



筑波大学

計算科学研究センター

平成21年度 年次報告書

平成22年10月

筑波大学計算科学研究センター

目次

1. 平成21年度 基本方針、重点施策・改善目標等	4
1.1. 基本方針	4
1.2. 重点施策・改善目標等	4
2. 平成21年度 実績報告	7
2.1. 重点施策・改善目標等の達成状況	7
2.2. 教育・研究、大学運営上の特色ある取組及びそれらの活動を円滑に進めるための工夫	9
2.3. 自己評価と課題	10

各研究部門の報告

1. 素粒子宇宙研究部門	13
1.1. 素粒子分野	13
1. メンバ	13
2. 概要	13
3. 研究成果	13
4. 研究業績	19
5. シンポジウムの開催	25
6. 受賞	25
1.2. 宇宙分野	26
1. メンバ	26
2. 概要	26
3. 研究成果	26
4. 科研費採択状況	34
5. 学位論文	35
6. 研究業績	36
7. 連携・国際活動・社会貢献、その他	46
2. 物質生命研究部門	48
2.1. 物質工学理論グループ	48
1. メンバ	48

2.	概要	48
3.	研究成果	48
4.	研究業績	52
2.2.	生命物理グループ	55
1.	メンバ	55
2.	概要	55
3.	研究成果	55
4.	研究業績	62
2.3.	計算物性グループ	66
1.	メンバ	66
2.	概要	66
3.	研究成果	66
4.	研究業績	72
2.4.	原子核理論グループ	80
1.	メンバ	80
2.	概要	80
3.	研究成果	80
4.	研究業績	83
3.	地球生物環境研究部門	88
3.1.	地球環境学分野	88
1.	メンバ	88
2.	概要	88
3.	研究成果	88
4.	研究業績	91
3.2.	生物分野	96
1.	メンバー	96
2.	概要	96
3.	研究成果	96
4.	研究業績	98
4.	超高速計算システム研究部門	102
1.	メンバ	102
2.	概要	102
3.	研究成果	102

4. 研究業績	107
5. 計算情報学研究部門	110
5.1. 計算知能分野	110
1. メンバ	110
2. 概要	110
3. 研究成果	110
4. 研究業績	116
5.2. 計算メディア分野	123
1. メンバ	123
2. 概要	123
3. 研究成果	124
4. 研究業績	132
5. 連携・国際活動・社会貢献、その他	134

1. 平成21年度 基本方針、重点施策・改善目標等

1.1. 基本方針

- (1) 基礎科学・物質科学・生命科学・環境科学における重要課題に対し、大規模シミュレーション・大規模データ解析等を中心とする計算科学の方法による研究を推進・発展させる。
- (2) これを実現するための超高速計算機システムの開発・製作及び超高速ネットワークに関する計算機科学・情報科学の先進的研究を推進・発展させる。
- (3) 計算科学分野における、国際的研究拠点機能並びに全国共同利用研究センターとしての研究拠点機能を提供し、当該分野における国内外の共同研究を推進・発展させる。

1.2. 重点施策・改善目標等

(1) 計算科学研究推進事業・大型プロジェクト研究の推進

超並列クラスタシステム PACS-CS による計算科学を推進する特別教育研究経費プロジェクト「計算科学による先導的知の創出推進事業」を実施、進行中の大型プロジェクトの諸研究と、相互に有機的に連関させて推進する。

(2) 次世代スーパーコンピュータ開発プロジェクトへの貢献

開発実施主体である理化学研究所と、「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト推進のための連携・協力に関する基本協定」に基づき、完成に向けた具体的な課題について共同研究を推進する。

(3) 共同研究・共同利用体制の整備、共同利用・共同研究拠点への申請

PACS-CSおよび T2K-Tsukuba システムの全国共同利用のためのプログラム「学際共同利用プログラム」を実施し、全国の計算科学の研究の推進に貢献する。共同利用・共同研究拠点への申請を受けて、拠点整備を行う。

(4) 計算科学に関する人材育成への取り組み

計算科学に関する大学院共通科目を実施。前年度から始めた計算科学についてのデュアルディグリ制度を本格的に実施する。

(5) 計算基礎科学に関する連携、および国際連携の推進

前年度、KEK、国立天文台と締結し計算基礎科学連携拠点について協定に基づき、連携を進めるとともに、国際的な連携を開拓・推進する。

(6) 次期中期計画に向けての将来計画策定

将来計画検討委員会を設け、計算科学の研究拠点としての、次期中期計画期間中の計画を策定する。

(7) 重点とする研究目標

センター全体としては、研究推進事業、大型プロジェクト等を中心に、基本方針に掲げる計算科学の学際的研究の遂行と成果の実現を図る。各部門の目標は次のとおりである。

素粒子宇宙研究部門: 物理的なクォーク質量で、体積や格子間隔を変えた計算をさらに進行させる。近似無しのゲージ配位を使った核力の計算を引き続き行い完了させる。FIRST プロジェクトをさらに推進し、第一世代天体の質量がその後の宇宙構造形成に与える影響について、詳細な計算を行う。

物質生命研究部門: 大規模並列計算により、ナノ構造体の持つ特徴的物性の解明、次世代半導体技術基盤の創成、光支援等による高速ダイナミクスの解明、バイオ機能と構造のダイナミクスの相関の解明、等の研究を行う。

地球生物環境研究部門: 大気大循環モデル NICAM を用いた北極域のプロセス研究を発展させる。都市豪雨に対する都市の効果を数値モデル WRF を用いて評価する。クリプト藻類・ハプト藻類に進化的に近縁であると考えら得れる生物種から網羅的に遺伝子配列を取得し、そのデータをもとに大規模系統解析をおこなう。

超高速計算システム研究部門: PACS-CS, T2K-Tsukuba, FIRST という大規模・超高性能計算システムを学際共同利用を中心とする応用プロジェクトで最大限の効率で活用できるような利用技術の研究及び応用グループへの支援を行う。また、グリッド技術の実応用として、他大学の情報基盤センターとのスパコン運用連携を進める。

計算情報学研究部門: 大規模データ、センシングデータの管理・統合や科学データの高度利用基盤に関する研究開発を他部門と連携して推進する。大量センサデータの解析・加工、人間への情報提示に関する研究開発と実世界計算情報学の基盤形成を他部門とも協力して推進する。

運営・予算面での改善目標・課題については以下にあげる。

- (1) 運営体制の整備: 研究体制の充実と強化に対応して研究企画・財務・総務広報等の執行体制及び事務体制の高度化と効率化を図る必要がある。特に次期スパコンの稼動に当たり運用支援体制の強化を図る必要がある。

- (2) 予算面での課題:全学的な研究システムの整備の中で、基盤教育研究経費および間接経費の配分方式について、研究センターの位置づけに関わる課題として引き続き検討の必要がある。

2. 平成21年度 実績報告

2.1. 重点施策・改善目標等の達成状況

(1) 計算科学研究推進事業・大型プロジェクト研究の推進

- 超並列クラスタシステム PACS-CS による計算科学を推進する特別教育研究経費プロジェクト「計算科学による先導的知の創出推進事業」を実施した。招聘、研究集会支援などを制度化し、実施した。
- 計算宇宙物理学のためのプロジェクト FIRST は、科学研究費(基盤 S)で推進した。
- 次世代 IT 基盤「e-サイエンス実現のためのシステム統合・連携ソフトウェアの研究開発」において、並列プログラミング言語やグリッドの研究を推進した。
- その他、JST CREST、科学振興調整費プロジェクト、科研費による大型プロジェクトなどを推進。

(2) 次世代スーパーコンピュータ開発プロジェクトへの貢献

- 国の次世代スーパーコンピュータプロジェクトの開発実施主体である理化学研究所と、「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト推進のための連携・協力に関する基本協定」に基づき、共同研究を実施、センターにプロジェクトチームを構成し、定期的に研究打ち合わせをしつつ実施中。
- センター教員3名が理化学研究所客員研究員に委嘱され、次世代スーパーコンピュータの開発に貢献している。さらに、センター教員2名が計算科学研究機構準備室室員として、計画策定に参画した。

(3) 共同研究・共同利用体制の整備

- 超並列クラスタ、スパコン T2K-tsukuba、融合型クラスタ FIRST を学際共同利用プログラムの元で公募プロジェクトおよび全国共同利用を実施した。
- 共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」に認定、平成22年度から活動開始することとなった。

(4) 計算科学に関する人材育成への取り組み

- 計算科学に関する大学院共通科目を実施。
- 計算科学についてのデュアルディグリー制度を実施した。成23年度からはグローバル30での英語マスターコースを計画している。

(5) 計算基礎科学に関する連携、および国際連携の推進

- KEK,天文台との素粒子・原子核・宇宙分野の「計算基礎科学連携拠点」について、運営を進めた。
- 「計算基礎科学連携拠点」として、「次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム」実施可能性調査実施機関に採択された。(分野5物質と宇宙の起源と構造、代表:青木慎也)
- 国際連携の一つとして、エジンバラ大学並列処理センター(EPCC)とワークショップを開催し、連携を進めた。

(6) 次期中期計画に向けての将来計画策定

- 次期中期目標・計画期間に向けての計画の策定を取りまとめた。

(7) 重点とする研究目標

センター全体としては、上記(1)に記した拠点形成事業、大型プロジェクト等と(3)に記した公募プロジェクト「学際共同利用プログラム」の実施を中心に、計算科学の学際的研究の遂行と成果の実現を図り、さらに、(2)に記した次世代スーパーコンピュータへの貢献に努力を傾注した。各部門の成果は次のとおりである。

素粒子宇宙研究部門:物理的なクォーク質量で、格子 QCD 大規模計算を行い、Reweighting 法を用いてパラメタの調整を正確に行えるようにした。近似無しのゲージ配位を使った核力の計算を進め、クォーク質量依存性を研究した。FIRST プロジェクトを推進し、ダークマターカスプが第一世代天体の質量決定に果たす役割を明らかにした。また、6次元ボルツマン方程式の数値解法を開発し実装した。

物質生命研究部門: 実空間密度汎関数法(RSDFT)、実時間密度汎関数法(TDDFT)、QM/MM 法等の大規模並列計算プログラムを開発し、次世代半導体デバイスとして期待されている Si ナノワイヤの電子状態計算の実現、分子等の光支援のダイナミクスの解明、原子レベルでのバイオ機能発現機構の提案等の物質生命分野において極めて重要な知見を得ることに成功した

地球生物環境研究部門:大気大循環モデル NICAM を用いた北極域のプロセス研究を発展させた。都市豪雨に対する都市の効果を数値モデル WRF を用いて評価した。クリプト藻類・ハプト藻類に進化的に近縁であると考えら得れる生物種から網羅的に遺伝子配列を取得し、そのデータをもとに大規模系統解析をおこなった。

超高速計算システム研究部門:センターのスパコン群における各種計算科学応用プログラムに対し、数値解析的手法・並列通信最適化等による性能向上を行い、応用分野研究を助成した。また、T2K 連携機関を始めとする各大学情報基盤センターとのスパコン・グリッド運用基盤を整備し、相互運用体制を整えた。

計算情報学研究部門:大規模データ、センシングデータの管理・統合や科学データの高度利用基盤に関する研究開発を他部門と連携して推進した。大量センサデータの解析・加工、人間への情報提示に関する研究開発と実世界計算情報学の基盤形成を他部門とも協力して推進した。

2.2. 教育・研究、大学運営上の特色ある取組及びそれらの活動を円滑に進めるための工夫

(1) 分野・部門間の連携研究の推進

当センターでは、科学諸分野と計算機科学・情報科学の連携・協働による「学際計算科学」を中心的なコンセプトとして研究活動を行っている。素粒子分野と超高速計算システム分野、地球環境分野と計算知能分野などが具体的な研究課題についてワーキンググループを設置して定期開催を行い、共同研究を進めている。今年度からは、次期マシン開発に向けて、応用分野と高性能計算機部門が中心となって、演算加速機構に関する研究会を定期的に開催した。

(8) 大規模計算設備を利用する「学際共同利用プログラム」の実施

全国共同利用施設として、大規模クラスタ PACS-CS と T2K-tsukuba システムを利用する公募プロジェクト「学際共同利用プログラム」を実施している。この公募プロジェクトはセンターのミッションの中心的な活動として、今後とも積極的に推進していく。

(9) 関連組織との連携の推進

これまで、T2K-tsukuba システムの導入を機会に、東京大学、京都大学との連携を推進している。この取り組みは、グリッド技術を使った連携や、新規のソフトウェア開発プロジェクト(e-science プロジェクト)などに発展している。また、素粒子・原子核・宇宙分野の計算科学の連携として、KEK と国立天文台との間で「計算基礎科学連携拠点に関する協定」を締結し、連携を進めている。この組織を中心として、「次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム」実施可能性調査実施機関に採択された。

(10) 人材育成への取り組み

計算科学に関する人材育成への取り組みとして、計算科学に関する大学院共通科目やデュアルディグリー制度などを実施している。計算科学に関する拠点を強化する取り組みとして、これからも進めていきたい。

(11) 国際連携の推進

国際連携については、センターの活動の国際化の活動として積極的に進めている。当該年度においては英国エジンバラ大学並列処理センターとのワークショップを開催するなど、連携を開始している。

2.3. 自己評価と課題

(1) 自己評価

今年度においては、これまでの実績を認められ、共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」に認定され、平成22年度から活動開始することとなった。また、前年度から素粒子・原子核・宇宙分野の計算科学の連携として、KEKと国立天文台との間で組織した「計算基礎科学連携拠点」を核に、「次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム」実施可能性調査実施機関に採択された。エジンバラ大学との連携を始めるなど、国内外での拠点の強化に努めた。その一方で、新規のマシン開発のための予算獲得など、今年度策定した将来計画に沿って更なる発展を目指していく必要がある。

(2) 課題

① 新規マシン開発のための概算要求

本センターは計算科学と計算機科学を連携・協働させ、計算基盤の能力および機能の飛躍的な高度化を図り、計算科学による諸課題の研究を推進してきた。このアプローチ、すなわち計算科学と計算機科学の協働により最先端を開拓するための根幹を成す部分であり、このためのマシン開発の予算獲得は喫緊の課題である。

② 次世代スパコン、全国的な計算科学コミュニティの中の位置づけの確保

これまでと比べて飛躍的な計算能力を持つ次世代スパコンが稼動し、その下に計算科学研究機構の設立が計画されている中で、当センターがこれまで以上に存在感を発揮し、全国の大学の中で唯一の計算科学の共同利用・共同研究拠点として、最先端の計算科学をリードしていく体制と戦略が急務である。

③ 予算面での課題

外部資金の間接経費の配分方式は、全学的な研究システムの整備の中で、研究センターの位置づけに関わる課題として引き続き検討の必要がある。

④ 運営体制の課題

センターの充実、T2k-tsukuba システムの稼動、連携の拡大、次世代スパコン戦略プログラムの実施に伴い、研究企画・財務・総務広報等のそれぞれの面で検討事項・処理事項と事務量が大幅に増大した。これらに対応して高い研究活動を維持・発展するには、センター長・部門長を中心とするセンターの執行体制の検討が必要である。また厳しい職員教員数流動化が必要とされる中で効率的な事務体制の構築の必要がある。

各研究部門の報告

1. 素粒子宇宙研究部門

1.1. 素粒子分野

1. メンバ

教授 青木 慎也, 宇川 彰, 金谷 和至(共同研究員)

准教授 石塚 成人, 蔵増 嘉伸, 吉江 友照

助教 谷口 裕介

研究員 浮田 尚哉, 滑川 祐介, 山崎 剛

2. 概要

素粒子分野においては、本年度も、格子場の理論の研究を柱に活発な研究活動が行なわれ、数理物質科学研究科と密接な連携のもと、格子 QCD の大型数値シミュレーションが推進された。

筑波大学の格子ゲージ理論の研究者は、2006年7月に計算科学研究センターの次期並列計算機として PACS-CS が導入されたのを契機として新たな研究グループとして立ち上げられた PACS-CS Collaboration に参加している。PACS-CS Collaboration では、PACS-CS や T2K-Tsukuba を主要な計算機資源として、3 種類 (up、down、strange) の軽いクォークをその物理的質量(物理点)において動的に扱うシミュレーションを行い、QCD に関する近似のない物理的予言を行うことを目的として、 $N_f=2+1$ QCD の大規模シミュレーションを進めている。また、これらの大規模シミュレーションのための Collaboration としての研究と並行して、核子間ポテンシャルの研究、ハドロン間相互作用の研究、核子形状因子の研究、有限温度・有限密度 QCD の研究、や、計算技術開発なども行われた。さらに、格子 QCD 配位やその他のデータを国内・外で共有する為のデータグリッド JLDG・ILDG の構築を推進した。

3. 研究成果

【1】 PACS-CS Collaboration の活動(全員)

計算科学研究センターでは、平成 17 年度から 3 ヶ年計画で特別教育研究経費(拠点形成)を受けて開発・製作が進められてきた超並列クラスタ計算機 PACS-CS(計算ノード数 2560、ピーク演算性能 14.3Tflops)が平成 18 年 7 月から稼働を開始した。PACS-CS Collaboration は PACS-CS を主要な計算設備として格子 QCD の研究を行うことを目的とし、筑波大学物理学系メンバーを中心として組織されている。その目標は、

domain-decomposed HMC (DDHMC) アルゴリズムと polynomialHMC (PHMC) アルゴリズムを組み合わせることによって3種類(up, down, strange)の軽いクォークをその物理的質量(物理点)において動的に扱うシミュレーションを行い、QCD に関する近似のない物理的予言を行うことである。平成 18、19 年度は物理点へ向けて up-down クォーク質量を段階的に軽くすることによって物理量のクォーク質量依存性を調べるのが主要課題であった。平成 20 年度より PACS-CS プロジェクトの目標である物理点でのシミュレーションへの取り組みを開始し、平成 21 年度 reweighting 法を用いた物理点直上でのシミュレーションに成功した。また、物理点における体積効果を調べるために超並列クラスタ計算機 T2K-Tsukuba(計算ノード数 648、ピーク演算性能 94.Tflops、平成 20 年 6 月稼働開始)を利用してより大きな空間サイズのシミュレーションを実行中である。以下に平成 21 年度における進展を述べる。

(1) 物理点直上での 2+1 フレーバー QCD シミュレーション

昨年度に引き続き、PACS-CS プロジェクトの目標である物理点直上でのシミュレーションに取り組んだ。この計算では格子サイズ $32^3 \times 64$ 、格子間隔 $a = 0.09$ fm の格子上で非摂動的に $O(a)$ 改良された Wilson クォーク作用と Iwasaki ゲージ作用を用いた。これらのパラメータは平成 18、19 年度に行ったクォーク質量依存性を調べるための計算に使用したものと同一である。物理点直上でのシミュレーションを行う上での最大の問題は、up-down クォーク質量および strange クォーク質量の物理点直上へのチューニングである。我々は reweighting 法を用いてこの問題を解決することに成功した(論文1)。図 1 左図は reweighting 因子の配位依存性を表している。異なる配位間のゆらぎは安定していることがわかる。図 1 右図では左図の reweighting 因子を用いて、up-down クォーク質量および strange クォーク質量の物理点へのチューニングを行った結果である。up-down クォーク質量、strange クォーク質量、格子間隔を決定するためのインプットは π メソン、K メソン、 Ω バリオンの質量である。それらのハドロン質量が誤算の範囲で実験値に正しくチューニングされていることが図1右図において見てとれる。本研究によって格子 QCD における物理点直上のシミュレーションという長年の課題は解決された。

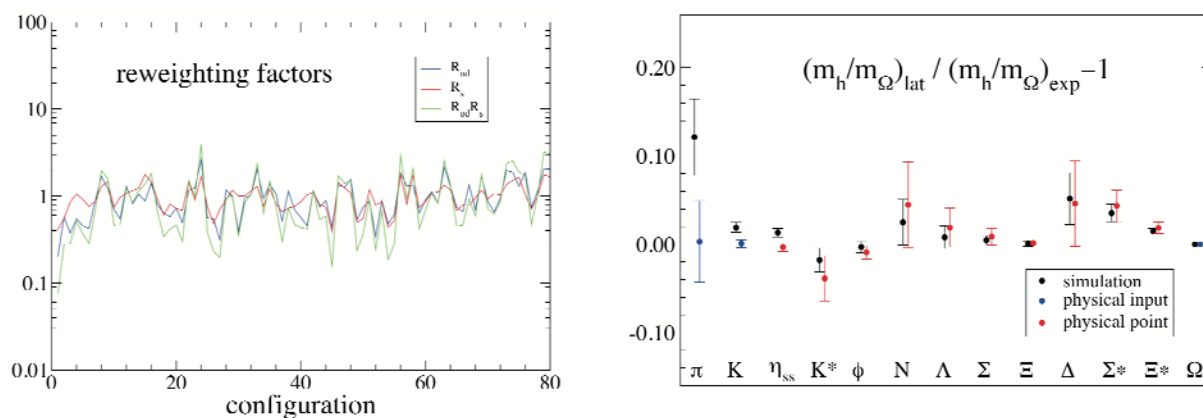


図1:物理点直上での 2+1 フレーバー QCD シミュレーション。左図:Reweighting 因子の配位依存性。Rud は up-down クォーク質量に対する Reweighting 因子を表し、Rs は strange クォーク質量に対する Reweighting 因子を表す。Rud Rs は両者の積。右図:ハドロン質量の実験値との比較。 Ω バリオンの質量で規格化されている。

黒丸は reweighting によるチューニング前の結果。赤丸は reweighting によって物理点直上にチューニングされた結果。青丸は up-down クォーク質量、strange クォーク質量、格子間隔を決めるためのインプットを表す。

(12) ρ 中間子崩壊幅の計算

これまで生成された配位を用いて幾つかの興味深い物理量の計算も行っている。特筆すべきは、 ρ 中間子崩壊幅の計算である。ハドロン共鳴状態の深い理解の為に、ハドロン散乱位相を、格子上の数値計算により定量的に評価し、実験値と比較することが本質的な重要性を持つ。本研究では、 1^{--} の共鳴状態である ρ 中間子の研究を、2 体 π の散乱位相から行った。最初のステップとして、410 MeV の π メソン質量に相当する up-down クォーク質量で生成された配位を用いて散乱位相の高精度計算を行った。これから得られた崩壊幅の値は 113 ± 22 MeV であり、実験値 150 MeV をほぼ再現している。本研究の成果は本年度論文に纏める予定である。今後より小さなクォーク質量を用いた計算を実行し、クォーク質量依存性を調べる計画である。

(13) 格子 QCD による原子核の直接構成

また、平成 21 年度は格子 QCD による原子核の直接構成という新たな研究の潮流を生み出した(論文3)。格子 QCD における原子核相関関数の評価は膨大な数のクォークダイアグラムの計算を必要とするが、我々はこの問題を解決するために計算コストを大幅に削減する方法を提案した。この方法を用いて、軽い原子核の中でも比較的大きな束縛エネルギーを持つヘリウム原子核に対して、現実世界よりも重いクォーク質量を用いた試験的計算を行った。散乱状態と束縛状態を識別するためにはヘリウム原子核と自由核子のエネルギー差の体積依存性を調べなければならないが、格子の空間サイズ L を 24 から 96 まで変化させる計算を行った結果ヘリウム原子核が束縛しているという結論が得られた(図2)。

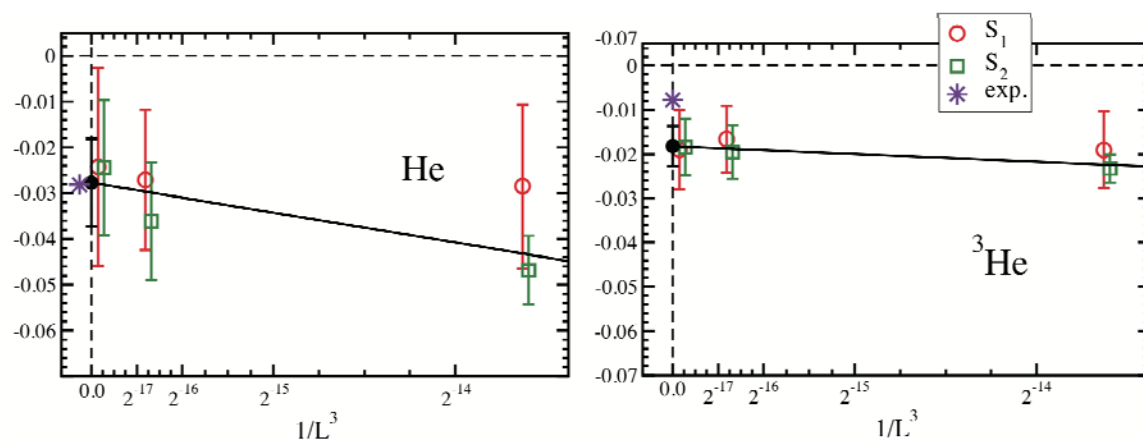


図2: 格子 QCD による原子核の直接構成。左図は He 原子核と 4 個の核子の質量のエネルギー差の体積依存性。L は格子の空間方向の長さ。S1,2 は原子核相関関数における演算子の選び方の違いを表

す。黒線は空間体積無限大への外挿の様子。右図は ^3He 原子核と3個の核子の質量のエネルギー差の体積依存性。

【2】有限温度・有限密度QCDの研究(青木、金谷、浮田 WHOT-QCD Collaboration)

金谷、青木らは、東京大学初田、新潟大学江尻、広島大学梅田らとの共同研究で、Wilson 型クォークによる有限温度・密度QCDの研究を引き続き推進した。

Wilson 型クォークによる系統的研究は世界的に見ても、1990年代前後に行われた筑波の qcdpax, cp-pacs グループ以降、ほとんど行われていなかった。そのため、有限温度の相図が既に詳細に調べられている $N_f=2$ QCD の場合について、Wilson クォークとして最初の有限密度QCD研究を実行した。有限密度に関しては、化学ポテンシャルに関するTaylor展開の手法を用いた。従来の方法に加えて有限密度の複素位相部分をガウス関数で近似して reweighting 法を用いる新しい手法による状態方程式の有限密度効果の計算や、クォーク数密度揺らぎの計算なども行った。これらの計算で、従来の Staggered クォークの計算で見つかった有限密度領域でクォーク数密度の揺らぎが増大する兆候が Wilson クォークによっても確認できた。これらの結果をまとめた本論文を投稿した。

(1) 固定格子間隔アプローチと T-integral 法の開発

最終目標である $N_f=2+1$ QCD での有限温度・有限密度研究は、極めて多くの計算時間を要求する。従来の固定格子数(N_t)で integral 法を用いる計算方法では、ゼロ温度格子のシミュレーションを大量に要求し、それが全体の計算コストの大きな部分を占めている。それを大きく削減する方法として、固定格子間隔アプローチを提案した。また、固定格子間隔アプローチで状態方程式を計算するために、状態方程式の新しい非摂動的評価法 T-integral 法を開発した。従来の非摂動的評価法 integral 法は固定格子間隔では用いることは出来ないが、ある熱力学関係式を元に、状態方程式(圧力)をトレースアノマリーの温度積分としてあらわすと、固定格子間隔でも状態方程式の計算が可能になる。このアイデアをまずクエンチ近似 QCD の場合でテストして、従来の方法で求めた状態方程式の結果と遜色の無い結果を再現した(論文 31,34)。

現在、CP-PACS+JLQCD グループによる $N_f=2+1$ QCD の温度ゼロでの研究結果と公開されているゼロ温度ゲージ配位を利用して、固定格子間隔アプローチに基づく $N_f=2+1$ QCD の有限温度配位生成を進めている。これまでに得られた状態方程式に関する成果の一部を国際会議等で発表した。

(14) 重いクォーク間の自由エネルギーと遮蔽質量の研究

固定格子間隔アプローチで生成された $N_f=2+1$ QCD の有限温度ゲージ配位上で、重いクォーク間の自由エネルギーを研究した。固定格子間隔方法の大きな利点として、純粋に系の温度だけを変化させた研究が可能である。自由エネルギーの研究においても、くりこみの不定性無しに、温度依存性を調べる事が出来る。図3の左図に、高温相における自由エネルギーの結果を示す。極めて高温でも、十分短距離にすれば、グレー

破線で示された温度ゼロでの重いクォーク間ポテンシャルに一致することが見て取れる。これは、温度効果は長距離のもので、十分短距離では高温相でも温度効果が無いという、理論的予想と一致しているが、従来の研究では、自由エネルギーの原点が温度毎に異なるくりこみを受けるために、この理論的予想を使って、短距離で一致するように手で調整されていた。固定格子間隔アプローチでは、くりこみが温度に依らないためにそうした調整は不要であり、理論的予想を初めて確認することに成功した。また、長距離では、クォークの閉じ込めがやぶれて、自由エネルギーが一定値になる様子も確認される。図4の右図に、デバイ遮蔽質量の温度、及びフレーバー数依存性を示す。 $N_f=0$ の結果と比べると、 $N_f=2$ および $2+1$ の結果は有意に大きく、軽いクォークが大きな影響を持っていることが示された(論文 33,35)。

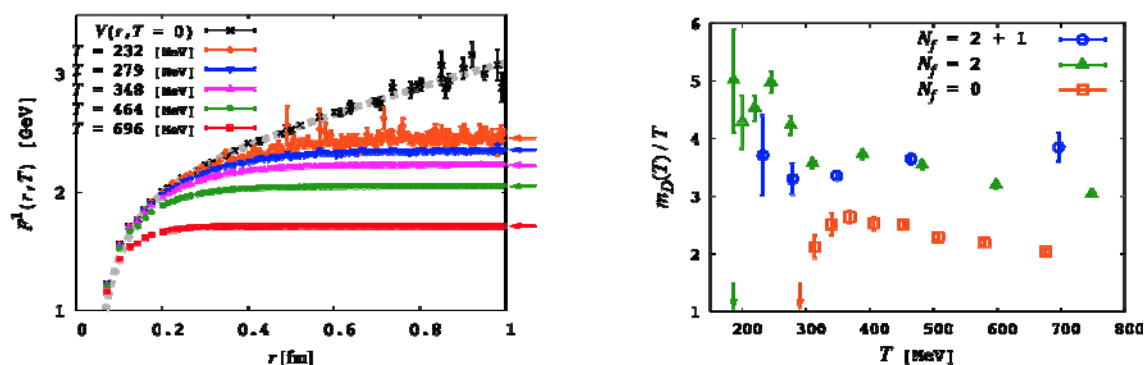


図3: 固定格子間隔アプローチによる高温相における重いクォーク間の自由エネルギーの研究。左図: ポリアコフ ライン相関関数から求めた重いクォーク間の自由エネルギーの温度依存性。グレーの破線は CP-PACS-JLQCD による温度ゼロの場合のクォーク間ポテンシャルの結果。左端の矢印は、ポリアコフ ライン 1本の真空期待値から計算した、完全に分離した重いクォークの自由エネルギーを2倍したもの。右図: ポリアコフ ライン相関関数から求めたデバイ遮蔽質量の温度、及びフレーバー数依存性。右図下の矢印は $N_f=2$ 及び 0 の場合の相転移温度を表す。

前項の研究では、ゲージをクーロン ゲージに固定して、自由エネルギーやデバイ遮蔽質量を計算している。クーロン ゲージはクォークの物理描像を取り出す上で有用なゲージとして他グループの研究でも広く用いられており、同じゲージを用いた現象論的研究に有用な非摂動論的情報を提供しているが、最終的な現象はゲージの取り方には依らないので、ゲージに依存した物理量は直接の観測可能量ではない。この問題に対処するために、ゲージ不変な遮蔽質量の計算方法を開発した。ゲージ不変なポリアコフ ラインを時間反転と荷電反転とでそれぞれ偶部分と奇部分に分類し、それらの相関関数を調べることで、電氣的遮蔽と磁氣的遮蔽をゲージ不変に分離した。これらの相関関数の長距離での遮蔽を調べることで、電氣的遮蔽質量と磁氣的遮蔽質量を計算した。そして、電氣的遮蔽質量と磁氣的遮蔽質量の比(スクリーニング比)が有効模型や超対称模型と同様な振る舞いをしていることがわかった(論文 37)。

(15) クォーク・グルオン・プラズマ相におけるチャーモニウム消失の研究

チャームクォークと反チャームクォークの束縛状態であるチャーモニウム(特に J/ψ , χ_c , ψ' 状態など)がクォーク・グルーオン・プラズマ(QGP)相中で消失する温度や特性を格子 QCD で研究した。我々は、対角化の方法を用いて基底状態と励起状態に対する有効質量及び波動関数を計算し、有効質量の空間方向境界条件依存性及び波動関数の空間分布を調べることでチャーモニウムの消失の有無を確かめた。シミュレーションは $O(a)$ 改良されたウィルソンクォーク作用とプラケットゲージ作用を使用し、クエンチ近似を用いて行った。その結果、少なくとも臨界温度の 2.3 倍の温度まで 1S、2S、1P、2P 状態のチャーモニウムが消失することは確認できなかった(論文 32)。

(16) QGP 有限温度相転移の次数に関する研究

QGP 有限温度・有限密度相転移の次数を判定する有効な手法の研究を行った。QGP 有限温度相転移の次数を判定する方法として、観測量のヒストグラムを用いる方法があるが、測定が容易なプラケットのヒストグラムに reweighting 法を組み合わせる研究方法が近年提案された。クォーク質量が非常に大きい領域でのシミュレーションを行い、この領域での QGP 有限温度相転移の次数について調べた。過去の研究からこの領域での相転移の概要は分かっているため、これと今回の結果を比較した。この比較から、この新しい方法が上手く機能していることを確かめた。この方法を用いることで臨界点をこれまでより容易に特定することができ、この方法が従来の方法に比べ優れていることがわかった。国際会議などで発表を行い、現在論文を準備中である。

【3】 ILDG・JLDG の構築(宇川, 吉江, 浮田)

格子 QCD シミュレーションの基礎データである配位を国際規模で共有する International Lattice Data Grid プロジェクトに参画し、システムの改良に携さると共に、定例のワークショップ(テレビ会議)を2回ホストした。また、国内の格子 QCD 研究者のデータグリッド Japan Lattice Data Grid の改良に携わった。

【4】 格子 QCD によるバリオン間力の研究(青木 HAL QCD Collaboration)

2つの核子の間に働く力、核力は、中遠距離では引力、近距離では強い斥力になることが実験的に知られているが、この核力の性質、特に近距離での斥力(斥力芯と呼ばれている)を理論的に導くことは、素粒子原子核物理に残された大問題の1つである。

青木、石井らは、東京大学の初田との共同研究で、二核子系の波動関数から核子間のポテンシャルを導き出すという方法を用いて格子 QCD により計算したが、その方法のまとめの論文 14 を発表した。また、青木はポテンシャルの近距離での振舞を解析的手法で研究した(論文 16, 22)。

また、青木と学生の村野らは、ポテンシャルのエネルギー依存性及び、角運動量 L の依存性を調べ、これらのポテンシャルは少なくとも、 $E=0\sim 45$ MeV、 $L=0\sim 2$ において利用可能であることを示した(論文 28)。

青木と研究員の井上らは、格子 QCD を用いてフレーバーSU(3)対称極限な世界におけるバリオン間相互作用を調べた。彼らは S 波状態に注目し、最近に開発された方法を用いて、必要十分な6つのポテンシャルを導出した。結果を用い、相互作用のフレーバー依存性、特に短距離における違いとその起源を議論した。特筆すべき点は、フレーバー1重項チャンネルが他と異なり短距離で引力である事を示した点、ダイバリオン状態が存在する可能性がある事を示した点である。

近年、原子核や中性子星などの諸性質を理解する上で、三体力の果たす役割の重要性が指摘されている。青木と研究員の土井らは、格子 QCD による三体力の決定を目指し、今年度は三体系内での有効二体相互作用に着目した計算を行った。PACS-CS Collaboration によって生成されたパイオン質量が 700MeV に対応する 2+1 フレーバーゲージ配位を使って三重水素原子核中の有効二体相互作用計算された。三体系でも有効相互作用が精度良く決定できることを実証している。このゲージ配位では、三体系の効果は誤差の範囲内でゼロコンシステントとなった。

4. 研究業績

(1) 研究論文

1. Physical point simulation in 2+1 flavor lattice QCD: PACS-CS Collaboration: S. Aoki, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, T. Izubuchi, D. Kadoh, K. Kanaya, Y. Kuramashi, Y. Namekawa, M. Okawa, Y. Taniguchi, A. Ukawa, N. Ukita, T. Yamazaki, T. Yoshie, *Phys. Rev. D* **81** (2010) 074503.
2. SU(2) and SU(3) chiral perturbation theory analyses on baryon masses in 2+1 flavor lattice QCD: PACS-CS Collaboration: K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, T. Izubuchi, D. Kadoh, K. Kanaya, Y. Kuramashi, Y. Namekawa, M. Okawa, Y. Taniguchi, A. Ukawa, N. Ukita, T. Yoshie, *Phys. Rev. D* **80** (2009) 054502.
3. Helium Nuclei in Quenched Lattice QCD: PACS-CS Collaboration: T. Yamazaki, Y. Kuramashi, A. Ukawa, *Phys. Rev. D* **81** (2010) 111504.
4. Precise determination of the strong coupling constant in $N_f=2+1$ lattice QCD with the Schroedinger functional scheme: PACS-CS Collaboration: S. Aoki, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, T. Izubuchi, D. Kadoh, K. Kanaya, Y. Kuramashi, K. Murano, Y. Namekawa, M. Okawa, Y. Taniguchi, A. Ukawa, N. Ukita, T. Yoshie, *JHEP* **10** (2009) 053.
5. Application of preconditioned block BiCGGR to the Wilson-Dirac equation with multiple right-hand sides in lattice QCD: H. Tadano, Y. Kuramashi, T. Sakurai, *Comput. Phys. Commun.* (in press).

6. Application of block Krylov subspace algorithms to the Wilson-Dirac equation with multiple right-hand sides in lattice QCD: T. Sakurai, H. Tadano, Y. Kuramashi, *Comput. Phys. Commun.* **181** (2010) 113.
7. Block BiCGGR: a new block Krylov subspace method for computing high accuracy solutions: H. Tadano, T. Sakurai, Y. Kuramashi, *JSIAM Lett.* **1** (2009) 44.
8. Physical point simulations in 2+1 flavor lattice QCD: Y. Kuramashi for PACS-CS Collaboration, *PoS(LATTICE 2009)* 110.
9. Determination of the running coupling constant α_s for $N_f=2+1$ QCD with the Schroedinger functional scheme: Y. Taniguchi for PACS-CS Collaboration, *PoS(LATTICE 2009)* 208.
10. Heavy-light mesons in 2+1 flavor lattice QCD: Y. Namekawa for PACS-CS Collaboration, *PoS(LATTICE 2009)* 111.
11. Vector and Axial Currents in Wilson Chiral Perturbation Theory: S. Aoki, O. Baer, S. Sharpe, *Phys. Rev. D* **80** (2009) 014506.
12. Pion form factors from two-flavor lattice QCD with exact chiral symmetry: S. Aoki, T. W. Chiu, H. Fukaya, S. Hashimoto, T. H. Hsieh, T. Kaneko, H. Matsufuru, J. Noaki, T. Onogi, E. Shintani, N. Yamada (JLQCD, TWQCD collaborations), *Phys. Rev. D* **80** (2009) 034508.
13. Chiral perturbation theory in a theta vacuum: S. Aoki and H. Fukaya, *Phys. Rev. D* **81** (2010) 034022.
14. Theoretical Foundation of the Nuclear Force in QCD and its applications to Central and Tensor Forces in Quenched Lattice QCD: S. Aoki, T. Hatsuda, N. Ishii, *Prog. Theor. Phys.* **123** (2010) 89.
15. Determination of the chiral condensate from 2+1-flavor lattice QCD Simulations: H. Fukaya, S. Aoki, S. Hashimoto, T. Kaneko, J. Noaki, T. Onogi, N. Yamada (LQCD collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **104** (2010) 122002.
16. Application of the operator product expansion to the short distance behavior of nuclear potentials: Sinya Aoki, Janos Balog, Peter Weisz, *JHEP* **05** (2010) 008.
17. Lattice QCD: S. Aoki, *Nucl. Phys. A* **827** (2009) 145c.
18. From Quarks to Nuclei: Challenges of Lattice QCD: S. Aoki, *Nucl. Phys. B(Proc. Suppl.)* **195** (2009) 281.
19. The vector and axial currents in Wilson chiral perturbation theory: S. Aoki, O. Baer, S. R. Sharpe, *PoS(LATTICE 2009)* 084.

20. Nucleon sigma term and strange quark content in 2+1-flavor QCD with dynamical overlap fermions: H. Ohki, S. Aoki, H. Fukaya, S. Hashimoto, T. Kaneko, H. Matsufuru, J. Noaki, T. Onogi, E. Shintani, N. Yamada, *PoS(LATTICE 2009)* 124.
21. Pion physics on the lattice: . Aoki, *PoS(CD09)* 070.
22. The repulsive core of the NN potential and the operator product expansion: S. AOKI, J. Balog and P. Weisz, *PoS(LATTICE 2009)* 132.
23. Flavor-singlet mesons in $N_f=2+1$ QCD with dynamical overlap quarks: T. Kaneko, S. Aoki, T.W. Chiu, H. Fukaya, S. Hashimoto, T.H. Hsieh, J. Noaki, E. Shintani and N. Yamada, *PoS(LATTICE 2009)* 107.
24. Calculation of nucleon strange quark content with dynamical overlap quarks: K. Takeda, S. Aoki, S. Hashimoto, T. Kaneko, T. Onogi, N. Yamada (JLQCD collaboration), *PoS(LATTICE 2009)* 141.
25. Chiral properties of light mesons with $N_f=2+1$ overlap fermions: J. Noaki, S. Aoki, T.W. Chiu, H. Fukaya, S. Hashimoto, T. H.Hsieh, T. Kaneko, H. Matsufuru, T. Onogi, E. Shintani, N. Yamada (JLQCD, TWQCD Collaborations), *PoS(LATTICE 2009)* 096.
26. π^0 to two-photon decay in lattice QCD: E. Shintani, S. Aoki, S. Hashimoto, T. Onogi, N. Yamada (for JLQCD Collaboration), *PoS(LATTICE 2009)* 246.
27. Determination of α_s in 2+1-flavor QCD through vacuum polarizationfunction: E. Shintani, S. Aoki, H. Fukaya, S. Hashimoto, T. Onogi, N. Yamada (for JLQCD Collaboration), *PoS(LATTICE 2009)* 207.
28. Energy dependence of nucleon-nucleon potentials in lattice QCD: K. Murano, N. Ishii, S. Aoki, T. Hatsuda, *PoS(LATTICE 2009)* 126.
29. S-wave π K scattering length from lattice QCD: K. Sasaki, N. Ishizuka, T. Yamazaki, M. Oka (PACS-CS Collaboration), *PoS(LATTICE 2009)* 098.
30. Derivation of Luescher's finite size formula for N π and NN system: N. Ishizuka, *PoS(LATTICE 2009)* 119.
31. Fixed Scale Approach to Equation of State in Lattice QCD: T. Umeda, S. Ejiri, S. Aoki, T. Hatsuda, K. Kanaya, Y. Maezawa, H. Ohno (WHOT-QCD Collaboration), *Phys. Rev. D* 79, (2009) 051501(R).
32. Search for the Charmonia Dissociation in Lattice QCD: H. Ohno, T. Umeda, and K. Kanaya (WHOT-QCD Collaboration), *Nucl. Part. Phys.* 36 (2009) 064027.

33. Free energies of heavy quarks in full-QCD lattice simulations with Wilson-type quark action: Y. Maezawa, S. Aoki, S. Ejiri, T. Hatsuda, N. Ishii, K. Kanaya, H. Ohno, T. Umeda (WHOT-QCD Collaboration), *Nucl. Phys. A* 830 (2009) 247c.
34. Fixed scale approach to the equation of state on the lattice: K. Kanaya, T. Umeda, S. Aoki, S. Ejiri, T. Hatsuda, N. Ishii, Y. Maezawa, H. Ohno (WHOT-QCD Collaboration), *Nucl. Phys. A* 830 (2009) 801c.
35. Heavy-quark free energy at finite temperature with 2+1 flavors of improved Wilson quarks in fixed scale approach: Y. Maezawa, S. Aoki, S. Ejiri, T. Hatsuda, K. Kanaya, H. Ohno and T. Umeda (WHOT-QCD Collaboration), *PoS(LATTICE 2009)* 165.
36. Towards the equation of state in 2+1 flavor QCD with improved Wilson quarks in the fixed scale approach: K. Kanaya, S. Aoki, H. Ohno, T. Umeda, S. Ejiri, T. Hatsuda, N. Ishii, Y. Maezawa (WHOT-QCD Collaboration), *PoS(LATTICE 2009)* 190.
37. Electric and Magnetic Screening Masses at Finite Temperature from Generalized Polyakov-Line Correlations in Two-flavor Lattice QCD: Y. Maezawa, S. Aoki, S. Ejiri, T. Hatsuda, N. Ishii, K. Kanaya, N. Ukita and T. Umeda (WHOT-QCD Collaboration), *Phys. Rev. D* 81 (2010) 091501.

(2)学会発表

(A)招待講演

1. Charmed mesons in lattice QCD: Y. Namekawa, KEK workshop on HEAVY QUARK PHYSICS IN QCD, (Tsukuba, Japan, Sep. 7-8, 2009).
2. Baryon interaction from Lattice QCD: S. Aoki, The miniworkshop ``Light Quark Masses and Hadron Physics (From quarks to life)`` (Universidad Complutense de Madrid, Spain, 2-5 June, 2009).
3. Pion Physics on the lattice: S. Aoki, Sixth International Workshop on Chiral Dynamics, (University of Bern, Switzerland, July 6-10, 2009).
4. Nuclear Forces from Lattice QCD: S. Aoki, KITPC Program ``Lattice Quantum Chromodynamics``, (KITPC@CAS, Beijing, China, July 6-25, 2009).
5. Baryon-Baryon-Interaction from Lattice QCD: S. Aoki, The 5-th International Conference on Quark and Nuclear Physics, (Beijing, September 21-26, 2009).
6. Baryon Interactions from Lattice QCD: S. Aoki, The 7-th Japan-China Joint Nuclear Physics Symposium, (University of Tsukuba, Tsukuba, Japan, November 9-13, 2009).

7. The repulsive core of the nucleon-nucleon potentials and the operator product expansion: S. Aoki, 2009 Taipei Workshop on Lattice QCD (National Taiwan University, Taiwan, Dec. 13-15, 2009).
8. A challenge in lattice QCD: S. Aoki, Conference on Computational Physics 2009, (Kaohsiung, Taiwan, December 15-19, 2009).
9. Computing Facilities in Japan: S. Aoki, The First ANPhA Symposium, (J-PARC, Tokai, Japan, Jan. 18-19, 2010).
10. QCD thermodynamics at zero and finite densities with improved Wilson quarks: K. Kanaya, YITP international workshop on "New Frontiers in QCD 2010 -Exotic Hadron Systems and Dense Matter-" (NFQCD2010) (YITP, Kyoto Univ., Kyoto, Japan, Mar.8-19, 2010).
11. International Lattice Data Grid: Y. Yoshie, HackLat2009 (NeSC, Edinburgh, May 06-07, 2009).
12. Nucleon structure functions from $N_f=2+1$ dynamical domain wall fermions: T. Yamazaki, The 7th Circum-Pan-Pacific Symposium on High Energy Spin Physics (Yamagata, Japan, Sep. 15-18, 2009).
13. 物理的クォーク質量における $2+1$ フレーバー格子 QCD: 蔵増 嘉伸、日本物理学会秋季大会(甲南大学、神戸、2008年9月10-13日)。
14. 重いフレーバーを含んだ領域での格子 QCD によるスペクトロスコピー: 滑川 裕介、新学術領域「新ハドロン」研究会(名古屋大学、名古屋、2009年11月27-28日)。
15. PACS-CS results for heavy quark physics in $N_f=2+1$ lattice QCD: 滑川 裕介、理研・格子 QCD 研究会(理化学研究所、和光、2009年12月22日)。
16. 格子 QCD データグリッド ILDG/JLDG: 吉江 友照、平成 21 年度 ITBL シンポジウム(海洋研究開発機構 横浜研究所、横浜、2009年5月29日)。
17. Hadron scattering from lattice QCD: 山崎 剛、新学術領域研究「素核宇宙融合による計算科学に基づいた重層的物质構造の解明」A01 班「量子色力学にもとづく真空構造とクォーク力学」第一回 A01 班研究会(大阪大学、大阪、2009年9月14日)。
18. Calculation of Helium nuclei in quenched lattice QCD: 山崎 剛、理研・格子 QCD 研究会(理化学研究所、埼玉、2009年12月22日)。
19. 格子 QCD を用いた $\Delta I = 3/2$ K 中間子崩壊行列要素の直接的計算(若手奨励賞記念講演): 山崎 剛、日本物理学会年會(岡山大学、岡山、2010年3月20-23日)

(B)その他の学会発表

1. Physical Point Simulations in 2+1 Flavor Lattice QCD: Y. Kuramashi, The XXVII International Symposium on Lattice Field Theory (Peking, China, July 25-31, 2009).
2. Determination of running coupling α_s for $N_f=2+1$ QCD with Schroedinger functional scheme: Y. Taniguchi, The XXVII International Symposium on Lattice Field Theory (Peking, China, July 25-31, 2009).
3. Nucleon axial charge in 2+1 flavor lattice QCD with $O(a)$ improved Wilson quark action: N. Ukita, The XXVII International Symposium on Lattice Field Theory (Peking, China, July 25-31, 2009).
4. Heavy-light mesons in 2+1 flavor lattice QCD: Y. Namekawa, The XXVII International Symposium on Lattice Field Theory (Peking, China, July 25-31, 2009).
5. Non-perturbative renormalization of $N_f=2+1$ QCD with Schroedinger functional scheme: Y. Taniguchi, 2009 Taipei Workshop on Lattice QCD (National Taiwan University, Taiwan, Dec. 13-15, 2009).
6. Repulsive core of the NN potential and operator product expansion: S. Aoki, The XXVII International Symposium on Lattice Field Theory (Peking, China, July 25-31, 2009).
7. Derivation of Luescher's finite size formula for N_π and NN system: N. Ishizuka, The XXVII International Symposium on Lattice Field Theory (Peking, China, July 25-31, 2009).
8. Fixed scale approach to the equation of state on the lattice: K. Kanaya, The 21st International Conference on Ultrarelativistic Nucleus-Nucleus Collisions (Quark Matter 2009) (Knoxville, TN, USA, Mar.30-Apr.4, 2009).
9. Towards the equation of state in 2+1 flavor QCD with improved Wilson quarks in the fixed scale approach: K. Kanaya, The XXVII International Symposium on Lattice Field Theory (Peking, China, July 25-31, 2009).
10. Site Report on Physics Plan from Japan: Y. Kuramashi, ILDG14 (TV workshop hosted by CCS, Tsukuba, June.05, 2009).
11. Site Report on Physics Plan from Japan: N. Ukita, ILDG15 (TV workshop hosted by CCS, Tsukuba, Dec.04, 2009).
12. Metadata Working Group report: T. Yoshie, ILDG15 (TV workshop hosted by CCS, Tsukuba, Dec.04, 2009).
13. $N_f=2+1$ 格子 QCD による重-軽中間子スペクトル及び崩壊定数: 滑川 裕介、日本物理学会秋季大会(甲南大学、神戸、2008年9月10-13日).

14. クローバーフェルミオンを用いた $N_f=2+1$ 格子 QCD での核子の軸性ベクトル結合定数: 浮田 尚哉、日本物理学会秋季大会(甲南大学、神戸、2008年9月10-13日).
15. 核子-中間子、核子-核子散乱位相の格子 QCD 計算のための有限体積公式の導出: 石塚 成人、日本物理学会秋季大会(甲南大学、神戸、2008年9月10-13日).
16. QCD at finite temperatures and densities on the lattice with improved Wilson quarks: 金谷 和至、KEK 理論研究会 2010 (高エネルギー加速器研究機構, 茨城, Mar.11-12, 2010).
17. Hepnet-J/sc 報告: 吉江 友照、Hepnet-J ユーザー会(KEK、つくば、2009年10月2-3日).

5. シンポジウムの開催

1. 青木 慎也 他、研究会「バリオン間相互作用に基づく核物質の構造」(つなぎ温泉、ホテル紫苑、盛岡、2009年6月25日-27日)、参加者 約40名.
2. 青木 慎也 他、次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」科研費新学術領域研究「素核宇宙融合による計算科学に基づいた重層的物質構造の解明」合同シンポジウム「次世代スーパーコンピュータでせまる物質と宇宙の起源と構造」(東京ステーションコンファレンス 605 A+B+C、東京 2010年3月15日、東京大学 理学部一号館 小柴ホール、東京、2010年3月16日)、参加者 約100名.

特記事項

次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」の活動を計算基礎科学連携拠点(筑波大学計算科学研究センター、KEK、国立天文台)が中心となって開始した。

6. 受賞

山崎 剛、日本物理学会 第四回若手奨励賞(素粒子論領域)「格子 QCD 数値計算による K 中間子崩壊過程の解析」、2010年3月.

1.2. 宇宙分野

1. メンバ

教授 梅村 雅之

准教授 森 正夫

講師 吉川 耕司

助教 岡本 崇(科研費基盤S)

助教 川勝 望(理数学生応援プロジェクト)

研究員 長谷川 賢二(科研費基盤S), 谷川 衡(計算科学研究センター)

川口 俊宏(科研費基盤A)

2. 概要

本年度、当グループスタッフは、FIRST プロジェクトを推し進めると共に、これを用いた大質量ブラックホール多体系におけるブラックホールの合体成長、高赤方偏移銀河における電離光子脱出確率の質量依存性、TREE 構造を用いた高速 Radiation Smoothed Particle Hydrodynamics 法の開発、三次元輻射輸送から探る相対論的ジェット構造、衝突銀河団における重元素の電離状態と電子・イオン温度の研究を行った。また、銀河進化標準モデルの構築を目的として、FIRST, T2K-Tsukuba を用いて、ライマンアルファエミッタとライマンブレイク銀河の理論進化モデルの構築、宇宙再電離と銀河形成・進化、ライマンアルファエミッタとサブミリ銀河との関係、銀河衝突とダークマターハローの構造、銀河衝突と銀河中心の巨大ブラックホールの活動性、ダークマターハローの力学構造の安定性解析、コールドダークマターハロー中の銀河風の定常解、超新星爆発と銀河進化、降着円盤の輻射磁気流体力学モデル、恒星進化と質量放出過程の研究を行った。さらに、宇宙論・銀河形成分野で、Baryon Acoustic Oscillation の非線形成長、衛星銀河問題の解決、合体銀河における爆発的星形成の研究を行った。

3. 研究成果

【1】FIRST プロジェクト

(1) 概要

文部科学省科学研究費補助金 基盤研究(S)「第一世代天体から原始銀河に至る宇宙暗黒時代の解明」(平成20年度～平成24年度, 代表 梅村雅之)に基づき, 宇宙第一世代天体および原始銀河形成に関する大規模なシミュレーションを実行するプロジェクト(FIRST プロジェクト)を推進した。

(17) 宇宙シミュレータ FIRST

宇宙第一世代天体の形成過程について大規模な輻射流体力学シミュレーションを行うためには, 物質と光の作用および重力相互作用を極めて高速に計算する必要がある。目的とするシミュレーションのためには, 物質・光の計算性能が数 Tflops, 重力計算性能が数 10 Tflops の計算機を必要とする。我々は, これを実現するために, PC クラスタに新規開発したサーバ組み込み型の**重力計算専用ボード Blade-GRAPE**を埋め込んだ **宇宙シミュレータ FIRST** を完成させた。

FIRST は, 256 の計算ノード, 2 つの管理ノード, 2 つのファイルサーバ, および Gfarm ファイルシステムからなる。計算ノードのうち, 16 ノードは 32 ビット型 Blade-GRAPE を有し, 224 ノードは 64 ビット型 Blade-GRAPE X64 を有する。ファイルサーバは 2 台で合計 4.5TB の容量をもつ。Gfarm ファイルシステムは, ネットワーク共有ファイルシステムであり, 分散したローカルディスクから一つの共有ファイルシステムをつくる機構である。これにより, 総計 22TB の共有ファイルシステムが構築されている。FIRST の総演算性能は, 36.1TFLOPS であり, 内ホスト部分 3.1TFLOPS, Blade-GRAPE 部分 33TFLOPS である。また, 主記憶容量は総計 1.6TB である。

(18) 大質量ブラックホール多体系におけるブラックホールの合体成長

多くの銀河中心には 10^6 から 10^9 太陽質量の大質量ブラックホール(SMBH)が存在する。銀河はより小さな銀河同士の衝突合体によって形成されたため, その中にあるブラックホールも合体成長した可能性がある。それらのブラックホールの合体成長過程は明らかになっていない。

SMBH 同士が合体するにはそれぞれの軌道角運動量を抜く必要がある。2つの SMBH だけで合体することは難しい。SMBH の軌道角運動量を抜く機構の1つは銀河の星による力学的摩擦であるが, 2つの SMBH 間距離が収縮すると, SMBH の間を通る星がなくなるため力学的摩擦が効かなくなり, SMBH 間距離の収縮が止まるからである(Begelman et al.1980; Makino, Funato 2004)。もう1つ SMBH が銀河内に存在すると, その SMBH が2つの SMBH の軌道角運動量を持ち去るため, 2つの SMBH は合体できる(Iwasawa et al.2006)。より多くの SMBH が銀河内に存在する場合, いくつかの SMBH は合体することが予想される。しかし, 合体過程が落ち着いた後の SMBH の質量関数は自明ではない。

我々は1つの銀河の中に 10 個の等質量の SMBH が存在する場合に, SMBH の合体を通して, SMBH の質量分布がどのように進化するかを N 体シミュレーションによって調べた。その結果, 5つの SMBH が合体して1つになった。一方, 残りの SMBH は一度も合体を経験しなかった。合体に寄与した SMBH の軌道角運動量を奪う機構は, それらが銀河中心にないときは銀河の星からの力学的摩擦であり, 銀河中心にあるときは SMBH 同士の三体相互作用である。1つの SMBH だけが合体成長するのは, 質量の大きい SMBH 程, 銀河の星から

の力学的摩擦や SMBH の三体相互作用を通して軌道角運動量を奪われやすいからである。この結果は、SMBH の成長過程の1つに SMBH 多体系があった可能性を示唆する。

(19) 高赤方偏移銀河における電離光子脱出確率の質量依存性

高赤方偏移の星形成銀河から放射される電離光子は、紫外線背景放射強度を決め宇宙暗黒時代における銀河間ガスの電離史を大きく左右する。この電離光子放射率を決める上で重要なのが銀河内で生まれた全電離光子数の内、銀河の外へ脱出する電離光子数の割合を示す電離光子脱出確率である。我々はこれまで Mori & Umemura (2006) の高精度流体計算による銀河進化のシミュレーション結果に対して3次元輻射輸送計算を行い、超新星爆発が活発的に起きている銀河が非常に高い電離光子脱出確率を持つことを示した (Yajima et al. 2009)。

我々はさらに、SPH 法による宇宙論的流体計算の結果から得られるさまざまな質量の銀河に対して輻射輸送計算を行い、電離光子脱出確率の質量依存性を調べた。結果として電離光子脱出確率は、質量に対して非常に強い依存性を持っており銀河の質量が小さくなるにつれ脱出確率は非常に大きくなることが分かった。これは質量が大きくなるにつれ銀河内のガスの構造はサブハローの集合、合体を繰り返しているため非常に clumpy な構造になっており、そのため電離光子は生成された高密度領域を脱出しても他の高密度ガス領域にトラップされてしまうためである。これらの結果により宇宙暗黒時代では、低質量の星形成銀河が宇宙再電離の電離源として有力であることが示唆された。

(20) TREE 構造を用いた高速 Radiation Smoothed Particle Hydrodynamics 法(START)の開発

輻射は物質との相互作用を通じて、ガスの化学進化や力学進化に影響を与える。このような過程を矛盾無く解く為には、輻射輸送計算と流体力学計算をカップルさせた輻射流体計算が必要となる。そのような輻射流体計算法の一つに Radiation Smoothed Particle Hydrodynamics(RSPH)法というものがある(Susa 2006)。この手法では、放射源一つにつきおおよそ $O(N)$ (N は SPH 粒子数) の計算量で輻射輸送計算が可能となる。我々は、この計算法を用いて種族 III 星からの紫外線フィードバックに関する研究を行ってきた(Hasegawa, Umemura and Susa 2009 など)。この RSPH 法を含め多くの輻射輸送計算では輻射性再結合による放射はすぐその場で吸収されるという近似(On the spot 近似)を用い、実際にはそれらの光子の輻射輸送計算を行っていない。これは、再結合光子の輻射輸送を計算する事はすべての粒子を放射源として扱う事と同等であり、計算量が $O(N \times N)$ と膨大となり、実現が非常に困難となる為である。また同様の理由により、星などの放射源の数が多数の場合にも計算を実行することが困難となってしまう。そこで、我々は重力多体計算でよく用いられる TREE 法の概念を適用する事により、高速化された新たな RSPH 法を開発した。この手法では、放射源の数を N_s とした場合、1 ステップ当たり $N \log(N_s)$ のオーダーの計算量で輻射流体計算をする事が可能となる。これにより、これまで非常に困難であった散乱光を考慮した輻射流体計算や多数の星からの輻射性フィードバックを同時に取り扱った計算を可能とした。この手法を用いて、光電離に対する散乱光の役割を解析した結果、吸収体の大きさが電離光子の平均自由行程と同程度になる場合、On the spot 近似が適当でないことを明らかにした。

(21) 三次元輻射輸送から探る相対論的ジェットの構造

活動銀河核やマイクロクエーサーでは、相対論的速度($\sim 0.999c$)で加速するジェットが見つっているが、ジェットの収束、加速メカニズムはまだ解明されていない。最も有力視されている磁氣的加速モデルでも、 $0.5c$ を超えるジェットの速度は完全には説明できていない。一方、ジェット天体の中には、エディントン光度を超える非常に明るい天体が見つっているため、輻射力によるジェットの収束、加速の可能性が考えられる。近年、輻射力と磁気力の両方の効果を取り入れた輻射磁気流体の研究が注目され始めている。しかし、これまでの計算では、輻射輸送を近似的に取り扱っているため、輻射フラックスや輻射ストレステンソルを正しく求めることができず、輻射力を正確に評価できない。例えば、Ohsuga et al.(2009)の2次元輻射磁気流体計算では、光束制限拡散(FLD)近似を用いているが、光学的に薄い($\tau < 1$)場所では輻射場が正しく求まっている保証がない。本研究では、Ohsuga et al.(2009)の計算結果を用いて、三次元輻射輸送計算を行い、FLD 近似の妥当性を検証した。また、FLD 近似では正確に求められない輻射ストレステンソルや輻射フラックス等を計算し、円盤からの輻射が、どの程度ジェットの収束、加速に影響を与えるかを調べた。

(22) 衝突銀河団における重元素の電離状態と電子・イオン温度の研究

銀河団の銀河は銀河団が銀河や銀河群の度重なる衝突合体で成長するときに力学的・熱的影響を強く受け形成・形態進化を遂げ、その過程で銀河団ガスに重元素を供給してきた。重元素の量と分布はこれらの形成進化をひもとく鍵であり、それは数千万度の温度にある銀河団ガスから放射されるX線を分光し、輝線を調べることで分かる。これまでに多くの銀河団で重元素の組成や量、空間分布がX線観測の研究によって調べられてきた。これらの研究においては重元素は衝突電離平衡にあり電子・イオンは温度平衡にあると仮定されるが、これは銀河団中心部ではこれらの平衡状態に達する時間スケールが十分短いと考えられるだけガスの密度が高いからである。しかしながら、ビリアル半径にせまる希薄な周縁領域や衝突加熱領域では平衡状態に達していない可能性を我々は注目している。もしそうであれば、平衡を仮定した解析結果は誤った重元素量を推定しかねない。そこで我々はFIRSTシミュレータを用いて鉄などの主要な重元素の衝突電離平衡と電子・イオンの温度平衡を仮定せず時間進化を解くダークマターとガスを含めた様々な衝突条件下(質量比・インパクトパラメータ)での衝突銀河団の3次元数値実験を世界で初めて行った。その結果、銀河団外縁部と銀河団中心部でそれぞれ特徴的な衝撃波が非平衡電離状態・2温度状態を伴って形成されることが分かった。更に、観測時の衝撃波面に対する角度によって非平衡電離状態や2温度状態の観測可能性が大きく変わることもわかった。実際の衝突銀河団における物理状態は、将来のX線観測衛星でその詳細が明らかになることが期待される。

【2】銀河進化標準モデルの構築

(1) 概要

飛躍的な観測技術や検出装置の進歩により、それまでは全く知り得なかった宇宙の深遠部で、活発な星形成の兆候を示すライマンアルファエミッター、ライマンブレイク銀河、サブミリ銀河等、莫大な数の銀河が観測されている。しかしながら、そういった天体が、我々の住む現在の宇宙に存在し、ハッブル系列などで分類され研究

されてきた近傍銀河とどのように関連しあっているのか？これらは非常に基本的な問いかけにもかかわらず、明確な答えを我々はもっていない。文部科学省科学研究費補助金 基盤研究(A)「理論と観測の融合による銀河発生学の探究」(平成21年度～平成24年度, 代表 森正夫)に基づき、銀河の標準進化モデルを構築すべく銀河形成・進化の理論研究を推進している。

(23) ライマンアルファエミッタとライマンブレイク銀河の理論進化モデルの構築

本研究では、ライマンアルファエミッタやライマンブレイク銀河に代表される高赤方偏移で発見されている天体が、近傍宇宙のハッブル系列を構成する銀河の進化経路の一側面を見ているに過ぎないという仮説を掲げ、銀河の化学力学モデルを駆使して、銀河の発生について詳細な理論モデルを構築している。さまざまな質量のスケールで化学力学シミュレーションを行った結果、ライマンアルファエミッタとライマンブレイク銀河が原始銀河の進化系列であることを見出すことができた。またライマンアルファエミッタで放射されるライマンアルファエミッションの光度は、原始銀河の質量および星形成率と密接な相関があることを示した。さらにその放射の物理的な起源として従来から考えられてきたメカニズムに加えて、衝撃波で加熱されたガスの放射冷却に起因するものが大きな影響を及ぼすことが分かった。

(24) 宇宙再電離と銀河形成・進化

赤方偏移 $z \sim 1100$ で一度中性化を迎えた宇宙は、その後形成される天体からの紫外線光子によって再び電離状態へと引き戻され、現在まで高度に電離した状態を維持している事が分かっている。この宇宙再電離に関しては、近年のクエーサー観測や WMAP による観測によってその電離史に大まかな制限はつけられてきた。しかしながら、宇宙再電離を引き起こした電離源に関しては未だ理論的にも観測的にもまったく分かっていない。これら電離源や電離史の研究では、これまでいつも銀河の電離光子脱出確率の不明瞭さが解析を困難にしていた。この電離光子脱出確率は銀河内の星から放射される全電離光子数のうち銀河間空間へ脱出する割合で、これによって銀河の電離光子放射率、紫外線背景輻射強度は大きく左右される。我々は宇宙論的流体計算により計算された多数の星形成銀河に対して、3次元輻射輸送計算を行う事により、銀河内の電離構造、電離光子脱出確率を見積った。結果として、赤方偏移 $z=3-6$ においては星形成銀河により銀河間ガスを電離する事が可能である事が示された。さらに電離源解明の鍵を握る電離光子脱出確率についての質量依存性やそのメカニズム、電離源を担う銀河の典型的質量について議論した。

(25) ライマンアルファエミッタとサブミリ銀河との関係

近年、ライマンアルファエミッタやライマンブレイク銀河の観測研究の分野では、従来からの可視光波長のみならず X 線、サブミリ等の多波長観測が行われはじめている。我々は Mori & Umemura (2006)における銀河風によるライマンアルファエミッタの理論モデルが現実的であるか検証すべく、星間ダストによる紫外線の吸収を詳細に扱うことで、赤外線特性を調べた。その結果、銀河進化と共にダストの温度分布、赤外線分布、赤外線光度の時間的変化が分かった。この結果を用いて、ALMA 等に代表される将来の大型観測装置による高赤方偏移天体のサブミリ波観測に対する理論的な示唆を与えた。

(26) 銀河衝突とダークマターハローの構造

現在の標準的な宇宙構造形成論では、小質量銀河が衝突合体を繰返しながら成長し階層的に構造形成をおこなうことにより、現在の銀河の姿を構築したと考えられている。近傍銀河 M31 においても、アンドロメダストリームやシェルといった銀河衝突の痕跡が発見されており、ストリームの速度構造が詳細に観測・解析されている。一方、理論的には N 体シミュレーションを用いた研究により、観測されている空間構造を再現することに成功しているが、ストリームの速度構造についてはこれまで調べられてこなかった。そこで我々は、観測されている空間構造を再現できる計算結果を用いてストリームの速度構造を観測結果と比較し、多くの観測結果が説明できることを明らかにした。宇宙論的 N 体シミュレーションを用いた構造形成では、ダークマターハローの密度分布がハローの外縁部で半径の -3 乗となることが示唆されており、ダークマターハローの“ユニバーサルプロファイル”として知られている。このプロファイルが現実の銀河でも成り立っていることを検証するためには、星の運動を観測し、これを解析することでダークマターハローの作るポテンシャルを調べ、これと“ユニバーサルプロファイル”の作るポテンシャルを比較することが有力な手段となる。銀河衝突の痕跡は銀河外縁部においても明るく、痕跡を形成している星の運動を観測することが可能であるため、銀河外縁部でのダークマターハローのプロファイルを観測的に調べるために適している。M31 のアンドロメダストリームを用いればそのダークマターハローの外縁部の構造に迫ることができる。我々の N 体シミュレーションでは、M31 のダークマターハローのプロファイルとして半径の -3 乗という密度分布を仮定し、その結果観測されているストリームの速度構造をよく再現できた。これは、半径の -3 乗というダークマターハローの密度分布が実際の銀河でも成り立っていることを示唆する重要な結果である。

(27) 銀河衝突と銀河中心の巨大ブラックホールの活動性

これまでの研究では銀河衝突現象の解析を重力多体系として解析してきたが、今後は銀河衝突に対するガスやダストの力学的な応答を調べる必要がある。特に銀河衝突と銀河中心ブラックホールの活動性との物理的な関係は大変興味深い。銀河衝突過程によっては、ブラックホールの活動性を際立たせる場合とその活動性を著しく減衰させる効果が予想される。我々はそのような状況を正確に解析する為、N 体シミュレーションでは取り入れられないガスの効果を取り入れるための銀河衝突の流体モデルの構築に取り組み、HLLC 法を採用した 3 次元並列流体コードの開発を行った。

(28) ダークマターハローの力学構造の安定性解析

宇宙の構造形成のパラダイムとなっているコールドダークマター(CDM)シナリオは、N 体シミュレーションによるとダークマター(DM)ハロー中心部で質量密度が発散する(カスプ)構造を予言する。DM が力学的に主たる役割を果たし、カスプを持つことが期待される天体として矮小銀河が挙げられる。その観測結果によると、矮小銀河は中心部で密度は発散せず、一定となる(コア)ことが報告されている。この理論と観測の不一致はコア-カスプ問題として知られ、CDM シナリオの未解決問題の一つである。コア-カスプ問題を解決するモデルとして、“かつて矮小銀河で大量の超新星爆発によるバリオン(ガス)の放出が起こり、その結果の重力場変動によりカスプがコアへと遷移した”というものがある。本研究では、これまで無視されてきた質量放出の起こる時間スケール

ルに注目し、DM ハローの力学応答への依存性を調べた。その結果、他の条件が同じであっても、”放出時間が短いほどカスプはコアに遷移しやすい”事を明らかにした。特に放出時間が DM ハロー中心部の力学時間に比べ十分に長い場合について、DM ハローの力学応答を断熱不変量を用いて解析的にモデル化した。

(29) コールドダークマターハロー中の銀河風の定常解

銀河風は超音速で流れる宇宙流体の1つとして知られている。銀河の中心付近で超新星爆発などにより星間ガスにエネルギーが放出されると星間ガスは銀河の外側に向かって超音速で流出するが、常に超音速で流れる場合だけではなく亜音速から始まって連続的に加速して超音速となって流れる遷音速流も存在する可能性がある。しかし先行研究では遷音速解が見つかっていなかった。本研究ではコールドダークマターハロー中の銀河風の遷音速流を発見することに成功した。恒星風を点源重力場における球対称定常流であると仮定すると、内側では重力の効果が効いているために亜音速流は加速し、外側では膨張の効果が効いているために超音速流が加速するので、膨張の効果と重力の効果が釣り合っている点をちょうど音速で流れる場合は亜音速から超音速への連続的な加速が実現でき、遷音速流となることがわかった。

(30) 超新星爆発と銀河進化

銀河形成・進化過程で爆発的な星形成に伴って発生する多重超新星爆発は、銀河内のガスに多大なエネルギーを供給する。超新星爆発によって生成された衝撃波から高温の銀河ガスを生成し、やがて銀河からのアウトフロー(銀河風)を形成することになる。このような銀河風生成メカニズムの研究は、計算機性能の飛躍的な向上と近年の高精度銀河観測データの蓄積に後押しされながら、現在も精力的に行われているが、未だ明確な答えを我々は持っていない。そこで本研究では、軸対称密度場中での衝撃波の伝播を扱う事ができる、Laubach-Probstein 法と呼ばれる強力な近似解法を用いて、銀河風生成メカニズムの理論的研究を行った。

(31) 降着円盤の輻射磁気流体力学モデル

本研究ではアルファ粘性モデルを用いず、輻射輸送と磁場の進化を正確に解く輻射磁気流体シミュレーションによって、スリム円盤、標準円盤、RIAF に対応する降着円盤の三つの状態を再現することに成功した。そして降着円盤のガス密度を変えることによって輻射冷却・輻射圧の効き方が変化して円盤の多様性が生み出されるため、一つの数値計算コードで三つの降着モードを再現することに成功した。その結果、(1) 超臨界降着流(スリム円盤に対応)の場合、輻射力と重力が釣り合った分厚い円盤の上空に、輻射力で加速されたアウトフローが発生する。また、円盤部の磁場エネルギーがガスの内部エネルギーを凌駕する、すなわちガスの内部エネルギーでリミットされないという新たな知見を得た。これはガスの回転運動によりトロイダル磁場が増幅されたことが原因と考えられる。ガスの温度は、円盤部では輻射の温度とほぼ等しいが、アウトフロー領域では輻射の温度よりはるかに高くなる。(2) 質量降着率が臨界値を下回る(標準円盤に対応)と、鉛直方向の構造はおおよそ静水圧平衡に近く、磁気圧がわずかに重力に勝るためアウトフローが発生する。この場合も円盤上空でのガス温度は輻射温度よりはるかに高くなる。(3) 質量降着率が臨界値よりはるかに小さい状況(RIAF に対応)では、主にガス圧が重力と釣り合った分厚い円盤が形成される。円盤上空では磁気圧がわずかに重力に勝り、

ガスが加速されてアウトフローとなる。ガス温度は領域全体で輻射温度よりはるかに高くなる。輻射圧加速アウトフローがおおよそ定常であるのに対し、磁気圧加速アウトフローは激しく時間変動する。

(32) 恒星進化と質量放出過程

本研究では、惑星状星雲の形態が恒星風と星間空間ガスとの間に発生した衝撃波面に対応しているという立場の下、衝撃波面の流体力学的な挙動を追うことで、惑星状星雲の形態進化過程を詳細に調べた。衝撃波の伝播の様子は背景の密度分布に大きく左右される。つまり、惑星状星雲の形態進化も星間空間の密度分布に大きく依存していると考えられる。そこで本研究では、惑星状星雲の形態を議論するために軸対称非一様密度場中での衝撃波の伝播の様子を Laubach-Probstein 近似により解析し、背景密度場について制限を加える事で惑星状星雲の形態を再現することに成功した。

【3】宇宙論・銀河形成

(1) Baryon Acoustic Oscillation の非線形成長

Baryon Acoustic Oscillation (BAO) は宇宙晴れ上がり以前のバリオン・光子混合流体の音波振動が、晴れ上がり以後にバリオンとダークマターの重力相互作用によって現在の宇宙大規模構造に伝搬したものである。この BAO の振動スケールは宇宙晴れ上がり時のサウンドホライズンの大きさで決まるため理論的に計算可能である。従って、宇宙の大規模構造の観測によって BAO の振動スケールを観測することができれば、それを物差しとして大規模構造のスケールを測定することが可能になる。また、様々な赤方偏移での BAO の観測から宇宙の膨張の履歴を測定することが可能になり、宇宙論パラメータ、特に暗黒エネルギーの状態方程式への制限が可能になると考えられている。

BAO の振動スケールは $100h^{-1}\text{Mpc}$ 程度であるので、その時間的な成長は線形理論が適用可能な範囲ではあるが、宇宙論パラメータや暗黒エネルギーの状態方程式のパラメータを高い精度で決定するためには、非線形な効果を取り入れたモデル化が必要となる。一般に、摂動論による弱非線形成長の取扱いが行われるがその適用範囲については必ずしも明らかではなかった。我々は宇宙論的な N 体シミュレーションを用いて BAO の非線形成長のシミュレーションを行い、様々な摂動論的な取扱いの適用可能範囲を明らかにした。

(33) 衛星銀河問題の解決

構造形成の標準的な理論となっているコールドダークマターモデルは、我々の天の川銀河のような銀河が数百から数千もの衛星銀河を持つことを予言する。一方、現在まで天の川銀河の周囲には 20 程度の衛星銀河しか発見されていない。この理論と観測の矛盾は「衛星銀河問題」と呼ばれ、標準モデルのもつ大問題とされてきた。一方、この問題はダークマターのみを考慮した宇宙論的シミュレーションによって指摘されているものである。そこで我々は、宇宙背景放射や超新星爆発による星間ガス加熱の影響を取り入れた宇宙論的な銀

河形成シミュレーションを行い、コールドダークマターモデルが预言する「目に見える」衛星銀河の数やその性質を調べた。

その結果、超新星爆発によるガスの加熱が十分に効けば、衛星銀河の光度関数は再現可能であること示した。このような加熱は衛星銀河の光度-金属量関係も同時に再現することも示した。さらに、衛星銀河の中心密度が数桁の光度に渡ってほぼ一定であり、コールドダークマターモデルと一見矛盾するという観測結果も自然に再現できることを明らかにした。これは、宇宙再電離の影響により、ある中心密度以下のダークマターハローでは銀河が形成されないからであることを示した。

(34) 合体銀河における爆発的星形成

従来の銀河形成シミュレーションは数値的分解能が足りないため、銀河内での星形成領域を直接取り扱うことは出来ず、温度 10^4 度、密度 $n_H \sim 0.1 \text{ cc}^{-1}$ 程度の温かいガスで星形成が起こると仮定していた。そこで、 100 度以下、密度 n_H が 100 cc^{-1} 以上の低温高密度ガスを扱える高分解能シミュレーションを行い、銀河の合体時に励起される星形成について調べた。その結果、このような低温高密度ガスでの星形成を仮定すると、従来のシミュレーションでは再現されなかった、銀河と銀河の衝突面での爆発的星形成が自然に生じることが分かった。この爆発的星形成ではダークマターハローを持たない星団も多数形成されることが明らかになった。

4. 科研費採択状況

・基盤研究(S):梅村 雅之(代表者)(継続)

「第一世代天体から原始銀河に至る宇宙暗黒時代の解明」(2,700 万円)

・基盤研究(A):森 正夫(代表者)(新規)

「理論と観測の融合による銀河発生学の探求」(440 万円)

・挑戦的萌芽研究 :吉川 耕司(代表者)(新規)

「6次元ボルツマン方程式による自己重力系の数値シミュレーション」(110 万円)

・若手研究(スタートアップ):岡本 崇(代表者)(新規)

「三次元輻射流体シミュレーションで探る銀河形成の物理」(90 万円)

・日本学術振興会特別研究員奨励費:川勝 望(代表者)(継続)

「巨大ブラックホールとその周辺空間との物質・エネルギー収支から探る銀河中心核形成」

(80 万円)

・日本学術振興会特別研究員奨励費：秋月 千鶴（代表者）(継続)

「相対論的輻射輸送から探る活動天体と宇宙ジェットの構造」(90 万円)

5. 学位論文

博士論文

1. 秋月 千鶴

The Structure of a Slim Disk Outflow Explored by Three-Dimensional Radiation Transfer

(三次元輻射輸送から探るスリム円盤アウトフローの構造)

2. 佐久間 優

Feedback Effects of First Supernovae on the Subsequent Population III Star Formation

(連続的種族 III 星形成に対する初代超新星のフィードバック効果)

3. 佐藤 大介

The Effect of Partial Redistribution on the Escape of Lyman alpha Photons from Subgalactic Clouds

(銀河内ガス雲からのライマンアルファ光子の脱出における部分再分配の効果)

4. 矢島 秀伸

Ultraviolet Radiation Transfer in Dusty Primordial Galaxies

(ダスト形成中の原始銀河における紫外線輻射輸送)

修士論文

1. 青山 浩之

高赤方偏移ガンマー線バーストによる宇宙背景放射の減衰

学士論文

1. 田中 賢

銀河間ガス雲の重力収縮シミュレーション

2. 田口 政樹

銀河風生成における輻射の役割

3. 遠藤 圭介

ブラックホール連星系からの重力波放出

4. 寺部 佑基

Laubach-Probstein 近似による惑星状星雲の形態解析

5. 土屋 聖海

コールドダークマターハロー中の銀河風の定常解

6. 研究業績

(1) 研究論文

Refereed Papers

1. Tanikawa, A., Umemura, M., 2010, Successive Merger of Multiple Massive Black Holes in a Primordial Galaxy, The Astrophysical Journal Letters, submitted.
2. Hasegawa, K., Umemura, M., 2010, START: Smoothed particle hydrodynamics with tree-based accelerated radiative transfer, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, in press.
3. Mori, M., Umemura, M., Yajima, H., 2009, A Supernova-driven Wind Model for High-z Galaxies, The proceedings of the International Symposium on Origin of Matter and Evolution of Galaxies 2010 (OMEG10), AIP Conference Proceeding, in press.
4. Miki, Y., Mori, M., Rich, R. M., 2010, Collision tomography: the progenitor of the Andromeda stellar stream and the metallicity gradient, The proceedings of the International Symposium on Origin of Matter and Evolution of Galaxies 2010 (OMEG10), AIP Conference Proceeding, in press.
5. Ogiya, G., & Mori, M., 2010, The core-cusp problem in CDM halos and supernova feedback, The proceedings of the International Symposium on Origin of Matter and Evolution of Galaxies 2010 (OMEG10), AIP Conference Proceeding, in press.
6. Shimizu, I., Umemura, M., 2010, Two types of Lyman alpha emitters envisaged from hierarchical galaxy formation, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 406, 913-921.
7. Okamoto, T., Frenk, C. S., Jenkins, A., Theuns, T., 2010, The properties of satellite galaxies in simulations of galaxy formation, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 406, 208-222.

8. Bett, P., Eke, V., Frenk, C. S., Jenkins, A., Okamoto, T., 2010, The angular momentum of cold dark matter haloes with and without baryons, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 404, 1137-1156
9. Hasegawa, K., Umemura, M., Susa, H., 2009, Radiative regulation of Population III star formation, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 395, 1280-1286.
10. Hasegawa, K., Umemura, M., Kitayama, T., 2009, Formation of globular clusters induced by external ultraviolet radiation, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 397, 1338-1347.
11. Susa, H., Umemura, M., Hasegawa, K., 2009, Formation Criteria and the Mass of Secondary Population III Stars, *Astrophysical Journal*, 702, 480-488.
12. Yajima, H., Umemura, M., Mori, M., Nakamoto, T., 2009, The escape of ionizing photons from supernova-dominated primordial galaxies, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 398, 715-721.
13. Kato, Y., Umemura, M., Ohsuga, K., 2009, Three-dimensional radiative properties of hot accretion flows on to the Galactic Centre black hole, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 400, 1742-1748.
14. Iliiev, Ilian T., Whalen, Daniel, Mellema, Garrelt, Ahn, Kyungjin, Baek, Sunghye, Gnedin, Nickolay Y., Kravtsov, Andrey V., Norman, Michael, Raicevic, Milan, Reynolds, Daniel R., Sato, Daisuke, Shapiro, Paul R., Semelin, Benoit, Smidt, Joseph, Susa, Hajime, Theuns, Tom, Umemura, Masayuki, 2009, Cosmological Radiative Transfer Comparison Project II: The Radiation-Hydrodynamic Tests, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 400, 1283-1316.
15. Ohsuga, K., Mineshige, S., Mori, M., Kato, Y., 2009, Global Radiation- Magnetohydrodynamic Simulations of Black-Hole Accretion Flow and Outflow: Unified Model of Three States, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 61, 7-11
16. Nishimichi, T., Shirata, A., Taruya, A., Yahata, K., Saito, S., Suto, Y., Takahashi, R., Yoshida, N., Matsubara, T., Sugiyama, N., Kayo, I., Jing, Y.P., Yoshikawa, K., 2009, Modeling Nonlinear Evolution of Baryon Acoustic Oscillations: Convergence Regime of N-body Simulations and Analytic Models, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 61, 321-332.
17. Saitoh, T. R., Daisaka, H., Kokubo, E., Makino, J., Okamoto, T., Tomisaka, K., Wada, K., Yoshida, N., 2009, Toward First-Principle Simulations of Galaxy Formation: II. Shock-Induced Starburst at a Collision Interface during the First Encounter of Interacting Galaxies, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 61, 481-486

18. Okamoto, T., Frenk, C. S., 2009, The origin of failed subhaloes and the common mass scale of the Milky Way satellite galaxies, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 399, L174-L178
19. Kawakatu, N., Nagao, T., Jong-Hak, W., 2009, Exploring the disk-jet connection from the properties of narrow line regions in powerful young radio-loud AGNs, *The Astrophysical Journal*, 693, 1686-1695.
20. Kino, M., Kawakatu, N., Nagai, H., 2009, New prediction of extragalactic GeV gamma-ray emission from radio lobes of young AGN jets, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 395, L43-L47.
21. Kawakatu, N., Kino, M., Nagai, H., 2009, On the Origin of Fanaroff-Riley Classification of Radio Galaxies: Deceleration of Supersonic Radio Lobes, *The Astrophysical Journal Letter*, 697, 173-176.
22. Watabe, Y., Kawakatu, N., Imanishi, M., Takeuchi, T.T., 2009, Supermassive Black Hole Mass Regulated by Host Galaxy Morphology, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 400, 1803-1807.
23. Kawakatu, N., Wada, K., 2009, Formation of High-redshift ($z > 6$) Quasars Driven by Nuclear Starbursts, *The Astrophysical Journal*, 706, 676-686.
24. Tanikawa, A., Fukushige, T., 2009, "Effects of Hardness of Primordial Binaries on Evolution of Star Clusters", *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 61, 721-736
25. Sakuma, M., Susa, H., 2009, Feedback Effects of First Supernovae on the Neighboring Dark Matter Halos, *Astrophysical Journal*, 698, 155-162.
26. Akizuki, C., Fukue, J., 2009, Black-Hole Winds with a Variable Eddington Factor, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 61, 543-548.

Non-Refereed Papers

1. Okamoto, T., 2010, Dark Satellites of the Milky Way, in "Hunting for the Dark: The Hidden Side of Galaxy Formation", Malta, 19-23 Oct. 2009, eds. V.P. Debattista & C.C. Popescu, *AIP Conf. Ser.*, in press
2. Umemura, M., Suwa, T., Susa, H., 2009, The Collapse of First Objects driven by Dark Matter Cusps, *Proceedings for Tours Symposium on Nuclear Physics and Astrophysics VII*, 101-106
3. Hasegawa K., Umemura M., Suwa T., 2009, Impacts of diffuse UV radiation on the secondary Population III star formation, *Proceedings for Tours Symposium on Nuclear Physics and Astrophysics VII*, 107-110
4. Umemura, Masayuki, 2009, Computational Astrophysics with a Hybrid Simulator FIRST, *Association of Asia Pacific Physical Societies, Research Activities on Astronomy and Astrophysics in Japan*, 19, 36-42

5. Kawakatu N., Wada, K., 2009, Co-Evolution Model of AGNs and Nuclear Starbursts, Astronomical Society of the Pacific Conference Series, 408, 148.
6. Kawakatu, N., Nagai, H., Kino, M., 2009, A New Evolution Scenario of Compact Symmetric Objects, Astronomical Society of the Pacific Conference Series, 402, 299.
7. Kawakatu, N., Nagai, H., Kino, M., 2009, Fate of baby radio galaxies: Dead or Alive ?, To be appeared the 4th GPS and CSS workshop (Astronomische Nachrichten), 330 , 283.
8. Kino,M., Kawakatu,N., Ito,H., Nagai, H., 2009, High energy emission from AGN cocoons in clusters of galaxies, To be appeared the 4th GPS and CSS workshop (Astronomische Nachrichten), 330, 257.

(2) 国際会議発表・海外講演

1. Mori, M., Umemura, M., 2009, Evolution of Lyman-alpha Emitters, Lyman-break Galaxies and Elliptical Galaxies, OPEN PROBLEMS IN GALAXY FORMATION, (May 12-15, Potsdam, Germany)
2. Mori, M., Rich, R. M., 2009, The once and future Andromeda stream, Tidal Dwarf Galaxies: Ghosts from structure formation, (May 25-29, Bad Honnef, Germany)
3. Mori, M., Yajima, H., Umemura, M., 2009, Formation and Evolution of Lyman-alpha Emitters, The Lyman alpha universe, (July 6-10, Paris, French)
4. Yajima, H., Umemura, M., Mori, M., The escape of ionizing photons from high-z Lyman alpha emitters, The Lyman alpha universe, (July 6-10, Paris, French)
5. Miki, Y., Mori, M., Rich, R. M., 2009, Possible progenitors of the Andromeda stellar stream, The 3rd Korea-Japan Young Astronomers Meeting, (Aug 19-21, 2009, Gwacheonsi, Korea)
6. Mori, M., Rich, R. M., 2009, The once and future Andromeda stream, The Milky Way and the Local Group - Now and in the Gaia Era, (Aug 31- Sep 4, 2009, Heidelberg, Germany)
7. Miki, Y., Mori, M., Rich, R. M., 2009, Possible Progenitors of the Andromeda Stellar Stream, The Milky Way and the Local Group - Now and in the Gaia Era, (Aug 31- Sep 4, 2009, Heidelberg, Germany)
8. Okamoto, T., 2009, Dark satellites of the Milky Way, Hunting for the Dark: The Hidden Side of Galaxy Formation, (Oct 19-23, 2009, Malta)
9. Umemura, M., Suwa, T., Susa, H., The Collapse of First Objects driven by Dark Matter Cusps, Tours Symposium on Nuclear Physics and Astrophysics VII, (Nov 16-20, 2009, Kobe, Japan)

10. Hasegawa K., Umemura M., Suwa T., 2009, Impacts of diffuse UV radiation on the secondary Population III star formation, Tours Symposium on Nuclear Physics and Astrophysics VII, (Nov 16-20, 2009, Kobe, Japan)
11. Kawakatu, N., Wada, K., Formation of High-redshift ($z>6$) Quasars Driven by Nuclear Starbursts, MPE seminar, (Nov. 13, Munich, Germany)
12. Mori, M., Yajima, H., Umemura, M., 2010, Theoretical study of dust emission from high- z starforming galaxies, Infrared Emission, ISM and Star Formation, (February 22-24, Heidelberg, Germany)
13. Hasegawa, K., Umemura, M., Suwa, T., The Impacts of Ultraviolet Radiation on Secondary Population III Star Formation, First Stars and Galaxies: Challenges in the Next Decade, (March 8-11, 2010, University of Texas, Austin, USA)
14. Tanikawa A., Umemura M., 2010, Successive Merger of Multiple Massive Black Holes in a Primordial Galaxy, First Stars and Galaxies: Challenges in the Next Decade, (March 8-11, 2010, University of Texas, Austin, USA)
15. Mori, M., Yajima, H., Umemura, M., 2009, A Supernova-driven Wind Model for High- z Galaxies, The 10th. International Symposium on Origin of Matter and Evolution of the Galaxies, (March 8-10, Osaka, Japan)
16. Miki, Y., Mori, M., Rich, R. M., 2010, Collision tomography: the progenitor of the Andromeda stellar stream and the metallicity gradient, 10th International Symposium on Origin of Matter and Evolution of Galaxies 2010, (Mar 8-10, 2010, Osaka, Japan)
17. Ogiya, G., & Mori M., The core-cusp problem in CDM halos and supernova feedback, 10th International Symposium on Origin of Matter and Evolution of Galaxies 2010 (OMEG10), (Mar 8-10, 2010, Osaka, Japan)

(35) 国内講演

(A)招待講演

1. 森正夫

「宇宙の果てと七夕の夜空」

世界天文年 全国同時七夕講演会(2009年7月4日, 筑波大学, つくば)

2. 梅村雅之

「6次元計算宇宙物理学の展開」

重力多体系とプラズマ系におけるシミュレーション研究会

(2009年9月10日～12日, 国立天文台, 三鷹)

3. 川勝望

「高赤方偏移クェーサーから探る超巨大ブラックホールの成長過程」

超広域サーベイによる巨大ブラックホール進化の研究:観測と理論の連携

(2009年10月15～17日, にぎたつ会館, 松山)

4. 川勝望

「超巨大ブラックホール形成の解明に向けて～多階層モデル構築の重要性～」

GCOE 研究会:宇宙ジェットのエンジンとしてのブラックホールとその進化

(2010年2月25～26日, 京都大学基礎物理学研究所, 京都)

5. 梅村雅之

「宇宙の旅をして宇宙の大きさを知ろう」

竹園東小学校講演会(2009年11月25日, 竹園東小学校, つくば)

(B)一般講演

1. 三木洋平

「Possible progenitors for reproducing the Andromeda stellar stream」

第39回 天文天体物理若手 夏の学校

(2009年7月27日～30日, 群馬県草津温泉ホテル櫻井, 草津)

2. 扇谷豪「矮小銀河のバリオン重力場が及ぼすダークマターハロー中心密度分布への影響」,

第39回 天文天体物理若手 夏の学校

(2009年7月27日～30日, 群馬県草津温泉ホテル櫻井, 草津)

3. 川勝望, 紀基樹

「相対論的ジェットの力学エネルギー源と粒子加速の理解に向けて:-VSOP-2への展望と期待-」

VSOP-2 Workshop 2009:VSOP-2で狙うキーサイエンス

(2009年9月4日～5日, 国立天文台, 三鷹)

4. 秋月千鶴, 梅村雅之, 大須賀健, 加藤成晃

「三次元輻射輸送から探る相対論的ジェットの構造」

日本天文学会秋季年会(2009年9月14日～16日, 山口大学, 山口)

5. 森正夫, 矢島秀伸, 梅村雅之

「ライマンアルファエミッターの化学力学進化モデル II」

日本天文学会秋季年会(2009年9月14日～16日, 山口大学, 山口)

6. 矢島秀伸, Choi Jun-Hwan, 長峯健太郎, 梅村雅之, 森正夫

「高赤方偏移銀河における電離光子脱出確率の質量依存性」

日本天文学会秋季年会(2009年9月14日～16日, 山口大学, 山口)

7. 長谷川賢二, 梅村雅之

「TREE 構造を用いた高速 Radiation Smoothed Particle Hydrodynamics 法の開発」

日本天文学会秋季年会(2009年9月14日～16日, 山口大学, 山口)

8. 三木洋平, 森正夫, R. Michael Rich

「N 体シミュレーションを用いたアンドロメダ・ストリームの速度構造の解析」

日本天文学会秋季年会(2009年9月14日～16日, 山口大学, 山口)

9. 吉川耕司, 赤堀卓也, 北山哲, 小松英一朗

「衝突銀河団における Sunyaev-Zel'dovich 効果」

日本天文学会 2009 年秋季年会(2009年9月14日～16日, 山口大学, 山口)

10. 赤堀卓也, 吉川耕司

「衝突銀河団 1E0657-56 における非平衡電離・2 温度状態の数値実験 II」

日本天文学会 2009 年秋季年会(2009年9月14日～16日, 山口大学, 山口)

11. 岡本 崇

「天の川銀河の衛星銀河の最小ハロー質量と, ダークサテライトの起源」

日本天文学会秋季年会(2009年9月14日～16日, 山口大学, 山口)

12. 川勝望

「超巨大ブラックホール進化の多階層理論モデルの構築に向けて」

日本天文学会秋季年会(2009年9月14日～16日, 山口大学, 山口)

13. 川勝望, 和田桂一

「超新星爆発駆動ガス降着過程における超巨大ブラックホールの最大質量」

日本天文学会秋季年会(2009年9月14日～16日, 山口大学, 山口)

14. 紀基樹, 川勝望, 高原文朗

「AGN ジェットの力学:陽子卓越か? ペアプラズマ卓越か?」

日本天文学会秋季年会(2009年9月14日～16日, 山口大学, 山口)

15. 伊藤裕貴, 紀基樹, 川勝望, 山田章一

「AGN ジェットが駆動するシェルからの非熱的放射」

日本天文学会秋季年会(2009年9月14日～16日, 山口大学, 山口)

16. 中村繁幸, 森正夫

「超新星爆発と銀河風」

宇宙磁気流体力学のフロンティア(2009年11月16日, 京都大学, 京都)

17. 三木洋平, 森正夫, R. Michael Rich

「Collision tomography: physical properties of possible progenitors for the Andromeda stellar stream」

第22回理論懇シンポジウム「2010年代の理論天文学」

(2009年12月20日～22日, 名古屋大学, 名古屋)

18. 扇谷豪, 森正夫

「矮小銀河のバリオン重力場変動が及ぼすダークマターハロー中心密度への影響」,

第22回理論懇シンポジウム「2010年代の理論天文学」

(2009年12月20日～22日, 名古屋大学, 名古屋)

19. 谷川衝, 岩澤全規, 牧野淳一郎

「恒星の軌道運動の観測による球状星団中心の中間質量ブラックホール検出」

大望遠鏡による高分散分光観測の展望

(2010年, 2月12日～13日, 国立天文台, 三鷹)

20. 梅村雅之

「セッション III サマリー-」

巨大ブラックホールと銀河の共進化ワークショップ

(2010年, 2月18日～20日, 筑波大学, つくば)

21. 岡本 崇

「宇宙論的シミュレーションによる巨大ブラックホールと銀河の共進化」

巨大ブラックホールと銀河の共進化ワークショップ

(2010年, 2月18日～20日, 筑波大学, つくば)

22. 川勝望, 和田桂一, 大須賀健

「超巨大ブラックホール形成の鍵を握る AGN トーラスについて」

巨大ブラックホールと銀河の共進化ワークショップ

(2010 年, 2 月 18 日～20 日, 筑波大学, つくば)

23. 谷川 衡, 梅村 雅之

「大質量ブラックホール多体系におけるブラックホールの合体成長」

巨大ブラックホールと銀河の共進化ワークショップ

(2010 年, 2 月 18 日～20 日, 筑波大学, つくば)

24. 三木 洋平, 森 正夫, R. Michael Rich

「Collision tomography: physical properties of possible progenitors for the Andromeda stellar stream」

巨大ブラックホールと銀河の共進化ワークショップ

(2010 年, 2 月 18 日～20 日, 筑波大学, つくば)

25. 扇谷 豪, 森 正夫

「銀河風による矮小銀河からの質量流出とダークマターハロー中心質量密度分布」

巨大ブラックホールと銀河の共進化ワークショップ

(2010 年, 2 月 18 日～20 日, 筑波大学, つくば)

26. 梅村 雅之

「巨大ブラックホールと銀河の共進化－現状と課題－」

JASMINE ワークショップ (2010 年, 2 月 22 日～23 日, 国立天文台, 三鷹)

27. 谷川 衡, 梅村 雅之

「大質量ブラックホール多体系でのブラックホール合体成長に伴う銀河中心構造の進化」

JASMINE ワークショップ

(2010 年, 2 月 22 日～23 日, 国立天文台, 三鷹)

28. 岡本 崇

「円盤銀河のバルジ - 銀河形成シミュレーションから」

JASMINE ワークショップ

(2010 年, 2 月 22 日～23 日, 国立天文台, 三鷹)

29. 梅村 雅之, 松元 亮治

「研究開発課題(天文・宇宙分野)の紹介」

シンポジウム「次世代スーパーコンピュータでせまる物質と宇宙の起源と構造」

(2010年, 3月15日, 東京ステーションコンファレンス, 東京)

30. 梅村雅之

「レビュー1: 初代星」

初代星・初代銀河研究会(2010年, 3月17日～19日, 長崎大学, 長崎)

31. 長谷川賢二, 梅村雅之, 須佐元, 諏訪多聞

「初代星からの輻射性フィードバックと次世代星形成」

初代星・初代銀河研究会(2010年, 3月17日～19日, 長崎大学, 長崎)

32. 矢島秀伸; Jun-Hwan Choi; 長峯健太郎; 梅村雅之; 森正夫

「高赤方偏移銀河による宇宙再電離とクエーサー吸収線系への寄与」

初代星・初代銀河研究会(2010年, 3月17日～19日, 長崎大学, 長崎)

33. 三木洋平, 森正夫, R. Michael Rich

「Collision tomography: the progenitor of the Andromeda stellar stream and the metallicity gradient」

初代星・初代銀河研究会(2010年, 3月17日～19日, 長崎大学, 長崎)

34. 扇谷豪, 森正夫

「銀河風による矮小銀河からの質量流出とダークマターハロー中心質量密度分布」

初代星・初代銀河研究会(2010年, 3月17日～19日, 長崎大学, 長崎)

35. 谷川衝, 梅村雅之

「大質量ブラックホール多体系におけるブラックホールの合体成長」

初代星・初代銀河研究会(2010年, 3月17日～19日, 長崎大学, 長崎)

36. 谷川衝, 梅村雅之

「大質量ブラックホール多体系におけるブラックホールの合体成長」

日本天文学会春季年会(2010年3月24日～27日, 広島大学, 東広島)

37. 川勝望, 大須賀健

「近赤外線光度の極端に低い活動銀河核は Super-Eddington 天体か？」

日本天文学会春季年会(2010年3月24日～27日, 広島大学, 東広島)

38. 矢島秀伸; Jun-Hwan Choi; 長峯健太郎; 梅村雅之; 森正夫

「Damped Lyman Alpha Systems における星の紫外線輻射と背景輻射場の影響」

日本天文学会春季年会(2010年3月24日～27日, 広島大学, 東広島)

39. 大須賀健; 嶺重慎; 森正夫; 加藤成晃; 竹内駿; 富田賢吾

「降着円盤の輻射磁気流体力学モデル;円盤およびアウトフローの力学構造」

日本天文学会春季年会(2010年3月24日～27日, 広島大学, 東広島)

40. 三木洋平, 森正夫, R. Michael Rich

「N 体シミュレーションを用いたアンドロメダ・ストリームの速度構造の解析とその時間発展」

日本天文学会春季年会(2010年3月24日～27日, 広島大学, 広島)

41. 扇谷豪, 森正夫

「矮小銀河からの銀河風が及ぼすダークマターハロー中心質量密度分布への影響」

日本天文学会春季年会(2010年3月24日～27日, 広島大学, 広島)

7. 連携・国際活動・社会貢献、その他

(1) センター内連携

超高速計算システム研究部門と連携し, FIRST プロジェクトを推進し, 重力専用計算ボードを PC クラスタに組み込んだ**宇宙シミュレータ FIRST**を超高速計算システム研究部門と共同で完成させた。そして, 超高速計算システム研究部門で開発されたグリッドファイルシステム Gfarm を FIRST シミュレータに導入することで, ローカルディスクをインターコネクトで接続した共有ファイルシステム(89.2TB)を実現した。

さらに, 超高速計算システム研究部門と連携し, エクサスケール計算の礎となる演算加速器搭載の計算機システム(**FCS**:フロンティア・コンピューター・システム)の提案を行った。

(2) 解説記事

1. 森正夫, 「銀河形成の流体力学模型」, 日本流体力学会誌“ながれ”, 2010年2月, 29巻 39-44
2. 岡本 崇, 2009, 「紫外背景輻射による銀河形成の抑制」, 天文月報, 102, 759-768

(36) 国際会議座長

・ Masayuki Umemura

"First Stars and Galaxies: Challenges in the Next Decade"

March 8, 2010, University of Texas, Austin, USA

(37) 研究会開催

1. 「巨大ブラックホールと銀河の共進化」ワークショップ

2010年, 2月18日～20日, 筑波大学, つくば市

世話人: 谷口義明(愛媛大), 嶺重慎(京大), 和田桂一(鹿児島大), 松元亮治(千葉大), 上田佳宏(京大), 中井直正(筑波大), 郷田直輝(国立天文台), 長尾透(愛媛大), 村山卓(東北大), 梅村雅之(筑波大), 森正夫(筑波大), 岡本崇(筑波大)

2. 超広域サーベイによる巨大ブラックホール進化の研究: 観測と理論の連携

2009 年, 10 月 15 日～17 日, にぎたつ会館, 松山市

世話人: 今西昌俊(国立天文台), 柏川伸成(国立天文台), 川勝望(国立天文台), 谷口義明(愛媛大), 寺島雄一(愛媛大), 長尾透(愛媛大), 長島雅裕(長崎大), 和田桂一(鹿児島大)

2. 物質生命研究部門

2.1. 物質工学理論グループ

1. メンバ

教授 日野 健一

准教授 Xiao-Min Tong

講師 小泉 裕康

助教 前島 展也

2. 概要

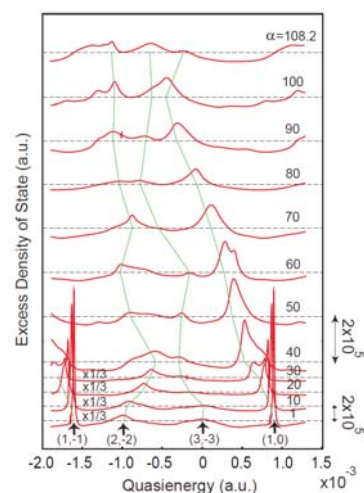
当グループは、光と物質の相互作用に起因する量子ダイナミクス・量子制御ならびに分子性結晶の光誘起相転移、遷移金属酸化物における光誘起超高速ダイナミクスを中心に理論研究を行っている。

3. 研究成果

【1】 レーザー場中における半導体超格子のFloquet状態の解析

(1) テラヘルツ光駆動 Wannier-Stark 階段構造における光着衣電子状態の解析

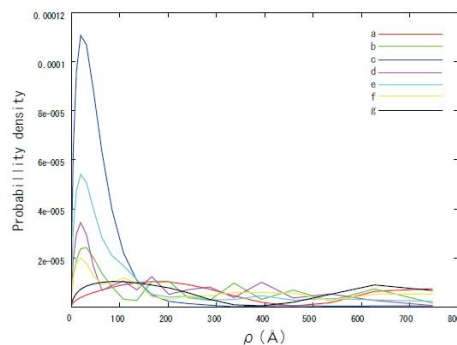
半導体超格子の積層方向に静電場を印加すると、電子状態は Wannier-Stark Ladder(WSL)と呼ばれる等間隔の準位を形成する。これに強いテラヘルツレーザーを照射すると、更に dynamic WSL(DWSL)と呼ばれる状況に移行することが知られている。DWSL においては、強束縛近似に基づく計算はレーザー強度の調節により電子状態をコントロールできることを示唆している。しかし強束縛近似を超える効果により電子状態がどのような影響を受けるかについては未解決となっていた。本研究では R-matrix Floquet 理論を用いた数値計算により DWSL における局在性の解析を行った。右図は計算から得られた Excess DOS(通常の状態密度に相当)の擬エネルギー依存性である。ここでは、レーザー強度を表す Ponderomotive 半径 α を 1 から $\alpha_{DL}=108.2(\text{a.u.})$ まで変化させている。 $\alpha=1$ における鋭いピーク(局在状態に対応)が α の増大とともに減衰していく様子が分かる。 $\alpha=\alpha_{DL}$ においては強束縛近似では動的局在状態が形成され鋭いピークが再び見られる



とされているが、本計算の結果はこの動的局在が不安定化することを示唆している。更に Dynamic Fano Resonance(DFR)という概念に基づいて動的局在の不安定化が説明できることを示した。

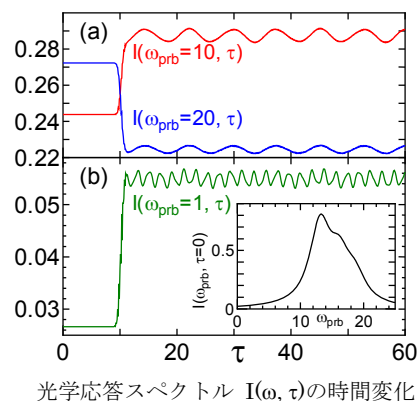
(38) テラヘルツ波誘起半導体超格子における光着衣励起子状態の解析

半導体超格子にテラヘルツレーザーを照射すると、系の電子および正孔の状態は Floquet 状態と呼ばれる光と結合した光着衣状態へと移行する。この時レーザー強度によって電子・正孔状態の制御が可能であることが理論的に示されている。本研究においては、そのような状況で電子と正孔が束縛した、いわば光着衣励起子系の解析を行った。この解析のため Houston-Floquet 状態を用いて光着衣励起子状態を展開し、厳密対角化により電子状態を求めるという方法を用いた。右図は光着衣励起子状態において正孔を原点に置いた場合の電子分布関数である。赤から順にレーザー強度を増加させた場合の結果を示しているが、これにより電子正孔間の束縛の程度をレーザーによってコントロールできることが分かる。更に、より空間的に広がった連続状態の効果を取り入れるため R-matrix 伝搬法を用いた計算を行い、上記と定性的に一致する結果を得た。



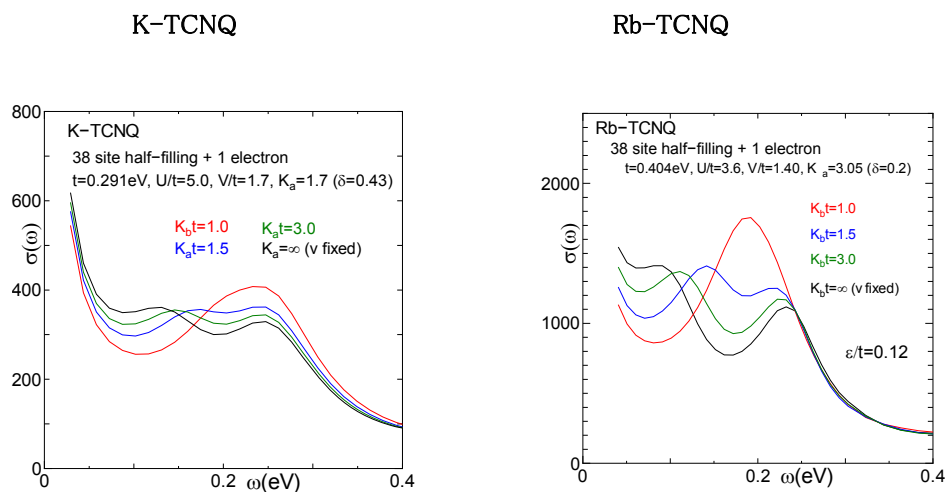
【2】時間依存シュレディンガー方程式の直接解法による1次元多軌道強相関電子系の光誘起超高速ダイナミクスの解析

近年、強相関電子系における光誘起現象が注目を集めている。強相関電子系とは、電子間クーロン斥力が物性の決定に主要な役割を果たしている系を指し、高温超伝導に代表されるその特異な物性から活発な研究対象となってきた。近年は光照射による物性制御そして光照射に付随して生じる光誘起超高速ダイナミクスが主要なトピックの一つに挙げられている。本研究においては、軌道縮退を有する1次元強相関電子系における光誘起ダイナミクスの理論的解析を行い、照射光強度が比較的弱い状況では光学応答スペクトルに右図のようなコヒーレント振動が見られること、そしてその振動の原因が、光励起状態間の量子干渉であることを見出した。特に図(a)に見られるコヒーレント振動現象は、軌道波と呼ばれる軌道縮退系特有の素励起を起源に持つことを示し、実験による観測可能性について議論を行った。



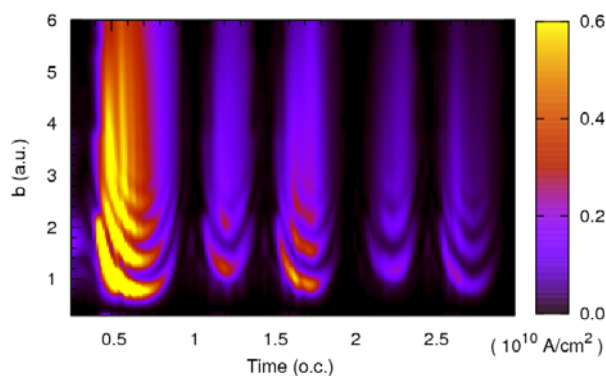
【3】有機モット絶縁体R-TCNQ(R=K,Rb)におけるギャップ内状態の解析

R-TCNQ(R=K,Rb)は擬一次元構造を持つ有機電荷移動錯体であり、強い電子相関のためにモット絶縁体となっている。またある有限の温度以下においてはスピンパイエルズ不安定性による二量化相が実現している。この二量化相に光を照射して二量化を壊す実験的試みが以前より行われてきたが、特に最近の実験において、光照射直後に電荷移動ギャップ($\sim 1\text{eV}$)よりも低エネルギー側にギャップ内状態が出現することが見出され、その起源については未解決なままであった。そこで我々は、R-TCNQ のギャップ内状態の解析を学外実験グループと共同で行った。動的密度行列繰り込み群による計算と実験との比較の結果、電荷移動ギャップ以下の低エネルギー領域に下図のようなギャップ状態が出現することを確認し、実験と定量的にも一致することを確認した。更にこれらの状態の起源がポーラロン状態およびスピン励起状態であることを明らかにした。



【4】 強レーザー場と原子・分子の相互作用

強レーザー場における水素原子の再散乱電子運動量分布と空間分布を研究した。初めて、数値計算で再散乱電子の空間分布を再現した。その研究結果は J.Phys.B に掲載された。再散乱電子の空間分布図は J. Phys. B 2009 年 Highlights として引用された。



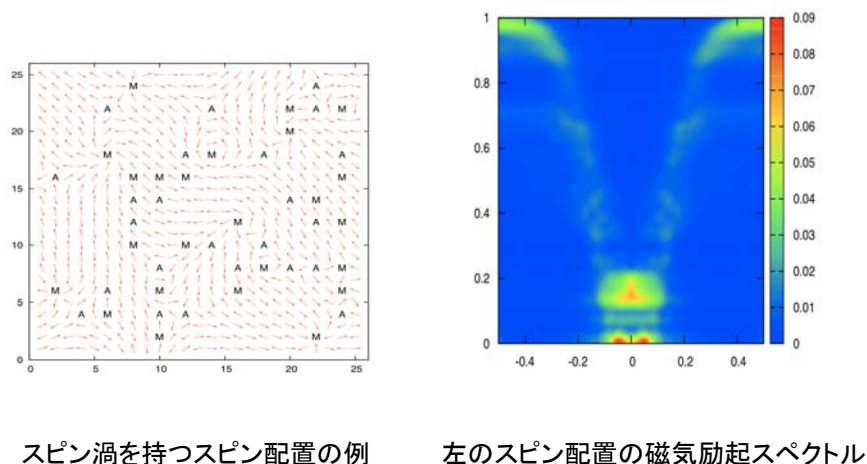
【5】 Fano 共鳴理論の新展開

近年、多価イオン生成装置の開発が進み、電子と多価イオンの衝突における2電子性再結合スペクトルでも Fano プロファイルの観測が可能となった。原理的には、きれいな Fano プロファイルが見えるためには、基底状態から準束縛状態への光吸収と連続状態への直接光吸収の両方の強度が同程度であることが必要である。し

かし、多価イオンの場合には2電子性再結合の過程は放射性再結合過程よりずっと強いにもかかわらず、明瞭なFanoプロファイルが電気通信大学の実験グループで観測された。その原因を明らかにするために、我々は新しいグリーン関数計算方法を開発した。将来、グリーン関数を直接計算する我々の方法と実験結果を比べることにより、様々な物理過程を解明することが可能になる。その研究結果はPhys. Rev. Aに登載された。計算手法も2009年の日本物理秋大会で計画講演として発表された。

【6】 砂時計型磁気励起スペクトル

銅酸化物超伝導体のスピン構造を調べるために中性子散乱による磁気励起スペクトルが観測されている。この磁気励起スペクトルはこれまで、ストライプモデルによって説明されてきたが、実験との一致は必ずしもよくない。われわれは、スピン渦モデルによりこれが説明できることを示した。今後さらに計算を精密化し実験との詳細な比較を目指す。

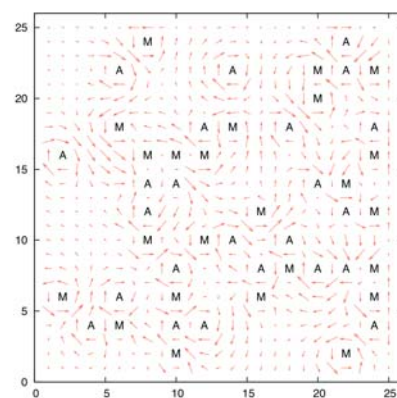


スピン渦を持つスピン配置の例

左のスピン配置の磁気励起スペクトル

【7】 スピン渦により生成されるループ電流と超伝導との関係

磁気励起スペクトルの解析より、スピン渦の存在がかなり確実である。このようなスピン渦が存在するとベリー位相が発生し、ベリー位相がつくる仮想磁場の影響でループ電流が生じることを我々は预言した。このループ電流はスピン渦が存在する限り、消失することがない。この電流が超伝導電流を担っている可能性を研究している。実験で観測されている巨大なネルンスト信号などがこのループ電流を使って説明出来る。



上記のスピン配置から生じるループ電流の例

4. 研究業績

(1) 研究論文

1. Anomalous Exciton Spectra of Laser-Driven Semiconductor Superlattices: Kenta Yashima, Kotaro Oka, Ken-ichi Hino, Nobuya Maeshima, Xiao Min Tong, *Solid State Commun.* **149**, 823-826 (2009)
2. Magnetic Field versus Temperature Phase Diagram of the Spin-1/2 Alternating Chain Compound F5PNN: Yasuo Yoshida, Tatsuya Kawae, Yuko Hosokoshi, Katsuya Inoue, Nobuya Maeshima, Koichi Okunishi, Kiyomi Okamoto, Toru Sakai, *J. Phys. Soc. Jpn* **78**, 074716 (2009)
1. Photoinduced dynamics in the one-dimensional two-orbital degenerate Hubbard model: Nobuya Maeshima, Kenji Yonemitsu, and Ken-ichi Hino, *J. Phys.: Conf. Ser.* **200**, 012109 (2010)
2. Instability of Dynamic Localization in the Intense THz-Driven Semiconductor Wannier-Stark Ladder due to the Dynamic Fano Resonance: Atsushi Kuku, Tomohiro Amano, Nobuya Maeshima, and Ken-ichi Hino, to be published in *Phys. Rev. B*
3. T. Shirahama, X. M. Tong, K. Hino, and N. Toshima, Atomic photoabsorption process controlled by static and oscillating magnetic fields, *Phys. Rev. A* **80** (2009) 043414.
4. T. Watanabe, A. T. Domondon and X. M. Tong, A theoretical study on the dynamical correlation in Ar focusing on 3s excitation with outer-shell ionization due to electron impacts, *Phys. Rev. A* **80** (2009) 042709.
5. X. M. Tong, N. Nakamura, S. Ohtani, T. Watanabe, and N. Toshima, Green's Function for Multielectron Ions and Its Application to the Radiative Recombination Involving Dielectronic Recombinations, *Phys. Rev. A* **80** (2009) 042502.
6. Nobuyuki Nakamura, Anthony P. Kavanagh, Hirofumi Watanabe, Hiroyuki A. Sakaue, Yueming Li, Daiji Kato, Fred J. Currell, Xiao-Min Tong, Tsutomu Watanabe, and Shunsuke Ohtani, Asymmetric Profiles Observed in the Recombination of Bi⁷⁹⁺: A New Benchmark for Relativistic Theories Involving Interference, *Phys. Rev. A* **80** (2009) 015403.
7. K. Sasaki, X. M. Tong, and N. Toshima, Coulomb focusing effect on the space distribution of the rescattering electron wavepacket in the laser-atom interaction, *J. Phys. B: At. Mol. Opt.* **42** (2009) 165603.
8. M. Tong, K. Hino and N. Toshima, New time-dependent scattering theory and its application to the capture of antiprotons by atoms, *J. of Phys: Conf. Series*, **185**(2009) 012047.

9. X. M. Tong, K. Sasaki, K. Hino and N. Tushima, Space distribution of the rescattering electron wavepacket in the laser-atom interactions, J. of Phys: Conf. Series, **185**(2009) 012048.
10. Persistent current generation by a Berry Phase, H. Koizumi, J. Phys. A 43 (2010) 354009.
11. Spin-vortices in cuprates: magnetic excitations, optical conductivity, enhanced Nernst signal, and a persistent current generation, H. Koizumi, to appear in Physica C: Superconductivity and its applications
12. Vibronic polarons and electric current generation by a Berry phase in cuprate superconductors, H. Koizumi in "The Jahn-Teller effect", ed. by H. Koeppel, D. R. Yarkony, and H. Barentzen, (2009)
13. Spin Vortices in Cuprate Superconductors: Fictitious Magnetic Fields, Fictitious Electric Fields, and Persistent Current, H. Koizumi, J. Phys. Chem A 113 (2009) 104704.

(39) 学会発表

(A)招待講演

1. Time-Dependent Method in the Laser-Atom Interactions, X. M. Tong, and N. Tushima, Conference on Computational Physics, Kaohsiung, Taiwan 2009, Dec. 15-19.
2. Fano 共鳴理論の新展開, 全曉民、2009 秋日本物理学会, 熊本、9 月 26 日。

(B)その他の学会発表

1. Photoinduced dynamics in the one-dimensional two-orbital degenerate Hubbard model: Nobuya Maeshima, Kenji Yonemitsu, and Ken-ichi Hino, ICM09 (July 26-31, 2009, Karlsruhe, Germany)
2. 2 軌道ハバード鎖における光誘起ダイナミクス: 前島展也、日野健一、米満賢治、日本物理学会 2009 年秋季大会 (熊本大学, 2009 年 9 月 25 日-28 日)
3. テラヘルツ光駆動半導体超格子における光着衣励起子のスペクトル特異性: 見崎大地, 前島展也, 日野健一, 八島健太, 岡浩太郎、日本物理学会 2009 年秋季大会 (熊本大学, 2009 年 9 月 25 日-28 日)
4. テラヘルツ光駆動 Wannier-Stark ladder における光着衣電子の量子カオス散乱: 天野智広, 久々宇篤志, 前島展也, 日野健一、日本物理学会 2009 年秋季大会 (熊本大学, 2009 年 9 月 25 日-28 日)

5. 多軌道ハバード模型における光誘起ダイナミクス: 前島展也、京都大学基礎物理学研究所研究会 (京都大学, 2009 年 12 月 10 日-12 月 11 日)
6. 多軌道ハバード模型における光励起状態のダイナミクス: 前島展也、日野健一、米満賢治、日本物理学会 第65回年次大会 (岡山大学, 2010 年 3 月 20 日-23 日)
7. テラヘルツ光駆動 Wannier-Stark ladder における光着衣電子の共鳴構造と安定性: 天野智広、柄澤朋宏、前島展也、日野健一、日本物理学会 第65回年次大会 (岡山大学, 2010 年 3 月 20 日-23 日)
8. テラヘルツ光駆動半導体超格子における光着衣励起子のスペクトル特異性 II: 見崎大地、前島展也、日野健一、八島健太、日本物理学会 第65回年次大会 (岡山大学, 2010 年 3 月 20 日-23 日)
9. AC ジョセフソン効果の再考、小泉裕康、日本物理学会第65回年次大会 ポスター発表 2010/03/23
10. 銅酸化物における砂時計型磁気励起スペクトルの起源、佐川英弥、秀方遼、小泉裕康、日本物理学会第65回年次大会 ポスター発表 2010/03/20
11. Persistent Current Generation By a Berry Phase, H. Koizumi, Poster presentation , Aharonov-Bohm Effect and Berry Phase Anniversary 50/25, 2009/12/14
12. Spin-vortices in Cuprates: Magnetic Excitations, Optical Conductivity, Enhanced Nernst Signal, and a Persistent Current Generation, H. Koizumi, Poster presentation, 9th Internal Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity, 2009/09/08
13. Macroscopic Quantum Interference Effects in the Spin-vortex Superconductivity, H. Koizumi, Poster presentation, 9th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity 2009/09/08
14. スピン渦、小泉裕康、配位子場討論会 2009/08/24
15. スピン渦構造による銅酸化物磁気励起スペクトル理論、小泉裕康、日本物理学会 第64回年次大会 2009/03/17
16. 銅酸化物における電荷、格子、スピンのインタープレイ、シンポジウム・特別講演・招待講演、小泉裕康、第2期菅野シンポジウム第5回講演会 複雑物質系に挑む配位子場の科学, 2009/03/07

2.2. 生命物理グループ

1. メンバ

准教授 舘野 賢

2. 概要

本年度は特に、超並列コンピュータ上で昨年度に開発した「量子力学(QM)計算と古典理論(MM)計算を融合させるインターフェース・システム」を用いて、「ハイブリッド QM/MM 分子動力学(MD)計算」を実現した。本システムにおいては、QM計算部分に全電子 *ab initio* DFT 計算を採用し、電子構造のダイナミクスに基づいて生体反応を正確に解析するために、目下これは最先端の計算手法である[5]。この計算技術を、「タンパク質・RNA」複合体による生体反応(加水分解反応)に応用したところ、従来、タンパク質酵素による触媒反応であると考えられてきた反応が、実際には RNA (transfer RNA) によって駆動されたリボザイム(RNA 酵素)反応であり、まったく新しい反応機構を有することが明らかになった。

さらにこの反応は、RNA のみならずタンパク質部分も同時に触媒作用に直接関与し、リボザイム/タンパク質からなるハイブリッド触媒であることが、QM/MM MD シミュレーションにより初めて明らかになった。そこで我々はこれを「ハイブリッド・リボザイム/タンパク質触媒」と名付けた。この反応機構は、ほぼ同時に、かつ独立に、ロシアの研究グループ(Tukaloら)によって実験的な検証がなされ証明された。さらにこの研究成果は、生命の起源・生命進化の理論にも大きな影響を与えるものであり、今後はその側面からの研究も推進する予定にある。

このように実験に先駆けて、生物物理学・生命科学における新しい重要な「事実」を理論計算が導いた例は、これまでにわずかしかない。特に日本の生物物理学においては一層、そうした傾向が強い。本年度のこれらの研究成果は、量子計算を単に形式的に適用するだけでは到底得られないものである。Structural Informatics 解析技術の開発、構造生物学(理論)の応用、さらには計算物理学などに渡る関連領域を、生体高分子の反応と構造の構築原理の解明に、統合・融合することによって初めて得られたものである。今後の精密な生物物理学の創出に向けた方向性を明示するものでもあり、我々はこれを「量子構造生物学」の創出として、広く提唱しているところである。またその結果として、現在多くの重要な共同研究へと発展しつつある。

3. 研究成果

【1】新しい酵素「ハイブリッド・リボザイム/タンパク質触媒」の発見とその反応機構 [文献 1, 5]

タンパク質などの生体機能高分子の場合には、サイズが巨大であることから、その化学反応(酵素反応や電子・プロトン移動など)を正確に解析するには、大規模な計算が必要となる。そのため、生体分子を以下のような領域に分けて計算する方法(図1)が、現在、国際的にも非常に注目されている。すなわち、

- 1) 電子構造を含めて化学反応を取り扱う量子力学(QM)計算部分:非常に大きな計算量のため、小さな領域をカバー
- 2) 化学反応に直接には関係しない領域に適用する古典理論(MM)計算部分:比較的小さな計算量のため、広い領域をカバー

本年度は、このシステムをさらに分子動力学(MD)計算と組み合わせて用いることにより、分子構造と電子構造のダイナミクスを同時に解析する研究を推進した。これまでは、QM 部分に CPMD が用いられるケースが多かったが、今後は全電子 *ab initio* DFT 計算を用いた解析システムが、(目的に応じて使い分けられながらも)その主流を形成していくであろう。これは、計算パフォーマンスの不利を超えて、その計算精度を追及する理由によるものである。

Gamess ... QM calculation (all electron based HF/DFT hybrid method)

Amber ... MM & MD calculation

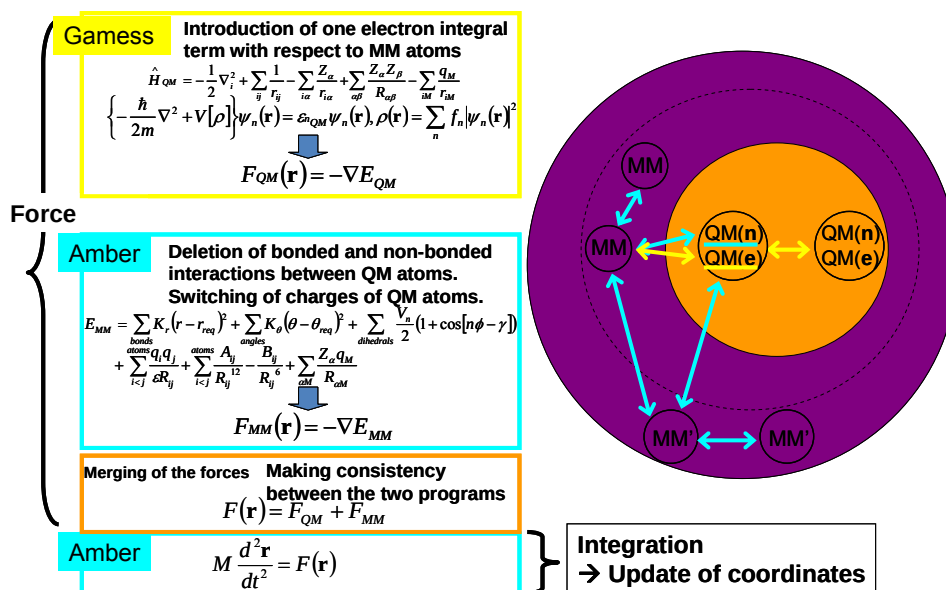


図1 QM/MM ハイブリッド・インターフェースプログラムの役割

したがって、後者の「全電子 *ab initio* DFT 計算」と組み合わせたハイブリッド QM/MM MD シミュレーションは、生体反応機構の詳細を高精度に解析する目的において、現在最先端の計算技術といえるものであり、この解析手法の応用が、今後の生物物理学理論の発展のひとつの鍵を握っているといえる。そのためには、前述のように、Structural Informatics における技術開発もまた同時に不可欠であることを意味する。

こうした全電子 *ab initio* DFT 計算と組み合わせて、ハイブリッド QM/MM MD 計算を生物物理学へ応用した研究は、国際的にみても最先端の成果である。中でも以下のケースは特に重要であり、RNA 分子とタンパク

質酵素の巨大な複合体が行う酵素反応機構の解析である。しかしこれを実現するためには、上記のハイブリッド QM/MM MD 計算システムだけでは、十分ではなかった。なぜなら、量子シミュレーションなどを実行するためには、高精度の計算モデルが不可欠である一方で、X 線結晶構造解析などによって実験的に得られた生体高分子の立体構造には、反応に必須の分子種に関する情報が欠如している場合や、技術的な制限により立体構造に誤謬を含む場合さえもあるからである。そのため、前述のコンピュータ・シミュレーションを高精度に実行するためには、これらの技術的な問題点も克服することが必須である場合が甚だ多い。

例えば、水分子自体が反応に寄与する系では、溶媒水分子の位置が実験的に観測できない場合、その配置情報を理論的に予測することが必須となる。また、触媒反応の対象となる分子(基質とよばれる)を酵素と混ぜた場合には、実際に反応が生じるわけであるから、酵素・基質複合体の結晶を実験的に得ることは原則的にできない。仮に基質を含む結晶を何らかの方法によって得ることができたとしても(酵素単体で結晶を作成した後に、基質分子を結晶にしみこませるなど。Soaking と呼ばれる)、結晶内部での酵素反応等によって実験データの質が深刻に低下する場合も多い。したがって、反応の対象となる基質と酵素との複合体の立体構造を得ることは、多くの場合に困難となる(そこで本来の基質の代わりに、反応は起こさずに結合のみ生じる「阻害剤」を使用して、結晶構造解析を行う場合が非常に多い)。

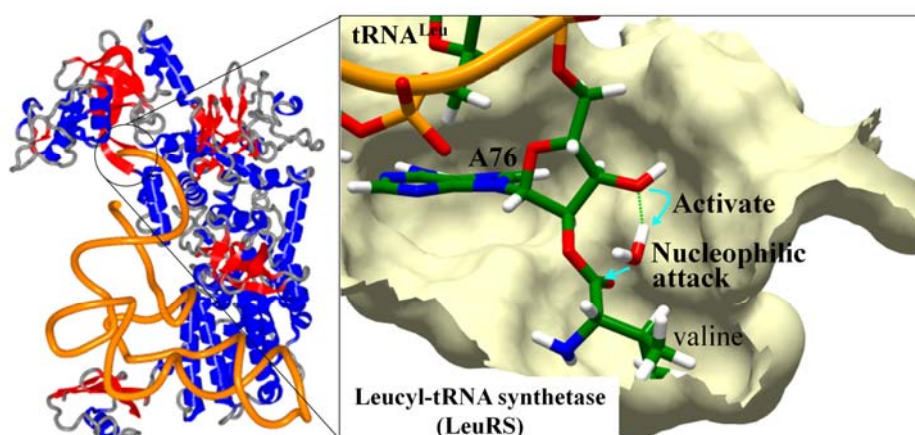


図2 ハイブリッド QM/MM MD 計算の対象となった RNA・タンパク質複合体の立体構造

(左図) ロイシル tRNA 合成酵素 (LeuRS) と、その基質として作用する tRNA^{Leu} 、および tRNA^{Leu} に結合したアミノ酸(バリン)の立体構造。溶媒水分子等を含め、全体として約 165,000 個の原子よりなる系である。(右図) 活性部位の拡大図。さらにこれらの周囲には、溶媒水分子等も存在する。

このように生体高分子の反応機構を解明するためには、実験上の様々な技術的限界が、現在もなお数多く存在するのが実情である。そこで本研究では、生命科学的に重要な系でありながら、こうした実験的な技術上の困難を回避することのできない系に対しても、その限界を理論的に補い、生体分子の立体構造を計算科学的に高精度に再構築するための理論手法の開発を試みた。そのために昨年度において、基質と酵素との分

子間ドッキング・アルゴリズムを新たに開発し、これを用いて研究の対象となる複合体の計算モデルを構築した(図2;後述)。

従来の分子ドッキングシミュレーション計算アルゴリズムは、溶媒水分子を含めずに、しかも酵素の立体構造を固定して計算するのが通常であったが、我々はそれらの制約をすべて解き放ち、溶媒中のタンパク質に対して、そのダイナミカルな立体構造変化を導入した上で、分子ドッキングを初めて実現した。これを FSDD (Fully Solvated Dynamical Docking) 法と名づけた(昨年度の年報参照)。こうした計算手法は、医薬分子設計の領域ではしのぎを削って開発が行われている課題であり、今後はそうした分野のみならず、本研究における量子デザインステップにおいても、広く応用が期待される、重要な解析手法である。

以上のようにして構築した精密な計算モデルは、ロイシル tRNA 合成酵素 (LeuRS) と、その基質として作用する tRNA^{Leu}、およびその tRNA^{Leu} に結合したアミノ酸とからなる(図2参照)。ここで LeuRS (分子量[~]120,000) は、tRNA (分子量[~]15,000) と複合体を形成し、本来はその 3'-末端に特定のアミノ酸分子を正確に結合させる生物機能を有する酵素である。しかし、互いによく似たアミノ酸分子を認識する際には、その識別が誤る場合もあり、LeuRS 自身がそれを校正・編集する(=誤ったアミノ酸分子を加水分解する)機能をも有している。これは校正反応(エディティング反応: Editing Reaction)とよばれ、あらゆる生物において遺伝情報の発現-----すなわち、すべてのタンパク質の生合成-----に不可欠な、極めて重要な反応である。

そこで、LeuRS による校正反応(エディティング反応)の機構を解明するために、前ページの計算モデル(原子数[~]165,000 個)に対して、ハイブリッド QM/MM MD 計算を実行した。本研究では、考え得る4つの反応スキームすべてについて、QM/MM MD 計算を実行し、LeuRS によるエディティング反応における反応経路を解析した。酵素反応機構の解析では、用いる初期構造の十分な検討と適切な反応座標の設定とが、非常に重要である。以上の解析の結果、エネルギー障壁が最も低い最適な反応スキームを見出した。この反応経路(図3)の特徴は、基質部位(tRNA^{Leu} における 76 位のアデノシン A76 およびバリリン)が有するリボースのヒドロキシル基(3'-OH)が、求核剤を活性化する点にある(図2)。これはすなわち、tRNA 自身が反応を駆動することを意味する。したがってこの反応は、誤ったアミノ酸が結合した tRNA^{Leu} (バリル-tRNA^{Leu}) が、触媒機能を有する RNA すなわち“リボザイム”であることを意味する。

しかしながら、tRNA^{Leu} がまったく単独で酵素反応を行うわけではない。反応の開始、つまり求核剤がカルボニル炭素に接近するためには、保存されたアミノ酸であるスレオニンが、求核剤の“通り道”を開く役割をしていることも明らかになった。すなわち、バリル-tRNA^{Leu} によるリボザイム反応は、タンパク質の助けを借りてその活性を向上させているといえる。さらにこのリボザイム反応では、遷移状態のエネルギーを低下させるのに、LeuRS のアミノ酸が関与していることもわかった。このように、LeuRS・バリル-tRNA^{Leu} 複合体によるエディティング反応は、リボザイムとタンパク質が共同で作用する“ハイブリッド触媒”による反応であることが明らかになった。

これまで様々なリボザイムが発見され、その反応メカニズムによって幾つかのクラスに分類されている。本研究において見出したバリル-tRNA^{Leu} は、(1) 水分子が求核剤として作用する点、および (2) タンパク質が反応を直接に手助けする点において、従来のリボザイムとは異なることが示唆される。さらに、これまでの実験結果

を統合すると、本研究において見出された新たなリボザイムのクラスは、LeuRS のみに留まらず、他のアミノシル tRNA 合成酵素である ValRS, IleRS, さらに、ThrRS, PheRS など、複数の酵素を含むことが明らかになった。

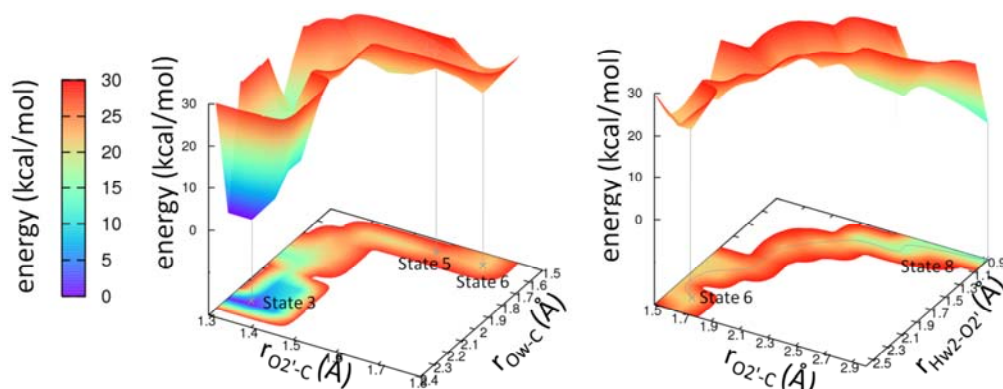


図3 エディティング反応におけるポテンシャルエネルギー面 (PES)

こうしたハイブリッド触媒の存在は、「生命の起源」や「遺伝暗号の起源」にも新たな考え方をもたらすものである。すなわち、「生命の起源」と考えられている RNA ワールド(リボザイムが生体触媒としての機能を担う)から、現在の RNP ワールド(主としてタンパク質が生体触媒としての機能を担う)への変遷を考えた場合、それら原始の生体分子の機能構造や反応機構の間に、大きなギャップのあることが、従来からの大きな問題であった。ハイブリッド触媒は、これらの溝を埋め、より連続的かつ統合的な生命進化の理論モデルを構築するために、不可欠の役割を果たすものと考えられる。

【2】生体・電子系に対する精密な有効ポテンシャル場の創出とその応用 [文献 4]

生体システムにおいて π 電子は、芳香環を有するアミノ酸やヘム・ビタミンなどの補因子等に広く見られ、生物機能に極めて重要な役割を果たしている。タンパク質の立体構造においては、アルギニン(Arg)やリジン(Lys)などの正に荷電したアミノ酸と、トリプトファン(Trp)やチロシン(Tyr)など、芳香環を有するアミノ酸との相互作用が頻繁にみられる。これらはカチオン- π 相互作用と呼ばれ、他の非共有結合性相互作用(ファンデルワールス相互作用や水素結合、疎水性相互作用など)と比べ極めて強く、分子認識や立体構造の安定化に大きく寄与していることがよく知られている。

生体内に多量に存在する金属カチオンである Na^+ や K^+ など、芳香環を有するアミノ酸とカチオン- π 相互作用を形成し、その安定化エネルギーはアミノ酸同士のそれと比べて非常に大きい。しかしこれらは、低分子量の化合物において見出されてきた結合様式であり、実際の生体高分子立体構造の中で、金属カチオン- π 複合体の存在が明らかになった例は、従来、極めて少なかった。このため、その生物機能における役割については、これまでほとんど不明であった。

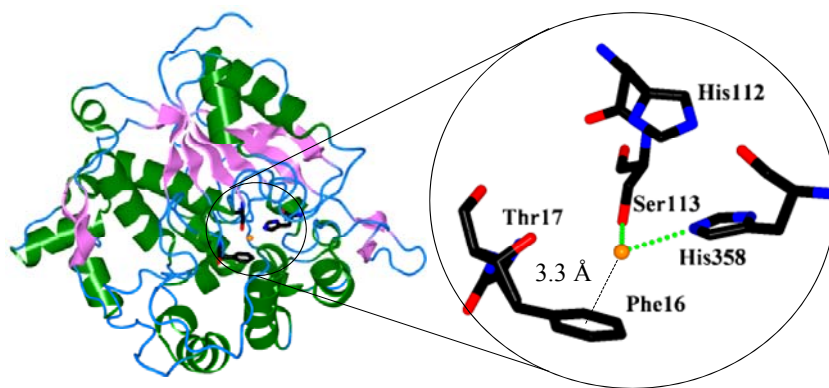


図4 T1 リパーゼの活性部位に存在する Na^+ -Phe 複合体

この立体構造は、大阪大学の松村らにより、X線結晶構造解析によって解析され、その結果に基づき提案されたものであるが(2008年)、 Na^+ イオンの代わりに、水分子である可能性も完全には否定できなかった。

最近、松村(大阪大学)らが行ったT1リパーゼ(脂質分解作用を有する)に対するX線結晶構造解析の結果、活性部位を構成するアミノ酸のひとつであるフェニルアラニン(Phe)の近傍に、球状の電子密度の存在することが明らかになった。松村らは、その電子密度が Na^+ イオンに相当すると考え、T1リパーゼの活性部位にPhe側鎖と Na^+ とのカチオン- π 相互作用が存在することを提案した(図4)。しかし実験手法の限界から、その電子密度が水分子である可能性も否定しきれないのが実情であった。そこで本研究では、分子動力学(MD)計算により、その電子密度の実体が何であるかについて解析した。

そのためにまず、MD計算に一般に用いられているエネルギー関数(m99およびm02)の評価を行った。ここでポテンシャルの比較参照値としては、極めて高精度な量子力学計算法であるCCSD(T)法に対して、さらに基底関数のサイズに因る誤差を補正することにより、「完備な基底関数を構成して計算した場合のエネルギー値」を見積もることによって得られる値を採用した。その結果、m99およびm02ともに、 Na^+ - π 結合に対しては先の比較参照値を全く再現し得ないことがわかった。特にm99における安定化エネルギーは、CCSD(T)による値の半分程度しか無かった(図5を参照)。実際、こうしたエネルギー関数を用いてMD計算を実行すると、 Na^+ -Phe複合体の立体構造が不安定になり、ひいては立体構造自体が壊れる結果となった。このように、これらのポテンシャル場においては、実験構造を全く再現しなかった。

そこで、この問題を真に解決するために有効な計算スキームの開発を試みた。そのために本研究では、芳香環近傍の空間をグリッドに分割し、原子核位置にその中心に有するガウス関数を用いて、各原子に与える電子の「密度関数」を定義し、これにより静電ポテンシャルを求めることによって、全エネルギーをCCSD(T)法によるポテンシャル曲線に適合させるスキームを開発した。このスキームを用いてエネルギー関数を構成することにより、先のCCSD(T)法と同等の計算精度で、しかし必要な計算時間はm99およびm02とほぼ同じレベルにおい

て、エネルギーを求められることがわかった(図6)。この計算法を Grid-based Energy Representation (GER) 法と名付けた。

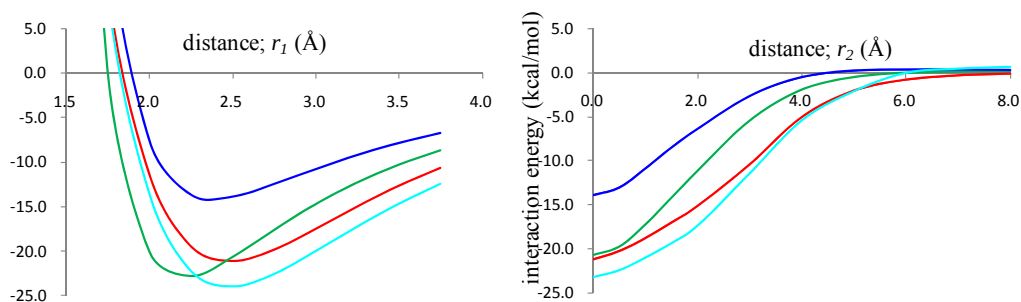


図5 様々な計算手法による, Na^+ -Phe 複合体のポテンシャル場

赤が CCSD(T)によって得られたポテンシャル・カーブ。これは「完備な基底関数を構成して計算した場合のエネルギー値」を見積もることによって得られたものである(いわば正解)。他の曲線は, ff99 (青), ff02 (緑), DFT (シアン)によって計算されたものであり, いずれも CCSD(T)の計算結果と十分に一致するものはない。

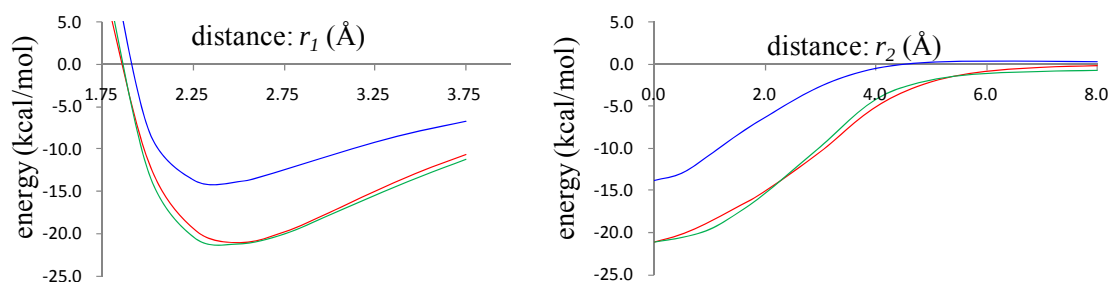


図6 Grid-based Energy Representation (GER) 法によって得られたポテンシャル・カーブ(緑)。

青は ff99 による計算結果。

この GER 法を用いた MD 計算 (5 ns) では, Na^+ -Phe 相互作用様式は安定に保持され, その活性部位の立体構造は, 実験構造を安定に再現した。これより, T1 リパーゼにおける Na^+ -Phe 複合体の役割は, その非常に大きいエンタルピー利得によって, 活性部位の立体構造の安定化に寄与することが明らかになった。また, Phe に結合している Na^+ は, 同時にセリン (Ser) やヒスチジン (His) とも結合している。ここで Phe は疎水性のアミノ酸であるのに対し, Ser および His は親水性のアミノ酸である。一般に, こうした性質の全く異なるアミノ酸同士が安定な相互作用を形成することはできない。ところが, Na^+ がこれら性質の異なるアミノ酸どうしを仲立ちすることにより, 通常は実現不可能な, 疎水的なアミノ酸と親水的なアミノ酸とからなる, 極めて安定なタンパク質コア構造の形成を可能にしていることが明らかになった。これを本研究では, ナトリウム・ブリッジと名付けた。

また, ff99 を用いた MD 計算から明らかのように, Na^+ -Phe 間の安定化エネルギーが小さいと, Na^+ -Phe 結合は保持されない。これは, Na^+ -Phe 結合よりもさらに弱い 水-Phe 結合が安定に保持されないことを示唆している。

実際、水-Phe 結合を仮定した MD 計算においては、実験構造を正確に再現しないことが明らかになった。したがって、X線結晶構造解析で得られた、Phe 近傍の球状の電子密度は、水分子ではあり得ない。このようにして、T1 リパーゼの活性部位における電子密度の実体が Na^+ イオンであり、 Na^+ -Phe 結合によるタンパク質コア構造形成における役割が明らかになった。

以上、本年度の成果は、量子場および古典場の双方における原理・解析を適確に組み合わせて用いることで、巨大な生体情報高分子による生物機能のしくみを、非常に重要な複数の系において解明することに成功した。今後はさらに、こうした方向性を飛躍的に発展させることが、新しい生物物理学分野を切り開くためにも重要である。

4. 研究業績

(1) 研究論文

1. Yohsuke Hagiwara, Osamu Nureki, and Masaru Tateno: Identification of the nucleophilic factors and the productive complex for the editing reaction by leucyl-tRNA synthetase: *FEBS Letters*, **583** (2009), 1901-08. (Cover)
2. Mauro Boero, Jiyoung Kang, Shin Tokumoto, and Masaru Tateno: A First-Principle Exploration of Heme α and Heme α_3 of the Bovine Cytochrome c Oxidase in Reduced and Oxidized Charge States: *J. Comp. Theor. Nanosci.*, **6** (2009), 2640-47.
3. Takehiro Ohta, Yohsuke Hagiwara, Jiyoung Kang, Keigo Nishikawa, Tetsunori Yamamoto, Hidemi Nagao, and Masaru Tateno: Evaluation of Electronic and Geometrical Properties of the Blue Copper Site in Fully Solvated Azurin by QM/MM Hybrid Calculations Using a New Interface Program Connecting QM and MM Engine: *J. Comp. Theor. Nanosci.*, **6** (2009), 2648-55. (Cover Image)
4. Yohsuke Hagiwara, Hiroyoshi Matsumura, and Masaru Tateno: Functional roles of a structural element involving $\text{Na}^+-\pi$ interactions in the catalytic site of T1 lipase revealed by molecular dynamics simulations: *J. Am. Chem. Soc.*, **131** (2009), 16697-705.
5. Yohsuke Hagiwara, Martin J. Field, Osamu Nureki, and Masaru Tateno: Editing mechanism of aminoacyl-tRNA synthetases operates by a hybrid ribozyme/protein catalyst: *J. Am. Chem. Soc.*, **132** (2010), 2751-58.
6. Yohsuke Hagiwara, Hiori Kino, and Masaru Tateno: Modulation of electronic structures of bases through DNA recognition of protein: *J. Phys.: Cond. Mat.*, **22** (2010), 152101. (Selected as "IOP select": Featured Article)

7. Yohsuke Hagiwara and Masaru Tateno: Recent advances in jointed quantum mechanics and molecular mechanics calculations of biological macromolecules: schemes and applications coupled to *ab initio* calculations: *J. Phys.: Cond. Mat.*, in press.
8. Mauro Boero and Masaru Tateno: Quantum-theoretical approaches to proteins and nucleic acids: in The Oxford Handbook of Nanoscience and Technology, Volume I: Basic Aspects (2010), pp.549-98.

(2) 学会発表 (主たるもの)

招待講演等

1. Masaru Tateno. Exploration of Mechanisms of Proton Transfer in Cytochrome c Oxidase Using First Principles Molecular Dynamics, International Workshop on Metalloprotein Functions, 2009 年 7 月 31 日 -8 月 1 日, 兵庫.
2. Masaru Tateno. Computational investigations of mechanisms of enzymatic reactions of RNA-binding proteins, 47th Annual Meeting of Biophysical Society of Japan, 2009 年 10 月 30 日-11 月 1 日, 徳島.
3. Masaru Tateno. 生体超分子における生物機能発現機構の理論的解析, 特定領域研究「生体超分子構造」第6回公開シンポジウム, 2009 年 12 月 1 日-12 月 2 日, 大阪府.

国際会議等

1. Yohsuke Hagiwara, Hiroyoshi Matsumura, Masaru Tateno. Functional roles of a novel structural element involving the Na^+ - π interaction present in the catalytic site of T1 lipase revealed by molecular dynamics simulations, Biophysical Society 54-th annual meeting, 2010 年 2 月 20 日-24 日, San Francisco, California
2. Yohsuke Hagiwara, Hiroyoshi Matsumura, Masaru Tateno. Development and applications of a novel QM/MM hybrid molecular dynamics calculation system on highly parallel supercomputer systems, Biophysical Society 54-th annual meeting, 2010 年 2 月 20 日-24 日, San Francisco, California
3. Mauro Boero, Jiyoung Kang, and Masaru Tateno. Electronic and geometrical structures of hemes a/a3 of the bovine cytochrome c oxidase in the fully-reduced and oxidized states revealed by *ab initio* calculations, Biophysical Society 54-th annual meeting, 2010 年 2 月 20 日-24 日, San Francisco, California
4. Sundaram Arulmozhiraja, Yohsuke Hagiwara, Takao Ohno, and Masaru Tateno. Theoretical identification of structural elements for stabilizing a cavity present in the entrails of the human aryl hydrocarbon receptor

- dioxin binding domain, Biophysical Society 54-th annual meeting, 2010 年 2 月 20 日-24 日, San Francisco, California
5. Mauro Boero, Jiyoung Kang, and Masaru Tateno. Computational analysis of electronic structures of heme a/a_3 of the bovine cytochrome c oxidase in the reduced and oxidized states, 47th Annual Meeting of Biophysical Society of Japan, 2009 年 10 月 30 日-11 月 1 日, 徳島.
 6. Keisuke Matsumoto, Riki Nakamura, Taku Mizukami, Hiroaki Saitou, Masaru Tateno, Kiyoshi Nishikawa, and Hidemi Nagao. Molecular dynamics study on thermodynamical stability of Oxidized Azurin – Reduced Cytochrome c_{551} complex, 47th Annual Meeting of Biophysical Society of Japan, 2009 年 10 月 30 日-11 月 1 日, 徳島.
 7. Riki Nakamura, Keisuke Matsumoto, Hiroaki Saitou, Taku Mizukami, Masaru Tateno, Kiyoshi Nishikawa, and Hidemi Nagao. Stability of Azurin(II) – Cytochrome(II) Complex: An effect of Change of Hydration Structure, 47th Annual Meeting of Biophysical Society of Japan, 2009 年 10 月 30 日-11 月 1 日, 徳島.
 8. Mauro Boero, Jiyoung Kang, Yohsuke Hagiwara, and Masaru Tateno. Computational analysis of interactions between the heme systems and the bovine cytochrome c oxidase in the reduced and oxidized states, 47th Annual Meeting of Biophysical Society of Japan, 2009 年 10 月 21 日-24 日, 徳島.
 9. Shigehide Kuroyanagi, Yohsuke Hagiwara, and Masaru Tateno. Novel channel of glutamine amidotransferase CAB for ammonia transport revealed by molecular dynamics simulations, 47th Annual Meeting of Biophysical Society of Japan, 2009 年 10 月 30 日-11 月 1 日, 徳島.
 10. Sundaram Arulmozhiraja, Yohsuke Hagiwara, Takao Ohno, and Masaru Tateno. Structural modeling and dynamical properties of human aryl-hydrocarbon receptor dioxin binding domain, 47th Annual Meeting of Biophysical Society of Japan, 2009 年 10 月 30 日-11 月 1 日, 徳島.
 11. Yohsuke Hagiwara, Osamu Nureki, and Masaru Tateno. Computational analyses of expression mechanisms of enzymatic functions in leucyl-tRNA synthetase, 47th Annual Meeting of Biophysical Society of Japan, 2009 年 10 月 30 日-11 月 1 日, 徳島.
 12. Tatsunori Nishimura, and Masaru Tateno. A novel theoretical scheme to describe stimulus/response relationships of biochemical reaction networks, 47th Annual Meeting of Biophysical Society of Japan, 2009 年 10 月 30 日-11 月 1 日, 徳島.

国内学会等

1. Shigehide Kuroyanagi, Yohsuke Hagiwara, and Masaru Tateno. Computational analyses of ammonia transport mechanisms in GatCAB, 第82回日本生化学会大会, 2009年10月21日-24日, 神戸.
2. Yohsuke Hagiwara, Osamu Nureki, and Masaru Tateno. Computational analyses of enzymatic reaction mechanisms in leucyl-tRNA synthetase, 第82回日本生化学会大会, 2009年10月21日-24日, 神戸.
3. Sundaram Arulmozhiraja, Yohsuke Hagiwara, Takao Ohno, and Masaru Tateno. Structural modeling and dynamical properties of human aryl-hydrocarbon receptor dioxin binding domain, 第82回日本生化学会大会, 2009年10月21日-24日, 神戸.
4. Tatsunori Nishimura, and Masaru Tateno. Computational analyses of the MAPK signaling cascade exploiting a novel scheme to describe the steady state of biochemical reaction networks, 第82回日本生化学会大会, 2009年10月21日-24日, 神戸.
5. Yohsuke Hagiwara, Osamu Nureki, and Masaru Tateno. Theoretical analyses of enzymatic reaction mechanisms in leucyl-tRNA synthetase, 第32回日本分子生物学会年会, 2009年12月9日-12日, 横浜.
6. Shigehide Kuroyanagi, Yohsuke Hagiwara, and Masaru Tateno. Unidirectional valved mechanism of ammonia transport in GatCAB, 第32回日本分子生物学会年会, 2009年12月9日-12日, 横浜.
7. Sundaram Arulmozhiraja, Yohsuke Hagiwara, Takao Ohno, and Masaru Tateno. Structural modeling and structural characterization of human aryl-hydrocarbon receptor dioxin binding domain, 第32回日本分子生物学会年会, 2009年12月9日-12日, 横浜.
8. Mauro Boero, Jiyoung Kang, and Masaru Tateno. Theoretical analysis of electronic and geometrical structures of hemes a/a₃ modulated by the bovine cytochrome c oxidase in the reduced and oxidized states, 第32回日本分子生物学会年会, 2009年12月9日-12日, 横浜.
9. Tatsunori Nishimura, and Masaru Tateno. A novel computational scheme to optimize kinetic parameters based on experimental stimulus/response data of biochemical reaction networks, 第32回日本分子生物学会年会, 2009年12月9日-12日, 横浜.

(3) その他の発表

プレスリリース、2010年2月

「第3の酵素」を発見！ -- RNA とタンパク質による「ハイブリッド触媒」 ---

毎日新聞(全国版), 読売新聞(全国版), 朝日新聞(全国版)等, 多数のメディアにおいて広く紹介された。

学内サイト <http://www.tsukuba.ac.jp/public/press/100210press.pdf>

2.3. 計算物性グループ

1. メンバ

教授 白石賢二

准教授 岡田 晋

助教 岩田潤一

研究員 高木祥光

2. 概要

計算物性グループは本年度は大きくわけて2つの大きなテーマを中心に研究を推進した。第1のテーマは新しい計算手法の開発、第2のテーマはナノ物質・ナノ材料の機能・物性解明、及び、新奇ナノ物質のデザインを目指したナノサイエンスの研究である。

3. 研究成果

【1】 グラフェンの層間相互作用による電子状態変調

グラファイトの電子状態は構成単位であるグラフェン間の相互作用により、わずかに変調されていることが知られている。すなわち、グラフェンの線形バンドがグラファイトにおいて通常の方物線的なバンド分散を有するようになる。ここでは、自然界に10%程度存在する菱面体晶グラファイト(ABC 積層構造グラファイト)の薄膜が基底状態として、その最外層グラフェン面においてフェリ磁性状態が実現されことを明らかにした[図1]。この磁性状態の起源はグラフェンナリボンにおいて生じる特異な端局在状態であるエッジ状態と等価な状態が菱面体晶グラファイトの表面に於いて生じることによる物である。この結果は、これまで sp² 炭素ネットワークへの端、欠陥の導入がグラファイトにおける磁性発現の必須条件と考えられていたが、完全な sp² ネットワークを有するグラファイトにおいても磁性状態が発現することを初めて理論的に予言した。今後は外場による磁性状態の制御も含めて、スピndeバイスへの応用研究へと繋がることが期待される。

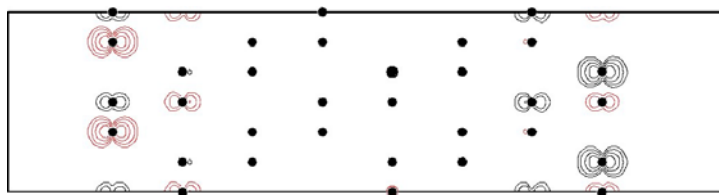


図 1: 菱面体晶グラファイト薄膜表面におけるフェリ磁性状態の分極スピン分布

一方、グラフェンから誘起される新たな構造として折り畳まれたグラフェンは自身との複合構造体として、新たなカテゴリーのグラフェン複合構造体とみなされる。この構造は、数層グラフェンの端において、各層の端間に新たな結合を形成することにより容易に実現される構造であり、グラフェンナノ構造を用いたデバイスにおいても必然的な構造である。我々は図 2 に示す折り畳まれたグラフェンに対する強結合近似計算から、この構造の有する電子物性がもはや孤立グラフェンと大きく異なる新奇 π 電子系となることを明らかにした。すなわち、自身の π 電子との相互作用により、その面間の相対配向に応じて金属-半導体の転移を示し、また金属的な場合、そのフェルミレベル近傍の電子系は通常の金属と同様の性質を有することが明らかになった。

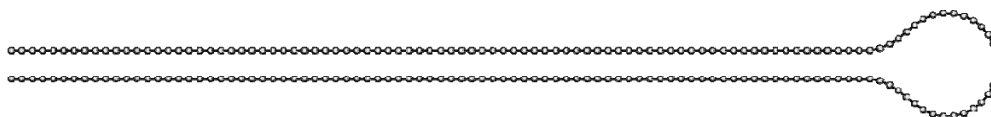


図 2 : 折り畳まれたグラフェンの構造

【2】 絶縁体基板によるグラフェン電子構造変調

グラフェン・グラファイトデバイスにおいて、基板、とりわけ絶縁体基板との複合構造は本質である。しかしながら、これまで絶縁体基板のグラフェンの電子上に及ぼす影響は注目されていなかった。そこで、我々は、平滑な2次元構造を有する六方晶窒化ホウ素(h-BN)シートを用いて絶縁体基板をモデル化し、その上にグラフェンを吸着させることによりグラフェンのフェルミレベル近傍の電子状態がどのように変調されるかを調べた。その結果、グラフェンの線形バンドは、グラフェンと基板の間の相互作用が10meV程度のオーダーであっても、もはや安定ではなく、ギャップを形成することを示した。形成されるギャップの大きさは、基板のh-BNに対するグラフェンの相対配向に強く依存し、20meV～100meVのオーダーとなる[図 3]。これは、基板が異種原子からなるイオン性を有することにより、基板内での電荷分布の偏りが生じ、この偏りによって、グラフェン上の原子の局所ポテンシャル変調が誘起されるためである。ここでは、基板の原子配列とグラフェンの原子配列の間に結晶整合性を課しているが、現実のアモルファス酸化物絶縁体基板の場合は、グラフェンのポテンシャル変調が空間的にランダムに誘起され、結果として基板上のグラフェンは、有限のフェルミレベル状態密度を有する通常の金属的性質が予想される。

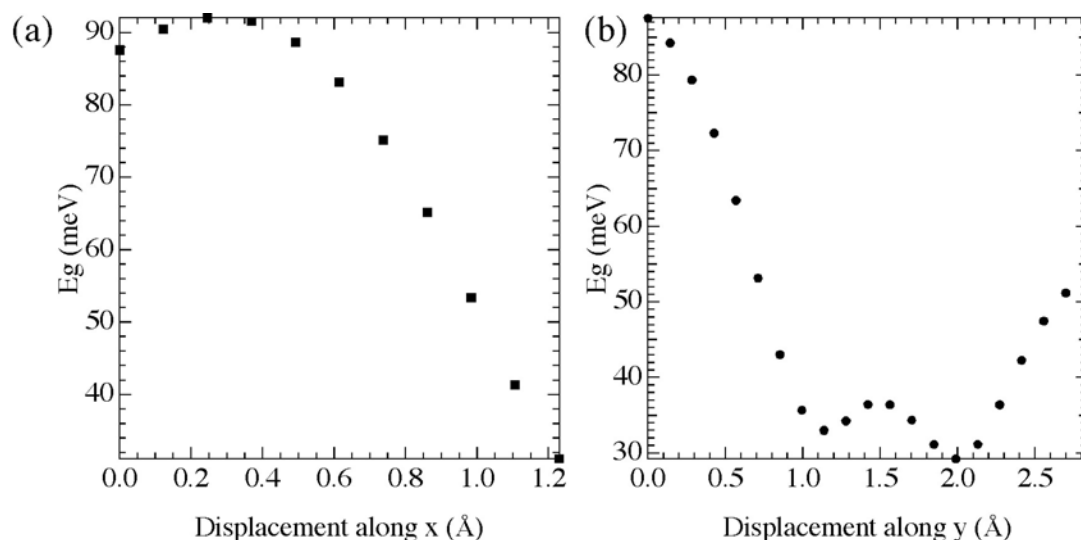


図 3: h-BN 上のグラフェンのバンドギャップの(a)x 軸方向の相対配向、(b) y 軸方向の距離依存性

【3】 吸着原子がグラファイト電子状態に及ぼす影響

次に、原子吸着によるグラファイト表面電子物性変調を明らかにするため、Pt を真空蒸着した高配向性熱分解グラファイト(HOPG)表面の電子状態を、極低温走査トンネル顕微鏡(STM)を用いた走査トンネル分光(STS)計測により詳細に調べた。この結果、白金微粒子は2~4nm 程度の幅を持つ1~2原子層程度の高さのクラスターとしてグラファイト表面上に堆積しており、白金微粒子の極近傍の炭素上において、通常のグラファイト表面では現れない鋭い電子状態密度ピークがフェルミエネルギー近傍に観測された。非弾性トンネル分光による局所フォノン構造計測や第一原理計算結果より、この電子状態密度ピークは Pt が炭素と混成軌道を形成したことで現れた炭素の非結合 π 電子準位であると帰属した。即ち、Pt が炭素と結合したことでグラファイトの π 共役系が崩れ炭素の非結合 π 電子準位がフェルミエネルギー近傍に現れたものと考えられる。この結果は、ある種の金属原子、クラスター吸着によりグラフェンのフェルミレベル近傍の電子状態の制御が可能であることを示したものである。

【3】 超高速並列計算機 PACS-CS 上での実空間密度汎関数法プログラムの開発とその応用

密度汎関数法に基づく第一原理計算は物理・化学のみならず、材料開発の現場においても非常に重要なツールとなっている。本研究は次世代超並列計算機を有効活用し、大規模なナノスケールシステムを扱える実空間密度汎関数コード(RSDFT)の開発を行った。コード開発と平行して、実際に 10000 原子を越えるSiナノワイヤー系に対する電子構造計算、計算科学者との連携によるアルゴリズムの見直しおよびチューニング、性能測定など、様々な角度から研究を進めている。

【4】書き込み／消去耐性が強い MONOS 型メモリ的设计指針の提案

MONOS 型メモリでは、原子レベルの空間である窒化シリコン膜中の欠陥に電荷を注入することによってメモリ機能を発現させているため、その小型化・高速化が可能となることから、次世代メモリの候補として期待されている。しかし、原子レベルの欠陥に電荷(データ)を充電(放電)してデータの書込(消去)を行う際に窒化シリコン膜中の欠陥がどのような振る舞いをするかは全く不明であった。上述の問題を解決するために、第一原理計算を用いて原子レベルで MONOS 型メモリにおける窒化シリコン中の欠陥がデータの書込・消去(電荷の充電と放電)に対してどのように振る舞うかを原子レベルで詳細に明らかにした(K. Yamaguchi 他 IEDM 2009)。得られた結果は以下の通りである。①窒化シリコン中に酸素が混入することによって生じた欠陥はデータの書込・消去によって構造が元に戻らなくなる傾向があること(不可逆的構造変化を起こす傾向があること)を示す(図1)。②一方、窒化シリコン中の窒素空孔を起因とする欠陥はデータの書込・消去を行っても構造が元に戻る。これは、①酸素混入欠陥はメモリ機能の劣化を引き起こすのに対し、②窒素空孔欠陥はメモリ機能の劣化を引き起こさないことを意味する。さらに、窒素空孔欠陥がデータの書込・消去によって引き起こす構造変化はヤン・テラー効果に伴う自発的対称性の破れであるため、原理的に可逆的であることも示した。

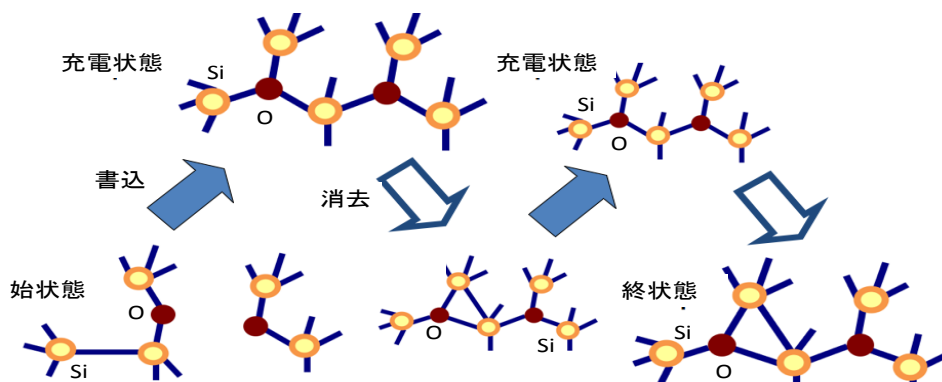


図1: SiN 中欠陥の書込／消去による大きな構造変化。

【5】窒化物半導体における擬立方晶近似の妥当性の理論的研究

窒化物半導体をベースにした光デバイスは擬立方晶近似を用いて設計されることが多い。本研究では第一原理量子論によって擬立方晶近似の妥当性について議論した。その結果、ウルツ鉱構造の窒化物半導体においては擬立方晶近似が大きく破綻することが示された。

【6】次元の異なるナノ構造間のトンネル現象の新しい物理描像の開拓

デバイスサイズ縮小は、デバイスを駆動するための電子数の減少も同時にもたらす。これらの事柄は、集積回路を構成するデバイスの性能・安定性を少数個の電子による駆動によって保つという、大きな課題が生じつ

つあることを意味している。言いかえると、数個の電子で駆動される将来のナノスケールデバイスにおいては個々の電子の動力学を踏まえた少数個の電子の精密制御技術が要求される。この課題はポストスケーリング時代の最大の課題の一つとなると考えられる。本研究では当該課題を考える上で重要となる「ナノ領域における動的電子物性の特徴」を理論実験両面から検討した。具体的には、将来のデバイスにあらわれる諸問題を

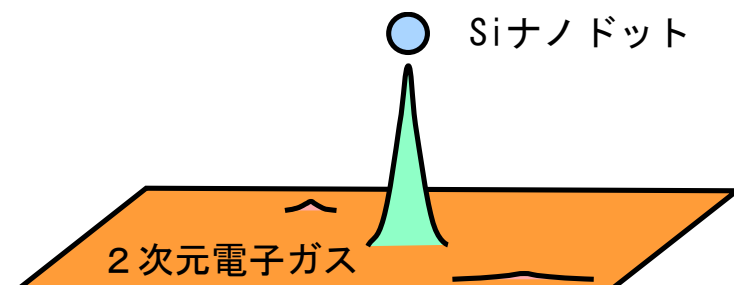


図2: 電子ガスから量子ドットへの電荷注入の模式図。ドットの真下に局在するとトンネルできる。

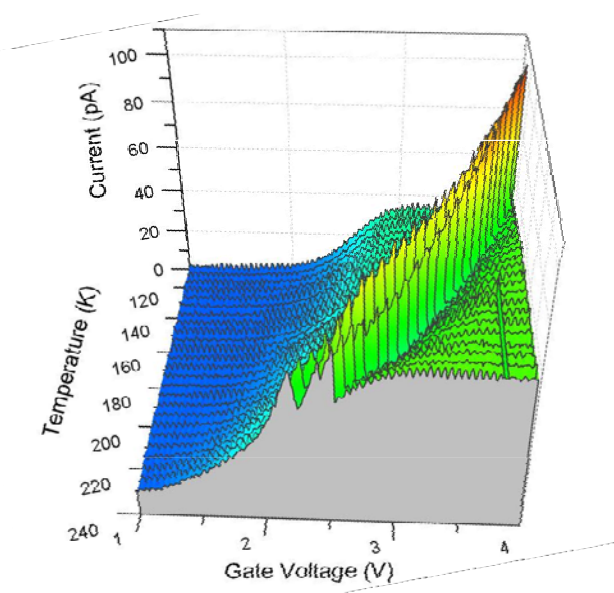


図3: 2次元電子ガス-量子ドット結合系における変位電流の温度依存性。

内包した系として、Siナノドットフローティングゲート構造への電子注入過程を実験、理論両面から検討した。この系においては電子がMOS構造の反転層から、絶縁膜を介したトンネルによりナノサイズのSiナノドットへ注入され、2次元電子ガス-量子ドット結合系と考えられるが、この系におけるトンネルを考えてみる。2次元電子ガスの波動関数が広がっているときには、0次元系の量子ドットへのトンネルは起こりにくい、2次元電子ガスが量子ドット直下で局在したときにはじめて、トンネルが可能となる(図2)。我々は2次元電子ガスからSiナノドットへの電子注入が、従来はないとされてきた直接トンネル領域で温度依存を示すことを見出した(図3、Y. Sakurai 他 JJAP 2010 等)。この特異な温度依存性を理解するには現時点では以下のような「大胆な仮定」が必要となっている。我々が現在用いている大胆な仮定とは以下の通りである。「十分量子ドットの真下で局在し、あるしきい値以上のトンネル確率をもつ波動関数だけが直接トンネルに寄与する」。上記のようなトンネル確率の下限

が存在するという仮定がなぜ必要となるかは今後の課題であるが、トンネル確率の下限は実験における電圧の掃引レートに依存することが実験的に示されている。今後は、上記「トンネル確率の下限」の物理的起源を電子ダイナミクスによって明らかにすると同時に、当該物理的起源がポストスケール時代に使われる電子デバイスにどのような要求をするか考察する予定である。

【7】 オーミック接触の新しい物理モデルの提案

金属と半導体のオーミック接触作製は、様々なデバイスや量子ホール効果等の物性実験において欠かせない技術である。特に、将来の LSI に導入が期待されている金属ソース/ドレインの作製のためには金属とシリコンの界面にナノスケールのオーミック接触を作る必要があり、このとき仕事関数の制御が次の技術的な難題である。これまでオーミック接触は、ショットキー障壁高さを制御することによって達成されていると考えられてきた。しかしながら、これまでの界面物理の知見は、金属と半導体の界面でフェルミレベルピンング現象が起こるため、ショットキー障壁高さの制御が困難であることを示している。そのため、従来のオーミック接触のバンドダイアグラムはフェルミレベルピンング現象との矛盾を含んでいると考えられる。このような観点から、本研究では実験で得られるオーミック接触と第一原理計算で考察した金属／半導体界面のフェルミレベルピンング現象の双方に矛盾のない、新たなオーミック接触のモデル(図 4)を提案した。このモデルでは、ショットキー障壁の広い範囲のエネルギー領域に多数の欠陥レベルが存在しており、電子はこの欠陥レベルを介した共鳴トンネルによる伝導によってオーミック接触が達成されていると考えている。さらに詳細について、今後の研究で本モデルの真偽も含めて検討してゆく予定である。

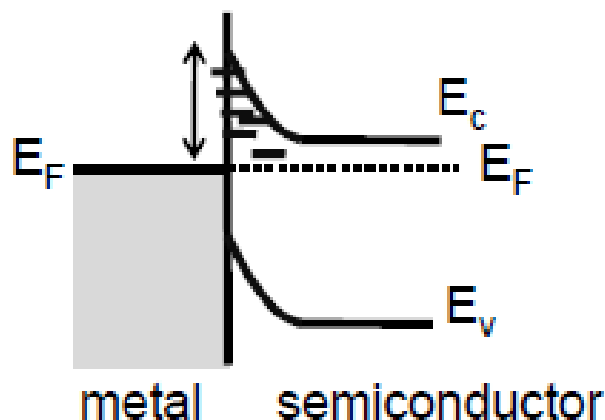


図 4：本研究で提案した新たなオーミック接触のモデル

【8】 ナノスタック構造界面制御手法の提案

MOS 半導体デバイスのように、金属／絶縁体／半導体のような 3 種類の物質が積層構造を作っており、中間に存在する絶縁体の膜厚がナノスケールになってくると、二つの界面を別個に考えるわけにはいかないことを我々が提案していたが、当該積層構造を制御する方法を理論的に提案した。第一が Ce 酸化物に代表される Multivalent 酸化物の利用、第二が炭素等のヘテロ元素の次世代絶縁膜への導入による界面熱力学の設計である。2つの手法とも実験的にその有効性が確認された。

4. 研究業績**<発表論文>**

1. Shingo Okubo, Toshiya Okazaki, Naoki Kishi, Takeshi Nakanishi, Susumu Okada and Sumio Iijima, "Diameter-Dependent Band Gap Modification of Single-Walled Carbon Nanotubes by Encapsulated Fullerenes" Journal of Physical Chemistry C, Vol. 113, 571 - 575 (2009).
2. Keisuke Sawada, Fumiyuki Ishii, Mineo Saito, Takazumi Kawai, and Susumu Okada, "Phase Control of Graphene Nanoribbon by Means of Carrier Doping: Antiferromagnetic, Noncollinear-Magnetic, and Ferromagnetic Phases", Nano Letters, Vol. 9 (1), pp 269--272 (2009).
3. Kazuyuki Uchida and Susumu Okada, "Electronic Structure of Carbon Nanotubes in Field-Effect Transistor: A First-Principle Study", Physical Review B Vol. 79, art. no. 085402 (2009).
4. Dam Hieu Chi, Nguyen Thanh Cuong, Ayumu Sugiyama, Taisuke Ozaki, Akihiko Fujiwara, Tadaoki Mitani, and Susumu Okada, "Adsorption and diffusion of Pt atoms on single-walled carbon nanotubes", Physical Review B Vol. 79, art. no. 115426 (2009).
5. Susumu Okada and Toshio Kobayashi, "Electronic Properties of Graphite with Rotational Stacking Arrangement", Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 48, art. no. 050207 (2009).
6. Susumu Okada, "Electronic Structures and Energetics of Semiconducting Carbon Nanotubes Absorbed on SiO₂ Surfaces", Chemical Physics Letters, Vol. 474, pp. 302 - 306 (2009).
7. Yoshiteru Takagi and Susumu Okada, "Theoretical calculation for the ultraviolet optical properties of single-walled carbon nanotubes", Physical Review B Vol. 79, art. no. 233406 (2009).
8. Takazumi Kawai, Susumu Okada, Yoshiyuki Miyamoto, and Hidefumi Hiura, "Self-redirection of tearing edges in graphene: Tight-binding molecular dynamics simulations", Physical Review B Vol. 80, art. no. 033401 (2009).

9. Soon-Kil Joung, Toshiya Okazaki, Naoki Kishi, Susumu Okada, Shunji Bandow, and Sumio Iijima, "Effect of Fullerene Encapsulation on Radial Breathing Mode Frequencies of Single-Wall Carbon Nanotubes", *Physical Review Letters*, Vol. 103, art. no. 027403 (2009).
10. Susumu Okada, "Atomic configurations and energetics of vacancies in hexagonal boron nitride: First-principles total-energy calculations", *Physical Review B* Vol. 80, art. no. 161404(R) (2009).
11. Minoru Otani, Susumu Okada, and Yasuharu Okamoto, "Intrinsic Dipole Moment on the Capped Carbon Nanotubes", *Physical Review B* Vol. 80, art. no. 153413 (2009).
12. Susumu Okada, "Formation of Graphene Nanostructures on Diamond Nanowire Surfaces", *Chemical Physics Letters*, Vol. 483, pp. 128--132 (2009).
13. Takahiro Kondo, Yosuke Iwasaki, Yujiro Honma, Yoshiteru Takagi, Susumu Okada, and Junji Nakamura, "Formation of non-bonding π electronic states of graphite due to Pt-C hybridization", *Physical Review B* Vol. 80, art. no. 233408 (2009).
14. Jun-Ichi Iwata, Daisuke Takahashi, Atsushi Oshiyama, Taisuke Boku, Kenji Shiraishi, Susumu Okada, and Kazuhiro Yabana, "Massively-parallel electronic-structure calculations based on the real-space density-functional theory", *Journal of Computational Physics*, Vol. 229, pp. 2339-2363 (2010).
15. Susumu Okada, "Semiconducting Electronic Structure of Graphene Adsorbed on Insulating Substrate: Fragility of the Graphene Linear Dispersion Band", *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol. 49, art. no. 020204 (2010).
16. Kazuhiro Yanagi, Yasumitsu Miyata, Zheng Liu, Kazu Suenaga, Susumu Okada, and Hiromichi Kataura, "Influence of metallic or semiconducting nanotube walls on encapsulated π -conjugated molecules", *Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 114, pp. 2524-2530 (2010).
17. Yoshiteru Takagi and Susumu Okada, "Optical Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes in Ultra-Violet Region", *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol. 49, art. no. 02BB01 (2010).
18. Susumu Okada, Yoshiteru Takagi, and Takazumi Kawai, "Formation of Multi-Walled Nanotubes from Diamond Nanowires", *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol. 49, art. no. 02BB02 (2010).
19. Yoshiteru Takagi and Susumu Okada, "Electronic Structure Modulation of Folded Graphene", *Journal of Physical Society of Japan*, Vol. 79, art. no. 033702 (2010).
20. Katsunori Wakabayash, Ryutaro Tomita, Yuhei Natsume, and Susumu Okada, "Edge states and flat bands of graphene nanoribbons with edge modification", *Journal of Physical Society of Japan*, Vol. 79, art. no. 034706 (2010).

21. Minoru Otani, Mikito Koshino, Yoshiteru Takagi, and Susumu Okada, "Intrinsic Magnetic Moment on (0001) Surfaces of Rhombohedral Graphite", Physical Review B, Vol. 81, art. no. 161403(R) (2010).
22. J.-I. Iwata, D. Takahashi, A. Oshiyama, T. Boku, K. Shiraishi, S. Okada, K. Yabana, "A Massively-parallel electronic-structure calculations based on real-space density-functional theory", J. Comp. Phys. 229, 2339 (2010).
23. J.-I. Iwata, "First-Principles Calculation for Extremely Large Systems by Parallel Computations Based on the Order- N^3 Real-Space Density-Functional Theory", Journal of Computational Theoretical Nanoscience 6, 2514 (2009).
24. J.-I. Iwata, A. Oshiyama, K. Shiraishi, "Large-Scale First-Principles Electronic Structure Calculations for Nano-Meter Size Si Quantum Dots", e-Journal of Surface Science and Nanotechnology 8, 48 (2010)
25. Y. Sakurai, J. Iwata, M. Muraguchi, Y. Shigeta, Y. Takada, S. Nomura, T. Endoh, S.-I. Saito, K. Shiraishi, M. Ikeda, K. Makihara, S. Miyazaki, "Temperature Dependence of Electron Tunneling between Two Dimensional Electron Gas and Si Quantum Dots", Jpn. J. Appl. Phys. 49, 014001 (2010).
26. Y. Sakurai, S. Nomura, Y. Takada, J. Iwata, K. Shiraishi, M. Muraguchi, T. Endoh, T. Shigeta, M. Ikeda, K. Makihara, S. Miyazaki, "Anomalous temperature dependence of electron tunneling between a two-dimensional electron gas and Si dots", Physica E, 42, 918 (2010)
27. K. Yamaguchi, A. Otake, K. Kobayashi, and K. Shiraishi, "Atomistic origin of high-quality "novel SiON gate dielectrics"", MICROELECTRONIC ENGINEERING, 86: 1680-1682 (2009)
28. K. Shiraishi, "Theoretical models for work function control", MICROELECTRONIC ENGINEERING, 86: 1733-1736 (2009) (Invited Paper).
29. N. Umezawa, K. Shiraishi, and T. Chikyow, "Stability of Si impurity in high-kappa oxides", MICROELECTRONIC ENGINEERING, 86: 1780-1781 (2009)
30. A. Otake, A. K. Yamaguchi, K. Kobayashi, and K. Shiraishi, "Theoretical studies on the charge trap mechanism of MONOS type memories -Relationship between atomistic information and program/erase actions", MICROELECTRONIC ENGINEERING, 86: 1849-1851 (2009)
31. T. Obata, J.-I. Iwata, K. Shiraishi, and A. Oshiyama, "First principles studies on In-related nitride semiconductors", JOURNAL OF CRYSTAL GROWTH, 311: 2772-2775 (2009)
32. Y. Kangawa, T. Akiyama, T. Ito, K. Shiraishi, K. Kakimoto, "Theoretical approach to structural stability of c-GaN: How to grow cubic GaN", JOURNAL OF CRYSTAL GROWTH, 311: 3106-3109 (2009)

〈学術講演〉

〈招待講演〉

国際会議

1. K. Shiraishi, "Physics for Si nanowire FET and its fabrication", PICE International Symposium on Silicon Nano Devices in 2030: Prospects by World's Leading Scientists, October 13-14, 2009, Tokyo, Japan.
2. K. Shiraishi, "Physics of Nano-Interfaces and Nano-Structures for Future Si Nano-Devices", 216th Meeting of Electrochemical Society, October 4-9, 2009, Vienna, Austria.
3. S. Nomura, Y. Sakurai, Y. Takada, K. Shiraishi, M. Muraguchi, T. Endoh, M. Ikeda, K. Makihara, S. Miyazaki, "Physics of Nano-contact between Si Quantum Dots and Inversion Layer", 216th Meeting of Electrochemical Society, October 4-9, 2009, Vienna, Austria.
4. K. Shiraishi, "Physics of Nano-Interfaces and Nano-Structures for Future Si Nano-Devices", 10th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures, September 21-25, 2009, Granada, Spain.
5. K. Shiraishi, "Guiding Principles toward Future Gate Stacks Given by the Construction of New Physical Concepts", 2009 Symposium on VLSI Technologies, June 15-17, 2009, Kyoto, Japan.
6. K. Shiraishi, "Theoretical models for work function control", 16th biannual conference of Insulating Films on Semiconductors, June 29- July 1, 2009, Cambridge, UK
7. K. Shiraishi, K. Yamaguchi, A. Otake, and K. Kobayashi, "Atomistic Studies for MONOS-Type Charge Trap Memories. -A Theoretical Guiding Principles for High Program/Erase Endurance", The 15th International Workshop on the Physics of Semiconductor Devices, Dec.15-19, New Delhi, India
8. K. Shiraishi, "Nano Device Design by Theoretical Approach", 2009 International Conference on Solid State Devices and Materials, Short Course, "From Basic Theory to Newest Application in MOS Devices", Oct. 6, 2009, Sendai, Japan.

国内学会

9. 白石賢二、「ポストスケーリング時代にデバイス・物性物理は何をなすべきか?」、2009年春季第56回応用物理学関係連合講演会シンポジウム、「ポストスケーリング時代をデバイス・物性物理から斬る-これが半導体デバイスの未来像だ-」、筑波大学、つくば市 2009年3月30日-4月2日

10. 白石賢二 「埋もれた界面に関する理論および計算科学研究の最前線」、2009 年春季第 56 回応用物理学関係連合講演会シンポジウム、「埋もれた界面に関する理論および計算科学研究の最前線」、筑波大学、つくば市 2009 年 3 月 30 日-4 月 2 日
 11. 村口正和, 遠藤哲郎, 牧原克典, 池田弥央, 宮崎誠一, 櫻井蓉子, 高田幸 宏, 野村晋太郎, 白石賢二、「少数電子で動く未来デバイスの姿 ? 量子電子ダイナミクスからのメッセージ - 」、2009 年春季第 56 回応用物理学関係連合講演会 シンポジウム「ポストスケーリング時代をデバイス・物性物理から斬る-これが 半導体デバイスの未来像だ-」、筑波大学、つくば市、2009 年 3 月 30 日-4 月 2 日
 12. 岩井洋、名取研二、白石賢二、山田啓作、大毛利健治、筒井一生、角嶋邦 之、パールハットアヘメト、「シリコンナノワイヤ FET 研究の現状とロードマップ作成の考え方」2009 年春季第 56 回応用物理学関係連合講演会シンポジウム 「ナノ CMOS への新展開-高機能化・高性能化を図る新材料・新構造技術」、筑波 大学、つくば市、2009 年 3 月 30 日-4 月 2 日
 13. 野村晋太郎、櫻井蓉子、高田幸宏、白石賢二、村口正和、遠藤哲郎、池 田弥央、牧原克典、宮崎誠一、「電子励起状態を介した量子ドットへのトンネル 現象の変調」、2009 年春季第 56 回応用物理学関係連合講演会シンポジウム、「Si 系 および C 系ナノ構造と励起プロセス」、筑波大学、つくば市、2009 年 3 月 30 日-4 月 2 日
 14. 白石賢二「Si ナノワイヤのバンド構造解析」、2010 年春季第 57 回応用物理 学関係連合講演会シンポジウム、「2020-30 年代のナノエレクトロニクスデバイスの本命を考える」東海大学、秦 野、2010 年 3 月 17 日-20 日
 15. 白石賢二「イオン性と共有結合性が織りなす新しい材料科学の世界-High-k ゲートスタックを振り返って」、2010 年秋季第 70 回応用物理学会学術講演会シンポジウム、「High-k ゲートスタック研究を振り返り次のステップへ 」、富山大学、富山、2009 年 9 月 8 日-11 日
 16. K. Shiraishi, K. Kamiya, M. Tateno, M. Boero, A. Oshiyama, "First principles studies on the proton transfer mechanism in cytochrome *c*/ oxidase", 第 47 回日本生物物理学会年会シンポジウム "Elucidation of Protein Functions at the Atomic Level with X-ray structural, Vibrational spectroscopic, Molecular biological and Theoretical analyses", Oct.31-Nov.1, 2009, Tokushima, Japan.
- <一般講演>
17. Jun-ichi Iwata, Atsushi Oshiyama, Kenji Shiraishi, "Large-scale first-principles electronic structure calculations for nano-meter size Si quantum dots", 10th International Conference on Atomically Controlled Surface, Interfaces, and Nanostructures, Sep.21-25, 2009, Granada, Spain

18. K. Yamaguchi, A. Otake, K. Kobayashi and K. Shiraishi, "Atomistic Origin of High-Quality, "Novel SiON Gate Dielectrics", 16th biannual conference of Insulating Films on Semiconductors, June 29- July 1, 2009, Cambridge, UK
19. N. Umezawa, K. Shiraishi, T. Chikyow, "Stability of silicon impurity in high-k oxides", 16th biannual conference of Insulating Films on Semiconductors, June 29- July 1, 2009, Cambridge, UK
20. A. Otake, K. Yamaguchi, K. Kobayashi and K. Shiraishi, "Theoretical Studies on the Charge Trap Mechanism of MONOS-Type Memories -Relationship between Atomistic Information and Program/Erase Actions", 16th biannual conference of Insulating Films on Semiconductors, June 29- July 1, 2009, Cambridge, UK
21. M. Kouda, N. Umezawa, K. Kakushima, P. Ahmet, K. Shiraishi, T. Chikyow, K. Yamada and H. Iwai "Charged defects reduction in gate insulator with multivalent materials", 2009 Symposium on VLSI Technologies, June 15-17, 2009, Kyoto, Japan.
22. R. Hasunuma, C. Tamura, T. Nomura, Y. Kikuchi, K. Ohmori, M. Sato, A. Uedono, T. Chikyow, K. Shiraishi, K. Yamada, and K. Yamabe, "Reversible and Irreversible Degradation Attributing to Oxygen Vacancy in HfSiON Gate Films during Electrical Stress Application", 2009 International Electron Devices Meetings, Dec. 7-9 Baltimore, USA.
23. M. Sato, S. Kamiyama, Y. Sugita, T. Matsuki, T. Morooka, T. Suzuki, K. Shiraishi, K. Yamabe, K. Ohmori, K. Yamada, J. Yugami, K. Ikeda, and Y. Ohji, "Negatively Charged Deep Level Defects Generated by Yttrium and Lanthanum Incorporation into HfO₂ for V_{th} adjustment, and the Impact on TDDB, PBTI and 1/f noise", 2009 International Electron Devices Meetings, Dec. 7-9 Baltimore, USA.
24. K. Yamaguchi, A. Otake, K. Kobayashi, and K. Shiraishi, "Atomistic Guiding Principles for MONOS-Type Memories with High Program/Erase Cycle Endurance", 2009 International Electron Devices Meetings, Dec. 7-9 Baltimore, USA.
25. J.-I. Iwata, K. Shiraishi, A. Oshiyama, "First-principles calculations for Si nanowires in nanometer diameters", International Symposium Silicon Nano Device 2030, 2009.10.13-14 Tokyo
26. J.-I. Iwata, "Density-Functional Simulation", Edinburgh-Tsukuba Computational Science Workshop, 2010.2.22-23 Edinburgh University
27. Y. Shinohara, K. Yabana, Y. Kawashita, J.-I. Iwata, T. Otake, "TDDFT Simulation for Electron-Phonon Dynamics in Dielectrics under Ultra short Laser Pulse", The 3rd Theory Meets Industry International Workshop, 2009.11.11-13 名古屋国際センター

28. Y. Futamura, H. Tadano, T. Sakurai, J.-I. Iwata, “Scalable Parallel Algorithm for Electronic Structure Calculations by Band Localization”, International Symposium of Electronic Structure Calculations, 2009.12.7-9 東大弥生講堂一条ホール
29. Y. Futamura, H. Tadano, T. Sakurai, J.-I. Iwata, “Scalable Eigensolver for Electronic Structure Calculations on Hierarchical Parallel Computers”, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, 2010.2.24-26 Grand Hyatt Seattle, Seattle, Washington
30. 李 映勲, 永田貴弘, 角嶋邦之, 白石賢二, 名取研二, 岩井 洋、「引っ張り歪みSiナノワイヤの電子構造とバリスティック伝導」、2009 年春季第 56 回応用物理学関係連合講演会、筑波大学、つくば市 2009 年 3 月 30 日-4 月 2 日
31. 櫻井蓉子, 野村晋太郎, 白石賢二, 村口正和, 遠藤哲郎, 池田弥央, 牧原克典, 宮崎誠一、「Si 量子ドットフローティングゲート MOS キャパシタにおける過渡電流特性」、2009 年春季第 56 回応用物理学関係連合講演会、筑波大学、つくば市 2009 年 3 月 30 日-4 月 2 日
32. 高田幸宏, 村口正和, 遠藤哲郎, 野村晋太郎, 白石賢二、「将来のナノコンタクトを目指したオーミック接触の再考」、2010 年秋季第 70 回応用物理学学会学術講演会、富山大学、富山、2009 年 9 月 8 日-11 日
33. 山口慶太, 大竹 朗, 小林賢司, 白石賢二、「MONOS 型メモリの書き込み／消去の繰り返しに対する電子・原子構造の振る舞い」、2010 年春季第 57 回応用物理学関係連合講演会、東海大学、秦野市 2010 年 3 月 17 日-3 月 20 日
34. 大竹 朗, 山口慶太, 小林賢司, 白石賢二、「MONOS 型メモリの電荷蓄積機構における水素混入効果の理論的検討」、2010 年春季第 57 回応用物理学関係連合講演会、東海大学、秦野市 2010 年 3 月 17 日-3 月 20 日
35. 吉崎智浩, 白石賢二, 梅澤直人、「光励起による La 原子の Multi-Valence 化の理論的検討」、2010 年春季第 57 回応用物理学関係連合講演会、東海大学、秦野市 2010 年 3 月 17 日-3 月 20 日
36. 高田幸宏, 村口正和, 遠藤哲郎, 野村晋太郎, 白石賢二、「将来のナノスケールコンタクトを目指した新しいオーミックコンタクトモデルの考察」、2010 年春季第 57 回応用物理学関係連合講演会、東海大学、秦野市 2010 年 3 月 17 日-3 月 20 日
37. 李 映勲, 角嶋邦之, 白石賢二, 名取研二, 岩井 洋、「バリスティックSiナノワイヤトランジスタの電気特性の直径依存性」、2010 年春季第 57 回応用物理学関係連合講演会、東海大学、秦野市 2010 年 3 月 17 日-3 月 20 日
38. 海老原康裕, 白石賢二, 山口敦史、「窒化物半導体のバンド構造の歪み依存性の理論的研究」。2010 年春季第 57 回応用物理学関係連合講演会、東海大学、秦野市 2010 年 3 月 17 日-3 月 20 日

39. 村口正和, 高田幸宏, 櫻井蓉子, 野村晋太郎, 白石賢二, 牧原克典, 池田弥央, 宮崎誠一, 重田育照, 遠藤哲郎、「2次元電子ガスー量子ドット界面における電子トンネル過程に対する微視的考察」、日本物理学会第65回年次大会、岡山大学、岡山市、2010年3月20日-3月23日
40. 岩田潤一, 白石賢二, 押山淳、「数nm直径Siナノワイヤに対する大規模第一原理電子状態計算」、日本物理学会第65回年次大会、岡山大学、岡山市、2010年3月20日-3月23日
41. 櫻井蓉子, 高田幸宏, 野村晋太郎, 白石賢二, 村口正和, 遠藤哲郎, 池田弥央, 牧原克典, 宮崎誠一、「光励起下における電子ガスー量子ドット結合系のC-V特性とI-V特性」、日本物理学会2009年秋季大会、甲南大学、神戸市、2009年9月20日-23日
42. 岩田潤一、「Large-Scale first-principles studies on Si nano dots」、第5回計算科学による新たな知の発見・統合・創出シンポジウム、2009.5.14 筑波大学
43. 篠原康、矢花一浩、川下洋輔、岩田潤一、乙部智仁、「実時間・実空間法による固体ダイナミクスの第一原理シミュレーション」、日本物理学会2009年秋季大会、2009.9.25-28 熊本大学黒髪キャンパス
44. 二村保徳、多田野寛人、櫻井鉄也、岩田潤一、「バンド局所化による電子状態計算の高性能並列アルゴリズム」、応用数理学会2009 若手優秀講演賞、2009.9.28-30 大阪大学豊中キャンパス
45. 岩田潤一、「超並列大規模第一原理電子状態計算用コードRSDFTの開発と応用」、特異値・固有値合同ワークショップ、2009.11.21-22 筑波国際会議場
46. 岩田潤一、「実空間密度汎関数法コードRSDFTの開発と応用」、物性研短期研究会、2009.12.10-11 東京大学物性研究所
47. 篠原康、矢花一浩、川下洋輔、岩田潤一、乙部智仁、「第一原理計算によるコヒーレントフォノン生成機構の解明」、第70回応用物理学会学術講演会、2009.9.8-11 富山大学
48. 岩田潤一、「実空間密度汎関数コード(RSDFT)の開発と応用」、次世代情報機能・材料分野公開研究会「新物質とエネルギー」、2010.3.10-11 東京国際フォーラム

2.4. 原子核理論グループ

1. メンバ

教授 矢花 一浩

講師 橋本 幸男

研究員 稲倉 恒法

2. 概要

当グループは、ともにフェルミ多粒子系として共通する核子多体系としての原子核、及び電子多体系としての物質科学の分野において量子ダイナミクス計算を発展させ、原子核の構造と反応、及び物質と光の相互作用に関する研究を展開している。

3. 研究成果

【1】原子核集団運動の理論、不安定核の構造

核子多体系としての原子核物理学の分野で、時間依存密度汎関数理論を中心とする量子多体理論を発展させ、陽子数と中性子数のアンバランスな不安定原子核の構造及び反応に関し、宇宙における元素合成過程を理解するのに必要とされる情報を得ることを視野に入れながら研究を展開している。この研究は、理化学研究所の理論グループ(中務准主任研究員のグループ)との密接な連携のもとに進めている。

(1) BCS 形式による時間依存密度汎関数理論の拡張(江幡、中務(理研)、稲倉、橋本、矢花)

原子核を系統的に計算する為には、対相関と変形の効果を取り入れる事が重要である。我々は超伝導の理論としてよく知られたBCS(Bardeen-Cooper-Schrieffer)理論を時間依存の方法へ拡張し、三次元座標空間のメッシュ表示を用いた実時間発展のプログラム開発を行なった。重い原子核に重要な核子超流動性を取り入れた記述を可能にし、線形応答の実時間計算や重イオン反応計算などに利用する事を目的とする。昨年度は現実的なSkyrme有効相互作用によるテスト計算を実行したが、今年度はより重い核種の計算を可能とするための準備と、プログラムの完成を確認する為の比較を行った。重い領域への準備としては広範な原子核の超流動性を表す対相関エネルギー汎関数の導入を行った。対相関エネルギー汎関数の導入は成功したが、重い領域を対象とする為には、より精度の良い基底状態を用意する必要がある事が分かった。プログラム完成については変形核のアイソスカラー型四重極の強度分布関数を材料に、対相関についてBCS理論よりも厳密な

HFB(Hartree-Fock-Bogoliubov)理論に基づく計算と比較した。その結果、HFB 理論に基づく計算とかなり近い計算結果を出している事が分かった。また、励起モードに依存して自己無撞着性の重要性が異なる事が分かった。現在は系統的計算への準備と重イオン反応計算の準備を行なっている。

(2) 時間依存密度汎関数理論による原子核の応答関数の系統的計算 (稲倉、中務(理研)、矢花)

安定核、不安定核を分け隔てることなく広範囲に亘って原子核の光核反応の断面積を求める系統的計算を進めた。光核反応は、微視的には最も単純な集団励起モードで表現されるので、これモードから多くの原子核の性質が引き出せる。しかしながら、実験で観測されているのは安定核の一部だけであるので、これを計算する事で原子核の性質の理解が深められると共に、今後の実験の指針を与える事にもなる。更に、この光核反応は元素組成が起きていると考えられている超新星爆発の r 課程にも深く関係している。一部の原子核の低励起エネルギー領域に現れるピグミー共鳴状態の有無が、元素組成の成分率に大きな影響を与えるだが、そのピグミー共鳴状態の発現条件は不明のままである。光核反応の系統的計算を行う事で、ピグミー共鳴状態が発現する機構の解明に一筋の光を与えた。中性子過剰核ではフェルミレベルが浅くなり、緩く束縛された一粒子軌道が現れてくる。特に軌道角運動量が小さな軌道では空間的に広がった波動関数を持つ。この軌道がピグミー共鳴状態の発現に重要な役割を担っている事を示した。

(40) 原子核の三次元的回転運動の理論 (橋本、堀端(青森大))

今年度はオスmium 182Os の傾斜角回転(tilted axis rotation; TAR)モードを含む励起状態について生成座標法(GCM)を用いて調べた。平均場近似では、オスmiumは prolate 変形(レモン型)をしているので、主たる回転軸が乗っている“赤道”から見て“北緯”方向と“南緯”方向に対称にクランクハートレーフォックボゴリェフ(CHFB)解が存在する。量子力学的には、これらの対称な平均場解の間にトンネル効果で結合が生じ、北緯領域の解と南緯領域の解で縮退していたものが分離する可能性が考えられている。実験結果では、P.M.Walkerらの実験で得られたK 量子数が8のバンドにおいて、基底状態のバンドとのバンド交差後の“シグネイチャ・スプリットイング”と呼ばれる現象がこのトンネリングのアイディアで説明できると期待している。GCMを用いた計算によって角運動量がJ=22から28の領域でエネルギー・スプリットイングが150keV から250keV という値が得られた。GCM計算の精度を上げて、波動関数の構造と一粒子運動の構造変化の関係を詰める必要がある。

(41) Gogny 力を用いた時間依存 HFB コードの開発 (橋本、笹倉)

我々は、Gogny 力を用いた時間依存HFB(TDHFB)方程式を数値的に解く方法を開発・展開している。微小振幅の撃力を与えた波動関数を初期条件にした場合にはこの方法は準粒子RPAになる。今回は、振幅

が微小に限らない変形を原子核に与えたときの原子核の応答を計算した。この計算では、RPAの線形近似では取り込めない大振幅の非線形効果を扱うことになる。注目点は、大振幅振動運動になっていく際の周期と振動中心の変化、および振幅の時間変化の様子である。RPAのような線形領域の状況ではないので、“何を見ていくか”も含めて考えていく必要がある。状況が比較的わかりやすいのがチタン(Ti)52である。そこでは、球形にひとつ、prolate 変形側にひとつというように、大きく2種類の振動中心があり、拘束条件付きHFBによって大きな変形を与えられたチタン52の核は巨大共鳴領域のエネルギーに相当する高い振動数の振動運動をしつつ、その振動中心はゆっくりと緩和して最終的に2種類の振動中心のいずれかに落ち着いていく。我々は波動関数の主要成分を分析して、振動運動の低エネルギー成分が、 $p_{3/2}$ 軌道内での対相関力による占有数の変動によることを示した。この例では、粒子状態の占有のされ方は断熱的であるように見える。また、初期条件での対相関の有無によって緩和していく先がいずれの振動中心になるかが決まる。緩和先の振動中心と局所平衡点との関係、また、最終的な振動振幅の決まる理由を今後理解していく。

【2】時間依存密度汎関数理論による物質の光応答

光と物質の相互作用、特に高強度・超短パルスレーザーと原子・分子・クラスター・固体の相互作用を、時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算から解明する研究を進めている。本グループが開発した実空間・実時間計算コードを多方面に発展させており、本年度は特に固体とパルスレーザーの相互作用で生じるコヒーレントフォノンの生成機構に関し大きな進展があり、さらに電磁気学と量子力学を統合したマルチスケールシミュレーションへの展開を意識するに至った。

本研究は、海外の研究者との密接な協力により進めている。米国ワシントン大学の G.F. Bertsch 氏とは経常的に研究協力を行っている。またスペイン・サンセバスチャンの A. Rubio 氏及び同グループのメンバーと、研究協力の進め方について検討中である。

(1) 分子の振動子強度分布の系統的計算(川下、矢花、岩田、中務(理研))

時間依存密度汎関数理論に基づく振動子強度計算を、多種の分子(2原子分子の例として、 N_2 , O_2 , 3 原子分子として H_2O , CO_2 、有機分子の例として C_2H_2 , C_2H_4 , C_6H_6 , $C_{10}H_8$ 、サイズの大きい分子としてフラーレン)に対して系統的に計算し、本手法が極めて高い精度で振動子強度分布を記述することを示した。計算では実時間法を用い、吸収境界条件を課すことにより、広範な振動数領域の振動子強度分布を高い精度で求めている。さらに、振動子強度の寄与がどの軌道によるものかの分類を、実時間計算により求める方法を開発し、分析を行った。

これらの結果は、Taylor&Francis 社から出版予定の書籍「Charged Particle and Photon Interactions with Matter: Recent Advances, Applications, and Interfaces」の中の1章として発表する予定である。

(2) コヒーレントフォノン生成メカニズムの解明 (篠原、川下、岩田、矢花、乙部(原研)、G. F. Bertsch(ワシントン大))

我々が開発した、無限周期系に対する時間依存密度汎関数理論の枠組みを用いて、バルクSiに超短パルスレーザーを照射した際に生じるコヒーレントフォノンの生成メカニズムに関する検討を行った。コヒーレントフォノンの生成メカニズムに関して、従来、2つのメカニズムが提唱されてきた。一つは撃力的なラマン散乱過程であり、パルス光が照射中に起こる電子の一時的な励起に起因して力が発生するというメカニズムである。もう一つは実励起が起こることにより原子の平衡位置がずれることに起因して力が発生するというメカニズムである。我々の計算は、時間依存密度汎関数理論に基づく計算が上記2つのメカニズムを包含することを明確に示すものであった。コヒーレントフォノンの生成に関しては、従来の理論研究は現象論的な記述にとどまっていたが、本研究により第一原理からの記述が可能となった。

本研究における議論の過程で、高強度場により非線形電子励起が強く起こる場合には、パルス光の伝播(マイクロメートルスケール)と単位胞内の電子ダイナミクス(ナノメートルスケール)を切り離して議論することができず、Maxwell 方程式と時間依存 Kohn-Sham 方程式を結合した取扱が不可避であるとの認識が得られた。これは、高強度パルスレーザーと物質の相互作用を定量的に記述し、物質中でのパルスレーザーの伝播を記述する上で、電磁気学と量子力学を統合したマルチスケールシミュレーションが必須であることを意味しており、次世代スパコンに匹敵する超並列計算機を用いてようやく可能になる課題である。このようなマルチスケールシミュレーションにより、光絶縁破壊の記述や、固体表面とパルス光の相互作用へ展開したいと考えている。

4. 研究業績

(1) 研究論文

1. Response Functions in the Continuum of Deformed Nuclei Studied with the Time-Dependent Density-Functional Calculations : Inakura Tsunenori, Nakatsukasa Takashi, Yabana Kazuhiro, *International Journal of Modern Physics E* **18** 2088-2092 (2009).
2. Systematic study of electric dipole excitations with fully self-consistent Skyrme HF plus RPA from light to mediummass nuclei: Tsunenori Inakura, Takashi Nakatsukasa, Kazuhiro Yabana, *European Physical Journal A* **42** (2009) 03.
3. Self-consistent calculation of nuclear photoabsorption cross section: Finite amplitude method with Skyrme functionals in the three-dimensional real space, Tsunenori Inakura, Takashi Nakatsukasa, Kazuhiro Yabana, *Phys. Rev. C* **80** (2009) 044301.

4. Tilted axis rotation and t-band in 182Os with the three-dimensional cranked Hartree-Fock Bogoliubov method,: Y. Hashimoto and T. Horibata, *Eur. Phys. J. A***42**, 571-575 (2009).
5. A description of t-band in 182Os within the fully microscopic calculation,: Y. Hashimoto and T. Horibata, to appear in *INFORMATION*.
6. Quantum mechanical effects in tilted axis rotations in 182Os: Y. Hashimoto and T. Horibata, to appear in *AIP Conference Proceedings*.
7. First-principles description for coherent phonon generation in diamond: Y. Shinohara, Y. Kawashita, J.-I. Iwata, K. Yabana, T. Otobe and G.F. Bertsch, *J. Phys.: Condens. Matter*, in press.
8. A massively-parallel electronic-structure calculations based on real-space density functional theory: J.-I. Iwata, D. Takahashi, A. Oshiyama, T. Boku, K. Shiraishi, S. Okada, K. Yabana, *J. Comp. Phys.* **229** 2339-2363 (2009).
9. First principle calculation for high harmonic generation in diamond: T. Otobe, K. Yabana, J.-I. Iwata, *J. Comp. Theor. Nanoscience* **6** 2545-2549 (2009).
10. Oscillator strength distribution of C-60 in the time-dependent density functional theory: Y. Kawashita, K. Yabana, M. Noda, K. Nobusada, T. Nakatsukasa, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **914** 130-135 (2009).

(2)学会発表

(A)招待講演

1. TDDFT simulation for ultrafast dynamics in molecules and dielectrics: K. Yabana, CECAM-LighTnet workshop on Computational Challenges emerging from Next-Generation Light Sources (DESY, Hamburg, 2009.10.13-15)
2. Time-dependent density functional theory : A comparative study between nuclear and electronic systems: K. Yabana, Arctic FIDIPRO-EFES Workshop: Future Prospects of Nuclear Structure Physics (Saariselka, Finland 2009.4.20-24)
3. Real-time calculation for RPA response and nonlinear dynamics: K. Yabana, Multidisciplinary Workshop on the Random Phase Approximation (Univ. Pierre et Marie Curie, Paris, France, 2010.1.26-29)
4. Systematic calculation of electric dipole strength with Skyrme-HF plus RPA: T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana, 7th Japan-China Joint Nuclear Physics Symposium (Univ. of Tsukuba, 2009. 11. 9-13)

5. Systematic calculation of electric dipole strength with Skyrme-HF plus RPA: T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana, INTERNATIONAL SYMPOSIUM Forefronts of Researches in Exotic Nuclear, Structures ---Niigata2010--- (Niigata, 2010. 3. 1-4)
6. Systematic calculation of E1 strength with fully self-consistent Skyrme-HF+RPA: T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana, 10th International Symposium on Origin of Matter and Evolution of the Galaxies (OMEG10) (RCNP, 2010. 3. 8-10)
7. Systematic calculation of electric dipole strength with Skyrme-HF plus RPA: T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana, JUSTIPEN workshop (JIHIR, ORNL, 2010. 3. 15-17)
8. Possible mechanism of the t-band based on the fully microscopic calculation,: Yukio Hashimoto and Takatoshi Horibata, Fifth international conference on information (Kyoto Univ., Kyoto, November 6-9, 2009)
11. Intermediate amplitude collective motion in ^{52}Ti with TDHFB: Y. Hashimoto and K. Sasakura, EFES-LIA workshop on the nuclear energy density functional method (RIKEN, February 26-27, 2010)

(B) 一般講演

1. Linear Response Calculation using Canonical-basis TDHFB with a schematic pairing functional: S. Ebata, T. Nakatsukasa, T. Inakura, Y. Hashimoto, K. Yabana, The 4th LACM-EFES-JUSTIPEN Workshop [ORNL Oak Ridge, Tennessee 2010.03.15 - 03.17]
2. Quantum mechanical effects in tilted axis rotations in ^{182}Os : Y. Hashimoto and T. Horibata, The 7th Japan-China Joint Nuclear Physics Symposium (Univ. of Tsukuba, November 9 - 13, 2009)
3. TDHFB calculation in nuclear system: Y. Hashimoto, Non-equilibrium transport dynamics in finite quantum systems (Ibaraki Univ., December 20-21, 2009)
4. TDDFT Simulation for Electron-Phonon Dynamics in Dielectrics under Ultrashort Laser Pulse: Yasushi Shinohara, Kazuhiro Yabana, Yosuke Kawashita, Jun-ichi Iwata, Tomohito Otake, The 3rd Theory Meets Industry International Workshop, Nov. 11-13, 2009, Nagoya, Japan
5. Real-time TDDFT simulation for light-induced electron-phonon dynamics in dielectrics: Yasushi Shinohara, Kazuhiro Yabana, Yosuke Kawashita, Jun-ichi Iwata, Tomohito Otake, International Symposium of Electronic Structure Calculations -Theory, Correlated and Large Scale Systems and Numerical Methods-』, Dec. 7-9, 2009, Tokyo, Japan

6. Simulation for Fermionic Dynamics: Nuclear vs Coulombic systems: K. Yabana, YITP International Workshop on Development of Nuclear Structure Models from the Viewpoint of Nuclear Force (Kyoto Univ. 2009.5.20-22)
7. Skyrme-HF+RPA を用いた E1 励起モードの系統的計算, 稲倉恒法, 中務孝, 矢花一浩, 原子核の E1, M1 励起モードの探究と今後の戦略 (RCNP, 2009. 8. 6-7)
8. 208Pb や 132Sn などに現れる pygmy dipole resonance の性質について: 稲倉恒法, 日本物理学会 2010 年秋季大会 (山形大学, 2010.3.20-23)
9. 中重核に対する Skyrme-TDHF+"BCS"のアプローチ: 江幡 修一郎, 中務 孝, 稲倉 恒法, 橋本 幸男, 矢花 一浩,, 日本物理学会 第 65 回年次大会 [岡山大学, 2010.03.20 - 03.23]
10. Linear Response Calculation using Canonical-basis TDHFB with a schematic pairing functional, 江幡 修一郎, 中務 孝, 稲倉 恒法, 橋本 幸男, 矢花 一浩 ICHOR-EFES International Symposium on New Facet of Spin-Isospin Responses (SIR2010) [東京大学 小柴ホール 2010.02.18 - 02.21]
11. Skyrme-TDHF+"BCS" を用いた線形応答計算～系統的計算を求めて～, 江幡 修一郎, 中務 孝, 稲倉 恒法, 橋本 幸男, 矢花 一浩 原子核三者若手夏の学校 [パノラマランド木島平 2009.08.24 - 08.29]
12. Skyrme-TDHF+"BCS" を用いた線形応答計算, 江幡 修一郎, 中務 孝, 稲倉 恒法, 橋本 幸男, 矢花 一浩, 原子核・ハドロン物理学 [KEK 3 号館, 2009.08.11 - 08.13]
13. Linear Response Calculation using Canonical-basis TDHFB with a schematic pairing functional, 江幡 修一郎, 中務 孝, 稲倉 恒法, 橋本 幸男, 矢花 一浩 The 10th. International Symposium on Origin of Matter and Evolution of the Galaxies (OMEG10), [RCNP 銀杏会館 2010.03.08 - 03.10]
14. Linear Response Calculation using Canonical-basis TDHFB with a schematic pairing functional, 江幡 修一郎, 中務 孝, 稲倉 恒法, 橋本 幸男, 矢花 一, INTERNATIONAL SYMPOSIUM Forefronts of Researches in Exotic Nuclear Structures (Niigata2010), [新潟十日町 ホテル BELNATIO 2010.03.01 - 03.04]
15. HFB + GCM による182Osの t バンドの構造: 橋本幸男、堀端孝俊, 日本物理学会第65回年会、[岡山大学, 2010.03.20 - 03.23]
16. 軸対称調和振動子基底を用いた TDHFB による軽い核の線形応答, 三藤竜也、橋本幸男、矢花一浩, 日本物理学会第65回年会、[岡山大学, 2010.03.20 - 03.23]
17. 第一原理電子ダイナミクス計算によるコヒーレントフォノン生成機構の解明, 篠原康、矢花一浩、川下洋輔、岩田潤一、乙部智仁, 日本物理学会 65 回年次大会、[岡山大学, 2010.03.20 - 03.23]

18. 時間依存密度汎関数理論によるコヒーレントフォノン生成機構の解明, 篠原康、矢花一浩、川下洋輔、岩田潤一、乙部智仁, 日本物理学会 2009 年秋季大会、2009 年 9 月 25 日-28 日、熊本大学
19. 第一原理計算によるコヒーレントフォノン生成機構の解明, 篠原康、矢花一浩、川下洋輔、岩田潤一、乙部智仁, 第 70 回応用物理学会学術講演会 2009 年 9 月 8 日-11 日、富山大学
20. 実時間・実空間法による固体ダイナミクスの第一原理シミュレーション, 篠原康、矢花一浩、川下洋輔、岩田潤一、乙部智仁, 次世代スーパーコンピューティングシンポジウム 2009、2009 年 10 月 7 日-8 日、東京
21. 多核子移行反応の微視的定式化への可能性, 矢花一浩, 日本物理学会第 65 回年次大会シンポジウム「速い中性子捕獲、元素組成第3ピーク周辺の核物理、宇宙物理」、[岡山大学, 2010.03.20 - 03.22
22. 光と物質の相互作用に対する実時間第一原理計算, 矢花一浩, 東京大学物性研究所短期研究会「計算物理学」、2009 年 12 月 10-11 日

(C) その他

1. (Seminar) Description of coherent phonon generation based on first-principle calculation」Yasushi Shinohara, Kazuhiro Yabana, Yosuke Kawashita, Jun-ichi Iwata, Tomohito Otake, George F. Bertsch., 2010 年 1 月 16 日、電気通信大学小林研究室
2. (Seminar) Real-time TDDFT for linear and nonlinear optical responses, K. Yabana, Center for Theoretical Quantum Dynamics, Univ. Washington, 2009.7.17
3. 大学院集中講義, 九州大学理学研究科大学院集中講義、矢花一浩、2009 年 10 月 28-30 日
4. 一般向け講演会「ミクロな物質世界の運動ー波動力学のコンピューターシミュレーションー」矢花一浩、Public Lectures “Computer simulations of nuclear and electronic many-body systems” 新潟大学、2010 年 3 月 5 日

3. 地球生物環境研究部門

3.1. 地球環境学分野

1. メンバ

教授 田中博、木村富士男(学内共同研究員)、
植田宏昭(学内共同研究員)、鬼頭昭雄(学外共同研究員)

講師 日下博幸

2. 概要

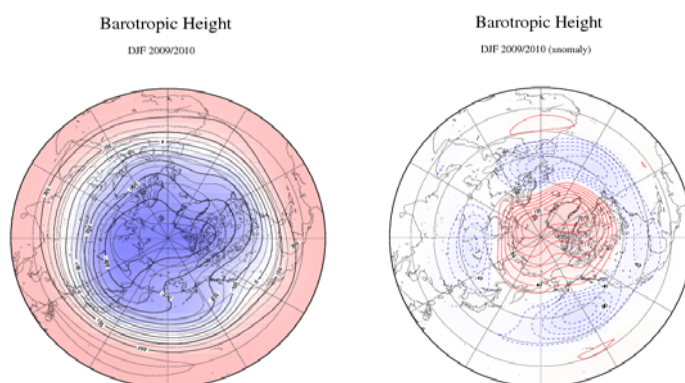
地球環境学分野における主な成果として、これまでESでしか走らないとされた全球雲解像モデルNICAMの7km解像度(GI=10)モデルが筑波大学の計算機システムで実行可能となった。北極振動、北極低気圧、ブロッキング、熱帯低気圧などの具体的な研究が開始され、NICAM-LETKFを開発した。特に台風とハリケーンの実際の初期値問題を解いて、現実とどの程度合うかを検証した。大気大循環研究と並んで領域気象モデルWRFを用いた都市気候シミュレーションが行われ、都市が降水に及ぼす影響評価、首都圏の気候再現計算、都市キャノピーモデルの開発などが行われた。さらには、つくば市のヒートアイランド観測を実施した。地球環境学分野として査読付き原著論文8編、報告書類20編、招待講演3件、学会発表等32件が行なわれた。

3. 研究成果

【1】北極振動とブロッキング高気圧の力学的成因と将来予測に関する研究(田中博)

(1) 北極振動研究

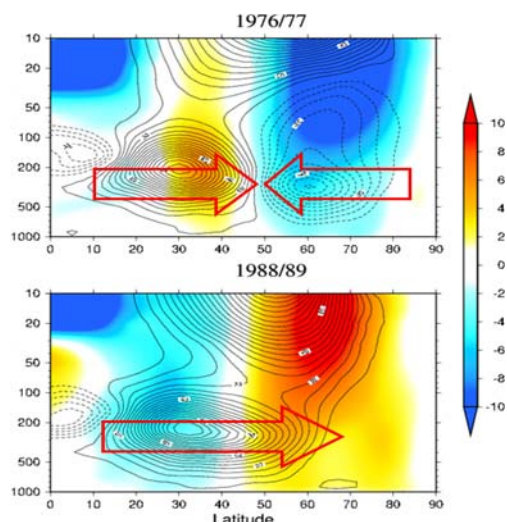
北極振動(Arctic Oscillation: AO)とは、ワシントン大学のThompson and Wallace(1998)により1998年提唱された現象で、北緯約60度を挟んで南北に海面更正気圧場が逆相関を持つというものである。本研究では、大気力学方程式系の固有解の中から位相速度がゼロとなり、減衰率が最もゼロに近い固有解についての構造を調べた。理論的に得られた固有解の



構造は、北極圏で低圧偏差の時に中緯度で高圧偏差となり、しかもその高圧偏差の中心は太平洋と大西洋の二箇所に現れる。この構造を観測値から統計的に得られる北極振動パターンと比較すると、両者はほぼ完全に一致する。このことから、これが北極振動に対応する固有解であると判断できた(北極振動の特異固有解理論)。NICAMの低解像度モデル(Glevel-5)の長期積分を試み、北極振動の再現を試みた。

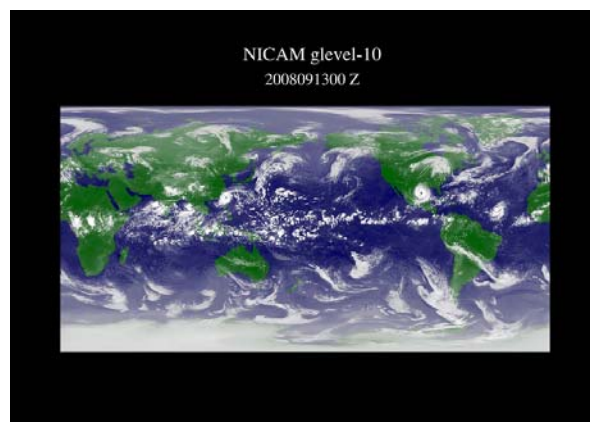
(3) ブロッキングの研究

ブロッキング高気圧とは、中高緯度対流圏にしばしば形成される背の高い高気圧のことである。高度場の順圧成分を取り出してその分布を調べてみると分かるように、ブロッキング高気圧の構造は、基本的に大気の高気圧成分に含まれている。ブロッキング高気圧は、ひとたび出現すると長い時には1カ月近く同じ場所に停滞し続ける特徴がある。ジェット気流に流されて通常西から東に移動する大気下層の高低気圧や前線が、この背の高い高気圧の出現により東進をブロックされることから、この高気圧はブロッキング高気圧(または単にブロッキング)と呼ばれている。本研究では、筑波大学で開発された順圧大気大循環モデル(順圧Sモデル)を用いて、ブロッキングの再現実験を行い、その成因について研究した。



【2】次世代型全球雲解像モデル NICAM の移植と開発(田中博)

東京大学気候システム研究センター(CCSR)と地球環境フロンティア研究センターでは、次世代大気大循環モデルと期待されている、非静力正20面体大気モデル NICAM (Nonhydrostatic ICosahedral Atmospheric Model)を開発している。NICAMは超並列計算機対応で開発されており、筑波大学の超並列計算機 PACS-CS(2560-node, 14.3TF)への移植が進められている。NICAMは雲微物理過程を実装しているため、全球雲解像モデルとして、温暖化に対する雲応答について、より信頼に足る結果が得られると期待されている。ただし、NICAMの物理過程は開発途上のため、モデルの欠点を把握し改善するための基礎的なデータ解析が必要である。本研究では、NICAMの出力を解析し、観測や他の全球予報モデルと比較することで、現時点でのその予報精度を評価した。



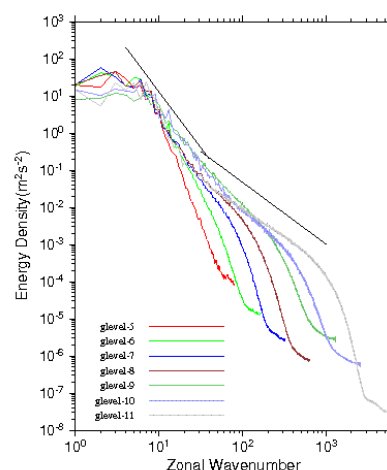
【3】アンサンブルカルマンフィルターによる4次元同化の開発（田中博）

全球雲解像モデルNICAMにLETKFを応用し、解析値が予報-解析サイクルを繰り返すうちに、次第に収束することを確認した。ファイル数が増大しシステムで管理できなくなるので、ファイルの整理を行った。

【4】大気大循環の3次元ノーマルモードエネルギー論の展開（田中博）

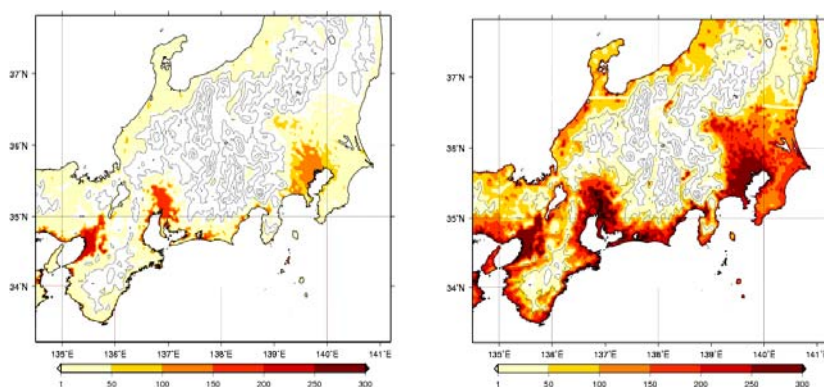
大気現象の卓越スケールの定量化には3次元ノーマルモード関数展開によるスペクトル解析が有用である。鉛直ノーマルモード関数展開において、これまで数値解を用いて行われた鉛直スペクトル解析を、本研究では静的安定度を定数と仮定して得られる解析解を用いて再検討した。その結果、水平波数スペクトルでこれまでに知られていた波数の-3乗則が鉛直波数スペクトルにおいても見られる事を明らかにした。

Zonal Energy Spectrum



【5】2070年代の首都圏の気候予測（日下博幸）

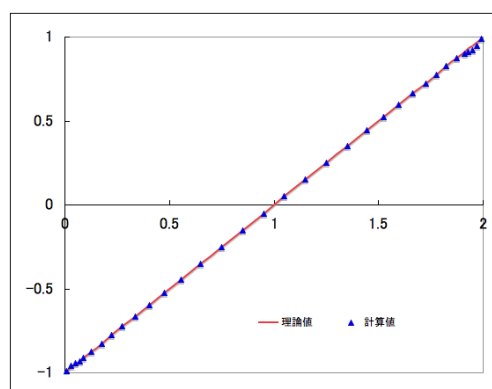
WRFモデルを用いて、2070年代の8月の都市気候予測を実施した。対象都市は、東京、名古屋、大阪とした。その結果、現在に比べてどの都市でも気温が3度程度上昇すること、とりわけ、名古屋において大きく上昇するという結果を得た。この結果に関連して、熱帯夜日数も名古屋においてもっとも増加する傾向にあるという結果も得た。ただし、異なるシナリオ・全球予測結果を用いた場合、東京や大阪の方が名古屋よりも大きな気温上昇となる可能性もあることから、この結果はあるシナリオ下でのあるGCMからのダウンスケーリング結果であることに注意されたい。



空間分解能 3km の領域気候モデル WRF によって予測された地球温暖化にともなう日本の熱帯夜日数の変化。
左図は 2000 年代の再現計算結果、右図は 2070 年代の予測計算結果

【6】LES モデルの開発(日下博幸)

都市街区内や複雑地形上の気象を高精度に再現・予測するための LES モデルを名古屋大学と共同開発した。力学モデルを検証するために平行平板間流れのシミュレーションと混合層発達シミュレーションを実施した。これらのシミュレーションから得られた風速分布が理論解とよく一致することを確認した。次に、乱流の計算の検証を行うために混合層発達シミュレーションから得られた乱流エネルギー収支と米国大気研究センター (NCAR) で開発された既存の LES モデルから得られた乱流エネルギー収支の比較解析を行った。その結果、NCAR の LES モデルの結果とよく一致することを確認した。最後に、座標変換の信頼性を検討するために、山越え気流のシミュレーションを実施した。ここで計算された山岳波が理論解とよく一致することを確認した。



LES モデルで計算された応力分布と理論解の比較結果。

4. 研究業績

(1) 研究論文

1. Tanaka, H.L., and M. Ohhashi, 2008 : Mechanism of the Decadal-Scale Variation of the Arctic Oscillation Index. Proc. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan. 20-23. (査読無)
2. Ohhashi, M. and H.L. Tanaka, 2008: Analysis of Arctic Oscillation Simulated by Global Warming Prediction Models. Proc. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan. 222-225. (査読無)

3. Seta, M. and H.L. Tanaka, 2008: Research of forcing sources causing the blocking high related to the Okhotsk high. Proc. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan. 249-252. (査読無)
4. Kondo, K. and H.L. Tanaka, 2008: Influence of local ensemble transform Kalman filter with the NICAM on high latitudes. Proc. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan. 226-229. (査読無)
5. Kato, S. and H.L. Tanaka, 2008: Prediction experiments of the Arctic Oscillation index using a barotropic general circulation model. Proc. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan. 241-244. (査読無)
6. Ikeda, M. and H.L. Tanaka, 2008: Positive feedback between polar jet and polar mode of baroclinic instability. Proc. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan. 210-213. (査読無)
7. Fujiwara, F. and H.L. Tanaka, 2008: Interaction between the baroclinically unstable wave and the subtropical and polar-frontal jets. Proc. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan. 234-237. (査読無)
8. Takahashi, S. and H.L. Tanaka, 2008: Dynamics and statistics of cyclones over the Arctic Ocean compared with extra-tropical cyclones. Proc. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan. 214-217. (査読無)
9. Kondo, K. and H. L. Tanaka 2009: Comparison of the extended Kalman filter and the ensemble Kalman filter using the barotropic general circulation model. J. Meteor. Soc. Japan, 87, 347-359. (査読付)
10. Matsueda, M., M. Kyouda, Z. Toth, T. Miyoshi, H.L. Tanaka, and T. Tsuyuki, 2009: On the predictability of a blocking occurred on 15th December 2005 Third International Conf. of Thorpex. May 2009, Monterey California, USA. (査読無)
11. Kondo, K. and H.L. Tanaka, 2009: Applying the local ensemble transform Kalman filter to the nonhydrostatic icosahedral atmospheric model (NICAM). SOLA, 5, 121-124. (査読付)
12. 大橋正宏・田中博 2009: 地球温暖化予測モデルに見られる北極振動の解析的研究. 「天気」、56、743-753. (査読付)
13. Terasaki, K., H. L. Tanaka, and M. Satoh, 2009: Characteristics of the kinetic energy spectrum of NICAM. SOLA, 5, 180-183. (査読付)

14. Ohashi, M. and H. L. Tanaka, 2010: Data analysis of warming pattern in the Arctic. SOLA, 6A, 1-4. (査読付)
15. 田中博・朴泰祐・佐藤正樹, 他 4 名, 2010: 大気大循環モデル力学コアの変遷について、「ながれ」(Journal of Japan Society of Fluid Mechanics), 29, 27-32. (査読無)
16. 田中博, 2010: 偏西風の気象学、「Pilot」日本航空機操縦士協会、2010 No.2, 8-12. (査読無)
17. 飯塚悟, 金原和矢, 日下博幸, 原政之, 秋本祐子, 2009: 領域気象モデル WRF による名古屋都市圏の温熱環境シミュレーション(その1)夏季の名古屋の温熱環境を対象とした現状再現の精度検証と疑似温暖化手法を併用した将来予測の試み. 日本建築学会環境系論文集, 75(647), 87-93. (査読付き)
18. 二宮順一, 森信人, 日下博幸, 重松孝昌, 2009: 都市気温へおよぼす大阪湾の海水温の影響. 海洋開発論文集, 25, 1047-1052. (査読付き)
19. 宮由可子, 日下博幸, 2009: 鉛直構造に着目した空っ風の気候学的研究. 地理学評論, 82, 346-355. (査読付き)
20. 木村広希, 川島英之, 日下博幸, 北川博之, 2009: サポートベクターマシンを用いた気圧配置検出手法の提案——西高東低冬型を対象として——. 地理学評論, 82, 323-331. (査読付き)
21. Ueno, K., S. Takano and H. Kusaka, 2009: “Nighttime Precipitation Induced by a Synoptic-scale Convergence in the Central Tibetan Plateau”. J. Meteor. Soc. Japan., 87, 459-472. (査読付き)
22. Kusaka, H. and H. Kitahata, 2009: Synoptic-scale climatology of cold frontal precipitation systems during the passage over central Japan. SOLA, 5, 61-64. (査読付き)
23. Tsunematsu, N., H. Kusaka, M. Yasui, 2009: Observing Systems simulation experiments on abnormally high surface air temperatures in the Tokyo metropolitan area using WRF-VAR. SOLA, 5, 49-52. (査読付き)
24. Kimura, H., H. Kawashima, H. Kusaka and H. Kitagawa, 2009: Applying a machine learning technique to classification of Japanese pressure patterns. Data Science Journal, 8, 59-67. (査読付き)
25. 畔柳秀匡, 大橋唯太, 亀卦川幸浩, 岡和孝, 重田祥範, 平野勇二郎, 日下博幸, Fei Chen, 2009: 街区構造と電力需要の違いが都市熱環境に及ぼす影響—大阪市街地を対象にした解析—. 水工学論文集, 53, 289-294. (査読付き)

26. Suga, M., E. Almkvist, R. Oda, H. Kusaka, and M. Kanda, 2009 : The impacts of anthropogenic energy and urban canopy model on urban atmosphere. *Annual Journal of Hydraulic Engineering, JSCE*, **53**, 283-288.
(査読付き)
27. Kusaka, H., F. Chen, M. Tewari, M. Duda, J. Dudhia, Y. Miya, Y. Akimoto, 2009 : Performance of the WRF model as a high resolution regional climate model: Model intercomparison study. Proceedings of 7th International Conference for Urban Climate, in CD-ROM. (査読なし)
28. Kusaka, H., F. Kimura, K. Nawata, T. Hanyu, and Y. Miya, 2009 : The chink in the Armor: Questioning the reliability of conventional sensitivity experiments in determining urban effects on precipitation patterns. Proceedings of 7th International Conference for Urban Climate, in CD-ROM. (査読なし)
29. Ikeda, R., H. Kusaka, 2009 : Development of the single multi-layer urban canopy models. Proceedings of 7th International Conference for Urban Climate, in CD-ROM. (査読なし)
30. Iizuka, S., K. Kinbara, H. Kusaka, M. Hara, Y. Akimoto, 2009 : An attempt to project a future thermal environment in the Nagoya metropolitan area combined with Pseudo global warming data. Proceedings of 7th International Conference for Urban Climate, in CD-ROM. (査読なし)
31. Chen, F., M. Tewari, K. Manning, S. Miao, A. Martilli, S. Grossman-Clarke, and H. Kusaka, 2009 : Development of the integrated WRF/urban modeling system and its application to urban environmental problems. Proceedings of 7th International Conference for Urban Climate, in CD-ROM. (査読なし)
32. 井上君夫, 木村富士男, 日下博幸, 吉川実, 後藤伸寿, 菅野洋光, 佐々木華織, 大原源二, 中園江, 2009 : 気候緩和評価モデルの開発とPCシミュレーション. 中央農業総合研究センター研究報告, **12**, 1-25. (査読なし)
33. 日下博幸, 2009 : 領域気象モデル WRF について. *ながれ*, **28**, 3-12. (査読なし)
34. 日下博幸, 2009: ヒートアイランド気象学事始め(第3回). 気象モデルで用いられる基礎方程式系.
(ア) 日本ヒートアイランド学会誌, vol. 4, p. 24-26. (査読なし)

(2) 学会発表

その他の学会発表

1. Kusaka, H., K. Nawata, F. Kimura, Y. Miya and Y. Akimoto, 2009 : Questioning the reliability of sensitivity experiments in determining urban effects on precipitation patterns. *Fourth Japan-Chiina-Korea Jooint Conference on Meteorollogy*, on the Website, Tsukuba, Japan.

2. Ohya, M. and H. Kusaka 2009 : Sensitivity of the WRF microphysics to the snowfall Simulation in the coastal area of Japan sea. *Fourth Japan-Chiina-Korea Joiint Conference on Meteorollogy*, on the Website, Tsukuba, Japan.
3. Akimoto, Y., and H. Kusaka, 2009 : Sensitivity of WRF model to input-datasets and surface parameters for heat island. *Fourth Japan-Chiina-Korea Joiint Conference on Meteorollogy*, on the Website, Tsukuba, Japan.
4. 高根雄也, 日下博幸, 2010 : 関東平野内陸域における夏季高温現象の実態調査と形成メカニズムの解明. 日本地理学会 2010 年春季学術大会予稿集, 東京.
5. 秋本裕子, 日下博幸, 2010 : 日本で発生する霧の気候学的特性. 日本地理学会 2010 年春季学術大会予稿集, 東京.
6. 日下博幸・縄田恵子・木村富士男・宮由可子・秋本祐子, 2009: 都市化が降水におよぼす影響—数値モデルを用いた3つの評価手法の提案. 日本ヒートアイランド学会全国大会予稿集.
7. 日下博幸・縄田恵子・羽生拓朗・宮由可子・木村富士男, 2009: 都市化が降水におよぼす影響—評価手法に関する現状と課題. 日本気象学会春季大会予稿集.

3.2. 生物分野

1. メンバー

教授 橋本哲男

准教授 稲垣祐司

2. 概要

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

1. 新奇真核生物の発見

真核生物の多様性の大部分は肉眼で認識することが難しい単細胞生物であるため、これまでの研究では真核生物多様性の全体像を十分に把握しているとは言い切れない。そこで自然環境からこれまでに認識されていない新奇真核生物を単離・培養株化しすることを目指している。

2. 大規模配列データ解析

真核生物の主要グループ間の系統関係を分子系統学的に解明するには、大規模遺伝子データが必須である。そこで系統進化的に興味深い生物種を選び、培養と遺伝子データの取得をおこなっている。そのデータを基に、大規模配列データ解析を行い正確な真核生物系統の推測を目指している。

3. 分子系統解析の方法論研究

分子系統解析においては、解析する配列データの特長、使用する解析法・配列進化モデルなどにより、系統推定に偏りが生じることが知られている。これまでの方法論は、単一遺伝子データに基づいて研究されてきたが、複数遺伝子から構成される大規模配列データを解析するための方法論の検討はそれほど進んでいない。そこで、大規模配列データ解析においてより偏りの少ない推測を目指し、方法論的研究を行っている。

3. 研究成果

【1】大規模配列データ解析（稲垣，橋本）

(1) 新奇真核生物種 YPF602 株と TKB055 株の系統的位置の解明に向けた予備研究

パラオ共和国の海水サンプルから新奇従属栄養性真核生物 YPF602 株を単離した。光学顕微鏡・電子顕微鏡観察からこの YPF602 株は、これまで知られている何れの単細胞真核生物にも類似していないことが分かった。この生物から6種類の遺伝子配列を決定・系統解析したところ、YPF602 株は光合成性真核生物であるクリプト藻類、あるいは一次植物類との近縁性が示唆されたが、その系統的位置は確定できなかった。これは6遺伝子データ中には、YPF602 株の系統的位置を精度よく推定するには情報が不足しているためだと予想される。分子系統解析と顕微鏡観察データにもとづき YPF602 株を *Palpitomonas bilix* として記載した論文は、Protist 誌[英文・査読付:Yabuki, Inagaki, Ishida. Protist 210(4):523-538]に掲載が決定した。

TKB055 株は筑波大学構内の評太郎池から単離された新奇従属栄養性真核生物である。光学顕微鏡観察では、TKB055 株はこれまで知られている何れの単細胞真核生物とも類似性は見られなかったが、電子顕微鏡観察ではこの生物種がエクスカバータ生物群に特徴的な細胞内微細構造をもつことが判明した。また、TKB055 株から複数遺伝子を単離し系統解析を行ったところ、エクスカバータ生物群の Discoba と呼ばれるグループとの近縁性が示唆された。これまでに、顕微鏡観察結果と系統解析の結果をまとめ TKB055 株を *Tsukubamonas globosa* として正式に記載する論文を Journal of Eukaryotic Microbiology 誌に投稿した(現在査読中:Yabuki, Nakayama, Yubuki, Hashimoto, Ishida, Inagaki. *Tsukubamonas globosa* gen. et sp. nov.; a novel excavate flagellate possibly holds a key for the early evolution in "Discoba")。

正式記載論文の作成と並行し、*Palpitomonas bilix* の大量培養を行い、ポリ A RNA サンプルを調製した。このポリ A RNA サンプルをもとに次世代シーケンシング用ライブラリーを作製、網羅的発現遺伝子 (Expressed sequence tag or EST) 解析を行った。H22 年度は、EST 解析により取得した遺伝子配列データを整理し、大規模配列データを作製・解析することにより、*Palpitomonas bilix* の系統的位置の精度良い解明を目指す予定である。この *Palpitomonas bilix* の EST 解析は、基盤研究(B)「ハプト・クリプト藻類を含む新奇巨大生物群の提唱とクロムアルベオラータ仮説の検証(研究代表者・稲垣;課題番号 21370031)」によりサポートを受けた。

【2】新奇真核生物の発見(稲垣・橋本)

(1) NY0170 株の解析

沖縄県石垣島のマングローブ林底泥から新規従属栄養性真核生物 NY0170 株を単離した。光学顕微鏡から NY0170 株はトリコモナス原虫に代表される寄生性真核生物種が大多数を占める Parabasalia に属すると予想された。我々は小サブユニットリボソーム RNA 遺伝子の塩基配列を決定し、系統解析を行った。その結果形態観察からの予想通り、NY0170 株は Parabasalia に属すること、NY0170 株は自由生活性であるにもかかわらず寄生性生物種と極めて近縁であることが判明した。NY0170 株は、Parabasalia 内での生活様式の進化、すなわち自由生活性から寄生生活性へ、あるいは寄生性生活から自由生活性への適応を研究する上で重要な情報を提供すると期待される。

【3】分子系統解析の方法論研究 (稲垣・橋本)**(1) 発見的樹形探索法の効率評価**

昨年度から引き続き発見的樹形探索法の効率評価を行った。我々は、300 個の 10 配列データから生成可能な 2,027,025 樹形に対して網羅的探索を行った。この解析には PACS-CS、T2K-Tsukuba、およびグリッドコンピュータを用いた。次に、網羅的探索から得られた最尤系統樹と、ヒューリスティック探索から得られた樹形を比較した。その結果、ヒューリスティック探索が最尤系統樹を選び出す効率は、(配列データの特性にも依存するが)これまで考えられてきたよりも低い(〜20%)こと、複数の樹形からヒューリスティック探索を開始することにより、探索効率を改善することが可能であること、などが判明した。現在解析データの整理、論文執筆の準備等を行っている。

(4) 遺伝子サンプリングが連結データ解析結果にもたらす影響

我々は 10,000 ポジション以上をふくむに 27 遺伝子データを用い、遺伝子サンプリングが一次植物類(紅藻類、緑色植物類、灰色藻類)の単系統性の復元にどのような影響があるかを精査した。その結果、一次植物類単系統に対するサポートが、データサイズよりも遺伝子サンプリングにより大きく変動することが判明した。この結果は *Molecular Biology and Evolution* 誌(2008 年 IP=7.280)に掲載された。

4. 研究業績**(1) 研究論文**

1. Takishita K, Yamaguchi H, Maruyama T, Inagaki Y. A hypothesis for the evolution of nuclear-encoded, plastid-targeted glyceraldehyde-3-phosphate dehydrogenase genes in "chromalveolate" members. 2009 **PLoS ONE** 4(3) e4737.
2. Burki F, Inagaki Y, Bråte J, Archibald JM, Keeling PJ, Cavalier-Smith T, Sakaguchi M, Hashimoto T, Horak A, Kumar S, Klaveness D, Jakobsen K, Pawlowski J, Shalchian-Tabrizi K. Large-scale phylogenomic analyses reveal that two enigmatic protist lineages, Telonemia and Centroheliozoa, are related to photosynthetic chromalveolates. 2009 **Genome Biology and Evolution** 1(1):231-238.
3. Kamikawa R, Sanchez-Perez GF, Sako Y, Roger AJ, Inagaki Y. Expanded phylogenies of canonical and non-canonical types of methionine adenosyltransferase reveal a complex history of these gene families in eukaryotes. 2009 **Molecular Phylogenetics and Evolution** 53(2):565-570.

4. Inagaki Y, Nakajima Y, Sato M, Sakaguchi M, Hashimoto T. Gene sampling can bias multi-gene phylogenetic inferences: the relationship between red algae and green plants as the case study. 2009 **Molecular Biology and Evolution** 26(5):1171-1178.

(2)学会発表

(A)招待講演

なし

(B)その他の学会発表

1. 石川奏太、稲垣祐司、田辺晶史、神川龍馬、橋本哲男. Apicoplast 由来配列を含む色素体 *rpo* 分子系統樹におけるアーティファクトの検出 (Oral) 2009 年 7 月 4-5 日第 4 回日本進化原生生物研究会(宮城教育大)
2. 池上裕子、中山卓郎、中山剛、井上勲、稲垣祐司. エピテミア科珪藻共生体 *spheroid body* の進化 (Oral) 2009 年 7 月 4-5 日第 4 回日本進化原生生物研究会(宮城教育大)
3. 小松崎洋志、稲垣祐司、瀧下清貴、古我友樹、矢吹彬憲、松本拓也、神川龍馬、雪吹直史、Martin Kolisko, Alastair Simpson, Andrew Roger, 橋本哲男. 複数遺伝子解析による *Fornicata* 生物群の系統進化の解明 (Oral) 2009 年 7 月 4-5 日第 4 回日本進化原生生物研究会(宮城教育大)
4. 神川龍馬、増田功、上田学、稲垣祐司、左子芳彦. ラフィド藻類 2 種のミトコンドリアゲノムとその進化 (Oral) 2009 年 7 月 4-5 日第 4 回日本進化原生生物研究会(宮城教育大)
5. 松本拓也、瀧下清貴、篠崎文彦、千國友子、Marianne Aastebol Minge, Kamran Shalchian-Tabrizi, 河地正伸、渡邊信、井上勲、橋本哲男、稲垣祐司. クロロフィル *a,b* を持つ緑色渦鞭毛藻類 *Lepidodinium chlorophorum* の葉緑体起源探索: 11 葉緑体遺伝子配列データに基づく解析 (Oral) 2009 年 7 月 4-5 日第 4 回日本進化原生生物研究会(宮城教育大)
6. 稲垣祐司、Fabien Burki, Jon Brate, John Archibald, Patrick Keeling, Thomas Cavalier-Smith, 坂口美亜子、橋本哲男、Ales Horak, Dag Klaveness, Kjetill Jakobsen, Jan Pawlowski, Kamran Shalchian-Tabrizi. 127 遺伝子データ解析によるテロネマ類と有中心粒太陽虫の系統的位置 (Oral) 2009 年 7 月 4-5 日第 4 回日本進化原生生物研究会(宮城教育大)
7. Martin Kolisko, Jeffrey D. Silberman, Ivan Cepicka, Naoji Yubuki, Kiyotaka Takishita, Yuji Inagaki, Andrew J. Roger, Alastair G. B. Simpson. New isolates of *Carpodomonas*-like organisms and phylogeny of Excavata. (Poster) 2009 年 8 月 23-28 日 ICOPXIII (ブラジル・リオデジャネイロ・Armação dos Búzios)

8. Naoji Yubuki, Akinori Yabuki, Yuji Inagaki, Takeshi Nakayama, Isao Inouye, Brian S. Leander. A novel, free-living parabasalid from Pacific mangrove sediments groups strongly with parasitic trichomonads as inferred from ultrastructural and molecular phylogenetic data. (Poster) 2009 年 8 月 23-28 日
ICOPXIII(ブラジル・リオデジャネイロ・Armação dos Búzios)
9. 石川奏太、稲垣祐司、田辺晶史、神川龍馬、橋本哲男. Apicoplast 由来配列を含む色素体 *rpo* 分子系統樹におけるアーティファクトの検出 (Poster) 2009 年 9 月 2-4 日 第 11 回日本進化学会(北海道大)
10. 池上裕子、中山卓郎、中山剛、井上勲、稲垣祐司. エピテミア科珪藻共生体 spheroid body の進化 (Poster) 2009 年 9 月 2-4 日 第 11 回日本進化学会(北海道大)
11. 小松崎洋志、稲垣祐司、瀧下清貴、古我友樹、矢吹彬憲、松本拓也、神川龍馬、雪吹直史、Martin Kolisko、Alastair Simpson、Andrew Roger、橋本哲男. 複数遺伝子解析による *Fornicata* 生物群の系統進化の解明 (Poster) 2009 年 9 月 2-4 日 第 11 回日本進化学会(北海道大)
12. 神川龍馬、増田功、上田学、稲垣祐司、左子芳彦. ラフィド藻類 2 種のミトコンドリアゲノムとその進化 (Poster) 2009 年 9 月 2-4 日 第 11 回日本進化学会(北海道大)
13. 松本拓也、瀧下清貴、篠崎文彦、千國友子、Marianne Aastebol Minge、Kamran Shalchian-Tabrizi、河地正伸、渡邊信、井上勲、橋本哲男、稲垣祐司. クロロフィル *a,b* を持つ緑色渦鞭毛藻類 *Lepidodinium chlorophorum* の葉緑体起源探索 (Poster) 2009 年 9 月 2-4 日 第 11 回日本進化学会(北海道大)
14. 稲垣祐司、辻美和子、Laurent Choy、佐藤三久、橋本哲男. 202 万樹形に対する網羅的探索結果に基づく発見的樹形探索法の効率評価 (Poster) 2009 年 9 月 2-4 日 第 11 回日本進化学会(北海道大)
15. Yuko Ikegami, Takuro Nakayama, Takeshi Nakayama, Isao Inouye, Yuji Inagaki. Origin of nitrogen-fixing cyanobacterial symbionts in epithemiacean diatoms. (Poster) 2009 年 9 月 20-24 日
LEOPOLDINA-SYMPOSIUM "Molecular Genetics of Chloroplasts and Mitochondria" (ドイツ・ベルリン・ベルリン自由大)
16. Ryoma Kamikawa, Isao Masuda, Manabu Ueda, Oyama Kenichi, Sadaaki Yoshimatsu, Yuji Inagaki, Yoshihiko Sako. Evolution of the mitochondrial genomes from two closely related raphidophytes *Chattonella marina* and *Heterosigma akashiwo*. (Poster) 2009 年 9 月 20-24 日
LEOPOLDINA-SYMPOSIUM "Molecular Genetics of Chloroplasts and Mitochondria" (ドイツ・ベルリン・ベルリン自由大)
17. Takuya Matsumoto, Kiyotaka Takishita, Tomoko Chikuni, Fumihiko Shinozaki, Marianne A. Minge, Kamran Shalchian-Tabrizi, Tetsuo Hashimoto, Yuji Inagaki. Searching for the origin of green-colored plastids in the dinoflagellate *Lepidodinium chlorophorum*. (Poster) 2009 年 9 月 20-24 日
LEOPOLDINA-SYMPOSIUM "Molecular Genetics of Chloroplasts and Mitochondria" (ドイツ・ベルリン・ベルリン自由大)
18. 池上裕子、中山卓郎、中山剛、井上勲、稲垣祐司. エピテミア科珪藻共生体 spheroid body の進化 (Oral) 2009 年 10 月 30 日-11 月 1 日 第 42 回日本原生動物学会(石巻専修大)

19. 矢吹彬憲、中山剛、雪吹直史、橋本哲男、稲垣祐司、石田健一郎. 新規エクスカータ鞭毛虫
Tsukubamonas globosa gen. et sp. nov. の分類学的・系統学的研究 (Oral) 2009 年 10 月 30 日-11 月 1
日 第 42 回日本原生動物学会(石巻専修大)

4. 超高速計算システム研究部門

1. メンバ

教授 佐藤 三久、朴 泰祐

准教授 建部 修見、高橋 大介、塙 敏博

助教 多田野 寛人

2. 概要

本研究グループは、高性能計算システムアーキテクチャ、省電力システムアーキテクチャ、並列数値処理の高速化研究、広域分散環境におけるデータ共有を中心とするグリッド計算技術等の研究を行っている。研究分野は計算機アーキテクチャ研究グループとグリッド研究グループに分かれるが、常に両グループ間で共同研究を行っているため、以下の報告では両者を区別せずまとめて記述する。

3. 研究成果

【省電力／高性能／ディペンダブル並列システムに関する研究】

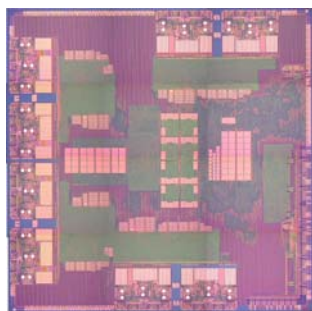
(1) クラウド技術を用いた高信頼並列ソフトウェアのテスト環境 D-Cloud の開発(佐藤)

クラウドコンピューティングシステムを用いての計算資源の管理をベースとして、テストシステムの構築、フォルトインジェクションによるハードウェア故障エミュレーション、様々なテストケース・シナリオの自動化機能を提供するクラウドコンピューティングシステム D-Cloud を提案し、そのプロトタイプを開発した。D-Cloud を用いることにより短期間で効率的なプログラムテストが可能となる。なお、JST-CREST「省電力でディペンダブルな組み込み並列システム向け計算プラットフォーム」プロジェクトは、中間評価を受けた(下記(2), (3)も同様)。

(5) 高性能・省電力・耐故障並列システムリンクに関する研究(朴, 塙)

ルネサステクノロジ社との共同研究により、PCI-Express gen.2 テクノロジーに基づく並列システム向け相互結合網リンク PEARL の開発を行い、これを実現する通信スイッチチップのプロトタイプである PEACH チップの実装を行った。PEACH は4レーンの PCI-Express gen.2 リンクを4ポートと、これらの間の通信を制御する4コア

の組み込みプロセッサを持つ通信チップである。PC クラスタ等の PCI-Express バスに接続することにより、高性能で耐故障性を持つ通信リンクを省電力で実現できる。過去3年間に渡り設計と開発を行い、PEACH チップの実装に成功した。完成した PEACH チップの物理特性と基本動作について評価・確認を行い、基本コンセプトに基づく応用に問題がないことを確認した。



PEACH チップフロアプラン PEACH チップを搭載した PCI-Express テストボード

(6) Ethernet トランキンクに基づくクラスタ間結合ネットワーク(朴, 埴)

対価格性能比の高い通信ネットワークである Gigabit Ethernet を束ね、クラスタ内ネットワークとして用いる RI2N の開発を継続して行った。今年度の成果は、各経路におけるトランキンク本数が一定でない形状においても、各リンクに対して最適な通信量配分を行うアルゴリズムを組み込み、さらに時間方向における通信の粗密がある場合でも、通信モニタ機能により常に最適化された通信バランスを保つように改良した。様々なトポロジや通信パターンにおいて、従来の RI2N よりも最大で 40%程度性能が向上することを確認した。

【次世代並列処理言語 XcalableMP の研究開発】(佐藤, 朴)

E-Science プロジェクト「並列プログラミング言語に関する研究開発」において、分散メモリ構成を基本とする大規模並列処理システムにおける並列 HPC アプリケーションのため、並列プログラミング言語 XcalableMP (XMP) の開発を行っている。XMP は OpenMP のようなディレクティブベースの言語で、グローバルビューでの並列化が簡易に行うことができる。これに加えて、PGAS 的な概念に基づき、ノードを中心としたローカルビューをプログラミングをサポートとしている。モデルで提供される動作を明確に定義することによって、性能チューニングが可能なフレームワークを提供する。当該年度は、SC09 において、HPCC ベンチマーク Class2 に結果を提出し、ファイナリストにのこり、Honorable Mention を受けた。

【仮想マシン環境における省電力化技術の研究とデータセンター電力ベンチマーク】(佐藤)

NEDO グリーン IT「エネルギー利用最適化データセンタ基盤技術の研究開発／データセンタのモデル設計と総合評価」において、データセンター電力ベンチマークの検討を行うとともに、現在、データセンターの運用で注目されている仮想マシン環境において、省電力化を行うための研究を進めた。

【大規模広域分散ファイルシステム及びグリッド／クラウド技術に関する研究】

(1) 大規模環境における広域ファイルシステムの評価(建部)

オープンソースで研究開発を進めている Gfarm ファイルシステムの大規模広域環境における性能評価を行った。国内 13 拠点 (はこだて未来大, 東北大, 筑波大, 国情研, 東大, 東工大, 早稲田, 慶応, 京大, 神戸大, 広大, 九大, 九工大) の計 239 ノードの PC クラスタ群を利用し, 147 TByte の広域ファイルシステムを構築した。メタデータ操作の性能測定では, 11 拠点のクライアントからの同時アクセスで毎秒 3,570 操作の性能を実現した。同一共有データの複数拠点, 複数クライアントからの読出しでは, 7 拠点の計 56 クライアントの同時読み出しまでクライアント数を変えて計測したが, 読込み性能はクライアント数に対しスケールし, 全体で毎秒 5,133MByte の読込み性能を達成した。メタデータサーバの性能ボトルネックとはなっておらず, さらにクライアント数が増加した場合も引き続き性能がスケールすることが見込まれる。本性能評価結果については, New Generation Computing 誌に投稿し, 採録が決定した。

(7) JLDG におけるグループ内広域ファイル共有の実現(建部, 佐藤)

素粒子物理研究グループとの共同研究により, 国内の素粒子物理学研究者における大規模データ共有基盤 JLDG の構築, 運用を行っている。JLDG は筑波大を中心とし, KEK, 金沢大, 京大, 阪大, 広島大で構成している Gfarm 広域ファイルシステムをベースに構築, 運用が行われている。これまでの運用では, スパコンで計算した公開データの共有を行っていたが, 本年度はそれぞれの研究グループの日々のデータの拠点間での共有について運用を開始した。研究グループ内におけるデータ共有を実現するためには, 組織とは無関係な研究グループによるアクセス制御の実現が必須となる。そのため, 仮想組織管理サーバが管理する研究グループにおけるアクセス制御が可能となるよう, 広域ファイルシステムの開発を行った。これにより, 公開データの共有だけではなく日々の研究データの共有も可能となった。

(8) T2K グリッド連携, 9 大学グリッド連携(建部, 佐藤, 朴)

筑波大, 東大, 京大の三大学における T2K システム間の連携を図るため, 筑波大 CCS 認証局の運用を行っている。グリッド環境としては, 単一認証におけるログイン, ファイル転送, 広域分散ファイルシステムの運用を行っている。本年度は単一認証を利用した遠隔からのジョブ起動について検討を行った。現在, GRAM2,

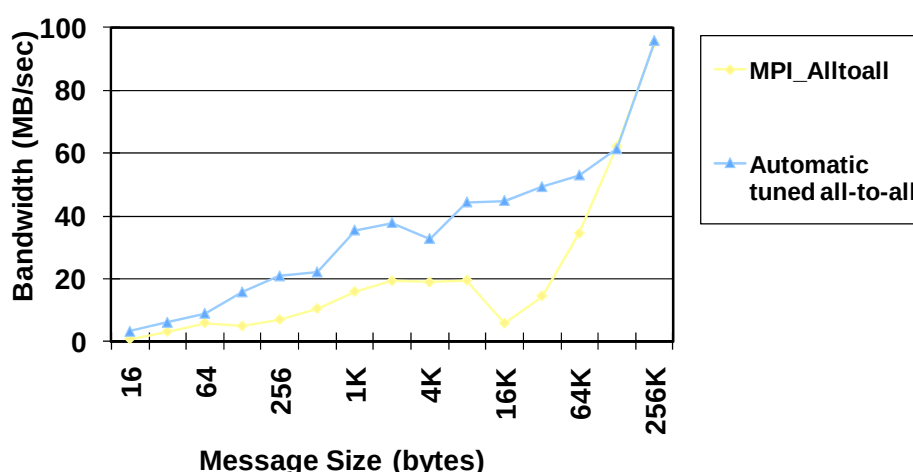
GRAM4 および OGSA-BES というジョブ起動の規格があるが、現在の T2K 筑波スーパーコンピュータシステムの運用を変えないで導入可能な規格は GRAM2 であり、GRAM2 について遠隔からジョブ起動が可能となるようシステム開発を行った。これにより、標準のグリッドミドルウェアを用いた T2K 筑波システムに対するジョブ起動が可能となった。また、9 大学のスパコンセンターにおけるグリッド連携に参加し、T2K 筑波システムの計算ノードへのジョブ起動を可能にするとともに、9 大学のアカウントを発行するためのグリッドパックにおいて、T2K 筑波システムのアカウント作成フローに組み込み、自動的にアカウント設定が可能となるよう国情研のサーバとの連携システムの開発を行った。これにより、グリッドパックにより申請されたアカウントは通常のアカウント作成フローでグリッド連携での利用も可能となった。

【高性能並列数値計算に関する研究】

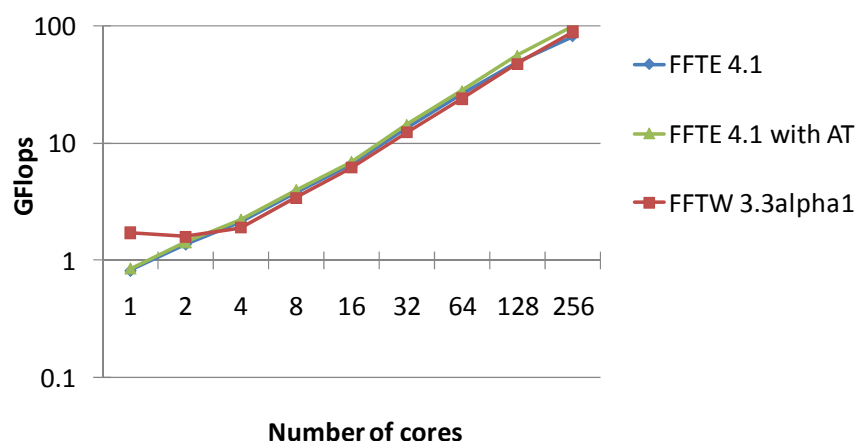
(1) 並列高速フーリエ変換(FFT)の自動チューニング手法に関する研究(高橋)

科学技術計算で広く用いられている並列 FFT の性能を改善するために、自動チューニング手法の研究を行った。性能に関わるパラメータとしては、全対全通信方式、基底、ブロックサイズがあるが、それぞれに対して最適な性能パラメータを探索することで、現在ソースコードを公開している並列 FFT ライブラリである FFTE の性能を向上させることができた。

T2K筑波システムにおける全対全通信の性能
(64ノード, 1024コア, 1024MPIプロセス)



T2K筑波システムにおける並列三次元FFTの性能 ($N_1 \times N_2 \times N_3 / P = 2^{24}$)

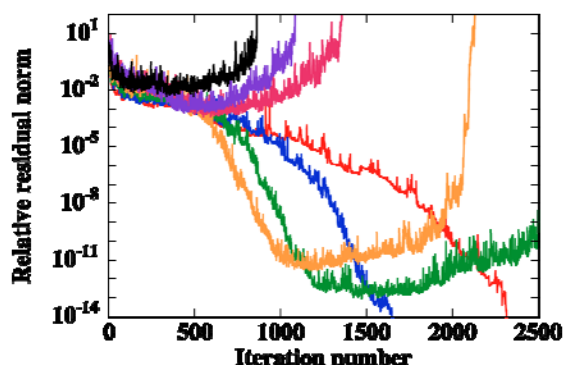


(9) T2K 筑波システムによる円周率 2 兆 5769 億 8037 万桁計算(高橋)

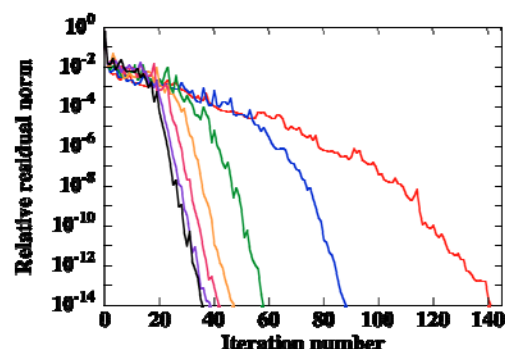
平成 20 年 6 月に導入された T2K 筑波システムにおいて、640 ノードを用いて円周率 2 兆 5769 億 8037 万桁を計算した。主計算が 29 時間 5 分、検証計算が 44 時間 30 分で完了した。その間一度もシステムダウンはなく、T2K 筑波システムの高い信頼性を実証することができた。

(10) Block Krylov 部分空間反復法に関する研究(多田野)

複数本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式 $AX = B$ を高速・高精度で解くための Block Krylov 部分空間反復法の研究を行った。従来の解法では、右辺ベクトル数 L を増やすと反復回数は減少するが、解の精度が悪化していた。新たに開発した Block BiCGGR 法により、反復回数の減少と高精度近似解生成の両立を達成した。また、格子 QCD 計算で現れる連立一次方程式に対しては、Jacobi 前処理付き Block BiCGGR 法が有効であることを明らかにした。



(a) 前処理無し.



(b) Jacobi 前処理付き.

格子 QCD における Block BiCGGR 法の相対残差履歴. ■: $L = 1$, ■: $L = 2$, ■: $L = 4$,

■: $L = 6$, ■: $L = 8$, ■: $L = 10$, ■: $L = 12$.

4. 研究業績

< 学術雑誌論文 >

1. 今田 貴之, 佐藤 三久, 木村 英明, 堀田 義彦: 分散型 Web サーバでの負荷変動を考慮した省電力化のためのノード状態制御, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, Vol.2, No.2, pp.75-88
2. 米元 大我, 埴 敏博, 三浦 信一, 朴 泰祐, 佐藤 三久, "トラフィック量に適應する非対称マルチリンク Ethernet トランッキング", 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, Vol.3, No.1, pp.25-37
3. Barbara M. Chapman, Jesus Labarta, Vivek Sarkar, Mitsuhsa Sato: Programmability Issues. IJHPCA 23(4): 328-331 (2009)
4. Jun-Ichi Iwata, Daisuke Takahashi, Atsushi Oshiyama, Taisuke Boku, Kenji Shiraishi, Susumu Okada and Kazuhiro Yabana: A massively-parallel electronic-structure calculations based on real-space density functional theory, Journal of Computational Physics, Vol. 229, No. 6, pp. 2339-2363
5. 佐藤佳州, 高橋大介: モンテカルロ木探索によるコンピュータ将棋, 情報処理学会論文誌, Vol. 50, No. 11, pp. 2740—2751
6. T. Sakurai, J. Asakura, H. Tadano, and T. Ikegami. Error Analysis for a Matrix Pencil of Hankel Matrices with perturbed Complex Moments. JSIAM Letters, Vol. 1, pp. 76--79, 2009.

7. Asakura, T. Sakurai, H. Tadano, T. Ikegami, and K. Kimura. A Numerical Method for Nonlinear Eigenvalue Problems Using Contour Integral. JSIAM Letters, Vol. 1, pp. 52--55, 2009.
8. H. Tadano, T. Sakurai, and Y. Kuramashi. Block BiCGGR: A New Block Krylov Subspace Method for Computing High Accuracy Solutions. JSIAM Letters, Vol. 1, pp. 44--47, 2009.
9. 多田野寛人, 櫻井鉄也. 周回積分法に対する Block Krylov 部分空間反復法の適用と分子軌道計算への応用. 情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム, Vol. 2, No. 2, pp. 10--18, 2009.

< 査読付き国際会議発表 >

1. Ryo Kanbayashi, Mitsuhsa Sato: A Distributed Architecture of Sensing Web for Sharing Open Sensor Nodes. GPC 2009: 340-352
2. Miwako Tsuji, Mitsuhsa Sato: Performance Evaluation of OpenMP and MPI Hybrid Programs on a Large Scale Multi-core Multi-socket Cluster, T2K Open Supercomputer. ICPP Workshops 2009: 206-213
3. Shin'ichi Miura, Toshihiro Hanawa, Taiga Yonemoto, Taisuke Boku, Mitsuhsa Sato: RI2N/DRV: Multi-link ethernet for high-bandwidth and fault-tolerant network on PC clusters. CAC2009 (in IPDPS 2009): 1-7
4. Toshihiro Hanawa, Mitsuhsa Sato, Jinpil Lee, Takayuki Imada, Hideaki Kimura, Taisuke Boku: Evaluation of Multicore Processors for Embedded Systems by Parallel Benchmark Program Using OpenMP. IWOMP 2009: 15-27
5. Jinpil Lee and Mitsuhsa Sato: Reliable Software Distributed Shared Memory using Page Migration, The Fifteenth International Conference on Parallel and Distributed Systems (ICPADS'09), pp.456-463
6. Taiga Yonemoto, Shin'ichi Miura, Toshihiro Hanawa, Taisuke Boku, and Mitsuhsa Sato: Flexible Multi-link Ethernet Binding System for PC Clusters with Asymmetric Topology, The Fifteenth International Conference on Parallel and Distributed Systems (ICPADS'09), pp.49-56
7. Takayuki Imada, Mitsuhsa Sato and Hideaki Kimura: Power and QoS Performance Characteristics of Virtualized Servers, in Proceedings of Energy Efficient Grids, Clouds and Clusters Workshop(E2GC2) in the 10th IEEE GRID 2009, pp.232-240
8. Daisuke Takahashi: Automatic Tuning for Parallel 3-D FFT with 2-D Decomposition, 2010 SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, Grand Hyatt Seattle, Seattle, Washington, USA, February 25, 2010.

9. T. Sakurai, J. Asakura, H. Tadano, T. Ikegami and K. Kimura. A Method for Finding Zeros of Polynomial Equations Using a Contour Integral Based Eigensolver. Proc. Symbolic Numeric Computation 2009, pp. 143--147, 2009.

<招待講演>

1. Daisuke Takahashi: Parallel Implementation of Multiple-Precision Arithmetic and 2.576 Trillion Digits of Pi Calculation on a Massively Parallel Cluster of Multi-Core Processors, Workshop on Ultra Performance and Dependable Acceleration Systems (held in conjunction with PDCAT'09), Gakushi-kaikan, Hiroshima University, Higashi-Hiroshima, December 11, 2009.

<ポスター・シンポジウム・研究会>

1. Masahiro Tanaka, Osamu Tatebe, "Impact of Gfarm, a Wide-area Distributed File System, upon Astronomical Data Analysis and Virtual Observatory", Poster, Astronomical Data Analysis Software and System XIX (ADASS2009), 2009
2. 米元大我, 塙敏博, 三浦信一, 朴泰祐, 佐藤三久:トラフィック量に適応する非対称マルチリンク Ethernet トランッキング 第21回コンピュータシステム・シンポジウム(ComSys 2009)論文集, pp. 21-30, 2009
3. 辻 美和子, 佐藤 三久:大規模 SMP クラスタにおける OpenMP/MPI ハイブリッドプログラムの性能評価 先進的計算基盤システムシンポジウム(SACIS 2009)論文集, pp.265-272, 2009
4. 緑川博子, 斉藤和広, 佐藤三久, 朴泰祐:クラスタをメモリ資源として利用するための MPI に基づいた高速大容量仮想メモリ 電子情報通信学会技術研究報告. CPSY, コンピュータシステム 109(168), 37-42, 2009
5. 坂西隆之, 小泉仁志, 神林亮, 佐藤三久:プログラムテスト環境を提供するクラウドコンピューティングシステムの検討 情報処理学会研究報告, 2009-OS-112(19), pp. 1-8, 2009
6. 米元大我, 三浦信一, 塙敏博, 朴泰祐, 佐藤三久:非対称な形状に適応する高バンド幅 multi-link Ethernet 情報処理学会研究報告, 情報処理学会研究報告, 2009-OS-112(19), pp. 1-9, 2009
7. 今田貴之, 佐藤三久, 木村英明:仮想計算機環境における省電力化を目的としたサーバ資源制御 情報処理学会研究報告, 2009-HPC-121(36), pp. 1-8, 2009
8. 李珍泌, 朴泰祐, 佐藤三久:分散メモリ向け並列言語 XcalableMP コンパイラの試作と評価 情報処理学会研究報告, 2009-H PC-121(6), pp. 1-10, 2009

5. 計算情報学研究部門

5.1. 計算知能分野

1. メンバ

教授 北川博之

准教授 天笠俊之

講師 川島英之

2. 概要

計算科学において、大規模データの管理や活用は極めて重要な課題となっている。計算情報学研究部門計算知能分野は、データ工学関連分野の研究開発を担当している。具体的には、異種データベースや多様な情報源を統合的に扱うための情報統合基盤技術、データ中に埋もれた知識や規則を発見するためのデータマイニング・知識発見技術、インターネット環境において様々なデータを統合的に扱うための XML 関連技術、プライバシー技術等の基盤技術の研究を行った。また、地球生物環境研究部門や素粒子宇宙研究部門と連携して、計算科学の各分野における応用的な研究を推進した。

3. 研究成果

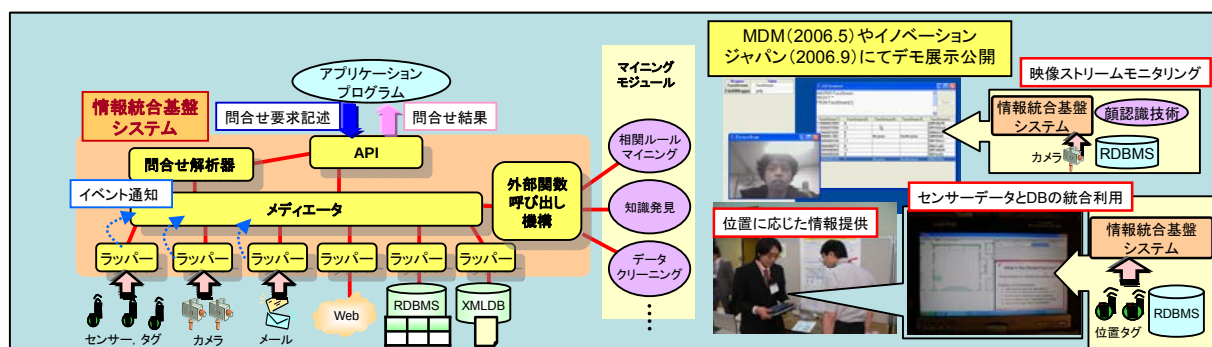
【1】情報統合基盤技術

(主な研究費：科研費基盤研究 A，科研費特定領域研究，科研費若手研究 B)

(1) 情報統合基盤システム(北川, 天笠, 川島)

異種の分散したデータベースや情報源を統合的に扱うための基盤技術・システム・応用の研究開発を行った。特に、従来型のデータベースや Web 等のみではなく、センサ、位置情報源等の連続的に情報を提供するストリーム情報源をも統合対象とすることができる基盤システム StreamSpinner を研究開発した。StreamSpinner は、リレーショナルモデルをベースとした情報統合処理機能を有するが、ビデオや音声等の連続メディアの統合処理にも適用可能である。また、あらかじめ提供される基本演算子に加えて、応用目的向けのプログラムを外部関数として問合せから呼び出す機能を実現している。これによって、時系列データの類似検索や、カメラ映像ストリームに対して解析機能を組み合わせた情報統合等が可能である。

さらに、複数ノード上で StreamSpinner を協調動作させることにより、分散環境におけるストリーム処理を実現することができる。また、ノード障害が発生した場合でも持続的に統合処理を実現するための機能の研究も推進した。



(2) 高信頼化ストリーム処理(北川, 川島)

近年、センサデータなどのストリームデータに対する問合せ要求が増大し、それらを実現するストリーム処理システムが研究開発されている。また、地理的に離れた情報源の統合や負荷分散を実現するために、ストリーム処理システムを分散配置した上で協調動作させる分散ストリーム処理環境が注目されている。そのような分散環境では、中継ノードが停止することでシステム全体が停止してしまうという問題がある。この問題に対して、分散環境において高信頼化を実現する Semi-Active Standby 方式を提案した。これは、各分散ノード間の通信にバッチ処理を導入することで、既存手法である Active Standby 方式, Upstream Backup 方式を一般化し、リカバリ時間とバンド幅オーバーヘッドの調節を可能にすることが可能となった。また本研究では、提案手法の評価実験を行い、本方式の動作特性を検証した。

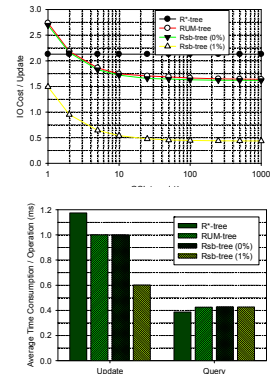
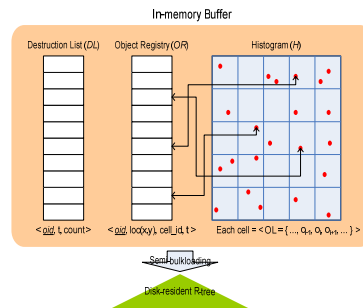
(3) 確率推論処理とストリーム処理の統合(川島, 北川)

本研究は確率推論技術であるベイジアンネットワークを拡張し、関係データストリーム処理に適合させる方法を提案した。ベイジアンネットワークをデータストリーム処理に適合させるために三つの貢献を行った。第一の貢献は、ベイジアンネットワークにウィンドウの概念を導入することである。ベイジアンネットワークのイベントに生起時間幅を持たせ、各イベントの生起状態を管理する状態変化管理機構を構築する。これに合わせて、状態変化を用いたウィンドウ処理を提案した。第二の貢献は、ベイジアンネットワークで行われる確率推論処理を関係演算系に編み込むために、ベイジアンネットワークを抽象データ型として関係表で表現することと、演算木に処理を組み込むために、入出力がタプル形式になるようにベイジアンネットワークのモデル化を行った。これに際して、入力データストリームをベイジアンネットワークのイベントに関連付ける ASSOC、ベイジアンネットワーク内の各ノードの確率値等の情報をタプル形式で選択するメソッド群を提案した。第三の貢献は、確率推論処理を効率化するために、オンラインで利用者の問合せに基づきベイジアンネットワークの確率伝播を部分的に

省略する方法を提案した。実験による評価を行い、提案手法により確率推論処理時間が削減されることを示した。

(4) 多次元ストリーム用高性能索引機構(北川)

ストリームデータの中には、移動体の位置情報等、多次元データが存在する。多次元データでは、空間的検索を支援する必要がある。例えば、距離検索や近傍検索等である。多次元データに対する索引機構としては、R 木等の空間索引が従来用いられてきたが、従来の空間索引は静的なデータを対象としており、オブジェクトの現在値が頻繁に変化する動的な環境下では、極めて性能が劣化することが知られている。本研究では、R 木を元に、主

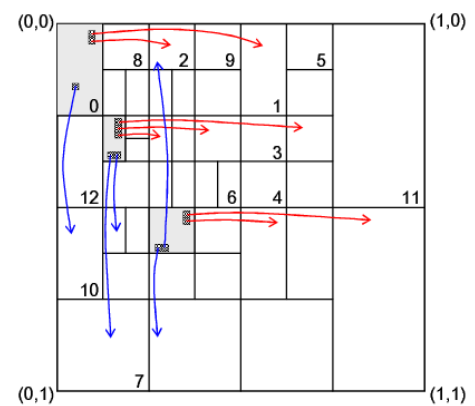


記憶と二次記憶を有機的に利用することで、この問題に対応するための新たな索引機構 R^b 木(R-tree with Semi-Bulkloading)を開発した。この成果は、著名な国際論文雑誌である TKDE に掲載された。

(5) P2P ネットワーク基盤技術(北川)

インターネットを基盤としたデータの相互運用がグローバル化する一方で、インターネット上に特定の組織やグループに閉じた専用のネットワークを構築したいという要求は、情報保全や情報流通の効率化の観点から急速に高まっている。ピアツーピアネットワーク(P2P)は、特定の応用向きのネットワークを柔軟に構築できる「オーバレイネットワーク」の基盤技術として近年注目されている。

我々は分散ハッシュ表(DHT; Distributed Hash Table)と呼ばれる P2P に着目し、その効率化に取り組んでいる。具体的には、CAN (Content Addressable Network)と呼ばれるプロトコルを取り上げ、その負荷分散やアクセス効率化を図った。従来の CAN では、特定のエントリポイントに対してピアの加入・離脱が頻発すると、ピア間の負荷分散に偏りが発生し、それに伴い検索効率が低下することが知られていた。この問題に対処するために、分散かつ自律的な負荷分散機構を取り入れるとともに、検索処理の効率化のための長距離リンクを加えた RCAN を提案した。これにより、上記の問題が解消されることを実験によるシミュレーションで示した。



[2]データマイニング・知識発見技術

(主な研究費: 科研費特定領域研究, 科研費基盤研究 A, 科研費若手研究 B)

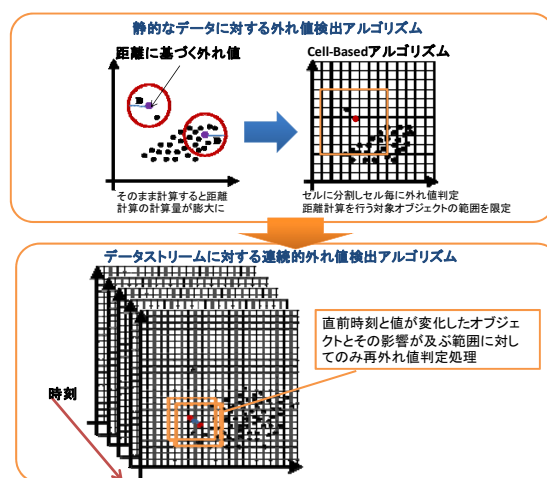
多様な情報源に対する外れ値検出, ソーシャルネットワーク分析, 移動体オブジェクトに対する移動統計量抽出等の種々のデータマイニング・知識発見技術の研究開発を進めた。以下では, 主なものについて述べる。

(1) 外れ値検出(北川)

外れ値とは通常のデータから大きく例外的なデータのことであり, 異常検出や興味あるデータの発見等に有用である。実世界には多様な情報源が存在するため, それぞれの情報源に対して固有の特徴を考慮した外れ値を定義し検出を行うことが重要である。

データストリームとして提供されるデータ量の増加により, データストリームに対するデータマイニングが重要となっている。データストリームに対する処理では, 時々刻々と到着するデータに対して連続的にモニタリングすることが求められる。そこで本研究ではデータストリームに対する連続的な外れ値検出手法を開発した。

本研究では, 各時刻におけるデータ分布が直前の時刻のものと類似していることが多いというデータストリームの特徴に着目して, 差分処理を行い効率的な外れ値検出を行う。提案アルゴリズムでは, 連続的に外れ値検出を行う際に, 処理を最小限に抑えるため, 直前時刻と比較して変化が生じたオブジェクトとそのオブジェクトが外れ値の判定に影響を与える範囲に限定して処理を行う。これにより無駄な処理を省き, 効率化を図った。実データ, 人工データを用いた実験により, 既存の Cell-Based アルゴリズムをスナップショット毎に適用する手法より効率的であることを確認した。



(2) ソーシャルブックマークにおけるトピック分析と活性度推定に基づく Web ページのランキング(北川)

SNS やブログに代表されるソーシャルメディアは, 知識や情報を共有することを可能にする新たなメディアとして注目されている。本研究では, Web 上でブックマーク情報を共有するサービスであるソーシャルブックマークに着目し, Web 検索エンジンの検索結果を, ソーシャルブックマークの情報を元に高精度にランキングする手法を提案した。具体的には, クラスタリングや隠れマルコフモデルによる時系列分析を用いて, Web ページの扱うトピックの違いや, 潜在的な注目度・持続度の違いを考慮した活性度の推定を行う。また, その活性度を基にした Web ページの高精度なランキングが可能となる。

【3】XML・Web プログラミング・データプライバシー

(主な研究費: 科研費特定領域研究, 科研費若手研究 B)

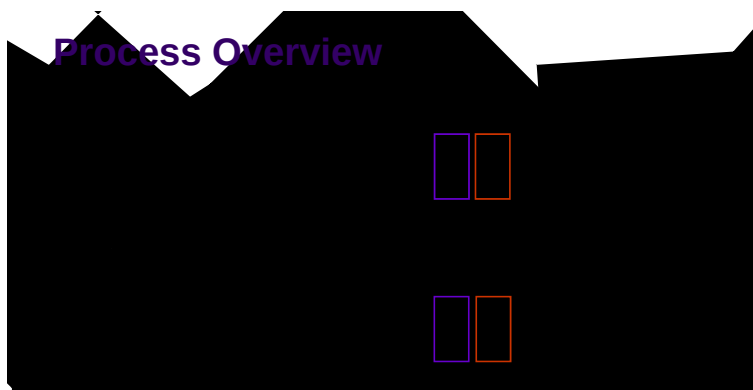
XML (Extensible Markup Language) は、データ記述のためのメタ言語であり、クリアテキストによって複雑なデータ構造を記述することができる。XML はネットワーク環境におけるデータ相互利用のための標準的なデータ記述フォーマットとして広く認知され、多くの分野で利用されている。XML 形式で生成、蓄積されるデータ量は爆発的に増加しており、今後もその傾向は継続することが予想される。このため、XML 形式で記述された大量の情報資源の効率的な蓄積および利活用を目的として、種々の研究を行った。

(1) XML データに対する OLAP (天笠, 北川)

XML データに対して必要な情報を獲得するための処理としては、検索が一般的である。しかしながら、XML の応用範囲が広がるにつれ、検索処理だけではなく、より複雑な分析処理と知識発見を可能にする対話的分析処理(OLAP; Online Analytical Processing)のサポートが重要になる。我々は、XML データの分析処理を可能にする XML-OLAP 技術の研究開発を行っている。OLAP では、データを多数の属性からなる仮想的な多次元キューブととらえ、キューブに対して演算を適用することによって分析を行う。今年度は、XML-OLAP において重要な役割を持つ TOPOLOGICAL ROLLUP 演算に着目した。これは、XML の特徴である木構造を利用し、葉ノードから根ノードに向かって集約計算を繰り返し行う演算であり、XML の木構造におけるさまざまなレベルでの集約値を使った解析を可能とする。TOPOLOGICAL ROLLUP 演算を高速に実行するためのいくつかのアルゴリズムを考案し、その特質を実験により評価した。

(2) 大規模 XML 検索の並列処理 (天笠, 北川)

XML データの大規模化に伴い、数百ギガバイト、あるいは数テラバイトの XML データを効率的に扱うための手法も今後必要となる。しかしながら、XML は本質的に木構造であるため、その処理には多大なコストを要することが問題となる。この問題に対し、近年普及しつつあるマルチコア CPU を利用した XML データの並列問合せ



処理方式に関する研究開発を行った。この研究では、XML データに対する効率の良い問合せアルゴリズムである Holistic Twig Join を対象とし、それを並列化することに成功した。具体的には、入力となる XML データのノードストリームを、XML の木構造に基づきリアルタイムに分割し、それを各 CPU コア上で並列に処理する。Holistic Twig Join のアルゴリズムの特徴を検討し、データ並列性とタスク並列性の両者を生かした処理が行えることが特徴である。この研究発表により、Machdi Imam 氏は DEIM2010 の学生奨励賞を受賞した。

(3) プライバシー保護検索技術 (天笠, 北川)

クラウド環境の一般化に伴い、クラウド上にデータベースをサービスとして委託する DAS (Database as a Service) が一般的になりつつある。この環境では、データベースの内容をクラウドに外部委託するため、機密

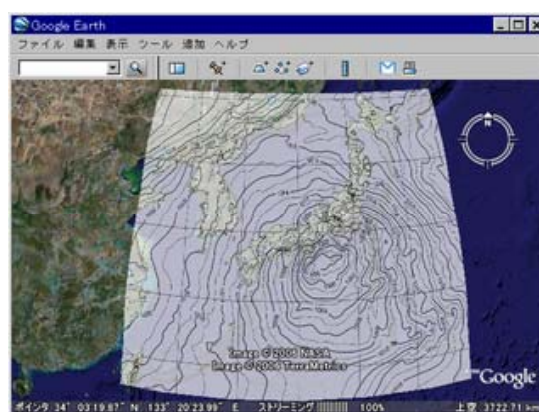
情報などは暗号化する必要がある。しかしながら、データベースを暗号化してしまうと、クラウド上の計算資源を利用した検索を行うことができないため、そのメリットを享受することができない。このため、データの機密を保持したままデータベースを検索する、プライバシー保護検索に関する技術が注目されている。本研究では、プライバシー保護検索技術の一種である、OPES (順序保存暗号化法, Order-Preserving Encryption Scheme) を拡張し、ある平文に対し、複数の暗号文を割り当てる、MV-OPES (Multi-valued OPES) を提案した。これにより、オリジナルの OPES よりも安全性が増すとともに、結合演算を含む多くの関係演算をクラウド上のサーバで実行することが可能となった。

【4】科学分野におけるデータベース応用

(主な研究費: 科研費若手研究 B)

(1) GPV/JMA アーカイブ(天笠, 北川)

地球生物環境研究部門と共同で、気象庁気象予報データベース「GPV/JMA アーカイブ」(<http://gpvjma.ccs.hpcc.jp>)の開発、および管理、運用を行っている。GPV/JMA アーカイブは、気象庁が公開している気象予報グリッドデータ(GPV データ)を蓄積するとともに、外部登録ユーザへのデータを提供することを目的としている。GPV/JMA アーカイブで提供しているデータは、全球モデル、メソスケールモデル、リージョナルスケールモデル、週間アンサンブル、月間アンサンブル、季間アンサンブルの6種類である。さらに、これらのグリッドデータに加えて、数値データを元に作図した天気図を公開するとともに、天気図の閲覧性の向上するため、GoogleEarth 上に天気図をマップするための KML ファイルの公開サービスも行っている。



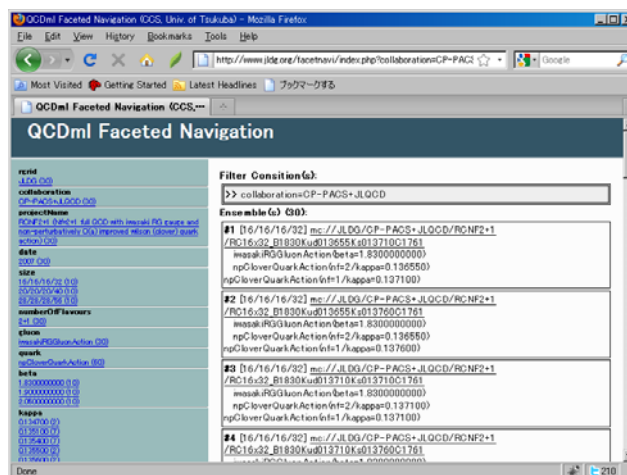
(2) 気圧配置図の自動分類(川島, 北川)

気圧配置は気象学において15種類に分類されている。気象学研究者は、西高東低冬型や南高北低夏型などの、ある特徴をもつ気圧配置の事例を多数必要とすることがある。過去の気圧配置データは膨大に蓄積されているが、各データが研究者にとって必要な気圧配置であるかを判別するには、目視以外の手法は存在しないのが現状である。我々は地球生物環境研究部門と共同で、この気圧配置の一つである西高東低冬型を Support Vector Machine(SVM) を用いて分類する手法を開発した。

(3) 格子 QCD アンサンブル XML のファセット検索(天笠, 北川)

ILDG (International Lattice Data Grid)では、格子 QCD 配意データのメタデータとして XML が用いられている。世界中の地域グリッドで公開されている配意データを検索するため、利用性の高いインタフェースの開発が望まれていた。このため我々は、QCDml のためのファセット検索インタフェースを設計、実装を行った。ファ

セット検索とは、検索対象オブジェクトの集合を効率よく探索するための手法である。オブジェクトは、あらかじめファセットと呼ばれるいくつかの独立したカテゴリ毎に分類されている。各カテゴリ(ファセット)において、オブジェクトは着目する属性の値毎にグルーピングされており、その値がリスト表示されている。利用者はファセットに含まれる具体的な値を選択することで、オブジェクトの絞り込みを行い、探索を行う。XML データに対してファセット検索を適用するため、XML は半構造化性を考慮したファセットの抽出および QCDml におけるファセットの検討を行い、実際にシステムを構築した。



4. 研究業績

(1) 学術雑誌論文

1. 木村広希, 川島英之, 日下博幸, 北川博之, "サポートベクターマシンを用いた気圧配置検出手法の提案 -冬型気圧配置を対象として-", 地理学評論, Vol. 82, No. 4, pp.323-331. 2009 年 7 月.
2. Chantola Kit, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "Algorithms for Structure-based Grouping in XML-OLAP", International Journal of Web and Information Systems, Vol. 5 Issue 2, pp. 122-150, June 2009.
3. Imam Machdi, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "XML Data Partitioning Schemes for Parallel Holistic Twig Joins", International Journal of Web and Information Systems, Vol. 5 Issue 2, pp. 151-194, June 2009.
4. Zhitao Shen, Hideyuki Kawashima and Hiroyuki Kitagawa, "Efficient Probabilistic Event Stream Processing with Lineage and Kleene-plus", International Journal of Communication Networks and Distributed Systems, Vol. 2, No.4 pp. 355 - 374, 2009
5. 寺島慎太郎, 天笠俊之, 北川博之, "木直列化に基づく XML データの類似結合における木構造の統合", 日本データベース学会論文誌, Vol. 8, No. 1, pp. 47-52. 2009 年 6 月.

6. 木村広希, 川島英之, 北川博之, "サポートベクターマシンによる気圧配置の自動分類", 日本データベース学会論文誌, Vol. 8, No. 1, pp. 59-64. 2009 年 6 月.
7. 川島英之, 北川博之, 寺島裕貴, "ストリーム処理エンジンにおける効率的な来歴管理", 日本データベース学会論文誌, Vol. 8, No. 1, pp. 101-106. 2009 年 6 月.
8. 渡辺知恵美, 新井裕子, 天笠俊之, "ブルームフィルタを用いたプライバシー保護検索における攻撃モデルとデータ攪乱法の一検討", 日本データベース学会論文誌, Vol. 8, No. 1, pp. 113-118. 2009 年 6 月.
9. 佐藤亮, 川島英之, 北川博之, "データストリーム処理へのベイジアンネットワークの導入", 日本データベース学会論文誌, Vol. 8, No. 1, pp. 137-142. 2009 年 6 月.
10. 大喜恒甫, 渡辺陽介, 北川博之, 川島英之, "対象情報源を動的に選択可能なストリーム処理機能の実装と評価", 情報処理学会論文誌:データベース, (TOD43), Vol.2, No.3, pp.1-17 September, 2009.
11. MoonBae Song and Hiroyuki Kitagawa, "Managing Frequent Updates in R-trees for Update-intensive Applications", IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, Vol. 21, No. 11, pp. 1573-1589, November 2009.
12. Takako Hashimoto, Takashi Katooka, Atsushi Iizawa, and Hiroyuki Kitagawa, "Important Scene Analysis Model Using Result Importance and Situation Importance", International Journal of Wireless and Mobile Computing, Vol. 3, No. 4, pp.225-235, 2009.
13. Hasan Kadhém, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Mixed Encryption over Semi-Trusted Database", MASAUM Journal of Basic and Applied Science (MJBAS), Vol.1 Issue.2 pp.302-312, 2009.
14. Yousuke Watanabe and Hiroyuki Kitagawa, "Query Result Caching for Multiple Event-driven Continuous Queries ", Information Systems, Vol. 35, No. 1, pp. 94-110, 2010.
15. Djelloul Boukhelef and Hiroyuki Kitagawa, "Efficient Load Balancing Techniques for Self-organizing Content Addressable Networks", Journal of Networks, Vol. 5, No. 3, pp. 321-334, Mar 2010.

(2) 国際会議発表論文

1. Hasan Kadhém, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "Encryption over Semi-trusted Database", Proc. DASFAA2009 PhD Workshop, LNCS5667, pp.358-362, Brisben, Australia, April 20, 2009.
2. Tsubasa Takahashi and Hiroyuki Kitagawa, "A Ranking Method for Web Search Using Social Bookmarks", Proc. International Conference on Database Systems for Advanced Applications (DASFAA 2009), pp. 585-589, Brisben, Australia, April 21 - 23, 2009.

3. Hasan Kadhém, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "A Novel Framework for Database Security based on Mixed Cryptography", Proc. International Conference on Internet and Web Applications and Services(ICIW 2009), pp. 163-170, Venice, Italy, May 24 - 28, 2009.
4. Xin Li,Zhitao Shen,Hideyuki Kawashima and Hiroyuki Kitagawa, "Pattern-based Window: A Novel Window Operator to Support Event Detection for Data Stream Processing",
Proc. International Workshop on Sensor Network Technologies for Information Explosion Era (SeNTIE 2009), Taipei, Taiwan, May 18 - 21, 2009.
6. Yuki Terajima, Hideyuki Kawashima and Hiroyuki Kitagawa, "Providing Persistence to Provenances on Stream Processing Environment", Proc. 3rd International Workshop on Sensor Webs, Databases and Mining in Networked Sensing Systems (SWDMNSS 2009), Carnegie Mellon University, Pittsburgh, USA, June 17-19.
7. Ryo Sato, Hideyuki Kawashima and Hiroyuki Kitagawa, "Associating Bayesian Networks with Stream Data Processing", Proc. 3rd International Workshop on Sensor-Webs, Databases and Mining in Networked Sensing Systems (SWDMNSS 2009), Carnegie Mellon University, Pittsburgh, USA, June 17-19.
8. Atsuyuki Morishima, Akiyoshi Nakamizo, Toshinari Iida, Shigeo Sugimoto, Hiroyuki Kitagawa, "Bringing Your Dead Links Back to Life: A Comprehensive Approach and Lessons Learned", Proc. the 20th ACM Conference on Hypertext and Multimedia (ACM Hypertext 2009),pp. 15-24, Torino, Italy, June 29 -July 1, 2009.
9. Djelloul Boukhelef, Hiroyuki Kitagawa, "Efficient Multidimensional Data Management in Structured Peer-to-Peer Systems", PhD Workshop (VLDB 2009). 24 August 2009, Lyon France.
10. Imam Machdi, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Executing Parallel TwigStack Algorithm on a Multi-core System", Proc. 11th International Conference on Information Integration and Web-based Applications and Services (iiWAS2009), Kuala Lumpur, Malaysia Dec. 14-16, 2009.
11. Yoshishige Tsuji, Hideyuki Kawashima and Ikuo Takeuchi, "Optimization of Query Processing with Cache Conscious Buffering Operator", Proc. 6th International Workshop on Databases in Networked Information Systems (DNIS 2010), University of Aizu, Japan, March 29 - 31, 2010.

(3)学会発表

(A)招待講演

1. Hideyuki Kawashima, "Recent Advances in Data Stream Processing", The 21st GRACE Seminar on Advanced Software Science and Engineering, 2009 年 5 月 26 日.
2. 川島英之, 「ネットワークセンシングシステムの目指す方向ーデータマネジメントの観点から-」, SICE センシングフォーラム, 東京工業大学大岡山キャンパス, 2009 年 9 月 29 日.

(B) その他学会発表

1. 川島英之, 北川博之, 天笠俊之, 「ストリーム処理における来歴データ永続化の投機的実行方式」, 情報処理学会ユビキタスコンピューティングシステム研究会(UBI), 2009 年 5 月 15 日, 奈良県新公会堂. Vol.5, pp. 1-8.
2. 佐藤亮, 川島英之, 北川博之, 「Applying a Probabilistic Inference Stream Processing Engine to a Camera Sensor Network」, 電気情報通信学会ユビキタス・センサネットワーク研究会(USN), 2009 年 7 月 16 日～17 日, ATR.
3. 高木崇, 川島英之, 天笠俊之, 北川博之, 「ASTER 衛星画像と Web コンテンツを用いた新築建造物の検出」, データ工学会 e-Science Data および Intensive Science. (DE), 2009 年 9 月 7 日, 産総研臨海副都心センター.
4. 高木潤一郎, 猿渡俊介, 川島英之, 南正輝, 森川博之, 「時系列センサデータベースシステムの初期の検討」, 電子情報通信学会, ソサイエティ大会, 2009 年 9 月 15 日～18 日, 新潟大学
5. 天笠俊之, Ngo Sy Viet Phu, 北川博之, 「Web ページを対象とした XML データ抽出手法の検討」, 情報処理学会 第 73 回デジタルドキュメント研究会(SIGDD), 2009 年 9 月 25 日, 東京大学.
6. 駒水孝裕, 天笠俊之, 北川博之, 「異種 XML データに対するファセット検索手法の提案」, 情報処理学会 第 73 回デジタルドキュメント研究会(SIGDD), 2009 年 9 月 25 日, 東京大学.
7. Machdi Imam, Amagasa Toshiyuki, Kitagawa Hiroyuki, "Task Parallelism for TwigStack Algorithm on a Multi-core System" 第 2 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2010), 2010 年 2 月 28 日～3 月 2 日.
8. BOUKHELEF Djelloul, KITAGAWA Hiroyuki, "Multidimensional Range Query Processing in Structured P2P Overlays", 第 2 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2010), 2010 年 2 月 28 日～3 月 2 日.
9. Kadhem Hasan, Amagasa Toshiyuki, Kitagawa Hiroyuki, "An Encryption Scheme to Prevent Statistical Attacks in the DAS Model" 第 2 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2010), 2010 年 2 月 28 日～3 月 2 日.

10. 劉 健全, 陳 漢雄, 古瀬 一隆, 北川 博之, "距離索引を用いた逆最遠傍問題に対する効率的な検索手法", 第2回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2010), 2010年2月28日～3月2日.
11. 石田 梢, 北川 博之, "データストリームに対するハイブリッド型連続的外れ値検出手法の提案", 第2回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2010), 2010年2月28日～3月2日.
12. 木村 広希, 天笠 俊之, 川島 英之, 北川 博之, "サポートベクターマシンと隠れマルコフモデルを用いた気圧配置分類手法", 第2回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2010), 2010年2月28日～3月2日.
13. 佐藤 亮, 川島 英之, 北川 博之, "ベイジアンネットワークのストリーム演算化ならびに関係データ処理との統合", 第2回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2010), 2010年2月28日～3月2日.
14. 高木 崇, 川島 英之, 天笠 俊之, 北川 博之, "時系列 ASTER 衛星画像と Web コンテンツを用いた建造物生成イベントの検出", 第2回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2010), 2010年2月28日～3月2日.
15. 高橋 翼, 渡邊 桂太, 北川 博之, "ソーシャルブックマークにおけるトピック分析と活性度推定に基づく Web ページのランキング", 第2回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2010), 2010年2月28日～3月2日.
16. 駒水 孝裕, 天笠 俊之, 北川 博之, "異種 XML データに対するファセット検索における多様な検索", 第2回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2010), 2010年2月28日～3月2日.
17. 塩川 浩昭, 北川 博之, 川島 英之, "分散ストリーム処理環境における適応的高信頼化手法", 第2回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2010), 2010年2月28日～3月2日.
18. 渡邊 桂太, 高橋 翼, 天笠 俊之, 北川 博之, "グラフ構造解析を用いたソーシャルブックマークにおけるスパマー検出", 第2回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2010), 2010年2月28日～3月2日.
19. 上江 まり子, 橋本 隆子, 北川 博之, "動画コンテンツ共有サイトの可視化手法の研究", 第2回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2010), 2010年2月28日～3月2日.
20. 菊森佳幹, 天笠俊之, 川島英之, 北川博之, "流域水循環シミュレーションシステムと河川・流域データベースの連携", 情報処理学会創立 50 周年記念(第 72 回)全国大会, 2010年3月9日～3月11日.
21. 佐藤亮, 川島英之, 北川博之, "ベイズネットを用いた時系列イベントに対する確率推論処理", 情報処理学会創立 50 周年記念(第 72 回)全国大会, 2010年3月9日～3月11日.

22. 山口卓郎, 天笠俊之, 北川博之, "センサネットに対する XML ビューの提案", 情報処理学会創立 50 周年記念(第 72 回)全国大会, 2010 年 3 月 9 日～3 月 11 日.
23. Xin Li, Hideyuki Kawashima, Hiroyuki Kitagawa, "Complex Event Processing over Uncertain Data Streams", 情報処理学会創立 50 周年記念(第 72 回)全国大会, 2010 年 3 月 9 日～3 月 11 日.
24. 阿部泰芽, 川島英之, 北川博之, "ストリーム処理エンジンにおける複数書込み最適化の提案", 情報処理学会創立 50 周年記念(第 72 回)全国大会, 2010 年 3 月 9 日～3 月 11 日.
25. 于美麗, 天笠俊之, 北川博之, "アソシエーション抽出を用いた Web 情報の統合方式" 情報処理学会創立 50 周年記念(第 72 回)全国大会, 2010 年 3 月 9 日～3 月 11 日.
26. 郭楽, 天笠俊之, 北川博之, "不確定性を有するデータ集合に対する外れ値検出", 情報処理学会創立 50 周年記念(第 72 回)全国大会, 2010 年 3 月 9 日～3 月 11 日.
27. 駒水孝裕, 天笠俊之, 北川博之, "異種 XML データに対するファセット検索システムの性能評価", 情報処理学会創立 50 周年記念(第 72 回)全国大会, 2010 年 3 月 9 日～3 月 11 日.
28. 史航, 天笠俊之, 北川博之, "On Finding Functional Dependencies in XML Data", 情報処理学会創立 50 周年記念(第 72 回)全国大会, 2010 年 3 月 9 日～3 月 11 日.
29. 高橋翼, 川島英之, 北川博之, "映像ストリームとタプルストリームの統合利用のためのモデルの提案", 情報処理学会創立 50 周年記念(第 72 回)全国大会, 2010 年 3 月 9 日～3 月 11 日.
30. Nguyen Thien Truc, 川島英之, 北川博之, "データストリーム処理におけるコスト推定に基づく動的な来歴保存方式", 情報処理学会創立 50 周年記念(第 72 回)全国大会, 2010 年 3 月 9 日～3 月 11 日.
31. NGO SY VIET PHU, 天笠俊之, 北川博之, "属性の共起関係に着目した WWW からの効率的な XML データ抽出", 情報処理学会創立 50 周年記念(第 72 回)全国大会, 2010 年 3 月 9 日～3 月 11 日.
32. 渡邊桂太, 高橋翼, 天笠俊之, 北川博之, "グラフ解析に基づくソーシャルブックマークにおけるスパマー検出", 情報処理学会創立 50 周年記念(第 72 回)全国大会, 2010 年 3 月 9 日～3 月 11 日.
33. 大澤昇平, 天笠俊之, 北川博之, "マイクロブログにおけるコミュニティの抽出と分析", 情報処理学会創立 50 周年記念(第 72 回)全国大会, 2010 年 3 月 9 日～3 月 11 日.
34. オオルイジョン, 川島英之, 北川博之, "StreamSpinner の EC2 における評価", 情報処理学会創立 50 周年記念(第 72 回)全国大会, 2010 年 3 月 9 日～3 月 11 日.
35. 上江まり子, 橋本隆子, 北川博之, "動画コンテンツ共有サイトの可視化手法の研究", 情報処理学会創立 50 周年記念(第 72 回)全国大会, 2010 年 3 月 9 日～3 月 11 日.

36. 清野真奈, 天笠俊之, 北川博之, "注釈によるトレーサビリティ機能を持つ XQuery 処理系の実装", 情報処理学会創立 50 周年記念(第 72 回)全国大会, 2010 年 3 月 9 日～3 月 11 日.
37. 山口祐人, 高橋翼, 天笠俊之, 北川博之, "リンク構造解析による Twitter ユーザのランキング手法", 情報処理学会創立 50 周年記念(第 72 回)全国大会, 2010 年 3 月 9 日～3 月 11 日.
38. LI CHONGJIE, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "Efficient Privacy Preserving Query Processing using GPGPU", 情報処理学会創立 50 周年記念(第 72 回)全国大会, 2010 年 3 月 9 日～3 月 11 日.

(4)受賞

1. 研究会優秀論文:川島英之, 北川博之, 天笠俊之, 「ストリーム処理における来歴データ永続化の投機的実行方式」, 情報処理学会ユビキタスコンピューティングシステム研究会(UBI), 2009 年 5 月 15 日, 奈良県新公会堂. Vol.5, pp. 1-8.
2. 学生奨励賞:Machdi Imam, Amagasa Toshiyuki, Kitagawa Hiroyuki, "Task Parallelism for TwigStack Algorithm on a Multi-core System" 第 2 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2010), 2010 年 2 月 28 日～3 月 2 日.
3. 学生奨励賞:駒水 孝裕, 天笠 俊之, 北川 博之, "異種 XML データに対するファセット検索における多様な検索", 第 2 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2010), 2010 年 2 月 28 日～3 月 2 日.
4. 学生奨励賞:大澤昇平, 天笠俊之, 北川博之, "マイクロブログにおけるコミュニティの抽出と分析", 情報処理学会創立 50 周年記念(第 72 回)全国大会, 2010 年 3 月 9 日～3 月 11 日.
5. 学生奨励賞:上江まり子, 橋本隆子, 北川博之, "動画コンテンツ共有サイトの可視化手法の研究", 情報処理学会創立 50 周年記念(第 72 回)全国大会, 2010 年 3 月 9 日～3 月 11 日.

(5)その他成果デモ展示

イノベーションジャパン 2009(主催:JST, NEDO):「大規模センサデータ処理のためのデータストリーム管理基盤」, 2008 年 9 月 16～18 日, 東京国際フォーラム.

5.2. 計算メディア分野

1. メンバ

教授 大田 友一

准教授 亀田 能成, 北原 格

2. 概要

当グループが属する計算情報学研究部門は、「中長期的観点から計算科学の研究を抜本的に発展させる斬新な方法の開拓研究を行う部門」として、2004年度から新しく発足した部門であり、人間社会とその環境を主な対象とする新しい計算科学の枠組みを創成し、その基盤を確立することを目標として研究活動を推進している。

人間社会を対象とする計算科学では、人間を系に含むために、計算処理の都合で時間軸を自由に変更することが出来ない。グローバルに広がる人間社会とそれを取り巻く環境(生活空間や都市環境など)を対象として、人間の時間軸(すなわち、リアルタイム)に沿って膨大な情報を処理し、実観測データとシミュレーション結果の融合情報を、人間に分かり易い形で提示し人間社会へフィードバックするためには、実世界計算情報学と呼ぶべき新しい枠組みが必要となる。

具体的には、“実世界の情報をセンシングする機能”、“膨大な情報を処理する潤沢な計算機能”、“情報を選択・蓄積する大規模データベース機能”を、コンピュータネットワーク上で融合することにより大規模知能情報メディアを構築し、そのバックボーン上で、先端的要素技術の研究開発と、ニーズに密着した応用システムの研究開発を並行して進めている。

研究成果は、研究論文や学会発表だけでなく、イノベーション・ジャパン-大学見本市に2005年から2009年まで連続で出展するなど、広報活動にも努めてきた。

【1】自由視点映像の生成と提示:複数の視聴者が、それぞれ自由に視点を選びながら、スタジアムや体育館で行われるスポーツイベントのライブ中継を、ネットワーク経由で観ることができる技術を開発。(主な研究費:総務省 SCOPE(大田) 2006～2008 年度、共同研究経費(大田) 2007～2009 年度、科研費若手研究A(北原) 2009～2011 年度)

【2(1)】監視カメラ映像を活用した歩行者のための視覚支援:監視カメラ設置数の増大は避けられないであろうことを前提に、一般市民が監視カメラから得るメリットとして、眼に見えて便利さを実感できる新しい付加価値の在り方を提案し、それを実現する基盤技術を創成。(主な研究費:科研費基盤研究A(大田)2005～2009 年度)

【2(2)】センサ情報の社会利用のためのコンテンツ化(センシング WEB):監視カメラなどのセンサ情報を、WEB のコンテンツを利用するように、一般ユーザがオープンに活用するための基盤技術を創成。(主な研究費:科学技術振興調整費(大田) 2006～2009 年度)

【3】複合現実感を用いたコミュニケーション支援メディア技術:複合現実提示技術を用いて、空間・視覚情報を共有することにより、円滑なコミュニケーションを実現する技術を開発。(主な研究費:科研費萌芽研究(北原) 2006～2008 年度)

【4】環境カメラ群による多視点同時観測技術:大規模センサデータの管理・統合を目的とし、事象の多発場所の検出、複数視点からの同一事象観測、事象の頻度解析などにより、カメラ群とその映像を利用者に見やすい形に組織化。(主な研究費:科研費若手研究A(亀田) 2004～2006 年度)

【5】モバイルカメラと環境カメラを補間的に利用する映像監視技術:環境カメラ映像とモバイルカメラ映像の特長を統合した次世代の監視映像技術に関する研究開発。(主な研究費:科研費若手研究A(北原) 2006～2008 年度)

【6】顔画像からの意図解析:高速撮影カメラ等を用いて、顔表情解析から、対象人物の深層意図を推定する研究。特に悪意検出を目標とする。

【7】画像による定位技術:歩行者に装着したカメラのみを用いて、市中での歩行位置を求める技術を開発。屋内外を問わないため、例えば GPS 等が利用できない環境でも利用可能である。(主な研究費:厚生労働省障害者保健福祉推進事業(障害者自立支援機器等研究開発プロジェクト)「画像・GPS 等のセンサ統合による日常利用可能な屋内外視覚障害者歩行支援システムの開発」(研究代表者 静岡県立大学 石川准、研究分担者 亀田) 2009 年度)

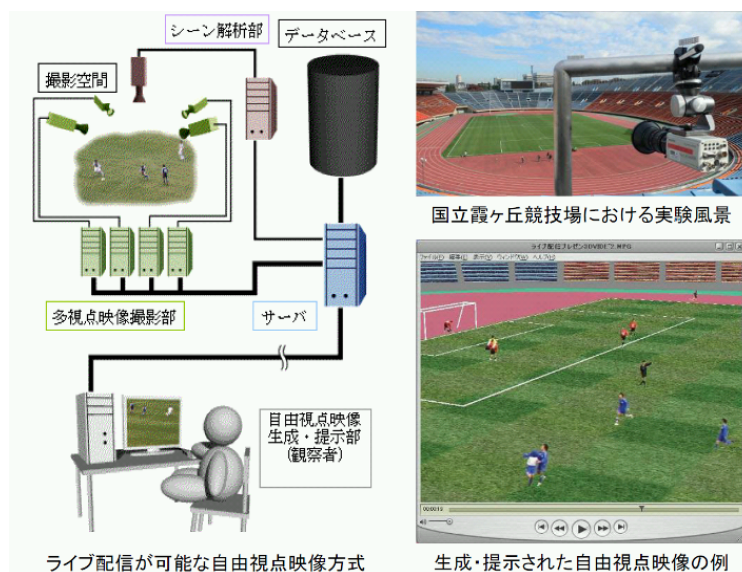
3. 研究成果

【1】自由視点映像の生成と提示 (大田, 亀田, 北原)

国立スポーツ科学センターとの共同研究として、総務省戦略的情報通信研究開発推進制度(SCOPE)による特定領域重点型研究開発「ネットワークによる自由視点映像のライブ配信とインタラクティブ提示」(研究代表者 大田友一)を2004年度から2006年度の3年間に渡り実施した。以降も、日本電気株式会社との共同研究や、2009年度からは科研費若手研究A「閲覧者中心型自由視点映像コンテンツ生成技術」として、研究開発を継続している。

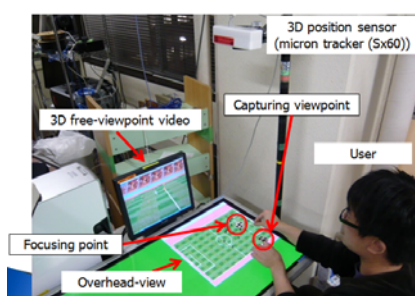
この研究は、複数の視聴者が、それぞれ自由に視点を選びながら、スタジアムや体育館で行われるスポーツイベントのライブ中継をネットワーク経由で観ることができる技術の開発と、素人でも使いやすいインタラクティ

ブな自由視点映像提示手法を開発し、蓄積・再生型の次世代コンテンツ技術を創出することを目的としている。



撮影物体を1枚の板(ポリゴン)とその表面に貼り付けるテクスチャ情報で表現する“人物ビルボード”という手法を開発することにより、多視点映像の撮影・加工・伝送から自由視点映像の生成・提示までの全ての処理をビデオレートで処理する世界初の自由視点映像のライブ配信を実現した。さらに、自由視点映像技術を実験室やスタジオから開放することを目指し、国立競技場や代々木体育館における実証実験において、システム全体の実用性・汎用性・ロバスト性の向上を目的とした技術開発を推進することにより、世界でも他に例を見ない、大規模空間で実施されるイベントを対象とした自由視点映像ライブ配信の実現に成功した。

2009 年度に顕著な進捗があったと認められる研究課題としては、素人でも使いやすいインタラクティブな自由視点映像撮影・提示インタフェースが挙げられる。このインタフェースでは、人間の身体動作を用いることにより、仮想カメラの位置・姿勢を直感的かつ正確に制御することが可能となる。フィールドを上空から俯瞰した映像をユーザに提示することにより、被写体と仮想カメラの相対的な位置関係の把握を容易にし、直感的なカメラ操作を実現した。また、フィールド俯瞰映像に被写体の位置や識別情報といった撮影シーンで発生しているイベントのコンテキストの理解を助ける情報を表示することにより、簡単な操作で注目対象を正確に撮影することが可能となる。開発したシステムは、2010 年 3 月 20 日に NHK BS で放送された「体感！デジタルパワーがやってくる」の“未来先取りテレビ、こんな番組いかがでショー”のコーナーで取り上げられている。撮影映像機器の高性能化と、それに伴う生成映像の高画質化については、今後、研究を推進する必要があるが、コンピュータグラフィックスを活用したシミュレーション環境の整備など、基礎的な検討はほぼ完了している。



自由視点映像撮影・提示インタフェース

「体感！デジタルパワーがやってくる」(2010.3.20)

【2】監視カメラ映像を活用する視覚支援方式（大田、亀田、北原）

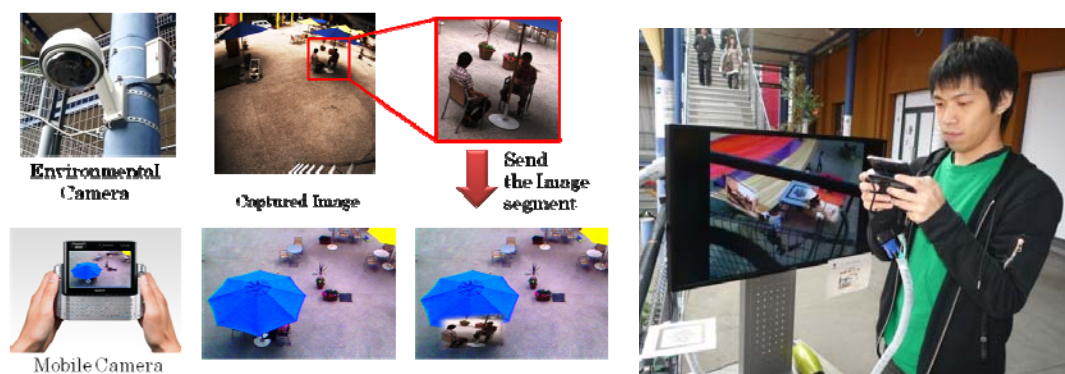
（1）シースルービジョン（大田、亀田、北原）

2006年度から2009年度の4年間の計画で、科学研究費補助金・基盤研究(A)「シースルービジョン：監視カメラ映像を活用する歩行者のための視覚支援方式の開発」（研究代表者 大田友一）を実施した。

本研究は、公共空間における監視カメラ設置数の増大は避けられないであろうことを前提に、一般市民が、自らのプライバシーと引き替えに監視カメラから得られるメリットとして、「安全」という重要だが眼に見えにくい価値の他に、眼に見えて便利さを実感できる新しい付加価値の在り方を提案し、それを実現する基盤技術を創成することを目的としていた。

新しい付加価値の在り方として、具体的には、従来、カメラの設置者のみが利用していた監視カメラ映像を、被写体である一般市民も利用可能とすることを前提に、歩行者が持つPDAなどの携帯型情報端末に監視カメラ映像を適切に加工した映像情報を提示し、自分の眼では直接見ることが出来ない視覚情報を歩行者に提供する「シースルービジョン」を提案した。

シースルービジョンとしては情報端末カメラを用いての直接透視方式の他に、利用者の位置からバーチャルに視点移動を行う方式も提案した。この方式は、特に透視先の物体が遠方に存在する場合に、その視認性を向上させることができる。

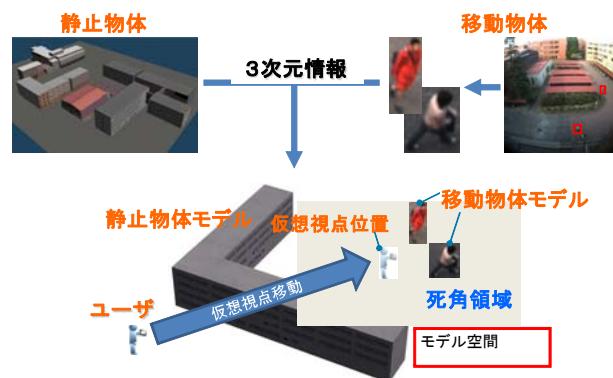


シースルービジョンの処理概要

左上：監視カメラ、中上：監視カメラ映像、右上：対象
左下：情報端末、中下：情報端末カメラ映像、右下：シースルービジョン

シースルービジョンの様子

背後の大型ディスプレイは情報端末画面と同一



バーチャルな視点移動を伴うシースルービジョン

これらの基盤技術の上で、屋外作業における視点共有の新しい枠組みについても取り組みを進めている。屋外においては、情報端末の操作に制約が付されてしまうため、そのユーザインタフェースは注意深く設計される必要があり、2010年度以降継続的に研究を進める予定である。

(4) センシングウェブ (大田、亀田、北原)

2007年度から2009年度の3年間に渡り、科学技術振興調整費・科学技術連携施策群の効果的・効率的な推進「センサ情報の社会利用のためのコンテンツ化」(研究代表者 美濃導彦)の研究課題において、「画像情報に対するプライバシー情報管理」(研究代表者 大田友一)を実施した。

本研究では、多種多様な画像センサ情報に含まれるプライバシー情報をフィルタリングするための基礎的技術を研究した。画像情報の中に含まれる被写体のプライバシー情報を分類して構造化することによって、利用者に応じて段階的かつ選択的にプライバシー情報を取り除いて提供するための技術を開発するとともに、開発した技術の有効性を検証するために、公共環境での実証実験を実施した。下図は実証実験の場である新風館でのプライバシーに配慮したシースルービジョン実現の様子である。右ではシースルービジョン利用者にパラソル下の映像を観るための権限がないため、人物はアイコン化されて表示されている。



実証実験会場(新風館)

利用者は2階回廊から中庭を見下ろす



プライバシーに配慮するシースルービジョン

パラソル下の人物と関係のない利用者は、
パラソルの下の人間をアイコンの形で観ることになる

本研究では技術内容を国際会議で発表するのみならず、社会貢献の立場から技術公開にも留意し、3回に渡って公開実証実験を行った。延べ200人以上の一般来場者へのデモと聞き取り調査も行った。

開催イベント「体感しよう！あいあいネット」

場所：京都市 中京区 新風館(〒604-8172 京都市中京区烏丸通姉小路下ル場之町 586-2)

第1回 日時：2009年7月31日(金) 12:00-17:00

第2回 日時：2009年9月19日(金) 13:00-18:00

第3回 日時：2009年11月15日(金) 12:00-17:00

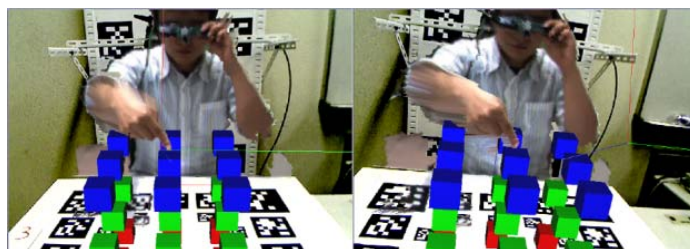
【3】複合現実感を用いたコミュニケーション支援メディア技術（大田、北原）

複合現実感(Mixed Reality)とは、コンピュータグラフィックスによって描かれた仮想世界を、現実世界にシームレスに融合した映像を提示する技術である。本研究では、複合現実感技術によって生成される空間を、遠隔地に居る複数のユーザが共有できる遠隔コミュニケーションシステムの開発を進めている。

2009年度は、卓上に存在する3次元物体の操作に適した立体人物像表現の提案と、実時間で人物像の取得・伝送・提示を行うシステムの実装について取り組んだ。構築したシステムを用いて遠隔作業指示を想定した評価実験を行い、提案手法の有効性を示すことに成功している。開発したシステムについては、大学院公開などの各種見学会において、システムを体験できるデモを実施し開発技術の広報に努めている。



遠隔協調型複合現実感システム



3次元物体への操作性に関する評価実験の様子

今後は、3次元物体操作を活用したシステムの開発を進める必要があるが、遠隔地間における機械組み立て作業支援システムなどへの応用を検討中である。

【4】ネットワーク結合型マルチメディアセンサアレイ群の自動協調（亀田、大田）

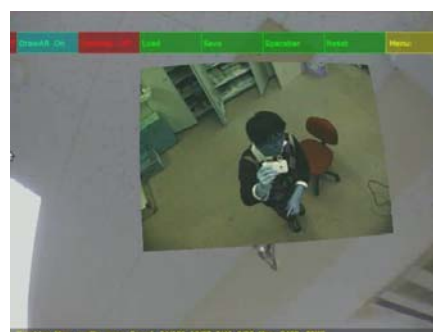
本年度は、日常生活の各所に散在する環境カメラの観測範囲を確認するための新しい可視化手法について研究を進めた。カメラ付きモバイル端末を持った利用者に対して、環境カメラ情報の位置および撮影像を分かりやすく提供するために、複合現実感技術を用いてモバイル端末上に可視化を行う手段を提供する。

本研究の成果によって、撮影対象となっている人々は、環境カメラが環境中のどの部分をどのように撮影しているかを理解できるようになり、環境カメラの有用性を評価することができるようになる。

技術的には、複合現実感技術を用いて、撮影空間中に位置する利用者に対して、モバイル端末のディスプレイ上に環境カメラ映像を鏡のように重畳し直接提示する。本技術は、自然特徴を利用したカメラ定位技術など、最先端の複合現実感技術や映像加工技術を組み合わせることで初めて可能となる。



監視カメラ映像可視化の概念図



実証システムの実行画面

モバイル端末画面相当のスナップショット。

利用者はモバイル端末を天井に向けている。

画面中央部のカラー部分が監視カメラからの映像。

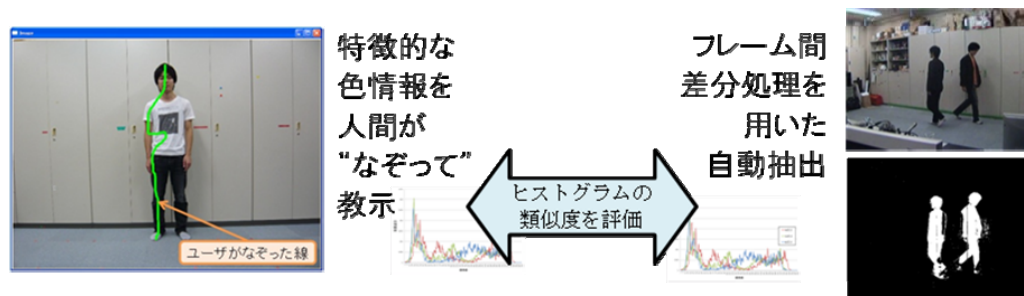
【5】モバイルカメラと環境カメラを補間的に利用する映像監視技術(北原、大田)

2006年度から2008年度の3年間の計画で、科学研究費補助金・若手研究A「被写体のプライバシーを考慮したモバイルカメラによる高自由度映像監視技術に関する研究」(研究代表者 北原格)を実施した。以降も、科研費若手研究A「閲覧者中心型自由視点映像コンテンツ生成技術」の基盤技術の一部として、研究開発を継続している。

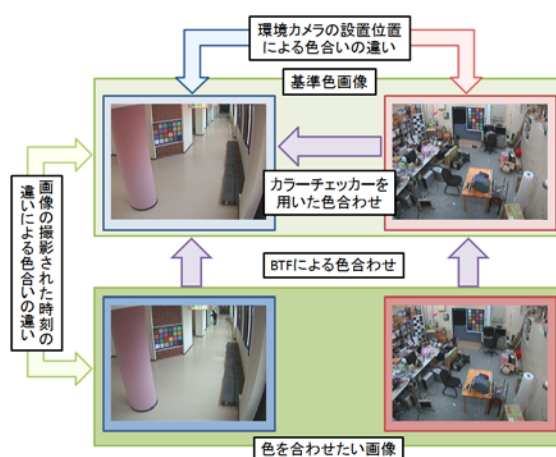
この研究では、環境に設置された多視点カメラとモバイルカメラを連動させることにより、互いの長所を融合した撮影システムを構築し、モバイルカメラのキャリブレーション技術や、モバイルカメラによって収集された映像情報を用いて環境設置型カメラの監視エリアを拡大する技術の研究開発を行っている。

2009年度は、複数の環境カメラで撮影した映像群から特定の人物を探索する処理を支援する方式の開発を行った。画像の中から物体の特徴となる情報を抽出する能力は、コンピュータより人間の方が優れている。一方で、画像の色分解能が十分に高ければ、色の微小な違いを判別する処理は、人間よりもコンピュータの方が得意である。そこで、探索対象人物の特徴を表す色情報の抽出作業は人間(映像監視者)が行い、色情報を用いた人物領域同士の類似度計算を元に観察画像群から注目人物を見つけ出す処理をコンピュータが担当

する仕組みを提案した。複数のカメラで撮影した映像の色合わせは、重要な基盤技術であるが、色合いが異なる原因を、環境カメラの設置位置の違いによるものと、同一の環境カメラにおける経時変化によるものとに分離し、異なる時間・場所で撮影した環境カメラ画像間の色合いを合わせる手法を開発した。



環境カメラ映像群を用いた人物探索支援方式



複数カメラ間での色合いの補正処理

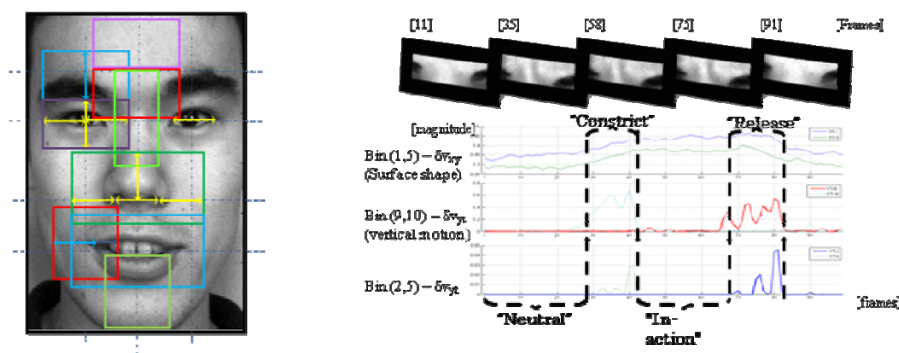
今後は、実環境に設置した複数の環境カメラを用いた実証実験を行い、提案手法の有効性や探索性能評価を行う必要があるが、大学キャンパスへの環境カメラや映像を伝送するネットワークの設置は概ね完了し、直ちに実験に取り掛かれる状況である。

【6】顔画像からの意図解析 by 亀田（亀田、大田）

2009年度から、顔表情動作の観測によって、対象人物の意図を認識する研究を本格的に開始した。研究上の最終目標は、対象人物が悪意(害意)を潜在的に有しているかどうかを判定することであり、世界的にも成功例が未だに報告されていない野心的な挑戦である。本研究で成果を挙げることができれば、テロ犯罪防止・抑制が容易になり、安心安全な社会の構築に貢献できる。

2009年度の研究要旨としては、Micro Expression という非常に短時間かつ僅かな顔の動きを、高速度撮影カメラを用いた観測により顔の筋肉モデルの運動拘束を元に数値化することで、検出できる手法を確立し、国際会議発表も行った。これは、顔動作に関する心理学的な知見、先端的な画像センシングデバイス、および適切な画像処理の高度な融合による成果である。Micro Expression は深層の心の動きの表出と考えられているため、今後はこの検出結果をもとに悪意判定を可能にするアルゴリズムの研究に進む予定である。

なお、本研究に関しては、現在、米国の表情解析の専門家グループとの連携を進めるための手続きを、産学リエゾン共同研究センターとも相談しつつ進めているところである。また、米国の別の心理解析の専門家グループと議論を行っており、共同研究について予算申請(米国)を含めて調整中である。



画像処理を重点的に行う領域 映像時空間の偏微分による Micro Expression 検出

【7】画像による定位技術 by 亀田（亀田、大田）

精度のよい歩行者ナビゲーションは、視覚障害者にとって、介助者や介助犬なしで自由に外出したいという希望を叶えるために必要な技術である。このために、高精度の歩行者位置推定の実現が不可欠である。このために、厚生労働省の障害者保健福祉推進事業(障害者自立支援機器等研究開発プロジェクト)「画像・GPS等のセンサ統合による日常利用可能な屋内外視覚障害者歩行支援システムの開発」(研究代表者:静岡県立大学 石川准)を通じて、2009年度は画像による屋外空間での定位技術の研究開発を行った。

我々が提案し実現したのは、歩行者カメラ1台を用いて、現在の歩行位置をリアルタイムに推定する手法である。本手法は、同一経路上で事前に撮影した映像を手がかりに、歩行者の現在位置を画像検索によって推定する。スタンドアロンシステムで実現できる性能が求められるため、プロトタイプシステムでは、位置回転不変な局所特徴量に基づく一般的画像認識方法をベースに、ノートPC1台程度でもリアルタイム実行可能な認識エンジンを実現した。

また、実証実験として、歩行者ナビゲーションが要求される状況の中でも比較的困難な状況と考えられる、東京駅周辺の地下から地上に至る1kmほどの歩行経路を対象にし、その有効性を確認した。実験に際しては、

定位技術の性能検証に加えて、プロジェクト全体としての視覚障害者を被験者にした実験も行った。その際、社会に還元できる実装の形についても意見を聴取した。また、研究成果の一般公開を行った。

イベント名:09年度障害者自立支援機器等研究開発プロジェクト研究成果一般公開

日付:2010年3月8日

場所:東京都千代田区厚生労働省



東京駅近郊の路上の様子



一般画像検索の応用による実現



システム内の画像処理の様子

4. 研究業績

(1) 研究論文

1. An Installation of Privacy-Safe See-Through Vision; Masayuki Hayashi, Ryo Yoshida, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, and Yuichi Ohta, *Procedia - Social and Behavioral Sciences*, vol.2, no.1, pp.125-128, (2010.3)
2. Facial Micro-Expressions Recognition using High Speed Camera and 3D-Gradient Descriptor; Senya Semion Polikovskiy, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, *Third International Conference on Imaging for Crime Detection and Prevention (ICDP-09)*, 6pages (2009.12)
3. 3D Pointing Interface by Using Virtual Diorama for Attention Sharing; Masayuki Hayashi, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, *Proceedings of "Let's Go Out" Workshop in conjunction with International Symposium on Mixed and Augmented Reality 2009 (ISMAR09)*, 2pages (2009.10)
4. MR based Visualization of Viewing Fields of Surveillance Cameras in Outdoor Scene; Yoshinari Kameda, Dao Ngoc Thanh, Itaru Kitahara, Yuichi Ohta, *The 1st International Workshop on Aware Computing (IWAC2009)*, pp.733-736 (2009.9)
5. MR-Mirror: A Complex of Real and Virtual Mirrors; Hideaki Satoh, Itaru Kitahara, Yuichi Ohta, *13th International Conference on Human-Computer Interaction (HCI International 2009)*, pp.482-491 (2009.7)
6. サッカーシーンにおける選手視点映像提示のためのリアルタイム選手軌跡獲得手法; 糟谷望, 北原格, 亀田能成, 大田友一, *画像電子学会誌*, 38, 4, pp.395-403 (2009.7)

7. Automatic Player's View Generation of Real Soccer Scenes Based on Trajectory Tracking; Nozomu Kasuya, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, Proceedings of 3DTV Conference 2009 (Capture, Transmission and Display of 3D Video), 4pages (2009.5)
8. シースルービジョンとプライバシー情報の管理; 大田友一, 亀田能成, 北原格, 人工知能学会誌, 24, 2, pp.214-219 (2009.3)

(2) 学会発表

(A) 招待講演

1. センサ情報利用によるシースルービジョン; 大田友一, 情報処理学会 創立 50 周年記念全国大会 (2010.3)
2. 複合現実感と Sensing Web; 大田友一, 日本色彩学会・視覚情報基礎研究会 2009 年度 第 4 回研究発表会 (2010.3)
3. 画像処理技術の新たな展開; 大田友一, 電子情報通信学会 2009 年総合大会, SS-5-6 (2009.3)

(B) その他の学会発表

1. 3次元位置センサとフィールド俯瞰映像を用いたサッカーシーンの自由視点カメラ操作方式; 渡邊哲哉, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 2010 年総合大会講演論文集, p.191 (2010.3)
2. 駐車場見守りシステムのための移動物体撮影手法の一検討; 渡辺大介, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 2010 年総合大会講演論文集, p.112 (2010.3)
3. シースルービジョンにおける移動物体のポップアップ表示; 吉田亮, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 2010 年総合大会講演論文集, p.189 (2010.3)
4. 車両の往来に合わせた優先表示による交差点近傍の空瞰映像生成; 藤垣真人, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 2010 年総合大会講演論文集, p.192 (2010.3)
5. マルチ解像度光源マップを用いた光学的整合性の評価実験方式; 末次祐樹, 北原格, 大田友一, 電子情報通信学会 2010 年総合大会講演論文集, p.159 (2010.3)
6. CHLAC 特徴量と錐制約部分空間法を用いた複数物体の動作分類; 佐藤竜太, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 2010 年総合大会講演論文集, p.174 (2010.3)
7. 自由視点映像生成のための低解像度映像を用いた人物動作推定; 越田弘樹, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 2010 年総合大会講演論文集, p.129 (2010.3)
8. 環境カメラによる交差点周辺領域の動的な危険度マップの作成; 剣持星二, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 2010 年総合大会講演論文集, p.193 (2010.3)
9. 多視点顔画像データベースを用いた モバイルカメラ画像中の人物識別手法の検討; 見目真一, 北原格, 大田友一, 電子情報通信学会 2010 年総合大会講演論文集, p.140 (2010.3)
10. 色情報を利用した環境カメラ画像群からの人物探索方式; 宇津野雄亮, 北原格, 大田友一, 電子情報通信学会 2010 年総合大会講演論文集, p.154 (2010.3)

11. Experimental Setup for Micro-Expression Detection ; Senya Polikovsky, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, 電子情報通信学会 2010 年総合大会講演論文集, p.136 (2010.3)
12. 画像から復元された3次元特徴点マップ群の世界座標系への統合; 林将之, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 2010 年総合大会講演論文集, p.188 (2010.3)
13. 輝度勾配特徴を用いた Mean-Shift 探索による目領域追跡手法; 佐藤秀昭, 北原格, 大田友一, 電子情報通信学会 2010 年総合大会講演論文集, p.203 (2010.3)
14. 影と3台のカメラを使った選手位置推定; 糟谷望, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 2010 年総合大会講演論文集, p.209 (2010.3)
15. ウインドシールドディスプレイを用いた道路鏡像提示に於ける幾何整合性と見易さの関係; 川俣貴也, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, 109, 373, pp.237-242 (2010.1)
- ※2010 年 1 月 MVE 研究会 MVE 賞受賞
16. CHLAC 特徴量と錘制約部分空間法による動作分類; 佐藤竜太, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 技術研究報告 PRMU, 109, 374, pp.173-178 (2010.1)
17. 遠隔協調型複合現実感における距離画像を用いた人物像の立体提示; 岡本祐樹, 北原格, 大田友一, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, 109, 215, pp.53-58 (2009.10)
18. 複合現実感における手と仮想物体の隠れ境界に生じる違和感の軽減手法; 田中康宏, 北原格, 大田友一, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, 109, 215, pp.47-52 (2009.10)
19. 仮想俯瞰模型を用いた3次元位置共有方式における 情報提示手法の検討と評価; 林将之, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 第 14 回日本バーチャルリアリティ学会大会論文集, 4pages (2009.9)
20. CHLAC 特徴量と部分空間法による複数行動の分類; 佐藤竜太, 亀田能成, 大田友一, 画像の認識・理解シンポジウム 2009 論文集(MIRU2009), pp.1344-1349 (2009.7)
21. 3次元位置センサと俯瞰映像モニタを用いた自由視点映像提示インタフェース; 渡邊哲哉, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 第 5 回デジタルコンテンツシンポジウム (DCS2009), 6pages (2009.6)
22. Watching a Player's View in Real Soccer Scenes by Using Player Trajectories; Nozomu Kasuya, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, The Second Korea-Japan Workshop on Mixed Reality (KJMR09), pp.65-68 (2009.5)

5. 連携・国際活動・社会貢献、その他

2009 年度は下記のイベント・展示会に参加し、広く社会に研究成果を広報した。

また、2009 年度は(株)日本電気と共同研究を実施した。

大学院専攻研究公開(展示)

日時:2009.5.9, 2009.6.13 (いずれも 10:00-16:00)

会場:筑波大学第三エリア

展示内容:自由視点映像や複合現実感技術に関連したデモシステムの展示、技術紹介ビデオの紹介

イベント「体感しよう！あいあいネット」(主催側)

<http://www.mm.media.kyoto-u.ac.jp/web/eye-i-net/index.html>

場所: 京都市 中京区 新風館(〒604-8172 京都市中京区烏丸通姉小路下ル場之町 586-2)

第1回 日時: 2009 年 7 月 31 日(金) 12:00-17:00

第2回 日時: 2009 年 9 月 19 日(金) 13:00-18:00

第3回 日時: 2009 年 11 月 15 日(金) 12:00-17:00

イノベーション・ジャパン 2009(展示)

開催日:2009.9.16-18

会場:東京国際フォーラム

・展示ブース番号 I-02

・テーマ名: 監視カメラ映像を「見える化」する技術

第9回 TX テクノロジー・ショーケース in つくば 2010(展示)

<http://www.science-academy.jp/showcase/09/index.html>

発表日:2010.1.22

会場:筑波大学大学会館

テーマ名:(括弧内は発表担当学生名)

自由視点映像技術を用いた選手視点映像生成・提示(糟谷望)

※ポスター発表インデクシング審査で「ベスト熱意賞」受賞

MR ミラー:鏡像を用いた現実世界と仮想世界の融合提示(佐藤秀昭)

仮想俯瞰模型を用いた3次元空間の指示共有システム(林将之)