

筑波大学 計算科学研究センター  
平成 24 年度 年次報告書



Center for Computational Sciences,  
University of Tsukuba  
**Annual Report FY2012**

## 目次

1	平成 23 年度 重点施策・改善目標.....	2
1-1.	重点施策 .....	2
1-2.	改善目標（法人評価，認証評価，外部評価及び監事監査・内部監査の指摘に対する取組等） .....	4
2	平成 24 年度 実績報告.....	5
2-1.	平成 24 年度計画並びに改善目標に記載されている事項についての達成状況等....	5
2-2.	自己評価と課題.....	9
3.	各研究部門の報告.....	11
I.	素粒子物理研究部門.....	11
II	宇宙・原子核物理研究部門 .....	40
II-1.	宇宙分野 .....	40
II-2.	原子核物理分野.....	65
III.	量子物性研究部門.....	88
IV	生命科学研究部門.....	115
IV-1.	生命機能情報分野.....	115
IV-2.	分子進化分野.....	125
V.	地球環境分野 .....	136
VI.	高性能計算システム研究部門.....	146
VII.	計算情報学研究部門.....	165
VII-1.	データ基盤分野.....	165
VII-2	計算メディア分野.....	178

## 1 平成 23 年度 重点施策・改善目標

### 1-1.重点施策

「第 2 期中期計画に関わる大学全体の年次別実行計画」についての重点施策は、以下のとおり：

22-1 「各研究科や研究センターの研究戦略・企画組織を充実・強化し、当該組織の学問分野における特色を生かしつつ、長期的展望に立つ基礎研究と学際融合的な研究を計画的に推進する。」

平成 24 年度重点施策：各系・研究センターにおいて、系等の特色を生かした研究戦略及び研究連携策を推進する。

32-1 「共同利用・共同研究拠点は重点戦略経費等により支援する。各拠点は第二期中期目標・中期計画期間中の目標と計画を定め、期間中に評価を実施して実施状況の検証を行いつつ高い研究成果の実現を図る。」

平成 24 年度重点施策：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。

#### 【研究】

- (1) 学際計算科学のアプローチにより、エクサスケール計算の礎となる、計算基盤の能力および機能の飛躍的な向上のための計算技術開発と計算科学の革新に取り組むプロジェクト「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」についての研究開発を実施する。
- (2) 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、学際共同研究プログラムを実施し、学際計算科学の共同研究を実施することにより、計算科学の研究を推進する。
- (3) KEK, 国立天文台とともに運営する計算基礎科学連携拠点において、HPCI 戦略プログラム（分野 5, 計算基礎科学）を実施する。我が国の計算資源の有効利用を図る HPCI コンソーシアムに参画し、我が国の計算科学の基盤の運営に貢献する。また、次のエクサに向けた検討を進め、国のエクサスケール計算の計画に貢献する。
- (4) センター全体としては、研究推進事業、大型プロジェクト等を中心に、計算科学の学際的研究の遂行と成果の実現を図る。各部門の目標は次のとおりである。

素粒子物理研究部門： 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、アルゴリズムの改良やバリオン間相互作用の計算方法と研究を行う。有限密度での格子 QCD の研究を行う。

宇宙・原子核物理研究部門： 宇宙における初代天体，銀河，巨大ブラックホールの形成史を，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。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。

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い，つくばナノテクアリーナに参画している産業界にも貢献する計算科学の知見を得る。また，宇宙分野，生命分野等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。

生命科学研究部門： 生命科学の重要な課題について計算機シミュレーションによる理論的解明とともに，GPU を用いた量子力学計算手法の開発を行い，生命科学研究において必要となる膨大な計算量に対応できるようにする。分子進化分野では，ハプト・クリプト生物群に近縁となる新奇真核微生物の探索と網羅的発現遺伝子解析を行う。

地球環境研究部門： 大気大循環モデル NICAM を用い北極低気圧のライフサイクルの研究を推進し，北極海海氷激減との関係を解明する。領域気象モデル WRF とともに建物解像 LES モデルを開発し都市気候の研究を実施する。

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 実運用を通じた評価・改良を行う。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。

計算情報学研究部門： 大規模計算に関わるデータ基盤技術の整備を継続すると共に，実時間実世界データの利活用についても応用的側面から技術の深化を図る。また，人介在型の高精度データ解析を，複合現実感型インタフェースを通じて行えるようにすることで，計算メディアの有効性を検討する。

【国際】

国際連携として、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進める。アジアでは韓国 KISTI との連携を進める。連携のために計算機システムを国際共同研究に活用できるように手続きを確立する。

#### 【教育】

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、このプログラムの学生の数を増やす。グローバル 30 の計算科学の英語による講義、計算科学に関する大学院共通科目を実施し、国際化・普及を進める。

### 1-2. 改善目標（法人評価，認証評価，外部評価及び監事監査・内部監査の指摘に対する取組等）

外部評価において指摘された計算機開発により最先端の計算科学を推進する「学際計算科学」の推進体制については、特別経費プロジェクトおよび HPCI 戦略プログラム等で確実に推進されつつあるが、次の課題として T2K 後継システムのスパコン開発・調達について推進体制が強化できるように注意深く検討していく必要がある。

## 2 平成 24 年度 実績報告

### 2-1.平成 24 年度計画並びに改善目標に記載されている事項についての達成状況等

センターの計算科学と計算機科学の協働による「学際計算科学」を強みとして、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」を実施している。今年度においては、アプリの開発、演算加速機構(GPU)間を直接結合するハードについては設計・実装を完了し、量産品の調達を終え、着実に進行している。さらに、本年度から、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、これからの我が国のスパコンについての検討を進めており、エクサスケールを目指す計算科学を推進している。また、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、運用することとし、そのための組織「最先端共同 HPC 基盤施設」の設置・運営について協定を締結した。

共同利用・共同研究拠点の共同研究プログラムとして、センターの主要計算設備を活用する学際共同プログラムを実施した。48 課題のプロジェクトを採択、実施し、38 件の旅費支援、1 件の集会支援の他、本年度は、センター設置 20 周年記念シンポとして、第 3 回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウムを 9 月に開催した。長期的な基礎研究を含む、各研究グループが行う重点課題についても、この学際共同プログラムのプロジェクトとして実施し、研究を着実に進めている。

国際的な連携として、これまで、米国はローレンスバークレイ研究所と、欧州はエジンバラ大学との協力関係づくりを進めている。さらに、人材育成においても、計算科学英語プログラムの推進や計算科学デュアルデグリー・プログラムの海外インターンシップの支援を行い、国際的な活動ができる人材育成に取り組んでいる。

#### 〔重点施策の達成状況〕

##### 【研究】

(1) 平成 24 年 2 月から運用を始めた HA-PACS については、当該プロジェクトの研究に供するとともに、10 月からは「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開始した。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、量産品の調達を終えた。次年度においては、これを組み込んだ TCA 部 HA-PACS システムの完成に向けて、調達作業を進めている。アプリケーションについても、昨年度設置した先端計算科学推進室で開発を進めている。

(2) 共同利用・共同研究拠点の共同研究プログラムとして、センターの主要計算設備である T2k+tsukuba, FIRST に、10 月からは HA-PACS を加え、これらのシステムを利用する学際共同プログラムを実施し、学際計算科学の研究を推進した。当該年度においては、48 課題のプロジェクトを採択、実施した。38 件の旅費支援、1 件の集会支援を行った。本年度は、センタ設置 20 周年記念シンポとして、第 3 回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウムを 9 月に開催した。

(3) 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 HCPI 戦略プログラム（分野 5）を推進した。HPCI コンソーシアムに参加し、本センターから宇川副学長が、理事長として組織運営にあたっている。また、HPCI システムの構築においては広域のストレージを担当し、引き続き、分散ファイルシステム Gfarm を用いた我が国の計算資源の有効利用を図る HPCI の共有ファイルシステムの整備を行った。さらに、この 7 月からは、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」のプロジェクトに採択され、これからの我が国のスパコンについての検討を進めている。

(4) センター全体としては、研究推進事業、大型プロジェクト等を中心に、計算科学の学際的研究の遂行と成果の実現を図った。各部門の達成状況は次のとおりである。

素粒子物理研究部門：京コンピュータでのゲージ配位生成のためのアルゴリズムの改良が完了し、24 年 10 月からはゲージ配位生成が本格的に始まった。バリオン間相互作用に関しては、計算方法の改良が完成し、それを使った研究が進められた。また、京コンピュータへのコード移植や京でのコードのチューニングなどを作業がほぼ終了した。有限密度での格子 QCD では、ヒストグラム法に基づく reweighting 法により、クォーク質量が重い領域での相構造の解析が完了した。

宇宙・原子核物理研究部門：宇宙における初代天体、銀河、巨大ブラックホールの形成史を、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した。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た。

量子物性研究部門：第一原理量子論等によるナノ構造体のもつ特徴的物性の解明を行うと同時に産業界にも貢献する知見の獲得を目指して研究を行った。その結果、グラフェン、光物性等の基礎物理学分野において大きな知見が得られた。また、つくばナノテクアリーナと連携して産業界に貢献する知見をえることにも成功した。中でも、パワーエレクトロ

ニクス分野においては、つくばパワーエレクトロニクスコンステレーション (TPEC) に参画している産業界に大きく貢献する計算科学的知見を得ることに成功し、次世代パワーデバイスの設計指針の獲得に成功した。

生命科学研究部門: 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。特に、生命分野、宇宙分野と連携して宇宙生物学分野においてはパイオニアとなる「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。

地球環境研究部門: 2008 年 6 月に北極海上で発生した北極低気圧に対し、水平解像度 14km (gl-9) の NICAM を用いた再現実験を行い、北極低気圧の発達と維持に関する詳細な分析結果を査読付き国際会議に発表した。北極海の海氷の減少に伴い、北極温暖化増幅をもたらす温度場の第 2EOF モードが正のトレンドを示す一方で、第 1EOF モードとしての北極振動が負のトレンドを示すことを明らかにし、国際誌に掲載するとともに、第 3 回国際北極研究シンポジウム(ISAR-3)で発表した。都市気象 LES 用の街路樹モデルを開発し、街路樹の中心断面の温度分布の再現実験を行った。領域気象モデル WRF-UCM による力学的ダウンスケーリングを行い、IPCC SRES A2 シナリオ下での三大都市圏の夏季気候の将来予測を実施した。

高性能計算システム研究部門: 並列言語 XMP の演算加速装置向け拡張を HA-PACS 上で評価すると共に、GPU と CPU の全リソースを並列プログラム内で無駄なく利用する機構を組み込み、プロトタイプコンパイラを実装・評価した。密結合演算加速機構はハードウェアの基本開発を終え、予備性能評価により従来方法に比べ通信遅延を大幅に低減することを確認し、研究最終年度に向けたハードウェアの量産を終えた。またセンター内計算科学研究グループとの共同により、宇宙物理学ツリーコード、気象コード等の HA-PACS への移植と高速化を進めた。Gfarm に関しては HPCI 実運用を支援し、性能ボトルネックを検出・改善し、全国規模の運用を推進した。並列数値アルゴリズムについては、FFT コードの改善により「京」コンピュータにおける HPC Challenge で再度世界第一位にランクされた。また、クリロフ部分空間法の改善により QCD を始めとするアプリケーションへの適用と高速化を進めた。

計算情報学研究部門：データ基盤分野では、ストリームを中心にした情報統合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、GEOGid データの利活用や X 線天文データ検索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、複合現実感型インタフェースを通じた人介在型の高精度データ解析法、多種センサによる人物の表情データベース収集システム、3 次元的な情報や指示を共有できるインタフェース、などの研究により、計算メディアの有効性を検証した。

#### 【国際】

3 月 7～8 日にローレンスバークレイ研究所とのワークショップを先方で行い、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 を締結される見込みとなった。エジンバラ大学とは、筑波でミーティングを行う予定であったが、先方の状況から調整がつかず、4 月以降になる見込みである。また、韓国 KISTI との連携に関しては、先方の組織改編のために調整中である。なお、計算機システムを国際共同研究のために海外からの利用に関しては整備を行い、手続きを運用している。当該年度は、海外からの利用件数は 7 件であった。

#### 【教育】

計算科学デュアルディグリー・プログラムに関しては、残念ながら、プログラムの学生の数は増やすことはできなかったが、今年度から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 名入ることになった。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。今年度は、2 人のインターンシップを支援した。グローバル 30 の計算科学英語コースに加えて、今年度から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開始され、英語による計算科学の教育の充実を図った。

#### 〔改善目標の達成状況〕

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。そのための組織を「最先端共同 HPC 基盤施設」として、そのための東大との協定書および覚書を準備し、協定の締結を行った。次年度からは、当該施設の組織整備を行い、システムの設計、調達準備など、具体的な運営を進めていく。また、次期システム設計・研究開発の準備として、平成 24 年度補正予算によりパイロットシステムを整備する他、情報環境機構との協議の上、「筑

波大学におけるスーパーコンピュータシステムの整備についてのガイドライン」に基づき、次期システムが設置されるまでの間の予算により、平成 26 年度にパイロットシステムの増強を図り、「最先端共同 HPC 基盤施設」に設置される次期スパコンと本センター設置のシステムの運用体制を検討していく。なお、現状の T2K システムについては、当初スケジュールを見直し、平成 26 年 2 月までの運用とし、次年度ではファイルシステム等を調達し、移行の準備を行う。

〔その他特色ある取組の実施状況〕

(1) 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) 分野・部門間の連携研究の推進

当センターでは、科学諸分野と計算機科学・情報科学の連携・協働による「学際計算科学」を中心的なコンセプトとして研究活動を行っている。素粒子分野と超高速計算システム分野、地球環境分野と計算知能分野などが具体的な研究課題についてワーキンググループを設置して定期開催を行い、共同研究を進めている。これを核にして、エクサスケールの計算科学を目指した特別経費プロジェクトを進めるとともに、外部資金の獲得についても取り組んでいる。

## 2-2.自己評価と課題

(1) 自己評価

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」では最終的な目標とする「密結合並列演算加速機構アーキテクチャ」を持つシステムの構築に向けて着実に進捗しており、共同利用・共同研究拠点の核となる、学際共同利用プログラムについても、着実に運営されている。センターの次期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「最先端共同 HPC 基盤施設」を設置し、柏キャンパスに共同して次期スパコンを設置、運用する計画である。そのための協定について締結され、来年度から計画をスタートすることとなった。本システムは 2015 年に運用になる計画で、稼働すれば我が国有数のスパコンシステムになる見込みである。

全国的観点からは、現在、本センターでは HPCI 戦略プログラム（分野 5、計算基礎科学）を戦略機関として推進しており、HPCI コンソーシアムの運営、ファイルシステムを中心として HPCI システムの構築にも大きく貢献している。今年度から、「将来の HPCI システムのあり方に関する調査研究」のプロジェクトを開始しており、これからの我が国のスパコン開発に貢献していく。さらに、計算科学デュアルディグリー・プログラムや計算科学の英語プログラムなどの人材育成、国際連携を進めていきたい。

## (2) 課題

### ① 生命科学やナノ科学の分野の研究体制の整備

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。

### ② 事務支援体制の充実

センターの充実、T2k-tasukuba システムに加えて、HA-PACS システムの運用開始、次世代スパコン戦略プログラムの実施に伴い、研究企画・財務・総務広報等のそれぞれの面で検討事項・処理事項と事務量が大幅に増大した。特に、次世代スパコン戦略プログラムについてはセンター事務とは別に事務組織を立ち上げ運営している。また、「共同利用・共同研究拠点形成強化事業」の支援により、計算機システムの運営のための人員 1 名を雇用して改善を図っている。しかし、依然として事務体制の人員は不足しており、改善する必要がある。

### ③ 省電力への取り組み、予算面での課題

震災後の電力事情の変化により、電気料金の高騰が予想されている。電気料金は本センターの予算の大きな部分を占める部分であり、高騰した場合の対処を検討しておく必要がある。また、外部資金の間接経費の配分方式は、全学的な研究システムの整備の中で、研究センターの位置づけに関わる課題として引き続き検討の必要がある。

### 3. 各研究部門の報告

#### I. 素粒子物理研究部門

##### 1. メンバー

教授	青木 慎也、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、藏増 嘉伸、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

##### 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部分は、2006 年 7 月に計算科学研究センターの次期並列計算機として PACS-CS が導入されたのを契機として新たに立ち上げられた研究グループ PACS-CS Collaboration に参加している。PACS-CS Collaboration では、計算科学研究センターの PACS-CS や T2K-Tsukuba を主要な計算機資源として、QCD に関する近似のない物理的予言を行うことを目的として、3 種類 (up、down、strange) の軽いクォークをその物理的質量 (物理点) において動的に扱う  $N_f=2+1$  QCD の大規模シミュレーションを進めてきた。更に発展的課題として、up、down クォーク間の質量差や電磁相互作用を取り入れる  $N_f=1+1+1$  QCD の研究や、格子 QCD による He 原子核の研究なども推進した。PACS-CS Collaboration は 2011 年 9 月末の PACS-CS 機シャットダウンに伴って解散したが、これまで取り組んできた研究課題は HPCI 戦略プログラム分野 5 (後述) における研究開発課題として発展的に引き継がれている。さらに、これと並行して、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 や、核子間ポテンシャルやハドロン間相互作用の研究に取り組んでいる HAL QCD Collaboration、有限温度・有限密度 QCD の研究を推進している WHOT-QCD 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。

一方、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、青木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、秋から一般利用が開始された「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】 PACS-CS Collaboration の活動（全員）

当センターでは、平成 17 年度から 3 ヶ年計画で特別教育研究経費（拠点形成）を受けて開発・製作が進められてきた超並列クラスタ計算機 PACS-CS（計算ノード数 2560、ピーク演算性能 14.3Tflops）が平成 18 年 7 月から稼働を開始した。PACS-CS Collaboration は PACS-CS を主要な計算設備として格子 QCD の研究を行うことを目的とし、筑波大学物理学域メンバーを中心として組織されている。その目標は、3 種類（up、down、strange）の軽いクォークをその物理的質量（物理点）において動的に扱うシミュレーションを行い、QCD に関する近似のない物理的予言を行うことである。平成 18、19 年度から物理点へ向けて up-down クォーク質量を段階的に軽くし、平成 20 年度より PACS-CS プロジェクトの目標である物理点でのシミュレーションへの取り組みを開始し、平成 21 年度に、reweighting 法を用いた物理点直上でのシミュレーションに成功した。その後、1+1+1 フレーバー QCD+QED シミュレーションの開発に取り組み、up、down クォークの質量差と電磁相互作用を reweighting 法によって取り入れることに成功し、平成 24 年度にその成果を論文として発表した。

なお、PACS-CS は平成 23 年 9 月末をもって運用を終了し、平成 24 年 2 月より後継機となる密結合並列演算加速機構実証システム 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）が稼働を開始した。

#### (1) 1+1+1 フレーバー QCD+QED シミュレーション

従来の格子 QCD 計算では、アルゴリズム的理由により up と down クォークの質量は人為的に等しくし（2+1 フレーバー）、電磁相互作用の効果も無視していた。これに対して、1+1+1 フレーバー QCD+QED シミュレーションでは自然界を再現すべく up、down、strange クォークの質量をすべて独立なものとして扱い、電磁相互作用の効果も同時に評価することを目指している。電磁相互作用および up と down クォークの質量差は reweighting 法によって取り入れる。その際、変形 block BiCGSTAB アルゴリズムの開発を行うことによって、reweighting 法の高効率実行を可能とした（論文 1）。本格計算は  $32^3 \times 64$  の格子サイズを用いて行われ、up クォーク質量、down クォーク

質量、strange クォーク質量、格子間隔を決定するための 4 つの物理インプットとして  $\pi^+$  メソン質量、 $K^0$  メソン質量、 $K^+$  メソン質量、 $\Omega$  バリオン質量を採用した。これにより、up と down クォークの質量差を直接定量的に評価することが可能となった(論文 2)。図 1 は電磁相互作用と up と down クォークの質量差を取り入れた  $K^0$  メソンと  $K^+$  メソンの伝播関数の比を時間の関数としてプロットしたものである。赤線は  $K^0$ - $K^+$  質量差の実験値 ( $K^0$  と  $K^+$  の平均質量の 1%未満) から期待される傾きであり、計算結果は誤差の範囲で実験値を再現している ( $t=0$  の近傍は励起状態の寄与のため実験値からずれている)。なお、本計算では PACS-CS 機の他に超並列クラスタ計算機 T2K-Tsukuba (計算ノード数 648、ピーク演算性能 94 Tflops、平成 20 年 6 月稼働開始) も利用している。

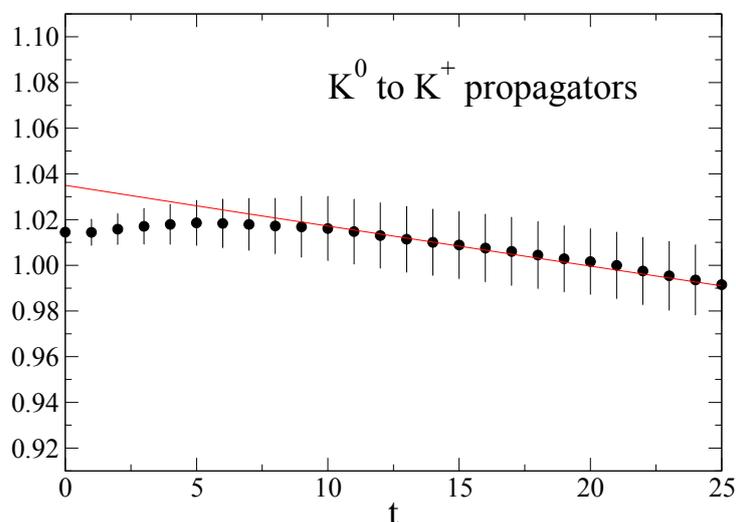


図 1 :  $K^0$  メソンと  $K^+$  メソンの伝播関数の比。赤線は実験から期待される傾き。

## (2) チャームバリオンの研究

物理点直上の極めて現実に近いシミュレーションにより、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 3、4)。チャームクォーク 1 つを含むバリオンは実験的に高精度で調べられている。他方、チャームクォークを 2 つ含むバリオンは、 $\Xi_{cc}(3520)$  のみが実験的発見を報告されている。ただし、この発見を報告している実験グループは 1 つのみであり、他の実験グループからは否定的な結果が報告されている。 $\Xi_{cc}$  の存在は未だ確定していない。本計算により、まず、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。次に、 $\Xi_{cc}$  の質量値を求め、 $3603(15)(16)$  MeV を得た。この値は、報告されている実験値 3520 MeV と有意に異なる。

る。本研究は、既存の実験報告値 3520 MeV が誤りであり、真の値は 100 MeV 程度高いと示唆する。また、 $\Xi_{cc}$ に加え、チャームクォークを 2 つ及び 3 つ含む他の未発見バリオンに対する質量予言値を 2%の精度で決定した。

## 【2】 HPCI 戦略プログラム分野 5 における研究開発課題（青木、石塚、藏増、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、そのうちのひとつである「格子 QCD による物理点でのバリオン間相互作用の決定」の責任者を藏増が務めている。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。前者は青木、初田（理研）を中心とした HAL QCD Collaboration が取り組んでいるアプローチであり、後者は藏増、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9月28日に「京」コンピュータの共用が開始されて以降、ゲージ配位生成の本格計算を開始した。96<sup>4</sup>の格子サイズ、0.1 fmの格子間隔を採用し、DDHMC (Domain-Decomposed Hybrid Monte Carlo) アルゴリズムを用いて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。HMCアルゴリズムは人為的に導入された擬時間に対する分子動力学法を組み入れたモンテカルロ法の一つであり、格子QCD シミュレーションにおいて広く採用されている。DDHMC法では、4次元時空間格子を小領域に分割し、擬時間に対するハミルトン方程式を階層的に積分することによってアルゴリズムの効率化を図っている。熱平衡状態に達したことを確認した後、5分子動力学時間（擬時間の単位）毎にゲージ配位を保存し、そのゲージ配位を用いてハドロン質量などの基本物理量の測定を並行して行っている。図2 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1%程度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、 $\pi$ メソン質量 ( $m_\pi$ )、Kメソン質量 ( $m_K$ )、 $\Omega$ バリオン質量 ( $m_\Omega$ ) を採用している。そのため、 $m_\pi$  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* 法を用いて行う。

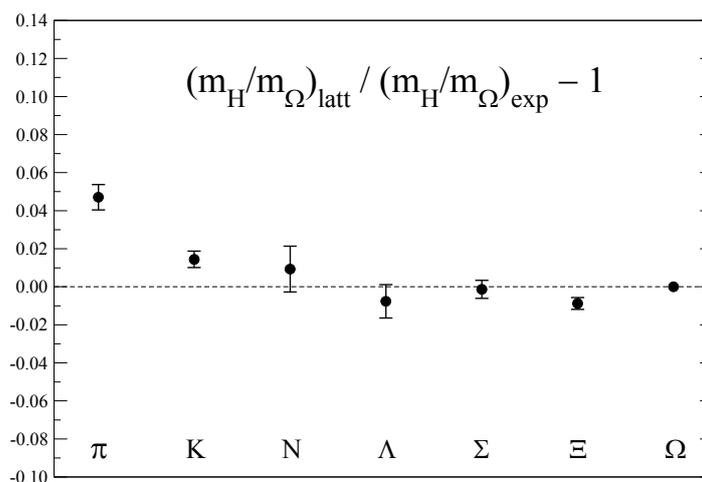


図 2：ハドロンの質量と実験値との比較。

なお、本研究開発課題では、クォーク作用として *smear link* を用いた *Wilson-clover* 作用を用いている。谷口はにより、*clover* 項の改良係数 *csw* が非摂動論的に決定されている（論文 5）。

**【3】 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、宇川らは山崎（名古屋大）とともに 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た後、2 核子系の束縛状態である重陽子の構成にも成功した。ただし、これらは計算コストを抑えるためにクエンチ近似かつ物理的な値よりも重いクォーク質量で行った計算であるため、次のステップとしてクォークの真空偏極効果を取り入れた 2+1 フレーバー格子 QCD 計算への拡張を行った。その結果、クエンチ近似だけでなく 2+1 フレーバー QCD においてもヘリウム原子核と重陽子が束縛することが確認された（論文 4）。ただし、クォーク質量は依然として物理的な値よりも重く、 $m_\pi = 0.51 \text{ GeV}$  相当である。図 3 左は  $^4\text{He}$  原子核のエネルギーシフト  $\Delta E_L(^4\text{He})$  の空間体積依存性を表している。ここで、エネルギーシフトは  $^4\text{He}$  原子核の基底状態と自由な 4

個の核子の質量との差  $\Delta E_L(^4\text{He})=E_L(^4\text{He})-4m_N$  で定義される。有限の空間体積 ( $L^3$ ) では、4 個の核子同士の散乱の効果も  $\Delta E_L(^4\text{He})$  に含まれるため、束縛エネルギーのみを取り出すためには、空間体積無限大極限 ( $1/L^3 \rightarrow 0$ ) への外挿が必要となる。星印は束縛エネルギーの実験結果を表しており、我々の計算結果も同程度の値を再現していることがわかる。図 3 右は重陽子のエネルギーシフト  $\Delta E_L(^3\text{S}_1)=E(^3\text{S}_1)-2m_N$  の空間体積依存性を表している。重陽子の場合、束縛エネルギーの計算結果が実験結果よりも 5 倍程度大きい。また、我々の計算では、実験的には束縛していないスピン一重項 ( $^1\text{S}_0$ ) チャンネルにおいても束縛状態が確認されており、これらの結果はクォーク質量が物理的な値よりも重いためではないかと推察している。今後クォーク質量を更に軽くして現実の値に近づけていくことが重要である。

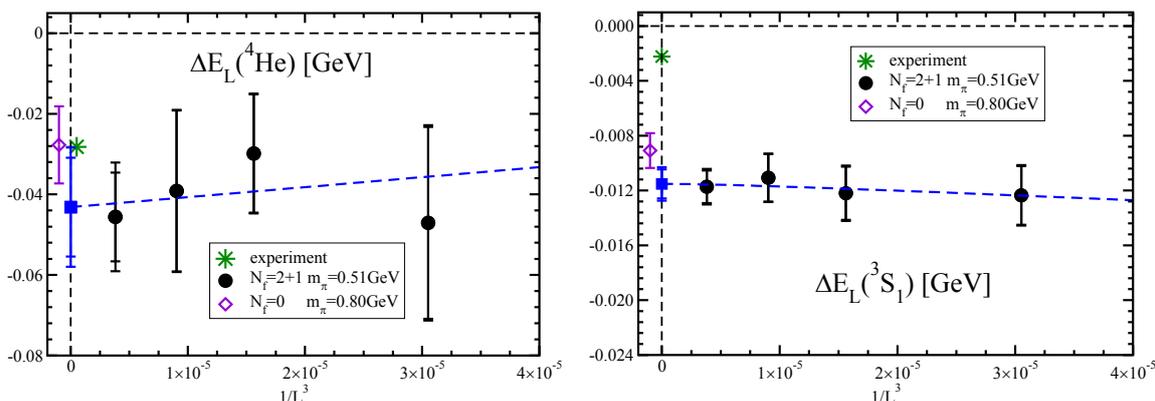


図 3 :  $L^3$  空間格子サイズにおける  $^4\text{He}$  原子核 (左図) と重陽子 (右図) のエネルギーシフト  $\Delta E_L$  の空間体積依存性。四角は空間体積無限大極限 ( $1/L^3 \rightarrow 0$ ) への外挿値、星印は束縛エネルギーの実験結果、白抜きダイヤはクエンチ近似の計算結果を表す。

#### 【4】 格子 QCD によるバリオン間相互作用の研究 (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。青木、石井、根村、佐々木は、理化学研究所の初田らと 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。その一連の研

究成果をレビューしたものが、論文 5 である。また、論文 6、7 では、斥力芯の起源を演算子積展開と摂動論的 QCD の繰り込み群という解析的な手法で研究し、格子 QCD の計算結果と比較している。論文 8 は、HAL QCD が用いてきた方法を非弾性散乱に拡張する方法を提案したものである。以下では、石井、根村、佐々木、及び青木の学生である山田の 2012 年度の研究成果を紹介する。

### (1) 負パリティセクタのハイペロン力・対称および反対称 LS 力

かねてよりの懸案であった flavor SU(3) 極限におけるハイペロン力の一般形について、二核子系の Okubo-Marshak の方法を拡張する事によって求める事に成功した。Octet-baryon の二体系は、flavor 規約表現で、8 表現が 2 度現れ、二粒子の交換に対して、対称な物(s)と反対称な物(a)に分類される。この二つをつなぐ、反対称 LS 力が二核子系との唯一の違いであった。同様に、flavor SU(3)が破れた状況下での一般形を求めた。ここでは、ハイペロンの結合チャンネルの off-diagonal 部分に二核子系では排除されていた形の項がたくさん生き残り、ポテンシャル逆構成の際にどのくらいまじめに取り扱うべきか悩んでいる。とりあえず、最初はこれらを見捨てて計算を進めるつもりである。これらの計算を実行するため、新型の contraction code の開発を行った。平成 25 年度の早期の段階で結果を出して、現実的な計算につなげていきたい。

### (2) 2+1 flavor QCD による核力

平成 22 年度から 23 年度にかけて開発した”時間依存型” Schrödinger-like eq. の方法は、バリオン 4 点関数の ground state saturation を必要としないため、小さな  $t$  でも安定してバリオン間ポテンシャルを計算できる方法である。PACS-CS のゲージ配位を用いた 2+1 flavor QCD の核力のデータに対して、統計を上げてこの方法を適用して再解析を行った。長距離における one pion exchange 極限を考慮するため、AV18 型の関数形を用いて、二つの中心力と一つのテンソル力の同時フィットを行った。ここでは実験的に周期境界の影響を取り込めるようなフィットを試してみた。滑らかにパラメトライズされたポテンシャルを使って求めた位相差は、引力的だが絶対値が実験値よりも遥かに小さかった(束縛状態は存在していない)。  $m_\pi=700, 570, 411$  MeV と変化させたが、この領域ではまだ実験値に向かって引力が強くなる傾向は見られていない(図 4、論文 9)。

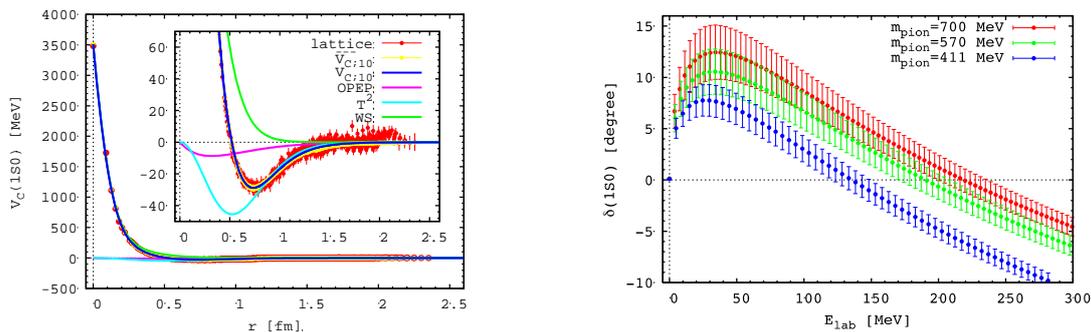


図 4：（左）2+1 flavor 格子 QCD で計算された核力 (spin-singlet 中心力) のフィットの結果 ( $m_\pi=570$  MeV)。(右) これを使った  $1S_0$  の散乱位相差 ( $m_\pi=411, 570, 700$  MeV)。

### (3) 格子 QCD で得られた核力ポテンシャルによる少数核子多体系の研究

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、Nambu-Bethe-Salpeter(NBS)波動関数から得られた (一般化) 核力ポテンシャルを用いて散乱位相などの物理量を導出するための各種方法の確立および軽い原子核構造への適用のための準備を進めた。より具体的には、フレーバーSU(3)対称点で得られた核力ポテンシャルの偶パリティ成分 ( $1S_0$  および  $3S_1-3D_1$  状態に働く中心力およびテンソル力) を用いた  $4\text{He}$  原子核の少数多体問題を精密に解き、束縛状態が存在することを確認した (図 5)。この束縛状態の結合エネルギーは約 4.4 MeV (陽子間のクーロン力も同時に考慮して 4 体問題を解いた場合) もしくは約 5.1 MeV (クーロン力を考慮せず 4 体問題を解いた場合) であり、現実の  $4\text{He}$  に比べて非常に小さい。この結果は、既に行われているテンソル力を繰り込んだ中心力のみで 4 体問題を解いた近似計算と定性的に良く似た結果である。今回用いた核力ポテンシャルは  $\pi$  中間子に対応するハドロンの質量が約 469 MeV であり、クォーク質量は現実よりも重く、得られた核力ポテンシャルのテンソル力成分は現実の場合に比べて非常に弱いと考えられる。4 体問題を解いて得られた  $4\text{He}$  の基底状態における全軌道角運動量 ( $L=2$ ) の状態の期待値はわずか 1.3% (クーロン力有り) ないしは 1.4% (クーロン力無し) である。これまでの現象論的に決められた現実的核力に基づいて計算された  $4\text{He}$  の基底状態の  $L=2$  状態の期待値が 10%程度であることが知られているので、物理点上での核力ポテンシャルの計算が極めて重要であることを示している。

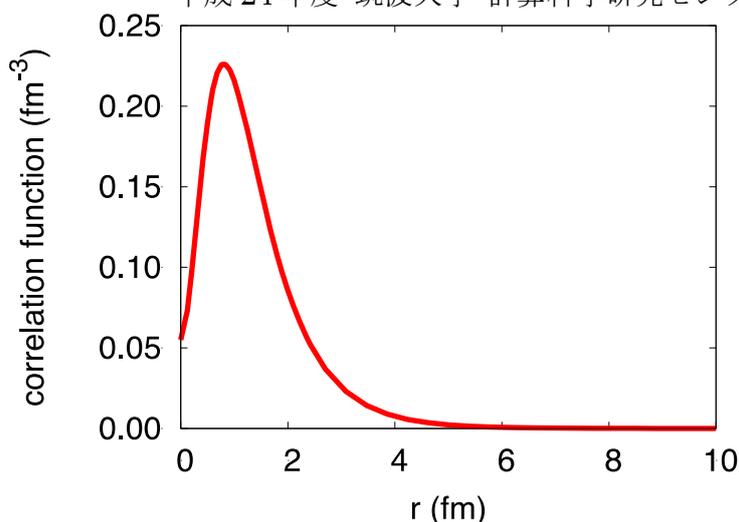


図 5：フレーバーSU(3)対称点での格子 QCD 計算から得られた核力ポテンシャルを用いて得られた  $^4\text{He}$  の基底状態における核子間距離  $r$  [fm] に対する相関関数。陽子間のクォークポテンシャルも考慮されている。

#### (4) 結合チャンネル手法を用いたバリオ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結合チャンネル Schrödinger 方程式に拡張しストレンジネスを含むバリオン 2 体系のポテンシャル行列を系統的に調べてきた。本年度は、バリオン間の近距離斥力の消失に伴い現れると期待されている H-dibaryon 状態に着目し、 $S=-2$  のバリオン間ポテンシャルを用いてこの状態に関する研究を行った。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、パイオン質量が 700 MeV、570 MeV、410 MeV 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ポテンシャルから計算された  $\Lambda\Lambda$  と  $N\Xi$  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束縛状態にあった H-dibaryon が共鳴状態に移り変わっていく様子を確認する事が出来た。今後はこの散乱位相差の誤差を評価し、H-dibaryon の様子を詳細に調べることを計画している。また、他の系についても解析をすすめ、束縛状態の有無などを調べようと考えている。

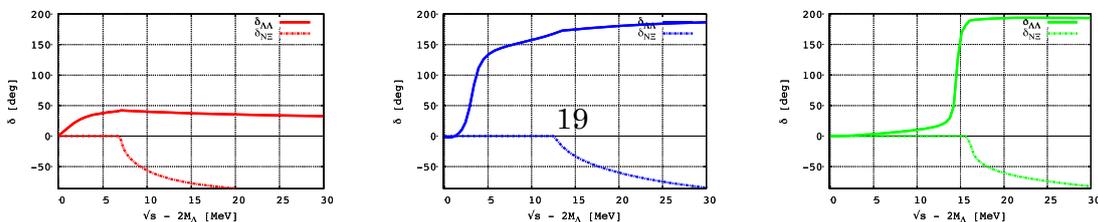


図 6 : Esb1 (左)、2 (中)、3 (右) における  $\Lambda\Lambda$  と  $N\Xi$  の散乱位相差。

### (5) $\Omega$ - $\Omega$ バリオオン間相互作用の研究

$\Omega$ バリオオンは、クォーク模型の分類におけるフレーバー10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。ストレンジネス  $S=-6$  にあたる  $\Omega$ - $\Omega$ 間のポテンシャルを HAL QCD Collaboration による核力ポテンシャルの導出方法を用いて計算した。フレーバー10重項の粒子間のポテンシャルの計算は今回が初めてである。今回は、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  $J=0$  の状態を計算した。計算には CP-PACS Collaboration 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 (パイオン質量 875 MeV に対応) のゲージ配位を用いた。結果は中心には斥力芯があり、中距離には引力ポケットがあり、束縛状態とは断言できないものの強い引力があることを示唆している (図 7)。

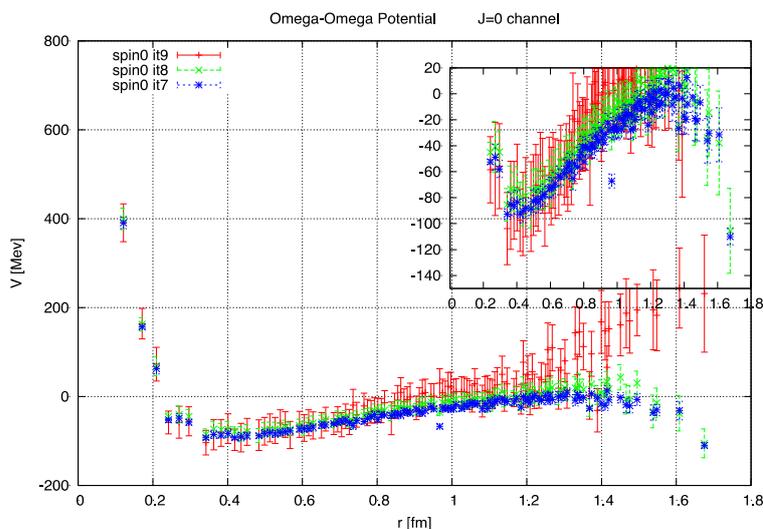


図 7 :  $J=0$  である  $\Omega$ - $\Omega$ 間のポテンシャル  $V$  [MeV]。横軸はバリオオン間の距離  $r$  [fm]。

### 【5】有限温度・有限密度 QCD の研究 (青木、金谷)

金谷、青木らは、理化学研究所初田主任研究員、新潟大学江尻准教授、広島大学梅田准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。WHOT-QCD Collaboration のこれまでの主要成果をまとめて、論文 10 を発表した。

## (1) 固定格子間隔アプローチと T-integral 法による状態方程式の研究

平成 20 年度に開発した T-integral 法に基づく固定格子間隔アプローチは、様々な温度のシミュレーションを、一つの格子スケールで実行する方法である。特に、固定格子間隔アプローチでは、既存のゼロ温度配位を活用できるメリットがあり、計算時間を大幅に抑えつつ、精度の高い有限温度計算を遂行する可能性を拓いている。平成 20 年度にクエンチ近似による試験研究で方法としての有効性を確認し、平成 21 年度から、現実的な  $N_f=2+1$  でのシミュレーションを進めている。第一段階として  $N_f=2+1$  QCD の有限温度シミュレーションを実行し、u、d クォーク質量が現実より重い点ではあるが、ウィルソン型クォークとして初めて、 $N_f=2+1$  の状態方程式の計算に成功した。この研究では、CP-PACS+JLQCD グループによる  $N_f=2+1$  QCD の温度ゼロでの研究結果と公開されているゼロ温度ゲージ配位を利用することで、計算コストを大幅に削減した (図 8、論文 11)。また、固定格子間隔アプローチで生成された  $N_f=2+1$  QCD の配位、及び平成 20 年度の試験研究で生成されたクエンチ近似の配位を使って、固定格子間隔アプローチによる静的クォークの自由エネルギーを計算し、固定格子間隔法が自由エネルギーの研究においても利点があることを示した (図 9、論文 12)。現在、u、d クォーク質量を物理点まで下げた PACS-CS グループのゼロ温度配位を利用した、物理点での有限温度シミュレーションに向けて、準備を進めている。

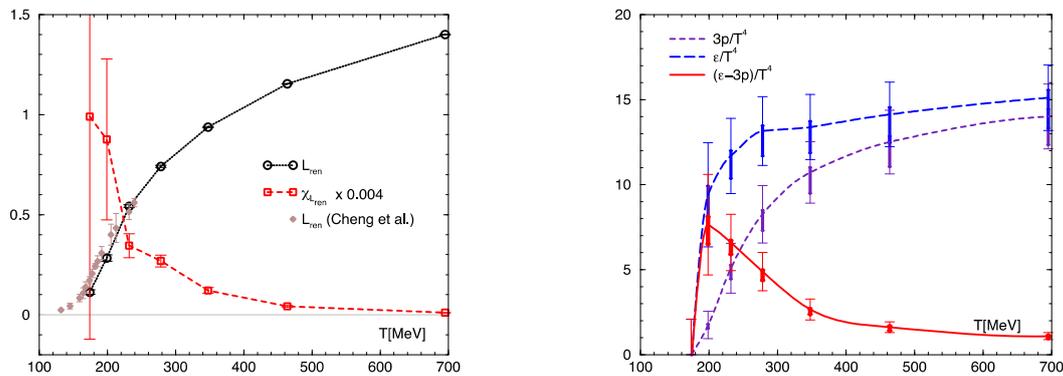


図 8：固定格子間隔アプローチによるウィルソン型クォークを用いた有限温度  $N_f=2+1$  QCD の研究 (論文 11)。(左図) くりこまれたポリアコフ ループとその感受率。U、d クォークは現実より重く、 $T \sim 200$  MeV あたりが有限温度クロスオーバー温度に相当する。比較のため、スタガード型クォークを用いた固定  $N_t$  アプローチの結果も示した。

(右図) 状態方程式。  $p$  はクォーク物質の圧力、  $\varepsilon$  はエネルギー密度、  $\varepsilon - 3p$  はトレース・アノーマリを表す。

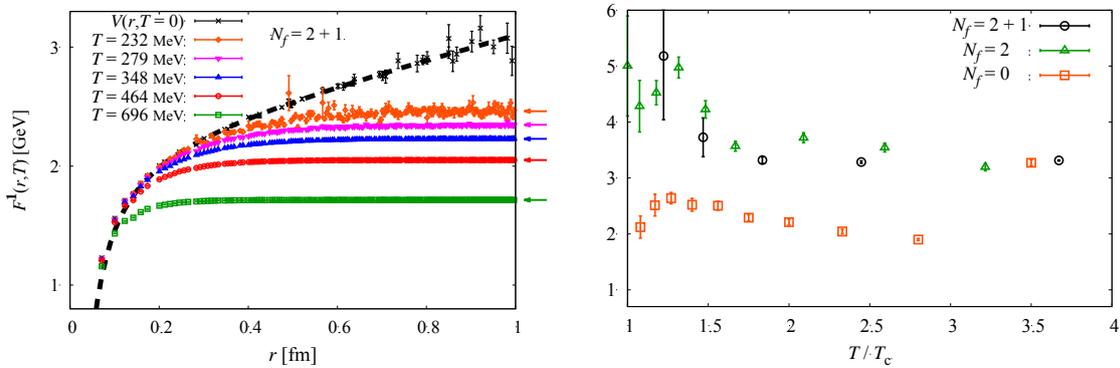


図 9: 固定格子間隔アプローチによる静的クォークの自由エネルギーの研究(論文 12)。

(左図)  $N_f=2+1$  QCD における  $QQ$ -bar カラー 1 重項チャンネルの静的クォーク自由エネルギー。ゼロ温度 ( $T=0$ ) の自由エネルギーはウィルソン・ループの測定により、有限温度の自由エネルギーは 2 個のポリアコフ・ループの相関から評価した。固定格子間隔アプローチでは、定数くりこみの調整無しに、自由エネルギーが短距離で温度に依らないことを直接示すことが出来る。右端の矢印は、ポリアコフ・ループ 1 個の期待値から期待される自由エネルギーの遠距離極限の漸近値。(右図) デバイ遮蔽質量  $m_D(T)$  のフレーバー数依存性。縦軸は  $m_D(T)/T$ 、横軸は  $T/T_c$ 。  $T_c$  は相転移温度で、  $N_f=2+1$  では 190 MeV を仮定した。

#### (5) ヒストグラム法による QCD 有限温度・有限密度相転移の研究

QGP 有限温度・有限密度相転移の性質や次数を判定するうえで、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、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(論文 10、13)。最初に、方法のテストとして、クォークが重い領域の QCD の相構造を、ポリアコフループなどの有効ポテンシャルの振る舞いから相構造を研究した。純ゲージ理論の有限温度 1 次相転移が、動的クォーク効果によりクロスオーバーに変わる臨界点の位置を、一般の化学ポテンシ

ラルの場合に計算した。クォークの有限密度位相項がどう振る舞うかを評価した結果、臨界点の位置に関しては極めて小さいことを示した。これにより、臨界点の位置を、クォーク質量と化学ポテンシャルの関数として計算した (図 10 左)。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。クォークが軽くなると、ポリアコフープは重要な役割を果たさなくなるので、クォーク部分の内部エネルギーに対応する、クォーク行列式そのものに関する有効ポテンシャルを研究する。N<sub>f</sub>=2 QCD の場合に位相項を無視した phase-quenched QCD シミュレーションを実行し、位相の効果を再重み付け法により評価した。まだプレリナリだが、化学ポテンシャルを大きくしてゆくと、クロスオーバー転移が 1 次転移に変わる点を示唆する結果を得た (図 10 右)。

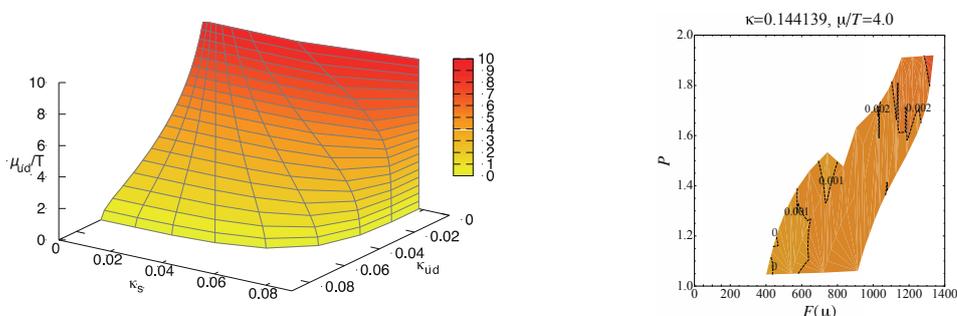


図 10: ヒストグラム法による QCD の有限温度相構造の研究。(左) 重クォーク領域における N<sub>f</sub>=2+1 QCD の臨界面。u、d クォークにだけ化学ポテンシャル  $\mu_{ud}$  がかかり、s クォークにはかかっていない場合の結果。ホッピングパラメータ  $\kappa$  はクォーク質量の逆数にほぼ比例する量で、 $\kappa_s=0$  は  $m_s=\infty$ 、 $\kappa_{ud}=0$  は  $m_u=m_d=\infty$  に対応する。図の臨界面の向こう側は有限温度 QCD 転移が 1 次相転移で、手前はクロスオーバーになっている。(右) クォークが軽い N<sub>f</sub>=2 QCD の相構造の研究。有効ポテンシャルの 2 階微分を、物理量 P (プラケット) と F (クォークの自由エネルギーに関する量) の関数として示す (プレリナリ)。この量がゼロになる点で、クロスオーバーが 1 次相転移になる。

## 【6】有限密度 QCD (藏増)

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。しかし、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。そのような困難を克服すべく、藏増、宇川らは、武田 (金沢大) とともに符号問題の解析的研究を行った。具体的には、クォーク行列式を巻き付き展開法を用いて表すことに

より、符号問題の根源である複素位相を解析的に表現し、さらに重質量展開法を適用することによって位相の上限値が格子の空間体積に比例し、時間方向の伸張とともに指数関数的に抑制されることを見出した。我々は先ず小さな格子サイズを用いたテスト計算によってこの解析の結果を検証し、論文に取り纏めた（論文 14）。その後、次のステップとして数値的に 4 フレーバー QCD に対して有限サイズスケーリング解析を行った。4 フレーバー QCD はある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おり、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。図 11 は「時間方向」の格子サイズを 4 に固定し、空間格子サイズを  $V=6^3 \sim 10^3$  まで変化させた場合の様々な物理量に対する感受率のピークの高さの  $V$  依存性を表している。その依存性が線形であることから、一次相転移と結論することができる。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リング解析の応用であり、その有効性を実証できた意義は大きい。現在結果を論文に取り纏めている。

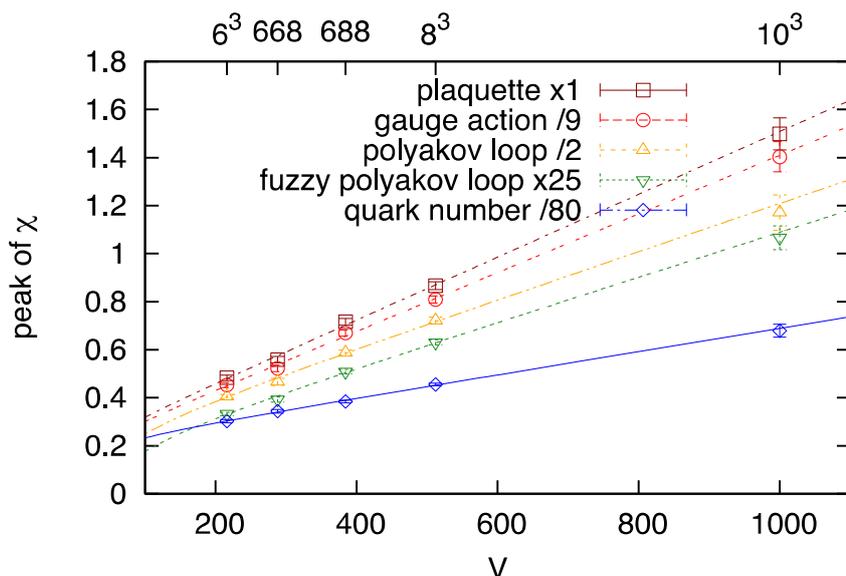


図 11：様々な物理量に対する感受率のピークの高さの空間格子サイズ ( $V$ ) 依存性。

### 【7】有限温度における $U(1)_A$ 対称性 (谷口)

谷口は、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を青木、深谷(大阪大)両氏と共に示した。具体的には、 $SU(2) \times SU(2)$  のカイラル対称性が高温で回復することを前提として、その対称性の回復した Ward-Takahashi 恒等

式をインプットとして、 $U(1)_A$  対称性の Ward-Takahashi 恒等式を調査し、 $U(1)_A$  対称性も熱力学的極限を正しく取れば、回復することを示した。有限温度において回復する対称性の種類は有限温度相転移の次数に強い影響を与えることから、今回の結果は  $N_f=2$  QCD の相転移の次数が一次であることを強く示唆している（論文 15）。

#### 【8】 Conformal 理論の研究（吉江）

Conformal 理論は、素粒子標準模型を越えた理論の候補であるテクニカラー理論との関連で興味深く、近年多くの研究がなされている。吉江は、岩崎筑波大名誉教授、中山 Caltech 教授、石川広島大准教授との共同研究で、格子数値シミュレーションによる conformal 理論の研究を行い、 $SU(N)$  ゲージ理論に  $N_f$  個のフェルミオンが結合した系で、 $N_f$  が conformal window 内にある場合の、理論の dynamics に関する新しい知見を得た。つまり、infrared cutoff を持つ "conformal 理論" では、1) フェルミオン質量の大小によって、閉じ込め相と "conformal 相" に分離されること、2) 2 相間の転移は、1 次転移であること、3) "conformal 相" でのメソン伝搬関数  $G(t)$  は、閉じ込め相での時間  $t$  に関する指数関数型 decay form  $c \cdot \exp(-mt)$  とは異なり、指数補正のある湯川型の decay form  $c' \cdot \exp(-m't)/t^\alpha$  であること、を示した（論文 16）。

#### 【9】 JLDG の改良と運用（吉江、浮田）

国内の格子 QCD 研究者の為のデータグリッド Japan Lattice Data Grid (JLDG) の利便性・可用性の向上のため、吉江は、建部筑波大准教授、天笠筑波大准教授、及び、JLDG 他拠点担当者として、以下の改良等をおこなった。1) 東京大学、名古屋大学拠点の立ち上げ、2) メタデータサーバと *gfarm* の更新、3) 筑波大 HA-PACS FE、WG 群への JLDG クライアント機能の組込み、4) KEK スパコンシステム A FE への JLDG クライアント機能の組込み、5) 管理・運用・保守支援業務の外部委託開始。また、HPCI 共用ストレージと JLDG の連携システム構築の為に、技術検討・システム設計をおこなった。

### 4. 教育

#### 【1】 学位論文

1. 斎藤華、博士論文「Finite density QCD in the heavy quark region (クォーク質量が大きい領域での有限密度 QCD)」

2. 崔在敦、修士論文「Phase diagram at finite temperature and chemical potential in strong coupling limit of lattice QCD (有限温度および化学ポテンシャルにおける格子 QCD の相図の強結合極限)」

## 【2】 非常勤講師・集中講義

1. 青木慎也、東京大学大学院総合文化研究科客員教授2012年4月から2014年3月まで(2年間)。2012年度は「格子ゲージ理論の基礎と応用」に関する講義を行った。
2. 青木慎也、集中講義「格子ゲージ理論入門」立教大学理学部、2012年6月7-9日

## 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

### 【1】 受賞

1. 青木慎也、初田哲男、石井理修「格子量子色力学による核力の研究」、第23回つくば賞(2012年10月17日)、茨城県科学技術振興財団
2. 青木慎也、初田哲男、石井理修「格子量子色力学に基づく核力の導出」、2012年度仁科記念賞(2012年12月6日)、仁科記念財団

### 【2】 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. 青木慎也(代表)、科学研究費補助金・新学術領域研究、平成20年度採択、「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」、5,900千円
3. 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」、3,200千円
4. 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」、1,000千円
5. 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

6. 藏増嘉伸（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(A)、平成22年度採択、「強い相互作用が織り成す物質形態のQCDによる統一的研究」、11,300千円
7. 藏増嘉伸（分担）、科学研究費補助金・新学術領域研究、平成20年度採択、「量子色力学にもとづく真空構造とクォーク力学」、5,100千円
8. 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
9. 吉江友照（分担）、科学研究費補助金・新学術領域研究、平成20年度採択、「分野横断アルゴリズムと計算機シミュレーション」、10,000千円
10. 谷口裕介（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(C)、平成22年度採択、「格子上の非摂動論的な繰り込みの実践」、650千円
11. 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」、1,200千円
12. 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」、1,170千円

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

1. Y. Nakamura, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, T. Sakurai, H. Tadano, Modified block BiCGSTAB for lattice QCD, Comp. Phys. Commun. 183, No.1 (2012) 34-37
2. PACS-CS Collaboration: S. Aoki, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, K. Kanaya, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, Y. Namekawa, M. Okawa, Y. Taniguchi, A. Ukawa, N. Ukita, and T. Yoshie, 1+1+1 flavor QCD+QED simulation at the physical point, Phys. Rev. D 86, No.3 (2012) ref.034507, pp.1-6
3. 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.

- Yoshie, Charmed baryons at the physical point in 2+1 flavor lattice QCD, arXiv:1301.4743
4. T. Yamazaki, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, and A. Ukawa, Helium nuclei, deuteron, and dineutron in 2+1 Flavor lattice QCD, Phys. Rev. D 86, No.7 (2012) ref.074514, pp.1-9
  5. Sinya Aoki, Takumi Doi, Tetsuo Hatsuda, Yoichi Ikeda, Takashi Inoue, Noriyoshi Ishii, Keiko Murano, Hidekatsu Nemura, Kenji Sasaki (HAL QCD Collaboration), Lattice QCD approach to Nuclear Physics, Prog. Theor. Exp. Phys. 2012, No.1 (2012) ref.01A105, pp.1-38
  6. Sinya Aoki, Janos Balog, Peter Weisz, Toward an understanding of short distance repulsions among baryons in QCD – NBS wave functions and operator product expansion – , Prog. Theor. Phys. 128, No.6 (2012) 1269-1282
  7. S. Aoki, J. Balog, T. Doi, T. Inoue, P. Weisz, Short Distance Repulsion Among Baryons, Int. J. Mod. Phys. E22, No.5 (2013) ref.1330012, pp.1-16
  8. Sinya Aoki, Bruno Charron, Takumi Doi, Tetsuo Hatsuda, Takashi Inoue, Noriyoshi Ishii, Construction of energy-independent potentials above inelastic thresholds in quantum field theories, Phys. Rev. D87, No.3 (2013) ref.34512, pp.1-10
  9. N. Ishii, S. Aoki, T. Doi, T. Hatsuda, Y. Ikeda, T. Inoue, K. Murano, H. Nemura and K. Sasaki (HAL QCD Collaboration), Hadron-Hadron Interactions from Imaginary-time Nambu-Bethe-Salpeter Wave Function on the Lattice, Phys. Lett. B712 (2012) 437-441
  10. Shinji Ejiri, Kazuyuki Kanaya, and Takashi Umeda, for the WHOT-QCD Collaboration, Ab initio study of the thermodynamics of quantum chromodynamics on the lattice at zero and finite densities, Prog. Theor. Exp. Phys. 2012, No.1 (2012) ref.01A104, pp.1-35

11. T. Umeda, S. Aoki, S. Ejiri, T. Hatsuda, K. Kanaya, Y. Maezawa, H. Ohno (WHOT-QCD Collaboration), Equation of state in 2 + 1 flavor QCD with improved Wilson quarks by the fixed scale approach, Phys. Rev. D 85, No.9 (2012) ref.094508, pp.1-11
12. Y. Maezawa, T. Umeda, S. Aoki, S. Ejiri, T. Hatsuda, K. Kanaya and H. Ohno (WHOT-QCD Collaboration), Application of fixed scale approach to static quark free energies in quenched and 2 + 1 flavor lattice QCD with improved Wilson quark action, Prog. Theor. Phys. 128, No.5 (2012) 955-970
13. S. Ejiri, S. Aoki, T. Hatsuda, K. Kanaya, Y. Nakagawa, H. Ohno, H. Saito, T. Umeda (WHOT-QCD Collaboration), Numerical study of QCD phase diagram at high temperature and density by a histogram method, Cent. Eur. J. Phys. 10, No.6 (2012) 1322-1325
14. Shinji Takeda, Yoshinobu Kuramashi, and Akira Ukawa, Phase of quark determinant in lattice QCD with finite chemical potential, Phys. Rev. D85 No.9 (2012) ref.096008, pp.1-12
15. S. Aoki, H. Fukaya and Y. Taniguchi, Chiral symmetry restoration, the eigenvalue density of the Dirac operator, and the axial U(1) anomaly at finite temperature, Phys. Rev. D 86, No.11 (2012) ref.114512, pp.1-18.
16. K.-I. Ishikawa, Y. Iwasaki, Yu Nakayama and T. Yoshie, Conformal theories with an infrared cutoff, Phys. Rev. D87, No.7 (2013) ref.071503(R), pp.1-5

B) 査読無し論文

1. Y. Namekawa for PACS-CS collaboration, Charmed baryon spectroscopy on the physical point in 2+1 flavor lattice QCD, PoS (LATTICE 2012) (2012) ref.139, pp.1-7
2. Y. Taniguchi, Non-perturbative evaluation of cSW for smeared link clover fermion with Iwasaki gauge action, PoS (LATTICE 2012) (2012) ref.236, pp.1-7

3. N. Ishii for HAL QCD Collaboration, 2+1 flavor QCD result of nuclear forces, Proceedings of the 20th International IUPAP Conference on Few-Body Problems in Physics, Few-Body Systems in press
4. N. Ishii for HAL QCD Collaboration, Baryon-baryon Interactions from Lattice QCD, PoS (CD12) ref.025, to be appeared
5. 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 in press
6. H. Nemura for HAL QCD Collaboration, Lattice calculation of baryon-baryon interaction and few-body systems, Proceedings of the International Workshop on Strangeness Nuclear Physics, to be published in Genshikaku Kenkyu Suppl.
7. K. Sasaki for HAL QCD Collaboration, Quark mass dependence of hyperonic interactions from lattice QCD, PoS (LATTICE 2012) (2012) ref.157, pp.1-7
8. K. Sasaki for HAL QCD Collaboration, Coupled channel approach to S-wave hyperonic interactions from lattice QCD, Proceedings of the 20th International IUPAP Conference on Few-Body Problems in Physics, Few-Body Systems in press
9. T. Umeda, S. Aoki, S. Ejiri, T. Hatsuda, K. Kanaya, Y. Maezawa, H. Ohno (WHOT-QCD Collaboration), Thermodynamics in 2 + 1 flavor QCD with improved Wilson quarks by the fixed scale approach, PoS (LATTICE 2012) (2012) ref.074, pp.1-7
10. S. Ejiri, Y. Nakagawa, S. Aoki, K. Kanaya, H. Saito, T. Hatsuda, H. Ohno, T. Umeda (WHOT-QCD collaboration), Probability distribution functions in the finite density lattice QCD, PoS (LATTICE 2012) (2012) ref.089, pp.1-7
11. Y. Nakagawa, S. Ejiri, S. Aoki, K. Kanaya, H. Saito, H. Ohno, T. Hatsuda, T. Umeda (WHOT-QCD Collaboration), Phase structure of finite density QCD with a histogram method, PoS (LATTICE 2012) (2012) ref.092, pp.1-7

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Sinya Aoki 「Chiral symmetry restoration and eigenvalue density of Dirac operator at finite temperature」 (招待講演) , Workshop 'New Horizons for Lattice Computations with Chiral Fermions' (BNL, Upton, NY, USA, May 14-16, 2012)
2. Yoshinobu Kuramashi 「1+1+1 flavor QCD+QED simulation at the physical point」 (招待講演) , Workshop 'New Horizons for Lattice Computations with Chiral Fermions' (BNL, Upton, NY, USA, May 14-16, 2012)
3. Y. Namekawa 「Charm quark physics from lattice QCD」 (招待講演) , International Workshop on heavy quark hadrons at J-PARC of Technology 2012 (Tokyo, Japan, Jun. 18-22, 2012)
4. Sinya Aoki 「Hadron interactions in lattice QCD」 (招待講演) , Lattice Hadron Physics IV (CSSM, University of Adelaide, Adelaide, Australia, Jul. 2-4, 2012)
5. Yoshinobu Kuramashi 「Lattice QCD – From quarks to nuclei –」 (招待講演) , 10th International Meeting on High-Performance Computing for Computational Science (VECPAR2012) (Kobe University, Kobe, Jul. 17-20, 2012)
6. Sinya Aoki 「Hadron interactions from lattice QCD」 (招待講演) , INT Program 'Lattice QCD studies of excited resonances and multi-hadron systems' (INT, Seattle, USA, Jul. 30-Aug. 31, 2012)
7. N. Ishii for HAL QCD Collaboration, 「Baryon-baryon interaction from lattice QCD」 (招待講演) , The 7th International Workshop on Chiral Dynamics (CD12) (Thomas Jefferson National Accelerator Facility, Newport News, Virginia, USA, Aug. 6-10, 2012)

8. Sinya Aoki 「Chiral symmetry restoration, eigenvalue density of Dirac operator and axial U(1) anomaly at finite temperature」 (招待講演) , Workshop 'New Frontiers in Lattice Gauge Theory' (GGI, Florence, Italy, Aug. 27-Sep. 28, 2012)
9. K. Sasaki for HAL QCD Collaboration 「Strangeness S=-2 baryon-baryon systems from Lattice QCD」 (招待講演) , Tours2012, VIII Tours symposium on Nuclear physics and Astrophysics on Black Forest (Lenzkirch-Saig, Germany, Sep. 2-7, 2012)
10. H. Nemura for HAL QCD Collaboration 「Lattice Calculation of Hyperon Potential and Few-Body System」 , The 2nd Korea-Japan Workshop on Nuclear and Hadron Physics at J-PARC (Busan, Seoul, Sep. 24-25, 2012)
11. Sinya Aoki 「Hadron interactions from lattice QCD」 (招待講演) , Workshop 'New Frontiers in Lattice Gauge Theory' (GGI, Florence, Italy, Aug. 27-Sep. 28, 2012)
12. Sinya Aoki 「Computing Nuclear Force in Lattice Gauge Theory」 (招待講演) , QCD Structure I (Central China Normal University, Wuhan, China, Oct. 7-20, 2012)
13. K. Kanaya 「Finite density QCD with Wilson quarks using the histogram method」 (招待講演) , International workshop "QCD Structure I" (Wuhan, China, Oct. 7-20, 2012)
14. Sinya Aoki 「Hadron interaction from lattice QCD」 (招待講演) , KMI workshop on "Strong Coupling Gauge Theories in the LHC Perspective", (Sakata-Hirata Hall, Nagoya University, Nagoya, Japan, Dec. 4-7, 2012)
15. Sinya Aoki 「Quarks to Universe in computational science」 (招待講演) , Symposium "Quarks to Universe in Computational Science" (QUCS2012) (Nara New City Hall, Nara, Japan, Dec. 13-16, 2012)

16. Sinya Aoki 「Nuclear force in lattice QCD」 (招待講演) , KEK theory center workshop on 'Hadron physics with high-momentum hadron beams at J-PARC in 2013' (KEK Tsukuba Campus, Japan, Jan. 15-18, 2013)
17. K. Sasaki for HAL QCD Collaboration 「Baryon-baryon interactions in strangeness sector from lattice QCD」 (招待講演) , Workshop on Future Prospects of Hadron Physics at J-PARC and Large Scale Computational Physics in 2013 (Tokai, Japan, Feb. 11-13, 2013)
18. K. Kanaya 「Finite density QCD on the lattice with a histogram method」 (招待講演) , International workshop on "Quarks, Gluons, and Hadronic Matter under Extreme Conditions" (St. Goar, Germany, Mar. 18, 2013)
19. K. Kanaya 「Finite density QCD with a histogram method」 (招待講演) , School and workshop "New Horizons in Lattice Field Theory" (Natal, Brazil, Mar. 25, 2013)

B) 一般講演

1. Sinya Aoki 「Chiral symmetry restoration and eigenvalue density of Dirac operator at finite temperature」 , The 30th International Symposium on Lattice Field Theory (Cairns Center, Cairns, Australia, Jun. 24-29, 2012)
2. Y. Taniguchi 「Non-perturbative evaluation of csw for smeared link clover fermion with Iwasaki gauge action」 , The 30th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2012) (Cairns Convention Centre, Cairns, Australia, Jun. 24-29, 2012)
3. N. Ishii for HAL QCD Collaboration 「2+1 flavor QCD results of nuclear forces」 , The 30th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2012) (Cairns Convention Center, Cairns, Australia, Jun. 24-29, 2012)

4. Y. Namekawa 「Charmed baryon spectroscopy on the physical point in 2+1 flavor lattice QCD」, The XXX International Symposium on Lattice Field Theory (Cairns, Australia, Jun. 24-29, 2012)
5. K. Sasaki for HAL QCD Collaboration 「Quark mass dependence of hyperonic interactions from lattice QCD」, The 30th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2012) (Cairns Convention Center, Cairns, Australia, Jun. 24-29, 2012)
6. N. Ishii for HAL QCD Collaboration 「2+1 flavor QCD results of nuclear forces」, The 20th International IUPAP Conference on Few-Body Problems in Physics (Fukuoka, Japan, Aug. 20-25, 2012)
7. H. Nemura for HAL QCD Collaboration 「Lambda N and Sigma N interactions from lattice QCD」, The 20th International IUPAP Conference on Few-Body Problems in Physics (Fukuoka, Japan, Aug. 20-25, 2012)
8. K. Sasaki for HAL QCD Collaboration 「Coupled channel approach to S-wave hyperonic interactions from lattice QCD」, The 20th International IUPAP Conference on Few-Body Problems in Physics (Fukuoka, JAPAN, Aug. 20-25, 2012)
9. H. Nemura for HAL QCD Collaboration 「Lattice calculation of baryon-baryon interaction and few-body systems」, The International Workshop on Strangeness Nuclear Physics (Osaka, Japan, Aug. 27-29, 2012)
10. K. Sasaki for HAL QCD Collaboration 「Coupled channel approach to hyperonic interactions from lattice QCD」, HYP2012-XI International Conference on Hypernuclear and Strange Particle Physics (Barcelona, Spain, Oct. 1-5, 2012)
11. Y. Namekawa 「Charmed baryons from lattice QCD」, Hadron Structure and Interactions 2012 (Osaka, Japan, Nov. 16-17, 2012)

12. K. Sasaki for HAL QCD Collaboration 「Coupled channel approach to  $S=-2$  baryon-baryon system in Lattice QCD」, International Symposium on "Quarks to Universe in Computational Science (QUCS 2012)" (Nara New City Hall, Nara, Japan, Dec. 13-16, 2012)
13. M. Yamada 「Omega-Omega interaction on the Lattice」, Symposium:Quarks to Universe in Computational Science (QUCS 2012) (Nara New City Hall, Nara, Japan, Dec.13-16, 2012)
14. H. Nemura for HAL QCD Collaboration 「Hyperonic nuclear forces from lattice QCD and toward an application to few-body systems」, YITP workshop Nuclear equation of state and hypernuclear physics (Kyoto, Japan, Jan. 4-31, 2013)
15. Y. Namekawa 「Charm quark physics from lattice QCD at the physical point」, Future Prospects of Hadron Physics at J-PARC and Large Scale Computational Physics (Ibaraki, Japan, Feb. 11-13, 2013)
16. H. Nemura for HAL QCD Collaboration 「Hyperonic potentials from lattice QCD and toward an application to few-body problems」, The 5th GCOE International Symposium on "Weaving Science Web beyond Particle-Matter Hierarchy (Sendai, Japan, Mar. 4-6, 2013)

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 青木慎也「はじめに」(招待講演), 新学術領域「素核宇宙融合」×「新ハドロン」クロスオーバー研究会 (名古屋大学, 名古屋, Jul. 12-13, 2012)
2. 滑川裕介「Charm quark system on the physical point in 2+1 flavor lattice QCD」(招待講演), 新学術領域「素核宇宙融合」×「新ハドロン」クロスオーバー研究会(名古屋大学, 名古屋, Jul. 12-13, 2012)

3. 金谷和至「Lattice QCD at finite T and  $\mu$  – updates from Lattice 2012」(招待講演), 基研研究会「熱場の量子論とその応用2012」(京都大学基礎物理学研究所, 京都, Aug. 22-24, 2012)
4. 藏増嘉伸「京コンピュータとHPCI戦略プログラム分野5」(招待講演), 日本物理学会2012年秋季大会理論核物理領域-素粒子論領域-宇宙線・宇宙物理領域合同シンポジウム「動き出した京コンピュータと素粒子・原子核・宇宙の計算物理」(京都産業大学, 京都, Sep. 11-14, 2012)
5. 青木慎也「HAL QCD」(招待講演), 第25回理論懇シンポジウム「計算宇宙物理学の新展開」(つくば国際会議場中ホール300, つくば, Dec. 22-24, 2012)
6. 藏増嘉伸「計算素粒子物理学のフロンティア」(招待講演), 日本物理学会第68回年次大会素粒子論領域-理論核物理領域-領域3-9-領域11-12合同シンポジウム「エクサスケールに向けて歩み出す計算物理学」(広島大学東広島キャンパス, 東広島, Mar. 26-29, 2013)

B) その他の発表

1. 石塚成人「Resonance on the lattice」, 新学術領域「素核宇宙融合」×「新ハドロン」クロスオーバー研究会(名古屋大学, 名古屋, Jul. 12-13, 2012)
2. 佐々木健志 for HAL QCD collaboration 「Coupled Channel Approach to Baryon-Baryon Interactions in Lattice QCD」, 新学術領域「素核宇宙融合」×「新ハドロン」クロスオーバー研究会(名古屋大学, 名古屋, Jul. 12-13, 2012)
3. 石井理修 for HAL QCD Collaboration 「PACS-CSゲージ配位を用いた2+1 flavor QCDによる核力ポテンシャル」, 日本物理学会2012年秋季大会(京都産業大学, 京都, Sep. 11-14, 2012)
4. 滑川裕介「物理点における2+1フレーバー格子フルQCDシミュレーションによるチャームバリオンの研究」, 日本物理学会2012年秋季大会(京都産業大学, 京都, Sep. 11-14, 2012)

5. 佐々木健志 for HAL QCD collaboration 「格子QCDによるハイペロン間相互作用のクォーク質量依存性の研究」, 日本物理学会2012年秋季大会 (京都産業大学, 京都, Sep. 11-14, 2012)
6. 吉江友照「HEPnet-J/sc報告」, HEPnet-Jユーザー会 (九州大学, 福岡, Feb. 20-21, 2013)
7. 吉江友照「JLDGの現状と計画」, 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 (秋葉原, 東京, Mar. 5-6, 2013)
8. 佐々木健志 for HAL QCD collaboration 「格子QCDによるS=-2バリオン間相互作用のクォーク質量依存性の研究」, HPCI戦略プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」シンポジウム (秋葉原, 東京, Mar. 5-6, 2013)
9. 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 (内幸町, 東京, Mar. 15-16, 2013)
10. 齋藤華「格子QCD シミュレーションにおける $\beta$ 関数の計算に関する研究」, 日本物理学会第68回年次大会 (広島大学東広島キャンパス, 東広島, Mar. 26-29, 2013)

(4) 著書、解説記事等

1. 藏増嘉伸「スーパーコンピュータ京と量子論の数値計算」パリティ2013年1月号丸善出版
2. 青木慎也、石井理修、初田哲男、根村英克「QCD による核力研究とその展開」日本物理学会誌2012年67巻11号
3. 青木慎也「2012 年ゴートン・ベル賞：石山智明氏、似鳥啓吾氏、牧野淳一郎氏」日本物理学会誌2013年68巻3号
4. 山田信博監修、「科学の芽」賞実行委員会編 (岩崎洋一, 白川秀樹, 金谷和至他著)「もっと知りたい!『科学の芽』の世界part 3」筑波大学出版会 (2012)

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. International Lattice Data Grid (ILDG)

<http://ildg.sasr.edu.au/Plone>

4. Japan Lattice Data Grid (JLDG)

<http://www.jldg.org/jldg/>, <http://ws.jldg.org/QCDArchive/index.jsp>

#### 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 青木慎也 他、新学術領域「素核宇宙融合」×「新ハドロン」、HPCI戦略プログラム分野5共催クロスオーバー研究会 -多彩なフレーバーで探る新しいハドロン存在形態の包括的件研究- 共催、2012年7月12、13日、名古屋大学坂田・平田ホール、名古屋（参加者75名）
2. 青木慎也 他、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」/HPCI戦略プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」/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-、2012年7月27日-31日、京都大学基礎物理学研究所、京都（参加者61名）
3. 青木慎也 他、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」/HPCI戦略プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」  
Symposium: 'Quarks to Universe in Computational Sciences (QUCS 2012)', 主催、2012年12月13日-16日、奈良新公会堂、奈良（参加者101名）

#### 9. 管理・運営

1. 青木慎也、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

なし

11. その他

なし

## II 宇宙・原子核物理研究部門

### II-1. 宇宙分野

#### 1. メンバー

教授	梅村 雅之
准教授	森 正夫
講師	吉川 耕司
准教授	岡本 崇 (HPCI 戦略プログラム)
助教	川勝 望 (理数学生応援プロジェクト)
研究員	谷川 衝 (科研費基盤 S)
	行方 大輔 (科研費基盤 S)
	川口 俊宏 (科研費基盤 A)
	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)
	Alexander Wagner (センター)
学生	大学院生 12名 学類生 1名

#### 2. 概要

本年度、当グループスタッフは、FIRST プロジェクトを推し進めると共に、FIRST, T2K-Tsukuba を用いて、宇宙論的銀河形成シミュレーション、粒子法輻射流体による宇宙再電離シミュレーション、メッシュ流体用高速輻射輸送計算、大質量ブラックホール多体系におけるブラックホールの合体成長、ダークマターハローの内部構造：コアカスプ問題、アンドロメダの涙とさざめき、銀河系中心領域の特異な物理環境が分子雲形成に与える影響、6次元 Vlasov 方程式による自己重力数値シミュレーションの研究を行った。さらに、AVX 命令版 Phantom-GRAPE の開発、HA-PACS に向けたアプリケーションの開発、「京」を用いた銀河形成シミュレーションを行った。また、宇宙・生命・物性・原子核分野連携で星間空間における光誘起 L 型アミノ酸過剰、系外惑星における光合成アンテナ機構の理論的研究を行った。また、プレ戦略イニシアティブ「アクセラレータによる銀河輻射流体力学の幕開け」(代表者 森正夫) の継続が採択され、輻射流体力学実現のための演算加速器を搭載した並列計算機システム構築を開始し、プロトタイプ制作を行った。

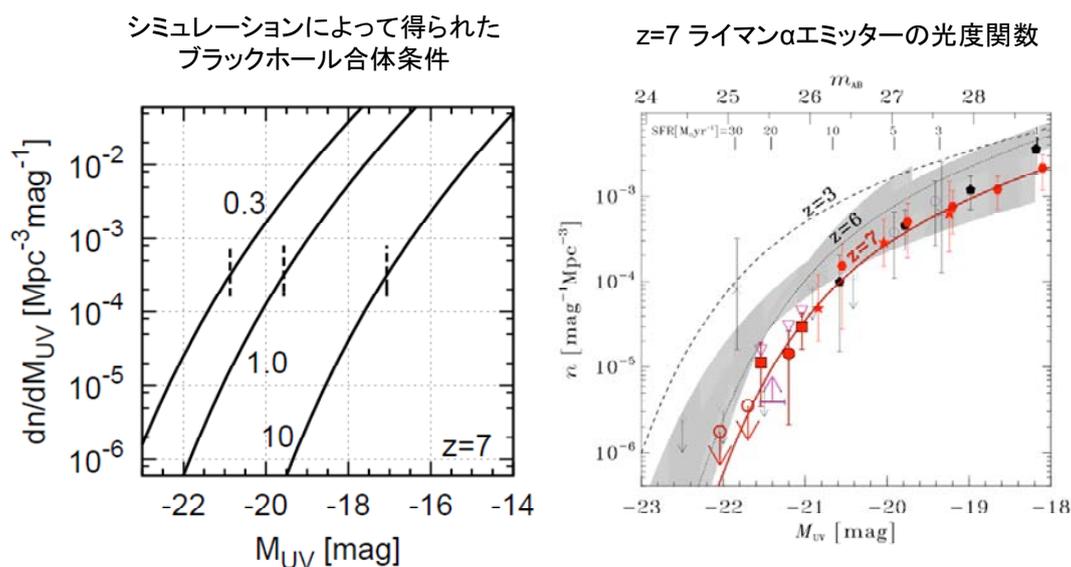
#### 3. 研究成果

##### 【1】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

### 一般相対論的N体計算によるブラックホール合体条件と観測との比較



線に付けられた数値は仮定した質量-光度比  
縦の波線より左側で合体が可能  
Tanikawa & Umemura 2012

Ouchi et al. 2009

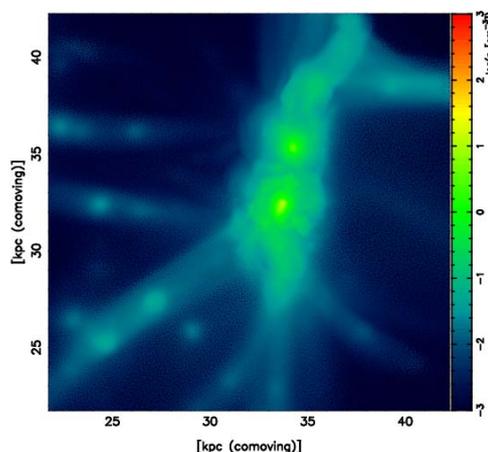
果を入れた高精度 N 体計算により調べた。銀河バルジの中に 10 個の巨大ブラックホールを置いて計算した結果、銀河中の星密度が高い場合には、星による力学的摩擦が有効に働き、ブラックホールは銀河中心に落ちることで多重散乱を繰り返して、連ブラックホールが生まれ、連ブラックホールは他のブラックホールとの散乱の結果、重力波を放出して合体することが分かった。そして、ブラックホール合体がどのような銀河で起こりうるかということ解析した結果、すばる望遠鏡で見えている赤方偏移  $z=7$  のライマンアルファ・エミッターで、ブラックホール

合体過程が起こっている可能性を示した（下図）。

## 【2】 第一世代天体の輻射流体計算

宇宙で最初に生まれた天体(第一世代天体)は、従来の計算では  $\approx 10^6 M_{\odot}$  のダークマターハローに  $\approx 10^5 M_{\odot}$  程度のバリオンガスが蓄積されて形成されるとされてきた。しかしながら、従来の研究では、ダークマターの小スケールでの振る舞い、特にダークマター・カスプの成長についてはあまり注目されてこなかった。そこで、我々は計算領域の全体を可能な限り高解像度にした数値計算で、ダークマター・カスプの成長を分解できるようにし、第一世代天体の形成と進化を調べた。

この計算では、ダークマターと流体粒子をそれぞれ約 1 億体( $512^3$  体)使い、計算領域の全体にわたってバリオンとダークマター質量解像度としてそれぞれ  $0.046 M_{\odot}$  と  $0.22 M_{\odot}$  を実現した（右図）。その結果、第一世代天体の質量は従来の計算で求められていた質量より 2 桁近く小さくなる ( $\approx 10^3 M_{\odot}$  程度) ことがわかった。この結果の一部は、既に特別推進研究で得られていたものであるが、その後の解析で、ダークマター・カスプの重力ポテンシャルが、ビリアル温度を上昇させ、その結果水素分子冷却の熱的不安定を引き起こすことで小質量の天体形成が可能になることを明らかにした (Umemura et al. 2012)。



## 【3】 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したと考えられている。キューサー吸収線系を利用した観測(e.g., Fan et al. 2006)では、 $z=6$  程度ではすでに宇宙は高度に電離されている事が示されているが、この宇宙再電離過程がいつ始まり、どのように進んだかは未だ明らかではない。宇宙再電離史を解き明かすには、銀河間空間への電離光子供給源である天体の形成史とそれに伴う電離領域の進化過程を同時に計算する必要があるが、この天体形成史自体に輻射性フィードバックが影響を及ぼす為、輻射流体計算が必要となる。このような計算では、多くの放射源を取り扱う必要がある為、非常に膨大な計算コストが要求される。

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)。

また、今年度は京のような大規模並列計算機で効率が出せるよう START のアルゴリズムの改善も行った。その結果、数 1000 並列以上での計算であっても非常によいスケーラビリティを実現する事を可能にし、演算数自体もおよそ半分にする事に成功した(START2: Hasegawa in prep.)。

#### 【4】 「京」を用いたダークマターシミュレーション

理化学研究所の京コンピュータ上で、重力多体シミュレーション用コード"GreeM" をチューニングした。我々は、数万や数十万並列でもスケールするように以下の最適化を行った。

- 1) 大規模な全対通信の階層化。まず全ノードをいくつかのグループに分割する。この時、空間的に近い領域を担当するノードが同じグループになるようにする。そしてグループ内での全対通信を行ってから、グループ間で通信するというように2段階に分けて通信を行うことによって全対通信の実行時間を抑制した。
- 2) 領域形状を過去の数ステップに渡って平均化することにより、サンプリングによるステップ間の形状のばらつきを抑え、粒子再配分の通信コストの抑制。
- 3) MPI+OpenMP によるハイブリッド並列化

こうして京コンピュータ上でほぼ完璧なスケーラビリティを実現した。さらに2兆ダークマター粒子の重力進化シミュレーションを、京コンピュータのほぼ全システムを用いて、5.67 ペタフロップスの実効性能(実行効率55%) で実現した。これらの成果が認められ、ハイ・パフォーマンス・コンピューティングに関する国際会議SC12 (2012 年11月, 米国・ソルトレイクシティ開催) において、ゴードン・ベル賞を単独受賞した。ゴードン・ベル賞ファイナリストには、ピーク性能が20 ペタフロップス(「京」の約2倍) の「セコイア」(米国・ローレンス・リバモア国立研究所) を用いて、同様のダークマターシミュレーションで14 ペタフロップスを達成した米国のグループがあった。ところが我々のコードが実際の計算速度で上回り、1 粒子あたり2.4 倍の速さでシミュレーションをすることが可能であった(同じ計算機を用いた場合は5 倍近く速い)。こういった点が評価され、ゴードン・ベル賞の受賞につながったようである。

#### 【5】 活動銀河核ジェットのパラズマ組成の研究

活動銀河核から噴出する相対論的ジェットのプラズマ組成が、電子・陽子なのか、それ

とも電子・陽電子であるかという根本的な問題は未だ明らかになっていない。これは、相対論的ジェット形成メカニズムや宇宙線の起源とも関連する宇宙物理学において最重要テーマの1つである。これまで、バルクコンプトンと呼ばれる2次的放射の有無、シンクロトロン自己吸収や円偏波成分から、ブレイザージェット中のプラズマ組成についての議論がされてきた。しかし、プラズマ組成と密接に関係する真のジェットパワーを評価することは困難であり、従来の手法では放射光度から類推するほかなかった。この問題を解決するために、我々は、ジェットエネルギーの貯蔵庫である膨張コクーン力学に注目し、真のジェットパワーと年齢を評価する方法 (Kino and Kawakatu 2005; Ito et al. 2008)、さらにはコクーン内での各成分(電子, 陽電子, 陽子)の分圧から相対論的ジェットの組成に制限をつける方法を提唱した。(Kino, Kawakatu, Takahara 2012)。本研究では、膨張コクーン力学により真のジェットパワーが求められているFR II型電波銀河 Cygnus A, 3C219, 3C223, 3C284 に対して、同様の方法を適応し解析を行った。その結果、Cygnus A を含む4つのFR II電波銀河はエディントン光度に匹敵するパワフルなジェットを持つにも関わらず、いずれの場合もペアプラズマが混在することが分かった。つまり、4天体のジェット組成は電子・陽子プラズマだけでは説明できず、陽電子の存在を示唆するものである (Kawakatu, Kino, Takahara in preparation)。

#### 【6】 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)構造を予言する(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・収縮が起こ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。

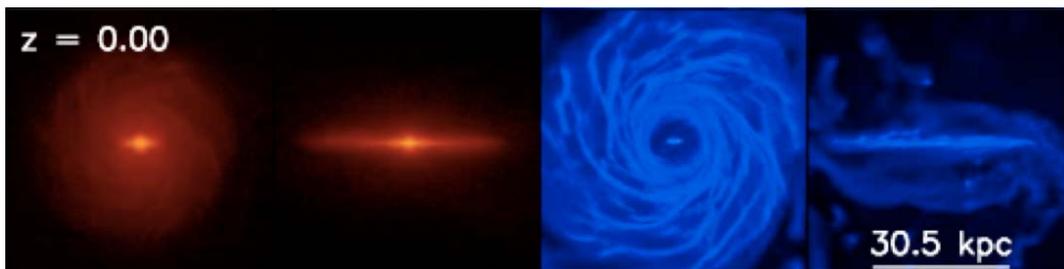
#### 【7】 アンドロメダの涙とさざめき

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エル等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。

#### 【8】 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、電波領域の既存装置で十分検出可能である事がわかった。

#### 【9】 宇宙論的銀河形成シミュレーション



ガスの冷却や星形成、超新星爆発等の物理過程を取り入れた宇宙論的銀河形成シミュレーションを用いて以下のような研究を行った (i) 遠方宇宙の星形成銀河であるラサブミリ波で明るく輝くサブミリ銀河の物理的性質を明らかにした (Shimizu et al. 2012ab). (ii) 銀河系サイズの銀河を高分解能な宇宙論的シミュレーションで形成し、銀河系バルジの形成について調べた. 擬バルジと呼ばれる構造が今まで考えられていたような円盤の永年進化ではなく高赤方偏移の爆発的星形成で形成されるという新しい描像を提案した (Okamoto 2013). また、様々なグループ間での銀河形成モデルを比較するプロジェクトにも参加した (Scannapieco et al. 2012).

#### 【10】 6次元位相空間上の Vlasov-Poisson シミュレーション

無衝突自己重力系の数値シミュレーションでは、これまで N 体シミュレーションが幅広く用いられてきたがニュートリノなどの速度分散が大きい成分の無衝突減衰を正確に取り扱うには不向きであった。この N 体シミュレーションの弱点を克服する手法として 6 次元位相空間上での無衝突ボルツマン方程式を有限体積法によって直接数値シミュレーションする手法を世界で初めて開発した。本年度は、宇宙論的な大規模構造形成の数値シミュレーションに応用できるように共動座標系での無衝突ボルツマン方程式の数値解法を開発した。

#### 【11】 GPU を利用した輻射輸送シミュレーションコードの開発

輻射輸送は宇宙物理学の数値シミュレーションにおいて重要な役割を果たすが、多数の光源からの輻射輸送計算は計算コストが膨大となり、大規模な計算や流体力学と組み合わせた輻射流体計算の実行は困難であった。我々は多数の光源からの輻射輸送を高速に計算する ARGOT (accelerated radiation transfer on grids using oct tree) 法を GPU を用いてさらに高速化することに成功した。また、GPU を搭載した大規模クラスターシステムである HA-PACS 上でノード並列化を行った。

#### 【12】 AGN の輻射にさらされた分子雲の進化についての研究

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。そこで、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輻射流体計算を行った。その結果、分子雲表面での電離パラメータの大きさに応

じて、分子雲の進化は 2 種類に大別されることがわかった。電離パラメータが弱い場合には、分子雲は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。電離パラメータが強い場合には、輻射圧が効果的になりはじめ、光蒸発流の分子雲表面に閉じ込めながら、分子雲押しつぶし、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。

### 【13】 極高光度 X 線源の中間質量ブラックホール候補

中間質量ブラックホール(BH)の最有力候補である極高光度 X 線源(Hyper Luminous X-ray source)について、X 線スペクトルを降着円盤モデルを用いて解析し、BH 質量を推定した。

極高光度 X 線源 ESO243-49 HLX-1 は、近傍の円盤銀河(赤方偏移  $z = 0.02$ ) の円盤面上空に写っており、赤方偏移測定の試みからこの銀河と同じ距離に居る事が示唆されている。この距離測定が正しければ、X 線光度は  $1042 \text{ erg/s}$  に達し、超高光度 X 線源 (Ultra Luminous X-ray source) よりも 1 桁以上明るく、中間質量 BH の最有力候補である。中間質量 BH は実在するか、その起源は何か、元衛星銀河の中心 BH が浮遊しているのか、巨大 BH の種なのか等の疑問に挑む絶好の実験場と言える。

これまでの HLX-1 の X 線スペクトルを降着円盤モデルを用いて解析する研究では、亜臨界降着率に限定される標準降着円盤モデルを基にしていた。しかし、大光度天体に亜臨界降着を仮定して BH 質量を推定し中間質量という答えを得る事は、仮定が結論に直結している危険性がある。

そこで、亜臨界から超臨界降着率まで幅広くカバーすることで降着率に事前の仮定を必要とせず、移流・相対論的效果円盤表層でのコンプトン散乱を含んだ円盤スペクトルモデル(Kawaguchi 2003)を 10 万太陽質量までの BH に対して計算した。3 年に渡って約 30 倍光度が時間変動する HLX-1 の多時刻 X 線スペクトルを解析したところ、約 1.8 万太陽質量 BH へのガス降着によってデータを説明できる事がわかった。

### 【14】 AVX 命令版 Phantom-GRAPE

2011年にリリースされた Intel の新型プロセッサ Sandy-Bridge で新たに実装された SIMD (Single-Instruction-Multi-Data) 命令である Advanced Vector eXtension (AVX) 命令セットを用いた、重力多体数値計算ライブラリ Phantom-GRAPE を開発し、これまでの SIMD 命令である Streaming SIMD Extension (SSE) 命令セットを用いたものよりもより高速な演算を実現した。

Phantom-GRAPE は、4 次エルミート積分を軌道計算に用いる高精度な衝突系重力多体用と、銀河や銀河団などの無衝突系用の 2 種類を開発し、Google Code で公開してある。

**【15】 星間空間におけるアミノ酸の円偏光波誘起鏡像異性体過剰の理論的研究  
(宇宙・生命・物性・原子核分野連携)**

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、地球上の生命ではほとんど 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。2010 年には、超高温の隕石からアミノ酸が発見され、隕石のアミノ酸は地球に大気圏通過の際に変成することなく落下することが分かった。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)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剰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  $\alpha$  帯の光が重要であることを明らかにした。

**【16】 系外惑星におけるバイオマーカー検出を目指した光合成アンテナ機構のエネルギー移動計算 (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の観測にも成功している。地球に類似した惑星の発見が期待される中で、得られるスペクトルから生命の痕跡であるバイオマーカーを如何に検出するかが課題になっている。地球の生命の進化において光合成は極めて重要であり、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) は有力なバイオマーカーとなり得る。様々なスペクトル型の主星を公転する系外惑星において光合成生物の存在を想定した場合、光捕集の形態が大きく異なると考えられる。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。これにより、アンテナ系の形態と red edge との相関を調べ、系外惑星で想定されるスペクトルを議論した。

#### 4. 教育

##### 【学位論文】

<博士論文>

1. Mohammad Ali Nawaz  
Interaction of Jets with the Intracluster Medium
2. Marc White  
Outflows from Young Stellar Objects

<修士論文>

1. 安部 牧人  
3次元輻射流体計算による紫外線輻射場中の星団形成過程の研究
2. 五十嵐 朱夏  
球対称定常銀河風の解析
3. 大野 純  
GPUを用いた輻射流体力学シミュレーションの高速化
4. 久保田 明夏  
初代星形成における紫外線輻射の流体力学的効果

< 学士論文 >

飯塚 実紅

系外惑星系における軌道交差によるホットジュピター形成

**【集中講義】**

・梅村 雅之

「輻射輸送・輻射流体力学」(2012年7月19日, 千葉大学, 千葉市)

・岡本 崇

「銀河形成とダークマター」第7回 素核宇宙融合 レクチャー シリーズ (2012年11月20日~2012年11月21日, 神戸大学, 神戸市)

**5. 受賞, 外部資金, 知的財産権等**

1) **【受賞】**

①ACM Gordon Bell Prize, 石山智明, 4.45 Pflops Astrophysical N-Body Simulation

on K computer – The Gravitational Trillion-Body Problem, 2012年11月16日

②HPCS IEEE Computer Society Japan Chapter 優秀若手研究賞, 扇谷豪, 重力多体

系用 Tree Code の並列 GPU 化による計算加速, 2013年1月16日

2) **【外部資金】**

< 代表者 >

・基盤研究 (S) : 梅村 雅之 (代表者) (2008年度採択, 継続)

「第一世代天体から原始銀河に至る宇宙暗黒時代の解明」(880万円)

・基盤研究 (A) : 森 正夫 (代表者) (継続)

「理論と観測の融合による銀河発生学の探求」(560万円)

・プレ戦略イニシアティブ : 森 正夫 (代表者) (継続)

「アクセラレータによる銀河輻射流体力学の幕開け」(500万円)

・科研費若手研究 (B) : 岡本 崇 (代表者) (新規)

「輻射流体シミュレーションを用いた銀河風駆動機構の解明」(110万円)

・科研費若手研究 (B) : 長谷川 賢二 (代表者) (新規) (210万円)

「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」

・科研費若手研究 (B) : 石山智明 (代表者), 2013-2015年, 350万(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」

<分担者>

- ・ 基盤研究 (A) : 梅村雅之 (分担者) (代表者 : 大内正巳) (2011 年度採択, 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) (新規)  
「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」 (2.5 万円)
  - ・ 基盤研究 (C) : 川口 俊宏 (分担者) (代表者 : 峰崎 岳夫) (継続)  
「活動銀河核多波長モニターデータベースと活動銀河核変光・放射機構の研究」  
(20 万円)
- ・ 挑戦的萌芽研究:川勝 望 (分担者) (代表者 : 長尾透) (継続)  
宇宙の「生きた化石」:「現在の宇宙に潜む進化最初期の銀河と巨大ブラックホールの探査」 (15 万円)

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

- 1) Doi, A., Nagira, H., Kawakatu, N. Kino, M., Nagai, H., Asada, K., 2012, Radio Galaxies in Narrow-line Seyfert 1 Galaxies, *The Astrophysical Journal*, 760(1), 41-51
- 2) Godet, B. Plazolles, T. Kawaguchi, J.-P. Lasota, D. Barret, S. Farrell, V. Braito, M. Servillat, N. Webb and N. Gehrels, 2012, Investigating slim disk solutions for HLX-1 in ESO 243-49, *The Astronomical Journal*, 752, 34 [12pages]
- 3) Hasegawa, K., Semelin, B., 2013, The impacts of ultraviolet radiation feedback on galaxies during the epoch of reionization, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, Volume 428, pp.154-166
- 4) Ishiyama, T., Nitadori, K., Makino, J. 2012, 4.45 Pflops Astrophysical N-Body Simulation on K computer – The Gravitational Trillion-Body Problem SC '12 Proceedings of the International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, Article No. 5
- 5) Kawata, D., Okamoto, T., Gibson, B. K., Barnes, D. J. and Cen, R., 2013, Calibrating an updated smoothed particle hydrodynamics scheme within gcd+, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 428, 1968-1979
- 6) Kino, M., Kawakatu, N., Takahara, F., 2012, Calorimetry of AGN Jets: Testing Plasma Composition in Cygnus A, *The Astrophysical Journal*, 751(2), 101-109

- 7) Kino M., Ito, H., Kawakatu, N., Orienti, M., 2013, New class of very high energy  $\gamma$ -ray emitter: radio-dark mini-shells surrounding in AGN jets, *The Astrophysical Journal*, 764(2), 134-138
- 8) Komatsu, Y., Yamada, H., Kawamoto, S., Fukuda, M., Miyakawa, T., Morikawa, R., Takasu, M., Akanuma, S. and Yamagishi, A., 2012, Designing the Binding Surface of Proteins to Construct Nano-fibers, *Progress in Theoretical Chemistry and Physics --Quantum Systems in Chemistry and Physics*, 26, 555-567
- 9) Komatsu, Y., Fukuda, M., Yamada, H., Kawamoto, S., Miyakawa, T., Morikawa, R., Takasu, M., Yokojima, S., Akanuma, S. and Yamagishi, A., 2012, Constructing Protein Nano-Fiber and Estimation of the Electronic State Around Metal Ions, *Int. J. Quantum Chem.*, 112, 3750-3755
- 10) Matsuda, Y., Yamada, T., Hayashino, T., Yamauchi, R., Nakamura, Y., Morimoto, N., Ouchi, M., Ono, Y., Umemura, M., Mori, M., 2012, Diffuse Ly $\alpha$  haloes around Ly $\alpha$  emitters at  $z=3$ : do dark matter distributions determine the Ly $\alpha$  spatial extents?, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 425, 878-883.
- 11) Miki, Y., Takahashi, D., Mori, M., 2012, A Fast Implementation and Performance Analysis of Collisionless N-body Code Based on GPGPU, *Procedia Computer Science*, 9, 96-105 (Proceeding of International Conference on Computational Science, ICCS 2012)
- 12) Nimori, M., Habe, A., Sorai, K., Watanabe, Y., Hirota, A., and Namekata, D., 2013, Dense cloud formation and star formation in a barred galaxy, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 429, 2175-2182.
- 13) Okamoto, T., 2013, The origin of pseudo-bulges in cosmological simulations of galaxy formation, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 428, 718-728
- 14) Prokhorov, D. A., Million, E. T., Akahori, T., Zemcov, M., Moraghan, A., Nagataki, S., Yoshikawa, K., Colafrancesco, S., Rawle, T. D., Egami, E., 2012, A high-resolution study of the X-ray emission and Sunyaev-Zel'dovich effect in the Bullet cluster (1E 0657-56), *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 426, 2291-2299
- 15) Scannapieco, C., Wadepuhl, M., Parry, O. H., Navarro, J. F., Jenkins, A., Springel, V., Teyssier, R., Carlson, E., Couchman, H. M. P., Crain, R. A., Dalla Vecchia, C., Frenk, C. S., Kobayashi, C., Monaco, P., Murante, G., Okamoto, T., Quinn, T., Schaye, J., Stinson, G. S., Theuns, T., Wadsley, J., White, S. D. M. and Woods, R., 2012, The Aquila comparison project: the effects of feedback and numerical methods on simulations of galaxy formation, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 423, 1726-1749

- 16) Shimizu, I., Yoshida, N. and Okamoto, T., 2012, Submillimetre galaxies in cosmological hydrodynamic simulations: source number counts and the spatial clustering, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 427, 2866-2875
- 17) Son, D., Woo, J.H., Kim, S.C., Fu, H., Kawakatu, N., Bennert, V.N., Nagao, T., Park, D., 2012, Accretion Properties of High- and Low-Excitation Young Radio Galaxies, *The Astrophysical Journal*, 757(2), 140-152
- 18) Tanikawa, A., Yoshikawa, K., Nitadori, K. and Okamoto, T., 2013, Phantom-GRAPe: Numerical software library to accelerate collisionless N-body simulation with SIMD instruction set on x86 architecture, *New Astronomy*, 19, 74-88
- 19) Umemura, M. Susa, H., Hasegawa, K., Suwa, T., Semelin, B., 2012, Formation and Radiative Feedback of First Objects and First Galaxies, *Prog. Theor. Exp. Phys.*, 01A306 (23pp)
- 20) Wagner, Y. , Bicknell, G. V. and Umemura, M. ,2012, Driving Outflows with Relativistic Jets and the Dependence of Active Galactic Nucleus Feedback Efficiency on Interstellar Medium Inhomogeneity, *The Astronomical Journal*, 757, 136
- 21) Wagner, Y. , Umemura, M. and Bicknell, G. V. ,2013, Ultrafast Outflows: Galaxy-scale Active Galactic Nucleus Feedback, *The Astronomical Journal Letters*, 763, L18
- 22) Yajima, H., Umemura, M., Mori, M., 2012, Sub-millimetre brightness of early star-forming galaxies, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 420, 3381-3388.
- 23) Yamada, K., Kitayama, T., Takakuwa, S., Iono, D., Tsutsumi, T., Kohno, K., Takizawa, M., Yoshikawa, K., Akahori, T., Komatsu, E., Suto, Y., Matsuo, H., Kawabe, R., 2012, Imaging Simulations of the Sunyaev-Zel'dovich Effect for ALMA, *Publications of the Astronomical, Society of Japan*, 64, 102
- 24) Yamada, T., Matsuda, Y., Kousai, K., Hayashino, T., Morimoto, N., Umemura, M., 2012, Profiles of Lyman alpha Emission Lines, *The Astronomical Journal*, 751, 29-41.
- 25) Yamada, T., Nakamura, Y., Matsuda, Y., Hayashino, T., Yamauchi, R., Morimoto, N., Kousai, K., Umemura, M., 2012, Panoramic Survey of Ly $\alpha$  Emitters at  $z = 3.1$ , *The Astronomical Journal*, 143, 79-92.
- 26) Yamaoka, K., Allured, R. , Kaaret, P. , Kennea, J.A. , Kawaguchi, T. , Ghandi, P. , Shaposhnikov, N. , Ueda, Y. , Nakahira, S. , Kotani, T. , Negoro, H. , Takahashi, I. , Yoshida, A. and Kawai, N. , 2012, RXTE Follow-up Observations of the Black Hole

Candidate MAXI J1659-152 Discovered by MAXI and Swift, Publications of the Astronomical Society of Japan, 64, 32 [15 pages]

- 27) Yoshikawa, K., Yoshida, N., Umemura, M., 2013, Direct Integration of the Collisionless Boltzmann Equation in Six-dimensional Phase Space: Self-gravitating Systems, The Astrophysical Journal, 762, 116
- 28) 川勝望, 白川友紀, 本多正尚, 戸田さゆり, 筑波大学, 2012 年, 理数学生応援プロジェクトとスーパーサイエンスハイスクールとの関係, 大学入試研究ジャーナル, 23, pp185-190
- 29) 扇谷豪, 三木洋平, 朴泰祐, 森正夫, 中里直人, 2013 年, 重力多体系用 Tree Code の並列 GPU 化による計算加速, 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論文集, Vol.2013, pp.146-155

## B) 査読無し論文

- 30) Hasegawa K. and Semelin, B., 2012, Impacts of Ultraviolet Radiation Feedback on the Cosmic Reionization History, FIRST STARS IV -from Hayashi to the Future- AIP Conference Proceedings, 1480, 267-270
- 31) Ishiyama, T., Makino, J., Ebisuzaki, T., 2012, The formation and evolution of first dark matter microhalos, FIRST STARS IV -from Hayashi to the Future- AIP Conference Proceedings, 1480, 382
- 32) Ogiya, G. and Mori, M., 2012, The Core-Cusp Problem in CDM Halos and Supernova Feedback, Astronomical Society of the Pacific Conference Series, Vol. 458, pp. 385-387
- 33) Okamoto, T., 2012, Cosmological pseudobulge formation, 2012, FIRST STARS IV -from Hayashi to the Future- AIP Conference Proceedings, Volume 1480, 403-405
- 34) Shimizu I., Yoshida N., and Okamoto T., 2012, Lyman alpha emitters in cosmological simulations: Lyman alpha escape fraction and statistical properties, FIRST STARS IV -from Hayashi to the Future- AIP Conference Proceedings, 1480, 412-414
- 35) Tanikawa, A., Yoshikawa, K., Nitadori, K. and Okamoto, T., 2012, Phantom-GRAPe: SIMD accelerated numerical library for N-body simulations, Astrophysics Source Code Library, record ascl:1209.008
- 36) Tanikawa, A., and Umemura, M., 2011, Successive Merger of Multiple Massive Black Holes in a Primordial Galaxy, FIRST STARS IV -from Hayashi to the Future- AIP Conference Proceedings, 1480, 430-432
- 37) 扇谷豪, 三木洋平, 朴泰祐, 森正夫, 中里直人, 2012 年, 重力多体系用 Tree Code の並列

GPU 化, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), 2012-HPC-135 巻,  
40 号, pp.1-9

- 38) 扇谷豪, 森正夫, 2012 年, 星フィードバックに対する銀河ガスの振る舞いの解析: 銀河形状・星形成率への依存性, 日本流体力学会 年会 2012 講演論文集, 215 号, pp.1-5

## (2) 国際会議発表

### A) 招待講演

- 1) Okamoto, T., 2012, Shaping galaxies by feedback: satellites, discs, and bulges, Disc galaxy formation in a cosmological context, (May 14-18, 2012, Heidelberg, Germany)
- 2) Tanikawa, A., 2012, Multiples in clusters ~ First binary formation via few-body modes~, (Aug.15 – 17, 2012, Kobe, Japan)
- 3) Wagner,A., Umemura,M., Bicknell,G., Hydrodynamic Simulations of AGN Jet and UFO Feedback, (Oct.5, 2012, Nagoya, Japan)
- 4) Yoshikawa, K., 2012, An alternative to N-body methods in astrophysical self-gravitating systems: Vlasov-Poisson simulations”, Conference on Computational Physics (Oct. 14-18, 2012, Kobe, Japan)
- 5) Yoshikawa, K., 2012, Vlasov-Poisson simulations of self-gravitating systems, The 5th East Asian Numerical Astrophysics Meeting (Oct. 29-Nov.2, 2012, Kyoto, Japan)
- 6) Kawakatu, N., 2012, Dynamical evolution of AGN cocoons, Relativistic jets in AGNs (Nov. 29, 2012, NAOJ, Japan)

### B) 一般講演

- 1) Hasegawa, K., Semelin, B., Umemura, M., Impacts of Ultraviolet Radiation Feedback on the Cosmic Reionization History, The Epoch of Reionization: Theory - Simulations – Observations (Apr. 23-27, 2012, Strasbourg, France)
- 2) Hasegawa, K., Semelin, B., Impacts of Ultraviolet Radiation Feedback on the Cosmic Reionization History, FIRST STARS IV –from Hayashi to the Future- (May 21-25, 2012, Kyoto, Japan)
- 3) Okamoto, T., Cosmological pseudobulge formation, FIRST STARS IV –from Hayashi to the Future- (May 21-25, 2012, Kyoto, Japan)

- 4) Miki, Y., Takahashi, D., Mori, M., A Fast Implementation and Performance Analysis of Collisionless N-body Code Based on GPGPU, International Conference on Computational Science (Jun. 4-6, 2012, Omaha, USA)
- 5) Ogiya, G. and Mori, M., The Core-Cusp problem in Cold Dark Matter halos and Supernova feedback: Effects of Oscillation, IAP-Subaru Joint International Conference: Stellar populations across Cosmic Times, (Jun. 25-29, 2012, Paris, France)
- 6) Kawakatu, N., Wada, K., 2012, Coevolution of AGNs and nuclear starbursts, AGN Workshop 2012 in Jeju (Sep. 12~14, 2012, Jeju Island, Korea)
- 7) Kawaguchi, T., Miki, Y. and Mori, M., Emission from AGN Dusty Tori and a Wandering BH, AGN Workshop 2012 in Jeju, (Sep. 12~14, 2012, Jeju Island, Korea)
- 8) Wagner, A., Umemura, M., Bicknell, G., Mechanical Feedback by AGN Jets, First East Asian AGN Workshop in Jeju, (Sep. 12-14, 2012, Jeju Island, Korea)
- 9) Ishiyama, T., Petascale Cosmological N-body Simulations, Conference on Computational Physics (CCP2012), (Oct.14-18, 2012, Kobe, Japan)
- 10) Kirihara, T., Miki, Y., Mori, M., Resolving the outer density profile of dark matter halo in Andromeda galaxy, Conference on Computational Physics(CCP2012), (Oct.14-18, 2012, Kobe, Japan)
- 11) Miki, Y., Mori, M. and Kawaguchi, M., Hunting a Wandering Black Hole in M31 Halo Using GPU Cluster, Conference on Computational Physics 2012(CCP2012), (Oct.14-18, 2012, Kobe, Japan)
- 12) Ogiya, G., Mori, M., Miki, Y., Boku, T. and Nakasato, N., Study of the core-cusp problem in cold dark matter halos using N-body simulations on GPU clusters, Conference on Computational Physics (CCP2012), (Oct.14-18, 2012, Kobe, Japan)
- 13) Ishiyama, T., The Gravitational Trillion-Body Problem on K computer, The Fifth East Asian Numerical Astrophysics Meeting (EANAM 2012), (Oct. 29-Nov.2, 2012, Kyoto, Japan)
- 14) Kirihara, T., Miki, Y., Mori, M., Galaxy Collision and the Outer Density Profile in Andromeda Galaxy, East Asia Numerical Astrophysics Meeting(EANAM 2012), (Oct. 29-Nov. 2, 2012, Kyoto, Japan)
- 15) Ogiya, G. and Mori, M., Landau resonance and the core-cusp problem in cold dark matter halos, East Asia Numerical Astrophysics Meeting (EANAM2012), (Oct.29-Nov.2, 2012, Kyoto, Japan)

- 16) Miki, Y., Mori, M., Kawaguchi, T., Galaxy Merger and Hungry Black Hole: Suppression of Black Hole Activity due to Galaxy Merger, East Asia Numerical Astrophysics Meeting (EANAM2012), (Oct.29-Nov.2, 2012, Kyoto, Japan)
- 17) Suzuki, H., Umemura, M., The impact of background and internal UV radiation on the galaxy formation. , East Asia Numerical Astrophysics Meeting, 2012 Kyoto (EANAM 2012) , (Oct.29-Nov.2, 2012, Kyoto, Japan) (poster)
- 18) Tanikawa A., 2012, Successive merger of multiple massive black holes in a primordial galaxy and its effect on the galactic structure, (Oct. 29 – Nov. 2, 2012, Kyoto, Japan)
- 19) Kawaguchi, T. , Innermost Structure and Near-Infrared Emission of AGN Dusty Tori, Torus Workshop 2012, U of Texas in San Antonio (Dec. 4-6,2012, USA),
- 20) Hasegawa, K., Okamoto, T., The improvement of START, Cosmological Radiative Transfer Comparison Project Workshop IV (Dec. 12-14, 2012, Austin, USA,)
- 21) Kawaguchi, T. , Growth of massive black holes revealed via the HSC survey, Supermassive Black Holes in the Universe: The Era of the HSC Surveys, (Dec.18-20, 2012, Matsuyama ,Japan),
- 22) Hasegawa, K., The improvement of a Radiation hydrodynamics code START, 3<sup>rd</sup> AICS international Symposium, (Feb.28-Mar. 1, 2013, Kobe, Japan)

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

- 1) 岡本崇,「理論シミュレーションで見た銀河形成研究の現状 (I) High-redshift discs and their descendants at  $z = 0$ 」, 銀河形成解剖ワークショップ "Resolved Views of Galaxy Formation and Evolution", (2012 年 5 月 29 日～31 日, Hilo, Hawaii)
- 2) 梅村雅之,「銀河・AGN 形成に関する理論的課題」, 研究会「すばる HSC サーベイによるサイエンス」(2012 年 9 月 26 日～28 日, 国立天文台, 三鷹市)
- 3) 石山智明, 「スーパーコンピューターの中で生まれる宇宙」, サイエнтиフィック・システム研究会 科学技術計算分科会 2012 年度会合(2012 年 10 月 24 日, ANA クラウンプラザホテル神戸)
- 4) 三木洋平, 「ガス雲 G2 落下による Sgr A\*へのガス降着」, 『銀河系中心ブラックホール 2013』研究会 (2012 年 11 月 7 日～9 日, 宇宙科学研究所, 相模原市)
- 5) 長谷川賢二, 「大規模並列化へ向けた輻射輸送コード START の改良」, 第 25 回理論懇シンポジウム, (2012 年 12 月 22 日～24 日, つくば国際会議場, つくば市)
- 6) 石山智明, 「ダークマターシミュレーション」, 第 25 回理論懇シンポジウム, (2012 年 12 月 22 日～24 日, つくば国際会議場, つくば市)

- 7) 川勝望, 「ALMA で探る超巨大ブラックホール形成」, ALMA 時代の宇宙構造形成理論 (2013 年 1 月 25 日～28 日, 北海道大学, 札幌市)
- 8) 岡本崇, 「Formation of high-redshift disks and pseudo-bulges in nearby galaxies」, ALMA 時代の宇宙の構造形成理論: 第 1 世代から第 n 世代へ (2013 年 1 月 26 日～28 日, 北海道大学, 札幌市)
- 9) 石山智明, 「Large scale dark matter simulation」, ALMA 時代の宇宙の構造形成理論: 第 1 世代から第 n 世代へ(2013 年 1 月 26 日～28 日, 北海道大学, 札幌市)
- 10) 石山智明, 「超並列重力多体シミュレーションコードの開発」, 宇宙磁気流体・プラズマシミュレーションワークショップ(2013 年 2 月 18 日～19 日, 千葉大学, 千葉市)
- 11) 吉川耕司, 「無衝突自己重力系の無衝突ボルツマンシミュレーション」, 宇宙磁気流体・プラズマシミュレーションワークショップ (2013 年 2 月 18 日～19 日, 千葉大学, 千葉市)
- 12) 川勝望, 「銀河とブラックホールの共進化」, 銀河進化と遠方宇宙 2013 (第 1 回) (2013 年 2 月 20 日～21 日, コープイン京都, 京都市)
- 13) 川勝望, 「サブミリ波観測で探る活動銀河核の形成と進化」, ALMA ミリ波サブミリ波観測で押さえる銀河の基本観測量とその理解(2013 年 2 月 25 日～26 日, 国立天文台, 三鷹市)
- 14) 川口俊宏, 「電波観測で探る銀河衝突に伴う巨大ブラックホールの成長」, 「ALMA ミリ波サブミリ波観測で押さえる銀河の基本観測量とその理解」ワークショップ(2013 年 2 月 25 日～26 日, 国立天文台, 三鷹市)
- 15) 岡本崇, 「スーパーコンピュータによる銀河形成」, 第 9 回 創成シンポジウム, 「スーパーコンピュータ "京" でせまる最先端の科学・技術」(2013 年 3 月 4 日, 北海道大学, 札幌市)
- 16) 石山智明, 「スーパーコンピュータ「京」の中の宇宙」, 2012 年度 HPCI 戦略プログラム分野 5 全体シンポジウム (2013 年 3 月 5 日～6 日, 富士ソフトアキバプラザ)
- 17) 川口俊宏, 「巨大ブラックホールの形成・成長と銀河との共進化」, 日本天文学会春季年会 (2013 年 3 月 20 日～23 日, 埼玉大学)

## B) その他の発表

- 1) 川口俊宏, 「活動銀河核のダストトラス, 及び中間質量ブラックホールの探査」, 理論部プラズマセミナー (2012 年 5 月 18 日, 国立天文台, 三鷹市)
- 2) 川勝望, 白川友紀, 本多正尚, 戸田さゆり 「筑波大学「理数学生応援プロジェクト」とスーパーサイエンスハイスクールとの関係」, 『平成 24 年度全国大学入学者選抜研究連絡協議会』岡山コンベンションセンター (2012 年 6 月 1 日, 岡山, 岡山市)

- 3) Wagner, A., Umemura, M. and Bicknell, G., 「Mechanical Feedback by AGN Jets」, Matsuyama Black Hole Workshop (2012 年 6 月 20 日～23 日, 愛媛大学, 松山市)
- 4) 川勝望, 和田桂一, 「AGN-Nuclear SB connection in Compton thick AGN」, 松山ブラックホールワークショップ 2012—ASTRO-H 衛星で目指すブラックホール研究の新展開— (2012 年 6 月 23 日, 愛媛大学, 松山市)
- 5) 川口俊宏, 「ダストトーラスの最内縁構造モデル」, ASTRO-H 衛星で目指すブラックホール研究の新展開 研究会 (2012 年 6 月 22 日～23 日, 愛媛大学)
- 6) 川口俊宏, 「漂う巨大ブラックホールと中間質量ブラックホールの探査」, 銀河中心超巨大ブラックホールの起源 研究会 (2012 年 7 月 26～27 日, 筑波大学)
- 7) 鈴木裕行, 「紫外線輻射場における原始銀河形成の物理」, 2012 年度第 42 回天文・天体物理若手 夏の学校, (2012 年 8 月 3 日～6 日, 福井県東尋坊温泉三国観光ホテル, 福井県) (口頭発表)
- 8) 三木洋平, 森正夫, 川口俊宏, 「銀河衝突による銀河中心巨大ブラックホール周辺からのガス剥ぎ取り過程」, VLBI WORKSHOP「巨大ブラックホールからの噴出流」 (2012 年 9 月 6 日～7 日, 国立天文台, 三鷹市)
- 9) 扇谷豪, 森正夫, 「星フィードバックに対する銀河ガスの振る舞いの解析: 銀河形状・星形成率への依存性」, 日本流体力学会 年会 2012 (2012 年 9 月 16 日～18 日, 高知)
- 10) 森正夫, 新田伸也, 五十嵐朱夏, コールドダークマターハローにおける遷音速銀河風解析, 日本流体力学会 年会 2012 (2012 年 9 月 16 日～18 日, 高知)
- 11) 五十嵐朱夏, 森正夫, 新田伸也, 「球対称等温定常銀河風の加速過程に与えるダークマターと星の質量分布の影響」, 日本天文学会秋季年会(2012 年 9 月 19 日～21 日, 大分大学, 大分市)
- 12) 石山智明, 「京速計算機による無衝突系重力多体シミュレーション」, 日本天文学会秋季年会 (2012 年 9 月 19 日～21 日, 大分大学, 大分市)
- 13) 小久保充, 諸隈智貴, 峰崎岳夫, 土居守, 吉井譲, 越田進太郎, 川口俊宏, 鮫島寛明, 小林行泰, 「QSOs の光度変動に伴う紫外カラー変動に対する標準円盤+質量降着率変化モデルの妥当性」, 日本天文学会秋季年会 (2012 年 9 月 19 日～21 日, 大分大学, 大分市)
- 14) 扇谷豪, 森正夫, 「星フィードバックに対する銀河ガスの振る舞いの解析: 銀河形状・星形成率への依存性」, 日本天文学会秋季年会 (2012 年 9 月 19 日～21 日, 大分大学, 大分市)
- 15) 川勝 望, 紀基樹, 「膨張コクーン力学から探る AGN ジェットのプラズマ組成: 陽電子は必要か?」, 日本天文学会秋季年会 (2012 年 9 月 19 日～21 日, 大分大学, 大分市)
- 16) 川口俊宏, O. Godet, B. Plazolles, 「極高光度 X 線源の 2 万太陽質量ブラックホール候補」, 日本天文学会秋季年会 (2012 年 9 月 19 日～21 日, 大分大学, 大分市)

- 17) 桐原崇亘, 森正夫, 「アンドロメダストリームの非対称構造と母矮小銀河の内部構造」, 日本天文学会秋季年会 (2012 年 9 月 19 日～21 日, 大分大学, 大分市)
- 18) 三木洋平, 森正夫, 川口俊宏, 濟藤祐理子, 「M31 ハローを漂う巨大ブラックホール探査: 衝突銀河の突入軌道への制限」, 日本天文学会秋季年会, (2012 年 9 月 19 日～21 日, 大分大学, 大分市)
- 19) 谷川衝, 梅村雅之, 「巨大ブラックホール多体系におけるブラックホールの進化と銀河の構造」, 日本天文学会秋季年会, (2012 年 9 月 19 日～21 日, 大分大学, 大分市)
- 20) Wagner, A., Umemura, M. and Bicknell, G. 「Mechanical Feedback by AGN Jets and UFOs」, 日本天文学会秋季年会, (2012 年 9 月 19 日～21 日, 大分大学, 大分市)
- 21) 三木洋平, 高橋大介, 森正夫, 「大規模 GPU クラスタにおける N 体計算コードの演算性能とスケーラビリティの評価」, 第 136 回 ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, (2012 年 10 月 3 日～4 日, 沖縄産業支援センター, 那覇市)
- 22) Wagner, A., Umemura, M. and Bicknell, G. 「Hydrodynamic Simulations of AGN Feedback in a Multiphase Medium」, 天体形成研究会, (2012 年 10 月 5 月～6 月, 筑波大学, つくば市)
- 23) 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, 蘇 垠成, 「系外惑星のバイオマーカー検出に向けた光合成アンテナ機構の励起状態計算」, 第 5 回 アストロバイオロジーワークショップ (2012 年 11 月, 国立天文台, 三鷹市)
- 24) 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進化について」, CfCA ユーザーズミーティング (2012 年 12 月 11 日～12 日, 国立天文台, 三鷹市) [ポスター発表]
- 25) 三木洋平, 森正夫, 川口俊宏, 「N 体計算による M31 ハロー領域を漂う巨大ブラックホール探査」, 第 25 回 理論懇シンポジウム (2012 年 12 月 22 日～24 日, つくば国際会議場, つくば市)
- 26) 五十嵐朱夏, 森正夫, 新田伸也, 「球対称等温定常銀河風の遷音速解析」, 第 25 回 理論懇シンポジウム (2012 年 12 月 22 日～24 日, つくば国際会議場, つくば市)
- 27) 扇谷豪, 森正夫, 「ランダウ共鳴が与えるダークマターハロー密度構造への影響」, 第 25 回 理論懇シンポジウム 「計算宇宙物理学の新展開」 (2012 年 12 月 22 日～24 日, つくば国際会議場, つくば市)
- 28) 桐原崇亘, 三木洋平, 森正夫, 「アンドロメダストリームで探るダークマターハローの内部構造」, 第 25 回 理論懇シンポジウム (2012 年 12 月 22 日～24 日, つくば国際会議場, つくば市)
- 29) 川口俊宏, 濟藤祐理子, 三木洋平, 森正夫, 「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」, 第 25 回 理論懇シンポジウム 「計算宇宙物理学の新

- 展開」(2012 月 12 日 22 日～24 日, つくば国際会議場, つくば市)
- 30) 鈴木裕行,梅村雅之,「背景および内部紫外線輻射による銀河の星形成史への影響」, 第 25 回理論懇シンポジウム「計算宇宙物理学の新展開」(2012 月 12 日 22 日～24 日, つくば市国際会議場, つくば市)(ポスター発表)
  - 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進化について」, 第 25 回理論懇シンポジウム(2012 月 12 日 22 日～24 日, つくば国際会議場, つくば市)
  - 32) 川口俊宏,「銀河中心に鎮座する巨大ブラックホール周辺の構造と銀河衝突に伴う巨大ブラックホールの成長」, 九州天文セミナー (2013 年 1 月 26 日, 九州大学, 福岡市)
  - 33) 鈴木裕行,梅村雅之,「The effect of ultraviolet radiation on the SFH and galactic morphology」, ALMA 時代の宇宙の構造形成理論:第 1 世代から第 n 世代へ 兼 2012 年度初代星・初代銀河研究会 (2013 年 1 月 26 日～28 日, 北海道大学, 札幌市) (ポスター発表)
  - 34) 川口俊宏,「速度分解エコマッピングで探る巨大ブラックホール周辺のガス流出入」, 岡山 3.8m 新望遠鏡によるサイエンス・装置ワークショップ(2013 年 3 月 12 日～13 日, 国立天文台, 三鷹市)
  - 35) 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, 蘇 垠成,「系外惑星バイオマーカー検出を目指した光合成機構のエネルギー移動計算」, 日本天文学会春季年会 (2013 年 3 月 20 日～23 日, 埼玉大学, さいたま市)
  - 36) 安部牧人, 梅村雅之, 長谷川賢二,「3 次元輻射流体計算による紫外線輻射場中の星団形成過程の研究」, 日本天文学会春季年会 (2013 年 3 月 20 日～23 日, 埼玉大学, さいたま市)
  - 37) 五十嵐朱夏, 森正夫, 新田伸也,「定常銀河風における銀河中心ブラックホールの影響」, 日本天文学会春季年会 (2013 年 3 月 20 日～23 日, 埼玉大学, さいたま市) (ポスター発表, 査読あり)
  - 38) 小田寛, 川口俊宏,「光学的に薄い磁気圧優勢円盤からの放射スペクトル: 明るいハード状態への適用」, 日本天文学会春季年会(2013 年 3 月 20 日～23 日, 埼玉大学, さいたま市)
  - 39) 川口俊宏,「速度分解エコマッピングで探る巨大ブラックホール周辺のガス流出入」, 岡山 3.8m 新望遠鏡によるサイエンス・装置ワークショップ(2013 年 3 月 12 日～13 日, 国立天文台, 三鷹市)
  - 40) 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の非対称構造と母矮小銀河内部構造の関係」, 日本天文学会春季年会 (2013 年 3 月 20 日～23 日, 埼玉大学, さいたま市)
  - 41) 済藤祐理子, 諸隈智貴, 川口俊宏, 今西昌俊, 美濃和陽典, 峰崎岳夫, 川勝望, 長尾透, 松岡健太, 大井渚, 今瀬佳介,「 $z\sim 3$  の QSO で探る超巨大ブラックホールと母銀河の

- 共進化」, 日本天文学会春季年会 (2013 年 3 月 20 日~23 日, 埼玉大学, さいたま市)
- 42) 鈴木裕行, 梅村雅之, 「紫外線輻射による銀河の星形成史・銀河形態への影響」, 日本天文学会春季年会(2013 年 3 月 20 日~23 日, 埼玉大学, さいたま市) (口頭発表)
- 43) 土居明広, 秦和弘, 中西康一郎, 河野孝太郎, 寺島雄一, 川口俊宏, 秋山和徳, 澤田・佐藤聡子, 尾崎忍夫, 「ALMA cycle-0 で捉えたソンプレロ銀河(M104) の超巨大質量ブラックホール周辺 10 シュバルツシルト半径付近からの電波放射」, 日本天文学会春季年会(2013 年 3 月 20 日~23 日, 埼玉大学, さいたま市)
- 44) 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」, 日本天文学会春季年会(2013 年 3 月 20 日~23 日, 埼玉大学, さいたま市) (口頭発表)
- 45) 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超巨大ブラックホール成長の現場」, 日本天文学会春季年会 (2013 年 3 月 20 日~23 日, 埼玉大学, さいたま市)

#### (4) 著書, 解説記事等

- ・石山智明, 岩波「科学」 2013 年 4 月号, 世界最大規模のダークマターシミュレーション

### 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)

宇宙・生命・物性分野間連携により, 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を導出することを目的に, 量子化学計算を進めた。

#### 【国際連携】

・ Alex Wagner,

##### 1) Collaboration with Prof. Joseph Silk (IAP, France) on the specific topic of "Star Formation in AGN-pressure confined Disk Galaxies."

##### 2) Collaboration with Dr. Kalliopi Dasyra, Prof. Françoise Combes, Dr. Greg Novak, Dr. Julia Scharwaechter (Observatoire de Paris, France) on "Kpc-scale multiphase outflows from AGN"

## 8. シンポジウム, 研究会, スクール等の開催実績

- 1) 国際会議「FIRST STARS IV - From Hayashi to the Future -」, May 22- 25, 2012, Heartpia Kyoto, Kyoto, Japan
- 2) ワークショップ「巨大ブラックホールの起源」, 2012 年 7 月 26 日～28 日  
筑波大学計算科学研究センター, つくば市
- 3) 研究会「AGN Workshop 2012 in Jeju」, 2012 年 9 月 12 日～14 日  
<http://astro.snu.ac.kr/~hjbae/Welcome.html>
- 4) 「天体形成研究会」2012 年 10 月 5 日～6 日  
筑波大学計算科学研究センター, つくば市
- 5) 第 25 回理論懇シンポジウム「計算宇宙物理学の新展開」, 2012 年 12 月 22 日(土) - 24 日(月), つくば国際会議場, つくば市

## 9. 管理・運営 (組織運営や支援業務の委員・役員の実績)

### ・梅村雅之

計算科学研究センター 運営委員会委員  
計算科学研究センター 副センター長  
計算科学研究センター 共同利用委員会主査  
計算科学研究センター 共同利用審査委員会委員長  
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 カリキュラム委員会委員長, 学務委員

### ・吉川耕司

計算科学研究センター・フロンティア計算機システム仕様策定委員会・委員 (書記)  
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

・川勝望

- 1) 大学説明会・模擬授業（千葉県立佐倉高等学校）, 2012 年 5 月 8 日,
- 2) 平成 24 年度筑波大学説明会, 2012 年 7 月 31 日, 筑波大学  
「銀河中心に潜む超巨大ブラックホール形成の謎」
- 3) SSH 生徒研究発表会 2012 (パシフィコ横浜, 横浜市), 2012 年 8 月 8 日～9 日 ,  
理数学生応援プロジェクト広報
- 4) 東京大学主催主要大学説明会（大田区産業プラザ PiO, 東京）, 2012 年 8 月 21 日  
理数学生応援プロジェクト説明

・川口俊宏

- 1) 「ブラックホールだらけの宇宙」, 全国同時七夕講演会 2012 (2012 年 7 月 14 日, つくば国際会議場, つくば市)

11. その他（海外長期滞在, フィールドワークなど）

なし

## II-2. 原子核物理分野

### 1. メンバー

教授	矢花 一浩
講師	橋本 幸男
准教授	寺崎 順 (HPCI 戦略プログラム)
研究員	谷口 億宇、須原 唯広 (学振特別研究員)
学生	大学院生 10名

### 2. 概要

当グループは、フェルミオン多粒子系のダイナミクスに対する計算科学的アプローチ、特に時間依存密度汎関数理論を主要な方法論として、原子核物理学から物質科学、光科学にわたる広範な分野で研究を展開している。

原子核物理学では、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に関する研究を進めている。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。本グループでは、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の計算などの研究が進展中である。

当グループではまた、原子核物理学と共通する方法論を活かして、物質中の電子ダイナミクスに対し物質科学の第一原理シミュレーション法を用いた計算物質科学研究を展開している。現在は、極限的パルス光と物質の相互作用に関わる光科学研究が進展している。特に本グループが最近開発したマクスウェル方程式と時間依存密度汎関数理論を組み合わせるマルチスケール・シミュレーションの方法は、光の伝播を記述する巨視的電磁気学を、ミクロな量子論に基づく第一原理計算から記述する過去に例のないものであり、国内外の注目を集めている。

### 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

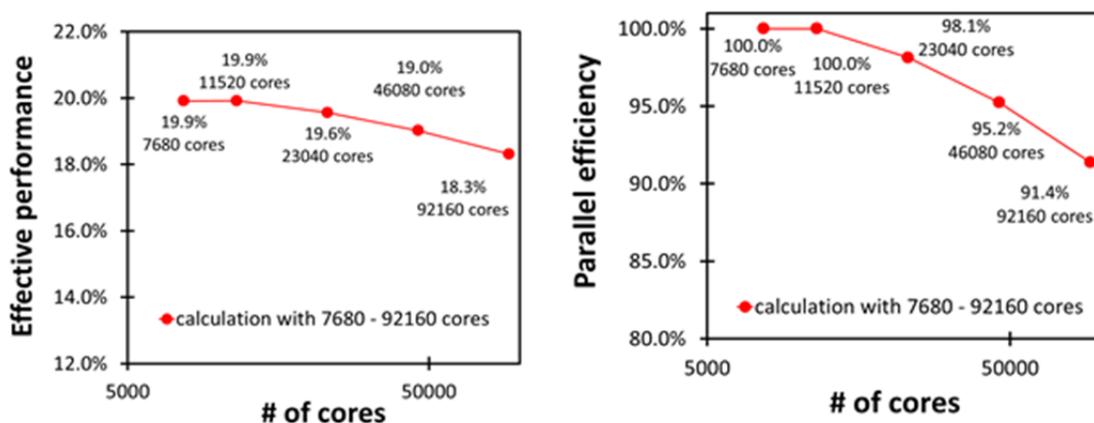
(1) 高強度パルス光と物質の相互作用を記述する第一原理マルチスケール・シミュレーション (矢花、篠原、佐藤、乙部 (原研)、G.F. Bertsch (Univ. Washington)、李 (APRI))

光とバルク物質 (結晶) との相互作用は、通常は巨視的マクスウェル方程式で記述され、物質の性質は誘電率などを含む構成関係式で取り入れられる。ところが近年発展の著しい極限的な光科学 (短パルス極限であるアト秒科学、物質中の電場と光電場が同程度となる高強度光科学など) では、もはや巨視的電磁場のダイナミクスと電子のダイナミクスを分離して扱うことが許されず、巨視的マクスウェル方程式と時間依存シュレディンガー方程式を同時に結合して解くことが必要とされている。また、可視光の波長は  $\mu\text{m}$  領域、電子ダイナミクスは nm 以下の空間スケールであることから、この問題はマルチスケール物理の課

題となっている。

昨年度我々は、パルス光が半導体表面に垂直に入射する場合に関して、高強度パルス光が物質中を伝播し、光電磁場から電子にエネルギーが不可逆に移行する過程を記述するマルチスケール・シミュレーション法の開発に成功した。この計算は、巨視的マクスウェル方程式を解くために用意する各巨視的格子点で、微視的電子ダイナミクスを独立に解くため、簡単な 1 次元の光伝播に対しても数千コアを要する大規模な数値計算となる。本年度の前半に、京コンピュータの試験運用を利用して、このマルチスケール・シミュレーションコードの高効率な並列化に取り組んだ。下の図は、実行効率と、強スケールリングのもとでの並列化効率を示している。ハイブリッド並列のもとで、およそ 7000 コアから 90000 コアの間で実行効率はおよそ 18-20%の高い値を示し、また 7680 コアを基準として 90000 コアを越える並列度においても並列化効率は 90%を越える値となっているなど、スケールリングに優れていることが示された。

本研究で作成した計算コードは、フェムト秒レーザーパルスと物質の相互作用を調べる上で極めて有効である。この課題に関し、本年度より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共同研究を開始している。また、韓国 APRI、ウィーン工科大、米国バンダービルト大の理論グループとの共同研究を立ち上げつつある。



(2) 半金属 Sb のコヒーレントフォノン生成機構の解明 (篠原、佐藤、矢花、岩田 (東大)、乙部 (原研)、G.F. Bertsch (Univ. Washington))

パルス光がバルク物質 (結晶) に照射した際に見いだされる現象の一つに、巨視的な空間領域で結晶を構成する原子が一様に運動するコヒーレントフォノンがある。本年度は、半金属 Sb を対象に、コヒーレントフォノン生成のメカニズムを調べた。実験的には光学フォノンの種類に応じて異なるフォノン生成メカニズムが見いだされているが、計算の結果

は同一のメカニズム（実励起型）を示唆しており、観測事実を説明することはできなかった。また、現象論としてしばしば用いられる 2 テンソルモデルに基づく記述の正当性を理論的に調べた。

(3) パルス光により励起した半導体の誘電応答に対するポンプ・プローブ数値実験（佐藤、篠原、矢花、乙部（原研）、G.F. Bertsch (Univ. Washington)）

パルス光により励起した物質の誘電率は、フェムト秒程度の時間で大きく変化することが知られている。我々は、ポンプ・プローブ実験に相当する数値シミュレーションを行い、ポンプ光電場により励起した半導体にプローブ光電場を印加し、そのプローブ光電場によって生じたカレントを調べることにより、励起した物質の誘電率を調べた。その結果、誘電率の実部は、励起したキャリアが自由電子として振る舞うことを仮定したドルーデモデルにより定量的に記述されることが分かった。一方誘電率の虚部は、より複雑な振る舞いをする事が明らかになった。

(4) 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、光応答に関わる物質の最も基本的な物理量はバンドギャップであるが、最も単純な汎関数の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が知られている。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、局所密度近似で問題となるバンドギャップ過小評価の問題が、大幅に改善されることが分かってきている。

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を著しく改善するものとして近年特に注目されているが、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、非局所交換項の計算のために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 の 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。その結果、同等のライブラリを用いた場合、GPU 計算は CPU 計算に比べ高い計算効率を示すことが確認できた。現在、高強度パルス光が Si 結晶に入射した場合のハイブリッド汎関数を用いた電子ダイナミクス計算を行っている。

## 【2】原子核の励起状態

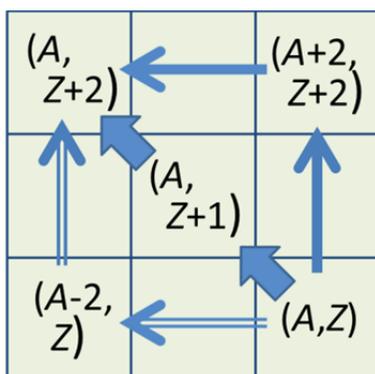
(1) 二重ベータ崩壊行列要素の QRPA 計算 (寺崎)

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 年度に引き続き取り組んでおり、この課題は平成 24 年度、科研費研究活動スタート支援に採択されている (2 年目)。もしこの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。

本研究の特徴の一つは、下図に示すように、二核子移行を経由する反応を考えていることである。これは完全性近似のもとで可能であるが、いままで用いられたことがない。この方法により、荷電変化反応に適用した際 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、また、原子核行列要素の重要な部分を実験的に直接検証する可能性をもたらす。もう一つの特徴は、今まで他の人々が用いてきた方法よりもずっと精密な QRPA 状態の重複の計算方法を用いていることである。QRPA 状態の式は複雑でそれをあらわに用いることは極力避けるのが QRPA 計算の常套的考えであったが、重複行列の特性をうまく用い、強力な並列計算機を用いれば、その常套的考えにこだわって計算精度を落とす必要はないということを示した点が特筆される。平成 24 年度の進展は、以下のとおりである。

1. 平成 24 年度に開発した、QRPA 励起状態の重複の計算方法の数学的性質を詳細に調べ、かつ数値計算可能であることを二つのテストケースで示し、それらの研究結果を二編の原著論文で発表した。
2. ニュートリノポテンシャルの二体相互作用行列を計算するプログラムを開発した。この計算に必要な関数は積分可能な特異点を持つのであるが、その特異性が数値積分の精度に影響しないように工夫してある。
3. 放出される電子の位相空間因子を計算するプログラムを開発した。
4. 上記 1 と 2 で求まる重複行列と二体相互作用行列、並びに二核子移行の遷移行列を用いて、原子核行列要素を求めるプログラムを開発した。 $^{150}\text{Sm}$ 、 $^{150}\text{Nd}$  並びにこの質量数領域の 2, 3 の原子核の Skyrme-QRPA 計算を複数の  $K^\pi$  について実行し、QRPA 励起状態を得た。現在質量数 150 近辺で QRPA 状態の重複計算と二体相互作用行列計算を京コンピュータ上で大規模に実行するため準備を進めている。



核図表 (縦軸: Z、横軸: N) 上でのニュートリノレス二重ベータ崩壊の経路 (対角線) と完全性近似のもとで計算上可能な二核子移行 (水平方向と鉛直方向の遷移) 経路。A は質量数。

(2) 多 Slater 行列式の重ね合わせによる  $^{12}\text{C}$  原子核の記述 (福岡、矢花、船木 (理研)、中務 (理研))

現実的核力から出発して、非経験的に原子核の基底状態と励起状態を計算により記述し予言することは、今日の原子核理論の最重要課題の一つとなっている。しかし、 $^{12}\text{C}$  より重い原子核の基底状態や、基底状態とは大きく異なる構造を持つ励起状態に対して、収束した解をえることは容易ではない。本研究で我々は、現実的な核力ではなく単純化された有効核力を用い、基底状態と励起状態に対しシュレディンガー方程式の収束した多体波動関数を求め、励起構造を解明することを目的として研究を進めている。本年度、Skyrme 力を用いて  $^{12}\text{C}$  原子核の基底状態と励起状態を総合的に調べ、論文にまとめた。方法論の特色として、通常基底状態を得るために用いられる虚時間計算法をさまざまなクラスター相関を持つ多体波動関数を生成するために利用し、それらを基底として多体ハミルトニアンを対角化していることが挙げられる。その結果、 $^{12}\text{C}$  の基底状態及び励起状態に現れる、さまざまな相関構造一殻模型的状態からクラスター状態までを一を統一的に記述し理解できることが明らかになった。

(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。2012 年度は、ラグランジュ格子点を利用した TDHFB のコードを作成し、酸素<sup>16</sup>O、<sup>20</sup>O、ネオン<sup>20</sup>Ne、マグネシウム<sup>34</sup>Mg などの核において四重極型の振動運動の線形応答計算を試みた。対相関が無い系では TDHF 計算になる。<sup>16</sup>O、<sup>20</sup>O、<sup>20</sup>Ne について HF および HF B 基底状態を求め、線形応答の計算を行い、エネルギー保存を確認した。また、強度関数が調和振動子基底による計算のものとほぼ同じになることを示した。<sup>34</sup>Mg の四重極型線形振動の計算は現在も継続中である。エネルギー保存のための定式化に時間が掛かってしまったが、調和振動子基底を用いた場合のエネルギー保存と同程度の精度を出せるようになった。

#### (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。本年度はカルシウム 42 (<sup>42</sup>Ca) や硫黄同位体の低励起状態の構造の研究を行った。

<sup>42</sup>Ca には変形回転帯や <sup>38</sup>Ar への  $\alpha$  移行反応で強く生成される構造が低励起状態に存在する。後者は  $\alpha$ -<sup>38</sup>Ar クラスタ構造を示唆する。しかし、<sup>42</sup>Ca について変形やクラスタ構造の両方を扱った理論的研究はなく、その詳細な構造は理解されていなかった。

谷口は様々な変形状態や  $\alpha$ -<sup>38</sup>Ar クラスタ構造波動関数を重ね合わせてハミルトニアンを対角化することにより、実験的に発見されている変形回転帯や  $\alpha$  移行反応でよく生成される励起状態を再現した。また、 $\alpha$  移行反応でよく生成される励起状態の上に立つ変形回転帯や、さらに別の大きく変形した変形状態 (超変形状態) が存在することを予言した。

硫黄同位体のうち陽子数と中性子数が等しい <sup>32</sup>S には、<sup>16</sup>O-<sup>16</sup>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、<sup>16</sup>O-<sup>16</sup>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。

本年度は、<sup>35</sup>S などの硫黄同位体の励起状態に現れる変形状態を研究した。励起状態に変形状態が存在することを予言した。その変形状態は、特に陽子密度分布が対称な括れ構造をしており、これは <sup>16</sup>O-<sup>16</sup>O クラスタ構造成分を多く含むことを示唆している。

<sup>42</sup>Ca や硫黄同位体の研究結果から、変形状態はクラスタ構造成分を含むことが予想される。クラスタ構造成分は、多核子移行あるいは捕獲反応断面積と密接に関係していることが予想され、それは元素合成などにも重要である。

(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  $^{16}\text{O} + ^{16}\text{O}$ 、 $^{16}\text{O} + ^{18}\text{O}$  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  $^{18}\text{O}$  の 2 余剰中性子の構造変化に起因することがわかった。

### 【3】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))

トリプルアルファ反応は、3つの  $\alpha$  粒子が同時に衝突して  $^{12}\text{C}$  原子核を生成する反応であり、元素合成や星の構造を理解する上で極めて重要な反応である。この反応率を直接実験で調べることはできないため、理論的な評価が重要となる。融合のメカニズムに関して、高温では  $^{12}\text{C}$  の  $0_2^+$  状態、いわゆる Hoyle 状態を経由した過程が主要であり、より低温では共鳴状態としてある時間存在する  $^8\text{Be}$  核が、第3の  $\alpha$  粒子と非共鳴的に衝突し生成する過程が重要となる。さらに低温では、3つの  $\alpha$  粒子が共鳴状態を経ることなく  $^{12}\text{C}$  が生成される非共鳴過程(共鳴の裾を経る過程)が重要となると考えられている。この反応率に対して、最近、量子3体理論に基づいた評価がいくつかのグループによりなされた。しかしそれらの結果は、低温領域において  $10^{20}$  を超える差異があり、反応率の理論的評価は混とんとした状況にある。

トリプルアルファ反応率を理論的に評価する上で困難となる点の一つは、3つの電荷を持つ粒子の散乱問題に対して、適切な定式化が知られていないことである。このため、3体反応の断面積や散乱振幅を求める際に、何かしらの近似が必要となる。我々はこの困難を克服する方策として、温度の逆数を虚時間とみなす光捕獲反応率に対する虚時間理論を提案した。この理論を用いると、散乱問題を解くことなく反応率を得ることが可能となるため、特にトリプルアルファ反応率の計算に適している。我々は虚時間理論に基づく計算によりトリプルアルファ反応率に関して次の結論を得た。①従来用いられてきた反応率(NACRE)が、我々の微視的な3体理論計算により高い精度で再現される。②チャンネル結合法を用いる場合、チャンネルを制約すると何十桁もの反応率の増大をもたらす危険がある。またチャンネル数に対する収束性が著しく遅い。③R 行列理論と虚時間理論を組み合わせることで、従来用いられてきた反応率(2体反応が連続して起こるプロセスを仮定)の導出がサポートされる。

現在、これらの結果を論文にまとめている。

(2) 多核子移行反応の TDHF 計算(関澤、矢花)

我々は、低エネルギー原子核衝突の周縁部で重要となる核子移行反応に対して、時間依存 Hartree-Fock 理論に基づく記述を検討している。今年度、実験的な測定がなされている系  $^{40,48}\text{Ca}+^{124}\text{Sn}$ 、 $^{40}\text{Ca}+^{208}\text{Pb}$ 、 $^{58}\text{Ni}+^{208}\text{Pb}$  に対する TDHF 計算の結果を論文にまとめた。さらに、KISS 計画の準備段階として KEK の実験グループが行っている  $^{136}\text{Xe}+^{198}\text{Pt}$  衝突に対して、移行反応に基づく原子核生成断面積の評価を行った。

#### 4. 教育

<学位>

1. 理学博士：

篠原 康 「Study on coherent phonon generation based on time-dependent density functional theory」

2. 理学修士：

西山了史 「Gauss 基底展開法を用いた Gogny-TDHF による軽い核の線形応答」

赤堀孝彦 「低温領域におけるトリプルアルファ反応率の虚時間法を用いた研究」

植草雅人 「ハイブリッド汎関数を用いた電子ダイナミクス計算」

高宮悠介 「Kadanoff-Baym 方程式による原子分子の光応答の研究」

<集中講義>

1. 中重原子核の構造

寺崎 順

千葉大学理学研究科、2012 年 11 月 29, 30 日

#### 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

1. 科学研究費補助金 基盤 (B)

矢花一浩 (代表)、2011 年 4 月～2015 年 3 月、総額 16250 千円、

課題名「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. 科学研究費補助金 新学術領域研究 (公募研究)

矢花一浩 (代表)、2011 年 4 月～2013 年 3 月、総額 3900 千円

課題名「高強度パルス光の伝播を記述するマルチスケール・シミュレータの開発」

3. 科学研究費補助金 研究活動スタート支援

寺崎順 (代表)、2011 年 8 月～2013 年 3 月、総額 2730 千円

課題名「Skyrme-QRPA を用いた二重ベータ崩壊の遷移行列要素の計算」

#### 6. 研究業績

(1) 研究論文

1. Nonadiabatic generation of coherent phonons

Yasushi Shinohara, Shunsuke A. Sato, Kazuhiro Yabana, Tomohito Otobe, Jun-ichi Iwata,

George F. Bertsch

J. Chem. Phys. 67, 22A527 (2012), 138, 029903 (2013) Erratum.

2. Imaginary-time method for the radiative capture reaction rate

K. Yabana, Y. Funaki

Phys. Rev. C85, 055803 (2012).

3. 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

arXiv:1303.0552 [nucl-th], submitted to Phys. Rev. C.

4. Dielectric response of laser-excited silicon

S.A. Sato, K. Yabana, Y. Shinohara, T. Otobe, G.F. Bertsch,

arXiv:1303.3249 [cond-mat.mtrl-sci], submitted to Phys. Rev. B.

5. Large scale calculations for cluster structure of light nuclei with Skyrme interaction

Y. Fukuoka, Y. Funaki, T. Nakatsukasa, K. Yabana

J. Phys. Conf. Ser. 436, 012012 (2013)

6. Stochastic approach to correlations beyond the mean field with the Skyrme interaction

Y. Fukuoka, T. Nakatsukasa, Y. Funaki, K. Yabana

AIP Conf. Proc. 1491, 222-225 (2012)

7. Overlap of quasiparticle random-phase approximation states for nuclear matrix elements of the neutrino-less double- $\beta$  decay

J. Terasaki

Phys. Rev. C 86, 021301(R) (2012)

8. Testing Skyrme energy-density functionals with the QRPA in low-lying vibrational states of rare-earth nuclei

J. Terasaki

Prog. Theor. Phys. Suppl. no. 196 (2012) 377

9. Overlap of quasiparticle random-phase approximation states based on ground states of different nuclei: Mathematical properties and test calculations

J. Terasaki

Phys. Rev. C 87, 024316 (2013).

10. Overlap of QRPA states based on ground states of different nuclei

J. Terasaki

Acta Physica Polonica B 44, 259 (2013).

11. 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

Submitted to Computer Physics Communications

12. Linear responses in time-dependent Hartree-Fock Bogoliubov Method with Gogny interaction,

Y.Hashimoto

Eur. Phys. Joun. A 48(2012): 55.

13. Separation of a Slater Determinant Wave Function with a Neck Structure into Spatially Localized Subsystems

Y. Taniguchi and Y. Kanada-En'yo

Prog. Theor. Phys. 128, 349-362 (2012).

14. Prolate, oblate, and triaxial shape coexistence, and the lost magicity of  $N = 28$  in  $^{43}\text{S}$

M. Kimura, Y. Taniguchi, Y. Kanada-En'yo, H. Horiuchi, and K. Ikeda

Phys. Rev. C 87, 011301(R) (2013).

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

Y. Taniguchi, Y. Kanada-En'yo and T. Suhara

Prog. Theor. Exp. Phys. 2013, 043D04 (2013).

16. Cluster correlations in largely deformed states

Y. Taniguchi

Jour. Phys. Conf. Ser. 436, 012055 (2013)

17. Separation of a Slater Determinant Wave Function with a Neck Structure into Spatially Localized Subsystems

Y. Taniguchi and Y. Kanada-En'yo

Few-Body Syst. DOI 10.1007/s00601-013-0623-3 (2013)

18. Cluster and deformation in C isotopes

Yoshiko Kanada-En'yo, Fumiharu Kobayashi, Tadahiro Suhara

AIP Conf. Proc. 1491, 5-9 (2012)

19.  $2\alpha+t$  cluster structure in  $^{11}\text{B}$

Tadahiro Suhara and Yoshiko Kanada-En'yo

Few-Body Syst. (2013)

20. Cluster structures of excited states in  $^{11}\text{B}$

Tadahiro Suhara and Yoshiko Kanada-En'yo

accepted by IOP Conference Series (Cluster12)

21. Cluster correlation in light nuclei

Yoshiko Kanada-En'yo, Fumiharu Kobayashi, and Tadahiro Suhara

accepted by IOP Conference Series (Cluster12)

22. Three-dimensional structure of low-density nuclear matter

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

Phys. Lett. B713, 284, 2012

23. Non-uniform structures in low-density nuclear matter and neutron star crust.

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

PoS (NIC XII) 218

24. Three-dimensional calculation of inhomogeneous nuclear matter

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

AIP Conf. Proc. 1484, 394 (2012)

国際会議発表

1. Ab-initio theory for intense laser pulses in solids

K. Yabana

Korean Physical Society 2012 Spring Meeting, April 25-27, 2012, Daejeon, Korea

2. Ab-initio theory for intense laser pulses in solids

K. Yabana

6th International Conference on Laser Probing, June 4-8, 2012, Paris, France

3. Real-time electron dynamics in solids under strong electromagnetic fields

K. Yabana

ISSP-CMSI International Workshop/Symposium on Material Simulation in Petaflops era (MASP2012), June 27, 2012, Tokyo, Japan

4. Time-Dependent Density Functional Theory for Electron Dynamics

K. Yabana

BERTSCHFEST, UW, Seattle, Sept. 7-9, 2012

5. Ab-initio description for the interaction of intense laser pulses with solids

K. Yabana

Frontiers in Intense Laser-Matter Interaction Theory (FILMITH), Sept. 19-21, 2012, Max Planck Institute fur Quantenoptik, Garching, Germany

6. Triple-alpha reaction rate - tunneling of three charged particles

K. Yabana

Many-body Open Quantum Systems: From Atomic Nuclei to Quantum Optics, Sept. 24-28, 2012, ECT\*, Trento, Italy

7. Multi-scale first-principles approach for strong electromagnetic fields in solids

K. Yabana

Int. Symp. on Computics: Quantum Simulation and Design, Oct. 11-13, 2012, Osaka,

Japan

8. A New Theoretical Approach for Triple-alpha Reaction Rate

K. Yabana

1st Visiting NAOJ Fellow Workshop on Element Genesis and Cosmic Chemical Evolution: r-process perspective, Oct. 17-19, 2012, RIKEN Nishina Hall

9. Time-dependent density functional theory for ultrafast electron dynamics in solid

K. Yabana

Computational approaches to nuclear many-body problems and related quantum systems, Feb. 12-16, 2013, RIKEN, Wako, Japan

10. Overlap of QRPA states based on ground states of different nuclei

J. Terasaki

XLVII Zakopane Conference on Nuclear Physics, Extremes of the Nuclear Landscape, Zakopane, Poland, Aug. 27–Sep. 2, 2012.

11. Effects of pairing correlation in anharmonic collective vibrations in  $^{44,52}\text{Ti}$  with Gogny-TDHFB (poster)

Y. Hashimoto

The 4th International Conference on “Collective Motion in Nuclei under Extreme Conditions”, Shonan Village Center, Kanagawa, Japan, Oct. 22-26, 2012.

12. Separation of a Slater determinant wave function with a neck structure into spatially localized subsystems,

Y. Taniguchi and Y. Kanada-En'yo

The 20th International IUPAP Conference on Few-Body Problems in Physics (FB20), Fukuoka, Japan, Aug. 20-25, 2012.

13. Cluster correlations in largely deformed states

Y. Taniguchi

10th International Conference on Clustering Aspects of Nuclear Structure and Dynamics (Cluster12), Debrecen, Hungary, Sept. 24-28, 2012.

14. Cluster correlations in largely deformed states

Y. Taniguchi

Large-scale computations for nuclear alpha-particle condensation, Wako, Japan, Nov. 13-19, 2012.

15. Cluster structures of excited states in  $^{11}\text{B}$

T. Suhara

10th International Conference on Clustering Aspects of Nuclear Structure and Dynamics (Cluster12), Debrecen, Hungary, Sept. 24-28, 2012.

16.  $2\alpha+t$  cluster structures in  $^{11}\text{B}$

T. Suhara

The 20th International IUPAP Conference on Few-Body Problems in Physics (FB20), Fukuoka, Japan, Aug. 20-25, 2012.

17. Real-Time TDDFT simulation for coherent phonon generation in crystalline solids

Y. Shinohara, S. A. Sato, K. Yabana, T. Otobe, J.-I. Iwata, G. F. Bertsch

APS march meeting 2013, Baltimore, USA, 2013 March 18-22 (Oral)

18. First principles calculation for electron-phonon dynamics in crystals under ultrashort laser pulses (Poster)

Y. Shinohara, S.A. Sato, K. Yabana, J.-I. Iwata, T. Otobe, G. F. Bertsch

ISD-QSD, Osaka, Japan, 2012 October 11-13

19. Coherent phonon generation in time-dependent density-functional theory (Poster)

Y. Shinohara, S.A. Sato, K. Yabana, J.-I. Iwata, T. Otobe, G.F. Bertsch

MAterial Simulation in Petaflops era (MASP2012), Kashiwa, Japan, 2012 July 12-13

20. First-principles calculation for coherent phonon generation in solids

Y. Shinohara, K. Yabana, J.-I. Iwata, T. Otobe, G.F. Bertsch

International Conference on Laser Probing, Paris, France, 2012 June 4-8

21. Theoretical investigation for coherent phonon generation studied with first-principles calculation (Poster)

Y. Shinohara, K. Yabana, J.-I. Iwata, T. Otobe, G.F. Bertsch

CLEO:2012, San Jose, USA, 2012 May 8-10

22. Non-uniform structures in low-density nuclear matter and neutron star crust

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

12th International Symposium on Nuclei in the Cosmos, Cairns conventional hole, Australia, Aug 5-10, 2012

23. Large scale calculations for cluster structure of light nuclei with Skyrme interaction

Y. Fukuoka, Y. Funaki, T. Nakatsukasa, K. Yabana

10<sup>th</sup> Int. Conf. Clustering Aspects of Nuclear Structure and Dynamics, Debrecen, Hungary, 24-28 Sept. 2012.

24. A fully microscopic study of multinucleon transfer processes in  $^{136}\text{Xe}+^{198}\text{Pt}$ : An application of the time-dependent Hartree-Fock theory

K. Sekizawa, K. Yabana

10th ASRC International Workshop, Nuclear Fission and Decay of Exotic Nuclei, Japan Atomic Energy Agency, Tokai, Japan, Mar. 21-22, 2013.

25. Time-dependent Hartree-Fock theory for multinucleon transfer processes in heavy-ion collisions

K. Sekizawa, K. Yabana

International workshop on Computational approaches to nuclear many-body problems and related quantum systems, RIKEN, Wakou, Japan, Feb. 12-16, 2013.

26. Projection method for TDHF final wave function: Analysis of multi-nucleon transfer processes

K. Sekizawa, K. Yabana

11th CNS International Summer School, RIKEN Nishina Center, Wakou, Japan, Aug. 29- Sept. 4, 2012.

27. Time-dependent density functional theory for ultrafast electron dynamics at solid surfaces (poster)

S.A. Sato, Y. Shinohara, T. Otobe, K. Yabana

Frontiers in Intense Laser-Matter Interaction Theory (FILMITH), Max Planck Institute of Quantum Optics, Munich, Germany, Sept. 19-21, 2012

28. First-principles numerical pump-probe experiments: intense laser pulses on solid (poster)

S.A. Sato, Y. Shinohara, T. Otobe, K. Yabana

MAterial Simulation in Petaflops era (MASP2012), Kashiwa library media hall, Kashiwa, Japan, July 12-13, 2012

国内学会・研究会発表

1. フェルミ多粒子系ダイナミクスの大規模計算

矢花一浩

研究会「大規模シミュレーションと数理アルゴリズム」, 2012 年 5 月 27-28 日, 東京大工学

2. 高強度超短パルス光と物質の相互作用を記述する巨視的マクスウェル方程式の第一原理計算

矢花一浩

超高速現象研究会、東京工業大学、8 月 3 日

3. 高強度パルス光と物質の相互作用を記述する第一原理マルチスケール・シミュレーション

矢花一浩

第 3 回計算物質科学イニシアティブ (CMSI) 研究会～超並列計算が拓く新しい計算物質科学～、

2012 年 12 月 3-5 日

4. 物質科学と原子核理論の接点を巡って

矢花一浩

離合集散の物理とその拡がり、2013 年 1 月 26 日 (土) 京都大学基礎物理学研究所

5. A hybrid density functional + configuration mixing approach for light nuclei

K. Yabana

GCOE interdisciplinary workshop on numerical methods for many-body correlations, Feb. 5-6, 2013, Univ. Tokyo

6. 量子多体系の密度汎関数アプローチ

矢花一浩

素核宇宙融合レクチャーシリーズ第 8 回、2013 年 2 月 22-23 日、理化学研究所

7. Overlap of QRPA states based on ground states of different nuclei

寺崎 順

筑波大学原子核理論研究室セミナー、2012 年 5 月 11 日

8. 原子核応答の大規模計算

寺崎 順

筑波大学数理物質科学研究科 平成 24 年度定例第 8 回物理学セミナー、2012 年 10 月 31 日

9. Skyrme-QRPA for nuclear collective dynamics with HPC

吉田賢市、松尾正之、下山裕孝、広川一也、中務孝、寺崎順

筑波大学計算科学研究センター学際共同利用 平成 23 年度成果報告・平成 24 年度中間報告、  
2012 年 10 月 25 日

10. 原子核の密度汎関数理論を用いた二重ベータ崩壊行列要素と基底状態の計算

寺崎 順、矢花一浩、橋本幸男、熱田貴之

筑波大学計算科学研究センター学際共同利用 平成 24 年度中間報告、2012 年 10 月 25 日

11. Nuclear transition matrix elements of neutrino-less double-beta decay for determining the neutrino mass

寺崎 順

筑波大学計算科学研究センター年次報告会、2013 年 2 月 26 日

12. ユーザー支援活動報告

寺崎 順

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、東京、  
2013 年 3 月 5,6 日

13. ニュートリノレス二重ベータ崩壊の原子核行列要素のための QRPA 状態の重複計算

寺崎 順

日本物理学会 第 68 回年次大会、広島大学、2013 年 3 月 26-29 日

14. 変形超流動原子核における素励起モード・応答関数の計算 (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 24 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、  
東京、2013 年、3 月 14,15 日

15.  $^{35}\text{S}$  の負パリティ超変形状態のクラスタ相関

谷口億宇

第 68 回日本物理学会年次大会、広島大学、東広島、2013 年 3 月 26-29 日

16. p 及び sd 殻核の変形とクラスタ相関

谷口億宇

微視的有効相互作用の理論と核構造・核反応、京都大学、京都、2013 年 2 月 12-14 日.

17.  $^{42}\text{Ca}$  における変形状態の共存と クラスタ相関

谷口億宇

日本物理学会秋季大会、京都産業大学、京都、2012 年 9 月 11-14 日.

18. sd 殻領域核の変形状態におけるクラスタ相関

谷口億宇

原子核の閾値近傍における共鳴現象と反応ダイナミクス、大阪大学、茨木、2012 年 7 月  
18-20 日.

19.  $^{11}\text{B}$  における  $2\alpha+t$  クラスタ構造

須原唯広

RCNP 研究会「原子核の閾値近傍における共鳴現象と反応ダイナミクス」、2012 年 7 月 20  
日

20. クラスタ・シェル競合を記述するモデルの発展

須原唯広、板垣直之

日本物理学会秋季大会、京都産業大学、京都、2012 年 9 月 11-14 日.

21. 炭素同位体におけるリニアチェイン構造

須原唯広

日本物理学会秋季大会、京都産業大学、京都、2012 年 9 月 11-14 日.

22. 現実的核力を用いたクラスター構造計算に向けて

須原唯広

原子核クラスター構造、反応研究における戦略ミーティング、理研ミニワークショップ、  
2012 年 11 月 9-10 日

23.  $^{16}\text{C}$  に現れるクラスター構造

須原唯広、延与佳子

日本物理学会 68 回年次大会、広島大学、2013 年 3 月 26 日-29 日

24. ラマン感受率の第一原理計算とコヒーレントフォノン振幅の評価

篠原康、佐藤駿丞、矢花一浩

日本物理学会 68 回年次大会、広島大学、2013 年 3 月 26 日-29 日

25. First-principles calculation for coherent phonon generation in solids (ポスター)

篠原康、佐藤駿丞、矢花一浩、乙部智仁、岩田潤一、G.F. Bertsch

テラヘルツ分光法の最先端--ここまできたテラヘルツ時間領域分光--、筑波大学  
2012 年 10 月 25 日-26 日

26. 時間依存密度汎関数理論による半金属コヒーレントフォノン生成の振動数依存性の分析

篠原康、佐藤駿丞、矢花一浩、岩田潤一、乙部智仁、George F. Bertsch

日本物理学会 2012 年秋季大会、横浜国立大学、2012 年 9 月 18 日-21 日 (口頭)

27. 第一原理計算による半金属コヒーレントフォノン生成の振動数依存性の分析

篠原康、佐藤駿丞、矢花一浩、岩田潤一、乙部智仁、George F. Bertsch

第 73 回応用物理学会学術講演会、愛媛大学・松山大学 2012 年 9 月 11 日-14 日

28. シフト線型方程式のクリロフ部分空間法のスカラー化とその時間依存密度汎関数理論への応用(ポスター)

篠原康、矢花一浩、二村保徳、櫻井鉄也

日本応用数学会 2012 年度年会、稚内全日空ホテル 2012 年 8 月 28 日-9 月 2 日

29. コヒーレントフォノンの第一原理計算

篠原康

超高速現象研究会、東工大、8月3日

30. 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

基研研究会「ハドロン物質の諸相と状態方程式-中性子星の観測に照らして-」、  
京都大学基礎物理学研究所、2012年8月30日-9月1日

31. 中性子星クラスト物質における構造と力学的性質

岡本稔、丸山敏毅、矢花一浩、巽敏隆

日本物理学会 2012 年秋季大会、京都産業大学、2012 年 9 月 11-14 日

32. Non-uniform nuclear matter in neutron star crust

岡本稔、丸山敏毅、矢花一浩、巽敏隆

Symposium on “Quarks to Universe in Computational Science (QUCS 2012) ”、奈良県  
新公会堂、2012 年 12 月 13-16 日

33. 実空間格子での Gogny 相互作用を用いた計算

福岡佑太、船木靖郎、矢花一浩、中務孝

日本物理学会 2012 年秋季大会、京都産業大学、2012 年 9 月 11-14 日

34. Skyrme 力を用いたスレーター行列式の重ね合わせによる軽い核の記述： $^{16}\text{O}$  と  $^{20}\text{Ne}$

福岡佑太、船木靖郎、矢花一浩、中務孝

日本物理学会 第 68 回年次大会、広島大学東広島キャンパス、2013 年 3 月 26-29 日

35. TDHF 計算による核子移行反応の系統的解析

関澤一之、矢花一浩

日本物理学会 第 68 回年次大会、広島大学東広島キャンパス、2013 年 3 月 26-29 日

36. 射影演算子を用いた核子移行 TDHF 波動関数の分析

関澤一之、矢花一浩

日本物理学会 2012 年秋季大会、京都産業大学、2012 年 9 月 11-14 日

37. 時間依存平均場計算に基づく核子移行反応による生成核種波動関数の分析

関澤一之、矢花一浩

2012 年度原子核三者若手夏の学校、2012 年 8 月 2-7 日

38. 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 24 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、イイノカンファレンスセンター、2012 年 3 月 15 日

39. 時間依存平均場計算に基づく核子移行反応による生成核種波動関数の分析 (ポスター)

関澤一之、矢花一浩

2012 年度原子核三者若手夏の学校、2012 年 8 月 2-7 日

40. 熱核融合反応率の虚時間計算

矢花一浩、船木靖郎

日本物理学会 2012 年秋季大会、京都産業大学、2012 年 9 月 11-14 日

41. 虚時間法を用いた  $3\alpha$  融合反応率の計算

赤堀孝彦、矢花一浩、船木靖郎

日本物理学会 2012 年秋季大会、京都産業大学、2012 年 9 月 11-14 日

42. 虚時間法を用いた  $3\alpha$  融合反応の研究

赤堀孝彦、矢花一浩、船木靖郎

日本物理学会 第 68 回年次大会、広島大学、2013 年 3 月 26 日~29 日

43. 超高速誘電応答変化に対する第一原理ポンププローブ数値実験

佐藤 駿丞、篠原康、乙部智仁、矢花一浩、George F. Bertsch

日本物理学会 第 68 回年次大会、広島大学、2013 年 3 月 26 日~29 日

44. パルス光による電子ホールプラズマ生成の第一原理計算

佐藤 駿丞、篠原 康、乙部智仁、矢花一浩

2012 年 秋季 第 73 回応用物理学会学術講演会、愛媛 松山大学、2012 年 9 月 11 日~14 日

45. パルス光による固体表面の超高速誘電関数変化の第一原理計算(ポスター)

佐藤 駿丞、篠原康、乙部智仁、矢花一浩、George F. Bertsch

計算物質科学研究センター(CCMS)・元素戦略プロジェクト 合同研究会「計算物性物理学の新展開」 東京大学物性研究所、2013 年 1 月 10 日~11 日

(4) その他の発表

<セミナー>

1. First principles calculation of electron dynamics under strong electromagnetic fields

K. Yabana

Univ. Vienna, Sept. 14, 2012

2. Ab-initio simulations of intense pulse propagation in SiO<sub>2</sub>

K. Yabana

Max-Planck Institute for Quantum Optics, Garching, Germany, Mar. 13, 2013

3. Time-dependent density functional theory for electron dynamics in solids under strong electromagnetic fields

K. Yabana

Technische Universitat Vienna, Mar. 15, 2013

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1. 計算科学研究センター内異分野間連携

- 量子物性研究部門の全暁民准教授と、パルスレーザーと物質の相互作用に関し、ウーレン工科大を交えた共同研究について準備を始めた。(矢花)
- 星間空間における光誘起 L 型アミノ酸過剰の理論的研究に関し、生命科学研究部門、宇宙分野との連携研究に参加。(矢花)
- 超並列 GPU 計算機 HA-PACS の利用に関し、センターの先端計算科学推進室に参画し、電子ダイナミクス計算を GPU 化した計算コードを作成し研究を進めた。(矢花、谷口)

2. 国際連携・国際活動

- アト秒光科学に関する F. Krausz 教授、V. Yakovlev 研究員(独マックスプランク量子光学研究所実験・理論グループ)との共同研究。ルードヴィヒ・マクシミリアン大学ミュンヘン客員教授(矢花)

- 電子ダイナミクスの計算科学的アプローチに関して、G.F. Bertsch 教授（米国ワシントン大学）との共同研究の継続、K. Varga 准教授（米国バンダービルト大学）と共同研究に関する打ち合わせを始める。（矢花）
- 電子ダイナミクスの計算科学的アプローチに関して、K.-M. Lee 研究員（韓国 APRI）との共同研究。（矢花）

#### 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 5 と分野 2 の共催による異分野交流研究会を、量子モンテカルロ計算をテーマに 2012 年 5 月 30 日東京大学物性研究所で開催。

#### 9. 管理・運営

- 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）

#### 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を果たしている（寺崎）。
- 企業研究会 CAMM フォーラムにおける講演「光科学のフロンティアと第一原理計算」、矢花一浩、2013 年 1 月 11 日、アイビーホール。
- 朝日カルチャーセンターでの一般向け講演「原子核物理学が解き明かす元素の起源」、矢花一浩、スーパーコンピュータが解き明かす宇宙と物質の起源、2012 年 8 月 25 日
- European Physical Journal A 誌の編集委員（矢花）

#### 11. その他

特になし

### III. 量子物性研究部門

#### III-1. 半導体ナノ物性グループ

##### 1. メンバー

教授	白石 賢二
助教	神谷 克政
研究員	Cristoph M. Puetter、洗平昌晃
学生	大学院生 14 名

##### 2. 概要

半導体ナノ物性グループは本年度は、ナノ物質・ナノ材料の機能・物性解明、及び、新奇ナノ物質のデザインを目指したナノサイエンス・ナノテクノロジーの研究、と宇宙生命連携の研究を行った。

##### 3. 研究成果

#### 【1】 次世代パワーデバイス材料 SiC の研究

SiC は次世代パワーデバイスとして期待されている。本研究では SiC 熱酸化によって C-C ボンドが界面フロントに必ず形成されることを第一原理計算によって示した。本研究成果は、熱酸化によって形成された SiC/SiO<sub>2</sub> 界面の特性がなぜ悪いのかという長年にわたる問題を原子レベルから世界で初めて明らかにしたもので、パワーデバイス業界から大きな注目を集めている。

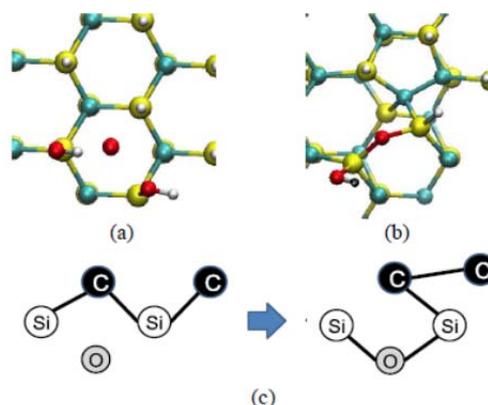


図 1: SiC の熱酸化の原子レベルの機構の模式図

#### 【2】 次世代メモリ抵抗変化型メモリの機能発現機構の電子レベルでの解明

#### の機能発現機構の電子レベルでの解明

次世代メモリとして期待される抵抗変化型メモリは酸素空孔の凝集・離散による伝導フィラメントの形成と破壊が機能発現機構と考えられている。昨年度我々は、伝導フィラメントの形成・破壊はキャリア注入をきっかけとする構造相転移であることを世界に先駆けて明らかにした。本年度我々は、高性能の抵抗変化型メモリの設計指針を明らか

にした。それは  $\text{HfO}_2$  と電極の間に酸素空孔が形成されにくい  $\text{Al}_2\text{O}_3$  層を挿入することによって、抵抗変化型目盛の ON-OFF 比が飛躍的に向上することを示し、さらに  $\text{Al}_2\text{O}_3$  層の最適な厚さ等に関する設計も第一原理量子論によって行った。

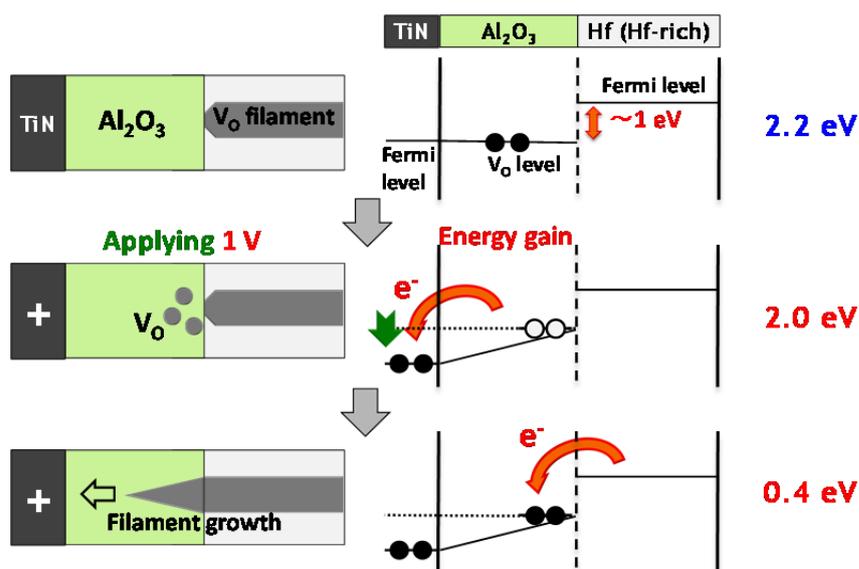


図 2 : 高性能の抵抗変化メモリ設計の指針

### 【3】 星間空間によるアミノ酸の形成・破壊過程の研究

星間空間におけるアミノ酸の形成・破壊は太陽系における生命誕生につながる非常に重要な物性である。本研究では当該センターの宇宙グループ・原子核グループ・生命グループと共同して初期太陽系における L 型アミノ酸過剰発生の原因を第一原理量子論によって昨年度に引き続いて考察した。具体的には昨年度行った 3 つのアミノ酸以外のアミノ酸の円偏光二色性の計算を行った。その結果、昨年度検討した 3 種のアミノ酸と同様に、真空紫外領域の円偏光照射が L 型アミノ酸過剰を引き起こす可能性が高いことを明らかにした。

#### 【4】 多電子波束ダイナミクスの計算科学による検討

多電子波束ダイナミクスを時間依存ハートリーフォック近似を用いて考察し、多電子波束の特異な性質を明らかにした。その結果、電子は多くの電子から構成される波束として運動し、さらに一つの波束に含まれる電子数には限界があることも示した。



図 3 : 多電子波束による新しい伝導機構の模式図

#### 4. 教育

##### 博士論文

- 田中潤一 エッチングプロセスにおける気相および表面反応の研究  
 鈴木輝夫 ナノスケール Si 半導体デバイスのコンポーネントレベル ESD に関する研究

##### 修士論文

- 吉崎智浩 4H-SiC 中の点欠陥の理論的検討  
 近藤大生 Q/N に富んだペプチドがつくるアミロイド線維の構造安定化機構の計算科学的解析  
 田口真彦 Theoretical study on the absorption spectrum of light-harvesting antenna in photosynthesis based on time-dependent density functional theory and its application for the detection of biomarker in extrasolar planets

#### 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

##### 受賞

1. 長川健太：若手奨励賞（服部賞）、第 18 回ゲートスタック研究会 一材料・プロセス・評価の物理一、2013 年 1 月 26 日、口頭発表 東レ総合研修センター、静岡県。

2. ヤンムンヨン : Best Poster Paper Award, Workshop and IEEE EDS Mini-colloquium on Nanometer CMOS Technology (WIMNACT) 37 2013 年 2 月 18 日、東京工業大学、東京都
3. ヤンムンヨン:優秀発表賞, 2012 年度韓国物理学会(秋学術論文発表会),2012 年 10 月

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

1. Y. Takada, Y. T. Yoon, T. Shiokawa, S. Konabe, M. Arikawa, M. Muraguchi, T. Endoh, Y. Hatsugai, and K. Shiraishi, "Multi-Electron Wave Packet Dynamics in Applied Electric Field", Jpn. J. Appl. Phys. 51, Art. No. 02BJ01 (2012)
2. K. Kamiya, Y. Ebihara, M. Kasu, and K. Shiraishi, "Efficient Structure for Deep-Ultraviolet Light-Emitting Diodes with High Emission Efficiency: A First-Principles Study of AlN/GaN Superlattice", Jpn. J. Appl. Phys. 51, Art. No. 02BJ11 (2012).
3. M. Arikawa, M. Muraguchi, Y. Hatsugai, K. Shiraishi, and T. Endoh, "Role of Synthetic Ferrimagnets in Magnetic Tunnel Junctions from Wave Packet Dynamics", Jpn. J. Appl. Phys. 51, Art. No. 02BM03 (2012).
4. Yasuhiro Ebihara, Kenta Chokawa, Shigenori Kato, Katsumasa Kamiya, Kenji Shiraishi, "Intrinsic origin of negative fixed charge in wet oxidation for silicon carbide", Applied Physics Letters **100**, 212110 (3 pages) (2012).
5. Takashi Yamauchi, Moon Young Yang, Katsumasa Kamiya, Kenji Shiraishi, Takashi Nakayama, "Theoretical study of Si-based ionic switch", Applied Physics Letters **100**, 203506 (4 pages) (2012).
6. Mitsuo Shoji, Kyohei Hanaoka, Akimasa Sato, Daiki Kondo, Moon Young Yang, Katsumasa Kamiya, and Kenji Shiraishi, "Calculation of the Electron Transfer Coupling Matrix Element in Diabatic Reactions", International Journal of Quantum Chemistry, DOI: 10.1002/qua.24074 (2012).

7. Katsumasa Kamiya, Yasuhiro Ebihara, Kenta Chokawa, Shigenori Kato, and Kenji Shiraishi, "Origins of Negative Fixed Charge in Wet Oxidation for SiC", Materials Science Forum, 740-742, 409-412 (2013).
  8. Kenta Chokawa, Shigenori Kato, Katsumasa Kamiya, and Kenji Shiraishi, "A New-Type of Defect Generation at a 4H-SiC/SiO<sub>2</sub> interface by Oxidation Induced Compressive Strain", Materials Science Forum, 740-742, 469-472 (2013).
  9. Shigenori Kato, Kenta Chokawa, Katsumasa Kamiya, and Kenji Shiraishi, "Theoretical Study of N incorporation Effect during SiC Oxidation", Materials Science Forum, 740-742, 455-458 (2013).
  10. Taro Shiokawa, Genki Fujita, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Takahiro Yamamoto, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, Kenji Shiraishi, "Dynamical Study of Multi-Electron Wave Packet in Nanoscale Structure", 52, 04CJ06 (2013).
  11. Katsumasa Kamiya, Moon Young Yang, Takahiro Nagata, Seong-Geon Park, Blanka Magyari-Köpe, Toyohiro Chikyow, Keisaku Yamada, Masaaki Niwa, Yoshio Nishi, and Kenji Shiraishi, "Generalized Mechanism of the Resistance Switching in Binary-Oxide-Based Resistive Random-Access Memories", Physical Review B, 87, 155201 (5 pages) (2013).
  12. Katsumasa Kamiya and Susumu Okada, "Energetics and Electronic Structures of Alkanes Adsorbed on Carbon Nanotubes", Japanese Journal of Applied Physics, 52, 04CN07 (3 pages) (2013).
  13. Kenji Shiraishi, Keita Yamaguchi, Moon Young Yang, Seong-Geon Park, Katsumasa Kamiya, Yasuteru Shigeta, Blanka Magyari-Köpe, Masaaki Niwa, and Yoshio Nishi, "Computational Study toward Micro Electronics Engineering", Proceedings of 2012 28th International Conference on Microelectronics (MIEL), 65-70 (2012).
- (2) 国際学会発表
- A) 招待講演
1. Kenji Shiraishi, Keita Yamaguchi, Moon Young Yang, Seong-Geon Park, Katsumasa Kamiya, Yasuteru Shigeta, Blanka Magyari-Köpe, Masaaki Niwa, and Yoshio Nishi,

- "Computational Study toward Micro Electronics Engineering", 2012 28th International Conference on Microelectronics, May 13-16 2012, University of Nis, Nis, Serbia.
2. Kenji Shiraishi, Moon Young Yang, Katsumasa Kamiya, Hiroyoshi Momida, Blanka Magyari-Köpe, Takahisa Ohno, Masaaki Niwa, and Yoshio Nishi, "On-Off Switching Mechanism of Oxide Based ReRAM by Ab Initio Electronic Structure Calculations", 2nd International Workshop on Resistive RAM, October 8-9 2012, Stanford University, Stanford, USA.
  3. Kenji Shiraishi, Moon Young Yang, Katsumasa Kamiya, Blanka Magyari-Köpe, Masaaki Niwa, and Yoshio Nishi, "First Principles Guiding Principles for the Switching Process in Oxide ReRAM", 2012 IEEE 11th International Conference on Solid-State and Integrated Circuit Technology, October 29-November 1 2012, Paradise Resort Hotel, Xian, China.
  4. Katsumasa Kamiya, "On-off Switching Mechanism of Oxide Based ReRAM by First Principle Calculation", NCCAVS Thin Film Users Group, November 2012,, SEMI Global Headquarters, San Jose, USA.
  5. Kenji Shiraishi, Katsumasa Kamiya, Yasuhiro Ebihara, Kenta Chokawa, and Shigenori Kato, Atomistic investigation of SiC/SiO<sub>2</sub> interfaces for the SiC-MOSFET power devices, The Collaborative Conference on Crystal Growth (3CG), December 11-14 2012, Orlando, Florida, USA
  6. K. Shiraishi, T. Shiokawa, G. Fujita, Y. Takada, M. Muraguchi, T. Yamamoto, T. Endoh, Y. Hatsugai, "Theoretical study of multi-electron wave packet dynamics in semiconductor nano-structures", 2nd International Conference on Small Sciences, December 16-19 2012, Orlando, Florida
  7. Katsumasa Kamiya, "First-Principles Studies on Proton Transfer Mechanisms in Cytochrome c Oxidase", 2012 International Conference on Small Science, December 2012, Wald Disney World Swan and Dolphin, Orlando FL, USA.
  8. Blanka Magyari-Köpe, Katsumasa Kamiya, Kenji Shiraishi, and Yoshio Nishi, "Atomic-size Effects of the Conductive Filaments Formation and Rupture in Resistance Change Based Memory Devices", 2012 International Conference on Small Science, December 2012, Wald Disney World Swan and Dolphin, Orlando FL, USA.
  9. K. Shiraishi, K. Chokawa, S. Kato, C. Shinnei, and K. Kamiya, Guiding Principles toward SiC-MOSFET for Future Power Device Applications, Workshop and IEEE EDS Mini-colloquium on Nanometer CMOS Technology (WIMNACT) 37, February 18 2013, 東京工業大学、東京都

B) 一般講演

1. Taro Shiokawa, Yukihiro Takada, Young Taek Yoon, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Mitsuhiro Arikawa, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, Kenji Shiraishi, “Applied Electric Field Dependence of Multi-electron Wave Packet Dynamics”, The Eighth International Nanotechnology Conference on Communication and Cooperation, May 8-11, 2012, Tsukuba, Japan.
2. Taro Shiokawa, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, Kenji Shiraishi, “The Effect of Coulomb Interaction in Multi-Electron Wave Packet Dynamics”, 31st International Conference on the Physics of Semiconductors, July 29-August 3, 2012, Zurich, Switzerland.
3. Yukihiro Takada, Young Taek Yoon, Taro Shiokawa, Satoru Konabe, Mitsuhiro Arikawa, Masakazu Muraguchi, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, Kenji Shiraishi, “Effectiveness of Time-Dependent Hartree-Fock Approaches for Multi-Electron Wave Packet Dynamics in Nanoscale Structures”, 31st International Conference on the Physics of Semiconductors, July 29-August 3, 2012, Zurich, Switzerland.
4. Christoph M. Puetter, Satoru Konabe, Kenji Shiraishi, “Wavepacket dynamics in grapheme”, 31st International Conference on the Physics of Semiconductors, July 29-August 3, 2012, Zurich, Switzerland.
5. Taro Shiokawa, Genki Fujita, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Takahiro Yamamoto, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, Kenji Shiraishi, “Effect of Coulomb Interaction in Electron Wave Packet Dynamics in Nanoscale Devices”, 2012 International Conference on Solid State Devices and Materials, September 25-27, 2012, Kyoto, Japan.
6. Yukihiro Takada, Taro Shiokawa, Young Taek Yoon, Satoru Konabe, Yasuhiro Hatsugai, Kenji Shiraishi Takahiro Yamamoto, “Multi-Electron Wave Packet Dynamics for Electron Transport in Classical-Quantum Crossover Regions”, IUMRS-International Conference on Electronic Materials (IUMRS-ICEM 2012), September 23-28, 2012, Pacifico Yokohama, Yokohama, Japan.

7. Taro Shiokawa, Genki Fujita, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Takahiro Yamamoto, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai Kenji Shiraishi, "Multi-Electron Wave Packet Dynamics with Long-range Coulomb Interaction", 2012 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS 2012), December 2-7, 2012, Kohala Coast, Hawaii, USA .
  8. C. M. Puetter, S. Konabe, Y. Hatsugai, K. Shiraishi, "Semi-classical Klein tunneling with Berry curvature effects in graphene", 2012 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS 2012), December 2-7, 2012, Kohala Coast, Hawaii, USA.
  9. Takefumi Kamioka, Hiroya Imai, Yoshinari Kamakura, Kenji Ohmori, Kenji Shiraishi, Masanori Niwa, Keisaku Yamada, Takanobu Watanabe, "Current fluctuation in sub-nano second regime in gate-all-around nanowire channels studied with ensemble Monte Carlo/molecular dynamics simulation", IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM), December. 11, 2012, San Francisco, USA.
  10. Katsumasa Kamiya, Moon Young Yang, Blanka Magyari-Köpe, Masaaki Niwa, Yoshio Nishi, and Kenji Shiraishi, "Physics in Designing Desirable ReRAM Stack Structure -Atomistic Recipes Based on Oxygen Chemical Potential Control and Charge Injection/Removal", IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM), December. 11, 2012, San Francisco, USA.
  11. C. Shinnei, K. Chokawa, K. Kamiya and K. Shiraishi, Effect of Strain to the Electronics Structures of SiC Thin Film with Various Poly Types and Suggestion of Suitable MOSFET Direction, Workshop and IEEE EDS Mini-colloquium on Nanometer CMOS Technology (WIMNACT) 37, February 18 2013, 東京工業大学、東京都
- (3) 国内学会・研究会発表
- A) 招待講演
  1. 白石賢二, 長川健太, 海老原康裕、加藤重徳、真栄力、神谷克政、第一原理計算に基づく SiC-MOSFET の設計指針、第 21 回 SiC 研究会講演会、大阪市中央公会堂、大阪府、2012 年 11 月.

B) その他の発表

1. 塩川太郎、藤田弦暉、高田幸宏、小鍋哲、村口正和、山本貴博、遠藤哲郎、初貝安弘、白石賢二、「多電子波束を用いた円電流ダイナミクスへの電子間相互作用の効果」、日本物理学会 2012 年年会、広島大学、2012 年 3 月 26 日～29 日
2. 高田幸宏、塩川太郎、尹永択、小鍋哲、初貝安弘、白石賢二、山本貴博、「古典-量子クロスオーバー系における電子波束ダイナミクス」、第 73 回応用物理学会学術講演会、愛媛大学・松山大学、松山市、2012 年 9 月 14 日
3. 塩川太郎、藤田弦暉、高田幸宏、小鍋哲、村口正和、山本貴博、遠藤哲郎、初貝安弘、白石賢二、「一次元非一様ポテンシャル中の波束ダイナミクス」、日本物理学会 2012 年秋季大会、横浜国立大学、2012 年 9 月 18 日～21 日
4. 藤田弦暉、塩川太郎、高田幸宏、小鍋哲、村口正和、山本貴博、遠藤哲郎、初貝安弘、白石賢二、「ナノ構造中の多電子波束ダイナミクスにおける電子間相互作用の効果」、日本物理学会 2012 年秋季大会、横浜国立大学、2012 年 9 月 18 日～21 日
5. 長川健太、加藤重徳、真栄力、神谷克政、白石賢二、酸化による C-C 欠陥の形成と SiC MOSFET の性能劣化の理論的考察、第 21 回 SiC 研究会講演会、2012 年 11 月、大阪市中央公会堂、大阪府。
6. 長川健太、加藤重徳、真栄力、神谷克政、白石賢二、SiC 酸化による Si-Si 結合欠陥の形成と結晶多形による違いの考察、第 21 回 SiC 研究会講演会、2012 年 11 月、大阪市中央公会堂、大阪府。
7. 真栄力、長川健太、神谷克政、白石賢二、第一原理計算を用いた結晶多形の異なる薄膜 SiC における歪みによる電子構造変化の考察、第 21 回 SiC 研究会講演会、2012 年 11 月、大阪市中央公会堂、大阪府。
8. 神谷克政、長川健太、個別討論会「SiC-MOS デバイス研究開発に関する最新動向と技術課題」、第 21 回 SiC 研究会講演会、2012 年 11 月 19～20 日、大阪市中央公会堂、大阪府。(パネル討論)
9. 長川健太、加藤重徳、真栄力、神谷克政、白石賢二、酸化により引き起こされる SiC の本質的欠陥 第 18 回 ゲートスタック研究会 -材料・プロセス・評価の物理- 2013 年 1 月 25～26 日、ニューウェルシティー湯河原、静岡県
10. 真栄力、長川健太、神谷克政、白石賢二、第一原理計算を用いた結晶多形の異なる薄膜 SiC における歪みによる電子構造変化の考察と MOSFET の最適面方位の提言、第 18 回 ゲートスタック研究会 -材料・プロセス・評価の物理-2013 年 1 月 25～26 日、ニューウェルシティー湯河原、静岡県
11. 藤田弦暉、塩川太郎、高田幸宏、小鍋哲、村口正和、山本貴博、遠藤哲郎、初

貝安弘、白石賢二、「スピン自由度を考慮した多電子波束ダイナミクスにおける電子間相互作用の効果」、日本物理学会 2013 年年会、横浜国立大学、2013 年 3 月 26 日～29 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
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

組織運営や支援業務の委員・役員の実績

10. 社会貢献・国際貢献
11. その他

海外長期滞在、フィールドワークなど

### III-2. ナノ構造物性グループ

#### 1. メンバー

准教授      岡田晋  
研究員      小鍋哲、富田陽子  
学生        大学院生 2名、学類生 3名

#### 2. 概要

ナノスケール構造を持つ物質においては、その物性は系のサイズ、表面(端)形状等に非常に大きく依存することが知られている。このことは、他方において、既存の物質においても、物質のサイズをナノメートルオーダーとし、その形状を制御することにより、新奇物性、新機能発現を誘起させることが可能であることを示唆している。実際、興味深い物性を示す種々のナノスケール炭素物質群の合成が近年盛んになされている。例えば、有限幅のグラファイト断片（グラファイトリボン）はその端形状に依存して、端を構成する原子にスピン分極が生じる事が知られている。さらに、このリボンを丸めた有限長さのナノチューブでは、そのチューブ直径に依存して、強磁性、反強磁性磁気秩序を示す事が我々の量子論に基づく全エネルギー計算から明らかになっている。また、チューブに5員環と8員環からなるトポロジカル欠陥を導入することにより、欠陥にそって分極電子が局在しチューブ軸にそって強磁性的秩序を発現する。

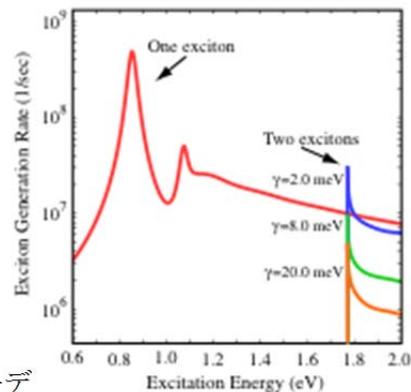
我々のグループでは、ナノサイズ炭素系（ナノチューブ、フラーレン、グラファイト）の電子物性を理論的に解析することによって、サイズ、形状が誘起する特異な電子物性発現の可能性を探索する事を目的としている。

#### 3. 研究成果

### 【1】 カーボンナノチューブにおける多重励起子生成機構の解明

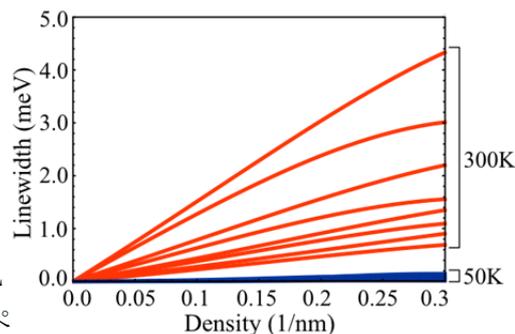
本論文では、単層カーボンナノチューブにおいて、多重励起子生成(一つの光子から複数個の励起子が生成されるプロセス)の微視的機構を調べた。多重励起子生成については、10 数年にわたりゼロ次元物質である量子ドット分野で注目され、現象の理論的解明が試みられてきたが、これまで未解決である。

これは、理論と実験との比較が困難なことや、理論モデリングが複雑なことが原因である。本研究は、カーボンナノチューブに注目する事で、量子ドットにおける理論解析の困難を克服し、多重励起子生成の微視的機構を明らかにした(図 1)。



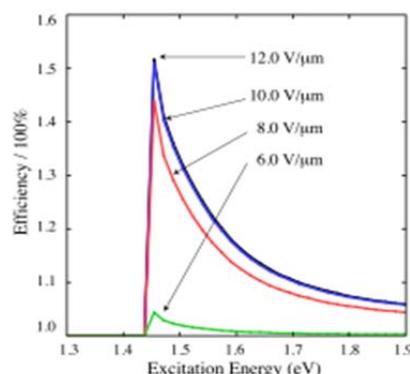
### 【2】 カーボンナノチューブにおける励起子—キャリア散乱抑制機構の解明

本論文では、キャリアドープした半導体カーボンナノチューブにおいて、励起子の位相緩和ダイナミクスを調べるため、励起子—キャリア弾性散乱率を計算した。その結果、低次元性に伴う多体効果により、励起子—キャリア散乱が強く抑制されることがわかった(図)。一般に、ドープした半導体では、この散乱は主要な励起子位相緩和プロセスであり、光吸収スペクトルの形状を決める。しかし、本研究により、従来の半導体光物性の常識が相互作用効果の強いナノスケール物質では全く成り立たないことが明らかになった。



### 【3】 カーボンナノチューブにおける光電流の見積もり

本論文では、単層カーボンナノチューブにおいて、多重励起子生成機構による電流生成を理論的に調べた。カーボンナノチューブでは、多重励起子生成が高効率に起こることが知られているが、それがどの程度電流生成に寄与するかは明らかではなかった。本研究により、多重励起子生成に起因し電流生成も高効率に生じることがわかった(図)。



### 【4】 有限長カーボンナノチューブにおける特異な電界遮蔽効果

CNT は半導体デバイスとしての応用が期待されている。デバイス中においては CNT は本質的に種々の異種物質との複合構造を形成している。そのなかで、電界はデバイスの機能制御において最も重要な広義異種物質である。ここでは、CNT を用いた電界効果トランジスタにおいて考えられる電界効果として、ソースドレイン電極間に架橋された CNT の電界下における基礎物性を密度汎関数理論に基づく第一原理計算と有効媒質遮蔽モデルを用いて明らかにした。その結果、CNT のキャップ、終端水素に起因する C-C 結合の結合交代が外部電界に対する遮蔽において非常に重要な影響を及ぼす事が明らかになった。すなわち、結合長の短い 2 重結合にかかわる炭素原子において電界遮蔽が強くおこり、結合長の比較的長い単結合領域において電界遮蔽が弱い事が明らかになった。さらに、ジグザグ端を有する有限長ナノチューブにおいては、其の端近傍において異常な電界遮蔽、すなわち電界に対する過剰な遮蔽現象が生じる事が明らかになった。この事は、仮に電極からオーミックにキャリアが注入されたとしても、CNT のジグザグ端近傍においてキャリアが多重散乱を受ける事を示しており、デバイス設計において電極とのコンタクト形状の制御が非常に重要である事を明らかにしたものである。

#### 【5】 小さいフラーレンからなる新奇ナノカーボン物質

本研究では、炭素原子数が 28 個からなる C<sub>28</sub> フラーレンに着目し、C<sub>28</sub> フラーレン多面体からなる 3 次元ネットワーク構造の安定性と電子構造を密度汎関数理論に基づく第一原理計算から明らかにした。その結果、C<sub>28</sub> 多面体から形成されるダイヤモンド構造を有する新奇炭素同素体の可能性が明らかになった。また、複数個の準安定構造が存在すること、それら全てが 1eV 程度の狭いバンドギャップを有する半導体であることが明らかになった。また、それらの準安定相は圧力誘起相転移において構造転移が可能であり、圧力によるバンドギャップエンジニアリングの可能性のある新しい炭素固体相である事を示した。

#### 【6】 2 層グラフェンの電界による電子物性制御

2 層グラフェンは面鉛直方向の電界下において有限のバンドギャップを形成する事が知られている。ここでは、外部電力を必要としない、有限ギャップを有する半導体化された 2 層グラフェン実現の方法を第一原理計算から理論的に予言した。すなわち、2 層グラフェンを上面、下面をそれぞれ正のイオン性液体と負のイオン性液体とでサンドイッチすることにより、イオン性液体間の電気的なポテンシャル差を用いる事により 2 層グラフェンに有限のバンドギャップを誘起する事が可能となる。また、正、負のイオン性液体のイオン種の組み合わせにより、真性半導体、p 型半導体、n 型半導体と半導体のキャリアタイプの制御が可能である事を明らかにした。

### 4. 教育

#### 卒業論文

木暮 聖太 フラーレン内包した短いカーボンナノチューブの物性」

曾根 準基 部分的に水素終端されたダイヤモンド構造(111)面における線形分散バンド」

新夕 晴奈 十重付加体フラーレンの電子構造」

#### 集中講義

名古屋大学 理学研究科物質理学専攻(化学系) 化学特別講義 7

### 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

#### 受賞

1. 日本物理学会若手奨励賞、小鍋哲、カーボンナノチューブにおける励起子多体効果の理論、2012 年 3 月
2. MNC25 Young Author's Award, 小鍋哲、Multiple exciton generation in graphene nano-ribbon, 2012 年 11 月

#### 外部資金

1. 科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業 CREST「次世代エレクトロニクスデバイスの創出に資する革新材料・プロセス研究」、岡田晋、代表、2009 年、18,500 千円、計算科学によるグラファイト系材料の基礎物性解明とそのデバイス応用における設計指針の開発

### 6. 研究業績

#### (1) 研究論文

1. Satoru Konabe and Susumu Okada, "Multiple Exciton Generation by A Single Photon in Single-Walled Carbon Nanotubes", *Physical Review Letters* **108**, 227401 (2012).
2. Takuma Shiga, Satoru Konabe, Junichiro Shiomi, Takahiro Yamamoto, Shigeo Maruyama, and Susumu Okada, "Graphene-Diamond Hybrid Structure as Spin-Polarized Conducting Wire with Thermally-Efficient Heat Sinks", *Applied Physics Letters* **100**, 233101 (2012).
3. Yoshiteru Takagi and Susumu Okada, "Electronic Structure Modulation of Graphene by Metal Electrodes", *Japanese Journal of Applied Physics* **51**, 085102 (2012).
4. Ayaka Yamanaka and Susumu Okada: "Electronic Properties of Carbon Nanotubes under an Electric Field" *Applied Physics Express*, **5**, 095101 (2012).

5. Donghui Guo, Takahiro Kondo, Takahiro Machida, Keigo Iwatake, Susumu Okada, and Junji Nakamura: "Landau levels under zero magnetic field on potassium intercalated graphite" *Nature Communications*, **3**, 1068 (2012).
6. Yoshiteru Takagi and Susumu Okada: "Modulation of Electron-states of Graphite Thin Films by the Nearly Free Electron States of Metal Surfaces" *Japanese Journal of Applied Physics*, **51**, 100203 (2012).
7. Satoru Konabe and Susumu Okada: "Robustness and Fragility of Linear Dispersion Band of Bilayer Graphene under an Electric Field" *Journal of the Physical Society of Japan*, **81**, 113702 (2012).
8. Mina Maruyama and Susumu Okada: "Elemental semiconductors of fused small fullerenes: Electronic and geometric structures of C<sub>28</sub> polymers" *Journal of the Physical Society of Japan*, **81**, 114719 (2012).
9. Satoru Konabe, Kazunari Matsuda, and Susumu Okada: "Suppression of Exciton-Electron Scattering in Doped Single-Walled Carbon Nanotubes" *Physical Review Letters*, **109**, 187403 (2012).
10. Soon-Kil Joung, Toshiya Okazaki, Susumu Okada, and Sumio Iijima: "Modest Response of Metallic Single-Walled Carbon Nano-tubes to C<sub>60</sub> Encapsulation Studied by Resonance Raman Spectroscopy" *Journal of Physical Chemistry C* **116**, 23844–23850 (2012).
11. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada: "Electron-state engineering of bilayer graphene by ionic molecules" *Applied Physics Letters*, **101**, 233106 (2012).
12. Masafumi Kubota, Shigenori Hayashi, Mototsugu Ogura, Yuichiro Sasaki, Susumu Okada, and Kikuo Yamabe: "Effects of Plasma Irradiation in Arsenic Plasma Doping Using Overhang Test Structures" *Japanese Journal of Applied Physics*, **52**, 021301 (2013).
13. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada: "Absence of Edge State near the 120 deg Corner of Zigzag Graphene Nanoaribbons" *Physical Review B* **87**, 045424 (2013).
14. Rieko Moriya, Kazuhiro Yanagi, Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada: "Charge Manipulation in Molecules Encapsulated Inside Single-Wall Carbon Nanotubes" *Physical Review Letters* **110**, 086801 (2013).

(2) 国際学会発表

A) 招待講演

B) 一般講演

1. Susumu Okada, ``Electronic structures of graphene ribbons encapsulated in carbon nanotube'', 13th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT12), June 24- 29, 2012, Brisbane.
2. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada, ``Energetics and electronic structures of graphene corner edges'', 13th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT12), June 24-29, 2012, Brisbane.
3. Katsumasa Kamiya and Susumu Okada, ``Energetics and Electronic Structures of Amino Acid Residues Adsorbed on Carbon Nanotubes'', 13th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT12), June 24-29, 2012, Brisbane.
4. Satoru Konaba and Susumu Okada, ``Multiple exciton generation by a single photon in semiconducting single-walled carbon nanotubes'', 13th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT12), June 24-29, 2012, Brisbane.
5. Ayaka Yamanaka and Susumu Okada, ``Electronic Properties of Carbon Nanotubes under the Electric Field'', 2012 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2012), 2012 年 9 月 25 日-27 日, 国立京都国際会館, 京都市
6. Satoru Konabe and Susumu Okada, "Multiple exciton generation in single-walled carbon nanotubes", 2012 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2012), 2012 年 9 月 25 日-27 日, 国立京都国際会館, 京都市
7. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada, "Tuning Semiconducting Property of Bilayer Graphene by Ionic Molecules", 2012 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2012), 2012 年 9 月 25 日-27 日, 国立京都国際会館, 京都市
8. Ayaka Yamanaka and Susumu Okada, ``Electronic Properties of Carbon Nanotubes under the Electric Field'', 25th International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC2012), 2012 年 10 月 30 日-11 月 2 日, 神戸メリケンパーク, 神戸市
9. Mina Maruyama and Susumu Okada, ``New Elemental Semiconductors of Fused Small Fullerenes'', 25th International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC2012), 2012 年 10 月 30 日-11 月 2 日, 神戸メリケンパーク, 神戸市
10. Satoru Konabe and Susumu Okada, "Multiple Exciton Generation in Graphene Nanoribbon", 25th International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC2012), 2012 年 10 月 30 日-11 月 2 日, 神戸メリケンパーク, 神戸市

11. Satoru Konabe and Susumu Okada, "Electronic Structures of Bilayer Graphene under Electric Field", 25th International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC2012), 2012 年 10 月 30 日-11 月 2 日, 神戸メリケンパーク, 神戸市
12. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada, "Edge-orientation of Graphene Corner: First-principles Calculations", 25th International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC2012), 2012 年 10 月 30 日-11 月 2 日, 神戸メリケンパーク, 神戸市
13. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani and Susumu Okada, "Electron-state engineering of bilayer graphene by sandwiching ionic molecules", American Physical Society, March Meeting, March 18-22, 2013, Baltimore.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 岡田晋, "グラファイト複合構造体の物性", ニューダイヤモンドフォーラム 平成 24 年度第 1 回研究会「ナノカーボンの最新研究」, 東京大学, 2012 年 6 月 15 日

B) その他の発表

1. 丸山実那, 岡田晋, "C<sub>26</sub> からなる二次元炭素結晶相の構造と電子状態", 第 43 回 フラレーン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東北大学, 2012 年 9 月 5 日-7 日
2. 山中綾香, 岡田晋, "電界下における水素終端カーボンナノチューブの静電ポテンシャル", 第 43 回 フラレーン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東北大学, 2012 年 9 月 5 日-7 日
3. 小鍋 哲, 岡田 晋, "単層カーボンナノチューブの多重励起子生成による光電流", 第 43 回 フラレーン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東北大学, 2012 年 9 月 5 日-7 日
4. 小鍋 哲, 岡田 晋, "電界下における二層グラフェンの電子状態", 第 43 回 フラレーン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東北大学, 2012 年 9 月 5 日-7 日
5. 富田 陽子, 岡田 晋, "トポロジカル欠陥のある六方晶系窒化ホウ素の電子構造", 第 43 回 フラレーン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東北大学, 2012 年 9 月 5 日-7 日
6. Thanh Cuong Nguyen, Minoru Otani, and Susumu Okada, "Bilayer graphene sandwiched by ionic molecules: Band-gap and carrier type engineering", 第 43 回 フ

- ラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東北大学, 2012 年 9 月 5 日-7 日
7. 小鍋哲, 松田一成, 岡田晋, “キャリアドーピングした単層カーボンナノチューブにおける励起子位相緩和”, 日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜国立大学, 2012 年 9 月 19 日
  8. 丸山実那, 岡田晋, “ $C_{28}$  をユニットとした新しい物質の安定構造と電子状態”, 日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜国立大学 2012 年 9 月 21 日
  9. 山中綾香, 岡田晋, “電界下におけるキャップ付きカーボンナノチューブの電子物性”, 日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜国立大学, 2012 年 9 月 21 日
  10. 小鍋 哲, 岡田 晋, “2 層グラフェンにおけるクーロンドラッグと励起子絶縁体”, 第 44 回 フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東京大学, 2013 年 3 月 11 日-13 日
  11. 木暮 聖太, 岡田 晋, “短い CNT に内包された  $C_{60}$  のエネルギー論と電子構造”, 第 44 回 フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東京大学, 2013 年 3 月 11 日-13 日
  12. 曾根 準基, 岡田 晋, “部分的に水素終端されたダイヤモンド構造(111)面における線形分散バンド”, 第 44 回 フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東京大学, 2013 年 3 月 11 日-13 日
  13. 新夕 晴奈, 岡田 晋, “十重付加体フラーレンの磁性状態”, 第 44 回 フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東京大学, 2013 年 3 月 11 日-13 日
  14. 山中 綾香, 岡田 晋, “平行電界によって電荷が蓄積されたキャップ付きカーボンナノチューブの電子物性”, 第 44 回 フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東京大学, 2013 年 3 月 11 日-13 日
  15. 丸山 実那, 岡田 晋, “2 次元金属炭素同素体の物性”, 第 44 回 フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東京大学, 2013 年 3 月 11 日-13 日
  16. 岡田 晋, 山本 貴博, “ラジカルを有するフラーレンのスピン状態”, 第 44 回 フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東京大学, 2013 年 3 月 11 日-13 日
  17. 丸山実那, 岡田晋, “ $C_{26}$  多面体をユニットとする二次元炭素結晶相の安定構造と電子状態”, 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月 26 日-29 日
  18. 新夕晴奈, 岡田晋, “十重付加体フラーレンの電子構造”, 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月 26 日-29 日

19. 近藤剛弘, Donghui Guo, 町田考洋, 鹿野大志, 鈴木哲也, 櫻井雅崇, 岩竹啓吾, 岡田晋, 中村潤児, “グラファイト表面に無磁場下で出現するランダウ準位の起源”, 日本物理学会 第 68 回年次大会、 広島大学、2013 年 3 月 26 日-29 日
20. 山中綾香, 岡田晋, “電界下における有限長 zigzag カーボンナノチューブの電子物性”, 日本物理学会第 68 回年次大会、 広島大学、2013 年 3 月 26 日-29 日
21. 曾根準基, 岡田晋, “部分的に水素終端されたダイヤモンド構造(111)面におけるディラック電子”, 日本物理学会第 68 回年次大会、 広島大学、2013 年 3 月 26 日-29 日
22. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada, “Electron-state control of multilayer MoS2 by electric field”, 日本物理学会 第 68 回年次大会、 広島大学、2013 年 3 月 26 日-29 日

(4) 著書、解説記事等

1. 日刊工業新聞、“ナノチューブ太陽電池：シリコン上回る計算 “、2012 年 5 月 30 日
2. 日刊工業新聞、“グラフェンの半導体化：シミュレーションで解明 “、2012 年 12 月 3 日

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  
組織運営や支援業務の委員・役員の実績
10. 社会貢献・国際貢献
11. その他  
海外長期滞在、フィールドワークなど

### III-3. 量子状態制御グループ

1. メンバー

准教授 全 暁民, 小泉 裕康

講師 前島 展也

学生 大学院生 7名、学類生 6名

教授 日野 健一(学内共同研究員、物質工学域)

## 2. 概要

レーザー照射による原子・分子状態の制御、固体における光誘起相転移、超伝導状態の制御から量子ビット操作につながる量子状態の制御等に関する研究を行っている。原子・分子系では、そのダイナミクス、およびそれらの電磁場との相互作用の理解と制御を時間依存シュレディンガー方程式を時間発展の直接解法で解く方法で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。さらに、巨視的な量子状態を室温で達成すべく、銅酸化 物超伝導の機構解明も行っている。この研究は、スピン渦超伝導理論の構築に発展し、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開発に関する研究と広がっている。

## 3. 研究成果

### 【1】強レーザー場中のヘリウム原子におけるアト秒精度での2色光電子過程の研究(全)

光電離の過程で、物質の特性を調べるのは従来よく使われる手法である。光電離或いは光吸収の能力は物質によって異なるが、弱い外場で光電離過程の制御はできない。近年、レーザー技術の進歩によって、強レーザー場による光電離過程の制御は可能になってきた。我々は強レーザー場下における原子光電離過程の計算方法を開発した。その計算方法で大規模計算を行い、原子光電離過程に対する有効的な制御方法を探索した。その結果得られたヘリウム原子の光電離と加えたレーザーの強度との関係(図1)を、アリゾナ大学の実験グループにより得られた実験結果と比較した。その結果、2色光の到着の時間差による、図2のような物質光電離過程をアト秒( $10^{-15}$ 秒)精度での制御ができることが明らかとなった。この研究結果は *Physical Review Letters* に発表された。

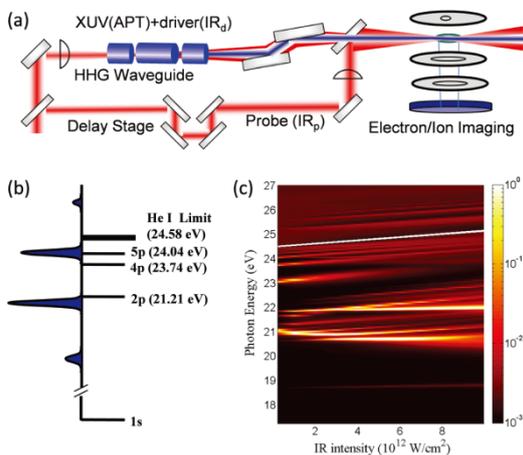
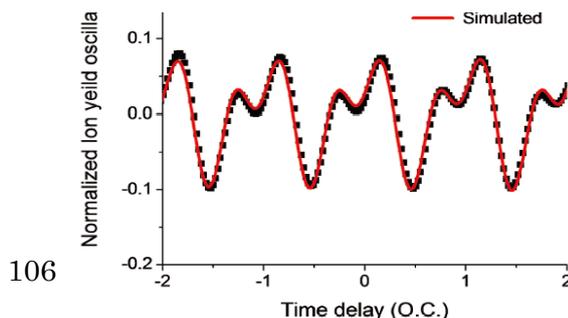


図1. 強レーザー場におけるヘリウム光電離断面積と コデータによって、2色光電離の実験概図。

図2:物質光電離確率と2色光の到着の時間差の依存性。



## 【2】中赤外線における原子電離過程の研究 (全)

レーザー技術の進歩により、従来よく使われた800nmの強レーザー以外でも、波長200 nmから4000nmの波長の強レーザーが利用できるようになってきた。特に、中赤外線における原子電離過程について、以前800nmの強レーザーで観測されていない様々な現象が報告されており、それらの現象は従来の理論では解釈できなかった。その理由は従来の理論計算法の計算量は波長の4.5乗に比例するので、波長が2倍になると、計算量が10倍以上となるため従来の手法では計算が極めて困難であったためである。我々は従来の手法で用いられたLength Gaugeの代わりにVelocity Gauge を採用することにより、GPUクラスタで計算できる新たな計算方法を開発した。この計算方法により、電離した電子の運動量分布と波長の関係(図3)を短波長(200 nm)から長波長(2000 nm)までの領域で系統的計算を実施し、アメリカのコロラド大学のM. Murnane 教授の実験グループによって得られた実験結果と比較研究を行った。その上で、多重散乱の寄与を初めて解明し、この結果はPhysical Review Letters に発表された。

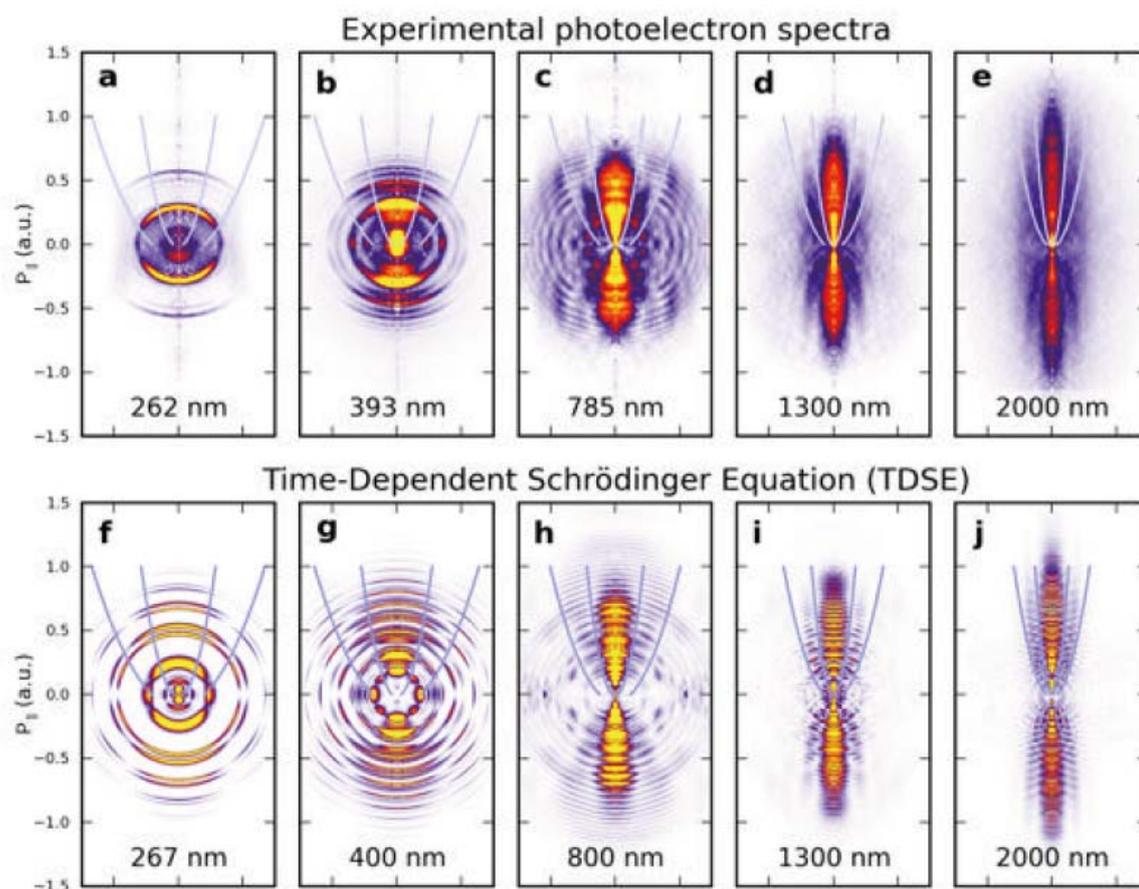


図3：強レーザー場における原子光電子の運動量分布（上：実験、下：理論）

## 【3】スピン渦誘起ループ電流の新たな計算方法の開発 (小泉)



行った。図 4 は $\eta=1$ における Excess Dos(赤線)、擬エネルギー(緑線)などの計算結果である。また、数学的操作により Excess DOS をシングルチャンネルに起因する項、多チャンネル非共鳴効果に起因する項、そして多チャンネル共鳴効果に起因する項の和として解析的に書き表すことで Excess DOS における多チャンネル効果に関して明確な議論を行った。結果として、駆動するレーザーに応じて Excess DOS における支配的な物理的寄与が変わることを示し、さらに今回の R 行列フロケ理論が従来のヒューストンモデルにおいて考慮されていた効果も内包しているより統一的な理論であることを示した。

### 【5】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きた。例えば時間周期外場のもたらす非線形効果として動的局在(DL)が知られている。このDLがおこるような強い時間周期外場中の電子状態を記述する手法として、フロケ状態がある。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、DLが出現

するレーザー強度領域を中心にしてファノ共鳴的な非対称ピークが光学応答スペクトルに現れることである。このファ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、励起子状態と連続準位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DLが起こるレーザー強度では、スペクトル形状の対称性が回復するとともに、スペクトル幅が最小になることが分かった(図5)。

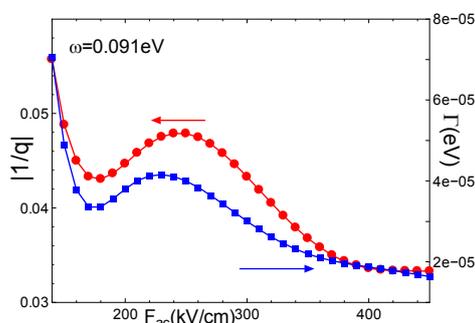


図5 ファノ共鳴ピークのスペクトル幅 $\Gamma$ と非対称パラメータ $q$ 。

### 【6】1次元パイエルス-ハバード模型における光誘起ギャップ内状態の解析（日野、前島）

光誘起相転移は物質に光を照射することで、相転移を起こす現象である。この現象を起こす物質に K-TCNQ などのスピnPaiエルス物質がある。この物質においては、光照射直後に、電荷移動ピークより低いエネルギー領域に過渡的な吸収ピ

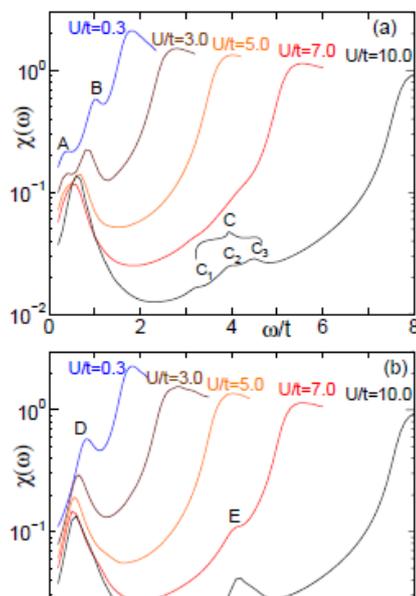


図6 (a) ポーロン、(b)荷電ソリトン状態における光学伝導度。

ーク（ミッドギャップピーク）が観測されており、光誘起相転移現象を解明する手掛かりとして注目されている。このピークの起源を解析するため、スピンパイエルス物質の理論模型である、一次元拡張パイエルスハバード模型に対する数値的解析を行った。光照射直後の状態としてポーラロン状態およびソリトン状態を仮定し、密度行列繰り込み群を用いて光学応答関数の計算を行った。その結果、いくつかのミッドギャップ吸収ピークを見出し(図6)、さらにそれらのピークに対応する状態の詳しい解析から、ポーラロン状態、ソリトン状態における格子歪みの中心近傍での電荷励起が原因となっていることが分かった。

#### 4. 教育

##### 修士論文

- 海老沼 英明 銅酸化物における砂時計型磁気励起スペクトルの起源に関する理論研究  
 根本 裕也 動的ワニエ・シュタルク階段における共鳴構造の不安定化と多チャンネル効果  
 守家 康介 1次元スピンパイエルス系における光励起状態の理論的研究

##### 卒業論文

- 井上 優 二原子分子の電離電子角度依存性における内殻軌道の寄与  
 金澤 健太 レーザー場により電離した電子運動量分布から原子内部情報を得る方法  
 岡崎 智 外部との電流のやり取りがあるスピン渦誘起ループ電流  
 大野 文隆 フラクショナルな動的 Wannier-Stark Ladder における Floquet 状態の不安定化  
 竹中 光 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  
 飛田 賢志 Wannier-Stark ladder における 2色レーザー駆動カオス散乱の時間周波数解析  
 渡辺 陽一 超短パルス励起コヒーレントフォノン生成初期過程における過渡的 Fano 共鳴

#### 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

##### 外部資金

1. 日本学術振興会科学研究費、基盤研究(C)、全 暁民(トン ショウミン)、代表、2012年、2990千円、「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」
2. 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)、分担、2009年、150千円、「散乱方程式直接解法の新展開」
3. 日本学術振興会科学研究費、基盤研究(B)、全 暁民(トン ショウミン)、分担、2009年、100千円、「自動電離状態における一般化ブライト相互作用効果の研究」
4. 日本学術振興会科学研究費、基盤研究(C)、日野 健一、代表、2011年、1560千円、「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」
5. 日本学術振興会科学研究費、若手研究(B)、前島 展也、代表、2011年、1040千円、「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. 住友財団基礎科学研究助成、前島 展也、代表、2011 年、500 千円、「有機強相関電子系における光誘起テラヘルツ電荷・格子ダイナミクスの生成と制御」

#### 知的財産権

米国特許出願 App. No.: 13/095,181, Inventor: Hiroyasu Koizumi, Quantum Computer,

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

1. H. Timmers, N. Shivaram, X. M. Tong, and A. S. Sandhu, “Photoionization dynamics in the presence of attosecond pulse trains and strong field”, Chem. Phys., **414**, 139-148 (2013).
2. C. Lemell, J. Burgdöfer, S. Gräfe, K. I. Dimitriou, D. G. Arbó, and X. M. Tong, “Classical-quantum correspondence in atomic ionization by mid-infrared pulses: multiple peak and interference structures”, Phys. Rev. A **87**, 013421\_1-9 (2013).
3. Y. J. Jin, X. M. Tong, and N. Toshima, “Anomalous alignment dependence of the third-order harmonic of  $H_2^+$  ions in intense laser fields”, Phys. Rev. A **86**, 053418\_1-5 (2012).
4. D. D. Hickstein, P. Ranitovic, S. Witte, X. M. Tong, Y. Huismans, P. Arpin, X. B. Zhou, B. S. Zhang, C. Y. Ding, K. E. Keister, P. Johnsson, N. Toshima, M. J. J. Vrakking, M. M. Murnane and H. C. Kapteyn, “Direct visualization of laser-driven electron multiple-scattering using velocity-map imaging”, Phys. Rev. Lett. **109**, 073004\_1-5 (2012).
5. N. Shivaram, L. H. Timmers, X. M. Tong, and A. S. Sandhu, “Measurement of the absolute timing of attosecond XUV bursts with respect to the driving field”, Phys. Rev. A **85**, 051802(R)\_1-5 (2012).
6. N. Shivaram, H. Timmers, X. M. Tong, and A. S. Sandhu, “Attosecond-Resolved Evolution of a Laser-Dressed Helium Atom: Interfering Excitation Paths and Quantum Phases”, Phys. Rev. Lett. **108**, 193002\_1-5 (2012).
7. 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”, to appear in J. Supercond. Nov. Magn.
8. H. Koizumi, “What is the phase variable in superconductors?: theory of superconductivity based on the spin-vortex formation”, J. Phys. : conf. ser. **428**, 12041\_1-13 (2013).
9. Y. Nemoto, K. Hino, and N. Maeshima, “Quasienergy resonance in a dynamic Wannier-Stark ladder”, Phys. Rev. B **87**, 205305\_1-13 (2013).
10. N. Maeshima, K. Moriya, and K. Hino, “Optical response of polarons and solitons in one-dimensional Peierls-Hubbard model”, J. Phys. Soc. Jpn. **81**, 104708\_1-7(2012).

11. N. Maeshima and K. Hino, “Dynamical Fano resonance of an exciton in laser-driven semiconductor superlattices”, *Phys. Rev. B* **85**, 205305\_1-9(2012).

B) 査読無し論文

1. S. Sugano, Y. Tanabe, and H. Koizumi. “Historical remarks on the birth of the ligand field diagram and the advent of laser”, *J. Phys. : conf. ser.* **428**, 12024\_1-4 (2013).

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Z. Hu, X. Han, Y. Li, D. Kato, X. M. Tong, H. Watanabe, and N. Nakamura, “Angular Distribution of X-ray Emission in Dielectronic Recombination”, 16th International Conference on Physics of Highly Charged Ions, September 2-7 2012, Heidelberg, Germany.
2. S. Sugano, Y. Tanabe, H. Koizumi, “Historical remarks on the birth of the ligand field diagram and the advent of laser”, XXIst International Symposium on the Jahn-Teller Effect, August 28, 2012, Tsukuba, Japan.
3. H. Koizumi, “What is the phase variable in superconductors?: theory of superconductivity based on the spin-vortex formation”, XXIst International Symposium on the Jahn-Teller Effect, August 31, 2012, Tsukuba, Japan.

B) 一般講演

1. X. M. Tong and N. Toshima, “Protonium formation in low-energy antiproton-hydrogen-atom collision --A case study in the V-coordinates with the mass polarization term”, International Conference on Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules”, Clusters and Surfaces, August 27 -- September 1, 2012, Berlin, Germany.
2. Y. J. Jin, X. M. Tong, and N. Toshima, “Anomalous alignment dependence of the third order harmonics from  $H_2^+$  ions in intense laser fields”, International Conference on Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters and Surfaces, August 27 -- September 1, 2012, Berlin, Germany.
3. Ranitovic, W. Petters, A. Spencer, L. Martin, D. Jonas, X. M. Tong, M. Murnane, and H. Kapteyn, “Ultrafast Dynamics of Ozone Exposed to Ionizing Radiation”, 43rd Annual Meeting of the APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics, June 4-8, 2012, Orange County, California.
4. N. Shivaram, H. Timmers, X. M. Tong, and A. Sandhu, “Quantum Interferences in Helium ionization in the Presence of Attosecond Pulses and Strong Laser Fields”, 43rd Annual Meeting of the APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics, June 4-8, 2012, Orange County, California.

5. R. Hidekata and H. Koizumi, "Spin-vortex-induced loop currents in the cuprate; a possible application to quantum computers", XXIst International Symposium on the Jahn-Teller Effect, August 27, 2012, Tsukuba, Japan.
  6. Y. Nemoto, N. Maeshima, and K. Hino, "Significance of Decay Mechanism into Continuum in Dynamical Wannier-Stark Ladder", ICPS 2012, July 29 - August 3, 2012, Zurich, Switzerland.
  7. N. Maeshima, K. Yamada, and K. Hino, "Laser-induces Fano resonance in semiconductor superlattice" ICPS 2012, July 29 - August 3, 2012, Zurich, Switzerland.
  8. N. Maeshima, K. Yamada, and K. Hino, "Laser-controlled excitonic Fano resonance in semiconductor superlattice", EXCON2012, Groningen, the Netherlands, July 1 - 6, 2012.
  9. K. Moriya, N. Maeshima, and K. Hino, "Dynamical properties of photogenerated polarons and solitons in one-dimensional dimerized Mott insulators", EXCON2012, Groningen, the Netherlands, July 1 - 6, 2012.
  10. Y. Nemoto, N. Maeshima, and K. Hino, "Destabilization of Dynamic Wannier-Stark ladder", EXCON2012, Groningen, the Netherlands, July 1 - 6, 2012.
- (3) 国内学会・研究会発表
- A)招待講演
- B)その他の発表
1. 小泉裕康, "スピン渦超伝導理論と BCS 理論の融合: 擬ギャップ相理解の為の考察", 日本物理学会 2012 年秋季大会. 横浜国立大学, 2012 年 9 月
  2. 海老沼英明, 秀方遼, 小泉裕康, "スピン渦誘起ループ電流のホール位置最適化", 日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜国立大学, 2012 年 9 月
  3. 小泉裕康, "スピン渦超伝導理論: 波動関数の一価性と超伝導", 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月
  4. 鈴木紀之, 小泉裕康, 秀方遼, "スピン渦誘起ループ電流における磁場について", 日本物理学会第 68 回年次大会. 広島大学, 2013 年 3 月
  5. 若浦光, 秀方遼, 鈴木紀之, 小泉裕康, "スピン渦誘起ループ電流の電流方向の変換", 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月
  6. 岡崎智, "外部からの電流のやりとりがあるスピン渦誘起ループ電流", 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月
  7. 根本裕也, 渡辺陽平, 前島展也, 日野健一, "超短パルス照射半導体におけるコヒーレントフォノン生成のファノ-アンダーソン模型", 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月

8. 竹中光, 前島展也, 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", 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月
9. 守家康介, 前島展也, 日野健一, "一次元パイエルスハバード模型における光照射後の時間発展", 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月

(6) 著書、解説記事等

**7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等**

1. 計算科学研究センターの先端計算科学推進室の活動に参画し、超並列 GPU 計算機 HA-PACS を用いた光科学の研究を推進した。(全)
2. 国際共同研究
  - (a) アメリカ コロラド大学 Kapteyn-Murnane 実験グループとの間で中赤外線レーザー場下における原子電離過程に関する国際共同研究を行った。(全)
  - (b) アメリカ アリゾナ大学 A.S. Sandhu 教授の実験グループとの間で強レーザー場下における原子状態制御に関する国際共同研究を行った。(全)
  - (c) オーストリア ウィーン工科大学 J. Burgdorfer 教授の理論グループとの間で中赤外線レーザー場下における原子電離メカニズムの解明に関する国際共同研究を行った。(全)

**8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績**

1. XXIst International Symposium on the Jahn-Teller Effect (August 26-31, 2012, University of Tsukuba, University Hall, Tsukuba, Japan) 組織委員長 (小泉)、プロシーディング編集長 (小泉)

**9. 管理・運営**

1. XXIst International Symposium on the Jahn-Teller Effect, 組織委員会委員 (小泉)
2. International Symposium on the Jahn-Teller Effect Steering Committee 委員 (小泉)
3. 計算科学研究センター大規模一般利用調整委員 (前島)

**10. 社会貢献・国際貢献**

**11. その他**

海外長期滞在、フィールドワークなど

## IV 生命科学研究部門

### IV-1.生命機能情報分野

#### 1. メンバー

助教 庄司光男

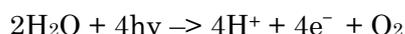
#### 2. 概要

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、核酸等に注目し、そ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 24 年度では、光合成酸素発生中心(PSII-OEC)、トレオニン合成酵素(TS)、DNA トポイソメラーゼについて、高精度計算手法(QM/MM)により、その特異的反応機構を生み出す分子メカニズムの解明を行った。また、異常型プリオン蛋白質の立体構造評価研究においては、全原子分子動力学法(MD)により構成アミノ酸特有の特徴(ケミカルトレンド)を明らかにした。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為、並列化効率の向上に取り組みながらスーパーコンピュータ(T2K-Tsukuba, HA-PACS)を活用した。さらなる高速化と次世代計算機環境への展開として、GPUによるQM計算の高速化を行った。宇宙生命分野においてはL型アミノ酸生成過程と系外惑星のバイオマーカーについての理論的研究を行った。

#### 3. 研究成果

##### [1] 光合成酸素発生中心(PSII-OEC)の電子状態についての理論的研究(庄司)

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、個々の現象は秒スケールの現象であるが、分子進化や多様性まで考慮すれば、極めて長い時間空間スケールでの、極めて複雑かつ重要なシステムである。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。電子伝達系における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)があり、水の分解反応を行っている。



この反応は電子を水から引き抜いていることから分かるように、極めて難しい化学反応である。実際、すべての人工触媒においてPSII-OECよりも高い触媒効率と耐性を持つものは未だ存在していない。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位置が明らかになった。活性中心はCaMn<sub>4</sub>O<sub>5</sub>クラスターが歪んだ椅子型構造を取っていた。しかしながらその構造は以前に報告されていた構造とは大きく異なっていたため、多くのグループによりその構造妥当性が検討された。我々はOECの構造妥当性を検証するため、量子古典混合法(QM/MM)法を用いて、精密に理論的検討を行った。特にプロトン位置はX線では決定できないが、プロトン化によってOECの電子状態や構造が大きく変化するため、すべての

可能な電荷・スピン・プロトン化状態を求め、PSII-OEC の構造特性について明らかにした。

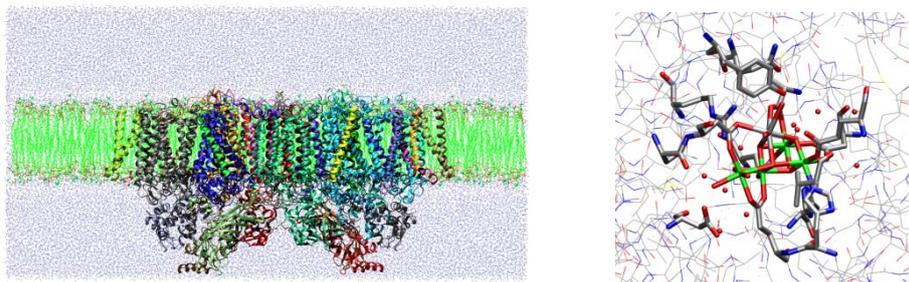


図 1. 光合成システム II(左図)と水分解サイト(右図)

### 【2】トレオニン合成酵素の特異的反応機構の理論的解明 (庄司)

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 (OPLH) 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 ( $\alpha$ -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、我々は TS の反応特異性に関わる反応過程に対して高精度理論解析 (QM/MM 計算) を行い、反応制御機構の解明を試みた。プロトン化状態と活性中心における水の存在を調べ、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 3kcal 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。

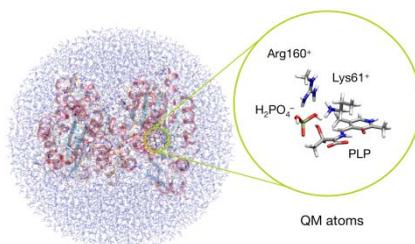


図 2. トレオニン合成酵素の QM/MM モデル: (左)全系, (右)QM 領域

### 【3】DNA トポイソメラーゼ II における DNA 再結合反応の理論的解明 (花岡恭平)

DNA トポイソメラーゼ II (topoII) は DNA の切断と再結合を行い、非常に長い DNA の構造的ストレスを緩和している。この反応では、DNA と酵素の共有結合中間体が生成し、細胞にとって危険な状態が一時的に生じる。通常この中間体は再結合反応によって速やかに解消されるが、いくつかの重要な抗生物質や抗がん剤は再結合反応を阻害することで共有結

合中間体を蓄積させ、癌細胞や細菌を死滅させる。したがって DNA トポイソメラーゼの再結合過程の解明は新たな抗がん剤や抗生物質をデザインする上でも非常に重要である。本研究では量子古典混合法(QM/MM)により topoII の DNA 再結合反応機構を解明する事を試みた。反応は DNA 3'0 の脱プロトン化から始まり、このプロトンは切断された DNA の間を移動し、さらに周囲の水、アルギニン残基を経由して、DNA から解離したタイロシン残基に移るといふ多段階プロトン移動経路(substrate-mediated proton transfer: SMPT)を持つ事を明らかにした。経路するアミノ酸残基はアルギニンだけであるが、これはアルギニンの変異により再結合反応が阻害され細胞が死滅するという実験と一致している。そのため、本結果は上記のプロトン移動経路を阻害することで新しい抗がん剤や抗生物質がデザインできることを示唆している。

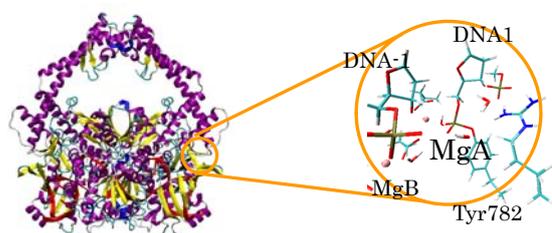


図 3. DNA-topoII の全体構造と活性中心構造

#### 【4】系外惑星における生命指標検出に向けた理論的検討（田口真彦）

近年、太陽系外惑星の数は大きく追加されており、ハビタブルゾーン内に入る惑星の観測にも成功し、地球に類似した惑星の発見が期待されている。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について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、その中でも red edge がある。これは、植物の反射スペクトル由来し、700-750nm 付近の近赤外領域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である。

系外惑星における生命指標の変異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。特にクロロフィルの吸収スペクトルがタンパク質環境やアミノ酸配位子によりどの程度変異性があるのかについて高精度計算法 (QM/MM 法) により理論的に評価した。その結果、タンパク質環境は約+9nm シフトさせており、アミノ酸の配位により約+13nm シフトさせている事を明らかにした。これらの結果をもとに、系外惑星における植物の光吸収について考察した。

#### 【5】異常型プリオン蛋白質の構造安定性評価（近藤大生）

プリオンとは哺乳類で発見されたタンパク質性の感染因子のことである。正常な立体構

造とは異なる立体構造のタンパク質(プリオン)が、正常型タンパク質を次々と異常型に転換、凝集していくことで、アミロイド線維と呼ばれる線維構造を形成する。これらは哺乳類ではアルツハイマー病やパーキンソン病のような神経疾患を引き起こすことが知られている(ポリグルタミン、ポリアスパラギン、酵母プリオン Sup35 等)。これらのタンパク質の立体構造は未だに決定されていない。しかし、X線回折や末端残基の微結晶構造から、 $\beta$ -helix モデルと in-register モデルの2つの主要な構造モデルが提案されている。また、プリオン蛋白質はグルタミン(Q)やアスパラギン(N)を組成として多く持つ事が分かっている。そこで、グルタミン組成を仮定し、 $\beta$ -helix と in-register モデルを構築し、全原子分子動力学計算(MD)法を用いて、 $1\mu\text{s}$ -MDを行う事で自由エネルギーを算出し、正確な構造安定化機構を明らかにすることを試みた。 $\beta$ -helixモデルは一巻き20個のアミノ酸を有し、ピッチが約  $4.7\text{ \AA}$ のヘリックス構造をしており、ヘリックス内部に水が存在した。一方、in-registerモデルは、2つの $\beta$ シートが合い向かい合い、非常に密にかみ合うことでシート間の水を排除していた。共に安定な構造であり、自由エネルギー差は数 kcal のオーダーとなった。 $\beta$ -helixモデルではグルタミン側鎖は親水的な役割をしており、in-registerモデルでは疎水的役割で構造安定化に寄与している事を明らかにした。

#### 【6】GPGPUによる量子化学計算法の高速化(梅田)

生命科学研究分野では、より短期間での問題解明やよりリアリスティックなシミュレーションのために、計算のさらなる高速化と大規模化対応が欠かせない。一方、近年の計算機環境は目覚ましく発展しており、CPU単体の演算性能向上は見込めない段階に達し、超並列やヘテロ並列計算による高速化が必須となる時代になってきている。中でも、GPUを用いるヘテロ計算機は消費電力や計算機コストの点でメリットが非常に大きい。そのため我々はQM/MM計算をGPU環境で行う事で、新たな生命科学研究領域を開拓することを試みている。

QM/MM計算においてボトルネックはQM(量子力学)計算であり、その中でも二電子積分ルーチンが最も重い。パッケージに組み込まれているCPU二電子積分コードは非常に煩雑であり、GPU対応させることは非常に難しい。そこで、改良が行いやすいOpenFMOにおいて二電子積分ルーチンをGPU対応させた。その結果、GPU利用により最大CPU1Coreに対して最大22倍の演算加速性能を得られるようになった。本研究は梅田宏明が主に研究を進め、朴泰介、埴敏博、庄司光男の協同研究体制でなされた。

#### 4. 教育

学生の指導状況

1. 近藤大生、Q/Nに富んだペプチドがつくるアミロイド線維の構造安定化機構の計算科学的解析、修士論文。

2. 田口真彦、Theoretical study on the absorption spectrum of light-harvesting antenna in photosynthesis based on time-dependent density functional theory and its application for the detection of biomarker in extrasolar planets、修士論文。
3. 氏家謙、分子動力学法によるトレオニンシンターゼの基質結合自由エネルギー計算、卒研発表。
4. 田中弥、高度好熱菌ウリジンシチジンキナーゼ (ttCK) の特異的基質認識機構の理論的解明、卒研発表。

## 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）

外部資金（名称、氏名、代表・分担の別、採択年度、金額、課題名）

知的財産権（種別、氏名、課題名、年月日）

<外部資金>

- (ア) 科研費、若手研究B、研究代表者：庄司光男、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、2012-2013.
2. 科研費、特別推進、研究代表：沈建仁、光合成系 I I における水分解反応の学理解明、2012-2017、研究分担：庄司光男。

## 6. 研究業績

(5) 研究論文

A) 査読付き論文

1. M. Shoji, K. Hanaoka, D. Kondo, A. Sato, H. Umeda, K. Kamiya, K. Shiraishi, A QM/MM study of nitric oxide reductase-catalyzed  $N_2O$  formation, Molecular Physics, accepted 2013.
2. 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, In Press.
3. 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  $CaMn_4O_5$  cluster of photosystem II. Elongation of Mn-Mn distances with hydrogen bonds, Catal. Sci. Technol., 3, 1831(2013)
4. 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  $Mn_5O_5$ ,  $CaMn_4O_5$  and  $Ca_2Mn_3O_5$  clusters revealed by UB3LYP computations. A bio-inspired strategy for artificial photosynthesis, Polyhedron, 57, 138(2013).

5. 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 and Y. Yoshioka, The nature of chemical bonds of the  $\text{CaMn}_4\text{O}_5$  cluster in oxygen evolving complex of photosystem II: Jahn-Teller distortion and its suppression by Ca doping in cubane structures, *Int. J. Quantum Chem.*, 113, 453(2013).
6. K. Yamaguchi, H. Isobe, S. Yamanaka, T. Saito, K. Kanda, M. Shoji, Y. Umena, K. Kawakami, J.-R. Shen, N. Kamiya and M. Okumura, Full geometry optimizations of the mixed-valence  $\text{CaMn}_4\text{O}_4\text{X}(\text{H}_2\text{O})_4$  ( $\text{X}=\text{OH}$  or  $\text{O}$ ) cluster in OEC of PS II: Degree of symmetry breaking of the labile Mn-X-Mn bond revealed by several hybrid DFT calculations, *Int. J. Quantum Chem.*, 113, 525 (2012).
7. T. Saito, S. Yamanaka, K. Kanda, H. Isobe, Y. Takano, Y. Shigeta, Y. Umena, K. Kawakami, J.-R. Shen, N. Kamiya, M. Okumura, M. Shoji, Y. Yoshioka and K. Yamaguchi, Possible mechanisms of water splitting reaction based on proton and electron release pathways revealed for  $\text{CaMn}_4\text{O}_5$  cluster of PSII refined to 1.9 Å X-ray resolution, *Int. J. Quantum Chem.*, 112, 253(2012).
8. H. Isobe, M. Shoji, S. Yamanaka, Y. Umena, K. Kawakami, N. Kamiya, J.-R. Shen and K. Yamaguchi, Theoretical illumination of water-inserted structures of the  $\text{CaMn}_4\text{O}_5$  cluster in the S2 and S3 states of oxygen-evolving complex of photosystem II: full geometry optimizations by B3LYP hybrid density functional Dalton Trans., 41, 13727(2012).

B) 査読無し論文

(6) 国際会議発表

A) 招待講演

1. O.M. Shoji, H. Isobe, S. Yamanaka, N. Kamiya, J.-R. Shen, K. Yamaguchi, A QM/MM study on the S2 spin state of the oxygen-evolving complex, 第5回 OCARINA シンポジウム, 大阪市立大学, 2013/3/5, oral.

B) 一般講演

1. O.M. Shoji, K. Hanaoka, D. Kondo, H. Umeda, K. Kamiya, K. Shiraishi, A QM/MM study of nitric oxide reductase-catalyzed  $\text{N}_2\text{O}$  formation, Sanibel Symposium, Florida, 2013/2/17-22, poster.
2. O.M. Shoji, H. Isobe, S. Yamanaka, K. Yamaguchi, J.-R. Shen, Ground spin state of the oxygen-evolving complex at the S2 state, Structure and Dynamics of Photosynthetic Systems, Okayama, 2012/10/22, poster.

3. ○K. Hanaoka, M. Shoji, D. Kondo, A. Sato, M.-Y. Yang, K. Kamiya, K. Shiraishi, QM/MM simulation revealed a substrate mediated proton relay mechanism in DNA religation reaction catalyzed by Type II DNA topoisomerase, CCP2012, Kobe, 2012/10/13, poster.
4. ○M. Shoji, K. Hanaoka, D. Kondo, H. Umeda, K. Kamiya, Y. Kitagawa, K. Shiraishi, QM/MM study on the catalytic mechanism of nitric oxide reductase, 2012 International Congress of Quantum Chemistry (ICQC2012), June 25 - 30, 2012, Boulder, Colorado, poster.

(7) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

B) その他の発表

1. ○庄司光男、花岡恭平、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におけるリン酸脱離以降の反応経路についての理論的検証、日本農芸化学会、東北大学、2013/03/26, 口頭。
2. ○田口真彦、小松勇、佐藤皓允、蘇垠成、庄司光男、栢沼愛、神谷克政、梅村雅之、矢花一浩、白石賢二、光化学系 II アンテナ部の光捕集機構についての量子化学的研究、第 9 3 回日本化学会春季年会、立命館大学、2013/3/22, 3G3-06(口頭)。
3. ○栢沼愛、花岡恭平、近藤大生、田口真彦、庄司光男、ニトリルヒドラーゼの触媒機構に関する理論的研究、第 9 3 回日本化学会春季年会、立命館大学、2013/3/22, ポスター。
4. ○庄司光男、磯部寛、山中秀介、山口兆、沈建仁、QM/MM 法による光合成酸素発生中心の S<sub>2</sub> 中間体の電子状態についての理論的研究、第 9 3 回日本化学会春季年会、立命館大学、2013/3/22, 1PA-098(ポスター)。
5. ○田口真彦、小松勇、佐藤皓允、蘇垠成、庄司光男、栢沼愛、神谷克政、梅村雅之、矢花一浩、白石賢二、生命指標となりうる光合成の光吸収スペクトル帰属についての理論的研究、2013 年日本天文学会春季年会、埼玉大学、2013/3/20, P53b(ポスター)。
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、田口真彦、佐藤皓允、蘇垠成、系外惑星バイオマーカー検出を目指した光合成機構のエネルギー移動計算、2013 年日本天文学会春季年会、埼玉大学、2013/3/20, P74a(口頭)。
7. ○田口真彦、小松勇、佐藤皓允、蘇垠成、庄司光男、栢沼愛、神谷克政、梅村雅之、矢花一浩、白石賢二、時間依存密度汎関数法に基づく光合成アンテナ部の吸収スペクトルの研究とそれを用いた系外惑星における生命指標検出に向けての検討、Supercomputer workshop 2013, 分子科学研究所 2013/1/22-23。
8. ○花岡恭平、庄司光男、近藤大生、田口真彦、神谷克政、白石賢二、QM/MM 法を用いた II 型 DNA トポイソメラーゼによる DNA 再結合反応の解明、Supercomputer workshop 2013, 分子

科学研究所, 2013/1/22-23.

9. ○近藤大生、花岡恭平、田口真彦、神谷克政、庄司光男、河合繁子、田口英樹、白石賢二、Gln や Asn を多く含むミスフォールドしたタンパク質の構造安定化機構に関する理論的研究、Supercomputer workshop 2013, 分子科学研究所, 2013/1/22-23.
10. ○庄司光男、花岡恭平、近藤大生、梅田宏明、神谷克政、白石賢二、一酸化窒素還元酵素における N2O 生成機構についての理論的研究、Supercomputer workshop 2013, 分子科学研究所, 2013/1/22-23.
11. ○田口真彦、小松勇、佐藤皓允、蘇垠成、庄司光男、栢沼愛、神谷克政、梅村雅之、矢花一浩、白石賢二、光合成光捕集複合体 II における光励起状態についての理論的研究、第 85 回日本生化学会大会@福岡国際会議場, 2012/12/16, ポスター。
12. ○花岡恭平、庄司光男、近藤大生、田口真彦、栢沼愛、神谷克政、白石賢二、アゴニスト結合型ビタミン D 受容体の溶液中のダイナミクスと活性制御機構、第 85 回日本生化学会大会@福岡国際会議場, 2012/12/16, ポスター。
13. ○近藤大生、花岡恭平、田口真彦、神谷克政、庄司光男、河合(野間)繁子、田口英樹、白石賢二、Q/N に富んだペプチドがつくるアミロイド線維の構造安定化機構の理論的解析、第 85 回日本生化学会大会@福岡国際会議場, 2012/12/16, ポスター。
14. ○庄司光男、花岡恭平、近藤大生、田口真彦、栢沼愛、梅田宏明、鴨志田良和、神谷克政、白石賢二、村川武志、林秀行、トレオニン合成酵素におけるリン酸脱離以降の反応機構についての理論的解明、第 85 回日本生化学会大会@福岡国際会議場, 2012/12/16, ポスター。
15. ○花岡恭平、庄司光男、近藤大生、田口真彦、栢沼愛、神谷克政、白石賢二、アゴニスト結合型ビタミン D 受容体のマイナーコンフォメーション、第 35 回日本分子生物学会年会@福岡国際会議場、2012/12/11, ポスター。
16. ○田口真彦、小松勇、佐藤皓允、蘇垠成、庄司光男、栢沼愛、神谷克政、梅村雅之、矢花一浩、白石賢二、光合成光化学系 II におけるアンテナ部の光捕集機構についての理論的研究、第 35 回日本分子生物学会年会@福岡国際会議場、2012/12/11, ポスター。
17. ○庄司光男、花岡恭平、近藤大生、梅田宏明、神谷克政、白石賢二、一酸化窒素還元酵素における N2O 生成機構についての理論的研究、第 3 回協定講座シンポジウム@神戸大学統合研究拠点、2012/11/29, ポスター。
18. ○花岡恭平、庄司光男、近藤大生、ヤンムンヨン、神谷克政、白石賢二、QM/MM 法による II 型 DNA トポイソメラーゼの DNA 再結合反応の解明、第 3 回協定講座シンポジウム@神戸大学統合研究拠点、2012/11/29, ポスター。
19. ○近藤大生、花岡恭平、田口真彦、神谷克政、庄司光男、河合繁子、田口英樹、白石賢二、Q/N に富んだペプチドがつくるアミロイド線維の構造安定化機構の計算科学的解析、第 3 回協定講座シンポジウム@神戸大学統合研究拠点、2012/11/29, ポスター。
20. ○田口真彦、小松勇、佐藤皓允、蘇垠成、庄司光男、栢沼愛、神谷克政、梅村雅之、矢花一

浩、白石賢二、光合成アンテナ部の光捕集機構についての理論的研究とそれをを用いた系外惑星における生命指標検出に向けての検討、第 3 回協定講座シンポジウム@神戸大学統合研究拠点、2012/11/29, ポスター。

21. ○田口真彦、小松勇、佐藤皓允、蘇根成、庄司光男、栢沼愛、神谷克政、梅村雅之、矢花一浩、白石賢二、系外惑星における生命指標としての光合成色素についての理論的研究、第 5 回アストロバイオロジーワークショップ、2012/11/23, 24, 口頭。
22. ○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、蘇根成、系外惑星のバイオマーカー検出に向けた光合成アンテナ機構の励起状態計算、第 5 回アストロバイオロジーワークショップ、2012/11/23, 24, 口頭。
23. ○M. Shoji, K. Hanaoka, D. Kondo, H. Umeda, M. Kayanuma, K. Kamiya, K. Shiraishi, S. Nakano, K. Katayanagi, QM/MM 法による同化型亜硝酸還元酵素の反応機構についての理論的研究、第 50 回日本生物物理学会年会、名大、2012/9/22。
24. ○花岡恭平・近藤大生・庄司光男・梁文榮・神谷克政・白石賢二 II 型 DNA トポイソメラーゼによる DNA 再結合反応に対する基質を介するプロトンリレー機構、第 6 回バイオ関連化学合同シンポジウム、北大、2012/9/6, ポスター。
25. ○花岡恭平、近藤大生、庄司光男、梁文榮、神谷克政、白石賢二、酵母 DNA トポイソメラーゼ II における DNA 再結合反応の理論的解明、第 12 回日本蛋白質科学会年会、名古屋国際会議場、2012/6/20, ポスター。
26. ○庄司光男、花岡恭平、近藤大生、梁文榮、梅田宏明、神谷克政、白石賢二、一酸化窒素還元酵素(NOR)における N2O 生成酵素についての理論的研究、第 12 回日本蛋白質科学会年会、名古屋国際会議場、2012/6/20, ポスター。
27. ○佐藤皓允、庄司光男、神谷克政、梅村雅之、矢花一浩、白石賢二、Theoretical Investigation of a Mechanism of Chirality Induction for Amino Acids in the Early Solar System, 日本地球惑星科学連合大会、2012/5/24, 口頭。

<その他(発表等)>

1. 花岡恭平, Q/N に富んだペプチドがつくるアミロイド線維の安定化機構の理論的解析, つくばソフトマター研究会 2013, 2013/3/11。
2. 田口真彦, 光合成アンテナ部の吸収スペクトルの理論的研究とそれをを用いた系外惑星における生命指標検出に向けての検討, つくばソフトマター研究会 2013, 2013/3/11。
3. 庄司光男, 生体酵素反応の理論的解明, つくばソフトマター研究会 2013, 2013/3/11。
4. Mitsuo Shoji, Computational Bioscience with Supercomputers、阪大タンパク研、セミナー、2013/3/7(招待)。
5. 佐藤皓允、第 7 回夏の学校 宇宙ライフサイエンス若手の会、2012/8/25, ポスター発表。
6. 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、第 4 回拠点シンポジウム

ム@秋葉原、2012/7/12。

(8) 著書、解説記事等

**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**

組織運営や支援業務の委員・役員の実績

**10. 社会貢献・国際貢献**

1. Mitsuo Shoji, Computational Bioscience Utilizing Supercomputers: Performance and Applications, INc8 での CCS-Tsukuba の紹介、CCS-Tsukuba, 2012/5/11。
2. 庄司光男、花岡恭平、第 2 回つくば科学研究コンテスト、審査員、2013/3/20。
3. 庄司光男、将来展望ワークショップ@大阪大学、2012/10/20。
4. 庄司光男、CCS 見学会(富山県立富山南高等学校) 2012/10/17。

**11. その他**

海外長期滞在、フィールドワークなど

## IV-2. 分子進化分野

### 1. メンバー

准教授 稲垣祐司 (生命環境系)

教授 橋本哲男 (共同研究員・生命環境系)

特任助教 神川龍馬 (生命環境科学研究科)

### 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切れない。そこで自然環境からこれまでに認識されていない新奇真核微生物を単離・培養株化する。

【2】大規模配列データ解析 真核生物の主要グループ間の系統関係を分子系統学的に解明するには、大規模遺伝子データが必須である。そこで系統進化的に興味深い生物種を選び、培養と遺伝子データの取得を進めている。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系列化を行っている。

### 3. 研究成果

#### 【1】大規模配列データ解析

##### (1) クリプト藻類に近縁な真核微生物種の解析

H24 年度までにパラオ共和国の海水サンプルから単離した新奇従属栄養性真核微生物 *Palpitomonas bilix* およびカタブレファリス類 *Roombia* sp. の網羅的発現遺伝子 (expressed sequence tag/EST) データを取得した。これら2種からの EST データを元に 159 遺伝子を含むアライメントデータを作成し、最尤法をもちいた系統解析を行うことで *Palpitomonas* の系統的位置の解明を試みた。

図1に示した159遺伝子系統解析では、*Palpitomonas* はクリプト藻類、ゴニオモナス類、カタブレファリス類と単系統となり、そのブートストラップ法によるサポート値は90%以

上となった。

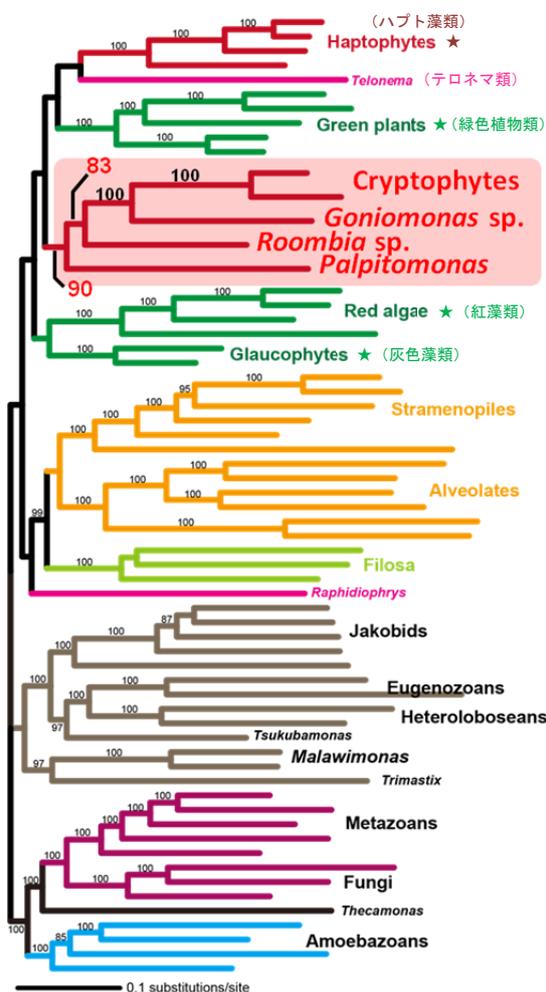


図 1: 159 遺伝子データに基づく最尤系統樹. 赤くシェードをかけたクレードは“クリプチスタ生物群”である。光合成性生物群には星印を付けた。

類) でも、MEP 経路を構成する遺伝子を保持していることが分かっている。しかし *Palpitomonas*、*Goniomonas* sp.、*Roombia* sp. の EST データ内には MEP 経路関連遺伝子転写物は発見できず、本解析では 2 次的に光合成能力を失ったかどうか判断することはできなかった。

このグループ内でまず *Palpitomonas* が分岐し、ついでカタブレファリス類が分岐した後、クリプト藻類とゴニオモナス類が分岐したと推測された。我々はこの生物群を“クリプチスタ生物群”と呼ぶことを提唱する。

興味深いことに、159 遺伝子解析ではクリプチスタ生物群は、解像度はないものの光合成を行うハプト藻類、緑色植物類、灰色藻類と近縁である可能性が示唆されている [図 1]。従って、クリプチスタ生物群の共通祖先は光合成性であり、*Palpitomonas*、ゴニオモナス類、カタブレファリス類は二次的に光合成能力を失った可能性がある。この可能性を検証するため、*Palpitomonas*、*Goniomonas* sp.、*Roombia* sp. の EST データ内に葉緑体関連遺伝子転写産物を探索した。本解析ではとくにイソプレノイド合成系について着目した。一般に光合成真核生物は、葉緑体に局在する非メバロン産 (MEP) 経路でイソプレノイドを合成する。これまでの研究で 2 次的に光合成能力を失った生物種 (例えばパーキンサス

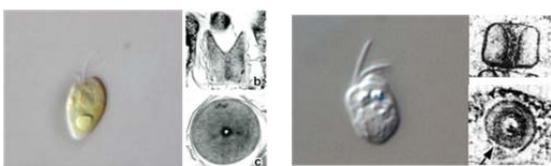
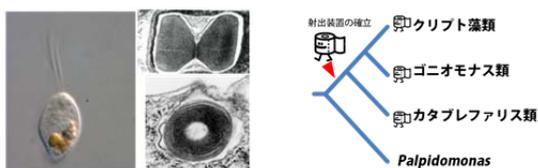


図 2: クリプト藻 (左上)、ゴニオモナス類 (右上) およびカタブレファリス類 (左下) の射出装置とクリプチスタ生物群における射出装置の進化 (右下). 光学得顕微鏡写真は矢吹彬憲博士から提供された. クリプト藻射出装置の電子顕微鏡写真 (左上) は Hausmann (*Int Rev Cytol* 1948 52:197-276) より、ゴニオモナス類射出装置の電子顕微鏡写真 (右上) は Mignot (*J Microscopie* 1965



4:239-252) より、カタブレファリス類射出装置の電子顕微鏡写真 (左下) は Lee & Kugrens (*J Phycol* 1991 27:505-513) および Okamoto & Inouye (*Protist* 2005 156:163-179) より抜粋した。

これまでの顕微鏡観察からクリプト藻類、ゴニオモナス類、カタブレファリス類は、電子顕微鏡観察によると「トイレットペーパー状」に見える射出装置 (ejectosomes) をもつことが分かっている [図 2、左上、左下、右上参照]。クリプト藻ではその構成タンパクをコードする *tri* 遺伝子群が同定されている (Yamgishi et al. *J Mol Evol* 2012 74:147-157)。興味深いことに *tri* 遺伝子転写物が *Goniomonas* sp. および *Roombia* sp. の EST データ中に発見された。一方 *Palpitomonas* 細胞には射出装置はなく、EST データにも *tri* 遺伝子転写物は検出されなかった。

射出装置の有無を、159 遺伝子系統解析から推測されたクリプチスタ生物群の分岐順にあてはめると、*Palpitomonas* が分岐した後、クリプト藻類、ゴニオモナス類、カタブレファリス類の共通祖先が射出装置を獲得したと解釈できる [図 2、右下の模式図参照]。

*Palpitomonas*・*Roombia* 等クリプチスタ生物群に含まれる従属栄養性真核微生物に関する研究は、科学研究費補助金基盤研究 (B)「ハプト・クリプト藻類を含む新奇巨大生物群の提唱とクロムアルベオラータ仮説の検証」(代表・稲垣; 課題番号 21370031) の支援を受けた。

## (2) 新奇真核生物種 *Tsukubamonas globosa* の解析

筑波大学構内の兵太郎池から単離された新奇従属栄養性真核微生物 *Tsukubamonas globosa* は、エクスカバータ生物群のディスコバ生物群と呼ばれるグループに含まれる。我々は H23 年度までに *Tsukubamonas* の EST 解析を行い、そのデータを元に 157 遺伝子データを作成し大規模系統解析を行った。157 遺伝子データにもとづく最尤法による分子系統解析では、*Tsukubamonas* を含むディスコバ生物群が単系統となり、この関係はブートストラップ値 92% で支持された。またこのクレード中で、*Tsukubamonas* はこれまで知られている既知のディスコバグループに属することはなかったが、ヘテロロボサ類 [図 3 では *Naegleria*] とユーグレノゾア類 [図 3 では *Diplonema* と *Euglena*] の基部から分岐し、その系統関係はブートストラップ値 99% で支持された。従って今回の 157 遺伝子アライメントの系統解析により、*Tsukubamonas* は、①ディスコバ生物群の独立した新奇系統群であること、②ヘテロロボサ類 + ユーグレノゾア類と姉妹群であると推測された。

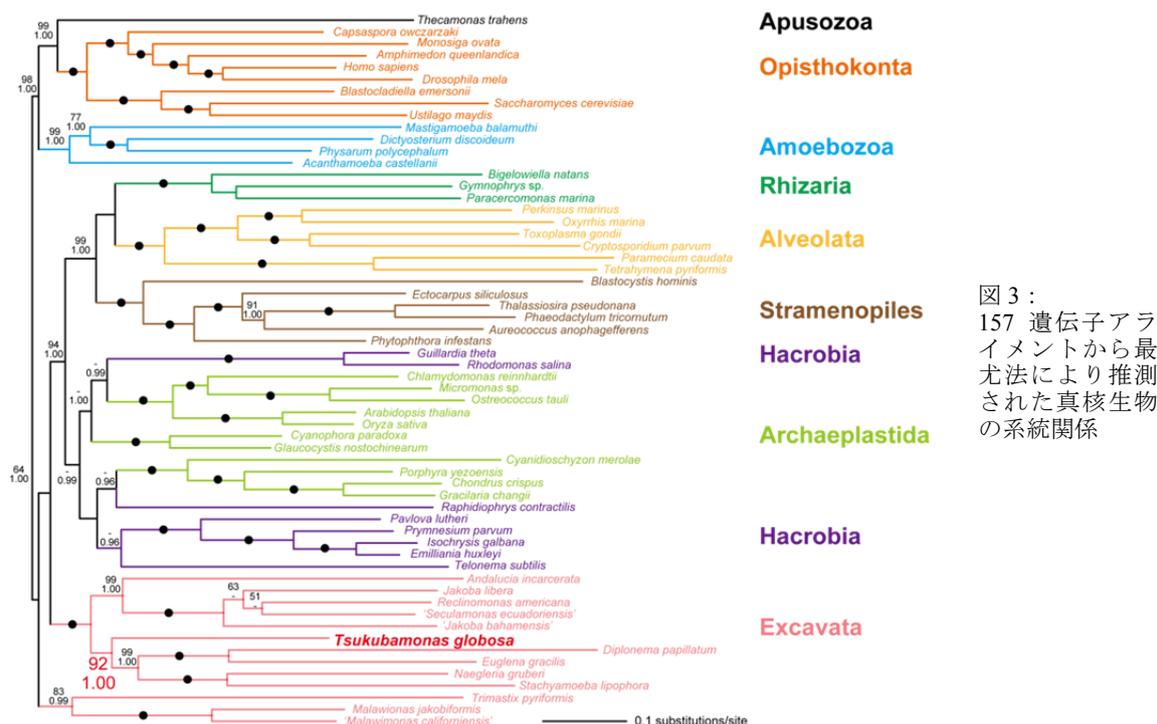


図 3 : 157 遺伝子アライメントから最尤法により推測された真核生物の系統関係

図 4 : *Tsukubamonas globosa* ミトコンドリアゲノム

ディスコバ生物群のうちヤコバ類のミトコンドリア (mt) ゲノムは、一般の真核生物 mt に比べより多くの遺伝子をコードしていることから原始的であるとも考えられ、mt ゲノムと真核生物の初期進化を考察する上で極めて重要である。我々は *Tsukubamonas* の mt ゲノムを完全解読に成功したが〔図 4〕、157 遺伝子データに基づく大規模分子系統解析から解明されたディスコバ生物群の系統関係をもとに、この生物群において mt ゲノムコード遺伝子がどのように変化したのかを解明すること

### (3) フォルニカータ生物群に属する嫌気性真核微生物種の解析

フォルニカータ生物群は嫌気性あるいは微好気性真核生物から構成され、病原性真核微生物 *Giardia intestinalis* に代表されるディプロモナス類と自由生活性の「カルペディエモナス様生物 (*Carpediemonas*-like organisms or CLOs)」が含まれる。病原性微生物として研究されてきた *Giardia* は、嫌気環境へ適応する過程で好気性 mt を機能不明の mt 由来オルガネラ・マイトソームへと改変したことが分かっている。しかし、ディプロモナス類のマイトソームがどのように成立したのかはよく理解できていない。我々は、フォルニカータ

生物群中での嫌気性 mt およびミトソームの進化を解明するため、主要な CLO から EST データを取得してきた (カナダ・Dalhousie 大学の Alastair Simpson 博士、Andrew Roger 博士等との共同研究)。これらの EST データを基盤に 163 遺伝子アライメントを作成し、大規模系統解析を行った結果、フォルニカータ生物群の主要生物種間の系統関係を高精度で解明することに成功した [図 5]。H25 年度には各種 CLOs の EST データ中に mt 由来オルガネラで機能すると考えられる遺伝子を網羅的に探索し、系統間での mt 由来オルガネラ機能の普遍性と特異性を検出する。

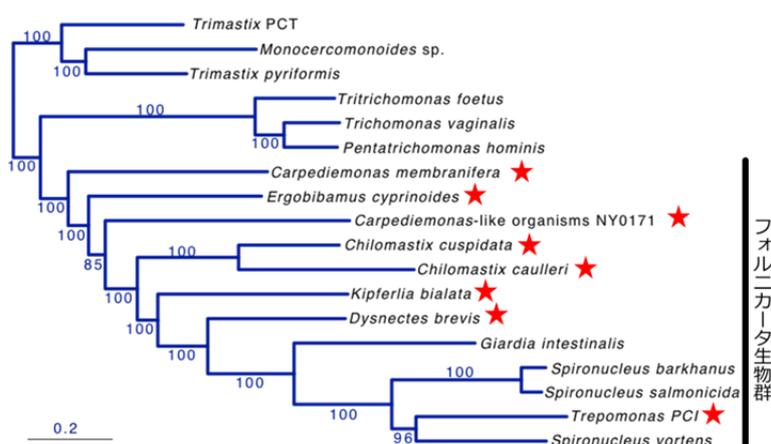


図 5 :  
163 遺伝子アライメントから最尤法により推測されたフォルニカータ生物群の主要系統間の関係  
我々が EST 解析に関連した生物種には星印を付けた。

## 【2】新奇真核生物の発見

H24 年度には以下の新奇真核微生物の培養株を新たに確立した。H25 年度には、次世代シーケンシングを用いてこれらの生物種の網羅的発現遺伝子解析を行う予定である。

### (1) 嫌気性従属栄養性ストラメノパイル生物 MAST-13

ストラメノパイル生物群には、海水から抽出した DNA から PCR 法により増幅した 18S リボソーム RNA 配列だけから存在が推測されている系統群 (通称 MAST) が多数存在する。我々は、この MAST グループのうち MAST-13 に属する嫌気性従属栄養性真核微生物を単離し、培養株化に成功した。[カナダ British Columbia 大・雪吹直史博士との共同研究]

### (2) 嫌気性従属栄養性真核微生物 PAP020 株

PAP020 株は嫌気性真核微生物であり、培養株化され、実験室内で継代培養されている。この細胞の光学顕微鏡観察による形態観察では、その系統的位置に目星をつけることができなかった。また 18S rRNA 配列を決定し分子系統解析を行ったが、PAP020 株が既知のどのような真核生物に近縁なのか全く分からず、高次分類群レベルで全く新奇な生物である可能性がある。[筑波大・石田健一郎博士、白鳥峻志氏との共同研究]

### (3) 緑色渦鞭毛藻類 TRD および MRD 株

一般に光合成性渦鞭毛藻類の葉緑体は「ペリニディン型」と呼ばれ、特異な補助色素ペリ

ディニンを含む。その一方、一部の渦鞭毛藻類は系統的に異なる真核藻類が細胞内共生を通して葉緑体化し、ペリディニン型葉緑体と置換した結果である「非ペリディニン型」葉緑体をもっている。*Lepidodinium* 属渦鞭毛藻類は緑色を呈する非ペリディニン型葉緑体を持ち、その葉緑体は緑藻起源であることが分かっている。我々は *Lepidodinium* 属とは形態的に異なる緑色渦鞭毛藻類 TRD 株および MRD 株を培養株化することに成功した。[山形大学・岩滝光儀博士、皿井千裕氏との共同研究]

### 【3】分子系統解析の方法論研究

#### (1) 塩基組成の偏りがもたらすアーティファクト

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”モデルによる系統解析プログラムの実用化が必須である。H24 年度までに、塩基組成の偏りの程度を変えたシミュレーションデータを作成し、non-homogeneous モデル解析の頑健性を詳細に検証した。その結果、non-homogeneous モデル解析は塩基組成の偏りに起因するアーティファクトを抑制しうることを示した。H24 年度からは、石川奏太（生物科学専攻後期 1 年・CS 専攻 M1）が non-homogeneous モデルを実装した系統解析プログラム NHML (Galtier & Gouy *Mol Biol Evol* 1998 15:871-879) を超並列計算機上での使用を前提とした改変を行い、その性能評価を開始した。Subtree pruning and regrafting（発見的樹形探索）の並列化、尤度計算の並列化における通信作業の最適化、複数の初期樹形からの樹形探索の並列化などを行っている。

### 4. 外部資金の獲得状況

- 基盤研究 (B)「ハプト・クリプト藻類を含む新奇巨大生物群の提唱とクロムアルベオラータ仮説の検証（課題番号 21370031）」代表、研究期間：2009~2012  
交付決定額：直接経費 1,800 千円（期間全体 14,200 千円）、間接経費 540 千円（期間全体 4,260 千円）
- 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）」代表、研究期間：2011~2015  
交付決定額：直接経費 17,100 千円（期間全体 14,200 千円・予定）、間接経費 5,130 千円（期間全体 4,260 千円・予定）

## 5. 研究業績

### (1) 研究論文

- 1 Matsumoto T, Kawachi M, Miyashita H, **Inagaki Y**. Prasinolaxanthin is absent in the green-colored dinoflagellate *Lepidodinium chlorophorum* strain NIES-1868: Pigment composition and 18S rRNA phylogeny. *Journal of Plant Research* 125:705-711.
- 2 Tsuji M, Sato M, Tanabe AS, **Inagaki Y**, **Hashimoto T**. An asynchronous parallel genetic algorithm for the maximum likelihood phylogenetic tree search. 2012 *Proceedings of 2012 IEEE Congress on Evolutionary Computation*. doi: 10.1109/CEC.2012.6256560
- 3 Ishitani Y, **Kamikawa R**, Yabuki A, Tsuchiya M, **Inagaki Y**, Takishita K. Evolution of elongation factor-like (EFL) protein in Rhizaria is revised by radiolarian EFL gene sequences. 2012 *Journal of Eukaryotic Microbiology* 59:367-373.
- 4 Ishikawa SA, **Inagaki Y**, **Hashimoto T**. RY-coding and non-homogeneous models ameliorate the maximum-likelihood inferences from nucleotide sequence data with parallel compositional heterogeneity. 2012 *Evolutionary Bioinformatics* 8:357-371.
- 5 Nishimura Y, **Kamikawa R**, **Hashimoto T**, **Inagaki Y**. Separate origins of group I introns in two mitochondrial genes of the katablepharid *Leucocryptos marina*. 2012 *PLoS One* 7:e37307.
- 6 Takishita K, Kolisko M, Komatsuzaki H, Yabuki A, **Inagaki Y**, Cepicka I, Smejkalova P, Silberman JD, **Hashimoto T**, Roger AJ, Simpson AGB. Multigene phylogenies of diverse *Carpodomonas*-like organisms identify the closest relatives of 'amitochondriate' diplomonads and retortamonads. 2012 *Protist* 163:344-355.
- 7 Nagayasu E, Ishikawa S, Taketani S, Ooka T, Chakraborty G, Yoshida A, **Inagaki Y**, Hayashi T, Maruyama H. Identification of a bacteria-like ferrochelatase gene in *Strongyloides venezuelensis*, an animal parasitic nematode. *PLoS One* 8:e58458.

### (2) 学会発表 (発表者は太字)

#### (A) 招待講演 (すべて口頭発表)

- 1 **Yuji Inagaki**. Genome evolution of the nitrogen-fixing cyanobacterial endosymbiont in the diatom *Epithemia turgida*. 2012年7月29日-8月3日 Integrated Microbial Biodiversity Program Meeting, Canadian Institute for Advanced Research. Hilton Hotel, Quebec City, Quebec, Canada.
- 2 **Yuji Inagaki**. A model for endosymbiotic genome reduction: rhopalodiacean diatoms and their nitrogen-fixing organelle, spheroid body. (Oral, Invited) 2012

年 7 月 29 日-8 月 3 日 Protist2012 University of Oslo, Oslo, Norway.

- 3 **Yuji Inagaki**, Ryoma Kamikawa, Takuro Nakayama, Goro Tanifuji, **Tetsuo Hashimoto**. 細胞共生体由来オルガネラ進化に関する新たな展開 (New aspects of the evolution of endosymbiotic bacterium-derived organelles). 2012 年 9 月 19-22 日 第 28 回日本微生物生態学会 (JSME 2012) 豊橋技術科学大学, 豊橋, 愛知.
- 4 **Ryoma Kamikawa**, Akinori Yabuki, **Tetsuo Hashimoto**, Yuki Nishimura, **Yuji Inagaki**. 新奇真核微生物がもたらす新しい真核生物大系統像 (Searching for missing pieces in natural environments: With the emphasis on the importance of culture strains of enigmatic eukaryotes for global eukaryotic phylogeny). 2012 年 9 月 19-22 日 第 28 回日本微生物生態学会 (JSME 2012) 豊橋技術科学大学, 豊橋, 愛知.
- 5 **稲垣祐司**、皿井千裕、**神川龍馬**、高橋和也、岩滝光儀. 渦鞭毛藻類における緑色葉緑体の起源と多様性. 2013 年 3 月 20 日 第 15 回植物オルガネラワークショップ オルガホール, 岡山, 岡山.

(B) その他の学会発表

- 1 石谷佳之、石川奏太、神川龍馬、矢吹彬憲、土屋正史、**稲垣祐司**、瀧下清貴. 放散虫と有孔虫が互いに姉妹群とする「レタリア仮説」に基づいたアクチン、チューブリンおよびペプチド伸長因子の複雑な進化シナリオ. (口頭発表) 2012 年 5 月 20-25 日 日本地球惑星科学連合 2012 年大会 幕張メッセ国際会議場, 幕張, 千葉.
- 2 横山亜紀子 守屋繁春、**稲垣祐司**、**橋本哲男**、白鳥峻志、中山剛、石田健一郎、井上勲. メタゲノミクスで探る東京湾沿岸の藻類・プロティスト相. (口頭発表) 2012 年 5 月 20-25 日 日本地球惑星科学連合 2012 年大会 幕張メッセ国際会議場, 幕張, 千葉.
- 3 西村祐貴、**神川龍馬**、**稲垣祐司**、**橋本哲男**. ローリングサークル型複製法に基づく原生生物ミトコンドリアゲノムのシーケンス解析. (口頭発表) 2012 年 7 月 13-15 日 日本藻類学会第 36 回大会 北海道大, 札幌, 北海道.
- 4 矢崎裕規、**神川龍馬**、**橋本哲男**、**稲垣祐司**. *Karenia* 属渦鞭毛藻類の三次葉緑体獲得に伴う葉緑体型 GAPDH の進化. (ポスター発表) 2012 年 7 月 13-15 日 日本藻類学会第 36 回大会 北海道大, 札幌, 北海道.
- 5 横山亜紀子、守屋繁春、**稲垣祐司**、**橋本哲男**、井上勲. 塩基配列情報で探る東京湾沿岸の真核微生物相とその季節変動. (口頭発表) 2012 年 7 月 13-15 日 日本藻類学会第 36 回大会 北海道大, 札幌, 北海道.
- 6 **神川龍馬**、吉田昌樹、平美砂歌、石田健一郎、**橋本哲男**、**稲垣祐司**. 光合成能進化研究のモデルとしての無色珪藻類 *Nitzschia* spp. (口頭発表) 2012 年 7 月 13-15 日 日本藻類学会第 36 回大会 北海道大, 札幌, 北海道.
- 7 松本拓也、**神川龍馬**、**橋本哲男**、**稲垣祐司**. 渦鞭毛藻 *Lepidodinium* EST 解析による

- ヌクレオモルフ関連遺伝子の探索. (ポスター発表) 2012 年 7 月 13-15 日 日本藻類学会第 36 回大会 北海道大, 札幌, 北海道.
- 8 **稲垣祐司**. 珪藻 *Epithemia turgida* 細胞における窒素固定シアノバクテリア共生体のゲノム解析. (口頭発表) 2012 年 7 月 20-21 日 第 1 回マトリョーシカ型生物学研究会 国立感染症研究所, 東京, 東京.
  - 9 西村祐貴、**神川龍馬**、**稲垣祐司**、**橋本哲男**. ローリングサークル型複製法に基づく原生生物ミトコンドリアゲノムのシーケンス解析. (ポスター発表) 2012 年 7 月 20-21 日 第 1 回マトリョーシカ型生物学研究会 国立感染症研究所, 東京, 東京.
  - 10 矢崎裕規、**神川龍馬**、**橋本哲男**、**稲垣祐司**. *Karenia* 属渦鞭毛藻類の三次葉緑体獲得に伴う葉緑体型 GAPDH の進化. (ポスター発表) 2012 年 7 月 20-21 日 第 1 回マトリョーシカ型生物学研究会 国立感染症研究所, 東京, 東京.
  - 11 久米慶太郎、平澤輝仁、松尾恵梨子、沈茹菁、**神川龍馬**、**稲垣祐司**、**橋本哲男**. *Dysnectes brevis* ミトコンドリア関連タンパク質における輸送シグナル配列の探索. (ポスター発表) 2012 年 7 月 20-21 日 第 1 回マトリョーシカ型生物学研究会 国立感染症研究所, 東京, 東京.
  - 12 Sohta Ishikawa, **Yuji Inagaki**, **Tetsuo Hashimoto**. RY-coding and non-homogeneous models can ameliorate the maximum-likelihood inferences from nucleotide sequence data with parallel compositional heterogeneity. (口頭発表) 2012 年 7 月 29 日-8 月 3 日 Protist2012 University of Oslo, Oslo, Norway.
  - 13 Yuki Nishimura, **Ryoma Kamikawa**, **Yuji Inagaki**, **Tetsuo Hashimoto**. A new strategy of organellar genome sequencing incorporating rolling circle amplification: protist mitochondria genomes. (ポスター発表) 2012 年 7 月 29 日-8 月 3 日 Protist2012 University of Oslo, Oslo, Norway.
  - 14 Yuki Yazaki, **Ryoma Kamikawa**, **Tetsuo Hashimoto**, **Yuji Inagaki**. Is the replacement of a gene encoding plastid-targeted GAPDH on-going in the dinoflagellate genus in *Karenia*? (ポスター発表) 2012 年 7 月 29 日-8 月 3 日 Protist2012 University of Oslo, Oslo, Norway.
  - 15 **Ryoma Kamikawa**, Yuki Nishimura, Akinori Yabuki, Martin Kolisko, Alastair G. B. Simpson, Andrew J. Roger, Ken-ichiro Ishida, **Tetsuo Hashimoto**, **Yuji Inagaki**. The phylogenetic position and mitochondrial genome sequence of the enigmatic discobid *Tsukubamonas globosa*. (口頭発表) 2012 年 7 月 29 日-8 月 3 日 Protist2012 University of Oslo, Oslo, Norway.
  - 16 Akiko Yokoyama, Shigeharu Moriya, **Yuji Inagaki**, **Tetsuo Hashimoto**, Isao Inouye. Seasonal succession of eukaryotic community detected by environmental sequences in Tokyo Bay, Japan. (ポスター発表) 2012 年 7 月 29 日-8 月 3 日 Protist2012

University of Oslo, Oslo, Norway.

- 17 Martin Kolisko, Ryoma Kamikawa, Kiyotaka Takishita, Ivan Cepicka, Qianqian Zhang, Tetsuo Hashimoto, Akinori Yabuki, Yuji Inagaki, Andrew J Roger, Alastair GB Simpson. Evolutionary analysis of mitochondrial ancestry of diplomonads: Phylogenomics of mitochondrial-related organelles in *Carpediemonas*-like organisms. (口頭発表)2012年7月29日-8月3日 Protist2012 University of Oslo, Oslo, Norway.
- 18 神川龍馬、西村祐貴、矢吹彬憲、Martin Kolisko、Alastair GB Simpson、Andrew J Roger、石田健一郎、橋本哲男、稲垣祐司. The enigmatic discobid *Tsukubamonas globosa*: phylogenomic analysis and mitochondrial genome sequence (新奇単細胞真核生物 *Tsukubamonas globosa* の系統的位置とミトコンドリアゲノム). (ポスター発表)2012 Dec 11-14 第35回日本分子生物学会 福岡国際会議場・マリンメッセ福岡, 福岡, 福岡.
- 19 神川龍馬、西村祐貴、左子芳彦、橋本哲男、稲垣祐司. The genes encoding elongation factor 1 $\alpha$  and elongation factor-like protein co-exist in distantly related eukaryotic genomes (真核生物における翻訳伸長因子 EF-1 $\alpha$  と EFL を両有するゲノムの分布). (ポスター発表)2012年12月11-14日 第35回日本分子生物学会 福岡国際会議場・マリンメッセ福岡, 福岡, 福岡.
- 20 神川龍馬、Martin Kolisko、Jan Andersson、Alastair GB Simpson、Andrew J Roger、稲垣祐司、橋本哲男. A comparative transcriptomic analysis of the mitochondrion-related organelles in members of an anaerobic protist group, Fornicata (嫌気環境に適応した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のトランスクリプトーム比較解析). (ポスター発表)2012年12月11-14日 第35回日本分子生物学会 福岡国際会議場・マリンメッセ福岡, 福岡, 福岡.
- 21 神川龍馬、Martin Kolisko、Jan O Andersson、Alastair GB Simpson、Andrew J Roger、稲垣祐司、橋本哲男. ミトコンドリア関連オルガネラの縮退進化. (口頭発表)2012年12月19-21日 日本ミトコンドリア学会第12回年会 筑波大学, つくば, 茨城.
- 22 橋本哲男、神川龍馬、林奈々子、稲垣祐司. 嫌気性寄生原虫におけるエネルギー代謝関連酵素の分子進化 (Molecular evolution of energy metabolism-related proteins in anaerobic protozoan parasites). (口頭発表)2013年3月29-31日 第82回日本寄生虫学会 日本医科歯科大学, 東京, 東京.

## 6. 異分野連携・国際連携等

なし

## 7. 国際活動

Councilor-at-large, International Society of Evolutionary Protistology (2008 年より)

## 8. 教育

- 矢崎裕規、修士（理学）論文題目「*Karenia* 属渦鞭毛藻類の三次葉緑体獲得に伴う葉緑体型 GAPDH の進化」
- 久米慶太郎、学士（理学）論文題目「Fornicata 生物の持つミトコンドリア関連タンパク質に存在する輸送シグナルの探索」

## 9. 社会貢献・国際貢献

なし

## 10. その他

関東プロティスト倶楽部（真核微生物を材料にした幅広い研究者の相互交流を目指す研究会：<https://sites.google.com/site/memicrobes/home/kpc>）を主催している。

※2012 年 6 月 1 日（順天堂大）と 2013 年 2 月 12 日（東京慈恵医科大）にて開催した。

## III. 地球環境研究部門

### V. 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（学外共同研究員 気象研）  
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 寺崎康児（国立極地研究所、センター勤務）  
大学院生 20 名、学類生 8 名

#### 2. 概要

地球環境学部門における主な活動としては、全球雲解像モデル NICAM (G1=10) の 7km 解像度モデルによる大規模計算を T2K-Tsukuba システムを用いて行った結果の解析を進めたことがあげられる。2008 年 9 月を初期値とした数値積分と、2009 年 1 月を初期値とした数値積分を、それぞれ夏と冬に 1 か月ランとなるように数値積分期間を延長して時間積分を行った。この他に 14 km 解像度 (G1=9) のデータを用いて北極振動、北極低気圧、温帯低気圧、ブロッキング、熱帯低気圧などの研究を継続した。特に北極低気圧の 3 次元構造について、NICAM による数値実験の結果と気象庁全球  $\eta$  面ガウス格子 (20 km 格子) の解析値とを比較した。極渦による大規模場からの渦度の供給と北極前線ジェットの傾圧性により発達するメソ低気圧の極渦との併合が重要であることを見出した。大気大循環研究と並んで領域気象モデル WRF を用いた都市気候シミュレーションが行われ、都市気候の将来予測、多治見猛暑の実態調査を推進したほか、建物解像 LES モデルの開発をセンター内共同研究として手掛け、都市キャノピーモデルの改良に役立てられた。地球環境学分野として査読付き研究論文 24 編、学会発表等多数が行なわれた。

#### 3. 研究成果

##### 【1】都市気候の将来予測

##### (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)

政策担当者や技術職員・研究員が単独で各地域の温暖化予測評価を実施可能にするため、「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 24 年度は、平成 23 年度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リ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。例えば、平成 23 年度版では解像度を 20km-5km から選択するのみであったが、平成 24 年度版では、30km-10km の解像度も選択することが可能となった。また、1) 計算領域の緯度経度を手動で入力する機能、2) 第

1 領域と第 2 領域をマウスで選択する機能を追加した (図 1)。これにより、計算領域選択の自由度が大きくなった。その他、ユーザーの要望を反映して、計算領域設定・計算結果表示における県境のプロット、計算設定に関するアドバイスの画面表示などの機能を追加した。

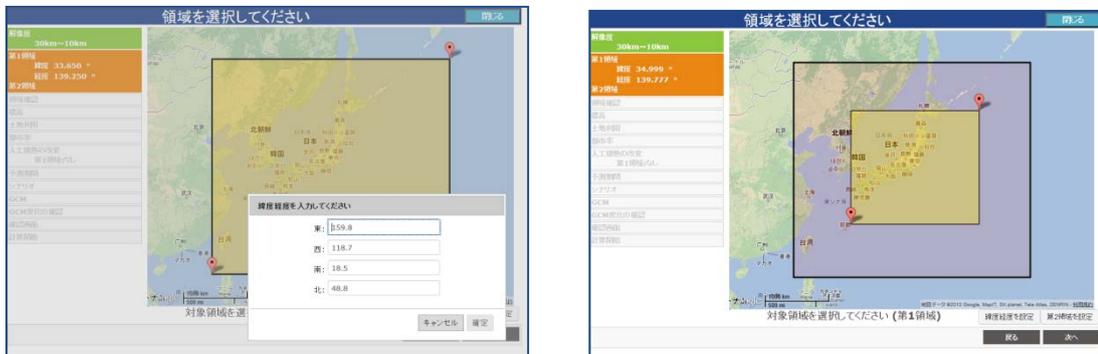


図 1 計算領域を手動入力で指定する機能 (左図) と マウス選択する機能 (右図)

## (2) 建物解像並列 LES モデルの共同開発 (日下)

都市気候の詳細な研究では、モデルの空間解像度を数十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 24 年度は、都市街区スケールでの詳細な気温分布を再現するのに必要となる放射モデルの開発を行い、LES モデルに組み込んだ。開発した放射モデルでは、建物による影や建物間の多重反射を考慮することができるため、現実に近い都市の放射環境を再現することが可能である。この放射モデルを LES に組み込み、流体計算と連成させ、計算を行った。結果は、10 時の地表面の影の位置 (図 1a) と地上 1.5m での気温の水平断面図 (図 1b) であり、直射日光が当たる日向では日影より  $0.3^{\circ}\text{C}$  程度気温が高い様子が示されている。このように、建物間放射モデルを導入したことで直射日光が当たっている場所と日影となっている場所とで気温差が現れ、より現実的な計算が可能となった。LES モデル開発では

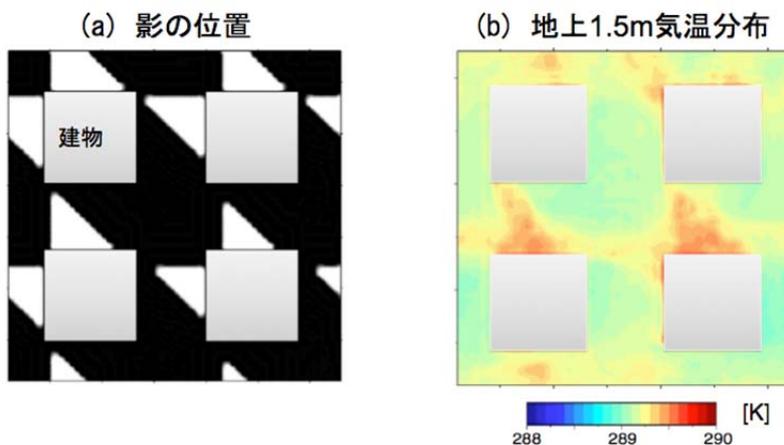


図 2 (a) 建物間放射モデルで計算した影の様子 (10 時)。(b) 放射モデルと LES モデルを結合し、街区内気温分布を計算した結果。日向では影の領域よりも  $0.3^{\circ}\text{C}$  程度気温が高い様子がみられる。

他に、計算の高速化のため、並列化に加え GPU 化を引き続き行っている。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。

## 【2】 NICAM を用いた北極低気圧の数値実験とその解析 (田中、寺崎)

文科省グリーン北極事業の一環で北極気候変動研究プロジェクトが 2011 年度から開始されている。今年はその 2 年目となった。北極気候変動研究は近年の地球温暖化研究の最前線として位置付けられ、北極海の海氷の減少は、地球温暖化の研究課題として重要であると同時に、北極海周辺の天然資源の発掘や北極航路の開拓という経済的理由からも注目されている。特に、2012 年は 2007 年を超える夏季の海氷現象がみられた。

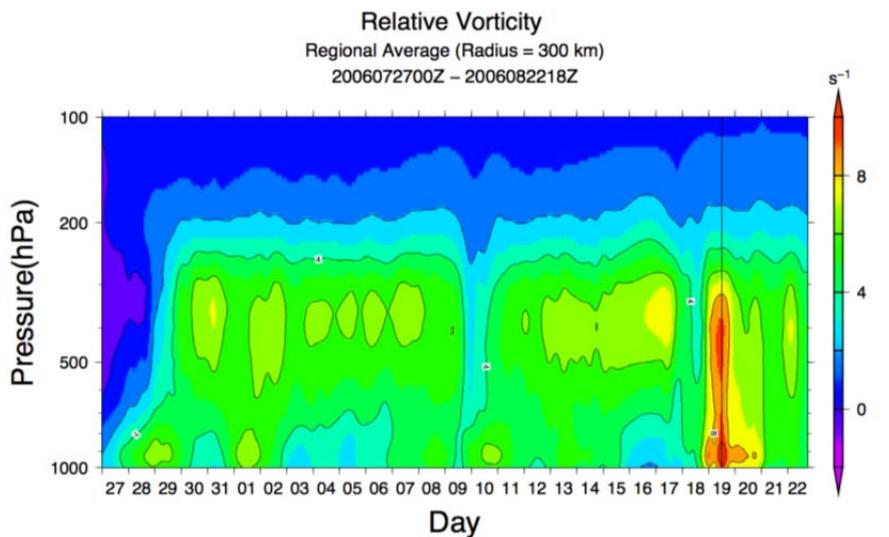


図3 2006 年 7 月に発生した北極低気圧の中心周辺で平均した相対渦度の時間鉛直断面図。

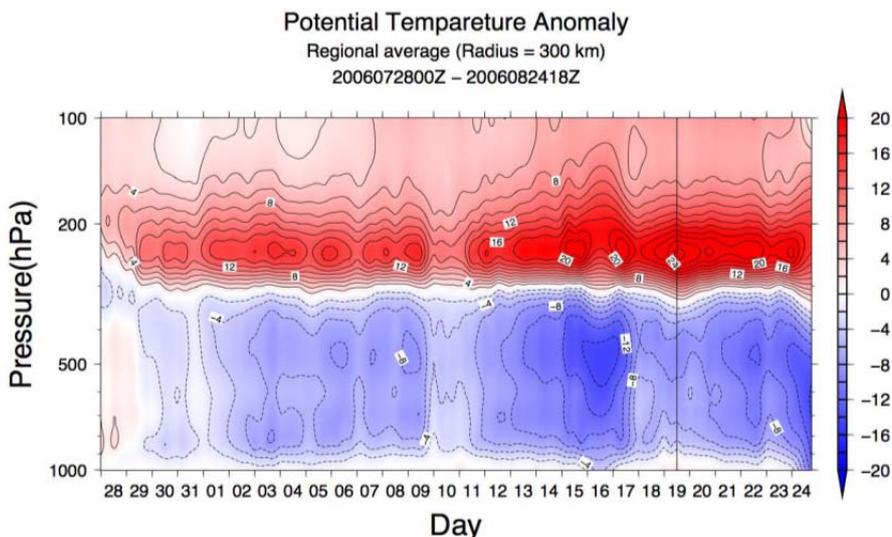


図 4 2006 年 7 月に発生した北極低気圧の中心周辺で平均した温位アノマリの時間鉛直断面図。

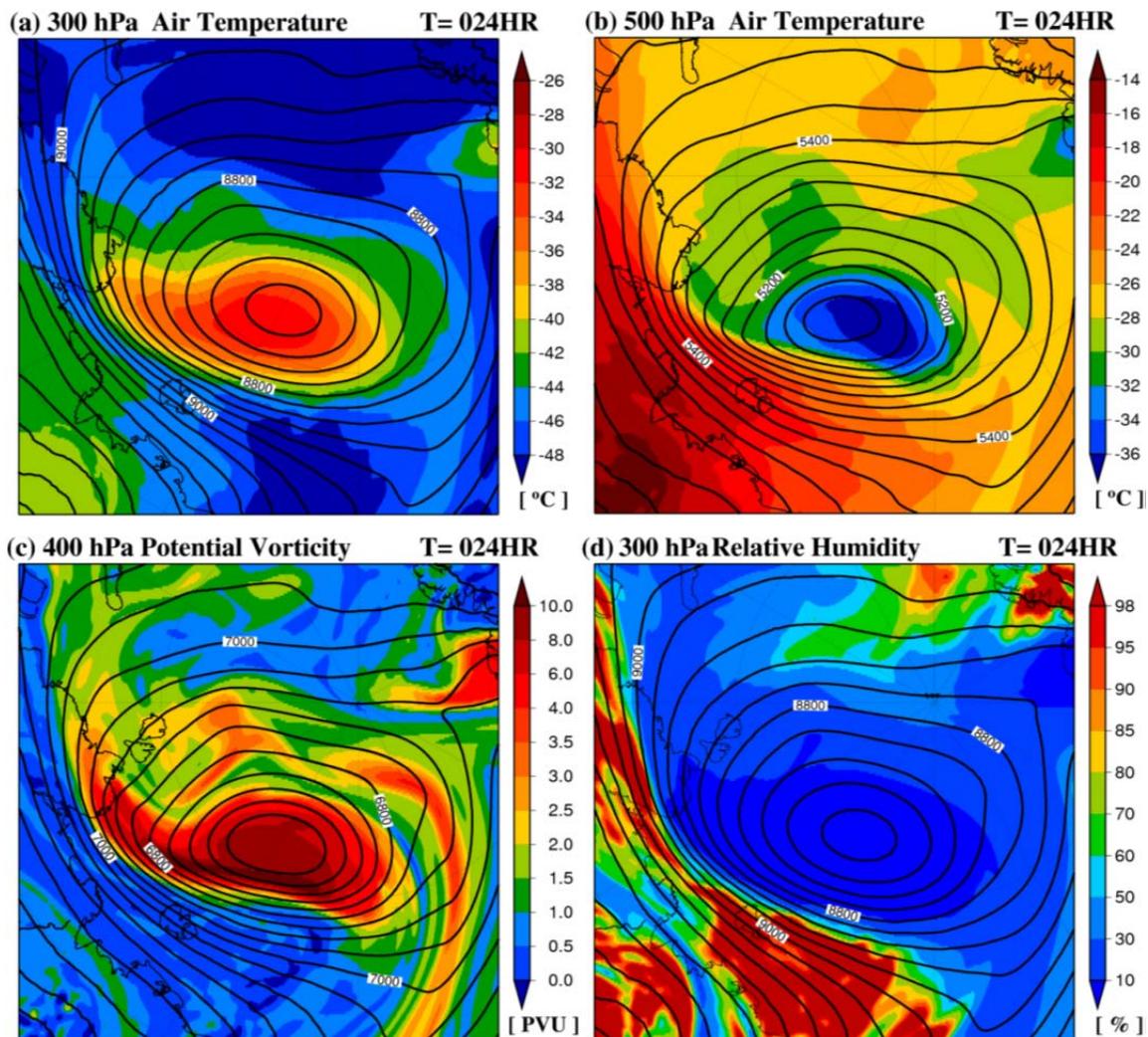


図5 NICAM による 2008 年 6 月に発生した北極低気圧の中心周辺の (a) 300hPa 気温、(b) 500hPa 気温、(c) 400hPa 渦位、300hPa 相対湿度 (Aizawa et al., 2013)。

その原因の一つに、スーパー北極的気圧の発生があった。北極海の海氷の消長には、ポーフォート高気圧と対をなし、北極海ダイポール気圧配置をもたらす北極低気圧の存在が重要であり、その成因解明と動向予測に注目が集められている。本研究では、全球雲解像モデル NICAM を用いて行った 2008 年 6 月の北極低気圧の 3 次元構造を、気象庁全球  $\eta$  面ガウス解析値の構造と比較した。この北極低気圧は北極海上を 20 日以上も迷走した低気圧で、温帯低気圧とは異なる特徴や構造を持つ。NICAM による数値実験の結果では、中心の低気圧性の渦度は対流圏上層の極渦と一体化した順圧構

造を持ち、極渦周辺の北極前線の傾圧性により対流圏下層で発達したメソ低気圧と併合を繰り返すことで長期間持続していることを示している(図3-5)。

#### 【4】 3D ノーマルモードによる 3 次元基本場の傾圧不安定解析 (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地球大気のノーマルモードは、大気潮汐理論により Hough 関数としてその解が知られている。これは上記ハミルトニアンシステムを、基本場に重なる微小擾乱として線形化することで求まる解析解であり、線形システムもハミルトニアンシステムを構成する。

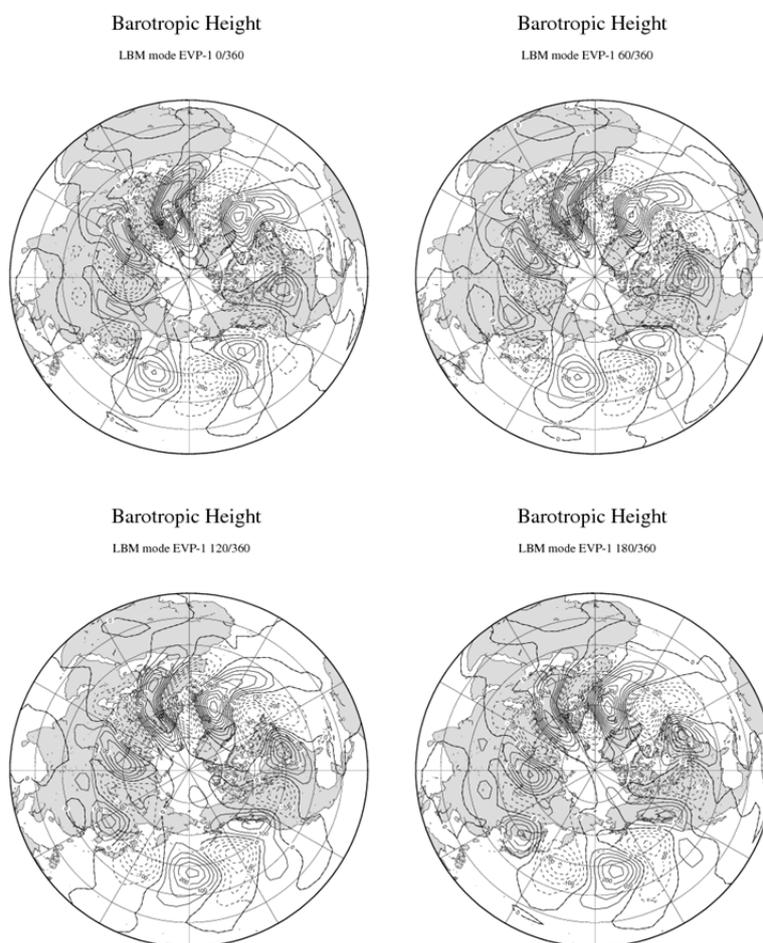


図6 冬季の 3 次元基本場における傾圧不安定 Charney モードのライフサイクルの理論解を、位相角 0, 60, 120, 180 度の順圧高度場で示した分布図 (Tanaka and Seki, 2013)。

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、順圧傾圧不安定理論の一般化を行った。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ち、波数で分割された領域での構造が東進し、ライフサイクルが完結する。それに対し、基本場が東西方向にも変化する場合の最大増幅率の傾圧不安定波は、ひとつの周期の構造変化を波数倍した期間でひとつのライフサイクルが完結する。図6は周期的に変化する順圧高度場を、位相角にして0度、60度、120度、180度の場合について示した図である。ここで、180度の図は0度の図を逆部号にした図となる。この間にトラフとリッジの関係が入れ替わると同時にひとつ東に移動することが解る。したがって、図6の360度を解の1周期とすると、その東西波数倍だけ同様に移動することで、ひとつのライフサイクルが完了する。大西洋では亜熱帯ジェットと寒帯前線ジェットが分かれ、ダブルジェットになっているところを傾圧不安定波が背景の基本場を感じながら東進する。一方、日本付近では、亜熱帯ジェットと寒帯前線ジェットが合流し、強い1本のジェットになった背景場を感じながら傾圧不安定波が東進する。このように、背景場に応じて変形しながら東西方向に地球を1週することでひとつのライフサイクルが完了する。これが3次元基本場における線形プリミティブ方程式の最大増幅率を持つ傾圧不安定波の解の振る舞いである。

#### 4. 教育

指導学生（田中）

D1：（地球）相澤、近藤

M2：（地球）長門、山上、植木、川津、小林、武田

M1：（地球）足立、海野、木野、馬場

B4：（地球）

指導学生（日下）

D3（地球）： 秋本、池田、高根

D2（地球）： 岡田、豊田

D1（地球）： 加藤、ドアン

M2（地球）： 水成、西、平田、阿部

M1（地球）： 久野、藤田、廣田、桑門、工藤

B4（地球）： 大高、柿沼

集中講義 岩手大学「地球規模環境論」（田中）

集中講義 首都大学東京「空間情報科学」（日下）

#### 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

文科省 GRENE 北極研究プロジェクト、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

## 6. 研究業績

研究論文他 (査読付き)

1. Okada, M., Kusaka, H., 2013 : Proposal of a new equation to estimate globe temperature in an urban park environment. *J. Agric. Meteor.*, 69(1), 23-32.
2. 仲野久美子, 仲吉信人, Alvin C.G. Varquez, 神田学, 足立幸穂, 日下博幸, 2013 : 最新の都市パラメタリゼーションを導入した集中豪雨シミュレーション. 土木学会論文集 B1(水工学), 69(4), I335-I360.
3. 高根雄也, 日下博幸, 高木美彩, 岡田牧, 阿部紫織, 永井徹, 富士友紀乃, 飯塚悟, 2013 : 岐阜県多治見市における夏季晴天日の暑熱環境の実態調査と領域気象モデル WRF を用いた予測実験 -物理モデルと水平解像度に伴う不確実性の検討-. 地理学評論, 86-1, 14-37.
4. 高根雄也, 日下博幸, 原政之, 2012 : IPCC SRES A2 シナリオ下での三大都市圏の夏季気候の将来予測 : WRF-UCMによる力学的ダウンスケーリング. 日本ヒートアイランド学会論文集, 7, 18-26.
5. Adachi, S. A., Kimura, F., Kusaka, H., Inoue, T., Ueda, H., 2012 : Comparison of the Impact of Global Climate Change and Urbanization on Summertime Future Climate in the Tokyo Metropolitan Area. *J. Appl. Meteor. Climatol.*, Vol.51, No.8., 1441-1454.
6. 日下博幸, 高根雄也, 阿部紫織, 高木美彩, 重田祥範, 大橋唯太, 布和宝音, 2012 : オープンスペースで実施した定点観測によって捉えられた夏季晴天日におけるつくば市のヒートアイランド : 都市内外の気温差に関する不確実性の評価. 日本ヒートアイランド学会論文集, 7, 1-9.
7. Ishizaki, N. N., Shiogama, H., Takahashi, K., Emori, S., Dairaku, K., Kusaka, H., Nakaegawa, T., Takayabu, I., 2012 : An Attempt to Estimate of Probabilistic Regional Climate Analogue in a Warmer Japan. *J. Meteor. Soc. Japan.*, 90B, 65-74.
8. Kusaka, H., Chen, F., Tewari, M., Dudhia, J., Gill, D. O., Duda, M. G., Wang, W., Miya, Y., 2012 : Numerical Simulation of Urban Heat Island Effect by the WRF Model with 4-km Grid Increment: An Inter-Comparison Study between the Urban Canopy Model and Slab Model. *J. Meteor. Soc. Japan.*, 90B, 33-45.
9. Kusaka, H., Hara, M., Takane, Y., 2012 : Urban climate projection by the WRF model at 3-km horizontal grid increment: Dynamical downscaling and predicting heat stress in the 2070' s August for Tokyo, Osaka, and Nagoya metropolies. *J. Meteor. Soc. Japan.*, 90B, 47-63.

10. Ishizaki, N. N., Takayabu, I., Oh'izumi, M., Sasaki, H., Dairaku, K., Iizuka, S., Kimura, F., Kusaka, H., Adachi, S. A., Kurihara, K., Murazaki, K., Tanaka, K., 2012 : Improved performance of simulated Japanese climate with a multi-model ensemble. *J. Meteor. Soc. Japan.*, 90(2), 235-254.
11. Iizumi, T., Takayabu, I., Dairaku, K., Kusaka, H., Nishimori, M., Sakurai, G., Ishizaki, N. N., Adachi, S. A., and Semenov, M. A., 2012 : Future change of daily precipitation indices in Japan: A stochastic weather generator-based bootstrap approach to provide probabilistic climate. *Journal of Geophysical Research-Atmosphere.*, Vol117, D11114 19PP.
12. Zagar, N., K. Terasaki, and H. L. Tanaka 2012: Impact of the Vertical Resolution of Analysis Data on the Estimates of Large-Scale Inertio-Gravity Energy. *Mon. Wea. Rev.* 140, 2297-2307.
13. Sang-Min Lee, Hi-Ryong Byun, and Hiroshi L. Tanaka 2012: Spatiotemporal Characteristics of Drought Occurrences over Japan. *J. Applied Meteor. and Clim.* , 51, 1087-1098..
14. 田中博 (分担執筆) , 2012: [地学基礎]. 森本他監修、実教出版社, 文科省検定済教科書、191 pp.
15. 田中博 (分担執筆) , 2012: [地学基礎]. 森本他監修、実教出版社, 教授用指導所、215 pp.
16. Tanaka, H.L., A. Yamagami, and S. Takahashi 2012: The structure and behavior of the Arctic cyclone in summer analyzed by the JRA-25/JCDAS data. *Polar Science*, 6, 55-69.
17. Nagato, Y. and H. L. Tanaka 2012: Estimation of global warming trend without the contributions from decadal variability of the Arctic Oscillation. *Polar Science*, 6, 15-22.
18. 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. *JMJS*, 90, 193-213.
19. Aizawa, T. , H. L. Tanaka, and M. Satoh 2012: Rapid arctic cyclogenesis by the cloud resolving global model NICAM. (Accepted in *Meteor. Atmos. Phys.*)
20. 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)
21. 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.
22. 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*, accepted.
23. Inoue, T., and H. Ueda, 2012: Delay of the Baidu withdrawal in Japan under global warming condition with relevance to warming patterns of SST. *J. Meteor. Soc. Japan*, 90, 855-868.
24. Kamae, Y. and Ueda, H.: Mid-Pliocene global climate simulation with MRI-CGCM2.3: set-up and initial results of PlioMIP Experiments 1 and 2, *Geosci. Model Dev.*, 5, 793-808, doi:10.5194/gmd-5-793-2012, 2012.

#### 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）

#### 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

気象学会公開気象講演会「地球温暖化問題における科学者の役割」（田中）

気象学会夏季大学「北極圏の温暖化と異常気象」教育と普及委員会企画（田中）

#### 9. 管理・運営

地球環境科学専攻長、学長補佐、全学FD委員会委員長、教育企画室員、教育イニシアチブ機構（田中）

全学計算機システム委員会委員、自然系学類計算機委員会委員長、研究科学生生活委員会委員、専攻広報委員会委員、学類メンタルヘルス学生支援チーム、CCS 大規模メニューコア仕様策定委員会委員、T2K 運用連絡会委員、HA-PACS 運用連絡会委員、TCA 仕様策定委員会委員、学際共同利用委員会委員、など（日下）

#### 10. 社会貢献・国際貢献

茨城県県民大学 平成 24 年度夏季講座 講師（田中）

熱中症予防声かけプロジェクト 実行委員、NEDO 発電量予測技術委員会 / 発電量予測技術研究会 委員、気象庁気候問題懇談会 検討部会 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)  
気象大学校非常勤講師、International Association for Urban Climate(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)  
メディア出演：NHK「ニュースウォッチ9」、テレビ朝日「報道ステーション」、日経産業新聞「先端人」、ラジオ Inter FM「GREEN STATION」ほか (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

助教 多田野 寛人

研究員 田中 昌宏、辻 美和子、梅田 宏明、中尾 昌広、奴賀 秀男

### 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。

現在の最先端のスパコンは大規模な並列システムであり、個々の要素であるプロセッサの高性能化とともに、システムを構成するプロセッサ数を増やすことにより高性能化を達成してきた。ナノテクやライフサイエンスの進歩、気候気象予測や地震・防災への対処には計算科学は不可欠かつ有効な手段であり、その他の様々な計算科学の諸分野において、そのためにはさらなる計算能力が要請されている。しかし、性能のさらなる向上のためにプロセッサ数をさらに増やす、これまでのアプローチは設置面積、消費電力等の制限から、限界が見えてきた。さらに性能を向上させるためには、演算性能を重視したプロセッサ構成や、チップ内メモリによるバンド幅の向上、特定アプリケーションに特化した演算回路などを導入することにより、汎用的な処理を行う従来の汎用プロセッサよりも大幅な処理性能の向上と電力効率の改善が必要である。さらに、ライフサイエンスの分子シミュレーションなど、多くのアプリにおいて一定の問題の高速化(強スケーリング)が要請されるようになってきた。本調査研究では、このような電力効率の大幅な効率化と強スケーリングによる新たな計算科学の展開を目指して、演算加速機構による並列大規模システムについて調査研究を行っている。

本調査研究に想定するシステムについての概略について図 1 に示す。多数の演算コアを内蔵したチップによる演算加速機構が汎用プロセッサで構成された並列システムの各ノードに接続もしくは内蔵されているヘテロジニアスな並列システムを想定する。

演算加速機構は、多数のスループットコアにより構成され、チップ内ネットワークにより結合される。コアはローカルメモリを持ち、メッシュネットワークで結合される。いくつかのコアごとにコントローラで同期制御（SIMD）される。

当該年度においては、各分野からのアプリを調査し、Co-design により基本アーキテクチャを検討した。

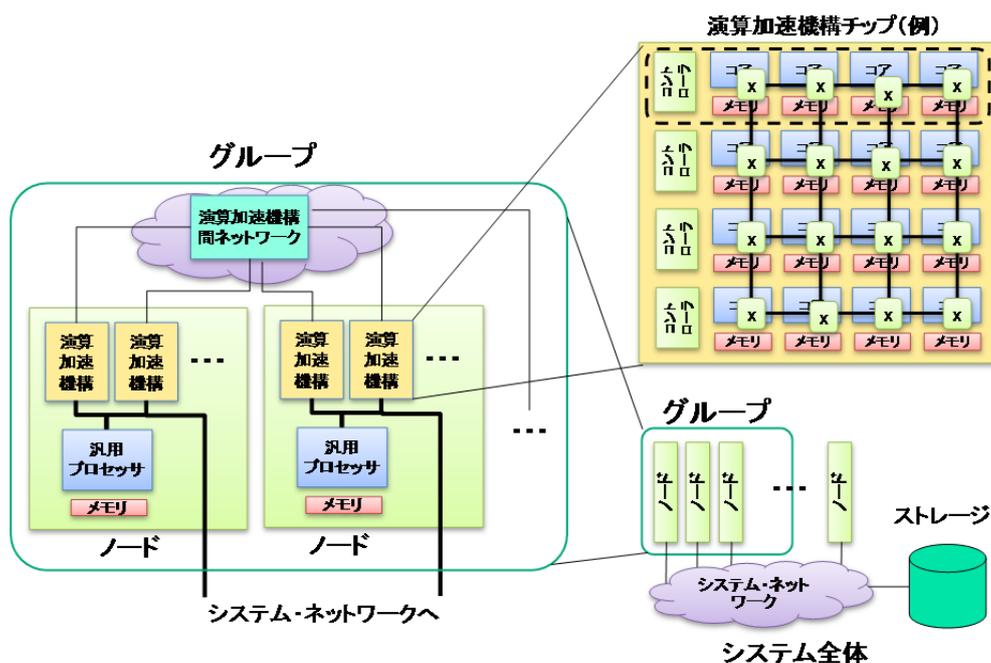


図 1 調査研究の対象とするシステムの想定概略

【次世代並列処理言語 XcalableMP の研究開発】（佐藤）

E-Science プロジェクト「並列プログラミング言語に関する研究開発」において開発を進めた、分散メモリ構成を基本とする大規模並列処理システムにおける並列 HPC アプリケーションのため、並列プログラミング言語 XcalableMP (XMP) の開発・改善を引き続き行っている。標準化の活動を PC クラスタコンソーシアムの XMP 規格部会を設置し、行っている。当該年度においては、1.0 を改善した、XMP Version 1.1 を公開した。

これまでの C 言語に加えて、Fortran95 の XMP コンパイラを行い公開した。

XMP version 1.1 の仕様及びプロトタイプコンパイラについては、それぞれ以下の URL において公開されている。

XMP version 1.0 仕様：<http://www.xcalablemp.org/spec/xmp-spec-1.1.pdf>

プロトタイプコンパイラ：<http://www.xcalablemp.org/download.html>

## 【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 ボードを開発している。前年度に行ったプロトタイプハードウェアの実装に基づき、今年度は PEACH2 ボードの量産と、FPGA 上の回路に PEACH2 の基本的な機能を実装し、8 ノードの実験システム上での動作確認を行った。また、初期的な通信性能評価及び機能確認を行った。これらにより、TCA の GPU クラスタ実装において必要とされる基本機能が実現されていることを確認した。



図 2 PEACH2 ボード (量産型)

PEACH2 ボードの量産タイプは、プロトタイプと基本的に同じ構成を持ち、Altera 社製 Stratix IV GX を用い、同社が提供する PCI Express gen.2 IP を 4 ポート (各ポート x8 lane) 実装している。この他、FPGA 内には汎用 CPU コア、DMA コントローラ等を組み込み、TCA アーキテクチャに基づく GPU 間直接通信における低レイテンシ通信と多様な HPC アプリケーションに対応する基本機能を備えている。図 2 に PEACH2 量産ボードの写真を示す。

このボードを HA-PACS ベースクラスタと同等の構成を持つ計算サーバに装着し、2 ノードに跨る通信性能を測定した結果を図 3 に示す。バンド幅については、ハードウェアとしての PCI Express gen.2 x8 lane の理論ピーク性能の 95%が出ており、レイテンシとしては CPU からの通信の場合に最小値で約  $1\mu$  秒が達成されている。ただし、現時点で使用している Intel SandyBridge E5 のプロセッサでは、PCI Express バス上のデバイス間通信にハードウェア的ボトルネックがあり、ノード間 GPU 間転送では  $2.5\mu$  秒程度がレイテンシの限界である。これは PEACH2 自体の本質的な性能ではなく (CPU を介した通信ではレイテンシはこの半分以下)、CPU の PCI Express の問題であり、今後の CPU の改良により改善されていくものと思われる。

【超並列 GPU コンピューティング技術に関する研究】(佐藤、朴)

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、超並列 GPU クラスタにおける並列プログラミング環境に関する研究を行っている。当該年度においては、フランス側が開発したアルゴリズム記述用のフロー言語 YML との統合を行った。従来の YML では、フローの中で用いることができる計算コンポーネントが逐次プログラムだけだったが、XMP で記述された

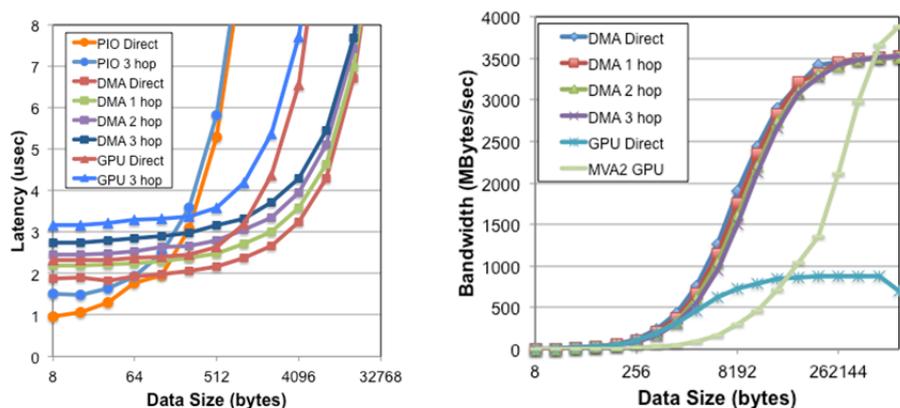


図 3 PEACH2 ボードによる CPU 間及び GPU 間通信性能 (左：レイテンシ、右：バンド幅)

複数プロセスのコンポーネントが作成できる。YML は、我々が開発した OmniRPC を実行時の

スケジューラとして使っている。この拡張を行うために OmniRPC を改造して行った。これにより、MPMD (Multiple Program/Multiple Data) の新しいプログラミングモデルを提案することができる。これを、ブロック型のガウスジョルダン法のプログラムを作成し、その有効性を確認した。

また、GPU と併せて高性能化・コア数増大が進む CPU 性能に着目し、単一ループ内の多数の計算を各ノード上の GPU と CPU に割り当て、ノード上の計算リソースを最大限利用するアプローチとして、XMP の GPU 対応版である XMP-dev に GPU/CPU ワークシェアリング機能を追加した XMP-dev/StarPU を開発している。これはフランス INRIA において開発されている StarPU スケジューラと XMP コンパイラを組み合わせる形で実現される共同研究である。今年度の研究では、GPU と CPU コアの性能差が大きい点に注目し、ループ中のタスクを単にタスク数で分割するのではなく、割り当てるタスクサイズそのものを、リソースの性能に合わせて最適化し、適度なロードバランスを取ることで、GPU のみを利用した場合に比べ性能向上が得られることを確認した。行列積計算や多体問題を HA-PACS ベースクラスタ上の XMP-dev/StarPU プロトタイプコンパイラで評価し、

GPU のみの場合に比べ 1.1～1.4 倍程度まで性能が向上することを確認した。

【大規模広域分散ファイルシステム及びグリッド／クラウド技術に関する研究】(建部)

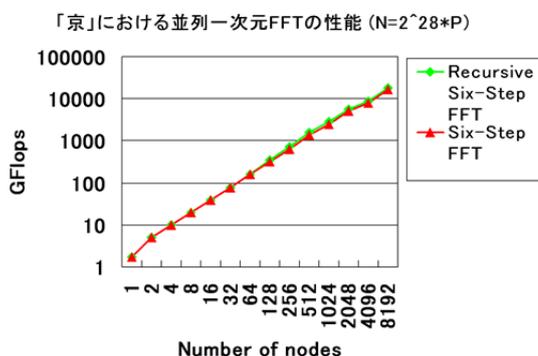
文部科学省が進める革新的ハイパフォーマンスコンピューティングインフラ (HPCI) の HPCI 共用ストレージのシステムソフトウェアとして利用される Gfarm ファイルシステムの整備を行った。具体的には、高負荷試験、不具合修正、ファイル複製数の自動保持、一貫性チェックの高速化、運用監視システム、性能監視システム、ドキュメントの更新、ファイル複製配置のグループ指定などである。この結果として、Gfarm バージョン 2.5.8 をリリースした。その成果を、運用中の QCD データ共有システムの JLDG で活用するための準備をすすめた。

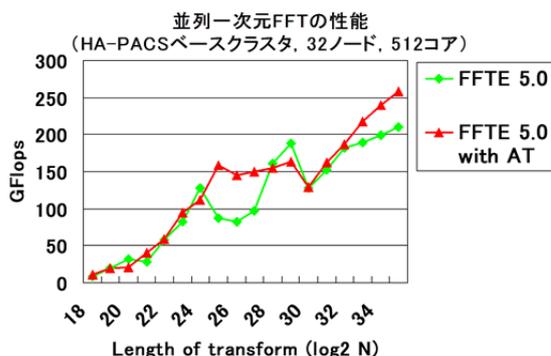
【高性能並列数値計算に関する研究】

(1) 並列高速フーリエ変換 (FFT) の高速化手法に関する研究 (高橋)

科学技術計算で広く用いられている並列高速フーリエ変換 (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。並列次元 FFT をポストペタスケール計算環境で実行する際に、どのようなアルゴリズムが望ましいかについて検討を行った。その結果、「京」における並列次元 FFT では、これまでに提案されていた三次元表現よりも、二次元表現を再帰的に適用して計算することで、キャッシュヒット率をさらに向上させることができることが分かった。

並列次元 FFT においては、全体に関わる性能パラメータとして、全対全通信方式と基底、そしてブロックサイズが存在するが、これらについて最適なパラメータを自動的にチューニングする機構をソフトウェアで実現した。その結果、並列次元 FFT において実行時間の多くを占めている全対全通信に要する時間を大幅に削減することに成功した。





「京」における並列次元 FFT の性能

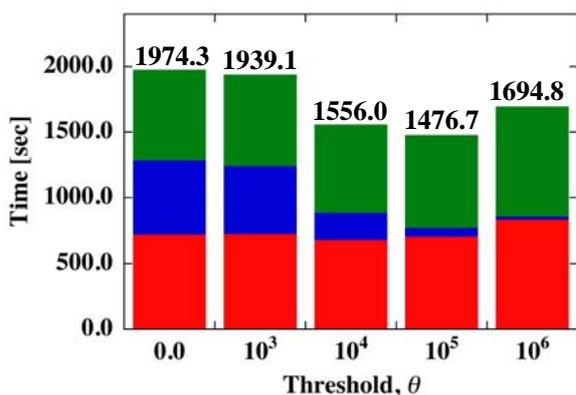
HA-PACS における並列次元 FFT の性能

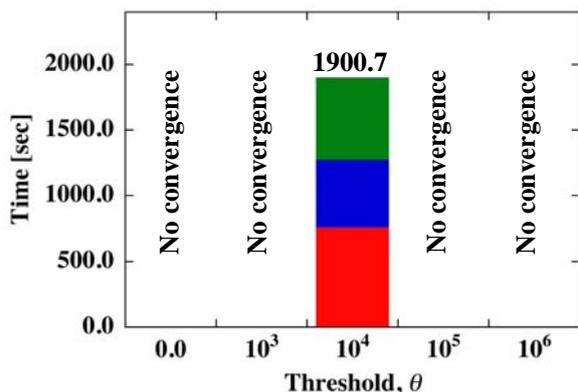
図 4 高性能 FFT の性能評価

(2) Block Krylov 部分空間反復法に関する研究 (多田野)

複数本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式を高速・高精度に解くための 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。この数値的不安定性は、反復過程でベクトルの正規直交化を行うことで緩和されるが、多くの演算量を要する。

本研究では、正規直交化の実行を動的に判断するアルゴリズムを構築し、Block Krylov 部分空間反復法の高速化を図った。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。その結果、Block BiCGGRRO 法に本アルゴリズムを適用することで、従来法である Modified Block BiCGSTAB 法よりも高速かつ安定に高精度近似解を生成できることが分かった。





(a) Block BiCGGRRO 法。

(b) Modified Block BiCGSTAB 法。

BiCGSTAB 法。

図 5 正規直交化の実行回数削減による Block Krylov 部分空間反復解法の計算時間変化

■ : 行列ベクトル積、 ■ : 正規直交化、 ■ : その他。

【エネルギー利用最適化に関する研究】(佐藤、児玉)

NEDO グリーン IT プロジェクト「エネルギー利用最適化データセンタ基盤技術の研究開発/データセンタのモデル設計と総合評価」(平成 20 年度から平成 24 年度)において、サーバシステムの評価指標に関する研究を行っている。本年度は、GreenSLA 策定のための定量的評価について SEPCWeb を用いて精緻化するとともに、最終年度としてのまとめを行った。SPECWeb の評価では、QoS の評価がベンチマーク内に組み込まれているとともに、サーバ負荷を変化させてその電力あたりの性能 (PPW: Performance per Watt) を評価することが可能となっている。その結果、サーバ負荷が 100% でない場合には、その負荷に応じた性能に落としつつ省エネルギー運用を行うことにより PPW を向上させることが可能であることを明らかにした。これらの結果をもとに Green SLA の有効性の評価を行った。サーバの運用側は Green SLA の範囲で省エネ運用を行うことにより、電力キャップなどに柔軟に対応することが可能になる。一方、ユーザ側は一定の性能低下を許容する代わりに、料金や一時的なリソースの追加などの特典を省エネ運用のインセンティブとして得ることができると考えられる。

【LES 気象コードの並列 GPU 化に関する研究】(朴、埴)

計算科学研究センター地球環境研究部門の日下准教授らのチームとの共同研究により都市規模の気象に関する Large Eddy Simulation (LES) コードの並列 GPU 化を進めた。同研究部門では地域レベルの気象シミュレーションとして、都市モデルを対象とした LES 計算の研究を進めており、昨年度よりこれらの開発コードの GPU 化を進めている。

昨年度の研究では、LES コードを CUDA 化したが、今年度の研究では日下グループのコード変更に柔軟に対応するために、Fortran コードをベースとし、PGI CUDA Fortran コンパイラで GPU 対応するという方針でコード移植を行った。コード全体中、単純なドメイン分割となっていない BiCGSTAB 法による行列計算以外の部分を完全に GPU 化し、基本的に全てのデータを GPU 内メモリに閉じ込め、カーネル関数呼び出しと I/O のオーバヘッドを最小化した。その結果、HA-PACS ベースクラスタのノード当たり 4GPU のメモリを最大限利用したケースで、CPU のみ（ノード当たり 16 core）を使った場合に比べ、GPU（ノード当たり 4 台）を使った場合では、関数に応じて 4.3～4.7 倍の高速化が得られた。しかし、BiCGSTAB 法計算は全体計算の約 30%を占めるため、コード全体での加速は 1.3 倍程度に留まった。今後、この部分も完全 GPU 化し、さらに最適化を施して性能を改善していく予定である。

#### 【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）

G8 多国間共同研究の一環として、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、全体の約 9 割のコードを 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。各関数についての性能チューニングが不十分なことと、一部関数については GPU 化が完了していないため、現時点では HA-PACS の同数ノードの CPU のみを利用した場合に比べ 2 倍程度の速度向上に留まっており、今後改善して行きたい。

GTC-P コードについては G8 プロジェクト内で並列記述言語 XcalableMP (XMP) の応用例としてコーディングを進めており、逐次版コードを XMP で一旦記述し、その後で XMP-dev 拡張を行って GPU 化する予定である。今年度については XMP 化の基本方針と予備評価を行った。G8 プロジェクト最終年度である次年度で XMP/XMP-dev 化を完了する予定である。

#### 【ディペンダブルシステムのためのテストツール】（佐藤，埴）

##### (1) クラウドを用いたディペンダブルな並列分散システムのためのテスト支援環境 D-Cloud

これまで、JST-CREST「実用化を目指した組込みシステム用ディペンダブル・オペレーティングシステム」研究領域において、我々は並列分散テスト環境 D-Cloud を開発してきた。高い信頼性確保のためには異なる入力による網羅的なテスト実行やハード

ウェア故障に対する耐故障性のテストなど様々なテストが必要で、それらを実行するには非常に時間と手間がかかる。D-Cloud ではフォルトインジェクション可能な仮想マシンを用いて仮想デバイスレベルでの故障についてのテストが可能であるだけでなく、物理マシン群、および仮想マシンをクラウドとして管理することにより、多くの計算資源を柔軟に利用することができ、多くのケースについてのテスト作業を自動化することができる環境を提供する。同時に、東大石川チームと共同で、各種の定量的なディペンダビリティ指標のシステムティックな計測を支援することを目的に、ディペンダビリティ計測ツール群 DS-Bench Toolset を開発してきた。ハードウェア異常、ソフトウェアバグ、過負荷、人的ミスといった様々な異常を系統立てて扱うことによって、大規模なシステムテストを実現し、多くのテストパターンを用いた複雑なテストを加速することができる。さらに、システムのディペンダビリティについてステークホルダとの間で議論するための D-Case Editor と連携することができる。

今年度は、我々の開発した D-Cloud に関する研究成果、および DS-Bench のシステムテスト環境として統合を行った DS-Bench Toolset の研究成果について発表を行った。

#### 4. 外部資金の獲得状況

1. 文部科学省・将来の HPCI システムのあり方の調査研究「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」H24 年度 32,148 千円（代表：佐藤三久）
2. 文部科学省，科学技術試験研究委託事業，「HPCI 共通運用システムの整備（共用ストレージソフトウェア整備）」， H24 年度，73,700 千円（業務主任者佐藤三久，担当責任者建部修見）
3. 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， 241,941 千円（代表：建部修見）
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， 312,380 千円（代表：朴泰祐）
5. 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 H24～26 年度 15,132 千円（H24）（共同研究者：高橋大介）
6. 日仏戦略プログラム「ポストペタスケールコンピューティングのためのプログラミング言語拡張および数値計算アルゴリズム、性能評価、大規模データ管理技術」、H22～H24 年度 11,000 千円（代表：佐藤三久）
7. NEDO「グリーンネットワーク・システム技術研究開発プロジェクト(グリーン IT プロジェクト)/エネルギー利用最適化データセンタ基盤技術の研究開発/データセ

- ンタのモデル設計」 H20～H24 年度 3,780 千円 (代表：佐藤三久)
8. 日本学術振興会・多国間国際研究協力事業「ECS：エクサスケール・コンピューティングによる精緻な気候シミュレーションの実現」H23～H25 年度 11,200 千円 (代表：佐藤三久)
  9. 日本学術振興会・多国間国際研究協力事業「NuFuSE：エクサスケール・コンピューティングにおける核融合シミュレーション」H23～H25 年度 25,920 千円 (代表：朴泰祐)
  10. 科学研究費補助金 若手研究 (B)「複数右辺項をもつ連立一次方程式の高速・高精度求解法の開発と科学技術計算への応用」780 千円 (代表：多田野寛人)
  11. 科学研究費補助金 基盤研究 (B)「有限節点法・境界節点法の完全メッシュレス化とその工学的応用」195 千円 (分担：多田野寛人)
  12. 科学研究費補助金 若手研究 (B)「複数右辺項をもつ連立一次方程式の高速・高精度求解法の開発と科学技術計算への応用」780 千円 (代表：高橋大介)
  13. 科学研究費補助金 基盤研究 (B)「有限節点法・境界節点法の完全メッシュレス化とその工学的応用」195 千円 (分担：高橋大介)
  14. 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 1,560 千円 (H24) (代表：高橋大介)
  15. 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 3,900 千円 (H24) (分担：高橋大介)

## 5. 研究業績

### (1) 研究論文

1. Adnan, M. Sato, “Dynamic Multiple Work Stealing Strategy for Flexible Load Balancing”, IEICE Transactions 95-D(6): 1565-1576 (2012)
2. A. Hori, J. Lee, M. Sato, “Audit: A new synchronization API for the GET/PUT protocol”, J. Parallel Distrib. Comput. 72(11): 1464-1470 (2012)
3. 椋木大地, 高橋大介, “GPUにおける3倍・4倍精度浮動小数点演算の実現と性能評価”, 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. 1, pp. 66—77, 2013.
4. M. Naito, H. Tadano, T. Sakurai, “A modified Block IDR(s) method for computing high accuracy solutions”, JSIAM Letters, Vol. 4, pp. 25-28, 2012.
5. 合田 憲人, 東田学, 坂根栄作, 天野浩文, 小林克志, 棟朝雅晴, 江川隆輔, 建部修見, 鴨志田良和, 滝澤真一郎, 永井亨, 岩下武史, 石川裕, “高性能分散計算環境のための認証基盤の設計”, 論文誌コンピューティングシステム(ACS), 情報処理学会, No.5, Vol.5, pp.90-102, 2012

6. Y. Kodama, S. Itoh, T. Shimizu, S. Sekiguchi, H. Nakamura and N. Mori, "Imbalance of CPU temperatures in a blade system and its impact for power consumption of fans", Journal of Cluster Computing, Springer, Vol.16, No.1, pp.27-37, 2013.

## (2)学会発表

### (A)招待講演

1. M. Sato, " The next step for Post-Petascale Computing in Japan", HPC in Asia Workshop, ISC 2012, June 2012.
2. T. Boku, "HA-PACS Project: Challenge for Next Step of Accelerating Computing", ATIP/A\*CRC Workshop, Singapore, May 2012.
3. T. Boku, "HA-PACS: Next Step for Scientific Frontier by Accelerated Computing", GTC Japan 2012, Tokyo, July 2012.
4. T. Boku, "HPC Trend in Asia", HPC in China Workshop (ISC2012), Hamburg, June 2012.
5. D. Takahashi, "Automatic Tuning for Parallel FFTs", 2013 Conference on Advanced Topics and Auto Tuning in High Performance and Scientific Computing (2013@^2HPSC), National Taiwan University, Taipei, Taiwan, March 28, 2013.
6. D. Takahashi, "Automatic Tuning for Parallel FFTs on Clusters of Multi-Core Processors", Special Session: Auto-Tuning for Multicore and GPU (ATMG) (held in conjunction with IEEE MCSoc-12), The University of Aizu, Aizu, Japan, September 22, 2012.
7. O. Tatebe, "File System for Post-Petascale Data-Intensive Computing", International Supercomputing Conference, 2012
8. 朴 泰祐, "「京」をはじめとする最先端スーパーコンピュータの動向", 核融合エネルギー連合講演会2012, 2012年6月.
9. 多田野 寛人, "複数右辺ベクトルをもつ連立一次方程式の数値解法と並列固有値計算への応用", 第5回日本数式処理学会理論分科会&システム分科会合同研究会, 2012.
10. 児玉祐悦, "FPGA の応用事例 ～並列計算機とネットワーク～," 電子情報通信学会リコンフィギャラブルシステム研究会, 2012.
11. 塙 敏博, "FPGAによる Tightly Coupled Accelerators向け通信機構の実現", 次世代 RHW 創造研究会 (JACORN2012), 2012.

### (B)その他の学会発表(査読付)

1. M. Nakao, J. Lee, T. Boku, M. Sato, "Productivity and Performance of Global-View Programming with XcalableMP PGAS Language", CCGRID 2012: 402-409, 2012.
2. M. Tsuji, M. Sato, A. S. Tanabe, Y. Inagaki, T. Hashimoto, "An asynchronous parallel

- genetic algorithm for the maximum likelihood phylogenetic tree search”, IEEE Congress on Evolutionary Computation 2012: 1-8, 2012.
3. T. Abe, M. Sato, “On-the-Fly Synchronization Checking for Interactive Programming in XcalableMP”, Proc. of P2S2 (with ICPP 2012), 29-37, 2012.
  4. H. Yoshizawa and D. Takahashi, “Automatic Tuning of Sparse Matrix-Vector Multiplication for CRS format on GPUs”, Proc. 2012 IEEE 15th International Conference on Computational Science and Engineering (CSE 2012), pp. 130—136 (2012).
  5. D. Takahashi, “An Implementation of Parallel 2-D FFT Using Intel AVX Instructions on Multi-Core Processors”, Proc. 12th International Conference on Algorithms and Architectures for Parallel Processing (ICA3PP 2012), Part II, Lecture Notes in Computer Science, No. 7440, pp. 197—205, Springer-Verlag (2012).
  6. D. Takahashi, A. Uno and M. Yokokawa, “An Implementation of Parallel 1-D FFT on the K computer”, Proc. 2012 IEEE 14th International Conference on High Performance Computing and Communications (HPCC-2012), pp. 344—350 (2012).
  7. Y. Miki, D. Takahashi and M. Mori, “A Fast Implementation and Performance Analysis of Collisionless N-body Code Based on GPGPU”, Proc. International Conference on Computational Science (ICCS 2012), Procedia Computer Science, Vol. 9, pp. 96—105, Elsevier (2012).
  8. T. Nomizu, D. Takahashi, J. Lee, T. Boku and M. Sato, “Implementation of XcalableMP Device Acceleration Extension with OpenCL”, Proc. 2012 IEEE 26th International Parallel and Distributed Processing Symposium Workshops & PhD Forum (IPDPSW 2012), Multicore and GPU Programming Models, Languages and Compilers Workshop (PLC 2012), pp. 2394—2403 (2012).
  9. D. Mukunoki and D. Takahashi, “Implementation and Evaluation of Triple Precision BLAS Subroutines on GPUs”, Proc. 2012 IEEE 26th International Parallel and Distributed Processing Symposium Workshops & PhD Forum (IPDPSW 2012), The 13th Workshop on Parallel and Distributed Scientific and Engineering Computing (PDSEC-12), pp. 1378—1386 (2012).
  10. D. Mukunoki and D. Takahashi, “Performance Comparison of Double, Triple and Quadruple Precision Real and Complex BLAS Subroutines on GPUs”, Proc. ATIP/A\*CRC Workshop on Accelerator Technologies for High-Performance Computing: Does Asia Lead the Way? (ATIP/A\*CRC Workshop '12), pp. 788—790 (2012).
  11. T. Odajima, T. Boku, T. Hanawa, J. Lee, M. Sato, "GPU/CPU Work-Sharing with Parallel Language XcalableMP-dev for Parallelized Accelerated Computing", Proc. of P2S2-2012 (with ICPP2012), Pittsburgh, CD-ROM, 2012.

12. L.Du, T. Sakurai, H. Tadano, M. Naito, “IDR(s) for linear systems with multiple shifts and multiple right-hand sides”, The 8th East Asia SIAM Conference (EASIAM2012), 2012.
13. T. Sakurai, Y. Futamura, L. Du, H. Tadano, “A hierarchical parallel implementation of a contour integral-based eigensolver on Trilinos”, SIAM Conference on Computational Science and Engineering, 2013.
14. Masahiro Tanaka, Osamu Tatebe, “Workflow Scheduling to Minimize Data Movement using Multi-constraint Graph Partitioning”, Proceedings of IEEE/ACM International Symposium on Cluster, Cloud and Grid Computing (CCGrid), pp.65-72, doi: 10.1109/CCGrid.2012.134, 2012
15. Shun Ishiguro, Jun Murakami, Yoshihiro Oyama and Osamu Tatebe, “Optimizing Local File Accesses for FUSE-Based Distributed Storage”, Proceedings of the international workshop on data-intensive scalable computing systems, 2012.
16. H. Fujita, Y. Matsuno, T. Hanawa, M. Sato, S. Kato, and Y. Ishikawa, "DS-Bench Toolset: Tools for Dependability Benchmarking with Simulation and Assurance," 42nd IEEE/IFIP International Conference on Dependable Systems and Networks (DSN 2012), 8 pages, Jun. 2012.
17. 佐藤佳州, 高橋大介, “大規模な対局に基づいた教師データの重要度の学習”, 第 17 回ゲームプログラミングワークショップ, pp. 22—29 (2012).
18. 合田憲人, 東田学, 坂根栄作, 天野浩文, 小林克志, 棟朝雅晴, 江川隆輔, 建部修見, 嶋志田良和, 滝澤真一郎, 永井亨, 岩下武史, 石川裕, “高性能分散計算環境のための認証基盤の設計”, 先進的計算基盤システムシンポジウム SACSIS2012 論文集, pp.227-236, 2012
19. 扇谷 豪, 三木 洋平, 朴 泰祐, 森 正夫, 中里 直人, “重力多体系用 Tree Code の並列 GPU 化による計算加速”, 2013 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, 2013.
20. 鷹津冬将, 建部修見, “ログ構造化ファイルシステム mylfs の設計と初期評価”, 先進的計算基盤システムシンポジウム SACSIS2012 ポスター発表, 2012.
21. 小田嶋 哲哉, 李 珍泌, 朴 泰祐, 佐藤 三久, “XMP-dev に基づく CPU/GPU ハイブリッド負荷分散システム”, 先進的計算基盤システムシンポジウム SACSIS2012 ポスター発表, 2012.
22. 鷹津冬将, 平賀弘平, 建部修見, Gabriel Antoniu, “広域分散ファイルシステム Blobseer-wan/HGMDS の設計と初期評価”, 2013 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 ポスター発表, 2013.
23. 藤田 典久, 奴賀 秀男, 朴 泰祐, 井戸村 泰宏, “GPU クラスタにおける核融合シミュレーションコードの実装”, 2013 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 ポスター発表, 2013.

(C)その他の学会発表(査読無)

1. 椋木大地, 高橋大介: GPU における高速な CRS 形式疎行列ベクトル積の実装, 情報処理学会研究報告, 2013-HPC-138, No. 5 (2013).
2. 椋木大地, 高橋大介: GPU における 4 倍精度演算を用いた疎行列反復解法の実装と評価, 情報処理学会研究報告, 2012-ARC-202, 2012-HPC-137, No. 37 (2012).
3. 三木洋平, 高橋大介, 森正夫: 大規模 GPU クラスタにおける N 体計算コードの演算性能とスケーラビリティの評価, 情報処理学会研究報告, 2012-HPC-136, No. 1 (2012).
4. 高橋大介: ポストペタスケール計算環境に向けた並列 FFT の自動チューニング, 日本応用数理学会 2012 年度年会講演予稿集, pp. 285—286 (2012).
5. 吉澤大樹, 高橋大介: GPU における CRS 形式疎行列ベクトル積の自動チューニング, 情報処理学会研究報告, 2012-HPC-135, No. 31 (2012).
6. 高橋大介: 並列 FFT における自動チューニング, 計算工学講演会論文集, Vol. 17, E-7-2 (2012).
7. 内藤 理大, 多田野 寛人, 櫻井 鉄也, Block IDR(s)法における残差停滞の回避法について, 日本応用数理学会 2012 年度年会, pp. 89-90, 2012.
8. 多田野 寛人, 櫻井 鉄也, 偽収束を回避する Block Krylov 部分空間反復法の安定化と計算量削減について, 日本応用数理学会 2012 年度年会, pp. 287-288, 2012.
9. 今倉 暁, 杜 磊, 多田野 寛人, 複数右辺ベクトルを持つ線形方程式に対する Weighted Block GMRES 法, 日本応用数理学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会 第 14 回研究会, 2012.
10. 田中昌宏, 建部修見, 大規模ワークフローに対応した Pwrake システムの設計と実装, 情報処理学会研究報告, 2012-HPC-135(14), pp.1-7, 2012
11. 大西健太, 建部修見, 冗長符号を用いたサーバマシン間でのデータ分散手法の検討, 情報処理学会研究報告, 2012-HPC-135(22), pp.1-7, 2012
12. 鷹津冬将, 建部修見, 高速なストレージに適したログ構造化ファイルシステム MyLFS の設計と評価, 情報処理学会研究報告, 2012-HPC-135(27), pp.1-7, 2012
13. 平賀弘平, 建部修見, ノンブロッキングトランザクションに基づく分散ファイルシステムのための分散メタデータサーバの設計と実装, 情報処理学会研究報告, 2012-HPC-135(28), pp.1-9, 2012
14. 大辻弘貴, 建部修見, Infiniband を用いたファイルアクセスの高速化, 情報処理学会研究報告, 2012-HPC-135(29), pp.1-6, 2012
15. 大辻弘貴, 建部修見, RDMA による低オーバーヘッドファイルアクセスと冗長記録,

情報処理学会研究報告, 2012-HPC-137(29), pp.1-6, 2012

16. 鷹津冬将, 平賀弘平, 建部修見, Gabriel Antoniu, 広域分散ファイルシステム BlobSeer-wan/HGMDS の設計と評価.情報処理学会研究報告, 2013-HPC-138(22), pp.1-7, 2013
17. 梅田 宏明, 埜 敏博, 庄司 光男, 朴 泰祐, "分子軌道計算の GPGPU 化に向けた行列加算手法の提案", 2013-HPC-138, 2013.
18. 藤田 典久, 奴賀 秀男, 朴 泰祐, 井戸村 泰宏, "GPU クラスタにおける核融合シミュレーションコードの実装", 2013-HPC-138, 2013.
19. 小田嶋 哲哉, 李 珍泌, 朴 泰祐, 佐藤 三久, 埜 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 協調計算", 2013-HPC-138, 2013.
20. 埜敏博, 児玉祐悦, 朴泰祐, 佐藤三久, "Tightly Coupled Accelerators アーキテクチャ向け通信機構の予備評価", 2012-ARC-202(13), pp.1-8, 2012.
21. 藤田典久, 奴賀秀男, 朴泰祐, 井戸村泰宏, "核融合シミュレーションコードの GPU クラスタ向け最適化", 2012-HPC-135, 2012.
22. 小田嶋哲哉, 李珍泌, 朴泰祐, 佐藤三久, 埜敏博, 児玉祐悦, Raymond Namyst, Samuel Thibault, Olivier Aumage, "GPU クラスタにおける GPU/CPU ハイブリッド・プログラミング環境", 2012-HPC-135, 2012.
23. 扇谷豪, 三木洋平, 朴泰祐, 森正夫, 中里直人, "重力多体系用 Tree Code の並列 GPU 化", 2012-HPC-135, 2012.
24. 埜敏博, 児玉祐悦, 朴泰祐, 佐藤三久, "Tightly Coupled Accelerators アーキテクチャのための通信機構", 2012-ARC-193, 2012.
25. 金子紘也, 埜敏博, 児玉祐悦, 朴泰祐, 佐藤三久, "PCI EXPRESS ネットワーク PEARL における耐故障機構", 2012-ARC-193, 2012.

(D) 著書

1. 佐藤三久 他 (共著) : スーパーコンピュータ (岩波講座 計算科学 別巻)
2. T. Hanawa, M. Sato 他 (共著) , "D-Cloud: Software Testing Environment for Dependable Distributed Systems Using Cloud Computing Technology", Software Testing in the Cloud, Perspectives on an Emerging Discipline, Scott Tilley, Tauhida Parveen (Editors), IGI Global, ISBN 9781466625365, pp. 340-356, Nov. 2012.
3. T. Hanawa 他 (共著) , "Dependability Test Support Tools", Open Systems Dependability -- Dependability Engineering for Ever-Changing Systems, Mario Tokoro (Editor), CRC Press, ISBN 978-1-4665-7751-0, pp.112-123, Nov. 2012.
4. T. Boku, T. Hanawa, Y. Kodama, M. Sato 他 (共著) , "Contemporary High Performance

Computing: From Petascale Toward Exascale”, J. Vetter (Editor), CRC Press, ISBN 1466568348, 9781466568341, 2013.

## 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. 佐藤三久: エジンバラ大学交流連絡交流責任者
2. T. Boku: Program Committee, 2012 International Workshop on High Performance Power-Aware Computing (HP-PAC2012)
3. T. Boku: Program Committee, IEEE/ACM International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC12)
4. T. Boku: Program Committee, 2012 International Workshop on Partitioned Global Address Space (PGAS2012)
5. T. Boku: Program Committee, 2012 International Conference on High Performance Computing (HiPC2012)
6. T. Boku: Program Committee, 2012 International Workshop on Large Scale Parallel Processing (LSPP2012)
7. T. Boku: Program Committee, 2012 IFIP International Conference on Network and Parallel Computing (NPC2012)
8. T. Boku: Program Committee, 2012 International Workshop on Parallel Programming Models and System Software for High-End Computing (P2S2-2012)
9. T. Boku: Scientific Committee, 10th International Meeting on High-Performance Computing for Computational Science (VECPAR 2012)
10. T. Boku: Program Committee, 2012 International Symposium on Cluster, Cloud and Grid Computing (CCGrid2012)
11. T. Boku: Program Committee, 2012 International Workshop on Communication Architecture for Scalable Systems (CASS2012)
12. T. Boku: Program Committee, 2012 International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS2012)

13. Y. Kodama: Program Committee, CoolChips 2012
14. D. Takahashi: Program Committee, 14th IEEE International Conference on High Performance Computing and Communications (HPCC-2012)
15. D. Takahashi: Program Committee, 11th IEEE/ACM International Conference on Ubiquitous Computing and Communications (IUCC 2012)
16. D. Takahashi: Program Committee, 2012 International Conference on Computational Science (ICCS 2012)
17. O. Tatebe: Editorial Board, International Journal of Computational Science and Engineering (IJCSE)
18. O. Tatebe: Co-chair, Open Grid Forum (OGF) Grid File System WG (GFS-WG)
19. O. Tatebe: Program Committee, IEEE/ACM International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC12)
20. O. Tatebe: Program Committee, 4th IEEE International Conference on Cloud Computing Technology and Science (CloudCom 2012)
21. O. Tatebe: Program Committee, The 41st International Conference on Parallel Processing (ICPP)
22. O. Tatebe: Co-organizer, 4rd Workshop on Interfaces and Architectures for Scientific Data Storage (IASDS)
23. O. Tatebe: Program Committee, The Sixth International Conference on Complex, Intelligent, and Software Intensive Systems (CISIS-2012)
24. O. Tatebe: Program Committee, International Workshop on Data-Intensive Distributed Computing (DIDC'12)
25. O. Tatebe: Program Committee, First Workshop on Big Data Management in Clouds
26. O. Tatebe: Scientific Committee, 10th International Meeting on High-Performance Computing for Computational Science (VECPAR 2012)

## 8. 教育

### ・学位論文（博士課程）

1. Adnan, 博士（工学）, Study on Efficient Work Stealing Based Execution of Parallel Programs for Multicore Processors, 筑波大学大学院システム情報工学研究科博士論文, 2013年3月（指導：佐藤三久）

### ・学位論文（修士課程）

1. 藤田典久, 修士（工学）, GPU クラスタにおける核融合シミュレーションコードの開発, 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：朴

泰祐)

2. 扇谷豪, 修士 (工学), 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, 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: 朴泰祐)
3. 小田嶋哲哉, 修士 (工学), GPU クラスタ向け並列言語 XMP-dev における GPU/CPU 協調計算, 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: 朴泰祐)
4. 金子拓也, 修士 (工学), PCI Express ネットワーク PEARL における耐故障・省電力支援機構, 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: 朴泰祐)
5. 野水拓馬, 修士 (工学), 並列言語 XcalableMP の OpenCL 実装とその最適化, 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: 高橋大介)
6. 吉澤大樹, 修士 (工学), GPU における CRS 形式疎行列ベクトル積の自動チューニング, 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: 高橋大介)
7. 三木洋平, 修士 (工学), 直接法に基づく無衝突系向け N 体計算コードの GPU 実装と性能評価, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 2013 年 3 月 (指導: 高橋大介)
8. 大辻弘貴, 修士 (工学), 高速・高信頼なネットワークファイルアクセスに関する研究, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 2013 年 3 月 (指導: 建部修見)
9. 大西健太, 修士 (工学), 冗長符号を用いたノード間のデータの冗長化に関する研究, 筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文, 2013 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: グリッド協議会 理事
3. 佐藤三久: 情報処理学会フェロー 2013/06 情報処理学会 フェロー
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. 児玉祐悦: 情報処理学会 ACS 論文誌 編集委員

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: 情報処理学会 計算機アーキテクチャ研究会運営委員
9. 児玉祐悦: 電子情報通信学会 リコンフィギャラブルシステム研究専門委員
10. 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と計算科学シンポジウム HPCS2013 実行委員
11. インターネットカンファレンス 2012 プログラム委員
12. 建部修見: 先進的計算基盤システムシンポジウム SACSIS2012 プログラム委員
13. 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
14. 多田野寛人: 日本応用数理学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会 幹事
15. 多田野寛人: 日本応用数理学会「若手の会」研究部会 運営委員
16. 多田野寛人: 日本応用数理学会「応用数理」編集委員
17. 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 HPCS2012 プログラム委員
18. 多田野寛人: 先進的計算基盤システムシンポジウム SACSIS2012 プログラム委員

#### 10. その他

1. T. Boku: Organizing Chair, 2012 International Workshop on HPC in Asia at ISC2012
2. 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
講師	川島 英之

#### 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一的に扱うための 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

(主な研究費：科研費基盤研究 (C) , 受託研究費 (KDDI 研究所, 三菱電機) )

分散した異種情報源を統合的に扱うための基盤技術・システム・応用の研究開発を行った。特に、ストリーム処理基盤の高信頼化技術、プライバシーを保護したストリーム処理技術を中心に研究開発を行なうとともに、ストリーム処理基盤の応用として、ストリーム処理基盤を利用したパケットストリームに対する異常検知手法の実現に関する研究開発を行なった。

##### (1) 高信頼化ストリーム処理 (北川, 川島) [C8, P3, P9]

発展的なデータストリーム処理では、継続的に実行されるクエリからデータベースやクラス分類器をはじめとする様々な外部リソースが参照される。継続的クエリは長時間にわたり実行されるため、クエリの実行期間中に参照する外部リソースが他のシステムによって更新され、クエリの処理結果に不整合が生じうるといった問題があった。この問題を解決するため、継続的クエリ内でのリソース参照を外部リソースに対する連続的な参照トランザクションとして実行するトランザクショナルデータストリーム処理が近年提案されている。トランザ

クショナルデータストリーム処理では処理結果の不整合を防ぐためにオペレータの再実行処理がおこなわれ、性能低下の要因となる。本研究では、オペレータの再実行回数がオペレータの実行順序に依存することを明らかにし、オペレータスケジューリングへ制約を付与することでオペレータの再実行回数を削減する方式を提案した。さらに実験により、オペレータスケジューリングに提案する制約を付与した場合、オペレータの再実行回数が削減され性能向上がみられることを示した。

(2) プライバシーを保護したストリーム処理 (川島, 北川) [C7, P12]

近年、増大しつつあるストリームデータを処理する基盤システムとして、ストリーム処理エンジン (SPE) が開発されている。数千～数万のストリーム情報源に対して処理を行うためには、SPE には非常に高い演算処理能力が要求される。このような処理の実行にはパブリッククラウドなどの分散並列処理基盤を用いることが有効であると考えられる。しかし、パブリッククラウドは一般に組織のファイアウォールの外側で第三者により管理されるため、パブリッククラウド上の情報に対して機密性を保持することができない。これに対し我々は、安全性を考慮したストリームデータ処理の実現を目的として暗号化ストリームデータ処理方式の研究を行っている。本年度は、暗号化ストリームデータ処理においてクエリ実行を停止することなく効率的に暗号化鍵を更新するための手法を提案した。

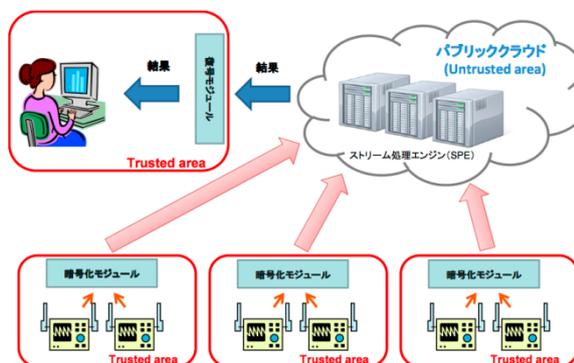


図 1: 暗号化ストリーム処理システム

(3) パケットストリームに対する異常検知手法の実現 (川島, 北川) [P6, P18]

ストリームデータの種類であるパケットストリームに対して複数の異常検知手法を適用する場合を考える。この場合、各検知手法を効率的にサポートする必要があり、ストリーム処理システムへの検知手法の組み込みは有力な方法であると考えられる。本研究では、我々の研究室で開発しているストリーム処理シ

システム SS\*に、異常検知手法である Change Point Detection (CPD) を実現する手法について検討した。特に、複数のパラメータ設定の異なる CPD を効率的に実行するために、CPD の一部処理を共有化する技法を提案し、その有効性を実験により検証した。

## 【2】 データマイニング・知識発見技術

(主な研究費：科研費基盤研究 (A) , 基盤研究 (C) , 若手研究 (B) , 受託研究費 (富士通研究所) )

### (1) 不確実データに対する外れ値検出 (北川) [C2, P2, P7]

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、通常の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を提案した。ガウス分布に対する距離計算には多大な計算コストが伴うため、セルベースの枝刈り手法を提案し、その有効性を実験により示した。

### (2) Twitter リストを用いたユーザのトピック推定 (北川, 天笠) [J3]

Twitter 上ではユーザが情報源となり、自らの興味や嗜好に基づいて情報を発信している。Twitter の普及に伴い、膨大な情報の中から有用な情報を発見したいという要求が高まりつつある。有用な情報を発見するには、各ユーザがどのようなトピックに関する情報を発信する傾向にあるかを知ることが重要であると考えられる。そこで本研究では、Twitter の機能であるリストを用いてユーザにタグを付けることによって、そのユーザが発信する情報のトピックを推定する手法を提案した。リストとは誰でも自由に作成し、共有できるユーザのリストである。リストに含まれるユーザ群は互いに関連を持ち、リストの名前がその関連を表すため、それを用いてユーザのタグ付けを行う手法を提案し、その有効性を実験によって評価した。

### (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 (天笠, 北川) [C6, P10]

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 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。本研究では、GPGPU 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た。具体的には、GPU 上で不確実トランザクションデータを表現するデータ構造を検討するとともに、GPU のメモリ階層を意識したアルゴリズムを開発した。実験による評価によって、提案手法の有効性を評価した。

### 【3】XML・Web プログラミング

(主な研究費：科研費基盤研究 (A) , 科研費若手研究 (B) )

メタデータ記述の枠組みである RDF (Resource Description Framework) の処理効率に関する研究、RDF に基づく公開データの枠組みである LOD (Linked Open Data) に対するオンライン分析処理等に関する研究を行った。以下では、主なものについて述べる。

#### (1) RDF データ処理の効率化 (天笠, 北川) [J2]

RDF データベースでは、RDF スキーマによって記述されたスキーマ情報に基づいて推論規則を適用する処理が必要であるが、大規模な RDF データを扱う場合、推論処理に多大な処理コストが必要となる。このため、事前に推論規則を適用した結果をキャッシュしておく手法が用いられるが、この場合、推論の結果得られるデータが膨大となり、空間コストを圧迫することが多い。この問題に対応するため、本研究では RDF Packages と呼ばれる、RDF データのよりコンパクトな表現方法を提案した。これは、同じ性質を持つデータをパッケージとしてまとめて表現することで、元のデータと等価でかつ空間コストの低い RDF データの表現が可能となる。実データおよび人工データにより提案手法の有効性を評価した。

#### (2) LOD データに対するオンライン分析処理のための ETL フレームワーク (天笠, 北川) [P15]

Linked Open Data (LOD) とは、相互に関連付けられたデータを公開するための枠組みであり、近年政府統計や科学データなどをはじめ、多くのデータが公

開されている。LOD データには、数値およびテキストが含まれているデータも多く存在し、これらのデータに対する既存の OLAP システムを用いた分析処理が強く求められている。このため本研究では、LOD を OLAP 分析のための多次元モデルに変換する ETL フレームワークを提案した。我々が提案するフレームワークは他の関連する手法と異なり、処理対象の LOD データが特定の RDF 語彙によって記述されていることを前提とせず、任意のデータを処理することが特徴である。分析対象とするデータセット内のリソース間の関係、内存する階層構造、および外部のリソースを用いて多次元モデルとその概念階層を導出する。実データを使ったケーススタディにより、提案手法の有効性を示した。

#### 【4】科学分野におけるデータベース応用

(主な研究費：科研費基盤研究 (A) , 科研費若手研究 (B) )

##### (1) GPV/JMA アーカイブ (天笠, 北川)

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.ces.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、年間アンサンブルの 6 種類である。

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.ces.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、年間アンサンブルの 6 種類である。



図 2 : GPV/JMA アーカイブ

##### (2) 大規模衛星センサデータからのイベント検出 (川島, 北川) [P13]

近年、人工衛星などから地球表面付近を観測するリモートセンシング技術が注目されている。この技術により、広範囲の観測に加え、人が行きにくい危険な場所の観測などができるようになった。観測データを活用するため、様々な研究プロジェクトが行われている。その一つに産業技術総合研究所が運用する GEO Grid がある。このプロジェクトではグリッド技術を用いて、地球観測衛星データの大規模アーカイブ・高度処理システムの開発を行っている。GEO Grid で扱うデータには、TIR (Thermal Infrared Radiometer) と呼ばれる熱放射輝度に関するデータがある。TIR を用いれば、ホットスポット、すなわち火山噴火、山焼き等、熱を放出する場所を検出できる可能性がある。本研究では、頻度を用いて TIR データからホットスポットを検出する技法を提案し、同技法の従来技法に対する優位性を示すと同時に、検出結果例を示した。

##### (3) 格子 QCD データグリッド JLDG/ILDG (天笠, 北川)

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携し、JLDG/ILDG の運営に継続参画している。

#### (4) 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 (天笠, 北川)

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。

### 1. 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, 山口 祐人, 伊川 洋平, 天笠 俊之, 北川 博之, "ソーシャルストリームからのイベント検出とユーザ位置推定の統合", 第 5 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 2013), A5-2, 2013 年 3 月 3 日~3 月 5 日.
- A2. 学生プレゼンテーション賞, 小山田 昌史, 川島 英之, 北川 博之, "オペレータスケジューリングへの制約付与によるトランザクショナルデータストリーム処理の効率化", 第 5 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 2013), E1-4, 2013 年 3 月 3 日~3 月 5 日.
- A3. 学生プレゼンテーション賞, Chongjie LI, Toshiyuki AMAGASA, Hiroyuki KITAGAWA, Gautam SRIVASTAVA, "An Improved Label-bag based Graph Anonymization based on Utility", 第 5 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 2013), E4-3, 2013 年 3 月 3 日~3 月 5 日.
- A4. 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, "局所計算に基づく ObjectRank 推定", 第 5 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 2013), E9-4, 2013 年 3 月 3 日~3 月 5 日.
- A5. 学生奨励賞, トラン ヴァン ディエン, 天笠 俊之, 北川 博之, "天体物理学文献データベース ADS からの情報抽出", 情報処理学会第 75 回全国大会 (IPJSJ 全国大会 2013), 4P-3, 2013 年 3 月 6 日~3 月 8 日.

### 4. 外部資金

研究種目：産総研基盤研究 (A) 2013 年 5 月~2014 年 3 月

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

クラウド基盤

研究分担者：北川博之

配分金額：2,080,000 円(直接経費：1,600,000 円 間接経費：480,000 円)

研究分担者：天笠俊之

配分金額：1,950,000 円(直接経費：1,500,000 円 間接経費：450,000 円)

研究分担者：川島英之

配分金額：1,950,000 円(直接経費：1,500,000 円 間接経費：450,000 円)

研究種目：基盤研究 (C) 2012 年 5 月～2015 年 3 月

研究課題：リアルタイム事象検知基盤に関する研究

研究代表者：川島英之

配分金額：2,340,000 円 (直接経費：1,800,000 円, 間接経費：540,000 円)

研究種目：若手研究 (B) 2011 年 5 月～2012 年 3 月

研究課題：オンライン分析による XML ストリームからの知識発見

研究代表者：天笠俊之

配分金額：1,950,000 円 (直接経費：1,500,000 円, 間接経費：450,000 円)

受託経費：三菱電機株式会社 2012 年 7 月～2013 年 3 月

研究課題：多様化構造情報統合・分析技術の研究開発

研究担当者：北川博之

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

受託経費：株式会社富士通研究所 2012 年 7 月～2013 年 3 月

研究課題：時系列データの分析基盤技術の研究

研究担当者：北川博之・天笠俊之

配分金額：2,000,000 円(直接経費：1,700,000 円 間接経費：300,000 円)

受託経費：株式会社 KDDI 研究所 2012 年 8 月～2013 年 3 月

研究課題：ストリームデータ分析プラットフォームに関する研究

研究担当者：北川博之・川島英之

配分金額：1,000,000 円(直接経費：909,090 円 間接経費：90,910 円)

受託経費：株式会社トヨタ IT 研究開発センター 2012 年 9 月～2013 年 3 月

研究課題：車両データ管理システムに関する研究

研究担当者：川島英之

配分金額：2,100,000 円(直接経費：1,910,000 円 間接経費：19,0000 円)

受託経費：情報通信研究機構 2012 年 9 月～2013 年 3 月

研究課題：新世代ネットワークを支えるネットワーク仮想化基盤技術の研究開発

研究担当者：川島英之

配分金額：4,389,000 円(直接経費：3,990,000 円 間接経費：39,9000 円)

(名称、氏名、代表・分担の別、採択年度、金額、課題名)

知的財産権 (種別、氏名、課題名、年月日)

## 5. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

学術雑誌論文

- J1. Takahiro Komamizu, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Faceted Navigation Framework for XML Data", International Journal of Web Information Systems (IJWIS), Volume 8, Issue 4, pp.348-370, 2012.
- J2. Shohei Ohsawa, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "RDF Packages: A Scheme for Efficient Reasoning and Querying over Large-Scale RDF Data", International Journal of Web Information Systems (IJWIS), Volume 8, Issue 2, pp. 212-233, 2012.
- J3. Yuto Yamaguchi, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Tagging users based on Twitter lists", Int. J. Web Engineering and Technology (IJWET), Vol. 7, No. 3, pp.273-298, 2012-08-01.
- J4. 石田 慎一, 原島 真吾, 鯉渕 道紘, 川島 英之, 西 宏章, "トラヒックからアプリケーションレイヤ情報の検索・抽出を可能とするソフトウェアの実装と評価", ソフトウェア学会論文誌, Vol. 29, No. 3, pp.59-73, 2012-11-01.
- J5. Yasin Oge, Takefumi Miyoshi, Hideyuki Kawashima, and Tsutomu Yoshinaga, "Design and Implementation of a Handshake Join Architecture on FPGA", IEICE Trans. on Information and Systems, Vol. E95-D, No. 12, pp. 2919-2927, 2012-12-01.

#### B) 査読無し論文

### (2) 国際会議発表

#### A) 招待講演

B) 一般講演

国際会議論文

- C1. Jianquan Liu, Hanxiong Chen, Kazutaka Furuse, and Hiroyuki Kitagawa, "An Efficient Algorithm for Arbitrary Reverse Furthest Neighbor Queries", Proc. 14th Asia-Pacific Web Conference (APWeb), Kunming, China, pp. 60-72, April 11-13, 2012.
- C2. Salman Shaikh and Hiroyuki Kitagawa, "Distance-based Outlier Detection on Uncertain Data of Gaussian Distribution", Proc. 14th Asia-Pacific Web Conference (APWeb), Kunming, China, pp. 109-121, April 11-13, 2012.
- C3. Yuta Sakakura, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Detecting Social Bookmark Spams using Multiple User Accounts", Proc. 1st International Workshop of Social Knowledge Discovery and Utilization (SKDU'12), Istanbul, Turkey, pp. 1185-1190, August 26-29, 2012.
- C4. Takahiro Komamizu, Mariko Kamie, Kazuhiro Fukui, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "A Scheme of Fragment-based Faceted Image Search", Proc. 23rd International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2012), Vienna, Austria, pp. 450-457, Sep. 3-7, 2012.
- C5. Yasin Oge, Takefumi Miyoshi, Hideyuki Kawashima, and Tsutomu Yoshinaga, "Design and Implementation of a Merging Network Architecture for Handshake Join Operator on FPGA" Proc. 6th IEEE International Symposium on Embedded Multicore SoCs (MCSoc-12), Aizu-Wakamatsu, Japan, pp. 84-91, September 20-22, 2012.
- C6. Yusuke Kozawa, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "GPU Acceleration of Probabilistic Frequent Itemset Mining from Uncertain Databases", Proc. 21st ACM International Conference on Information and Knowledge Management (CIKM 2012), Maui, Hawaii, pp. 892-901, October 29 - November 2, 2012.
- C7. Katsuhiko Tomiyama, Hideyuki Kawashima, and Hiroyuki Kitagawa, "A Security aware Stream Data Processing Scheme on the Cloud and its Efficient Execution Methods", Proc. Fourth International Workshop on Cloud Data Management (CloudDB'12), Maui, Hawaii, pp. 59-66, October 29, 2012.
- C8. Masafumi Oyamada, Hideyuki Kawashima, and Hiroyuki Kitagawa, "Continuous Query Processing with Concurrency Control: Reading Updatable Resources Consistently", Proc. 28th ACM Symposium on Applied Computing (SAC 2013), Coimbra, Portugal, pp. 788-794, March 18-22, 2013.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

B) その他の発表

学会発表

- P1. Katsuhiko Tomiyama, Hideyuki Kawashima, Hiroyuki Kitagawa, "A Security aware Stream Data Processing Scheme with Encryption", The 4th International Workshop with Mentors on Databases, Web and Information Management for Young Researchers (iDB2012), Nagoya, Japan, July 31 - August 1, 2012.
- P2. Salman Ahmed Shaikh, Hiroyuki Kitagawa, "Distance-based Outlier Detection on Uncertain Data of Bounded Gaussian Distribution", The 4th International Workshop with Mentors on Databases, Web and Information Management for Young Researchers (iDB2012), Nagoya, Japan, July 31 - August 1, 2012.
- P3. 小山田昌史, 川島英之, 北川博之, "トランザクショナルなストリームデータ処理の実現方式", 信学技報, vol. 112, no. 172, DE2012-21, pp. 29-34, 2012年8月1日～8月2日.
- P4. 坂倉悠太, 天笠俊之, 北川博之, "複数のユーザアカウントを用いたソーシャルブックマークスパムの検出", 第154回DBS・第107回IFAT合同研究発表会, 2012年8月1日～8月2日.
- P5. 村上直, 天笠俊之, 北川博之, "概念モデルに基づく柔軟なO/Rマッピングを実現するフレームワークDBPowderの提案", 第154回DBS・第107回IFAT合同研究発表会, 2012年8月1日～8月2日.
- P6. 大桶真宏, 川島英之, 北川博之, "ストリーム処理システムを用いたマルウェア検知基盤システム", マルウェア対策研究人材育成ワークショップ 2012 (MWS2012), 2012年10月30日～11月1日.
- P7. Salman Ahmed SHAIKH and Hiroyuki KITAGAWA, "Top-k Distance-based Outlier Detection on Uncertain Dataset", 第5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 2013), A8-1, 2013年3月3日～3月5日.
- P8. 山口 祐人, 伊川 洋平, 天笠 俊之, 北川 博之, "ソーシャルストリームからのイベント検出とユーザ位置推定の統合", 第5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 2013), A5-2, 2013年3月3日～3月5日.
- P9. 小山田 昌史, 川島 英之, 北川 博之, "オペレータスケジューリングへの制約付与によるトランザクショナルデータストリーム処理の効率化", 第5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 2013), E1-4, 2013年3月3日～3月5日.

- P10. 小澤 佑介, 天笠 俊之, 北川 博之, "複数 GPU による確率的頻出アイテム集合マイニングの高速化", 第 5 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 2013), A8-2, 2013 年 3 月 3 日~3 月 5 日.
- P11. 高橋 毅, 天笠 俊之, 北川 博之, "評価値の時系列変化に着目したユーザレビューの分析", 第 5 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 2013), D10-4, 2013 年 3 月 3 日~3 月 5 日.
- P12. 富山 克裕, 川島 英之, 北川 博之, "暗号化ストリームデータ処理における効率的な暗号化鍵更新手法", 第 5 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 2013), E1-1, 2013 年 3 月 3 日~3 月 5 日.
- P13. 郭 恒超, 川島 英之, 北川 博之, "イベントの出現頻度を考慮した衛星データからのホットスポット抽出", 第 5 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 2013), D4-5, 2013 年 3 月 3 日~3 月 5 日.
- P14. Chongjie LI, Toshiyuki AMAGASA, Hiroyuki KITAGAWA, Gautam SRIVASTAVA, "An Improved Label-bag based Graph Anonymization based on Utility", 第 5 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 2013), E4-3, 2013 年 3 月 3 日~3 月 5 日.
- P15. 井上 寛之, 天笠 俊之, 北川 博之, "LOD の OLAP 分析を可能にする ETL フレームワークの提案", 第 5 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 2013), B2-3, 2013 年 3 月 3 日~3 月 5 日.
- P16. 坂倉 悠太, 山口 祐人, 天笠 俊之, 北川 博之, "局所計算に基づく ObjectRank 推定", 第 5 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 2013), E9-4, 2013 年 3 月 3 日~3 月 5 日.
- P17. 中村 高士, 早瀬 康裕, 北川 博之, "ソフトウェアプロダクト間に存在する Logical Coupling を用いた変更箇所の推薦", 第 5 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 2013), B8-3, 2013 年 3 月 3 日~3 月 5 日.
- P18. 大桶 真宏, 川島 英之, 北川 博之, "ストリーム処理システムにおける時系列異常検出手法の共有計算技法", 情報処理学会第 75 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2013), 1P-3, 2013 年 3 月 6 日~3 月 8 日.
- P19. 片岡 えり, 天笠 俊之, 北川 博之, "EPUBCFI を用いた読書関連情報の管理と検索", 情報処理学会第 75 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2013), 5N-6, 2013 年 3 月 6 日~3 月 8 日.
- P20. 中挾 晃介, 天笠 俊之, 北川 博之, "JavaScript 処理系における LINQ を用いた NoSQL ストレージに対する問合せ処理", 情報処理学会第 75 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2013), 2N-5, 2013 年 3 月 6 日~3 月 8 日.

- P21. トラン ヴァン ディエン, 天笠 俊之, 北川 博之, "天体物理学文献データベース ADS からの情報抽出", 情報処理学会第 75 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2013), 4P-3, 2013 年 3 月 6 日~3 月 8 日.

## 6. 管理・運営

組織運営や支援業務の委員・役員の実績

北川博之教授

- 大学院システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻長
- システム情報系情報工学域長
- 文部科学省・特別経費「大規模情報コンテンツ時代の高度 ICT 専門職業人育成」取組責任者
- 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

## 7. 社会貢献・国際貢献

北川博之教授

- 国際学会委員等
  - 国際ジャーナル編集委員：IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, World Wide Web Journal, Journal of Web Engineering
  - 国際会議運営委員：DASFAA Steering Committee
  - 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
  - 国際会議プログラム委員会委員：DASFAA2013, CoopIS2012, DEXA2012, MDM2013, PAKDD2013
- 国内学会委員等
  - 日本学術会議連携会員
  - 日本データベース学会副会長

天笠俊之准教授

- 国際学会委員等
  - 国際学会プログラム委員長：SKDU2012
  - 国際学会プログラム委員：DEMoC2012, IDEAS2012, SCA2012, iiWAS2012, SITIS2012, AINA2012, DASFAA2013, APWeb2013, WAIM2013
- 国内学会委員等

- 情報処理学会論文誌データベース (TOD) 副編集委員長
- 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委員
- 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) 2013  
プログラム副委員長
- 情報科学技術フォーラム (FIT) 2013 プログラム委員

川島英之講師

- 国際学会委員等
  - 国際学会プログラム委員 : SC'13 external reviewer, Future Generation  
Computing System reviewer, Information Systems reviewer.
- 国内学会委員等
  - 電子情報通信学会査読委員、情報処理学会論文誌査読委員

## 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 18 名、学類生 6 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 年度から新しく発足した部門であり、人間社会とその環境を主な対象とする新しい計算科学の枠組みを創成し、その基盤を確立することを目標として研究活動を推進している。

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

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

研究成果は、研究論文や学会発表だけでなく、イノベーション・ジャパン-大学見本市において、2005 年から継続的に出展や技術説明会を開催するなど、広報活動にも努めてきた。

**【1】自由視点映像を用いた選手視点映像生成：**多視点でのサッカー試合観測をもとに、臨場感ある自由視点映像を生成するために、選手情報抽出のための新しい映像処理や自由視点の誘導方法などを提案した。

**【2】マルチタッチインタフェースを用いた自由視点操作方式：**マルチタッチインタフェースを有する携帯型端末を用いて、自由視点映像を撮影する仮想カメラの位置・姿勢の直感的な制御を実現することを目的とした研究開発。(主な研究費：共同研究経費(大田) 2007～2011 年度、科研費若手研究A(北原) 2009～2011 年度)

**【3】監視カメラ映像を活用した歩行者のための視覚支援：**屋外に設置された環境カメラの記録映像から、過去の移動物体の行動を複合現実感技術を用いて提示し、現場にい

る閲覧者が、時空間に展開する移動物体の行動を一覧して把握できる新しい提示手法を提案した。（主な研究費：科研費基盤研究B（亀田）2011-2012年度）

【4】インタビュー対象者の心理的変動を計測するための基盤技術：対面型のインタビューにおいて、対象者のインタビューにおける反応を、詳細・精密に計測するための新しい方法論を確立し実現した。また、そのうちの高速度撮影映像での解析から、従来は得られなかったマイクロエクスプレッションの時間的遷移が推定可能であることを示した。（主な研究費：学振DC2（センヤ）2011-2012年度）

【5】複合現実感を用いた照明設計支援システム：複合現実感と仮想模型の特徴を活用して、多様な機材操作に関する高度なノウハウを要する照明設計を幅広いユーザ層が実施可能になることを目的とした研究開発。（主な研究費：科研費挑戦的萌芽研究（北原）2010～2012年度）

【6】動画像上での複合現実感を用いた壁紙シミュレーションシステム：ユーザインタラクションを活用した領域分割手法により、手持ちのビデオカメラで撮影した映像シーケンス中の壁紙領域を分割し、仮想壁紙データと置き換えることで、様々な壁紙の張り替えを簡易にシミュレーション可能にするシステムの実現。（主な研究費：科研費若手研究A（北原）2006～2008年度）

### 3. 研究成果

#### 【1】自由視点映像を用いた選手視点映像生成（大田、亀田、北原）

国立スポーツ科学センターとの共同研究として、総務省戦略的情報通信研究開発推進制度（SCOPE）による特定領域重点型研究開発「ネットワークによる自由視点映像のライブ配信とインタラクティブ提示」（研究代表者 大田友一）を2004年度から2006年度の3年間に渡り実施した。以降も、日本電気株式会社との共同研究などを通じて、サッカースポーツを題材に研究を進めている。本節では、多視点でのサッカー試合観測をもとに、選手情報抽出のための新しい映像処理と、より臨場感ある自由視点映像生成の研究について報告する。

(1a) 自由視点映像技術を用いて選手視点映像を生成するために必要な選手軌跡の獲得に、従来はノイズとして除去されてきた影領域を活用する手法を提案する。選手位置の推定を細かな形状ではなく、領域の主軸を用いて行うことで低解像度画像からの位置推定を可能にし、ユニフォーム色によるチーム分類を行うことで誤追跡を削減する。国立霞ヶ丘競技場（図 1）において、実際のサッカーの試合を撮影した映像を用いて選手追跡実験を行い、提案手法の有効性を示した。図 2 は影領域を利用して選手位置を正確に求めている様子を示している。



図 1: サッカーフィールド撮影の一例

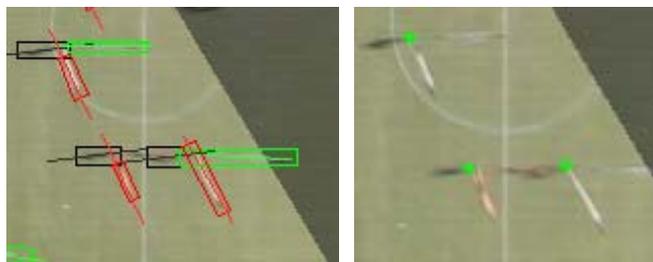


図 2: 影を利用した正確な選手位置推定（左：2 地点からの撮影を解析して選手位置を求めている様子。右：推定されて選手位置をサッカーフィールド直上からの視点でプロットした結果。）

(1b) 見やすさと臨場感を両立させた映像を提示するため、歩行・走行時のエゴモーション感の再現と、ボールの可視状況に応じた視線方向の切り替え提示を提案する。人間の歩行・走行時の視点移動を解析し、その移動感（エゴモーション感）を適切に再現した選手視点映像を生成・提示することにより、見やすさを損なわず、かつ、視聴者が選手の運動を感じられる一人称視点映像らしい映像を提示する。その際の最適なエゴモーション感の再現手法について、主観評価実験によって検証した。また、ボールの可視

状況に応じて、視線のボールに対する遅延・先行を切り替え提示する、新しい映像提示方法を実現した。図 3 はエゴモーション感を再現するために実験で取得した、歩行・走行時の頭部の揺動解析の一例である。

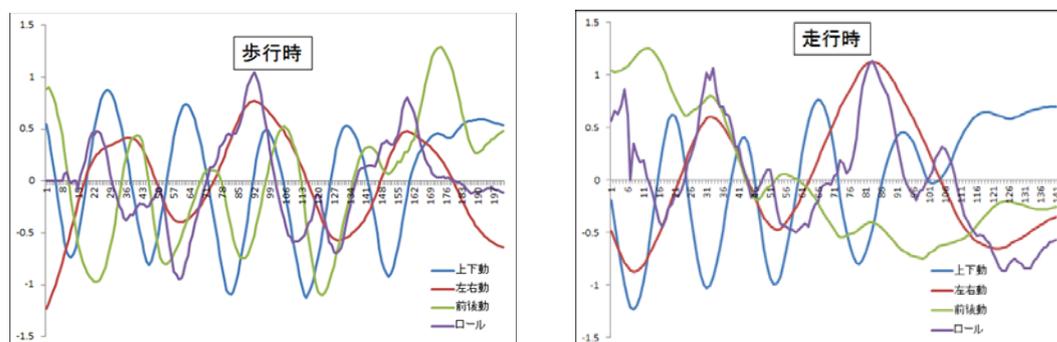


図 3: 歩行・走行時の頭部の上下動、左右動、前後動、ロールの解析

## 【2】 マルチタッチインターフェースを用いた自由視点操作方式 (大田、亀田、北原)

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

本研究では、図 4 に示すタブレット PC を用いたマルチタッチ操作による自由視点映像閲覧インターフェースを提案する。タブレット PC の主要な入力手段であるマルチタッチ操作に注目し、この操作の最大の利点である直感的入力の特性を活用し、3次元空間を自由に動き回る仮想を簡易に操作可能なインターフェースの実現を目的としている。我々は、様々なマルチタッチ入力と仮想カメラ操作の組み合わせを検討し、主観評価実験により、それらの中から最適な組み合わせを抽出し、図 5 に示す、マルチタッチインターフェースを用いた推奨操作として定義することに成功している。その結果に基づいた図 6 に示す自由視点映像閲覧システムを実装し、その有効性に関する実証実験を実施した。



図 4: マルチタッチインターフェースを用いた自由視点操

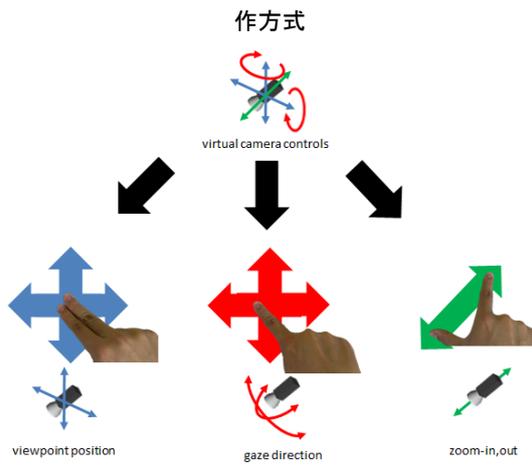


図 5: マルチタッチインターフェースを用いた推奨操作

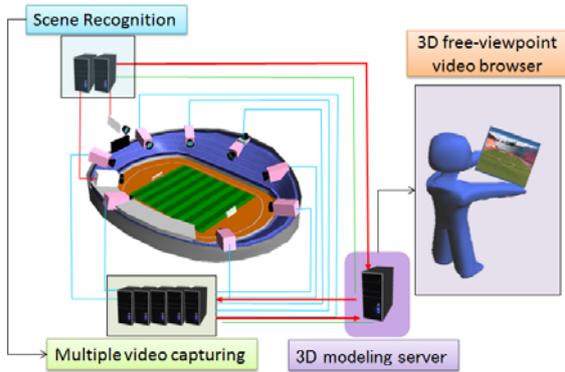


図 6: タブレット PC を用いた自由視点映像配信システ

## 【3】 監視カメラ映像を活用した歩行者のための視覚支援（大田、亀田、北原）

我々は、2006 年度～2009 年度の科学研究費補助金・基盤研究 A「シースルービジョン:監視カメラ映像を活用する歩行者のための視覚支援方式の開発」（研究代表者 大田 友一）の頃から研究をすでに開始し、2011 年度～2014 年度の科学研究費補助金・基盤研究 B「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」（研究代表者 亀田能成）に一部の支援を得て研究を進めている。

本年度は、屋外に設置された環境カメラの記録映像から、過去の移動物体の行動を複合現実感技術を用いて提示し、現場にいる閲覧者が、時空間に展開する移動物体の行動を一覧して把握できる新しい提示手法を提案した。

屋外に設置された環境カメラで記録された移動物体の行動記録を、複合現実感型提示によって一覧性よく可視化することが本研究の目標である。移動物体の行動は、シーン中での時空間的軌跡とその振る舞いによって定義できる。本研究では、移動物体の進行方向を理解できるような軌跡の提示方法と、移動物体の振る舞いを現在の複合現実空間の可視化視野内に一覧性よく提示する方法とを提案した。移動物体の進行方向を明示化するために、どのような色と形状の組み合わせが有効か、被験者実験により検証した（図 7）。狭い利用者視野内に、事前に撮影されていた歩行者の様子を複合現実感的に可視化するために、その映像再生に見かけ上の重なりを抑制し、かつ再生の連続性を担保できる条件を定義し、それによって可視化する手法を提案した（図 8）。

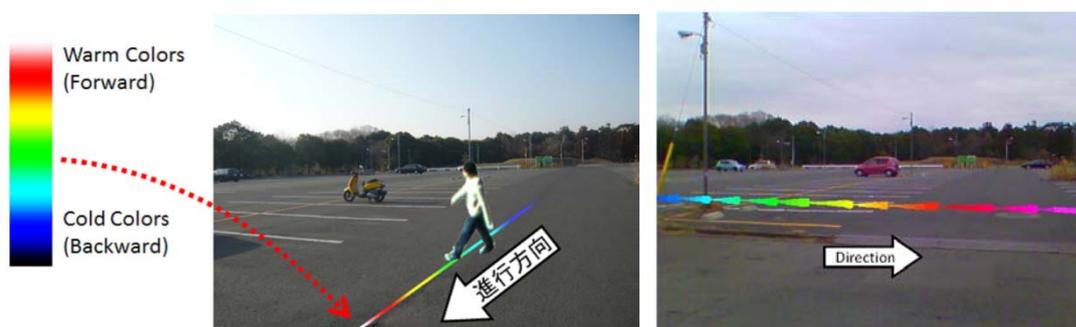


図 7: 利用者視点映像における事前に撮影されていた歩行者軌跡の可視化（左：色による進行方向の明示、右：形状パターンによる進行方向の明示）

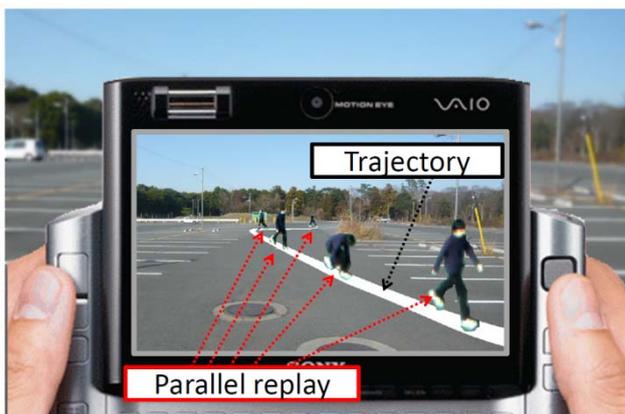


図 8: 利用者視点映像における事前に撮影されていた歩行者像の複数並列再生

#### 【4】インタビュー対象者の心理的変動を計測するための基盤技術（亀田）

対面型のインタビューにおいて、対象者のインタビューにおける反応を、詳細・精密に計測するための新しい方法論を確立し実現した。また、そのうちの高速撮影映像での解析から、従来は得られなかったマイクロエクспレッションの時間的遷移が推定可能であることを示した。

本研究では図 9 に示すように、右側の審査官が左側の対象者を調べている状況を想定している。審査官では通常気付けない微細な表面的変化をとらえるため、高速撮影カメラ、サーマルカメラ、モーショントラッカ、音声マイク等からの情報をミリ秒単位の時間分解能で同期記録できるシステムを開発した（図 10）。対象者に与えられる刺激の提示も同じくミリ秒オーダーで記録しているため、今後、本研究基盤によって、精神生理学における人間解析が進むものと期待されている。なお、本研究基盤によって得られたマルチモーダルデータセットは一般公開に向けて現在準備中である。



図 9: 想定するインタビュー状況

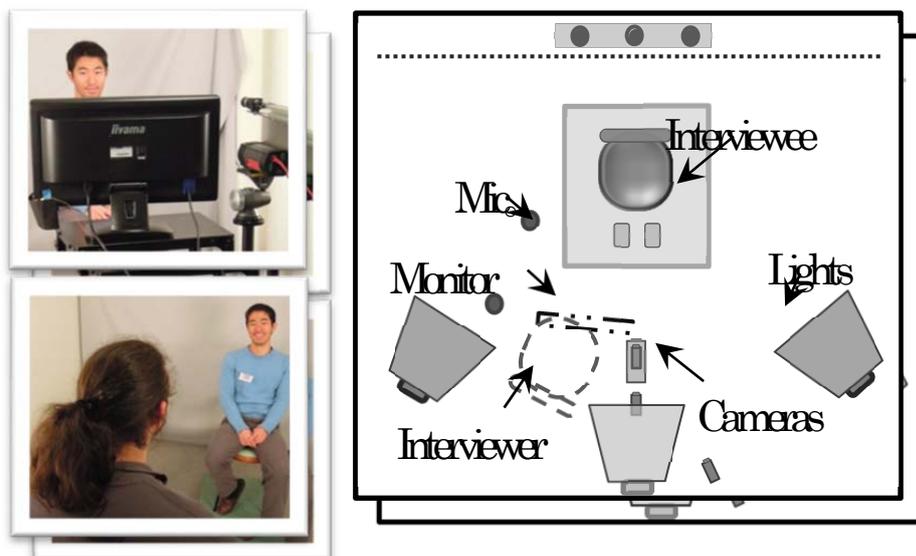


図 10: マルチセンサリーインタビュー記録システム

**【5】複合現実感を用いた照明設計支援システム（大田、北原）**

2010 年度から 2012 年度の 3 年間の計画で、科学研究費補助金・挑戦的萌芽研究「複合現実感技術を利用した境界知の探索による臨場感を表現する情報量の圧縮」（研究代表者 北原格）を実施した。

本研究では、図 11 に示すように、バーチャルリアリティ（VR）と複合現実感（MR）を活用して、従来の舞台照明の演出計画支援における問題を解決し、舞台照明の演出計画を支援する方式を提案した。また、実際に構築した試作システムを用いて提案手法の有効性を確認した。特に、学生アマチュア団体が学園祭などの特設イベントにおいて照明演出計画を行う場合、経験や知識のレベルが異なるユーザによる共同作業や、リハーサル時の機材不足など、本方式による支援が有効に機能することが確認された。バーチャルジオラマを用いた照明計画支援については、個々人が思い描いている舞台照明演出が、図 12 に示すバーチャルジオラマにおいて可視化されることにより、円滑なコミュニケーションが可能になることが確認された(図 13)。図 14 に示す MR 提示を用いた舞台照明演出計画支援については、仮想照明によりリハーサルの際に不足している照明機器を補えることが確認されている。

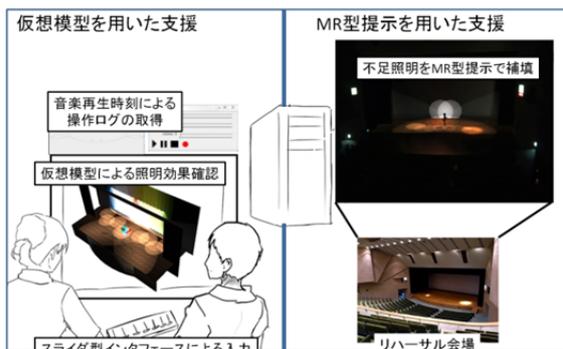


図 11: バーチャルジオラマとMR提示を用いた照明演

出計画支援方式

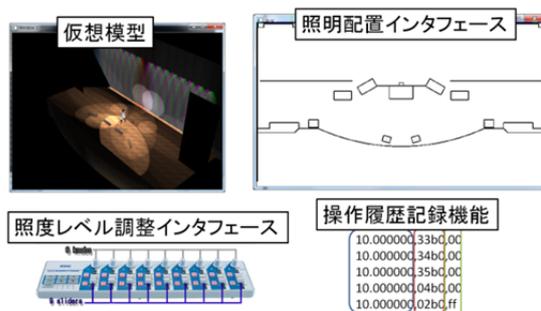


図 12: バーチャルジオラマを用いた舞台照明演出計  
画支援法

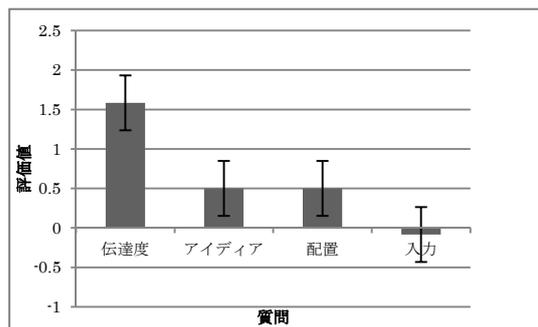


図 13: バーチャルジオラマの有効性に関する主観評  
価実験の結果

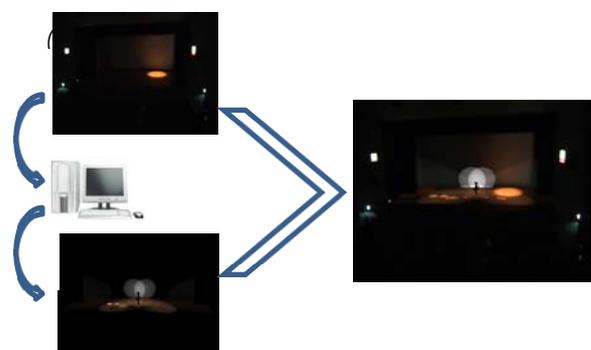


図 14: MR 提示を用いた舞台照明演出の支援

舞台照明の演出計画支援方式としての実用性を確認するため、図 15 に示すように、日常的に照明演出を行っているユーザを対象として、バーチャルジオラマを用いた照明演出計画シミュレーションから、MR 提示を用いた照明計画の確認（リハーサル）、実照明を用いた本番までの一連の作業を実施し、提案方式の課題を指摘してもらった。まず、バーチャルジオラマを用いた照明演出計画シミュレーションにおいて、CG モデルの精度が仮想照明の品質に影響を与える点に関連して、CAD モデルが存在しない舞台においてもシミュレーションの品質を維持するためには、舞台の CG モデルを簡易かつ正確に生成する手法を準備する必要があることが指摘された。また、自調光卓を用いた照明操作を可能とするためには、スライドを用いた手動照明操作だけでなく、パターンの繰り返し設定などの人工的な照明操作への対応が必要であることが指摘された。さらに、MR 提示を用いた照明演出の確認においては、空気遠近法やスモークによる照明ボケを考慮した高品質な仮想照明効果の再現が求められている。また、リアリティの追求

とは別に、アノテーション表示など、リハーサルを円滑に実施するインタフェース機能の追加に関する要望もあった。今後は、これらの指摘項目に対応することにより、提案方式の実用性の向上を目指す。



図 15: パーチャルジオラマ(仮想模型)を用いた舞台照明演出計画支援システム操作の様子

#### 【6】 動画像上での複合現実感を用いた壁紙シミュレーションシステム (大田、北原)

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

本研究では、図 16 に示す、手持ちカメラで取得したフリーハンド映像上で、複合現実感を用いて壁紙を変更する手法を提案する。手持ちカメラで部屋を見渡したような映像から壁領域を抽出し、そこに CG の壁紙を重畳提示することにより見た目を変更する。高品質な複合現実感を実現するためには、特殊機材や複雑な手順を要するケースが一般的であるが、我々は、図 17 に示すように、ユーザから入力された情報を利用することにより、簡易な機材構成の計測精度を補い、高品質な複合現実感を実現するアプローチを提案している。具体的には、映像から壁領域を抽出する処理において、ユーザが壁紙領域を指定し、その情報を利用した領域分割処理により CG 壁紙の重畳精度を高めることに成功している。本手法によれば、一般家庭やオフィスにおいて手軽に撮影した映像を用いて、複合現実型壁紙シミュレーションが実現可能になる。

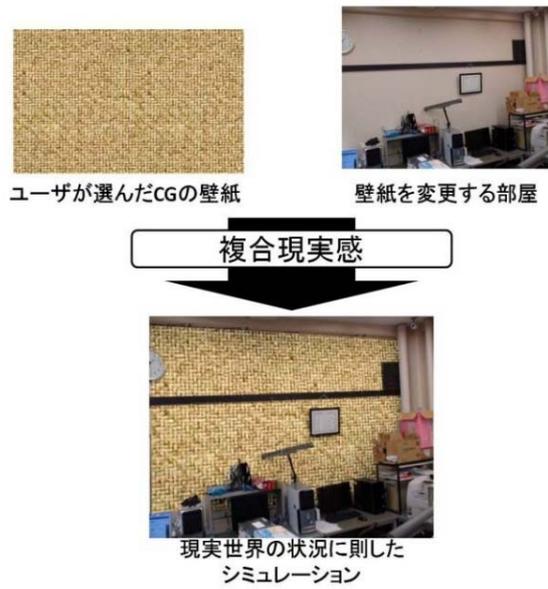


図 16: 複合現実型壁紙変更シミュレーション

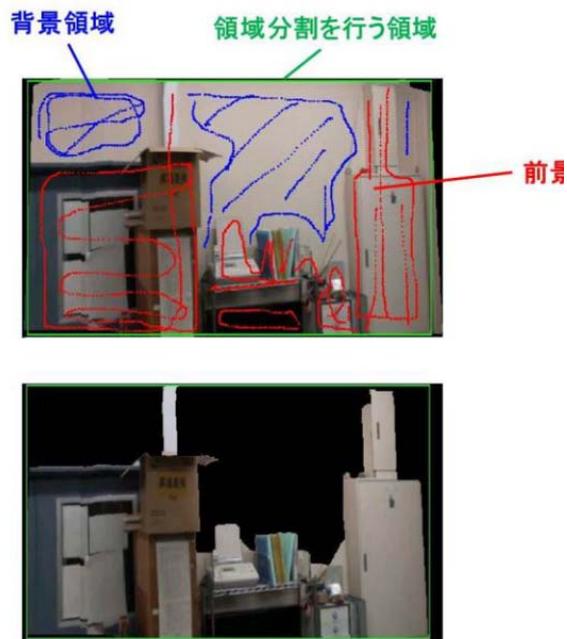


図 17: ユーザから入力された情報の利用による高品質な複合現実感の実現

#### 4. 教育

##### 学生の指導状況（学生氏名、学位の種類、論文名）

ポリコウスキ センヤ セミオン、博士（工学）、  
インタビューシナリオにおける精神生理学的解析のためのマイクロエクスプレ  
ッション検出と複数センサによるデータセット獲得の研究

上田 将司、修士（工学）、  
フリーハンド映像から切り出した壁領域に対する複合現実型壁紙シュミレーシ  
ョン

柏熊 淳也、修士（工学）、  
自由視点映像を対象としたマルチタッチ入力による仮想カメラ操作

宍戸 英彦、修士（工学）、  
モーションブレンダーを活用したバドミントンのシャトル追跡手法

清水 諒、修士（工学）、  
昼間の映像を用いて遠方の景観を表現した複合現実型の夜間映像提示

田邊 健、修士（工学）、  
ウィンドシールドディスプレイを用いた駐車場状況の鏡像提示

西川 康之、修士（工学）、  
複合現実感を用いたカメラトラッキング支援手法

山桐 靖史、修士（工学）、  
身体動作を用いた自由視点映像閲覧インタフェースの検討

厚見 彰吾、学士（工学）、  
空間解像度の異なる多視点画像から復元した三次元モデルの統合手法

金川 祐貴、学士（工学）、

道路監視カメラ映像における局所特徴量を用いた車両軌跡推定

河内 駿、学士（工学）、  
携帯情報端末に装着した 2 台のカメラを用い端末画面の透明化処理

雫 泰裕、学士（工学）、  
複合現実感を用いた発話内容と会話方向の可視化手法

中筋 啓允、学士（工学）、  
選手視点映像を用いたサッカー選手のポジショニング支援

李 云、学士（工学）、  
RGB-D カメラでの動作撮影におけるシーン中の静止情報に着目した拡張三次元映像の獲得

#### 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）

第 16 回パターン認識・マルチメディア理解アルゴリズムコンテスト審査員特別賞、  
宍戸 英彦・鳥屋 剛毅・鈴木 友規・江夏 寛朗・李 云、書き手の個性を反映した文字  
テンプレートの合成による筆跡鑑定手法、2012 年 9 月 4 日

2011 年度日本バーチャルリアリティ学会 SIG-MR 賞（受賞は 2012 年度）、  
林 将之・北原 格・亀田 能成・大田 友一、“AR/MR デモンストレーションの再現性  
を保証するソフトウェア環境の構築—Casper Cartridge プロジェクト—”、2012  
年 9 月 27 日

**外部資金（名称、氏名、代表・分担の別、採択年度、金額、課題名）**

科学研究費助成事業（基盤研究（B））、亀田能成（研究代表者）・大田友一・北原格、2011年度、2,470,000円（2012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

科学研究費助成事業（挑戦的萌芽）、北原格（研究代表者）、2010年度、910,000円（2012年度分）、複合現実感技術を利用した境界知の探索による臨場感を表現する情報量の圧縮

共同研究（日本電気株式会社）、大田友一（代表者）・亀田能成・北原格、2012年度、735,000円、自由視点映像生成の研究

**知的財産権（種別、氏名、課題名、年月日）**

なし

**6. 研究業績**

**(9) 研究論文**

**A) 査読付き論文**

1.徳本晋之介,北原格,大田友一

バーチャルジオラマと複合現実型提示を用いた舞台照明の演出計画支援  
日本バーチャルリアリティ学会論文誌, Vol.17,No.4,pp. 317-325,2012

2.長島正典,林将之,北原格,亀田能成,大田友一

録画された移動物体行動の複合現実型提示における一覧性の向上  
日本バーチャルリアリティ学会論文誌, Vol.17,No.4,pp.447-456,2012

3 .Senya Polikovsky, Yoshinari Kameda, and Yuichi Ohta

Facial Micro-Expression Detection in Hi-Speed Video Based On Facial Action Coding System (FACS)

The Transactions of the IEICE D, Vol. E96-D, No.1, pp.81-92, 2013

4 .Hiroyoshi Tsuru,Itaru Kitahara,Yuichi Ohta

A Mobile Camera Calibration Method Using an Environmental Stereo Camera

IEEJ Transactions on Electronics, Information and Systems,Vol.133,No.1,pp.47-53,2013

B) 査読無し論文

なし

(10) 国際会議発表

A) 招待講演

なし

B) 一般講演

1 .Shinnosuke Tokumoto, Itaru Kitahara , Yuichi Ohta

Visual Support for Planning of Stage Lights Control by Using Virtual-Diorama and Mixed-Reality

Proceedings of The 5th Korea-Japan Workshop on Mixed Reality (KJMR2012) , 20 pages, 2012

2 .Masashi Ueda, Itaru Kitahara , Yuichi Ohta

A Wallpaper Replacement Method in a Free-Hand Movie

Proceedings of the 4th international Conference on 3D Systems and Applications (3DSA2012) , 5 pages, 2012

3.Senya Polikovsky, Yoshinari Kameda, and Yuichi Ohta

A New Noninvasive Multi-Sensor Capturing System for Human Physiological and Behavioral Responses Analysis During the Interview  
The 30th International Congress of Psychology, Panel, 2012

4.Senya Polikovsky, Maria Alejandra Quiros-Ramirez, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, Judee Burgoon

Benchmark Driven Framework for Development of Emotion Sensing Support Systems  
Proceedings of Workshop on Innovation in Border Control 2012, pp.353-355, 2012

5.Yoshinari Kameda, Itaru Kitahara, and Yuichi Ohta

Uniform Software Environment for AR Performance Evaluation based on USB Boot Linux  
International Workshop on Benchmark Test Schemes for AR/MR Geometric Registration and Tracking Method (TrakMark) (in conjunction with ICPR2012), 4 pages, 2012

6.Senya Polikovsky, Maria Alejandra Quiros-Ramirez, Takehisa Onisawa, Yoshinari Kameda, and Yuichi Ohta

A Non-Invasive Multi-Sensor Capturing System for Human Physiological and Behavioral Responses Analysis  
First IAPR TC3 Workshop on Multimodal Pattern Recognition of Social Signals in Human-Computer-Interaction (MPRSS), vol.LNAI-7742, pp.63-70, 2012.

7.Hiroyoshi Tsuru ,Itaru Kitahara,Yuichi Ohta

Mixed-Reality Snapshot System Using Environmental Depth Sensors  
21st international Conference on Pattern Recognition (ICPR2012) ,  
pp.97-100, 2012.

8.Maria Alejandra Quiros-Ramirez, Senya Polikovsky, Yoshinari Kameda,  
and Takehisa Onisawa

Towards Developing Robust Multimodal Databases for Emotion Analysis  
The 6th International Conference on Soft Computing and Intelligent  
Systems, 6 pages, 2012.

9.Takaya Kawamata,Itaru Kitahara,Yoshinari Kameda,Yuichi Ohta

Lifted Road Map View on Windshield Display  
IEEE 8th Symposium on 3D User Interface,2 pages, 2013

(11) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

なし

B) その他の発表

1.出口 大輔, 亀田 能成, 北原 格, 近藤 一晃, 島田 敬士, 日浦 慎作  
これまでの PRMU アルゴリズムコンテストを振り返って  
電子情報通信学会 技術研究報告 PRMU, vol.112, no.197, pp.143-147, 2012.

2.鳥屋 剛毅, 北原 格, 大田 友一  
位置情報付き俯瞰画像を用いたモバイルカメラの位置と方位の推定  
Proceedings of FIT2012, pp.541-546, 2012.

- 3.大川原 友樹, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一  
シーン状況と多視点映像の解像度を考慮した自由視点映像生成支援手法  
第 17 回日本バーチャルリアリティ学会大会論文集, pp.27-30, 2012.
  
- 4.佐藤 翔悟, 北原 格, 大田 友一  
Active Appearance Model を用いた表情の操作手法  
第 17 回日本バーチャルリアリティ学会大会論文集, pp.205-208, 2012.
  
- 5.林将之, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一  
シーン中の 3 次元点群の投影誤差による AR/MR 向けカメラキャリブレーションの精度評価  
電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.112, no.221, pp.43-48, 2012.
  
- 6.中野 一成, 亀田 能成, 大田 友一  
人物が存在し得る部分空間の多重スリット表現による可視化  
HCG シンポジウム 2012, pp.105-110, 2012.
  
- 7.原 祥堯, 坂東 茂, 坪内 孝司, 大島 章, 北原 格, 亀田 能成  
MAP-ICP:最大事後確率推定により事前確率を考慮した 6 自由度 Iterative Closest Point マッチング  
第 18 回ロボティクスシンポジウム, pp.592-599, 2013
  
- 8.宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一  
モーションブレンダーを活用したバドミントンシャトルの追跡手法  
電子情報通信学会 技術研究報告 PRMU, vol.112, no.385, pp.139-144, 2013.
  
- 9.鳥屋 剛毅, 北原 格, 大田 友一  
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  
電子情報通信学会 技術研究報告 PRMU, vol.112, no.441, pp.1-6, 2013

1 0.中野 一成, 亀田 能成, 大田 友一

物体が存在し得る錐体空間の多重スリットによる可視化

電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.112, no.474, pp.203-208, 2013

1 1.穴戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一

位置と速度の観測に基づく高速移動物体の追跡手法

電子情報通信学会 2012 年総合大会講演論文集(情報・システム講演論文集 2),  
pp.181, 2013

1 2.君島 直城, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一

広域空間で撮影した人物の簡素な形状モデルによる可視化手法の提案

電子情報通信学会 2012 年総合大会講演論文集(情報・システム講演論文集 2),  
pp.123, 2013

1 3.小林 直樹, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一

道路監視カメラ映像における前照灯の鏡面反射成分を用いた車両の位置推定

電子情報通信学会 2012 年総合大会講演論文集(情報・システム講演論文集 2),  
pp.180, 2013

1 4.森田 航平, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一

仮想車両の複合現実型提示による交差点死角の車両認識支援

電子情報通信学会 2012 年総合大会講演論文集(情報・システム講演論文集 2),  
pp.121, 2013

1 5.樽見 佑亮, 亀田 能成, 大田 友一

歩行経路上の位置推定のための画像検索性能評価

電子情報通信学会 2012 年総合大会講演論文集(情報・システム講演論文集 2),  
pp.144, 2013

(12) 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

当研究室教員が、General Chair、組織委員会委員長、現地実行委員会委員長などの中心メンバーとして運営に携わり、下記の通りパターン認識研究分野で最も歴史がある世界最大の国際会議、21st International Conference Pattern Recognition (ICPR2012) を34年ぶりに日本で開催した。会議には、世界49カ国、約1200名（国内約300名、海外約900名）の研究者が参加し、パターン認識、コンピュータビジョン、画像処理、文字認識、音声処理、信号処理等の基礎分野や、文書解析、バーチャルリアリティ、ヒューマンインタフェース、医療情報技術等の応用分野等を主要題目として、最新かつ最先端の研究発表と活発な討論が行われた。また、会議初日には、近隣市町村の中高生を対象とした国内外トップレベルの研究者による市民公開講座を開催し、科学、工学の面白さと奥深さを若者に伝える活動を行った。

会議名：21st International Conference Pattern Recognition (ICPR2012)

開催期間：2012年11月11日～15日

開催場所：つくば国際会議場

下記のイベントに参加し、広く社会に研究成果を広報した。

イベント：大学院専攻研究公開（展示）

日時：2012年5月12日（土）、6月2日（土）（9：30～16：00）

場所：筑波大学第三エリア

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

9. 管理・運営

組織運営や支援業務の委員・役員の実績

大田友一

情報環境機構 情報環境企画室員

システム情報系 戦略室員

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

ICPR2012(\*1) 組織委員会委員長・General Chair

情報処理学会 情報科学技術フォーラム (FIT) 推進委員会委員長 (2012.6.1.～  
2013.5.31.)

大学評価・学位授与機構 学位審査会専門委員

電子情報通信学会 教科書委員会委員

亀田能成

ICPR2012(\*1) 現地実行委員会委員

TMA/TrakMark 2013: IEEE ISMAR 2013 Joint Workshop on Tracking Methods &  
Applications and TrakMark オーガナイズングメンバー

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 ヒューマンコミュニケーショングループ 運営委員会委員

電子情報通信学会 PRMU 研究専門委員会委員、MVE 研究専門委員会委員、サイバーワー  
ルド研究専門委員会委員

画像の認識・理解シンポジウム(MIRU)2012 プログラム委員会領域チェア

北原格

ICPR2012(\*1) 現地実行委員会委員長

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

日本バーチャルリアリティ学会論文編集委員

(\*1) 21st International Conference Pattern Recognition

**11. その他**

海外長期滞在、フィールドワークなど

なし