

目次

1	平成 25 年度重点施策および改善目標の達成状況.....	2
2	自己評価と課題.....	8
3	各研究部門の報告	10
	I. 素粒子物理研究部門	10
	II. 宇宙・原子核物理研究部門	32
	II-1. 宇宙物理理論グループ	32
	II-2. 原子核分野.....	56
	III. 量子物性研究部門	69
	IV. 生命科学研究部門.....	83
	IV-1. 生命機能情報分野	83
	IV-2. 分子進化分野	93
	V. 地球環境研究部門	104
	VI. 高性能計算システム研究部門	118
	VII. 計算情報学研究部門	148
	VII-1. データ基盤分野	148
	VII-2. 計算メディア分野	166

1 平成 25 年度重点施策および改善目標の達成状況

1-1. 全体的な状況

ミッション再定義に基づき、センターの組織改革を行うと共に、「計算基礎科学連携拠点」や「宇宙生命計算科学連携拠点」を中心とした学内外連携体制を強化した。平成 26 年 2 月には、3 日間にわたり海外委員 8 名、国内委員 3 名による外部評価を実施した。また、センター人事委員会を設置し、センター部局化に向けた取り組みを開始し、転出枠 (2 枠)、全学戦略枠 (2 枠)、国際テニュアトラック枠 (4 枠) により、計算基礎科学、物質・生命、地球環境、宇宙生命の新たな人事を行った。共同利用・共同研究拠点の共同研究プログラムとして、学際共同利用プログラムにより 37 課題のプロジェクトを採択し共同研究を実施した。また、第 5 回「学際計算科学による新たな知の発展・統合・創出」シンポジウム –T2K-Tsukuba, HA-PACS による計算科学の発展と次世代コンピューティングの展望– を 11 月に開催し、T2K-Tsukuba と HA-PACS による学術成果を総括した。各研究グループが行う重点課題についても、学際共同利用プログラムのプロジェクトとして実施し、着実に研究を進めた。特別経費プロジェクト「エクサスケール計算技術開拓による先端学際計算科学教育研究拠点の充実」においては、密結合並列演算加速機構 (TCA 機構) を開発し、これを HA-PACS に実装することで、システムの総ピーク演算性能 1.166 ペタフロップスを実現した。T2K システムの後継システムについては、パイロットシステム COMA(PACS-IX)を導入すると共に、東京大学情報基盤センターと共同設置した「最先端共同 HPC 基盤施設」において次期マシンの検討を行った。さらに、東工大、理研、会津大、日立とともに「将来の HPCI システムのあり方に関する調査研究」において、演算加速機構をもつ次世代スパコンについての提案を取りまとめた。また、学外連携強化のため、名古屋大学大学院工学研究科との連携協定を締結した。

1-2. 重点施策の達成状況

25 年度重点施策・改善目標と実施内容は以下の通り。

(1) 次期 T2K マシンとして、東大と共同して大規模システムを開発・運用する体制を構築する。

T2K システムの後継システムについては、東京大学情報基盤センターとともに柏キャンパスに共同して次期スパコンを設置、運用することを計画している。そのため、昨年度東大と協定を締結し、「最先端共同 HPC 基盤施設」を設置した。今年度は、各々の大学において資料提供招請 (平成 26 年 2 月末提出締切) を行い、提出された資料に基づき、合同で各社へのヒアリングを開始し、技術的な検討を始めた。また、次期導入予定のシステム的设计・予備研究のためのパイロット・システムとして大規模メニーコア実験システム COMA (PACS-IX) を計算科学研究センター別棟に平成 26 年 3 月末に導入した。なお、T2K-Tsukuba システムについては、平成 26 年 2 月 28 日に運用を終了し、ファイルシステム等を調達し、移行の準備を行った。

(2) HA-PACS プロジェクト「エクサスケール計算技術開拓による先端学際計算科学教育研究拠点の充実」および、「将来の HPCI システムに関する調査研究」を実施し、将来のエクサスケールシステムに検討する。

HA-PACS については、「学際共同利用プログラム」に組み入れ、本システムを用いた共同研究を行った。また、本プロジェクトの一つの重要な研究項目である、演算加速機構(GPU)間を直接結合する PEACH2 については設計・実装を完了し、これを組み込んだ密結合並列演算加速機構(TCA 機構)システムを完成させ、システムの総ピーク演算性能 1.166 ペタフロップスを実現した。アプリケーションについても、先端計算科学推進室で開発を進めた。また、センターを中心に東工大、理研、会津大、日立とともに「将来の HPCI システムのあり方に関する調査研究」のプロジェクトの下で、演算加速機構をもつ次世代スパコンについての提案を取りまとめた。

(3) HPCI 戦略プログラム(分野 5)を中心、「京」コンピュータを活用し、研究を推進する。

KEK、国立天文台と締結した計算基礎科学連携拠点を運営し、これを中心として計算基礎科学分野の HPCI 戦略プログラム(分野 5)「物質と宇宙の起源と構造」を推進し、素粒子、原子核、宇宙分野で重要な成果を上げた。

(4) 研究成果を基に、国際連携を進める。

7月4～5日にエジンバラ大学とのワークショップを筑波大で開催し、連携の状況についてミーティングを行った。共同研究のテーマについて情報交換する他、研究協力全般の MoU を締結した。また、韓国 KISTI との連携に関しては、韓国の HPC 関係機関と共に、2月24～27日に日韓 HPC Winter School ならびにワークショップを開催した。ローレンスバークレイ研究所とは、H26年4月に筑波でミーティングを行う予定である。

(5) 共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」の活動として、特別経費プロジェクト「先端学際計算科学の開拓・推進・展開事業」とともに、学際共同利用プログラムを演算加速機構を持つスパコンや次期 T2K マシンに移行しつつ、共同研究を推進する。

「先端学際計算科学共同研究拠点」として、「先端学際計算科学の開拓・推進・展開事業—計算科学による先導的知の創出—」プロジェクトを推進し、共同研究プログラムとして、T2K-Tsukuba と HA-PACS を活用する学際共同利用プログラムを実施し、(1) 学際開拓プログラム、(2) 重点課題推進プログラム、(3) 共同研究推進プログラムについて、計 37 課題のプロジェクトを採択し共同研究と重点研究を推進した。

1-3. 研究の年度目標と達成状況

(1) 素粒子物理研究部門

京での「格子 QCD による物理点でのバリオン間相互作用の決定」の計算に向け、ゲージ配位の

生成の第 1 段階を完了し、それを用いたバリオン間相互作用の計算方を開始する。

「京」でのゲージ配位生成が目標の 90%程度まで到達し、残りは来年度初めに終了する予定である。バリオン間相互作用の計算に関しては、「京」を用いたテスト計算を実行し、来年度からの本格計算へ向けた準備が進められた。有限密度 QCD では、4 フレーバーにおいて有限サイズスケールリング法を用いた相構造解析に成功した。また、有限温度 QCD では、3 フレーバーにおける臨界終点を同定する計算が進行中である。

(2) 宇宙・原子核物理研究部門

宇宙における初代天体形成、銀河進化と相互作用、巨大ブラックホールの形成史を、輻射流体力学、N体シミュレーションによって探究する。多フェルミオン系の量子ダイナミクスに対する大規模計算により、元素合成に関わる原子核反応や、光と物質の相互作用に関する理解を発展させる。

宇宙分野では、初代銀河形成と宇宙再電離、ダークマター宇宙における構造形成と銀河進化、銀河と矮小銀河の衝突過程、ブラックホール多体系の合体過程、活動銀河核による星間物質のダイナミクスを、大規模な輻射流体力学、N体シミュレーションによって探究すると共に、自己重力多体系の6次元ボルツマン計算を実現させた。原子核分野では、重元素生成に重要なトリプルアルファ反応に対し、当グループが発展させた虚時間理論を適用し、広い温度範囲で信頼のおける反応率を得ることに成功した。二重ベータ崩壊からニュートリノ質量を決定するために必要となる原子核行列要素の計算を進めた。また、星間空間アミノ酸、系外惑星上の光合成の量子計算で、生命分野と協働した。

(3) 量子物性研究部門

第一原理量子論等によりナノ構造体の持つ特徴的物性の解明、次世代技術基盤の創成等の研究を行う。つくばナノテクアリーナの産業界との連携をさらに強固なものとし、計算科学の知見を得る。

光と物質の相互作用に関して、計算科学手法を用いた研究を発展させた。高強度なレーザーと原子の相互作用では、中赤外線における原子電離過程に対して多重散乱の寄与を明らかにした。高強度なパルス光と誘電体の相互作用では、極限的なパルス光により誘起されるカレントの特性を明らかにした。強相関物質と光の相互作用では、多軌道強相関電子系における特異な光照射効果を見出した。また、銅酸化物超伝導体でその存在が予言されている‘スピン渦誘起ループ電流’の方向を、レーザーにより変換可能であることが計算により示された。

(4) 生命科学研究部門

特に、宇宙分野と連携して宇宙生物学分野に資する知見を第一原理量子論によって獲得する。分子進化分野では、クリプト生物群とフォルニカータ生物群の多様性と系統関係の解明を目指し、

網羅的発現遺伝子データに基づく大規模系統解析を行う。

生命科学の重要な課題を解決するために、計算機シミュレーションによる生命機能の理論的解明と GPU を用いた量子力学計算手法の開発を行った。宇宙分野と連携した宇宙生物学分野においては、当該分野においてパイオニアとなる「L 型アミノ酸過剰の起源」や「系惑星における光合成の可能性」等の量子論的知見を得ることに成功した。また、分子進化分野では、クリプト生物群に含まれるカタブレファリス類 *Roombia* sp. とフォルニカータ生物群に含まれる *Dysnectes brevis* と未記載種 NY0171 株の網羅的発現遺伝子を行い、そのデータを使用した大規模分子系統解析を行うことで、これらの新奇生物種の系統的位置を確定した。

(5) 地球環境研究部門

文科省 GRENE プロジェクトにおいて、NICAM を用いた北極圏の温暖化の再現実験を行い、北極振動との関係を調べる。街路樹による都市熱環境緩和効果に対する数値実験を行い、街路樹モデルの LES への導入を進める。

文科省グリーン北極事業の北極温暖化研究プロジェクトを実施した。北極振動と北極温暖化の関係を分析。2000 年以降に北極温暖化増幅が強化され、同時に負の北極振動が顕在化した。その結果、温和な北極圏と寒冷な中緯度が発現することを示した。線形傾圧モデル(LBM)を用いて北極振動の特異固有解理論を発展させ、北極振動指数(AOI)の正負に伴う傾圧不安定解の構造変化を解析した。前年度開発した建物間放射モデルと樹木モデルを結合させ、建物と樹木が混在する都市街区内における放射・熱環境をシミュレートできるモデルを開発した。夜間の都市熱環境に対する植生の効果を評価するための人工気象室（ポリエチレンチャンパー）を開発した。環境省の S8 プロジェクトで開発した「温暖化ダウンスケーラ」をインドネシア気候・気象・地球物理庁 (BMKG) に導入した。このソフトウェアの導入により、今後、途上国が独力で地域の温暖化予測ができるようになると期待される。

(6) 高性能計算システム研究部門

HA-PACS における並列言語 XMP 及びその演算加速向け拡張、また密結合演算加速機構の大規模実アプリケーションでの評価を進める。広域分散ファイルシステム Gfarm の HPCI での安定実稼働と一層の性能向上を行う。並列数値アルゴリズムの一層の大規模高速化と演算加速機構向け高度化を進める。

並列言語 XMP の演算加速装置向け拡張を HA-PACS 上に実装し、CPU/GPU 間のワークシェアリングの付加分散を適応的に制御する言語系を開発した。また、XMP 言語によるプログラムが「京」の上で H P C C Challenge Class2 アワードを受賞した。密結合演算加速機構のハード/ファームウェア/ドライバソフト等の開発を終え、HA-PACS/TCA として 64 ノードに実装した。基本通信性能が現在の I n f i n i Band 技術を上回ることを示し、いくつかの

アプリケーションにおける性能評価を実施した。Gfarm に関しては HPCI での全国規模の運用を継続支援し、大規模システムにおける運用の安定性向上と高性能化を行った。FFT、クリロフ部分空間法の改善を進め、各種アプリケーション分野との連携の下で高性能化を進めた。

(7) 計算情報学研究部門

データ基盤分野では、大規模データに対応するためのデータ管理・分析技術や異種データ連携技術の高度化等に取り組む。また、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。計算メディア分野では、人介在型データ解析に、実世界の 3 次元情報を取り込むことにより、計算メディアの有効性を検討する。

データ基盤分野では、ストリームを含むデータ連携技術を深化させると共に、GPU を活用した大規模計算に関わるデータマイニング・知識発見や XML・Web プログラミング等のデータ基盤技術に関する研究を推進した。また、X 線天文データ検索、ゲノムデータ管理等の応用的な研究開発も遂行した。計算メディア分野では、映像・画像メディアにおいてデータ解析を効率よく行えるインタフェースの方法論を構築してきた。特に、人間の直感的な操作と計算機の定量性な補正処理を組み合わせた人介在型の映像データ閲覧法、大規模画像データ群を用いた位置情報探索方式、複合現実感技術によってコミュニケーションの円滑化を実現するビデオ会議システム、多種センサによる人物の表情表出のデータベース化、などの研究により、計算メディアの有効性を検証した。

1-4. 国際連携の年度目標と達成状況

各共同利用・共同研究拠点は、国際研究拠点化に向けた体制構築に係る活動を実施する。【各副学長等との重点施策 14-32-1】 具体的には、これまで進めてきたエジンバラ大学および、米国のローレンスバークレイ研究所との連携を推進し、国際研究拠点化に向けた体制構築を進める。

7月4～5日にエジンバラ大学とのワークショップを筑波大で開催し、連携の状況についてミーティングを行った。共同研究のテーマについて情報交換する他、研究協力全般の MoU を締結した。ローレンスバークレイ研究所とは、H26年4月に筑波でミーティングを行う予定である。また、韓国 KISTI との連携に関しては、韓国の HPC 関係機関と共に、2月24～27日に日韓 HPC Winter School ならびにワークショップを開催した。

1-5. 教育の年度目標と達成状況

計算科学のデュアルディグリー・プログラムを研究科とともに実施し、グローバル 30 およびヒューマンバイオロジプログラム、大学院共通科目等の計算科学の教育に関する英語プログラムを充実させる。

計算科学デュアルディグリー・プログラムに関しては、新たに開設した生命環境研究科とシス

テム情報研究科との計算科学デュアルディグリー・プログラムのコースに博士課程の学生が1名入り、プログラムを実施している。計算科学デュアルディグリー・プログラムに在籍する学生については RA として雇用する他、海外インターンシップを支援している。グローバル30の計算科学英語コースに加えて、ヒューマンバイオロジープログラム対応の英語コースも行い、英語による計算科学の教育の充実を図っている。

1-6. 業務運営等の年度目標と達成状況

第三者評価を実施し、実施状況の検証を行い、高い研究成果の実現を図る。これまでの拠点の運営、研究、連携について第三者評価を行う。

2月18日～20日の3日間、海外委員8名、国内委員3名による外部評価を実施した。委員の内訳は、素粒子分野海外1名、宇宙分野海外1名、原子核分野海外1名、量子物性分野海外1名、国内1名、生命科学分野海外1名、地球環境分野海外1名、国内1名、高性能計算システム分野海外1名、国内1名、計算情報学分野海外1名である。初日から2日目にかけて、各分野の研究進捗報告を行い、2日目後半は、分野ごとのパラレルトラックにより、詳細な報告を行うと共にこれに対する助言を受けた。3日目は、センター将来計画について、計算機開発および、「計算基礎科学連携拠点」、「宇宙生命計算科学連携拠点」などによる学際計算科学の推進計画を取りまとめ報告した。

1-7. 改善目標の達成状況

センター評価、監事監査での指摘事項に基づき、本研究センターがこれまで実績を積んできた研究領域を中心に推進しつつ、生命科学やナノ科学との協業・連携を活発化、推進する方策を検討する必要がある。そのための、その分野の研究者の確保や協力体制をどのようにすべきかについて検討を進める。分野間連携と人材育成を強化するためにセンター改組を行う。

これまで空き枠となっていた応用分野の充実のため、転出枠(2枠)、全学戦略枠(2枠)、国際テニュアトラック枠(4枠)により、計算基礎科学、物質・生命、地球環境の新たな人事を行った。これにより、生命分野教授1名、物質分野准教授1名、原子核分野教授1名、宇宙生命分野教授1名、素粒子分野国際テニュアトラック助教1名、原子核分野国際テニュアトラック助教1名、宇宙分野国際テニュアトラック助教1名、地球環境分野国際テニュアトラック助教1名、の人員配置が行われることとなった。分野間連携と人材育成を強化のため、ミッション再定義に基づき、センターの組織改革を行った。また、センター人事委員会を設置し、センター部局化に向けた取り組みを開始した。

1-8. 特色ある取組の実施状況

(1) 分野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、宇宙、地球環境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。また、全国的な学際融合として、「宇宙生命計算科学連携拠点」をセンターが中核拠点となって設置し、宇宙、惑星、物質、生命科学の連携を行った。また、この拠点の学外連携強化のため、名古屋大学大学院工学研究科との連携協定を締結した。基礎科学分野では「計算基礎科学連携拠点」を継続推進し、京コンピュータを用いた分野間連携のみならず、広く HPCI を通じた連携を実施した。

(2) データ共有基盤 JLDG の運用と分散ファイルシステム Gfarm の研究開発

主に、計算素粒子物理学のデータを分野の研究者で共有するシステム JLDG(Japan Lattice Data Grid)を運営している。現在、主に HPCI 戦略プログラム（分野 5）の支援を受けて運営しているが、この取組は十年に渡ってセンターを中心に取り組んできたものである。昨年までの最先端基盤整備による支援も受け、現在、7 機関、20 サーバーを結ぶシステムとなっており、ディスク総量は 2.6PB を提供するまでになっている。また、このシステムを支えるシステムソフトウェアである分散ファイルシステム Gfarm も本センターが開発を行っており、このシステムは HPCI システムの実運用にも供されている。

2 自己評価と課題

2-1. 自己評価

ミッション再定義に基づくセンターの組織改革は、「計算基礎科学連携拠点」や「宇宙生命計算科学連携拠点」などを中心とした学際計算科学推進体制を明確にし、外部評価委においても高い評価を得た。また、全学戦略枠、国際テニユアトラック枠、転出枠によって行った、計算基礎科学、物質・生命、地球環境、宇宙生命の計 8 枠の新たな人事は、長年センターにおいて重点化が望まれていた分野の体制強化につながった。共同利用・共同研究拠点としての学際共同利用プログラムは、37 課題を採択し、T2K-Tsukuba、HA-PACS による多くの共同研究が行われ、各分野の重点課題についても着実に研究が進展した。特別経費プロジェクト「エクサスケール計算技術開拓による先端学際計算科学教育研究拠点の充実」においては、密結合並列演算加速機構（TCA 機構）を HA-PACS に実装することで、所期の性能を達成した。T2K の後継システムとして、パイロットシステム COMA(PACS-IX)を導入すると共に、東京大学情報基盤センターと共同設置した「最先端共同 HPC 基盤施設」において次期マシンの検討を行った。「将来の HPCI システムのあり方に関する調査研究」では、エクサスケール・コンピューティングに向け演算加速機構をもつ次世代計算機アーキテクチャの提案を取りまとめた。また、他大学との連携協定により、学際計算科学のハブ拠点へ向けた取り組みを推し進めた。

2-2. 課題

(1) 部局化の課題

本年度、センター人事委員会を設置し、センター部局化に向けた取り組みを開始したが、本格的な部局化の実現に向けては、解決すべき課題が残っている。教員組織については、教員所属の変更は、関連する系・学域との間の研究活動や運営に支障がないよう十分な準備が必要である。また、教員は学群・研究科にも所属することになり、予算管理については、研究経費、教育経費の別をどのように行うかを検討する必要がある。事務体制についても、研究（センター）業務、教育（学群、研究科）業務の切り分けが必要であり、またそのために必要な事務の人員体制も再検討の必要がある。さらに、現在センター教員の半数以上は、センター外に居室（研究室）を持っており、所属変更となる場合の居住空間の確保は喫緊の課題である。これらの課題を解決し、本格的な部局化の実現時期をどこに設定するか、十分な検討が必要である。

(2) 国際拠点化の課題

国際的な学際計算科学のハブ拠点形成に向けては、諸外国機関との具体的な研究連携が必要であり、この取り組みを加速するために、これまでの国際連携に加えて、国際テニュアトラック等を活用した連携強化を図ることが望まれる。

(3) HPCI 中での位置づけの確保

国策によるエクサスケールに向けた次世代スパコン開発の検討が進む中、計算科学研究機構が設立されるなど、我が国の計算科学の体制が変化する中で、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ことのできる体制を考えていかなければならない。東京大学情報基盤センターと共同設置した「最先端共同 HPC 基盤施設」は、大学間連携による計算科学の推進という新たな取り組みとして重要である。今後、計算機科学者と計算科学者とのコデザインによる計算機開発を大学においてどのように推進していくかは予算措置も含めて十分な戦略を考える必要がある。そのためには、基礎科学、実験・観測等を含む幅広い分野との連携が重要になると考えられる。

3 各研究部門の報告

1. 素粒子物理研究部門

1. メンバー

教授 蔵増 嘉伸、青木 慎也(筑波大学客員教授)、宇川 彰 (計算科学研究センターフェロー)、金谷 和至 (共同研究員)

准教授 石塚 成人、吉江 友照、石井 理修、根村 英克

講師 谷口 裕介

研究員 浮田 尚哉、佐々木 健志、滑川 裕介

学生 大学院生 6名、学類生 2名

2. 概要

当部門では、本年度も格子QCDの大型シミュレーション研究の分野で活発な研究活動が行われた。格子場の理論グループの研究者の大半が参加している主要プロジェクトとして、HPCI戦略プログラム分野5（後述）における研究開発課題1「格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定」がある。これは、PACS-CS Collaboration（2011年9月末のPACS-CS機シャットダウンに伴って解散）が取り組んで来た物理点での $N_f=2+1$ QCDシミュレーションやup-downクォーク質量差および電磁相互作用を取り入れた $N_f=1+1+1$ QCD+QEDシミュレーションを発展的に引き継いだものであり、HAL QCD Collaborationが推進している核子間ポテンシャルやハドロン間相互作用の計算も取り入れている。これと並行して、有限温度・有限密度QCDの研究を推進しているWHOT-QCD Collaborationや、高エネルギー加速器研究機構（KEK）と共同してカイラルフェルミオンを用いた研究を推進しているJLQCD Collaborationなどで、活発な研究を行った。さらに、格子QCD配位やその他のデータを共有する為のデータグリッドILDG/JLDGの構築・整備を推進した。

国内の計算科学全体の動向として、「京」コンピュータを中核とした革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラの構築を主導するために、「High Performance Computing Infrastructure (HPCI) 戦略プログラム」が文部科学省により推進されている。そのHPCI戦略プログラムの5つの戦略分野の1つとして、京都大学基礎物理学研究所青木慎也教授(本学客員教授)が統括責任者を努める分野5「物質と宇宙の起源と構造」が採択され、2011年度から本格的に活動が始まり、2012年度は、秋から共用が開始された「京」コンピュータを中心に、その研究活動が活発化している。詳しい活動内容は、<http://www.jicfus.jp/field5/jp/>を参照していただきたい。また、分野5の戦略プログラムを実施する機関は、青木教授が拠点長を努める「計算基礎科学連携拠点」であるが、その活動は、<http://www.jicfus.jp/jp/> に詳しい。

3. 研究成果

【1】 HPCI 戦略プログラム分野 5 における研究開発課題（蔵増、青木、石塚、石井、根村、谷口、浮田、佐々木、滑川）

分野5「物質と宇宙の起源と構造」の戦略目標は、ビッグバンに始まる宇宙の歴史に於ける、素粒子から元素合成、星・銀河形成に至る物質と宇宙の起源と構造を、複数の階層を繋ぐ計算科学的手法で統一的に理解することにある。この目標を目指して4つの研究開発課題が設定されており、そのうちの一つである「格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定」の責任者を蔵増が務めている。本課題が目指すものは、格子QCD計算の微細化とマルチスケール化を鍵とする新しい展開である。微細化とは、電磁相互作用やupとdownクォークの質量差を取り入れた大規模シミュレーションの実現を意味する。これにより、QCDの基本パラメータであるクォーク質量を高精度で決定することが可能になる。他方、マルチスケール化とはQCDを用いて核子を複数作ることによって核子間の有効相互作用を調べたり、更には核子の束縛状態である原子核の直接構成を行うことを意味する。前者はHAL QCD Collaborationが取り組んでいるアプローチであり、後者は蔵増、宇川を中心としたグループによって推進されている（後述）。

(1) 格子 QCD による物理点でのバリオン間相互作用の決定

平成24年度秋の「京」の共用開始以降、ゲージ配位生成の本格計算を継続している。DDHMC (Domain-Decomposed Hybrid Monte Carlo) 法によるゲージ配位生成においては、 96^4 の格子サイズ、0.1 fmの格子間隔を採用し、2+1フレーバー ($m_u=m_d \neq m_s$) QCD のシミュレーションを実行している。平成24年度中に、人為的に設定した初期状態から出発して熱平衡状態に到達することができた。生成されたゲージ配位は5分子動力学時間毎に保存し、ネットワークを通じて筑波大学へ転送し、HA-PACS（計算ノード数268、GPU部ピーク演算性能713Tflops、CPU部ピーク演算性能89Tflops）を用いてハドロン質量などの基本物理量の測定を行っている。図1はこれまで得られた安定な（強い相互作用で崩壊しない）ハドロンの質量の計算結果を実験値と比較したものである。既に0.1%オーダーの統計誤差に到達していることがわかる。ここでは、クォーク質量 ($m_u=m_d \neq m_s$) と格子間隔を決めるための3つの物理量として、 π 中間子質量 (m_π)、K中間子質量 (m_K)、 Ω バリオン質量 (m_Ω) を採用している。 m_π と m_K に対しては更に数%程度の実験値へのチューニングが必要であることが見てとれるが、その補正は今後reweighting法と呼ばれる計算手法を用いて行う予定である。

ハドロン質量の計算が0.1%オーダーの統計誤差に到達したことは、本研究開発課題の目標である原子核の直接構成に基づく束縛エネルギーの測定および2体・3体バリオン間ポテンシャルの計算にとって本質的に重要である。というのも、重いクォーク質量を用いた先行研究により、軽原子核の束縛エネルギーを20%ないしはそれ以下の統計誤差で計算するためには、核子質量が0.1%オーダーの統計誤差で得られている必要があることがわかっている。

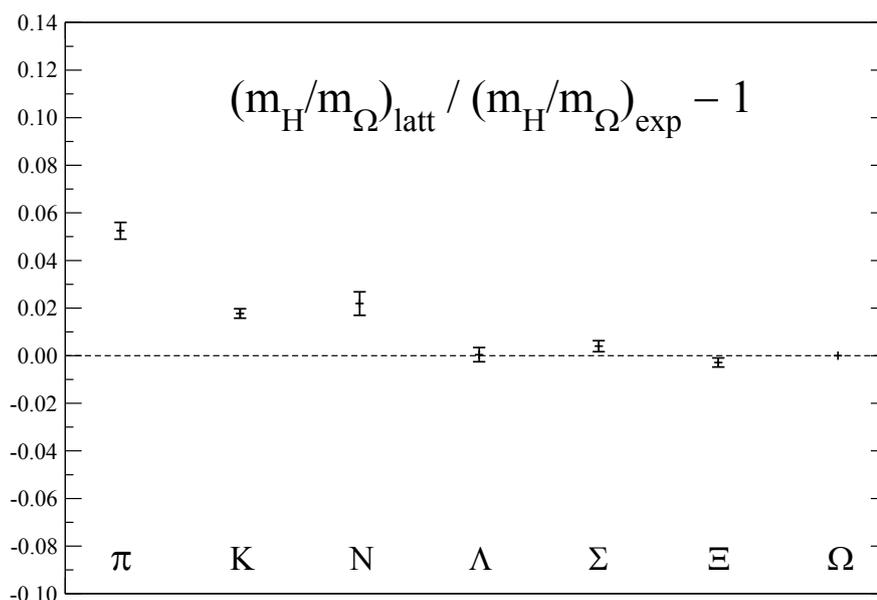


図1：2+1フレーバー格子QCD 計算で得られた安定ハドロン質量（ Ω バリオンの質量との比）と実験値との比較。

(2) 格子 QCD 共通コード開発

格子QCD共通コードBridge++の開発を進めた(論文1)。格子QCD共通コードBridge++は、QCDを含む格子ゲージ理論シミュレーションのためのコードである。様々な格子作用やアルゴリズムを取り扱うことが可能であり、ノートPCから超並列計算機まで幅広いアーキテクチャに対応している。最先端の研究に必要なパフォーマンスを実現でき、なおかつ使い易いものを目指している。2012年7月にBridge++ ver.1.0.0を公開して以降、継続してコードの改善、拡張を行っている(<http://bridge.kek.jp/Lattice-code/>)。本年度は、コード全体に大きく手が入れた。種々の物理量測定が追加され、またファクトリー化等のコード構造化がより一層推し進められた。2013年7月にBridge++ ver.1.1.0としてメジャーアップデートが行われた。その後も、コードの修正、改良が進められている。最新版は、ver.1.1.3である。

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

藏増、宇川は名古屋大学山崎特任助教との共同研究により、2010年世界で初めて格子QCDによるヘリウム原子核の構成に成功し、そののち2核子系の束縛状態である重陽子の構成にも成功した。これらの計算は、コストを抑えるためにクエンチ近似かつ重いクォーク質量を用いた試験的なものであったが、その後、真空偏極効果を取り入れた2+1フレーバーQCDシミュレーションを行い、近似を排したより現実世界に近い状況でのヘリウム原子核および2核子系の束縛エネルギー計算に成功した。ただし、この計算は π 中間子質量0.5GeV相当のクォーク質量を用いたものであり、

物理点 (π 中間子質量 0.14GeV に相当) よりもかなり重い。現在、物理点へ向けてクォーク質量依存性を調べるために、 π 中間子質量 0.3GeV 相当のクォーク質量での計算を遂行中である (論文 2)。図 2 は ${}^4\text{He}$ 原子核の束縛エネルギーのクォーク質量依存性をプロットしたものである。 π 中間子質量 0.5GeV での結果と 0.3GeV での結果を比較すると、誤差の範囲を超えた顕著なクォーク質量依存性は認められない。今後、 π 中間子質量 0.3GeV の結果の誤差を小さくするとともに、平成 26 年度は「京」を用いた物理点での軽原子核束縛エネルギー計算に取り組む。

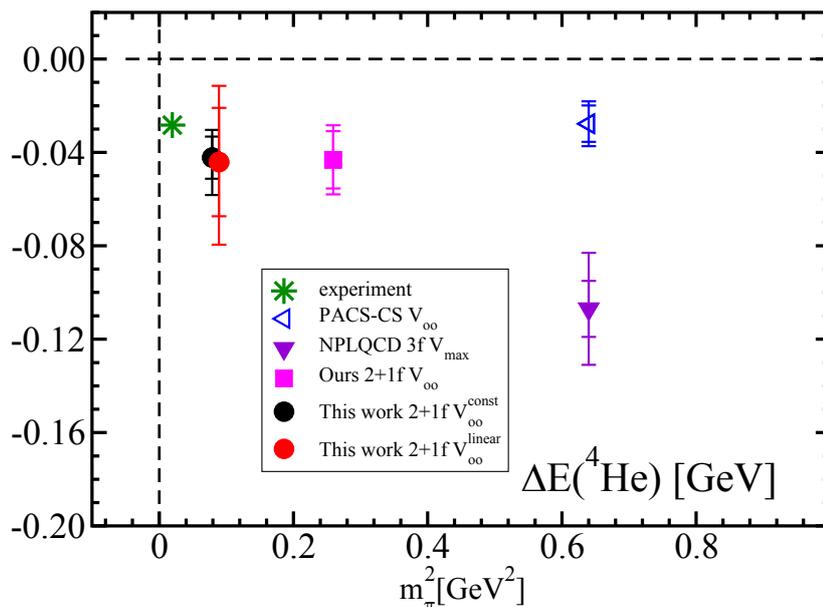


図 2 : ${}^4\text{He}$ 原子核の束縛エネルギーの π 中間子質量依存性。白抜きはクエンチ近似の結果を表す。

【3】 K 中間子崩壊幅の研究 (石塚、宇川、吉江)

素粒子標準模型には、昔からの未解決問題で、かつ理論の検証において極めて重要な問題が残されている。K 中間子崩壊での $\Delta I = 1/2$ 則の解明と、CP 非保存パラメータ (ϵ'/ϵ) の理論からの予測である。これらの問題には、K 中間子が二つの π 中間子に崩壊する過程での崩壊振幅の計算が必要である。崩壊過程には、終状態のアイソスピンが $I=0$ と $I=2$ の二つの場合があり、それぞれの崩壊振幅を A_0 と A_2 と呼ぶ。石塚、宇川、吉江らは、格子 QCD により崩壊振幅を数値計算し、問題の研究を行った (論文 3)。計算は、 π 中間子質量 $m_\pi = 280\text{MeV}$ のもとで行った。 A_0 の計算では、非連結ダイアグラムからの寄与を求める必要がある。このダイアグラムの存在により、崩壊振幅の統計誤差が非常に大きくなることが知られていた。この計算では、ホッピング定数展開法と不完全収束法を用いて、統計揺らぎを小さくすることに成功した。得られた結果と実験値は以下である。

	結果	実験値
$\text{Re}A_2(\times 10^{-8} \text{ GeV})$	2.426 ± 0.038	1.479 ± 0.004
$\text{Re}A_0(\times 10^{-8} \text{ GeV})$	60 ± 36	33.2 ± 0.2
$\text{Re}A_0/\text{Re}A_2$	25 ± 15	22.45 ± 0.06
$\text{Re}(\epsilon'/\epsilon)(\times 10^{-3})$	0.79 ± 2.54	1.65 ± 0.26

$\text{Re}A_2$ が実験値と大きくずれているが、これは計算が実際のquark質量より重い所で行われた為であると考えられる。質量依存性は、有効理論から $\text{Re}A_2 \propto (m_K)^2 - (m_\pi)^2$ の形をしていると予想されており、これを実際に数値計算で確かめることが、今後の課題として残された。 $\text{Re}A_0$ の統計誤差はいまだに大きい、 A_0 の値が A_2 より非常に大きくなるという $\Delta I = 1/2$ 則の兆候が見えている。CP非保存パラメータ(ϵ'/ϵ)に関しては統計誤差が非常に大きく、計算の改善が必要である。現在、二体 π 中間子の演算子の改良を検討中である。

【4】 チャームバリオンの研究 (滑川)

物理点直上の格子QCDシミュレーションを行い、チャームクォークを含むバリオンの検証及び予言を与えた(論文5)。本計算により、チャームクォーク1つを含むバリオン質量スペクトルは実験値を再現する事が分かった。他方、チャームクォークを2つ含むバリオン Ξ_{cc} の質量値は、報告されている実験値と有意に異なった。 Ξ_{cc} の実験値は1つの実験グループからしか報告されておらず、他の実験グループによる検証では既存の実験値付近にシグナルは発見されていない。本計算も、他の実験同様、既存の実験報告値に疑義を呈しており、今後の検証が待たれる。また、チャームクォークを2個ないし3個含む Ξ_{cc} 以外の未発見バリオンに対する質量予言も行った。

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

金谷らは、新潟大学江尻准教授、広島大学梅田准教授、理化学研究所初田主任研究員、京都大学基礎物理学研究所青木教授らとの共同研究で、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。

(1) 有限温度・有限密度 2 フレーバーQCD におけるカイラル相転移

QCDの有限温度・有限密度相構造を研究する上で、軽いu,dクォークのみを持つ2フレーバーQCDのカイラル極限近傍の相転移は重要な役割を担ってきた。通常考えられてきたシナリオでは、ゼロ温度で量子効果で陽に壊れている軸性U(1)対称性が有限温度相転移近傍でも十分強く壊れ、その結果、2フレーバーQCDの有限温度相転移は3次元O(4)スピン系と同じユニバーサルティークラスに属する2次相転移になる。実際、筑波大のグループを中心とした(改良)Wilsonクォークを用いた一連の研究により、O(4)のスケーリング関数と臨界指数で2フレーバーQCDの

イラル凝集のクォーク質量と温度依存性がよく説明されることが示されている。またスタガード・クォークを用いた BNL-Bielefeld グループの研究でも、QCD が $O(4)$ スケーリングに従うことが報告されている。他方、青木・深谷・谷口の最近の研究により、軸性 $U(1)$ 対称性が高温相で有効的に回復するだろうことが議論された。これは、2 フレーバー QCD の有限温度相転移が 1 次転移である可能性を示唆する。しかし、その場合のカイラル・スケーリングは $O(4)$ とは大きくずれるはずであり、上記の結果と矛盾する。

この研究では、2 フレーバー QCD のカイラル・スケーリングを再度検証し、またそれを有限密度に拡張した (図 3、論文 6)。 $16^3 \times 4$ 格子と $16^3 \times 24$ 格子で $m_{ps}/m_v \approx 0.65$ と 0.80 に相当する数点でシミュレーションし、有限密度効果は、我々の以前の研究と同様に、**reweighting** 係数の評価に Taylor 展開を利用した **reweighting** 法を使って計算した。詳細は、論文 6 とその引用文献を参照。化学ポテンシャル μ_q によるカイラルの破れの効果は、最低次で温度による破れの効果と同じであり、 μ_q/T が小さい領域におけるスケーリング解析では、有効温度変数を $t = \beta - \beta_c + c/2(\mu_q/T)^2$ のように補正することで吸収できると期待される。(β は格子上のゲージ結合定数で、スケール変換を通じて温度を動かす役割を果たす。) 有限密度でのスケーリングの検証は、上記の問題を考察する上で非自明な情報を提供すると期待される。さらに、この補正に現れる係数 c は、有限温度相転移が有限密度で化学ポテンシャルとともにどの様に移動するかを決めるものであり、高エネルギー重イオン衝突実験によるクォーク・グルオン・プラズマの現象論的研究に重要である。

図 3 左図に、 $\mu_q/T < 1$ におけるカイラル凝集の結果を示す。曲線は $O(4)$ スピン模型のスケーリング関数。様々な温度や化学ポテンシャル、クォーク質量の結果を $O(4)$ 臨界指数を使って再編すると、 $O(4)$ スピン模型のスケーリング関数をよく再現することがわかる。図 3 中央に、カイラル凝集の μ_q/T に関する 2 次微分係数を示す。 $\mu_q/T < 1$ のデータを $(\mu_q/T)^2$ の 1 次関数でフィットして評価した (method 1)。曲線は、様々な c の場合の $O(4)$ スケーリング関数の μ_q/T に関する 2 次微分係数。微分係数を直接評価する方法 (method 2) でも同様の結果を得た。相転移点近傍では統計誤差や系統誤差がまだ大きい、高温領域 (主に図の右側のデータ) では $c \approx 0.0290$ に調整 (マゼンタの曲線) すればひとつのユニバーサルな曲線に乗る傾向が見られる。図 3 右図は、それを c へのフィットとして表したもので、マゼンタの線が $c = 0.0290$ で、青い線が、全データの平均 $c = 0.0273(42)$ である。これから、プレリミナリな結果と $-(1/T)[d^2T/d(\mu_q/T)^2] \approx 0.05 - 0.06$ を得た。

まだ領域によって統計誤差も系統誤差も小さくないが、有意な領域の誤差の範囲で、有限密度でも QCD のデータが $O(4)$ スケーリングと矛盾しないことがわかった。ユニバーサリティー・クラスに関する明確な結論を引き出すためには、この研究を発展させ、格子体積や格子間隔をシステマティックに変化させてスケーリングの性質を確定する必要がある。

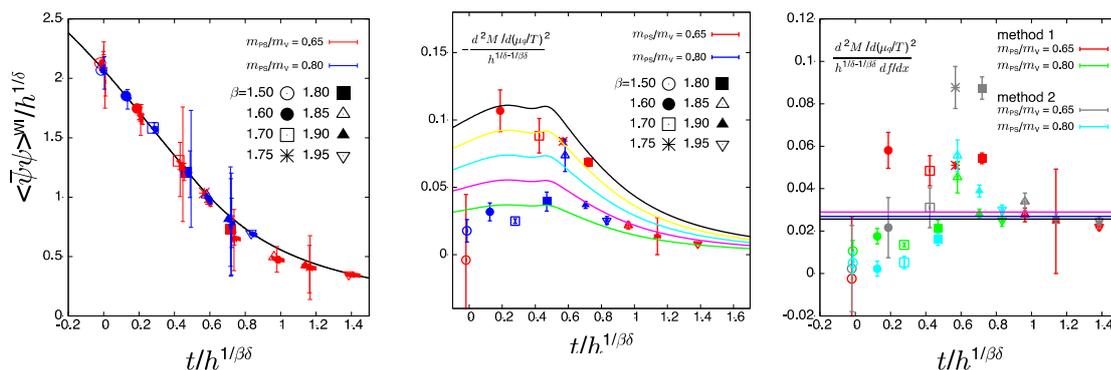


図3：2フレーバーQCDの有限温度・有限密度カイラル相転移近傍のスケーリング（論文6）：（左図）カイラル凝集のO(4)スケーリング。 $\mu_q/T < 1$ の全データが示されている。誤差の大きなデータは $\mu_q/T \sim 1$ のもの。曲線はO(4) スピン模型のスケーリング関数。（中央）カイラル凝集の μ_q/T に関する2次微分係数。method 1の結果。 $\mu_q/T < 1$ （右図）係数c。

(2) ヒストグラム法による重クォーク QCD の有限温度・有限密度相転移

有限温度・有限密度QCDの相図を判定するうえで、観測量のヒストグラムやその対数として定義される有効ポテンシャルは、最も直感的な情報を提供するが、変数の広い領域で有効ポテンシャルを精度よく評価する必要があり、統計的に大きな課題を含んでいる。他方、系のパラメータ依存性を調べる上で強力な手法であるreweighting法では、系の作用に現れる物理量に関するヒストグラムを必ず計算する。我々は、これらの物理量のヒストグラムとreweighting法を組み合わせることにより、様々なパラメータにおけるヒストグラムをつなぎあわせ、変数の広い領域で有効ポテンシャルを精度よく評価することにより、相転移次数を容易に判定する解析方法（「ヒストグラム法」）を開発した。その最初の検証として、方法のテストを兼ねて、クォークが重い領域のQCDの相構造を研究した。2011年に行った密度ゼロでの研究を発展させて、多数点のシミュレーション結果を結合させるmultipoint reweighting法を用い、さらに有限密度に拡張して、QCDの相構造を導いた（論文7）。

クォークが重い領域では、クォークが重い極限からreweightingすることにより、SU(3)純ゲージ理論のシミュレーションとホッピングパラメータ展開が適用出来る。この研究では、プラケット（ゲージ場のエネルギーの自由度に対応する）に関する有効ポテンシャル、ポリアコフループ（重いクォークのエネルギーの自由度に対応する）に関する有効ポテンシャル、及び、両者の2重分布に関する有効ポテンシャルをシミュレーションとmultipoint reweighting法により評価した。クォークが重い極限の1次相転移は、クォークを軽くしたり密度を上げるなどするとクロスオーバーに変化すると期待されている。1次相転移領域の端の2次の臨界点の位置を、有効ポテンシャルの振る舞いから特定した。（クォークが軽い現実的なQCDにおいて、物理点のクロスオーバー転移が密度やクォーク質量を変化させた時に1次相転移に変化する臨界点の特定は現象論

的に重要である。この研究はそのモデルケースとして行っている。) 図4に、プラケットとポリアコフループの2重分布に関する有効ポテンシャルの傾きに関する結果を示した。Reweighting法により、ゲージ結合パラメータやクォーク質量を動かすと、有効ポテンシャルの傾きにそれぞれある定数加わることが示される。つまり、傾き一定の曲線は、別のパラメータ点における傾きゼロの曲線と読み替えることができる。2つの方向の傾きが伴にゼロの点は安定な基底状態の相や準安定相、および、鞍点に相当する。傾きゼロの曲線が3点で交差するパラメータ点は1次相転移近傍であり、それが1点だけで交差するようになれば、そのパラメータ点はクロスオーバー領域に有る。それらの領域の端が臨界点である。

3種類の有効ポテンシャルにより計算された臨界点の位置は相互にコンシステントで、それらの解析を組み合わせることにより、臨界点を(ここで導入した重いクォークの近似の範囲で)精度よく特定できた。なお、有限密度の効果としては、有限密度のクォーク位相を評価した結果、臨界点の位置に関しては極めて小さいことが示された。この成果を受けて、クォークが軽い領域におけるQCDの有限密度相構造の解明に向けて研究を進めている。

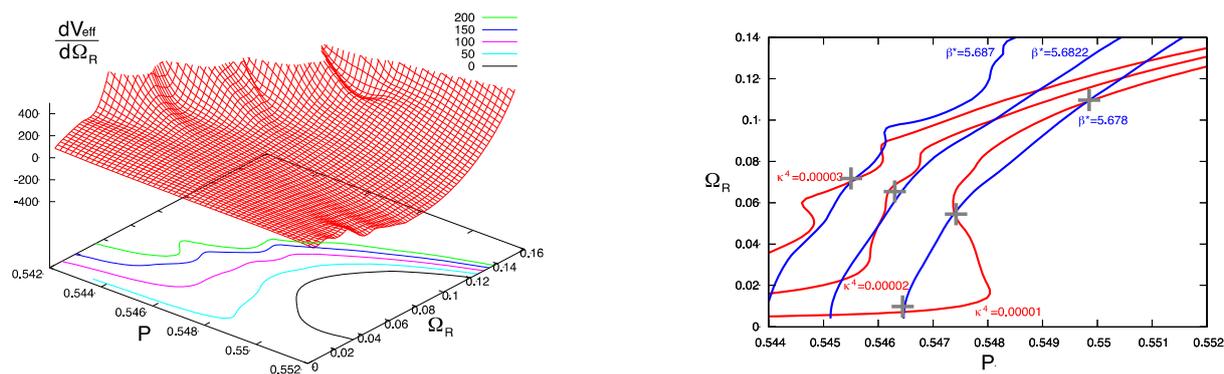


図4: ヒストグラム法によるクォークが重い領域のQCDにおける有限温度相構造の研究(論文7)。

(左) プラケット(ゲージ場のエネルギー)とポリアコフループ(重いクォークのエネルギー)に関する有効ポテンシャルのポリアコフループに関する微分と、ポリアコフループ方向の傾き一定の線。(右) 前述の有効ポテンシャルにおけるプラケット方向とポリアコフループ方向の傾き一定の線。詳細は本文参照。

[6] 有限密度 QCD (蔵増、宇川)

有限密度QCD研究のためには、非ゼロ化学ポテンシャル領域での格子QCD計算が必要となるが、化学ポテンシャルの導入は「符号問題」を引き起こしてしまうことが知られている。蔵増、宇川は、金沢大学武田助教、理研計算科学研究機構(AICS)中村研究員およびJin特別研究員との共同研究のもと、行列式の高速計算手法を開発し、reweighting法を用いて4フレーバー有限密度QCDに対して有限サイズスケール解析を行った。4フレーバーQCDでは、ある有限のクォ

ーク質量領域において一次相転移を起こすことが期待されているが、それを示せるか否かは我々の計算手法の良いベンチマークテストとなる。シミュレーションでは、 $O(a)$ 改良を施した Wilson-Cloverクォーク作用とIwasakiゲージ作用を採用し、「時間方向」の格子サイズを4に固定し、空間格子サイズを $V = 6^3 \sim 10^3$ まで変化させた。PlaquetteやPolyakov loopなどの様々な物理量に対する感受率のピークの高さの V 依存性を調べ、その依存性が線形であることから、一次相転移であることの確証を得た。これは世界で初めての有限密度QCDに対する有限サイズスケール解析の応用であり、その有効性を実証できた意義は大きい（論文8）。次のステップとして、我々は3フレーバー有限密度QCDにおける臨界終点（Critical End Point）の同定計算を試みた。4フレーバーの場合と同じクォーク作用とゲージ作用を採用し、「時間方向」の格子サイズを6に固定し、空間格子サイズを $L^3=8^3, 10^3, 12^3$ と変化させた。化学ポテンシャルを $\mu=0.1$ として、 $\kappa-\beta$ （クォーク質量-温度）平面上の相転移を系統的に調べ、有限サイズスケール解析手法の一つである尖度（kurtosis）交叉法によって臨界終点の位置を決定することに成功した。図5は、Plaquetteのkurtosisの β 依存性であり、異なる L に対応する線の交点が臨界終点を表す（論文9）。

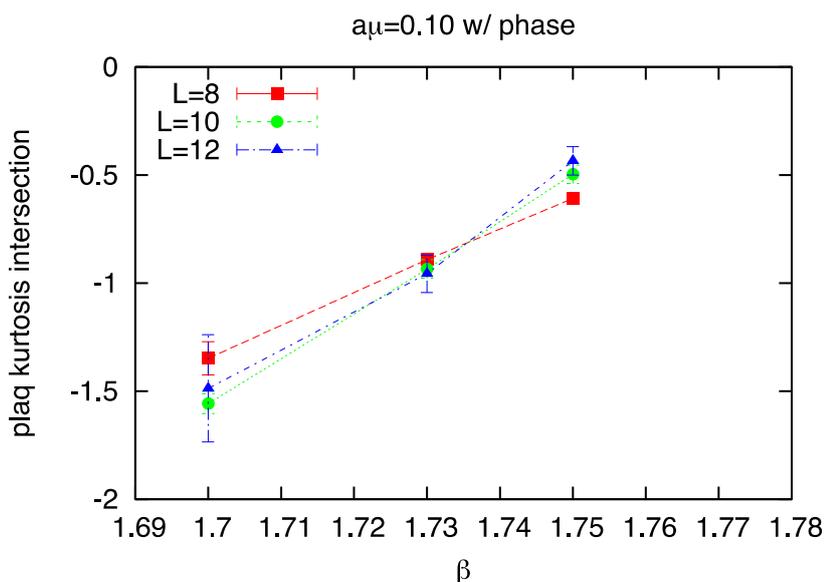


図5：Plaquetteに対するkurtosisの β 依存性。異なる L に対応する線の交点が臨界終点を表す。

【7】 有限温度における $U(1)_A$ 対称性（谷口）

2個のクォークを含む $N_f=2$ QCDにおいて、 $SU(2) \times SU(2)$ のカイラル対称性の他にアノマリーで破れていた $U(1)_A$ 対称性も有限温度で回復する可能性が高いことが先行研究から明らかになった。昨年度は $N_f=2$ QCDの低エネルギー有効理論である中間子有効理論を用いた相転移次数の研究を青木、深谷両氏と共に行った。具体的には、有限温度における有効理論として $SU(2) \times SU(2)$ カイラル対称性と共に関 $U(1)_A$ 対称性を保持している理論を構成し、摂動展開と ϵ 展開を用いて求めた繰り込み群の流れから許される相転移の次数を調査した。中間子的な量で書かれたorder

parameterが熱力学的極限で全て消えるように構成された有効理論においては、繰り込み群方程式に安定な赤外固定点が存在せず、 $N_f=2$ QCDの相転移の次数は一次であることが強く示唆される(論文12)。

【8】 格子 QCD によるバリオン間相互作用の研究 (HAL QCD Collaboration : 青木、石井、根村、佐々木)

2つの核子間に働く力、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、特に斥力芯と呼ばれる近距離での斥力、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。石井、根村、佐々木は、京都大学基礎物理学研究所青木教授、理化学研究所初田主任研究員らとHAL QCD Collaborationを結成し、2核子間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応用して、様々な粒子間のポテンシャルを格子QCDの数値シミュレーションで計算してきた。論文13では、3体力をHAL QCDの方法を用いて計算する場合、その理論的基礎となる3体(以上)のNBS波動関数の漸近形とS行列の位相差との関係を明らかにしたものである。論文14では、HAL QCDの方法で求められたポテンシャルから計算した位相差とLüscherの有限体積法で求められた位相差が良く一致する事を $I=2$ の $\pi\pi$ 散乱の場合に示した。論文15は、HAL QCDの方法で得られたポテンシャルを用いて核物質の状態方程式や中性子星の最大質量などのクォーク質量依存性を計算したものである。論文16では、HAL QCDの方法をチャームクォークを含んだメソン間の相互作用に応用し、4体クォーク状態の存在の可能性を研究した。以下では、石井、根村、佐々木、及び青木教授の学生である山田の2013年度の研究成果を紹介する。

(1) 格子 QCD による反対称 LS 力

Momentum wall sourceとcubic groupを駆使して、格子QCDにより、負パリティセクタのハイペロン力と反対称LS力を研究した。格子QCD計算には、CP-PACS/JLQCD生成のflavor SU(3) limitの2+1 flavorゲージ配位を用いた。計算の都合上、flavor既約表現1を除いた $27 \oplus 10 \oplus 10^* \oplus 8$ 表現についてのポテンシャルを求め、それをNA-N Σ 結合チャンネルポテンシャルの形に変形した。この段階では、反対称LS力は対称LS力に比べて非常に小さい物であったが、N Σ sectorをintegrate outすることによって有効NAポテンシャルを求めることによって、反対称LS力は大きくなった。現象論的に、対称LS力と反対称LS力のcancellationが期待されており、我々の結果はこれに対してポジティブである。

(2) 一般化されたバリオン間ポテンシャルの高速計算コードの開発

物理点での格子QCDによる(一般化)核力ポテンシャルの導出に備えて、この計算の基本部分となるNambu-Bethe-Salpeter (NBS) 波動関数の格子QCD計算を効率よく高速に行うためのアルゴリズムの開発並びに実際に大型計算機で高速に動くプログラムの開発を進めた。物理点にな

るべく近い格子QCD計算では、フレーバーSU(3)対称性の破れを直接扱う必要があるため、計算すべきチャンネルが膨大になり、その各チャンネルの計算を系統的に効率よく行うことが求められる。また、こうした計算には大型計算機の使用が不可欠であるため、大型計算機上の計算効率の向上は、全体の研究の進捗を左右する重要な要素である。より具体的には、NBS波動関数を求める際の数値計算の主要部分（Wick contractionを計算する部分）のアルゴリズムの抜本的な整備をまずすすめた。核子だけでなく、 Λ や Σ 、 Ξ など、ハイペロンを含む複数（例えば52チャンネル）のNBS波動関数を、一度の計算で同時にかつ効率よく計算することのできるアルゴリズムを開発した。クォーク演算子の内部自由度とフェルミ統計性に起因する演算の繰り返しの回数を、unified contraction法よりも数分の一程度に短縮することに成功した。このアルゴリズムを、C++で書かれたプログラムとして実装することにも成功しており、格子QCD 共通コード(Bridge++)と組み合わせて計算することが可能である。大型計算機（BlueGene/Q）上で、分散メモリ用の並列処理（MPI）と共有メモリ用の並列処理（OpenMP）を同時に利用したハイブリッド並列実行が可能であり、MPI並列数とスレッド並列数の様々な組み合わせにおいて、安定して効率よく計算が行えることを確認した。

(3) ハイペロン間相互作用の研究

ストレンジネス(S)を含むバリオン間相互作用の研究は、バリオン間の近距離斥力の起源を明らかにする上で重要である。佐々木らは、HAL QCD Collaborationによるポテンシャルの導出方法を用いて、 $\Xi\Xi$ 間に働く相互作用についての研究を行った。この系はNN系とフレーバーに関して共役関係になっており、バリオン間力の対称性を調べるうえで重要となっている。計算はPACS-CS collaborationによって生成された2+1フレーバーのゲージ配位を用い、 π 中間子質量が700MeV, 570MeV, 410MeVに対応する3つの異なるクォーク質量について結果の解析を行った。これらをそれぞれEsb1, 2, 3と呼ぶことにし、SU(3)対称性の破れもこの順に大きくなっている事に注意する。

図6は、準備段階ではあるが、Esb1, 2, 3のゲージ配位により得られた $1S_0$ の $\Xi\Xi$ 間ポテンシャル（左図）と、そのポテンシャルを用いて計算された $\Xi\Xi$ の散乱位相差を示している。この図から、クォーク質量が軽くなり、SU(3)の破れが大きくなるにつれてポテンシャルの近距離斥力が徐々に強くなり、この影響で散乱位相差が斥力的に移り変わっていく様子を確認する事が出来た。図7は、先ほどと同様に $3S_1$ の $\Xi\Xi$ 間ポテンシャル（左図）と、そのポテンシャルを用いて計算された $\Xi\Xi$ の散乱位相差を示している。ここでは、 $1S_0$ の場合と事なり、得られたポテンシャルは強い斥力的な性質を示すことが分かった。この性質は構成子クォーク模型で予想された性質と一致しており、バリオン内のクォーク自由度によるパウリ斥力の存在を示していると言える。また、この状態はフレーバー10次元表現に属し、NN系の重陽子状態が属する10次元表現とは共役関係にあるが、この系には束縛状態が存在しない事が明らかとなった。今後は、他の系についても解析をすすめ、中間子交換模型との差異を明らかにしつつ、2バリオン系における束縛状態の有無などを

調べようと考えている。

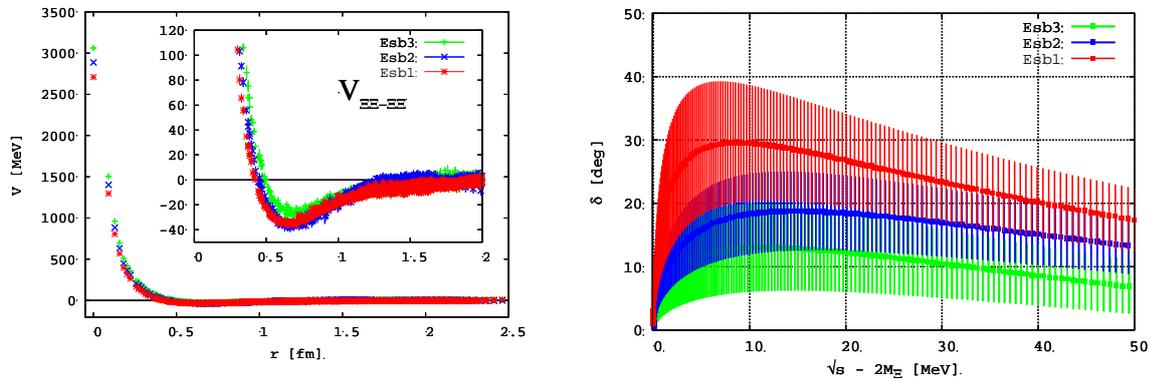


図6： 1S_0 チャンネルにおける $\Xi\Xi$ 間のポテンシャルと散乱位相差。

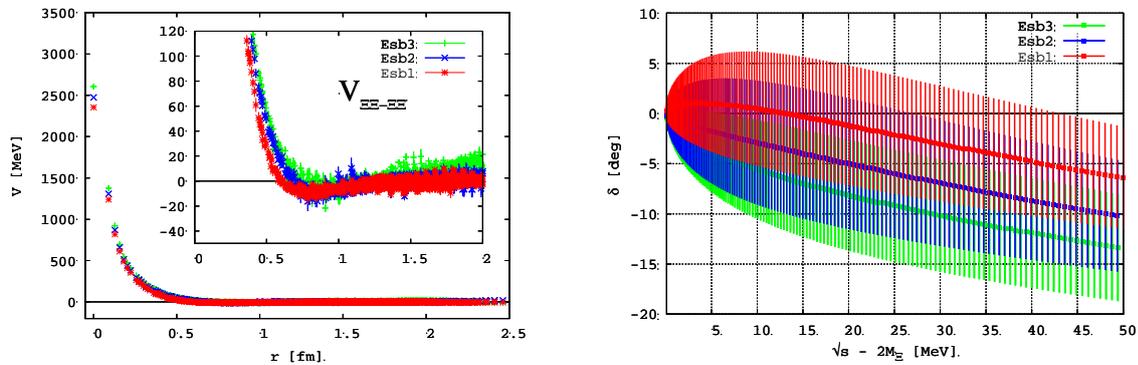


図7： 3S_1 チャンネルにおける $\Xi\Xi$ 間のポテンシャルと散乱位相差。

(4) Ω - Ω バリオオン間相互作用の研究

Ω バリオオンは、クォーク模型の分類におけるフレーバー 1 0 重項のなかで唯一強い相互作用で安定なバリオオンである。山田らは、 Ω - Ω のポテンシャルをHAL QCD Collaborationによる核力ポテンシャルの導出方法を使い計算した。昨年引き続き、クォーク模型の計算で強い引力があると予想されるトータルスピン $J=0$ の状態の計算を行った。前回までの計算では、CP-PACS/JLQCD Collaborationsが生成した2+1フレーバーの現実より重いクォーク質量 (π 中間子質量875MeVに対応)、体積としては1辺1.934(26)fmのゲージ配位を用いていたが、今回の計算ではより体積の大きい1辺2.902(42)fmのPACS-CS Collaborationが生成したゲージ配位 (π 中間子質量700MeVに対応)を用いた。結果は中心に斥力芯があり中距離には引力ポケットが存在していることがわかる(図8)。前回と同様に強い引力であることは間違いがないが、束縛するかどうかはギリギリのポテンシャルであるので、今後も慎重に解析を進めていこうと考えている。

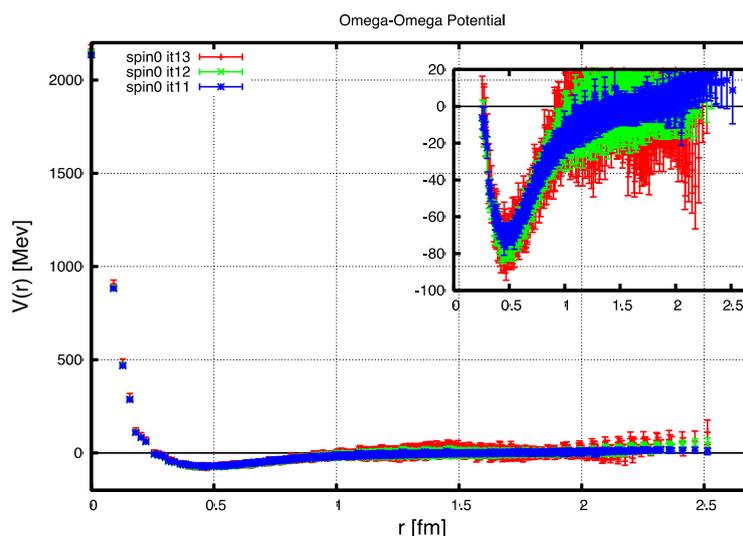


図8： $J=0$ である Ω - Ω 間のポテンシャル V [MeV]。横軸はバリオン間の距離 r [fm]。

【9】 重いクォークに対する改良型フェルミオン作用（趙）

KEKを中心としたJLQCD Collaborationでは重いクォーク系の精密計算に向けて、残余質量の小さいドメインウォールフェルミオン作用を用いて細かい格子の配位生成が進められている。それと平行して進められているのが、趙が担当している重いクォークを扱うための改良型フェルミオン作用の開発である。趙は高エネルギー加速器機構の橋本省二教授、野秋淳一特任助教らと共に、ブリルアンフェルミオンと呼ばれる新しいタイプのフェルミオン定式化に注目し、この離散化誤差を削減する改良を行った（論文25）。改良型フェルミオンを用いた分散関係や固有値分布は連続理論に近い性質を持っていることが明らかになっている。図9は、自由場上での分散関係を示している。緑はウィルソンフェルミオン、青はブリルアンフェルミオン、マゼンダは改良型ブリルアンフェルミオンを表す。横軸は運動量、縦軸は運動量を表しており、各フェルミオン作用に関して運動量の方向 $(1,0,0)$, $(1,1,0)$, $(1,1,1)$ を同時にプロットしている。また、クエンチ近似配位（ $a=0.052-0.099\text{fm}$ ）を用いたスケールリングテストを英国サウサンプトン大学のグループ（UKQCD Collaboration）と共同で行っており共著論文を作成中である。さらにブリルアンフェルミオンや改良型フェルミオン作用の摂動的性質を調べるため、米国Brookhaven National LaboratoryのChristoph Lehner氏と共同でPhySyHCAL（A PhysicsSystem based on Hierarchical Computer Algebra）を用いた研究を進めている。

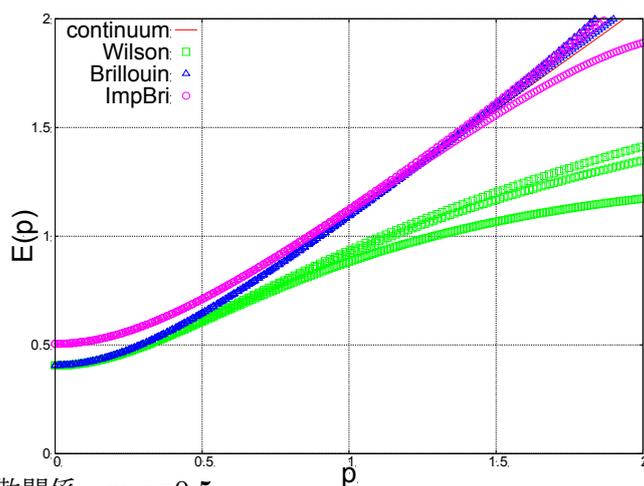


図9：自由場上での分散関係。 $m_{qa}=0.5$ 。

【10】 コンフォーマル理論の研究（吉江）

吉江は、コンフォーマル理論の数値的研究を、岩崎（筑波大学・KEK）、石川（広島大学）、中山（Caltech）と共同で行った。前年度の、有限カットオフをもつコンフォーマル理論の相構造の解明に続き、(a) 有限格子サイズの $N_f = 7, 8, 12, 16$ QCD のコンフォーマル領域の真空は、空間方向のポリヤコフラインが非自明な $Z(3)$ twisted の値を取ることを（論文26）、(b) $N_f = 2$ QCD の高温相にもコンフォーマル領域が存在すること（論文27）、(c) $N_f = 2$ 高温相に於けるコンフォーマル領域の温度 T/T_c と、コンフォーマル領域のフレーバー数 N_f には、中間子伝搬関数の対応関係があることを（論文26）、を示した。

【11】 JLDG の改良と運用（吉江）

吉江は、格子QCDデータグリッドJLDGの改良を、建部、天笠(筑波大電子情報)等と行った。主な改良は、(a) 京都大学基礎物理学研究所拠点及び理化学研究所仁科加速器研究センター拠点の新設、(b) HPCI共用ストレージ・JLDG 連携システムの構築（仮想組織管理サーバ改修を含む）、(c) 監視システムZabbixの導入、などである。

4. 教育

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

【1】 外部資金

1. 青木慎也（代表）、高性能汎用計算機高度利用事業費補助金、平成23年度採択、「HPCI戦略プログラム分野5『物質と宇宙の起源と構造』」、492,939,785円
2. 金谷和至（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(B)(一般)、平成21年度採択、「物理的クォーク質量における有限温度・有限密度QCDの格子研究」、3,000千円
3. 金谷和至（分担）、科学研究費補助金・基盤研究(A)、平成23年度採択、「湯川・朝永・坂田記念史料から分析する日本の素粒子物理学者の系譜100」、1,300千円

4. 石塚成人 (代表)、科学研究費補助金・基盤研究(B)、平成23年度採択、「格子QCDによるK中間子崩壊振幅の研究」、2,900千円
5. 藏増嘉伸 (分担)、戦略的創造研究推進事業(CREST)、平成23年度採択、「ポストペタスケールに対応した階層モデルによる超並列固有値解析エンジンの開発」、1,428千円
6. 浮田尚哉 (代表)、科学研究費補助金・若手研究(B)、平成24年度採択、「物理点での格子QCD+QED数値計算の実現と陽子荷電半径の計算」、1,100千円
7. 滑川裕介 (代表)、科学研究費補助金・基盤研究(C)、平成24年度採択、「格子量子色力学による未発見ハドロン探索」、1,040千円
8. 根村英克(代表)、科学研究費補助金・新学術領域研究(研究領域提案型)、平成25年度採択、「格子QCDによるハイペロン相互作用の研究とハイパー核への展開」、1,040千円

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. K. Sasaki, N. Ishizuka, M. Oka, T. Yamazaki, “Scattering lengths for two pseudoscalar meson systems”, Phys. Rev. D89 (2014) ref. 054502.
2. PACS-CS Collaboration: Y. Namekawa, S. Aoki, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, K. Kanaya, Y. Kuramashi, M. Okawa, Y. Taniguchi, A. Ukawa, N. Ukita, T. Yoshié, “Charmed baryons at the physical point in 2+1 flavor lattice QCD”, Phys. Rev. D 87, No. 9 (2013) ref. 094512.
3. H. Saito, S. Ejiri, S. Aoki, K. Kanaya, Y. Nakagawa, H. Ohno, K. Okuno, T. Umeda, “Histograms in heavy-quark QCD at finite temperature and density”, Phys. Rev. D 89, No.3 (2014) ref. 034507.
4. X.-Y. Jin, Y. Kuramashi, N. Nakamura, S. Takeda, and A. Ukawa, “Finite size scaling study of $N_f=4$ finite density QCD on the lattice”, Phys. Rev. D88 (2013) ref. 094508.
5. Y. Shimizu and Y. Kuramashi, “Grassmann Tensor Renormalization Group Approach to One-Flavor Lattice Schwinger Model”, to be appeared in Phys. Rev. D.
6. Sinya Aoki, Noriyoshi Ishii, Takumi Doi, Yoichi Ikeda, Takashi Inoue, “Asymptotic behavior of Nambu-Bethe-Salpeter wave functions for multi-particles in quantum field theories”, Phys. Rev. D88 (2013) ref. 014036.

7. T. Kurth, N. Ishii, T. Doi, S. Aoki and T. Hatsuda, “Phase shifts in $I=2$ $\pi\pi$ -scattering from two lattice approaches”, JHEP1312 (2013) ref. 015.
8. Takashi Inoue, Sinya Aoki, Takumi Doi, Tetsuo Hatsuda, Yoichi Ikeda, Noriyoshi Ishii, Keiko Murano, Hidekatsu Nemura, Kenji Sasaki (HAL QCD collaboration), “Equation of State for Nucleonic Matter and its Quark Mass Dependence from the Nuclear Force in Lattice QCD”, Phys. Rev. Lett. 111 (2013) ref. 112503.
9. Yoichi Ikeda, Bruno Charron, Sinya Aoki, Takumi Doi, Tetsuo Hatsuda, Takashi Inoue, Noriyoshi Ishii, Keiko Murano, Hidekatsu Nemura, Kenji Sasaki (HAL QCD Collaboration), “Charmed Tetraquarks T_{cc} and T_{cs} from Dynamical Lattice QCD Simulations”, Phys. Lett. B729 (2014) 85.
10. K.-I. Ishikawa, Y. Iwasaki, Yu Nakayama, T. Yoshié, “Global Structure of Conformal Theories in the $SU(3)$ Gauge Theory”, Phys. Rev. D89 (2014) ref. 114503.
11. K.-I. Ishikawa, Y. Iwasaki, Yu Nakayama, T. Yoshié, “Conformal Behavior in QCD”, arXiv:1304.4345[hep-lat].

B) 査読無し論文

1. S. Ueda S. Aoki, T. Aoyama, K. Kanaya, H. Matsufuru, S. Motoki, Y. Namekawa, H. Nemura, Y. Taniguchi, N. Ukita, “Bridge++: an object-oriented C++ code for lattice simulations”, Proceedings of Science (Lattice 2013) ref. 412.
2. T. Yamazaki, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, and A. Ukawa, “Multi-nucleon bound states in $N_f=2+1$ lattice QCD”, Proceedings of Science (Lattice 2013) ref. 230.
3. N. Ishizuka, K.-I. Ishikawa, A. Ukawa, T. Yoshié, “Calculation of $K \rightarrow \pi\pi$ decay amplitudes with improved Wilson fermion”, Proceedings of Science (Lattice 2013) ref. 474.
4. T. Umeda, S. Ejiri, K. Kanaya, Y. Maezawa, Y. Nakagawa, H. Ohno, H. Saito, S. Yoshida (WHOT-QCD Collaboration), “Scaling properties of the chiral phase transition in the low density region of two-flavor QCD with improved Wilson fermions”, Proceedings of Science (Lattice 2013) ref. 450.

5. S. Takeda, X.-Y. Jin, Y. Kuramashi, N. Nakamura, and A. Ukawa, “Finite size scaling study for 3 and 4-flavor QCD with finite chemical potential”, Proceedings of Science (Lattice 2013) ref. 203.
6. X.-Y. Jin, Y. Kuramashi, N. Nakamura, S. Takeda, and A. Ukawa, “Zeros of QCD partition function from finite density lattices”, Proceedings of Science (Lattice 2013) ref. 204.
7. S. Aoki, H. Fukaya, and Y. Taniguchi, “1st or 2nd; the order of finite temperature phase transition of $N_f=2$ QCD from effective theory analysis”, Proceedings of Science (Lattice 2013) ref. 139.
8. N. Ishii, “2+1 Flavor QCD Results of Nuclear Forces”, Few Body Syst. 54 (2013) 1071.
9. N. Ishii for HAL QCD Collaboration, “Baryon-baryon Interactions from Lattice QCD”, Proceedings of Science (Chiral Dynamics 2012) ref. 025.
10. N. Ishii, K. Murano, H. Nemura, K. Sasaki for HAL QCD Collaboration, “The anti-symmetric LS potential in flavor SU(3) limit from lattice QCD”, Proceedings of Science (Lattice 2013) ref. 234.
11. H. Nemura for HAL QCD Collaboration, “Lambda N and Sigma N interactions from lattice QCD, Proceedings of the 20th International IUPAP Conference on Few-Body Problems in Physics, Few-Body Systems 54 (2013) 1223.
12. H. Nemura for HAL QCD Collaboration, “An Implementation of Hybrid C++ Code for the Four-Point Correlation Function of Various Baryon-Baryon Systems, Proceedings of Science (Lattice 2013) ref. 426.
13. K. Sasaki for HAL QCD Collaboration, “Studies of multi-strangeness baryonbaryon interactions from lattice QCD”, Proceedings of Science (Lattice 2013) ref. 233.
14. K. Sasaki for HAL QCD Collaboration, “Coupled channel approach to baryonbaryon interactions with strangeness on the lattice”, to be appeared in Few-Body Systems.
15. M. Yamada, “Omega-Omega Interaction on the Lattice”, Proceedings of Science (Lattice 2013) ref. 232.

16. Y.-G. Cho, S. Hashimoto, J.I. Noaki, A. Jüttner and M. Marinovic, $O(a^2)$ -improved actions for heavy quarks and scaling studies on quenched lattices, Proceedings of Science (Lattice 2013) ref. 255.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. N. Ishii, 「Lattice QCD approach to Nuclear Physics」, 13th International Conference on Meson-Nucleon Physics and the Structure of the Nucleon (MENU2013) (Rome, Italy, Sep. 30-Oct. 4, 2013).
2. N. Ishii, 「Baryon-baryon interaction from Lattice QCD」, Lattice Field Theory on multi-PFLOPS computers, German-Japanese Seminar 2013 (Regensburg, Germany, Nov. 6-8, 2013).
3. Y. Kuramashi, 「Lattice QCD – From Quarks to Nuclei –」, University of Tsukuba and Beihang University Collaboration Meeting on Nuclear Physics (Tsukuba, Japan, Nov. 11-12, 2013).
4. Y. Kuramashi, 「Elementary Particle Physics in Future HPC」, The 4th AICS International Symposium (Kobe, Japan, Dec. 2-3, 2013).

B) 一般講演

1. Tomoteru Yoshié, 「Metadata Working Group Report」, International Lattice Data Grid 19 (TV workshop hosted by INTF, Italy, May 5, 2013).
2. K. Sasaki for HAL QCD Collaboration, 「Lattice QCD approach to the strangeness $S=-2$ two-baryon system」, THE 9TH INTERNATIONAL WORKSHOP ON THE PHYSICS OF EXCITED NUCLEONS (Valencia, Spain, May 27 - 30, 2013).
3. Y. Kuramashi, 「2+1 Flavor Lattice QCD Simulation on K Computer」, The XXXI International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2013) (Mainz, Germany, Jul. 29-Aug. 3, 2013).
4. Yusuke Taniguchi, 「1st or 2nd; the order of finite temperature phase transition of $N_f=2$ QCD from effective theory analysis」, The XXXI International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2013) (Mainz, Germany, Jul. 29-Aug. 3, 2013).
5. Yong-Gwi Cho, 「 $O(a^2)$ -improved actions for heavy quarks and scaling studies on quenched lattices」, The XXXI International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2013) (Mainz, Germany, Jul. 29-Aug. 3, 2013).

6. Naruhito Ishizuka, 「Calculation of $K \rightarrow \pi\pi$ decay amplitudes with improved Wilson fermion」, The XXXI International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2013) (Mainz, Germany, Jul. 29-Aug. 3, 2013).
7. T. Umeda, Y. Nakagawa, S. Aoki, H. Saito, K. Kanaya, H. Ohno, T. Hatsuda, S. Yoshida, Y. Maezawa (WHOT-QCD Collaboration), 「Scaling properties of the chiral phase transition in the low density region of two-flavor QCD with improved Wilson fermions」, The XXXI International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2013) (Mainz, Germany, Jul. 29-Aug. 3, 2013).
8. Hana Saito (WHOT-QCD Collaboration), 「QCD phase transition at finite T and mu in the heavy quark region」, The XXXI International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2013) (Mainz, Germany, Jul. 29-Aug. 3, 2013).
9. N. Ishii, K. Murano, H. Nemura, K. Sasaki for HAL QCD Collaboration, 「The anti-symmetric LS potential in flavor SU(3) limit from Lattice QCD」, The XXXI International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2013) (Mainz, Germany, Jul. 29-Aug. 3, 2013).
10. K. Sasaki for HAL QCD Collaboration, 「Studies of multi-strangeness baryon-baryon interactions from lattice QCD」, The XXXI International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2013) (Mainz, Germany, Jul. 29-Aug. 3, 2013).
11. M. Yamada, 「Omega-Omega interaction on the Lattice」, The XXXI International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2013) (Mainz, Germany, Jul. 29-Aug. 3, 2013).
12. K. Sasaki for HAL QCD Collaboration, 「Coupled channel approach to baryon-baryon interactions with strangeness on the lattice」, The 22nd European Conference on Few Body Problems in Physics (Krakow, Poland, Sep. 9-13, 2013).
13. H. Nemura for HAL QCD Collaboration, 「Hypernuclei on the Lattice」, Forth International Conference on Nuclear Fragmentation (NUFRA2013) (Kemer, Antalya, Turkey, Sep. 29 - Oct. 6, 2013).
14. K. Sasaki for HAL QCD Collaboration, 「Strangeness $S = -2$ baryon-baryon interactions on the lattice」, ECT* Conference: Strangeness in the Universe? Theoretical and experimental progress and challenges (Trento, Italy, Oct. 21-25, 2013).
15. H. Nemura for HAL QCD Collaboration, 「Recent developments on LQCD studies of nuclear force」, The Seventh International Symposium on Chiral Symmetry in Hadrons and Nuclei (Beijing, China, Oct. 27-30, 2013).

16. Yusuke Taniguchi, 「The order of finite temperature phase transition of $N_f=2$ QCD from effective theory analysis」, German-Japanese Seminar 2013: Lattice Field Theory on multi-PFLOPS computers (Regensburg, Germany, Nov. 6-8, 2013).
17. Tomoteru Yoshié, 「Metadata Working Group Report」, International Lattice Data Grid 21 (TV workshop hosted by CSSM, Australia, Dec. 13, 2013).
18. H. Nemura for HAL QCD Collaboration, 「Study of hyperon potentials from 2+1 Lattice QCD」, The Third Korea-Japan on Nuclear and Hadron Physics at J-PARC (Incheon, Korea, Mar. 20-21, 2014).

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 石井理修「時間相関と空間相関」, 日本物理学会2013年秋季大会(高知大学, 高知, 2013年9月20-23日) .
2. 藏増嘉伸「PACS-CS Project and beyond」, 新学術領域「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」のまとめと今後を語る研究会(鳴子温泉, 宮城, 2013年12月20-21日) .
3. 滑川裕介「格子QCD によるヘビーハドロン」, 「ヘビークォークハドロンと原子核のスペクトルと構造」研究会(高エネルギー加速器研究機構, つくば, 2014年2月26-28日) .

B) その他の発表

1. 谷口裕介「Two flavor QCD の有限温度相転移次数の有効理論による解析」, 日本物理学会2013年秋季大会(高知大学, 高知, 2013年9月20-23日).
2. 石井理修, 村野啓子, 根村英克, 佐々木健志 for HAL QCD Collaboration 「格子QCD による反対称LS 力」, 日本物理学会2013年秋季大会(高知大学, 高知, 2013年9月20-23日).
3. 平沼孝一郎, 石井理修, 岡真「波動関数等価ポテンシャルの微分展開」, 日本物理学会2013年秋季大会(高知大学, 高知, 2013年9月20-23日).
4. 佐々木健志 for HAL QCD Collaboration 「格子QCD によるハイペロン間ポテンシャルの性質」, 日本物理学会2013年秋季大会(高知大学, 高知, 2013年9月20-23日) .
5. 趙栄貴「ブリルアンフェルミオンを用いた格子上での重いクォークの定式化の開発」, 日本物理学会2013年秋季大会(高知大学, 高知, 2013年9月20-23日) .
6. 吉江友照「HPCI 共用ストレージ・JLDG 連携」, HPCIシステム利用研究課題中間報告会(東京, 2013年10月3-4日).

7. 石塚成人「格子QCD による共鳴状態の研究」, 新学術領域「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」のまとめと今後を語る研究会（鳴子温泉, 宮城, 2013年12月20-21日）.
8. 吉江友照「LDG/JLDG とHPC」, 新学術領域「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」のまとめと今後を語る研究会（鳴子温泉, 宮城, 2013年12月20-21日）.
9. 谷口裕介「1st or 2nd; the order of finite temperature phase transition of $N_f=2$ QCD from effective theory」, 計算基礎科学連携拠点（JICFuS）研究会「Lattice QCD at finite temperature and density」（高エネルギー加速器研究機構, つくば, 2014年1月20-22日）.
10. 吉江友照「ILDG/JLDG の進捗」, HPCI戦略プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」全体シンポジウム（富士ソフトアキバプラザ, 秋葉原, 2014年3月3-4日）.
11. 石井理修, 村野啓子, 根村英克, 佐々木健志, 井上貴史 for HAL QCD Collaboration「格子QCD による反対称LS 力(II)」, 日本物理学会第69回年次大会（東海大学, 平塚, 2014年3月27-30日）.
12. 根村英克 for HAL QCD Collaboration「格子QCDによる一般化核力研究のための高速アルゴリズムの検討」, 日本物理学会第69回年次大会（東海大学, 平塚, 2014年3月27-30日）.

(4) 著書、解説記事等

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1. 計算基礎科学連携拠点
<http://www.jicfus.jp/jp/>
2. High Performance Computing Infrastructure (HPCI) 戦略プログラム
<http://www.jicfus.jp/field5/jp/>
3. 理化学研究所 計算科学研究機構 (AICS)
<http://www.aics.riken.jp/>
4. International Lattice Data Grid (ILDG)
<http://ildg.sasr.edu.au/Plone>
5. Japan Lattice Data Grid (JLDG)
<http://www.jldg.org/jldg/>, <http://ws.jldg.org/QCDArchive/index.jsp>

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. HPCI 戦略プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」/計算基礎科学連携拠点/京都大学基礎物理学研究所主催,
サマースクール「クォークから超新星爆発まで」-基礎物理の理想への挑戦-
2013年8月20日-24日, 京都大学基礎物理学研究所, 京都

2. 計算基礎科学連携拠点・HPCI 戦略プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」主催
HPCI戦略プログラム分野5全体シンポジウム,
2014年3月4日-5日, 富士ソフトアキバプラザ6階セミナールーム1, 東京

9. 管理・運営

1. 藏増嘉伸、運営委員会委員、運営協議会委員
2. 吉江友照、共同研究運用委員会委員
3. 吉江友照、藏増嘉伸、計算機システム運用委員会委員

10. 社会貢献・国際貢献

11. その他

II. 宇宙・原子核物理研究部門

II-1. 宇宙物理理論グループ

1. メンバー

教授	梅村 雅之
准教授	森 正夫
講師	吉川 耕司
研究員	Alexander Wagner (センター) 石山 智明 (HPCI 戦略プログラム) 長谷川 賢二 (HPCI 戦略プログラム) 行方 大輔 (エクサ FS) 澁谷 隆俊 (基盤 A)
学生	大学院生 14名 学類生 7名

2. 概要

本年度、当グループは、数値シミュレーションによる研究として、ダークマターハローのコア-カスプ問題、アンドロメダの涙とさざめきの研究、銀河ハロー中を漂う巨大ブラックホールへのガス降着とその広波長域放射、輻射流体計算による第一世代星形成、原始銀河形成と宇宙再電離、AGN の輻射にさらされた分子雲の進化、一般相対論的 N 体計算による巨大ブラックホール合体過程、電波銀河 Hydra A の Radio モードフィードバック、超新星残骸 1987A の電波放射のモデル化、「京」を用いた宇宙ダークマターシミュレーション、Vlasov-Poisson 方程式を用いた大規模構造形成におけるニュートリノの数値シミュレーション、を推進した。また、GPU を用いた輻射輸送・輻射流体シミュレーションコードの開発を行った。さらに、観測との共同研究としてハッブル宇宙望遠鏡による高解像画像を用いた LAE の形態研究 LAE のガス速度構造の研究を行った。また、宇宙・生命分野間連携として、星間空間におけるアミノ酸生成と光不斉化の理論的研究、系外惑星における光合成アンテナ機構の研究を推進した。

3. 研究成果

【1】 ダークマターハローの内部構造：コア-カスプ問題

宇宙の構造形成のパラダイム、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)構造を预言する(Navarro, Frenk & White 1997; Fukushige & Makino 1997)。しかし、その観測結果によると、矮小銀河の密度は中心部で発散せず、一定となる(コア)ことが報告されている(Swaters et al. 2003; Spekkens et al. 2005; Oh et al. 2010)。この理論と観測の不一致は“コア-カスプ問題”と呼ばれ、CDM シナリオの未解決問題の一つである。今回我々は、“超新星爆発により矮小銀河内のガスが加熱・膨張し、やがて放射冷却・収縮が起り再び星形成が起こる、という一連の過程の繰り返しの重力場変動によりカスプがコアへと遷移するか”を N 体シミュレーションを用いて調

べた。ここでバリオンの重力場は周期的に時間変化する外場によって表現した。その結果バリオンの重力場変動の時間スケールに依存して DM ハローに形成されるコアの大きさや位置が大きく変化する事がわかった。また、DM ハローの粒子群と外場間で起こる共鳴的な現象に対する解析的なモデルを構築した。この共鳴モデルによって、コア半径が重力場の時間変動周期と関係があることを突き止めた。また、銀河の形成時期とコア部分の密度との関係を導き出した。

【2】 アンドロメダの涙とさざめき

近年、ハッブル宇宙望遠鏡やすばる望遠鏡に代表される地上大型望遠鏡を最大限活用した近傍の深宇宙探査により、現在も続く銀河進化の過程を垣間見ることができるようになってきた。アンドロメダ銀河周辺においては、おびただしい数の暗い矮小銀河が発見されるとともに、それら矮小銀河の衝突によるものと思われるステラーストリームやステラーシェルの痕跡が続々と明らかにされてきている。特にアンドロメダの涙（アンドロメダストリーム）に関しては、観測・理論の両面からの研究が進展してきており、銀河衝突の際の軌道運動やその時期、衝突した銀河の質量や化学組成等について理解が進んできている。我々は、N 体計算と 3 次元の流体力学計算を組み合わせたハイブリッドシミュレーションにより、アンドロメダ銀河の円盤ガスと矮小銀河に付随するガスの流体力学的な相互作用の詳細について調べた。銀河円盤ガスと矮小銀河ガスの相互作用により発生する銀河円盤ガスの流体力学的な挙動と、アンドロメダの円盤ガスで観測されているリング状構造の生成過程について詳細な解析を行った。また、矮小銀河の軌道運動の初期条件依存性について大規模パラメータサーベイを行い、観測を再現する軌道要素を求めた。

【3】 銀河ハロー中を漂う巨大ブラックホールへのガス降着とその広波長域放射

各銀河はそれぞれの中心に巨大ブラックホールを宿す。また、銀河は周辺の銀河と衝突・合体し、吸収合併する事でその質量を成長させてきたと考えられる。これらの事から、銀河衝突により衛星銀河が壊された後しばらくの間、元衛星銀河の中心巨大ブラックホールが親銀河のハロー中を漂っていると期待される。隣の銀河であるアンドロメダ銀河は、この銀河衝突による銀河とブラックホールの共進化を理論と観測の両面から理解する上で、最上の実験場である。詳細な観測と数値実験の比較により、約 10 億年昔に衛星銀河が衝突し、今現在、元衛星銀河の破片がアンドロメダ銀河周辺に痕跡として残っている事がわかっている。この元衛星銀河の中心巨大ブラックホールが、ハローの希薄ガスを Bondi 降着により吸い込む時に形成される降着円盤の広波長域放射を計算した。様々な検出装置の感度と比較したところ、SKA や EVLA, ALMA 等の電波領域の既存装置で検出可能である事がわかった。

【4】 輻射流体計算による第一世代星形成

京コンピュータを用いて宇宙論的流体計算を実行する事で多数の第一世代ハローを形成し、その後それぞれのハローについて 3 次元輻射流体計算を実行する事で、初代星の形成過程の解明を

試みた。その結果、一つのハロー内でも星周円盤の分裂によって複数の初代星が形成される事、初代星の質量は典型的に 10-100 太陽質量程度となり、数割合は多くないが太陽質量オーダーの初代星や、100 太陽質量を超える大質量の初代星も形成される事を明らかにした。また、初代星の質量、分裂頻度は、母ハロー中心部のガスの角運動量と強い相関がある事もわかった。得られた初代星の質量関数を軽い方に 0.2dex シフトさせた場合に予想されるレムナントのアバンドンスパターンは、銀河ハロー金属欠乏星のそれとよく一致する。これは、シミュレーション結果は、数値計算分解能の不足などの理由から、初代星初期質量関数上限値となっている事に起因していると予想される(Susa, Hasegawa, Tominaga submitted to ApJ)。

【5】 原始銀河形成と宇宙再電離

宇宙は赤方偏移 $z=1000$ 程度で一度中性化し、その後形成された天体からの輻射によって再び電離が起り、現在の宇宙はほぼ完全電離状態である事が知られている。しかし、この宇宙再電離が「いつ」「どの天体によって」「どのように」引き起こされたかは未だ明らかにされていない。

そこで、我々は独自に開発したツリー構造を用いて高速に輻射輸送計算を行えるスキーム START (SPH with Tree-based Accelerated Radiative Transfer) (Hasegawa & Umemura 2010) を宇宙論的輻射流体計算に対応できるように拡張し、これを用いて宇宙再電離シミュレーションを行った。その結果、宇宙の星形成史は主に光加熱効果によって著しく阻害される事を示した (Hasegawa & Semelin 2013)。また、再電離過程にとって重要な鍵となる電離光子の銀河からの脱出割合は、紫外線のフィードバックで高密度領域がならされる事によって上昇する事も分かった (Umemura et al. 2012)。シミュレーションから得られた UV 光度関数は、 $z=6-8$ で観測可能な $MUV = -18$ 等より明るい銀河の光度関数と矛盾しない。さらに、紫外線による銀河形成過程阻害を受けつつも、未だ見えない暗い銀河が多数存在する事も明らかになり、これら低光度銀河は数が多い事、電離光子脱出確率が高い事から再電離における主要な電離光子源となっている事も明らかにした。

【6】 AGN の輻射にさらされた分子雲の進化

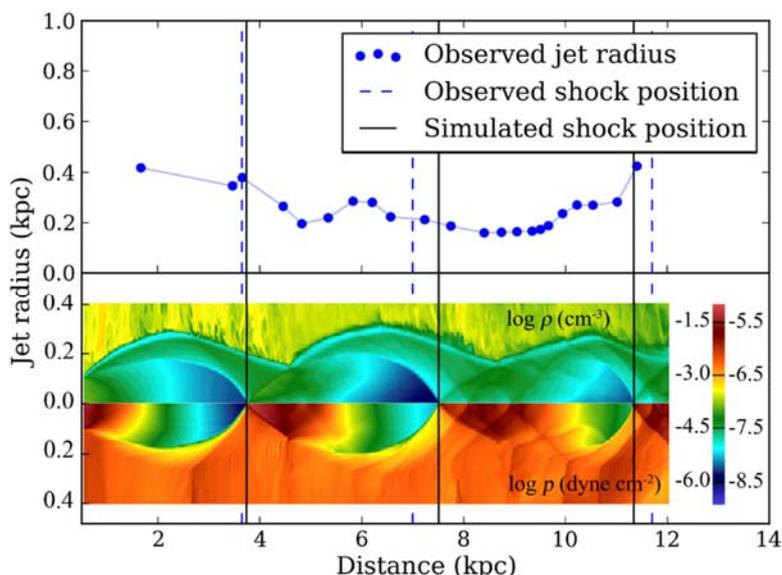
活動銀河核 (AGN) は、宇宙で最も明るい天体の 1 つであり、その光度は銀河本体に匹敵する。光の大部分は、電離能力を持った紫外光、及び、X 線の波長帯で放射されるため、母銀河の進化に大きな影響を与えたと一般に考えられている。しかし、AGN の活動性の詳細がどのように決定されるかは明らかでない。本研究では、AGN 現象の持続性の理解を進めることを目的として、ガス供給に重要な役割を果たすと期待される光学的に厚い分子雲の 1 次元及び 3 次元輻射流体計算を行った。その結果、電離パラメータと呼応学的厚みに応じて、分子雲の進化は光蒸発駆動型 (I) と輻射圧駆動型 (II) に大別できることがわかった。与えられた電離パラメータに対し、光学的厚みが小さい場合は I 型の進化を示し、光学的厚みが十分に大きい場合は II 型の進化を示す。I 型の

場合、球対称的な光蒸発によって質量を失いながら、その反作用による圧力で、分子雲の一部が重力崩壊に至る。一方、II 型の場合、輻射圧が光蒸発流を分子雲表面に閉じ込めながら、質量をほとんど失わずに分子雲を押しつぶし、最終的には分子雲の一部を重力崩壊させることがわかった。分子雲の寿命は被照射面で発生する衝撃波の速度と分子雲のサイズで決定される。我々は 1 次元輻射流体計算により、広い範囲の電離パラメータと光学的厚みについて、分子雲の寿命を測定した。この結果に基づくと、もし AGN トーラスが非常に volume filling factor の小さいクランピー構造をしているとすれば、トーラス表層のガスクランプはトーラスの力学的時間に比べて非常に短い時間で破壊されることが予想される。

【7】 一般相対論的 N 体計算による巨大ブラックホール合体過程

巨大ブラックホールは銀河中心に観測され、ブラックホール質量は銀河バルジ質量の約 1/1000 になっているという“ブラックホール - バルジ質量関係”が見出されている (Kormendy & Richstone 1995; Magorrian et al. 1998; Merrifield et al. 2000; Merritt & Ferrarese 2001, Marconi & Hunt 2003)。これは、巨大ブラックホール形成が、銀河バルジ形成史と密接に関係し、ブラックホール質量を決める普遍的な物理メカニズムが存在したことを示唆する。宇宙の階層的な天体形成論に従えば、大きな銀河は小銀河の集合体として生まれることになり、大きな銀河には多数の巨大ブラックホールが存在することになる。これは、銀河の中心にブラックホール - バルジ質量関係を満たす巨大ブラックホールが一つあるという観測事実を説明できない。可能性の一つは、銀河が合体した際に、ブラックホールも全て合体して、銀河中心に落ちるというものである。しかし、これまで巨大ブラックホールの合体は極めて難しいとされてきた。我々は、ブラックホールを持つ銀河が合体した後、ブラックホール合体が起こるかという問題を、一般相対論効果を入れた高精度 N 体計算により調べた。銀河バルジの中に 10 個の巨大ブラックホールを置いて計算した結果、銀河中の星密度が高い場合には、星による力学的摩擦が有効に働き、ブラックホールは銀河中心に落ちることで多重散乱を繰り返し、連ブラックホールが生まれ、連ブラックホールは他のブラックホールとの散乱の結果、重力波を放出して合体することが分かった。そして、赤方偏移 $z=7$ のライマンアルファ・エミッターで、ブラックホール合体過程が起こっている可能性を示した (Tanikawa & Umemura 2014)。

【8】 The Radio Mode Feedback in Hydra A

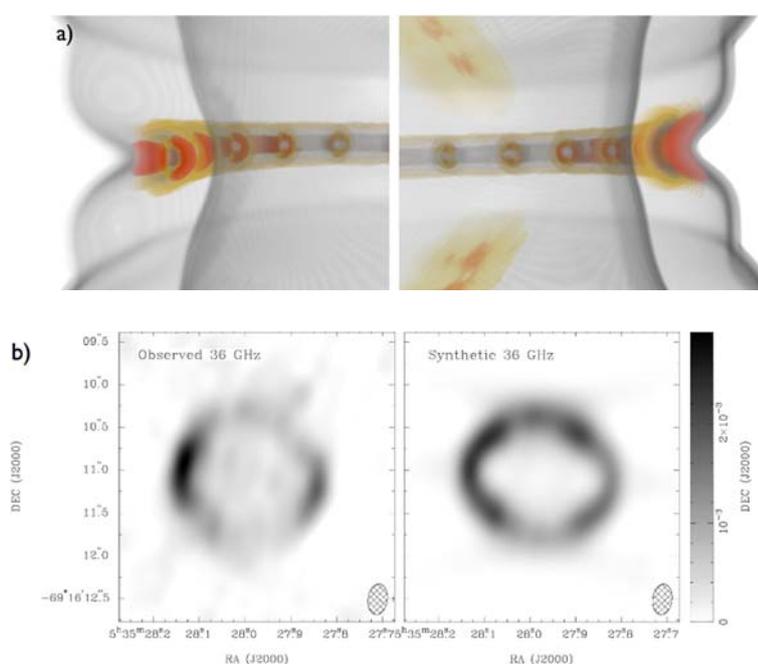


Together with collaborators at the Australian National University (Mohammad Ali Nawaz, Geoffrey Bicknell) and the University of Waterloo (Brian McNamara) we have begun a detailed study of the famous cool-core radio galaxy Hydra A to understand the heating and mixing processes involved in radio-mode feedback on cluster scales. From existing data, we have made accurate measurements of the hot ICM structure and the jet power using synchrotron minimum energy calculations. We then created realistic 2.5D relativistic hydrodynamic models with the PLUTO code for the inner 30 kpc of the radio source, focusing on the correct reproduction of conical reconfinement shocks and Mach disks. This procedure yields very accurate estimates of jet parameters, especially the jet radius, velocity, pressure, constitution, and amount of entrainment. We have also embarked upon creating. A paper has been submitted, and is under revision, summarizing the results of the first stage of this work. (Fig: hydra_a_shocks.png. Hydrodynamic model of the jet stream, with comparison to observations of the jet radius and reconfinement shock locations.)

【9】 Modeling the Radio emission of Supernova Remnant 1987A

In a project led by collaborator Toby Potter (University of Western Australia), we modeled the time-dependent radio emission of supernova remnant 1987A from days 820 to 10,000 since the explosion. Following a thorough examination of the ambient ISM density structure involving a blue supergiant wind, an HII region, and equatorial clouds, a realistic 3-dimensional hydrodynamic model of the supernova expansion was performed with the

FLASH code. The synchrotron emission from accelerated cosmic-ray electrons was calculated by incorporating a shock detection algorithm and advecting a non-thermal particle distribution at every shock in a semi-analytic post-process calculation involving diffusive shock acceleration and magnetic field amplification. The resulting synthetic radio data are directly compared with observations and shown to reproduce the global asymmetric structure and the equatorial bright ring of emission. A paper has been submitted and accepted with minor revisions pending. (Fig: vol_obs_synth.png. Left: Volume render of the equatorial ring-like radio emission after the interaction with dense clouds. Right: Comparison between synthetic and observed radio data.)



【10】 「京」を用いたダークマターシミュレーション

平成 25 年度は、主として 2 つの質的に異なる世界最大規模のシミュレーションを行った。図 1 の左パネルは現在の宇宙の大規模構造を、5500 億のダークマター粒子を用いてシミュレーションしたものである。右パネルは宇宙初期に形成するダークマター構造を 690 億粒子でシミュレーションしたものである。いずれも、それぞれのスケールのシミュレーションでは世界最大規模である。

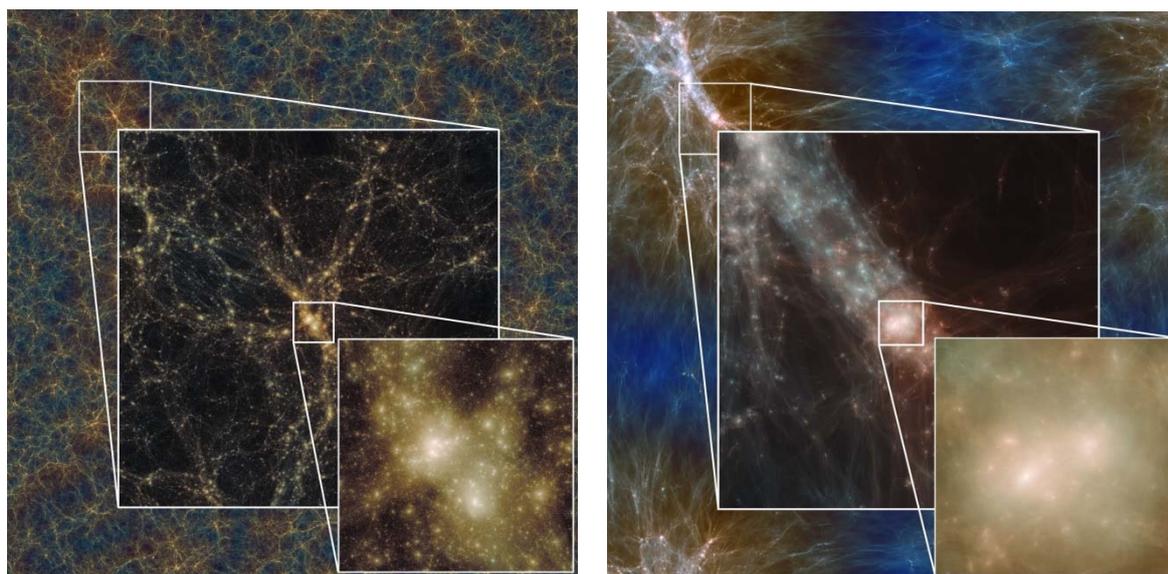


図 1: 京による世界最大規模のダークマターシミュレーション。左パネルは、現在の宇宙の大規模構造を 5500 億粒子を用いてシミュレーションしたものであり、およそ 50 億光年にわたる空間の銀河分布を再現している。白枠内は拡大図であり、右下のパネルは銀河団サイズ(約 10^{15} 太陽質量) のハローである。右パネルは、宇宙初期に形成するダークマター構造を 690 億粒子を用いてシミュレーションしたものである。宇宙誕生からおよそ 1 億年後の宇宙であり、右下のパネルは約 10^3 太陽質量のハローである。

両者は似ているが、いくつか大きな違いがあることがわかる。宇宙初期に形成するダークマター構造は、現在に比べ滑らかな構造を示していることがわかる。フィラメント構造の中や、ハロー周囲に存在する小さいハローの数が少ないこともわかる。以下それぞれのシミュレーションについて述べる。

(i) 宇宙の大規模構造形成

図 1 の左パネルに対応するシミュレーションについての成果について述べる。5500 億ダークマター粒子の重力進化を、一片およそ 50 億光年の領域で現在の宇宙までシミュレーションした。初期条件は Planck 衛星による、CMB の最新の観測結果に基づいている。小銀河スケールから宇宙の大規模構造まで分解されている。シミュレーションデータは解析中であるが、以下に述べることが研究できるようになる。

ダークマターハローはそのスケールに対応する様々な天体を宿す。例えば我々の銀河系をはじめとするさまざまな銀河は 10^{11-12} 太陽質量程度のハローの中に含まれていると考えられている。また銀河団は 10^{14-15} 、矮小銀河は 10^{6-10} 、初代星は 10^{5-7} 太陽質量程度のハローに存在していると考えられている。銀河中心には超巨大ブラックホールが存在し、銀河によってはガスをまとい、活動銀河核として明るく輝いている。超巨大ブラックホールの質量は、銀河のバルジの質量と良く相関しており、ブラックホールと銀河の共進化を示唆しているが、その形成、進化過程は謎に

含まれている。

このシミュレーションと、準解析的銀河形成モデルという現象論的なモデルを組み合わせることで、シミュレーションでは直接追っていない、バリオン成分の進化を追うことが可能である。シミュレーション上では、(離散化された)ダークマター粒子の数千~数万ステップの進化を追っている。各シミュレーション時刻においては、数十~数千万粒子で構成されるハローが無数に存在している。シミュレーションのスナップショットを 50~100 程度の時刻で保存しておき、まずそれぞれのスナップショットでハローを検出する(このシミュレーションでは現在の宇宙でおおよそ数億のハローが検出される)。次に時刻間で同じハローを結び付け、宇宙初期から現在までの個々のハローの形成史を構築する。

ここから先が準解析的銀河形成モデルの出番である。バリオンはおおよそハローの中で進化していくので、各時刻で得られたハローの形成史をもとに、現象論的なモデルを用いて、個々のハローでできる銀河やブラックホールの性質を理論的に予言することができる。特に高赤方偏移における銀河に存在する活動銀河核は非常に稀な天体である。これまで世界で行われてきたシミュレーションでは、活動銀河核を宿す銀河の階層的構造を追うだけの分解能、または稀な天体が形成できるだけのシミュレーション体積のどちらかが不足していた。今回「京」コンピュータを用いることで、はじめて両方の条件を満たすことが可能となった。そしてすばる望遠鏡の Hyper-Prime-Cam によって今後数年間にわたって得られる、高赤方偏移の最新の観測データと直接比較できるような広大な領域にかけて、銀河とブラックホールの分布両方を予測することができるようになり、共進化過程の解明への手がかりなどが得られるようになった。

平成 25 年度中にシミュレーション、およびハロー検出は終了した。平成 26 年度中に、ハロー合体史を構築し、準解析的銀河形成モデルによる銀河+ブラックホールの模擬カタログを構築する予定である。

(ii) 最小スケールからはじまるダークマター構造形成

最小ハロー(地球質量)は中心の密度構造が、半径の -1.5 乗程度のべきに比例する急なカスプ構造をもつことが知られている。一方、銀河スケールや銀河団スケールのような大きいハローでは、 -1.0 乗程度のべきである。この違いが起因する物理メカニズムははっきりとはわかっていない。

この問題を明らかにするためには、最小ハローが合体してできるそれより大きいハローがどのような構造であるかを調べるのが、手掛かりとなりそうである。最終的な目標は、粒子数 5500 億、領域 800pc 程度のシミュレーションを実行し、太陽質量(10^6 地球質量)程度のハローの構造を調べることである。平成 25 年度は、予備計算として粒子数 690 億、領域 200-400pc の宇宙論的 N 体シミュレーションを実行し(図 1 右)、数百地球質量程度のハローまでの構造を調べた。予備計算ではあるが、このスケールのハローの構造を分解するシミュレーションとしては、世界最大

のものである。

今回のシミュレーションで得られた、それらが合体してできるハローはべきが -1.5 より浅く、 50 地球質量程度のハローでは -1.3 程度になることがわかった。ハロー質量が大きくなるほど、よりべきが浅くなる傾向にある (図 2)。より大きい銀河スケール以上のハロー(10^{15} - 21 地球質量)では、ハローのスケールによらず、べきが -1 程度になることが良く研究されており、地球質量を含むそれ以外のスケールでもそうであろうと考えられていた。今回の結果は 100 倍地球質量程度のハローまで、従来の説を覆すことを世界ではじめて示すものである (Ishiyama, 2014, ApJ, 788, 27)。

この成果は今後、銀河系の中のダークマター対消滅シグナルを評価し、ダークマターの素粒子の探査とその詳細な性質を解明するために応用される。対消滅シグナルは局所的ダークマター密度の構造の 2 乗に比例するため、ハローの微細構造は極めて重要である。ハロー自体の構造自体の他に、ハロー内に無数に存在する局所的位相空間密度の極大、いわゆるサブハローの構造、分布を明らかにする必要がある。そのためにはできるだけ大きいハローをシミュレーションする必要がある。平成 26 年度に行う予定である、粒子数 5500 億のシミュレーションは、太陽質量のハローの構造を明らかにできるだけでなく、こういったサブハローとしての最小スケールハローの進化を追うことができる唯一のシミュレーションである。

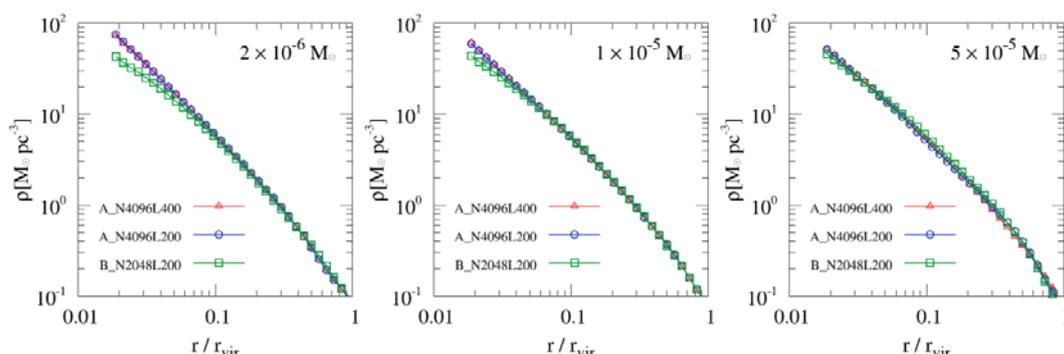


Figure 3. Stacked radial density profiles at $z = 32$ for three simulations as a function of the normalized radius by the virial radius.

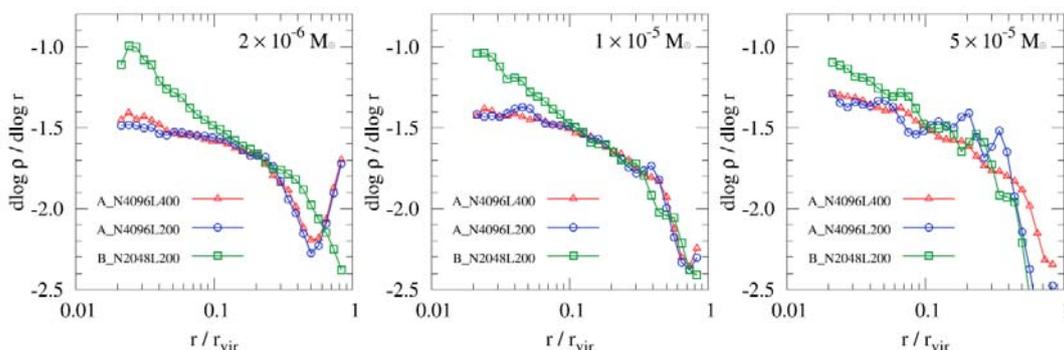


図 2 : 2 地球質量(左), 10 地球質量(中央), 50 地球質量(右)のハローの密度構造(上 3 パネル)と、密度プロファイルのべき(下 3 パネル)。赤線と青線が、地球質量のハローができる物理を正しく追ったシミュレーションの結果である。緑線は、銀河スケールなどより大きいハローの構造形成史を模倣するシミュレーションである (reference model)。

【11】 Vlasov-Poisson 方程式を用いた大規模構造形成におけるニュートリノの数値シミュレーション

素粒子実験によるニュートリノ振動の発見によって質量を持つことが明らかとなったニュートリノは、宇宙初期に相対論的な状態で他の成分から脱結合して、光子とほぼ同じ数密度で大量に存在する。また、ニュートリノはその軽い質量の為に現在の宇宙においては銀河の脱出速度に匹敵する速度分散を持ち、宇宙の大規模構造の形成過程において、密度揺らぎの重力的成長を無衝突減衰によって阻害する働きがある。通常、宇宙の大規模構造形成の数値シミュレーションは N 体シミュレーションで行われるが、N 体シミュレーションでは粒子性によるショットノイズのために無衝突減衰のシミュレーションを精度良く計算するのは難しい。そこで、我々は N 体シミュレーションの代わりに Vlasov-Poisson 方程式を直接数値シミュレーションする手法を用いて、大規模構造形成過程におけるニュートリノのダイナミクスを数値シミュレーションすることを目指している。本年度は、ダークマターを N 体シミュレーションでシミュレーションし、ニュートリノの運動を Vlasov-Poisson 方程式の直接シミュレーションで解くコードを開発した。

【12】 GPU を用いた輻射輸送・輻射流体シミュレーションコードの開発

輻射輸送シミュレーションやそれを流体力学シミュレーションとカップルさせた輻射流体シミュレーションは、輻射輸送シミュレーションの計算コストが膨大であるため、これまでの天体形成の数値シミュレーションでは無視されるか簡便な手法で近似的にのみ計算される場合がほとんどであった。我々は、輻射輸送計算を GPU やマルチコア・メニーコアアーキテクチャに基づくプロセッサで効率的に実行するアルゴリズムを開発した。このコードは、点源からの輻射輸送を解く ARGOT 法と再結合放射などの広がった領域からの輻射輸送を解く ART 法を GPU やマルチコアプロセッサにおいて実装したものであり、MPI によるノード並列化も行い高い並列化効率を達成した。

【13】 ハッブル宇宙望遠鏡の高解像画像を用いた LAE の形態研究 《観測との共同研究》

独自に構築した 426 個の大規模 $z=2.2$ LAE サンプルとハッブル宇宙望遠鏡の高解像画像を組み合わせ、LAE の統計的形態研究を行った。特に我々は LAE の「(1) 合体銀河の割合」「(2) Ly α と星成分連続光の空間的ずれ(Ly α spatial offset; $\delta_{\text{Ly}\alpha}$)」「(3) 楕円率 (~銀河の見込み角の指標)」とそれらの Ly α 等価幅への依存性を調べた。これまでも LAE の形態研究はいくつかあったが、Ly α 光子の出易さ(~Ly α 等価幅)との関係に着目し、統計的に調査したのは今回が初めてである。これにより、これまでの小さなサンプル(N~10)を用いた研究によって信じられてきた「銀河合体によって周辺銀河物質が剥ぎ取られ Ly α の脱出を促進する」という予想(Cooke+2010 など)の妥当性や「Ly α 光子は銀河円盤と垂直の方向(face-on)から脱出し易い」という理論予想(Zheng & Wallance 2013 など)を統計的に検証することができた。調査の結果、Ly α 等価幅が大きな LAE

は典型的に (1) 銀河合体の兆候がなく, (2) $\delta_{\text{Ly}\alpha}$ が小さく, (3) 楕円率が小さい (すなわち face-on) であることが分かった. このことから, 銀河合体はガスを剥ぎ取る代わりに, 主として中心銀河を覆い隠す効果がある可能性を示した. 銀河合体に加え, $\delta_{\text{Ly}\alpha}$ /楕円率の議論から, $\text{Ly}\alpha$ 光子は「周辺銀河物質の柱密度が低い領域から効率的に放射される」ことが観測的に明らかになった (Shibuya et al. 2014a).

【14】 LAE のガス速度構造の研究 《観測との共同研究》

遠方銀河のガスの速度構造は, 中性水素ガスに対して光学的に薄い「星雲線」をその銀河の系統的速度(基準)として, $\text{Ly}\alpha$ 輝線または金属吸収線との速度差 ($\Delta v_{\text{Ly}\alpha}, \Delta v_{\text{IS}}$)を測ることで調べられる. 近赤外分光器の技術発展により, 明るい銀河種族(LBG)のみならず, 典型的に暗い種族である LAE から星雲線が検出され, それらの速度構造が調べられてきた(Chonis+2013 など). Hashimoto+2013 は $\Delta v_{\text{Ly}\alpha}$ と $\text{Ly}\alpha$ 等価幅の間に逆相関があることを示したが, $\Delta v_{\text{Ly}\alpha}$ は中性水素柱密度 N_{HI} とガス アウトフロー速度の両方に敏感な物理量であるため, この関係の起源が分からない状況にあった. そこで我々は, Keck 望遠鏡/LRIS などの分光器を用いて $z=2.2$ LAE の可視/近赤外分光観測を行った. その結果, これまでの $\Delta v_{\text{Ly}\alpha}$ が測定された LAE サンプルを 2 倍に増やすことができ, 提案されていた $\Delta v_{\text{Ly}\alpha}$ - $\text{Ly}\alpha$ 等価幅 逆相関を高い有意性で確認することができた. さらに, LRIS の長時間分光観測により今までは検出が困難であった暗い紫外線連続光, 及び多数の金属吸収線を 4 個の LAE から検出することに成功した. それらの(アウトフロー速度にのみ敏感な) Δv_{IS} は $-200\sim 300$ km/s であり, LAE も LBG と同様に強いアウトフローを起こしていることが明らかになった. このことから, 小さな $\Delta v_{\text{Ly}\alpha}$ を持つ LAE は「小さなガス アウトフロー速度を持っている」というよりは寧ろ, 「中性水素 柱密度 N_{HI} が低く $\text{Ly}\alpha$ 光子が抜け出し易い環境にある」ことが明らかになった (Shibuya et al. 2014b).

【15】 星間空間におけるアミノ酸生成と光不斉化の理論的研究 《宇宙・生命分野連携》

生命体の基本分子にアミノ酸があるが, 実験室でアミノ酸を作成すると, 左巻き (L 型) と右巻き (D 型) が同量生成されるが, 地球上の生命では基本的に L 型アミノ酸しか使われていない. これを, 鏡像異性体過剰という. 1969 年, オーストラリアのマーチソン村に隕石が落下し, その隕石からアミノ酸が検出された. そして, わずかではあるが鏡像異性体過剰が発見された. 発見された鏡像異性体過剰はわずかなものであるが, 実験をすると鏡像異性体過剰は自己触媒反応により急速に増大することが分かってきた. よって, アミノ酸の鏡像異性体過剰が宇宙空間で起こり隕石を通じて地球に運ばれ, それが地上で急速に増幅した可能性がある. また, 実験室で円偏光の光を当てると鏡像異性体過剰が引き起こされることが分かってきた. そして, 近年になって, オリオン座の星形成領域(OMC-1)や他の星形成領域 (NGC 6334-V IRN) で円偏光波が発見された. よって, 原始系の近くで大質量星が誕生したとすれば, 太陽系内でアミノ酸の鏡像異性体過

剩が起こった可能性がある。以上の事実を背景に、宇宙空間で円偏光波からアミノ酸の鏡像異性体過剰を引き起こす過程についての量子多体計算を進めている。我々は、円偏光波吸収とアミノ酸の光励起による崩壊・改変反応の過程を解析した。第一原理計算により、真空中におけるアミノ酸の最安定構造を求め、その光吸収性と円偏光二色性の値を求めた。その結果、アミノ酸の光物性はその種の特徴となる側鎖よりアミノ酸全体に共通する主鎖の構造により強く依存し、波長帯としてライマン α 帯の光が重要であることを明らかにした。また、宇宙空間におけるアミノ酸の生成について、アミノ酸前駆体候補であるヒダントインからアミノ酸に至る過程をエネルギー面の量子力学計算によって解析し、アミノニトリルを経てアミノ酸が容易に形成され得ることが示した。

【16】系外惑星における光合成アンテナ機構の研究《宇宙・生命分野連携》

探査機 Kepler によって太陽系外惑星の数は大きく追加されており、地球型惑星やハビタブルゾーン内に入る惑星も発見されている。光合成は、生命の痕跡であるバイオマーカーの有力な候補になっている。光合成の痕跡の中でも 750nm 付近の近赤外領域に見られる反射スペクトルの特徴的な勾配 (red edge) はバイオマーカーとして重要である。地球の光合成生物の場合は主星である太陽のスペクトル比の光を効率良く捕集するように進化して来たと考えるべきであり、クロロフィルなどの光合成色素からなるアンテナ系は環境によって色素の種類や配置などの形態が異なる。光を受けた色素は電子励起され、近くの色素に電子状態を移動させるという過程を通じて効率的に光エネルギーを化学エネルギーに変換する。系外惑星においては異なる光捕集の形態を取る場合、それに対応した波長域に光合成の兆候を示す可能性がある。我々は、系外惑星の光のスペクトル比と植物の光捕集の形態との相関について定量的指標を導出することを目的に、光捕集系の量子化学計算を行った。アンテナを構成する色素 1 つ 1 つの励起状態を時間依存密度汎関数法により計算し、色素間では双極子-双極子相互作用する近似モデルを構築した。また、入射光としてある振動数の電場を印加して系の量子力学的時間発展を追跡することによってスペクトル強度を算出した。また、エネルギー輸送効率が最大となる主星の黒体輻射温度を求めた。

4. 教育

【学位論文】

<博士論文>

1. 扇谷 豪

Solving the core-cusp problem of cold dark matter halos and the origin of their observational universalities

2. 三木 洋平

Numerical Investigation of Galactic Merger Utilizing High Performance Computing

Architectures: Ancient Satellite Galaxy and Wandering Supermassive Black Hole

3. Mohammad Ali Nawaz (The Australian National University, Research School of Astronomy and Astrophysics)

Interaction of Jets with the Intracluster Medium

4. Marc White (The Australian National University, Research School of Astronomy and Astrophysics)

Outflows from Young Stellar Objects

<修士論文>

1. 桐原 崇亘
矮小銀河の衝突シミュレーションで探る銀河とダークマターハローの内部構造
2. 鈴木 裕行
内部紫外線と背景紫外線が及ぼす銀河形成への影響
3. 山井 勇樹
ガスによる力学的摩擦を考慮した原始銀河ブラックホールの合体過程の研究

<学士論文>

1. 小島 匠
フリードマン方程式の有質量ニュートリノによる補正
2. 加藤 悠太
星間物質と超新星爆発の相互作用のシミュレーションに向けて
3. 木立 佳里
宇宙ダスト上のアミノ酸前駆体生成過程と光不斉化の研究
4. 近藤 さらな
質量変化する連ブラックホールの合体過程の研究
5. 柴野 祥平
CIP 法による数値流体計算に向けて
6. 古谷 眸
磁気圧効果を入れたブラックホール降着円盤の定常解についての研究
7. 結城 文香
高精度宇宙流体シミュレーションに向けて

【集中講義】

- ・梅村 雅之
「宇宙輻射流体力学の基礎」(2013 年 10 月 31 日～11 月 1 日, 東京大学広域システム科学系, 東京都)

5. 受賞, 外部資金, 知的財産権等

【受賞】

筑波大学数理物質科学研究科研究科長賞, 扇谷 豪, Solving the core-cusp problem of cold dark matter halos and the origin of their observational universalities, 平成 26 年 3 月 25 日

【外部資金】

<代表者>

- ・基盤研究（S）：梅村 雅之（代表者）（繰越）
「第一世代天体から原始銀河に至る宇宙暗黒時代の解明」（500 万円）
- ・基盤研究（A）：森 正夫（代表者）（繰越）
「理論と観測の融合による銀河発生学の探求」（150 万円）
- ・基盤研究（C）：森 正夫（代表者）（新規）
「輻射流体シミュレーションによる銀河系統樹の構築」（80 万円）
- ・科研費若手研究（B）：行方 大輔（代表者），2013-2015 年，403 万円
「マルチグループ輻射流体計算による AGN トーラスから降着円盤へのガス供給過程の解明」
- ・科研費若手研究（B）：石山 智明（代表者），2013-2015 年，350 万(3 年総額，直接経費)
「銀河系内のダークマター微細構造の解明およびダークマター検出への応用」
- ・科研費若手研究（B）：長谷川 賢二（代表者），2012 年度採択，350 万円
「宇宙論的輻射シミュレーションで解明する宇宙再電離期の銀河形成史」

<分担者>

- ・戦略的創造研究推進事業 CREST：梅村雅之（分担者）（代表者 朴泰祐）
「ポストペタスケール時代に向けた演算加速機構・通信機構統合環境の研究開発」（1188 万円）
- ・挑戦的萌芽研究：梅村雅之（分担者）（代表者：高橋 芳太）（継続）
「6 次元光子ボルツマン方程式による一般相対論的輻射流体シミュレーション」（10 万円）
- ・基盤研究（A）：梅村雅之（分担者）（代表者：大内正巳）（継続）
「次世代大規模探査とシミュレーションで挑む宇宙再電離」（1 万円）
- ・基盤研究（A）：森 正夫（分担者）（代表者：大内正巳）（継続）
「次世代大規模探査とシミュレーションで挑む宇宙再電離」（400 万円）

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

- 1) Miki Y., Mori M., Kawaguchi T., Saito Y., 2014, “Hunting a Wandering Supermassive Black Hole in the M31 Halo Hermitage”, *The Astrophysical Journal*, 783, 87-95
- 2) Tsuchiya, M., Mori, M., Nitta, S., 2013, “Transonic solutions of isothermal galactic winds in a cold dark matter halo”, *MNRAS*, 432, 2837-2845
- 3) Miki Y., Takahashi D., Mori M., 2013, “Highly scalable implementation of an N-body code on a GPU cluster”, *Computer Physics Communications*, 184, 2159-2168
- 4) Yuma, S., et al., 2013, “First Systematic Search for Oxygen-line Blobs at High Redshift: Uncovering AGN Feedback and Star Formation Quenching”, *The Astrophysical Journal*, 779, 53-64
- 5) 扇谷 豪 , 三木 洋平 , 朴 泰祐 , 森 正夫 , 中里 直人, 2013 年, 「計算宇宙物理のための GPU クラスタ向け並列 Tree Code の開発と性能評価」, 情報処理学会論文誌コンピュータシミュレーションシステム (ACS) , 6(3), 58-70
- 6) Ishiyama, T., et al., 2013, “The Cosmogrid Simulation: Statistical Properties of Small Dark Matter Halos”, *The Astrophysical Journal*, 767, 146 (14pp)
- 7) Rieder, S., Ishiyama, T., et al., 2013, “Evolution of star clusters in a cosmological tidal field”, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 446, 3695

B) 査読無し論文

- 8) Kirihara T., Miki Y., Mori M., 2013, “Resolving the outer density profile of dark matter halo in Andromeda galaxy”, *JPhCS*, 454, 012012
- 9) Miki Y., Mori M., Kawaguchi, T., 2013, “Hunting a wandering black hole in M31 halo using GPU cluster”, *JPhCS*, 454, 012013
- 10) Ogiya G., Mori M., Miki Y., Boku T., Nakasato N., 2013, “ Studying the core-cusp problem in cold dark matter halos using N-body simulations on GPU clusters”, *JPhCS*, 454, 012014

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

- 1) Hasegawa K., “The roles of radiative feedback on galaxies and IGM during the epoch of reionization”, *Workshop on Photo-Evaporation in Astrophysical Systems*(Jun.3-28, 2013, Stockholm, Sweden)
- 2) Wagner, A., Umemura, M., Bicknell, G. V., Sutherland, R., Silk, J., “Mechanical AGN Feedback - Previous Work and Planned Projects”, *AGN and Structure Formation Workshop* (Jun.20, 2013, Institut d'Astrophysique de Paris, France)

- 3) Yoshikawa, K., “Vlasov-Poisson Simulations of Astrophysical Self-Gravitating Systems”, CCS-EPCC Workshop (Jul.4-5, 2013, University of Tsukuba, Japan)
- 4) Wagner, A., Umemura, M., Bicknell, G. V., Sutherland, R., Silk, J., “Feedback in Galaxy Formation”, Johns Hopkins University Physics Colloquium (Nov.14, 2013, Johns Hopkins University, Baltimore MD, USA)
- 5) Wagner, A., Umemura, M., Bicknell, G. V., Sutherland, R., Silk, J., “Galaxy-scale Feedback by AGN Jets and Winds”, Workshop on AGN and Starburst-driven Outflows (Nov.20, 2013, Johns Hopkins University, Baltimore MD, USA)
- 6) 石山智明, “Supercomputer Simulations of Structure Formation in the Universe”, Taiwan-Japan Symposium on Celestial Mechanics and N-Body Dynamics 2013 (2013 年 12 月 6 日-8 日,台湾國立清華大學)
- 7) Yoshikawa, K. “Phantom-GRAPE : High-Performance Library to Accelerate N-body Calculation with SIMD Instruction Set”, Japan-Korea HPC mini-workshop (Feb. 26-27, 2014, University of Tsukuba, Japan)
- 8) Abe M., Umemura M., Hasegawa K., “Star-cluster formation regulated by the interstellar radiation field”, Ludwig Maximilians University Munich (Mar.21, 2014, Munich, Germany)

B) 一般講演

- 1) Komatsu, Y., Umemura, M., Shoji, M., Yabana, K., Shiraishi, K., Kamiya, K., Kayanuma, M., Taguchi, M., Sato, A., “The energy transfer calculation of light harvesting systems for detecting biomarker on extrasolar planets”, Japan Geoscience Union Meeting 2013 (May 19-24, 2013, Chiba, Japan)
- 2) Ogiya G., Mori M., “Surfing of dark matter on density waves of galactic gas -Landau resonance and the core-cusp problem in cold dark matter halos-”, (poster), The Physical Link between Galaxies and their Halos, Garching by Munich (Jun.24-28, 2013, Germany)
- 3) Igarashi A., Mori M., Nitta S., “A New Concept of Transonic Galactic Outflows in a Cold Dark Matter Halo with a Central Super-Massive Black Hole”, The 12th Asia Pacific Physics Conference (Jul.14-19, 2013, Makuhari, Japan)
- 4) 石山智明, “The formation and evolution of earth-mass dark matter microhalos and their impact on indirect probes of dark matter”, Probes of Dark Matter on Galaxy Scales (Jul. 14-19, 2013, Monterey, USA)

- 5) Kirihara T., Mori M., Miki Y., “Andromeda Giant Stream and Outer Density Profile of the Dark Matter Halo in M31”, (poster), The 12th Asia Pacific Physics Conference (Jul.14-19, 2013, Makuhari, Japan)
- 6) Hasegawa K., “Radiation hydrodynamics simulations on the formation of galaxies during the epoch of reionization”, (poster), Workshop on Reionization in the Red Center: New windows on the high redshift Universe (Jul.15-19, 2013, Yulara, Australia)
- 7) Komatsu, Y., Umemura, M., Shoji, M., Yabana, K., Shiraishi, K., Kamiya, K., Kayanuma, M., Sato, A., “The energy transfer simulation for detecting photosynthetic biosignatures on extrasolar planets”, the 1st Awaji International Workshop on “ Electron Spin Science & Technology ” (Jul.16-18, 2013, Hyogo, Japan)
- 8) Wagner, A., Umemura, M., Bicknell, G. V., Sutherland, R., Silk, J., “Hydrodynamical Simulations of AGN Feedback”, 2nd East Asia AGN Workshop (Aug.19-23, 2013, Sapporo, Japan)
- 9) Shibuya, T., “A statistical study on galactic outflows of Ly- α emitters probed by velocity offsets between their Ly- α /UV absorption and nebular lines”, Workshop on Lyman-alpha as an astrophysical tool (Sep.9-13, 2013, Nordita, Stockholm, Sweden)
- 10) Igarashi A, Mori M. Nitta S., “Transonic Galactic Outflows and Their Influences to the Chemical Evolutions of Galaxies and Intergalactic Space”, (poster), 12th International Symposium on Origin of Matter and Evolution of Galaxies (Nov.18-20, 2013, Tsukuba, Japan)
- 11) Komatsu, Y., Umemura, M., Shoji, M., Yabana, K., Shiraishi, K., Kayanuma, M., Sato, A., “Light harvesting and energy transfer in photosystem: implication for biosignatures”, International Astrobiology Workshop 2013 (Nov.28-30, 2013, Kanagawa, Japan)
- 12) Shibuya, T., “Demographics of Lyman Alpha Emitter Structures”, Subaru Users' Meeting FY2013, NAOJ (Jan.21-23, 2014, Mitaka, Tokyo, Japan)
- 13) Komatsu, Y., Umemura, M., Shoji, M., Shiraishi, K., Kayanuma, M., Yabana, K., Sato, A., “Toward understanding as photosynthetic biosignatures: light harvesting and energy transfer calculation”, The Search for Life Beyond the Solar System: Exoplanets, Biosignatures & Instruments (Mar.16-21, 2014, Tuscon, USA)

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

- 1) 小松勇, 「光合成光捕集機構の量子化学計算による系外惑星バイオマーカーのモデル構築」, 「宇宙と生命」懇話会 (第 13 回) (2013 年 6 月 21 日, 自然科学研究機構新分野創成センター, 東京都)
- 2) Wagner, A., Umemura, M., Bicknell, G. V., Sutherland 「AGN Feedback by Jets」, Semi-analytic Method with SWANS Meeting (2013 年 9 月 19 日, お茶の水女子大学, 東京都)
- 3) 梅村雅之, 「古典的円盤形成進化 シナリオと問題点」, 円盤銀河の形成と進化研究会 (2013 年 9 月 26 日～ 28 日, 国立天文台, 三鷹市)
- 4) 石山智明, 「スーパーコンピュータの中で生まれる宇宙」, 日本物理学会 2013 年度 大阪支部公開シンポジウム (2013 年 10 月 26 日, 甲南大学, 神戸市)
- 5) 梅村雅之, 「宇宙生命計算科学連携拠点 (CAB) について」, 計算惑星科学シンポジウム, (2013 年 11 月 23 日, 石垣港離島ターミナル, 石垣市)
- 6) 石山智明, 「ペタフロップス級 N 体シミュレータの開発 –ダークマターの超大規模シミュレーション–」, 「京」における高速化ワークショップ (2013 年 12 月 18 日, 理化学研究所計算科学研究機構, 神戸市)
- 7) 吉川耕司, 「衝突銀河団における非平衡電離過程と二温度構造」, 「銀河団の物理」研究会, (2013 年 12 月 28 日, 東京理科大学神楽坂キャンパス, 東京都)
- 8) 長谷川賢二, 「近年の宇宙再電離に関する理論・観測研究の進展と今後の課題」, 初代星・初代銀河研究会 (2014 年 1 月 22 日～24 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
- 9) 梅村雅之, 「宇宙生命計算科学連携拠点の進め方について」, 研究会「地上実験・宇宙実験・観測・計算シナジーによる星間での生体分子・生体機能創生の解明」(2014 年 2 月 3 日, 筑波大学計算科学研究センター, つくば市)
- 10) 長谷川賢二, 「再電離シミュレーション」, 「銀河進化と遠方宇宙」研究会 (2014 年 3 月 24 日～25 日, 東京大学本郷キャンパス, 東京都)

B) その他の発表

- 1) 梅村雅之, 「宇宙生命計算科学連携拠点について」, 「宇宙生命計算科学連携拠点」ワークショップ (2013 年 6 月 28 日～29 日, 筑波大学計算科学研究センター, つくば市)
- 2) 五十嵐朱夏, 森正夫, 新田伸也, 「球対称定常銀河風模型による Sombbrero 銀河の X 線強度分布」, 日本天文学会 2013 年秋季年会 (2013 年 9 月 10 日～12 日, 東北大学, 仙台市)
- 3) 五十嵐朱夏, 森正夫, 新田伸也, 「ダークマターハローと銀河中心ブラックホールの重力場における球対称定常銀河風解析」, 日本天文学会 2013 年秋季年会 (2013 年 9 月 10

日～12 日, 東北大学, 仙台市)

- 4) 石山智明, 「最小スケールからはじまる階層的ダークマターハロー形成」, 日本天文学会 2013 年秋季年会 (2013 年 9 月 10 日～12 日, 東北大学, 仙台市)
- 5) 扇谷豪, 森正夫, 石山智明, Andreas Burkert, 「ダークマターハローの質量密度構造から探る観測的経験則」, 日本天文学会 2013 年秋季年会 (2013 年 9 月 10 日～12 日, 東北大学, 仙台市)
- 6) 小松勇, 梅村雅之, 庄司光男, 矢花一浩, 白石賢二, 神谷克政, 栢沼愛, 佐藤皓允, 「系外惑星における光合成の痕跡の指標構築のための光捕集計算」, 日本天文学会 2013 年秋季年会, (2013 年 9 月 10 日～12 日, 東北大学, 仙台市)
- 7) 鈴木裕行, 梅村雅之, 「内部紫外線・背景紫外線が及ぼす銀河進化への影響」, 日本天文学会 2013 年秋季年会 (2013 年 9 月 10 日～12 日, 東北大学, 仙台市)
- 8) 田中賢, 吉川耕司, 岡本崇, 長谷川賢二, 「GPU を用いた輻射輸送シミュレーションの高速化」, 日本天文学会 2013 年秋季年会 (2013 年 9 月 10 日～12 日, 東北大学, 仙台市)
- 9) 長谷川賢二, 「紫外線フィードバックが再電離期の銀河や銀河間物質に与える影響」, 日本天文学会 2013 年秋季年会 (2013 年 9 月 10 日～12 日, 東北大学, 仙台市)
- 10) Wagner, A., Umemura, M., Bicknell, G. V., Sutherland, R., Silk, J., 「Kinetic-mode Feedback: Radio Galaxies and UFOs」, 日本天文学会 2013 年秋季年会 (2013 年 9 月 10 日～12 日, 東北大学, 仙台市)
- 11) 五十嵐朱夏, 森正夫, 新田伸也, 「銀河中心ブラックホールとコールドダークマターハローの重力場における遷音速銀風解析とその応用」, 流体力学会 (2013 年 9 月 12 日～14 日, 東京農工大学, 府中市)
- 12) 梅村雅之, 「超巨大ブラックホール形成: 降着 vs 合体」, 超巨大ブラックホール研究推進連絡会・キックオフワークショップ (2013 年 9 月 16 日～17 日, 愛媛大学, 松山市)
- 13) 三木洋平, 森正夫, 川口俊宏, 濟藤祐理子, 「大規模 GPU クラスタを駆使した M31 ハローを漂う巨大ブラックホール探査」, 超巨大ブラックホール研究推進連絡会・キックオフワークショップ (2013 年 9 月 16 日～17 日, 愛媛大学, 松山市)
- 14) 梅村雅之, 「宇宙流体シミュレーションによる天体形成の研究」, 第 5 回「学際計算科学による新たな知の発展・統合・創出」シンポジウム –T2K-Tsukuba、HA-PACS による計算科学の発展と、次世代コンピューティングの展望– (2013 年 11 月 5 日～6 日, 筑波大学, つくば市)
- 15) 梅村雅之, 「宇宙生命計算科学連携について」, 自然界における生体分子キラリティ起源 –実験・観測・計算シナジーによるアプローチ (2013 年 11 月 16 日, 岡崎コンファレンスセンター)

- 16) 小松勇, 「系外惑星のバイオマーカー検討に向けて: 光合成の光吸収モデル」, ALMA ワークショップ「宇宙と生命」(2013 年 11 月 23 日, 国立天文台, 三鷹市)
- 17) 安部牧人, 梅村雅之, 長谷川賢二, 「星間輻射場によって制御される星団形成過程の 3 次元輻射流体力学による研究」, 第 26 回理論懇シンポジウム (2013 年 12 月 25 日~27 日, 東京大学柏キャンパス, 柏市)
- 18) 五十嵐朱夏, 森正夫, 新田伸也, 「遷音速銀河風が銀河間空間の化学進化に与える影響」, 第 26 回理論懇シンポジウム(2013 年 12 月 25 日~27 日, 東京大学柏キャンパス, 柏市)
- 19) 扇谷豪, 「コールドダークマターハローのコア-カusp問題の解決とその観測的経験則の起源」, 第 26 回理論懇シンポジウム (2013 年 12 月 25 日~27 日, 東京大学柏キャンパス, 柏市)
- 20) 桐原崇亘, 三木洋平, 川口俊宏, 森正夫, 「アンドロメダストリームと母矮小銀河の内部構造」, (ポスター), 第 26 回理論懇シンポジウム (2013 年 12 月 25 日~27 日, 東京大学柏キャンパス, 柏市)
- 21) 行方大輔, 梅村雅之, 長谷川健二, 「AGN の輻射にさらされた分子雲の寿命」, (ポスター), 第 26 回理論懇シンポジウム (2013 年 12 月 25 日~27 日, 東京大学柏キャンパス, 柏市)
- 22) 長谷川賢二, 「宇宙再電離過程における輻射性フィードバックの重要性」, (ポスター), 第 26 回理論懇シンポジウム(2013 年 12 月 25 日~27 日, 東京大学柏キャンパス, 柏市)
- 23) 三木洋平, 森正夫, 川口俊宏, 濟藤祐理子, 「Numerical Investigation of Merger Remnants Utilizing High Performance Computing Architectures: Ancient Satellite Galaxy and Wandering Supermassive Black Hole」, 第 26 回理論懇シンポジウム (2013 年 12 月 25 日~27 日, 東京大学柏キャンパス, 柏市)
- 24) 安部牧人, 梅村雅之, 長谷川賢二, 「星間輻射場によって制御される星団形成過程の 3 次元輻射流体力学による研究」, 初代星・初代銀河研究会 (2014 年 1 月 22 日~24 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
- 25) 五十嵐朱夏, 森正夫, 新田伸也, 「ダークマターハローと銀河中心ブラックホールの重力場における球対称定常銀河風解析」, 初代星・初代銀河研究会 (2014 年 1 月 22 日~24 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
- 26) 石山智明, 「最小のダークマターハローからの階層的構造形成」, CfCA ユーザーズミーティング (2014 年 1 月 28 日~29 日, 国立天文台三鷹キャンパス, 三鷹市)
- 27) 行方大輔, 梅村雅之, 長谷川健二, 「AGN の輻射にさらされたガス雲の輻射流体計算」, 初代星・初代銀河研究会 (2014 年 1 月 22 日~24 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
- 28) 鈴木裕行, 梅村雅之, 「内部及び背景紫外線による銀河の星形成史への影響」, 初代星・

- 初代銀河研究会 (2014 年 1 月 22 日～24 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
- 29) 梅村雅之, 「まとめ」, 初代星・初代銀河研究会 (2014 年 1 月 22 日～24 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
- 30) 山井勇樹, 「ガスによる力学的摩擦を考慮した原始銀河ブラックホールの合体過程の研究」, 初代星・初代銀河研究会 (2014 年 1 月 22 日～24 日, 鹿児島大学, 鹿児島市)
- 31) 行方大輔, 梅村雅之, 長谷川賢二, 「AGN の輻射にさらされた分子雲の寿命」, (ポスター), 国立天文台 CfCA ユーザーズミーティング (2014 年 1 月 28 日～29 日, 国立天文台三鷹キャンパス, 三鷹市)
- 32) 長谷川賢二, 「宇宙論的輻射流体計算で解明する再電離期の宇宙進化史」, (ポスター), 国立天文台 CfCA ユーザーズミーティング (2014 年 1 月 28 日～29 日, 国立天文台三鷹キャンパス, 三鷹市)
- 33) 吉川耕司, 「Vlasov シミュレーションによる宇宙大規模構造形成におけるニュートリノのダイナミクス」, 国立天文台 CfCA ユーザーズミーティング (2014 年 1 月 28 日～29 日, 国立天文台三鷹キャンパス, 三鷹市)
- 34) 五十嵐朱夏, 森正夫, 新田伸也, 「ダークマターハローと銀河中心ブラックホールの重力場における球対称定常銀河風解析」, プラズマセミナー (2014 年 1 月 31 日, 三鷹市)
- 35) 小松勇, 「光合成の光吸収計算: 太陽系外惑星のバイオマーカーへの示唆」, 地上実験・宇宙実験・観測・計算シナジーによる星間での生体分子・生体機能創生の解明 (2014 年 2 月 3 日, 筑波大学, つくば市)
- 36) 長谷川賢二, 「宇宙初期の銀河形成と宇宙再電離」, HPCI 戦略プログラム分野 5 「物質と宇宙の起源と構造」全体シンポジウム (2014 年 3 月 3 日～4 日, 富士ソフトプラザ, 東京都)
- 37) 安部牧人, 梅村雅之, 「星間輻射場によって制御される星団形成過程の 3 次元輻射流体力学による研究」, 日本天文学会春季年会 (2014 年 3 月 19 日～22 日, 国際基督教大学, 三鷹市)
- 38) 桐原崇亘, 三木洋平, 森正夫, 川口俊宏, 「アンドロメダストリームで探る母矮小銀河の内部構造」, 日本天文学会 2014 年春季年会 (2014 年 3 月 19 日～22 日, 国際基督教大学, 三鷹市)
- 39) 澁谷隆俊, 「Lya 輝線銀河の速度構造研究で探る Lya の放射機構」, 日本天文学会春季年会 (2014 年 3 月 19 日～22 日, 国際基督教大学, 三鷹市)
- 40) 行方大輔, 梅村雅之, 長谷川賢二, 「AGN の輻射にさらされたガス雲の輻射流体計算 II.」, 日本天文学会春季年会 (2014 年 3 月 19 日～22 日, 国際基督教大学, 三鷹市)

- 41) 三木洋平, 森正夫, 川口俊宏, 「大規模 GPU クラスタを用いて探る M31 ハローを漂う超巨大ブラックホールの現在位置」, 日本天文学会 2014 年春季年会 (2014 年 3 月 19 日～22 日, 国際基督教大学, 三鷹市)
 - 42) Wagner, A., Umemura, M., Bicknell, G. V., Sutherland, R., Silk, J. 「Positive vs Negative AGN Feedback in Galaxy Formation」 Semi-analytic Method with SWANS Workshop (2014 年 3 月 27 日～28 日, 理化学研究所計算科学研究機構, 神戸市)
- (4) 著書, 解説記事等
- 梅村雅之
- シリーズ<宇宙物理学の基礎>①「宇宙流体力学の基礎」, 福江純, 和田桂一, 梅村雅之 著
- (日本評論社, 2014 年 2 月)

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

【異分野間連携】

- 1) 星間アミノ酸 L 型過剰の研究 (梅村, 木立)
宇宙・生命分野間連携により, アミノ酸前駆体からのアミノ酸生成, および円偏光波照射によるアミノ酸鏡像異性体過剰についての量子力学計算を進めた。
- 2) 系外惑星における光合成アンテナ機構の研究 (小松, 梅村)
宇宙・生命分野間連携により, 系外惑星系の主星光スペクトルと光合成光捕集の相関について量子化学計算を進めた。

【国際連携】

・ Alex Wagner

Collaboration with Prof. Joseph Silk (IAP) and Prof. Colin Norman on "Positive Feedback through AGN-pressure Induced Star Formation in Disk Galaxies." Visiting researcher to the Institut d'Astrophysique de Paris, France, and Johns Hopkins University, Baltimore MD.

8. シンポジウム, 研究会, スクール等の開催実績

- 1) 「宇宙生命計算科学連携拠点」ワークショップ
2013 年 6 月 28 日～29 日, 筑波大学計算科学研究センター, つくば市
- 2) 超巨大ブラックホール研究推進連絡会・キックオフワークショップ
2013 年 9 月 16 日～17 日, 愛媛大学理学部, 松山市
- 3) 円盤銀河の形成と進化研究会

2013 年 9 月 26 日～28 日，国立天文台，三鷹市

4) 天体形成研究会

2013 年 10 月 4 日～5 日，筑波大学計算科学研究センター，つくば市

5) 「観測と理論で探る宇宙再電離と遠方銀河形成」ワークショップ

2013 年 11 月 27 日～29 日，神戸大学，神戸市

6) 国際会議「2nd East Asian AGN Workshop in Sapporo」，2013 年 8 月 19 日～23 日，ブルーウェーブイン札幌市 (<http://www.kusastro.kyoto-u.ac.jp/~matsuoka/20130312agnw>)

7) 初代星・初代銀河研究会 2014

2014 年 1 月 22 日～24 日，鹿児島大学理学部，鹿児島市

9. 管理・運営

・梅村雅之

計算科学研究センター センター長

計算科学研究センター 運営委員会委員長

計算科学研究センター 人事委員会委員長

計算科学研究センター 宇宙・原子核物理研究部門主任

計算科学研究センター 運営協議会委員

計算科学研究センター 研究企画室委員

物理学域 運営委員会委員

物理学域 宇宙物理理論グループ長

物理学類 学務委員，カリキュラム委員会委員長

東京工業大学「GCOE 地球から地球たちへ」外部評価委員

・吉川耕司

計算科学研究センター・計算機運用委員

計算科学研究センター・メニーコア型大規模スーパーコンピュータシステム仕様策定委員会・委員

計算科学研究センター・大規模メニーコア実験システム仕様策定委員会・委員

計算科学研究センター・密結合並列演算加速機構実験システム仕様策定委員会・委員

10. 社会貢献・国際貢献

・吉川耕司

「宇宙大規模構造 ー宇宙は素粒子の夢を見るかー」，全国同時七夕講演会 2013 (2013 年 7 月)

6 日, つくば国際会議場, つくば市)

• Alex Wagner

Publication of a free, open-source code to create initial conditions representative of a fractal, log-normal, inter-stellar medium density field for hydrodynamic simulations, "pyFC" (<http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/Astro/Members/ayw/code/pyFC/index.html>).

II-2. 原子核分野

1. メンバー

教授	矢花 一浩
准教授	寺崎 順 (HPCI 戦略プログラム)
講師	橋本 幸男
研究員	谷口 億宇
学生	大学院生 4名

2. 概要

当部門では、陽子と中性子の多体系として捉えた原子核の励起・応答・反応などの量子ダイナミクスを中心的な課題として研究に取り組んでいる。当部門で開発に取り組んでいる方法は、フェルミオン多粒子系の量子ダイナミクス計算という観点から、物質科学や光科学においても有効であり、当部門に属する研究者は2つの階層にまたがる研究を進めている。後者の活動については、量子物性研究部門の報告を参照されたい。

原子核物理学は、格子 QCD に基づく核力の計算や軽い原子核の直接計算などで素粒子物理学と結びつき、また元素の起源や星の構造を通じて宇宙物理学とも密接に関係している。現在このような連携を持つテーマとして、ニュートリノ質量に関係する二重ベータ崩壊行列要素の計算や、重元素合成の鍵となるトリプルアルファ反応計算が進展中である。

3. 研究成果

【1】原子核の励起状態

(1) ニュートリノレス二重ベータ崩壊における原子核行列要素の QRPA 計算 (寺崎)

寺崎は、準粒子乱雑位相近似 (QRPA) を用いて、ニュートリノ質量を決めるためのニュートリノレス二重ベータ崩壊の原子核行列要素の計算に平成 23 年度以来取り組んでおり、平成 25 年度には前年度に大部分完成していた必要な計算コードを大規模計算用に整備する段階が完了し、 ^{150}Nd - ^{150}Sm で QRPA 多体相関の原子核行列要素への新しい機構を通じた影響を示す興味深い結果を生みつつある。

本課題は平成 24 下期-25 年度の「京」を含む HPCI システム共用計算資源の利用研究課題において「京」の一般利用に採択された。また平成 26 年度から 3 年間科研費基盤 C に採択されることが内定した。

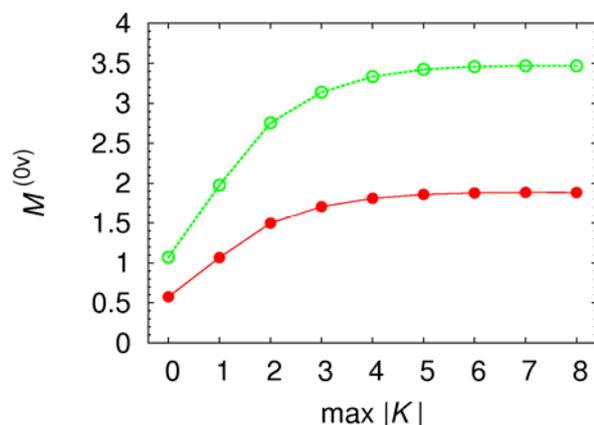
もしニュートリノレス二重ベータ崩壊が観測されれば、原子核行列要素の二乗と電子の位相空間因子の積 (理論計算) とその崩壊の寿命 (実験測定) からニュートリノ質量の期待値が求められる。原子核行列要素は、ニュートリノポテンシャルの二体相互作用行列、始状態と終状態から

求めた二種類の QRPA 励起中間状態の重複行列、始状態と終状態から QRPA 励起中間状態への二つの二核子移行遷移行列の積のトレースによって求められる。

本研究の特徴は三つある。最も強調されるのは、QRPA 基底状態は準ボソンの真空状態であるという定義を採用することにより、QRPA 相関を正しく取り込んだ重複行列要素計算を行うことである。第二に、完全性近似のもとで、二核子移行を経由する仮想反応を考えていることである。この方法により、荷電変化反応に対して QRPA はあまり良い近似でないという問題を避けることができる。第三に世界的に頂上級の並列計算機を用いることにより、できる限り波動関数空間の広い、精度の高い計算を行うことである。

これらの特徴をもつ方法により、Skyrme エネルギー密度汎関数 (SkM*) と体積型対エネルギー密度汎関数を用いて、 ^{150}Nd - ^{150}Sm において 1.88 という原子核行列要素の数値が得られた。今までに行われたいくつかの方法による計算値はおおよそ 1.9-2.5 の範囲にあり、本研究の値は比較的小さいといえる。図から QRPA 相関は重複行列要素を通じて原子核行列要素を顕著に小さくすることがわかる。また、従来の QRPA 計算では、二つのニュートリノを放出する二重ベータ崩壊のデータを再現するように陽子・中性子対エネルギー密度汎関数が導入され、この処方箋は原子核行列要素の値を減少させる効果をもつのであるが、本研究ではこの処方箋を用いていない。用いられる核がかなり中性子過剰だからである。現象論的陽子・中性子対エネルギー密度汎関数なしに、本来の QRPA 基底状態の定義により QRPA 相関を取り入れて小さい原子核行列要素の値が得られたという点が興味深い。本研究により、30 年以上もの間未解決となっている QRPA と殻模型による原子核行列要素計算値の系統的不一致問題の突破口が開かれた可能性が高い。

寺崎は、平成 24 年度以来の研究と並ぶ業務である HPCI 戦略プログラム分野 5 のユーザー支援活動にも積極的に従事した。平成 25 年度は、ユーザー支援（物理にまで踏み込んだプログラム相談）の窓口ならびに連絡業務に加え、HPCI 戦略プログラムの主催または共催するふたつの研究会でユーザー支援の広報発表を行った。



図。計算で得られた原子核行列要素 $M^{(0v)}$ の中間状態 (K 量子数) の増加に対する収束性。赤線が我々の計算法で、緑線は QRPA 中間状態の重複に、QRPA 基底状態ではなく、HFB 基底状態を用いた際の値。

(2) 多 Slater 行列式の重ね合わせによる軽い原子核のクラスター状態の記述 (福岡、矢花、船木 (理研)、中務 (理研))

乱雑な初期配置を持つ波動関数を虚時間発展させると、基底状態へと至る過程でさまざまなクラスター状態が現れる。この過程で現れる Slater 行列式を重ね合わせ、さらにパリティ及び角運動量射影を行うことにより、軽い原子核のクラスター状態を記述することを試みている。 ^{12}C 原子核に対しては論文を出版し、さらに ^{16}O 、 ^{20}Ne 原子核に対する計算を進めた。

(3) Gogny 力を用いた時間依存平均場計算 (橋本)

原子核の集団運動を記述する方法の中でも時間依存平均場の方法は、理論的な枠組みの展開においても、また、実際の現象に対応した定性的・定量的な説明・記述を行ううえでも中心的な役割を果たしてきた。時間依存平均場の方法の中では、時間依存ハートレーフォック (TDHF) が広く用いられている。TDHFは、スキルム有効相互作用を用いた密度汎関数理論として位置づけられ、計算機の能力向上によって核図表上の広い範囲の原子核を対象とした応用が可能になっている。TDHFは、ゼロレンジの力であるスキルム有効相互作用と3次元空間格子の組み合わせにより、計算コードがシンプルで適応範囲の広いツールとなった。最近では、中性子過剰核のダイナミクスにおける対相関の役割を研究するために、空間格子によるスキルム力+時間依存ハートレーフォックボゴリュボフ (TDHFB) の枠組みが提案されている。一方、ゴグニー有効相互作用は、そのレンジが有限の大きさを持つことで、平均場計算に用いられる基底はもっぱら調和振動子基底であった。そこで、連続状態と束縛状態の間に対相関が働く中性子過剰核の運動を記述するうえでは空間格子が便利であることに着目し、ゴグニー有効相互作用でも空間格子を用いた平均場計算が可能な枠組みを作ることを目指している。ゴグニー有効相互作用の場合には、ガウス型の相互作用形のおかげで対相関の働く空間に自然なカットオフが入る点がメリットである。一方、有限なレンジのために、2体相互作用の行列要素の計算にCPU時間をとられることになる。

2013年度は、ラグランジュ格子点を用いたTDHFBのコードにより、対相関のある球形核の代表として酸素 ^{20}O 、また、変形核の代表としてマグネシウム ^{34}Mg を対象とするHFB計算を行った。時間依存計算のために、格子間隔と基底状態のエネルギーとの関係、さらにゴグニー力に含まれる各要素(ガウス型2体力、密度依存力、LS力など)のエネルギーと格子間隔との関係を押さえた。時間依存計算においては、エネルギーと粒子数期待値を保存させる方法の開発に時間がかかったが一定の精度を出せるようになった。これによってTDHFB計算が可能になり、酸素 ^{20}O 、マグネシウム ^{34}Mg について、軸対称四重極型振動運動の強度関数を求めることができた。同時に、対相関を持つ原子核同士の衝突を扱う方法の開発を開始した。

(4) 励起状態に現れる変形状態とクラスタ相関 (谷口)

原子核は励起により多彩に構造が変化する。低励起状態では変形構造とクラスタ構造が重要である。クラスタ構造は、原子核が複数の塊に分かれて局在した、空間的な相関の強い構造である。本年度は $^{33-36}\text{S}$ の超変形状態の構造の研究を行った。

硫黄同位体のうち陽子数と中性子数が等しい ^{32}S には、 $^{16}\text{O}-^{16}\text{O}$ クラスタ構造を多く含む超変形状態が存在することが理論的に予想されている。似た構造として、ベリリウム 8 の基底状態の $\alpha-\alpha$ クラスタ構造がある。ベリリウム同位体の中性子過剰核には、 $\alpha-\alpha$ クラスタ構造の周りに余剰中性子が分布した構造が基底状態やその近傍に現れることが知られている。従って、硫黄同位体には、 $^{16}\text{O}-^{16}\text{O}$ クラスタ構造の周りに余剰中性子が分布した超変形状態が系統的に存在することが期待される。

$^{33-36}\text{S}$ の様々な変形構造波動関数を重ねあわせた結果、それらの核には超変形状態が系統的に存在し、それらはクラスタ描像では $^{16}\text{O} + ^{16}\text{O}$ クラスタと、その周りに余剰中性子が $^{16}\text{O} + ^{16}\text{O}$ 芯が作る分子軌道に入った構造と理解されることがわかった。

(5) エネルギー変分を用いた断熱核間ポテンシャルの導出と低エネルギー核融合 (谷口、延与 (京都大学)、須原)

核反応研究において、核間ポテンシャルは基礎となり重要である。しかし、核子間力から核間ポテンシャルを微視的に導出する手法は確立していない。そのためには核の構造変化を微視的に扱うことが必要である。

谷口や須原らは、核間距離を拘束条件としてエネルギー変分して、得られたエネルギーから各核の基底状態のエネルギーの和を引くことにより、核間ポテンシャルを導出する方法を開発した。この手法は、核間運動が核子の運動よりも遅い断熱近似に相当する。

その手法により得られた断熱核間ポテンシャルを $^{16}\text{O} + ^{16,18}\text{O}$ 低エネルギー核融合断面積の導出に応用した。それぞれの核融合断面積の衝突エネルギーの依存性が再現され、それによりこの断熱核間ポテンシャルの妥当性が確認された。また、 $^{16}\text{O} + ^{18}\text{O}$ は $^{16}\text{O} + ^{16}\text{O}$ に比べて核融合断面積が大きくなるが、それは ^{18}O の 2 余剰中性子の構造変化に起因することがわかった。

【2】原子核の反応**(1) トリプルアルファ反応率の虚時間理論 (赤堀、矢花、船木 (理研))**

我々は光放出を伴う融合過程に対して新しい理論的枠組みである虚時間理論を提唱し、この理論を用いたトリプルアルファ過程の研究を行っている。トリプルアルファ過程は、電荷を持つ 3 粒子の散乱過程を扱う必要があること、また 3 体量子トンネル過程であり興味を持たれる 1GK から 0.01GK の範囲で反応率が 10^{60} も変化することなどから、理論的記述は困難を極めており、最

近 5 年間に発表された論文においても、反応率は実に低温で 10^{26} に及ぶ差異がある。我々は、虚時間理論を用いることにより、容易に収束した反応率が得られることを示し、その結果は標準的な反応率として NACRE で採用されている値に極めて近いことを示した。

さらに、R 行列理論と虚時間理論を組み合わせることにより、3 体ハミルトニアンに分離型近似を仮定すると、NACRE で用いられている解析式に極めて近い表式が得られることを明らかにし、経験的な反応率の表式に対する微視的根拠を与えた。数値的にも分離型近似は良い近似となっていることを示した。これらの結果を論文にまとめ、投稿中である。

(2) TDHF 計算による多核子移行反応の記述 (関澤、矢花)

粒子数射影の方法を用いた、多核子移行反応断面積に対する TDHF 計算の結果を論文にまとめ発表した。TDHF 計算で得られる終状態の原子核は励起しており、実験で得られている断面積とより正確な比較をするためには粒子放出の効果を取り入れる必要がある。このため、粒子数射影後の波動関数に対してエネルギー期待値を計算する方法を開発し、粒子放出効果の影響を調べた。

^{238}U を含む原子核衝突では、多数の陽子が移行する過程が測定されている。この理由について、TDHF 計算により調べた。その結果、陽子移行を伴う過程は、変形核である ^{238}U の変形方向と衝突軸との相対角度に強く依存することが分かった。prolate 変形した ^{238}U の尖った部分が標的核にぶつかる時、ネック領域が発達し、多くの核子移行が見出される。一方、 ^{238}U の腹の部分に標的核がぶつかると、ネックはあまり発達せず、多くの核子が移行する過程は見出されないことが明らかとなった。

4. 教育

学生の指導状況 (学生氏名、学位の種類、論文名)

<理学博士>

岡本稔 「Three-dimensional calculation of non-uniform structures in low-density nuclear matter and neutron star by a relativistic mean field model」

福岡佑太 「Deformation and cluster structures in light nuclei studied with configuration mixing using Skyrme interaction」

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞 (賞の名称、受賞者名、タイトル、年月日)

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. Low-energy E1 strength in select nuclei: Possible constraints on neutron skin and symmetry energy

T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana

Phys. Rev. C88, 051305 (2013)

2. Computational Nuclear Quantum Many-Body Problem: The UNEDF Project

S. Bogner, A. Bulgac, J. Carlson, J. Engel, G. Fann, R.J. Furnstahl, S. Gandolfi, G. Hagen, M. Horoi, C. Johnson, M. Kortelainen, E. Lusk, P. Maris, H. Nam, P. Navratil, W. Nazarewicz, E. Ng, G.P.A. Nobre, E. Ormand, T. Papenbrock, J. Pei, S. C. Pieper, S. Quaglioni, K. Roche, J. Sarich, N. Schunck, M. Sosonkina, J. Terasaki, I. Thompson, J.P. Vary, S.M. Wild,

Computer Physics Communications 184, 2235 (2013)

3. Deformation and cluster structures in ^{12}C studied with configuration mixing using Skyrme interactions

Y. Fukuoka, S. Shinohara, Y. Funaki, T. Nakatsukasa, and K. Yabana

Phys. Rev. C 88, 014321 (2013).

4. Time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov calculations using a Lagrange mesh with the Gogny interaction

Y. Hashimoto

Phys. Rev. C88, 034307 (2013)

5. A description of t-band in ^{182}Os with generator coordinate method,

Y. Hashimoto and T.Horibata,

INFORMATION, Vol.17, No.2, 429 – 434(February 2014).

6. Adiabatic internuclear potentials obtained by energy variation with the internuclear-distance constraint

Yasutaka Taniguchi, Yoshiko Kanada-En'yo, Tadahiro Suhara

Prog. Theor. Exp, Phys. 2013, 043D03 (2013)

7. Time-dependent Hartree-Fock calculations for multinucleon transfer processes in $^{40,48}\text{Ca}+^{124}\text{Sn}$, $^{40}\text{Ca}+^{208}\text{Pb}$, and $^{58}\text{Ni}+^{208}\text{Pb}$ reactions

K. Sekizawa, K. Yabana

Phys. Rev. C 88, 014614 (2013)

8. Nuclear “pasta” structures in low-density nuclear matter and properties of the neutron-star crust

M. Okamoto, T. Maruyama, K. Yabana, T. Tatsumi

Phys. Rev. C 88, 025801, 2013.

9. Imaginary-time theory for triple-alpha reaction rate

T. Akahori, Y. Funaki, K. Yabana

arXiv:1401-4390

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Imaginary-time theory for triple-alpha reaction rate

K. Yabana

12th Int. Symp. on Origin of Matter and Evolution of Galaxies (OMEG12), Tsukuba, Nov. 18-22, 2013.

2. Imaginary-time theory for triple-alpha reaction rate

K. Yabana

Workshop on large-scale computational methods applied to multi-particle resonances and astrophysical reaction problems in few-body systems, RIKEN, Wako, Oct. 21-25, 2013.

3. Relation between pairing gaps and transition probabilities in $^{132,136}\text{Te}$

J. Terasaki

XX International School on Nuclear Physics, Neutron Physics and Applications, September 16-21, 2013, Varna, Bulgaria

4. Prallel-GPU calculation of electron dynamics using a hybrid density functional

Y. Taniguchi, S.A. Sato, Y. Shinohara, K. Yabana

Quantum Dynamics Research Meeting, March 10-12, 2014, Vanderbilt University, Nashville, USA

5. Time-dependent Hartree-Fock calculation for multinucleon transfer processes in heavy-ion reactions

K. Sekizawa, K. Yabana

A ECT* Workshop on "From nuclear structure to particle-transfer reactions and back", Nov. 4-8, 2013, ECT*, Trento, Italy

6. Time-dependent Hartree-Fock Calculations for Nuclear Multi-nucleon Transfer Processes

K. Sekizawa, K. Yabana

A ECT* Workshop on "Advances in time-dependent methods for quantum many-body systems", Oct. 14-18, 2013, ECT*, Trento, Italy

B) 一般講演

1. Imaginary time theory for triple-alpha reaction rate

K. Yabana

International Molecular-type Workshop on New Correlations in Exotic Nuclei and Advances of Theoretical Models, YITP, Kyoto Univ, Mar. 10-23, 2014.

2. Effect of QRPA correlations to nuclear matrix element of neutrinoless double-beta decay through overlap matrix

J. Terasaki

International molecule-type workshop on new correlations in exotic nuclei and advances of theoretical models, March 10-23, 2014, Kyoto

3. Study of t-band in 182Os with cranked three-dimensional

Hartree-Fock-Bogoliubov method

Y. Hashimoto and T. Horibata,

The Sixth International Conference on Information (May 8 - 11, 2013, Hotel

Arcadia Ichigaya, Tokyo, Japan)

4. Time-dependent Hartree-Fock calculations for multinucleon transfer processes

K. Sekizawa, K. Yabana

VI International Conference on Fusion and allied reactions around Coulomb barrier
"FUSION14", Feb. 24-28, 2014, Inter University Accelerator Centre (IUAC), New
Delhi, India

5. Time-dependent Hartree-Fock calculations for multinucleon transfer processes

K. Sekizawa, K. Yabana

JUSTIPEN-JUSEIPEN Workshop, Dec. 9-12, 2013, RIKEN, Wako, Japan

6. Quasi-fission Dynamics in Time-dependent Hartree-Fock Theory (ポスター)

K. Sekizawa, K. Yabana

12th CNS International Summer School, Aug. 28 - Sept. 3, 2013, RIKEN Nishina
Center, Wako, Japan

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

該当なし。

B) その他の発表

1. 非共鳴領域におけるトリプルアルファ反応率の理論的記述

矢花一浩、赤堀孝彦、船木靖郎

日本物理学会秋の分科会、高知大学朝倉キャンパス、2013年9月21日

2. 変形超流動原子核における素励起モード・応答関数の研究 (ポスター)

中務孝、藏増嘉伸、数納広哉、江幡修一郎、稲倉恒法、寺崎順

平成 25 年度「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題中間報告会、タイム 24 ビ
ル、東京、2013年10月2-3日

3. 密度汎関数理論の二重ベータ崩壊原子核行列要素への応用 (ポスター)

寺崎 順

第 5 回「学際計算科学による新たな知の発展・統合・創出」シンポジウム、筑波大学、つくば、2013 年 11 月 5-6 日

4. ユーザー支援のご案内

寺崎 順

新学術領域「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」のまとめと今後を語る研究会、旅館すがわら、大崎、2013 年 12 月 20-21 日

5. 分野 5 ユーザー支援の紹介

寺崎順

第 9 回 CMSI 若手技術交流会、ホテル水葉亭、熱海、2014 年 1 月 28-30 日

6. Calculation of nuclear transition matrix elements of neutrinoless double-beta decay

寺崎 順

第 9 回 CMSI 若手技術交流会、ホテル水葉亭、熱海、2014 年 1 月 28-30 日

7. ユーザー支援報告

寺崎 順

平成 25 年度 HPCI 戦略プログラム分野 5 全体シンポジウム、富士ソフトアキバプラザ、東京、2014 年 3 月 3-4 日

8. Calculation of nuclear transition matrix elements of neutrinoless double-beta decay using QRPA

寺崎 順

平成 25 年度 HPCI 戦略プログラム分野 5 全体シンポジウム、富士ソフトアキバプラザ、東京、2014 年 3 月 3-4 日

9. ニュートリノレス二重ベータ崩壊の原子核行列要素に対する QRPA 関連の効果

寺崎 順

日本物理学会 第 69 回年次大会、東海大学、平塚、2014 年 3 月 27-30 日

10. Lagrange 格子を用いた Gogny-TDHF による線形応答計算

橋本幸男

日本物理学会 2013 年秋季大会（高知大学朝倉キャンパス、2013 年 9 月 20 日-23 日）

11. S 同位体の励起状態の変形が発達とクラスタ構造

谷口億宇

日本物理学会年次大会, 2014 年 3 月 27-30 日, 東海大学

12. ハイブリッド汎関数による電子ダイナミクスの並列 GPU 計算

谷口億宇, 佐藤駿丞, 篠原康, 矢花一浩

日本物理学会秋季大会, 2013 年 9 月 25-28 日, 徳島大学

13. 硫黄同位体の超変形状態とクラスタ相関

谷口億宇

日本物理学会秋季大会, 2013 年 9 月 20-23 日, 高知大学

14. sd 及び pf 殻領域における超変形状態とクラスタ相関

谷口億宇

RCNP 研究会「核子・ハイペロン多体系におけるクラスター現象」, 2013 年 7 月 26-27 日, KGU 関内メディアセンター

15. ^{238}U を伴う多核子移行反応過程の TDHF 計算

関澤一之, 矢花一浩

日本物理学会 第 69 回年次大会, 東海大学湘南キャンパス, 神奈川県平塚市, 2014 年 3 月 27-30 日

16. TDHF 計算による多核子移行反応の研究

関澤一之, 矢花一浩

第 3 回 HPCI 戦略プログラム 分野 2×分野 5 異分野交流研究会

"量子多体系のダイナミクス計算 -原子核から物質科学まで-",

自然科学研究機構 分子科学研究所, 愛知県岡崎市, 2013 年 11 月 13 日-14 日

17. 密度汎関数理論に基づく原子核ダイナミクスの研究（ポスター）

関澤一之, 矢花一浩, 橋本幸男

平成 25 年度「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 中間報告会, タイム 24 ビル, 東京都江東区, 2013 年 10 月 2 日-3 日

18. 準核分裂ダイナミクスの TDHF 計算

関澤一之, 矢花一浩

日本物理学会 2013 年秋季大会, 高知大学朝倉キャンパス, 高知県高知市, 2013 年 9 月 20 日-23 日

19. パスタ構造と中性子星クラスト物質の力学的性質

岡本稔, 丸山敏毅, 矢花一浩, 巽敏隆

日本物理学会 2013 年秋季大会, 高知大学, 2013 年 9 月 20 - 23 日

20. “原子核パスタ”と中性子星クラスト

岡本稔, 丸山敏毅, 矢花一浩, 巽敏隆

原子核研究 4 月, 基研研究会「ハドロン物理の諸相と状態方程式 - 中性子星の観測に照らして -」報告集, pp.17-20, 2013 年

21. トリプルアルファ反応率の虚時間理論

矢花一浩

東工大量子物理学ナノサイエンス第 7 4 回セミナー, 2013 年 7 月 3 日

22. TDHF 計算による多核子移行反応の研究

関澤一之, 矢花一浩

第 916 回九大原子核セミナー, 九州大学箱崎キャンパス, 福岡県福岡市, 2014 年 3 月 3 日

23. Time-dependent Hartree-Fock calculations for multinucleon transfer processes

K. Sekizawa, K. Yabana

A seminar at INFN-LNL, Oct. 22, 2013, Legnaro, Padova, Italy

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

- HPCI 戦略プログラム分野 5 と分野 2 の共催による異分野交流研究会を、量子ダイナミクス計算をテーマに 2013 年 11 月 13-14 日に分子科学研究所で開催。

- 当グループは、フェルミオン多粒子系の量子ダイナミクスという観点から、当センター量子物性研究部門においても共通する研究を行っており、その活動実績については量子物性研究部門の報告に含まれている。

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

HPCI 戦略プログラム分野 2 と分野 5 の第 3 回交流研究会「量子多体系のダイナミクス計算－原子核から物質科学まで－」（2013 年 11 月 13～14 日、分子科学研究所）を主催者の一人として開催した（矢花）。

9. 管理・運営

- センター共同研究担当主幹（矢花）
-

10. 社会貢献・国際貢献

- HPCI 戦略プログラム分野 5 のユーザー支援において、プログラム支援をとりまとめる役割（寺崎）
- 教員免許状更新講習「物質の起源と量子の世界」矢花一浩、筑波大学、2013 年 7 月 28 日
- European Physical Journal A 誌の編集委員（矢花）
- KEK 大型シミュレーション研究推進委員（矢花）
- APCTP 日本委員会委員（原子核分野）（矢花）
- 核理論委員会委員（矢花）

11. その他

海外長期滞在、フィールドワークなど

III. 量子物性研究部門

III-1. 光科学分野

1. メンバー

教授	矢花 一浩
准教授	全 暁民
講師	前島 展也
学生	大学院生 5名、学類生 2名

教授 日野 健一(学内共同研究員、物質工学域)

2. 概要

物質中の電子ダイナミクス、レーザー照射による原子・分子の状態制御、固体における光誘起相転移等に関する研究を行っている。電子ダイナミクスについては時間依存密度汎関数理論(TDDFT)に基づく第一原理計算を行い、更に巨視的マクスウェル方程式と微視的TDDFT計算をマルチスケール手法で結びつけ高強度なパルス光が物質中を伝播する様子を記述する新しいシミュレーション法の開発も行っている。原子・分子系では、ダイナミクスおよびそれらの電磁場との相互作用により生じる現象について時間依存シュレディンガー方程式の直接解法で解く方法によりシミュレーションを行っている。これは、強レーザー場における原子・分子の非線形過程や反陽子と原子の衝突などにおけるエキゾチック原子の生成、さらに振動磁場などの外場による物理的な過程の制御方法の探索につながる。また、パルスレーザー照射下における半導体(超格子)中の励起子、コヒーレントフォノン状態の解析、光誘起相転移を起こす系における CW レーザー誘起状態の解析も行なっている。

3. 研究成果

【1】 時間依存密度汎関数理論による物質中の電子ダイナミクス計算

光科学のフロンティアの一つに、高強度で極めて短いパルスレーザーと物質の相互作用に関する研究分野がある。光の瞬間的な最大強度が $10^{14}\text{W}/\text{cm}^2$ 程度を越えると物質は瞬時にプラズマ化される。この光破壊プロセスは、物質を非熱的に加工する手段として注目されている。一方光破壊に近い強度では光と物質の相互作用に著しい非線形性が生じる。このような極限的なパルス光と物質の相互作用をどのように理論的に記述するのか、またどのような応用の可能性があるのかを明らかにすることが課題となっている。

我々は極限的なパルス光と物質の相互作用に対して、実験研究との密接な連携のもと、光電場に

より生じる電子ダイナミクスを TDDFT に基づく第一原理計算で記述し、空間的にはナノメートル以下、時間的にはフェムト秒以下で起こる素過程を明らかにすることを目標に研究を進めている。開発を進めている TDDFT に基づく電子ダイナミクス計算コードの核となるのは、与えられたパルス光電場が引き起こす単位セル中の電子軌道の時間変化の計算である。この単位セル計算から、パルス光による電子ダイナミクスを実時間・実空間で記述し、電子励起の様相を明らかにすることができる。また、この単位セル計算は、入力となる光電場に対して結晶中を流れる電流密度を求めることから、電場と分極を結び付ける（数値的な）構成方程式とみなすことができる。我々はこの観点から、巨視的マクスウェル方程式と微視的 TDDFT 計算をマルチスケール手法で結びつけ、高強度なパルス光が物質中を伝播する様子を記述する巨視的電磁気学シミュレーション法（Maxwell+TDDFT マルチスケールシミュレーション法）の構築に成功している。この新奇なシミュレーション法は、京コンピュータ程度の今日利用可能な最大規模の計算機を用いてのみ実行可能であり、高強度パルス光と物質の相互作用を自在に記述する手法として注目を集めている。

(1) 高強度パルス光と誘電体薄膜の相互作用（李(APRI、韓国)、佐藤、篠原、乙部（原研）、矢花）

SiO₂ の薄膜及びバルク結晶に高強度パルス光が照射する場合の極限的な光応答に関し、Maxwell+TDDFT マルチスケールシミュレーションによる解析結果を論文にまとめた。通常の光学では、薄膜の厚さが光波長の 1/2、1/4 等の場合に表面と裏面における反射波の干渉が起き、この干渉は多層膜ミラーなどに応用されている。本研究では、光強度が増すにつれて非線形相互作用のために干渉効果が消失する様子を明らかにした。また、パルス光から電子へのエネルギー移送により、薄膜にどのようなエネルギー分布を生じるかを明らかにし、光破壊の閾値エネルギーに対する見積もりを与えた。この計算は、京コンピュータの試験利用を用いて得られた成果である。

(2) 高強度パルス光により透明誘電体に生じる超高速電流の生成メカニズム（Wachter 他（ウィーン工科大）、佐藤、矢花、全（計科セ））

最近、透明な誘電体である SiO₂ の表面に高強度パルス光を照射すると、フェムト秒程度の短い時間スケールで表面にキャリアが生じ電流が流れることが実験的に示され、注目されている。我々は、TDDFT に基づく第一原理計算により、高強度パルス光の SiO₂ への照射による電流発生メカニズムを明らかにした。計算では実験で見出されているのと同様に、光破壊に近い強度で電流発生が示された。また、パルス光の照射中のみ起こる電荷移動と光照射後も存在する電流という、異なるメカニズムによる電流発生が見られた。

(3) 光破壊メカニズムの解明と閾値予測（佐藤、篠原、乙部（原研）、李（APRI、韓国）、矢花、

G.F. Bertsch(Univ. Washington))

Maxwell+TDDFT マルチスケールシミュレーション法を用いると、高強度パルス光が透明な誘電体に引き起こす電子励起を求めることができる。電子励起エネルギーが物質の結合エネルギーを上回れば、アブレーション等の不可逆変化が起こると考えられることから、計算により物質の光破壊過程を記述することが可能となると考えられる。SiO₂等の物質での予備的な検討を行い有望な結果が得られつつある。

(4) 高強度パルス光による物質の誘電応答変化に対する数値ポンプ・プローブ実験 (佐藤、篠原、乙部 (原研)、矢花、G.F. Bertsch (Univ. Washington))

高強度パルス光を用いた実験では、しばしばポンプ・プローブ分光と呼ばれる実験手法が用いられる。これは、一つのパルス光をハーフミラー等を用いて時間差を持つ2つのパルス光に分け、最初のパルス光が物質を励起し、2番目のパルス光により励起した物質の性質を探る方法である。本研究では、ポンプ・プローブ分光を模した第一原理シミュレーションを遂行し、パルス光により電子励起した直後の物質の誘電的性質を調べた。高強度なパルス光により誘電体中に自由キャリアが生成し、それが物質の光応答を金属的に変化させる様子を明らかにすることができた。

(5) ハイブリッド汎関数を用いた電子ダイナミクス計算の GPU 並列計算 (谷口、佐藤、篠原、矢花)

光電場により物質中に引き起こされる電子ダイナミクスを定量的に調べる上で、エネルギー汎関数の適切な選択は極めて重要である。絶縁体や半導体の場合、物質の電子構造と光応答を規定する最も基本的な物理量はバンドギャップであるが、最も単純な選択肢である局所密度近似を用いると、系統的にバンドギャップが過小評価されることは良く知られている。最近、メタ GGA やハイブリッド汎関数など、密度だけではなく軌道の性質を取り入れた汎関数を用いることにより、局所密度近似によるバンドギャップ過小評価の問題のかなりの部分が解決されることが分かってきた。

ハイブリッド汎関数は、バンドギャップや誘電関数の記述に著しい改善を見せるものとして近年特に注目されているが、一方で局所密度近似と比較すると、計算コストが膨大なものとなる欠点がある。我々は、計算科学研究センターに導入された超並列 GPU 計算機である HA-PACS を用いて、ハイブリッド汎関数を用いた電子ダイナミクス計算の高速化を試みた。ハイブリッド汎関数を用いる場合、比較的小さいサイズの3次元複素離散フーリエ変換を非常に多数回行うことが必要となる。この作業を GPU CUDA ライブラリである cufft を用いて実装する計算コードの開発を行った。

計算の結果、Si 結晶の誘電関数を再現し、さらに高強度レーザー照射によって非線形応答であ

る多光子吸収が現れることがわかった。また、計算時間を計測した結果、GPU ライブラリ cufft を用いると、標準的な CPU ライブラリ FFTW3 に比べて 1 ノード (CPU: 16 コア、GPU: 4) あたり 8 倍の速度で計算できることがわかった。

【2】 強中赤外線レーザーにおける電離過程の解明 (全)

以前実行した大規模数値計算により、電離された電子の運動量分布と波長の関係を短波長(200 nm)から長波長 (2000 nm) まで系統的に研究し、実験グループで観測した現象と一致することが明らかになったが、強中赤外線レーザーにおける電離過程のメカニズムは分かっていなかった。今回、我々が開発した計算手法により、電子の電離過程と電離された電子のレーザー電場中の伝播を分離して、各時刻のレーザー電場の寄与を詳しく分析した。図 1 (a)のように半周期中に電離された電子の運動量分布と図 1 (b)のように全レーザー中に電離された電子の運動量分布を比べて、強中赤外線レーザーにおける電離過程のメカニズムを解明した。その上、多重散乱の寄与もはっきり観測された。この研究結果は Physical Review A に発表された。このメカニズムによって、実験の観測結果と比較することにより原子・分子の内部情報を得ることが可能となる。

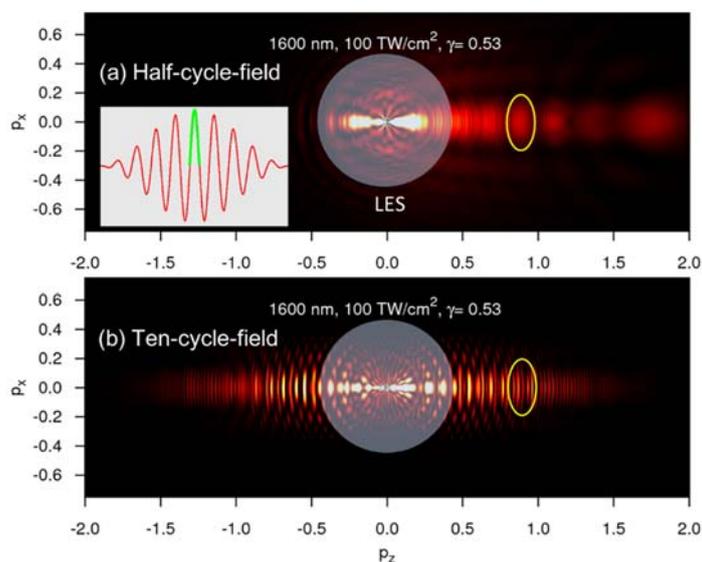


図 1. 強中赤外線レーザー場における水素原子からの光電子運動量の分布 : (a) レーザー電場中心の半周期から電離された電子、(b) 全レーザー電場から電離された電子。

【3】 赤外線による分子動的過程アト秒範囲内の制御 (全)

分子の動的過程制御に必要とされるアト秒 (10^{-18} 秒) スケールのパルスレーザーは高次高調波の光源開発により利用可能となっている。しかし、分子軌道の制御には軟X-線電場の波形を精密に制御する必要があるため、現実の動的過程制御の実現は困難とされてきた。最近、アメリカの

Colorado大学のM. Murnane 教授の実験グループで精密な軟X-線電場の形の調整が実現し、その軟X-線を利用して、図2のように強レーザー時間遅延による重水素分子の電離と解離過程がアト秒範囲内で制御された。この実験結果は我々の理論計算によって、電離と解離のルートが解明された。その上、長時間時間遅延によって、分子精密なエネルギー状態の測定が可能ということをも提案して、同じ実験で実現された。共同研究結果はPrecedings of the National Academy of Sciencesに発表された。

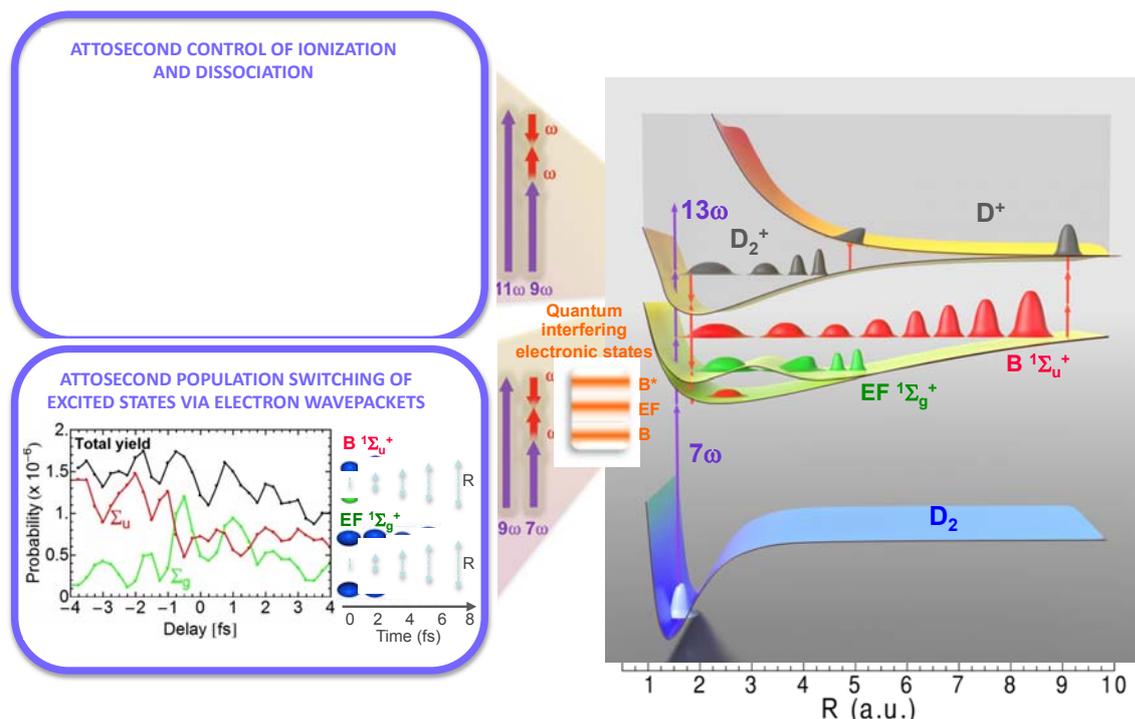


図2：軟 X 線による重水素分子電離、解離アト秒範囲の制御ルート。

【4】 光着衣励起子における動的Fano共鳴 (日野、前島)

物質中の電子状態に対する強力な外場による非線形効果は量子ダイナミクスや状態のコヒーレント制御という観点から注目を集めている。特に、強い時間周期レーザー場中において実現するフロケ状態と呼ばれる特殊な状態をりよすることにより電子の状態を自在に制御する研究が実験・理論の両面から行われている。我々は、このフロケ状態で記述される電子と正孔が束縛した光着衣励起子の形成により、半導体超格子の光学応答スペクトルがどのように影響を受けるかを調べた。得られた結果のうちで最も特筆すべき点はファノ共鳴的な非対称ピーク光学応答スペクトルに現れることである。このファ

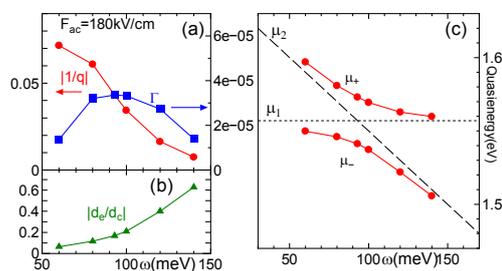


図3 ファノ共鳴ピークのスペクトル幅 Γ 、非対称パラメータ q 、双極子モーメント比 d_v/d_c 、AC-ツェナー結合による2つのミニバンド準位の周波数 ω 依存性

ノ共鳴は強いレーザー外場によって生み出されるAC-ツェナー結合(ZC)によって、光着衣励起子状態と電子正孔対の間に相互作用が発生するためにおこる。またこの相互作用はレーザー外場によって制御可能なため、ファノ共鳴特有の物理パラメータもレーザーによって変化させられることが分かった。その意味で、このファノ共鳴は動的ファノ共鳴と呼ばれるものである。特にレーザー周波数 ω を変化させることによりスペクトル幅 Γ や非対称パラメータ q などのファノ共鳴特有のパラメータを制御できることが分かった(図3)。

【5】 2 軌道縮退ハバード模型における光誘起ダイナミクス

ペロブスカイト型バナジウム酸化物 RVO_3 (R は Y もしくは希土類) における光照射による状態変化を調べるため、 $2 \times 2 \times 2$ クラスタ上の 2 軌道ハバード模型に対する厳密対角化計算を行った。励起光の偏光を z 軸に平行とした場合の計算の結果、基底状態と光励起状態ではスピン構造因子に大きな差異がみられることが明らかとなった。その結果、期待されるスピン軌道秩序が基底状態のものから大きく変化しうることが分かった(図 4)。

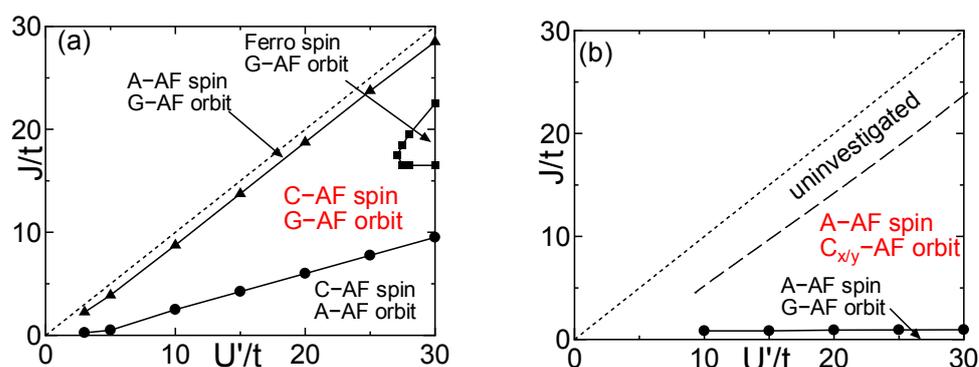


図 4 基底状態(a)および光励起状態(b)における相図。

4. 教育

修士論文

佐藤 駿丞 Theoretical study on optical properties of solids excited by ultra-short laser pulses

卒業論文

井本 文裕 2 軌道縮退ハバード模型におけるスピン・軌道相関と光励起効果の解析
 日高 篤俊 ボゾン化法によるコヒーレントフォノン生成機構の理論的モデルの構築
 樋口 祐葉 2 軌道縮退ハバード模型のスピン・軌道相関に対するヤーン・テラー型格子歪み効果

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

1. 日本学術振興会科学研究費、基盤研究(B)、矢花一浩、代表、2011 年度、3250 千円、「固体中のフェムト・アト秒電子ダイナミクスに対する第一原理計算」
2. 日本学術振興会科学研究費、新学術領域研究(研究領域提案型)公募研究、矢花一浩、代表、2013 年度、1950 千円、「光と電子のダイナミクスを記述する第一原理マルチスケールシミュレーション法の開発」
3. 日本学術振興会二国間交流事業オープンパートナーシップ共同研究(アメリカ合衆国)、矢花一浩、代表、2013 年度、2320 千円、「超高速電子ダイナミクスに対する第一原理計算アプローチ」
4. 日本学術振興会科学研究費、基盤研究(C)、全 暁民(トン ショウミン)、代表、2013 年度、780 千円、「赤外線レーザーの付加による原子・分子高速過程の制御の理論研究」
5. 日本学術振興会科学研究費、基盤研究(C)、日野 健一、代表、2013 年度、650 千円、「超短パルス励起半導体における動的ファノ共鳴と過渡的準粒子生成」
6. 日本学術振興会科学研究費、若手研究(B)、前島 展也、代表、2013 年度、650 千円、「光誘起相転移初期過程における超高速ダイナミクスの量子動力学的研究」

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. Kyung-Min Lee, Chul Min Kim, Shunsuke A. Sato, Tomohito Otobe, Yasushi Shinohara, Kazuhiro Yabana, and Tae Moon Jeong, “First-principles simulation of the optical response of bulk and thin-film α -quartz irradiated with an ultrashort intense laser pulse”, *J. Appl. Phys.* **115**, 053519 (2014).
2. S.A. Sato, K. Yabana, Y. Shinohara, T. Otobe, G.F. Bertsch, “Numerical pump-probe experiments of laser-excited silicon in nonequilibrium phase”, *Phys. Rev. B* **89**, 064304 (2014).
3. M. Noda, K. Ishimura, K. Nobusada, K. Yabana, T. Boku, “Massively-parallel electron dynamics calculations in real-time and real-space: Toward applications to nanostructures of more than ten-nanometers in size”, *J. Comp. Phys.* **265**, 145 (2014).
4. Georg Wachter, Christoph Lemell, Joachim Burgdörfer, Shunsuke A. Sato, Xiao-Min Tong, Kazuhiro Yabana, “Ab-initio simulation of optical-field induced currents in dielectrics”, *Phys. Rev. Lett.* accepted (arXiv:1401.4357 [cond-mat.mtrl-sci]).
5. Qianqiang Li, Xiao-Min Tong, Toru Morishita, Hui Wei and C. D. Lin, “Fine structures in the intensity dependence of excitation and ionization probabilities of hydrogen atom in intense 800-nm laser pulses”, *Phys. Rev. A* **89**, 023421_1-9 (2014)
6. P. Ranitovic, C. W. Hogle, P. Riviere, A Palacios, X. M. Tong, N. Toshima, A. Gonzalez-Castrillo, L. Martin, F. Martin, M. M. Murnane, and H. C. Kapteyn, “Attosecond vacuum UV Coherent Control of Molecular Dynamics”, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **111**, 912-917 (2014)

7. X. M. Tong, P. Ranitovic, D. D. Hickstein, M. M. Murnane, H. C. Kapteyn and N. Toshima, “Enhanced multiple-scattering and intra-half-cycle interferences in the photoelectron angular distributions of atoms ionized in mid-infrared laser fields”, Phys. Rev. A **88**, 013410_1-5 (2013)
8. X. W. Wang, M. Chini, Y. Cheng, Y. Wu, X. M. Tong, and Z. H. Chang, “Subcycle laser control and quantum interferences in attosecond photoabsorption of neon”, Phys. Rev. A **87**, 063413_1-4 (2013)
9. M. G. Pullen, W. C. Wallace, D. E. Laban A. J. Palmer, G. F. Hanne, A. N. Grum-Grzhimailo, K. Bartschat, I. Ivanov, A. Kheifets D. Wells, H. M. Quiney, X. M. Tong, I. V. Litvinyuk, R. T. Sang, D. Kielpinski, “Measurement of laser intensities approaching 10^{15} W/cm² with an accuracy of 1%”, Phys. Rev. A **87**, 053411_1-6 (2013)
10. Nobuya Maeshima, Kohei Yamada, and Ken-ichi Hino, “Laser-Controlled Exciton Fano-Resonance in Semiconductor Superlattices”, J. Phys.: Condens. Matter **25**, 435801_1-6 (2013)
11. Hikaru Takenaka, Nobuya Maeshima and Ken-ichi Hino, “Spin and Orbital Correlations in Photoexcited States of Multi-Orbital Hubbard Models”, JPS Conf. Proc. , 017026 (2014)

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. K. Yabana, “Multiscale description for strong electromagnetic fields in solids”, Gordin Research Conference on TDDFT, Univ. New England, Biddeford, ME, Aug. 11-16, 2013.
2. K. Yabana, “Light-matter interactions in time-dependent density functional theory”, Advances in time-dependent methods for quantum many-body systems, ECT*, Trento, Italy, Oct. 14-18, 2013.
3. K. Yabana, “First-principles description of strong electromagnetic fields in solids”, Invited talk at focus session: Computer Simulation of Interaction of Electromagnetic fields and Nanostructures, APS Meeting 2014, Colorado Convention Center, Denver, USA, Mar. 3-7, 2014.
4. K. Yabana, “Maxwell + TDDFT multiscale simulation for strong electromagnetic fields in solids”, Quantum Dynamics Research Meeting, Vanderbilt University, Nashville, USA, Mar. 10-12, 2014.

B) 一般講演

1. Yuya Nemoto, Ken-ichi Hino, Nobuya Maeshima, “Quasienergy resonance in a dynamic Wannier-Stark ladder”, APS March Meeting 2014 (March 3 - 7, 2014, Denver, U.S.A.)
2. Ken-ichi Hino, Fumitaka Ohno, Yuya Nemoto, Nobuya Maeshima, “Collapse of Fractal Structure in a Dynamic Fractional Stark Ladder Driven by an Intense THz Laser”, APS March Meeting 2014 (March 3 - 7, 2014, Denver, U.S.A.)
3. Yohei Watanabe, Yuya Nemoto, Ken-ichi Hino, Nobuya Maeshima, “Semiclassical Theory of

Coherent Phonon Generation Accompanying Transient Fano Resonance in Semiconductors”, APS March Meeting 2014 (March 3 - 7, 2014, Denver, U.S.A.)

7. 国内学会・研究会発表

A)招待講演

1. 矢花一浩, “高強度パルス光と物質の相互作用に対する第一原理計算—フェムト秒時間スケールの電子ダイナミクス・シミュレーション”, 物性科学領域横断研究会、東京大学、2013年12月1-2日

B)その他の発表

1. 矢花一浩, “極限的パルス光と結晶の相互作用を記述する第一原理計算”, 新学術領域「コンピュータティクスによる物質デザイン: 複合相関と非平衡ダイナミクス」平成 25 年度第一回研究会、東大武田先端知ビル、2013年7月8-9日
2. 矢花一浩, “電子ダイナミクス計算と巨視的電磁気学”, 第3回戦略プログラム分野2×分野5異分野交流研究会「量子多体系のダイナミクス計算—原子核から物質科学まで—」、分子科学研究所、2013年11月13-14日
3. 佐藤 駿丞、李畊旻、篠原康、乙部智仁、矢花一浩, “レーザー加工現象における初期過程の第一原理計算”, 日本物理学会 第69回年次大会、東海大学 2014年3月27日-30日
4. Shunsuke A. Sato, “Theoretical study on optical properties of dielectrics near optical break-down”, 第14回光量子科学シンポジウム, 日本原子力研究開発機構, 関西光科学研究所 2013年11月14日-15日
5. 佐藤 駿丞、篠原康、谷口億宇、矢花一浩, “様々な密度汎関数を用いた固体中の電子ダイナミクス計算”, 日本物理学会 2013年秋季大会、徳島大学 2013年9月25日-28日
6. 矢花一浩, “物質中を伝播する高強度パルス光の理論的記述”, 東工大量子物理学ナノサイエンス第75回セミナー、2013年7月10日
7. K. Yabana, “First-principles theory of a strong electromagnetic field in solids”, Seminar at CNR S3, Modena, Italy, Oct. 21, 2013.
8. K. Yabana, “First-principles theory of a strong electromagnetic field in solids”, Seminar at Vanderbilt University, Nashville, USA, Dec. 9, 2013.
9. K. Yabana, “First-principles theory of a strong electromagnetic field in solids”, Seminar at Molecular Foundry, LBNL, USA, Dec. 12, 2013.
10. 前島展也、竹中光、日野健一、"2軌道縮退ハバード模型における光励起状態のスピン・軌道相関 II"、日本物理学会 2013 秋季大会、徳島大学常三島キャンパス、2013年9月25-28日
11. 根本裕也、日野健一、渡辺陽平、前島展也、"過渡的ファノ共鳴を伴ったコヒーレント

フォノンにおける解析的表式の導出"、日本物理学会第 69 回年次大会、東海大学湘南キャンパス、2014 年 3 月 27-30 日

12. 井本文裕, 前島展也, 日野健一, "2 軌道縮退ハバード模型における光誘起ダイナミクス"、日本物理学会第 69 回年次大会、東海大学湘南キャンパス、2014 年 3 月 27-30 日
13. 大野文隆, 根本裕也, 日野健一, 前島展也, "分数型動的ワニエ-シュタルク階段におけるフラクタル構造と多チャンネル効果"、日本物理学会第 69 回年次大会、東海大学湘南キャンパス、2014 年 3 月 27-30 日

8. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1. 平成 25 年より 2 年間、日本学術振興会二国間交流事業オープンパートナーシップ共同研究 (代表・矢花) のもと、米国バンダービルト大学及びワシントン大学と、超高速電子ダイナミクスに対する第一原理計算アプローチに関する共同研究を推進している。
2. 矢花は光と物質の相互作用に関する第一原理計算に関し、独マックスプランク量子光学研究所のアト秒科学実験グループとの共同研究を推進している。
3. 矢花、及び Tong は、ウィーン工科大学の理論グループと、固体中における光と物質の相互作用に関して共同研究を推進している。
4. 矢花は、韓国光科学研究所のグループと、固体中における光と物質の相互作用に関して共同研究を推進している。
5. 矢花は、宇宙・原子核研究部門原子核分野において、フェルミオン多粒子系の量子ダイナミクスという観点から関連する研究を行っている。その活動については、宇宙・原子核研究部門に記述している。
6. 矢花は、本センターの朴教授のサポートのもと、分子科学研究所の信定准教授のグループが中心となって進めている電子ダイナミクスの大規模計算に関するコード開発を進めている。本年度、計算法に関する論文(M. Noda, K. Ishimura, K. Nobusada, K. Yabana, T. Boku, J. Comp. Phys. 265, 145 (2014).)が出版された。

9. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. HPCI 戦略プログラム分野 2 と分野 5 の第 3 回交流研究会「量子多体系のダイナミクス計算－原子核から物質科学まで－」(2013 年 11 月 13~14 日、分子科学研究所) を主催者の一人として開催した (矢花)。

10. 管理・運営

1. 計算科学研究センター共同研究担当主幹を担当 (矢花)
2. 計算科学研究センター共同利用委員会・一般利用 WG (前島)

11. 社会貢献・国際貢献

12. その他

III-2. 電荷-スピン-格子結合系分野

1. メンバー

准教授 小泉 裕康
学生 大学院生 3名、学類生 2名

2. 概要

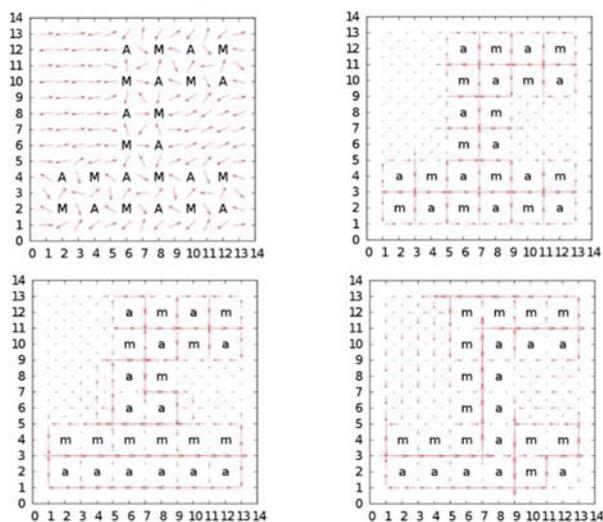
銅酸化物高温超伝導体などの電子の電荷の自由度が電子のスピン自由度及び格子の自由度と密接に結びついた物質についての量子力学的基礎理論およびその応用についての研究を行っている。特に、我々は、銅酸化物にスピン渦誘起ループ電流の存在を予言しており、スピン渦誘起ループ電流に基づく超伝導理論および、スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子コンピュータの実現を目指した理論研究を行っている。

3. 研究成果

【1】 銅酸化物高温超伝導体の超伝導機構の解明に向けた研究: スピン渦誘起ループ電流の計算法の開発。

銅酸化物高温超伝導体の母物質は反強磁性絶縁体であり、そこにホールをドーピングすることにより、超伝導が実現する。ホールは室温では、動き回り電流担体となっているが、低温では擬ヤーン・テラー効果による格子変形によりスモールポーラロン化し、ほとんど動かなくなると考えられる。このことは、ホール係数が低温で正から負に変わること、Cu-O 結合長に変化が現れることなどの実験結果により示されている。銅酸化物の高温超伝導はこのような反強磁性体母物質にスモールポーラロン化したホールが導入された状況で実現している。ホールは動かないので、電流は、母物質で磁性を担っていた伝導電子が担うことになる。母物質同様、反強磁性が保たれていると絶縁体となるが、伝導電子によりスピン渦が形成されると我々が発見した新しい電流生成機構により、電気伝導が可能となる。これは、スピン渦誘起ループ電流による電流生成である。スモールポーラロン化したホールを媒介とした反強磁性的超交換相互作用が、ホールを挟んだ銅原子上の電子間に働き、スピン渦が安定化されると考えられる。スピン渦の存在により、伝導電子はスピンの方向を変化させながら移動することになるが、このとき波動関数の一価性の要請より全体運動が誘起される。我々は、この誘起された全体運動を持つ量子状態に対する波動関数を求める方法を開発した (H. Koizumi, R. Hidekata, A. Okazaki, M. Tachiki, J. Supercond. Nov. Magn. 27, 121 (2014); H. Koizumi, A. Okazaki, M. Abou Ghantous, M. Tachiki, J. Supercond. Nov. Magn. DOI: 10.1007/s10948-014-2626-9)。この波動関数は、試料の端から流入し、他の端から

流出する境界条件で解くこともでき、カメリン-オネスが 1911 年に発見した電位差なしで電流が流れる状態をシミュレートすることもできる。以下の計算例を示す。



図：新たに開発された計算方法で計算したスピン渦誘起ループ電流。

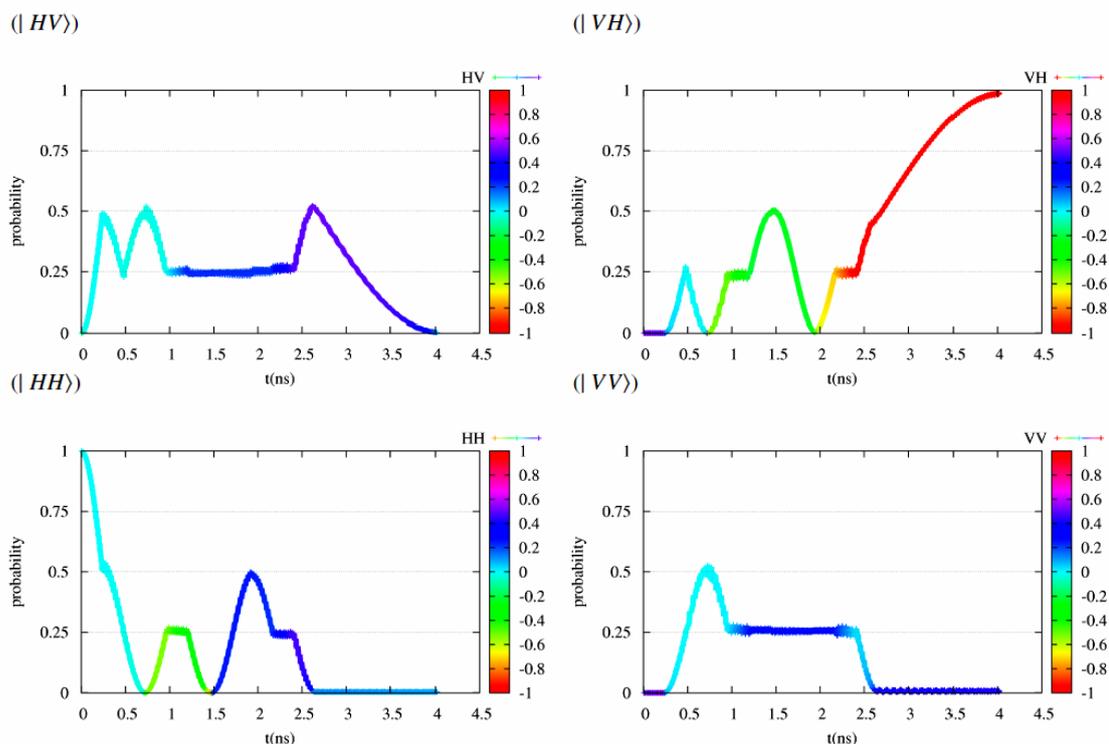
左上：反強磁性の中にスモールポーランを中心にスピン渦が存在するスピン配置図。A が左回りのスピン渦の中心、M が右回りのスピン渦に中心を表す。

右上：基底状態のスピン渦誘起ループ電流。a が左回りのループ電流の中心、m が右回りのループ電流の中心を表す。電流は局在している。

左下：(1,3)から(13,3)に電流が流れているスピン渦誘起ループ電流を持つ状態。右下：(1,3)から(7,3)よ(7,11)をへて(13,11)に電流が流れているスピン渦誘起ループ電流を持つ状態。

【2】 銅酸化物高温超伝導体を使った量子コンピュータ実現に向けた研究

我々がその存在を予言しているスピン渦誘起ループ電流は、右回りと左回りの自由度があり、それを量子ビットとして使うことが可能である。スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子コンピュータ実現に向けたシミュレーションを行った。2量子ビット系でグローバーの検索アルゴリズムを行った結果の例を下に示す。10⁵ V/m の電場を持つレーザー照射により、4ナノ秒で検索が終了するという結果が得られた。これは、ディコヒーレンス時間が十分長くでき且つ多数の量子ビットを扱うことができれば実用に耐える量子コンピュータが可能であることを示唆している。



図：スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした2量子ビット系によるグローバーの検索アルゴリズムのシミュレーション。初期状態は左下の状態で、0.5 ナノ秒後に4つの状態が同等の確率で存在する状態が準備される。そして、右上の状態が4 ナノ秒に検索されている。色は、量子状態の位相を表す。

4. 教育

修士論文

- 鈴木紀之 銅酸化物超伝導体におけるスピン渦の生成、移動、秩序形成に関する理論研究
 若浦光 スピン渦誘起ループ電流を利用した量子コンピューター

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

- H. Koizumi, R. Hidekata, A. Okazaki, M. Tachiki, “Persistent current generation by the spin-vortex formation in cuprate with the single-valuedness constraint on the conduction electron wave functions”, J. Supercond. Nov. Magn. **27**, 121 (2014)

(2) 国際会議発表

B) 一般講演

1. H. Koizumi, A. Okazaki, M. Tachiki, “Spin-vortex-induced loop currents in high T_c cuprate superconductors”, First International Symposium on Topological quantum technology, Jan 27-30, 2014, Tokyo Japan
2. H. Wakaura, A. Okazaki, H. Koizumi, A. “Simulation of Grover’s search algorithm using the spin-vortex-induced loop currents in the cuprate”, First International Symposium on Topological quantum technology, Jan 27-30, 2014, Tokyo Japan

(3) 国内学会・研究会発表

B) その他の発表

1. 岡崎智、小泉裕康、秀方遼、”外部からの電流のやりとりがあるスピントル誘起ループ電流の安定性”、日本物理学会 2013 秋季大会、徳島大学常三島キャンパス、2013 年 9 月 25-28 日
2. 小泉裕康、立木昌、”銅酸化物超伝導体の超伝導機構”、日本物理学会 2013 秋季大会、徳島大学常三島キャンパス、2013 年 9 月 25-28 日
3. 若浦光、小泉裕康、”スピントル誘起ループ電流利用した量子ビット”、日本物理学会 2013 秋季大会、徳島大学常三島キャンパス、2013 年 9 月 25-28 日
4. 小泉裕康、立木昌、”ディラックモノポール様特異点と銅酸化物超伝導”、日本物理学会第 69 回年次大会、東海大学湘南キャンパス、2014 年 3 月 27-30 日
5. 若浦光、小泉裕康、”スピントル誘起ループ電流を量子ビットとした量子計算”、日本物理学会第 69 回年次大会、東海大学湘南キャンパス、2014 年 3 月 27-30 日

(4) 著書、解説記事等

1. 小泉裕康、”ベリー位相入門：ディラックモノポール様特異点の出現から、スピントル誘起ループ電流の生成まで”、応用物理 83 巻、(222-227) 2014.

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

9. 管理・運営

10. 社会貢献・国際貢献

11. その他

IV. 生命科学研究部門

生命科学部門は生命機能情報分野、および、分子進化分野の2つの研究分野からなり、それぞれ、第一原理計算に基づく原子レベルでの酵素や DNA の機能解析、真核生物系統間の遺伝情報系統解析を独立に行ってきた。26 年 2 月に行われた外部評価において生命科学部門 2 分野の共同研究についてのコメントを受け、また、3 月には研究部門の部門長である教授の着任に伴い、25 年度の終わりから共同研究体制の構築を試みている。

以下では、それぞれの部門の業績を個別に示す。

IV-1. 生命機能情報分野

1. メンバー

教授	重田 育照 (センター勤務、物理学系、平成 26 年 3 月着任)
助教	庄司 光男 (センター勤務、物理学系)
学生	大学院生 3 名、学類生 1 名

2. 概要

生命機能情報分野では、生体内で重要な働きをしている蛋白質と核酸に注目し、その原子レベルでの特異的機能を理論的に解明することを目的としている。平成 25 年度には、[1]光合成酸素発生中心(PSII-OEC)、および、[2]トレオニン合成酵素(TS)における特異的反応機構を生み出す分子メカニズムの解明を、高精度計算手法である量子/古典混合(QM/MM)法により行った。また、全原子分子動力学(MD)法により、[3]トレオニン合成酵素のプロトン化状態、[4]核内受容体の基質結合状態、[5]ウリジンシチジンキナーゼの基質認識機構の解明を行った。これらの研究には膨大な計算を高速に実行する必要があるため、スーパーコンピューターの効率的利用に取り組み、国内のスーパーコンピュータ(T2K-Tsukuba, HA-PACS, 東大 FX10)を活用した。センター内の共同研究として、宇宙理論分野と連携し、[6]系外惑星のバイオマーカーおよびアミノ酸生成過程に関する理論的研究を推進した。

3. 研究成果

【1】 光合成酸素発生中心の電子状態についての理論的研究

光合成は光エネルギーを化学エネルギーに変換するシステムであり、生命にとって極めて重要なシステムの1つである。光合成は蛋白質複合体の集合体で構成されており、各複合体は光捕集、電子伝達、ATP 生成と糖生成(酸素固定反応)の働きを担っている。電子伝達系では重要な化学反応として光合成システム II における酸素発生中心(PSII-OEC)をもち、水の分解反応を行っている。



この反応では水から電子を引き抜いているが、一般的に本反応は極めて難しい化学反応である。2011年に沈教授(岡大)、神谷教授(大阪市大)により原子分解能(1.9Å)のX線構造解析がなされ、初めて活性中心構造とその周りの水分子の立体的配置が明らかとなった。OECの活性中心はCaMn₄O₅クラスターが歪んだ椅子型構造になっている。

我々はOECの反応機構を解明する為、大規模量子古典混合法(QM/MM)法を用いて検討を行った。初期の中間状態におけるOEC構造と電荷状態について理論解析を行った。X線構造解析で決定されないプロトン化状態に関して、すべての可能な電荷、スピン、プロトン化状態を検証し、PSII-OECの構造特性を明らかにした。

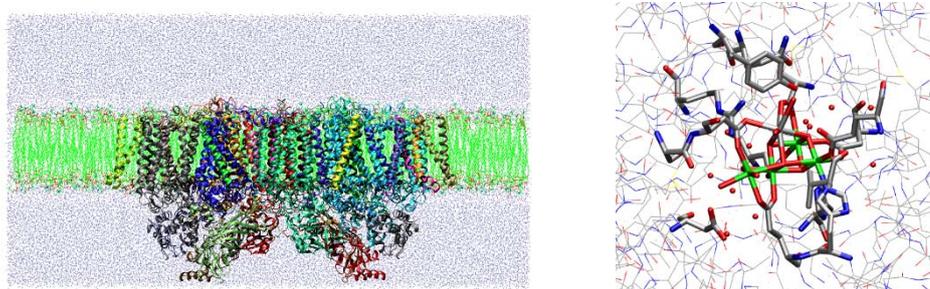


図1. 光合成システム II(左図)と水分解サイト(右図)

【2】 トレオニン合成酵素の特異的反応機構の理論的解明

生体酵素における反応機構と反応制御機構(副反応の抑制機構)は、化学合成における究極のテーマといっても過言でないほど重要である。トレオニン合成酵素(TS)はトレオニン生合成の最終ステップであるO-phospho-L-homoserine(OPHS)からL-トレオニンを生成する段階を触媒しており、いくつもの副生成物(α -ケトブチラート、ケトン)の生成を制御している。しかしながら未だTSの反応制御機構は明らかにされておらず、その本質の解明のためには基質・酵素複合体で各反応経路における構造変化とエネルギープロファイルを明らかにすることが不可欠である。

そこで、反応特異性に関わる反応過程に対してQM/MM計算を行い、プロトン化状態と活性中心における水の存在の検証、可能な反応経路を網羅的に探索した。その結果、自由エネルギーが実験値と3 kcal/mol以内で一致し、中間体のUVスペクトル形状も完全に実験と一致した。これにより、反応制御因子を明らかにするとともに各中間体の構造特性も初めて明らかにした。研究成果は国際論文誌に掲載され、プレスリリースを行った。

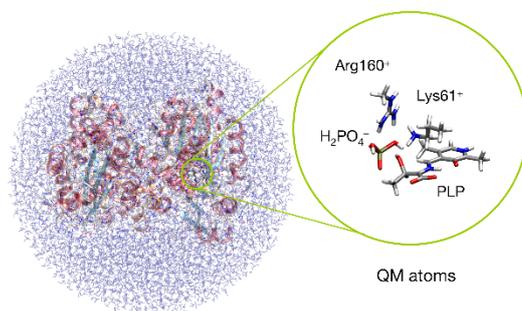


図 2. トレオニン合成酵素の QM/MM モデル: (左)全系, (右)QM 領域

【3】 トレオニン合成酵素の基質結合状態解析

トレオニン合成酵素における重要な反応中間体について、長時間 MD シミュレーションを行うことで、基質結合相互作用解析と基質のプロトン化状態を明らかにした。また、反応過程における活性中心への水分子の侵入についても理論解析を行った。今後は反応制御に関わる中間体における自由エネルギー評価を熱力学積分法により精密に算出することで、酵素反応特有の反応制御機構の解明を試みている。

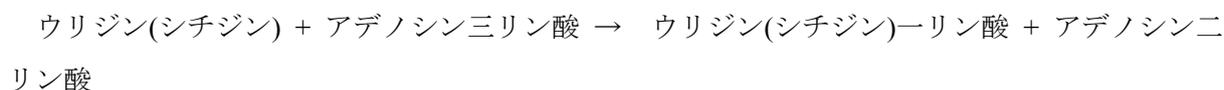
【4】 ビタミン D 受容体の活性制御機構の解明

ビタミン D 受容体 (VDR) は核内受容体 (NR) の一つである。NR は重要な創薬標的であり、NR 標的薬は NR のヘリックス 12 を活性構造化あるいは不活性構造化にすることによって、NR が関わる細胞応答を調節する。これまで NR の構造は、X 線結晶解析に基づいて理解されてきたが、近年、溶液中でのコンフォメーションアンサンブル (可能な構造の集合) が受容体活性の制御に関係することが実験から示唆されている。しかし、ヘリックス 12 のコンフォメーションアンサンブルの実態は明らかではない。一方で、NR は極めて重要な創薬標的であるため、薬剤による NR 活性調節機構について多くの計算科学的解析が行われてきたが、NR コンフォメーションアンサンブルの計算モデルは未だ提案されていない。そこで、天然作動薬 (受容体を活性化する小分子) 結合時の VDR のコンフォメーションアンサンブルを明らかにするために、蛋白質折りたたみ過程の自由エネルギープロファイルの計算などに使われるレプリカ交換分子動力学(REMD)法による大規模構造探索を行った。

計算によって得られた最安定構造は結晶構造と良く一致する活性構造であった。一方で僅かな自由エネルギー差でヘリックス 12 が大きく構造変化 (不活性化) した複数の準安定構造を取りうる事が分かった。これらの準安定構造の一部は、糖質コルチコイド受容体の不活性構造と良く似た構造を取っていた。また、結晶とは異なる準安定において、作動薬結合ポケットを発見し、作動薬結合様式とヘリックス 12 構造の関係を明らかにした。それにより、リガンド特異的な VDR 活性制御機構を提案した。

【5】 ウリジンシチジinkinナーゼの基質特異性についての理論解明

ウリジンシチジinkinナーゼ(uridine-cytidine kinase : UCK)は生体内でエネルギー源や DNA、RNA の材料となる物質をリサイクルする経路で作用し、以下のようにウリジンとシチジンのリン酸化を触媒する。



この反応は腫瘍細胞の成長を抑制する働きも有することから UCK は抗がん剤のターゲットとなっている。UCK では初めにヒト由来のものの結晶構造が解かれたが、高度好熱菌 *Thermus thermophilus* HB8 に由来する UCK(*Thermus thermophilus* UCK : ttCK)は、基質結合部位にヒト由来 UCK とは異なるアミノ酸残基を 1 つ持ち、ウリジンには作用しないという基質特異性を持っている。この残基をヒト由来 UCK が持つものと同じ残基に置換した変異体 ttCK ではウリジンにも作用することが明らかとなっている。しかしながら ttCK の残基認識がどのようになされているかの分子レベルでの機構が不明であり、1 残基の変化だけで基質認識が大きく変わる理由は結晶構造からでは明らかでない。そこで、MD 法により実際に ttCK と基質の複合体をシミュレーションすることで、正確な相互作用のエネルギーを算出した。また、野生型および変異体の ttCK と基質であるウリジン、シチジンとの複合体との比較をすることで、ttCK の基質認識機構を明らかにした。

【6】 宇宙生命計算 (宇宙物理分野との共同研究)

近年、系外惑星の発見が多く報告されてきている。ハビタブルゾーン内の惑星観測が成功し、地球に類似した惑星の発見もなされている。それに伴い、惑星のスペクトルから生命の痕跡 (バイオマーカー) をいかに検出するかも非常に注目がなされている。バイオマーカーには様々な指標が提案されているが、red edge は、植物の反射スペクトル由来の近赤外領域 (700-750nm) に見られる特徴的な急勾配である。この勾配の由来は様々なスケールでの要因が関わっているが、主要な要因としては光合成色素の 1 つであるクロロフィルの吸収スペクトルがある。

系外惑星における生命指標の可変性を明らかにするためには、地球における red edge 相当のスペクトルの環境依存性を明らかにすることが極めて重要と考えられる。まず始めに、主要な光合成色素の励起スペクトル計算を行い、系外惑星における植物の光吸収効率について考察をおこなった。また、光捕集システムの仕組み解明とその可変性について、光合成システムモデルを構築し、量子動力学計算により理論的検討をおこなった。

宇宙でのアミノ酸生成過程については様々な反応経路が考えられている。我々は、一般的な生成過程に対して反応物及び中間体の生成エネルギーの安定性を評価することで、宇宙におけるアミノ酸生成の仕組みの解明を試みた。ヒダントインやアミノニトリルを経由する、グリシン及びアラニンの生成過程について、高精度第一原理計算(密度汎関数法)により検討することで、構成要素なる反応物があればグリシン、アラニン生成は容易に起こりうるということが明らかになった。

4. 教育

【学位論文】

<博士論文>

1. 花岡恭平

Theoretical elucidations on the activity modulation mechanism of vitamin D receptor and the DNA relegation mechanism of DNA topoisomerase II(ビタミンD受容体の活性制御機構とII型DNAトポイソメラーゼのDNA再結合反応機構に対する計算科学的解明)

<卒業研究>

1. 坂本浩隆

葉緑体チラコイド膜の構築

【講義】

1. 庄司光男

- ・「生物物理科学」(物理学類専門科目、春ABC)
- ・「計算科学リテラシー」(数理・シス情修士学生対象、1コマ担当、2014/3/18-19)
- ・「基礎計算生物学」(ヒューマンバイオロジー、2コマ担当、2013/11/28, 12/5)
- ・「生体内化学反応の理論解明」(物理学セミナー、2013/11/13)

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

1) 【受賞】(賞の名称、受賞者名、タイトル、年月日)

- ① 研究科長賞(筑波大学数理物質科学研究科)、花岡恭平、2014年3月

2) 【外部資金】(名称、氏名、代表・分担の別、採択年度、金額、課題名)

<代表者>

- ・若手研究B: 庄司光男(代表者)(平成24年度採択、継続)

「生体酵素における反応機構と反応制御機構解明のための理論的研究」

<分担者>

- ・特別推進研究: 庄司光男(分担者)(代表者: 沈建仁)(平成24年採択、継続)

「光合成系IIにおける水分解反応の学理解明」

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. M. Shoji, K. Hanaoka, Y. Ujiie, W. Tanaka, D. Kondo, H. Umeda, Y. Kamoshida, M. Kayanuma, K. Kamiya, K. Shiraishi, Y. Machida, T. Murakawa, H. Hayashi, "A QM/MM Study of the l-Threonine Formation Reaction of Threonine Synthase: Implications into the Mechanism of the Reaction Specificity", *J. Am. Chem. Soc.*, **136** (12), 4525-4533, 2014.
2. K. Hanaoka, M. Shoji, D. Kondo, A. Sato, M. Y. Yang, K. Kamiya, K. Shiraishi, "Substrate mediated proton relay mechanism for the religation reaction in topoisomerase II", *J. Biomol. Struct. Dyn.*, DOI:10.1080/07391102.2013.834848, 2013.
3. M. Shoji, K. Hanaoka, D. Kondo, A. Sato, H. Umeda, K. Kamiya, K. Shiraishi, "A QM/MM study of nitric oxide reductase-catalyzed N₂O formation", *Mol. Phys.*, **112**(3-4), 393-397, 2013.
4. M. Shoji, K. Hanaoka, A. Sato, D. Kondo, M. Yang, K. Kamiya, K. Shiraishi, "Calculation of the Electron Transfer Coupling Matrix Element in Diabatic Reactions", *Int. J. Quantum Chem.*, **113**, 342-347, 2013.
5. K. Yamaguchi, M. Shoji, H. Isobe, Y. Kitagawa, S. Yamada, T. Kawakami, S. Yamanaka, M. Okumura, "Theory of chemical bonds in metalloenzymes XVI. Oxygen activation by high-valent transition metal ions in native and artificial systems", *Polyhedron*, **66**, 228-244, 2013.
6. M. Shoji, H. Isobe, S. Yamanaka, Y. Umena, K. Kawakami, N. Kamiya, J.-R. Shen and K. Yamaguchi, "Theoretical insight in to hydrogen-bonding networks and proton wire for the CaMn₄O₅ cluster of photosystem II. Elongation of Mn-Mn distances with hydrogen bonds", *Catal. Sci. Technol.*, **3**, 1831-1848, 2013.
7. K. Yamaguchi, Y. Kitagawa, H. Isobe, M. Shoji, S. Yamanaka, M. Okumura, "Theory of chemical bonds in metalloenzymes XVIII. Importance of mixed-valence configurations for Mn₅O₅, CaMn₄O₅ and Ca₂Mn₃O₅ clusters revealed by UB3LYP computations. A bio-inspired strategy for artificial photosynthesis", *Polyhedron*, **57**, 138-149, 2013.
8. K. Yamaguchi, S. Yamanaka, H. Isobe, T. Saito, K. Kanda, Y. Umena, K. Kawakami, J.-R. Shen, N. Kamiya, M. Okumura, H. Nakamura, M. Shoji, Y. Yoshioka, "The nature of chemical bonds of the CaMn₄O₅ cluster in oxygen evolving complex of photosystem II: Jahn-Teller distortion and its suppression by Ca doping in cubane structures", *Int. J. Quatum. Chem.*, **113**, 453-473, 2013.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. ○M. Shoji, “QM/MM study on the photosystem II oxygen evolving complex at the S₁ state”, The 51st Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Kyoto, 2013/10/28-30.
2. ○M. Shoji, H. Isobe, S. Yamanaka, N. Kamiya, J.-R. Shen, K. Yamaguchi, “Theoretical investigation on the electronic structures of photosystem II oxygen evolving complex at the S₂ state”, 1st Awaji International Workshop on “Electron Spin Science & Technology: Biological and Materials Science Oriented Applications” (1st AWEST2013), Awaji, 2013/6/16.
3. ○M. Shoji, K. Hanaoka, Y. Ujiie, W. Tanaka, M. Kayanuma, H. Umeda, Y. Machida, T. Murakawa, H. Hayashi, “A QM/MM Study on the Reaction Mechanism of Threonine Synthase”, BIT’s 4th Symposium on Enzymes and Biocatalysis 2013 (SEB-2013), Nanjing, China, 2013/4/26.

B) 一般講演

1. M. Taguchi, Y. Komatsu, A. Sato, ○M. Shoji, M. Kayanuma, K. Kamiya, K. Shiraishi, K. Yabana, and M. Umemura, “Theoretical investigation on the absorption spectrum of photosystem as a biomarker of extrasolar plants”, ISTCP-8, Budapest, Hungary, 2013/8/25, poster.
2. ○W. Tanaka, Y. Ujiie, K. Hanaoka, M. Shoji, M. Kayanuma, K. Kamiya, T. Ishida, F. Tomoike, S. Kuramitsu, K. Shiraishi, “Theoretical Investigation on the Substrate Specificity of Uridine-cytidine Kinase”, ISTCP-8, Budapest, Hungary, 2013/8/25, poster.
3. ○Y. Ujiie, W. Tanaka, K. Hanaoka, M. Shoji, M. Kayanuma, K. Kamiya, T. Ishida, K. Shiraishi, Y. Machida, T. Murakawa, H. Hayashi, “Molecular dynamics study on the substrate binding free energy of Threonine Synthase”, ISTCP-8, Budapest, Hungary, 2013/8/25, poster
4. ○M. Shoji, H. Isobe, S. Yamanaka, N. Kamiya, J.-R. Shen, K. Yamaguchi, “QM/MM study on the photosystem II oxygen evolving complex at the S₁ state”, The 16th International Congress on Photosynthesis Research, St. Louis(MO), 2013/8/11, poster.
5. ○Y. Komatsu, M. Umemura, M. Shoji, K. Yabana, K. Shiraishi, K. Kamiya, M. Kayanuma, A. Sato, “The energy transfer simulation for detecting photosynthetic biosignatures on extrasolar planets”, 1st AWEST2013, Awaji, 2013/6/16, poster.
6. ○M. Kayanuma, K. Hanaoka, M. Shoji, “Theoretical Study on Catalytic Mechanism of Nitrile Hydratase”, The 51st Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Kyoto, 2013/10/28-30, poster.
7. ○M. Shoji, K. Hanaoka, Y. Ujiie, W. Tanaka, M. Kayanuma, H. Umeda, Y. Machida, T. Murakawa, H. Hayashi, “Theoretical elucidation on the reaction control mechanism in Threonine Synthase”, The 51st Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Kyoto, 2013/10/28-30, poster.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. ○庄司光男、「QM/MM 法による光合成酸素発生中心の電子状態と構造」、異分野融合による新材料開発のための計算科学、RIKEN AICS、2014/3/8、口頭。
2. ○庄司光男、「QM/MM 法による光合成酸素発生中心 S_1 状態の電子状態解析」、第 2 回公開シンポジウム人工光合成特別セッション、立命館大学、2013/10/28、口頭。
3. ○庄司光男、花岡恭平、氏家謙、田中弥、梅田宏明、栢沼愛、神谷克政、白石賢二、町田康博、村川武志、林秀行、「トレオニン合成酵素における反応特異性決定過程の理論的説明」、蛋白質科学会年会、鳥取、2013/6/13、口頭 および ポスター発表。

B) その他の発表

1. ○庄司光男、磯辺寛、山中秀介、沈建仁、山口兆、「大規模 QM/MM 法による光合成酸素発生中心の電子状態」、日本化学会春年会 2014、名古屋大学、2014/3/27-30、口頭。
2. ○庄司光男、氏家謙、田中弥、栢沼愛、梅田宏明、町田康博、村川武志、林秀行、「トレオニン合成酵素の反応機構についての理論的研究:反応特異性決定過程の解明」、日本化学会春年会 2014、名古屋大学、2014/3/27-30、口頭。
3. ○栢沼愛、花岡恭平、庄司光男、「ニトリルヒドラターゼの触媒機構に関する理論的研究」、日本化学会春年会 2014、名古屋大学、2014/3/27-30、ポスター。
4. ○花岡恭平、庄司光男、栢沼愛、白石賢二、「ビタミン D 受容体におけるコンフォメーションアンサンブル:分子動力学法による解明」、第 36 回日本分子生物学会年会、神戸、2013/12/3-6、ポスター。
5. ○花岡恭平、庄司光男、栢沼愛、神谷克政、白石賢二、「ビタミン D 受容体のコンフォメーションアンサンブルと細胞応答」、第 86 回日本生化学会大会、横浜、2013/9/11-12、口頭+ポスター。
6. ○氏家謙、田中弥、花岡恭平、庄司光男、栢沼愛、神谷克政、白石賢二、町田康博、村川武志、林秀行、「分子動力学法によるトレオニン合成酵素の反応特異性についての理論的解明」、第 86 回日本生化学会大会、横浜、2013/9/11-12、ポスター。
7. ○庄司光男、氏家謙、田中弥、花岡恭平、梅田宏明、栢沼愛、神谷克政、白石賢二、町田康博、村川武志、林秀行、「トレオニン合成酵素における反応特異性についての理論的解明」、第 86 回日本生化学会大会、横浜、2013/9/11-12、口頭+ポスター。
8. ○田中弥、氏家謙、花岡恭平、庄司光男、栢沼愛、神谷克政、友池史明、倉光成紀、白石賢二、「ウリジンシチジンキナーゼ(ttCK)の基質認識機構についての分子動力学解析」、第 86 回日本生化学会大会、横浜、2013/9/11-12、ポスター。

9. ○氏家謙、田中弥、花岡恭平、庄司光男、栢沼愛、神谷克政、白石賢二、町田康博、村川武志、林秀行、「分子動力学法によるトレオニン合成酵素の基質結合自由エネルギー計算」、蛋白質科学会年会、鳥取、2013/6/13、ポスター。
10. ○田中弥、氏家謙、花岡恭平、友池史明、庄司光男、栢沼愛、神谷克政、倉光成紀、白石賢二、「ウリジンシチジンキナーゼの特異的基質認識機構の理論的解明」、蛋白質科学会年会、鳥取、2013/6/13、ポスター。
11. ○花岡恭平、庄司光男、栢沼愛、神谷克政、白石賢二、「QM/MM 法による HIT スーパーファミリー酵素の触媒機構の解明」、蛋白質科学会年会、鳥取、2013/6/13、ポスター。
12. ○小松勇、梅村雅之、庄司光男、矢花一浩、白石賢二、神谷克政、栢沼愛、田口真彦、佐藤皓允、「太陽系外惑星バイオマーカー検出に向けた光捕集機構のエネルギー転移計算」、Japan Geoscience Union Meeting 2013、幕張メッセ、2013/5/19-24、口頭。
13. 田口真彦、小松勇、佐藤皓允、○庄司光男、栢沼愛、神谷克政、白石賢二、矢花一浩、梅村雅之、「系外惑星のバイオマーカーのための光合成光吸収についての理論的研究」、Japan Geoscience Union Meeting 2013、幕張メッセ、2013/5/19-24、ポスター。
14. ○花岡恭平、「レプリカ交換分子動力学法によるビタミン D 受容体のコンフォメーションアンサンブルの生成」、つくばソフトマター研究会 2014、NIMS, 2014/3/3、口頭。
15. ○庄司光男、「酵素反応機構の理論的解明」、つくばソフトマター研究会 2014、NIMS, 2014/3/3、口頭。
16. ○M. Shoji, "Computational bioscience with supercomputers", Division of Life Sciences, External Review (Reviewer: Andrew Roger), 2014/2/19.
17. ○庄司光男、「生体システムにおける動作原理の理論的解明」、第 5 回「学際計算科学による新たな知の発展・統合・創出」シンポジウム、筑波大学、2013/11/6.
18. ○庄司光男、「トレオニン合成酵素における反応制御機構の理論的解明」、5th JHPCN、品川、2013/7/11.
19. ○M. Shoji, "Computational Bioscience Utilizing Supercomputers: Performance and Applications", CCS-EPCC Workshop, CCS-Tsukuba, 2013/7/4-5.

20. 田口真彦、小松勇、佐藤皓允、木立佳里、○庄司光男、栢沼愛、神谷克政、梅村雅之、矢花一浩、白石賢二、「L-型アミノ酸生成機構とバイオマーカーのための光合成光吸収機構についての理論的研究」、「宇宙生命計算科学連携拠点」ワークショップ、CCS-Tsukuba、2013/6/28-29.

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1) 宇宙・生命・物性分野間連携（宇宙生命）

宇宙空間での L-アミノ酸生成に関する量子化学計算と系外惑星における光合成光捕集の関係について研究を進展させた。

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 「蛋白質中における金属補欠分子の電子状態制御に関する理論的研究」、講演者：鷹野優、計算生命科学 WG 第 3 回講演会、世話人:庄司光男、計算科学研究センター会議室 A、2014/3/17.

9. 管理・運営

組織運営や支援業務の委員・役員の実績

・ 庄司光男

日本生化学会、協力委員

第 3 回つくば科学研究コンテスト、審査員、2014/3/16

10. 社会貢献・国際貢献

- 1) 「筑波大 スパコンを用いてトレオニン生合成の最終過程を明らかに」、QLife Pro、2014/3/26
2) 「必須アミノ酸"トレオニン"生合成の最終過程が明らかに—スーパーコンピュータで網羅的に反応経路を探索」、庄司光男、林秀行、プレスリリース、筑波大学、大阪医科大学、2014/3/14

11. その他

海外長期滞在、フィールドワークなど

なし

IV-2. 分子進化分野

1. メンバー

准教授	稲垣 祐司 (センター勤務、生命環境系)
研究員	中山 卓郎
教授	橋本 哲男 (共同研究員、生命環境系)
特任助教	谷藤 吾朗 (生命環境系)
学生	大学院生 9 名、学類生 1 名

2. 概要

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

【1】新奇真核微生物の発見 …………… 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きれない。そこで自然環境からこれまでに認識されていない新奇真核微生物を単離・培養株化する。

【2】各種トランスクリプトーム・ゲノム解析 …………… 真核生物の主要グループ間の系統関係を分子系統学的に解明するには、大規模遺伝子データが必須である。そこで系統進化的に興味深い生物種を選び、培養と遺伝子データの取得を進めている。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す。

【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。また、現状では超並列計算機上で効率よく作動する解析プログラムも十分に普及しているとは言えない。そこで、大規模配列データ解析においてより偏りの少ない推測を目指し、方法論的研究と系統解析プログラムの並列化を行っている。

3. 研究成果

【1】大規模配列データに基づく真核生物大系統の推測

H25 年度まで、*Paliptomonas bilix* を含むクリプチスタ生物群の大規模系統解析、ディスコバ生物群内での *Tsukubamonas globosa* の系統的位置の検討とミトコンドリアゲノムの解読を終了し、論文として発表した (Yabuki et al. 2014 *Sci Rep* ; Kamikawa et al. 2014 *Genome Biol Evol*)。H25 年度には、系統的位置が確定していない新奇生物種についてトランスクリプトーム解析を行った。

(1) *Microheliella maris* の系統的位置の推測

Microheliella maris は海産の“太陽虫”であり、形態的に有中心粒太陽虫との近縁性が示唆されている（図 1 左：Yabiki et al. 2012 *Protist* 163:356-388）。しかしこれまで決定された遺伝子配列に基づく系統解析では、その系統的位置は確定することができなかった。そこで、Illumina Hi-seq2000 によるトランスクリプトーム解析を行った。*M. maris* と併せて解析するため、未記載有中心粒太陽虫 SRT127 株、未記載従属栄養性鞭毛虫 SRT149 からもトランスクリプトームデータを取得した。H26 年度は、上記 3 種からのトランスクリプトームデータを用い、大規模系統解析の準備を行う。本研究は、独立行政法人海洋研究開発機構・矢吹彬憲博士との共同研究である。

(2) *Rigifila ramosa* の系統的位置の推測

Rigifila ramosa は従属栄養性アメーバ鞭毛虫であり、*Micronuclearia* と系統的に近縁である（図 1 中央）。しかし *Rigifila*+*Micronuclearia* クレードが、他の系統群とどのような関係にあるかは不明のままである（Yabuki et al. 2013 *Protist* 164:75-88）。我々は *R. ramosa* の系統的位置の確定をめざし、*Rigifila ramosa* を含む複数の真核微生物について、Dalhousie 大学（カナダ）・Andrew Roger および Alastair Simpson 博士、およびミシシッピ州立大学（アメリカ）・Matthew Brown 博士の研究グループとともに Illumina Hi-seq2000 によるトランスクリプトーム解析を行った。我々は、*Rigifila*+*Micronuclearia* クレードとの近縁性が示唆されているディフェレリア類 *Diphylleria* sp. SRT116 株からもトランスクリプトームデータを取得した。一方、共同研究者らはアンキロモナス類に含まれる 2 種（*Ancyromonas* および *Fabomonas*）、マンタモナス類 *Mantamonas* からトランスクリプトームデータを取得した。引き続き上記真核微生物 5 種からのトランスクリプトームデータを用い、大規模系統解析の準備を行った。H26 年度は系統解析を行い、論文作成に取り掛かる。

(3) *Azumiobodo hoyamushi* の系統的位置の推測

キネトプラスチダ類は、アフリカ眠り病を引き起こすトリパノソーマなどの各種寄生性の系統と、ボド類などの自由生活性系統から構成される。キネトプラスチダ類が進化する過程で、自由生活性から寄生性への移行が独立に複数回起こったと考えられているが、その詳細は解明されていない。*Azumiobodo hoyamushi* は、ホヤの「フニャフニャ病」を引き起こすキネトプラスチダ類の新奇系統である（図 1 右：Hirose et al. 2012 *Dis Aquat Organ* 97:227-235）。我々はキネトプラスチダ類における自由生活性から寄生性への移行を詳細に解明するため、ホヤ寄生虫である *A. hoyamushi* に加え、魚類に寄生するキネトプラスチダ類 *Trypanoplasma borreli* を含む大規模系統解析を計画した。H25 年度は、まず上記 2 種に対して Illumina Hi-seq2000 によるトランスクリプトーム解析を行った。H26 年度は、上記トランスクリプト

ームデータを用い、大規模系統解析の準備を行う。本研究は、独立行政法人水産総合研究センター増養殖研究所・釜石隆博士との共同研究である。

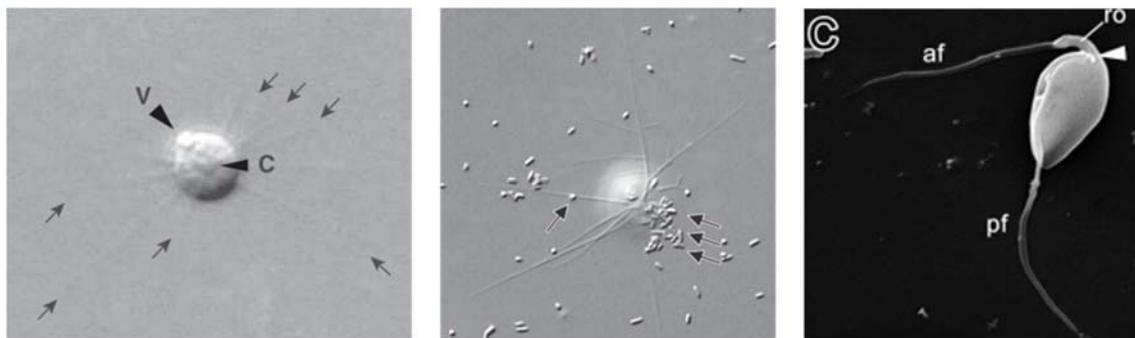


図 1. 左から *Microheliella maris* (写真は Yabuki et al. 2012 に使用されたもの)、*Rigifila ramosa* (写真は Yabuki et al. 2013 に使用されたもの)、*Azumiobodo hoyamushi* (写真は Hirose et al. 2012 に使用されたもの)

【2】各種トランスクリプトーム・ゲノム解析

真核生物進化における各種の未解決問題にチャレンジするため、系統的に多様な真核微生物からトランスクリプトーム・ゲノムデータを取得した。

(1) ロパロディア科珪藻細胞内のシアノバクテリア共生体（楕円体）のゲノム解読

ロパロディア科珪藻は、ミトコンドリアや色素体に加え、独自のシアノバクテリア共生体を保持する（楕円体, spheroid body）。楕円体は窒素固定能力を持ち、窒素化合物を宿主細胞に供給していると考えられてきた。また楕円体は珪藻細胞外では生育できず、珪藻細胞の分裂とともに娘細胞に受け継がれることは分かっていた。しかし、楕円体が珪藻細胞にどの程度統合されているのか詳細は不明であった。

中山研究員を中心に、我々はロパロディア科珪藻の一種 *Epithemia turgida* の楕円体から抽出した DNA を次世代シーケンサーにて解析を行い、楕円体ゲノムの全塩基配列を決定した（図 2 左）。楕円体ゲノムの総塩基数は 2.79 Mbp であり、共生生活を送らないシアノバクテリアに比べゲノムは縮小していることが明らかとなった。楕円体ゲノムには、珪藻細胞外で生育するために必要と考えられる代謝関連遺伝子の多くが消失しており、宿主細胞に代謝的に依存していること裏付けられました。興味深いことに、楕円体は光合成関連遺伝子を失い、二次的に光合成能を失っていることが判明した。一方、予想通り窒素固定に必要な遺伝子一式が楕円体ゲノム中に同定された。以上の結果から、楕円体は窒素固定能力をキープしつつ、シアノバクテリアのアイデンティティともいべき光合成能力を捨てるという前例のない進化を遂げていることがわかった。Dalhousie 大学(カナダ)・John M. Archibald 博士との共同で、*E. turgida* 楕円体ゲノムに関する論文を執筆し、アメリカ科学アカデミー紀要 *Proc Nat Acad Sci USA* に掲載が決定した。また *E.*

*turgida*に加え、H25年度にはロパロディア科珪藻の別種 *Rhopalodia gibberula* の楕円体ゲノム、宿主細胞のトランスクリプトーム解析も行った。H26年度は *R. gibberula* (図2右) 材料に、楕円体ゲノム解析と宿主核ゲノム解析を通して、楕円体がどの程度珪藻細胞に統合されているのか、宿主ゲノムは楕円体獲得によりどのように変化したのかの2点について解明を試みる。

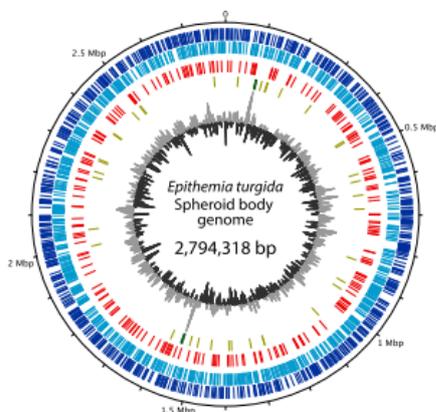


図2. 左; *Epithemia turgida* 楕円体ゲノム. 右; *Rhopalodia gibberula*. 矢頭は楕円体を示す. (写真提供; 中山卓郎)

ロパロディア科珪藻と楕円体の研究は、稲垣が研究代表を務める、新学術領域研究(研究領域提案型)「ミトコンドリア・色素体以外の共生オルガネラ成立過程の解明(課題番号 23117006)」の中心的課題である。

ロパロディア科珪藻と楕円体の研究は、稲垣が研究代表を務める、新学術領域研究(研究領域提案型)「ミトコンドリア・色素体以外の共生オルガネラ成立過程の解明(課題番号 23117006)」の中心的課題である。

(2) 光合成性真核微生物の色素体ゲノム解析

我々は渦鞭毛藻における葉緑体置換、二次的な光合成能の欠失に伴う色素体ゲノム進化に興味を持ち、渦鞭毛藻 *Lepidodinium chlorophorum* と未記載珪藻 IriIs04 株 (NIES-3581) の色素体ゲノムを解析した。両研究とも、京都大学大学院・人間環境学研究科・地球環境学堂・神川龍馬博士との共同研究である。

渦鞭毛藻 *L. chlorophorum* は、元々持っていた色素体を細胞内共生した緑藻の色素体と置換したと考え

られる(図3左)。我々はこの特異な渦鞭毛藻系統で、色素体はどのような緑藻が色素体化したのか、色素体置換に伴い *L. chlorophorum* の宿主ゲノムにどんな変化が起こったのかを研究してきた。H25年度には *L. chlorophorum* のゲノムシーケンスデータを取得し、色素体ゲノムを完全に解読した。*L. chlorophorum* 色素体ゲノムは約 66 Kbp であり、これまで解読された緑藻色素体ゲノムに比べ縮小していた。このゲノムにコードされるタンパク質配列を用いた系統解析では、*L. chlorophorum* 色素体の起源となった緑藻はペディノ藻であることが解明された。H26年度には、この色素体ゲノムデータと系統解析結果を論文にまとめ、投稿する。

IriIs04 株 (NIES-3581) は、二次的に光合成能力を失った未記載珪藻である(図3右)。こ

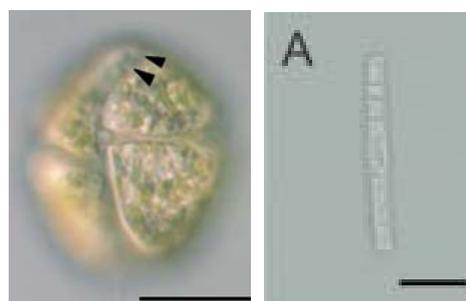


図3. 左; *Lepidodinium chlorophorum* (写真は Takishita et al. 2008 に使用されたもの). スケールバーは 20 μm . 右; 未記載珪藻 IriIs04 株. スケールバーは 10 μm . (写真提供; 神川龍馬)

の珪藻細胞内には色素体構造が残っており、色素体ゲノムにコードされるリボソーム RNA 遺伝子も決定された (Kamikawa et al. *Phycol Res* に掲載予定; ブリティッシュコロンビア大 (カナダ)・Brian Leander 博士および雪吹直史博士との共同研究)。H25 年度には IriIs04 株のゲノムシーケンスデータを取得した。H26 年度には、色素体ゲノムの完全解読と論文の作成までを目指す。

(3) 緑色葉緑体をもつ新奇渦鞭毛藻 TRD および MRD 株のゲノム・トランスクリプトーム解析

これまで渦鞭毛藻の進化中で緑藻色素体の獲得は、*Lepidodinium* 属の祖先で一回しか起きていないと考えられてきた。しかし我々は東京大学アジア生物資源環境研究センター・岩滝光儀博士の研究グループと共同で、*L. chlorophorum* とは系統的に離れた緑色の色素体をもつ未記載渦鞭毛藻 TRD 株と MRD 株の研究を進めている (図 3)。H25 年度までに TRD

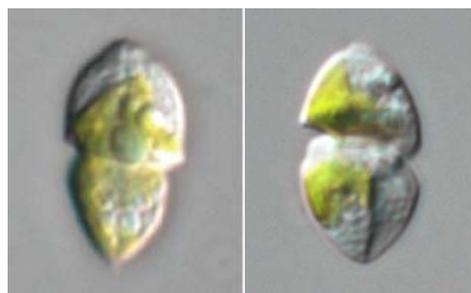


図 4. 左; 緑色渦鞭毛藻 MRD 株. 右; 緑色渦鞭毛藻 TRD 株. (写真提供; 皿井千裕)

株と MRD 株の色素体は、*L. chlorophorum* と同じくペディノ藻を起源とするが、宿主 (渦鞭毛藻) の系統は互いに近縁とはならないことを明らかにしてきた。これまでの結果は、互いに独立な渦鞭毛藻 3 系統が、細胞内共生したペディノ藻から緑藻色素体を独立に獲得したことを示唆する。従って、独立した緑色渦鞭毛藻 3 系統の色素体と宿主核ゲノムを比較解析することにより、色素体置換に伴う共生体と宿主のゲノムの変化の本質について迫ることが可能となる。

H25 年度では、TRD 株と MRD 株についてトランスクリプトーム解析とゲノムシーケンス解析を行った。トランスクリプトームデータからは、緑藻共生体から渦鞭毛藻ゲノムへ転移した遺伝子の探索を行った。また、2 株のゲノムシーケンスデータ中に色素体ゲノム断片を探索している。H26 年度には、緑藻-渦鞭毛藻間での遺伝子転移の全貌の把握、色素体ゲノムの完全解読などを目指す。

(4) 各種真核微生物のミトコンドリアゲノム解析

ミトコンドリアは細胞内共生した α プロテオバクテリアが退化したオルガネラである。ミトコンドリアの成立は原始真核生物細胞に深く関連し、真核生物の細胞体制とゲノム構造に大きな影響を与えたと考えられている。また真核生物の進化過程で、ミトコンドリアゲノムにコードされる遺伝子の種類や数、ゲノム構造などが大きく多様化してきた。我々は各種の

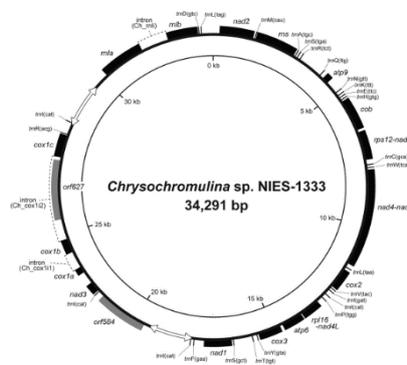


図 5. *Chrysochromulina* sp. NIES-133 のミトコンドリアゲノム

真核微生物のミトコンドリアゲノムを解読し、その多様性と進化を解明しようと試みている。H25 年度には、有殻アメーバ *Paulinella chlamatophora*、ハプト藻 *Chrysochromulina* sp. NIES-1333 のミトコンドリアゲノムを解読した。またカタブレファリス類 *Roombia* sp. NY0200 株、クリプチスタ生物群の新規メンバーである *Paliptomonas bilix* のミトコンドリアゲノムの解読にも取り掛かった。*Chrysochromulina* sp. のミトコンドリアゲノムについては、Nishimura et al. (2014 *Mobile Genet Elements* 4:e29384) で発表した。そのほかのデータについては H26 年度中に論文として発表することを目指す。上記ミトコンドリアゲノム解析は、京都大学・神川龍馬博士との共同研究である。

(5) 嫌気性従属栄養性ストラメノパイル生物 MAST-13 のトランスクリプトーム解析

ストラメノパイル生物群には PCR 法により海水サンプルから増幅された 18S リボソーム RNA 配列だけから存在が推測されている MAST 系統群が多数知られている。我々は、ブリテイッシュコロンビア大 (カナダ)・雪吹直史博士と共同で MAST-13 グループに含まれる嫌気性従属栄養性真核微生物の単離培養に成功した。H25 年度にこの培養株のトランスクリプトームデータを取得し、独立行政法人海洋研究開発機構・瀧下清貴博士の研究グループと共同でこの生物がもつ退化型ミトコンドリアの代謝機能を推測している。H26 年度には論文を執筆、投稿することを目指す。

【3】分子系統解析の方法論研究

一般に分子系統解析で用いられる“homogeneous”塩基置換モデルでは、配列間で塩基組成は大きく異なることを前提としている。しかし現実には、生物種間あるいは同一ゲノムの異なる領域間でも塩基組成が異なることがある。配列間の塩基組成が大きく異なる場合、homogeneous 置換モデルを前提とした解析では著しいモデル不整合が生じ、その結果誤った系統樹 (アーティファクト) に導かれることが分かっている。この塩基組成の偏りに起因するアーティファクトを防ぐためには、配列間の塩基組成の偏りを取り入れたより複雑な“non-homogeneous”置換モデルによる系統解析プログラムを適応することで解消可能である (Ishikawa et al. 2012 *Evol Bioinform* 8:357-371)。一方、この解析法では推定すべきパラメータ数と計算時間が飛躍的に増大するという問題が生じるため、系統解析プログラムの並列化が必須である。

H25 年度には、塩基配列データにおける系統間での G+C 含量の不均一性を許容する non-homogeneous 置換モデルを搭載した系統解析プログラム“NHML”を対象とし、系統樹の尤度計算アルゴリズムに MPI および OpenMP によるハイブリッド並列計算技術を導入した。シミュレーション配列を用いた性能評価では、1 本の系統樹の尤度計算において 256 並列まで良好な並列化効率が認められた。さらに MPI コミュニケータを分割することで、複数本の系統樹に対する尤度計算を並列的に行わせた。結果、1024 CPU コア以上を用いた場合であっても優れた並列性を実

現した。これらの研究は、生物科学専攻博士課程（後期）およびシステム情報工学研究科博士課程（前期）に所属する石川奏太の成果である。H26 年度は、このハイブリッド並列化した NHML を用いた実データ解析を行い、non-homogeneous 置換モデルの有効性を検証する計画である。

4. 教育

【学生の指導状況】

なし

【集中講義】

1. 橋本哲男

「核酸・タンパク質配列データにもとづく生物進化の推測」, 計算科学リテラシー (日・英)

2. 稲垣祐司

基礎計算生物学 (2 コマ担当 ; 2014/11/14, 21)

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

1) 【受賞】

① Paul Claude Silva Travel Award, 皿井千裕 (共同研究者, 山形大・院), 10th International Congress of Phycology.

2) 【外部資金】 (名称、氏名、代表・分担の別、採択年度、金額、課題名)

<代表者>

- ・ 新学術領域研究 (研究領域提案型) 稲垣祐司 (代表)

「ミトコンドリア・色素体以外の共生オルガネラ成立過程の解明 (課題番号 23117006)」, 研究期間 : 2009-2013 年, 交付決定金額 : 直接経費 17,300 千円, 間接経費 5,190 千円.

<代表者>

- ・ 基盤研究 (A) 稲垣祐司 (分担) (代表:橋本哲男)

「新型分割イントロン切り出し因子同定に基づく真核生物 mRNA 成熟機構進化の解明 (課題番号 23247038)」, 研究期間 : 2011-2013 年, 交付決定額 : 直接 1000 千円.

- ・ 基盤研究 (B) 稲垣祐司 (分担) (代表:橋本哲男)

海外学術「ミトコンドリアをもたない真核微生物群フォルニカータの多様性の解明 (課題番号 23247038)」, 研究期間 : 2011-2013 年, 交付決定額 : 直接 1000 千円.

3) 知的財産権（種別、氏名、課題名、年月日）

なし

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

- 1) R. Kamikawa, M. Kolisko, Y. Nishimura, A. Yabuki, M.W. Brown, S.A. Ishikawa, K. Ishida, A.J. Roger, **T. Hashimoto**, **Y. Inagaki**. “Gene content evolution in discobid mitochondria deduced from the phylogenetic position and complete mitochondrial genome of *Tsukubamonas globosa*”. 2014 *Genome Biology and Evolution* 6(2):306-315.
- 2) 石川奏太, 中尾昌広, **稲垣祐司**, **橋本哲男**, 佐藤三久、「Non-homogeneous 置換モデルに基づく進化系統樹推測の MPI/OpenMP HYBRID 並列化：大規模計算システム向けプログラムの開発と性能評価」、ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム (HPCS2014) 論文集、情報処理学会 10-20.
- 3) 石川奏太, 中尾昌広, **稲垣祐司**, **橋本哲男**, 佐藤三久、「Non-homogeneous 置換モデルを搭載した系統解析プログラムの MPI/OpenMP ハイブリッド並列化：大規模遺伝子データセットへの適応に向けて」、**Proceedings of High Performance Computing Symposium 2014**.
- 4) R. Kamikawa, M.W. Brown, Y. Nishimura, Y. Sako, A.A. Heiss, N. Yubuki, R. Gawryluk, A.G.B. Simpson, A.J. Roger, **T. Hashimoto**, **Y. Inagaki**, “Parallel re-modeling of EF-1 α function in eukaryotic evolution: Divergent, low-expressed EF-1 α genes co-occur with EFL genes in diverse distantly related eukaryotes”, 2013 *BMC Evolutionary Biology* 13:131.

B) 査読無し論文

なし

(2) 国際会議発表（発表者には*を付けた）

A) 招待講演

- 1) ***T. Nakayama**, “Nitrogen-fixing organelle? Genome sequence of a cyanobacterial endosymbiont in a rhopodiacean diatom”, 2014 年 3 月 24 日 *Microbial Evolution 2014* Tsukuba. University of Tsukuba, Tsukuba, Japan.
- 2) ***Y. Inagaki**, “Progress in placing newly discovered protist lineages in the deep tree of eukaryotes: *Tsukubamonas globosa* and *Palpitomonas bilix*”, 2013 年 7 月 28 日－8 月 3 日 *International Congress of Protistology (ICOP) XIV*, Westin Bayshore Hotel, Vancouver, Canada.

B) 一般講演

- 1) *C. Sarai, K. Takahasi, R. Kamikawa, Y. Inagaki, M. Iwataki, “Morphologies and phylogenetic characteristics of two novel dinoflagellates with green-colored chloroplasts”, 2013 年 8 月 4–10 日 *10th International Congress of Phycology (IPC 10)*, Oland, Florida, USA.
- 2) *Y. Nishimura, R. Kamikawa, T. Hirasawa, N. Yubuki, T. Hashimoto, Y. Inagaki, “An intron-rich mitochondrial *cox1* gene of the katablepharid *Roombia* sp. NY0200”, 2013 年 7 月 28 日–8 月 3 日 *International Congress of Protistology (ICOP) XIV*, Westin Bayshore Hotel, Vancouver, Canada.
- 3) *Y. Inagaki, R. Kamikawa, M. Brown, Y. Nishimura, Y. Sako, A.A. Heiss, N. Yubuki, R. Gawryluk, A.G.B. Simpson, A.J. Roger, T. Hashimoto, “The genes encoding EF-1 α and EFL genes co-exist in diverse distantly related eukaryotes”, 2013 年 7 月 28 日–8 月 3 日 *International Congress of Protistology (ICOP) XIV*, Westin Bayshore Hotel, Vancouver, Canada.
- 4) *Y. Inagaki, R. Kamikawa, T. Matsumoto, “Pedinophyte-origin of the non-canonical plastids in the dinoflagellate genus *Lepidodinium*”, 2013 年 7 月 28 日–8 月 3 日 *International Congress of Protistology (ICOP) XIV*, Westin Bayshore Hotel, Vancouver, Canada.
- 5) *N. Yubuki, T. Panek, A. Yabuki, I. Cepicka, K. Takishita, Y. Inagaki, B.S. Leander, “Morphological identities of two MAST-13 (marine stramenopile) environmental sequence clades”, 2013 年 7 月 28 日–8 月 3 日 *International Congress of Protistology (ICOP) XIV*, Westin Bayshore Hotel, Vancouver, Canada.
- 6) *M. Kolisko, R. Kamikawa, J.O. Andersson, T. Hashimoto, Yuji Inagaki, A.G.B. Simpson, A.J. Roger, “The origin of the *Giardia* mitosome demystified: comparative analyses of predicted organellar proteomes across free-living and parasitic metamonads”, 2013 年 7 月 28 日–8 月 3 日 *International Congress of Protistology (ICOP) XIV*, Westin Bayshore Hotel, Vancouver, Canada.
- 7) *S. Ishikawa, Y. Inagaki, T. Hashimoto, M. Sato, “Efficient parallelization of the maximum-likelihood phylogenetic inference with the non-homogeneous substitution model”, 2013 年 7 月 21–25 日 *Meeting and Conference Center*, Snowbird, Utah, USA.
- 8) *Y. Inagaki, “The enigmatic discobid *Tsukubamonas globosa*: phylogenomic analysis and mitochondrial genome sequence”, 2013 年 5 月 14–17 日 *Integrated Microbial Biodiversity Program meeting*, Canadian Institute for Advanced Research. Four Seasons Hotel, Whistler, Canada.
- 9) *Y. Inagaki, “The genes encoding elongation factor 1 α and elongation factor-like protein co-exist in distantly related eukaryotic genomes”, 2013 年 5 月 14–17 日 *Integrated Microbial Biodiversity Program meeting*, Canadian Institute for Advanced Research. Four Seasons Hotel, Whistler, Canada.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

- 1) *中山卓郎、神川龍馬、谷藤吾朗、John M. Archibald、稲垣祐司、「窒素固定オルガネラ？—珪藻細胞内共生シアノバクテリアに見るゲノム縮小進化」、2013 年 8 月 25–30 日 第 15 回日本進化学会 筑波大学、つくば、茨城。
- 2) *皿井千裕、神川龍馬、高橋和也、稲垣祐司、岩滝光儀、「紅（アカ）からミドリへのお色直し—渦鞭毛藻類における緑藻類由来葉緑体の獲得—」、2013 年 8 月 25–30 日 第 15 回日本進化学会 筑波大学（茨城県つくば市）。
- 3) *松尾恵梨子、神川龍馬、矢崎裕規、田原 美智留、佐倉孝哉、永宗喜三郎、稲垣祐司、「*Karenia* 属渦鞭毛藻における進化的起源の異なる葉緑体型 GAPDH の進化と細胞内局在」、2013 年 8 月 25–30 日 第 15 回日本進化学会 筑波大学（茨城県つくば市）。
- 4) *稲垣祐司、「新奇生物種の単離と大規模分子系統解析が解明（？）する真核生物の多様性と系統関係」、2013 年 7 月 27 日 お茶の水大学大学院生生命情報学副専攻公開セミナー・第 39 回バイオインフォマティクスへの招待 お茶の水大学（東京都文京区）。

B) その他の発表

- 1) *久米慶太郎、高林舜、森田幸之介、神川龍馬、稲垣祐司、橋本哲男、「フォルニカータ生物群におけるミトコンドリア関連オルガネラ標的シグナルの分子進化」、2014 年 3 月 27–28 日 第 83 回日本寄生虫学会 愛媛大学（愛媛県松山市）。
- 2) *松尾恵梨子、中山卓郎、神川龍馬、谷藤吾朗、皿井千裕、高橋和也、岩滝光儀、稲垣祐司、「緑藻由来葉緑体をもつ渦鞭毛藻における葉緑体型 *gapdh* 遺伝子の進化」、2014 年 3 月 15–16 日 第 38 回日本藻類学会 東邦大学習志野キャンパス（千葉県船橋市）。
- 3) *中山卓郎、神川龍馬、谷藤吾朗、J.M. Archibald、稲垣祐司、「*Rhopalodia* 科珪藻における細胞内共生シアノバクテリアのゲノム縮小進化」、2014 年 3 月 15–16 日 第 38 回日本藻類学会 東邦大学習志野キャンパス（千葉県船橋市）。
- 4) *石川奏太、中尾昌広、稲垣祐司、橋本哲男、佐藤三久、「non-homogeneous 置換モデルを搭載した系統解析プログラムの MPI/OpenMP ハイブリッド並列化：大規模遺伝子配列データセットへの適用に向けて」、2014 年 1 月 7–8 日 HPCS2014 一橋大学（東京都国立市）。
- 5) *西村祐貴、野村真未、石田健一郎、小保方潤一、橋本哲男、稲垣祐司、「独自の光合成シアノバクテリア共生体を持つ有殻アメーバ *Paulinella chromatophora* におけるテトラピロール合成系の進化」、2013 年 9 月 13–15 日 北海道大学（北海道札幌市）。
- 6) *西村祐貴、野村真未、中山卓郎、石田健一郎、小保方潤一、橋本哲男、稲垣祐司、「独自の光合成シアノバクテリア共生体を持つ有殻アメーバ *Paulinella chromatophora* におけるテトラピロール合成系の進化」、2013 年 8 月 25–30 日 第 15 回日本進化学会 筑波大学（茨城県つくば市）。

- 7) *石川奏太、神川龍馬、稲垣祐司、「真正細菌由来翻訳終結因子パラログにおける相同組換えの検出」、2013 年 8 月 25-30 日 第 15 回日本進化学会 筑波大学（茨城県つくば市）。
- 8) *久米慶太郎、高林舜、森田幸之介、神川龍馬、稲垣祐司、橋本哲男、「Fornicata 生物のミトコンドリア関連オルガネラタンパク質における matrix targeting signal」、2013 年 8 月 25-30 日 第 15 回日本進化学会 筑波大学（茨城県つくば市）。

(4) 著書、解説記事等

なし

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

なし

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

- 1) 国際ワークショップ「*Microbial Evolution 2014 Tsukuba*」開催場所：筑波大学（茨城県つくば市），2014 年 3 月 24 日，オーガナイザー：橋本哲男、稲垣祐司、中山卓郎、谷藤吾朗（招待講演者 6 名、内海外からの招待者 3 名）
- 2) ワークショップ「ウズベン葉緑体の進化」（於・第 15 回日本進化学会）開催場所：筑波大学（茨城県つくば市），日時：2013 年 8 月 25-30 日，オーガナイザー：稲垣祐司
- 3) シンポジウム「進化原動力としての共生」（於・第 15 回日本進化学会）開催場所：筑波大学（茨城県つくば市），日時：2013 年 8 月 25-30 日，オーガナイザー：稲垣祐司、他 3 名

9. 管理・運営

10. 社会貢献・国際貢献

11. その他

V. 地球環境研究部門

V-1. 地球環境分野

1. メンバー

教授	田中博（センター勤務）、植田宏昭（学内共同研究員） 木村富士男（学外共同研究員 JAMSTEC）、鬼頭昭雄（学内共同研究員）
准教授	日下博幸（センター勤務）
助教	若月泰孝（学内共同研究員）
研究員	秋本祐子、池田亮作、岡田牧（センター勤務）
大学院生	24 名、学類生 6 名（田中・日下）

2. 概要

地球環境学部門における主な活動としては、文科省グリーン北極事業の北極温暖化研究プロジェクトに参加し、北極振動と北極温暖化増幅の関係を分析した。2000 年以降に北極温暖化増幅が強化され、同時に負の北極振動が顕在化した。その結果、北極圏が温暖化する一方で、シベリアを中心とする中緯度が寒冷化している。IPCC で報告されている気候モデルは、北極温暖化と平行して地球温暖化が進行すると予測しているが、実際には 1998 年以降は予測に反して既に 15 年も温暖化が停滞するハイエイタスが生じている。気候モデルは温暖化で正の北極振動が現れると予測しているが、実際には負の北極振動が顕在化している。この矛盾がハイエイタスの原因のひとつと考えられることから、大気場の主要な自然変動としての北極振動の観点からハイエイタスの原因を究明している。また、線形傾圧モデル(LBM)を用いて北極振動の特異固有解理論を発展させ、北極振動指数(AOI)の正負に伴う傾圧不安定解の構造変化を解析した。

地球環境部門におけるもう一つの主な活動として、都市気象研究と将来の地域気候予測研究がある。都市気象研究については、文部科学省の気候変動適応推進プログラム(RECCA)に参加し、次世代の都市気象モデルを開発している。また、本センターと多治見市の連携協定に基づき、多治見の熱環境の緩和策に資する観測研究を行っている。地域気候の将来予測研究については、環境省の環境研究総合推進費(S-8)の課題代表を務め、地域気候の将来予測を GUI ベースで実行できるアプリケーションの開発を行っている。以下に、それぞれの研究成果の概要を記す。文科省の RECCA プロジェクトでは、前年度開発した建物間放射モデルと樹木モデルを結合させ、建物と樹木が混在する都市街区内における放射・熱環境をシミュレートできるモデルを開発した。夜間の都市熱環境に対する植生の効果を評価するための人工気象室(ポリエチレンチャンバー)を開発した。多治見市との共同プロジェクトでは、多治見駅付近の熱環境を詳細に調査するとともに、人が感じる温度(体感温度)や人体生理測定(皮膚温など)を行い、ドライミスト、ウエットミスト、街路樹、高反射性舗装道路の効果を評価した。環境省の S8 プロジェクトでは、これまで開発してきた「温暖化ダウンスケーラ」をインドネシア

気候・気象・地球物理庁（BMKG）に導入した。このソフトウェアの導入により、今後、途上国が独力で地域の温暖化予測ができるようになると期待される。

3. 研究成果

【1】 北極振動と北極温暖化増幅との関係 （田中）

文科省グリーン北極事業の北極温暖化研究プロジェクトに参加し、北極振動と北極温暖化の関係を分析した。2000 年以降に北極温暖化増幅が強化され、同時に負の北極振動が顕在化した。その結果、北極圏が温暖化する一方で、シベリアを中心とする中緯度が寒冷化している。IPCC 報告にある気候モデルは、北極温暖化と平行して地球温暖化が進行すると予測しているが、実際には 1998 年以降は予測に反して既に 15 年も温暖化が停滞している。これはハイエイタスと呼ばれ、温暖化予測の重要な矛盾点として最近注目されている。気候モデルは温暖化で正の北極振動が現れると予測しているが、実際には負の北極振動が顕在化し、これが原因となって中緯度の広域で寒冷化が起きている。この矛盾がハイエイタスの原因のひとつと考えられることから、大気場の主要なカオス的自然変動としての北極振動の観点からハイエイタスの原因を究明している。

図 1 は、IPCC 報告による地球温暖化予測に含まれる数十年の準周期変動の影響を考察したものである（赤祖父 2007）。1940 年台の高温、1970 年台の寒冷化、2000 年までの急上昇が、数十年スケールの自然変動によるものであるとすると、1970 年から 2000 年までの急上昇には人為的な温暖化と同程度の自然変動が含まれる。もし、気候モデルが 1970 年から 2000 年までの急上昇を、人為的温室効果ガスの増加のみでチューニングしたとすると、将来の温暖化予測は過大評価となり、実際には温暖化は 100 年で 1°C 程度となる可能性がある、という一つの仮説である。1998 年以降、既に 15 年も温暖化が停滞していることから、最近のハイエイタス問題は、この仮説を支持する結果となっている。観測事実としてのハイエイタスの原因には真実が存在するはずなので、その原因解明が急務である。本研究では、北極振動の負傾向と中緯度の寒冷化傾向が、ハイエイタスにどのように関係しているのかを研究した（田中 2013）。

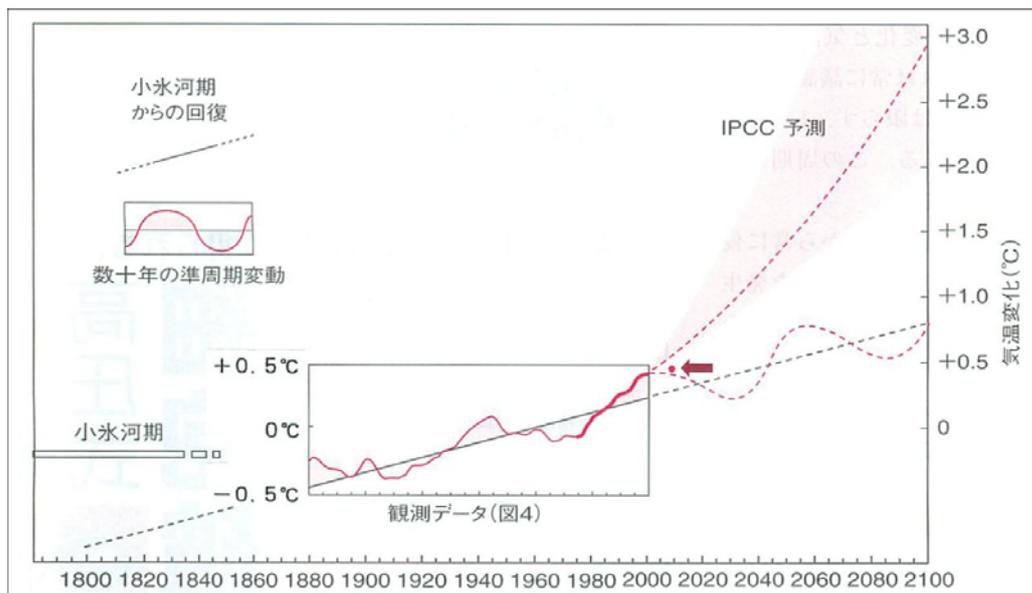


図1 1800年から2100年までの気温変化における数十年の準周期変動の影響評価（赤祖父 2007）

【2】 線形傾圧モデル(LBM)を用いた北極振動の特異固有解理論（田中）

地球大気は非線形流体力学におけるハミルトニアンシステムであり、全エネルギーを保存すると同時に剛体力学にはない渦位という量を保存する。静止大気を基本場とする全球大気のノーマルモードは、大気潮汐理論により Hough 関数としてその解析解が知られている。Hough 関数は、それ自身が線形ハミルトニアンシステムの中立解である。

基本場が鉛直子午面で変化する帯状平均気候値の場合、基本場からエネルギーを受け取り増幅する傾圧不安定が発生し、それが中緯度の温帯低気圧を発達させる。本研究では、静止大気における3D ノーマルモードを正規直交基底とした3D スペクトルモデルを構築し、東西方向にも変化する3次元的な気候値を基本場とした線形方程式の固有値問題を解くことで、傾圧傾圧不安定理論の一般化を行った。

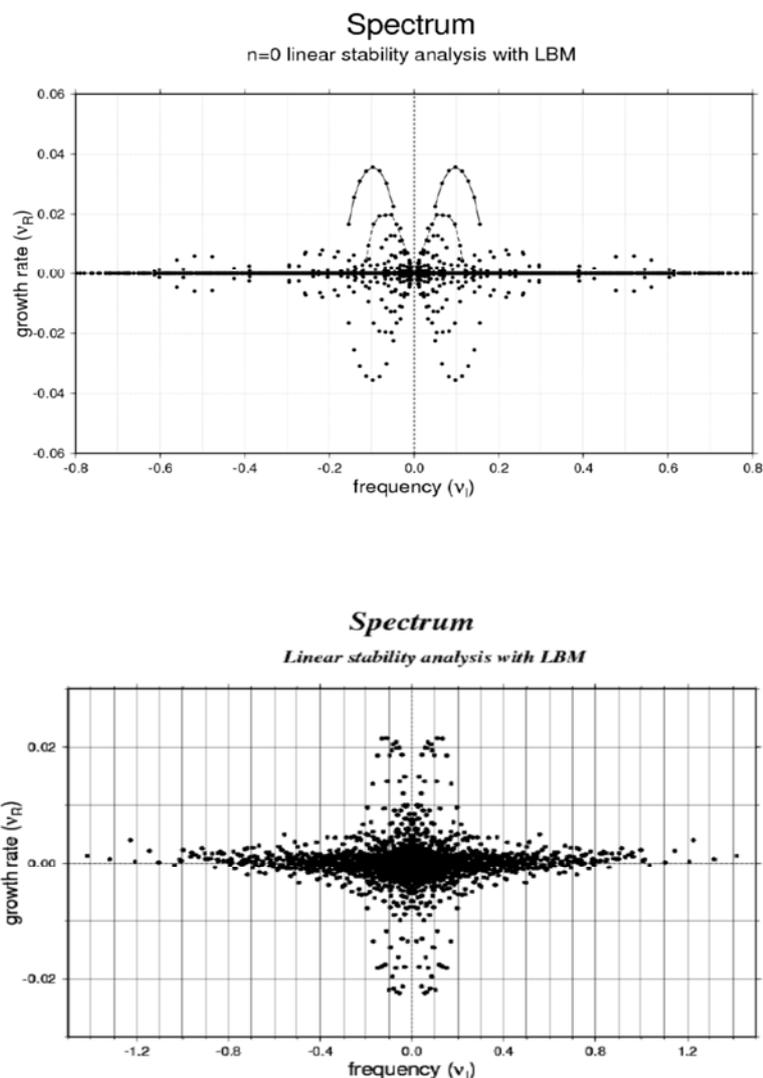


図2 帯状平均基本場(上)と3次元一般基本場(下)における不安定ノーマルモードのスペクトル

はじめに、帯状平均基本場における傾圧不安定波は、東西波数 6 付近に最大増幅率を持つ Charney モードが解となる。東西波数で分割された解の構造が東進し、ライフサイクルが完結する。この不安定解のスペクトルを固有値の実部(増幅率)と虚部(振動数)で表すと、図2a の分布となる。座標軸により振動数が線対称となるほかに増幅率も線対称となる。最大不安定 monopole-Charney モードの他に、dipole-Charney モード、tripole-Charney モードなど高次の不安定解が得られる。それに対し、基本場が東西方向にも変化する一般の場合の固有値のスペクトルは、振動数の線対称は保存するものの、増幅率の線対称性が破れる(図2b)。最大増幅率の傾圧不安定波は、Charney モードの変形であり、その構造を表現するためにはすべての東西波数が必要になる。地球を東西に一回りする間に、地域性をもった構造変化を示しながらライフサイクルが完結する。また、振動数が0の定在解も現れて、その中で最も不安定な定在解に北極振動の固有解が含まれていることを

明らかにした(Tanaka and Seki 2013)。 図2は中立解として振動数軸上に乗る Hough 関数を、2次元基本場と3次元基本場に拡張した場合の不安定ノーマルモードの一般解を表す。これは、3次元ノーマルモード(Hough 関数)を任意の3次元基本場に拡張したノーマルモードの一般解である。

【3】 AOI 方程式を用いた北極振動の解析的研究 (田中)

3次元ノーマルモード関数を基底とするスペクトル型プリミティブ方程式を応用して北極振動指数(Arctic Oscillation Index: AOI)の変動を力学的に表現したAOI方程式を導出し、近年の北極振動(AO)の成因解明に向けた解析を行った。

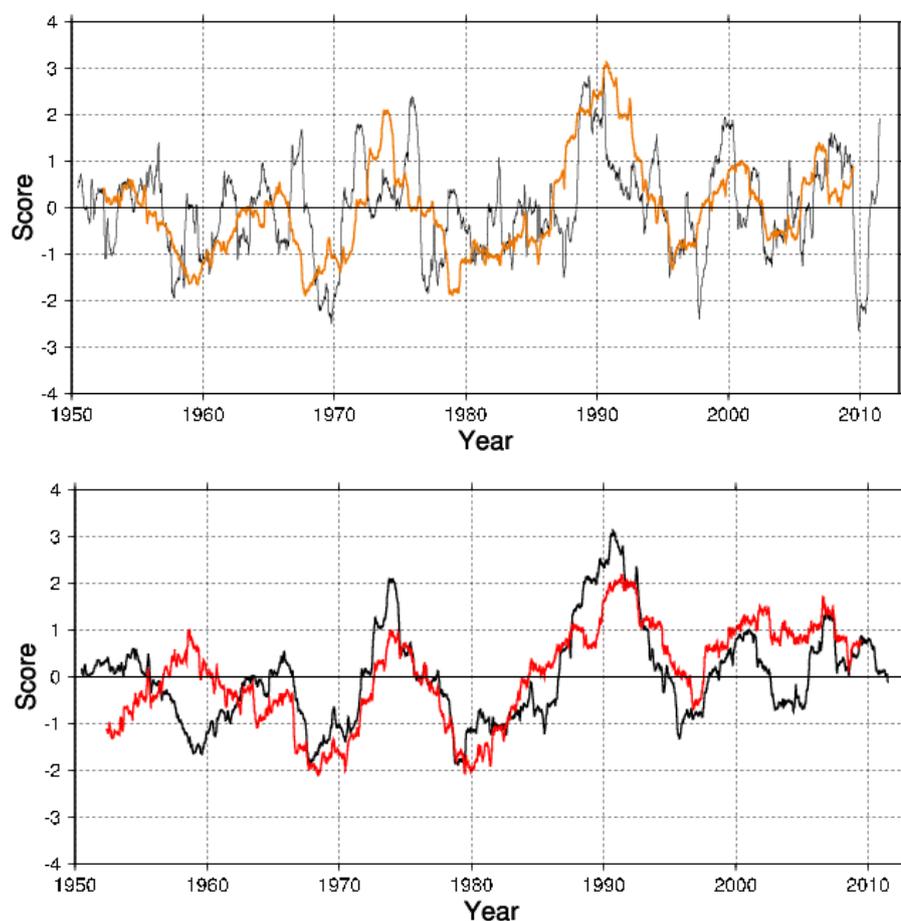


図3 AOI 時系列(上)とAOI 方程式の線形項の時系列(5年移動平均)

全球大気を3次元ノーマルモードに展開し、大気の順圧成分に対しその展開係数の時系列のEOF-1を求めると、北極振動がEOF-1として得られる。北極振動は最も大振幅な長周期変動だからである。そのEOF-1の構造と元の展開係数の時系列の内積がEOF解析の時系列となり、これがAOIである。したがって、AOIの時系列を時間微分して、展開係数の時間変化項にプリミティブ方程式各項を代入することで、AOIの時間変化を力学的に分析するAOI方程式が導かれる。図3aはAOIの365日移動平均の時系列とその5年移動平均である。1989年のプラス 3σ のイベントや2010年のマイナス 3σ のイベントが見られる。図3bはAOIの5年移動平均と、AOI方程式の線形項の5年移動平均のグラフである。

本研究の結果、10年スケールのAOIはAOI方程式の線形項と同位相の関係にあり、線形項はAOを増幅させる正のフィードバックの関係にあることが解った。この事は、AOが線形項の固有解であることと整合的である。一方、AOI方程式の非線形項及び外力項はAOIと負のフィードバックの関係にあり、正または負に大きく振れたAOIを減衰させる働きをしていることが解った。このことは、10年スケールのAOIの変動が、主として大気の内力学により生じていることを意味している。以上の結果は北極振動が特異固有解の共鳴により励起される事と整合的である。

【4】 都市気候の将来予測

1. 環境省のS8プロジェクトで開発した「温暖化ダウンスケーラ」をインドネシア気候・気象・地球物理庁(BMKG)に導入した。このソフトウェアの導入により、今後、途上国が独力で地域の温暖化予測ができるようになることを期待される。

2. 前年度開発した建物間放射モデルと樹木モデルを結合させ、建物と樹木が混在する都市街区内における放射・熱環境をシミュレートできるモデルを開発した。このモデルにより、都市街区内の熱環境の緩和策を従来以上に定量的に精緻に評価できるようになった。また、大規模計算のために、PGI CUDA Fortranを利用してGPU化を進め、CPU実行によるプロファイリングの結果から実行時間比で約40%の関数をGPUに対応させた。

3. 夜間の都市熱環境に対する植生の効果を評価するための人工気象室(ポリエチレンチャンバー)を開発した。さらには、この実験装置を用いて、葉の多い植生ほど夜間の都市熱環境をより効率的に冷却させることがわかった。このことは、熱帯夜の減少に対して葉の多い樹木による都市内緑地が効果的であることを示唆している。

(1) 温暖化影響評価研究者のためのダウンスケーリング (日下)

環境省の環境研究総合推進費(S-8)の一課題として、気候予測の非専門家が独力で各地域の温暖化予測を実行可能にするためのウェブアプリケーション、「温暖化影響評価研究者のためのダウンスケーラシステム(ダウンスケーラ)」の開発を行っている。平成25年度は、平成24年度までに開発したダウンスケーラをベースに、影響評価研究者(ユーザー)の意見を取り入れる形で改良を行った。具体的には、前年度のアドバイザー会合などで出された意見や、テストユーザーからの要望をまとめ、改良箇所に反映させた。また、アジアの途上国での利用に向けて、海外版(ベータ版)を開発した。さらには、この海外版をインドネシアの気象庁(インドネシア気候・気象・地球物理庁, BMKG)に導入し、BMKGの技術系職員を対象に利用講習会を開催した。

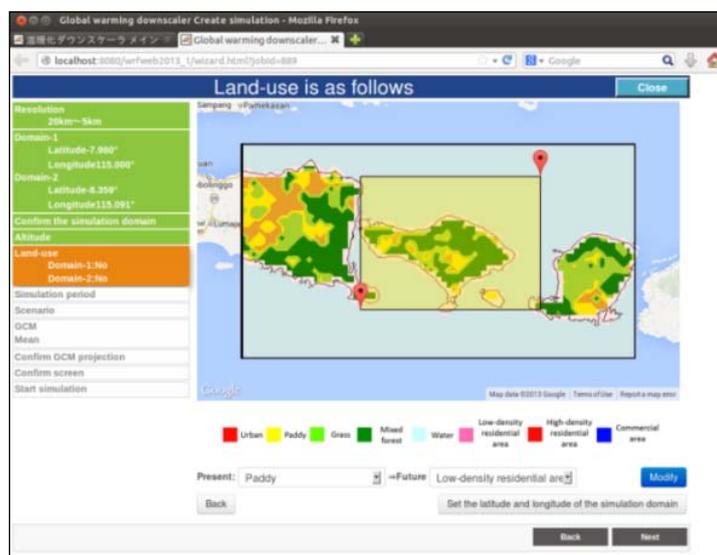


図 4 海外版ダウンスケーラ（ベータ版）



図 5 インドネシア気候・気象・地球物理庁（BMKG）への導入とその講習会の様子

（2）建物解像並列 LES モデルの共同開発（日下）

都市気象の詳細な研究では、モデルの空間解像度を数メートル以下とする必要があるため、本研究では、都市の詳細な熱環境を解析可能な Large Eddy Simulation (LES) モデルの開発を行っている。平成 25 年度は、都市街区内の街路樹や公園の樹木等の熱的・力学的効果を表現できる樹木モデルを LES に組み込んだ。この街路樹モデルは、街路樹による影や街路樹間や街路樹・建物間の放射の多重反射を考慮することができる。また、樹木からの蒸散効果も考慮することが可能である。このモデルを LES に組み込み、流体計算と連成させ、岐阜県多治見市の住宅街を対象に計算を行った。図 6 (a)は 2013 年 8 月 15 日に行った気温観測の結果、図 6 (b)は LES によるシミュレーション結果である。シミュレ

ーション結果から、公園と住宅地で比較すると、樹木が多い公園で気温が低く観測ともよく整合している。また、住宅街では場所により気温のばらつきが大きいことが分かる。このように、現実街区を対象とした、より現実的な計算が可能となった。

また、多治見市と共同で、多治見駅周辺の熱環境観測と人体生理測定を実施した。これらの結果を用いて、暑熱環境マップ（人はどの場所で暑く感じるか？）の作成を行った。さらには、このマップを多治見市が取り組んでいる熱環境緩和策実地地点（ドライミスト、ウエットミスト、街路樹、後半社塗料道路）と比較することで、暑熱環境緩和策の効果を評価した。

この他に、計算の高速化のため、並列化に加え PGI CUDA Fortran を利用して GPU 化を引き続き進めている。LES を構成する関数群において、CPU 実行によるプロファイリングの結果から実行時間比で約 40% の関数を GPU に対応させた。現状では、関数単体での高速化率は、4GPU 対 16CPU-core で 0.4~25.1 倍の高速化を得た。

本研究は文科省 RECCA プロジェクトの一環として行われ、本センターの計算機科学の研究者の協力を得た共同開発を推進している。

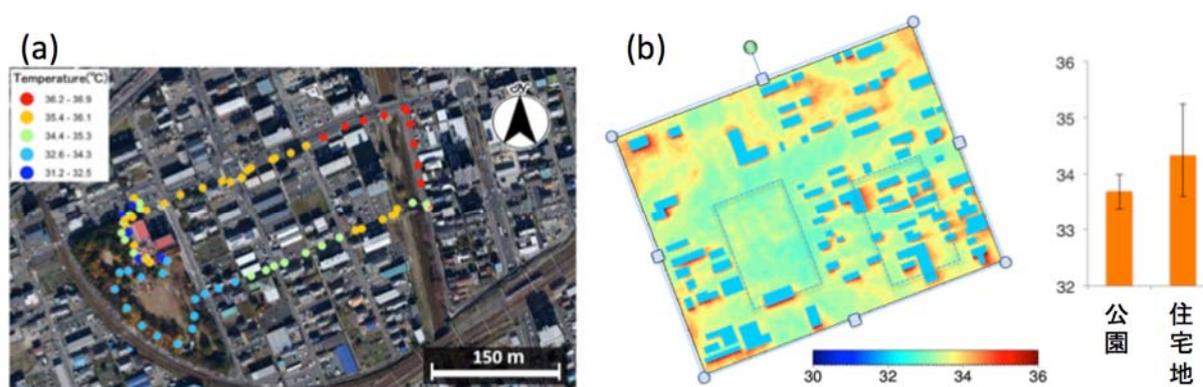


図 6 (a) 2013 年 8 月 15 日の岐阜県多治見市での気温観測結果。(b) LES モデルによる街区内部気温分布を計算した結果。

(3) 人工気象室（ポリエチレンチャンバー）の開発（日下）

夜間における植生の大気冷却効果に関する基礎的知見を取得することを目指して、本研究では人工気象室（ポリエチレンチャンバー）を開発した（図 7）。平成 25 年度には、ポリエチレンチャンバーを開発し、熱交換面の面積を考慮した実験を行った。ポリエチレンチャンバーは、長波放射を透過しやすいポリエチレンフィルムの放射特性を活かすことで、これまで難しかった夜間における植生の大気冷却効果の実験を可能にした。このチャンバーに葉を模した黒ケント紙を入れ、さらに黒ケント紙の面積を変えることで、熱交換面積が大気冷却効果に及ぼす作用を調査した。表 1 は、黒ケント紙の

面積 LAI = 1, 2, 4 における対流熱伝達量と大気冷却量を比較した結果である。負の対流熱伝達量は空気から黒ケント紙への熱伝達を意味している。LAI = 1 に比べて、LAI = 2 と 4 の黒ケント紙を入れた際の対流熱伝達量と大気冷却量の値が大きいことが分かる。熱交換面積が増えたことで、熱交換面と空気との対流熱伝達量が増え、空気がより冷却されたことを示している。このように、開発したポリエチレンチャンバーによって、熱交換面の面積が夜間の大気冷却効果に及ぼす影響の調査が可能になった。



図 7 開発したポリエチレンチャンバーの外観

表 1 ポリエチレンチャンバーを使った LAI = 1, 2, 4 における対流熱伝達量と大気冷却量

LAI	1	2	1	4	2	4
対流熱伝達量[W/m ²]	-6.9	-9.4	-5.5	-6.9	-10.0	-10.1
大気冷却量[°C]	-0.8	-1.0	-0.7	-0.9	-1.0	-1.0
実験日	2013.09.27		2013.08.15		2013.09.27	

4. 教育

指導学生（田中）

D2: (地球) 相澤、近藤

D1: (地球) 山上、小柴

M2: (地球) 海野、木野、馬場

M1: (地球) 足立

B4: (地球) 市川、山田

指導学生（日下）

D3 (地球) : 岡田

D2 (地球) : 加藤、豊田、ドアン

D1 (地球) : 西

M2 (地球) : 久野、藤田、工藤、廣田、藤田

M1 (地球・環境) : 大高、柿沼、浩、一澤、高橋、渡邊

B4 (地球) : 荒井、今井、佐藤、小久保

放送大学「自然環境科学プログラム」(田中)

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

第 52 回日本生気象学会 若手・学生発表コンテスト「優秀賞」 日下 (共同受賞)

日本ヒートアイランド学会 第 8 回全国大会 アカデミックセッション ベストポスター賞 日下
(共同受賞)

文科省 GRENE 北極研究プロジェクト、田中

JICA/JST SATREPS 防災研究領域、田中

文科省 RECCA プロジェクト、日下

環境省 S8 プロジェクト、日下

JSPS 科研費、日下

東芝 分担金 日下

ウエザーニューズ 分担金 日下

日本気象協会 寄付金 日下

気象予測に関する特許 日下 (共同特許)

6. 研究業績

研究論文他

1. Kayaba, M., T. Ihara, H. Kusaka, S. Iizuka, K. Miyamoto, and Y. Honda, 2014: Association between sleep and residential environments in the summertime in Japan. *Sleep medicine*, 15, 556-564.
2. Takane, Y., H. Kusaka, and H. Kondo, 2014: Climatological study on mesoscale extreme high temperature events in the inland of the Tokyo Metropolitan Area, Japan, during the past 22 years. *International Journal of Climatology*, DOI:10.1002/joc.3951.
3. 岡田牧, 日下博幸, 高木美彩, 阿部紫織, 高根雄也, 富士友紀乃, 永井徹, 2014: 夏季における岐阜県多治見市の気温分布調査. *天気*, 61(1), 23-29.

4. 岡田牧, 岡田益己, 日下博幸, 2013: 岡田・日下の黒球温度推定式の広域適用とパラメータ調整. 日本ヒートアイランド学会論文集, 8, 13-21.
5. 日下博幸, 飯島奈津美, 井原智彦, 原政之, 高根雄也, 飯塚悟, 2013: 2070 年代 8 月を対象とした東京・名古屋・大阪における熱中症および睡眠困難の将来予測. 日本建築学会環境系論文集, 78(693), 873-881.
6. Okada, M., Kusaka, H., 2013: Proposal of a new equation to estimate globe temperature in an urban park environment. *J. Agric. Meteorol.*, 69(1), 23-32.
7. Takane, Y., Ohashi, H., Kusaka, Y., Shigeta and Y. Kikegawa, 2013: Effects of Synoptic-Scale Wind under the Typical Summer Pressure Pattern on the Mesoscale High-Temperature Events in the Osaka and Kyoto Urban Areas by the WRF Model. *J. Appl. Meteor. Climatol.*, Vol152, 1764 -1778.
8. 平田航, 日下博幸, 2013: 二つ玉低気圧通過に伴う降水の気候学的研究, 地理学評論, 86(4), 338-353.
9. 岡田牧, 若月泰孝, 犬飼俊, 廣田陸, 日下博幸, 2013: 初冬早朝における緑地内外の気温分布調査 一代々木公園・明治神宮の事例-. 日本ヒートアイランド学会論文集, 8, 7-12.
10. Akimoto, Y., Kusaka, H., Xue, L., Haeffelin, M., 2013: Development of the boundary layer model based on LES model for fog simulation. The 6th International Conference on Fog, Fog Collection and Dew. Yokohama, Japan. P. 29
11. 日下博幸, 2013: 「学んでみると気候学はおもしろい」. ベレ出版, 261.
12. Tanaka, H.L., and S. Seki 2013: Development of 3D spectral linear baroclinic model and the application to the baroclinic instability associated with positive and negative Arctic Oscillation Index. *JMSJ*, 91, 193-213.
13. Aizawa, T., H.L. Tanaka, and M. Satoh 2013: Rapid arctic cyclogenesis simulated by the cloud resolving global model NICAM. *Meteor. Atmos. Phys.*, DOI 10.1007/s00703-013-0272-6.
14. Kondo, K., T. Miyoshi, and H.L. Tanaka 2013: Parameter sensitivities of the dual-localization approach in the local ensemble transform Kalman filter. *SOLA*. 174-178.
15. 田中博 2013: 北極がホットになるホットな話: 北極域研究最前線、要旨. 16-17 pp. 第 11 回環境研究シンポジウム、水圏・海洋を巡る環境研究の最前線、環境研究機関連絡会
16. 田中博, 2013: 北極低気圧、新用語解説、天気. 2013.
17. 田中博, 2013: 書評: 「お天気ハカセになろう-竜巻は左巻き?」 木村龍治 著 岩波ジュニア新書、天気、書評 2013.

18. 田中博, 2013: 書評: 「気候で読み解く日本の歴史」 田家康 著 日本経済新聞出版社、日本農業新聞、読書 2013.
19. 木野公朝・田中博, 2013: AOI 方程式を用いた北極振動の解析的研究. (投稿中)
20. Ogata, T., H. Ueda, T. Inoue, M. Hayasaki, A. Yoshida, S. Watanabe, M. Kira, M. Ooshiro, and A. Kumai, 2014: Projected future changes of the Asian monsoon - A comparison between CMIP3 and CMIP5 model results-. *J. Meteorol. Soc. Japan.* 92, 207-225.
21. Hill, D. J., A. M. Haywood, D. J. Lunt, S. J. Hunter, F. J. Bragg, C. Contoux, C. Stepanek, L. Sohl, N. A. Rosenbloom, W-L. Chan, Y. Kamae, Z. Zhang, A. Abe-Ouchi, M. A. Chandler, A. Jost, G. Lohmann, B. L. Otto-Bliesner, G. Ramstein, and H. Ueda, 2014: Evaluating the dominant components of warming in Pliocene climate simulations. *Clim. Past*, 10, 79-90.
22. Salzmann, U., Dolan, A. M., Haywood, A. M., Chan W.-L., Voss, J., Hill, D. J., Lunt, D. J., Abe-Ouchi, A., Otto-Bliesner, B., Bragg, F., Chandler, M. A., Contoux, C., Dowsett, H. J., Jost, A., Kamae, Y., Lohmann, Pickering, S. J., Pound M. J., Ramstein, G., Rosenbloom, N. A., Sohl, L., Stepanek, C., Ueda, H, Zhang, Z. (2013): Challenges in reconstructing terrestrial warming of the Pliocene revealed by data-model discord. *Nature Climate Change*.
23. Zhang, R., Q. Yan, Z. S. Zhang, D. Jiang, B. L. Otto-Bliesner, A. M. Haywood, D. J. Hill, A. M. Dolan, C. Stepanek, G. Lohmann, C. Contoux, F. Bragg, W.-L. Chan, M. A. Chandler, A. Jost, Y. Kamae, A. Abe-Ouchi, G. Ramstein, N. A. Rosenbloom, L. Sohl, and H. Ueda, 2013: Mid-Pliocene East Asian monsoon climate simulated in the PlioMIP. *Clim. Past*, 9, 2085-2099. (accepted).
24. Dowsett, H. J., K. M. Foley, D. K. Stoll, M. A. Chandler, L. E. Sohl, M. Bentsen, B. L. Otto-Bliesner, F. J. Bragg, W.-L. Chan, C. Contoux, A. M. Dolan, A. M. Haywood, J. A. Jonas, A. Jost, Y. Kamae, G. Lohmann, D. J. Lunt, K. H. Nisancioglu, A. Abe-Ouchi, G. Ramstein, C. R. Riesselman, M. M. Robinson, N. A. Rosenbloom, U. Salzmann, C. Stepanek, S. L. Strother, H. Ueda, Q. Yan, and Z. Zhang, 2013: Sea surface temperature of the mid-Piacenzian ocean: A data-model comparison. *Scientific Reports*, 3, 2013, doi:10.1038/srep02013
25. Zhang, Z.-S., K. H. Nisancioglu, M. A. Chandler, A. M. Haywood, B. L. Otto-Bliesner, G. Ramstein, C. Stepanek, A. Abe-Ouchi, W.-L. Chan, F. J. Bragg, C. Contoux, A. M. Dolan, D. J. Hill, A. Jost, Y. Kamae, G. Lohmann, D. J. Lunt, N. A. Rosenbloom, L. E. Sohl,

and H. Ueda, 2013: Mid-pliocene Atlantic Meridional Overturning Circulation not unlike modern. *Clim. Past*, 9, 1495-1504.

26. Haywood, A. M., D. J. Hill, A. M. Dolan, B. Otto-Bliesner, F. Bragg, W.-L. Chan, M. A. Chandler, C. Contoux, A. Jost, Y. Kamae, G. Lohmann, D. J. Lunt, A. Abe-Ouchi, S. J. Pickering, G. Ramstein, N. A. Rosenbloom, L. Sohl, C. Stepanek, Q. Yan, H. Ueda, and Z. Zhang, 2013: Large scale features of Pliocene climate: Results from the Pliocene model intercomparison project. *Clim. Past*, 8, 2969-3013.

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

センター内連携： LES-GPU グループ

大規模気象計算 WG

産学官連携： 岐阜県多治見市と連携協定（日下）

国際活動： 米国大気研究センター訪問、米国アラスカ大学訪問、アラスカ大学との大学間協定
北極環境研究コンソーシアム、国際北極科学会議(IASC)副議長（田中）

国際都市気候学会（IAUC）理事（日下）

国際都市気候学会第 8 回大会(ICUC8)発表（日下）

JICA 研修講師（日下）

米国大気研究センター訪問、ベトナム国家大学ハノイ自然科学大学訪問、
ベトナム国会大学ホーチミン校訪問、台湾中央研究院訪問

インドネシア気候・気象・地球物理庁訪問、インドネシア JICA 訪問（日下）

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

第 11 回環境研究シンポジウム、水圏・海洋を巡る環境研究の最前線、環境研究機関連絡会
（田中）

気象学会夏季大学「台風学の最前線」教育と普及委員会企画（田中）

温暖化ダウンスケーラ講習会開催（日下）

9. 管理・運営

学長補佐、副学長補佐、学生生活支援室長（田中）

10. 社会貢献・国際貢献

放送大学 客員教授（田中）

国立極地研究所 客員教授（田中）

国際北極科学会議(IASC)副議長（田中）

日本学術会議 IASC 小委員会（田中）

国際都市気候学会 (IAUC) 理事 (日下)

気象庁 気象大学校 非常勤講師 (日下)

気象庁 気候変動懇談会検討部会 委員 (日下)

環境省 風力発電等分散型エネルギーの広域運用システムに関する実証研究検討会 委員 (日下)

国土交通省 ヒートアイランド対策に資するデータと分析システムに係る検討委員会 委員 (日下)

NEDO 発電量予測技術委員会・発電量予測技術研究会 委員 (日下)

熱中症予防声かけプロジェクト 実行委員 (日下)

11. その他

放送大学客員教授、気象学会理事、地球惑星連合代議員 (田中)

国際都市気候学会 (IAUC) 理事、日本ヒートアイランド学会理事、気候影響利用研究会幹事 (日下)

VI. 高性能計算システム研究部門

1. メンバー

教授	佐藤 三久、朴 泰祐、児玉 祐悦、高橋 大介
准教授	建部 修見、埴 敏博
講師	川島 英之
助教	多田野 寛人
研究員	田中 昌宏、梅田 宏明、中尾 昌広、奴賀 秀男、松本 和也、Jabri Mohamed Amin

2. 概要

本研究部門では、高性能計算システムアーキテクチャ、並列プログラミング環境、GPU利用技術、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。

3. 研究成果

【演算加速機構を持つ将来の HPCI システムに関する調査研究】(佐藤、朴、児玉、高橋)

本調査研究においては、将来の HPCI システムのあり方の調査研究に対して科学技術計算のアプリケーションに適合した演算加速機構による並列大規模システムを提案し、調査研究を行った。

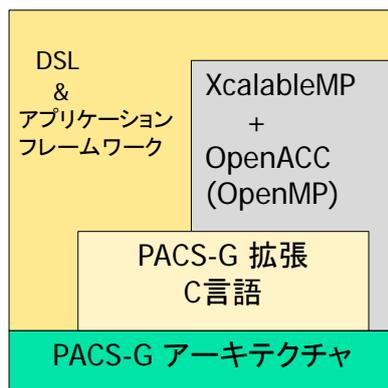
本システムのサイクルベースの評価に関して、当該年度においては、昨年度開発したシングルチップ向けサイクルベースシミュレータをベースとして、マルチチップによるシミュレーションを可能とする開発を行った。主な改良点は、(ア) グローバルメモリ (GM) 機能、(イ)チップ内通信機構の 3D/4D メッシュへの対応、(ウ)チップ間通信機構の 3 点である。GM 機能はオフチップの高バンド幅メモリをシミュレートするもので、各ブロードキャストメモリ(BM)に GM の各パーティションが一对一に対応する形で同時転送を行う。チップ内通信機構は 3D/4D メッシュへの対応するために 3 ホップ先のコアと直接接続するバイパスポートをサポートした。チップ間通信機構は、4 次元トーラスをサポートし、チップ間は 1 対 1 の接続を行う。チップ間通信のためのバッファとして BM と同様に各コアと接続された CM を 2 次元メッシュの 4 方向にもち、コアから CM への転送および CM からコアへのデータ転送はコア命令で行い、チップ間の通信は DMA 起動で行う。本サイクルベースシミュレータを用いて GM 利用および複数チップ利用の場合の性能評価を行った。アプリケーションとしては地震波計算コードである Seism3D を利用した。これにより、ピーク性能を用いたアプリケーション性能見積り方法が妥当であることを確認した。

また、本研究において、演算加速プロセッサ PACS-G 向けプログラミング・モデルの検討を行った。PACS-G のプログラミング・モデルを検討するために、まず、ソフトウェアからのアーキテクチャを明らかにする命令レベルシミュレータを開発した。次に、アーキテクチャの詳細を記述できる、低レベルプログラミング向けの記述言語 PACS-G 拡張 C 言語を設計し、PACS-G の命令レベ

ルシミュレータ用にコンパイラを実装した。この知見をもとに、一般プログラマ向けに指示文ベースでプログラミングをするための並列言語 PACS-G 拡張 XcalableMP を設計した。また、プロセッサ間の通信ライブラリ API についても設計を行い、シミュレータに実装した。

想定されるプログラミング環境のソフトウェアスタックを図VI-1 に示す。

- (1) 低レベルプログラミングのための、PACS-G 拡張 C 言語。PE の制御構文、Intrinsic 命令により命令レベルの記述が可能
- (2) XcalableMP 拡張 (+ OpenACC) による指示文ベースのプログラミング環境を提供。
- (3) 既存のコード (主にステンシル計算) の移植を容易する。Domain-Specific Language (DSL) とアプリケーションフレームワーク。例えば、粒子法のための DSL 等、が考えられる。
- (4) さらに、ホストと協調してプログラミングする場合には、ホストからのオフロードのための指示文ベースのプログラミング環境をサポートする。低レベルではホストインタフェースライブラリを提供する。
- (5) プロセッサ間については、MPI もしくは専用メッセージ通信ライブラリを想定。



図VI-1 PACS-G システムのプログラミング・ソフトウェアスタックの構成図

拡張 C 言語は、低レベルの詳細なプログラミングのためのもので、一般のアプリケーションユーザーには煩雑である。そのために、指示文ベースで、分散メモリ向けの PGAS 言語である XcalableMP をベースに、OpenACC と組み合わせて、Fortran のアプリケーションの PACS-G 向け移植を容易にするために設計した。

以下に、特徴を挙げる。

- (1) 基本的には、OpenACC の拡張

XcalableMP の枠組みを用いて、OpenACC で PE にオフロードした時のデータ配置を指定する。template を拡張して、PE/LM を仮想化する。

- (2) template 指示文

PE 上の仮想 index 空間を定義する。分散方法については、block 分散のみを想定する。

(3) data 指示文

OpenACC の拡張で、PE にオフロードされたデータについて PE でのデータ環境を設定する。データは当初は、GM またはマスタプロセッサ側にあることを前提とする。

copy/copyin/copyout/create/present/present_or_copy/present_of_copyin/present_or_copyout/prpresent_or_create により、PE 側にセットアップするデータを指定することができる。

(4) align 指示文 / shadow 指示文

align 指示文 により、template に従い、分散配置を指定。align で指定されない場合には、それぞれの PE で重複。align で分散された配列に関しては、shadow 指示文で、袖領域を確保を指定できる。

(5) parallel 指示文

各 PE で実行するコードを指定。

(6) loop 指示文

ループを分割実行する。on 節で、並列の index スペースを指定。reduction 節で、reduction する変数を指定する。

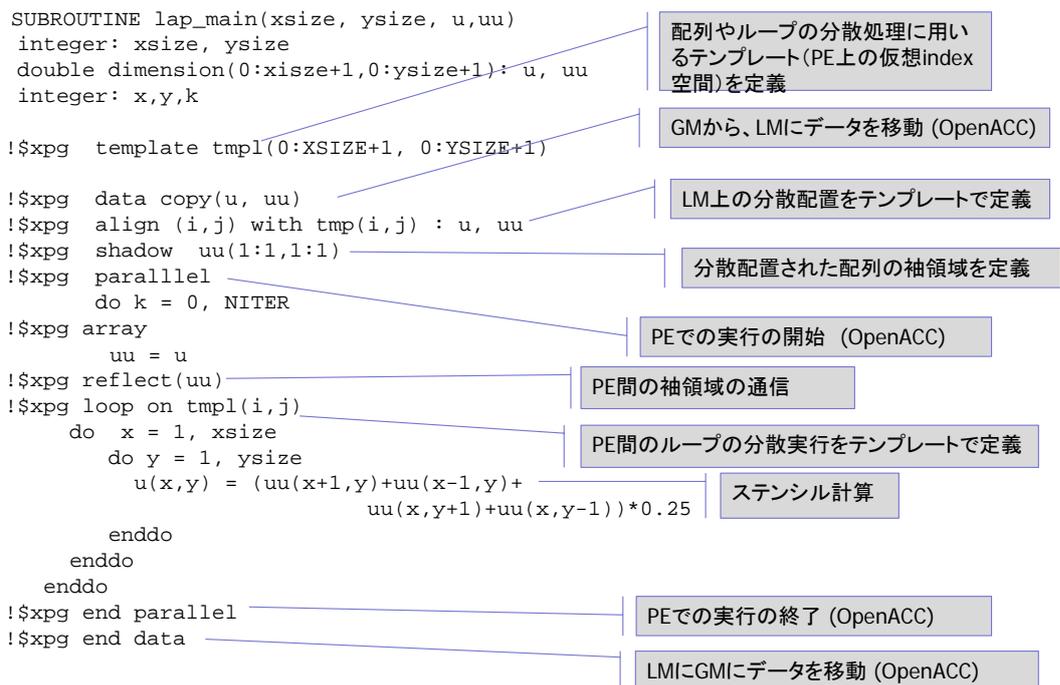
(7) reflect 指示文

shadow 領域の update を実行する。

(8) update directive

data 環境中で、GM/マスタプロセッサと PE のデータをやり取りする。

以下に、laplace 方程式の陽解法のステンシル計算の例を示す。



【PGAS モデル並列プログラミング言語 XcalableMP の開発と HPC Class2 Award の受賞】 (佐藤)

XcalableMP は、PC クラスタコンソーシアム XcalableMP 規格部会でコミュニティで議論されている PGAS モデルの並列プログラミング言語である。筑波大と理研でレファレンス実装 Omni XcalableMP コンパイラを開発している。

当該年度においては、11 月に開催される SC で行われている HPC Class2 ベンチマークに京コンピュータでの XcalableMP の結果を提出し、Award を獲得することができた。

【Xeon Phi 向け XcalableMP 実行時システムの設計】 (佐藤)

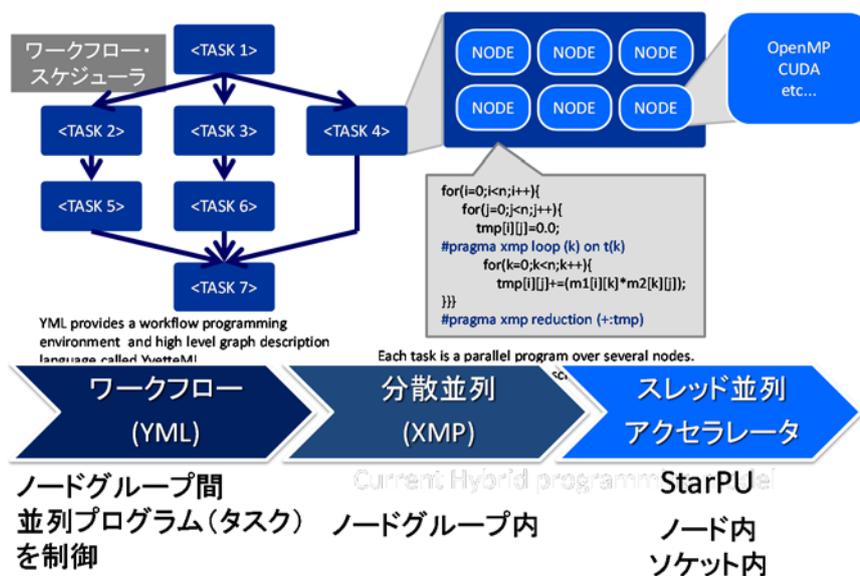
PGAS 言語 XcalableMP で記述したステンシル計算をマルチノードのメニーコアプロセッサ Xeon Phi 上で効率よく実行するための実行時システムを試作・評価した。この実行時システムでは、プログラムの並列実行にはプロセスを用い、ステンシルコード上のグローバル配列は並列数でブロック分割し、それぞれに袖領域を加えた上で共有メモリ上に置く。配列のブロッキングはメモリ参照の局所性を高め、さらに袖領域の追加により、ブロック間の境界領域を異なるコアがアクセスすることによるキャッシュラインのシェアリングを削減できるため、演算性能が向上する。また、袖領域交換のために発生するノード内のプロセス間通信を共有メモリ上での規則的なメモリ転送に置き換えることができるため、この通信時間も削減することができる利点がある。評価は、よる Laplace 方程式の計算と姫野ベンチマークの 2 つのベンチマークを用いて行った。この結果、姫野ベンチマークにおいては、2 ノードから 16 ノードのマルチノード上で、従来プロセッサ向きに実装された実行時システムを用いた場合の 2 倍程度の性能が得られることが確認

できた。

【階層的並列コンポーネントベース FP2C プログラミングモデルの研究】（佐藤）

JST 国際科学技術共同研究推進事業（戦略的国際共同研究プログラム）課題名「ポストペタスケール・コンピューティングのためのフレームワークとプログラミング」において、フランスとの共同研究を実施した。このなかで、ポストペタスケール・コンピューティングのための並列プログラミング基盤として、並列プログラミング言語拡張仕様 XcalableMP (XMP) を用いて、他のグループで研究開発されるコンポーネントへのインターフェースを与えるとともに、上位のプログラミングパラダイムとして、ワークフロー言語である YAML を用いる。XMP で記述されたコンポーネントからは、OpenMP もしくは、後述する GPU への拡張仕様 XMP-dev を用いて、GPU を利用することができる。XMP-dev からは、実行時スケジューラ StarPU を用いることにより計算を GPU と CPU に自動的に振り分けることができる。その階層的なプログラミングモデル FP2C (Framework for Post-Petascale Computing) を図 1 に示す。

当該年度においては、YML の開発を担当するベルサイユ大学グループと INRIA サクレグループ、理化学研究所のグループと協力し、京コンピュータ上で性能評価を行った。この FP2C を用いて、階層構造を持つブロックガウスジョルダン法による密行列解法プログラムをこのプログラミングモデルで記述し、その有効性について評価した。具体的には、XMP で並列行列積のコンポーネントを記述し、そのコンポーネントを用いたガウスジョルダン法を YML で記述する。評価の結果、逆行列を計算するベンチマークにおいて FP2C で記述したプログラムが、通常の MPI で記述したプログラムよりも性能が良いことを確認し、その有効性について検証した。



図VI-2 FP2C による階層的プログラミングモデル

【エクサスケールの気候シミュレーションのための耐故障技術およびプログラミングモデルの研究】 (佐藤)

多国間国際研究協力事業 (G8 Research Councils Initiative) の研究課題「エクサスケールの気候シミュレーションを実現する技術(Enabling Climate Simulation at Extreme Scale)」において、エクサスケールの気候シミュレーションのための耐故障技術およびプログラミングモデルの研究を行った。

耐故障技術については、共同研究者である INRIA の Cappello 博士のグループが研究を進めている、ハイブリッドなチェックポイント手法(Franck)を利用する言語機能について、言語サポートとクラスタに分割するための高速アルゴリズムを設計・実装・評価を行った。気象コードをはじめとする典型的な科学技術計算のアプリケーションでは、時間発展等のメインループを持ち、ループごとに同じ通信パターンになることが多い。ここに注目し、メインループを指示文を用いて指定することにより、ここにおいて、最初の繰り返しで通信パターンを検出し、次回以降のチェックポイントにおいて、これを利用する。ハイブリッドチェックポイント手法は、局所的なクラスタ間でチェックポイントするメッセージロギングと、クラスタで協調チェックポイントを組み合わせたもので、その分割がチェックポイントの効率を左右する。ここでは、最初に通信パターンを検出し、実行時にクラスタ分割を計算しなくてはならないために、クラスタ分割自体の時間も重要である。本グループでは、通信する各プロセスが実行されているノードを分割の単位とし(node-based)、各ノードは正規的なグリッド・トポロジーで構成されている(grid-based)とすることにより、短時間に最適化分割を行うことができる。これを、気象のミニアプリである GC-POP や他の科学技術計算コード(GeoFEM)に適用した結果、一般的なグラフ分割アルゴリズムよりも大幅に短時間でグラフ分割が可能で、得られた分割も同程度の最適化(エッジカット等)が行えることを示した。

また、プログラミングについては、理研計算科学機構にある京コンピュータにおける気象コードの性能評価と最適化に取り組んだ。特に、京コンピュータにおいては片方向通信を用いて気象コードの通信を行い、性能の改善を行った。本グループでは、GAS(Partitioned Global Address Space)モデルに基づく並列プログラミング言語 XcalableMP を開発しており、片方向通信にはこの言語の機能の1つである Coarray を用いることにより、従来の MPI 通信よりも簡便に記述することができる。その結果、GG-POP ではハードウェアによるリダクション通信の利用と合わせて、84%(7500 ノード)の性能改善、NICAM においては 7%(640 ノード)、CICE においては 15%(1024 ノード)の性能改善をすることができた。特に、ノード数が多い大規模なプログラムで性能が改善でき、将来のエクサスケール計算においては、片方向通信による通信の最適化が重要であることが分かった。

【HA-PACS/TCA の研究開発】 (朴、児玉、埴)

文部科学省特別経費「エクサスケール計算技術開拓による先端学際計算科学教育研究拠点の充

実」(H23～H25 年度の 3 年間)において、密結合演算加速装置 (Tightly Coupled Accelerators: TCA) を提案し、中核となる PEACH2 (PCI Express Adaptive Communication Hub ver.2)チップを FPGA により実装し、これを汎用 GPU クラスタノードに実装するための PCI Express ボードのハードウェアを完成させ、これを量産したバージョンを全計算ノードに搭載した HA-PACS/TCA を構築した。

図VI-3 に量産型の PEACH2 ボードの写真を示す。ボード中央に放熱フィンと共に FPGA (Altera Stratix-IV) が設置され、DRAM メモリ、他のノードとの外部 PCIe リンク接続のためのポート (計 3 ポート) とマザーボードに接続される PCIe スロットを備えている。ボードの右側 1/3 程度のエリアは安定化電源のためのレギュレータ類である。



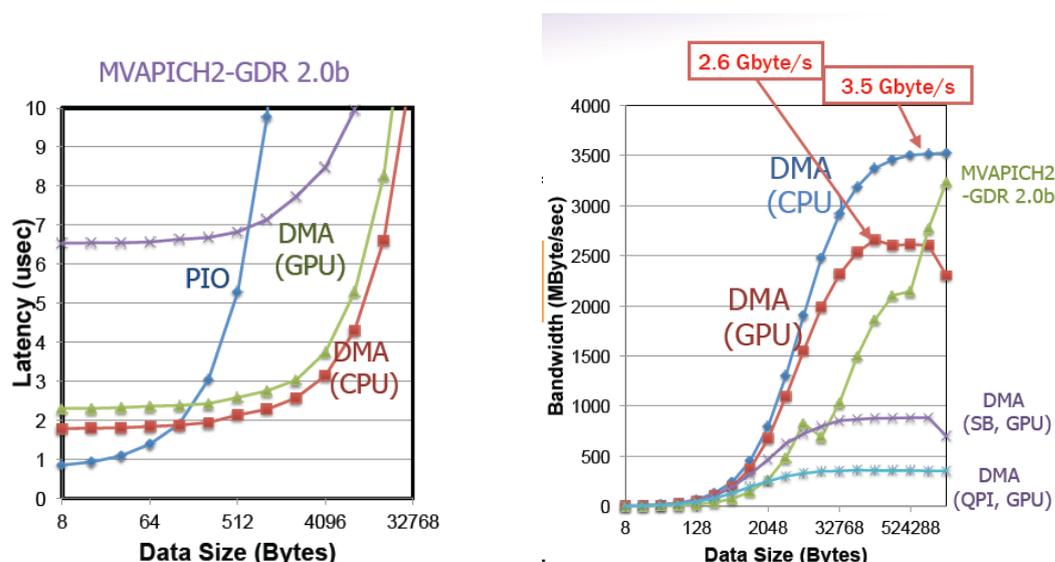
図VI-3 PEACH2 ボード (量産型)

HA-PACS/TCA (以下、TCA 部) は平成 25 年 10 月に導入され、平成 24 年 2 月から稼働開始した HA-PACS ベースクラスタの拡張部分として接続された。ベースクラスタと TCA 部は共通の InfiniBand ネットワークスイッチに接続され、ファイルサーバ等を共有する。TCA 部がベースクラスタと大きく違う点は、全ノード (64 ノード) に PEACH2 ボードを装着し、TCA 技術による低レイテンシの GPU 間直接通信が可能であることと、GPU として NVIDIA 社の最高性能製品である Tesla K20X を搭載している点である。なお、K20X を用いた Linpack 性能は効率が 70%以上を達成し、TCA 部のみでの Linpack 性能は 277 TFLOPS、電力当たりの Linpack 性能は 3518MFLOPS/W で、2013 年 11 月の Green500 リストで世界第三位にランクされた。

TCA 部の完成により、これまでの 2 ノード間での基本通信性能評価に加え、多数ノードでの集合通信ライブラリやアプリケーションへの適用を開始した。TCA 部完成後の本格的なシステム及びアプリケーションソフトウェアの開発は JST-CREST 研究領域「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」における「ポストペタスケール時代に向けた演算加速機構・通信機構統合環境の研究開発」(研究代表者: 朴泰祐) に引き継がれている。PEACH2 による TCA 通信は基本通信性能のチューニングが進み、平成 25 年度末時点において、最小レイテンシを約 2 μ 秒まで縮め、PC クラスタにおける事実上の標準通信技術である InfiniBand FDR

の約 1/3 という極めて短いレイテンシを実現している。また、256KB 程度までのデータ転送においては同ネットワークを上回るバンド幅を達成しており、加えて DMA チェイニングやブロックストライド転送等、典型的な科学技術計算における様々な通信パターンの最適化を実現している。

図VI-4 に point-to-point での通信性能を示す。TCA 部において Intel の IvyBridge アーキテクチャプロセッサの CPU を導入したことにより、CPU 内蔵の PCIe スイッチの性能が改善され、ノードを跨ぐ GPU 間通信でも十分なバンド幅が達成された。



図VI-4 最適化された TCA 機構による通信基本性能 (左：レイテンシ、右：バンド幅)

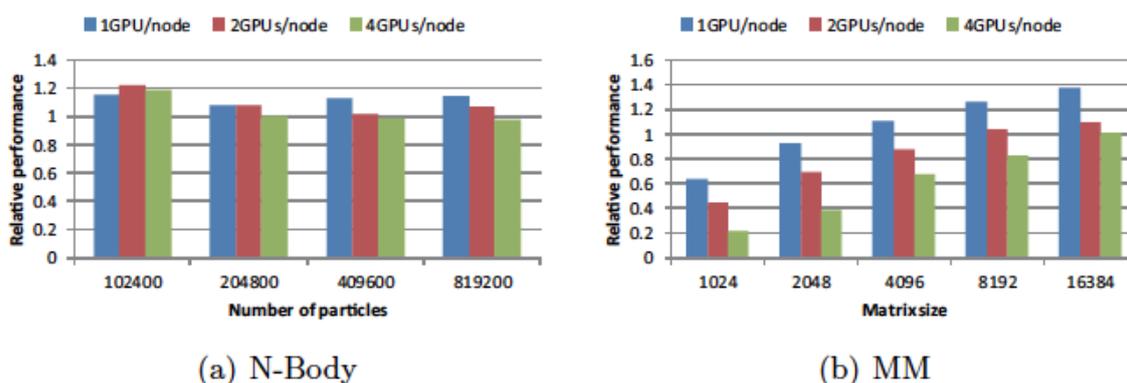
TCA を用いたアプリケーションに関しては、NVIDIA 社で開発が続けられている GPU 向け QCD ライブラリである QUDA を、同社との共同研究により TCA に移植した。オリジナルは MPI によって記述されているが、これを TCA に移植するために、片方向通信をベースとした RMA (Remove Memory Access) ライブラリを新たに定義し、通信部分をこれによって書き換えた。その上で、RMA ライブラリの TCA 実装と、比較対象となる MPI-3 の片方向通信を用いた実装を行い、比較した。通信がボトルネックとなるような小さな計算モデルにおいて、TCA を用いた strong scaling が有効であることを確認している。また、より一般的な数値計算ライブラリとして、並列 CG 法の GPU 実装に TCA を適用した。NAS-PB 等の CG 法実装を参考に、各 GPU 上での疎行列ベクトル積ルーチンの他、GPU 上の計算経過ベクトルの reduction、及び各部分ベクトルの alltoall 通信という 2 種類の集合通信を TCA により実装した。本研究に関しては進行中であり、今後性能チューニングを順次行っていく。

【GPU クラスタにおける並列言語ベースでの GPU/CPU ワークシェアリング】 (佐藤、朴)

平成 25 年度末をもって終了した戦略的国際科学技術協力推進事業（日仏共同研究）「ポストペタスケールコンピューティングのためのフレームワークとプログラミング」において、高レベル並列プログラミング環境での CPU/GPU ワークシェアリングに関する研究を行った。理化学研究所と共同開発している XcalableMP の GPU 対応版である XMP-dev を対象に、並列化されたプログラムに対し、各計算ノード上のランタイムシステムによって GPU と CPU コア的全計算リソースを有効利用する動的負荷分散システムを開発した。本研究ではフランス INRIA との共同研究に基づき、彼らが開発した StarPU ランタイムシステムを我々の XMP-dev コンパイラと協調動作させることにより、本システムを実現した

StarPU 本体はユーザにとって極めて扱いやすく、負荷分散の対象となる並列タスクの定義やデータの入出力を煩雑な記述によって表さなければならず、実応用の障壁となっていた。XMP-dev とのカップリングにより、ユーザは通常の GPU を対象とした XMP-dev 言語での記述を行うだけで、StarPU の GPU/CPU 動的負荷分散機能を利用できる。その際、GPU と CPU コアという演算性能が大幅に異なるリソースにどのようなサイズのタスクを割り当てるかという、タスク分割方法が性能上の問題となることを突き止め、この分割自体を動的に変更する機能を追加した。例えば、反復計算において GPU と CPU コアの負荷状況を観察し、簡単なアルゴリズムによってその比率を変更することが可能である。

図VI-5 に、重力多体問題（N-Body）及び行列行列積（MM）において、GPU のみを用いた XMP-dev プログラム実行に対し、本システムによる GPU/CPU ワークシェアリングを最適に適用した場合の性能向上を示す。アプリケーションや問題規模、使用 GPU 数に依存するが、最大で 1.2～1.4 倍の性能向上が実現された。



図VI-5 XMP-dev/StarPU による GPU/CPU ワークシェアリングの性能向上

【核融合シミュレーションコードの並列 GPU 化に関する研究】（朴）

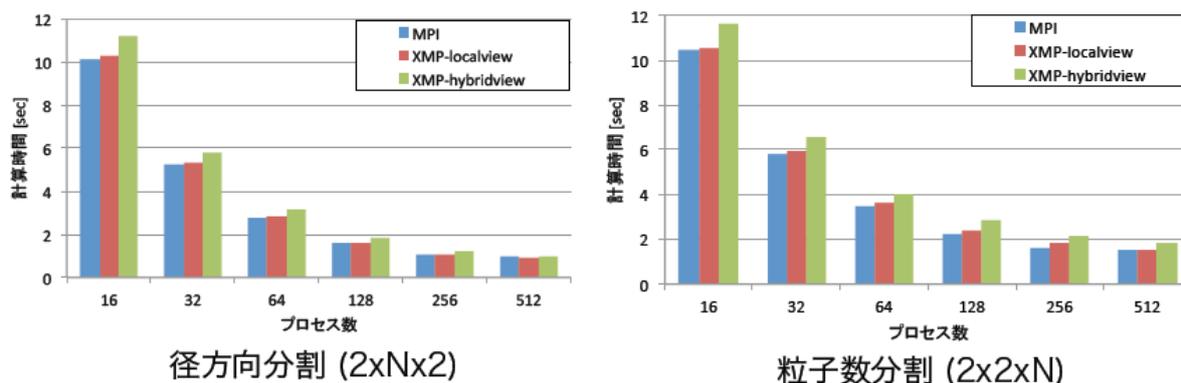
JSPS 多国間国際研究協力事業（G8 Research Councils Initiative）における研究課題「エクサスケ

ール規模の核融合シミュレーション」(H23～H25 年度、研究代表者：朴泰祐)において、日本原子力研究開発機構及び米国プリンストン大学との共同研究により、次世代核融合シミュレーションコードの並列 GPU 化を行った。前者においては「京」等で開発中の GT5D コードを、後者においては BG/Q 等で開発中の GTC-P コードを対象とする。

GT5D コードについては、PGI CUDA Fortran を用いて HA-PACS ベースクラスタへの移植を行い、全コードを GPU 化し、データに関しては全てを GPU メモリに保持するようにコードを作成した。MPI 通信と GPU・CPU 間データ転送のオーバーラップ、データ再配置を伴う MPI 通信における CPU と GPU での処理の分散、各カーネルの最適化等の性能向上を実現した。最終的に、HA-PACS ベースクラスタにおいて最大 16 ノードを用いた場合、CPU のみを用いた場合に対して 1.91 倍の性能が得られた。

GTC-P コードについては並列記述言語 XscalableMP (XMP)の応用例としてコーディングを行った。ここでは、XMP による実アプリケーションとして初めての試みである、global view と local view の hybrid view 記述による PIC (Particle In Cell)コードの記述を実現した。GTC-P は PIC コードの一種であるが、静的な空間(場)の物理の記述と、電子等の粒子が動的に動き回るという二種類の振る舞いに対し、データ及び処理の分散の記述のし易さとプロセス間の負荷の変動を同時に記述する必要がある。従来の MPI 実装では全てを詳細に記述する必要があったが、XMP の hybrid view 記述では、静的な空間の分割は XMP の宣言文だけでデータ分割・処理分割・分散データの同期を簡潔に記述でき、プログラムの生産性が向上する。一方、動的要素が強い部分については coarray 記法による片方向通信で記述し、同様に MPI における煩雑な配列記述のようなプログラム生産性低下要因が排除できる。

図VI-6 に HA-PACS ベースクラスタ(CPU のみ使用)における strong scaling の性能評価を示す。オリジナルの MPI 実装、XMP による coarray 記述で単純に MPI 通信を置き換えた場合、hybrid view による記述の場合について、並列化による処理時間の短縮を示している。hybrid view では他の 2 方式に比べ最大で若干処理時間が延びているが、これは配列のインデックス計算を自動化している部分でのオーバヘッド等が原因で、今後コンパイラの改良を行う予定である。hybrid view による生産性の向上を考慮すると十分十分許容可能な性能差と考えられる。

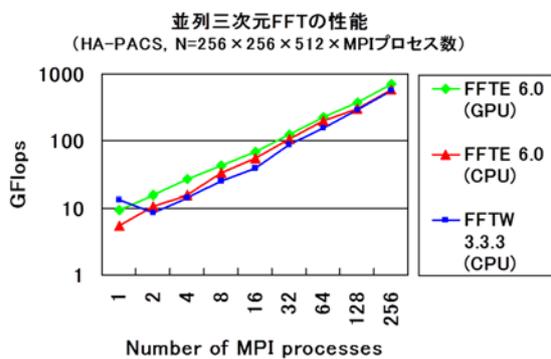


図VI-6 XMP hybrid-view による GTC-P コードの strong scaling 性能（左右は並列化における分割方向を変えた場合で、どの分割方法でもほぼ同じ傾向の高速化が行えている）

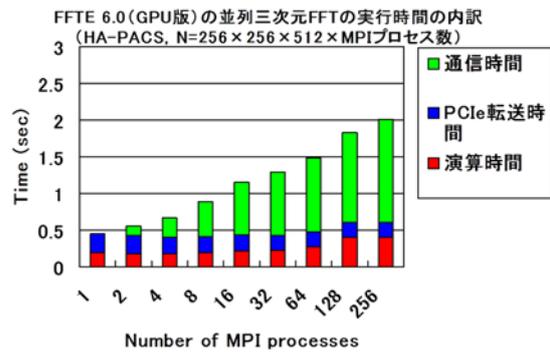
【並列高速フーリエ変換に関する研究】（高橋）

科学技術計算で広く用いられている並列高速フーリエ変換（FFT）の性能を改善するために、高速化手法に関する研究を行った。ポストペタスケール計算環境の一つと考えられる GPU クラスタにおいて並列 FFT を実行する際に、どのようなアルゴリズムや実装が望ましいかについて検討を行った。GPU クラスタにおいて並列 FFT を行う際には、全対全通信が複数回行われることから、計算時間の大部分が全対全通信によって占められることになる。さらに CPU と GPU 間を接続するインターフェースである PCI Express バスの理論ピークバンド幅は PCI Express Gen 2 x 16 レーンの場合には一方向あたり 8GB/sec となっていることから、CPU と GPU 間のデータ転送時間を削減することも重要になる。そこで、CPU と GPU 間のデータ転送と計算ノード間の MPI 通信をパイプライン化してオーバーラップすることができる MPI ライブラリである MVAPICH2 を用いることで、この問題を解決した。さらに、FFT の処理において出現する行列の転置の処理を GPU 上で行うなどの工夫も行った。

その結果、GPU クラスタにおける並列 FFT が PC クラスタにおける並列 FFT よりも高速に実行できることを確認した。



HA-PACS における並列三次元 FFT の性能

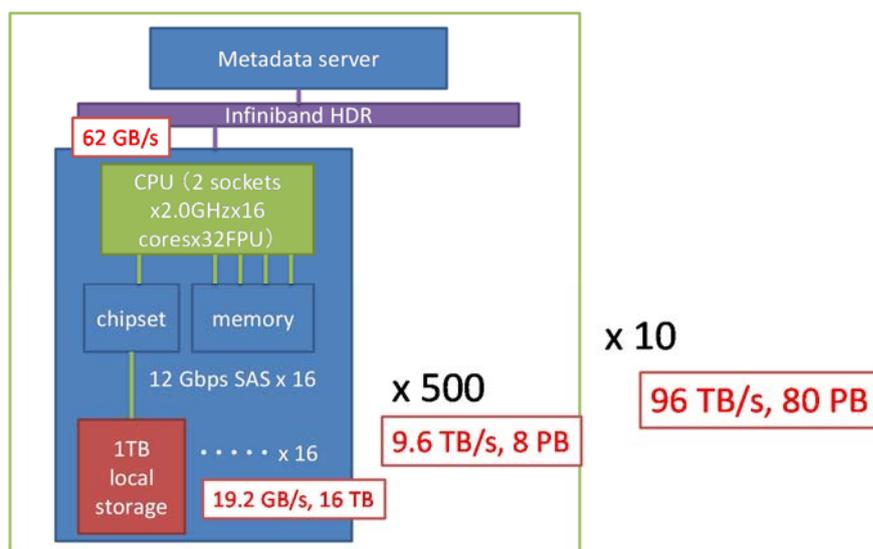


HA-PACS における並列三次元 FFT の実行時間の内訳

図VI-7 高性能 FFT の性能評価

【データインテンシブサイエンスのためのシステムソフトウェア】(建部、川島)

ビッグデータ解析が必要となるデータインテンシブサイエンスをポストペタスケールシステムで実施するため、分散ファイルシステム、計算ノード OS、実行時システムの設計を行い、プロトタイプ実装による評価を行った。現行の分散ファイルシステムは、メタデータサーバの性能、データアクセス性能のいずれにおいてもポストペタスケールシステム、エクサスケールシステムにおいては十分な性能を発揮することができない。ポストペタスケール以降のシステムにおいて必要となるメタデータサーバの性能、データアクセス性能を達成するためには、アーキテクチャ、システムソフトウェアの転換が必要となる。本研究では、ポストペタスケールシステムにおいて必要とされる性能を達成するため、以下のようなアーキテクチャを想定し、システムソフトウェアの研究開発を実施している。



図VI-8 ポストペタスケールデータサーバのアーキテクチャモデル

各計算ノードは高速なローカルストレージを備える。2015 年を想定すると、たとえば 12 Gbps SAS を 16 本用い、フラッシュストレージあるいは不揮発性 RAM を利用することで 19.2 GB/s の I/O バンド幅を実現可能と考えられる。この計算ノードを 5,000 ノード、ファイルシステムを管理するメタデータサーバを 10 ノード利用することにより、96 TB/s の I/O バンドを実現することが可能となる。IOPS については、理論的な性能を出すのは難しいが、経験的に 1 メタデータサーバでは 100K IOPS ほどは処理可能であるため、スケールアウトできれば 10 ノードで 1M IOPS が達成可能となる。

上記の性能はハードウェアの限界性能であるが、実際にシステムソフトウェアでこの性能を達成するためにはいくつかの問題を解決する必要がある。分散ファイルシステムについては、1M IOPS、100 TB/s を目指してアーキテクチャ設計、システム設計を実施した。途中結果であるが、分散 KVS に対してノンブロッキング分散トランザクション処理を行うことにより、15 サーバで 250K IOPS を達成した。また、フラッシュストレージ、不揮発性 RAM を効率的に利用して高い I/O 性能を達成するためのローカルストレージ、ローカル KV ストアの設計、評価を行った。更には、遠隔の計算ノードのローカルストレージに格納されているデータを高速にアクセスするためのネットワーク、システムの設計、計算ノードに障害が発生した場合にデータを消失しないための複数ノードのストレージへの冗長書込手法の設計、評価を行った。

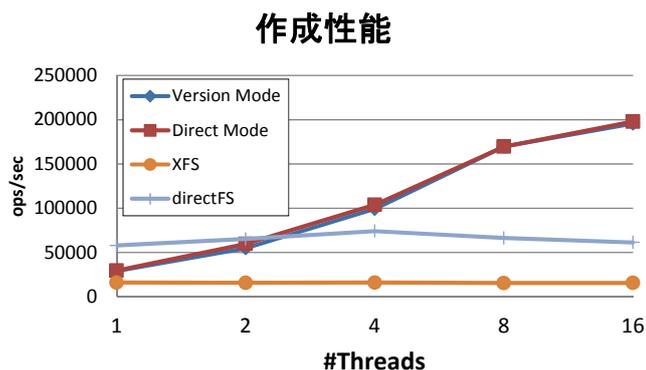
【エクストリームビッグデータの基盤技術】(建部、川島)

エクストリームビッグデータ (EBD) アプリケーションの実行に求められる、数万～数十万プロセスからの並列アクセスを想定した IOPS、プロセス数に比例した読込、書込アクセスバンド幅性能を目標として、分散オブジェクトストアの設計を行った。

本年度は、設計において重要な部分となる、数十万プロセスからの並列アクセスを可能とする分散メタデータサーバ、高速なアクセスを実現するローカルオブジェクトストア、大規模データに対する典型的な問合せを行う並列問合せ手法の概念設計を行った。分散メタデータの設計においてはこれまで分散ファイルシステムの分散メタデータサーバの研究開発をベースとし、より高効率な分散処理が可能となるように設計を行った。現在 EBD アプリケーションの実行に求められるアクセスパターン、API を他グループとのコ・デザインにより設計中であり、EBD アプリケーションで効率的な処理が可能となるよう進めている。

ローカルオブジェクトストアの設計においては、flash および不揮発性メモリにおいて可能となる操作をベースに、より効率的なデータアクセスが可能となるように設計を行った。具体的には OpenNVM を用いて、ローカルオブジェクトストアと範囲検索可能な Key Value ストアの設計を行った。ローカルオブジェクトストアでは、OpenNVM で可能となるスパースアドレス空間と、不可分書込を用い、スレッドセーフな設計を行った。従来の i ノードをベースにする設計では多

段の間接参照が性能を落とす原因となっていたが、スパースアドレスを用いたリージョンベースの設計によりこの間接参照を回避した。この設計を元に、現在プロトタイプ実装を進め、検証を行っている。図VI-9にこれまでの性能結果を示す。提案手法である Version Mode、Direct Mode では並列クライアント数を増やすと性能が向上し、16 スレッドで 190,000 ops/sec を達成した。一方、従来手法である directFS や XFS では、並列クライアント数を増やしても性能は向上していない。



図VI-9 エクストリームビッグデータ処理基盤のプロトタイプにおける性能評価

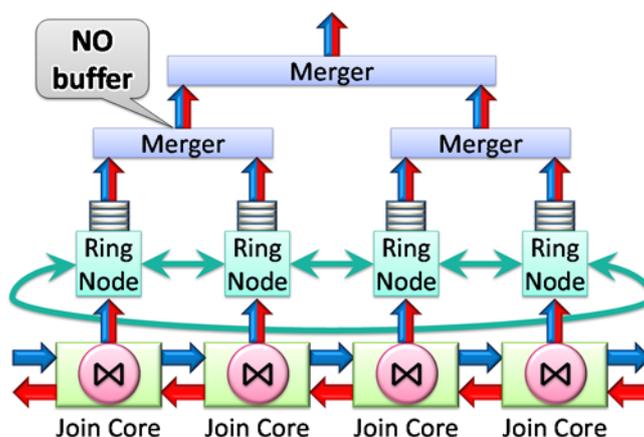
範囲検索可能な Key Value ストアの設計では、OpenNVM で提供される Key Value ストアに対して、範囲検索を可能とするためインメモリの B+木を利用する。並列アクセスを可能とするためには、スレッドセーフなノンブロッキング B+木が必要であるが、その設計がほぼ完了し、現在設計の検証段階にある。

【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】(建部)

文部科学省が進める革新的ハイパフォーマンスコンピューティングインフラ (HPCI) の HPCI 共用ストレージ、素粒子物理学データ共有システム JLDG のシステムソフトウェアとして利用される Gfarm ファイルシステムの整備を行った。具体的には、それぞれのファイルについてチェックサムを自動的に計算することによるファイル損傷検知機能、運用監視システムにおける監視項目の整備、不具合修正、ドキュメントの更新などである。この結果として、Gfarm バージョン 2.5.8.6 をリリースした。

【高性能ストリームデータ処理に関する研究】(川島)

2つのストリームデータを高速に結合する従来研究としてハンドシェイクジョインがある。ハンドシェイクジョインの結果回収パイプラインにはデータがオーバーフローしやすいという欠点が存在する。本研究ではその欠点を克服するために適応的マージ機構を提案した。FPGA 上に提案システムを実装し、オリジナルのハンドシェイクジョインと比較した結果、5倍程度の性能向上を得た。

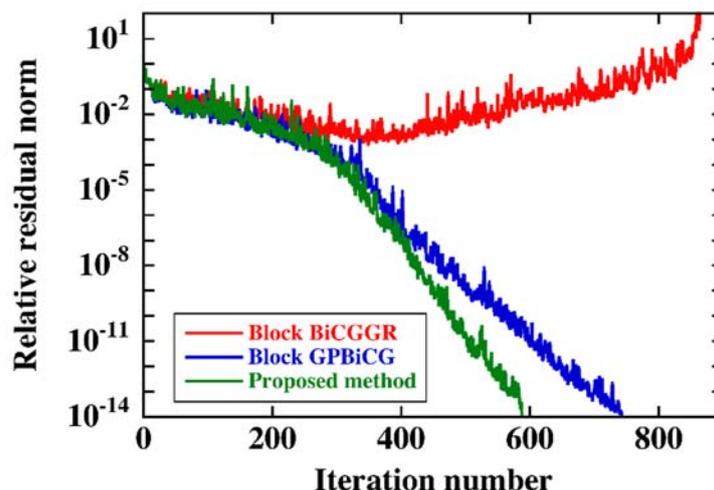


図VI-10 ストリーム結合

【Block Krylov 部分空間反復法に関する研究】(多田野)

複数右辺ベクトルをもつ連立一次方程式の数値解法である、Block Krylov 部分空間反復法の研究を行った。Block Krylov 部分空間反復法では、右辺ベクトル数が増加すると数値的に不安定な状況に陥り、残差の発散や停滞を引き起こすことがある。また、計算過程に発生する誤差の影響で、最終的に得られる近似解の精度が劣化する場合もある。

本研究では、残差の収束性向上、及び近似解の精度劣化を回避するアルゴリズムを構築した。格子 QCD 計算で現れる連立一次方程式（行列サイズ：1,572,864、右辺ベクトル数：12）に対して実験を行った。図VI-11 に示すように、提案手法は従来手法である Block BiCGGR 法、Block GPBiCG 法よりも少ない反復回数で残差が収束しており、高い収束性を示している。また、近似解の精度の指標である真の相対残差の値は、Block GPBiCG 法は 2.3×10^{-7} であるのに対し、提案法は 1.2×10^{-14} となり、提案法は高精度の近似解を生成することが分かった。



図VI-11 Block BiCGGR 法、Block GPBiCG 法、及び提案法の相対残差履歴

4. 外部資金の獲得状況

1. 文科省委託研究「次世代 IT 基盤構築のための研究開発将来のスーパーコンピューティングのための要素技術の研究開発」 課題名「演算加速機構を持つ将来の HPCI システムに関する調査研究の研究開発」 H24～H25 年度, 42,929 千円(H25) (代表:佐藤三久)
2. JST 国際科学技術共同研究推進事業 (戦略的国際共同研究プログラム) 課題名「ポストペタスケール・コンピューティングのためのフレームワークとプログラミング」 H22～H25 年度, 8,446 千円 (H25) (代表:佐藤三久)
3. 多国間国際研究協力事業 (G8 Research Councils Initiative) 研究課題「エクサスケールの気候シミュレーションを実現する技術(Enabling Climate Simulation at Extreme Scale)」 H23～H25 年度, 2,090 千円 (H25) (代表:佐藤三久)
4. JST CREST 研究領域「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」, 「ポストペタスケール時代に向けた演算加速機構・通信機構統合環境の研究開発」, H24～H29 年度, 77,180 千円 (H25) (代表:朴泰祐)
5. 多国間国際研究協力事業 (G8 Research Councils Initiative) 研究課題「エクサスケール規模の核融合シミュレーション (Nuclear Fusion Simulation at Exascale)」 H23～H25 年度, 8,640 千円 (H25) (代表:朴泰祐)
6. JST CREST 研究領域「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」, 「数値計算ライブラリによる超並列複合システムの階層的抽象化に関する研究 H24～28 年度, H25 14,820 千円 (共同研究者:高橋大介)
7. 科学研究費補助金 新学術領域研究 (研究領域提案型)「大規模並列環境における数値計算アルゴリズム」 H22～26 年度, H25 3,770 千円 (分担:高橋大介)
8. 科学研究費補助金 基盤研究 (C)「エクサスケール計算環境に向けた高速フーリエ変換のアルゴリズムに関する研究」 H24～26 年度, H25 1,300 千円 (代表:高橋大介)
9. JST CREST 研究領域「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」, 「ポストペタスケールデータインテンシブサイエンスのためのシステムソフトウェア」, H23 年度～H27 年度, 40,245 千円 (H25) (代表:建部修見)
10. JST CREST 研究領域「ビッグデータ統合利活用のための次世代基盤技術の創出・体系化」, 「数値計算ライブラリによる超並列複合システムの階層的抽象化に関する研究 H25～30 年度, 2,000 千円 (H25) (共同研究者:建部修見)

11. 科学研究費補助金 基盤研究 (C)「リアルタイム事象検知基盤に関する研究」H24～26 年度, 1,100 千円 (H25) (代表: 川島英之)
12. 科学研究費補助金 基盤研究 (B)「高性能計算のための抽象化に基づく資源管理システムソフトウェア」H25～27 年度, 1,000 千円 (H25) (分担: 川島英之)
13. 科学研究費補助金 基盤研究 (A)「大規模・異種の時空間データ統合で生じる矛盾を許容するサイエンスクラウド基盤」H24～26 年度, 800 千円 (H25) (分担: 川島英之)
14. 共同研究,「ストリームデータ処理における異常検知基盤の構築 (H25 年度)」日立製作所, 300 万円 (H25 年度) (代表: 川島英之)

5. 研究業績

(1) 研究論文

1. 埜 敏博, 児玉 祐悦, 朴 泰祐, 佐藤 三久, "Tightly Coupled Accelerators アーキテクチャに基づく GPU クラスタの構築と性能予備評価", 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, Vol.6, No.4, pp.14-25, 2013.
2. 梅田 宏明, 埜 敏博, 庄司 光男, 朴 泰祐, 稲富 雄一, "フラグメント分子軌道法に現れる Fock 行列の GPGPU 化", 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, Vol.6, No.4, pp.26-37, 2013.
3. 扇谷 豪, 三木 洋平, 朴 泰祐, 森 正夫, 中里 直人, "計算宇宙物理のための GPU クラスタ向け並列 Tree Code の開発と性能評価", 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, Vol.6, No.3, pp.58-70, 2013.
4. Y. Miki, D. Takahashi and M. Mori, "Highly scalable implementation of an N-body code on a GPU cluster", Computer Physics Communications, Vol. 184, No. 9, pp. 2159--2168 (2013).
5. Ken T. Murata, Hidenobu Watanabe, Kazunori Yamamoto, Eizen Kimura, Masahiro Tanaka, Osamu Tatebe, Kentaro Ukawa, Kazuya Muranaga, Yutaka Suzuki, Hirotsugu Kojima, "A high-speed data processing technique for time-sequential satellite observation data", IEICE Communications Express, Vol.3, No.2, pp.74-49, 2014 (doi: 10.1587/comex.3.74)
6. Eric S. Fukuda, Hideyuki Kawashima, Taro Fujii, Koichiro Furuta, Tetsuya Asai and Masato Motomura, "C-based Design of Window Join for Dynamically Reconfigurable Hardware", Journal of Computer Science and Engineering, Volume 20, Issue 2, November 2013.

7. Masafumi Oyamada, Hideyuki Kawashima, and Hiroyuki Kitagawa. 2013. “Data Stream Processing with Concurrency Control”, SIGAPP Appl. Comput. Rev. 13, 2 (June 2013), 54-65.
8. T. Sakurai, Y. Futamura and H. Tadano, “Efficient parameter estimation and implementation of a contour integral-based eigensolver”, J. Alg. Comput. Tech., Vol. 7, No 3, pp. 249—269, 2013.
9. 山崎 育朗, 今倉 暁, 多田野 寛人, 櫻井 鉄也, “残差最小性に基づく Krylov 部分空間反復解法に対する疎行列用直接解法を用いた前処理のパラメータ推定”, 日本応用数学会論文誌, Vol. 23, No. 3, pp. 381—404, 2013.
10. A. Imakura, L. Du and H. Tadano, “A weighted Block GMRES method for solving linear systems with multiple right-hand sides”, JSIAM Letters, Vol. 5, pp. 65—68, 2013.

(2) 学会発表

(A) 招待講演

1. Mitsuhsa Sato, Issues for Exascale Accelerated Computing - system architecture and programming, 7th Int'l. Conf. on PGAS Programming Models.
2. T. Boku, “Nu-FuSE Exascale Simulations and the XMP programming language”, Exascale Applications and Software Conference, Edinburgh, April 2013.
3. T. Boku, “Toward Exa-scale Accelerated Computing”, Int. HPC Forum China, Changsha, May 2013.
4. 朴泰祐, “G8 NuFuSE プロジェクトにおけるプラズマコードの大規模並列化/GPU化”, プラズマシミュレーションシンポジウム2013, 土岐, 2013年9月.
5. T. Boku, “Accelerated Computing Unified with Communication Towards Exascale”, CODESIGN China 2013, Guilin, October 2013.
6. 児玉 祐悦, “将来の演算加速機構について”, 計算分子化学研究拠点第4回研究会, 2013年9月.
7. 児玉祐悦, 朴泰祐, 埴敏博, 佐藤三久, 梅村雅之, “超並列GPUクラスタHA-PACSにおけるGPU間直接通信機構”, 大学ICT推進推進協議会年次大会, 2013年12月.

8. 児玉 祐悦, ”スーパーコンピュータにおけるアクセラレータ技術”, 情報処理学会第 76 回全国大会「エクサスケールを目指す技術開発最前線」, 2014年3月.
9. D. Takahashi, “Implementation of Parallel FFTs on GPU Clusters”, 2014 Conference on Advanced Topics and Auto Tuning in High Performance and Scientific Computing (2014 ATAT in HPSC), National Taiwan University, Taipei, Taiwan, March 2014.
10. Osamu Tatebe, Gfarm: Present Status and Future Evolution, OpenSFS APAC Lustre User Group, Tokyo, October 17, 2013.
11. 建部修見, Gfarmファイルシステムの実装と応用事例、第4回地域間インタークラウドワークショップ、沖縄、2014年3月.
12. Hideyuki Kawashima, “Taming Big Data Streams”, The International Symposium on Embedded Multicore/Manycore System-on-Chip (MCSoc-13), Tokyo, Japan, September 26-28, 2013, Keynote talk.

(B) その他の学会発表(査読付)

1. Hitoshi Murai and Mitsuhsa Sato: An Efficient Implementation of Stencil Communication for the XcalableMP PGAS Parallel Programming Language, In Proc. 7th Int'l. Conf. on PGAS Programming Models (2013)
2. Masahiro Nakao, Hitoshi Murai, Takenori Shimosaka and Mitsuhsa Sato: Productivity and Performance of the HPC Challenge Benchmarks with the XcalableMP PGAS language, In Proc. 7th Int'l. Conf. on PGAS Programming Models (2013).
3. Akihiro Tabuchi, Masahiro Nakao, Mitsuhsa Sato: A Source-to-Source OpenACC Compiler for CUDA. Euro-Par Workshops 2013: 178-187
4. Miwako Tsuji, Mitsuhsa Sato, Maxime R. Hugues, Serge G. Petiton: Multiple-SPMD Programming Environment Based on PGAS and Workflow toward Post-petascale Computing. ICPP 2013: 480-485

5. Tatsuya Abe, Toshiyuki Maeda, Mitsuhsa Sato: Model Checking Stencil Computations Written in a Partitioned Global Address Space Language. IPDPS Workshops 2013: 365-374
6. Tomotake Nakamura, Mitsuhsa Sato: XMP-IO function and its application to MapReduce on the K computer. PARCO 2013: 35-42
7. 小田嶋 哲哉, 朴 泰祐, 佐藤 三久, 埴 敏博, 児玉 祐悦, Raymond Namyst, Samuel Thibault, Olivier Aumage, "GPU クラスタ向け並列言語 XMP-dev における GPU/CPU 動的負荷分散機能", 2014 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム HPCS2013 論文集, 2014.
8. 埴 敏博, 児玉 祐悦, 朴 泰祐, 佐藤 三久, "Tightly Coupled Accelerators アーキテクチャに基づく GPU クラスタの構築", 先進的計算基盤システムシンポジウム SACSIS2013 論文集, 2013.
9. T. Odajima, T. Boku, M. Sato, T. Hanawa, Y. Kodama, R. Namyst, S. Thibault, O. Aumage, "Adaptive Task Size Control on High Level Programming for GPU/CPU Work Sharing", Proc. of Int. Workshop on Advances of Distributed and Parallel Processing 2013 (ADPC-2013, with ICA3PP-2013), Vietri sul Mare, LNCS-8286 Part II, pp.59-68, 2013.
10. T. Hanawa, Y. Kodama, T. Boku, M. Sato, "Interconnect for Tightly Coupled Accelerators Architecture", Proc. of HotInterconnect? 2013, San Jose, 2013.
11. T. Hanawa, Y. Kodama, T. Boku, M. Sato, "Tightly Coupled Accelerators Architecture for Minimizing Communication Latency among Accelerators", Proc. of 3rd Int. Workshop on Accelerators and Hybrid Exascale Systems (AsHES 2013, with IPDPS2013), Boston, CD-ROM, 2013.
12. Y. Yamaguchi, K. Fujinami, A. Sugiura and Y. Kodama, "A Study of a Three-Dimensional Multiphase-Flow Simulator", International Conference on Field Programmable Logic and Applications, 1-4, Sep 2013.
13. Y. Kodama, T. Boku, T. Hanawa, M. Sato, "HA-PACS/TCA: Tightly Coupled Accelerators for Low-Latency Communication", The 4th AICS International Symposium, poster, Dec. 2013.

14. S. Ochiai, Y. Yamaguchi and Y. Kodama, “The Flexible Sound Synthesizer on an FPGA”, International Symposium on Computing and Networking, 104-111, Dec. 2013.
15. D. Mukunoki and D. Takahashi, “Using Quadruple Precision Arithmetic to Accelerate Krylov Subspace Methods on GPUs”, Proc. 10th International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics (PPAM 2013), Part I, Workshop on Numerical Algorithms on Hybrid Architectures, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 8384, pp. 632--642, Springer-Verlag, 2014.
16. T. Hiragushi and D. Takahashi, “Efficient Hybrid Breadth-First Search on GPUs”, Proc. 13th International Conference on Algorithms and Architectures for Parallel Processing (ICA3PP 2013), Part II, 2013 International Symposium on Advances of Distributed and Parallel Computing (ADPC 2013), Lecture Notes in Computer Science, Vol. 8286, pp. 40--50, Springer International Publishing, 2013.
17. D. Takahashi, “Implementation of Parallel 1-D FFT on GPU Clusters”, Proc. 2013 IEEE 16th International Conference on Computational Science and Engineering (CSE 2013), pp. 174—180, 2013.
18. Y. Sato, M. Miwa, S. Takeuchi and D. Takahashi, “Optimizing Objective Function Parameters for Strength in Computer Game-Playing”, Proc. 27th AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI-13), pp. 869—875, 2013.
19. D. Mukunoki and D. Takahashi, “Optimization of Sparse Matrix-vector Multiplication for CRS Format on NVIDIA Kepler Architecture GPUs”, Proc. 13th International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2013), Part V, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 7975, pp. 211--223, Springer-Verlag, 2013.
20. Hiroki Ohtsuji, Osamu Tatebe, "Optimized Communication Layer for Exa-scale Storage Systems", PRAGMA Students Workshop, Beijing, October 16, 2013
21. Li Xieming, Osamu Tatebe. Design of Data-Aware Scheduler, PRAGMA Students Workshop, October 16, 2013
22. Fuyumasa Takatsu, Kohei Hiraga, and Osamu Tatebe, Object Storage for High Speed Storage Device, PRAGMA Students Workshop, October 16 2013

23. Naoko Kosugi, Naoki Kodama, Sachiko Shimizu, Shunsuke Saruwatari, Tsutomu Terada, Hiroaki Kazui, Koichi Yamashita, Hideyuki Kawashima, Masayuki Hata, "A Prototype System of Remote Music Therapy Using the Latest Communication Technology in Japan", The 15th International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services (iiWAS2013) , pp. 671-676.
24. Naotaka Nishimura, Hideyuki Kawashima, Hiroyuki Kitagawa, "A High Throughput Complex Event Detection Technique with Bulk Evaluation", 5th International Workshop on Streaming Media Delivery and Management Systems In Conjunction with 7th 3PGCIC-2013 Conference, pp. 624-629.
25. Yasin Oge, Masato Yoshimi, Takefumi Miyoshi, Hideyuki Kawashima, Hidetsugu Irie and Tsutomu Yoshinaga, "An Efficient and Scalable Implementation of Sliding-Window Aggregate Operator on FPGA", The First International Symposium on Computing and Networking (CANDAR), pp. 112--121.
26. Masahiro Oke, Hideyuki Kawashima, "A Multiple Query Optimization Scheme for Change Point Detection on Stream Processing System", SHORT PAPER, The 7th International Workshop on Business Intelligence for the Real Time Enterprise (BIRTE 2013) in conjunction with International Conference on Very Large Databases (VLDB).
27. Yasin Oge, Masato Yoshimi, Takefumi Miyoshi, Hideyuki Kawashima, Hidetsugu Irie, Tsutomu Yoshinaga (2013): Wire-Speed Implementation of Sliding-Window Aggregate Operator over Out-of-Order Data Streams. In: IEEE 7th International Symposium on Embedded Multicore/Many-core SoCs (MCSoc-13), pp. 55-60, 2013.
28. H. Tadano, Improvement of numerical stability of a Block Krylov subspace method for computing high accuracy solutions, International Conference on Simulation Technology (JSST2013), 2013.

(C) その他の学会発表(査読無)

1. Takenori Shimosaka, Hitoshi Murai, Mitsuhsa Sato: A communication library between multiple sets of MPI processes for a MPMD model. EuroMPI 2013: 147-148
2. 中尾昌広, 佐藤三久. “京速コンピュータ「京」における CGPOP Miniapp の性能評価“, 第 139 回 HPC 研究会, 2013 年 5 月, 東京大学 柏の葉キャンパス (千葉)

3. 中尾昌広, 佐藤三久. “京速コンピュータ「京」における PGAS モデルによる 気象コード NICAM の実装”, 2013 年並列/分散/協調処理に関する『北九州』サマー・ワークショップ (SWoPP 北九州 2013), 研究報告 ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), Vol.2013-HPC-140, pp.1-5, 2013 年 8 月, 北九州 国際会議場.
4. 藤井 久史, 埜 敏博, 児玉 祐悦, 朴 泰祐, 佐藤 三久, 藏増 嘉伸, Mike Clark, "GPU 向け QCD ライブラリ QUDA の TCA アーキテクチャによる実装", 2014-HPC-143, 2014.
5. 奴賀 秀男, 朴 泰祐, 藤田 典久, 中尾 昌広, 佐藤 三久, William Tang, "並列言語 XcalableMP による核融合シミュレーションコードの開発", 2013-HPC-142, 2013.
6. 藤井 久史, 埜 敏博, 児玉 祐悦, 朴 泰祐, 佐藤 三久, "TCA アーキテクチャによる並列 GPU アプリケーションの性能評価", 2013-HPC-140, 2013.
7. 藤田 典久, 奴賀 秀男, 朴 泰祐, 井戸村 泰宏, "GPU クラスタ HA-PACS における核融合シミュレーションコードの性能評価", 2013-HPC-140, 2013.
8. 小田嶋 哲哉, 朴 泰祐, 佐藤 三久, 埜 敏博, 児玉 祐悦, Raymond Namyst, Samuel Thibault, Olivier Aumage, "並列言語 XMP-dev における GPU/CPU 動的負荷分散機能", 2013-HPC-140, 2013.
9. 児玉 祐悦, 山口 佳樹, 中里 直人, 牧野 淳一郎, 朴 泰祐, 佐藤 三久, "大規模 SIMD 型アクセラレータの検討", 2013-HPC-140, 2013.
10. 下坂 健則, 佐藤 三久, 朴 泰祐, William Tang, "京速コンピュータ「京」における核融合シミュレーションコード GTC-P の評価", 2013-HPC-139, 2013.
11. 高橋 航平, 埜 敏博, 朴 泰祐, 児玉 祐悦, 扇谷 豪, 佐藤 三久, "各種アプリケーションにおける GPGPU 対 Many Core Processor の性能比較", 2013-HPC-139, 2013.
12. 丸山裕士, 矢葺徹, 山口佳樹, 児玉祐悦, “FPGA を用いた実時間動画像手ブレ補正システムの構築”, 信学技報, Vol.113, No.22, pp.13-18, 2013 年 4 月.
13. 藤浪健太, 杉浦彰, 山口佳樹, 児玉祐悦, “3D 流体解析用 FPGA システムの構築”, 信学技報, Vol.113, No.22, pp.37-42, 2013 年 4 月.

14. 藤浪健太, 山口佳樹, 児玉祐悦, “FPGA による三次元混相流シミュレータの設計と検証”, 信学技報, Vol.113, No.52, p.103-108, 2013 年 5 月.
15. 落合優, 山口佳樹, 児玉祐悦, “FPGA サウンドシンセサイザとそのユーザインタフェースについて”, 信学技報, Vol.113, No.52, pp.85-90, 2013 年 5 月.
16. 金紅坤, 山口佳樹, 児玉祐悦, “FPGA 用マルチコアプロセッサをターゲットとしたマルチポート共有キャッシュシステムの提案”, 信学技報, Vol.113, No.324, pp.65-70, 2013 年 11 月.
17. 藤浪健太, 山口佳樹, 児玉祐悦, “格子法に基づく 3 次元流体シミュレータの高速化”, 数値流体力学シンポジウム講演論文集, D06-2, 1-4, 2013 年 12 月.
18. T. Nagashima, Y. Yamaguchi and Y. Kodama, “A study of SuperH processor cores on an FPGA”, International Workshop on Innovative Architecture for Future Generation High-Performance Processors and Systems, Mar. 2014.
19. 棕木大地, 高橋大介 : GPU における 4 倍精度浮動小数点演算を用いたクリロフ部分空間法の高速化, 情報処理学会研究報告, 2013-HPC-140, No. 35, 2013.
20. 平櫛貴章, 高橋大介 : GPU クラスタにおける幅優先探索の高速化, 情報処理学会研究報告, 2013-HPC-139, No. 12, 2013.
21. Hiroki Ohtsuji, Osamu Tatebe, "High-throughput Remote File Access for Exa-scale Storage Systems", IWCST2013, Hangzhou, October 26, 2013
22. 渡邊英伸, 黒澤隆, 一岡翔太郎, 木村映善, 村田健史, 建部修見, UDT を用いた並列ファイル転送技術, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) ,2013-HPC-139(8),1-8 (2013-05-22)
23. 村田 健史, 渡邊 英伸, 山本 和憲, 久保田 康文, 建部 修見, 田中 昌宏, 深沢 圭一郎, 木村 映善, 鶴川 健太郎, 村永 和哉, 鈴木 豊, 磯田 総子, Gfarm/Pwrake による NICT サイエンスクラウドの並列分散処理技法, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) ,2013-HPC-139(9),1-6 (2013-05-22)

24. Marilia Melo, Osamu Tatebe, "Fault Tolerance Design for Hadoop MapReduce on Gfarm Distributed Filesystem",研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) ,2013-HPC-140(14),1-5 (2013-07-24)
25. 鷹津冬将 , 平賀弘平 , 建部修見, 不揮発性デバイス向けの Object Storage の設計, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) ,2013-HPC-140(12),1-7 (2013-07-24)
26. 李燮鳴 , 建部修見, データ配置を考慮したタスクスケジューリング, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) ,2013-HPC-140(19),1-5 (2013-07-24)
27. 渡邊英伸 , 亀澤祐一 , 高杉英利 , 平野一樹 , 今井潔 , 村田健史 , 建部修見, 広域分散ファイルシステム Gfarm の SLA 評価手法, インターネットと運用技術シンポジウム 2013 論文集,2013,9-16 (2013-12-05)
28. 建部修見, 原田浩, 實本英之, 佐藤仁, 平川学, HPCI 共用ストレージの性能評価, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) ,2013-HPC-142(8),1-6 (2013-12-09)
29. 大辻弘貴, 建部修見, 分散ストレージシステムに対する低オーバーヘッド冗長化書き込み手法の提案と評価, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) ,2013-HPC-142(10),1-6 (2013-12-09)
30. 鷹津冬将, 平賀弘平, 建部修見. 不揮発性デバイス向けの Object Storage の実装と評価.研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) ,2014-HPC-143(1),1-7 (2014-02-24)
31. 田中昌宏, 建部修見, ワークフローシステム Pwrake における I/O 性能を考慮したタスクスケジューリング, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) ,2014-HPC-143(3),1-10 (2014-02-24)
32. 川島英之 : In-DSMS 分析へ向けて. 電子情報通信学会技術研究報告. 知的環境とセンサネットワーク 113(38), 13-18, 2013 年 5 月.
33. 西村直孝, 川島英之 : AIS を用いた複合イベント処理の効率化. 情報処理学会研究報告. UBI, [ユビキタスコンピューティングシステム]/2013(13)/pp.1-6. 2013 年 5 月.
34. 川島英之, 黒川茂莉 : 推論処理を有するストリーム処理基盤. 情報処理学会研究報告. UBI, [ユビキタスコンピューティングシステム]/2014(38)/pp.1-6. 2014 年 3 月.
35. 川島英之, 黒川茂莉 : ストリームイベントの効率的なオンライン名寄せ処理. 電子情報通信学会総合大会. 2014 年 3 月.

36. 多田野 寛人, 石川 陽一, 今倉 暁, “双共役残差型反復解法の複数右辺ベクトル対応版への拡張と性能評価”, 日本応用数学会 2013 年度年会, 2013.
37. 齊藤 周作, 多田野 寛人, 今倉 暁, “Block BiCGSTAB(*l*)法の構築と安定化”, 第 10 回日本応用数学会 研究部会連合発表会, 2013.

(D) 著書

6. 異分野間連携・国際連携等

1. 戦略的国際科学技術協力推進事業（日仏共同研究）「ポストペタスケールコンピューティングのためのフレームワークとプログラミング」（佐藤）
2. 多国間国際研究協力事業 G8 Research Councils Initiative “Nuclear Fusion Simulation for Exascale”
日本代表 PI（朴）
3. 多国間国際研究協力事業 G8 Research Councils Initiative “Exascale Climate Simulation” 日本代表 PI（佐藤）

7. 国際活動

1. M. Sato: Program Committee, CCGRID 2013
2. M. Sato: Program Committee, Cluster 2013
3. M. Sato: Program Committee, EASC 2013
4. M. Sato: Program Committee, EuroMPI 2013
5. M. Sato: Program Committee, FTXS 2013
6. M. Sato: Program Committee, HeteroPar 2013
7. M. Sato: Program Committee, IWOMP 2013
8. M. Sato: Program Committee, PGAS 2013
9. M. Sato: Track Chair, HiPC 2013
10. T. Boku: Program Committee, CASS 2013
11. T. Boku: Program Committee, HiPC 2013
12. T. Boku: Organizing Chair, HPC in Asia Session at ISC2013

13. T. Boku: Program Committee, ICS2013
14. T. Boku: Program Committee, Int. Conf. HPCS 2013
15. T. Boku: Program Committee on Tutorial, ISC2013
16. T. Boku: Program Committee, PMAM2013
17. T. Boku: Area Chair on System Software Area, SC13
18. T. Boku: Committee member of ACM Gordon Bell Prize 2013
19. D. Takahashi: Program Committee, The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC13)
20. D. Takahashi: Program Committee, The International Conference on Computational Science (ICCS 2013)
21. D. Takahashi: Review Committee, The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC13) Doctoral Showcase
22. D. Takahashi: Program Committee, 15th IEEE International Conference on High Performance Computing and Communications (HPCC 2013)
23. D. Takahashi: General Chair, IEEE 7th International Symposium on Embedded Multicore/Many-core SoCs (MCSoc-13) Special Session on Legacy HPC Application Migration (LHAM 2013)
24. O. Tatebe: Program Committee, IEEE/ACM International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC13)
25. O. Tatebe: Program Committee, 5th IEEE International Conference on Cloud Computing Technology and Science (CloudCom 2013)
26. O. Tatebe: Program Committee, International Supercomputing Conference
27. O. Tatebe: Program Committee, The 42nd International Conference on Parallel Processing (ICPP)
28. O. Tatebe: Program Committee, International Conference on P2P, Parallel, Grid, Cloud and Internet Computing (3PGCIC 2013)
29. O. Tatebe: Program Committee, Architecture, Languages, Compilation and Hardware support for Emerging ManYcore systems (ALCHEMY) workshop
30. O. Tatebe: Program Committee, Workshop on Big Data Management in Clouds (BigDataCloud)
31. O. Tatebe: Program Committee, The Sixth International Conference on Complex, Intelligent, and Software Intensive Systems (CISIS-2013)

32. O. Tatebe: Scientific Committee, 11th International Meeting on High-Performance Computing for Computational Science (VECPAR 2013)
33. O. Tatebe: Program Committee, International Conference on Grid and Pervasive Computing (GPC)
34. O. Tatebe: Program Committee, IEEE International Conference on High Performance Computing and Communications (HPCC)
35. H. Kawashima: Program Committee, 4th International Workshop on Streaming Media Delivery and Management Systems, In Conjunction with 8th 3PGCIC-2013 Conference

8. 教育

・学位論文（博士課程）

1. 椋木大地, 博士（工学）, A study on linear algebra operations using extended precision floating-point arithmetic on GPUs (GPU における拡張精度浮動小数点演算を用いた線形計算の研究), 筑波大学大学院システム情報工学研究科博士論文, 2013 年 11 月（指導：高橋大介）
2. 佐藤佳州, 博士（工学）, ゲームにおける棋譜の性質と強さの関係に基づいた学習, 筑波大学大学院システム情報工学研究科博士論文, 2014 年 3 月（指導：高橋大介）

・学位論文（修士課程）

1. Alamri Hussain Ali A, 修士（工学）, Evaluation of Many-core processor with Analysis of Sparse Matrix Vector Multiplication（疎行列ベクトル積の解析によるメニーコアプロセッサの評価）、筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 2013 年 3 月（指導：佐藤三久）
2. 石川 奏太, 修士（工学）, Non-Homogeneous 置換モデルを実装した分子系統解析プログラムの並列化、筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 2013 年 3 月（指導：佐藤三久）（計算科学ディグリープログラム）
3. 金 紅坤, 修士（工学）, FPGA 用マルチコアプロセッサの提案と実装, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 2013 年 3 月（指導：児玉祐悦）
4. 鷹津冬将, 修士（工学）, 高性能計算機向けのストレージシステムに関する研究, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 2014 年 3 月（指導：建部修見）

5. 李燮鳴, 修士 (工学), 大規模データ処理基盤のタスクスケジューリング, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 2014 年 3 月 (指導: 建部修見)
6. Marilia Rodrigues de Melo e Silva, 修士 (工学), Fault Tolerance Design for Hadoop MapReduce on Gfarm Distributed File System (Gfarm 分散ファイルシステム上での Hadoop MapReduce の耐故障性設計に関する研究), 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 2014 年 3 月 (指導: 建部修見)

・ 学外教育

1. 佐藤三久: 神戸大学システム情報学研究科・客員教授

9. 社会貢献

1. 佐藤三久: PC クラスタコンソーシアム 理事 XMP 規格部会会長
2. 佐藤三久: 情報処理学会フェロー
3. 佐藤三久: 大川出版賞 「岩波講座 計算科学 別巻 スーパーコンピュータ」(共著)
4. 朴泰祐: 先進的計算基盤システムシンポジウム SACSIS 運営委員会委員
5. 朴泰祐: 情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会運営委員
6. 朴泰祐: Annual Meeting on Advanced Computing System and Infrastructure (ACSI) 2015 組織委員長
7. 児玉祐悦: 情報処理学会 デジタルプラクティス査読委員
8. 児玉祐悦: 電子情報通信学会 論文誌査読委員
9. 児玉祐悦: 情報処理学会 計算機アーキテクチャ研究会運営委員
10. 児玉祐悦: Cool Chips プログラム委員
11. 高橋大介: 先進的計算基盤システムシンポジウム SACSIS2013 プログラム委員
12. 建部修見: 特定非営利団体つくば OSS 技術支援センター理事長
13. 建部修見: インターネットカンファレンス 2013 プログラム委員
14. 建部修見: 情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会運営委員
15. 川島英之: 情報処理学会 データベースシステム研究会 幹事
16. 川島英之: 情報処理学会論文誌編集委員会委員

17. 川島英之: 電子情報通信学会 知的環境とセンサネットワーク研究会 委員
18. 多田野寛人: 日本応用数学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会 幹事
19. 多田野寛人: 日本応用数学会「若手の会」研究部会 運営委員
20. 多田野寛人: 日本応用数学会「応用数理」編集委員
21. 多田野寛人: 情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム
HPCS2014 実行委員
22. 多田野寛人: 情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム
HPCS2014 プログラム委員
23. 多田野寛人: 先進的計算基盤システムシンポジウム SACSIS2013 プログラム委員

10. その他

1. 筑波大学計算科学研究センター・HPC サマーセミナー開催

VII. 計算情報学研究部門

VII-1. データ基盤分野

1. メンバー

教授	北川 博之
准教授	天笠 俊之
学生	大学院生 32 名、学類生 7 名

2. 概要

e サイエンスにおいて、大規模データの管理や活用は極めて重要な課題となっている。計算情報学研究部門データ基盤分野は、データ工学関連分野の研究開発を担当している。具体的には、異種データベースや多様な情報源を統合的に扱うための情報統合基盤技術、データ中に埋もれた知識や規則を発見するためのデータマイニング・知識発見技術、インターネット環境において様々なデータを統合的に扱うための XML 関連技術の研究を継続して行った。また、センター内の地球環境研究部門や素粒子物理研究部門、産業技術総合研究所、JAXA 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

(関連研究費：文部科学省受託研究，大川情報通信基金，三菱電機受託研究)

(1) 指定イベント駆動型ストリーム処理

近年、ネットワークパケットやログデータやセンサデータ等、永続的に生成されるストリームデータが増加してきている。このストリームデータを扱うために、ストリーム処理エンジンが開発されている。従来のストリーム処理エンジンは、どのストリームソースから来たデータに対しても問合せが実行され、結果が生成される。しかし、応用処理によってはこれは必ずしも望ましいと言えないこともある。例えば、複数のセンサストリームを統合処理している場合、あるセンサ値により異常が観測された場合に他の関連センサデータを集約分析したいというような場合、全てのセンサ値に連動して統合処理を行うことは無駄である。また、統合処理においてはタイマー等に連動して周期的にデータの分析や集約を行いたいという場合も多い。このような要求に対応するためには、従来のようなあらゆる種類の新規データの到着に処理が連動するのではなく、特定の指定イベントのみに連動した指定イベント駆動型のストリーム処理が必要である。また、指定イベント駆動型のストリーム処理は、ストリーム型データ分析処理とバッチ型データ分析処理を自然に融合する上でも重要である。

本研究では、指定イベント駆動型ストリーム処理を実現したストリーム統合基盤システム **JsSpinner** のプロトタイプを開発した。**JsSpinner** は、多様な不均質データの統合処理に対応するため、多くのストリーム処理エンジンが採用しているリレーショナルストリームではなく、半構造データの JSON 形式のストリームや情報源を対象とするように設計されている。指定イベント駆動型ストリーム処理では、問合せにおいてユーザによってマスタストリームとして指定されたストリームソースから新規のデータが到着したときのみ、問合せが評価される。

実際のストリーム処理エンジンにおける問合せ処理では、冗長な処理を避けるため差分計算が行われる。指定イベント駆動型ストリーム処理を差分計算処理の枠組みの中で実現する最もナイーブな方法は、マスターストリームからの新規タプルに起因する結果か、それ以外の新規タプルに起因する結果かにマーキングを行い、マスターマークのあるタプルが到着した時点でのみ、最終的な問合せ結果の出力を行うというものである。しかし、ナイーブな方式では、最終的な問合せ結果に

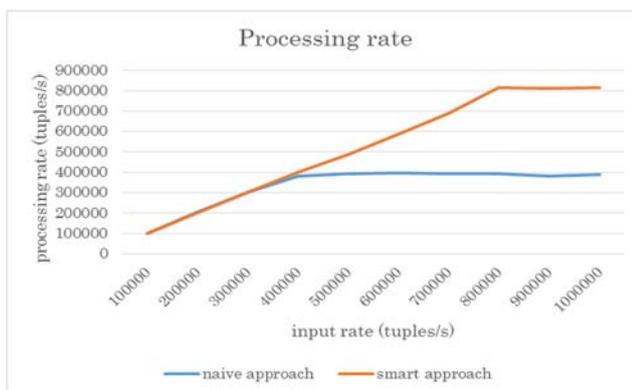


図 1 スマート方式とナイーブ方式の比較

寄与しない多くの無駄な処理が発生し得る点が問題としてある。そこで本研究では、マスターストリームデータを処理するためのマスタウィンドウ演算子と非マスターストリームデータを処理するためのスマートウィンドウ演算子を導入するスマート方式を提案した。予備的な比較実験の結果はスマート方式の有効性を確認した。

(2) トランザクショナルストリーム処理

データストリームの分析処理のためにデータストリーム処理エンジンが用いられている。データストリームのより詳細な解析処理のためには、データストリームであるログデータとリレーショナルデータベースなどの外部リソース中のユーザデータを結合する処理などが必要になる場合がある。しかしこのような処理を実行する際に外部リソースに対して更新処理が施される場合を考えると、連続的問合せの一回の処理結果の中で、一貫して同じ外部リソースの状態を参照しなくなるという一貫性の問題が発生しうる。そこで、我々は連続的問合せの一回の処理結果における外部リソースの参照が一貫性を有していることを保証する、トランザクショナルストリーム処理の概念を既に提案している。本研究では、差分計算処理の枠組みにおいてトランザクショナルストリーム処理を実現するための方式を提案し、その有効性を検証した。具体的には、外部リソースの更新を監視するモニタ演算子を導入し、更新イベントをストリームとして下流に伝搬することで参照の一貫性を保

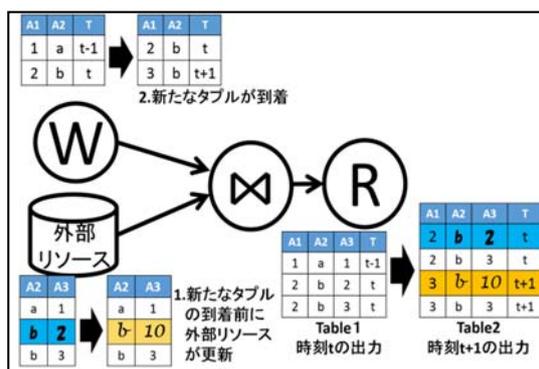


図 2 一貫性のない外部リソース参照

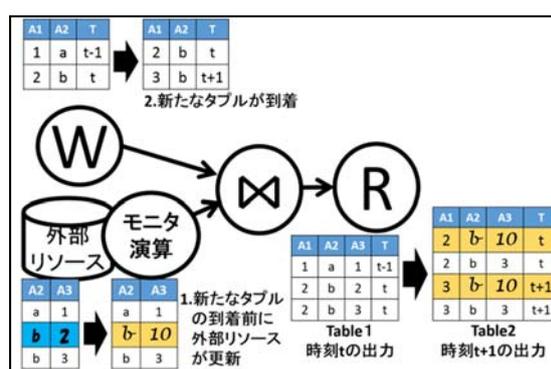


図 3 一貫性のある外部リソース参照

(3) ストリーム OLAP

近年、センサデータやマイクロログ等、連続的に生成され、配信されるようなストリームデータの増加に伴い、ストリーム処理エンジンが多数開発されてきている。一方、ストリームデータに対してより高いレベルの分析を行いたいというニーズが増加している。この代表例として、多次元データ分析(OLAP 処理)がある。ストリームデータに対して

OLAP 処理を行う研究として, Jiawei Han らはストリームデータに対する OLAP 処理を容易にする Stream Cube を提案している. ただし, ストリーム処理エンジンを活かした OLAP 処理については十分検討が行われていない.

そこで本研究では, ストリーム処理エンジンを用いた OLAP 処理を実現するための手法を検討した. 具体的には, エンジン側に連続的問合せを登録しておき, これらの登録しておいた問合せから OLAP 処理の結果として必要なデータを得る. OLAP 処理では, 分析対象のデータの次元 (属性) や次元内の階層の全ての組合せを頂点とする lattice を考える. 例えば, 商品情報 (商品 ID, 商品名, ジャンル, 顧客 ID, 顧客名, 地域, 売上額) のようなスキーマを考えると図のような lattice を構築できる.

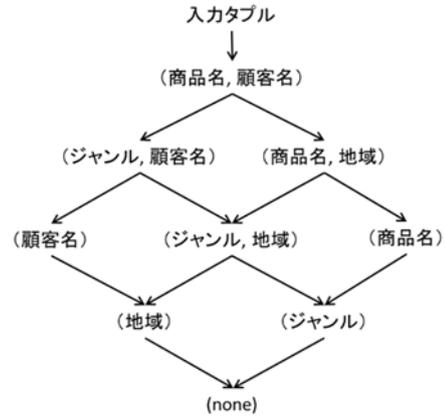


図 4 多段の集約レベル

lattice の各頂点は, OLAP 処理において集約する対象の次元の組合せに対応する. 最も単純には, lattice 内の全ての頂点の次元の組合せの実行すればよい. しかし一般には, lattice の全頂点数は膨大な数になることが多く, これらの全てをエンジンに登録することは, 処理性能上難しい場合が多い. また, 必ずしも全ての頂点に対応する集約値を常時取得し続けなくても, ユーザ要求に応じて導出できればよいという場合も多いと考えられる. そこで本研究では, lattice 内の一部の頂点のみを適切に選択し連続的問合せとして登録し, それ以外はユーザから求められたときのみ集約処理をし結果を生成する問合せ (オンデマンドに評価する問合せ) とすることで, 効率的な OLAP 処理を実現する.

どの問合せをエンジンに登録し, どの問合せをオンデマンドに評価する問合せとするかの最適な組み合わせの選択は一般に組合せ最適化問題となるため, 貪欲アルゴリズムを提案した. このアルゴリズムは, 最初に全ての集約問合せをオンデマンドに評価する問合せとしておき, それぞれをエンジンに登録したときの処理コストと登録する前の処理コストの差分が最も大きくなるものを順に選んでいく. また, 空間コストとして, エンジンに登録した集約問合せが保持する演算対象のタプル数と演算結果のタプル数の総数とする.

【2】 データマイニング・知識発見技術

(関連研究費: 文部科学省委託研究, 産総研基盤研究(A), 富士通研究所受託研究)

(1) 不確実データに対する外れ値検出

データや応用の多様化や, 各種センサデバイスの発達に伴い, 不確実性を伴うデータ処理に対する要求が高まっている. 例えば, GPS による位置情報には, 本質的に誤差が含まれており, その誤差を考慮した処理が求められる. 一方, 通常データからは著しく異なるデータ (外れ値) を検出する外れ値検出がさまざまな応用で利用されている. 不確実データに対して外れ値検出を行う場合, データの不確実性を考慮した上で検出処理を行うことが望ましい.

本研究では, ガウス分布に従う不確実性を持つデータに対する距離に基づく外れ値検出手法について検討した. 特に, 外れ値の度合いが大きいものから k 件の外れ値を検出するトップ k 外れ値検出のアルゴリズムを考案しその有効性を示した. 厳密な外れ値度を計算する上ではガウス分布を考慮した距離計算が必要であるが, それには多大な計

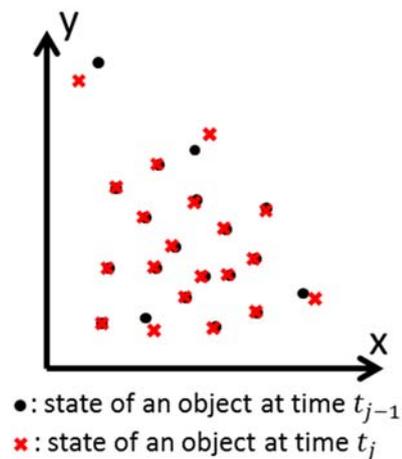


図 5 ストリームにおける外れ値

算コストが伴う。そこで、提案手法では、外れ値候補オブジェクトの外れ値度の上限と下限を求め、それに基づきトップ k 外れ値に入り得るかを判定する k とで、計算コストを大幅に削減する。

またさらに、静的なデータ集合ではなく、データがストリームとして系列的に到着する場合を想定し、それに対応した差分計算に基づく効率的な連続的外れ値検出の手法についても検討を行った。

(2) Twitter ユーザの位置推定

近年では、ソーシャルメディアの普及により、ソーシャルストリームの情報を利活用して実世界をモニタリングする研究が多く行われている。ソーシャルストリームの情報を利用する上で、時間と位置に関する情報が重要である。時間情報は比較的容易に得ることができるのに対し、位置情報の把握はかならずしも容易ではない。代表的な位置情報として情報発信者の居住地情報がある。しかし、多くの研究で指摘されているように、ソーシャルメディアユーザは自らの居住地を公開していないことが多い。本研究では、ストリーム情報源に対するメタデータ推定の具体的な事例として、マイクロブログユーザの居住地推定手法を開発した。

マイクロブログユーザの居住地推定を行う従来の研究は、大きくグラフベース手法とコンテンツベース手法に分類される。前者はユーザの友人関係等を示したグラフの分析がベースとなっており、後者は発信されたコンテンツの分析がベースとなっている。本研究においては、グラフベースとコンテンツベースの両手法に関して従来よりもより推定精度の高い手法を開発した。

○ソーシャルグラフにおけるグラフランドマークを用いた手法

従来のグラフベース手法の大部分は **closeness assumption** を基にしてユーザの居住地を推定している。**Closeness assumption** とは、ソーシャルグラフ上で接続されているユーザ同士（友人等）はその居住地が互いに近いという仮定である。しかし、ソーシャルグラフの性質によっては **closeness assumption** は必ずしも有効ではない。例えばある一般ユーザのアカウントと、そのユーザが興味を持っている企業などのアカウントがソーシャルグラフ上で接続されることがある。このような環境では **closeness assumption** はあまり有効でないことが多い。

そこで本研究では **closeness assumption** とは異なる **concentration assumption** を導入する。**Concentration assumption** とは、ソーシャルグラフ上には自らのフォロワー群の居住地がある地域に集中しているユーザが存在するという仮定である。このユーザのことをグラフランドマークと呼ぶ。グラフランドマークを用いると、「グラフランドマークのフォロワー群の居住地は互いに近い」という推定が可能になる。

提案手法 (landmark mixture model; LMM) は、グラフランドマークをフォローするユーザ群の居住地は互いに近いという仮定にもとづき、ユーザの居住地を確率分布でモデル化する手法である。まず全てのユーザに対して、そのユーザのフォロワー群の居住地の分布 (**dominance distribution**) を計算し、割り当てる。そして、あるユーザの居住地の分布をそのユーザがフォローするユーザ群の **dominance distribution** を混合することにより得る。得られた居住地の分布において確率密度が最大になる点を推定した居住地とする。

比較実験の結果を図 6 に示す。横軸は推定誤差 (単位:m) の値を示し、縦軸は推定誤差が対応する値以下であるユーザの割合、すなわち精度を示している。提案手法が他の手法を概ね上回っていることが分かる。

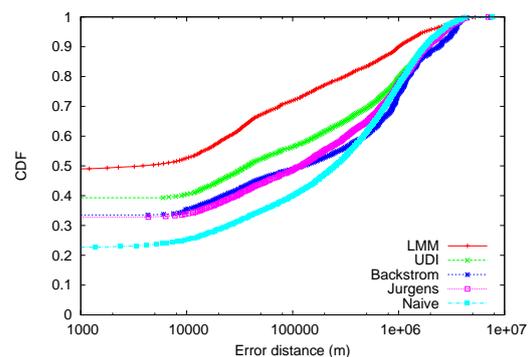


図 6 比較実験結果

○ソーシャルストリームを用いたオンライン居住地推定

ソーシャルストリームでは、ユーザが時々刻々と大量の投稿をしている。そのため、居住地推定の手がかりとなる情報もリアルタイムに増え続けており、コンテンツベース手法においても本来インクリメンタルに居住地を推定することが可能である。しかし、既存のコンテンツベース手法では、このようなインクリメンタルな処理は実現できていない。

本研究では、ソーシャルストリームから次々に得られるコンテンツを基に居住地を逐次推定することの出来る手法 (Online Location Inference Method; OLIM) を提案した。また、本手法ではコンテンツの時間的特徴を考慮することにより、temporally-local word という新しいローカルワードを導入する。Temporally-local word とは、従来の定常的な局所性を持つローカルワード (statically-local word) とは異なり、一時的な局所性を持つ単語のことである。本手法ではこれら 2 種類のローカルワードを併用する。

比較のための評価実験では、提案手法と四つの既存手法 (UDI, Cheng, Hecht, Kinsella) 及びナイーブな手法 (NaiveC) を比較した。ナイーブな手法とは、ユーザが投稿した地名のメドイドを計算する手法である。また、提案手法は二つのローカルワードを併用するものと、statically-localwords のみを用いるものとを比較した。

図 7 は各手法の精度の比較結果を示している。結果から、提案手法の精度が最も高いことが分かる。図 8 は時間を追って提案手法が推定誤差を減少させていく結果を示している。横軸はデータセットに含まれるツイートの時系列順に処理した時の処理したツイートの割合を表し、縦軸はその辞典での推定誤差の中央値を表している。結果から、推定誤差はオンライン推定により徐々に減少していくことが分かる。

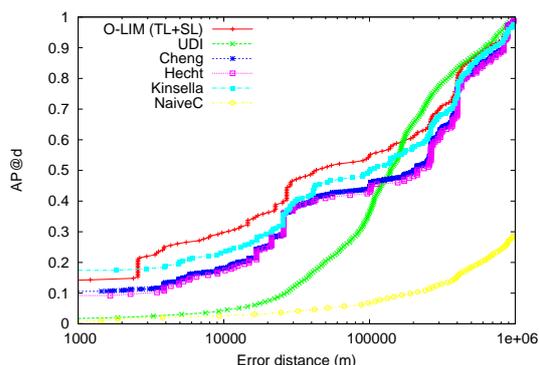


図 7 推定精度の比較

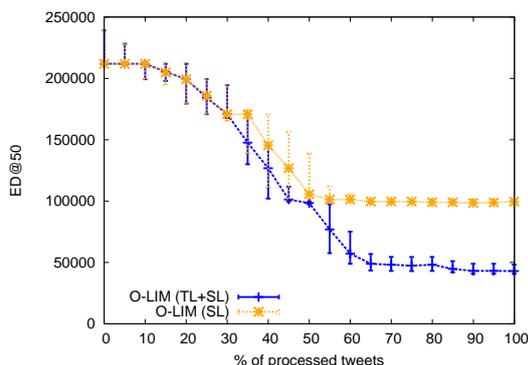


図 8 推定精度の時間変化

(3) GPU を用いた不確実トランザクションデータに対する確率的頻出アイテム集合マイニング

不確実性を含む大量のデータの処理のために、不確実データベースの研究が広く行なわれている。不確実データベースに対して、頻出アイテム集合マイニングを行なう手法がいくつか提案されているが、処理速度が遅いという問題がある。一方、GPU (Graphics Processing Unit) を用いた GPGPU (General Purpose computation on GPU) という手法が、高性能計算の分野で注目されている。GPGPU は、元々はグラフィック処理のための演算装置である

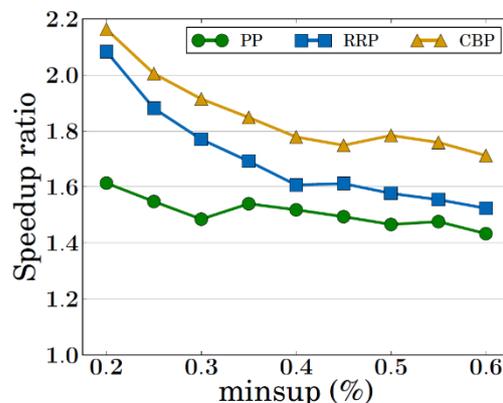


図 9 性能評価 (Kosarak データセット)

GPU を、その高い並列度をいかして汎用的な計算に利用するものである。

我々はこれまで単一 GPU を用いた不確実データベースに対する頻出アイテム集合マイニングの高速化のための手法を提案してきた。本研究では単一 GPU に対する手法をベースに、複数の GPU を搭載した複数のノードから構成されるクラスタ環境において、同様の処理を行う手法を提案する。複数 GPU を用いる利点として、GPU の増加による並列度の向上がある。また、GPU のメモリはそれほど大きくないが、複数 GPU にすることで利用可能なメモリ領域が増加し、巨大なデータを扱うことも可能となる。一方、複数 GPU を利用する上で問題になる点として、GPU 間でのデータ通信がある。通常、GPU は PCI-Express によって接続されているが、ここの通信のメモリバンド幅が小さいため、ボトルネックになる可能性が高い。そのため、GPU 間でのデータの依存をできるだけ削減することが望ましい。提案手法では、GPU 間でのデータ通信の削減に加え、負荷分散を行ない処理の高速化を図った。さらに、複数 GPU を持つノードからなるクラスタにおける手法も提案した。また、実験により、提案手法の性能を評価した。図 9 が実験結果である。NVIDIA Tesla M2090 を 2 台搭載した単一ノードの実験において、単一 GPU を利用した場合に比べて最大 2 倍程度の高速化が実現できている。また、スペースの都合で割愛するが、複数ノードを利用した環境でも高速化が達成されることを示した。

【3】 XML・Web プログラミング

(1) LINQ を用いた LOD 問合せ

政府や行政などの公共機関が保有する様々なデータを、再利用可能な形式で外部へ公開する取り組みをオープンデータと呼び、近年先進国を中心に積極的に推進されている。このような構造化されたデータを Web 上で公開、共有する一つの方法として Linked Open Data (LOD) が注目されている。

LOD では、一般に RDF (Resource Description Framework) フォーマットが用いられ、RDF データに対する問合せには、専用の問合せ言語である SPARQL が用いられる。しかしながら SPARQL の記述においては、問合せ言語の習得、LOD および RDF の関連技術についての知識が必要になる。また、RDF は本質的にはグラフ構造であり、LOD は複雑かつ冗長な構造になるため、これらの知識を持たない利用者が、LOD として公開されたオープンデータを利用するのは容易ではない。

そこで、本研究ではビューを用いた LINQ による LOD に対する問合せを提案した。予め LOD や RDF に知識のあるデータベース設計者らが LOD に対する JSON ビューを定義する。定義されたビューに対して、米マイクロソフト社が提供する .NET Framework の機能の一つである LINQ を用いて、C#等のプログラミング言語から LOD に対する問合せを記述する。より具体的には、まず設計者が、本手法で提案するビュー定義言語を用いて、ビュー定義を行う (図 10)。データの利用者は、ビュー定義に基づいて、LINQ 問合せを記述すると、システムが LINQ 問合せをビュー定義に基づき対応する情報源に対する SPARQL 問合せに書き換える。SPARQL 問合せの結果は、JSON 形式のデータに変換され、利用者に返却される。このように、利用者は SPARQL や LOD の詳細を知ることなく、LOD を利用することが可能となる。

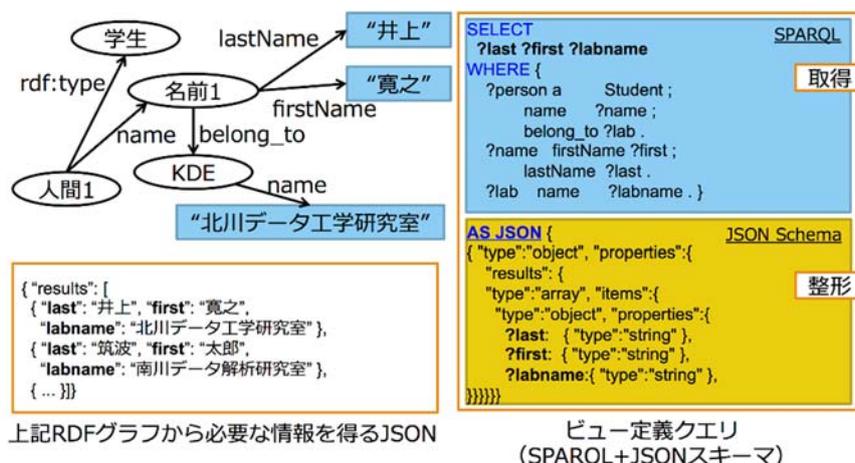


図 10 LOD に対する JSON ビューの定義

(2) 局所計算に基づく ObjectRank 推定

PageRank はリンク構造解析手法の一つであり、グラフ上のノードの重要度を評価する手法である。Web 検索やソーシャルネットワーク分析、バイオインフォマティクスなどの様々な分野に用いられている。しかし、PageRank は計算コスト が大きいという問題がある。また、多くの応用において、全てのノードにおける PageRank スコアは必ずしも必要でなく、少数のノードのスコアだけ計算できれば十分であるケースが多い。

この問題に対して、グラフ全体の情報を用いずに特定のノード（対象ノード の PageRank 値を計算する手法が提案されている。本研究では、Chen らの手法をベースに、より効率的な手法を提案した。Chen の手法では、PageRank スコアを計算したい対象ノードに対して、その周囲の影響力の強い部分グラフを同定する。あるノードの影響力はそのノードがエッジを張っているノードの影響力を用いて再帰的に計算することができるという特徴を用いて、反復計算を行わずに部分グラフを同定することができる。これにより、提案手法は PageRank 値の推定精度を維持したまま、効率的に対象ノードの PageRank 値 を推定することができる。

提案手法の性能を評価するために Twitter と Web グラフのデータセットを用いて評価実験を行った。実験結果より、提案手法は推定精度を維持しながら、高速に対象ノードの PageRank 値を推定できることが分かった。具体的には、Chen らの手法と比較して、提案手法は精度を維持したまま高速に PageRank 値を推定することができた (図 11)。

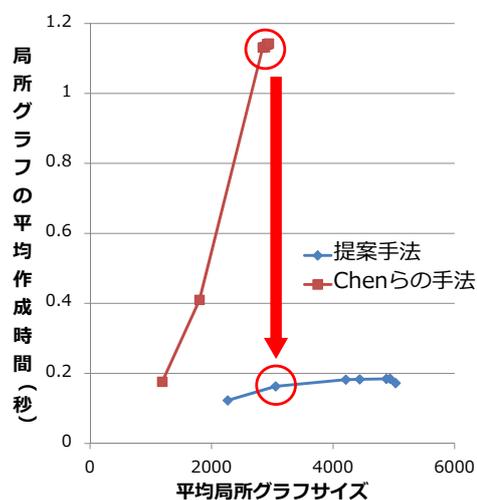


図 11 Web グラフを利用した実験結果

【4】 科学分野におけるデータベース応用

(1) GPV/JMA アーカイブ

地球環境研究部門と共同で、気象庁気象予報データベース「GPV/JMA アーカイブ」(<http://gpvjma.ccs.hpcc.jp>)の開発、および管理、運用を行っている。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。



(2) 格子 QCD データグリッド
ILDG/JLDG

Japan Lattice Data Grid (JLDG), International Lattice Data Grid (ILDG)は、格子 QCD 配位データを共有するためのデータグリッドである。素粒子物理研究部門と連解し、JLDG/ILDG の運営に継続参画している。

(3) X線天体観測データにおけるアウトバーストの類似検索

ブラックホール、中性子星などは X 線を発する天体として知られており、それらの天体には、短期間に大量の X 線を放出する「アウトバースト」という現象が存在することが知られている。また、JAXA 宇宙研海老沢教授らのグループにより、異なる X 線天体の間で、アウトバーストの X 線強度変化に類似性が見られることが近年明らかにされた。これは、背後にある物理過程の類似性を示す可能性があり興味深い。このため、海老沢教授らのグループと共同で、X 線天体の観測データを対象に、類似したアウトバーストパターンを検索する手法を研究開発している。

4. 教育

学生の指導状況

【学位論文】

<博士論文>

1. Salman Ahmed SHAIKH

A Study on Distance-based Outlier Detection on Uncertain Data

2. 村上 直

概念モデリングに基づく O/R マッピング手法に関する研究

3. 山口 祐人

A Study on User Location Inference in Social Media

4. 高橋 翼

系列データの匿名化に関する研究

5. 丸橋 弘治

A Study on Large Scale Graph Analysis Using Eigen Decomposition and Tensor Decomposition

<修士論文>

1. 西村 直孝

- 一括評価による複合イベント処理の高スループット化
2. 坂倉 悠太
リンク構造解析における部分グラフに基づいた効率的なノード評価値の推定
 3. 井上 寛之
Linked Open Data に対する多様な問合せ処理に関する研究
 4. 中村 高士
リポジトリを跨いだコミットトランザクションの推定に基づくロジカルカップリング検出手法
 5. Bou Savong
A Study on Keyword Search over XML Streams
 6. 石 剣峰
Modularity-based Clustering of Dynamic Graphs
 7. 林 史尊
GPU を用いた Canopy クラスタリングの高速化

< 特定課題研究報告書 >

財前 涼

字幕ダウンロード機能付き HDD レコーダ開発による字幕後付システムの実現
-HDD レコーダの GUI 及びサーバとの通信機能の実装-

< 学士論文 >

1. 岡田 莉奈
ソーシャルネットワークデータの距離関係の変化を抑制する k 匿名化アルゴリズム
2. 森 智彦
ソーシャルリーディングシステムにおけるデータの格納と検索に関する研究
3. 大西 誠
Twitter の即時性に着目したニュース記事のリアルタイムソーシャルアノテーション
4. 熊本 和正
テンソル分解によるユーザレビューの分析に関する研究
5. 小柳 涼介
XML データにおけるテキストおよび構造を考慮した効率的な類似検索

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

< 受賞 >

A1. 学生プレゼンテーション賞, 坂倉 悠太, 山口 祐人, 天笠 俊之, 北川 博之, "部分グラ

- フに基づく効率的な PageRank 推定", 第 6 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 2014), D6-4, 2014 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- A2. 学生プレゼンテーション賞, 林 史尊, 小澤 佑介, 天笠 俊之, 北川 博之, "GPU を用いた Canopy クラスタリングの高速化", 第 6 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 2014), D5-4, 2014 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- A3. 学生プレゼンテーション賞, 優秀インタラクティブ賞, 岡田 莉奈, 渡辺 知恵美, 北川 博之, "ソーシャルネットワークデータの距離関係の変化を抑制する k 匿名化アルゴリズム", 第 6 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 2014), E5-4, 2014 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- A4. 学生プレゼンテーション賞, 小柳 涼介, 天笠 俊之, 北川 博之, "テキストおよび構造の類似度に基づいた XML データに対する効率的な類似検索", 第 6 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 2014), D7-5, 2014 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- A5. 学生奨励賞, 大西 誠, 北川 博之, "ニュース記事の効率的なリアルタイムソーシャルアノテーション手法", 情報処理学会第 76 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2014), 3M-8, 2014 年 3 月 11 日～3 月 13 日.
- A6. 学生奨励賞, 小柳涼介, 天笠俊之, 北川博之, "大規模 XML データにおける効率的な重複データ検出", 情報処理学会第 76 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2014), 3N-8, 2014 年 3 月 11 日～3 月 13 日.
- A7. 日本データベース学会論文賞, 福角駿, 森嶋厚行, 品川徳秀, 北川博之, "DB 抽象化とゲーム理論に基づくマイクロブログからの構造データ抽出 GWAP の開発", 日本データベース学会論文誌, Vol. 11, No. 1, pp. 19-24, 2012.

<外部資金>

受託経費：文部科学省 (平成 25 年度)

研究課題：ビックデータ利活用のためのデータ連携技術に関するフェージビリティ
スタディ及び予備研究

研究代表者：北川 博之

配分金額：27,405,000 円 (直接経費 21,080,770 : 間接経費 6,324,230)

研究種目：基盤研究(A) (平成 24 年度～平成 26 年度)

研究課題：大規模・異種の時空間データ統合で生じる矛盾を許容するサイエンスクラウド
基盤 (研究代表者：小島功 (産総研))

研究分担者：北川 博之

配分金額：1,300,000 円 (直接経費 1,000,000 : 間接経費 300,000)

研究分担者：天笠 俊之

配分金額：2,210,000 円（直接経費 1,700,000：間接経費 510,000）

寄付金：大川情報通信基金（平成 25 年度）

研究課題：大規模実世界実時間情報基盤のための高度ストリーム処理

研究代表者：北川 博之

配分金額：1,000,000 円（直接経費 950,000：間接経費 50,000）

受託経費：三菱電機株式会社（平成 25 年度）

研究課題：時系列データベース・分析技術の研究開発

研究代表者：北川 博之・天笠 俊之

配分金額：500,000 円（直接経費 450,000：間接経費 50,000）

受託経費：株式会社富士通研究所（平成 25 年度）

研究課題：時系列データの分析基盤技術の研究

研究代表者：北川 博之・天笠 俊之

配分金額：2,000,000 円（直接経費 1,800,000：間接経費 200,000）

研究種目：基盤研究(C)（平成 25 年度～平成 27 年度）

研究課題：EPU3.0 を核とした知識集積型ソーシャルリーディング基盤に関する研究

研究代表者：天笠 俊之

配分金額：1,690,000 円（直接経費 1,300,000：間接経費 390,000）

研究種目：基盤研究(A)（平成 25 年度）

研究課題：災害後の復旧・復興における共有情報管理

研究分担者：天笠 俊之

配分金額：1,300,000 円（直接経費 1,000,000：間接経費 300,000）

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

<学術雑誌論文>

- J1. Rong-Hua Li, Jianquan Liu, Jeffrey Xu Yu, Hanxiong Chen, and Hiroyuki Kitagawa, "Co-occurrence Prediction in a Large Location-based Social Network", *Frontiers of Computer Science*, Vol. 7, No. 2, pp. 185-194, April 2013.
- J2. 林 史尊, 天笠 俊之, 北川 博之, 海老沢 研, 中平 聡志, "動的タイムワーピング距離を用いた X 線天文データの類似検索", *宇宙科学情報解析論文誌 第二号*, pp. 19-27,

June 2013.

- J3. Masafumi Oyamada, Hideyuki Kawashima, and Hiroyuki Kitagawa, "Data Stream Processing with Concurrency Control", SIGAPP Appl. Comput. Rev., Vol. 13, No. 2, pp. 54-65, June 2013.
- J4. 山口祐人, 伊川洋平, 天笠俊之, 北川博之, "ソーシャルメディアにおけるローカルイベントを用いたユーザ位置推定手法", 情報処理学会論文誌データベース (TOD60), Vol. 6, No. 5, pp. 23-37, December 2013.
- J5. 丹治寛佳, 森嶋厚行, 井ノ口宗成, 北川博之, "Web 情報を用いた竜巻経路推定支援のためのクラウドソーシング技術開発の試み", 情報処理学会論文誌データベース (TOD60), Vol. 6, No. 5, pp. 95-106, December 2013.

<査読付き国際会議論文>

- C1. Yutaka Kabutoya, Tomoharu Iwata, Hiroyuki Toda, and Hiroyuki Kitagawa, "A Probabilistic Model for Diversifying Recommendation Lists", Proc. 15th Asia-Pacific Web Conference (APWeb 2013), Sydney, Australia, pp. 348-359, April 4-6, 2013.
- C2. Salman Shaikh and Hiroyuki Kitagawa, "Fast Top-k Distance-based Outlier Detection on Uncertain Data", Proc. 14th International Conference on Web-Age Information Management (WAIM 2013), Beidaihe, China, LNCS7923, pp. 301-313, June 14-16, 2013.
- C3. Hiroyuki Inoue, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "An ETL Framework for Online Analytical Processing of Linked Open Data", Proc. 14th International Conference on Web-Age Information Management (WAIM 2013), Beidaihe, China, LNCS7923, pp. 111-117, June 14-16, 2013.
- C4. Tadashi Murakami, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "DBPowder: A Flexible Object-Relational Mapping Framework based on a Conceptual Model", Proc. 37th IEEE International Computer Software and Applications Conference (COMPSAC 2013), Kyoto, Japan, pp. 589-598, July 22-26, 2013.
- C5. Yusuke Kozawa, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Parallel and Distributed Mining of Probabilistic Frequent Itemsets Using Multiple GPUs", Proc. 24th International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2013), Prague, Czech Republic, pp. 145-152, August 26-30, 2013.
- C6. Kenji Gonnokami, Atsuyuki Morishima, Shigeo Sugimoto, Hiroyuki Kitagawa, "Condition-Task-Store: A Declarative Abstraction for Microtask-based Complex Crowdsourcing", Proc. First VLDB Workshop on Databases and Crowdsourcing (DBCrowd 2013), pp. 20-25, August 26-30, 2013.

- C7. Kousuke Nakabasami, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Querying MongoDB with LINQ in a Server-side JavaScript Environment", Proc. 2nd International Workshop on Advances in Data Engineering and Mobile Computing (DEMoC 2013), Gwangju, Korea, pp. 344-349, September 4-6, 2013.
- C8. Yuto Yamaguchi, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Landmark-Based User Location Inference in Social Media", Proc. 1st ACM Conference on Online Social Networks (COSN 2013), Boston, USA, pp. 223-234, October 7-8, 2013.
- C9. Atsuyuki Morishima, Erika Yumiya, Masami Takahashi, Shigeo Sugimoto, Hiroyuki Kitagawa, "Efficient Filtering and Ranking Schemes for Finding Inclusion Dependencies on the Web", Proc. 22nd International Conference on Information and Knowledge Management (CIKM), pp. 763-768, October 29, 2013.
- C10. Yuta Sakakura, Yuto Yamaguchi, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "A Local Method for ObjectRank Estimation", Proc. 15th International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services (iiWAS 2013), Vienna, Austria, pp. 92-101, December 2-4, 2013.
- C11. Eri Kataoka, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "A System for Social Reading based on EPUB3", Proc. 15th International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services (iiWAS 2013), Vienna, Austria, pp. 72-76, December 2-4, 2013.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

該当なし

B) 一般講演

- C1. Yutaka Kabutoya, Tomoharu Iwata, Hiroyuki Toda, and Hiroyuki Kitagawa, "A Probabilistic Model for Diversifying Recommendation Lists", Proc. 15th Asia-Pacific Web Conference (APWeb 2013), Sydney, Australia, pp. 348-359, April 4-6, 2013.
- C2. Salman Shaikh and Hiroyuki Kitagawa, "Fast Top-k Distance-based Outlier Detection on Uncertain Data", Proc. 14th International Conference on Web-Age Information Management (WAIM 2013), Beidaihe, China, LNCS7923, pp. 301-313, June 14-16, 2013.
- C3. Hiroyuki Inoue, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "An ETL Framework for Online Analytical Processing of Linked Open Data", Proc. 14th International Conference on Web-Age Information Management (WAIM 2013), Beidaihe, China, LNCS7923, pp. 111-117, June 14-16, 2013.

- C4. Tadashi Murakami, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "DBPowder: A Flexible Object-Relational Mapping Framework based on a Conceptual Model", Proc. 37th IEEE International Computer Software and Applications Conference (COMPSAC 2013), Kyoto, Japan, pp. 589-598, July 22-26, 2013.
- C5. Yusuke Kozawa, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Parallel and Distributed Mining of Probabilistic Frequent Itemsets Using Multiple GPUs", Proc. 24th International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2013), Prague, Czech Republic, pp. 145-152, August 26-30, 2013.
- C6. Kenji Gonnokami, Atsuyuki Morishima, Shigeo Sugimoto, Hiroyuki Kitagawa, "Condition-Task-Store: A Declarative Abstraction for Microtask-based Complex Crowdsourcing", Proc. First VLDB Workshop on Databases and Crowdsourcing (DBCrowd 2013), pp. 20-25, August 26-30, 2013.
- C7. Kousuke Nakabasami, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Querying MongoDB with LINQ in a Server-side JavaScript Environment", Proc. 2nd International Workshop on Advances in Data Engineering and Mobile Computing (DEMoC 2013), Gwangju, Korea, pp. 344-349, September 4-6, 2013.
- C8. Yuto Yamaguchi, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Landmark-Based User Location Inference in Social Media", Proc. 1st ACM Conference on Online Social Networks (COSN 2013), Boston, USA, pp. 223-234, October 7-8, 2013.
- C9. Atsuyuki Morishima, Erika Yumiya, Masami Takahashi, Shigeo Sugimoto, Hiroyuki Kitagawa, "Efficient Filtering and Ranking Schemes for Finding Inclusion Dependencies on the Web", Proc. 22nd International Conference on Information and Knowledge Management (CIKM), pp. 763-768, October 29, 2013.
- C10. Yuta Sakakura, Yuto Yamaguchi, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "A Local Method for ObjectRank Estimation", Proc. 15th International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services (iiWAS 2013), Vienna, Austria, pp. 92-101, December 2-4, 2013.
- C11. Eri Kataoka, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "A System for Social Reading based on EPUB3", Proc. 15th International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services (iiWAS 2013), Vienna, Austria, pp. 72-76, December 2-4, 2013.

(3) 国内学会・研究会発表

- A) 招待講演
該当なし

B) その他の発表

- P1. 福角駿, 森嶋厚行, 品川徳秀, 北川博之, "DB 抽象化とゲーム理論に基づくマイクロブログからの構造データ抽出 GWAP の開発", 日本データベース学会, 2013 年 6 月 22 日
- P2. Salman Ahmed Shaikh, Hiroyuki Kitagawa, "Differential Outlier Detection on Uncertain Streams of the Gaussian Distribution", The 5th International Workshop with Mentors on Databases, Web and Information Management for Young Researchers (iDB2013), Sapporo, Japan, July 21 - 23, 2013.
- P3. Yuto Yamaguchi, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "Landmark-Based User Location Inference on Social Media", The 5th International Workshop with Mentors on Databases, Web and Information Management for Young Researchers (iDB2013), Sapporo, Japan, July 21 - 23, 2013.
- P4. Yuta Sakakura, Yuto Yamaguchi, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "A Local Method for ObjectRank Estimation", The 5th International Workshop with Mentors on Databases, Web and Information Management for Young Researchers (iDB2013), Sapporo, Japan, July 21 - 23, 2013.
- P5. Hiroyuki Inoue, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "An ETL Framework for Online Analytical Processing of Linked Open Data", The 5th International Workshop with Mentors on Databases, Web and Information Management for Young Researchers (iDB2013), Sapporo, Japan, July 21 - 23, 2013.
- P6. 中村 高士, 早瀬 康裕, 北川 博之, "ソフトウェアプロダクト間での Logical Coupling 検出に向けた予備的な調査", 第 182 回ソフトウェア工学研究発表会, 2013 年 10 月 24~10 月 25 日.
- P7. 小澤 佑介, 天笠 俊之, 北川 博之, "データ分割と協調的マージに基づく GPU 上の効率的ソートアルゴリズム", 第 6 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 2014), A2-1, 2014 年 3 月 3 日~3 月 5 日.
- P8. Savong Bou, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "Path-based Keyword Search over XML Streams", 第 6 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 2014), A1-5, 2014 年 3 月 3 日~3 月 5 日.
- P9. 西村 直孝, 川島 英之, "リンク集約とパタンキャッシュを用いた複合イベント処理の高性能化", 第 6 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 2014), D3-3, 2014 年 3 月 3 日~3 月 5 日.
- P10. 井上 寛之, 天笠 俊之, 北川 博之, "LINQ を用いた Linked Open Data に対する問合せ", 第 6 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 2014), D7-2, 2014 年 3 月 3 日~3 月 5 日.
- P11. 坂倉 悠太, 山口 祐人, 天笠 俊之, 北川 博之, "部分グラフに基づく効率的な

- PageRank 推定", 第 6 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 2014), D6-4, 2014 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- P12. 林 史尊, 小澤 佑介, 天笠 俊之, 北川 博之, "GPU を用いた Canopy クラスタリングの高速化", 第 6 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 2014), D5-4, 2014 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- P13. 王 岩, 北川 博之, "An Efficient Execution Scheme for Designated Event-based Stream Processing", 第 6 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 2014), D3-2, 2014 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- P14. 黄 峻, 小澤 佑介, 天笠 俊之, 北川 博之, "GPGPU を用いた不確実時系列データ類似検索の高速化", 第 6 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 2014), D5-1, 2014 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- P15. 中挾 晃介, 北川 博之, 天笠 俊之, "ストリーム処理エンジンを用いたストリームデータの OLAP 処理", 第 6 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 2014), D3-1, 2014 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- P16. 岡田 莉奈, 渡辺 知恵美, 北川 博之, "ソーシャルネットワークデータの距離関係の変化を抑制する k 匿名化アルゴリズム", 第 6 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 2014), E5-4, 2014 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- P17. 小柳 涼介, 天笠 俊之, 北川 博之, "テキストおよび構造の類似度に基づいた XML データに対する効率的な類似検索", 第 6 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 2014), D7-5, 2014 年 3 月 3 日～3 月 5 日.
- P18. 権守健嗣, 森嶋厚行, 北川博之, "マイクロタスク型クラウドソーシング処理の変換", 第 6 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 2014), 2014 年 3 月 3 日.
- P19. 福田 宏樹, 早瀬 康裕, 北川 博之, "クラス名の文法構造と周辺の識別子を用いたクラスの命名支援", 情報処理学会第 76 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2014), 2M-5, 2014 年 3 月 11 日～3 月 13 日.
- P20. 大西 誠, 北川 博之, "ニュース記事の効率的なリアルタイムソーシャルアナリシス手法", 情報処理学会第 76 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2014), 3M-8, 2014 年 3 月 11 日～3 月 13 日.
- P21. 小柳涼介, 天笠俊之, 北川博之, "大規模 XML データにおける効率的な重複データ検出", 情報処理学会第 76 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2014), 3N-8, 2014 年 3 月 11 日～3 月 13 日.
- P22. 岡田莉奈, 渡辺知恵美, 北川博之, "ノード間の距離関係を考慮したソーシャルネットワークにおける k 匿名化", 情報処理学会第 76 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2014), 5N-5, 2014 年 3 月 11 日～3 月 13 日.
- P23. 熊本和正, 天笠俊之, 丸橋弘治, 北川博之, "テンソル分解を用いたレビューデータの

分析", 情報処理学会第 76 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2014), 6N-7, 2014 年 3 月 11 日～3 月 13 日.

(4) 著書、解説記事等

井上克郎, 楠本真二, 後藤厚宏, 鶴林尚靖, 北川博之, "実践的情報教育協働ネットワーク enPiT", 情報処理, Vol.55, No.2, pp.194-197, February 2014.

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

- 地球環境研究部門との連携：気象庁気象予報データベース「GPV/JMA アーカイブ」(<http://gpvjma.ccs.hpcc.jp>)の開発, 管理, 運用.
- 素粒子物理研究部門との連携：Japan Lattice Data Grid (JLDG), International Lattice Data Grid (ILDG)の運営.
- 産業技術総合研究所との連携：大規模・異種の時空間データ統合で生じる矛盾を許容するサイエンスクラウド基盤に関する研究.
- Carnegie Mellon University との国際共同研究に関する準備。(2014 年度より共同研究実施中.)

8. 管理・運営

北川博之教授

- 学外
 - 文部科学省・情報技術人材育成のための実践教育ネットワーク形成事業「分野・地域を越えた実践的情報教育協働 NW」 ビジネスアプリケーション分野代表.
- 学内
 - システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻：高度 IT・実践 NW 統括.
 - 計算科学研究センター：計算情報学研究部門長, 計算科学振興室長.

天笠俊之准教授

- 学外
 - つくばライフサイエンス推進協議会 情報システム構築 WG 委員長
- 学内
 - CS 専攻・情報 (科) 学類学生委員会 委員長

9. 社会貢献・国際貢献

北川博之教授

- 国際委員等
 - 国際ジャーナル編集委員：IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, World Wide Web Journal

- 国際会議運営委員：WAIM Steering Committee Member, DASFAA Steering Committee Member Emeritus
- 国際会議共同委員長：WAIM2013
- 国際会議共同最優秀論文委員長：DASFAA2013
- 国際会議共同パネル委員長：ASONAM2014
- 国際会議プログラム委員会委員：DASFAA2013, MDM2013, PAKDD2013, DEXA2013, IDEAS2013, CoopIS2013, DASFAA2014, MDM2014, PAKDD2014, IDEAS2014, DEXA2014
- 国際会議アドバイザー委員：SRDS2014
- 国内委員等
 - 日本学術会議連携会員
 - 日本データベース学会副会長
 - (独) 科学技術振興機構・戦略的創造研究推進事業「ビッグデータ統合利活用のための次世代基盤技術の創出・体系化」領域アドバイザー
 - (独) 情報通信研究機構・高度通信・放送研究開発委託研究評価委員会委員
 - 公益財団法人国際科学技術財団・国際科学技術財団 2014 年研究助成選考委員
 - FIT2014 第 13 回情報科学技術フォーラム現地実行副委員長

天笠俊之准教授

- 国際委員等
 - 国際学会プログラム委員：BSI2013, AICCSA 2013, WAIM2013, DEMoC2013, SITIS2013, FutureTech 2013, iiWAS2013
- 国内委員等
 - データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM フォーラム) 2014 プログラム委員長
 - 電子情報通信学会論文誌「データ工学と情報マネジメント特集号」編集幹事
 - 日本データベース学会論文誌編集委員
 - 情報科学技術フォーラム (FIT) 2013 プログラム委員

10. その他

特になし

VII-2. 計算メディア分野

1. メンバー

教授	大田 友一
准教授	亀田 能成, 北原 格
学生	大学院生 20 名, 学類生 3 名

2. 概要

当グループが属する計算情報学研究部門は、「中長期的観点から計算科学の研究を抜本的に発展させる斬新な方法の開拓研究を行う部門」として、2004 年度に発足した部門であり、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。

純粋なデータ処理の効率や速度が求められる通常のスーパーコンピュータ分野とは違い、人間に纏わる情報を処理対象とする計算科学では、情報処理の時間軸を人間に合わせる必要が必須である。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を中心に公開しているが、それだけでなく、イノベーション・ジャパン・大学見本市等の展示の機会も利用して広報活動にも努めてきた。本年度の報告では、下記の 4 件の研究について概要を説明する。

【1】拡張現実感による顔表情操作を用いたビデオ通話方式：画像処理技術を用いて拡張した顔表情を拡張現実提示することにより、豊かな表情表出を伴う映像コミュニケーションメディアを実現する。（主な研究費：科研費挑戦的萌芽研究（北原）2010～2012 年度）

【2】空撮画像との対応点情報を用いたモバイルカメラの位置・姿勢推定手法：航空機などから撮影された空撮画像と、スマートフォン等のモバイル端末で撮影した画像間の対応点情報を用いて、モバイル端末の位置と姿勢を推定する手法を実現する。地理情報システム(GIS: Geographic Information System)が有する空撮画像データベースに、本手法を適用することにより、モバイル端末を持ったユーザの位置・姿勢を推定する。（主な研究費：科研費若手研究A（北原）2006～2008 年度）

【3】RGB-D カメラを用いた教示者の作業の AR 再表示：AR 技術を用いて、実際の作業環境に合わせてチュートリアルビデオ中の教示者の様子を 3 次元的に再生することを提案

する。(主な研究費：科研費基盤研究(B) (亀田) 2011～2013 年度)

【4】時空間拘束を利用した車両前照灯の路上反射位置推定：道路監視カメラ映像を用いた夜間における車両位置の3次元位置推定を実現する。

3. 研究成果

【1】 拡張現実感による顔表情操作を用いたビデオ通話方式

人と人とのコミュニケーションでは、感情や関心を相手に正確に伝えることが重要であるが、言語情報だけでは、それらを十分伝えられない場合がある。そのような場合、我々は、表情、しぐさ、声の抑揚といった非言語情報を用いることで、情報を補っている。そのため、会話相手の表情表出が乏しい場合には、その感情や関心を正しく読み取ることが困難となり、結果として円滑なコミュニケーションが妨げられることが懸念される。

我々は、画像処理技術を用いて顔の表情を操作し、それを拡張現実 (AR: Augmented Reality) 提示することにより、豊かな表情表出を伴った映像コミュニケーションメディアの実現を目的とした研究に取り組んでいる。

本研究で提案するシステムでは、Fig.1 に示すように、様々な表情画像を用いた事前学習により、表情変化を表現するパラメトリック空間を構築し、入力された顔画像をその空間に射影して得られるパラメータを操作することで、表情操作を実現する。表情識別処理を行うことなく、表情の操作が可能であるため、微細な表情変化にも対応可能という特長を有する。撮影から提示までの処理をリアルタイム実行することにより、ビデオ通話システムへの応用を試みる。

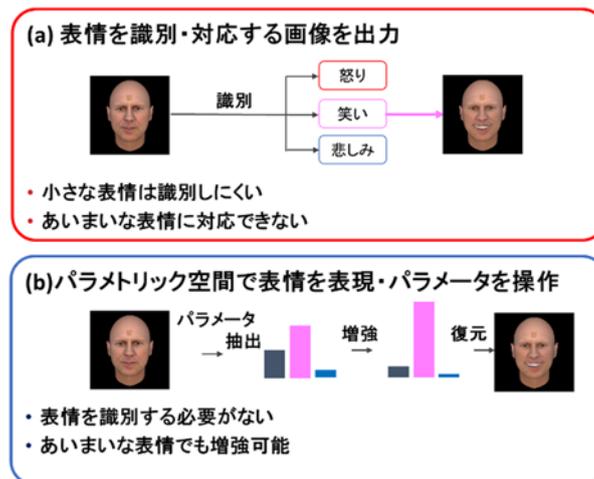


Fig. 1 表情操作のアプローチ

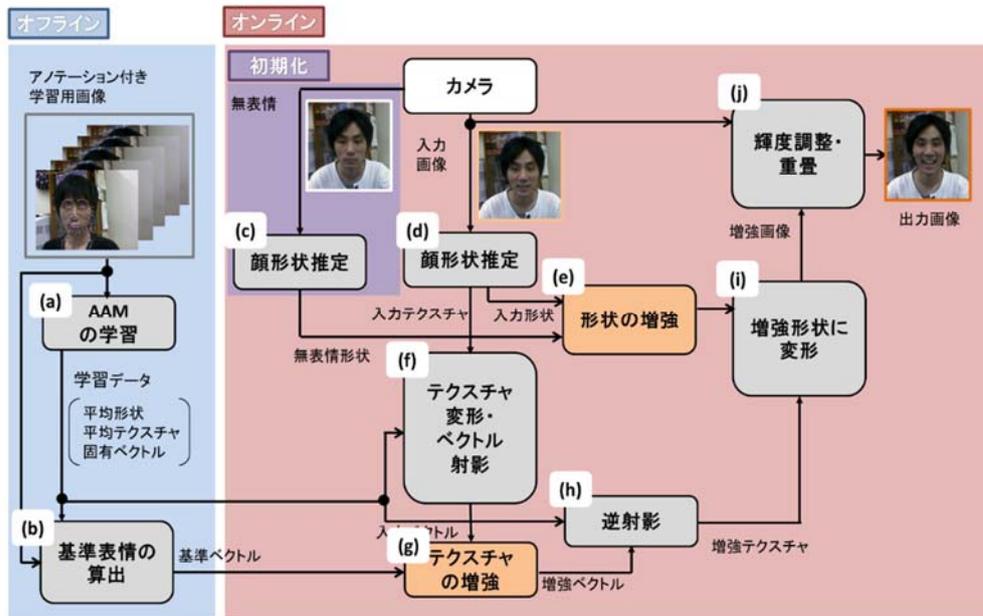


Fig. 2 提案手法の処理の流れ

本研究では、Fig.2に示すように、二種類の Point Distribution Models (PDM) [1]を用いて、顔の形状とテクスチャのパラメトリック表情空間を生成し、表情操作を実現する。表情をパラメトリック空間に射影することにより、ある表情をパラメトリック空間における一点として考えることができる。ある表情点からある表情点へのベクトルの長さを操作することにより、表情識別処理を行うことなく、顔表情変化を操作することが可能となる。また、この手法を用いれば、基本的な五つの表情（驚き、喜び、恐怖、悲しみ、嫌悪）に属さない曖昧な表情の増強も可能である。

顔形状は、Constrained Local Models (CLM) [2]を用いて顔形状を推定し、パラメトリック空間を構築する。入力されたビデオ会話映像に CLM を適用してリアルタイムで顔形状のベクトルを推定し、事前に求めておいた基準表情の形状ベクトルを推定し、それを誇張するような操作を施すことで顔の形状の増強を行う。表情表出に伴うテクスチャの変化は、Active Appearance Models (AAM)[11]を用いてパラメトリック空間を構築し、表情操作を実現する。入力画像を AAM のパラメトリック空間に射影し、事前に求めておいた基準表情の射影点との間で与えられるベクトルを操作することで、顔のテクスチャ変化を操作する。

提案手法をビデオ通話システムに適用することにより、Fig. 3 に示す、豊かな表情を提示可能な通話システムを実装する。左に表情増強を用いたビデオ通話の一例が示されており、右下に通話の様子を撮影した画像が示されている。



Fig.3 表情操作を用いたビデオ通話システム

- [1] Cootes T. F., Taylor C. J. “Active shape models—‘smart snakes’.” BMVC. (1992): 266-275.
- [2] Cristinacce D., Cootes T. F. “Feature Detection and Tracking with Constrained Local Models.” BMVC. (2006): 929-938.

【2】 空撮画像との対応点情報を用いたモバイルカメラの位置・姿勢推定手法

GPS (Global Positioning System) を搭載したスマートフォンやタブレット端末、コンパクトデジタルカメラなどのモバイル端末の普及を背景として、ユーザの位置・方位情報を用いた街角案内システムが実用化されている。一般的な GPS の位置情報には、数メートル程度の誤差が含まれる。さらに、都市部などの建物が林立する地点では、GPS 衛星の電波のマルチパスの影響で計測誤差が増大し、その結果誤った情報提示が行われる問題が存在する。自動車に搭載された GPS の場合、時系列測位により進行方向を推定し、方位情報の算出や計測誤差の補正を行っているが、モバイル端末の場合、ユーザは立ち止まるか低速で歩行していることが多いため、時系列観測の利用が困難である。電子コンパスを併用することが一つの解決策であるが、電子コンパスの方位情報には 0~5 度ほどの誤差が含まれ、環境によっては周囲の電子機器などで発生した磁場により誤差が生じることが知られている。

近年、Google Earth を代表として、人工衛星や航空機から地上を撮影した空撮画像の入手が容易になりつつある。地理情報システム (GIS: Geographic Information System) の空撮画像データは、各画素に位置情報を含んでいるため、空撮画像とモバイルカメラ画像との対応関係を推定できれば、正確なモバイルカメラの位置・姿勢を求めることが可能となる。

本発表では、位置情報付き空撮画像とスマートフォンやタブレット端末等のモバイル端末で撮影した画像を対応点探索することにより、Fig.4 に示すように、モバイル端末の位置・姿勢を画像情報に基づき推定する手法を提案する。

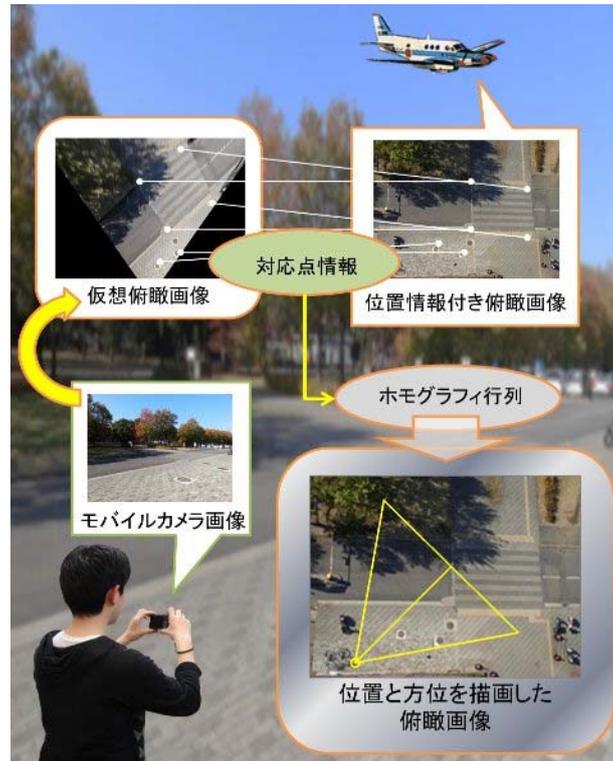


Fig.4 空撮画像との対応点情報を用いた処理

ユーザは、モバイルカメラを用いて目の前の風景を撮影する。モバイルカメラ画像と空撮画像は、同一空間を撮影しているものの、撮影角度が大きく異なるため射影歪みが発生し、画像上での見え方をそのまま用いて対応点探索を行っても、正確な対応点を求めることが困難である。そこで本手法では、モバイルカメラ画像から仮想俯瞰画像を生成し、両者の視点位置を仮想的に一致させる。事前に求めておいたカメラの内部パラメータと、撮影時にモバイル端末に内蔵された加速度センサから得た重力情報に基づいて、撮影した画像を上空から真下を見下ろした俯瞰視点からの見え方に射影変換し、仮想俯瞰画像を生成する。この仮想俯瞰画像と、航空機などから実際に真下を撮影した空撮画像において SIFT[3]などの画像特徴量を用いた対応点探索処理を行い、その結果から、両画像間のホモグラフィ行列を算出する。求められたホモグラフィ行列を用いて、モバイルカメラの位置と姿勢を推定する。

Fig.5 に示す無人航空機 (UAV: Unmanned Aerial Vehicle) で撮影した比較的高解像度な空撮画像を用いて、モバイルカメラの位置姿勢推定実験を行った。空撮画像を段階的にリサイズし、空撮画像の空間解像度と、モバイルカメラの位置姿勢推定の精度との相関関係を検証した。



Fig.5 撮影に用いた UAV

その結果、空撮画像の空間解像度が 6 cm/画素より低くなるとホモグラフィ行列の算出に失敗しやすくなることがわかる。この結果は、位置姿勢推定の誤差が大きくなる空間解像度ともほぼ一致している。

携帯端末上に提案システムを実装した。実装したシステムのブロック図を Fig.6 に示す。カメラ付き携帯端末として ASUS 社の Android タブレット PC である ASUS Pad TF700T (Android 4.2.1) を用いた。端末には GPS と加速度センサが搭載されている。屋外での撮影時には、モバイル Wi-Fi ルータなどを用いてインターネットに接続されている必要がある。開発に用いた OS は Windows 8 Pro, 統合開発環境は Eclipse 4.2, 使用言語は Java, 開発ツールとして OpenCV4Android SDK ver.2.4.3 を使用した。空撮画像の取得には Google Static Maps API ver.2 を用いた。撮影と同時に GPS の測位値を取得し、その GPS 測位値を含んだ URL パラメータを HTTP リクエストで送信することで、その返信として撮影地点周辺の Google Map の空撮画像を得ることができる。加速度センサの値から仮想俯瞰画像を生成し、空撮画像との間で特徴点マッチングを行う。

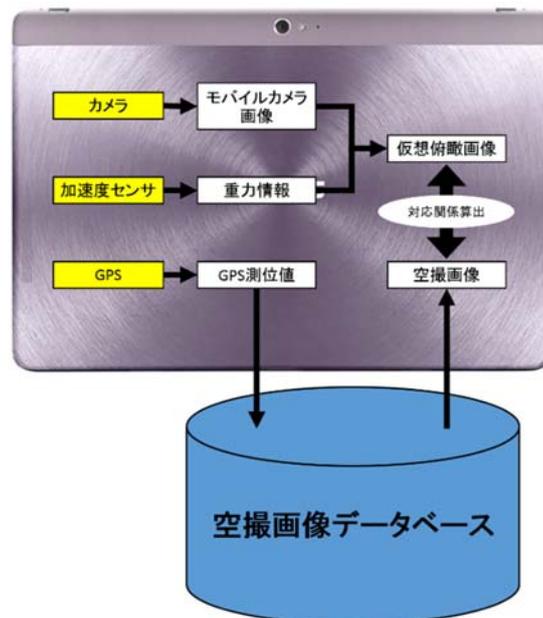


Fig.6 携帯端末上に実装したシステムのブロック図

Fig.7 に、アプリケーションの実行画面を示す。Capture ボタンをタッチしたときに GPS 測位値から空撮画像を取得し仮想俯瞰画像と特徴点マッチングを行う。ステッチング処理が必要な場合には、Capture ボタンをタッチする前に、視点を変えて pre-Capture ボタン何回かタッチすることで仮想俯瞰画像を追加し、広域仮想俯瞰画像を生成することができる。また、Show Stitched VTV Image ボタンをタッチして広域仮想俯瞰画像を確認することができる。特徴点マッチングに成功すれば、モバイルカメラ画像と空撮画像との間のホモグラフィ行列を算出することができる。このアプリケーションでは、そのホモグラフィ行列を用いて、Aerial ボタンをタッチすれば空撮画像を、RoadMap ボタンをタッチすれば地図画像をモバイルカメラ画像に重畳提示させることが可能である。

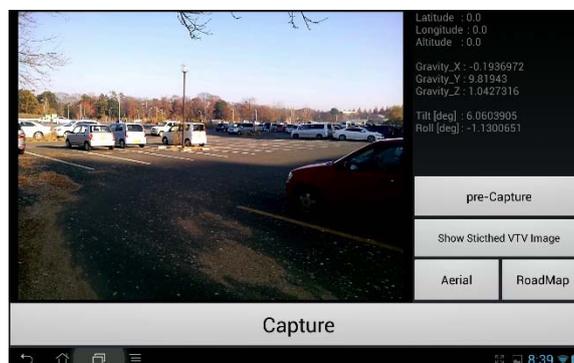


Fig7. 実装したアプリケーションの実行画面

[3] D. G. Lowe, "Distinctive Image Features from Scale-Invariant Keypoints," International Journal of Computer Vision (IJCV), pp91-110, 2004.

【3】 RGB-D カメラを用いた教示者の作業の AR 再表示

教示者がいない作業現場において、作業を学習する時、学習者はチュートリアルビデオを見てビデオ内の教示者の作業と実際の作業環境の対応付けを目視で確認することがある。本研究では AR 技術を用いて、実際の作業環境に合わせてチュートリアルビデオ中の教示者の様子を 3 次元的に再生することを提案する。本方法では、教示者の作業記録時に一台の RGB-D カメラを手で構えて撮影する。提案手法は KinectFusion をベースとし、それによる記録した作業環境と現在の作業環境のレジストレーション結果を利用することで、学習者に対して同じ作業環境の上に教示者の 3 次元的な作業を重ね合わせて AR 再表示を実現する。

作業に合わせて注目視点を換えながら作業様子を記録して、注目視点の周りでその様子を 3 次元的に再表示できれば、作業確認に効果的であろうと考えている。そこで、Fig.8 のような、RGB-D カメラ 1 台のみを用いた作業現場における教示者の作業様子の獲得と AR に

よる再表示システムを提案する。このシステムは一台の RGB-D カメラを用いて事前に作業シーンにおける教示者の作業様子を記録しておく。教示者が作業現場にいなくとも、学習者は同じ作業現場の上に教示者の 3 次元的な作業様子を重ね合わせて AR 再表示できる。



Fig. 8: AR 再表示の概念

提案手法は KinectFusion をベースとし、一台の RGB-D カメラのみ用いて、作業シーンの記録と AR 再生を行う。Fig.9 に提案システムの構成を示す。提案したシステムは大きく作業シーンの記録と AR 表示の 2 つのステップに分かれる。

最初の作業シーンの記録のステップにおいては、まず、RGB-D カメラを用いて入力データを取得する。次に静的な作業環境を表す作業環境モデルとの形状比較により、幾何形状の整合性が取れた静的な要素と、整合性が取れなかった動的な要素に分割する。静的な要素を作業環境モデルに統合し、蓄積された静的な作業環境モデルを更新する。それと同時に各フレームの動的な要素を、教示者の作業様子を表す点群とする。

AR 再表示のステップにおいては、まず、AR 表示は記録時で獲得した静的な環境のモデルと実際の作業環境の参照により、カメラの位置姿勢を算出する。その上で、ディスプレイシーンスルービデオ上で獲得した教示者の作業様子の点群を実際の作業環境に合わせて重畳表示する。

AR 再表示する際には、学習者が視点の操作により、元のカメラ位置からより良い眺めからその作業様子及び相互作用を観察と理解できるようになる。

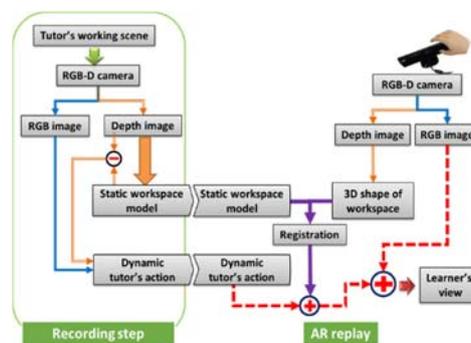


Fig. 9: 処理の構成

蓄積された静的な作業環境は **volume** として保存される。教示者の作業様子は点群ストリームとして保存される。同じ作業環境でその教示者の作業様子を再表示する際には、我々はすでに保存された静的な作業環境を読み込み、学習者がカメラを構え、作業環境に対してレジストレーションし、現在の作業環境のモデルと整列させるためのマッチングを行う。その上で、教示者の作業様子を現在の作業環境の上に重畳表示する。Fig.10(左図が実際の環境、右図が AR 再表示結果)は AR 再表示の結果を示している。Fig.10 では、AR 再表示する際、獲得した教示者の作業様子が位置正しく再表示され、融合した映像が得られている。カメラの位置姿勢が常に推定されているので、学習者はカメラを動かすことで、学習者の観察視点に合わせたより良い眺めの映像を見られる。



Fig. 10: 実験結果 (left: source, right: synthesized)

【4】 時空間拘束を利用した車両前照灯の路上反射位置推定

本研究では、道路監視カメラ映像を用いた夜間における車両位置の 3 次元位置推定手法を提案する。夜間は車両の前照灯が点灯しているため、道路監視カメラ映像において前照灯は安定した観測が可能である。しかし、画像上での前照灯位置のみでは、車両の 3 次元位置推定を行うことができない。我々は、これまでに前照灯と路面での前照灯の反射の位置関係から車両位置を正確に推定できることに注目する。本手法は、路面反射率が一定であるという前提条件を必要とする。実際の路面には道路標示等が存在し、路面反射率が一定であるという前提条件が成り立たずに、反射位置を誤検出する問題があった。そこで、反射位置を時空間的に走査し、この問題に対処する手法を提案する。

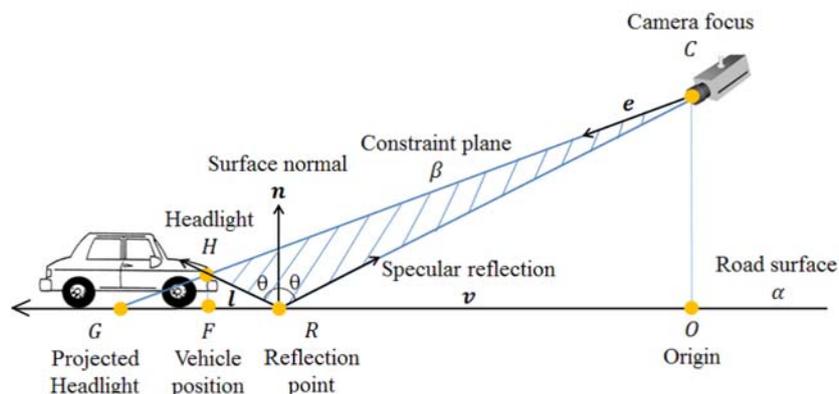


Fig. 11: 前照灯と前照灯の反射の位置関係を利用した前照灯位置の推定

本研究では、単独で設置されている道路監視カメラを利用する。事前に道路監視カメラのキャリブレーションを行い、道路監視カメラと路面の関係は既知と仮定する。このとき、Fig.11 に示すように、道路監視カメラの焦点位置を C とし、これも既知とする。焦点位置 C を路面に垂直に射影した位置を世界座標系の原点 O と定義する。前照灯が路面で鏡面反射して、焦点位置 C で観測されるということは、鏡面反射位置 R が前照灯位置 H と焦点位置 C を含み、鏡面反射位置 R からの路面の法線ベクトル n を含む拘束面上に存在するということである。かつ、その拘束面は焦点位置 C からは拘束線として観測される。すなわち、画像上での前照灯位置 H の投影点 H' から拘束線に沿っていけば、鏡面反射画像位置 R' を発見することができる。

Fig. 12 のような映像を撮影する道路監視カメラに対して、実験を行った。実験結果を Fig. 13 に示す。Frame number は映像番号を表し、vertical position は映像中での道路に沿った位置を示す。検出された鏡面反射位置を緑色マーカーで示している。この点が安定して求まっている様子がわかる。この鏡面反射位置と道路監視カメラのキャリブレーション情報から、前照灯の路上での 3 次元位置を求めることが可能になる。



Fig. 12: 道路監視カメラ (昼・夜)

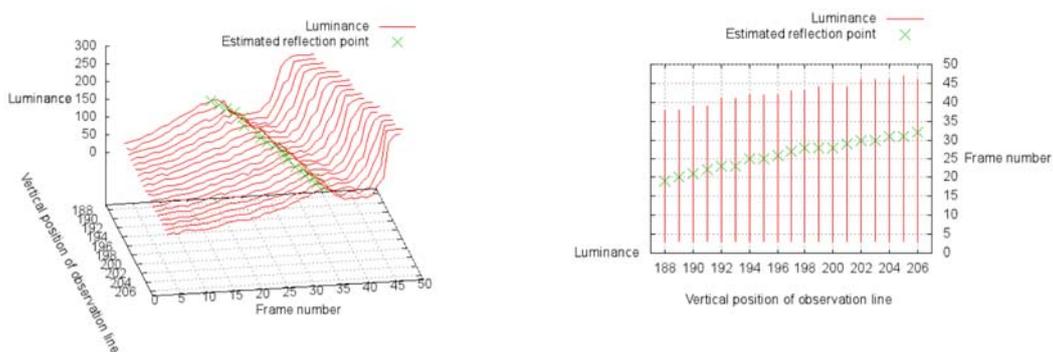


Fig. 13: 実験結果

4. 教育

学生の指導状況 (学生氏名, 学位の種類, 論文名)

- 佐藤秀昭 博士 (工学) 「鏡像を用いた仮想世界と現実世界の重畳提示」
林将之 博士 (工学) 「屋外環境における指示共有のための複合現実型ジオラマインタフェース」
大川原友樹 修士 (工学) 「自由視点映像操作における仮想カメラ位置姿勢補正手法」
君島直城 修士 (工学) 「分割パーツモデルによる低解像度映像からの歩行者の 3 次元表現」
小林直樹 修士 (工学) 「夜間の道路監視カメラ映像における前照灯に注目した車両の 3 次元位置推定」
佐藤翔悟 修士 (工学) 「パラメトリック空間を用いた顔表情のリアルタイム増強処理」
鈴木友規 修士 (工学) 「仮想化現実と複合現実型提示を用いた可搬的な卓上作業空間の実現」
張明 修士 (工学) 「建物模型への投影型複合現実感を用いた内外観提示方式」 鳥屋剛毅
修士 (工学) 「空撮画像を用いたモバイルカメラの位置姿勢推定手法」
及川純耶 学士 (工学) 「環境埋め込み型カメラ映像の閲覧のための透明スクリーンを用いた AR 提示」
上山嵩 学士 (工学) 「選手動作に基づくバドミントン映像分割」
笹井翔太 学士 (工学) 「ダッシュボードの透明化による運転車両の車輪軌道の可視化」

集中講義など

なし

5. 受賞, 外部資金, 知的財産権等

受賞 (賞の名称, 受賞者名, タイトル, 年月日)

1. Junya Kashiwakuma, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, and Yuichi Ohta
Best Paper Honorable Mention on "a Virtual Camera Controlling Method Using Multi-Touch Gestures for Capturing Free-Viewpoint Video"
11th European Interactive TV Conference, 2013.
2013/06/24-26, Como, Italy.
2. Junya Kashiwakuma, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, and Yuichi Ohta
Best Paper Honorable Mention on "a Virtual Camera Controlling Method Using Multi-Touch Gestures for Capturing Free-Viewpoint Video"
11th European Interactive TV Conference, 2013.
2013/06/24-26, Como, Italy.

外部資金（名称，氏名，代表・分担の別，採択年度，金額，課題名）

1. 科学研究費補助金 基盤研究(B) 課題番号 23300064
亀田能成（研究代表者），大田友一，北原格，2011年度，2,210,000円
（2013年度分），「環境カメラ群映像の安心かつ効率的見える化の為の時空間解析と複合現実感的可視化」
2. 科学研究費補助金 基盤研究(B) 課題番号 25280056
大田友一（研究代表者），亀田能成，北原格，2013年度，7,410,000円
（2013年度分），「大規模空間を対象とする人物ビルボードを用いた任意視点映像生成提示方式の高画質化」
3. 共同研究（日本電気株式会社），北原格（代表者）・大田友一・亀田能成，2013年度，735,000円，自由視点映像生成の研究
4. 共同研究（ヤフージャパン株式会社），北原格（代表者），2013年度，550,000円，超高解像度多視点画像における視点移動に関する研究

知的財産権（種別，氏名，課題名，年月日）

なし

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. 佐藤秀昭，北原格，大田友一，“鏡像を用いた現実世界と仮想世界の重畳提示における運動視差と前後関係把握精度の関係，”日本バーチャルリアリティ学会論文誌，18, 3, pp.421-430, 2013.
2. Youhei Kawamura, Ashraf M Dewan, Bert Veenendaal, Masahiro Hayashi, Takeshi Shibuya, Itaru Kitahara, Hajime Nobuhara, Kento Ishii, “Using GIS to Develop a Mobile Communications Network for Disaster-damaged Areas,” International Journal of Digital Earth (DOI: 10.1080/17538947.2013.808277), 2013.

B) 査読無し論文

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Itaru Kitahara, Hisatoshi Toriya, Yuichi Ohta, “A Mobile Camera Localization Method for Updating Topography Map,” The 3rd International Workshop on Soft Computing and Disaster Control (SocDic 2013), 2013.

B) 一般講演

1. Yun Li, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, “Acquisition of Enhanced 3D Video Stream by Analyzing Static Property of the Scene Taken by RGB-D Camera,” Proceedings of The 6th Korea-Japan Workshop on Mixed Reality (KJMR2013), 13 pages, 2013.
2. Junya Kashiwakuma, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, “A Virtual Camera Controlling Method Using Multi-Touch Gestures for Capturing Free-viewpoint Video,” 11th European Interactive TV Conference, pp.67-74, 2013.
3. Masayuki Hayashi, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, Koji Makita, Takeshi Kurata, “Projective indices for AR/MR benchmarking in TrakMark,” ISMAR2013 Joint Workshop on Tracking Methods & Applications and TrakMark, 3 pages, 2013.
4. Hidehiko Shishido, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, and Yuichi Ohta, “A Visual Object Tracking and Trajectory Estimation Method for Badminton Shuttlecock Utilizing Motion Blur”, 6th Pacific-Rim Symposium on Image and Video Technology, 12 pages, 2013.
5. Yoshinari Kameda and Takeshi Kurata, “Introduction of Trakmark and its Standardization Activity at ISO/IEC JTC 1/SC 24/WG 9,” IEEE ISMAR 2013 Joint Workshop on Tracking Methods & Applications and TrakMark, 3 pages, 2013.
6. Yoshitaka Hara, Shigeru Bando, Takashi Tsubouchi, Akira Oshima, Itaru Kitahara, and Yoshinari Kameda, “6DOF Iterative Closest Point

Matching Considering a Priori with Maximum a Posteriori Estimation,”
IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems,
pp.4172 - 4179, 2013.

7. Hisatoshi Toriya, Itaru Kitahara, Yuichi Ohta, “A Mobile Camera Localization Method Using Aerial-View Images,” Asian Conference on Pattern Recognition 2013 (ACPR2013), 5 pages, 2013.
8. Shogo Sato, Itaru Kitahara, Yuichi Ohta, “Augmented-Reality Facial Expression Enhancement for Video Chatting Using Point Distribution Models 【Poster】,” 5th Joint Virtual Reality Conference (JVRC2013), pp.51-56, 2013.
9. Yun Li, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, “AR Replay in a Small Workspace,” Proceedings of 23rd International Conference on Artificial Reality and Telexistence (ICAT2013), pp.97-101, 2013.
10. Yasushi Yamagiri, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, and Yuichi Ohta, “Body Motion Design for Maneuvering a Virtual Camera in 3D Soccer Game,” Proceedings of 23th International Conference on Artificial Reality and Telexistence (ICAT2013), 2 pages, 2013.
11. Masashi Ueda, Itaru Kitahara, and Yuichi Ohta, “MR Simulation for Re-Wallpapering a Room in a Free-Hand Movie,” The 20th Anniversary International Conference on MultiMedia Modeling (MMM2014), LNCS 8325, pp.436-448, Springer, 2014.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

B) その他の発表

1. 林将之, 北原格, 亀田能成, 大田友一, “屋外カメラ設置におけるポーズ決定タスクによる複合現実型ジオラマインタフェースの評価,” 電子情報通信学会技術研究報告 MVE, 113, 51, pp.45-50, 2013.

2. 樽見佑亮, 亀田能成, 大田友一, “歩行経路記録映像における画像検索性能評価,” 第 19 回画像センシングシンポジウム論文集 (SSII2013), 5 pages, 2013.
3. 宍戸英彦, 北原格, 亀田能成, 大田友一, “モーショントラッカーを活用したバドミントンシャトルの軌跡推定法,” 画像の認識・理解シンポジウム 2013 論文集 (MIRU2013), pp.2, 2013.
4. 山桐靖史, 北原格, 亀田能成, 大田友一, “自由視点映像閲覧に適した全身身体動作の検討,” 第 12 回情報科学技術フォーラム(FIT2013), vol.3, pp.529-530, 2013.
5. 鈴木友規, 北原格, 大田友一, “卓上空間の 3 次元モデルの獲得と複合現実型提示を用いた再現,” 第 18 回日本バーチャルリアリティ学会大会論文集, pp.55-58, 2013.
6. 張明, 北原格, 亀田能成, 大田友一, “投影型複合現実感と建物模型を用いたインタラクティブな内外観提示方式,” 第 18 回日本バーチャルリアリティ学会大会論文集, pp.224-227, 2013.
7. 森田航平, 亀田能成, 北原格, 大田友一, “ウィンドシールドディスプレイを用いた交差点における進入車両提示法,” 第 18 回日本バーチャルリアリティ学会大会論文集, pp.295-298, 2013.
8. 佐藤翔悟, 北原格, 大田友一, “ビデオ通話のための Point Distribution Models を用いた顔表情増強手法,” 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, 113, 227, pp.71-76, 2013.
9. 山桐靖史, 北原格, 亀田能成, 大田友一, “自由視点映像閲覧に適した全身身体動作の検討,” 第 12 回情報科学技術フォーラム(FIT2013), 2 pages, 2013.
10. 厚見彰吾, 北原格, 大田友一, “多視点画像を用いた岩石のモデリングと配置図の生成,” 地盤工学会関東支部発表会 2013, 4 pages, 2013.
11. 宍戸英彦, 北原格, 亀田能成, 大田友一, “モーショントラッカーを活用したバドミントンのシャトル軌跡推定法,” SAT テクノロジー・ショーケース 2014, p.84, 2014.

12. 牧田 孝嗣, 林 将之, 蔵田 武志, 亀田 能成, 佐藤 智和, “TrakMark: AR/MR
トラッキングのベンチマーク,” 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE,
vol.113, no.402, pp.245-250, 2014.
13. 小林直樹, 北原格, 亀田能成, 大田友一, “前照灯の路上反射位置を利用した車
両の 3 次元位置推定,” 電子情報通信学会 技術研究報告 ITS, vol.113, no.433,
pp.111-116, 2014.
14. 樽見佑亮, 亀田能成, 大田友一, “経路上での事前の移動撮影映像を用いたスナ
ップショット撮影位置の推定,” 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE,
vol.113, no.470, pp.1-5, 2014.
15. 小林直樹, 北原格, 亀田能成, 大田友一, “時空間拘束を利用した車両前照灯の
路上反射位置推定,” 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.113, no.470,
pp.25-30, 2014.
16. 雫泰裕, 北原格, 大田友一, “複合現実感を用いた発話内容の可視化と 3 次元イ
ンタラクション,” 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.113, no.470,
pp.205-210, 2014.
17. 鈴木友規, 北原格, 大田友一, “仮想化現実と複合現実型提示を用いた可搬的な
卓上作業空間,” 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.113, no.470,
pp.211-216, 2014.
18. 李云, 亀田能成, 大田友一, “RGB-D カメラを用いた教示者の作業の AR 再表
示,” 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.113, no.470, pp.223-228,
2014.
19. 大川原友樹, 北原格, 亀田能成, 大田友一, “ユーザの仮想カメラ操作を考慮し
た位置姿勢補正による自由視点映像の生成,” 電子情報通信学会 技術研究報
告 MVE, vol.113, no.470, pp.261-266, 2014.
20. 宍戸英彦, 北原格, 亀田能成, 大田友一, “逆順時系列探索による高速に移動す
るバドミントンシャトルの追跡,” 電子情報通信学会 2014 年総合大会講演論
文集 (情報・システム講演論文集 2), pp.141, 2014.

21. 明智那央, 北原格, 大田友一, “オクルージョンを考慮した画像補間手法, 電子情報通信学会 2014 年総合大会講演論文集 (情報・システム講演論文集 2), pp.137, 2014.
22. 江夏寛朗, 北原格, 亀田能成, 大田友一, “屋外空間における歩行者とその注視領域の撮影法,” 電子情報通信学会 2014 年総合大会講演論文集 (情報・システム講演論文集 2), pp.133, 2014.
23. 金川祐貴, 北原格, 亀田能成, 大田友一, “道路監視カメラ映像における車両領域の正規化を用いた軌跡推定,” 電子情報通信学会 2014 年総合大会講演論文集 (情報・システム講演論文集 2), pp.132, 2014.
24. 河内駿, 北原格, 亀田能成, 大田友一, “タブレット端末とユーザ視点との位置関係がシースルービジョンの知覚に与える影響についての基礎的検討,” 電子情報通信学会 2014 年総合大会講演論文集 (情報・システム講演論文集 2), pp.134, 2014.
25. 東井隼斗, 北原格, 亀田能成, 大田友一, “ウィンドシールドディスプレイを用いた速度抑制を促す拡張現実型提示,” 電子情報通信学会 2014 年総合大会講演論文集 (情報・システム講演論文集 2), pp.135, 2014.
26. 宍戸 英彦, 亀田 能成, 大田 友一, “逆順時系列探索による高速に移動するバドミントンシャトルの追跡,” 電子情報通信学会 2013 年総合大会講演論文集(情報・システム講演論文集 2), pp.141, 2014.

(4) 著書, 解説記事等

1. 亀田 能成, “USB プータブルな AR/MR プログラム開発・検証環境(Casper Cartridge Project),” 電子情報通信学会会誌, vol.96, no.7, pp.512-515, 2013.
2. Yoshinari Kameda, “Producing Free Viewpoint 3D Video from a Real Soccer Game and its User Interface for the Virtual Camera Control,” A Talk at Max Plank Institute for Intelligent Systems, 2014. (At Perceiving Systems, Max Planck Institute for Intelligent Systems, Tubingen, Germany.)

3. 亀田 能成, “視覚情報メディア—コンピュータビジョンと拡張現実への挑戦—,” 京都大学学術情報メディアセンター月例セミナー, 2014. (2014 年 3 月 24 日, 京都大学)

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

筑波大学研究戦略イニシアティブ推進機構 (URA) 平成 25 年度海外若手研究者中短期招へいプログラムを利用して, Curtin University の Dr. Yohei Kawamura を平成 26 年 2 月 10 日~24 日の間, 筑波大学に招聘し, モバイルカメラを用いた GIS 地形マップの更新方式に関する共同研究に取り組んだ.

8. シンポジウム, 研究会, スクール等の開催実績

なし

9. 管理・運営

大田友一
副学長・理事 (企画評価・情報)
情報環境機構長

亀田能成
筑波大学 e ラーニング委員会委員

北原格
筑波大学全学計算機委員会委員

10. 社会貢献・国際貢献

大田友一
電子情報通信学会 教科書委員会委員
第 13 回情報学フォーラム (FIT2014) 現地実行委員会 委員長

亀田能成
TMA/TrakMark 2013: IEEE ISMAR 2013 Joint Workshop on Tracking Methods & Applications and TrakMark; One of the organizers [2013/03 - 2013/10/1]
IEEE and ACM International Symposium on Mixed and Augmented Reality; a PC

member [2013/03 -]

電子情報通信学会 情報システムソサイエティ 庶務幹事
電子情報通信学会 パターン認識・メディア理解 研究専門委員会 委員
電子情報通信学会 マルチメディア・仮想環境基礎 研究専門委員会 委員
電子情報通信学会 サイバーワールド 時限研究専門委員会 委員
第 13 回情報学フォーラム (FIT2014) 現地実行委員会 幹事

北原格

電子情報通信学会 和文論文誌 D 編集委員
電子情報通信学会 パターン認識・メディア理解 研究専門委員会 委員
日本バーチャルリアリティ学会 論文編集委員
第 13 回情報学フォーラム (FIT2014) 現地実行委員会 幹事

11. その他

なし