

ACT-I「情報と未来」研究領域 領域活動・評価報告書 －2020 年度終了研究課題－

研究総括 後藤 真孝

1. 研究領域の概要

情報学とそれに基づく技術開発の目覚ましい進展は、これまでに学術・産業・社会・文化的に新たな価値を生み続けてきましたが、今後も未来社会を創造する中心的技術として、その重要性がより一層高まっています。既に情報学・情報技術は、あらゆる学術分野の進展や、産業・経済の持続発展、物理空間・情報空間が融合した社会基盤の高度化、健康で文化的な生活の質の向上等において、本質的な役割を果たしています。そのため、情報学における独創的な研究開発を推進して、人類が現在および未来において直面する問題を解決しつつ新たな価値を創造することは、人類の未来を切り拓き、人類が持続発展していく上で不可欠です。

本研究領域では、情報学における研究開発によって未来を切り拓く気概を持つ若手研究者を支援するとともに、新しい価値の創造につながる研究開発を推進します。具体的には、人工知能、ビッグデータ、IoT、サイバーセキュリティ等を含む、情報学に関わる幅広い専門分野において、新しい発想に基づいた挑戦的な研究構想を求めます。今後の学術・産業・社会・文化を変えていくような多種多様な研究開発を、独創的な発想によっていかに推進するかが重要だと考えています。

研究推進においては、未来開拓型の研究開発、価値創造型の研究開発を募り、本研究領域で若手研究者同士がお互いに切磋琢磨し相互触発する場を設けることで、未来社会に貢献する先端研究を推進する研究人材の育成や、将来の連携につながる研究者のヒューマンネットワーク構築を促していきます。それによって、ひとときわ輝き存在感のある研究者がより一層増え、ひいてはより良い未来社会が切り拓かれることを期待します。

なお、本研究領域は文部科学省の人工知能/ビッグデータ/IoT/サイバーセキュリティ統合プロジェクト(AIP プロジェクト)の一環として運営していきます。

2. 事後評価対象の研究課題・研究者名

件数：2 期生加速フェーズ・・・11 件

※研究課題名、研究者名は別紙一覧表参照

3. 研究実施期間（本事後評価対象期間）

2 期生加速フェーズ研究者： 2019 年 4 月～2021 年 3 月

（注記：ACT-I 標準期間 2017 年 10 月～2019 年 3 月も研究に従事しているが、本評価対象期間には含まない）

4. 領域の活動状況

(1) 領域会議（非公開）：2 期生加速フェーズ研究者・・・7 回参加（ACT-I 標準期間を含む）

第 3 回領域会議	2017 年 11 月 17 日～19 日開催	・・・2 期生研究者
第 4 回領域会議	2018 年 6 月 8 日～10 日開催	・・・2 期生研究者
第 5 回領域会議	2018 年 11 月 16 日～18 日開催	・・・2 期生研究者
第 6 回領域会議	2019 年 6 月 21 日～23 日開催	・・・2 期生加速フェーズ研究者
第 7 回領域会議	2019 年 11 月 15 日～17 日開催	・・・2 期生加速フェーズ研究者
第 8 回領域会議	2020 年 6 月 13 日～14 日開催	・・・2 期生加速フェーズ研究者
第 9 回領域会議	2020 年 11 月 14 日～15 日開催	・・・2 期生加速フェーズ研究者

(2) 担当アドバイザーによるサイトビジット（非公開）

本領域の運営にあたっては担当アドバイザー制を採用した。これは各領域アドバイザーが、2、3 名の研究者の担当となり、研究計画や進捗状況について確認、助言を行い、各研究者が個を確立するために細やかなサポートを行うことを支援する制度である。

担当アドバイザーによるサイトビジット（研究実施場所等の訪問）を 2 期生加速フェーズ研究者は 5 回ずつ（ACT-I 標準期間を含む）実施した。サイトビジットでは各研究者と担当アドバイザーが個別に研究推進について議論を行った。

(3) 成果発表会（公開）

2021年3月13日 オンライン開催

詳細: <https://www.jst.go.jp/kisoken/act-i/presentation2021/index.html>

5. 事後評価の手続き

研究者の研究報告書を基に、領域会議、サイトビジット、成果発表会等での発表・質疑応答、領域アドバイザーの意見などを参考に、下記の流れで研究総括が評価を行った。

(事後評価の流れ)

2021年2月	研究報告書提出
2021年3月13日	成果発表会(公開、オンライン開催)
2021年3月～4月	研究総括および領域アドバイザーによる評価
2021年4月～5月	被評価者への評価フィードバック

6. 事後評価項目

(1) 研究課題等の研究目的の達成状況

但し、未達成の場合であっても、独創性や挑戦性が認められ、将来的に高水準の発展が見込まれる場合は積極的に評価する。

(2) 研究実施体制及び研究費執行状況

(3) 研究成果の科学技術及び社会・経済への波及効果(今後の見込みを含む)

ACT-I では、「学術・産業・社会・文化を変えていくような多種多様な研究開発の推進」を支援しているため、学術・産業・社会・文化のいずれかへの波及効果(今後の見込みを含む)を評価する。

7. 評価結果

本領域では、若手研究者が個を確立し、自由な発想で主導権を握りながら挑戦的な研究開発を推進する支援をするとともに、将来の連携の土台となる人的交流の機会を提供してきた。こうした環境の中で、2017年度より研究を開始した2期生加速フェーズ研究者11名は学術・産業・社会・文化的に新たな価値を生み出し、未来を切り拓く気概を持って、今解決すべき問題、あるいは、未来に起こりうる問題の解決に向けて切磋琢磨し、情報学に関わる様々な成果が出てきた。今後も11名それぞれが研究活動や人的交流を継続して、多様な研究テーマで世界をリードする活躍をしていくことを期待したい。

(1) 牛久 祥孝 研究者 担当アドバイザー:土井アドバイザー

「多様なデータへのキャプションを自動で生成する技術の創出」

本研究は、画像のような静的なデータから動画のような動的なデータまで、多様な形態のデータを説明するキャプションを生成する問題に対し、(i)個人の属性や好みへの対応、(ii)詳細な表現への対応、(iii)教師キャプションを持たないデータへの対応と、加速フェーズで追加した(iv)非言語的に埋め込まれた文法構造の獲得の4点において着実に研究成果を創出し、詳細なキャプションを生成する一連の技術を確立した。その学術成果は国際会議 LREC 2020、ICCV 2019 等で発表されている。さらに、他の ACT-I 研究者達と連携して Visual & Language に関連した国際会議ワークショップ企画を主催したり、企業・大学等との共同研究にも幅広く取り組んだりした点も高く評価できる。今後も、画像・動画のキャプション生成研究を社会実装までつなげられる研究者として大きなインパクトを生み出していくことが期待される。

(2) 栗田 修平 研究者 担当アドバイザー:松尾アドバイザー

「大規模テキストからの知識獲得と深層学習・意味解析による知識活用」

本研究は、自然言語の大規模テキストから知識獲得を目指すもので、深層学習を活用し、省略解析、意味依存構造解析、意味役割ラベル付与などを行う。またテキストの中だけに留まらず、3D シミュレータの環境における、視覚と言語によるエージェントのナビゲーション課題についても挑戦している。一連の研究は、ACL 2019 や ICLR 2021 などのトップ国際会議に採択されており、また、言語処理学会の論文賞を受賞するなど、大きな成果を収めていて高く評価できる。自然言語処理の長年の、そして最難関の課題に、深層学習の技術を用いながら真っ向から挑むスタンスであり、大変素晴らしい心的な態度である。今後、この分野、広くは知能に関する分野全体に関わる大きな道標となるようなブレークスルーを生み出すことが期待される。

(3) 小林 努 研究者 担当アドバイザー:千葉アドバイザー

「プログラムコードの整合性ある自動抽象化による表明強化の支援」

本研究は、ソフトウェア開発における設計図ともいえる「ソフトウェアの仕様」の正しさを検証する技術を高めようとするものである。仕様に基づいて書かれたプログラムが仕様と一致しているかを検証する技術も重要だが、本研究は仕様そのものがプログラムの誤りをきちんと検出できるように精密に構成されているかを検証する技術についての研究である。本研究はこの仕様の検証という課題に、プログラムの検証で近年用いられるようになってきた変異解析の手法を応用しようという独創的なものであった。本研究は、変異解析により、仕様の中で緻密さが足りない部分を発見し、それをより強い緻密なものに強化していくことが効率的に実施可能であることを明らかにした点が評価できる。本研究で取り組んだ手法は有望な手法であり、今後もこれを深めてソフトウェアの仕様に関する研究分野全体を牽引する研究者となることが期待される。

(4) 佐藤 重幸 研究者 担当アドバイザー:千葉アドバイザー

「自動チューニング可能な一般化 N 体問題解法枠組みの開発」

本研究は N 体問題を例として言語処理系(コンパイラ)による自動並列化・最適化をおこなうための新しい技法を開発しようというものである。N 体問題は天文学・物理学などにおける計算科学分野に典型的に見られるシミュレーションの計算方法の総称である。本研究は、領域特化言語(DSL, domain specific language)を用いることでプログラムの中の計算の依存関係を分析しやすくし、高度な自動並列化・最適化を可能にしようとするものである。Python をホスト言語とする埋め込み DSL を開発し、高性能な C++ プログラムを自動生成することを可能にした。N 体問題に特徴的な計算の直積構造をうまくモデル化した DSL のデザインは高く評価できる。また N 体問題の最適化技術の評価のためにベンチマーク集を開発したことも、研究コミュニティ全体に対する貢献として評価できる。今後は本研究成果をすみやかに論文化し、世に出して欲しい。また当該分野を牽引する研究者としてのさらなる活躍が期待される。

(5) 塩川 浩昭 研究者 担当アドバイザー:河原林アドバイザー

「Data Skewness を捉えた超高速・省メモリな大規模データ処理」

本研究は、誰もが手持ちの計算環境でビッグデータ処理をする技術の開発を目指すものである。具体的には、多様な計算環境において、高精度なデータ処理を想定した超高速・省メモリな大規模データ処理アルゴリズムの開発である。ACT-I での研究成果として、グラフデータ処理や多次元データ処理に対する Data Skewness を捉えた新しい高速化・省メモリ化技術の有効性を、実験・理論の両面から達成した点が高く評価できる。これらの研究成果は、IJCAI 2019、AAAI 2021 などのトップカンファレンスに採択され、学術的にも非常に大きなインパクトを与えた。また本研究の発展的なテーマが、JST さきがけに採択されており、今後さらに大きなインパクトを与える研究成果を出すことが期待される。

(6) チョ シンキ 研究者 担当アドバイザー:中小路アドバイザー

「視覚に基づく言い換えのセマンティック類型」

本研究は、画像上で視覚的に表現された概念に対応する言い換え(パラフレーズ)である VGP (Visually Grounded Paraphrase)という概念を核として、その基礎技術の開発と応用展開を目指したものである。基礎技術として、視覚的言い換への同定技術、言い換の類型化とアノテーション技術、多言語間の視覚的言い換え技術の開発に成功した。その成果は、AAAI 2020 といった国際会議をはじめ、Neurocomputing、IEEE Access などの海外論文誌で発表され、国際的なスケールで大きな成果をあげたことが高く評価できる。VGP に関わるこれらの個々の基礎技術の開発に加えて、基礎技術、技術課題、技術展開、応用、という四つのレイヤーからなる VGP 研究のフレームワークを構築したことで、自然言語処理とコンピュータビジョンを融合する VGP という新たな研究領域を自ら立ち上げることに成功したとも位置付けられる。今後は、VGP 分野のさらなると深化と共に、より広い自動翻訳研究における VGP の応用展開が期待される。

(7) 平原 秀一 研究者 担当アドバイザー:湊アドバイザー

「安全な暗号の確立に向けた回路最小化問題の計算困難性の解析」

本研究は、計算量理論における中心的な未解決問題である $P \neq NP$ 予想に正面から取り組むものである。本研究者は $P \neq NP$ 予想をさらに細分化した最悪時計算量の困難性と平均時計算量の困難性の関係を明らかにする課題に取り組み、これまでの証明方法では解決できないとされていた「数学的なバリア」を突破するための新しい証明手法を開拓している。ACT-I 本期間では「ブラックボックス帰着」と呼ばれるバリ

アを世界で初めて突破する成果を得て、理論計算機科学の世界でトップ研究者の一人になりつつあったが、加速フェーズ期間では「メタ計算量」という新しい視点を用いて「困難性増幅の不可能性」のバリアを世界で初めて突破することに成功した。この成果は、理論計算機科学の超難関トップ国際会議に単著論文として採択され、名実ともに世界のトップ研究者として高く評価されている。ACT-I 終了後は、JST さきがけ研究者として、メタ計算量に基づく手法をさらに推し進めていく予定であり、今後の活躍が大いに期待される。

(8) 宮本 崇 研究者 担当アドバイザー:内田アドバイザー

「衛星リモートセンシングから得られる時空間ビッグデータの機械学習による地震被害の判別」

本研究は、衛星画像を用いて建造物の震災被害状況推定を行うため、機械学習モデルの開発を目指す、情報学と土木工学の融合分野の研究である。正解付きデータ数も少なく、また解像度も非常に低いという困難な状況で、深層畳み込みニューラルネットワークを適用する点に本研究者の独創性があると言える。具体的には、過去の衛星画像系列の利用や、住宅の築年代と構造種別(木造・モルタル等)など、使える情報を積極的に取り込むことで、この難題に取り組んだ。その結果、90%精度で倒壊の有無を検出できることを実証した点はインパクトがあり、土木工学における貢献は大きい。また本研究者は学術的成果を出すことに留まらず、土木工学分野における機械学習活用に関する講演や執筆で活躍したことも高く評価できる。実際、土木学会誌という当該分野最大の学術誌において、AI×土木の特集号を組むなど、情報学と土木工学の融合を図るべく活躍しており、今後も分野全体をけん引していくことが期待される。

(9) 山下 聖悟 研究者 担当アドバイザー:原アドバイザー

「水泳プール中の水の流れを3次元計測する技術の開発」

本研究では、プールのように水中に人が存在する環境における流体計測技術の実現を目指して、人体に悪影響を与えないトレーサー粒子と光源を用いた流体計測手法を開発した。加速フェーズでは特に、水泳プール中の水の流れを3次元計測する技術をより深める研究を行い、既に開発したトレーサー粒子(人工いくら)が沈む問題を解決するために、ナノセルロースをトレーサー粒子として用い、その流動性複雑折という特性(流れによって複雑折が生じる性質)を利用した光学系を提案した。この光学系により、計測が必要な部分のみが可視化されるため、流体計測を可能とする範囲が飛躍的に向上した。これらの一連の成果は、複数の国際会議・国内会議で公表されて高く評価されている。さらに、スポーツや水流計測の専門家など異分野との連携やアウトリーチ活動にも積極的に取り組んでいる。今後、情報学と光学やバイオメカニクス等の融合分野の発展に貢献する研究者として活躍していくことが期待される。

(10) 吉田 博則 研究者 担当アドバイザー:川原アドバイザー

「適材適所システム:広葉樹林業で発生する多様な小径木の家具および建築への応用」

本研究は、小径木を家具や建築部材として活用するために、各々の材の特徴をデジタル化したデータを活用し、適材適所を誰もが実現できるワークフローの確立に取り組んだ。プロダクトスケールでのデザイン支援ツール「Tsgite」を開発し、組み立て可能性、加工可能性、強度などを考慮し、接合部の性能についてリアルタイムに解析結果を表示することで木工継手・仕口の設計と製作を支援することを可能にした。その研究成果は国際会議 ACM UIST 2020 に採択されて高く評価されている。さらに、建築スケールでは三次元形状を考慮した枝を組み合わせるための、交差部のジョイントを生成し加工するシステムを開発した。それを利用して製作されたインスタレーション「Swirled Branches」は日本科学未来館に展示されている。本研究者の研究成果は、HCI および情報学の研究成果を持続可能な社会の実現につなげることを目指したものであり、今後も分野を牽引する研究者として活躍していくことが期待される。

(11) 劉 麗君 研究者 担当アドバイザー:土井アドバイザー

「時空間並列計算による高性能マルチスケール解析手法の確立」

本研究は高性能マルチスケール解析手法の確立を目指して研究を進め、スーパーコンピューティング技術を駆使した時間並列計算手法と機械学習手法の導入により、巨視的モデルの効率と微視的モデルの精度が両立できるような従来にないマルチスケール解析を実現した。実際に炭素鋼材料の分子動力学解析に適用し、従来の分子動力学計算と同程度の精度を達成しつつ大幅な高速化を達成したことで、実問題における有用性も検証したことを高く評価できる。研究を加速するために、米国、中国、日本国内の共同研究者と密に連携し、研究者として大きく成長してきた。確立した高性能マルチスケール解析手法は汎用性が高く、今後さらに他の材料等を対象に様々な研究者・企業と連携して多様な研究展開をしていくことで、学

術的にも産業的にも一層大きな成果を生み出していくことが期待される。

8. 評価者

研究総括 後藤 真孝 産業技術総合研究所 人間情報インタラクション研究部門 首席研究員

領域アドバイザー（五十音順）

五十嵐 健夫	東京大学 大学院情報理工学系研究科 教授
井上 大介	情報通信研究機構 サイバーセキュリティ研究所 室長
内田 誠一	九州大学 大学院システム情報科学研究院 教授
尾形 哲也	早稲田大学 理工学術院 教授
川原 圭博	東京大学 大学院工学系研究科 教授
河原林 健一	国立情報学研究所 情報学プリンシプル研究系 教授
千葉 滋	東京大学 大学院情報理工学系研究科 教授
土井 美和子	情報通信研究機構 監事
中小路 久美代	公立はこだて未来大学 情報アーキテクチャ学科 教授
原 隆浩	大阪大学 大学院情報科学研究科マルチメディア工学専攻 教授
松尾 豊	東京大学 大学院工学系研究科 教授
湊 真一	京都大学 大学院情報学研究科 教授

9. 外部発表件数、特許出願件数、受賞等、招待講演（2019年度～2020年度）

(1) 外部発表件数

	国内	国際	計
論文	3	34	37
口頭	21	19	40
その他	9	9	18
合計	33	62	95

(2) 特許出願件数

国内	国際	計
3	1	4

(3) 受賞等

<2019年度>

- ・栗田 修平 言語処理学会論文賞、ニューラルネットワークを利用した中国語の統合的な構文解析 Vol.26, No.1, pp. 231-258
- ・山下 聖悟 Best Poster/Demo Award, “Water Flow Measurement for Swimmers using Artificial Food-grade Roe as Tracer Particles”, The 5th Asian CHI Symposium Emerging HCI Research Collection (CHI 2019)

<2020年度>

- ・塩川浩昭 日本データベース学会 第16回 上林奨励賞
- ・塩川浩昭 第12回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2020) 優秀論文賞 基調構造を利用したグラフクラスタリングの高速化

(4) 招待講演

国際 6件（2019年度:4件、2020年度:2件）
 国内 12件（2019年度:10件、2020年度:2件）

ACT-I「情報と未来」領域 事後評価実施 研究課題名および研究者氏名

2 期生加速フェーズ研究者(11 名)

研究者氏名 (参加形態)	研究課題名 (研究実施場所)	所属・役職(2021年3月末現在) (加速フェーズ開始時所属・役職)	加速フェーズ 研究費(百万円)
牛久 祥孝 (委託先機関に所属)	多様なデータへのキャプションを自動 で生成する技術の創出 (オムロンサイニクエックス株式会社)	オムロンサイニクエックス株式会社 リサーチアドミニストレイティブディ ビジョン プリンシパルインベスティゲーター (同上)	20
栗田 修平 (委託先機関に所属)	大規模テキストからの知識獲得と深層 学習・意味解析による知識活用 (理化学研究所)	理化学研究所 革新知能統合研究センター 特別研究員 (同上)	23
小林 努 (専任)	プログラムコードの整合性ある自動抽 象化による表明強化の支援 (国立情報学研究所)	情報・システム研究機構 国立情報学研究所 特任研究員 (同上)	12
佐藤 重幸 (委託先機関に所属)	自動チューニング可能な一般化 N 体 問題解法枠組みの開発 (東京大学)	東京大学 大学院情報理工学系 助教 (同上)	22
塩川 浩昭 (委託先機関に所属)	Data Skewness を捉えた超高速・省メ モリな大規模データ処理 (筑波大学)	筑波大学 計算科学研究センター 准教授 (同上・助教)	20
チヨ シンキ (委託先機関に所属)	視覚に基づく言い換えのセマンティック 類型 (京都大学)	京都大学 学院情報学研究科 特定准教授 (大阪大学・特任助教(常勤))	22
平原 秀一 (委託先機関に所属)	安全な暗号の確立に向けた回路最小 化問題の計算困難性の解析 (国立情報学研究所)	情報・システム研究機構 国立情報学研究所 助教 (同上)	20
宮本 崇 (委託先機関に所属)	衛星リモートセンシングから得られる 時空間ビッグデータの機械学習による 地震被害の判別 (山梨大学)	山梨大学 大学院総合研究部 准教授 (同上・助教)	20
山下 聖悟 (学生)⇒ (委託先機関に所属)	水泳プール中の水の流れを 3 次元計 測する技術の開発 (株式会社エクサウィザーズ)	株式会社エクサウィザーズ 技術統括部 AI Vision グループ 事業部長補佐 (東京大学・大学院生(博士課程))	23
吉田 博則 (学生)⇒ (委託先機関に所属)	適材適所システム: 広葉樹林業で発生 する多様な小径木の家具および建築 への応用 (東京大学)	東京大学 大学院情報理工学系研究科 特任研究員 (同上・大学院生(博士課程))	19
劉 麗君 (委託先機関に所属)	時空間並列計算による高性能マルチ スケール解析手法の確立 (大阪大学)	大阪大学 大学院工学研究科 助教 (同上・特任助教(常勤))	24

以上

研究報告書

「多様なデータへのキャプションを自動で生成する技術の創出」

研究期間：2019年4月～2021年3月
研究者番号：50221
研究者：牛久 祥孝

1. 研究のねらい

画像や動画のキャプション生成は、データ内の事物とそれぞれの関係性を理解して自然言語で表現する、メディア理解の究極の形態の一つである。

この研究では、画像や動画と言った多様な形態のデータそれぞれを説明するキャプションを自動で生成する技術の確立をめざす。特に本研究では、キャプション生成に本質的に必要であり未解決である、(i)個人の属性や好みへの対応、(ii)詳細な表現への対応、(iii)教師キャプションを持たないデータへの対応と、加速フェーズではさらに、(iv)非言語的に埋め込まれた文法構造の獲得を実現し、多様なデータへのキャプション生成を可能にする大きなブレークスルーをもたらす。

まず、画像を説明するキャプションは、(i)何を説明するか、どう表現するか、ということがユーザの属性や好みに応じて変化するべきである



図1 個人の属性や好みに応じたキャプションの生成。

(図1)。

また、これらのキャプションは(ii)データ中の小さな領域をも詳細に表現できる必要がある。現在の画像キャプション生成は、「猫がこちらを見ている」など、画像中に大きく映った事物のみを、抽象的な語彙で表現する傾向がある。本研究では、注目されそうな部分に応じて図1のように「凶悪な目つき」という小さな領域と「猫」という大きな領域の対象を同時に扱える技術を確立する。

さらに、(iii)教師キャプションを持たないデータへの対応が必要である。現在のキャプション生成技術は、教師キャプションが付与された画像を数万枚の規模で作成したデータセットを用いる。しかし、実世界のマルチメディアデータには動画や音声と言った多様なモダリティが存在し、さらに画像でも撮影位置や時刻といったメタデータが付随する場合も多い。しかしながら、大規模データ収集の高いコストにより、上記のような様々なモダリティのマルチメディアデータについて、他の要求機能を満たすようなキャプション生成を実現するために都度大規模なデータセットを収集するのは困難である。

最後に加速フェーズでは、レシピや組み立て書のような図とテキストが混在したマニュアル、料理などの作業動画といった手順が埋め込まれたデータを理解する技術も確立する。そのためには、工程を抽出してその前後関係を学習する必要がある。このような(iv)非言語的に埋め込まれた文法構造の獲得は、より一般的なコンテンツのストーリー理解にも必須の機能である。

2. 研究成果

(1) 概要

本研究が画像キャプション生成において満たしたい要求機能は、(i)個人の属性や好みへの対応、(ii)詳細な表現への対応、(iii)教師キャプションを持たないデータへの対応、(iv)非言語的に埋め込まれた文法構造の獲得の4点であった。その成果として、各要求機能への取組とその統合的な評価を並列で進めてきた。

具体的には以下の通りである。(i)個人の属性や好みへの対応の解として**研究テーマ A 「転移学習の研究」**に取り組み、既存研究より現実的かつ難しい問題設定におけるドメイン適応についての技術を確立し、特許を出願中である。(ii)詳細な表現への対応の解としては**研究テーマ B 「ユーザーフレンドリーな参照表現生成」**を遂行し、詳細な差異に注目できるようなキャプション生成基盤技術としてトップ国際会議での発表に至っている。(iii)教師キャプションを持たないデータへの対応については**研究テーマ C 「教師なしキャプション生成の研究」**として疑似教師データを活用しながらの教師なし学習によるキャプション生成を実現し、トップ国際会議での発表を予定している。(iv)非言語的に埋め込まれた文法構造の獲得については、**研究テーマ D 「作業手順の構造的な理解」**に取り組んだ。調理の様子をおさめた動画に埋め込まれた作業の手順をグラフ構造として理解し、そのレシピを生成する技術を開発し、国際論文誌での発表に至っている。

またこれらを統合して評価するために**研究テーマ E 「料理動画・レシピデータセットの構築と統合評価」**として新規データセットの収集と、上記技術を統合したキャプション生成技術の評価に取り組んだ。

(2) 詳細

研究テーマ A 「転移学習の研究」は、個人に依らない基本的なキャプション生成モデルを個人ごとの属性に応じた画像や自然言語に転移させることで、教師データが少ない状態(iii)での個人適応(i)を実現するための研究である。そもそも従来の転移学習は、その評価実験に明示的に/暗黙的に仮定されている条件が複数あり、実用性に疑問があった。本研究では、キャプション生成への適用を見据えて現実に即した評価条件設定に改めた深層転移学習手法を開発した。本成果は特許出願中かつ、コンピュータビジョン分野でのトップ国際会議である CVPR 2021 に採択され、発表予定である。

研究テーマ B 「ユーザーフレンドリーな参照表現生成」は、「データ中の小さな領域をも詳細に表現できる」という(ii)の要求機能だけを切り出したものに対応する。参照表現生成では、画像内にある複数の物体の中から、どれに言及しているのかが一意に定まるようなキャプションを生成する。例えば図1に対して「物が写った写真の一部」というキャプションを生成しても、間違っていないもののどの領域についての記述かが全く分からない。そこで「猫の首輪についた魚」と言うと、画像中央下部にある金色の物体に定まる。単に一意に定まることだけを指すと「魚」だけでも良いことになってしまうが、それだと画像のあらゆる領

域を探さないといけないような参照表現生成になってしまうため、人に対して生成するキャプションとしては利便性が少ない。そこで本テーマでは、「猫の首輪」のように画像内で視覚的に顕著性の高い領域を紐づけながら、冗長性の少ないキャプションを生成する技術をアテンション機構とランキング学習を組み合わせた深層学習モデルで実現した。この成果は代表者が東京大学に在籍している際にデンソー、デンソーアイティラボラトリとの共同研究として進めたものであり、コンピュータビジョン最高峰の国際会議である ICCV 2019 でデータセットの公開と併せて発表済みである。

研究テーマ C 「教師なしキャプション生成の研究」は、転移学習が難しい場合でも (iii) を解決するための手段として進めている。教師データとなる画像/動画とキャプションの対が無い状態でも、そうした画像/動画といったデータやキャプションのような文のデータといった、ペアになっていないデータであれば容易に収集可能である。そこで本テーマでは、そうした画像と文が独立に存在するデータについて、一部の画像から尤もそうな画像・キャプションの疑似ペアを少しずつ増やして教師あり学習する手法を開発した。この成果は NAIST および理研 AIP と共同で取り組み、自然言語処理分野においてメジャーである国際会議 EACL 2021 で発表済みである。

研究テーマ D 「作業手順の構造的理解」は、動画のような動的なデータの中での非言語的に埋め込まれた文法構造 (iv) を獲得するためのテーマである。長い動画のようなデータの中では、時々刻々を言語で記述するキャプションの上位に、そのストーリーのような遷移が存在する。例えば調理動画であれば、各調理ステップに対応する記述と、それらの系列を同時に理解する必要がある。そこで本テーマでは、調理動画の理解を各調理ステップのキー画像からなる画像列の理解と捉え、途中経過の食材や初出の材料がどのステップで組み合わせられているのかを示す木構造を定義し、そうした木構造を用いたレシピ生成技術を開発した。画像列と材料のリストから木構造を生成し、その木構造からレシピを生成する。また生成されたレシピからも木構造を推定し、前述の木構造と一致するかどうかを評価させてレシピと動画列の一貫性を担保している。この成果は京都大学との共同研究として進め、速報誌である IEEE Access に掲載されている。

研究テーマ E 「料理動画・レシピデータセットの構築と統合評価」は、テーマ D のような調理動画を対象として、その多様性への対応を正しく評価できるようなベンチマークを作成し、実際にそれぞれの研究テーマから得られた技術を統合したキャプション生成技術を適用して評価を行うことを目的としている。料理レシピのデータベースとそれらに基づいたサービスで定評のあるクックパッドと、京都大学や東京大学の研究者との合同でデータセットの構築にあたった。

本研究テーマでは2段階でデータセット収集とその公開を進めている。まず、クックパッドが既に所持している画像列データとレシピのデータについて、その作業手順構造をグラフとして付与したデータセットを構築、こうした自然言語を含めたリソースについて公開して共有する国際会議としてはもっとも著名な

LREC 2020 で発表済みである。

次の段階として、既存のレシピに基づいて調理する様子を収録した動画像を新規に収集し、その上で研究テーマ A~D の成果を統合したキャプション生成技術を実行して評価する予定である。残念ながら新型コロナウイルスの影響によってデータ収集プロセスの策定の再検討を余儀なくされ、収集スピードも低下したことで1年弱の遅れを来しているが、データ収集自体は着手済みであり、2021年度の前半でデータセット構築を完了して公開・キャプション生成結果の報告へとつなげる予定である。

3. 今後の展開

この2年間によって、画像のような静的なデータから動画のような動的なデータまで、個人に応じて詳細なキャプションを生成する一連の技術が確立された。これらは画像や動画と言った非言語情報を自然言語で検索・閲覧したり、更に近年盛んに研究されているデータ生成ネットワークに応用したりと言った形で、自然言語によってマルチモーダルなデータを活用する基盤技術となる。例えば、本研究で最終的に実現した手順映像の言語理解は、作業記録の自動生成や非熟練者への言語サポートに活用できる。

最近では自己注意機構を活用した Transformer と呼ばれるネットワーク構造が自然言語処理のみならずマルチモーダルなデータの理解についても有効性を認められつつある。本研究でもこのネットワーク構造の活用について試行中であるが、Transformer を用いる場合はより大量な学習データが必要となる。そのため、より少ないデータでもそのバイアスを活用してキャプション生成を可能にする畳み込みニューラルネットワークと再帰ニューラルネットワークの組合せや、そうしたバイアスをデータセット間で吸収する転移学習など、本研究で取り組んできた諸技術については引き続きわめて有効な技術であり続けると考えている。

さらに、本研究は本質的に、画像/動画といった画素数列データと自然言語列というグラフのような構造を持つデータの変換に取り組むものであった。今後もこうしたデータ構造を超えるモダリティ変換の研究を別の系に適用し、効率的なデータ活用基盤の研究を続行する予定である。

4. 自己評価

研究目的の達成状況および研究費執行状況については、要求仕様(i)~(iv)それぞれを満たす技術の開発に成功し、それぞれ特許出願や国際論文誌/会議での発表に至っている。ただし新たなデータセットを更に構築してその上で統合的に評価する部分については、新型コロナウイルスの影響で遅滞している。

研究実施体制については、各研究テーマの遂行にあたって研究代表者と相乗効果の見込める研究者と産学問わず連携して進めたことにより、複数の研究成果を並行して創出できた。

研究成果の波及効果については、企業との共同研究によって各企業が持つデータに対する社会実装が期待される。また、各研究テーマは世界的にも広く注目されているような論文誌/国際会議で発表しており、積極的に国内外での招待講演を通じてその更なる周知に努めている。更に、研究テーマ A や E で述べたようなデータセットの公開を通じて広く世界の研究者に本テーマでの更なる研究を促しており、今後より本研究領域が盛んに研究されるようになることを期待している。

研究課題の独創性・挑戦性としては、画像/動画キャプション生成という研究領域を真に社会実装するために必要となる機能を網羅的に押さえた研究課題であると自負している。現在もこうした画像/動画と自然言語を含めたメディア理解は Vision and Language というテーマでコンピュータビジョン、自然言語処理、機械学習といった諸分野で取り組まれているが、今も同一のデータセットに対する精度競争を注意機構や Transformer などの新たな関連技術によって更新する取り組みが多い。本研究では一貫して、基本的に既存の研究課題をより現実的な設定に改善しながらその解となる技術を提案し続けており、新規かつ有用な課題に挑戦し続けている。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

- | |
|---|
| 1. M. Tanaka, T. Itamochi, K. Narioka, I. Sato, Y. Ushiku, T. Harada. Generating easy-to-understand referring expressions for target identifications. Proceedings of the IEEE/CVF International Conference on Computer Vision. 2019, pp. 5794–5803. |
| 2. T. Nishimura, S. Tomori, H. Hashimoto, A. Hashimoto, Y. Yamakata, J. Harashima, Y. Ushiku, S. Mori. Visual grounding annotation of recipe flow graph. Proceedings of the Language Resources and Evaluation Conference. 2020, pp. 4275–4284. |
| 3. T. Nishimura, A. Hashimoto, Y. Ushiku, H. Kameko, Y. Yamakata, S. Mori. Structure-Aware Procedural Text Generation from an Image Sequence. IEEE Access. 2020, vol. 9, pp. 2125–2141. |
| 4. U. Honda, Y. Ushiku, A. Hashimoto, T. Watanabe, Y. Matsumoto. Removing Word-Level Spurious Alignment between Images and Pseudo-Captions in Unsupervised Image Captioning. Proceedings of the European Chapter of the Association for Computational Linguistics. 2021, pp. 3692–3702. |
| 5. Q. Yu, A. Hashimoto, Y. Ushiku. Divergence Optimization for Noisy Universal Domain Adaptation. Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. 2021, accepted. |

(2) 特許出願

研究期間累積件数: 2 件

1.

発 明 者: 郁 青、牛久 祥孝、橋本 敦史

発明の名称: 推定システム、推定装置および推定方法

出 願 人: オムロン

出 願 番 号: 2019-206384

2.

発 明 者: 橋本 敦史、牛久 祥孝、森 信介、西村 太一

発明の名称: 構造化データ表現の獲得方法

出 願 人: オムロン

出 願 番 号: 2020-038785

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

1. 【基調講演】牛久祥孝. 深層学習によるビジョン&ランゲージの世界. ビジョン技術の実利用ワークショップ(VIEW), 2019/12/5.
2. 【招待講演】Yoshitaka Ushiku. Deep Learning for Natural Language Processing and Computer Vision. Tutorial on Asian Conference on Machine Learning, Nagoya, Japan, 2019/11/17.
3. 【招待講演】牛久祥孝. 画像・映像理解と自然言語への架け橋. 情報処理学会連続セミナー第3回, 2019/9/26.
4. 【招待講演】牛久祥孝. 多様なデータへのキャプションを自動で生成する技術の創出. 情報科学技術フォーラム(FIT), 2019/9/3.
5. 【招待講演】牛久祥孝. ビジョン&ランゲージ~「意図」をどのようにモデリングするか? 画像センシングシンポジウム(SSII), 2019/6/12.

研究報告書

「大規模テキストからの知識獲得と深層学習・意味解析による知識活用」

研究期間：2019年4月～2021年3月
研究者番号：50222
研究者：栗田 修平

1. 研究のねらい

自然言語による文章を解析する手法は、深層学習の採用によりその精度が大きく向上した。しかし、自然言語の意味を解析し、現実世界のなかで実際に人間の言語指示等に従わせるシステムを作成していくためには、単純に深層学習を限られた学習コーパスに利用するだけではなく、学習コーパスからは得られないような多様な知識を、モデルが様々なリソースから学習し処理できるようになることが必要であるだろう。これまでの自然言語処理では、専ら人手で作成されたラベル付きコーパスに頼ってモデル学習が行われていた。このようなデータセットは、一つ一つの自然言語文や文章に対して非常に詳細な情報を付与している一方で、作成には膨大なコストがかかり、利用可能なデータサイズも限られている。より高度な構文・意味解析のためには、本質的により大規模なデータから情報や知識を取る必要があると考えられる。ACT-I 期間中には日本語の省略解析に対し大規模なラベルなしコーパスを学習に用いる手法で省略解析に対する世界最高性能を達成した。加速フェーズでは、これらの自然言語文解析手法を利用し、大規模なコーパスや外界知識源から既存のコーパスには存在しない知識をモデルに学習させることを目指す。また、これら大規模コーパスや知識ベース等から学習される知識に加えて、自然言語処理をなるべく現実世界に近い環境で学習・評価を行う手法を模索する。ロボット等への将来的な応用を意識し、シミュレーション環境中でのエージェントに対して、自然言語文で指示を与え、深層強化学習等により学習させることを研究提案し、自然言語を用いた解析モデルにはどれだけ知的なことが可能であるか調査する。この目的のため以下の課題に具体的に取り組む。

- [1] 大規模コーパスからの知識獲得による意味解析の精緻化
- [2] Wikipedia 等からの知識を利用した新しい事前学習手法
- [3] 強化学習と自然言語文によるシミュレーション環境下での報酬付け

これらのうち、[1]と[2]は互いに深く関連し合うテーマであり、事前学習モデルを活用して双方の課題に取り組むとともに、[3]の課題では、得られた自然言語の意味理解手法を、現実世界に近い条件での課題に適用することを目的に、自然言語文の解析モデルとシミュレーション環境下での視覚や動作のモデルとを統合したニューラルネットワークモデルの作成を行う。

2. 研究成果

(1) 概要

テーマ[1] 大規模コーパスからの知識獲得による意味解析の精緻化では ACT-I 期間中の省略解析等の研究成果に引き続き、自然言語文章の高精度な解析システムを作成することを目指した。既存の限られたアノテーション付きコーパスには出現しない文の解析精

度を高めるために、Wikipedia 等の大規模なコーパスを利用したモデル学習を行う。これにより、ACT-I 期間に引き続いた研究テーマである英語の意味依存構造解析についてコペンハーゲン大学 Anders Søgaard 先生と共同で 56th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics (ACL2019)にて”Multi-Task Semantic Dependency Parsing with Policy Gradient for Learning Easy-First Strategies”(研究成果リスト[1])の発表を行った。加えて、英語の意味役割ラベル付与に対し事前学習済み手法および強化学習の応用を検討し、自然言語処理の国際会議に投稿中である。

テーマ[2] Wikipedia 等からの知識を利用した新しい事前学習手法では、Wikipedia 等の知識を処理して学習に用いることで、あらかじめ基本的な知識が備わったモデルを作成し、別のタスクに応用することを検討した。この研究は筑波大学・理化学研究所の中山功太君と共同で、複数のモデルを Wikipedia から作られた少量のアノテーション付きコーパスでタスク別学習させ、得られた複数のモデルを教師として用いてより大規模なコーパスを処理することで、精度と大規模なコーパスからの知識獲得の両方を行う手法を提案した。この手法については、国内学会での発表を行い、国際会議への投稿準備を進めている。加速フェーズ期間の後半からテーマ[3] 強化学習と自然言語文によるシミュレーション環境下での報酬付けに取り組んだ。このテーマでは人間に与えられた指示に従って、実際の家屋環境を模した 3D シミュレータの中を移動する視覚と言語によるナビゲーション課題について研究を進め、学習済みの条件付き言語モデルを利用して視覚や動作から指示文章を逆に予測する手法で、人間の指示に従ったナビゲーションを可能にするとともに、個別の動作選択と言語指示との対応付けを明らかにする可視化手法を提案した。この研究はニューヨーク大学 Kyunghyun Cho 先生と共同で行われた。研究成果は 37th ICML Workshop on Learning in Artificial Open Worlds (ICML2020 LAOW)にて部分的な発表を行った後に、”Generative Language-Grounded Policy in Vision-and-Language Navigation with Bayes’ Rule,”として 9th International Conference on Learning Representations (ICLR2021) (研究成果リスト[2])に採択され、発表を予定している。

これらの成果に加えて、ACT-I の小林亮太先生と進めていた共同研究である”Reconstructing neuronal circuitry from parallel spike trains”について雑誌 Nature Communications に採択された。(研究成果リスト[2])

(2) 詳細

研究テーマ[1] 大規模コーパスからの知識獲得による意味解析の精緻化

本研究テーマでは、ACT-I 期間に引き続いた研究テーマである英語の意味依存構造解析についてコペンハーゲン大学 Anders Søgaard 先生と共同で 56th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics (ACL2019)にて”Multi-Task Semantic Dependency Parsing with Policy Gradient for Learning Easy-First Strategies”の発表を行った。加えて、英語における意味役割付与研究について、大規模な事前学習済みモデルを深層強化学習と組み合わせて解析するシステムについて研究を進めた。本システムについては、現在、自然言語処理の国際会議に投稿中である。

研究テーマ[2] Wikipedia 等からの知識を利用した新しい事前学習手法

本研究テーマでは、大規模な事前学習モデルを作成及び応用する箇所については研究テーマ[1]と同様に扱うとともに、理化学研究所関根先生及び筑波大学・理化学研究所の中山功太君と共同で、固有表現抽出タスクに対し、複数のモデルを Wikipedia から作られた少量のアノテーション付きコーパスでタスク別学習させ、得られた複数のモデルを教師として使用することで、より大規模なコーパスを処理し、大規模な疑似教師コーパスを作成する手法を提案した。これによりモデルの解析精度の向上と大規模なコーパスからの知識獲得の両方を同時に進めることが可能となった。この手法については、国内学会での発表を行い、現在、国際会議への投稿準備を進めている。

研究テーマ[3] 強化学習と自然言語文によるシミュレーション環境下での報酬付け

本課題分野は、言語の意味を理解するモデルをより現実に近い環境で評価するものであり、将来的には、視覚と言語の統合モデルや、ロボティクスなどへの応用が見込まれる、国内外で近年とても大きな注目を集めている分野である。本研究テーマでは、実際の家屋環境を模した 3D シミュレータの中を利用して、仮想のエージェントを言語によって指示された場所まで移動させる視覚と言語によるナビゲーション課題について研究を進めた。事前学習された条件付き言語モデルを動作選択に使用し、言語情報と視覚や動作情報を直接結びつける新しい手法を提案した。このように画像からの条件付き言語モデルをナビゲーションに直接使用する手法は、国内外に類を見ない新しいアプローチである(図1)。また、本手法を取るメリットとして、与えられた言語入力と、モデルの動作選択との対応関係を可視化することができることが示された(図2)。

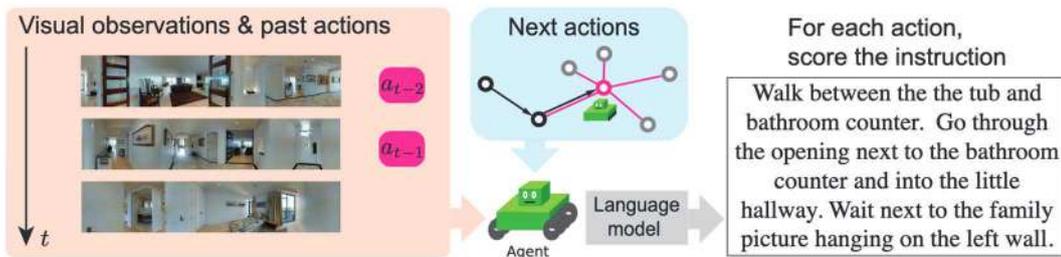


図1:事前学習された条件付き言語モデルをモデル学習に使用する手法。既存手法では、視覚情報と言語の対応関係が必ずしも明確ではなかったが、提案手法では、明示的に入力画像を自然言語出力へと対応付けるように学習し、自然言語の予測スコアを動作選択に使用する。

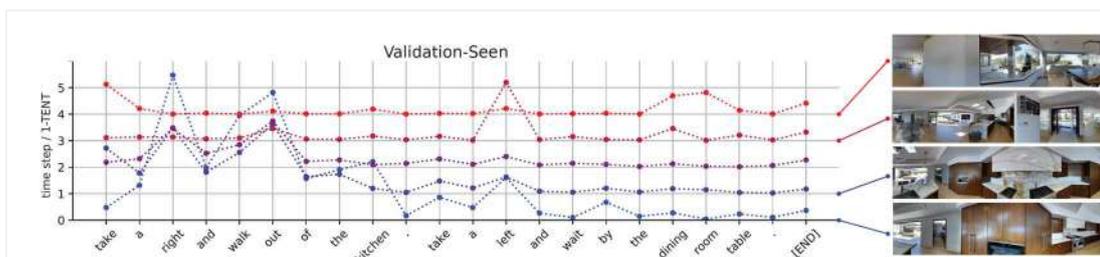


図2:トークンごとの予測エントロピーの可視化。各時刻(縦軸)にて、次の動作を決める上で大きな予測スコアを持つ指示文章中のトークン(単語)を可視化している。グラフの振幅が大きいトークンほど、その時刻の動作選択に大きな影響を持っていることを示している。

本研究成果は 37th ICML Workshop on Learning in Artificial Open Worlds (ICML2020 LAOW)にて部分的な発表を行った後に、” Generative Language-Grounded Policy in Vision-and-Language Navigation with Bayes’ Rule,”として 9th International Conference on Learning Representations (ICLR2021)に採択され、発表を予定している。

3. 今後の展開

ACT-I 加速フェーズ研究期間では、大規模なコーパスから知識を獲得し、自然言語の理解に役立てるシステムを研究すると同時に、自然言語を理解するための手法を現実世界での応用を意識した課題に応用することを目指して研究を進めた。特に研究期間の後半には、自然言語を理解するシステムについて、現実世界に近い仮想環境の中で外部から与えられた指示に従わせる手法について研究を行った。この分野は、将来的に視覚と言語の統合モデルや、ロボティクスなどへの応用が見込まれ、国内外で、近年、トップ国際会議でデータセット整備やモデルの提案が活発に行われ、ロボティクスへの応用も試行されるなど、とても大きな注目を集めている。今後は、自然言語を理解するシステムの長所を生かして、人間の持つ日常的な常識を理解して行動するシステムや、より長期的な時系列での自然言語の意味での計画立案手法、および画像認識技術と組み合わせること、ロボティクスへの応用を視野に入れたシステムの作成に向けて取り組んでいく予定である。

4. 自己評価

ACT-I での研究目的について、特に研究テーマ [3] 強化学習と自然言語文によるシミュレーション環境下での報酬付けでは、画像による条件付き言語モデルを動作選択に使用し、言語情報と視覚や動作情報を直接結びつけるという、国内外に類を見ない新しい手法を提案する等、当初の予定を上回る大きな進展があったと認識している。また、研究テーマ[1]および[2]にても、ACT-I 研究時に得られた成果や加速フェーズ研究時に得られた成果の国際会議での発表およびその準備を進めている。研究実施体制については、特に期間の後半にて、新型コロナウイルスの国際的な蔓延により、当初の予定よりも海外ニューヨーク大学訪問予定を切り上げて帰国する必要が生じるなどの影響があったが、概ね、計画通りに進展したものと認識している。今後は研究テーマ[1]および[2]で得られた成果を研究テーマ[3]のように現実世界に近い条件下で評価するとともに、画像認識やロボティクス技術とのコラボレーションなど、より社会的な実装に近い領域で、ACT-I で得られた自然言語処理技術を応用していくことが見込まれる。その上で、

ACT-I 期間での研究は、自然言語の意味理解に関する基礎研究と、画像やロボティクへの応用研究への橋渡しとなる非常に独創的な位置づけの研究課題となったと考えている。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

1. Shuhei Kurita and Anders Søgaard, Multi-Task Semantic Dependency Parsing with Policy Gradient for Learning Easy-First Strategies, Proceedings of the 56th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics (ACL2019), 2019, pages 2420–2430, Long paper.
2. Ryota Kobayashi, Shuhei Kurita, Anno Kurth, Katsunori Kitano, Kenji Mizuseki, Markus Diesmann, Barry J. Richmond & Shigeru Shinomoto, Reconstructing neuronal circuitry from parallel spike trains, Nature Communications, 2019, Volume 10, Article number: 4468.
3. Shuhei Kurita and Kyunghyun Cho, Generative Language-Grounded Policy in Vision-and-Language Navigation with Bayes' Rule, Ninth International Conference on Learning Representations (ICLR2021), May 2021. To appear.

(2) 特許出願

研究期間累積件数:0 件

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

1. 中山功太, 栗田修平, 小林暁雄, 関根聡. Pre-Distillation Ensemble:リソース構築タスクのためのアンサンブル手法. 言語処理学会第 26 回年次大会, オンライン, (2020.3.16–19).
2. Shuhei Kurita and Kyunghyun Cho, Toward Understanding Language-Grounded Agents in Vision-and-Language Navigation, 37th International Conference on Machine Learning Workshop on Learning in Artificial Open Worlds (ICML2020 LAOW), Online (July 2020).
3. 栗田修平, Kyunghyun Cho. 視覚と言語によるナビゲーション課題への言語に対応付けられた生成的な方策. 言語処理学会第 27 回年次大会, (2021.3.15–19) .
4. 中山功太, 栗田修平, 馬場雪乃, 関根聡. 能動的サンプリングを用いたリソース構築共有タスクにおける予測対象データ削減. 言語処理学会第 27 回年次大会, (2021.3.15–19).
5. 栗田修平, 河原大輔, 黒橋禎夫. ニューラルネットワークを利用した中国語の統合的な構文解析. 2019, Vol.26, No.1, pp. 231–258. (言語処理学会論文賞受賞および招待講演. 2020 年 3 月.)

研究報告書

「プログラムコードの整合性ある自動抽象化による表明強化の支援」

研究期間：2019年4月～2021年3月

研究者番号：50223

研究者：小林 努

1. 研究のねらい

現代のソフトウェアの品質保証における最大の難しさの1つはその複雑さにあり、その本質は、対象ソフトウェアの動作する環境や利用の際のルールといったドメインの複雑さにある。

ここで、特にドメインがどのような性質を持つか(例えば、常に成り立つべき「不変条件」など)が品質保証に重要である。

例えば、Java や C#などの言語でサポートされている Design by Contract (DbC)というアプローチでは、開発者がプログラムコードの中に不変条件などの性質の形式的記述を書き、それがテストコードの生成やコードの解析に利用される。

このような明示的に性質を扱うアプローチは高品質なソフトウェアの開発に有効とされる一方、現実には十分に活用されているとは言えない。これは、性質を記述するのに労力がかかることに加え、開発者が複雑な対象の性質を把握することが困難なためである。特に、開発初期段階の分析で対象の性質を把握する作業には限界があり、開発時には開発者に認識されない暗黙的な性質も多く存在することになる。このような暗黙的な性質は品質保証の対象とならず、開発後期やリリース後の大きな問題につながる。

そこで本研究では、与えられたプログラムコードをもとに、ドメインに関する性質(特に不変条件)を獲得する手法を提案した。

ここで特に、獲得する不変条件は(1)多くのバグ・難しいバグを排除できるような強い不変条件(2)プログラムの式の一部を大量に連ねたような条件でなく、ドメイン上の意味を簡潔に表すような不変条件 となることを目指した。

本提案の中心となったのは、テストコードの性能(どれだけ多くの欠陥・どれだけ難しい欠陥を発見できるか)を解析するための変異解析という技法の応用である。変異解析では、テスト対象のコードに人工的な欠陥を埋め込み、テストコードがその埋め込んだ欠陥を検出できるか否かを分析する。

本提案の手法では、プログラムコードと対応付いた形式仕様に対し、変異解析と同様に人工的な欠陥を埋め込み、不変条件がその欠陥を検出できるか否かを分析することを目指した。さらに、その結果をもとに不変条件を強化することを通じ、不変条件を獲得することを目指した。

2. 研究成果

(1)概要

本研究では、プログラムコードにおけるドメインのロジックと対応付いた形式仕様に対し、多様な人工的欠陥を埋め込み、不変条件が埋め込んだ欠陥を検出できるかを分析し、検出で

きなかった欠陥を検出できるように不変条件を強化することを目指した。
 この目標を達成するにあたり、主に以下の3つの研究テーマに取り組んだ。
 テーマA: 形式仕様に対する人工的欠陥の埋め込みおよびその検出チェック
 テーマB: 検出結果に基づく不変条件の強化
 テーマC: プログラムコードにおけるドメインのロジックと形式仕様の対応付け
 本研究の提案手法は特定のプログラミング言語・仕様記述言語に限ったものではないが、具体的に研究を進めるにあたってはプログラミング言語として Java を、仕様記述言語として Event-B を採用した。
 研究の初期段階で行った feasibility study の結果、特にテーマA・Bについて学術上・実用上意義深いものであると考えられたため、特にこれらに注力を行った。
 結果として、テーマA・Bについては手法を確立し、Event-B の開発環境 Rodin Platform のプラグインとして手法の実装を行った。またテーマCについても方法論と典型的な対応付けについて整備を進めることができた。

(2) 詳細

研究テーマA: 形式仕様に対する人工的欠陥の埋め込みおよびその検出チェック

研究テーマB: 検出結果に基づく不変条件の強化

テーマAでは、ソフトウェアテストの技法である変異解析を応用し、与えられた振舞いの形式仕様 b に対して人工的に欠陥を埋め込んだ版(mutant) b' を構築し、与えられた不変条件 i が b' を検出できるかどうかチェックする手法の構築を目指した。

テーマBでは、 b' を検出できるように不変条件 i を強化する手法の構築を目指した。

テーマAの手法はテーマBの手法と密接に関連しているため、ここでは両テーマを同時に説明する。

ここではまず、埋め込む欠陥とは何か、そして検出するとはどういうことが重要となる。

不変条件は、仕様 b の振舞いが到達可能な全ての状態が満たす条件であるため、到達可能な状態と不変条件を満たす状態との関係は図 1-a のようになる。

本研究の目的は、図 1-a における到達可能な状態がどのようなものかの把握が難しいので、把握が容易な不変条件を強化することで到達可能な状態をより良く「説明」することである。それはすなわち到達可能な状態が不変条件を満たす範囲内で、不変条件を狭めていくことに対応する(図 1-b)。



図 1-a



図 1-b

従って、埋め込む欠陥としては、対象システムの振舞いの遷移を広げるような欠陥、すなわ

ちイベントの発火条件の弱化および状態遷移の非決定性の増大とした。
 また、不変条件 i が振舞いの仕様 b' に埋め込まれた欠陥を検出するとは、 b' の到達可能な状態のうち i を満たさないものが存在することを検出することとした(図 1-c)。

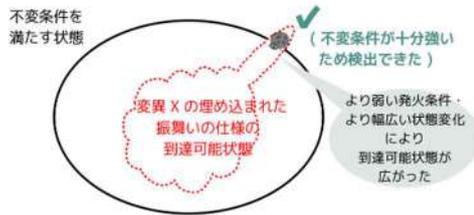


図 1-c

この検出チェックは、 i を満たす状態から b' で定義された振舞いにより i を満たさない状態に遷移するかどうか、すなわち

$$\forall s. i(s) \wedge b \text{ の発火条件}(s) \wedge b \text{ の状態遷移}(s, s') \Rightarrow i(s')$$

を検証することで行うことができる。本提案では、この式をもとにした式の充足可能性・不能性の検査問題として検出チェックを定式化した。

このような定式化により、欠陥を埋め込んで生成された mutant が相変わらず不変条件を満たす(不変条件が mutant を検出できなかった)場合(図 1-d)に、埋め込んだ欠陥を検出することができるように不変条件を強化する(図 1-e)ということが体系的に行えるようになった。



図 1-d



図 1-e

ソフトウェアテスト分野で従来行われてきた変異解析の研究でプログラムコードに埋め込まれる欠陥は、文法エラーを起こさない範囲のランダムなものが基本であった。

一方で、形式仕様の式には論理式の形を取るものが多く、本研究が対象とした手法 Event-B では一階述語論理と集合論をベースにした言語が採用されている。

このような式に対しては、上記に説明した、「発火条件の弱化」「状態遷移の満たす条件の弱化」「不変条件の強化」を(当てずっぽうに試すのではなく)確実に行うことが可能である。

例えば、「 $P \vee Q$ 」を強化するには、「 false 」「 P 」「 Q 」「 $P \wedge Q$ 」「(P を強化した式) $\vee Q$ 」などに式を変更すれば良い。

また、「 $S \subseteq T$ 」を弱化するには、「 true 」「(S の部分集合) $\subseteq T$ 」「 $S \subseteq$ (T の上位集合)」などに式を変更すれば良い。

本研究では、Event-B の言語で定義されている全ての式と述語の形式に対して、上記のような強化ルール・弱化ルール・部分集合構成ルール・上位集合構成ルールを定義した。

また、本アプローチは、多様な欠陥を埋め込み、それを検出する不変条件を構成するもので

あるため、その本質は探索である。

探索を効率化するため、式の強化であればまず大きく強化した上で徐々に弱化する、また埋め込んだ変異に関係のある強化を優先する、簡潔な式になる強化を優先するなどの各種ヒューリスティクスを提案している。

また、弱化・強化の典型的な場合のパターン化も行った。

さらに、過学習のような状態を避けるためのヒューリスティクスや対話的手法も提案した。

その上、本研究の前段階である ACT-I 期間の研究(整合性を保持する形式仕様の自動抽象化システム「ソフトウェア顕微鏡」の開発)において提案した仕様の抽象化手法を用いることにより、元の仕様の一部の側面のみを反映した抽象版の仕様を構築し、それに対して変異解析と条件強化を行うことでより効率化を行える見込みがあることを確認した。

このような変異解析をベースにした強化手法により、発生しがちな欠陥をあらかじめカバーするような不変条件を獲得することができる。

上記の式の変異ルールと変異解析手法・強化手法は Event-B の開発環境 Rodin platform のプラグインとして実装している。

これらの研究成果は、研究期間終了時現在、論文としてまとめ上げつつある。

研究テーマC: プログラムコードにおけるドメインのロジックと形式仕様の対応付け

テーマCでは、プログラムコードにおけるドメインのロジックをもとに、その本質を抽出した形式仕様を構築することを試みた。

プログラムコードにおいてドメインのロジックを扱う研究はオブジェクト指向開発の分野で長年行われてきたが、その中でもドメイン駆動設計(DDD)と呼ばれる設計パラダイムが、特に開発の実務に関わるソフトウェアエンジニアの間で近年注目を集めている。

本研究では、この、実用的かつドメインのロジックが切り分けられるような DDD 手法で開発されたプログラムコードのドメインロジックに対応する部分を形式仕様として切り出すことを試みた。

具体的には、DDD では主にドメインの性質を陽に扱うためのソフトウェア設計パターンが提案されているが、それらの分析を通じ、特にドメインサービス・アプリケーションサービスと呼ばれるパターンを中心として形式仕様の形に落とし込む方法論を模索した。

研究期間終了時現在では一部の典型的な場合の対応付けを提案しており、今後より多くの場合の対応付けを提案していく予定である。

また、DDD で設計されたオープンソースのソフトウェアをもとに形式仕様を構築し、その上でテーマA・Bの手法を適用する実験を行っている。

3. 今後の展開

本研究では DbC の導入を促進しソフトウェアの信頼性を向上するという未来ビジョンを掲げてきた。

研究期間終了時における成果から、この目標に対し一定の基礎固めと一連の手法の提案ができたと考えられる。

学術への波及効果を考えると、特にテーマA・Bで提案した手法は、ソフトウェアテストの近年

の最大の関心の一つである変異解析について、論理式の性質を利用しより意味のある解析を行うというものであり、様々な発展の余地が非常に大きいと見込まれる。

例えば、変異解析では多種の変異が生成され状態爆発問題が起こるが、上記で言及したように、仕様の抽象化を用いることで重要な側面に注力しつつこれを軽減できることが見込まれた。これらの方向に向け技術的な発展を今後も進めていく予定である。

また、産業や社会への波及効果を考えると、特にテーマCで提案した手法の完成度を高め、近年エンジニアに注目されるドメインの性質を明示的に扱った開発を促進する、実用的かつソフトウェアの複雑さの本質に切り込む手法として発展させていく予定である。

4. 自己評価

研究終了段階において、挑戦的な問題に対応する手法について、その基礎を固め、具体的な手法を提案し、豊かな発展の方向性を示すことができたと考えられる。

一方、研究テーマCの進捗や研究内容の発表については当初の予定より遅れており、この点は計画時に問題の大きさを過小評価していたという点で改善の余地があったと考えている。この点は今後の糧としていきたい。

本研究の技術的・学術的な側面は、「ソフトウェアの検査基準自体の検査」という重要だが難しく注目されている問題に対し、ソフトウェアテストの基盤技術に式的意味の考慮を加えるというアプローチで切り込む独創的なものであったと考えている。

ソフトウェア工学では近年自動修正技術が産学両者の両者から注目されているが、その一部を進展させることができたとも考えている。

また、社会的側面として、DDDなどのソフトウェアのドメインに集中する設計手法は近年産業界からの注目が集まっており、それに沿った形で信頼性を向上するという社会的要請への対応に貢献する研究を進められたと考えている。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

(なし)

(2) 特許出願

なし

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

なし

研究報告書

「自動チューニング可能な一般化 N 体問題解法枠組みの開発」

研究期間：2019年4月～2021年3月
研究者番号：50224
研究者：佐藤 重幸

1. 研究のねらい

効率的な並列計算を実現するプログラムを正しく作ることは、一般に難しい。計算対象に関する高水準の要求仕様から、計算機に関する低水準の要求仕様まで、幅広い専門知識を動員し、多大な工数を掛けて慎重にプログラミングする必要がある。その上、そのように苦労して開発した高性能なソフトウェアは、しばしば再利用し難い形となり、本質的に類似する計算であっても、具体的な応用問題毎に、別々にハードコーディングされることが一般的である。特に本研究で注目する N 体問題は、様々な応用領域に見られるような汎用性がありつつ、それを解くアルゴリズムの実装(ソルバ)は、用途毎にハードコーディングされている。そこで本研究では、N 体ソルバの為にドメイン特化言語(DSL)を設計し、その DSL 処理系によって効率的な並列ソルバの開発を助ける。提案 DSL は、様々な N 体アルゴリズムが記述できるような表現能力を持ちつつ、並列計算機を隠蔽する高水準抽象化を提供する。一方、DSL 処理系は、並列計算機に適応した効率的で正しいコードを生成する。これにより、高性能 N 体ソルバに関する車輪の再発明を防止し、多分野に渡る N 体ソルバプログラミングの無駄を削減することを目指す。

2. 研究成果

(1) 概要

大きく分けて次の 4 つを実施した。

- A) 様々な N 体ソルバに対応可能なドメイン特化言語(DSL)を開発した。
- B) N 体ソルバの効率化手法をコンパイラ最適化として定式化し、DSL コンパイラに実装した。
- C) 複数の複雑な N 体ソルバに対して提案コンパイラ最適化を適用し、性能向上を実験的に評価した。
- D) 多分野の応用における提案手法の正しさと妥当性を実証するための N 体ベンチマーク集を開発した。

(2) 詳細

A) 様々な N 体ソルバに対応可能な DSL

Python ベースの言語内 DSL として、N 体 DSL を設計し、C++を生成するコンパイラを実装した。言語設計として特徴的なのは、次の 2 点である。

- N 体カーネルとそれを適用するソルバに記述を分離させたこと。
- 入力データセットをネストした有限集合と述語に限定したこと。

第 1 の点により、カーネルの代数的性質とソルバの計算構造が明確になり、プロ

グラムが読み易く、それぞれに特化した効率化手法を適用しやすくした。第2の点は、多様なデータ構造の詳細を隠蔽し、アルゴリズム記述を高水準化させる。実際のN体ソルバで用いられる様々なデータ構造の実装の詳細を意識させるアルゴリズム記述は、人にとって仕様が分かりにくい上に、機械的な変換を難しくする。高速化のためのデータ構造レベルのトリックは、集合及び述語の実装として、実行時ライブラリの責任として分離させた。

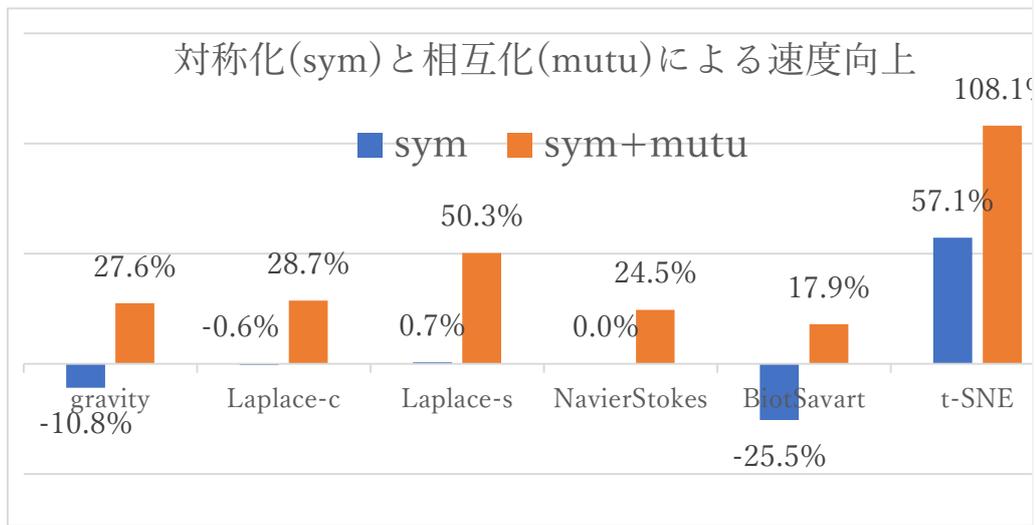
B) N体DSLのコンパイラ最適化

N体カーネルは、重力作用の作用と反作用のように、2つのデータ対に対して、部分的な対称性を持った形で適用されることが多い。一般的には、手作業で対称性を考慮した実装を与えるが、これには専門家の知識が要る。これを自動化するように、プログラムの代数的性質に関するプログラム解析を設計し、対称性が基づく冗長性を発見・除去する**相互化**というコンパイラ最適化を実装した。同時に、ソルバの計算構造を集合論と述語論理で定式化し、対称性のある部分計算を特定して特殊化させる**対称化**というコンパイラ最適化を実装した。

一方、並列化の観点では、N体ソルバの直積構造に着目した並列化技法を開発した。SIMD命令と呼ばれるデータ並列性を持つ命令の利用(SIMD化)は、通常のコンパイラでは、最内ループに対して限定される。しかし、それでは複雑なカーネルを含んだソルバを、効率的にデータ並列処理することが叶わない。そこで、カーネル全体をパラメトリシティに基づいてSIMD化し、ソルバ部分の最内の直積構造を変換して、そのSIMD化カーネルを呼び出す手法を開発した。これにより、カーネルがどれだけ複雑であっても、N体ソルバが共通してもつ直積構造に沿って、効率的なデータ並列処理ができるようになる。

C) 提案DSLとコンパイラ最適化の実験的評価

複数の異なるカーネルとソルバを用いて、コンパイラ最適化の効果を測定した。次の図は、特に対称化と相互化の速度向上である。



この実験で、100 行以上もあり、5-6 重のループネストを持つような複雑なカーネルコードを用いたソルバについての、性能向上にも成功した。このような複雑なループに対して、既存の汎用コンパイラは、対称化や相互化のような高水準の大域的な最適化は適用できない。その上、N 体ソルバに特化した SIMD 化手法によって、複雑なカーネルコードに含まれる数学関数などの重い計算をも含めて SIMD 化され、性能が向上した。

D) 近似 N 体ベンチマーク集の開発

対称化や相互化のような代数的性質を利用したプログラム変換において問題になるのは、実計算機上での結果の正しさと妥当性である。数学的な数字(例えば有理数)として考えれば、プログラム解析によって正しさは保証されているが、実計算機では浮動小数点数演算を用いるので、演算順序に依存した丸め誤差が生じる。したがって、提案するコンパイラ最適化が、丸め誤差に有意な差を生まないことが実用上重要である。更に難しいことに、誤差は、丸め誤差からのみ生じる訳ではない。実用的な N 体ソルバは、しばしば近似アルゴリズムを採用しており、モデルレベルの誤差が生じる。提案処理系を、実際のアプリケーションで用いるには、モデルレベルの誤差の許容範囲に収まることを検証する必要がある。それを検証するためのベンチマークとして、近似 N 体ソルバアプリケーションを 4 つ開発した。

- H-matrix(境界要素法, 電界解析)
- t-SNE(クラスタリング, 可視化)
- gravity(重力 N 体シミュレーション, 球状星団)
- SPH(流体シミュレーション, 表面波)

これらのベンチマークで重要なのは、合理的な入力データセットの生成と共に、モデルレベルの誤差パラメータを持ちつつ、出力に関して応用上の許容される誤差基準を、それぞれに設計した点である。これによって、提案するコンパイラ最適化に対する評価基盤というだけでなく、実用的な近似計算のベンチマーク集として、精度と速度のトレードオフを調べる基盤としても利用できるようになっている。

3. 今後の展開

プログラミング言語の実装研究という観点では、DSL 処理系の基盤を作れたという面が大きい。開発した DSL コンパイラは、提案する N 体 DSL にしか使えない枠組みではなく、他の用途の DSL にもほぼそのまま転用できる仕組みとなっている。例えば、テンソル計算の DSL などに発展させ、機械学習分野のプログラミングに貢献できるような実装技術の開発などの展開が考えられる。そして、本研究で扱った近似計算に対する高水準最適化というのは、未だに発展途上であり、今後も発展させられる余地が大いにある。例えば、同じ部分計算の結果を保存して再利用することで計算を効率化する漸増化を、近似計算に対して拡張する展開などが考えられる。

本プロジェクトで開発した近似 N 体ベンチマークは、近似計算を支援するプログラミング言語技術の評価基盤として即座に利用可能だが、プログラミング言語分野に限らず有用なものである。近似計算は、ハードウェア分野でも研究が進んでおり、低信頼だが低電消費の CPU や、

低信頼だが高速なメモリなどが研究されている。そのようなハードウェアの評価基盤としても利用できる。現段階では公開していないが、速やかに permissive license でオープンソース化する予定である。

より大きな観点で言えば、本研究は、N 体ソルバを通して、用途毎にコンパクトな DSL を利用することの意義を実証できたと考えている。実社会では、既存のソフトウェア資産と同じ言語で、新しいソフトウェアを作りがちである。DSL に基づくプログラミング言語技術によって、既存ソフトウェアを上回るような高品質なソフトウェアが手軽に作れるようになることの認知度が上がれば、社会全体のソフトウェア開発の生産性向上に寄与する、

4. 自己評価

研究目的の達成状況

ソフトウェア開発を重点的に進め、2 年間という期間内に目途がやっと立ったが、結局、トップ国際会議に論文出版には至らなかった。研究の性質上、ある程度仕方がない面はあるが、2 年間においてポスター発表のみで論文出版が間に合わなかったという出版の少なさは大きな課題である。

研究の進め方(研究実施体制及び研究費執行状況)

研究費執行の計画は当初の予定から変わり、結果としてフィクスターズとの共同体制に資金の大部分を投じることになったが、結果としては大成功だった。フィクスターズが持つ産業側のノウハウと、自身が持つアカデミア側のノウハウを協調させる研究マネジメントを実施できたことは、自身の研究経験における大きな財産となった。

修士学生に研究補助を依頼しつつ、それに関連した、その学生の修士研究になるようなテーマを割り当てるという学生マネジメントの経験が積めたことも良かった。

研究成果の科学技術及び学術・産業・社会・文化への波及効果

近似 N 体ベンチマーク集は、計算を扱う学術分野において、大きなインパクトをもたらす可能性があると考えている。近似計算は、技術的に扱うことは可能だが、それを評価することが難しい。単にプログラムだけがあるのではなく、そのモデル式やパラメータの意味や制約、そして出力検証まで、きちんとドキュメント化されたベンチマーク集は、大変貴重である。

既存の汎用言語と違って、研究レベルの DSL は、発表段階では誰も使ったことが無く、しばしば、それ自体はすぐには役立たないものである。しかし、DSL 研究を通して、様々なプログラミング言語を使い分けることの意義が広がることは、プログラミングという活動を、より豊かで生産的なものにすると考えている。

研究課題の独創性・挑戦性

コンパイラ最適化では、変換後のプログラムの正しさが至上命題である。その限界を超えるような、少し正しくない結果が生じることがあっても、応用上の常識から許容される範囲のより効率の良いプログラムを得ることは、これまで人が、経験的に手作業で行ってきたことである。本研究で、その 1 つの形を形式化し自動化できたということは、プログラミングの自動化という観点で大変意義深いことである。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

1. 著者. 発表論文タイトル. 掲載誌名. 発行年, 巻号, 始頁-終頁, その他

(2) 特許出願

研究期間累積件数:0 件

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

Sato, S. A Symmetry-Based N-Body Solver Compiler. SPLASH Companion 2019: Proceedings Companion of the 2019 ACM SIGPLAN International Conference on Systems, Programming, Languages, and Applications: Software for Humanity. Poster.

研究報告書

「Data Skewness を捉えた超高速・省メモリな大規模データ処理」

研究期間：2019年4月～2021年3月
研究者番号：50225
研究者：塩川 浩昭

1. 研究のねらい

近年、ビジネスや医療、スポーツなどの幅広い分野においてデータ分析技術の活用が成功を収めており、時々刻々と生み出される大規模なデータを高速高精度に分析処理することの重要性については疑いの余地がない。一方で、高速に高い精度の分析処理結果を獲得するためには、高い計算性能を持った計算機が不可欠である。大規模なデータに対して高速かつ高精度なデータ処理を行おうとした場合、それに見合った計算環境を利用者は準備する必要があり、誰でも容易に大規模データを扱うことが出来るわけではないのが現状である。

本研究では、大規模データ処理が必要とする計算資源と我々が手にすることができる計算資源のギャップを埋めるべく、多様な計算環境における高精度なデータ処理を想定した超高速・省メモリな大規模データ処理アルゴリズムの開発に取り組む。一般的に我々が容易に入手可能な計算環境は、前述の高性能計算機と比較して CPU やメモリ、バス速度などの性能が低い場合が多い。とりわけ、CPU性能とメモリサイズは、データ処理の規模と性能に直結する重要な要素であり、両者の性能低下は扱えるデータと分析の規模を直接的に制限する要因となり得る。そこで本研究では、超高速かつ省メモリな大規模データ処理アルゴリズムを開発・提供することにより、誰もが手持ちの計算環境でビッグデータ処理を実現できるようにすることを目指す。

本研究では実世界のデータの中に含まれているデータ分布の偏りや属性間の従属性などといったデータの偏り (Data Skewness) に着目する。例えば、現実世界に存在するグラフデータには特定の部分グラフ構造が頻出するということがこれまでの研究で明らかになっている。本研究は実データの持つ Data Skewness を捉えることで既存のデータ処理アルゴリズムを再設計し、高速かつ省メモリなアルゴリズム群の構築を目指す。これまでの ACT-I 期間では決定的アルゴリズムの性質に基づいた Data Skewness Caching と呼ばれる高速化手法を提案した。加速フェーズ期間ではこの性質を前提に、(1) 多様なグラフデータ処理、ならびに(2) 全点对計算・データベース処理のような多次元データ処理に対するアルゴリズムの大幅な高速化を狙う。

2. 研究成果

(1) 概要

大規模データに対する Data Skewness を捉えた超高速・省メモリなアルゴリズムの構築を目標として、本研究期間では【(1) 属性付きグラフや不確実グラフといった多様なグラフデータに対する分析アルゴリズムの高速化】、ならびに【(2) 全点对計算やデータベース検索処理などを含む多次元データ処理アルゴリズムの高速化】を対象とした研究開発を実施した。これらの研究を通じ、複雑な構造を持つグラフデータや構造の定まらない多次元データに対する処理についても、Data Skewness Caching が有効に働くことを確認することができた。

(2) 詳細

【研究課題 (1)】 多様なグラフデータに対する分析アルゴリズムの高速化

本研究の目的は多様なグラフデータに対して Data Skewness を利用した高速化手法を構築することである。本研究期間では不確実グラフに対する信頼性問合せや属性付きグラフに対するコミュニティ検索を題材として、Data Skewness Caching やデータ構造の偏りを利用した高速化アプローチの開発を行い、本研究の提案する方式の有効性を確認した。数百万ノード規模の実データセットを利用した評価実験を通じて、各題材に対する提案手法が最先端の手法よりも数十～数百倍程度高速に計算可能であることを確認した。また、本研究では上述した手法を応用して分散計算環境におけるグラフデータ処理の効率化にも取り組み、スケーラビリティの高い分散グラフ処理を実現した。以下に各成果の詳細をまとめる。

● 不確実グラフに対する信頼性問合せの高速化

不確実グラフはグラフのエッジに対してその生成確率が付与されたグラフ構造であり、実世界の現象をモデル化するために用いられる重要なデータ構造のひとつである。本研究ではこの不確実グラフにおいて、任意の2ノードが接続される確率(信頼性)を高速に計算する手法 Sharing RCSS+ (Sharing Recursive Cut-Set Sampling+) を開発した。Sharing RCSS+は不確実グラフから生成され得るグラフインスタンスをサンプリングすることで信頼性を推定する。この際に、不確実グラフ内で頻出する部分グラフ構造を考慮して不確実グラフを分割することで、サンプリングの対象とする確率空間を分割する。これにより、少ないサンプル数を用いて高精度に信頼性を推定することを可能とする。

提案手法 Sharing RCSS+と既存手法である MC [Fishman, 1985], BFSS [Zhu et al., 2015] とのサンプル数および信頼性推定時間の比較を図 1 に示す。図 1 (a)は推定した信頼性が一定の推定精度に達するまでに必要としたサンプル数の比較である。提案手法はいずれの設定においても既存手法よりも少ないサンプル数で信頼性を推定できていることが確認できる。図 1 (b)は一定の精度水準に達するまでの推定時間の比較結果を示しており、提案手法は推定時間を数十倍～数百倍程度高速化することに成功していることがわかる。この結果からも示唆される通り、提案手法は少ないサンプル数で高精度の信頼性推定を可能とする。本研究ではこの性質を理論的にも証明した。

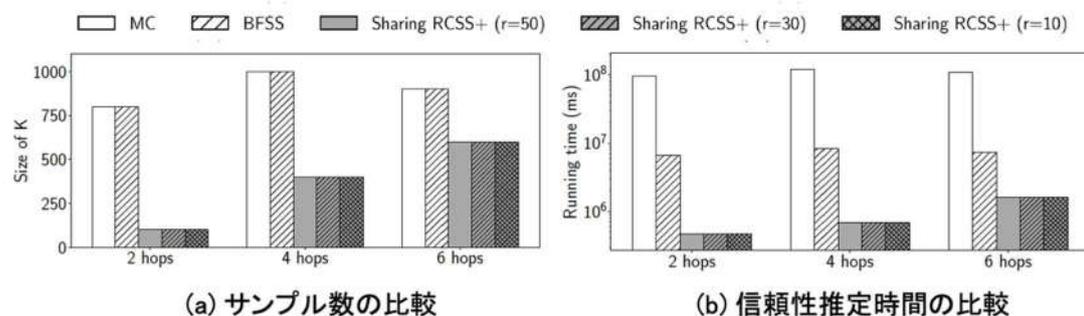


図 1. Sharing RCSS+の性能比較

● 属性付きグラフに対するコミュニティ検索の高速化

ノードに属性が付与された属性付きグラフに対するコミュニティ検索の高速化手法を開発した。コミュニティ検索は属性付きグラフにおいて、ユーザが与えたクエリに対して最も適合性の

高いコミュニティを見つけ出す処理である。膨大なノードの組合せの中からコミュニティの頑健性とクエリに対する属性の類似度の最も組合せを探索する必要があり、大きな処理時間を必要とする。本研究では Data Skewness を利用した計算不要ノードの探索枝刈りを導入することで、計算時間の大幅な削減に成功した。

図 2 に提案手法 (Fast enumeration) と最先端手法 LocATC [Huang and Lakshmanan, 2017]との実行時間の比較を示す。図 2 では Cornell, Texas という 2 種類の実データセットを対象にランダムに選択した 100 個のクエリを処理した際の平均実行時間を比較している。この図からもわかるように提案手法は LocATC と比較して数十倍程度高速にコミュニティを検索できていることが確認できる。

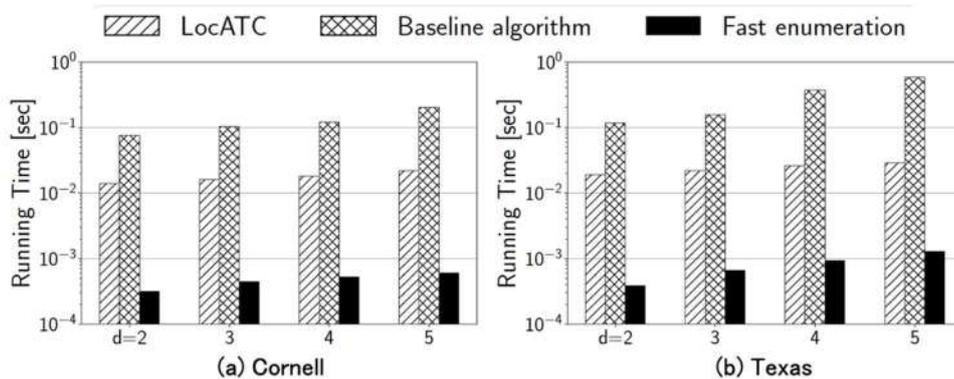


図 2. Fast enumeration 法の実行時間比較

● 分散グラフクラスタリングのスケーラビリティ向上

本研究では Data Skewness を用いた効率的な分散グラフクラスタリング DSCAN を開発した。一般的に分散グラフ処理では計算機間で同期処理を必要とする。この同期処理は一般的に大きな処理時間を要することから、同期処理を可能な限り削減することが重要な課題となる。DSCAN では Data Skewness を捉えることで同期不要なエッジを特定する。同期不要な処理を削減することで効率的な分散グラフクラスタリングを実現する。

図 3 に DSCAN の実行時間の比較を示す。代表的な既存手法よりも数十倍から数千倍程度高速な処理を実現している。また、既存の手法で処理できなかった clueweb データセットも数十秒程度で処理可能となった。また図 4 にスケーラビリティを比較した結果を示す。図 4 では各データセットに対して処理に使用した計算機台数を増加させた際の性能向上率を示しており、提案法は既存法よりも良いスケーラビリティを示していることが確認できる。

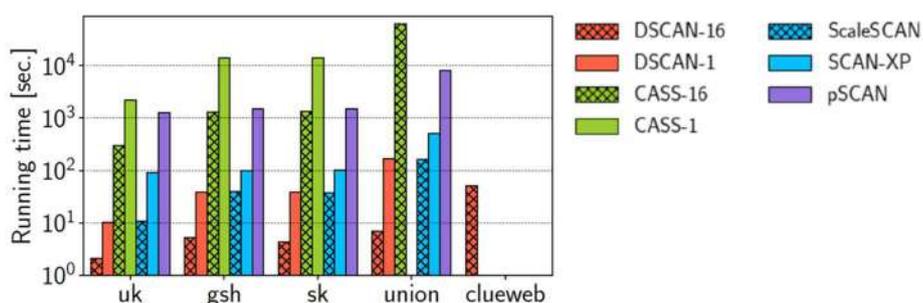


図 3 実行時間の比較

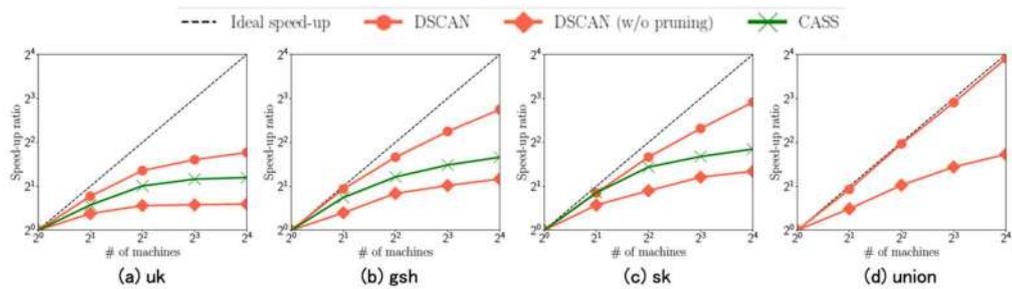


図 4. スケーラビリティの比較

【研究課題 (2)】 多次元データに対する分析アルゴリズムの高速化

本研究の目的は多次元データ処理において Data Skewness に着眼した高速化手法の有効性を検証することである。本研究期間では全点对計算を必要とする Affinity Propagation とグラフデータベースにおける問合せ処理を題材として、本研究のアプローチの有効性を検証した。これらの研究においても上述した研究成果と同様に、数百万から数億件程度の実データセットにおいて、提案法が数十倍～数百倍程度高速に計算可能であることを確認した。

● Affinity Propagation の高速化

Affinity Propagation は多次元データを含む多様なデータオブジェクトを対象としたクラスタリングアルゴリズムである。最適解に対して非常に性能の良い近似解を求めることができる性質が知られており、幅広い領域で利用されている手法である。しかしながら、クラスタの検出には全点对計算を必要とするため膨大な計算時間を必要とする。本研究では Data Skewness とその決定性を利用することで、必要最低限のデータのみ計算するようにアルゴリズムを設計した。本研究の提案手法 ScaleAP は数百万件程度のデータセットに対して、従来技術よりも精度を劣化させず 100 倍以上高速な処理を可能とした。

図 5 は提案手法と代表的な最先端手法との実行時間ならびに精度の比較結果を示す。精度の比較では、それぞれのアルゴリズムが出力した結果が Affinity Propagation とどれだけ一致しているかについて F 値を用いて比較している。この結果からもわかるように提案手法 ScaleAP は既存手法よりも 100 倍程度高速であるが、Affinity Propagation と同じクラスタリング結果を出力可能である。これに対して既存手法は提案手法よりも低速であり、多くの場合、近似解のみを出力する。これらの結果からも本研究が主眼をおいている Data Skewness を捉えた高速化アプローチは全点对計算を必要とするデータ処理にも応用できる可能性が示唆されたと考える。

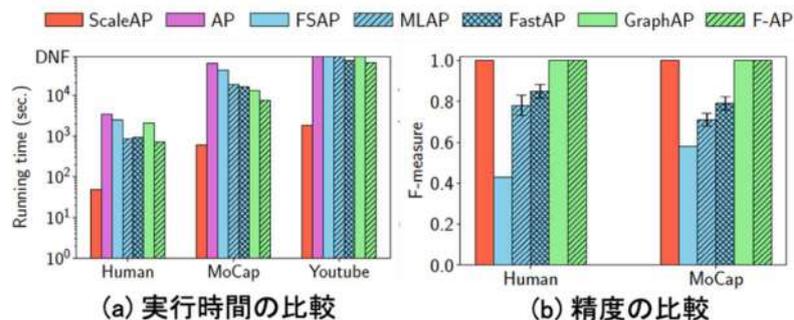


図 5. ScaleAP の性能比較

3. 今後の展開

本研究の狙いは、提案技術の開発により、誰もが手持ちの計算環境でビッグデータ処理を出来るようにすることである。本研究は、ACT-I 期間や加速フェーズ期間を通じて、グラフデータ処理や多次元データ処理に対する Data Skewness を捉えた新しい高速化・省メモリ化技術の有効性を実験・理論の両面から確認してきた。この成果は大規模なデータを処理する際に必ずしも膨大な計算資源を必要としないことを示唆している結果であると考えている。本研究では引き続き、開発した技術のライブラリ化等を通じて、産業や社会に還元できるよう進めていく予定である。

昨今様々な IoT デバイスが普及にともなって、我々が利用可能な計算環境や計算資源の多様化が加速している。このような環境において IoT アプリケーションの高機能化を実現する上では、本研究で開発したアルゴリズムの様な高いパフォーマンスを発揮することが出来るアルゴリズムが必要不可欠になるのではないかと考えている。このような背景を受けて、本研究では IoT データなどのリアルタイムかつ計算資源の乏しい状況下におけるデータ処理の高性能化を次の研究の展開として見据えており、JST さきがけ「IoT が拓く未来」の支援のもと、IoT データ処理の高性能化に向けたプロジェクトを開始した。本プロジェクトではこれまで ACT-I を通じて開拓してきた Data Skewness を捉えた高性能化を軸として、よりリアルタイムかつマルチモーダルなデータ処理の高性能化に取り組んでいく計画である。

また、これまで ACT-I で取り組んできた研究成果の一部からも示唆されるように、Data Skewness を捉えたアプローチの有効性はアルゴリズムの高速化に限定されず、幅広い領域に展開可能なアイデアであると考えている。例えば、Data Skewness に基づきデータレイアウトを調整することで、並列計算時のメモリ(NW)バンド幅使用量を削減できることがこれまでの研究からわかってきている。これは HPC 等における HW 最適化技術にも応用可能な発見である。他にも、【研究課題(1)】で取り組んだ分散グラフクラスタリングのスケラビリティ向上では計算機間の通信コスト削減にも本アプローチが有効であることが示唆された。これらの成果を踏まえて、今後の研究の方向性として、ACT-I を通じて開拓した技術を HW 最適化や効率的な超並列計算等のより新しい研究課題への展開していくことを見据えている。

4. 自己評価

- 研究目的の達成状況

本研究期間を通じて、単純なグラフデータのみならず複雑な構造をもつ多様なアルゴリズムに対する Data Skewness を捉えたアプローチの構築とその有効性の検証を理論・実験の両側面行なった。これは当初計画していた研究目的を十二分に達成しており、幅広いアルゴリズムに対する提案アプローチの有効性を示唆するものであったと考える。

- 研究の進め方(研究実施体制及び研究費執行状況)

研究の実施体制及び研究費の執行状況は、新型コロナウイルス感染症の流行による海外との往来を伴う連携や出張の停止を除き、概ね計画通り進捗した。

- 研究成果の科学技術及び学術・産業・社会・文化への波及効果

本研究期間を通じて多くのアルゴリズムに対して提案アプローチの有効性を示すことができた点は学術的に成果のあった点であると考えている。特に加速フェーズ期間中はいくつかの難関国際会議にも論文が採択されており、技術的新規性や有用性、論文のイン

パクトについては高い評価を得ていると考えている。また、本研究に興味を持った海外の研究者らから問い合わせが多くあり、国際的な研究連携も進みつつある状況にある。したがって、今後着実に技術開発や研究連携を続けていくことで、学術面への波及効果は次第に大きくなると期待できる。また、主要な提案技術は論文発表と同時にソフトウェア化を行うことで産業面での波及効果を見込んでいる。

- 研究課題の独創性・挑戦性

本研究で提案する Data Skewness を捉えたアプローチ、とりわけ Data Skewness Caching は我々が知る限り例を見ない手法である。また、上述の通り、ACT-I 期間や加速フェーズ期間を通じて複数の難関会議で発表を行い、技術的な新規性や有効性について非常に高い評価を得ており、国際的な共同研究も進みつつある。以上のことから、本研究課題の独創性・挑戦性は高いと自己評価している。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

1. Hiroaki Shiokawa. Scalable Affinity Propagation for Massive Datasets. In Proceedings of the 35th AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI 2021), February 2021 (in press)
2. Hiroaki Shiokawa, Tomokatsu Takahashi. DSCAN: Distributed Structural Graph Clustering for Billion-edge Graphs. In Proceedings of the 31st International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2020), pp.38-54, September 2020.
3. Shohei Matsugu, Hiroaki Shiokawa, Hiroyuki Kitagawa. Fast and Accurate Community Search Algorithm for Attributed Graphs. In Proceedings of the 31st International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA2020), pp.233-249, September 2020
4. Junya Yanagisawa, Hiroaki Shiokawa. Fast One-to-Many Reliability Estimation for Uncertain Graphs. In Proceedings of the 31st International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA2020), pp.106-121, September 2020
5. Hiroaki Shiokawa, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa. Scaling Fine-grained Modularity Clustering for Massive Graphs. In Proceedings of the 28th International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI2019), pp.4597-4604, August 2019

(2) 特許出願

研究期間累積件数: 0件

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

- 主要な学会発表

1. Hiroaki Shiokawa, “Scalable Affinity Propagation for Massive Datasets,” the 35th AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI 2021), February 2021.
2. Hiroaki Shiokawa, Tomokatsu Takahashi, “DSCAN: Distributed Structural Graph Clustering for Billion-edge Graphs,” The 31st International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2020), September 2020.
3. Junya Yanagisawa, Hiroaki Shiokawa, “Fast One-to-Many Reliability Estimation for

Uncertain Graphs,” The 31st International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA2020), September 2020.

4. Hiroaki Shiokawa, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, “Scaling Fine-grained Modularity Clustering for Massive Graphs,” The 28th International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI2019), August 2019
5. 塩川 浩昭, 天笠 俊之, 北川 博之, “基調構造を利用したグラフクラスタリングの高速化,” 第 12 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM2020), March 2020.

● 受賞

1. 塩川 浩昭, 日本データベース学会 第 16 回 上林奨励賞, 2020 年 6 月 26 日
2. 塩川 浩昭, 天笠 俊之, 北川 博之, 第 12 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2020) 優秀論文賞 “基調構造を利用したグラフクラスタリングの高速化”

研究報告書

「視覚に基づく言い換えのセマンティック類型」

研究期間: 2019年4月~2021年3月
研究者番号: 50226
研究者: チョ シンキ

1. 研究のねらい

Visually grounded paraphrases (VGPs) are different phrasal expressions describing the same visual concept in an image. Our research until now treats VGP identification as a binary classification task, which ignores various phenomena behind VGPs. E.g., Figure 1 (a) “field hockey” and “lacrosse” are linguistic paraphrases; Figure 1 (g) “competitors” and “a group of bicyclist” describe the same visual concept from different aspects; however, these two pairs of VGPs have been treated equally, which is obvious undesirable. In the acceleration phase, we aim to **create typology of VGPs to elucidate the phenomena behind VGPs**. Studying typology for linguistic paraphrases is not new in natural language processing. The paraphrase typology focuses on lexicon, syntax and discourse phenomena in paraphrases. VGPs differ from paraphrases that they focus on the semantic aspects of images to describe the same visual concept. Therefore, we believe that the paraphrase typology is unsuitable for VGPs, and **propose to create VGP typology based on semantics**.

In natural language inference, seven basic semantic relations between two phrases have been defined, i.e., *equivalence*, *forward entailment*, *reverse entailment*, *negation*, *alternation*, *cover* and *independence*. As VGPs describe the same concrete visual concept, *negation* and *cover* relations should not exist in VGPs.

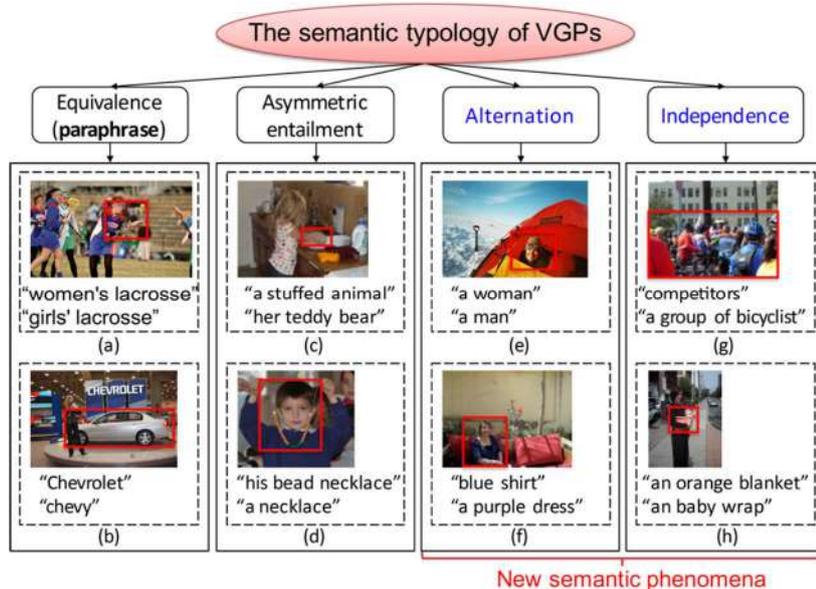


Figure 1: The semantic typology of VGPs.

Detailed analyses on the Flickr30k entities dataset indicate that the other five semantic relations cover VGPs. Figure 1 shows our semantic VGP typology (note that forward and reverse entailment are combined, but these can be further classified according to applications). Figure 1 (a) and (b) are linguistic paraphrases; Figure 1 (c) and (d) are entailment VGPs where one phrase

contains more fine object attribute description of the same concept, i.e., “teddy bear” and “bead.” Knowledge such as “teddy bear *is a* stuffed animal” can be mined from this type. Figure 1 (e) and (f) use alternate phrases to describe the same visual concept, which may come from the difference in human recognition. The phrases in Figure 1 (g) and (h) are linguistically independent but become VGPs upon grounding. We believe that **alternation and independence VGPs are new semantic phenomena that cannot be explained only with language**, and visual inference is required to automatically identify them. More interestingly, when we look at a combination of two noun phrases, **the semantic relation can change from the sub-noun phrases**. E.g., “A woman speaking in front of a chevy” and “A woman promoting the Chevrolet” of Figure 1 (b), although both the sub-noun phrases are *equivalence*, the relation of the entire phrase pair is *independence*.

In the acceleration phase, **we plan to annotate the VGP typology on the Flickr30k entity dataset and design novel language and vision models to automatically classify VGPs**. The creation of the semantic VGP typology will not only elucidate the phenomena behind VGPs but also **open up novel ways of utilizing VGPs for various language and vision tasks, which require semantic understanding**. E.g., it can significantly boost the performance of textual entailment via visual grounding, which is a fundamental but very challenging natural language understanding problem. Understanding the semantic relation via visual grounding is also crucial towards machine reading, which is the main challenge in the Todai robot project. Therefore, we believe that this work will **significantly deepen and promote the research in both language and vision understanding**.

2. 研究成果

(1) 概要

In summary, we mainly studied the following VGP topics in the acceleration phase.

1. **VGP identification improvement.** We improved the VGP identification model proposed in the ACT-I research period via a gated network and visual grounding. Our model can adaptively use visual and language features based on different VGPs.
2. **VGP typology annotation and classification.** Following the VGP typology explained in the previous section, we annotated a large-scale VGP typology dataset based on the original VGP dataset and designed a model for VGP classification.
3. **Cross-lingual visual grounding.** As the core technology of VGP, visual grounding has been studied for English only. We created a French visual grounding dataset and created a cross-lingual visual grounding model for French visual grounding via transferring knowledge from English.

Besides the core VGP research, we also studied its applications of visual question answering and human prediction. We published our work at international journals of Neurocomputing [1], IEEE Access [2], and international conferences of AAAI, WACV etc. [3-7]

(2) 詳細

We detail the main VGP topics in the acceleration phase that we studied.

1. VGP identification improvement

Previous studies have developed models to identify VGPs from language and visual features. In these existing methods, language and visual features are simply fused. However, our detailed analysis indicates that VGPs with different lexical similarities require different weights on language and visual features to maximize identification performance. This motivates us to propose a gated neural network model (Figure 2) to adaptively control the weights. In addition, because VGP identification is closely related to phrase localization, we also propose a way to explicitly incorporate phrase-object correspondences. From our evaluation in detail, we confirmed our model outperforms the state-of-the-art model.

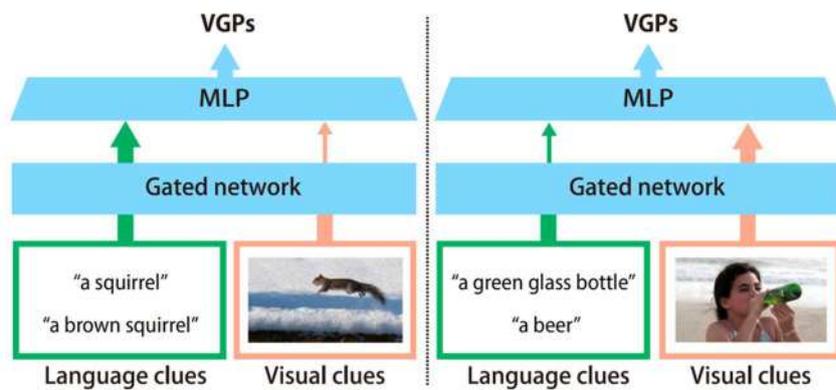


Figure 2: Our gated network for VGP identification.

2. VGP typology annotation and classification

Previous studies treat VGP identification as a binary classification task, which ignores various phenomena behind VGPs such as linguistic paraphrases and VGPs from different aspects. In this work, we propose semantic typology for VGPs, aiming to elucidate the VGP phenomena. We construct a large VGP dataset that annotates the class to which each VGP pair belongs according to our typology. In addition, we present a classification model that fuses language and vision features for VGP classification on our dataset (Figure 3). Experiments indicate that joint language and vision representation learning is important for VGP classification.

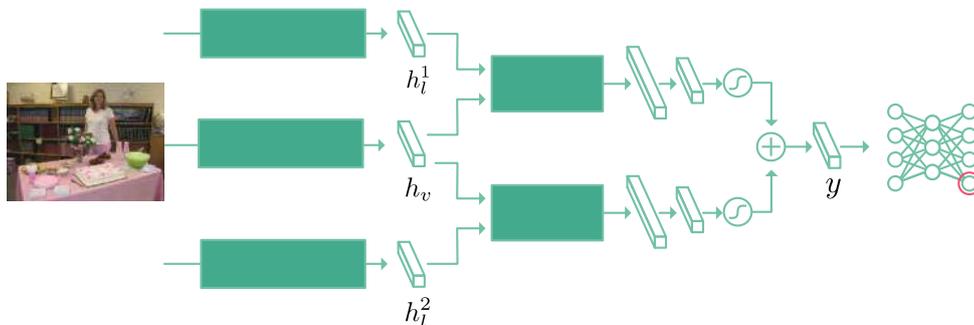


Figure 3: Our VGP classification model.

3. Cross-lingual visual grounding

Visual grounding is a vision and language understanding task aiming at locating a region in an image according to a specific query phrase. However, most previous studies only address this task for the English language. In this work, we present the first work on cross-lingual visual grounding to expand the task to different languages to study an effective yet efficient way for visual grounding on other languages. We construct a visual grounding dataset for French via crowdsourcing. Our dataset consists of 14k, 3k, and 3k query phrases with their corresponding image regions for 5k, 1k, and 1k training, validation and test images, respectively. In addition, we propose a cross-lingual visual grounding approach that transfers the knowledge from a learnt English model to a French model (Figure 4). Despite that the size of our French dataset is 1/6 of the English dataset, experiments indicate that our model achieves an accuracy of 65.17%, which is comparable to the accuracy 69.04% of the English model.

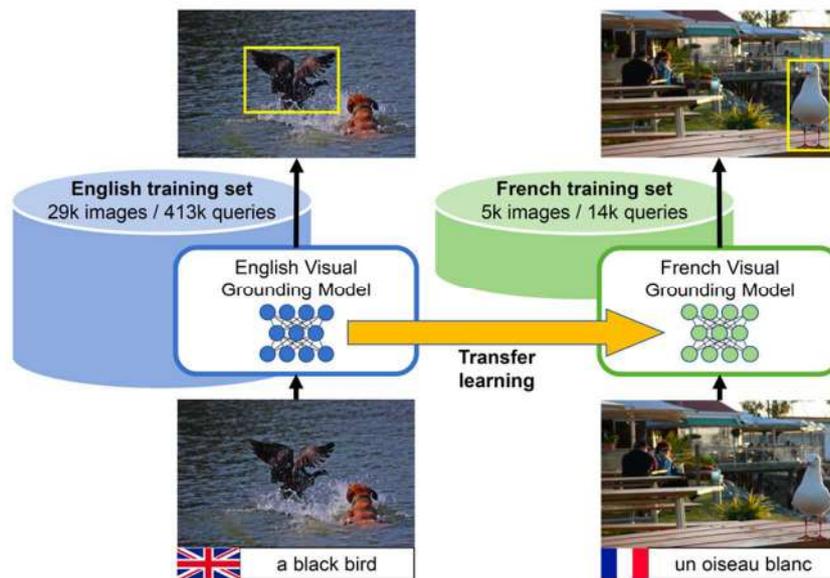


Figure 4: Cross-lingual visual grounding.

3. 今後の展開

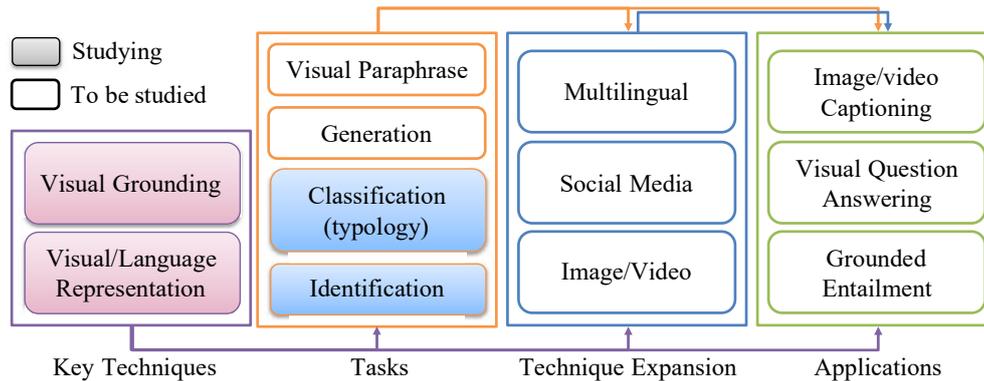


Figure 5: The VGP research field that we aim to establish (arrows denote the technical hierarchy between each module category).

Although we originally created the concept of VGP and its typology in our JST ACT-I project, this is just a **start point**. There is a large amount of problems to be studied, by addressing which we can: **1) establish a research field of VGP; 2) establish vision and language processing techniques based on VGP understanding; 3) it has the potential to elucidate how humans learn and process paraphrases in vision and language understanding.** Figure 5 summarizes these problems and shows the VGP research field that we aim to establish.

4. 自己評価

We have successfully achieved our research goal, which was creating typology for VGP. We further improved VGP identification and proposed cross-lingual visual grounding.

・研究の進め方(研究実施体制及び研究費執行状況)

Regarding to the research implementation system, because of the multimodality of the project, we closely collaborated with researchers in the computer vision (CV) field. We also employed RA students for creating VGP related datasets.

Regarding to the research funding execution status, we reasonably used it for purchasing GPU servers, dataset annotation, RA employment, and travel expenses. However, due to COVID-19, we have to apply for an extension of half a year for our project.

・研究成果の科学技術及び学術・産業・社会・文化への波及効果

VGP identification and classification that we have started in our ACT-I research period is a great start point for VGP research. VGP research is crucial for both language and vision understanding. We believe that our pioneering work on VGPs in the ACT-I research period has the potential to make VGPs a new language and vision research field in both NLP and CV fields. We are eager to promote the VGP research field with other researchers further.

・研究課題の独創性・挑戦性

We originally proposed the concept of VGPs, which is an achievement inspired by our study in

both NLP and CV. Due to the pioneer and multimodality characteristics, this work is very challenging. We overcame the problems and systematized VGP research via close collaboration between NLP and CV researchers.

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

- | |
|--|
| [1]. Wenjian Dong, Mayu Otani, Noa Garcia, Yuta Nakashima, <u>Chenhui Chu</u> . Cross-Lingual Visual Grounding. IEEE Access, (2021). |
| [2]. Mayu Otani, <u>Chenhui Chu</u> , Yuta Nakashima. Visually Grounded Paraphrase Identification via Gating and Phrase Localization. Neurocomputing, Volume 404, Pages 165–172, (2020). |

(2) 特許出願

研究期間累積件数:0 件

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

- [3] Yuta Kayatani, Zekun Yang, Mayu Otani, Noa Garcia, Chenhui Chu, Yuta Nakashima, Haruo Takemura. The Laughing Machine: Predicting Humor in Video. In Proceedings of the IEEE 2021 Winter Conference on Applications of Computer Vision (WACV 2021), (2021).
- [4] Zekun Yang, Noa Garcia, Chenhui Chu, Mayu Otani, Yuta Nakashima, Haruo Takemura. BERT Representations for Video Question Answering. In Proceedings of the IEEE 2020 Winter Conference on Applications of Computer Vision (WACV 2020), (2020).
- [5] Noa Garcia, Mayu Otani, Chenhui Chu, Yuta Nakashima. KnowIT VQA: Answering Knowledge-Based Questions about Videos. In Proceedings of the Thirty-Fourth AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI 2020), (2020).
- [6] Mayu Otani, Chenhui Chu, Yuta Nakashima. Adaptive Gating Mechanism for Identifying Visually Grounded Paraphrases. ICCV 2019 MDALC Workshop, (2019).
- [7] Chenhui Chu. Visually Grounded Paraphrase Identification. Third International Workshop on Symbolic-Neural Learning, (2019).

研究報告書

「安全な暗号の確立に向けた回路最小化問題の計算困難性の解析」

研究期間：2019年4月～2021年3月
研究者番号：50227
研究者：平原 秀一

1. 研究のねらい

情報通信技術は現代の社会にとって必要不可欠になっており、通信の秘密は公開鍵暗号方式と呼ばれる暗号技術によって守られている。一方で、その安全性は未だ数学的に証明されていない。本研究の究極的な目標は、計算量理論に裏付けされた**絶対的に安全な暗号**の存在を示すことである。残念ながら現在の暗号は**相対的な安全性**に基づいている。例えば、現在広く使われているRSA暗号などの安全性は「素因数分解を効率的に解けない」といった証明されていない経験的な仮定に基づいており、真に安全とは限らない。

しかしながら、前述の目標を達成するためには計算量理論(計算複雑性理論)における超難問である $P \neq NP$ 予想を解決する必要がある。 NP とは効率的に証拠の正しさを検証できる問題全体のこと、 P とは効率的に計算できる問題全体のことである。 $P \neq NP$ 予想は効率的に正しさを検証できるが、効率的に計算することはできない問題の存在を問う未解決問題であり、暗号の安全性に深く関わっている。この未解決問題はミレニアム懸賞の問題のひとつで100万ドルの懸賞金がかけられているが、現状では残念ながら解決への道筋がたっていない。さらに悪いことに、公開鍵暗号の安全性は $P \neq NP$ 予想を解決するだけでは不十分であり、 $P \neq NP$ 予想の平均時計算量の一般化である $DistNP \not\subseteq AvgP$ 予想などを解決しなければならない。

そこで本研究では、「回路最小化問題(Minimum Circuit Size Problem; MCSP)」および「時間制限付きコルモゴロフ記述量問題(MINKT)」と呼ばれる、計算量理論において中心的な問題の計算困難性を解明することを目指す。これらの問題は「メタ計算問題」と呼ばれる問題群で、どのくらい計算するのが難しいか未解決である。ACT-I本期間において、メタ計算問題は $DistNP \not\subseteq AvgP$ 予想に深く関連していることが明らかになった。本ACT-I加速フェーズでは、メタ計算問題の計算困難性を解明することにより、絶対的に安全な暗号の構築に資することを目指す。

2. 研究成果

(1) 概要

本研究における最も重要な成果として、平均時計算量に対して「メタ計算量」を用いた新しい解析手法を開発し、 NP の平均時計算量に関する長年の未解決問題を解決することに成功した。以下に用語の説明と詳細を述べる。

平均時計算量とは、最悪時計算量に対する概念である。通常アルゴリズムの性能は最悪時計算量に対して行われることが多い。すなわち、アルゴリズムにとって最悪な入力における計算時間のことを**最悪時計算量**と呼ぶ。最悪時計算量は、現実的には現れないような入力も考慮していることから、非現実的な計算時間の解析になることがある。対して、平均時計算量とは、ランダムに生成された入力におけるアルゴリズムの期待計算時間のことであ

り、より現実的な状況に即している。特に、暗号の安全性を議論するためには、平均時計算量の概念は不可欠である。

計算量理論の主要な未解決問題の一つとして、NP の最悪時計算量の困難性の仮定(例えば $P \neq NP$)から NP の平均時計算量の困難性(例えば $\text{DistNP} \not\subseteq \text{AvgP}$; 平均時計算量の意味での $P \neq NP$)を証明する、というものがある。この未解決問題を解決することは、安全な暗号を構築するための重要な一歩である。しかしながら、中心的未解決問題であるがゆえ、なぜ現在の証明手法では解決できないか、ということに関して多くの研究がなされてきた。特に「相対化のバリア」、「ブラックボックス帰着の限界」、「困難性増幅の不可能性」という三つのバリアを同時に突破するような新しい証明手法が必要であるということが知られている。

ACT-I 本期間および ACT-I 加速フェーズの集大成となる成果として、とある強い最悪時計算量の仮定 ($UP \not\subseteq \text{DTIME}(2^{o(n)})$) に基づいて NP の平均時計算量の困難性 ($\text{DistNP} \not\subseteq \text{AvgP}$) を証明した。これを証明するためには「ブラックボックス帰着の限界」、「困難性増幅の不可能性」という二つのバリアを突破する必要があることが知られており、長年の未解決問題であった。本研究では、メタ計算量に基づく新しい証明手法を開発し、それら二つのバリアを突破し未解決問題を解決することに成功した。

ACT-I 本期間においては、ブラックボックス帰着の限界を世界で初めて突破する成果を得ていた。本加速フェーズでは、メタ計算量に基づく証明手法を開発することにより、さらに困難性増幅の不可能性のバリアを突破することに成功した。この新しい証明手法は、時間制限付きコルモゴロフ記述量問題の解析(成果 1, 2, 3, 4 および本期間の成果)に基づいている。成果 1 および 2 は理論計算機科学の二大トップ会議である FOCS 2020, STOC 2020 にそれぞれ採択された。

(2) 詳細

以下ではメタ計算量および成果 1, 2, 3 について詳細な説明を与える。

計算量とは、計算問題を計算するために必要な資源(計算時間やメモリ、回路サイズなど)のことである。例えば素因数分解を解くための時間計算量は非常に大きいと予想されている。**メタ計算量**とは、「計算量を問う計算問題の計算量」のことである。例えば、回路最小化問題は「ブール値関数 $f: \{0,1\}^n \rightarrow \{0,1\}$ を計算する最小サイズの回路を計算せよ」という問題である。「計算」というものを二つ異なるレベルで考えていることから、回路最小化問題を解くためにかかる計算量はメタ計算量と呼ばれる。同様に、時間制限付きコルモゴロフ記述量問題とは、「文字列 $x \in \{0,1\}^*$ と時間制限 t が与えられたときに、 t 時間以内で x を計算する最小のプログラムを計算せよ」という問題である。

回路最小化問題や時間制限付きコルモゴロフ記述量問題は、NP に属する問題であることは簡単にわかる。しかし、どのくらい計算が難しいかということに関してはよくわかっていない。Allender ら(STACS' 04, CiE' 12)は、コルモゴロフ記述量問題の計算困難性はある種の証明手法(非適応的ブラックボックス帰着など)では証明できない、ということ予想した。

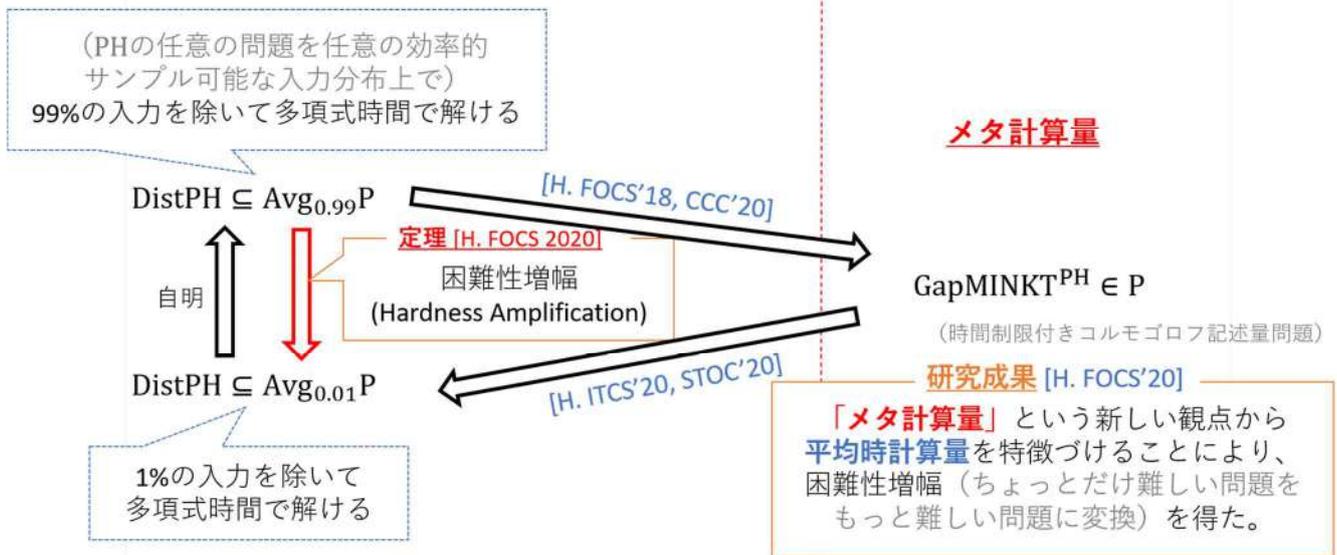
成果 2, 3: Allender の予想の否定的解決

STOC' 20 および ITCS' 20 の成果では、Allender らの予想を否定的に解決することに成功した。具体的には、NP の平均時計算量版である DistNP を解くことよりも、一般化された時間制限付きコルモゴロフ記述量問題 MINKT^{NP} の方が計算困難である、ということを証明した。

成果 1: メタ計算量による平均時計算量の新しい解釈とその応用

FOCS' 20 の成果では、前述の成果 1,2 および成果 4 などに基づいて、メタ計算量による平均時計算量の新しい解析手法を開発した。具体的には、NP の一般化として PH という計算量クラスがある。PH の平均時計算量を GapMINKT^{PH} というある種の時間制限付きコルモゴロフ記述量問題の最悪時計算量を用いて特徴付けを与えた。この成果により、平均時計算量という解析しにくく捉えがたいものを、最悪時計算量というより解析のしやすいものに置き換えることが可能になった。特に、特徴づけの系として、PH に対する困難性増幅を証明することに成功した。困難性増幅とは、少し難しい計算問題をより難しい問題に変換することである。これはメタ計算問題 GapMINKT^{PH} を経由することによって、以下の図のように証明している。

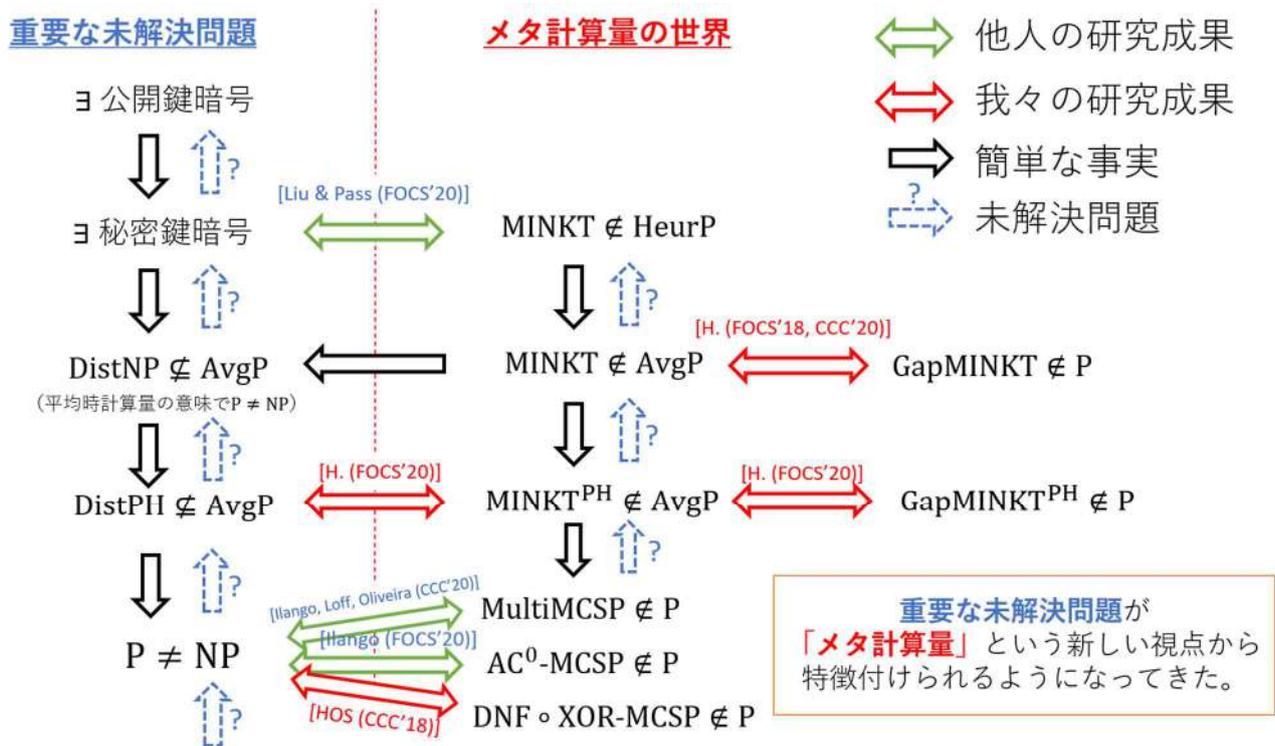
平均時計算量 ≈ 計算時間を期待値で測る概念
 ≈ ヒューリスティクスの理論的解析



この研究成果は ACT-I 本期間における成果 (FOCS' 18)、成果 4 (CCC' 20) および成果 2, 3 (STOC' 20, ITCS' 20) において開発した時間制限付きコルモゴロフ記述量問題を解析する証明手法に基づいている。

3. 今後の展開

近年、世界的にもメタ計算量の重要性が認知されてきており、重要な成果が得られてきた。下に我々の研究成果と他の研究チームによって得られた研究成果を図示する。



図の左側に図示しているものは、計算量理論における中心的未解決問題である。これら重要な未解決問題が、メタ計算量という概念によって特徴付けが得られるようになってきた。これらの特徴付けは「メタ計算量」という新しい視点を与えており、この新しい視点により計算量理論がさらに発展していくことが見込まれる。

今後は、JST さきがけ「数学と情報科学で解き明かす多様な対象の数理構造と活用」領域において「メタな視点に基づく計算量理論の新展開」として、メタ計算量に基づく手法をさらに推し進めていくことを目指す。

4. 自己評価

時間制限付きコルモゴロフ記述量問題に関して新しい証明手法を開発し、それによって平均時計算量のメタ計算量による解析手法という新しい証明手法を開発した。特に、NPの平均時計算量に関する長年の未解決問題を解決することができたことから、予想以上に研究に進展があったといえる。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

1. Shuichi Hirahara. “Characterizing Average-Case Complexity of PH by Worst-Case Meta-Complexity.” 61th IEEE Annual Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS 2020). 50-60
2. Shuichi Hirahara. “Unexpected hardness results for Kolmogorov complexity under uniform reductions.” 52nd Annual ACM SIGACT Symposium on Theory of Computing (STOC 2020). 1038-1051
3. Shuichi Hirahara. “Unexpected Power of Random Strings.” 11th Annual Innovations in Theoretical Computer Science (ITCS 2020). 41:1-41:13
4. Shuichi Hirahara. “Non-Disjoint Promise Problems from Meta-Computational View of Pseudorandom Generator Constructions.” 35th Computational Complexity Conference (CCC 2020), 20:1-20:47
5. Shuichi Hirahara, Nobutaka Shimizu “Nearly Optimal Average-Case Complexity of Counting Biclques Under SETH.” ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms (SODA 2021).

(2) 特許出願

研究期間累積件数:0件

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

6. Shuichi Hirahara, “Non-black-box Worst-case to Average-case Reductions within NP” Highlights of Algorithms (HALG 2019), 招待講演
7. 平原 秀一, “メタ計算量の近年の進展について” 離散数学とその応用研究集会 (JCCA 2020), 招待講演

研究報告書

「衛星リモートセンシングから得られる時空間ビッグデータの機械学習による地震被害の判別」

研究期間：2019年4月～2021年3月
研究者番号：50228
研究者：宮本 崇

1. 研究のねらい

大地震が生じた際の人命救助などの初動対応を円滑に行う上で、建物の倒壊状況などの被害情報の収集は重要となる。被害情報は現状では人的に収集されているが、近年は人工衛星画像の分析が被害情報の把握手段として注目を受けている。衛星画像は高速に広範囲を撮影する一方で、その解像度の限界から住宅1棟単位の被害判別が困難とされており、重要な研究課題とされてきた。そこで本研究では、近年に発展の著しい深層学習をはじめとした機械学習手法を用いることによって、衛星画像からの住宅1棟単位の地震被害判別を高精度することを目的とする。

被害判別の高精度化を達成するにあたり、本研究では以下の2つのアイデアを導入する。1点目は、地震後に撮影された画像だけでなく、平常時から撮影・ストックされている衛星画像を入力データとして用いることにより、時系列での画像の変化を捉えて建物の被害判別に利用する点である。2点目は、衛星画像に加えて建物築年代などの被害有無と関連の高い情報を補助的に用いることにより、被害判別の確度を高めようとする点である。

上記のような考えを反映させた被害判別のシステムを実現することにより、今後もハードウェア開発の継続が期待される人工衛星によって周期的に撮影・蓄積される、大規模な撮影画像群を災害時に効果的に利用するデータ処理プログラムを構築する。衛星から得られる災害情報は、都市内の監視カメラやUAV・SNSなどから得られる情報などと併せて多角的に分析されることにより、災害直後の混乱期において客観的に高精度な被害情報を得る手段として活用されることが期待される。本研究提案では、そのような次世代の防災体制構築のための基幹的な要素技術の一つを開発することを狙いとする。

2. 研究成果

(1) 概要

多時期に渡る衛星画像の系列データを元に、地震によって異常の生じた箇所を検出する手法として、時系列異常検知の手法と3次元畳み込みニューラルネットワークの比較を行い、後者の有効性を確認した。また、衛星画像と構造物情報という異なるモードの情報を統合して被害有無を判断する手法として、マルチモーダルニューラルネットワークモデルを設計し、衛星画像単体による被害有無の判断よりも精度が大きく向上する結果を得た。

上記の2つの構造を統合した深層学習モデルによって、住宅の倒壊・非倒壊の判別精度を約90%まで向上させる結果が得られた。判別に失敗した10%のデータの分析からは、住宅の傾きや1階部分のみの破壊など、直上からの撮影では把握の困難な破壊形態が半数

以上を占めていることが分かった。このことから、本研究で開発したモデルは上空からの衛星画像から判別可能な住宅の倒壊を十分に把握する性能を有していると結論付けた。

開発した技術について都道府県庁や内閣府へとヒアリングを行い、初動対応や激甚災害の指定といった場面における開発技術の適用性を確認するとともに、ヒアリング先の協力の下で今後は実証実験を行うこととなった。

また、本研究を通して得られた、防災上の問題に対する機械学習手法の応用に関する知見を体系的に整理し、国内外の事例に関するレビューを行いながら論文として公表を行った。同論文では、本研究のような被災状況の把握や災害事象の予測といった課題において、データの不均衡性、機械学習モデルの説明性、データのない領域での外挿的予測性能の向上、の3点の克服が重要であることを指摘し、これら3点に対応する情報学的手法の整理を行うと共に、今後の見通しについて論述した。

(2) 詳細

研究テーマ A「衛星画像の系列データからの地震被害判別手法の検討」

平常時から撮影・保存されている衛星画像群と地震後に緊急撮影された衛星画像の比較から、地震によって異常のあった住宅を同定・検出する手法の検討を行った。大きく、

①平常時の撮影画像を正常データとして学習し、地震後の画像が正常データの範囲を外れたかどうかを判断する異常検知モデル

②地震前・地震後の画像ペアから画像特徴の時系列的变化を抽出し、被害有無を判別する時系列畳み込みニューラルネットワークモデル

の2種の機械学習モデルを比較検討した結果、後者の方が優位であることが分かった(図1)。

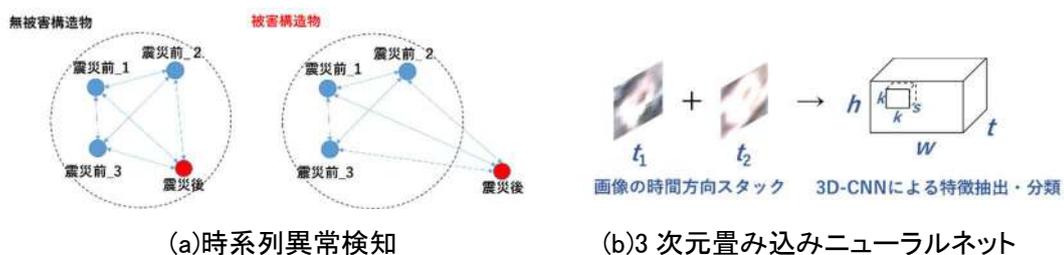


図1 衛星画像の系列データからの地震被害判別モデル

研究テーマ B「衛星画像を補完するデータを活用したマルチモーダル機械学習による被害判別モデルの検討」

地震直後から被害判別のために活用可能なデータとして、住宅の築年代と構造種別の2種のデータに着目し、これらのデータと衛星画像から統合的に地震被害の有無を判別するマルチモーダルニューラルネットワークを設計した(図2)。

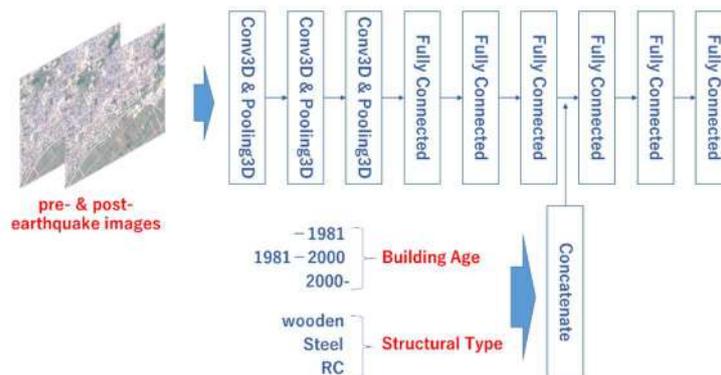


図 2 マルチモーダルニューラルネットワークによる被害判別モデル

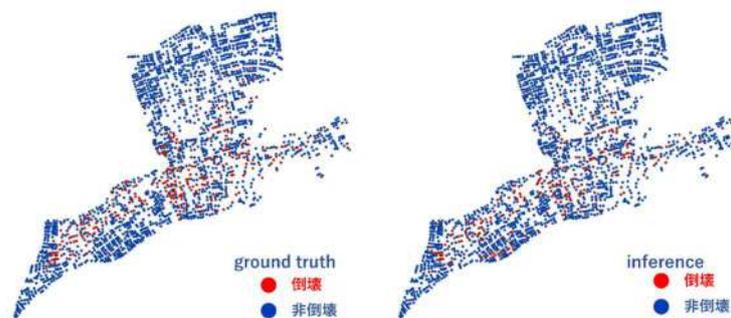


図 3 実際の被害分布(左)と提案手法による被害推定結果(右):
2016年熊本地震における被災地域を分析

検討手法によって、約 90%の精度で倒壊住宅を検出可能であることが確認された(図 3, および研究成果リスト:論文 1)。また、判別を誤った 10%について詳細に分析を行った結果、その半数以上は住宅の傾きや 1 階部分のみの倒壊といった、直上撮影からは原理的に判別の難しい倒壊形態であることが分かった。そのため、本研究で開発したモデルは、上空からの衛星画像から判別可能な住宅の倒壊を十分に把握する性能を有していると考えられる。

【誤判別したデータの内訳】

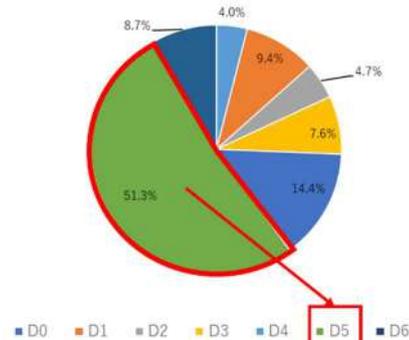


図 3 誤判別したデータの内訳:半数以上は D5(部分的な倒壊や傾き)に属している

研究テーマ C「防災上の課題に対する機械学習手法応用のレビューと体系化」

本研究を通して得られた、防災上の問題に対する機械学習手法の応用に関する知見を体系的に整理した。本研究のような被災状況の把握や災害事象の予測といった課題において、データの不均衡性、機械学習モデルの説明性、データのない領域での外挿的予測性能の向上、の 3 点の克服が重要であることを指摘し、これら 3 点に対応する情報学的手法の整理を行うと共に、今後の見通しについて論述した(研究成果リスト:論文 2,3)。

3. 今後の展開

本研究を通して開発した地震被害把握の技術は、我が国における衛星ビッグデータや構造物データといった情報資産を最大限に活用しながら、地震直後の災害対応の円滑化を行うものであり、1 応歳の実務上大きな意義を有するものである。また学術的な観点からは、先端的なセンシング手法や機械学習技術を防災学上の課題に適用している点において、日本の目指す超スマート社会の将来像に沿った防災の在り方の実現に資するものと考えられる。

今後は、大きく以下の2点の方向性において、研究の展開が考えられる。1点目は、衛星画像は直上撮影という手法を採るために、住宅内部の破壊やわずかな傾きといった破壊形態を原理的に検知することが難しい。そのため、他のセンシング手法との相補的な運用による、より詳細な被害把握手法の確立が望まれる。2点目は、国際社会に目を向けた際に、日本のように各構造物の詳細なデータといった情報資産が豊富な国は多くない。したがって、全球的にデータ取得可能な衛星画像のみから、地震による被災地域の被害判別を行う精度を向上させることは、国際的な防災力の向上に必要と考えられる。

4. 自己評価

衛星データからの住宅1棟単位での被害判別という当初に掲げた研究目的について、具体的な判別モデルの提案、衛星データから判別可能な被害形態の限界に関する検証と考察、という2点を達成することができた他、今後の方針として、上記の今後の展開に述べたように他のセンシング手法との相補的な運用などの発展的な研究課題が明らかになった。また、本研究課題を通して得られた知見を元に、防災学と情報学の接点に関するレビューを行い、論文やパネルディスカッション、学会誌への寄稿といった様々な形で広く本取り組みを周知することができた。こうしたことから、当初の目的については十分に達成することができたと考えている。

本研究は、ACT-I研究プログラムにおける領域会議やサイトビジット等の行事をマイルストーンとして計画的に行うことができた。最終年度にはコロナ禍の影響を受け、特に一部物品費や旅費の執行、および研究の実施に困難が生じたが、研究期間を延長することによって、上記の今後の展開に述べた一部の発展的研究課題について取り組む機会とする計画である。

地震をはじめとする様々な自然社会に度々見舞われる我が国において、先端的なセンシング手法やデータ分析技術を活用することにより、災害対応をより円滑にすることは学術・実務の両面から大きく重要視されている。本研究は、そうした潮流の下での先駆的な研究成果と位置付けられる。

これまでに、衛星データから地震被害を分析しようとする研究は多くあった中で、震災前後の衛星画像を時空間データとして捉え3次元畳み込み構造を適用する着想、および多数のデータから被害判別を行うマルチモーダル学習を適用する着想はいずれも本研究が独自に提案・検証したものであり、研究の独自性は高いものである。

5. 主な研究成果リスト

(1)論文(原著論文)発表

- | |
|--|
| 1. Takashi Miyamoto and Yudai Yamamoto: Using multimodal learning model for earthquake damage detection based on optical satellite imagery and structural attributes, Proceedings of 2020 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium, 2020, in press |
| 2. 宮本崇, 浅川匡, 久保久彦, 野村泰稔, 宮森保紀: 防災応用の観点からの機械学習の研究動向, AI・データサイエンスシンポジウム論文集, 2020, Vol.1, No.J1, pp.242-251. |
| 3. 宮本崇: パターン認識と法則発見のデータサイエンス, AI・データサイエンスシンポジウム論文集, 2020, Vol.1, No.J1, pp.270-277. |
| 4. 宮本崇: 人工衛星撮影データの時系列性と不均衡性を考慮した機械学習モデルによる地震被害判別, 建造物の安全性・信頼性 Vol. 9 JCROSSAR2019 論文集 B, 2019, pp.298-299. |

(2)特許出願

ありません.

(3)その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

1. 受賞: 2020 AI・データサイエンス論文賞
2. 受賞: 2020 応用力学シンポジウム講演賞
3. 学会発表: Takashi Miyamoto and Yudai Yamamoto: Using multimodal learning model for earthquake damage detection based on optical satellite imagery and structural attributes, 2020 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium, Online, September 2020.
4. 学会発表: Takashi Miyamoto: Earthquake Building Damage Detection Using 3D Spatio-Temporal Convolutional Neural Network and Multi-Temporal Satellite Imagery, AAAI 2019 Artificial Intelligence for Natural Disasters Workshop, Hawaii(USA), January 2019.

研究報告書

「水泳プール中の水の流れを3次元計測する技術の開発」

研究期間：2019年4月～2021年3月

研究者番号：50229

研究者：山下 聖悟

1. 研究のねらい

水中での推進効率や速度を向上させるためには、水流を理解することが大事であることが知られている。例えば、水中で生活する魚や昆虫は泳ぐ際に後方に複数の渦状の水流を作り、その力により水中を素早く移動している。人の泳動作による水流を広範囲で計測することができるになれば、水中での人の推進を妨げる抵抗の発生原因や位置を新たに明らかにできる。また、3次元的水流が計測できれば、人の推進メカニズムの解明やより効率のよい泳動作の発見ができる可能性がある。しかし、既存の流体計測手法には、人が存在する環境での流体計測においていくつかの問題があった。流体計測には、流体に微小な粒子(トレーサー粒子)を散布し、レーザー照射による粒子の散乱光によって粒子を周囲より明るくし、カメラによる水の流れを計測可能にする粒子イメージ計測法(PIV)が用いられることが多い。しかし、広範囲の粒子に十分な光を照射するためには強力なレーザー光源が必要になる。もし人全体をかばうような範囲での流体計測が必要である場合、人の肌や目に重大な悪影響を与える可能性がある強力なレーザー光源が必要とされる。本研究では、人体に悪影響を与えないトレーサー粒子と光源を用いた流体計測手法を開発する。提案流体計測手法には、計測範囲の拡大が従来の手法に比べて容易であり、トレーサー粒子が均一に分散する・沈殿しないという特徴も持つ。本研究では、トレーサー粒子として偏光面を回転させる能力(複屈折あるいは旋光性)のある粒子(セルロースなど)を用いる。トレーサー粒子を可視化するためには、偏光した光を照射する室内灯程度の光量のバックライトと、カメラのレンズに設置された偏光板を用いる。2枚の偏光板(右・左円偏光板)を重ねた場合、後部からの光が透過しなくなる遮光が起こる。2つの偏光板に挟まれた位置に偏光面を回転する能力を持つ粒子がある場合、偏光板の外から見ると粒子のみが明るくなる。粒子のみが周囲に比べて大幅に明るく見える場合、カメラを用いた位置計測が可能となる。

2. 研究成果

(1) 概要

ACT-I 加速フェーズでは、ACT-I の研究課題である“水泳プール中の水の流れ 3 次元計測する技術の開発”をより深める研究を行った。具体的には、水泳、流体計測を専門とする研究者との共同研究の推進、実用性の向上、他研究領域への応用を目指した。

申請者は、水泳動作と水中での抵抗・抗力や水泳動作による水流について高い専門性を持つ鹿屋体育大学(現筑波大学)の研究者らとの共同研究を開始した。このコラボレーションは本研究課題を飛躍的に加速させる。本研究では、水流計測を水泳のために用いている専門家からの意見を継続的に得ながら、より学術的な貢献が大きくなる方向へ研究を的確に進めた。

プール中の水の動きを計測するためには、トレーサー粒子が万遍なく長期間水中に漂っている状態が好ましい。しかし、ACT-I 研究期間で開発したトレーサー粒子(人工いくら)はゆっくりと底に向かって沈むため、計測の際には水をかき混ぜる等の方法により水中に漂わせる必要があった。また、粒子径が大きいため、大まかな水の流れしか計測できないという制限もあった。加速フェーズでは、実用性に関わるこれらの問題を解決した。申請者はこれまでの基礎実験から、セルロースが既存のトレーサーの問題(沈殿速度の早さ、粒子径の大きさ)を解決する糸口になることを明らかにした。提案した光学系は複屈折を持つ部分だけを周囲に比べて明るく可視化することができる。また、ナノセルロースのトレーサー粒子は、流れによって複屈折が生じる流動性複屈折という光学特性を持つ。つまり、水泳動作などにより水が流れた場合、その部分のみが周囲に比べて明るくなる。計測が必要な部分のみが可視化されるため、既存の流体計測手法の問題点とされていた粒子同士による遮蔽が少なくなり、より広範囲で流体計測が可能になると考えられる。

(2) 詳細

研究テーマ A 「水泳、流体計測を専門とする研究者との共同研究の推進」

申請者は、大型のガラス水槽(幅 2m、奥行き 3m、高さ 1.5m)を用いて人が泳ぐ際に起こす水の流れを観測する実験を共同研究者と共に行った。実験の際には、0.02wt%のセルロースナノクリスタル懸濁液 5 トンを水槽中に準備した。また、水泳経験者に水槽中で様々な泳法を用いて泳ぐように依頼し、その水流を観測した(図 1)。例を挙げると、スカーリングと呼ばれる水中でその場で留まる際に用いられる手の動き、クロールの手の動作などによって発生する手の周りの水流を観測した。また、平泳ぎに伴う足の動きやバタ足、ドルフィンキックの際の足周辺の水の流れについても観測した(図 2)。結果として、過去の研究により予測されたような水の流れが観測された。例えば、スカーリングは手を左右に振るような動作を行いその場に留まるための浮力を作り出すためのものである。過去の研究から、手で作り出した水の流れ(渦)を横方向に投げ、手のひらでそれを受けることで下方向に安定した水流を作り出していることがわかっている。本実験においても、手のひらが渦を作り出していること、その渦が横方向に移動すること、渦を手のひらで受けることによって結果的に下方向に流れが発生していることが観測できた[5]。ドルフィンキックにおいても、揃えた足が上から下に移動する際に足の裏の上部に強い渦が発生していることと、その渦が足の動きについていくよ

うに下方方向に移動して、結果として体に対して後下方方向に大きな水の流れを発生していることが観測された。しかし、大型水槽を用いた本実験では、スペースの制限のため、連続した泳動作を行うことができない。水泳に関する学術的な貢献を提供するためには、実際のプールや回流水槽のような連続的な泳動作が可能な環境において計測を実現する必要がある。本研究では、計測範囲を更に拡大できる光学系の開発や、遠隔地への計測環境の実装を考慮した携帯性の実現、更に水の容量の多い環境にて十分な濃度のトレーサー粒子を散布する方法の確立などを目指した。



図 1 人が泳ぐ際に起こす水の流れを可視化し観測する実験

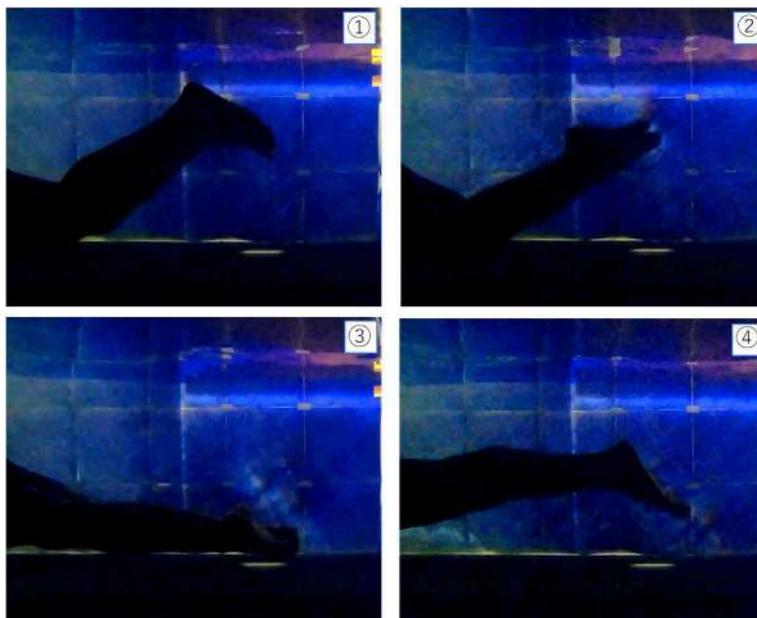


図 2 ドルフィンキックによる水の流れを可視化した例

研究テーマ B 「トレーサー粒子の均一分散・長時間浮遊の実現と計測可能範囲の向上」

ACT-I の期間中に、セルロース微粒子や人工いくらなどによるトレーサー粒子を提案した。しかし、これらの粒子には沈殿速度が速く粒子径が大きいため、微少な水の動きに追従することが難しいという問題があった。本研究では、ナノサイズのセルロース粒子が、既存のトレーサー粒子の問題を解決する糸口になることを基礎実験から明らかにした。セルロースは植物繊維の主成分であり健康食品としても販売されている。セルロースナノファイバー(SNF)は、ナノサイズのセルロース繊維である。SNFは最大で数ヶ月の間、沈殿または浮上せず水中を浮遊し続ける特性を持つ。また、水全体に万遍なく分散した状態を保つことも知られている。加えて、SNFは粒子サイズが微細であり光を散乱させないため水に散布した場合も水をほとんど白濁させない SNF を含む水は、流れなどにより力(せん断力)を受けた部分だけが強い複屈折を持つ特徴を持つ。また、提案する光学系は複屈折を持つ部分だけを周囲に比べて明るく可視化することができる[3]。これらを組み合わせることで、水泳動作などにより水が流れた場合、その部分のみが周囲に比べて明るく観測される。計測が必要な部分のみが可視化されるため、既存の流体計測手法の問題点とされていた粒子同士による遮蔽が少なくなり、より広範囲で流体計測が可能になると考えられる。セルロースの加工や製造は、これらに高い専門性を持つ大阪大学能木研究室の春日氏らと共同で行った。セルロース及び材料合成に精通している研究協力者の存在は、本研究をさらに加速した。

研究テーマ C 「精度や制限の明確化」

セルロースナノファイバーをトレーサー粒子に用いる場合、粘度が剪断力(渦や乱流の際に発生)に応じて変化するという特性を考慮に入れて流体計測を実現する必要がある。本研究では、従来のトレーサー粒子を用いて流体計測を行なった場合との比較実験を行い精度や制限の明確化を試みた(図 3)。具体的には、レーザーを用いてトレーサー粒子を可視化しカメラで流れを観測する既存手法を用いて水の流れを計測した。また、回流水槽中に一定の形のオブジェクトを置いた際の水の流れをシミュレーションにより求め、提案手法との比較検証のための足掛かりとした。

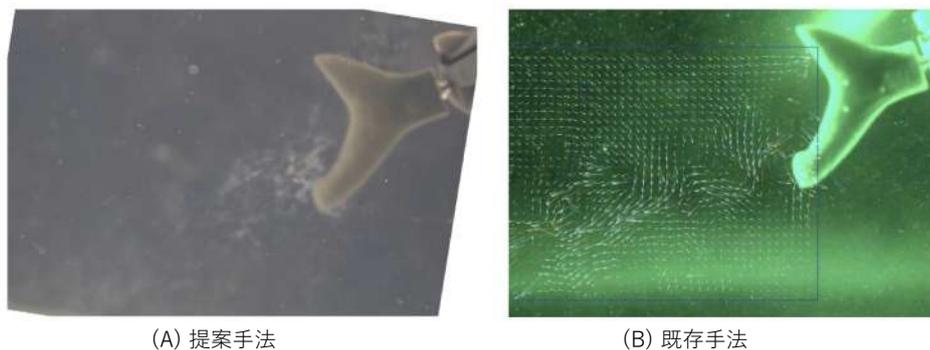


図 3 既存の光学系との比較実験の例

3. 今後の展開

2020 年度には、実際のプールを用いた検証実験を実施予定であった。新型コロナウイルスによる緊急事態宣言などの影響により 2020 年度の実験が延期されたため、2021 年度は引き続き、上記した検証実験の実施を目標に研究活動を行う。また、2019 年度、2020 年度に引き続き、計測範囲を更に拡大できる光学系の開発や、遠隔地への計測環境の実装を考慮した携帯性の実現、更に水の容量の多い環境にて十分な濃度のトレーサー粒子を散布する方法の確立などを目指す。2020 年度に引き続き、セルロースナノファイバーをトレーサー粒子に用いる場合と、従来のトレーサー粒子を用いて流体計測を行なった場合との比較実験を行う。比較実験により、精度や制限を明確化する。例えば、セルロースナノファイバーをトレーサー粒子に用いる場合、粘度が剪断力(渦や乱流の際に発生)に応じて変化するという特性を考慮に入れて流体計測を実現する必要がある。本研究の目標は、水の流れを 3 次元的に計測することである。そのため、ステレオカメラを用いて粒子を追跡する従来手法と、提案する粒子と可視化手法に特化した、3 次元的に流れを計測するため新たな光学系と計測手法の研究開発を行う。例えば、機械学習を用いて粒子の形状やブレを学習して、既存手法よりも正確に粒子を追跡する手法や、粒子のボケ方などの見た目の情報から、その 3 次元位置を推測する手法など考えられる。加えて、提案技術を学校やスイミングスクール等の一般社会においても使用可能な製品にすることを旨とする。また、提案技術の他研究領域への応用も促進する。例えば、本技術の光学系は透明な身体を持つゾウリムシやミジンコなどを可視化することもできるため、水中微生物の行動観察に役に立つことが明らかになっている。流体だけではなく気体への応用も可能であることが予測される。

4. 自己評価

・研究目的の達成状況

トレーサー粒子を可視化して水の流れを計測可能にする光学系の開発や、トレーサー粒子の検証についてはおおよそ計画通りに進行している。しかし、粒子を 3 次元的に計測するための機構についてはまだ多くの課題が残されている。例えば、現段階では、トレーサー粒子の数を従来手法に比べて大幅に制限した場合にのみ 3 次元計測が可能である。水の流れの 3 次元的な計測や、様々な角度からの水の流れの可視化はバイオメカニクス領域に大きな学術的な貢献をもたらすため、引き続き誠意的に研究開発を進める。また、人が連続的に泳動作を行うことができる大型の水槽またはプールにおける計測実験は、水泳のメカニズムに関する理論の証明などに必須である。新型コロナウイルスの感染拡大の影響により年度内の大規模な実験はほとんど断念されてしまったが、来年度は、実際の水泳環境を用いた人の起こす水の流れの可視化に関する実験を遂行できるように準備を進めている。

・研究の進め方(研究実施体制及び研究費執行状況)

2019 年度は、当初予定された通りに研究が実施された。検証実験のための費用が予定よりも多くかかることが予測されたため、増額措置に申請した。2020 年度は、新型コロナウイルスの感染拡大の影響で、ほとんどの実験が来年度以降に延期された。実際の水泳環境を用いた大規模な実験を来年度に行うために予算の執行は制限された。既存の流体計測手法との比較実験のために想定よりも多くの費用が必要になることがわかったため、増額措置に申請した。

・研究成果の科学技術及び学術・産業・社会・文化への波及効果(今後の見込みも重視してください。)

流体計測における提案手法の有効性がある程度証明されたが、既存の手法との定量的な比較や制限の明確化が不足している。そのため、本研究成果に関心がある企業や研究者らとともに、提案手法をより実用的にするための研究開発を続ける。例を挙げると、セルロースナノファイバーをトレーサー粒子に用いる場合、粘度が剪断力(渦や乱流の際に発生)に応じて変化するという特性を考慮に入れて流体計測を実現する必要がある。また、従来のトレーサー粒子を用いて流体計測を行なった場合との比較実験を行い精度や制限を明確化する必要がある。3次元的に流れを計測するための新たな仕組みも必要とされる。

・研究課題の独創性・挑戦性

本研究課題の進行には光学、情報処理、バイオメカニクスなどの総合的な知識と技術が必要である。申請者は、水泳動作と水中での抵抗・抗力や水泳動作による水流について高い専門性を持つ研究者との共同研究を推進している。加えて、材料の開発や検証に専門的な知識を持つ研究者らも協力しながら研究開発を進めている。これらのコラボレーションは、情報工学や光学の知見を他の領域に応用し、様々な領域で学術的な貢献を生み出すことに寄与している。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

1. Shogo Yamashita, Shunichi Suwa, Takashi Miyaki, Jun Rekimoto, “Feasibility Study on Water Flow Visualization Using Cellulose Particles and Pervasive Display”, The 8th ACM International Symposium on Pervasive Displays(PerDis 2019), June 12-14, 2019.
2. Shogo Yamashita, Shunichi Suwa, Takashi Miyaki, Jun Rekimoto, “Water Flow Measurement for Swimmers using Artificial Food-grade Roe as Tracer Particles”, The 5th International ACM In Cooperation HCI and UX Conference(CHIUxD 2019), April 8-9, 2019
3. Shogo Yamashita, Takaaki Kasuga, Shunichi Suwa, Takashi Miyaki, Masaya Nogi and Jun Rekimoto, “Fluid-Measurement Technology using Flow Birefringence of Nanocellulose”, SIGGRAPH '19: ACM SIGGRAPH 2019 Posters, July 13, 2019
4. Shogo Yamashita, Shunichi Suwa, Takashi Miyaki, Jun Rekimoto, “A Human-Friendly Fluid Measurement Technology using Artificial Fish Eggs as a Tracer”, ACM CHI 2019 ASIAN CHI SYMPOSIUM: EMERGING HCI RESEARCH COLLECTION, May 2, 2019
5. Shogo Yamashita, Shunichi Suwa, Takashi Miyaki, Jun Rekimoto, “Water Flow Visualization for Swimming using Nanocellulose”, ACM CHI 2020 ASIAN CHI SYMPOSIUM: EMERGING HCI RESEARCH COLLECTION, April 25, 2019

(2) 特許出願

研究期間累積件数: 1 件

1.

発 明 者: 山下 聖悟

発 明 の 名 称 : 3 次元流体計測法

出 願 人: 東京大学

出 願 日: 2019/07/12

出 願 番 号: 2019-13324 (2018-12298)

(2) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

Best Poster Award at CHI 2019 Asia CHI symposium (The 5th Asian CHI Symposium Emerging HCI Research Collection)

研究報告書

「適材適所システム: 広葉樹林業で発生する多様な小径木の家具および建築への応用」

研究期間: 2019年4月~2021年3月
研究者番号: 50230
研究者: 吉田 博則

1. 研究のねらい

戦後の針葉樹林化に伴い落葉広葉樹林の減少また、安価な輸入材により人工林の放置が問題となっている。広葉樹林を維持管理するには択伐による小径木や枝の処理が必要であるが、これらはチップ化され燃やすしかなかった。本研究の狙いはこれらの使いづらい多様な形状の木材を、より高付加価値を持つ家具や建築に活用できるようにすることである。落葉広葉樹は堅く密度も高いので成木だと高価だが、択伐から出る材なので安価に入手可能である。これらの材は使い方を工夫すれば、高付加価値を持つ家具や建築構造に十分応用可能である。

従来の伝統工法では経験ある職人によって材の特徴を見極める適材適所が行われていたが、人手不足や国内林業の衰退もあり今後ますますこのような材を使う機会は減っていくと考えられる。本研究では各々の材の特徴をデジタル化したデータを活用し、適材適所を誰もが実現できるワークフローを社会実装することを目指す。このようなワークフローの実現に向けて、1. 使いやすいデザインインターフェースを実現し、これらの材の需要を高める 2. これらのデザインと実際の林業から発生する枝をリンクし、生産工程に落とし込む包括的なワークフロー の2点に着目し開発を進めていく。

適材適所が実現されると小径木にも需要が生まれる。需要があると落葉広葉樹林に恒常的に手が入り、本来の森林の姿である適地適木にもつながる。最終目標として持続可能な循環型社会の実現に貢献したい。

2. 研究成果

(1) 概要

加速フェーズ期間ではプロダクトスケールと建築スケールの二つのスケールに意識して研究を遂行した。プロダクトスケールでは、以前の Act-I 期間では決め打ちだった接合部のデザインを多様化するようなデザイン支援ツール「Tsugite」を開発した。家具スケールでは人間の距離が近く、より部材の接合部にディテールデザインが求められデザインの差別化要素となる。建築スケールでは前回の Act-I 期間の後半および加速フェーズ前半で開発した三次元枝材の適材適所アルゴリズム、および3次元加工支援システムを用いて科学技術未来館の常設展示インスタレーション「Swirled Branches」を製作・提供した。また今年9月に Los Angeles のギャラリーで発表予定の「Tsugiki」プロジェクトでは、これまでの直接部材にジョイント加工するのではな

く、接合部の型を三次元出力し、レジンでキャストする方向で進めている。

(2) 詳細

テーマ1. プロダクトスケールでのデザイン支援ツールの開発および検証

釘を使わない接合部である木工継手・仕口を新たに設計して製作することは、熟練者でないユーザにとって困難で時間がかかる作業である。「Tsugite」システムは、切削加工機による加工と、計算機を用いたインタラクティブな形状モデリングを組み合わせることによって、カスタムデザインの木工継手・仕口の設計と製作を支援するものである。本システムには、マニュアル編集モードと、ギャラリーモードの2つのモードがある。マニュアルモードでは、リアルタイムに更新される接合部の性能に関する解析結果やシステムからの提案を見ながら、ユーザが手作業で接合部の形状を編集する。性能としては、組み立て可能性、加工可能性、強度などを考慮している。ギャラリーモードでは、あらかじめ計算済みの接合部形状が多数画面に提示され、ユーザはその中から好みのものを選択する。接合部の設計が完成したら、角を丸めるなどの処理をして、3軸CNCフライス盤で製造する。本研究ではユーザスタディによる評価の結果や、実際に設計し製作した接合部や家具の例を示した。



図1 左: 開発したシステムを利用して設計・製作した接合部の例。右: 開発したシステムを利用して設計・製作した椅子の例。釘や接着材を使わずに、組み立て、分解、再組立てが可能である。

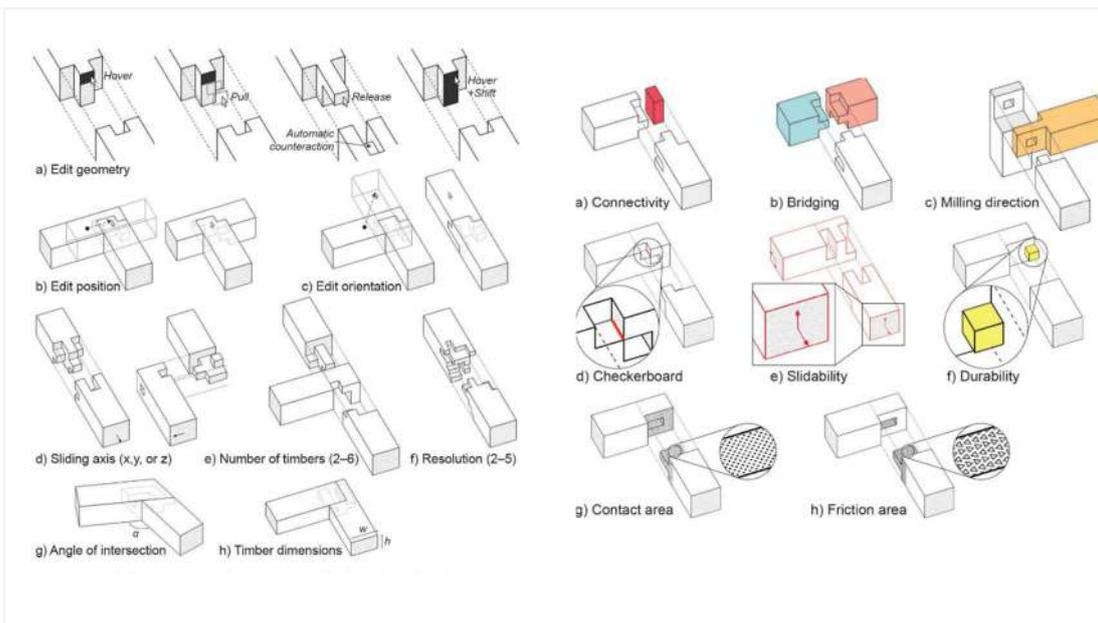


図2 左:ユーザによる操作の例、右: システムからのフィードバックの例

テーマ2. 建築スケールでの適材適所システムの開発および検証

三次元形状の枝を三次元的に配置し、自動で交差部のジョイントを生成し加工するシステムを開発した。テーマ1と違いジョイント部の基本的な設計は固定でパラメータを変化させるのみである。三次元的にジョイントを加工するため、従来の2.5次元CNC切削機では加工が困難である。そこでユーザーが加工ベッドに枝を3次元的に配置する際に正確に三次元形状の枝を配置をサポートする音声ガイダンスシステムを開発し、実際に使用することで科学技術未来館のインスタレーション「Swirled Branches」を製作した。

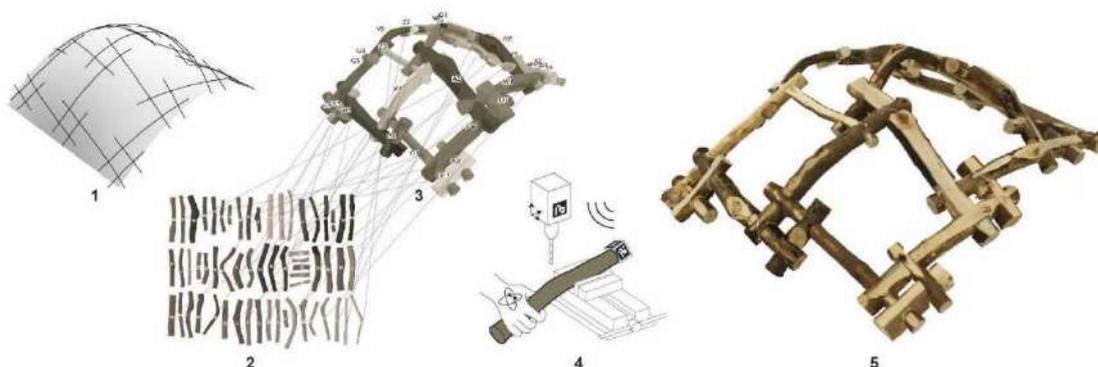


図3 設計および製作のワークフロー。自由曲面を入力に、あらかじめ3次元スキャンしておいた枝群を自動で適切に配置し、加工はユーザーに配置を指示することで2.5次元加工機でも3次元加工が可能となる。



3. 今後の展開

「Tsugite」システムは Github でも公開されており、すでに多数の問い合わせがある。これらの中には CAD のベンダー等もあり、既存のシステムに組み込むことも可能である。また適材適所システムにおいては、データ駆動型手法を取り入れることで、より多様な形態に対応できつつある。

4. 自己評価

- ・研究目的の達成状況

当初提案した研究テーマ1は達成され、さらに研究テーマ2も現在開発中の Tsugiki は型を使用したシームレスな接合を目指しており、このような研究は他に類を見ない。

- ・研究の進め方（研究実施体制及び研究費執行状況）

国内外での発表を通じて一緒に研究体制は整いつつある。研究費は主に加工機械や材料費および場所代として執行され、当初計画していた通り適切に処理されたと考えられる。

- ・研究成果の科学技術及び学術・産業・社会・文化への波及効果

海外ではリサイクルよりもアップサイクルという考えた方が広まりつつある。リサイクルが材料を粉々にするのに対し、アップサイクルは材料をできるだけそのままの形で別の用途に用いる。ACM で Upcycle を検索してもヒットする論文数は限られるが、本研究の考え方は今後 HCI および情報学が持続可能な社会の実現に貢献する際に、重要かつ先駆的な研究例として挙げられると期待できる。また文化的にも本研究のテーマである、適材適所はそもそも日本の伝統構法から発想を得ており、日本の伝統文化の海外への発信という意味でも期待できる。参加型設計製作と合わせて、SNS のような情報と人をつなげる手法に実際の素材や経験を介して情報、人、モノをつなげるようなサービスに発展することが期待できる。

5. 主な研究成果リスト

(1)論文(原著論文)発表

- | |
|--|
| 1. Human-in-the-loop fabrication of 3D surfaces with natural tree branches. <i>Maria Larsson, Hironori Yoshida, and Takeo Igarashi.</i> SCF '19: Proceedings of the ACM Symposium on Computational Fabrication (June 2019). |
| 2. Tsugite: Interactive Design and Fabrication of Wood Joints. <i>Maria Larsson, Hironori Yoshida, Nobuyuki Umetani, and Takeo Igarashi.</i> UIST '20: Proceedings of the ACM Symposium on User Interface Software and Technology (October 2020). |

(2)特許出願

研究期間累積件数:1 件

1.

発 明 者: Larsson Maria, Hironori Yoshida, Nobuyuki Umetani, Takeo Igarashi

発明の名称: Information Processing System, Information Processing Method And Program

出 願 人: 東京大学

出 願 日: 2020/09/30

出 願 番 号: 63,085,401

(3)その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

Wood change award: <https://awrd.com/award/woodchangeaward>

東京大学プレスリリース <https://www.u-tokyo.ac.jp/content/400148405.pdf>

研究報告書

「時空間並列計算による高性能マルチスケール解析手法の確立」

研究期間： 2019年4月～2021年3月
研究者番号： 50231
研究者： 劉麗君

1. 研究のねらい

材料構造の最適化や新規材料の設計などには高精度な計算手法による特性予測が必要不可欠である。これまでに良く用いられてきたマクロスケールのモデリング方法では実スケールのシミュレーションができるものの、線形化などの非常に単純なアイデアに基づいて経験的に得られることが多く、離散的またはマイクロスケールの効果がある複雑なシステムでは、経験的なアプローチの成功は限られている。

一方、原子レベルの計算手法、例えば第一原理計算や分子動力学(MD)計算などは計算コストが高いため、現在世界中最速なペタスケールのスパコンを利用しても最長マイクロ秒までしか計算できない。材料の組成は原子レベルでの反応現象を再現する必要があり、ミリ秒程度の時間スケールの反応計算が必要となる。しかしながら、現状のスパコンと通常的空間並列計算のみではミリ秒の反応を再現できないため、拡散やと変態などの問題に関して、材料内部構造の長時間発展挙動に関する原子レベルのメカニズム解明調査が困難である。

そこで、高性能マルチスケール解析手法が必要とされる。異なるスケールのモデルを同時に検討することで、巨視的モデルの効率と微視的モデルの精度を共有するアプローチを実現する本研究テーマの着想に至った。本研究では、スーパーコンピューティング技術を駆使した時間並列計算手法を新規アイデアとして提案し、第一原理計算の精度を保持しつつ、時間スケールを克服するマルチスケール計算の実現を狙う。本マルチスケール解析手法の確立により、今後の新規半導体材料等の不純物拡散、炭素鋼内部構造の発展解析と材料制御の指針を得るところまでを目指す。

2. 研究成果

(1) 概要

本研究では、時間並列計算の概念を導入しつつ、スーパーコンピューティング技術を駆使した時間並列計算手法の確立を目指し、以下の2つの研究テーマを進めた。

研究テーマ A 「機械学習に基づく原子間ポテンシャルの開発と検証」

研究テーマ B 「時間並列計算手法の開発と炭素鋼のシミュレーション応用」

まず研究テーマ A については、機械学習の手法を用いて、密度汎関数法の精度を維持しながら、同時に分子動力学の効率も維持することで、密度汎関数理論が計算できるスケールから分子動力学が計算できるスケールまでの拡張を実現した。密度汎関数法から得たデータを学習データセットとして用い、MD 計算のための機械学習ポテンシャルを作成した。そのポテンシャルを実際に MD 計算に適用し結果として、計算時間は従来の経験的ポテンシャルと比べ同等にもかかわらず、密度汎関数法に匹敵するくらいの計算精度を得る

ことができた。

また、研究テーマ B については、時間スケールを並列化するために、時間方向の軌跡を複数の独立な軌跡に分割し、これらの軌跡を並列に計算するアプローチを用いた。これにより超並列コンピューターの性能を最大限に利用して長い時間スケールの軌跡を生成することができる。 α 鉄中の炭素原子の拡散計算に適用することにより、従来の分子動力学 (MD) 計算と同精度の結果が得られることを定量的に示した。さらに、従来の逐次 MD 計算と比べると、2000 倍以上の高速化を実現できた。

(2) 詳細

研究テーマ A「機械学習に基づく原子間ポテンシャルの開発」

材料開発の分野では、密度汎関数法 (DFT) が良く用いられている。この理論は、原子と分子の量子挙動を記述する基本方程式シュレディンガー方程式の解を見つけるための非常に高精度であると同時に、計算コストも非常に高い方法である。通常、モデルのサイズは数百原子に制限されており、最大シミュレーション時間も数十ピコ秒のオーダーである。一方で、古典分子動力学は経験的ポテンシャルを使用する原子シミュレーションの方法であり、マイクロ秒程度の数百万の原子を含む大規模なシステムをシミュレーションすることができる。しかし、高速であるものの複雑なシステムには大きな誤差が生じる。そこで、本研究は密度汎関数法を用いた計算により、マグネシウム、鉄の単体と合金のデータベース作成を行った。各結晶構造の幾何構造と全エネルギー、力など情報をデータセットとし、深層ニューラルネット及びアクティブランニング手法を用いて原子ポテンシャルを作成した(国際学会1, 2)。

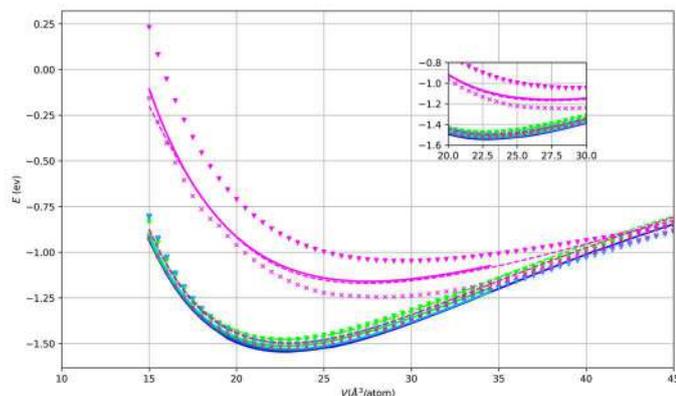


図1. 深層学習ポテンシャル(×)、アクティブランニングポテンシャル(点線)、MEAMポテンシャル(▼)を用いた MD と DFT(実線)で計算したポテンシャルエネルギー比較

図1に、作成したデータベースを用いて学習した深層学習ポテンシャル、アクティブランニングポテンシャルと経験的ポテンシャル MEAM を MD 計算に適用し、Materials Project からダウンロードした訓練に使用されていない結晶構造を用いてポテンシャルエネルギーの結果を示す。アクティブランニングは DFT の結果とほぼ一致し、他のポテンシャルより高い予測精度を得たことがわかった。

また、計算時間について、DFT 計算に匹敵するくらいの計算精度を得た深層学習ポテンシャルは従来の経験的ポテンシャルと比べやや計算時間が長くなったが、DFT より 10000 倍以上の高速化を実現した。

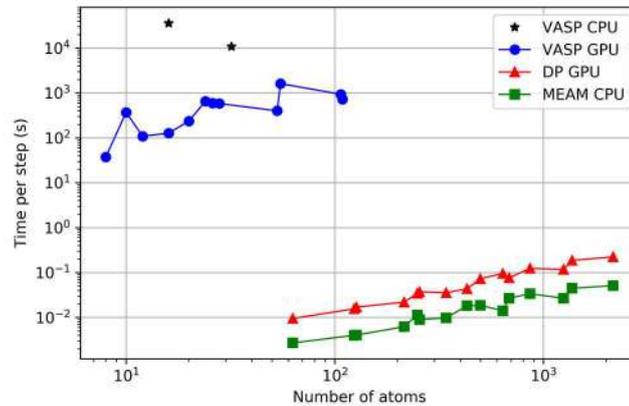


図2. 計算時間の比較

研究テーマ B「時間並列計算手法の開発と炭素鋼のシミュレーション応用」

これまでのほとんどの時間並列計算の方法は、高精度で計算コストが高いファインソルバーと低精度で計算コストが低いコースソルバーを組み合わせ、並列処理で軌跡の近似を反復的に再現する予測と修正アルゴリズムに基づいており、加速性能に大きな影響を与えるコースソルバーの選択が困難である課題があった。そこで、本研究ではスーパーコンピューティング技術を駆使した時間並列計算手法を新規アイデアとして提案し、時間スケールを克服する長時間分子動力学計算の実現を目指す。

基本的な概念は、計算対象を複数のプロセッサに複製してランダムモメンタムを与えて同時に計算することにより、初期状態からの脱出ルートを見つける時間を短縮させ、さらに、準定常分布(Quasi-Stationary Distribution)を準備すれば、状態遷移の軌跡は時間に依存なくなり、最終状態と初期状態が一致する軌跡を結合することができる。これにより、長い軌跡を生成することができ、時間スケールの拡張が可能になった(国際学会1)。図3に示すように、時間並列 MD は古典 MD の精度と同等であるが、計算速度は逐次 MD 計算より 2000 倍以上高速化することができた。

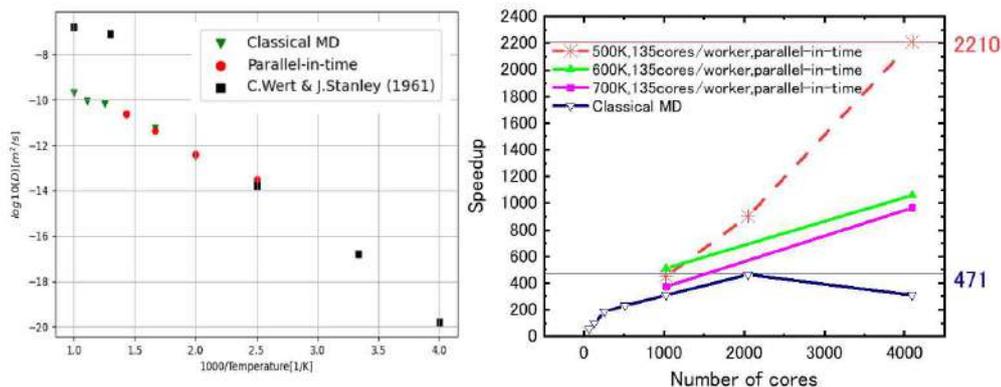


図3. 計算精度と計算時間

3. 今後の展開

本研究は時間並列計算と機械学習手法を用いて、高性能マルチスケール解析手法を確立することができた。この解析手法の適用対象は鉄鋼材料だけでなく、電子デバイス、ナノ材料など幅広い分野で使用できる点で汎用性が高く、多くの材料を対象とした応用研究が期待できる。すでに電子工学や化学分野の実験系研究者と密に連携した物性評価解析に乗り出しており、シミュレーターへの幅広い応用展開を視野に入れた研究に引き続き取り組んでいく。特に、情報学の知識をフル活用して工学の知識と融合させることで、幅広い分野で使われるシミュレーターを創出することで、世の中に研究成果の形で社会還元して貢献していきたい。

4. 自己評価

・研究目的の達成状況

本研究の目的は高性能マルチスケール解析手法の確立を目指して、時間並列手法を提案することができた。また機械学習手法の導入により、巨視的モデルの効率と微視的モデルの精度を共有するアプローチでマルチスケールを実現した。さらに、炭素鋼材料の分子動力学解析に提案手法を適用することで、実問題に開発手法の有用性も検証した。その意味で、解析手法の確立の目標は達成できたと考えられる。また、ACT-I 加速フェーズの研究を通じて、研究者として大きく成長し、国際共同研究もいくつか展開することができ、個の確立の面からみるも十分達成できたと思う。

・研究の進め方

本研究テーマは非常に挑戦性が高く、技術的に難易度も高かった背景から、米国、中国、日本国内の共同研究者と密に議論を行いながら進めた。研究費は、計算環境の構築、共同研

研究者との打ち合わせ旅費、研究成果発表（論文のオープンアクセス費、国際会議での発表）などに執行した。

・研究成果の科学技術及び学術・産業・社会・文化への波及効果

本研究テーマである高性能マルチスケール解析手法の創出により、計算主体の超高速研究開発を行うことができるため、社会的波及効果が大きい。さらに空間並列計算、時間並列計算については情報学の分野における基礎研究の側面も強く、高精度かつ高速な計算手法の学理を探究できる点でも意義深い。今後は電子デバイスや結晶成長、鉄鋼材料などの幅広い分野で本研究で開発した手法を適用し、世の中に研究成果で貢献していきたい。

・研究課題の独創性・挑戦性

時間並列計算手法と機械学習を同時に導入したマルチスケール計算に関する研究は前例がなく、独創性と新規点があるプロジェクトであった。情報学の知識だけでなく、材料科学、固体力学やなどの分野の知識融合した分野を横断型の学際的な本研究は、産業応用上価値が高いことに加え、高い挑戦性がある。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

1. Chun Yik Wong, Wai Yin Wong, Lijun Liu, Yoji Shibutani, Kee Shyuan Loh, Molecular Dynamic Simulation Approach to Understand the Physical and Proton Transport Properties of Chitosan/Sulfonated Poly(Vinyl Alcohol) Composite Membranes, Polymer, Vol. 217, 123458, 2021.
2. Lijun Liu, Kazuaki Sekiya, Masao Ogino, Koki Masui, A COMINRES-QLP method for solving complex symmetric linear systems. Electrical Engineering in Japan, pp. 1-11, 2021.
3. Koki Masui, Masao Ogino, Lijun Liu, Multiple-precision iterative methods for the solution of complex symmetric systems of electromagnetic analysis, Numerical Methods for Flows in Lecture Notes in Computational Science and Engineering, pp. 321-329, 2020.

(2) 特許出願

研究期間累積件数:0 件

(2) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

1. Lijun Liu, Yoji Shibutani, Long-Time Molecular Dynamics: Parallel-in-Time Integration and Machine Learning Interatomic Potentials, 14th WCCM & ECCOMAS Congress 2020 (Virtual congress), January 11-15, 2021.
2. Lijun Liu, Daisuke Matsunaka, Yoji Shibutani, New Deep Learning Interatomic Potential for Pure Magnesium, The 11th International Conference on Computational Methods (Virtual conference), August 9-12, 2020.
3. Lijun Liu, Haoyuan Li, Jean-Luc Bredas, Evaluation of An Efficient 3D Poisson Solver for

Organic Field-Effect Transistors Simulation, COMPUMAG 2019, Paris, France, July 15-19, 2019.
4. Kazuaki Sekiya, Masao Ogino, Lijun Liu, Koki Masui, Efficient Mixed-precision Iterative Methods for High-frequency Electromagnetic Field Analysis, COMPUMAG 2019, Paris, France, July 15-19, 2019.
5. Lijun Liu, Haoyuan Li, Jean-Luc Bredas, Simulations of Organic Field-Effect Transistors by the Combination of Finite Difference Method and Kinetic Monte Carlo Method, The 10th International Conference on Computational Methods 2019, Singapore, July 9-13, 2019.