

## 令和元年度 領域報告書

研究領域名：ACT-I「情報と未来」

研究総括名：後藤 真孝

## 本年度の研究状況

本年度は募集終了後の次年度として、1期生加速フェーズ研究者12名、2期生加速フェーズ研究者11名、3期生研究者29名の合計52名の研究者による研究活動を実施した。

2018年度に研究終了となった2期生研究者については4月に日本科学未来館で先端研究フォーラム（公開）を開催し各研究者からの研究成果のアピールを実施した。また、6月の第6回領域会議および11月の第7回領域会議では1期生加速フェーズ研究者・2期生加速フェーズ研究者・3期生研究者により、それぞれ研究発表を行った。加えて、7月～10月および1月～3月には担当アドバイザーによるサイトビジット（研究者が担当アドバイザーの元などへ訪問する逆サイトビジットや担当アドバイザーグループでのミニ領域会議的な研究ディスカッションを含む）を行い、研究計画や進捗状況について対面で深い議論をする機会を設けた。

12月に3期生を対象とするACT-I評価会（加速フェーズ応募に対する審査）を実施し、12名の研究者が次年度4月より最長2年間の加速フェーズ研究に進むことになった。今後の研究成果を期待する。

## 領域会議、報告会などの開催記録

No.	会の名称	開催日	開催場所	内容
1	ACT-I 2期生 先端研究フォーラム （公開）	4/20(土)	日本科学未来館7階	一人5分間のショートプレゼンテーション+ポスター発表の形式で、2期生研究者29人による研究成果の発表会を実施した。
2	第6回領域会議 （非公開）	6/21(金) 6/22(土) 6/23(日)	柏の葉カンファレンス センター	2期生加速フェーズ研究者11名による研究ビジョン説明、1期生加速フェーズ研究者12名・3期生研究者29名による研究中間報告を行った。
3	情報ひろば サイエンスカフェ （公開）	9/20(金)	文部科学省 情報ひろばラウンジ	3期生の中山 悠（東京農工大学 准教授）が登壇、研究成果がもたらす社会的インパクトに関する科学者と市民による対話を行った。
4	CEATEC （公開）	10/15(火) ～ 10/18(金)	幕張メッセ	3期生研究者のヴァルガス ダニロ（九州大学 准教授）、大屋 優（早稲田大学 大学院生）の2名による研究成果に関する展示を実施した。
5	第7回領域会議 （非公開）	11/15(金) 11/16(土) 11/17(日)	柏の葉カンファレンス センター	1期生加速フェーズ研究者12名・2期生加速フェーズ研究者11名による研究中間報告、3期生研究者29名による一人2分間のBriefing+ポスター発表を行った。

## 研究者の動向（所属機関、研究実施場所、研究実施形態の変更など）

- 1期生加速フェーズ：黒木 菜保子 ... お茶の水女子大学 中央大学：4/1 付異動  
 2期生加速フェーズ：宮本 崇 ... 山梨大学 助教 准教授：2/1 付昇格  
 2期生加速フェーズ：牛久 祥孝 ... 東京大学 オムロンサイニクエックス株式会社：4/1 付異動  
 3期生：ヴァルガス ダニロ ... 九州大学 助教 准教授：1/1 付昇格  
 3期生：竹内 孝 ... NTT 京都大学：2/1 付異動

以上

## 研究進捗状況

## 1. 本半期の研究項目

本研究では、画像/動画キャプション生成について重要かつ未解決である、(i)個人の属性や傾向への対応、(ii)詳細な表現への対応、(iii)教師キャプションが無いデータへの対応、(iv)ストーリーの多様性への対応、という4つの要求機能を満たす手法の実現が目的である。本半期の研究項目は以下の通りである。

- ユーザーフレンドリーな参照表現生成 (要求機能(ii)に対応)
- 少サンプルキャプション生成を実現するため (要求機能(i, iii)に対応) の
  - 転移学習の研究
  - 教師なしキャプション生成の研究
- 料理動画・レシピデータセットの構築 (要求機能(iv)に対応)

## 2. 研究経過および進捗状況、成果

**ユーザーフレンドリーな参照表現生成**については、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。特許申請中であり、コンピュータビジョン最高峰の国際会議である ICCV 2019 で発表済みである。

**転移学習の研究**は、将来的にキャプション生成を転移学習させることで、教師データが少ない(i, iii)を解決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。本半期では、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、共同学習およびカリキュラム学習を取り入れた深層転移学習手法を開発した。本成果は特許申請中かつ、ECCV 2020 に投稿中である。**教師なしキャプション生成の研究**は、転移が難しい場合でも(i, 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とキャプションの対が無い状態でも、画像に対して尤もそうな画像・キャプションの疑似ペアを少しずつ増やしながら学習する手法を開発した。本研究は2020年度も継続中であり、COLING 2020などの自然言語処理の著名会議への投稿を目指している。

**料理動画・レシピデータセットの構築**は、そもそも動画のストーリーを動画内の作業手順というものに限定した際に、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の作成を目的としている。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の研究者と合同で、データセット構築の準備を進めている。研究者やアナウンサー同士でのコミュニケーションが緊密であるべきフェーズであったが、Covid-19の影響もあって2020年度も事前準備の議論が残っている。

## 3. 今後の予定

転移学習および教師なしキャプション生成の研究、そしてデータセットの構築を同時に進める。ユーザーフレンドリーな参照表現生成の根幹は詳細部分に注目したキャプション生成能力であり、これを教師データが少ない場面に対応するための研究と組み合わせることで、最終的に上記の要求機能を満たすキャプション生成手法を開発し、評価する予定である。

## 4. 外部との研究交流

**ユーザーフレンドリーな参照表現生成**についてはデンソーおよびデンソーアイティラボラトリとの共同研究による成果である。**データセット構築**ではクックパッドと協力体制を構築している。

2019 年度

研究者番号: 50222

個人研究者氏名: 栗田修平

## 研究進捗状況

## 1. 本半期の研究項目

本期は主に以下の3つの課題に取り組んだ。

課題[1] 事前学習モデルと知識獲得による意味解析

課題[2] 知識獲得と事前学習モデル

課題[3] 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

このうち、課題[1]と課題[2]は相互に深く関連し合うテーマであり、広く事前学習及び転移学習と意味解析・知識獲得をテーマに研究を行った。特に課題[1]に関連して、自然言語解析タスクである意味役割付与問題を具体的な検討課題とした。また、課題[2]に関連して、Wikipediaからの知識の再獲得と事前学習モデルをテーマに研究を行った。2019年度の後半からは、課題[3]に関連して、意味の解析及び自然言語理解をテーマにシミュレーション環境下でのエージェントへのテキストによる具体的な指示付けをテーマに研究を行っている。

## 2. 研究経過および進捗状況、成果

課題[1]については、言語モデル型の前学習モデルと ACT-I にて研究を行った深層強化学習の組み合わせが有効であることを示し、特に意味役割付与の研究において有効性を示した。

課題[2]については、言語モデル型の前学習モデルと Wikipedia から得られたエンティティ知識の同時学習を研究し、また、知識筑波大学博士課程学生・理化学研究所 RA の中山功太君を指導しながら、複数の言語モデル組み合わせて知識獲得に応用する研究を行っている。この他、課題[1]に関連して、深層構文・意味解析などの業績により、ACL Long Paper に採択された他、雑誌『自然言語処理言語』投稿論文について論文賞を受賞した。この他、ACT-I 研究者の小林亮太先生との共著論文が Nature Communications に採択された。

・ [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).

・ [Ryota Kobayashi](#), [Shuhei Kurita](#), [Anno Kurth](#), [Katsunori Kitano](#), [Kenji Mizuseki](#), [Markus Diesmann](#), [Barry J. Richmond](#) and [Shigeru Shinomoto](#)

Reconstructing neuronal circuitry from parallel spike trains,

Nature Communications, Volume 10, Article number: 4468 (2019).

雑誌『自然言語処理言語』論文賞 (2019年3月)

招待講演 1 件 国内発表 1 件

## 3. 今後の予定

課題[1]については深層強化学習の有効性を示すことができ、課題[2]についても中山君と共著で、それぞれ言語処理系のトップカンファレンスへの投稿を予定している。課題[3]についても、提案手法である新しい言語理解手法の有効性が確かめられつつあり、論文投稿を予定している。今後は特に課題[2]および課題[3]のテーマに注力していくことを予定している。

## 4. 外部との研究交流

特に課題[3]のテーマに関連して、2020年1月からアメリカのニューヨーク大学(NYU)を訪問し、深層学習を用いた言語処理の世界的な権威で、深層学習を利用した言語モデルおよびニューラル機械翻訳モデルの提案者の一人である [Kyunghyun Cho](#) 先生と共同研究を進めている。ただし、3月下旬現在、新型コロナウイルスの影響を注視し帰国を早める可能性があるが、共同研究自体は2020年度も継続する。

この他、課題[2]および課題[3]に関連するテーマでいくつかの共同研究を検討している。

## 研究進捗状況

プログラムコードにそのコードが満たす条件を付記し、デバッグやテストコード生成に利用する手法が品質向上に効果的である。しかし、十分に強い有用な条件を開発者が記述することは難しく、既存手法が自動で生成する条件も弱いという問題がある。

本研究では、プログラムコードと対応する形式仕様の上で形式仕様の性質を利用した解析を行うことで条件を強化することを目指す。本年度は主に形式仕様上での解析部分に注力し、下記の研究を行った。また、コードと仕様の接続についても検討を行った。

### 1. 本半期の研究項目

- (1) 形式仕様の変異解析手法の構築
- (2) 形式仕様の不変条件強化手法の構築
- (3) コードと仕様の接続手法についての調査・検討

### 2. 研究経過および進捗状況、成果

#### (1) 形式仕様の変異解析手法の構築

形式仕様の条件の強化のため、ソフトウェアテストの分野で注目されている変異解析という手法から着想を得て手法を構築した。本手法では、形式仕様におけるシステムの振る舞いに関する記述を、その状態遷移の可能性に着目して人工的に変化させ、その変化と不変条件との対応を取ることを目的としている。そのために、まず振る舞いの記述の各構成要素を人工的に変化させる操作を定義し、また、振る舞いの変化時に不変条件との対応がどう変わるかを解析する手法を構築した。

#### (2) 形式仕様の不変条件強化手法の構築

さらに、変異解析の結果をもとに仕様の不変条件を強化する手法を構築した。まず不変条件の式を弱める操作を定義し、既存の形式仕様の不変条件に対して弱化操作を適用した上で変異解析を行うことで振る舞いの変化と不変条件の変化との関係を分析した。さらに、変数や定数の型を考慮して強化の可能性を狭めることで手法を効率化した。

#### (3) コードと仕様の接続手法についての調査・検討

また、仕様とコードとの対応を取るため、仕様からコードを生成する既存手法についての調査を行った。また、特に近年注目されているドメイン駆動開発で用いられるスタイルのコードとの対応を取る方法について検討した。

### 3. 今後の予定

上記の研究結果について論文にまとめ、国際会議に投稿する。

また、上記(3)の続きとして、接続手法を構築し、評価を行う。

さらに、ACT-1 期間において提案した仕様の抽象化手法を用いて解析を発展させる。

### 4. 外部との研究交流

フランス ENSEEIHT の Yamine Aït Ameur 教授、Neeraj Kumar Singh 博士、Guillaume Dupont 氏と形式仕様とプログラムコードの接続および形式仕様の変異解析について議論を行った。

## 研究進捗状況

## 1. 本半期の研究項目

- A) 様々な N 体ソルバに対応可能なドメイン特化言語 (DSL) を設計 .
- 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 .
- C) DSL コンパイラに最適化器を実装 .
- D) 複数の複雑な N 体カーネルに対して最適化を適用し性能向上を確認 .
- E) 多目的 N 体ベンチマーク集の仕様策定 .

## 2. 研究経過および進捗状況、成果

項目 A では, N 体ソルバとして, 既存のループ最適化の枠組みで扱えるようなナイーブな直接解法だけでなく, 複雑なデータ構造を用いた高速解法も統一的に扱えるように, Python 構文を借りた集合ベースの高水準 DSL を設計した. 項目 B では, N 体ソルバ計算において頻出する計算の対称性を自動的に抽出し, 内在する冗長な計算を除去するコンパイラ最適化を, プログラム合成の考え方に基づいて定式化した. 項目 C では, 既存のプログラム検証器を取り入れて, 項目 B で定式化された最適化を DSL コンパイラに実装した. DSL コンパイラは, Python ライブラリとして実装されており, Python ソースコードに注釈を加えるだけで, 最適化された C++ コードを自動的に生成する. 項目 D では, 複雑で非自明なカーネル (相互作用の数理モデルを定義する関数) を用いる N 体ソルバについて, 提案する最適化器が機能し, 期待通りの最適化の効果が得られることを確認した. 以上 A-E の成果を, プログラミング言語に関する国際会議 SPLASH 2019 にてポスター発表した.

項目 E では, 提案 DSL 処理系が, 様々な分野のアプリケーションで役立つことを示せるように, 多目的な N 体ベンチマーク集の開発を目指している. N 体問題の高速解法は近似解法になるため, 速度と精度のトレードオフがあり, それを適正に評価するためには, 応用問題毎の専門知識に基づく精度の validation が不可欠となる. クラスタリング・電界解析・流体シミュレーション・天体シミュレーションの 4 つについてベンチマークを策定した.

## 3. 今後の予定

主要なタスクは, 次の 3 点である.

- DSL コンパイラに自動 SIMD 化を実装し, その効果を実験的に評価する.
- 多目的 N 体ベンチマーク集の開発を完了し, オープンソースで公開.
- 上記 2 点の仕事を, それぞれ国際会議論文として出版する.

これらのタスクに目途が付いたら, 分散メモリ環境への対応や, より高度な効率化の自動化などにも取り組む予定である.

## 4. 外部との研究交流

N 体ベンチマーク集の開発は, 株式会社フィクスターズに業務委託しつつ, 共同して取り組んでいる.

## 研究進捗状況

## 1. 本半期の研究項目

ACT-I 期間で獲得した Data Skewness に関する知見を基に、重み付きグラフや属性付きグラフ等の多様なグラフデータを対象とした Data Skewness Caching ならびに Data Skewness を捉えた高性能なアルゴリズムの開発に取り組んだ。

特に本年度は下記のテーマについて重点的に取り組んだ。

- 研究テーマ A: 大規模グラフクラスタリングの超高速化
- 研究テーマ B: 属性付きグラフにおける類似度計算の高速化
- 研究テーマ C: 不確実グラフにおける信頼性計算の高速化

## 2. 研究経過および進捗状況、成果

● 研究テーマ A: 大規模グラフクラスタリングの超高速化

ACT-I 期間から引き続き、局所相関に基づく Modularity クラスタリングの超高速・省メモリ化手法 gScarf を開発した。gScarf は解の決定性が保証されるシンプルな部分グラフ構造の計算結果を動的にメモ化することで、計算に必要な時間・空間コストの削減を図り、約 30 億エッジ(TW)規模のデータに対して、最大で 1,000 倍以上の高速化性能を確認した。

本研究成果は人工知能分野のトップカンファレンスの一つである IJCAI-19 (2019 年 8 月, 中国 マカオ) に採択され、口頭発表を行った。

● 研究テーマ B: 属性付きグラフにおける類似度計算の高速化

知識グラフ等に代表される属性付きグラフを対象とした高速なエンティティ類似度計算方式 SchemaRank 法を開発した。SchemaRank 法では属性間の Data Skewness に基づいてグラフのスキーマを集約することにより、各ノードの取りうる重要度の上限値と下限値を高速に推定する。この上限値・下限値を利用することにより、高い類似度を持ち得ないエンティティを属性付きグラフから動的に除外することで高速化を図る。SchemaRank 法は 3,660 万エッジ規模の知識グラフに対する類似度計算を最先端の手法と比較して、100 倍程度高速に計算できることを確認した。本研究の成果は現在、難関国際会議に投稿中である。

● 研究テーマ C: 不確実グラフにおける信頼性計算の高速化

エッジに存在確率が重みとして付与された不確実グラフはノイズの多いデータを表現するための基本的なデータ構造である。不確実グラフにおいて重要な指標として 2 頂点間の接続の強さを評価する信頼性があるが、信頼性を求める計算コストは大きいことが知られている。本研究期間では、層化抽出法と Data Skewness を統合した高速な信頼性推定手法を提案した。本研究の成果は現在国際会議に投稿中である。

## 3. 今後の予定

2020 年度は、2019 年度の研究成果を基にグラフデータ処理の高性能化を引き続きすすめるとともに、多次元データ処理の高速化およびデータベース処理の高性能化について手法の開発を進める計画である。

## 4. 外部との研究交流

本プロジェクトで開発を進めるグラフデータ処理の高性能化・問合せ処理の高性能化についてグリフィス大学 Junhu Wang 准教授、ボルドー大学 Sofian Maabout 准教授と共同研究を進めている。また、グラフ処理のアウトリーチとして、Holon Institute of Technology の研究チームと検討を進めている。

## 研究進捗状況

### 1 . 本半期の研究項目

In this financial year, we planned to study the following topics to **establish the visually grounded paraphrase (VGP) research field**:

- 1) Improve the VGP identification model based on our study in the ACT-I research phrase.
- 2) The typology for VGP: VGP typology design and annotation, VGP classification model development.
- 3) Applications for VGP such as visual question answering and grounded textual entailment.

### 2 . 研究経過および進捗状況、成果

The progress and achievements accordingly are as follows:

- 1) Improve the VGP identification model: after analyzing the VGP dataset, we found that language and visual features should be used adaptively for identifying different types of VGPs. Therefore, we developed a gate model with phrase localization for VGP identification. This work has been published at **ICCV 2019 MDALC Workshop** and conditionally accepted by **the journal of Neurocomputing**. Furthermore, I presented our work on VGP identification as **an invited talk at SNL 2019**.
- 2) The typology for VGP: we defined the linguistic typology of VGP from the natural language inference perspective, which consists of the type of equivalence, entailment, alternation, and independence. We annotated the VGP dataset based on this typology via crowdsourcing and developed a baseline model for VGP classification. Currently, we are improving the model and aiming to submit our work to **COLING 2020**.
- 3) Applications for VGP: we focused on the application of visual question answering (VQA). For which, we developed a strong VQA model with both knowledge and BERT representations. We presented our VQA model at **MIRU 2019, AAAI 2020 and WACV 2020**.

### 3 . 今後の予定

The VGP research field can be categorized as follows: 1) key techniques (visual grounding, language/visual representation), 2) tasks (identification, classification/typology, generation), 3) applications (image captioning, VQA, grounded textual entailment), 4) advanced topics (multilingual, social media, video). Our studies until now only covered a small set of the field including visual grounding, language/visual representation, VGP identification and classification. In the next financial year, we plan to study the following topics to further advance the VGP research field.

- 1) Multilingual visual grounding and VGP: current visual grounding and VGP study is limited to English. We plan to extend the study of visual grounding and VGP in other languages such as Japanese.
- 2) VGP generation: we will study a generative model to automatically generate the possible types of VGPs that can be generated from a given object in an image, which can help understand VGPs from the visual perspective.
- 3) Language/visual representation refinement by VGP for applications: we will use VGP and its typology to refine language/visual representation for applications such as VQA and grounded textual entailment.

### 4 . 外部との研究交流

This project has been conducted together with a previous ACT-I researcher Mayu Otani, Dr. Noa Garcia and Associate Professor Yuta Nakashima in Osaka University. I have also been collaborating with Prof. Mitamura in CMU in the manner of a capstone project. In addition, two internship and three RA students in Osaka University have been working on the project under my supervision.

## 研究進捗状況

### 1. 本年度の研究項目

2019年度は研究テーマである回路最小化問題に深く関連する(時間制限付き) **コルモゴロフ記述量**の計算量に関して主に研究を行った。

### 2. 研究経過および進捗状況、成果

理論計算機科学のトップ会議 STOC'20 (52nd ACM Symposium on Theory of Computing) や計算量理論のトップ会議 CCC'20 (36th Computational Complexity Conference) また革新的なアイデアを議論する国際会議 ITCS'20 (11th Innovations in Theoretical Computer Science) に論文がそれぞれ採択された。

ITCS'20 および STOC'20 の論文では、3つの Allender の予想をすべて否定的に解決することに成功した。大雑把に述べると、Allender の予想は「コルモゴロフ記述量の計算困難性を示すことは(効率的な帰着を使う手法では)不可能であろう」という予想である。本研究成果では、新しい証明手法を開発することにより、その予想を覆すようなコルモゴロフ記述量の計算困難性を示すことに成功した。

この新しい計算困難性の解析の結果(および CCC'20 の研究成果)として、次のことが明らかになった。(暗号の安全性の基礎となる) NP の平均時計算量の困難性を解析することは、コルモゴロフ記述量の計算困難性を解析することと、ほぼ同値である。従って、コルモゴロフ記述量の(最悪時計算量の意味での)計算困難性の解析が暗号の安全性とより密接に結びついていることが明らかとなった。

### 3. 今後の予定

近年、回路最小化問題に関して世界的に新しい結果が多く出てきている。例えば、回路最小化問題の NP 完全は重要な未解決問題であるが、問題を多出力の回路を最小化する問題に緩和した場合、NP 完全性が解決された [Illango, Loff, Oliveira (CCC'20)]。また、コルモゴロフ記述量の(平均時計算量の意味での)計算困難性と秘密鍵暗号方式の存在が同値である、といった結果が示されている [Liu & Pass '20]。

今後は上述のような別の研究チームによって開発された証明のアイデアなどを取り入れることにより、研究をさらに進展させることを目指す。

### 4. 外部との研究交流

Oxford 大学、MIT などを訪問し、研究議論および共同研究等を行った。



## 研究進捗状況

## 1. 本半期の研究項目

本半期では、大きく以下の 2 点の研究を実施した。

## (1) 衛星画像と構造物属性から総合的に地震被害を判断する深層学習モデルの開発

これまでの研究では、災害前後の衛星画像から構造物の被害有無の判別を行ってきたが、築年代や構造材料といった構造物毎の特性は、一般に地震被害との関連性が高いことが統計的に知られている。そこで、こうした構造物属性と衛星画像から総合的に被害判別を行う深層学習モデルの開発を行った。

## (2) 多時期の平常時データと災害後の緊急撮影データを利用した地震被害判別モデルの開発

人工衛星は定期的に地表を撮影していることから、震災を受けた地域の撮影データは過去に遡ることで多数のものが存在している。そうした多時期の平常時撮影データと地震後の緊急撮影データを比較することによって、災害前後の 2 枚の比較を行う場合よりも被害判別の精度が向上するかどうかを検証した。

## 2. 研究経過および進捗状況、成果

研究項目(1)に関して、2016 年熊本地震時における被災地域における撮影画像と構造物情報・被害情報を元に、機械学習モデルの学習と精度検証のためのデータセットを構築した。衛星画像と構造物属性を総合的に判断するモデルとして、これまでに有効性を検証できた 3 次元畳み込み構造にマルチモーダル学習構造を新たに加えることにより、大きく被害判別精度が向上する結果が得られた。

研究項目(2)に関して、光学画像に比較して被害判別精度が低い SAR 衛星撮影画像を対象に、過去 7 シーンの平常時撮影画像と災害直後の撮影画像を比較する異常検知モデルを開発した。画像間の類似度を評価するいくつかの基本的な指標を利用して異常検知を実施したが、これまでの研究成果と比較しても精度の向上が達成されず、モデルの改良に課題が残された。

## 3. 今後の予定

上記の 2 つの研究項目について、衛星画像と他の事前情報を統合した被害判別の有効性が確認されたため、今後は構造物属性に加えて地盤情報や震度情報などを加えることによる、一層の被害判別精度の向上を図る。

また、過去の平常データと災害時の撮影データを比較する異常検知モデルにおいては、期待された精度の向上につながっていないことから、画像の特性を考慮した画像類似度評価法の開発や光学衛星と組み合わせた判断など、SAR 画像に特化した工夫の下でモデルの改良を行っていく。

## 4. 外部との研究交流

本研究を通して得た衛星画像の処理技術や機械学習モデルの開発技術を他の研究へと波及させる目的で、香川大学四国危機管理教育・研究・地域連携推進機構と協力を行っており、2020 年 4 月からは同大学客員准教授を務めている。また、通常の学会発表の他に、本研究に関する 3 件の招待講演を行い、研究成果の普及に努めた。

## 研究進捗状況

### 1. 本半期の研究項目

本半期はトレーサー粒子の分布を3次元的に計測する技術の開発と、水泳と流体計測を専門とする研究者との共同研究の推進を行った。また、トレーサー粒子として用いるセルロースナノファイバーを、乾燥粉の状態から水に満遍なく分布する特性を持つ懸濁液に加工するために適した方法などについて、セルロースナノファイバーを専門とする大阪大学の研究者らと議論を行いながら調査した。

### 2. 研究経過および進捗状況、成果

水流計測を水泳のために用いている研究者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ることを目指した。具体的には、水泳の経験を持つ実験参加者に大型の水槽 2m×3m×1m の中で複数種類の泳法を用いて泳んでもらい、その水の流れを本研究の提案手法によって可視化した。また、提案手法によって可視化したそれぞれの泳法による水の流れと、既存研究により計測された2次元的な水の流れ・シミュレーション結果との定性的な比較検証を行った。加えて、どのような泳法の流れを計測できれば最も学術的貢献があるかなどについての議論を行った。密度の差がある箇所を明暗差として可視化する方法として、シュリーレン光学系がある。デジタルシュリーレン光学系は一定の奥行きにある2次元平面にフォーカスを合わせることができる。フォーカスする奥行きを変更することで、3次元的な計測も可能となる。本半期は、シュリーレン光学系を用いて空気中の超音波の力場を可視化する研究を行っているイギリスのサセックス大学 Interact Lab の研究者とともに、水中の粒子を3次元的に計測するための光学系を開発を行った。

1. Shogo Yamashita, Jun Rekimoto et al. "Fluid-Measurement Technology using Flow Birefringence of Nanocellulose", SIGGRAPH 2019, Poster.
2. Shogo Yamashita, Jun Rekimoto et al. "Feasibility Study on Water Flow Visualization Using Cellulose Particles and Pervasive Display", The 8th ACM International Symposium on Pervasive Displays (PerDis 2019), Full Paper.
3. Shogo Yamashita, Jun Rekimoto et al. "Water Flow Measurement for Swimmers using Artificial Food-grade Roe as Tracer Particles", The 5th International ACM In Cooperation HCI and UX Conference(CHIUxID 2019), Full Paper.

### 3. 今後の予定

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。また、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。3次元的に流れを計測するための新たな仕組みも継続的に開発する。

### 4. 外部との研究交流

イギリス、サセックス大学 Interact lab と光学系に関する共同研究  
大阪大学、能木研究室との材料やナノセルロースに関する共同研究  
筑波大学、角川先生との水泳や流体計測に関する共同研究

## 研究進捗状況

### 1. 本半期の研究項目

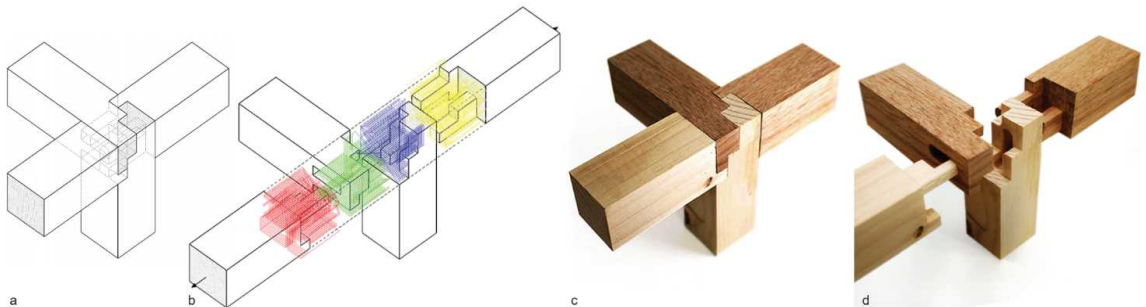
- 1.1 3次元形状: TEI19 では2次元レイアウトのみであったが、同様のジョイントを3次元に拡張し、曲面での表現および製作ができるようにする。ユーザーが3次元曲面を設計しシステムに入力することで、手持ちの枝ライブラリから自動的に最適な3次元配置が出力される。3次元形状はループ構造をユニットとし、あらかじめユニットで構造試験を行うことで、設計された構造的な性能を推定することを目指す。
- 1.2 Tsugite (Larsson 氏との協働研究): これまでは仕口の形態が固定されていたが、本研究ではジョイント部をユーザーが設計できるようにした、具体的にはジョイント部を  $3^3$  のボクセル空間とし、ボクセルを追加したり差し引いたりできるデザインインターフェースを提案する。

### 2. 研究経過および進捗状況、成果

- 2.1 3次元形状: SCF19 にて論文発表を行った。また同論文で開発した手法を改善し、日本科学技術未来館にてパーマネント展示用のオブジェ(右図)を製作した。SCF19 では4辺で構成されるクアッドメッシュを入力としていたが、このオブジェはらせん構造を入力できるようにした。



- 2.2 Tsugite: エンドユーザーによるデザインインターフェース(下図 a)を開発した。デザインされたジョイントは3軸 CNC 工作機で製作できるように加工パスが自動で生成される(下図 b)。切削されたジョイントは合計 6 個までの部材を接合することができ、ボクセル空間の解像度は  $5 \times 5 \times 5$  まではラップトップ環境で対応可能である。



### 3. 今後の予定

- ・ Tsugite を Siggraph に投稿したが Reject された。現在 UIST に投稿済み。右図のような斜めのジョイントを接合することもできるようになったため、実際の家具製作にも応用可能であるため、建築家や家具デザイナーと協働をすすめていく。

### 4. 外部との研究交流

- ・ 4 月から大阪芸術大学の学生を指導しつつ枝だけにこだわらずに様々な素材を活用するような仕組みを考案していく。
- ・ アーティストの Daniel Silva 氏と協働で新たな 3 次元オブジェの製作をすすめている。



## 研究進捗状況

## 1. 本半期の研究項目

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す。今年度は以下の2つの研究項目を実施した。

- A. 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
- B. 機械学習に基づく原子間ポテンシャルの開発と検証

## 2. 研究経過および進捗状況、成果

## 項目 A. 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

これまでに様々な時間並列手法が提案されているが、これらのほとんどの方法は、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。今年度は、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。本研究成果はマルチスケール計算で最大規模の国際学会 MMM2020 に投稿した。

## 項目 B. 機械学習に基づく原子間ポテンシャルの開発

原子間ポテンシャルの選択は分子動力学計算の計算精度と計算時間に大きな影響を与える。近年 MD 計算では ReaxFF という反応型原子間ポテンシャルが高精度のため広く使われていたが、計算コストが EAM や MEAM などのポテンシャルより大きく上回る。

そこで今年度は、低計算コストかつ高精度なポテンシャルを開発するために第一原理計算のデータベースに基づき、機械学習手法によりマグネシウム(Mg)原子間ポテンシャルの開発を行った。第一原理計算から得た単元系 Mg のデータを学習データセットとして使い、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、既存の経験的ポテンシャルを用いた MD 計算の結果や第一原理計算から得られた結果と比較することで、作成した機械学習ポテンシャルの評価を行った。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、第一原理計算に匹敵するくらいの計算精度を得ることができた。本研究成果は計算力学の国際学会 WCCM2020 に採択された。

## 3. 今後の予定

本半期で開発した機械学習原子間ポテンシャルを時間並列分子動力学計算に適用し、時間並列計算のさらなる高速化及び高精度化を試みる。また、時間並列分子動力学計算を炭素鋼内部構造の発展挙動解析に適用し、解析時間の拡張により炭素鋼中の炭素拡散メカニズムを探求する。さらに、並列計算により有機半導体トランジスタの高精度/高速特性評価を行う。

## 4. 外部との研究交流

並列計算の有機半導体応用について、ジョージア工科大学の Jean-Luc Bredas 先生の研究室を訪問し、共同研究の詳細、次回訪問予定など議論した。機械学習によるポテンシャル開発では、第一原理計算の専門家である松中 大介先生(信州大)と議論して研究を進めている。