

平成 18 年度

計算科学研究センター研究報告

目次

1. 平成18年度重点施策	1
2. 素粒子宇宙研究部門	5
3. 物質生命研究部門	21
4. 地球生物環境研究部門	44
5. 超高速計算システム研究部門	51
6. 計算情報学研究部門	61
7. 平成18年度年次報告会プログラム	74

平成 18 年度 基本方針、重点施策、改善目標等について

様式 8

部局等名	計算科学研究センター	部局長等氏名	宇川 彰
1. 基本方針			
<p>(1) 基礎科学・物質科学・生命科学・環境科学における重要課題に対し、大規模シミュレーション・大規模データ解析等を中心とする計算科学の方法による研究を推進・発展させる。</p> <p>(2) これを実現するための超高速計算機システムの開発・製作及び超高速ネットワークに関する計算機科学・情報科学の先進的研究を推進・発展させる。</p> <p>(3) 計算科学分野における、国際的研究拠点機能並びに全国共同利用研究センターとしての研究拠点機能を提供し、当該分野における国内外の共同研究を推進・発展させる。</p>			
2. 重点施策			
(1) 拠点形成事業・大型プロジェクト研究の推進			
<p>「計算科学による新たな知の発見・統合・創出」事業2年目を迎え、超並列クラスシステムPACS-CSの稼働開始と計算科学諸分野の研究、及び宇宙、物質生命、計算機科学等で進行中の大型プロジェクト諸研究を、相互に有機的に関連させて推進し、さらに次のステップへの計画検討を行う。</p>			
(2) 次世代スーパーコンピュータ開発プロジェクトへの貢献			
<p>平成18年度から始動した国の次世代スーパーコンピュータプロジェクトに対し、計算機アーキテクチャと科学技術アプリケーションの両面から貢献を行うべく研究を進める。</p>			
(3) 共同研究・共同利用体制の整備			
<p>PACS-CS稼働開始に伴い、共同利用を実施するための体制整備と共同利用の実施を図る。本センターが責任を持つこととなったスーパーコンピュータの基本方針を定め、その整備を進める。</p>			
(4) 附置研究所化への検討			
<p>全国共同利用の附置研究所への転換に向けて、教育・研究における学内での位置付けと学内諸組織との関係、全国的及び世界的観点からの位置付けと共同利用の体制、組織・施設・予算等について検討を進める。</p>			
(5) 重点とする研究目標			
<p>センター全体としては、拠点形成事業、大型プロジェクト等を中心に、基本方針に掲げる計算科学の学際的研究の遂行と成果の実現を図る。さらに、次世代スーパーコンピュータへの貢献に努力を払う。</p>			
各部門の目標は次のとおりである。			
<p>素粒子宇宙研究部門:PACS-CSにおける近似なし QCD による素粒子標準模型の研究を実施する。FIRST プロジェクトを柱に、宇宙輻射流体力学を用いて天体形成の研究を推進する。</p>			
<p>物質生命研究部門:ナノ・バイオ物質に対する量子論的計算科学手法を整備し、PACS-CS 上での大規模計算を実行する。実空間密度汎関数法により、1 万原子の量子論的シミュレーションを行い、ナノ構造体の生成機構と新機能を探索。量子論的分子動力学シミュレーションにより、蛋白質・核酸の構造と機能の相関を解明する。</p>			
<p>地球生物環境研究部門:気象庁 JRA-25 再解析データを蓄積公開する。気象庁の現業全球アンサンブル予報システムと領域モデル WRF を PACS-CS に移植し、予報精度の向上に資する研究を実施する。分子系統樹用並列化 PAML を用いてデータ解析を進め、他の汎用分子系統解析プログラムの並列化を進める。</p>			
<p>超高速計算システム研究部門:PACS-CS による科学諸分野の計算の成果実現に向けて支援するとともに、本格化する次期スーパーコンピュータ開発プロジェクトに対して貢献できるように研究を進める。</p>			
<p>計算情報学研究部門:大規模センサデータの管理・統合や科学技術データの高度利用基盤に関する研究開発を他部門と連携して推進する。大量センサデータの解析・加工、人間への情報提示に関する研究を推進するとともに、新しいプロジェクト研究を開拓していく。</p>			
3. 改善目標等			
(1) 運営体制の整備			
<p>研究体制の充実と強化に対応して研究企画・財務・総務広報等の執行体制及び事務体制の高度化と効率化を図る必要がある。</p>			
(2) 予算面での課題			
<p>全学的な研究システムの整備の中で、基盤教育研究経費および間接経費の配分方式について、研究センターの位置づけに関わる課題として引き続き検討の必要がある。</p>			



計算科学研究センターこの一年

宇川 彰
筑波大学計算科学研究センター
数理物質科学研究科物理学専攻

- 平成18年度センターの重点施策
- 平成18年度の成果
- 平成19年度に向けて

1



平成18年度センターの重点目標 (様式8を参照)

1. 拠点形成事業・大型プロジェクト研究の推進

「計算科学による新たな知の発見・統合・創出」事業2年目を迎え、超並列クラスシステムPACS-CSの稼動開始と計算科学諸分野の研究、及び宇宙、物質生命、計算機科学等で進行中の大型プロジェクト諸研究を、相互に有機的に連関させて推進し、さらに次のステップへの計画検討を行う。

2. 次世代スーパーコンピュータ開発プロジェクトへの貢献

平成18年度から始動した国の次世代スーパーコンピュータプロジェクトに対し、計算機アーキテクチャと科学技術アプリケーションの両面から貢献を行うべく研究を進める。

3. 共同研究・共同利用体制の整備

PACS-CS稼動開始に伴い、共同利用を実施するための体制整備と共同利用の実施を図る。本センターが責任を持つこととなったスーパーコンピュータの基本方針を定め、その整備を進める。

4. 附置研究所化への検討

全国共同利用の附置研究所への転換に向けて、教育・研究における学内での位置付けと学内諸組織との関係、全国的及び世界的観点からの位置付けと共同利用の体制、組織・施設・予算等について検討を進める。

5. 重点とする研究目標

各分野で目標を設定

2



平成18年度センターの成果

1. 拠点形成事業・大型プロジェクト研究の推進
 - 「計算科学による新たな知の発見・統合・創出」事業
 - PACS-CSの稼働開始(平成18年7月)とシステム整備の進捗
 - 科学計算の開始(素粒子、物質、気象、生物)
 - WGの活動(システム、QCD、comas-dft、globe-gpv、mol-evol)
 - FIRSTプロジェクト
 - フルシステム稼働(平成18年10月)と物理計算の推進
 - データグリッド・データベースプロジェクト
 - 素粒子ILDG/JLDGの推進
 - 気象GPV/JMAデータベースとその発展
 - CRESTプロジェクト
 - 計算量子科学(押山)、組み込み並列プラットフォーム(佐藤)
 - 大型科研費プロジェクト 基盤(S)1件、基盤(A)4件他
2. 次世代スーパーコンピュータ開発プロジェクトへの貢献
 - 理研との連携協定締結(平成18年9月)
 - 概念設計への参加
 - ターゲットアプリの提供(LatticeQCD、RSDFT)
 - 要素技術プロジェクト(日立・筑波大)
3. 共同研究・共同利用体制の整備
 - PACS-CSを中心とする計算科学全国共同利用プロジェクト(今後の課題)
 - 次期スーパーコンピュータ調達 (平成19年3月稼働を目標 80TF以上)
4. 附置研究所化への検討
 - 平成19年度の重要課題
 - センター第三者評価の実施(平成19年10月30日-11月1日)

3



平成19年度に向けて

継続課題

1. 拠点形成事業・大型プロジェクト研究の推進
 - 最終年度プロジェクトの成果とりまとめと国際シンポジウム開催
 - 「計算科学による新たな知の発見・統合・創出」事業 平成19年秋
 - FIRSTプロジェクト 平成20年春
 - CRESTプロジェクト等の大型プロジェクトの推進・新規プロジェクトの計画・発足
 - 平成20年度以降の計画の概算要求
2. 次世代スーパーコンピュータ開発プロジェクトへの貢献
 - 理研との連携・協力関係の一層の強化
 - 要素技術プロジェクト(日立・筑波大)最終年度成果とりまとめ
3. 共同研究・共同利用体制の整備
 - PACS-CSを中心とする計算科学全国共同利用プロジェクトの体制整備と運用の開始
 - 次期スーパーコンピュータの稼働と運用(平成19年3月)

未来への課題

4. 附置研究所化への検討
 - センターの将来像の策定(平成19年春～秋)
 - グローバルCOE「計算科学学際融合機構」構想 等
 - センター第三者評価の実施(平成19年10月30日-11月1日)

4



私個人の活動

平成18年度

- 計算科学研究センターの運営
- 格子QCDの研究
 - PACS-CS Collaborationによる $N_f=2+1$ 格子QCDシミュレーションを中心とした研究を取りまとめ
 - ILDG/JLDG活動の取りまとめ
- 次世代スパコンプロジェクトのセンター側取りまとめ
 - 理研開発実施本部において
 - 客員研究員(宇川、佐藤、朴)
 - 実務者会議メンバー
 - アプリケーション検討部会委員
 - 次世代計算科学研究開発プログラムアドバイザー委員

平成19年度

- 学長特別補佐
 - 研究関係 研究戦略室
 - 情報関係 情報環境機構

5



論文・国際会議・国内研究会等

- Journal papers
 1. First Nonperturbative Test of a Relativistic Heavy Quark Action in Quenched Lattice QCD, CP-PACS Collaboration Y. Kayaba et al, JHEP02(2007)019
 2. Neutron electric dipole moment with external electric field method in lattice QCD, E. Shintani et al, Rev. D 75, 034507 (2007)
- International Conference Proceedings
 3. Kaon B -parameters for Generic $S=2$ Four-Quark Operators in Quenched Domain Wall QCD, CP-PACS Collaboration: Y.Nakamura et al, PoS(LAT2006)089
 4. $2+1$ Flavor Lattice QCD with Luescher's Domain-Decomposed HMC Algorithm, PACS-CS Collaboration: Y.Kuramashi et al, PoS(LAT2006)029
 5. $2+1$ flavor light hadron spectrum and quark masses with the $O(a)$ improved Wilson-clover quark formalism, CP-PACS, JLQCD Collaborations: T. Ishikawa et al, PoS(LAT2006)181
 6. An application of the UV-filtering preconditioner to the Polynomial Hybrid Monte Carlo algorithm, PACS-CS Collaboration: K-I.Ishikawa et al, PoS(LAT2006)027
 7. JLQCD's dynamical overlap project, JLQCD Collaboration: T.Kaneko et al, PoS(LAT2007)
 8. Calculation of Neutron EDM in quenched and full QCD, E. Shintani et al, PoS LAT2006 (2006) 123
 9. An estimate of the eta and eta-prime meson masses in $N_f=2+1$ lattice QCD, CP-PACS, JLQCD Collaborations: S. Aoki et al, PoS(LATTICE2006)
 10. ρ meson decay from the lattice, CP-PACS collaboration: S. Aoki et al, PoS(LAT2006)110
 11. Status and Physics Plan of the PACS-CS Project, A. Ukawa et al, Pos(LATTICE2006)039
- Miscellaneous
 - Review of the Tata Institute of Fundamental Research (September 2006, Mumbai, India)
 - 第二回計算科学技術シンポジウム(平成18年9月)物理天文分野パネル

6

素粒子宇宙研究部門

素粒子分野

宇川 彰	数理物質科学研究科物理学専攻	教授
吉江 友照	数理物質科学研究科物理学専攻	助教授
石塚 成人	数理物質科学研究科物理学専攻	助教授
蔵増 嘉伸	数理物質科学研究科物理学専攻	講師
谷口 裕介	数理物質科学研究科物理学専攻	助教

宇宙分野

梅村 雅之	数理物質科学研究科物理学専攻	教授
吉川 耕司	数理物質科学研究科物理学専攻	講師
平下 博之	数理物質科学研究科物理学専攻	講師

近似無し格子QCD計算によるU(1)問題の研究

計算科学研究センター 吉江 友照

- 格子QCDシミュレーションによるハドロン質量の計算
 - u,d,s クォーク対生成・消滅効果を入れた近似無しQCD計算
 - 軽い(基底状態、s波)ハドロンを高い精度で再現

- U(1)問題
 - 擬スカラー中間子 η η' 質量が(理論予想より)圧倒的に重い

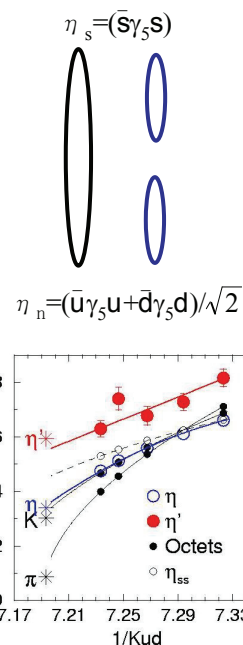
$$m_{\eta'} = 960 \text{ MeV} < \sqrt{3} m_{\pi} = 234 \text{ MeV}$$

$$m_{\eta} + m_{\eta'} = 1510 \text{ MeV} \neq 2m_K = 990 \text{ MeV}$$
 - 素粒子物理学に於ける長年の課題 (1975, Weinberg)
 - QCDの真空構造(位相配位)と関係、QCDと模型を峻別
- U(1)問題の定量的解決への道筋をつける

平成18年度の成果

- 計算法
 - 近似無し(Nf=2+1)計算必須、対生成消滅過程による質量獲得と混合
 - 生成済み (CP-PACS/JLQCD)の最も荒い格子の配位
 - 既知の手法の組み合わせ
 - 現実の u,d,s クォーク質量へ外挿

- 結果
 - $m_{\eta'} = 0.871(46) \text{ GeV}$ exp. 0.960 GeV
 - $m_{\eta} = 0.545(16) \text{ GeV}$ exp. 0.550 GeV
 - 実験値をほぼ再現
 - Nf=2+1計算で、混合を解いて質量を求めた唯一の計算



平成19年度(以降)の目標

- **U(1)問題の定量的解決**
 - より細かい格子の計算→連続極限
 - 生成済みの配位を使用
 - 現実のクォーク質量への外挿: 系統誤差の一因
 - PACS-CS で生成中の配位を使用
 - 伝搬関数計算法の改良による計算時間の大幅な縮減
- **U(1)問題と真空構造の関係の数値的解明**
 - QCDの位相構造と重い η' 中間子の関係の半数値的・半理論的な説明 (1986)
 - 非自明な位相配位→ 伝搬関数のクォークゼロモード→ π/η の大きな質量差
 - 位相電荷密度、ゼロモード、 $\pi/\eta/\eta'$ 伝搬関数の相関等

その他の活動と発表

- **ILDG/JLDG (International/Japan Lattice Data Grid)**
 - 格子QCDデータを国際/国内で共有する仕組み
 - ILDG metadata WG member として、QCDml 改訂に従事
 - JLDG Gfarm file system の構築(佐藤、建部、石井)に協力
 - CP-PACS Nf=2 配位を KEK, RCNP ヘミラー
 - CP-PACS/JLQCD Nf=2+1 配位を ILDG へ公開する準備

An estimate of the eta and eta-prime meson masses in Nf=2+1 lattice QCD
talk presented at Lattice2006 (July 23-28 2006, Tucson ,Arizona, USA)
CP-PACS, JLQCD Collaborations: S. Aoki, et.al., PoS(LAT2006) 204

Report from Metadata Working Group
talk presented at ILDG9 (Dec. 01 2006)

格子QCDによる不安定粒子の研究

素粒子 石塚成人

平成18年度の研究目標

不安定粒子の崩壊幅の第一原理計算方法の確立

研究背景

これまでは、崩壊幅は、粒子崩壊のおこらない所での、
適当な仮定をおいたあやしい計算しかなかった。

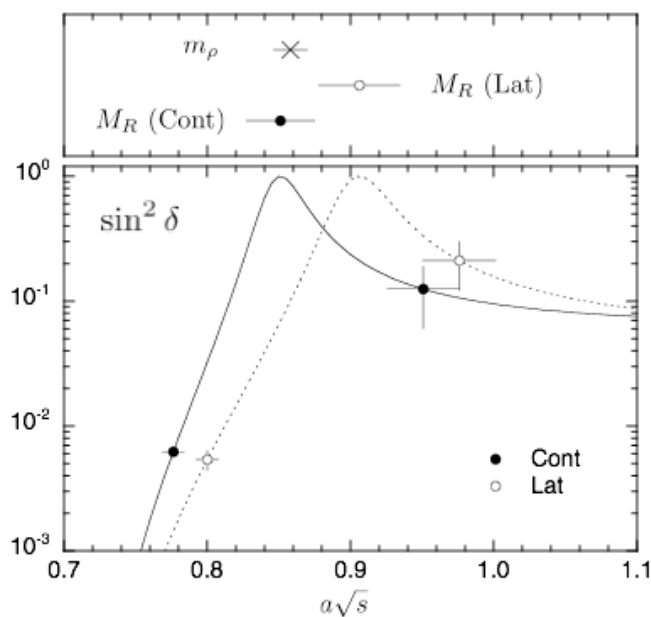
第一原理計算方法のアイデアは既にあった。
ただし、それをやりきった人間がいなかった。

実際にトライして、やりきれるか調べてやろう。
はじめてのトライなので、話を ρ 中間子に限る。

平成18年度の研究成果

終状態である2体 π 中間子の“散乱位相” or “散乱断面積” を計算した。

計算方法：有限体積法（：第一原理計算）



計算成功。(on VPP500)

$$\Gamma = 162 \pm 35 \text{ MeV}$$

$$aM_R = 0.851 \pm 0.024$$

計算の問題点

1. 計算を行った所 : $m_\pi/m_\rho = 0.42$

現実世界 : $m_\pi/m_\rho = 0.18$

非常に長い外挿が必要 ----> 余分なエラー

2. 今回は first try なので連続極限はまだとっていない。

今回の研究で「やればできる」ことがわかった。
よって、力ませにやれば、これらは解決できる。

平成19年度以降の目標

1. 力ませに計算しまくって、上の問題を解決する。

2. 効率良い演算子の開発。

3. 波動関数、運動量空間での散乱振幅からのアプローチ。

発表論文、国際会議、研究会発表リスト

The XXIV International Symposium on Lattice Field Theory
(Lattice 2006 at Tucson, Arizona)

PoS LAT2006:110,2006.

hep-lat/0610020.

$N_f = 2 + 1$ Lattice QCD Simulation toward the Physical Point

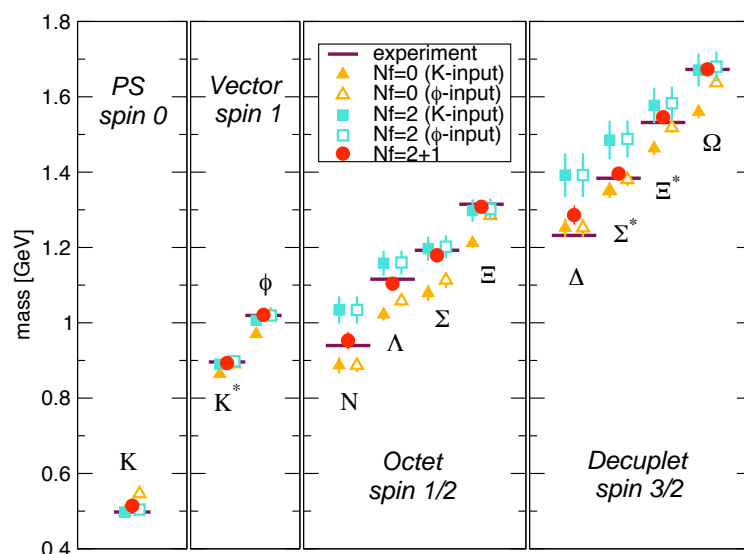
筑波大学大学院数理物質科学研究科
藏増嘉伸

平成 18 年度の研究目標

- PACS-CS を用いた軽い動的クォーク (u, d, s) の効果を取り入れた格子 QCD シミュレーション
- 現実世界の ud クォーク質量 (physical point) の実現を目指す

1

ハドロン質量 ($N_f = 0, 2$ および実験値との比較)



2

平成19年度の目標

N_f	格子間隔	体積	ud クォーク質量
0	0.05–0.10fm	$(3\text{fm})^3$	$\gtrsim 20\text{MeV}$
2	0.086–0.215fm	$(2.4\text{fm})^3$	$\gtrsim 35\text{MeV}$
2+1(cp-pacs)	0.07-0.122fm	$(2\text{fm})^3$	$\gtrsim 65\text{MeV}$
2+1(pacs-cs)	0.1fm	$(3.2\text{fm})^3$	6,12,24MeV

- physical point(ud クォーク質量 $\approx 3.5\text{MeV}$)でのシミュレーション
- 連続極限(格子間隔ゼロ)への外挿
- QCDの基本パラメータであるゲージ結合定数、クォーク質量の決定

3

発表論文リスト

- [1] Y. Kuramashi for PACS-CS Collab., PoS (LAT2006) 029.
- [2] K.-I. Ishikawa for PACS-CS Collab., PoS (LAT2006) 027.
- [3] A. Ukawa for PACS-CS Collab., PoS (LAT2006) 039.
- [4] Y. Nakamura and Y. Kuramashi, Phys. Rev. D73 (2006) 094502.
- [5] CP-PACS Collab.: E. Shintani *et al.*, Phys. Rev. D75 (2007) 034507.
- [6] CP-PACS Collab.: Y. Kayaba *et al.*, to appear in JHEP.

国際会議、研究会等発表リスト

- [1] "2+1 Flavor Lattice QCD with Lüscher's Domain-Decomposed HMC Algorithm", Workshop on "Lattice QCD Simulations with Light Quarks", Tegernsee, Germany, April 2006.
- [2] "Lattice QCD Calculation of Neutron Electric Dipole Moment",

4

IVth International Conference on Quark and Nuclear Physics(QNP06), Madrid, Spain, June 2006.

[3] "2+1 Flavor Lattice QCD with Lüscher's Domain-Decomposed HMC Algorithm", XXIVth International Symposium on Lattice Field Theory, Arizona, USA, July 2006.

[4] "Toward $N_f=2+1$ Lattice QCD Simulation at the Physical Point on PACS-CS", Joint Meeting of Pacific Region Particle Physics Communities, Hawaii, USA, November 2006.

[5] *Workshop on "Domain Wall Fermions at Ten Years"*, BNL, USA, March 2007.

[6] *INT Workshop on Electric Dipole Moments and CP violation*, Seattle, USA, March 2007.

Non-perturbative renormalization of B_K

谷口裕介

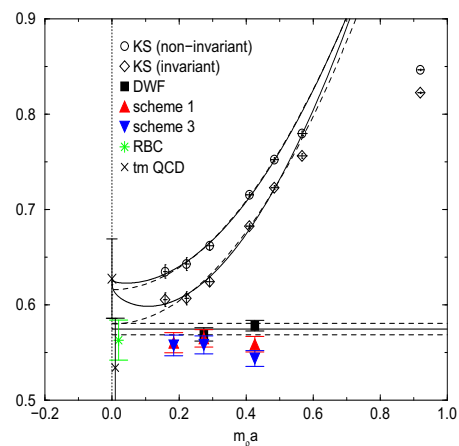
- 平成18年度の研究目標
- B_K の非摂動的な繰り込み
- $N_f = 2$ QCD の running coupling の非摂動的な導出

1

- 標準模型 = (電磁気力) × (弱い力) × (強い力)
 ↑ ↑
 摂動論 (手計算) 非摂動的

- 理論計算と実験の比較
 - 理論のパラメータの決定
 - 新しい理論の探求

- クォークの関わる反応
⇒ 非摂動的
- 場の理論のパラメータ
⇒ 発散 ⇒ 繰り込み
- B_K : (K^0 - $\overline{K^0}$ mixing)



2

- 平成19年度の目標

- $N_f = 3$ QCDにおけるクォーク質量の非摂動論的な繰り込み
- $N_f = 3$ QCDにおけるrunning couplingの非摂動論的な導出
- カイラル対称性の破れによる B_K のoperator mixingの問題

3

- 発表論文リスト

- Schroedinger functional formalism with domain-wall fermion
Y. Taniguchi
JHEP **0610** (2006) 027 [arXiv:hep-lat/0604002].

4

FIRSTプロジェクトと輻射流体力学による宇宙構造形成

梅村雅之（素粒子宇宙研究部門）

18年度研究目標

● FIRSTプロジェクトの推進

特別推進研究「融合型並列計算機による宇宙第一世代天体の起源の解明」の推進と宇宙シミュレータFIRSTの製作

● 輻射流体力学による宇宙構造形成の研究の推進

- ① 大規模シミュレーションコードの開発
 - 粒子法(SPH)輻射流体力学
 - 格子法輻射流体力学
 - 格子法輻射磁気流体力学
 - 多次元ボルツマン方程式解法
- ② 宇宙第一世代星の輻射流体力学シミュレーション

18年度の成果

FIRST 240ノードの製作

480 CPU + 240 Blade-GRAPE (X64)

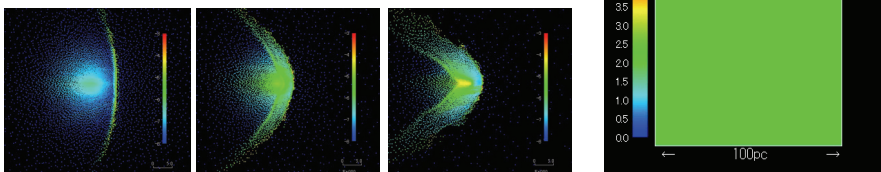
- 演算性能:
 - 汎用機(クラスター) 3 Tflops
 - 専用機(Blade-GRAPE) 33 Tflops
- 主記憶 1.44TB (メモリ増強2GB→6GB)
- gfarmの導入

FIRST 240 ノード



第一世代星形成の輻射流体シミュレーション

以前の研究: 最初の星の周りで次の星形成が阻害
今回の研究: 最初の星の周りでも星形成が可能となる



19年度以降の目標

● **宇宙シミュレータ FIRST の開発**

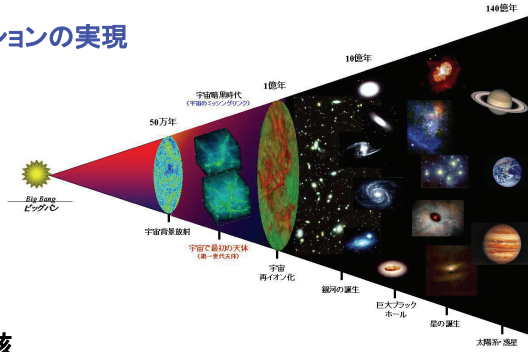
理学・工学の研究者が協力して開発

● **大規模輻射流体力学シミュレーションの実現**

多次元輻射輸送
 多次元輻射流体力学
 多次元輻射磁気流体力学
 多次元ポルツマン方程式

● **天体の起源の解明**

第一世代天体, 宇宙再電離,
 第一世代銀河, 活動銀河中心核



研究業績

査読付論文

- 1) Susa, H.; Umemura, M., Secondary Star Formation in a Population III Object, *Astrophysical Journal Letters*, **645**, L93-L96 (2006)
- 2) Kawakatu, N. et al., Type I Ultraluminous Infrared Galaxies: Transition Stage from ULIRGs to QSOs, *Astrophysical Journal*, **637**, 104-113 (2006)
- 3) Kashikawa, N. et al., Clustering of Lyman Break Galaxies at $z = 4$ and 5 in the Subaru Deep Field: Luminosity Dependence of the Correlation Function Slope, *Astrophysical Journal*, **637**, 631-647 (2006)
- 4) Mori, M.; Umemura, M., Early Metal Enrichment and Lyman Alpha Emission, *New Astronomy Reviews*, **50**, 199-203 (2006)
- 5) Mori, M.; Umemura, M., The Evolution of Galaxies from Primeval Irregulars to Present-day Ellipticals, *Nature*, **440**, 644-647 (2006)
- 6) Kashikawa, N. et al., The End of the Reionization Epoch Probed by Ly-alpha Emitters at $z=6.5$ in the Subaru Deep Field, *Astrophysical Journal*, **648**, 7-22 (2006)
- 7) Hirose, Y.; Umemura, M.; Yonehara, A.; Sato, J., Imprint of Gravitational Lensing by Population III Stars in Gamma Ray Burst Light Curves, *Astrophysical Journal*, **650**, 252-260 (2006)
- 8) Iliiev, I. et al., Cosmological Radiative Transfer Codes Comparison Project I: The Static Density Field Tests, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.*, **371**, 1057-1086 (2006)
- 9) Yoshida, M. et al., Luminosity Functions of Lyman Break Galaxies at $z=4$ and $z=5$ in the Subaru Deep Field, *Astrophysical Journal*, **653**, 988-1003 (2006)
- 10) Kawakatu, N. et al., Formation of SMBHs and QSO Evolution, *New Astronomy Reviews*, **50**, 769-771 (2006)

国際会議発表

- <招待講演>
- 1) Umemura, M., Coevolution and Downsizing of Supermassive Black Holes and Galactic Bulges, Mapping the Galaxy and Nearby Galaxies (June 25-30, 2006, Ishigaki, Japan)
 - 2) Umemura, M., FIRST Project: Ground Challenge for Radiation Hydrodynamic Simulations, 2nd East-Asia Numerical Astrophysics Meeting 2006 (November 1-3, 2006, Daejeon, Korea)
- <一般講演>
- 1) Watabe, Y.; Umemura, M., 3-D Simulation of SMBH Growth by Radiation Drag, The History of Nuclear Black Holes in Galaxies, (May 15-18, 2006, Harvard University, Gutman Library, Cambridge, MA, USA)
 - 2) Watabe, Y.; Umemura, M., Beyond the Unified Theory: Evolution of Active Galactic Nuclei driven by Starburst Events, Mapping the Galaxy and Nearby Galaxies (June 25-30, 2006, Ishigaki, Japan)
 - 3) Mori, Masao; Umemura, Masayuki, Chemodynamics of Lyman alpha emitters, Lyman break galaxies and elliptical galaxies, Chemodynamics: from first stars to local galaxies (July 10-14, 2006, Lyon, France)
 - 4) Watabe, Y.; Hirashta, H.; Umemura, M., Indication of Starburst-Driven Galactic Nuclei Activity, The 4th ALMA Science Working Group Meeting, The 2nd Japan-Taiwan ALMA Science Meeting (July 27-28, 2006, NAOJ, Japan)
 - 5) Watabe, Y.; Umemura, M., Obscuration of AGNs by Circumnuclear Starbursts, The Central Engine of Active Galactic Nuclei (October 16-21, 2006, Xi'an, China)
 - 6) Mori, Masao; Umemura, Masayuki, The Evolution of Galaxies from Primeval Irregulars to Present-day Ellipticals (Invited), 2nd East-Asia Numerical Astrophysics Meeting 2006 (November 1-3, 2006, Daejeon, Korea)
 - 7) Kato, Y.; Umemura, M.; FIRST Project Team, Development of MHD-GRAPE Code for FIRST Simulator, 2nd East-Asia Numerical Astrophysics Meeting 2006 (November 1-3, 2006, Daejeon, Korea)
 - 8) Suwa, Tamon; Umemura, Masayuki, P3MSPH-GRAPE Simulations with FIRST Cluster, 2nd East-Asia Numerical Astrophysics Meeting 2006, (November 1-3, 2006, Daejeon, Korea)
 - 9) Hasegawa, K.; Umemura, M., Formation of Globular Clusters under the Influence of UV Radiation, 2nd East-Asia Numerical Astrophysics Meeting 2006 (November 1-3, 2006, Daejeon, Korea)
 - 10) Mori, Masao; Umemura, Masayuki, The Evolution of Galaxies from Primeval Irregulars to Present-day Ellipticals, Fifth Stromlo Symposium: Disks, Winds & Jets From Planets to Quasars (December 3-8, 2006, Canberra, Australasia)
 - 11) Mori, Masao; Umemura, Masayuki, Embryology of Elliptical Galaxies, The Extreme Universe in the Suzaku Era (December 4-8, 2006, Kyoto, Japan)
 - 12) Hasegawa, K.; Umemura, M., Formation of Globular Clusters within UV Radiation Field, A New Zealand for Old Galaxies (March 25-30, 2007, Rotorua, New Zealand)

宇宙理論グループ全体

博士論文3件, 修士論文6件, 学士論文5件

査読付雑誌論文19件, 国際会議論文6件

国際会議発表25件, 学会・研究会発表47件

H18年度の研究成果

吉川 耕司 (宇宙理論)

東京大学大学院理学系研究科より、3月1日付けで着任

H18年度の研究目標

- ダークバリオンにおける非平衡電離状態の研究
- イオンと電子の二温度構造でのダークバリオンの電離状態の研究
- GRAPE-DR用の天体シミュレーションコードの開発

平成18年度の成果

- 遠方の明るい天体を利用したダークバリオン探査の可能性

遠方のQSO・GRBなどの明るい天体の分光観測によって、大量に存在するはずの観測的に未同定のバリオン(ダークバリオン)を検出できる可能性を、将来のX線観測衛星計画に基づいて評価した。

- ダークバリオンでの非平衡電離状態の数値シミュレーション

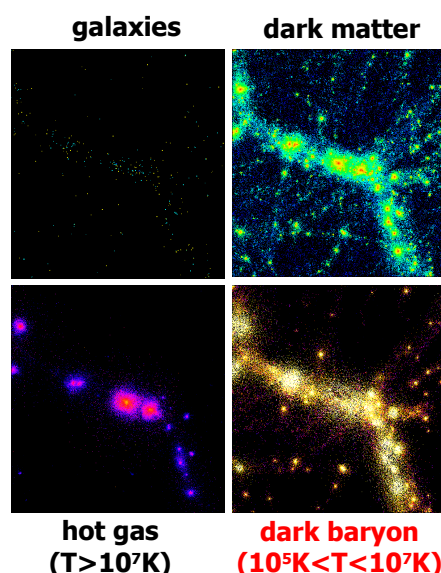
ダークバリオンのような希薄なプラズマで重要となる非平衡電離状態を考慮した数値シミュレーションを初めて行い、これまでの電離平衡を仮定した場合のダークバリオンの検出可能性や観測量がどの程度影響を受けるか調べた。

- GRAPE-DR用のシミュレーションソフトウェアの開発

Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) ライブラリの開発

- Streaming SIMD Extension を利用した重力多体計算ライブラリ(Phantom GRAPE)の開発

コモディティー CPUに搭載されたSIMD演算器を利用した重力多体計算ライブラリ



平成19年度以降の目標

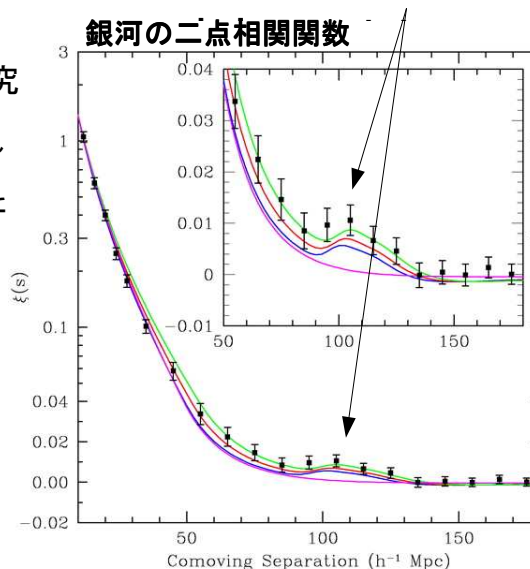
バリオン音響振動

- バリオンの熱史・化学進化の理論的・数値的研究

非平衡電離状態やプラズマの二温度状態など、これまでの一連の研究では考慮されてこなかったダークバリオンの重要な物理的性質を包括的に取り入れた数値シミュレーションによって、宇宙のバリオンの熱史や銀河形成・化学進化をより整合的に調べる。

- バリオン音響振動の数値シミュレーション

宇宙のスケールを測る物差しとして利用可能なバリオン音響振動を様々な赤方偏移で検出するための観測的戦略を数値シミュレーションで探る。



- GRAPE-DRやSSEを用いた天体数値シミュレーションライブラリの開発

SPH法による流体計算や輻射輸送の計算の高速化を目指す。

業績リスト

論文

Yoshikawa, K., Sasaki, S.
“Non-equilibrium Ionization State of a Warm-Hot Intergalactic Medium”
PASJ, 2006, 58, 641

Kawahara, H., Yoshikawa, K., Sasaki, S., Suto, Y., Kawai, N., Mitsuda, K., Ohashi, T., Yamasaki, N.Y.,
“Soft X-Ray Transmission Spectroscopy of a Warm/Hot Intergalactic Medium with XEUS”
PASJ, 2006, 58, 657

Suwa, T., Habe, A., Yoshikawa, K.,
“Protoclusters in the LCDM Universe”
ApJ, 2006, 646, L5

研究会発表等

“Non-equilibrium Ionization State of the Warm-Hot Intergalactic Medium”
Talk at EDGE General Meeting, 19-21 December 2006 at Rome, Italy

“Non-equilibrium Ionization State of the Warm-Hot Intergalactic Medium”
日本天文学会 2006年秋季年会 於 北九州市

“Phantom GRAPE”
国立天文台天文データ解析センター 2006年度 ユーザーズミーティング

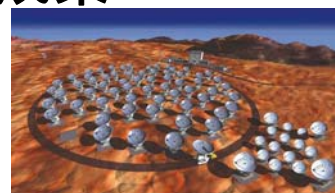
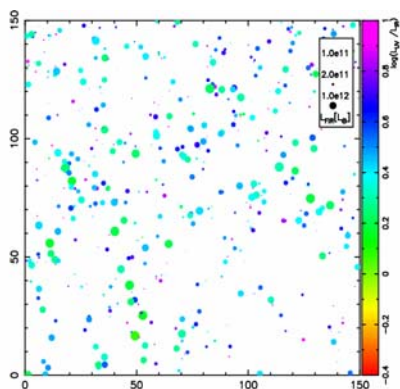
遠赤外線・サブミリ波で 探る銀河形成・進化

平下 博之 (H. Hirashita)
(宇宙理論・講師)

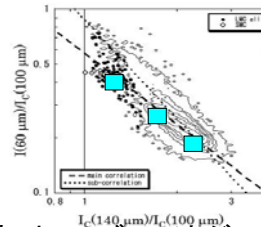
平成18年度の研究目標

1. 銀河の遠赤外・サブミリ光度進化の理解
2. 銀河形成シミュレーションへの組み込み

平成18年度の成果



ALMA (2010年頃～)での
観測的検証を目指す



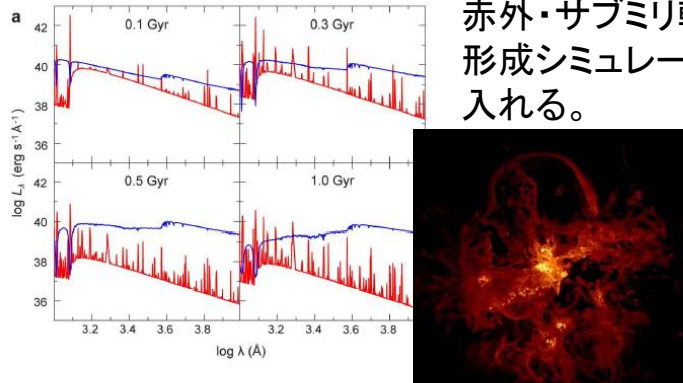
ALMAによってサブミリ波で検出可能な
遠方($z=6$)銀河分布のシミュレーション
Suwa, Hirashita, & Shimizu (2007)

遠赤外・サブミリ波ダスト輻射
スペクトルモデルの近傍銀河
での検証(Hirashita et al. 2006)

平成19年度の目標

Mori & Umemura (2006)

ダストによる可視の減光と遠赤外・サブミリ輻射を、銀河形成シミュレーションに取り入れる。



可視からサブミリにわたる銀河スペクトル進化の総合理解

平成18年度の業績

査読付き論文4件

1. Hirashita, Hiroyuki; Shibai, Hiroshi; Takeuchi, Tsutomu T.
“Search for High Column Density Systems with Gamma Ray Bursts”
Astronomy & Astrophysics, **452**, 481-485 (2006)
2. Iliev, Ilian; Hirashita, Hiroyuki; Ferrara, Andrea
“Fate of Clumps in Damped Ly α Systems”
Mon. Not. Roy. Astron. Soc., **368**, 1885-1892 (2006)
3. Hibi, Yasunori; Shibai, Hiroshi; Hirashita, Hiroyuki;
Kawada, Mitsunobu; Oostubo, Takafumi; Hirashita, Hiroyuki
“Common Correlations between 60, 100, and 140 μm Intensities in the Galactic Plane and Magellanic Clouds
Publications of the Astronomical Society of Japan, **58**, 509-519 (2006)
4. Hirashita, Hiroyuki; Hunt, Leslie K.
“Time Evolution of the Radio Continuum of Young Starbursts: the Importance of Synchrotron Emission”
Astronomy & Astrophysics, **460**, 67-81 (2006)

国内研究会での発表
4件

国際会議発表2件

1. Hirashita, Hiroyuki; Hunt, L. K.
“Radio--Far-Infrared Spectral Energy Distribution of Young Starbursts”
Mapping the Galaxy and Nearby Galaxies” (June 26-31, 2006, Ishigaki, Japan)
2. Hirashita, Hiroyuki.
“Unified Understanding of the Far-Infrared SEDs of Nearby Galaxies”
A New Zealand for Old Galaxies (March 26-30, 2007, Rotorua, New Zealand)

物質生命研究部門

計算物質生命科学

押山 淳	数理物質科学研究科物質創成先端科学専攻	教授
岡田 晋	数理物質科学研究科物質創成先端科学専攻	講師
白石 賢二	数理物質科学研究科物質創成先端科学専攻	助教授(共)
舘野 賢	数理物質科学研究科物理学専攻	助教授
ボエロ マウロ	数理物質科学研究科物理学専攻	助教授

量子多体系

矢花 一浩	数理物質科学研究科物理学専攻	教授
橋本 幸男	数理物質科学研究科物理学専攻	講師
中務 孝	数理物質科学研究科物理学専攻	講師
日野 健一	数理物質科学研究科物性・分子工学専攻	教授)
小泉 裕康	数理物質科学研究科物性・分子工学専攻	助教授
トン・ショーミン	数理物質科学研究科物性・分子工学専攻	講師

計算科学によるナノサイエンス

押山 淳

共同研究者

白石賢二、岡田晋、岩田潤一(物質生命研究部門)
岩田潤一、藤本義隆、内田和之、神谷克政(計算科学研究セ研究員)
Berber Savas(物理学専攻)

平成18年度の目標

量子論に立脚した大規模電子状態計算、ダイナミクス計算、
ナノ機能探索計算により、ナノ物質およびバイオ物質での、現象
解明と新たな機能発見を目指す。具体的には、

- 実空間密度汎関数法の開発とPACS-CSでの10**3原子
群計算の実行
- ナノ・キャパシタンス計算の定式化と炭素ナノチューブへの
応用
- 炭素ナノチューブ/既存物質ハイブリッド系の物性解明

平成18年度の成果と19年度以降の目標

18年度成果

- 実空間密度汎関数法(差分法)の開発と1000超原子計算の実行. シリコン
中複原子空孔の構造決定
- 二重炭素ナノチューブ系のキャパシタンス決定とナノスケール・キャパシタに
おける量子性の発見
- シリコン表面炭素ナノチューブ配列制御の予測
- シトクローム酸化酵素でのプロトン移動機構の解明と反応自由エネルギー
計算

19年度以降目標

- 実空間密度汎関数法(差分法)によるPACS-CS上での10,000原子計算の
実行とそれによるシリコン系ナノ構造の新機能探索
- 実空間差分法による第一原理動力学法の開発
- 量子論計算によるナノアーキテクチャの解明

成果発表リスト

発表論文

1. K. Kamiya, M. Boero, K. Shiraishi and A. Oshiyama, "Enol-to-Keto Tautomerism of Peptide Groups", J. Phys. Chem. B 110, 4443 (2006).
2. S. Berber and A. Oshiyama, "Reconstruction of mono-vacancies in carbon nanotubes: atomic relaxation vs. spin polarization", Physica B 376-377, 272 (2006).
3. M. Boero, A. Oshiyama, P. L. Silvestrelli and K. Murakami, "First-principle molecular dynamics study of bond disruption and formation in SiO₂ upon irradiation", Physica B 376-377, 945 (2006).
4. J.-I. Iwata, A. Oshiyama and K. Shiraishi, "Real-space Density-functional Calculations for Si Divacancies with Large Size Supercell Models", Physica B 376-377, 196 (2006).
5. S. Berber and A. Oshiyama, "Atomic and Electronic Structures of Carbon Nanotubes on Si(001) Stepped Surfaces", Phys. Rev. Lett. 96, 195505 (2006).
6. M. Otani, S. Okada and A. Oshiyama, "Formation of titanium-carbide in a nanospace of C78", Chem.Phys.Lett. (2007) in press.

国際会議招待講演

1. A. Oshiyama, "Prediction of Atomic and Electronic Structures of Hybrid Materials with Carbon Nanotubes" International Workshop on Computational Challenges and Tools for Nanotubes (Nagano, June, 2006)
2. A. Oshiyama, "Atomic and Electronic Structures of Carbon nanotubes on Si and Metal Surfaces" 9th Asian Workshop on First-Principles Electronic-Structure Calculations (Seoul, November, 2006).
3. A. Oshiyama, "Carbon Nanotube and its Hybrid Structures" 2nd Int. Symposium on Nanometer-Scale Quantum Physics (nanoPHYS07), (Tokyo, January 24-26, 2007)

その他出版物

1. 押山淳, "計算機で探るナノの世界"「物理学の挑戦」日本物理学会編(相原博昭、大橋隆哉、押山淳)(日本評論社, 2006).
2. A. Oshiyama and S. Okada, "Magnetism in Nanometer-scale Materialsthat Contain No Magnetic Elements" in *Carbon Based Magnetism*, edited by T. Makarova and F. Palacio (Elsevier, 2006).
3. 押山淳, "計算科学で探索するナノ・バイオの世界" 物性研究 87, 664-725 (2007).

ナノスケール物質の物性解明と物質設計

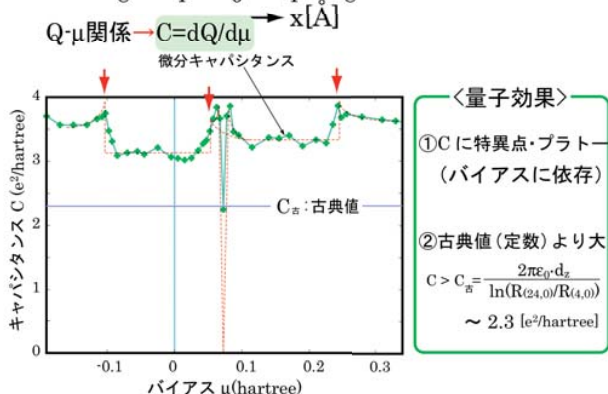
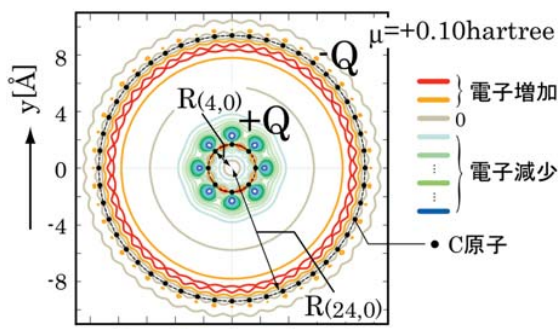
岡田晋

研究目的

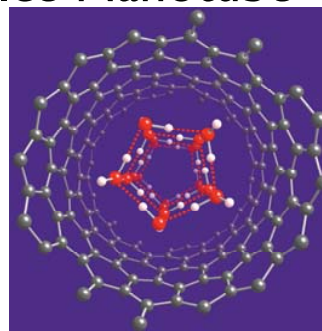
- ナノチューブ内包空間制御による新奇物性探索
 - ✓ 2層ナノチューブ構造によるナノキャパシター
 - ✓ チューブ内空隙の新規氷結晶
- ナノネットワーク構造制御による新規能探索
 - ✓ 強磁性炭素ナノチューブ

18年度の成果

CNTキャパシター

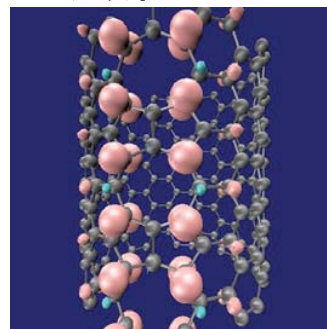


Ice Nanotube



新奇氷結晶の物性
ナノチューブ内空隙の特殊性

強磁性CNT



幾何学欠陥の誘起する強磁性

19年度以降の目標

- ナノ空間を用いた新規物質相の探索
- 新奇ナノチューブ構造体の探索と物質設計
- 種々の物質表面上におけるナノチューブの物性解明

業績リスト

● 論文

- S. Okada, K. Nakada, K. Kuwabara, K. Daigoku, and T. Kawai "Ferromagnetic Spin Ordering on Carbon Nanotubes with Topological Line Defects" Phys. Rev. B 74, 121412(R) (2006).
- S. Okada, K. Nakada, and T. Kawai, "Orientation Dependence of Magnetic Moment of Carbon Nanotubes with Topological Line Defects", Appl. Phys. Lett. 90, (2007) in press.
- S. Okada, "Electronic structures of finite-length carbon nanotubes: Crossover from fullerenes to nanotubes" NANO, (2007) in press.
- S. Okada, "Radial-breathing mode frequencies for nanotubes encapsulating fullerenes", Chem. Phys. Lett. (2007) in press.
- S. Okada, K. Nakada, and T. Kawai, "Energetics and Electronic Structure of Armchair Nanotubes with Topological Line Defect", J. Phys. Condensed Matter, (2007) in press.
- K. Uchida, S. Okada, K. Shiraishi, and A. Oshiyama, "Quantum effects in cylindrical carbon-nanotube capacitor", J. Phys. Condensed Matter, (2007) in press.
- M. Otani, S. Okada, and A. Oshiyama, "Formation of Titanium-carbide in nanospace of C78 fullerenes", Chem. Phys. Lett. (2007) in press.
- T. Kurita, S. Okada, and A. Oshiyama, "Energetics of ice nanotubes and their encapsulation in carbon nanotubes from density-functional theory", Phys. Rev. B, submitted.

● 国際会議

- S. Okada, T. Kawai, and K. Nakada, "Energetics and Electronic Structure of Armchair Nanotubes with Topological Line Defect", International Conference on Quantum Simulators and Design, December 2--4, 2006, Hiroshima University.
- Susumu Okada, "Electronic Structure of Nanotubes Adsorbed on Metal Surfaces", International Symposium on Theories of Organic/Metal Interfaces, January 15--17, 2007, Osaka University.

大規模第一原理計算によるナノサイエンス・ナノテクノロジーの研究

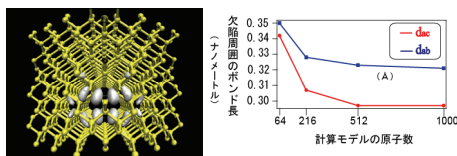
白石賢二

H18年度の目標

大規模第一原理計算の手法を開拓すると同時に、本手法を用いて21世紀のナノテクノロジーに貢献する科学的知見・概念の獲得を目指す。

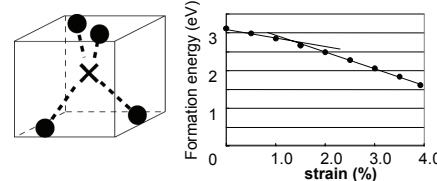
H18年度の成果

1: 実空間差分法による大規模第一原理計算手法の開発 (~1000原子ナ構造が計算可能になった)



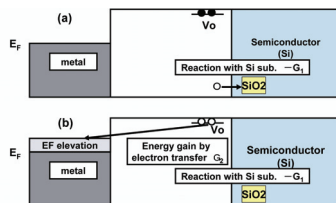
Si中の2原子空孔の形成エネルギーが十分収束する大規模計算が可能となった。

2: 次世代ナノCMOS用の歪みGeチャネルの基礎物性の第一原理計算による予言



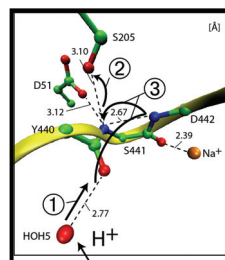
歪みを起源とする定常原子空孔構造形成のため、Ge空孔が極めて形成しやすい。

3: ナノ界面におけるショットキー障壁形成の新しい機構の提案とその実験的検証



ショットキー障壁が該当する界面ではなく、別の界面によって決定される理論提案と実験検証

4: 呼吸のメカニズムの原子レベルでの解明(チトクロム酸化酵素におけるプロトン移動機構)



2段階移動によりプロトンがペプチド結合を移動できることを計算科学によって提案。(生化学分野における新概念創成に向けた取り組み)

H19年の目標

計算手法開発

1. ~10000原子規模の計算を可能とするように実空間差分法のチューニングを行う。
2. 第一原理分子動力学法の実空間化を行う。

計算の対象

3. 超大規模計算のナノバイオ物質への応用。
4. ナノ科学の新概念創成を目指した大規模計算の実行

H18年度実績

論文リスト

- 1) F. L. Gervasio, M. Boero and M. Parrinello, *Double Proton Coupled Charge Transfer in DNA*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **45**, (2006) 5606-5609.
- 2) M. Boero, A. Oshiyama, P. L. Silvestrelli and K. Murakami, "First-principle molecular dynamics study of bond disruption and formation in SiO₂ upon irradiation", *Physica B* **376-377** (2006) 945-949.
- 3) J.-I. Iwata, A. Oshiyama and K. Shiraishi, "Real-space Density-functional Calculations for Si Divacancies with Large Size Supercell Models", *Physica B* **376-377** (2006) 196-199.
- 4) M. Uematsu, H. Kageshima, S. Fukatsu, K. M. Itoh, K. Shiraishi, M. Otani and A. Oshiyama, "Enhanced Si and B diffusion in Semiconductor-Grade SiO₂ and the Effect of Strain on Diffusion", *Thin Solid Films* **508** (2006) 270-275.
- 5) Y. Akasaka, G. Nakamura, K. Shiraishi, N. Umezawa, K. Yamabe, O. Ogawa, M. Lee, T. Amiaka, T. Kasuya, H. Watanabe, T. Chikyow, F. Ootsuka, Y. Nara, and K. Nakamura, "Modified Oxygen Vacancy Induced Fermi Level Pinning Model Extendable to P-Metal Pinning", *Jpn. J. Appl. Phys. Part 2*, **45**, (2006) L1289-L1292.
- 6) K. Shiraishi, K. Yamada, K. Torii, Y. Akasaka, K. Nakajima, M. Konno, T. Chikyow, H. Kitajima, T. Arikado and Y. Nara, "Oxygen-vacancy-induced threshold voltage shifts in Hf-related high-k gate stacks", *Thin Solid Films*, **508**, (2006) 305-310.
- 7) N. Umezawa, K. Shiraishi, T. Ohno, M. Boero, H. Watanabe, T. Chikyow, K. Torii, K. Yamabe, K. Yamada, and Y. Nara, "Unique behavior of F-centers in high-k Hf-based oxides", *PHYSICA B-CONDENSED MATTER*, **376**, (2006) 392-394

他19件

国際会議リスト(招待講演のみ)

- 1) K. Shiraishi, et al., "Theory of Fermi Level Pinning of High-k Dielectrics", 2006 International Conference on Simulation of Semiconductor Process and Devices, Monterey, CA, USA (September 6-8, 2006).
- 2) K. Shiraishi, et al., "Physics of interfaces between gate electrodes and high-k dielectrics", 8th International Conference on Solid-State and Integrated-Circuit Technology, Shanghai, China (Oct. 23-26, 2006).
- 3) K. Shiraishi, et al., "Theoretical approaches for protein function", Fifth East Asian Biophysics Symposium "Structural chemical studies on physiological functions of proteins", Okinawa, Japan, (November 12-16, 2006).
- 4) K. Shiraishi, et al. "A new theory of the Schottky barrier heights at metal/metal oxide interfaces based on the first principles calculations", Computational Science Workshop, Tsukuba, Japan, (April 17-19, 2006).
- 5) K. Shiraishi, et al. "New theory of effective workfunctions at metal/high-k dielectric interfaces -Application to metal/high-k HfO₂ and La₂O₃ dielectric interfaces-", SECOND INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON DIELECTRICS FOR NANOSYSTEMS: MATERIALS SCIENCE, PROCESSING, RELIABILITY, AND MANUFACTURING at the 209th Meeting of Electrochemical Society - Denver, Colorado, USA (May 7-12, 2006).
- 6) K. Shiraishi, et al., "Theoretical Approaches towards Elucidation of the Cytochrome c Oxidase Reaction Mechanism", International Workshop on Reaction Mechanisms of Energy-Transducing Metalloenzymes, Kamigohri, Akoh, Hyogo, (June 17, 2006).
- 7) M. Boero, *Hybrid reactive CPMD based QM/MM simulations of biomolecules*, 1st CMM QM/MM Workshop "Developers Meet Users", Center for Molecular Modeling (CMM), Univ. of Pennsylvania, Philadelphia (USA), 23-26, September 2006

他国際会議5件、国内会議招待講演7件

生命科学・量子科学・情報科学による生体物質の機能制御機構の研究

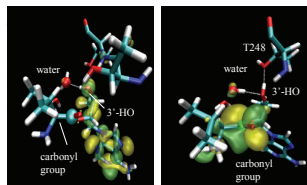
舘野 賢



平成18年度の研究目標

- 1) タンパク質生成・翻訳システムの機能制御機構の解明
 - a. アミノアシルtRNA合成酵素 → LeuRSなどによる酵素触媒反応機構の解析
 - b. アミド・トランスフェラーゼ → GatCAB内チャンネル構造による分子輸送機構の解析
- 2) 呼吸鎖末端における分子機構の解明
 - a. シトクローム酸化酵素 (CcO) におけるプロトン輸送反応機構の解析 (H-path)
 - b. ヘムの電子状態と側鎖の影響, およびCcOとの相互作用機構の解析
 - c. シトクローム酸化酵素 (CcO)・シトクロームc (Cyt c) 複合体立体構造の精密な予測
- 3) タンパク質フォールディングにおける量子効果の解明
 - a. Tyr-TrpのT型スタッキングによる安定性の精密な評価とタンパク質フォールディングにおける役割
- 4) 構造インフォマティクスおよびシステム・バイオロジ分野
 - a. グラフ理論によるタンパク質間ドッキング・シミュレーション技術の開発 → 2-c.へ応用
 - b. 細胞内シグナル伝達ネットワークシステム (タンパク質分子間相互作用ネットワークシステム) のモデル構築とその数理解析

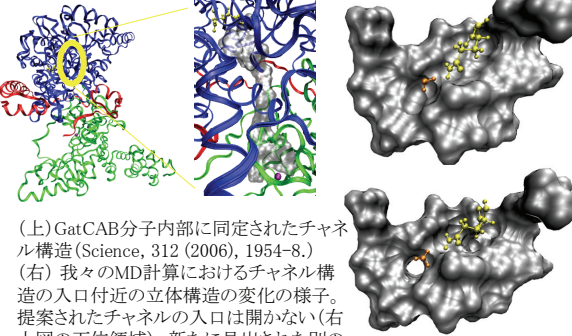
1. LeuRSによる酵素触媒反応



活性部位における反応前後のLUMOの変化

- a) 低解像度のデータを理論的に精密化して, 計算モデルを再構築 (約170,000原子)
- b) QM/MMハイブリッドMD計算により巨大な系における反応機構丸ごと解析する
- c) 反応初段の機構を解明 (H-gateの開放 → LUMOの変化)

2. GatCABによる分子輸送機構の解析

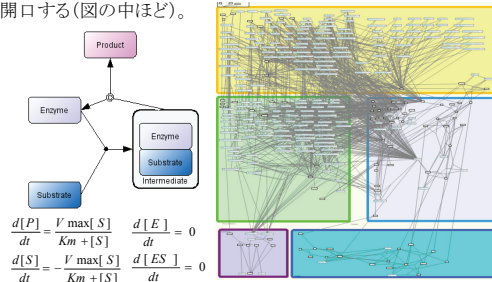


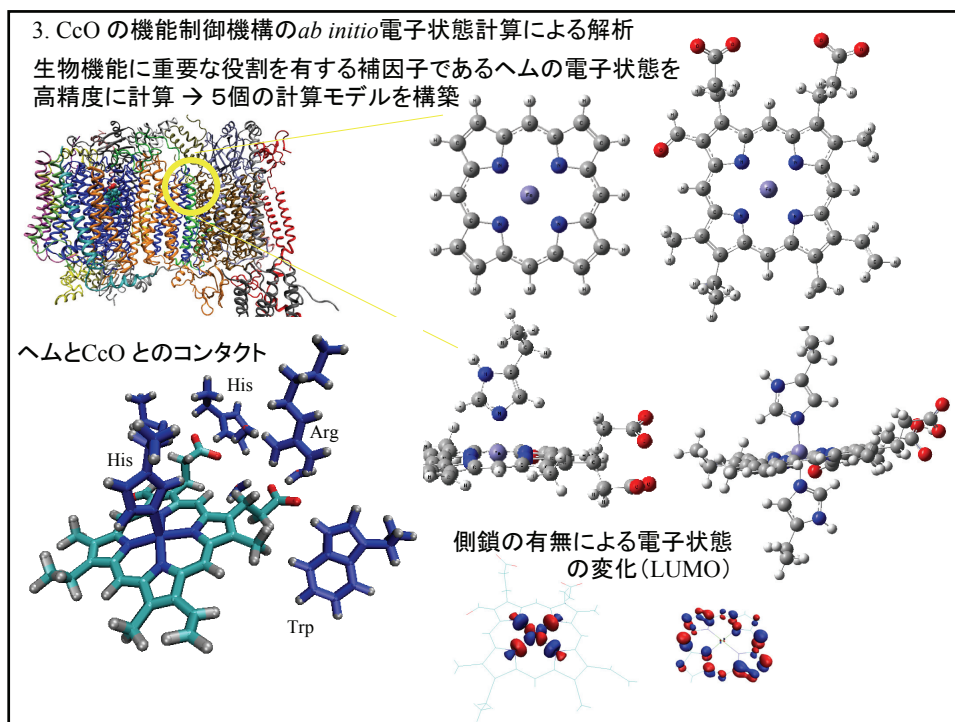
(上) GatCAB分子内部に同定されたチャンネル構造 (Science, 312 (2006), 1954-8.)
 (右) 我々のMD計算におけるチャンネル構造の入口付近の立体構造の変化の様子。提案されたチャンネルの入口は開かない (右上図の下部領域)。新たに見出された別のチャンネル構造とその入口の変化の様子 (右下図)。アンモニア分子が通過可能なサイズの穴が開く (図の中ほど)。

3. 細胞内シグナル伝達ネットワークシステムの解析

タンパク質分子間相互作用ネットワークシステムの数理解析

細胞は, 外部からのシグナルに対して応答するために, タンパク質分子間の相互作用 (酵素反応など) を通じて, 情報をゲノム (遺伝子) にまで伝達する → 複雑な分子間相互作用ネットワークシステム





Publication List

- 1) Yamaguchi, H., Tateno, M., and Yamasaki, K., Solution structure and DNA-binding mode of the matrix attachment region-binding domain of the transcription factor SATB1 that regulates the T-cell maturation., *J. Biol. Chem.*, **281** (2006), 5319-5327.
- 2) Boero, M. and Tateno, M., Investigations of catalytic reaction mechanisms of biological macromolecules by using first principles and combined classical molecular dynamics methods., *Modelling Molecular Structure and Reactivity in Biological Systems* (2006), 206-216.
- 3) Boero, M., Park, J. M., Hagiwara, Y., and Tateno, M., First principles molecular dynamics study of catalytic reactions of biological macromolecular systems: Toward analyses with QM/MM hybrid molecular simulations., *Journal of Physics*, in press.
- 4) Kamiya, K., Boero, M., Tateno, M., Shiraiishi, K., and Oshiyama, A., First-principles molecular dynamics study of proton transfer mechanism in bovine cytochrome c oxidase., *Journal of Physics*, in press.
- 5) ナノシミュレーション技術ハンドブック(川添良幸・池庄司民夫 編) (2006.7), 笹野 賢, ゲノムDNAの塩基配列と遺伝子領域の発見, pp.32-33; 笹野 賢, 相同性(ホモロジ)検索, pp.411-413.
- 6) Hagiwara, Y., and Tateno, M., Fully solvated dynamical docking scheme for prediction of specific interactions of protein, ligand, and solvent water., submitted.
- 7) Hagiwara, Y., and Tateno, M., Prediction of structural transitions and specific interactions of protein and ligand by using the fully solvated dynamical docking scheme., submitted.
- 8) Kitta, K. and Tateno, M., A novel docking scheme of protein-protein complexes based on informatical detection of hydrogen bond networks by using a graph theory algorithm., submitted.

国際会議 (抜粋)

- 1) Tateno, M., Boero, M., Hagiwara, Y., and Nureki, O., "Toward QM/MM hybrid MD simulations of huge biological macromolecular systems: free-energy-based dynamical analyses of molecular architecture of a protein-RNA complex", International Conference on Quantum Simulators and Design, 2006.
- 2) Hagiwara, Y. and Tateno, M., "Fully Solvated Dynamical Docking Scheme for Prediction of Specific Interactions of Protein, Ligand and Solvent Water Molecules", East Asian Biophysics Symposium & Forty-Fourth Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, 2006.
- 3) Yulong, C., Hagiwara, Y., and Tateno, M., "Computational analyses of mechanisms of large conformational changes for switching of distinct catalytic reactions of an enzyme", East Asian Biophysics Symposium & Forty-Fourth Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, 2006.



題目: 計算生命グループの18年度の研究成果

名前: BOERO Mauro

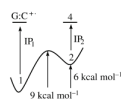
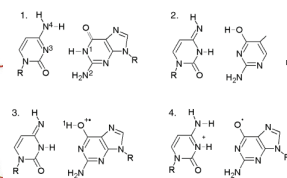
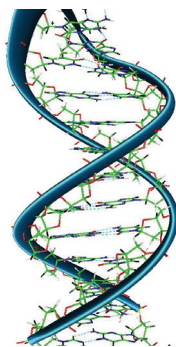
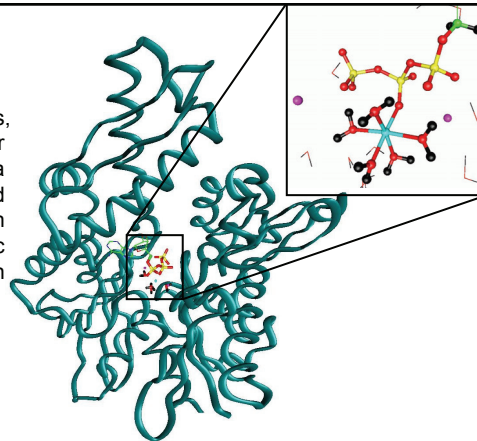
平成18年度の研究目標:

- Double proton coupled charge transfer in DNA
- Water dissociation and catalytic role of K^+ and Mg^{2+} metal ions in Hsc70 ATP hydrolysis
- Structural, Electronic, and Optical Properties of Diindenoperylene
- Enol to keto tautomerization reaction in peptide groups: an exploratory calculation for cytochrome *c* oxidase
- Solvation properties of alkali metal ions

18年度の成果

ATP synthase in Hsc70 protein

QM/MM simulations, coupled to metadynamics, on Hsc70 ATPase protein, show how a water molecule coordinated to Mg^{2+} acts as a catalyst and evidence the unique and cooperative role of K^+ and Mg^{2+} metal ions in promoting the release of the inorganic phosphate via an exchange of OH^- between their respective solvation shells.

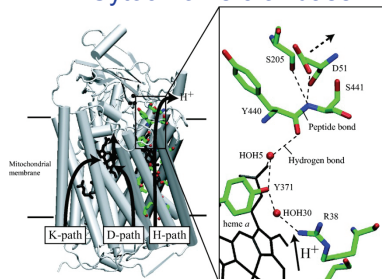


Charge transfer in DNA

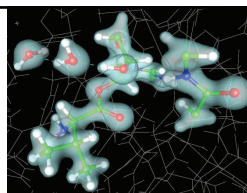
The mechanism of electron hole transfer in a solvated double-helical DNA has been investigated via QM/MM simulations. The results provide a direct evidence of a coherent single step charge transfer and show that a double proton transfer has a fundamental role in triggering the charge hopping along the double stranded DNA.

19年度の目標 – In collaboration with 舘野 賢

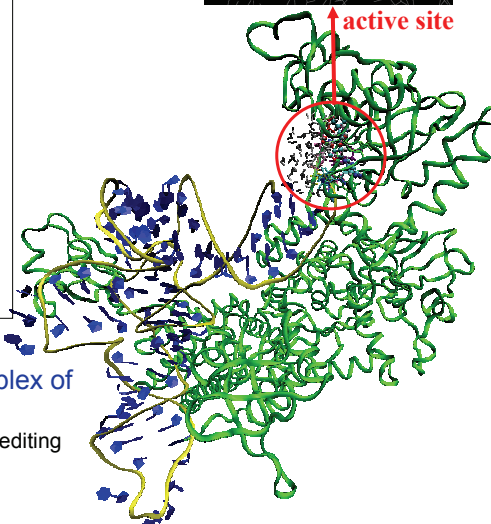
Proton transfer H-path in Cytochrome c oxidase



Study of the unconventional proton transfer mechanism across a peptide bond in the cell respiration process



↑ active site



QM/MM Simulation of the Complex of LeuRS and its specific tRNA:

One of the active sites in LeuRS in the editing reaction phase

Publications list

Research papers:

- 1) K. Kamiya, M. Boero, K. Shiraiishi and A. Oshiyama *J. Phys. Chem. B* **110**, 4443 (2006)
- 2) M. Boero, A. Oshiyama, P. L. Silvestrelli and K. Murakami *Physica B* **376-377**, 945 (2006)
- 3) M. Oshikiri and M. Boero *J. Phys. Chem. B* **110**, 9188 (2006)
- 4) F. L. Gervasio, M. Boero and M. Parrinello *Angew. Chem. Intl. Ed.* **45**, 5606 (2006)
- 5) L. M. Ramaniah and M. Boero *Phys. Rev. A* **74**, 042505 (2006)
- 6) M. Boero, T. Ikeda, E. Ito and K. Terakura *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 16798 (2006)

Book chapters:

M. Boero and M. Tateno, *Investigations of catalytic reaction mechanisms of biological macromolecules by using first principles and combined classical molecular dynamics methods* in *Modelling Molecular Structure and Reactivity in Biological Systems*, pag. 206-216, ed. By J. J. Naidoo, J. Brady, M. Field, J. Gao and M. Hann, RSC publishing, Cape Town, July 2006. ISBN 0 85404 668 2.

Invited talks:

- 1) Workshop on Large Scale - High Accuracy Electronic Structure Calculation Methods. Osaka University, Osaka, Japan. 13-14 July 2006
Title: *Hybrid QM/MM simulations of biosystems*
- 2) 1st CMM QM/MM International Workshop “Developers Meet Users”. Center for Molecular Modeling University of Pennsylvania, Philadelphia (USA). 23-26 September 2006
Title: *Hybrid reactive CPMD based QM/MM simulations of biomolecules*

フェルミ多粒子系ダイナミクスの量子シミュレーション

矢花 一浩
物質生命研究部門

H18年度の研究目標:

時間依存密度汎関数理論に基づいた励起・衝突ダイナミクスの非経験的な記述

- ・原子核の励起状態を非経験的に記述する理論の開発
- ・PACS-CSを用いた電子ダイナミクスの超並列計算
- ・電子とイオンのダイナミクスを同時に記述する実空間計算法の開発
- ・パルスレーザーによる固体の誘電破壊メカニズムの解明

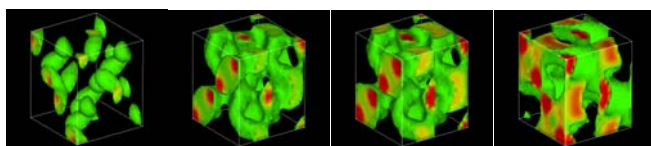
平成18年度の成果

パルスレーザーによって誘起される物質中の電子ダイナミクス

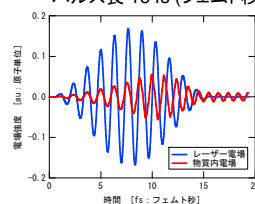
原研・ワシントン大との共同研究

ダイヤモンドに高強度・超短パルスレーザーを照射、絶縁破壊の解明を目指す。
ナノメートル、フェムト秒スケールの量子ダイナミクス計算

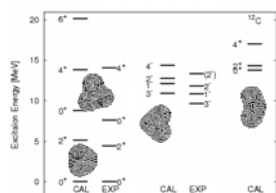
強度 $I=10^{15} \text{W/cm}^2$
波長 800nm
パルス長 16 fs (フェムト秒)



レーザー光によって生じる電子密度分布のゆらぎ



原子核の励起状態に対する新しい非経験的理論の開発



多様な相関構造を持つ
 ^{12}C 原子核の励起構造の
統一的理解に成功

実時間・実空間計算法による多電子ダイナミクスの超並列計算

- ・固体中の多電子ダイナミクス計算は、k点に関する並列化で高効率な計算を遂行。
- ・空間分割による超並列計算は、通信時間の比率が高く、実用のためさらに要検討。

平成19年度以降の目標

フェルミオン多粒子系の3次元量子ダイナミクス・シミュレーションを共通の基盤として、基礎・応用科学の多様な分野を横断した取り組みを行う。

電子ダイナミクス計算

ナノメートル・フェムト秒領域の電子・イオンダイナミクスを、ミクロな量子計算によって解明する。
様々な学際領域にある分野に関係

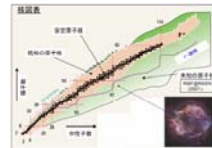
- ・強レーザー場科学: 非線形光応答、高次高調波発生
- ・超高速現象: コヒーレントフォノン生成、光絶縁破壊のメカニズム
- ・XFEL計画との連携: 生体分子中の多電子ダイナミクスなど

原子核ダイナミクス計算

RIビームファクトリー計画(理化学研究所・2007年実験開始)に連携した理論研究

- ・原子核の励起・応答の非経験的計算
- ・元素の起源の解明、新しい原子核像の構築。

- ・UNEDFプロジェクト(SciDAC-2)との連携(2006-2010)
(Unified Nuclear Energy Density Functional:
原子核エネルギー密度汎関数の構築)



研究発表リスト

論文

- Real-time, real-space implementation of the linear response time-dependent density-functional theory
K. Yabana, T. Nakatsukasa, J.-I. Iwata, G.F. Bertsch, *Physica Status Solidi (b)* 243, 1121-1138 (2006).
Suppressed fusion cross section for neutron halo nuclei
M. Ito, K. Yabana, T. Nakatsukasa, M. Ueda, *Phys. Lett. B* 637, 53-57 (2006).
Configuration mixing calculation for complete low-lying spectra with a mean-field Hamiltonian
S. Shinohara, H. Ohta, T. Nakatsukasa, K. Yabana, *Phys. Rev. C* 74, 054315 (2006).
First-principles description for electron dynamics in solid under intense laser field,
J.-I. Iwata, T. Otobe, T. Nakatsukasa, K. Yabana, *J. Phys. Cond. Matt.* Submitted.
Photoinduced electric currents in ring-shaped molecules by circularly polarized laser pulses,
K. Nobusada, K. Yabana, *Phys. Rev. A*, in press.
Density functional calculation for tunnel ionization rate of hydrocarbon molecules,
T. Otobe, K. Yabana, *Phys. Rev. A*, submitted.

国際会議・国内学会発表

- First-principle simulation of electron dynamics in solid under intense pulse laser
46th IUVSTA Workshop & 5th Int. Symp. on Ultrafast Surface Dynamics 21-25 May 2006, Abashiri, Hokkaido, JAPAN
Multiphoton vs field ionization of molecules and solids by intense ultrashort pulses
TAGEN Int. Symp. on Photoelectric Effects - from atoms to solids, weak vs strong fields -19 June 2006, Tohoku Univ., JAPAN
First-principle simulation for electron dynamics in molecules and solids under intense laser field
Canada-Japan SRO-COAST Symp. on Ultrafast Intense Laser Science 1 7-8 July 2006, Univ. of Tokyo, JAPAN
Time-dependent approaches for reactions and responses of unstable nuclei
INT. SUMMER SCHOOL ON SUBATOMIC PHYSICS, Peking University (Beijing, China) from Aug.21 to Aug. 25, 2006.
高強度場にある粒子のシミュレーション--- 原子核理論からのアプローチ---
日本物理学会シンポジウム2006.9.21
Time-dependent approaches for nuclear reaction and response
2nd German-Japanese Workshop on Nuclear Structure and Astrophysics, RIKEN, Japan, October 4-7 2006
Real-time simulation for the electron-ion dynamics in solid induced by laser field
International Workshop on First Principles Calculation of Correlated Electrons 30 Nov. - 1 Dec., 2006, Tokyo, JAPAN
Simulation for electron dynamics in dielectric material under intense laser pulse
Canada-Japan Bilateral Conference on Ultrafast Intense Laser Science, March 5-8., 2007, Quebec, Canada

原子核の三次元回転運動の微視的理論

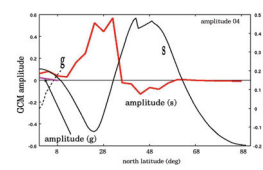
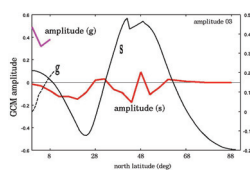
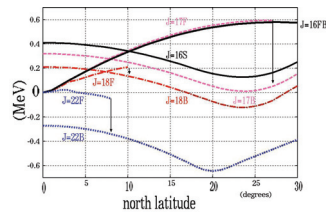
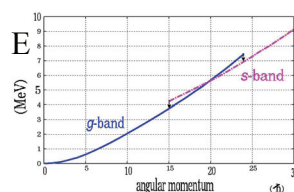
橋本幸男

平成18年度の目標:

1. Hartree-Fock Bogoliubov に基づいて
原子核回転運動のなかの“非主軸非定常回転運動”
のモードについて、その微視的な背景を理解する。
2. 平均場近似を越えて量子論的效果を取り入れた
枠組み(生成座標法;GCM)による計算法を整備する。

平成18年度:

1. ^{182}Os は基底状態では軸対称 → 回転状態で3軸非対称
→ J=20 前後にヒステリシスを伴う二重構造
(基底状態=真空の構造変化)
2. 角運動量をチルト(tilt):非主軸回転運動
チルト角に対して
 - i) J=17以下では基底状態が安定
 - ii) J=18以上で第2極小点(second minimum)あり
 - iii) J=20以上では第2極小点が基底状態になる
 - iv) 陽子・中性子の対相関にヒステリシスあり
3. チルト角を生成座標とした生成座標法(GCM)の試行
→ 量子効果を取り入れて平均場よりも広い枠組みで



平成19年度:

1. GCM計算をすすめ、非主軸回転運動の源としての量子効果の働きを理解
運動エネルギー、密度依存ポテンシャルエネルギー、対相関の競争過程
2. 有効相互作用を改良
対相関を粒子空孔相関と同じ立場で扱える有限レンジ有効相互作用を利用
3. 質量数の小さい領域で非主軸回転運動の系統的な計算
質量数A~80領域に着目

論文等

1. Stability of s-band states in the tilting calculation of ^{182}Os
Y.Hashimoto and T.Horibata,
Phys.Rev.C74(2006), 017301.
2. Possible excitations of the wobbling motion in ^{182}Os based on the three-dimensional cranked HFB,
Y.Hashimoto and T.Horibata,
Proceedings of the Fourth International Conference on Information
(ed. Lei Li et al., August 1-5 2006, University College Cork, Ireland), p.118 - 121.
3. Wobbling motions in ^{182}Os based on the three-dimensional cranked HFB plus generator
coordinate method,
Y.Hashimoto and T.Horibata,
INFORMATION, Vol.10 No.2 (to be published).

国際会議

- Information-MFCSIT'06 (アイルランド コーク大学)
平成18年7月31日~平成18年8月6日
Y.Hashimoto and T.Horibata,
Possible excitations of the wobbling motion in ^{186}Os based on the three-dimensional cranked HFB

密度汎関数論的アプローチによる 計算核物理

中務 孝

平成18年度研究目標

1. 長距離相関を考慮した新しい理論・手法の確立
2. アイソベクトル双極子共鳴の時間依存密度汎関数計算

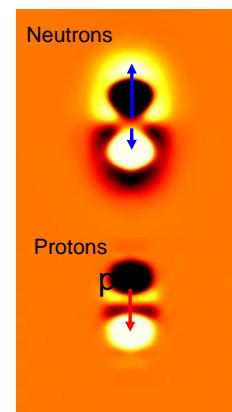
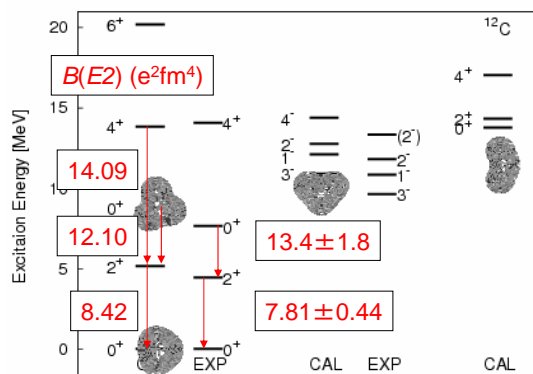
成果

長距離相関
の取り込み

- Skyrme密度汎関数の拡張と非経験的構造計算
- 比較的軽い安定核において有効性を確立

時間依存密
度汎関数法

- アイソベクトル型双極子巨大共鳴の3次元ダイナミクスを解析
- 中性子の強い遮蔽的効果を確認



平成19年度以降の目標

- 重い核、系統的な解析へ
 - 軌道分割によるプログラム並列化
 - 振動数固定形式へ(計算の安定化)
- 対相関の導入
 - BCS,ボゴリューボフ形式
 - $2p2h$ の明示的な取り込み
- 非線形・大振幅運動への適用
 - 原子核大振幅集団運動理論の適用

査読付論文

- Effects of Time-Odd Components in Mean Field on Large Amplitude Collective Dynamic
N. Hinohara, T. Nakatsukasa, M. Matsuo, and K. Matsuyanagi, Prog. Theor. Phys. 115 (2006) 567-599
- Real-Time, Real-Space Implementation of the Linear Response Time-Dependent Density-Functional Theory
K. Yabana, T. Nakatsukasa, J.-I. Iwata, and G. F. Bertsch, Physica Status Solidi (b) 243 (2006) 1121-1138
- Suppressed Fusion Cross Section for Neutron Halo Nuclei
M. Ito, K. Yabana, T. Nakatsukasa, and M. Ueda, Phys. Lett. B637 (2006) 53-57
- Configuration mixing calculation for complete low-lying spectra with the mean-field Hamiltonian
S. Shinohara, H. Ohta, T. Nakatsukasa, and K. Yabana, Phys. Rev. C 74 (2006) 054315 (10 pages).
- Real-time Skyrme TDHF dynamics of giant resonances
T. Nakatsukasa and K. Yabana, Nucl. Phys. A in press; Preprint: nucl-th/0610078
- Fusion Reaction of Halo Nuclei: A Real-Time Wave-Packet Method
M. Ito, K. Yabana, T. Nakatsukasa, and M. Ueda, Nucl. Phys. A in press
- Gauge-Invariant Formulation of Adiabatic Self-Consistent Collective Coordinate Method
N. Hinohara, T. Nakatsukasa, M. Matsuo, and K. Matsuyanagi, Prog. Theor. Phys. in press;
Preprint: nucl-th/0701004

国際会議 Proc.

- Fusion Reaction of Halo Nuclei: A Real-Time Wave-Packet Method for Three-Body Tunneling Dynamics
T. Nakatsukasa, K. Yabana, M. Ito, and M. Ueda, AIP Conference Proceedings 853 (AIP Press, 2006) pp. 291-296.
- Nuclear dynamics in time-dependent picture
T. Nakatsukasa, M. Ito, and K. Yabana, AIP Conference Proceedings 865 (AIP Press, 2006) pp. 114-119.

国際会議招待講演

- Nuclear dynamics in time-dependent picture
The Sixth China-Japan Joint Nuclear Physics Symposium (Shanghai, China, May, 16 - 20, 2006).
- Static and Dynamic Approaches to Collective Excitations in Nuclei Far From Stability Line
International conference on Nuclear Structure '06 (Oak Ridge, Tennessee, USA, July 24 - 28, 2006).

戸嶋・日野・全グループ (光物理理論)

強いレーザーと物質(原子、分子、固体)の相互作用の研究

- 量子制御(コヒーレント制御) → 報告:日野
- 量子ダイナミクス → 報告:全(本日後)

題目:周期的パルスレーザーによる動的Wannier-Stark ladder

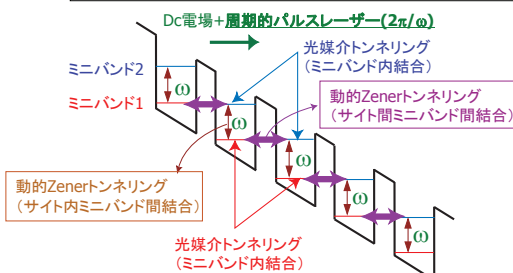
数理物質科学研究科 物性・分子工学専攻、計算科学研究センター 日野 健一

平成18年度の研究目標

- Floquet状態の擬エネルギー構造、とりわけ、動的Zenerトンネリング
- パルス波形による量子制御
- バンド間(有効)光吸収スペクトル

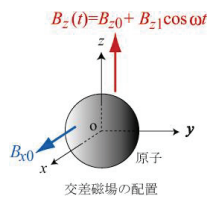
平成18年度の成果

GaAs/Ga_xAl_{1-x}As 超格子 → 動的Wannier-Stark ladder

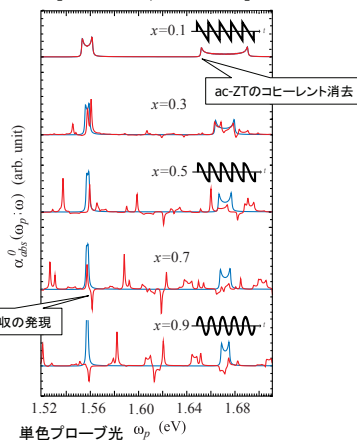


類似する物理系

変動型交差磁場下の原子のRydberg状態の動的(2次)Zeeman分裂



バンド間(有効)光吸収スペクトル [with ac-ZT, w/o ac-ZT]





平成19年度(以降)の目標

強いレーザーと物質(原子、分子、固体)の相互作用の研究

- 周期的パルスレーザー下の低次元半導体
- 変動型交差磁場下の原子のFloquet状態
- 超短強パルスレーザー下の多電子原子、分子の量子ダイナミクス
- 電子状態の周期的パルスキックと量子カオス
- 新しい数値計算法の開発と応用



発表論文リスト、国際会議、研究会等発表リスト

発表論文リスト

- ・K. Hino, and N. Tushima
Removal of interminiband interactions in dynamic Wannier-Stark ladder by means of a pulse train with periodic repetition
Solid State Communications, **138**, 341-346 (2006).
- ・X. M. Tong, K. Hino, and N. Tushima
Phase dependent atomic ionization in few-cycle laser fields: direct ionization and rescattering
Phys. Rev. A **71**, 031405_1-031405_4 (2006).
- ・X. M. Tong, K. Hino, and N. Tushima
State-specified protonium formation in low-energy antiproton-hydrogen-atom collisions
Phys. Rev. Lett. **97**, 243202-243205 (2006).
- [参考]
 - ・K. Hino, X. M. Tong, and N. Tushima
Interacting dynamic Wannier-Stark ladder driven by a periodic pulse train
Phys. Rev. B (submitted).
 - ・X. M. Tong, T. Shirahama, K. Hino, N. Tushima
A novel time-dependent approach to three-body rearrangement collisions: application to the capture of heavy negatively-charged particles by hydrogen atoms
Phys. Rev. A (submitted).

国際会議発表リスト

- ・K. Hino, X. M. Tong, and N. Tushima
Interacting Dynamic Wannier-Stark Ladder Driven By A Pulse Train With Periodic Repetition: Removal Of Interminiband Interactions And Negative Absorption
28th International Conference on the Physics of Semiconductors (Vienna, Austria, July 24-28, 2006) (Proceedings in press).
- ・X. M. Tong, K. Hino, and N. Tushima
Phase Dependent Atomic Ionization in a Few-Cycle Laser Field
20th International Conference on Atomic Physics, (Innsbruck, Austria, July 16-21, 2006)

研究会等発表リスト

- ・日野健一、全境民、戸嶋信幸
Zener効果を取り込んだ動的Wannier-Stark ladderの吸収スペクトル特異性
日本物理学会第61回年次大会(鹿児島大、3/18-21, 2007) [領域5:光物性]
- ・白濱丈朗、全境民、日野健一、戸嶋信幸
静磁場に垂直にかけられた振動磁場中の原子の電子状態をFloquet展開を用いて解析
日本物理学会第61回年次大会(鹿児島大、3/18-21, 2007) [領域1:原子・分子、量子エレクトロニクス、放射線物理]
- ・全境民、日野健一、戸嶋信幸
因果律を利用した散乱問題の解手法:水素原子による反陽子の捕獲
日本物理学会第61回年次大会(鹿児島大、3/18-21, 2007) [領域1:原子・分子、量子エレクトロニクス、放射線物理]
- ・その他

「銅酸化物超伝導体の電子状態」

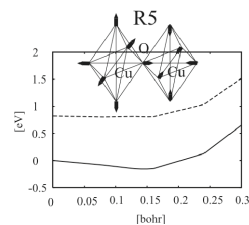
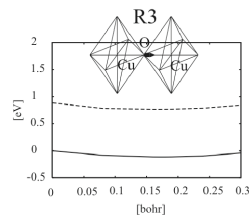
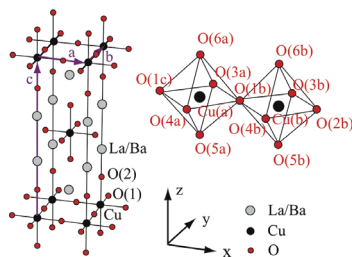
小泉 裕康(数理物質科学研究科物性・分子工学専攻)

平成18年度の目標

1. 局所電子状態と格子不安定性の解明
2. スピン渦(メロン)の生成によるスピン流・永久電流の生成

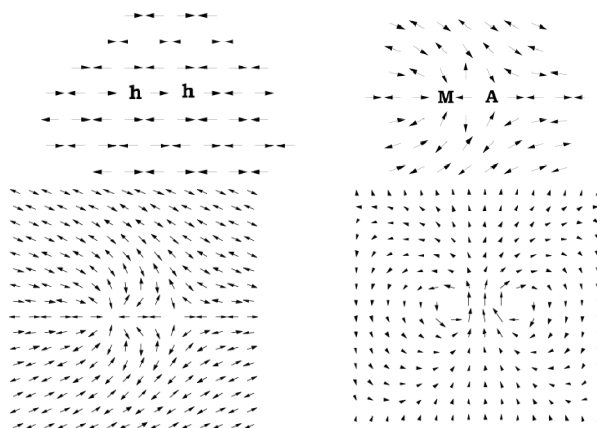
平成18年度の成果

1. 局所電子状態と格子不安定性の解明



ホールをドーブするとホールが銅原子の間の酸素に多く集まり格子変形を引き起こす(擬ヤン・テラー効果)。これは現在広く支持されているドーブしたホールはCuO平面にある銅原子の回りの4つの酸素に均等に分布し、Zhang-Rice Singlet状態を形成するとするモデルと著しく異なっている。

2. スピン渦(メロン)の生成によるスピン流・永久電流の生成



スピン渦の回りにはスピン流(上向きスピンを持った電子の流れと下向きスピンを持った電子の流れの差)が生じる。ある種の超選択則(Superselection Rule)が自発的に生じ永久ループ電流(上向きスピンを持った電子の流れと下向きスピンを持った電子の流れの和)が出来る可能性がある。

平成19年度(以降)の目標

1. 局所電子状態と格子不安定性をさらに大きなクラスターで調べる。
2. スピン渦(メロン)の生成した状態が基底状態になるかどうか調べる。
3. メロンシナリオにより銅酸化物超伝導体の物性と統一的に説明する。

発表論文リスト

- H. Koizumi, "The origin of the Fermi arc in Cuprates.", to appear in Physica C.
H. Koizumi, "Current flow around small polarons embedded in a Mott insulator." to appear in J. Mol. Structure.

国際会議発表リスト

- H. Koizumi, "The origin of the Fermi arc in Cuprates."
Materials and Mechanisms of Superconductivity High Temperature Superconductors VIII
in Dresden, Germany.
- H. Koizumi, "Persistent current around small polarons embedded in spin density wave order",
International Symposium on the Jahn-Teller Effects: Novel Aspects in Orbital Physics and Vibronic
Dynamics of Molecules and Crystals in Trieste, Italy.

少数多体系の量子ダイナミクス計算

物質生命研究部門：全曉民

平成18年度の研究目標：

この時間依存の方程式を用いて

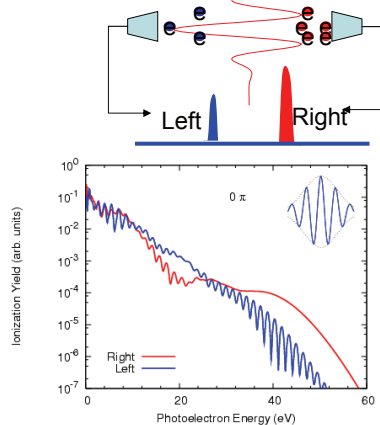
$$\Psi(t) = \Psi_0 - i \int_{-\infty}^t e^{-i \int_{\tau}^t (E_0 - H(t')) dt'} V_{in}(\tau) f(\tau) \Psi_0 d\tau$$

下記の過程を研究する：

- (1) 超短強レーザーパルスにおける電離電子の非対称性；
(時間依存の問題)
- (2) 水素原子に衝突において反陽子の捕獲。
(時間依存しない問題)

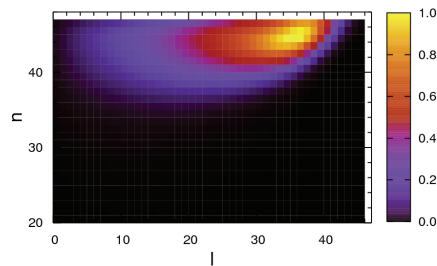
平成18年度の成果

物理的な過程： $E(t) = f(t) \cos(\omega t + \delta)$



結果：実験と比べて 位相を決める
Phys. Rev. A: Rapid Communication

物理的な過程：



結果：初めて量子力学の計算で、
詳しい捕獲情報を得る
Phys. Rev. Lett.

平成19年度(以降)の目標

- 強レーザー場下における原子分子のさまざまな過程：
特に 再散乱電子を中心として量子力学で解明すると
その上に再散乱電子を利用していろいろの過程を研究する；
- 原子衝突過程：
今開発した時間依存の計算方法で一般的なクーロン三体衝突
の過程を研究する；
- 多価イオンにおける光電効果の理論研究：
東京EBITsに行われた電子と多価イオンの再結合の実験の
解明のために、相対論の計算方法を開発する。
(電気通信大学の実験グループと共同研究)

発表論文リスト： 共 14 件

Phys. Rev. Lett. 2(1c);

Phys. Rev. A: 8(4R)

1. X. M. Tong, K. Hino, and N. Toshima, Phys. Rev. Lett. **97** (2006) 243202.
"State-specified protonium formation in low-energy antiproton-H collisions",
2. X. M. Tong, K. Hino and N. Toshima, Phys. Rev. A **74** (2006) 031405(R).
"Phase-dependent atomic ionization in few-cycle intense laser fields",
3. X. M. Tong and C. D. Lin, Phys. Rev. A **73** (2006) 042716.
"Attosecond xuv pulses for complete mapping of the time-dependent wave packets of D_2^+ "
... ..

国際会議： ICAP (国際原子物理会議) 3件；
DAMOP アメリカ原子分子光学年会 5件；

- 研究会：
1. 理研・原子研究室セミナー： 2006年1月17日
"Molecular Tunneling Ionization Theory and Its Applications"；
 2. 日本原子分子過程理論セミナー： 2007年2月4日
"How to read the molecular clock and probe the molecular dynamics..."；
 3. 日米X線と反物質セミナー： 2006年4月12-14日
"Time-dependent scattering theory and its application ..."；
 4. Vienna Technology University ADLIS seminar: 2006年7月14日
"Molecular Tunneling Ionization Theory and Its Applications"。

地球生物環境研究部門

地球環境科学

田中 博 生命環境科学研究科地球環境科学専攻 教授

日下 博幸 生命環境科学研究科地球環境科学専攻 講師

生物科学

稲垣 祐司 生命環境科学研究科構造生物科学専攻 助教授

筑波大学計算科学研究センター
平成18年度年次報告会

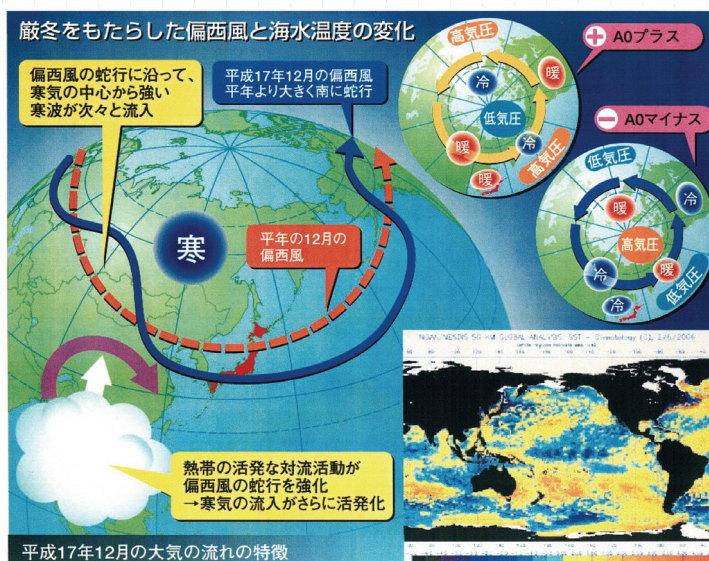
「近年の異常気象と北極振動」

田中博 (地球生物環境部門)

科研費基盤A(代表:田中)
アサヒビール学術助成金
国際北極圏研究センター(NSF)



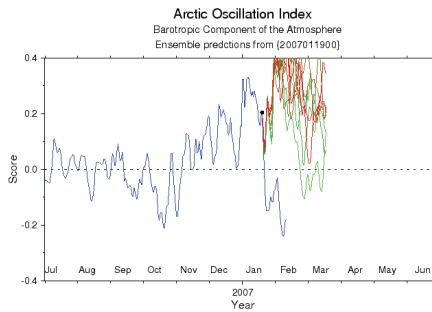
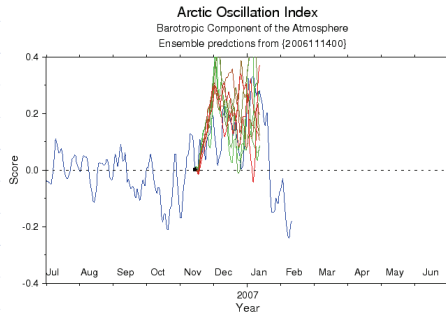
2005年12月の大寒波



2006/07の暖冬とAO指数

11月14日 初期値

1月19日 初期値



実況のAO指数（青）は12月から1月上旬にかけて正となった。これが日本の暖冬をもたらした。赤から緑は筑波大学順圧Sモデルによるそのアンサンブル予報

発表論文リスト 2006-2007 (Tanaka)

- ◆ Tanaka, H. L. and Koji Terasaki, 2006: Blocking Formation by an Accumulation of Barotropic Energy Exceeding the Rossby Wave Saturation Level at the Spherical Rhines Scale. *J. Meteor. Soc. Japan*, 83, 319-332.
- ◆ 田中博 2006: 大気大循環に観られるE=mc^2の法則. 数理解析研究所講義録1483. 非線形波動の数理と応用. 京都大学数理解析研究所. 84-89.
- ◆ Hayasaki, M., S. Sugata, and H.L. Tanaka 2006: Interannual variations of cold front activity in spring in Mongolia. *J. Meteor. Soc. Japan*, 83, 463-475.
- ◆ Matsueda, M., M. Kyoda, and H.L. Tanaka 2006: Multi-center grand ensemble using three operational ensemble forecasts. *SOLA*, 2, 33-36.
- ◆ Tanaka, H.L., D. Nohara, and H.-R. Byun 2006: Numerical simulation of wind hole circulation at Ice Valley in Korea using a simple 2D model. *JMSJ* 84, 1073-1084
- ◆ Terasaki, K. and H.L. Tanaka 2006: Analysis of the 3D energy spectrum and interactions of the general circulation of the atmosphere using analytical vertical structure functions. (Submitted to JMSJ).
- ◆ Terasaki, K. and H.L. Tanaka 2006: Barotropic energy spectrum by the Rossby wavesaturation in the zonal wavenumber domain. *SOLA*, 3, 25-28..
- ◆ Watarai, Y. and H.L. Tanaka 2006: Comparison among JRA-25, ERA-40 and NCEP/NCAR reanalysis datasets from the viewpoint of global energetics. *SOLA*, 3, 9-12.
- ◆ Matsueda, M., M. Kyoda, H.L. Tanaka, and T. Tsuyuki 2006: Daily forecast skill of multi-center grand ensemble. *SOLA*, 3,29-32.
- ◆ Byun, H.-R., K.-T. Byun, H.L. Tanaka, D. Azzaya, J.-H. Oh, and S. Kim 2006: On the ice control conserving water resources and suppressing global warming. (Submitted).
- ◆ 田中博 2006: 異常気象をもたらす北極振動の解明とその予測. (第1報). アサヒビル學術振興財団, 2005年度研究紀要, 地球環境科学, 113--119.
- ◆ 田中博 2006: 気象予測とカオス, 日本信頼性学会誌, 28, 481-488.
- ◆ 田中博 2006: 異常気象をもたらす北極振動の解明とその予測 (第2報). アサヒビル學術振興財団研究紀要, 地球環境科学, (submitted).
- ◆ 田中博 2007: 地球学シリーズ、「地球環境学」(共同執筆), (古今書院).
- ◆ 田中博 2007: 極域循環と日本の気候、「地球温暖化」(共同執筆), (月刊海洋特集号).
- ◆ 田中博 2007: 「偏西風の気象学」(成山堂).
- ◆ Tsutsui, J. and H.L. Tanaka 2006: Trends in large-scale circulation and thermodynamic structures in the tropics derived from atmospheric reanalyses and climate change experiments. (Submitted).
- ◆ Tanaka, H.L., S. Kato, I. Suzuki (2007) A trial of predicting the Arctic Oscillation index using the barotropic S-model. *Proc. GCCA-7, Fairbanks Alaska*
- ◆ Yokoyama, N. and H. L. Tanaka (2007) Seasonal variation of the Arctic Oscillation. *Proc. GCCA-7, Fairbanks Alaska*
- ◆ Matsueda, M. M. Kyouda, H. L. Tanaka and T. Tsuyuki (2007) Daily forecast skill of multi-center grand ensemble. *Proc. GCCA-7, Fairbanks Alaska*

原著論文査読付 7 著書 3 その他 5 Submitted 4

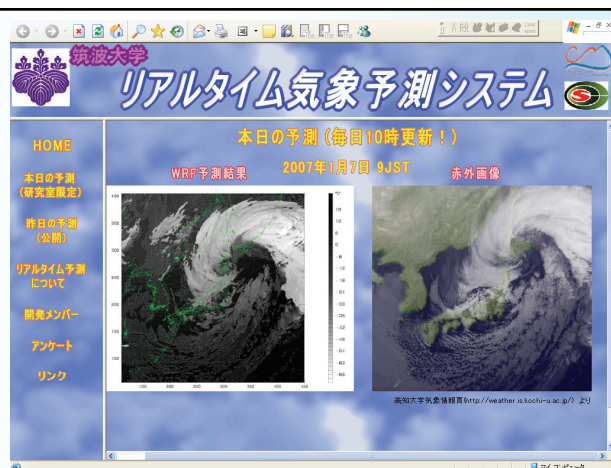
最新の領域気象モデル WRFV2.2の開発と気象予測・ シミュレーション研究への適用

日下博幸(地球生物環境研究部門)

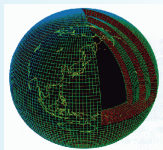
平成18年度の目標：
WRFV2.2の開発，プログラムの再構築，
リアルタイム気象予測システムの開発，

18年度の成果

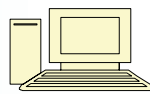
1. WRFV2.2の開発，都市モデルの公式採用とリリース
2. 解析プログラムの再構築
3. 気象予測システムβ版の構築



JMA/GPV



WPS



WRF



平成19年度の目標

- リアルタイム気象予測システムの構築
- WRFV3.0の開発
- 都市モデルの高精度化

開発

- 都市モデルのインパクト評価
- 寒帯低気圧, 南岸低気圧の解析
- GPSデータ同化のインパクト評価

論文投稿

- 温暖化シミュレーション(環境省)
- 気象予測システム(日本気象協会)
- 水循環予測(科研費)

プロジェクト

発表論文リスト

(論文, 国際会議, 会議報告)

- Kusaka, H.** and H. Hayami (2006) Numerical simulation of local weather for a high photochemical Oxidant event using the WRF model. *JSME International Journal*, Ser. B, vol. 49, p72-77.
- 日下博幸** (2006) 最新の気象モデルWRFを用いた平成16年新潟・福島豪雨の数値シミュレーション. 電力土木, No.324, p9-16.
- Tomita, T., **H. Kusaka**, R. Akiyoshi, and Y. Imasato (2007) Thermal and geometric controls on the rate of surface air temperature changes in a medium-size, mid-latitude city. *Journal of Applied Meteorology*. In press.
- Kusaka, H., S. Kataniwa, H. L., Tanaka, F. Kimura, and M. Hara (2006) Numerical simulation of polar low development over the Japan sea using the WRF model. 7th WRR Users workshop.
- 菅原広史・大橋唯太・**日下博幸**・近藤裕明・浜田崇・山本奈美(2006) ICUC6参加報告. 天気,
- 日下博幸**・竹見哲也・原政之・稲田愛・坂本晃平(2007) 第7回WRF Users workshop報告. 天気, 3月号掲載予定.

複数遺伝子配列データによる 大規模真核生物系統解析に向けて

稲垣祐司

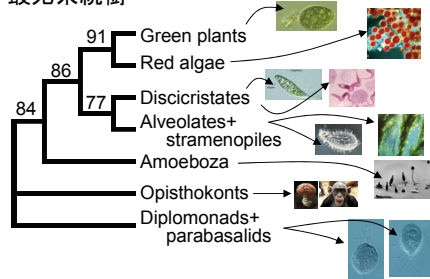
平成18年度研究目標

「複数遺伝子配列データ解析に向けた方
法論の検討、解析プログラムの整備」

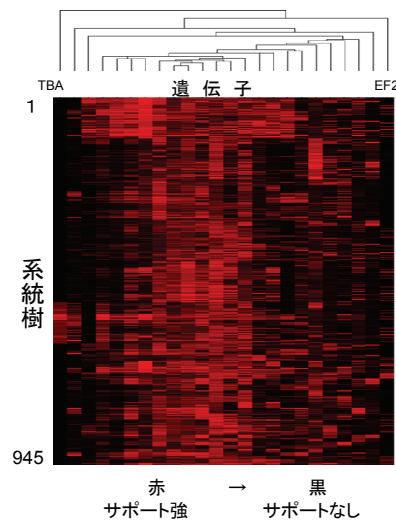
平成18年度の研究成果

真核生物分子系統樹の大規模データ解析

真核生物超生物界を構成するスーパー
グループ相互の系統関係の解析:
24遺伝子10,000アミノ酸座位に基づく
最尤系統樹



緑色植物(Green plants)と紅藻(Rhodophyta)
の近縁性を高い統計的支持で復元
⇒ これまでの論争に終止符



TbAは「変わり者」遺伝子
⇒ 「変わり者」遺伝子の検出と
シグナルの偏りの評価が重要

平成19年度以降の研究目標

並列化Tree-Puzzleをもちいた、200万樹形の網羅的尤度計算に基づく真核生物分子系統解析

- オリジナル遺伝子配列の決定
 - 太陽虫類*Raphidophrys*のEST解析 → 真核生物の根元の推定にかかわる
 - Excavate類*Dysnectis*のEST解析 → Excavate類の単系統性の評価
 - カタブレファリス類*Leucocryptos*のEST解析 → クロモアルベオラータの単系統性の評価
- 最尤系統樹の評価方法の検討
 - Conventional bootstrap vs. RELL bootstrap

平成18年度発表論文等

- 発表論文 (2006)
 - Inagaki, Susko, Roger *PNAS*
 - Simpson, Inagaki, Roger *Mol Biol Evol*
 - Inagaki, Roger *Mol Phylogenet Evol*
 - Nambu, Inagaki, Kutsukake *Gene Genet Syst*
- 発表論文 (in press)
 - Hosoi-Tanabe et al. *Phycol Res*
 - Yubuki et al. *J Eukaryot Microbiol*
 - Kamikawa, Inagaki, Sako *Protist*
 - Takishita et al. *Extremophiles*
 - Yoshizawa et al. *J Eukaryot Microbiol*
 - Makiuchi et al. *Gene*
- 学会発表 (国内)
 - 日本進化学会年会 (東京)
 - 日本遺伝学会年会 (つくば)
 - 日本分子生物学フォーラム (名古屋)
 - 日本藻類学会年会 (神戸)
- 学会発表 (国外)
 - 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and FAOBMB Congress (京都)
 - Annual Meeting of Society of Molecular Biology and Evolution: Genomes, Evolution, & Bioinformatics (Tempe, Arizona)
 - 16th Meeting of International Society of Evolutionary Protistology (Wroclow, Poland)
 - International Conference on Marine Algae and Global Warming (Seoul, Korea)

超高速計算システム研究部門

超高速システム分野

朴 泰祐	システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻	教授
高橋 大介	システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻	講師

グリッド分野

佐藤 三久	システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻	教授
建部 修身	システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻	助教授

超並列クラスタPACS-CSの開発と運用

朴 泰祐

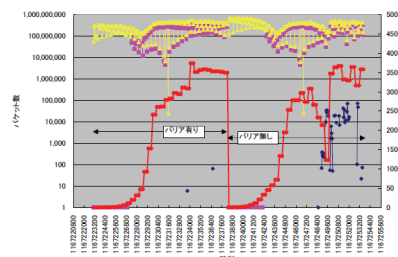
システム情報工学研究科・コンピュータサイエンス専攻

平成18年度の研究目標

- ◆PACS-CS開発に関して
 - ◆超並列計算機PACS-CSのシステム設置及び運用開始
 - ◆基本性能評価及びアプリケーション開発支援
- ◆個人的な研究に関して
 - ◆JST-CREST, 科研で実施中のコモディティネットワークに基づく高性能クラスタ向けネットワークの研究

平成18年度の成果

- PACS-CSの運用を開始(平成18年7月)
 - 立ち上げ1ヶ月を経た段階で、システム自体は比較的(予想を上回る)安定に動作
 - MPICHとYAMPの両者をユーザレベルで使い分
- PACS-CSの通信性能評価・対策
 - 実アプリケーションにおける通信性能、特に多次元隣接通信性能が予想以上に低いことが判明
 - 通信パターン、スイッチでの衝突、メモリにおけるデータコピーのオーバーヘッド等を解析
 - 多次元当時転送時のスイッチ出口でのパケット衝突によるロスが予想以上に大きく、データ再送手続きのオーバーヘッドも大きいことが判明
 - ライブラリでの解消を目指すと共に、データコピーオーバーヘッドを生じない新プロトコルを年度内に実現
- PACS-CSのアプリケーション運用支援
 - COMAS-DFT, GPV/JMA等のアプリケーションWGを支援



平成19年度以降の目標

- PACS-CSの通信機能・性能の強化と実アプリケーションへの展開
 - 性能劣化問題点を解決するドライバ/ライブラリの改善
 - 実アプリケーションの通信パターンに対する最適化
 - 技術面・運用面でのアプリケーション支援を強化
- T2K Open Supercomputer Allianceに基づくスパコン導入とfeasibility study
 - テストベッドを中心とした基本性能検証・アプリケーション性能予備評価
 - 他大学との計算グリッドの形成等
- その他
 - P2Pコンピューティングにおける海外との研究協力の推進
 - 低電力・高性能クラスター向け要素技術(JST-CREST)
 - コモディティネットワークに基づく高性能・耐故障ネットワークの展開

平成18年度発表論文

- T. Okamoto, T. Boku, M. Sato, T. Osamu, "P2P Overlay Network for TCP Programming with UDP Hole Punching", Proc. of NPC2006, Tokyo, 2006.
- H. Kimura, M. Sato, Y. Hotta, T. Boku, D. Takahashi, "Empirical Study on Reducing Energy of Parallel Programs using Slack Reclamation by DVFS", Proc. of Cluster2006, Barcelona, 2006.
- S. Sumimoto, K. Ooe, K. Kumon, T. Boku, M. Sato, A. Ukawa, "Scalable Communication Layer for Multi-Dimensional Crossbar Network Using Multiple Gigabit Ethernet", Proc. of ICS2006, Cairns, Australia, 2006.
- T. Boku, M. Sato, A. Ukawa, D. Takahashi, S. Sumimoto, K. Kumon, T. Moriyama, M. Shimizu, "PACS-CS: A large-scale bandwidth-aware PC cluster for scientific computations", Proc. of CCGrid2006, Singapore, 2006.
- T. Boku, M. Sato, D. Takahashi, H. Nakashima, H. Nakamura, S. Matsuoka, Y. Hotta, "MegaProto?/?/E: Power-Aware High-Performance Cluster with Commodity Technology", Proc. of HP-PAC06 (in IPDPS2006), Rhodes, Greece, 2006.
- 岡本 高幸, 三浦 信一, 朴 泰祐, 佐藤 三久, 高橋 大介, "EthernetマルチリンクによるPCクラスター向け高バンド幅・耐故障ネットワークRI2N/UDP", 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HPCS2007論文集.
- 三浦 信一, 岡本 高幸, 朴 泰祐, 佐藤 三久, 高橋 大介, "VFREC-Net: ドライバ制御によるtagged-VLANを用いたPCクラスター向けマルチパスネットワーク", 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, Vol.47, No. SIG12 (ACS 15), pp.35-45, 2006.
- 住元 真司, 大江 和一, 久門 耕一, 朴 泰祐, 佐藤 三久, 宇川 彰, "複数Gigabit Ethernetを用いたPACS-CSのための高性能通信機構の設計と評価", 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, Vol.47, No. SIG12 (ACS 15), pp.25-34, 2006.

超高速計算システムにおける 大規模科学技術計算

高橋大介(システム情報工学研究科)

- 平成18年度の研究目標
 - 超高速計算システムにおける, 大規模科学技術計算アルゴリズムに関する研究
 - オンチップマルチプロセッサにおける大規模科学技術計算の最適化手法に関する研究
 - 超高速計算システムにおける性能評価に関する研究

2007/3/6

計算科学研究センター平成18年度
年次報告会

平成18年度の成果

- 古典Gram-Schmidt直交化の高速化手法に関する研究
 - 内積計算およびベクトル変換を行列-行列積(レベル3 BLAS)に帰着させることにより高速化
 - 実空間DFTプログラム(岩田氏作成)に適用されている
- オンチップマルチプロセッサにおける大規模科学技術計算の最適化
 - 多次元FFTにおいてメモリアクセスを削減することにより, オンチップマルチプロセッサ上でも高い性能を発揮
- 超高速計算システムにおける性能評価に関する研究
 - HPC Challenge Benchmark(HPCC)

2007/3/6

計算科学研究センター平成18年度
年次報告会

平成19年度(以降)の目標

- PACS-CSシステムの性能評価に関する研究
 - HPC Challengeベンチマークなどを用いて, PACS-CSの性能を多角的に評価し, 計算科学アプリケーションの高速化や超高速計算システムの開発にフィードバックする.
- Short Vector SIMD命令を用いた4倍精度計算の高速化に関する研究
 - 今後, ペタスケールコンピューティングが行われる際には, 丸め誤差の影響がこれまでよりもさらに大きな問題となると考えられることから, 4倍精度計算を高速化することは重要と考えられる.
 - Short Vector SIMD命令のようなベクトル算術演算命令を有効活用し, 4倍精度計算を高速に行う手法を確立させる

2007/3/6

計算科学研究センター平成18年度
年次報告会

発表論文リスト

- 論文誌
 - 木村英明, 佐藤三久, 堀田義彦, 朴泰祐, 高橋大介: DVS制御による負荷不均衡のある並列プログラムの電力削減手法. 情報処理学会論文誌: コンピューティングシステム, Vol. 47, No. SIG 12(ACS 5), pp. 235-236, (2006)
 - 堀田義彦, 佐藤三久, 木村英明, 松岡聡, 朴泰祐, 高橋大介: PCクラスにおける電力実行プロファイル情報を用いたDVS制御による電力性能の最適化. 情報処理学会論文誌: コンピューティングシステム, Vol. 47, No. SIG 12(ACS 15), pp. 272-284, (2006)
 - 三浦信一, 岡本高孝, 朴泰祐, 佐藤三久, 高橋大介: VFREC-Net: ドライバ制御によるtagged-VLANを用いたPCクラス向けマルチパスネットワーク. 情報処理学会論文誌: コンピューティングシステム, Vol. 47, No. SIG 15(ACS 15), pp. 35-46, (2006)
 - 中島佳宏, 佐藤三久, 相田祥昭, 高橋大介, 朴泰祐, Franck Cappello: 複数グリッドジョブ実行システムの計算資源を統合・利用するGrid RPCシステムの設計と実装. 情報処理学会論文誌: コンピューティングシステム, Vol. 47, No. SIG 7(ACS 14), pp. 207-218, (2006)
- 国際会議
 - H. Kimura, M. Sato, Y. Hotta, T. Boku and D. Takahashi: Empirical Study on Reducing Energy of Parallel Programs using Slack Reclamation by DVFS, Proc. 8th IEEE International Conference on Cluster Computing (Cluster 2006), (CD-ROM), (2006).
 - T. Yokozawa, D. Takahashi, T. Boku and M. Sato: Efficient Parallel Implementation of Classical Gram-Schmidt Orthogonalization Using Matrix Multiplication, Proc. 4th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications (PMAA'06), pp. 37-38, (2006).
 - T. Boku, M. Sato, A. Ukawa, D. Takahashi, S. Sumimoto, K. Kumon, T. Moriyama and M. Shimizu: PACS-CS: A large-scale bandwidth-aware PC cluster for scientific computations, Proc. Sixth IEEE International Symposium on Cluster Computing and the Grid (CCGRID'06), pp. 233-240, (2006).
 - D. Takahashi: A Hybrid MPI/OpenMP Implementation of a Parallel 3-D FFT on SMP Clusters, Proc. 6th International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics (PPAM 2005), Lecture Notes in Computer Science, No. 3911, Springer-Verlag, pp. 970-977, (2006).
 - Y. Aida, Y. Nakajima, M. Sato, T. Sakurai, D. Takahashi, T. Boku: Performance Improvement by Data Management Layer in a Grid RPC System, Proc. First International Conference on Grid and Pervasive Computing (GPC 2006), Lecture Notes in Computer Science, No. 3947, pp. 324-335, Springer-Verlag, (2006).
 - T. Boku, M. Sato, D. Takahashi, H. Nakashima, H. Nakamura, S. Matsuoka and Y. Hotta: MegaProto/E: Power-Aware High-Performance Cluster with Commodity Technology, Proc. 20th IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS'06), (CD-ROM), (2006).
 - Y. Hotta, M. Sato, H. Kimura, S. Matsuoka, T. Boku and D. Takahashi: Profile-based Optimization of Power Performance by using Dynamic Voltage Scaling on a PC cluster, Proc. 20th IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS'06), (CD-ROM), (2006).
- 査読付き国内学会
 - 岡本高孝, 三浦信一, 朴泰祐, 佐藤三久, 高橋大介: EthernetマルチリンクによるPCクラス向け高バッド幅・耐故障ネットワークR2N/UDP. 2007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HPCS2007論文集, pp. 41-48, (2007).
 - 木村英明, 佐藤三久, 堀田義彦, 朴泰祐, 高橋大介: DVS制御による負荷不均衡のある並列プログラムの電力削減手法. 先進的計算基盤システムシンポジウムSACSI2006論文集, pp. 477-486, (2006).
 - 三浦信一, 岡本高孝, 朴泰祐, 佐藤三久, 高橋大介: VFREC-Net: ドライバ制御によるtagged-VLANを用いたPCクラス向けマルチパスネットワーク. 先進的計算基盤システムシンポジウムSACSI2006論文集, pp. 117-125, (2006).
 - 相田祥昭, 中島佳宏, 佐藤三久, 櫻井鉄也, 高橋大介, 朴泰祐: Grid RPCにおける広域データ管理レイヤの利用. 先進的計算基盤システムシンポジウムSACSI2006論文集, pp. 85-92, (2006).
- 研究会
 - 高橋睦史, 佐藤三久, 高橋大介, 朴泰祐, 宇川彰, 中村宏, 青木秀貴, 澤本英雄, 助川直伸: オンチップメモリプロセスでの演算加速機構の検討. 情報処理学会研究報告, 2007-ARC-172, 2007-HPC-109, pp. 263-268, (2007).
 - 木村英明, 佐藤三久, 堀田義彦, 今田貴之, 朴泰祐, 高橋大介: MegaProto/EIにおける電力性能評価および電力性能最適化の検討. 情報処理学会研究報告, 2006-HPC-108, pp. 73-78, (2006).
 - 今田貴之, 佐藤三久, 堀田義彦, 木村英明, 朴泰祐, 高橋大介, 三浦信一: MegaProto/EIにおける電力性能評価および電力性能最適化の検討. 情報処理学会研究報告, 2006-HPC-108, pp. 67-72, (2006).
 - 三浦信一, 岡本高孝, 朴泰祐, 佐藤三久, 高橋大介: tagged-VLANとマルチリンクに基づくPCクラス向け高性能・耐故障ネットワークの実装と評価. 情報処理学会研究報告, 2006-HPC-108, pp. 25-30, (2006).
 - 横澤拓弥, 高橋大介, 朴泰祐, 佐藤三久: 行列積を用いた古典 Gram-Schmidt直交化の再構装. 日本応用数理学会2006年度年會講演予稿集, pp. 324-325, (2006).
 - 佐川和明, 大江利一, 久門耕一, 高橋大介, 朴泰祐, 佐藤三久, 吉江友照, 宇川彰: PACS-CSのための高性能通信ライブラリインターフェイスの設計. 情報処理学会研究報告, 2006-IPC-107, pp. 215-219, (2006).
 - 朴泰祐, 佐藤三久, 高橋大介, 宇川彰, 深川正一, 藤田不二男, 清水正明, 住元真司, 久門耕一: 科学技術計算用超並列クラスTPACS-CSの実装と基本性能評価. 情報処理学会研究報告, 2006-HPC-107, pp. 209-214, (2006).
 - 堀田義彦, 佐藤三久, 木村英明, 朴泰祐, 高橋大介: PCクラスにおける全体電力プロファイルを用いた電力性能最適化. 情報処理学会研究報告, 2006-ARC-169, pp. 1-6, (2006).
 - 横澤拓弥, 高橋大介, 朴泰祐, 佐藤三久: 行列積を用いた古典 Gram-Schmidt直交化の並列化手法の検討. 情報処理学会研究報告, 2006-HPC-106, pp. 31-36, (2006).

2007/3/6

計算科学研究センター平成18年度
年次報告会

「ILDG/JLDGと次世代スパコン要素技術プロジェクトの進捗」

超高速計算システム研究部門
佐藤三久

- 平成18年度の研究目標
 - ILDGとの接続、JLDGの運用を目指した開発(NII/CSIプロジェクト)
 - オンチップメモリ(SCIMA)と加速機構を持つマルチコアプロセッサの設計・評価(次世代ペタコン要素技術プロジェクト)
 - 「低電力組込み並列システム」のプロジェクト提案

2007/3/6

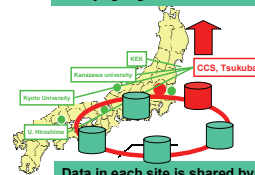
計算科学研究センター 平成18年度年次報告会

平成18年度の成果

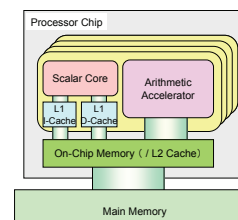
- ILDG/JLDG: International/Japan Lattice Data Grid
 - 7月のlattice06でILDG MDGの連携のデモ
 - Gfarmを用いたJLDGの構築(3月中に運用開始)
- オンチップメモリ(SCIMA)と加速機構を持つマルチコアプロセッサの設計・評価
 - シミュレータを開発、加速機構(vector/SIMD)を評価
 - 電力性能評価については遅れている
- JST-CREST「省電力でディペンダブルな組込み並列システム向け計算プラットフォーム」の採択
 - 10月からスタート
- その他
 - CREST「メガスケールコンピューティング」プロジェクト(11月終了)
 - 科研費「大容量分散コンピューティングのための大規模スケラブルP2Pグリッド基盤の研究」
 - 日仏2国間共同研究SAKURA, JST-CNRS共同研究

JLDG: infrastructure of QCD collaboration inside Japan

A part of data can be open through www.jldg.org



Data in each site is shared by "Gfarm" global file system over the grid.



2007/3/6

計算科学研究センター 平成18年度年次報告会

平成19年度の目標

- ILDG/JLDG
 - JLDGの本格運用とILDGとの接続
 - 「ILDG/JLDGモデル」の他分野への展開
 - VOの構築は、データ共有から(T2Kオープンスパコン、CSI)
 - 計算資源の共有は時期尚早?
 - Gfarmの展開・応用を見据えた改良
 - 大規模データ処理、クラスタファイルシステム、広域データ共有
- JST-CREST「並列高性能組込みプラットフォーム」プロジェクト
 - 高性能低消費電力並列プラットフォームの設計・試作
 - センシング分野での計算情報学部門との連携
 - 計算科学としてのあたらしい「情報学」分野への展開
- 「京速」ペタコンへの対応
 - 「要素技術」プロジェクトでは、電力性能、実アプリでの評価を進める
 - 計算科学の専門組織としての貢献、位置づけの認知
 - 計算機工学と科学との共同研究による大規模アプリ・アルゴリズムの開発
 - 超並列プログラミングシステム・言語の開発の必要性
 - 超並列プログラミング言語のためのプロジェクト提案

2007/3/6

計算科学研究センター 平成18年度年次報告会

研究発表リスト

- 論文誌
 - 木村英明, 佐藤三久, 堀田義彦, 朴泰祐, 高橋大介, "DVSによる負荷不均衡のある並列プログラムの電力削減手法", 情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム, Vol.49, No. S1G12(ACS 15), pp. 285-294, (2006).
 - 堀田義彦, 佐藤三久, 木村英明, 松岡聡, 朴泰祐, 高橋大介, "PCクラスタにおける電力実行プロファイル情報を用いたDVS制御による電力性能の最適化", 情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム, Vol.49, No. S1G12(ACS 15), pp. 272-284, (2006).
 - 三浦 信一, 岡本 高幸, 朴 泰祐, 佐藤 三久, 高橋 大介, "VFREQ-Net: ドライバ制御によるtagged-VLANを用いたPCクラスタ向けマルチネットワーク", 情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム, Vol.49, No. S1G12(ACS 15), pp. 35-45, (2006).
 - 住元 真司, 大江 和一, 久門 耕一, 朴 泰祐, 佐藤 三久, 宇川 彰, "複数Gigabit Ethernetを用いたPACS-CSのための高性能通信機構の設計と評価", 情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム, Vol.49, No. S1G12(ACS 15), pp. 25-34, (2006).
 - 中島 佳宏, 佐藤 三久, 相田 祥昭, 朴 泰祐, 高橋 大介, Cappello Franck, "複数グリッドジョブ実行システムの計算資源を統合・利用するGrid RPCシステムの設計と実装", 情報処理学会論文誌: コンピューティングシステム, Vol. 49, No. S1G7(ACS14), pp. 207-218, 2006.
- Conference Proceedings
 - Yoshifumi Uemura, Yoshihiro Nakajima, Mitsuhsa Sato, "Direct Execution of Linux Binary on Windows for Grid RPC Workers", Workshop on Large-Scale and Volatile Desktop Grids (PCGrid 2007) in conjunction with the IEEE International Parallel & Distributed Processing Symposium (IPDS 2007) (to appear)
 - T. Okamoto, T. Boku, M. Sato, T. Osamu, "P2P Overlay Network for TCP Programming with UDP Hole Punching", Proc. of NPC2006, Tokyo, 2006.
 - Hideaki Kimura, Mitsuhsa Sato, Yoshihiko Hotta, Satoshi Matsuoka, Taisuke Boku and Daisuke Takahashi, "Empirical Study on Reducing Energy of Parallel Programs using Slack Reclamation by DVFS in a Power-scalable High Performance Cluster", Proc. 8th IEEE International Conference on Cluster Computing (CLUSTER), CD-ROM, (2006).
 - S. Sumimoto, K. Ooe, K. Kumon, T. Boku, M. Sato, A. Ukawa, "Scalable Communication Layer for Multi-Dimensional Crossbar Network Using Multiple Gigabit Ethernet", Proc. of ICS2006, Cairns, Australia, 2006.
 - Taisuke Boku, Mitsuhsa Sato, Akira Ukawa, Daisuke Takahashi, Shinji Sumimoto, Kouichi Kumon, Takashi Moriyama, Masaaki Shimizu, "PACS-CS: A large-scale bandwidth-aware PC cluster for scientific computations", CCGRID 2006, pp. 233-240, 2006.
 - Yoshihiro Nakajima, Mitsuhsa Sato, Yoshiaki Aida, Taisuke Boku and Franck Cappello, "Integrating Computing Resources on Multiple Grid-enabled Job Scheduling Systems Through a Grid RPC System", CCGRID 2006, pp. 296-300, 2006.
 - Yoshiaki Aida, Yoshihiro Nakajima, Mitsuhsa Sato, Tesuya Sakurai, Daisuke Takahashi, Taisuke Boku, "Performance Improvement by Data Management Layer in a Grid RPC System", GPC2006, pp. 324-335, 2006.
 - Taisuke Boku, Mitsuhsa Sato, Daisuke Takahashi, Hiroshi Nakashima, Hiroshi Nakamura, Satoshi Matsuoka, Yoshihiko Hotta, "MegaProto/E: Power-Aware High-Performance Cluster with Commodity Technology", The 2nd workshop on High Performance Power-Aware Computing (IPDPS 2006 Workshop), (CD-ROM), 2006.
 - Yoshihiko Hotta, Mitsuhsa Sato, Hideaki Kimura, Satoshi Matsuoka, Taisuke Boku, Daisuke Takahashi, "Profile-based Optimization of Power Performance by using Dynamic Voltage Scaling on a PC cluster", The 2nd workshop on High Performance Power-Aware Computing (IPDPS 2006 Workshop), (CD-ROM), 2006.

2007/3/6

計算科学研究センター 平成18年度年次報告会

平成19年度の計算科学研究センターの計画について

- PACS-CSの運用・活用
 - 運営費交付金特別教育研究経費による拠点形成事業「計算科学による新たな知の発見・統合・創出」の最終年度
 - 最終成果発表のためのシンポジウムを開催予定(新棟お披露目)
 - 全国共同利用の開始
 - 計算科学の重点課題研究の推進(19年度以降)
- 次期スパコン、次世代スパコンプロジェクトへの対応
 - 次期スパコン: 入札(9月)、納入(3月)
 - 次世代スパコン: 詳細設計へ
 - アーキテクチャ: 「要素技術プロジェクト」、アプリケーション: 重点アプリのベンチマーク
- 計算科学の国際的推進
 - ILDG/JLDG、... その他の分野でも...
- 人事制度の見直し: 新職制、テニユア制度の導入
- 新棟への引越し

超高速クラスタファイルシステムの研究

建部修見(システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻)

H18年度研究目標

1000ノード規模の大規模クラスタにおけるGfarmファイルシステムの性能評価と効率化

平成18年度の成果

- **KEK新B計算機を利用して, 1000ノード規模のクラスタファイルシステムの構築, 性能評価を行った**
 - ▶ 総容量: 26Tbyte(各24GByte x 1112ノード)
 - ▶ 最大理論I/O性能: 52GB/s(各48MB/sec x 1112ノード)
 - ▶ B加速器の全実験データ(24.6TByte)を格納
 - ▶ 1112ノードの並列読み込み性能で52.0GB/sを達成
 - ◎ ディスクI/O性能を3,024倍高速化
 - ▶ $b \rightarrow s \gamma$ 崩壊におけるスキムで704ノードを利用して24.0GB/sを達成
 - ◎ 3週間を30分以内に


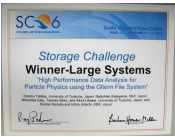
平成19年度の目標



- **FIRST**クラスタのGfarmファイルシステムの効率化
 - ▶ 起動時に全ノードで参照されるバイナリプログラムの効率的な自動複製作成
- **JLDG/ILDG**におけるVO対応
 - ▶ VO・グループ名をファイルシステムのACLで利用
- **PACS-CS**へのGfarmファイルシステム導入の検討
 - ▶ バッチジョブスクリプトにおけるファイル入出力処理を代替
 - ▶ 計算ノードのワーク領域の管理

発表論文リスト



- **受賞**
 - ▶ SC2006 HPC Storage Challenge, Winner – Large Systems
- 
- **国際会議**
 - ▶ Z. Ding, Y. Luo, X. Wei, C. Misleh, W. W. Li, P. W. Arzberger, O. Tatebe, "**My WorkSphere: Integrative Work Environment for Grid-unaware Biomedical Researchers and Applications**", Procs of 2nd Grid Computing Environment Workshop, 2006.
 - ▶ X. Wei, Z. Ding, W. W. Li, O. Tatebe, J. Jiang, L. Hu, P. W. Arzberger, "**GDIA: A Scalable Grid Infrastructure for Data Intensive Applications**", Procs of IEEE International Conference on Hybrid Information Technology (ICHIT 2006), 2006.
 - ▶ Cindy Zheng, Osamu Tatebe et al, "**The PRAGMA Testbed - Building a Multi-Application International Grid**", Procs of International Workshop on Grid Testbeds (Grid Testbeds), 2006.
 - ▶ Wilfred W. Li, Osamu Tatebe et al, "**Building Cyberinfrastructure for Bioinformatics Using Service Oriented Architecture**", Procs of Fourth International Workshop on Biomedical Computations on the Grid (BioGrid), 2006.

計算情報学研究部門

計算知能分野

北川 博之	システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻	教授
川島 英之	システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻	講師
天笠 俊之	システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻	講師

計算メディア分野

大田 友一	システム情報工学研究科知能機能工学専攻	教授
亀田 能成	システム情報工学研究科知能機能工学専攻	助教授
北原 格	システム情報工学研究科知能機能工学専攻	講師

データ統合利用基盤技術に関する研究

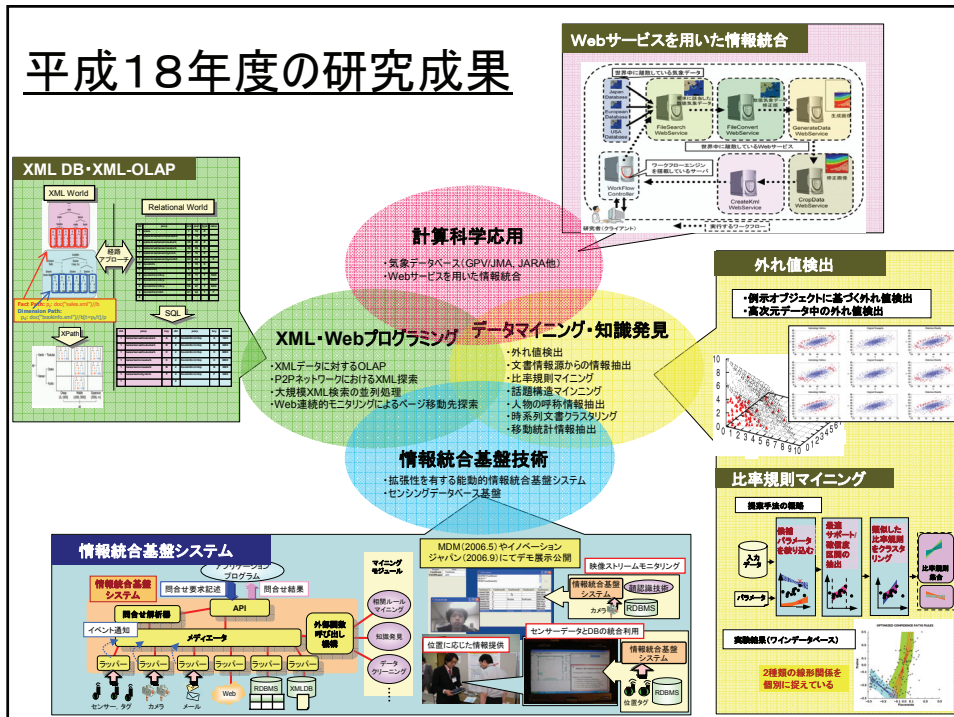
平成19年3月6日

北川博之

平成18年度の研究目標

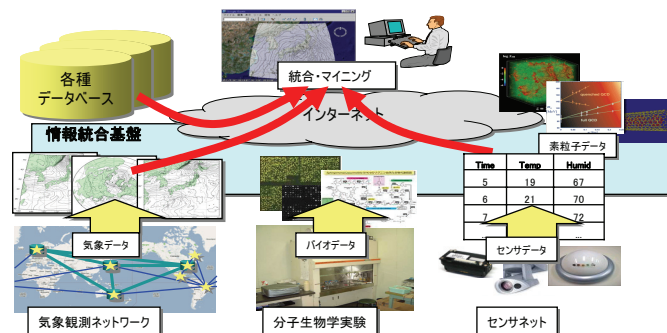
- ・ データ工学分野の先端基盤技術の研究開発
 - 情報統合基盤システム(基盤A, CREST)
 - データマイニング・知識発見(特定)
 - XML・Webプログラミング(特定)
- ・ 基盤技術の計算科学応用
 - GPV/JMAを中心とした気象データベース研究開発(気象Gと連携:萌芽)

平成18年度の研究成果



平成19年度(以降)の研究目標

- ・ データ工学分野の先端基盤技術の研究開発
 - 大規模データ管理・統合・マイニング
 - 実時間センシング(メディアGと連携)
 - 分散ストリーム高度化(基盤A), 持続型ストリーム処理(CREST)
- ・ 計算科学データ基盤に関する研究開発
 - 気象データベース利用の高度化(気象G等と連携: 萌芽)
 - 他の応用分野との連携



平成18年度の研究発表

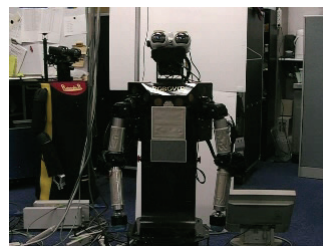
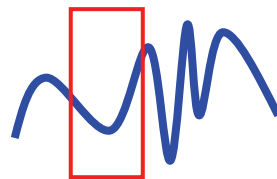
- ・ 学術雑誌論文(9編)
 - 濱本, 北川 「サポートと確信度をもとにした比率規則による線形関係抽出」 情報処理学会論文誌: データベース.
 - 石川, 町田, 北川 「マルコフ連鎖モデルに基づく移動ヒストグラムの動的構築法」電子情報通信学会論文誌.
 - Khy, Ishikawa, and Kitagawa, "A Novelty-based Clustering Method for On-line Documents", World Wide Web Journal.
- ・ 査読付国際会議論文(14編; 含 ポスター・デモ論文)
 - Yamada, Watanabe, Kitagawa, and Amagasa, "Location-based Information Delivery Using Stream Processing Engine StreamSpinner", MDM 2006.
 - Toda, Kataoka, and Kitagawa, "Topic Structure Mining for Document Sets using Graph-Based Analysis", DEXA 2006.
 - Hokama and Kitagawa, "Extracting Mnemonic Names of People from the Web", ICADL 2006.
 - Li and Kitagawa, "DB-Outlier Detection by Example in High Dimensional Datasets", IEEE SWOD 2007. (to appear)
- ・ 査読付国内会議論文(13編)
- ・ 国内研究会論文(11編)
- ・ 招待講演: 第23回中国データベース学会

計算科学研究センター 平成18年度年次報告会

- 題目
 - センサデータ処理基盤に関する研究
- 氏名
 - 川島英之
- 平成18年度の研究目標
 - センサデータを管理するDBMSの開発

平成18年度の成果

- KRAFT(ドイツ語でPower)
 - 高速データ挿入
 - 類似シーケンス検索/統計処理
 - 周期的データ提供
- KRAFT応用
 - オブジェクト検索システム
 - 位置、加速度、光
- ロボットジェスチャ変換



平成19年度(以降)の目標

- KRAFT
 - 現実的応用(記号接地、WEBとの結合)
 - 機能&性能(並列化、分散化、圧縮、索引)
- ロボットジェスチャ変換
- 組込DBMS(携帯電話)
- GEO Grid
- その他
 - ストリーム、データ統合、マイニング

発表論文、国際会議、研究会発表等リスト

- 広田, 川島, 梅澤, 今井, ``セマンティック・センサネットワークの実現に向けた実世界指向メタデータ管理システム MeTの設計と実装'', 信学会論文誌(A) センサネットワーク小特集号, Vol. 89-A, No. 12, pp. 1190-1103, 2006年.
- 中村, 川島, 佐竹, 今井, 安西, ``RSV: コミュニケーションロボットのためのセンサデータ可視化システム'', 情報論文誌: データベース, Vol. 47, No. SIG 8 (TOD 30), pp. 105-120, 2006年.
- M. Nakamura, H. Kawashima, S. Satake, M. Imai, ``RSV: Sensor Data Analysis System for Human Robot Interaction'', Proc. of IASTED-HCI'07, To Appear, 2007.
- M. Imai, Y. Hirota, S. Satake, H. Kawashima, ``Semantic Sensor Network for Physically Grounded Applications'', Proc. of ICARV'06, pp. 1637-1642, 2006.
- M. Imai, Y. Hirota, S. Satake, H. Kawashima, ``Semantic Connection between Everyday Objects and a Sensor Network'', Proc. of SSN, pp. 1-13, 2006.
- M. Imai, Y. Hirota, S. Satake, H. Kawashima, ``Description of Environments with Semantic Sensor Network'', Proc. of SCIS&ISIS'06, pp. 1280-1285, 2006.
- H. Kawashima, Y. Hirota, Michita Imai, ``MeT: A Real World Oriented Metadata Management System for Semantic Sensor Networks'', Proc. DMSN'06, pp. 13-18, 2006.
- H. Kawashima, M. Imai, Y. Anzai, ``Providing Persistence for Sensor Data Stream by Remote WAL'', Proc. of DaWaK'06, LNCS Vol. 4081, pp. 524-533, 2006.
- H. Kawashima, M. Imai, Y. Anzai, ``Accelerating Remote Logging by Two Level Asynchronous Checkpointing'', Proc. of FMUIT'06, pp. 206-210, 2006.
- H. Kawashima, S. Satake, M. Imai, Y. Shinagawa, Y. Anzai, ``PORSCHER: A Physical Objects Recommender System for Cell Phone Users'', Proc. ubiPCMM'06, ISSN 1613-0073, Vol. 197, 2006.
- H. Kawashima, M. Imai, Y. Anzai, ``DAC: Accelerating Remote WAL for Sensor-Oriented DBMS'', Proc. of INSS'06, pp. 139, 2006.
- 査読付国内学会: 3件

計算科学をサポートする XMLデータ基盤に関する研究

■ 背景

- 標準データ形式としてのXML
- 多くのデータがXML形式で保存・流通
- XMLデータ基盤がますます重要に

■ 平成18年度の研究目標

- PCクラスタ上の大規模XMLデータ処理
- オーバレイネットワーク上のXMLデータ管理
- XMLデータの(複雑な)分析処理方式
- 気象データベース(GPV/JMA)の高度利用

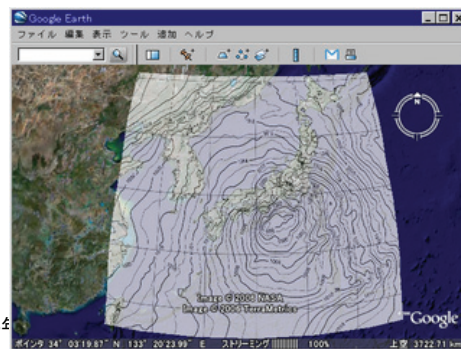
2007/3/6

H18年度年次報告会

1

平成18年度の成果

1. PCクラスタ上のXMLデータ並列処理
2. 分散ハッシュ表を用いたXMLデータ管理
3. XML-OLAP
4. 気象データのための
Webサービス



2007/3/6

H18



平成19年度(以降)の目標

- XMLデータ基盤に関する研究を継続
 - 過去2年で得られた成果を国際ジャーナルへ
- 気象データの高度利用
 - 気象データWebサービスの拡充
 - トラスト(データトレーサビリティ)
 - データベースへのマイニング技術の応用
- e-Science基盤
 - 気象以外の分野との連携

2007/3/6

H18年度年次報告会

3



発表論文リスト

- 学術論文(レター)
 - 城戸, 天竺, 北川, "PCクラスタを用いたXMLデータ並列処理方式の評価", DBSJ Letters, Vol. 5, No. 2, pp. 85-88, 2006年9月.
- 国際会議
 - K. Kido, T. Amagasa, H. Kitagawa, "Processing XPath Queries in PC Clusters Using XML Data Partitioning," SWOD 2006, pp. 114-119, 2006.
 - S. Yamada, Y. Watanabe, H. Kitagawa, and T. Amagasa, "Location-based Information Delivery Using Stream Processing Engine StreamSpinner", MDM 2006, pp. 57-61, 2006.
 - C. Kit, T. Amagasa, H. Kitagawa, "OLAP Query Processing for XML Data in RDBMS," SWOD2007, 2007. (採録決定)
 - T. Amagasa, C. Wu, H. Kitagawa, "Retrieving Arbitrary XML Fragments from Structured Peer-to-Peer Networks," APWeb/WAIM2007, 2007. (採録決定)
- 国内ワークショップ(査読付き)
 - C. Kit, T. Amagasa, and H. Kitagawa, "An Approach to XML-OLAP Based on Relational Databases," DEWS2007, 2007年3月.
 - 呉, 天竺, 北川, "構造型P2Pネットワークにおける負荷分散を考慮したXMLデータ処理", DEWS2007, 2007年3月.
- 研究会
 - 城戸, 天竺, 北川, "PCクラスタを用いたXMLデータ並列処理方式の評価", 情報処理学会研究報告 Vol. 2006, No. 78 (2006-DBS-140(II)), 2006年7月.
 - C. Kit, T. Amagasa, H. Kitagawa, "Towards Analytical Processing of XML Data," 情報処理学会研究報告 Vol. 2006, No. 78 (2006-DBS-140(I)), pp. 201-208, 2006年7月.
 - 呉, 天竺, 北川, "P2P環境における構造概要を利用したXMLデータの検索手法の実装について", 情報処理学会研究報告 Vol. 2006, No.77 (2006-DBS-140(I)), 2006年7月.
 - 山田, 渡辺, 北川, 天竺, "ストリーム管理システムにおける複数永続化要求の妥当性評価", 情報処理学会研究報告 Vol. 2006, No. 78 (2006-DBS-140(II)), 2006年7月.
 - 文, 天竺, 北川, "オントロジとパスの類似度を用いたXMLデータの意味検索", DEWS2007, 2007年3月.
 - 山田, 渡辺, 北川, 天竺, "ストリーム管理システムにおける複数永続化要求最適化手法", DEWS2007, 2007年3月.
 - 稲守, 渡辺, 北川, 天竺, "分散ストリーム処理環境のための運用管理システムの提案", DEWS2007, 2007年3月.

2007/3/6

H18年度年次報告会

4

監視カメラ映像を活用した 複合現実型視覚支援メディア 大田友一

平成18年度の研究目標

科研費基盤研究A「シースルービジョン: 監視カメラ映像を活用する歩行者のための視覚支援方式の開発」(H18-H21)

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

総務省SCOPE「ネットワークによる自由視点映像のライブ配信とインタラクティブ提示」(H16-H18)

- 複数の視聴者が、それぞれ自由に視点を選びながら、スタジアムや体育館で行われるスポーツイベントのライブ中継を、ネットワーク経由で観ることができる技術を開発

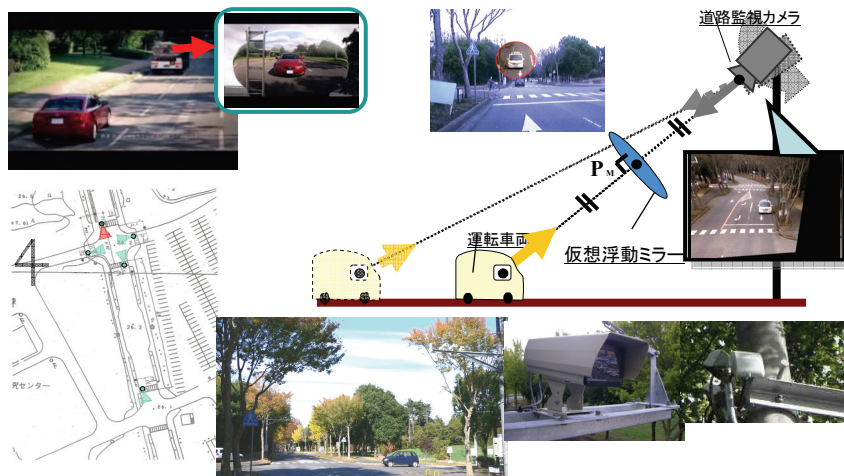
科学技術振興調整費「状況・意図理解によるリスクの発見と回避: 動的環境センシングによる視覚増強技術」(H16-H18)

- 自動車事故の低減を目指し、状況・意図に応じた運転支援を実現する予防安全型技術の構築のために、道路監視カメラ映像を画像処理によって加工し、運転者が直感的に受け入れやすい視覚情報として提示する技術を開発

平成18年度の成果(一例)

科学技術振興調整費「状況・意図理解によるリスクの発見と回避: 動的環境センシングによる視覚増強技術」(H16-H18)

- Floating Virtual Mirrors: Visualization of the Scene behind a Vehicle;
Toru Miyamoto, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta,
16th International Conference on Artificial Reality and Telexistence (ICAT2006), (2006.11)



平成19年度(以降)の目標

- 科研費基盤研究A「シースルービジョン:監視カメラ映像を活用する歩行者のための視覚支援方式の開発」(H18-H21)
 - 公共空間における監視カメラ設置数の増大は避けられないであろうことを前提に、一般市民が、自らのプライバシーと引き替えに監視カメラから得られるメリットとして、「安全」という重要だが眼に見えにくい価値の他に、眼に見えて便利さを実感できる新しい付加価値の在り方を提案し、それを実現する基盤技術を創成
- 科研費特定領域研究「開放型知覚情報ネットワークによる実世界情報学の確立」における計画研究「開放型ネットワーク上の知覚センサーデータの4次元映像空間による管理と検索・提示」(H19-H23) 申請中
 - センシングWebのノードから得られる多様な映像情報を、ユーザの多様な目的に沿って検索し、分かり易い視覚情報に編集加工して、実時間提示するために必要となる技術基盤を構築
- 総務省戦略的情報通信研究開発制度・ICTイノベーション創出型研究開発「高画質な任意視点映像のライブ配信技術と複合現実型提示方式の研究開発」(H19-H21) 申請中
 - 複数の視聴者が任意に視点を選びながら、現在のアナログ放送レベルの画質の3次元映像をネットワーク経由で観ることができる技術を実現。任意視点映像生成技術として、我々が独自に開発した人物ビルボード方式が、高画質化にも優位性が高いことを実証

発表論文リスト (大田友一)

Journal Papers

- Live 3D Video in Soccer Stadium ; [Yuichi Ohta](#), Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, International Journal of Computer Vision, (2007) To be published.
- 会話シーンを対象とした自動撮影・編集システム; 西崎隆志, 尾形 涼, 中村裕一, 大田友一, 電子情報通信学会論文誌 D, Vol.J89-D, No.7, pp.1557-1567 (2006.7)
- Visualization Methods for Outdoor See-Through Vision; Takahiro Tsuda, Haruyoshi Yamamoto, Yoshinari Kameda, [Yuichi Ohta](#), Transactions of the IEICE D, Vol.E89-D, 6, pp.1781-1789 (2006.6)

International Conference

- A Nested Marker for Augmented Reality ; Keisuke Tateno, Itaru Kitahara, [Yuichi Ohta](#), IEEE VR2007, (2007.3)
- Sensory Property in Fusion of Visual/Haptic Cues by Using Mixed Reality; Morio Nakahara, Itaru Kitahara, [Yuichi Ohta](#), World Haptics 2007, (2007.3)
- Floating Virtual Mirrors: Visualization of the Scene behind a Vehicle; Toru Miyamoto, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, [Yuichi Ohta](#), 16th International Conference on Artificial Reality and Telexistence (ICAT2006), (2006.11)
- Scene Clustering with Multiple Non-Calibrated Cameras; Takashi Nishizaki, Kouji Kanari, Yoshinari Kameda, [Yuichi Ohta](#), First Korea-Japan Workshop on Pattern Recognition (KJPR), (2006.11)
- Analytical Compensation of Inter-reflection for Pattern Projection; Yasuhiro Mukaigawa, Takayuki Kakinuma, [Yuichi Ohta](#), ACM Symposium on Virtual Reality Software and Technology (VRST2006), pp.265-268 (2006.11)
- Photometric Inconsistency on a Mixed-Reality Face; Masayuki Takemura, Itaru Kitahara, [Yuichi Ohta](#), Fifth IEEE and ACM International Symposium on Mixed and Augmented Reality (ISMAR2006), pp.129-138 (2006.10)
- Visual Navigation System on Windshield Head-up Display; Akihiko Sato, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, [Yuichi Ohta](#), CDROM Proceedings of 13th World Congress on Intelligent Transport Systems, a technical paper, PaperID 1221, (2006.10)
- Smooth Video Hopping for Surveillance Cameras; Takahiro Tsuda, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, [Yuichi Ohta](#), The 33rd International Conference on Computer Graphics and Interactive Techniques (SIGGRAPH2006) Sketches, (2006.7)
- A Fast Compensation Method of Inter-reflection for Pattern Projection onto a Non-planar Surface; Yasuhiro Mukaigawa, [Yuichi Ohta](#), IEEE International Workshop on Projector-Camera Systems (PROCAMS2006), pp.9-10 (2006.6)

その他、解説記事 2編、国内学会研究会発表 14件

多視点同時観測への非校正カメラ群の利用

亀田 能成

平成18年度の研究目標

【前提】

部屋規模で密に配置されたカメラ群

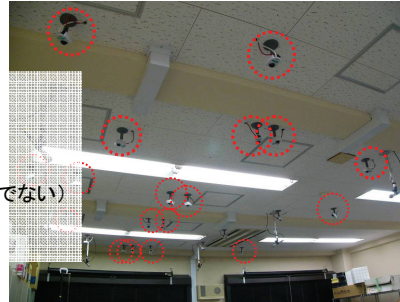
非均一な配置 (配置に関して仮定をおかない)

非校正な状態 (事前に校正を行わない)

非均質なセンサ (焦点距離等の光学特性は同一でない)

対象となる事象

主に人間の行動



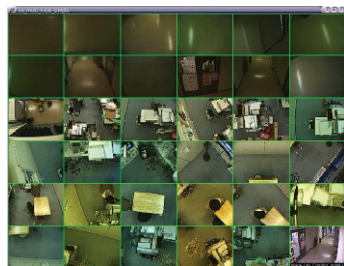
【目標】

カメラ群とその映像を利用者に見やすい形に組織化する

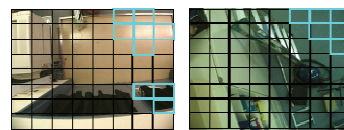
- ・ 事象のよく発生する場所の検出
- ・ 複数視点からの同一事象の観測
- ・ 事象の頻度解析

平成18年度の成果

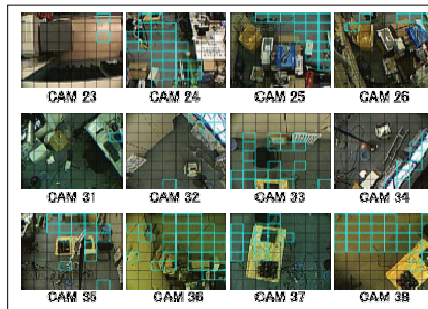
非校正カメラによる監視支援



入力(長時間観察)



カメラ毎に前景領域を抽出



共起性が高い小ブロック集合の抽出法を提案

- ⇒ 抽出領域のみをモニタすることで物事がよく起こる領域を効率よく多方面から観測可能に
- ⇒ 共起性に基づく事象のクラスタリングにより事象解析を容易にする方法の提案【発展】

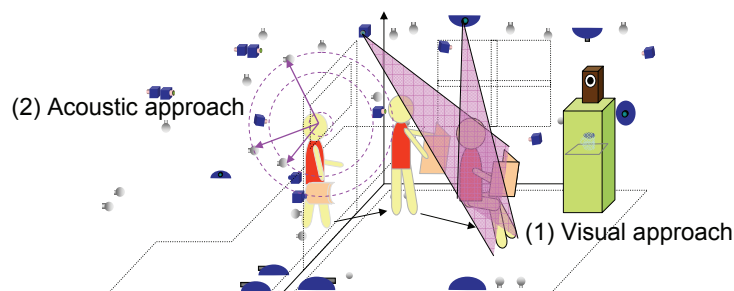
平成19年度以降の目標 非校正・非均一なセンサ群の自動組織化

(1) 点・線対応を利用しないカメラ群の位置関係の推測

これまでのカメラ校正には映像上での点ないし線の対応付けが必須
事前校正しない場合、このような対応付けができる点ないし線のペアを得ることは困難
⇒侵入物体のシルエット(輪郭)情報のみに基づいてカメラ校正を行う方法を研究

(2) 非校正・非均一なマイク群による音源位置の推定

これまでの音源位置推定では校正済みのマイクアレイの存在が前提
⇒白色化相互相関法を用いマイクペアの時間差のみからの音源位置推定法を研究



発表文献リスト(平成18年度)

論文

- Takahiro Tsuda, Haruyoshi Yamamoto, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, "Visualization Methods for Outdoor See-Through Vision," The Transactions of the IEICE D, E89-D, No.6, pp.1781-1789, 2006.

国際会議

- Toru Miyamoto, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, "Floating Virtual Mirrors: Visualization of the Scene behind a Vehicle," 16th International Conference on Artificial Reality and Telexistence (ICAT2006), LNCS 4282, pp.302-313, 2006.
- Takashi Nishizaki, Kouji Kanari, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, "Scene Clustering with Multiple Non-Calibrated Cameras," First Korea-Japan Joint Workshop on Pattern Recognition (KJPR), pp.97-102, 2006.
- Akihiko Sato, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, "Visual Navigation System on Windshield Head-Up Display," CDROM Proceedings of 13th World Congress on Intelligent Transport Systems, a technical paper, 8 pages, 2006.
- Takahiro Tsuda, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, "Smooth Video Hopping for Surveillance Cameras," The 33rd International Conference on Computer Graphics and Interactive Techniques (SIGGRAPH2006), Sketches, 2006.

研究会等発表

- 野村 尚史, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一, 「自由視点映像生成のための簡易な操作による背景生成手法」, 電子情報通信学会 技術研究報告 PRMU, Vol.103, No.429, PRMU2006-176, pp.31-36, 2006.
- 大津 寛之, 宮本 徹, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一, 「複数の道路監視カメラを用いた交差点における俯瞰映像作成」, 第5回ITSシンポジウム, pp.297-302, 2006.
- 服部 傑, 小林 智行, 亀田 能成, 大田 友一, 「多数センサによる観測データの相関を手がかりとする人間行動判別」, 電子情報通信学会 技術研究報告MVE, Vol.106, No.396, MVE2006-68, pp.29-34, 2006.
- 山本 治由, 津田 崇博, 塚田 正人, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一, 「屋外における複合現実型情報提示の広域化～特性の異なるカメラ群の利用～」, 電子情報通信学会 技術研究報告MVE, Vol.106, No.396, MVE2006-67, pp.23-28, 2006.
- 宮本 徹, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一, 「Floating Virtual Mirror: 浮動式仮想鏡による車両背後領域の可視化」, 電子情報通信学会 技術研究報告MVE, Vol.106, No.234, MVE2006-45, pp.13-18, 2006.
- 西崎 隆志, 金成 幸司, 亀田 能成, 大田 友一, 「非校正カメラ群を用いた多視点同時観測におけるシーンの判別」, 画像の認識・理解シンポジウム2006論文集(MIRU2006), pp.1168-1173, 2006.
- 田中 晴美, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一, 「透過型HMDを用いた歩行者用経路提示の評価」, 電子情報通信学会 技術研究報告MVE, Vol.106, No.91, MVE2006-23, pp.117-122, 2006.
- 古谷 仁志, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一, 「視点に依存した微小面群モデルによるスポーツシーンの自由視点映像生成」, 第2回デジタルコンテンツシンポジウム (DCS2006), 4 pages, 2006.



モバイルカメラによる 高自由度映像監視技術

科学研究費補助金(若手研究A)

計算情報学研究部門 計算メディア分野

北原 格

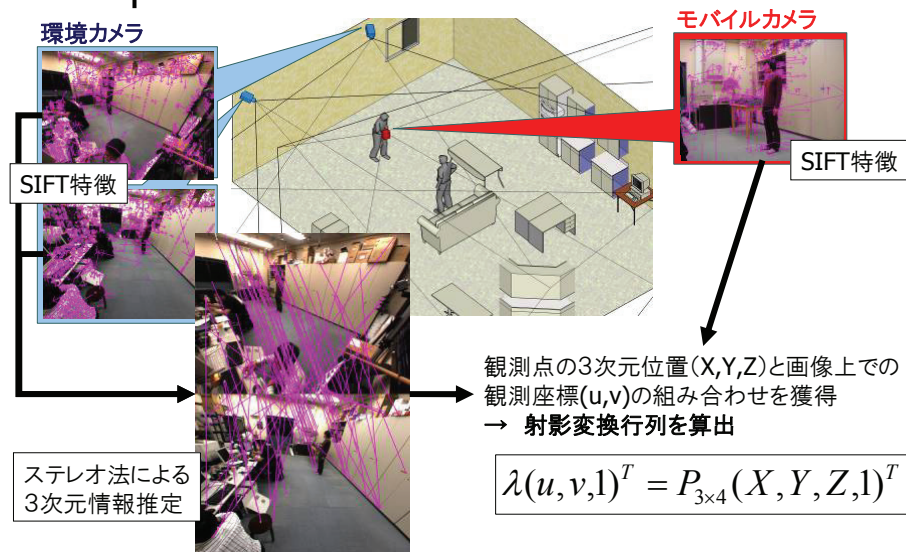
平成18年度の研究目標

モバイルカメラと環境設置型監視カメラの特長を融合
した撮影システムの構築



平成18年度の成果

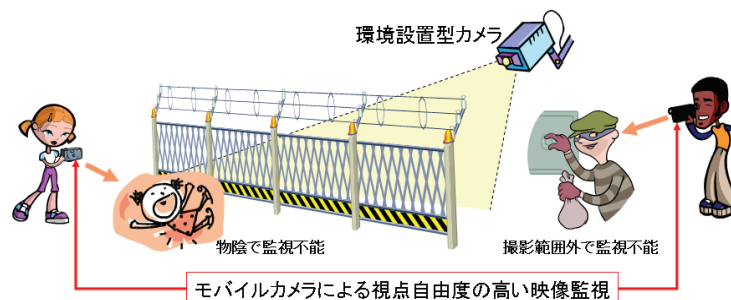
環境カメラ映像を用いたモバイルカメラの位置合わせ





平成19年度(以降)の目標

- 環境カメラとモバイルカメラを連動させた撮影空間の理解
 - 見たい所から見た認識
- 環境カメラ映像とモバイルカメラ映像の統合
 - 死角の少ない・高解像度な監視映像獲得



発表論文リスト、国際会議、研究会等発表リスト

- 雑誌論文 (1件)
 - International Journal of Computer Vision (IJCV)
- 国際会議 (13件)
 - 18th IAPR International Conference on Pattern Recognition (ICPR 2006)
 - IEEE Virtual Reality 2007 ※
 - ACM SIGGRAPH 2006 ※
 - IEEE and ACM International Symposium on Mixed and Augmented Reality (ISMAR06) ※
 - International Symposium on 3D Data Processing, Visualization and Transmission (3DPVT 2006)
 - IEEE Workshop on Three-Dimensional Cinematography (3DCINE'06)
 - International Conference on Artificial Reality and Telexistence (ICAT2006) ※
 - World Congress & Exhibition on Intelligent Transport Systems and Services ※
 - World Haptics 2007 ※
- 国内会議 (7件)
- 研究会 (7件)

※ 大田教授、亀田助教授との共著論文

筑波大学計算科学研究センター

平成18年度年次報告会

日時: 平成19年3月6日(火) 10:00~16:00

場所: 筑波大学総合研究棟B棟112講義室

プログラム

10:00~10:05 開会挨拶 (宇川 彰, センター長)

セッション1(10:05~11:05)座長:梅村 雅之

- 10:05~ 宇川 彰 (数理物質科学研究科物理学専攻)
「計算科学研究センターこの1年」
- 10:15~ Mauro Boero (数理物質科学研究科物理学専攻)
「計算生命グループの18年度の研究成果」
- 10:25~ 田中 博 (生命環境科学研究科地球環境科学専攻)
「近年の異常気象と北極振動」
- 10:35~ 天笠 俊之 (システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻)
「計算科学をサポートするXMLデータ基盤に関する研究」
- 10:45~ 吉江 友照 (数理物質科学研究科物理学専攻)
「近似無し格子QCD計算によるU(1)問題の研究」
- 10:55~ 日野 健一 (数理物質科学研究科物性・分子工学専攻)
「周期的パルスレーザーによる動的Wannier-Stark ladder」

11:05~11:20 休憩

セッション2(11:20~12:20)座長:佐藤 三久

- 11:20~ 稲垣 祐司 (生命環境科学研究科構造生物科学専攻)
「生物グループ平成18年度年次報告:複数遺伝子配列データによる
大規模真核生物系統解析に向けて」
- 11:30~ 建部 修見 (システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻)
「超高速クラスタファイルシステムの研究」
- 11:40~ 梅村 雅之 (数理物質科学研究科物理学専攻)
「FIRSTプロジェクトと輻射流体力学による宇宙構造形成」
- 11:50~ 小泉 裕康 (数理物質科学研究科物性・分子工学専攻)
「銅酸化物超伝導体の電子状態」
- 12:00~ 朴 泰祐 (システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻)
「超並列クラスタPACS-CSの開発と運用」
- 12:10~ 亀田 能成 (システム情報工学研究科知能機能システム専攻)
「多視点同時観測への非校正カメラ群の利用」

12:20~13:30 昼食

セッション3(13:30~14:40)座長:田中 博

- 13:30~ 北川 博之 (システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻)
「データ統合利用基盤技術に関する研究」
- 13:40~ 藏増 嘉伸 (数理物質科学研究科物理学専攻)
「Nf=2+1 Lattice QCD Simulation toward the Physical Point」
- 13:50~ Tong Xiao-Ming (数理物質科学研究科物性・分子工学専攻)
「少数多体系の量子ダイナミクス計算」
- 14:00~ 北原 格 (システム情報工学研究科知能機能システム専攻)
「モバイルカメラによる高自由度映像監視技術」
- 14:10~ 舘野 賢 (数理物質科学研究科物理学専攻)
「生命科学・量子科学・情報科学による生体物質の機能制御機構の研究」
- 14:20~ 大田 友一 (システム情報工学研究科知能機能システム専攻)
「監視カメラ映像を活用した複合現実型視覚支援メディア」
- 14:30~ 谷口 祐介 (数理物質科学研究科物理学専攻)
「Non-perturbative Renormalization of BK」

14:40~14:55 休憩

セッション4(14:55~15:55)座長:朴 泰祐

- 14:55~ 高橋 大介 (システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻)
「超高速計算システムにおける大規模科学技術計算」
- 15:05~ 石塚 成人 (数理物質科学研究科物理学専攻)
「格子 QCD による不安定粒子の研究」
- 15:15~ 日下 博幸 (生命環境科学研究科地球環境科学専攻)
「最新の領域気象モデル WRFV2.2 の開発と気象予測・シミュレーション研究への適用」
- 15:25~ 橋本 幸男 (数理物質科学研究科物理学専攻)
「原子核の三次元回転運動の微視的理論」
- 15:35~ 川島 英之 (システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻)
「センサデータ処理基盤に関する研究」
- 15:45~ 佐藤 三久 (システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻)
「ILDG/JLDG と次世代スパコン要素技術プロジェクトの進捗」
- 15:55~16:00 閉会挨拶 (佐藤 三久)

追加資料

- 白石賢二 (数理物質科学研究科物質創成先端科学専攻)
「大規模第一原理計算によるナノサイエンス・ナノテクノロジーの研究」
- 岡田 晋 (数理物質科学研究科物質創成先端科学専攻)
「ナノスケール物質の物性解明と物質設計」
- 吉川 耕司 (数理物質科学研究科物理学専攻)
「H18年度の研究成果と今後の研究計画」

