

目次

まえがき.....	2
1 センター組織と構成員	3
2 平成 27 年度の活動状況	7
3 特色ある共同研究活動	7
4 研究者コミュニティへの貢献	9
5 各研究部門の報告	10
I. 素粒子物理研究部門	10
II. 宇宙物理研究部門	42
III. 原子核物理研究部門	66
IV. 量子物性研究部門	86
V. 生命科学研究部門	105
V-1. 生命機能情報分野	105
V-2. 分子進化分野	120
VI. 地球環境研究部門	135
VII. 高性能計算システム研究部門.....	148
VIII. 計算情報学研究部門.....	193
VIII-1. データ基盤分野.....	193
VIII-2. 計算メディア分野.....	213

まえがき

筑波大学計算科学研究センターは、科学諸分野と計算機科学分野の協働・融合を軸とした「学際計算科学」を推進し、超高速計算機システムおよび超高速ネットワーク技術の開発を行うと共に、科学の諸領域における超高速シミュレーションおよび大規模データ解析や情報技術の革新的な応用方法の研究を行っています。現在、素粒子物理、宇宙物理、原子核物理、量子物性、生命科学、地球環境、高性能計算機システム、計算情報学の 8 つの研究部門を有し、先進的な計算科学の研究を行っています。

本センターは、平成 4 年度に設置された計算物理学研究センターを前身とし、平成 16 年 4 月に改組拡充され発足しました。上記の研究を行う機関であると同時に、外部の研究者の利用に供する全国共同利用施設としての機能ももっており、学際共同利用プログラムの下で全国の研究者にセンター計算機資源を提供しています。さらに、「研究集会開催支援」、「研究者招聘支援」、「共同研究旅費支援」、「短期雇用支援」など、共同研究における研究者や学生の交流を図るための支援も行っています。平成 22 年には、文部科学省共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」に認定され、平成 27 年度に再認定を受け、新たなスタートを切りました。

平成 27 年度は、東京大学情報基盤センターとの協定により設置された「最先端共同 HPC 基盤施設 (JCAHPC: Joint Center of Advanced HPC)」の活動を本格的に開始し、ポスト T2K システムの検討と調達に向けた作業を進めました。また、「計算基礎科学連携拠点」におけるポスト京重点課題 9「宇宙の基本法則と進化の解明」の推進や、「宇宙生命計算科学連携拠点」における惑星と生命の起源解明の共同研究の推進など、異分野間連携・融合の取り組みを積極的に行っています。さらに、英国エジンバラ大学、米国ローレンスバークレイ研究所との協定に基づく国際連携を推進し、我が国における計算科学の国際的拠点の形成を目指しています。

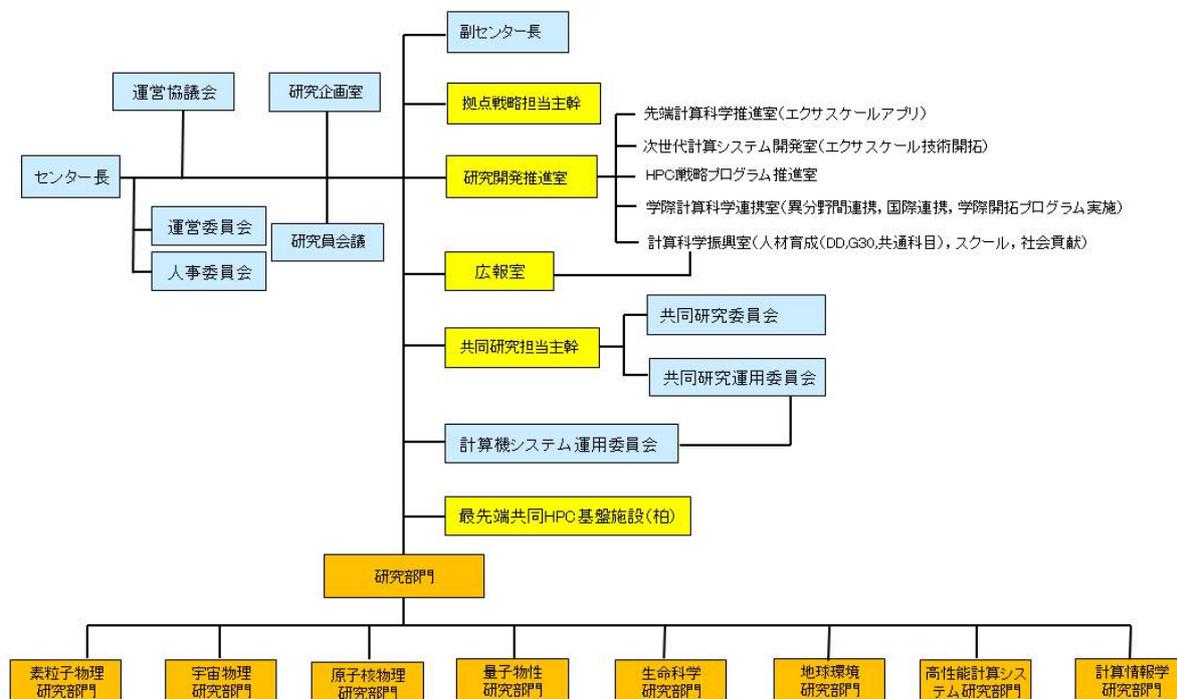
本小冊子は、平成 27 年度の計算科学研究センターの活動内容をまとめたものです。ご高覧いただければ幸甚に存じます。

平成 28 年 7 月 吉日

計算科学研究センターセンター長
梅村 雅之

1 センター組織と構成員

計算科学研究センター組織図



組織人員・教員一覧リスト

センター長	梅村 雅之
副センター長	朴 泰祐
運営協議会	委員長 常行 真司 (東京大学)
運営委員会	委員長 梅村 雅之
人事委員会	委員長 梅村 雅之
研究企画室	委員長 梅村 雅之
研究員会議	議長 梅村 雅之
研究開発推進室	
• 先端計算科学推進室	室長 矢花 一浩
• 次世代計算システム開発室	室長 朴 泰祐
• HPC 戦略プログラム推進室	室長 藏増 嘉伸
• 学際計算科学連携室	室長 高橋 大介
• 計算科学振興室	室長 北川 博之

拠点戦略担当主幹 梅村 雅之
共同研究担当主幹 矢花 一浩

- 共同研究委員会 委員長 矢花 一浩
- 共同研究運用委員会 委員長 矢花 一浩

計算機システム運用委員会 委員長 朴 泰祐
最先端共同 HPC 基盤施設 施設長 中村 宏 (東京大学) 副施設長 梅村 雅之

研究部門 (共同研究員は学内のみ記載)

素粒子物理研究部門

教授 藏増 嘉伸 (部門主任)
准教授 吉江 友照、石塚 成人、根村 英克、谷口 裕介
助教 大野 浩史
研究員 浮田 尚哉、滑川 裕介、佐々木 健志、齋藤 華
客員教授 青木 慎也 (京都大学)
共同研究員 金谷 和至 (教授)、山崎 剛 (准教授)

宇宙物理研究部門

教授 梅村 雅之 (部門主任)、相川 祐理
准教授 森 正夫
講師 吉川 耕司
助教 Wagner, Alexander
研究員 小松 勇、三木 洋平、行方 大輔、野村 真理子
客員准教授 中里 直人 (会津大学)

原子核物理研究部門

教授 中務 孝 (部門主任)、矢花 一浩
准教授 寺崎 順
講師 橋本 幸男
助教 日野原 伸生

量子物性研究部門

教授 矢花 一浩 (部門主任)
准教授 小泉 裕康、全 曉民、小野 倫也
講師 前島 展也

研究員	Kirkham Christopher James
客員准教授	押山 淳 (東京大学)
共同研究員	日野 健一 (教授)、岡田 晋 (教授)

生命科学研究部門

生命機能情報分野

教授	重田 育照 (部門主任)
助教	庄司 光男、栢沼 愛
研究員	佐藤 竜馬、原田 隆平

分子進化分野

准教授	稲垣 祐司 (分野リーダー)
研究員	中山 卓郎、石川 奏太
共同研究員	橋本 哲男 (教授)
特任助教	谷藤 吾朗 (生命環境系)

地球環境研究部門

教授	田中 博 (部門主任)
准教授	日下 博幸
助教	松枝 未遠
研究員	池田 亮作、秋本 祐子
共同研究員	植田 宏昭 (教授)、若月泰孝 (助教)、鬼頭 昭雄 (主幹研究員)、鈴木パーカー明日香

高性能計算システム研究部門

教授	朴 泰祐 (部門主任)、高橋 大介、建部 修見
准教授	川島 英之
助教	多田野 寛人
研究員	田中 昌宏、Mohamed Amin Jabri、松本 和也、梅田 宏明
客員准教授	塙 敏博 (東京大学)
共同研究員	安永 守利 (教授)、和田 耕一 (教授)、櫻井 鉄也 (教授)、山口 佳樹 (准教授)、今倉 暁 (助教)

計算情報学研究部門

データ基盤分野

教授	北川 博之 (部門主任)
准教授	天笠 俊之
助教	塩川 浩昭
研究員	Salman Ahmed Shaikh、Franck Gass 駒水 孝裕、山口 祐人

計算メディア分野

准教授	亀田 能成 (分野リーダー)
准教授	北原 格
共同研究員	白川 友紀 (特命教授)

2 平成 27 年度の活動状況

本センターの目的は、科学諸分野と計算機科学の協働による計算機の開発・製作、ならびにこれを用いた共同研究により、最先端の学際計算科学を開拓・推進し、全国的な学術研究に寄与することである。積極的な次世代計算機開発などのプロジェクト推進に加えて、共同利用・共同研究拠点としての役割を果たしており、①学際共同利用プログラムの実施による共同研究の実施、②海外の計算科学主要拠点との連携強化、③理研「計算科学研究機構」との連携、④若手研究者の積極的な雇用による人材育成、⑤計算科学の普及活動、を活発に推進している。

本年度は、共同利用・共同研究拠点としての共同研究プログラムとして、主要計算設備である、HA-PACS/TCA, COMA(PACS-IX)を利用する学際共同利用プログラムを実施し、様々な分野における計算科学の研究を推進した。当該年度においては、COMA 45 課題, HA-PACS 29 課題のプロジェクトを採択し実施した。センターの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、研究を着実に進めた。東京大学情報基盤センターとの協定により設置された「最先端共同 HPC 基盤施設 (JCAHPC: Joint Center of Advanced HPC)」では、次期システムの検討と調達に向けた仕様書策定を進めた。また、第 7 回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」—多分野に広がる計算科学の発展と将来像—を 10 月に開催し、各分野で活躍されている講師を招待し、計算科学の発展と分野間連携への取り組みについて情報交換と議論を行った。国際連携としては、米国ローレンスバークレイ、英国エジンバラ大学とワークショップを行い、最新の研究成果を報告するとともに、共同研究の課題について議論した。英国エジンバラ大学へは、大学院学生のインターンシップも行った。国内においては、「計算基礎科学連携拠点」を、8 つの機関（筑波大学計算科学研究センター、高エネルギー加速器研究機構、自然科学研究機構国立天文台、京都大学基礎物理学研究所、大阪大学核物理研究センター、東京大学原子核科学研究センター、千葉大学大学院理学研究科附属ハドロン宇宙国際研究センター、理化学研究所仁科加速器研究センター）との間で推進し、各機関の研究開発能力及び人材、設備等を活かし、計算科学の手法による素粒子・原子核・宇宙分野の戦略的な研究教育拠点の形成を行った。この拠点では、フラッグシップ 2020 プロジェクト（ポスト「京」の開発）において、重点課題 9「宇宙の基本法則と進化の解明」の各課題を推進した。また、当センターが中核機関を務める「宇宙生命計算科学連携拠点」では、宇宙分野・惑星科学分野と物質・生命分野の計算科学が連携して、星間空間有機物質、太陽系外惑星の生命指標、原始惑星系円盤の研究を推進した。また、センター宇宙グループが代表を務める「超巨大ブラックホール研究推進連絡会」第 3 回ワークショップを 10 月に開催した。

3 特色ある共同研究活動

計算科学の学際融合拠点として、「計算基礎科学連携拠点」と「宇宙生命計算科学連携拠点」を推進するとともに、筑波大学と東京大学が共同で「最先端共同 HPC 基盤施設」を設置し、ポスト T2K の調達を進めた。この他、各部門において共同プロジェクトを推進した。

「**計算基礎科学連携拠点**」（大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構，大学共同利用機関法人自然科学研究機構国立天文台，国立大学法人京都大学基礎物理学研究所，国立大学法人大阪大学核物理研究センター，国立大学法人東京大学原子核科学研究センター，国立大学法人千葉大学大学院理学研究科附属ハドロン宇宙国際研究センター，独立行政法人理化学研究所仁科加速器研究センター）においては，各機関の研究開発能力及び人材，設備等を活かし，計算科学の手法による素粒子・原子核・宇宙分野の戦略的な研究教育拠点の形成を行い，HPCI 戦略プログラム分野 5「物質と宇宙の起源と構造」および，ポスト「京」重点課題 9「宇宙の基本法則と進化の解明」を進めた。

「**宇宙生命計算科学連携拠点**」においては，計算科学による異分野間連携・融合の取り組みとして共同研究を推進した。平成 27 年度は，宇宙物理研究部門と生命科学研究部門の連携により，「星間ダストにおけるアミノ酸生成」，「量子科学計算を用いた太陽以外の恒星周りの光合成の研究」を実施した。また，名古屋大学の乱流計算のグループと共同で，「原始惑星系円盤乱流中の微惑星形成の研究」を行った。

東京大学情報基盤センターと共に設置した「**最先端共同 HPC 基盤施設**」では，計算科学の発展に従って増大する計算能力のニーズに応じて，数十ペタフロップスの計算設備を整備する計画を立て，このために計算科学の研究者とともにシステム設計と仕様策定を進めた。

地球環境研究部門においては，(株)東芝と日射量予測のための共同研究を実施した。日射量予測を行っている気象学研究室は非常に少ない。また，(株)ウェザーニューズと関東平野の雪予報精度向上のための共同研究を実施した。(株)ウェザーニューズが保有しているウェザーリポートデータの観測網は，気象庁の観測網より 10 倍以上，空間詳細であり，このデータを使って雪の研究を行ったのは，本共同研究が初めてである。ウェザーリポートのデータは SNS データであり，気象学分野における SNS データの利用という観点からも非常に独創的である。また，東京大学 (AORI)との共同研究により，大気モデル NICAM を利用した北極低気圧研究を推進した。

文部科学省国家課題対応型研究開発推進事業「**実社会ビッグデータ利活用のためのデータ統合・解析技術の研究開発**」においては，情報技術の発展及び情報化の進展に伴い，実社会の各種活動に伴い生成・取得されるデータは爆発的に増加しており，これらのビッグデータの利活用による社会コスト削減，安心・安全の実現，コミュニティ活性化，イノベーションの創出等が強く求められている。実社会ビッグデータ利活用のためのデータ統合・解析技術の研究開発を目的として，1)データ連携技術の研究開発，2)高性能データ融合解析技術の研究開

発、3)データ格納・可視化技術の研究開発、4)システム統合化技術の研究開発を行い、さらに、神奈川県藤沢市をフィールドに、社会実装を意識した実証研究を行った。

4 研究者コミュニティへの貢献

本拠点が対象とする計算科学は、諸科学の分野に跨る学際的な学術領域であり、研究者コミュニティは様々な分野に跨っている。研究者コミュニティの意見を反映する場としては、まず第一に外部委員を含む共同利用・共同研究拠点の運営に関する諮問機関である運営協議会である。この運営協議会は、センターがカバーする各科学分野からの代表的な研究者から構成されており、年 2 回開催される運営協議会では、本拠点の中心的な活動である「学際共同利用プログラム」をはじめとする活動について、承認いただくとともに意見を伺って活動に反映している。また、「学際共同利用プログラム」に採択された共同研究の課題については、中間報告と最終報告会を開催し、研究の進捗状況を報告願うと同時に、センターの計算機の運用や支援体制についての意見を伺っている。例えば、年度末に、要望状況に応じて、計算機資源の追加割り当て・調整を行うなどの柔軟な運営体制をとっている。

本センターは、前身の計算物理学研究センターから、特に、素粒子・宇宙分野の計算科学を世界的にリードしてきた。この分野の研究者コミュニティを組織し、計算基礎科学の全国的な研究体制を構築するために、平成 23 年度に高エネルギー加速器研究機構と自然科学研究機構国立天文台とともに、計算基礎科学連携拠点(<http://www.jicfus.jp/jp/>)を設立した。平成 26 年 12 月からは、前記 3 機関に加え、京都大学基礎物理学研究所、大阪大学核物理研究センター、東京大学原子核科学研究センター、千葉大学大学院理学研究科ハドロン宇宙国際研究センター及び理化学研究所仁科加速器センターの 5 機関を加え、全 8 機関として拠点を形成・運営している。この拠点は、コミュニティの研究者のサポートだけでなく、本拠点の課題である「先端学際計算」を推進するための計算基礎科学とそれを高度化するための計算機科学の研究者との共同の場を提供することを目的としている。この活動は本拠点の方向性に沿ったものであり、計算基礎科学の研究者コミュニティの意見を反映する有効なチャンネルとなっている。計算基礎科学連携拠点においては、平成 26 年度からポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発重点課題 9「宇宙の基本法則と進化の解明」を推進している。

最先端の計算システムの整備・運用は、本拠点の重要なミッションである。目下、メニーコアシステム COMA と GPU 搭載計算機 HA-PACS/TCA を「学際共同利用プログラム」の計算資源として提供している。さらに、計算科学の発展に従って増大する計算能力の要請に応じて、「最先端共用 HPC 基盤施設」において、数十ペタフロップスの計算設備を整備する計画を進めている。このために計算科学の研究者とともにシステム設計を進めている。

5 各研究部門の報告

1. 素粒子物理研究部門

1. メンバー

教授	藏増 嘉伸、青木 慎也（客員研究員）、金谷 和至（共同研究員）
准教授	石塚 成人、谷口 裕介、吉江 友照、根村 英克、山崎 剛（共同研究員）
助教	大野 浩史（国際テニュアトラック）
研究員	浮田 尚哉、齋藤 華、佐々木 健志、滑川 裕介
学生	大学院生 6名、学類生 0名

2. 概要

当部門では、数理物質系物理学域との密接な連携のもと、格子QCD (Quantum ChromoDynamics : 量子色力学) の大型シミュレーション研究を推進している。当部門の研究者の大半が参加する主要プロジェクトであるHPCI戦略プログラム分野5研究開発課題1「格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定」は、2015年度で終了した。2016年秋からJCAHPC（最先端共同HPC基盤施設：筑波大学と東京大学両機関の教職員が中心となり設計するスーパーコンピュータシステムを設置し、最先端の大規模高性能計算基盤を構築・運営するための組織）においてOakforest-PACS（ピーク演算性能25PFLOPSの超並列クラスタ計算機、「京」を超える国内最高性能システムとなる見込み）が稼働予定であり、これに向けてPACS Collaborationを組織し、準備研究を開始している。これと並行して、有限温度・有限密度QCDの研究、テンソルネットワーク形式に基づく格子ゲージ理論の研究、標準理論を超える物理の探求など、活発な研究活動を行った。さらに、格子QCD配位やその他のデータを共有する為のデータグリッドILDG/JLDGの構築・整備を推進した。

国内の計算科学全体の動向として、2015年度で終了したHPCI戦略プログラムの後継として、2016年度から「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題」に関するアプリケーション開発・研究開発が始まった。現在9つの重点課題が設定されており、9番目の課題である「宇宙の基本法則と進化の解明」が素粒子物理・原子核物理・宇宙物理分野が対象とする基礎科学的研究課題である。その活動は、<http://www.jicfus.jp/jp>に詳しい。

3. 研究成果

- 【1】 HPCI 戦略プログラム分野5 における研究開発課題（藏増、青木、石塚、根村、山崎、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 하나가「格子 QCD による物理点でのバリオン間相互作用の決定」である。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、アイソスピン対称性の破れの効果を取り入れた計算や、低エネルギーのハドロン構造計算を意味する。他方、マルチスケール化とは、格子 QCD を用いた原子核の直接構成によってその束縛エネルギーを求めたり、あるいは核子間の有効ポテンシャルを調べたりすることを意味する。前者は、山崎・藏増を中心としたグループによって推進されており、後者は HAL QCD Collaboration が取り組んでいるアプローチである(後述)。

(1) 「京」で生成された配位を用いた基本物理量計算

「京」では、DDHMC (Domain-Decomposed Hybrid Monte Carlo) 法を用いて、 96^4 の格子サイズ、0.084 fm 程度の格子間隔を持つ、2+1 フレーバー ($m_u=m_d \neq m_s$) QCD のゲージ配位を生成した。この配位の最大の特徴は、約 $(8.1 \text{ fm})^3$ という従来にない圧倒的な大きさの空間体積である。その最大の利点は、複数の核子から原子核を直接構成することが可能になることや、離散化された運動量の刻み幅が細くなることによって、ハドロン形状因子の運動量空間における精密な解析が可能となることである。配位生成は 2014 年度初めに終了し、HA-PACS (計算ノード数 332、GPU 部ピーク演算性能 1.048 Pflops、CPU 部ピーク演算性能 0.118 Pflops) を用いてハドロン質量などの基本物理量の測定を行ってきた。2015 年度は、ハドロン質量、クォーク質量、擬スカラー中間子崩壊定数などの基本的な物理量の計算に対して時空間並進対称性を利用した統計精度の向上を目指した。図 1 は物理点でのハドロン質量計算の最終結果を実験値と比較したものである。ここでは、クォーク質量 ($m_u=m_d \neq m_s$) と格子間隔を決めるための 3 つの物理量として、 π 中間子質量 (m_π)、K 中間子質量 (m_K)、 Ω バリオン質量 (m_Ω) を採用している。安定粒子(強い相互作用で崩壊しない)は実験値と誤差の範囲で一致しているのに対して、不安定粒子(強い相互作用で崩壊する ρ や Δ など)は、誤差の範囲を超えて実験値との有意なズレが見て取れる。これは、現在採用しているハドロン質量の計算方法が不安定粒子に対しては有効でないことを表しており、これほど明確に実証された例は世界で初めてである。この他、ハドロン質量の計算と並行して、擬スカラー中間子の崩壊定数、カイラル摂動論における低エネルギー定数、核子のシグマ項などの計算も実行し、大変興味深い結果を得ている(論文 B-1)。

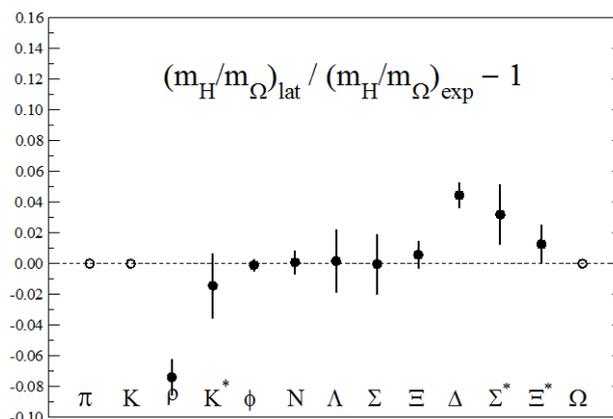


図 1 : 2+1 フレーバー格子 QCD 計算で得られたハドロン質量 (Ω バリオン質量で規格化されている) と実験値との比較。白抜きシンボルはクォーク質量と格子間隔を決めるための物理インプットを表す。

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

藏増、山崎は理研計算科学研究機構 (AICS) の宇川副機構長との共同研究により、2010 年世界で初めて格子 QCD によるヘリウム原子核の構成に成功し、そののち 2 核子系の束縛状態である重陽子の構成にも成功した。これらの計算は、計算コストを抑えるためにクエンチ近似かつ重いクォーク質量を用いた試験的なものであった。その後、真空偏極効果を取り入れた 2+1 フレーバー QCD シミュレーションを行い、近似を排したより現実世界に近い状況でのヘリウム原子核および 2 核子系の束縛エネルギー計算に成功した。ただし、この計算は π 中間子質量 0.5 GeV 相当のクォーク質量を用いたものであり、物理点 (π 中間子質量 0.14 GeV に相当) よりもかなり重い。そのため、物理点へ向けたクォーク質量依存性を調べるために、広島大学石川健一准教授を共同研究者に加え、 π 中間子質量 0.3 GeV 相当のクォーク質量での計算を遂行した。この研究成果は、本年度、学術論文に掲載された (論文 A-1、B-5)。この成果を踏まえ、「京」で生成された 96^4 格子サイズのゲージ配位を用いた物理点での軽原子核束縛エネルギー計算を行なっている。 ^3He 原子核の束縛エネルギーに対応する有効エネルギー差の中間結果を図 2 に示す。物理点での計算では統計誤差を抑えることが非常に難しいため、現段階では統計的に有意な結果は得られていないが、今後統計誤差を小さくするための計算を継続していく。

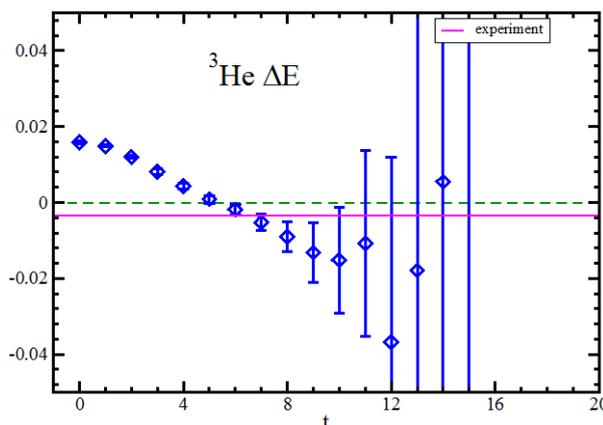


図 2 : ${}^3\text{He}$ 原子核の有効エネルギー差 (格子単位)。横軸は虚時間、実線は実験値。大きな虚時間領域で、有効エネルギー差が定数になれば、その値が束縛エネルギーに対応する。

【3】 格子 QCD を用いた核子構造研究 (藏増、山崎)

陽子と中性子 (核子) はクォークの束縛状態であり、その構造を詳細に調べるためには、強い相互作用の第一原理計算である格子QCDを用いた計算が必要である。これまでに格子QCDを用いて、核子構造に関する核子形状因子の研究が行なわれてきたが、非常に良い精度で測定されている実験結果を再現できていない。この実験値との不一致の主な原因は、計算に用いられたクォーク質量が現実のものよりも大きいためであると考えられている。

藏増、山崎は、広島大学石川健一准教授、東北大学佐々木勝一准教授、理研計算科学研究機構 (AICS) 宇川副機構長とともに、PACS Collaborationにおいて、この原因を取り除いた計算である、現実のクォーク質量に極めて近いパラメータ (π 中間子質量145 MeV) での核子形状因子計算を行なった (論文B-5)。図3は電氣的核子形状因子 $G_E(q^2)$ (図には規格化されたものが示されている) の中間結果である。これまでの計算結果とは異なり、実験値に良く一致した結果が得られている。今後もこの計算を進め、磁氣的形状因子や軸性カレントに関する形状因子の研究を行なっていく予定である。

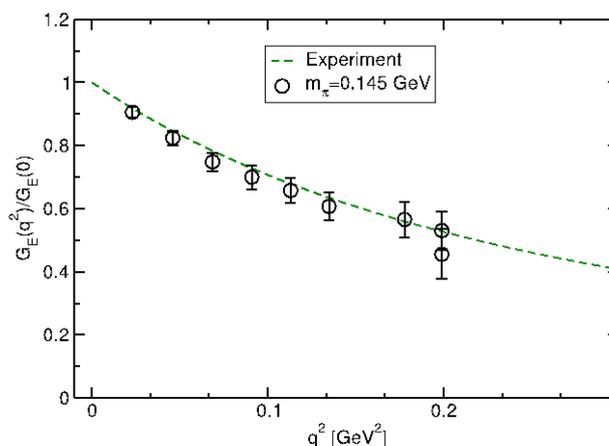


図 3 : 電氣的核子形状因子。横軸は運動量移行、破線は実験値を表す。

【4】 K 中間子崩壊振幅の研究 (石塚、吉江)

素粒子標準模型には、昔からの未解決な問題で、かつ理論の検証において極めて重要な問題が残されている。K 中間子崩壊のアイソスピンチャンネルにおける $\Delta I=1/2$ 則の解明と、CP 非保存パラメータ (ϵ'/ϵ) の理論からの予測である。これらの問題には、K 中間子が二つの π 中間子に崩壊する場合の崩壊振幅の計算が必要である。

石塚、吉江らは、格子 QCD により崩壊振幅を数値計算し、問題の研究を行った。 π 中間子質量 $m_\pi=280$ MeV のもとで、終状態の π 中間子が運動量をもたない場合の計算を完成させた (論文 A-2)。この計算により、 $\Delta I=1/2$ 則の兆候を見ることができた。CP 非保存パラメータ (ϵ'/ϵ) に関しては統計誤差が非常に大きく、計算の改善が必要であることが分かった。

この研究をもとに、計算を運動量をもつ現実の崩壊の場合に拡張し、信頼性の高い振幅を求める研究を開始した。現在、崩壊振幅の計算のために、新たなゲージ配位を生成し、本格計算に向けた試験計算を行っている。

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

金谷、谷口らは、新潟大学江尻信司准教授、広島大学梅田貴士准教授、九州大学鈴木博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。改良 Wilson クォークによる $N_f=2+1$ QCD の物理点近傍における状態方程式のための配位生成を継続して推進するとともに、状態方程式の評価に必要なベータ関数を QCD の多変数空間で精度よく決定する手法として、多重点再重み付け法によるベータ関数評価の試験を行った。さらに、Gradient Flow 法を用いた有限温度状態方程式の評価を、動的クォークを含む QCD で実行する最初の研究を開始し、試験研究の結果を得た。

(1) 多重点再重み付け法による QCD ベータ関数

有限温度・有限密度 QCD の状態方程式や物理量の温度・密度依存性を計算するためには、理論のパラメータ空間内の「等物理線 (Line of Constant Physics : LCP)」 (同一の物理系を様々な格子間隔で表現) と、LCP 上でパラメータの格子間隔依存性をあらかず「ベータ関数」の情報が必要である。QCD は、ゲージ結合定数 (β) と複数のクォーク質量 (κ) や化学ポテンシャル (μ) を基本パラメータとして持つが、多次元のパラメータ空間で LCP やベータ関数を精度よく評価することは簡単ではない。それを解決するために「多重点再重み付け法 (multi-point reweighting 法)」を検討し、密度ゼロの $N_f=2$ QCD の場合に試験研究を行った (論文 B-6、A-3)。

系のパラメータ依存性を調べる有力な方法として、再重み付け法 (reweighting 法) がよく使われるが、有限温度・有限密度 QCD の研究で要求されるような、パラメータ空間の広い領域に応用することには困難が伴う。図 4 左に、改良プラケット P の κ 依存性を示す。黒丸は 3 つのシミュレーション点における観測結果で、紫、緑、青は、それぞれのシミュレーション点

のデータを使って再重み付け法を使って計算した P の κ 依存性の予言をあらわす。パラメータを大きく動かすと観測結果を再現できないことがわかる。誤差評価も信頼性が低く、このままLCPやベータ関数の計算に使うことは難しい。これは、再重み付け法に必要なヒストグラムを、各シミュレーション点での期待値近傍でしか信頼できる評価ができず、期待値が大きく動く事に対応するようなパラメータの大きな変化に対応できない事による（「重ねあわせ問題」）。

多重点再重み付け法では、重ねあわせ問題を解決するために、複数のシミュレーションデータを統合して再重み付けする。図4左に、3つのシミュレーションを合わせて多重点再重み付け法により計算した結果を赤線で示す。観測結果（黒丸）をスムーズに繋ぎ、シミュレーション点の間の領域も含め、広いパラメータ領域で信頼性と精度の高い結果が得られた。これにより、LCPとベータ関数の計算に必要な、パラメータ空間の広い領域での精度の高い測定が可能となる。それに基づいて計算した $N_F=2$ QCDのLCPとベータ関数を、図4右と図5に示す。

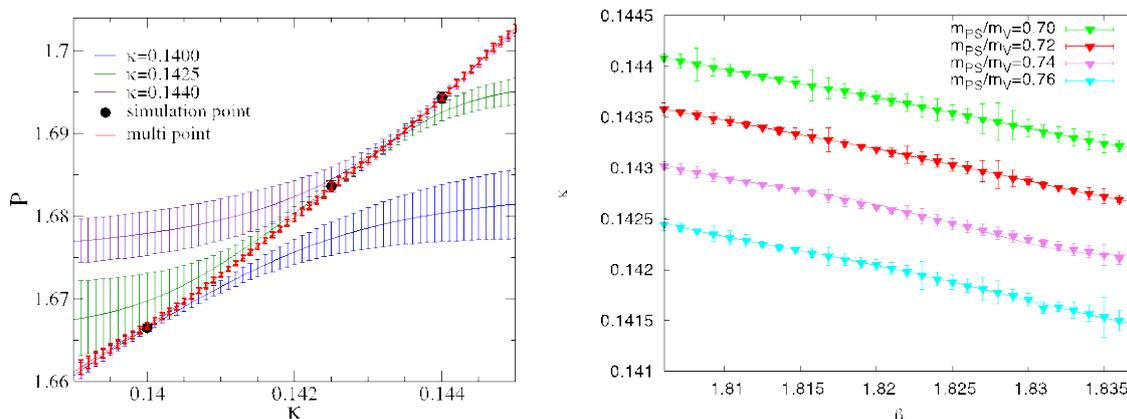


図4： $N_F=2$ QCDにおける多重点再重み付け法の研究（論文A-3）。左図：改良プラケット $P=c_0W^1 \times 1 + 2c_1W^1 \times 2$ の期待値の $\beta=1.825$ における κ 依存性。黒丸は、3つのシミュレーション点における観測結果。紫、緑、青は、3点それぞれのデータによる単純な再重み付け法の結果。「重ねあわせ問題」のために、パラメータを大きく動かすと単純な再重み付け法では観測結果を再現できないことがわかる。赤は、3点のデータを多重点再重み付け法により結合して計算した結果。観測結果をスムーズに繋ぎ、広いパラメータ領域で精度の高い計算が可能となる。右図： m_{PS}/m_V の結果から求めた等物理線（LCP）。 m_{PS}/m_V が1に近いほどクォーク質量が大きい場合に相当する。

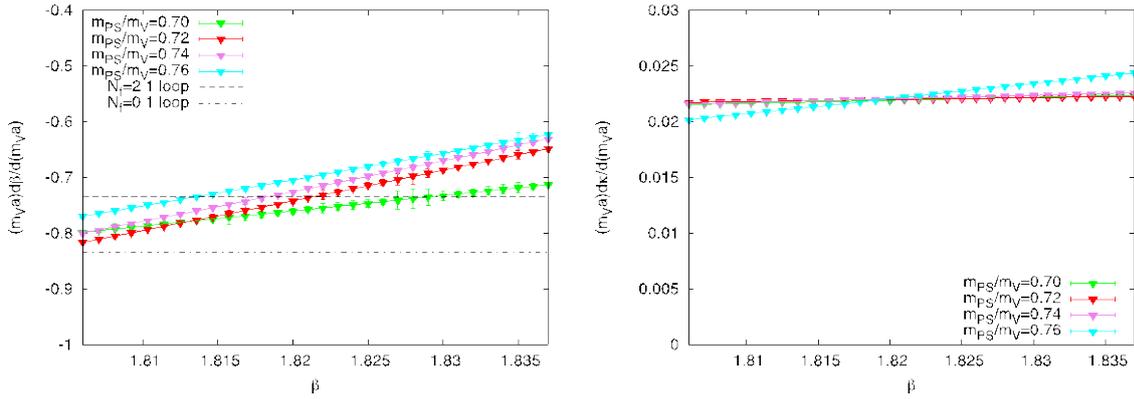


図5：多重点再重み付け法による、 $N_F=2$ QCDのベータ関数 $a(d\beta/da)$ (左図) と $a(d\kappa/da)$ (右図)。 m_{VA} を近傍で結合パラメータの2次フィットした結果に基づいて計算したもの。左図の破線は、 $N_F=0$ と2の場合の摂動1次の結果 (論文A-3)。

(2) $N_F=2+1$ 物理点 QCD と有限密度 QCD

この手法を応用して $N_F=2+1$ 物理点QCDや有限密度QCDを研究するための準備も進めている (論文B-7)。

我々が開発した固定格子間隔アプローチに基づき、PACS-CSのゼロ温度シミュレーションと同じシミュレーション・パラメータを使って、 $T=140-500$ MeVに相当する有限温度配位を系統的に蓄積している。これまでに生成した有限温度配位と、PACS-CSが公開しているゼロ温度配位やreweighting factorを用いて、Plaquette期待値、Polyakov loop期待値、さらに状態方程式の計算で必要となるQCD作用のcoupling parameter微分の試験計算をおこない、期待する振る舞いを確認した (図6左)。これを発展させ、多重点再重み付け法やGradient Flow法を用いた物理点でのベータ関数の評価が次の課題である。

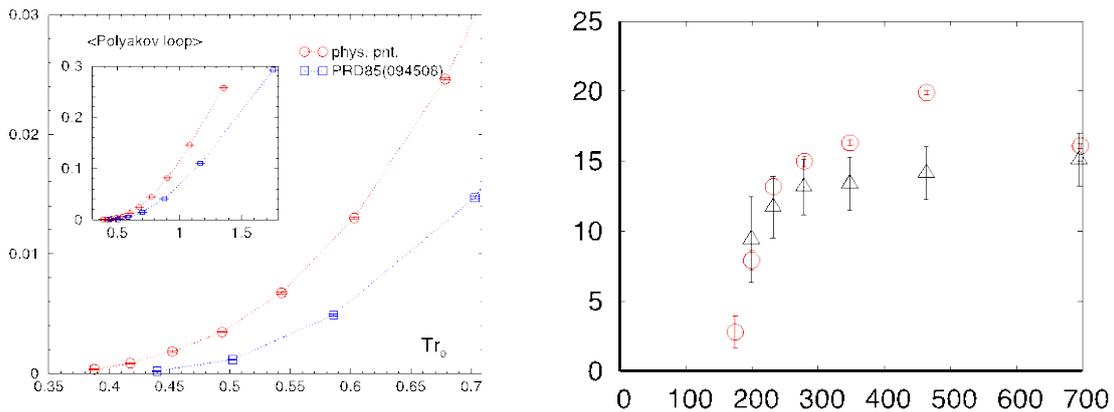


図6：左図：物理点における有限温度QCDの配位で計算したPolyakov loop期待値の温度 (Sommer scale r_0 で規格化) 依存性。以前の計算による比較的重いクォーク質量での結果も示す。クォーク質量が軽くなると相転移温度が下がる事が分かる (論文A-3)。右図：Gradient Flow法による $N_F=2+1$ QCD状態方程式 (中間結果)。縦軸は ϵ/T^4 、横軸は T [MeV]。赤丸がGradient Flow法の結果で、黒三角はT-積分法による以前の結果。

(3) Gradient Flow 法による $N_f=2+1$ QCD 状態方程式

近年QCD熱力学量の新しい計算方法としてgradient flowを用いた方法が注目を浴びている。この方法では繰り込まれたエネルギー運動量テンソルを格子上で直接計算することが可能になり、エネルギー密度などの状態方程式を計算することができる。さらにgradient flowによるクーリングの効果によって、熱力学量における誤差の大部分を占めるゲージ配位の揺らぎが押さえられ、従来の積分法をベースとした計算手法に比べて、高精度の計算が可能になることが期待されている。

これまでにクエンチ近似ではgradient flowを用いた計算が行われており、その有効性が示されている。動的クォークを含む作用でのgradient flowの定式化は、M. Lüscherにより行われており、full QCDでのエネルギー運動量テンソルの評価方法もH. MakinoとH. Suzukiの論文で開発されている。さらに、カイラルオーダーパラメータや位相数の評価もgradient flowにより容易になると期待されており、相構造などの研究にも大きな進展が期待される。我々は、これらを使って動的クォークを含む(2+1)-flavor QCDにおけるgradient flowを用いたQCD熱力学量の計算を目的として、研究を進めている。そのための計算コードを、Bridge++をベースに開発した。

最初のステップとして、 $m_{ps}/m_v=0.65$ のやや重いクォーク質量領域で $N_f=2+1$ QCDの状態方程式の研究を開始した。固定格子間隔法を採用し、CP-PACS Collaborationで生成したゼロ温度配位と同じシミュレーション・パラメータを用い、 $T=170-700\text{MeV}$ に相当する有限温度配位を生成している。図6右に、gradient flowを用いた状態方程式計算の中間結果を示す。Makino-Suzukiによる状態方程式(エネルギー・運動量テンソル)の評価方法では、flow time t についてゼロの極限を外挿する必要があるが、 $N_t \approx 4$ の高温格子以外では、安定した結果を得ることが出来た。図6右で、赤丸がGradient Flow法によるエネルギー密度の結果で、黒三角は、T-積分法により我々が以前計算した結果である。Gradient Flow法による右端のデータ($N_t=4$)とその次のデータ($N_t=6$)では、 $t \rightarrow 0$ の外挿に不定性が有るが、その系統誤差はエラーバーに含まれていない。連続極限以外でGradient Flow法とT-積分法が一致する必然性はないが、有限の格子上で両者がほぼ一致していることは、方法の有用性を示唆している。

Gradient Flow法による計算時間は、T-積分法より大きく削減されている。次の目標は、異なる格子間隔での同様の計算を行い、連続極限を調べることである。最終的には、物理点での有限温度配位を用いたエネルギー運動量テンソルの測定を目指している。

【6】 有限温度・有限密度 QCD の研究 (BNL-Bielefeld-CCNU Collaboration : 大野)

大野は、国際テニュアトラック助教として米国Brookhaven National Laboratory (BNL) に長期滞在し、Frithjof Karsch教授を中心とするBNL-Bielefeld-CCNU Collaborationに参加して有限温度・有限密度QCDの共同研究を行っている。

(1) 格子 QCD による保存電荷の揺らぎと相関の研究

閉じ込め・非閉じ込め相転移の前後では、系の自由度がハドロンからクォークに変化する。保存電荷の揺らぎやそれらの間の相関は、この自由度の変化に敏感であり、相転移の性質を詳細に調べるのに有用である。

大野は、BNL-Bielefeld-CCNU Collaborationに参加し、2+1フレーバーのHighly Improved Staggered Quark作用を用いた格子QCDシミュレーションにより、様々な保存電荷の揺らぎ及びそれらの間の相関に関する共同研究を行った。ここで、シミュレーションは複数の格子間隔にて行い、連続極限をとった。まず、300-700 MeVの高温領域において、u、d、sクォークに対する対角及び非対角クォーク数感受率を4次のオーダーまで計算した。そして、得られた結果をいくつかの摂動計算と比較し、互いによく一致することを示した（論文A-5）。また、温度と化学ポテンシャルに関するテイラー展開を用いて、総バリオン数及び総電荷の揺らぎの平均と分散を計算した。そして、その結果をSTAR及びPHENIX実験の結果と比較し、バリオン化学ポテンシャルが0の極限でのfreeze-out温度を決定するとともに、初めて、freeze-out lineの曲率に制限を与えた（論文A-6）。

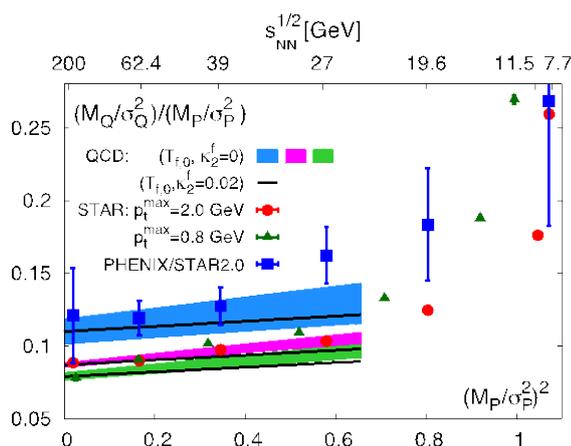


図7：総電荷揺らぎの平均と分散の比 (M_Q/σ_Q^2) と総陽子数揺らぎの平均と分散の比 (M_P/σ_P^2) の実験値（シンボル）と格子QCD計算（バンド及び線）との比較。

(2) 有限温度格子 QCD によるクォークコニウム消失と重クォーク輸送の研究

クォークコニウムはチャームやボトムといった重クォークとその反クォークの束縛状態である。RHIC やLHC での相対論的重イオン衝突実験におけるクォークコニウム生成量の抑制は、クォーク・グルオン・プラズマ (QGP) 生成を示す重要なシグナルの一つであり、クォークコニウムの高温媒質中での振る舞いを理論的に理解することは、実験結果を説明する上で非常に重要である。また、QGPの流体力学的な性質も注目されており、流体モデルに基づく実験結果の説明には、QGP中での重クォーク輸送現象の理論的理解が必要不可欠である。

大野は、York大のAnthony Francis氏、Bielefeld大のOlaf Kaczmarek氏、Bern大のMikko Laine氏及びJülich計算センターのThomas Neuhaus氏らと共に、最大 $192^3 \times 48$ という非常に大

きな格子を用いて pure SU(3) の格子 QCD シミュレーションを行い、連続極限における色電荷相関関数を計算した。そして、この相関関数に対して様々なモデルに基づくフィットを行い、スペクトル関数を計算し、そのゼロ周波数近傍の振る舞いから重クォーク運動量拡散係数 (κ) を見積もった。その結果、相転移温度の約 1.5 倍の温度 (T) において、 $\kappa/T^3=1.8-3.4$ という値を得た (論文 A-7)。また、Heng-Tong Ding 氏、Olaf Kaczmarek 氏、Swagato Mukherjee 氏及び Hai-Tao Shu 氏らとの共同研究により、相関関数からスペクトル関数を計算する方法として、確率論的な手法を導入し、クォークonium のスペクトル関数の計算に向けた様々な予備的計算を行った (論文 B-8)。今後は、より詳細な系統誤差の検証や既存の方法との比較等と共に、様々な温度におけるクォークonium のスペクトル関数を計算し、クォークonium の消失温度や重クォーク拡散係数の推定を行う。

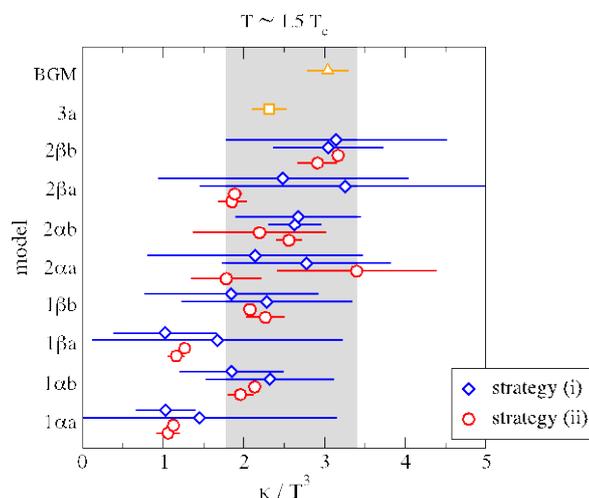


図8: 様々なモデルに基づくスペクトル関数のフィットから得られた重クォーク運動量拡散係数の結果。灰色のバンドは最終結果を示す。

【7】 3 フレーバー・2+1 フレーバー有限温度 QCD における相構造 (蔵増)

温度 T とクォーク化学ポテンシャル μ を関数とする QCD の相図を確定させることは、格子 QCD シミュレーションにおける最大の目標の一つである。蔵増は、理研計算科学研究機構 (AICS) の宇川副機構長、中村研究員、金沢大学武田助教および米国アルゴンヌ国立研究所の Jin 研究員らとの共同研究のもと、0(a)改良を施した Wilson-Clover クォーク作用と Iwasaki ゲージ作用を用いて、 T 、 μ 、クォーク質量 m_q のパラメータ空間における 3 フレーバー QCD の臨界終線の決定に取り組んできた。まず、最初のステップとして $\mu=0$ (密度ゼロ) における 3 フレーバー QCD における臨界終点を決定した (論文発表済)。われわれが用いた方法は、尖度 (kurtosis) 交叉法と呼ばれる有限サイズスケーリング解析手法の一種であり、一次相転移領域における物理量分布の尖度とクロスオーバー側の対応物が、異なる空間体積依存性を持つ性質を利用している。本研究は、世界で初めて 3 フレーバー QCD における臨界

終点の決定に成功したものであり、QCD の相構造を理解する上での非常に重要な礎石となっている。

次のステップは 3 フレーバー QCD から 2+1 フレーバー QCD への拡張であるが、われわれは先ず 3 フレーバー QCD の計算結果を用いた reweighting 法によって、3 フレーバー QCD の臨界終点近傍の臨界終線の振る舞いを調べた。ただし、今回は「時間方向」の格子サイズを $N_T=6$ に固定している。図 9 は、 $(m_\pi)^2-(m_\eta)^2$ 平面における SU(3) 対称点近傍の臨界終線の振る舞いをプロットしたものである。紫色の直線は SU(3) 対称点を表しており、それを横切る臨界終線の傾きは理論的に -2 になるはずであるが、われわれの結果も良い精度でそれを再現している。

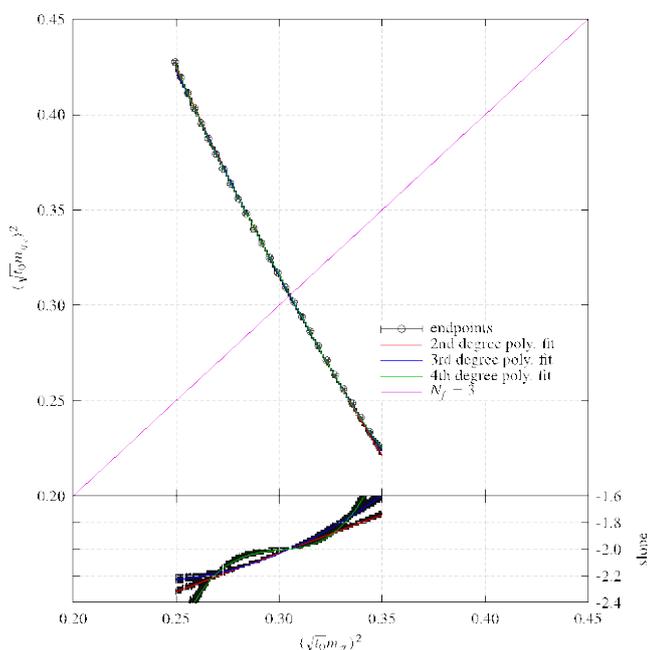


図 9 : $(m_\pi)^2-(m_\eta)^2$ 平面における臨界終線。直線は SU(3) 対称点 ($m_\pi=m_\eta$) を表す。

【8】 有限密度 QCD の研究 (谷口)

鈴木と谷口は阪大の中村純氏、立教大の岡将太郎氏らと共同でカノニカル法を用いた有限密度 QCD の研究を行った。

有限密度格子 QCD には複素作用の問題、及びその派生としての符号問題と呼ばれる未解決の問題がある。この複素作用の問題を直接回避する方策として、カノニカル分配関数をフガシティー展開の係数として直接計算するカノニカル法と呼ばれる手法を採用した研究を行った。特に重いクォークに対して有効な hopping parameter 展開を採用することで、広い温度領域でカノニカル分配関数の計算を行った。

物理量としては、クォーク数密度とその高次のキュムラントの計算を主に行った。特にクォーク数の揺らぎに相当する 2 次のキュムラントには $T < T_c$ の低温側において相転移に特有な

ピーク構造が現れていることが見て取れる (図10)。更に2次と1次のキュムラントの比 $\langle N^2 \rangle_c / \langle N \rangle$ について計算を行った (図11)。これはハドロンレゾナンスガス模型及びクォークガス模型との比較が明確な量であるが、注目すべきポイントは、特に $T < T_c$ の低温側での振る舞いである。低密度側ではハドロン模型の予言とよく一致している一方で、密度を上げて行くに従って、ハドロン模型からはずれて、クォーク模型の予言に近づいていく様子が見て取れる。高温側では一貫してクォーク模型の予言とよく一致していることと比較するとこれは著しい違いである。これは、低温側で密度を上げて行くに従って、QCD相図のクォークの閉じ込め-非閉じ込め相転移の境界をまたいで行く現象と考えられる。最後に2次のキュムラントに現れたピークの位置からQCDの相図を類推したものが図12である。

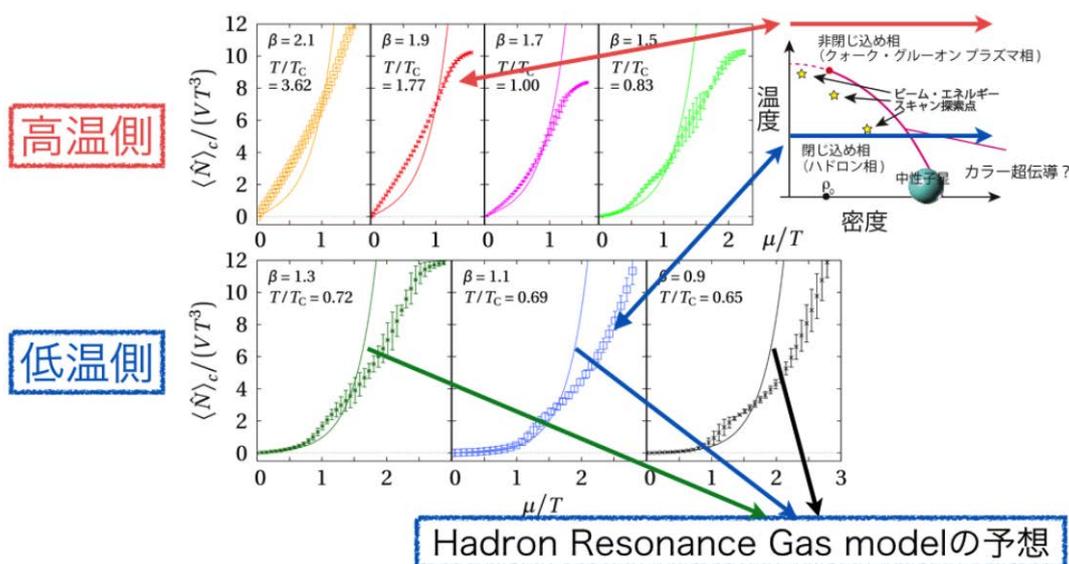


図 10 : クォーク化学ポテンシャル μ/T の関数としてのクォーク数密度の2次キュムラント $\langle N^2 \rangle_c / (VT^3)$ 。グラフは上から高温側： $\beta=2.1$ (orange)、 1.9 (red)、 1.7 (magenta)、 1.5 (green)、 1.3 (dark green)、 1.1 (blue)、 0.9 (black) : 低温側。

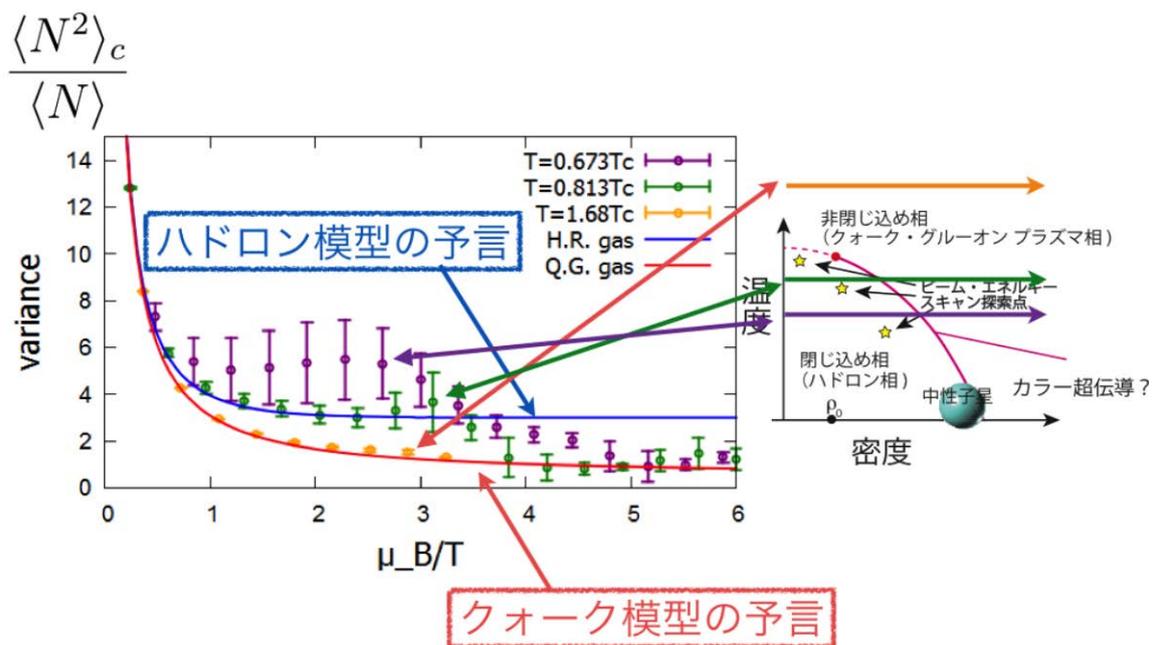


図 11：バリオン化学ポテンシャル μ_B/T の関数としてのクォーク数の 2 次キュムラントとクォーク数の比 $\langle N^2 \rangle_c / \langle N \rangle$ 。ハドロンレジナンスガス模型（青線）及びクォークガス模型（赤線）との比較を行っている。

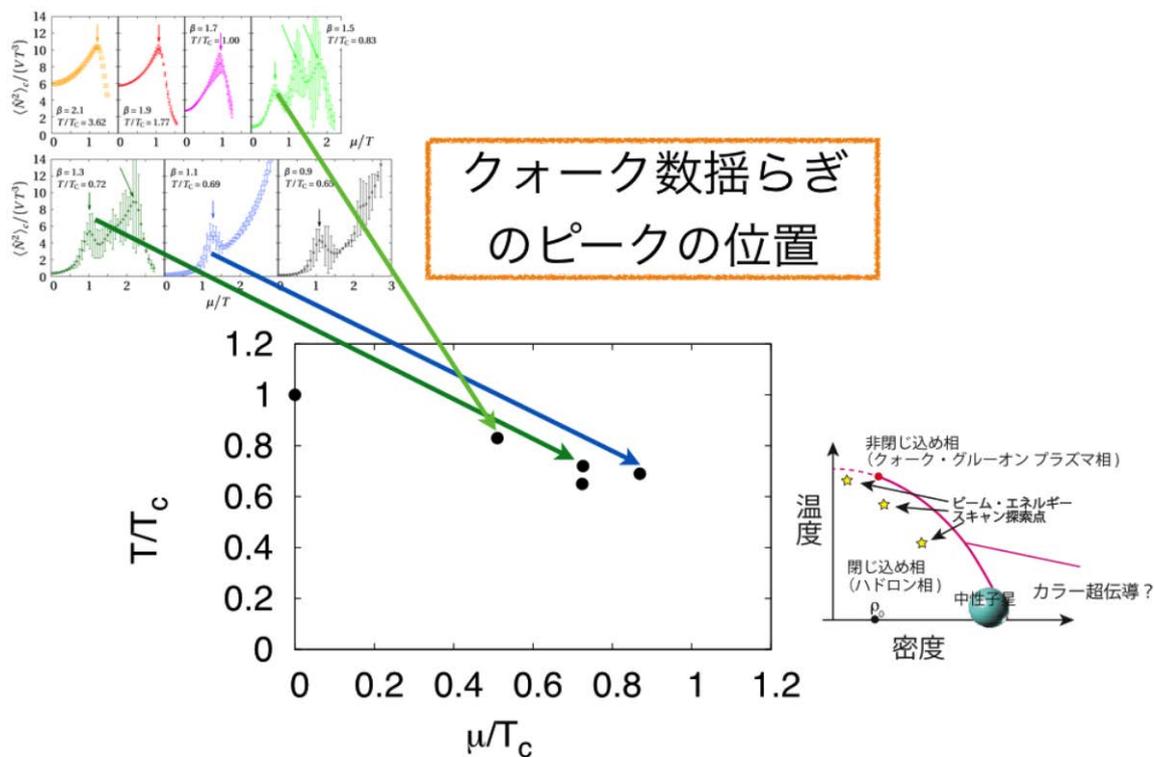


図 12：クォーク数揺らぎに現れるピークの位置から類推した QCD 相図。

【9】 テンソルネットワーク形式に基づく格子ゲージ理論の研究（藏増、齋藤）

格子 QCD 計算では、近年の計算機能力の向上や新規アルゴリズムの開発・改良の結果、自然の u、d、s クォーク質量上でのシミュレーションや、更には軽原子核の束縛エネルギー計算までもが可能となりつつある。その一方で、解決すべき長年の課題がそのまま残されていることも事実である。最も重要な課題は、フェルミオン系を扱う際の負符号問題および複素作用を持つ系のシミュレーションである。これらは、軽いクォークのダイナミクス、Strong CP 問題、有限密度 QCD の研究において避けて通れない問題である。われわれは、近年物性物理分野で提案されたテンソルネットワーク形式に基づく分配関数の数値計算手法を格子ゲージ理論へ応用し、モンテカルロ法に起因する負符号問題および複素作用問題を解決し、これまでの格子 QCD 計算が成し得なかった新たな物理研究の開拓を目指している。

これまで、藏増と理研計算科学研究機構（AICS）の清水特別研究員は、テンソル繰り込み群をグラスマン数も扱えるように拡張し（グラスマンテンソル繰り込み群）、世界で初めてフェルミオン入りのゲージ理論への応用に成功した。具体的には、グラスマンテンソル繰り込み群を用いて、 θ 項が有る場合と無い場合の 1 フレーバーの 2 次元格子 Schwinger モデル（2 次元格子 QED）における相構造を調べた（論文発表済）。この研究により、グラスマンテンソル繰り込み群が、現在の格子 QCD 計算が抱える負符号問題や複素作用問題を解決していることを示すことに成功した。今後は、最終目標である 4 次元 QCD への応用に向け、(i) 非可換ゲージ理論への拡張、(ii) 高次元モデルへの応用、(iii) 物理量計算のための手法開発、という 3 つの課題に取り組む必要がある。2015 年度において特に進展があった研究は、テンソル繰り込み群を用いた 4 次元イジングモデルの解析である。図 13 は、 1024^4 格子サイズにおける 4 次元イジングモデルの相転移温度計算を表している。まず、各 Dcut（テンソル繰り込み群において計算精度をコントロールするパラメータ）において、テンソル固有値の縮重度を調べることによって相転移温度を決定する。左図では Dcut=10 の例をプロットしている。その後、相転移温度の Dcut 依存性において収束の様子を調べることによって、最終的な相転移温度を決定する（右図）。青い横線はモンテカルロ法の結果を表しているが、テンソル繰り込み群の結果も近い値に収束していることがわかる。ただし、従来のモンテカルロ計算における最大格子サイズは 80^4 であり、今回のわれわれの計算における 1024^4 格子サイズに比べて非常に小さい。テンソル繰り込み群における計算コストの体積依存性は対数的であり、この点もモンテカルロ法にくらべて圧倒的な優位性を持つ特徴の一つである。

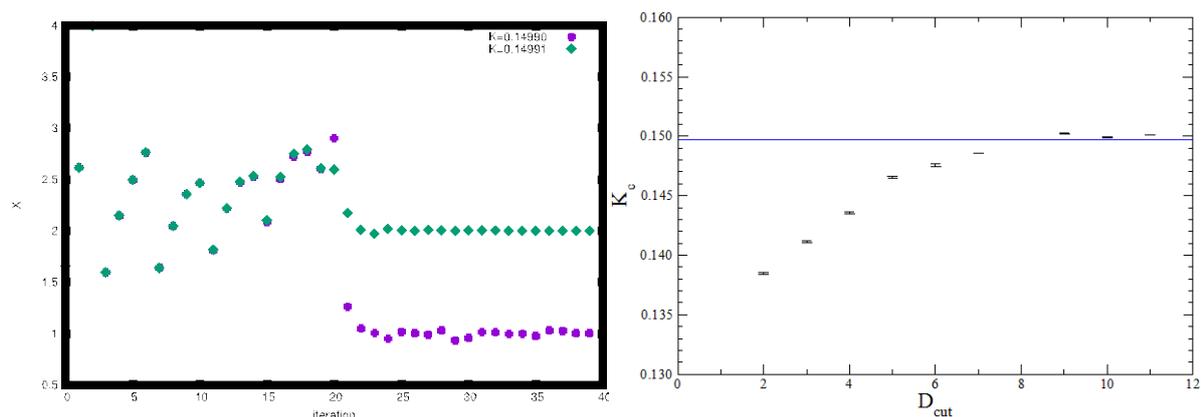


図 13 : 1024⁴ 格子サイズにおける 4 次元イジングモデルの相転移温度の決定。左図 : $D_{\text{cut}}=10$ におけるテンソルの固有値の縮重度による高温相 (縮重度 1) と低温相 (縮重度 2) の同定。右図 : 転移温度の D_{cut} 依存性。青い横線はモンテカルロ法による計算結果を表す。

【10】素粒子標準模型を超えた理論の探索 (山崎)

ウォーキングテクニカラー模型は素粒子標準模型を超えた理論の有効な候補である。この模型は、強結合ゲージ理論のダイナミクスにより、素粒子標準模型では手で与えられていた電弱対称性の自発的破れの起源を説明できる。しかし、この模型を構築するために必要な強結合ゲージ理論には、近似的共形対称性を持つなど、特殊な条件が課されている。山崎は名古屋大学素粒子宇宙起源研究機構 (KMI) を中心とした LatKMI Collaboration の研究者、山脇幸一特別教授、青木保道准教授らと共に、格子ゲージ理論を用いた数値計算から、そのような条件を満たすゲージ理論が存在するかの探索を行った。これまでの 4 (論文 B-14)、8、12 フレーバー SU(3) ゲージ理論の研究から、8 フレーバー理論がそれら条件を満たす可能性がある事を示した (論文 B-15)。その可能性を確かめるため、様々なハドロン質量 (論文 B-16)、 S パラメータ (論文 B-17)、トポロジカルチャージに関係した物理量 (論文 B-18、B-19) を計算し、8 フレーバー理論の性質をより明確に理解するための研究を行った。

【11】コンフォーマル理論の数値的研究 (WMFQCD Collaboration: 吉江)

素粒子標準模型を超える理論の候補であるウォーキングテクニカラー模型は、コンフォーマル対称性をもった理論をベースに構築されると考えられている。WMFQCD Collaboration (岩崎 (筑波・KEK)、石川 (広島)、中山 (Walter Burke Institute)、野秋、Cossu (KEK)、吉江) は、QCD 的な場の理論 (N_f 個の基本表現のフェルミオンが結合した SU(3) ゲージ理論) のコンフォーマル対称性に関する理論構造の解明を目的に研究を行っている。繰り込み群等に基づく理論的な考察と、それを検証する為の格子シミュレーションを研究手段としている。

前年度までに、「有限の IR cutoff を持つコンフォーマル理論」という、新概念を提唱し、その理論の特徴を明らかにしてきた。つまり、

- ゲージ結合定数が IR fixed point (赤外固定点) を持つ理論を、有限の IR cutoff を持つ時空 (例えば、空間方向のサイズが有限な時空) 上で定式化すると、IR cutoff が無い理論ではフェルミオン質量 m_f がゼロでのみ実現する conformal 対称性が、有限の m_f へ広がり、「閉じ込め相」とも「非閉じ込め相」とも異なる「conformal 領域」が存在すること、
- 「conformal 領域」での meson 伝搬関数 $G(t)$ (空間運動量ゼロ) は、変形湯川型

$$G(t) \sim C \exp(-mt) / t^\alpha$$
 となる (閉じ込め相では指数関数型 $G(t) \sim C \exp(-mt)$) こと、
- conformal 領域の真空は、空間方向の Polyakov Loop が非自明な $Z(3)$ 位相を持つ”twisted $Z(3)$ vacuum” であること

を理論的・数値的に示した。(後二者は、conformal 領域の特徴。) QCD 的理論の理論構造としては、

- $N_f=7, 8, 12, 16$ の系でコンフォーマル領域が存在することから、QCD 的理論 (ゼロ温度) の conformal window は $N_f=7-16$ であること、
 - $N_f=2$ の有限温度 QCD においても、高温相に conformal 領域が存在すること
- などを明らかにした。

本年度は、ゼロ温度の QCD 的理論に対して、IR fixed point を同定する新手法を提案し、 $N_f=7, 8, 12, 16$ の格子シミュレーションで実際に IR fixed point を求めた (論文 A-10)。新手法は、繰り込み群に基づく。サイズ (IR cutoff) の異なる時空上の meson 伝搬関数に関する繰り込み群方程式から出発し、伝搬関数 (から定義される有効質量 $m(t)$) のスケールリング則が導かれる。つまり、 $m(t)$ は、時間 t (と有効質量自身) をサイズでスケールすると、IR fixed point 上 ($m_f=0$) では、サイズに依存しないユニバーサルな関数となる。この手法の検証のため、 $N_f=7, 8, 12, 16$ の理論に対して、Iwasaki ゲージ作用と Wilson フェルミオン作用を用いた格子シミュレーションを 3 つの格子サイズ $8^3 \times 32$ 、 $12^3 \times 48$ 、 $16^3 \times 64$ で、結合定数を変えながら行い、「特定の結合定数の時 (のみ)、スケールした meson 有効質量がサイズによらない」ことを示した。つまり、IR fixed point を同定できた。伝搬関数のスケールリング則から、異常質量次元を求める事ができるが、数値的に意味のある結果を得るには、より大きなサイズの計算が必要であり、今後の課題である。

$N_f=2$ 高温相のコンフォーマル的性質の解明についても進展があった (論文 A-11)。昨年度までは、時間方向 (温度方向) のサイズ L_t が空間方向のサイズ L_s より大きい系に対して、conformal 領域の存在を示してきたが、正しい有限温度系である $L_t < L_s$ の系に対しても conformal 領域が存在する事を示した。具体的には、Polyakov loop と meson 有効質量を測定し、 $m_f=0$ で、 $Z(3)$ twisted state が実現している事を示した。

今年度は、さらに domain wall quark を用いたシミュレーションによるコンフォーマル理論の研究も推進し、中間結果を、国際会議で報告した（論文 B-20）。Domain wall quark では、質量のチューニングが不要であり、カイラル対称性の破れ/回復の直接検証が可能である点で、Wilson quark の計算より優位である。計算はゼロ温度 $N_f=8$ で行い、Wilson quark に対して行ってきた前述の解析を行うとともに、ディラックスペクトル密度の解析から異常質量次元を見積もる試みも行っている。

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

陽子および中性子(核子) を結びつけ、原子核を構成している力(核力) は、現象論的には中間子交換によって生じると考えられているが、その起源をより基本的なクォーク・グルーオンの自由度に基づいて理解すること、とりわけ短距離核力における斥力芯の発現機構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一つである。根村、佐々木は、京都大学基礎物理学研究所青木教授、理化学研究所初田主任研究員らと HAL QCD Collaboration を結成し、2核子間の波動関数から核子間のポテンシャルを導き出すという方法を応用して、様々な粒子間のポテンシャルを格子QCDの数値シミュレーションで計算してきた。論文A-12では、PACS-CSによって生成されたゲージ配位のうち、格子間隔 $a=0.09$ fm、空間体積 $L^3=(2.9\text{ fm})^3$ 、 $m_\pi \approx 700$ MeV、 $m_\Omega \approx 1970$ MeVのものを用いて 1S_0 チャネルの $\Omega\Omega$ ポテンシャルの計算を行った。論文A-13では、CP-PACS/JLQCDによって生成されたゲージ配位を用いて、空間体積 $L^3=(1.93\text{ fm})^3$ におけるフレーバーSU(3)対称性が破れたクォーク質量 ($m_\pi/m_K=0.96, 0.90, 0.86$) でのストレンジネス $S=-2$ セクターの結合チャネルバリオン間ポテンシャルの計算を行った。以下では、格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定に関連して行われた2015年度の研究成果を紹介する。

(1) 格子 QCD による物理点でのバリオン間相互作用の決定

格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定は、京速計算機などの大規模な計算機資源を活用して計算が行われた。この研究課題には、ストレンジネスを持たない核力ポテンシャルと、ストレンジネスを持ったハイペロンポテンシャルの両方が含まれる。核力については、これまでに豊富な実験データに基づいて現象論的には精密に調べられているため、この研究課題で用いる方法によって、これまでの核力ポテンシャルに対する理解と矛盾しない結果が得られることを検証するという側面がある。一方、ハイペロンポテンシャルについては、実験データが限られている、もしくはほとんど実験からの情報が無いため、この研究課題で得られる結果は、従来の現象論的なモデルとは異なり、パラメータフリーの予言を与えるという重要な成果が期待される。従って、貴重な計算機資源をできるだけ有効活用するために、2+1フレーバーの格子QCD 計算で引き出すことのできるアイソスピン対称性を持った八重項バリオン間相互作用の情報をすべて求められるように、以下に示す52チャネルの4点相関関

数を一度の計算ジョブで同時に計算するようにプログラムを準備した上で計算を開始している。

$$\begin{aligned}
 & \langle p\bar{n}p\bar{n} \rangle, \\
 & \langle p\Lambda\bar{p}\bar{\Lambda} \rangle, \quad \langle p\Lambda\Sigma^+n \rangle, \quad \langle p\Lambda\Sigma^0p \rangle, \\
 & \langle \Sigma^1 n\bar{p}\bar{\Lambda} \rangle, \quad \langle \Sigma^1 n\Sigma^+n \rangle, \quad \langle \Sigma^1 n\Sigma^0p \rangle, \\
 & \langle \Sigma^0 p\bar{p}\bar{\Lambda} \rangle, \quad \langle \Sigma^0 p\Sigma^+n \rangle, \quad \langle \Sigma^0 p\Sigma^0p \rangle, \\
 & \langle \Lambda\Lambda\bar{\Lambda}\bar{\Lambda} \rangle, \quad \langle \Lambda\Lambda p\bar{\Xi}^- \rangle, \quad \langle \Lambda\Lambda n\bar{\Xi}^0 \rangle, \quad \langle \Lambda\Lambda\Sigma^+\Sigma^- \rangle, \quad \langle \Lambda\Lambda\Sigma^0\Sigma^0 \rangle, \\
 & \langle p\Xi^- \bar{\Lambda}\bar{\Lambda} \rangle, \quad \langle p\Xi^- p\bar{\Xi}^- \rangle, \quad \langle p\Xi^- n\bar{\Xi}^0 \rangle, \quad \langle p\Xi^- \Sigma^+\Sigma^- \rangle, \quad \langle p\Xi^- \Sigma^0\Sigma^0 \rangle, \quad \langle p\Xi^- \Sigma^0\bar{\Lambda} \rangle, \\
 & \langle n\Xi^0 \bar{\Lambda}\bar{\Lambda} \rangle, \quad \langle n\Xi^0 p\bar{\Xi}^- \rangle, \quad \langle n\Xi^0 n\bar{\Xi}^0 \rangle, \quad \langle n\Xi^0 \Sigma^+\Sigma^- \rangle, \quad \langle n\Xi^0 \Sigma^0\Sigma^0 \rangle, \quad \langle n\Xi^0 \Sigma^0\bar{\Lambda} \rangle, \\
 & \langle \Sigma^+\Sigma^-\bar{\Lambda}\bar{\Lambda} \rangle, \quad \langle \Sigma^+\Sigma^-\bar{p}\bar{\Xi}^- \rangle, \quad \langle \Sigma^+\Sigma^-\bar{n}\bar{\Xi}^0 \rangle, \quad \langle \Sigma^+\Sigma^-\bar{\Sigma}^+\Sigma^- \rangle, \quad \langle \Sigma^+\Sigma^-\bar{\Sigma}^0\Sigma^0 \rangle, \quad \langle \Sigma^-\Sigma^-\bar{\Sigma}^0\bar{\Lambda} \rangle, \\
 & \langle \Sigma^0\Sigma^0\bar{\Lambda}\bar{\Lambda} \rangle, \quad \langle \Sigma^0\Sigma^0 p\bar{\Xi}^- \rangle, \quad \langle \Sigma^0\Sigma^0 n\bar{\Xi}^0 \rangle, \quad \langle \Sigma^0\Sigma^0 \Sigma^+\Sigma^- \rangle, \quad \langle \Sigma^0\Sigma^0 \Sigma^0\Sigma^0 \rangle, \\
 & \quad \langle \Sigma^0\Lambda p\bar{\Xi}^- \rangle, \quad \langle \Sigma^0\Lambda n\bar{\Xi}^0 \rangle, \quad \langle \Sigma^0\Lambda\Sigma^+\Sigma^- \rangle, \quad \langle \Sigma^0\Lambda\Sigma^0\bar{\Lambda} \rangle, \\
 & \langle \Xi^- \Lambda\bar{\Xi}^- \bar{\Lambda} \rangle, \quad \langle \Xi^- \Lambda\Sigma^-\bar{\Xi}^0 \rangle, \quad \langle \Xi^- \Lambda\Sigma^0\bar{\Xi}^- \rangle, \\
 & \langle \Sigma^-\Xi^0\bar{\Xi}^- \bar{\Lambda} \rangle, \quad \langle \Sigma^-\Xi^0\Sigma^-\bar{\Xi}^0 \rangle, \quad \langle \Sigma^-\Xi^0\Sigma^0\bar{\Xi}^- \rangle, \\
 & \langle \Sigma^0\Xi^-\bar{\Xi}^- \bar{\Lambda} \rangle, \quad \langle \Sigma^0\Xi^-\Sigma^-\bar{\Xi}^0 \rangle, \quad \langle \Sigma^0\Xi^-\Sigma^0\bar{\Xi}^- \rangle, \\
 & \langle \Xi^-\Xi^0\bar{\Xi}^- \bar{\Xi}^0 \rangle,
 \end{aligned}$$

2015年度中では、上記八重項に加えて、強い相互作用による崩壊チャネルの開かない（従って現在の方法で安全にポテンシャルを求められる） $\Omega\Omega$ チャネルも加えた大規模計算がすすめられた。データが膨大であるため解析もまだ進行中であるが、予備的な結果の一例として、 ΛN の中心力及びテンソル力ポテンシャルを図14に示す。

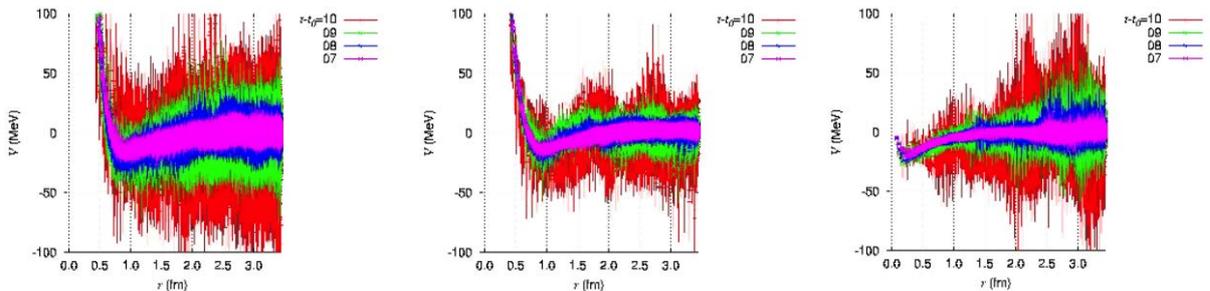


図14：体積 $(96a)^4 \approx (8.2 \text{ fm})^4$ 、格子間隔 $a \approx 0.085 \text{ fm}$ 、 $(m_\pi, m_K) \approx (146, 525) \text{ MeV}$ に対応するほぼ物理点上で計算された、 ΛN - ΛN 対角成分のポテンシャルを示す。横軸は2体のバリオン間の距離を表す。色の違いは格子上で測定された虚時間の違いを示している。左： 1S_0 チャネルにおける中心力ポテンシャル。中央： 3S_1 - 3D_1 チャネルにおける中心力ポテンシャル。右： 3S_1 - 3D_1 チャネルにおけるテンソル力ポテンシャル。

【13】 格子QCD 研究用データグリッドJLDG/ILDG の運用（吉江、山崎、藏増）

JLDG (Japan Lattice Data Grid) は、国内の計算素粒子物理研究グループが日々の研究データを管理・共有する為のデータグリッドである。主システムは、国内の主要な格子QCD研究拠点9箇所に設置したファイルサーバを国立情報学研究所が提供するSINET VPNで接続し、グリッドファイルシステムソフトウェアGfarmで束ねたファイルシステムである。どの拠点からアクセスしても同一のファイルシステムが見えるので、「ある拠点のスパコンで生成したデータ（格子QCD配位など）をJLDGに投入・蓄積し、別拠点で読み出して、その拠点のスパコンで再解析（物理量の計算）をおこなう」といったデータ共有を、容易におこなう事ができる。また、サブシステムとして、HPCI共用ストレージとの連携システムとILDG (International Lattice Data Grid) との接続システムを備えている（図15参照）。JLDGの運用は、各拠点の代表者、研究グループの代表者、システム開発者、管理運用支援の委託先の業者の担当者、をメンバーとするJLDGチームが行っており、筑波大学からは、建部(高性能計算システム研究部門)、天笠（計算情報学研究部門）と吉江、山崎が参加している。

JLDGは2005年に開発を開始し、2007年から運用している。JLDGは、一昨年度まではシステムの改良や新機能の実装をおこなって、その利便性が向上してきたが、昨年度からは、システムの増強・安定運用に主眼が移ってきている。また、国内の複数の大きな研究グループが研究インフラとしてJLDGを使用している。この事から、JLDGが実用システムとして、一定の完成の域に達したと判断し、この段階でのシステムとその運用についての記録と国内外への広報の目的で、国際会議CHEP2015にてJLDGの総合報告をおこなった（論文B-22）。また、今年度は、以下のシステム増強と安定運用の為の活動をおこなった。

- ファイルサーバの増強：前年度28サーバ5.0PBから39サーバ7.5PBへ
- 管理機器更新（JLDG 2件、ILDG 2件）
- Gfarm更新（4回）
- SINET5への移行対応：一部拠点で1 Gbpsから10 Gbpsへ増速
- ファイルサーバの個別障害対応

ILDGは、世界5地域に構築されたLattice QCD用のデータグリッドを、Lattice QCDの基礎データ（配位）の共有を目的として、相互運用を可能にするGrid of Gridsである。JLDGはILDGの日本地域グリッドである。また、日本からは、ILDGのboard memberとして藏増が、Metadata working group memberとして吉江が参加している。また、もうひとつのMiddleware working groupには、天笠がメンバーとして参加するとともに、吉江もオブザーバとして参加しユーザーサイドからの提言等をおこなっている。ILDGは、2007年の運用開始以来、細かな改良はあるものの、主要部分は安定した運用を続けている。

ILDGには、運用開始当初から「公開されている格子QCD配位アンサンブルの利用状況を把握する仕組みが無い」事が問題であった。論文の引用・被引用の記録とは別に、データの引用・被引用関係の記録を蓄積できれば、それをを用いて、その配位データの有用性を測る資料とな

りうるし、ひいては、データ共有の為のILDGの有用性を示す資料ともなりうる。この事は、格子QCD配位データに限った問題ではなく、多くの研究分野が、データの引用・被引用関係を把握するニーズを持っている。この様な背景の下で、学术论文の出版界で広く用いられている『DOI (Digital Object Identifier) 登録』の仕組みを研究データにも用いる試みが始まっている。ILDGでも、『格子QCDアンサンブルへのDOI登録』を行い、High Energy Physics 分野の最大の情報システムであるINSPIRE-HEPを用いて、アンサンブルの引用・被引用関係を把握できる仕組みを構築する提案がなされ、2015年4月のILDG workshopで、各地域グリッドで検討する事となった。この合意を受け、日本では、天笠、松古 (KEK)、吉江が中心となって、DOI登録の体制面の検討 (DOI登録機関との協議、関係機関との協議とDOI登録実施体制とフローの検討) をおこなうとともに、DOI登録に必要な実作業 (Metadataとlanding pageのILDG ensemble/configuration metadataからの半自動生成) の試行に着手した。

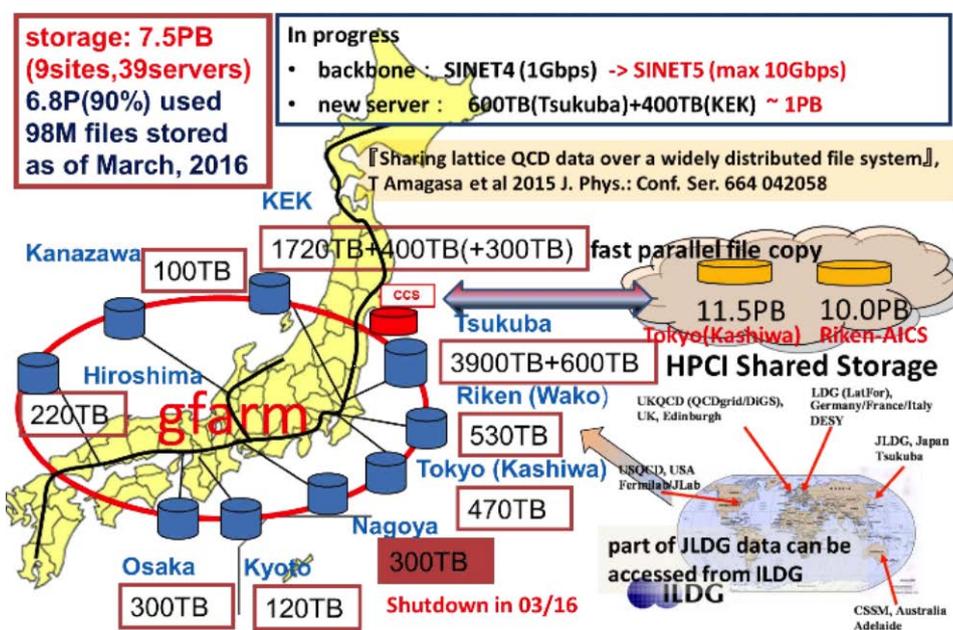


図15：JLDGの概略図。現在9サイト39サーバを運用している。

【14】 格子 QCD 共通コード開発 (金谷、谷口、根村、浮田、滑川)

昨年度に引き続き、格子 QCD 共通コード Bridge++の開発を進めた (論文 B-23、B-24)。格子 QCD 共通コード Bridge++は、QCD を含む格子ゲージ理論シミュレーションのための汎用コードセットである。様々な格子作用やアルゴリズムを適用可能で、ノート PC から超並列計算機まで幅広いアーキテクチャに対応している。2012 年 7 月に Bridge++ ver. 1.0.0 を公開して以降、継続してコードの改善、拡張を行っている (<http://bridge.kek.jp/Lattice-code/>)。素粒子理論グループからは、金谷、谷口、根村、浮田、滑川が参加している。

本年度は、一般化フェルミオンの追加、FFT 対応、XML 形式の導入などを行った。これらの変更を含めた Bridge++ ver. 1.3.0 へのメジャーアップデートが 2015 年 10 月に実施された。

その後も、コードの細かい改定、改良が進められている。最新版は ver. 1.3.2 である。なお、共通コードを使用した研究論文が、今年度新たに 9 本追加された。通算 13 本の論文が共通コードを元に発表されている。

4. 教育

【1】 修士論文

1. 賀数淳平、「 $N_f=2+1$ 格子QCDによる微小な運動量移行での π 中間子形状因子計算へ向けた基礎研究」

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

【1】 外部資金

1. 青木慎也（代表）、高性能汎用計算機高度利用事業費補助金、平成23年度採択、「HPCI戦略プログラム分野5『物質と宇宙の起源と構造』」、397,910千円
2. 青木慎也（代表）、一般受託研究、平成26年度採択、「ポスト『京』で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発」重点課題⑨「宇宙の基本法則と進化の解明」、46,924千円
3. 金谷和至（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(C)、平成27年度採択、「有限温度・有限密度クォーク物質の物性と相構造」、1,000千円
4. 蔵増嘉伸（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」、1,000千円
5. 蔵増嘉伸（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(B)、平成27年度採択、「テンソルネットワーク形式による格子ゲージ理論の研究」、3,500千円
6. 石塚成人（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(B)、平成27年度採択、「格子QCDによるK中間子崩壊の直接的CP非保存パラメータの決定」、4,100千円
7. 山崎剛（代表）、科学研究費補助金・若手研究(B)、平成25年度採択、「量子色力学を基にしたクォーク多体系としての原子核の研究」、700千円
8. 滑川裕介（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(C)、平成27年度採択、「格子量子色力学による新たなハドロン存在形態の解明」、1,170千円

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. Takeshi Yamazaki, Ken-ichi Ishikawa, Yoshinobu Kuramashi, and Akira Ukawa, “Study of quark mass dependence of binding energy for light nuclei in 2+1 flavor lattice QCD”, Phys. Rev. D92 (2015) ref. 014501.
2. N. Ishizuka, K.-I. Ishikawa, A. Ukawa, and T. Yoshié, “Calculation of $K \rightarrow \pi\pi$ decay amplitudes with improved Wilson fermion action in lattice QCD”, Phys. Rev. D92 (2015) ref. 074503.
3. R. Iwami, S. Ejiri, K. Kanaya, Y. Nakagawa, D. Yamamoto, and T. Umeda, “Multipoint reweighting method and its applications to lattice QCD”, Phys. Rev. D92, No.9 (2015) ref. 094507.
4. A. Francis, O. Kaczmarek, M. Laine, T. Neuhaus, and H. Ohno, “Critical point and scale setting in SU(3) plasma: An update”, Phys. Rev. D 91, No. 9 (2015) ref. 096002.
5. H.-T. Ding, S. Mukherjee, H. Ohno, P. Petreczky, and H.-P. Schadler, “Diagonal and off-diagonal quark number susceptibilities at high temperatures”, Phys. Rev. D92, No. 7 (2015) ref. 074043.
6. A. Bazavov, H.-T. Ding, P. Hegde, O. Kaczmarek, F. Karsch, E. Laermann, Swagato Mukherjee, H. Ohno, P. Petreczky, C. Schmidt, S. Sharma, W. Soeldner, and M. Wagner, “Curvature of the freeze-out line in heavy ion collisions”, Phys. Rev. D93 (2016) ref. 014512.
7. A. Francis, O. Kaczmarek, M. Laine, T. Neuhaus, and H. Ohno, “Nonperturbative estimate of the heavy quark momentum diffusion coefficient”, Phys. Rev. D92, No. 11 (2015) ref. 116003.
8. X.-Y. Jin, Y. Kuramashi, N. Nakamura, S. Takeda, and A. Ukawa, “Curvature of the critical line on the plane of quark chemical potential and pseudoscalar meson mass for three-flavor QCD”, Phys. Rev. D92 (2015) ref. 114511.
9. A. Nakamura, S. Oka, and Y. Taniguchi, “QCD phase transition at real chemical potential with canonical approach”, Journal of High Energy Physics, 2016(2), pp. 1-19.
10. K.-I. Ishikawa, Y. Iwasaki, Yu Nakayama, and T. Yoshié, “IR fixed points in SU(3) gauge Theories”, Phys. Lett. B748 (2015) 289.
11. K. -I. Ishikawa, Y. Iwasaki, Yu Nakayama, and T. Yoshié, “Conformal Properties in High Temperature QCD”, arXiv:1511.03411 [hep-lat].

12. M. Yamada, K. Sasaki, S. Aoki, T. Doi, T. Hatsuda, Y. Ikeda, T. Inoue, N. Ishii, K. Murano, and H. Nemura for HAL QCD Collaboration, “ $\Omega\Omega$ interaction from 2+1 flavor lattice QCD”, PTEP 2015, No. 7, 071B01 (2015).
13. K. Sasaki, S. Aoki, T. Doi, T. Hatsuda, Y. Ikeda, T. Inoue, N. Ishii, and K. Murano for HAL QCD Collaboration, “Coupled-channel approach to strangeness $S = -2$ baryon-bayron interactions in lattice QCD”, PTEP 2015, no. 11, 113B01 (2015).

B) 査読無し論文

1. PACS Collaboration: K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yamazaki, and T. Yoshié, “2+1 Flavor QCD Simulation on a 96^4 Lattice”, Proceeding of Science (LATTICE 2015) 075.
2. PACS Collaboration: K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yamazaki, and T. Yoshié, “Mass and Axial Current Renormalization in the Schrödinger Functional Scheme for the RG-Improved Gauge and the Stout Smeared $O(a)$ -Improved Wilson Quark Actions”, Proceeding of Science (LATTICE 2015) 271.
3. H. Suno, Y. Nakamura, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, Y. Futamura, A. Imakura, and T. Sakurai, “Eigenspectrum Calculation of the Non-Hermitian $O(a)$ -Improved Wilson-Dirac Operator using the Sakurai-Sugiura Method”, Proceeding of Science (LATTICE 2015) 026.
4. Hirokazu Kobayashi, Yoshifumi Nakamura, Shinji Takeda, and Yoshinobu Kuramashi, “Optimization of Lattice QCD with CG and Multi-Shift CG on Intel Xeon Phi Coprocessor”, Proceeding of Science (LATTICE 2015) 029.
5. Takeshi Yamazaki for PACS Collaboration, “Light Nuclei and Nucleon Form Factors in $N_f=2+1$ Lattice QCD”, Proceedings of Science (LATTICE 2015) 081.
6. Ryo Iwami, S. Ejiri, K. Kanaya, Y. Nakagawa, T. Umeda, D. Yamamoto (WHOT-QCD Collaboration), “Multipoint reweighting method and beta functions for the calculation of QCD equation of state”, Proceeding of Science (LATTICE 2014) 222.
7. T. Umeda, S. Ejiri, R. Iwami, and K. Kanaya, “Towards the QCD equation of state at the physical point using Wilson fermion”, Proceeding of Science (LATTICE 2015) 209.

8. H. Ohno, H.-T. Ding, S. Mukherjee, O. Kaczmarek, and H.-T. Shu, “Charmonia and bottomonia at finite temperature on large quenched lattice”, *Proceeding of Science (LATTICE 2015)* 175.
9. S. Takeda, X.-Y. Jin, Y. Kuramashi, N. Nakamura, and A. Ukawa, “Phase structure of $N_f=3$ QCD at finite temperature and density by Wilson-Clover fermions”, *Proceeding of Science (LATTICE 2015)* 145.
10. N. Nakamura, X.-Y. Jin, Y. Kuramashi, S. Takeda, and A. Ukawa, “Towards the continuum limit of the critical endline of finite temperature QCD”, *Proceeding of Science (LATTICE 2015)* 160.
11. A. Nakamura, S. Oka, A. Suzuki, and Y. Taniguchi, “Study of high density phase transition in lattice QCD with canonical approach”, *Proceeding of Science (LATTICE 2015)* 165.
12. A. Nakamura, S. Oka, A. Suzuki, and Y. Taniguchi, “Calculation of high-order cumulants with canonical ensemble method in lattice QCD”, *Proceeding of Science (LATTICE 2015)* 168.
13. R. Fuluda, A. Nakamura, S. Oka, S. Sakai, A. Suzuki, and Y. Taniguchi, “Beating the sign problem in finite density lattice QCD”, *Proceeding of Science (LATTICE 2015)* 208.
14. Yasumichi Aoki, Tatsumi Aoyama, Ed Bennett, Masafumi Kurachi, Toshihide Maskawa, Kohtaroh Miura, Kei-ichi Nagai, Hiroshi Ohki, Enrico Rinaldi, Akihiro Shibata, Koichi Yamawaki, Takeshi Yamazaki (LatKMI Collaboration), “SU(3) gauge theory with four degenerate fundamental fermions on the lattice”, *arXiv:1512.00957*.
15. Yasumichi Aoki, Tatsumi Aoyama, Ed Bennett, Masafumi Kurachi, Toshihide Maskawa, Kohtaroh Miura, Kei-ichi Nagai, Hiroshi Ohki, Enrico Rinaldi, Akihiro Shibata, Koichi Yamawaki, Takeshi Yamazaki (LatKMI Collaboration), “Walking and conformal dynamics in many-flavor QCD”, *arXiv:1601.02287*.
16. Yasumichi Aoki, Tatsumi Aoyama, Ed Bennett, Masafumi Kurachi, Toshihide Maskawa, Kohtaroh Miura, Kei-ichi Nagai, Hiroshi Ohki, Enrico Rinaldi, Akihiro Shibata, Koichi Yamawaki, Takeshi Yamazaki (LatKMI Collaboration), “Lattice study of the scalar and baryon spectra in many-flavor QCD”, *arXiv:1510.07373*.
17. Yasumichi Aoki, Tatsumi Aoyama, Ed Bennett, Masafumi Kurachi, Toshihide Maskawa, Kohtaroh Miura, Kei-ichi Nagai, Hiroshi Ohki, Enrico Rinaldi, Akihiro Shibata, Koichi Yamawaki, Takeshi Yamazaki (LatKMI Collaboration),

- “S-parameter and vector decay constant in QCD with eight fundamental fermions”, arXiv:1602.00796.
18. Yasumichi Aoki, Tatsumi Aoyama, Ed Bennett, Masafumi Kurachi, Toshihide Maskawa, Kohtaroh Miura, Kei-ichi Nagai, Hiroshi Ohki, Enrico Rinaldi, Akihiro Shibata, Koichi Yamawaki, Takeshi Yamazaki (LatKMI Collaboration), “Topological insights in many-flavor QCD on the lattice”, arXiv:1510.05863.
 19. Yasumichi Aoki, Tatsumi Aoyama, Ed Bennett, Masafumi Kurachi, Toshihide Maskawa, Kohtaroh Miura, Kei-ichi Nagai, Hiroshi Ohki, Enrico Rinaldi, Akihiro Shibata, Koichi Yamawaki, Takeshi Yamazaki (LatKMI Collaboration), “Topological observables in many-flavour QCD”, arXiv:1601.04687.
 20. J. Noaki, G. Cossu, K-I. Ishikawa, Y. Iwasaki, and T. Yoshié, “Study of the conformal region of the SU(3) gauge theory with domain-wall fermions”, Proceeding of Science (LATTICE 2015) 312.
 21. S. Aoki, “Hadron Interactions from lattice QCD”, EPJ Web Conf. 113 (2016) 01009.
 22. T. Amagasa, S. Aoki, Y. Aoki, T. Aoyama, T. Doi, K. Fukumura, N. Ishii, K.-I. Ishikawa, H. Jitsumoto, H. Kamano, Y. Konno, H. Matsufuru, Y. Mikami, K. Miura, M. Sato, S. Takeda, O. Tatebe, H. Togawa, A. Ukawa, N. Ukita, Y. Watanabe, T. Yamazaki, and T. Yoshié, “Sharing lattice QCD data over a widely distributed file system”, J. Phys.: Conf. Ser. 664 (2015) 4, 042058 (CHEP2015).
 23. H. Matsufuru, S. Aoki, T. Aoyama, K. Kanaya, S. Motoki, Y. Namekawa, H. Nemura, Y. Taniguchi, S. Ueda, and N. Ukita, “OpenCL vs OpenACC: Lessons from Development of Lattice QCD Simulation Code”, Procedia Computer Science Volume 51 (2015) 1313.
 24. S. Motoki, S. Aoki, T. Aoyama, K. Kanaya, H. Matsufuru, Y. Namekawa, H. Nemura, Y. Taniguchi, S. Ueda, and N. Ukita, “Lattice QCD code Bridge++ on arithmetic accelerators”, Proceeding of Science (LATTICE 2015) 040.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Yoshinobu Kuramashi, 「Tensor Network Scheme for Lattice Gauge Theories」, XXVII IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2015), (Indian Institute of Technology Guwahati, Assam, India, December 2-5, 2015).

2. Hiroshi Ohno, 「Charmonia and bottomonia in hot medium and heavy quark diffusion from lattice QCD at finite temperature」, New Progress in Heavy Ion Collision: What is Hot in the QGP (CCNU, Wuhan, China, October 5-9, 2015).
3. Hiroshi Ohno, 「Charmonium and bottomonium spectral functions at finite temperature」, RBRC Workshop on Lattice Gauge Theories 2016 (BNL, New York, USA, March 9-11, 2016).
4. Takeshi Yamazaki, 「Light nuclei from 2+1 flavor lattice QCD」, Lattice Nuclei Nuclear physics and QCD – Bridging the gap – (European Centre for Theoretical Studies in Nuclear Physics and Related Areas (ECT*), Italy, June 6-10, 2015).
5. Takeshi Yamazaki, 「Light nuclei and nucleon form factors in $N_f=2+1$ lattice QCD」, The 5th International Workshop on Lattice Hadron Physics (LHPV) (Conference Centre of the Cairns Colonial Club Resort, Australia, June 20-24, 2015).
6. Takeshi Yamazaki, 「Nucleon form factors and light nuclei in $N_f=2+1$ lattice QCD」, RBRC Workshop on Lattice Gauge Theories 2016 (Brookhaven National Laboratory, USA, March 9-11, 2016).
7. S. Aoki, 「Hadron Interactions from lattice QCD」, 21th International Conference on Few-Body Problems in Physics, (Chicago, USA, May 18-22, 2015).
8. S. Aoki, 「Nuclear forces from lattice QCD」, ECT* Workshop on “Lattice Nuclei Nuclear Physics and QCD - Bridging the gap”, (Trento, Italy, July 6-10, 2015).
9. S. Aoki, 「Comparative studies for baryon interactions with HAL QCD method and Lüscher’s method」, Long-term and Nishinomiya-Yukawa Memorial International Workshop on “Computational Advances in Nuclear and Hadron Physics”, (YITP, Kyoto, Japan, September 21-October 30, 2015).
10. S. Aoki, 「Recent developments and challenges in lattice QCD」, International Symposium “RIKKYO MathPhys 2016”, (Rikkyo University, Tokyo, Japan, January 9-11, 2016).
11. S. Aoki, 「New strategies with HAL QCD potential method」, Joint HAL QCD-CalLat mini-workshop on lattice QCD for NP, (LBL, Berkeley, USA, January 27-29, 2016).
12. S. Aoki, 「Hadron interactions at heavier quark masses in lattice QCD –Are deuteron and di-neutron bound? –」, YITP and IOPP Joint workshop on Heavy Ion Physics, (CCNU, Wuhan, China, February 20, 2016).

B) 一般講演

1. Y. Taniguchi, 「QCD energy momentum tensor at finite temperature using gradient flow」, RBRC Workshop on Lattice Gauge Theories 2016 (BNL, NY, USA, March 9-11, 2016).
2. Hiroshi Ohno, 「Charmonia and bottomonia at finite temperature on large quenched lattice」, The 33rd International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2015) (Kobe International Conference Center, Kobe, Japan, July 14-18, 2015).
3. Hiroshi Ohno, 「Charmonium and bottomonium spectral functions from lattice QCD at finite temperature」, The XXV International Conference on Ultrarelativistic Nucleus-Nucleus Collisions (Quark Matter 2015) (Kobe Fashion Mart, Kobe, Japan, September 27-October 3, 2015).
4. Asobu Suzuki, 「Calculation of high-order cumulants with canonical ensemble method in lattice QCD」, The 33rd International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2015), (Kobe International Conference Center, Kobe, Japan, July 14-18, 2015).
5. Asobu Suzuki, 「Study of finite density phase transition with Canonical approach」, The 13th international eXtreme QCD conference (XQCD 2015), (CCNU, Wuhan, China, September 21-23, 2015).
6. Asobu Suzuki, 「Calculation of high-order cumulants with canonical ensemble method in lattice QCD」, The XXV international conference on ultra-relativistic heavy ion collisions (Quark Matter 2015), (Kobe Fashion Mart, Kobe, Japan, September 27-October 3, 2015).
7. Asobu Suzuki, 「Calculation of Hadronic observable with Canonical approach in finite density lattice QCD」, RBRC Workshop on Lattice Gauge Theories 2016, (BNL, NewYork, USA, March 9-11, 2016).
8. Yusuke Taniguchi, 「Study of high density phase transition in lattice QCD with canonical approach」, The 33rd International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice2015), (Kobe Convention Center, Kobe, Japan, July 14- 18, 2015).
9. Yusuke Taniguchi, 「Study of high density phase transition in lattice QCD with canonical approach」, XXV INTERNATIONAL CONFERENCE ON ULTRA-RELATIVISTIC NUCLEUS-NUCLEUS COLLISIONS (Quark Matter 2015), (Kobe, Fashion Mart, Japan, September 27-October 3, 2015).
10. Yusuke Taniguchi, 「Study of high density lattice QCD with canonical approach」, Symposium on 'Quarks to Universe in Computational Science (QUCS 2015)', (Nara Kasugano International Forum IRAKA, Nara, Japan, November 4-8, 2015).

11. Takeshi Yamazaki, 「Light nuclei and nucleon form factors in $N_f=2+1$ lattice QCD」, The 33rd International Symposium on lattice field theory (Lattice 2015) (Kobe International Conference Center, Japan, July 14-18, 2015).
12. Takeshi Yamazaki, 「Light nuclei and nucleon form factors from lattice QCD」, Symposium on Quarks to Universe in Computational Science (QUCS 2015) (Nara Kasugano International Forum IRAKA, Japan, November. 4-8, 2015).
13. Tomoteru Yoshié, 「Sharing lattice QCD data over a widely distributed file system」 21st International Conference on Computing in High Energy and Nuclear Physics (CHEP2015) (Okinawa, Japan, April 13-17, 2015).
14. Tomoteru Yoshié, 「MetadataWorking Group Report」 23th Workshop of International Lattice Data Grid (video conference hosted by CSSM, Adelaide, Australia, April 24, 2015).
15. H. Nemura for HAL QCD Collaboration, 「An implementation of hybrid parallel CUDA code for the hyperonic nuclear forces」, The 33rd International Symposium on Lattice Field Theory, (Kobe, Japan, July 14-18, 2015).
16. H. Nemura for HAL QCD Collaboration, 「A fast algorithm for lattice hyperonic potentials」, The 12th International Conference on Hypernuclear and Strange Particle Physics, (Tohoku University, Sendai, Japan, Sep. 7-12, 2015).
17. H. Nemura for HAL QCD Collaboration, 「Hyperonic lattice QCD potentials and hypernuclear few-body problems」, YIPQS Long-term and Nishinomiya-Yukawa Memorial International Workshop, Computational Advances in Nuclear and Hadron Physics (CANHP 2015), (YITP, Kyoto, Japan, September 21-Oct. 30, 2015).
18. H. Nemura for HAL QCD Collaboration, 「Algorithm, benchmarks, and hyperon potentials with strangeness $S=-1$ at almost physical point」, Symposium on 'Quarks to Universe in Computational Science (QUCS 2015)', (Nara Prefectural New Public Hall, Nara, Japan, November 4-8, 2015).
19. K. Sasaki for HAL QCD Coll., 「First results on baryon interactions from lattice QCD with physical masses (3) –Strangeness $S=-2$ two-baryon system–」, The 33rd International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2015) (Kobe, Japan, July 14-18, 2015).
20. K. Sasaki for HAL QCD Coll., 「Results from HALQCD on light nuclei and exotic states」, EMMI workshop on anti-matter, hyper-matter and exotica production at the LHC (CERN, Geneva, Switzerland, July 20-22, 2015).

21. K. Sasaki for HAL QCD Coll., 「Coupled channel baryon-baryon interactions on the lattice」, The 12th International Conference on Hypernuclear and Strange Particle Physics (HYP2015), (Tohoku University, Sendai, Japan, September 7-12, 2015).
22. K. Sasaki for HAL QCD Coll., 「Lattice QCD studies of baryon-bayon interactions and dibaryon states」, ELPH workshop C013 “Meson Production and Meson-Baryon Interaction”, (Tohoku University, Sendai, Japan, September 12-14, 2015).
23. K. Sasaki for HAL QCD Coll., 「Physical point lattice QCD simulation on the $S=-2$ baryon-baryon interactions」, Symposium on Quarks to Universe in Computational Science (QUCS 2015), (Nara, Japan, November 4-8, 2015).
24. Y.Namekawa, 「Comparative study of topological charge in lattice QCD」, Quarks to Universe in Computational Science (QUCS2015) (Nara, Japan, November 4-8, 2015).

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 大野浩史, 「Quarkonia at finite temperature」, 研究会「有限温度密度系の物理と格子QCDシミュレーション」(筑波大学計算科学研究センター, つくば, 2015年9月5日).
2. 吉江友照, 「計算物理学におけるデータシェアリングの現状と課題」, データシェアリングを利用した科学技術に関する勉強会(文科省, 東京, 2015年5月13日).

B) その他の発表

1. 谷口裕介, 石見涼, 梅田貴士, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 鈴木博, 若林直輝, 「Gradient flowで見る有限温度QCD」, 日本物理学会第71回年次大会(東北学院大, 仙台, 2016年3月19日-22日).
2. 大野浩史, 「有限温度格子 QCD によるチャーモニウム及びボトモニウムスペクトル関数の研究」, 日本物理学会 2015 年秋季大会(大阪市立大学杉本キャンパス, 大阪, 2015 年 9 月 25 日-28 日).
3. 谷口裕介, 「QCD phase transition at real chemical potential with canonical approach」, JICFUS セミナー(京都大学基礎物理学研究所, 京都, 2015 年 6 月 3 日).
4. 谷口裕介, 「カノニカル法で発見した格子 QCD の有限密度相転移現象の研究」, 日本物理学会 2015 年秋季大会(大阪市立大学杉本キャンパス, 大阪, 2015 年 9 月 25 日-28 日).
5. 鈴木遊, 「カノニカル法を用いた有限密度格子 QCD における相転移現象の研究」, 日本物理学会 2015 年秋季大会(大阪市立大学杉本キャンパス, 大阪, 2015 年 9 月 25 日-28 日).

6. 鈴木遊, 「カノニカル法を用いた有限密度格子QCDにおける相転移現象の研究」, 原子核三者若手夏の学校 (ホテルたつき, 愛知, 2015年8月17日-22日).
7. 鈴木遊, 「カノニカル法を用いた有限密度格子QCDにおける物理量の計算とその体積依存性の研究」, 日本物理学会第71回年次大会 (東北学院大, 仙台, 2016年3月19日-22日).
8. 山崎剛, 石川健一, 藏増嘉伸, 佐々木勝一, 宇川彰 for PACS Collaboration, 「改良されたウィルソンフェルミオン作用を用いた2+1フレーバーQCDによる核子形状因子の研究」, 日本物理学会2015年秋季大会 (大阪市立大学杉本キャンパス, 大阪, 2015年9月25日-28日).
9. 山崎剛, 藏増嘉伸, 石川健一, 浮田尚哉, 「格子QCD を用いた原子核構造計算へ向けた基礎研究」, HPCI 第2 回成果報告会 (日本科学未来館, 東京, 2015年10月26日).
10. 山崎剛, 石川健一, 藏増嘉伸, 宇川彰 for PACS Collaboration, 「 $N_f=2+1$ 格子QCDによる軽原子核束縛エネルギーの計算」, 日本物理学会第71回年次大会 (東北学院大, 仙台, 2016年3月19日-22日).
11. 賀数淳平, 「 $N_f=2+1$ 格子QCDによる微小な運動量移行での π 中間子形状因子の研究」, 日本物理学会第71回年次大会 (東北学院大, 仙台, 2016年3月19日-22日).
12. 吉江友照, 「格子シミュレーションによるコンフォーマル理論の研究」, 筑波大学計算科学研究センター学際共同利用成果報告会 (筑波大学, つくば, 2015年10月20日).
13. 吉江友照, 「計算素粒子物理データ管理・共有基盤JLDG」, HPCIシステム利用研究課題成果報告会 (科学未来館, 東京, 2015年10月26日).
14. 吉江友照, 「HEPnet-J/sc報告」, 2015年度HEPnet-Jユーザー会 (広島大学, 広島, 2015年11月24日-25日).
15. 根村英克 for HAL QCD Collaboration, 「ハイパー核の少数多体系計算に向けた格子QCDによるハイペロンポテンシャルの研究」, 日本物理学会2015年秋季大会 (大阪市立大学杉本キャンパス, 大阪, 2015年9月25日-28日).
16. 根村英克 for HAL QCD Collaboration, 「格子QCDによるハイペロンポテンシャルと軽い原子核への応用」, 新学術領域「実験と観測で解き明かす中性子星の核物質」の第4回研究会 (湘南国際村センター, 2015年9月17日-18日).
17. 根村英克 for HAL QCD Collaboration, 「ハイパー核の少数多体系計算に向けたHAL QCD法によるハイペロンポテンシャルの研究」, 日本物理学会第71回年次大会 (東北学院大, 仙台, 2016年3月19日-22日).
18. 佐々木健志 for HAL QCD Collab., 「Coupled channel approach to two-baryon interactions from QCD」, ストレンジネス・ハドロン合同研究会 (KEK東海キャンパス, 2015年8月3日-7日).

19. 佐々木健志 for HAL QCD Collab., 「物理点格子QCDによるバリオン間相互作用 - S=-2 セクター -」, 日本物理学会2015年秋季大会 (大阪市立大学杉本キャンパス, 大阪, 2015年9月25日-28日).
20. 佐々木健志 for HAL QCD Collab., 「物理点格子QCDによるバリオン間相互作用[2] - S=-2 セクター -」, 日本物理学会第71回年次大会 (東北学院大, 仙台, 2016年3月19日-22日).
21. 佐々木健志 for HAL QCD Collab., 「Dibaryon searches from lattice QCD」, 素粒子・原子核・宇宙「京からポスト京に向けて」シンポジウム (ワンテラスコモンホール, 東京都千代田区神田, 2016年3月30日-31日).

(4) 著書、解説記事等

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

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

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 第 33 回格子上の場の理論国際会議組織委員会主催 (組織委員長: 藏増嘉伸), The XXXIII International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2015), 2015 年 7 月 14 日-18 日, 神戸国際会議場, 神戸.
2. 筑波大学計算科学研究センター/理研 BNL 研究センター共催, RBRC Workshop on Lattice Gauge Theories 2016, 2016 年 3 月 9 日-11 日, Brookhaven National Laboratory, New York, USA.
3. 筑波大学計算科学研究センター/計算基礎科学連携拠点(JICFuS)主催, 研究会「有限温度密度系の物理と格子 QCD シミュレーション」, 2015 年 9 月 5 日, 筑波大学計算科学研究センター, つくば.

4. 筑波大学計算科学研究センター主催,
Advanced Summer School on Lattice Gauge Theories,
2015 年 8 月 26 日-28 日, 筑波大学計算科学研究センター, つくば.

9. 管理・運営

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

10. 社会貢献・国際貢献

11. その他

II. 宇宙物理研究部門

1. メンバー

教授	梅村 雅之
教授	相川 祐理
准教授	森 正夫
講師	吉川 耕司
助教	Wagner, Alexander
研究員	小松 勇 (学振 PD)
	行方 大輔 (HPCI 戦略)
	野村 真理子 (HPCI 戦略)
	三木 洋平 (CREST)
学生	大学院生 16 名 、 学類生 8 名

2. 概要

本年度、当グループは、活動銀河核トーラスのダスト昇華半径付近のガス構造とガスダイナミクスの研究、星団形成に関する 3 次元輻射流体力学による研究、初代ブラックホールの合体過程の研究、原始惑星系円盤の分子組成、原始惑星系円盤の形成過程、Cold dark matter halo における cusp-core 問題と too-big-to-fail 問題の関連性、アンドロメダ銀河のステラーハロー形成過程、活動銀河核アウトフローの輻射流体計算を行った。また、計算コード開発として、銀河の多成分力学平衡分布生成コードの開発、Vlasov-Poisson シミュレーションの高次精度化の研究、GPU を用いた重力多体計算コードの開発を進めた。さらに、宇宙生命計算科学連携として、原始惑星系円盤乱流中の微惑星形成、星間ダストにおけるアミノ酸生成、量子化学計算を用いた太陽以外の恒星周りの光合成への示唆の研究を行った。

3. 研究成果

【1】 活動銀河核トーラスのダスト昇華半径付近のガス構造とガスダイナミクスの研究

活動銀河核(AGN)は銀河の形成・進化に大きな影響を与えてきたと考えられており、AGN の活動性の詳細な理解は、銀河形成を理解する上で欠かせない課題である。本研究はAGNの活動性の発現・維持機構に着目し、AGNダストトーラスから巨大ブラックホール降着円盤へのガス供給過程の解明を目指すものである。これに関係して、我々はガス供給がAGNの輻射で最も阻害される領域、すなわち、ダスト昇華半径付近でのガス構造、及び、そこからのアウトフロー率に関して、軸対称マルチグループ輻射流体計算を実施して調査を行った。その結果、以下の知見を得た：

(1) 準定常状態においては、ほぼ中性で、幾何学的に薄い、高密度なガス円盤がダスト昇華半

径付近に形成され、円盤の表面から高速な($\sim 200\text{-}3000$ [km/s])アウトフローが吹く。

(2) アウトフロー率は、AGNのX線光度の割合やダストサイズに依存して、 $0.05\text{-}0.1$ [太陽質量/年]の範囲を取る。これは質量-エネルギー変換効率が0.1の場合のEddington質量降着率の20-40%程度に相当する。

(3) 銀河半径1[pc]以内におけるアウトフローの水素柱密度は約 10^{21} [cm^{-2}]である。

(4) AGNからの照射とダスト再放射だけでは、先行研究で提案されているような幾何学的に厚い遮蔽構造をダスト昇華半径付近に形成させるのは困難である。

上記の結果は、欧文雑誌に査読論文として受理され、現在印刷中である。

【2】 星団形成に関する3次元輻射流体力学による研究

非常に古い星団として知られる球状星団は、矮小楕円銀河といった他の低質量天体とともに階層的構造形成過程の初期段階に形成されたと考えられるが、球状星団は光度に対してより高い速度分散を持つコンパクトな天体である。最近の観測から、宇宙は赤方偏移 $z > 6$ で電離していることが分かっており、大部分の球状星団が形成された時期には強い電離光源が存在していたと考えることができる。紫外線は、光電離・光加熱過程によってガスの重力成長を妨げ、さらに初期宇宙で重要な冷却剤である水素分子の形成を阻害する。背景紫外線輻射場中の天体形成で重要となる自己遮蔽効果はガス密度の2乗平均に依存し、ガス雲の3次元的な非一様性に影響される。また背景輻射場が非等方的な場合は遮蔽領域も非等方的になる。我々は、非一様密度構造を持つ低質量ガス雲 ($10^6\text{-}7$ 太陽質量) を生成し、ガスの自己重力流体力学 (SPH 法)、分子の非平衡化学反応、輻射輸送、ダークマターの重力を同時に解く3次元の輻射流体力学計算によって、等方輻射場・片側照射中でのガス雲の収縮過程、自己遮蔽に至る過程を正確に解いた。更に紫外線を遮蔽し十分冷却したガス粒子を星粒子とみなし、重力多体計算をすることで形成された星団のダイナミクスを評価した。その結果、等方輻射場と違い日陰領域を伴った非等方性の強い自己遮蔽領域が形成されるものの、星形成の大半は輻射場の非等方性にあまりよらずに系の中心から ~ 10 pc 程度のコンパクトな領域で行われることが分かった。また、星粒子の運動を追跡した結果、電離ガスの超音速落下によって形成される星団は、半質量半径、mass-to-light ratio、速度分散-光度関係それぞれが球状星団の観測と矛盾しないコンパクトな星団となることが示された。

【3】 初代ブラックホールの合体過程の研究

銀河中心には $10^6\text{-}10^9 M_{\odot}$ を持つ超巨大ブラックホール(BH) が存在すると考えられているが、その質量獲得過程や形成過程は未だに解明されていない。その種として初代星起源のBHを仮定した場合、ガスの質量降着で観測されている質量に達するためには常にEddington

降着率を超えていなければならない。しかし、BH の合体が効率よく起これば、この制限は緩和される。第一世代天体形成の頃はガスが豊富であり、ガスによる力学的摩擦の効果が有効に働く可能性がある。これまで、3 体より多い BH の合体過程の研究は唯一 Tanikawa & Umemura (2014) で行われている。この計算では、銀河内に存在する恒星から受ける力学的摩擦を考慮し、BH 合体が寡占的に起こることを示した。我々は、一般相対論効果を入れたポストニュートニアンN体計算によって、第一世代天体形成期のガスによる力学的摩擦を考慮して、 $30M_{\odot}$ と 10^4M_{\odot} の10体のBHの合体過程の研究を行った。その結果、ガスによる力学的摩擦を取り入れると、100 Myr で10個全てのBHが合体できるパラメータがあることが分かった (Tagawa, Umemura, et al 2015)。さらに、この研究を発展させ、ガス降着を伴う $30M_{\odot}$ BH 多体系の計算を行った (Tagawa, Umemura, Gouda, 2015)。今年になって、LIGOによって $36^{+5.4}_{-4} M_{\odot}$ と $29^{+4.4}_{-4} M_{\odot}$ のブラックホールの合体による重力波が検出された (GW150914)。これは、我々が想定したブラックホール質量に極めて近く、シミュレーションと突き合わせたところ、GW150914 イベントのブラックホール合体が起きるのは、密度が 10^6cm^{-3} 以上のガスの中で3体相互作用が起きる場合であること、また数 M_{\odot} のガス降着があることがわかった。

【4】 原始惑星系円盤の分子組成

原始惑星系円盤は惑星系の母胎であり、そこでのガス、氷、ダストは惑星系の材料物質である。現在、ALMA 望遠鏡により、円盤からのガス輝線の高空間分解能観測が行われている。TW Hya 周りの原始惑星系円盤では N_2H^+ のリング構造が発見された (Qi et al. 2013)。 N_2H^+ はCOとの反応で破壊されるので、 N_2H^+ のリング内縁はCO snow line (円盤中心面でのこの半径より内側ではCOが昇華する)に相当すると考えられる。しかし N_2H^+ の親分子である N_2 の昇華温度はCOの昇華温度に近く、CO snow lineの外側で N_2H^+ が多くなる条件などの定量的なモデルはなかった。そこで我々は反応ネットワークモデルを用いて、 N_2H^+ やCOの存在度を温度・密度・電離率の関数として解析的に求め、 N_2H^+ の存在度が確かにCO昇華の良い指標になること、さらに気相中のCOと電子の数密度比が $\sim 10^3$ の時に N_2H^+ の存在度が極大になることなどを示した。またALMAでの円盤観測に共同研究者として加わり、理論モデルと観測結果の比較を行った。

【5】 原始惑星系円盤の形成過程

理論モデルによると原始惑星系円盤と星は同時に形成される。しかし円盤の形成と成長は磁場とガスの相互作用に依存することも指摘されており、Class 0-I 程度の若い原始星での円盤形成過程の観測は現在盛んに行われている。円盤形成領域ではSO輝線はリング状の強度分布を示す一方、 C_3H_2 はSO輝線よりも外側の落下するガスをトレースするなど、分子組成

が場所によって変わることがわかってきており、組成進化と物理構造・進化を同時に考える必要がある。我々は、今までに構築してきた原始星形成過程における分子組成進化モデルをもとに、ALMA での円盤形成過程の観測的研究に共同研究者として貢献した。また、円盤形成を輻射流体力学計算によってシミュレーションした Tsukamoto et al. (2015) のモデルに基づき、円盤形成時のガスと氷の組成進化を調べた。

【6】 原始惑星系円盤乱流中の微惑星形成の研究

惑星形成過程において、ミクロンサイズのダストから微惑星に至るダストの集積・衝突・合体過程は、未だに解明されていない。微惑星形成過程では、原始惑星系円盤乱流が大きな影響を与えると考えられているが、乱流中のダスト成長の確かなシナリオは得られていない。乱流によって運ばれるダスト(慣性粒子)の流体への追従性はダストサイズ(慣性の大きさ)に依存する。乱流の非線形性の強さはレイノルズ数 $Re = UL/\nu$ (U と L は乱流中のエネルギー保有渦の代表的な速さと大きさ、 ν は動粘性係数)、粒子の流体運動への追従性はストークス数 $St = \tau_p / \tau_\eta$ (τ_p は粒子の緩和時間、 τ_η は乱流中の最小渦のコルモゴロフ・タイムスケール) で表される。原始惑星系円盤乱流の場合 $Re = O(10^{10})$ であり、大小の渦のスケール比は巨大である。また、 St の値は 0.01 程度から 100 以上にわたる。高レイノルズ数乱流の性質の理解にはナビエ・ストークス(NS) 方程式の「第一原理計算」、すなわち微細な渦の動きまで解像する大規模な直接数値計算(DNS) が必要であるが、宇宙分野ではこれまで数値粘性による近似的なオイラー方程式の計算しか行われてこなかった。近年、流体分野では乱流 DNS を用いた粒子追跡計算が盛んであり、乱流による微粒子のクラスタリングや衝突促進などの第一原理計算が行われているが、これまでの計算は $Re < 10^4$ に限られ、原始惑星系円盤乱流中のダストの成長過程の本質的な解決には至っていない。我々は名古屋大学の乱流計算のグループと協働して、原始惑星系円盤乱流中の微惑星成長過程解明を目的とし、NS 方程式の大規模 DNS に基づく高 Re 乱流中の粒子追跡の大規模数値実験を進めている。最新の計算によれば、乱流構造は $Re \approx 10^4$ を超えたあたりから、質的な変化が現れ、渦糸から渦クラスターへ変化する。そして、慣性粒子は、渦クラスターの表面に集積する傾向を表す。また、ストークス数の大きな慣性粒子ほど、レイノルズ数が大きくなるにつれ、空間相関が強くなる傾向を見せる。これは、ダストの合体成長過程がレイノルズ数増加と共に加速することを表しており、ダストから微惑星形成に至る物理過程の解明にとって極めて重要な結果である。

【7】 Cold dark matter halo における cusp-core 問題と too-big-to-fail 問題の関連性

現在の標準的な構造形成理論である cold dark matter(CDM)モデルは宇宙の大規模構造の統計的性質を説明することに成功した反面、1Mpc 以下の小さなスケールの構造においていくつかの問題が指摘されている。dark matter halo(DMH)の中心質量密度は CDM 理論では、

発散する cusp 構造を预言するが、観測的には中心質量密度が一定となる core 構造が多数発見されている。また、質量の中心集中度が高い DMH を持つ大質量衛星銀河が見つからない (Too-big-to-fail 問題) 等がある。本研究ではこれら二つの問題を、DMH とバリオンの力学的相互作用に起因した DMH の中心密度分布の進化過程に関わる問題として捉えて解析を行っている。活発な星形成活動が発生する以前の原始銀河の DMH は cusp 構造を持っているが、銀河形成期に発生する周期的な超新星爆発フィードバックによって core 構造へと遷移する、cusp-core 遷移過程の解析を行っている。本年度は特に、ガスの振動がランダウ共鳴を介してダークマターハローの中心部分を加熱する加熱効率について詳細な解析をおこなった。その結果、振動の高波長モードが高いエネルギー輸送効率を示すことを見出した。

【8】 アンドロメダ銀河のステラーハロー形成過程

近年、ハッブル宇宙望遠鏡やすばる望遠鏡に代表される大型望遠鏡を最大限活用した近傍宇宙の大規模探査により、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。近傍のアンドロメダ銀河においては、おびただしい数の暗い矮小銀河が発見されるとともに、それら矮小銀河の衝突によるものと思われるステラーストリームやステラーシェル、あるいは銀河円盤上で見られるリング構造等、銀河衝突の痕跡が続々と明らかにされてきている。本研究では、銀河衝突の重力多体計算及び流体力学計算による銀河衝突過程のみならず、アンドロメダ銀河に付随するダークマターハローの構造や、銀河円盤の構造、銀河ハロー中を徘徊するブラックホールの存在可能性について議論している。本年度は、アンドロメダ・ジャイアント・ストリームを生成した母銀河の性質について大規模な数値シミュレーションを行い、幅広いパラメータサーベイを行って、その性質に制限をつけることに成功した。その結果、母銀河は質量が 10^9 太陽質量程度の矮小銀河であり、その回転が観測されるアンドロメダ・ジャイアント・ストリームの形状を決定する重要な要因であることが分かった。

【9】 活動銀河核アウトフローの輻射流体計算

一部の活動銀河核 (AGN) の輻射スペクトルに現れる、金属による青方偏移した吸収線はアウトフローの存在を示唆している。特に、X 線スペクトル上の鉄吸収線は光速の 10–30% の速さで噴出する超高速アウトフローの存在を示唆している。このアウトフローは質量・エネルギー放出率が非常に大きいため、巨大ブラックホールと銀河の成長・進化に甚大な影響を及ぼしている可能性がある。しかしながらその加速メカニズムや構造はわかっていない。そこで、我々は有力モデルの一つである“ラインフォース駆動型円盤風”に着目し、この円盤風が超高速アウトフローの観測結果を再現できるか否かを調べた。ラインフォースとは降着円盤から放射された紫外光を金属元素が束縛・束縛遷移吸収する際に受ける力であり、物質の運動に起因するドップラーシフトにより、広範囲の波長にわたって輻射を吸収することができるため非常に加速効率が良い。我々はこのラインフォースを考慮した輻射流体シミュレー

ションを行い、以下のことを明らかにした。(1) ラインフォース加速による円盤風の速度は光速の約 10%、(2) 極角 ~ 75 度において、円盤風は超高速アウトフローの観測的特徴(高階電離状態、光速の 10%程度の視線速度、 10^{23} cm^{-2} 程度の柱密度)を再現、(3) 超高速アウトフローの観測確率(アウトフローの特徴が現れる立体角/ 4π)は Eddington 比 0.1 以上の場合 20-30% であり、観測と矛盾しない、(4) Eddington 比が 0.01 以下の場合、円盤風の噴出はなく、超高速アウトフローの特徴は現れない。以上の結果によって、我々は明るい活動銀河核に付随する超高速アウトフローがラインフォース駆動型円盤風で説明できる、ということを解明した。

【10】 銀河の多成分力学平衡分布生成コードの開発

銀河どうしの衝突・合体や銀河円盤中の渦状腕の形成などの力学進化過程を詳細に調べるために、N 体シミュレーションを用いた研究が精力的に進められている。こうした計算を行うためには適切な初期条件を生成する必要がある。しかしながら、一般に銀河はバルジ・ハロー・円盤からなる多成分系であり、これを力学平衡な粒子分布として表現することは容易ではなく、現在も初期条件の生成方法に関する研究が続けられている。さらに、銀河の質量やサイズ、各成分の質量分布に対する依存性を調べるためには、これらを手軽に変更できることも重要であるが、こうした望ましい性質を全て備えた初期条件生成コードは存在しない。また、得られた粒子分布は観測データのフィッティングやガス入りの計算にも利用可能であるが、特にフィッティングに用いるためには手軽に粒子分布を変更できる必要がある。

そこで我々は、複数の球対称成分と軸対称成分を粒子系として表現する初期条件生成コードを開発した。球対称成分については、等方的な速度分布を仮定し Eddington formula を用い分布関数を作成、この分布関数に従う粒子分布を生成することで、Burkert, Einasto, Hernquist, King, Moore, NFW, Plummer model などの多様なモデルやその重ね合わせを力学平衡な粒子分布として表現できる。また円盤成分については、天の川銀河のように厚い円盤と薄い円盤が共存する系を念頭に、厚さの異なる複数の円盤成分を持った粒子系を生成できるような実装になっている。生成された粒子分布の長時間の安定性についての数値実験を行ったところ、長時間に渡る安定性も確認できた。

【11】 Vlasov—Poisson シミュレーションの高次精度化の研究

銀河・銀河団・宇宙大規模構造などの無衝突自己重力系の数値シミュレーションは従来より N 体シミュレーションによって行われてきたが、物理量を評価する際のショットノイズや速度分散が大きい成分の無衝突減衰を正確に取り扱えないという欠点があった。その欠点を克服する手段として、Vlasov 方程式を直接数値積分することによって 6 次元位相空間中の物質の分布関数を数値シミュレーションする手法を研究している。この手法では空間 3 次元・運動量空間 3 次元の合わせて 6 次元の情報をメモリに載せる必要があり、メッシュ数をあま

り大きくできず、実効的な空間分解能が N 体シミュレーションなどと比較して良くない。そこで、我々は Vlasov 方程式の数値解法の高次精度化を行った。これまでに行われてきた手法に基づいて高次精度化を行うと数値解の安定性に影響が表れ、分布関数が負になる領域が現れたりすることが知られていたが、流速制限法を拡張することで分布関数の正值性を数学的に保証する手法を構築した。この正值化の手法を用いて、正值性を保証した空間 5 次精度及び 7 次精度の数値解法を構築した。

【1 2】 GPU を用いた重力多体計算コードの開発

宇宙物理学の研究で広く用いられている重力多体計算に用いるための Tree コードを GPU を用いて高速化した。Fermi, Kepler, Maxwell 世代を代表する GPU を用いて性能評価を行った結果を、図 1 に示した。直接法によって得られた重力からの誤差の関数として 1 ステップあたりの実行時間をプロットしたところ、先行研究でも採用されている一般的な実装（図 1 中の◇）に比べて 5-10 倍程度の高速化が確認できた（図 1 中の赤塗りの丸）。

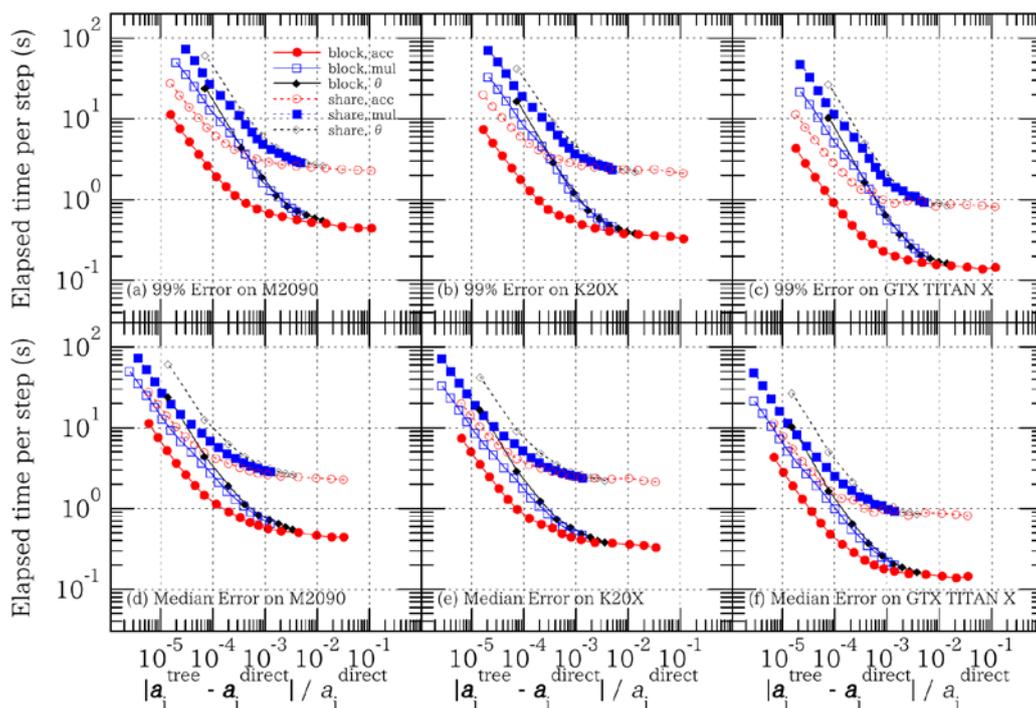


図 1. Tree code の性能評価の結果。（横軸は、直接計算との誤差）

高速化の効果が特に大きかったのは block time step の採用であり、一般的に採用されている shared time step と比較して 2-6 倍程度の高速化が達成できた（図 2）。図 2 の横軸はツリー法による重力計算の精度を制御するパラメータであり、銀河スケールの計算であれば

10^{-2} 程度に取っておけば十分である。従って、現実的な計算を行った際には block time step の導入によって 5 倍程度の高速化が期待できる。

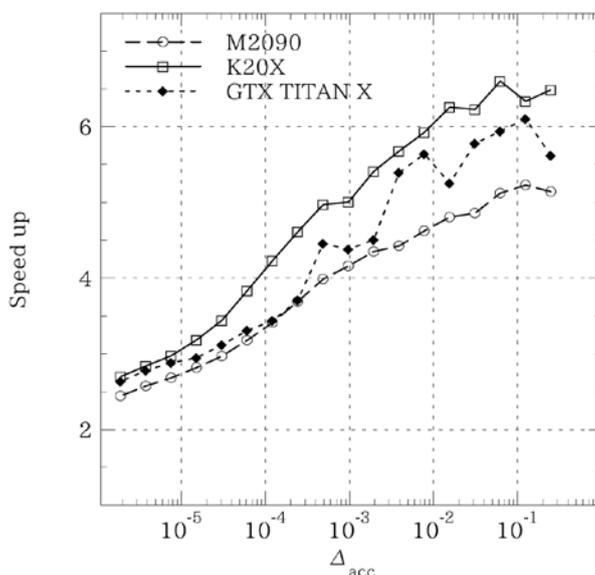


図 2. Block time step による速度向上率。

【13】 星間ダストにおけるアミノ酸生成

地球上の生命の起源はいまだに明らかにされていないが、1953 年の Miller の実験によりアミノ酸などの有機物が単純な物質から無生物的に合成されることが示され、生命の起源は原始地球での化学進化であるとする説が有力視されてきた。しかしながら、1969 年オーストラリアに落下した Murchison 隕石からアミノ酸が検出され、生命は宇宙から飛来した物質を起源と考える「宇宙起源説」が浮上した。さらに Murchison 隕石以外の炭素質コンドライトからもアミノ酸が検出され、2009 年には NASA の探査機スターダストにより彗星の塵からアミノ酸の一つであるグリシンが見つかった。2010 年には、1200~1300 K の高温環境を経験した Almahata sitta 隕石からアミノ酸が検出され、非常に高温の小惑星が冷える過程で生じる反応でアミノ酸が生成される可能性のあることがわかった。我々は、宇宙由来のアミノ酸がどのように生成される可能性があるのか明らかにすることを目的に、分子雲から見つかった分子から隕石や分子雲から検出された前駆体を経由するグリシン生成経路について、量子化学計算(密度汎関数理論)を用い詳細な反応機構を求めた。アミノ酸前駆体としては、Murchison 隕石から検出されたヒダントイン(Cooper & Cronin, 1995)と分子雲から検出されたアミノアセトニトリル(Belloche et al., 2008)に注目した。ヒダントインとアミノアセトニトリルは加水分解によりグリシンとなる。まず、すでに判明している実験室系での生成過程に対し、反応物及び中間体の生成エネルギーから安定性を評価し、低密度かつ低温の宇宙環境で反応が起こりうるか検討した。さらに反応経路中の各反応の気相反応の遷移状態探索を行い、反応のエネルギー障壁を求めた。さらに、氷で覆われた星間ダスト表面での反応を

模擬するために、水分子による触媒反応を考慮した遷移状態探索を行った。その結果、生成エネルギーの評価よりアミノ酸はほとんど発熱反応で生成されることがわかった。次に、各反応の遷移状態探索を行った結果、真空中では最大で 70 kcal/mol 程度の反応障壁が見つかった。水分子による触媒反応では最大 55 kcal/mol 程度と反応障壁が低くなった。よって、分子雲中に豊富な水は触媒として重要であることがわかった。しかしながら現実的には、50 ~ 70 kcal/mol ほど反応障壁があると低温の分子雲のタイムスケールでは反応が起きない。ヒダントインが隕石から検出されていることから、隕石母天体でアミノ酸生成が起きる可能性もある。そこで、惑星形成時の天体衝突による $T \sim 10^3$ K 程度の温度上昇を仮定すると、70 kcal/mol 程度の反応障壁でも超えることができる。また、分子雲のような低温環境での反応障壁の上限は約 12 kcal/mol 程度であった。水分子の触媒効果だけではなく、反応場としての氷の効果を考慮すると、より一層反応障壁が低下し反応が進む可能性もある。近傍での星形成があれば、紫外線による光化学反応を含む反応経路によるアミノ酸生成も考えられる。

【14】 量子化学計算を用いた太陽以外の恒星周りの光合成への示唆

今後観測で得られる太陽系外惑星のスペクトルから光合成生物に由来する痕跡、バイオマーカーを検出することが期待されている。水圏に生息する光合成生物の吸収スペクトルは透過光のスペクトルの概形と良く一致しており、これらの生物は生息地の光を効率的に吸収していることが示唆される。今後の観測においては低質量の M 型矮星周りの惑星に焦点が当たるので、このような地球と異なる環境において、周囲の光をスペクトル的にどの程度効率的に吸収するかを本研究では定量的に評価した。鉛直 1 次元の惑星大気の輻射対流・光化学モデル、輻射輸送モデルを用いて様々なスペクトルタイプ (F,G,K,M 型) の星の周りの地球型惑星の表層環境 (水中など) での透過スペクトルを算出した。一方で、クロロフィルに代表される光合成色素や、これらで構成される光捕集複合体 (LHC) の吸収スペクトルを量子化学計算によって見積もった。このように得られた光合成生物の器官の吸収スペクトルと、ある輻射環境における透過光スペクトルの一致の度合いを示す吸収効率を評価、それぞれの条件を比較した。色素の励起状態計算には時間依存密度汎関数法などを用いた。

色素の金属を天然のものから交換した色素で構成された LHC のスペクトルの長波長化、水を持つ M 型周りの地球型惑星の環境における吸収効率を見積もった。その結果、カドミウムを中心金属にした系は、天然の系よりも高効率で吸収できることがわかった。水中の深度の関数として表現するとより複雑になり、10cm 程の深度で高効率になった。ただし、さらに深い箇所ではたとえカドミウムに交換したとしても、到達する光自体が減光されるので高効率にはならないことがわかった。

4. 教育

【学位論文】

<博士論文>

1. 安部 牧人

Three-Dimensional Radiation-Hydrodynamic Study on the Formation of Star Clusters Regulated by External Ultraviolet Radiation

(外部紫外線輻射場によって制御される星団形成に関する 3 次元輻射流体力学による研究)

<修士論文>

1. 土屋 将太郎

Vlasov シミュレーションにおける計算スキームの高次精度化

2. 木立 佳里

星間ダストにおけるアミノ酸生成の理論的研究

3. 結城 文香

矮小楕円銀河核の形成シミュレーション

<学士論文>

1. 石川 徹

銀河中心領域における巨大ブラックホールの合体シミュレーション

2. 北澤 優也

星間分子雲中でのグリシン生成についての理論的検討①: $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CO}\cdot$ 中間体を經由する低温ラジカル反応

3. 越智 聡郎

星間分子雲中でのグリシン形成についての理論的検討②: $\cdot\text{CH}_2\text{COOH}$ 中間体を經由する低温ラジカル反応

4. 藤原 隆寛

SPH 法の性能比較

5. 杉本 隼

銀河のマイナーマージャーによって形成されるステラーハローの構造

6. 高橋 瞭太

M31North-West Stream 形成シミュレーション

7. 河田 隼季

SIMD 命令による移流方程式の数値計算の高速化

8. 櫻井 駿介

Particle-in-Cell 法による無衝突衝撃波の数値シミュレーション

【集中講義】

- ・相川祐理

「惑星宇宙物理学特論 I」 (2015 年 8 月 24 日～25 日, 神戸大学惑星学専攻)

「特別講義 IX」 (2015 年 8 月 26 日～28 日, 大阪大学宇宙地球科学専攻)

- ・町田正博 (九州大学)

「宇宙物理特講 II」 “星・惑星の形成過程” (2016 年 1 月 28 日～30 日, 筑波大学数理物質科学研究科)

5. 受賞, 外部資金, 知的財産権等

【受賞】

1. 2014 年度地球惑星科学振興西田賞

相川祐理「分子雲から原始惑星系円盤形成にいたる化学進化の統合的理論モデルの研究」,
2015 年 5 月 27 日

2. HEART2015 最優秀論文賞

Chiharu Tsuruta, Yohei Miki, Takuya Kuhara, Hideharu Amano, Masayuki Umemura,
“Off-loading LET generation to PEACH2 : A switching hub for high performance GPU
clusters” International Symposium on Highly Efficient Accelerators and Reconfigurable
Technologies, 2015 年 6 月 2 日

【外部資金】

<代表者>

- ・基盤研究 (B) (一般) H27 年度～H30 年度 : 梅村雅之

「一般相対論的輻射流体によるブラックホール超臨界降着流と超大質量星の研究」
(H27 年度 180 万円 / 全体 540 万円)

- ・基盤研究 (C) (一般) H23 年度～H27 年度 : 相川祐理

「星・惑星系形成過程における揮発性物質の組成, 同位体比, 気相・固相分配」
(H27 年度 50 万円 / 全体 340 万円)

- ・基盤研究 (C) (一般) H26 年度～H29 年度 : 森正夫

「輻射流体シミュレーションによる銀河系統樹の構築」

(H27 年度 104 万円／全体 520 万円)

<分担者>

- ・ 基盤研究 (A) (一般) H27 年度～H31 年度：梅村雅之 (代表者：大内正巳)
「すばる HSC と SDSS で探る宇宙論的スケールの物質循環」 (2.5 万円)
(H27 年度分担金 2.5 万円／分担金全体 12.5 万円)
- ・ 基盤研究 (A) (一般) H27 年度～H31 年度：森正夫 (代表者：大内正巳)
「すばる HSC と SDSS で探る宇宙論的スケールの物質循環」 (2.5 万円)
(H27 年度分担金 2.5 万円／分担金全体 12.5 万円)
- ・ 戦略的創造研究推進事業 CREST H24 年度～H29 年度：梅村雅之 (代表者：朴泰祐)
「ポストペタスケール時代に向けた演算加速機構・通信機構統合環境の研究開発」
(H27 年度分担金 2,000 万円／分担金全体 7853 万円)
- ・ 新学術領域研究(研究領域提案型)「太陽系外惑星の新機軸：地球型惑星へ」
計画研究「円盤から惑星へ」 H23 年度～H27 年度：相川祐理 (代表者：百瀬宗武)
(H27 年度分担金 115 万円／分担金全体 692 万円)

6. 研究成果報告

(1) 【研究論文】

A) 査読付き論文

- 1) Aikawa, Y., Furuya, K., Nomura, H., Qi, C., 2015, “Analytical Formulas of Molecular Ion Abundances and N₂H⁺ Ring in Protoplanetary Disks”, *The Astrophysical Journal*, 807, 19pp (DOI: 10.1088/0004-637X/807/2/120)
- 2) Aso, Y., Ohashi, N., Saigo, K., Koyamatsu, S., Aikawa, Y., Hayashi, M., Machida, M.N., Saito, M., Takakuwa, S., Tomida, K., Tomisaka, K., Yen, H.-W., 2015, “ALMA Observations of the Transition from Infall Motion to Keplerian Rotation around the Late-phase Protostar TMC-1A”, *The Astrophysical Journal*, 812, 27, 20pp (DOI:10.1088/0004-637X/812/1/27)
- 3) Favre, C., Bergin, E. A., Cleaves, L. I., Hersant, F., Qi, C., Aikawa, Y., 2015, “Evidence for DCO⁺ as a Probe of Ionization in the Warm Disk Surface”, *Astrophysical Journal Letters*, 802, L23, 6pp (DOI: 10.1088/2041-8205/802/2/L23)
- 4) Furuya, K., Aikawa, Y., Hincelin, U., Hassel, G.E., Bergin, E.A., Vasyunin, A.I., Herbst, E., 2015, “Water Deuteration and Ortho-to-Para Nuclear Spin Ratio of H₂ in Molecular Clouds Formed via Accumulation of HI Gas”, *Astronomy and Astrophysics*, 584, A124, 18pp (DOI: 10.1051/0004-6361/201527050)

- 5) Furuya, K., van Dishoeck, E.F and Aikawa, Y., 2016, “Reconstructing the history of water ice formation from HDO/H₂O and D₂O/HDO ratios in protostellar cores”, *Astronomy and Astrophysics*, 586, A127, 8pp (DOI: 10.1051/0004-6361/201527579)
- 6) Kirihara, T., Miki, Y., Mori, M., & Kawaguchi, T., “Formation of the Andromeda Giant Stream: Asymmetric Structure and Disc Progenitor”, submitted to *Monthly Notices of Royal Astronomical Society*
- 7) Komatsu, Y., Umemura, M., Shoji, M., Kayanuma, M. Yabana, K. and Shiraishi, K., 2015, “Light absorption efficiencies of photosynthetic pigments: the dependence on spectral types of central stars”, *International Journal of Astrobiology* 14, 505-510 (DOI: 0.1017/S147355041400072X)
- 8) Komatsu, Y., Kayanuma, M., Shoji, M., Yabana, K., Shiraishi, K., Umemura, M., 2015, “Light absorption and excitation energy transfer calculations in primitive photosynthetic bacteria”, *Molecular Physics*, 113, 12, 1413-1421 (DOI: 10.1080/00268976.2014.998305)
- 9) Mousis, O., Chassefière, E., Holm, N. G., Bouquet, A., Waite, J. H., Geppert, W. D., Picaud, S., Aikawa, Y., Ali-Dib, M., Charlou, J-L., Rousselot, P., 2015, “Methane Clathrates in the Solar System”, *Astrobiology*, 15, 308-326 (DOI: 10.1089/ast.2014.1189)
- 10) Namekata, D., Umemura, M., 2016, “Subparsec-scale dynamics of a dusty gas disk exposed to anisotropic AGN radiation with frequency dependent radiative transfer”, *Monthly Notices of Royal Astronomical Society*, 460, 980-1018 (DOI: 10.1093/mnras/stw862)
- 11) Momose, R., Ouchi, M., Nakajima, K., Ono, Y., Shibuya, T., Shimasaku, K., Yuma, S., Mori, M., Umemura, M., 2016, “Statistical properties of diffuse Ly α haloes around star-forming galaxies at $z \sim 2$ ”, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 457, 2318-2330 (DOI: 10.1093/mnras/stw021)
- 12) Nishimura, Y., Shimonishi, T., Watanabe, Y., Sakai, N., Aikawa, Y., Kawamura, A., & Yamamoto, S., 2016, “Spectral Line Survey toward Molecular Clouds in the Large Magellanic Cloud”, *The Astrophysical Journal*, 818, 161, 17pp (DOI: 10.3847/0004-637X/818/2/161)
- 13) Nomura, M., Ohsuga, K., Takahashi, R. H., Wada, K., & Yoshida, T., 2016, “Radiation Hydrodynamic Simulations of Line-Driven Disk Winds for Ultra Fast Outflows”, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 68, 16 (DOI: 10.1093/pasj/psv124)

- 14) Öberg, K. I., Guzmán, V. V., Furuya, K., Qi, C., Aikawa, Y., Andrews, S. M., Loomis, R., Wilner, D. J., 2015, “The comet-like composition of a protoplanetary disk as revealed by complex cyanides”, *Nature*, 520, 198-201 (DOI: 10.1038/nature14276)
- 15) Öberg, K.I., Furuya, K., Loomis, R., Aikawa, Y., Andrews, S.M., Qi, C., van Dishoeck, E.F., Wilner, D.J., 2015, “Double DCO⁺ Rings Reveal CO Ice Desorption in the Outer Disk Around IM Lup”, *The Astrophysical Journal*, 810, 112, 7pp (DOI: 10.1088/0004-637X/810/2/112)
- 16) Sakai, T., Sakai, N., Furuya, K., Aikawa, Y., Hirota, T., Foster, J. B., Sanhueza, P., Jackson, J. M., Yamamoto, S. ,2015, “ALMA Observations of the IRDC Clump G34.43+00.24 MM3: DNC/HNC Ratio”, *The Astrophysical Journal*, 803, Issue 2, article id. 70, 9pp (DOI:10.1088/0004-637X/803/2/70)
- 17) Tagawa, H., Umemura, M., Gouda, N., Yano, T., Yamai, Y., 2015, “Early Cosmic Merger of Multiple Black Holes”, *Monthly Notices of Royal Astronomical Society*, 451, 2174-2184 (DOI: 10.1093/mnras/stv1099)
- 18) Takahashi, R., Umemura, M., “General relativistic radiation hydrodynamics I: MASTER - a ray-tracing code in a rotating black hole spacetime”, submitted to *Monthly Notices of Royal Astronomical Society*
- 19) Tanaka, S., Yoshikawa, K. Okamoto, T., Hasegawa, K., 2015, “A new ray-tracing scheme for 3D diffuse radiation transfer on highly parallel architectures”, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 67, 62 (DOI: 10.1093/pasj/psv027)
- 20) Wagner, A. Y., Bicknell, G. V., Umemura, M., Sutherland, R. S., Silk, J., 2016, “Galaxy-scale AGN Feedback – Theory”, *Astronomische Nachrichten*, 335, 167 (DOI: 10.1002/asna.201512287)
- 21) Igarashi, A., Mori, M., Nitta, S., “Polytropic transonic galactic outflows in a dark matter halo with a central black hole”, submitted to *Monthly Notices of Royal Astronomical Society*
- 22) Miki, Y., Mori, M., Rich, R.M., “Collision tomography: Physical properties of possible progenitors of the Andromeda stellar stream”, submitted to *The Astrophysical Journal*
- 23) Tagawa, H., Umemura, M., Gouda, N., 2016, “Mergers of accreting stellar-mass black holes”, submitted to *Monthly Notices of Royal Astronomical Society* (arXiv:1602.08767)

B) 査読無し論文

- 24) Aikawa, Y. 2015, “Astrochemical models of water in molecular clouds and protoplanetary disks”, submitted to Astronomy in Focus Vol. 1 (proceedings of IAU Focus meeting 15)
- 25) Aikawa, Y. 2015, “Evaporation of Grain-surface Species by Shock Waves onto a Forming Protoplanetary Disk”, submitted to proceedings of IAU Symposium 315
- 26) Aikawa, Y. 2015, “Analytical Formulas of Molecular Ion Abundances and N_2H^+ Ring in Protoplanetary Disks”, submitted to proceedings of IAU Symposium 315
- 27) Bicknell, G.V., McNamara, B.R., Nawaz, M.A., Sutherland, R.S., Umemura, M., Wagner, A.Y. 2015, “AGN feedback by relativistic jets”, IAU Symposium 313, 101-107.
- 28) Igarashi, A., Mori, M., Nitta, S., 2015, “Transonic galactic outflows in a dark matter halo with a central black hole”, IAU General Assembly Meeting 29, 2256244
- 29) Igarashi, A., Mori, M., Nitta, S., 2016, “A new concept of transonic galactic outflows and its application to the Sombrero galaxy”, submitted to Proceedings of IAU Symposium 321 "Formation and evolution of galaxy outskirts"
- 30) Kirihara, T., Miki, Y., Mori, M., & Kawaguchi, T., 2016, “Disk dwarf galaxy as the progenitor of the Andromeda giant stream”, proceedings of IAU Symposium 317, 1500712

(2) 【国際会議発表】

A) 招待講演

- 1) Wagner, A. Y., Bicknell, G. V., Umemura, M., Mukherjee, D., Sutherland, R. S., “AGN Feedback: Theory”, 5th Workshop on Compact Steep Spectrum and GHz-Peaked Spectrum Radio Sources, May 27-29, 2015, Rimini, Italy.
- 2) Yoshikawa, K., “Vlasov-Poisson Simulation of Self-Gravitating Systems and Its Application to Dynamics of Cosmic Neutrinos”, YITP molecular-type workshop on “Vlasov-Poisson: towards numerical methods without particles”, June 1-12, 2015, Kyoto
- 3) Aikawa, Y., “Astrochemical models of water in molecular clouds and protoplanetary disks”, Focus Meeting 15, International Astronomical Union General Assembly XXIX, Aug. 3-5, 2015, Honolulu
- 4) Nomura, M., Ohsuga, K., Takahashi, H., Wada, K., Yoshida, T. “Radiation Hydrodynamic Simulations of Line-Driven Disk Winds for Ultra Fast Outflows”,

Prospects, challenges and evolution of AGN modeling in the Astro-H Era, Oct. 21-22, 2015, Rikkyo University, Tokyo

- 5) Aikawa, Y., “Chemistry in the Forming Disks”, Workshop ALMA-Cycle 4, Astrochemistry as a diagnostic of Star and Planet Formation, Jan.12-13, 2016, Observatoire de Bordeaux, France
- 6) Aikawa, Y. "Chemistry in the disk formation", Workshop on Astrochemistry in Star and Planet Formation, Feb.16, 2016, Riken, Wako

B) 一般講演

- 1) Aikawa, Y., “Analytical Formulas of Molecular Ion Abundances and N₂H⁺ Ring in Protoplanetary Disks”, 3rd DTA Symposium: The Origins of Planetary Systems: from the Current View to New Horizons (Jun.1-4, 2015, NAOJ, Tokyo)
- 2) Tsuruta C., Miki, Y., Kuhara T., Umemura, M., Amano, H., “Off-loading LET generation to PEACH2: A switching hub for high performance GPU clusters”, HEART2015 (Jun. 1-2, 2015, Boston, USA)
- 3) Nomura, M., Ohsuga, K., Takahashi, H., Wada, K., “Radiation Hydrodynamic Simulations of Line-Driven Disk Winds for Ultra Fast Outflows”, Black Hole Accretion and AGN Feedback (Jun. 1-5 2015, Shanghai, China) (Poster)
- 4) Komatsu, Y., Umemura, M., Shoji, M., Kayanuma, M., Shigeta, Y., “Absorption Efficiencies of Antenna Complexes in Photosynthetic Organisms Exposed to the Photoenvironment of Exoplanets”, AbSciCon2015 (Jun.15-19, 2015, Chicago, USA)
- 5) Tagawa, H., Umemura, M., Gouda, N., Yano, T., Yamai, Y., “Early Cosmic Merger of Multiple Black Holes”, First stars, galaxies and black holes: now and then (Jun. 15-19, 2015, Groningen, The Netherlands)
- 6) Komatsu, Y., Umemura, M., Shoji, M., Kayanuma, M., Shigeta, Y., “Absorption efficiencies of light-harvesting complexes in photosynthetic organisms exposed to the photoenvironment of exoplanets”, Pathways2015 (Jul. 13-17, 2015, Bern, Switzerland) (Poster)
- 7) Aikawa, Y., Furuya, K., Nomura, H., Qi, C., “Analytical Formulas of Molecular Ion Abundances and N₂H⁺ Ring in Protoplanetary Disks”, IAU Symposium 315: From interstellar clouds to star-forming galaxies: universal processes?, IAU General Assembly 2015 (Aug. 3-7, 2015, Honolulu)(Poster)
- 8) Aota, T., Aikawa, Y., Inoue, T., “Evaporation of Grain-surface Species by Shock Waves onto a Forming Protoplanetary Disks” , IAU Symposium 315: From

- interstellar clouds to star-forming galaxies: universal processes?, IAU General Assembly 2015 (Aug. 3-7, 2015, Honolulu)(Poster)
- 9) Kirihara, T., Miki, Y., Mori, M., Kawaguchi, T., “Disk minor merger as the progenitor of the Andromeda giant stream”, IAU XXIXth General Assembly Symposium 317 (Aug. 3-14, 2015, Honolulu, USA) (Poster)
 - 10) Kirihara, T., Miki, Y., Mori, M., “Investigating the outer density profile of the dark matter halo of M31”, IAU XXIXth General Assembly Focused meeting 18 (Aug. 3-14, 2015, Honolulu, USA) (Poster)
 - 11) Kato, K., Mori, M., Ogiya, G., “Connection between cusp-core problem and too-big-to-fail problem”, IAU XXIX General Assembly (Aug. 3-14, 2015, Hawaii USA)(Poster)
 - 12) Igarashi, A., Mori, M., Nitta, S., ” Transonic galactic outflows in a dark matter halo with a central black hole”, The 29th International Astronomical Union General Assembly, FM18p13, (Aug. 10-14, 2015, Honolulu, USA) (Poster)
 - 13) Miki,Y., “Computation / Communication Unification on FPGA Solution”, LENS2015 (Oct. 29-30, 2015, Akihabara, Japan)
 - 14) Nomura,M., Ohsuga, K., Takahashi, R. H., Wada, K., Yoshida, T., “Radiation hydrodynamic simulations of line-driven disk winds around super massive black holes”, Symposium on ‘Quarks to Universe in Computational Science (QUCS 2015)’ (Nov. 4-8, 2015, Nara, Japan)
 - 15) Aikawa, Y., “Molecular ions and COMs in protoplanetary disks”, International Workshop on “Exoplanets and Disks: Their Formation and Diversity III” (Feb. 22-24, 2016, Hotel Nikko Yaeyama, Japan)
 - 16) Kirihara, T., Miki, Y., Mori, M., Kawaguchi, T., & Rich, R. M., “Multilateral Study of the Formation of the Andromeda Giant Stellar Stream”, IAU Symposium 321: Formation and Evolution of Galaxy Outskirts (Mar.14-18, 2016, Toledo, Spain) (Poster)
 - 17) Igarashi, A., Mori, M., & Nitta, S., “A new concept of transonic galactic outflows and its application to the Sombrero galaxy”, IAU Symposium 321: Formation and Evolution of Galaxy Outskirts (Mar.14-18, 2016, Toledo, Spain)(Poster)

(3) 【国内学会・研究会発表】

A) 招待講演

- 1) 森正夫, 「ダークマターの構造と銀河進化」, 研究会「新世紀における 銀河宇宙観測の方向」 (2015 年 3 月 31 日~4 月 2 日, KKR 熱海, 熱海)
- 2) 梅村雅之, 「元素はめぐる」, 日本天文学会公開講演会 (2015 年 9 月 12 日, 甲南大学, 神戸)
- 3) 相川祐理「Astrochemistry in star-forming cores and protoplanetary disks」, 研究会「星形成の諸階層 - 銀河から惑星まで -」 (2015 年 9 月 14 日~16 日, フォレスト箱根)
- 4) 相川祐理「星・惑星系形成領域の星間化学: モデルと ALMA 観測」, 日本地球化学会第 62 回年回 (2015 年 9 月 16 日~18 日, 横浜国立大学, 横浜)
- 5) 三木洋平, 「GPU を用いた N 体シミュレーション向けの実践的テクニック」, GPU Computing Workshop for Advanced Manufacturing (2015 年 9 月 17 日, 虎ノ門ヒルズフォーラム, 東京)
- 6) 梅村雅之, 「The Origin of Cosmic Objects」, 新学術領域「加速宇宙」発足シンポジウム(2015 年 9 月 20 日~21 日, 東大 IPMU, 柏)
- 7) 梅村雅之, 「宇宙の旅」, 竹園東小学校講演会 (2015 年 10 月 23 日, 竹園東小学校, つくば)
- 8) 相川祐理「星間化学におけるテラヘルツ単一鏡観測の役割」, 南極で切り開くテラヘルツ天文学 (2015 年 11 月 18 日, 国立天文台, 三鷹)
- 9) 森正夫「南極テラヘルツ望遠鏡と銀河形成・進化シミュレーション」, 南極で切り開くテラヘルツ天文学 (2015 年 11 月 18 日, 国立天文台, 三鷹)
- 10) 野村真理子, 「活動銀河核アウトフローの輻射流体力学シミュレーション」理論天文学研究会 2015(2015 年 11 月 27 日~29 日, 伊豆大仁ホテル, 伊豆の国)
- 11) 相川祐理, 「星・惑星系形成領域における有機物: 理論と観測の現状」理論懇話会シンポジウム 2015「宇宙における天体形成から生命まで」 (2015 年 12 月 23 日~25 日, 大阪大学, 大阪)
- 12) 梅村雅之, 「TAO による銀河形成研究の新展開」, 企画セッション「東京大学アタカマ天文台のサイエンス戦略」, 日本天文学会春季年会 (2016 年 3 月 14 日~17 日, 首都大学東京, 八王子)

B) その他の発表

- 1) 野村真理子, 「輻射流体シミュレーションと可視分光観測で探る AGN アウトフローの姿」, 研究会「活動銀河核ワークショップ 2015 ~すばる PFS の登場に向けて~」(2015 年 5 月 18 日~19 日, 国立天文台, 三鷹)

- 2) 木立佳里, 梅村雅之, 庄司光男, 小松勇, 栢沼愛, 重田育照, 「量子化学計算による星間ダストでのグリシン生成の研究」, 日本地球惑星科学連合 2015 年大会, (2015 年 5 月 24 日~28 日, 幕張メッセ, 千葉)
- 3) 加藤一輝, 森正夫, 扇谷豪, 「CDM モデルにおける cusp-core 問題と too-big-to-fail 問題の関連性」, 「第 2 回 銀河進化研究会」 (2015 年 6 月 3 日~6 月 5 日, 名古屋大学, 名古屋)
- 4) 桐原崇亘, 「アンドロメダ銀河に衝突した矮小銀河の性質」, 「第 2 回 銀河進化研究会」 2015 (2015 年 6 月 3 日~6 月 5 日, 名古屋大学坂田・平田ホール, 名古屋)
- 5) 五十嵐朱夏, 「Sombrero 銀河に銀河風は存在するのか?」, 「第 2 回 銀河進化研究会」 2015 (2015 年 6 月 3 日~6 月 5 日, 名古屋大学坂田・平田ホール, 名古屋)
- 6) 安部牧人, 梅村雅之, 長谷川賢二, 「Star cluster formation regulated by the interstellar radiation field」, Star Formation Workshop 2015: From Cloud to Cores (2015 年 6 月 29 日~7 月 1 日, 国立天文台, 三鷹)
- 7) 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非等方背景輻射場中の球状星団形成過程の研究」, 日本天文学会秋季年会 (2015 年 9 月 9 日~11 日, 甲南大学, 神戸)
- 8) 江野畑圭, 石原卓, 白石賢二, 森下浩二, 中本泰史, 梅村雅之, 「微惑星形成過程解明のための乱流の直接数値計算と粒子追跡」日本天文学会秋季年会 (2015 年 9 月 9 日~11 日, 甲南大学, 神戸)
- 9) 加藤一輝, 森正夫, 扇谷豪, 「Cold dark matter モデルにおける cusp-core 問題と too-big-to-fail 問題の関連性」, 研究会「日本天文学会 2015 年秋季年会」 (2015 年 9 月 9 日~11 日, 甲南大学, 神戸)
- 10) 桐原崇亘, 三木洋平, 森正夫, 川口俊宏, 「M31 に衝突した矮小銀河の形態とダークマター分布の進化」, 日本天文学会 2015 年秋季年会 (2015 年 9 月 9 日~11 日, 甲南大学, 神戸)
- 11) 小林直樹, 江野畑圭, 石原卓, 白石賢二, 梅村雅之, 「乱流の直接数値計算による原始惑星系円盤中の粒子運動に対する鉛直重力の影響の解析」, 日本天文学会秋季年会 (2015 年 9 月 9 日~11 日, 甲南大学, 神戸)
- 12) 三木洋平, 梅村雅之, 「銀河の多成分力学平衡分布生成コードの開発」, 日本天文学会 2015 年 秋季年会 (2015 年 9 月 9 日~11 日, 甲南大学, 神戸)
- 13) 行方大輔, 梅村雅之, 「活動銀河核トーラス内縁部の輻射流体計算」, 日本天文学会秋季年会 (2015 年 9 月 9 日~11 日, 甲南大学, 神戸)
- 14) 鈴木裕行, 長谷川賢二, 梅村雅之, Benoit Semelin, 「SPH-based Ly α 輻射輸送コードの開発」, 日本天文学会秋季年会 (2015 年 9 月 9 日~11 日, 甲南大学, 神戸)

- 15) 田川寛通, 梅村雅之, 郷田直輝, 矢野太平, 「初期宇宙における多重ブラックホールの合体過程の研究」, 日本天文学会秋季年会 (2015 年 9 月 9 日~11 日, 甲南大学, 神戸)
- 16) 高橋良輔, 岡本直也, 芳松克則, 石原卓, 白石賢二, 梅村雅之, 「電磁流体乱流中の直接数値シミュレーションによる原始惑星系円盤内の粒子運動の解析」, 日本天文学会秋季年会 (2015 年 9 月 9 日~11 日, 甲南大学, 神戸)
- 17) 梅村雅之, 高橋芳太, 「一般相対論的輻射流体力学計算コードの開発」, 「超巨大ブラックホール研究推進連絡会」第 3 回ワークショップ (2015 年 10 月 17 日~18 日, 甲南大学, 神戸)
- 18) 梅村雅之, 「Cosmo Simulator 構想について」, 第 7 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—多分野に広がる計算科学の発展と将来像— (2015 年 10 月 19 日~20 日, 筑波大学, つくば)
- 19) 相川祐理, 「原始惑星系円盤の輝線観測とモデル」, 新領域「宇宙における分子進化: 星間雲から原始惑星系へ」研究会 (2015 年 10 月 22 日~23 日, 北海道大学低温科学研究所, 札幌)
- 20) 小松勇, 「光合成生物の光吸収モデル: 低質量星周りにおける吸収効率の評価」, 近赤外高分散分光研究会: 地球型惑星探索と広がるサイエンス, (2015 年 11 月 24 日~26 日, 国立天文台, 三鷹)
- 21) 梅村雅之, 「宇宙生命計算科学連携拠点の現状」, 第 3 回キラル研究会 (2015 年 11 月 28 日, 京都大学, 京都)
- 22) 行方大輔, 梅村雅之, 「輻射流体計算で探る活動銀河核トーラスのダスト昇華半径付近の構造」, ALMA ワークショップ「AGN 銀河の中心 1kpc → 1pc スケールでの質量降着機構の理解に向けて」, (2015 年 12 月 21 日~22 日, 国立天文台, 三鷹)
- 23) 桐原崇亘, 「M31 における矮小円盤銀河の衝突シミュレーション」, 第 28 回理論懇シンポジウム「宇宙における天体形成から生命まで」 (2015 年 12 月 23 日~25 日, 大阪大学, 大阪)
- 24) 木立 佳里, 「星間でのアミノ酸生成過程の理論的研究」, 第 28 回理論懇シンポジウム「宇宙における天体形成から生命まで」 (2015 年 12 月 23 日~25 日, 大阪大学, 大阪) (ポスター)
- 25) 小松勇, 「太陽と異なる主星の輻射場における光合成の吸収効率」, 第 28 回理論懇シンポジウム「宇宙における天体形成から生命まで」 (2015 年 12 月 23 日~25 日, 大阪大学, 大阪)
- 26) 野村真理子, 「Ultra Fast Outflow のラインフォース駆動型円盤風モデル: 質量・エネルギー放出率と AGN 光度依存性」, 第 28 回理論懇シンポジウム「宇宙における天

- 体形成から生命まで」(2015 年 12 月 23 日～25 日, 大阪大学, 大阪) (ポスター)
- 27) 相川祐理, 「惑星系形成領域の有機物進化」, 日本天文学会春季年会, (2016 年 3 月 14 日～17 日, 首都大学東京, 八王子)
- 28) 古谷眸, 江野畑圭, 石原卓, 白石賢二, 芳松克則, 岡本直也, 梅村雅之, 「原始惑星系円盤における圧縮性乱流場中の粒子運動」, 日本天文学会春季年会 (2016 年 3 月 14 日～17 日, 首都大学東京, 八王子)
- 29) 小林直樹, 江野畑圭, 石原卓, 白石賢二, 梅村雅之, 「乱流の「第一原理計算」による原始惑星系円盤中のダスト粒子衝突過程に対する鉛直重力の影響の解析」, 日本天文学会春季年会 (2016 年 3 月 14 日～17 日, 首都大学東京, 八王子)
- 30) 小松勇, 梅村雅之, 「様々な主星の輻射環境における光合成の吸収効率」, 日本天文学会春季年会 (2016 年 3 月 14 日～17 日, 首都大学東京, 八王子)
- 31) 田川寛通, 梅村雅之, 郷田直輝, 「 $z>10$ の初代天体における中性子星連星の合体」, 日本天文学会春季年会 (2016 年 3 月 14 日～17 日, 首都大学東京, 八王子)
- 32) 田中賢, 吉川耕司, 吉田直紀, 「6 次元位相空間上での Vlasov シミュレーションにおける高次精度化」, 日本天文学会春季年会 (2016 年 3 月 14 日～17 日, 首都大学東京, 八王子)
- 33) 野村真理子, 大須賀健, 高橋博之, 「Ultra Fast Outflow のラインフォース駆動型円盤風モデル: 質量・エネルギー放出率と AGN 光度依存性」, 日本天文学会春季年会 (2016 年 3 月 14 日～17 日, 首都大学東京, 八王子)

(4) 【著書, 解説記事等】

- 1) 森正夫, 「アンドロメダ銀河の素顔」, Newton 6 月号, 2015 年 4 月 26 日
- 2) 森正夫, 「アンドロメダ銀河が我が銀河に大衝突」, Newton 9 月号, 2015 年 7 月 25 日
- 3) 森正夫, 「大宇宙—保存版」, Newton 別冊, 2015 年 11 月 26 日

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

【宇宙生命計算科学連携 (CAB)】

- 1) 星間アミノ酸部会
宇宙・生命分野間連携により, 星間空間におけるアミノ酸前駆体ならびにアミノ酸の生成過程についての量子力学計算を進めた。
- 2) バイオマーカー部会
宇宙・生命分野間連携により, 系外惑星の大気吸収効果を入れた光合成光捕集機構について量子化学計算を進めた。
- 3) 宇宙乱流部会
名古屋大学工学研究科乱流グループとの協働により, 原始惑星系円盤におけるダストと乱

流の相互作用による微惑星形成過程を、ナビエ・ストークス方程式の直接計算により探究した。

【国際連携】

- ・ LBNL-CCS Tsukuba Joint Meeting 2015, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, USA (May 28-29, 2015) (Umemura)
- ・ SC15 出展, Austin, USA(Nov.16-21,2015) (Umemura)

8. シンポジウム, 研究会, スクール等の開催実績

- 1) 「銀河・銀河間物質に関する観測・理論合同ミニワークショップ」
2015年6月10日～11日, 筑波大学計算科学研究センター, つくば市
- 2) 「銀河・銀河間物質に関するワークショップ」
2015年11月25日～27日, 大阪産業大学(梅田サテライト), 大阪市
- 3) 「超巨大ブラックホール研究推進連絡会」第3回ワークショップ
2014年10月17日～18日, 甲南大学, 神戸市
- 4) 「天体形成研究会」
2015年10月30日～31日, 筑波大学計算科学研究センター, つくば市



- 5) 「初代星・初代銀河研究会」
2015年11月30日～12月2日, 草津セミナーハウス, 草津市
- 6) Goldschmidt 2015, session 'Protoplanetary disks in the age of ALMA: physics and

chemistry of dust and volatiles in the Solar Nebula and its analogues', Prague (Aug. 16-21, 2015) (Aikawa)

- 7) The 6th Zermatt ISM-Symposium, Conditions and Impact of Star Formation, Zermatt, Switzerland (Sept. 7-11, 2015) (Aikawa)
- 8) From Clouds to Protoplanetary Disks: the Astrochemical Link, Berlin (Oct. 4-8, 2015) (Aikawa)

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

【本部】

学長補佐室会議委員
教育研究評議会委員
人事企画委員会委員
研究推進会議委員
情報環境委員会委員
全学年俸制教員評価実施委員会委員

【系・センター】

計算科学研究センター センター長
計算科学研究センター 運営委員会委員長
計算科学研究センター 人事委員会委員長
計算科学研究センター 宇宙物理研究部門主任
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 研究企画室委員長
数理物質系人事委員会総会委員
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

- ・相川祐理

【系・センター】

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 人事委員会委員
物理学域 運営委員会委員

・森正夫

【系・センター】

計算科学研究センター 共同研究委員会学内委員

物理学域図書委員会委員

計算基礎科学連携拠点企画チーム

10. 社会貢献・国際貢献

- ・2015 年 10 月 23 日 竹園東小学校講演会「宇宙の旅」（梅村）
- ・2015 年 11 月 21 日 竹園東中学校土曜特別講座「PC で宇宙旅行」（相川）
- ・2016 年 1 月 23 日 つくばエキスポセンター講演会「一般相対性理論と宇宙」（梅村）

11. その他

学会活動等

- ・IAU Commission H2 Astrochemistry, Organizing Committee（相川）
- ・日本天文学会欧文報告誌 PASJ 編集委員（相川）

III. 原子核物理研究部門

1. メンバー

教授	中務 孝、矢花一浩（量子物性部門兼務）
准教授	寺崎 順（HPCI 戦略プログラム）
講師	橋本幸男
助教	日野原伸生（国際テニユアトラック）
研究員	温 凱（数理物質系物理学域）、鷲山広平（数理物質系物理学域）
学生	大学院生 4 名、学類生 2 名

2. 概要

核子（陽子・中性子）の多体系である原子核の構造・反応・応答などの多核子量子ダイナミクスの研究を推進している。安定線（ハイゼンベルグの谷）から離れた放射性アイソトープの原子核の構造と反応、エキゾチックな励起状態の性質、様々な集団運動の発現機構など、未解決の謎の解明に取り組んでいる。原子核の研究は、フェルミ粒子の量子多体系計算という観点で、物質科学や光科学、冷却原子系の物理と密接なつながりをもつ。また、クォーク・グルーオンのダイナミクスを記述する格子 QCD に基づく核力の計算、軽い原子核の直接計算などが進展する中、素粒子物理学との連携も重要性が増している。ニュートリノの解明に向けたニュートリノレス二重ベータ崩壊の観測実験や、素粒子標準模型のテストに関わる実験などにも原子核理論の精密計算が不可欠とされている。また、元素の起源や星の構造にも原子核の性質は深く関わり、宇宙物理学とも密接に関係している。原子核物理部門のメンバーは、このような幅広い課題に取り組み、分野の枠を超えた研究を推進している。

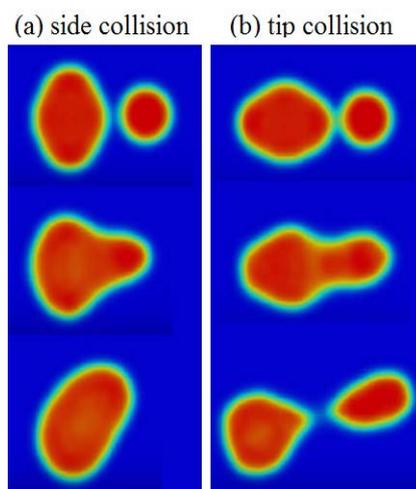
3. 研究成果

【1】 時間依存平均場理論による低エネルギー重イオン反応の研究

(1) 多核子移行反応・準核分裂過程に対する系統的な TDHF 計算（関澤、矢花）

低エネルギー原子核衝突は、融合反応と共に終状態で 2 つの分裂片に分かれる反応を利用した、安定に存在しない原子核を生成する手段として興味を持たれている。我々は時間依存 Hartree-Fock (TDHF) 法を用い、 $^{64}\text{Ni} + ^{238}\text{U}$ 反応に対する詳細な計算を行った。この反応は、合成系が原子番号 120 の超重核となることや、 ^{238}U が大きな変形を持つことなどの観点から興味を持たれ、実験が行われてきた。この反応の特徴として、計算から以下のことを明らかにした。まず、反応の様相が、衝突時の U の方向に強く依存する。U の変形軸が入射方向と平行な場合には、長く伸びた複合系が形成され、比較的短い反応時間で分裂し、相対運動から内部運動へのエネルギー移行は小さくなる。この場合、重い分裂片が ^{208}Pb となる傾向が見られ、

魔法数が準核分裂ダイナミクスに大きな影響を与えることが見出された。一方、U の変形軸が入射方向に対し垂直な場合には、反応時間が長くなり、エネルギー移行も大きくなる。また、入射エネルギー依存性を調べたところ、バリア近傍の入射エネルギーでは準核分裂が主要であり核融合過程は見られなかったが、より高い入射エネルギーにおいて融合過程が見出された。右図に、計算によって得られた $^{64}\text{Ni}+^{238}\text{U}$ 反応における密度分布の時間発展の様子を示す。衝突時の U の向きに応じ、反応の様相が大きく異なることが分かる。この知見は、 $Z=120$ の超重核を生成する反応への示唆を与えるものであると考えられる。

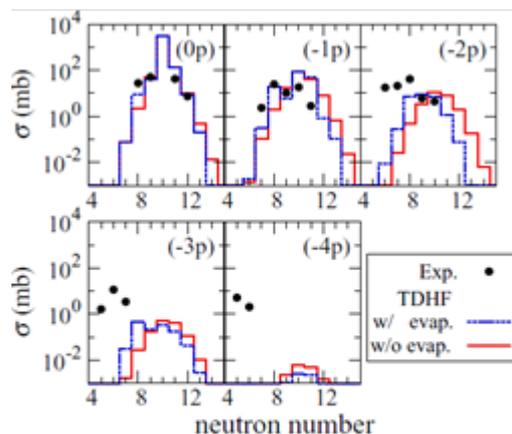


$^{64}\text{Ni}+^{238}\text{U}$ 反応の様子：

- (a) U の側面に衝突し、融合
- (b) U の先端に衝突し、分裂

(2) 質量の非対称な系における多核子移行反応の研究 (B. J. Roy 他 (BARC、インド)、 関澤)

中性子過剰な原子核を実験的に生成し、その性質を明らかにすることは、原子核物理学の重要課題の一つである。近年、多核子移行反応は、中性子過剰な不安定核の生成が期待できる反応として注目を浴びている。我々は、微視的な計算により反応機構を明らかにし、目的の不安定核を生成する最適な反応を予言することを目指し、研究を進めている。この目的を達成するため、2014 年末から、インドの実験グループとの共同研究を進めている。これまでに我々は、 $^{16,18,24}\text{O}+^{206,208}\text{Pb}$, $^{16,24}\text{O}+^{154}\text{Sm}$, $^{16}\text{O}+^{27}\text{Al}$ 反応に対する系統的な TDHF 計算を行った。その内、実験データの解析が完了した、 $^{18}\text{O}+^{206}\text{Pb}$ 反応について、移行反応の角度分布、フラグメントの運動エネルギー分布、移行反応断面積に対する実験値と計算値の比較を行った。その結果、主要な反応過程について、TDHF 計算により定量的な記述が得られることが示された。しかし、平均値から離れた反応確率の小さい過程について、実験値とのずれが見出された。この結果は、分析した反応における、現在の計算に含まれていない多体相関の重要性を示唆している。現在は、大きく変形し



移行反応断面積の実験値との比較

た ^{154}Sm 原子核を標的核とした $^{16}\text{O}+^{154}\text{Sm}$ 反応に着目し、入射エネルギーを変えた結果を分析することにより、多核子移行反応における原子核の変形の効果を明らかにするための研究を進めている。

(3) 大振幅集団運動理論を用いた核反応ダイナミクスの記述 (温、中務)

線形領域を超える大振幅集団運動を扱う理論として、断熱近似型の理論が提案されているが、そのうちの 하나가、2000 年に提案された断熱自己無撞着集団座標法 (Adiabatic Self-consistent Collective Coordinate Method: ASCC 法) である。この理論では、少数自由度の集団空間 (座標) の自己無撞着な抽出が可能であり、特に、過去の断熱時間依存平均場理論では不可能であった一意的な抽出ができる点が優れている。2014 年の秋から、この理論に基づいて、低エネルギーの多核子反応ダイナミクスを記述することを目指した研究を開始した。BKN 相互作用と呼ばれる有効相互作用を用いた 3 次元座標表示のコード開発を行い、昨年度に引き続き、今年度は、アルファ粒子と炭素 (融合核: 酸素)、アルファ粒子と酸素 (融合核: ネオン) の散乱・融合過程を記述する集団座標をマイクロに決定した。拘束条件付き平均場方程式と、その拘束演算子を決定する局所調和近似方程式を自己無撞着に解くことで、これを実現した。こうして、核反応の集団運動を支配するポテンシャルと質量パラメータが決定される。昨年度求めた 2 つのアルファ粒子の融合・分裂過程に対して決定した集団質量と同様、上記のより重い系においても、遠方で換算質量に一致することが示された。また、2 つの原子核が接触すると、換算質量が大きくなることが分かった。また、反応経路に対しても興味深い結果が得られている。通常行われるように、拘束演算子を四重極演算子や八重極演算子に仮定して反応経路を求めた結果と、ASCC 法によって自己無撞着に反応経路を決めた場合では、異なる経路が得られた。これは、系の動的な性質を反映した理論によって初めて可能になった成果と言える。

【2】 アイソスピン不変なエネルギー汎関数とアイソスピン対称性の破れ (中務、佐藤 (理研)、Dobaczewski (ワルシャワ大)、Satula (ワルシャワ大))

現在主流となっている原子核のエネルギー密度汎関数は、Skyrme 形式、Gogny 形式、共変形式 (相対的) の 3 つに大別されるが、どれも陽子と中性子の密度の汎関数としてエネルギーが与えられている。しかし、陽子や中性子はアイソスピンの第 3 成分の固有状態であり、アイソスピン空間における回転に対して不変ではなく、一般にはアイソスピンが任意の方向を向いた状態、すなわち陽子と中性子が混合した状態に拡張する必要がある。これを実行するため、昨年度までに、陽子・中性子を区

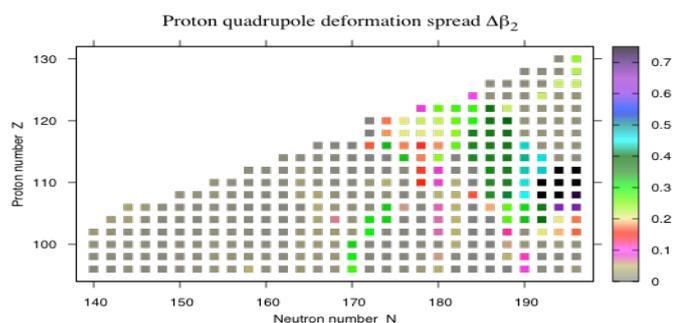
別せずに「核子」として扱う新しい Kohn-Sham 方程式と、それに対応する非対角要素を含むエネルギー汎関数を構築し、その計算コード開発を実施した。今年度は、開発したコードを利用して、アイソスピン対称性の破れを定量的に検証する研究を行った。

アイソスピン対称性は、原子核において近似的に成立する対称性であるが、電磁相互作用では破れていることが知られている。また、強い相互作用においても、u, d クォーク間に質量差が存在するためにわずかに破れている。この破れの度合いと核力との関係は、軽い原子核について調べられていたが、重い原子核における研究はほとんど無かった。我々は、アイソスピン不変なエネルギー汎関数にそれを破る汎関数を加えることでこれを実現し、実験データとの比較からその破れの大きさを評価した。荷電類似状態（アイソバリックアナログ状態）と呼ばれる状態を系統的に計算し、豊富な実験データとの比較を行い、新しいパラメータを 2 つだけ導入することにより、アイソスピン対称性を破る普遍的な汎関数を構築することに成功した。特に、質量依存性に現れるジグザグ構造等、特徴的な振る舞いが再現できており、また破れの大きさが重い原子核の質量に拡大されて現れるといった現象も明らかになりつつある。現在、より詳細な解析を実行中である。

【3】 超重元素領域におけるエネルギー密度汎関数の不定性（中務、Afanasjev(ミシシッピ州立大)、Ring(ミュンヘン工科大))

2015 年 6 月から 8 月にかけて、米国・ミシシッピ州立大学の Anatoli Afanasjev 教授が研究室にサバティカルで滞在した。これを契機に、原子核のエネルギー密度汎関数の精度・不定性を明らかにする研究をスタートさせた。特に、陽子数が 100 を超える超重元素領域には、実験データが少ないために不定性が大きいと予想される。2015 年の大晦日に、森田氏をグループリーダーとする理化学研究所の実験グループが元素番号 113 の命名権を獲得したニュースは記憶に新しいが、将来の実験の設計などにおいても、理論の不定性を明らかにしておくことは重要である。

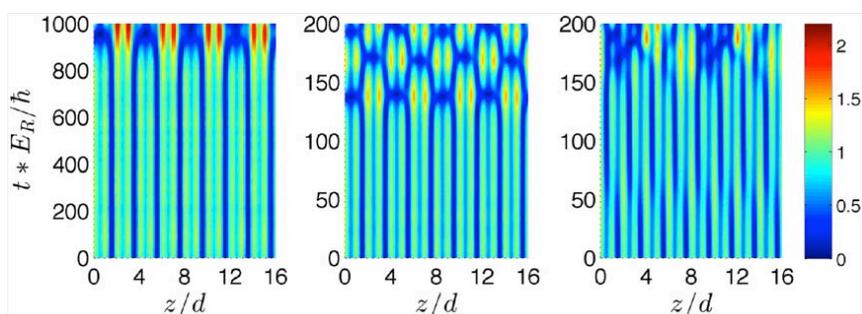
我々は、多くの異なる共変形式エネルギー汎関数を用いて軸対称性変形を取り入れた計算を実行し、理論予測のばらつきを評価した。その結果、以下の図に示すように、開殻配位 (open-shell configuration) に対応する多くの超重核の構造に対しては、ばらつきが非常に小さく、理論予測の信頼度が高いことが分かった。一方、閉殻配位 (closed-shell configuration) に近い原子核に対してのばらつきが大きい。また、変形を考慮しない計算によって示唆された中性子の魔法数 $N=172$ が、変形を考慮することによって消滅すること（すなわち、 $N=172$ の原子核のほとんどは変形していること）を示した。



超重核領域における変形度の理論予測不確定性

【4】 冷却フェルミ系における倍周期状態の安定性 (中務、渡辺 (APCTP)、Yoon (APCTP)、Dalfvo(トレント大))

光格子にトラップされたフェルミ粒子の冷却原子系における対相関・超流動ダイナミクスを、周期性を取り入れた Bogoliubov-de-Gennes (BdG) 方程式を解くことで研究した。光格子のポテンシャルが距離毎に周期的である場合、通常、固体のバンド計算として良く知られているように、この周期 d に対応するブロッホ波動関数で記述される。しかし、対相関が対ポテンシャルを生み出す場合には、その機構が非線形であるために、ポテンシャルの周期が d ではなく、 $2d$ 、 $3d$ 、 \dots といった d の整数倍の周期のポテンシャルが現れる場合がある。これを倍周期状態と呼ぶ。これまでのボソン凝縮系の研究では、これらの倍周期状態は常にエネルギー的に高く、基底状態には現れないと言われていた。今回、フェルミ粒子系での対相関が比較的弱い BCS 的な状態においては、周期 d の状態よりも、倍周期状態のエネルギーが低くなる可能性を示唆した。また、倍周期状態の安定性を、時間依存 BdG 方程式を解くことで調査し (下図参照)、現在実験が可能となる時間スケールにおいて実現・観測が可能であることを示した。



TDBdG 計算による倍周期状態の安定性の検証。中央の図がユニタリ極限に対応し、左が BCS、右が BEC 側に対応。波動関数の時間発展 (縦軸が時間) を表しており、左図は長時間変化しないことを示している。

【5】 リチャードソン模型における集団励起構造(中務、侃(M2))

原子核の励起状態の中で、スピン・パリティが 0^+ の状態の性質には多くの未解決問題が残っている。多重フォノン状態、クラスター状態、対振動状態など、原子核における 0^+ 励起状態は多様な様相を示すが、最近の実験でも、過去の伝統的な解釈を否定する実験データが数多く報告されている。これらのデータの蓄積にも関わらず、まだその本質が理解できていないというのが現状である。

我々は、対相関をもたらす集団的ダイナミクスにこの問題の本質があると考え、厳密解を求めることができる対相関模型（リチャードソン模型）を最初の手がかりとして、この課題に取り組んでいる。厳密解では、対凝縮によって基底状態が対回転スペクトルを生み出すことが示されたが、励起 0^+ 状態に対しては、対回転スペクトルが現れる場合と現れない場合があることが分かった。この違いを生み出す機構を理解するために、厳密解に加えて、準古典的なアプローチを取ることによって、そのダイナミクスを解析した。対回転は、対凝縮したフェルミ系で発現する集団運動（南部・ゴールドストーン・モード）であり、ゲージ空間での回転運動と見なすことができる。このような回転運動が現れるためには、系に対して大局的なゲージ角が定義できる必要があるが、これが励起状態に対して可能になると対回転スペクトルが現れることが分かった。

【6】 3次元空間上の有限振幅法の開発（鷲山、中務）

原子核の励起モードの解析に対相関を含む密度汎関数に基づく準粒子乱雑位相近似法(QRPA)がよく用いられている。ただし、自己無撞着な密度汎関数法に基づく QRPA 計算は大規模な数値計算を必要とする。その要因として、残留相互作用の煩雑な計算、及び、大次元の QRPA 行列の対角化があげられる。これらの要因を回避して効率良く QRPA 計算を実行するために 2007 年に有限振幅法が提案された。有限振幅法では、大規模数値計算となる残留相互作用の計算と QRPA 行列の対角化をあらわに行なうことなく、外場に対する原子核の線形応答モードを記述する。これまで QRPA 計算は 2 次元の軸対称原子核に限られてきたが、本研究では、3 次元空間上での有限振幅法 QRPA 計算の数値計算コードの開発を行なった。数値計算コードはほぼ完成し、妥当な計算時間及びメモリ容量での数値計算の実行が可能であることを示した。また、テスト計算としていくつかの軸対称変形原子核のアイソスカラー四重極応答に応用し、先行研究と同様の結果を得た。今後は、非軸対称原子核の励起モード、大振幅集団運動に対する質量パラメータ計算に応用する。

【7】 原子核の二重ベータ崩壊の原子核行列要素（寺崎）

寺崎は五年前に赴任して以来ニュートリノレス二重ベータ崩壊の理論的研究を実施している。その中心的内容は、準粒子乱雑位相近似を用いたその崩壊の原子核行列要素の計算である。その崩壊が観測された場合にニュートリノの質量スケールを決定するために必要な原子核行列要素の信頼できる数値を出すことが目標である。

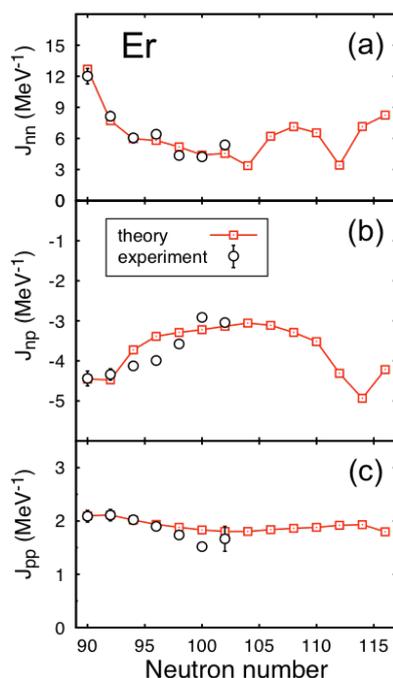
2015 年度は、 ^{150}Nd から ^{150}Sm へのニュートリノレス二重ベータ崩壊の原子核行列要素を陽子・中性子準粒子乱雑位相近似 (pnQRPA) を用いて本来の二重ベータ崩壊経路に沿って求め、2014 年度に得ていた、完全性近似のもとで可能な二核子移行経路を用いた原子核行列要素との整合性を研究した。これら二つの原子核行列要素は一致しなければならないが、QRPA アプローチでは、二重ベータ崩壊経路と二核子移行経路では、影響の大きい相互作用が異なるため、任意の相互作用に対して一致を保証することができない。寺崎は、異なる経路による原子核行列要素の一致要請が、不確定性の比較的大きい陽子・中性子対相互作用の強さを決める条件として用いることができるということを見出した。この原理によって求めたアイソスカラー陽子・中性子対相互作用の強さは、ほぼ同種核子間対相互作用の強さの平均値であった。これを用いた二個ニュートリノ二重ベータ崩壊の原子核行列要素は、この崩壊に対する寿命の実験値から求められる半実験値より約 50%大きい、この半実験値を再現するように相互作用の強さを調節する計算を除くと、因子 2 以下のずれは、いい方である。寺崎の方法では、pnQRPA の解は近似がよい範囲にあり、従来の強すぎるアイソスカラー陽子・中性子対相互作用 (従来の重複計算方法で二個ニュートリノ二重ベータ崩壊原子核行列要素のフィッティングをすることでこうなる) による pnQRPA の劣化問題が解決される。

寺崎は 2011 年度以来 QRPA を用いた二重ベータ崩壊の研究を行ってきたが、異なる原子核に基づく QRPA 状態の重複を求める際、QRPA 基底状態の波動関数をあらわに用いること、pnQRPA と同種粒子 QRPA の積基底状態波動関数を用いること、そして 2015 年度の、異なる崩壊経路を相互作用に対する拘束条件として用いることの三つが分野にとって大きな意味のある進歩であった。これによって QRPA の適用方法の主要な改良は完結した。

【8】 有限振幅法による南部=Goldstone モードを取り扱う定式化と対回転モードの系統的評価 (日野原、Nazarewicz(ミシガン州立大))

大局的な連続対称性が自発的に破れると対称性を回復させる南部=Goldstone (NG) モードが発生する。有限核では並進対称性やゲージ対称性の破れに伴って重心運動、対回転運動が NG モードとして発生し、そのモードの慣性質量である Thouless-Valatin の慣性モーメントは準粒子乱雑位相近似 (QRPA) によって計算できる。原子核密度汎関数の QRPA を線形応答理論によって解く有限振幅法を座標一運動

量表示で定式化することにより、NG モードの Thouless-Valatin の慣性モーメントおよび NG モードの非自明な座標演算子を応答関数から効率よく計算する方法を確立した。この定式化は重心運動と対回転運動で成立することを数値計算によって確認した。対相関はゲージ対称性の破れをもたらす原子核での代表的な集団的相関であるが、原子核密度汎関数での対密度汎関数の理解はあまり進んでいない。これは対相関と関連のある実験観測量が少ないことが一因である。一般的には対ギャップを奇核と偶核の束縛エネルギー差と対応させて対密度汎関数の結合定数を決めるが、対ギャップは厳密には実験観測量ではないため、これだけから対密度汎関数の詳細を議論することは難しい。先の定式化を用いて、対回転の Thouless-Valatin の慣性モーメントを系統的に評価し、以下の結論を得た（図参照）。1) 対回転の慣性モーメントは対相関の新しい指標となることを提案した。慣性モーメントは偶々核の束縛エネルギーからのみ導出できる測定量であるため密度汎関数の時間反転に対して符号を変える time-odd 項の影響を受けない。2) 対回転の慣性モーメントは偶々核の二重束縛エネルギー差の逆に対応しており、 δ_{2n} 、 δ_{2p} 、 δV_{pn} として知られている二重閉殻付近での一粒子状態の性質を表す量は、超伝導状態では対相関の集団性と関連のある対回転の慣性モーメントとして総合的に理解できることを示した。3) 中性子過剰不安定原子核の対回転の慣性モーメントは対密度汎関数の密度依存性に依存することを指摘した。中性子過剰不安定核の質量測定によって将来的に対相関の詳細が明らかになる可能性がある。4) 中性子、陽子両方の粒子数保存が破れている場合の NG モードは中性子と陽子の混ざったモードになっていることを初めて系統的に示した。



エルビウム同位体基底状態での二次元対回転の慣性モーメントの対角成分 J_{nn} (a), J_{pp} (c) と非対角成分 J_{np} (b).

【9】 非軸対称励起モードを扱う有限振幅法の計算コード構築と希土核双極子巨大共鳴の系統的計算 (日野原、Kortelainen (ユバスキュラ大)、大石(ユバスキュラ大)、Nazarewicz(ミシガン州立大))

原子核密度汎関数理論での準粒子乱雑位相近似(QRPA)は巨大共鳴を始めとする集団励起状態を記述する理論であるが、従来の行列対角化の方法は計算スケールが大きくなるため、二準粒子模型空間のサイズに制限を加える必要がある。QRPAの効率的解法である有限振幅法ではこの模型空間の制限なく計算が可能である。これまでに軸対称調和振動子基底によるHartree-Fock-BogoliubovコードHFBTHOに基づいて有限振幅法を実装してきたが、今回の拡張によって軸対称変形原子核の非軸対称励起モードを計算することが可能となった。一例として、重い軸対称変形原子核の ^{240}Pu の四重極、八重極巨大共鳴が計算できることを示し、また、 ^{154}Sm の低エネルギー集団モードの励起エネルギーおよび遷移強度 $B(E3)$ を以前に開発した複素積分の方法を用いて示した。このコードの開発によって、軸対称変形した原子核のあらゆる多重極モードの効率よい系統的計算が可能となった。

構築したコードを用いて希土類核(Gd-W)の巨大双極子共鳴の系統的計算を行った。巨大双極子共鳴の平均エネルギーとエネルギー幅の多くは計算によって再現できることを示したが、Erより重い原子核ではエネルギー幅にずれがあった。このずれを評価するために密度汎関数の結合定数を変化させ、その依存性を分析した。和則を増大させるThomas-Reiche-Kuhn増大因子を増やすと共鳴エネルギーのピークが高エネルギー側に動くが、遷移の分布にはあまり影響しないことがわかった。実験とのずれの解消のためにはさらなる系統的な密度汎関数の最適化、あるいはQRPAを超えた理論を用いるが今後必要になると考えられる。

【10】 生成座標法による二重ベータ崩壊核行列要素における集団相関の役割の分析 (日野原、Menéndez(東大)、Engel(ノースカロライナ大)、Martínez-Pinedo(ダルムシュタット工科大)、Rodríguez(マドリッド自治大))

変形や対相関といった集団的自由度は原子核基底状態の記述には不可欠であるが、ニュートリノレス二重ベータ崩壊の原子核行列要素に対して集団相関はどの程度関連があるのかを、シェル模型厳密計算が可能なpf殻領域(Ca, Ti, Cr)での二重ベータ崩壊のGamow-Teller核行列要素をシェル模型計算と生成座標法計算によって分析した。KB3G相互作用を用いたシェル模型計算、およびKB3Gから導出した分離型集団ハミルトニアン(シュル模型計算、および同じ分離型集団ハミルトニアンを四重極変形とアイソスカラー型中性子-陽子対振幅を生成座標に用いた生成座標法を比較した。

シェル模型計算同士の比較では分離型集団ハミルトニアンはKB3Gの核行列要素の結果をよく再現し、核行列要素を記述する上でもハミルトニアンの集団相関近似の重要性を示した。さらに、アイソスカラー型対相関を取り入れた生成座標法の結果はシェル模型計算をよく再現した。生成座標法は平均場理論に基づいているため模型空間をシェル模型よりも容易に拡張することができる。そのため、特に集団性が高く厳密なシェル模型計算が困難となる変形中重核領域では今後分離型集団ハミルトニアンを用いた生成座標法計算による核行列要素の評価が強力な手法となりうることを示した。

【11】 Gogny-TDHFB 法による $^{20}\text{O}-^{20}\text{O}$ 正面衝突の計算 (橋本)

原子核の振る舞いを研究するうえで、時間依存平均場の方法は定性的にも定量的にも極めて有用な枠組みとなっている。原子核の基底状態近傍の状態においては対相関が重要な働きをすることが知られているので、中性子過剰核の性質を理解する目的で、TDHFの枠組みを拡張して対相関を扱えるようにした時間依存ハートレーフォックボゴリェボフ (TDHFB) 法の実用的な数値計算が行われるようになってきた。橋本は、調和振動子基底と空間格子としての Lagrange 格子点を組み合わせた基底を利用し、Gogny 力を用いた TDHFB 方程式を解く、という数値計算の方法を整備してきた。今年度は、 $^{20}\text{O}+^{20}\text{O}$ および $^{20}\text{O}+^{34}\text{Mg}$ の正面衝突の計算を行った。この計算で特に着目した点は、1960年代から話題になっている、超流動原子核反応における核子移行機構とジョセフソン効果との対応である。HFB 方程式を解いて得られる超流動原子核では、粒子数演算子の共役量であるゲージ角に関連した不変性があるが、反応時の超流動原子核においては、物理的な量が (相対) ゲージ角に依存すると考えられる。実際の数値計算は、 $^{20}\text{O}+^{20}\text{O}$ において、クーロン障壁頂上付近の軌道を2本 (2個の初期エネルギー) 設定し、また、相対ゲージ角 χ を0度、45度、90度、135度のそれぞれについて、相対距離2.1 fm 離れた点から計算を開始した。この一連の計算により、① 超流動原子核間のポテンシャルエネルギーに相対ゲージ角依存性があり、その“高さ”では0.5 MeV程度、ピーク位置では0.2 fm程度のずれになる、② 対相関エネルギーは相対ゲージ角が90度のときに最小となる、さらに、③ 移行中性子数は、相対ゲージ角の2倍 ($\Phi=2\chi$) の正弦 ($\sin \Phi$) に比例する、ことがわかってきた。③は、ジョセフソン効果と類似である。今後は、粒子数射影法を用いながら、対相関のあるときの核子移行の機構を明らかにするための TDHFB 計算を継続する。

4. 教育

1. 佐藤駿丞、博士（理学）

Time-dependent density functional theory for extremely nonlinear interactions of light with dielectrics

2. 桑原有輝、修士（理学）

時間依存密度汎関数理論による非線形分極の時空間分析

3. 倪 放、修士（理学）

Richardson 模型における集団座標の量子化と 0+集団励起状態の解明

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 第 10 回日本物理学会若手奨励賞（第 17 回核理論新人論文賞）、

関澤一之、「時間依存密度汎関数法による重イオン多核子移行反応の研究」、2016 年 3 月

2. 筑波大学学長表彰、

佐藤駿丞、“Time-dependent density functional theory for extremely nonlinear interactions of light with dielectrics”、2016 年 3 月 25 日

外部資金

1. 日本学術振興会科学研究費・基盤研究(B)、中務孝、代表、2013-2015 年、5,800,000 円 (H27 年度直接経費)、「原子核の低エネルギー集団励起と核融合・核分裂機構の解明」

2. 科研費・新学術領域研究(研究領域提案型)、中務孝、分担、2012-2016 年、1,000,000 円 (H27 年度直接経費)、「冷却原子を用いた中性子過剰な低密度核物質の状態方程式」

3. JST ImPACT「核変換による高レベル放射性廃棄物の大幅な低減・資源化」、中務孝、課題責任者、2014-2018 年、6,000,000 円 (H27 年度)、「核構造計算による核反応モデルの高精度化」

4. 科研費 平成 27 年度基盤研究 C、寺崎順、研究代表者、平成 26 年度採択、交付額(直接経費) 1,300,000 円、「QRPA を用いたニュートリノレス二重ベータ崩壊の原子核行列要素計算」

5. 科研費 平成 27 年度新学術領域「宇宙の歴史をひもとく地下素粒子原子核研究」

公募研究、寺崎順、研究代表者、平成 27 年度採択、交付額（直接経費）900,000 円、「原子核行列要素の方法による不一致問題の解決」

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. T. Akahori, Y. Funaki, K. Yabana,
“Imaginary-time formalism for triple-alpha reaction rate”, Phys. Rev. C92, 022801 (2015).
2. K. Sekizawa, K. Yabana,
“Time-dependent Hartree-Fock calculations for multinucleon transfer and quasifission processes in the $^{64}\text{Ni}+^{238}\text{U}$ reaction”, Phys. Rev. C 93, 054616 (2016).
3. Sonika, B.J. Roy, A. Parmar, U.K. Pal, H. Kumawat, V. Jha, S.K. Pandit, V.V. Parkar, K. Ramachandran, K. Mahata, A. Pal, S. Santra, A.K. Mohanty, and K. Sekizawa,
“Multinucleon transfer study in $^{206}\text{Pb}(^{18}\text{O}, x)$ at energies above the Coulomb barrier”, Phys. Rev. C 92, 024603 (2015).
4. S. Yoon, F. Dalfovo, T. Nakatsukasa, and G. Watanabe,
“Multiple period states of the superfluid Fermi gas in an optical lattice”, New J. Phys. 18, 023011 (2016).
5. K. Wen, K. Washiyama, F. Ni, T. Nakatsukasa,
“Time-dependent Density Functional Studies of Nuclear Quantum Dynamics in Large Amplitudes”, Acta Phys. Polo. B. Proc. Suppl. 8, 637 (2015).
6. S. E. Agbemava, A. V. Afanasjev, T. Nakatsukasa, and P. Ring,
“Covariant density functional theory: Reexamining the structure of superheavy nuclei”, Phys. Rev. C 92, 054310 (2015).
7. S. Ebata and T. Nakatsukasa,
“Repulsive aspects of pairing correlation in nuclear fusion reaction”, JPS Conf. Proc. 6, 020056 (2015).
8. W. Horiuchi, T. Inakura, T. Nakatsukasa, and Y. Suzuki,
“Systematic analysis of total reaction cross sections of unstable nuclei with Glauber theory”, JPS Conf. Proc. 6, 030079 (2015).
9. K. Sato, J. Dobaczewski, T. Nakatsukasa, and W. Satula,

- “Mean-field calculation based on proton-neutron mixed energy density functionals”, JPS Conf. Proc. 6, 020051 (2015).
10. K. Matsuyanagi, M. Matsuo, T. Nakatsukasa, K. Yoshida, N. Hinohara, K. Sato,
“Microscopic derivation of the quadrupole collective Hamiltonian for shape coexistence/mixing dynamics”, J. Phys. G 43,024006 (2016).
11. J. Terasaki
“Two decay paths for calculating the nuclear matrix element of neutrinoless double- β decay using quasiparticle random-phase approximation”, Phys. Rev. C 93, 024317 (2016)
12. J. Terasaki
“Many-body correlations of QRPA in nuclear matrix elements of double- β decay” AIP Conf. Proc. 1686, 020025 (2015).
13. N. Hinohara, M. Kortelainen, W. Nazarewicz, E. Olsen,
“Complex-energy approach to sum rules within nuclear density functional theory”, Phys. Rev. C 91, 044323 (2015)
14. N. Hinohara,
“Collective inertia of the Nambu-Goldstone mode from linear response theory”, Phys. Rev. C 92, 034321 (2015)
15. M. Kortelainen, N. Hinohara, W. Nazarewicz,
“Multipole modes in deformed nuclei within the finite amplitude method”, Phys. Rev. C 92, 051302(R) (2015)
16. J. Menéndez, N. Hinohara, J. Engel, G. Martínez-Pinedo, T. R. Rodríguez,
“Testing the importance of collective correlations in neutrinoless $\beta\beta$ decay”, Phys. Rev. C 93, 014305 (2016)
17. T. Oishi, M. Kortelainen, N. Hinohara,
“Finite amplitude method applied to the giant dipole resonance in heavy rare-earth nuclei”, Phys. Rev. C 93, 034329 (2016)
18. N. Hinohara and J. Engel,
“Effect of Fluctuations of Quadrupole Deformation and Neutron-Proton Correlations on Double-Beta Decay Nuclear Matrix Element”, JPS Conf. Proc. 6, 020034 (2015)
19. Y. Hashimoto,
“Hartree-Fock and time-dependent Hartree-Fock calculations with the Gogny

interaction using a Lagrange mesh”, INFORMATION Vol. 18(2015), 2219 - 2232.

B) 査読無し論文

1. 倪 放、“対相関模型における 0^+ 集団励起状態の解明”、原子核研究 2016 夏の学校特集号、Vol. 60、Suppl. 1、pp. 69-71 (2016)

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. K. Yabana,
“Time-dependent Hartree-Fock calculations for multi-nucleon transfer and quasi-fission processes”, The 12th Int. Conf. on Nucleus-Nucleus Collisions, Catania, Italia, June 21-26, 2015,
2. T. Nakatsukasa,
“Recent activities in the time-dependent density-fuinctional theory”, 9th Japan-China Joint Nuclear Physics Symposium (JCNP2015), Ibaraki, Japan, Nov. 7-12, 2015.
3. T. Nakatsukasa,
“Isospin invariant energy density functional and its applications”, 2015 SKLTP-BLTP Joint Workshop on Physics of Strong Interaction, Guillin, China, Oct. 29 - Nov. 3, 2015.
4. T. Nakatsukasa,
“TDDFT studies of nuclear quantum dynamics in small and large amplitudes”, XXII Nuclear Physics Workshop “Marie & Pierre Curie”, Kazimierz-Dolny, Poland, Sep. 22-27, 2015.
5. T. Nakatsukasa,
“Problems associated with the symmetry breaking”, Progress in and beyond Theoretical Nuclear Physics Laboratory, Wako, Japan, Mar. 28, 2016.
6. J. Terasaki,
“Proton-neutron pairing correlations in double- β decay”, 2nd International Workshop & 12th RIBF Discussion on Neutron-proton Correlations, Hong Kong, P. R. China, Jul. 6-9, 2015.
7. N. Hinohara,

“Isospin Invariant Density Functional Theory”, 2015 Gordon Research Conference on Nuclear Chemistry “Confluence of Structure and Reactions”, Colby-Sawyer College, New London, NH, USA, May 31-Jun. 5, 2015.

8. N. Hinohara,

“Neutron-proton pairing fluctuations and double-beta decay”, 2nd International Workshop & 12th RIBF Discussion on Neutron-Proton Correlations, Univ. of Hong Kong, Hong Kong, Jul. 6-9, 2015.

9. Kai Wen,

“The inertial mass of nuclear collective motion derived by the adiabatic self-consistent collective coordinate(ASCC) method”, SKLTP-BLTP Joint Workshop on Physics of Strong Interaction in Guilin, China. Oct. 29-Nov. 3rd, 2015.

B) 一般講演

1. J. Terasaki,

“Effects of nuclear many-body correlations on neutrinoless double- β decay in quasiparticle random-phase approximation”, Symposium on Quarks to Universe in Computational Science (QUCS2015), Nara, Japan, Nov. 4-9, 2015.

2. J. Terasaki,

“Many-body correlations of QRPA in nuclear matrix elements of double- β decay” 10th MEDEX'15 Meeting (Matrix Elements for the Double- β -decay Experiments), Prague, Czech, Jun. 9-12, 2015.

3. N. Hinohara,

“QRPA sum rules within the finite-amplitude method”, Nuclear Computational Low-Energy Initiative Collaboration Meeting (NUCLEI2015), Michigan State Univ., East Lansing, MI, USA, Jun. 10-13, 2015.

4. N. Hinohara, J. Engel,

“Generator coordinate method with proton-neutron pairing coordinates and evaluation of double-beta decay nuclear matrix elements”, Nuclear Structure and Dynamics III, Portorož, Slovenia, Jun. 14-19, 2015.

5. N. Hinohara,

“Generator Coordinate Method with Proton-Neutron Pairing Amplitudes”, The future of multi-reference Density Functional Theory, Univ. of Warsaw, Poland, Jun. 25-26, 2015.

6. N. Hinohara,
“Collective modes and sum rules within nuclear density functional theory”,
YITP Long-term workshop “Computational Advances in Nuclear and Hadron
Physics” (CANHP2015), YITP, Kyoto Univ., Kyoto, Japan, Sep. 21-Oct. 30, 2015
7. N. Hinohara,
“Recent development of finite-amplitude method for nuclear collective
excitation”, Symposium on ‘Quarks to Universe in Computational Science
(QUCS2015)’, Nara, Japan, Nov. 4-8, 2015
8. K. Washiyama,
“Microscopic Description of Fusion Hindrance in Heavy Systems”, 5th
International Conference on the Chemistry and Physics of the Transactinide
Elements (TAN15), Urabandai, Japan, May 25-29, 2015

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 中務 孝、
“原子核構造における自発的対称性の破れ”、日本物理学会第 72 回年次大会シン
ポジウム、東北学院大学、仙台、2016 年 3 月 19-22 日
2. 鷺山広平、
“低エネルギー重イオン反応の最前線と微視的反応模型”、KEK 理論センター研究
会「原子核・ハドロン物理の課題と将来」、KEK、2015 年 11 月 24-26 日
3. 関澤一之、
“時間依存密度汎関数法による重イオン多核子移行反応の研究”、日本物理学会
第 71 回年次大会 若手奨励賞受賞記念講演、東北学院大学泉キャンパス、2016 年 3
月 20 日
4. 関澤一之、
“TDHF の現状と新しい反応機構”、日本物理学会 2015 年秋季大会 実験・理論核
物理領域合同シンポジウム“重イオン深部非弾性散乱の基礎と応用”、大阪市立大学
杉本キャンパス、2015 年 9 月 25 日

B) その他の発表

1. Kai Wen, 中務 孝、
“ ^8Be の崩壊経路と集団質量”、日本物理学会第 72 回年次大会、東北学院大学、仙
台、2016 年 3 月 19-22 日

2. 中務 孝、
“核構造計算による核反応モデルの高精度化”、ImPACT 藤田プログラム全体会議、JST 別館、東京、2016 年 3 月 24 日
3. 寺崎 順、
“QRPA を用いた原子核行列要素計算の理論的一貫性”、日本物理学会 2015 年度秋季大会、大阪市、2015 年 9 月 25 日
4. 寺崎 順、
「QRPA を用いた ^{48}Ca のニュートリノレス二重ベータ崩壊の原子核行列要素計算」
日本物理学会第 71 回年次大会、仙台市、2016 年 3 月 22 日
5. 日野原伸生、
“密度汎関数理論における巨大共鳴と和則”、アイソスカラー型単極遷移で探る原子核の励起状態とクラスター構造、大阪大学核物理研究センター、2015 年 7 月 16-17 日
6. N. Hinohara,
“Binding-energy differences and pairing Nambu-Goldstone modes”, Nuclear Theory Seminar, National Superconducting Cyclotron Laboratory, Michigan State Univ., East Lansing, MI, USA, Jan. 26, 2016
7. N. Hinohara,
“Pairing Nambu-Goldstone modes and binding energy differences within nuclear density functional theory”, Nuclear Physics Seminar, Department of Physics, Univ. of Jyväskylä, Jyväskylä, Finland, Mar. 15, 2016
8. 橋本幸男、
“Gogny-TDHFB による $^{20}\text{O} + ^{20}\text{O}$ の計算における相対位相の効果”、
日本物理学会第 71 回年次大会（平成 28 年 3 月 19~22、東北学院大学）
9. 鷺山広平、
“重い反応系における核融合阻害現象の微視的解析 II”、日本物理学会秋季大会、
大阪市立大学、2015 年 9 月 25-28 日
10. 鷺山広平、
“Microscopic analysis of fusion hindrance in heavy nuclear systems”、
RCNP セミナー、大阪大学核物理研究センター、2015 年 10 月 5 日
11. 鷺山広平、
“3 次元空間上の有限振幅法 QRPA 計算”、
日本物理学会年次大会、2016 年 3 月 19-22 日
12. 倪 放、中務 孝、

“ 0^+ 対励起状態を記述する集団座標の量子化”、日本物理学会第 71 回年次大会、東北学院大学、2016 年 3 月。

13. 倪 放、中務 孝、
“リチャードソン模型における 0^+ 集団励起状態の解明”、日本物理学会 2015 年秋季大会、大阪市立大学、2015 年 9 月
14. 倪 放、
“対相関模型における 0^+ 集団励起状態の解明”、2015 年度原子核三者若手夏の学校、ホテルたつき、2015 年 8 月
15. 倪 放、
“対相関模型における 0^+ 集団励起状態の解明”、RCNP 研究会—アイソスカラー型単極遷移で探る原子核の励起状態とクラスター構造、大阪大学核物理研究センター、2015 年 7 月
16. 柏葉 優、中務 孝、
“中性子星 inner crust 核物質における密度汎関数計算”、「低密度領域の EOS」研究会、東京大学、2016 年 2 月 27 日
17. 柏葉 優、中務 孝、
“中性子星 inner crust 核物質における密度汎関数計算”、
日本物理学会第 71 回年次大会、東北学院大学、2016 年 3 月 19-22 日

(4) 著書、解説記事等

1. 中務 孝、“物質を構成する原子核”、自動車技術会関東支部報「高翔」、2016 年 1 月号 (No. 65), pp. 32-35.
2. 中務 孝、“放射化学の事典” (一部を執筆)、朝倉書店、2015 年 9 月。

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

【国際連携】

1. ポーランド・ワルシャワ大学の原子核理論グループと共同で、オープンソースコード HFODD をアイソスピン不変なエネルギー密度汎関数へ適用する拡張に取り組んでいる (中務)。
2. 韓国・APCTP およびイタリア・トレント大学の冷却原子系理論グループと、1 次元周期ポテンシャル中のフェルミ粒子系の超流動状態に関する共同研究を行っている (中務)。
3. 米国・ミシシッピ州立大学と、エネルギー密度汎関数の不定性に関する共同研究を行っている (中務)。

4. 米国ノースカロライナ大学の Engel 教授と二重ベータ崩壊の核行列要素に関する共同研究（日野原）
5. 米国ミシガン州立大学 Nazarewicz 教授およびフィンランド・ユバスキュラ大学の Kortelainen 研究員、インド・カシミア大学 Sheikh 教授と原子核密度汎関数の諸問題に関する共同研究、オープンソースコード HFBTHO への有限振幅法の実装とアイソスピン不変な汎関数への拡張（日野原）
6. 低エネルギー重イオン反応に関する国際共同研究
時間依存平均場理論に基づく低エネルギー重イオン反応の研究に関し、ワルシャワ工科大学の理論グループ（P. Magierski 教授、G. Wlazłowski 博士）、インド BARC の実験グループ（B. J. Roy 教授、他）、オーストリア国立大学の理論・実験グループ（C. Simenel 博士、他）、イタリアレニャーロ原子核物理研究所の実験グループ（L. Corradi 教授、他）、東北大学の理論研究者（G. Scamps 博士）と、国際共同研究を推進している（関澤）

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 第 14 回国際サマースクール CNSSS15 (RIKEN, Aug. 26 - Sep. 1, 2015)（中務）。
2. Long-term workshop on Computational Advances in Nuclear and Hadron Physics (Kyoto, Japan, Sep. 21-Oct. 30, 2015) の国際諮問委員を務めた（中務）。

9. 管理・運営

矢花一浩

センターの共同研究担当主幹として、当センターの全国共同利用業務である学際共同利用プログラムの運営を統括した。また、数理物質系物理学域長・数理物質科学研究科物理学専攻長、数理物質系広報委員長などを務めた。

中務 孝

計算科学研究センター 原子核物理研究部門 部門主任

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 人事委員会委員

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 共同研究委員会委員

計算科学研究センター 学際計算科学連携室員

数理物質系物理学域 運営委員会委員

数理物質系物理学域 原子核理論グループ長
数理物質系物理学域 図書委員長
理化学研究所・中務原子核理論研究室 准主任研究員（兼務）
核理論委員会委員
日本物理学会 理論核物理領域・領域副代表
高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所・運営会議議員
雑誌「原子核研究」編集委員
文部科学省 HPCI 戦略プログラム分野 5「物質と宇宙の起源と構造」運営委員
日本原子力研究開発機構 黎明研究評価委員会委員
日本原子力研究開発機構 タンデム専門部会委員

寺崎 順

文部科学省 HPCI 戦略プログラム分野 5「物質と宇宙の起源と構造」中の計算機ユーザーのプログラミング支援活動において連絡係を務めた。

10. 社会貢献・国際貢献

中務 孝

理化学研究所一般公開(2015. 4. 18)において講演「量子力学と原子核」
物理チャレンジ 2015・フィジックスライブ(2015.08.21)において
講演「元素・原子核と量子の世界」
カナダ・TRIUMF 国際プログラム諮問委員会(SAP-EEC)委員
Editor for Journal of Physical Society of Japan
Editor for International Journal of Modern Physics E

11. その他

海外長期滞在

- 1) 日野原 伸生, National Superconducting Cyclotron Laboratory,
Michigan State Univ., East Lansing, MI, USA, 2015 年 4 月 1 日～2016 年
3 月 31 日(次年度に継続)

長期ビジター

- 1) Anatoli Afanasjev 氏 (ミシシッピ州立大学・米国)、
2015. 6. 22-2015. 8. 16、学振・外国人招へい研究員 (受入研究者: 中務)

IV. 量子物性研究部門

1. メンバー

教授	矢花 一浩
准教授	小野 倫也、小泉 裕康、全 暁民
講師	前島 展也
研究員	Kirkham Christopher James
学生	大学院生 7 名、学類生 1 名
教授	日野 健一(学内共同研究員、物質工学域)

2. 概要

時間依存密度汎関数理論(TDDFT)に基づく物質中の電子ダイナミクスに対する第一原理シミュレーション法の開発と、それを用いたパルスレーザーと誘電体・半導体の相互作用の解明に関わる研究を進めている。本年度は、パルスレーザーにより固体中に生じる非線形分極の生成とそのアト秒科学の方法を用いた計測に対するシミュレーション、フェムト秒レーザーによる非熱加工初期過程に関わる研究を中心に行った。伝導特性については、量子力学の第一原理に基づいて高精度に計算でき、最先端のスーパーコンピュータで大規模計算を実現できる計算手法とこの方法に基づく計算コード **RSPACE** の開発を行っている。開発した **RSPACE** を用いて SiC-MOSFET 開発に用いる界面の電子状態計算を行った。銅酸化物高温超伝導体については、銅酸化物高温超伝導体を始めとする、電子の電荷の自由度が電子のスピン自由度及び格子の自由度と密接に結びついた物質についての量子力学的基礎理論およびその応用についての研究を行っている。特に、銅酸化物高温超伝導体の超伝導機構解明を目指した研究を行っている。また、銅酸化物超伝導体にスピン渦誘起ループ電流の存在を予言しており、スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子コンピュータの実現を目指した理論研究も行っている。原子・分子系では、ダイナミクスおよびそれらの電磁場との相互作用により生じる現象について時間依存シュレディンガー方程式の直接解法で解く方法によりシミュレーションを行っている。これは、強レーザー場における原子・分子の非線形過程や反陽子と原子の衝突などにおけるエキゾチック原子の生成、さらに振動磁場などの外場による物理的な過程の制御方法の探索につながる。また、レーザー照射下における半導体(超格子)中の電子状態、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強相関電子系における光励起状態の解析も行なっている。

3. 研究成果

【1】 高強度パルス光と誘電体の相互作用の解明

高強度で極めて短いパルスレーザーと物質の相互作用に関する研究は、光科学のフロンティアの一つとして急速に進展している。光の瞬間的な最大強度が $10^{14}\text{W}/\text{cm}^2$ 程度を越えると物質は瞬時にプラズマ化され、物質を非熱的に加工する手段として注目されている。これに近い光強度では、光と物質の相互作用は著しい非線形性が生じる。この非線形性を活用した新奇な光デバイス原理の開拓が課題となっている。我々は、このような極限的なパルス光と物質の相互作用を記述する理論と第一原理計算の手法開発に取り組んでいる。

我々のアプローチの根幹をなすのは、結晶の単位セルに、空間的に一様で時間とともに変化する電場が印加されたときの電子ダイナミクスに対する時間依存密度汎関数理論

(TDDFT) に基づく第一原理計算である。実時間・実空間法を用いて TDDFT の基礎方程式である時間依存コーン・シャム方程式を解くことにより、空間的にはナノメートル以下、時間的にはフェムト秒以下の微視的な解像度で光と物質の相互作用を記述し理解することが可能になる。

この単位セル計算により、任意の光電場に対して結晶中に生じる電流密度（と時間積分した分極密度）を得ることができ、それは電場と分極を結び付ける数値的な構成関係式とみなすことができる。この観点から我々は、マクスウェル方程式と TDDFT に基づく電子ダイナミクス計算をマルチスケール手法で結びつけた新奇なシミュレーション法の開発に成功している。これは、京コンピュータ程度の今日利用可能な最大規模の計算機を用いてのみ実行可能であり、高強度パルス光と物質の相互作用を自在に記述する手法として注目を集めている。

以下、この課題に関係した今年度の研究の中から特筆すべきものを紹介する。

(1) ガラス中に生じる非線形分極の実時間計測とパルス光と物質の間のエネルギー移行 (A. Sommer 他 (マックス・プランク量子光学研)、佐藤 (筑波大院生)、矢花)

独マックスプランク量子光学研究所のアト秒実験グループとの共同研究である。高強度パルス光が $10\mu\text{m}$ のガラス薄膜を透過する際の光波波形的変化を、アト秒ストリーキング技術

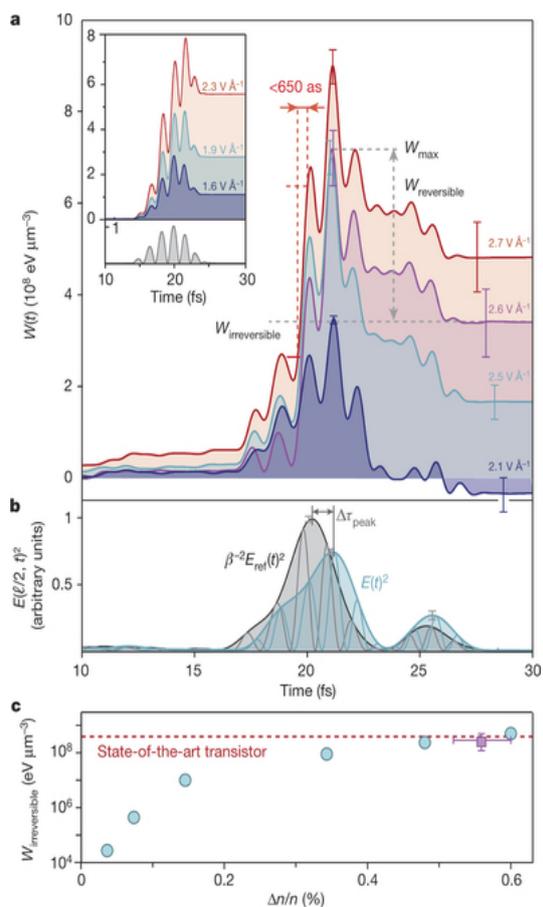


図 1 レーザーパルス光から物質電子へのエネルギー移行と対応する計算値 (インセット) 文献[1]より。

を用いて正確に測定した実験に対して、我々の第一原理マルチスケール計算による解析を行った。京コンピュータを用い、パルス光伝播を実験に正確に対応する条件で計算し、その結果を実験結果と比較した。ガラス薄膜を透過したパルス光の時間波形から、非線形分極の時間領域での振る舞いを求め、電場と非線形分極の間に時間の遅れがあることが示された。この時間の遅れは、パルス光と物質電子の間にエネルギー移行があることを示しており、エネルギー移行の時間変化を詳細に調べることが可能となった。得られた結果は、我々の理論計算と少なくとも定性的には良い一致を示すことが確認された。

この成果を大学 HP 及び独マックスプランク量子光学研究所において紹介した。

(2) メタ一般化勾配近似(GGA)汎関数及びハイブリッド汎関数を用いた電子ダイナミクス計算 (佐藤、谷口、矢花)

密度汎関数理論で用いられる最も簡単な近似である局所密度近似は、半導体や誘電体のバンドギャップを系統的に過小評価するという問題がある。光応答を記述し実験と比較する際に、このバンドギャップの過小評価は大きな問題となる。近年、バンドギャップを再現可能な汎関数がいくつか知られるようになった。一つは、運動エネルギー密度を用いたメタ GGA 汎関数であり、もう一つは非局所な交換ポテンシャルを部分的に用いるハイブリッド汎関数である。我々は、これらの汎関数を用いた電子ダイナミクス計算を試みた。

メタ GGA 汎関数を用いた場合には、軌道関数の時間発展を安定して遂行するために、予測修正法を用いることが必要であることが明らかとなった。また、バンドギャップを再現できるメタ GGA 汎関数では、ポテンシャルの表式が直接与えられエネルギー密度が未知であることから、系の励起エネルギーをどのように評価するかが課題となる。この点に関し、外場が行った仕事に着目することで計算が可能となることを示した。

ハイブリッド汎関数を用いた計算では、非局所な交換ポテンシャルの軌道関数に対する作用の計算に極めて大きな計算リソースを必要とする。我々は、GPU を搭載したスパコン HA-PACS を利用し交換ポテンシャルの計算に必要となる高速フーリエ変換を GPU で加速することにより、高速な計算が可能となることを示した。

(3) 動的 Franz-Keldysh 効果 (乙部 (原研)、篠原 (東大)、佐藤、矢花)

高強度なパルス光が照射している間、物質の光学的性質が極めて短い時間にどのように変化するのは、基礎物理学の観点に加え、パルス光を利用した新奇なデバイス原理の開拓に向けて高い興味を集めている。静的な強い電場を印加した時には、誘電体のバンドギャップよりも低いエネルギーで吸収が起こることが知られており、Franz-Keldysh 効果と呼ばれる。時間とともに変化する強い光電場を印加した場合に起こる光学的性質の変化は、動的 Franz-Keldysh 効果と呼ばれ、長く議論されてきた課題である。我々は、光電場の 1 周期以

下の時間スケールで、この動的 Franz-Keldysh 効果がどのように現れるかに関し、計算機シミュレーションと解析的アプローチの両方から検討を行った。

(4) 計算コード ARTED の Xeon-Phi における高速化 (廣川、朴、佐藤、矢花)

電子ダイナミクス計算で最も計算の負荷が高いのは、ハミルトニアンを軌道関数に作用する部分、特にラプラシアン作用である。実空間差分法では、これはステンシル計算となる。高性能計算システム研究部門との共同研究により、このステンシル計算部分の高速化を行った。特に超並列メニーコアマシンである COMA を用い、ARTED による電子ダイナミクス計算を高速化できることを確認した。

【2】第一原理計算コード RSPACE の開発

超並列計算機での計算に適した実空間差分法に基づく第一原理電子状態・伝導特性計算法とこの方法に基づく計算コード RSPACE を開発している。RSPACE の伝導特性計算において、散乱領域の摂動グリーン関数の計算と電極の自己エネルギーの計算は、計算のボトルネックのひとつである。前者については、平成 26 年度までに数理研究グループと協力して解決法を開発した。平成 27 年度は、後者の問題に取り組んだ。後者の問題の本質は、一般化ブロッホ状態を計算する二次固有値問題用ソルバーである QZ 法は全固有値固有ベクトルを計算するため、計算量が行列サイズの 3 乗に比例しプロセス並列化にも向かないことである。この問題を回避すべく、本研究グループで以前開発していた波動関数接合法を用いた伝導計算法のテクニックを応用し、自己エネルギーが満たすべき連分数方程式を利用して自己エネルギーを計算する方法を開発した。

この方法は、進行波と進行波の直交補空間を用いて連分数方程式を解くので、全固有値固有ベクトルの計算を必要としない。そのため、QZ 法の使用による計算速度の制約がない。開発した計算方法の精度評価のため、この方法で計算した電極自己エネルギーを用いてナノ構造の電気伝導特性を計算した結果と、従来法の厳密な方法で計算した電極自己エネルギーを用いた結果、および従来の回避法で計算した電極自己エネルギーを用いた結果の差を図 2 に示す。従来の回避法では、厳密解との差が顕著であるが、本計算手法で用いた自己エネルギーを用いると、厳密解との差は数値計算の有効数字の範囲内である。この方法は、QZ 法を用

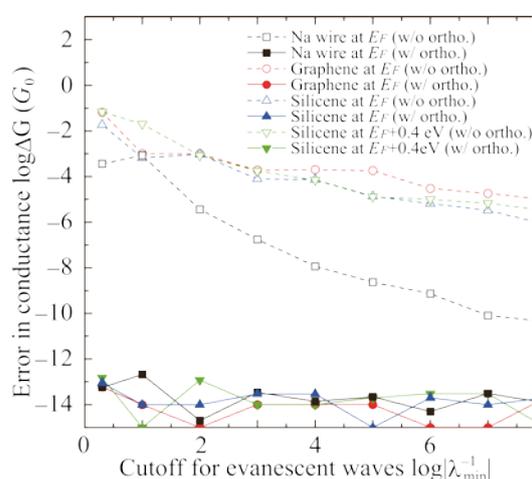


図 2 厳密解との比較。従来の回避法で計算した結果(点線)と本研究で開発した結果(実線)。文献 [13] より。

いる必要がないだけでなく、並列計算に有利な櫻井-杉浦法を活用できるため、さらなる高速化が期待できる。

【3】SiC-MOSFET 開発における界面電子状態シミュレーション

代表的な SiC-MOS 界面に用いられる SiC(0001)面は、4 回周期で SiC 原子層が積層し、h(hexagonal)面と k(cubic)面が交互に現れる。h 面の表面 3 原子層分は cubic 積層構造を持ち、k 面は hexagonal 積層構造が現れる。表面エネルギーは、h 面よりも k 面の方が低いため、表面では h 面が優位に現れることが実験的に確認されている。これに対し界面では、h 面と k 面がほぼ同じ割合で出現することが実験的に確認されている。本研究グループでは、開発した第一原理計算コード RSPACE を用いて、このような h 面、k 面と呼ばれる積層面に起因する 4H-SiC(0001)/SiO₂ 界面の電子状態の違いを調べた。SiC は、伝導帯端に floating states という特徴的な準位をもつ。この準位の波動関数は cubic 積層の領域に分布し、原子周りではなく Si に囲まれた四面体構造の内部に局在する。

電子状態計算の結果、図 3 に示すように h 面では界面第一層から floating states が現れるのに対し、k 面では界面第二層から floating states が現れることが分かった。これは、k 面では界面第二層より cubic 積層構造が始まることから説明できる。次に、熱酸化により導入される O 原子を、界面の SiC 結合の間に挿入した。図 4 に示すように、h 面では界面伝導帯端の floating states のエネルギーが増加し、界面での禁制帯幅が広がるのに対し、k 面では界面の禁制帯幅に変化がないことが分かった。結晶中の floating states は、C よりも Si の方が電気陰性度が低いので、静電ポテンシャルが低い Si に囲まれた四面体構造内部に局在する。h 面では、電気陰性度の大きい O 原子が挿入されることにより、四面体構造内部の静電ポテンシャルが上昇することで禁制帯幅が広がる。一方、k 面は界面部に floating states が現れないため、禁制帯幅の変化が小さいと説明できる。

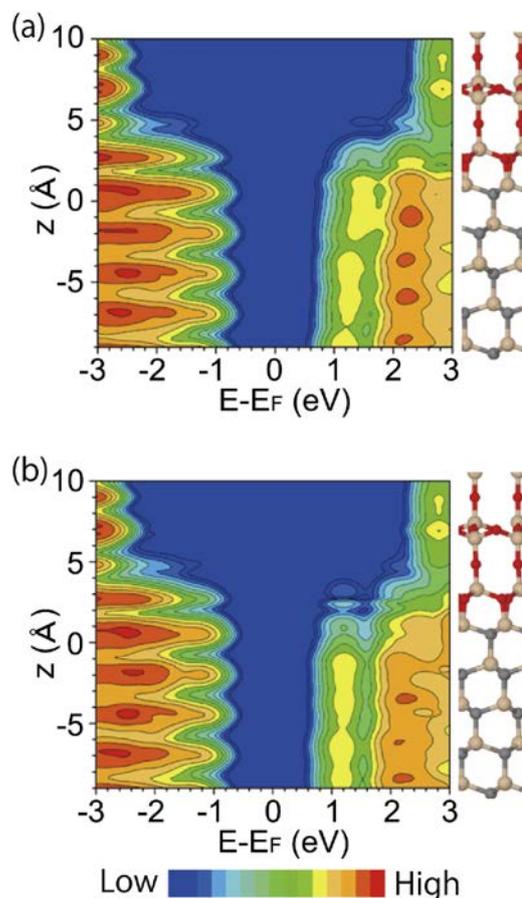


図 3 酸素導入前の局所状態密度。(a) h 面。(b) k 面。文献[12]より。

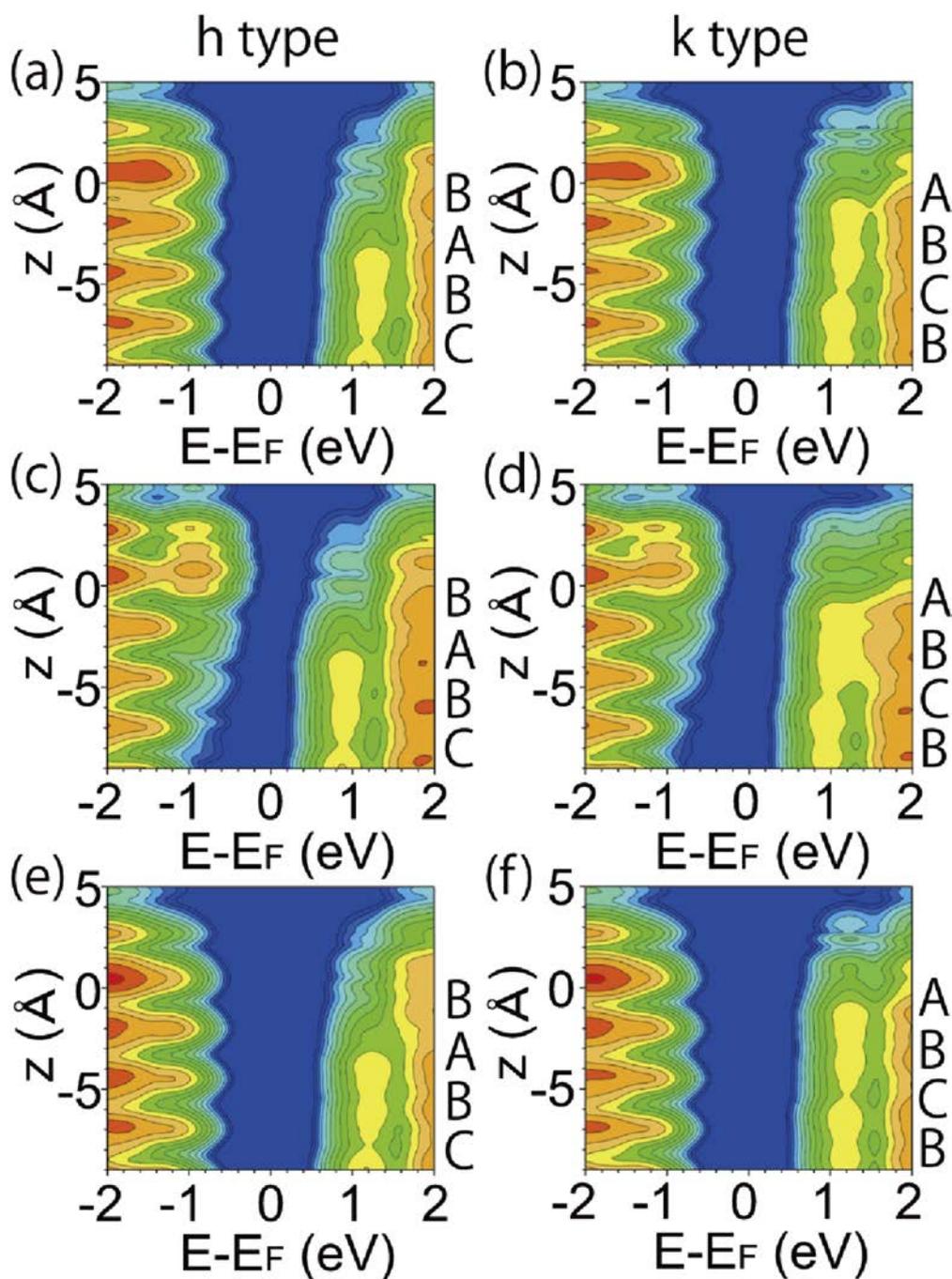


図 4 酸素導入後の局所状態密度。(a), (b) O 原子 1 個。(c), (d) O 原子 2 個。(e), (f) O 原子 3 個挿入後に CO 分子を放出。文献[12]より。

この結果は、n チャンネル SiC-MOSFET によく使われる SiC(0001)面の電子移動度を制限するメカニズムの一つであると予想される。移動度を向上させるには floating states の影響を軽減させるか、(0001)面以外の結晶面で MOS 界面を作成する必要がある。現時点で、前者の方法は実現困難であるため、(0001)面と違う結晶面を用いた界面の評価を、筑波大パワエレ研・産総研の実験グループと協力して進めている。

【4】銅酸化物高温超伝導体の超伝導機構の解明に向けた研究

1987 年の発見以来、銅酸化物高温超伝導体の超伝導機構の解明に向けた研究が精力的に進められてきたが、未だに多くの研究者が納得する理論ができていない。標準的な超伝導理論として BCS 理論が存在するが、銅酸化物超伝導は BCS 理論では説明できず、現在の標準理論の限界が明らかになっている。さらに、銅酸化物超伝導体の発見以来、類似物質でも従来の物質科学の常識を覆す現象が見つかっており、銅酸化物超伝導の理論的解明は、超伝導だけではなく物質科学全体に大変革をもたらすと考えられている。

我々は、銅酸化物高温超伝導体の超伝導出現機構を説明するために、BCS 理論を超える新しい理論を提出している。BCS 理論は、超伝導状態の高温側の常伝導相がフェルミ液体論で説明できる電子状態であることが前提となっているが、新理論ではこの前提が必要ない。銅酸化物や類似物質などでは電子状態がフェルミ液体論で記述できないので、このことは非常に重要である。これらの物質の電気伝導では一粒子状態では記述できない集団運動が支配的である。新理論は、この集団運動としての“スピン渦誘起ループ電流”を電流の基本単位として持つ。

スピン渦誘起ループ電流は、伝導電子がスピンを回転しながら遍歴運動をすることにより生じる。この時、電子の平均場はスピン渦を持ちスピン回転の中心点は全電子波動関数の特異点となる。電子波動関数はこの特異点の周りで一価関数となる必要があり、この要請により全体運動として永久ループ電流、“スピン渦誘起ループ電流”が出現する。超伝導電流はスピン渦誘起ループ電流のネットワークが作る巨視的永久電流として説明される。

我々は新理論に基づき、スピン渦誘起ループ電流のネットワークが安定する温度を超伝導転移温度と同一視し、それを数値計算により求めた。各スピン渦の周りのスピン渦誘起ループ電流には、右回り(巻き数-1)と左回り(巻き数+1)の自由度が存在するが、計算では、簡単のため、スピン渦のネットワークはすでに安定に存在しているとし、ループ電流の右回りと左回りの自由度だけの熱揺らぎを考慮したモンテカルロ計算を行った (Okazaki et al., J. Supercond. Nov. Magn. **28**, 3221-3232 (2015))。その結果、最適ドーパ(銅原子 1 個あたりのホールドーパ量が $x=0.16$)の試料で実験結果と同程度の超伝導転移温度が得られた。このことは、新理論の確かさを示していると考えられる。しかし、図 5 に見られるように低ドーパ

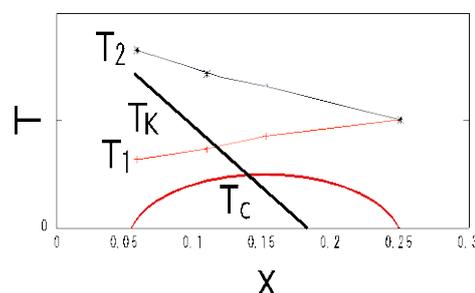


図 5 ホールドーパ量 x と各種転移温度。
 T_c は実験で得られている超伝導転移温度。
 T_K はカー効果の測定から得られた擬ギャップ相への転移温度。 T_1 と T_2 はモンテカルロ計算で得られた転移温度。 T_1 が T_c に、 T_2 が T_K 対応すると考えられる。

試料($x < 0.16$)と高ドーピング試料($x > 0.16$)では、実験とは一致しなかった。これは、スピン渦のネットワークの存在を仮定した単純化が原因であると考えられる。スピン渦のネットワークの形成過程と安定化を取り入れたより現実的なモンテカルロ計算を行うことにより、実験結果は再現可能と思われる。今回の計算ではまた、超伝導転移温度の高温側にループ電流の巻き数の総和がゼロとなる相が存在することが示された。この相は、銅酸化物超伝導体の擬ギャップ相に対応するものと考えられる。

【5】トポロジカル超伝導体の研究

トポロジカル絶縁体は、その興味深い物性により、新規なデバイス、量子コンピュータへの応用などが考えられている。我々は、トポロジカル絶縁体 Bi_2Se_3 に銅をドーピングすることにより得られる超伝導体、 $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ について、その渦糸状態をギンツブルグ-ランダウ方程式を解くことにより調べた (M. Tachiki and H. Koizumi, Phys. Rev. B **91**, 104505(1-5) (2015))。その結果この物質は磁性超伝導体であり、渦糸間にある適当な距離では引力が働くことを示した。これにより、磁場印加による渦糸状態への変化にはヒステリシスが生じることを予言した。また、超伝導状態はドーピングした Cu_x の島状領域の周りに発生する“スピン渦誘起ループ電流”により説明出来る可能性があることに言及した。

【6】銅酸化物高温超伝導体を使った量子コンピュータ実現に向けた研究

我々が銅酸化物超伝導体にその存在を予言している“スピン渦誘起ループ電流”は、右回りと左回りの自由度がある。この自由度を量子ビットとして使い量子コンピュータを作ることが可能であることが理論的に予想される (H. Wakaura, H. Koizumi, Physica C: Superconductivity and its applications **521-522**, 55-66 (2016))。この量子ビットはトポロジカルに保護された量子ビットであり、デコヒーレンスに対する耐性を持つと考えられる。我々は、この“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”について特許を取得した (米国特許 US 9,224,099 B2; 日本特許第 5910968 号)。この量子コンピュータ実現の為に制御ビットを実現しなければならないが、その際必要となる量子ビット間のカップラーについては、外部電流を使うことにより実現可能であることを理論的に示した。また、外部電流からの応答電流が、スピン渦誘起ループ電流系の電流分布を識別する為に使える事も示した。これは、量子コンピュータの結果の読みとりに使える可能性がある。

【7】赤外線レーザー場におけるヘリウム原子光吸収過程の解明

赤外線強レーザー場によって、原子光吸収能力を制御することができる。従来の理論で赤外線とアト秒パルス到着の時間遅延によって、電離確率が図 1 (a) のように赤外線の半周期で変化することになる。最近、実験で電離確率が赤外線 1 周期に 1 回 (図 1 (c)) 変化しかないと

ことも観測された。我々の理論研究で二つのメカニズムを明らかにした。一つは非共鳴過程で電離確率は半周期変化させる。もう一つは共鳴過程で電離確率は1周期に1回変化させる。図6に我々の理論結果と実験がよく一致することを示した。研究結果を物理の有名な雑誌 Physical Review Letters に発表した。

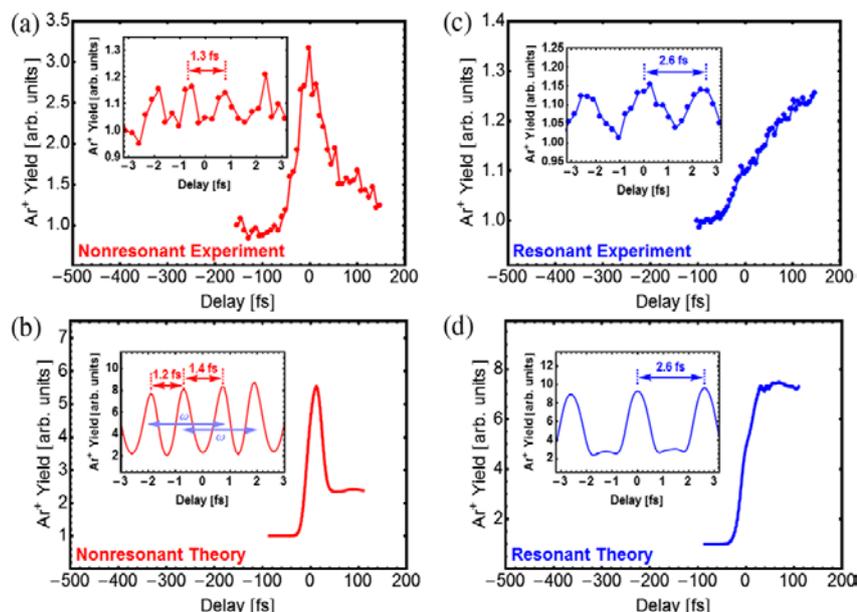


図6 赤外線強レーザー場における Ar 原子電離確率と時間差：非共鳴（左）、共鳴（右）。

【8】中赤外線レーザー場における原子電離過程

アト秒パルスレーザーの特長はパルスの半値幅が短く（数十アト秒）、不確定性原理によって、エネルギーの分解率がよくない。詳しい原子エネルギー構造を見るために、長いパルスを利用しないと行けない。我々は赤外線レーザー場を付加すると、赤外線レーザーとアト秒レーザーの時間差によって、電離信号の強さを制御できることを明らかにした。特に図7のように長い時間遅延で原子エネルギー構造の詳細を得ることを実験屋さんへ提案して、実験で実現された。共同研究結果は J. Phys. B に発表した。

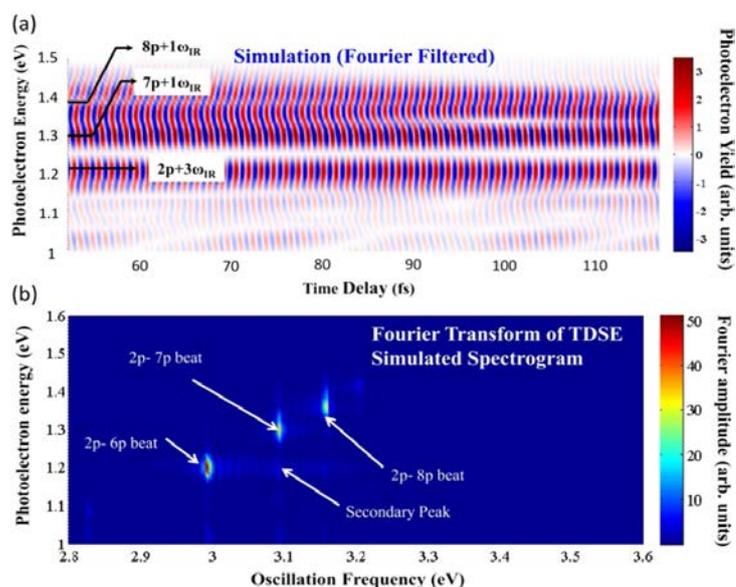


図 7 赤外線強レーザー場におけるヘリウム電子のアト秒レーザーの電離確率と時間差の関係（上）とその電離確率の Fourier 変換（下）。

【9】半導体・強相関電子系におけるレーザー誘起ダイナミクス

半導体にパルスレーザーを照射した場合に発生するコヒーレントフォノンの発現機構についてボゾン化法に基づく解析的・数値的方法により調べた。N 型 Si などの非極性半導体にレーザーを照射した場合過渡的なファノ共鳴現象が発現するが極性半導体では発現しないこと、両者の差異が電子-格子相互作用の違いから生じていることなどを明らかにした。また、光誘起相転移を起こす物質として知られる一次元電荷移動錯体 TTF-CA では、電荷移動ギャップよりも低エネルギー領域において、観測可能な程度に大きな双極子モーメントを持つ光学活性な励起状態が存在し(図 8)、それがいわゆるドメイン壁と呼ばれる 2 つの電子相の境界と関連していることを示した。

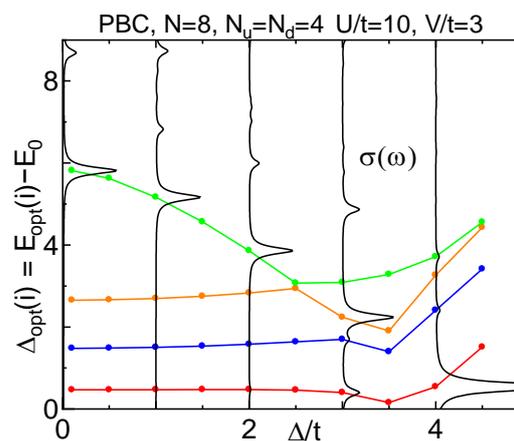


図 8 光学伝導度 $\sigma(\omega)$ と光励起状態の HOMO-LUMO ギャップ (Δ/t) 依存性

4. 教育

博士論文

- 佐藤駿丞 Time-dependent density functional theory for extremely nonlinear interactions of light with dielectrics (光と誘電体の極限的非線形相互作用に対する時間依存密度汎関数理論)
- 根本裕也 Theoretical Study of Resonance Structure in Dynamic Wannier-Stark Ladder Driven by Intense Terahertz Laser

修士論文

- 桑原有輝 時間依存密度汎関数理論による非線形分極の時空間分析
- 日高篤俊 コヒーレントフォノン生成初期過程における過渡的ファノ共鳴のレーザーパルス依存性

卒業論文

- 富永夏輝 1次元拡張イオン性パイエルスーハバード模型におけるスピンソリトン状態の解析

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

1. 日本学術振興会科学研究費、基盤研究 (B)、矢花一浩、代表、2015 年度 4900 千円、「第一原理計算に基づく極限パルス光と物質の相互作用の解明」
2. 日本学術振興会二国間交流事業オープンパートナーシップ共同研究(アメリカ合衆国)、矢花一浩、代表、2015 年度 288 千円、「超高速電子ダイナミクスに対する第一原理計算アプローチ」
3. 株式会社 IHI との共同研究、2015 年度研究経費 1000 千円、「時間依存第一原理解析によるフェムト秒レーザと物質との相互作用に関する研究」
4. 科学技術振興機構、戦略的創造研究推進事業・さきがけ、小野倫也、代表、2013 年度より継続、6630 千円、「計算科学的手法による省電力・低損失デバイス用界面のデザイン」
5. 東京大学、委託研究、小野倫也、代表、2014 年度 6310 千円、「実空間手法に基づくナノ構造の電子・スピン輸送特性計算コードの開発」
6. 科学技術振興機構、先導的物質変換領域、小野倫也、分担、2012 年度より継続、0 円、「二酸化炭素活性化機構の学理に基づくメタノール室温合成触媒の創成」
7. 文部科学省、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発、小野倫也、分担、2014 年度 0 円、「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」

8. 日本学術振興会、基盤研究(C)： 全 暁民 (トン ショウミン)、代表、2012 年より継続, 780 千円、「赤外線レーザーの付加による原子・分子高速過程の制御の理論研究」
9. 日本学術振興会科学研究費、若手研究(B)、前島 展也、代表、2015 年度 1170 千円、「多自由度強相関電子系における光誘起超高速ダイナミクスの生成と制御」
10. 日本学術振興会科学研究費、基盤研究(C)、日野 健一、代表、2015 年度 2860 千円、「コヒーレントフォノン生成機構における過渡的準粒子描像の定量的検証」

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. Sommer, E. M. Bothschafter, S. A. Sato, C. Jakubeit, T. Latka, O. Razskazovskaya, H. Fattahi, M. Jobst, W. Schweinberger, V. Shirvanyan, V. S. Yakovlev, R. Kienberger, K. Yabana, N. Karpowicz, M. Schultze, F. Krausz, "Attosecond nonlinear polarization and light-matter energy transfer in solids", *Nature*, doi:10.1038/nature17650.
2. T. Otobe, Y. Shinohara, S.A. Sato, K. Yabana, "Femtosecond time-resolved dynamical Franz-Keldysh effect", *Phys. Rev. B*93, 045124 (2016).
3. G. Wachter, S.A. Sato, C. Lemell, X.M. Tong, K. Yabana, J. Burgdoerfer, "Controlling ultrafast currents by the non-linear photogalvanic effect", *New J. Phys.* 17, 123026 (2015).
4. G. Wachter, S. Nagele, S.A. Sato, R. Pazourek, M. Wais, C. Lemell, X.-M. Tong, K. Yabana, J. Burgdoerfer, "Protocol for observing molecular dipole excitations by attosecond self-streaking", *Phys. Rev. A*92, 061403 (2015).
5. S.A. Sato, Y. Taniguchi, Y. Shinohara, K. Yabana, "Nonlinear electronic excitations in crystalline solids using meta-generalized gradient approximation and hybrid functional in time-dependent density functional theory", *J. Chem. Phys.* 143, 224116 (2015).
6. S.A. Sato, K. Yabana, Y. Shinohara, T. Otobe, K.M. Lee, G.F. Bertsch, "Time-dependent density functional theory of high-intensity, short-pulse laser irradiation on insulators", *Phys. Rev. B*92, 205413 (2015).
7. X.-M. Tong, G. Wachter, S.A. Sato, C. Lemell, K. Yabana, J. Burgdoerfer, "Application of norm-conserving pseudopotentials to intense laser-matter interactions", *Phys. Rev. A*92, 043422 (2015).

8. Y.Komatsu, M.Umemura, M.Shoji, M.Kayanuma, K.Yabana, K.Shiraishi, "Light absorption efficiencies of photosynthetic pigments: the dependence on spectral types of central stars", *International Journal of Astrobiology*, 14 (3), 505-510 (2014).
9. Y. Komatsu, M. Kayanuma, M. Shoji, K. Yabana, K. Shiraishi, M. Umemura, "Light absorption and excitation energy transfer calculations in primitive photosynthetic bacteria", *Molecular Physics*, 113 (12), 1413-1421 (2015).
10. S. Iwase, T. Hoshi, T. Ono, "Numerical solver for first-principles transport calculation based on real-space finite-difference method", *Phys. Rev. E* 91, 063305 (2015).
11. Y. Egami, S. Iwase, S. Tsukamoto, T. Ono, K. Hirose, "First-principles calculation method for electron transport based on the grid Lippmann-Schwinger equation", *Phys. Rev. E* 92, 033301 (2015).
12. C. J. Kirkham, T. Ono, "First-principles study on interlayer states at the 4H-SiC/SiO₂ interface and the effect of oxygen-related defects", *J. Phys. Soc. Jpn.* 85, 024701 (2016).
13. T. Ono, S. Tsukamoto, "Real-space method for first-principles electron transport calculations: Self-energy terms of electrodes for large systems", *Phys. Rev. B* 93, 045421 (2016).
14. C. J. Kirkham, T. Ono, "Importance of SiC Stacking to Interlayer States at the SiC/SiO₂ Interface", *Mater. Sci. Forum* 858 457 (2016)
15. Okazaki, H. Wakaura, H. Koizumi, M. Abou Ghantous, M. Tachiki, "Superconducting transition temperature of the hole-doped cuprate as the stabilization temperature of supercurrent loops generated by spin-twisting itinerant motion of electrons", *J. Supercond. Nov. Magn.* 28, 3221-3232 (2015).
16. M. Tachiki and H. Koizumi, "Vortex state of topological superconductor CuxBi₂Se₃", *Phys. Rev. B* 91, 104505 (2015).
17. H. Wakaura, H. Koizumi, "Possible use of spin-vortex-induced loop currents as qubits: a numerical simulation for two-qubit system", *Physica C: superconductivity and its applications* 521-522, 55-66 (2016).
18. N Shivaram, XM Tong, H Timmers and A Sandhu, "Attosecond Quantum-Beat Spectroscopy in Helium", *J. Phys. B: At. Mol. Opt.* 49 (2016) 055601:1-7.
19. V Wanie, H Ibrahim, S Beaulieu, N Thire, B Schmidt, DY Peng, AS Alnaser, I Litvinyuk, XM Tong, F Legare, "Coherent control of D₂/H₂ dissociative

- ionization by a mid-infrared two-color laser field", *J. Phys. B: At. Mol. Opt.* 49, 025601 (2016).
20. H Li, XM Tong, N Schirmel, G Urbasch, KJ Betsch, S. Zharebtsov, F Sussmann, A Kessel, SA Trushin, GG Paulus, KM Weitzel, MF Kling, "Intensity dependence of the dissociative ionization of DCl in few-cycle laser fields", *J. Phys. B: At. Mol. Opt.* 49, 015601 (2016).
21. G Wachter, S Nagele, SA Sato, R Pazourek, M Wais, C Lemell, XM Tong, K Yabana, and J Burgdorfer, "Protocol for observing molecular dipole excitations by attosecond self-streaking", *Phys. Rev. A* 92, 061403(R) (2015).
22. G Wachter, SA. Sato, C Lemell, XM Tong, K Yabana, and J Burgdorfer, "Controlling ultrafast currents by the nonlinear photogalvanic effect", *New J Phys.* 17, 12036 (2015).
23. XM Tong, G Wachter, SA Sato, C Lemell, K Yabana, and J Burgdorfer, "Application of norm-conserving pseudopotentials to intense laser-matter interactions", *Phys. Rev. A* 92, 043422 (2015).
24. CW Hogle, XM Tong, L Martin, MM Murnane, HC Kapteyn, P Ranitovic, "Attosecond Coherent Control of Single and Double Photoionization in Argon", *Phys. Rev. Lett.* 115, 173004 (2015).
25. XM Tong, ZM Hu, YM Li, XY Han, D Kato, H Watanabe and N Nakamura, "Mechanism of dominance of the Breit interaction in dielectronic recombination", *J. Phys. B: At. Mol. Opt.* 48, 144022 (2015).
26. F. Imoto, H. Takenaka, N. Maeshima, and K. Hino, "Spin and Orbital Correlations of a Photoexcited State of a Two-Orbital Hubbard Mode", *J. Phys. Soc. Jpn.* 84, 124705 (2015).

B) 査読無し論文

なし

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. K. Yabana, "Time-dependent density functional theory for strong laser pulses in dielectrics", *Exploration of ultra-fast time scales using time dependent density functional theory and quantum optical control theory*, Sept. 28-Oct. 2, 2015, CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland.

2. K. Yabana, "Time-dependent density functional theory for extreme nonlinear optics", Psi-K 2015, Sept. 6-10, 2015, San Sebastian, Spain.
3. Shunsuke A. Sato, "Multiscale implementation of real-time TDDFT for nonlinear light-matter interactions", 5th International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Quantum Chemistry and Physics - Toward exascale computing, November 26-27, 2015, University of Tokyo, Tokyo, Japan.
4. T. Ono, "First-Principles Calculations using Real-Space Finite-Difference Method", Advances in Modeling of Nano Materials, June 14-16, 2015, Hefei, China.
5. T. Ono, C. J. Kirkham, "Ab initio investigations for interface electronic structures of SiC-MOS", International Workshop on Dielectric Thin Films for Future Electron Devices – Science and Technology –, November 2-4, 2015, Tokyo, Japan.
6. T. Ono, "Density functional theory calculation for transport property of carbon nanostructures", EMN Meeting on Carbon Nanostructures, March 27-31, Honolulu, USA.

B) 一般講演

1. Shunsuke A. Sato, Kazuhiro Yabana, Yasushi Shinohara, Kyung-Min Lee, Tomohito Otobe, George F. Bertsch, "First-principles calculations for ultrafast laser-induced damage in dielectrics", CLEO 2015, May 10-15, 2015, San Jose, California.
2. S. Iwase, T. Ono, "Efficient solver of the Green's function method for electronic transport calculations", Psi-k Conference 2015, September 6-10, 2015, San Sabastian, Spain.
3. T. Ono, "Transport calculation method using real-space finite-difference Green's function scheme, Psi-k Conference 2015, September 6-10, 2015, San Sabastian, Spain.
4. T. Ono, C. J. Kirkham, "First-principles electronic-structure calculation for defect at SiC(0001)/SiO₂ interface", 16th International Conference on Silicon Carbide and Related Materials, October 4-9, 2015, Sicily, Italy.
5. T. Ono, C. J. Kirkham, S. Iwase, "Electronic structure and scattering property of 4H-SiC(0001)/SiO₂ interface", APS March Meeting 2016, March 14-18, 2016, Baltimore, USA.
6. H. Wakaura, H. Koizumi, "Quantum Computation using Spin-Vortex induced loop current as qubit", the 11th International Conference on Materials &

Mechanisms of Superconductivity (M2S), August 23-28, 2015, Geneva, Switzerland.

7. Y Cheng, M Chini, XM Tong, A Chew, J Biedermann, Y Wu, E Cunningham and ZH Chang, "Quantum beats in attosecond time-resolved autoionization of Krypton", 46th Annual Meeting of the APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics, June 8-12, 2015, Hyatt Regency, Columbus, OH, USA
8. P Ranitovic, XM Tong, D Hickstein, MM Murnane and HC Kapteyn, "Control of Attosecond Electron Diffraction by Elliptical Long-Wavelength Radiation", 46th Annual Meeting of the APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics, June 8-12, 2015, Hyatt Regency, Columbus, OH, USA
9. XM Tong and N Toshima, "Steering the electron motion by two counter-rotating circularly polarized laser pulses", XXIX International Conference on Photonic, Electron, and Atomic Collisions, July 22-30, 2015, Congress Centre – EI Greco, Toledo, Spain.
10. B Wolter, C Lemell, M Baudisch, MG Pullen, XM Tong, M Hemmer, A Senftleben, M Sclafani, CD Schroter, J Ullrich, R Moshhammer, J Burgdrofer, and J Beigert, "Origins of Very-Low and Zero-Energy Electron Structures in Strong-Field Ionization with Intense Mid-IR Pulses", XXIX International Conference on Photonic, Electron, and Atomic Collisions, July 22-30, 2015, Congress Centre – EI Greco, Toledo, Spain.
11. R Bello, LS Martin, CW Hogle, A Palacios, JL Sanz-Vicario, XM Tong, F Martin, MM Murnane, HC Kapteyn, and P Ranitovic, "Mapping ultrafast dynamics of highly excited D_2^+ by ultrashort XUV pump – IR probe radiation", XXIX International Conference on Photonic, Electron, and Atomic Collisions, July 22-30, 2015, Congress Centre – EI Greco, Toledo, Spain.
12. Y. Watanabe, K. Hino, M. Hase, N. Maeshima, "Quantum Generation Dynamics of Coherent Phonon in Semiconductors: Transient and Nonlinear Fano Resonance", APS March Meeting 2016, March 14-18, 2016, Baltimore, Maryland, USA.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

- ◎ 矢花一浩、"第一原理計算によるレーザー加工初期過程解明への取り組み"、レーザー学会学術講演会第 36 回年次大会、名城大学、2016 年 1 月 9-11 日

- ◎ 小野倫也, "SiC 酸化過程と MOS 界面電子状態の第一原理シミュレーション", 応用物理学会先進パワー半導体分科会 第 1 回個別討論会 「SiC 酸化メカニズムと界面欠陥」, 2015 年 8 月 4 日, 東京.
- ◎ 小野倫也, "第一原理計算による SiC/SiO₂ 界面の電子状態とキャリア輸送特性解析", 2015 年度大阪大学産業科学研究所共同研究会, 2016 年 1 月 8 日~9 日, 岐阜.

B) その他の発表

1. 小野倫也, "実空間差分法を用いた第一原理輸送特性計算: 自己エネルギー項計算の高速化", 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016 年 3 月 19-22 日, 東北学院大学.
2. 小泉裕康, "スピン回転遍歴運動する電子と超伝導: 銅酸化物超伝導と BCS 型超伝導の相違", 日本物理学会 2015 年秋季大会, 2015 年 9 月 16 日-19 日, 関西大学.
3. 若浦光, 岡崎智, 小泉裕康, "スピン渦誘起ループ電流を利用したカップラービット", 日本物理学会 2015 年秋季大会, 2015 年 9 月 16 日-19 日, 関西大学.
4. 小泉裕康, "BCS 超伝導体の秩序パラメーターの位相の起源: 電荷に関する超選択則に矛盾しない新しい起源", 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016 年 3 月 19-22 日, 東北学院大学.
5. 森崎翼, 小泉裕康, "銅酸化物超伝導体における電荷秩序と $4a \times 4a$ と $4a \times 6a$ のスピン渦ユニットの安定性", 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016 年 3 月 19-22 日, 東北学院大学.
6. 若浦光, 小泉裕康, 森崎翼, "スピン渦誘起ループ電流量子ビットのディコヒーレンス", 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016 年 3 月 19-22 日, 東北学院大学.
7. 日野健一, 渡辺陽平, 長谷宗明, 前島展也, "コヒーレントフォノン生成量子ダイナミクス I: 過渡的準粒子描像に基づく理論構築", 日本物理学会 2015 年秋季大会, 2015 年 9 月 16 日-19 日, 関西大学.
8. 渡辺陽平, 日野健一, 長谷宗明, 前島展也, "コヒーレントフォノン生成量子ダイナミクス II: 過渡的な非線形 Fano 共鳴効果の解析", 日本物理学会 2015 年秋季大会, 2015 年 9 月 16 日-19 日, 関西大学.
9. 渡辺陽平, 日高篤俊, 日野健一, 長谷宗明, 前島展也, "コヒーレントフォノン生成量子ダイナミクス III: 過渡的非線形 Fano 共鳴のパルスレーザー依存性", 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016 年 3 月 19-22 日, 東北学院大学.
10. 横井浩太, 前島展也, 日野健一, "1 次元拡張イオン性ハバード模型の低エネルギー領域における光励起状態", 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016 年 3 月 19-22 日, 東北学院大学.

(4) 著書、解説記事等

1. XMTong and N Toshima "Controlling Atomic Photoabsorption by Intense Lasers in the Attosecond Time Domain" Chapter 7 in Ultrafast Dynamics Driven by Intense Light Pulses Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics 86 (2016) pp 161-176. Editors Markus Kitzler and Stefanie Gräfe.
2. T. Ono, "First-principles Study on Transport Property of Nanostructures Using Real-space Finite-difference Method, Simulation", 34, 18 (2015).
3. T. Ono, S. Saito, S. Iwase, "First-principles study on oxidation of Ge and its interface electronic structures", Jpn. J. Appl. Phys., accepted.
4. 小野倫也, 塚本茂, 江上喜幸, "実空間差分法を用いた第一原理電気伝導特性計算の高速化", アンサンブル 18, 82 (2016).

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

異分野間連携

1. 高性能計算システム研究部門との共同研究

矢花は、高性能計算システム研究部門の朴、及び大学院生の廣川と、実時間電子ダイナミクス計算コード ARTED のメニーコアシステムを用いた加速に関して共同研究を行っている。

国際連携

1. 日本学術振興会二国間交流事業共同研究（平成 25～27 年度）

矢花は米国との間で、超高速電子ダイナミクスに対する第一原理計算アプローチをテーマとする共同研究を平成 25 年度より推進している。米国はバンダービルト大学及びワシントン大学（米国側代表はバンダービルト大学の K. Varga 准教授）、日本側は筑波大学（代表：矢花）の他、分子科学研究所、日本原子力研究開発機構が参加している。

2. アト秒科学に関する国際共同研究

矢花は、アト秒科学に関し、マックスプランク量子光学研究所の実験グループ (F. Krausz 教授、M. Schultze 博士、他)、チューリッヒ工科大学の実験グループ (U. Keller 教授、他) と国際共同研究を推進している。

3. 時間依存密度汎関数理論に基づく光科学に関する国際共同研究

矢花、全は、ウィーン工科大学の理論グループ (J. Burgdoerfer 教授、及びそのグループメンバー) と、実時間電子ダイナミクス計算コード ARTED を用いた国際共同研究を推進している。

4. 第一原理計算コード国際共同開発

小野は、ドイツ・ユーリッヒ研究センター及び北海道大学応用物理の物性理論グループと第一原理計算コードの開発に関して共同研究を行っている。

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 2015 年 9 月大阪大学にて開催された CMD ワークショップのアドバンストコースで、本グループで開発している第一原理計算コード RSPACE のチュートリアルを行った。
2. 2016 年 2 月に大阪大学にて開催された CMD ワークショップのスパコンコースで、本グループで開発している第一原理計算コード RSPACE のチュートリアルを行った。

9. 管理・運営

1. 矢花は、センターの共同研究担当主幹として、当センターの全国共同利用業務である学際共同利用プログラムの運営を統括した。また、数理物質系物理学域長・数理物質科学研究科物理学専攻長、数理物質系広報委員長などを務めた。
2. 前島は計算科学研究センター共同利用委員会の一般利用 WG において、当センター大規模一般利用プログラムの申請受付などの業務を担当した。

10. 社会貢献・国際貢献

1. 小野は、ポスト「京」プロジェクト重点課題 7「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」の産学官連携担当として、ワークショップを開催した。

11. その他

V. 生命科学研究部門

生命科学研究部門は生命機能情報分野、および、分子進化分野の2つの研究分野からなり、それぞれ、第一原理計算や分子動力学計算に基づく原子レベルでの生体内分子の機能解析、真核生物系統間の遺伝情報系統解析を独立に行ってきた。H27年度は定期的会合を行い、共同研究をスタートした。

以下では、それぞれの部門の業績を個別に示す。

V-1. 生命機能情報分野

1. メンバー

教授	重田 育照
助教	庄司 光男
助教	栢沼 愛
研究員	原田 隆平 (学術振興会特別研究員)
研究員	佐藤 竜馬 (7月1日より)
学生	大学院生 2名 (後期課程在学 1名、前期課程在学 1名 (途中退学))、学類生 1名

2. 概要

生命機能情報分野では、生体内で重要な働きをしているタンパク質と核酸に注目し、その原子レベルでの特異的機能を理論的に解明することを目的としている。平成27年度には、光合成酸素発生中心(PSII-OEC)およびニトリルヒドラターゼにおける反応機構の解明を、高精度計算手法である量子/古典混合(QM/MM)法により行った。また、全原子分子動力学(MD)法により、タンパク質の折り畳み経路解析を行った。これらの研究には膨大な計算を高速に実行するため、スーパーコンピューター(HA-PACS, COMA)の効率的利用に取り組んだ。センター内の共同研究として宇宙物理研究部門、ならびに、高性能計算システム研究部門と連携し、それぞれアミノ酸生成過程、フラグメント分子軌道法のGPU化に関する研究を推進した。

3. 研究成果

【1】タンパク質フォールディングを再現するシミュレーション手法の開発

[発表論文 1-8]

タンパク質フォールディングは「レアイベント」であり、通常の分子動力学(Molecular Dynamics: MD)シミュレーションが到達可能な時間スケールと比較して、長時間の確率過程において観測される。従って、従来のMDシミュレーションに基づきレアイベントを再現す

ることは、時間スケールの制約から困難な場合が多い。時間スケールの制約を打破するために、“ANTON”に代表される生体分子の分子動力学シミュレーション専用の汎用計算機の開発が急速に進んでおり、マイクロ秒からミリ秒に至るタンパク質フォールディングシミュレーションも実現可能になってきている。しかしながら、これらの高速計算機は誰もが利用出来る訳ではない。現状として、研究室レベルの計算機を用いてタンパク質フォールディングに至る時間スケールまで MD シミュレーションを実行することは、依然として困難である。故に、高速計算機に代わる戦略として、タンパク質のレアイベントを再現するためのシミュレーション手法の開発が必要である。

本研究では、汎用計算機を用いた長時間 MD シミュレーションを実行する代わりに、初期構造の異なる超並列な短時間 MD シミュレーションをカスケード的に実行する「カスケード型超並列シミュレーション」の概念に基づくシミュレーション手法(タンパク質構造探索法)を提案した[1-8]。本計算手法では、タンパク質の長時間ダイナミクスを直接追跡することは困難であるが、時間的制約によるタンパク質構造探索を打開することが可能である。何故ならば、複数の初期構造の異なる短時間 MD シミュレーションをリスタートさせることで、遷移確率を上昇させることが出来るからである。本研究では、カスケード型超並列シミュレーションを駆使し、タンパク質機能に重要なレアイベントを効率的に再現する計算手法を開発した。

カスケード型超並列シミュレーションに属するシミュレーション手法の例として、OFLOOD法[8]の研究成果を記述する。OFLOOD法では、タンパク質の状態分布に注目し、確率密度が疎な状態分布に着目する。一般的に、タンパク質の状態分布は反応座標により射影された構造空間における高次元構造分布として記述される。この高次元構造分布において、密な分布は出現確率が高いクラスタとして認識され、タンパク質の安定状態に対応する。これに対して、クラスタに属さない密度が疎な分布は、はずれ値(Outlier)と呼ばれ、遷移状態近傍に存在している可能性が高い。OFLOOD法では、これら出現確率が低いOutlierに対応するタンパク質構造を構造リサンプリングの初期構造として選択し、短時間 MD シミュレーションに構造探索していくことで、構造遷移を促進する。Outlierを検出するために、タンパク質の高次元構造分布を階層的クラスタリング手法である「FlexDice」によりクラスタリングし、クラスタに属さない構造分布を求め、Outlierとした。Outlierは元々準安定状態間の遷移状態近傍に位置しているので、初期速度の再分配により運動エネルギーを与え直すことにより、容易に隣接する準安定状態に構造変化させることが出来る。計算手順としては、Outlierの構造リサンプリングにより得られたトラジェクトリを用いてタンパク質構造分布をアップデートし、Outlierを逐次検出していく。最終的に、考えている高次元構造空間におけるタンパク質状態分布が収束するまでOutlierの検出とその構造リサンプリングを繰り返す。

OFLOOD 法を用いた構造サンプリング効率の検証として、小タンパク質のフォールディング経路の再現を試みた。選択した小タンパク質は、汎用計算機 ANTON で用いられた中から選択した。その 1 例として、35 残基の Villin の計算結果について記述する。フォールディングシミュレーションの初期構造としては、完全に伸びきった変性構造をアミノ酸配列からモデリングし、タンパク質周りの溶媒効果は一般化ボルンモデルにより取り込んだ。反応座標として、天然構造の 2 次構造を参照構造とした部分的平均自乗距離 (Root Mean Square Deviation: RMSD) を採用し、構造空間を定義した。この構造空間に構造リサンプリングにより得られるトラジェクトリを射影し、構造分布を作成した後、FlexDice により Outlier を検出した。1 サイクルあたり 100 個の Outlier を検出し、初期構造あたり 100 ps の短時間 MD シミュレーションをリスタートさせた (サイクル当たりの計算コストは、10 ns: 100 初期構造 X100 ps)。計算結果として、50 サイクル (500 ns) 以内で、Villin のフォールディング経路を再現することが出来た。特に、主フォールディング経路に加えて、先行研究では報告されていない副フォールディング経路の再現に成功した。計算コストとしては、ANTON を用いた長時間 MD シミュレーションではフォールディング経路の再現にマイクロ秒オーダーを要していたが、OFLOOD 法はナノ秒のオーダーでタンパク質フォールディングを再現することが出来た。

【2】三重項-三重項消滅に基づくフォトン・アップコンバージョン機構の理論的研究

太陽光エネルギーを利用した技術が多数開発されており、光触媒、光有機合成、太陽電池などである。しかし、既存の技術では幅広いスペクトル領域を有している太陽光のほんの一部しか利用できておらず、個々の技術においては決まった波長領域だけしか利用できていない。そこで、近年太陽光においてほとんど利用されていない、赤外・近赤外の光を利用しようとする試みが成されている。なかでも注目されているのがフォトン・アップコンバージョン (UC) である。UC とは、低エネルギー (長波長) の光を高エネルギー (短波長) の光に変換する方法である。この方法には複数あり二光子吸収、二段階励起、三重項-三重項消滅がある。二光子吸収、二段階励起は桁違いに強い励起光を必要とするため、今回の目的に即した方法ではない。一方、三重項-三重項消滅に基づくフォトン・アップコンバージョン (TTA-UC) は太陽光レベルの低い励起光を利用することができることから注目されている。TTA-UC はドナーである増感剤が光を吸収し励起一重項状態となり、その後項間交差により励起三重項状態となる。励起三重項状態のドナーからアクセプターである発光体へ三重項エネルギー移動が起こり、発光体が励起三重項状態となる。これと同じプロセスで別の発光体が励起三重項状態となり、それらが拡散・衝突することで、一方が励起一重項状態、もう一方が基底状態となる。これにより吸収光よりも高いエネルギーレベルのアップコンバージョン発光が起こる仕組みである。この方法を用いた技術の開発が進められているが空気中での反応効率など

に問題があり実用化に至っていない。そのため、反応機構を詳細に調べ実用化に向けた反応効率の向上が必要である。

本研究では現在最も研究の進んでいる溶液中における TTA-UC について研究を進めた。ドナーとしてオクタエチルポルフィリン (PtOEP)、アクセプターとして 9,10-ジフェニルアントラセン (DPA) および DPA の改良型 (二つのフェニル基をエーテル結合を介して炭素鎖 n のアルキル基で架橋: C_n -DPA)、溶媒はジメチルスルホキシド (DMSO) を用いた。この系に対する実験が行われ、反応効率が $C7$ -sDPA > DPA > $C8$ -sDPA > $C6$ -sDPA の順であることが示された。しかし、 $C6$ -、 $C7$ -、 $C8$ -sDPA はそれぞれ同じようなアルキル鎖であるにもかかわらず反応効率に差が生じている原因については明らかとされていない。本研究では、それぞれの分子の特性および溶媒中におけるダイナミクスを分子シミュレーションを用いて解析した。

TTA-UC を引き起こすためには発光体の励起三重項状態のエネルギー (E_{T1}) の二倍が励起一重項状態のエネルギー (E_{S1}) よりも大きくなるエネルギー整合条件 ($\Delta E = 2 E_{T1} - E_{S1} > 0$) を満たす必要がある。そこで、第一原理電子状態計算を実行し、それぞれの分子で見積もった。その結果、すべての分子でエネルギー整合条件を満たすことが確認できた。しかし、分子同士に明確な差が確認できなかったことから、個々の分子の特性には明確な差がないと考えられる。そこで、溶媒中でのダイナミクスに差があることが反応効率に効いていると考え、溶媒中での分子動力学 (MD) シミュレーションを実行した。MD シミュレーションの結果から拡散係数を見積もった。その結果、拡散係数の大きさは DPA > $C7$ -sDPA > $C8$ -sDPA > $C6$ -sDPA の順に大きいことがわかった。さらに TTA が起こる際に二つの分子間で電子交換機構が働く。そこで、電子交換の際の電子の移動速度を見積もった。電子移動速度定数を決定する物理量として電子カップリング (T_{DA}) があり、本研究では T_{DA} に着目して調べた。その結果、最も T_{DA} が大きくなる分子が $C7$ -sDPA であることを明らかにした。このことから同じアルキル鎖を有する分子において反応効率が違う理由が、拡散係数および電子カップリングから説明することができた。

【3】ニトリルヒドラーゼ (NHase) の反応機構についての理論的研究 [発表論文 9]

NHase はニトリルを水和してアミドを生成 ($R-CN + H_2O \rightarrow R-CONH_2$) する酵素であるが、化学工業においてアクリルアミド等の合成に広く用いられている重要な生体触媒の一つである。NHase の反応機構の詳細に関しては、最近、K. H. Hopmann による先行理論研究、更に Y. Yamanaka らによる変異体 (β R56K) の時間分解 X 線結晶構造解析から、環状中間体が形成されることが示唆された。しかし、環状中間体形成後の反応機構に関しては、これまで 3 つの異なる経路が提唱されており、明らかになっていなかった。我々は、QM/MM 法により、環状中間体生成以降の想定される複数の反応機構の解析を行い、以下の機構であることを明らかにした。(1) β Tyr72 から基質に α Ser113 を経由してプロトン移動が起こり、 α Cys114-S 0 の

S-O 結合が開裂すると同時に α Cys109 と α Cys114 の間に S-S 結合が生成、(2)水分子が α Cys114 の硫黄原子と反応することでイミド酸生成と α Cys114 のシステインスルフェン酸の再生が起こり、(3)活性中心あるいはタンパク質の外でイミド酸がアミドに異性化する。また、反応機構に深く関わる周辺アミノ酸残基 (β Arg56) の役割についても分子レベルで明らかにし、S-S 中間体の形成において重要な役割を果たしていることを明らかにした [9]。

【4】光化学系 II 酸素発生中心(OEC)の反応機構についての理論的研究 [発表論文 12-16]

光合成は光エネルギーを化学エネルギーに効率的に変換するシステムであり、生命が作り上げた洗練された化学反応系とも言える。光合成反応は巨大な蛋白質複合体内で行われ、一連の化学反応：光捕集、電子伝達、ATP 生成と糖生成が行われる。電子伝達を担う光化学系 II では水を分解し、酸素分子を発生する以下の反応を触媒している。



この反応では化学的に安定な水から電子を引き抜いて(酸化して)いる事から分かるように、極めて難しいため、多くの反応制御がなされていると考えられる。そのため、これらの反応機構を明らかにする事は、生化学的重要性のみならず人工光合成の有益な設計指針を与えるものと期待される。

我々は最も初めの化学反応過程である S₂→S₃ 遷移を量子古典混合(QM/MM)法を用いて理論解析した[2, 6]。活性中心の Mn クラスタでの化学反応のみならず、Y161(Yz)に関連するプロトン共役電子移動も取り扱うため、Y161 も含む大きな QM 領域を用いて、反応経路探索を行った。その結果、Ca に配位する水(W3)が Mn(III)サイトに移動する 2つの経路(L, R 反応)が存在する事を見いだした。中でも L 構造(L-opened structure)を経由する経路(L 経路)が R 反応経路よりもエネルギー障壁が低く、より好ましい事も明らかにした。

2015 年に PSII-OEC の Mn クラスタ骨格を良く再現した (4つの Mn 原子を持つ) モデル錯体が C. Zhang らにより合成がなされた。天然系(native OEC)とより詳しい比較を行うため、取りうる酸化状態での構造変化、電荷、スピン状態について詳しく理論解析を行った[3, 5]。モデル錯体は多くの物性が native OEC と極めて良く似ている事を明らかにしたが、少し違いも有る事も明らかになった。Native OEC とモデル錯体の構造を比較するとモデル錯体は Mn₃ と Mn₄をつなぐ酸素原子(O₄)が無い。理論モデルに O₄を導入すると native OEC により構造が近づく事から、O₄の導入がより正確なモデル錯体に重要である事を示した[13]。

【5】アミノ酸生成経路についての理論的検討 (宇宙生命分野)

宇宙分野での目覚ましい観測技術の向上により、宇宙(星間空間)でのアミノ酸検出が近年注目されている。隕石中での数種類にわたるアミノ酸の検出、電波観測による分子雲中のグリシン前駆体の発見、探査機 Stardust のサンプルリターンによる彗星中のグリシンの発見

等により、星間アミノ酸の存在が強く示唆されるようになった。一方で、その生成機構は不明な点が多く、観測されている星間分子からどのようにしてアミノ酸が作られるかは未だ謎が多い。我々は、これまでに提案されている生成経路を基に、反応物と生成物の安定性、および反応における遷移状態に関するエネルギー評価を行うことで、最も妥当なアミノ酸生成経路を理論的に推定した。特にアミノニトリルやヒダントインといった安定性の高い中間体を経由した加水分解反応によるアミノ酸生成と、反応活性の高いラジカル分子を用いた経路について、第一原理計算（密度汎関数法）による解析を行った。

その結果、前駆体の加水分解によるアミノ酸生成では、その反応エネルギー障壁は、60 kcal/mol 以上となり、触媒として水分子を加えたものでも 50 kcal/mol 程度となった。星間雲中のような極低温下ではこの程度のエネルギー障壁を熱揺らぎによって越えることは難しく、光輻射のような外部エネルギー供給による反応促進が必要となる。一方で、ラジカルを用いたグリシン生成機構ではその生成経路中における反応のエネルギー障壁が最大で 7.99 kcal/mol、最も低い経路では全体で 1.85 kcal/mol しかなく、星間ダスト上でも比較的起こりやすい生成経路である。このことから、星間分子としてのアミノ酸生成にはラジカルが強く関わることを計算科学的に解明した。本研究により星間アミノ酸の生成機構に対する詳細な反応エネルギープロファイルの構築に成功した。

【6】フラグメント分子軌道 (FMO) 法の GPGPU 化[研究論文 18]

GPU 等の演算加速装置を用いた高性能科学技術計算システムへの対応は、量子化学計算においても重要なトピックとなっている。これまでに我々は、大規模分子軌道計算の実現に向けてフラグメント分子軌道 (FMO) 計算プログラム実装の一つである OpenFMO の GPGPU 化に向けた開発を行ってきた。本年度の成果としては、フラグメント間の静電相互作用 (ESP) 計算の GPU 化である。ESP 計算のうち特に二つの近接フラグメント間の静電相互作用を計算する 4 中心フラグメント間クーロン相互作用計算 (4C-IFC) のアルゴリズム構成はこれまで GPU 化してきた Fock 行列計算と類似しており、その知見を大いに活用できる。平成 27 年度は、実装した GPGPU 化 OpenFMO の性能評価は筑波大学の HA-PACS ベースクラスタを用いて行った。8 ノードを利用してクランビン (642 原子、20 フラグメント) の FMO-HF/6-31G(d) 計算を実行した。比較のため CPU による直接計算の他、SCF (self consistent field) 中に積分を保存しておく in-core 手法も行っている。GPU 化により全ての計算過程で 3~4 倍の高速化となっており、計算全体としては 3.3 倍の高速化を実現している。

4. 教育

【卒業研究】

坂本航太郎、「伸長因子 EF-1 の立体構造に関する理論的研究」

【講義】

重田育照、計算物理学 2、物理学類専門科目、春 ABC

重田育照、計算物理学 3、物理学類専門科目、秋 ABC

庄司光男、生物物理学、物理学類専門科目、春 ABC

【集中講義】

重田育照、「量子化学に基づく化学反応理論」“大学院講義反応量子化学”、14th-15th Jan. 2016、名古屋大学大学院理学研究科。（8コマ）

重田育照、“大学院講義”、June 22nd 2015、徳島大学大学院薬学研究科。（1コマ）

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

(1) 受賞

1. 栢沼愛、第一回黒田チカ賞、2016年1月.
2. 佐藤皓允（博士後期課程2年）、ポスター賞（物理化学部門優秀賞）、CSJ化学フェスタ2015、2015年11月.
3. 庄司光男、新学術領域3D活性サイト科学第二回成果報告会 講演賞(大門賞)、2015年9月.

(2) 外部資金

【研究代表者】

1. 新学術領域研究「複合光応答」計画研究、重田育照（代表者）（平成26～30年度）「実験と理論の協奏的アプローチによる多重スピン励起子変換制御」 金額（H27年度）：（直）11,600,000円（間）3,480,000円
2. 基盤研究C：庄司光男（代表者）（平成26年～28年度）「トレオニン合成酵素の全反応機構の理論的解明」 金額（H27年度）：（直）600,000円（間）180,000円
3. 若手研究（B）：原田隆平（研究代表者）（平成26年～27年度）「タンパク質構造揺らぎに基づく構造変化予測法の構築」 金額（H27年度）：（直）900,000円（間）270,000円

【分担研究者】

1. 挑戦的萌芽研究：重田育照（分担者）（代表者：岡野泰則 大阪大学教授）（平成27～28年度）「メゾスケール空間内移動速度論創成のための挑戦的研究」 金額（H27年度）：（直）400,000円（間）120,000円
2. 特別推進研究：庄司光男（分担者）（代表者：沈建仁 岡山大学教授）（平成24～28

年度)「光合成系 II における水分解反応の学理解明」金額 (H27 年度) : (直) 2,500,000 円 (間) 750,000 円

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, “TaBoo SeArch (TBSA) algorithm with a modified inverse histogram for reproducing biologically relevant rare-events of proteins”, *Journal of Chemical Theory and Computation* **12**, 2436–2445 (2016), DOI:10.1021/acs.jctc.6b00082.
2. R. Harada, T. Nakamura, Y. Shigeta, “Sparsity-weighted Outlier FLOODing method” *Journal of Computational Chemistry* **37**, 724-738 (2016), DOI:10.1002/jcc.24255.
3. R. Harada, A. Kitao, “Non-targeted Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics for Enhancing the Conformational Sampling of Proteins” *Journal of Chemical Theory and Computation* **11**, 5493-5502 (2015), DOI:10.1021/acs.jctc.5b00723.
4. R. Harada, T. Nakamura, Y. Shigeta, “Automatic Detection of Hidden Dimension in OFLOOD Method” *Chemical Physics Letters* **639**, 269-274 (2015), DOI: 10.1016/j.cplett.2015.09.031.
5. R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, “Efficient Conformational Sampling of Proteins based on a Multi-Dimensional Inverse Histogram: an Application to Folding of Chignolin in Explicit Solvent” *Chemical Physics Letters* **630**, 68-75 (2015), DOI:10.1016/j.cplett.2015.04.039.
6. R. Harada, Y. Takano, T. Baba, Y. Shigeta, “Simple, yet Powerful for Conformational Sampling of Proteins” *Physical Chemistry Chemical Physics* **17**, 6155-6173 (2015), *invited as a feature article*, DOI: 10.1039/C4CP05262E.
7. R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, “Enhanced Conformational Sampling Method for Proteins on the TaBoo SeArch algorithm: Application to the Folding of a Mini-Protein Chignolin” *Journal of Computational Chemistry* **36**, 763-772 (2015), DOI: 10.102/jcc.23854.
8. R. Harada, T. Nakamura, Y. Takano, Y. Shigeta, “Protein Folding Pathways Extracted by OFLOOD Method” *Journal of Computational Chemistry* **36**, 97-102 (2015), DOI: 10.1002/jcc.23773.

9. M. Kayanuma, M. Shoji, M. Yohda, M. Odaka, Y. Shigeta, “Catalytic Mechanism of Nitrile Hydratase Subsequent to Cyclic Intermediate Formation: A QM/MM Study”, *The Journal of Physical Chemistry B* **123**(13), 3259-3266 (2016), DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b11363.
10. M. Kayanuma, T. Stoll, C. Daniel, F. Odobel, J. Fortage, A. Deronzier, M.-N. Collomb, “A computational mechanistic investigation of hydrogen production in water with the $[\text{Rh}^{\text{III}}(\text{dmbpy})_2\text{Cl}_2]^+ / [\text{Ru}^{\text{II}}(\text{bpy})_3]^{2+} / \text{ascorbic acid}$ photocatalytic system”, *Physical Chemistry Chemical Physics* **17**, 10497-10509 (2015), DOI: 10.1039/C4CP04949G.
11. T. Stoll, C. E. Castillo, M. Kayanuma, M. Sandroni, C. Daniel, F. Odobel, J. Fortage, M.-N. Collomb, “Photo-induced redox catalysis for proton reduction to hydrogen with homogeneous molecular systems using rhodium-based catalysts”, *Coordination Chemistry Reviews* **304**, 20-37, (2015), DOI:10.1016/j.ccr.2015.02.002.
12. M. Shoji, H. Isobe, K. Yamaguchi, “QM/MM Study of the S2 to S3 Transition Reaction in the Oxygen-Evolving Complex of Photosystem II”, *Chemical Physics Letters* **636**, 172-179 (2015), DOI:10.1016/j.cplett.2015.07.039.
13. M. Shoji, H. Isobe, J.-R. Shen, K. Yamaguchi, “Geometric and electronic structures of the synthetic Mn_4CaO_4 model compound mimicking the photosynthetic oxygen-evolving complex”, *Physical Chemistry Chemical Physics* **18**, 11330-11340 (2016), DOI: 10.1039/C5CP07226C.
14. M. Shoji, M. Kayanuma, H. Umeda, Y. Shigeta, “Performance of the divide-and-conquer approach used as an initial guess”, *Chemical Physics Letters* **634**, 181-187 (2015), DOI:10.1016/j.cplett.2015.06.011.
15. M. Shoji, H. Isobe, T. Nakajima, K. Yamaguchi, “Full Geometry Optimizations of the CaMn_4O_4 Model Cluster for the Oxygen Evolving Complex of Photosystem II”, *Chemical Physics Letters* **640**, 23-30 (2015), DOI:10.1016/j.cplett.2015.10.006.
16. H. Isobe, M. Shoji, J.-R. Shen, K. Yamaguchi, “Chemical Equilibrium Models for the S3 State of the Oxygen-Evolving Complex of Photosystem II”, *Inorganic Chemistry* **55**(2), 502-511(2015), DOI:10.1021/acs.inorgchem.5b02471.
17. K. Hanaoka, W. Tanaka, M. Kayanuma, M. Shoji, “A QM/MM study of the 5'-AMP DNA hydrolysis of aprataxin”, *Chemical Physics Letters* **631-632**, 16-20 (2015), DOI:10.1016/j.cplett.2015.04.053.

18. 梅田宏明、埴敏博、庄司光男、朴泰祐、重田育照、“OpenFM0 における 4 中心クーロン相互作用項計算の GPGPU 化の試み”、*Journal of Computer Chemistry Japan (invited letter)* **14**, 69-70(2015). DOI: 10.2477/jccj.2015-0041.
19. S. Maekawa, R. Sato, K. Hirao, Y. Shigeta, “Solvent effects on excited-state electron-transfer rate of pyrene-labeled deoxyuridine: a theoretical study”, *Chemical Physics Letters* **644**, 25-30 (2016). DOI:10.1016/j.cplett.2015.11.037.
20. S. Maekawa, T. Matsui, K. Hirao, Y. Shigeta, “A Theoretical Study on Reaction Mechanisms of Nitrite Reduction in Copper Nitrite Complexes as Models for the Copper Nitrite Reductase”, *Journal of Physical Chemistry B* **119**, 5392-5403 (2015). DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b01356.

B) 査読無し論文

なし

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Y. Shigeta, “Theoretical design of photochemical properties of diarylethenes”, *International Mini-Symposium on Fundamentals and Applications of Photosynthetic Excitations*, AIST Osaka center Mar. 15th 2016, Osaka, Japan.
2. Y. Shigeta, “Inverse Histogram-based Sampling Algorithm for Protein-folding Problems”, *The Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 7)*, Jan. 25th-28th 2016, Kaohsiung, Taiwan.
3. R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, “Simple, yet powerful conformational sampling methodologies for proteins”, Symposium #98 ‘Conformational Dynamics of Biomolecules and the Biomolecule-Solvent Interface’ *Pacificchem 2015*, Dec. 15th-20th 2015, Hawaii, USA.
4. Y. Shigeta, “Theoretical studies on triplet-triplet annihilation processes of diphenylanthracene derivatives in solution”, *Symposium #44 Modeling and Analyzing Exciton and Charge Dynamics in Molecules and Clusters’ Pacificchem 2015*, Dec. 15th-20th 2015, Hawaii, USA.
5. Y. Shigeta, “Molecular Design for Optical Properties of Diarylethenes”, *Energy, Materials, Nanotechnology (EMN) Bangkok meeting*, Nov. 10th-13th 2015, Bangkok, Thailand.
6. Y. Shigeta, “Simple Conformational Search Algorithms For Protein Folding”, 6th

Czech-Slovakia-Japan Theoretical Chemistry meeting, Oct. 11th-14th 2015, Bratislava, Slovakia.

7. 庄司光男、“光化学系 II の酸素発生中心の電子状態”、総会シンポジウム、第 53 回生物物理学会、2015/9/14.
8. M. Shoji, “QM/MM study on the possible reactions of Photosystem II oxygen evolving complex in the S2 to S3 transition”, *AWEST2016*, Awaji island Conference, Hyogo, 2015/6/14-15.
9. M. Shoji, “Possibilities of Glycine formation in interstellar medium”, *Symposium on Hierarchy and Holism in Natural Sciences*, National Astronomical Observatory of Japan, 2016/2/5.

B) 一般講演

1. Y. Shigeta, K. Kamiya, T. Baba, M. Boero, “An Integrated Approach for Analyzing Mutational Effects on Enzymatic Reactions of Nylon Oligomer Hydrolase (NylB)”, *20th Quantum Systems Chemistry, Physics, and Biology*, September 14th-20th, Varna, Bulgaria.
2. M. Kayanuma, M. Shoji, Y. Shigeta, “A QM/MM study of catalytic mechanism of nitrile hydratase”, *The 53rd Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan*, Kanazawa University, oral, 2015/9/13.
3. M. Kayanuma, M. Shoji, Y. Shigeta, “Theoretical study on the reaction mechanism of nitrile hydratase”, *Kyoto University*, Kyoto, 2016/3/17.
4. M. Shoji, Y. Ujiie, M. Kayanuma, Y. Shigeta, T. Murakawa, H. Hayashi, “Theoretical elucidation on the molecular mechanism of product assisted catalysis of threonine synthase”, *The 53rd Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan*, Kanazawa University, 2015/9/14.
5. M. Shoji, Y. Ujiie, R. Harada, M. Kayanuma, Y. Shigeta, T. Murakawa, H. Hayashi, “Molecular dynamics study on the key catalytic intermediates of threonine synthase”, *29th Annual Symposium of the Protein Society*, Barcelona, Spain, poster, 2015/7/22-25.
6. M. Shoji, “QM/MM Study on the Reaction Mechanism of Assimilatory Nitrite Reductase (aNiR)”, *Metals in Biology in Wako*, (poster+2 min's talk), 2015/6/16-17.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 重田育照、“ナノバイオ系のシミュレーションとダイナミクス：その後の展開”、
「量子化学の最近の進展- 大規模・複雑系の量子化学シミュレーション -」、Mar.
23rd 2016、AICS、兵庫.
2. 重田育照、“分子動力学法と情報科学の融合によるタンパク質の構造探索”、「分子
技術と理論計算・データ科学」大阪大学未来研究分子技術イニシアティブセミナー、
Mar. 14th-15th 2016、大阪大学豊中キャンパス、大阪
3. 重田育照、“第一原理計算に基づく物質の起源と生命痕跡の探求”、シンポジウム
「宇宙惑星居住の実現に向けて - 生命維持, 食糧生産, エネルギー・資源開発 等
-」、化学工学会第 81 年会、Mar. 13th-15th 2016、関西大学千里山キャンパス、大
阪.
4. 重田育照、“化学における動力学と統計について”、研究交流会「理論分子科学・
分子非線形科学のこれまでとこれから」、東京大学駒場リサーチキャンパス、Mar.
5th-6th 2016、東京.
5. 重田育照、“レアイベントとしてのタンパク質の構造変化と機能”、タンパク研セ
ミナー「構造を基盤とする蛋白質科学における未解決問題」、東京大学 先端科学
技術研究センターENEOS ホール、Mar. 1st-2nd 2016、東京.
6. 重田育照、神谷克政、“理論研究によるチトクロム *c* 酸化酵素の酸化還元と共役し
たプロトン輸送機構：入り口と出口”、生物物理学会シンポジウム「膜を介したプ
ロトン透過機構」、Sep. 13th-15th 2015、金沢、石川.
7. 重田育照、“理論計算に基づくタンパク質の反応性と物性の解析”、「2015 年度第
1 回水とナノ構造研究会」、Sep. 1st-2nd 2015、那須、栃木.
8. 重田育照、“第一原理計算に基づく酵素機能解析：チトクロム *c* 酸化酵素のプロト
ンポンプを例として”、東京大学物性研究所 「機能物性融合科学シリーズ(3)「反
応と輸送」」、Jun. 24th-26th、柏、千葉.
9. 重田育照、神谷克政、“チトクロム *c* 酸化酵素におけるプロトン輸送の構造的仕掛
け”、分子研研究会「膜タンパク質内部のプロトン透過を考える」、Apr. 20th-21st
2015、分子研、愛知.
10. 庄司光男、“NTChem による光合成酸素発生中心の電子状態解析”、第五回 NTChem ワ
ークショップ、秋葉原 UDX6 階カンファレンス、2016/3/9.
11. 原田隆平、“Simple yet Powerful Conformational Sampling Methods for Reproducing
Biologically Rare Events”、生物物理学会シンポジウム「生体分子に関するレ
アイベントの探究」、第 53 回生物物理学会年会、金沢大学、石川、2015/9/15.

12. 原田隆平、 “カスケード型超並列シミュレーションを用いた生物学的レアイベント探索手法の開発”、 第 2 回凝縮系の理論化学、琉球大学、沖縄、2016/3/10.

B) その他の発表

1. 栢沼愛、庄司光男、重田育照、“ニトリル水和酵素の触媒機構に関する理論的研究”、日本化学会第 96 春季年会、同志社大学、京都、口頭、2016/3/27.
2. 栢沼愛、庄司光男、重田育照、“QM/MM 法によるニトリル水和酵素の触媒機構の解析”、生体分子科学討論会 2015、高崎シティーギャラリー、群馬、口頭、2015/6/13.
3. 庄司光男、“宇宙空間におけるアミノ酸生成反応についての理論的研究”、第 3 回キラル研究会、京都大学、京都、口頭発表、2015/11/28.
4. 庄司光男、磯部寛、山口兆、重田育照、鷹野優、“光化学系 II 酸素発生中心の S2→S3 状態変化についての理論的解明”、3D active site、第 2 回成果報告会、筑波山京成ホテル、茨城、口頭+Poster、2015/9/4-5.
5. 庄司光男、栢沼愛、重田教育照、長友重紀、長井雅子、“ヘム蛋白の特異的円二色性(Soret 帯 CD)についての理論的解明”、蛋白質科学会、あわぎんホール、徳島、ポスター、2015/6/24-26.
6. 張致遠、原田隆平、栢沼愛、庄司光男、○重田育照、“主成分解析に基づくエントロピー計算に関する一考察”、第 18 回理論化学討論会 2015、大阪大学、大阪、口頭、2015/5/20-22.
7. 庄司光男、栢沼愛、梅田宏明、重田育照、“分割統治法を用いた初期電子密度行列の構築、第 18 回理論化学討論会 2015、大阪大学、大阪、ポスター、2015/5/20-22.
8. 栢沼愛、庄司光男、重田育照、“ニトリル水和酵素の触媒機構に関する理論的研究”、第 18 回理論化学討論会 2015、大阪大学、大阪、ポスター、2015/5/20-22.
9. M. Shoji, H. Isobe, J.-R. Shen, K. Yamaguchi, “Electronic structure analysis on the synthetic model (Mn₄CaO₄) of the photosynthetic oxygen evolving complex”、日本化学会春季年会、同志社大学、京都、口頭、2016/3/27.
10. 庄司光男ら、“宇宙空間でのアミノ酸生成反応機構についての理論的研究”、日本天文学会 2016 年春季年会、首都大学東京、東京、口頭、2016/3/15.
11. 庄司光男、佐藤皓允、佐藤竜馬、原田隆平、栢沼愛、重田育照、“分割統治法を用いた初期電子密度行列の効率的作成”、蛋白質研セミナー、東京大学先端科学研究センター、東京、ショートトーク+ポスター、2016/3/1-2.
12. 佐藤竜馬、鎌田賢司、岸亮平、中野雅由、重田育照、“三重項-三重項消滅光アップコンバージョンの反応機構の理論的研究”、第 29 回分子シミュレーション討論会、朱鷺メッセ、新潟、口頭、2015/11/30-12/2.

13. 佐藤竜馬、鬼頭（西岡）宏任、安藤耕司、重田育照、倭剛久、“光回復酵素における電子移動経路解析”、蛋白研セミナー、東京大学先端科学研究センター、東京、ポスター、2016/3/1-2.
14. 佐藤皓允、庄司光男、重田育照、白石賢二、矢花一浩、梅村雅之、“星間空間での光反応によるL型アミノ酸過剰生成の計算科学的検証”、第3回キラル研究会、京都大学、口頭、2015/11.
15. 佐藤皓允、庄司光男、重田育照、“アミノ酸過剰生成の起源についての理論解析”、大阪大学蛋白質研究所セミナー、東京大学 先端科学技術研究センター、ポスター、2016/3.
16. 佐藤皓允、庄司光男、重田育照、“L型アミノ酸過剰生成の起源についての計算化学的解析”、第5回CSJ化学フェスタ2015、タワーホール船堀、ポスター、2015/10.
17. 原田隆平、鷹野優、重田育照、“逆状態分布に基づく効率的タンパク質構造サンプリング手法の開発”、第29回分子シミュレーション討論会、朱鷺メッセ、新潟、ポスター、2015/11/30-12/2.
18. 原田隆平、鷹野優、重田育照、“レアイベント探索手法” OFLOOD”で解明するタンパク質フォールディング機構”、第15回日本蛋白質科学会年会、あわぎんホール、徳島県、ポスター、2015/6/24-6/26.

(4) 著書、解説記事等

1. R. Harada, Y. Inagaki, Y. Shigeta, “Protein Folding and Evolution”, Materials Science and Engineering, Article ID: Protein Folding and Evolution/00999 Elsevier.

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1. 宇宙・生命・物性分野間連携（宇宙生命）
宇宙空間でのL-アミノ酸生成に関する研究を物性・宇宙分野と連携して進展させた。
2. 生命情報・分子進化分野間連携
伸長因子 EF-1 の立体構造に関する理論的研究を分子進化分野と連携して進展させた。
3. 生命-高性能計算システム研究部門連携
フラグメント分子軌道法の GPU 化を高性能計算システム研究部門と連携して進展させた。

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 重田育照、研究交流会「理論分子科学・分子非線形科学のこれまでとこれから」、

2016. 3. 5-3. 6.

2. 重田育照、「構造を基盤とする蛋白質科学における未解決問題」大阪大学蛋白研セミナー、2016. 3. 1-3. 2.

9. 管理・運営

1. 重田育照、分子科学会 速報配信担当、2015/09/01-2016/08/31
2. 重田育照、水和ナノ構造研究会委員(平成 27 年度-)、ATI-公益財団法人新世代研究所.

10. 社会貢献・国際貢献

11. その他

【産学連携：3 件】

1. 重田育照、原田隆平、庄司光男、谷口岳志氏(株式会社MCHCR&Dシナジーセンター)との共同研究(受託 30万 受け入れ)
2. 重田育照、原田隆平、中村朋健(富士通株式会社)との共同研究.
3. 庄司光男、阿部幸浩氏(東洋紡)への学術指導.

【特許出願：3 件】

1. 名称：情報処理、シミュレーションプログラムおよびシミュレーション方法
発明者：中村朋健、重田育照、原田隆平
出願人：富士通、筑波大学
出願番号：2015-032321
出願年月日：2015/02/20
2. 名称：情報処理装置、シミュレーション方法、およびシミュレーションプログラム
発明者：中村朋健、重田育照、原田隆平
出願人：富士通、筑波大学
出願番号：2015-156702
出願年月日：2015/08/07
3. 名称：情報処理装置、指標次元抽出方法、および指標次元抽出プログラム
発明者：中村朋健、重田育照、原田隆平
出願人：富士通、筑波大学
出願番号：2015-156703
出願年月日：2015/08/07

V-2 分子進化分野

1. メンバー

准教授	稲垣 祐司 (センター勤務・生命環境系)
研究員	中山 卓郎
教授	橋本 哲男 (共同研究員・生命環境系)
特任助教	谷藤 吾朗 (生命環境系)
研究員	石川 奏太 (生命環境系)
学生	大学院生 8 名 (後期課程在学 4 名、前期課程在学 4 名)、学類生 1 名

2. 概要

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

【1】新奇真核微生物の発見 …… 真核生物の多様性の大部分は肉眼で認識することが難しい単細胞生物であるため、これまでの研究では真核生物多様性の全体像を十分に把握しているとは言い切れない。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】各種トランスクリプトーム・ゲノム解析 …… 真核生物の主要グループ間の系統関係を分子系統学的に解明するには、大規模遺伝子データが必須である。そこで系統進化的に興味深い生物種を選び、培養と遺伝子データの取得を進めている。そのデータを基に、大規模配列データ解析を行い正確な真核生物系統の推測を目指す。

【3】分子系統解析の方法論研究 …… 分子系統解析においては、解析する配列データの特長、使用する解析法・配列進化モデルなどにより、系統推定に偏りが生じることが知られている。これまでの方法論は単一遺伝子データに基づいて研究されてきたが、複数遺伝子から構成される大規模配列データを解析するための方法論の検討はそれほど進んでいない。また、現状では超並列計算機上で効率よく作動する解析プログラムも十分に普及しているとは言えない。そこで、大規模配列データ解析においてより偏りの少ない推測を目指し、方法論的研究と系統解析プログラムの並列化を行っている。

3. 研究成果

【1】大規模配列データに基づく真核生物大系統の推測

H25 年度末には、我々の研究グループが単離・同定し、正式に記載した *Tsukubamonas globosa* の大規模分子系統解析とミトコンドリアゲノムの完全解読結果を *Genome Biol Evol* 誌に (Kamikawa et al. 2014 *Genome Biol Evol* 6:306-315)、H26 年度初めには *Palpitomoans bilix* の大規模分子系統解析の結果を *Sci Rep* 誌に発表した (Yabuki et al. 2014 *Sci Rep* 4:4641)。これまでのところ未発表ではあるが、系統的帰属が未解明な真核微生物 (*Microheliella*

maris および *Rigifila ramosa*) をはじめホヤ病原性寄生原虫 *Azumiobodo hoyamushi* などを解析し、現在論文執筆あるいは執筆準備中である。今回は、H25 年度から継続して解析を進めている新奇真核微生物 PAP020 株の系統的位置に関する大規模分子系統解析と、H26 年度から解析準備を開始した SRT308 株の系統的位置に関する大規模分子系統解析の進捗を報告する。

(1) 新奇真核微生物 PAP020 株の系統的位置の推測

新奇真核微生物 PAP020 株は、筑波大・白鳥峻志氏によりパラオ共和国のマングローブ林の底泥から単離された嫌気／微好気性真核微生物である。顕微鏡観察と小サブユニットリボソーム RNA 配列に基づく系統解析では、PAP020 株と既知の真核生物との間に明らかな近縁性は示唆されなかった。そこで H25-26 年度では、PAP020 株から Illumina Hi-seq2000 によるトランスクリプトームデータを取得し、そのデータを基盤とした予備的な大規模分子系統解析を行った。H27 年度には、前年度実施した予備解析には含まれなかったが、PAP020 株の系統的位置解明のカギを握るカルペディエモナス様生物群 (CLOs) をふくむ 148 遺伝子から構成されるアライメントデータを作成した。この解析では、予備解析では不明だった PAP020 株、既知の CLOs、ディプロモナス類との間の系統関係を厳密に検討した。この大規模分子系統解析の結果、先行研究でのディプロモナス類と CLOs との近縁性が復元され、PAP020 株はディプロモナス類と CLOs が形成する「フォルニカータ」クレードの基部から分岐し、この系統関係はブートストラップ値 100% で支持された (図 1)。この解析は H27 年度の筑波大学計算科学研究センター学際共同利用プログラム REALPHYL (15a18 ; 代表・稲垣祐司) によりサポートされた。

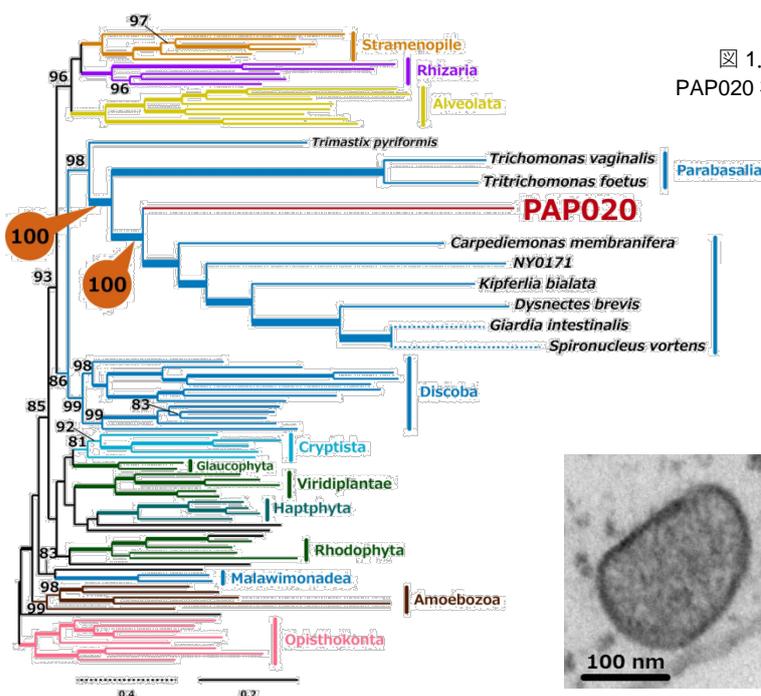


図 1. 148 遺伝子データに基づく PAP020 株の系統的位置。

フォルニカータ
クレード

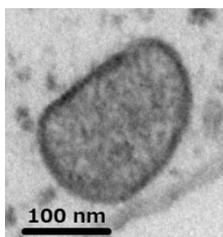


図 2. PAP020 株の縮退ミトコンドリアと考えられる構造。
写真提供：白鳥峻志 (筑波大)

本解析結果から、①PAP020 株がこれまで認識されていなかった祖先的フォルニカータ生物である、あるいは②フォルニカータ生物群と近縁だがこれまで認識されていなかった系統群が存在し、PAP020 株はその新奇系統群に含まれるという 2 つの可能性が示唆された。フォルニカータクレードにふくまれる生物は、いずれも嫌気性あるいは微好気性であり、構造・機能ともに縮退したミトコンドリアをもつ。電子顕微鏡観察では PAP020 株細胞内に縮退ミトコンドリアと思しき構造が観察された (図 2)。そこで、PAP020 株の縮退ミトコンドリアの代謝機能を予測するためトランスクリプトーム解析をやり直す。最終的に、148 遺伝子データから推測された系統的位置と縮退ミトコンドリア機能を合わせて、論文作成に取り掛かる。

(2) 新奇真核微生物 SRT308 株の系統的位置の推測

新奇真核微生物 SRT308 株は、筑波大・白鳥峻志氏によりパラオ共和国で採取された海水サンプルから単離された好気性真核微生物である。予備的な顕微鏡観察で把握された形態的特徴、リボソーム RNA 遺伝子配列に基づく系統解析では、この生物の系統的位置を確定することはできなかった。我々は H26 年度に SRT308 株のトランスクリプトームデータを取得し、系統的位置を確定するための大規模分子系統解析の準備を進め、H27 年度は 116 遺伝子データを予備的に解析した。この系統解析で SRT308 株は、キネトプラスチダ類、ディプロネマ類、ユーグレナ類から構成されるユーグレノゾア生物群の基部から分岐した。H28 年度の筑波大学計算科学研究センター学際共同利用プログラム REALPHYL (16a25 ; 代表・稲垣祐司) により、SRT308 株の系統的位置をさらに検証してゆく。

【2】各種トランスクリプトーム・ゲノム解析

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

ロパロディア科珪藻は、ミトコンドリアや色素体に加え、独自のシアノバクテリア共生体を保持する (橢円体, spheroid body)。橢円体は窒素固定能力を持ち、窒素化合物を宿主細胞に供給していると考えられてきた。また橢円体は珪藻細胞外では生育できず、珪藻細胞の分裂とともに娘細胞に受け継がれる。しかし、橢円体が珪藻細胞にどの程度統合されているのか詳細は不明であり、我々はゲノム情報を軸に、珪藻と橢円体の共生関係機構の解明を目指している。これまでに我々はロパロディア科珪藻 *Epithemia turgida* (Nakayama et al. 2014 *Proc Nat Acad Sci USA* 111:11407-11412) および *Rhopalodia gibberula* の橢円体ゲノム全塩基配列を決定することに成功している。予備的な比較解析により 2 つの橢円体ゲノム間には明らかな違いがみられ、ロパロディア科珪藻の種間で橢円体ゲノム配列に進化的多様性があることが示唆された (中山・稲垣 ; 未発表データ)。

H27 年度においては、さらに別のロパロディア科珪藻種 *Epithemia adnata* の橢円体ゲ

ノム配列 (2.79M 塩基対) の解読・アノテーションを完了させ、計 3 種における楕円体間の詳細なゲノム比較解析を行なった (図 3)。比較した 3 種 (*E. adnata*、*E. turgida* および *R. gibberula*) 全ての楕円体ゲノムにおいて、光化学系複合体タンパク質遺伝子がほとんど確認できなかったことから、光合成能の欠失は *Rhopalodia* 属、*Epithemia* 属の分岐以前に起こったことが示唆された。一方、*R. gibberula* 楕円体ゲノムには *Epithemia* 属の楕円体ゲノムからは既に失われたビタミン B₁₂ 生合成経路やクロロフィル生合成経路の酵素遺伝子が複数同定され、*Epithemia* 属の楕円体ゲノムは、より縮退的であることが示された。さらに、*Epithemia* 属楕円体ゲノムの遺伝子は *R. gibberula* 楕円体遺伝子に対して比較的高い非同義置換率をもっていたことから、楕円体ゲノムは宿主珪藻の系統間において遺伝子進化速度に違いが見られることが示された。

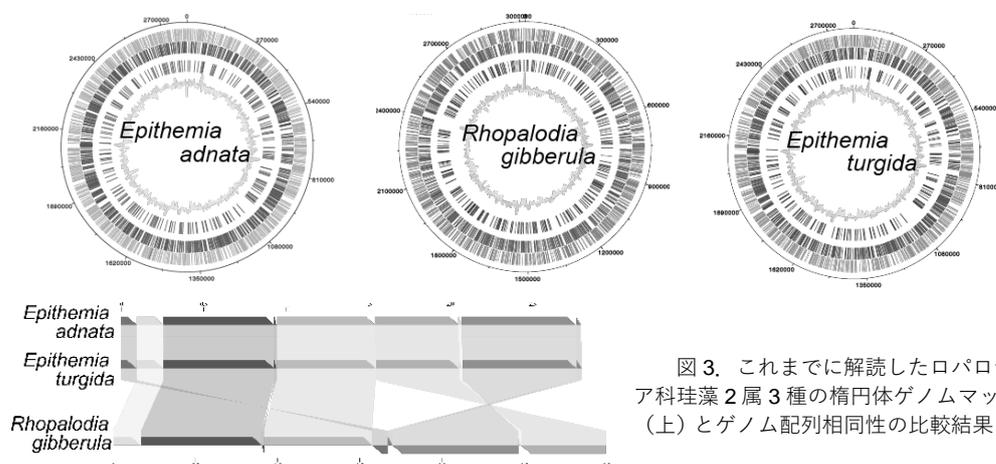


図 3. これまでに解読したロパロディア科珪藻 2 属 3 種の楕円体ゲノムマップ (上) とゲノム配列相同性の比較結果 (左)

H27 年度では、珪藻細胞がどのように細胞内共生体である楕円体を制御しているかの分子的知見を得るため、*Epithemia adnata* の核ゲノムにコードされているタンパク質遺伝子の解析を行い、楕円体の制御に関わるとみられる遺伝子の探索を行なった。次世代 DNA シーケンサー Illumina MiSeq を用いて、比較的小規模 (合計約 800 M 塩基対) のトランスクリプトームデータを取得し、そこから 48,538 タンパク質配列を推定した。これらのタンパク質について、配列相同性検索および分子系統解析を用いて進化的起源の推定を行なったところ、5 種類のタンパク質遺伝子がシアノバクテリアから遺伝子の水平転移によって獲得されたことが示唆された。系統解析の結果に基づけば、これらのタンパク質は楕円体の祖先とは異なる系統のシアノバクテリアから獲得されたと考えられるが、そのうち 2 つの遺伝子は珪藻細胞内において楕円体特異的に局在するペプチドグリカン壁の代謝に関わるものであり、これらの遺伝子が楕円体の制御に関わっている可能性がある。今後は、*Epithemia turgida* の核ゲノム解析を行い、より網羅的な楕円体制御遺伝子の探索を行う予定である。

(2) 光合成性真核微生物の色素体ゲノム解析
我々は渦鞭毛藻における葉緑体置換、二次的な光合成能の欠失に伴う色素体ゲノム進化に興味を持ち、各種の真核藻類の色素体ゲノム解読を行っている。

H26 年度に解読した非光合成性珪藻 *Nitzschia* sp. NIES-3581 株の色素体ゲノムは 70 Kbp 程度であり、光合成能喪失に伴いゲノム縮退が進行したと考えられる (図 4)。この色素体ゲノム上には光化学系 I および II、シトクロム *b6/f* 複合体に関連する遺伝子は存在しないため、ATP 合成酵素の駆動力となるプロトン勾配を造り出せず、従って ATP を産生できない。しかし奇妙なことに、NIES-3581 株をはじめ非光合成性色素体で ATP 合成酵素遺伝子が色素体ゲノム上に保存されていることから、①これらの色素体中の ATP 合成酵素では ATP 分解してプロトン勾配を形成し (通常とは逆反応)、②プロトン勾配はストロマからチラコイドルーメンへのタンパク質を輸送に利用されているという仮説を提案した。本論文は分子進化学分野のインパクトファクター第一位 (IF = 9.105 ; 2014 年) のジャーナルに掲載された (Kamikawa et al. *Mol Biol Evol* 2015 32:2598-2604)。

多くの渦鞭毛藻は紅藻の二次共生によって獲得された色素体 (ペリディニン色素体) をもつが、未記載渦鞭毛藻 MRD-151 株では、祖先型のペリディニン色素体が、緑藻であるペディノ藻の三次共生に由来する緑藻型の色素体に置換されていることが判明している。我々は MRD-151 株の色素体の全ゲノムの配列決定を目指し、同株のトータル DNA サンプルを次世代シーケンス解析した結果、約 102 Kbp の環状葉緑体ゲノム配列を取得し、タンパク質コード遺伝子と構造 RNA 遺伝子合計 131 を同定した (図 5)。ゲノム比較解析の結果、MRD-151 株色素体ゲノムコードタンパク質のレパートリーは、自由生活性ペディノ

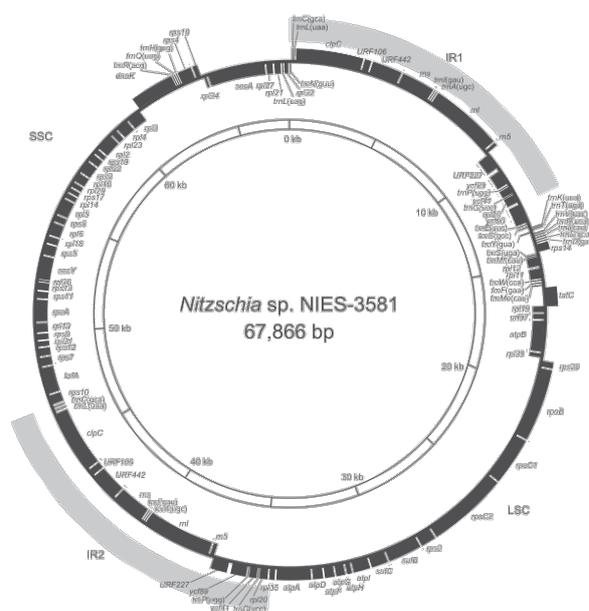


図 4. *Nitzschia* sp. NIES-3581 株の非光合成性色素体ゲノム (Kamikawa et al. 2015 *Mol Biol Evol*)

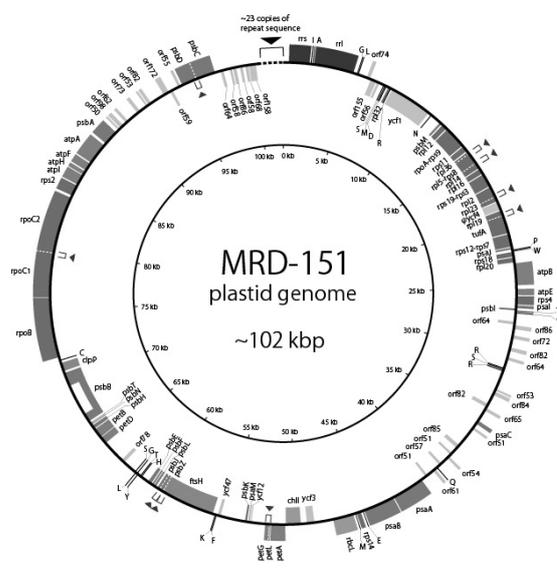


図 5. 未記載渦鞭毛藻 MRD-151 株の色素体ゲノム

藻（例えば *Pedinomonas minor*）よりは縮退的であった。これまでの我々の研究により、渦鞭毛藻 *Lepidodinium chlorophorum* もペディノ藻色素体によりペリディニン色素体を置換したことが判っている (Kamikawa et al. 2015 *Genome Biol Evol* 7:1133-1140)。しかし、*L. chlorophorum* と MRD-151 株色素体ゲノムは *L. chlorophorum* 色素体ゲノムほどの縮退段階には至っていないことが明らかとなった。興味深いことに、渦鞭毛藻 2 種が独立にペディノ藻の葉緑体を獲得したと考えられが、2 つの色素体ゲノム間の遺伝子レパートリーが類似しており、さらには *L. chlorophorum* のレパートリーが MRD-151 株のサブセットになっていた。これらのことから独立した 2 系統でのペディノ藻の葉緑体化に共通の進化的背景が存在する可能性が示唆された。

(3) 各種真核微生物のミトコンドリアゲノム解析

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

H26 年度に解読したカタブレファリス類 *Roombia* sp. NY0200 株、クリプチスタ生物群の新規メンバーである *Palpitomonas bilix* のミトコンドリアゲノムについて論文を執筆し、現在 *Genome Biol Evol* 誌に投稿中である。*P. bilix* ミトコンドリアゲノムは 77 Kbp の線状ゲノムであり、その両端に約 30 Kbp 弱の Inverted repeat 構造をもっていることと、それに関する進化的考察を行った (図 6)。また *P. bilix* ミトコンドリアゲノムには、チトクローム *c* 成熟に関わるバクテリア型タンパク質サブユニット (*ccmA*, *ccmB*, *ccmC*, *ccmF*) を複数コードする点でユニークである。*P. bilix*

以外のクリプチスタ生物は、バクテリア型とは異なる真核生物特異的チトクローム *c* 成

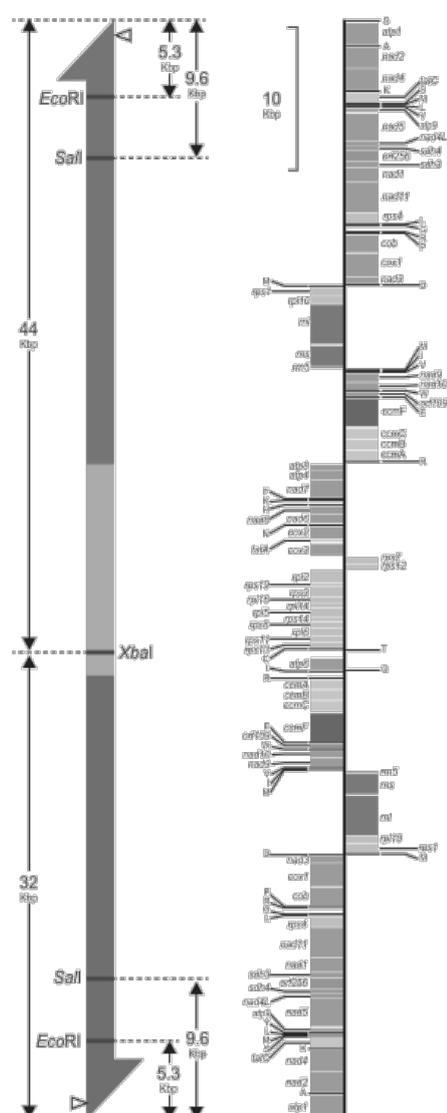


図 6. *Palpitomonas bilix* ミトコンドリアゲノム、左に大まかなゲノム構造を、右には詳細な遺伝子配置を示した。

熟機構をもつことから、①*P. bilix* を含むクリプチスタ生物群の共通祖先ではバクテリア型チトクローム *c* 成熟機構を使用していたこと、②*P. bilix* とその他のクリプチスタ生物の共通祖先が分岐した後、チトクローム *c* 成熟機構の置換が起こったと推測された。

H27 年度には、新たに有中心粒太陽虫の未記載種 SRT127 株のミトコンドリアゲノムの解読も行った。次世代シーケンス解析により復元されたミトコンドリアゲノムは環状で約 113 K 塩基対の環状ゲノムであり、41 種類の典型的なミトコンドリアタンパク質が確認された。

(4) 嫌気性従属栄養性ストラメノパイル生物 *Cantina marsupialis* のトランスクリプトーム解析に基づくミトコンドリア代謝機能の推測

ストラメノパイル生物群には PCR 法により海水サンプルから増幅された 18S リボソーム RNA 配列だけから存在が推測されている MAST 系統群が多数知られている。我々は、ストラメノパイル生物群に含まれる嫌気性従属栄養性真核微生物 *Cantina marsupialis* の単離培養に成功し、その詳細な形態データを *J Eukaryot Microbiol* 誌に報告した (Yubuki et al. 2015 *J Eukaryot Microbiol* 62:532-542)。H25 年度にこの培養株のトランスクリプトームデータを取得し、H26 年度にはそのデータを独立行政法人海洋研究開発機構・瀧下清貴博士の研究グループと共同で解析することで、この生物がもつ退化型ミトコンドリアの代謝機能を推測した。通常酸素呼吸型ミトコンドリアには電子伝達に必要な複合体 I、II、III、IV および F_1F_0 ATPase をもつが (図 7 上)、*C. marsupialis* ミトコンドリアには複合体 II だけが検出された (図 7 下)。また *C. marsupialis* は、嫌気環境に適応した生物に見られる退化型ミトコンドリア (例えばヒドロゲノソーム) に特有の pyruvate:ferredoxin oxidoreductase、iron-hydrogenase および嫌氣的 ATP 合成にかかわる酵素を保持する。一方、不完全ながら TCA 回路やアミノ酸合成系を含むことから、ヒドロゲノソームなどの退化型ミトコンドリアよりは酸素呼吸型ミトコンドリアに近い特徴をもつ。従って、*C. marsupialis* ミトコンドリアは、これまでに研究されてきたミトコンドリアとは異なる、独自の代謝系を保持していると考えられる。この研究結果は *Protist* 誌に掲載された (Noguchi et al. 2015 *Protist* 166:534-550)。

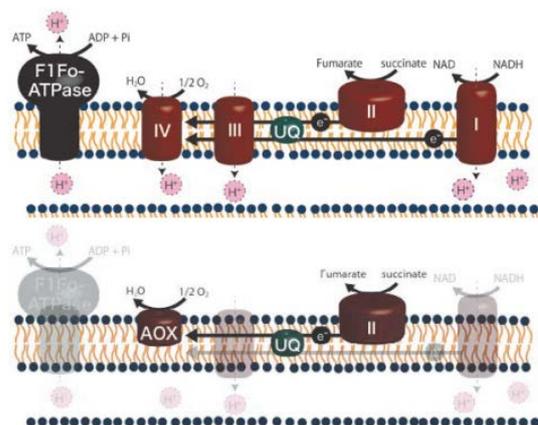


図 7. 酸素呼吸型ミトコンドリアと *Cantina marsupialis* ミトコンドリアとの比較。(上) ミトコンドリア内膜には ATP 合成のために電子伝達に関わるタンパク質複合体が存在している。(下) 一方、*C. marsupialis* ミトコンドリアでは、複合体 II 以外が欠失している。左図は海洋研究開発機構発行 *Blue Earth* 142 号 (9 頁) に掲載されたものを使用した。

【3】分子系統解析の方法論研究

分子系統解析で広く用いられる“homogeneous”塩基置換モデルでは、遺伝子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。遺伝子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、遺伝子配列間の塩基組成の違いを独立したパラメータとして評価できる“non-homogeneous (NH)”置換モデルによる系統解析プログラムを適応することで解消可能である。一方、この解析法では推定すべきパラメータ数と計算時間が飛躍的に増大するという問題が生じるため、系統解析プログラムの並列化が必須である。そこで本研究では、NH モデルを実装した NHML プログラム (Galtier and Gouy, *Mol. Biol. Evol.*, 15(7), 871-879, 1998) に対し、大規模遺伝子配列データに基づく分子系統解析に想定したコード並列化を施し、スーパーコンピュータ (COMA PACS-IX) 上で良好な並列性能を得るためのチューニングを行った。

H26 年度までの成果では、NHML を用いた分子系統解析のうち、①分子系統樹 1 本ごとの尤度計算 (=モデルパラメータおよび枝長の最適化) と、②分枝交換法による最尤系統樹の発見的探索という粒度の異なる 2 つのアルゴリズムに着目し、それぞれに OpenMP および MPI に

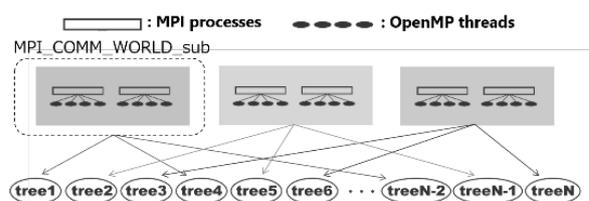


図 8. MPI プロセスのグループ分割

よる並列計算技術を導入した。これにより、共有メモリ型並列と分散メモリ型並列を効率よく組み合わせたハイブリッドな並列スキームを提案した (石川ら 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, 7(3), 2014)。H27 年度ではこのスキームをさらに拡張し、より多くの計算ノード (コア) を利用して上記の multi-grained なデータ解析を効率的に並列処理できるよう改良を行った。具体的には、① 1 本の系統樹の尤度計算において、遺伝子配列アライメントの座位ごとの尤度計算を独立に行えること、またモデルパラメータおよび枝長も解析的な手法を用いることでそれぞれ独立に最適化できることに着目し、前者を OpenMP によるスレッド並列化 (共有メモリ型並列)、後者を MPI によるプロセス並列化 (分散メモリ型並列) した。その上で、②分枝交換により提案された複数の樹形もまた並列に尤度計算できることを踏まえ、MPI_COMM_WORLD の分割により複数の MPI プロセスからなるサブグループを作成し、異なる提案樹形の尤度計算をこれらのサブグループ単位で管理し、サブグループ内でも①のハイブリッドな並列計算を行う、という階層的な並列スキームを実装した (図 8)。

上記の並列化による性能向上を確認するため、COMA システムにて最大 32 ノード (512 コア) までを利用し、17 種 10,000 座位からなるシミュレーションデータを用い、評価試験を行った。結果、32 ノード使用時において、128 の MPI プロセスを 1 グループ 4 プロセス (16 スレッド) の計 32 グループに分割し、それぞれのグループで異なる提案樹形の尤度計算を並列に処理することで、1 コアでの逐次処理に比

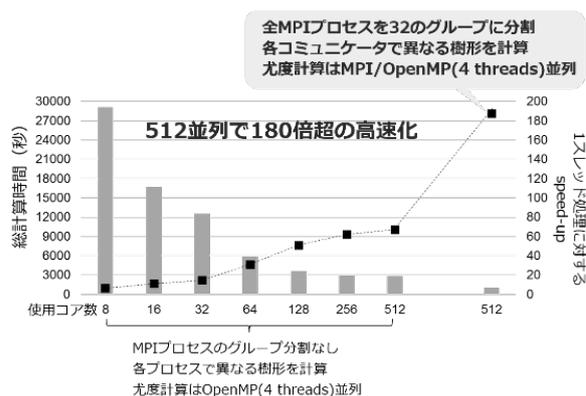


図 9. COMA システムにおける性能評価

べ 187.3 倍の高速化を達成した (図 9)。また、上記スキームによる並列化を、MPI プロセスをグループ分割しない H26 年度までの並列スキームと比較したところ、512 コア使用時に 2.79 倍の高速化を達成できたことから、より多くの計算資源を必要とする大規模分子系統解析に適したものであると評価できる。本成果は H27 年度学際共同利用プログラム (15a-24, 代表: 石川) によるものである。H28 年度ではこれらの成果を論文として国際学会に投稿するとともに、更なる高速化のために①のアルゴリズムに GPU 並列計算技術を導入する予定である (H28 年度学際共同利用プロジェクト 16a-46)。

4. 教育

(1) 博士論文

- A) 西村祐貴 “Diversity and Evolution of Protist Mitochondria: Introns, Gene Content and Genome Architecture”

(2) 修士論文

- A) 沈茹菁 「ヒト腸管寄生虫 *Giardia intestinalis* における新規スプライソソーム構成因子の探索」
 B) 森田幸之介 「新奇緑色渦鞭毛藻 MRD-151 株の葉緑体ゲノム比較解析」
 C) 高林舜 「*Kipferlia bialata* の大規模配列データから推測するフォルニカータ生物ミトコンドリアの縮退進化」

(3) 卒業論文

- A) 宮田凌佑 「セスジアカムカデ中のアピコンプレクサ寄生虫のリボソーム RNA 系統解析」

(4) 集中講義

橋本哲男 : 「核酸・タンパク質配列データにもとづく生物進化の推測」

計算科学リテラシー (日・英)

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

(1) 受賞

- A) 矢崎裕規 (博士後期課程 2 年) Holtz-Conner Travel Award, VII ECOP-ISOP Joint meeting 2015.
- B) 西村祐貴 (博士後期課程 3 年) 筑波大学大学院生命環境科学研究科 研究科長表彰
- C) 森田幸之介 (博士前期課程 2 年) 筑波大学大学院生命環境科学研究科生物科学専攻 専攻長表彰
- D) 高林舜 (博士前期課程 2 年) 筑波大学大学院生命環境科学研究科生物科学専攻 専攻長表彰

(2) 外部資金 (名称、氏名、代表・分担の別、採択年度、金額、課題名)

- A) 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)」, 稲垣祐司 (代表), 研究期間: 2011-2015 年度, 交付額: 直接経費 17,300 千円, 間接経費 5,190 千円.
- B) 基盤研究 (B) 「新型分割イントロンのスプライシング機構と進化多様性の解明 (課題番号 15H04406)」, 橋本哲男 (分担; 稲垣祐司), 研究期間: 2015-2017 年, 交付額: 直接経費 4,600 千円, 間接経費 1,380 千円.
- C) 基盤研究 (B) 海外学術「嫌気環境に生育する真核微生物の多様性の解明 (課題番号 15H05231)」, 橋本哲男 (分担; 稲垣祐司), 研究期間: 2015-2017 年, 交付額: 直接経費 5,300 千円, 間接経費 1,590 千円.
- D) 若手研究 (B) 「ケルコゾア生物における“ミトコンドリア型解糖系”の理解に向けた基礎的研究 (課題番号 23247038)」, 中山卓郎, 研究期間: 2014-2016 年, 交付額: 直接経費 1,100 千円.
- E) 若手研究 (B) 「非光合成葉緑体の進化と機能多様性探索～比較ゲノムとプロテオームから」, 谷藤吾朗, 研究期間: 2014-2016 年, 交付額: 直接経費 500 千円.

(3) 知的財産権 (種別、氏名、課題名、年月日)

なし

6. 研究業績

(1) 研究論文

- A) 査読付き論文
 - ① Nishimura Y, Amagasa T, Inagaki Y, Hashimoto T, Kitagawa H. A system for supporting phylogenetic analyses over alignments of next generation sequence data. *Proceedings for the 10th International Conference on Complex, Intelligent, and Software Intensive Systems (CISIS-2016)* Accepted to be

published.

- ② Templeton T, Asada M, Jiratanh M, **Ishikawa SA**, Tiawsirisup S, Sivakumar T, Namangala B, Takeda M, Mohkaew K, Ngamjituea S, Inoue N, Sugimoto C, **Inagaki Y**, Suzuki Y, Yokoyama N, Kaewthamasorn M, Kaneko O. Ungulate malaria parasites. 2016 *Scientific Reports* 6:23230.
- ③ Harada R, **Inagaki Y**, Shigeta Y. Protein folding and evolution. *Reference Module in Materials Science and Materials Engineering*. Article ID: Protein Folding and Evolution/00999.
- ④ Noguchi F, Shimamura S, **Nakayama T**, Yazaki Y, Yabuki A, **Hashimoto T**, **Inagaki Y**, Fujikura K, Takishita K. Metabolic capacity of mitochondrion-related organelles in the free-living anaerobic stramenopile *Cantina marsupialis*. 2015 *Protist* 166:534-550.
- ⑤ Kamikawa R, **Tanifuji G**, **Ishikawa SA**, Onodera NT, Ishida K, **Hashimoto T**, Miyashita H, Mayama S, **Inagaki Y**. Proposal of a Twin-arginine translocator system-mediated constraint against loss of ATP synthase genes from nonphotosynthetic plastid genomes. 2015 *Molecular Biology and Evolution* 32:2598-2604.
- ⑥ **Ishikawa SA**, Kamikawa R, **Inagaki Y**. Multiple conversion between the genes encoding bacterial class-I release factors. 2015 *Scientific Reports* 5:12406.
- ⑦ Takeuchi F, Sekizuka T, Ogasawara Y, Yokoyama H, Kamikawa R, **Inagaki Y**, Nozaki T, Sugita-Konish Y, Ohnishi T, Kuroda M. The mitochondria genomes of *Kudoa* species are extremely diverged among Metazoa. 2015 *PLOS ONE* 10(7):e30132030.

B) 査読無し論文

- ① **中山卓郎**, **稲垣祐司**. シアノバクテリアと真核藻類の細胞統合—「窒素固定オルガネラ」へ続く道? 2016 *生物の科学 遺伝* 70:176-180.
- ② **稲垣祐司**. 共生体由来オルガネラにまつわるエトセトラ. 2016 *生物の科学 遺伝* 70:156-160.

(2) 国際会議発表 (発表者には*を付けた)

A) 招待講演

***Yuji Inagaki**. Green alga-derived nucleomorphs in dinoflagellate cells. 2015 年 9 月 30 日-10 月 2 日 2nd International Symposium on Matryoshka-type Evolution of Eukaryotic Cells. University of Tsukuba, Tsukuba, Japan.

B) 一般講演

- ① Fumihiko Takeuchi, Tsuyoshi Sekizuka, Yumiko Ogasawara, Hiroshi Yokoyama, Ryoma Kamikawa, **Yuji Inagaki**, Tomoyoshi Nozaki, Yoshiko Sugita-Konishi, Takahiro Ohnishi, *Makoto Kuroda. Phylogenetic analysis of a myxozoan genus *Kudoa* mitochondrial genomes, and the modulation of host innate immunity by *Kudoa* infection. 2015 年 9 月 30 日-10 月 2 日 2nd International Symposium on Matryoshka-type Evolution of Eukaryotic Cells. University of Tsukuba, Tsukuba, Japan.
- ② *Ryoma Kamikawa, **Yuji Inagaki**. Convergent evolution of carbon metabolisms after loss of photosynthesis. 2015 年 9 月 30 日-10 月 2 日 2nd International Symposium on Matryoshka-type Evolution of Eukaryotic Cells. University of Tsukuba, Tsukuba, Japan.
- ③ *Kounosuke Morita, **Goro Tanifuji**, **Takuro Nakayama**, Ryoma Kamikawa, Chihiro Sarai, Kazuya Takahashi, Mitsunori Iwataki, **Yuji Inagaki**. Plastid genome reduction in two separate dinoflagellate lineages bearing pedinophyte-derived plastids. 2015 年 9 月 30 日-10 月 2 日 2nd International Symposium on Matryoshka-type Evolution of Eukaryotic Cells. University of Tsukuba, Tsukuba, Japan.
- ④ *Keitaro Kume, Shun Takabayashi, Ryoma Kamikawa, **Goro Tanifuji**, **Yuji Inagaki**, **Tetsuo Hashimoto**. Prediction and comparison of the metabolism of mitochondrion-related organelles in free-living fornicate organisms. 2015 年 9 月 30 日-10 月 2 日 2nd International Symposium on Matryoshka-type Evolution of Eukaryotic Cells. University of Tsukuba, Tsukuba, Japan.
- ⑤ *Eriko Matsuo, Yuki Nishimura, **Yuji Inagaki**. Impact of endosymbiotic gene transfer on plastid metabolic pathways in dinoflagellates with haptophyte-derived plastids. 2015 年 9 月 30 日-10 月 2 日 2nd International Symposium on Matryoshka-type Evolution of Eukaryotic Cells. University of Tsukuba, Tsukuba, Japan.
- ⑥ *Euki Yazaki, Takashi Shiratori, Keitaro Kume, **Tetsuo Hashimoto**, Ken-Ichiro Ishida, **Yuji Inagaki**. Strain PAP020, a novel anaerobic microeukaryote branching at the base of Fornicata. 2015 年 9 月 5-10 日 VII ECOP-ISOP Joint meeting 2015. Hotel-Conterence Center Sylken Al-Andalus Palace & the "Reina Mercedes" Scientific Campus of the University of Seville, Seville, Spain.

- ⑦ *Kounosuke Morita, Goro Tanifuji, Takuro Nakayama, Ryoma Kamikawa, Chihiro Sarai, Kazuya Takahashi, Mitsunori Iwataki, Yuji Inagaki. Comparative genome analysis of pedinophyte plastids and the pedinophyte-derived plastids in two dinoflagellates *Lepidodinium chlorophorum* and strain MRD-151. 2015 年 9 月 5-10 日 VII ECOP-ISOP Joint meeting 2015. Hotel-Conterence Center Sylken Al-Andalus Palace & the "Reina Mercedes" Scientific Campus of the University of Seville, Seville, Spain.
- ⑧ Euki Yazaki, Takashi Shiratori, Keitaro Kume, Sohta Ishikawa, Ken-Ichiro Ishida, Tetsuo Hashimoto, *Yuji Inagaki. Is a microaerophilic flagellate strain PAP020 is the most basal member of the Fornicata? 2015 年 5 月 27-29 日 Integrated Microbial Biodiversity Program meeting, Canadian Institute for Advanced Research. Westin Mountain Bear Resort, Victoria, Canada.
- ⑨ *Fumiya Noguchi, Shigeru Shimamura, Takuro Nakayama, Yuki Yazaki, Tetsuo Hashimoto, Yuji Inagaki, Katsunori Fujikura, Kiyotaka Takishita. 2015 年 3 月 30-4 月 2 日 Society of General Microbiology, Annual Conference 2015. The International Convention Centre, Birmingham, UK.

(3) 国内学会・研究会発表（発表者には*を付けた）

A) 招待講演

- ① 皿井千裕, 谷藤吾朗, 中山卓郎, 神川龍馬, 高橋和也, 石田健一郎, 岩滝光儀, *稲垣祐司. ヌクレオモルフをもつ 2 種の未記載渦鞭毛藻: 「真核-真核型」細胞内共生を介した葉緑体成立過程を解き明かす新たなモデルとして. 2015 年 8 月 20-23 日 第 37 回日本進化学会第 17 回大会. 中央大学後楽園キャンパス, 文京区, 東京.

B) その他の発表

- ① *矢崎裕規, 白鳥峻志, 久米慶太郎, 橋本哲男, 石田健一郎, 稲垣祐司. フォルニカタ生物群の基部から分岐する新奇嫌気性生物 PAP020 株のミトコンドリア様オルガネラの代謝機能の推測. 2016 年 3 月 19-20 日 第 85 回日本寄生虫学会大会 宮崎市民プラザ, 宮崎, 宮崎.
- ② *神川龍馬, Stefan Zauner, Uwe Maier, Daniel Moog, John M Archibald, Andrew J Roger, 真山茂樹, 石田健一郎, 宮下英明, 稲垣祐司. 非光合成性珪藻類葉緑体における機能. 2016 年 3 月 19-20 日 日本藻類学会第 40 回大会 日本歯科大学生命歯科部, 千代田区, 東京.
- ③ *中山卓郎, 稲垣祐司. Rhopalodia 科珪藻細胞内共生体の比較ゲノム解析. 2016

年 3 月 19-20 日 日本藻類学会第 40 回大会 日本歯科大学生命歯科部, 千代田区, 東京.

- ④ *松尾恵梨子, 稲垣祐司. 葉緑体を置換した渦鞭毛藻の葉緑体関連代謝系における EGT の傾向. 2016 年 3 月 19-20 日 日本藻類学会第 40 回大会 日本歯科大学生命歯科部, 千代田区, 東京.
- ⑤ *高林舜, 久米慶太郎, 神川龍馬, 谷藤吾朗, 稲垣祐司, 橋本哲男. フォルニカータ+パラバサリア生物群内でのミトコンドリア縮退進化. 2015 年 9 月 26 日 第 75 回日本寄生虫学会東日本支部大会 順天堂大学, 文京区, 東京.
- ⑥ *中山卓郎, 神川龍馬, 谷藤吾朗, 稲垣祐司. Rhopalodia 科珪藻における細胞内共生シアノバクテリアのゲノム縮小進化. 2015 年 9 月 6-8 日 日本植物学会第 79 回大会 朱鷺メッセ・新潟コンベンションセンター, 新潟, 新潟.
- ⑦ *矢崎裕規, 白鳥峻志, 久米慶太郎, 橋本哲男, 石田健一郎, 稲垣祐司. トランスクリプトームデータを基盤とした大規模分子系統解析による新奇嫌気性真核微生物 PAP020 株の系統的位置の解明. 2015 年 8 月 20-23 日 第 37 回日本進化学会第 17 回大会. 中央大学後楽園キャンパス, 文京区, 東京.

(4) 著書、解説記事等

なし

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

(1) 異分野連携

高性能計算システム研究部門との連携による分子系統解析プログラムの並列化

(2) 国際連携

- A) A. J. Roger 博士 (Dalhousie 大・カナダ) および A. G. B. Simpson 博士 (Dalhousie 大・カナダ) との共同研究：フォルニカータ生物群における嫌気性ミトコンドリア機能の解析
- B) A. J. Roger 博士 (Dalhousie 大・カナダ)、A. G. B. Simpson 博士 (Dalhousie 大・カナダ)、M. W. Brown 博士 (アメリカ・ミシシッピ州立大) との共同研究：大規模遺伝子配列データに基づく真核生物大系統の推測

(3) 国際活動

なし

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

- (1) 2nd International Symposium on Matryoshka-type Evolution of Eukaryotic Cells 開催場所:筑波大学大学会館国際会議場(茨城県つくば市), 2014 年 9 月 30 日-10 月 2 日,

オーガナイザー：稲垣祐司、橋本哲男、石田健一郎。

- (2) 研究会「微生物進化 2015」開催場所：筑波大学計算科学研究センター（茨城県つくば市），
日時：2015 年 2 月 27 日，オーガナイザー：案浦健、千葉洋子、橋本哲男、稲垣祐司。

9. 管理・運営

なし

10. 社会貢献・国際貢献

なし

11. その他

なし

VI. 地球環境研究部門

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） 鬼頭昭雄（学内共同研究員）
准教授	日下博幸（センター勤務）
助教	松枝未遠（センター勤務）、若月泰孝（学内共同研究員）
研究員	池田亮作（センター勤務）、秋本祐子（センター勤務）、 鈴木パーカー明日香（学内共同研究員）
学生	大学院生 29 名、学類生 5 名（田中・日下）

2. 概要

地球環境研究部門における主な活動のひとつとしては、文科省グリーン北極事業の北極温暖化研究プロジェクトが最終年となり、北極振動と北極温暖化増幅の関係を分析した。大気場の主要な自然変動としての北極振動の観点からハイエイタスの原因を究明している。また、線形傾圧モデル(LBM)を用いて北極振動の特異固有解理論を発展させ、北極振動指数(AOI)の正負に伴う傾圧不安定解の構造変化を解析した。

地球環境研究部門における主な活動として、都市気象研究と将来の地域気候予測研究がある。本センターと多治見市の連携協定に基づき、多治見の熱環境の緩和策に資する観測研究を行っている。多治見市との共同プロジェクトでは、多治見駅付近の熱環境を詳細に調査するとともに、人が感じる温度（体感温度）や人体生理測定（皮膚温など）を行い、ドライミスト、ウエットミスト、街路樹、高反射性舗装道路の効果を評価した。環境省のS8プロジェクトでは、これまで開発してきた「温暖化ダウンスケーラ」をインドネシア気候・気象・地球物理庁（BMKG）に導入した。このソフトウェアの導入により、今後、途上国が独力で地域の温暖化予測ができるようになることを期待される。

さらに、地球環境研究部門における主な活動として、世界各国の気象庁により日々行われているアンサンブル予報データを用いた、数日から数ヶ月先までの大気現象を対象とした予測可能性研究がある。科研費・研究活動スタート支援では、世界各地で起こる天候レジームの1-2週間先までの予測可能性を解析し、文科省・北極域研究推進(ArCS)プロジェクトでは、1-2ヶ月先までを対象とした熱帯から極域までの諸大気海洋現象の予測可能性についての解析を開始した。

3. 研究成果

【1】 大気大循環研究（田中）

(1) 北極低気圧のデータ解析

文科省グリーン北極事業の北極温暖化研究プロジェクトが最終年となり、北極振動と北極温暖化の関係を分析した。2000 年以降に北極温暖化増幅が強化され、同時に負の北極振動が顕在化した。その結果、北極圏が温暖化する一方で、シベリアを中心とする中緯度が寒冷化している。北極圏の温暖化は急激な海氷の融解をもたらしているが、北極低気圧による海氷の攪乱もその重要な要因と考えられている。北極低気圧は上空の極渦による渦度が地上に達して出来る地上低気圧であり、対流圏内で寒気核を持つことから、温帯低気圧とは構造が異なるユニークな低気圧である。

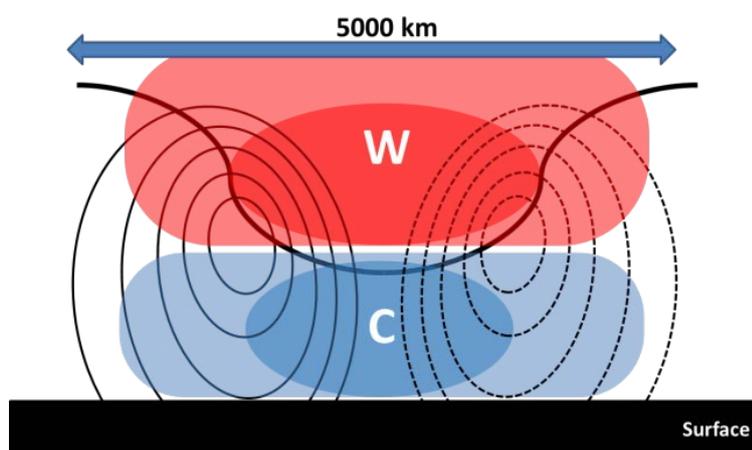


図1 JRA-55 再解析による北極低気圧の概念図

図1は気象庁 JRA-55 再解析データを用いて解析した北極低気圧の鉛直概念図である。以前に NICAM モデルを用いて数値的に再現された北極低気圧について報告したが、再解析データの結果も数値実験とほぼ同様の結果となった。北極圏は極循環により下降流が卓越するが、一部の下降流はより大きなスケールの下降流と繋がり成層圏から空気塊が降りてくる。対流圏界面が垂れ下がり、圏界面上で正の温位偏差が起こる。これが圏界面上の暖気核の特徴となる。また、圏界面付近で正の渦位偏差がもたらされると、これにより低気圧性循環が励起される。その正の渦度が大気下層に伝わり境界層でエクマン摩擦により収束を引き起こす。すると、北極低気圧の中心で上昇流により断熱冷却が起こり、寒気核が対流圏下層に現れて、これが北極低気圧の対流圏下層の特徴となる。熱帯低気圧は、中心付近の上昇気流により水蒸気の凝結が起こり、暖気核が形成され、それが浮力を強化して発達するが、寒冷な北極低気圧では、潜熱加熱は無視できるため、寒気核となる。温帯低気圧もポーラーローも基本的には暖気核を持つので、北極低気圧の寒気核とは本質的に異な

る構造となる。北極低気圧の構造は寒冷渦に近いが、地表付近まで低気圧性渦度が降りてくる点で寒冷渦と異なる特徴を持つ。北極低気圧は温暖化が進んだ際の北西航路の開拓と関係するので、予測の精度向上のためにもメカニズムの正しい理解が必要である。

(2) 火山灰追跡 PUFF モデルの開発

JST と JICA による SATREPS インドネシア防災プロジェクトに参加し、リアルタイム火山灰追跡 PUFF モデルの開発とインドネシア気象局 (BMKG) への移植を開始した。PUFF モデルは空気塊のトラジェクトリーを計算するラグランジュモデルであるが、正確な風の 3 次元データと火山噴火の際の正確な噴出率のデータが重要である。そのため、世界的に最も観測網が充実している桜島火山の地震計や傾斜計のデータから、リアルタイムで分刻みの噴出率を算出する方法を PI の井口が独自に開発し、それを PUFF モデルに接続した。

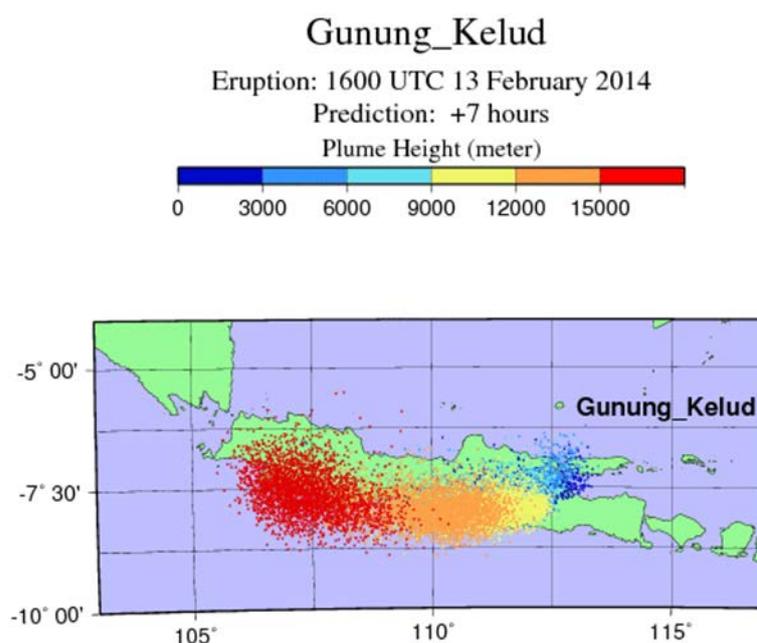


図 2 Kelud 火山灰の輸送拡散 PUFF モデルによる数値実験

図 2 は 2014 年の 2 月に噴火したインドネシアの Kelud 火山から吹き出す火山灰の追跡を行ったもので、カラーは噴煙高度を表す (Tanaka et al 2015)。この噴火は高度 17km に達し、フィリピンのピナツボ火山噴火に次ぐ大噴火であった。上層風は東風で、火山灰は西向きに流され、ジョグジャカルタ空港に降灰をもたらしたが、大気下層には西風が緩やかに入っており、スラバヤ空港にも降灰をもたらしている。同時

刻の衛星画像から噴煙の広がり調べた結果、このような大規模な噴火では、噴煙の浮力による上昇流と上層での収束の結果、水平方向に噴煙が発散し、半径 50km もの笠雲を形成する特徴が重要である、この特徴をモデルに組み込む必要がある。笠雲の特徴を組み込んだモデルの結果は衛星画像と一致し、3次元構造とその時間変化を再現する事に成功した。

【2】 都市気候の将来予測（日下）

（1） 温暖化影響評価研究者のためのダウンスケーリング

環境省の環境研究総合推進費（S-8）の研究課題である、「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）」で開発した温暖化ダウンスケーラ（ウェブアプリケーション）のクラウド版の開発に向けた第一歩として、筑波大学が保有する PC クラスタ型計算サーバとスーパーコンピュータ（COMA）に対応するための開発を行った。さらには、PC クラスタ型計算サーバとスーパーコンピュータ（COMA）を利用したクラウド計算に近いテスト計算を行った。また、ダウンスケーラの海外版の利用講習会が環境省とアジア工科大学主催の下、平成 28 年 2 月にアジア工科大学（AIT）にて開催され、アジア 9 カ国（タイ、ベトナム、マレーシア、フィリピン、インドネシア、カンボジア、モンゴル、フィジー、サモア）の国および自治体の政策担当者に向けて講習を行った。アジア各国の自治体の政策担当者からは、温暖化ダウンスケーラのクラウド版の海外版が完成した暁には、ぜひ利用したいとの評価を得ることができた。

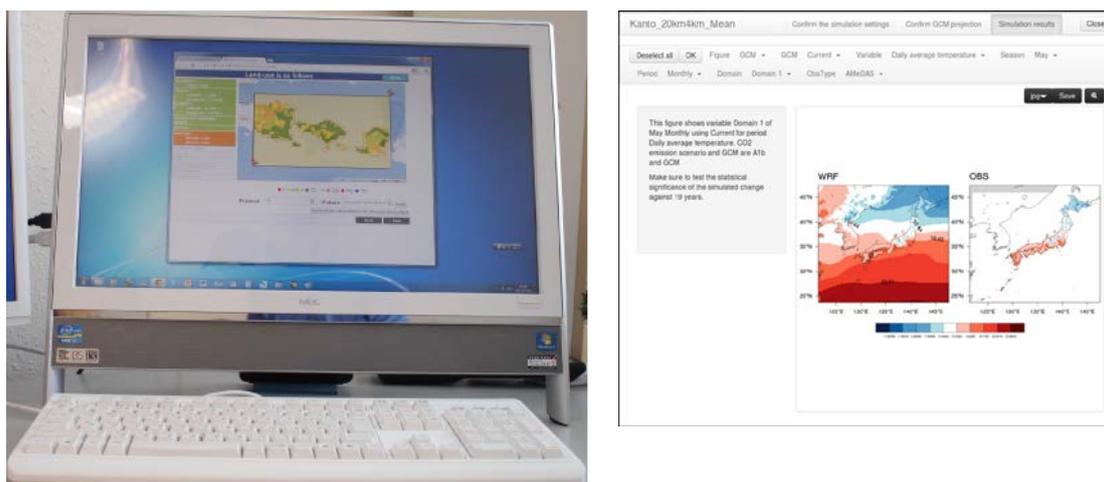


図 3 開発したダウンスケーラ。右は解析結果表示画面の例。



図 4 アジア工科大学での温暖化ダウンスケーラ講習会の様子
(アジア工科大学にて)

(2) 建物解像並列 Large Eddy Simulation (LES)モデルの共同開発

地球環境部門日下研究室では高性能計算システム研究部門の朴教授のグループと連携して、建物解像都市気象 LES モデルの開発（解像度 1m）を行ってきた。LES の GPU 化については、PGI CUDA Fortran を用いた開発を進めており、平成 27 年度からは GPU/TCA 対応の取り組みを開始した。また、メニーコアプロセッサ対応に向け、実用計算に耐えうるハイブリッド並列コード（MPI + OpenMP）の開発を進めている。

建物解像に加え、比較的粗いメッシュ（100m 程度）でも都市の建物効果を表現できるようにするため、Ikeda and Kusaka(2010)の多層都市キャノピーモデルを導入した。これにより、現象の着目スケールに従い、解像度 1m の建物解像の計算から解像度 50m から 100m 程度の粗い格子でも都市建物の効果を反映した計算が可能となった。

本研究課題で開発した建物解像都市気象 LES モデルを用いて、岐阜県多治見市の暑さ緩和策の大規模な社会実装に向けた暑熱環境シミュレーションを実施した。市街地内の局所的な暑熱対策として、街路樹とドライミストを設置した場合を想定した。その結果、街路樹下では気温低下量は少ないが、熱中症リスクの評価指数としてよく利用されている Wet Bulb Globe Temperature (WBGT, 湿球黒球温度)が 2℃程度低下した。日射の遮蔽や表面温度の低下による長波放射量の減少が寄与していると考えられる。ミスト散布は、集中的に配置・散布することで気温低減効果は大きいですが、WBGT はほぼ低下しない結果となった。本年度はシミュレーションに加え、夏季に被験者による生理測定を行った。その結果、街路樹下において皮膚温がもっとも低い傾向が得られた。また、参加者に暑さ対策に関する

アンケートも実施し、市民目線からの情報を得た。今後もシミュレーションと観測、被験者実験を継続し、社会実装に向けた取組みを行っていく予定である。

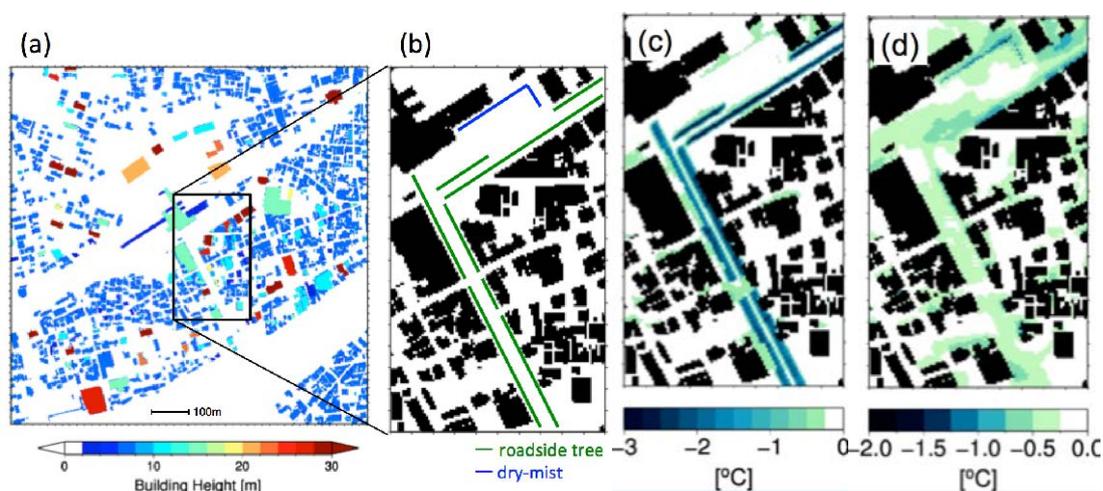


図5 LESによる暑熱環境シミュレーションの結果。(a) 対象領域の建物分布、(b) 街路樹・ドライミストの設置場所、(c) WBGTの低下量、(d) 気温の低下量。

【3】 アンサンブル予報データによる予測可能性研究（松枝）

(1) 研究活動スタート支援（天候レジームの予測可能性）

世界各地(欧州、北米、東アジア、北極、南米、オセアニア)の天候レジームに対して、そのレジーム間遷移を調べたところ、領域ごとに興味深い特徴が見られた。中でも東アジア域レジームの遷移頻度の偏りはかなりユニークであり、あるレジームから始まり、複数のレジームを経由してまた再びそのレジームに戻ってくるレジーム・サーキットを定量的に特定する事が出来た(ここでは、冬型の気圧配置→高気圧→南風→日本の南および日本海に低気圧→冬型の気圧配置、というサーキット)。このサーキットは平均して10日程度の周期を持っており、熱帯の卓越振動であるマッデン・ジュリアン振動(MJO)が、低気圧を介してサーキットに影響を及ぼしうることが示唆された。他の領域でもサーキットの存在は確認できたが、東アジア域ほど高頻度にサーキットが起こるわけではなく、MJOとサーキットの関係もそれほど明瞭には見られなかった。さらに、中期(1-2週間先が対象)アンサンブル予報データ(TIGGEデータ)を用いて、MJOの活動活発域(位相)ごとのレジームの予測可能性を調べたところ、MJOが特定の領域で活発なときにレジームの予測可能性が向上(あるいは低下)することがあることが分かった(図6)。このことは、レジームの予報精度の善し悪しをMJOの活動活発域により事前に知ることが出来ることを意味する。その他、海洋の卓越変動であるエルニーニョ/ラニーニャ現象が世界各地の特定のレジームの出現頻度に影響を与えうることも分かった。

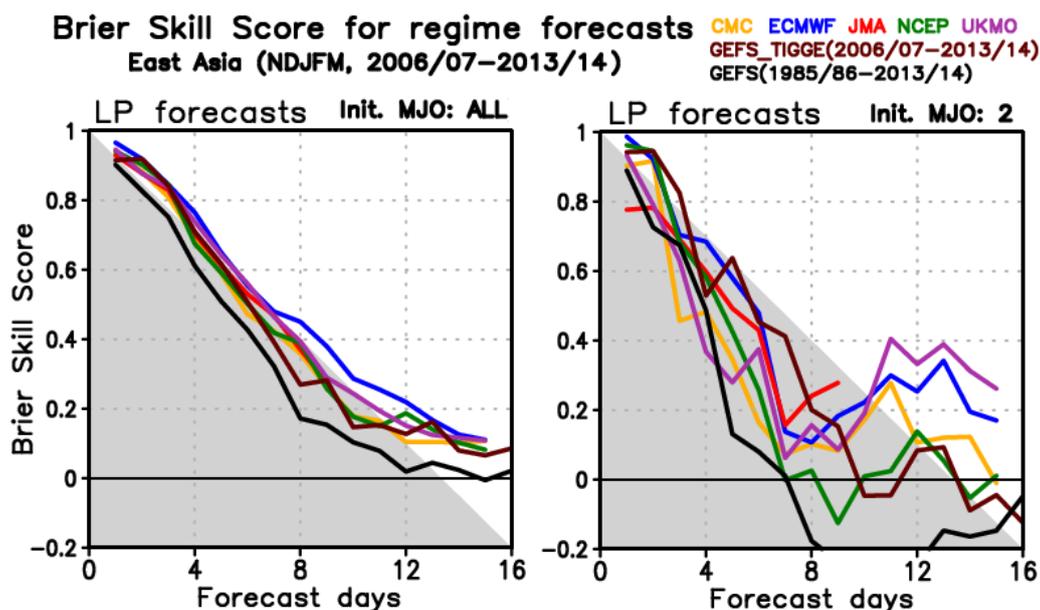


図6 MJO の活動活発域が低気圧型(LP)レジームの予測精度(ブライアスキルスコア: 1 は完全予報、0 以下は予報として価値がない事を表す)に与える影響(左: 全予報サンプルに対するもの、右: MJO がインド洋を東進しているときのもの)

(2) 北極域研究推進(ArCS)プロジェクト

世界各地の数値予報機関が現業的に行っている TIGGE データ(前述)、および、季節内～季節(1-2 ヶ月先が対象)アンサンブル予報データ(S2S(subseasonal to seasonal) データ)を用い、大気・海洋・陸面諸現象の予測可能性研究、ならびに、準リアルタイム予報プロダクトページ(TIGGE Museum および S2S Museum)の開設・運営を行った。以前より TIGGE データを使った大気現象の予測可能性研究、ならびに、TIGGE データによる各種予報プロダクトを準リアルタイムに配信する TIGGE Museum(<http://gvpjma.ccs.hpcc.jp/TIGGE/>) の運営を行ってきたが、これを継続・発展させるとともに、2015 年夏から利用可能になった新しいデータセットである S2S データでも同様の研究を行った。S2S データがまだ世界的にほとんど利用されていない状況を踏まえ、S2S データ(含各数値予報機関のアンサンブル予報システム)の仕様調査、S2S データの取得・デコード方法の確立を行った後、S2S データを用いた準リアルタイムウェブサイト(S2S Museum: <http://gvpjma.ccs.hpcc.jp/S2S/>)の開設・運営を行った(図 8)。S2S 時間スケールで特に重要である北極振動(AO)、南極振動(AAO)、北大西洋振動(NAO)、太平洋・北米(PNA)パターン、成層圏突然昇温(SSW)、マッデン・ジュリアン振動(MJO)、海面更正気圧、海面水温、海氷被覆率などの予報プロダクトを作成し、準リアルタイムで更新されるようにした。今後、地上気温、地上風、降水量などに関する予報プロダクトを順次作成・公開する予定である。また、これらの活動で得られた成果

の一部を、研究会において発表し、データ利用の普及活動も行った。その結果、TIGGE Museum 同様、S2S Museum にも世界各地から多数のアクセスがある。

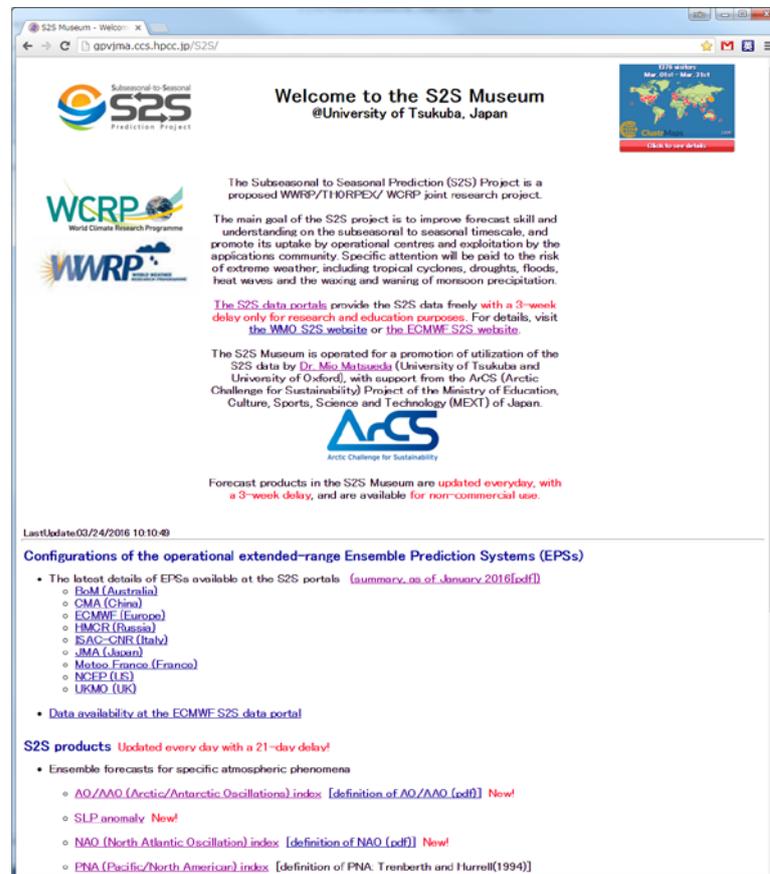


図 7 S2S Museum(S2S データによる予報プロダクトを準リアルタイムに配信)。

4. 教育

指導学生 (田中)

D 3 (地球) : 相澤、山上、小柴

M 2 (地球) : 新井、田村

M 1 (地球) : 須長、桜井

B 4 (地球) : 佐々木、大塚、シェン

指導学生 (日下)

D 3 (地球) : 加藤、豊田、ドアン、西

M 2 (地球) : 荒井、今井、佐藤亮吾、中村真吾

(環境) : 小久保、沖、静居、名和、三浦

M1（地球）：畔上、猪狩、矢部、清水

（環境）：沖、相場

B4： 佐藤拓人、中村好江、浅野、小柳

他大学等での集中講義等

放送大学放送講師・地球科学客員教授（田中）

国立極地研究所客員教授（田中）

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

1. 平成 26 年度～平成 30 年度、2015 年度予算額(受託金)3,302 万 6 千円、国立開発研究法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）電力系統出力変動対応技術研究開発/電力発電予測・制御高度化、日下
2. 平成 26 年度～平成 30 年度、2015 年度予算額(受託金)285 万円、農林水産省 戦略的イノベーション創造プログラム（Cross-ministerial Strategic Innovation Promotion Program）SIP 1-(4). フェーンの発生実態の解明とリスク情報の創出、日下
3. 平成 27 年度～平成 31 年度、2015 年度予算額(受託金)550 万円、文部科学省 気候変動適応技術社会実装プログラム（SI-CAT: Social Implementation Program on Climate Change Adaptation Technology）（i）気候変動に関する分野別影響・適応策評価技術の開発（e：適応策評価のための暑熱環境と健康影響モデル開発）、日下
4. 平成 25 年度～平成 29 年度、2015 年度予算額(分担金)20 万円、科研費 基盤(A)東京首都圏における夏季ヒートアイランドと熱的低気圧・局地的豪雨の発生要因解明、日下
5. 平成 24 年度～平成 27 年度、2015 年度予算額 182 万円、株式会社東芝 共同研究 太陽光発電のための気象予測技術に関する研究、日下
6. 平成 25 年度～平成 27 年度、2015 年度予算額 51 万 4 千 700 円、株式会社ウェザーニューズ 共同研究 首都圏に影響をおよぼす雷雨、降雪、霧等に関する気象現象の解析と予測の改善に関する研究、日下
7. 平成 27 年度、文科省特別研究促進費、2015 年口永良部島噴火に関する総合調査（分担金） 30 万円、火山灰拡散シミュレーション、田中
8. H26 年度～平成 27 年度、JSPS 科研費(研究活動スタート支援)、金額（H27 年度）：（直）800,000 円 （間）240,000 円、天候レジームの予測可能性と予測精度の予測に関する研究、松枝
9. H27 年度、文科省 北極域研究推進(ArCS)プロジェクト、分担金、金額（H27 年度）：（直）1,350,000 円、気象・海氷・波浪予測研究と北極航路支援情報の統合、松枝

6. 研究業績

研究論文（査読付き、国際発表、他）

1. Suzuki-Parker, A., H. Kusaka, 2015: Assessment of the impact of metropolitan-scale urban planning scenarios on the moist thermal environment in a warmed climate: A study of the Tokyo metropolitan area using regional climate modeling. *Advances in Meteorology*, DOI:/10.1155/2015/693754 査読付き論文
2. Takane, Y., H. Kusaka, and H. Kondo, 2015: Investigation of a recent extreme high-temperature event in the Tokyo metropolitan area using numerical simulations: the potential role of a 'hybrid' foehn wind. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 141(690), 1857-1869. DOI: 10.1002/qj.2490. 査読付き論文
3. Suzuki-Parker, A., H. Kusaka, 2015: Future projections of labor hours based on WBGT for Tokyo and Osaka, Japan, using multi-period ensemble dynamical downscale simulations. *Int. J. Biometol.* DOI:/10.1007/s00841-015-1001-2. 査読付き論文
4. Lin, C., C. Su, H. Kusaka, Y. Akimoto, Y. Sheng, J. Huang, and H. Hsu 2016: Impact of an improved WRF urban canopy model on diurnal air temperature simulation over northern Taiwan. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 16, 1809–1822. DOI: :10.5194/acp-16-1809-2016. 査読付き論文
5. Okada, M., M. Okada, and H. Kusaka, 2016: Dependence of Atmospheric Cooling by Vegetation on Canopy Surface Area During Radiative Cooling at Night: Physical Model Evaluation Using a Polyethylene Chamber., *Journal of Agricultural Meteorology*, 72(1), 1-9. DOI: 10.2480/agrmet.D-15-00015. 査読付き論文
6. Kusaka, H., A. Nishi, M. Mizunari, 2015: Impact of Urbanization on Local Circulation and Precipitation over the Leeward Mountain., 9th International Conference for Urban Climate, Toulouse, France. 国際会議論文
7. Ikeda, R., H. Kusaka, S. Iizuka, and T. Boku, 2015: Development of Urban Meteorological LES model for thermal environment at city scale., 9th International Conference for Urban Climate, , Toulouse, France. 国際会議論文
8. Doan, Q., H. Kusaka, 2016: Future urban climate projection for a mega city in Asia: Greater Ho Chi Minh City metropolitan area, Vietnam., The International Science Conference on MAHASRI, Tokyo, Japan. 国際会議論文
9. 鈴木パーカー明日香, 日下博幸, 2015: 気候予測の注意点, *電力土木*, 377(5), 45-50. 解説
10. 岡田牧, 桃谷辰也, 日下博幸, 2015: 観測の注意点, *電力土木*, 378(7), 71-75. 解説

11. 田中博、伊賀啓太、2015: はじめての気象学、放送大学教育振興会、NHK 出版、共著、250 pp.
12. 田中博 2015: 地球温暖化のハイエイタスが自然変動によるものならば人為起源の温暖化の将来予測は過大評価となる. 伝熱 54, 226, 12-15.
13. Zagar, N., A. Kasahara, K. Terasaki, J. Tribbia, and H.L. Tanaka, 2015: Normal-mode function analysis of global 3D datasets: an open-access software for atmospheric research community. (accepted BAMS)
14. Yamagami, A. and H.L. Tanaka 2015: Characteristics of the JRA-55 and ERA-Interim datasets by using the three-dimensional normal mode energetics. SOLA, 12, 27-31.
15. Matsueda, M., A. Weisheimer, and T. N. Palmer, 2016: Calibrating Climate-Change Time-Slice Projections With Estimates of Seasonal Forecast Reliability. J. Climate, 29, 3831–3840. doi: 10.1175/JCLI-D-15-0087.1.
16. Swinbank, R., M. Kyouda, P Buchanan, L. Froude, T. M. Hamill, T. Hewson, J. H. Keller, M. Matsueda, J. Methven, F. Pappernberger, M. Scheuerer, H. Tittley, M. Yamaguchi, and L. Wilson, 2016: The THORPEX Interactive Grand Global Ensemble (TIGGE) and its Achievements. Bull. Amer. Meteor. Soc., 97. 49 – 67. DOI:10.1175/BAMS-D-13-00191.1.
17. Jung, T. and M. Matsueda, 2016: Verification of global numerical weather forecasting systems in Polar Regions using TIGGE data. Quart. J. Roy. Meteor. Soc., DOI: 10.1002/qj.2437.
18. Nakazawa, T. and M. Matsueda, 2016: Update: Toward the Better Health Forecasting on Meningitis in the West Africa. Korean Meteorological Society Spring Meeting. 27th – 28th April 2016, Pusan, Republic of Korea.
19. Nakazawa, T. and M. Matsueda, 2015: Toward the Better Health Forecasting on Meningitis in the West Africa. Korean Meteorological Society Autumn Meeting. 12th – 14th October 2015, Jeju, Republic of Korea. (invited talk)
20. Schiemann, R., M. -E. Demory, L. C. Shaffrey, J. Strachan, P. L. Vidale, M. S. Mizieliński, M. J. Roberts, M. Matsueda, and M. F. Wehner, 2015: Representation of blocking in an ensemble of high-resolution global atmospheric models. European Geoscience Union General Assembly 2015. 12th – 17th May 2015, Vienna, Austria.
21. Nakazawa, T., H. -S. Kang, F. Vitart, A. Robertson, M. Matsueda, 2015: Predictive skill of the MJO event in March 2015 from the S2S database. Asian Conference on Meteorology. 26th – 27th October 2015, Kyoto, Japan.

22. Nakazawa, T. and M. Matsueda, 2015: MJO in the S2S Database. 11th – 13th April 2016, Singapore.
23. Matsueda, M., S. Corti, and T. N. Palmer, 2015: Flow-dependent predictability of summertime Euro-Atlantic weather regimes at medium-range timescale. Workshop on sub-seasonal predictability. 2nd – 5th November 2015, European Centre for Medium-Range Weather Forecasts, Reading, UK.
24. Matsueda, M. and T. N. Palmer, 2015: Flow-dependent predictability of summertime Euro-Atlantic weather regimes at medium-range timescale. 26th IUGG General Assembly 2015. 22th June – 2nd July 2015, Prague Congress Centre, Prague, Czech Republic.
25. Nakazawa, T., M. Matsueda, and F. Vitart, 2015: Could the S2S database predict a MJO in March 2015? Workshop on Sub-seasonal to Seasonal Predictability of Monsoons. 22th – 24th June 2015, Jeju, Republic of Korea.
26. Kyouda, M. and M. Matsueda, 2015: Predictability of wintertime East-Asian weather regimes in medium-range forecasts. PANDOWAE Final Symposium. 18th – 21st May 2015, Castle of Karlsruhe, Karlsruhe, Germany.

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

産学官連携：岐阜県多治見市と連携協定（日下）

タイ・アジア工科大学で開催された気候変動ダウンスケーラ研修会に講師として参加（日下）

アラスカ大学フェアバンクス校、国際北極圏研究センター(IARC)との大学間協定（田中）
インドネシア気候・気象・地球物理庁との共同研究、SATREPS 火山灰追跡モデル（田中）

スロベニア・リュブリアーナ大学との共同研究、MODES プロジェクト（田中）

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

WRF 講習会開催（日下）

気象学会夏季大学開催（田中）

気象学会公開気象講演会（田中）

9. 管理・運営

学生生活支援室長・T-ACT 推進室長、副学長補佐、紫峰会顧問（田中）

10. 社会貢献・国際貢献

国際都市気候学会（IAUC）理事（日下）

気象庁 気候変動懇談会検討部会 委員（日下）

NEDO 発電量予測技術委員会・発電量予測技術研究会 委員（日下）

熱中症予防声かけプロジェクト 実行委員（日下）

日本ヒートアイランド学会理事（日下）

気候影響利用研究会幹事（日下）

（公社）日本気象学会理事（田中）

（公社）日本地球惑星科学連合代議員（田中）

IASC（国際北極科学会議）AWG 大気部門（田中）

11. その他

VII. 高性能計算システム研究部門

1. メンバー

教授	朴 泰祐
教授	高橋 大介
教授	建部 修見
准教授	川島 英之
助教	多田野 寛人
研究員	梅田 宏明
研究員	田中 昌宏
研究員	Mohamed Amin Jabri
研究員	松本 和也
学生	大学院生 17 名、学類生 6 名

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

【1】 PEACH2 基本システムソフトウェアの開発と NASPB-CG における評価 (朴)

PEACH2 の通信ドライバ及び制御方式について API 上でユーザがエラーを起こしにくいような変更とエラーハンドリングを行い、ユーザアプリケーションをより記述しやすくした。また、この仕様をもとに、NAS Parallel Benchmarks の CG ベンチマークを GPU クラスタ HA-PACS/TCA 上で 2 次元プロセスマッピング実装し、短メッセージ通信に強いという TCA の特性を生かし性能を向上させた。

図 1-1 にベンチマークの中核となる conj_grad 関数の実行時間を、PEACH2 による実装 (TCA) と InfiniBand 上の MPI による実装 (MPI) で比較した結果を示す。問題サイズ (CLASS) は S, W, A, B の順で大きくなる。最大 16 ノード (16 GPU) による評価では、CLASS=W 以上でスケラビリティが見え始め、CLASS=B では概ねスケールしている。2 次元分割によって平均メッセージ長が短くなり、CLASS=W までは TCA の性能が上回る。一方、strong scalability が現れる CLASS=A 以上では、メッセージ長が長くなるため、TCA の優位性が減り、MPI との性能差はほとんどなくなる。さらに CLASS=B では InfiniBand のレイテンシを隠す十分なメッセージ長が得られるため、ノード数が増えると性能が逆転する。平成 26 年度に行った CG 法の

1 次元分割アルゴリズムに比べると TCA の優位性は高まったが、より大きな問題サイズにおいても性能を維持できるよう、さらに工夫が必要であることがわかった。

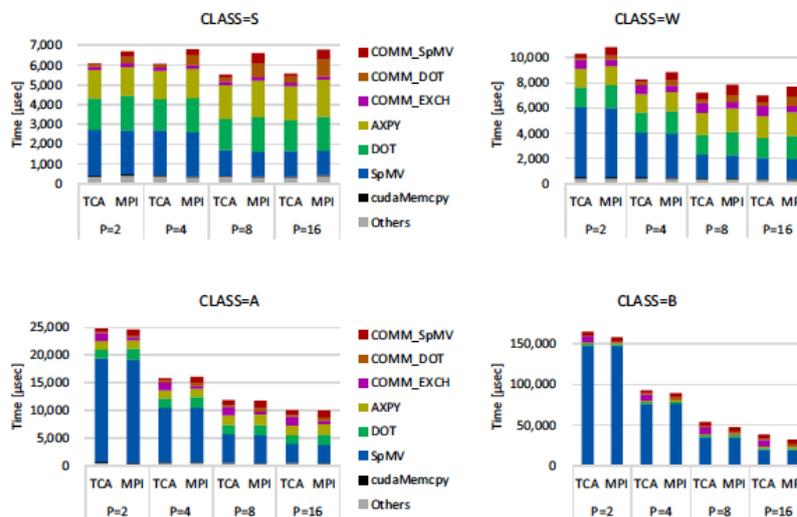


図 1-1 NASPB-CG の 2 次元マッピング実装における各クラス問題での TCA 実装と MPI/IB 実装の conj_grad 関数の実行時間比較

【2】 GPU 間直接通信 MPI ライブラリ GMPI の開発 (朴)

従来の CUDA などの典型的 GPU 環境を並列処理に展開する場合、MPI 通信を GPU のカーネル実行と別途記述する必要があるが、MPI 通信を能動的に行えるのはホスト CPU のみであり、このため CPU 用の MPI プログラムを GPU 並列化するためには、通信に挟まれた計算部分の GPU カーネル化を通信が発生するたびに行わなければならない。この切り分けコストは並列 GPU アプリケーションコーディングにおいて大きな制約となり、プログラミングの複雑さとデバッグの難しさにより、プログラムの生産性を大きく低下させる要因となっている。本研究テーマでは、この問題を解決するために、GPU のカーネルコード上で直接 GMPI 関数を呼び出せる新しいフレームワークとして GMPI (GPU-self MPI) を提案・実装した。

当然ながら、GPU は能動的デバイスではないため、内部から自由に InfiniBand のような外部通信機構を呼び出すことはできない。このため、実際の MPI 通信はホスト CPU に依頼し、GPU 側とホスト CPU の間で通信依頼と結果のリターンを司る通信チャンネルを作成する。この通信チャンネルに通常の cudaMemcpy のような通常のメモリ参照関数を使うことはできない。なぜならば、これらの関数は GPU からホスト CPU に制御が戻っていることを仮定しているが、GMPI では GPU はホスト CPU と並行して走り続けることを想定するからである。近年の CUDA 環境では、ホスト CPU のアドレス空間に GPU のアドレス空間をピンダウンし、ここを双方で読み書きすることで、PCIe を介した仮想的な共有メモリ空間を作成することができる。そこ

で、ここに双方がアクセスする情報通信用のリングバッファを複数設け、互いにポーリングとアップデートを繰り返して必要な情報のやり取りを行う。図 2-1 にこの様子を示す。

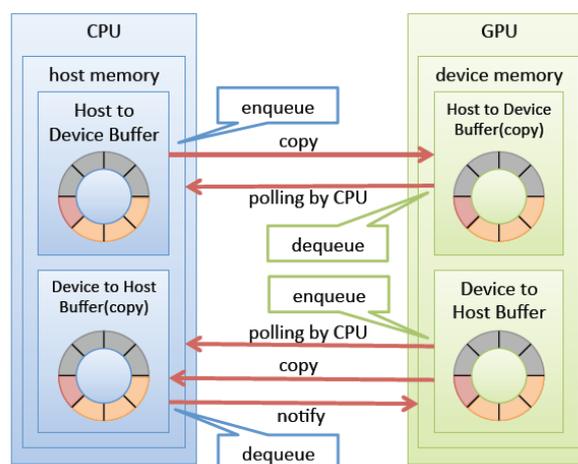


図 2-1 GMPI で用いるピンダウンメモリ領域を使った GPU・ホスト間のリングバッファ構造

ここで、ノード間 MPI 通信性能をできるだけ低下させないために、GMPI ではこのリングバッファを用いて全ての通信データをやり取りせず、GPU 対応 MPI が GDR 等の機能を使って最高の性能で実際の MPI 通信が実現されるように設計した。つまり、リングバッファを使ってやり取りされるのは MPI 関数の引数や結果の状態だけであり、通信対象となる実データは GPU 側メモリに置いたままで、実際の MPI 関数にその参照を委ねる。

GMPI においては、(a) MPI 関数を呼ぶたびにホスト CPU に制御を戻す必要がないためオーバーヘッドが削減される、(b) プログラムの書き換えを最小限の手間で行える、という 2 つのメリットがある。(b)については自明であるが、(a)が正しいかどうかは、上述のリングバッファ機構を通じたデータ交換の性能に大きく依存する。そこで、従来方式の MPI-GDR/IB (InfiniBand 上の GDR を用いた MPI 通信)と GMPI の基本通信性能を、pingpong 通信を用いて評価した。結果を図 2-2 に示す。ここで、MVAPICH2-GDR は GDR を用いた MPI 本体の通信レイテンシであるが、実際の通信前には必ず GPU 側のメモリ読み書きが終了していることを保証するために、GPU との同期を取らなければならない。そこで、この同期コストも含めた通信レイテンシも測定した。これと GMPI による通信性能の比較を行った結果、図に示されるように、メッセージ長が 4KB 程度までの短い場合は 10~20%程度の性能差はあるが、これを超えるとほとんど性能低下はないことがわかった。よって、ある程度の長さのメッセージであれば、上記(b)のメリットが大きく活き、並列 GPU プログラミングの生産性が向上すると期待される。

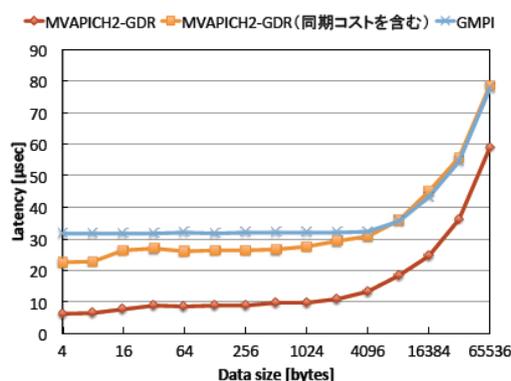


図 2-2 GDR 付き MPI の直接実行と GMPI を用いた場合の pingpong 性能評価

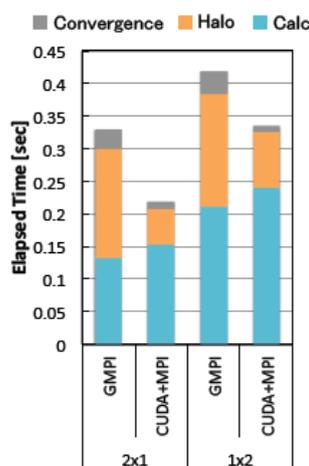


図 2-3 Himeno Benchmark (SMALL) の GMPI 性能評価

現在 GMPI はまだ実装中で、MPI の全関数に対応していないが、NAS Parallel Benchmarks 等の基本ベンチマークを評価するための関数セットは実装されている。これを用いて、Himeno Benchmark を 2 ノードで実行した場合の評価結果を図 2-3 に示す。ここでは 3 次元空間を 2 ノードに分割する際、データの連続方向分割と非連続方向分割（ブロックストライド転送を必要とする）の 2 通りの分割方法を比較した（問題サイズは SMALL）。結論として、どちらの分割方法でも GMPI の通信オーバーヘッドは通常の CUDA+MPI に比べ大きいですが、分割方法が連続方向であった場合の差は相対的に小さく、通信時間全体で見ると 2 倍から 3 倍の時間がかかっているが、総計算時間では 40~20%程度の時間増加に収まっている。Himeno Benchmark は並列通信に比べ比較的計算量の小さい問題であるため、計算時間がより支配的なアプリケーションにおいては、さらに性能差が縮まり、GMPI によるプログラミングメリットが生きて考えられる。なお、Himeno Benchmark におけるオリジナルコード（CUDA+MPI）は 1317 行であるのに対し、GMPI 版では 1210 行と小さくなった。差はほぼ 100 行で 1 割弱であるが、

それ以上にプログラミングの見通しがずっと良くなり、CPU+MPI のプログラムからの移植性が極めて高くなる効果が期待される。今後は GMPI 関数の種類の充実化を行い、オーバヘッドの削減を目指す。その上で、より本格的な大規模コードの GMPI 化を行い、コード量比較と性能比較を進めていく予定である。

なお、本研究は情報処理学会 ACSI2016 において発表され、Outstanding Research Award を受賞した。

【3】 PGAS 言語向け通信ライブラリ GASNet の GPU 向け実装と TCA 実装 (朴)

GASNet は米国 LBNL (Lawrence Berkeley National Laboratory) で開発された、PGAS (Partitioned Global Address Space) モデル実装用の低レベル通信ライブラリである。分散メモリ上で MPI よりも軽い通信を実現する。これまで GASNet は CPU における並列通信のみを対象にしてきたが、現在、これを GPU クラスタに対応させる拡張が LBNL によって進められている。そこで我々は、LBNL の GASNet/GPU 開発チームと共同研究を行い、先方が InfiniBand を対象として進めているリファレンス実装と並行し、これを TCA 機構にも用い、両者の性能比較を行う研究を進めている。本研究により、今後本格化されると思われる GPU を対象とした PGAS モデル言語の実装に TCA を容易に用いることができるようになると思込んでいる。

TCA 上の GASNet/GPU (以下、GASNet/TCA) の設計・実装は、前節で述べた GMPI に似ている。GPU 側から発生される GASNet 通信要求は、ホスト CPU と GPU で共有されるピンダウンされたメモリ空間に実装されたリングバッファを通じ、GPU 側の通信リクエストをホスト CPU が受け取って TCA 通信によって実施し、その結果をまた逆向きのリングバッファで返す。ただし、GMPI ではリクエストはそのまま MPI 通信に引き渡されていたのに対し、GASNet/TCA では InfiniBand を対象とした GASNet/GPU (以下、GASNet/IB) で想定される基本プロトコルを TCA の限られた API で実装するため、より一層の工夫が必要である。

図 3-1 に GASNet/TCA における GPU とホスト CPU の間のリクエストを受け渡すパケット通信機構の様子を示す。この機構を用い、図 3-2 に示す 4 つのデータ転送モードを実装した。ここで注意すべき点は、GASNet においては segment と呼ばれる連続アドレス空間を通信におけるオブジェクトと定義しているが、現在の GASNet/GPU プロトタイプではこの segment を 1 つだけ許していることである。並列 GPU 処理では当然、データは基本的に GPU 上に存在していると仮定するため、この 1 つだけの segment は GPU メモリ上に存在することになる。図 3-2 の各通信モードはこれを意識している。

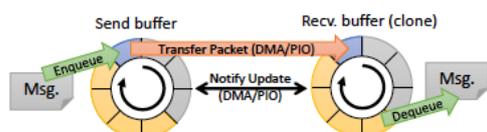


図 3-1 GASNet/TCA における GPU・CPU 間通信のためのパケット通信機構

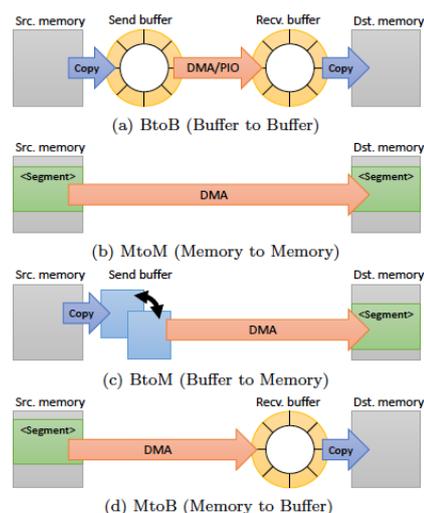


図 3-2 GASNet/TCA における 4 つの通信モード

LBNL で開発されている GASNet/IB は GPU を搭載した計算ノードに InfiniBand が搭載されていることを想定している。我々はこれを TCA の制約下で通信レイヤを置き換え、GASNet/GPU で定義される全ての core 通信 API と一部の extended API を実装した。なお、extended API は全て core API で実装することも可能で、今回実装していない extended API は、実装した core API で実現可能である。

GASNet はユーザが直接使用するのではなく、分散メモリ向け PGAS モデルに基づく UPC 等の言語実装を想定しているが、プログラミングによりユーザレベルで利用することは可能である。そこで、GASNet/IB と GASNet/TCA の性能比較を、低レベルな通信ライブラリ上で行った。性能評価は筑波大学における GPU クラスタ HA-PACS/TCA を用いて行った。

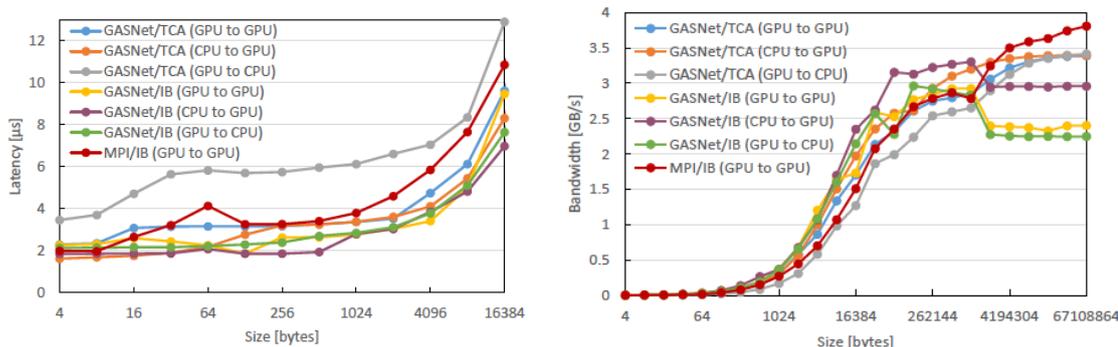


図 3-3 GASNet/TCA と GASNet/IB の各種メモリ間連続転送のレイテンシとバンド幅比較

図 3-3 は、GPU または CPU メモリからリモートノードの GPU または CPU メモリへのデータ転送の通信レイテンシ及びバンド幅の測定結果である。ここでは GASNet/TCA と GASNet/IB

の他に、参考データとして MPI/IB の結果も載せている。注目してもらいたいのは、“GASNet/TCA (GPU to GPU)” (青線) と“GASNet/IB (GPU to GPU)” (黄線) である。データ長が数十 Byte と非常に小さい区間では GASNet/TCA のレイテンシは GASNet/IB に比べ 3 割程度大きいのが、数百 Byte 程度では互角または TCA の方が若干小さくなり差はなくなる。また、データ長が 256KB を超えた場合では両者は逆転し、バンド幅を見ると、GASNet/IB はこの近辺で性能が大きく低下しているのに対し、GASNet/TCA は伸び続け、3.3GB/s 程度で律速する（これは理論的なピークに近い）。GASNet/IB の性能が低下するのは、GPU メモリの管理方法が最適化されておらず、TCA 版では Page-Locked Host Memory を用いた PCIe 上のデータ転送最適化を行っているのでは差が生じていると考えられる。

次に、GASNet/GPU における extended API として、多次元矩形領域のドメイン分轄法で非常によく用いられる、多次元ステンシル計算等を想定したブロックストライド転送における性能評価を行った。TCA 機構では FPGA ハードウェア上でブロックストライド転送を単一メッセージとして扱うことができ、このようなアプリケーションを想定した通信においてその効果を発揮する。我々はこのブロックストライド転送の extended API を TCA 向けに最適化実装した。結果を図 3-4 に示す。

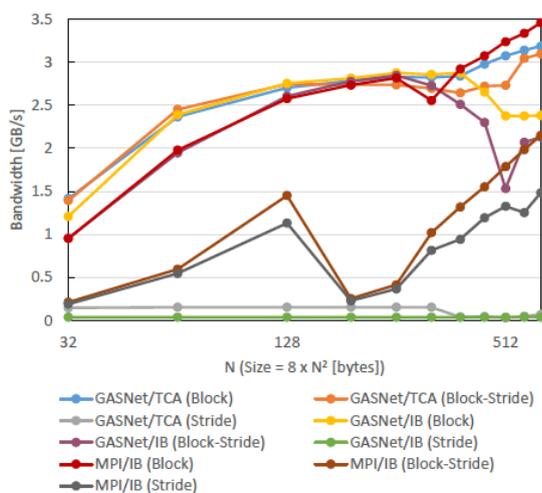


図 3-4 ブロックストライド転送を含む各種パターンの GASNet/TCA と GASNet/IB の比較 (GPU to GPU copy)

ここでは、“GASNet/TCA (Block-Stride)” (オレンジ線) と“GASNet/IB (Block-Stride)” (紫線) に注目して頂きたい。両者ともバンド幅は伸びているが、2 次元領域の要素数 (N) が 256 を超える辺りから GASNet/IB が失速するのに対し、GASNet/TCA での性能低下は小さい。これも、先に述べた通信最適化 (Page-Lock) が TCA 側で功を奏しているためだと思われる。なお、単純な Stride 転送では全く性能が出ていないが、これは GASNet/GPU ではデータの

pack/unpack を定義できないため (memory to memory copy を行うので) である。MPI/IB ではメッセージの送受信の際に pack/unpack を行っているため性能が高い。

本研究は CCS と LBNL の共同研究契約に基づいて行われ、特に基本部分の議論と HA-PACS を用いた MPI/IB の性能評価は、LBNL からの共同研究者が CCS を訪問滞在中に行われた。同共同研究契約の重要な成果であると位置付けられる。

【4】 電子動力学法コード ARTED の Xeon Phi (KNC)向け性能最適化 (朴)

平成 26 年度より、量子物性研究部門の矢花グループとの共同研究として、同グループで京コンピュータ等の大規模システム向けに開発を進めている、量子動力学法に基づく電子シミュレーションコード ARTED (Ab-initio Real Time Electron Dynamics) を Intel Xeon Phi メニーコアプロセッサ向けに最適化を行っている。本研究は、現在本センターで運用中の大規模メニーコアクラスタである COMA 上のアクセラレータ、Intel Xeon Phi (KNC: Knights Corner) での高性能実行を実現することにより、同システムをより効率的に利用すると共に、平成 28 年度に導入予定の次期 Intel Xeon Phi (KNL: Knights Landing) プロセッサを用いた超並列クラスタ (Oakforest-PACS) への移植も視野に入れている。

ARTED は RSDFT (Real Space Density Functional Theory) を基本とし、これで計算された基底状態を実時間発展させるコードで、一般の RSDFT に比べ比較的小さな空間ドメインの問題に対し、大量の波数空間計算を多重に行う。このため、一般の大規模並列処理と異なり、空間ドメインを並列プロセスに分割するのではなく、波数空間の計算を並列処理する。各空間ドメインの格子はステンシル計算となるが、これに関しては並列化しないため、袖領域に関する通信 (Halo 通信) は発生しない。代わりに波数空間の計算結果の Allreduce 処理が発生するが、この通信時間は 100 程度の並列プロセスではオーバーヘッドとはならない。従って、本研究では空間ドメインの処理を Xeon Phi 上で多数のスレッドでどのように効率的に処理するかを傾注している。

現在の KNC アーキテクチャの Xeon Phi では、チップ当たり 61 個のコアがあり、各コア内で最大 4 つのハードウェアスレッドを利用できる。1 つのコアは OS 処理に向けられるため、最大 240 のスレッドを意識する必要がある。さらに、512bit の AVX 命令により、倍精度浮動小数点演算を最大 8 つ SIMD 処理可能である。よって、1 つの MPI プロセスを Xeon Phi チップに割り当ててスレッド並列処理を行う場合、極めて大量のスレッドレベル及び命令レベル並列処理を行わなければならない。また、60 のコアが最終レベルキャッシュを共有するため、データアクセスパターンを意識したメモリ配置に注意する必要がある。

以上の背景の下、オリジナルコードを図 4-1 のような形で最適化し、コンパイラによる自動並列化を適用した。ここで行った最適化は以下の通りである。

- ・ 同一空間に対して異なる配列を割り当てていた多数の変数を多次元配列にまとめた。これにより、コンパイラによるベクトル展開が容易になる。
- ・ 空間分割に対する周期境界条件付きの配列参照のインデックス計算が剰余演算を用いて行われていたのを、静的なインデックス配列に置き換えた。Xeon Phi では整数剰余計算が非常に遅いため、インデックス配列を参照した方が、メモリ参照回数が多くても結果的に高速になる。
- ・ 大きなループ内で書き込みを行っている変数のうち、実際にはそのループ内で互いに参照されないものについては non-temporal store をディレクティブ指示し、キャッシュが汚れないようにした。
- ・ 演算の順序を変更し、メモリアクセスが連続パターンとなるようにした。

これらに加え、自動ベクトル化の代わりに Xeon Phi のイントリンシック命令を手で書くことにより、手動ベクトル化を追加することで、さらに詳細な最適化を行った。この部分については、今後 KNL アーキテクチャ向けに再度変更する必要がある。

```

real(8), intent(in) :: B(0:NLz-1,0:NLy-1,0:NLx-1)
complex(8),intent(in) :: E(0:NLz-1,0:NLy-1,0:NLx-1)
complex(8),intent(out) :: F(0:NLz-1,0:NLy-1,0:NLx-1)

#define IDX(dt) iz,iy,modx(ix+(dt)+NLx)
#define IDY(dt) iz,mody(iy+(dt)+NLy),ix
#define IDZ(dt) modz(iz+(dt)+NLz),iy,ix

do ix=0,NLx-1
do iy=0,NLy-1
!dir$ vector nontemporal(F)
do iz=0,NLz-1
v=0; w=0
! z-computation
v=v+Cz(1)*(E(IDZ(1))+E(IDZ(-1))) ...
w=w+Dz(1)*(E(IDZ(1))-E(IDZ(-1))) ...
! y-computation
! x-computation
F(iz,iy,ix) = B(iz,iy,ix)*E(iz,iy,ix) &
& + A *E(iz,iy,ix) &
& - 0.5d0*v - zI*w
end do
end do
end do
    
```

3次元配列に変換

インデックスを直接計算
(剰余テーブルを使用)

キャッシュを経由しない書き込みを指示
(for Intel Compiler)

メモリ上連続な領域から計算

図 4-1 Xeon Phi 向けに最適化されたカーネル部分

これらの最適化を全て適用した結果、オリジナルコードに比べ、Xeon Phi 上での実行性能が大幅に向上した。この結果を表 4-1 に示す。なお、最適化する前の同コード部分の性能は 30.06GFLOPS であったが、これが最終的に 224.5GFLOPS となり、約 7.5 倍の性能向上を達成した。

表 4-1 ARTED カーネルコード (MPI プロセス内) の最適化と性能向上

OpenMP 240 Thread	GFLOPS	ピーク性能比
自動ベクトル化実装	130.4	12.15 %
初期実装	113.7	10.58 %
複素数積最適化 (A)	114.9	10.70 %
非アラインアクセス最適化 (B)	179.4	16.70 %
インデックス計算ベクトル化 (C)	142.7	13.29 %
(B) + (C)	221.4	20.61 %
全最適化適用時 (A + B + C)	224.5	20.90 %

本研究では、この最適化コードをベースに、Xeon Phi だけでなくホスト CPU の Xeon でも波数空間分割したプロセスを実行し、COMA 上の 2 基の Xeon CPU と 2 枚の Xeon Phi カードという、ノード内の全リソースを利用した高性能計算を実行した。2 基の Xeon は NUMA アーキテクチャによる共有メモリ結合がされているが、メモリの局所性を有効活用するため、各 CPU に 1 つずつの MPI プロセスを配置し、スレッド並列は CPU 内で閉じるようにした。結果的に、ノード当たり 4 つの MPI プロセスを走らせることとした。ただし、Xeon と Xeon Phi では後者の方が性能が高いため、MPI プロセスに割り当てる波数を調整し、負荷分散を実施した (静的負荷分散)。この結果、SiO₂ を対象とした COMA 上の ARTED の実行で 128 ノードまでの strong scaling を実現した。ノード数を増加した場合のタイムステップ当たりの実行時間を図 4-2 に示す。

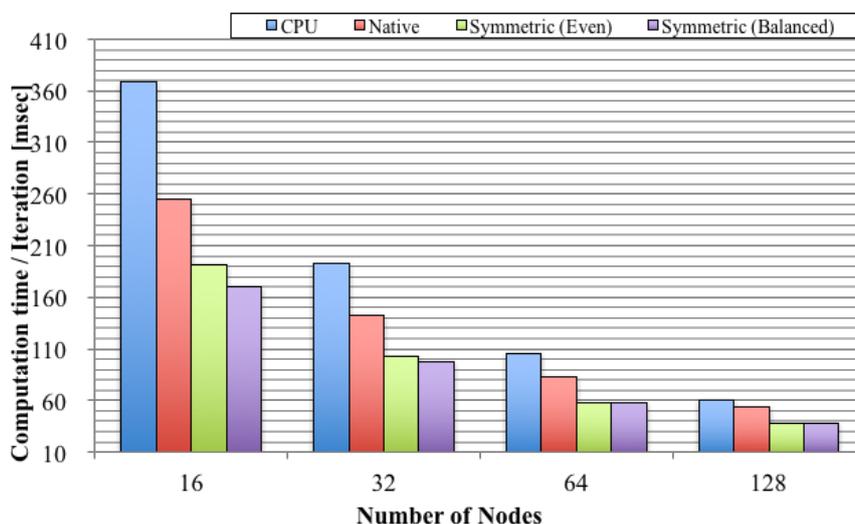


図 4-2 ARTED の COMA 上の実行時間 (strong scaling)

図 4-2 では、最適化された CPU のみの実行、Xeon Phi を Native mode で実行した Xeon Phi のみの実行、CPU と Xeon Phi を両方使った Symmetric mode での実行、そして CPU と Xeon Phi の負荷分散を考慮して最適化した Symmetric mode での実行を示している。16 ノードの場合、負荷最適化された Symmetric mode 実行では、CPU のみの場合に比べ約 2.2 倍の性能向上となった。しかし、ノード数が増えるにつれ、それぞれのケースでの性能差が小さくなっている。

これは、strong scaling における通信時間ボトルネックが発生しているのではなく、Xeon Phi 上の演算処理量が小さくなり、ハードウェアが求める十分な処理量が確保できなくなり、効率が低下したことによるものである。

今後はより大きな物質と実空間サイズ・波数空間サイズを持つような問題を対象とし、Oakforest-PACS 導入時には KNL プロセッサでの大規模高性能処理が実現できるよう準備をしていく予定である。

【5】 TCA/Infiniband ハイブリッド通信 (朴)

PEACH2 を効率的に利用する研究として、並列アクセラレータ記述言語 XcalableACC において、PEACH2 実装された TCA 通信網と従来の InfiniBand を並行して利用する研究を行った。今年度は、通信の pairwise などの最適化を行ったことで、袖領域交換 (Halo) の実行時間が以前より短縮した。また、後述するハイブリッド通信による集団通信 (Allreduce) を適用することで、集約 (Reduction) の実行時間が短縮している。特に、Reduction の実行時間が InfiniBand (IB) 通信に対して高速であるため、IB に対してハイブリッド通信は Himeno ベンチマークの問題サイズ Small (64×64×128) において最大 41%の性能向上を達成した (図 5-1)。

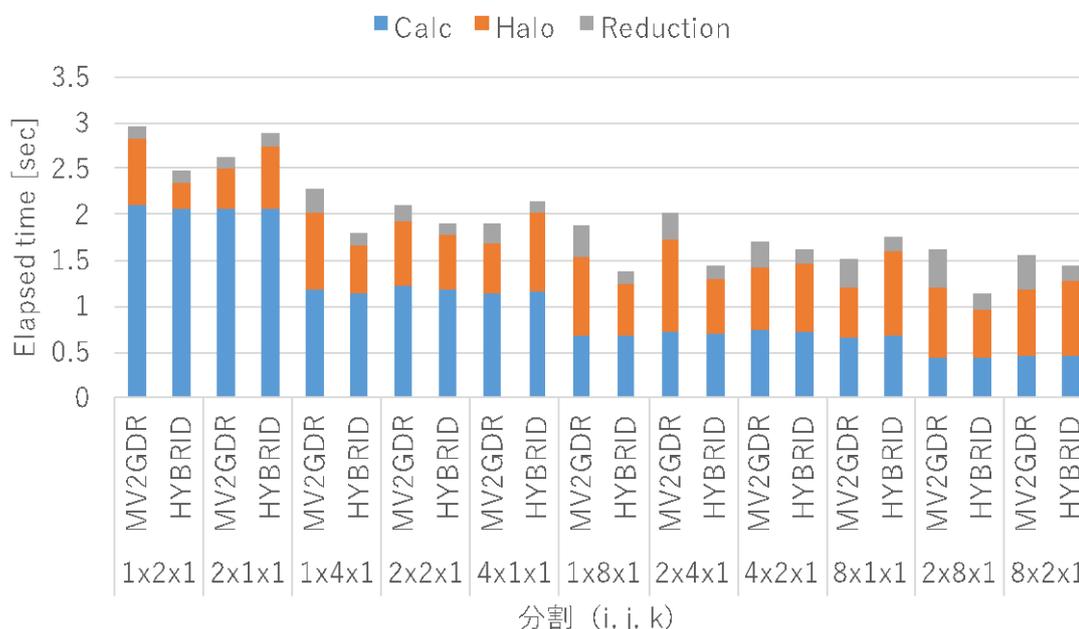


図 5-1 Himeno ベンチマーク (問題サイズ Small)

更に、集団通信 (Allgather, Bcast, Allreduce) に対するハイブリッド通信の実装を行った。ハイブリッド通信による集団通信では、通信サイズに対して適切な通信パス (TCA/PEACH2 or IB) を選択することで、高い性能が得られている。それぞれ、IB に対して

ハイブリッド通信は最大 47% (図 5-2)、42% (図 5-3)、21% (表 5-1) の性能向上を達成している。

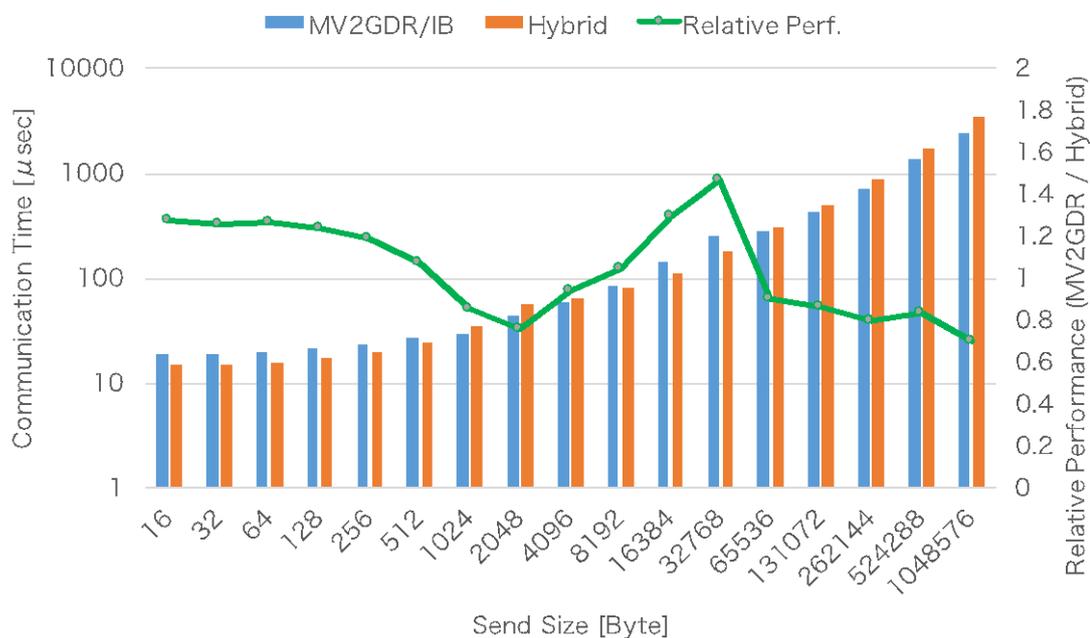


図 5-2 Allgather (8 ノード)

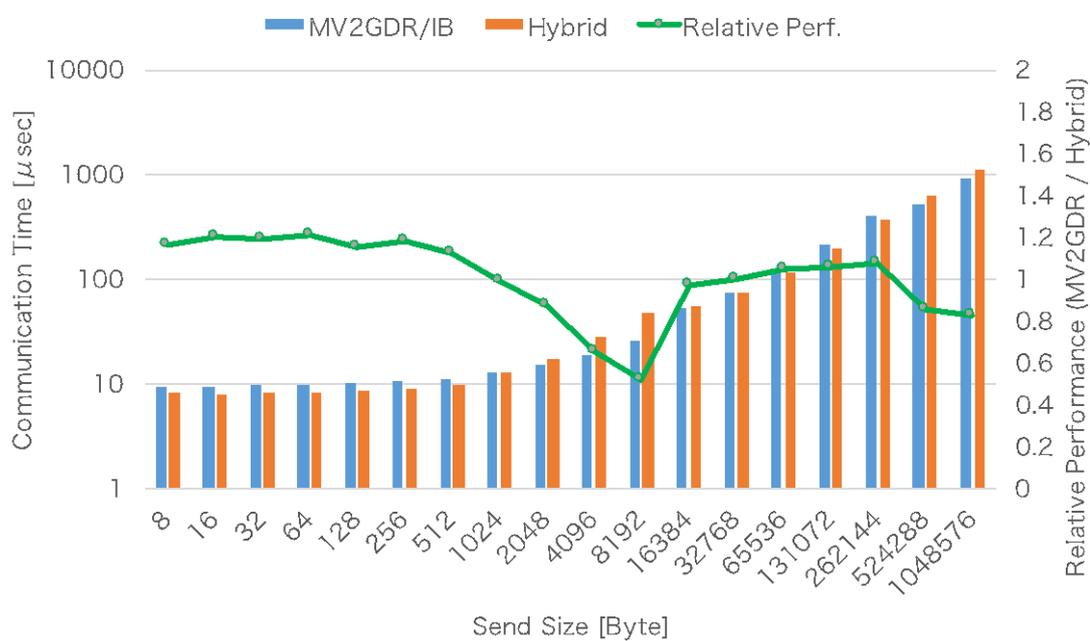


図 5-3 Bcast (8 ノード)

表 5-1 Allreduce の性能 [μ sec]

	MPI_Allreduce	Hybrid_Allreduce	Speedup (MPI/Hybrid)
8 ノード	18.322	13.390	1.36
16 ノード	22.835	16.007	1.42

また、ソースコードの行数を比較した結果、Hand-coding に対しておおよそ半分程度のコード行数で記述できることも確認した。表 5-2 に Himeno ベンチマークにおける SLOC の比較を示す。

表 5-2 Himeno ベンチマーク：ソースコード行数

	MPI	TCA	OpenACC	XMP	Init	Calc	Sum
Serial					72	27	99
Hand-coding	141	16	18		110	29	345
XACC			12	23	88	29	152

【6】 XcalableMP における動的タスク並列記述（朴、佐藤[CCS フェロー]）

XcalableMP (XMP) 2.0 から採用される予定である、分散メモリ環境向けの動的タスク並列機能の記述方法の提案と、その予備評価を行った。記述方法として tasklet 指示文を追加し、ブロックコレスキー分解のコードを用いて関連研究である StarPU と性能・生産性の比較を行った。

分散メモリ環境における動的なタスク並列機能を実現するためには、ノードを跨ぐタスク間の依存関係を記述する必要がある。しかし、ノード内における依存関係の記述は OpenMP 4.0 から登場した task 指示文の depend 節で表すことが可能だが、ノードを跨ぐタスク間の依存関係を表す機能は MPI、OpenMP 共に存在しない。そのため本研究では、ノード内で実行されるタスク内で MPI による通信を発生させ、その通信の完了によりタスクの実行を開始する方法をノード間での依存関係とした。図 6-1 にノードを跨ぐタスク間の依存関係の例を示す。taskA にて演算した配列 A[0:25] を taskB が用いる場合、taskA と taskB の間には実行順序に依存関係が存在する。この場合、ノード 1 では taskA の演算終了後に配列 A[0:25] を送信し、ノード 4 では taskB に到達した際に taskA から値の受信完了（配列 B は受信用のバッ

ファを表す) により実行を開始する。したがって、タスク内で必要な値の授受により分散メモリ環境における依存関係を指定することが可能である。

XMP において共有メモリ向けにプログラミングをする場合は、OpenMP と組合せて記述する必要がある。分散メモリ環境における動的タスク並列機能を実現する場合は、XMP の task 指示文により実行ノードを決定、XMP の task ブロック内にて OpenMP の task 指示文および depend 節によりノード内のタスクを生成し、OpenMP の task ブロック内にて演算や XMP の通信を記述する。通信には、XMP の分散配列を対象とした gmove 指示文や coarray が用いられる。これらの記述では、通信以外はほぼ MPI+OpenMP と同様の記述が求められるため、プログラムは煩雑になりやすい。そのため、XMP に新たな指示文として tasklet 指示文を追加し、上記の処理を単一の指示文で記述可能とすることで生産性の向上を目指す。

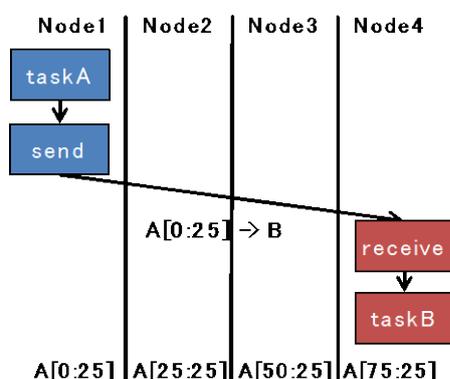


図 6-1 分散メモリ環境におけるタスク依存の例

図 6-2 に tasklet 指示文によるプログラミング例を示す。tasklet 指示文は、ユーザが OpenMP 同様の依存関係の記述に加え、ノードを跨いだ依存関係の場合の通信相手の記述、受信データを格納するバッファや実行ノードを指定する。依存記述は OpenMP task depend 節同様に in、out および inout とし、合わせて XMP の分散配列を記述する。通信相手は、XMP が提供するテンプレート、ノード集合で抽象的に記述し、さらにタグでより詳細な通信制御が可能である。図 2 の場合は、実行ノードは on 節により taskA はノード 1、taskB はノード 4 である。また、out 節に記述されたノード集合により taskA が実行終了後に MPI_Send により配列 A[0:25] をノード 4 へ送信し、in 節に記述されたノード集合、バッファによりノード 1 から MPI_Recv により受信した配列 A[0:25] を配列 B へ格納し、taskB の演算を開始する。

tasklet 指示文を用いたプログラムの評価には、筑波大学計算科学研究センターの COMA を用いた。1 ノードあたり 1MPI プロセスを割り当て、最大 16 ノード 16MPI プロセスとする。また、ノード内のスレッド数は 1 から 16 へと変動させる。対象としたプログラムはブロックコレスキー分解を行うコードである。tasklet 指示文と関連研究である StarPU で記述したコ

ードを実装し、性能・生産性の比較を行う。StarPU は、フランス国立情報学自動制御研究所で開発が進められている、ヘテロジニアスな環境におけるタスク並列機能を提供するランタイムライブラリである。また、本研究は tasklet 指示文の予備評価であるため、実際にコンパイラに機能を実装したのではなく、コンパイラによるコード変換を想定したコードを実装し、評価を行った。

```
int A[100]; /* Distributed array */
int B[25]; /* Local array */
#pragma xmp nodes P(4)
#pragma xmp template T(0:99)
#pragma xmp distribute T(block) onto P
#pragma xmp align A[i] with T(i)
/* ... */
#pragma xmp tasklet out(A[0:25], P(4)) on P(1)
taskA();

#pragma xmp tasklet in(A[0:25], P(1), B) on P(4)
taskB();

#pragma xmp taskletwait
```

図 6-2 XMP tasklet 指示文によるプログラミング例

図 6-3 に行列サイズ 8192×8192、ブロックサイズ 128×128 のブロックコレスキー分解のコードの評価を示す。縦軸のラベルである XMP はコンパイラによるコード変換を想定した MPI+OpenMP コードである。結果として、スレッド数が 8、16 の場合において XMP コードの性能が良く、StarPU と比較して 16 プロセス、各プロセスにおけるスレッド数が 8 の場合に最大で 1.54 倍の性能を得た。しかし、スレッド数が 1、2、4 の場合の性能は低く、現在その原因を調査中である。

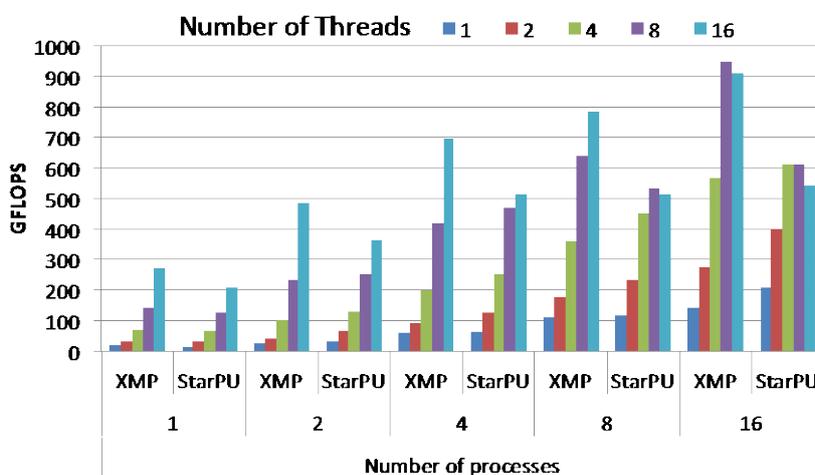


図 6-3 ブロックコレスキー分解の評価 (行列サイズ 8192×8192)

生産性の評価には各実装のコード行数を用いた。XMP 実装は、グローバルビューモデルによる簡易なデータ分割に加え、OpenMP とほぼ同等の記述でタスク依存が記述可能な tasklet 指示文により、StarPU と比較して全体でコード行数を 85%に抑えられた。したがって、tasklet 指示文の生産性の高さを示すことができた。

今後の課題として、現在の実装は Send/Recv ベースな実装であるため、PGAS 言語と親和性の高い片側通信を用いた実装を行うことが挙げられる。また、指示文内のみではなく、ユーザがタスク内で片側通信や XMP の通信を記述可能とすることでより自由度が高く詳細なチューニングが可能な記述を考えている。

なお、本研究は CCS と理化学研究所計算科学研究機構とのポスト京システム開発共同研究の一環として行われた。

【7】 大規模並列システム性能予測ツール SCAMP (朴、佐藤[CCS フェロー])

ポスト京システムを含む次世代超並列計算システムでは、ノード上のコア数の増強に加え、ノード数自体もさらに数倍～数十倍に増強されると見込まれる。理化学研究所・計算科学研究機構では以前より、プロセッサ性能の向上に対して既存のプロセッサのプロファイルを利用した性能向上予測を進めているが、本研究ではこれと直交して、同一プログラム・同一問題サイズの並列処理プロファイルを利用して、より大規模なシステムでの性能予測を行う手法とこれに基づくツールを開発する。同システムは SCAMP (Scalable MPI Profiler) と名付けられている。

SCAMP の概念は、MPI で記述されたプログラムの実システムでの計算及び通信プロファイルを元に、これがより大規模、すなわちより多くのノード数とプロセス数のシステムで実行された場合の「仮想 MPI プロファイル (Pseudo MPI Profile)」をシステムティックに作成し、これを並列システムシミュレータにかけることで、実行時間の予測を行うものである。シミュレータとしては、Sandia National Laboratory で開発された SST/macro を用いる。

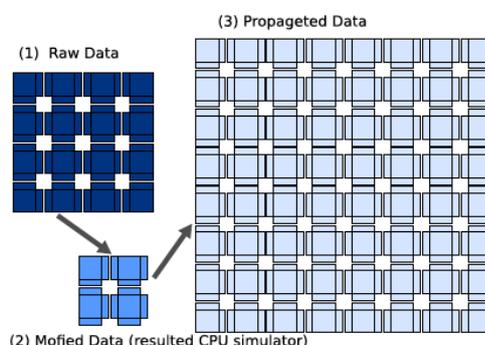


図 7-1 SCAMP で扱う MPI profile の概念

図 7-1 に SCAMP で扱う MPI profile の概念を示す。ここでは 2 次元ステンシル計算を取り上げる。Raw Data は実プログラムを実機で実行して得られるプロファイルで、これから CPU simulator で得られた「MPI プロセス数を増やした場合のプロセス当たりの実行時間が短縮された」プロファイルを生成したものが Modified Data、そして最後に MPI プロセス数を増加させたことで通信相手やメッセージサイズが変わった状況でのプロファイルが Propagated Data である。並列システムにおいてノード数 (MPI プロセス数) が増えた場合、強スケールリングでは一般的に CPU 実行時間が短縮され、MPI 通信量の増加と通信オーバーヘッドの増加が生じる。この状況を、CPU simulator による再評価と MPI プロセス数の増加を想定して「水増し」されたプロファイルによって表現するというのが SCAMP の手法である。この手法は当然、弱スケールリングにも適用できる。弱スケールリングの場合は CPU の実行時間が基本的に変化しないと想定し、MPI プロファイルの水増しのみを行うため、より簡便かつ正確なシミュレーションが実行できる。よって、平成 27 年度の研究では、弱スケールリングの場合のみを対象とした。

```

#define XSIZE 1000

np = MPI_Comm_size();
myid = MPI_Comm_rank();
xsize = XSIZE / np;
ux = malloc(sizeof(double), xsize + 2);
uux = malloc(sizeof(double), xsize + 2);
MPI_Send(&ux[1], 1, MPI_DOUBLE, ..., (myid-1+np)%np,.);
MPI_Send(&ux[xsize], 1, MPI_DOUBLE, ..., (myid+1)%np,.);
MPI_Recv(&ux[xsize+1], 1, MPI_DOUBLE, ..., (myid+1)%np,.);
MPI_Recv(&ux[0], 1, MPI_DOUBLE, ..., (myid-1+np)%np,.);
for(i=1; i<=xsize; i++)
    uux[i]=(ux[i-1]+ux[i+1])-2.0*u[i];
for(i=1; i<=xsize; i++)
    ux[i]=uux[i];

```

図 7-2 SCAMP で対象とするプログラムコードの典型例

SCAMP の手法は基本的にシンプルであり、特に SIMD 性の高いデータ並列型の処理を想定している。ターゲットコードの例を図 7-2 に示す。これは 2 次元ステンシルコードの典型例であり、MPI 通信の相手は全プロセス数 (np) と自プロセスのランク (myid) で決定される。多くのデータ並列型プログラムでは、このように通信相手が自動的に決定される場合がほとんどで、これが MPI プロファイルの水増しのメカニズムである。より大規模なシステムを想定した、水増しされたプロファイルは図 7-3 のように通信相手ランクが変更される。

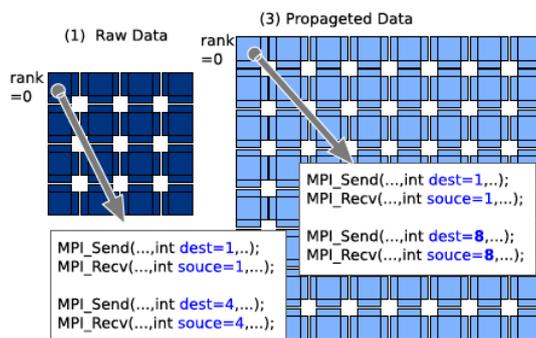


図 7-3 水増しされた MPI プロファイルのイメージ

QCD や Himeno Benchmark のような多次元ステンシル計算では、隣接プロセス間の point-to-point 通信と、全プロセス間での Allreduce 通信が必要となる。そこで、これらの通信パターンについて実際に京コンピュータ上で得たプロファイルと、SCAMP の手法で水増しされたプロファイルを SST/macro でシミュレーションした結果を図 7-4 に示す。

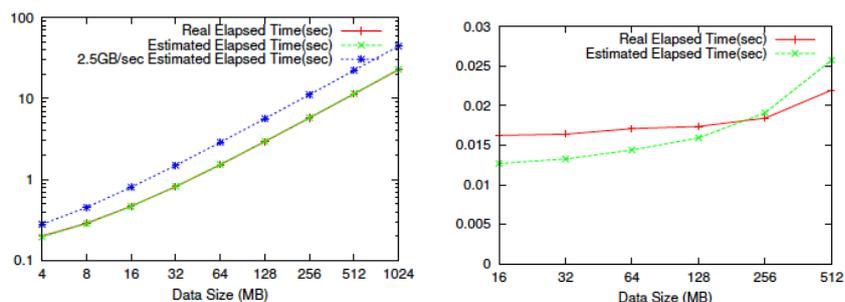


図 7-4 ping-pong 通信と Allreduce 通信の実機測定結果と水増しプロファイルのシミュレーション結果の比較

図 7-4 の左側の図は 2 プロセス間の pingpong 通信の実機評価と、京コンピュータの通信パラメータをモデル化して SST/macro の通信シミュレータで実行した場合の比較である。各種メッセージサイズに対してほぼ一定の差が出ており、これを補正するために実効通信バンド幅を補正すると、性能がほぼ一致することがわかる。また、右側の図ではデータサイズを変えた場合の Allreduce 時間を示しており、データサイズによって性能が逆転していることがわかる。これは、データサイズに依存した通信プロトコルの変化が SST/macro シミュレーション上では考慮されないことによると推測される。

これらの基本的通信性能評価を踏まえ、NPB-CG、NPB-FT、CCS-QCD 等のベンチマークを評価した。ここでは実アプリケーションに近いベンチマークとして CCS-QCD の結果を示す。図 7-5 は 2 つの問題サイズ 4x4x4 と 8x8x8 について、弱スケーリングを想定した場合、すなわち後者は前者の 8 倍 (=2x2x2) のプロセス数で実行し、CPU 時間は変わらないという想定の下で、ステンシル計算の隣接通信と Allreduce 通信を適用した。

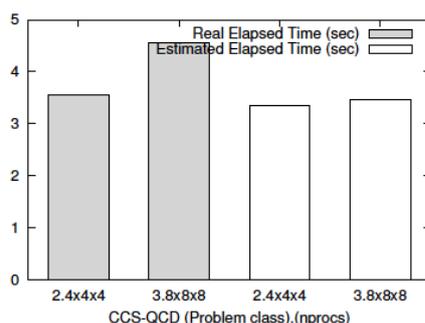


図 7-5 CCS-QCD ベンチマークの弱スケーリング評価結果

この結果より、比較的予測が簡単な弱スケーリングの場合でも、8 倍サイズのシステムの予測性能が実機性能より 20%強程度高く出ていることがわかる。この差は前述の Allreduce 時間の差や、実機でのジッター等のプロセス実行時間の微妙な差が影響していると思われるが、計算時間の予測はできていると結論できる。

現在、SCAMP のツール群を実装中であり、現時点では多くの作業が手作業によっている。平成 28 年度研究では、MPI プロファイルの水増しツール（現在は line editor を使って半自動的に生成）の構築と、ソースコードをコンパイラで解析することで、MPI 実行環境から得られるプロセス数等のパラメータからプロファイル水増しのためのパラメータを自動抽出する方法等を研究する予定である。

なお、本研究は CCS と理化学研究所計算科学研究機構とのポスト京システム開発共同研究の一環として行われた。

【8】 並列 FFT における通信隠蔽の自動チューニングに関する研究（高橋）

科学技術計算で広く用いられている高速フーリエ変換 (FFT) の性能を改善するために、通信隠蔽の自動チューニングに関する研究を行った。分散メモリ型並列計算機においてチューニングを行う際に、最適な性能パラメータはプロセッサのアーキテクチャ、ノード間を結合するネットワーク、そして問題サイズなどに依存するため、これらのパラメータをその都度手動でチューニングすることは困難になりつつある。自動チューニングを適用した FFT ライブラリとして、FFTW や SPIRAL などが知られているが、通信隠蔽において自動チューニングを適用した FFT ライブラリはまだ提案されていないのが現状である。そこで、並列 FFT において通信隠蔽のパラメータを自動チューニングする手法について検討した。並列 FFT において演算と通信を分割しパイプライン方式でオーバーラップさせる場合、通信メッセージサイズの分割数 (パイプラインの段数) を大きくすれば、オーバーラップの割合が高くなる。その一方で、通信メッセージサイズの分割数を大きくすれば、通信 1 回あたりの通信メッセージサイズが小さくなるため、通信バンド幅も小さくなる。また、演算と通信をオーバーラ

ップさせる際には、通信によってメモリバンド幅が消費される。したがって通信メッセージサイズの分割数には最適な値が存在すると考えられる。また、FFT を計算する際の基底や、行列の転置を行う際のブロックサイズについても自動チューニングを行うことが可能である。

図 8-1 に並列一次元 FFT の性能を示す。図 6-11 から、 $N \leq 2^{29}$ の場合には、FFTE 6.1alpha (no overlap) と FFTE 6.1alpha with AT (自動チューニング) がほぼ同じ性能となっているが、 $N \geq 2^{30}$ の場合には通信隠蔽の効果により FFTE 6.1alpha with AT の性能が高くなっていることが分かる。また、FFTE 6.1alpha (NDIV=4) では通信メッセージサイズが常に 4 分割されており全対全通信性能が低くなっていることから、 $N \leq 2^{29}$ の場合には FFTE 6.1alpha (no overlap) よりも性能が低くなっていることが分かる。

分散メモリ型並列計算機における並列一次元 FFT において、通信メッセージサイズの分割数、基底の組み合わせ、そしてブロックサイズについて自動チューニングを行うことで、性能をさらに向上できることが分かった。

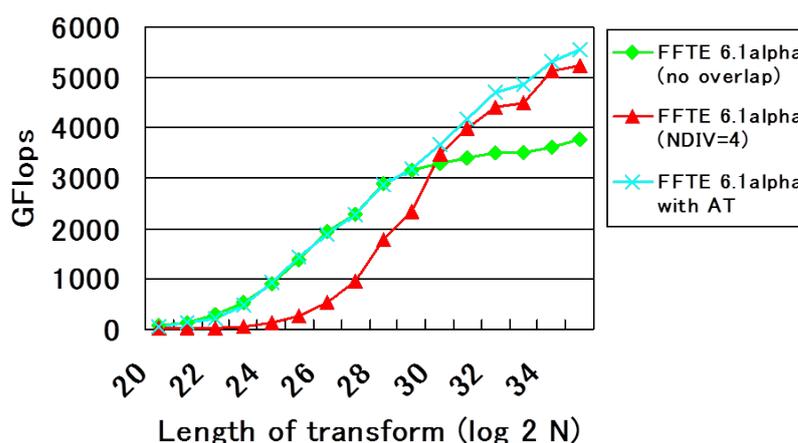


図 8-1 並列一次元 FFT の性能 (Fujitsu PRIMEHPC FX100, 512 ノード)

【9】 データインテンシブサイエンスのためのシステムソフトウェア (建部、川島)

本研究では分散ファイルシステム、大規模データ処理実行基盤の研究を実施し、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の設計プロトタイプ実装と性能評価を行った。以下、項目別に記述する。

【分散ファイルシステム】

研究の狙いは、CPU コア数の増加に対し、アクセス性能がスケールアウトし、かつアクセス応答時間が長くない分散ファイルシステムの研究開発を行うことである。本年度は、ファイルデータの冗長化について研究開発を行った。

分散ファイルシステムのアクセス性能をスケールアウトさせるために、計算ノードのローカルストレージを利用する場合、計算ノードの障害によりそのノードのローカルストレージに格納されたデータにアクセス不能となってしまう。この問題を解決するためこれまでファイル複製を他ノードのローカルストレージに保持する方法がとられたが、この方法ではストレージ領域が 2 倍以上必要となってしまう、データ転送量が 2 倍以上となってしまうという問題があった。この問題を解決するため、ノード間で冗長符号を用いることが考えられる。しかしながらこれまではノード間での冗長符号を書き込み時に行うことは冗長符号計算のオーバーヘッドが大きく行われていなかった。そのため、書き込み時は冗長符号化のオーバーヘッドがない複製を作成し、その後、冗長符号に変換する等の方法が用いられていた。この問題を根本的に解決するため、平成 26 年度にストレージに冗長符号計算とデータ転送をオフロードしたアクティブストレージを提案した。平成 27 年度は、本方式を RAID-5 に拡張した。図 9-1 にそのデータ転送パターンを示す。

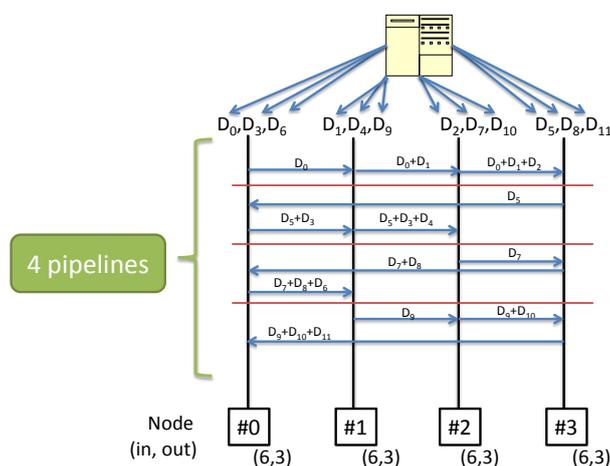


図 9-1 RAID-5 におけるアクティブストレージのデータ転送パターン

RAID-5 の場合は、3 ブロックずつ異なるストレージサーバにパリティブロックを持つため、図 9-1 のように 4 つの独立したパイプラインを構成することとなる。ストレージサーバ間のデータ転送を別ネットワークで行った 3D1P のアクティブストレージによる RAID-5 の性能を図 9-2 に示す。4 クライアント以上からのアクセスにおいて、3D の RAID-0 の性能を凌ぐ性能を示した。

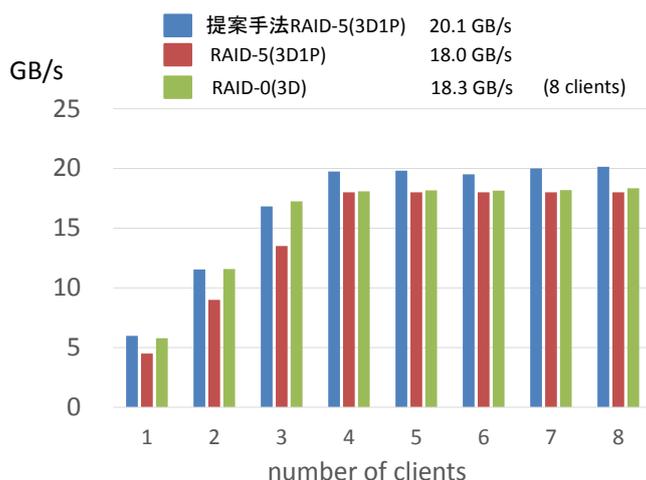


図 9-2 アクティブストレージ RAID-5 の性能評価

本成果は、平成 27 年 12 月に IEEE データサイエンスとデータインテンシブシステムに関する国際会議（DSDIS）で発表した。

[大規模データ処理実行基盤]

本研究項目ではデータインテンシブサイエンスのアプリケーションを効率的に実行するため、MPI-IO、大規模ワークフロー実行、MapReduce 処理、バッチキューイングシステム、データベース管理システムなどの実行環境の研究開発を行う。本研究提案で研究開発する分散ファイルシステムは、全体としてのファイルアクセス性能はスケールアウトさせるように設計、実装を行っているが、ファイルアクセス性能が非均一である。そのため、効率的に利用するためには、ファイルアクセスの局所性の利用とデータ移動を最小化するプロセススケジューリングが重要となる。さらに、データ移動と計算処理はオーバーラップが可能であり、プロセススケジューリングとデータ移動のスケジューリングを最適化することにより、更に効率的な実行が可能となる。

バッチキューイングシステムの研究では、引き続きデータアクセス局所性を高めるためのスケジューリング手法の研究を進めた。昨年度は I/O インテンシブなジョブだけではなく CPU インテンシブなジョブについても扱うため、スケジューリング手法の拡張を行った。それぞれのジョブにおける入力ファイルからアクセス局所性の指標を求め、CPU の負荷と併せてパラメタ β によりノード割り当てを行う手法の設計を行った。今年度は最適な β の値を自動的に求めるための研究を行った。成果の一部は平成 27 年 5 月にグリーン、パーベイシブ、クラウドコンピューティングに関する国際会議（GPC）で発表し、IEEE Systems Journal への掲載が決定している。

【10】 エクストリームビッグデータの基盤技術（建部、川島）

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

平成 27 年度は、これまでに行った OpenNVM を用いたローカルオブジェクトストアの設計を改善したプロトタイプ実装と他の実装との性能比較を行った。提案している OpenNVM を用いたオブジェクトストアでは、オブジェクト生成性能が 16 スレッドで 747,000 ops/sec であった。性能評価した結果を図 10-1 に示す。directFS は OpenNVM を用いたファイルシステムである。従来のファイルシステムに比べ性能は高いものの、スレッド数を増やしても性能は変化しない。性能は 4 スレッドのときに最高で 74,000 ops/sec であり、我々の提案手法の方が 10 倍高速であった。NVMKV と RocksDB は Key Value ストアであり、今回設計したオブジェクトストアとはインタフェースが異なるものの、ストレージとして同様の機能を持つため比較を行った。スレッド数を増やすと多少は性能が向上するものの、最高でも NVMKV が 16 スレッドのときの 173,000 ops/sec であり、我々の提案手法の方が 4.3 倍高速であった。これらの成果を含め情報処理学会 ACS 論文誌に採録が決定している。

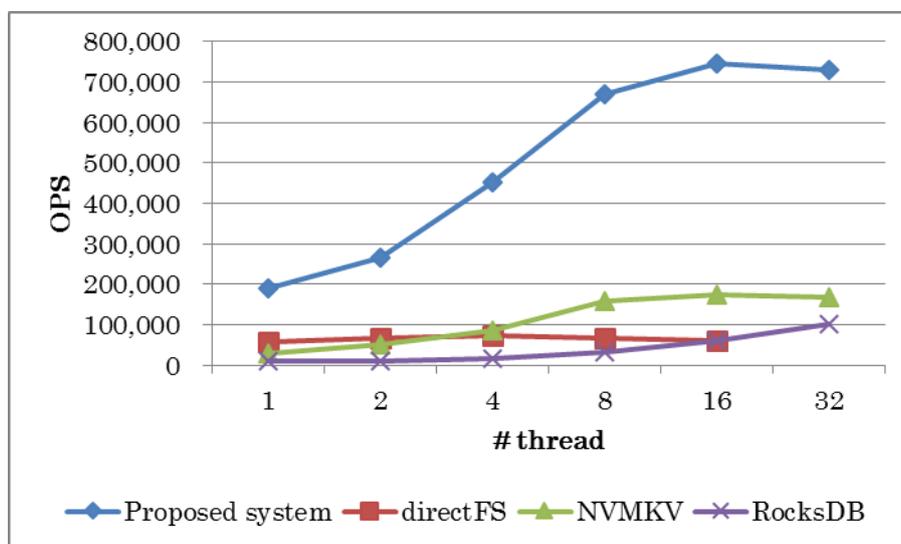


図 10-1 オブジェクト作成の性能評価

範囲検索可能な Key Value ストアの設計では、OpenNVM で提供される Key Value ストアに対して範囲検索を可能とするためにインメモリの B+木を設計している。これまでは並列に B+木をアクセスしたときに性能を向上させるため、ロックフリーな並列 B+木の設計を行ってきた。検索、挿入、削除に対し、B+木をロックすることなく並列に実行することが可能である。B+木の再平衡化は動的になされ、検索はその再平衡化により遅延しない。H27 年度は、

B+木の範囲検索を並列に行うため、空間局所性を持った並列連結リストの設計を行った。範囲検索を効率的に行うためにはB+木のノードをつなぐ連結リストが必要であり、設計したロックフリーな並列B+木のノードに対する並列連結リストの設計が必要となるためである。基本的にはロックフリーのアプローチをとり、compare and swap 命令を用いる。設計した並列連結リストを図 10-2 に示す。

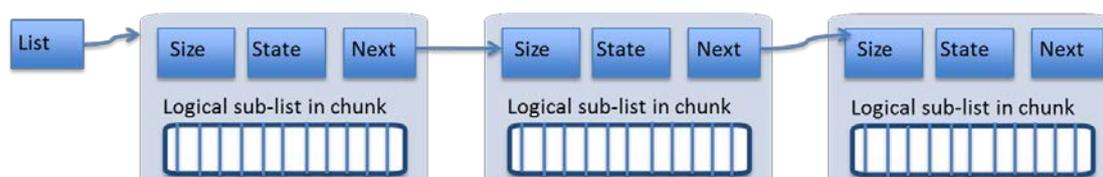


図 10-2 空間局所性を持った並列連結リスト

【11】 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 共有ストレージ、素粒子物理学データ共有システム JLDG のシステムソフトウェアとしても利用される Gfarm ファイルシステムの研究開発を行った。本年度は自動的に余剰ファイル複製を削除する機能、HPSS（階層型ストレージシステム）への高速コピー機能、書込後の自動ベリファイ機能についての設計と実装を行った。Gfarm ファイルシステムは、ファイルサーバの障害などによりファイル複製数が減ると自動的に必要な数のファイル複製を作成する機能を持っている。ここで、障害を起こしたファイルサーバが復旧したときなど、ファイル複製数が必要数より増えてしまう。また、必要なファイル複製数を減らした場合も、必要数以上のファイル複製を持つこととなる。この余剰ファイル複製を自動的に削除する機能を設計した。ファイル複製削除にあたり、ファイルをアクセス中であることなどを考慮する必要がある。ファイルをアクセス中の場合は、ファイル削除を一時延期することとした。利用頻度が低いファイルは階層型ストレージへ移動するが、その移動を高速に行うため、並列にファイルコピーを行う高速ファイルコピー機能を設計、実装した。書込後の自動ベリファイ機能は、サイレントデータ破損への対策である。サイレントデータ破損を検出するためには、一度読み出してダイジェストを計算する必要があるが、一度も読込まれないファイルはその検査を行うことができない。そのため、これまでは手動で全ての書込みファイルに対し読込を行っていた。この作業を自動化するための機能である。ただし、書込後、すぐに読み出すとバッファキャッシュから読み出してしまうため、サイレントデータ破損の検査を行うことができない。そのため、デフォルトでは自動的に 6 時間後に読み出して検査を行う機構を設計、実装した。その他、不具合修正、ドキュメントの更新なども行った。この結果として、Gfarm バージョン 2.6.8 をリリースした。

【12】 天文データ処理に関する研究（建部、川島）

1. すばる望遠鏡データの高速処理化

すばる望遠鏡に搭載された超広視野主焦点カメラ Hyper Suprime-Cam (HSC) から得られる画像データを処理することで、研究者や一般人にとって有益な情報を有する画像を導出することができる。このデータ処理には長時間が必要である。一日分の入力データを処理するために 24 時間程度の処理時間が必要である。この処理時間を短くすることが研究の狙いである。

昨年度は解析パイプラインシステムを理解するために、IPMU 側との打合せを行い、現在のパイプラインシステムのプログラムならびに入力データを入手した。その後、プログラムの実行ならびに分析を行った。今年度は 2 つの研究を実施した。詳細を以下に述べる。

[Pwrake を用いた解析パイプラインの高速化]

本年度は解析パイプラインに Pwrake を適用した。Pwrake (Parallel Workflow extension for RAKE) とは、我々が開発しているワークフローシステムである。このシステムは Rake という Ruby 版ビルドツールをベースに、並列分散実行の機能を拡張したものである。特にデータインテンシブなワークフローを目的として、Gfarm ファイルシステムを利用し、ローカリティを高めるスケジューリングにより、高い I/O 性能を発揮する処理を可能にする。Pwrake と Gfarm を適用する様子を図 12-1 に示す。図の左側は現状を示し、ファイルアクセスがボトルネックになる様子が表されている。右側は Pwrake と Gfarm によりファイルアクセスが並列化されている様子が表されている。

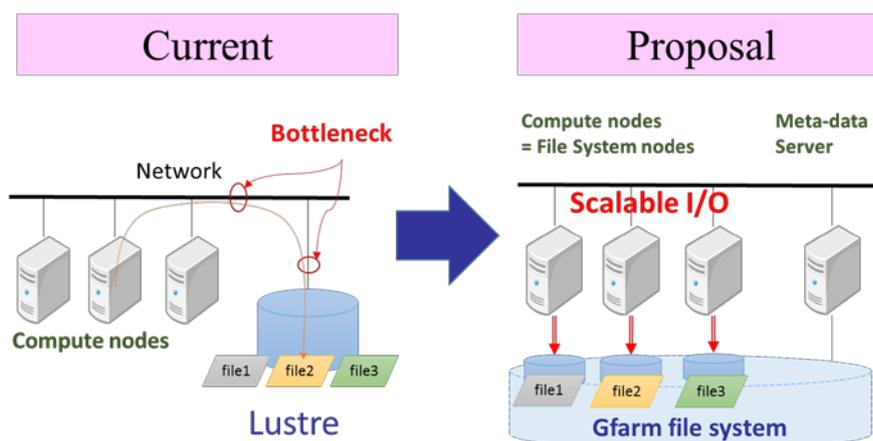


図 12-1 Pwrake と Gfarm の解析パイプラインへの適用

Pwrake を解析パイプラインに適用したところ、性能を改善することができた。CPU 利用率に関する性能向上に関する結果を図 12-2 に示す。図はいずれも横軸が実行時間、縦軸が使われているプロセスの数を示す。左図はオリジナルの解析パイプライン、右図は Pwrake を適

用したパイプラインの結果を示している。両図を比較すると右図では実行プロセス数が減らない一方、左図では実行プロセス数が時間の経過と共に増減を繰り返すことがわかる。また、右の場合は左の場合に比べて実行時間が短く、性能に優れることがわかる。

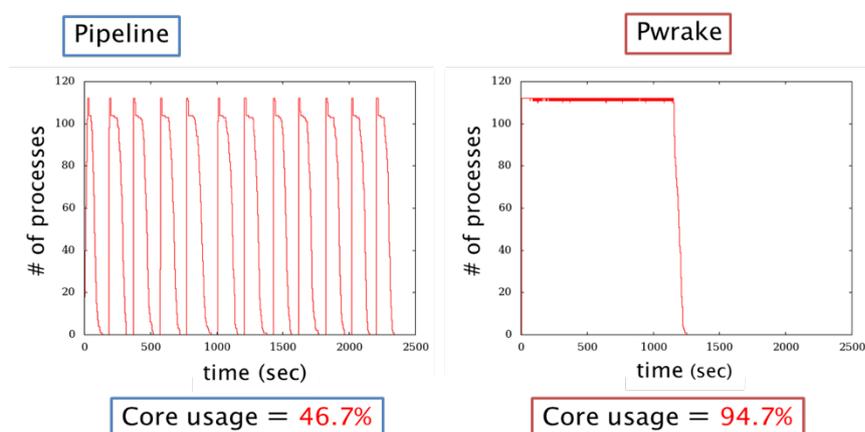


図 12-2 Pwrake 利用による起動プロセス数減少問題の解決

また、利用ノード数/CPU コア数を変動させた場合の実験結果を図 12-3 に示す。図の縦軸は実行時間、左側はオリジナルパイプラインの結果、右側は Pwrake を適用したパイプラインの結果を示している。図ではパイプラインを構成する各処理に要した時間も示されている。図 12-3 より次のことがわかる。まず、Pwrake は実行時間をおよそ 2/3 まで削減できている。次に、その性能改善は Frames に改善によるところが大きい。この理由は、Frames の並列化は容易だからである。

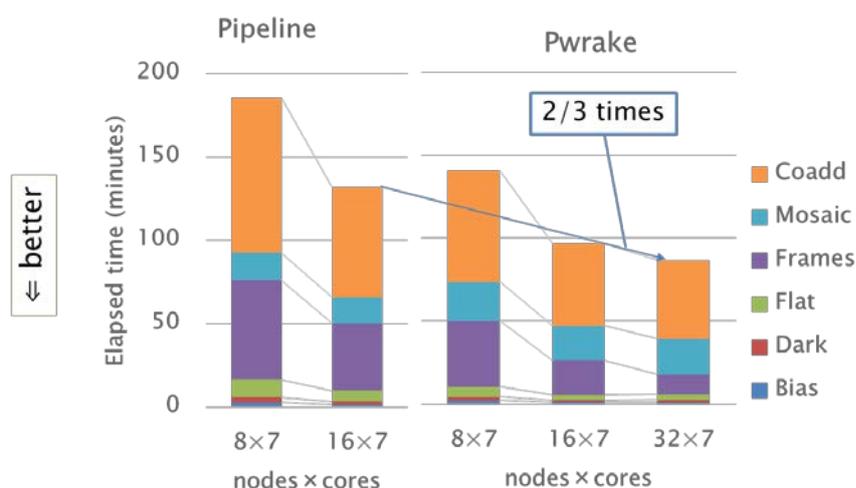


図 12-3 解析パイプラインの性能改善

[Gfarm 高性能化のための高速トランザクション処理]

Pwrake は Gfarm と連動して動作する。Gfarm は高い I/O 並列度を有するが、メタデータサーバへのアクセス数が増加すると、そこがボトルネックとなり、データアクセスの並列度が向上しなくなる。この問題を解決するにはメタデータサーバで実行されるトランザクション処理を高速化する必要がある。そこで今年度は並列ログ先行書込技術 P-WAL を開発した。これを図 12-4 に示す。図の左側が従来 WAL であり、複数のログレコードを 1 つのログファイルへ一括して書込んでいる。図の右側が P-WAL であり、ログファイルへの書込みを並列的に実行している。

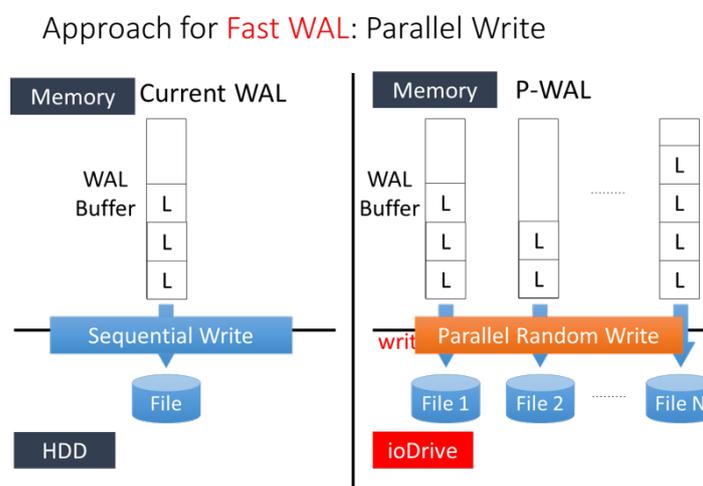


図 12-4 P-WAL : 並列ログ先行書込

高速ストレージである ioDrive を用いた P-WAL の性能評価の結果を図 12-5 に示す。この図より P-WAL は従来技法よりも 2.43 倍程度の性能改善を示していることがわかる。

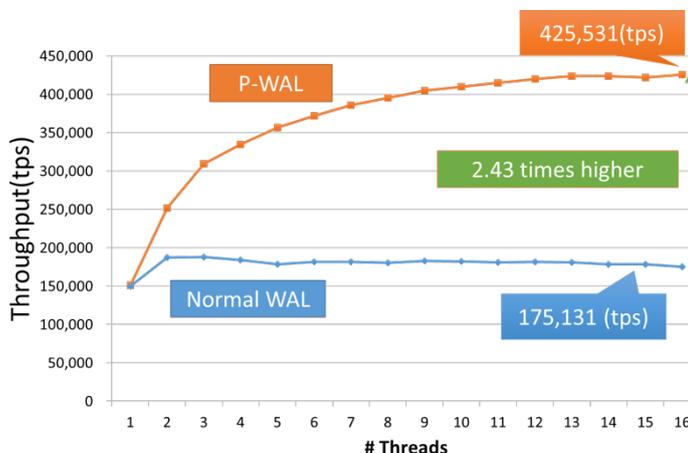


図 12-5 P-WAL の性能評価

2. 高速データベース構築

解析パイプラインから出力される結果は、天体カタログとして管理される。天体カタログの例としては SDSS が著名である。SDSS において、データはリレーショナルデータベースに登録され、SQL での問合せが行われる。本研究の狙いはこれらの問合せを高速化することである。本件について 2 件の研究を行った。詳細を下記に述べる。

[リレーショナルデータベースにおける問合せ処理の高速化]

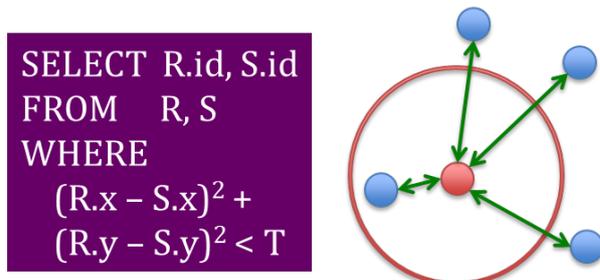


図 12-6 近傍星を探す問合せ

天体カタログでは様々な問合せ処理が行われる。初年度に IPMU と議論した結果、頻繁に使われるという近傍検索について取上げることにした。近傍検索とは、ある星の近い星を求めるという問合せに該当する。図 12-6 にこれを示す。図の左側は SQL ライクな問合せ表現、右側は直感的な表現であり、赤い問合せ点からユークリッド距離で一点範囲の星を探す状況を示している。この場合には 1 つのみが検索結果として返却される。空間索引と環結合を利用すると近傍探索処理を高速化できることが 26 年度でわかった。ただし検索結果数の変動に伴い性能向上がどのように変動するのかはわからなかった。そこで、27 年度では検索結果数によって空間索引の検索性能がどのように変わるのか測定した。その上で、検索結果数が大きな場合でも小さな場合でも検索性能が向上するように環結合と空間索引を組合せた実装とその評価を行った。

Q1: SELECT R.id, S.id FROM R, S WHERE (R.x - S.x)² + (R.y - S.y)² < r²

上記 Q1 に該当するワークロードの性能を 5 つの手法について評価した結果を図 12-7 に示す。横軸は選択率 (0.01%は 10^8)、縦軸は実行時間を表す。データサイズは R, S ともに 100 万件である。CycloJoin については 10 台を分散処理用に用いた。R-tree ならびに R*-tree はシングルマシンで動作させているが、検索は SIMD とマルチコアを用いて並列実行している。CycloJoin と空間索引の組み合わせ (CycloJoin-RTree, CycloJoin-R*Tree) が最速である。また、R*-tree は R-tree よりもかなり低速である。これは索引構築に要する時間が長いからである。また、このモジュールを PostgreSQL から呼び出すために、PostgreSQL の Nested Loops Join をフックする拡張モジュールを開発し、それを GitHub で公開した。

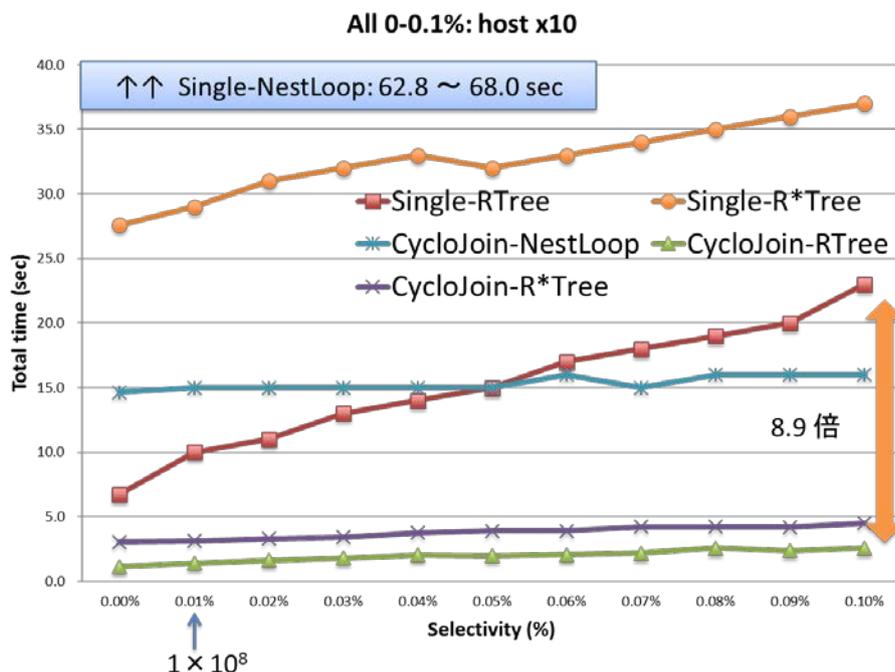


図 12-7 CycloJoin による近傍探索の高速化

[NoSQL データベースにおける問合せ処理の高速化]

NoSQL である配列データベースである集約演算の高性能化技法を検討した。再帰的インクリメンタル計算に基づく集約演算の高性能化技法を構築し、SciDB 上に実装を行い、その性能を確かめた。具体的には配列データベースにおけるウィンドウ集約演算（最大、最小、平均、総和、分散、標準偏差）を高性能化する手法を提案した。高性能化のためにインクリメンタル計算スキームを適用した。提案手法を代表的な配列データベースである SciDB に実装して実験的に評価した。その結果、提案手法は最大で従来手法に比べて 225 倍高速だった。実験に用いたコードは GitHub に公開した。

【13】 複数次元ベクトル・複数次元シフトパラメータをもつ連立一次方程式の数値解法に関する研究 (多田野)

複数次元ベクトル、及び係数行列にシフトパラメータをもつ連立一次方程式（以下、シフトブロック連立一次方程式）の数値解法である、Shifted Block Krylov 部分空間反復法に関する研究を行った。1 本の右辺ベクトル、及びシフトパラメータをもつ連立一次方程式の数値解法として、Shifted Krylov 部分空間反復法がある。同法は、メインの連立一次方程式（以下、シフト連立一次方程式）を解く過程で、他のシフトパラメータをもつ連立一次方程式（以下、シフト連立一次方程式）の近似解更新を少ない計算量で行うことができる。一方、複数次元ベクトルをもつ連立一次方程式に対する数値解法である Block Krylov 部分空間反復

法は、各右辺に対して Krylov 部分空間反復法を適用するよりも、少ない反復回数で近似解が得られることがある。本研究では、Shifted Krylov 部分空間反復法と Block Krylov 部分空間反復法を組み合わせた、Shifted Block Krylov 部分空間反復法を構築した。

本研究では、我々がこれまで開発してきた Block Krylov 部分空間反復法である、Block BiCGGR 法と Block BiCGSTAB(l)法を基盤として、シフトブロック連立一次方程式に適用するための方法の拡張を行った。この拡張により、Shifted Krylov 部分空間反復法を各右辺ベクトルに対して適用する場合と比較して、シフトブロック連立一次方程式をより少ない反復回数で解くことが可能となった。しかしながら、最終的に得られる近似解の精度が劣化する問題点が発見された。近似解更新部分で現れる計算の大部分は、縦長行列と小行列の積であるため、この計算がなるべく現れないようにアルゴリズムを修正し、近似解の精度向上を図った。

図 13-1 に Shifted Block BiCGGR 法の単純な実装と改良法の真の相対残差履歴を示す。テスト問題は、格子量子色力学計算 (QCD) で現れる連立一次方程式 (行列サイズ: 1,572,864, 非零要素数: 80,216,064) で、右辺ベクトル数を 12 とし、係数行列のシフトパラメータ σ は、 0.0×10^{-3} , 2.0×10^{-3} , 4.0×10^{-3} , 6.0×10^{-3} , 8.0×10^{-3} の 5 つを用いた。真の相対残差は近似解の精度の指標であり、この値が小さい場合は高精度の近似解が得られていることを示している。単純な実装の場合は、真の相対残差が 10^{-7} 付近で停滞しており、高精度近似解が得られていない。一方、改良法を用いた場合は、単純な実装よりも全体的に真の相対残差が小さくなっており、高精度近似解が得られている。

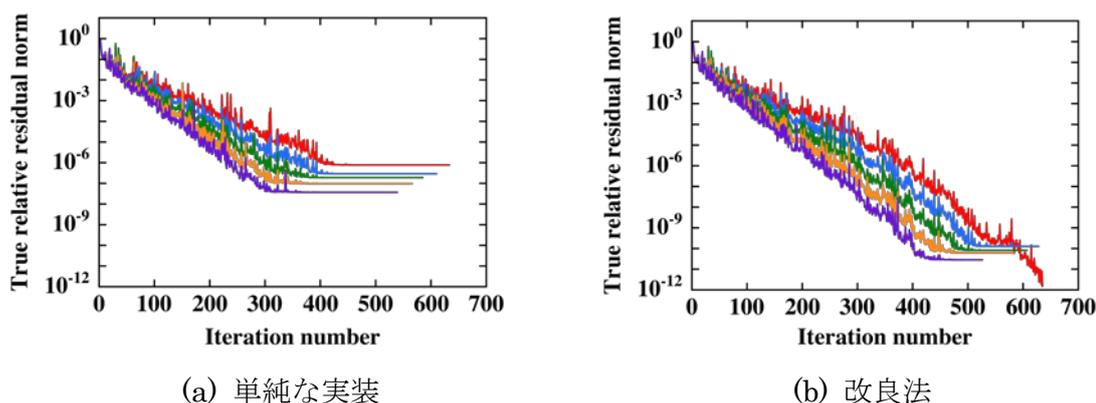
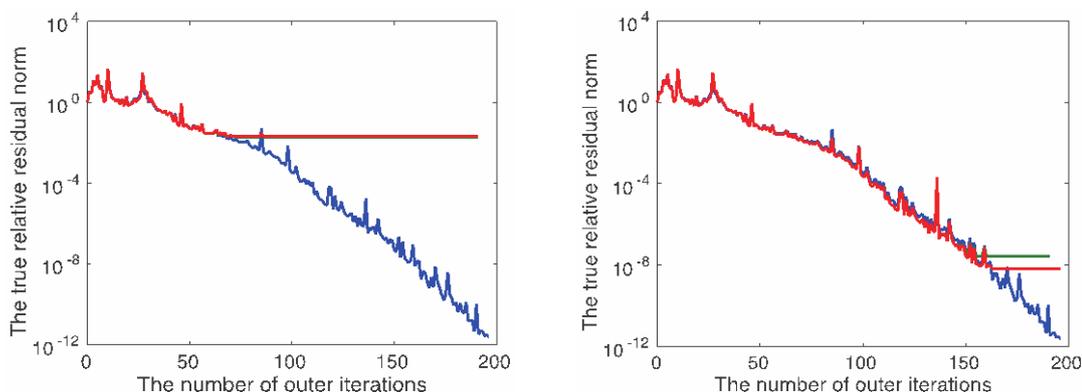


図 13-1 シフトブロック連立一次方程式 $(A + \sigma DX^{(\sigma)}) = B$ に対する Shifted Block BiCGGR 法の真の相対残差履歴。■ : $\sigma = 0.0 \times 10^{-3}$, ■ : $\sigma = 2.0 \times 10^{-3}$, ■ : $\sigma = 4.0 \times 10^{-3}$, ■ : $\sigma = 6.0 \times 10^{-3}$, ■ : $\sigma = 8.0 \times 10^{-3}$ 。

図 13-2 に Shifted Block BiCGSTAB(l)法の単純な実装と改良法の真の相対残差履歴を示す。テスト問題は、The University of Florida Sparse Matrix Collection の行列 Coupled (行

列サイズ：11,341，非零要素数：97,193）で，右辺ベクトル数は 16 とし，係数行列のシフトパラメータ σ は 1.0×10^{-3} とした．また，Shifted Block BiCGSTAB(l)法のパラメータ l は 2 とした．単純な実装，改良法の両方について，シード連立一次方程式の真の相対残差は十分に小さくなっている．単純な実装では，シフト連立一次方程式の真の相対残差は，倍精度計算，一部疑似 4 倍精度利用計算の両方とも 10^{-2} 付近で停滞しており，近似解の精度は極めて低い．一方，改良法においては倍精度で計算したシフト連立一次方程式の相対残差は 10^{-7} 付近まで減少している．さらに一部の計算に疑似 4 倍精度を用いることにより，真の相対残差は 10^{-8} 付近まで減少しており，高精度の近似解を生成することができた．



(a) 単純な実装

(b) 改良法

図 13-2 シフトブロック連立一次方程式 $(A + \sigma DX^{(l)}) = B$ に対する Shifted Block BiCGSTAB(l)法の真の相対残差履歴．ここで，■：シード連立一次方程式，■：シフト連立一次方程式（倍精度計算），■：シフト連立一次方程式（一部疑似 4 倍精度利用）．

4. 教育

博士学位論文

1. 小田嶋哲哉、博士（工学）、高並列言語による演算加速器及び相互結合網の効率的利用に関する研究、筑波大学大学院システム情報工学研究科博士論文、平成 28 年 3 月（指導：朴泰祐）
2. 藤田典久、博士（工学）、GPU クラスタにおけるアプリケーション高速化に関する研究、筑波大学大学院システム情報工学研究科博士論文、平成 28 年 3 月（指導：朴泰祐）
3. 大辻弘貴、博士（工学）、A Study on High-performance and Reliable Distributed Storage System（高性能かつ信頼性の高い分散ストレージシステムに関する研究）、筑波大学大学院システム情報工学研究科博士論文、平成 28 年 3 月（指導：建部修見）

修士学位論文

1. 廣川祐太、修士（工学）、メニーコア型プロセッサにおける計算科学アプリケーションの最適化に関する研究、筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文、平成 28 年 3 月（指導：朴泰祐）
2. 篠塚敬介、修士（工学）、融合積和演算命令を利用した中心-半径型区間演算に基づく精度保証付き高速フーリエ変換、筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文、平成 28 年 3 月（指導：高橋大介）
3. 前田広志、修士（工学）、アクセラレータを用いた疎行列ベクトル積の高速化、筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文、平成 28 年 3 月（指導：高橋大介）
4. 齋藤周作、修士（工学）、複数右辺・複数シフトを持つ線形方程式を高速に解く反復法の構築とその精度改善に関する研究、筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文、平成 28 年 3 月（指導：高橋大介）
5. 古江、修士（工学）、Implementation of Collective I/O on MPI-IO over Gfarm File System（分散ファイルシステム Gfarm 上での MPI-IO の Collective I/O の実装）、筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文、平成 28 年 3 月（指導：建部修見）
6. 蔣立、修士（工学）、Efficient Window Aggregate Processing for Multi-dimensional Scientific Big Data in Array Databases（アレイデータベースにおける多次元科学的ビッグデータ向けの効率的なウィンドウ集約処理）、筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文、平成 28 年 3 月（指導：建部修見）

卒業論文

1. 大島佑真、学士（工学）、OpenCL に基づく FPGA プログラミングによる高性能計算に関する研究、筑波大学情報学群情報科学類卒業論文、平成 28 年 3 月（指導：朴泰祐）
2. 桐井祐樹、学士（工学）、並列離散イベントシミュレーションを用いた大規模分散システムの性能評価、筑波大学情報学群情報科学類卒業論文、平成 28 年 3 月（指導：建部修見）
3. 五味歩武、学士（工学）、自動変換によるプログラムの可読性を維持した最適化および移植の省力化、筑波大学情報学群情報科学類卒業論文、平成 28 年 3 月（指導：高橋大介）
4. 大黒晴之、学士（工学）、In-memory MapReduce の高速化、筑波大学情報学群情報科学類卒業論文、平成 28 年 3 月（指導：川島英之）
5. 村田直郁、学士（工学）、RDMA を用いた分散トランザクション処理の高速化、筑波大学情報学群情報科学類卒業論文、平成 28 年 3 月（指導：川島英之）

6. 瀧沢亮太、学士（工学）、リレーショナルデータベースシステムにおける並列ハッシュ結合の評価、筑波大学情報学群情報科学類卒業論文、平成 28 年 3 月（指導：川島英之）

集中講義

1. 「CCS HPC セミナー」（一般公開、全学共通科目）、2015 年 2 月 1 日～2 日
2. “HPC Seminar”（全学共通科目）及び“Japan Korea HPC Winter School”（韓国 KISTI との共催）2015 年 2 月 15 日～17 日

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. Outstanding Research Awards: Yuta Kuwahara, Toshihiro Hanawa, Taisuke Boku, “A proposal of GMPI: GPU self MPI for GPU clusters”, 情報処理学会 ACSI2016 シンポジウム, 福岡, 2016 年 1 月 18 日.
2. The Best Technical Talk Award: Hiroki Ohtsuji, Osamu Tatebe, “Breaking the Trade-off between Performance and Reliability of Network Storage System”, PRAGMA29, Depok, Indonesia, Oct. 7, 2015
3. 最優秀学生発表賞: 神谷孝明, “P-WAL: 並列ログ先行書き込みの提案”, 情報処理学会システムソフトウェアとオペレーティング・システム研究会, 2015 年 11 月 25 日.
4. 平成 27 年度日本応用数学会論文賞 JSIAM Letters 部門, J. Asakura, T. Sakurai, H. Tadano, T. Ikegami, K. Kimura, “A numerical method for nonlinear eigenvalue problems using contour integrals”, JSIAM Letters, Vol. 1, pp. 52-55, 2009.

外部資金

(名称、氏名、代表・分担の別、採択年度、金額、課題名)

1. JST CREST、朴泰祐（代表）、H24 年度～H29 年度、29,000 千円 (H27)、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」
2. 理化学研究所共同研究、朴泰祐（代表）、H27 年度～H31 年度、8,000 千円(H27)
「ポスト京の並列プログラミング環境およびネットワークに関する研究」
3. JST CREST、高橋大介（共同研究者）、H23～28 年度、15,600 千円(H27)、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」

4. JST CREST、建部修見（代表）、H23 年度～H28 年度、31,709 千円（H27）、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」
5. JST CREST、建部修見（共同研究者）、H25～30 年度、5,200 千円（H27）、研究領域「ビッグデータ統合利活用のための次世代基盤技術の創出・体系化」、
「EBD：次世代の年ヨッタバイト処理に向けたエクストリームビッグデータの基盤技術」
6. KDDI 研究所共同研究、川島英之（代表）、H27 年度、1,000 千円、「データ仮想化システムにおける大規模データ処理方式に関する研究」
7. JST CREST、川島英之（共同研究者）、H26～30 年度、5,500 千円（H27）、研究領域「科学的発見・社会的課題解決に向けた各分野のビッグデータ利活用推進のための次世代アプリケーション技術の創出・高度化」、
「広域撮像探査観測のビッグデータ分析による統計計算宇宙物理学」
8. 科学研究費補助金 基盤研究 (B)、川島英之（分担）、H24～26 年度、800 千円（H26 年度）、
「高性能計算リソースの抽象化を実現するランタイムシステム」
9. 科学研究費補助金 若手研究 (B)、多田野寛人（代表）、H27～28 年度、1,690 千円（H27 年度）、
「複数右辺ベクトルをもつ連立一次方程式に対する高精度・高効率アルゴリズムの開発」

知的財産権

なし

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. 小田嶋哲哉, 朴泰祐, 埴敏博, 児玉祐悦, 村井均, 中尾昌広, 田淵晶大, 佐藤三久, “アクセラレータ向け並列言語 XcalableACC における TCA/InfiniBand ハイブリッド通信”, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS), Vol. 8, No.4, pp. 61-77, 2015 年 11 月.
2. 松本和也, 埴敏博, 児玉祐悦, 藤井久史, 朴泰祐, “密結合並列演算加速機構 TCA による GPU 間直接通信における Collective 通信の実装と性能評価,” 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS), Vol. 8, No.4, pp. 36-49, 2015 年 11 月.
3. Tetsuya Odajima, Taisuke Boku, Toshihiro Hanawa, Hitoshi Murai, Masahiro Nakao, Akihiro Tabuchi, Mitsuhsa Sato, “Hybrid Communication with TCA

- and InfiniBand on A Parallel Programming Language for Accelerators XcalableACC”, Proc. of HUCAAA2015 (in Cluster2015), Chicago, 2015.
4. Toshihiro Hanawa, Norihisa Fujita, Tetsuya Odajima, Kazuya Matsumoto, Taisuke Boku, “Evaluation of FFT for GPU Cluster Using Tightly Coupled Accelerators Architecture”, Proc. of HUCAAA2015 (in Cluster2015), Chicago, 2015.
 5. Toshihiro Hanawa, Hisafumi Fujii, Norihisa Fujita, Tetsuya Odajima, Kazuya Matsumoto, Yuetsu Kodama, Taisuke Boku, “Improving Strong-Scaling on GPU Cluster Based on Tightly Coupled Accelerators Architecture”, Proc. of IEEE Cluster2015 (short paper), Chicago, 2015.
 6. Kazuya Matsumoto, Toshihiro Hanawa, Yuetsu Kodama, Hisafumi Fujii, Taisuke Boku, “Implementation of CG Method on GPU Cluster with Proprietary Interconnect TCA for GPU Direct Communication”, Proc. of AsHES2015 in IPDPS2015, Hyderabad, 2015.
 7. T. Amagasa, S. Aoki, Y. Aoki, T. Aoyama, T. Doi, K. Fukumura, N. Ishii, K. Ishikawa, H. Jitsumoto, H. Kamano, Y. Konno, H. Matsufuru, Y. Mikami, K. Miura, M. Sato, S. Takeda, O. Tatebe, H. Togawa, A. Ukawa, N. Ukita, Y. Watanabe, T. Yamazaki and T. Yoshie , “Sharing lattice QCD data over a widely distributed file system”, Journal of Physics: Conference Series, 664, 8 pages, 2015 (DOI:10.1088/1742-6596/664/4/042058)
 8. Hiroki Ohtsuji, Osamu Tatebe, “Network-based Data Processing Architecture for Reliable and High-performance Distributed Storage System”, Euro-Par 2015: Parallel Processing Workshops, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 9523, pp.16-26, 2015 (DOI: 10.1007/978-3-319-27308-2_2)
 9. Shin Sasaki, Kazushi Takahashi, Yoshihiro Oyama, Osamu Tatebe, “RDMA-based Direct Transfer of File Data to Remote Page Cache,” Proceedings of 2015 IEEE International Conference on Cluster Computing (Cluster), pages 214-225, 2015. (DOI: 10.1109/CLUSTER.2015.40)
 10. Hiroki Ohtsuji, Osamu Tatebe, “Server-side Efficient Parity Generation for Cluster-wide RAID System”, Proceedings of 7th IEEE International Conference on Cloud Computing Technology and Science (CloudCom), pp.444-447, 2015 (DOI: 10.1109/CloudCom.2015.25) (short paper)

11. Hiroki Ohtsuji and Osamu Tatebe, “Active-Storage Mechanism for Cluster-wide RAID System”, Proceedings of IEEE International Conference on Data Science and Data Intensive Systems (DSDIS), pp.25-32, 2015
(DOI: 10.1109/DSDIS.2015.101)
12. Shin Sasaki, Ryo Matsumiya, Kazushi Takahashi, Yoshihiro Oyama, Osamu Tatebe, “RDMA-based Cooperative Caching for a Distributed File System,” Proceedings of the 21st IEEE International Conference on Parallel and Distributed Systems (ICPADS), pp.344-353, 2015
(DOI: 10.1109/ICPADS.2015.51)
13. Yasin Oge, Masato Yoshimi, Takefumi Miyoshi, Hideyuki Kawashima, Hidetsugu Irie, Tsutomu Yoshinaga, “Design and Evaluation of a Configurable Query Processing Hardware for Data Streams”, IEICE Transactions on Information and Systems, Vol. E98-D, No. 12, pp.2207-2217, December 2015.
14. L. Su, A. Imakura, H. Tadano, T. Sakurai, “Improving the convergence behaviour of the BiCGSTAB method by applying D-norm minimization”, JSIAM Letters, Vol. 7, pp. 37-40, 2015.

B) 査読無し論文

なし

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Taisuke Boku, “Extreme-SIMD Accelerator toward Exascale Computing”, International HPC Forum China 2015, Tianjin, May 20, 2015.
2. Taisuke Boku, “HPC Status Report from Japan”, HPC in Asia Session at ISC2015, Frankfurt, Jul. 15, 2015.
3. Taisuke Boku, “Case Study on PBS Pro Operation on Large Scale Scientific GPU Cluster”, PBS Works 2015, Mountain View, Sep. 16, 2015.
4. Taisuke Boku, “Accelerator+Communication+Language: New Age of Extreme Parallel Computing”, CODESIGN Workshop 2015 (in HPC China), Wuxi, Nov 10, 2015.
5. Taisuke Boku, “Communication and Calculation Co-design for HPC on FPGA”, ANL-FPGA Workshop 2015, Argonne, Jan. 21, 2016.

6. Daisuke Takahashi, “Sparse Matrix-Vector Multiplication on GPUs”, International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2015), Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Japan, September 14, 2015.

B) 一般講演

1. Tetsuya Odajima, Taisuke Boku, Toshihiro Hanawa, Hitoshi Murai, Masahiro Nakao, Akihiro Tabuchi, Mitsuhisa Sato, “Hybrid Communication with TCA and InfiniBand on A Parallel Programming Language for Accelerators XscalableACC”, Proc. of HUCAA2015 (in Cluster2015), Chicago, 2015.
2. Toshihiro Hanawa, Norihisa Fujita, Tetsuya Odajima, Kazuya Matsumoto, Taisuke Boku, “Evaluation of FFT for GPU Cluster Using Tightly Coupled Accelerators Architecture”, Proc. of HUCAA2015 (in Cluster2015), Chicago, 2015.
3. Toshihiro Hanawa, Hisafumi Fujii, Norihisa Fujita, Tetsuya Odajima, Kazuya Matsumoto, Yuetsu Kodama, Taisuke Boku, “Improving Strong-Scaling on GPU Cluster Based on Tightly Coupled Accelerators Architecture”, Proc. of IEEE Cluster2015, Chicago, 2015.
4. Kazuya Matsumoto, Toshihiro Hanawa, Yuetsu Kodama, Hisafumi Fujii, Taisuke Boku, “Implementation of CG Method on GPU Cluster with Proprietary Interconnect TCA for GPU Direct Communication”, Proc. of AsHES2015 in IPDPS2015, Hyderabad, 2015.
5. Hiroshi Maeda and Daisuke Takahashi, “Performance Evaluation of Sparse Matrix-Vector Multiplication Using GPU/MIC Cluster”, Proc. 2015 Third International Symposium on Computing and Networking (CANDAR'15), 3rd International Workshop on Computer Systems and Architectures (CSA'15), pp. 396-399 (2015).
6. Daisuke Takahashi, “Automatic Tuning for Parallel FFTs on Intel Xeon Phi Clusters”, 2016 Conference on Advanced Topics and Auto Tuning in High-Performance and Scientific Computing (2016 ATAT in HPSC), National Taiwan University, Taipei, Taiwan, Feb. 19, 2016.
7. Xieming Li and Osamu Tatebe, “Data-Aware Task Dispatching”, the 10th International Conference on Green, Pervasive and Cloud Computing (GPC 2015), Fiji, May 4, 2015

8. Fuyumasa Takatsu, Kohei Hiraga, and Osamu Tatebe, “Design of object storage using OpenNVM for high-performance distributed file system”, the 10th International Conference on Green, Pervasive and Cloud Computing (GPC 2015), Fiji, May 4, 2015
9. Yuki Kirii, Hiroki Ohtsuji, Kohei Hiraga, Osamu Tatebe, “Simulation of PPMDS: A Distributed Metadata Management System”, Summer of CODES Workshop, Argonne, USA, Jul. 13, 2015
10. Hiroki Ohtsuji, Osamu Tatebe, “Network-based Data Processing Architecture for Reliable and High-performance Distributed Storage System”, 4th Workshop on Big Data Management in Clouds (BigDataCloud), Vienna, Austria, Aug. 24, 2015
11. Shin Sasaki, Kazushi Takahashi, Yoshihiro Oyama, Osamu Tatebe, “RDMA-based Direct Transfer of File Data to Remote Page Cache,” 2015 IEEE International Conference on Cluster Computing (Cluster), Chicago, USA, Sep. 10, 2015
12. Hiroki Ohtsuji, Osamu Tatebe, “Breaking the Trade-off between Performance and Reliability of Network Storage System”, PRAGMA29, Depok, Indonesia, Oct. 7, 2015 (The Best Technical Talk Award)
13. Hiroki Ohtsuji, Osamu Tatebe, “Server-side Efficient Parity Generation for Cluster-wide RAID System”, 7th IEEE International Conference on Cloud Computing Technology and Science (CloudCom), Vancouver, Canada, Dec. 3, 2015
14. Hiroki Ohtsuji and Osamu Tatebe, “Active-Storage Mechanism for Cluster-wide RAID System”, IEEE International Conference on Data Science and Data Intensive Systems (DSDIS), Sydney, Australia, Dec. 11, 2015
15. Shin Sasaki, Ryo Matsumiya, Kazushi Takahashi, Yoshihiro Oyama, Osamu Tatebe, “RDMA-based Cooperative Caching for a Distributed File System,” 21st IEEE International Conference on Parallel and Distributed Systems (ICPADS), Melbourne, Australia, Dec. 17 2015
16. H. Tadano, S. Saito, A. Imakura, “Accuracy improvement of the Shifted Block BiCGGR method for linear systems with multiple shifts and multiple right-hand sides”, Poster Session, International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2015), Tsukuba, Japan, Sep., 2015.

17. H. Tadano, S. Saito, A. Imakura, “Development of the Shifted Block BiCGGR method and accuracy improvement of approximate solutions”, International Conference on Simulation Technology (JSST2015), Toyama, Japan, Oct., 2015.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 朴泰祐, “JCAHPCにおける国内最大PCクラスタの導入と運用に向けて”, PCクラスタワークショップ, 仙台, 2016年2月19日.

B) その他の発表

1. Yuta Kuwahara, Toshihiro Hanawa, Taisuke Boku, “A proposal of GMPI: GPU self MPI for GPU clusters”, ACSI2016, 2016. (ACSI2016 Outstanding Research Award)
2. 松本和也, 埜敏博, 児玉祐悦, 藤井久史, 朴泰祐, “密結合並列演算加速機構TCAを用いたGPU間直接通信によるCollective通信の実装と性能評価”, 2015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 (HPCS2015) 論文集, 2015.
3. 津金佳祐, 朴泰祐, 村井均, 佐藤三久, William Tang, Bei Wang, “PGAS 言語 XcalableMP のハイブリッドビューによる核融合シミュレーションコードの実装と評価”, 2015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 (HPCS2015) 論文集, 2015.
4. 廣川祐太, 朴泰祐, 佐藤駿丞, 矢花一浩, “電子動力学シミュレーションコードの Symmetric モードによる Xeon Phi クラスタ への実装と性能評価”, 情報処理学会第 153 回 HPC 研究会報告 2016-HPC-153, 2016年3月.
5. 佐藤賢太, 藤田典久, 埜敏博, 松本和也, 朴泰祐, Ibrahim Khaled, “密結合並列演算加速機構 TCA による GPU 対応 GASnet の実装”, 情報処理学会第 153 回 HPC 研究会報告 2016-HPC-153, 2016年3月.
6. 辻美和子, 李珍泌, 朴泰祐, 佐藤三久, “SCAMP: MPI 疑似通信プロファイル による ネットワーク性能推定手法の提案”, 情報処理学会第 153 回 HPC 研究会報告 2016-HPC-153, 2016年3月.
7. 廣川祐太, 朴泰祐, 佐藤駿丞, 矢花一浩, “Xeon Phi クラスタにおける Symmetric 並列実行による電子動力学シミュレーションの性能評価”, 情報処理学会第 151 回 HPC 研究会報告 2015-HPC-151, 11 pages, 2015年10月.
8. 桑原悠太, 埜敏博, 朴泰祐, “GMPI : GPU クラスタにおける GPU セルフ MPI の提案”, 情報処理学会第 151 回 HPC 研究会報告 2015-HPC-151, 8 pages, 2015年10月.

9. 佐藤賢太, 藤田典久, 埴敏博, 朴泰祐, “密結合演算加速機構 TCA における Verbs 実装による MPI 環境の実現”, 情報処理学会第 150 回 HPC 研究会報告 (SWoPP2015) 2015-HPC-150, 8 pages, 2015 年 8 月.
10. 松本和也, 埴敏博, 藤田典久, 朴泰祐, “密結合並列演算加速機構 TCA による並列 GPU コードの性能予測モデル”, 情報処理学会第 150 回 HPC 研究会報告 (SWoPP2015) 2015-HPC-150, 6 pages, 2015 年 8 月.
11. 小田嶋哲哉, 朴泰祐, 埴敏博, 村井均, 中尾昌広, 田淵晶大, 佐藤三久, “アクセラレータ向け並列プログラミング言語 XcalableACC における TCA/InfiniBand?ハイブリッド通信”, 情報処理学会第 150 回 HPC 研究会報告 (SWoPP2015) 2015-HPC-150, 12 pages, 2015 年 8 月.
12. 飯島大貴, 廣川祐太, 埴敏博, 朴泰祐, “密結合演算加速機構 TCA アーキテクチャの Intel MIC プロセッサへの適用”, 2015-HPC-149, 2015.
13. 高橋大介, “Xeon Phi における並列 FFT の実現と評価”, 日本応用数理学会 2015 年度年会講演予稿集 (2015).
14. 高橋大介, “Xeon Phi における多倍長精度浮動小数点演算の実現と評価”, 日本応用数理学会 2015 年度年会講演予稿集 (2015).
15. 椋木大地, 今村俊幸, 高橋大介, “NVIDIA GPU におけるメモリ律速な BLAS カーネルのスレッド数自動選択手法”, 情報処理学会研究報告, Vol. 2015-HPC-150, No. 13 (2015).
16. 高橋大介, “Xeon Phi クラスタにおける並列 FFT の自動チューニング”, 計算工学講演会論文集, Vol. 20, E-2-2 (2015).
17. 椋木大地, 今村俊幸, 高橋大介, “NVIDIA GPU における GEMV カーネルの自動チューニング”, 計算工学講演会論文集, Vol. 20, E-2-1 (2015).
18. Mohamed Amin Jabri, Osamu Tatebe, “Design of concurrent B+Tree index for native KVS on non-volatile-memories”, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC), 2015-HPC-150(25), 4 pages, Aug. 2015
19. 田中昌宏, 建部修見, 川島英之, 村田直郁, “すばる HSC データ処理の性能調査と Gfarm/Pwrake の適用”, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC), 2015-HPC-150(36), 8 pages, 2015 年 8 月
20. 桐井祐樹, 建部修見, Ross Robert, “CODES/ROSS による分散ファイルシステムのための分散メタデータサーバ PPMDS の評価”, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC), 2015-HPC-152(7), 9 pages, 2015 年 12 月
21. Osamu Tatebe, “System Software for Post Petascale Data-Intensive Science”, Sapporo Summer HPC Seminar 2015, Sapporo, July 23, 2015

22. Mohamed Amin Jabri, Osamu Tatebe, “Design of concurrent B+Tree index for native KVS on non-volatile-memories”, 情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC)研究発表会, 別府, Aug. 5, 2015
23. 田中昌宏, 建部修見, 川島英之, 村田直郁, “すばる HSC データ処理の性能調査と Gfarm/Pwrake の適用”, 情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC)研究発表会, 別府, 2015 年 8 月 6 日
24. 建部修見, “Gfarm ファイルシステムの概要と実演”, Gfarm ワークショップ, 神戸, 2015 年 9 月 4 日
25. 桐井祐樹, 建部修見, Ross Robert, “CODES/ROSS による分散ファイルシステムのための分散メタデータサーバ PPMDS の評価”, 情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) 研究発表会, 札幌, 2015 年 12 月 16 日
26. Fuyumasa Takatsu, Kohei Hiraga and Osamu Tatebe, “Design of object storage using OpenNVM for high-performance distributed file system”, 2nd Annual Meeting on Advanced Computing System and Infrastructure (ACSI2016), Fukuoka, Jan. 18, 2016
27. Shin Sasaki, Kazushi Takahashi, Yoshihiro Oyama and Osamu Tatebe, “RDMA-based Direct Transfer of File Data to Remote Page Cache”, 2nd Annual Meeting on Advanced Computing System and Infrastructure (ACSI2016), Fukuoka, Jan. 20, 2016
28. 川島英之, 建部修見, “縮退表現に基づくシーケンスパターン集合の圧縮”, 情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム (OS) , Vol. 2016-OS-136, No. 13, pp. 1-6, 2016.
29. Li Jiang, Hideyuki Kawashima, Osamu Tatebe, “Recursive Incremental Computation for Efficient Window Aggregate over Array Database”, 情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム (OS) , Vol. 2016-OS-136, No. 5, pp. 1-15, 2016.
30. Komei Kamiya, Hideyuki Kawashima, Osamu Tatebe, “Efficient Write Ahead Logging with Parallel Write”, Annual Meeting on Advanced Computing System and Infrastructure, 2016.
31. 堀尾健太郎, 川島英之, 建部修見, “暗号化データベースシステムにおける総和計算の並列化技法に関する評価”, 情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム (OS) , Vol. 2016-OS-136, No. 6, pp. 1-9, 2016.

32. 神谷孝明, 川島英之, 建部修見, “並列ログ先行書き込みの評価”, 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), Vol. 2015-HPC-150, No. 37, pp. 1-6, 2015.
33. 田中昌宏, 建部修見, 川島英之, 村田直郁, “すばる HSC データ処理の性能調査と Gfarm/Pwrake の適用”, 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), Vol. 2015-HPC-150, No. 36, pp. 1-8, 2015.
34. 堀尾健太郎, 川島英之, 建部修見, “暗号化データベースシステムにおける総和計算処理の並列化”, 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), Vol. 2015-HPC-150, No. 23, pp. 1-6, 2015.
35. 三橋龍也, 川島英之, 建部修見, “環結合による類似検索の高性能化”, 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), Vol. 2015-HPC-150, No. 16, pp. 1-8, 2015.
36. 川島英之, 建部修見, “縮退表現に基づくシーケンス演算処理の効率化”, 情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム (OS), Vol. 2015-OS-134, No. 9, pp. 1-7, 2015.
37. Li Jiang, Hideyuki Kawashima, Osamu Tatebe, “Design of Automatic Supernova Detection System”, 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), Vol. 2015-HPC-150, No. 19, pp. 1-8, 2015.
38. 堀尾健太郎, 川島英之, 建部修見, “暗号化データベースシステムにおける効率的な集約処理の評価”, 情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム (OS), Vol. 2015-OS-133, No. 19, pp. 1-10, 2015.
39. 神谷孝明, 川島英之, 建部修見, “P-WAL: 並列ログ先行書き込みの提案”, 情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム (OS), Vol. 2015-OS-133, No. 18, pp. 1-10, 2015.
40. 齋藤周作, 多田野寛人, 今倉暁, “Shifted Block BiCGSTAB(*l*)法の構築とその精度について”, 第 44 回数値解析シンポジウム (NAS2015), ふどうの丘, 2015 年 6 月.
41. 多田野寛人, 齋藤周作, 今倉暁, “複数右辺ベクトル・複数シフトをもつ線形方程式に対する Shifted Block Krylov 部分空間法の近似解の精度改善”, 【プラズマ壁相互作用における非線形現象の理論モデル構築と画像・動画解析手法開発に関する研究会】 & 【プラズマ工学・電磁会解析とその数値解析手法およびビジュアライゼーションに関する研究会】 合同研究会 第 1 回非線形・可視化部門研究会, 自然科学研究機構 核融合科学研究所, 2015 年 9 月.

(4) 著書、解説記事等

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1. 朴泰祐：日独仏・三ヶ国国際共同研究 SPPEXA（JST-CREST 内で実施）“MUST Correctness Checking for YML and XMP Programs”, 2015-2017,

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. Gfarm ワークショップ 2015, 神戸, 2015 年 9 月 4 日
2. Gfarm シンポジウム 2015, 東京, 2015 年 12 月 14 日
3. International Workshop on Language, Network and System Software (LENS2015), Tokyo, Oct. 29-30, 2015.

9. 管理・運営

組織運営や支援業務の委員・役員の実績

1. 朴泰祐：計算科学研究センター副センター長
2. 朴泰祐：計算科学研究センター・計算機システム運用委員長
3. 朴泰祐：筑波大学情報環境機構企画室室員
4. 朴泰祐：筑波大学ネットワーク管理委員会委員
5. 朴泰祐：HPCI 連携サービス委員会委員
6. 朴泰祐：理化学研究所客員研究員
7. 朴泰祐：東京大学情報基盤センター・スーパーコンピュータ専門委員会委員
8. 建部修見：HPCI 連携サービス運営・作業部会委員
9. 建部修見：理化学研究所客員研究員
10. 建部修見：HPCI 利用研究課題審査委員会レビューアー
11. 建部修見：学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）課題審査委員
12. 建部修見：東京工業大学学術国際情報センター共同利用専門委員
13. 建部修見：特定非営利団体つくば OSS 技術支援センター理事長
14. 建部修見：情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会運営委員
15. 建部修見：インターネットカンファレンス 2015 プログラム委員

10. 社会貢献・国際貢献

1. Taisuke Boku: Organizing Chair, HPC in Asia Session, ISC2015
2. Taisuke Boku: Program Committee, HiPC 2015
3. Taisuke Boku: Member, 2015 Gordon Bell Prize Selection Committee, ACM

4. Taisuke Boku: Member, DoE INCITE Proposal Review Committee
5. Taisuke Boku: Program Committee, International Workshop ExaComm2015
6. Taisuke Boku: Program Committee, SC15 Invited Talk Session
7. Taisuke Boku: Program Committee, 15th IEEE/ACM International Symposium on Cluster, Cloud and Grid Computing (CCGrid) 2015
8. 朴泰祐 : 情報処理学会 ACSI2015 シンポジウム・組織委員長
9. Osamu Tatebe: Program Committee, 15th IEEE/ACM International Symposium on Cluster, Cloud and Grid Computing (CCGrid) 2015
10. Osamu Tatebe: Program Committee, IEEE International Conference on Cluster Computing (Cluster) 2015
11. Osamu Tatebe: Program Committee, 7th IEEE International Conference on Cloud Computing Technology and Science (CloudCom) 2015
12. Osamu Tatebe: Program Committee, International Supercomputing Conference (ISC) 2015
13. Osamu Tatebe: Track Chair, 10th International Conference on P2P, Parallel, Grid, Cloud and Internet Computing (3PGCIC-2015)
14. Osamu Tatebe: Program Committee, Architecture, Languages, Compilation and Hardware support for Emerging ManYcore systems (ALCHEMY) Workshop 2015
15. Osamu Tatebe: Program Committee, 4th Workshop on Big Data Management in Clouds (BigDataCloud) 2015
16. Osamu Tatebe: Program Committee, 4th International Workshop on Advances in High-Performance Computational Earth Sciences: Applications & Frameworks (IHPCES) 2015
17. Hideyuki Kawashima: Program Committee, The IEEE International Conference on Multimedia Big Data (BigMM).
18. Hideyuki Kawashima: Program Committee, IEEE 9th International Symposium on Embedded Multicore/Many-core Systems-on-Chip (MCSoc-15)
19. 川島英之 : WebDB Forum プログラム委員
20. 川島英之 : 情報処理学会 データベースシステム研究会 運営委員
21. 川島英之 : 電子情報通信学会 論文誌査読委員
22. 川島英之 : 電子情報通信学会 知的環境とセンサネットワーク研究会 運営委員
23. 川島英之 : 電子情報通信学会英文論文誌小特集号 編集委員
24. 川島英之 : Annual Meeting on Advanced Computing System and Infrastructure (ACSI) 2016 プログラム委員

25. International Workshop on Eigenproblems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2015) Local Committee
26. 多田野寛人: 日本応用数学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会 主査
27. 多田野寛人: 日本応用数学会「若手の会」研究部会 運営委員
28. 多田野寛人: 日本応用数学会 JSIAM Letters 編集委員
29. 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 HPCS2016 プログラム委員
30. 多田野寛人 : Annual Meeting on Advanced Computing System and Infrastructure (ACSI) 2016 プログラム委員

11. その他

海外長期滞在、フィールドワークなど

なし

VIII. 計算情報学研究部門

VIII-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
助教	塩川 浩昭
研究員	Salman Ahmed Shaikh, Franck Gass, 駒水 孝裕, 山口 祐人
学生	大学院生 23 名、学類生 6 名

2. 概要

計算科学において、大規模データの管理や活用は極めて重要な課題となっている。計算情報学研究部門データ基盤分野は、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 関連技術等の研究を継続して行っている。また、国際睡眠医科学統合機構(IHS)等との連携を通じて、計算科学の各分野における応用的な研究を推進している。

3. 研究成果

【1】情報統合基盤技術

(関連研究費：文部科学省受託研究，基盤研究(B)，日本電気株式会社，株式会社ユーザーカル)

(1) イベント駆動型ストリーム処理の効率化

ストリームデータの増加に伴い、ストリームデータ処理方式は重要な課題となっており、ストリームデータ処理を行うためのストリーム処理エンジン (SPE) が様々な研究者や企業により開発されている。SPE は複数のストリーム情報源からデータが到着するたびに、予め指定された問合せを処理し結果を出力することを可能とする。

ストリームデータに対する処理要求の高度化にともない、特定のストリーム情報源からデータが到着した時にのみ問合せ処理を実行したいという状況が考えられる。例えば、あるニュースが発生した際に、関連するツイートを収集するという状況である。特定の状況が発生した場合にのみ問合せ処理を行う方式をイベント駆動型ストリーム処理と呼び、本研究ではイベント駆動型ストリーム処理を効率的に行う手法として、指定イベント駆動型ストリーム処理モデルを提案した。

平成 26 年度の時点の研究成果では、指定イベント駆動型ストリーム処理モデルのプロトタイプを作成したとともに、その有効性確認実験を行った。本年度は、平成 26 年度に作成したプロトタイプから (1) 指定イベント駆動型ストリーム処理モデルの効果を確認するための既存モデルとの比較実験、および、(2) 複数問合せを同時に実行する際の効率化手法の提案の二点において拡張を行った。

本研究で提案する指定イベント駆動型ストリーム処理では、スマートウィンドウ方式を導入している。既存の処理方式では、イベントが発生していないにもかかわらず、受け取った

データを処理することで計算機リソースの無駄が発生していた。これに対し、スマートウィンドウ方式はイベント発生までの間データを処理せず保管しておくことで無駄な処理を省く方式である。平成 26 年度時点の評価実験では、本研究で開発したプロトタイプにスマートウィンドウ方式を適用した場合と適用しない場合の性能差を確認した。本年度はより客観的な評価を行うために、既存の SPE である Stanford STREAM との比較を行った。スマートウィンドウ方式の効果を確認するために、実際に処理したデータ量およびスループットの比較評価を行った。図 1, 図 2 にそれぞれ実験結果を示す。図 1 から既存の SPE である STREAM (緑線) に比べてスマートウィンドウ方式 (赤線) が不要なデータ処理を削減出来ていることが確認できた。また、図 2 からスマートウィンドウ方式によって単位時間あたりにより多くのデータを処理できていることが確認できた。

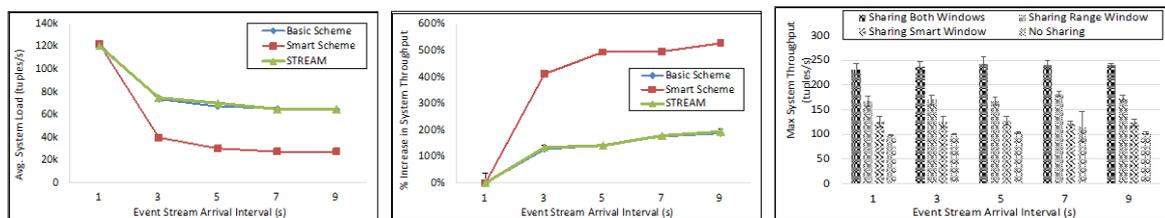


図1. データ処理量

図2. スループット

図3. 複数クエリ最適化効率

ストリーム処理を行う際、ユーザは問合せを SPE に予め登録する。SPE は一般的に複数の問合せを受け付けることができることから、複数の問合せが登録された場合にそれらを効率的に処理することが重要となってくる。複数の問合せを処理する際の方針としては、複数の問合せのあいだで共通する部分問合せを一括して計算することで冗長な処理を避ける。しかしながら、本研究で提案するスマートウィンドウ方式ではこのアイデアを単純には適用できない。そこで本年度は、スマートウィンドウ方式でも複数問合せを効率的に処理する方法を提案した。提案手法の有効性を確認するために、共通化する部分問合せを変化させた場合のスループットを比較した。比較結果を図 3 に示す。共通化した場合 (図中の Sharing Both Windows) が共通化しない場合 (図中の No Sharing) に比べて、倍近くのスループットであり、提案手法が有効であることが確認できた。

(2) ストリームに対するオンライン分析処理 (OLAP)

前年度に引き続き、ストリーム OLAP 基盤の研究開発を行った。

本研究では、時々刻々と配信されるストリーム型のデータに対して、オンライン多次元分析処理 (OLAP) を可能にする基盤システムを開発している。提案システムは、ストリームデータを処理する SPE と従来型の (ストリーム非対応の) OLAP 処理エンジンを組み合わせることでストリームデータに対する OLAP 分析 (以下、Stream OLAP) を実現する (図 4)。

Stream OLAP を実現する最も単純な方法として、異なる粒度に対する問合せを SPE にあらかじめ全て登録するアプローチが考えられる。ところが一般に複数の次元に対して複

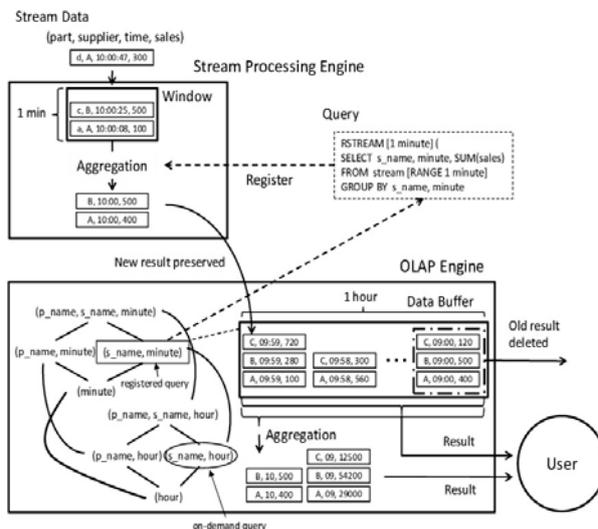


図 4. Stream OLAP システムアーキテクチャ

数の粒度が考えられるため、それらの全ての組合せをカバーすることは、組合せ爆発を招くため現実的ではない。また、必ずしも全ての粒度を常に処理しておく必要はなく、ユーザの要求に応じて動的に計算することも考えられる。この場合、解を導出するための処理コストやレイテンシが問題となるため、メモリが許す限り多くの解を実体化しておき、それ以外の解については要求時に動的に計算するアプローチが考えられる。

そこで本研究では、コストモデルに基づいた最適化アルゴリズムを提案する。これは、全 OLAP 問合せを、(1) SPE に連続的問合せとして登録し集約結果を実体化しておく問合せと、(2) ユーザ要求に応じて実体化した問合せ結果から自身の集約結果を導く問合せ (On-demand Query) の二種類に分類する。この分類を、与えられたメモリ制約の範囲内で、処理コストが最小になるように行うアルゴリズムである。

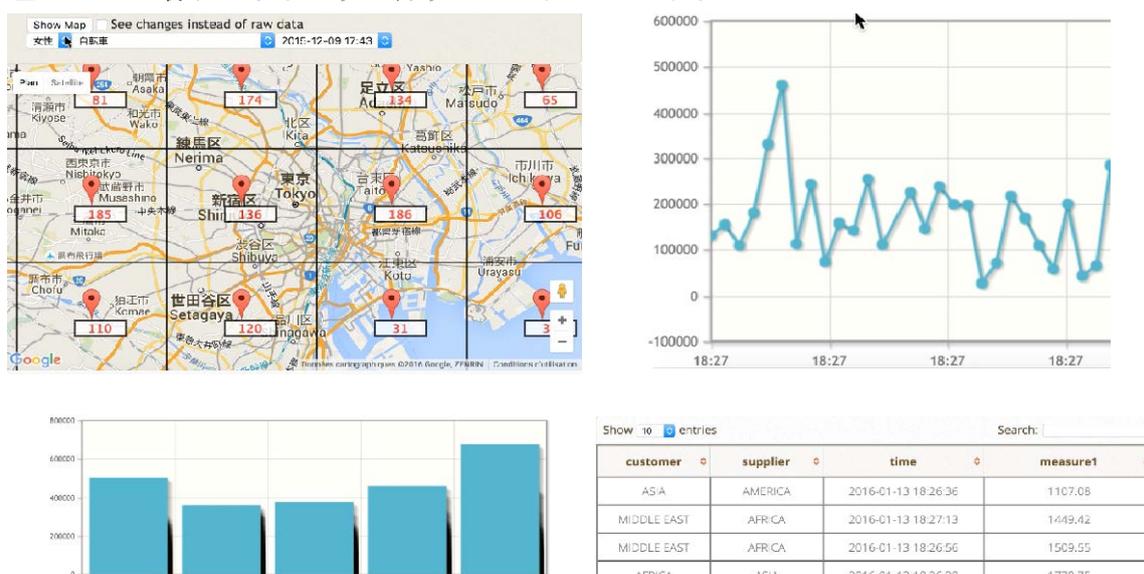


図 5. Stream OLAP の GUI インタフェース

さらに、開発したプロトタイプシステムをベースに、対話的な分析を行うためユーザインタフェースを開発した。開発したインタフェースでは、リアルタイムに更新されるストリームデータに対して、位置情報を利用した地図表示や数値データに対するヒストグラム、折れ線グラフ、さらにテーブル形式での表示が可能である (図 5)。

(3) メタデータ推定

ソーシャルメディアは今日重要な情報源であり、ソーシャルメディアデータに対するメタデータの推定・付与は、異種データの連携に極めて有用である。例えば、ソーシャルメディアユーザの居住地を推定できれば、ソーシャルメディアとニュースメディア等のデータとを統合することで、実世界のどこでどのようなニュースが注目されているかなどが分かる。

本研究ではメタデータを推定するアルゴリズムとして、ノード分類アルゴリズムを提案した。本研究で提案するノード分類アルゴリズムを用いると、Twitterにおけるユーザ居住地にかぎらず様々なソーシャルメディアにおける多様なメタデータを推定することが可能となる。

ネットワークにおけるノード分類とは、一部のノードにラベルが付与されたネットワークが与えられた時、ラベルが付与されていないノードのラベルを推定する問題である。例えば、ソーシャルメディアにおけるユーザ間の関係を表したネットワークを入力とし、ユーザの居住地、年齢、性別などのラベルを推定する問題がこれに当たる。他にも様々な問題に対して応用可能であるため、ノード分類は幅広く研究されている問題である。

ノード分類問題を解く主要なアルゴリズムとしてBelief Propagation (BP)がある。BPは、あるラベルAと接続しやすいラベルはラベルBであるというパラメータを指定することで任意のラベル相関を持つネットワークに適用できる。例えば、ソーシャルグラフ上において隣接ノード同士は居住地に近い傾向にあると言われているが、Pokectと呼ばれるソーシャルメディア上では隣接ノードは性別が異なる傾向にあることが分かっている。BPはこのような様々なラベル相関を持つ実世界のネットワークを扱うことが可能である。

しかし、BPは分類結果の確信度を考慮しない。あるノードのラベルを推定するとき、そのノードの隣接ノードが多いほど手がかりとなる情報が多いため、より確信度を持って推定することができる。そこで本研究では確信度を考慮することができ、かつBPの強みである様々なラベル相関への適用性も合わせ持つノード分類アルゴリズムを提案する。これにより、様々なネットワークにおけるノード分類をより高精度に行うことが可能になる。

本研究の着眼点は、ラベル推定の対象となるノードがどれくらいの隣接ノード数を持つかを考慮するという点である。あるノードAの隣接ノードが1、ノードBの隣接ノードが100あるとする。提案アルゴリズムは隣接ノードのラベルに基づいて繰り返しノードのラベルを推定する。このとき、提案アルゴリズムではノードBの推定結果はAより確信度が高いとみなすため、次の繰り返しではBのラベルをAのラベルより強い手がかりとして積極的に利用する。こうすることにより、最終的なラベル推定結果の精度を向上させる。本研究では様々な相関を持つ5つのネットワークを用いて既存手法のノード分類精度と比較を行った結果、ほぼ全てのデータセットにおいて提案手法が最も高い精度を示すことを確認した。

【2】 データマイニング・知識発見技術

(関連研究費：文部科学省受託研究，基盤研究(B)，Sky 株式会社)

(1) 大規模グラフの分析の高速化

グラフデータ分析技術には情報検索や推薦など様々な応用があることから、分析処理の高速化が求められている。特に近年では、マルチコア CPU を利用したグラフ分析手法の並列化による高速化手法が盛んに研究されているが、グラフ処理は局所性の低いメモリアクセスパターンを示すことからキャッシュ効率が悪くなるため、メモリ帯域の飽和が発生しスケーラビリティが低下するという問題がある。

例えば、図 6 (a)に示したグラフデータは計算機上において図 6 (b)に示すような隣接行列表現として保持される。この隣接行列表現を用いて PageRank や最短経路分析などのグラフ分析を実行した場合、計算時に読み込む必要のある数値データはメモリ空間上において互いに離れた領域にそれぞれ格納されることとなる。そのため、CPU のプリフェッチ機能やキャッシュ機能が効果的に作用せず、計算を行うたびにメモリ空間上から CPU レジスタへ数値データを読み込む必要がある。マルチコア CPU を用いた場合、計算に用いた全ての CPU コアが上述のようにメモリ空間上から数値データを読み込むこととなるため、結果として計算機のメモリ帯域幅を使いきりスケーラビリティが低下してしまうことになる。

本研究では、マルチコア CPU を用いた大規模グラフ分析における上述の課題を解決するために、数十億ノード規模のグラフデータに対して高いキャッシュヒット効率を示すデータレイアウトを与える手法 Rabbit Order を提案した。Rabbit Order では、実世界のグラフデータが階層的なコミュニティ構造を持つことに着目し、グラフクラスタリング手法を利用した階層的なデータレイアウトを構築する。

例えば図 6 (a)で示したグラフデータは、図 6 (c)のように 2つのコミュニティ構造を持つことがグラフクラスタリング手法を用いることでわかる。Rabbit Order では、このコミュニティに対して、コミュニティに含まれるノードがメモリ空間上において互いに連続した領域に格納されるようにデータレイアウトを構築する。これにより、CPU の持つプリフェッチ機能

やキャッシュ機能の実行効率を向上させ、可能な限りメモリ空間上からデータを読み込まないようにする。その結果として、マルチコア CPU を用いて大規模グラフを分析した場合においても、計算機のメモリ帯域幅を使いきらずに分析を並列化することが可能となる。

本研究では実世界のグラフデータを用いて、Rabbit Order と既存のグラフデータレイアウト手法におけるキャッシュヒット率およびスケーラビリティを評価した。図 7 に示すように、提案手法 Rabbit Order は既存手法と比較して最も高いスケーラビリティを示すことを明らかにした。

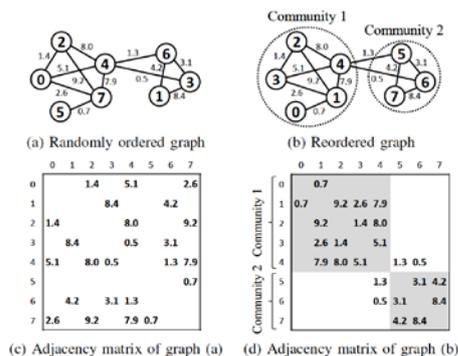


図 6. グラフの行列表現

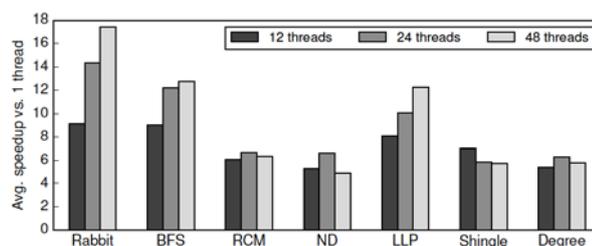


図 7. スケーラビリティの比較

(2) GPU を利用したデータマイニングの高速化

今年度は、演算加速装置 (GPU) を用いた大規模データからのマイニングに関して、(1) 集合間類似度に基づくテキストデータに対する類似結合の高速化、(2) キャンノピークラスタリングの高速化、ラベル伝搬法によるグラフクラスタリングの高速化、(3) SIFT 特徴量に基づく画像検索の高速化、に関する研究を実施した。以下では、ラベル伝搬法によるグラフクラスタリングの高速化について述べる。

グラフデータ分析手法の一種であるグラフクラスタリングが注目を集めている。グラフクラスタリングは、グラフデータから、密に接続した頂点の集合をクラスタとして抽出する技術である。グラフクラスタリングは、Web やソーシャルネットワークから生物学など、多種多様なグラフデータに対する応用が考えられている。しかし、近年の情報通信技術の進歩に伴い、グラフデータの大規模化が進んでいるという問題がある。巨大なネットワークに対してグラフクラスタリングを適用するためには、クラスタリング処理の高速化が非常に重要な課題となる。

高速なグラフクラスタリングアルゴリズムの一つとして、ラベル伝搬法が存在する (図 8)。ラベル伝搬法は、グラフの辺数に比例する計算量を持ち、他の多くのアルゴリズムより効率的である。また、処理性能だけでなく、クラスタリング精度においても良い性能を示すという結果が報告されている。さらに、局所的な情報のみをもとにクラスタリング処理を行うため、並列化に適しているという利点もある。これは、現在のプロセッサのマルチコア化・メニーコア化を考慮すると、処理の高速化を行なうにあたって極めて重要な特性であると考えられる。

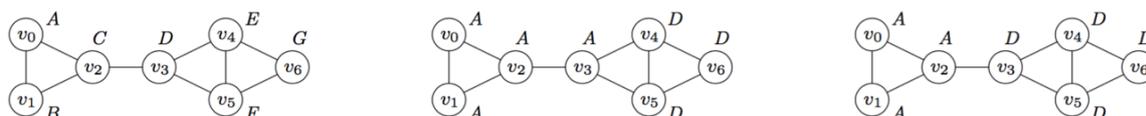


図 8. ラベル伝搬法によるグラフクラスタリング

一方、GPU (graphics processing unit) を一般の計算に用いる GPU コンピューティングが注

目されている。しかし、GPU の性能を引き出すためにはいくつかの技術的課題を解決する必要がある。特に、GPU 上でグラフデータを処理するにあたって、負荷分散が重要な課題となる。これは、多くの実世界のグラフデータにおいて、次数分布はべき乗則に従うことが知られており、かつ GPU 上では千以上のスレッドが並列に動作するので、単純に頂点ごとに処理を振り分けるような並列化では非常に非効率的となってしまうためである。GPU を用いてラベル伝搬法の高速化を行なった研究が既に存在するが、負荷分散に関してはあまり考慮されていないという問題点がある。

本研究では、既存研究と異なり、GPU 上での負荷分散を考慮したグラフクラスタリングの高速化を行なった。まず、ラベル伝搬法をベースに、アルゴリズムを GPU 上での高並列処理に適した形式へと変換する。これにより、各スレッドが行なう仕事量を均一化すると同時に、GPU に適した処理である、配列上の単純な操作のみでクラスタリング処理が可能となる。さらに、segmented sort や segmented reduce などの、次数の偏りが存在するデータにおいても効率的に並列処理が可能な演算を活用する。本稿では、実世界のグラフデータと合成データを用いて評価実験を行なった。その結果、処理性能においては、既存手法と比較して最大で 117 倍の高速化を達成した。また、正解クラスタ情報を用いたクラスタリング精度の評価においても、提案する GPU を用いたラベル伝搬法が良い性能を示した。

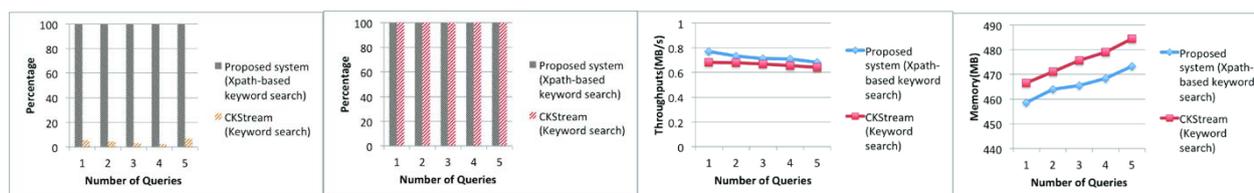
【3】XML・Web プログラミング

(関連研究費：文部科学省受託研究，基盤研究(A)，基盤研究(C)，株式会社富士通研究所)

(1) XML ストリームに対するキーワード検索

本研究では、XML ストリームに対して、指定したキーワードが特定のパス式に含まれるような部分 XML データを検索する手法を開発した。より具体的には、キーワード検索と XPath に基づく検索を合わせた検索を可能にする。本研究では、非決定性有限オートマトンを基にした手法を拡張して、パス式とキーワードを組み合わせた検索を XML ストリームに適用することを可能にした。

本研究の有効性を示すために、人工データと実データを利用して評価を行った。人工データとしては、XMark データセットを利用した。実データとしては、DBLP の XML データと Mondial を用いた。実験では、検索精度（適合率および再現率）と性能（スループットおよびメモリ使用量）について評価を行った。既存研究の CKStream と本研究を比較した結果を示す。精度については、既存手法、提案手法ともに問合せにマッチするべき結果がすべて抽出されている（図 9. 実験結果(b)）。一方、既存手法の適合率は不要な検索結果も抽出しているのに対し、提案手法では必要な検索結果だけを抽出できていることがわかる（図 9. 実験結果 (a)）。性能評価では、単位時間あたりのデータ処理量（スループット：図 9. 実験結果 (d)）では、既存手法よりも大きいサイズのデータを処理できている。また、メモリ使用量（図 9. 実験結果 (c)）は既存手法よりも少ないメモリ量で検索を実現している。



(a) 適合率

(b) 再現率

(c) メモリ使用量

(d) スループット

図 9. 実験結果

(2) LOD に対するビューおよび LINQ による問合せ

前年度に引き続き、LOD (Linked Open Data) に対して、LINQ (Language Integrated Query) を使った簡便な問合せを実現するシステムについて研究開発を行った。

LOD (Linked Open Data) はコンピュータ処理に適したオープンデータを、ウェブ上で公開・共有するための方法である。LOD では、RDF (Resource Description Framework) を用いてリソース自身と他のリソースとの関係を記述することができる。これにより、異なる種類のデータを互いにリンクすることで、データの相互利用性の向上が期待されている。しかしながら、LOD では多様な問題領域における多様なデータセットが存在するため、複数の異なるデータセットを活用するには、それぞれについて複雑なグラフ構造を理解する必要がある。さらに、データセット固有の語彙や SPARQL 問合せ言語など多くの事前知識や準備が必要である。

これに対して、我々の研究グループでは、プログラミング言語に埋込む形でデータベースに対する問合せを記述することができる LINQ を利用し、半構造データ形式である JSON 形式のビューを用いた LOD に対する問合せ手法を研究開発してきた。具体的には、扱いたい LOD を良く知る開発者が、LOD データベース (SPARQL エンドポイント) に対して、情報要求に基づいたビュー定義を行う。これにより、SPARQL エンドポイントの一つまたは複数の仮想的に JSON データとして扱うことが可能となる。利用者は、JSON ビューに対して LINQ 形式で問合せを発行することで、JSON 形式の問合せ結果を得ることができる。システムは内部で受け取った LINQ 問合せをビュー定義に基づいて SPARQL 問合せに変換し、SPARQL エンドポイントに問合せを発行する。得られた問合せ結果をビュー定義に基づき JSON 形式に変換して利用者に返却する (図 10)。

これまでの研究を受け、今年度は (1) 複数の SPARQL エンドポイントを含むような分散問合せのサポート、(2) SPARQL エンドポイントやネットワークの性能を考慮した分散問合せ最適化方式を検討した。具体的には、システムを複数の異なる SPARQL エンドポイントに対して問合せ可能なように拡張した。さらに、各 SPARQL エンドポイントにおける JSON ビューに関する各種統計情報や問合せ処理性能、さらにネットワーク帯域幅等をメタデータとして想定し、これらを考慮した上で問合せの書き換えを行う。これにより、著しく性能が異なる SPARQL エンドポイントやネットワークが混在する状況において、最適な問合せ処理を行うことができる。プロトタイプシステムによる予備的な評価を行い、SPARQL が本来持っている分散問合せ処理機能に対して、提案手法の方が性能的に優位であることを確認した (図 11)。

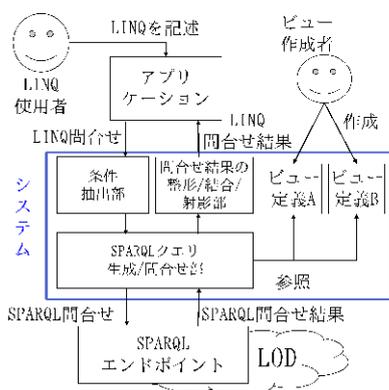


図 10. システム概要

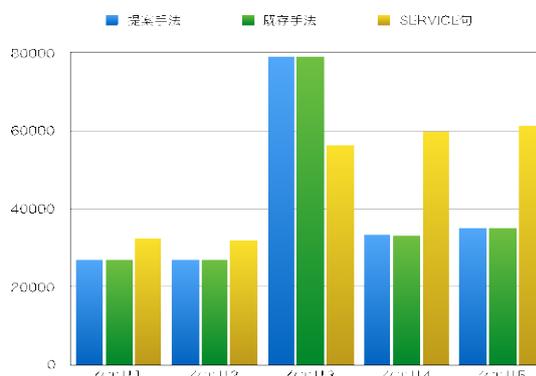


図 11. 評価実験

(3) LOD に対する OLAP 分析のための ETL フレームワーク

Linked Open Data (LOD) はデータを公開する枠組みとし欧州を中心に全世界的に広がっている。これまでにすでに様々なデータが LOD として公開されており、今後もますます増えていくことが予想される。最も有名なデータは DBpedia である。DBpedia のような辞典データだけでなく、様々な事実が LOD データとして公開されてきている。例えば、東日本大震災に関するデータを東日本大震災アーカイブ福島協議会が収集し、公開している。また、桜島の噴火に関連して、鹿児島市の避難所の情報が公開されている。このように多様なデータが LOD として公開されるようになってきており、LOD として公開されたデータを分析したいという要求がある。

データの分析方法として、伝統的な方法として OLAP がある。OLAP は複数の属性を持ったデータに対する分析手法で対話的に分析を行うことができる。分析者はいろいろな側面から分析を行いたいと考えることが多く、OLAP はそのような分析時に有用である。

本研究の目的は LOD で公開されたデータを OLAP 分析できるようにすることである。LOD として公開されたデータはそのままでは OLAP 分析できない形式になっている。そのために、まず LOD として公開されたデータを解析し、OLAP 分析可能な形式に変換する必要がある。加えて、LOD として公開されているデータはデータサイズが大きく、データを取得する際にクエリを発行してデータを取得する必要がある。このようにデータを取得するだけでも大きな労力になってしまう。

これらの問題点に対し、本研究は OLAP 分析に必要なデータを LOD データから段階的に取得するフレームワーク SPOOL を提案する。まず、SPOOL は分析対象となりうるデータの候補を検出する。利用者は候補から分析対象を選択する。SPOOL は選択された候補を手がかりに、データを分析するための属性を抽出する。抽出された属性に対して、利用者は分析に不要な属性を排除することができる。SPOOL は残った属性から OLAP 分析に必要なデータ構造を生成し、LOD データからデータ構造に合うデータのみを所得するクエリを発行し、OLAP 分析を可能にする。我々は SPOOL を実際のデータに適用し SPOOL によって LOD データに対して OLAP 分析を可能であることを確認した。

【4】科学分野におけるデータベース応用

(関連研究費：新学術領域)

(1) GPV/JMA アーカイブ

地球環境研究部門と共同で、気象庁気象予報データベース「GPV/JMA アーカイブ」(<http://gpvjma.ccs.hpcc.jp>)の開発、および管理、運用を行っている(図 12)。GPV/JMA アーカイブは、気象庁が公開している気象予報グリッドデータ(GPV データ)を蓄積するとともに、外部登録ユーザへのデータを提供することを目的としている。GPV/JMA アーカイブで提供しているデータは、全球モデル、メソスケールモデル、リージョナルスケールモデル、週間アンサンブル、月間アンサンブル、季間アンサンブルの 6 種類である。



図 12. GPV/JMA アーカイブ

(2) 格子 QCD データグリッド ILDG/JLDG

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

(3) 時系列を考慮した睡眠ステージ判定

本研究では睡眠計測のための脳波解析を自動化に向け、マウスから取得された脳波および筋電図を用いた睡眠ステージの自動判定手法アルゴリズム・ソフトウェアの開発を行った。特に本年度は、Sunagawa らにより 2013 年に提案された FASTER と呼ばれる睡眠ステージ判定アルゴリズムの改善を題材に、先行技術よりも高精度なアルゴリズムの開発に取り組んだ。

本年度は先行技術 FASTER の性能分析結果を基に、より高精度な睡眠ステージ判定を実現するアルゴリズム exFASTER を開発した。先行技術 FASTER の判定誤りの多くは、脳波および筋電図データの時系列的な情報を利用しないことに起因している。一方で、先行技術 FASTER において正しく判定できないエポックの中には、時系列を考慮することで正しい判定へと修正可能であるものが多く存在する。そこで本研究は、先行技術 FASTER の自動判定結果から、時系列的に不自然な睡眠ステージ遷移を行うエポックを抽出し、それらのエポックを時系列的に正しい睡眠ステージ遷移へと修正するアルゴリズム exFASTER を提案した。

exFASTER の概要を図 13 に示す。exFASTER では、時系列的に不自然な睡眠ステージ遷移を抽出するために、各睡眠ステージの遷移をマルコフモデルによりモデル化した。人手でラベル付けした信頼性の高い睡眠ステージ判定結果（正解データ）からマルコフモデルの遷移確率を学習することで、先行技術 FASTER の出力結果の中から正解データから乖離した睡眠ステージ判定が行われたエポックを特定する。exFASTER は、この手順を経て特定したエポックを先に構築したマルコフモデルを用いて最も尤度の高い睡眠ステージ遷移へと修正する。提案技術 exFASTER は、上述の手順を通じて先行技術 FASTER の判定誤りを修正することで睡眠ステージの自動判定の高精度化を実現する。

本年度は提案したアルゴリズム exFASTER のソフトウェアを開発するとともに、比較的ノイズの少ないマウス 14 匹分の脳波および筋電図データを用いて性能評価を行った。性能評価の結果、提案技術 exFASTER は先行技術 FASTER に対して判定精度を約 3%程度改善し、結果として 93.41%の睡眠ステージ自動判定精度を達成することを明らかにした。一方で、レム睡眠の自動判定に限定した場合の精度は、先行技術 FASTER と同程度の 79.72%にとどまり、さらなる改善の余地が必要な状況であることを確認した。

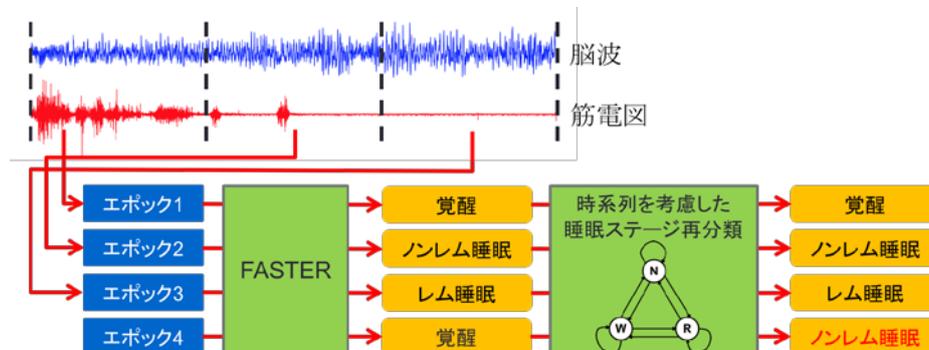


図 13. exFASTER の概要

4. 教育

学生の指導状況（学生氏名、学位の種類、論文名）

<修士（工学）>

1. TRAN VAN DIEN

文献データベースにおける Wikipedia を利用した検索結果のクラスタリングに関する研究

2. 大西 誠

オンラインニュースとツイートのリアルタイムマッチング手法

3. 川合 健斗

暗黙的フィードバックを用いた推薦システムに関する研究

4. 熊本 和正

ビューを用いた SPARQL エンドポイントに対する分散問合せ処理

5. 小柳 涼介

木構造データに対する高速な類似検索に関する研究

<修士（工学）：特定課題研究>

1. 大桶 真宏

問題解決の実践によるプログラミング教育向け学習支援システム

ーWeb アプリケーションの開発と自動評価機能およびサンドボックス環境の実装ー

2. 柳沼 工也

リポジトリデータを利用したソフトウェア開発者評価支援システムの開発

ーリポジトリ連携機能の開発ー

<学士（情報科学，情報工学）>

1. 秋山 賢人

索引を用いた複数演算対応の秘匿検索

2. 草村 優太

GPU を用いた類似画像検索の高速化

3. 長城 沙樹

オンラインニュースに対する Twitter 上での地域局所的な注目の分析及び予測

4. 丸山 純

EPUB 出版物のための EPUBCFI に対する索引手法に関する研究

5. 王 可婧

ストリームデータに対する OLAP 分析のための可視化手法

6. 索手 一平

複数の推定手法の誤り傾向の違いを利用したソフトウェアプロダクト派生関係のアンサンブル推定手法

集中講義など

1. 大学院共通科目「計算科学リテラシー」講義分担：天笠
2. 大学院共通科目「Computational Science Literacy」講義分担：天笠

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

(賞の名称、受賞者名、タイトル、年月日)

1. Best Paper Award, Shun Fukusumi, Atsuyuki Morishima and Hiroyuki Kitagawa, "Game Aspect: An Approach to Separation of Concerns in Crowdsourced Data Management", 27th International Conference on Advanced Information Systems Engineering (CAiSE2015), 2015 年 6 月 12 日.
2. Best Paper Award, Takahiro Komamizu, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "SPOOL: A SPARQL-based ETL Framework for OLAP over Linked Data", 17th International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services (iiWAS 2015), 2015 年 12 月 13 日.
3. 最優秀インタラクティブ賞, 太田 千尋, 森嶋 厚行, 中村 聡史, 寺田 努, 北川 博之, 第 8 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 2016), 2016 年 3 月 2 日.
4. 学生プレゼンテーション賞, 秋山 賢人, 渡辺 知恵美, 北川 博之, "索引を用いた複数演算に対応した安全で効率的な秘匿検索手法", 第 8 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 2016), 2016 年 3 月 2 日.
5. 学生プレゼンテーション賞, 長城 沙樹, 山口 祐人, 北川 博之, 天笠 俊之, "オンラインニュースに対する Twitter 上での地域局所的な注目の分析及び予測", 第 8 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 2016), 2016 年 3 月 1 日.
6. 学生奨励賞, 秋山 賢人, 渡辺 知恵美, 北川 博之, "索引を用いた秘匿検索における安全性の高い複数演算の連携法", 情報処理学会第 78 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2016), 2016 年 3 月 12 日.
7. 学生奨励賞, 草村 優太, 小澤 佑介, 天笠 俊之, 北川 博之, "GPU を用いた類似画像検索の高速化", 情報処理学会第 78 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2016), 2016 年 3 月 12 日.

8. 学生奨励賞, 索手 一平, 早瀬 康裕, 北川 博之, "可逆圧縮を利用したプロダクト派生関係推定手法の実験的評価 - 圧縮アルゴリズム毎の誤りの傾向分析 -", 情報処理学会第 78 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2016), 2016 年 3 月 12 日.
9. 2015 年度日本データベース学会若手功績賞, 天笠 俊之, 2016 年 3 月 1 日.

外部資金

(名称、氏名、代表・分担の別、採択年度、金額、課題名)

受託経費：文部科学省 (平成 26 年度～平成 29 年度)

研究課題：実社会ビッグデータ利活用のためのデータ統合・解析技術の研究開発

研究代表者：北川 博之

平成 27 年度配分額：37,341,000 (直接経費 28,723,847 : 間接経費 8,617,153)

研究種目：基盤研究(B) (平成 26 年度～平成 28 年度)

研究課題：複合型並列計算環境を活用した大規模不均質データの実時間分析基盤

研究代表者：北川 博之

平成 27 年度配分額：5,980,000 (直接経費 4,600,000 : 間接経費 1,380,000)

研究種目：新学術領域 (平成 27 年度～平成 31 年度)

研究課題：超ストレス環境・宇宙を見据えた新規睡眠覚醒制御手法の開発

(研究代表者：長瀬 博)

研究分担者：北川 博之

平成 27 年度配分額：3,000,000 (直接経費 3,000,000 : 間接経費 0)

研究種目：基盤研究(C) (平成 25 年度～平成 27 年度)

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

研究代表者：天笠 俊之

平成 27 年度配分額：1,100,000 (直接経費 1,100,000 : 間接経費 0)

研究種目：基盤研究(A) (平成 25 年度～平成 28 年度)

研究課題：災害後の復旧・復興における共有情報管理のための基盤技術に関する研究

(研究代表者：横田 治夫 (東京工業大学))

研究分担者：天笠 俊之

平成 27 年度配分額：750,000 (直接経費 750,000 : 間接経費 0)

受託経費：日本電気株式会社 (平成 27 年度)

研究課題：安心安全なデータの管理及び活用に関する研究

研究代表者：北川 博之・天笠 俊之

平成 27 年度配分額：1,080,000 (直接経費 981,818：間接経費 98,182)

受託経費：Sky 株式会社 (平成 27 年度～平成 28 年度)

研究課題：機械学習の適用による SKYSEA Client View のログ及び資産情報からの例外的
状況の自動検出

研究代表者：北川 博之・天笠 俊之

平成 27 年度～28 年度配分額：5,000,000 (直接経費 4,500,000：間接経費 500,000)

受託経費：株式会社富士通研究所 (平成 27 年度)

研究課題：時系列データの分析基盤技術の研究

研究代表者：北川 博之・天笠 俊之

平成 27 年度配分額：2,000,000 (直接経費 1,800,000：間接経費 200,000)

受託経費：株式会社ユーザーローカル (平成 27 年度)

研究課題：Twitter のユーザー分析

研究代表者：北川 博之

平成 27 年度配分額：550,000 (直接経費 500,000：間接経費 50,000)

知的財産権 (種別、氏名、課題名、年月日)

該当なし

6. 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, "Facet-value Extraction Scheme from Textual Contents in XML Data", International Journal of Web Information Systems (IJWIS), Vol. 11, Iss. 3, pp.270-290, 2015.
- J2. Savong Bou, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "Path-based Keyword Search over XML Streams", International Journal of Web Information Systems (IJWIS), Vol. 11, Iss. 3, pp.347-369, 2015.

- J3. 中挾 晃介, 北川 博之, Salman Ahmed Shaikh, 天笠 俊之, "StreamOLAP における問合せの最適化手法", 日本データベース学会和文論文誌, Vol.14, No.4, Article No.3, 2016 年 3 月.
- J4. 塩川 浩昭, 藤原 靖宏, 飯田 恭弘, 鬼塚 真, "動的グラフに対する密度ベースクラスタリング", 日本データベース学会和文論文誌, Vol.14, No.4, Article No.4, 2016 年 3 月.
- J5. 伊藤 寛祥, 天笠 俊之, 北川 博之, "論文データベースにおけるトピックの変遷の検出", 日本データベース学会和文論文誌, Vol.14, No.4, Article No.13, 2016 年 3 月.
- J6. 大西 誠, 北川 博之, "オンラインニュースに関連するツイートのリアルタイムな収集", 日本データベース学会和文論文誌, Vol.14, No.4, Article No.15, 2016 年 3 月.

B) 査読無し論文

該当なし

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

該当なし

B) 一般講演

<査読付き国際会議論文>

- C1. Yuto Yamaguchi, Mitsuo Yoshida, Christos Faloutsos and Hiroyuki Kitagawa, "Why Do You Follow Him? Multilinear Analysis on Twitter", Proc. 24th International World Wide Web Conference (WWW2015), pp. 137-138 (companion volume), Florence, Italy, May 18-22, 2015.
- C2. Yuto Yamaguchi, Christos Faloutsos and Hiroyuki Kitagawa, "SocNL: Bayesian Label Propagation with Confidence", Proc. 19th Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data mining (PAKDD 2015), pp. 633-645, Ho Chi Min City, Vietnam, May 19-22, 2015.
- C3. Yuto Yamaguchi, Mitsuo Yoshida, Christos Faloutsos and Hiroyuki Kitagawa, "Patterns in Interactive Tagging Networks", Proc. 9th International AAAI Conference on Web and Social Media (ICWSM 2015), pp. 513-522, Oxford, UK, May 2015.
- C4. Shun Fukusumi, Atsuyuki Morishima and Hiroyuki Kitagawa, "Game Aspect: An Approach to Separation of Concerns in Crowdsourced Data Management" Proc. 27th International Conference on Advanced Information Systems Engineering

- (CAiSE2015), pp. 3-19, Stockholm, Sweden, June 8-12, 2015.
- C5. Hao Ye, Hiroyuki Kitagawa and Jun Xiao, "Continuous Angle-based Detection on High-dimensional Data Streams", Proc. the 19th International Database Engineering & Applications Symposium (IDEAS 2015), pp. 162-167, Yokohama, Japan, July 13-15, 2015.
- C6. Alceu Ferraz Costa, Yuto Yamaguchi, Agma Juci Machado Traina, Caetano Traina Jr. and Christos Faloutsos, "RSC: Mining and Modeling Temporal Activity in Social Media", The 21st SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (KDD 2015), Sydney, Australia, August 10-13, 2015.
- C7. Yusuke Kozawa, Fumitaka Hayashi, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "Parallel Canopy Clustering on GPUs", Proc. 26th International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2015), pp. 334-348, Valencia, Spain, September 1-4, 2015.
- C8. Mateus S. H. Cruz, Yusuke Kozawa, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "GPU Acceleration of Set Similarity Joins", Proc. 26th International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2015), pp. 384-398, Valencia, Spain, September 1-4, 2015.
- C9. Kazumasa Kumamoto, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "A System for Querying RDF Data using LINQ", Proc. the 4th International Workshop on Advances in Data Engineering and Mobile Computing in conjunction with NBiS2015 (DEMoC 2015), Taipei, Taiwan, September 2-4, 2015.
- C10. Sei Onishi, Yuto Yamaguchi and Hiroyuki Kitagawa, "Real-Time Relevance Matching of News and Tweets", Proc. 23th International Conference on Cooperative Information Systems (CoopIS 2015), pp. 109-126, Rhodes, Greece, October 28-30, 2015.
- C11. Kosuke Nakabasami, Toshiyuki Amagasa, Salman Shaikh, Franck Gass and Hiroyuki Kitagawa, "An Architecture for Stream OLAP Exploiting SPE and OLAP Engine (short)", Proc. 2015 IEEE International Conference on Big Data (IEEE BigData 2015), Santa Clara-CA, USA, October 29 - November 1, 2015.
- C12. Saki Ueda, Yuto Yamaguchi, Hiroyuki Kitagawa and Toshiyuki Amagasa, "Tweet Location Inference based on Contents and Temporal Association", Proc. 16th International Conference on Web Information System Engineering (WISE 2015), part II, pp. 259-266, Miami, USA, November 1-3, 2015.

- C13. Takahiro Komamizu, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "SPOOL: A SPARQL-based ETL Framework for OLAP over Linked Data", Proc. 17th International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services (iiWAS 2015), pp. 49:1-10, Brussels, Belgium, December 11-13, 2015.
- C14. Eri Kataoka, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "A Social Reading System for EPUB Publications", Proc. 17th International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services (iiWAS 2015), pp.43-52, Brussels, Belgium, December 11-13, 2015.
- C15. Yasuhiro Fujiwara, Yasutoshi Ida, Hiroaki Shiokawa, Sotetsu Iwamura, "Fast Lasso Algorithm via Selective Coordinate Descent", Proc. 30th AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI 2016), Phoenix, Arizona, USA, February, 2016 (to appear).

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

該当なし

B) その他の発表

- P1. Salman Ahmed Shaikh, Yousuke Watanabe, Yan Wang and Hiroyuki Kitagawa, "Multi-Query Optimization for the Smart Query Execution Scheme", 第 8 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 2016), G1-3, 2016 年 2 月 29 日～3 月 2 日.
- P2. 小澤 佑介, 天笠 俊之, 北川 博之, "GPU を用いたラベル伝搬法によるグラフクラスタリングの高速化", 第 8 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 2016), A8-3, 2016 年 2 月 29 日～3 月 2 日.
- P3. Savong Bou, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "Efficient Keyword Search over Relational Data Streams", 第 8 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 2016), A3-4, 2016 年 2 月 29 日～3 月 2 日.
- P4. 大西 誠, 山口 祐人, 北川 博之, "オンラインニュースとツイートのリアルタイムマッチング手法", 第 8 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 2016), B5-2, 2016 年 2 月 29 日～3 月 2 日.
- P5. 熊本 和正, 天笠 俊之, 北川 博之, "LINQ によるビューを用いた LOD に対する分散問合せ", 第 8 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 2016), F7-6, 2016 年 2 月 29 日～3 月 2 日.

- P6. 小柳 涼介, 天笠 俊之, 北川 博之, "木構造データに対する類似部分木検索の並列化", 第 8 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 2016), D5-4, 2016 年 2 月 29 日～3 月 2 日.
- P7. 長 裕敏, 塩川 浩昭, 北川 博之, "高水準言語で記述可能なストリーム処理とバッチ処理の統合フレームワーク", 第 8 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 2016), G1-4, 2016 年 2 月 29 日～3 月 2 日.
- P8. 篠塚 千愛, 渡辺 知恵美, 北川 博之, "秘密計算による秘匿検索フレームワーク OSIT-bs における検索コストと最適化", 第 8 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 2016), F5-6, 2016 年 2 月 29 日～3 月 2 日.
- P9. 奥村 彩水, 天笠 俊之, 北川 博之, "リンク構造解析を用いた Linked Open Data に対するキーワード検索", 第 8 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 2016), F7-4, 2016 年 2 月 29 日～3 月 2 日.
- P10. 鈴木 悠太, 佐藤 牧人, 塩川 浩昭, 北川 博之, 柳沢 正史, "脳波／筋電図を利用したマウスの睡眠ステージ判定", 第 8 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 2016), G4-3, 2016 年 2 月 29 日～3 月 2 日.
- P11. 太田 千尋, 森嶋 厚行, 中村 聡史, 寺田 努, 北川 博之, "床に投影したマイクロタスクのデータ品質向上手法", 第 8 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 2016), D6-3, 2016 年 2 月 29 日～3 月 2 日.
- P12. 大津 祐汰, Franck Gass, Salman Ahmed Shaikh, 天笠 俊之, 北川 博之, "リアルタイムデータと蓄積データを対象としたシームレスなストリーム OLAP 分析", 第 8 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 2016), G1-1, 2016 年 2 月 29 日～3 月 2 日.
- P13. 秋山 賢人, 渡辺 知恵美, 北川 博之, "索引を用いた複数演算に対応した安全で効率的な秘匿検索手法", 第 8 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 2016), F8-2, 2016 年 2 月 29 日～3 月 2 日.
- P14. 長城 沙樹, 山口 祐人, 北川 博之, 天笠 俊之, "オンラインニュースに対する Twitter 上での地域局所的な注目の分析及び予測", 第 8 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 2016), A6-5, 2016 年 2 月 29 日～3 月 2 日.
- P15. 索手 一平, 早瀬 康裕, 北川 博之, "可逆圧縮に基づく相違性と類似ファイル数を併用したプロダクト派生関係の推定手法の提案", 第 8 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 2016), G6-1, 2016 年 2 月 29 日～3 月 2 日.
- P16. 秋山 賢人, 渡辺 知恵美, 北川 博之, "索引を用いた秘匿検索における安全性の高い複数演算の連携法", 情報処理学会第 78 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2016), 2016 年 3 月 10 日～3 月 12 日.

- P17. 草村 優太, 小澤 佑介, 天笠 俊之, 北川 博之, "GPU を用いた類似画像検索の高速化", 情報処理学会第 78 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2016), 2016 年 3 月 10 日～3 月 12 日.
- P18. 長城 沙樹, 山口 祐人, 北川 博之, 天笠 俊之, "Twitter 上の社会・地理・内容的特徴を用いたローカルニュースの抽出", 情報処理学会第 78 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2016), 2016 年 3 月 10 日～3 月 12 日.
- P19. 丸山 純, 天笠 俊之, 北川 博之, "EPUB 出版物のための EPUBCFI に基づく索引の提案", 情報処理学会第 78 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2016), 2016 年 3 月 10 日～3 月 12 日.
- P20. 索手 一平, 早瀬 康裕, 北川 博之, "可逆圧縮を利用したプロダクト派生関係推定手法の実験的評価 - 圧縮アルゴリズム毎の誤りの傾向分析 -", 情報処理学会第 78 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2016), 2016 年 3 月 10 日～3 月 12 日.

(4) 著書、解説記事等

該当なし

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

- 地球環境研究部門との連携：気象庁気象予報データベース「GPV/JMA アーカイブ」(<http://gpvjma.ccs.hpcc.jp>)の開発、管理、運用.
- 素粒子物理研究部門との連携：Japan Lattice Data Grid (JLDG), International Lattice Data Grid (ILDG)の運営.
- 生命科学研究部門との連携：機械学習を用いた非モデル生物におけるミトコンドリア及び関連オルガネラタンパク質の予測に関する研究.
- 国際統合睡眠医科学研究機構(IIS)との連携：マウスの脳波／筋電図データを利用した睡眠ステージの自動判定アルゴリズム・ソフトウェアの研究開発.
- Carnegie Mellon University とのソーシャルメディア分析に関する国際共同研究.

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

- 第 8 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 フォーラム 2016), ヒルトン福岡シーホーク (福岡県福岡市), 2016 年 2 月 29 日 (月) ～3 月 2 日 (水)

9. 管理・運営

北川博之教授

- 学外

- 該当なし
- 学内
 - システム情報工学研究科：研究科長
 - 計算科学研究センター：計算情報学研究部門長，計算科学振興室長

天笠俊之准教授

- 学外
 - 該当なし
- 学内
 - 該当なし

塩川浩昭助教

- 学外
 - 該当なし
- 学内
 - 該当なし

10. 社会貢献・国際貢献

北川博之教授

- 国際委員等
 - 国際ジャーナル編集委員：World Wide Web Journal
 - 国際会議運営委員：WAIM Steering Committee Member, DASFAA Steering Committee Member Emeritus
 - 国際会議プログラム委員：DEXA2015, IDEAS2015, CoopIS2015, AAI2016, ACM SAC2016
- 国内委員等
 - 日本データベース学会会長
 - 日本学術会議連携会員
 - (独) 科学技術振興機構・戦略的創造研究推進事業「ビッグデータ統合利活用のための次世代基盤技術の創出・体系化」領域アドバイザー

天笠俊之准教授

- 国際委員等
 - ACM SIGMOD 日本支部 副支部長
 - 国際会議プログラム委員：DaWaK2015, IDEAS2015, iiWAS2015, DEMoC-2015, DSAA2015, DASFAA2015, FutureTech2015 他.

- 国内委員等

- 電子情報通信学会論文誌特集号編集委員長
- 第 8 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 フォーラム 2016) 副実行委員長

塩川浩昭助教

- 国際委員等

- 国際ジャーナル査読委員 : IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, IEICE Transactions on Information & Systems, Proceedings of VLDB Endowment (PVLDB)
- 国際会議査読委員 : DASFAA2015, DEXA2015, DaWaK2015

- 国内委員等

- 日本データベース学会電子広報委員会編集委員
- 第 8 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 フォーラム 2016) Web・出版委員

11. その他

該当なし

VIII-2. 計算メディア分野

1. メンバー

准教授	亀田 能成
准教授	北原 格
学生	大学院生 17名、学類生 6名、研究生 1名

2. 概要

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

純粋なデータ処理の効率や速度が求められる通常のスーパーコンピュータ分野とは違い、人間に纏わる情報を処理対象とする計算科学では、情報処理の時間軸を人間に合わせることに必須である。そのために、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）を対象とした研究を進めている。それによって得られる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”、“多様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バックボーンとして実現していく。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。

本年度の報告では、下記の2件の研究について概要を説明する。

【1】 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追跡手法：高速に移動する物体を撮影した映像中で観測されるモーションブレンダーを活用することにより、物体の位置推定精度の向上を実現する手法を提案した。物体の位置推定処理では、モーションブレンダーを観測誤差と見なすのが一般的であるが、その一方で、モーションブレンダーの観測形状は、物体の移動速度の情報を有していることが知られている。この特徴に注目し、映像情報から移動物体の位置と速度を両方同時に観測し、それらにカルマンフィルタを適用することにより、頑健な追跡手法を実現した。（主な研究費：科研費基盤 B（大田）2012～2016年度）

【2】 ドライバの体感速度変化を促すバーチャルパターン：ドライバの体感速度変化を促すバーチャルパターンを車上で運転者に提示することを提案した。自動車運転時に光学シース

ルーディスプレイが利用できることを想定し、自動車の走行速度に応じて変化するバーチャルパターンをドライバ視界に重畳する。バーチャルパターンの変化により、ドライバの体感速度変化を促し、速度抑制を目指す。実車映像を用いたシミュレーション実験による評価を実施し、提案手法の有効性を検証した。また、実車環境による評価実験も実施し、提案手法の有効性を確認した。

3. 研究成果

【1】 モーションブラーを活用したバドミントンシャトル追跡手法

映像情報を用いた移動物体追跡処理の応用分野としてスポーツ競技に注目が集まっている。スポーツシーンにおける物体追跡処理は、大規模空間で撮影した映像から、複数の高速で複雑な動きを伴う物体を同時に検出・追跡するといった課題を含有する。我々は、大規模空間で撮影された比較的解像度の低い映像から、低速から高速まで大きな速度変化を伴いながら移動する観測物体を検出し、安定して追跡する手法を提案する。高速移動する物体を撮影した映像では、物体はモーションブラー（動きによるブレ）を伴って観測される。物体の位置推定処理では、モーションブラーを観測誤差と見なすのが一般的であるが、その一方で、モーションブラーの観測形状は、物体の移動速度の情報を有していることが知られている。本研究ではこの特徴に注目し、映像情報から移動物体の位置と速度を両方同時に観測し、それらにカルマンフィルタを適用することにより、頑健な追跡手法を実現する。

図1のように世界座標系を定め、フレーム k におけるシャトルの状態を3次元位置とその速度及び加速度を用いて、式(1)のように表す。このときカルマンフィルタの状態モデルは式(2)で表される。ここで、 \mathbf{A} は状態遷移行列であり斜方投射運動方程式で表される。移動物体が比較的低速で運動している場合は、モーションブラーの影響を受けにくく位置 (x_k, y_k, z_k) を高い精度で推定可能なので、まず位置情報を求め、その差分情報として速度 $(\dot{x}_k, \dot{y}_k, \dot{z}_k)$ と加速度 $(\ddot{x}_k, \ddot{y}_k, \ddot{z}_k)$ を推定し、式(1)(2)を用いて追跡する。移動物体が高速で運動している場合、モーションブラーの影響により位置 (x_k, y_k, z_k) の推定精度が低下するため、モーションブラーの観測形状から速度 $(\dot{x}_k, \dot{y}_k, \dot{z}_k)$ を求め、その差分情報として加速度 $(\ddot{x}_k, \ddot{y}_k, \ddot{z}_k)$ を、積算情報として位置 (x_k, y_k, z_k) を推定し、式(1)(2)を用いて物体追跡を実現する。



図 1 : 世界座標系と原点の位置

$$X_k = \{x_k, y_k, z_k, \dot{x}_k, \dot{y}_k, \dot{z}_k, \ddot{x}_k, \ddot{y}_k, \ddot{z}_k\} \quad (1)$$

$$X_k = AX_{k-1} + Bu_k + \omega_k \quad (2)$$

図 2 にモーシヨンプラーの観測像を用いた物体の速度の推定処理を示す。本手法では、粒子を用いて観測対象の物体の 3 次元位置と速度情報を確率的に表現する。まず、カルマンフィルタで予測された 3 次元位置周辺に粒子を散布する。初期の散布は、プロセスノイズ ω_k の範囲（球状）とする。次に、図 2 (b) に示すように、物体の色情報に基づいて粒子の位置に追跡対象の物体が存在している尤度を求め、図 2 (c) のように尤度値が低い粒子を除去する。最後に、粒子に対して図 2 (d) のように楕円体を当てはめ、その長軸ベクトル \mathbf{l} をシャッタ開放時間 t 中で割ることにより物体の速度ベクトル $\mathbf{v} = (\dot{x}_k, \dot{y}_k, \dot{z}_k)$ を求める。

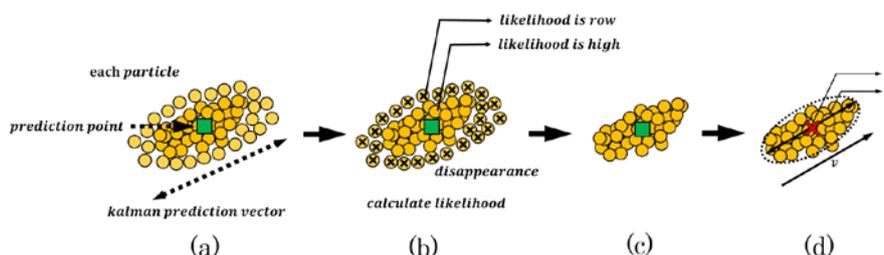


図 2 : モーシヨンプラーの観測像を用いた物体の速度の推定処理

低速から高速まで大きな速度変化を伴いながら移動する物体としてバドミントンシャトルを取り上げ、評価実験を実施した。図 3 に提案手法によって推定された 3 次元移動軌跡を示す。手動で位置情報を与えた結果（緑色のバツ印）と遜色のない追跡精度を自動処理によって実現できていることがわかる。

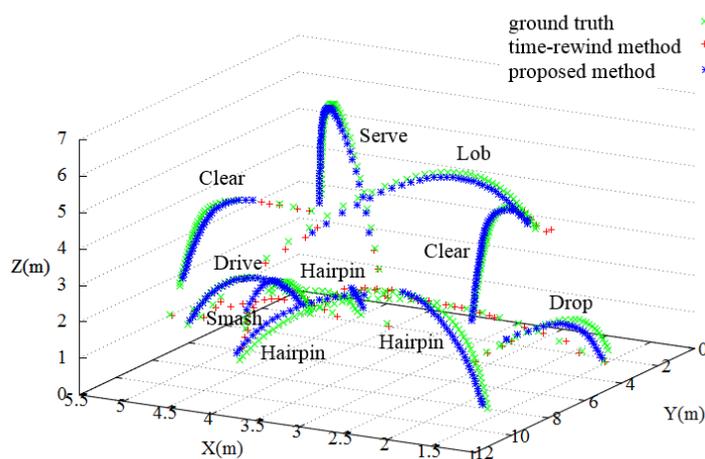


図 3 : 提案手法を用いた物体追跡結果

【2】ドライバの体感速度変化を促すバーチャルパターン

本研究では、バーチャルパターンによる視覚的な働きかけにより、ドライバの体感速度変化を促す方法を提案する。

人間の体感速度は、自己の身体感覚によって得られる情報の統合に基づいており、その中でも、特に視覚情報の重要性は高い。例えば、観察者が静止している電車の中で座っている際に、向かい側のホームの列車が動き出した時、自分の体は動いていないにも関わらず、視覚から受け取った情報により、自分の乗っている電車があたかも動いているかのように感じる事がある。この現象は視覚誘導自己運動（vection）と呼ばれている。ドライバが運転の際に手掛かりとする情報の大部分が視覚情報であるため、視覚情報を用いた速度抑制手法は、理にかなっていると言える。これまでの実際的な取り組みとしては、減速してほしい路上に幾何パターンを描くことで、走行車両の速度低下を促している例などが挙げられる。ただし、この方式では、その場に差し掛かったドライバにしかその効果を与えることができない。

本研究では、光学シースルーディスプレイの具現例の一つである Wind-Shield Display (WSD) を用いて、速度抑制を促す模様を拡張現実感によって再現したバーチャルパターンを提示することを提案した。これにより、場所を問わずに速度抑制が可能となる。

バーチャルパターンは運転の際に邪魔にならないようなデザインを工夫して作成する。バーチャルパターンを提示する際の速度をコントロールすることによって、高い速度抑制効果を目指した。

バーチャルパターンは、運転者に対して速度抑制を与えるものでありながら、運転の際の邪魔にならないものとなるように注意深く作成する必要がある。本提案で提示するバーチャルパターンは、WSD を用いて表示することから、模様が浮いて見えるため、形状によらず運転風景中にある他の物体とすぐに区別できるという利点がある。そのため、バーチャルパターンを単調な形状で構成する。単調な形状であれば、面積が少なく、物体を隠しづらいため、オクルージョンが発生しづらいと考えられる。

エレメントとしては、面積が小さいほど視界の妨げにならないことから、まず点（点群）が候補となるが、運転風景によっては、視認が困難であるという問題点がある。そこで、線図形をエレメントに用いることを提案する。エレメントの配置には、空中と路面の2か所が考えられる。そのそれぞれについて、見かけの速度変化が得られるような進行方向に直交する垂直形状エレメントと、進行方向に沿った流れが分かりやすい進行方向に沿った平行形状エレメントの2種類を用意する。進行方向に沿った平行形状エレメントは路上や環境中の道路に沿った線分に埋没して見える可能性があるため、その面積を増加させた平行形状エレメントも視認性向上に有効と考えてさらに用意した。ここでは、平行形状エレメントは、面積

を増加させても停止線や交通標識など運転上重要な指標を隠す可能性が低いため、面積を増加させても運転への妨げになる可能性が低いと考えている。

実際のバーチャルパターンの例を図 4 に示す。これを運転者が運転中に見ている世界に重畳した様子が図 5 である。

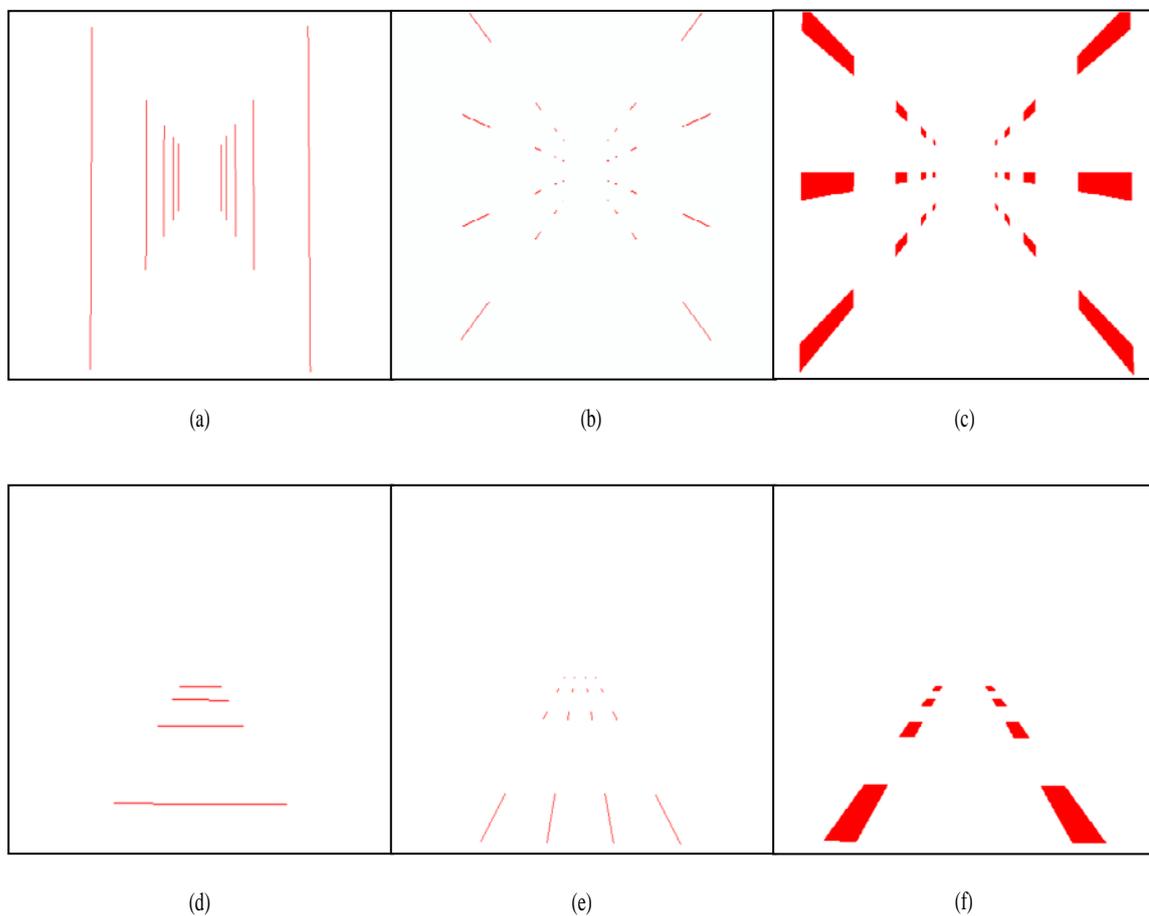


図 4 : 6 種類のバーチャルパターン

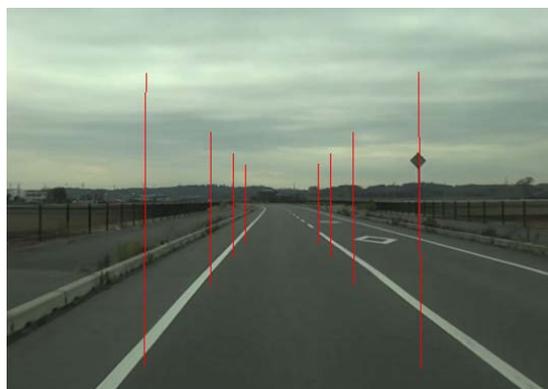


図 5 : バーチャルパターン提示

こうして用意した 6 種類のバーチャルパターンに対して、速度や提示環境を変えながら被験者による評価実験を行った結果、実験においては(a)が体感速度の変化について最も効果があり、続いて(b)の効果が高いという知見が得られた。なお、詳細については下記発表文献を参照されたい。

東井 隼斗, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一“ドライバの体感速度変化を促すバーチャルパターン”, 電子情報通信学会論文誌 D, vol. J99-D, no. 1, pp. 45-55, 2016.

4. 教育

学生の指導状況 (学生氏名、学位の種類、論文名)

笹井 翔太 修士(工学) 搭乗者のストレス軽減を目的とした自車シースルー処理と車幅の可視化

及川 純耶 修士(工学) 透明スクリーンを用いた固定カメラ映像中の被写体の実物大提示

上山 嵩 修士(工学) バドミントン競技解析のための選手追跡を用いた映像の時間分割

湊 洋輔 修士(工学) プール俯瞰映像を用いた競泳のレース解析

楊 茗越 修士(工学) 拡張現実による前方車両までの距離提示

XU HAOWE I 修士(工学) 監視カメラへの反応の観測による異常行動検知

山内 敬太 学士(工学) 快適な乗車を目的とした搭乗者の心理状態推定システム

釜坂 一步 学士(工学) 歩行者ナビゲーションに適した事前撮影映像からのデータベース生成

積田 貴幸 学士(工学) 競泳プールにおける泳者位置推定のための色情報解析

今井 健太 学士(工学) RGB-D カメラを用いた歩行可能な平面領域の検出

北村 誠之 学士(工学) 観察視点の 3 次元操作に基づく多視点映像切り替え法

志村 直樹 学士(工学) 撮影距離の異なる 2 台のカメラ間の視点移動表現法

集中講義など

北原 格

2015 年 10 月 16 日 放送大学 面接授業「体育・スポーツにおける情報学」

2015 年 11 月 12 日 豊橋技術科学大学 情報・知能工学大学院特別講義 II 「スポーツ映像における物体追跡処理」

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

該当なし

外部資金

(名称、氏名、代表・分担の別、採択年度、金額、課題名)

科学研究費補助金 基盤研究(B) 課題番号 25280056、大田友一(研究代表者)、亀田能成(分担者)、北原格(分担者)、採択 2012 年度、2,470,000 円(2015 年度分)、「大規模空間を対象とする人物ビルボードを用いた任意視点映像生成提示方式の高画質化」

科学技術振興機構受託研究費、亀田能成(研究担当者)、採択 2014 年度、7,247,500 円(2015 年度分)、「持続可能な多世代共創社会のデザイン」研究開発領域「多世代共創による視覚障害者移動支援システムの開発」

知的財産権

該当なし

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

Youhei Kawamura, Kento Ishii, Hyongdoo Jang, Markus Wagner, Hajime Nobuhara, Ashraf M Dewan, Bert Veenendaal, and Itaru Kitahara, “Analysis of radio wave propagation in an urban environment and its application to initial disaster response support”, Journal of Disaster Research, Vol.10, No.4, pp.655-666, 2015 年 4 月

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追跡手法”, 電子情報通信学会論文誌 D, vol. J98-D, no. 7, pp. 1083-1097, 2015 年 7 月 1 日

宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一 “異なるシャッタ速度で撮影した映像を用いたバドミントンシャトル軌跡推定法”, 映像情報メディア学会学会誌, vol. 69, no. 8, J237-J244, 2015 年 7 月

雫 泰裕, 北原 格, 大田 友一 “複合現実感を用いた関心共有による展示物閲覧支援”, 日本バーチャルリアリティ学会論文誌, Vol. 20, No. 4, pp. 273-281, 2015 年 12 月

東井 隼斗, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一 “ドライバの体感速度変化を促すバーチャルパターン”, 電子情報通信学会論文誌 D, vol. J99-D, no. 1, pp. 45-55, 2016. 2016 年 1 月 1 日

B) 査読無し論文

該当なし

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

該当なし

B) 一般講演

Tsukasa Sumiya, Yoshinari Kameda, and Yuichi Ohta “Location Sensitive Monitoring of Surveillance Camera Videos”, The Eighth Korea-Japan Workshop on Mixed Reality (KJMR15), 2015.

Bo Gao, Itaru Kitahara, Yuichi Ohta, “MR Lighting Coordinate Support System”, Korea-Japan Workshop on Mixed Reality (KJMR2015), 2015.

Yosuke Minato, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, and Yuichi Ohta “Swimmer Tracking by Single High-Definition Camera”, 20th Congress of European College of Sport Science (ECSS), 2015.

Yoshinari Kameda, Itaru Kitahara, Yuichi Ohta, Joe Yoshimi, Keisuke Ishikura, and Hideki Takagi, “Digital Zoom Video of Swimmers by High-Definition Camera”, 20th Congress of European College of Sport Science (ECSS), 2015.

Peng Yang, Itaru Kitahara, Yuichi Ohta, “Remote Mixed Reality System Supporting Interactions with Virtualized Objects”, IEEE International Symposium on Mixed and Augmented Reality (ISMAR2015), Poster, pp.64-67, 2015.

Shota Sasai, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, Masayuki Kanbara, Norimichi Ukita, Tetsushi Ikeda, Yoichi Morales, Norihiro Hagita, Kazuhiko Shinozawa, “MR Visualization of Wheel Trajectories of Driving Vehicle by Seeing-Through Dashboard”, International Workshop on Diminished Reality as Challenging Issue in Mixed and Augmented Reality (IWDR2015), 6pages, 2015.

Kazuho Kamasaka, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, and Yuichi Ohta, “Reference-Frame Selection at Walking Navigation Based on Prerecorded Video”, 1st International Workshop on Challenges and Applications of Urban Augmented Reality (in conjunction with ISMAR2015), 2015.

Hidehiko Shishido, Yoshinari Kameda, Itaru Kitahara, and Yuichi Ohta, “3D Position Estimation of Badminton Shuttle Using Unsynchronized Multiple-View Videos”, 7th Augmented Human International Conference (AH2016), 2016.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

北原 格, 韓垂 由美, “ドライビング・アシスト・デザイン 視覚情報 AR 拡張現実によるアプローチ”, 総合デザイン工学科公開レクチャー講演会, 2015. 4. 21, 前橋工科大学

北原 格, “複合現実感技術によるウィンドシールドディスプレイの開発と運転者への視覚支援”, AR ヘッドアップディスプレイセミナー, 2015. 9. 8, 技術情報協会, 日幸五反田ビル

北原 格, “自由視点映像技術を用いたスポーツ中継システムの開発”, 次世代デジタルコンテンツが拓く新ビジネス創出セミナー2015, 2015. 9. 18, みなとパーク芝浦 リーブラホール

北原 格, PoTS 映像学シンポジウム～自由視点映像／自由焦点映像が切り開く新しい映像表現の地平～ パネルディスカッション “PoTS 映像学をどう育て、どう活用

して行くのか”のパネリスト担当, 2016. 3. 10, 慶應義塾大学 日吉キャンパス 来往舎

B) その他の発表

笹井 翔太, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一, 神原 誠之, 浮田 宗伯, 池田 徹志, Morales Yoichi, 萩田 紀博, 篠沢 一彦, “拡張現実提示による自動走行ストレス軽減の試み”, 交通心理学会第 80 回大会, 2A-1, 2015 年 6 月 6 日~7 日, 早稲田大学

上山 嵩, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一, “Image Inpainting 処理を用いたバドミントン映像における選手追跡精度の向上”, 映像情報メディア学会年次大会 2015, 2 pages, 2015 年 8 月 26 日~28 日, 東京理科大学

鶴 亮輔, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一, “車両の進行方向に対する対称性を利用した外形復元”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.115, no.245, pp.103-108, 2015 年 10 月 8 日~9 日, 小樽観光物産プラザ

志田 全弘, 亀田 能成, 北原 格, 大田 友一, 松田 壮一郎, 山本 淳一, 鈴木 健嗣, “多視点映像閲覧のためのデータハンドリングとカメラ位置ズレ補正”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.115, no.245, pp.67-72, 2015 年 10 月 8 日~9 日, 小樽観光物産プラザ

及川 純耶, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一, “環境埋め込み型カメラ映像提示のための透明スクリーンキャリブレーション”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.115, no.245, pp.55-59, 2015 年 10 月 8 日~9 日, 小樽観光物産プラザ

上山 嵩, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一, “白線領域除去によるバドミントン映像からの選手位置解析”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.115, no.245, pp.37-42, 2015 年 10 月 8 日~9 日, 小樽観光物産プラザ

楊 茗越, 亀田 能成, 北原 格, 大田 友一, “測域センサを用いた前方車両の視覚情報提示支援”, 第 13 回 ITS シンポジウム 2015, 6 pages, 2015 年 12 月 3 日~4 日, 首都大学東京

北原 格, 志田 全弘, “多視点を用いたコミュニケーションの記録と観察”, HCG シンポジウム 2015, pp.327-331, 2015 年 12 月 16 日～18 日, 富山国際会議場

謝 淳, 亀田 能成, 北原 格, 大田 友一, “大規模空間における Interactive Projection Mapping システム”, HCG シンポジウム 2015, pp.283-286, 2015 年 12 月 16 日～18 日, 富山国際会議場

今井 健太, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一, “RGB-D カメラを用いた歩行可能な平面領域の検出”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.115, no.494, pp.13-18, 2016/3/7-8, 名桜大学

釜坂 一步, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一, “経路上の歩行者位置推定に適した事前撮影映像からのデータベース生成”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.115, no.494, pp.19-24, 2016/3/7-8, 名桜大学

馬 雪詩, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一, “視覚障害者の歩行支援のためのジェスチャ入力方式の検討”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.115, no.494, pp.163-168, 2016/3/7-8, 名桜大学

Xu Haowei, 亀田 能成, 北原 格, 大田 友一, “監視カメラへの反応の観測による異常行動検知”, 情報処理学会第 78 回全国大会, no.2, pp.223-224, 2016 年 3 月 19 日～12 日 慶応義塾大学

Cesar Daniel Rojas Ferrer, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, and Yuichi Ohta, “Players Displacement Based on Captured Data in a Vr Soccer Training Simulation”, Proceedings of the 2015 IEICE General Conference, pp.306, 2016/3/15-18, Kyushu University, Japan

張 欣博, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一, “サッカー選手軌跡記録からの試合の VR 再体験”, 電子情報通信学会 2015 年総合大会講演論文集, pp.305, 2016 年 3 月 15 日～18 日, 九州大学

宍戸 英彦, 亀田 能成, 北原 格, 大田 友一, “モバイルカメラ映像を補完的に用いた疎に配置した多視点カメラのキャリブレーション”, 電子情報通信学会 2015 年総合大会講演論文集, pp.134, 2016 年 3 月 15 日～18 日, 九州大学

原崎 葵, 亀田 能成, 北原 格, 大田 友一, “高速で移動する物体を撮影した映像に適したフレーム補間法”, 電子情報通信学会 2015 年総合大会講演論文集, pp.152, 2016 年 3 月 15 日～18 日, 九州大学

(4) 著書、解説記事等

亀田 能成 (Chapter 5, Section 2, “Casper Cartridge”), 北原格 (Chapter 3, Section 4, “自由視点映像技術を用いた MR”), “AR (拡張現実) 技術の基礎・発展・実践” (蔵田武志, 清川清監修, 大隅隆史編集), 2015.

亀田 能成, “コンピュータビジョンに基づく動きの計測”, 日本バイオメカニクス学会 バイオメカニクス研究, vol.19, no.4, pp.256-260, 2016 年 3 月 15 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

亀田 能成

筑波大学 e ラーニング委員会委員

エンパワーメント情報学プログラム運営委員会委員

エンパワーメント情報学プログラム学生委員会委員長

北原 格

筑波大学全学共通教育計算機システム WG 委員

システム情報工学研究科広報委員長

10. 社会貢献・国際貢献

亀田 能成

IEEE and ACM International Symposium on Mixed and Augmented Reality 2015;

PC member

電子情報通信学会 パターン認識・メディア理解 研究専門委員会 委員

電子情報通信学会 マルチメディア・仮想環境基礎 研究専門委員会 副委員長

電子情報通信学会 サイバーワールド 時限研究専門委員会 委員

北原 格

電子情報通信学会和文論文誌 D 編集幹事

映像情報メディア学会スポーツ情報処理時限研究会 (SIP)幹事

日本バーチャルリアリティ学会 SIG-MR 研究会幹事

11. その他

北原格 野村総合研究所による「スポーツ×IT 教室」(スポーツ分野での IT 活用に関する授業)に技術協力, 2016 年 3 月 3 日

Digital Contents Expo (DCEXPO2015), Features2015 スポーツを変えるコンテンツ技術展示「自由視点映像スタジアム」, 2015 年 10 月 23 日・25 日