

Center for Computational Sciences,
University of Tsukuba
Annual Report FY2018



筑波大学 計算科学研究センター
平成 30 年度 年次報告書



筑波大学
University of Tsukuba



筑波大学

計算科学研究センター
Center for Computational Sciences

目次

まえがき	2
1 センター組織と構成員	4
2 平成 30 年度の活動状況	8
3 各研究部門の報告	15
I. 素粒子物理研究部門	15
II. 宇宙物理研究部門	40
III. 原子核物理研究部門	65
IV. 量子物性研究部門	83
V. 生命科学研究部門	110
V-1. 生命機能情報分野	110
V-2. 分子進化分野	125
VI. 地球環境研究部門	140
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	207
VIII-1. データ基盤分野	207
VIII-2. 計算メディア分野	229

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、2018 年に設立 27 年目に入り、次世代の計算科学と高性能コンピューティングの研究開発に向かってより一層の努力を続けることを改めて確認し、次の四半世紀の研究を着実に進めました。

本センターは、1992 年度に設置された計算物理学研究センターを前身とし、2004 年 4 月に改組・拡充されて設立されました。2010 年には、文部科学省共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」に認定され、「学際共同利用プログラム」によって、外部の研究者に計算機資源を提供し幅広く計算科学研究を支援する全国共同利用施設としての役割を果たしています。また、「研究集会開催支援」、「研究者招聘支援」、「共同研究旅費支援」、「短期雇用支援」など、共同研究における研究者や学生の交流を図るための支援も行っています。2018 年度にはさらに、これまで長期間の海外滞在のみを視野に入れていたのに対し、これをより柔軟かつ効果的に展開するために、センター独自のマンスリーサバティカル制度を開始し、数週間から数ヶ月単位でのサバティカルを奨励し、国際的な研究展開を強力に押し進める新たな試みを開始しました。さらに、こちらからの中期訪問だけでなく、先方からも同じような期間で海外のトップレベル研究者を招聘し、集中した共同研究を支援する中期招聘体制も整えました。

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

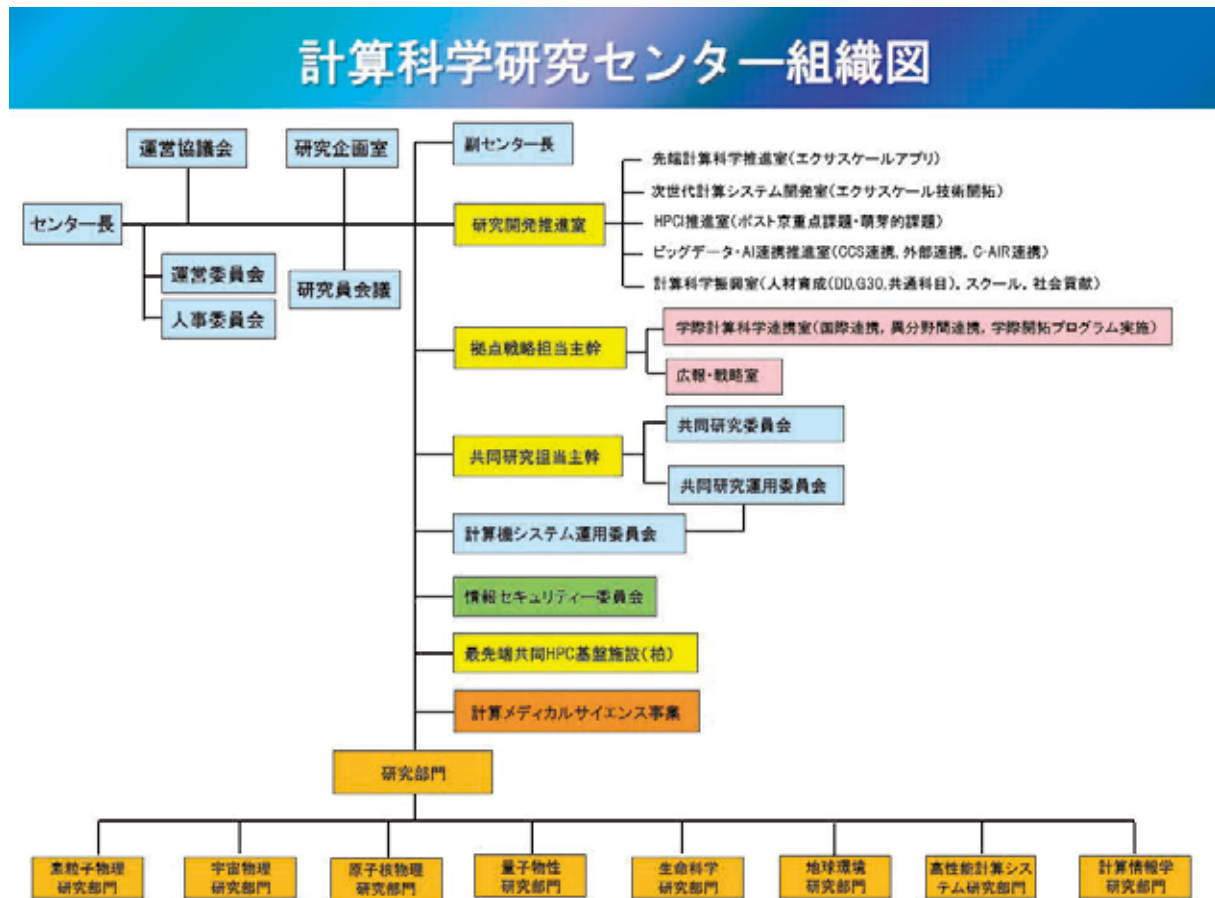
センターには、素粒子物理、宇宙物理、原子核物理、量子物性、生命科学、地球環境、高性能計算システム、計算情報学の 8 つの研究部門があり、38 名の専任教員が従事している他、任期付助教 3 名、研究員 27 名が在籍しています。また、国際連携として、英国エジンバラ大学、米国ローレンスバークレー国立研究所を始めとする海外 13 機関と MOU を締結するとともに、37 機関（北米 15、欧州 13、アジア・オセアニア 9）と国際共同研究連携を行っています。異分野間連携として、ポスト「京」重点課題・萌芽的課題の推進や、「計算基礎科学連携拠点」、「宇宙生命計算科学連携拠点」を行っています。国際的教育活動としては韓国 KISTI との日韓 HPC ウィンタースクールを毎年開催しています。2017 年より開始した「計算メディカルサイエンス推進事業」では、計算生体分子医科学、睡眠ビッグデータ解析・自動診断、3DCG バーチャル手術、計算光バイオイメージングによる医学分野との連携を継続し、医計連携のコンセプトの下、共同研究と人材交流を加速しています。

筑波大学 計算科学研究センター 平成 30 年度 年次報告書

本小冊子は、平成時代最後である 2018 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。

2019 年 6 月吉日
計算科学研究センター長
朴 泰祐

1 センター組織と構成員



組織人員・教員一覧リスト

センター長	梅村 雅之
副センター長	朴 泰祐
運営協議会	委員長 佐藤 正樹 (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	委員長 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 重田 育照

共同研究担当主幹 中務 孝

- 共同研究委員会 委員長 中務 孝
- 共同研究運用委員会 委員長 中務 孝

計算機システム運用委員会 委員長 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 田浦 健次郎（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
 客員教授 青木 愼也（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）、大須賀 健
 准教授 森 正夫、矢島 秀伸
 講師 吉川 耕司
 助教 Wagner, Alexander、古家 健次
 研究員 田中 賢、高水 裕一、安部 牧人
 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、Guillaume Scamps、Kai Wen

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
主任研究員	山田 篤志
研究員	植本 光治、山田 俊介、竹内 嵩、野田 真志、Hashmi Arqum、 廣川 祐太
共同研究員	日野 健一（教授）、岡田 晋（教授）

生命科学研究部門

生命機能情報分野

教授	重田 育照（部門主任）
准教授	原田 隆平
助教	庄司 光男、栢沼 愛、西澤 宏晃
研究員	鬼頭（西岡） 宏任
共同研究員	広川 貴次（教授）、吉野 龍之介（助教）

分子進化分野

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

地球環境研究部門

教授	田中 博（部門主任）、日下 博幸
助教	松枝 未遠
研究員	山上 晃央、Doan Quang Van、石崎 紀子、荒木 貴光
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
助教	多田野 寛人、小林 諒平
研究員	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（准教授）
-------	--

計算情報学研究部門

データ基盤分野

教授	北川 博之（部門主任）、天竺 俊之
助教	塩川 浩昭、堀江 和正
研究員	Savong Bou、太田 玲央

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 30 年度の活動状況

2.1 計算科学研究センターの次のステップに向けて

筑波大学計算科学研究センターは、2017 年度に設立 26 年目に入り、次の四半世紀の活動に向け新たな一歩を踏み出しました。2018 年度はこれまで続けてきた本センターの歩み、特に計算科学者と計算機科学者が協力し、高性能計算システムの開発とそれを有効利用する計算科学アプリケーションの開発を同時に行う**コ・デザイン**のコンセプトの下、両分野の研究協力をより一層推進することに加え、特に国際研究展開力の向上と世界トップレベルの研究機関への進化を目指した活動を行いました。

筑波大学計算科学研究センターは、1992 年（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、今でこそ広く認知されるようになった**コ・デザイン**の先駆けでもありました。その後、平成 16 年の国立大学法人化の節目に改組し、部門を拡充して、素粒子宇宙研究部門、物質生命研究部門、地球生物環境研究部門、超高速計算システム研究部門、計算情報学研究部門の 5 部門からなる**計算科学研究センター**が発足しました。

その後、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「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く融合型並列計算機「宇宙シミュレータFIRST」が開発されました。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「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（Tsukuba-Tokyo-Kyoto）オープンスーパーコンピュータアライアンスを結成し、それぞれの大学のスーパーコンピュータの共同仕様を策定し、筑波大では T2K-Tsukuba を調達しました。これは筑波大学としては初めて超並列クラスタ型スーパーコンピュータを導入すると同時に、筑波大学として初めて米国メーカーによるスーパーコンピュータ

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

この流れを受け、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による、我が国で初めてとなる 2 大学連携によるスーパーコンピュータの開発・運用を目的とした「最先端共同 HPC 基盤施設 (JCAHPC)」が設置されました。そして、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 (Top500 ランキングでは当時世界第 6 位)。

この間、センター組織として、素粒子と宇宙、物質と生命が独立した部門となるとともに原子核部門も加わって 8 部門の体制となり、38 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行う部局となりました。学術センターが独立した部局となるのは、筑波大学では初めてのことです。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 30 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する。さらに、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)、メニーコア型演算加速クラスタ COMA (PACS-IX) (393 ノード, 1,001 TFlops) 及び GPU 間直接通信機構を持つ演算加速クラスタ HA-PACS/TCA (64 ノード, 364 TFlops) 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，原子核，宇宙，物質科学，生命科学，地球環境，生物，化学，計算機工学の 9 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。

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

■ 実施状況

東京大学情報基盤センターと共同設置した「最先端共同 HPC 基盤施設」において，一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 は運用 3 年目に入り安定した稼働率とユーザ利用率を記録した。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 79 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 235 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	HPCS	計算情報学	数値解析
15	10	9	10	1	7	3	2	5	2	3
計算機ごとの採択数										
COMA										
素粒子	宇宙	原子核	物質科学	化学	生命	地球環境	生物	HPCS	計算情報学	数値解析
12	6	6	7	1	6	3	2	2	1	2
Oakforest-PACS										
素粒子	宇宙	原子核	物質科学	化学	生命	地球環境	生物	HPCS	計算情報学	数値解析
10	7	2	8	0	3	2	0	5	2	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30年度			
			うち国際学術誌掲載論文数	
化学	5	(0)	5	(0)
材料科学	0	(0)	0	(0)
物理学	114	(44)	114	(44)
計算機 & 数学	22	(12)	21	(12)
工学	17	(9)	14	(9)
環境 & 地球科学	23	(9)	21	(8)
臨床医学	0	(0)	0	(0)
基礎生命科学	54	(22)	54	(22)
人文社会系	0	(0)	0	(0)
合計	235	(96)	229	(95)

※右側の（ ）内には、拠点に所属する者（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）を示す

表 3 学際共同利用プログラムの参加状況

平成30年度									
区分	機関数	受入人数	外国人	若手研究者 (35歳以下)	大学院生	延べ人数	外国人	若手研究者 (35歳以下)	大学院生
学内(法人内)	6	207 (15)	14 (4)	106 (11)	87 (7)	69145 (5,169)	4678 (1,387)	36143 (3,709)	29472 (2,395)
国立大学	18	110 (2)	0 (0)	46 (0)	32 (0)	38433 (702)	0 (0)	16290 (0)	11338 (0)
公立大学	2	3 (1)	0 (0)	1 (1)	0 (0)	1033 (351)	0 (0)	351 (351)	0 (0)
私立大学	7	12 (1)	0 (0)	3 (1)	3 (0)	4190 (365)	0 (0)	1047 (365)	1033 (0)
大学共同利用機関法人	3	25 (0)	3 (0)	7 (0)	0 (0)	8502 (0)	1018 (0)	2367 (0)	0 (0)
独立行政法人等公的研究機関	5	28 (3)	5 (1)	7 (1)	0 (0)	9594 (1,061)	1791 (365)	2415 (365)	0 (0)
民間機関	3	5 (1)	0 (0)	2 (0)	0 (0)	1767 (365)	0 (0)	701 (0)	0 (0)
外国機関	10	21 (1)	17 (1)	8 (1)	2 (1)	5245 (365)	3785 (365)	2332 (365)	730 (365)
その他	5	5 (0)	0 (0)	2 (0)	0 (0)	1768 (0)	0 (0)	687 (0)	0 (0)
計	59	416 (24)	39 (6)	182 (15)	124 (8)	139677 (8,378)	11272 (2117)	62333 (5155)	42573 (2760)

※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、英国エジンバラ大学（EPCC: Edinburgh Parallel Computing Cent）との合同ワークショップを12月に同大学で行い、また米国ローレンスバークレー国立研究所（LBNL: Lawrence Berkeley National Laboratory）との合同ワークショップを3月に同研究所で行なった。また、2月には韓国 KISTI との共催で、ソウル市内の梨花女子大学において Korea-Japan 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「高機能半導体デバイス」、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じた極限の探求」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」の本格的活動を開始し、次年度における事業部化の足がかりを作った。

2.5 センターシンポジウムの国際化

センターでは毎年 10 月、「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創造シンポジウム」の名の下に、センターの活動と先進的計算科学及び高性能計算に関するシンポジウムを、学際共同利用中間発表会を兼ねて開催してきた。平成 29 年度と同シンポジウムはセンター設立 25 周年シンポジウムとして四半世紀の研究の総括と今後の展開という意味を込めて拡大して行われた。平成 30 年度のシンポジウムでは、今後の国際研究拠点化を睨み、初めてセンターシンポジウムを国際化し、シンポジウムの全講演を英語化、国際シンポジウムとして開催した。

今後、世界トップレベルの国際的研究拠点を目指す上で、様々なイベントやプログラムの英語化は重要なステップである。平成 30 年度における学際共同利用の申請システムの電子化・英語化と、センターシンポジウムの国際化により、今後の活動の基盤を作った。

2.6 今後のあり方

計算科学研究センターは、筑波大学の研究センター組織再編の下で、先端研究センター群の中の世界級研究拠点（R1）に位置付けられた。これにより、全学戦略枠の人員配置やプロジェクト予算の配分等を通じて重点的な機能強化が行われ、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、医計連携を目指す「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。これらの活動全てについて、世界トップレベルの国際研究拠点に向けた発展を目指し、活性化と成果の創出を目指す。

3 各研究部門の報告

I. 素粒子物理研究部門

1. メンバー

教授	藏増 嘉伸、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
研究員	浮田 尚哉、吉村 友佑
学生	大学院生 6 名、学類生 5 名

2. 概要

当部門では、数理物質系との密接な連携のもと、格子 QCD の大型シミュレーション研究を推進している。2016 年秋から JCAHPC（最先端共同 HPC 基盤施設：筑波大学と東京大学両機関の教職員が中心となり設計するスーパーコンピュータシステムを設置し、最先端の大規模高性能計算基盤を構築・運営するための組織）において Oakforest-PACS（略称「OFP」：ピーク演算性能 25PFLOPS の超並列クラスタ計算機、HPC(High Performance Computing)向けとしては「京」を超える国内最高性能システム）が稼働を開始した。昨年度に引き続き、本年度も筑波大学を中心とした PACS Collaboration に基づく共同研究体制のもと、OFP を用いた大型プロジェクト研究を推進した。これと並行して、有限温度・有限密度 QCD の研究、 $K \rightarrow \pi\pi$ 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)

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」コンピュータの 2 倍以上の理論演算性能を持つスーパーコンピュータである。平成 29 年度に引き続き、平成 30 年度も PACS Collaboration に基づく共同研究体制のもと、OFP を用いて物理点における 2+1 フレーバーQCD の大規模シミュレーションを推進した。

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。

平成 29 年度は、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サイズ）の配位上で π 中間子質量と崩壊定数の計算を行い、両格子サイズ上での結果に差異が見えることから、有限体積効果（系統誤差の一つ）の存在を確認した。平成 30 年度は、計算手法の改良によって更なる高精度計算を実現し、有限サイズ効果の定量的解析に成功した。図 1(左)は、格子サイズ 128^4 と 64^4 の配位上で計算された π 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 π 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。黒シンボルは 128^4 格子サイズの結果で、青シンボルは 64^4 格子サイズの結果である。両者の有限サイズ効果による差異は 2.1(8)%である。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 π 中間子崩壊定数を比較したものである。 64^4 格子サイズの結果(青シンボル) は 128^4 格子サイズの結果(黒シンボル)と誤差 1σ の範囲でかろうじて一致しているが、reweighting(再重み付け) 法によって 128^4 格子サイズと 64^4 格子サイズの π 中間子質量が等しくなるようにすると（図 1(左)の赤シンボル参照）赤シンボルで表された結果となり、有限サイズ効果による差異は 0.66(33)%となる。これらの結果は、研究論文 A-1 で発表済みである。

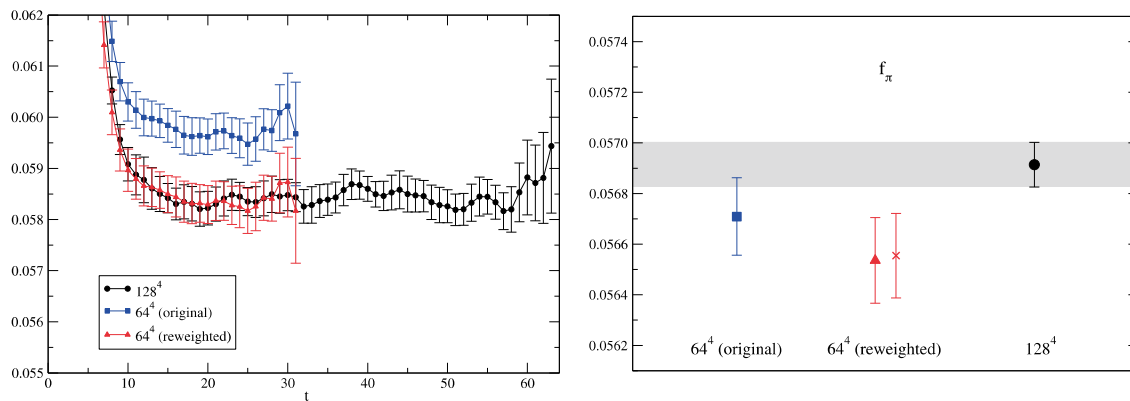


図 1: 格子サイズ 128^4 と 64^4 における π 中間子局所有効質量 (左) と π 中間子崩壊定数 (右)。

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

また、これまでの束縛エネルギー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。具体的には、異なる二つの演算子、指数型演算子とウォール型演算子を用いた計算を比較した。励起状態の寄与が抑えられていない小さな虚時間領域では、二つの演算子から得られた結果は異なる。ウォール型演算子では、励起状態が抑えられるまでに大きな虚時間領域を取る必要があるが、その領域で得られた束縛エネルギーは、指数型演算子から得られた結果と一致した。これまでの計算で用いている指数型演算子では、励起状態の寄与はウォール型演算子よりも小さな虚時間で抑えられるため、これまでの計算では励起状態の系統誤差は十分小さいと考えられる。

さらに、ウォール型演算子から得られる有効エネルギー差の体積依存性を調べた。束縛状態、2核子散乱状態、核子-励起核子散乱状態を考慮し、各状態のエネルギーを別計算で得られ

た値で固定した解析を行った。図2に、各体積の有効エネルギー差のフィット結果と2核子散乱状態と核子-励起核子散乱状態の係数の体積依存性を示す。この結果から、ウォール型演算子は体積が大きくなると散乱状態の寄与が体積に比例して大きくなることを示した。つまり、ウォール型演算子は束縛エネルギー計算に適さないことを示唆した。

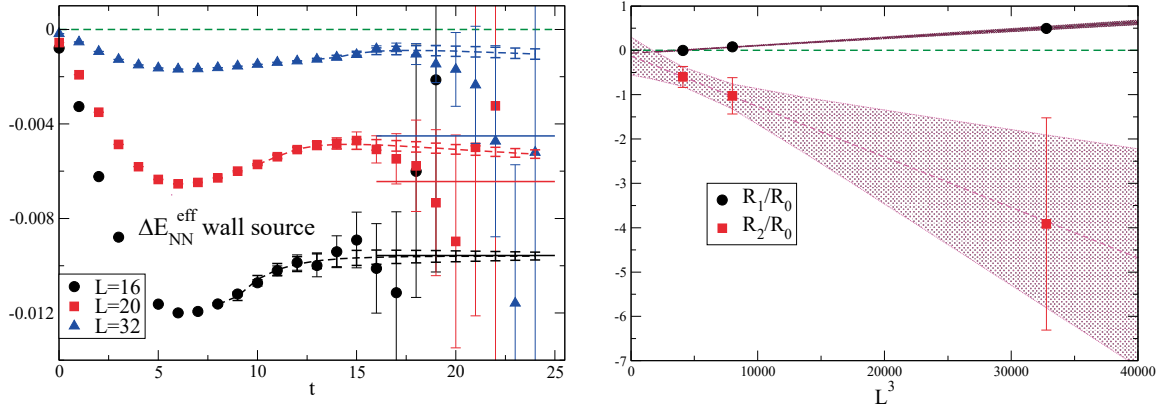


図2: (左) ウォール型演算子を用いた有効二核子エネルギー差。各体積の色に対応する破線はフィット関数 $\Delta E_{NN}^{\text{eff}} = \sum_{i=0,1,2} R_i \exp(-\Delta E_i t)$ を使ったフィット結果。 $i=0,1,2$ は束縛状態、2核子散乱状態、核子-励起核子散乱状態に対応する。実線は各体積での指数型演算子から得られた束縛エネルギーの値。(右) 散乱状態係数比の体積依存性。茶色と桃色破線はフィット結果。

【3】 格子 QCD を用いた核子構造研究 (蔵増、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かった。

蔵増、山崎は、宇川名誉教授と、広島大学石川健一准教授、東北大学佐々木勝一准教授、理研計算科学研究センター新谷栄悟研究員、東北大学大学院生塚本夏基氏とともに、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（ π 中間子質量146MeV）を用いた核子形状因子計算を行ない、論文としてまとめた（研究論文A-4）。さらに、現実的クォーク質量直上で、一辺が10fmを超える体積のゲージ配位「PACS10」配位を用いた計算を行った（研究論文A-5）。その結果を図3にまとめる。図3は、電磁形状因子から得られた荷電半径 $\sqrt{\langle r_E^2 \rangle_V}$ 、磁気的半径 $\sqrt{\langle r_B^2 \rangle_V}$ 、磁気能率 μ_N について、本計算結果(青塗丸)と実験値(緑線)、及び以前の結果(白抜き青丸)を比較したものである。本計算は研究論文A-6の結果(PACS'18)よりも高精度であり、実験と良く一致した結果が得られた。荷電半径の実験値の違いは陽子パズルとして知られており、今後さらなる高精度計算を行い、このパズルの解明に挑戦する計画である。

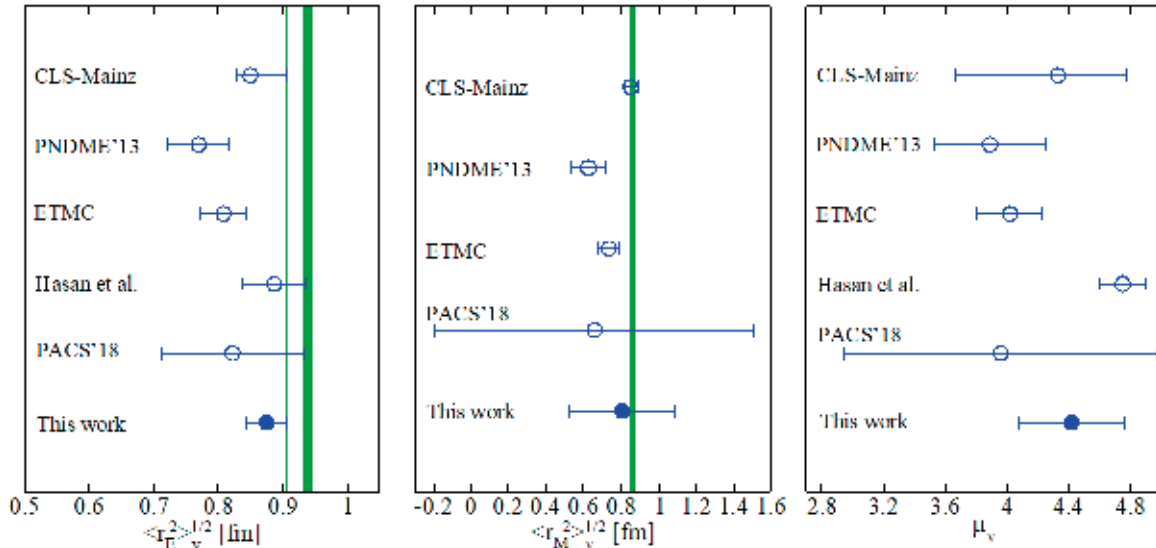


図3: 荷電半径 $\sqrt{\langle r_E^2 \rangle_V}$ (左)、磁気的半径 $\sqrt{\langle r_M^2 \rangle_V}$ (中央)、磁気能率 μ_V (右)。青塗丸、白抜き青丸、緑線は、PACS10配位結果 (研究論文A-5)、以前の結果、実験値を表す。PACS'18は研究論文A-4の結果。

【4】 現実的クォーク質量を用いた K 中間子セミレプトニック崩壊形状因子計算

(蔵増、石塚、谷口、山崎、吉江、浮田)

大学院生賀数と山崎は現実の π 中間子質量及び K 中間子質量でのセミレプトニック崩壊の動的 2+1 フレーバー大規模格子 QCD シミュレーションを行うことで、CKM 行列要素の一つである V_{us} (の絶対値) の決定を行った。この物理量はクォークの世代間混合を表す行列である CKM 行列の行列要素のうち、アップクォークとストレンジクォークの混合の度合いを表す量である。この行列は標準理論においてユニタリー性を持つと考えられ、ユニタリー性の確認を行うことで標準理論を超える物理の検証を行うことができる。 V_{us} の測定は K 中間子のセミレプトニック崩壊の崩壊率を測り、そこから $|V_{us}|$ とセミレプトニック形状因子と呼ばれるハドロニックな補正を表す量との積が得られる。この形状因子を制限することで $|V_{us}|$ が得られる。

本研究では K 中間子セミレプトニック崩壊を表すハドロン行列要素を計算、そこからセミレプトニック形状因子の構成を行った。また、実験でよく使われている *monopole ansatz* や QCD の低エネルギー有効理論であるアップ、ダウン、ストレンジクォークのカイラル対称性の破れに関わる SU(3)カイラル摂動論から得られた形状因子の表式等を使って、CKM 行列要素の評価に必要な運動量移行がゼロでの形状因子の結果を評価、これと実験結果を組み合わせ、 $|V_{us}|$ の評価を行い、標準理論の予測と無矛盾な結果を得た。図 4 には、本研究結果(赤四角と赤丸)と標準模型の予測(茶色帯)、及びこれまでの研究結果を示す。今後は詳細な系統誤差の見積もり、具体的には、励起状態の寄与や離散化誤差の評価等を行う予定である。

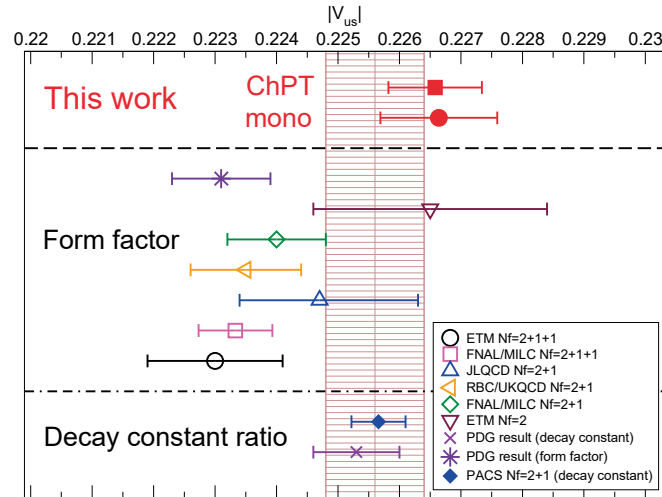


図 4: $|V_{us}|$ の他の研究結果(形状因子の計算結果、崩壊定数の比の計算結果から)との比較。茶色の帯は CKM 行列のユニタリー性から求まる標準理論の予測。

【5】 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波動関数からは、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できるだけでなく、実験で観測される質量殻上散乱振幅を一般化した半質量殻外散乱振幅を求める公式も導出できる。藏増、山崎は、昨年度導出したBethe-Salpeter波動関数と散乱振幅の関係式を元に議論を発展させ（研究論文A-6）、現在、他グループで用いられている計算方法から正しい結果を得るために必要な条件を議論した。

【6】 格子 QCD による相互作用範囲内の Bethe-Salpeter 波動関数を用いた散乱振幅（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 2π 中間子系において、相互作用範囲内のBethe-Salpeter波動関数を用いて散乱振幅を決定した（研究論文A-7）。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。平成30年度は、さらに散乱振幅の π 中間子質量依存性を調べ、論文としてまとめた（研究論文B-4）。この論文では、演算子依存性や虚時間依存性などの散乱振幅の性質についても議論を行った。

【7】 K 中間子崩壊振幅の研究（石塚、吉江）

素粒子標準模型には、昔からの未解決な問題で、かつ標準模型の検証において極めて重要な問題が残されている。K 中間子崩壊での $\Delta I=1/2$ 則の解明と、CP 非保存パラメータ(ϵ'/ϵ)の

理論からの予測である。これらの問題には、K 中間子が二つの π 中間子に崩壊する場合の崩壊振幅の計算が必要である。

石塚、吉江らは、格子 QCD により崩壊振幅を数値計算し、問題の研究を行った。 π 中間子質量 $m_\pi=250\text{MeV}$ の元で、終状態の π 中間子状態が運動量をもった物理的な崩壊過程について計算した（研究論文 A-8）。この計算により、 $\Delta I=1/2$ 則の兆候を見ることができた。CP 非保存パラメータ(ϵ'/ϵ)に関しては、実験値を再現する結果が得られた: $\text{Re}(\epsilon'/\epsilon)=(1.94\pm 5.72)\times 10^{-3}$, (実験値: $(1.66\pm 0.23)\times 10^{-3}$)。標準模型から実験値を再現できたことは一定の成果ではあるが、より詳細な標準模型の検証のためには、CP 非保存パラメータの有限値を求める必要がある。そのためには現在の計算誤差を 1/5 以下にする必要がある。現在、K 中間子、 π 中間子の演算子を改良し統計誤差を小さくすることを考え、その試験計算を行っている。

【8】 Gradient flow による K 中間子 B パラメータの研究（谷口）

K 中間子の K_0 - \bar{K}_0 混合は、間接的な CP の破れを与える重要な物理現象である。 K_0 - \bar{K}_0 混合の実験結果から弱い相互作用の CKM 行列要素を引き出すためには、強い相互作用による補正項である B パラメータ B_K を量子色力学に基づき評価しておく必要がある。非摂動論的問題なので、計算機を用いた格子による評価が重要で、多くの先行研究がある。ダブラー問題を避けて Wilson フェルミオンにより B パラメータを評価しようとする、従来の計算では、カイラル対称性の陽な破れのために、本来カイラル対称性から禁じられている寄与が混入してしまい、これを差し引きするために大きな誤差がもたらされていた。

この問題に対する解決策として、我々はグラジエントフローを用いる方法を有力視している。上記有限温度の場合と同様に、ゼロ温度でも、カイラル対称性の関係した物理量の正しくくりこまれた値を評価する上で、グラジエントフロー法が有力であると期待している。グラジエントフローによるカイラル対称性の回復を確認するために、谷口、鈴木、馬場は、グラジエントフロー法を用いて PCAC 関係式の検証を行った。図5の左図で、赤と青のデータはそれぞれ PCAC 関係式の左辺と右辺の評価結果を表している。期待どおり、両者がよく一致していることがわかる（国内学会発表 B-19）。これを受け、谷口と鈴木は B パラメータの数値計算に着手した。図5の右図で、今回測定された B パラメータのフロー時間依存性を示す。黒が各フロー時間 t で得られた B_K の結果を表し、青が、小さな t での格子誤差を避けながら $t \rightarrow 0$ に外挿した結果である。ここから $B_K=0.607(24)$ を得た。ただし、現在計算に使用しているクォークは物理的な値と比して非常に重い ($m_\pi \sim 630\text{MeV}$)。このために、今回の結果は FLAG 等の結果よりも大きな値となっていると考えられる（国内学会発表 B-20）

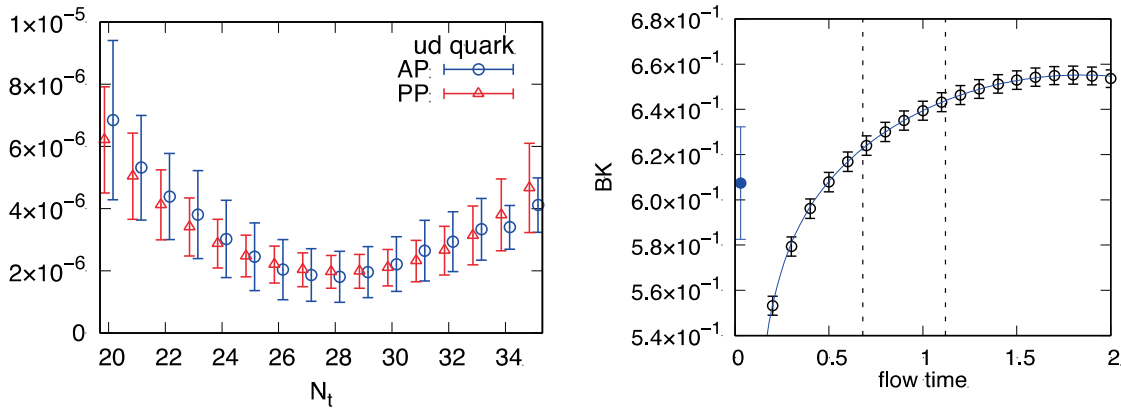


図5: グラジエントフロー法によるK中間子Bパラメータの研究。(左) PCAC関係式の計算。横軸は空間距離(学会発表19)。(右) K中間子Bパラメータ B_K の計算。横軸はフロー時間 t (国内学会発表B-20)。

【9】 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、九州大学鈴木博教授、大阪大学北沢正清助教、新潟大学江尻信司准教授、広島大学梅田貴士准教授らとの共同研究で、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た。格子上では連続な並進対称性が陽に壊されているため、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論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。本研究では、この非摂動論的なくくりこみの問題に関して、グラジエントフロー(勾配流)を用いて根本的な解決を図る。Lüscherらにより提案されたグラジエントフロー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論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適用して、クォーク物質の熱力学特性を研究している。2016-2017年度に実行したクォークが重い場合の $N_f=2+1$ QCDで最初の研究により、エネルギー運動量テンソルの対角成分が従来の方法による状態方程式を再現することを示し、カイラル感受率がクロスオーバー温度でピークを示すことをウィルソン型クォークとして初めて示した。また、位相感受率を評価し、アクシオン質量がインスタントン模型の予想と一致する温度依存性を持つことを示した。2018年度は、この研究を発展させ、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推進した。並行して、エネルギー運動量テンソルの相関関数やグラジエントフロー法のマッチング係数における高次項の効果の研究などを行った。

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

(i) 物理点でのシミュレーション

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。また、グラジエントフローのクーリング効果によって、誤差の大部分を占めるゲージ配位の揺らぎが押さえられ、従来の計算手法に比べて高精度の計算が可能になることが期待される。クォークが重い場合にグラジエントフロー法の高い有用性が示されたことをうけ、計算コストの高い物理点での研究をグラジエントフロー法で推進することとし、改良ウィルソン型クォーク作用と岩崎ゲージ作用を用いて、クォーク質量を現実の値に合わせた研究を開始した。PACS-CS Collaborationが生成した $32^3 \times 64$ 格子、格子間隔 $a \approx 0.09\text{fm}$ のゼロ温度物理点配位を利用し、固定格子間隔法で $T \approx 122\text{--}544\text{MeV}$ ($N_t=18\text{--}4$)の温度をシミュレーションしている。クォークが重い場合の $a \approx 0.07\text{fm}$ より格子がやや粗いので、温度 $T=1/(aN_t)$ をより細かく変える為に、奇数の N_t も数点採用している。クォークが重い場合は 190MeV 周辺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。

格子場の理論国際会議LATTICE2017で行った中間発表(研究論文B-8)で、エネルギー運動量テンソルの一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ことが確認された。他方、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、クォークが重い場合より格子化誤差が大きい傾向があり、より高い統計と精密な系統誤差評価が必要である。この発表の段階である程度完了していた $T > 157\text{MeV}$ ($N_t \leq 14$)でのシミュレーションから、相転移温度がかなり低そうである($T_{pc} < 169\text{MeV}$)ことが示唆されたが、相転移点の特定には至らなかった。

その後、より低温側の $T \approx 122\text{MeV}, 137\text{MeV}$ ($N_t=18, 16$)を含むシミュレーションを系統的に進めた。図6に、2018年度末の学会発表の段階での状態方程式の結果を示す。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まだ無いが、クォークが重い場合の経験から、 $T > 247\text{MeV}$ ($N_t \leq 8$)では格子化誤差が小さくないと予想される。

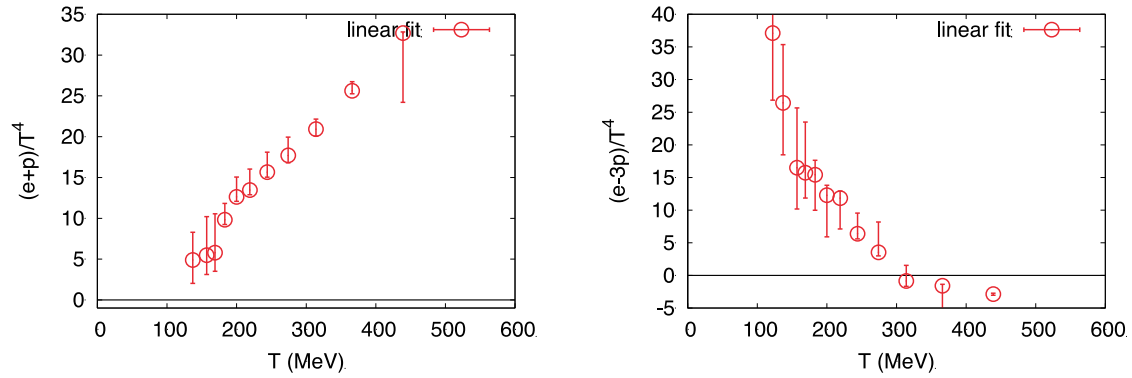


図6: グラジエントフロー法による有限温度(2+1)-flavor QCDの状態方程式。現実のクォーク質量の結果(preliminary)。(左) エントロピー密度 $\epsilon+p$ と(右) トレース・アノマリ $\epsilon-3p$ (国内学会発表B-16)。横軸は温度 T 。

物理点でのカイラル凝集の現状の結果を図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。クォークが重い場合には、 u, d クォーク質量が s クォーク質量と同程度だったために、両者のカイラル凝集が同様の振る舞いを示していたが、 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わかる。 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。

低温格子 ($N_t=18, 16$ など) の統計はまだ十分ではないが、これらの結果から相転移点近傍であることが想像される。それをより明確に見るために、カイラル感受率の非連結部分を図8に示す。この u, d クォークの結果からは、 $122 < T_{pc} < 146 \text{ MeV}$ に臨界温度があると示唆される。この低い臨界温度は、改良スタガード型クォークを用いた連続極限の結果 $T \sim 150 \text{ MeV}$ と矛盾しない。現在、この臨界温度近傍で、統計を上げるための配位生成や、奇数 N_t シミュレーションを進めている。

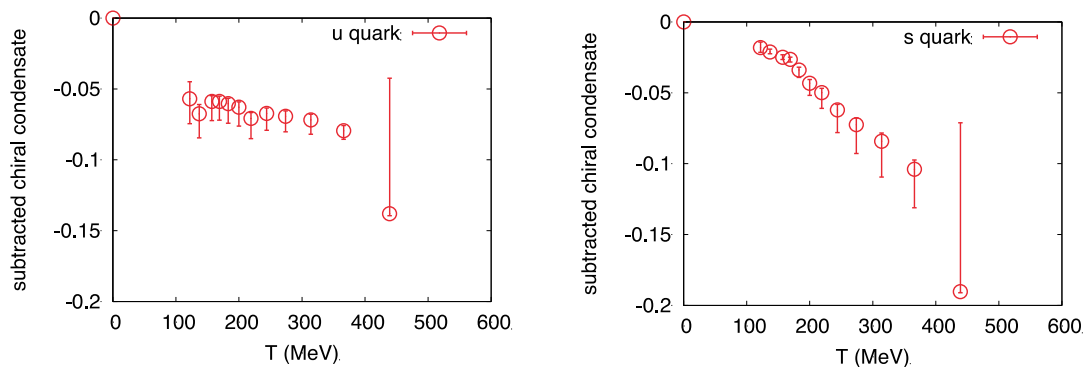


図7: グラジエントフロー法による有限温度(2+1)-flavor QCDのカイラル凝集。真空期待値が差し引かれている。現実のクォーク質量の結果(preliminary)。(左) u, d クォークと(右) s クォーク

ク（国内学会発表B-16）。

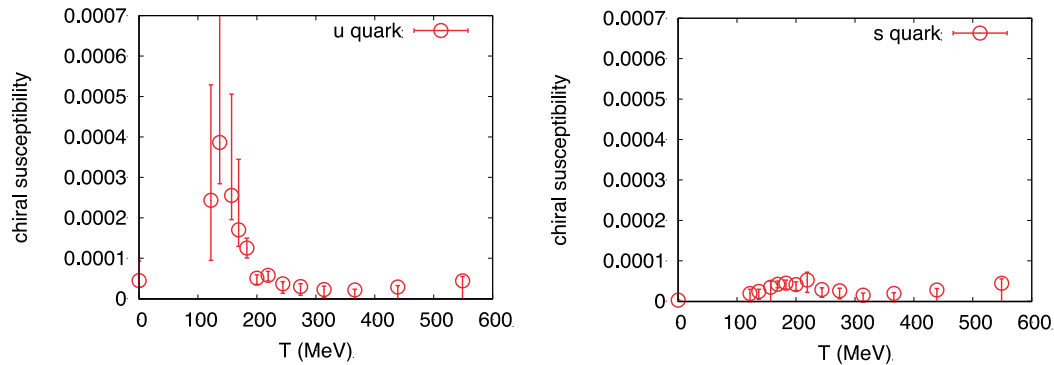


図8: グラジエントフロー法による有限温度(2+1)-flavor QCDのカイラル感受率の非連結部分。現実のクォーク質量の結果(preliminary)。(左) u,dクォークと(右) sクォーク（国内学会発表B-16）。

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

(ii) 格子間隔依存性

2016-2017 年度に実行したクォークが重い場合の(2+1)-flavor QCD で最初の研究では、エネルギー運動量テンソルやカイラル感受率、位相感受率などで、物理的期待と一致する様々な結果が得られた。これらの結果は、 $a \approx 0.07 \text{ fm}$ の格子間隔 1 点で得られたものである。様々な物理量で、全く異なる評価方法の結果が良く一致していることにより、この格子が連続極限に近いことが強く示唆されるが、格子間隔依存性が小さいことは直接確認しておく必要がある。そのために、このクォークが重い場合で格子間隔を変えた研究も進めている。統計はまだ十分ではないが、状態方程式について格子間隔依存性が大きくないことを示唆する中間結果を得た（国内学会発表 B-9）。

Gradient flow を用いたエネルギー運動量テンソル相関関数と輸送係数の研究

グラジエントフロー法でエネルギー運動量テンソルそのものが計算できるようになったことにより、その非対角要素や二点相関関数も直接評価可能となった。そこから、輸送係数など、クォーク物質の様々な熱力学特性を引き出す試みを進めている。最初の試みとして、クォークが重い場合を研究した。図 9 の左図に、様々な方法で計算したエントロピー密度の結果を示す。赤三角と青三角はエントロピー密度をエネルギー運動量テンソルの異なる成分の二点関数から線形応答関係式を用いて評価した結果で、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我々の 2017 年の結果である。誤差はまだ大きい、フロー時間がゼロの極限 $t \rightarrow 0$ で、格子間隔依存性が取り除かれ、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-8）。図 9 の右図では、エネルギー運動量テンソルの二点関数から評価した剪断粘性係数(shear viscosity η)の中間結果を示す。剪断粘性率の計算にはスペクトル関数の低

エネルギー極限を評価する必要がある。ここでは、エネルギー運動量テンソルの二点関数をスペクトル関数に関する 2 種類のモデル関数（Breit-Wigner 型および hard thermal loop 型）でフィットし、その低エネルギー極限をとった。図 9 の右図でこれら 2 種類の評価結果を黒丸と赤三角で示す。重イオン衝突実験の示唆する $\eta/s \sim 0.12$ や AdS/CFT 対応理論の予言である $\eta/s = 1/(4\pi)$ に近い結果を得た。ただし、二点関数では格子化誤差が一点関数より大きくなる傾向があり、系統誤差の精密な評価に向けて更なる研究が必要である（研究論文 B-11）。

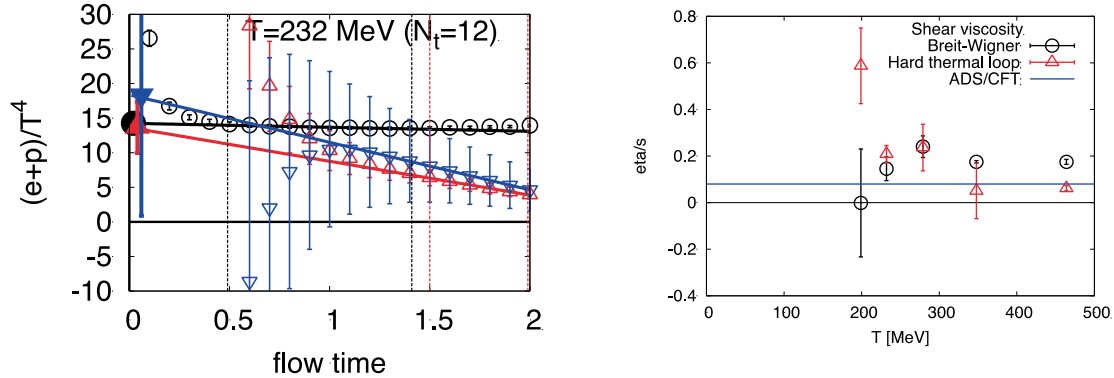


図9: グラジエントフロー法による有限温度(2+1)-flavor QCDにおけるエネルギー運動量テンソルの二点相関関数の研究。クォークが重い場合の結果(preliminary)。 (左) 様々な方法で計算したエントロピー密度。横軸はフロー時間 t (研究論文B-9)。 (右) 剪断粘性係数 η とエントロピー密度 s の比。青線はAdS/CFT対応から予言される $1/(4\pi)$ (研究論文B-11)。

その他

相転移点の特定において、カイラル感受率の非連結部分が大きな役割を果たした。カイラル感受率の連結部分については、計算にクォーク二体演算子の相関関数の評価が要求される。スタガード型クォークなどを使った先行研究では、カイラル感受率の連結部分は相転移に敏感では無さそうであることが報告されている。グラジエントフローを使ってクォークが重い場合の連結部分を評価した結果、ウィルソン型クォークでも同様の振る舞いが示唆されることを見た（研究論文B-10）。

フルQCDの研究と並行して、SU(3)ゲージ理論における一次相転移の研究も継続している。これは、有限密度QCD やクエンチ近似QCD 近傍のクォークが非常に重い場合に期待されている一次相転移やその端点（臨界点）の検出に向けての計算技法開発の一環でもある。グラジエントフロー法を用いてSU(3)ゲージ理論の潜熱評価を見直し、従来の方法との比較や、格子間隔効果、有限体積効果の検証を行った（研究論文B-12）。

【10】 4 フレーバー有限温度 QCD における臨界終点（蔵増、大野）

有限温度 QCD における相転移の次数は、クォークのフレーバー数及び質量に依存して多様に変化すると予想されている。特に、3 フレーバー QCD の場合、クォーク質量 0 の極限では 1 次相転移となり、クォーク質量を大きくしていくと、2 次相転移点である臨界終点を経て、クロスオーバーになると期待されている。しかしながら、これまでの格子 QCD 研究の結果は、連続極限に近づく程、臨界終点でのクォーク質量が小さくなり、その近づき方も、フェルミオン作用の違いで大きく異なることを示しており、未だに臨界終点の位置について、確定的な結果は得られていない。

大野は、筑波大の蔵増嘉伸教授、金沢大の武田真滋准教授、理研の中村宜文氏らとともに、ウィルソン型フェルミオン作用を用いて、有限温度 4 フレーバー QCD の臨界終点を調べた（研究論文 B-13）。ここで、4 フレーバー QCD は、3 フレーバー QCD と同様に、クォーク質量 0 の極限で 1 次相転移があり、スタaggerド型フェルミオン作用でしばしば疑問視されている rooting の必要もないため、スタaggerド型とウィルソン型フェルミオン作用の結果をより理想的な条件で比較できる。よって、3 フレーバー QCD の結果を検証する上でよい比較対象となる。本研究では時間方向の格子サイズを 4、6、8 として計算を行い、それらの結果を用いて臨界終点の連続極限をとった。得られた結果を、先行研究の 3 フレーバー、ウィルソン型フェルミオン作用での結果と比較すると、4 フレーバーの場合の方が、臨界終点における π 中間子質量が大きいことが分かった。また、同様に、スタaggerド型フェルミオン作用の結果と比較すると、3、4 フレーバー共に、ウィルソン型フェルミオン作用の方が大きい π 中間子質量を持つことが分かった（図 10）。

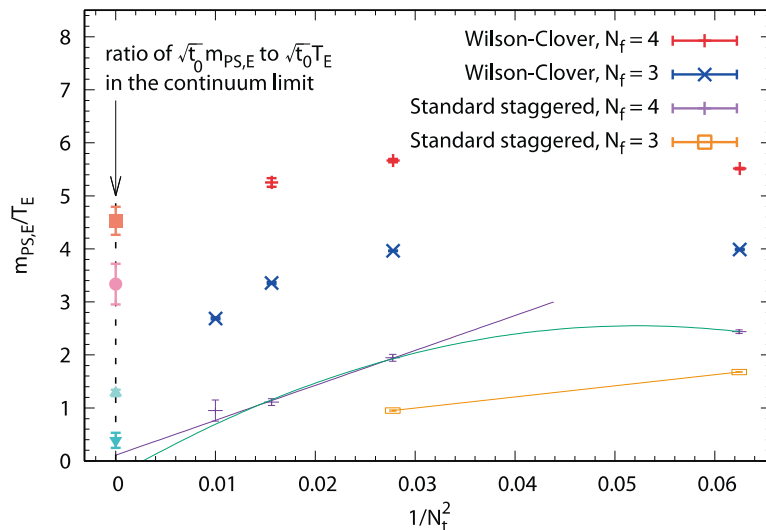


図10: 臨界終点における π 中間子質量の格子間隔依存性。3、4フレーバーウィルソン型フェルミオン作用の結果をそれぞれ青、赤色の点で示す。同様に、スタaggerド型フェルミオン作用の結果をそれぞれ橙、紫色の点で示す。

【11】 クォーコニウムスペクトル関数の研究（大野）

有限温度におけるクォーコニウムのスペクトル関数は、クォーコニウムの高温媒質中での振る舞いや、重クォーク輸送に関する情報を含んでおり、重イオン衝突実験で実現していると考えられるクォーク・グルーオン・プラズマの性質を、理論的に理解する上で非常に有用である。しかしながら、格子 QCD による第一原理計算において直接得られる量は相関関数であり、これはスペクトル関数を積分したものと関係している。従って、スペクトル関数は、相関関数に対する逆問題を解くことによって得ることができる。ところが、これは典型的な ill-posed 問題として知られており、解くことは一般的に非常に困難である。大野は、主に、華中師範大の Heng-Tong Ding 教授、Bielefeld 大の Olaf Kaczmarek 氏、Brookhaven 国立研究所の Swagato Mukherjee 氏らと共に、Stochastic 法を用いてクォーコニウムのスペクトル関数を計算した（研究論文 A-9）。得られた結果を、従来よく用いられている最大エントロピー法の結果と比較したところ、互いに無矛盾な結果が得られることが分かった。また、スペクトル関数の形状をみることで、クォーコニウムの消失温度や重クォーク拡散係数を調べた（研究論文 A-10）。

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

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

2014年、蔵増と理研計算科学研究機構（現理研計算科学研究センター）の清水特別研究員は、テンソル繰り込み群をグラスマン数も扱えるように拡張し（グラスマンテンソル繰り込み群）、世界で初めてフェルミオン入りのゲージ理論への応用に成功した。具体的には、グラスマンテンソル繰り込み群を用いて、 θ 項が有る場合と無い場合の1フレーバーの2次元格子Schwingerモデル（2次元格子QED）における相構造を調べた。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。

平成 30 年度における課題(i)~(iv)の主要な研究成果は、以下のとおりである。課題(i): 3次元 Z_2 ゲージ理論を TN 法によって数値計算するためのアルゴリズム開発を行った。具体的には、Higher Order Tensor Renormalization Group(HOTRG)法をベースとしたアルゴリズム改良を行い、3次元 Z_2 ゲージ理論における有限温度相転移の高精度解析に成功した。図 11 (左) は、比熱の体積依存性をプロットしたものである。体積が増大するにつれて、期待通り鋭いピークが形成されている。これらの解析結果を論文にまとめ、現在学術雑誌に投稿中である(研究論文 B-15)。課題(ii)、(iii): 一般的に、TN 法はモデルの次元が上がるにつれて計算コストが増大する。そのため、これまで TN 法の主な応用例は2次元モデルに限られており、4次元モデルへの適用例は存在しない。われわれは、4次元における最も簡単なモデルであるイジングモデルに対して HOTRG 法を応用し、相転移現象の解析を試みた。その際、不純物テンソル法と呼ばれるグリーン関数計算手法を用いて内部エネルギーを計算し、その温度・体積依存性を詳細に調べることによって相転移の次数決定を可能とした。今後論文の取り纏めの作業に入る予定である。課題(iv): 素粒子標準理論およびそれを超える理論の重要な構成要素としてスカラー理論における自発的対称性の破れがある。その低次元モデルとして2次元 ϕ^4 理論に着目し、TN 法による自発的対称性の破れの解析に取り組んだ。具体的には、自発的対称性の破れが起きる臨界結合定数の高精度計算を行った。図 11 (右) は臨界結合定数の連続極限への外挿の様子を表している。他グループによる異なる手法で得られた結果と比較すると、連続極限において概ね誤差の範囲で矛盾しない結果が得られている(研究論文 A-12)。

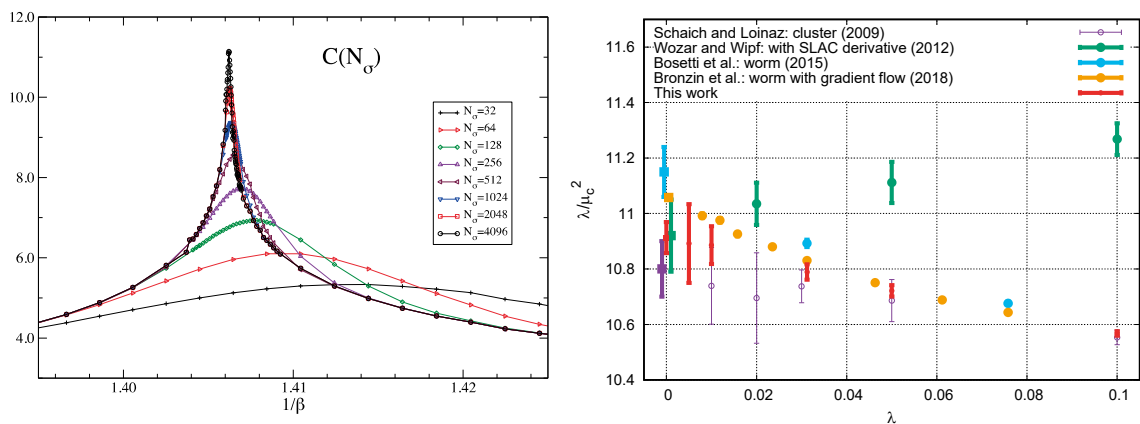


図11: (左) 3次元 Z_2 ゲージ理論における比熱の体積依存性。(右) 2次元 ϕ^4 理論における臨界結合定数の連続極限への外挿。

【13】 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結果を加え、崩壊定数などの物理量のカイラル外挿解析を更新した。また、4、8、12 フレーバー理論のフレーバー1 重項擬スカラー中間子質量の比較や 8 フレーバー理論の S パラメータ計算を行った。

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

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。2008 年に実運用を開始して以来 10 年経過した現在、国内の複数の大きな研究グループが研究インフラとして使用している。JLDG は実用システムとして、数年前から一定の完成の域に達しており、今年度もシステムの増強・安定運用を主眼に活動を行った。システムメンテナンス等の日常業務以外の活動は、以下の通りである。

- ① 東大拠点整備 (Intel AMT を利用した遠隔監視・起動・停止システム構築)
- ② 筑波大 IPMI 管理ネットワークの整備
- ③ 公開 QCD 配位の DOI 登録 (『DOI 登録ポリシー』『公開データ管理ポリシー』の策定、JICFuS 内に DOI 運用部会を立ち上げ)
- ④ 利用統計集計システムの整備
- ⑤ 新拠点設置準備
- ⑥ セキュリティ向上 (脆弱性対策、ILDG 基本サービスの一部中止と代替手段の提供)

4. 教育

【1】 学位論文

[博士論文]

1. 賀数 淳平

「Calculation of V_{us} from lattice QCD」

2. 鈴木 遊

「Study of Kaon Bag Parameter with Wilson Fermion using Gradient Flow」

[修士論文]

1. 秋山 進一郎

「高次テンソル繰り込み群による 4 次元 Ising 模型の比熱の解析」

【2】 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（2018年4月～2018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

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』、208,763千円
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」、800千円
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）』、16,400千円
4. 谷口裕介（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(C)、平成30年度採択、「勾配流法を用いたクォーク・グルーオン・プラズマの物性的研究」、910千円
5. 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」、7,200千円
6. 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」、700千円

知的財産権

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. PACS Collaboration: K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yamazaki, and T. Yoshié, “Finite size effect on pseudoscalar meson sector in 2+1 flavor QCD at the physical point”, Phys.Rev. D99 (2019) no.1, ref.014504.
2. PACS Collaboration: Naoya Ukita, Ken-Ichi Ishikawa, and Yoshinobu Kuramashi, “Utility of geometry in lattice QCD simulations”, Phys.Rev. D98 (2018) no.1, ref.014515.
3. PACS Collaboration: Taku Izubuchi, Yoshinobu Kuramashi, Christoph Lehner, and Eigo Shintani, “Finite-volume correction on the hadronic vacuum polarization contribution to the muon $g-2$ in lattice QCD”, Phys.Rev. D98 (2018) no.5, ref.054505.
4. PACS Collaboration: Ken-Ichi Ishikawa, Yoshinobu Kuramashi, Shoichi Sasaki, Natsuki Tsukamoto, Akira Ukawa, and Takeshi Yamazaki, “Nucleon form factors on a large volume lattice near the physical point in 2+1 flavor QCD”, Phys. Rev. D 98, no. 7 (2018) ref.074510.
5. PACS Collaboration: Eigo Shintani, Ken-Ichi Ishikawa, Yoshinobu Kuramashi, Shoichi Sasaki, and Takeshi Yamazaki, “Nucleon form factors and root-meansquare radii on a $(10.8 \text{ fm})^4$ lattice at the physical point”, Phys. Rev. D 99, no. 1 (2019) ref.014510.
6. Takeshi Yamazaki and Yoshinobu Kuramashi, “Reply to “Comment on ‘Relation between scattering amplitude and Bethe-Salpeter wave function in quantum field theory’””, Phys. Rev. D 98, no. 3 (2018) ref.038502.
7. Yusuke Namekawa and Takeshi Yamazaki, “Scattering amplitude from Bethe-Salpeter wave function inside the interaction range, Phys. Rev. D 98, no. 1 (2018) ref. 011501.
8. N. Ishizuka, K.-I. Ishikawa, A. Ukawa, T. Yoshié, “Calculation of $K \rightarrow \pi\pi$ decay amplitudes with an improved Wilson fermion action in a nonzero momentum frame in lattice QCD”, Phys. Rev. D92 (2015) ref.074503
9. H. T. Ding, O. Kaczmarek, S. Mukherjee, H. Ohno and H. T. Shu Stochastic, “Reconstructions of spectral functions: Application to lattice QCD”, Phys. Rev. D 97, no. 9 (2018) ref.094503.
10. H.-T. Ding, O. Kaczmarek, A.-L. Kruse, R. Larsen, L. Mazur, Swagato Mukherjee, H. Ohno, H. Sandmeyer and H.-T. Shu, “Charmonium and bottomonium spectral functions in the vector channel”, Nucl. Phys. A 982 (2019) ref.715.
11. Daisuke Kadoh, Yoshinobu Kuramashi, and Ryoichiro Ueno, “Irregular parameter dependence of numerical results in tensor renormalization group analysis”, PTEP in press.

12. Daisuke Kadoh, Yoshinobu Kuramashi, Yoshifumi Nakamura, Ryo Sakai, Shinji Takeda, and Yusuke Yoshimura, “Tensor network analysis of critical coupling in two dimensional ϕ^4 theory”, JHEP 1905 (2019) ref.184.

B) 査読無し論文

1. PACS Collaboration: Eigo Shintani and Yoshinobu Kuramashi, “Study of systematic uncertainties in hadronic vacuum polarization contribution to muon $g-2$ with 2+1 flavor lattice QCD”, arXiv:1902.00885 [hep-lat].
2. PACS Collaboration: Eigo Shintani and Yoshinobu Kuramashi, “Analysis of systematic error in hadronic vacuum polarization contribution to muon $g-2$ ”, PoS (LATTICE2018) (2019) ref.060.
3. Yusuke Namekawa and Takeshi Yamazaki, “Quark mass dependence of on-shell and half off-shell scattering amplitudes from Bethe-Salpeter wave function inside the interaction range”, arXiv:1904.00387 [hep-lat].
4. Yusuke Namekawa and Takeshi Yamazaki, “Scattering length from BS wave function inside the interaction range”, PoS (LATTICE2018) (2019) ref.078.
5. Takeshi Yamazaki and Yoshinobu Kuramashi, “Relation between scattering amplitude and Bethe-Salpeter wave function in quantum field theory”, PoS (LATTICE2018) (2019) ref.077.
6. Takeshi Yamazaki, “Relation between scattering amplitude and Bethe-Salpeter wave function inside interaction range”, Springer Conference Proceedings (2019) pp.1-7, in press.
7. PACS Collaboration: J. Kakazu, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yamazaki, T. Yoshié, “Calculation of $K \rightarrow \pi l \nu$ form factor in $N_f=2+1$ QCD at physical point on $(10 \text{ fm})^3$ ”, PoS (LATTICE2018) (2019) ref.265.
8. 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 Conferences 175 (2018) ref.07023.
9. Yusuke Taniguchi, Shinji Ejiri, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Asobu Suzuki, Hiroshi Suzuki, 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 Conferences 175 (2018) ref.07013.
10. Atsushi Baba, Shinji Ejiri, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Takanori, Shimojo, Asobu Suzuki, Hiroshi Suzuki, Yusuke Taniguchi and Takashi Umeda, “Measuring of chiral susceptibility using gradient flow”, PoS (LATTICE 2018) (2019) ref.173.

11. Yusuke Taniguchi, Atsushi Baba, Shinji Ejiri, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Takanori Shimojo, Asobu Suzuki, Hiroshi Suzuki, Takashi Umeda, “Study of energy-momentum tensor correlation function in $N_f=2+1$ full QCD for QGP viscosities”, PoS (LATTICE 2018) (2019) ref.166.
12. Mizuki Shirogane, Shinji Ejiri, Ryo Iwami, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Hiroshi Suzuki, Yusuke Taniguchi, Takashi Umeda, “Equation of state near the first order phase transition point of SU(3) gauge theory using gradient flow”, PoS (LATTICE 2018) (2019) ref.164.
13. H. Ohno, Y. Kuramashi, Y. Nakamura and S. Takeda, “Continuum extrapolation of the critical endpoint in 4-flavor QCD with Wilson-Clover fermions”, PoS (LATTICE 2018) (2019) ref.174.
14. Ryo Sakai, Daisuke Kadoh, Yoshinobu Kuramashi, Yoshifumi Nakamura, Shinji Takeda, and Yusuke Yoshimura, “Tensor network study of two dimensional lattice ϕ^4 theory”, PoS (LATTICE2018) (2019) ref.232.
15. Yoshinobu Kuramashi and Yusuke Yoshimura, “Three-dimensional finite temperature Z_2 gauge theory with tensor network scheme”, arXiv:1808.08025 [hep-lat].

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Yoshinobu Kuramashi 「Application of tensor network scheme to particle physics」, International Workshop on Tensor Network States: Algorithms and Applications (TNSAA 2018-2019), (R-CCS, Kobe, Japan, Dec. 3-6, 2018).
2. Takeshi Yamazaki 「Relation between scattering amplitude and Bethe-Salpeter wave function inside interaction range」, XXII International Conference on Few-Body Problems in Physics (FB22) (Caen Convention Center, France, June 9-13, 2018).
3. Takeshi Yamazaki 「PACS10 project in lattice QCD」, 10th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (University of Tsukuba, Tsukuba, October 15-16, 2018).

B) 一般講演

1. Shinji Ejiri, Shota Itagaki, Ryo Iwami, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Yusuke Taniguchi, Hiroshi Suzuki, Mizuki Shirogane, Takashi Umeda, Naoki Wakabayashi 「Thermodynamics near the first order phase transition point of SU(3) gauge theory」, YITP

- long-term workshop on New Frontiers in QCD 2018 (NFQCD2018) (YITP, Kyoto Univ., Kyoto, Japan, 5.28-6.29, 2018).
2. Mizuki Shirogane, Shinji Ejiri, Ryo Iwami, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Hiroshi Suzuki, Yusuke Taniguchi, Takashi Umeda 「Thermodynamic quantity near first phase transition point using Gradient flow method」, YITP long-term workshop on New Frontiers in QCD 2018 (NFQCD2018) (YITP, Kyoto Univ., Kyoto, Japan, 5.28-6.29, 2018).
 3. Takeshi Yamazaki and Yoshinobu Kuramashi 「Relation between scattering amplitude and Bethe-Salpeter wave function in quantum field theory」 The 36th International Symposium on lattice field theory (Lattice 2018) (Michigan State University, MI, USA, July 22-28, 2018).
 4. Yusuke Namekawa and Takeshi Yamazaki 「Scattering length from BS wave function inside the interaction range」 The 36th International Symposium on lattice field theory (Lattice 2018) (Michigan State University, MI, USA, July 22-28, 2018).
 5. Yoshinobu Kuramashi, Eigo Shintani, Ken-Ichi Ishikawa, Shoichi Sasaki, Natsuki Tsukamoto and Takeshi Yamazaki for PACS Collaboration 「Nucleon form factors on a $(10.8 \text{ fm})^4$ lattice at the physical point in 2+1 flavor QCD」, The 36th International Symposium on lattice field theory (Lattice 2018) (Michigan State University, MI, USA, July 22-28, 2018).
 6. 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 「Calculation of $K \rightarrow \pi l \nu$ form factor in $N_f=2+1$ QCD at physical point on $(10 \text{ fm})^3$ 」 The 36th International Symposium on lattice field theory (Lattice 2018) (Michigan State University, MI, USA, July 22-28, 2018).
 7. Mizuki Shirogane, Shinji Ejiri, Ryo Iwami, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Hiroshi Suzuki, Yusuke Taniguchi, Takashi Umeda 「Equation of state near the first order phase transition point of SU(3) gauge theory using gradient flow」, The 36th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2018) (Michigan State University, MI, USA, July 22-28, 2018).
 8. Yusuke Taniguchi, Shinji Ejiri, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Takanori Shimojo, Hiroshi Suzuki, Takashi Umeda, Asobu Suzuki, Atsushi Baba 「Study of energy-momentum tensor correlation function in $N_f=2+1$ full QCD for QGP viscosities」, The 36th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2018) (Michigan State University, MI, USA, July 22-28, 2018).
 9. Atsushi Baba, Shinji Ejiri, Kazuyuki Kanaya, Masakiyo Kitazawa, Takanori Shimojo, Hiroshi Suzuki, Takashi Umeda, Yusuke Taniguchi, Asobu Suzuki 「Measuring of chiral susceptibility

using gradient flow」, The 36th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2018) (Michigan State University, MI, USA, July 22-28, 2018).

10. H. Ohno, Y. Kuramashi, Y. Nakamura and S. Takeda 「Continuum extrapolation of the critical endpoint in 4 flavor QCD with Wilson Clover fermions」, The 36th Annual International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2018) (Michigan State University, MI, USA, July 22-28, 2018).
11. Yusuke Yoshimura and Yoshinobu Kuramashi 「Z₂ gauge theory with tensor renormalization group」, The 36th Annual International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2018) (Michigan State University, MI, USA, July 22-28, 2018).
12. Ryo Sakai, Daisuke Kadoh, Yoshinobu Kuramashi, Yoshifumi Nakamura, Sinji Takeda, and Yusuke Yoshimura 「Tensor network study of two dimensional lattice ϕ^4 theory」, The 36th Annual International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2018) (Michigan State University, MI, USA, July 22-28, 2018).
13. Kazuyuki Kanaya 「Thermodynamic quantities in (2+1)-flavor QCD using gradient flow」, CCS international symposium 2018: 10th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (Univ. Tsukuba, Tsukuba, Ibaraki, Japan, 10.15-16, 2018).
14. H. Ohno 「The nature of the finite temperature phase transition of 4 flavor QCD」, Edinburgh-Tsukuba Collaboration Meeting (Bayes Center, The University of Edinburgh, Edinburgh, UK, Decenmber 3-4, 2018).

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 山崎剛 「Lattice QCD studies on nucleon form factors」, KEK 研究会「QCD と核子構造の進展 2019」(KEK, つくば, 2019 年 2 月 28 日-3 月 1 日).

B) その他の発表

1. 鈴木博, 江尻信司, 石見涼, 金谷和至, 北澤正清, 下条昂礼, 谷口裕介, 梅田貴士 「グラディエント・フローによる量子色力学の状態方程式」, 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN) 第 10 回シンポジウム(THE GRAND HALL, 東京都, 品川区, 7/12-13, 2018).
2. 谷口裕介, 馬場惇, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 下条昂礼, 鈴木遊, 鈴木博, 梅田貴士 「QGP 粘性係数導出に向けた Nf=2+1 QCD エネルギー運動量テンソル相関関数

- の研究」, 熱場の量子論とその応用 2018 (TQFT2018) (理化学研究所 iTHES, 埼玉県, 和光市, 8.28-30, 2018).
3. 金谷和至, 江尻信司, 石見涼, 北澤正清, 下条昂礼, 白銀瑞樹, 鈴木博, 谷口裕介, 梅田貴士「グラジエントフローによる 2+1 フレーバーQCD の状態方程式-格子間隔依存性の検証」, 熱場の量子論とその応用 2018 (TQFT2018) (理化学研究所 iTHES, 埼玉県, 和光市, 8.28-30, 2018).
 4. 板垣翔太, 石見涼, 梅田貴士, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 白銀瑞樹「再重み付け法による SU(3)ゲージ理論の重いクォーク領域における一次相転移終点でのハドロン質量の計算」, 熱場の量子論とその応用 2018 (TQFT2018) (理化学研究所 iTHES, 埼玉県, 和光市, 8.28-30, 2018).
 5. 馬場惇, 梅田貴士, 江尻信司, 金谷和至, 北澤正清, 下条昂礼, 鈴木博, 谷口裕介, 鈴木遊「Gradient flow を用いたカイラル感受率の測定」, 熱場の量子論とその応用 2018 (TQFT2018) (理化学研究所 iTHES, 埼玉県, 和光市, 8.28-30, 2018).
 6. 滑川裕介, 山崎剛「格子 QCD による半質量殻外散乱振幅のクォーク質量依存性評価」, 日本物理学会 2018 年秋季大会 (信州大学, 松本, 2018 年 9 月 14-17 日).
 7. 賀数淳平, 石川健一, 石塚成人, 藏増嘉伸, 中村宜文, 滑川裕介, 谷口裕介, 浮田尚哉, 山崎剛, 吉江友照 for PACS Collaboration「物理点での大規模格子 QCD による軽中間子形状因子計算」, 日本物理学会 2018 年秋季大会 (信州大学, 松本, 2018 年 9 月 14-17 日).
 8. 谷口裕介, 梅田貴士, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 下条昂礼, 鈴木遊, 鈴木博, 馬場惇「QGP 粘性係数導出に向けた $N_f=2+1$ QCD エネルギー運動量テンソル相関関数の研究」, 日本物理学会 2018 年秋季大会 (信州大学, 松本, 2018 年 9 月 14-17 日).
 9. 鈴木博, 石見涼, 梅田貴士, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 下条昂礼, 白銀瑞樹, 鈴木遊, 谷口裕介, 馬場惇「Thermodynamic quantities in the $N_f=2+1$ QCD; the case of somewhat heavy ud quarks」, 日本物理学会 2018 年秋季大会 (信州大学, 松本, 2018 年 9 月 14-17 日).
 10. 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「Gradient flow を用いたカイラル感受率の測定」, 日本物理学会 2018 年秋季大会 (信州大学, 松本, 2018 年 9 月 14-17 日).
 11. 板垣翔太, 石見涼, 梅田貴士, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 白銀瑞樹「重いクォーク領域における格子 QCD の臨界質量の決定に関するホッピングパラメータ展開の収束性」, 日本物理学会 2018 年秋季大会 (信州大学, 松本, 2018 年 9 月 14-17 日).

12. 清原淳史, 板垣翔太, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 谷口裕介, 白銀瑞樹「ポリヤコフループを含む作用に基づくモンテカルロ計算による重クォーク QCD の相転移の解析」, 日本物理学会 2018 年秋季大会 (信州大学, 松本, 2018 年 9 月 14-17 日).
13. 鈴木遊, 谷口祐介「Gradient flow を用いた $\Delta S=1$ の 4-fermion 演算子の繰り込み因子の計算」, 日本物理学会 2018 年秋季大会 (信州大学, 松本, 2018 年 9 月 14-17 日).
14. 吉村友佑, 蔵増嘉伸「テンソルくりこみ群による 3 次元有限温度 Z_2 ゲージ理論」, 日本物理学会 2018 年秋季大会 (信州大学, 松本, 2018 年 9 月 14-17 日).
15. 江尻信司, 金谷和至, 梅田貴士, 谷口裕介, 北澤正清, 鈴木博, 若林直輝, 下条昂礼, 鈴木遊, 馬場惇, 板垣翔太, 白銀瑞樹「ウィルソン型フェルミオンを用いた 2+1 フレーバーQCD の熱力学量」, 第 5 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会(THE GRAND HALL, 東京都, 品川区, 11/2, 2018).
16. 金谷和至, 石見涼, 梅田貴士, 江尻信司, 北沢正清, 下条昂礼, 白銀瑞樹, 鈴木遊, 鈴木博, 谷口裕介, 馬場惇「グラジエントフローによる格子 2+1 フレーバーQCD の熱力学研究」, 日本物理学会第 74 回年次大会 (九州大学, 福岡, 2019 年 3 月 14-17 日).
17. 谷口裕介, 梅田貴士, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 下条昂礼, 鈴木遊, 鈴木博, 馬場惇「QGP 粘性係数導出に向けた $N_f=2+1$ QCD エネルギー運動量テンソル相関関数の研究(II)」, 日本物理学会第 74 回年次大会 (九州大学, 福岡, 2019 年 3 月 14-17 日).
18. 清原淳史, 板垣翔太, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 白銀瑞樹, 谷口裕介「改良したクエンチ QCD による重クォーク QCD の臨界点の精密解析」, 日本物理学会第 74 回年次大会 (九州大学, 福岡, 2019 年 3 月 14-17 日).
19. 馬場惇, 石見涼, 梅田貴士, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 下条昂礼, 白銀瑞樹, 鈴木遊, 鈴木博, 谷口裕介「Wilson fermion の下での gradient flow を用いた PCAC 関係式の検証」, 日本物理学会第 74 回年次大会 (九州大学, 福岡, 2019 年 3 月 14-17 日).
20. 鈴木遊, 石見涼, 梅田貴士, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 下条昂礼, 白銀瑞樹, 鈴木博, 谷口裕介, 馬場惇「Gradient flow を用いた K 中間子の Bag パラメータの数値的研究」, 日本物理学会第 74 回年次大会 (九州大学, 福岡, 2019 年 3 月 14-17 日).
21. 秋山進一郎, 蔵増嘉伸, 吉村友佑, 山下巧「高次テンソル繰り込み群を用いた 4 次元 Ising 模型の比熱の解析」, 日本物理学会第 74 回年次大会 (九州大学, 福岡, 2019 年 3 月 14-17 日).
22. 坂井涼, 加堂大輔, 蔵増嘉伸, 中村宜文, 武田真滋, 吉村友佑「テンソルくりこみ群による 2 次元 ϕ^4 理論の臨界結合定数の計算」, 日本物理学会第 74 回年次大会 (九州大学, 福岡, 2019 年 3 月 14-17 日).

(4) 著書、解説記事等

1. 藏増嘉伸, “経路積分における数値的方法 –確率的手法と決定論的手法–”, 「数理科学」(サイエンス社) 2019 年 2 月号 No.668, 44-51.

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センター (R-CCS)
<https://www.r-ccs.riken.jp/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
教授	大須賀 健
准教授	森 正夫
准教授	矢島 秀伸
講師	吉川 耕司
助教	Wagner, Alexander
助教	古家 健次
研究員	高水 裕一 (CCS)
研究員	田中 賢 (HPCI 重点)
研究員	安部 牧人 (科研費/矢島)
研究員	五十嵐 朱夏 (数理解物質科学研究科)
学生	大学院生 13 名 学類生 7 名

2. 概要

本年度、当グループは、ライン駆動型円盤風による巨大ブラックホール成長の抑制、ボンディ半径領域の輻射流体計算によるブラックホールの急速成長メカニズム、超高光度 X 線パルサーの理論モデルの構築、冷たいダークマターハローにおけるカスプ-コア問題、IC10 とダークサテライトの衝突シミュレーション、遷音速アウトフローモデルにおける銀河風の遷音速および常亜音速流の存在可能性、初代銀河のスターバーストと輻射特性の関係、21-cm 線マップによる宇宙再電離研究、初代ブラックホール成長における輻射と角運動量の影響、宇宙大規模構造形成に対するニュートリノの力学的影響、活動銀河核フィードバック、原始惑星系円盤の化学構造にダスト成長が与える影響、星形成領域における水素分子の核スピン転換、一般相対論を拡張した重力理論におけるスカラーテンソルの摂動論の研究、初代星形成における再結合放射の影響、初代星の影響を考慮した高解像度初代銀河形成シミュレーションの研究を行った。また、宇宙生命計算科学連携として、ガスのダスト表面でのラジカル反応、原始太陽系におけるダスト成長過程の研究を行った。計算コード開発としては、ボルツマン法に基づく一般相対論的輻射磁気流体力学計算コードの開発、SIMD 命令を用いた SPH 法的高速化、重力多体高速演算ライブラリ Phantom-GRAPE の AVX-512 命令への対応を行った。

3. 研究成果

【1】 ライン駆動型円盤風による巨大ブラックホール成長の抑制

巨大ブラックホールがその正体と考えられている活動銀河中心核では、光速の 10%程度に達する強力なアウトフローが観測されている。しかし、その起源はよくわかっていない。これまでの研究により、ブラックホール周囲の降着円盤がエディントン光度の 10%から数十%で輝く場合、ラインフォース（重元素の束縛-束縛遷移吸収による輻射力）が部分的に重力を凌駕するようになり、円盤表面からガスが噴出することがわかっている（Proga et al. 2000, Nomura & Ohsuga 2017）。このライン駆動型円盤風モデルは、観測結果とよく説明できるが、円盤の光度がエディントン光度に近い場合が適用範囲外であった。大量のガスが噴出することによる降着円盤の変化を考慮していないからである。本研究では、輻射流体シミュレーションを実施し、円盤風の噴出による降着円盤の質量降着率の変化を考慮した新たな円盤風モデルを構築した。その結果、降着円盤に供給されたガスのうち、最大で 60-70%が円盤風として吹き出すことがわかった（Nomura et al. submitted）。これは、エディントン光度付近で、巨大ブラックホールの成長速度が抑制されることを意味する。

【2】 ボンディ半径領域の輻射流体計算によるブラックホールの急速成長メカニズム

初期宇宙に既に巨大ブラックホールが存在するという事実は、ブラックホールが急速成長したことを意味する。急速成長を可能にするメカニズムの一つが超エディントン降着であるが、ボンディ半径領域でそれが可能か否か、まだ決着がついていない。ブラックホール近傍の降着ガスが発する光の輻射スペクトルがベキ型であると仮定した輻射流体シミュレーションでは、ブラックホール質量が大きく、ガス密度が高い場合に超エディントン降着が実現されることが示された（Takeo et al. 2018）が、超エディントン降着が実現されると、ブラックホール近傍ではスリム円盤が形成され、ベキ型ではなく熱的放射が生じると考えられる。そこで本研究では、円盤からの熱的放射を考慮した輻射流体シミュレーションを実施した。その結果、ベキ型を仮定して先行研究よりも、広いブラックホール質量で超エディントン降着が可能であることが判明した（Takeo et al. submitted）。ブラックホール質量が小さいと円盤の温度が高くなるため、ベキ型を仮定した場合よりも電離光子の数が減ることがその理由である。

【3】 超高光度 X 線パルサーの理論モデルの構築

超高光度 X 線源は、太陽光度のおよそ 100 万倍を超える X 線光度を持つ天体で、近傍銀河で数百個発見されているが、そのエネルギー源はよくわかっていない。そのような状況の中、5 つの超高光度 X 線源で X 線パルスが検出され、その中心天体は中性子星と判明した。これらの超高光度 X 線源を超高光度 X 線パルサーと呼ぶが、強力な X 線の放射機構および X 線

パルスの生成機構は未解明である。本研究では、大量のガスが中性子星の磁極に降着するという超臨界降着柱モデルを構築した。輻射流体シミュレーションにより、降着ガスの重力エネルギーが輻射エネルギーに変換され、それが主に降着柱の側面から解放されるという描像が得られた (Kawashima et al. 2016, Kawashima & Ohsuga submitted)。これは、従来の電波パルサーとは全くことなる構造である。また、回転軸と磁軸が傾いているという状況を想定し、一般相対論的輻射輸送計算で光度曲線を計算した。その結果、観測されている X 線パルスと大きく矛盾しないことがわかった。

【4】 Cold dark matter halo における cusp-core 問題

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。本研究ではこの問題を、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 SCF 法も用いたシミュレーション解析を行った。本年度は特に、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について詳細な解析をおこなった。その結果、振動の高波長モードが高いエネルギー輸送効率を示すことを見出し、カスプからコアへの遷移を引き起こす素過程の詳細を解析した。

【5】 IC10 と dark satellite の衝突シミュレーション

我々の住む天の川銀河や近傍のアンドロメダ銀河 (M31) の周囲には、数十個程度の衛星銀河が観測されているが、 Λ CDM モデルに基づく N 体シミュレーションによると、M31 サイズの Dark Matter Halo には、観測されているよりも遥かに多くの sub halo が付随していると予想されている (Moore et al., 1999)。この理論と観測との不一致は Missing satellite problem と呼ばれ、銀河形成の謎の一つとされている。この Missing satellite problem に対して、総質量のほとんどが dark matter で構成された非常に暗い銀河 (Dark Satellite ; DS) が多数存在している可能性が理論的に指摘されている。本研究では IC10 で観測された HI gas stream に着目し、DS の存在可能性について調査した。M31 の衛星銀河である IC10 に counter part が観測されていない HI gas stream が観測されており、DS との相互作用の可能性が議論されている(Nidever et al., 2013)。我々は IC10 モデルとのダークマターとガスをもつ DS の衝突実験を N 体/SPH シミュレーションを用いて行った。IC10 モデルには proper motion の観測 (Brunthaler et al., 2007)

に基づく軌道運動を考え、DS の質量やスケール半径、軌道要素を変えながら銀河衝突シミュレーションを実行し、観測を再現する stream を形成する DS の条件を見出すことに成功した。

【6】 Transonic outflow モデルにおける銀河風の遷音速および常亜音速流の存在可能性

銀河風はエネルギーやガスの輸送、銀河内での重元素循環や銀河間空間の重元素汚染といった、銀河の形成進化や銀河間空間の進化に対して重要な役割を担っている。我々は、現実的なダークマターハロー (DMH) /超大質量ブラックホール (SMBH) 重力場の下での銀河風の遷音速加速過程の研究を行ってきた。その加速過程は超新星や恒星風などによって供給される熱エネルギーと銀河中心の SMBH や DMH による重力ポテンシャルの大小関係を表す無次元パラメーターによって決定され、遷音速流が最大エントロピーもしくは最小エネルギーの解であることを示した。また我々は、銀河風の解析解の線形安定性について調べ、DMH の密度分布に依らず、常亜音速解は物理的には不安定であるが摂動の成長時間が宇宙年齢よりも長く実質的には安定であるという結果を得た。本研究では、常亜音速流の吹出す速度について、赤方偏移や DMH の密度分布、銀河の質量に対する依存性について解析を行った。その結果、赤方偏移が小さくなるにつれて常亜音速流として銀河風が吹出すことが難しくなり、低質量の銀河においてその条件はより厳しくなっていくことを示した。

【7】 初代銀河のスターバーストと輻射特性の関係

近年の観測により遠方銀河が多数観測されている。それらは紫外線で明るいものや、赤外線で見えるもの、水素や炭素、酸素の輝線が強い天体などさまざまな個性を持つ。我々は宇宙論的流体計算と輻射輸送計算を組み合わせる事で、初代銀河の物理状態と光学特性の関係を調べた。結果として、多重超新星爆発の影響により、銀河内のガスは銀河外に排出され、星形成が間欠的に起きることが分かった。この時、スターバースト開始直後は、星形成領域内のダストとガスに星の紫外線は吸収され銀河は赤外線で見えるようになる。その後、ガスのアウトフローとともに紫外線が外に漏れ出す事で銀河は紫外線で明るくなることを示した。これらの結果は現在 *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* に投稿中である (Arata, Yajima, Nagamine, 2019)。また、これらの計算に加え、現在アルマ望遠鏡の重要な観測波長である炭素と酸素の輝線放射を計算する部分もコードに加え、輝線を含む多波長スペクトルの計算コードを新たに完成させた。これを使った計算により、初代銀河は、スターバースト初期フェーズでは[OIII]輝線を強く放射する事などが分かった。これら輝線を含む光学特性の研究成果もまとまりつつあり、近日中に論文として投稿予定である。

【8】 21-cm 線マップによる宇宙再電離研究

遠方銀河間ガスの水素が放射する超微細構造線 (21-cm 線) は、宇宙の大域的電離構造、すなわち宇宙再電離過程を探る手段として有力視されている。この遠方宇宙の 21-cm 線を観測するために、現在 SKA 計画など大規模な電波観測計画が国際連携のもと進められている。我々は、輻射流体計算によって初代星周辺に形成される 21-cm 線放射分布をモデル化した。結果として、初代星形成直後は電離波面がミニハロー内に捕捉されているため、周辺ガスは低温のままで 21-cm 線シグナルは宇宙背景放射に対して吸収になることを示した。その後、電離波面がハローの外に到達すると電離バブルは大きく広がり、周辺 21-cm シグナルは宇宙背景放射に対して優位に大きくなることが分かった (Tanaka et al. 2018)。

これらの研究に加え、銀河の大域的分布と 21-cm シグナルの分布の関係についても調べた。銀河と 21-cm シグナルは近距離では反相関の関係があることが期待されている。大規模スケールの N 体計算と、輻射流体計算による銀河のモデル化を組み合わせる事で、銀河と 21-cm の相互相関関数を見積もった。結果として、SKA とすばる PFS の将来観測を組み合わせる事で、1 メガパーセク程度以上の電離バブル分布を反映したパワースペクトルが得られる事を示した(Kubota et al. 2018)。

【9】 初代ブラックホール成長における輻射と角運動量の影響

初期宇宙の巨大ブラックホールがどのように形成されたのかは、理論的にも観測的にもよく分かっていない。我々は 2 次元輻射流体計算により、角運動量を持つガス雲の中にブラックホールが存在する場合、ブラックホールの質量成長はどのように進むのかを調べた。

結果として、角運動量が小さい場合においては、ブラックホール降着円盤からの輻射の影の部分からガスは効率良くブラックホールへ輸送され、エディントン限界を超える降着率も実現できることが分かった。一方、輻射フィードバックが等方に近い場合、ガス降着率はボンディ降着率の 1% 程度まで抑制されることが分かった。これに加え、非等方な輻射フィードバックの場合でも、ガス雲の角運動量が大きい場合は、半径の大きいガス円盤が形成される。この場合、アルファ粘性によってゆっくりとガス円盤の角運動量輸送が起こり、ブラックホールへのガス降着率はボンディ降着率の 1% 程度まで抑制される事が分かった。したがって我々は、角運動量や輻射フィードバックにより、初代ブラックホールの質量成長は効率良く進まないことを示した (Sugimura, Hosokawa, Yajima, Inayoshi, Omukai 2018, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society)。

【10】 宇宙大規模構造形成に対するニュートリノの力学的影響

ブラソフ方程式の直接数値シミュレーションを用いて、質量を持つニュートリノの宇宙大規模構造形成に対する影響の研究を行った。H30 年度は、複数のニュートリノ質量について

の宇宙大規模構造の数値シミュレーションを様々な大きさのシミュレーション領域について行い、さらに数多くの統計的サンプルについて数値シミュレーションを行うことで、幅広い空間スケールについてニュートリノの力学的影響を精度よく詳細に調べた。具体的にはダークマターの密度揺らぎのパワースペクトル、ダークマターハローの質量関数を調べ、従来の N 体シミュレーションを用いた数値シミュレーションや解析的な研究と整合的な結果を確認した。また、理論的に予言されていたニュートリノとダークマターの相対速度に起因するニュートリノ航跡の存在をダークマターとニュートリノの相互相関関数の解析により明らかにし、ニュートリノ航跡の大きさがニュートリノ質量に依存することを発見した。

更に、ダークマターの重力計算に関して昨年度まではニュートリノ成分とのカップリングのために Particle-Mesh (PM) 法と呼ばれる空間解像度があまり良くない手法を用いていたが、ブラソフ方程式のメッシュ幅と重力計算のメッシュ幅を適切に調整することでダークマターの重力計算を空間解像度の良い TreePM 法を用いて計算できるように改良することに成功した。

【11】 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) conducted simulations of jets interacting with massive disc galaxies and inducing turbulence and star-formation within. A strong dependence of the interaction on the inclination of the disc was discovered. (Mukherjee, Bicknell, Wagner, et al 2018); 2) performed high-resolution wind-cloud interaction simulations, following the fragmentation, compression and destruction of a turbulent cloud embedded in a fast astrophysical flow. The work uncovered the very differing of evolution of turbulent clouds dominated by solenoidal modes, and those dominated by compressive modes (Banda-Barragán, including Wagner, 2019); 3) investigated how the jet in 4C 31.04 is shocking and exciting molecular and ionized gas in the circumnuclear region of the galaxy using adaptive optics-assisted H- and K-band integral field Gemini/NIFS observation. A picture emerges in which the jet is directly dispersing the

ionized gas in the inner few 100 pc while the energy bubble is shock exciting molecular hydrogen on an approximately kpc scale (Zovaro et al 2019).

【12】 原始惑星系円盤の化学構造にダスト成長が与える影響

原始惑星系円盤は惑星形成の現場である。円盤内の固体粒子（ダスト+氷）やガスは惑星の材料物質であり、それら材料物質の分子組成が、やがて形成される惑星の組成を決める。近年の ALMA による観測から、ダスト成長が円盤内の揮発性物質分布に大きな影響を与えることが示唆されているが、その詳細は観測的にも理論的にもよく分かっていない。そこで、ダスト成長が円盤内の揮発性物質分布に与える影響を数値計算により調べた。ダスト成長モデルと化学反応モデルをカップルした数値計算コードを開発し、計算を実行した。その結果、成長した氷ダストの中心星方向への落下と氷マントルの昇華により、水 (H_2O) や一酸化炭素 (CO) はそれぞれの昇華半径（＝スノーライン）より内側において気相に溜まることが確認された。この現象はすべての分子種について起こるわけではなく、一部の分子種は氷ダストの落下の時間スケールよりも短い時間スケールで効率的に気相反応により破壊され、リング状に分布することが分かった。また、氷ダストの中心星方向への落下により、原始惑星系円盤の元素組成の非一様化が起こることが分かった。

【13】 星形成領域における水素分子の核スピン転換

星形成領域の主成分は水素分子である。水素分子には2つの原子核スピン状態（オルソとパラ）が存在する。オルソとパラの割合（オルソ/パラ比）は、星形成領域における分子の励起や化学反応速度（例、重水素濃縮）に多大な影響を与えるため、オルソ/パラ比の理解は重要である。これまで星形成領域における水素分子の核スピン転換は、気相でのプロトン交換反応が主要な機構と考えられてきた。一方近年の室内実験により、氷ダスト表面上で効率的にスピン転換が起こることが明らかになってきた。星形成領域において気相でのプロトン交換反応、氷ダスト表面上でのスピン転換のどちらが主要なスピン転換機構かを明らかにする目的で、モデル計算を行った。その結果、ダスト温度が 20 K 以下であれば氷ダスト表面でのスピン転換が支配的であることが分かった。低温な星形成前の分子雲コアでは、これまでと考えられていたよりも最大で数倍程度短い時間スケールでスピン転換が起こっていると考えられる。

【14】 一般相対論を拡張した重力理論におけるスカラーテンソルの摂動論の研究

宇宙は現在まで、二度の加速膨張期をへており、それぞれダークエネルギーとインフラトンという正体解明のエネルギーに支配されていた時期がある。これらのモデルが示す観測的特徴を明確に区別するには、スカラーテンソルの一般的な揺らぎの発展方程式を扱う必要が

ある。例えば宇宙背景放射や背景重力波の将来観測は、それぞれ原始密度揺らぎというスカラー揺らぎ、原始重力波のテンソル揺らぎが対応している。宇宙の地平線を超える超巨視的スケールにおける勾配展開を用いて、これらが結合する非線形領域まで解析することができる画期的手法を確立した。

【15】 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、宇宙初期の第一世代星の形成過程について、これまでの研究では適切に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。一般に第一世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、光加熱によって星形成を抑制する一方で光電離による自由電子の供給を通して水素分子を形成することで星形成を促進するという両面があるが、再結合放射は光加熱には寄与せず光電離とそれに伴う水素分子形成のみに寄与するため、第一世代星形成に重要な働きをすると考えられる。そこで、本研究では近傍の星が第一世代星形成を促進・阻害する条件をARGOTコードを用いて計算し、その結果、再結合放射を考慮した場合は電離波面付近の中性ガスが緩やかに電離されることにより水素分子形成とそれによる水素分子解離光子の自己遮蔽が促進され、再結合放射を考慮しない場合に比べ第一世代星の形成が促進される傾向があることがわかった。

【16】 初代星の影響を考慮した高解像度初代銀河形成シミュレーション

初代銀河は、現在の銀河の最も基本的なビルディングブロックであり、また初代銀河のような低質量銀河は宇宙再電離に重要な役割を果たしたと考えられている。そのため、初代銀河は次世代観測計画のターゲットとなっており、理論天文学においてもその形成過程の解明は重要な研究課題の一つである。初代銀河は、宇宙で最初の天体である初代星の形成、および進化を経た多数のminihaloが集積して形成される。そのため、初代銀河形成シミュレーションでは、minihaloにおける初代星の形成条件や、個々の初代星の輻射や超新星爆発といったフィードバックの効果を分解する高解像度の計算が必要となる。本研究では、ガスの質量分解能 $\sim 10M_{\odot}$ を達成し、単体の初代星を分解した宇宙論的流体力学計算によって、初代星の形成・進化から、それらが合体して初代銀河へと進化する一連の過程を追った。シミュレーションの結果、多数の初代星超新星爆発によって銀河間ガスへ放出された重元素は、やがて合体成長過程で初代銀河のホストハローに再び取り込まれることが示された。初代星の初期質量関数 (initial mass function, IMF) として、core-collapse supernova (CCSN, $8M_{\odot} < M_{\text{popIII}} < 40M_{\odot}$) が優勢となる Salpeter-like IMF を仮定したところ、初代銀河の星形成のモードは、赤方偏移 $z \sim 12$ を境に種族 III から種族 II へと遷移することがわかった。一方、top-heavy IMF

では pair-instability SN (PISN, $140M_{\odot} < M_{\text{popIII}} < 260M_{\odot}$) が優勢となる。PISN は CCSN に対して放出されるエネルギーが 100 倍程度大きく、激しい爆発を多数起こした結果としてガス欠の初代銀河が形成された。この場合は銀河の星形成率が低く、 $z=9$ においても種族 II の星が形成されないことがわかった。

【17】 ガスのダスト表面でのラジカル反応（宇宙生命計算科学連携）

星間空間における複雑有機分子生成において重要な星間ダスト表面におけるラジカル反応のメカニズムの詳細を明らかにするため、第一原理分子動力学計算を行った。ダスト表面モデルとしてグラフェン表面を用い、グラフェン表面に化学吸着している CHO と遊離 H の反応 (Eley-Rideal (ER) 機構) を、Car-Parrinello molecular dynamics simulation (CPMD) を用いて解析した。CHO の化学吸着の状態を 2 通り (C または H 原子においてグラフェン表面に吸着, 図 1) 検証し、反応生成物の種類や生成後の移動の様子を解析した。CHO が H 原子でグラフェン表面に吸着している場合、多くのトラジェクトリーにおいて、遊離 H は CHO の C 原子と結合して CH_2O を生成したが、生成した CH_2O は、CHO がいた場所の近くにとどまっていた (図 1(b))。一方、CHO が C 原子でグラフェン表面に結合している場合、主に $\text{CO} + \text{H}_2$ が生成し、生成した CO は垂直方向に (表面から解離する方向に) 移動していく一方、生成した H_2 は表面に水平方向に移動していくものが多いという結果が得られた (図 1(a))。

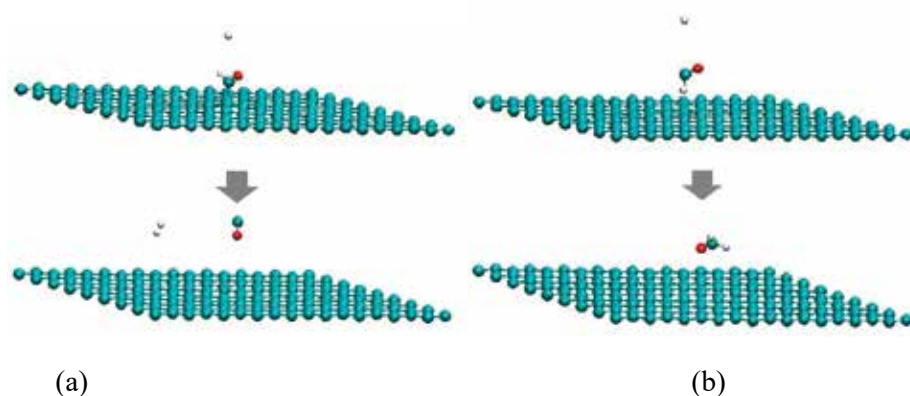


図 1 (a) グラフェン表面に C 原子で吸着している CHO と遊離 H の反応により生成した $\text{CO} + \text{H}_2$ 。
(b) グラフェン表面に H 原子で吸着している CHO と遊離 H の反応により生成した CH_2O 。

【18】 原始太陽系におけるダスト成長過程の研究（宇宙生命計算科学連携）

原始惑星系円盤乱流中の微惑星形成過程を明らかにするため、「原始惑星系円盤乱流中のダストの衝突付着成長シミュレーションコードの開発」を行い、以下の成果を得た。

・ 非圧縮性及び圧縮性乱流場中のダストの衝突付着の比較

圧縮性乱流中のダストの平均衝突速度や衝突付着率等の統計を非圧縮性乱流における結果と比較し、圧縮性が弱い場合、基本的には非圧縮の場合と同等な結果が得られることを定量

的に明らかにした（図 2 参照）。圧縮性乱流の直接数値計算における外力項の取り扱い方の見直しを行い、乱流場の圧縮性の強さをより細かく制御することが可能になった。結果として、圧縮性乱流場の統計的な準定常性を向上させることが可能となり、信頼性の高い結果による比較が実現した。また、乱流場の圧縮性が強くなると弱い衝撃波が現れ、慣性が小さい粒子の衝突付着の統計がわずかに影響を受けること、及び、慣性の大きい粒子においても衝突速度分布がわずかに変化し、付着率が若干高まることが明らかとなった。

・圧縮性乱流場シミュレーションコードの高効率化

圧縮性ナビエ・ストークス方程式中の外力を数値的に制御することにより、圧縮性乱流場における圧縮成分と非圧縮成分の割合をある程度任意に設定できることを確認した。また、これにより圧縮性の強さの異なる多様な条件下での数値実験が可能となった。また、その外力の制御の方法を高効率化し、結果として、圧縮性乱流場のシミュレーションコードの高効率化に成功した。

・シミュレーション結果の解析手法の開発

開発したコードによる乱流中のダストの衝突付着成長シミュレーションでは、乱流による粒子のクラスタリングが乱流中のダストの衝突付着成長を促進することを示す結果を得た。乱流クラスタリングによる粒子の衝突付着成長促進の効果の原理を明らかにするため、乱流場のストレインテンソルの固有ベクトルを活用した解析手法（Elsinga & Marusic, JFM 2010）を応用し、流れ構造と粒子分布の関係を定量的に調べることを可能にする解析手法を開発した。その結果、乱流中の高渦度領域は慣性のある粒子の低密度領域を生成し、慣性の大きさに応じた特定の非等方的な密度分布を有することが分かった（Ishihara & Sakurai, JPSJ 2018）。また、高渦度領域の周りで平均化して得られた乱流場中の慣性粒子の振る舞いを調べた結果、慣性粒子は遠心力で高渦度の中心から吐き出されるが背景となるストレイン場によって中心からある程度離れた箇所に留まる傾向があること、また、そこでは慣性粒子同士が低速に接触しうることが分かった。

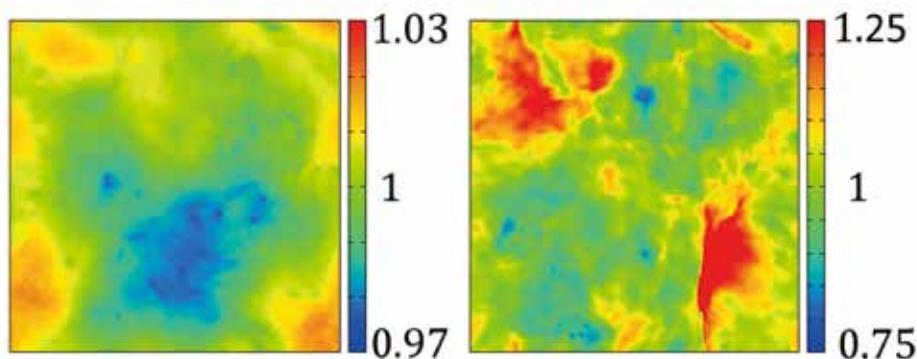


図 2 圧縮性乱流 ($Re=900$) のある断面上の密度分布; (左) マッハ数 $Ma=0.1$ (右) $Ma=0.3$ 。比較に用いた非圧縮乱流($Re=900$)では密度は一様($=1$)である。このように乱流場そのものは

目に見える違いを有する場合でも、乱流中の粒子衝突に関する統計量には目立った違いがないことが定量的に示された。

【19】 ボルツマン法に基づく一般相対論的輻射磁気流体力学計算コードの開発

ブラックホールや中性子星の周囲でおこる高エネルギー現象を調べるには、一般相対性理論、輻射輸送、磁気流体力学を全て加味した一般相対論的輻射磁気流体力学（GR-RMHD）計算が必要となる。GR-RMHD 計算は近年ようやく可能となったが、輻射輸送の計算量を抑えるために M1-closure 法を用いていた。これはある種の近似法であり、輻射場の非等方性を正しく扱うことができないという問題がある。本研究では、輻射輸送方程式を直接解くことで、輻射場の非等方性をより厳密に考慮できる新たな GR-RMHD コードを開発した。光の交差問題、散乱問題、相対論的輻射衝撃波問題など、いくつかのテスト計算に成功した。

【20】 SIMD 命令を用いた SPH 法的高速化

近年のプロセッサではプロセッサ内部で同一の命令を複数のデータに対して並列に実行することで演算性能を向上させる SIMD（Single Instruction Multi Data）命令が実装されていて、この SIMD 命令を効率的に利用することで数値シミュレーションを高速化することが可能である。我々は宇宙物理学における数値流体シミュレーションで用いられる Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法を SIMD 命令によって 5～8 倍高速化することに成功した。

【21】 AVX-512 命令に対応した重力多体高速演算ライブラリ Phantom-GRAPE

宇宙物理学の数値シミュレーションでよく使われる N 体シミュレーションにおいて、粒子間の重力相互作用を SIMD 命令を用いて高速に演算する数値演算ライブラリ、Phantom-GRAPE を Intel 社の最新の SIMD 命令である AVX-512 命令に対応させることによって、最新の Intel x86 アーキテクチャのプロセッサにおいて従来の AVX 命令を用いた場合と比較して約 2 倍の演算性能を達成した。

4. 教育

【学位論文】

<博士論文>

1. 加藤一輝

Dynamics of the cusp-to-core transformation in less massive galaxies and formation of the ultra-diffuse galaxies

<修士論文>

1. 阿左美 進也
輻射拡散方程式に基づく初代天体形成へのライマンアルファ輻射の効果の解明
2. 田辺 直人
PopIII天体による銀河間重元素の検出可能性
3. 永野裕太
銀河風における遷音速および常亜音速流の存在可能性
4. 宮川銀次郎
IC10 に付随する HI gas stream の形成シミュレーションから探る dark satellite の存在可能性

<学士論文>

1. 倉西 嶺人
相対論的変動エディントン因子の輻射輸送計算
2. 茂木 孝人
ダークマターの超巨大ブラックホールへの降着
3. 大滝恒輝
銀河形成シミュレーションに向けた SPH 法の実装
4. 井上壮大
中性子星への超臨界降着柱モデルによる超高光度 X 線源の X 線パルスの計算
5. 荻野圭那子
円盤風の噴出による降着円盤の構造の変化
6. 和間雄司
AGN ジェットによる乱流とガス円盤でのフィードバックの解析

【集中講義】

- 森正夫
新潟大学大学院自然科学研究科非常勤講師
集中講義「宇宙物理学」，2018 年 11 月 20 日～21 日，新潟大学

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」

(H30 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～H31 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」萌芽的課題，「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）

(H30 年度 1,278 万円／全体 4,874 万円)

- 基盤研究（C）（一般）H30 年度～H32 年度：大須賀健

「輻射磁気流体力学計算と輻射スペクトル計算で解明する超高光度 X 線源の起源」

(H30 度 110 万円／全体 290 万円)

- 新学術領域研究（研究領域提案型）H30 年度～H31 年度：大須賀健

「連星ブラックホール形成の解明に向けた孤立ブラックホールの輻射磁気流体力学計算」

(H30 度 90 万円／全体 180 万円)

- 基盤研究（C）（一般）H26 年度～H30 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」

(H30 度 80 万円／全体 520 万円)

- 若手研究（A）H29 年度～H32 年度：矢島秀伸

「高分解能数値シミュレーションで迫る初期宇宙の銀河進化メカニズム：多様性の解明へ」

(H30 年度 360 万円 / 全体 1400 万円)

- 新学術領域研究（研究領域提案型）H30 年度～H31 年度：矢島秀伸

「初代銀河と共存する初代星の形成メカニズムの研究」

(H30 年度 100 万円 / 全体 200 万円)

- ALMA 共同科学研究事業（区分 A）H31 年度～H33 年度：矢島秀伸

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

(H30 年度 100 万円 / 全体 300 万円)

- 新学術領域研究（研究領域提案型）公募研究 H30 年度～H31 年度：吉川耕司

「Vlasov シミュレーションで迫るニュートリノの宇宙大規模構造形成への力学的影響」

(H30 年度 104 万円/全体 510 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」

(H30 年度 60 万円/全体 240 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」
(H30 年度分担金 15 万円／分担金全体 67.5 万円)
- 基盤研究 (C) (一般) H28 年度～H31 年度：梅村雅之 (代表者：高橋芳太)
「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」
(H30 年度分担金 10 万円／分担金全体 60 万円)
- 基盤研究 (A) (一般) H29 年度～H33 年度：大須賀健 (代表者：大向一行)
「理論シミュレーションで解明する巨大ブラックホールの起源」
(H30 年度分担金 10 万円／分担金全体 195 万円)
- 基盤研究 (C) (一般) H28 年度～H30 年度：大須賀健 (代表者：海老沢研)
「X 線観測と理論の比較によるコンパクト天体への質量降着とアフトフロー現象の研究」
(H30 年度分担金 15 万円／分担金全体 65 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」
(H30 年度分担金 40 万円／分担金全体 52.5 万円)
- 基盤研究 (A) H29 年度～H32 年度：矢島秀伸 (代表者：井上昭雄)
「すばる狭帯域深宇宙探査で暴く宇宙再電離：CHORUS プロジェクト」
(H30 年度分担金 66 万円 / 分担金全体 280 万円)
- 基盤研究 (A) H30 年度～H34 年度：矢島秀伸 (代表者：児玉忠恭)
「銀河形成の加速と減速を司る物理過程の実証的解明」
(H30 年度分担金 10 万円 / 分担金全体 40 万円)
- 科学技術試験研究委託事業, H27 年度～H31 年度：吉川耕司 (代表者：青木慎也)
「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」(サブ課題 C 大規模
数値計算と広域宇宙観測データの融合による宇宙進化の解明)
(H30 年度 819 万円/全体 3428 万円)
- 挑戦的萌芽研究 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」
(H30 年度分担金 50 万円/分担金全体 100 万円)

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. V. Taquet et al. (including K. Furuya), 2018, Linking interstellar and cometary O₂: a deep search for ¹⁶O¹⁸O in the solar-type protostar IRAS 16293–2422, *Astronomy & Astrophysics*, 618, A11
2. M. Nomura et al. (including K. Ohsuga), 2018, Magnetohydrodynamic Simulations of a Plunging Black Hole into a Molecular Cloud, *The Astrophysical Journal*, 859, 29
3. T. Tanaka, K. Hasegawa, H. Yajima, M. I. N. Kobayashi, N. Sugiyama, 2018, Stellar Mass Dependence of the 21-cm Signal Around the First Stars and Its Impact on the Global Signal, accepted in *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*
4. T. Kitaki, S. Mineshige, K. Ohsuga, T. Kawashima, 2018, Systematic two-dimensional radiation hydrodynamic simulations of super-Eddington accretion flow and outflow: Comparison with the slim disk model, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 70, 108
5. T. Kawashima, K. Ohsuga, Super-critical column-accretion onto strongly magnetized neutron stars in ULX pulsars, submitted to *Publications of the Astronomical Society of Japan*
6. M. G. H. Krause, (including A. Y. Wagner) 2018, How Frequent Are Close Supermassive Binary Black Holes in Powerful Jet Sources? *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 482, pp.240–261
7. Shutaro Ueda, Tetsu Kitayama, Masamune Oguri, Eiichiro Komatsu, Takuya Akahori, Daisuke Iono, Takumi Izumi, Ryohei Kawabe, Kotaro Kohno, Hiroshi Matsuo, Naomi Ota, Yasushi Suto, Shigehisa Takakuwa, Motokazu Takizawa, Takahiro Tsutsumi, Kohji Yoshikawa, Cool core disturbed: Observational evidence for coexistence of sub-sonic sloshing gas and stripped shock-heated gas around the core of RXJ1347.5-1145, accepted for *The Astrophysical Journal*
8. K. Furuya, Y. Watanabe, T. Sakai, Y. Aikawa, S. Yamamoto, Depletion of ¹⁵N in the center of L1544: Early transition from atomic to molecular nitrogen?, 2018, *Astronomy & Astrophysics*, 615, L16
9. Zovaro, H.R.M. et al. (including A. Y. Wagner), 2019. Jets blowing bubbles in the young radio galaxy 4C 31.04., *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 484, 3393
10. M. Nomura, K. Ohsuga, C. Done, Line-driven disc wind in near-Eddington active galactic nuclei: decrease of mass accretion rate due to powerful outflow, submitted to *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*

11. S. Arata, H. Yajima, K. Nagamine, S. Khochfar, C. Dalla Vecchia, Radiative properties of the first galaxies: rapid transition between blue and red, submitted to Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, arXiv: 181007621
12. W. E. Banda-Barragán, F. Zertuche, C. Federrath, J. García Del Valle, M.~Brüggen, and A. Y. Wagner, 2019, On the dynamics and survival of fractal clouds in galactic winds, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, submitted
13. I. Shimizu, K. Todoroki, H. Yajima, and K. Nagamine, 2019, Osaka Feedback Model: Isolated Disk Galaxy Simulations, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 484, 2632
14. E. Egami, ... H. Yajima (40 authors), Probing the high-redshift universe with SPICA: Toward the epoch of reionisation and beyond, 2018, PASA, 35, 48
15. E. Takeo, K. Inayoshi, K. Ohsuga, H. R. Takahashi, S. Mineshige, Super-Eddington growth of black holes in the early Universe: effects of disk radiation spectra, submitted to Monthly Notices of the Royal Astronomical Society
16. Kayanuma, M., Shoji, M., Furuya, K., Aikawa, Y., Umemura, M., Shigeta, Y., 2019, Theoretical study of the photodissociation reaction of methanol, Chemical Physics Letters 714, 137-142
17. 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, Publications of the Astronomical Society of Japan 70, 55.
18. Abe, M., Suzuki, H., Hasegawa, K., Semelin, B., Yajima, H., Umemura, M., 2018, SEURAT: SPH scheme extended with ultraviolet line radiative transfer, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 476, 2664-2673.
19. Miki, Y., Umemura, M., 2018, MAGI: many-component galaxy initializer, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 475, 2269-2281.
20. K. Kubota, S. Yoshiura, K. Takahashi, K. Hasegawa, H. Yajima, M. Ouchi, B. Pindor, R. L. Webster, 2018, Detectability of the 21-cm signal during the epoch of reionization with 21-cm Lyman-alpha cross correlation -I, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 479, 2754
21. K. Sugimura, T. Hosokawa, H. Yajima, K. Inayoshi, K. Omukai, 2018, Stunted accretion growth of black holes by combined effect of angular momentum and radiation feedback, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 478, 3961

22. H. Yajima, K. Sugimura, K. Hasegawa, 2018, Modelling of Lyman-alpha emitters and ionized bubbles at the epoch of reionization, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 477, 5406
23. A. K. Inoue, K. Hasegawa, H. Yajima, et al. 2018, SILVERRUSH. VI. A simulation of Lyman-alpha emitters in the reionization epoch and a comparison with Subaru Hyper Suprime-Cam survey early data
24. H. Fukushima, H. Yajima, K. Omukai, 2018, Condition for dust evacuation from the first galaxies, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 477, 1071
25. M. Abe, H. Suzuki, K. Hasegawa, H. Yajima, B. Semelin, H. Yajima, M. Umemura, 2018, SEURAT: SPH scheme extended with ultraviolet line radiative transfer
26. Komossa, D. W. Xu, & A. Y. Wagner. Extreme gaseous outflows in radio-loud narrow-line Seyfert 1 galaxies, 2018, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 477, pp.5115–5126.
27. D. Mukherjee, G. V. Bicknell, A. Y. Wagner. et al, Relativistic jet feedback - III. Feedback on gas discs, 2018, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 479, pp.5544–5566.
28. Y. Takamizu, Gradient expansion formalism for nonlinear superhorizon perturbations, submitted to Physical Review D, p1-p13, arXiv:1804.07516[gr-qc]

B) 査読無し論文

1. K. Yoshikawa, A. Tanikawa, Phantom-GRAPE: A Fast Numerical Library to Perform N-body Calculations, 2018, Research Notes of the AAS, 2, 231

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. 大須賀健, Radiation-MHD simulations of accretion flows and outflows around black holes and neutron stars, Max-Planck/Princeton Center for Plasma Physics Workshop, 4/23-4/26, Princeton Center for Theoretical Science, アメリカ合衆国
2. 大須賀健, Super-Eddington Flows and X-ray spectra, ULTRA-LUMINOUS X-RAY PULSARS, 6/6-6/8, European Space Astronomy Centre, スペイン
3. 大須賀健, Numerical simulations of super-Eddington accretion flows and outflows around black holes and neutron stars, 42nd COSPAR Scientific Assembly, 7/14-7/22, Pasadena, CA, USA
4. Wagner Alexander, Multiphase AGN Feeding and Feedback, 7/9 - 7/13, Sexten, Italy

5. 大須賀健, Radiation-MHD simulations of super-Eddington accretion flows and outflows, Time for Accretion, 8/6-8/10, Sigtuna, Sweden
6. 古家健次, Astrochemical models of water, Astrochemistry:: Past, Present, and Future, 7/10-7/13, Pasadena, CA, USA
7. 古家健次, Hydrogen and nitrogen isotopes follow different fractionation pathways in interstellar clouds, Our astrochemical history; Past, Present, and Future, 9/10-9/14, Assen, Netherlands
8. 吉川耕司, Vlasov simulations of collisionless selfgravitating systems and astrophysical plasmas, CCS International Symposium 2018, 15-16 Oct., Univ. of Tsukuba, Japan
9. 矢島秀伸, Cosmological simulations of dusty starburst galaxy formation in protocluster regions, East Asia ALMA science workshop, 17-19 Dec., Osaka Prefecture University, Japan
10. 大須賀健, R Effects of magnetic field on active galactic nuclei (accretion disk), Polarimetry in the ALMA era: A New Crossroads of Astrophysics, 3/26-3/29, NAOJ, Japan
11. 矢島秀伸, Cosmological simulations of galaxy formation in protocluster regions, FAPESP-Japan workshop, 18-21 Feb., University of Sao Paulo, Brazil
12. 大須賀健, Effects of magnetic field on active galactic nuclei (accretion disk), Polarimetry in the ALMA era: A New Crossroads of Astrophysics, 3/26-3/29, NAOJ, Japan

B) 一般講演

1. Satoshi Tanaka, Kohji Yoshikawa, Naoki Yoshida, Higher-order Vlasov-Poisson Simulation for Large-Scale Simulation with Massive Neutrino, XXX IUPAP Conference on Computational Physics 2018, 7/29 – 8/2, 2018, University of California, Davis, USA
2. 古家健次, Hydrogen and nitrogen isotopes follow different fractionation pathways in star-forming clouds, 42nd COSPAR Scientific Assembly, 7/14-7/22, Pasadena, CA, USA
3. 吉川耕司, Vlasov-Poisson simulations of cosmic neutrinos in the large-scale structure formation, The Eighth East Asian Numerical Astrophysics Meeting (EANAM 2018). October 22-26, National Cheng-Kung University (NCKU), Tainan, Taiwan
4. 田中賢, Effect of recombination radiation in the formation of first stars, The Eighth East Asian Numerical Astrophysics Meeting (EANAM 2018). October 22-26, National Cheng-Kung University (NCKU), Tainan, Taiwan
5. 古家健次, Isotopic fractionation in interstellar clouds: Hydrogen, carbon, nitrogen, and oxygen, Workshop on Interstellar Matter 2018, November 14-16, Hokkaido, Japan
6. 矢島秀伸, Cosmological simulations of first galaxy formation: Impacts of first stars, 2nd annual symposium of gravitational wave genesis, November 26-28, Kyoto University, Japan

7. 田中賢, Vlasov-Poisson simulations of neutrinos in the large-scale structure formation, The 1st R-CCS International Symposium, February 18-19, Kobe International Conference Center, Kobe, Japan
8. 矢島秀伸, Cosmological simulations of galaxy formation in the early Universe, LNBL-Tsukuba Workshop 2019, March 6-7th, Berkeley, USA
9. 大須賀健, Accretion onto isolated BHs and its observational signatures, Area Workshop 2019, Gravitational wave physics and astronomy: Genesis, February, 19, Nagaoka University of Technology, Niigata, Japan
10. 古家健次, Evolution of ices and deuteration during the formation stage of protoplanetary disks, New Quests in Stellar Astrophysics IV Astrochemistry, Astrobiology and the Origin of Life, 3/31-4/5, Puerto Vallarta, Mexico
11. 矢島秀伸, Panchromatic study of the first galaxies in cosmological simulations, IAU Symposium 341, PanModel2018: Challenges in Panchromatic Galaxy Modelling with Next Generation Facilities, 12-16 Nov. Osaka University, Japan

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 古家健次, 星・惑星系形成領域における水素・窒素同位体分別, 日本地球惑星科学連合 2018 年大会, 2018 年 5 月 20 日-24 日, 幕張メッセ, 千葉
2. 田中賢, 『ブラソフ方程式の高精度数値解法』, 平成 30 年度 名古屋大学宇宙地球環境研究所および国立極地研究所 共同研究集会 STE シミュレーション研究会, 2018 年 9 月 3 日-5 日, 成蹊大学, 東京
3. 梅村雅之, 『宇宙生命計算科学連携拠点と研究成果』, 宇宙科学談話会, 2018 年 10 月 17 日, JAXA 宇宙科学研究所, 相模原
4. 古家健次, 分子雲から円盤への水の進化, アストロバイオロジーセンターシンポジウム 2019, 2019 年 1 月 31 日-2 月 1 日, 東京工業大学, 東京
5. 大須賀健, 『超臨界降着流・噴出流のダイナミクス ～ブラックホール vs 中性子星～』, 高感度・広帯域 X 線観測で探るブラックホール降着現象の物理, 2019 年 3 月 5-6 日, 京都大学
6. 大須賀健, 『ブラックホール降着円盤の理論と観測への期待』, 高エネルギー宇宙物理学の最前線と 2020/30 年代のロードマップ, 2019 年 3 月 18-20 日, 東京大学
7. 矢島秀伸, 『初期宇宙におけるサブミリ波銀河と巨大ブラックホールの共進化』, 呉 AGN 研究会, 2019 年 2 月 8 日-9 日, 呉高専, 広島

B) その他の発表

1. 田中賢, 『初代星形成における再結合放射の影響』, 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 第 10 回 シンポジウム, 2018 年 7 月 12-13 日, THE GRAND HALL (品川), 東京
2. 高橋芳太, 梅村雅之, 「相対論的流体中での光子多重散乱効果」, 日本天文学会 2018 年秋季年会 (2018 年 9 月 19 日～21 日, 兵庫県立大学, 姫路)
3. 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, 山田亨, 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 の全体的な状況」, 日本天文学会 2018 年秋季年会 (2018 年 9 月 19 日～21 日, 兵庫県立大学, 姫路)
4. 都丸亮太 (東大理, IPMU), 大須賀健 (筑波大), Chris Done (Durham 大学), 高橋忠幸 (IPMU, 東大理), X 線連星における降着円盤風の放射流体シミュレーション, 日本天文学会秋季年会, 2018 年 9 月 19-21 日, 兵庫県立大学姫路キャンパス, 兵庫
5. 川島朋尚 (国立天文台), 大須賀健 (筑波大学), 高橋博之 (国立天文台), 一般相対論的輻射輸送計算で探る超臨界降着ブラックホール・中性子星の輻射スペクトルの差異とその起源, 日本天文学会秋季年会, 2018 年 9 月 19-21 日, 兵庫県立大学姫路キャンパス, 兵庫
6. 五十嵐太一(千葉大学), 加藤成晃(理化学研究所), 高橋博之(国立天文台), 大須賀健(筑波大学), 松元亮治(千葉大学), ブラックホール降着流におけるハード・ソフト遷移の大局的輻射磁気流体シミュレーション, 日本天文学会秋季年会, 2018 年 9 月 19-21 日, 兵庫県立大学姫路キャンパス, 兵庫
7. 朝比奈雄太(京都大学), 高橋博之(国立天文台), 大須賀健(筑波大学), ボルツマン方程式を解いた一般相対論的輻射磁気流体コードの開発, 日本天文学会秋季年会, 2018 年 9 月 19-21 日, 兵庫県立大学姫路キャンパス, 兵庫
8. 北木孝明 (京都大学), 嶺重慎 (京都大学), 大須賀健 (筑波大学), 川島朋尚 (国立天文台), スリム円盤モデルは正しかったのか?, 日本天文学会秋季年会, 2018 年 9 月 19-21 日, 兵庫県立大学姫路キャンパス, 兵庫
9. 竹尾英俊 (京都大学), 稲吉恒平 (コロンビア大学), 大須賀健 (筑波大学), 高橋博之 (国立天文台), 嶺重真 (京都大学), 円盤スペクトルが超臨界降着に与える影響, 日本天文学会秋季年会, 2018 年 9 月 19-21 日, 兵庫県立大学姫路キャンパス, 兵庫
10. 恒任優, 嶺重慎 (京都大), 大須賀健 (筑波大), 川島朋尚 (国立天文台), 活動銀河核におけるシンクロトロン偏光輻射輸送計算, 日本天文学会秋季年会, 2018 年 9 月 19-21 日, 兵庫県立大学姫路キャンパス, 兵庫

11. 野村真理子, 大向一行 (東北大学), 大須賀健 (筑波大学), ラインフォース駆動型円盤風の金属量依存性: 銀河-SMBH 共進化への影響, 日本天文学会秋季年会, 2018 年 9 月 19-21 日, 兵庫県立大学姫路キャンパス, 兵庫
12. 田中賢, 吉川耕司, 岡本崇, 長谷川賢二 『第一世代星形成における再結合放射の影響』, 日本天文学会 2018 年秋季年会, 2018 年 9 月 19 日-21 日, 兵庫県立大学 姫路工学キャンパス, 兵庫
13. 吉川耕司, 田中賢, 斎藤俊, 吉田直紀 『ニュートリノによる宇宙大規模構造への力学的影響』, 日本天文学会 2018 年秋季年会, 2018 年 9 月 19 日-21 日, 兵庫県立大学 姫路工学キャンパス, 兵庫
14. 森正夫, 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関係, 日本天文学会 2018 年秋季年会, 2018 年 9 月 19 日-21 日, 兵庫県立大学 姫路工学キャンパス, 兵庫
15. 加藤一輝, 森正夫(筑波大学), 扇谷豪(ニース天文台), 穂積俊輔(滋賀大学), SCF 法によるダークマターハローの cusp-core 遷移過程の解析, 日本天文学会 2018 年秋季年会, 2018 年 9 月 19 日-21 日, 兵庫県立大学 姫路工学キャンパス, 兵庫
16. 永野裕太, 森正夫(筑波大学), 新田伸也(筑波技術大学), コールドダークマターハロー中の銀河風の線形安定性解析, 日本天文学会 2018 年秋季年会, 2018 年 9 月 19 日-21 日, 兵庫県立大学 姫路工学キャンパス, 兵庫
17. 永野裕太, 森正夫(筑波大学), 新田伸也(筑波技術大学), コールドダークマターハロー中の銀河風の線形安定性解析, 日本天文学会 2018 年秋季年会, 2018 年 9 月 19 日-21 日, 兵庫県立大学 姫路工学キャンパス, 兵庫
18. 宮川銀次郎, 森正夫(筑波大学), 三木洋平(東京大学), 桐原崇亘(千葉大学), Dark satellite と矮小銀河の衝突シミュレーション, 日本天文学会 2018 年秋季年会, 2018 年 9 月 19 日-21 日, 兵庫県立大学 姫路工学キャンパス, 兵庫
19. 五十嵐朱夏, 森正夫(筑波大学), 新田伸也(筑波技術大学), 星形成銀河からのアウトフローの遷音速解析, 日本天文学会 2018 年秋季年会, 2018 年 9 月 19 日-21 日, 兵庫県立大学 姫路工学キャンパス, 兵庫
20. 古家健次, 「分子雲コア L1544 中心領域における重窒素の希釈」, 日本天文学会 2018 年秋季年会, 2018 年 9 月 19-21 日, 兵庫県立大学, 兵庫
21. 加藤一輝, 「Cusp-core 遷移過程におけるダークマターハローの力学進化」, 第 9 回 DTA シンポジウム ダークマターハロー研究会, 2018 年 8 月 27-28 日, 国立天文台 三鷹キャンパス

22. 大須賀健, 一般相対論的輻射磁気流体シミュレーションの進展と今後の課題, 第二回 ポスト「京」時代の天体形成シミュレーション研究会, 神戸大学, 2018 年 10 月 12 日
23. 田中賢, 「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」, 素粒子・原子核・宇宙「京からポスト京に向けて」シンポジウム, 2019 年 1 月 9 日-10 日, 筑波大学 東京キャンパス文京校舎, 東京
24. 吉川耕司, 「SIMD 命令を用いた重力多体計算と SPH 計算の高速化」, 国立天文台天文シミュレーションプロジェクト 2018 年度ユーザーミーティング, 国立天文台, 2019 年 1 月 15 日
25. 田中賢, 「Vlasov 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影響」, 国立天文台天文シミュレーションプロジェクト 2018 年度ユーザーミーティング, 国立天文台, 2019 年 1 月 16 日
26. 櫻井幹記, 小林直樹, 白石賢二, 岡本直也, 石原卓, 古谷眸, 梅村雅之, 「原始惑星系円盤乱流の圧縮性がダスト粒子運動に及ぼす影響について」, 日本天文学会 2019 年春季年会, 2019 年 3 月 14 日-17 日, 法政大学, 東京
27. 梅村雅之, 「計算宇宙生命科学からの期待」, 宇宙生命探査シンポジウム・設立準備研究会, 2019 年 3 月 25 日, JAXA 宇宙科学研究所, 相模原
28. 矢島秀伸, 「宇宙再電離期における原始銀河団形成」, 銀河進化と遠方宇宙, 神奈川大学, 2019 年 3 月 11-13 日
29. 安部牧人, 「初代星の影響を考慮した高精度初代銀河形成シミュレーション」, 銀河進化と遠方宇宙, 神奈川大学, 2019 年 3 月 11-13 日
30. 安部牧人, 「初代星の影響を考慮した高精度初代銀河形成シミュレーション」, 天文学会年会, 法政大学, 2019 年 3 月 14-17 日
31. 大須賀健, 「円盤風の噴出による円盤構造の変化について」, ブラックホール降着流ミニワークショップ, 千葉大学, 2019 年 2 月 28 日-3 月 1 日
32. 大須賀健, 「円盤風の噴出による円盤構造の変化について」, 第 9 回アウトフロー研究会, JAXA, 2019 年 3 月 25 日
33. 朝比奈雄太 (京都大学), 高橋博之 (中部大学), 大須賀健 (筑波大学), 「ボルツマン方程式を解く一般相対論的磁気流体コードによる超臨界降着流シミュレーション」, 日本天文学会春季年会, 2019 年 3 月 14-17 日, 法政大学小金井キャンパス, 東京
34. 井上壮太, 大須賀健(筑波大), 川島朋尚(国立天文台), 「中性子星への超臨界降着柱モデルによる超高光度 X 線源の X 線パルスの計算」, 日本天文学会春季年会, 2019 年 3 月 14-17 日, 法政大学小金井キャンパス, 東京

35. 川島朋尚 (国立天文台), 大須賀健 (筑波大学), 高橋博之 (中部大学), 「超臨界降着流を伴うブラックホール・中性子星の輻射スペクトルの質量降着率依存性」, 日本天文学会春季年会, 2019 年 3 月 14-17 日, 法政大学小金井キャンパス, 東京
36. 都丸亮太 (東大理, IPMU), 大須賀健 (筑波大), Chris Done (Durham 大学), 高橋忠幸 (IPMU, 東大理), 「X 線連星のハード状態における熱駆動型円盤風」, 日本天文学会春季年会, 2019 年 3 月 14-17 日, 法政大学小金井キャンパス, 東京
37. 北木孝明 (京都大学), 嶺重慎 (京都大学), 大須賀健 (筑波大学), 川島朋尚 (国立天文台), 「超臨界降着流の大域計算」, 日本天文学会春季年会, 2019 年 3 月 14-17 日, 法政大学小金井キャンパス, 東京
38. 五十嵐太一 (千葉大学), 加藤成晃 (理化学研究所), 高橋博之 (国立天文台), 大須賀健 (筑波大学), 松元亮治 (千葉大学), 「セイファート銀河の降着流における X 線放射領域形成の 3 次元大局的輻射磁気流体シミュレーション」, 日本天文学会春季年会, 2019 年 3 月 14-17 日, 法政大学小金井キャンパス, 東京
39. 恒任優, 嶺重慎 (京都大), 大須賀健 (筑波大), 川島朋尚 (国立天文台), 中村雅徳 (台湾中央研究院), 「偏光の一般相対論的輻射輸送計算による活動銀河核ジェットの構造解明」, 日本天文学会春季年会, 2019 年 3 月 14-17 日, 法政大学小金井キャンパス, 東京
40. 大須賀健, 「円盤風の噴出による円盤構造の変化について」, SWANS/SNAWS 会議, 鹿児島大学, 2019 年 3 月 26-27 日
41. 矢島秀伸, 「大規模数値シミュレーションで探る吸収線系と銀河進化」, Cosmic Shadow 2018, 石垣島, 沖縄
42. 大須賀健, 円盤風の噴出による円盤構造の変化について, 第 9 回アウトフロー研究会, 3/25, JAXA
43. 大須賀健, 円盤風の噴出による円盤構造の変化について, SWANS/SNAWS 会議, 3/26-3/27, 鹿児島大学

(4) 著書、解説記事等

1. 森正夫, Newton 別冊『138 億年の大宇宙』 宙の章 PART3 「宇宙の未来」, 2018 年 9 月 5 日発行

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1. Edinburgh-Tsukuba Collaboration Meeting, The University of Edinburgh (3rd – 4th December, 2018), M. Umemura, H. Yajima, A. Wagner

2. LBNL- CCS Joint Workshop, Lawrence Berkeley National Laboratory (6th – 7th March, 2019), M. Umemura, H. Yajima

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「銀河・銀河間ガス研究会 2018」2018 年 8 月 8 日(水)～10 日(金), 筑波大学・計算科学研究センター・会議室 A
2. 研究会開催「天体形成研究会」, 2018 年 11 月 2 日(金), 3 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「初代星・初代銀河研究会 2018」, 2018 年 11 月 19 日～21 日, 茨城大学, 水戸市
4. 研究会開催「Radiation Hydrodynamic Approaches to the Study of Black Hole Accretion and Outflows」, 2019 年 2 月 22 日, 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

計算科学研究センター 運営委員会委員
計算科学研究センター 人事委員会委員
計算科学研究センター 宇宙物理研究部門主任
計算科学研究センター 運営協議会委員
計算科学研究センター 研究企画室委員
物理学域 運営委員会委員
物理学域 宇宙物理理論グループ長

- 大須賀健

計算科学研究センター 運営委員会委員
物理学域 運営委員会委員

- 森正夫

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 4 年担任
計算科学研究センター共同研究委員会学内委員
最先端多重複合型計算機システム技術審査委員

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」, 2018 年 12 月 14 日

日本天文学会欧文研究報告編集顧問

- 大須賀健

NHK カルチャーラジオ「やさしいブラックホール入門」, 2018 年 12 月 7 日, 14 日, 21 日, 28 日 (全 4 回)

なかの ZERO プラネタリウム「大人のための天文教室『やさしいブラックホール天文学 ~基本から最新の成果まで』」, 2018 年 11 月 17 日

スパコンを知る集い in 山口「スパコンで迫るブラックホール~天文学最大の謎の解明へ向けて~」, 2019 年 1 月 26 日

理論天文学宇宙物理学懇談会運営委員会 運営委員長

11. その他

III. 原子核物理研究部門

1. メンバー

教授	中務 孝、矢花一浩（量子物性部門兼務）
講師	橋本幸男
助教	日野原伸生
研究員	鷲山広平（2018.9 転出）、Guillaume Scamps（2018.12 転出）、 温 凱（2019.2 着任）
学生	大学院生 4 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】 理論計算核データと InPACS （中務、江幡（東工大）、鷲山）

平成 29 年度、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预言した。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。今年度、これに加えて、偶核・奇核・奇々核に対して、球対称性を仮定した 1 次元 HFB 計算による核子密度分布を計算し、およそ 4,000 核種のデータを整備した。

理論計算データとして、これらに加えて、質量や半径、陽子や中性子を剥ぎ取って別の原子核に変換（核変換）するために必要なエネルギーなど、原子核物理学だけでなく様々な応用のために有益な情報をウェブ上に公開した（図 1）。この公開したサイトを、InPACS (Interactive Plot for Atomic nuclei and Computed Shapes) と名付け、平成 31 年 1 月に、筑波大において関連するプレスリリースを行った。

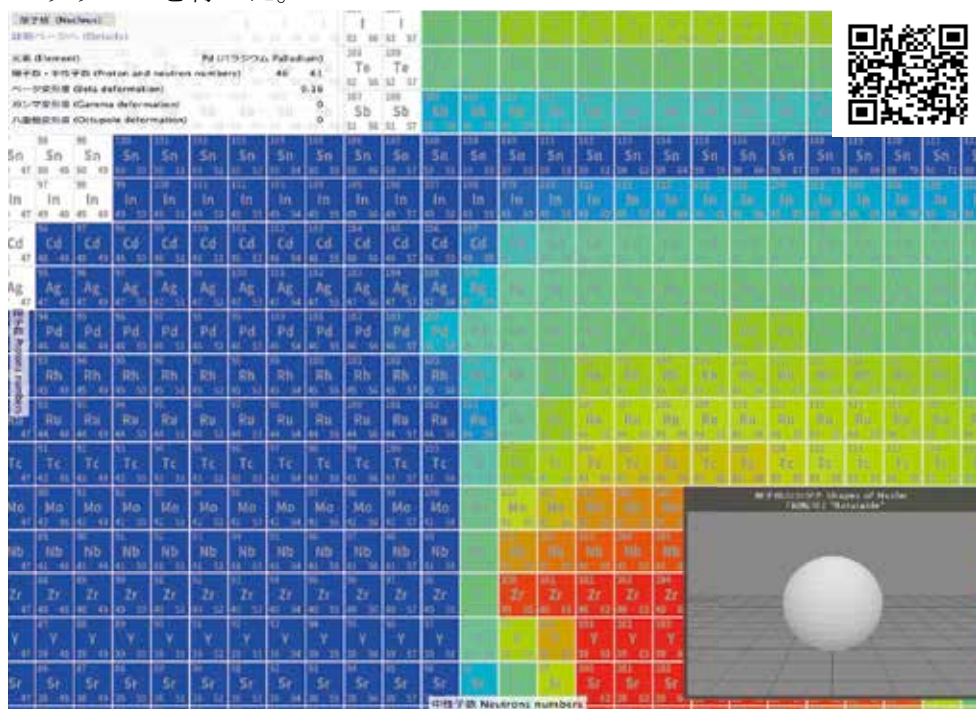


図 1: 公開したウェブサイト InPACS のスナップショット。原子核の四重極変形の度合いを表すパラメータ β_2 の大きさを、核図表を色分けで図示したもの。青が球形を表し、赤は大きく変形した原子核を表している。核種のマスをクリックすることで、その原子核の形の概略図、詳細な計算データをダウンロードできる。

【2】 時間依存平均場の新たな量子化手法と対振動集団ダイナミクス（俣（D3）、中務、日野原）

時間依存平均場理論は、原子核のダイナミクスを非経験的に記述する理論として、多くの成功をおさめてきたが、一方で、集団的量子トンネル現象が記述できないなど、問題点も知られている。これに対して、時間依存平均場の再量子化という手法が提唱されているが、周期軌道を求める必要があり、これが困難であるために、実際にはほとんど行われていない。

また、平均場を超えた相関を取り入れる理論として、（一般化）スレーター行列式を重ね合わせる生成座標法（GCM）が有名であるが、密度依存相互作用への適用などに大きな問題があることが明らかになり、近年大きな進展が見られない。

そこで我々は、これらの問題を解決する新たな量子化の処方提唱した。多次元空間中の周期軌道を求める代わりに、はじめに可積分系となる集団部分空間を抽出し、その部分空間上で量子化を行う（図2）。可積分系の量子化は比較的容易であり、経路積分の停留位相近似を用いて、（一般化）スレーター行列式を重ね合わせとしてエネルギー固有状態を記述する。この新たな手法を原子核のスピン・パリティ 0^+ 状態の問題に応用し、鉛アイソトープの励起状態などに関する計算を実行し、手法の有用性を示した。

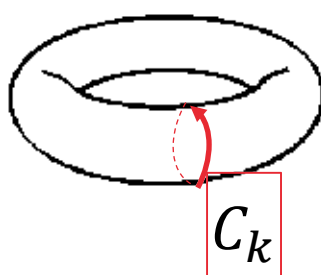


図2: 集団部分空間を抜き出すことで、図のようなトーラス上の独立なループ上で量子化が可能となる。

【3】 密度汎関数法による四重極集団ハミルトニアン構築に向けて（鷲山、中務）

遷移領域の原子核の中で、低励起状態に複数の変形状態が存在したり変形に対してソフトな性質を示したりするものがある。このような原子核を大振幅集団運動の観点から記述するために、原子核密度汎関数法に基づく5次元四重極集団ハミルトニアンの構築と原子核低励起状態への応用を目指している。昨年度、5次元四重極集団ハミルトニアンの回転運動項の慣性モーメントの評価を行なったので、今年度は、振動運動項の集団慣性質量を評価するために局所乱雑位相近似法（Local quasi-particle random phase approximation: LQRPA）の応用を行なった。5次元四重極集団ハミルトニアンの振動慣性質量を計算するには（1）各変形度での拘束条件付き密度汎関数計算を行ない、（2）得られた状態を基に LQRPA 方程式を解いて集団的な四重極低励起モードの固有解を求め、（3）得られた低励起モードの解から振動慣性質量を構成する。本研究では、巨大次元の LQRPA 方程式を直接解く代わりに数値的に簡便でかつ同等な結果を与える有限振幅法を用いた。

まず、有限振幅法の枠組みで離散的な低励起モード解を得るために、有限振幅法と複素エネルギー平面での周回積分法を組み合わせた手法の実装を行なった。いくつかの変形核の離散的な低励起四重極モード解に対してベンチマーク計算を行ない、先行研究と同様の低励起状態の分光学的性質（換算遷移確率、励起エネルギー）を得た。

次に、この有限振幅法+周回積分法を四重極変形度 β のみの一次元振動慣性質量である核分裂経路の集団慣性質量計算に応用した。 ^{240}Pu の質量対称核分裂経路を四重極変形度 β の拘束条件付き密度汎関数法で計算し、各変形度で局所有限振幅法+周回積分法により集団慣性質量を四重極変形度 β の関数として求めた。得られた集団慣性質量は基底状態及び核分裂アイソマー状態では他の変形度に比べて大きな値を示した。また、変形度が変化するにつれて集団慣性質量が大きく変化する変形領域が存在することを示した。これはこの変形領域で ^{240}Pu の一粒子構造が劇的に変化していることを示唆する結果である。

【4】 3次元実空間座標を用いた HFB 計算コードの開発（柏葉（D2）、中務）

従来の方法では、HFB 理論に基づく自己無撞着な密度関数計算は基底の数の三乗 (N^3) に比例する計算コストがかかるため、調和振動子基底を用いて基底の数を減らすなどの工夫をしなければ現実的な計算時間内での計算が困難であった。しかし、近年 Krylov 部分空間法を用いた手法が提案されており、これを使うことで計算コストを N^2 に抑えることが可能となる。本研究では、Krylov 部分空間法による 3次元実空間座標を用いた HFB 計算コードの開発を行った。数値計算コードはほぼ完成し、妥当な計算時間で実行が可能であることを示した。また、Oakforest-PACS 上で高い並列性能を実現した。3次元実空間座標を採用することで、従来の方法が苦手とする大きな変形や非対称変形を含む原子核の解析が可能になる。今後は、中性子星内殻に存在するとされているパスタ原子核など、特異な形状をした原子核の構造の計算に応用する。

【5】 中性子過剰 Mo 同位体の低励起状態の分析（Ha（ソウル国立大）、炭竈（理研）、日野原）

中性子過剰 Mo 同位体では三軸非対称 (γ) 変形が基底状態で現れる可能性やソフトな γ 振動が予言されており、理化学研究所の RIBF において $^{106,108,110}\text{Mo}$ 原子核の低励起状態が測定された。これらの原子核に対して、5次元四重極集団 Hamiltonian を CHFB+LQRPA 法を用いて構築し、四重極低励起状態の分析を行った。有効相互作用は SLy4, SkM*, SLy5+T による Skyrme-HFB の結果を再現するように Pairing-plus-quadrupole 相互作用のパラメータを決定してこれを用いた。SLy4 を用いた理論計算ではオブレート変形にエネルギー極小点が現れ、スペクトルには γ ソフトな性質が強く見られた（図 3）。一方 SLy5+T を用いた計算ではプロレート変形が現れ、 $^{106,108}\text{Mo}$ では γ 振動的なスペクトルが得られ、実験とのよい一致が見られた。

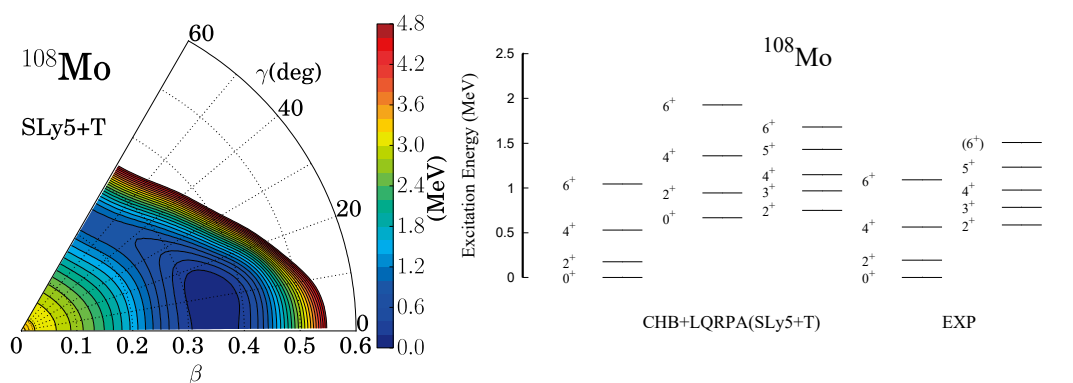


図 3: ^{108}Mo の四重極変形ポテンシャル曲面（左図）と CHFB+LQRPA による低励起状態のスペクトル（右図）。

【6】 有限振幅法による二重ベータ崩壊原子核行列要素の計算（日野原、Engel（ノースカロライナ大））

ニュートリノレス二重ベータ崩壊の半減期から電子ニュートリノの有効質量を決定するためには崩壊の原子核行列要素を精密に計算する必要があるが、原子核行列要素は中性子—陽子対相関によって抑制されることが知られており、対相互作用の結合定数を決定することが行列要素の精密計算のために重要である。ニュートリノを 2 つ放出する二重ベータ崩壊には豊富な実験データが存在し、これを用いて中性子—陽子対相関の結合定数を決定することが可能である。二重ベータ崩壊の原子核行列要素を準粒子乱雑位相近似で計算する場合、大次元の行列対角化を行う必要があるが、有限振幅法によって応答関数を反復法で効率的に計算し、応答関数の二重複素積分によって原子核行列要素の導出が可能である定式化をこれまでに行った。米国ノースカロライナ大学で開発された中性子—陽子チャンネルの有限振幅法のコードを拡張し、二重 Gamow-Teller 遷移強度およびニュートリノを 2 つ放出する二重ベータ崩壊原子核行列要素計算の実装を行った。pf 殻領域の原子核に対して系統的な計算を行い、原子核行列要素の中性子—陽子対相関依存性の分析を行った（図 4）。

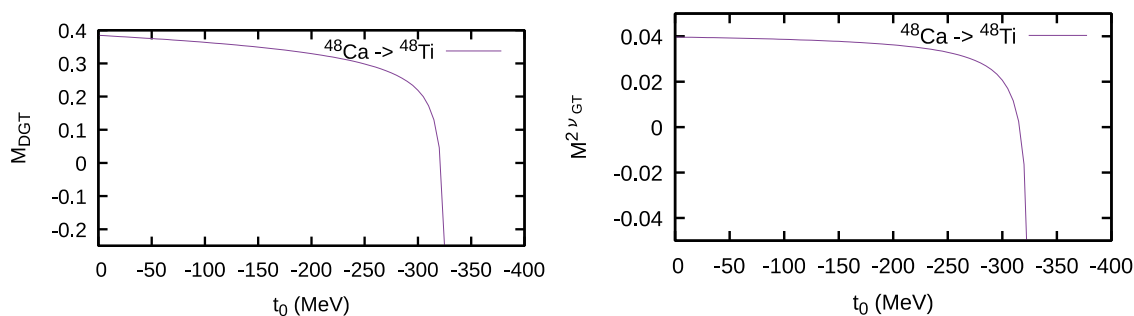


図 4: ^{48}Ca の二重 Gamow-Teller 遷移（左図）とニュートリノを 2 つ放出する二重ベータ崩壊（右図）の原子核行列要素のアイソスカラー対相関結合定数依存性。

【7】 超流動原子核の融合過程における対相関の効果（橋本、G. Scamps）

今年度は、拘束条件付きハートレーフォック・ボゴリユボフ（CHFB）法により硫黄 ^{40}S を二つの酸素 ^{20}O に分離する過程のエネルギー面と一粒子波動関数のセットを得た。これは、二つの酸素 ^{20}O の正面衝突による融合過程のポテンシャルエネルギーを求めることに当たる。この CHFB 法によるエネルギー面上の点を初期条件として TDHFB 軌道を計算し、二つの酸素 ^{20}O の融合過程の TDHFB 軌道と比較した。その結果、i) 二つの酸素 ^{20}O の接触から重なりを経て減衰振動に至る過程における対相関エネルギーの変化は、CHFB 法によって求めたエネルギー面上の点を初期値とする TDHFB 軌道のものとよく似た振る舞いをする（図 5 左）、ii) また、i) の対相関エネルギーは CHFB 法による静的な対相関エネルギーの相対距離依存性に沿った変化をすることで、この領域では系の変化は断熱的であることが示唆される、iii) CHFB 法によって求めた一粒子エネルギーの分布は、相対距離の減少につれて二つの酸素 ^{20}O のものから縮退が解ける。特にフェルミ面近傍の $f_{5/2}$ 軌道の分布の散開が対相関エネルギーの滑らかな減少をもたらす、iv) 融合後の減衰振動は、TDHFB 軌道の正準軌道占有数が CHFB 軌道の軌道占有数分布（図 5 右）から時間的に変化することにより内部運動の励起エネルギーの増大をもたらすこと、などが理解された。

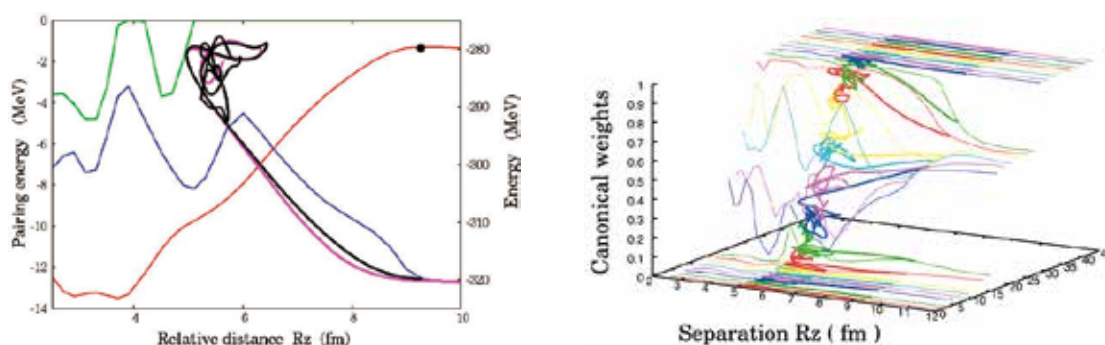
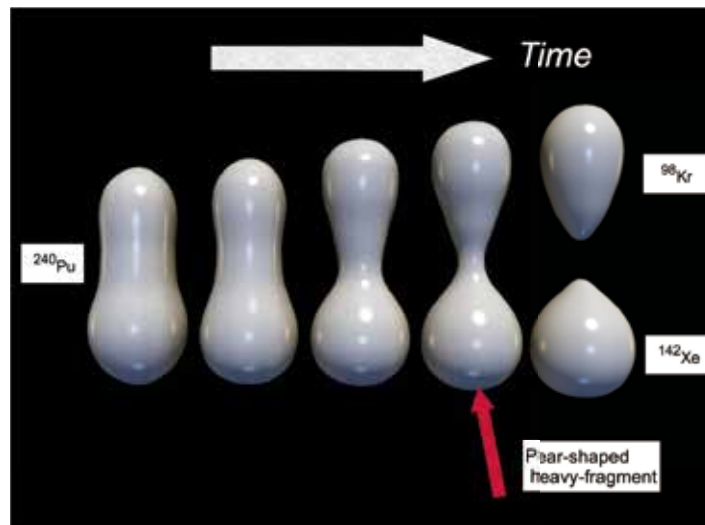


図 5: (左) CHFB による酸素 ^{20}O - 酸素 ^{20}O 間の相対距離 (R_z) とエネルギー (赤)、対相関エネルギー (陽子 (緑)、中性子 (青))。衝突エネルギー 11.4 MeV の正面衝突 TDHFB 計算の中性子対相関エネルギー (紫)、黒丸 (●) を初期条件とする TDHFB 計算の中性子対相関エネルギー (黒)。(右) 左図黒線の TDHFB 軌道の正準占有数 (太線) と CHFB の正準占有数 (細線) の相対距離による変化。

【8】 Effect of octupole deformation on the fission of actinides (G. Scamps and C. Simenel)

図 6 : Evolution of the fission of ^{240}Pu nuclei.

Nuclear fission is a process in which a heavy nucleus split into two. Most of the actinides nuclei (Plutonium, Uranium, Curium...) fission asymmetrically with one big fragment and one small. Empirically, the heavy fragment presents on average a Xenon element (with charge number $Z=54$) independently from the initial fissioning nucleus. To understand the mechanism that determines the number of protons and neutrons in each of the two fragments has been a longstanding puzzle. It was expected that the deformation of the fragments could play a role. Indeed, the atomic nuclei can have different shapes depending on their internal structure. Some of them are spherical, most of them are deformed like a rugby ball and a few have a pear-shaped deformation. The internal structure of the nuclei varies as a function of the number of protons and neutrons composing the nuclei. The state of the art of nuclear theory has been used to describe dynamically the fission process. This simulation of the nuclear fission uses the quantum-mechanics to take into account the motion of the nucleons in the nuclei and uses adequate simplifications to solve the many-body problem. Using that model, in the case of the ^{240}Pu , it has been found that the fission fragments are preferably formed with a pear-shaped deformation (see figure 6). This pear-shaped deformation is due to the strong Coulomb repulsion of the two fragments. This initial deformation favours nuclei which are pear-shaped in their ground state. This is the case of the Xenon due to some internal structure effects associated with a number of proton $Z=54$. This mechanism is strong enough to strongly influence the partition of nucleons in several fissioning systems. This mechanism has been found in simulations of the fission of ^{230}Th , ^{234}U , ^{236}U , ^{246}Cm and ^{250}Cf in agreement with the experimental observations. These findings may explain in future, surprising recent observations of asymmetric fission of lighter than lead nuclei, and improve predictions of fission

properties of exotic nuclei which impact the abundance of elements produced in the astrophysical processes.

【9】 Density-constraint Hartree-Fock-Bogoliubov (G. Scamps and Y. Hashimoto)

A new method is developed in order to determine the Nucleus-Nucleus potential for fusion reactions for which pairing play an important role, the Density-constraint Hartree-Fock-Bogoliubov theory. Using this method, we investigate the splitting of the Nucleus-Nucleus potential with respect to different relative gauge angles (figure 7).

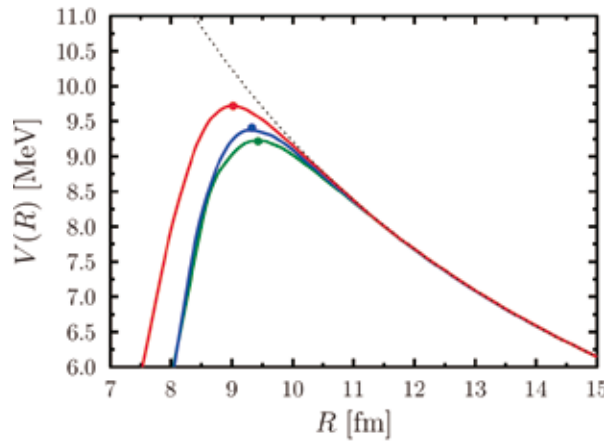


図 7: Nucleus-Nucleus potential for the $^{20}\text{O} + ^{20}\text{O}$ reaction for 3 gauge-angle.

【10】 Self-consistent random phase approximation based on the relativistic Hartree-Fock theory: Role of ρ -tensor coupling (Wang (特別研究生)、Naito (東大)、Liang (理研)、Long (Lanzhou Univ.))

The framework of the random phase approximation (RPA) based on the relativistic Hartree-Fock (RHF) theory is extended to achieve a self-consistent calculation with the ρ -meson tensor coupling. The model self-consistency is verified by the check of the isobaric analog state, and it is found that the ρ -tensor and ρ -vector-tensor couplings play significant roles in maintaining the self-consistency. Using the RHF Lagrangian PKA1, the properties of the Gamow-Teller resonances (GTR) are investigated (figure 8), in which the roles played by the particle-hole residual interaction of various meson-nucleon couplings are clarified in details. Furthermore, the effects of the tensor force, which is introduced naturally via the Fock terms, are analyzed by comparing the calculations with full Lagrangians and the ones artificially dropping the tensor force components. It is found that for the RHF Lagrangians PKOi ($i = 1, 2, 3$) and PKA1, the tensor forces play the role mainly via the RHF mean-field rather than via the RPA residual interaction in determining the GTR. Moreover, the tensor-force effects are not as strong as those indicated by the Skyrme Hartree-Fock calculations.

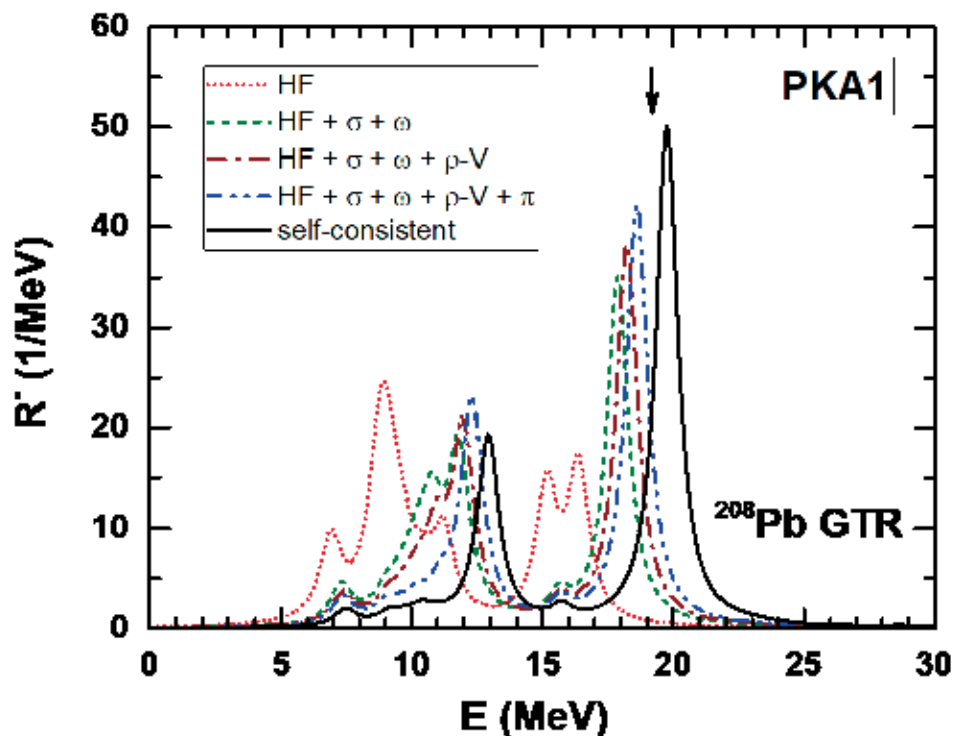


図 8: Transition strength distributions of GTR in ^{208}Pb . The calculations are performed by the RHF + RPA approach with the effective interaction PKA1. The unperturbed results (short-dotted line, denoted as HF), and the results of the calculation with σ -S+ ω -V (short-dashed line), σ -S+ ω -V+ ρ -V (dash-dotted line), σ -S+ ω -V+ ρ -V+ π -PV (short-dot-dotted line) in the ph residual interactions, as well as the results of the full calculation (solid line) are shown. A Lorentzian smearing parameter $\Gamma = 1$ MeV is used. The horizontal position of the arrow corresponds to the experimental peak energy.

4. 教育

学位

1. 倪 放 (Ni Fang)、博士 (理学)

Requantization of time-dependent mean field for pairing collective motion in superfluid nuclei (超流動核における対励起集団運動に対する時間依存平均場再量子化)

2. 堀川 健、修士 (理学)

長さゲージを用いた周期系の電子ダイナミクス計算

集中講義

中務 孝

「原子核の構造・反応と計算核物理学」、千葉大学、2018 年 6 月 27 – 28 日.

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

外部資金

1. 日本学術振興会科学研究費・基盤研究(B)、中務 孝、代表、2018–2021 年、4,000,000 円 (H30 年度直接経費)、「密度汎関数超並列ソルバの開発と原子核から中性子星までの統一的高精度計算」
2. 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、4,646,000 円 (H30 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」
3. 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、1,470,000 円 (H30 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」
4. 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、700,000 円 (H30 年度直接経費)、「中性子–陽子対相関・対凝縮の解明」
5. 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、1,000,000 円 (H30 年度直接経費)、「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. K. Wen and T. Nakatsukasa, “Nuclear reaction path and requantization of TDDFT”, JPS Conf. Proc. **23**, 012024 (2018).
2. K. Washiyama and T. Nakatsukasa, “Multipole modes for triaxially deformed superfluid nuclei”, JPS Conf. Proc. **23**, 013012 (2018).
3. F. Ni, N. Hinohara, and T. Nakatsukasa, “Low-lying collective excited states in non-integrable pairing models based on the stationary-phase approximation to the path integral”, Phys. Rev. C **98**, 064327 (2018).
4. F. Ni and T. Nakatsukasa, “Comparative study of the requantization of the time-dependent mean field for the dynamics of nuclear pairing”, Phys. Rev. C **97**, 044310 (2018).
5. G. Scamps and C. Simenel, “Impact of pear-shaped fission fragments on mass-asymmetric fission in actinides”, Nature **564**, 382 (2018).

6. H. Zheng, S. Burrello, M. Colonna, D. Lacroix, and G. Scamps, “Connecting the nuclear EoS to the interplay between fusion and quasifission processes in low-energy nuclear reactions”, *Phys. Rev. C* **98**, 024622 (2018).
7. Z. H. Wang, Q. Zhao, H. Z. Liang, and W. H. Long, “Quantitative analysis of tensor effects in the relativistic Hartree-Fock theory”, *Phys. Rev. C*, **98**, 034313 (2018).
8. S. Burrello, M. Colonna, D. Lacroix, X. Roca-Maza, G. Scamps, and H. Zheng, “Collective aspects of the dipole response in nuclei: an analysis from semi-classical and quantal approaches”, Accepted for publication in *Phys. Rev. C* (2019), arXiv:1807.10118.
9. Y. Kashiwaba and T. Nakatsukasa, “Self-consistent band calculation of slab phase in neutron-star crust”, submitted to *Phys. Rev. C*; Preprint arXiv:1904.10712.
10. N. Hinohara, “Energy-weighted sum rule for nuclear density functional theory”, Submitted to *Phys. Rev. C*, arXiv:1902.11105.

B) 査読無し論文

1. K. Wen and T. Nakatsukasa, “Self-consistent collective motion path for nuclear fusion/fission reactions”, *Proceedings of the International Conference on Nuclear Theory in the Supercomputing Era - 2016 (NTSE-2016)* (Pacific National University, 2018), pp. 115 – 123.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. T. Nakatsukasa, “Dipole response in exotic nuclei”, ECT* workshop on Probing exotic structure of short-lived nuclei by electron scattering, Trento, Italy, Jul. 16 – 20, 2018.
2. T. Nakatsukasa, “Theories of nuclear large amplitude collective motion”, 1st APCTP-TRIUMF joint workshop on understanding nuclei from different theoretical approaches, Pohang, Korea, Sep. 14 – 19, 2018.
3. T. Nakatsukasa, “Self-consistent determination of nuclear reaction path and clustering”, ECT* workshop on indirect methods in nuclear astrophysics, Trento, Italy, Nov. 5 – 9, 2018.
4. T. Nakatsukasa, “Nuclear structure and reaction with quantum shape fluctuation”, 13th International Conference on nucleus-nucleus collisions (NN2018), Saitama, Japan, Dec. 4 – 8, 2018.
5. T. Nakatsukasa, “Self-consistent band calculation for 1D neutron-star crust”, Workshop on Nonequilibrium phenomena in superfluid systems, Warsaw, Poland, Mar. 1 – 3, 2019.

6. N. Hinohara, “Nuclear density functional theory for description of collective excitation”, 10th China-Japan Joint Nuclear Physics Symposium (CJNP2018), Huizhou, China, Nov. 18 – 23, 2018.
7. N. Hinohara, “Nuclear density functional theory for collective excitation”, Fifth Joint Meeting of the Nuclear Physics Divisions of the APS and the JPS (HAWAII2018), Waikoloa Village, HI, USA, Oct. 23 – 27, 2018.
8. N. Hinohara, “Application of finite-amplitude method for nuclear collective motion”, 2018 PKU-CUSTIPEN workshop on “Low-Energy Nuclear Dynamics and Effective Nuclear Interactions”, Beijing, China, Sep. 17 – 19, 2018.
9. N. Hinohara, “Collective motion in stable and unstable nuclei within nuclear density functional theory”, IX International Symposium on Exotic Nuclei (EXON-2018), Petrozavodsk, Russia, Sep. 10 – 15, 2018.
10. K. Washiyama, “Shape fluctuation and large amplitude collective motion in transitional nuclei”, New Frontiers in Nuclear Physics and Astrophysics-1, Antalya, Turkey, May 28 – Jun. 1, 2018.
11. K. Yoshida, “Analog pygmy-dipole resonance and low-lying charge-exchange dipole state in neutron-rich nuclei”, The 6th International Conference on Collective Motion in Nuclei under Extreme Conditions, Cape Town, South Africa, Oct. 29 – Nov. 2, 2018.

B) 一般講演

1. T. Nakatsukasa, “New scheme of MCRP-2019”, 10th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba, Japan, Oct. 15 – 16, 2018.
2. T. Nakatsukasa, “Collective coordinate for pairing dynamics and requantization of TDHFB”, Fifth joint meeting of the Nuclear Physics Divisions of the APS and the JPS (HAWAII2018), Waikoloa Village, HI, USA, Oct. 23 – 27, 2018.
3. T. Nakatsukasa, “Multi-reference EDF theory alternative to GCM: Application to the pairing model”, Tsukuba-CCS workshop on “microscopic theories of nuclear structure and dynamics”, Tsukuba, Japan, Dec. 10 – 12, 2018.
4. N. Hinohara, “Finite-amplitude method for double-beta decay nuclear matrix elements” (poster presentation), International Symposium on Revealing the history of the universe with underground particle and nuclear research 2019, Sendai, Japan, Mar. 7 – 9, 2019.
5. N. Hinohara, “Finite-amplitude method for double-beta decay”, Tsukuba-CCS workshop on “microscopic theories of nuclear structure and dynamics”, Tsukuba, Japan, Dec. 10 – 12, 2018.

6. N. Hinohara, “Binding-energy differences of even-even nuclei and pairing correlation”, 13th International Conference on Nucleus-Nucleus Collisions (NN2018), Saitama, Japan, Dec. 4 – 8, 2018.
7. N. Hinohara, “Energy-weighted sum rule for nuclear density functional theory” (poster presentation), 13th International Conference on Nucleus-Nucleus Collisions (NN2018), Saitama, Japan, Dec. 4 – 8, 2018.
8. N. Hinohara and J. Engel, “Double-beta decay nuclear matrix element using finite-amplitude method”, Fifth Joint Meeting of the Nuclear Physics Divisions of the APS and the JPS (HAWAII2018), Waikoloa Village, HI, USA, Oct. 23 – 27, 2018.
9. N. Hinohara, “Double-beta decay nuclear matrix elements with linear and non-linear dynamics of neutron-proton pairing” (poster presentation), 10th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba, Japan, Oct. 15 – 16, 2018.
10. N. Hinohara, “Neutron-proton DFT”, The 4th workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model (SADO2018), Sado, Japan, Aug. 18 – 20, 2018.
11. N. Hinohara, “Nuclear collective excitation within finite-amplitude method” (poster presentation), 10th international conference on Direct Reactions with Exotic Beams (DREB2018), Matsue, Japan, Jun. 4 – 8, 2018.
12. Y. Hashimoto, “Study of structure changes in $^{40}\text{S} \rightarrow ^{20}\text{O} + ^{20}\text{O}$ by Gogny TDHFB method”, The 4th workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model (SADO2018), Sado, Japan, Aug. 18 – 20, 2018.
13. Y. Hashimoto, “Study of ^{40}S by Gogny-TDHFB method”, Tsukuba-CCS workshop on “microscopic theories of nuclear structure and dynamics”, Tsukuba, Japan, Dec. 10 – 12, 2018.
14. K. Washiyama, “Collective Hamiltonian from Skyrme EDF”, The 4th workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model (SADO2018), Sado, Japan, Aug. 18 – 20, 2018.
15. G. Scamps, “Dynamical effects of superfluidity on multi-nucleon transfer, fusion and fission”, “ECT* workshop on Probing exotic structure of short-lived nuclei by electron scattering”, Trento, Italy, Apr. 9 – 13, 2018.
16. G. Scamps, “Role of octupole deformed shell effects on the fission of actinides”, 2018 PKU-CUSTIPEN workshop on “Low-Energy Nuclear Dynamics and Effective Interactions”, Beijing, China, Sep. 17 – 19, 2018.

17. G. Scamps, “Role of octupole deformed shell effects on fission” (poster presentation), 13th International Conference on Nucleus-Nucleus Collisions (NN2018), Saitama, Japan, Dec. 4 – 8, 2018.
18. G. Scamps, “Impact of pear-shaped fission fragments on mass-asymmetric fission”, Tsukuba-CCS workshop on “microscopic theories of nuclear structure and dynamics”, Tsukuba, Japan, Dec. 10 – 12, 2018.
19. Z. H. Wang, “Quantitative analysis of tensor effects in relativistic Hartree-Fock theory”, The 17th CNS International Summer School, Wako, Japan, Aug. 22 – 28, 2018.
20. K. Yoshida, “First-Forbidden Beta-decay near the Drip Line”, The 4th workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model, Sado (SADO2018), Niigata, Aug. 18 – 20, 2018.
21. K. Yoshida, “Beta-decay around ^{78}Ni : N=50 magic number and shell structure”, YITP workshop on ‘Recent advances in nuclear structure physics 2018’, Kyoto, Japan, Nov. 29 – Dec. 3, 2018.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 中務 孝、“原子核質量と核構造・核力”、研究会「重力波観測時代の r プロセスと不安定核」、理化学研究所、和光、2018 年 6 月 20 – 22 日。
2. 中務 孝、“Nuclear deformation and radii in heavy nuclei”、ELPH 研究会「電子散乱による原子核研究」、ELPH、東北大学、仙台、2019 年 3 月 20 – 21 日。
3. 日野原伸生、“原子核対相関と観測量”、NITEP 研究会「微視的理論でつなぐ散乱観測量と核構造」、大阪市立大学梅田サテライト、大阪、2019 年 3 月 28 日。
4. 日野原伸生、“二重ベータ崩壊原子核行列要素計算の現状”、「宇宙の歴史をひもとく地下素粒子原子核研究」京大・A 班共催二重ベータ崩壊若手研究会、京都大学、京都、2018 年 11 月 8 – 9 日。
5. 日野原伸生、“原子核集団現象への平均場アプローチ”、第 64 回原子核三者若手夏の学校、ホテルニューカネイ、長生郡白子町、2018 年 8 月 6 – 11 日。
6. 鷲山広平、“微視的モデルでの超重元素合成反応・構造研究”、九大研究会「超重元素研究の新展開」、九州大学、福岡、2018 年 7 月 30 – 31 日。
7. 吉田賢市、“Nuclear density-functional theory for weak matrix elements”、KEK 研究会「ニュートリノ原子核反応とニュートリノ相互作用」、東海、2019 年 2 月 22 日。

8. 吉田賢市、“Magic numbers, shell structures and collective phenomena”、シンポジウム ‘Nuclear structure studies through the magic numbers’、日本物理学会第 74 回年次大会、九大伊都キャンパス、福岡、2019 年 3 月 14 – 17 日.

B) その他の発表

1. 中務 孝、鷲山広平、“微視的集団模型による LLFP の核構造研究”、日本原子力学会 2018 秋の大会、岡山大学、岡山、2018 年 9 月 5 – 7 日.
2. 中務 孝、江幡修一郎、鷲山広平、“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 (5-5) 密度汎関数計算による核構造データ”、日本原子力学会 2019 春の年会、茨城大学、水戸、2019 年 3 月 20 – 22 日.
3. 中務 孝、“低エネルギー核反応と量子クラスターへの非経験的アプローチ”、「量子クラスターで読み解く物質の階層構造」 キックオフシンポジウム、東工大、東京、2018 年 11 月 19 – 20 日.
4. 中務 孝、“PJ3-3: 核構造計算による核反応モデルの高精度化”(ポスター)、ImPACT プログラム「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」公開成果報告会 ―新たな選択肢の提案、未来に向けて―、品川インターシティホール、東京、2019 年 3 月 9 日.
5. 日野原伸生、“原子核密度汎関数理論における和則に関する Thouless の定理”、日本物理学会第 74 回年次大会、九州大学伊都キャンパス、福岡、2019 年 3 月 14 – 17 日.
6. 日野原伸生、“原子核密度汎関数の決定と関連する実験データ”、RIBF 若手放談会：エキゾチック核物理の将来、理化学研究所神戸キャンパス、神戸、2019 年 2 月 18 – 20 日.
7. 日野原伸生、“二重ベータ崩壊と中性子―陽子対の非線形ダイナミクス”(ポスター)、第 5 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会、THE GRAND HALL、東京、2018 年 11 月 2 日.
8. 橋本幸男、“Gogny-TDHFB による ^{40}S の対称型大振幅振動運動の記述”、日本物理学会第 74 回年次大会、九州大学伊都キャンパス、福岡、2019 年 3 月 14 – 17 日.
9. 橋本幸男、“時間依存密度汎関数理論に基づく超流動原子核の反応機構の研究”(ポスター)、第 5 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会、THE GRAND HALL、東京、2018 年 11 月 2 日.
10. 倪 放、“断熱的自己無撞着集団座標の方法で探る原子核の新しい集団運動”、RIBF 若手放談会：エキゾチック核物理の将来、理化学研究所神戸キャンパス、神戸、2019 年 2 月 18 – 20 日.

11. 吉田賢市、”Toward a systematic and microscopic calculation of beta-decay rates”、重力波観測時代の r プロセスと不安定核、理研、和光、2018 年 6 月 20 – 22 日.
12. 吉田賢市、”ベータ崩壊率から探る核構造: ^{78}Ni における $N=50$ の魔法数と殻構造”、宇宙核物理連絡協議会研究会「核データと重元素合成を中心とする宇宙核物理研究会」、北海道大学、札幌、2019 年 3 月 6 – 8 日.

(4) 著書、解説記事等

1. M. Bender, A. Bulgac, T. Duguet, J.-P. Ebran, J. Engel, M. M. Forbes, M. Kortelainen, T. Nakatsukasa, N. Schunck, “Energy Density Functional Methods for Atomic Nuclei”, (IOP Publishing, Bristol, UK) 2019.

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. 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）.
3. 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）.
4. 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 β - γ 核分光実験に関する共同研究（日野原）.
5. 韓国・Hoseo 大学 Moon 教授と Te 原子核の低励起状態に関する共同研究（日野原）.
6. 米国・ミシガン州立大学 Wang 氏、Nazarewicz 教授らと中性子過剰 Mg 原子核の基底状態および低励起状態に関する共同研究（日野原）.

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 国際シンポジウム 10th China-Japan Joint Nuclear Physics Symposium (CJNP2018), (Huizhou, China, Nov. 18 - 23, 2018)の組織委員を務めた(中務).
2. 国際会議 Nuclear Theory in the Supercomputing Era – 2018 (NTSE-2018) (Daejeon, Korea, Oct. 29 - Nov. 2, 2018) の科学諮問委員を務めた(中務).
3. 筑波大学計算科学研究センター主催シンポジウム：10th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (Tsukuba, Japan, Oct. 15 - 16, 2018) の組織委員長を務めた(中務) .

4. 国際ワークショップ Recent advances in nuclear structure physics 2018 (RANSP2018) (Kyoto, Japan, Nov. 29-Dec. 3, 2018) の組織委員を務めた (日野原) .
5. 国際ワークショップ Microscopic theories of nuclear structure and dynamics (Tsukuba, Japan, Dec. 10-12, 2018) の組織委員長(日野原)および組織委員 (中務、橋本) を務めた.

9. 管理・運営

組織運営や支援業務の委員・役員の実績

中務 孝

計算科学研究センター 原子核物理研究部門 部門主任
計算科学研究センター 運営委員会委員
計算科学研究センター 人事委員会委員
計算科学研究センター 運営協議会委員
計算科学研究センター 共同研究担当主幹
計算科学研究センター 共同研究委員会および共同研究運用委員会 委員長
計算科学研究センター 学際計算科学連携室員
計算科学研究センター 情報セキュリティ委員
数理物質系物理学域 運営委員会委員
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
最先端共同 HPC 基盤施設 大規模 HPC チャレンジ審査委員会 副委員長
HPCI コンソーシアム機関代表

日野原伸生

計算科学研究センター 先端計算科学推進室員
計算科学研究センター 情報セキュリティ委員

10. 社会貢献・国際貢献

中務 孝

Editor for Journal of Physical Society of Japan
Editor for International Journal of Modern Physics E
JAEA タンデム専門委員会委員
JAEA 黎明研究評価委員会委員
大阪大学核物理研究センター・運営委員会委員

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・自己評価委員会委員

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

核理論委員会委員

11. その他

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、竹内 嵩、野田 真史、 Arqum Hashmi、廣川 祐太 (2018.10～)
学生	大学院生 11 名、学類生 4 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)

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/SiO₂ 界面の原子構造解析などを行った。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を、スピン渦誘起ループ電流を電流要素とする超伝導理論に基づいて行っている。また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に関する理論的研究を行っている。

これらの計算科学研究に加えて、独自の計算コード開発も行なっている。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 <https://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 の開発を行っている。

3. 研究成果

【1】 光科学分野の第一原理計算ソフトウェア SALMON の開発 (矢花、植本、竹内、野田、廣川、山田(篤)、山田(俊)、廣川、朴[高性能計算システム研究部門])

パルス光と多様な物質の相互作用を物質科学の第一原理計算に基づき記述する汎用のソフトウェア SALMON の構築を進めている。これは先端の光科学実験を丸ごとシミュレーションすることができ、原子の空間スケールとアト秒の時間解像度で現象を分析することができ

る、他に例のない特徴を持つソフトウェアである。SALMON は、筑波大学で開発を進めていた ARTED と分子科学研究所で開発を進めていた GCEED を統合したオープンソースソフトウェアとして構築され、現在ウェブページ <https://salmon-tddft.jp> を整備し公開している。また以下で述べるように、単原子層から薄膜・表面まで記述する理論と計算法の開発、光・電子・フォノンの 3 者のダイナミクスを同時に記述する第一原理計算法の開発など、光科学の多様な現象に対応する取り組みを続けている。

また、理化学研究所計算科学研究センター（理研 R-CCS）で開発中のポスト京（スーパーコンピュータ富岳）への SALMON 実装を開始している。SALMON/ARTED は Knights Landing (KNL) クラスタ “Oakforest-PACS” に対し強力に最適化を行ってきたが、我々は同実装を活用することでポスト京への実装と大規模シミュレーションを円滑に遂行できると考えている。現在までに、主に SALMON/ARTED で利用されているステンシル計算について、KNL 向けの AVX-512 SIMD 命令実装をポスト京の A64FX プロセッサが採用する Scalable Vector Extension (SVE) SIMD 命令に変換、動作を確認した。本件は、理研 R-CCS が提供するポスト京シミュレータ上で性能評価を実施中である。

SALMON に関して、下で述べるハンズオンチュートリアルの実施など、その普及に務めている。大阪大学が毎年、年 2 回実施しているコンピュテーショナル・マテリアルズ・デザインワークショップにおいて、2018 年度から SALMON の実習を継続的に取り上げて頂いており、SALMON のチュートリアルを実施している。高度情報科学技術研究機構（RIST）が行なっている HPCI (High Performance Computing Infrastructure) 事業において、日本で開発されたオープンソースソフトウェアのうち利用の多いものを、各大学の情報基盤センターの所有するスパコンにプリインストールする利用者支援活動が行われている。SALMON は、物質科学分野の計 3 本のソフトウェアの一つとして、その支援対象に選ばれた。現在 SALMON は、東工大、名古屋大、九州大のスパコンにインストールされている (http://www.hpci-office.jp/pages/appli_software)。

【2】 マクスウェル方程式と時間依存密度汎関数を多階層で結合したシミュレーション法の発展（矢花、植本）

(1) 斜法入射のマルチスケール法における取扱について

我々はこれまで、第一原理電子ダイナミクス計算と電磁界計算をハイブリッドさせた、独自のマルチスケール計算手法の開発を進めてきた。先行研究では薄膜系（一次元マクスウェル方程式）への垂直入射に制限した議論が行われてきた。一方で、「反射・屈折現象」、「境界面の表面電荷」、「表面プラズモン励起」、「（実験などでよく用いられる）Brewster 角入射」を議論する上で、任意角度入射条件（斜方入射）を取り扱えることは重要である。

今年度、我々は一次元マルチスケール計算法を斜方伝搬する電磁場を取り扱うためのフォーマリズム構築・計算コードへの実装作業をおこなった。

また、本プロジェクトに関連してマックスプランク研究所（実験）と筑波大学（計算）の共同研究を進めており、これまで SALMON コードをもちいたアト秒分光実験の計算機シミュレーションを試みてきた。（実験では）ブリュースター角度入射されたフェムト秒レーザーパルスが固体中を伝搬する過程の非線形光学効果によるパルス波形変化を観測している。本手法を実装した理論計算は実験の振る舞いをよく再現する結果を得ることに成功している。

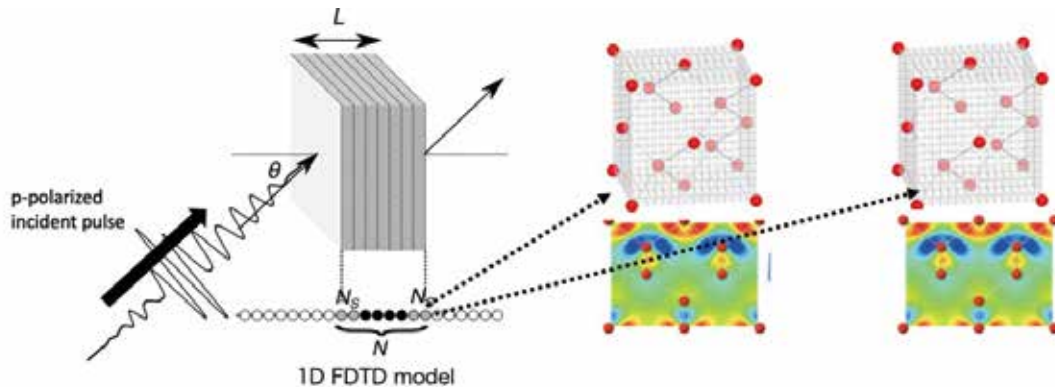


図 1 : Maxwell+TDDFT マルチスケール法による、斜め方向に伝搬するレーザーパルスの光透過シミュレーションの概略図

(2) グラファイト薄膜と強レーザーパルスの相互作用の第一原理シミュレーション

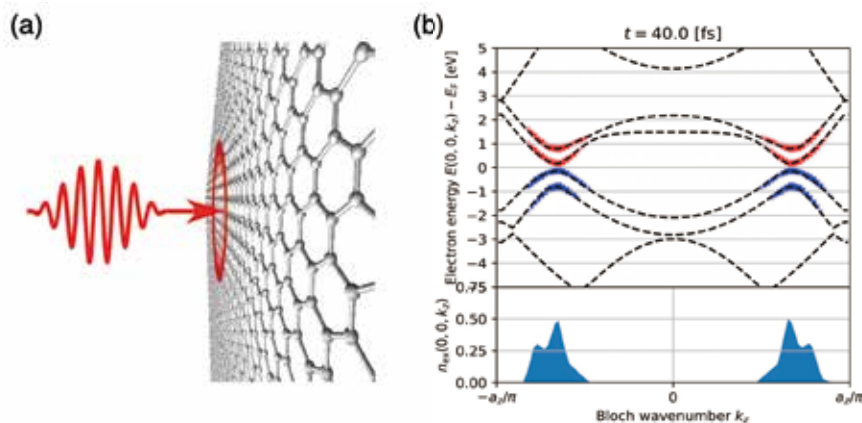


図 2 : (a)計算モデル概略、(b)可飽和吸収条件下における励起電子(赤)、ホール(青)の k 空間分布

グラフェン・グラファイトなどの層状物質では、二次元的電子状態密度の存在により、巨大かつ高速な可飽和吸収（光強度依存の吸収率変化）などの特徴的な非線形光学特性の存在が知られている。本研究では、TDDFT をもちいた、グラファイト、1～4 層グラフェン、層状リン、TiS₂ 等の二次元物質の光学応答の第一原理計算から、10 フェムト秒オーダーの短時間で現れる可飽和吸収の出現を確認した。また、後述のマルチスケール計算による、グラ

ファイト結晶内のレーザーパルス伝搬、侵入深さにあられる光強度依存性の評価を行った。本理論予測は、炭素材料に対するレーザー加工のシミュレーションへの応用が期待される。(これらの成果をまとめた論文が現在投稿準備段階にある。)

【3】 原子層を含む薄膜とパルス光の相互作用を記述する単一空間格子を用いた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)、野田、矢花)

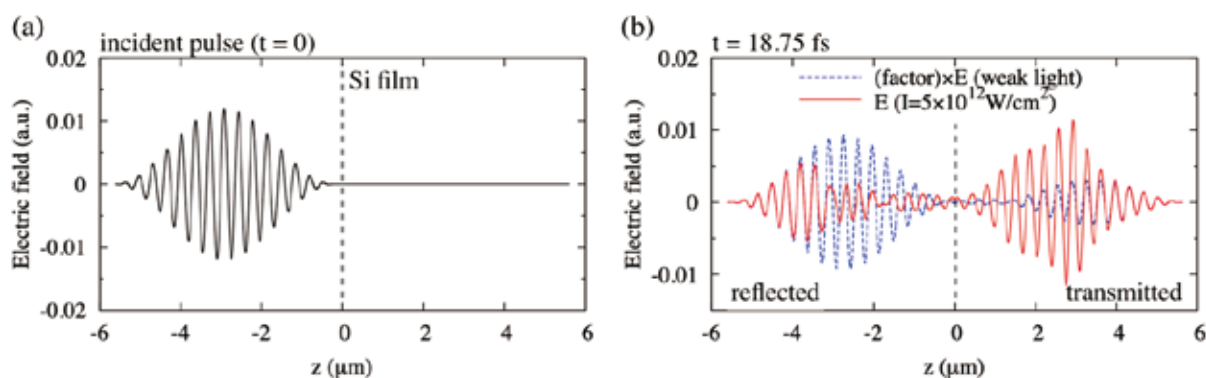


図 3：厚さ 5nm の Si 薄膜に高強度光パルス照射する微視的 Maxwell-TDDFT 計算。(a) 画面上で右向きに進む入射パルス (パルス幅 18 fs, 光振動数 $\hbar\omega=3.5$ eV, 強度 $I=5\times 10^{12}$ W/cm²)。 (b) 反射波と透過波。青線は線形応答領域の結果をファクター倍したもの。パルスの後半で非線形相互作用によるパルス形状の変化が確認できる。

薄膜における高次高調波発生や非熱的なレーザー加工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、2次元物質を含む極めて薄い薄膜における光・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、上記のような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。そこで本研究では、単一の空間スケールで電子系と電磁場を結合する新手法を開発した。本手法は、光電磁場のための微視的 Maxwell 方程式と電子系のための時間依存 Kohn-Sham 方程式を結合し、共通の実空間グリッド上で同時に時間発展させる第一原理計算法である。光の強度や薄膜の厚さに依らず光・電子相互作用を記述できるため、本手法はこの問題における包括的な枠組みとなる。また、薄膜が薄い極限と厚い極限の場合について議論し、それぞれの場合に有効な巨視的近似法を構築した。特に、厚い極限の巨視的近似法はマルチスケール Maxwell+TDDFT 法に一致する。具体的には、例えば Si 薄膜では膜厚およそ 5nm で両近似法の結果がほぼ一致し、それよりも薄い場合は薄膜化による電子構造変化を取り入れた近似法を、厚い場合は光減衰の効果を取り入れた近似法 (マルチスケール法) を採用すれば良いことがわかった。こ

れにより、薄膜の光・電子相互作用を網羅的に記述することが可能になった。以後は本研究の手法を活用して薄膜の非調和光・電子相互作用に関する応用研究を進める予定である。

【4】 光電磁場・電子・格子振動を同時に記述する多階層シミュレーション法の開発と、コヒーレントフォノンのポンプ・プローブ分光への応用（山田(篤)、矢花）

マルチスケール法に MD 機能を加えたシミュレーション、すなわち、光電磁波の伝搬と第一原理分子動力学をマルチスケールモデルの枠組みで連立させた Maxwell + TDDFT + MD 法を開発して SALMON に実装した。この計算手法を用いると、光電磁波の照射に始まり、物質との相互作用とともに光の伝搬、干渉、反射、透過といった複雑な分光プロセス全体を実験系そのままに模倣した時間発展を追跡でき、分光信号を直接的に再現することができる。

本手法の最初の適用として、コヒーレントフォノンの生成に関わる瞬間誘導ラマン分光によるポンプ・プローブ測定の実シミュレーションを行った。右図に示すように、マクロスケール（一次元モデル）において時間幅 18 fs/1.55 eV (800 nm) のポンプ光および遅延時間 89.5 fs のプローブ光を真空領域から物質領域へ入射する。ここでの物質領域は 15 nm のマクログリッド 400 個からなる膜厚 6 μm のダイヤモンド結晶である。これらマクログリッド各々に対して 8 原子から成る一辺 3.567 Å のユニットセル（三次元）をミクロスケールの系（空間グリッド数 16^3 , k 点数 12^3 , LDA 汎関数）として配置し、両スケールとも時間刻み幅 0.002 fs で積分した。

バンドギャップエネルギー以下でのポンプ光との非共鳴型相互作用により原子核の振動（光学フォノン）が誘起されている様子が得られ、さらにポンプ光の伝搬に伴っ

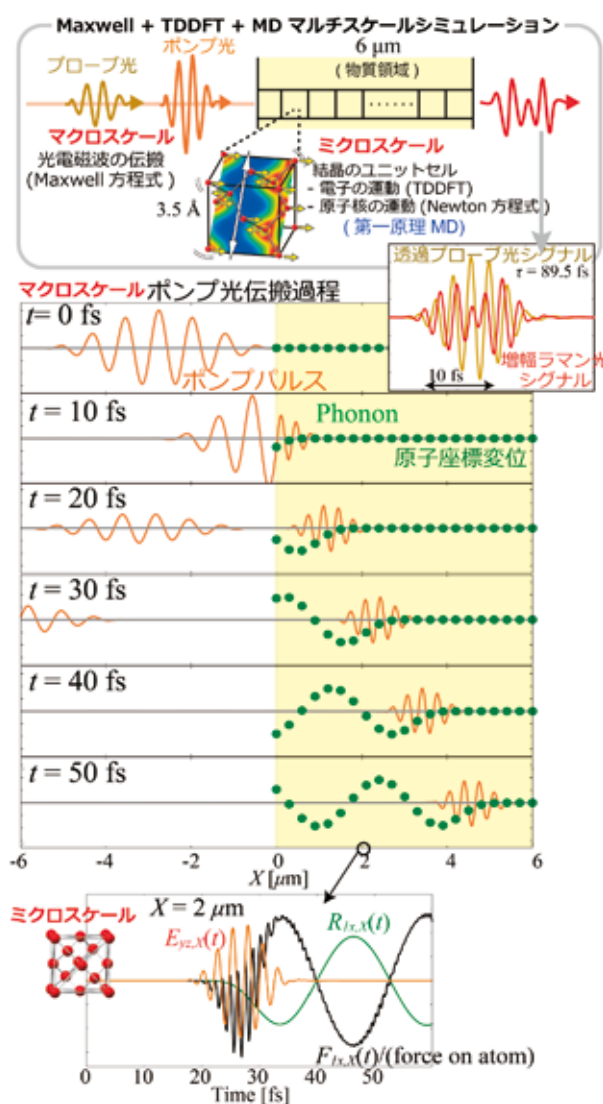


図 4 : Maxwell + TDDFT + MD マルチスケール法の概略図、および瞬間誘導ラマン分光におけるポンプ光照射過程でのコヒーレントフォノン生成のマクロ・ミクロ両スケールでの時間発展。

て位相が異なるフォノンが各点で次々と生じている、つまりコヒーレントフォノンの生成が再現された（図 4）。続くプローブ光プロセスでは、コヒーレントフォノンとの相互作用により誘導ラマン波が増幅し、透過プローブ信号が再現された。これら一連の描像は実験プロセスの詳細を明らかにするとともに、より正確な透過信号の理解を与えることができた。

【5】 金属ナノ粒子が 2 次元配列したメタ表面の光応答（竹内、野田、矢花）

近年金属ナノ粒子を 2 次元配列したメタ表面が注目されている。特に、金属ナノ粒子間の距離（ギャップ）をサブ nm まで縮小させギャップでの高い光増強を利用することで、自然界では見られない高い屈折率を持つメタ表面が得られることが実験で報告され、多くの関心を集めている。本研究では TDDFT を用い、サブ nm のギャップを持つメタ表面の光物性解析を行った。また、古典電磁気学計算機能を SALMON に実装し、比較を行った。結果、古典電磁気学ではギャップが小さい程光増強が高まるのに対し、TDDFT ではギャップ 0.4nm 付近を境に金属界面間にトンネル電流が流れ、光増強が失われることを示した（図 5）。これにより、メタ表面の高屈折率化設計のための重要な指針が明らかとなった。

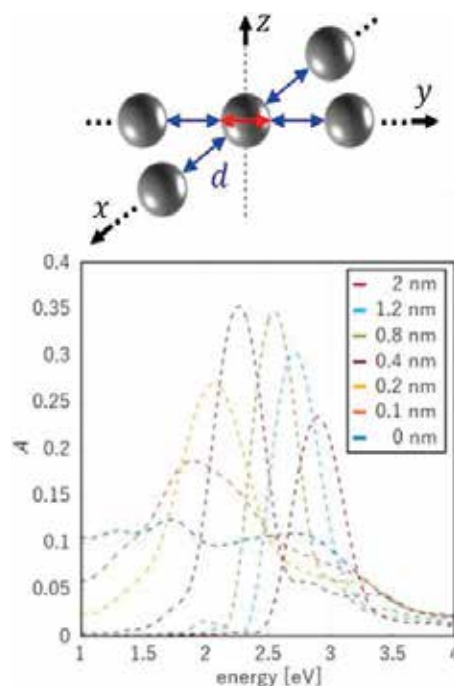


図 5：メタ表面の光吸収率

【6】 金ナノ粒子・グラフェン系の光応答（野田、飯田（分子科学研究所））

光照射時に金ナノ粒子から発生した励起電子によるグラフェンの電気伝導の増強が観測されていることから、金ナノ粒子とグラフェンからなる複合系は光電子デバイスへの応用が期待されている系である。金ナノ粒子から発生する光近接場が電気伝導に影響を及ぼすと考えられるが、この系における原子レベルでの光励起の理解についてはこれまで行われていない。そこで系全体の光学応答の第一原理計算を SALMON で行った。

図は、グラフェンの層に水平な y 偏光の光を照射した時の金-グラフェン系のパワースペクトルである。 y 方向には入射光と同じエネルギー (2.3 eV) の線形な応答のみが生じている。一方、グラフェンの層に垂直な z 方向には、入射エネルギーの二倍 (4.6 eV) の応答のピークが見てとれる (図 6)。これは、近接場光の空間的な非一様性に由来すると考えられ、エチレンを内包した有機金属錯体に対して同様の二倍波発生が報告されている。加えて、0 eV 近傍にもピークが存在する (図中 II)。これは、金とグラフェンの間の光誘起電子移動という、量子力学的な相互作用で支配される光学応答現象であることが明らかになった。光近接場の空間的な非一様に着目したさらなる解析は、近接場光を用いる光電子デバイスの高機能化に繋がると期待される。

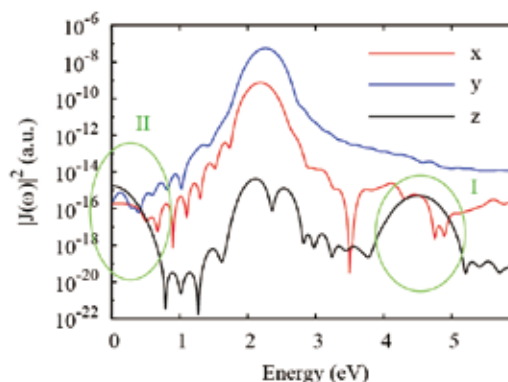


図 6： 金-グラフェン系に y 偏光の光を照射した時のカレントのパワースペクトル。

【7】 第一原理計算コード RSPACE の改良 (小野)

第一原理計算コード RSPACE の伝導計算のボトルネックであった電極自己エネルギー計算部分を改良した。櫻井-杉浦法のように部分的に固有解を求める方法を用いて電極自己エネルギーを計算する場合、自己エネルギーの要素に急峻なエバネッセント波まで取り込む必要がある。しかし、周回積分時に使用する疎行列を係数行列とする連立方程式ソルバの計算コストは、ブロッホ係数の絶対値の対数に対し、2 乗に比例して増大することが問題であった。今年度は、周回積分の積分領域を複素平面上でリング状に分割する方法を開発した。この方法により、緩やかなエバネッセント波に対しては、少ない計算コストで計算できるため、従来法に対して最大で 6 倍の高速化が可能になった。この方法を用いて、カーボンナノチューブの複素バンド構造を計算し、改良法の計算効率と精度の高さを実証した。

【8】 窒化アニール後の SiC/SiO₂ 界面原子構造の探索（小野）

SiC は、次世代パワーエレクトロニクスデバイス用のチャネル材料として期待されているものの、MOSFET のキャリア移動度が SiC バルクよりも大幅に低いことが本格普及への課題となっている。NO アニールによって移動度が向上することが分かっているが、アニールによって導入された N の役割や界面に N が入った原子構造は現在まで明らかになっていない。共同研究を行う産総研の共同研究グループが行った実験によると、界面の 0.5nm 程度の領域に N が局在していることが分かっているが、N が界面の基板側にいるのか SiO₂ 側にいるのか分かっていない。今年度は、基板側に N が局在すると仮定して、界面の原子構造を調べた。その結果、図 7 のように界面第一層に N 原子が挿

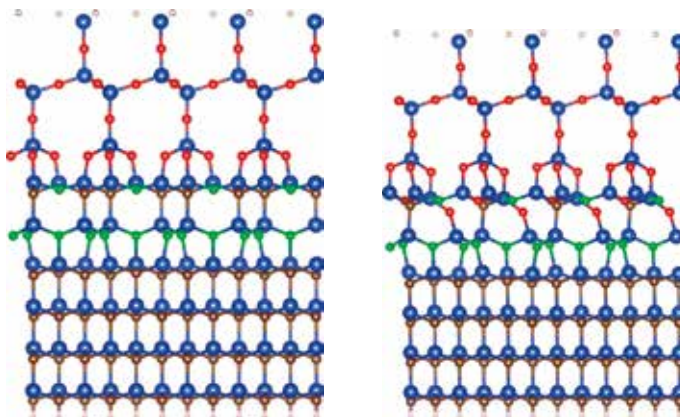


図 7 : NO アニール後の SiC/SiO₂ 界面原子構造。(左) 窒化界面。(右)酸化界面。青球、赤球、緑球、茶球は、Si、O、N、C 原子。

表 1 : (酸)窒化界面の形成エネルギー(eV/(3x1)unit)。

	窒化界面		酸窒化界面	
	h 面	k 面	h 面	k 面
結晶モデル	+0.64	+1.02	+1.13	+1.65
界面モデル	0.00	+0.38	0.00	+0.40

入した構造に界面欠陥準位は生成されないこと、N 原子は基板内部よりも界面第一層に存在する方が安定であることが分かった。また、この場合の N 原子面密度は実験結果と矛盾しない。さらに、NO アニールをしない SiC/SiO₂ 界面では、h 面と k 面の 2 種類の界面の形成エネルギー差が数 meV/unit しかなく、両方が出現することにより伝導帯端が揺らぎキャリア散乱が起こる。一方、表 1 に示すように、(酸)窒化界面は h 面の形成エネルギーが 0.4 eV/unit 程度低く、h 面界面が優先的に形成されるため、NO アニールにより移動度低下の原因になりうる伝導帯端の揺らぎを抑えられることが分かった。

【9】 銅酸化物超伝導体におけるラシュバ相互作用と自発的外部電流供給状態（小泉、真鍋）

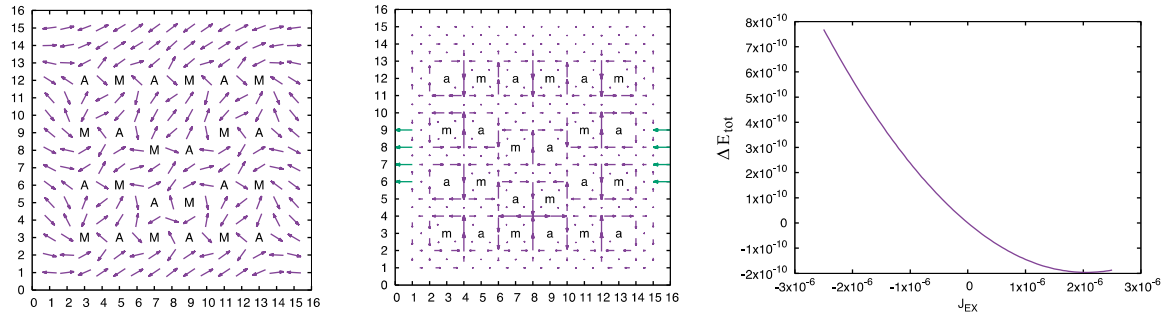


図 8：銅酸化物 CuO_2 面に存在する 24 のスピนว (左)、スピนว誘起ループ電流 (中央)、エネルギーの外部電流依存性 (右)。M (A) は巻き数 1 (-1) のスピนว、m (a) は巻き数 1 (-1) のループ電流を表す。外部電流 J_{EX} は中央の図で、緑色の矢印で表されている。右図が示すように、外部電流 J_{EX} がゼロでない値のところでエネルギーが最小値を取っている。これは、この値の外部電流が自発的に流れることを意味する。

ラシュバ型相互作用が存在する場合、外部からの電流の供給を可能とする境界条件を持つ系では、自発的に電流が供給される状態が生じることを突き止めた。図 8 に計算例を示す。左図のように 24 個のスピนวが存在する系に、中央図の緑色で示した矢印のように外部電流を供給した場合を考える。この時、中央図に示すように、スピนวに対応し 24 個のスピนว誘起ループ電流が生じる。計算では、面に垂直な電場成分を持つラシュバ相互作用が、渦中心の直近に存在するとしている。この時、右図が示すように、外部電流がゼロでない状態の方が、外部電流がゼロである状態よりもエネルギーが低くなっている。これは、自発的に外部からの電流供給が起こることを意味し、この電流は実験で観測されている超伝導電流を説明する。これまで、このような状態を理論的に計算した例はなく、超伝導研究における一つの画期となる理論的な結果であると考えられる。

【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、真鍋）

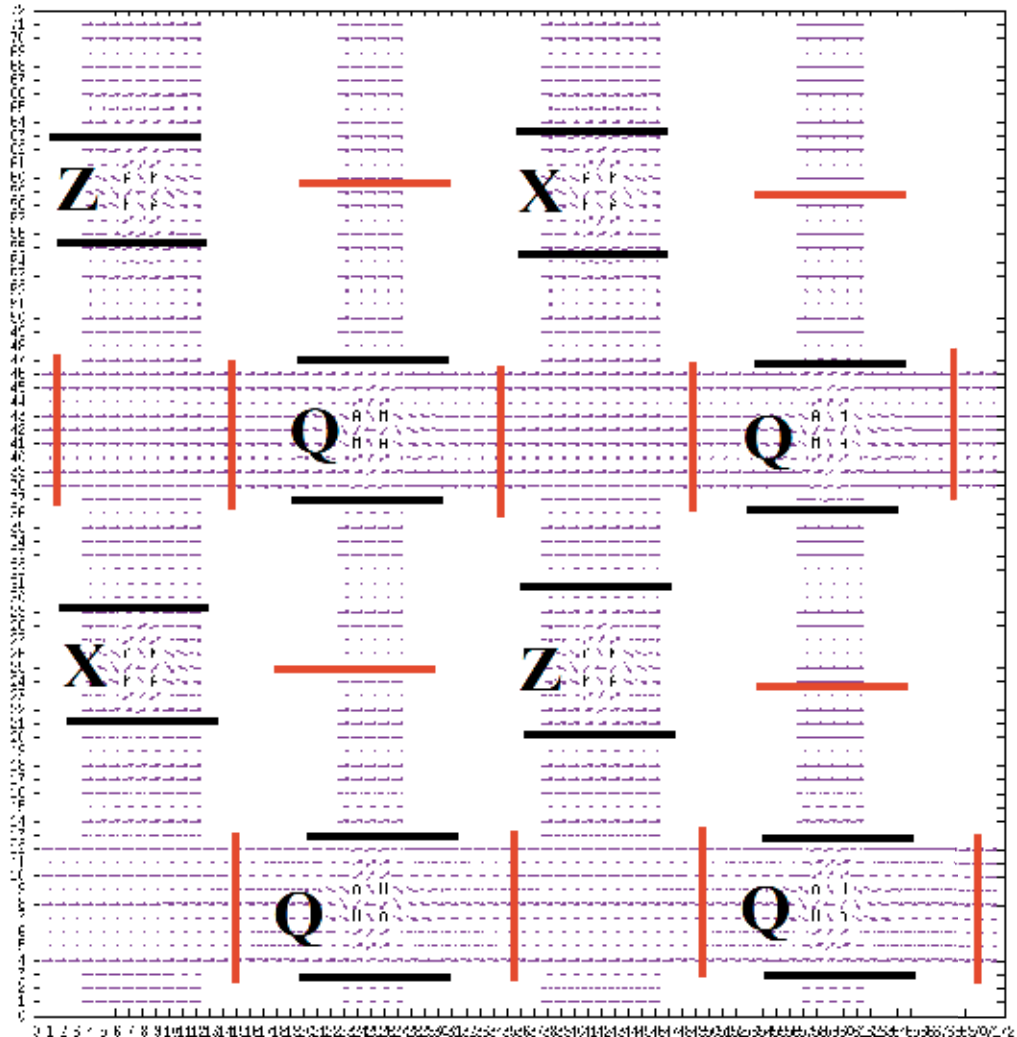


図 9：surface code を実現するスピン渦誘起ループ電流を量子ビットとする量子コンピューターのアーキテクチャーの例（8 量子ビット系）。各々の量子ビットは、4 つ組のスピン渦誘起ループ電流よりなる。Q はデータビットを表し、X と Z がエラーのシンδροーム測定に利用する量子ビットである。量子ビット間の結合は、外部電流を（赤、黒のラインに沿って）供給することにより行う。

スピン渦誘起ループ電流はトポロジカルに保護されており、その電流の方向を 2 準位として量子ビットを作ることができる。実際には、いくつかのループ電流をひとまとまりとして一つの量子ビットとした方が、都合がよく、我々は、4 つ組のループ電流で 1 量子ビットを作る場合を研究している。量子ビット間の結合は外部電流の供給により On-Off が可能であり、それを利用すれば、ナノサイズで surface code を実現するアーキテクチャーが可能になる。

我々は、8量子ビット系で図9のようなアーキテクチャーを考察している。計算量がかなり大きくなり、シミュレーションを行うのに時間がかかりすぎ、現在までのところ具体的な結果を出せていない。今後、モデルを簡素化し、計算を効率化する必要がある。

【11】 赤外線強レーザー場における酸素分子電離過程の制御（トン）

我々が開発したFFTにより新しい時間依存密度汎関数計算方法をスーパーコンピュータ（Oakforest-PACS [OFP]）に移植し、その計算方法で赤外線強レーザー場における酸素分子電離過程を調べた。特に電離確率と軟X-線と赤外線強レーザー場偏光向きとの依存性や二つのパルスの時間遅延との関係を解明した。我々の計算でアメリカローレンス・バークレー国立研究所での実験結果を解釈した。本研究は国際共同研究の成果として、Physical Review A に発表した。

【12】 重水素分子解離過程における電子相関の寄与（トン）

新しい計算方法で、短パルス軟X-線レーザーにより、重水素分子電離に伴う解離過程について調べた。図のように、単電子近似の計算と多電子の計算結果とアメリカの実験グループの観測結果と比べて、高い励起状態における電子相関の寄与を明らかにした。特に時間遅延の手法で、電子相関と原子イオン間距離の関係を初めて明らかにした。本研究は多国国際共同研究の成果として、Physical Review A に発表した。

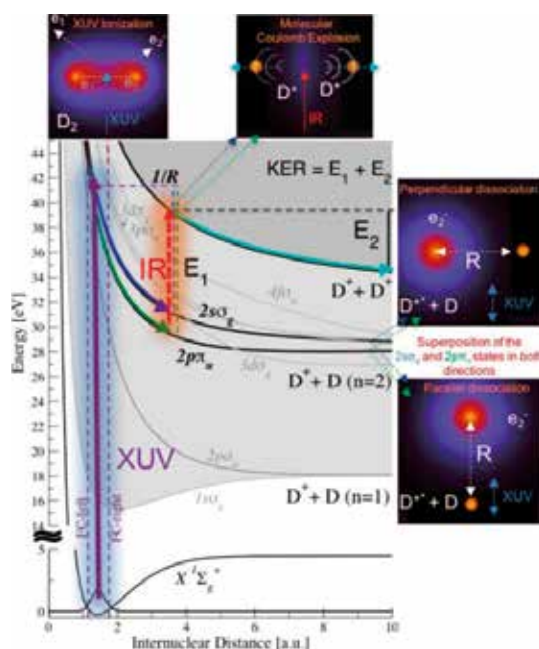


図 10： 重水素分子軟 X 線吸収に伴う解離過程

【13】 強相関電子系における励起状態・レーザー誘起状態の研究（前島）

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電荷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動的電荷構造因子にスピン励起状態起源のスペクトルピークが現れることを見出し、厳密解等の解析計算との比較から特に 2-spinon singlet と呼ばれる励起状態が強いスペクトル強度を有することを明らかにした（図 11）。またスピンプラストレーション系であるジグザグハバード梯子模型にレーザー光を照射した場合生じるフロケ状態の解析から実効的飛び移り積分の抑制による光誘起相転移が起こりうることを厳密対角化計算により示した。

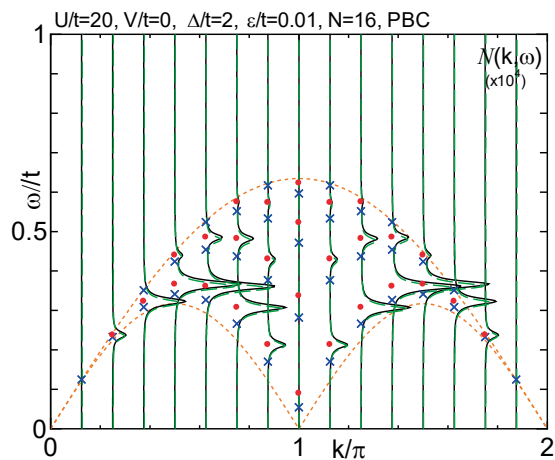


図 11：イオン性ハバード模型における電荷動的構造因子 $N(k, \omega)$ 。

4. 教育

博士論文

岩瀬 滋 Development and application of first-principles real-space transport calculations

修士論文

出口 泰資 レーザー場中のハバード梯子模型におけるフロケ状態の解析

林田 伸明 半導体コヒーレントフォノン生成におけるプラズモン効果

堀川 健 長さゲージを用いた周期系の電子ダイナミクス計算

卒業論文

岩瀬 悠馬 1次元イオン性ハバード模型の動的電荷構造因子に対する低エネルギー有効模型による解析

酒井 貴義 トポロジカル絶縁体における不純物効果

奥田 悠希 コヒーレントフォノン生成における過渡的プラズモン・フォノン相互作用

森口 大志 Su-Schrieffer-Heeger 模型におけるフロケ状態の解析

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

なし

外部資金

1. JST CREST「光・電子融合第一原理計算ソフトウェアの開発と応用」、矢花一浩、代表、2016-2021 年度、37200 千円（2018 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、2016-2019 年度、15208 千円（2018 年度直接経費）
3. Q-LEAP 先端レーザーイノベーション拠点「次世代アト秒レーザー光源と先端計測技術の開発」、矢花一浩、3170 千円（2018 年度直接経費）
4. 日本学術振興会、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、2300 千円（2018 年度直接経費）
5. 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と物質との相互作用に関する研究」、矢花一浩、450 千円（2018 年度直接経費）
6. 日本学術振興会、科研費基盤研究(B)「大規模第一原理スピン輸送シミュレータの開発と革新的デバイス用界面構造の設計」、小野倫也、代表、2018 年、3,300 千円
7. 筑波大学、筑波大学・DAAD パートナシップ・プログラム、小野倫也、代表、2018 年、150 千円、「大規模物質・デバイス設計シミュレーションを目指した第一原理計算コードの開発」
8. 民間企業、学術指導、小野倫也、100 千円.
9. 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」
10. 日本学術振興会、科研費基盤研究(C)「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」、全 暁民、代表、2018 年、650 千円、

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. M. Noda, S.A. Sato, Y. Hirokawa, M. Uemoto, T. Takeuchi, S. Yamada, A. Yamada, Y. Shinohara, M. Yamaguchi, K. Iida, I. Floss, T. Otobe, Kyung-Min Lee, K. Ishimura, T. Boku, George F. Bertsch, K. Nobusada, K. Yabana, "SALMON: Scalable Ab-initio Light-Matter

- simulator for Optics and Nanoscience", Computer Physics Communications. Volume 235, 356 (2019).
2. T. Ootobe, Y. Shinohara, S.A. Sato, K. Yabana, "Theory for Electron Excitation in Dielectrics under an Intense Linear and Circularly Polarized Laser Fields", J. Phys. Soc. Jpn. 88, 024706 (2019).
 3. A. Yamada, K. Yabana, "Energy transfer from intense laser pulse to dielectrics in time-dependent density functional theory", Eur. Phys. J. D, (2019) 73: 87.
 4. M. Uemoto, Y. Kuwabara, S. A. Sato, and K. Yabana, "Nonlinear polarization evolution using time-dependent density functional theory", J. Chem. Phys. 150, 094101 (2019).
 5. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, and K. Yabana, "Time-dependent density functional theory for interaction of ultrashort light pulse with thin materials", Phys. Rev. B 98, 245147 (2018)
 6. A. Yamada, K. Yabana, "Multiscale time-dependent density functional theory for a unified description of ultrafast dynamics: Pulsed light, electron, and lattice motions in crystalline solids", Phys. Rev. B, accepted.
 7. I. Floss, C. Lemell, K. Yabana, J. Burgdorfer, "Incorporating decoherence into solid-state time-dependent density functional theory", Phys. Rev. B, accepted.
 8. T. Yatsui, S. Okada, T. Takemori, T. Sato, K. Saichi, T. Ogameoto, S. Chiashi, S. Maruyama, M. Noda, K. Yabana, K. Iida, K. Nobusada, "Enhanced photo-sensitivity in a Si photodetector using a near-field assisted excitation", Comm. Phys., accepted.
 9. T. Takeuchi, T. Sako, K. Nobusada, "Light-dressed states under intense optical near fields", Phys. Rev. A 98, 053440 (2018).
 10. M. Noda, K. Iida, M. Yamaguchi, T. Yatsui, K. Nobusada, "Direct Wave Vector Excitation in an Indirect Band Gap Semiconductor of Silicon with an Optical Near-Field", Phys. Rev. Applied **11**, 044053 (2019).
 11. K. Iida, M. Noda, K. Nobusada, "Photoinduced Electron Transfer at the Interface between Heterogeneous Two-Dimensional Layered Materials", JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, **122**, 37, 21651-21658, DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b05684 (2018).
 12. K. Iida, M. Noda, K. Nobusada, "Photoinduced Electron Transfer at the Interface between Heterogeneous Two-Dimensional Layered Materials", JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, **122**, 37, 21651-21658 (2018).
 13. K. Takagi, T. Ono, "First-principles study on leakage current caused by oxygen vacancies at HfO₂/SiO₂/Si interface", Jpn. J. Appl. Phys. 57(6) 066501 1-4 (2018).

14. S. Iwase, Y. Futamura, A. Imakura, T. Sakurai, S. Tsukamoto, T. Ono, "Contour integral method for obtaining the self-energy matrices of electrodes in electron transport calculations", *Phys. Rev. B* **97**(19) 195449 1-15 (2018).
15. S. Tsukamoto, T. Ono, S. Iwase, S. Blügel, "Complex band structure calculations based on the overbridging boundary matching method without using Green's functions", *Phys. Rev. B* **98**(19) 195422 1-19 (2018).
16. T. Harashima, Y. Hasegawa, S. Kaneko, M. Kiguchi, T. Ono, T. Nishino, "Highly Reproducible Formation of a Polymer Single-Molecule Junction for a Well-Defined Current Signal", *Angew. Chem.* in press.
17. T. Ono, "DFT calculation for oxidation reaction of SiC(0001)", *Mater. Sci. Forum*, accepted.
18. P. Ranitovic, F. P. Sturm, X. M. Tong, T. W. Wright, D. Ray, I. Zalyubovskya, N. Shivaram, A. Belkacem, D. Slaughter, Th. Weber, "Attosecond coherent control of oxygen dissociation by XUV-IR laser fields using three-dimensional momentum imaging", *Phys. Rev. A* **98**, 013410:1:11 (2018).
19. S. Borbely, X.-M. Tong, S. Nagele, J. Feist, I. Brezinov, F. Lackner, L. Nagy, K. Tokesi, and J. Burgdorfer, "Electron correlations in the antiproton energy-loss distribution in He", *Phys. Rev. A* **98**, 012707:1:12 (2018).
20. L. Martin, R. Y. Bello, C. W. Hogle, A. Palacios, X. M. Tong, J. L. Sanz-Vicario, T. Jahnke, M. Schöffler, R. Dörner, Th. Weber, F. Martín, H. C. Kapteyn, M. M. Murnane, and P. Ranitovic, "Revealing the role of electron-electron correlations by mapping dissociation of highly excited D_2^+ using ultrashort XUV pulses", *Phys. Rev. A* **97**, 062508 (2018).
21. X. M. Tong, "Photoelectron angular distribution of atoms in pulsed XUV and IR fields", *Phys. Rev. A*, accepted.
22. D. Manabe and H. Koizumi, "Magnetic field induced charge order in cuprate superconductors: and explanation by spin-vortex-induced loop currents", *J. Phys.: Conf. Ser.* **1148**, 012009 (2018).
23. D. Manabe and H. Koizumi, "Supercurrent generation by spin-twisting itinerant motion of electrons", *J. Supercond. Nov. Magn.* **32**, 2303-2312, (2019).
24. Y. Komaki, Y. Iwase, S. Yanagimatsu, Y. Muta, N. Maeshima, and K. Hino, "Dynamical charge structure factor of a one-dimensional ionic Hubbard model in the low-energy region", *J. Phys. Soc. Jpn.* (2019) accepted.
25. Y. Watanabe, K. Hino, N. Maeshima, H. Petek, M. Hase, "Ultrafast asymmetric Rosen-Zener-like coherent phonon responses observed in silicon", *Phys. Rev. B* **99**, 174304 (2019).

B) 査読無し論文

1. A. Yamada, K. Yabana, "First-Principles Electron Dynamics Simulation Study of High Intensity Laser Irradiation on Crystal Systems: Photon Energy Dependent Energy Transfer", Proceedings of XXI International Conference on Ultrafast Phenomena 2018, **205**, 04020 (2019).
2. M. Uemoto, K. Yabana, S.A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku, "A first-principles simulation method for ultrafast nano-optics", Proceedings of XXI International Conference on Ultrafast Phenomena 2018, **205**, 04023 (2019).
3. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, and K. Yabana, "First-principles method for propagation of ultrashort pulsed light in thin films", Proceedings of XXI International Conference on Ultrafast Phenomena 2018, **205**, 01003 (2019).
4. B. Buades, A. Picón, I. León, N.D. Palo, S.L. Cousin, C. Cocchi, E. Pellegrin, J. H. Martin, S. Mañas-Valero, E. Coronado, T. Danz, C. Draxl, M. Uemoto, K. Yabana, M. Schultze, S. Wall, J. Biegert, "Attosecond-resolved petahertz carrier motion in semi-metallic TiS₂", arXiv: 1808.06493.
5. 植本光治、矢花一浩、"Maxwell+TDDFT マルチスケール計算のための 斜め方向光入射の取り扱いについて"、第 29 回光物性研究会論文集、205-208 (2018).
6. X. Gao and X. M. Tong, "Photoabsorption of atoms in a strong elliptical laser field", submit to ICPEAC2019.
7. X. M. Tong and N. Toshima, "Abnormal photoelectron angular distribution of Aratoms in pulsed XUV and IR laser fields", submit to ICPEAC2019.
8. H. Koizumi, "Theory of Supercurrent generation in BCS Superconductors", arXiv:1810.125.
9. S. Borbely, X. M. Tong, et al., "Energy loss of p and pbar in He: electron correlation effects", submit to ICPEAC2019.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. K. Yabana, "Ab-initio simulations for ultrashort laser-pulse irradiation on nanomaterials ", SPIE Defense + Commercial Sensing 2018, Orlando, Florida, USA, April 15 , 2018
2. K. Yabana, M. Uemoto, S.A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku, "Ab-initio large-scale simulation for initial stage of laser damage in transparent nano-materials", 3rd Smart Laser Processing Conference 2018, Pacifico Yokohama, April 24-26, 2018

3. K. Yabana, "Practical Aspects of TDDFT Calculations", TDDFT School and SALMON Hands-on Seminar, Univ. Tsukuba, Nov. 11-12, 2018
4. K. Yabana, "First-Principles Simulations for Extreme Light-Matter Interaction ", 50th Reimei Workshop on Universal Physics in Many-Body Quantum Systems - From atoms to Quarks, Ibaraki Quantum Beam Research Center, Tokai, Dec. 12-14, 2018
5. K. Yabana, "First-principles calculation for propagation of strong laser pulse with dielectrics International Symposium on Ultrafast Electronic and Structural Dynamics", Tohoku University, Sendai, March7-8, 2019
6. M. Uemoto, S. A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku and K. Yabana, "Maxwell+TDDFT Ab initio Multiscale Simulation and Application to Nano-optics", International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations 2018 (AIEDS18), Tsukuba, Japan, Nov. 16, 2018
7. A. Yamada, K. Yabana, "Maxwell + Nonadiabatic ab initio MD Multi-Scale Simulation and Application to Impulsive Stimulated Raman Scattering Spectroscopy", International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations 2018 (AIEDS18), Tsukuba, Japan, Nov. 16, 2018
8. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, K. Yabana, "Microscopic and Macroscopic descriptions for interaction of ultrashort light pulse with thin materials", International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations 2018 (AIEDS18), Tsukuba, Japan, Nov. 16, 2018
9. M. Uemoto, "Ab-initio large-scale computational approach for ultrafast dynamics in Nano-Optics", International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics 2019, RIKEN R-CCS, Jan. 16, 2019
10. T. Ono, "Evolution of ab-initio calculation based on real-space finite-difference method for massively parallel computers", International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics 2019, Kobe, Japan, January 15-17, 2019

B) 一般講演

1. K. Yabana, M. Uemoto, S.A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku, "A first-principles simulation method for ultrafast nano-optics", XXI International Conference on Ultrafast Phenomena, Hamburg, Germany. July 15-20, 2018 (Poster)
2. M. Uemoto and K. Yabana, "Ab-initio simulation for propagation of ultrashort laser pulse in solids" SPIE Photonics Europe, Strasbourg, France, Apr.24, 2018 (Oral)
3. M. Uemoto, S. A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku, K. Yabana, "Ab-initio large-scale computational approach for ultrafast dynamics in nano-structures", EXCON2018, Nara, Japan, Jul. 9, 2018 (Oral)

4. Atsushi Yamada, Kazuhiro Yabana, "First Principle Electrons Dynamics Simulation Study of High Intensity Laser Irradiation on Crystal Systems: Photon Energy Dependent Energy Transfer", XXI International Conference on Ultrafast Phenomena, Germany Hamburg, July 2018 (Poster)
5. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, and K. Yabana, "First-principles method for propagation of ultrashort pulsed light in thin films", XXI International Conference on Ultrafast Phenomena, Hamburg, Germany, July 19, 2018 (Poster)
6. K. Yabana, M. Uemoto, S.A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku, "Ab-initio multiscale simulation method for ultrafast nano-optics, 15th Int. Conf. on Near-Field Optics", The 15th International Conference of Near Field Optics Nanophotonics and Related Techniques, Troyes, France, Aug. 26-31, 2018 (Poster)
7. M. Noda, M. Yamaguchi, K. Iida and K. Nobusada, "First principles calculations for wave vector excitations of silicon induced by optical near fields", The 15th International Conference of Near Field Optics Nanophotonics and Related Techniques, Troyes, France, Aug. 26-31, 2018 (Poster)
8. T. Takeuchi and K. Nobusada, "Electronic States Dressed up in an Optical Near Field: Optical Responses Induced by Spatial Symmetry and Asymmetry", The 15th International Conference of Near Field Optics Nanophotonics and Related Techniques, Troyes, France, Aug. 26-31, 2018 (Poster)
9. A. Yamada, K. Yabana, "First-Principles Electron Dynamics Simulation Study of High Intensity Laser Irradiation on Crystal Systems: Pulse Frequency Dependent Energy Transfer", International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations, Tsukuba, Japan, Nov. 14, 2018 (Poster)
10. M. Uemoto, Y. Kuwabara, S. A. Sato and K. Yabana, "Spatio-Temporal Analysis of Nonlinear Optical Responses by Time-Dependent Density Functional Theory", International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations, Tsukuba, Japan, Nov. 14, 2018 (Poster)
11. T. Takeuchi and K. Yabana, "Optical Properties of Metallic Nanoparticle Arrays by TDDFT", International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations, Tsukuba, Japan, Nov. 14, 2018 (Poster)
12. M. Noda, K. Iida, M. Yamaguchi, T. Yatsui and K. Nobusada, "Direct wave vector excitations of silicon induced by optical near fields", International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations, Tsukuba, Japan, Nov. 14, 2018 (Poster)

13. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, K. Yabana, "Comprehensive theoretical framework for light-matter interaction in thin materials based on TDDFT ", CSW2019, Ryogoku, Tokyo, Japan, Jan. 16, 2019 (Poster)
14. T. Takeuchi and K. Yabana, "Optical Responses of a Metasurface Consisting of Metallic Nanoparticles", CSW2019, Ryogoku, Tokyo, Jan. 16, 2019 (Poster)
15. M. Uemoto, K. Yabana, "Large-scale ab-initio simulation for nano-optics based on time-dependent density functional theory", The 1st R-CCS International Symposium, Kobe, Japan, Feb. 18, 2019 (Poster)
16. M. Noda, K. Iida, M. Yamaguchi, K. Ishimura, T. Yatsui, K. Nobusada and K. Yabana , "Massively-parallel first-principles calculations for near field optics: wave vector excitations in silicon", The 1st R-CCS International Symposium, Kobe, Japan, Feb. 18, 2019 (Poster)
17. Atsushi Yamada and Kazuhiro Yabana, "Maxwell + First-Principles TDDFT-MD Multi-Scale Simulation and Application to Impulsive Stimulated Raman Scattering Spectroscopy", APS March Meeting 2019, Boston, USA, March, 2019 (Oral)
18. M. Uemoto and K. Yabana, "Maxwell+TDDFT multiscale simulation for optical response of nanomaterials", APS March Meeting 2019, Boston, USA, March 5, 2019 (Oral)
19. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, and K. Yabana, "Microscopic and macroscopic Maxwell-TDDFT descriptions for light-matter interaction in thin materials", APS March Meeting 2019, Boston, USA, March 5, 2019 (Oral)
20. M. Noda, K. Iida, M. Yamaguchi, K. Ishimura, T. Yatsui, K. Nobusada, K. Yabana, "Massively-parallel time-dependent density functional theory calculations for optical near-field excitations in silicon", APS March Meeting 2019, Boston, USA, March 5, 2019 (Oral)
21. T. Ono, "Density functional study on functionality of nanoscale devices", JSPS Core to Core workshop, Cambridge, UK, April 16-18, 2018
22. T. Ono, "Evolution of ab-initio transport calculation scheme based on real-space method", Workshop on UT/DAAD partnership program "Development of first-principles calculation codes for large scale simulations targeting materials and device design", Tsukuba, Japan, April 26, 2018
23. T. Ono, S. Tsukamoto, "Improvement of wave-function-matching technique for large-scale first-principles electron-transport calculation", H30 年度 ポスト「京」重点課題（7）第 3 回 CDMSI 研究会, Tokyo, Japan, July 19-20, 2018
24. T. Ono, "DFT calculation for electronic structure of SiC/SiO₂ after nitridization", European Conference on Silicon Carbide and Related Materials 2018, Birmingham, UK, September 2-6, 2018

25. T. Ono, "DFT Study on Atomic and Electronic Structures of SiC/SiO₂ after NO Annealing", 49th IEEE Semiconductor Interface Specialists Conference, San Diego, USA, December 6-8, 2018
26. A. Hashmi, K. Nakanishi, T. Ono, "Graphene and h-BN based symmetric and non-symmetric magnetoresistive junctions", 19th International Workshop on Computational Physics and Material Science: Total Energy and Force Methods 2019, Italy, January 9-11, 2019
27. X. M. Tong, "Theoretical Studies on Antiproton Captured by H and He atoms", Workshop to discuss PUMA experiment and its future possibilities, Osaka University, Aug. 24, 2018
28. H. Koizumi, "Charge order in cuprate superconductors: effect of Rashba spin-orbit interaction", XXIVth International Symposium on the Jahn-Teller Effect, Santander, Spain, June 24-29, 2019
29. H. Koizumi, "Reformulating supercurrent generation in superconductors", 12th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors, Beijing, China, August 19-24, 2018
30. H. Koizumi, "Superconducting state as an energy minimal state under external current feeding: A story of gauge potential from Maxwell to Berry", 筑波大学ーエジンバラ大学 合同ワークショップ, Edinburgh, UK, December 3-4, 2018
31. H. Koizumi, "Error correctable architecture for quantum computers using spin-vortex-induced loop current qubits", LBNL/CRD-Tsukuba/CCS Meeting, Berkeley, USA, March 6-7, 2019
32. DB Esry et al., "Comparing the performance of time-dependent-Schrödinger-equation solvers for the 800-nm, one-electron-atom, strong-field problem", 49th Annual Meeting of the APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics, Lauderdale, FL, USA, May 28-June 1, 2018

C) セミナー等

1. 矢花一浩、"Ab-initio description for propagation of extreme light pulse in solids: Recent progresses", ウィーン工科大学 (オーストリア)、2019 年 3 月 20 日
2. 矢花一浩、"Ab-initio description for propagation of extreme light pulse in solids: Recent progresses", グラーツ大学 (オーストリア)、2019 年 3 月 25 日
3. 矢花一浩、"Ab-initio description for propagation of extreme light pulse in solids: Recent progresses", マックスプランク物質構造動力学研究所 (ドイツ)、2019 年 3 月 27 日
4. 小泉裕康、"External current as a coupler between spin vortex induced loop current qubits", Federal University of Rondonia, Porto Velho (ブラジル)、2019 年 3 月 27 日

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 矢花一浩、"第一原理計算光・物質科学の創成"、光極限第 5 回領域会議、柏の葉カンファレンスセンター、2018 年 4 月 21 日
2. 矢花一浩、"電子ダイナミクスの第一原理計算を巡って"、光とナノ物質の相互作用：分子科学の未来に向けて、岡崎コンファレンスセンター、2018 年 6 月 10 日
3. 矢花一浩、"高強度超短パルス光と誘電体の相互作用を記述する第一原理計算"、BRL セミナー、NTT 物性科学基礎研究所、2018 年 8 月 20 日
4. 矢花一浩、"誘電体の超高速光応答～第一原理計算からのアプローチ～"、レーザー学会学術講演会シンポジウム「固体におけるアト秒・強光子場科学の最前線、東海大学高輪キャンパス、2019 年 1 月 13-14 日
5. 矢花一浩、"固体超高速現象に対する数値実験手法の開発と応用"、日本光学会光波シンセシス研究グループ研究会「光の絶対位相制御と分光計測・物質操作への応用」、東京大学生産技術研究所、2019 年 2 月 12 日
6. 矢花一浩、物質科学分野における高強度パルス光を用いた研究の現状と展望～理論・計算物理からの視点～ 日本物理学会第 74 回年次大会シンポジウム「チャープパルス増幅法の恩恵」九州大学、2019 年 3 月 14-17 日

B) その他の発表

1. 矢花一浩、"汎用光科学第一原理計算ソフトウェア SALMON の開発と応用"、H30 年度ポスト「京」重点課題（7）第 3 回 CDMSI 研究会、東京大学、2018 年 7 月 19-20 日（口頭）
2. 植本光治、矢花一浩、"第一原理電子ダイナミクス計算による ナノフォトニクスシミュレーション"、3 回 CDMSI（ポスト「京」重点課題（7））シンポジウム、東京大学、2018 年 7 月 19 日（口頭）
3. 野田真史、飯田健二、信定克幸、"表面-金クラスター複合系における光誘起電子ダイナミクス"、第 3 回 CDMSI（ポスト「京」重点課題（7））シンポジウム、東京大学、2018 年 7 月 19-20 日（口頭）
4. 植本光治、矢花一浩、"第一原理電子ダイナミクス計算による半導体微細構造の斜方向光伝搬シミュレーション"、日本物理学会 2018 年秋季大会、同志社大学、2018 年 9 月 10 日（口頭）
5. 山田俊介、野田真史、信定克幸、矢花一浩、"薄膜・表面における光伝搬の実時間第一原理シミュレーション"、日本物理学会 2018 年秋季大会、同志社大学、京田辺、2018 年 9 月 10 日（口頭）

6. 山田篤志、矢花一浩、"瞬間誘導ラマン分光の Maxwell/TDDFT/MD マルチスケールシミュレーション—ダイヤモンドにおけるコヒーレントフォノンのポンプ—プローブ分光シグナルの解析—", 第 79 回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2018 年 9 月 21 日(口頭)
7. 山田篤志、矢花一浩、"Maxwell + TDDFT + MD マルチスケールシミュレーションの開発および瞬間誘導ラマン分光におけるコヒーレントフォノンとシグナルの計算への適用"、分子シミュレーション討論会、産業総合研究所、2018 年 11 月 29 日 (口頭)
8. 植本光治、矢花一浩、"Maxwell+TDDFT マルチスケール計算のための 斜め方向光入射の取り扱いについて"、第 29 回光物性研究会、II-51、京都大学宇治おうばくプラザ、2018 年 12 月 8 日 (口頭)
9. 山田篤志、矢花一浩、"Maxwell + TDDFT + MD マルチスケールシミュレーションの開発および瞬間誘導ラマン分光におけるコヒーレントフォノンへの適用"、CREST 次世代フォトニクス領域会議、秋葉原、2018 年 12 月 12 日 (ポスター)
10. 山田俊介、野田真史、信定克幸、矢花一浩、"薄膜における光・物質相互作用のための微視的および巨視的理論"、CREST 次世代フォトニクス領域会議、秋葉原 2018 年 12 月 12 日 (ポスター)
11. 竹内嵩、矢花一浩、"第一原理計算による微小金属周期列の光物性解析"、CREST 次世代フォトニクス領域会議、秋葉原、2018 年 12 月 12 日 (ポスター)
12. 植本光治、桑原有輝、佐藤俊介、矢花一浩、"TDDFT による非線形光学応答の時空間空間解析"、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(CDMSI)」第 4 回シンポジウム、柏、2018 年 12 月 17 日 (ポスター)
13. 野田真史、飯田健二、信定克幸、"表面-金クラスター複合系における光誘起電子ダイナミクス"、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(CDMSI)」第 4 回シンポジウム、柏、2018 年 12 月 17 日 (ポスター)
14. 植本光治、"第一原理電子ダイナミクス計算に基づくナノフォトニクスシミュレーション"、MI2I マテリアルズ探索グループ拡大合同 Working 「ナノテクノロジーにおけるマテリアルズ・インフォマティクス・ネットワーク」、浜松、2019 年 2 月 17 日 (口頭)
15. 山田篤志、矢花一浩、"コヒーレントフォノンとプローブ光シグナルの位相差の理論解析およびシミュレーションによる検証"、第 66 回応用物理学会春季学術講演会、東京工業大学、2019 年 3 月 9 日(口頭)

16. 竹内嵩、矢花一浩、"時間依存密度汎関数法による微小金属周期配列の光物性解析"、第 66 回応用物理学会春季学術講演会、東京工業大学、2019 年 3 月 10 日 (口頭)
17. 山田篤志、矢花一浩、"Maxwell+TDDFT+MD マルチスケールシミュレーションの開発および瞬間誘導ラマン分光におけるポンププローブ分光への適用"、日本物理学会第 74 回年次大会(2019 年春季大会)、九州大学、2019 年 3 月 15 日 (口頭)
18. 植本光治、矢花一浩、"Maxwell+TDDFT マルチスケール計算によるナノフォトニクスシミュレーション"、日本物理学会第 74 回年次大会(2019 年春季大会)、九州大学、2019 年 3 月 15 日 (口頭)
19. 山田俊介、野田真史、信定克幸、矢花一浩、"薄膜とパルス光の相互作用に対する包括的第一原理計算方法の構築"、日本物理学会第 74 回年次大会(2019 年春季大会)、九州大学、2019 年 3 月 15 日 (口頭)
20. 廣川祐太、"電子動力学アプリケーション SALMON の各最先端プロセッサへの実装状況"、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(CDMSI)」第 4 回シンポジウム、千葉、2018 年 12 月 17 日 (口頭)
21. 廣川祐太、朴泰祐、矢花一浩、"AVX-512 Intrinsics で実装されたステンシル計算の Scalable Vector Extension への展開"、第 168 回 HPC 研究会、Vol. 2019-HPC-168 No. 4、石川、2019 年 3 月 5 日 (口頭)
22. 小野倫也、"第一原理計算による SiC/SiO₂ 界面の電子状態解析と評価"、内閣府 SIP 成果報告会、大阪、2018 年 7 月 20 日
23. 中西健太、小野倫也、A. Hashmi、"二次元 Cr₂O₃ のスピン伝導特性計算"、日本物理学会第 74 回年次大会、福岡、2019 年 3 月 14 日～17 日
24. 岩瀬滋、小野倫也、"空間分割と特異値分解による自己エネルギー計算方法の開発"、日本物理学会第 74 回年次大会、福岡、2019 年 3 月 14 日～17 日
25. A. Hashmi, K. Nakanishi, T. Ono, "Graphene and h-BN based symmetric and non-symmetric magnetoresistive junctions", 日本物理学会第 74 回年次大会、福岡 2019 年 3 月 14 日～17 日
26. 真鍋大地、"スピン渦誘起ループ電流理論:モンテカルロ法による銅酸化物超伝導体超伝導転移温度の計算"、日本物理学会 2018 年秋季大会、同志社大学京田辺キャンパス、2018 年 9 月 9-12 日
27. 小泉裕康、"スピン渦誘起ループ電流理論:電流の保存を利用した、波動関数の一価性条件を満たす波動関数の計算方法"、日本物理学会 2018 年秋季大会、同志社大学京田辺キャンパス、2018 年 9 月 9-12 日
28. 真鍋大地、小泉裕康、"銅酸化物超伝導体の量子臨界性と超伝導 T_c"、日本物理学会第 74 回年次大会、福岡、2019 年 3 月 14 日～17 日

29. 小泉裕康、“ベリー接続を含んだ密度汎関数法と超伝導”、日本物理学会第 74 回年次大会、福岡、2019 年 3 月 14 日～17 日
30. 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レーザー誘起現象”、日本物理学会 2018 年秋季大会、同志社大学京田辺キャンパス、2018 年 9 月 9-12 日

(4) 著書、解説記事等

1. 矢花一浩, “レーザー加工初期過程を記述する第一原理光科学計算法”, レーザー加工学会誌 Vol.25 No.2 2018 pp.3-7
2. 乙部智仁、矢花一浩、佐藤駿丞、篠原康, “高強度短パルスレーザー照射下にある絶縁材料の第一原理計算”, J. Plasma Fusion Research Vol.94, No.5 2018 pp.266-269

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1. 光科学ソフトウェア SALMON の開発にあたり、高性能計算システム研究部門の朴グループと密接な研究協力を行なっている。
2. アト秒光科学に関し、マックスプランク量子光学研究所（ドイツ・ガルヒング）及びバルセロナ大学（スペイン）の実験グループと共同研究を行っている（矢花）。
3. 時間依存密度汎関数理論を用いた光と物質の相互作用に関して、内殻電子ダイナミクス計算についての共同研究をマックスプランク物質構造動力学研究所（ドイツ・ハンブルク）の理論グループと、位相緩和に関する共同研究をウィーン工科大学（オーストリア）の理論グループと行っている（矢花）。
4. H2020-MSCA-RISE（欧州の国際交流プロジェクト）による光と物質の相互作用の理論と計算に関わる国際ネットワーク形成プロジェクト ATLANTIC の申請に矢花が加わった。このプロジェクトは採択され、2019.4 より開始予定である。

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. International School and Tutorial on Time-Dependent Density Functional Theory and SALMON Hands-on Tutorial

SALMON の利用者を拡大する活動として、2017 年度に、SALMON を用いたハンズオン（スパコンを用いた実習）を含む第一回 SALMON チュートリアルを実施したが、2018 年度も継続して行なっている。2018 年度は 11 月に、以下のような国際スクール・チュートリアルを実施した。2 日間の日程で行い、午前中のスクールでは、SALMON の背景となる理論について、国際的に著名な研究者による講義を実施し、午後は本 CREST で雇用の研究員が中心となり筑波大学のスパコンで SALMON を利用する実習を行なった。図 1 に、午前中の講義の様子を示す。主に博士後期課程の大学院生やポスドクなどの若手研究者を中心に、海

外からの参加者 23 名を含む 57 名が参加した。このイベントは、SALMON の利用者拡大と国際的な認知において、大変有意義であった。



図 1：国際スクール・チュートリアルの教室。

- ・ 日程：2018 年 11 月 12 日(月)～ 13 日 (火)
- ・ 場所：筑波大学計算科学研究センター 会議室 A
- ・ 参加人数：日本人 26 名、国内外国人 8 名、海外参加者 23 名 合計 57 名

2. International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations (AIEDS2018)

国際スクール・チュートリアルに引き続く 3 日間の日程で、SALMON が主な対象とする電子ダイナミクス計算を主題とする国際シンポジウムを実施した。シンポジウムでは招待講演を含めて 30 件の口頭発表と 14 件のポスター発表があり、海外からの参加者 38 名を含め 75 名が参加した。口頭発表 30 件のうち SALMON を利用した発表が 6 件あり、SALMON がこの分野で有用であることをアピールする大変良い機会となった。



図 2：国際シンポジウムの会場

- ・ 日程：2018 年 11 月 14 日(水)～16 日(金)
- ・ 場所：つくば国際会議場(EPOCAL) 102 室
- ・ 参加人数：日本人 31 名、国内外国人 6 名、海外参加者 38 名 合計 75 名

・（参考）スクール及びシンポジウムの重複を除いた参加人数：日本人 38 名、国内外国人 10 名、海外参加者 39 名 合計 87 名

3. JST-CREST 研究課題進捗報告・討論会、神奈川県足柄下郡、2018 年 9 月 27 日（矢花）。

9. 管理・運営

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

小泉：応用理工学類、入試実施委員（長）、筑波大学全学計算機システム、3D サテライト管理

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

矢花：

- ・2018 年 9 月及び 2019 年 2 月に大阪大学にて開催された CMD ワークショップにおいて SALMON のチュートリアルを実施。
- ・平成 30 年度テニユアトラック普及・定着事業委員会委員。

小野：

- ・2019 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。
- ・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活動した。

11. その他

1. SALMON に関わる広報。プレスリリース（筑波大、分子研、東工大各 HP）、先端の光科学に役立つ第一原理計算ソフトウェア SALMON の開発、2019 年 2 月 1 日。科学新聞、先端光科学研究に貢献 第一原理計算ソフト、2019 年 2 月 22 日。

2. SALMON に関わる一般記事。実験をリアルに再現するマルチスケール シミュレーション～「光と物質の相互作用」を理解する、京算百景 Vol.22, 2018.7
3. マンスリーサバティカルによる海外滞在（小泉）、Federal University of Rondonia, Porto Velho, Brazil、平成 31 年 3 月 18 日～平成 31 年 4 月

V. 生命科学研究部門

V-1. 生命機能情報分野

1. メンバー

教授	重田 育照
准教授	原田 隆平
助教	庄司 光男
助教	栢沼 愛
助教	西澤 宏晃
研究員	鬼頭-西岡 宏任
学生	大学院生 5 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 30 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ュン過程の理論研究、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ー (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】 酵素反応機構の解明

1. 光化学系 II 酸素発生中心(PSII-OEC)における水分解反応機構の理論的解明

光化学系 II (PSII) では光エネルギーを利用して水分解反応 ($2\text{H}_2\text{O} + 4h\nu \rightarrow \text{O}_2 + 4\text{H}^+ + 4\text{e}^-$) を触媒している。本系は生体による効率的な光エネルギー変換システムとして極めて重要であり、現在、その反応機構の解明が非常に注目されている。

PSII の反応サイクルは 4 つの (準) 安定な S 状態を経由すると考えられている。この S 状態遷移の中でも、 $\text{S}_3 \rightarrow \text{S}_0$ 遷移は酸素-酸素結合、酸素分子放出、基質水分子の Mn クラスターへの挿入、 MnCaO_5 クラスター骨格の再構築が含まれ、非常に複雑な化学反応を伴う。高精度

電子状態計算 (QM/MM) により、 $S_3 \rightarrow S_0$ 遷移に含まれる O-O 結合形成を検討し、2つの新しい機構を提唱した[1,5,7]。非断熱電子移動 (NA-CT) 機構 [1] と非ラジカルカップリング (CBS) 機構[5,7]である。酸素分子放出は水分子挿入と協奏過程であることを明らかにした[2]。また、Mn クラスタに存在する Ca イオンが水分子導入に重要な役目を果たしていることも明らかにした。複雑な化学反応を効率良く自動的に探索するアルゴリズムも新規に提案した。Mn 錯体の高酸化状態の電子状態については高精度な多参照電子状態理論 (DMRG 等) で精密に評価した。

2. ビリルビンオキシダーゼの活性中心構造変化と触媒機構についての理論解明 [5,7]

ビリルビンオキシダーゼ (BOD: Bilirubin Oxidase) は活性中心に 3 種類の Cu イオンを 4 原子 (Type 1 Copper (T1Cu) と Type 2 Copper (T2Cu)、Type 3 Copper (T3Cu)) 含有している。T1Cu 部位でビリルビンは酸化され、電子は T2Cu と 2 つの T3Cu で構成される三核銅中心 (TNC: Trinuclear Copper Center) に移動し、 O_2 を H_2O に 4 電子還元する。BOD は、触媒活性が安定しているため、疾病の原因であるビリルビンに対する検査薬や酵素燃料電池の電極への応用研究がなされている。Cu イオンの配位子の違いにより、立体構造や酸化還元電位に顕著な違いが現れることについての理論解明を行った。野生型 (WT: Wild type) と変異型 M467Q (Met467Gln) の高解像度の X 線結晶構造を基に、量子力学/古典力学混合 (QM/MM) 法を用いて、酸化還元電位の変化や反応中間体の同定についての理論的解明を行った。WT と変異型 (Met467Gln: M469Q) の T1Cu 近傍の立体構造を再現できることを確認した[5]。

次に、4 電子還元過程による 4 個の Cu イオンの構造変化と電子状態の変化について理論解析した。触媒サイクル中の初期構造である RO (Resting Oxidized) 状態では μ^2 -OH を持つ RO_1 状態よりも μ^3 -oxo を持つ RO_0 の方が 24.9 kcal/mol も安定であった。NI 状態における Löwdin のスピン密度を解析すると、NI 状態は完全酸化型であるが $\rho(T1Cu)=0.00$ であったことから、NI 状態にプロトンをつ加えた NI^{H+} 状態が安定な native intermediate の候補であると予測した。これらの触媒サイクルの中間体候補と、WT BOD と M467Q BOD の還元過程での分子軌道の変化を解析し、本論文で提案した新たな中間体候補を含む新しい触媒サイクルを解明した。T1Cu 周囲の構造変化自体が非常に小さいことや、TNC を構成する T2Cu と T3Cu で作る距離は各中間体の構造で変化が大きいことに注目し、T2Cu と 2 つの T3Cu 原子によって形成される三角形の面積に比例する新しい指標 I を用いることで、それぞれの BOD の構造変化を特徴づけた。指標 I は、酸化型と還元型の構造を良く分離し、TNC の酸化状態の良い指標となることを示した。

【2】 データ駆動型分子動力学シミュレーションの開発と応用

我々はこれまで、超並列カスケード選択型分子動力学シミュレーション (PaCS-MD) 法を開発し、タンパク質の折りたたみやドメイン運動などの遅い過程の構造変化の解析を行って

きた。PaCS-MD ではこれまで初期構造の選択の際に終構造などの情報を事前に与えていた。同じアルゴリズムを用いて、実験から得られる低解像度の構造データ（例えば SAXS や Cryo-MD）と MD で得られた構造に基づく理論計算データの差を小さくする構造を探索することが可能である。そこで平成 30 年度は、実験データとの類似度を用いて PaCS-MD を実行することにより、低解像度の構造データを再現する MD 構造を探索する計算手法を開発した。また、実験データとの非類似度を利用することで、構造遷移を誘起可能であることを示した。

SAXS/EM-駆動型PaCS-MDの応用例として、リジン-アルギニン-オルニチン結合 (LAO) タンパク質を選択した。LAOタンパク質はOpen状態構造とClosed状態構造のX線結晶構造が決定されており、Open-Closed構造遷移をPaCS-MDを用いて誘起した。PaCS-MD の 1 サイクルは100-psのMDシミュレーション ($T = 300$ K, $P = 1$ bar) を10個の独立な初期構造から実行した。

SAXS駆動型PaCS-MDのサンプリング効率を示すために、図1にSAXSのプロファイルを計算した。図1にターゲットデータ（緑）、初期構造（青）、SAXS駆動PaCS-MDデータ（赤）をそれぞれ示す。初期構造では、 $q = 0.15$ から $q = 0.4$ においてターゲットデータから著しく外れていたが、SAXS駆動PaCS-MD後に得られた理論SAXSプロファイルは、目標となる実験データのプロファイルを良好に再現し、ほぼ完全に重なっていた。SAXS駆動PaCS-MDによって得られた生成物（Closed状態構造）から測定した最小 C_{α} RMSDは 0.8\AA であり、Closed状態構造に関して高い分解能の構造が得られたことを示している。興味深いことに、SAXSデータが3次元の1次元平均回折パターンを表していたとしても、SAXS駆動型PaCS-MDはレアイベントである構造遷移を誘起し、最終構造の細密化に成功している。この結果は、LAOタンパク質のOpen状態構造とClosed状態構造の二次構造のポーズのおよびトポロジーの類似性に起因している。故に、本手法が低解像度の実験データから妥当な高分解能の原子レベルの構造を生じる可能性があることを示している。

EM 駆動型 PaCS-MD に関しても、Open-Closed 構造遷移が再現された。図 1(b)は、Closed 状態構造との C_{α} RMSD が最も小さいスナップショット（青）を X 線構造（赤）・EM データ（網掛け）に重ねたものである。得られた構造は、いくつかの柔軟なループ領域を除いて X 線構造とほぼ一致しており、EM 駆動型 PaCS-MD の有効性が検証できた。

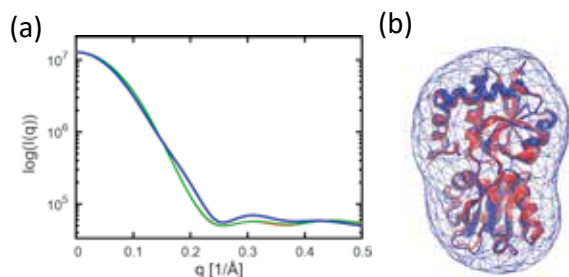


図 1 (a) SAXS のデータ（緑：実験、青：PaCS-MD の初期構造、赤：PaCS-MD の終構造、
(b) Cryo-EM データ（網掛け）、青：PaCS-MD の終構造、赤：X 線結晶構造。

【3】 伸長因子 EF-1 α ・EFL の分子進化過程に関する理論的研究

分子進化分野と連携して、真核生物の伸長因子 EF-1 α (図 2) 及び類似の EFL というタンパク質の構造特性の解析を行った。ホモロジーモデリングにより得られた構造において表面電荷の解析を行い、EF-1 α と EFL の両方を持つ生物種において EF-1 α がどのような特徴を持つのか解析した。その結果、これらの EF-1 α では、負電荷を帯びた領域が広いことが明らかになり、伸長因子としては機能していないことが、構造特性からも示唆された。また、ホモロジーモデリングにより得られた構造に対して分子動力学計算を行って構造の安定性や妥当性を検証し、更に、ドッキングシミュレーションにより aa-tRNA 等との結合の強さを解析した。

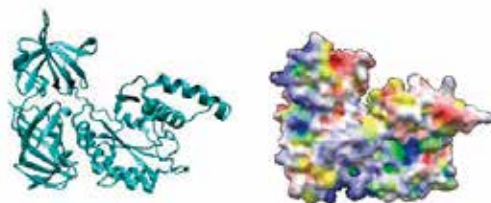


図 2 EF-1 α の構造及び表面電荷

【4】 宇宙空間における有機分子の生成・分解機構の解明

星間空間に存在する複雑有機分子の生成には、星間ダスト上でのラジカル反応が関わっていると考えられている。ラジカル生成に関わる有機分子の光解離反応の過程を明らかにする為、電子状態間遷移を考慮した *ab initio* 分子動力学計算 (surface hopping simulation) を行った。メタノールの光解離反応において、水素原子の解離が起こる場合、気相中では $\text{CH}_3\text{O} + \text{H}$ が、固相中では $\text{CH}_2\text{OH} + \text{H}$

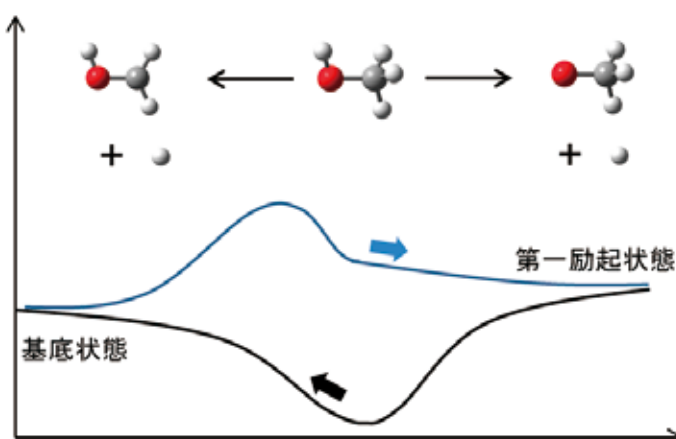


図 3 電子基底状態と電子励起状態（第一励起状態）における、 CH_3OH からの水素原子の解離

がより多く生成されると報告されているが、環境の違いによる生成物分岐比の違いの原因は明らかにされていなかった。シミュレーションの結果、電子励起状態では $\text{CH}_2\text{OH} + \text{H}$ よりも $\text{CH}_3\text{O} + \text{H}$ が生成しやすいが、電子基底状態では $\text{CH}_3\text{O} + \text{H}$ よりも $\text{CH}_2\text{OH} + \text{H}$ が生成しやすいことが明らかになった (図 3)。このことから、固相中では、電子基底状態に戻った後で解離が起こる割合が多い可能性があることを示し、固相中で $\text{CH}_3\text{O} + \text{H}$ よりも $\text{CH}_2\text{OH} + \text{H}$ が生成しやすい理由を説明した。

また、星間ダスト表面におけるラジカル反応のメカニズムの詳細を明らかにするため、第一原理分子動力学計算を行った。ダスト表面モデル (グラフェン表面) に化学吸着している CHO と遊離 H との反応を、Car-Parrinello molecular dynamics simulation (CPMD) を用いて解析した。その結果、CHO がグラフェン表面と共有結合を形成して化学吸着している場合、主

に $\text{CO} + \text{H}_2$ が生成するが、生成した CO は垂直方向に（表面から解離する方向に）移動していく一方、生成した H_2 は表面に水平方向に移動していくものが多いという結果が得られた。

【5】 固体系の三重項-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、固体系における 9,10-ジフェニルアントラセン（DPA）およびその誘導体（Cn-sDPAs）に対して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、それぞれの分子の固体中での二量体モデルに対してフラグメント分子軌道（FMO）法および FMO-linear combination of molecular orbitals (FMO-LCMO) 法を用いて TTA 反応速度および三重項エネルギー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 C7-sDPAs のほうが、三重項エネルギー移動速度が速いことがわかった。これは、2つの系の結晶形の違いに起因して、DPA は擬 2 次元的拡散、C7-sDPA は 1 次元的拡散となっており、同一の三重項増感剤から生じた三重項励起子の出会い確率が後者の方が高いことを理論的に明らかにした。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おり、本研究は実験結果を支持することがわかった。

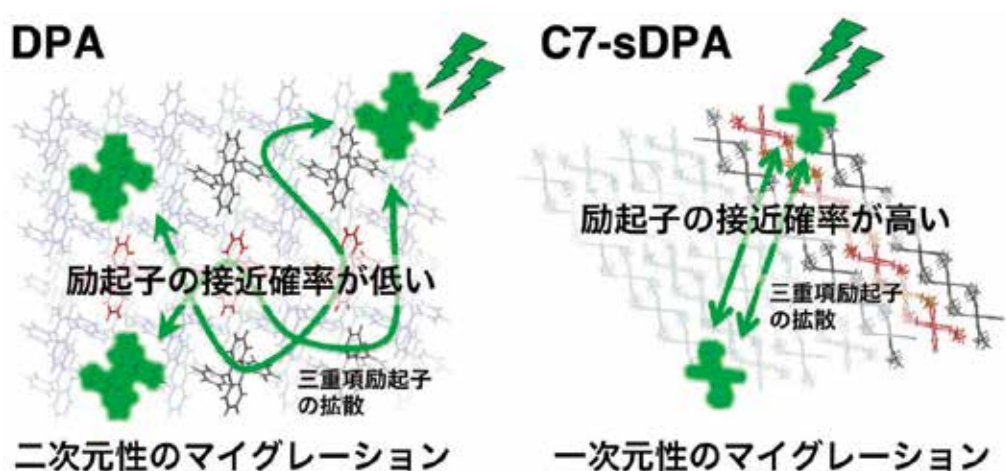


図 4 DPA および C7-sDPA でのエネルギー移動速度の違い

【6】 分子間電荷移動積分の高精度密度汎関数法計算

有機 EL や有機薄膜太陽電池などの有機半導体を用いたデバイスの効率は、その有機半導体を持つキャリアの移動度に大きく依存する。この移動度を理論から見積もるには、分子間電荷移動積分やサイトエネルギーなどの主要な電荷移動パラメータを、構成有機分子のモフォロジーとその電子状態から決定する必要がある。

本研究 [H. Kitoh-Nishioka and K. Ando, *J. Phys. Chem. C* **2019**, 123, 11351] では、非経験的に距離分割パラメータを最適化した長距離補正密度汎関数法 (NET-LC-DFT) を用いて、分子間電荷移動積分 (T_{DA}) が低計算コストかつ高精度に求めることが可能であることを示した。多参照摂動理論 (MRCI+Q, NEVPT2) や結合クラスター法 (SCS-CC2) などの計算負荷の非常に大きい高精度電子状態計算法によって作られた分子間移動積分のデータセット (HAB11: 11 個の正孔移動積分データ、HAB7-: 7 個の電子移動積分データ) に対して NET-LC-DFT を適用し、その精度を評価した。

NET-LC-DFT 法からデータセットの有機分子のフロンティア軌道エネルギーを求め、その値がイオン化ポテンシャルエネルギーの実験値や電子親和力の高精度計算値と良く一致することを確認した。このフロンティア軌道間の相互作用として T_{DA} を計算した結果、参照データからの誤差 (mean relative unsigned errors, MRUEs) は、HAB11 に対しては 3.2%、HAB7- に対しては 7.3% となった。これは他の手法を使った過去のベンチマーク計算と比較して、もっとも良い結果になっている。

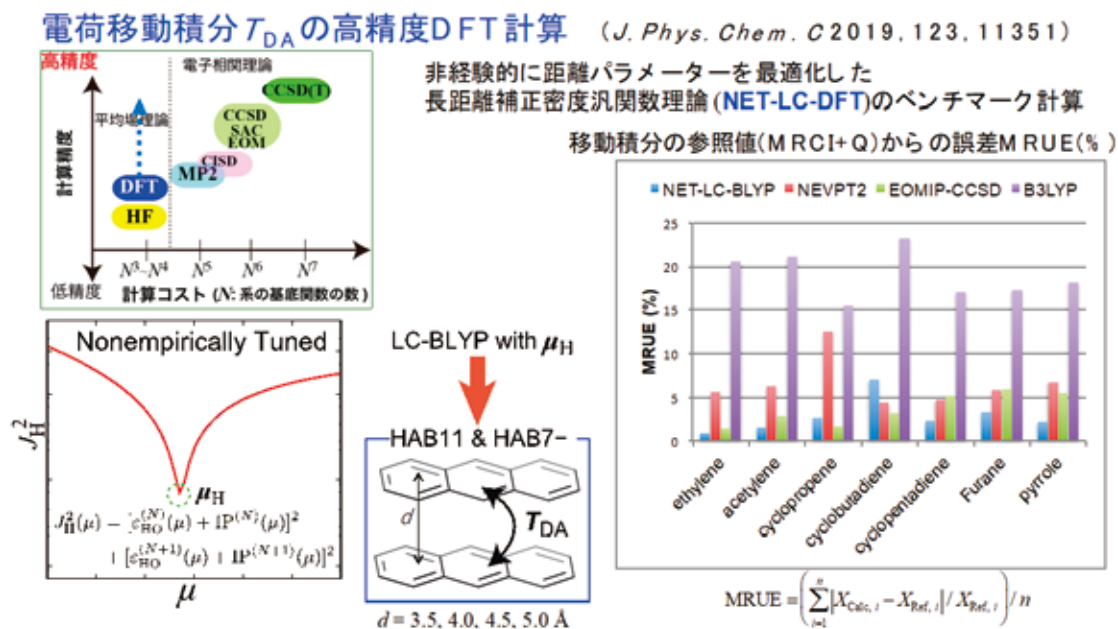


図 5 概要

【7】 ナトリウム含有遷移金属酸化物の物性解析

過去 20 年間に亘る二次イオン電池開発の進歩は、家庭用電化製品や電気自動車等の技術的な革命をもたらしてきた。最も一般的な Li イオンバッテリーは、正極材料における遷移金属イオンの複数の酸化状態変化がイオン電荷キャリアとして作用する Li イオンの挿入・抽出を可能とする上で重要となっている。しかしながら新たな材料を設計する上で、高価な Li や、Co などの希少な遷移金属の使用を避ける事が望ましい。前者に対しては、Li を Na のような、より入手しやすいアルカリ金属で置き換えることが急務である。後者に関しても、遷移金属イオンの酸化還元能の限界を超えて容量を増大させるため、他の安価な遷移金属への代替が望まれている。そのためには、Na を含む遷移金属酸化物における、酸化還元能を評価する必要がある。

本研究では、新規かつ優れた電気化学的性質を有する Na 含有 4d 遷移金属酸化物における可逆的な酸素のアニオン性酸化還元能を密度汎関数法によって評価した。図 6 に示すように、直感的に遷移金属イオンの酸化還元が支配的であると予想された $\text{Na}_{1-x}\text{Pd}_2\text{O}_3$ や $\text{Na}_{3-x}\text{AgO}_2$ のような化合物においてさえ、電荷補償機構において酸素原子の酸化状態が大きく変化していることが明らかとなった。これらの化合物における酸素原子の酸化数の変化は、以前の研究で提案された Na イオン過剰メカニズムから生じるのではなく、遷移金属の 4d 軌道と酸素原子の 2p 軌道との間の強い混成の副産物であることを解明した。

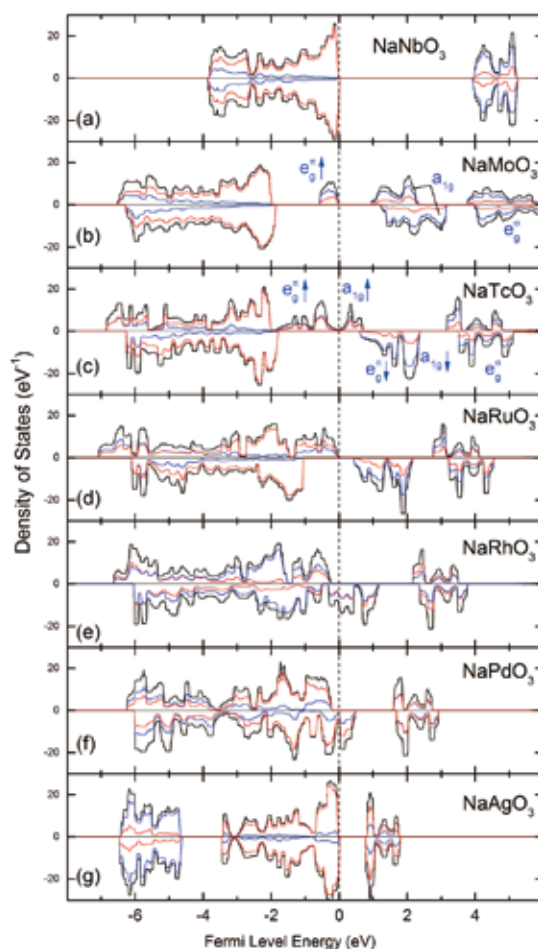


図 6 Na 含有遷移金属酸化物の状態密度（黒）全体、（赤）O の 2p 軌道、（青）遷移金属の 4d 軌道

4. 教育

【卒業研究発表】

松本悠路、「MD 計算を用いたアポ体・ホロ体シトクロム *c* の安定性解析」

柳 昂輝、「環状ジペプチドの安定構造における系統的な傾向と特徴」

【修士課程修了】

山崎笙太郎、「DNA-小分子複合体の構造安定性」

木間塚政人、「環状ペプチドの膜通過における構造変化の理論解析」

【博士課程修了】

なし

【講義】

重田育照・庄司光男、生物物理学 II、物理学類専門科目、秋 AB

重田育照・庄司光男、生物物理科学、物理学類専門科目、春 ABC

庄司光男、生物物理学実験、物理学類専門科目、秋 B

原田隆平、分子進化学 II (分担) 生命環境学群生物学類 秋 AB

原田隆平、基礎生物学実験 I (分担) 生命環境学群生物学類 秋 AB

原田隆平、生物学演習 生命環境学群生物学類 秋 C

原田隆平、計算科学リテラシー 計算科学研究センター 秋 C

原田隆平、先端生物科学セミナー (分担) 生命環境学群生物学類 秋 AB

原田隆平、専門語学 BII (分担) 生命環境学群生物学類 秋 AB

原田隆平、専門語学 BIII (分担) 生命環境学群生物学類 秋 C

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 原田隆平、日本物理学会 第 13 回 若手奨励賞 (領域 12) (受賞日: 2019 年 3 月 14 日)
2. 重田育照、2018 Best Faculty Award, Feb. 18th 2019, 筑波大学 (Japan) .

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」
4. さきがけ (日本学術振興機構) : 鬼頭-西岡宏任 (研究代表者) (2017/10 ～ 2021/3) 「量子シミュレーション技術による未知の生体電子移動/機能発現の探索」

【分担研究者】

1. AMED「中分子創薬」、重田育照 (代表者: 前仲勝実) (平成 30～令和 2 年度) 「立体構造を基盤とする中分子創薬の合理的設計」
2. ポスト「京」重点課題 7A、重田育照 (代表者: 押山淳 教授) (平成 28～31 年度) 「構成の半導体デバイス」
3. 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」
4. 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. V. Sladek, H. Tokiwa, Y. Shigeta, “Protein side-chain networks from energetic and geometric data – are they identical?”, *Journal of Chemical Theory and Computation* **14** (12), 6623-6631 (2018). DOI:10.1021/acs.jctc.8b00733
2. M. Kayanuma, M. Shoji, K. Furuya, Y. Aikawa, M. Umemura, Y. Shigeta, “Theoretical Study of the Photodissociation Reaction of Methanol in Interstellar Clouds”, *Chemical Physics Letters* **714**, 137-142 (2018). DOI:10.1016/j.cplett.2018.10.077
3. R. Sato, H. Kitoh-Nishioka, K. Kamada, Y. Shigeta, “Synergetic Effects of Triplet-Triplet Annihilation and Triplet-Triplet Energy Transfer Processes on Photon Up-conversion in Crystalline Systems”, *The Journal of Physical Chemistry Letters* **9**, 6638-6643 (2018). DOI:10.1021/acs.jpcclett.8b02887
4. K. M. Bui, J. Iwata, Y. Kangawa, K. Shiraishi, Y. Shigeta, A. Oshiyama, "First principle analysis of ammonia adsorption and desorption on GaN surface", *The Journal of Physical Chemistry C* **122** (43), 24665-24671 (2018) DOI:10.1021/acs.jpcc.8b05682
5. M. H. N. Al Assadi, M. Fronzi, M. Ford, Y. Shigeta, "High-performance Na ion cathodes based on the ubiquitous and reversible O redox reaction", *Journal of Materials Chemistry A* **6**, 24120-24127 (2018). DOI: 10.1039/C8TA05961F

6. R. Harada, Y. Shigeta, "Selection Rules on Initial Structures in Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics Affect Conformational Sampling Efficiency", *Journal of Molecular Graphics and Modelling* **85**, 153-159 (2018). DOI:10.1016/j.jmgm.2018.08.014
7. M. Akter, T. Tokiwa, M. Shoji, K. Nishikawa, Y. Shigeta, T. Sakurai, K. Kataoka, Y. Higuchi, N. Shibata, "Redox potential-dependent formation of an unusual His-Trp bond in bilirubin oxidase", *Chemistry-A European Journal* **24**, 18052-18058 (2018).
DOI:10.1002/chem.201803798
8. R. Fujiki, Y. Kasai, Y. Seno, T. Matsui, Y. Shigeta, N. Yoshida, H. Nakano, "A new scheme for computation of pK_a values based on the three-dimensional reference interaction site model self-consistent field theory coupled with the linear fitting correction scheme", *Physical Chemistry Chemical Physics* **20**, 27272-27279 (2018). DOI:10.1039/C8CP04354J
9. A. Ghiami-Shomami, B. Ghalami-Choobar, Y. Shigeta, "Computational electrochemistry of a novel ferrocene derivative", *Journal of Chemical Information and Modeling*, **85**, 84-90 (2018). DOI: 10.1016/j.jmgm.2018.08.004
10. R. Harada, H. Aida, Y. Shigeta, "The Formation of Hydrophobic Core Regulates the Protein Folding of Villin Elucidated with Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics", *Chemistry Letters* **47**, 1300-1303 (2018). DOI:10.1246/cl.180596
11. M. Shoji, M. Kayanuma, Y. Shigeta, "A practical approach for searching stable molecular structures by introducing repulsive interactions among walkers", *Bulletin of Chemical Society of Japan (Selected Paper)* **91**, 1465-1473 (2018). DOI: 10.1246/bcsj.20180122
12. R. Harada, Y. Shigeta, "How Does Friction Coefficient Affect the Conformational Sampling Efficiency of Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics?", *Chemistry Letters* **47**(9), 1119-1122 (2018). DOI: 10.1246/cl.180464
13. R. Harada, Y. Shigeta, "Temperature Shuffled Structural Dissimilarity Sampling Based on a Root-Mean Square Deviation", *Journal of Chemical Information and Modeling* **58**(7), 1397-1405 (2018). DOI: 10.1021/acs.jcim.8b00095
14. R. Harada, Y. Shigeta, "How low-resolution data can predict conformational changes of a protein: a molecular dynamics study", *Physical Chemistry Chemical Physics* **20**, 17790-17798 (2018). DOI: 10.1039/C8CP02246A
15. M. Shoji, H. Isobe, Y. Shigeta, T. Nakajima, K. Yamaguchi, "Concerted Mechanism of Water Insertion and O₂ Release during the S₄ to S₀ Transition of the Oxygen-Evolving Complex in Photosystem II", *Journal of Physical Chemistry B* **122** (25), 6491-6502 (2018). DOI:10.1021/acs.jpcb.8b03465.

16. I. Kurniawan, K. Kawaguchi, M. Shoji, T. Matsui, Y. Shigeta, H. Nagao, "A Theoretical Study on Redox Potential and pK_a of [2Fe-2S] cluster model from Iron-Sulfur Proteins", *Bulletin of Chemical Society of Japan (Selected Paper)* **91**, 1451-1456(2018).
17. R. Harada, Y. Shigeta, "On-the-Fly Specifications of Reaction Coordinates in Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics Accelerate Conformational Transitions of Proteins", *Journal of Chemical Theory and Computation* **14**, 3332-3341 (2018). DOI: 10.1021/acs.jctc.8b00264
18. Y. Terai, R. Sato, T. Yumiba, R. Harada, K. Shimizu, T. Toga, T. Ishikawa-Fujiwara, T. Todo, S. Iwai, Y. Shigeta, J. Yamamoto, "Coulomb and CH- π interactions in (6-4) photolyase-DNA complex dominate DNA binding and repair abilities", *Nucleic Acid Research* **46**(13), 6761-6772 (2018). DOI: 10.1093/nar/gky364
19. M. Hada, S. Saito, R. Sato, Y. Hayashi, Y. Shigeta, K. Onda, "Novel Techniques for Observing Structural Dynamics of Photoresponsive Liquid Crystals", *Journal of Visualized Experiments* (135), e57612 (2018). DOI:10.3791/57612
20. M. H. N. Al Assadi, Y. Shigeta, "The effect of octahedral distortions on the electronic properties and magnetic interactions in O_3 NaTMO₂ compounds (TM = Ti-Ni & Zr-Pd)", *RSC Advance* **8**, 13842-13849 (2018). DOI:10.1039/C8RA00576A
21. M. H. N. Al Assadi, Y. Shigeta, "Negative influence of orbital splitting on cathode potential of O_3 NaTMO₂ compounds", *Journal of Power Sources* **388**, 1-4 (2018). DOI: 10.1016/j.jpowsour.2018.03.056
22. R. Harada, T. Mashiko, M. Tachikawa, S. Hiraoka, Y. Shigeta, "Programmed Dynamical Ordering in Self-organization Processes of Nano-cube: A Molecular Dynamics Study", *Physical Chemistry Chemical Physics* **20**, 9115-9122 (2018). DOI: 10.1039/C8CP00284C
23. Y. Yamamoto, K. Takei, S. Arulmozhiraja, V. Sladek, N. Matuo, S.-I. Han, T. Matsuzaka, M. Sekiya, T. Tokiwa, M. Shoji, Y. Shigeta, Y. Nakagawa, H. Tokiwa, H. Shimano, "Molecular association model of PPAR α and its new specific and efficient ligand, pemafrilate: Structural basis for SPPARM α ", *Biochemical and Biophysical Research Communications* **499**, 239-245 (2018). DOI: 10.1016/j.bbrc.2018.03.135
24. M. Shoji, H. Isobe, Y. Shigeta, T. Nakajima, K. Yamaguchi, "Nonadiabatic one-electron transfer mechanism for the O-O bond formation in the oxygen-evolving complex of photosystem II", *Chemical Physics Letters* **698**, 138-146 (2018). DOI: 10.1016/j.cplett.2018.02.056
25. R. Sato, H. Kitoh-Nishioka, K. Kamada, T. Mizokuro, K. Kobayashi, Y. Shigeta, "Does Inactive Alkyl Chain Enhance Triplet-triplet Annihilation of 9,10-diphenylanthracene

- Derivatives?", *The Journal of Physical Chemistry C*, **122** (10), 5334–5340 (2018). DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b01328
26. A. Sato, M. Shoji, Y. Kitazawa, T. Ochi, Y. Komatsu, M. Kayanuma, Y. Aikawa, M. Umemura, Y. Shigeta, "First-principles study of the formation of glycine-producing radicals from common interstellar species", *Molecular Astrophysics* **10**, 11-19 (2018). DOI: 10.1016/j.molap.2018.01.002
 27. R. Sato, R. Harada, Y. Shigeta, "The binding structure and affinity of photodamaged duplex DNA with members of the photolyase/cryptochrome family: A computational study", *Biophysics and Physicobiology* **15**, 18-27 (2018). DOI:10.2142/biophysico.15.0_18
 28. M. Shoji,* H. Isobe, K. Miyagawa, K. Yamaguchi,* Possibility of the right-opened Mn-oxo intermediate (R-oxo (4444)) among all nine intermediates in the S3 state of the oxygen-evolving complex of photosystem II revealed by large-scale QM/MM calculations, *Chem. Phys.*, 518, 81-90(2019). <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2018.11.003>
 29. K. Yamaguchi,* M. Shoji, H. Isobe, K. Miyagawa, K. Nakatani, Theory of chemical bonds in metalloenzymes XXII: a concerted bond switching mechanism for the oxygen-oxygen bond formation coupled with one electron transfer for water oxidation in the oxygen-evolving complex of photosystem II, *Mol. Phys.* 2018, 1-35.
 30. C. E. Castillo, T. Stoll, M. Sandroni, R. Gueret, J. Fortage, M. Kayanuma, C. Daniel, F. Odobel, A. Deronzier, M.-N. Collomb, "Electrochemical generation and spectroscopic characterization of the key rhodium(III) hydride intermediates of rhodium poly(bipyridyl) H₂-evolving catalysts", *Inorg. Chem.*, **57**, 11225-11239, 2018
 31. R. Sato, H. Kitoh-Nishioka, K. Ando, T. Yamato, "Electron Transfer Pathways of Cyclobutane Pyrimidine Dimer Photolyase Revisited", *The Journal of Physical Chemistry B*, **122**(27), 6912-6921 (2018).

B) 査読無し論文

なし

(2) 国際会議等での招待講演

1. R. Harada, "Developments of Efficient Conformational Sampling Methods for Biologically Rare Events", Asia Hub for e-Drug Discovery (AHeDD) 2018 2018 年 9 月 28 日
2. R. Harada, "Simple yet Powerful Conformational Sampling Methods for Detecting Biologically Rare Events of Proteins", LBNL-CCS 合同ワークショップ 2019 年 3 月 6 日

3. Y. Shigeta, "Theoretical Studies on Triplet-Triplet Annihilation Up-conversion Processes in Solution and Solid Phases", *Theoretical Chemistry Symposium 2019*, Feb. 13th-16th 2019, Pilani, India.
4. Y. Shigeta, "Theoretical Insight into Triplet-Triplet Annihilation Up-conversion Processes in Solution and Solid Phases", *International Workshop of Photofunctional Materials Using Spin Degrees of Freedom: Interplay among synthesis, measurement, and theory*, 24th Jan. 2019, Toyonaka, Osaka, Japan.
5. Y. Shigeta, "Triplet-Triplet Annihilation Up-conversion Processes of 9,10-diphenylanthracene in solution and solid phases", *10th Asian Photochemistry Conference*, Dec. 16th-20th 2018, Taipei, Taiwan.
6. Y. Shigeta, "QM/MM analysis of metalloenzymes and beyond", *Quantum International Frontiers 2018*, Oct. 17th-21st 2018, Hunan, China.
7. Y. Shigeta, "QM/MM analysis of metalloenzymes", *The Asia Hub for e-Drug Discovery Symposium 2018*, Sep. 27th -29th 2018, Korea.
8. Y. Shigeta, "Data-driven Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics", *22nd International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE22)*, Aug. 2nd-3rd, Chulalongkorn University, Bangkok, Thailand.
9. Mitsuo Shoji, "Water Insertion Reactions of the Oxygen-Evolving Complex of Photosystem II Revealed by QM/MM", 2019/2/14, Theoretical Chemistry Symposium 2019 (TCS2019), Birla Institute of Technology and Science, Pilani, Rajasthan, India.
10. M.Shoji, H.Isobe, Y.Shigeta, T.Nakajima, K.Yamaguchi, "Water insertion reactions in the oxygen-evolving complex of photosystem II revealed by QM/MM calculations" 2018/10/31, ICPAC Langkawi 2018, Langkawi Island, Malaysia.
11. M.Shoji, H.Isobe, Y.Shigeta, T.Nakajima, K.Yamaguchi, "QM/MM study on the S state transitions of the oxygen-evolving complex in photosystem II" 2018/8/3, the 43rd International Conference on Coordination Chemistry (ICCC2018), Sendai, Miyagi.

(3) 国内学会・研究会での招待講演

1. 原田隆平, “分子混雑のシミュレーション研究とカスケード選択型分子動力学シミュレーションの開発”, 日本物理学会 第 13 回若手奨励賞 (領域 12) 受賞記念講演, 日本物理学会 2019 年春季大会 2019 年 3 月 14 日
2. 原田隆平, “生物学的レアイベントを再現予測するタンパク質構造サンプリング法の開発”, 第 2 回ワークショップ「レアイベントの計算科学」 2018 年 12 月 1 日

3. 原田隆平, “カスケード型超並列シミュレーションで探る FtsZ の細胞分裂ダイナミクス”, 東京大学 情報基盤センター H29 年度 インターン・後期「若手・女性利用者推薦」 成果報告会 2018 年 6 月 4 日
4. 重田育照, “第一原理計算による生命機能の探求”, 第 26 回 XFEL 構造生物ミーティング、November 22nd 2018、RIKEN、播磨.
5. 重田育照, “QM/MM studies on structure-function relationships of metalloenzymes”, 第 56 回生物物理学会シンポジウム「X 線自由電子レーザーと融合分野が拓くタンパク質反応ダイナミクスの新しい計測」, September 19th-21st 2018、岡山大学、岡山.
6. 重田育照, ポスト「京」に向けたアプリ高度化合宿、June 11th-13th 2018、理化学研究所・計算科学研究センター、神戸.

(4) 著書、解説記事等

1. 庄司光男, 磯部寛, 重田育照, 中嶋隆人, 山口兆, 「光合成における酸素発生の反応機構」, 生物物理, **58**(3), 127-133 (2018). (解説) DOI:10.2142/biophys.58.127.
2. Y. Shigeta, R. Harada, H. Matsumura, “Identification of the key interactions in structural transition pathway of FtsZ from *Staphylococcus aureus*”, 物性研究所 Activity Report 2017、リサーチハイライト (**invited letter**) (2018). ISSN:2189-6070
3. R. Harada, Y. Shigeta, “Recent Extensions and Applications of Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics Simulations”, 物性研究所スーパーコンピューターセンター Activity Report 2017 (**invited review**) (2018).
4. 重田育照, 「研究室だより「筑波大学計算科学研究センター 生命科学研究部門 重田研究室」」, アンサンブル **20**(1), 67-71 (2018).
5. 原田隆平, 重田育照, 「カスケード選択型分子動力学法によるタンパク質機能の動的秩序解析」, *Journal of Computer Chemistry Japan* (**invited review**) **17**(1), 46-56 (2018). DOI: 10.2477/jccj.2017-0055
6. 原田隆平, “生体機能を解明する革新的分子シミュレーション技術の開拓”, *化学工業*, volume 69, pages 11-21 (2018)

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、メタノール光分解反応に関する研究を物性・宇宙分野と連携して進展させ、論文を 1 報発表した。
2. 生命情報・分子進化学分野間連携

伸長因子 EF-1 α 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、論文を 1 報発表した。

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、高性能計算機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「第 2 回 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、Dec. 1st 2018, 筑波大学計算科学研究センター。

9. 管理・運営

重田育照

物理学類学類長、教養教育機構構成員、学群教育会議構成員、研究戦略室員、数理物質科学研究科運営委員、数理物質科学研究科人事委員、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、「理論化学」（集中講義）・化学コースコロキウム、13rd-14th Dec. 2018、首都大学東京大学院理工学研究科。
2. 重田育照、「物性物理フロンティア」（集中講義）、10th Nov. 2018、日本女子大理学研究科。
3. 重田育照、「生物物理学」（集中講義）、30th Aug. 2018、秋田大学大学院工学研究科。
4. 重田育照、「理論セミナー」27th Jul. 2018、東京大学物性研究所。

11. その他

1. 重田育照、JAXA ・宇宙科学研究所 客員教授（2018-2020）
2. 重田育照、ポスト K 課題 7 コデザイン WG 主査（2018-2020）
3. 重田育照、生物物理学会代議員（2018-2020）
4. 重田育照、分子科学会第 6 期運営委員会委員（2018-2020）
5. 重田育照、理論化学研究会第 5 期世話人（2018-2019）
6. 重田育照、大阪大学 大学院基礎工学研究科 招聘教授（2015-）

V-2. 分子進化的分野

1. メンバー

教授	稲垣祐司、橋本哲男（共同研究員、生命環境系）
特任助教	湯山育子（生命環境系）
研究員	石谷佳之、矢崎裕規（生命環境系）
学生	大学院生 6 名（後期課程 2 名、前期課程在学 4 名）、学類生 5 名

2. 概要

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

新奇真核微生物の系統的位置の検討

真核生物の多様性の大部分は肉眼で認識することが難しい単細胞生物であるため、これまでの研究では真核生物多様性の全体像を十分に把握しているとは言い切れない。そこで自然環境からこれまでに認識されていない新奇真核微生物を単離・培養株化し、100 以上の遺伝子データから構成される大規模分子系統解析によりその系統的位置を確定する。

各種トランスクリプトーム・ゲノム解析

真核生物の主要グループ間の系統関係を分子系統学的に解明するには、大規模遺伝子データが必須である。そこで系統進化的に興味深い生物種を選び、培養とトランスクリプトームおよびゲノムデータの取得を進めている。これら大規模配列データを基に、核ゲノム解析、オルガネラゲノム解析等を行う。

系統解析における方法論研究およびタンパク質立体構造と分子進化を統合した研究

解析する配列データの特徴、使用する解析法・配列進化モデルなどにより系統推定に偏りが生じるが、その偏りは複数遺伝子解析ではより顕著になる。そこで、大規模配列データ解析においてより偏りの少ない推測を目指し、系統解析プログラムの高速化をふくむ各種の方法論的研究を行う。また、タンパク質の進化中で一次配列（アミノ酸配列）の変化パターンは、機能と立体構造の両者に強く影響されると考えられる。そこで立体構造的知見を取り入れ、新たな側面からタンパク質の分子進化を研究する。

3. 研究成果

【1】 新奇真核微生物の系統的位置の検討

我々はこれまでの大規模分子系統解析により①*Tsukubamonas globosa* および②*Palpitomonas bilix* の系統的位置の解明、③キネトプラスト類内部の系統関係の解明、④フォルニカータ生

物群内部の系統関係の解明、⑤*Rigifila ramosa*、コロディクティオン類、マンタモナス類から構成される“CRuMs クレード”の提案を行った（Kamikawa et al. 2014 *Genome Biol Evol* 6:306-315; Yabuki et al. 2014 *Sci Rep* 4:4641; Yazaki et al. 2016 *Genes Genet Syst* 92:35-42; Leger et al. 2017 *Nat Ecol Evol* 1:0092; Brown et al. 2018 *Genome Biol Evol* 10:427-433）。また、大規模分子系統解析により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（H25 年度年次報告書参照）については現在投稿論文を準備中である。

今年度の報告では、2018 年度学際共同研究の成果である有孔虫類内部の系統関係とその結果に基づく分岐年代推定に関する報告を行う。また 2017 年度に引き続き、今のところ系統的位置が確定できていない真核微生物の一種である *Microheliella maris* についての解析結果についても議論する。

有孔虫門主要 5 目間の系統関係の推測

有孔虫は石灰質（ガラス質や陶器質）あるいは膠着質等の殻をもつアメーバ状原生生物の一群で、基本的に海水中に棲息する。現在広く用いられている真核生物の分類体系では、有孔虫門は 5 つの目（*Rotaliida*、*Textulariida*、*Miliolida*、*Spirillinida*、*Allogromiida*）から構成される。有孔虫の殻は微化石として多量に産出し、その形態の多様性と複雑性から、地質年代の推定や古気候学・古海洋学等に有用な情報を提供する生物群として研究されてきた。上記研究において正確な推測をするためには、多様な有孔虫の系統がどのような順番で出現したか、すなわち高精度の有孔虫類の内部系統関係が基盤データとして必須である。ところが、現在のところ本生物群を構成する目間の分岐についてさえ十分に解明されているとは言えない。これは有孔虫現存種の大多数は実験室内での培養ができない、あるいは培養が出来ても増殖速度が遅いため、大規模配列データの整備が極めて遅れていることが主要原因である。

我々は本研究で、有孔虫の主要 5 目を代表する生物種からのトランスクリプトームデータ獲得と、その大規模配列データを基盤とした分子系統解析により有孔虫 5 目間の系統関係を高精度で再構築することを目指した。*Rotaliida* に属する *Ammonia beccarii*、*Miliolida* に属する *Quinqueloquolina* sp.、*Spirillinida* に属する *Spirillina* sp.、*Textulariida* に属する *Textularina conica* からトランスクリプトームデータを取得した。*Allogromiida* に属する *Reticulomyxa filose* については、他のグループがドラフトゲノムデータを公開しているのでこれを使用した。*A. beccarii* は我々の研究室において維持されている培養株を使用した。が、*Quinqueloquolina* sp.、*Spirillina* sp.および *T. conica* は海水サンプルから単離した細胞から RNA サンプルを調製し、増幅した後 Illumina 社 MiSeq を用いたシーケンス解析に供した。我々が解析した有孔虫 4 種から、それぞれ 240 万～410 万リード（合計 7 億～12 億塩基対）のトランスクリプトームデータを取得した。これら有孔虫配列データを神川らが先行研究で作製した大規模複数遺伝子アライメントに追加し、最終的に 157 遺伝子から構成されるアライメントデータ（合計 41,365 アミノ酸座位）を取得した。このデータを最尤法とベイズ法を用いて有孔虫 5 目間の系統関

係を検証した。157 遺伝子解析が復元した有孔虫内部の系統関係は最尤法およびベイズ法における最大のサポート値で支持された(図 1)。今回の我々の行った 157 遺伝子解析により、有孔虫の主要系統の関係が初めて頑健に解明されたことになる。

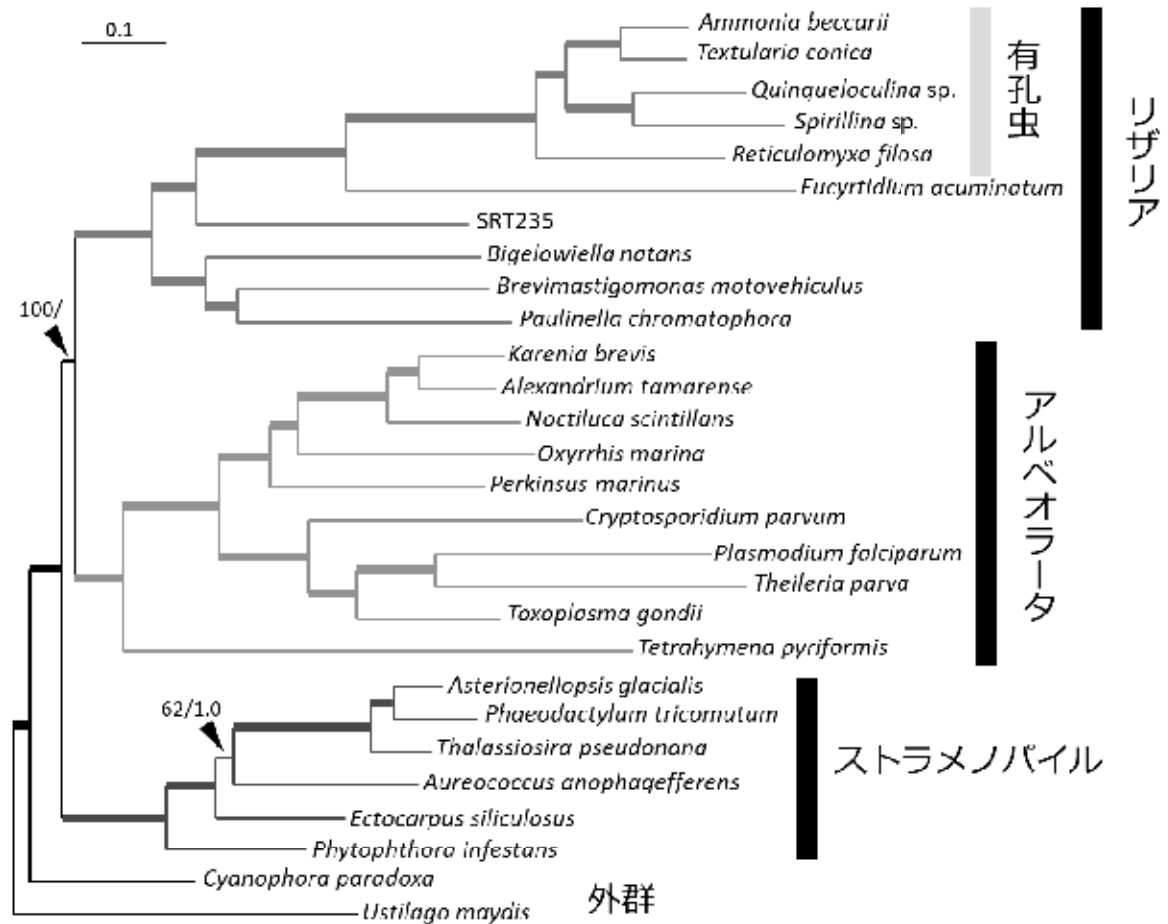


図 1. 最尤法により復元された有孔虫 5 目間の系統関係。太く表記された枝は、最尤法によるブートストラップ値 100%およびベイズ法事後確率 1.0 で支持された枝は太く表記した。矢頭でハイライトした 2 カ所の枝のみブートストラップ値を左に、事後確率を右に表記した。

157 遺伝子アライメントと頑健に復元された系統関係を用いて分岐年代推定を行った。4 遺伝子 (リボソーム RNA、アクチン、 β チューブリン、RBP1) 配列に基づく先行研究 (Groussin et al. 2011 *Mol Phylogenet Evol* 61:157–166) では、有孔虫の初期分岐は新原生代クリオジェニアン紀の約 770 Mya (7 億 7 千万年前) と推測され、その 95%信頼区間は 650–920 Mya (6 億 5 千万年–9 億 2 千万年前) と 270 Mya もの幅があった。一方 157 遺伝子解析により推測された有孔虫の初期分岐は、原生代カンブリア紀の 507 Mya (約 5 億 7 百万年前) と推測された(図 2)。また我々の解析における 95%信頼区間は 502–523 Mya (5 億 2 百万–5 億 2 千 3 百万年前) とその幅はわずか 21 Mya となり、先行研究に比べて分岐年代推定の精度が格段に改善された。カンブリア紀は海洋環境における動物の爆発的放散が特徴であるが、動物の捕食圧の上昇が多様な殻を持つ有孔虫の多様化の背景である可能性がある。

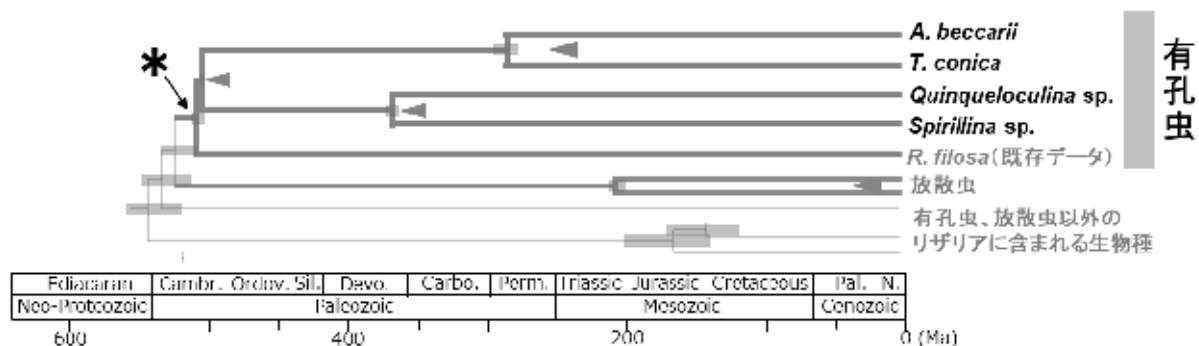


図 2. Local clock を適応したベイズ法により推測された有孔虫の分岐年代。系統樹のトポロジーは 157 遺伝子アライメントから復元したものを解析に使用した。有孔虫の初期分岐はアスタリスク (*) で示した。矢頭は化石データに基づく校正点を示す。系統樹の結節点に示したバーは 95%信頼区間を示す。

338 遺伝子データに基づく *Microheliella maris* の系統的位置の検討

2017 年度では系統的位置が確定していない真核微生物種（所謂 orphan 生物種）について、157 遺伝子データでは *Microheliella maris* や未記載真核微生物 SRT605 株の系統的位置を解明できないことについて報告し、使用した配列データにふくまれる進化シグナルは orphan 生物種の系統的位置を精度よく推測するには不十分であると議論した。そこで 2018 年度にはカナダ Dalhousie 大学 Gordon Lax 博士が作成した 351 遺伝子データ (Lax et al. 2018 *Nature* 564:20-27) の分与を受け、そこに *M. maris* をふくむ orphan 生物種を追加し新たに 338 遺伝子データ（合計 98,904 アミノ酸座位）を完成させた。

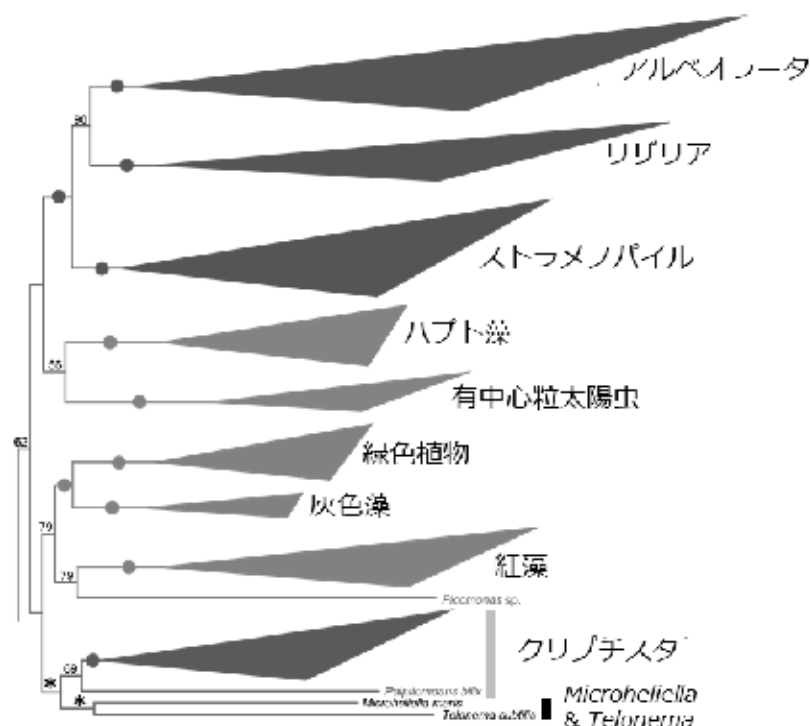


図 3. 338 遺伝子データに基づく最尤系統樹の一部。 *Microheliella maris* は *Telonema subtile* と姉妹群となり、Cryptista（クリプチスタ）の基部に位置した。ただし、図中に * で示したこれらの分岐に対する最尤法ブートストラップ解析により支持は 50%未満であり、この系統関係について強い結論を出すことはできなかった。

M. maris をふくむ 338 遺伝子データを最尤法により解析したところ、Lax らが発表した 351 遺伝子データに基づく解析結果 (Lax et al. 2018 *Nature* 564:20-27) と矛盾しない系統樹を復元

することに成功した。*M. maris* は *Telonema subtile* と姉妹群を形成し、クリプト藻と *Palpitomonas bilix* をふくむ従属栄養性真核微生物から構成される Cryptista の基部に位置すると推定されたが、この系統的位置についてブートストラップ解析からの支持は低く、*M. maris* の系統的位置について結論を出すに至らなかった (図 3)。ただしブートストラップ解析の結果を詳細に検討したところ、*T. subtile* の系統的位置が極めて不安定であることが示唆された。338 遺伝子データにおける *T. subtile* のデータカバー率は全 98,904 アミノ酸座位の 12% と非常に低く、このため当該配列の系統的位置が安定しないのではないかと推測できた。そこで *T. subtile* を除いて再度 338 遺伝子データの解析を行った結果、*M. maris* は Cryptista の基部に位置し、この関係はブートストラップ解析により頑健に支持された。今後 *T. subtile* のデータカバー率の改善した解析を行い、*M. maris* の系統的位置を再検討する必要がある。幸いなことに *T. subtile* の新しいトランスクリプトームデータが最近入手可能となった (Strassert et al. 2019 *Mol Biol Evol* 36: 757–765)。そこで 2019 年度には 338 遺伝子データをアップデートし、*M. maris* と Cryptista の近縁関係が高精度で復元されるかを確かめる。

【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

大多数の光合成性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（ペディノ藻）由来色素体に置換されている。我々のこれまでの研究結果は、上記緑色渦鞭毛藻 3 種は、互いに独立に細胞内共生させたペディノ藻を葉緑体化したことを示唆する。我々はこれまでに *L. chlorophorum* の色素体ゲノム (Kamikawa et al. 2015 *Genome Biol Evol* 7:1133–1140)、MRD-151 株の色素体ゲノム配列 (2015 年度年次報告書)、TRD-132 株の色素体ゲノム (2016 年度年次報告書) を解読した。さらに 2017 年度年次報告書には上記 3 種の渦鞭毛藻細胞内のペディノ藻由来緑色色素体と自由生活性ペディノ藻色素体のゲノムを比較結果の概要を報告した。2018 年度には、これまで色素体ゲノム解析に供した 3 種とは異なる「第 4 の緑色渦鞭毛藻」を東京大学・岩滝光儀博士と高橋和也博士から入手し、その色素体ゲノムの解読を開始した。この研究結果については次年度以降に報告する。

真核生物系統においては、一旦獲得した光合成能力を 2 次的に失った系統が多数存在する。この光合成能力の 2 次的欠失は、光合成性真核生物の進化において独立に複数回起こっていることは確実である。ただし、2 次的に光合成能力を失った細胞の多くは縮退した非光合成性色素体を保持している。我々は光合成能力の欠失した色素体においてどのような進化が起こっているかに興味を持ち、非光合成化した珪藻の色素体ゲノム解読を中心に京都大学・神川龍馬博士と共同研究を進めてきた (Kamikawa et al. 2015 *Phycol Res* 63:19–28; Kamikawa et al.

2015 *Mol Biol Evol* 32:2598-2604; Kamikawa et al. 2017 *Mol Biol Evol* 34:2355-2366)。同様にクリプト藻において 2 次的な非光合成化が独立な複数系統で起こっていることが分かっており、非光合成化した複数のクリプト藻の色素体ゲノムの解読を行っている（国立科学博物館・谷藤吾郎博士との共同研究）。これらのデータについては来年時以降に報告する。

ミトコンドリアゲノム解析

我々は、これまで系統的に広範なミトコンドリア (Mt) ゲノムを解読し、真核生物進化における Mt ゲノムの構造、遺伝子組成、可動性イントロンの進化について研究を行ってきた (Masuda et al. 2011 *Harmful Algae* 10:130-137; Nishimura et al. 2012 *PLOS ONE* 7:e37307; Kamikawa et al. 2014 *Genome Biol Evol* 2:306-315; Nishimura et al. 2014 *Mob Genet Elements* 4:e29384; Takeuchi et al. 2015 *PLOS ONE* 10:e000132030; Nishimura et al. 2016 *Genome Biol Evol* 8:3090-3098)。さらに 2018 年度には、2016 年度に報告した有中心粒太陽虫 *Marophrys* sp. SRT127 の Mt ゲノムに関する論文を *Sci Rep* 誌に掲載した (図 4; Nishimura et al. 2019 *Sci Rep* 9:4850)。この論文では、Mt ゲノムで同定されたグループ II イントロンの大多数が、緑藻のオルガネラゲノム中のイントロンと起源を共有していることを報告した。有中心粒太陽虫は自然環境中で緑藻類を捕食し、さらに一部では捕食した緑藻の葉緑体だけを一定期間細胞内で維持する「盗葉緑体」現象が知られている。本論文では、自然環境中での有中心粒太陽虫と緑藻間の密接な関係が、イントロンの水平転移の背景だと考察した。

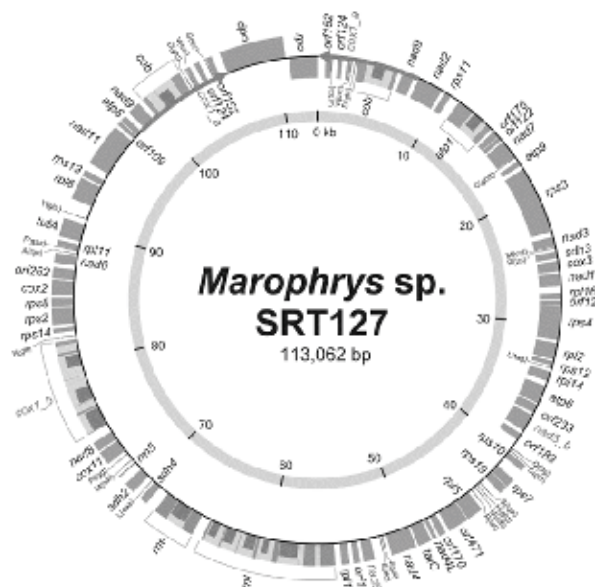


図 4. *Marophrys* sp. SRT127 のミトコンドリアゲノムマップ。タンパク質と RNA 遺伝子は濃い灰色で、イントロンは薄い灰色のボックスで示した。イントロン内の濃い灰色のボックスはホーミングエンドヌクレアーゼコード領域を示す。

今年度は Cryptista にふくまれる *Hemiarma marina* の Mt ゲノムの解読を行ったので、その概要を報告する。Cryptista のメンバーのうち、我々はこれまでにカタブレファリス類（理化学研究所・西村祐貴博士、アメリカ自然史博物館・E. Kim 博士との共同研究）と *Palpitomonas bilix* (Nishimura et al. 2016 *Genome Biol Evol* 8:3090-3098) の Mt ゲノムの解析を行ってきた。*H. marina* は、これまでメタバーコーディング解析だけで検出された Cryptista 系統の一つの実態として最近報告された生物種である。この生物種の Mt ゲノムを解読したところ、65 kb の環状 DNA であることが判明した (図 5)。詳細は省くが、*H. marina* Mt ゲノムの遺伝子レパートリーは、他の Cryptista 系統の Mt ゲノムの遺伝子レパートリーに類似していた。ただ、*H. marina* Mt ゲノムに細菌型のシトクロム *c* 成熟 (cytochrome *c* maturation/CCM) 系に関わる遺

伝子群がコードされていることは注目に値する(図 5; *ccmA*, *ccmC* & *ccmF* は矢頭で示した)。*H. marina* Mt ゲノムデータの存在前に発表された我々の論文では、Cryptista の最原始系統である *P. bilix* は細菌型 CCM 系をもつことから、*P. bilix* が他の Cryptista 系統の祖先と分岐した後、後者で細菌型 CCM 系が失われたと推測していた (Nishimura et al. 2016 *Genome Biol Evol* 8:3090-3098)。しかし *H. marina* は *P. bilix* よりも後に分岐したにもかかわらず、その Mt ゲノムデータは細菌型 CCM 系を使用していることを示唆する。従って、この生物群における CCM 系の進化は、以前に提唱されていたよりも複雑である可能性が高い。今後 *H. marina* Mt ゲノムデータは、理化学研究所・西村祐貴博士が決定したカタブレファリス類の 1 種の Mt ゲノムデータと併せて投稿論文の執筆を開始する。

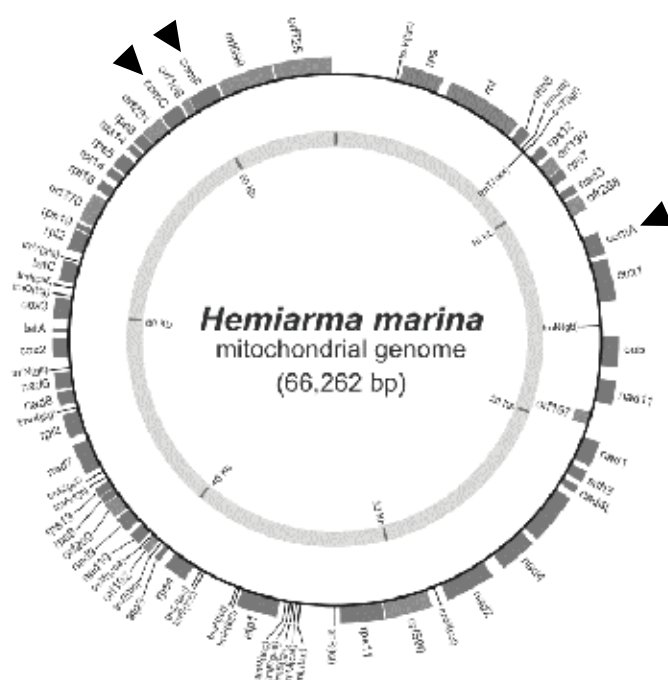


図 5. *Hemiarma marina* のミトコンドリアゲノムマップ。タンパク質と RNA 遺伝子は濃い灰色で、イントロンは薄い灰色のボックスで示した。細菌型シトクロム c 成熟に関わるタンパク質遺伝子 (*ccmA*, *C* & *F*) は矢頭で示した。このゲノムにはイントロンは検出されなかった。

次年度以降、以下の真核微生物の Mt ゲノム解読を予定している：①新奇真核微生物 SRT605 株、②SRT312 株 (*Glissandra* sp.)、③SRT706 株、④*Microheliella maris*、⑤有孔虫 *Ammonia berccari*、⑥放散虫 (*Didymocyrtis tetrathulumus* と *Acanthodesmia viniculata*)

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

ミトコンドリア移行タンパク質予測プログラムの開発

これまでシステム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻／生命環境科学研究科生物科学専攻デュアルディグリープログラムに参加した久米慶太郎氏を中心に、アミノ酸配列をもとにそのタンパク質がミトコンドリア輸送されるか否かを予測するソフトウェア NommPred を開発してきた (2016 年度年次報告書参照)。これまでに利用可能なソフトウェアは、モデル生物と呼ばれるごく一部のグループから得られたデータのみを学習データとして利用していたため、このソフトウェアによる予測をモデル生物以外の系統的に広い生物種

に由来するアミノ酸配列に適用した場合、予測精度に問題が生ずることが分かっていた。そこで①非モデル生物由来のデータを広範に取り入れたデータセットを構築して学習データとし、②学習方法として勾配ブースティング（GBM）を採用した NommPred を開発した。NommPred と既存ソフトウェアとの比較実験を行ったところ、NommPred は非モデル生物のミトコンドリアタンパク質の予測において提案手法は既存研究と同等以上の精度を示すことが明らかとなった。このソフトウェアに関する報告は英文論文として *Evol Bioinformat* 誌に発表され（Kume et al. 2018 *Evol Bioinformat* 14:1-12）、GitLab からダウンロード可能である（<https://gitlab.com/kkei/NommPred>）。

立体構造情報を加味した EF-1 α –EF-1 α 様（EFL）タンパク質間での機能比較

翻訳伸長因子 EF-1 α と EFL はアミノアシル tRNA（aa-tRNA）に結合し、ペプチド伸長に不可欠な役割を果たす。ただし EFL の機能は生化学的に検証されたことはなく、アミノ酸配列の相同性以外に EFL が翻訳伸長因子として機能するかどうかについての生化学的・細胞生物学的実験からの知見はない。また EFL の機能を推測する上で立体構造は重要な情報であるが、EFL の三次構造はこれまでの研究で明らかとなっていない。そこで EF-1 α の情報を基に EFL 立体構造を予測し、分子動力学（MD）シミュレーションにより EFL 三次構造モデルの妥当性を検討した（図 6）。MD シミュレーション前後の構造には大きな違いがみられず、予測された EFL 立体構造は安定であろうと考えられる。

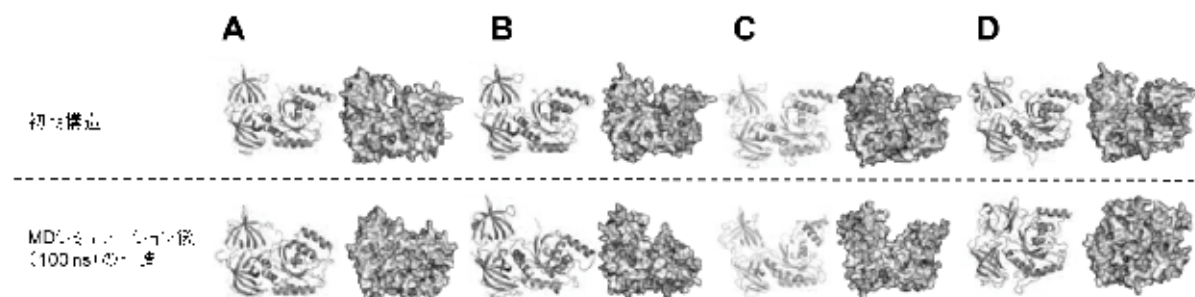


図 6. EFL タンパク質の三次構造モデル。(A) *Subulatomonas* sp. の EFL、(B) *Pythium ultimum* の EFL、(C) *Thecamonas trahens* の EFL、(D) *Fabomonas tropica* の EFL タンパク質を示した。上段は SWISS-MODEL により作成した初期構造、下段は 100 ns の分子動力学シミュレーション後の平均的構造である。各構造の左では α ヘリックスと β シートはコイルと矢印で表示し、右図では分子表面を示した。

通常真核生物は EF-1 α あるいは EFL のどちらかをもつが、特定の種では EF-1 α と EFL の両方をもつ「dual-EF 生物種」も知られている。この dual-EF 生物種のもつ EF-1 α (divEF-1 α) の一次配列は、他の生物種の EF-1 α の 1 次配列とは大きく異なっている。そのため dual-EF 生物では、翻訳伸長因子としての機能は EFL が担い、divEF-1 α は aa-tRNA との結合能が低い（あるいは欠失している）のではないかと提唱されている。そこで本研究では dual-EF 生物種のもつ特徴的 EF-1 α は、dual-EF 生物以外の持つ典型的 EF-1 α あるいは EFL (solo-EF) ほど強く aa-tRNA に結合することができないという仮説を立て、その検証を行うために各種 EF-1 α と EFL の三次構造のホモロジーモデリングを行い、分子動力学計算により三次構造モデルの

妥当性と安定性を確認した。この三次構造モデルをもちいた表面電荷計算および分子ドッキング計算では、一貫して divEF-1 α と aa-tRNA 間の結合は、solo-EF と aa-tRNA 間の結合ほど強くないと推測された。上記研究は生命科学研究部門生命機能情報分野との共同研究であり、その成果は英文論文として出版された (Sakamoto et al. 2019 *ACS Omega* in press)。

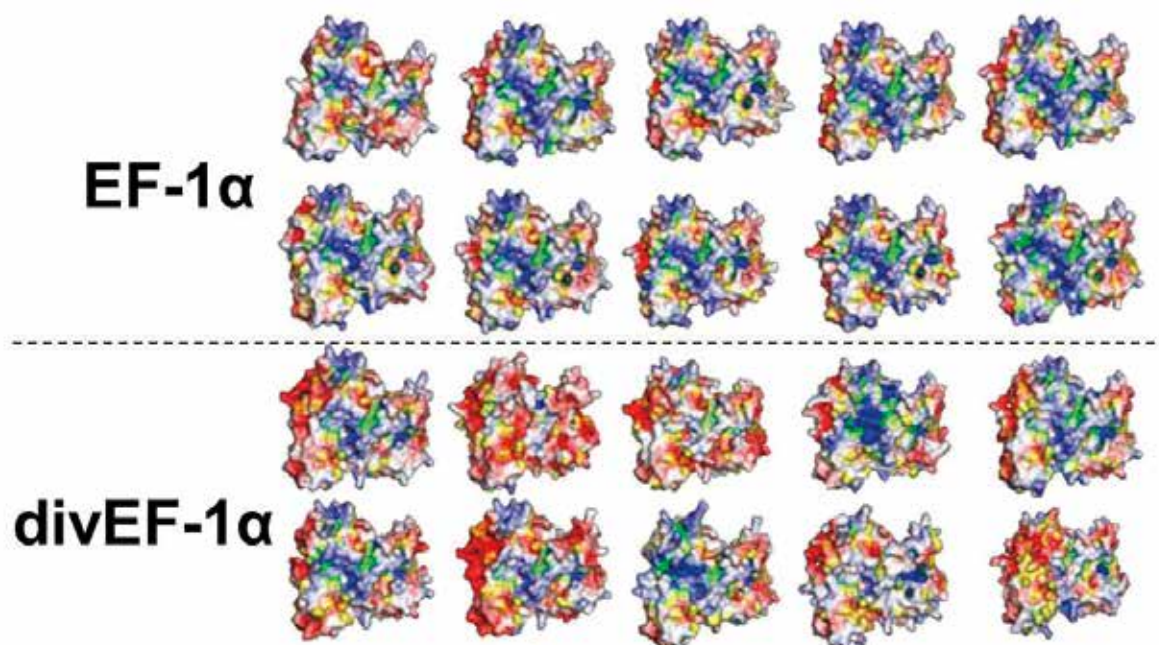


図 7. 各種 EF-1 α および EFL タンパク質の三次構造モデルで予測された分子表面の静電ポテンシャル。点線の上は EF-1 α 、下は EFL と共存する EF-1 α (div EF-1 α) である。EF-1 α では分子表面が正に帯電する傾向がある（青く表示された部分）一方、div EF-1 α では同じ分子表面が負に帯電する傾向が強い（赤く表示された部分）。EF-1 α が翻訳伸長因子として機能するなら、tRNA 結合部は正に帯電する方が負に帯電した aa-tRNA と相互作用しやすいと考えられる。

この他、①真核生物と古細菌の翻訳終結因子の C 末端ドメインにおける部分的欠失の進化、②細菌類がもつ ATP 硫化酵素の進化的起源について構造的見地からの検証を行っている。これらの研究も生命科学研究部門生命機能情報分野との共同で行っている。

4. 教育

久米慶太郎, 博士 (理学), 論文名: Evolution of Mitochondrion-related Organelles in Metamonada

松尾恵梨子, 博士 (理学), 論文名: Evolution of Nuclear and Plastid Genomes in Dinoflagellates Experiencing Plastid Replacements

田村拓海, 修士 (理学), 論文名: 大規模トランスクリプトームデータ解析による *Aduncisulcus paluster* のミトコンドリア関連オルガネラ機能の推測

今泉彩香, 学士 (理学), 論文名: 単細胞真核生物 *Microheliella maris* の大規模分子系統解析

宇川尚登，学士（理学），論文名：サンゴ-褐虫藻共生系に関わる褐虫藻遺伝子の網羅的解析

川久保卓志，学士（理学），論文名：葉緑体を置換すると光合成関連遺伝子群には何が起こるか？

曾根原奎斗，学士（理学），論文名：クリプチスタ生物群におけるシトクロム *c* 成熟系の複雑な進化：*Hemiarma marina* ミトコンドリアゲノムに基づく一考察

原田亮，学士（理学），論文名：真核生物におけるファミリーA タイプ DNA ポリメラーゼの多様性と分布：新たなタイプのミトコンドリア DNA ポリメラーゼ同定を目指して

集中講義など

なし

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 生命環境科学研究科 専攻長表彰，久米慶太郎，2019 年 3 月 25 日
2. 筑波大学茗溪会賞，宇川尚登，2019 年 3 月 25 日

外部資金

（名称、氏名、代表・分担の別、採択年度、金額、課題名）

1. 科学研究費補助金 国際共同研究加速基金（国際共同研究強化（B）），稲垣祐司（代表），2018-2023 年度，交付額：直接経費 1,800 千円，間接経費 540 千円，海洋原生生物に共生する細菌多様性の実態解明（課題番号 18KK0203）
2. 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 3,200 千円，間接経費 960 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）
3. 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 2,200 千円，間接経費 660 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）
4. 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 3,100 千円，間接経費 930 千円，非光合成生物の光適応進化の全容解明（課題番号 17H03723）

5. 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 1,000 千円, 間接経費 300 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)
6. 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 3,000 千円, 間接経費 900 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— (課題番号 17H02978)
7. 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 900 千円, 間接経費 270 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)」
8. クリタ水・環境科学振興財団 国内研究助成, 湯山育子 (代表), 2018 年度, 950 千円, 造礁性サンゴ体内の褐虫藻の増加に影響する物質の特定 (課題番号 18B083)

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. Sakamoto K, Kayanuma M, **Inagaki Y**, **Hashimoto T**, Shigeta Y. In silico structural modeling and analysis of elongation factor-1alpha and elongation factor-like protein. 2019 *ACS Omega* in press.
2. Nishimura Y, Shiratori T, Ishida K, **Hashimoto T**, Ohkuma M, **Inagaki Y**. Horizontally-acquired genetic elements in the mitochondrial genome of a centrohelid *Marophyris* sp. SRT127. 2019 *Scientific Reports* 9:4850. Doi: 10.1038/s41598-019-41238-6
3. 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 karenian dinoflagellates. 2018 *Journal of Eukaryotic Microbiology* 65(5):669-678. Doi: 10.1111/jeu.12512
4. **Matsuo E**, **Inagaki Y**. Patterns in evolutionary origins of heme, chlorophyll *a* and isopentenyl diphosphate biosynthetic pathways suggest non-photosynthetic periods prior to plastid replacements in dinoflagellates. 2018 *PeerJ* 6:e5345. Doi: 10.7717/peerj.5345
5. Matsuo M, Katahata A, Satoh S, Matsuzaki M, Nomura M, Ishida K, **Inagaki Y**, Obokata J. Characterization of spliced leader *trans*-splicing in a photosynthetic rhizarian amoeba,

- Paulinella micropora*, and its possible role in functional gene transfer. 2018 **PLOS One** 13(7): e0200961. Doi: 10.1371/journal.pone.0200961
6. Nurkanto A, Jeelani G, Yamamoto T, Naito Y, Hishiki T, Mori M, Suematsu M, Shomi K, **Hashimoto T**, Nozaki T. Characterization and validation of *Entamoeba histolytica* pantothenate kinase as a novel antiamebic drug target. 2018 **International Journal for Parasitology: Drugs and Drug Resistance** 8(1):125-138. Doi: 10.1016/j.ijpddr.2018.02.004
 7. Bradley A, **Hashimoto T**, Ono M. Elucidating T cell activation-dependent mechanisms for bifurcation of regulatory and effector T cell differentiation by multidimensional and single-cell analysis. 2018 **Frontier in Immunology** 9:1444. Doi: 10.3389/fimmu.2018.01444
 8. Nurkanto A, Jeelani G, Yamamoto T, Hishiki T, Naito Y, Suematsu M, **Hashimoto T**, Nozaki T. Biochemical, metabolomics, and genetic analyses of dephospho coenzyme A kinase involved in coenzyme A biosynthesis in the human enteric parasite *Entamoeba histolytica*. 2018 **Frontier in Microbiology** 9:2902. Doi: 10.3389/fmicb.2018.02902
 9. **Kume K**, Amagasa T, **Hashimoto T**, Kitagawa H. NommPred: Prediction of mitochondrial and mitochondrion-related organelle proteins of nonmodel organisms. 2018 **Evolutionary Bioinformatics** 14:1-12. Doi: 10.1177/1176934318819835.
 10. **Yuyama I**, Ishikawa M, Nozawa M, Yoshida M, Ikeo K. Transcriptomic changes with increasing algal symbiont reveal the detailed process underlying establishment of coral-algal symbiosis. 2018 **Scientific Reports** 8:16802. Doi: 10.1038/s41598-018-34575-5

B) 査読無し論文

1. **湯山育子**. ゲノム，トランスクリプトームデータから明らかにされる刺胞動物－藻類の細胞内共生． 2018 生物科学 69(4):1087-1090.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. **Yuji Inagaki**. Heterotrophic side of the tree of the eukaryotic life. Seminar in Station Biologique de Roscoff, Jan. 18, 2019, Station Biologique de Roscoff (Roscoff, France)
2. **Yuji Inagaki**. Recent progress in understanding the early evolution of eukaryotes based on phylogenomic data-analyses. 第 10 回「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, Oct 15-16, 2018, 筑波大学 (つくば市, 茨城県)
3. **Yuji Inagaki**. Novel eukaryotes for elucidating the early eukaryotic evolution., ISEP18, May 27-Jun 1, 2018, Droushia Heights Hotel (Paphos, Cyprus)

B) 一般講演

1. Takashi Shiratori, Akinori Yabuki, Euki Yazaki, Yuki Nishimura, Moriya Ohkuma, Katsunori Fujikura, Tetsuo Hashimoto, Yuji Inagaki, Ken-ichiro Ishida. Orphan protistology, accelerating in Japan. Joint meeting of the Japan Society of Protistology and the Korean Society of Protozoologists, Jul 13-15, 2018, Korea Institute of Ocean Science & Technology (Jeju Island, Korea)
2. Yoshiyuki Ishitani, Yurika Ujiie, Euki Yazaki, Takashi Toyofuku, Yukiko Nagai, Yuji Inagaki. FORAMS2018, June 17-22, 2018, University of Edinburgh (Edinburgh, UK)
3. Takuro Nakayama, Yoshito Takano, Mami Nomura, Kogiku Shiba, Kazuo Inaba, Goro Tanifuji, Yuji Inagaki, Masakado Kawata. Genome analysis of a symbiotic cyanobacterium in a dinophysialean dinoflagellate, *Orthocercus magnificus*. ISEP18, May 27-Jun 1, 2018, Droushia Heights Hotel (Paphos, Cyprus)
4. Goro Tanifuji, Ryoma Kmikawa, Chista E Moore, Tyler Mills, Naoko T Onodera, John M Archibald, Yuji Inagaki, Tetsuo Hashimoto. Comparative genomics of photosynthetic and non-photosynthetic *Cryptomonas* (Cryptophyta) species. ISEP18, May 27-Jun 1, 2018, Droushia Heights Hotel (Paphos, Cyprus)

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 稲垣祐司. ゲノム・トランスクリプトームデータを用いて推測される真核生物の初期分岐. 第 1 回ゲノム・分子進化・構造の会, Feb. 8, 2019, 筑波大学サテライトオフィス (つくば市, 茨城県)

B) その他の発表

1. 白鳥峻志, 矢崎裕規, 久米慶太郎, 稲垣祐司, 橋本哲男, 石田健一郎. 新奇原生生物 SRT308 株が明らかにするユーグレノゾアの初期進化. 日本藻類学会第 43 回大会, March 15-17, 2019, 京都大学 (京都市, 京都府)
2. 石谷佳之, 矢崎裕規, 氏家由利香, 稲垣祐司. 有孔虫の大規模分岐年代推定. 高知大学海洋コア総合研究センター共同利用成果報告会, March 7-8, 2019, 高知大学海洋コア総合研究センター (南国市, 高知県)
3. 松尾充啓, 湊端篤, 立川誠, 水口洋平, 野口英樹, 豊田敦, 藤山秋佐夫, 鈴木穰, 佐藤壮一郎, 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析から見えてきた一次細胞内共生進化における DNA ウイルスの役割. 日本共生学会第 2 回大会, November 24-25, 2018, 神戸大学百年記念会館六甲ホール (神戸市, 兵庫県)

4. 矢崎裕規, 上原忠晃, Guifré Torruella, 水島昇, 橋本 哲男, 稲垣祐司. オートファジーの普遍性の検証 ～オピストコンタとその近縁系統について～. 第 11 回オートファジー研究会, November 18-20, 2018, つま恋リゾート彩の郷 (掛川市, 静岡県)
5. 矢崎裕規, 上原忠晃, 坂本寛和, 水島昇, 橋本哲男, 稲垣祐司. 渦鞭毛藻細胞内共生珪藻にもオートファジーはあるのか?! 第 51 回日本原生生物学会大会, October 19-21, 2018, 島根大学 (松江市, 島根県)
6. 上原忠晃, 矢崎裕規, Guifré Torruella, 橋本哲男, 稲垣祐司. オピストコンタおよび近縁系統におけるオートファジー関連遺伝子の網羅的探索. 日本進化学会第 20 回大会, August 22-25, 2018, 東京大学駒場キャンパス (目黒区, 東京都)
7. 湯山育子. サンゴの白化現象に伴う遺伝子発現変動, 第 41 回日本分子生物学会年会. November 28-30, 2018, パシフィコ横浜 (横浜市, 神奈川県)
8. 湯山育子. 遺伝子発現から明らかにする サンゴと褐虫藻の白化時の変化. 第 21 回日本サンゴ礁学会, November 22-25, 2018, 琉球大学 (中頭郡, 沖縄県)

(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 博士および A. G. B. Simpson 博士 (ダルハウジー大・カナダ) との共同研究: メタモナス生物群の系統関係と嫌気性ミトコンドリア機能の解析
2. E. Kim 博士 (アメリカ自然史博物館・アメリカ合衆国) との共同研究: カタブレファリス類のミトコンドリアゲノム解析
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
4. V. Hampl 博士 (チャールズ大学・チェコ共和国) との共同研究: ユーグレノゾアにおけるミトコンドリア DNA ポリメラーゼの進化
5. De Vargas 博士 (CNRS/ロスコフ海洋研究所・フランス) との共同研究: 海洋原生生物に共生する細菌多様性の実態解明

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

なし

9. 管理・運営

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

10. 社会貢献・国際貢献

なし

11. その他

1. 海洋研究調査船みらい観測航海（MR18-04 Leg. 1），期間：2018 年 7 月 16 日－8 月 17 日，参加者：石谷佳之、矢崎裕規

VI. 地球環境研究部門

1. メンバー

教授	田中 博（センター勤務）、日下 博幸（センター勤務） 植田 宏昭（学内共同研究員）
助教	松枝 未遠（センター勤務）
研究員	石崎 紀子、荒木 貴光、山上 晃央、Doan Quang Van
学生	大学院生 23 名、学類生 6 名、特別研究留学生 1 名

2. 概要

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

地域規模の気候の研究として、内閣府 SIP プロジェクトの一環としてのフェーン研究がある。平成 30 年度は、2018 年 7 月 23 日に熊谷で発生した日本最高気温記録 41.1℃の要因が地面加熱を伴うタイプのフェーンであることを明らかにした。また、関東地方で吹く空っ風に対して、脊梁山脈が持つ前橋付近の半盆地地形が重要な要因の一つであることを明らかにした。そのほか、NEDO プロジェクトの一環として、風ランプ現象予測手法を開発した。また、文科省 SIP プロジェクトの一環として都道府県単位での熱中症予測手法を開発した。

地球規模の気象研究のひとつに、北極低気圧の研究がある。平成 30 年度は、全球気象モデル NICAM を用いて、過去に発生した北極低気圧の数値シミュレーションを実施し、北極低気圧の形成に重要となる暖気核は、北極圏周辺で発生発達する温帯低気圧が北極圏に侵入し、北極低気圧と融合することで供給されていることを明らかにした。

さらなる地球環境研究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。平成 30 年度は、科研費・研究活動スタート支援として、世界各地で起こる天候レジームの 1-2 週間先までの予測可能性を解析した。また、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た。

3. 研究成果

【1】 全球雲解像モデル NICAM をもちいた北極低気圧の数値実験

東京大学 AORI の佐藤正樹教授のグループとの共同研究により、全球雲解像モデル NICAM を用いた北極低気圧の数値実験を実施した。当センターの COMA および OFP を用いること

で、NICAM の解像度を gl-9 まで上げて 2016 年 8 月に発生した北極低気圧を初期値問題として再現した。用いた初期値は NCEP FNL 再解析データである。北極低気圧は熱帯低気圧のように同一気団の中で発生する順圧的な渦であるため、傾圧大気の特徴的な前線構造を持たず、台風のようなスパイラルバンドの雲構造を持つ。

しかし、熱帯低気圧のような潜熱加熱はないため、そのエネルギー源が熱帯低気圧とは大きく異なっている。先行研究によると、北極低気圧中心付近の対流圏下層は寒気核、下部成層圏が暖気核となっており、この暖気核の形成が北極低気圧の発生維持に重要であることがわかってきた。この暖気核は、北極圏周辺で発生発達する温帯低気圧が北極圏に侵入し、北極低気圧と融合することで供給されている。

図 1 は 250 hPa 面における北極低気圧の暖気核に、北上する温帯低気圧の暖気核が融合 (merging) する様子を再現したものである。この暖気核の融合により、低気圧性の順圧渦度が発達し、地上摩擦によるエクマン収束で生じた上昇気流が断熱冷却により下層の寒気核を形成していることを実証した。(田中、石山、松信)

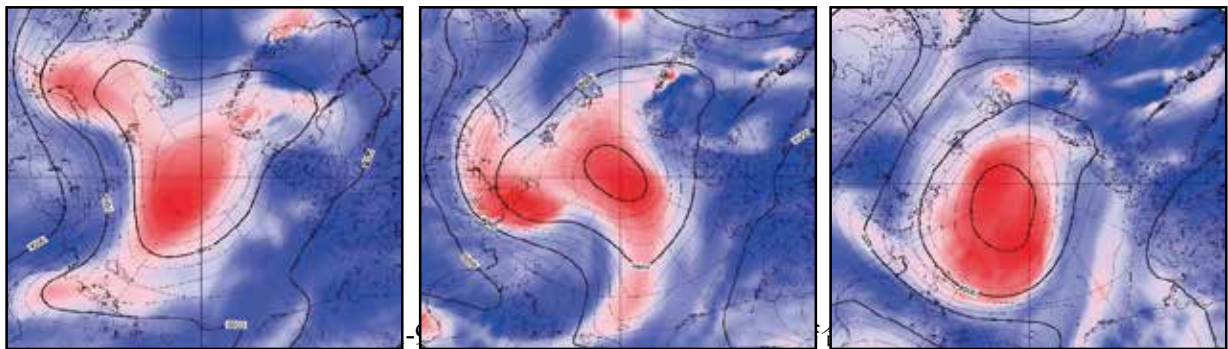


図 1 NICAM (gl-9)による北極低気圧暖気核の結合の再現実験

【2】 火山灰追跡モデル PUFF とリアルタイム噴出率推定システムの結合

JST と JICA による SATREPS インドネシア防災プロジェクト (PI: 京都大学の井口正人教授) は 5 年間の最終年を迎えた。Tanaka (1994) が開発したリアルタイム火山灰追跡 PUFF モデルをインドネシア気象局 (BMKG) のオペレーション室に導入し、大スクリーンに噴煙予測分布図が映し出されるシステムが完成した。現地でモデルの取り扱い説明セミナーを開催し、BMKG 予報官が独自に PUFF モデルを用いた火山灰追跡を行えるように指導した。

一方、桜島火山観測所 (京大) の井口所長との共同研究により、PUFF モデルにリアルタイム噴出率推定システムを結合した新システムの開発を行った。PUFF モデルは空気塊のトラジェクトリーを計算するラグランジュモデルであるが、正確な風の 3 次元データと火山噴火の際の正確な噴出率のデータが重要である。そのため、世界的に最も観測網が充実している桜島火山の地震計や傾斜計のデータから、リアルタイムで分刻みの噴出率を算出する方法を PI の井口が独自に開発し、それを PUFF モデルに接続し、リアルタイムで火山灰輸送拡散予測を行っている (図 2)。新システム運用開始後の 2018 年 6 月 16 日に、やや大規模な噴火が発生し、噴煙の 3 次元分布の時間変化や降灰分布図

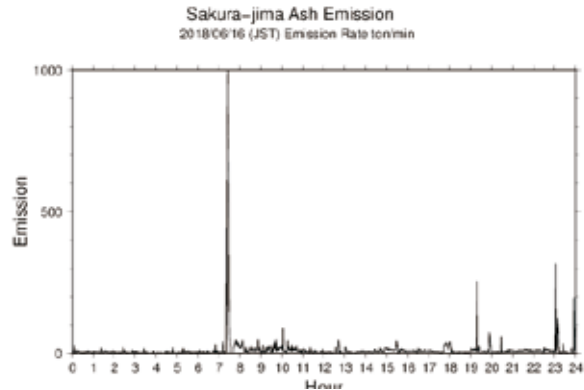


図 2 桜島火山噴出率のモニタリング

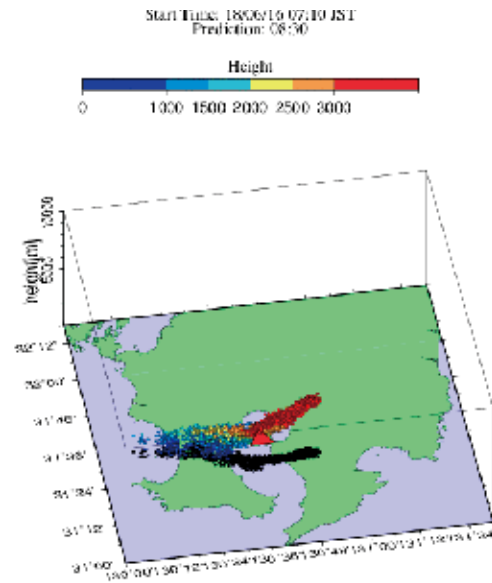


図 3 桜島火山灰の輸送拡散モデル予測

の推定が初めて実際に運用された (図 3)。この事例では鹿児島市に大量の降灰が起こり、その定量的な分布がモデル予測結果と比較された。降灰分布の輸送拡散予測の結果は観測とほぼ一致するが、降灰量に差異がみられることから、モデルのさらなる改良が必要である。(田中、井口)

また、富士山の仮想的な大爆発を想定し、首都圏に大量の火山灰が降った場合の対策を考える中央防災会議「大規模噴火時の広域降灰対策検討会」が内閣府で組織され、PUFF モデルを応用した仮想的な噴煙予測の結果を示すことで協力した。(田中)

【3】 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。本研究は、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、顕著現象による被害の低減に貢献することを目指した。夏季欧州域における天候レジームと熱波の関係、および、それらの予測可能性について調査した。夏季欧州の天候レジームは 8 種類が有意なものとして検出され、そのうちの 6 つが欧州各地の熱波（スカンジナビア、北西/中央/東ヨーロッパ、地中海、英国/フランス）に関連していた。このうち、2003 年 8 月に発生したような英国/フランス熱波が最も予測可能性が低く、地中海熱波が最も予測可能性が高いことがわかった。また、欧州、日本、米国の現業中期アンサンブル予報データ、および、計算科学研究センターに導入した欧州中期予報センター (ECMWF) 簡易版数値予報 (OpenIFS) モデルを用いて、2018 年 7 月上旬に日本列島で発生した豪雨（平成 30 年 7 月豪雨）の予測可能性について調査した。この豪雨は、日本列島が異常に発達した北太平洋高気圧と列島北側の高気圧リッジに挟まれたことで、熱帯からの水蒸気が西日本に集中して流入したことで引き起こされた。現業アンサンブル予報によると、この 7 月 5 日の豪雨イベントは少なくとも 5 日前から予測可能であったことがわかった。米国のアンサンブル予報はもっとも早い 7 日前から発生を予測していたため、米国のアンサンブル予報の初期値を用いて OpenIFS モデルによる予報実験を行った。実験結果は欧州の予報と変わらず 5 日前からのみ豪雨を予測していた。このことは、この豪雨イベントの予報改善には、初期値の改善よりもむしろ ECMWF モデルの改善が必要であることを示している。本結果は査読論文として投稿した。（松枝）

【4】 海洋地球研究船みらい北極航海（MR18-05C）でのラジオゾンデ観測データによる ECMWF の検証

2018 年みらい北極航海（2018 年 10 月 24 日～12 月 7 日）で得られたラジオゾンデ観測データおよび地上観測データを用いて、ECMWF の決定論的予報の検証を行った。11 月 6 日から 22 日にみらいは最も海氷縁に近づいた。ECMWF の予報では、9 日から 13 日にかけて観測よりも高温を予測した（正の誤差）。この高温の誤差は 925hPa の高度まで見られ、地上気温の誤差が最も大きかった（2K 以上）12 日には 700 hPa の高度まで到達していた。この正の気温バイアスが見られた期間は、みらいの位置において北西風が吹いていた期間と一致していた。12 日を対象とした 24 時間予報の気圧場を見ると、みらいの位置の西側において低気圧性の誤差があり、それに伴って地上風の低気圧性回転をもつ誤差が見られた。この低気圧性の誤差によって、みらい周辺（低気圧性回転の東端に位置）では北西風が弱く予測され、その結果、高温バイアスが現れたことが示唆された。観測と比較して、予報モデルに用いられ

る海氷密接度が海氷縁では低く表現されているため、この低気圧性の誤差と海氷の表現が関係しているかどうかについては調査中である。この解析結果は 2019 年 6 月に ECMWF で行われるワークショップにおいて発表予定である。（松枝）

【5】 夏季の北極低気圧とその予測可能性

アメリカ大気海洋庁（NOAA）が提供する長期アンサンブル再予報データ（GEFS 再予報）を用いて、北極域における極端大気現象のひとつである北極低気圧（Arctic cyclone; AC）の予測スキルとその長期変化傾向について調べた。1985-2016 年の夏季（6-8 月）に顕著な AC は 26 事例発生した。これら 26 事例の AC の中心気圧・サイズ・発生頻度について、長期変化傾向は見られなかった。26 事例の AC がどの程度予測出来ていたかを調べた結果、平均的に最盛期の 3 日前の予測から 9 割以上のアンサンブルメンバーがその存在を予測できていた。また、最盛期の 3 日前の予測から、平均的な中心位置の予測誤差が 433.1 km（26 事例の AC の最盛期における平均半径の半分）以下となり、その時の中心気圧の予測誤差は 6.1 hPa であった。これらの結果と 2008-2016 年の 10 事例の AC に対する予測スキルは同程度であった。この結果は、顕著な AC の予測スキルには長期的な改善傾向が見られないことを示唆している。このことは個々の事例を調べた結果からも見られ、AC の予測スキルは事例依存性が高いことが示された。さらに、10 事例に対する GEFS 再予報の予測スキルを、代表的な 5 つの数値予報センター（カナダ、欧州、日本、米国、英国）の現業アンサンブル予報の予測スキルと比較した。その結果、存在の予測では各予報時間における存在率の最も低い数値予報センターと同程度であった。中心気圧と中心位置の予測スキルは、長い予報時間（4.0-6.0 日）では最も良い欧州と同程度であった。一方、短い予報時間（1.0-3.0 日）では 5 つの現業予報の中間程度であることが示された。これらの結果は査読論文として投稿し、受理された。（松枝）

【6】 TIGGE Museum および S2S Museum

現業アンサンブル予報表示サイトである、TIGGE Museum（中期（数日～2 週間）予報を対象）および S2S Museum（延長（数週間～2 ヶ月）予報を対象）の管理・運営を行なった。プロダクトの改良および各数値予報センターの提供するアンサンブル予報データの仕様変更への対応を行なった。また、国際学会において S2S museum に関する発表を行い、S2S プロジェクトの一つの重要な成果として高い評価を得た。（松枝）

【7】 フェーンの研究（内閣府 SIP プロジェクト）

2018 年 7 月 23 日に熊谷で、41.1℃という高温が観測され、日本の最高気温記録が更新された。日本で高温現象が発生すると、ほとんどの場合、その原因として、太平洋高気圧とチベット高気圧の張り出しによる晴天日の連続や、フェーン現象が取りあげられる。本研究では、数値シミュレーションの結果を詳細に分析することで、熊谷で発生した 41.1℃の異常高温は、太平洋高気圧とチベット高気圧が張り出し続けた（気象庁 HP による）だけでなく、これにフェーン現象が重なったためであることを明らかにした。しかも、このフェーン現象は、教科書や天気予報の番組で紹介される一般的なフェーン現象（I 型、II 型）ではなく、最近専門家の間で注目されている第三のフェーン現象（図 4、図 5）であったことが明らかとなった。

さらには、今回の異常高温発生時と 2007 年 8 月 16 日に熊谷で更新された当時の最高気温記録（40.9℃）発生時の大気の状態を比べたところ、両者の大気の状態は非常に良く似ており、両方とも第三のフェーンによって発生していたことも分かった。（日下）

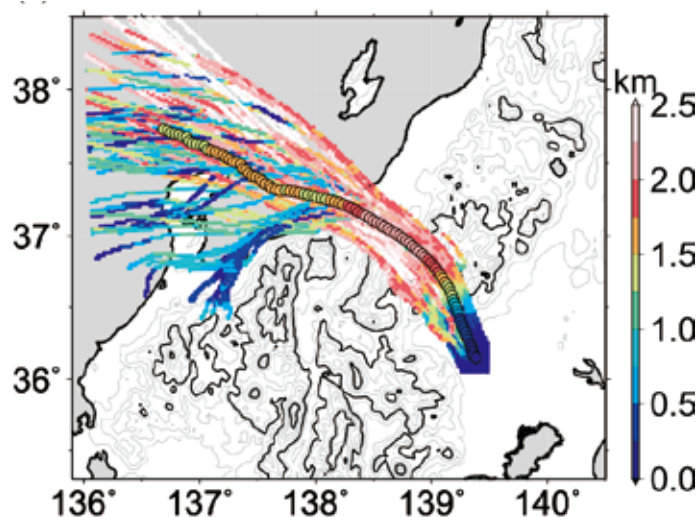


図 4 数値シミュレーションによって明らかにされた空気の移動経路。2018 年 7 月 23 日の最高気温記録時に熊谷にあった空気が、日本海の上空から越後山地の上空を通過した後に関東平野内陸部に吹き降りてきて熊谷に到達したことを示している。色は、移動中の空気の高度。

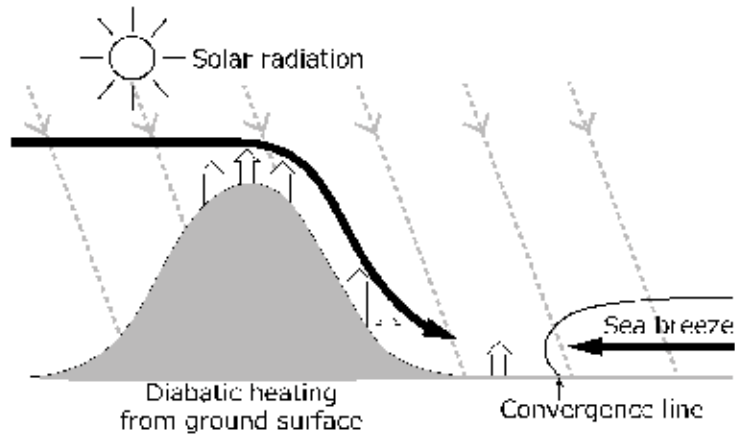


図 5 第三のフェーン現象の概念。黒矢印は、空気の移動経路を意味している（風が山を越えて下りてくる様子）。白矢印は、地面から大気へ供給される熱を意味している。風が山岳近くを吹き降りてくる際に、乾いた暖かい山岳斜面から熱を供給されることにより、それほど上空から吹き降りてこないにもかかわらず平野の気温が大きく上昇する。(Takane et al. 2013 より)

4. 教育

指導学生（日下）

D 3（地球）：加藤隆之、リディアビタノバ、西暁史、今井優真

D 1（地球）：浅野裕樹、佐藤拓人、佐藤亮吾

M 2（地球）：根岸もも子、遠藤周平、山田駿介

M 1（地球）：前田知夏、前畑美瑠、永田彩、小林大樹、本橋洋介

B 4（地球）：池田貴史、石田理沙、金子竜也

特別研究留学生：沈 旻昱

指導学生（田中）

D 3（地球）：小柴厚

M 2（地球）：遠藤あずさ、栗花卓也、岡崎晴菜

M 1（地球）：伊藤一輝、松信匠、萩原美沙子、原淑貴

B 4（地球）：石山涼太、豊岡大地、縄司瑛太

放送大学放送講師・地球科学客員教授（田中）

国立極地研究所客員教授（田中）

ベトナム国家大学日越大学・講師（日下）

茨城県緑丘高校生研究室体験受け入れ（日下）

筑波大学付属駒場高校生研究室体験受け入れ（日下）

茨城県勝田高校生科学体験教室受け入れ（日下）

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

【1】受賞

1. 第 57 回日本生気象学会.若手・学生発表コンテスト「優秀賞」（佐藤・日下ほか）
2. 大気環境学会平成 30 年度最優秀論文賞（富山・日下ほか）

【2】外部資金

1. 科学研究費補助金 基盤研究（C）、代表、2017-2019 年度、ロスビー波の碎波と飽和による地衡風乱流理論の構築、3,400,000 円（田中）
2. 日本学術振興会・学術研究助成基金助成金、若手研究（B）、代表、2016－2018 年度、天候レジームに関連する大気顕著現象の予測可能性、3,510,000 円（松枝）
3. 文部科学省・北極域研究推進プロジェクト（ArCS）、分担、2015－2019 年度、気象・海氷・波浪予測研究と北極航路支援情報の統合、25,000,000 円、（松枝）
4. 内閣府、戦略的イノベーション創造プログラム（SIP）、分担、2014-2018 年度、フェーレンの発生実態の解明とリスク情報の創出国立研究開発法人、12,180,000 円（日下）
5. 文部科学省、気候変動適応技術社会実装プログラム（SI-CAT）、課題代表、2015-2018 年度、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）、19,994,000 万円（日下）
6. 環境省、地域適応コンソーシアム事業、分担、2017-2019 年度、熱中症リスクの評価手法の整理・構築、10,220,000 円（日下）
7. 科学研究費補助金 基盤研究（B）、分担、2017-2019 年度、極端気象予測を拓くビッグデータ機械学習基盤の研究、3,600,000 円（日下）
8. 科学研究費補助金 基盤研究（B）、分担、2018-2020 年、発展途上諸国の急成長都市群におけるヒートアイランド現象の形成要因と将来予測、1,400,000 円（日下）
9. 科学研究費補助金 基盤研究（B）、分担、都市大気環境におけるトレードオフの推計と機構解明、2017-2019 年度、3,600,000 円（日下）
10. 新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）、分担、2014-2018 年度、電力系統出力変動対応技術研究開発事業、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、163,421,000 円（日下）

【3】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. **Tanaka, H.L.** and M. Iguchi 2019: Numerical simulations of volcanic ash plume dispersal for Sakura-jima using real-time emission rate estimation, Journal of Disaster Research, 14, No.1, 160-172, 2019.
2. Iguchi, M., H. Nakamichi, H. **Tanaka, H.L.** and others 2019: Integrated monitoring of volcanic ash and forecasting at Sakurajima volcano, Japan, Journal of Disaster Research, Vol. 14, No. 5, 2019.
3. **Yamagami, A.**, **M. Matsueda**, and **H. L. Tanaka**, 2019: Skill of Medium-range Reforecast for Summertime Extraordinary Arctic Cyclones in 1986-2016. Polar science, doi:10.1016/j.polar.2019.02.003.
4. Vanniere, B., ME. Demory, R., Schiemann, C. D. Roberts, **M. Matsueda**, L. Terray, T. Koenigk, R. Senan and P. L. Vidale, 2019: Multi-model evaluation of the sensitivity of the global energy budget and hydrological cycle to resolution. Clim. Dyn., 52, 6817–6846.
5. Nakanowatari, N., J. Inoue, K. Sato, L. Bertino, J. Xie, **M. Matsueda**, **A. Yamagami**, Sugimura, H. Yabuki, N. Otsuka, 2018: Medium-range predictability of early summer sea ice thickness distribution in the East Siberian Sea based on the TOPAZ4 ice-ocean data assimilation system. The Cryosphere, 12, 2005-2020.
6. **Yamagami, A.**, **M. Matsueda**, and **H. L. Tanaka**, 2018: Medium-range Forecast Skill for Arctic Cyclones in Summer of 2008-2016. Geophys. Res. Lett., 45, 4429-4437. doi:10.1029/2018GL077278
7. **Doan, Q. V.**, **H. Kusaka**, T. M. Nguyen, 2019: Roles of past, present, and future urbanization on urban heat island effects in Hanoi, Vietnam: Numerical experiments with a regional climate model. Sustainable Cities and Society, 47, 1-9.
8. Tewari, M., J. Yang, **H. kusaka**, F.Salamanca, C. Watson and L. Treinish, 2019: Interaction of urban heat islands and heat waves under current and future climate conditions and their mitigation using green and cool roofs in New York City and Phoenix, Arizona. Environmental Research Letters, 14, Article ID 034002.
9. **Doan, Q. V.**, **H. Kusaka**, 2019: Development of a multilayer urban canopy model combined with a ray tracing algorithm. SOLA, 15, 37-40.

10. Vitanova, L. L., **H. Kusaka, V. Q. Doan**, A. Nishi, 2019: Numerical Study of the Urban Heat Island in Sendai City with Potential Natural Vegetation and the 1850s and 2000s Land-Use Data. *Journal of the Meteorological Society of Japan*, 97(1), 227-252.
11. Nishi, A., **H. Kusaka**, 2019: Comparison of Spatial Pattern and Mechanism between Convexity and Gap Winds. *SOLA*, 15, 12-16.
12. Nishi, A., **H. Kusaka**, 2019: Effect of Foehn Wind on Record-Breaking High Temperature Event (41.1 degrees C) at Kumagaya on 23 July 2018. *SOLA*, 15, 17-21.
13. Chatterjee, S., A. Khan, A. Dinda, S. Mithun, R. Khatun, H. Akbari, **H. Kusaka**, C. Mitra, S. S. Bhatti, V. Q. Doan, Y. Wang, 2019: Simulating micro-scale thermal interactions in different building environments for mitigating urban heat islands. *Science of the Total Environment*, 663, 610-631.
14. **Doan, Q. V., H. Kusaka, M. Matsueda**, R. Ikeda, 2019: Application of mesoscale ensemble forecast method for prediction of wind speed ramps. *Wind Energy*, 22, 499-508.
15. Gu, Y., **H. Kusaka, V. Q. Doan**, J.G. Tan, 2019: Impacts of urban expansion on fog types in Shanghai, China: numerical experiments by WRF model. *Atmospheric Research*, 220, 57-74.
16. 佐藤拓人, **目下 博幸**, 2018: 気象学 RANS モデルと翼非回転風車モデルを用いた風車後流による風速欠損の再現性(気象学 LES モデルとの比較). *日本風工学会論文集*, 43(4), 131-142.
17. **Doan, Q. V., H. Kusaka**, Toan V. D., Duc D. N., Thanh C. , 2018: Numerical Approach for Studying Offshore Wind Power Potential Along the Southern Coast of Vietnam. *Proceedings of the 1st Vietnam Symposium on Advances in Offshore Engineering*, 2018, 245-249.
18. Suzuki-Parker, A., Y. Miura, **H. Kusaka**, M. Kureha, 2018: Assessing the sustainability of ski fields in southern Japan under global warming. *Advances in Meteorology*, 2018, Article ID 8529748. 10 pages.
19. Kakimoto, M., Y. Endoh, H. Shin, R. Ikeda, **H. Kusaka**, 2018: Probabilistic Solar Irradiance Forecasting by Conditioning Joint Probability Method and its Application to Electric Power Trading. *IEEE Transactions on Sustainable Energy*, 1-1.
20. Suzuki-Parker, A., **H. Kusaka**, I. Takayabu, K. Dairaku, N. N. Ishizaki, S. Ham, 2018: Contributions of GCM/RCM uncertainty in ensemble dynamical downscaling for precipitation in East Asian summer monsoon. *SOLA*, 14(0), 97-104.
21. **Doan, Q.V., H. Kusaka**, 2018: Projections of Urban Climate in the 2050s in a Fast-Growing City in Southeast Asia: the Greater Ho Chi Minh City Metropolitan Area, Vietnam. *International Journal of Climatology*, 38, 4155-4171.

22. Vitanova, L. L., **H. Kusaka**, 2018: Study on the urban heat island in Sofia City: Numerical simulations with potential natural vegetation and present land use data. SUSTAINABLE CITIES AND SOCIETY, 40, 110-125.
23. 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.

B) 査読無し論文

1. Akasofu, S. and **H.L. Tanaka**, 2018: On the natural component of climate change, Tsukuba Geoenvironmental Sciences, Vol. 14, pp. 1-7, Dec., 2018.
2. **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-O04.
3. Akasofu, S. I., and **H. L. Tanaka** 2018: On the natural component of climate change. Abstract, Fifth International Symposium on Arctic Research, January 15-18, 2018, Hitotsubashi Hall, Tokyo, Japan, S1-O01.
4. 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.
5. 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.
6. **田中博**・佐々木剛史, 2018: 北極低気圧の 3 次元構造とラグランジュ運動の解析, 平成 29 年度東京大学大気海洋研究所 共同研究報告 51-54, 2018 年 6 月.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. **Tanaka, H. L.** 2018: How to Use the PUFF Model. Volcanic Ash and Aviation Safety Lecture. BMKG, Indonesia.
2. **Kusaka H.**, 2018: Comparison of the Past and Future Urban Impact on the Regional Climate of Southeast Asian Capital Cities. The Final Workshop of the First Phase and the Second Technical Workshop of the Second Phase of the Southeast Asia Regional Climate Downscaling (SEACLID)/ CORDEX Southeast Asia Project, Malaysia. 2018/05/07

B) 一般講演

1. **Matsueda, M.**, and **A. Yamagami**, 2018: The S2S Museum – a website of ensemble forecast products –. International Conferences on Subseasonal to Decadal Prediction. 17th – 21st September 2018, Boulder, USA.
2. **Matsueda, M.**, and T. N. Palmer, 2018: Predictability of winter Pacific weather regimes and its connections with MJO on medium-range timescales. International Conferences on Subseasonal to Decadal Prediction. 17th – 21st September 2018, Boulder, USA.
3. **Yamagami, A** and **M. Matsueda**, 2018: Forecast Verification of Pacific/North American (PNA) Teleconnection on Sub-seasonal to Seasonal Timescales. Asia Oceania Geosciences Society 15th Annual Meeting. 3rd – 8th June, 2018, Hawaii, USA.
4. **Yamagami, A.**, **M. Matsueda**, and H. L. Tanaka, 2018: Forecast verification of summertime Arctic cyclones on medium-range timescales. European Geoscience Union General Assembly 2018. 8th – 13th April, 2018, Vienna, Austria. (highlight)
5. **Matsueda, M.**, and T. N. Palmer, 2018: Estimates of flow-dependent predictability of wintertime Euro-Atlantic weather regimes in medium-range forecasts. European Geoscience Union General Assembly 2018. 8th – 13th April, 2018, Vienna, Austria.
6. Okada, M., T. Ichizawa, Y. Nakamura, K. Yamaguchi, R. Kodama, H. Kato, Y. Nagano, R. Ikeda, **V. Q. Doan, H. Kusaka, T. Araki, I. N. Ishizaki**, N. Ogasawara, 2018: Japan's R&D Project of Ramp Forecasting Technology: Meteorological Pattern Analysis Method. 17th Wind Integration Workshop, Stockholm/Sweden. 2018/10/18.
7. **Araki, T.**, R. Ikeda, **V. Q. Doan, N. Ishizaki, H. Kusaka**, 2018: Japan's R&D Project of Ramp Forecasting Technology: Correction Method with Additive Model for NWP-based Wind Speed Forecast. 17th Wind Integration Workshop, Stockholm/Sweden. 2018/10/18.
8. **Asano, Y., H. Kusaka**, 2018: Dynamical effect of topography of Aso caldera on “Matsubori-kaze”. Tsukuba Global Science Week 2018, つくば, 2018/09/21.
9. **V. Q. Doan, H. Kusaka**, R. Ikeda, 2018: Sensitivity of the WRF model to initial/ boundary conditions in the numerical prediction of wind speed ramps in Hokkaido, Japan. グランド再生可能エネルギー2018 国際会議, Yokohama, Japan. 2018/06/19.
10. Okada M., T. Ichizawa, Y. Nakamura, K. Yamaguchi, R. Kodama, H. Kato, Y. Nagano, R. Ikeda, **V. Q. Doan, H. Kusaka**, N. Ogasawara 2018: Development of Wind Power Ramp Forecast System based on Statistical and Meteorological Approach. グランド再生可能エネルギー2018 国際会議, Yokohama, Japan. 2018/06/19.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

特になし

B) その他の発表

1. 田中博 2018: 地球環境を考える。國學院栃木高校創立記念講演会.
2. 松信匠, 松枝未遠, 田中博, 2018: アンサンブル予報による平成 30 年 7 月豪雨の予測可能性について. 異常気象研究会 2018 「季節予測システムの進展と異常気象の要因分析」, 2018 年 11 月 21 日-11 月 22 日, 宇治 (口頭)
3. 日下 博幸, 西 暁史, 柿沼 亜衣, 遠藤 周平, 2018: 「日本の南フェーン”神通おろし”の特徴とメカニズム」, 第 60 回風に関するシンポジウム, 東京, 2018/12/01.
4. 山田 駿介, 日下 博幸, 2018: 鈴鹿おろしのタイプ別の強風域の分布, 第 69 回気候影響・利用研究会, 東京, 2018/12/01.
5. 浅野 裕樹, 日下 博幸, 2018: まつぼり風に対するカルデラ地形の力学効果, 第 69 回気候影響・利用研究会, 東京, 2018/12/01.
6. 佐藤 亮吾, 日下 博幸, 2018: 地上地衡風に着目した channeling 流の気候学的研究, 第 60 回風に関するシンポジウム, 東京, 2018/12/01.
7. 西暁史, 日下 博幸, 2018: 局地風「空っ風」の力学的・熱力学的形成メカニズム, 第 60 回風に関するシンポジウム, 東京, 2018/12/01.
8. 永野 良紀, 加藤 央之, 池田 亮作, Doan Quang Van, 日下 博幸, 岡田 牧, 小笠原 範光, 2018: 北海道と東北地方の発電量ランプの確率予測, 2018 年日本気象学会秋季大会, 仙台, 2018/10/29.
9. 西暁史, 日下 博幸, 2018: 空っ風の風分布に対する地形の影響, 気象学会 2018 年度秋季大会, 仙台, 2018/10/29.
10. 石崎 紀子, 日下 博幸, 荒木 貴光, Quan Van Doan, 池田 亮作, 永野 良紀, 加藤 央之, 2018: 風力発電予測における気圧パターンを考慮したモデル選択システムの構築, 気象学会 2018 年度秋季大会, 仙台, 2018/10/29.
11. 佐藤 拓人, 日下 博幸, 日野英逸, 2018: 熱中症患者搬送者数予測モデルのための温熱要素の調査, 第 57 回日本生気象学会大会, 京都, 2018/10/27.
12. Doan Q. V., 日下 博幸, 2018: 東南アジアの急発展する大都市の気候の将来予測: ホーチミンシティ都市圏を対象として, 日本地理学会 2018 年秋季学術大会, 和歌山, 2018/09/22.
13. 荒木 貴光, 池田 亮作, 日下 博幸, 2018: 風力数値予報の時変係数回帰モデルによる補正, 統計関連学会連合大会, 東京, 2018/09/13.
14. 横山 仁, 宮島 亜希子, 岩波 越, 日下 博幸, 2018: 小学校の百葉箱を活用した環境・防災教育の試み, 日本安全教育学会第 19 回横浜大会, 横浜, 2018/09/08.

15. 佐藤 亮吾, 日下 博幸, 佐藤 拓人, 清水 麻未, 中野 美紀, 荒木 貴光, 2018: 地域性と季節性・適応力を考慮した熱中症搬送者数予測手法の開発, 日本ヒートアイランド学会 第 13 回全国大会, 大阪, 2018/08/26.
16. 荒井 崇嘉, 日下 博幸, 2018: 内陸盆地都市における気温の日変化と地形・都市の影響, 日本ヒートアイランド学会 第 13 回全国大会, 大阪, 2018/08/26.
17. 佐藤 拓人, 日下 博幸, 日野英逸, 2018: 熱中症患者搬送者数予測に資する温熱要素の同定, 日本ヒートアイランド学会 第 13 回全国大会, 大阪, 2018/08/25.
18. 佐藤 拓人, 日下 博幸, 2018: 三次元プリュームモデルに基づく暑熱環境評価モデルの開発, 日本ヒートアイランド学会 第 13 回全国大会, 大阪, 2018/08/25.
19. Doan Q. V., 日下 博幸, 2018: 東南アジアの急発展する大都市の気候の将来予測: ホーチミンシティ都市圏を対象として, 日本ヒートアイランド学会 第 13 回全国大会, 大阪, 2018/08/25.
20. Doan Q. V., 日下 博幸, 2018: レイトレーシング法(光線追跡法)を採用した多層都市キャノピーモデルの開発, 日本ヒートアイランド学会 第 13 回全国大会, 大阪, 2018/08/25.

(4) 著書、解説記事等

1. 松岡憲・田中博他編 2019: 改訂版—地球環境学. 古今書院, 114pp.
2. 日下博幸・藤部文昭編 2018: 日本気候百科. 丸善出版, 516pp.
3. 若月泰孝, 日下博幸, 2018: 降水短時間予測の現状と課題. ながれ, 37, 41-47.

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1. 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).
2. 米国ミズリー大学コロンビア校との部局間協定 ブロッキングと異常気象の研究(田中)
3. インドネシア気象局(BMKG)との共同研究、SATREPS火山灰追跡モデル(田中)
4. ベトナム国家大学ハノイ自然科学大学(VUN/HUS)と本センター間の協定(日下)
5. ハノイ科学技術大学(USTH)と本センター間の協定(日下)
6. 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)

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 第二回インスブルック大学-筑波大学フェーンワークショップの開催(日下)
2. TGSW2018 でのセッション開催(日下)

9. 管理・運営

1. 生命環境科学研究科長、教育研究評議員、T-ACT 推進室員（田中）
2. 学長補佐（日下）

10. 社会貢献・国際貢献

1. 日本気象予報士会、CPD 制度運営委員会委員長（田中）
2. 下郷町教育委員会、中山風穴特殊植物群落保護指導委員会委員長（田中）
3. 東京都環境影響評価審議会委員（日下）
4. 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）
5. 熱中症予防声かけプロジェクト実行委員（日下）
6. 気象庁気候問題懇談会検討部会委員（日下）
7. 日本学術会議自然地理学環境防災小委員会委員（日下）
8. 洋上風況観測システム及び洋上風況推定に関する検討会委員（日下）
9. ベトナム国家大学日越大学講師（日下）
10. 和光市での講演（日下）
11. 茨城県のイベント（茨城県エコスタイルセミナー）での講演（日下）
12. 新宿区の市民講座（きのえね会）での講演（日下）

11. その他

1. 放送大学放送講師 「はじめての気象学」 30 分番組、年 30 コマ、2015-2024.（田中）
2. 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)
3. 温暖化ダウンスケーラの保守・管理（日下）
4. 日本放送草野満代 夕暮れ WONDER4 で研究成果紹介（日下）
5. フジテレビとくダネ！でヒートアイランドの解説（日下）
6. オンラインニュース日経 xTECH で研究活動紹介（日下）
7. BS-TBS Biz Street で研究活動紹介（日下）
8. Top Researchers で研究者紹介（日下）

VII. 高性能計算システム研究部門

1. メンバー

教授 朴 泰祐、高橋 大介、建部 修見

准教授 塙 敏博（客員、東京大学）

助教 多田野 寛人、小林 諒平

フェロー 佐藤 三久

研究員 藤田 典久

学生 大学院生 22 名、学類生 6 名

学内共同研究員

安永 守利、和田 耕一、櫻井 鉄也、山口 佳樹、今倉 暁

（以上、システム情報系）

学外共同研究員

小柳 義夫（RIST）、石川 裕（理化学研究所）、

松岡 聡（理化学研究所）、中島 浩（京都大学）、

天野 英晴（慶應義塾大学）、後藤 仁志（豊橋技術科学大学）、

関口 智嗣（産業技術総合研究所）、中尾 昌広（理化学研究所）、

佐野 健太郎（理化学研究所）、川島 英之（慶應義塾大学）、

田中 昌宏（慶應義塾大学）、平賀 弘平（慶應義塾大学）

2. 概要

本研究部門では、高性能計算システムアーキテクチャ、並列プログラミング環境、GPU 利用技術、FPGA 利用技術、並列数値処理の高速化研究、分散システムソフトウェア、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 GPU-FPGA 間 DMA 転送技術の開発（朴、小林）

CPU-GPU クラスタ構成である現在の HPC システムの性能を更に向上させるために、GPU に演算通信性能に優れている FPGA (Field Programmable Gate Array)を連携させ、双方を相補的に利用する GPU-FPGA 複合システムに関する研究を進めている。GPU、FPGA といった異なるハードウェアを搭載するシステム上では、各デバイスで実行される演算をどのようにプログラミングし、全デバイスを協調動作させるかが重要な課題となる。そこで本研究では、GPU-

FPGA 間連携をシームレスに行うためのデバイス間メモリ転送について着目し、その要素技術を提案している。

昨年度には、PCIe プロトコルをベースとする GPU-FPGA 間 DMA 転送技術を開発し、この技術により、CPU を介さない DMA 転送を FPGA が自律的に起動することが可能となった。ただしこれは、Verilog HDL のレベルで GPU-FPGA 間で DMA 転送が実現できるのを確認したのみであり、C 言語のようなユーザーフレンドリーなプログラミング言語からこの機能を制御することができなかった。この問題を、これまでの研究から得られた知見と Intel が提供する高位合成ツール Intel FPGA SDK for OpenCL の機能とを活用することによって解決した。その成果を図 1 に示す。

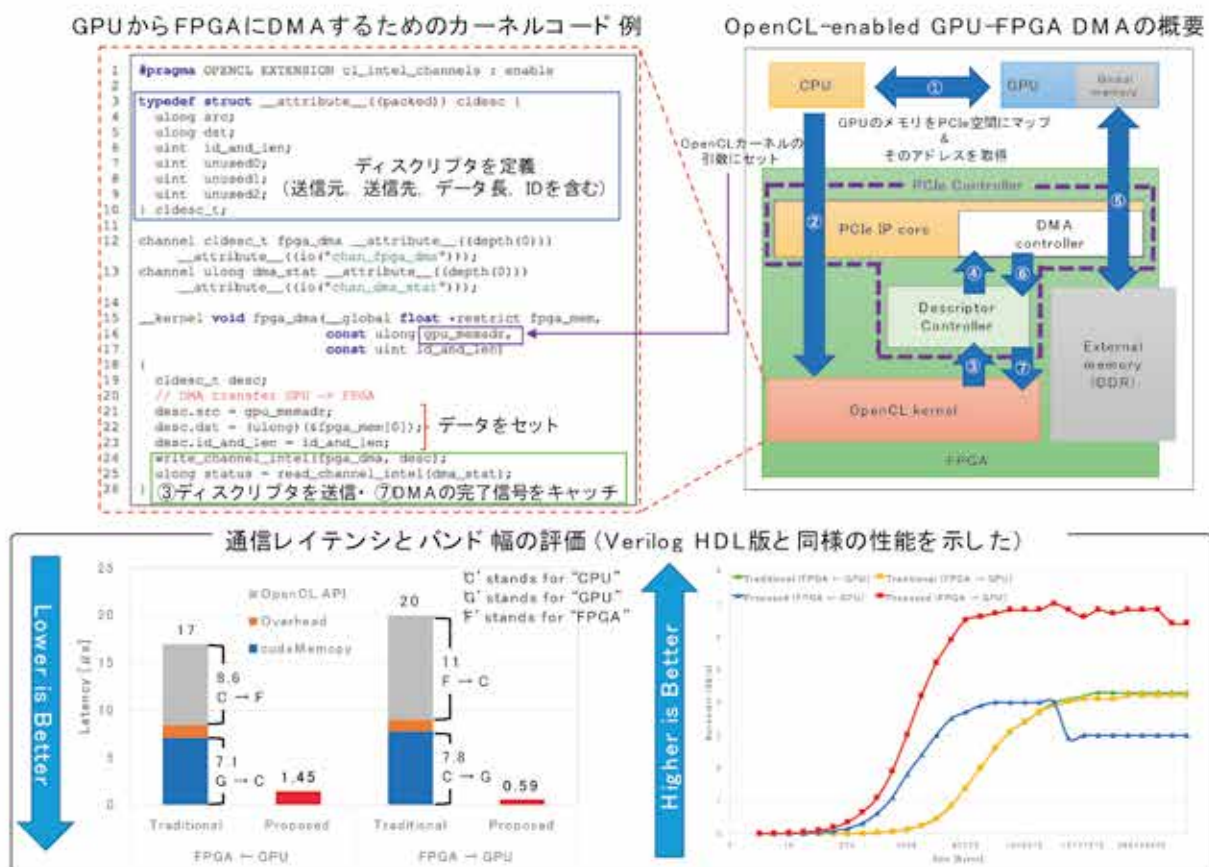


図 1 OpenCL から制御可能な GPU-FPGA 間 DMA 転送の実現

この技術により、GPU-FPGA 間 DMA 転送を OpenCL のレベルで制御できるようになり、通信レイテンシと通信バンド幅を評価したところ Verilog HDL 版と同様の性能を示すことを確認した。図から明らかなように、FPGA から GPU への通信は常に従来手法より性能が高く、最大で 7.0 GB/s (理論性能の 87.5%) のバンド幅が確認された。一方、GPU から FPGA への通信は、4 MB データサイズを超えると従来手法の方が性能が良い結果となった。この理由について NVIDIA の技術者と議論したところ、GPU の L2 キャッシュオーバーフローによるもの

だと考えられており、現在詳細に解析中である。そして、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、低レイテンシ通信を実現できる提案手法の方が有利であることが確認された。

【2】 GPU-FPGA 連携のためのプログラム開発手法（朴、小林）

前項に示した通り、我々は GPU に演算通信性能に優れている FPGA (Field Programmable Gate Array) を連携させ、双方を相補的に利用するために GPU-FPGA 間でデータを送受信するための仕組みを開発している。GPU と FPGA をソフトウェア的に連携させるためには、ハードウェア及び周辺システムの開発だけでなく、GPU および FPGA を同一プログラムから呼び出し、提案した DMA 転送技術を活用しながら協調計算を行うためのプログラム環境が必要となる。そのため本研究では、GPU と FPGA のコンパイル環境や開発言語の組み合わせを調査し、GPU-FPGA 協調計算を行うための基本モデルを提案した。図 2 にその概要および成果を示す。

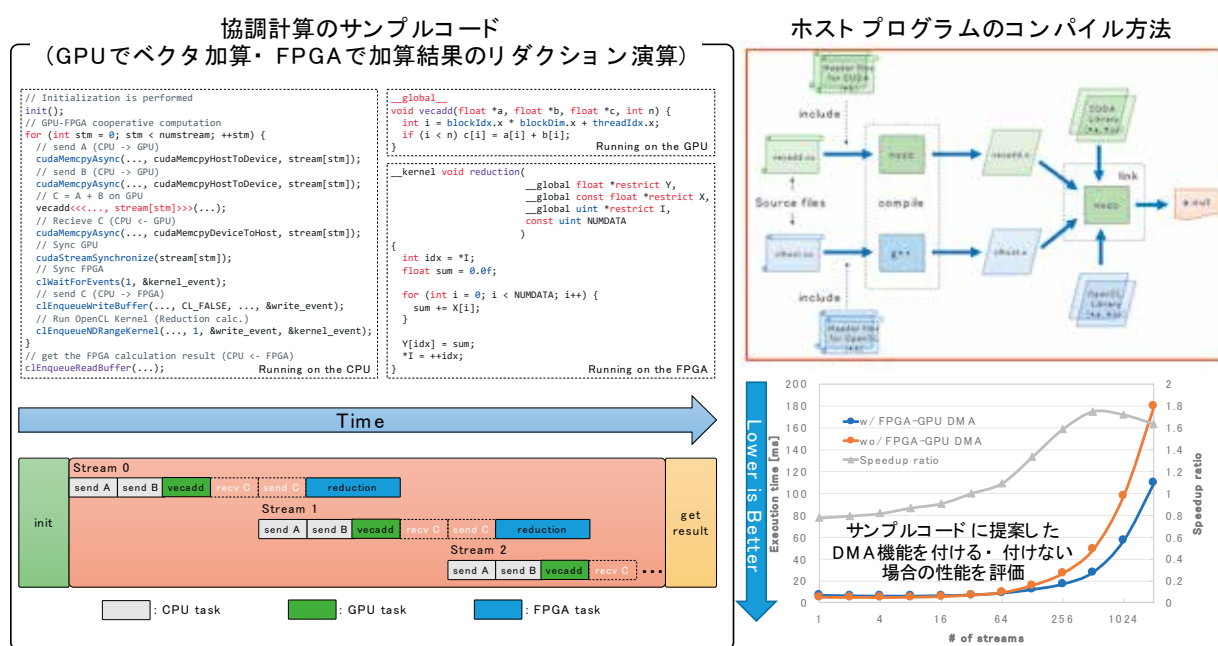


図 2 GPU-FPGA 協調計算するための基本モデルの提案

GPU プログラムは CUDA、FPGA プログラムは OpenCL で記述される。図に示すように、CUDA コードと OpenCL ホストコードは、nvcc と g++ を用いて分割コンパイルされ、生成されたオブジェクトファイルは、nvcc でリンクされることによって、実行ファイル (図の a.out) が生成される。協調計算するための例として、GPU でベクタ加算、FPGA で加算結果のリダクション演算を同時かつ非同期的に実行するサンプルコードを実装し、これを上記のコンパイル方法でコンパイルして実行させたところ、意図した通りの結果を示すことが確認さ

れた。また、このサンプルに前項目で述べた DMA 転送技術を付加した場合と付加しない場合の実行時間を比較し、通信が支配的な状況下では DMA 転送技術を付加した場合の方が優れていることも確認出来た。ただし、このような複数のプログラミング言語を用いたマルチリンガルプログラミングは、ユーザーに多大な負担を強いるので、今後の研究では GPU と FPGA が搭載された計算機システム上にて、両アクセラレータの統合的な制御を可能にするプログラミング環境について検討する。

現在、この手法の一つとして、米国 Oak Ridge National Laboratory の Jeff Vetter 博士の研究グループとの共同研究を進め、同グループが開発中の FPGA をターゲットとした OpenACC コンパイラである OpenARC を用い、演算加速コードの評価及び我々の環境への実装を行なっている。ここでは、OpenACC を FPGA 及び GPU の共通プログラミング言語として位置付け、それぞれのデバイス用に書かれた OpenACC 化されたコード（カーネルコードに相当）を、GPU 用部分と FPGA 用部分に分割、前者を従来の PGI 製 OpenACC コンパイラで、後者を OpenARC でそれぞれ部分コンパイルし、生成されたオブジェクトを PGI コンパイラのホストコードと連結することで、OpenACC のみで両デバイスの演算加速プログラムを完結するプログラミング環境の研究を進めている。

現時点では両デバイス向けに OpenACC 化された部分を分離するメタコンパイラが開発中であるため、システムとして完成していない。メタコンパイラ部分は理化学研究所 R-CCS の並列プログラミング言語開発部門との共同研究で開発している Omni Compiler の派生である XscalableACC Compiler を流用して実装する予定である。このメタコンパイラが生成するコードを想定し、これを本項で述べた GPU と FPGA を両立させる実行環境に適用したところ、OpenACC のみのコードを正しく両デバイスで分担実行することが可能であることが実証された。次年度の研究では、OpenACC メタコンパイラを実装し、OpenACC による GPU+FPGA プログラミング環境の実現を目指す。

【3】 OpenCL による FPGA 上の演算と通信を融合した並列処理システムの開発（朴、小林）

最新の FPGA は最大で 100Gbps×4 の通信性能を有し、またそれらの通信機構は直接 FPGA に接続されているため、オーバーヘッドの少ない FPGA 間通信を可能とすることがわかっている。FPGA を単体のアクセラレータとして見ると、他のアクセラレータに絶対的な浮動小数点性能で優ることは難しい。しかしながら、FPGA が持つ演算能力と前述した強力な通信能力を組み合わせることで、より広いアプリケーション及び並列実行環境に FPGA を適用できると考えられる。本研究の目的は、高位合成で記述された FPGA アプリケーションから通信機構を操作し並列処理システムを実現することである。本研究では高位合成の開発環境として Intel FPGA SDK for OpenCL を用いる。本 SDK は OpenCL 言語に対していくつかの FPGA

に特化した拡張を加えており、その拡張の 1 つに「Channel」機構がある。Channel は OpenCL カーネル間でデータを直接交換するパイプを構築できる機能である。また、Channel の一つとして「I/O Channel」があり、これを用いることで OpenCL カーネルと外部ペリフェラルのデータ交換が可能となる。本研究では、OpenCL 開発環境に通信機構を操作するためのコントローラ (本研究では 40Gbit Ethernet) を追加し、I/O Channel を通じて OpenCL コードから通信を行える Channel over Ethernet (CoE) システムの開発を行った。

図 3 に Intel Arria10 FPGA を用いて行った CoE システムの結果を示す。この性能測定は、2 つの異なるノードにある FPGA を Ethernet スイッチ経由で接続して測定したものであり、スループットは 29.77Gbps (理論値のおよそ 75%)、最小レイテンシは 950ns という結果が得られた。

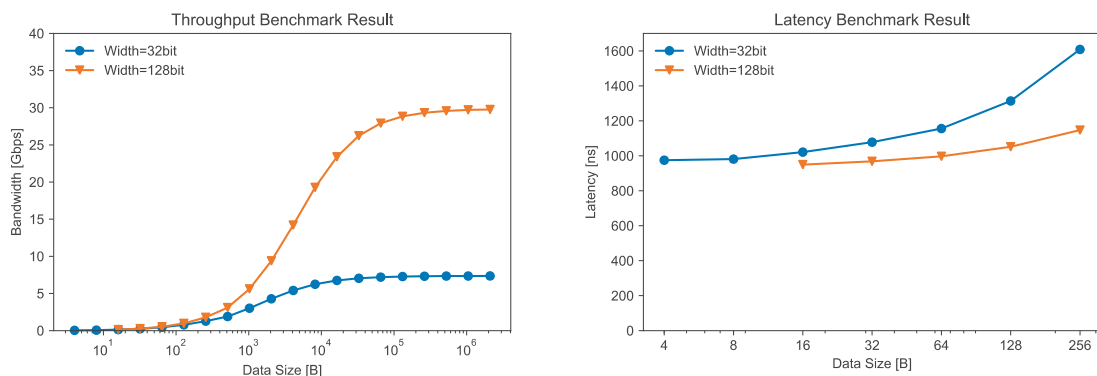


図 3 スループット (左) およびレイテンシ (右) の測定結果

図 4 に従来手法である InfinBand (IB) 経由の通信と CoE による調節通信の性能比較の結果と、CoE を袖領域交換および収束判定の Allreduce に適用した姫野ベンチマークの測定結果を示す。IB 環境には Mellanox ConnectX-4 EDR Host Channel Adapter (HCA) を使い、IB 通信ライブラリとして OpenMPI 3.0.1 を用いた。IB HCA は FPGA のメモリに PCIe バス経由で直接アクセスすることができないため、OpenCL API による CPU-FPGA 間転送と、MPI による CPU-CPU 間転送を store-and-forward で組み合わせて測定を行った。IB EDR の帯域は 100Gbps であり、40Gbps である CoE よりも高速であるにもかかわらず、CoE による通信は IB を用いた通信よりも高速であり、特に短・中サイズのメッセージで性能改善が大きい結果が得られた。CPU-FPGA 間の通信が並列計算時のボトルネックであり、それを FPGA 間の直接通信を用いることで解消できることがわかる。また、姫野ベンチマークの性能評価では、問題サイズ = M, 4FPGA 実行時に 23.7GFLOPS の性能が得られた。また、1 ノード実行時の性能と比べると 3.93 倍となっており、CoE の低遅延な通信によって高い並列化効率が得られていることがわかる。姫野ベンチマークで用いられているステンシル計算は、HPC アプリケーションで広

く用いられている計算手法であり、ステンシル計算に CoE を適用可能であることを示したことは、CoE が多くのアプリケーションに適用可能であることを示している。

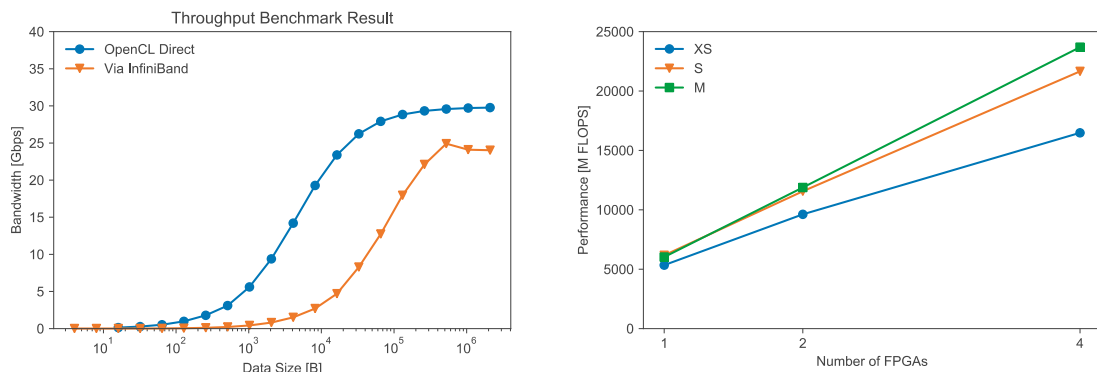


図 4 InfiniBand との性能比較 (左) および姫野ベンチマークの測定結果 (右)

今後は計算科学研究センターに本年度導入されたスーパーコンピュータ Cygnus への対応を進める予定である。Cygnus の各ノードは Intel Stratix 10 FPGA を 2 枚搭載し、システム全体で 64 枚の FPGA を有しており、それらの FPGA 間には 100Gbps の高速リンクによる 2D トーラスネットワークで結合されている。CoE の通信速度を 40Gbps から 100Gbps に向上させた 2D トーラスネットワークで、必要なパケットルーティング機構を組み込む予定である。この部分の実装には理化学研究所 R-CCS で開発中の FPGA 間通信ルータを共同研究に基づき導入する予定である。

【4】 疑似 MPI トレースファイルを用いた性能予測手法の研究 (朴)

本研究では、理化学研究所 R-CCS との共同研究の下、多様な将来システムにおけるさまざまなアプリケーションの通信性能を平易に予測するために、実トレースを用いるネットワークシミュレータを拡張し、将来システムのサイズに合わせた疑似 MPI トレースファイルを生成して通信性能予測を行う手法である SCAMP を提案している。

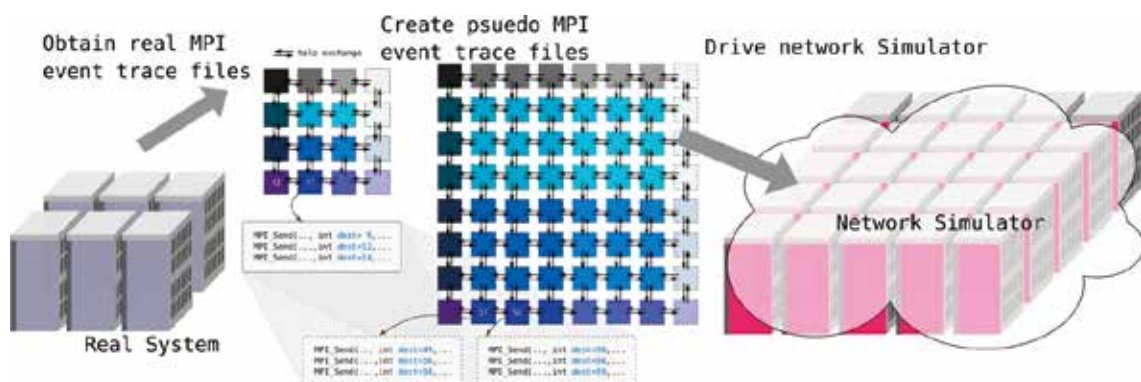


図 5 SCAMP 法の概要

大規模化し複雑化する HPC システムにおいて、システム導入当初からアプリケーションによる成果を早期創出するためには、システム設計段階からのアプリケーションとシステムのコードデザインが重要である。アプリケーションとシステムのコードデザインにおいては、アプリケーションの性能が発揮されるようシステムがデザインされる一方、アプリケーションもシステムに併せて最適化される、双方向的なアプローチがとられる。この過程では、複数のまだ存在しない将来システム候補のパラメータに対して、さまざまなアプリケーションの性能を推定する必要があるため、平易に利用できる性能予測ツールが必要とされる。

本研究では通信性能推定を対象として、特に実システム上での実行から得られる MPI トレースを用いる性能予測手法に焦点を当てる。トレースを入力として通信シミュレータを実行する手法は、(1) アプリケーションを実行し、各ランクの MPI トレースを集める、(2) 得られたトレースファイルを入力としてネットワークシミュレータを実行する、という機械的な作業で、幅広いアプリケーションに適用可能なため、広く用いられている。しかし、将来システムが現在のシステムよりも大規模な場合、それらに対応する MPI ランクのトレースファイルを得ることができず、通信性能の推定が行えないという問題があった。本研究では、実システムにおける実行で得られた少数の MPI トレースファイルを複製・編集して、将来システムの規模に合わせた数に水増し、大量の疑似 MPI トレースファイルを生成し、それをネットワークシミュレータの入力として用いる手法 SCAlable Mpi Profiler (SCAMP) 法を提案している。

図 5 に示すように、SCAMP 法では、

1. アプリケーションを実システムで実行し、実 MPI トレースファイルを得る。ファイルはランクごとに生成されるものとする
2. 実 MPI トレースファイルを複製し、将来システムの規模を考慮して MPI 関数の引数などの記録を編集し、疑似 MPI トレースファイルを生成する。1 つの実ファイルから 1 つ以上の疑似ファイルが生成される
3. 疑似 MPI トレースファイルと将来システムのノード数などのパラメータを入力として用いて、ネットワークシミュレータを実行することで、大規模システム上での通信性能推定を行う。

本年度においては、疑似 MPI トレースファイルの自動生成手法の実装および性能評価を行った。SCAMP においては、将来システムの規模を考慮して MPI 関数の引数などの記録を編集し、1 つの実トレースファイルから、複数の疑似 MPI トレースファイルを生成する。疑似トレースファイルの生成は、平易な DLS などで行うか、もしくは自動的になされるべきであり、本年度は比較的単純な MPI アプリケーションについて、疑似トレースファイルを自動的に生成する手法を検討した。

表 1 MPI-event logs (4 nodes) and Pseudo MPI-event logs (8 nodes)

	Original file	Psuedo file
entering wall time	3038480.192285198	3038480.192285198
sendcount	512	256
sendtype	MPI_DOUBLE	MPI_DOUBLE
recvcount	512	256
recvtype	MPI_DOUBLE	MPI_DOUBLE
comm	MPI_COMM_WORLD	MPI_COMM_WORLD
returning wall time	3038480.192420677	3038480.192420677

疑似トレースファイルの例として、表 1 に 2048 要素の double 型配列を 4 ノードに分配し、なんらかの計算の後に `MPI_Alltoall` を行った場合のトレースファイルと、これを 8 ノードに置き換えて生成した疑似トレースファイルを示す。この例では、ノード数が倍になっていることからノードごとの配列の要素数が半分になり、`MPI_Alltoall` のバッファのサイズも半分になっている。本研究では、ターゲットランクの疑似 MPI トレースファイルを自動生成するために、LLVM-IR と呼ばれる中間言語を解析し、MPI 関数の引数を将来システムのノード数とランク数を用いて再計算し、特定のランクの実 MPI トレースファイルを編集する手法を実装した。

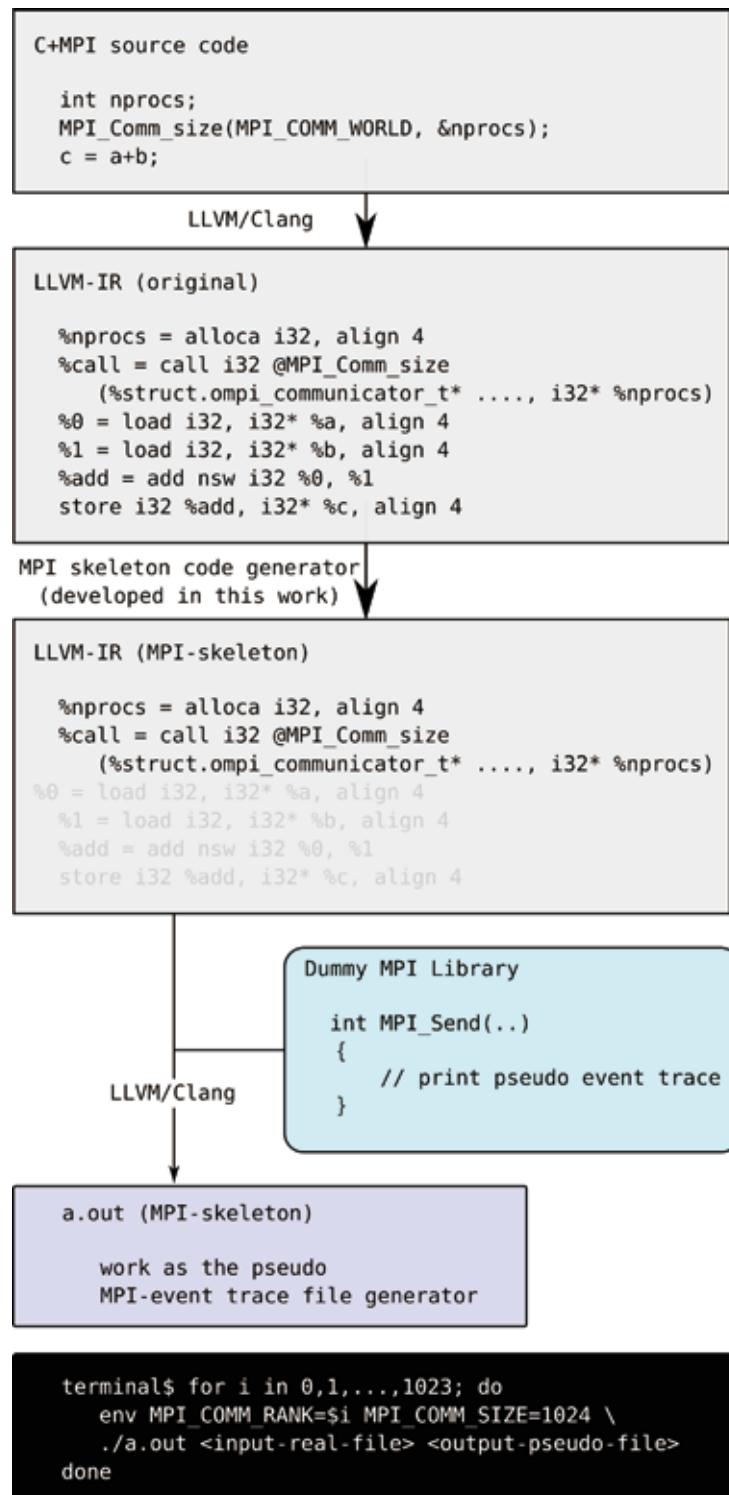


図 6 疑似 MPI トレースファイル生成の流れ

図 6 に疑似 MPI トレースファイル生成の流れを示す。まず、もとのアプリケーションソースコードを中間表現 LLVM-IR に変換する。変換された LLVM-IR コードを解析し、MPI 関数およびその引数の計算に必要な部分のみ抜粋し、MPI スケルトンコードを生成する。MPI ス

スケルトンコードを再度コンパイルし、ダミーMPI ライブラリとリンクして実行可能なバイナリファイルを作成する。このバイナリをターゲットシステムのサイズ、ランク、および実トレースファイルを入力として与えて実行すると、MPI スケルトンから呼び出されたダミーMPI ライブラリが、通信を行う代わりに、実トレースファイルの引数をターゲットサイズ、ランクを用いて MPI スケルトンコードにより再計算された引数と置き換え、疑似 MPI トレースファイルを作成する。

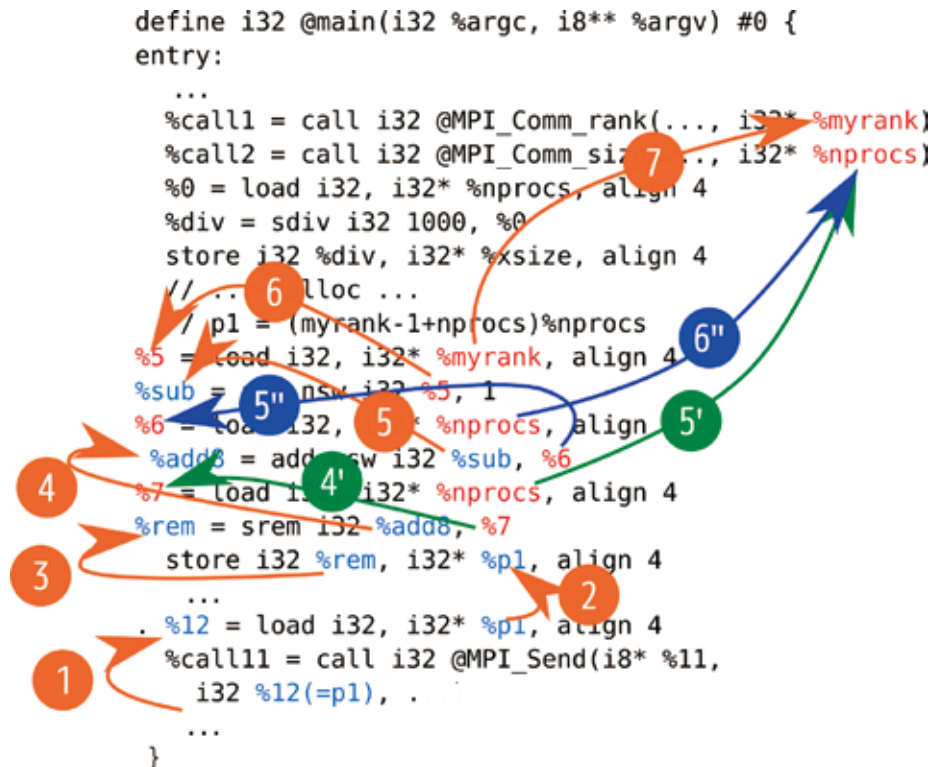


図 7 MPI スケルトンコードの生成の流れ

図 7 に、オリジナルの LLVM-IR を解析し、MPI スケルトンコードを生成する例を示す。この生成アルゴリズムは、MPI 関数を見つけた場合、通信性能に関係する引数 --- たとえばソースランクや、バッファの要素数 --- に必要な命令をターゲット変数の逆伝搬により抜き出す。

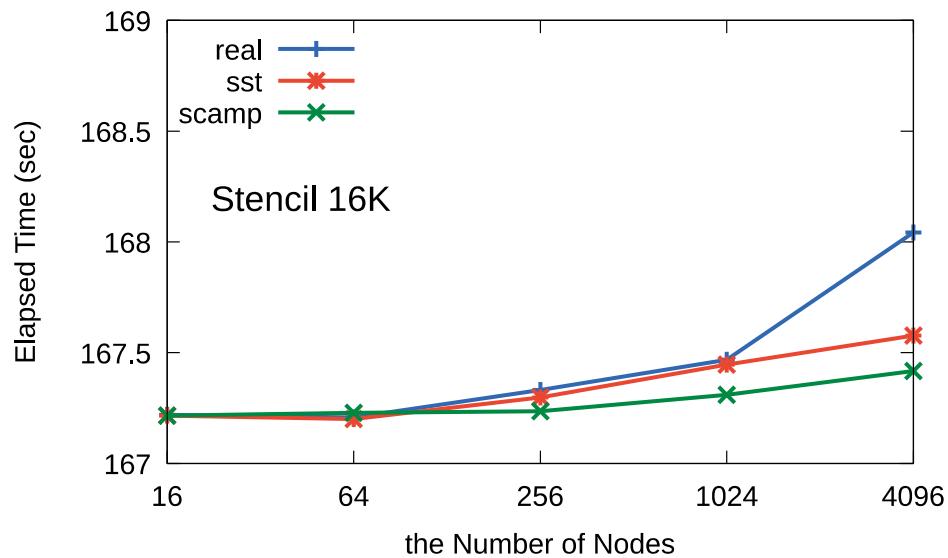


図 8 2次元ステンシル計算の性能推定結果。Real は実実行時間、SST は対応するサイズの実 MPI トレースファイルを用いた推定時間、SCAMP は 4×4 ノードの実ファイルから $8 \times 8 \sim 64 \times 64$ ノードの疑似ファイルを生成した場合の推定時間。

図 8 に、2次元ステンシル計算を用いた SCAMP 法の性能評価の結果を示す。ネットワークシミュレータとしては米サンディア国立研究所で開発されている SST/macro を用いた。16 ノードから 4096 ノードまでについて、京コンピュータ上での実実行時間、実 MPI トレースファイルを用いた推定時間、16 ノードから得られた疑似トレースファイルから 64 ノードから 4096 ノードまでの疑似トレースファイルを生成した推定時間について調査した。図から、SCAMP における推定結果は、ノード数の増加によるノード毎の計算時間のダイバーシティの増加を考慮していないため、実トレースを用いた推定よりはやや短い、対応する実トレースによる SST/macro の推定時間にほぼ一致している。一方、実実行時間と実および疑似トレースファイルを用いた性能推定には、やや乖離がみられるが、これはネットワークシミュレータに実装されている通信アルゴリズムと京コンピュータの通信アルゴリズムの違いによるものと考えられる。

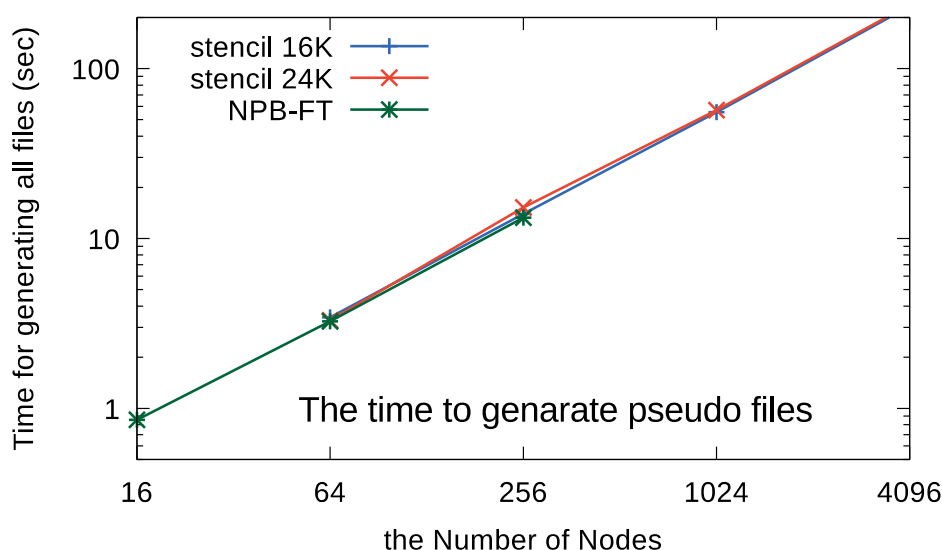


図 9 疑似トレースファイルの生成時間

次に、疑似トレースファイルの生成のコストを評価した。図 9 に、ステンシル、FFT について、16～4096 個の疑似トレースファイルを生成した場合にかかった時間を示す。図 8 と比較すると、1 つのトレースの生成にかかる時間は実際の実行時間よりもじゅうぶんに短く、LLVM-IR の解析によるスケルトンコード生成は、MPI 関数の引数に不要な部分を効率的に除去していると考えられる。また、各ランクに対する生成は独立に行えることから、必要な個数の疑似トレースファイルの生成時間はノード数に対して、線形に増加している。これらは、スクリプトなどで平易に並列化可能である。

【5】 OpenMP タスク並列実行における FPGA オフローディングの性能最適化（朴）

理化学研究所 R-CCS との共同研究において、OpenMP における並列処理における演算加速装置として、FPGA (Field Programmable Gate Array) を想定する場合の演算カーネル作成に関する最適化の研究を行なった。従来の典型的な高速化の手法は大きな計算部分を 1 つの FPGA カーネルとして FPGA 上の論理ゲートをできるだけ多く利用し、性能を上げるのが一般的であった。つまり、大粒度の演算加速処理を行っていた。これに対し、OpenMP 4.0 からはタスクレベルでの並列処理が可能となり、かつ近年の FPGA は複数のカーネルを独立に論理回路上に配置し、これらを非同期に実行することが可能となっていることに着目し、中規模カーネルを複数、非同期実行することで全体の性能を向上させる試みを行った。現在、OpenMP 内の処理を直接コンパイルできる FPGA 環境は存在しないため、本年度の研究ではタスク管理のみをホスト CPU 上の OpenMP で行い、FPGA にオフローディングするカーネルは OpenCL で記述するというアプローチを取った。

昨年度までの共同研究では OpenMP のタスク処理自体を全て CPU 上のコア（マルチコアまたはメニーコア）で非同期処理し、全体性能を向上させる研究を行ったが、今年度はこれをさらに発展させ、FPGA におけるオフローディングに適用した。対象とするベンチマークはブロック化したコレスキー分解アルゴリズムで、昨年度までの研究により、比較的小さなデータを対象にした DGEMM ルーチンを非同期に並列実行することでタスク並列処理による性能向上が見込まれることがわかっている。DGEMM 自体を FPGA にオフローディングすることは OpenCL で比較的容易に記述可能であるため、このブロック化したコレスキー分解アルゴリズムを適用することにした。ただし、現在の FPGA は単精度浮動小数点演算はハード IP で高速化できるが、倍精度浮動小数点演算はまだ論理合成によって生成しないといけなため性能が低い。そこで、今回の評価では単精度 GEMM を用いた。

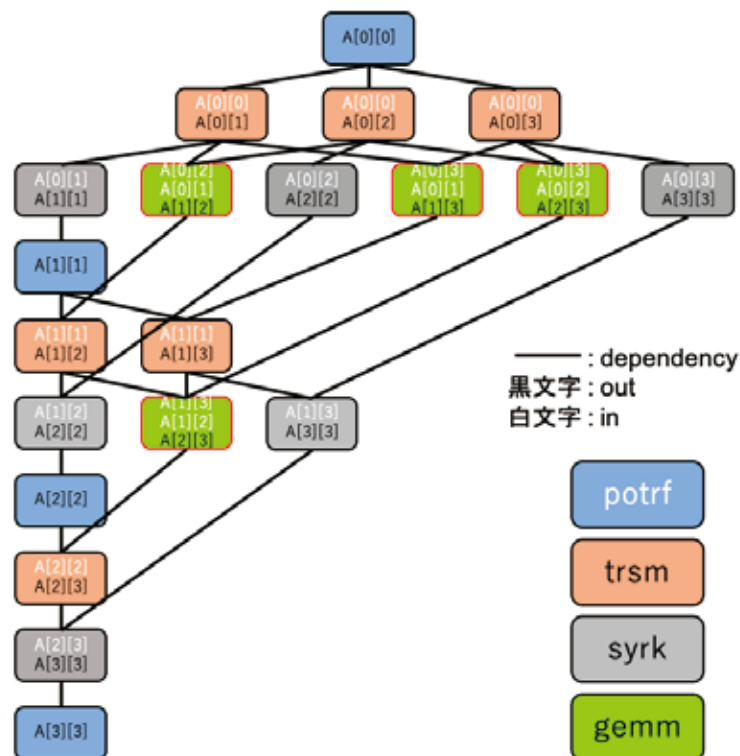


図 10 ブロック化されたコレスキー分解のタスクフローグラフ

図 10 にブロック化したコレスキー分解アルゴリズムのタスクフローを示す。ホスト CPU と FPGA は PCIe バスによって接続されており、いくつかの FPGA ドライブ関数を使ってデータの転送やカーネルの起動が可能である。write_data_to_fpga 関数はホストから FPGA へのデータ転送を行う関数、read_data_from_fpga 関数は FPGA からホストにデータ転送を行うプログラムである。また、enqueue_request_to_fpga 関数はホストから FPGA にオフロードの依頼を行う関数である。このプログラムでは、行列データが既に FPGA DDR メモリに転送され

ていることを想定している。図 10 に示されている通り、GEMM が必要とするデータは TRSM タスクによってのみ更新されることから、GEMM のオフロードを行う直前ではなく TRSM タスク終了時に FPGA へのデータ転送を行うことにより、FPGA ホスト間のデータ転送を削減できる。

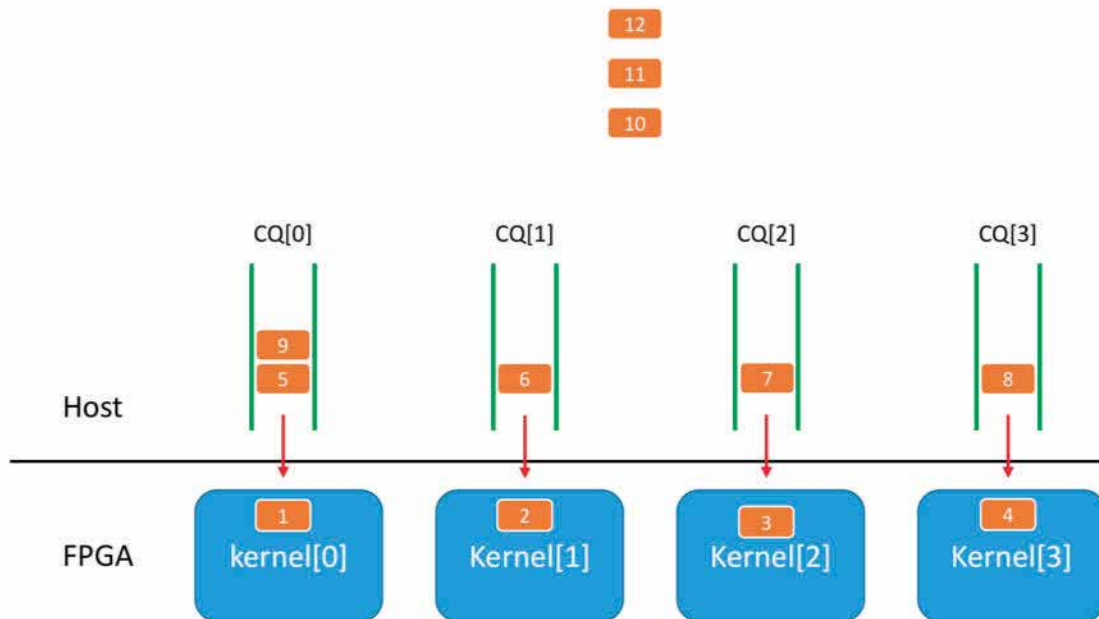


図 11 FPGA カーネルの非同期実行とホスト上のキューの様子

図 11 に、ホスト CPU から複数の FPGA カーネルを非同期に実行するためのコマンドキューの状況を示す。また、Listing 1 にこの処理を行うためのホスト上の OpenMP コードを示す。各カーネルへはタスクは 1 つずつしか投入実行できないが、各カーネル毎にキューを用意し、それらの切り替えをホスト上でプログラムすれば比較的均等にタスクを振り分けることが可能となる。この実装では FPGA カーネルはどれも同じ GEMM ルーチンを実行するので、タスクのキューへの振り分けは容易に決定できる。GEMM タスクについては、`enqueue_request_to_fpga` 関数や `read_data_from_fpga` 関数の実行後、`taskyield` でこれを適宜中断する。ホストでのタスクが中断されている間も、FPGA ではバックグラウンドでオフロードされた計算の実行やデータ転送が行われる。この手法により FPGA へのオフロード処理の非同期化および CPU/FPGA での計算のオーバーラップを実現する。中断されたタスクが再開された際、オフロードした計算が終了しているか、もしくはデータ転送が終了したか確認を行う。それらが終了していない場合、再度中断し他のタスクを実行する。

Listing 1 プログラムの概要

```

void cholesky(const int ts, const int nt, float* A[nt][nt])
{
#pragma omp parallel
#pragma omp single
    for (int k = 0; k < nt; k++) {
//create POTRF task
#pragma omp task depend(out:A[k][k])
    {
        omp_potrf(A[k][k], ts, ts);
    }

    for (int i = k + 1; i < nt; i++) {
//create TRSM task
#pragma omp task depend(in:A[k][k]) depend(out:A[k][i])
    {
        omp_trsm(A[k][k], A[k][i], ts, ts);
        write_data_to_fpga(A[k][k], event0);
        waitForFinish(event0);
    }
    }

    for (int i = k + 1; i < nt; i++) {
        for (int j = k + 1; j < i; j++) {
//create GEMM task
#pragma omp task depend(in:A[k][i], A[k][j]) depend(out:A[j][i])
    {
        enqueue_request_to_fpga(gemmKernel, . . . , event1);
        do {
#pragma omp taskyield
            checkStatus(event1, &ret);
        } while (ret != done);
        read_data_from_fpga(A[j][i], event2);
        do {
#pragma omp taskyield
            checkStatus(event2, &ret);

```

```

        } while (ret != done);
    }
}

//create SYRK task
#pragma omp task depend(in:A[k][i]) depend(out:A[i][i])
{
    omp_syrk(A[k][i], A[i][i], ts, ts);
}
}
}
#pragma omp taskwait
}

```

オフロードされる GEMM の計算を行うカーネルは、NDRange モデルを用いて実装した。その際、ブロッキングアルゴリズムを使用し、ブロック当たりの大きさを 64 x 64 とした。DDR メモリへのアクセスを削減するため、各ブロックを計算時に M20K Block RAM にロードし再利用した。また、"num_simd_work_items"属性をパラメータとし、カーネルインスタンスあたりのリソース使用量の調整を行った。また、カーネルインスタンスあたりのリソース使用量に応じて複製を行った。他の最適化として、ツールチェーンが提供する 1KB メモインターリブを使用せず、各データが確保されるメモリバンクの明示を行った。

以上のようなプログラミングを筑波大学計算科学研究センターの FPGA クラスタ実験システムである PPX (Pre-PACS-X)の 1 ノードに実装して性能評価を行った。表 2 に PPX システムの仕様を示す。

表 2 評価環境 PPX の仕様

CPU	Xeon E5-2660 v4 @2.00GHz x 2
Host DRAM	DDR4-2400 16GB x4
GPU	NVIDIA Tesla P100 PCIe x2
FPGA Board	BittWare A10PL4
FPGA	Intel Arria10 (10AX115N3F40E2SG)
FPGA DRAM	DDR4-2133 4GB x2
InfiniBand	Mellanox ConnectX-4 EDR
OS	CentOS 7.3 64bit

FPGA Compiler	Intel FPGA SDK for OpenCL 17.1.2
CPU Compiler	Intel C Compiler 18.0.1
CPU BLAS Library	Intel Math Kernel Library
Thread Library	Argobots 1.0b1

FPGA 上の GEMM カーネルの機能と回路規模を制御するパラメータとして、1 つのカーネル内の GEMM 処理を行う多重ループの最内側ループでの SIMD 並列性の制御を行った。SIMD の幅を 16、8、4 の 3 段階に分け、それぞれを Type1、Type2、Type3 と名付ける。SIMD 幅が広いカーネルは論理回路のゲート数を消費する。今回用いた Intel Arria10 FPGA では、約 70% の DSP リソースを用いるようにしたところ、Type1、Type2、Type3 のカーネルを実装できるインスタンス数は 1、2、4 個となった。例えば Type1 GEMM カーネルを 1 つ実行する場合と、Type3 GEMM カーネルを 4 つ同時に実行した場合では、基本的な理論ピーク性能は等しくなる。しかし、実際には論理合成の制約から各 Type のカーネル生成では動作周波数に差が見られた。これは実行性能を決める重要なファクタである。

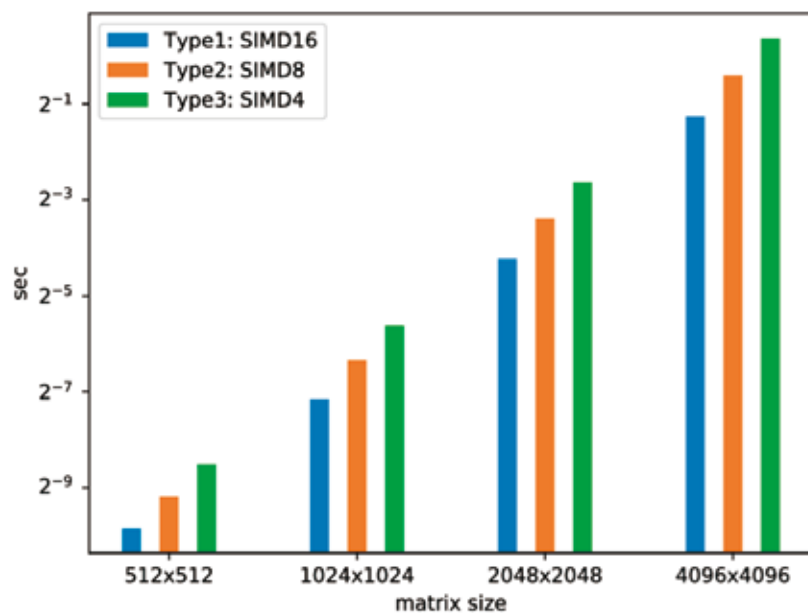


図 12 SIMD 幅を変えた 3 種類の DGEMM カーネルの実行時間比較

図 12 に 3 種類のカーネルの 1 つずつを実行した場合の実行時間を示す。問題サイズを 512x512 から 4096x4096 まで変えた結果、全ての場合で Type1 から Type3 まで概ね回路規模に比例した実行時間短縮が見られた。まず、最も小規模である Type3 カーネルでは演算性能は安定しており、問題サイズを $X \times X$ とした時、 X を 2 倍にすると演算時間はほぼ 8 倍になって

いるが、GEMM の演算量は X の 3 乗に比例するためこれはリーズナブルである。Type1 になると問題サイズが小さい場合はこの関係が崩れ、小さい問題では効率が悪くなっている。

次に、これらのカーネルを非同期並列実行可能としたプログラムで全体のスループットを評価した。Type1 カーネルは 1 つしかインスタンスがないため、全ての GEMM オフローディングは逐次的に FPGA に投げられるが、Type2 では 2 つのインスタンス、Type3 では 4 つのインスタンスが非同期並列実行可能である点が重要である。結果を図 13 に示す。

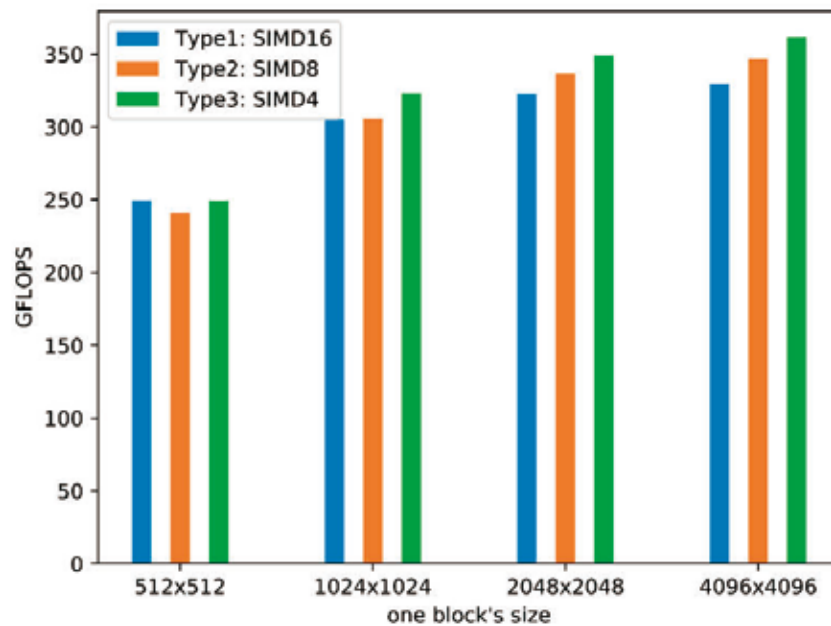


図 13 各 Type の DGEMM カーネルについて非同期同時実行を行わせた場合の性能

まず、どの Type のカーネルにおいても問題サイズが大きいほど性能が向上しており、これはカーネル起動のオーバーヘッド等が相対的に小さくなるためと思われる。次に、Type 別で見ると問題サイズが大きい場合、Type3 の総合性能（SIMD 幅の小さいカーネルを複数同時実行する）が Type1 を最大で約 10% 上回っている。これには小さいカーネルを生成することで動作周波数が若干高いカーネルを論理合成できる可能性があることと、粒度の小さいカーネルの非同期実行というストラテジが性能を向上させる可能性があることが示された。

最後に、ブロック化コレスキー問題を OpenMP タスクを使って非同期並列実行可能としたプログラムで全体の性能を評価した。結果を図 14 に示す。

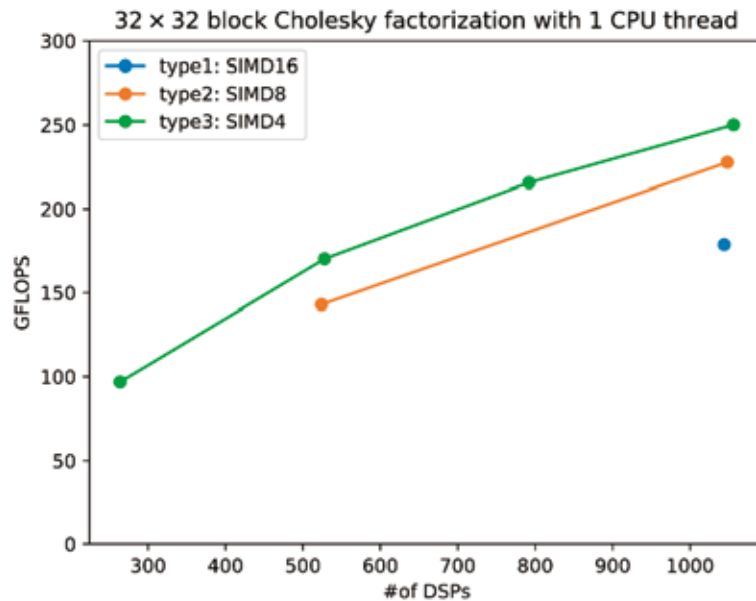


図 14 ブロック化コレスキー分解の非同期カーネル実装による性能評価

この結果から、このストラテジを実際の問題に適用した場合、同じ個数の DSP（この場合、1000 個程度）を消費した場合の性能は、Type1 が最も低く、Type3 が最も高いことがわかる。これらの結果より、同規模の比較的小さいカーネルを複数インスタンス生成でき、かつそれらを同時実行可能な場合、全体的な性能を向上させる可能性があることが示された。特筆すべきは、図 14 で示された以上の性能が、実際のコレスキー分解プログラムで示されたことである。さらなる詳細解析が必要であるが、我々のタスク並列 OpenMP プログラムに複数カーネルの非同期同時実行を組み合わせるアプローチが有効であることが示されたと言える。

【6】 地域気象乱流コード Large Eddy Simulation の並列 GPU 化（朴）

地球環境研究部門の日下博幸教授の研究グループと共同で、同グループによって開発された地域気象乱流コード Large Eddy Simulation (LES) の GPU 化を行なっている。本年度の研究では、CPU 版での実行で全実行時間の 70% 程度を占める主要関数群について、カーネル単位での CUDA 化を行なった。その上で、GPU へのカーネルオフローディングの際に毎回、必要なデータを GPU のグローバルメモリにコピーし、カーネル実行終了後に CPU のメインメモリに引き上げるという作業、すなわち CPU-GPU コピーと GPU-CPU コピーの時間がオーバーヘッドとなることから、(1) GPU カーネルから次の GPU カーネルに引き継がれるデータ、かつ CPU 側では必要としないデータについては GPU のグローバルメモリに残してデータコピー時間を節約する、(2) 大部分の処理を GPU カーネル化することで、データのメインは GPU のグローバルメモリ上に常駐させ、必要に応じて CPU に戻る際に CPU-GPU メモリコピーを行う、という 2 種類の最適化を行なった。

対象とする LES コードは MPI 化されており、さらに CPU のマルチコアを有効利用するように各 MPI プロセスは OpenMP によるスレッド並列化されている。つまり、OpenMP+MPI のハイブリッドコードとなっている。マルチスレッド化されたコードであることが GPU 実装の CUDA 化におけるヒントとなっている。MPI 並列については大きな変更を加えなくてすむように、1 つの MPI プロセスが 1 つの GPU を担当するように実装した。例えば、実験環境 PPX (Pre-PACS-X、表 3 参照) では 2 ソケットの CPU に 14 コアがそれぞれ実装されており、CPU 版の LES コードでは 1 ノード当たり 2 MPI プロセスを走らせ、各プロセスが 14 スレッドの OpenMP 実行を行う。PPX には 2 台の GPU (NVIDIA Tesla P100 x2 または同 V100 x2) が搭載されているので、CPU の 1 ソケット分の処理を GPU の 1 台に対応させ、1 つの MPI プロセスが 1 つの GPU を管理するように実装した。

本年度の研究では 70%コード実行部分の GPU カーネル化と MPI 化を組み合わせた実装までを行なった。主要データを GPU 側に置いて CPU-GPU 及び GPU-CPU データコピー時間を短縮するところまでは実装が完了せず、現状では全てのデータは CPU 側にあり、GPU カーネル実行のたびに GPU のグローバルメモリへのコピーとその CPU メモリへの引き上げが必要である。

以上のようにして PPX の 1 ノード、2 GPU での実行を行なった結果、演算結果が正しいことを確認した。そこで、1 ノードでの 2 MPI プロセス (2 GPU) による性能評価を行なった。結果を図 15 に示す。CPU のみ (14 スレッド x プロセス)、GPU と CPU (Tesla P100 x2 または Tesla V100 x2) の併用について合計 3 種類の実行時間を測定した。計算は 100 タイムステップの総実行時間で、MPI 通信を含む。ただし、現時点のコードでは MPI 通信時間は軽微である。図 15 のグラフは積み上げ棒グラフで、CPU での実行 (GPU 化されたコードでは CPU に残された処理)、GPU での実行、GPU から GPU へのデータコピー時間、CPU から GPU へのデータコピー時間、MPI 通信時間に分けて示している。実際には多数のカーネルや関数、さらに MPI 通信が実行されているが、各部分はそれぞれ対応する処理時間の総和となっている。

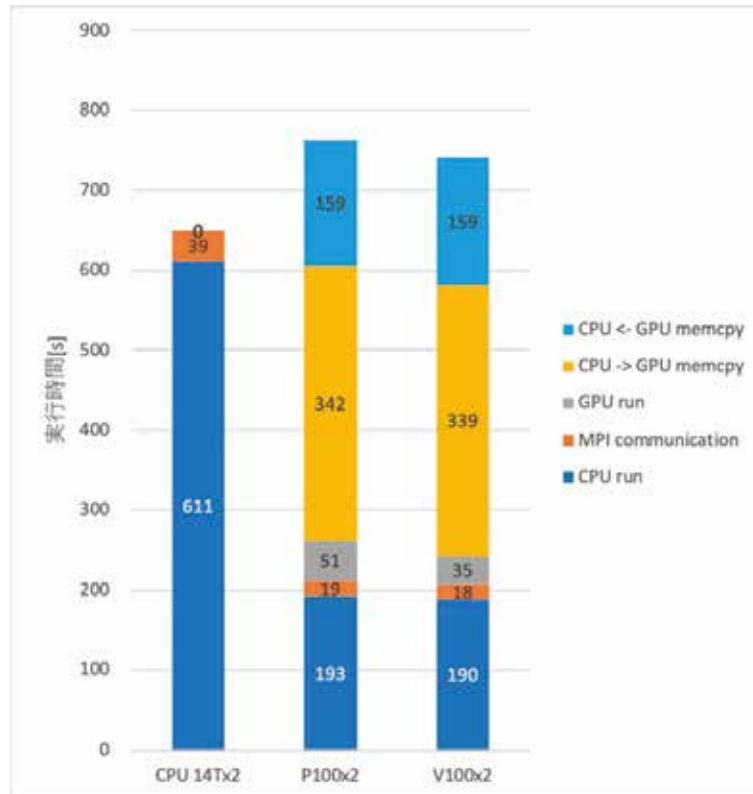


図 15 LES コードの CPU 及び GPU (Tesla P100 及び Tesla V100) での実行時間の比較

結果より、現時点では GPU 化されたコードの総実行時間は CPU のみの実行より 10%程度多くかかっていることがわかる。すなわち、GPU 化による計算時間は短縮されなかった。しかし、内訳を見ると CPU のみの総演算時間 611[sec]に対し、GPU 化ではこのうち 193[sec]または 190[sec]が残り、約 420[sec]の CPU 実行時間は 51[sec]または 35[sec]の GPU 実行までに短縮された。総演算時間で見れば CPU のみの 611[sec]が GPU 化により 244[sec] (P100) または 225[sec] (V100) まで短縮され、演算時間は 37~40%にまで短縮、演算性能としては 2.5~2.7 倍に加速されている。なお、GPU 化した場合の CPU 時間に若干の差があるのは P100 を実装したノードと V100 を実装したノードの CPU にバージョンの差があり、性能がわずかに違うためであるが、総実行時間に対し 3.7%程度の差であるのでここでは無視することとする。

よって、この GPU 性能の低さは棒グラフの上部 2 つのセクション、CPU->GPU データコピーと GPU->CPU データコピーによって引き起こされている。この部分の総時間は 498~501[sec]で極めて大きい。上述のように、データの大部分を GPU 側メモリに置くことで、この時間は大幅に短縮されることが見込まれる。仮にこの部分が 1/3 程度に短縮されれば、GPU 化で 2 倍以上の高速化が期待できる。次年度はこの方針で実装を改良し、さらに高速化を目指す方針である。

【7】 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、量子物性研究部門の矢花一浩教授の研究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 年度に本格稼働を開始した、JCAHPC における世界最大の Intel Xeon Phi (コード名 KNL: Knights Landing) 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 性能を達成している。

OFP 上の計算ノードに実装された Xeon Phi (KNL) は、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 16 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。最終的には、KNL が採用する 512bit SIMD 命令の intrinsic を用いてベクトル化を手動実装し、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 16 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 MCDRAM (16 GiB/node) と低バンド幅メモリである DDR4 (96 GiB/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 MCDRAM 上に確保することにより、ほとんど苦勞せず flat mode における MCDRAM 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 MCDRAM の容量に収まる場合と、これを超える場合について、演算時間はリニアであり FLOPS 値が落ちていない様子を図 17 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 18 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。この現象は、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その影響が如実に現れており、性能低下を引き起こしていることがわかった。図 19 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に性能が律速され、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。

以上の成果は、現在矢花グループが中心に開発を行っているアプリケーション SALMON (Scalable Ab initio Light-Matter simulator for Optics and Nanosciences) に取り込まれる。SALMON は ARTED の発展的アプリケーションで、本共同研究が実施した内容をほぼすべてを活用できることが期待される。なお、2018 年 10 月に本研究の中心の実施者である廣川祐太氏が学位取得後、量子物性研究部門の研究員に配属されたため、2018 年度後期の成果は量子物性研究部門にて別途報告するので参照されたい。

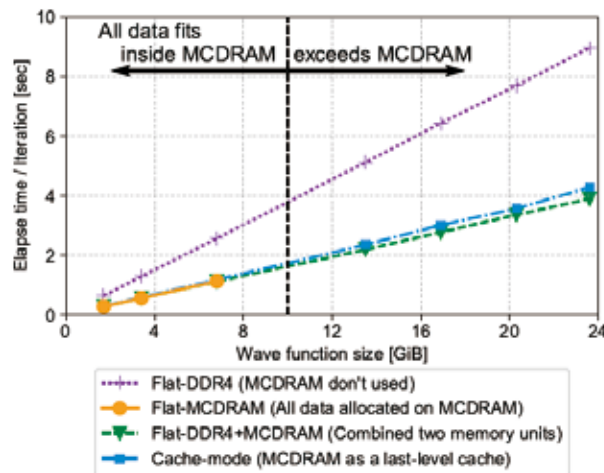


図 17 OFP の 1 ノード上で MCDRAM 容量を超えるデータを扱う場合の処理時間 (MCDRAM 容量内のデータ処理に比べ線形に増加するのみで FLOPS 値は低下していない)

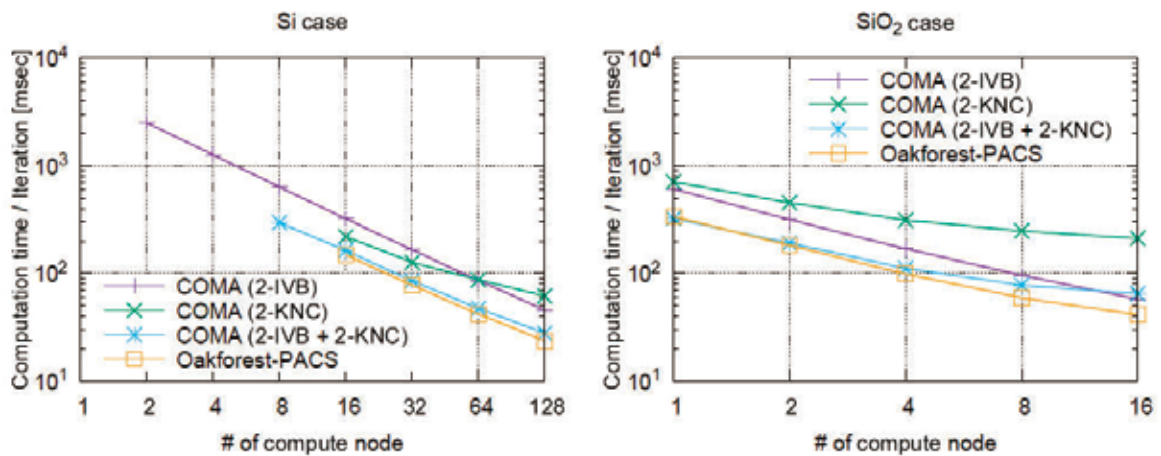


図 18 128 ノード及び 16 ノード (物質はそれぞれ Si 及び SiO_2) 使用時の COMA (KNC) と OFP (KNL) の strong scaling 性能

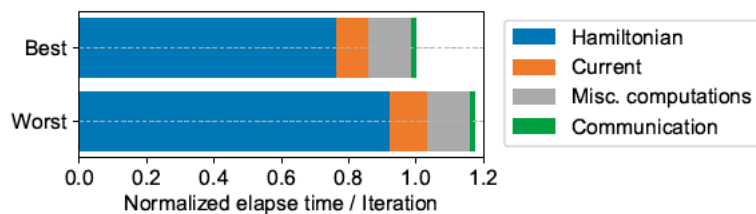


図 19 全系計算における turbo boost 状況に差により発生するノード間性能のバラつき

【8】 Intel Xeon Phi クラスタにおける 2 次元分割を用いた並列実数 3 次元 FFT の実現と評価 (高橋)

高速フーリエ変換 (fast Fourier transform、以下 FFT) は科学技術計算において今日広く用いられているアルゴリズムである。これまでに提案されてきた並列 3 次元 FFT における典型的なデータ分散方法としては、3 つの次元 (x、y および z 軸) のうち 1 つの次元 (例えば z 軸) のみが分割される。この場合、z 軸におけるデータ点数は MPI プロセス数以上となる必要がある。FFTW および Intel MKL (Math Kernel Library) は、この 1 次元分割を用いている。

最近のスーパーコンピュータでは、性能を向上させるためにコア数やプロセッサ数が増加する傾向にある。例えば、Sunway TaihuLight は 2018 年 11 月に TOP500 リストの 3 位にランクされ、そのコア数は 1000 万個を超えている。このようなシステムにおいては、MPI と OpenMP を用いたハイブリッド並列プログラミングにより MPI プロセス数を減らしたとしても、MPI プロセス数は最大で 1 万個以上になる。したがって、z 軸で 1 次元分割を行った場合、z 軸におけるデータ点数が 1 万点以上でなければならないことになり、3 次元 FFT の問題サイズに制約が生じることになる。この問題に対処する方法として、2 次元分割を用いた並列 3 次元 FFT が提案されている。しかし、Intel Xeon Phi クラスタにおける 2 次元分割を用いた並列 3 次元実数 FFT の実装はまだ報告されていない。そこで Intel Xeon Phi クラスタにおいて 2 次元分割を用いた並列 3 次元実数 FFT を実装して評価を行った。

FFT は離散フーリエ変換 (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。DFT は次式で定義される。

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

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

DFT の入力データ $x(j)$ が実数の場合、2 つの n 点実数 DFT は 1 つの n 点 DFT を使って効率的に計算することができる。複素数入力データの実数部と虚数部に 2 つの実数データを入れて、複素 DFT を実行する。

$$x(j) = x_1(j) + ix_2(j), \quad 0 \leq j \leq n-1 \quad (2)$$

ここで、 $x_1(j)$ および $x_2(j)$ は 2 つの n 点実数入力データである。

複素 DFT の出力データ $y(k)$ に関して、DFT の複素共役性から以下の式が成り立つ。

$$y(k) = y_1(k) + iy_2(k), \quad 0 \leq k \leq n-1 \quad (3)$$

$$\bar{y}(n-k) = y_1(k) - iy_2(k), \quad 0 \leq k \leq n-1 \quad (4)$$

ここで、 $y_1(k)$ および $y_2(k)$ はそれぞれ $x_1(j)$ および $x_2(j)$ の n 点実数 DFT である。

2 つの n 点実数 DFT の出力データ $y_1(k)$ および $y_2(k)$ は式(3)および(4)より、

$$y_1(k) = \frac{1}{2} \{y(k) + \bar{y}(n-k)\}, \quad 0 \leq k \leq n-1 \quad (5)$$

$$y_2(k) = -\frac{i}{2}\{y(k) - \bar{y}(n-k)\}, \quad 0 \leq k \leq n-1 \quad (6)$$

と計算することができる。

3 次元 DFT は以下の式で与えられる。

$$y(k_1, k_2, k_3) = \sum_{j_1=0}^{n_1-1} \sum_{j_2=0}^{n_2-1} \sum_{j_3=0}^{n_3-1} x(j_1, j_2, j_3) \omega_{n_1}^{j_1 k_1} \omega_{n_2}^{j_2 k_2} \omega_{n_3}^{j_3 k_3},$$

$$0 \leq k_1 \leq n_1 - 1, \quad 0 \leq k_2 \leq n_2 - 1, \quad 0 \leq k_3 \leq n_3 - 1$$

ここで、 $\omega_{n_r} = e^{-2\pi i/n_r}$ ($1 \leq r \leq 3$)、 $i = \sqrt{-1}$ である。

DFT の共役対称性と row-column アルゴリズムに基づく 3 次元実数 FFT アルゴリズムは以下のようになる。

Step 1: $n_2 n_3$ 組の n_1 点 multicolumn 実数 FFT

$$x_1(k_1, k_2, k_3) = \sum_{j_1=0}^{n_1-1} x(j_1, j_2, j_3) \omega_{n_1}^{j_1 k_1}$$

Step 2: 転置

$$x_2(j_2, j_3, k_1) = x_1(k_1, j_2, j_3)$$

Step 3: $n_3 \cdot (n_1/2 + 1)$ 組の n_2 点 multicolumn 複素 FFT

$$x_3(k_2, j_3, k_1) = \sum_{j_2=0}^{n_2-1} x_2(j_2, j_3, k_1) \omega_{n_2}^{j_2 k_2}$$

Step 4: 転置

$$x_4(j_3, k_1, k_2) = x_3(k_2, j_3, k_1)$$

Step 5: $(n_1/2 + 1) \cdot n_2$ 組の n_3 点 multicolumn 複素 FFT

$$x_5(k_3, k_1, k_2) = \sum_{j_3=0}^{n_3-1} x_4(j_3, k_1, k_2) \omega_{n_3}^{j_3 k_3}$$

Step 6: 転置

$$y(k_1, k_2, k_3) = x_5(k_3, k_1, k_2)$$

Step 1 では、 $n_2 n_3$ 組の n_1 点 multicolumn 複素 FFT および式(5)、(6)を用いて、 $n_2 n_3$ 組の n_1 点 multicolumn 実数 FFT を計算することができる。もし $n_2 n_3$ が 2 で割り切れない場合、残りの n_1 点実数 FFT は、入力データの虚数部が 0 である n_1 点複素 FFT を用いて計算する。Step 1 における n_1 点実数 FFT の出力データは conjugate-even 対称性に従うので、 $(n_1/2 + 1)$ 点の複素出力データのみを記憶すれば十分である。

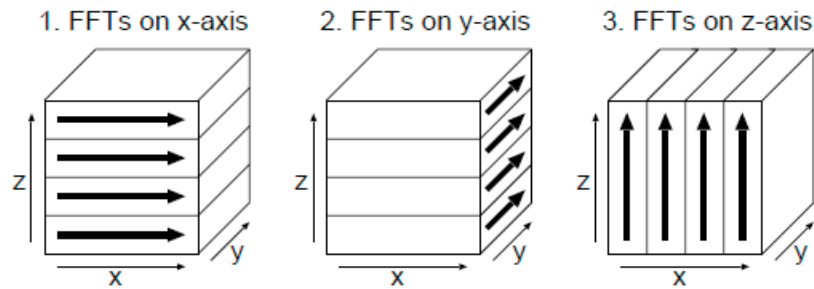


図 20 1次元分割を用いた場合の並列3次元実数FFT

図 20 は、 z 軸上で初期データを 1 次元分割した並列 3 次元実数 FFT を示している。これは、並列 3 次元実数 FFT における典型的なデータ分散方法である。2 次元分割を用いた並列 3 次元実数 FFT の提案する実装は、DFT の共役対称特性および 2 次元分割を用いた並列 3 次元複素 FFT に基づいている。

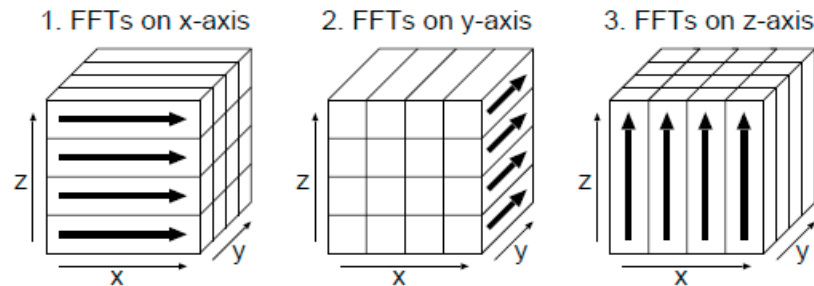


図 21 2次元分割を用いた場合の並列3次元実数FFT

図 21 は、 y 軸と z 軸の初期データを 2 次元分割した並列 3 次元実数 FFT を示している。Intel Advanced Vector Extensions 512 (Intel AVX-512) 命令を使用して FFT カーネルをベクトル化した。OpenMP を使用して multicolumn FFT を並列化すると、各 FFT ステップの最外側ループが複数のスレッドに分散される。この場合、最外側ループ長は Intel Xeon Phi プロセッサに対して十分な並列性がない可能性があるが、OpenMP の collapse 節を使用することによって、最外側ループの並列性を拡張することができる。

性能評価にあたっては、提案する並列 3 次元実数 FFT である FFTE (version 7.0、2 次元分割) の性能を FFTE (version 7.0、1 次元分割)、FFTW (version 3.3.8) および P3DFFT (version 2.7.7) と比較した。測定に際しては、weak scaling と strong scaling における実数 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い、三角関数のテーブルはあらかじめ作り置きとしている。入力と出力では同じデータ分散を使用した。FFTW では、"measure" planner を使用した。Xeon Phi クラスタとして、最先端共同 HPC 基盤施設 (JCAHPC) に設置されている Oakforest-PACS (8208 ノード) の 1~2048 ノードを用いた。FFTE および P3DFFT に対しては、コンパイラは Intel Fortran Compiler version 18.0.1.163

を用い、コンパイルオプションは”`mpiifort -O3 -xMIC-AVX512 -qopenmp`”を指定した。FFTW および P3DFFT に対しては、コンパイラは Intel C Compiler version 18.0.1.163 を用い、コンパイルオプションは”`mpiicc -O3 -xMIC-AVX512 -qopenmp`”を指定した。MPI ライブラリは Intel MPI 2018.1.163 を用いた。各ノードあたりの MPI プロセス数は 4、各 MPI プロセスあたりのスレッド数は 64 に設定し、環境変数 “`KMP AFFINITY=balanced`” を設定して flat/quadrant モードで MCDRAM のみを用いて実行した。 $N = 2^m$ 点実数 FFT の GFlops 値は $2.5N \log_2 N$ より算出している。

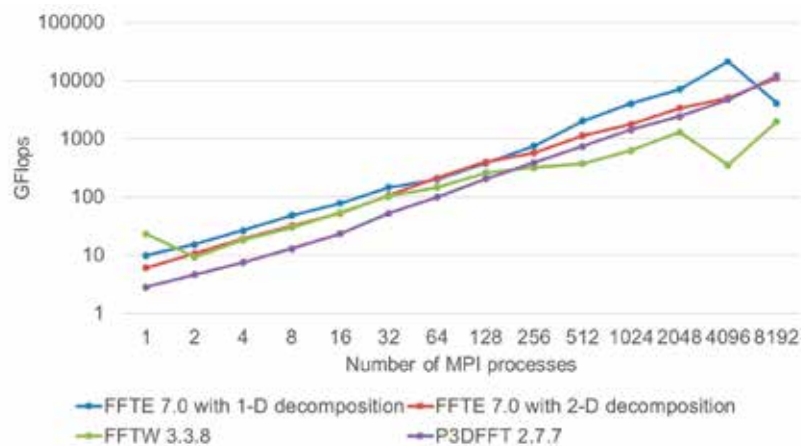


図 22 並列 3 次元実数 FFT の weak scaling 性能 ($N = 256 \times 512 \times 512 \times$ MPI プロセス数)

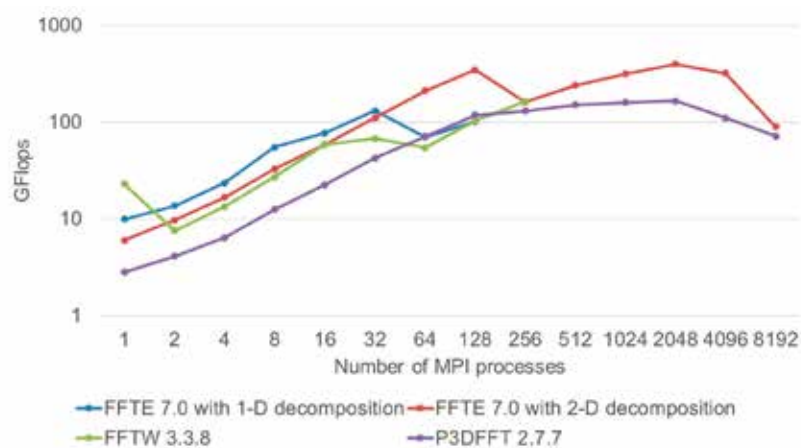


図 23 並列 3 次元実数 FFT の strong scaling 性能 ($N = 256 \times 512 \times 512$)

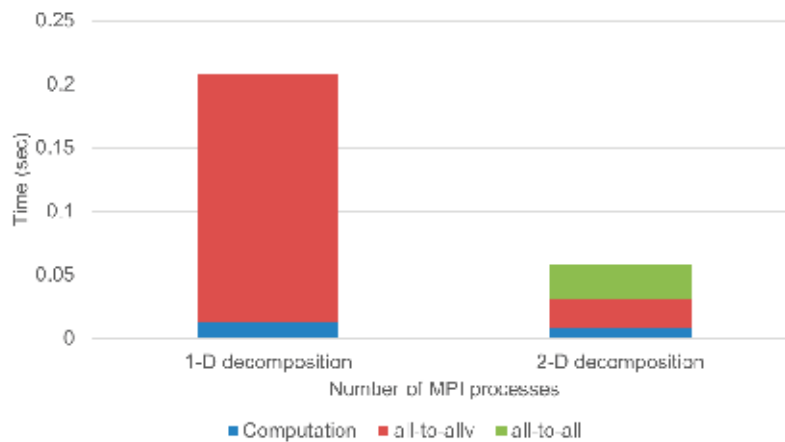


図 24 FFTE 7.0 の実行時間の内訳 ($N = 1024^3$ 、512 MPI プロセス)

並列 3 次元実数 FFT の weak scaling 性能 ($N = 256 \times 512 \times 512 \times \text{MPI プロセス数}$) を図 22 に示す。図から分かるように、64、128 および 8192 MPI プロセスにおいて FFTE (1 次元分割) は FFTE (2 次元分割) よりも高速であることが分かる。これは、1 次元分割における全体の通信量は 2 次元分割の約半分であるのが原因であると考えられる。また、FFTE (2 次元分割) は 1、16 MPI プロセスを除いて FFTW よりも高速であり、8192 MPI プロセスを除いて P3DFFT よりも高速である。

並列 3 次元実数 FFT の strong scaling 性能 ($N = 256 \times 512 \times 512$) を図 23 に示す。図から分かるように、FFTE (2 次元分割) は 64、256 MPI プロセスにおいて FFTE (1 次元分割) よりも高速である。これは 2 次元分割の方が 1 次元分割よりも通信レイテンシの影響が少ないことが原因であると考えられる。また、FFTE (2 次元分割) は 1、256 MPI プロセスにおいて FFTW よりも高速であり、P3DFFT よりも高速である。

FFTE 7.0 の実行時間の内訳 ($N = 1024^3$ 、512 MPI プロセス) を図 24 に示す。図から分かるように、2 次元分割の通信時間は 1 次元分割よりも短くなっている。これは 1 次元分割における all-to-allv 通信のメッセージサイズが 32KB であるのに対して、2 次元分割における all-to-all(v)通信のメッセージサイズが 16MB であるのが原因であると考えられる。

【9】 Intel AVX-512 命令を用いた複数の整数除算の高速化 (高橋)

整数除算は多くのアプリケーションで広く用いられている演算の一つである。一般的に除算は加減乗算に比べて遅いことが知られている。多くのプロセッサでは整数加減乗算の SIMD 命令がサポートされているが、整数除算の SIMD 命令をサポートしているプロセッサはほとんど存在しないのが現状である。

Intel 64 命令セットの div 命令は 128 ビットの被除数と 64 ビットの除数に対する符号なし整数除算を行う。Intel SVML (Short Vector Mathematical Library) にはベクトル化された整数

除算の組み込み関数が含まれているが、被除数および除数は 8 ビットから 64 ビットまでであり、128 ビットの被除数と 64 ビットの除数に対する符号なし整数除算には対応していない。また、逆数を用いて整数除算を求めるアルゴリズムが提案されているが、ベクトル化は考慮されていない。そこで、Intel AVX-512 命令を用いて複数の 128 ビットの被除数と 64 ビットの除数に対する符号なし整数除算を高速化し、性能評価を行った。

符号なし整数除算は被除数を A 、除数を B とすると、商 $Q = \lfloor A/B \rfloor$ および剰余 $R = A - BQ$ ($0 \leq R < B$) で定義される。提案手法は複数の 128 ビットの被除数と 64 ビットの除数に対する符号なし整数除算を再帰除算により行う。Algorithm 1 に再帰除算アルゴリズムを示す。被除数が 128 ビットで除数および商が 64 ビットの符号なし整数除算は、Algorithm 1 において $\beta = 2^{32}$ 、 $n = m = 2$ 、 $A < \beta^m B$ とすると、96 ビットの被除数と 64 ビットの除数に対する符号なし整数除算を 2 回行うことで計算することができる。

Algorithm 1 再帰除算アルゴリズム

Algorithm 1 RecursiveDivRem

Input: $A = \sum_{i=0}^{n+m-1} a_i \beta^i$, $B = \sum_{j=0}^{n-1} b_j \beta^j$,
 $\beta^n/2 \leq B < \beta^n$, $n \geq m$

Output: quotient Q and remainder R of A divided by B

- 1: if $m < 2$ then return $Q := A \text{ div } B$,
 $R := A \text{ mod } B$
- 2: $k \leftarrow \lfloor m/2 \rfloor$, $B_1 \leftarrow B \text{ div } \beta^k$, $B_0 \leftarrow B \text{ mod } \beta^k$
- 3: $(Q_1, R_1) \leftarrow \text{RecursiveDivRem}(A \text{ div } \beta^{2k}, B_1)$
- 4: $A' \leftarrow R_1 \beta^{2k} + (A \text{ mod } \beta^{2k}) - Q_1 B_0 \beta^k$
- 5: while $A' < 0$ do $Q_1 \leftarrow Q_1 - 1$, $A' \leftarrow A' + \beta^k B$
- 6: $(Q_0, R_0) \leftarrow \text{RecursiveDivRem}(A' \text{ div } \beta^k, B_1)$
- 7: $A'' \leftarrow R_0 \beta^k + (A' \text{ mod } \beta^k) - Q_0 B_0$
- 8: while $A'' < 0$ do $Q_0 \leftarrow Q_0 - 1$, $A'' \leftarrow A'' + B$
- 9: return $Q := Q_1 \beta^k + Q_0$, $R := A''$.

96 ビットの被除数と 64 ビットの除数に対する符号なし整数除算を行う際には、上位 64 ビットの被除数と上位 32 ビットの除数に対する符号なし整数除算で商を近似する。除数 B が $\beta^n/2 \leq B < \beta^n$ に正規化されている場合、正確な商を Q とすると商の近似値は Q 、 $Q + 1$ 、 $Q + 2$ のいずれかになる。したがって、剰余 $R = A - BQ$ が $0 \leq R < B$ の範囲に収まるように商の近似値を補正することにより正確な商が得られる。

性能評価にあたっては、複数の 128 ビットの被除数と 64 ビットの除数に対する符号なし整数除算の性能を、提案手法と Intel 64 命令セットの `div` 命令で比較した。除数は $1 \sim 2^{64} - 1$ の範囲の乱数とし、被除数は $0 \sim 2^{127} - 1$ の範囲の乱数で商が $2^{64} - 1$ 以下になるものとした。256 要素の符号なし整数除算を 100 万回実行し、その平均の経過時間から 1 秒あたりの符号なし整数除算回数 (Mops) を算出した。

表 3 Intel Xeon Phi 7250 における複数の 128 ビットの被除数と 64 ビットの除数に対する符号なし整数除算の性能

	性能 (Mops)
提案手法	32.763
div 命令	13.985

評価環境として、Intel Xeon Phi 7250 の 1 コア、1 スレッドを用いた。コンパイラは Intel C compiler 18.0.3.222 を使い、コンパイルオプションは”icc -O3 -xMIC-AVX512”を用いた。

Intel Xeon Phi 7250 における複数の 128 ビットの被除数と 64 ビットの除数に対する符号なし整数除算の性能を表 3 に示す。表から提案手法が div 命令よりも約 2.34 倍高速であることが分かる。

【10】 エクストリームビッグデータの基盤技術（建部）

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。

アプリケーショングループとのコデザインにより、オブジェクトストアに対するアクセスにおいても POSIX インターフェースが有用であることが分かった。そのため、POSIX インターフェースでのアクセスを実現するため、分散メタデータサーバ PPMDS の研究開発を進めた。PPMDS は分散キーバリューストアを用いた分散メタデータサーバである。POSIX で必要となる階層型の名前空間とその操作を実現するためには、複数キーの変更をアトミックに行う必要がある。PPMDS ではこの問題に対し、動的ソフトウェアトランザクショナルメモリをベースとしたトランザクショナルキーバリューペアを用いて、分散トランザクションを実現した。階層型のディレクトリ構造は、親ディレクトリ ID とエントリ名をキーとするキーバリューで管理する。キーバリューペアはハッシュにより分散される。ディレクトリリスティンクは、親ディレクトリ ID の前方一致検索で行う。ディレクトリの移動や削除などの操作は、複数のメタデータサーバに格納されるキーバリューペアを一貫して変更する必要があり、そのために分散トランザクションが必要となる。本設計に基づいた PPMDS を実装し、性能評価を行った。

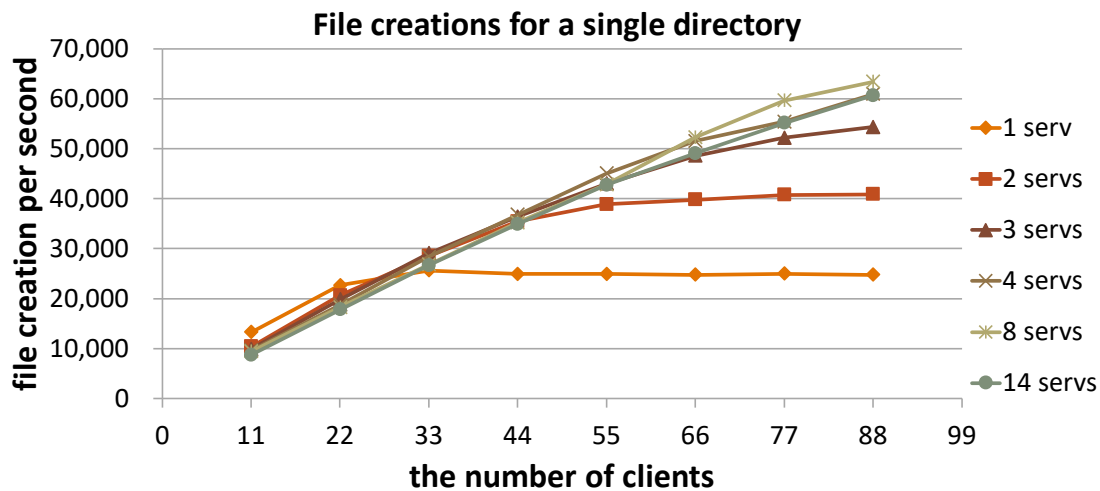


図 25 メタデータサーバのスケラビリティ

図 25 にクライアント数を増やした時のファイル作成性能を示す。ファイル作成性能は 1 秒間に作成したファイル数を示している。メタデータサーバ数を増やして性能を評価したところ、メタデータサーバ数を増やすと性能が向上し、スケラブルな性能を示した。本性能は、他の分散メタデータサーバの IndexFS に比べサーバあたりの性能が高い。本成果は The Fifth International Conference on Social Networks Analysis, Management and Security (SNAMS-2018) に併設したワークショップにおいて発表し、複数あるワークショップ全体におけるベストペーパーアワードを受賞した。

【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）

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 30 年度は、極端気象に関する知識を獲得するため、深層学習の効率化を図った。深層学習では、学習の効率をあげるため、複数の学習を同時に行うミニバッチ学習が行われる。しかしながら、このミニバッチのサイズによって GPU の利用効率が変わり、最適なミニバッチサイズを設定するのは試行錯誤が必要であった。そのため、この試行錯誤を自動化するための研究を行った。GPU の利用効率が向上する間はミニバッチサイズを増やしていくという単純な方法では、データサイズが大きくなりデータの入力がボトルネックとなるなど、GPU の計算以外のところがボトルネックとなるケースにおいて最適な値を推定することが困難であった。そのため、1 エポック当たりの平均計算時間が最小となるようにミニバッチサイズを増やしていく手法の提案を行った。本手法により、GPU の計算以外のところがボトルネックとなるケースにおいても十分なミニバッチサイズを推定することが可能となった。今後は、特に学習データが大きくなった場合の検討を進める。学習データが大き

くなると、学習データをいかに高速に入力するかが問題となる。これまでの研究では、メモリからの入力を高速化する研究はあるが、ストレージからの入力を高速化する研究は少ない。ストレージからの入力を高速化する研究をすすめていく。

【12】 ビッグデータサイエンスに関する研究（建部）

ビッグデータを用いたサイエンスの研究として、すばる望遠鏡の Hyper Prime-Cam (HSC) で撮影された天体データのパイプラインデータ処理の高速化を行った。HSC は 116 枚の CCD で構成され、それぞれの CCD は $4,272 \times 2,272$ ピクセルである。一晩で約 300GB のデータが生成される。パイプラインデータ処理はその天文データを天文学の研究で利用できるようにデータ処理を行うものである。超新星など時間的な変化の速い物体を検出するためには、高速にデータ解析を行う必要がある。

これまでのパイプラインデータ解析では、ファイルシステムとして GPFS が用いられ、並列処理フレームワークとして scatter-gather のみ利用可能な MPIpool が用いられていたが、計算ノード数を増やした場合、並列データ解析の性能が頭打ちになるという問題があった。この問題を解決するため、計算ノード数を増やしても性能が頭打ちにならない Gfarm ファイルシステムを用いた。またデータ解析のワークフローに対し、Pwrake を使い、タスク間の細粒度な依存性によってデータ解析を進めることにより、計算ノードの CPU コアの利用率の向上とタスクのオーバーラップを実現し、この問題の解決を図った。

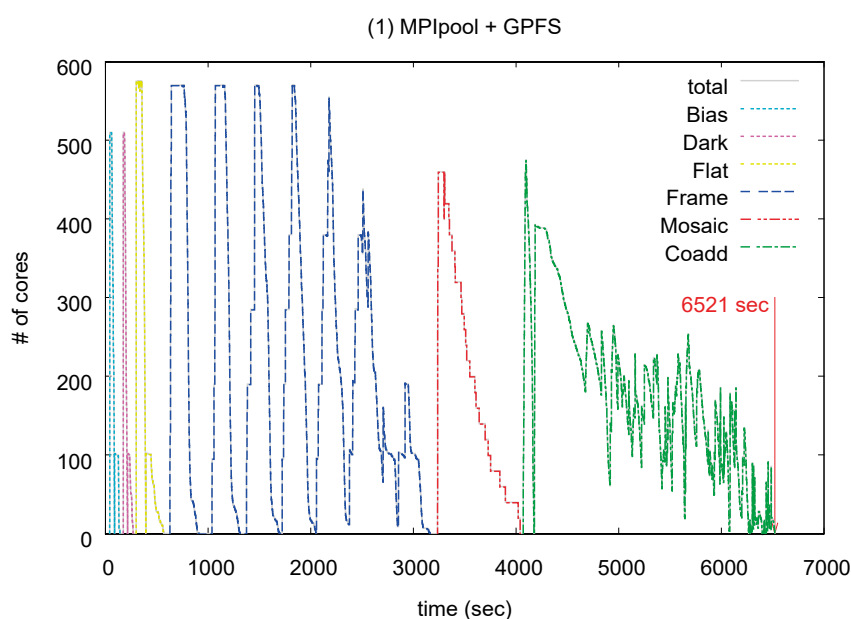


図 26 これまでの方法によるデータ解析の様相

図 26 に一晩の 1/4 のデータを用いたデータに対するこれまでの方法によるデータ解析の模様を示す。横軸は経過時間であり、縦軸は同時に利用している CPU コア数を示している。Frame 計算では、574 コアの全ての計算が終了するのを待っている時間が何度か生じている。また各データ解析のステップで終了を待っている。これらにより、コアの利用率が下がっている。

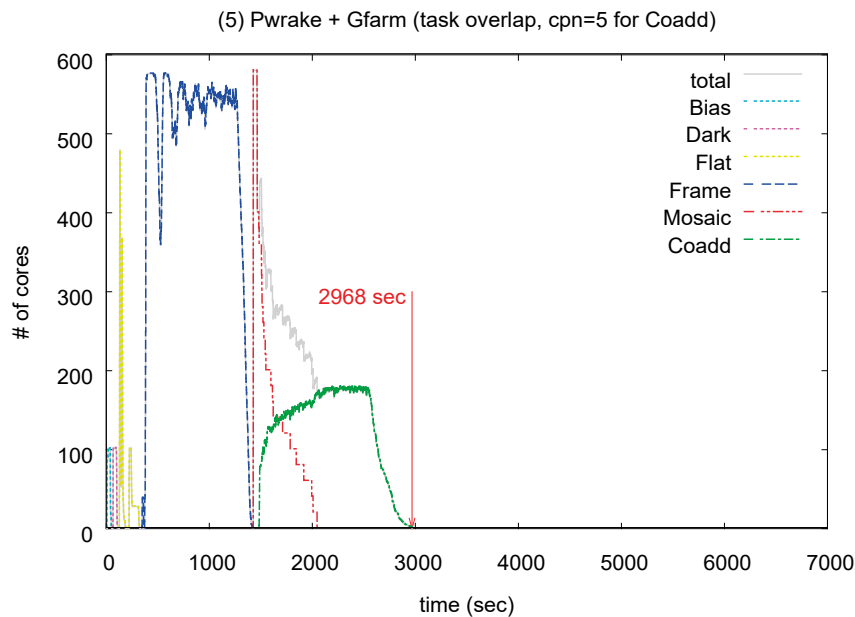


図 27 提案手法による実行の模様

図 27 に提案手法による実行の模様を示す。Frame 計算中の待ち時間がなくなり、またその他の計算がオーバーラップして実行されていることにより、大幅に計算時間の短縮が可能となっている。データ解析の時間については、2.2 倍の高速化を実現した。この成果は IEEE International Conference on Cluster Computing において発表した。

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

文部科学省が進める革新的ハイパフォーマンズコンピューティングインフラ（HPCI）の HPCI 共用ストレージ、素粒子物理学データ共有システム JLDG のシステムソフトウェアとしても利用される Gfarm ファイルシステムの研究開発を行った。

本年度は、ファイル複製が正しく存在することをパトロールする時間の効率化、ファイルシステムノードを一時的に読込しかできないようにできるよう改善を行った。

Gfarm ファイルシステムには、ファイル複製の格納場所とその複製数を指定する機能がある。HPCI 共用ストレージでは、その機能を利用して東拠点に複製を 2、西拠点に複製を 2 配

置し、東拠点あるいは西拠点だけの片拠点しか利用できない場合も HPCI 共用ストレージの運用を可能としている。しかしながら、このような設定をしている時、とくにファイル数が多くなった時に、ファイル複製が正しく存在することをパトロールする時間が長くなってしまいう問題があった。本パトロールでは、全ファイルについて、指定されたファイルシステムグループに指定された数の複製が配置されているかをチェックしている。この集合操作に対し、ビット演算を用いることにより処理速度の効率化を図った。これにより、これまで約 1 億ファイルのパトロールに対し、3 時間ほどかかっていたものが 5 分ほどで終了するようになった。

ファイルシステムノードの保守や障害発生時など、特定のファイルシステムノードを読込のみしかできないようにしたいという要求がある。これまでも、特定のファイルシステムノードに対し読込しかできなくする設定はあったが、全てのファイル複製が読込しかできないファイルシステムノードに格納されている時に、そのファイルの更新ができない問題があった。また、読込しかできなくしていても、ファイル削除はできてしまうため、厳密にストレージに変更を加えないという状態ではなかった。これらの問題を解決するため、全てのファイル複製が読込しかできないファイルシステムノードに格納されている場合は、そのファイルを変更するときに、更新可能なファイルシステムノードに動的にファイル複製を作成する機能の開発を行った。また、読込しかできない状態のストレージに変更を加えないようにするため、ファイル削除の遅延を行うようにした。これにより、読込のみ可能としたときもユーザが通常通りのアクセスが可能となり、また読込のみ可能としたストレージに変更を加えなくなり、状態の保全が可能となった。

これらの成果は平成 31 年 3 月 22 日にリリースした Gfarm バージョン 2.7.13 に含まれている。

【14】 ブロッククリロフ部分空間反復法の近似解精度向上に関する研究（多田野）

n 次行列 A と L 本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式

$$AX = B \quad (1)$$

は、素粒子物理学分野や固有値計算の内部問題などにおいて現れ、同方程式の求解時間、近似解精度はアプリケーションの性能に大きな影響を及ぼす。同方程式の数値解法の 1 つであるブロッククリロフ部分空間反復法は、計算時間、反復回数の観点において、ベクトルが 1 本用の数値解法であるクリロフ部分空間反復法よりも優れた性能を示すことがある。しかしながら近似解精度については、計算過程で生じる誤差の影響で精度劣化が生じることがある。我々はこれまでの研究において、高精度近似解の生成が可能なブロッククリロフ部分空間反復法として、Block BiCGGR 法を開発した。Block BiCGGR 法では Block BiCGSTAB 法で発生

する近似解精度劣化を回避できるが、右辺ベクトル数が多い場合は、収束性に難があることが明らかになった。

そこで平成 30 年度は、Block BiCGSTAB 法の収束性を維持しつつ、高精度近似解を生成できる手法の開発を行った。Block BiCGSTAB 法において、連立一次方程式(1)の第 $k+1$ 番目の近似解 X_{k+1} と対応する残差 $R_{k+1} = B - AX_{k+1}$ の漸化式は、 $n \times L$ 補助行列 P_k, T_k を用いて以下のように表される。

$$X_{k+1} = X_k + P_k \alpha_k + \zeta_k T_k, \quad (2)$$

$$R_{k+1} = R_k - (AP_k) \alpha_k - \zeta_k (AT_k). \quad (3)$$

式 (2), (3) 中に現れる α_k は L 次行列、 ζ_k はスカラーパラメータである。式 (3) の計算では、まず行列 AP_k, AT_k を行列 A に関する行列積で計算し、その後 α_k と ζ_k を乗じることで R_{k+1} が計算される。行列 AP_k と α_k の積の計算で生じる誤差が、近似解の精度劣化に大きな影響を及ぼす。近似解と残差の漸化式更新量の間には、 $-A$ 倍の関係があるが、この関係が崩れてしまうことが原因である。そこで漸化式の再構築を行い誤差が発生しやすい計算を避けることで、近似解と残差の漸化式更新量の間の関係を極力保持することを考える。

本研究では、漸化式の複数回分の更新量をグループ化する。この手法は group-wise 更新手法と呼ばれる。近似解 X_{k+1} の漸化式 (2) の s 反復分の更新量をグループ化し、以下のように変形する。但し、反復番号 k を $k = ms + j$ と表す。ここで、 $m \equiv [k/s], 0 \leq j \leq s-1$ である。

$$X_{ms+j+1} = X_0 + \sum_{l=0}^{m-1} U_s^{(l,s)} + U_{j+1}^{(m,s)} = X_{ms} + U_{j+1}^{(m,s)}.$$

ここで、行列 $U_q^{(l,s)}$ は以下で定義される。

$$U_q^{(l,s)} \equiv \sum_{i=0}^{q-1} (P_{ls+i} \alpha_{ls+i} + \zeta_{ls+i} T_{ls+i}).$$

近似解 X_{ms+j+1} に対する残差 R_{ms+j+1} は、以下の漸化式で計算する。

$$R_{ms+j+1} = R_{ms} - AU_{j+1}^{(m,s)}.$$

この方法では、漸化式の複数回分の更新量に対してまとめて係数行列 A を乗じているため、近似解と残差の漸化式更新量の関係を保つことができると期待される。Block BiCGSTAB 法に対して、漸化式の group-wise 更新手法を組み込んだ手法を Block GWBiCGSTAB 法と名付けた。ブロッククリロフ部分空間反復法は、一般的に右辺ベクトル数が多いと数値的不安定性の影響で、残差の収束性が悪化する。反復毎に残差を構成するベクトルの正規直交化を行うことで、この数値的不安定性が緩和されることが知られている。本研究では、Block GWBiCGSTAB 法に残差の正規直交化を組み込んだ Block GWBiCGSTABrQ 法も併せて構築した。

数値実験において、Block GWBiCGSTABrQ 法、Block BiCGSTABrQ 法、Block BiCGGRrQ 法の 3 解法について、真の相対残差、反復回数、右辺ベクトル 1 本あたりの求解時間の観点で比較を行う。真の相対残差は $\|B - AX_k\|_F / \|B\|_F$ で定義され、近似解精度の指標となる値である。この値が十分に小さければ、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 n 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 κ は 0.1359 とした。右辺項 B は $B = [e_1, e_2, \dots, e_L]$ とした。但し、 e_j ($j = 1, 2, \dots, L$) は n 次元基本ベクトルである。実験環境は、CPU : Intel Xeon E5-2620v3 2.4GHz (6 cores) \times 2、メモリ : 64GiB DDR4 2133MHz、コンパイラ : Intel Fortran ver. 19.0.0、コンパイルオプション : -qopenmp -axCore-AVX2 であり、OpenMP を用いて 12 スレッド並列で計算した。

図 27~29 に、Block GWBiCGSTABrQ 法のパラメータ s を変化させたときの真の相対残差、反復回数、右辺ベクトル 1 本あたりの計算時間の変化をそれぞれ示す。右辺ベクトル数 L は 1, 4 とした。図 27(a)より、 $L = 1$ の場合は Block BiCGGRrQ 法、Block BiCGSTABrQ 法も真の相対残差が 10^{-14} を下回っており高精度の近似解が得られているが、Block GWBiCGSTABrQ 法で s を大きくしていくと、従来法以上の近似解精度が得られている。また、図 27(b)に示すように、右辺ベクトル数が増えると Block BiCGSTABrQ 法の近似解精度は誤差の影響で劣化しているが、Block GWBiCGSTABrQ 法では Block BiCGGRrQ 法よりも高精度の近似解が得られている。図 28 より、Block GWBiCGSTABrQ 法の反復回数は、従来法とほぼ同程度であることが分かる。しかしながら、パラメータ s を大きくし過ぎると、反復回数が徐々に増加する傾向にあることも明らかになった。図 29 に示すように、右辺ベクトル 1 本あたりの計算時間に関しても Block GWBiCGSTABrQ 法は従来法と同程度であった。しかしながら、パラメータ s を大きくすると反復回数が増加する傾向にあり、その影響で計算時間も徐々に増加している。

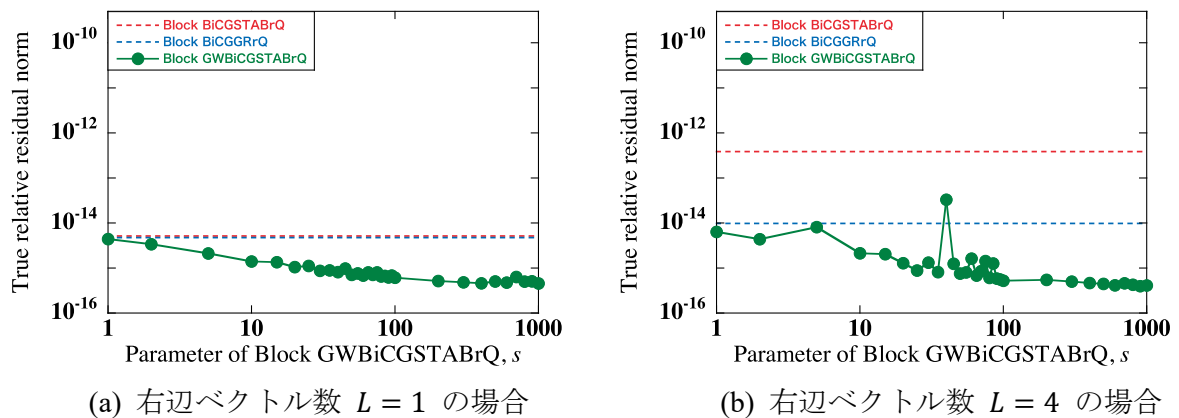
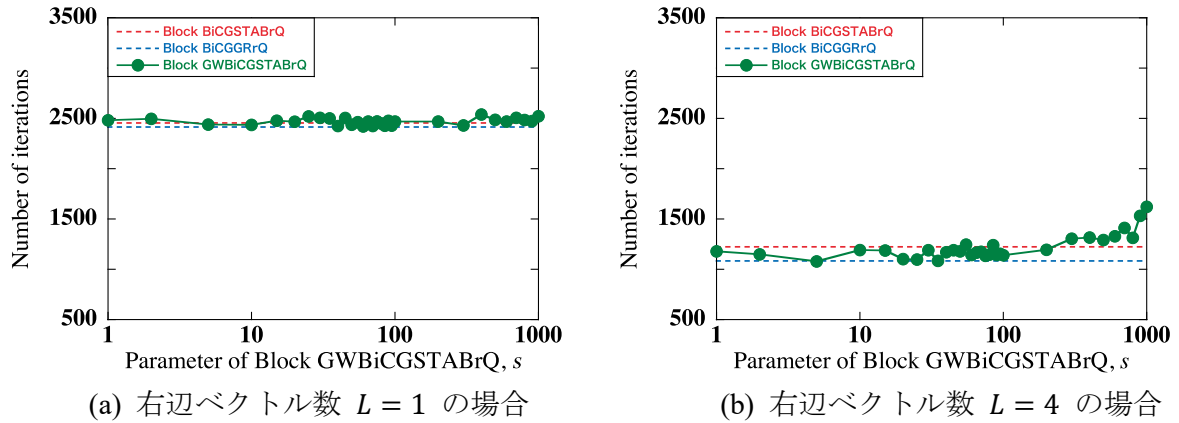
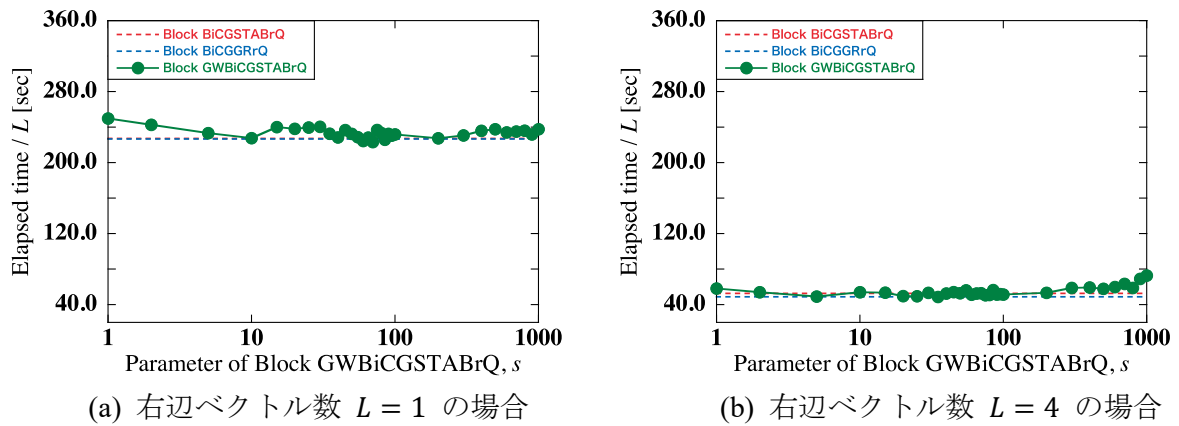
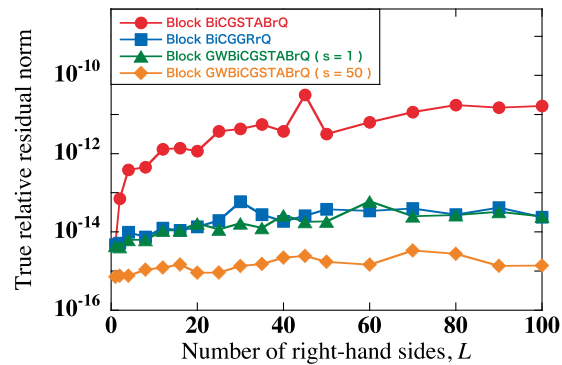


図 27 パラメータ s が真の相対残差に与える影響

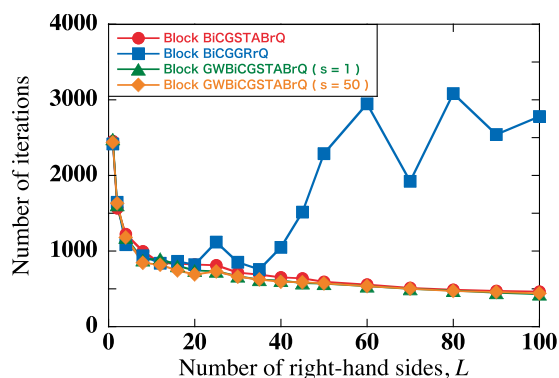

 図 28 パラメータ s が反復回数に与える影響

 図 29 パラメータ s が右辺ベクトル 1 本あたりの計算時間に与える影響

次に、右辺ベクトル数 L を変化させたときの真の相対残差、反復回数、右辺ベクトル 1 本あたりの求解時間を評価する。図 30 に、右辺ベクトル数 L を変化させたときの真の相対残差、反復回数、右辺ベクトル 1 本あたりの求解時間の変化を示す。図 30(a)に示すように、Block BiCGSTABrQ 法では右辺ベクトル数の増加に伴い真の相対残差が増加しており、近似解の精度劣化が発生している。Block BiCGGRrQ 法と Block GWBiCGSTABrQ 法($s = 1$)の真の相対残差は同程度であった。一方、Block GWBiCGSTABrQ 法($s = 50$)では、真の相対残差が 10^{-15} 付近まで減少しており、非常に高精度な近似解を生成できている。また、図 30(b), (c) に示すように、Block BiCGGRrQ 法では右辺ベクトル数の増加に伴い収束性が悪化しており、反復回数、求解時間が増加している。一方、Block GWBiCGSTABrQ 法は Block BiCGSTABrQ 法と同程度の性能を示しており、近似解精度と収束性の両面で優れていることが分かった。

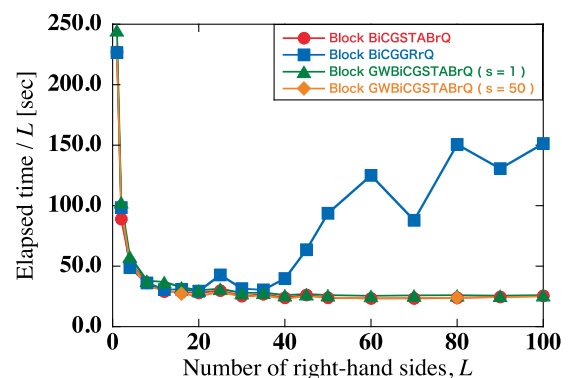
現時点では、Block GWBiCGSTABrQ 法のパラメータ s はユーザが事前に設定する必要があるが、漸化式のグループ化を動的に行えるようになれば、より使いやすい解法になることが期待される。これは次年度以降の今後の課題である。



(a) 真の相対残差の変化



(b) 反復回数の変化



(c) 右辺ベクトル 1 本あたりの求解時間

図 30 右辺ベクトル数 L の変化が真の相対残差、反復回数右辺ベクトル 1 本あたりの求解時間に与える影響

4. 教育

1. 廣川祐太, 博士 (工学), 最先端高性能計算システムにおける第一原理電子動力学シミュレーションの子デザイン, 筑波大学システム情報工学研究科博士論文, 平成 30 年 9 月 (指導: 朴泰祐)
2. 西村慧, 修士 (工学), 高性能 FPGA システムのメモリチャネルを有効利用するためのホスト FPGA 連携システム, 筑波大学システム情報工学研究科修士論文, 平成 31 年 3 月 (指導: 朴泰祐)
3. 岩井厚樹, 修士 (工学), 大規模環境における IO の性能評価に関する研究, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 平成 31 年 3 月 (指導: 建部修見)

4. 小林淳司, 修士 (工学), シミュレータを用いた分散メタデータサーバ PPMDS の性能評価, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 平成 31 年 3 月 (指導: 建部修見)
5. 梶原顕伍, 修士 (工学), 合意手法 Raft を用いた分散 KVS の高性能化, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 平成 31 年 3 月 (指導: 建部修見)
6. 中村泰大, 修士 (工学), メニーコアマシンにおけるトランザクション処理の高性能化, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 平成 31 年 3 月 (指導: 建部修見)
7. 渡邊敬之, 修士 (工学), 並行実行木 Masstree の高性能構築手法に関する研究, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 平成 31 年 3 月 (指導: 建部修見)
8. 小田健斗, 学士 (工学), メニーコアプロセッサにおける冪剰余計算の性能評価, 筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 平成 31 年 3 月 (指導: 高橋大介)
9. 諸戸雄治, 学士 (工学), 微分カーネルを用いた 2 次元畳み込み積分の高速化, 筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 平成 31 年 3 月 (指導: 高橋大介)
10. 杉原航平, 学士 (工学), ノードローカルバーストバッファのための並列 IO の設計, 筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 平成 31 年 3 月 (指導: 建部修見)
11. 高橋宗史, 学士 (工学), 高性能計算に向けた分散オブジェクトストレージ Ceph の性能評価, 筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 平成 31 年 3 月 (指導: 建部修見)
12. 横田健太, 学士 (工学), Hadoop における Erasure Coding の性能評価, 筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 平成 31 年 3 月 (指導: 建部修見)
13. 畑中智之, 学士 (工学), コンテナ型仮想化における NVMe-oF の性能評価筑波大学情報学群情報科学類卒業論文, 平成 31 年 3 月 (指導: 建部修見)

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. Best Paper Award, Kohei Hiraga, Osamu Tatebe, Hideyuki Kawashima, “PPMDS : A Distributed Metadata Server Based on Nonblocking Transactions”, The Fifth International Conference on Social Networks Analysis, Management and Security, Valencia, Spain, October 17, 2018
2. Workshop Best Paper, Yasuhiro Nakamura, Hideyuki Kawashima, Osamu Tatebe, “Integrating TicToc with Parallel Logging”, 6th International Workshop on Computer Systems and Architectures, Gifu, Japan, November 29, 2018

外部資金

1. 文部科学省高性能汎用計算機高度利用事業費補助金 朴泰祐（代表）, H29～33 年度, 23,400 千円（H30 年度）, 「次世代演算通信融合型スーパーコンピュータの開発」
2. 科学研究費補助金 基盤研究 (B), 朴泰祐（代表）, H30～32 年度, 6,110 千円（H30 年度）, 「再構成可能システムと GPU による複合型高性能計算プラットフォーム」
3. 理化学研究所受託研究 朴泰祐（代表）, H27～H32 年度, 6,600 千円（H30 年度）, 「ポスト京の並列プログラミング環境およびネットワークに関する研究」
4. 科学研究費補助金 基盤研究 (C), 高橋大介（代表）, H28～30 年度, 1,300 千円（H30 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」
5. JST CREST, 建部修見, 主たる共同研究者, H25～H30 年度, 7,150 千円, 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
6. 科学研究費補助金 基盤研究(B)（一般）, 建部修見, 代表, H29～H31 年度, 5,070 千円, 極端気象予測を拓くビッグデータ機械学習基盤の研究
7. NEDO, 建部修見, 分担, H30～H32 年度, 7,345 千円, 実社会の事象をリアルタイム処理可能な次世代データ処理基盤技術の研究開発
8. 共同研究（富士通研究所）, 建部修見, 代表, H30 年度, 3,564 千円, 大量データ管理に向けたストレージ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. Miwako Tsuji, Taisuke Boku, Mitsuhsa Sato, “Scalable Communication Performance Prediction Using Auto-Generated Pseudo MPI Event Trace.”, Proc. of HPC Asia 2019, Guangzhou, Jan. 15th, 2019.
2. 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”, ISC High Performance 2018, Frankfurt, June 2018, https://doi.org/10.1007/978-3-319-92040-5_11
3. Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Yoshiki Yamaguchi, Yuuma Oobata, Taisuke Boku, Makito Abe, Kohji Yoshikawa, and Masayuki Umemura: Accelerating Space Radiate Transfer

- on FPGA using OpenCL, International Symposium on Highly-Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies (HEART 2018) pp.6:1-6:7 (June 2018)
4. Yutaka Watanabe, Jinpil Lee, Taisuke Boku and Mitsuhsa Sato, "Trade-off of offloading to FPGA in OpenMP Task-based programming", Proc. of Int. Workshop on OpenMP 2018 (IWOMP2018), 12 pages, Barcelona, Sep. 2018.
 5. Takahiro Katagiri and Daisuke Takahashi, "Japanese Autotuning Research: Autotuning Languages and FFT", Proceedings of the IEEE, Vol. 106, No. 11, pp. 2056-2067, 2018. (invited paper)
 6. Daisuke Takahashi, "Computation of the 100 quadrillionth hexadecimal digit of π on a cluster of Intel Xeon Phi processors", Parallel Computing, Vol. 75, pp. 1-10, 2018.
 7. Takuya Edamatsu and Daisuke Takahashi, "Acceleration of Large Integer Multiplication with Intel AVX-512 Instructions", Proc. 20th IEEE International Conference on High Performance Computing and Communications (HPCC-2018), pp. 211-218, 2018.
 8. Takayuki Tanabe, Hideyuki Kawashima, and Osamu Tatebe, "Integration of Parallel Write Ahead Logging and Cicada Concurrency Control Method", Proceedings of 2nd IEEE International Workshop on Big Data and IoT Security in Smart Computing (BITS), pp.291-296, 2018
 9. Masahiro Tanaka, Osamu Tatebe, and Hideyuki Kawashima, "Applying Pwrake Workflow System and Gfarm File System to Telescope Data Processing", Proceedings of 2018 IEEE International Conference on Cluster Computing, pp.124-133, 2018
 10. Kohei Hiraga, Osamu Tatebe, and Hideyuki Kawashima, "PPMDS: A Distributed Metadata Server Based on Nonblocking Transactions", Proceedings of The Second International Workshop on Data Science Engineering and its Applications, pp.202-208, 2018
 11. Yasuhiro Nakamura, Hideyuki Kawashima, and Osamu Tatebe, "Integrating TicToc with Parallel Logging", Proceedings of the 6th International Workshop on Computer Systems and Architectures, pp.105-111, 2018
 12. Harunobu Daikoku, Hideyuki Kawashima, and Osamu Tatebe, "Skew-Aware Collective Communication for MapReduce Shuffling", Proceedings of the 6th Workshop on Scalable Cloud Data Management, pp.3331-3340, 2018
 13. Hiroto Tadano, Ryosei Kuramoto, Accuracy improvement of the Block BiCGSTAB method for linear systems with multiple right-hand sides by group-wise updating technique, Journal of Advanced Simulation in Science and Engineering, Vol. 6, No. 1, pp. 100—117, 2019.

14. Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, Yoshiki Yamaguchi, Taisuke Boku: OpenCL-enabled High Performance Direct Memory Access for GPU-FPGA Cooperative Computation (short paper), Proceedings of Workshops of HPC Asia 2019, 4 pages, (January 2019)

B) 査読無し論文

1. 中道 安祐未, 小林 諒平, 藤田 典久, 朴 泰祐: GPU・FPGA 混載ノードにおけるヘテロ演算加速プログラム環境に関する研究, 研究報告ハイパフォーマンスコМПユーティング (HPC) /2019-HPC-168(10)/pp.1-7 (March 2019)
2. 小林 諒平, 藤田 典久, 山口 佳樹, 朴 泰祐: 異デバイス間での PCIe 通信を実現する OpenCL 対応 FPGA モジュールの提案と検証, IEICE-RECONF2018-63/IEICE-118(432)/pp.107-112 (January 2019)
3. 藤田 典久, 小林 諒平, 山口 佳樹, 朴 泰祐: OpenCL による FPGA 上の演算と通信を融合した並列処理システムの実装及び性能評価, 研究報告ハイパフォーマンスコМПユーティング (HPC) /2018-HPC-167(9)/pp.1-9 (December 2018)
4. 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 GPU-FPGA デバイス間連携, 研究報告ハイパフォーマンスコМПユーティング (HPC) /2018-HPC-167(11)/pp.1-10 (December 2018)
5. 横野 智也, 藤田 典久, 山口 佳樹, 大畠 佑真, 小林 諒平, 朴 泰祐, 吉川 耕司, 安部 牧人, 梅村 雅之: FPGA による宇宙輻射輸送シミュレーションの演算加速, IEICE-RECONF2018-25/118(215)/pp.35-40 (September 2018)
6. 藤田 典久, 小林 諒平, 山口 佳樹, 朴 泰祐, 吉川 耕司, 安部 牧人, 梅村 雅之: 並列 FPGA システムにおける OpenCL を用いた宇宙輻射輸送コードの演算加速, 研究報告ハイパフォーマンスコМПユーティング (HPC) /2018-HPC-165(27)/pp.1-8 (July 2018)
7. 廣川 祐太, 朴 泰祐, 矢花 一浩, "AVX-512 Intrinsics で実装されたステンシル計算の Scalable Vector Extension への展開", 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコМПユーティング(HPC), 2019-HPC-168(4), pp.1-7, 2019 年 2.
8. 辻 美和子, 村井 均, 佐藤 三久, 朴 泰祐, Serge Petiton, Nahid Emad, Joachim Protze, Christian Terboven, Matthias S. Müller, "MYX : マルチ SPMD プログラミングモデルにおける実行時正当性チェック", 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコМПユーティング(HPC), 2019-HPC-168(6), pp.1-7, 2019 年 2 月.
9. 辻 大亮, 多田野 寛人, 朴 泰祐, 池田 亮作, 佐藤 拓人, 日下 博幸, "都市気象 LES コードの並列 GPU 環境における高速化", 研究報告ハイパフォーマンスコМПユーティング(HPC), 2019-HPC-168(8), pp.1-7, 2019 年 2 月.

10. 小林 諒平, 阿部 昂之, 藤田 典久, 山口 佳樹 朴 泰祐: GPU-FPGA 複合システムにおけるデバイス間連携機構, 研究報告ハイパフォーマンスコМПユーティング (HPC) /2018-HPC-165(26)/pp.1-8 (July 2018)
11. 小林 諒平, 藤田 典久, 大畠 佑真, 山口 佳樹 朴 泰祐: 複数の FPGA による分散ソートの実現に向けた予備評価, 電子情報通信学会技術研究報告 : 信学技報 /118(63)/pp.65-70 (May 2018)
12. 佐藤 駿一, 高橋 大介, “GPU における SELL 形式疎行列ベクトル積の性能評価”, 日本応用数理学会 2018 年度年会講演予稿集, 2 pages, 2018.
13. 高橋 大介, “Intel AVX-512 命令を用いた複数の整数除算の高速化”, 日本応用数理学会 2018 年度年会講演予稿集, 2 pages, 2018.
14. 佐藤 駿一, 高橋 大介, “GPU における SELL 形式疎行列ベクトル積の実装と性能評価”, 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコМПユーティング (HPC) , 2018-HPC-164(3), 6 pages, 2018.
15. 堀江 悠樹, 川島 英之, 建部 修見, 耐ビザンチン障害性を持つ分散合意手法の調査, 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) , 2018-OS-143(15), 5 pages, 2018 年 5 月
16. 岩井 厚樹, 建部 修見, サイエнтиフィックビッグデータアプリケーションのためのベンチマークセットの提案, 研究報告ハイパフォーマンスコМПユーティング (HPC) , 2018-HPC-165(4), 5 pages, 2018 年 7 月
17. 畑中 智之, 建部 修見, コンテナ型仮想化における NVMe-oF の性能評価, 研究報告ハイパフォーマンスコМПユーティング (HPC) , 2018-HPC-167(13), 7 pages, 2018 年 12 月
18. 高橋 宗史, 建部 修見, 高性能計算に向けた分散オブジェクトストレージ Ceph の性能評価, 研究報告ハイパフォーマンスコМПユーティング (HPC) , 2018-HPC-167(15), 8 pages, 2018 年 12 月
19. 杉原 航平, 建部 修見, ノードローカルバーストバッファのための MPI-IO の設計, 研究報告ハイパフォーマンスコМПユーティング (HPC) , 2019-HPC-168(22), 7 pages, 2019 年 3 月
20. 芹沢 和洋, 建部 修見, 深層ニューラルネットワークにおける訓練高速化のための自動最適化, 研究報告ハイパフォーマンスコМПユーティング (HPC) , 2019-HPC-168(25), 10 pages, 2019 年 3 月
21. 渡部 裕, 李 珍泌, 佐野 健太郎, 朴 泰祐, 佐藤 三久, "FPGA へのオフロード最適化のための SPGen と OpenCL の統合の検討", 研究報告ハイパフォーマンスコМПユーティング(HPC), 2019-HPC-168(11), pp.1-10, 2019 年 2 月.

22. 渡部 裕, 李 珍泌, 朴 泰祐, 佐藤 三久, "OpenMP タスク並列実行における FPGA オフローディングの性能最適化", 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), 2018-HPC-165(25), pp.1-7, 2018 年 7 月.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Taisuke Boku, "Oakforest-PACS: Japan's Fastest Intel Xeon Phi Supercomputer and Its Applications", IXPUG Conference Middle East, Jeddha, Saudi Arabia, Apr. 24, 2018.
2. Taisuke Boku, "Oakforest-PACS: World Largest KNL/OPA Cluster and Its Performance Optimization", IPCC Asia Summit 2018, Chengdu, China, May 10, 2018.
3. Taisuke Boku, "Hybrid Accelerated Parallel Computing, GPU+FPGA=?", CODESIGN Workshop 2018 (at HPC China 2018), Qingdao, China, Oct. 19, 2018.
4. Taisuke Boku, "Overview and Scientific Results of Oakforest-PACS", KNL Workshop in Korea, Daejeon, South Korea, Nov. 6, 2018.
5. Taisuke Boku, "What's the Next Step of Accelerated Supercomputing?", Supercomputing Frontier Europ 2019, Warsaw, Poland, Mar. 13, 2019.
6. Taisuke Boku, "MUST system applied to high level language approach in MYX project", SPPEXA Workshop 2019, Versailles, France, Mar. 21, 2019.
7. Daisuke Takahashi, "Automatic Tuning for Parallel FFTs on Cluster of Intel Xeon Phi Processors", Parallel Fast Fourier Transforms (PFFT) (held in conjunction with IEEE HiPC 2018), Radisson Blu Bengaluru Outer Ring Road, Bengaluru, India, December 17, 2018.

B) 一般講演

1. 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", ISC High Performance 2018, Frankfurt, June 2018
2. Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, Yoshiki Yamaguchi, Taisuke Boku: OpenCL-enabled High Performance Direct Memory Access for GPU-FPGA Cooperative Computation, IXPUG Workshop at HPC Asia 2019, January 2019
3. Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Yoshiki Yamaguchi, Yuuma Oobata, Taisuke Boku, Makito Abe, Kohji Yoshikawa, and Masayuki Umemura: Accelerating Space Radiate Transfer on FPGA using OpenCL, International Symposium on Highly-Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies (HEART 2018), June 2018

4. Daisuke Takahashi, “Implementation of Parallel 3-D Real FFT with 2-D Decomposition on Intel Xeon Phi Clusters”, SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE19), Spokane Convention Center, Spokane, Washington, USA, March 1, 2019.
5. Takuya Edamatsu and Daisuke Takahashi, “Acceleration of Large Integer Multiplication with Intel AVX-512 Instructions”, The 20th IEEE International Conference on High Performance Computing and Communications (HPCC-2018), Mercure Exeter Rougemont Hotel, Exeter, United Kingdom, June 28, 2018.
6. Takayuki Tanabe, Hideyuki Kawashima, and Osamu Tatebe, “Integration of Parallel Write Ahead Logging and Cicada Concurrency Control Method”, 2nd IEEE International Workshop on Big Data and IoT Security in Smart Computing (BITS), Sicily, Italy, June 18, 2018
7. Masahiro Tanaka, Osamu Tatebe, and Hideyuki Kawashima, “Applying Pwrake Workflow System and Gfarm File System to Telescope Data Processing”, 2018 IEEE International Conference on Cluster Computing, Belfast, North Ireland, September 11, 2018
8. Kohei Hiraga, Osamu Tatebe, and Hideyuki Kawashima, “PPMDS: A Distributed Metadata Server Based on Nonblocking Transactions”, the Second International Workshop on Data Science Engineering and its Applications, Valencia, Spain, October 15, 2018
9. Yasuhiro Nakamura, Hideyuki Kawashima, and Osamu Tatebe, "Integrating TicToc with Parallel Logging", the 6th International Workshop on Computer Systems and Architectures, Takayama, November 29, 2018
10. Osamu Tatebe, “Memory-Storage Hierarchy”, Big Data and Exascale-Computing 2, Bloomington, IN, USA, November 30, 2018
11. Harunobu Daikoku, Hideyuki Kawashima, and Osamu Tatebe, "Skew-Aware Collective Communication for MapReduce Shuffling", the 6th Workshop on Scalable Cloud Data Management, Seattle, USA, December 10, 2018
12. Osamu Tatebe, “Gfarm/BB – Gfarm file system for burst buffers”, CCS - LBNL Collaborative Workshop, Berkeley, CA, USA, March 7, 2019
13. Hiroto Tadano, Ryosei Kuramoto, An improvement of the Block BiCGSTAB method by reconstructing recursions, The 37th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2018), Hokkaido, Japan, Sep. 18, 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

1. 中道 安祐未, 小林 諒平, 藤田 典久, 朴 泰祐: GPU・FPGA 混載ノードにおけるヘテロ演算加速プログラム環境に関する研究, 第 168 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, 2019 年 3 月
2. 小林 諒平, 藤田 典久, 山口 佳樹, 朴 泰祐: 異デバイス間での PCIe 通信を実現する OpenCL 対応 FPGA モジュールの提案と検証, 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, 2019 年 1 月
3. 藤田 典久, 小林 諒平, 山口 佳樹, 朴 泰祐: OpenCL による FPGA 上の演算と通信を融合した並列処理システムの実装及び性能評価, 第 167 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, 2018 年 12 月
4. 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 GPU-FPGA デバイス間連携, 第 167 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, 2018 年 12 月
5. 廣川 祐太, 朴 泰祐, 矢花 一浩, "AVX-512 Intrinsics で実装されたステンシル計算の Scalable Vector Extension への展開", 第 168 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, 2019 年 2 月 26 日.
6. 辻 美和子, 村井 均, 佐藤 三久, 朴 泰祐, Serge Petiton, Nahid Emad, Joachim Protze, Christian Terboven, Matthias S. Müller, "MYX : マルチ SPMD プログラミングモデルにおける実行時正当性チェック", 第 168 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, 2019 年 2 月 26 日.
7. 辻 大亮, 多田野 寛人, 朴 泰祐, 池田 亮作, 佐藤 拓人, 日下 博幸, "都市気象 LES コードの並列 GPU 環境における高速化", 第 168 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, 2019 年 2 月 26 日..
8. 横野 智也, 藤田 典久, 山口 佳樹, 大畠 佑真, 小林 諒平, 朴 泰祐, 吉川 耕司, 安部 牧人, 梅村 雅之: FPGA による宇宙輻射輸送シミュレーションの演算加速, 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, 2018 年 9 月
9. 藤田 典久, 小林 諒平, 山口 佳樹, 朴 泰祐, 吉川 耕司, 安部 牧人, 梅村 雅之: 並列 FPGA システムにおける OpenCL を用いた宇宙輻射輸送コードの演算加速, 第 165 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, 2018 年 7 月
10. 小林 諒平, 阿部 昂之, 藤田 典久, 山口 佳樹 朴 泰祐: GPU-FPGA 複合システムにおけるデバイス間連携機構, 第 165 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, 2018 年 7 月

11. 小林 諒平, 藤田 典久, 大畠 佑真, 山口 佳樹 朴 泰祐: 複数の FPGA による分散ソーティングの実現に向けた予備評価, リコンフィギャラブルシステム研究会, 2018 年 5 月
12. 佐藤 駿一, 高橋 大介, “GPU における SELL 形式疎行列ベクトル積の性能評価”, 日本応用数理学会 2018 年度年会, 名古屋, 2018 年 9 月 5 日.
13. 高橋 大介, “Intel AVX-512 命令を用いた複数の整数除算の高速化”, 日本応用数理学会 2018 年度年会, 名古屋, 2018 年 9 月 4 日.
14. 佐藤 駿一, 高橋 大介, “GPU における SELL 形式疎行列ベクトル積の実装と性能評価”, 情報処理学会第 164 回ハイパフォーマンส์コンピューティング研究会, 東京, 2018 年 5 月 7 日.
15. 堀江 悠樹, 川島 英之, 建部 修見, 耐ビザンチン障害性を持つ分散合意手法の調査, 第 143 回システムソフトウェアとオペレーティング・システム研究発表会, 沖縄, 2018 年 5 月 22 日
16. 岩井 厚樹, 建部 修見, サイエнтиフィックビッグデータアプリケーションのためのベンチマークセットの提案, 第 165 回ハイパフォーマンส์コンピューティング研究発表会, 熊本, 2018 年 7 月 30 日
17. 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, 2018 年 10 月 26 日
18. 畑中 智之, 建部 修見, コンテナ型仮想化における NVMe-oF の性能評価, 第 167 回ハイパフォーマンส์コンピューティング研究発表会, 沖縄, 2018 年 12 月 17 日
19. 高橋 宗史, 建部 修見, 高性能計算に向けた分散オブジェクトストレージ Ceph の性能評価, 第 167 回ハイパフォーマンส์コンピューティング研究発表会, 沖縄, 2018 年 12 月 17 日
20. 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, 鹿児島, 2019 年 2 月 1 日
21. 杉原 航平, 建部 修見, ノードローカルバーストバッファのための MPI-IO の設計, 第 168 回ハイパフォーマンส์コンピューティング研究発表会, 石川, 2019 年 3 月 7 日
22. 芹沢 和洋, 建部 修見, 深層ニューラルネットワークにおける訓練高速化のための自動最適化, 第 168 回ハイパフォーマンส์コンピューティング研究発表会, 石川, 2019 年 3 月 7 日
23. 多田野 寛人, “精度混合型前処理付きクリロフ部分空間反復法”, 研究会「データ駆動科学と高速計算科学」, 東京大学駒場キャンパス, 2018 年 7 月 17 日.

24. 多田野 寛人, "漸化式の再構築による Block BiCGSTAB 法の近似解精度改善", 2018 年並列／分散／協調処理に関する『熊本』サマー・ワークショップ (SWoPP2018), 熊本市国際交流会館, 2018 年 7 月 31 日.
25. 多田野 寛人, 倉本 亮世, "Block BiCGSTAB 法の近似解高精度化と数値的安定化", 日本応用数理学会 2018 年度年会, 名古屋大学東山キャンパス, 2018 年 9 月 4 日.
26. 倉本 亮世, 多田野 寛人, "Shifted Block BiCGStab 法の近似解精度劣化の数値的原因解析", 日本応用数理学会 2018 年度年会 (ポスターセッション), 名古屋大学東山キャンパス, 2018 年 9 月 4 日.
27. 齋藤 歩, 平吹 勇司, 多田野 寛人, 高山 彰優, 神谷 淳, "断層画像データから 3D ボリュームメトリックモデルの再構成: Global ICCG 法による高速化", 【非線形問題の解法と可視化に関する研究会】2018 年度第 2 回研究会, 自然科学研究機構核融合科学研究所, 2019 年 1 月 24 日.
28. 渡部 裕, 李 珍泌, 佐野 健太郎, 朴 泰祐, 佐藤 三久, "FPGA へのオフロード最適化のための SPGen と OpenCL の統合の検討", 第 168 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, 2019 年 2 月 26 日.
29. 渡部 裕, 李 珍泌, 朴 泰祐, 佐藤 三久, "OpenMP タスク並列実行における FPGA オフローディングの性能最適化", 第 166 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, 2018 年 7 月 23 日.

(4) 著書、解説記事等

- A) 多田野 寛人, 数値線形代数の数理と HPC, 第 1 章 1.2.1 定常反復法, 1.2.2 クリロフ部分空間反復法, 櫻井 鉄也, 松尾 宇泰, 片桐 孝洋 (編), 共立出版, 2018.

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1. 日独仏 3 カ国国際共同研究 SPPEXA, 朴 泰祐 (日本代表 PI), "MYX: MUST correctness checking for YML and XMP programs", JST

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. XcalableMP ワークショップ, つくば, 2018 年 11 月 1 日
2. Korea-Japan HPC Winter School, ソウル, 2019 年 2 月 20 日～21 日
3. Gfarm シンポジウム, 東京, 2018 年 10 月 26 日
4. Gfarm ワークショップ, 鹿児島, 2019 年 2 月 1 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：理化学研究所客員主管研究員
2. 朴 泰祐：HPCI 連携サービス委員会委員長
3. 朴 泰祐：HPCI コンソーシアム理事
4. 朴 泰祐：PC クラスタコンソーシアム理事
5. 朴 泰祐：学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）運営委員
6. 朴 泰祐：筑波大学情報環境企画室委員
7. 朴 泰祐：筑波大学ネットワーク管理委員会委員
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. 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
14. 高橋 大介：情報処理学会ハイパフォーマンスコピューティング研究会幹事
15. 建部 修見：HPCI 共用ストレージ運用部会副部長
16. 建部 修見：HPCI 連携サービス運営・作業部会委員
17. 建部 修見：理化学研究所客員主管研究員
18. 建部 修見：情報通信研究機構協力研究員
19. 建部 修見：HPCI 利用研究課題審査委員会レビュアー
20. 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
21. 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
22. 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
23. 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
24. 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
25. 多田野 寛人：日本応用数理学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会 運営委員.
26. 多田野 寛人：情報処理学会ハイパフォーマンスコピューティング研究会運営委員.
27. 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.
28. 小林 諒平：SWoPP2018 実行委員 コンピュータシステム研究会担当幹事
29. 小林 諒平：電子情報通信学会リコンフィギャラブルシステム研究会専門委員
30. 小林 諒平：電子情報通信学会コンピュータシステム研究会専門委員

10. 社会貢献・国際貢献

1. Taisuke Boku: Steering Committee Chair, International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPCAsia)
2. Taisuke Boku: Steering Committee Member, Intel eXtreme Performance Users Group (IXPUG)
3. Taisuke Boku: Organizing Committee Member, HPCAsia 2019
4. Taisuke Boku: Scientific Committee Member, Supercomputing Frontier Europe 2019
5. Taisuke Boku: Program Committee, IPDPS2018
6. Taisuke Boku: Organizing Co-Chair, IXPUG Workshop HPCAsia 2019
7. Taisuke Boku: Committee Member, SC18 Test of Time
8. Taisuke Boku: Organizing Committee Member, IXPUG Workshop ISC 2018
9. Taisuke Boku: Committee Member, CCGrid2019 Scale Challenge
10. Taisuke Boku: Program Committee, HPC China 2018
11. Taisuke Boku: Organizing Co-Chair: ATiP Workshop at SC18
12. Daisuke Takahashi: Program Committee, The 16th IEEE International Symposium on Parallel and Distributed Processing with Applications (IEEE ISPA 2018)
13. Daisuke Takahashi: Program Committee, International Conference on High Performance Computing in Asia Pacific Region (HPC Asia 2019)
14. Daisuke Takahashi: Program Committee, 6th International Workshop on Large-scale HPC Application Modernization (LHAM 2018) in Conjunction with 6th International Symposium on Computing and Networking (CANDAR'18)
15. Daisuke Takahashi: Program Committee, Parallel Fast Fourier Transforms (PFFT) in Conjunction with 25th IEEE International Conference on High Performance Computing, Data, and Analytics (HiPC 2018)
16. Daisuke Takahashi: Organizing Committee, Parallel Fast Fourier Transforms (PFFT) in Conjunction with 25th IEEE International Conference on High Performance Computing, Data, and Analytics (HiPC 2018)
17. Daisuke Takahashi: Program Committee, The 18th IEEE International Conference on Computer and Information Technology (CIT 2018)
18. Daisuke Takahashi: Program Committee, The 3rd International Workshop on GPU Computing and AI (GCA'18) in Conjunction with 6th International Symposium on Computing and Networking (CANDAR'18)
19. Daisuke Takahashi: Program Committee, 20th IEEE International Conference on High Performance Computing and Communications (HPCC-2018)

20. Daisuke Takahashi: Publicity Committee, The 18th International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2018)
21. Daisuke Takahashi: Program Committee, The International Conference on Computational Science (ICCS 2018)
22. Daisuke Takahashi: Program Committee, The 13th International Workshop on Automatic Performance Tuning (iWAPT 2018)
23. Daisuke Takahashi: Program Committee, IEEE 12th International Symposium on Embedded Multicore SoCs (MCSoc-18)
24. Osamu Tatebe: Program Committee, IEEE/ACM International Symposium on Cluster, Cloud and Grid Computing (CCGrid 2018)
25. Osamu Tatebe: Program Committee, IEEE International Conference on Cluster Computing (Cluster 2018)
26. Osamu Tatebe: Program Committee, International Supercomputing Conference
27. Osamu Tatebe: Poster Committee, IEEE/ACM International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC18)
28. Osamu Tatebe: Program Committee, International Workshop on Advances in High-Performance Computational Earth Sciences: Applications & Frameworks (IHPCES 2018)
29. Hiroto Tadano: Publication Co-Chair, The 37th Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2018).
30. Hiroto Tadano: Publication Co-Chair, The 38th Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2019).
31. Hiroto Tadano: Deputy Chair, 48th International Conference on Parallel Processing (ICPP2019).
32. Ryohei Kobayashi: Program Committee, International Conference on Field-Programmable Technology (FPT'18)
33. Ryohei Kobayashi: Program Committee, 6th International Workshop on Computer Systems and Architectures (CSA'18) held in conjunction with CANDAR'18

11. その他

海外長期滞在、フィールドワークなど
(該当なし)

VIII. 計算情報学研究部門

VIII-1. データ基盤分野

1. メンバー

教授	北川 博之、天笠 俊之
助教	塩川 浩昭、堀江 和正
研究員	Bou Savong、太田 玲央
学生	大学院生 24 名、学類生 6 名、研究生 2 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、国際睡眠医科学統合機構 (IIIS) 等との連携を通じて、計算科学の各分野における応用的な研究を推進している。

3. 研究成果

【1】 情報統合基盤技術

(関連研究費：情報通信研究機構受託研究)

(1) シーケンス OLAP 分析

近年、IoT やソーシャルメディアの普及に伴い、移動ログデータなど時系列等の順序にしたがって生成されるシーケンスデータが増加している。そのようなシーケンスデータに対して、時系列的な並びのパターンに注目し、特定パターンの発生箇所（パターンオカレンス）を抽出・集約する分析技術が求められている。データベースに蓄積されたシーケンスデータに対するパターンオカレンスの集約分析手法としては、シーケンス OLAP (Online Analytical Processing) が知られている。シーケンス OLAP はシーケンスデータからパターンオカレンスを抽出（行パターンマッチング）し、データの次元の階層構造に基づき集約条件を変更する drill-down や roll-up などの OLAP 操作を実行することで多次元集約分析を行う。シーケンス OLAP 分析では集約結果を取得後、集約対象のパターンとは異なるパターンの集約結果を確認したいという要求がある。このような要求に対して、シーケンス OLAP では図 1 のように pattern-drill-down や pattern-roll-up, pattern-occurrence-drill-down などの集約対象パターンを切

換える OLAP-Pattern 操作を実行することで、異なるパターンの集約結果を取得することができる。OLAP-Pattern 操作を実行するためには、複数のパターンについて行パターンマッチングを行い、パターンオカレンス間の親子関係を検出する必要がある。一般に、このような複数パターンの行パターンマッチングはそれぞれ個別に実行されるが、それらのパターン同士が共通部分を持つ場合に冗長な処理が発生する。

本研究では、最も汎用的なデータベースの 1 つである関係データベース上でのシーケンス OLAP における OLAP-Pattern 操作をサポートするために、複数行パターンマッチング問合せの効率的処理手法を開発した。提案手法では、拡張前のパターンを親、拡張後のパターンを子とするパターンの階層構造を定義し、複数パターンを統合した非決定的オートマトン (NFA) によって複数パターンの行パターンマッチングを実行する。さらに、パターンオカレンス抽出時に逐次的にパターンオカレンス間の親子関係を検出する。提案手法によって、複数パターンの行パターンマッチングとパターンオカレンス間の親子関係検出を効率的に実行することができる。本研究では、提案手法を実際の関係データベースシステム上で UDF (ユーザ定義関数) として実装し、人工データを用いた実験で提案手法の性能の検証を行った。

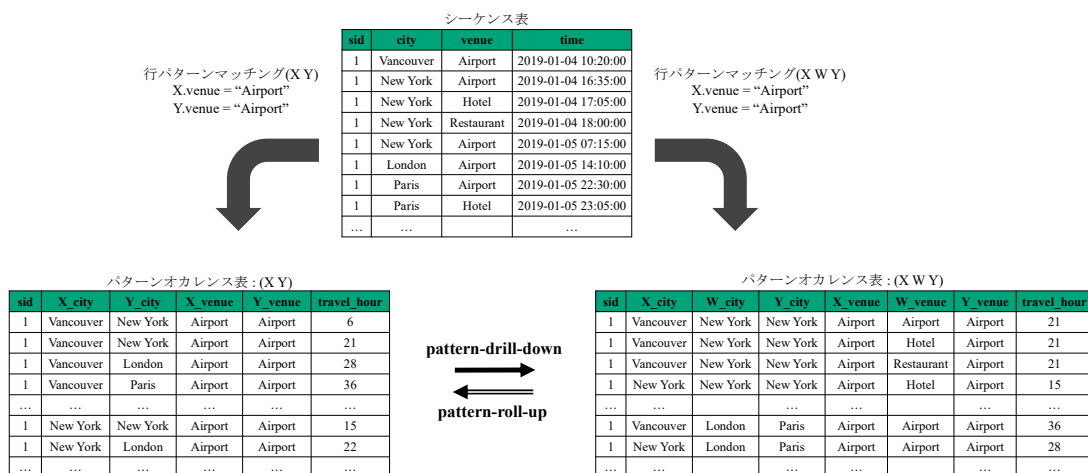


図 1 シーケンス OLAP における行パターンマッチングと OLAP-Pattern 操作

(2) ストリームに対する集約計算処理

実時間でデータストリームを提供するストリーム情報源の活用は重要な研究課題である。ストリームデータの処理に関してはこれまでも多くの研究を行ってきたが、本研究では基本的な処理演算であり集約計算処理に注目する。具体的には、指定した件数の直近のレコードのみを含む移動窓 (Moving window) を想定し、移動窓に含まれるレコードを対象とする合計、平均等の集約値を計算する処理を対象とする。新たなレコードが到着した場合は、移動窓がスライドするため集約値が変化するが、それを連続的に効率的に計算する連続的集約問合せを対象とする。

連続的集約問合せの既存処理手法としては、Two-Stacks が代表的であり、その計算量は $O(1)$ であることが知られている。しかし、移動窓のサイズが大きくなった場合には、索引構造の維持コストが増大し、その処理性能は大きく劣化する。

本研究では、この問題に対応するため、L-BiX (Linear Bidirectional Index) と呼ぶ新たな手法を開発した。L-BiX では、移動窓内のデータに対する順次前向き方向の集約値 f 値と、順次後向き方向の集約値 b 値を交互に活用することで移動窓内のデータに対する集約値を効率的に計算することを可能とする。図 2 は L-BiX による合計計算の様子を示したものである。レコード 5 から右方向に順次新たなレコードが到着するものし、移動窓サイズを 8、スライド幅を 2 と仮定する。また、レコード列の上に f 値を、レコード列の下に b 値を示している。レコード 10 が到着し、最初の移動窓内のレコード数が 8 になった時点で、この移動窓内のレコードに対する b 値が計算される。その後、レコード 12 と 18 が到着すると、これらを対象として f 値 30 を算出すると共に、既に計算済の b 値 37 を用いて、2 レコードだけ移動した新たな移動窓に対する合計値 67 を算出する。このような集約計算を逐次繰り返すことで効率的な連続的集約問合せ処理を行う。

図 3 は L-BiX の処理性能を既存の連続的集約問合せ処理手法と比較した実験結果である。比較に用いたデータは、DEBS2012 Grand Challenge データである。本実験結果は、L-BiX は他の既存手法のいずれよりも高速であり、最速の既存手法である Two-Stacks と比較しても 70% 以上高速であることを示している。

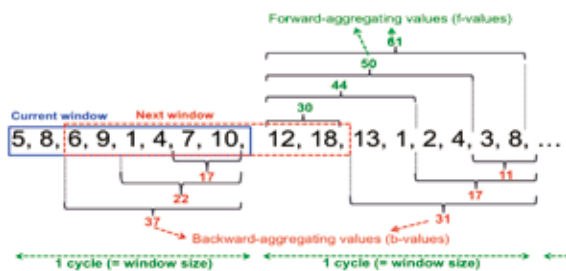


図 2 L-BiX による連続的合計計算

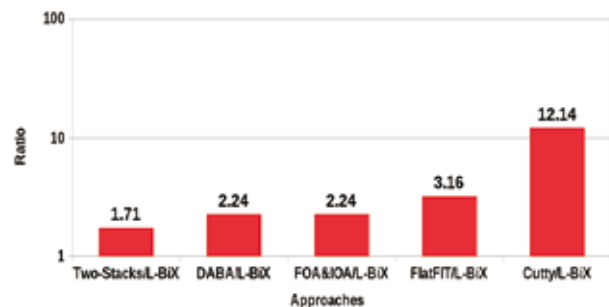


図 3 L-BiX と既存手法の性能比較

【2】 データマイニング・知識発見技術

(関連研究費：科研費・若手研究, JST ACT-I「情報と未来」, 医療経済研究機構受託研究)

(1) 大規模データ分析の高速化

大規模データに対する高速な分析手法の構築について、本年度は Affinity Propagation の高速化に関する研究成果を得た。

Affinity Propagation はグラフ構造を利用した多次元データクラスタリング手法である．この手法は，*exemplar* と呼ばれるクラスタの核となるデータポイントをすべてのデータポイントの中から自動的に検出することでクラスタを構築する．Affinity Propagation では，データが与えられるとクラスタ数を自動で決定するため，k-means 法や k-medoid 法などのようなこれまで提案されてきた手法とは異なり，ユーザが予め出力するクラスタ数を指定する必要がない．他のクラスタリングアルゴリズムと比較してクラスタリング精度が高くなることから，近年幅広い分野から着目されているアルゴリズムである．しかしながら，Affinity Propagation は大きな計算コストを要するアルゴリズムである．具体的には，データポイント数を n のとき，Affinity Propagation の計算量は $O(n^3)$ となる．

本研究では，Affinity Propagation を大規模なデータセットに適用可能とするため，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 Intel Xeon Phi Co-processor を活用した超並列化手法 Parallel C-AP を開発した．従来の Affinity Propagation では，入力された全てのデータポイントの組合せについて比較計算を行い，クラスタを検出する．これに対して本研究で提案した Parallel C-AP では，図 4(a)に示すようにセルベースの索引を事前に構築し，図 4(b)のように本質的に計算が必要なデータポイント間についてのみ処理を行うことで計算コストの削減を行う．加えて，提案手法 Parallel C-AP では，各セル間の計算に対してスレッド並列化を行い，計算時間のさらなる削減を行う．

図 5 に実世界のデータセットを用いた際の実行時間の比較を示す．図 5 中の Original-AP は従来の Affinity Propagation，Graph-AP および F-AP は最先端の Affinity Propagation 高速化手法を示している．また，C-AP は並列化を用いない提案手法，Parallel C-AP は並列化を用いた提案手法を示している．提案手法である Parallel C-AP は他の手法と比較して最大で 60 倍程度の高速化を達成した．

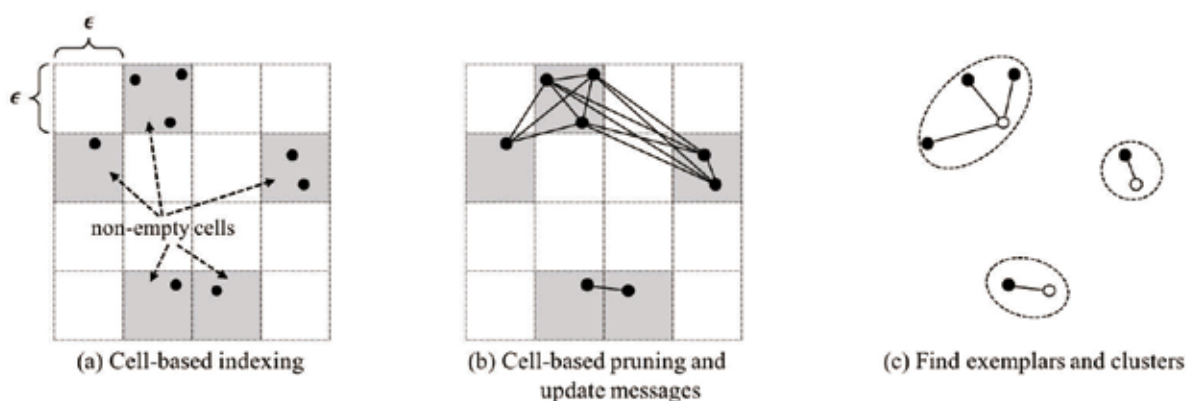


図 4 提案手法 Parallel C-AP の処理の流れ

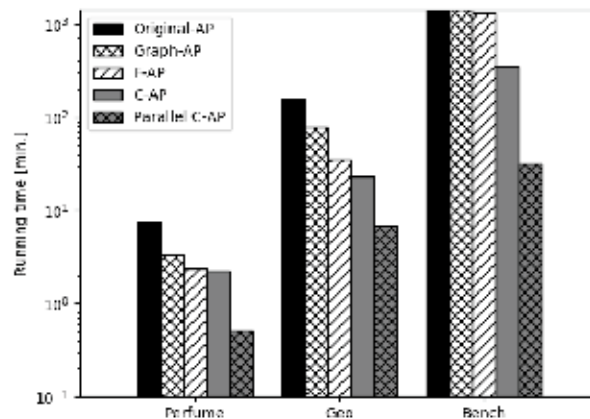


図 5 実行時間の比較

(2) 確率的な制約を考慮した非負値行列分解

非負値行列分解 (non-negative matrix factorization; NMF) は所与の行列をよりランクの低い二つの行列の積として近似するアルゴリズムである。文書データからのトピック抽出、音声処理、グラフ／ネットワークにおけるコミュニティ検出など、多くの応用に適用されている。その特徴として、処理が単純なのにも関わらず高い精度を達成することができる点が挙げられる。

NMF では確率的な事象を扱う応用が少なくない。例えば、文書データを例にとると、各単語が文書に出現する確率を行列として表現し、それに対して NMF を適用することで、検出されたトピックと単語、あるいはトピックと文書の関係を確率的に記述することができる。このとき、既存の NMF では確率的な制約 (非負で最大値が 1.0, 合計すると 1.0 など) が考慮されないため、アルゴリズムの結果出力される行列は確率的な条件を満たさない。このため既存の研究では、行列に対して、スケーリング等の後処理を適用することで、疑似的に確率的な制約を満たすよう調整を行なうことが多い。

このため本研究では、確率的な制約を満たしたまま行列の分解を行なうことができる確率的非負値行列分解 (probabilistic NMF) を提案した。提案手法では、NMF における損失関数を行列の確率的な性質を考慮して定義するとともに、NMF における分解行列の更新式を確率的な制約の元で与えることができた。提案手法について、その計算コストが (確率的な制約を考慮しない) 従来のアルゴリズムと同等であることを理論的に示すとともに、複数のデータセットおよびモデルを用いた実験により、提案手法が既存の NMF に比べて高い精度を達していることを示した (表 1)。

表 1 ネットワークにおけるコミュニティ検出の精度を比較．先行研究（CARNMF）に対して確率的な制約を考慮した提案手法を適用することで更なる精度向上を達成．

	DBLP dataset			arXiv dataset		
	Author	Paper	Conference	Author	Paper	Journal
NMF(A-T)	64.02 \pm 5.73	N/A	N/A	60.99 \pm 0.07	N/A	N/A
NMF(A-P)	43.12 \pm 5.17	44.58 \pm 5.89	N/A	44.84 \pm 5.06	30.94 \pm 1.15	N/A
NMF(A-C)	75.35 \pm 6.85	N/A	87.60 \pm 1.73	75.85 \pm 7.29	N/A	73.68 \pm 2.33
NMF(T-P)	N/A	50.02 \pm 7.93	N/A	N/A	39.80 \pm 5.05	N/A
NMF(T-C)	N/A	N/A	69.88 \pm 6.68	N/A	N/A	100.00 \pm 0.0
LCTA	48.90 \pm 7.57	26.13 \pm 4.36	68.50 \pm 12.46	46.72 \pm 5.72	31.50 \pm 1.17	56.87 \pm 6.53
SCI	54.78 \pm 8.79	22.31 \pm 1.48	58.20 \pm 7.40	35.42 \pm 4.01	29.79 \pm 1.11	47.49 \pm 6.37
HINMF	68.90 \pm 9.08	56.46 \pm 3.08	90.10 \pm 12.63	74.30 \pm 7.99	29.68 \pm 0.95	73.12 \pm 8.86
CARNMF	86.34 \pm 2.39	78.19 \pm 9.87	97.20 \pm 5.21	77.64 \pm 2.88	44.05 \pm 3.14	75.00 \pm 5.23
CARNMFprob	88.56 \pm 1.62	79.28 \pm 5.83	100.00 \pm 0.0	83.42 \pm 0.0	47.84 \pm 0.71	87.50 \pm 0.0

【3】 XML・Web プログラミング

（関連研究費：富士通奨学寄附金）

(1) 関係ストリームデータに対するキーワード検索

情報源からリアルタイムに送信されるデータを（データ）ストリームといい，計測機器やネットワーク技術の進展とともに，ストリーム型の情報源が増加している．本研究では，リレーション（関係データ）に対して新規のレコードがストリーム形式で配信される関係ストリームを対象とする．関係ストリームには，従来，CQL や Jaql などの問合せ言語を使うことで問合せを記述することが一般的であるが，言語習得やリレーションの構造を理解する必要があり，利用に対する障壁が高い．このため，問合せとしていくつかのキーワードのみを使って関係ストリームに対して問合せを行う手法が研究されてきた．

関係ストリームに対するキーワード検索では，検索キーワード集合が与えられると，それらを全て含むタプルネットワーク（network of tuples）を結果として返却する．S-KWS や SS-KWS などの従来手法では，効率的な問合せ処理のため，あらかじめ可能なキーワードとリレーションの結合パターンを全て列挙し，新たなタプルが到着するたびに照合する CN を探索することで問合せ処理を行う．このとき，CN の多くは共通部分を持つため，この処理を共通化することで性能改善を図っている．

ところが，CN ベースのアプローチでは，検索キーワードの数や，タプルネットワークのサイズが大きくなるにつれ，生成される CN の数が指数関数的に増大し，処理性能が劣化するという問題があった．そこで本研究では，既存手法に比べてさらに CN の共有を可能にする MX 構造を提案した．従来の CN に比べて，可能な限り共通するエッジを共通化し，その上で問合せ処理を実現するために，各ノードにバッファを関連付けている．関係タプルが到着すると，それらに対応するノードに到達し，バッファ内の適切な位置で管理されることで効率的な処理が実現される．実験による評価により，既存手法に比べて処理性能を大幅に改善できることを示した（図 6）．

今年度は、過去の研究成果 (DEXA2016) をさらに発展させた内容を、国際雑誌 Information Systems に投稿し採択された。

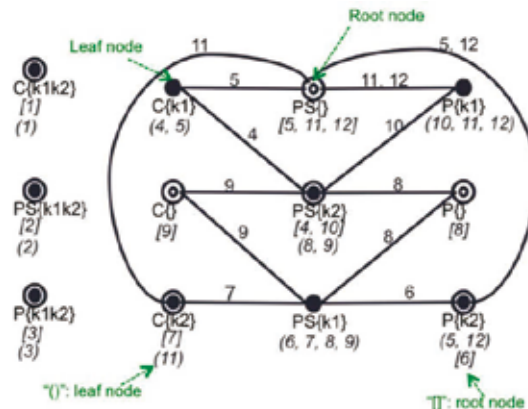


図 6 提案する MX 構造 (MX-structure) . 複数のキーワード検索をよりコンパクトに表現することが可能.

【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：科研費・新学術領域，文部科学省/つくばグローバル・イノベーション推進機構受託研究，農業・食品産業技術総合研究機構受託研究)

(1) 生体信号解析に基づく睡眠ステージ分析

一般的に、ヒトの睡眠は脳波や眼電位の状態から複数の睡眠ステージ (レム・ノンレム等) に分類される。これらのステージは睡眠における役割が異なっており、その割合や遷移を調べることで、睡眠の質や睡眠障害の有無を把握できる。

従来、これら睡眠ステージの判定は医師や技師が生体信号を直接確認することで行っている。これは非常に大きな労力・専門性を要することから、本研究では睡眠ステージ判定の自動化に取り組んでいる。

昨年度までの研究により、ヒトの睡眠ステージを比較的高精度 (技師との一致率：87%) で判定できる深層学習モデルが開発できた。本年度は、上記モデルのさらなる精度改善を図るとともに、判定理由の可視化について研究を進めた。

図 7 に現在の睡眠ステージ判定モデルを示す。昨年度と同様、本モデルでは生体信号から、ステージ判定の基準となる「特徴波形」を抽出する“特徴抽出部”，抽出した特徴量と睡眠ステージの対応を学習・判定する“判定モデル”から成る。本年度は特に判定モデル部分に進展があった。

昨年度では、判定モデルには一般的な多層パーセプトロンを使用していたが、これを畳み込みと Global Averaged Pooling から成るニューラルネットワークに変更した。本変更により、従来よりも特徴波形の位置が出力に与える影響が小さくなった。その結果として、小サンプル・小学習回数でも高精度な判定モデルを達成した (技師との判定一致率：88.2%)。また、

畳み込み層の出力が「ある瞬間のステージらしさ (Class Activation Map: CAM)」を表すことから、信号内のどの部分を基に睡眠ステージを判定したか視覚化できた(図 8)。実際の睡眠医療現場においても十分な判定精度を達成するとともに、判定結果が正しいか否か医師が確認するための基礎的な部分が完成したと考えている。

平成 31 年度では、判定理由の詳細、特にどの位置に何の特徴波形があるのかを視覚化する手法について取り組む。また、家庭用の簡易睡眠計を対象とした睡眠ステージ判定に取り組む予定である。

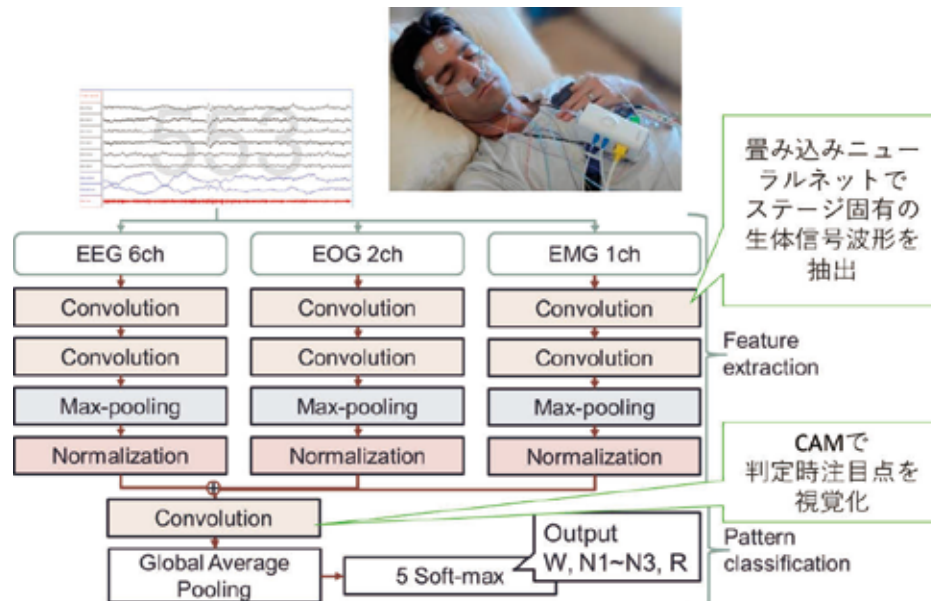
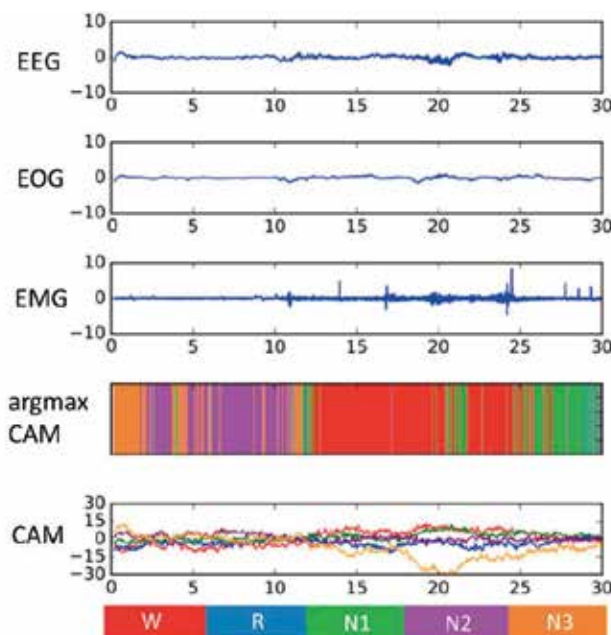


図 7 睡眠ステージ判定手法の概要



< 技師判定 >

10 秒前後より、筋電位 (EMG) の増幅がみられる。

→ステージは W (覚醒)。

< 提案システム >

ステージ判定結果は W だった。

特に 10-25 秒の領域が W らしい (argmax CAM 参照) と報告されている。技師の注目点 (判定理由) と一致している。

図 8 睡眠ステージ判定理由の視覚化例

(2) 機械学習を用いたすばる望遠鏡 Hyper Suprime-Cam による遠方銀河データの自動分類

東京大学宇宙線研究所大内准教授らのグループと共同して、すばる望遠鏡から得られる観測データに対する機械学習の適用について継続して検討した。

あらゆる分野でビッグデータおよび AI の活用が課題となっているが、天文学の分野も例外ではない。すばる望遠鏡には 2012 年より超広視野 CCD カメラ Hyper Suprime-Cam (HSC) が設置された。その視野角は従来の Suprime-Cam の 7 倍にもなり、結果として一度の観測において膨大な量の超遠方天体のデータを得ることを可能となった。天体観測用カメラを用いた撮影の結果、巨大な観測画像が得られるが、そこから重要な天体を見つけだす際は、画像中の光源の等級を測定し、設定された基準を満たすものを取り出す処理が必要となる。しかし、その処理の結果として得られる天体の候補には、移動天体、ノイズなど (spurious sources) を誤検出したデータや、観測対象の同定条件を満たさないものが数多く含まれ、その割合は最大で全候補の 98% を占めることもある。真に重要な天体を見つけだすには、天体の候補からそれら誤検出データを取り除くことが必要である。従来は人手によりそれらのスクリーニングを行っていたが、HSC の主宇宙津力する規模のデータに対して人での処理を行なうのは不可能である。

本研究では、HSC によって得られる観測データのうち、特に遠方銀河 Lyman-alpha emitter (LAE) の候補から、spurious sources や近傍銀河などの LAE でないデータ (非 LAE) を取り除くモデルを設計した。教師データの正例・負例のアンバランスを人工データによって補うとともに、単一バンド画像しか存在しない教師データに対して、マルチバンドの判定を行なうためのルールベースの判定器を設計した。実データを用いた実験により、専門家が実用の際に必要とする検出精度 95% を達成した。次年度は実データへの適用に取り組む予定である。

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. 董 于洋

A Study on Rank-aware Query Processing for Multidimensional Data

< 修士 (工学) >

1. 佐藤 朋紀

逐次的ノード枝刈りを用いた ObjectRank の高速化

2. 菅野 健太

メニーコアプロセッサを用いた集合間類似結合の高速化

3. 那須 勇弥
シーケンス OLAP をサポートする複数行パターンマッチング問合せ処理の提案
4. 山部 剛士
深層学習を用いた大規模マウスデータに対する睡眠ステージ判定
5. 松下 朋弘
大規模データに対する Affinity Propagation の高速化
6. 安坂 祐紀
ブロックチェーンの機密トランザクションにおける取引者間事前合意プロトコル
7. 岩本 英一
床投影型マイクロタスクシステムにおける歩行者の意図推定に関する研究
8. 水澤 健
クラウドソーシングワークフローにおけるパイプライン処理の効率化
9. Walmor Silveira de Souza
An improved label propagation method for efficient clustering in large-scale networks
10. 楽 桑
Balanced Nearest Neighborhood Query

< 学士 (情報科学, 情報工学) >

1. 大倉 真一希
機械学習を用いたすばる望遠鏡 Hyper Suprime-Cam による遠方銀河観測データの自動分類
2. 小川 大河
転移学習を用いた複数の SNS における年齢推定手法
3. 北出 紘章
分散環境におけるコンテナオーケストレーションシステムのためのライブマイグレーションの実現
4. 栗本 真太郎
プログラム要素のグラフ埋め込みに基づくクラス名推薦
5. 真次 彰平
大規模グラフに対するコミュニティ検索の高精度化に関する研究
6. 三浦 賢人
FPGA によるグラフに対する正規パス問合せ処理の高速化

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. 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) 優秀論文賞 : 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”, 2018 年 6 月 24 日
2. 優秀論文賞 : Masafumi Oyamada, Jianquan Liu, Shinji Ito, Kazuyo Narita, Takuya Araki, Hiroyuki Kitagawa, "Compressed Vector Set: A Fast and Space-Efficient Data Mining Framework", 第 11 回 Web とデータベースに関するフォーラム (WebDB Forum 2018), 2018 年 9 月 12 日.
3. Best Paper Award Runner-up : Hiroyoshi Ito, Toshiyuki Amagasa, "An Optimization Scheme for Non-negative Matrix Factorization under Probability Constraints", Proc. 6th IEEE International Conference on Big Data and Smart Computing (BigComp 2019) , Kyoto, Japan, February 27th - March 2nd 2019.
4. 学生プレゼンテーション賞 : Happy Buzaaba, Amagasa Toshiyuki, "A Scheme for Factoid Question Answering over Knowledge Base", 第 11 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 2019) , G7-5, 2019 年 3 月 6 日.
5. 学生プレゼンテーション賞 : 佐藤 朋紀, 塩川 浩昭, 北川 博之, "グラフの構造情報を用いた ObjectRank の高速化", 第 11 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 2019) , D2-3, 2019 年 3 月 6 日.
6. 学生プレゼンテーション賞 : 那須 勇弥, 中挟 晃介, 北川 博之, "シーケンス OLAP のための複数行パターンマッチング問合せ処理", 第 11 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 2019) , H4-1, 2019 年 3 月 6 日.
7. 学生プレゼンテーション賞 : 松下 朋弘, 塩川 浩昭, 北川 博之, "メッセージ集約に基づく Affinity Propagation の高速化", 第 11 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 2019) , A8-3, 2019 年 3 月 6 日.
8. 優秀インタラクティブ賞 : 安坂 祐紀, 渡辺 知恵美, 天笠 俊之, 北川 博之, "取引額を秘匿したブロックチェーンにおける取引者間合意による資産売買プロトコル", 第 11 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 2019) , I6-4, 2019 年 3 月 6 日.

9. 学生プレゼンテーション賞：住谷 雄樹, 堀江 和正, 塩川 浩昭, 北川 博之, "敵対的生成ネットワークを用いたマウス EEG のノイズ削減手法の提案", 第 11 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 2019), D1-6, 2019 年 3 月 6 日.
10. 学生プレゼンテーション賞：宮本 達朗, 北川 博之, "トピック情報に注目した効率的な Salient Entity 検出手法", 第 11 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 2019), C5-1, 2019 年 3 月 6 日.
11. 学生プレゼンテーション賞：山崎 耕太郎, 塩川 浩昭, 北川 博之, "大規模グラフに対するノードの枝刈りを用いた RankClus の高速化", 第 11 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 2019), F5-3, 2019 年 3 月 6 日.
12. 学生奨励賞：大倉真一希, 伊藤凌平, 大内正己, 天笠俊之, 北川博之, "畳み込みニューラルネットワークを用いたすばる望遠鏡による Lyman-alpha Emitter 観測データの自動分類", 情報処理学会第 81 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2019), 2019 年 3 月 16 日.
13. 学生奨励賞：栗本真太郎, 早瀬康裕, 米内裕史, 伊藤寛祥, 北川博之, "プログラム要素間の関係のグラフ埋め込みに基づくクラス名の調査", 情報処理学会第 81 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2019), 2019 年 3 月 16 日.
14. 学生奨励賞：真次彰平, 塩川浩昭, 北川博之, "属性付きグラフに対する効率的なコミュニティ問合せ処理", 情報処理学会第 81 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2019), 2019 年 3 月 16 日.
15. 学生奨励賞：三浦賢人, 天笠俊之, 北川博之, "FPGA を用いたグラフに対する正規パス問合せの高速化", 情報処理学会第 81 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2019), 2019 年 3 月 14 日～3 月 16 日.
16. 情報処理学会 2018 年度 山下記念研究賞：塩川 浩昭, "分散グラフ処理におけるグラフ分割", 2019 年 3 月 15 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：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 30 年度配分額：8,663,411 円 (直接経費 7,875,829 円：間接経費 787,582 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～令和 2 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 30 年度配分額：9,353,637 円

受託経費：（一財）医療経済研究・社会保険福祉協会 医療経済研究機構（平成 30 年 4 月
1 日～平成 31 年 3 月 31 日）

事業名称：＜政策科学総合研究事業(政策科学推進研究事業)＞

研究課題：ナショナルデータベース (NDB) データ分析における病名決定ロジック作成の
ための研究

研究分担者：北川 博之

平成 30 年度配分額：3,000 千円（直接経費 3,000 千円：間接経費 0 円）

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

研究課題：データエンジニアリングの知見の応用による SKYSEA Client View のログ及び資
産情報の処理の高速化・軽量化・高度化

研究代表者：北川 博之・天笠 俊之

平成 30 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：国立研究開発法人農業・食品産業技術総合研究機構(平成 30 年 11 月 9 日～令和
5 年 3 月 31 日)

事業名称：＜SIP（戦略的イノベーション創造プログラム（スマートバイオ産業・農業基盤
技術）＞

研究課題：脳波解析アルゴリズムおよび睡眠軽度不調評価システムの開発

研究担当者：北川 博之・堀江 和正

平成 30 年度配分額：8,696 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 30 年度配分額：500 千円

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 30 年度配分額：1,837,637 円

研究種目：若手研究 （平成 30 年度～令和 3 年度）

研究課題：超並列計算環境における大規模グラフの実時間問合せ処理

研究代表者：塩川 浩昭

平成 30 年度配分額：1,300 千円

奨学寄付金：富士通研究所（平成 30 年 8 月 8 日～）

研究課題：データ工学を中心とする次世代情報化社会

研究代表者：北川 博之・天笠 俊之

平成 30 年度配分額：1,000 千円（直接経費 900 千円：間接経費 100 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. Yuyang Dong, Hanxiong Chen, Kazutaka Furuse, Hiroyuki Kitagawa, "Efficient Methods for Aggregate Reverse Rank Queries", IEICE Transactions on Information and Systems, 101 (4), pp.1012-1020, 2018.
2. Yuta Kusamura, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, Yusuke Kozawa, "Efficient Position Estimation based on GPU-Accelerated Content-based Image Retrieval", Journal of Mobile Multimedia (JMM), Vol.14, Iss.2, pp.197-230, April 2018.
3. Masafumi Oyamada, Jianquan Liu, Shinji Ito, Kazuyo Narita, Takuya Araki, Hiroyuki Kitagawa, "Compressed Vector Set: A Fast and Space-Efficient Data Mining Framework", Journal of Information Processing, Vol.26, pp.416-426, 2018.

4. Salman Ahmed Shaikh, Yousuke Watanabe, Yan Wang, and Hiroyuki Kitagawa, "Smart Scheme: An Efficient Query Execution Scheme for Event-driven Stream Processing", Knowledge and Information Systems, Springer, 2018 (Published online).
5. Yuyang Dong, Hanxiong Chen, Jeffery Xu Yu, Kazutaka Furuse and Hiroyuki Kitagawa, "Weighted Aggregate Reverse Rank Queries", ACM Transactions on Spatial Algorithms and Systems (TSAS), pp.5:1.-5:23, 2018.
6. Yuyang Dong, Hanxiong Chen, Kazutaka Furuse, Hiroyuki Kitagawa, "Bound-and-filter Framework for Aggregate Reverse Rank Queries", Transactions on Large-Scale Data and Knowledge-Centered Systems (TLDKS)XXXVIII, pp.1-26, 2018.
7. Eiichi Iwamoto, Masaki Matsubara, Chihiro Ota, Tsutomu Terada, Satoshi Nakamura, Hiroyuki Kitagawa, and Atsuyuki Morishima, "Passerby Crowdsourcing: Workers' Behavior and Data Quality Management", Proceedings of the ACM on Interactive, Mobile, Wearable and Ubiquitous Technologies, pp.169:1--169:20, 2018.
8. 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", 日本データベース学会和文論文誌, Vol.17-J, Article No.2, 2019 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

1. Hiroyuki Kitagawa, "Towards Ubiquitous Big Data Analytics and Management: Research Issues and Challenges", The 6th International Conference on Big Data Applications and Services (BIGDAS2018) (Keynote Talk), Zhengzhou, China, August 20, 2018.
2. Hiroyuki Kitagawa, "Machine Learning Approach to Automated Sleep Stage Analysis", The 10th Symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (Invited Talk), University of Tsukuba, Japan, October 16, 2018.

B) 一般講演

<査読付き国際会議論文>

1. Tomoki Sato, Hiroaki Shiokawa, Yuto Yamaguchi, Hiroyuki Kitagawa, "FORank: Fast ObjectRank for Large Heterogeneous Graphs", In Companion Proceedings of the The Web Conference 2018 (WWW 2018), pp.103-104, Lyon, France, April 23-27, 2018.

2. Hiroaki Shiokawa, Tomokatsu Takahashi and Hiroyuki Kitagawa, "ScaleSCAN: Scalable Density-based Graph Clustering", Proc. 29th International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2018), LNCS11029, pp.18-34, Regensburg, Germany, September 2018.
3. Kenta Sugano, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "Approximate Set Similarity Join using Many-core Processors", Proc. 29th International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2018) (Short Paper) ,LNCS11030,pp.214-222, Regensburg, Germany, September 2018.
4. Kotaro Yamazaki, Tomoki Sato, Hiroaki Shiokawa and Hiroyuki Kitagawa, "Fast Algorithm for Integrating Clustering with Ranking on Heterogeneous Graphs", Proc. 20th International Conference on Information Integration and Web-based Applications and Services (iiWAS 2018) , Yogyakarta, Indonesia, November 2018.
5. Tomohiro Matsushita, Hiroaki Shiokawa and Hiroyuki Kitagawa, "C-AP: Cell-based Algorithm for Efficient Affinity Propagation", Proc. 20th International Conference on Information Integration and Web-based Applications and Services (iiWAS 2018), Yogyakarta, Indonesia, November 2018.
6. Hiroaki Shiokawa and Yasunori Futamura, "Graph Clustering via Cohesiveness-aware Vector Partitioning", Proc. 20th International Conference on Information Integration and Web-based Applications and Services (iiWAS 2018) , Yogyakarta, Indonesia, November 2018.
7. Ken Mizusawa, Keishi Tajima, Masaki Matsubara, Toshiyuki Amagasa, Atsuyuki Morishima, "Efficient Pipeline Processing of Crowdsourcing Workflows", Proc. 27th ACM International Conference on Information and Knowledge Management (CIKM 2018) (short Paper), pp.1559-1562, Torino, Italy, October 22-26, 2018.
8. Yusuke Suzuki, Masaki Matsubara, Keishi Tajima, Toshiyuki Amagasa, Atsuyuki Morishima, "A Cache-based Approach to Dynamic Switching between Different Dataflows in Crowdsourcing", In Proceedings of The Second IEEE Workshop on Human-in-the-loop Methods and Human Machine Collaboration in BigData (IEEE HMDData2018), pp.3551-3553, Seattle, USA, December 10-13, 2018.
9. Hiroyoshi Ito, Toshiyuki Amagasa, "An Optimization Scheme for Non-negative Matrix Factorization under Probability Constraints", Proc. 6th IEEE International Conference on Big Data and Smart Computing (BigComp 2019) , Kyoto, Japan, February 27th - March 2nd 2019.
10. Savong Bou, Hiroaki Shiokawa, Yasuhiro Hayase, Hiroyuki Kitagawa, "StreamingCube-based Analytical Framework for Environmental Data Analysis", 1st International Workshop on Big data, cloud, and IoT technologies for smart cities (IWBigDataCity 2019), co-located with Proc.

6th IEEE International Conference on Big Data and Smart Computing (BigComp 2019), Kyoto, Japan, February 27th - March 2nd 2019.

11. Yuki Yasusaka, Chiemi Watanabe, Hiroyuki Kitagawa, "Privacy-Preserving Pre-Consensus Protocol for Blockchains", 1st International Workshop on Big data, cloud, and IoT technologies for smart cities (IWBigDataCity 2019), co-located with Proc. 6th IEEE International Conference on Big Data and Smart Computing (BigComp 2019), Kyoto, Japan, February 27th - March 2nd 2019.

(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. 米内 裕史, 早瀬 康裕, 北川 博之, "メソッド呼び出し関係に基づくメソッド名の予測", ソフトウェアエンジニアリングシンポジウム 2018 (SES-2018), (to appear), 2018 年 9 月 5 日-2018 年 9 月 7 日.

<学会発表>

1. Masafumi Oyamada, Jianquan Liu, Shinji Ito, Kazuyo Narita, Takuya Araki, Hiroyuki Kitagawa, "Compressed Vector Set: A Fast and Space-Efficient Data Mining Framework", 第 11 回 Web とデータベースに関するフォーラム (WebDB Forum 2018), 2018 年 9 月 12 日.
2. Yuyang Dong, Hanxiong Chen, Hiroyuki Kitagawa, "Monitoring Dynamic Spatial Keyword Data", iDB 特別セッション, 第 11 回 Web とデータベースに関するフォーラム (WebDB Forum 2018), 2018 年 9 月 12 日.
3. 安坂 祐紀, 渡辺 知恵美, 天笠 俊之, 北川 博之, "プライバシーを考慮したブロックチェーンの取引者間事前合意プロトコル", コンピュータセキュリティシンポジウム 2018 (CSS 2018), 論文集 pp.850-856, 2018 年 10 月 22 日~10 月 25 日.
4. Savong Bou, Hiroyuki Kitagawa, Toshiyuki Amagasa, "CBiX: Incremental Sliding-Window Aggregation For Real-Time Analytics Over Out-of-Order Data Streams", 第 11 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 2019), F7-5, 2019 年 3 月 4 日~3 月 6 日.
5. Happy Buzaaba, Amagasa Toshiyuki, "A Scheme for Factoid Question Answering over Knowledge Base", 第 11 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 2019), G7-5, 2019 年 3 月 4 日~3 月 6 日.

6. 佐藤 朋紀, 塩川 浩昭, 北川 博之, "グラフの構造情報を用いた ObjectRank の高速化", 第 11 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 2019), D2-3, 2019 年 3 月 4 日～3 月 6 日.
7. 那須 勇弥, 中挟 晃介, 北川 博之, "シーケンス OLAP のための複数行パターンマッチング問合せ処理", 第 11 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 2019), H4-1, 2019 年 3 月 4 日～3 月 6 日.
8. 松下 朋弘, 塩川 浩昭, 北川 博之, "メッセージ集約に基づく Affinity Propagation の高速化", 第 11 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 2019), A8-3, 2019 年 3 月 4 日～3 月 6 日.
9. 安坂 祐紀, 渡辺 知恵美, 天笠 俊之, 北川 博之, "取引額を秘匿したブロックチェーンにおける取引者間合意による資産売買プロトコル", 第 11 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 2019), I6-4, 2019 年 3 月 4 日～3 月 6 日.
10. 山部 剛士, 堀江 和正, 塩川 浩昭, 柳沢 正史, 北川 博之, "大規模マウス睡眠ステージ解析のための深層学習モデルの開発", 第 11 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 2019), A3-5, 2019 年 3 月 4 日～3 月 6 日.
11. 住谷 雄樹, 堀江 和正, 塩川 浩昭, 北川 博之, "敵対的生成ネットワークを用いたマウス EEG のノイズ削減手法の提案", 第 11 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 2019), D1-6, 2019 年 3 月 4 日～3 月 6 日.
12. 宮本 達朗, 北川 博之, "トピック情報に注目した効率的な Salient Entity 検出手法", 第 11 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 2019), C5-1, 2019 年 3 月 4 日～3 月 6 日.
13. 山崎 耕太郎, 塩川 浩昭, 北川 博之, "大規模グラフに対するノードの枝刈りを用いた RankClus の高速化", 第 11 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 2019), F5-3, 2019 年 3 月 4 日～3 月 6 日.
14. 米内 裕史, 早瀬 康裕, 北川 博之, "コールグラフの分散表現を利用したメソッド名予測手法の定量的評価化", 第 11 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 2019), G1-4, 2019 年 3 月 4 日～3 月 6 日.
15. 大倉 真一希, 天笠 俊之, 伊藤 凌平, 大内 正己, 北川 博之, "畳み込みニューラルネットワークを用いたすばる望遠鏡 Hyper Suprime-Cam による遠方銀河 Lyman-alpha emitter の観測データの自動分類", 第 11 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 2019), F8-1, 2019 年 3 月 4 日～3 月 6 日.
16. 真次 彰平, 塩川 浩昭, 北川 博之, "属性付きグラフに対するビームサーチを用いたコミュニティ検索", 第 11 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 2019), D7-1, 2019 年 3 月 4 日～3 月 6 日.

17. 三浦 賢人, 天笠 俊之, 北川 博之, "FPGA を用いたグラフに対する正規パス問合せアクセラレータ", 第 11 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 2019), D7-2, 2019 年 3 月 4 日～3 月 6 日.
18. 大倉 真一希, 伊藤 凌平, 大内 正己, 天笠 俊之, 北川 博之, "畳み込みニューラルネットワークを用いたすばる望遠鏡による Lyman-alpha Emitter 観測データの自動分類", 情報処理学会第 81 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2019), 2019 年 3 月 14 日～3 月 16 日.
19. 北出 紘章, 塩川 浩昭, 北川 博之, "分散環境におけるコンテナ オーケストレーション システムのためのライブ マイグレーションの実現", 情報処理学会第 81 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2019), 2019 年 3 月 14 日～3 月 16 日.
20. 栗本 真太郎, 早瀬 康裕, 米内 裕史, 伊藤 寛祥, 北川 博之, "プログラム要素間の関係のグラフ埋め込みに基づくクラス名の調査", 情報処理学会第 81 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2019), 2019 年 3 月 14 日～3 月 16 日.
21. 真次 彰平, 塩川 浩昭, 北川 博之, "属性付きグラフに対する効率的なコミュニティ問合せ処理", 情報処理学会第 81 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2019), 2019 年 3 月 14 日～3 月 16 日.
22. 三浦 賢人, 天笠 俊之, 北川 博之, "FPGA を用いたグラフに対する正規パス問合せの高速化", 情報処理学会第 81 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2019), 2019 年 3 月 14 日～3 月 16 日.
23. 大森 雄基, 北川 博之, "Twitter における投稿内容とユーザ間関係を用いたユーザの居住地推定", 電子情報通信学会 2019 年総合大会, D-4-9, 2019 年 3 月 21 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 (IIIS) との連携：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.
- 医学医療系との連携：レセプトデータベースの構築, 解析
- 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

- JAXA 第三研究ユニットとの連携：開発ビッグデータの活用

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

- IEEE Big Data and Smart Computing2019 (IEEE BigComp2019) , 京都大学国際科学イノベーション棟 (京都府京都市) , 2019 年 2 月 27 日 (水) ～3 月 2 日 (土) .
- 1st International Workshop on Big data, cloud, and IoT technologies for smart cities (IWBigDataCity 2019) (IEEE BigComp 2019 と併設) , 京都大学国際科学イノベーション棟 (京都府京都市) , 2019 年 2 月 27 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
 - 計算科学研究センター：計算情報学研究部門主任，計算科学振興室長，ビッグデータ・AI 連携推進室長
 - 人工知能科学センター：人工知能基盤研究部門長
 - 情報科学類：広報企画委員会委員
 - コンピュータサイエンス専攻：国際交流委員会委員
 - ヒューマニクス学位プログラム：運営委員会オブザーバ

天笠俊之教授

- 学外
 - JAXA 内研究確認会アドバイザー
- 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
 - 筑波大学情報ガバナンス基盤室員
 - 筑波大学附属図書館オープンアクセス専門委員

塩川浩昭助教

- 学外
 - 該当なし.
- 学内
 - 計算科学研究センター：セキュリティ委員会委員
 - 情報科学類：カリキュラム委員会委員，企画広報委員会委員，クラス担任

- コンピュータサイエンス専攻：広報委員会委員，企画委員会委員

堀江和正助教

- 学外
 - 該当なし.
- 学内
 - 情報科学類：カリキュラム委員会委員
 - ヒューマニクス学位プログラム：準備委員会委員，広報委員会副委員長，運営委員会委員

10. 社会貢献・国際貢献

北川博之教授

- 国際委員等
 - 国際ジャーナル編集委員：IEEE Transactions on Big Data, World Wide Web Journal
 - 国際会議運営委員：VLDB2020 組織委員長，IEEE Bigcomp 2019 共同プログラム委員長，Vice Chair of KJDB Working Group, DASFAA Steering Committee Member Emeritus
- 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
 - IEEE BigComp 2019 Publication co-chair
 - IEEE ICDE 2019 プログラム委員
- 国内委員等
 - ACM SIGMOD 日本支部 副支部長
 - 情報処理学会データベースシステム研究会（DBS）幹事

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：IJCAI2019, AAAI2019, PAKDD2019, BigComp2019, ICSC2019, IWBIGDataCity2019, xSIG2019
- 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）

- 電子情報通信学会 2019 総合大会 プログラム編成委員
- 第 11 回 Web とデータベースに関するフォーラム (WebDB Forum 2018), Web 広報委員長
- 第 11 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2019), 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

堀江和正助教

- 国際委員等
 - 該当なし.
- 国内委員等
 - 該当なし.

11. その他

該当なし.

VIII-2. 計算メディア分野

1. メンバー

教授	亀田 能成
准教授	北原 格
助教	宋戸 英彦
学生	大学院生 21 名、学類生 4 名、研究生 1 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。

視覚障害者や歩行者その他を対象にした行動支援の研究は、外部との共同研究を進める機会を得て、本年度から新たに二つの科研費（基盤研究 B）の研究分担者として研究展開を進めることになった。スポーツ関係の映像解析および VR 利用による可視化とスキル習得の方法論についても順調に研究が進展している。

科研費（基盤研究 B・代表：北原）では、撮影空間の周囲と内部に配置したカメラで撮影した映像を切り替えながら提示することによって、多様な観点で撮影空間を観察する映像閲覧方式を提案した。JST CREST Social Imaging（代表：システム情報系 鈴木健嗣）では、撮影から提示までをリアルタイムで処理する多視点映像提示方式に、注視点再設定と視点切替え処

理の自動化機能を追加した，リアルタイム視覚フィードバックシステムを実現した．JST CREST CyborgCrowd（代表：図書館情報メディア系 森嶋厚行）では，JST CREST 海外派遣事業で宍戸をイギリス University of Surry に 5 ヶ月派遣し，深層学習処理の一つである自己符号化器を用いた対応点探索法の考案，および，それに基づいた数十年過去の画像と現在の画像のマッチング処理を実現した．

下記に，外部予算による研究計画の進捗について簡潔に示す．次節では研究成果の幾つかについて述べる．

- 科研費・基盤研究(B)「経路撮影に基づく歩行者・パーソナルモビリティナビゲーション基盤の構築」代表：亀田能成（研究分担者：北原）
 - 視覚障害者が持つ一人称視点映像からの経路上の位置推定技術を，画像検索に加えて，SLAM の技法も統合することを視野に入れて改良を進めた．
- 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」代表：高木英樹（研究分担者：亀田）
 - 研究成果の詳細は 3.【1】の「ホモグラフィ変換と画素分布に基づく競泳者位置推定」参照．
- 科研費・基盤研究(B)「日本版シェアードスペースのためのデザインシステム構築」代表：山本早里（研究分担者：亀田）
 - シェアードスペースにおける歩行者などのリスク計量化とその表示技術について研究を進めた．
- 科研費・基盤研究(B)「歩行中の視覚障害者の外界知覚と地理知識」代表：喜多伸一（研究分担者：亀田）
 - 視覚障害者の誘導のためのヒューマンインタフェースについて，歩行形態に合わせた提示を実現する方法を考案し，その実現のための研究開発を進めた．
- 科研費・基盤研究(B)「不特定人称視点映像を用いたコミュニケーション型教示映像メディア」代表者：北原格（研究分担者：亀田）
 - 研究成果の詳細は 3.【2】の「多視点映像を用いた不特定人称視点映像の閲覧方式」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）
 - 研究成果の詳細は 3.【3】の「多視点映像によるオンサイト視覚フィードバック方式」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、「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.【4】の「文化遺産建造物を対象とした 3 次元復元に関する研究」を参照
- 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生成方式を実現した.
- 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、多数のユーザから寄せられた映像情報を統合し、様々な視点からの観測を可能とする提示方式を実現した.
- 科研費・基盤研究(B) 「柔軟臓器の形状推定と術前モデルへの実時間位置合わせを行う肝手術ナビゲーション開発」 (2018-2021 年度)代表者：大城幸雄（研究分担者：北原）
 - 肝臓手術のバーチャルナビゲーションシステムの実現を目指し、腹腔鏡映像から内臓の 3 次元形状復元に関する研究に取り組んだ.
- 共同研究・日本電気株式会社「動的環境におけるカメラキャリブレーション」代表者：北原格
 - 歩行者などが行き交う動的な環境において、複数のカメラのキャリブレーションを効率的に行うことを目的とした研究に取り組み、人物の移動情報を手がかりとしたカメラパラメータ推定法を考案した.
- 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)
 - 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. トップアスリートの撮影実験を実施し、提案手法の有効性を確認した.
- JSPS CREST AIP チャレンジ PRISM 加速支援 (PRISM トップ人材育成) 「マーカレス 3 次元関節位置情報に基づく心拍推定に関する研究」 (宍戸)
 - 計測した 3 次元関節位置情報と心拍情報の関連性を深層学習することによって、スポーツ競技映像からの心拍推定を実現した. バドミントン競技の撮影および心拍計測実験を実施し、データセットを作成し、提案アルゴリズムの推定精度を検証した.

3. 研究成果

【1】 ホモグラフィ変換と画素分布に基づく競泳者位置推定

競泳競技において、パフォーマンスは特定の地点の通過時刻に基づいて評価されてきた。この方法では、レース進行に基づく速度変化などを詳細に調べることができない。本研究では観客席の最上段にカメラを設置するだけで、時間軸に沿った詳細なパフォーマンス解析を可能にする映像解析の研究を進めてきた。このアプローチにより、撮影した競泳プールから全てのレーンの泳者情報を分析することが可能である。競泳では競技者は概ね水面近辺に存在することから、競泳プール映像に対してホモグラフィ変換を行って映像をプール水面に対して正規化する。その後、競泳特有の事象に対応した背景差分法と対象領域中の画素の色分布に着目して泳者位置を推定する。本手法により、映像のフレームごとでの位置推定を実現することに成功した。

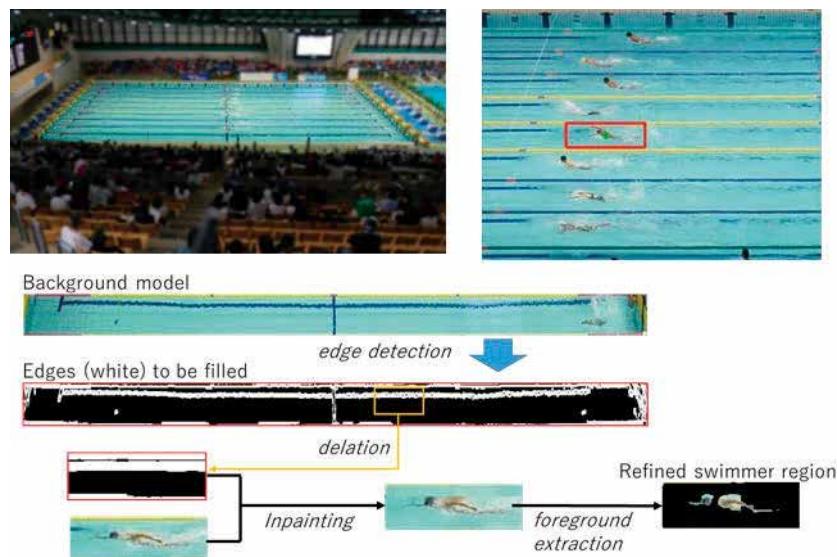


図 1. プール映像からの泳者位置推定

【2】 多視点映像を用いた不特定人称視点映像の閲覧方式

作業支援を目的とした映像記録では、手持ちカメラや少数台の固定カメラによる撮影が一般的である。しかし、複数人によるコミュニケーションの状況分析では、人物の注目方向や、表情、手の動きなどが重要な情報となるため、少数台のカメラでは被写体とカメラの位置関係によっては映像の撮り逃しが発生し、映像分析が困難となる問題が存在する。

本研究では、図 2 に示すように、撮影空間を外部から撮影した Outside-In 映像に加え、撮影空間内部から外向きに撮影した Inside-Out 映像を用いることにより、双方の長所を兼ね備えた映像閲覧システムを考案し、Outside-In 映像のみでは観察が困難な詳細な観察を実現した。その際、被写体の周囲に設置したカメラ映像と撮影空間内部に設置したカメラ映像を単純に

切り替えるだけでは、被写体や背景の見え方が急激に変化するため、切り替わり前後の空間的な位置関係の把握が困難となることが懸念される。そこで、両映像視点間を滑らかに遷移させる映像を合成することで問題の解決を図った。撮影空間を様々な角度から閲覧することにより、作業者（一人称）視点、指示者（二人称）視点、参加者（三人称）視点のみならず、俯瞰視点や空間中に配置された物体視点からの見え方（不特定人称映像）の観察が可能であり、作業支援を目的とした映像記録・教示メディアとしての新しい可能性を示した。

提案システムの有効性を検証するため、空間分解能マップに基づく定量的評価実験を行った。Inside-Out カメラを設置した場合、設置しなかった場合に比べ空間分解能が高い領域が増加していることを確認した。特に、Inside-Out カメラを用いて表情や視線といった細部の観察を行いたい人物の正面領域で効果が顕著に表れていた。また、NASA-TLX を用いて本システムの定性的評価実験を実施した。Inside-Out カメラを設置した結果、総合的な評価指標である WWL が改善し、本閲覧方式を用いた観察作業は心的負荷を軽減する効果があることが確認された。

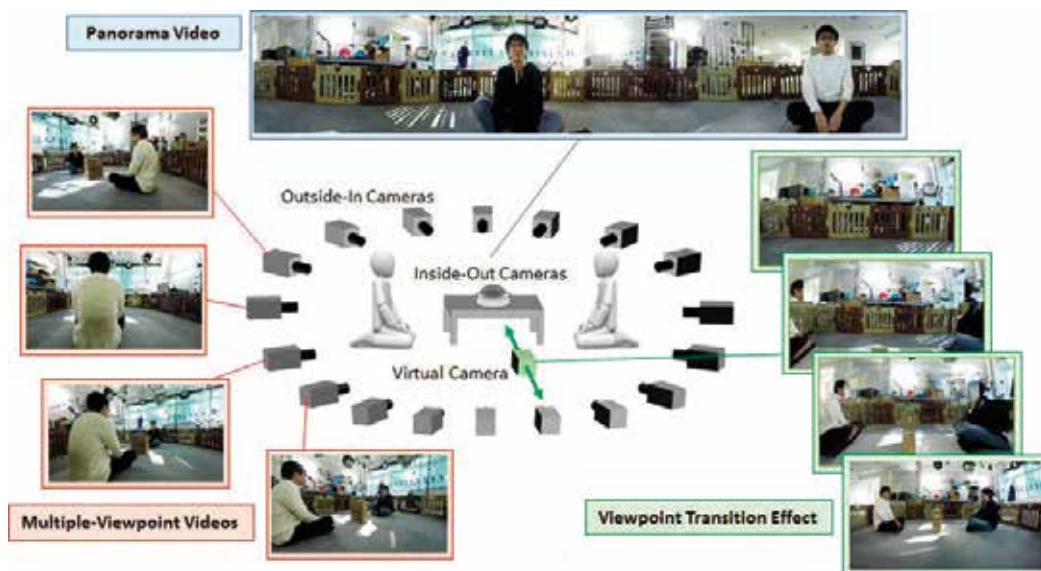


図 2. 提案システムの全体図と撮影映像

【3】 多視点映像によるオンサイト視覚フィードバック方式

本研究では、図 3 に示すように多数のカメラで同一シーンを様々な角度から撮影した多視点映像を用いることにより、視覚フィードバック方式の実現を目的とした研究に取り組んだ。多数枚の画像の切替え提示によって視点移動感を再現するバレットタイム映像は、自由視点映像と異なり、撮影シーンの 3 次元形状を推定する必要がないため、高品質な映像を高速に生成・提示することが可能である。バレットタイム映像をオンサイト視覚フィードバックに導入するためには、次の二つの要件を満たす必要があった。

(要件 1) バレットタイム映像のリアルタイム生成：映像の撮影・加工・提示の全ての多視点映像を 1 台の計算機に集約することで、多視点映像データの計算機への取込み処理、および映像生成・提示に要する計算コストの課題を解決し、リアルタイムフィードバックが可能なシステムを実現した。

(要件 2) 閲覧操作の簡易化：閲覧者が観察に集中できるよう閲覧操作を簡易化する。具体的には、(a)注視点再設定の自動化、(b)多視点映像の切り替えの自動化の二つの処理をシステムに導入した。

(a)注視点再設定の自動化：バレットタイム映像では、滑らかな多視点映像の切り替えを実現するために、全てのカメラの光軸が撮影空間中の一点（注視点）で交わるようにカメラの姿勢を調整する必要がある。リアルタイム 3 次元センサとリアルタイムバレットタイム映像生成方式を組み合わせることにより、注視点再設定の自動化を実現した。

(b)多視点映像の切り替えの自動化：機械学習によりキーフレームを学習し、動作中のキーフレームを検出することで、各キーフレームにおいて、観察に適した方向から撮影された多視点映像への切り替え処理の自動化を実現した。

ピッチングフォームのトレーニング支援を想定した実証実験を実施し、オンサイト視覚フィードバックの動作確認とその有効性を確認した。



図 3. オンサイト視覚フィードバック方式の構成（左）と自動化された閲覧者の操作（右）

【4】 文化遺産建造物を対象とした 3 次元復元に関する研究

画像情報を用いた画像の重ね合わせ手法は、コンピュータビジョンの重要な研究テーマとされている。中でも、様々な角度から撮影された多数の画像を用いた 3 次元点群の推定及びカメラ位置姿勢推定の研究に注目が集まっている。本研究では、図 4 に示すような文化遺産建造物の 50-100 年前までの画像と現在の画像群を用いて、過去の写真と現在の写真の画像マッチングを目的とする。図 3 に示す文化遺産建造物の過去の写真と現在の写真では、長期間に渡る建物の形状劣化により、レリーフなどの模様によって生じる勾配強度を手がかりとし

たマッチング処理の適用が困難となる問題が存在する。また、門や柱などの建物を構成する外観の特徴における勾配強度のマッチングは取得できるが、図 4 中段に示すように、勾配強度の強い特徴量は建物に对称性がある場合、正対応と誤対応が混在する。

本手法では、自己符号化器を利用して勾配強度の強い特徴量の正対応だけを残し、Guided Matching 手法を活用して画像中の正対応を再探索することで、建物に对称性がある場合に発生する誤対応の問題を解決した。コーナー検出に特化した FAST 特徴量を用いることで、自己符号化器による小さな次元の出力画像においても門や柱などの建物を構成する外観の特徴点を検出した。この問題を解決することにより、数十年単位の過去の画像と現在の画像マッチング結果から、3次元モデル生成のための過去の画像のカメラの位置姿勢推定を実現した。今後は、3次元モデルの時系列変化映像を生成し、過去から現在までの文化遺産建造物の変形の可視化に取り組む予定である。

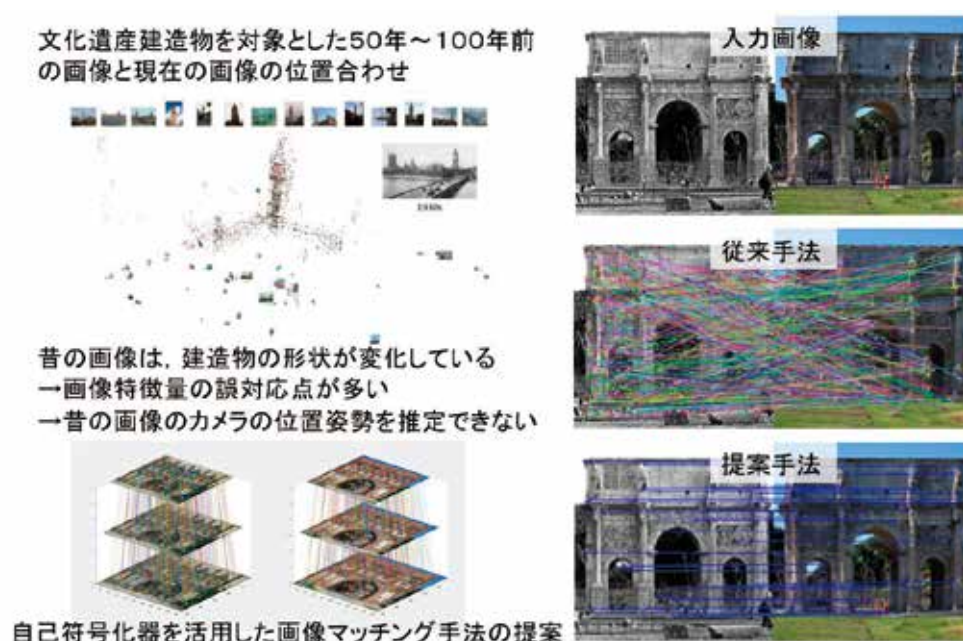


図 4. 文化遺産建造物の画像を用いた画像マッチング

4. 教育

学生の指導状況（学生氏名、学位の種類、論文名）

永井 隆昌	修士(工学)	視点映像によるオンサイト視覚フィードバック方式
岡田 庸佑	修士(工学)	大規模空間における動的シーン状況把握のための多視点映像切替方式
坂村 祐希	修士(工学)	拡張現実を用いた自動走行車両搭乗者の安心感の操作
関井 駿	修士(工学)	単眼映像から推定した位置情報に基づくバドミントン選手の運動分析方式
鈴木 啓太	修士(工学)	サッカーシーンを対象とした多視点カメラ配置検討のための VR 環境の構築

ZHA WANZHI	修士(工学)	A Clustering Method of Point Clouds Estimated From Multiple Viewpoint Images of Rocks Using Adjacent Angles of Surface Planes
南雲 悠太	修士(工学)	コンパニオンロボットによる歩行者誘導のためのフィードバックの検討

武田 隆雅	学士(工学)	多視点画像から復元した 3 次元形状に基づく建築物の倒壊判定法
蛭田 雄也	学士(工学)	Inside-Out 映像中の鏡像領域を利用した一人称視点映像生成法
石川 晋也	学士(工学)	バスケットボール VR シミュレータにおける視覚探索運動の指標化
山崎 陸	学士(工学)	パーソナルトランスポーターの精密な挙動計測によるハンズフリー操作の解析

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」

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. The 2019 Joint International Workshop on Advanced Image Technology International Forum on Medical Imaging in Asia, IWAIT Best Paper Award (2019/1)
2. JST CREST 第 2 回 AIP チャレンジプログラム AIP ネットワークラボ長賞 2018 年 4 月

外部資金

- 科研費・基盤研究(B)「経路撮影に基づく歩行者・パーソナルモビリティナビゲーション基盤の構築」代表者: 亀田能成 2018 年度 416 万円
- 科研費・基盤研究(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 2018 年度 416 万円
- 共同研究・日本電気株式会社「動的環境におけるカメラキャリブレーション」代表者: 北原格 2018 年度 100 万円
- JST CREST AIP チャレンジ PRISM 加速支援 (PRISM トップ人材育成)「マーカレス 3 次元関節位置情報に基づく心拍推定に関する研究」2018 年度 代表者: 宍戸英彦 390 万円

- 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」(2017-2018 年度) 代表者：宍戸英彦 403 万円
- 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」代表者：高木英樹 (研究分担者：亀田) 2018 年度 39 万円
- 科研費・基盤研究 (B)「日本版シェアードスペースのためのデザインシステム構築」代表者：山本早里 (研究分担者：亀田) 130 万円
- 科研費・基盤研究 (B)「歩行中の視覚障害者の外界知覚と地理知識」代表者：喜多伸一 (研究分担者：亀田) 117 万円
- 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) 2018 年度 1200 万円
- 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) 2018 年度 200 万円
- 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) 2018 年度 65 万円
- 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) 2018 年度 10 万円
- 科研費・基盤研究(B)「柔軟臓器の形状推定と術前モデルへの実時間位置合わせを行う肝手術ナビゲーション開発」(2018-2021 年度)代表者：大城幸雄 (研究分担者：北原) 2018 年度 50 万円

知的財産権

(種別、氏名、課題名、年月日)

- 特許、北原格、映像処理システム及び映像処理装置 (特願 2018-219927)、2018 年 11 月 26 日

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. Itaru Kitahara, Youhei Kawamura, Yasunori Endo, Erkan Topal, Ryo Degawa, Samson Mazara, and Hyongdoo Jang, "Development of 3D Rock Fragmentation Measurement System Using Photogrammetry", Taylor Francis, International Journal of Mining, Reclamation and Environment (NSME), (DOI: 10.1080/17480930.2019.1585597), 2019. (accepted)
2. 謝 淳, 高橋 一誠, 大木 美加, ブロー バティスト, 鈴木 健嗣, 北原 格, "視覚教示による学習支援のための大規模床面投影システム", 電子情報通信学会和文論文誌 A, Vol.J102-A, No.2, pp.68-79, 2019.
3. Issey Takahashi, Mika Oki, Baptiste Bourreau, Itaru Kitahara, and Kenji Suzuki, "An Empathic Design Approach to an Augmented Gymnasium in a Special Needs School Setting", International Journal of Design, Vol.12, No.3, pp.111-125, 2018.
4. 永井 隆昌, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, "多視点映像コンテンツによるオンライン視覚フィードバック方式", 映像情報メディア学会誌, Vol.72 (2018), No.9, pp.J119-J124, 2018.

B) 査読無し論文

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Itaru Kitahara "Keynote: Augmented Reality Display for Visually Supporting Human on a Vehicle", International Workshop on Comfort Intelligence with AR for Autonomous Vehicle, 2018/10/20.
2. Itaru Kitahara, "Free-Viewpoint Video Generation in Sports Stadium", 3DSA2018, 2018/8/30, Taipei.

B) 一般講演

1. Nobuyuki Kitamura, Hidehiko Shishido, Tokuya Enomoto, Yoshinari Kameda, Jun-Ichi Yamamoto and Itaru Kitahara, "Development of Multi-View Video Browsing Interface Specialized for Developmental Child Training," Asia Pacific Workshop on Mixed and Augmented Reality (APMAR2019), 8 pages, (2019/3).
2. Cesar Daniel Rojas Ferrer, Hidehiko Shishido, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, "Visual exploratory activity under microgravity conditions in VR: An exploratory study during a parabolic flight," The 26th IEEE Conference on Virtual Reality and 3D User Interfaces (IEEE VR 2019), 2 pages, (2019/3).

3. Tayakuki Tsumita, Hidehiko Shishido, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, "Swimmer Position Estimation by Lane Rectification," International Workshop on Advanced Image Technology, 5 pages, (2019/1).
4. Yosuke Okada, Hidehiko Shishido, Masaaki Koido, Yoshinari Kameda, Itaru Kitahara, "Automatic camera-work generation of bullet-time video for soccer scene," The 15th ACM SIGGRAPH European Conference on Visual Media Production (CVMP2018), 1pages, (2018/12).
5. Chun Xie, Hidehiko Shishido, Mika Oki, Yoshinari Kameda, Kenji Suzuki, Itaru Kitahara, "A Calibration Method of Floor Projection System for Learning Aids at School Gym," Third IEEE International Conference on Image Processing, Applications and Systems (IPAS 2018), 6pages, (2018/12).
6. Koyo Kobayashi, Hidehiko Shishido, Yoshinari Kameda, Itaru Kitahara, "A Method to Collect Multi-view Images of High Importance Using Disaster Map and Crowdsourcing," The Second IEEE Workshop on Human-in-the-loop Methods and Human Machine Collaboration in BigData (IEEE HMDData2018), pp.3509-3511, (2018/12).
7. Hidehiko Shishido, Emi Kawasaki, Yutaka Ito, Youhei Kawamura, Toshiya Matsui, Itaru Kitahara, "Time-Lapse Image Generation using Image-Based Modeling by Crowdsourcing," The Second IEEE Workshop on Human-in-the-loop Methods and Human Machine Collaboration in BigData (IEEE HMDData2018), pp.3540-3541, (2018/12).
8. Yuki Sakamura, Akitoshi Tomita, Hidehiko Shishido, Tazu Mizunami, Kazuya Inoue, Yoshinari Kamedas, Etsuko T. Harada, Itaru Kitahara, "A Virtual Boarding System of an Autonomous Vehicle for Investigating the Effect of an AR Display on Passenger Comfort," International Workshop on Comfort Intelligence with AR for Autonomous Vehicle 2018, 6 pages, (2018/10).
9. Takasuke Nagai, Hidehiko Shishido, Yoshinari Kameda, Itaru Kitahara, "An On-site Visual Feedback Method Using Bullet-Time Video," ACM Multimedia Conference (1st International Workshop on Multimedia Content Analysis in Sports), 6 pages, (2018/10).
10. Oto Takeuchi, Hidehiko Shishido, Yoshinari Kameda, Hansung Kim, Itaru Kitahara, "Generation Method for Immersive Bullet-Time Video Using an Omnidirectional Camera in VR Platform," ACM Multimedia 2018 Workshop on Audio-Visual Scene Understanding for Immersive Multimedia, 8 pages, (2018/10).
11. Naoki Shimura, Hidehiko Shishido, Yoshinari Kameda, Kenji Suzuki, Itaru Kitahara, "Xth Person View Video for Observation from Diverse Perspectives," 7th International Conference on Informatics, Electronics & Vision (ICIEV), 6 pages, (2018/6).

12. Cesar Daniel Rojas Ferrer, Hidehiko Shishido, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, "Realization of a full-body immersive VR system for READ-THE-GAME skill development," The 2nd Asia-Pacific Workshop on Mixed and Augmented Reality (APMAR), 4 pages, (2018/4).
13. Qiu Xin Yi, Hidehiko Shishido, Yoshinari Kameda, Itaru Kitahara, "Bullet-Time Book: Augmentation of Visual Information in Figures by Bullet-Time Video Display," The 2nd Asia-Pacific Workshop on Mixed and Augmented Reality (APMAR), 4 pages, (2018/4).

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

B) その他の発表

1. 小林 洸陽, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, "3 次元画像処理とクラウドソーシングによる被災状況マップ生成法", 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, 2019 年 3 月.
2. 竹内 音, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, "敵対的生成ネットワークを用いた全方位自由視点画像の生成に関する検討", 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, 2019 年 3 月.
3. 南雲 悠太, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, "歩行者を先導するコンパニオンロボットの間合いの調査", 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, 2019 年 3 月.
4. 永井 隆昌, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, "運動学習のための映像情報を用いたオンサイト視覚フィードバック方式", 情報処理学会コンピュータビジョンとイメージメディア研究会(CVIM), 8 pages, 2019 年 3 月.
5. 岡田 庸佑, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, "大規模空間における動的シーン状況把握のための多視点映像切替手法", 情報処理学会コンピュータビジョンとイメージメディア研究会(CVIM), 8 pages, 2019 年 3 月.
6. 宍戸 英彦, "マーカレス 3 次元関節位置情報に基づく心拍推定に関する研究", AIP チャレンジ PRISM 加速支援成果報告会, 2019 年 3 月.
7. 山崎 康平, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, "類似画像検索と SLAM の同時利用による歩行者位置推定の頑健性向上", 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.118, no.405, pp.1-4, 2019 年 1 月.

8. 小河原 洸貴, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, "類似画像検索による歩行位置精度向上のための凸包の利用", 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.118, no.405, pp.5-10, 2019 年 1 月.
9. Zhang Weiyi, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, "路面におけるパーソナルトランスポートの安全領域の可視化", HCG シンポジウム 2018, HCG2018-C-4-3, 4 pages, 2018 年 12 月.
10. 今井 美里, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, "HMD スキーシミュレータにおける臨場感向上のための重心と風の利用", HCG シンポジウム 2018, HCG2018-A-6-5, 4 pages, 2018 年 12 月.
11. 亀田 能成, 今井 健太, 釜坂 一步, 渡辺 哲也, 関 喜一, 喜多 伸一, "岡本商店街における野外ナビゲーション実験実施報告", 第 44 回感覚代行シンポジウム, 4 pages, 2018 年 12 月.
12. 野原 直翔, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, "バックネット裏からの映像を用いた投球フォーム自動評価", 日本野球科学研究会, 2 pages, 2018 年 12 月.
13. 前川 凌佑, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 坂本 堪亮, 大城 幸雄, 北原 格, "3次元臓器CGモデル生成に適した腹腔鏡映像撮影条件の検討", 第 27 回日本コンピュータ外科学会大会, vol.20, no.4, pp.275, 2018 年 11 月.
14. 吉田 駿, 謝 淳, 宍戸 英彦, 亀田 能成, 掛谷 英紀, 北原 格, "実在感の向上を目的とした空中像と床面像の同時投影方式", 第 23 回日本バーチャルリアリティ学会大会論文集, 14D-3, 4 pages, 2018 年 9 月.
15. 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歩行誘導インタフェースと評価方法の検討", 第 21 回 画像の認識・理解シンポジウム (MIRU2018), PS2-54, 4 pages, 2018 年 8 月.
16. 野原 直翔, 宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, "単眼カメラからの骨格推定に基づく野球の投球フォーム評価", 第 21 回 画像の認識・理解シンポジウム (MIRU2018), PS1-58, 4 pages, 2018 年 8 月.
17. 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, "超微速度撮影画像を対象とした重畳処理の高精度化", 第 21 回 画像の認識・理解シンポジウム (MIRU2018), PS2-3, 4 pages, 2018 年 8 月.

7. 著書、解説記事等

8. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

北原 格

イギリスの University of Surrey と締結した MoU に基づき、3 月に研究員として滞在した。
オーストラリアの Curtin University と締結した MoU により、共同研究を継続実施した。
2018 年 3 月に、マンスリーサバティカル事業によりイギリスの Imperial College London に滞在し、共同研究の可能性を議論した。

9. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

10. 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

システム情報工学研究科知能機能システム専攻 広報委員会委員長

工学システム学類 知的工学システム主専攻 主専攻長

北原 格

ヒューマニクス学位プログラム運営委員

11. 社会貢献・国際貢献

亀田 能成

電子情報通信学会 メディアエクスペリエンス・仮想環境基礎 研究会 委員

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 副委員長

情報処理学会コンピュータビジョンとイメージメディア研究会 委員

12. その他

宍戸 英彦

JST 戦略的創造研究推進事業 国際強化支援策の支援により、イギリスのサリー大学へ 8 月から 12 月まで客員研究員として滞在し、JST CREST 「Cyborg Crowd : 柔軟でスケーラブルな人と機械の知力集約」における基礎研究を行った。

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/>

