路映像を利用し、撮影環境の変化に頑健な位置推定を実現する。

環境音から自己位置を推定するためには、認知地図上での音源位置と自己位置の相対的な位置関係を判断する必要がある。音源位置の認識が可能な三次元音響提示手法を用いたナビゲーション情報の通知は、視覚障がい者の外出特性に適していると考えられる。視覚障がい者が外出時に得たい情報として、経路情報、位置情報、方向情報が求められている。これらの情報を視覚障がい者と認知地図の相対的な関係に応じた方向から再生するため、視覚障がい者の進行方向を推定する。モバイルデバイスに搭載されているセンサと画像情報を利用した進行方向推定手法を提案する。推定された進行方向に応じて異なる方向から音声を提示するナビゲーションシステムを実装し、被験者実験により有効性を検証した。

### 実証実験結果

2017 年 11 月 25 日に兵庫県岡本商店街で実証実験を行った時の位置推定結果について示す。図 3-2-1 左は経路、図 3-2-1 右がその時の経路の様子である。



図 3-2-1 実証実験場の様子

10 時と 14 時に撮影した 2 本の経路事前撮影映像を統合して、提案手法を用いて位置推定を行ったところ、各映像を単独で用いるよりも推定能力が向上することが確認された。図 3-2-2 左のグラフにおいて、DB\_(HH)は、HH 時に撮影された映像を利用して位置推定した結果を表し、DB\_(10+(14))は、10 時の映像をベースに 14 時の映像を統合した結果である。Q\_(10/26-KK)は、別の日の KK 時に撮った映像を歩行時の映像入力として位置推定を行ったときの結果を示している。縦軸のレスポンスレートとは、問合せ回数に対して有効回答数の比率を表しており、高いほどよい結果と言える。いずれの時間帯に外出しても、本提案手法が最もよい結果を出すことがわかる。

この位置推定手法をもとに、骨電動ヘッドフォンを用いて、経路情報・位置情報・方向情報を音声によって視覚障がい者に経路誘導を行う手法を実装した。システム装着の様子は図 3-2-2 右を参照されたい。岡本商店街の経路において、実際に視覚障がい者の誘導に成功した。このときに主観評価なども得ているので、今後成果発表を行っていく予定である。

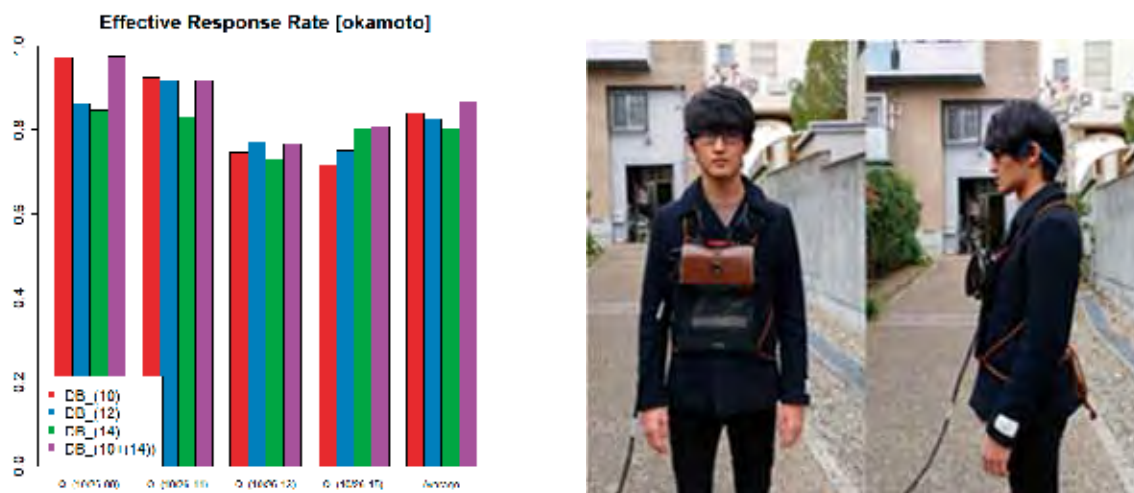


図 3-2-2 実験結果

### 【3】 疎に配置した多視点カメラのキャリブレーション手法（宍戸、北原）

#### 研究の概要

3次元追跡や3次元形状復元など多視点画像を用いた研究開発が盛んに行われている。特に大規模空間における被写体の3次元位置推定の研究は、多様なシーンを対象とした研究が進められている。これらの処理で必要となる3次元空間と2次元画像空間の射影関係を求めるためには、撮影カメラのパラメータが必要である。基本的なカメラキャリブレーション処理は、空間中に3次元位置が既知なランドマークを設置し、その観測位置との対応関係から射影変換行列を推定する強校正である。しかし、大規模空間に適用する場合、ランドマークの設置作業の手間が問題となる。一方、ランドマークを必要としない方法として弱校正がある。多視点画像間の対応情報からカメラ間の相対的な位置姿勢情報や内部パラメータを推定することが可能である。しかし、カメラが疎に配置されている場合、十分な対応点が得られず射影関係の推定精度が低下するという問題が存在する。我々が適用対象と考えている体育館などの大規模空間では、密にカメラを配置することが難しい場合が多く、疎に配置したカメラを高精度でキャリブレーションする手法の実現が望まれている。

本研究では、モバイルカメラで移動しながら撮影した映像と疎に配置したカメラの画像を統合することにより、密な多視点画像群を構築し弱校正の推定精度向上を実現する。

図 3-3-1 (a) に示すように、疎に配置した固定カメラによって複数視点画像を撮影する。同時に、固定カメラの間を固定カメラと同じ方向を向いた状態でモバイルカメラを移動させながらビデオを撮影する。ビデオをフレームに分割した補完画像と疎な多視点画像により、固定カメラを含む密な多視点画像群を獲得する。それらの画像群に対して弱校正を適用することにより、全ての多視点画像の射影変換行列を推定する。推定した射影変換行列から、疎な多視点画像に対応するものを抜き出すことにより、ランドマークを設置することなく疎に配置した固定カメラの高精度なカメラキャリブレーションを実現する。なお、推定精度を高めるためには、十分な対応点が検出される必要があることから、撮影空間中に対応点が十分に取れる程の画像特徴が存在することを提案手法適用の前提条件とする。また、弱校正はスケール不変であるため、大きさが既知の物体が撮影空間中に存在しているとする。図 3-3-1 (b) に示すように、弱校正座標系は、観測される対応点の分布に基づいて座標系が設定されるため、撮影毎に原点や各軸の方向が変化してしまう。異なる撮影データにおいて統一的な計測を実現するために、撮影空間の世界座標系を設定し、弱校正座標系から世界座標系へ変換する。

我々は、本手法の応用事例の一つとしてバドミントン選手の姿勢推定を検討している。撮影画像中での被写体の姿勢推定には Convolutional Neural Network (CNN : 深層学習) を利用した人物の骨格位置推定手法[1]を利用する。撮影した多視点カメラ画像に Convolutional Pose Machines [1]を適用した結果と、2 視点で撮影した画像から検出した骨格情報から 3 次元骨格位置を推定した結果を図 3-3-2 に示す。この際ステレオ処理に利用する射影変換行列は本提案手法を用いて推定したものである。図 3-3-2 より、良好に 3 次元骨格位置が推定されていることが確認できる。

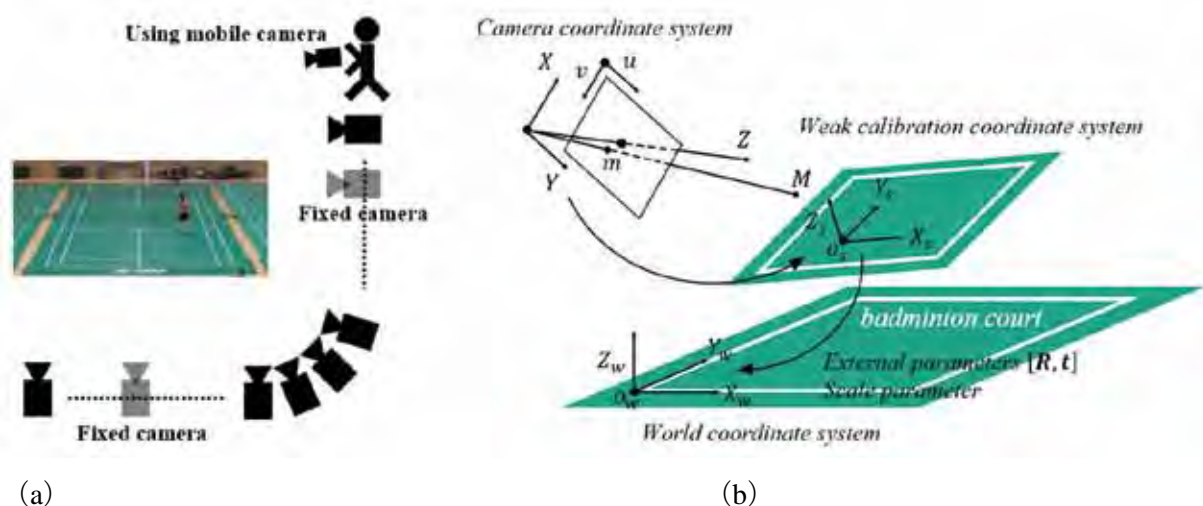


図 3-3-1 (a) 提案手法による撮影方式、(b) カメラ座標系、弱校正座標系、世界座標系の幾何学的関係

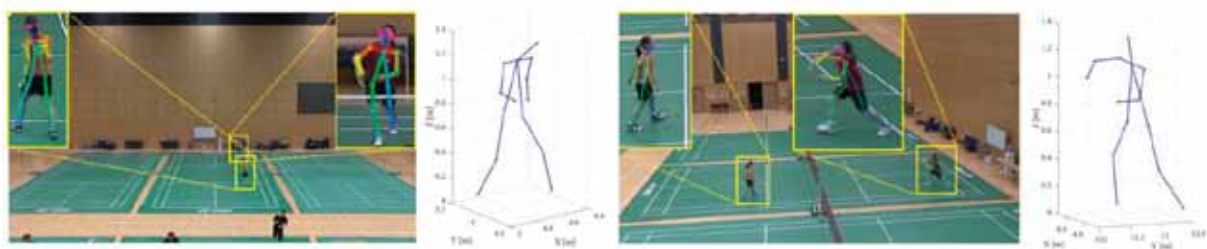


図 3-3-2 撮影画像に Convolutional Pose Machines [1]を適用して検出した 2 次元骨格情報とそこから推定される 3 次元骨格

- [1] Shih-En Wei, Varun Ramakrishna, Takeo Kanade and Yaser Sheikh, “Convolutional Pose Machines,” Proc. The IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR) , pp. 4724-4732, 2016.

**【4】 クラウドソーシングと 3 次元復元技術による世界遺産の予防的保存（宍戸、北原）**  
**研究の概要**

アンコール遺跡群に訪れる観光客は年間百万人を超える。多くの観光客が訪れるゆえに、観光客の移動によって発生する振動が建物の外観劣化に与える影響は大きな問題の一つである。また、遺跡の石材表面には、蘚苔類などの様々な生物が付着し、遺跡を劣化させる要因の一つとなっている。我々は、クラウドソーシングと 3 次元復元技術を利用したアンコール遺跡群の予防的保存プロジェクトに取り組んでいる。世界文化遺産であるアンコールトム・バイヨン寺院の予防的保存活動として、損傷個所の判定及び、損傷状態の可視化を目的とした研究開発について紹介する。



図 3-4-1 アンコール遺跡群の予防的保存活動の流れ

クラウドソーシングと 3 次元復元技術を活用したアンコール遺跡群の予防的保存活動計画の流れを、図 3-4-1 を用いて説明する。

1. 多視点映像撮影：対象物体（遺跡）を様々な角度から観測した多視点映像を撮影する。初期の撮影画像群は、あらかじめ手動で取得する。
2. 3 次元復元：撮影した遺跡の多視点画像群から被写体の 3 次元モデルを生成する。撮影画像群に **Structure from Motion (SfM)** を適用することで、遺跡の 3 次元形状を復元する。SfM は、画像間の対応点を探索することで、カメラの位置・姿勢と疎な点群を生成し、再投影誤差を最小化し、密な点群を生成する技術である。適用後、不要な点群を削除し、表面モデルを張り付けることで表面情報を有する 3 次元モデルを完成する。
3. 損傷個所予測：考古学者の見解や振動センサを活用し、損傷個所の判別を行う。クラウドソーシング処理のタスク生成に専門家の見解や振動センサ情報を活用し、処理効率を上げる。
4. クラウドソーシング：3.の予測結果に基づき損傷が必要な地点の撮影をインターネットでつながる不特定多数のクラウドワーカー（本システムでは情報端末を携帯した観光客を想定している）に依頼する。撮影画像が多様である程、高精度な 3 次元モデル生成が可能となるため、より多くのクラウドワーカーの協力を得る工夫が必要となる。
5. クラウドワーカーによる撮影：ワーカーは損傷個所の撮影を行う。撮影機器は携帯端末に搭載されたカメラなどの民生品を用いることが可能である。損傷個所に対して多様な角度からの撮影を指示し、網羅的な観測を実現する。
6. 3 次元再復元：5.で撮影された損傷個所の多視点画像群を用いて、被写体の 3 次元モデルを再構築する。対象とした画像の存在有無を調べ、エラー画像の除外処理を行う。損傷状態の可視化処理などの結果を専門家にフィードバックする。

上述した流れを繰り返すことで、対象とする世界遺産の損傷個所の判別及び損傷状態の可視化を実現し、予防的保存活動を実現する。

本研究では、アンコールトム・バイヨン寺院の支柱の損傷状態の可視化として、撮影タイミングの異なる画像の重畳手法を提案する。現在、表面に掘られたレリーフなどの形状劣化の要因調査として、遺跡と同じ材質の石に様々な薬剤を塗布し、目視確認作業によって蘚苔類の繁殖経過の観察を行っているが、撮影タイミングの異なる画像を重畳することによって、詳細な繁殖経過の観察だけでなく分析までもが期待できる。しかし、パノラマ画像生成手法や、多視点画像群を用いた 3 次元モデルは平均的な情報にまとめられることから、パノラマ画像やレンダリング画像は低解像度となり、繁殖経過の観察や分析に役立つ解像度とはならない問題がある。また撮影タイミングの異なる画像の対応点情報からホモグラフィ変換を施し、画像を重畳するとズレが生じる。これは、実写画像 2 枚の撮影位置はほぼ同じであったとしても、日照や 3 次元的な見え方の変化の影響を受けた特徴点の誤対応が要因である。そ

ここで、本研究では、撮影タイミングの異なる画像の重畳における特徴点の誤対応の問題を、複数の撮影画像と撮影画像に対応した被写体の 3 次元モデルのレンダリング画像を用いることで解決を図る。

はじめに、同じ被写体に対して日時の異なる撮影を実施する。この場合、撮影画像の位置はほぼ同じとする。次に、あらかじめ用意した様々な角度から被写体を撮影した画像群と、日時の異なる複数の撮影画像を含めた画像群に Structure from Motion (SfM) を適用することで、被写体の 3 次元モデルを生成し、テクスチャを張り付けた 3 次元モデルを生成する。生成した 3 次元モデルに多視点カメラの位置姿勢情報を取得し、取得した位置と同じ位置にバーチャルカメラを設置する。設置したバーチャルカメラへ 3 次元モデルをレンダリングする。例えば、撮影画像が 2 枚の場合、実写画像は 2 枚に対して、バーチャルカメラにレンダリングされた画像 2 枚が生成される。この 4 枚の画像を用いて撮影タイミングの異なる画像を重畳する。実写画像 1, 2 とバーチャルカメラへレンダリングされた画像 1, 2 のそれぞれの画像特徴量を算出し正対応ペアを求める。求めた正対応情報より、ホモグラフィ変換を施すことにより、実写画像 1 は、バーチャルカメラのレンダリング画像 1 へホモグラフィ変換できる。同様に、実写画像 2 は、バーチャルカメラのレンダリング画像 2 へホモグラフィ変換できる。同様に、バーチャルカメラのレンダリング画像 1 へホモグラフィ変換した画像は、バーチャルカメラのレンダリング画像 2 へホモグラフィ変換できる。以上の処理により、実写画像の変換画像は、バーチャルカメラのレンダリング画像 2 上へ重畳できる。図 3-4-2 に示すように、2 枚の入力画像と提案手法による出力結果を比較すると、違和感なく入力画像が重畳されていることがわかる。このように提案手法は、異なるカメラ位置や異なる日照条件による画像の重畳処理に有効であることが分かった。



図 3-4-2 左：入力画像 1（2016 年 12 月撮影），中央：提案手法による出力結果，右：入力画像 2（2017 年 8 月撮影）



## 【5】 フレーム補間処理を用いた非同期多視点映像の滑らかな切り換え手法（北原、戸）

### 研究の概要

近年、被写体を様々な角度から撮影する多視点映像を用いた自由視点映像技術の研究が盛んに行われている。自由視点映像では映像閲覧者が見たい位置から被写体を観察することが可能であり、従来の単眼カメラを用いて撮影された映像と比べ、被写体の状態や距離感のような空間的認識がしやすいという特長を有するため、映画などの映像産業やスポーツ科学などの応用分野で注目が集まりつつある。

本研究では、自由視点映像技術のなかでも、より高品質映像が提示可能であるバレットタイム映像を取り扱っている。バレットタイム映像は、様々な視点から撮影した映像をカメラの位置関係に従って順番に切り換えながら提示することで視点移動感を与えることができる。しかしサッカースタジアムのような大規模空間において多視点映像を撮影する場合、全てのカメラを同期しながら撮影するには膨大な労力と機材が必要となる。そして、高速で移動する被写体を撮影した非同期多視点映像を用いて生成したバレットタイム映像では、視点切り換えの際に同期ズレの影響によって被写体の観測位置が画像上でブレたようになり、観察者に違和感を与える一因となる。

本研究では非同期多視点映像から生成されたバレットタイム映像中で観察されるブレを、フレーム補間処理を用いて低減することにより、滑らかな視点切り換え映像の生成法を提案する。

提案手法は主に二つの処理によって構成される。一つ目は、各視点においてフレーム補間処理を用いて連続する前後フレーム間に複数枚の補間画像を生成する処理である。はじめに初期補間画像に見え方の手がかりとして、入力画像間で被写体の対応情報を一組だけ与える。与えられた対応情報からモーショントラッキングが生じたような画像を作成する。これにより、初期補間画像において観測されるべき画像中心付近に、被写体の見え方の手がかりを与えることができる。モーショントラッキングを付与した初期補間画像から生成された補間画像は、モーショントラッキング上の全体にサッカーボールの情報が生成される問題が残る。そこで内挿距離に応じて被写体と背景のブレンド比率をこちらの正規分布を用いて決定する。以上の処理により、図 3-5-1 左に示すように、各多視点カメラにおいて連続する前後フレーム間で高速で移動する被写体に対してフレーム補間処理を行う際、被写体間に手がかりとなる情報を、正規分布に基づき重み付けした初期補間画像を用いることで、補間処理結果が向上したことを確認した。

二つ目は、生成された補間画像のうち、被写体の観測位置の変化の少ない画像を選択することで切り換え時の違和感を低減したバレットタイム映像を生成する処理である。図 3-5-1 右に示すように、切り替え画像の選択法として、まず多視点カメラの入力画像と補間画像の全

てにおいて，被写体の画像上での観測座標を取得する．取得した観測座標から算出される二つのベクトルのなす角は，小さいほど 3 点の座標が一定の曲線状に存在する．従って，評価値が小さいほど被写体の観測位置の変化が小さく，滑らかな画像切り換えになることから，評価値の最小のものを切り替え画像として採用する．このように，視点移動時の被写体の観測位置の変化が最も小さくなるような補間画像を選択することにより，滑らかな視点切り換えのバレットタイム映像を生成することが可能となった．図 3-5-2 左は撮影した多視点画像の切り換えによるバレットタイム映像，図 3-5-2 中央は従来手法を適用した処理結果を示し，図 3-5-2 右は提案手法を適用した処理結果を示す．画像を切り換える際，従来手法では観測位置（サッカーボール）の軌跡が大きくブレているが，提案手法ではそれが解消されていることがわかる．3 点の観測座標から求めた角度の合計を最小にすることで，全ての観測座標が統一感のあるものになり，より滑らかな切り換えが実現されていることがわかる．

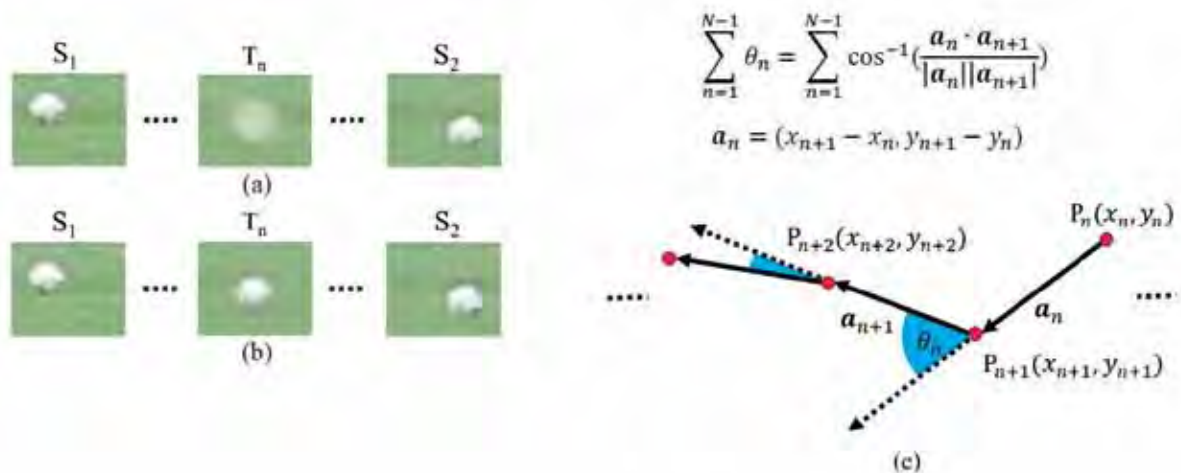


図 3-5-1 左：提案手法を適用した補間画像，右：切り換え画像選択手法



図 3-5-2 左：撮影した多視点画像の切り換えによるバレットタイム映像，中央：従来手法を適用した処理結果，右：提案手法を適用した処理結果

**【6】 画像再構成処理を用いた疑似ドリーイン映像の生成手法（北原、宍戸）****研究の概要**

本論文では、多視点映像に対して 3 次元復元処理に基づいた画像再構成処理を施すことで、運動視差の再現可能な疑似ドリーイン映像の生成手法を提案する。ドリーとは、ドリーと呼ばれる台車にカメラを載せ、レール上を走らせながら撮影を行う技法であり、台車を被写体に近づけながら撮影した映像がドリーイン映像である。ドリーインによって撮影された映像（以降、ドリーイン映像と呼ぶ）は、運動視差の再現が可能であり、その結果、視聴者に奥行きを知覚させ、高い没入感を与えることができる。しかし、屋外大規模空間におけるスポーツ競技を対象とする場合、選手が移動する範囲（フィールド）内に入り込んでの撮影は現実的ではなく、ドリーイン映像の撮影が困難である。本研究では、フィールドの外側に固定した複数台のカメラで撮影した多視点映像を用いてドリーイン映像と同等の視覚効果を生み出す映像生成の実現を目的としている。

多視点映像を解析することにより任意の視点からの見え方を再現する手法として、Image-Based Modeling and Rendering（IBMR）技術がある。被写体の 3 次元モデルを復元することで実際にはカメラを配置することが不可能な視点位置からの見え方を再現することができるため、3 次元モデルを撮影したドリーイン映像の生成も可能である。しかし、多視点カメラのキャリブレーション誤差や同期ズレ、照明条件の変化や日照変動などによる見え方の変化などの影響により、生成された 3 次元モデルには復元誤差が含まれることが多く、結果として、3 次元モデルを用いて生成されるドリーイン映像の品質が低下することが懸念される。

撮影映像の品質を維持しつつ視点移動感を再現可能な手法として、バレットタイムがある。バレットタイムは、等間隔に配置した複数台の固定カメラで撮影した多視点映像を、配置の順に連続的に切り替えることにより、視点を移動しているような視覚効果を再現する手法である。視点移動方向は、カメラを配置した方向に限定されるという問題が存在したが、被写体（注目物体）の 3 次元位置を推定することにより、デジタルズームをした状態でのバレットタイム映像生成を実現し、疑似的にはあるが、前後方向の視点移動を可能とした。これにより、屋外大規模空間などで被写体と離れた場所から撮影を行った場合でも、細部の情報まで観察することが可能となった。しかし、デジタルズームにより生成された画像は、被写体の観測サイズは変化するものの、実際にカメラを前後に移動した時の見え方の変化（運動視差）が再現されないため、実際に撮影空間に入りこんでいくような没入感のある見え方は再現困難である。

本研究では、複数台の固定カメラから撮影した多視点映像に 3 次元情報の復元処理と画像再構成処理を適用することで疑似的なドリーイン映像を生成する手法を提案する。はじめに、屋外大規模空間において複数の固定カメラを用いて多視点映像を撮影する。多視点映像の対応点情報から多視点カメラのキャリブレーション及び 3 次元点群の生成を行い、3 次元モデ

ルを復元する。復元した 3 次元モデルの空間内において、多視点カメラ中のある 1 台をドリーインし（以降このカメラをドリーインカメラと呼ぶ）、その位置姿勢を推定する。多視点映像で観測されている 3 次元点群を 3 次元モデルから抽出し、その点群をドリーインカメラで撮影する映像上に投影することでドリーインカメラのデプスマップを生成する。生成したデプスマップを用いて多視点映像を変換することによりドリーインカメラから観測される見え方を再現する。デプス情報が欠落している領域は、見え方の再現が困難である。本手法では、再構成処理によって画像中から欠損領域と見え方が類似したパターンを検出し、それを使って穴埋め処理を行うことで、視覚的連続性を保った高品質な映像を生成する。

図 3-6-1 上段は、デジタルズーム映像、図 3-6-1 中段は、IBMR 映像、図 3-6-1 下段は、提案手法による疑似ドリーイン映像を示す。本シーケンスにおいて、提案手法を適用した場合、疑似ドリーイン映像が生成されていることが確認できる。

デジタルズーム映像と IBMR 映像を比較すると、デジタルズーム映像は、運動視差の再現が不可能であり、奥行きを把握することはできない（図 3-6-1※1）。一方で、IBMR 映像は、運動視差の再現が可能であり、奥行きが把握できる（図 3-6-1※2）。次に、IBMR 映像と提案手法による疑似ドリーイン映像を比較すると、提案手法による疑似ドリーイン映像は、IBMR 映像と同様に、運動視差の再現が可能であり、奥行きが把握できる（図 3-6-1※3）。次にデジタルズーム映像と IBMR 映像と提案手法による疑似ドリーイン映像の画像品質を比較すると、図 3-6-1 最下段に各手法の拡大図を示す。デジタルズーム映像と提案手法による疑似ドリーイン映像の選手の画像品質は同等に高品質であることが確認できる。一方で、IBMR 映像の選手の画像品質は、3 次元情報の復元精度に依存するため、画像品質が低い。従って、提案手法による疑似ドリーイン映像（図 3-6-1※3）は、デジタルズーム映像（図 3-6-1※1）のように画像品質が高い。また、IBMR 映像（図 3-6-1※2）のように、3 次元情報を基に運動視差が再現された画像であるため、空間内を移動しているような没入感を得ることに成功している。さらに、IBMR 映像（図 3-6-1※2）よりも、提案手法は、元の多視点画像の画素値をそのままマッピングし、欠損領域に対して再構成処理を施しているため、画像品質が保たれている。

以上の結果から、本手法により生成した画像は運動視差を再現することができ、デジタルズームよりも高い没入感を呈示できている。



図 3-6-1 上段：デジタルズーム映像，中段：IBMR 映像，下段：提案手法による疑似ドリイン映像，最下段：各手法の拡大図

#### 4. 教育

桑野 秀豪	博士（工学）	映像・音声認識・自然言語処理によるメタデータ生成の作業コスト削減に関する研究
今井 健太	修士（工学）	歩行支援に向けた歩行可能領域の深度カメラによる検出と音による提示
釜坂 一步	修士（工学）	歩行者ナビゲーションのための単眼カメラを用いた位置推定方式
北村 誠之	修士（工学）	発達教育支援に着目した多視点映像閲覧インターフェース
志村 直樹	修士（工学）	多視点映像を用いた不特定人称視点映像の閲覧方式

Rojas Ferrer Cesar Daniel	修士（工学）	READ-THE-GAME skill training with full body immersive VR（全身没入型 VR による試合を読む技術の習得）
積田 貴幸	修士（工学）	競泳プール映像における泳者情報分析

今井 美里	学士（工学）	VR スキーシミュレータにおける風と臨場感の関係
小河原 洗 貴	学士（工学）	事前歩行時の回転角速度に応じた歩行記録に基づく誘導インタフェース
小林 洗陽	学士（工学）	3次元被災状況マップ生成のためのクラウドソーシングプラットフォームの構築
竹内 音	学士（工学）	全方位バレットタイム映像の生成と提示
野原 直翔	学士（工学）	投球映像中のボール握りからの球種識別の検討

集中講義など

北原格，放送大学 面接授業，「専門科目：情報 体育・スポーツと映像情報処理」（日本体育大学 角田先生と共同開講）

## 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

### 受賞

1. The 2nd CREST Research Area Meeting 2017, Intelligent Information Processing Systems Creating Co-Experience Knowledge and Wisdom with Human-Machine Harmonious Collaboration, Best Poster Award - 1st Place, Hidehiko Shishido, “Proactive Preservation of World Heritage by Crowdsourcing and 3D Reconstruction Technology”, (2018/3/15)

### 外部資金

1. 科研費・基盤（B）「経路撮影に基づく歩行者・パーソナルモビリティナビゲーション基盤の構築」代表者：亀田能成 2017年度 468万円
2. JST 戦略的創造研究推進事業（社会技術研究開発）「多世代視覚障害者移動支援システムにおける画像技術の社会実装」代表者：産総研 関喜一（研究担当者：亀田）2017年度 143万円
3. 科研費・基盤研究（A）「体工連携によるスポーツ科学イノベーション」（2015-2018年度）代表者：高木英樹（研究分担者：亀田）2017年度 13万円。

4. 科研費・基盤 (B) 「不特定人称視点映像を用いたコミュニケーション型教示映像メディア」代表者：北原格 2017 年度 650 万円
5. 共同研究・2501 株式会社「多視点映像処理に基づく次世代映像メディアに関する研究開発」代表者：北原格 2017 年度 250 万円
6. 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）2017 年度 1200 万円
7. JST CREST 研究領域「人間と調和した創造的協働を実現する知的情報処理システムの構築」研究総括：ATR 萩田紀博、「ソーシャル・イメージング：創造的活動促進と社会性形成支援」代表：鈴木健嗣（研究分担者：北原）2017 年度 200 万円
8. 科研費・基盤研究 (A) 「強震動と液状化の複合作用を受けるライフラインネットワークの被害推定システムの開発」 (2016-2019 年度) 代表者：庄司学 (研究分担者：北原) 2017 年度 65 万円
9. 科研費・基盤研究 (B) 「アンコール遺跡群における予防的保存に資する劣化・変形・環境観測システムの構築」 (2016-2019 年度) 代表者：川村洋平 (研究分担者：北原) 2017 年度 10 万円
10. 学術指導 2501 株式会社「自由視点映像撮影・生成システムの実証実験における学術的知見・実践経験を活かした学術指導」 (北原) 2017 年度 50 万円
11. JSPS CREST AIP チャレンジ「疎に配置した多視点カメラ映像における 3 次元骨格位置の推定手法」 (宍戸) 2017 年度 100 万円
12. 科研費・若手研究 (B) 「人工知能を活用したスポーツ選手映像における関節位置の可視化」 (宍戸) 2017 年度 403 万円

## 知的財産権

(種別、氏名、課題名、年月日)

1. 特許、北原格・宍戸英彦、「画像処理装置、画像表示装置及び画像処理プログラム」、2017.9.25
2. 特許、北原格・宍戸英彦、「撮像システム、撮像方法」、2017.8.7

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

1. Takashi Kamiyama, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, and Itaru Kitahara, “Improvement of Badminton-Player Tracking Applying Image Pixel Compensation,” ITE transaction on Media technology and applications (2017/4)
2. 笹井 翔太, 亀田 能成, 大田 友一, 神原 誠之, 萩田 紀博, “自動走行車両搭乗者のストレス軽減を目的とした死角領域と車両制御情報の可視化”,日本バーチャルリアリティ学会論文誌 (2017/6)
3. Hidehiko Shishido, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, and Itaru Kitahara, “Visual Tracking Method of a Quick and Anomalously Moving Badminton Shuttlecock”, ITE Transactions on Media Technology and Applications (2017/7)
4. Issey Takahashi, Mika Oki, Baptiste Bourreau, Itaru Kitahara, Kenji Suzuki, “FUTUREGYM: A Gymnasium with Interactive Floor Projection for Children with Special Needs”, International Journal of Child-Computer Interaction (2017/12)

**B) 査読無し論文**

**(2) 国際会議発表**

**A) 招待講演**

該当なし

**B) 一般講演（査読有）**

1. Cesar Daniel Rojas Ferrer, Itaru Kitahara, and Yoshinari Kameda, “Read-The-Game Skill Evaluation by Analyzing Head Orientation in Immersive VR,” 2017 3DTV Conference 2017 (2017/6)
2. Hidehiko Shishido, Aoi Harazaki, Yoshinari Kameda, and Itaru Kitahara, “Smoothly Switching Method of Asynchronous Multi-View Videos Using Frame Interpolation,” 2017 3DTV Conference 2017 (2017/6)
3. Kenta Imai, Itaru Kitahara, and Yoshinari Kameda, “Detecting Walkable Plane Areas by Using RGB-D Camera and Accelerometer for Visually Impaired People,” 2017 3DTV Conference 2017 (2017/6)
4. Kazuho Kamasaka, Itaru Kitahara, and Yoshinari Kameda, “Image Based Location Estimation for Walking Out of Visual Impaired Person,” The 14th Association for the Advancement of Assistive Technology in Europe Conference 2017 (2017/9)
5. Hidehiko Shishido, Yamanaka Kazuki, Yoshinari Kameda, and Itaru Kitahara, "Pseudo-Dolly-In Video Generation Combining 3D Modeling and Image Reconstruction," ISMAR 2017



Workshop on 13th: Workshop on Highly Diverse Cameras and Displays for Mixed and Augmented Reality (HDCD4MAR2017), pp.327-333, (2017/10).

6. Hidehiko Shishido, Itaru Kitahara, "Calibration Method for Sparse Multi-view Cameras by Bridging with a Mobile Camera," International Conference on Image Processing Theory, Tools and Applications (IPTA2017), 6 pages, (2017/11).
7. Koyo Kobayashi, Hidehiko Shishido, Yoshinari Kameda, and Itaru Kitahara, "A Method to Generate Disaster-Damage Map by Using 3D Photometry and Crowd Sourcing," The First IEEE Workshop on Human-Machine Collaboration in BigData (HMData2017), pp.4397-4399, (2017/12)
8. Hidehiko Shishido, Yutaka Ito, Youhei Kawamura, Toshiya Matsui, Atsuyuki Morishima, Itaru Kitahara, "Proactive Preservation of World Heritage by Crowdsourcing and 3D Reconstruction Technology," The First IEEE Workshop on Human-Machine Collaboration in BigData (HMData2017), pp.4426-4428, (2017/12).
9. Chun Xie, Hidehiko Shishido, Yoshinari Kameda, and Itaru Kitahara, "A Calibration Method for Large-Scale Projection Based Floor Display System," poster, IEEE VR, (2018/3)

#### C) 一般講演 (査読無)

1. Yuta Nagumo, Itaru Kitahara, and Yoshinari Kameda, "Location Estimation from Pre-Recorded Video Taken by Omnidirectional Cameras," Asia-Pacific Workshop on Mixed and Augmented Reality (APMAR) 2017, 1 page, (2017/2)
2. Chun Xie, Kenji Suzuki, Yoshinari Kameda, and Itaru Kitahara, "An Automated Calibration Method for Large Scale Projector-Camera System," Asia-Pacific Workshop on Mixed and Augmented Reality (APMAR) 2017, 2017.2017/7/2-4, Beijing, China.

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

1. 北原格, 車載 AR 提示を用いた車両搭乗者の快適性の操作, 技術情報協会セミナー“ヘッドアップディスプレイの AR 表示技術と最適な設計方法”, 2017/5.
2. 北原格, 多視点映像メディア技術に基づいた研究開発事例の紹介, URCF 超臨場感映像 WG: 医工連携の最前線とその周辺技術, 2017.11
3. 北原格, PoTS スポーツ科学の創出, 第 3 回 PoTS 映像学シンポジウム～新しい映像学が切り拓く地平の展望と課題～, 2018/3

#### B) その他の発表

1. 今井 健太, 北原 格, 亀田 能成, RGB-D カメラと加速度センサを併用した歩行可能な平面領域の検出, 第 20 回画像の認識・理解シンポジウム (MIRU2017), 4 pages, 2017/7.
2. 志村 直樹, 亀田 能成, 北原 格, 撮影方向が異なる多視点映像の閲覧方式, 第 20 回画像の認識・理解シンポジウム (MIRU2017), 4 pages, 2017/8.
3. 宍戸 英彦, 北原 格, 疎に配置した多視点カメラのキャリブレーション手法, 第 20 回画像の認識・理解シンポジウム (MIRU2017), 4 pages, 2017/8.
4. 北村 誠之, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, 提示デバイスの位置姿勢情報を用いた多視点映像閲覧インタフェース, 日本バーチャルリアリティ学会第 22 回大会論文集, 1E1-06, 2017/9.
5. 竹内 音, 宍戸 英彦, 亀田 能成, キム ハンソン, 北原 格, 全方位カメラを用いたパレットタイム映像生成法, 日本バーチャルリアリティ学会第 22 回大会論文集, 1G1-01, 2017/9.
6. 小河原 洗貴, 北原 格, 亀田 能成, 事前撮影映像に基づく視覚障害者の歩行誘導インタフェースの検討, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.117, no.252, pp.1-5, 2017/10.
7. 関井 駿, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 飯塚 太郎, 上松 芳則, 北原 格, 単眼映像を用いたバドミントン選手の位置推定法, 映像情報メディア学会スポーツ情報処理研究会, ITE-ME2017-118, 2017/11.
8. 坂村 祐希, 富田 瑛智, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 原田 悦子, 北原 格, 疑似搭乗体験システムを用いた自動走行車両の速度感と安心感の調査, 第 15 回 ITS シンポジウム 2017, 2-C-01, 2017/12.
9. 謝 淳, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 鈴木 健嗣, 北原 格, 大規模 Projector-Camera システムに適したキャリブレーション手法, HCG シンポジウム 2017, 8 pages, 2017/12.
10. 志村 直樹, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 鈴木 健嗣, 北原 格, Xth Person View: 多人称視点を連続的に閲覧可能な観察システム, HCG シンポジウム 2017, 8 pages, 2017/12.
11. 釜坂 一步, 北原 格, 一刈 良介, 興梠 正克, 蔵田 武志, 亀田 能成, カメラベース位置推定手法への PDR の統合及び音声インタフェースの検討, HCG シンポジウム 2017, 5 pages, 2017/12.
12. 今井 健太, 北原 格, 亀田 能成, RGB-D カメラを用いた歩行安全領域の検出と提示方法の検討, HCG シンポジウム 2017, 5 pages, 2017.
13. 今井 美里, 北原 格, 亀田 能成, スキーシミュレータにおける臨場感と風の関係映像情報メディア学会スポーツ情報処理次元研究会 技術報告, 2018/2.

14. 野原 直翔, 北原 格, 亀田 能成, 投球映像中のボール握りの違いによる球種識別の検討, 映像情報メディア学会スポーツ情報処理次元研究会 技術報告, 2018/2.
15. 宍戸 英彦, 河崎 衣美, 伊藤 豊, 川村 洋平, 松井 敏也, 森嶋 厚行, 北原 格, クラウドソーシングと 3 次元復元技術による世界遺産の予防的保存, 電子情報通信学会技術研究報告 PRMU, vol.117, no.442, pp.77-82, 2018/2.
16. 南雲 悠太, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, 広視野画像と深度画像を利用した経路誘導のための性能評価, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.117, no.485, pp.5-9, 2018/3.
17. 積田 貴幸, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, 競泳プール映像における泳者位置とストローク数の推定, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.117, no.485, pp.11-16, 2018/3.
18. 小河原 洸貴, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, ステレオ音と振動提示による視覚障害者誘導インタフェース, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.117, no.485, pp.17-22, 2018/3.

#### (4) 著書、解説記事等

宍戸 英彦, ISMAR2017 ショート速報 [MR・AR], 一般財団法人光産業技術振興協会 国際会議速報 H29-No.33, 2017/10.

#### 7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

北原 格

イギリスのサリー大学との MoU 締結に主導的役割を果たした。

オーストラリアのカーティン大学との MoU 締結に主導的役割を果たした。

#### 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生委員会委員長

北原 格

筑波大学全学共通教育計算機システム WG 委員

システム情報工学研究科広報委員長

## 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・バーチャル環境基礎 研究専門委員会 委員長

電子情報通信学会 サイバーワールド 時限研究専門委員会 委員

北原 格

電子情報通信学会和文論文誌 D 編集幹事

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

日本バーチャルリアリティ学会 SIG-MR 研究会幹事

情報処理学会コンピュータビジョンとイメージメディア研究会 委員

## 11. その他

該当なし

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/>

