

目次

1 平成 26 年度重点施策および改善目標の達成状況.....	2
2 自己評価と課題	10
3 各研究部門の報告.....	13
I. 素粒子物理研究部門	13
II. 宇宙・原子核物理研究部門	40
II-1. 宇宙分野.....	40
II-2. 原子核物理分野	63
III. 量子物性研究部門	78
IV. 生命科学研究部門	96
IV-1. 生命機能情報分野.....	96
IV-2. 分子進化分野.....	108
V. 地球環境研究部門	123
VI. 高性能計算システム研究部門.....	133
VII. 計算情報学研究部門.....	166
VII-1. データ基盤分野	166
VII-2. 計算メディア分野.....	187

1 平成 26 年度重点施策および改善目標の達成状況

1-1. 全体的な状況

理学・工学分野で実施したミッション再定義ならびに昨年度実施した外部評価に基づき、センター部門体制の再構築を行うと共に、「計算基礎科学連携拠点」ならびに「宇宙生命計算科学連携拠点」を含む学内外連携体制を強化した。人事としては、9月よりポイント制を先行導入し、センターの人事計画を策定した。新たな人事として、全学戦略枠（物質科学分野准教授、宇宙生命分野教授）、転出枠（原子核分野教授、生命科学分野教授）、国際テニュアトラック助教授（素粒子、原子核、宇宙、地球環境分野）の計8枠の人事を行った。また、システム情報分野における2名の教授の転出に伴う後任人事として助教（テニュアトラック）2名の配置を決定すると共に、宇宙生命分野での任期付助教1名の配置を行うこととした。共同利用・共同研究拠点としては、学際共同利用プログラムにより41課題のプロジェクトを採択し共同研究を実施した。各研究グループが行う重点課題についても、学際共同利用プログラムのプロジェクトとして実施し、着実に研究を進めた。11月には、第6回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム—HA-PACSとCOMAによる計算科学の発展と、分野融合への取り組み—を開催し、HA-PACSとCOMAによる学術成果を総括した。学内外の連携の取組みとしては、東京大学情報基盤センターと共同設置した「最先端共同HPC基盤施設」において、次期導入計算機の仕様策定を行った。4月には、米国のローレンスバークレイ研究所との合同ワークショップを開催し、計算科学発展のための協働を進めた。1月には、韓国 KISTI (Korea Institute of Science and Technology Information) と合同で、HPC Winter School を Seoul National University にて開催した。3月には、エジンバラ大学にて合同ワークショップを開催した。また、センターと理化学研究所計算科学研究機構、日立製作所の3者間で「次世代演算加速機構に関する共同研究」の覚書を取り交わし、エクサスケール・コンピューティングの実現に向けた要素技術開拓の共同研究を開始した。「計算基礎科学連携拠点」では、これまでの3機関連携から、8機関連携へ拡大した包括協定を締結し、この下で計算科学研究センターは、『ポスト「京」で取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーションの開発・研究開発重点課題』の一つである課題⑨「宇宙の基本法則と進化の解明」の代表機関として採択され、事業を開始した。「宇宙生命計算科学連携拠点」では、オーストラリア国立大学、名古屋大学との連携の下で、星間アミノ酸部会、系外惑星バイオマーカー部会、宇宙乱流部会の活動を進めた。地球環境分野では、アラスカ大学との国際交流協定の締結を更新した。

1-2. 重点施策の達成状況

研究面では、文部科学省共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」とし

て、計算機システムの開発・運用とこれを用いた学際計算科学の研究を推進した。また、「計算基礎科学連携拠点」「宇宙生命計算科学連携拠点」などを中心に、学外連携を強化し、国際拠点化に向けた体制構築を行なった。教育面では、計算科学の教育に関する英語プログラムを充実させた。また、センターの本格的な部局化に向けた取り組みを実施した。26 年度重点施策・改善目標と実施内容は以下の通り。

(1) T2K 後継機としてパイロットシステム COMA (PACS-IX) を運用すると共に、次期マシンとして、東京大学と共同して大規模システムを開発・運用する体制を構築する。

メニーコアパイロットシステム COMA (PACS-IX) を運用し、学際共同利用及び HPCI プログラムにおいて全国共同利用に供した。センターとしては、各種大規模計算科学アプリケーションのメニーコアプロセッサ向けコード開発と性能評価を実施し、メニーコアプロセッサの予備評価を先行研究として行った。また、東大で開発中の McKernel の試験的利用と性能特性に関する研究も行った。東京大学情報基盤センターと共同設置した「最先端共同 HPC 基盤施設」においては、これらの実績に基づき、次期導入計算機の資料招請ならびに仕様策定を行った。

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

HA-PACS プロジェクトにおいて開発した GPU 間直接通信機構である PEACH2 を JST-CREST によるフォローアップ研究で高度化し、基本通信ライブラリの整備、QCD, CG 法, FFT 等の主要アプリケーションに適用した。特に、演算加速クラスタで難しいとされる小中規模問題における強スケーリング性能が得られることを確認した。「将来の HPCI システムに関する調査研究」では、次世代超並列型演算加速装置の提案とシミュレーション及び机上評価による各種アプリケーションの性能評価を行った。最終的に、同種の装置を用いた超並列システムが、特定のクラスの応用問題においてエクサスケール規模のシステムを高い電力性能比の下で実現可能であることを示し、文部科学省に報告した。

(3) HPCI 戦略プログラム（分野 5）を中心に、「京」コンピュータおよび HPCI 計算資源を活用し、研究を推進する。

4 つの研究開発課題、課題(1) 格子 QCD による物理点でのバリオン間相互作用の決定、課題(2) 大規模量子多体計算による核物性解明とその応用、課題(3) 超新星爆発およびブラックホール誕生過程の解明、課題(4) ダークマターの密度ゆらぎから生まれる第 1 世代天体形成について、「京」コンピュータおよび HPCI 計算資源を活用し、研究を推進した。特に、課題(1)では、物理点における格子 QCD 計算、格子 QCD を用いた軽い原子核の計算、格子 QCD によるバリオン間相互作用の計算、課題(2) では、原子核殻模型計算による E1 励起の記述、軽い

核におけるモンテカルロ殻模型による第一原理計算の現状，核力から出発した有効相互作用の構築とその応用，課題(3) では，ブラックホール磁場中性子星連星合体の数値相対論シミュレーション，連星中性子星合体における r-process 元素合成，多次元ボルツマン輻射流体コードによる超新星計算，課題(4)では，超臨界降着円盤の一般相対論的輻射磁気流体シミュレーション，Kninja を使った微惑星の大領域集積計算：アイスラインから外側への惑星移動，ダスト再放射を考慮した輻射流体計算コードの開発において進展があった。

(4) 「計算基礎科学連携拠点」および「宇宙生命計算科学連携拠点」を中心とした学内外連携を一層強化し，国際連携を進める。

「計算基礎科学連携拠点」では，これまでの3機関連携（国立大学法人筑波大学計算科学研究センター，大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構，大学共同利用機関法人自然科学研究機構国立天文台）から，8機関連携（大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構，大学共同利用機関法人自然科学研究機構国立天文台，国立大学法人筑波大学計算科学研究センター，国立大学法人京都大学基礎物理学研究所，国立大学法人大阪大学核物理研究センター，国立大学法人東京大学原子核科学研究センター，国立大学法人千葉大学大学院理学研究科附属ハドロン宇宙国際研究センター，独立行政法人理化学研究所仁科加速器研究センター）へ拡大した包括協定を締結し，各機関の研究開発能力及び人材，設備等を活かし，計算科学の手法による素粒子・原子核・宇宙分野の戦略的な研究教育拠点の形成を行った。そして，この連携に基づき，計算科学研究センターは，『ポスト「京」で取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーションの開発・研究開発重点課題』の一つである課題⑨「宇宙の基本法則と進化の解明」の代表機関として採択された。「宇宙生命計算科学連携拠点」では，オーストラリア国立大学，名古屋大学との連携により，星間アミノ酸部会で，第一原理計算に基づくアミノ酸生成・キラリティー発生・アミノ酸前駆体形成についての共同研究を行った。また，系外惑星バイオマーカー部会では，中心星のスペクトルタイプを考慮した紅色細菌光合成の計算を行った。宇宙乱流部会では，名古屋大学流体工学分野と連携のもとで乱流と慣性粒子の相互作用に関する計算を進めた。これらの共同研究推進のため，名古屋大学大学院工学研究科との連携協定を締結した。

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

「先端学際計算科学共同研究拠点」として，“先端学際計算科学の開拓・推進・展開事業－計算科学による先導的知の創出－”プロジェクトを推進し，共同研究プログラムとして，HA-PACS と COMA を活用する学際共同利用プログラムを実施し，(1) 学際開拓プログラム，(2) 重

点課題推進プログラム，(3) 共同研究推進プログラムについて，HA-PACS 29 課題，COMA 42 課題のプロジェクトを採択し共同研究と重点研究を推進した。

1-3. 研究の年度目標と達成状況

(1) 素粒子物理研究部門

素粒子物理研究部門：格子 QCD における微細化と多体系への展開を目指し，「京」を用いた物理点でのバリオン間相互作用の計算を行う。また，有限温度・有限密度 QCD における相構造解析を進める。

「京」でのゲージ配位生成が終了し，ハドロン質量などの基本物理量測定，軽原子核の直接構成，バリオン間ポテンシャル計算が進行中である。また，有限温度 QCD では，世界で初めて 3 フレーバーにおける臨界終点を決定することに成功した。今後は，3 フレーバーの臨界終点の精度を上げるとともに，より現実世界に近い 2+1 フレーバーへの拡張に着手する。

(2) 宇宙・原子核物理研究部門

宇宙における初代天体形成，銀河の形成・進化と相互作用，活動銀河核の進化と巨大ブラックホールの形成史を，輻射流体力学，N 体シミュレーションによって探究する。また，宇宙生命計算科学で生命分野と連携する。核子を基本自由度とみなした原子核に対して，密度汎関数理論を中心とする量子多体論に基づく計算手法を発展させ，不安定核の構造や応答，宇宙元素合成に関わる反応の研究を推進する。

宇宙分野では，初代天体形成，銀河形成，活動銀河核の進化について輻射流体シミュレーションを行った。また，銀河の進化と相互作用についての流体・N 体シミュレーションを行った。宇宙生命計算科学連携拠点では，星間空間アミノ酸部会で，キラリティーと前駆体の形成について，生命分野との連携の下に第一原理計算を行った。系外惑星バイオマーカー部会では，紅色細菌光合成のスペクトル計算を行った。宇宙乱流部会では，流体力学分野と連携のもとで乱流と慣性粒子の相互作用に関する計算を進めた。これらの研究により，26 編の原著論文を発表した。

原子核分野では，原子核のより精密な記述に向けて，これまで無視されてきたアイソスピン対称性を厳密に取り入れたエネルギー密度汎関数を開発し，荷電類似状態の計算を可能にした。また，時間依存密度汎関数計算では，原子核の形状について制限を課さない 3 次元実空間およびハイブリッド基底計算を用いて，中性子過剰核の低エネルギー励起モードの系統的計算と分析，核子超流動性を取り入れた核融合反応の非経験的計算に向けた開発を行った。さらに，ニュートリノ質量の絶対値を決定するために必要な二重ベータ崩壊の原子核行列要素計算では，準粒子乱雑位相近似に基づく大規模並列計算を進めるとともに，これと相補的

な生成座標法を用いた配位混合計算の開発を実行した。元素合成を理解する鍵となるトリプル・アルファ反応について、虚時間理論を用いたより高精度な計算法を検討した。

(3) 量子物性研究部門

光と物質の相互作用を記述する第一原理計算や模型計算の手法を発展させ、物質中における電子・イオンの超高速ダイナミクスや、光による相変化のメカニズムを解明する。

光と物質の相互作用に関し、時間依存密度汎関数理論に基づく大規模計算により、パルス光が誘電体に照射して生じる超高速光電流の発生を明らかにした。また、時間依存シュレーディンガー方程式に基づく大規模計算により、パルス光を用いた重水素分子の電離を制御する方法を提案し、それが最新の実験で確認された。強相関係では、厳密対角化を用いた解析により、光励起状態において電子スピンの整列する傾向にあることを示した。また、銅酸化物超伝導のスピントル誘起ループ電流に関し、外部からの電流供給がある場合に計算が可能となるよう理論を拡張した。

(4) 生命科学研究部門

生命機能情報分野では、生命機能の理論解析を進めると共に、宇宙分野と連携して宇宙生物学分野に資する知見を第一原理量子論によって獲得する。分子進化分野では、クリプト生物群とフォルニカータ生物群の多様性と系統関係の解明を目指し、網羅的発現遺伝子データに基づく大規模系統解析を行う。

生命科学研究部門の生命機能情報分野では、生命機能の理論解析を進めると共に、宇宙分野と連携して宇宙生物学分野に資する知見を第一原理量子論によって獲得する研究を遂行し、22報の論文報告、ならびに16件の招待講演（うち国際学会は6件）を行った。また、分子進化分野では、クリプト生物群とフォルニカータ生物群の多様性と系統関係の解明を目指し、網羅的発現遺伝子データに基づく大規模系統解析を遂行し、8報の論文報告、ならびに3件の招待講演を行った。全体のその他の業績として、8件の外部資金導入、1件の受賞、1件のプレスリリースがあった。

(5) 地球環境研究部門

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

地球温暖化のプロセスを解明し、将来を予測することは重要であるが、気候モデルによる温暖化予測に反して最近 15 年間の全球平均気温は停滞したままとなっている。これは地球温暖化のハイエイタスと呼ばれている。その原因としては、人為起源の地球温暖化を相殺するように気候システムの自然変動（内部変動）が負の温暖化として重なったためと考えられ

ている。システムの内部変動としては海洋の数十年スケールの変動が注目されているが、大気の数十年変動としては北極振動が最も卓越する内部変動である。そこで、北極振動の成因の力学的解明と地球温暖化との関係についての研究を推進した。また、局地スケールの気候変動を理解するために、街路樹による都市熱環境緩和効果に対する数値実験を行い、街路樹モデルの LES への導入を進めた。

(6) 高性能計算システム研究部門

HA-PACS 及び COMA という 2 種類の演算加速装置における高性能演算プログラミング・言語・アルゴリズム・ライブラリの開発を、各アプリケーション分野との連携を視野に進め、密結合演算加速機構の研究もその一環として展開する。広域分散ファイルシステム Gfarm の一層の性能・機能の拡張を行う。

HA-PACS における GPU 間直接通信機構 PEACH2 の通信ライブラリを整備し、各種実応用に適用可能とした。特に QCD, FFT, CG 法における強スケーリングが実現可能であることを示した。また、HA-PACS における演算加速装置向け並列拡張言語 XcalableACC を開発し、国際会議 SC14 において HPC Challenge Class2 部門において最高性能賞を 2 年連続で受賞した。COMA については実行性能を向上させるのが難しいとされる現行のメニーコアプロセッサにおいて、量子物性研究分野との共同研究により、実時間実空間密度汎関数法コードの性能を大幅に引き上げ、COMA における計算性能をほぼ 2 倍に向上させた。GPU 及びメニーコアプロセッサにおけるグラフ問題及び FFT の最適化をさらに推進した。全国のスパコン共通基盤である HPCI において全国規模で利用されている Gfarm 広域分散ファイルシステムの運用を安定化させ、高速なアトリビュートアクセス機能実装や性能の一層の向上を図り、国内の計算科学研究ユーザの研究に貢献した。

(7) 計算情報学研究部門

データ基盤分野では、ビッグデータ利活用に資する管理・分析技術やデータ連携技術の高度化等に取り組む。また、科学データの高度利用基盤に関する研究開発を他部門と連携して推進する。計算メディア分野では、人介在型データ解析に、実世界の 3 次元情報を取り込むことにより、計算メディアの有効性を検討する。また、映像メディアを用いた可視化技術を他部門の科学データに適用するなどの連携をはかる。

データ基盤分野では、ビッグデータ利活用に資する管理・分析技術やストリーム OLAP やメタデータ推定等のデータ連携技術の高度化に取り組むと共に、GPU を活用したデータマイニング・知識発見や XML・Web プログラミング等の研究を推進した。また、ゲノムデータ管理等の応用的な研究開発を他部門と連携して遂行した。計算メディア分野では、映像・画像メディアにおいてデータ解析を効率よく行えるインタフェースの方法論について研究を進

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

1-4. 国際連携の年度目標と達成状況

国際研究拠点化に向けた体制構築に係る活動を実施する。具体的には，これまで進めてきたエジンバラ大学および，米国のローレンスバークレイ研究所との連携の下で共同研究を推進し，国際研究拠点化に向けた体制構築を進める。

毎年行っている米国ローレンスバークレイ国立研究所（LBNL）との合同ワークショップを計算科学研究センターにて4月に開催し，高性能計算技術及びこれを用いた計算科学に関し，両研究機関の主要研究部門の研究者が最新研究成果を発表し，議論を行った。これにより，高性能計算／計算科学研究における連携を強化し，共同研究を推進するための共通認識を深めた。1月には，計算科学研究センターと韓国 KISTI（Korea Institute of Science and Technology Information）と合同で，HPC Winter School を Seoul National University にて開催した。3月には，エジンバラ大学にて合同ワークショップを開催し，計算機科学，データ基盤，計算物質科学，計算生命科学について発表と議論を行った。

1-5. 教育の年度目標と達成状況

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

生命環境科学研究科（博士後期）とシステム情報工学研究科（博士前期）に関わる計算科学デュアルディグリー・プログラムの博士前期課程修了者1名を出した。次年度新規に1名が同デュアルディグリー・プログラムを履修予定である。また，コンピュータサイエンス専攻における英語プログラムに新規に2科目が追加となった。

1-6. 改善目標の達成状況

外部評価，監事監査での指摘事項に基づき，本センターがこれまで実績を積んできた研究領域を中心に推進しつつ，各分野の協業・連携体制を強化する。そのための研究者の確保や部門体制をどのようにすべきかについて検討を進める。また，センターの本格的な部局化に向けた取り組みを実施する。

これまで空き枠となっていた応用分野の充実のため，転出枠（2 枠），全学戦略枠（2 枠），

国際テニユアトラック枠（4 枠）により、計算基礎科学、物質・生命、地球環境の新たな人事を行った。これにより、生命分野教授 1 名、物質分野准教授 1 名、原子核分野教授 1 名、宇宙生命分野教授 1 名、素粒子分野国際テニユアトラック助教 1 名、原子核分野国際テニユアトラック助教 1 名、宇宙分野国際テニユアトラック助教 1 名、地球環境分野国際テニユアトラック助教 1 名、の人員配置が行われることとなった。また、システム情報分野における 2 名の教授の転出に伴う後任人事として助教（テニユアトラック）2 名の配置を決定すると共に、宇宙生命分野での任期付助教 1 名の配置を行うこととした。分野間連携と人材育成を強化のため、ミッション再定義に基づき、センターの組織改革を行った。また、センター部局化に向けた取り組みを開始した。

1-7. 特色ある取組の実施状況

(1) 分野間の連携研究の推進

当センターでは、科学諸分野と計算機科学・情報科学の連携・協働による「学際計算科学」を中心的なコンセプトとして研究活動を行っている。共同利用・共同研究拠点として進めている学際共同利用では、(1) 学際開拓プログラム、(2) 重点課題推進プログラム、(3) 共同研究推進プログラムを推進し、分野間連携、計算機利用、プログラム開発サポートなどを行っている。また、素粒子、原子核、宇宙、物質、生命、地球環境分野と超高速計算システム分野が具体的な研究課題についてワーキンググループを設置して定期的に開催し、共同研究を進めている。また、全国的な学際融合の取り組みとして、「宇宙生命計算科学連携拠点」の下で、宇宙、惑星、物質、生命科学の連携を行った。さらに、この拠点の学外連携強化のため、名古屋大学大学院工学研究科との連携協定を締結した。基礎科学分野では「計算基礎科学連携拠点」を 8 機関に拡大し、『ポスト「京」で取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーションの開発・研究開発重点課題』の一つである課題⑨「宇宙の基本法則と進化の解明」が採択され、当センターが代表機関となった。

(2) 計算科学の学外連携の推進

東京大学情報基盤センターとの連携協定の下に、「最先端共同 HPC 基盤施設」を共同設置し、次期導入計算機の資料招請を行うと共に、ベンチマークテストを実施し、仕様策定を行った。平成 28 年 6 月運用開始を目指し、共同利用のための体制構築を進めた。また、理化学研究所計算科学研究機構、株式会社日立製作所との間で「次世代演算加速機構に関する共同研究」の覚書を取り交わし、エクサスケール・コンピューティングの実現に向けた要素技術開拓の共同研究を開始した。

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

センターが推進するクラウドコンピューティングの一つとして、計算素粒子物理学のデータを分野の研究者で共有するシステム JLDG (Japan Lattice Data Grid) を運営している。これまで、主に HPCI 戦略プログラム（分野 5）の支援を受けて運営してきたが、今後は当センターが継続的な支援を行うこととした。現在、筑波大学（計算科学研究センター）を主幹として、高エネルギー加速器研究機構、理化学研究所、東京大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、広島大学、金沢大学の 9 拠点で共同運用し、20 サーバーを結ぶシステムとなっており、ディスク総量は 5PB を提供するまでになっている。また、このシステムを支えるシステムソフトウェアである分散ファイルシステム Gfarm も本センターが開発を行っており、このシステムは HPCI システムの実運用にも供されている。

(4) ミッションの再定義を踏まえた取組状況

ミッション再定義により、センター組織をプロジェクト推進型に改組し、「計算基礎科学連携拠点」や「宇宙生命計算科学連携拠点」などを中心とした学際計算科学推進体制を確立し、新たな人事も行った。この体制の下で、科学諸分野間、ならびに計算機科学との間での連携が一層強化され、成果が上がっている。

(5) チャレンジプランの取組状況

【研究】post-T2K 計画：東京大学情報基盤センターと共同設置した「最先端共同 HPC 基盤施設」においては、大規模計算重点プロジェクトの選定とプロトタイプによるテストを行い、これらに基づき、次期導入計算機の資料招請ならびに仕様策定を行った。

【研究】エクサスケールシステム：エクサスケール・コンピューティングに向け演算加速機構をもつ次世代計算機アーキテクチャの提案を取りまとめ、文科省に報告した。採用には至らなかったが、理化学研究所計算科学研究機構、株式会社日立製作所との間で、エクサスケール・コンピューティングの実現に向けた要素技術開拓の共同研究を継続することとした。

2 自己評価と課題

2-1. 自己評価

全学戦略枠、転出枠、国際テニユアトラック枠によって行った計算基礎科学（素粒子、原子核、宇宙分野）、物質科学、生命科学、地球環境、宇宙生命の計 8 枠の新たな人事は、重点化が望まれていた分野の体制強化につながり、センターの部門再編を実現すると共に、「計算基礎科学連携拠点」および「宇宙生命計算科学連携拠点」における学際的、国際的連携も進展した。共同利用・共同研究拠点としての学際共同利用プログラムは、41 課題を採択し、T2K-Tsukuba、HA-PACS による多くの共同研究が行われ、各分野の重点課題についても着実に研究

が進展した。体制特別経費プロジェクト「エクサスケール計算技術開拓による先端学際計算科学教育研究拠点の充実」の下で HA-PACS に実装導入した密結合並列演算加速機構（TCA 機構）は、各分野での利用が進み初期成果を上げることができた。T2K の後継システムとして導入したメニーコア・システム COMA (PACS-IX) も順調に稼働し、この実績を基に東京大学情報基盤センターと共同設置した「最先端共同 HPC 基盤施設」において次期マシンの仕様策定を行った。「将来の HPCI システムのあり方に関する調査研究」では、エクサスケール・コンピューティングに向け演算加速機構をもつ次世代計算機アーキテクチャの提案を取りまとめ、文科省に報告した。最終的には、ポスト「京」のアーキテクチャとしては採用には至らなかったが、センターと独立行政法人理化学研究所計算科学研究機構、株式会社日立製作所の 3 者間で「次世代演算加速機構に関する共同研究」の覚書を取り交わし、エクサスケール・コンピューティングの実現に向けた要素技術開拓の共同研究を継続することを取り決めた。

2-2. 課題

(1) 部局化の課題

本年度、センター部局化に向けた取り組みを開始したが、センター全体の真の部局化に向けては、解決すべき課題が残っている。教員組織については、教員所属の変更は、関連する系・学域との間の研究活動や運営に支障がないよう十分な準備が必要である。また、教員は学群・研究科の担当を前提とすることから、予算管理については、研究経費、教育経費の別をどのように行うかを検討する必要がある。また、各種委員会の立ち上げが必要となるが、部局としての規模が小さいため、それらの委員会がうまく機能するかも問題となる。事務体制についても、研究（センター）業務、教育（学群、研究科）業務の切り分けが必要であり、またそのために必要な事務の人員体制も再検討の必要がある。これらの課題を解消し、本格的な部局化の実現時期をどこに設定するかは、十分な検討が必要である。これまで、現在センター教員の半数以上は、センター外に居室を持っており、所属変更となる場合の居住空間の確保は喫緊の課題であったが、今年度センター建物増築案が承認され、本部との調整の下で進めることとなった。

(2) 共同利用・共同研究拠点としての位置づけ

全国の共同利用・共同研究拠点の中で、当センターは、唯一の単独型の計算科学の拠点となっている。国策によるエクサスケールに向けた次世代スパコン開発が進み、我が国の HPCI の体制が変化する中で、当センターは、これまで以上に存在感を発揮し、学際計算科学の拠点として、最先端の計算科学をリードしていくことのできる体制を考えていかなければならない。東京大学情報基盤センターと共同設置した「最先端共同 HPC 基盤施設」は、大学間連携による計算科学の推進という新たな取り組みとして重要である。概算要求の厳しい予算措

置の中で、今後、計算科学者と計算機科学者とのコデザインによる計算機開発を大学においてどのように推進していくかは十分な戦略を考える必要がある。そのためには、基礎科学、実験・観測等を含む幅広い分野との連携が重要になると考えられる。

3 各研究部門の報告

I. 素粒子物理研究部門

1. メンバー

教授	藏増 嘉伸、青木 慎也（筑波大学客員教授）、金谷 和至（共同研究員）
准教授	石塚 成人、吉江 友照、根村 英克、山崎 剛（共同研究員）
講師	谷口 裕介
助教	大野 浩史（国際テニュアトラック）
研究員	浮田 尚哉、佐々木 健志、滑川 裕介
学生	大学院生 9 名、学類生 3 名

2. 概要

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

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

3. 研究成果

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

分野5「物質と宇宙の起源と構造」の戦略目標は、ビッグバンに始まる宇宙の歴史に於ける、素粒子から元素合成、星・銀河形成に至る物質と宇宙の起源と構造を、複数の階層を繋ぐ計算科学的手法で統一的に理解することにある。この目標を目指して4つの研究開発課題が設定されており、そのうちの 하나가「格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定」である。本課題が目指すものは、格子QCD計算の微細化とマルチスケール化を鍵とする新しい展開である。微細化とは、アイソスピン対称性の破れの効果を取り入れた計算や、低エネルギーのハドロン構造計算を意味する。他方、マルチスケール化とはQCDを用いて核子を複数作ることによって核子間の有効相互作用を調べたり、更には核子の束縛状態である原子核の直接構成を行うことを意味する。前者はHAL QCD Collaborationが取り組んでいるアプローチであり、後者は藏増、山崎を中心としたグループによって推進されている（後述）。

(1) 格子 QCD による物理点でのバリオン間相互作用の決定

平成24年度秋の「京」の共用開始以降、継続的に実行していたゲージ配位生成が終了した。DDHMC (Domain-Decomposed Hybrid Monte Carlo) 法を用いて、 96^4 の格子サイズ、0.1 fm程度の格子間隔を持つ、2+1フレーバー ($m_u=m_d \neq m_s$) QCDのゲージ配位を生成した。生成されたゲージ配位は5分子動力学時間毎に保存し、ネットワークを通じて筑波大学へ転送し、HA-PACS (計算ノード数332、GPU部ピーク演算性能1.048Pflops、CPU 部ピーク演算性能0.118Pflops) を用いてハドロン質量などの基本物理量の測定を行っている。図1はこれまで得られた物理点でのハドロン質量の計算結果を実験値と比較したものである。ここでは、クォーク質量 ($m_u=m_d \neq m_s$) と格子間隔を決めるための3つの物理量として、 π 中間子質量 (m_π)、K中間子質量 (m_K)、 Ω バリオン質量 (m_Ω) を採用している。

まだすべてのゲージ配位の解析が終了したわけではないが、安定粒子（強い相互作用で崩壊しない）は実験値と誤差の範囲で一致しているのに対して、不安定粒子（強い相互作用で崩壊する ρ や Δ など）は、誤差の範囲を超えて実験値との有意なズレが見て取れる。これは、現在採用しているハドロン質量の計算方法が不安定粒子に対しては有効でないことを表しており、これまで長い間期待されていたことであるが、今回初めて確認に成功した。ハドロン質量の計算と並行して、擬スカラー中間子の崩壊定数、カイラル摂動論における低エネルギー定数、核子のシグマ項、ハドロンの各種形状因子などの様々な物理量の計算を行っており、興味深い結果を得ている。

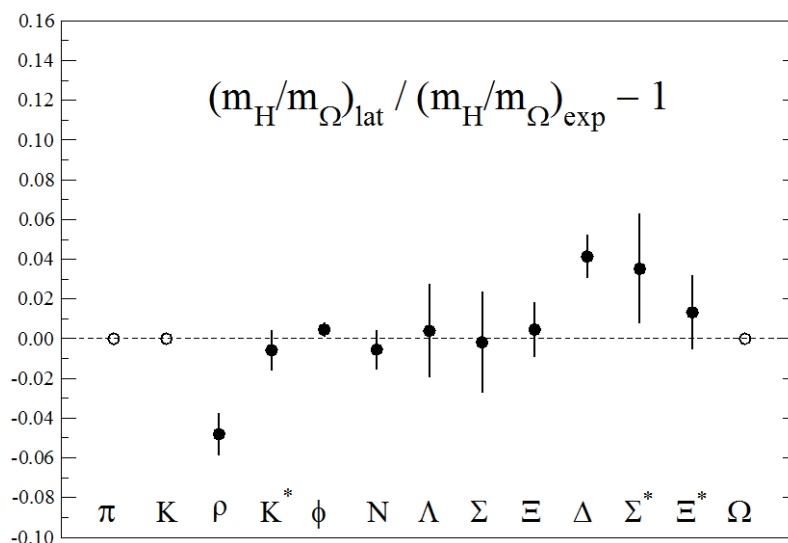


図1：2+1フレーバー格子QCD計算で得られたハドロン質量と実験値との比較。白抜きシンボルはクォーク質量と格子間隔を決めるための物理インプットを表す。

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

藏増、山崎は理研計算科学研究機構（AICS）の宇川副機構長との共同研究により、2010年世界で初めて格子QCD によるヘリウム原子核の構成に成功し、そのうち2核子系の束縛状態である重陽子の構成にも成功した。これらの計算は、コストを抑えるためにクエンチ近似かつ重いクォーク質量を用いた試験的なものであったが、その後、真空偏極効果を取り入れた2+1フレーバーQCDシミュレーションを行い、近似を排したより現実世界に近い状況でのヘリウム原子核および2核子系の束縛エネルギー計算に成功した。ただし、この計算は π 中間子質量0.5 GeV相当のクォーク質量を用いたものであり、物理点（ π 中間子質量0.14 GeVに相当）よりもかなり重い。そのため、物理点へ向けたクォーク質量依存性を調べるために、 π 中間子質量0.3 GeV相当のクォーク質量での計算を遂行し、本年度結果を論文として発表した（論文A-1）。図2は ^4He 原子核の束縛エネルギーのクォーク質量依存性をプロットしたものである。 π 中間子質量0.5 GeVでの結果と0.3 GeVでの結果を比較すると、誤差の範囲を超えた顕著なクォーク質量依存性は認められない。現在、「京」で生成された96⁴格子サイズのゲージ配位を用いた物理点での軽原子核束縛エネルギー計算に取り組んでいる。

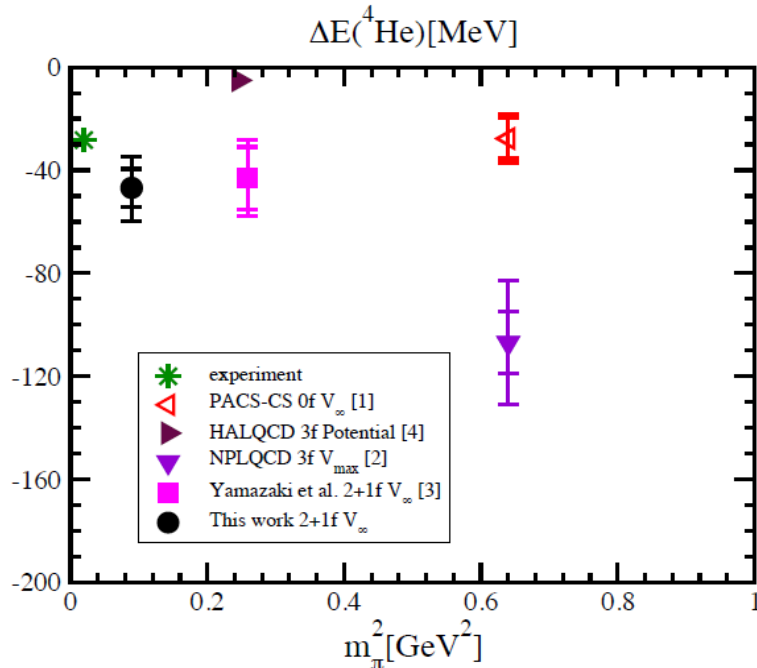


図2: ${}^4\text{He}$ 原子核の束縛エネルギーの π 中間子質量依存性。白抜きシンボルはクエンチ近似の結果を表す。

【3】 K 中間子崩壊幅の研究 (石塚、吉江)

素粒子標準模型には、昔からの未解決な問題で、かつ理論の検証において極めて重要な問題が残されている。K中間子崩壊での $\Delta I=1/2$ 則の解明と、CP非保存パラメータ (ϵ'/ϵ) の理論からの予測である。これらの問題には、K中間子が二つの π 中間子に崩壊する場合の崩壊振幅の計算が必要である。石塚、吉江らは、格子QCDにより崩壊振幅を数値計算し、問題の研究を行った。 π 中間子質量 $m_\pi=280$ MeVのもとで、終状態の π 中間子が運動量をもたない場合の計算を完成させた(文献3)。この計算により、 $\Delta I=1/2$ 則の兆候を見ることができた。CP非保存パラメータ (ϵ'/ϵ) に関しては統計誤差が非常に大きく、計算の改善が必要である。現在、二体 π 中間子の演算子の改良を検討中である。また、この計算を運動量をもつ現実の場合に拡張し、より信頼性の高い振幅を求めることを考えた。具体的には、 π 中間子質 $m_\pi=250$ MeVに下げ、格子の一辺を1.5倍にし、運動量を持たせる方法をとる。現在、この場合の崩壊振幅の計算を行う為に、あらたにゲージ配位を生成している。また、本格計算に向けた試験計算を行っている。

【4】 トポロジカルチャージの研究 (滑川)

滑川は、トポロジカルチャージの系統的比較研究を行い、トポロジカルチャージ定式化間における結果の同等性を定量的に明らかにした（論文B-3）。トポロジカルチャージは量子色力学において真空を特徴付ける重要な物理量である。但し、その定式化は数種類存在しており、定式化間における結果の一致・不一致が不明であった。本研究により、単純なグルーオンの演算子及び平滑化を用いた場合、厳密な指数定理の結果との一致度が70-80%に留まる事が分かった。また、演算子及び平滑化の改良により、一致度を90%強に引き上げ可能である事を示した。

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

金谷らは、新潟大学江尻准教授、広島大学梅田准教授、理化学研究所初田主任研究員らとの共同研究で、Wilson型クォークによる有限温度・密度QCDの研究を引き続き推進した。改良Wilsonクォークによる $N_f=2+1$ QCDの物理点近傍における状態方式のための配位生成を継続して推進するとともに、状態方程式の評価に必要なベータ関数をQCDの多変数空間で精度よく決定する手法として、多重点再重み付け法によるベータ関数評価の試験を行った。

(1) 多重点再重み付け法による QCD ベータ関数

有限温度・有限密度 QCD の状態方程式や物理量の温度・密度依存性を計算するためには、理論のパラメータ空間内の「等物理線 (Line of Constant Physics: LCP)」(同一の物理系を様々な格子間隔で表現)と、LCP 上でパラメータの格子間隔依存性をあらわす「ベータ関数」の情報が必要である。QCD は、ゲージ結合定数 (β) と複数のクォーク質量 (κ) や化学ポテンシャル (μ) を基本パラメータとして持つが、多次元のパラメータ空間で LCP やベータ関数を精度よく評価することは簡単ではない。それを解決するために「多重点再重み付け法 (multi-point reweighting 法)」を検討し、密度ゼロの $N_f=2$ QCD の場合に試験研究を行った (論文 B-4)。

系のパラメータ依存性を調べる有力な方法として、再重み付け法 (reweighting 法) がよく使われるが、有限温度・有限密度 QCD の研究で要求されるような、パラメータ空間の広い領域に応用することには困難が伴う。図 3 左に、改良プラケット P の κ 依存性を示す。黒丸は 3つのシミュレーション点における観測結果で、紫、緑、青は、それぞれのシミュレーション点のデータを使って再重み付け法を使って計算した P の κ 依存性の予言をあらわす。パラメータを大きく動かすと観測結果を再現できないことがわかる。誤差評価も信頼性が低く、このまま LCP やベータ関数の計算に使うことは難しい。これは、再重み付け法に必要なヒストグラムを、各シミュレーション点での期待値近傍でしか信頼できる評価ができず、期待値が大きく動く事に対応するようなパラメータの大きな変化に対応できない事による(「重ね合わせ問題」)。

多重点再重み付け法では、重ねあわせ問題を解決するために、複数のシミュレーションデータを統合して再重み付けする（方法の詳細は論文 B-4 を参照）。図 3 左の赤線で、3つのシミュレーション点のヒストグラムを合わせて多重点再重み付け法により計算した結果を示す。観測結果（黒丸）をスムーズに繋ぎ、シミュレーション点の間の領域も含め、広いパラメータ領域で信頼性と精度の高い結果が得られた。

図 3 中央と右に、再重み付け法に必要なヒストグラムの β および κ 依存性を示す。 β および κ の様々なシミュレーション点のデータを組み合わせることにより、LCP とベータ関数の計算に必要な、パラメータ空間の広い領域で精度の高い結果が得られることがわかる。それに基づいて計算した $N_f=2$ QCD の LCP とベータ関数の結果の一部を、図 4 に示す。いずれも十分な精度で評価することが出来た。

この手法の $N_f=2+1$ QCD や有限密度 QCD への応用を計画している。

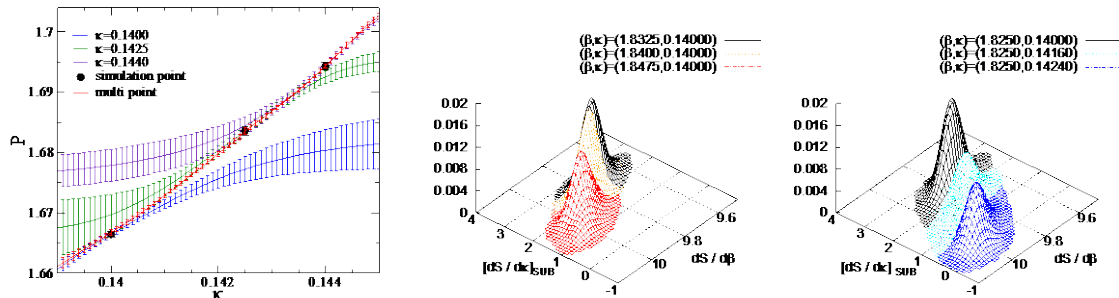


図3： $N_f=2$ QCDにおける多重点再重み付け法の試験研究（論文B-4）。左図：改良プラケット $P=c_0W^{1x1}+2c_1W^{1x2}$ の期待値の $\beta=1.825$ における κ 依存性。黒丸は、3つのシミュレーション点における観測結果。紫、緑、青は、3点それぞれのデータによる単純な再重み付け法の結果。パラメータを大きく動かすと単純な再重み付け法では観測結果を再現できないことがわかる。赤は、3点のデータを多重点再重み付け法により結合して計算した結果。中央および右図：再重み付け法で重要な、作用の β 微分、 κ 微分のヒストグラムのパラメータ依存性。様々なシミュレーション点のデータを組み合わせることにより、重ねあわせ問題を回避してパラメータ空間の広い領域をカバーすることができる。

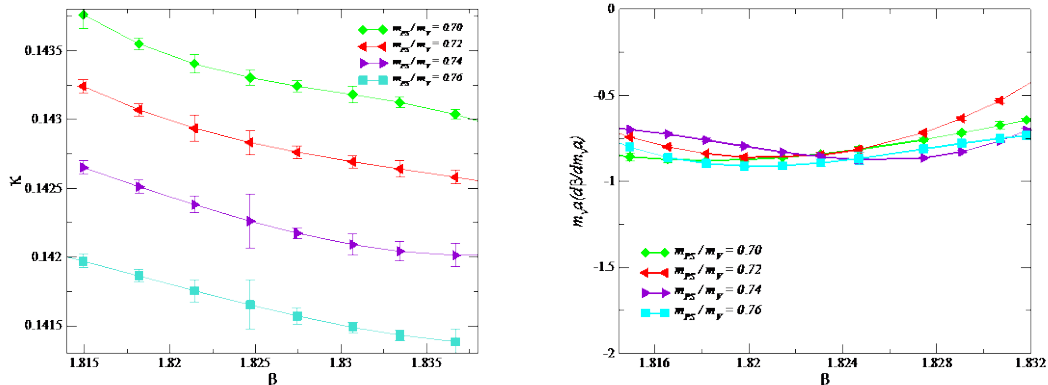


図4：多重点再重み付け法による $N_f=2$ QCDの等物理線（左図）と、ゲージ結合パラメータに関するベータ関数（右図）（論文B-4）。

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

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

(1) 格子 QCD によるストレンジネス及びチャームの揺らぎとそれらの間の相関の研究

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

大野は、BNL-Bielefeld-CCNU Collaborationにおいて、2+1フレーバーのHighly Improved Staggered作用を用いた格子QCDシミュレーションにより、ストレンジやチャーム等、様々な保存電荷の揺らぎのキュムラントを計算する共同研究を行った（論文A-2、A-3）。そして、得られた結果を、相互作用の無い様々なハドロンからの寄与の重ね合わせに基づく、hadron resonance gas（HRG）モデルで計算されたものと比較した。図5 に示す通り、実験的に見つかったハドロンを用いるだけでは、HRGモデルの結果は我々の結果を記述できなかった。一方で、ある種のクォークモデルにより予言される、未発見のハドロンまで含めたHRGモデルは、カイラルクロスオーバー温度以下において、我々の結果をよく再現した。このことから、カイラルクロスオーバー温度近傍で、ストレンジハドロンやチャームハドロンは消失していることが示唆された。加えて、実験的に見つかっていないハドロンの存在も示唆された。

(2) 有限温度格子 QCD によるチャーモニウム・ボトモニウム相関関数の研究

チャームやボトムといった、重いクォークとその反クォークの束縛状態であるクォーコニウムは、RHIC や LHC での相対論的重イオン衝突実験におけるクォーク・グルオン・プラズマ（QGP）生成を確かめるプローブのひとつである。従って、クォーコニウムの高温媒質中での振る舞いを理論的に調べることは、QGP の性質を理解し、実験結果を説明する上で重要である。また、近年では、クォーク・グルオン・プラズマの流体力学的性質に関する研究も盛んに行われており、重いクォークの輸送等についても理論的理解が必要となっている。

これらのことを第一原理から調べるため、本研究では有限温度における格子QCDによる数値シミュレーションを用いて、クォーコニウムの相関関数を計算し、その温度依存性を調べた。

その際、相関関数からより多くの情報を引き出せるよう、格子サイズとして $96^3 \times 24$ から $192^3 \times 96$ と非常に大きなものを用いた。また、計算コストを抑えるため、動的クォークの効果を見逃したクエンチ近似を適用した。さらに、チャームからボトムまでクォーク質量を変化させ、チャーモニウムとボトモニウムの違いを調べた（論文B-5）。

まず、図6に、ベクターチャネルの空間的相関関数より計算された基底状態の遮蔽質量の温度依存性を示す。ここで、ゼロ温度において遮蔽質量はクォーコニウムの質量と等しくなるのに対して、高温の極限では自由クォークの場合に収束する。チャーモニウムの場合を見ると、温度上昇に伴い、遮蔽質量も上昇しており、媒質の影響を強く受けていることが分かった。一方、ボトモニウムの場合は、温度依存性が比較的小さく、高温でも安定に存在していることが示唆された。次に、クォーコニウムのスペクトル関数の温度変化を間接的に調べるため、 $1.4T_c$ (T_c は臨界温度) における通常の時間的相関関数と、 $0.7T_c$ における時間的相関関数を用いて作られたreconstructed correlatorとを比較した。通常の相関関数をreconstructed correlatorで割った量を調べた結果、虚時間 τ の大きい領域で大きな変化が見られた。この変化は、温度変化に伴ってスペクトル関数の低周波数領域に大きな変化が現れたことに対応すると考えられる。これは、スペクトル関数のゼロ周波数近傍にtransport peakが現れたことによると予想された。このことから、スペクトル関数のその他の部分の温度変化が比較的小さいと仮定して、通常の相関関数からreconstructed correlatorを引くことで、transport peakの寄与を抜き出し、これより重いクォークの拡散係数を概算した。その結果は、先行研究と矛盾のないものだった。

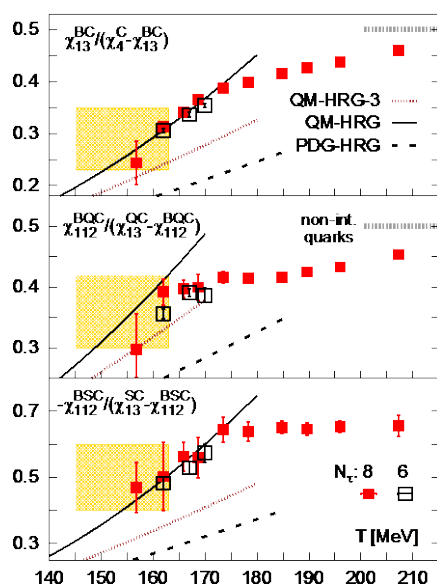


図5：ストレンジネス・チャーム等の揺らぎの様々なキュムラントの比。PDG-HRG、QM-HRG及びQM-HRG-3はそれぞれ、実験的に見つかったハドロンを用いたHRGモデルの結果、ある種のクォ

ークモデルで予言されるハドロンまで含めたHRGモデルの結果及び、同じクォークモデルが予言する3GeV以下の質量を持つハドロンを含めたHRGモデルの結果。

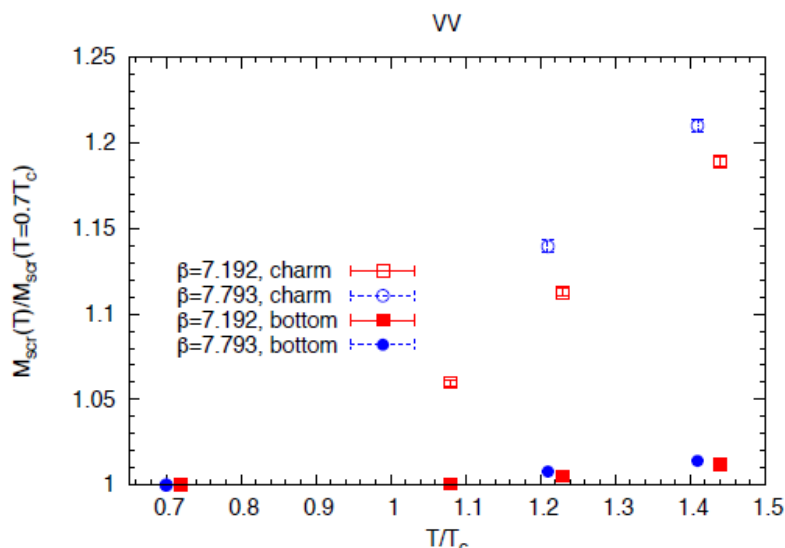


図6：ベクターチャンネルの遮蔽質量の温度依存性。横軸は温度を臨界温度 T_c で規格化、縦軸は $0.7T_c$ の遮蔽質量で規格化したものである。チャーモニウムの結果を中抜き、ボトモニウムの結果を中塗りのシンボルで表す。また、粗い格子間隔の結果を四角、細かい格子間隔の結果を丸で表す。

【7】 3フレーバーにおける有限温度・有限密度QCD（蔵増）

温度 T とクォーク化学ポテンシャル μ を関数とするQCDの相図を確定させることは、格子QCDシミュレーションにおける最大の目標の一つである。蔵増は、理研計算科学研究機構(AICS)の宇川副機構長、中村研究員、金沢大学武田助教および米国アルゴンヌ国立研究所のJin研究員らとの共同研究のもと、0(a)改良を施しWilson-Cloverクォーク作用とIwasakiゲージ作用を用いて、 T 、 μ 、クォーク質量 m_q のパラメータ空間における3フレーバーQCDの臨界線の決定に取り組んでいる。まず、最初のステップとして $\mu = 0$ （密度ゼロ）における臨界終点を決定した（論文A-4）。われわれが用いた方法は、尖度(kurtosis)交叉法と呼ばれる有限サイズスケーリング解析手法の一種であり、一次相転移領域における物理量分布の尖度とクロスオーバー側の対応物が、異なる空間体積依存性を持つ性質を利用している。「時間方向」の格子サイズを $N_t = 4, 6, 8$ と変化させることによって格子間隔依存性を調べ、連続極限における臨界終点の温度として $T_E = 133(2)(1)(3)\text{MeV}$ 、また、擬スカラー中間子質量として $m_{PS} = 306(7)(14)(7)\text{MeV}$ という値を得た（図7参照）。本研究は、世界で初めて3フレーバーQCDにおける臨界終点の決定に成功したものであり、QCDの相構造を理解する上での非常に重要な礎石となる。

次のステップとして、われわれは本研究を有限密度領域 $\mu \neq 0$ へと拡張した。具体的には、

「時間方向」の格子サイズを $N_t=6$ に固定し、 $\mu/T-(m_{PS})^2$ 平面における $\mu=0$ 近傍での臨界線の曲率を決定した（論文A-5）。有限の化学ポテンシャル $\mu \neq 0$ における臨界終点の決定は、 $\mu=0$ の場合と同様である。また、 $\mu \neq 0$ におけるクォーク行列式からの位相の寄与は、reweighting法によって取り入れた。更に、幅広い μ の領域に対する臨界線の振る舞いを調べるために、マルチパラメータreweighting法を採用した。図8は、 $\mu/T-(m_{PS})^2$ 平面における臨界線の振る舞いをプロットしたものである。赤シンボルと青シンボルの違いは、格子間隔を決めるための物理インプットの選択の任意性による不定性を表している。臨界線が曲率を持っていることは明らかであるが、定量的に評価するために以下の関数形でフィットを行った結果、 $\alpha_1=1.924(60)$ （赤シンボル）、 $\alpha_1=2.148(39)$ （青シンボル）という値を得た。

$$\left(\frac{m_{PS,E}(\mu)}{m_{PS,E}(0)}\right)^2 = 1 + \alpha_1 \left(\frac{\mu}{\pi T_E(0)}\right)^2 + \alpha_2 \left(\frac{\mu}{\pi T_E(0)}\right)^4$$

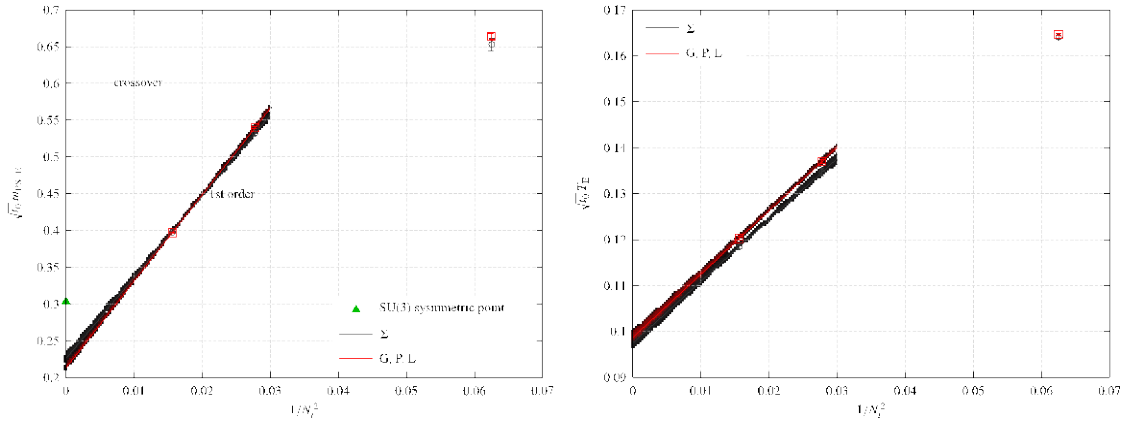


図7：臨界終点における擬スカラー中間子質量（左）と転移温度（右）の $1/(N_t)^2$ 依存性。

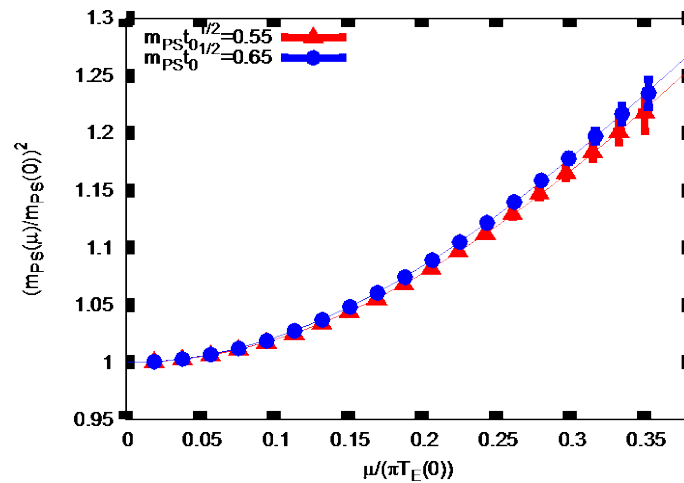


図8： $\mu/T-(m_{PS})^2$ 平面における臨界線。赤シンボルと青シンボルは、格子間隔を決めるための異なる物理インプットを表す。

【8】 カノニカル法を用いた有限密度 QCD の研究（谷口）

有限密度格子QCD には複素作用の問題、及びその派生としての符号問題と呼ばれる未解決の問題がある。2014 年度はこの複素作用の問題を直接回避する方策として、カノニカル分配関数をフガシティー展開の係数として直接計算するカノニカル法と呼ばれる手法を採用した。更に重いクォークに対して有効なhopping parameter展開を採用することで、広い温度領域でカノニカル分配関数の計算を行った。物理量の計算としては、求めたカノニカル分配関数を用いてグランドカノニカル分配関数を実化学ポテンシャルの関数として再構成したことが挙げられる。その結果、クォークの閉じ込め相である低温側から出発して、実化学ポテンシャルを上げて行った時の各種物理量の振る舞いを見ることができた（図9）。そこからはクォークの閉じ込め－非閉じ込め相転移（図9 左）や自発的に破れているカイラル対称性が回復する相転移の様子（図9 右）が見て取れた。特に明らかな閉じ込め相において、比較的大きな化学ポテンシャルでの相転移現象を捉えることができたことは特筆すべき点であると思われる。

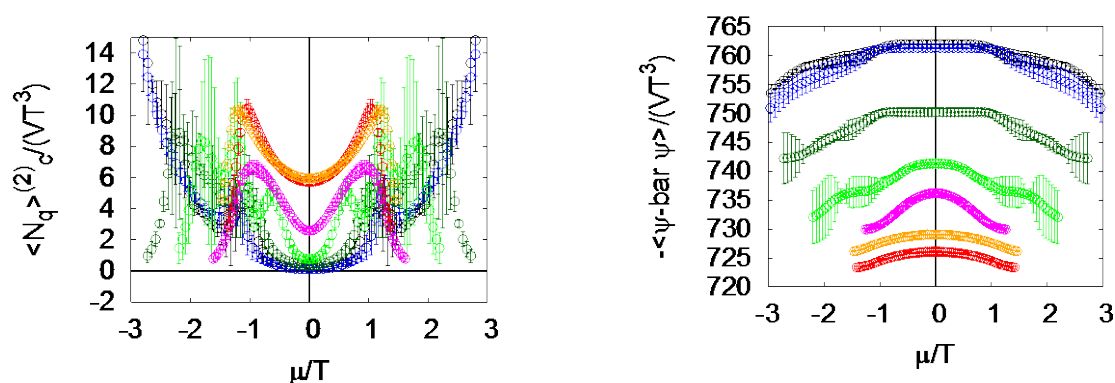


図9：左図：クォーク化学ポテンシャル μ/T の関数としてのクォーク数密度の2次キュムラント $\langle (\hat{N})^2 \rangle_c / (VT^3)$ 。グラフは上から高温側： $\beta=2.1$ (orange)、1.9 (red)、1.7 (magenta)、1.5 (green)、1.3 (dark green)、1.1 (blue)、0.9 (black)：低温側。右図：グランドカノニカル分布から求めたクォーク化学ポテンシャル μ/T の関数としてのカイラル凝縮 $-\int d^3x \langle \bar{\psi}\psi \rangle / (VT^3)$ 。グラフの色と β の関係は左図と同じ。ただし、上側が低温、下側に行くほど高温側。

【9】 テンソルネットワーク形式に基づく格子ゲージ理論の研究（蔵増）

格子QCDを用いた数値計算の最大の特徴は非摂動的な第一原理計算であり、それは強い相互作用の定量的理解を可能とする。過去30 年以上にわたって継続的なアルゴリズムの開発・改良が行われた結果、スーパーコンピュータの著しい性能向上と相俟って、現在では自然界の u 、 d 、 s クォーク質量（物理点）を用いたシミュレーションや質量数4以下の軽原子核の束縛エネルギー計算も可能となりつつある。このような成功の一方で、長年にわたり本質的問題

として認識されながらも、効果的な解決策が見出されることなく取り残されたままの課題が存在する。その代表的かつ重要な例として、以下の3 つが挙げられる。

i) 負符号問題

現在の典型的な格子QCD計算である2+1フレーバーQCDシミュレーションでは、sクォークは独立に扱うが、u、dクォーク質量は人為的に縮退させる ($m_u=m_d$)。この操作により、軽い質量のクォークに起因する負符号問題をアルゴリズム的にうまく回避することが可能となる。もし、仮にu、dクォークを独立に扱おうとすると ($m_u \neq m_d$)、現在広く用いられているモンテカルロアルゴリズムでは、分配関数(経路積分)におけるBoltzman weightの部分に負符号の寄与が現れ、確率解釈が困難になってしまう。

ii) 複素作用を持つ系のシミュレーション

格子QCDにおいてStrong CP問題や有限密度QCDを扱う場合、作用が複素数になってしまう。具体的には、前者の場合は通常のQCD作用に付加する θ 項が複素数となり、後者の場合は非ゼロ化学ポテンシャル μ の導入が複素作用の問題を引き起こしてしまう。格子QCDを用いてStrong CP問題や有限密度QCDの物理を系統的に研究するためには、複素作用を持つ分配関数の精確な数値評価は避けて通れない課題であるが、いまだ効果的な解決策が見つかっていないのが現状である。

iii) フェルミオン系の計算コスト

格子QCDシミュレーションが多大な計算コストを必要とすることはよく知られた事実だが、その原因はモンテカルロ法においてグラスマン数を直接扱えないことに起因する。現在広く用いられているアルゴリズムでは、QCD作用におけるフェルミオン場を一旦解析的に積分し、その後改めてボゾン場を用いてQCDの有効作用を構築し、そのBoltzman weightをもとにモンテカルロ計算を行っている。しかしながら、ボゾン場で記述されたQCDの有効作用は非局所的なものとなってしまう(オリジナルなQCD作用は局所的)、そのシミュレーションに要する計算コストは膨大なものとなる。

以上の3つの問題の原因を考察してみると、いずれもモンテカルロ法の本質的な欠点に起因していることがわかる。すなわち、現在の格子QCD計算が抱える重要な問題は、そのベースとなるアルゴリズムとしてモンテカルロ法を採用している限り、根本的解決は難しい。

一方、他分野に目を転じてみると、物性物理(あるいは統計基礎論)分野においても分配関数を用いた数値計算が行われているが、比較的シンプルなモデルを扱っているということもあり、格子QCDよりもはるかに多様なアルゴリズムが開発・試行されている。そのような状況のもと、2007年LevinとNaveにより、テンソルネットワーク形式に基づいたテンソル繰り込み群という古典格子スピンモデルに対する新たな計算アルゴリズムが提案された。この手法では、まず分配関数を局所的(格子点)に定義されたテンソルの積で書き表す。

$$Z = \sum_{i,j,k,\dots} e^{-S(i,j,k,\dots)} = \sum_{i,j,k,\dots} T_{ijkl} T_{imno} T_{jpqr} T_{ksuv} T_{lwxy} \cdots$$

ここでは2次元正方格子を仮定しているが、それ以外の場合でも、相互作用が局所的であれば必ず上式のようなテンソルネットワーク形式で表せることが知られている。もちろん、このテンソル積の添字に関する縮約をすべて実行してしまえば、厳密な分配関数 Z の値が得られるが、それでは自由度が巨大過ぎて、たとえ最先端のスーパーコンピュータであっても計算可能な格子サイズは非常に小さなものに限られる。そのため、LevinとNaveは、特異値分解に基づいた重要度の高い自由度の選択とブロック変換の一種による疎視化を組み合わせた手続きを反復することにより、分配関数 Z の値そのものを高精度で計算することが可能なアルゴリズムを提唱した。なお、特異値分解とは行列の近似手法であり、画像データの圧縮など幅広い分野で応用されている。このアルゴリズムの最大の長所は、符号問題や複素作用の問題がないことであり、欠点はモデルの高次元化に伴ってテンソルの添字が増えることによる計算コストの増大である（注：ただし、計算コストに関しては、一辺の長さ L の d 次元格子体積 L^d に対して $d \log L$ でしか増大しないという大変魅力的な側面もある。ちなみに、4次元格子QCD計算において、現在広く用いられているモンテカルロ法をベースとしたアルゴリズムでは、計算コストの体積依存性は L^5 である）。その後、物性物理分野の研究者によりテンソル繰り込み群のアルゴリズム改良が提案され、実際に幾つかの2次元スピン系と3次元イジングモデルの高精度計算に応用された。

蔵増と理研計算科学研究機構（AICS）の清水特別研究員は、先ず論文A-6においてテンソル繰り込み群をグラスマン数も扱えるように拡張し（グラスマンテンソル繰り込み群）、世界で初めてフェルミオン入りのゲージ理論への応用を行った。具体的には、グラスマンテンソル繰り込み群を用いて1 フレーバーの2次元格子Schwingerモデル（2次元格子QED）における相構造を調べた。相転移に対しては、Lee-Yang/Fisherゼロの有限サイズスケーリング解析を行い、フェルミオンのゼロ質量極限における2次相転移を確認し、その臨界指数の高精度計算を行うことによって、ユニバーサリティクラスを同定した。この論文において、テンソル繰り込み群がグラスマン数に対しても定式化可能であり、必要な計算コストがボゾン系の場合と変わらないことおよびフェルミオン系に起因する負符号問題がないことを示した。また、論文A-7では、論文A-6中の作用に θ 項を付け加えた系の相構造を調べた。この系では $\theta = \pi$ 場合、フェルミオン質量がある有限の値以上であれば一次相転移が起きることが期待されている。われわれは、論文A-6と同じ解析手法を用いて、期待されている一次相転移を確認した。さらに、臨界終点における2次相転移の臨界指数の高精度計算を行うことによって、そのユニバーサリティクラスを同定した。これにより、グラスマンテンソル繰り込み群が、複素作用の

分配関数も精確に取り扱えることを示した。以上2本の論文において、われわれは2次元Schwingerモデルを用いて、グラスマンテンソル繰り込み群が、現在の格子QCD計算が持つ3つの重要問題をすべて解決していることを示すことに成功した。

【10】 素粒子標準模型を超えた理論の探索（山崎）

ウォーキングテクニカラー模型は素粒子標準模型を超えた理論の有力な候補である。この模型は、強結合ゲージ理論のダイナミクスにより、素粒子標準模型では手で与えられていた電弱対称性の自発的破れの起源を説明できる。しかし、この模型を構築するために必要な強結合ゲージ理論には、近似的共形対称性を持つなど、特殊な条件が課されている。山崎は名古屋大学素粒子宇宙起源研究機構（KMI）を中心としたLatKMI Collaborationの研究者、山脇幸一特別教授、青木保道准教授らと共に、格子ゲージ理論を用いた数値計算からそのような条件を満たすゲージ理論が存在するかの探索を行った。これまでの4、8（論文A-8）、12（論文B-10）フレーバーSU(3)ゲージ理論の研究から、8 フレーバー理論がそれら条件を満たす可能性がある事を示した。特に、論文A-8では、ウォーキングテクニカラー模型ではヒッグス粒子に対応するフレーバー1重項スカラー中間子が、 π 中間子と同程度に軽くなるという結果を得た。この結果は、8フレーバー理論がウォーキングテクニカラー模型の理論として好ましい性質を持っている事を示唆している。

【11】 コンフォーマル理論の研究（吉江）

吉江は、コンフォーマル理論の数値的研究を、岩崎（筑波大学・KEK）、石川（広島大学）、中山（Walter Burke Institute）、野秋、Cossu（KEK）と共同で行った。繰り込み群の議論から、i) 赤外固定点（クォーク質量はゼロ）でのメソン伝搬関数の体積依存性に関するスケーリング則を導き、ii) そのスケーリング則を満たす点をサーチする事で、 $N_f=7, 8, 12, 16$ QCDでの赤外固定点を同定した（論文A-9）。

【12】 格子 QCD によるバリオン間相互作用の研究

（HAL QCD Collaboration：青木、根村、佐々木、山田、宮本）

陽子および中性子（核子）を結びつけ、原子核を構成している力（核力）は、現象論的には中間子交換によって生じると考えられているが、その起源をより基本的なクォーク・グルーオンの自由度に基づいて理解すること、とりわけ短距離核力における斥力芯の発現機構を理論的に導くことは、素粒子原子核物理に残された大問題の1つである。根村、佐々木は、京都大学基礎物理学研究所青木教授、理化学研究所初田主任研究員らとHAL QCD Collaborationを結成し、2核子間の波動関数から核子間のポテンシャルを導き出すという方法を応用して、様々な粒子間のポテンシャルを格子QCDの数値シミュレーションで計算してきた。論文A-10では、 $m_\pi \approx 470 \text{ MeV}$ において得られた核力ポテンシャルの、有限核（ ^{16}O および ^{40}Ca ）への適用を行

った。論文A-11では、核力のスピン軌道力成分を格子QCD計算から導出できることを具体的に示した。論文A-12は、HAL QCDの方法を用いて、核子と Ω 粒子との間に働くポテンシャルを計算したものである。以下では、根村、佐々木、及び青木教授の学生である山田、宮本の2014年度の研究成果を紹介する。

(1) 4点相関関数のGPGPU対応高速計算コードの開発および格子QCDに基づく核力ポテンシャルによる精密少数系の研究

物理点での格子QCDによる（一般化）核力ポテンシャルの導出に備えて、この計算の基本部分となるNambu-Bethe-Salpeter（NBS）波動関数の格子QCD計算を効率よく高速に行うためのアルゴリズムの開発並びに実際に大型計算機で高速に動くプログラムの開発を進めた。とりわけ今年度は、演算加速器（GPGPU）を搭載した大型計算機であるHA-PACS上で、2+1フレーバー格子QCD計算のもとで4点相関関数を効率よく計算するためのアルゴリズムの開発ならびに、複数のGPGPUを利用可能な、MPI+OpenMP+CUDAによるハイブリッド並列化されたC++プログラムを作成した。また、これまでに得られている正パリティの核力ポテンシャル（中心力、テンソル力）に加え、負パリティの核力（中心力、テンソル力、スピン軌道力）を含んだ格子QCDによる核力ポテンシャルを用いた ^4He の精密計算を行った。

(2) 結合チャンネルポテンシャル法を用いたハイペロン力の研究

佐々木は、従来のHAL QCD Collaborationによるポテンシャルの導出方法を結合チャンネルSchrödinger方程式に適用しストレンジネスを含む2体バリオン系のポテンシャル行列を導出してきた。本年度は、これらをさらに拡張し、スピン3重項状態におけるテンソル力も含めた結合系ポテンシャルの導出に成功した。PACS-CS Collaborationによって生成されたパイオン質量が701MeVに対応する2+1フレーバーゲージ配位を使って計算した $\Lambda\text{N}-\Sigma\text{N}$ 結合系のポテンシャルを図10に示す。今度はこれらのポテンシャルを使って、散乱観測量の計算を行う予定である。

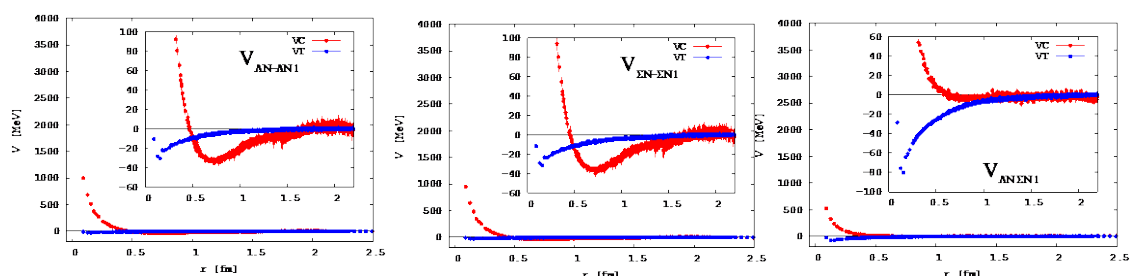


図10： $\Lambda\text{N}-\Sigma\text{N}$ 結合チャンネルポテンシャル。赤は中心力、青はテンソル力を表す。

(3) 格子QCDを用いた $\Omega-\Omega$ 相互作用の研究

ストレンジクォークを含むハイペロン間の相互作用の研究は自然を理解する上で重要かつ

実験と理論の両側が互いに協力して研究されている分野である。特にストレンジクォークを多く含む Ω バリオンは実験が難しく格子QCDを用いた理論的導出が重要な手掛かりになると期待されている。山田らは、HALQCD法を用いて Ω - Ω 間のポテンシャルを計算した。これまでの計算では体積が小さく（格子の一边1.9 fm、 π 中間子質量875MeV）ポテンシャルがシミュレーション空間に入りきっていない可能性があるものであった。また大きい体積の結果では統計が少なくシグナルが統計エラーに埋もれていた。本年度は大きい体積（格子の一边2.9 fm、 π 中間子質量701MeV）での統計を上げポテンシャルを計算した。計算の結果を図11に示す。図より近距離には斥力芯があり、中距離には強い引力ポケットがある事がわかる。

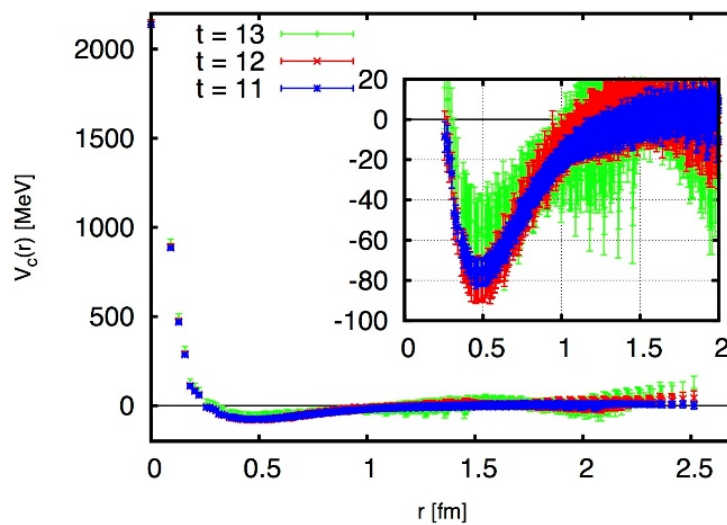


図11： Ω - Ω の中心力ポテンシャル（色の違いはソースとシンクの相対時間）。

(4) Λ_c -N 相互作用の研究

チャームクォークを含む重いバリオンの物理を調べることは、物質世界の謎を解明する上で重要なことである。宮本らは、チャームクォークを含むバリオンのうち最も軽いとされる Λ_c^+ ($J^P=1/2^+$) と核子との間に働く核力ポテンシャルをHAL QCD Collaborationによる方法を用いて数値的に計算した。本研究ではCP-PACS/JLQCD Collaborationsにより生成された2+1フレーバーのゲージ配位（格子の一边1.934(26) fm、 π 中間子質量884.04(81)MeV）を用い、チャームクォークの伝搬関数はストレンジクォークの質量を重く設定することで部分クエンチ近似的に解いた。また、比較のために同じゲージ配位で Λ -N間のポテンシャルも計算した。計算の結果を図12に示す。図より、 Λ_c -N間のポテンシャルが Λ -Nのものに比べて斥力芯が弱いことと、引力が小さいことが分かる。今後得られたポテンシャルを適当な解析関数によって表現し、位相差などの物理量を求めていく予定である。

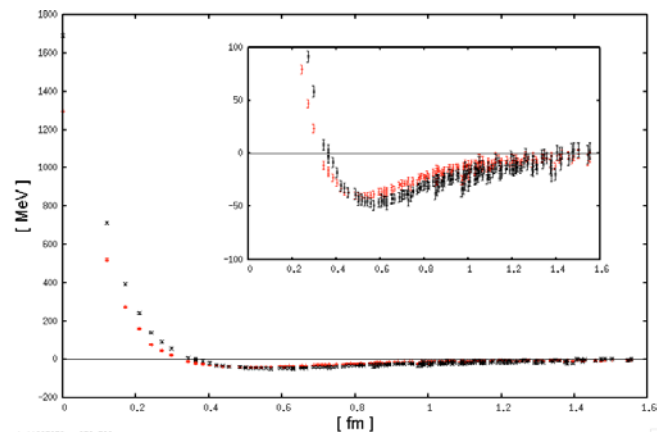


図12： Λ -N（黒）と Λ_c -N（赤）の中心ポテンシャル。

【13】 JLDG の改良と運用（吉江）

吉江は、格子QCD データグリッドJLDG の改良を、建部、天笠(筑波大電子情報) 等と行った。主な改良は、(a) 阪大RCNPでのJLDG FUSE mountの実装、運用開始、(b) Metadata Slave サーバの阪大RCNPへの設置、(c) HPCI共用ストレージ・JLDG連携システムの運用開始、などである。

【14】 格子 QCD 共通コード開発（金谷、滑川、根村、谷口、浮田）

昨年度に引き続き、格子QCD共通コードBridge++の開発を進めた（論文A-13、B-12、B-13）。格子QCD共通コードBridge++は、QCDを含む格子ゲージ理論シミュレーションのための汎用コードセットである。様々な格子作用やアルゴリズムを適用可能で、ノートPCから超並列計算機まで幅広いアーキテクチャに対応している。2012年7月にBridge++ ver. 1.0.0を公開して以降、継続してコードの改善、拡張を行っている（<http://bridge.kek.jp/Lattice-code/>）。素粒子物理研究部門からは、金谷、滑川、根村、谷口、浮田が参加している。本年度は、OpenMPによるスレッド並列化への対応を進めた。また、ゲージ群をSU(3)から一般のSU(N)へと拡張した。これらの変更を含めたBridge++ ver. 1.2.0へのメジャーアップデートが2014年9月に行われた。その後も、コードの細かい改定、改良が進められている。最新版は、ver. 1.2.2である。

4. 教育

【1】 博士論文

1. 趙栄貴、「Improvement of the Brillouin fermion action for heavy quark（重いクォークの物理に向けたブリルアンフェルミオン作用の改良）」

2. 山田真徳、「A study of the Omega-Omega interaction using the central potential in Lattice QCD (格子QCDでの中心力ポテンシャルを用いたオメガバリオン間の相互作用に関する研究)」

【2】 修士論文

1. 酒井慧、「テンソル繰り込み群の開発と応用」
2. 鈴木遊、「カノニカル法を用いた格子QCDにおける高次キュムラントの計算」
3. 寺松宏平、「 $I=2$ $\pi\pi$ 散乱におけるHAL methodでの演算子依存性」
4. 宮本貴也、「格子QCDを用いた Λ_c -N子間相互作用の研究」

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

【1】 受賞

1. 青木慎也、初田哲男、石井理修
「量子色力学の第一原理計算に基づく核力の研究」
平成26年度科学技術分野の文部科学大臣表彰 科学技術賞（研究部門）
2014年4月7日、文部科学省

【2】 外部資金

1. 青木慎也（代表）、高性能汎用計算機高度利用事業費補助金、平成23年度採択、「HPCI戦略プログラム分野5『物質と宇宙の起源と構造』」、441,910千円
2. 青木慎也（代表）、一般受託研究、平成26年採択、『ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発 重点課題⑨宇宙の基本法則と進化の解明』、5,479千円
3. 蔵増嘉伸（分担）、戦略的創造研究推進事業(CREST)、平成23年度採択、「ポストペタスケールに対応した階層モデルによる超並列固有値解析エンジンの開発」、1,035千円
4. 山崎剛（代表）、科学研究費補助金・若手研究(B)、平成25年度採択、「量子色力学を基にしたクォーク多体系としての原子核の研究」、600千円
5. 谷口裕介（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(C)、平成24年度採択、「格子上の非摂動論的な繰り込みの実践」、500千円
6. 浮田尚哉（代表）、科学研究費補助金・若手研究(B)、平成24年度採択、「物理点での格子QCD+QED数値計算の実現と陽子荷電半径の計算」、1,100千円
7. 滑川裕介（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(C)、平成24年度採択、「格子量子色力学による未発見ハドロン探索」、600千円
8. 根村英克(代表)、科学研究費補助金・新学術領域研究(公募研究)、平成25年度採択、「格子QCDによるハイペロン相互作用の研究とハイパー核への展開」、900千円

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. Takeshi Yamazaki, Ken-ichi Ishikawa, Yoshinobu Kuramashi, Akira Ukawa, “Study of quark mass dependence of binding energy for light nuclei in 2+1 flavor lattice QCD”, arXiv:1502.04182.
2. A. Bazavov, H.-T. Ding, P. Hegde, O. Kaczmarek, F. Karsch, E. Laermann, Y. Maezawa, S. Mukherjee, H. Ohno, P. Petreczky, C. Schmidt, S. Sharma, W. Soeldner and M. Wagner, “Additional Strange Hadrons from QCD Thermodynamics and Strangeness Freezeout in Heavy Ion Collisions”, Phys. Rev. Lett. 113, No. 7 (2014) ref. 072001.
3. A. Bazavov, H.-T. Ding, P. Hegde, O. Kaczmarek, F. Karsch, E. Laermann, Y. Maezawa, S. Mukherjee, H. Ohno, P. Petreczky, C. Schmidt, S. Sharma, W. Soeldner and M. Wagner, “The melting and abundance of open charm hadrons”, Phys. Lett. B 737 (2104) ref. 210.
4. X.-Y. Jin, Y. Kuramashi, N. Nakamura, S. Takeda, and A. Ukawa, “Critical endpoint of the finite temperature phase transition for three-flavor QCD”, Phys. Rev. D91 (2015) ref. 014508.
5. X.-Y. Jin, Y. Kuramashi, N. Nakamura, S. Takeda, and A. Ukawa, “Curvature of the critical line on the plane of quark chemical potential and pseudoscalar meson mass for three-flavor QCD”, arXiv:1503.00113.
6. Y. Shimizu and Y. Kuramashi, “Grassmann tensor renormalization group approach to one-flavor lattice Schwinger model”, Phys. Rev. D90 (2014) ref. 014508.
7. Y. Shimizu and Y. Kuramashi, “Critical behavior of the lattice Schwinger model with a topological term at $\theta=\pi$ using the Grassmann tensor renormalization group”, Phys. Rev. D90 (2014) ref. 074503.
8. Yasumichi Aoki, Tatsumi Aoyama, Masafumi Kurachi, Toshihide Maskawa, Kohtaroh Miura, Kei-ichi Nagai, Hiroshi Ohki, Enrico Rinaldi, Akihiro Shibata, Koichi Yamawaki, Takeshi Yamazaki (LatKMI Collaboration), “Light composite scalar in eight-flavor QCD on the lattice”, Phys. Rev. D 89 (2014) ref. 111502(R).
9. K.-I. Ishikawa, Y. Iwasaki, Yu Nakayama, T. Yoshié, “IR fixed points in SU(3) gauge Theories”, arXiv:1503.02359[hep-lat].

10. T. Inoue, S. Aoki, T. Doi, T. Hatsuda, Y. Ikeda, N. Ishii, K. Murano, H. Nemura and K. Sasaki, for HAL QCD Collaboration, “Medium-Heavy Nuclei from Nucleon-Nucleon Interactions in Lattice QCD”, Phys. Rev. C 91, 011001(R).
11. K. Murano, N. Ishii, S. Aoki, T. Doi, T. Hatsuda, Y. Ikeda, T. Inoue, H. Nemura, K. Sasaki, for HAL QCD Collaboration, “Spin-Orbit Force from Lattice QCD”, Phys. Lett. B 735 (2014) 19.
12. F. Etminan, H. Nemura, S. Aoki, T. Doi, T. Hatsuda, Y. Ikeda, T. Inoue, N. Ishii, K. Murano, K. Sasaki, for HAL QCD Collaboration, “Spin-2 $N\Omega$ Dibaryon from Lattice QCD”, Nucl. Phys. A 928 (2014) 89.
13. S. Motoki, S. Aoki, T. Aoyama, K. Kanaya, H. Matsufuru, Y. Namekawa, H. Nemura, Y. Taniguchi, S. Ueda, N. Ukita, “Development of Lattice QCD Simulation Code Set ‘Bridge++’ on Accelerators”, Procedia Computer Science Volume 29 (2014) 1701.
14. Sinya Aoki, Michael Creutz, “Pion masses in 2-flavor QCD with η condensation”, Phys. Rev. Lett. 112 (2014) ref. 141603, 1-5 (arXiv:1402.1837[hep-lat]).
15. H. Fukaya, S. Aoki, S. Hashimoto, T. Kaneko, H. Matsufuru, J. Noaki, “Computation of the electromagnetic pion form factor from lattice QCD in the epsilon regime”. Phys. Rev. D 90, (2014) ref. 034506 (arXiv:1405.4077 [hep-lat]).
16. Sinya Aoki, Janos Balog and Peter Weisz, “Walking in the 3-dimensional large N scalar model”, JHEP 1409 (2014) 167 (arXiv:1407.7074[hep-lat]).
17. Xu Feng, Sinya Aoki, Shoji Hashimoto, Takashi Kaneko, “Time-like pion form factor in lattice QCD”, Phys. Rev. D91 (2015) ref. 054504 (arXiv:1412.6319 [hep-lat]).

B) 査読無し論文

1. Takeshi Yamazaki, “Hadronic interactions”, Proceeding of Science (LATTICE 2014) 009.
2. N. Ishizuka, K.I. Ishikawa, A. Ukawa, T. Yoshié, “Calculation of $K \rightarrow \pi\pi$ decay amplitudes with improved Wilson fermion in 2+1 flavor lattice QCD”, Proceeding of Science (LATTICE2014) ref. 364.
3. Y. Namekawa, “Comparative study of topological charge”, Proceeding of Science (LATTICE2014) ref. 344.
4. Ryo Iwami, S. Ejiri, K. Kanaya, Y. Nakagawa, T. Umeda, D. Yamamoto (WHOT-QCD Collaboration), “Multi-point reweighting method and beta functions for the calculation of QCD equation of state”, Proceeding of Science (LATTICE2014) ref. 222.

5. H. Ohno, H.-T. Ding and O. Kaczmarek, “Quark mass dependence of quarkonium properties at finite temperature”, Proceeding of Science (LATTICE2014) ref. 219.
6. Y. Nakamura, X.-Y. Jin, Y. Kuramashi, S. Takeda, and A. Ukawa, “Update on the critical endpoint of the finite temperature phase transition for three flavor QCD with clover type fermions”, Proceedings of Science (LATTICE2014) ref. 194.
7. X.-Y. Jin, Y. Kuramashi, N. Nakamura, S. Takeda, and A. Ukawa, “Scalar correlators near the 3-flavor thermal critical point”, Proceedings of Science (LATTICE2014) ref. 195.
8. S. Takeda, X.-Y. Jin, Y. Kuramashi, N. Nakamura, and A. Ukawa, “Critical end point in $N_f=3$ QCD with finite density and temperature”, Proceedings of Science (LATTICE2014) ref. 196.
9. A. Nakamura, S. Oka, Y. Taniguchi, “Canonical approach to the finite density QCD with winding number expansion”, Proceeding of Science (LATTICE2014) ref. 198.
10. Yasumichi Aoki, Tatsumi Aoyama, Ed Bennett, Masafumi Kurachi, Toshihide Maskawa, Kohtaroh Miura, Kei-ichi Nagai, Hiroshi Ohki, Enrico Rinaldi, Akihiro Shibata, Koichi Yamawaki, Takeshi Yamazaki (LatKMI Collaboration), “Conformality in twelve-flavor QCD”, Proceeding of Science (LATTICE2014) ref. 256.
11. H. Nemura, for HAL QCD Collaboration, “Recent developments on LQCD studies of nuclear force”, Proceedings of the Seventh International Symposium on Chiral Symmetry in Hadrons and Nuclei, Int. J. Mod. Phys. E23 (2014) 1461006.
12. S. Ueda S. Aoki, T. Aoyama, K. Kanaya, H. Matsufuru, S. Motoki, Y. Namekawa, H. Nemura, Y. Taniguchi, N. Ukita, “Development of an object oriented lattice QCD code 'Bridge++’”, J. Phys. Conf. Ser. 523 (2014) 012046.
13. S. Ueda S. Aoki, T. Aoyama, K. Kanaya, H. Matsufuru, S. Motoki, Y. Namekawa, H. Nemura, Y. Taniguchi, N. Ukita, “Lattice QCD code Bridge++ on multithread and many core accelerators”, Proceeding of Science (LATTICE2014) ref. 036.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Sinya Aoki, 「Some topics in 2-flavor QCD at zero and finite temperature」, Workshop “Facing Strong Dynamics” (Liselund Castle, Denmark, June 2-6, 2014).

2. Takeshi Yamazaki, 「Hadronic Interactions」, The 32nd International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2014) (Columbia University, USA, June 23-28, 2014).
3. Sinya Aoki, 「Finite-volume methods for hadrons and their interactions in lattice QCD」, CERN Theory Workshop “Conceptual advances in lattice gauge theory (LGT14)” (CERN, Geneva, Switzerland, July 21-August 1, 2014).
4. Yusuke Namekawa, 「Heavy hadrons from lattice QCD」, Structure and productions of charmed baryons II (Tokai, Japan, August 7-9, 2014).
5. Sinya Aoki, 「Hadron interactions from lattice QCD」, KITPC program “Present Status of the Nuclear Interaction Theory” (KITPC/ITPCAS, Beijing, China, August 25-September 19, 2014).
6. Sinya Aoki, 「2-flavor QCD with non-degenerate quarks」, Creutz Fest 2014 “A Celebration of the Career and Accomplishments of Michael Creutz” (Physics Department, BNL, USA, September 4-5, 2014).
7. Yoshinobu Kuramashi, 「Lattice QCD」, US/Japan Exascale Applications Workshop (Gatlinburg, Tennessee, USA, Sep. 5-6, 2014).
8. Takeshi Yamazaki, 「Light nuclei from lattice QCD」, Advances and perspectives in computational nuclear physics (Hilton Waikoloa Village, USA, Oct. 5-7, 2014).
9. K. Sasaki, 「Coupled channel approach to hyperon-nucleon interaction from Lattice QCD」, Workshop “Achievements and Perspectives in Low-energy QCD with Strangeness” (Trento, Italy, Oct. 27-31, 2014).
10. K. Sasaki, 「Hadron interactions and resonances from lattice QCD」, Workshop “Resonance Workshop at Catania” (Catania, Italy, Nov. 3-7, 2014).
11. Takeshi Yamazaki, 「Light nuclei from lattice QCD」, RIKEN BNL Research Center workshop “Multi-Hadron and Nonlocal Matrix Elements in Lattice QCD” (Brookhaven National Laboratory, USA, Feb. 5-6, 2015).
12. Naruhito Ishizuka, 「 $K \rightarrow \pi\pi$ decay amplitudes with improved Wilson fermion」, RIKEN BNL Research Center workshop “Multi-Hadron and Nonlocal Matrix Elements in Lattice QCD” (Brookhaven National Laboratory, USA, Feb. 5-6, 2015).
13. Sinya Aoki, 「Hadron interaction in lattice QCD」, Long-term workshop on “Hadrons and Hadron Interactions in QCD 2015 (HHIQCD2015)” (YITP, Kyoto, Japan, February 12-March 21, 2015).

14. H. Nemura (for HAL QCD Collaboration), 「Stochastic variational calculation of 4He using lattice NN potential」, International Workshop on New Frontier of Numerical Methods for Many-Body Correlations — Methodologies and Algorithms for Fermion Many-Body Problem (University of Tokyo, Tokyo, Japan, Feb. 18-21, 2015).
15. Yoshinobu Kuramashi, 「2+1 flavor lattice QCD simulation on K computer」, CCS-BNL Workshop on Lattice Gauge Theories 2015 (CCS-BNL LGT 2015) (University of Tsukuba, Tsukuba, March 12-13, 2015).
16. Naruhito Ishizuka, 「Calculation of $K \rightarrow \pi\pi$ amplitudes」, CCS-BNL Workshop on Lattice Gauge Theories 2015 (CCS-BNL LGT 2015) (University of Tsukuba, Tsukuba, March 12-13, 2015).
17. Yusuke Taniguchi, 「Study of high density phase transition in lattice QCD with canonical approach」, CCS-BNL Workshop on Lattice Gauge Theories 2015 (CCS-BNL LGT 2015) (University of Tsukuba, Tsukuba, March 12-13, 2015).
18. Hiroshi Ohno, 「Quarkonia in hot medium and heavy quark diffusion from lattice QCD」, CCS-BNL Workshop on Lattice Gauge Theories 2015 (CCS-BNL LGT 2015) (University of Tsukuba, Tsukuba, March 12-13, 2015).

B) 一般講演

1. Hiroshi Ohno, 「Lattice QCD study on quark mass dependence of quarkonium properties at finite temperature」, The XXIV International Conference on Ultrarelativistic Nucleus-Nucleus Collisions (Quark Matter 2014) (Darmstadt, Germany, May 19-24, 2014).
2. Sinya Aoki, 「Pion masses in 2-flavor QCD with eta condensation」, The 32nd International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2014) (Columbia University, New York, USA, June 23-28, 2014).
3. Naruhito Ishizuka, 「Calculation of $K \rightarrow \pi\pi$ decay amplitudes with improved Wilson fermion in 2+1 flavor lattice QCD」, The 32nd International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2014) (Columbia University, New York, USA, June 23-28, 2014).
4. Yusuke Taniguchi, 「Canonical approach to the finite density QCD with winding number expansion」, The 32nd International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2014) (Columbia University, New York, USA, June 23-28, 2014).

5. Hiroshi Ohno, 「Quark mass dependence of quarkonium properties at finite temperature」, The 32nd International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2014) (Columbia University, New York, USA, June 23-28, 2014).
6. Y.Namekawa, 「Comparative study of topological charge」, The 32nd International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2014) (Columbia University, New York, USA, June 23-28, 2014).
7. Ryo Iwami, S. Ejiri, K. Kanaya, Y. Nakagawa, T. Umeda, D. Yamamoto (WHOT-QCD Collaboration), 「Multi-point reweighting method and beta functions for the calculation of QCD equation of state」, The 32nd International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2014) (Columbia University, New York, USA, June 23-28, 2014).
8. Masanori Yamada, for HAL QCD Collaboration, 「Omega-Omega interaction from 2+1 flavor QCD」, The 32nd International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2014) (Columbia University, New York, USA, June 23-28, 2014).
9. Tomoteru Yoshié, 「Report from JLDG」, International Lattice Data Grid 22 (Columbia University, New York, USA, June 24, 2014).
10. Yusuke Taniguchi, 「Canonical approach to the finite density lattice QCD with winding number expansion (II) hadronic observables」, Fourth Joint Meeting of the Nuclear Physics Divisions of the American Physical Society and The Physical Society of Japan (Hawaii, USA, October 7-11, 2014).
11. Masanori Yamada, for HAL QCD Collaboration, 「Omega-Omega interaction on the Lattice」, Fourth Joint Meeting of the Nuclear Physics Divisions of the American Physical Society and The Physical Society of Japan (Hawaii, USA, October 7-11, 2014).
12. Takeshi Yamazaki, 「Light nuclei from 2+1 flavor lattice QCD」, Hadrons and Hadron Interactions in QCD 2015 (Kyoto University, Kyoto, Feb. 15-Mar. 21, 2015).

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 山崎剛, 「hadronic interaction and beyond standard model from lattice gauge theory」, 素粒子物理学の進展2014 (京都大学基礎物理学研究所, 京都, 2014年7月28日-8月1日).

2. 青木慎也, 「Toward the entanglement entropy in lattice gauge theories」, 「離散的手法による場と時空のダイナミクス」研究会2014 (慶應大学日吉キャンパス, 神奈川県, 2014年9月12日-15日).
3. 山崎剛, 「格子QCD を用いた原子核直接計算」, RCNP workshop “QCDを基礎とする核子多体系物理の理解” (大阪大学RCNP, 大阪, 2014年12月19-20日).
4. 谷口裕介, 「カイラル相転移を迫いかけて」, 素粒子論の展望: 80年代、90年代から未来へ (大阪大学, 豊中市, 2015年2月14日).
5. 谷口裕介, 「カノニカル法による格子QCD有限密度相転移現象への挑戦」, 九大研究会 “格子QCDと現象論模型による有限温度・有限密度の物理の解明” (九州大学, 福岡市, 2015年2月19日).
6. 青木慎也, 「全体概要」, 素粒子・原子核・宇宙「京からポスト京に向けて」シンポジウム (紀尾井フォーラム, 東京, 2015年3月11日-12日).
7. 山崎剛, 「格子QCDを用いた軽い原子核の計算」, 素粒子・原子核・宇宙「京からポスト京に向けて」シンポジウム (紀尾井フォーラム, 東京, 2015年3月11日-12日).

B) その他の発表

1. 谷口裕介, 「カノニカル法による格子QCD の有限密度相転移現象への挑戦」, 理研シンポジウム・iTHES 研究会「熱場の量子論とその応用」 (理化学研究所, 和光市, 2014年9月3日-5日).
2. 大野浩史, 「有限温度格子QCD におけるチャーモニウム及びボトモニウム相関関数の研究」, 理研シンポジウム・iTHES 研究会「熱場の量子論とその応用」 (理化学研究所, 和光市, 2014年9月3日-5日).
3. 石塚成人, 「Calculation of K to $\pi\pi$ decay amplitudes with improved Wilson fermion」, 日本物理学会2014年秋季大会 (佐賀大学, 佐賀, 2014年9月18日-21日).
4. 山崎剛 for LatKMI Collaboration, 「Study of hadron spectra in 8-flavor QCD with lattice gauge theory」, 日本物理学会2014年秋季大会 (佐賀大学, 佐賀, 2014年9月18日-21日).
5. 根村英克 (HAL QCD Collaboration), 「Study of hyperon potentials from lattice QCD and hypernuclei」, 「ストレンジネスを含む原子核の最近の展開」研究会 (熱川ハイツ, 静岡, 2014年9月25日-27日).
6. 佐々木健志, 「格子QCD から導くハイペロン間相互作用の研究」, 「ストレンジネスを含む原子核の最近の展開」研究会 (熱川ハイツ, 静岡, 2014年9月25日-27日).
7. 吉江友照, 「HPCI共用ストレージ・JLDG連携」, HPCIシステム利用研究課題成果報告会 (東京, 2014年10月30日-31日).

8. 吉江友照, 「HEPnet-J/sc報告」, HEPnet-Jユーザー会 (KEK, つくば, 2014年12月11日-12日).
9. 吉江友照, 「格子QCDデータ共有・管理基盤JLDG/ILDG」, HPCI戦略プログラム分野 5 「物質と宇宙の起源と構造」全体シンポジウム (東京, 2015年3月11日-12日).
10. 山崎剛 for LatKMI Collaboration, 「格子ゲージ理論を用いた8フレーバーQCD における近似的共形対称性の研究」, 日本物理学会第70回年次大会 (早稲田大学, 東京, 2015年3月21日-24日).
11. 谷口裕介, 「カノニカル法による格子QCDの有限密度相転移現象の研究」, 日本物理学会第70回年次大会 (早稲田大学, 東京, 2015年3月21日-24日).
12. 大野浩史, 「有限温度格子QCD によるチャーモニウム及びボトモニウムの研究」, 日本物理学会第70回年次大会 (早稲田大学, 東京, 2015年3月21日-24日).
13. 鈴木遊, 「カノニカル法を用いた格子QCDにおける高次キュムラントの計算」, 日本物理学会第70回年次大会 (早稲田大学, 東京, 2015年3月21日-24日).
14. 大野浩史, 「有限温度格子QCDによるチャーモニウム・ボトモニウム及び重クォーク拡散係数の研究」, チュートリアル研究会「重イオン衝突の物理: 基礎から最前線まで」 (理化学研究所, 和光, 2015年3月25日-27日).

(4) 著書、解説記事等

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

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

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

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

2014年7月22日-26日，京都大学基礎物理学研究所，京都.

2. HPCI 戦略プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」計算基礎科学連携拠点主催，素粒子・原子核・宇宙「京からポスト京に向けて」シンポジウム，ポスト「京」重点課題（9）「宇宙の基本法則と進化の解明」，2015年3月11日-12日，紀尾井フォーラム，東京.
3. 筑波大学計算科学研究センター/理研BNL 研究センター共催，CCS-BNL Workshop on Lattice Gauge Theories 2015 (CCS-BNL LGT 2015)，2015年3月12-13日，筑波大学計算科学研究センター，つくば.

9. 管理・運営

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

10. 社会貢献・国際貢献

11. その他

Ⅱ. 宇宙・原子核物理研究部門

Ⅱ-1. 宇宙分野

1. メンバー

教授	梅村 雅之
准教授	森 正夫
講師	吉川 耕司
助教	Alexander Wagner (国際テニユアトラック)
研究員	石山 智明 (HPCI 戦略プログラム)
	行方 大輔 (HPCI 戦略プログラム)
	三木 洋平 (CREST)
学生	大学院生 17名 学類生 7名

2. 概要

本年度、当グループは、数値シミュレーションによる研究として、ガスの力学的摩擦による多重ブラックホールの合体過程の研究、Cold dark matter halo における cusp-core 問題と too-big-to-fail 問題の関連性、アンドロメダ銀河における漂うブラックホールとダークマターハローの姿、アンドロメダ銀河の潮汐破壊を耐えた衛星銀河中心部に期待される観測的特徴、ダークマターハローと中心ブラックホールの重力場におけるポリティロピック球対称定常銀河風の遷音速解析、再結合放射を含めた輻射流体シミュレーションコードの開発、宇宙暗黒時代の構造形成、ダスト再放射を考慮した輻射流体計算コードの開発、Jet-intracluster Medium Interaction in Hydra A: The Effect of Jet Precession, 世界最大規模のダークマターシミュレーション、GPU を用いた重力多体系の数値シミュレーションの高速化、を推進した。さらに、観測との共同研究として、Ly α 輝線銀河の速度構造研究で探る Ly α の放射機構の研究を行った。また、宇宙・生命分野間連携として、星間空間におけるアミノ酸生成過程の理論的研究、光合成光捕集機構の量子力学計算による太陽系外惑星のバイオマーカー・モデルの研究を推進した。

3. 研究成果

【1】 ガスの力学的摩擦による多重ブラックホールの合体過程の研究

銀河中心には $10^6 \sim 10^9 M_\odot$ の大質量ブラックホール(BH) が存在すると考えられているが、その質量の獲得過程や形成過程の正確なところは未だに解明されていない。その起源として初代星残余物の種 BH を仮定した場合、ガス降着のみでは観測されている高赤方偏移クェーサーの超巨大 BH を成長させることができないと見積もられる。我々は、BH の成長のもう一つの可能性として、種 BH の合体過程を考えた。3 体より多い数の BH の合体過程の研究は、Tanikawa & Umemura (2011, 2014) で行われているが、力学的摩擦は銀河内に存在する恒星から受ける影響のみを考慮している。第一世代天体の形成時はガスが豊富にあり、ガスによる力学的摩

擦の効果が有意に効く可能性がある。我々は、ガスによる力学的摩擦の影響を考慮し、10 体の BH の合体過程の研究を行った。特に、ガス密度と BH 密度に対する依存性に注目し、BH 合体が起こる条件を導出した。シミュレーションの結果、ガスによる力学的摩擦を取り入れると、100 Myr で 10 個全ての BH が合体する広いパラメーター領域があることが分かった。合体の物理過程は、力学的摩擦のみで合体 (Type A)、力学的摩擦と 3 体相互作用の相乗効果で合体 (Type B)、3 体相互作用で合体 (Type C)、の 3 種類に分けられることが分かった。Tanikawa & Umemura (2011, 2014) の星による力学的摩擦を考慮した場合には、合体は 10 個中 4~6 個までであったが、本研究により、ガスによる力学的摩擦が全ての BH の合体を可能にすることが明らかとなった。

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

現在の標準的な構造形成理論である cold dark matter (CDM) モデルは宇宙の大規模構造の統計的性質を説明することに成功した反面、1Mpc 以下の小さなスケールの構造においていくつかの問題が指摘されている。例えば、dark matter halo (DMH) の中心質量密度が発散する cusp 構造を预言する CDM モデルに対し、中心質量密度が一定となる core 構造が多数観測されていること (Cusp-core 問題) や、質量の中心集中度が高い DMH を持つ大質量衛星銀河が見つからない (Too-big-to-fail 問題) 等がある。本研究ではこれら二つの問題を、DMH とバリオンの力学的相互作用に起因した DMH の中心密度分布の進化過程に関わる問題として捉えて解析を行った。その結果、活発な星形成活動が発生する以前の原始銀河の DMH は cusp 構造を持っているが、銀河形成期に発生する周期的な超新星爆発フィードバックによって core 構造へと遷移する、cusp-core 遷移過程が重要な役割を果たすことを見出した。さらに、cusp-core 遷移過程の発生によって too-big-to-fail 問題が解決する可能性について議論した。

【3】 アンドロメダ銀河における、漂うブラックホールとダークマターハローの姿

近年、ハッブル宇宙望遠鏡やすばる望遠鏡に代表される大型望遠鏡を最大限活用した近傍宇宙の大規模探査により、現在も続く銀河進化の過程を垣間見ることができるようになってきた。近傍のアンドロメダ銀河においては、おびただしい数の暗い矮小銀河が発見されるとともに、それら矮小銀河の衝突によるものと思われるステラーストリームやステラーシェル、あるいは銀河円盤上で見られるリング構造等、銀河衝突の痕跡が続々と明らかにされてきている。本研究では、銀河衝突の重力多体計算及び流体力学計算による銀河衝突過程のみならず、アンドロメダ銀河に付随するダークマターハローの構造や、銀河円盤の構造、銀河ハロー中を徘徊するブラックホールの存在可能性について議論した。特に、アンドロメダ銀河のダークマターハローに関する解析では、現在の標準理論として考えられているコールドダークマター模型の预言するユニバーサル密度分布に従わない可能性を示唆しており、理論と観測の深刻な矛盾点について議論した。

【4】 アンドロメダ銀河の潮汐破壊を耐えた衛星銀河中心部に期待される観測的特徴

各銀河の中心に存在するブラックホールの質量は、銀河のバルジ(又は楕円銀河本体)の質量に比例しているが、その相関関係の起源は未解明である。銀河が衝突・合体する際に巨大ブラックホールどうしも合体することが共進化の起源として有力であるものの、いまだ観測的に検証されていない。我々はまずば抜けて近いために過去の銀河衝突の履歴が詳細に明らかになっているアンドロメダ銀河に着目し、大規模数値シミュレーションと放射スペクトルの理論計算を基に、共進化のこの重要な過程の解明に取り組みつつある (Miki et al. 2014; Kawaguchi et al. 2014)。本研究では、アンドロメダ銀河との衝突の際に潮汐破壊された衛星銀河の中心部に期待される観測的特徴を調べた。衛星銀河の大部分は、潮汐力により散り散りになりアンドロメダストリームなどを形成している。一方、潮汐破壊を耐えて生き残った衛星銀河中心部は、中心に大質量ブラックホールを含む星団として、現在、アンドロメダ銀河円盤の外縁部に居ると考えられる。この残骸星団の質量は、主に両銀河の近心点距離で決まり、アンドロメダ銀河中心から約1kpc の位置を衛星銀河中心が通過したこの衝突では、衛星銀河の中心ブラックホール質量の約 1 割、すなわち合計約 10^6 太陽質量の星々が衛星銀河中心ブラックホールに引き連れられていると考えられる。星種族合成モデル (Fio et al. 1997) を用いて年齢が10-100 億年の場合について星団の放射スペクトルを見積もると、例えば V バンドでは、 $L = 10^{(38.7-39.5)}$ [erg/s] と予想され、見かけの明るさは $F = 10^{-(10.4-11.2)}$ [erg/s/cm²] (AB 等級で14-16mag) と期待される。

【5】 ダークマターハローと中心ブラックホールの重力場におけるポリトロピック球対称定常銀河風の遷音速解析

銀河風は銀河進化に影響を与え、銀河間空間の重元素量を左右する重要な現象である。我々は、ダークマターハロー及び銀河中心ブラックホールの重力場中での球対称定常銀河風の加速過程を研究している。ここではポリトロピック銀河風モデルを用いて、銀河風としての遷音速解を、多様なパラメーター空間内でその解曲線のトポロジーによって系統的に分類している。本研究では、その結果を等温銀河風モデルの解析結果と比較し、温度変化が銀河風の加速過程に与える影響について議論した。さらに、ダークマターハローと中心ブラックホールから成る現実的な重力場に於いても、点源重力場でのParker 解同様に、遷音速流はエントロピー最大の解であり、自発的に実現し易いことを示した。また、冷却による比熱比の変化を想定した場合の解の振る舞いについて調べ、実際の銀河で観測されている温度・密度分布が、ポリトロピック銀河風モデルによって再現可能であるかを議論している。

【6】 再結合放射を含めた輻射流体シミュレーションコードの開発

輻射輸送シミュレーションやそれを流体力学シミュレーションとカップルさせた輻射流体シミュレーションは、天体形成の数値シミュレーションで多く用いられるようになってきたが、電離領域からの再結合放射などの空間的に広がった光源からの輻射輸送は計算コストが膨大であるため、これまでは無視されることが多かった。我々は、輻射輸送計算を GPU やマルチコア・メニーコアアーキテクチャに基づくプロセッサで効率的に実行するアルゴリズム

を開発し実装した。このコードは、点源からの輻射輸送を解く ARGOT 法と再結合放射などの広がった領域からの輻射輸送を解く ART 法を GPU やマルチコアプロセッサにおいて実装したものであり、MPI によるノード並列化も行い高い並列化効率を達成した。このコードを用いて、これまで無視されてきた再結合放射が輻射流体シミュレーションに及ぼす効果を様々な初期条件で調べ、主に臨界 D-type の電離波面に於いて再結合放射が重要な役割を果たすことを見出した。

【7】 宇宙暗黒時代の構造形成

宇宙晴れあがり以降から最初の日体形成されるまでの宇宙暗黒時代はこれまでの観測では手の届かない領域であったが、Square Kilometer Array に代表される中性水素の 21cm 線を観測する電波干渉計画によってこの時期の宇宙大規模構造形成の観測可能性が注目されている。特に近年注目を集めているのが、宇宙晴れあがり以前のダークマターとバリオンの運動の違いに起因するダークマターとバリオンの超音速な速度差で、この速度差によって密度ゆらぎの成長が抑制されることによって初期天体の形成時期や形成される天体の質量、更には宇宙の再電離過程にも影響を与え得る。この速度差が宇宙暗黒時代の大規模構造形成に与える影響について宇宙論的な数値流体シミュレーションを行い、相対速度の大きさに対してバリオンの密度ゆらぎパワースペクトルがどのように影響を受けるかを予言し、相対速度の関数としてフィッティング関数を与えた。

【8】 ダスト再放射を考慮した輻射流体計算コードの開発

活動銀河核 (AGN) は銀河の形成・進化に多大な影響を与えてきたと目され、AGN の活動性の理解は銀河形成論において重要な課題の 1 つである。活動性を理解するためには、AGN 降着円盤と降着円盤へのガス供給過程に関する詳細な理解が必要不可欠である。本研究は後者に焦点を当て、ガス供給過程と密接に関係する AGN トーラス内縁部の構造・物理状態を輻射流体計算によって可能な限り第一原理的に解明することを目指している。本年度は、この計算の実施に必要な輻射流体計算コードの開発と予備計算を実施した。コード開発においては、トーラス内縁部を扱うのに必要な、(1) ガスの自己重力、(2) ガスの光電離・光解離反応、(3) ダストからの赤外線再放射を考慮した。この計算コードを用いてエディントン比 1、ブラックホール質量 $10^7 [M_{\odot}]$ の場合の予備計算を実施したところ、(i) ダスト再放射による輻射圧はトーラス内縁部を膨らませアウトフロー率を数割上昇させること、(ii) アウトフロー率はエディントン質量降着率(変換効率 0.1)に匹敵しうることがわかった。

【9】 Jet-intracluster Medium Interaction in Hydra A: The Effect of Jet Precession

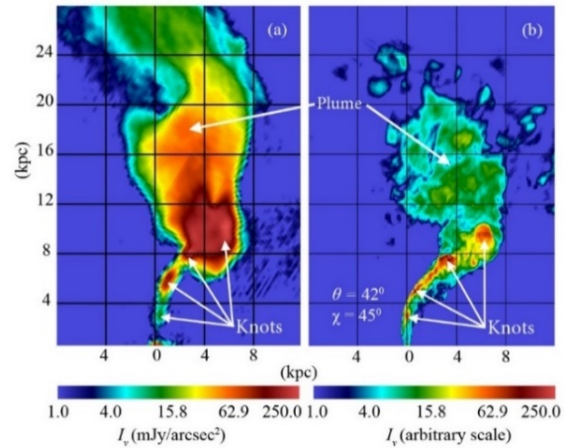
Using high-resolution 3-dimensional relativistic hydrodynamic simulations, we have succeeded in producing a most accurate model for the 30 kpc radio structure of the Hydra A source. The energetics of the jet have been narrowed down in previous work, and we use these parameters to perform a high-resolution simulation of a precessing jet, and find the

best precession angle and precession period for Hydra A. We find that a precession period of ~ 1 Myr and a precession angle of ~ 20 degrees, the hydrodynamic model reproduces, i) the curvature of the jet, ii) the correct number of bright knots within 20 kpc at approximately correct locations, and iii) the turbulent transition of the jet to a plume (See Figure 1). The Mach number of the advancing bow shock is 1.85 and is indicative of gentle cluster atmosphere heating during the early stages of the AGN's activity. The shocked gas is then effectively mixed with the turbulent jet plasma in the jet cocoon, preventing catastrophic cooling. We find a strong dependence of the radio morphology on viewing angle (See Figure 2), which is enhanced by different degrees of Doppler boosting and de-boosting of plasmons at different points along the precessing jet stream. The radio morphologies obtained from different viewing angles exhibit a range of jet curvatures and different orientations of jet lobes. In some instances, the radio morphology even resembles that of an X-shaped radio galaxy (Figure 2, panel d). The difficulty in comparing simulated to observed jets becomes clear: one must probe not only a range of jet parameters, but one must also sample along a cone of viewing directions in order to determine whether a model matches observations.

Figure 1 Caption

Comparison of the Hydra A radio image (Panel a) with a good match synthetic data image from our high-resolution simulation (Panel b). The curvature, the location of the knots, the flaring region and the plume structure are well reproduced. The brightness contrast between diffuse plume

and the knots, however, is not correctly reproduced. One possible explanation for this is that turbulent amplification of the magnetic field and associated re-acceleration of electrons increases the surface in the plume beyond the flaring zone.



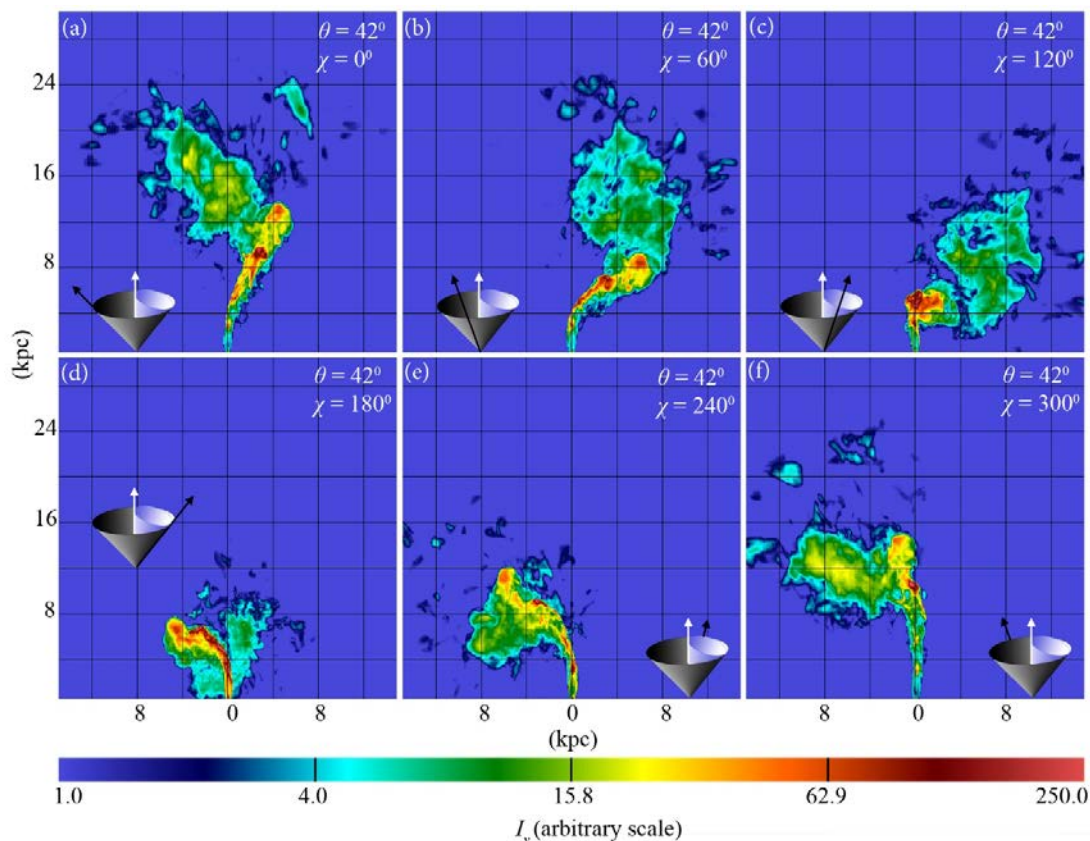


Figure 2 Caption

The Hydra A jet surface brightness viewed from different directions of a cone with known opening angle corresponding to the inclination angle of the jet with the line-of-sight. The source morphology varies drastically depending on viewing direction, an effect exacerbated by Doppler boosting and de-boosting.

【10】 世界最大規模のダークマターシミュレーション

理化学研究所のスーパーコンピュータ「京」や、国立天文台の「アテルイ」を用いて、5500億ダークマター粒子の超大規模宇宙論的N体シミュレーションを行った。一片およそ50億光年の領域で初期宇宙から現在の宇宙までシミュレーションした。初期条件はPlanck衛星による、CMBの最新の観測結果に基づいている。小銀河スケールから宇宙の大規模構造まで分解されている。これほど大きい空間でのシミュレーションとしては世界最高の分解能であり、銀河スケールのハローの階層的形成を追うシミュレーションとしては世界最大である。

シミュレーション結果から、ハローを検出し、ハローの階層的構造形成史をモデル化した。データはおよそ1ペタバイトにもおよぶ。今回、最大規模のシミュレーションの他に、空間サイズやひとつのシミュレーションダークマター粒子の大きさが異なる複数のシミュレーションを行った。そうすることで、質量スケールに換算しておよそ8桁にもおよぶ範囲でのハ

ローの構造形成史をモデル化した (Ishiyama et al. 2015, PASJ in press)。

シミュレーションではダークマター分布の重力的な進化のみ解き、ハローの階層的構造形成史をモデル化した。現在、シミュレーションから得られたハローの進化史の上で、準解析的銀河形成モデルという手法を用いてバリオンの進化を解いている。そして我々が目にする銀河や活動銀河核などの大規模天体サーベイ観測と直接比較可能な、様々な天体の疑似カタログを整備し、公開していく予定である。

【1 1】 GPU を用いた重力多体系の数値シミュレーションの高速化

無衝突重力多体系の数値シミュレーションにおいて広く用いられている Tree 法を、GPU を用いて高速化した。ここでは、interaction list 方式と on-the-fly 方式の中間方式を採用し、warp 毎に interaction list を順次構築し、近ければセル or 粒子を距離判定リストに追加、遠ければセル群を計算リストに追加する。そして、計算リストのサイズが一定値よりも大きくなれば、重力計算を行う。これにより、性能低下の要因となる warp divergence は回避できるが、判定リストの正確なサイズは予測不可能なので、グローバルメモリへの退避も必要となる。加えて、block time step の採用や重力計算以外の主要な関数の GPU 化を進めることでさらなる高速化を進め、先行研究である Ogiya et al. (2013) や Watanabe & Nakasato (2014) に比べて 3-4 倍程度の高速化を達成した。

【1 2】 $\text{Ly}\alpha$ 輝線銀河の速度構造研究で探る $\text{Ly}\alpha$ の放射機構の研究《観測との共同研究》

これまでの遠方銀河研究で、 $\text{Ly}\alpha$ 輝線銀河 ($\text{Ly}\alpha$ Emitter; LAE) は遠方星形成銀河における重要な銀河種族であることが認識されると共に、宇宙再電離を探索するプローブとして用いられている。しかし、 $\text{Ly}\alpha$ 光子は星間物質内の中性水素ガスやダストにより散乱・吸収を受けるため、その放射機構は完全には理解されていない。さらに、遠方銀河に付随する中性水素ガスの分布、及び量は現在でも観測が難しい状況にある。LAE の $\text{Ly}\alpha$ 光子放射機構を探るべく、我々はケック望遠鏡/LRIS、マゼラン望遠鏡/IMACS、すばる望遠鏡/FMOS を用いて合計約 30 個の $z=2.2$ LAEs の可視／近赤外分光観測を行った。その中の 12 天体について $\text{Ly}\alpha$ 輝線と星雲線 ([OIII]5007 など) の両方を検出した。星雲線で LAE の赤方偏移を決定し、そこからの $\text{Ly}\alpha$ 輝線の速度差 ($\text{Ly}\alpha$ velocity offset) を求めた。その結果、 $\text{Ly}\alpha$ velocity offset が測定された LAE サンプルを 2 倍以上に増やすことができ、これまで提案されていた $\text{Ly}\alpha$ 等価幅と $\text{Ly}\alpha$ velocity offset の逆相関を高い有意性で確認することができた。さらに、我々の長時間分光によりこれまで検出が難しかった暗い紫外線連続光、及び多数の金属吸収線を 4 個の LAEs から検出することに成功した。吸収線の速度差を測ったところ、星雲線に対し $\sim 200\text{--}300\text{ km/s}$ で青方偏移していることが分かり、Lyman Break Galaxies と同様に強いアウトフローが見られることが明らかになった。我々はこれらの輝線／吸収線情報を用いて、 $\text{Ly}\alpha$ 等価幅- $\text{Ly}\alpha$ velocity offset 逆相関の起源を探ると共に、遠方銀河における $\text{Ly}\alpha$ 放射と中性水素ガスの関係性を探究した。

【13】 星間空間におけるアミノ酸生成過程の理論的研究《宇宙・生命分野連携》

宇宙観測や模擬実験によって、有機物や高分子が星間ダスト表面などで生成されているということが明らかになってきている。観測ではアミノ酸前駆体（アミノアセトニトリル）が見つかっており、ALMA ではアミノ酸の検出も期待されている。また、地球に飛来した隕石からはアミノ酸やアミノ酸前駆体（ヒダントイン）が検出されている。本研究では、考えられる様々な反応経路の中でも最も一般的だと思われる生成過程について反応物および中間体の生成エネルギーを評価し、宇宙におけるアミノ酸生成の仕組みを探究した。手法は、密度汎関数法（第一原理計算）を用い、ヒダントインやアミノニトリルを経由する、グリシン及びアラニンの生成に対して高精度計算を行った。また、ダスト表面を想定するため、水溶液中での反応経路の解析を、Polarizable Continuum Model (PCM) による溶媒効果を考慮した計算を用いて行った。真空中においては、計算した全ての反応過程の中でグリシンが最も安定であり、過剰に安定な中間体は存在しなかった。アラニンについても同様の傾向が見られた。水溶液中でも反応過程の中でグリシンが最も安定であったが、ヒダントインが形成されにくい可能性があることがわかった。以上より、構成要素となる反応物があれば、グリシン、アラニンは容易に起こりうるということが明らかになった。さらに、今回計算した反応過程の遷移状態についても計算を行った結果、反応障壁が高く、これらを超えて反応が進むためには、UV 照射による光励起やラジカル形成、もしくはダスト衝突時の熱励起などの機構が必要であることがわかった。

【14】 光合成光捕集機構の量子力学計算による太陽系外惑星のバイオマーカー・モデルの研究（小松氏博士論文）《宇宙・生命分野連携》

太陽系外惑星の生命の重要な指標（バイオマーカー）の一つとして、光合成由来のスペクトルが考えられているが、太陽系とは異なる輻射環境下で、どのような光合成が可能できるかは明らかにされていない。我々は、光合成生物がどの程度効率的に光を吸収するかを量子化学計算し、これを惑星大気吸収の輻射輸送計算を用いて評価した。特に、今後の太陽系外惑星の観測では M 型星の周りの惑星がターゲットになるので、そのような長波長の光を多く含む環境における効率に焦点を当てて計算を行った。クロロフィル、バクテリオクロロフィルなどの光合成色素から始めて、これらの凝集体であるアンテナ部、光捕集複合体における吸収効率を評価した。また、輻射環境としては主星の寿命が長い FGKM 型星周りのハビタブルゾーンにある惑星を想定した。クロロフィルなどの光合成色素はソーレー帯、Q_x 帯、Q_y 帯の 3 つの主要な吸収帯を持ち、これらがどのように吸収効率に寄与しているか TDDFT（時間依存密度汎関数法）によって定量的に評価した。その結果、早期型星（F, G, K 型星）においてはソーレー帯が 4000 Å ブレーク（恒星の重金属によって引き起こされる 400 nm 前後での輻射スペクトルの急な変化）の長波長側、短波長側のどちらに位置するかによって顕著に吸収効率が変わることがわかった。バクテリオクロロフィルの場合、ソーレー帯は 400 nm より短波長側にあるので効率が小さくなり、クロロフィルは長波長側にあるので大きくなる。一方、晩期型の M 型星においてソーレー帯は吸収効率には寄与せず、代わりに Q_y 帯が重要になる。

バクテリオクロロフィルはクロロフィルより長波長側に Qy 帯があるのでより効率的に光を吸収できる。

続いてこれらの色素のうち、バクテリオクロロフィル a からなる紅色細菌の光捕集複合体 (LH2) の吸収効率を評価した。色素同士が双極子-双極子相互作用によって相互作用する、という近似モデルを用いて吸収スペクトルを算出した。さらに、ここでは惑星大気上端の放射スペクトルだけでなく、黒体放射スペクトルを用いて恒星の有効温度に依存してどのように吸収効率が変わるかを調べた。その結果、これらが最も効率的に吸収するのは、太陽の有効温度である 5778 K よりもかなり高温側であることがわかった。また、光捕集複合体においては励起エネルギー移動によって、効率的に必要な場所にエネルギーを引き渡すことができる。この過程を励起ダイナミクスモデルによって再現した。相互作用は上のモデルと同様に双極子-双極子相互作用を考慮した。その結果、LH2 の凝集体において色素を長波長側の光を吸収するものに変えると (850 nm → 870 nm)、エネルギー移動の速度が 2 倍になることがわかった。

これまでは惑星大気上端 (TOA) における放射や黒体放射の環境を考慮してきたが、実際に惑星において生物が存在している環境を想定するには地表における吸収効率を評価する必要がある。地球の場合は、TOA と地表での吸収効率は大きくは変わらなかった。また、ソーレー帯がほぼ 400 nm にあるため、どちらの場合もこの吸収帯からの寄与は無視できなかった。さらに、異なる主星を持つ惑星大気の効果を取り入れた上で効率を比較するために、M 型星、G 型星 (太陽) 周りの惑星において放射輸送計算を行った。惑星大気の状態としては、酸化型、還元型、地球に似た大気の 3 つを想定した。M 型星の場合は G 型星と比較すると、大気の状態によって大きく吸収効率に差が出るということがわかった。これは、ソーレー帯が M 型星の放射スペクトルとほとんど重なっていないことに由来する。また、いずれの場合においても Qy 帯において水蒸気の影響を大きく受けることがわかった。さらに、M 型星における効率的な光合成の条件を探ることに焦点を当てて、色素の構造、アンテナの配置、溶媒などの条件を変えて、吸収スペクトルの長波長化、M 型星における効率化の程度を評価した。その結果、色素の中心金属を Pd に交換すると金属なしの場合 (H2) と比較して 120 nm 程長波長化することがわかった。

4. 教育

【学位論文】

<博士論文>

1. 小松 勇

Absorption efficiencies of antenna complexes in photosynthetic organisms exposed to the photoenvironment of extrasolar planets

(太陽系外惑星の光環境にさらされた光合成生物のアンテナ複合体の吸収効率)

2. 田中 賢

A new ray-tracing scheme for radiation hydrodynamic simulations on highly parallel architectures

(並列プロセッサに最適化されたレイトレーシング法による輻射流体シミュレーション)

3. Mohammad Ali Nawaz

(The Australian National University, Research School of Astronomy and Astrophysics)

Interaction of Jets with the Intracluster Medium". (Thesis submitted)

<修士論文>

1. 小野間 章友

バリオンとダークマターの相対速度が及ぼす初期構造形成への影響

2. 渡邊 歩

宇宙大規模構造における高温水素ライマンアルファ吸収体の物理的性質

3. 加藤 一輝

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

4. 村田 貴紀

銀河形成初期のアウトフローと銀河形状

5. 山崎 健太郎

ブラックホール降着円盤における輻射抵抗による磁気回転不安定性について

<学士論文>

1. 石原 駿

系外惑星の大気吸収による放射スペクトルと生命活動の指標について

2. 荻野 孝浩

銀河風と銀河間物質との相互作用に関する遷音速解析

3. 久喜 奈保子

原始銀河における Lyman α 光子の脱出確率について

4. 小山 亮平

銀河の clustering 解析

5. 佐々木 さゆり

宇宙大規模構造形成シミュレーション

6. 保科 さや香

中心星輻射圧効果を入れた原始惑星系円盤ダストの軌道運動について

7. 今 友宏

ポリトロープ近似によるダークマターハローへの降着流の遷音速解析

【集中講義】

・吉川 耕司

「宇宙論と銀河団」(2014 年 7 月 15 日～7 月 17 日, 北海道大学大学院理学研究院物理学部門)

5. 受賞, 外部資金, 知的財産権等

【受賞】

1. 平成 26 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞, 石山 智明, 高精度大規模計算によるダークマター微細構造の研究, 平成 26 年度
2. 平成 26 年度筑波大学若手教員特別奨励賞, 石山 智明, 平成 26 年度

【外部資金】

<代表者>

- ・基盤研究 (C): 森 正夫 (代表者) (繰越)
「輻射流体シミュレーションによる銀河系統樹の構築」(78 万円)
- ・基盤研究 (C): 森 正夫 (代表者) (継続)
「輻射流体シミュレーションによる銀河系統樹の構築」(150 万円)
- ・日本学術振興会特別研究員 (DC2): 小松 勇 (代表者) (新規)
「光合成光捕集機構の量子化学計算による太陽系外惑星のバイオマーカー・モデルの構築」(100 万円)
- ・科研費若手研究 (B): 石山智明 (代表者) 2012-2014 年 (継続)
「銀河系内のダークマター微細構造の解明およびダークマター検出への応用」350 万 (3 年総額, 直接経費)
- ・科研費若手研究 (B): 行方大輔 (代表者) 2013-2015 年 (継続)
「マルチグループ輻射流体計算による AGN トーラスから降着円盤へのガス供給過程の解明」(403 万円)
- ・日本学術振興会特別研究員 (DC1): 桐原崇亘 (代表者) (新規)
「大規模数値シミュレーションを用いた局所銀河群形成過程の解明」(100 万円)
- ・日本学術振興会特別研究員 (DC1): 鈴木裕行 (代表者) (新規)
「大質量星の紫外線輻射輸送と超新星爆発の共存輻射流体モデル構築による銀河形成の

研究」(100 万円)

<分担者>

- ・基盤研究 (A) : 梅村雅之 (分担者) (代表者 : 大内正巳) (継続)
「次世代大規模探査とシミュレーションで挑む宇宙再電離」 (1 万円)
- ・基盤研究 (A) : 森 正夫 (分担者) (代表者 : 大内正巳) (継続)
「次世代大規模探査とシミュレーションで挑む宇宙再電離」 (398 万円)
- ・挑戦的萌芽研究 : 梅村雅之 (分担者) (代表者 : 高橋 勇太)
「6 次元光子ボルツマン方程式による一般相対論的輻射流体シミュレーション」 (10 万円)
- ・戦略的創造研究推進事業 CREST : 梅村雅之 (分担者) (代表者 : 朴泰祐)
「ポストペタスケール時代に向けた演算加速機構・通信機構統合環境の研究開発」 (1, 565 万円)

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

- 1) Bedorf, J., Gaburov, E., Fujii, S. M., Nitadori, K., Ishiyama, T., Portegies Zwart, S., 2014, “24.77 Pflops on a Gravitational Tree-Code to Simulate the Milky Way Galaxy with 18600 GPUs”, SC '14 Proceedings of the International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, 54-65
- 2) Enoki, M., Ishiyama, T., Kobayashi, M.A.R., Nagashima, M., 2014, “Anti-hierarchical evolution of the AGN space density in a hierarchical universe”, The Astrophysical Journal, 794, 69-76
- 3) Igarashi, A., Mori, M., Nitta, S., 2014, “Transonic galactic outflows in a dark matter halo with a central black hole and its application to the Sombrero galaxy”, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 444, 1177-1188
- 4) Ishiyama, T., 2014, “Hierarchical Formation of Dark Matter Halos and the Free Streaming Scale”, The Astrophysical Journal, 788, 27-39
- 5) Kawaguchi, T., Saito, Y., Miki, Y., Mori, M., 2014, “Relics of Galaxy Merging: Observational Predictions for a Wandering Massive Black Hole and Accompanying Star Cluster in the Halo of M31”, Astrophysical Journal Letters, 789, L13-17
- 6) Kirihaara, T., Miki, Y., Mori, M., 2014, “Puzzling outer-density profile of the dark matter halo in the Andromeda galaxy”, Publications of the Astronomical Society of Japan, 66, L106

- 7) Konno, A., Ouchi, M., Ono, Y., Shimasaku, K., Shibuya, T., Furusawa, H., Nakajima, K., Naito, Y., Momose, R., Yuma, S., Iye, M., 2014, “Accelerated Evolution of Ly α Luminosity Function at $z \gtrsim 7$ Revealed by the Subaru Ultra-Deep Survey for Ly α Emitters at $z=7.3$ ”, The Astrophysical Journal, 797, Issue 1, article id. 16, 15 pp.
- 8) Miki, Y., Mori, M., Kawaguchi, T., Saito, Y., 2014, “Hunting a Wandering Supermassive Black Hole in the M31 Halo Hermitage”, The Astrophysical Journal, 783, 87-95
- 9) Momose, R., Ouchi, M., Nakajima, K., Ono, Y., Shibuya, T., Shimasaku, K., Yuma, S., Mori, M., Umemura, M., 2014, “Diffuse Ly α haloes around galaxies at $z = 2.2$ -6.6: implications for galaxy formation and cosmic reionization”, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 442, 110-120
- 10) Namekata, D., Umemura, M., Hasegawa, K., 2014, “On the evolution of gas clouds exposed to AGN radiation. I. Three-dimensional radiation hydrodynamic simulations”, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 443, 2018
- 11) Nawaz, M. A., Wagner, A. Y., Bicknell, G. V., Sutherland, R. S., McNamara, B. R., 2014, “Jet-intracluster medium interaction in Hydra A - I. Estimates of jet velocity from inner knots”, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 444, 1600~1614
- 12) Ogiya, G., Mori, M., Ishiyama, T., Burkert, A., 2014, “The connection between the cuspto-core transformation and observational universalities of DM haloes”, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society: Letters, Volume 440, L71-L75
- 13) Ogiya, G., Mori, M., 2014, “The Core-Cusp Problem in Cold Dark Matter Halos and Supernova Feedback: Effects of Oscillation”, The Astrophysical Journal, Volume 793, article id. 46, 12 pp
- 14) Ogiya, G., Burkert, A., 2015, “Re-examining the too-big-to-fail problem for dark matter haloes with central density cores”, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 446, 2363.
- 15) Potter, T. M., Staveley-Smith, L., Reville, B., Ng, C.-Y., Bicknell, G.V., Sutherland R. S., Wagner, A. Y., 2014 “Multi-dimensional Simulations of the Expanding Supernova Remnant of SN 1987A”, The Astrophysical Journal, 794, 174-199
- 16) Shibuya, T., Ouchi, M., Nakajima, K., Yuma, S., Hashimoto, T., Shimasaku, K., Mori, M., Umemura, M., 2014, “What is the Physical Origin of Strong Ly α Emission? I. Demographics of Ly α Emitter Structures”, The Astrophysical Journal, 785, 64-76
- 17) Shibuya, T., Ouchi, M., Nakajima, K., Hashimoto, T., Ono, Y., Rauch, M., Gauthier, J., Shimasaku, K., Goto, R., Mori, M., Umemura, M., 2014, “What is the Physical Origin of Strong Ly α Emission? II. Gas Kinematics and Distribution of Ly α Emitters”, The

Astrophysical Journal, 788, 74-84

- 18) Susa, H., Hasegawa, K., Tominaga, N., 2014, “The mass spectrum of the first stars”, The Astrophysical Journal, 792, 32-48
- 19) Tanikawa, A., Umemura, M., 2014, “Merger criteria of multiple massive black holes and the impact on the host galaxy, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society”, 440, 652-662
- 20) Toshikawa, J., Kashikawa, N., Overzier, R., Shibuya, T., Ishikawa, S., Ota, K., Shimasaku, K., Tanaka, M., Hayashi, M., Niino, Y., Onoue, M., 2014, “A First Site of Galaxy Cluster Formation: Complete Spectroscopy of a Protocluster at $z=6.01$ ”, The Astrophysical Journal, 792, Issue 1, article id. 15, 15 pp.

B) 査読無し論文

- 21) Bicknell, G. V., McNamara, B. R., Nawaz, M. A., Sutherland, R. S., Umemura, M., Wagner, A. Y., 2014, "AGN feedback by relativistic jets", Proceedings of the International Astronomical Union, 10, S313, p101-107.
- 22) Bicknell, G. V., Nawaz, M. A., Wagner, A. Y., Umemura, M., McNamara, M. A., Sutherland, R. S., "Relativistic Jets in Active Galactic Nuclei", 2014, JPS Conference Proceedings, 1, 1, 5098 pp.
- 23) Igarashi, A., Mori, M., Nitta, S., 2014, “A New Concept of Transonic Galactic Outflows in a Cold Dark Matter Halo with a Central Super-Massive Black Hole”, JPSCP, 2, 7
- 24) Igarashi, A., Mori, M., Nitta, S., 2014, “Transonic galactic outflows and their influences to the chemical evolution of galaxies and intergalactic space”, AIPC, 1594, 82-87
- 25) Komatsu, Y., Umemura, M.; Shoji, M.; Shiraishi, K., Kayanuma, M., Yabana, K., 2014, “Toward understanding as photosynthetic biosignatures: light harvesting and energy transfer calculation”, Search for Life Beyond the Solar System. Exoplanets, Biosignatures & Instruments, 2014ebi.conf.1.3K
- 26) Komatsu, Y., Umemura, M., Shoji, M., Kayanuma, M., Yabana, K., Shiraishi, K. 2014, “Toward extending photosynthetic biosignatures: quantum dynamics calculation of light harvesting complexes”, 40th COSPAR Scientific Assembly, Abstract F3.4-8-14. 40, 1561
- 27) Potter, T. M., Staveley-Smith, L., Kirk, J., Reville, B., Bicknell, G. V., Sutherland, R. S., Wagner, A. Y., Zanardo, G., 2014, “Three-dimensional simulations of the expanding remnant of SN 1987A”, Proceedings of the International Astronomical Union, IAU Symposium, 296, 330-331

- 28) Susa, H., Hasegawa, K., Tominaga, N., 2014, “On the IMF of first stars”, AIP Conference Proceedings, 1594, 105-108

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

- 1) Wagner, A. Y., Umemura, M., Bicknell, G. V., Sutherland, R., Silk, J. 「The Inner Workings of Mechanical AGN Feedback」ASTRON Colloquium (2015 年 2 月 12 日, ASTRON, Dwingeloo, Netherlands)

B) 一般講演

- 1) Umemura, M., “HPC at CCS”, CCS-LBNL Collaborative Workshop (April 10-11, 2014, Center for Computational Sciences, University of Tsukuba, Japan)
- 2) Komatsu, Y., Umemura, M., Shoji, M., Kayanuma, M., Yabana, K., Shiraishi, K., “Light absorption and energy transfer in photosynthesis: Toward extending our current biosignatures”, The Japan Geoscience Union Meeting 2014, (Apr. 28- May 2, 2014, Pacifico Yokohama, Kanazawa)
- 3) Kidachi, K., Umemura, M., Shoji, M., Komatsu, Y., Kayanuma, M., Yabana, K., Shiraishi, K., “Theoretical investigation of amino acid formations on interstellar dust”, (poster), The Japan Geoscience Union Meeting 2014, (Apr. 28- May 2, 2014, Pacifico Yokohama, Kanazawa)
- 4) Ishiyama, T. “Hierarchical Formation of Dark Matter Halos and the Free Streaming Scale”, IAUS308: The Zeldovich Universe: Genesis and Growth of the Cosmic Web(Jun. 23-28, 2014, Tallinn, Estonia)
- 5) Komatsu, Y., Umemura, M., Shoji, M., Kayanuma, M., Yabana, K., Shiraishi, K., “Toward extending our current biosignatures: Light absorption and energy transfer calculation in photosystem”, Origins2014, (Jul. 6-11, 2014, the Nara-ken New Public Hall, Nara)
- 6) Kidachi, K., Umemura, M., Shoji, M., Komatsu, Y., Kayanuma, M., Yabana, K., Shiraishi, K., “Theoretical investigation of alanine formation on interstellar dust”, (poster), Origins2014, (Jul. 6-11, 2014, the Nara-ken New Public Hall, Nara)
- 7) Suzuki, H., Umemura, M. “The effect of internal and background UV radiation on the galaxy formation”, (poster), The physics of first star and first galaxy formation, (Jul. 9-14, 2014, Edinburgh, Scotland, UK)

- 8) Ogiya. G., Mori, M., “Solving the core-cusp problem through resonances between dark matter particles and density waves of interstellar gas”, (poster), IAU Symposium 311 Galaxy Masses as Constraints of Formation Models (Jul. 21-25, 2014, Oxford, UK)
- 9) Ogiya G., “The link among density structures, scaling laws and the too-big-to-fail problem of CDM halos”, (poster), 11th Potsdam Thinkshop: Satellite galaxies and dwarfs in the local group (Aug. 25-29, 2014, Potsdam, Germany)
- 10) Kirihaara, T., Miki, Y., Mori, M., “Puzzling Outer Density Profile of the Dark Matter Halo in the Andromeda Galaxy”, (poster), Satellite galaxies and dwarfs in the local group, (Aug. 25-29, 2014, Potsdam, Germany)
- 11) Umemura, M., Takahashi, R. “The Cutting-edge of Radiation Hydrodynamics”, The 6th East-Asian Numerical Astrophysics Meeting (Sep.15-19, 2014, Suwon, Korea)
- 12) Miki, Y., Mori, M., Kawaguchi, T., Saito, Y., “Hunting a Wandering Supermassive Black Hole in M31 Halo Hermitage using GPU Cluster”, The 6th East-Asian Numerical Astrophysics Meeting (Sep.15-19, 2014, Suwon, Korea)
- 13) Kirihaara, T., Miki, Y., Mori M., “A new puzzle of the Cold Dark Matter Prediction in the Outer Density Profile of the Andromeda Galaxy”, (poster), Evolving Galaxies in Evolving Environments, (Sep. 15-19, 2014, Bologna, Italy)
- 14) Igarashi, A., Mori, M., Nitta, S., “Transonic solutions of isothermal galactic outflows in gravitational potential of a dark matter halo and a super massive black hole”, Accretion and Outflows throughout the scales from young stellar objects to AGNs (Oct.1-3, 2014, Lyon, France)
- 15) Komatsu, Y., Umemura, M., Shoji, M., Kayanuma, “photosynthesis on exoplanets: Light absorption model”, (Oct. 13-16, 2014, The 14th European Astrobiology Meeting, Edinburgh, Scotland)
- 16) Ishiyama, T. “Structures of Dark Matter Halos Near the Free Streaming Scale and Their Impact on Indirect Detections”, (poster), Fifth International Fermi Symposium (Oct. 20-24, 2014, Nagoya, Japan)
- 17) Umemura, M., Miki, Y., “Development of Applications with GPU/TCA ~Research and Development on Unified Environment of Accelerated Computing and Interconnection for Post-Petascale Era~, (poster), JST/CREST International Symposium on Post Petascale System Software (Dec. 2-4, 2014, Kobe, Japan)

- 18) Wagner, A. Y., Umemura, M., Bicknell, G. V. 「Types of AGN Feedback」 AGN Feedback Mini-workshop (Dec.12, 2014, Research School of Astronomy and Astrophysics, Canberra, Australia.)
- 19) Kawaguchi, T., Saito, Y., Miki, Y., Mori, M., “Relics of Galaxy Merging: Optical Emission from a Star Cluster Trailing a Wandering Massive Black Hole in the M31 Halo”, (poster), Evolution of SMBHs with HSC: First results from initial dataset (Dec.18-20, 2014, Taipei, Taiwan)
- 20) Shibuya, T., Ouchi, M., Harikane, Y., “Size Evolution at $z=0-10$ ”, Getting a Grip on Galactic Girths (Feb.2-6, 2015, IPMU, Kashiwa, Japan)
- 21) Kawaguchi, T., Saito, Y., Miki, Y., Mori, M., “Relics of Galaxy Merging: Observational Predictions for a Wandering Massive Black Hole and Accompanying Star Cluster in the M31 Halo”, (poster), 2015 Aspen Winter Conference -- Black Holes in Dense Star Clusters (Jan.17-22, 2015, Aspen, USA)
- 22) Kidachi, K., Umemura, M., Shoji, M., Komatsu, Y., Kayanuma, M., Shigeta, Y., “Glycine formation pathway via hydantoin in the interstellar medium”, (poster), Icy Grain Chemistry for Formation of Complex Organic Molecules: From Molecular Clouds to Protoplanetary Disks, Comets and Meteorites, (Mar. 5-7, 2015, Tokyo Institute of Technology, Japan)

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

- 1) 森正夫, 「Research Activities of Astrophysics at CCS」, CCS - LBNL Collaborative Workshop (2014 年 4 月 10~11 日, 筑波大学計算科学研究センター, つくば市)
- 2) 石山智明, 「大規模シミュレーションと大規模データ」, 第 27 回 理論懇シンポジウム (2014 年 12 月 24 日~26 日, 国立天文台, 三鷹市)

B) その他の発表

- 1) 梅村雅之, 「活動銀河核のサイエンスー現状と展望ー」, 活動銀河核ワークショップ ~ 2020 年代への展望~ (2014 年 4 月 23~24 日, 国立天文台, 三鷹市)
- 2) 五十嵐朱夏, 森正夫, 新田伸也, 「球対称定常銀河風モデルによる遷音速解析」, 「次世代大規模探索とシミュレーションで挑む宇宙再電離」ミーティング (2014 年 5 月 29 日~30 日, 筑波大学計算科学研究センター, つくば市)
- 3) 五十嵐朱夏, 森正夫, 新田伸也, 「球対称定常銀河風モデルによる遷音速解析」, 銀河進化研究会 (2014 年 6 月 4 日~6 日, 国立天文台, 東京都三鷹市)

- 4) 桐原崇亘, 三木洋平, 森正夫, 「Puzzling outer-density profile of the dark matter halo in the Andromeda galaxy」, 銀河進化研究会(2014 年 6 月 4 日～6 日, 国立天文台, 三鷹市)
- 5) 森正夫, 桐原崇亘, 三木洋平, 川口俊宏, 濟藤祐理子, 「アンドロメダ銀河における, さすらいのブラックホールとダークマターハローの姿」, 日本天文学会 2014 年秋季年会 (2014 年 9 月 11 日～13 日, 山形大学, 山形市)
- 6) 川口俊宏, 濟藤祐理子, 三木洋平, 森正夫, 「アンドロメダ銀河の潮汐破壊を耐えきった衛星銀河中心部に期待される観測的特徴」, 日本天文学会 2014 年秋季年会 (2014 年 9 月 11 日～13 日, 山形大学, 山形市)
- 7) 扇谷豪, Andreas Burkert 「Re-examining the Too-Big-To-Fail Problem for Dark Matter Halos with Central Density Cores」, 日本天文学会 2014 年秋季年会 (2014 年 9 月 11 日～13 日, 山形大学, 山形市)
- 8) 石山智明, 「New Numerical Galaxy Catalog (ν^2 GC) Model . II. 超大規模宇宙論的 N 体シミュレーション」, 日本天文学会 2014 年秋季年会 (2014 年 9 月 11 日～13 日, 山形大学, 山形市)
- 9) 扇谷豪, Andreas Burkert, 「Re-examining the Too-Big-To-Fail Problem for Dark Matter Halos with Central Density Cores」, 日本天文学会 2014 年秋季年会 (2014 年 9 月 11 日～13 日, 山形大学, 山形市)
- 10) 五十嵐朱夏, 森正夫, 新田伸也, 「ダークマターハローと中心ブラックホールの重力場におけるポリトロピック球対称定常銀河風の遷音速解析」, 日本天文学会 2014 年秋季年会 (2014 年 9 月 11 日～13 日, 山形大学, 山形市)
- 11) 木立佳里, 梅村雅之, 庄司光男, 小松勇, 栢沼愛, 矢花一浩, 白石賢二, 「星間ダストにおけるアミノ酸生成過程の理論的研究」, 日本天文学会 2014 年秋季年会 (2014 年 9 月 11 日～13 日, 山形大学, 山形市)
- 12) 五十嵐朱夏, 森正夫, 新田伸也, 「ポリトロピック球対称定常銀河風モデルによる遷音速解析と実現性の考察」, 流体力学会 2014 年会 (2014 年 9 月 15 日～17 日, 東北大学, 仙台市)
- 13) 梅村雅之, 「宇宙生命計算科学連携拠点 Computational Astrobiology (CAB) – 計算科学の手法を用いた異分野間連携 –」, 自然科学研究機構新分野創成センター宇宙における生命研究分野プロジェクト&JAXA 地球周回軌道でのアストロバイオロジー実験 WG 合同研究会&第 7 回アストロバイオロジーワークショップ Part2 (2014 年 11 月 29 日, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎市)
- 14) 小松勇, 「太陽系外惑星における光合成モデル」, 自然科学研究機構新分野創成センター宇宙における生命研究分野プロジェクト&JAXA 地球周回軌道でのアストロバイオロジー実験 WG 合同研究会&第 7 回アストロバイオロジーワークショップ Part2 (2014 年 11 月 29 日, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎市)
- 15) 木立佳里, 梅村雅之, 庄司光男, 小松勇, 栢沼愛, 重田育照, 「星間ダスト上でのア

- ラニン形成に関する理論的考察」，自然科学研究機構新分野創成センター宇宙における生命研究分野プロジェクト&JAXA 地球周回軌道でのアストロバイオロジー実験 WG 合同研究会&第 7 回アストロバイオロジーワークショップ Part2(2014 年 11 月 29 日，岡崎コンファレンスセンター，岡崎市)
- 16) 長谷川賢二「大規模再電離シミュレーションの為のサブグリッドモデルの開発」，第 27 回 理論懇シンポジウム「理論天文学・宇宙物理学と境界領域」(2014 年 12 月 24 日～26 日，国立天文台，三鷹市)
- 17) 行方大輔，「ダストからの赤外線放射を考慮した輻射流体計算コードの開発」，(ポスター)，第 27 回 理論懇シンポジウム「理論天文学・宇宙物理学と境界領域」(2014 年 12 月 24 日～26 日，国立天文台，三鷹市)
- 18) 五十嵐朱夏，森正夫，新田伸也，「ポリトロピック球対称定常銀河風モデルによる遷音速解析とその応用」，第 27 回 理論懇シンポジウム「理論天文学・宇宙物理学と境界領域」(2014 年 12 月 24 日～26 日，国立天文台，三鷹市)
- 19) 加藤一輝，森正夫，扇谷豪，「Cold dark matter halo における Cusp/Core 問題と Too-Big-To-Fail 問題の関連性」，第 27 回 理論懇シンポジウム「理論天文学・宇宙物理学と境界領域」(2014 年 12 月 24 日～26 日，国立天文台，三鷹市)
- 20) 村田貴紀，「銀河形成初期のアウトフローと銀河形状」，第 27 回 理論懇シンポジウム「理論天文学・宇宙物理学と境界領域」(2014 年 12 月 24 日～26 日，国立天文台，三鷹市)
- 21) 木立佳里，「量子化学計算による宇宙でのアミノ酸生成過程の研究」第 27 回 理論懇シンポジウム「理論天文学・宇宙物理学と境界領域」(2014 年 12 月 24 日～26 日，国立天文台，三鷹市)
- 22) 梅村雅之，「宇宙生命計算科学の取り組み Computational Astrobiology (CAB)－計算科学の手法を用いた異分野間連携－」，「自然科学における階層と全体」シンポジウム(2015 年 1 月 19 日～20 日，桑山ビル 8 階 (名古屋駅前)，名古屋市)
- 23) 長谷川賢二，「再電離シミュレーションコードの開発とそれを用いた再電離期における 21cm 線分布の計算」，初代星・初代銀河研究会(2015 年 1 月 19 日～21 日，東北大学，仙台市)
- 24) 安部牧人，梅村雅之，長谷川賢二，「3 次元輻射流体力学による星間輻射場中での球状星団形成モデルの研究」，初代星・初代銀河研究会(2015 年 1 月 19 日～21 日，東北大学，仙台市)
- 25) 鈴木裕行，長谷川賢二，梅村雅之，Semelin, B.，「non-grid based Lya 輻射輸送コードの開発」，(ポスター)，初代星・初代銀河研究会(2015 年 1 月 19 日～21 日，東北大学，仙台市)
- 26) 桐原崇亘，三木洋平，森正夫，「Puzzling outer-density profile of the dark matter halo in the Andromeda galaxy」，初代星・初代銀河研究会(2015 年 1 月 19 日～21 日，東北大学片平キャンパス，仙台市)

- 27) 石山智明, 「New Numerical Galaxy Catalog (ν^2 GC) Model における超大規模宇宙論的 N 体シミュレーション」, 平成 26 年度 CfCA ユーザーズミーティング (2015 年 1 月 20 日~21 日, 国立天文台, 三鷹市)
- 28) 行方大輔, 「ダスト再放射を考慮した輻射流体計算コードの開発」, (ポスター), 平成 26 年度 CfCA ユーザーズミーティング (2015 年 1 月 20 日~21 日, 国立天文台, 三鷹市)
- 29) 長谷川賢二, 「輻射流体的フィードバックを考慮した新しい再電離シミュレーション」, SKA-Japan ワークショップ 2015 (2015 年 3 月 3 日~5 日, 国立天文台, 三鷹市)
- 30) 行方大輔, 「ダスト再放射を考慮した輻射流体計算コードの開発」, HPCI 戦略プログラム分野 5 全体シンポジウム (2015 年 3 月 11 日~12 日, 紀伊フォーラム, 東京都)
- 31) 長谷川賢二, 「大規模再電離シミュレーションの為のサブグリッドモデルの開発」, 日本天文学会 2015 年春季年会 (2015 年 3 月 18 日~21 日, 大阪大学, 豊中市)
- 32) 加藤一輝, 森正夫, 扇谷豪, 「Cold dark matter halo における cusp-core 問題と too-big-to-fail 問題の関連性」, 日本天文学会 2015 年春季年会 (2015 年 3 月 18 日~21 日, 大阪大学, 豊中市)
- 33) 森正夫, 「ダークマターの構造と銀河進化」, 研究会「新世紀における 銀河宇宙観測の方向」 (2015 年 3 月 31 日~4 月 2 日, KKR 熱海, 熱海市)

(4) 著書, 解説記事等

【著書】

シリーズ<宇宙物理学の基礎>: 宇宙流体力学の基礎

福江純, 和田桂一, 梅村雅之著, 日本評論社 (2014)

【翻訳】

森正夫, 「銀河を操るダークウェブ」, 日経サイエンス 2014 年 10 月号, 8 月 25 日

【解説記事】

情報処理 “「京の威力で宇宙の正体に迫る」ーダークマターの超大規模シミュレーション”, 石山智明 (情報処理学会, 2014 年 8 月)

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

【異分野間連携】

1) 星間アミノ酸生成の研究 (梅村, 木立, 小松)

宇宙・生命分野間連携により, 星間空間におけるアミノ酸前駆体ならびにアミノ酸の生成過程についての量子力学計算を進めた。

2) 系外惑星における光合成アンテナ機構の研究 (小松, 梅村, 石原)

宇宙・生命分野間連携により, 系外惑星の大気吸収効果を入れた光合成光捕集機構につ

いて量子化学計算を進めた。

【国際連携】

・ Masayuki Umemura

CCS-LBNL Collaborative Workshop, April 10th - 11th, 2014

Center for Computational Sciences, University of Tsukuba

・ Masao Mori, Collaboration with Prof. Andreas Burkert, "Supernova feedbacks and structure of cold dark matter halo", (2014 年 9 月 30 日～10 月 6 日, Ludwig Maximilians Universität München, Germany)

・ Alexander Wagner, 国際テニユアトラック

a) Collaboration with Prof. Joseph Silk (Institut d'Astrophysique de Paris) and Prof. Colin Norman (Johns Hopkins University, Baltimore MD) on AGN-pressure Induced Star Formation in Disk Galaxies.

b) Collaboration with Raffaella Morganti and Tom Oosterloo (ASTRON, Netherlands), Kalliopi Dasyra and Francoise Combes (Observatoire de Paris), Geoffrey Bicknell and Dipanjan Mukherjee (RSAA, ANU, Canberra, Australia), on Multiphase AGN-driven Outflows.

c) Collaboration with Christoph Federrath and Roland Crocker (RSAA, ANU, Canberra, Australia) on simulations and interpretations of the Fermi Bubble.

8. シンポジウム, 研究会, スクール等の開催実績

1) 「次世代大規模探査とシミュレーションで挑む宇宙再電離」 ミーティング
2014 年 5 月 29 日～30 日, 筑波大学計算科学研究センター, つくば市

2) 宇宙物理理論研究室発足 20 周年記念式典 (2014 年 9 月 27 日, つくば研究
支援センター)

交流会 (2014 年 9 月 28 日, 筑波大学計算科学研究センター)

<http://www.rccp.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2014/09/27/twenty-years/>



3) 「天体形成研究会」

2014 年 10 月 17 日～18 日，筑波大学計算科学研究センター，つくば市

<http://www.rccp.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2014/10/17/tentaikeisei/>

4) 「超巨大ブラックホール研究推進連絡会」第 2 回ワークショップ

2014 年 11 月 3 日～4 日，筑波大学計算科学研究センター，つくば市

<http://www.rccp.tsukuba.ac.jp/Astro/conferences/ccs/ja/2014/11/03/smbh-liason-workshop/>

5) 「初代星・初代銀河研究会」

2015 年 1 月 19 日～21 日，東北大学，仙台市

9. 管理・運営

組織運営や支援業務の委員・役員の実績

・梅村雅之

計算科学研究センター センター長

計算科学研究センター 運営委員会委員長

計算科学研究センター 人事委員会委員長

計算科学研究センター 宇宙・原子核物理研究部門主任

計算科学研究センター 運営協議会委員

計算科学研究センター 研究企画室委員

物理学域 運営委員会委員

物理学域 宇宙物理理論グループ長

・森正夫

筑波大学計算科学研究センター・共同研究委員会学内委員

数理物質科学研究科学生相談室員

物理学域図書委員会委員

計算基礎科学連携拠点企画チーム

10. 社会貢献・国際貢献

森正夫，出前講義，「宇宙物理学入門」，茨城県立並木中等教育学校，2014 年 6 月 18 日

11. その他

【海外長期滞在】

・扇谷豪

Ludwig-Maximilians-Universität München, Max Planck Institute for Extraterrestrial Physics 滞在（2014 年 4 月～2015 年 3 月）

Ⅱ-2. 原子核物理分野

1. メンバー

教授	矢花一浩、中務 孝
准教授	寺崎 順 (HPCI 戦略プログラム)
講師	橋本幸男
助教	日野原伸生 (国際テニユアトラック)
研究員	温 凱 (数理物質系物理学域)
学生	大学院生 6 名、学類生 2 名

2. 概要

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

3. 研究成果

【 1 】時間依存ハートレー・フォック法による核子移行過程の記述（矢花、関澤）

多核子移行反応は、核子多体系に発現する非平衡量子輸送過程としてその反応機構に興味を持たれており、また近年、多核子移行反応を用いこれまでに生成されたことのない不安定原子核を生成する可能性が盛んに議論されている。我々は、多核子移行反応の微視的反応機構を明らかにすると共に、不安定核の生成方法を予言することを目指し研究を進めてきた。昨年度までに、TDHF 法に粒子数射影法を組み合わせることにより、起こる確率の大きい移行反応過程の断面積を定量的に記述できることを明らかにした。しかし、移行する核子数が大きく、起こる確率の小さい移行反応過程については、実験値を過小評価するという問題に直面した。そこで本年度には、この実験値と食い違いを解消することを試みた。相違の原因として、励起した原子核からの核子放出による脱励起（核子蒸発）の効果が考えられる。核子

蒸発過程は、我々の数値シミュレーションで扱う時間スケールより遥かに長い時間スケールで起こる現象であり、TDHF 計算とは別に統計模型を用いた計算を行う必要がある。統計模型を利用するために、我々は粒子数射影法を応用し、生成された原子核の励起エネルギーを評価する方法を開発した。そして、核子蒸発の効果を取り入れた断面積を評価し、実験値との比較を行った。その結果、核子蒸発の効果が実験値との相違を改善することを確認したが、効果は不十分であった。このことは、TDHF 計算で扱えていない相関の影響を示唆している。

【 2 】 正準基底時間依存ハートレー・フォック・ボゴリューボフ理論による多核子ダイナミクス計算（中務、江幡（北大）、稲倉（京大））

原子核理論分野で発展が目覚ましい 3 次元実空間表示の時間依存ハートレーフォック法に対して、計算コストの増加をミニマムに抑えた上で、核子対凝縮と超流動ダイナミクスを扱えるように拡張した理論を、2010 年に我々が提唱した。このときの論文に対して、第一著者である江幡氏（当時筑波大学大学院生・理化学研究所 JRA）が、本年度の日本物理学会若手奨励賞を受賞した。この方法を線形応答領域に応用し、原子核の応答関数の系統的計算を行い、軽い原子核から希土類領域の重い原子核まで、中性子分離エネルギーが 2MeV 以上のアイソトープについて電気双極子 (E1) 強度分布を調査した。その結果、中性子過剰核の広い領域において低エネルギーの E1 ピーク（ピグミー共鳴）が現れ、その出現のメカニズムに中性子の殻効果が重要であることが分かった。また、通常、E1 強度のほとんどは巨大共鳴状態に集中するため、低エネルギー領域の E1 強度は大幅に弱められていることが知られているが、非常に中性子過剰な重い原子核の励起エネルギー 5 MeV 以下には、この E1 抑制が働かない新種のピグミー共鳴が現れることを予言した。さらに、これらのピグミー共鳴の性質と中性子星の構造を決定する状態方程式との関係を精査した。

また、同じ計算手法を用いた核融合反応計算を開始し、軽い原子核に限定的ではあるが、対相関の影響に関して興味深い結果を得た。衝突エネルギーを同じにして、対相関を入れた計算と無視した計算

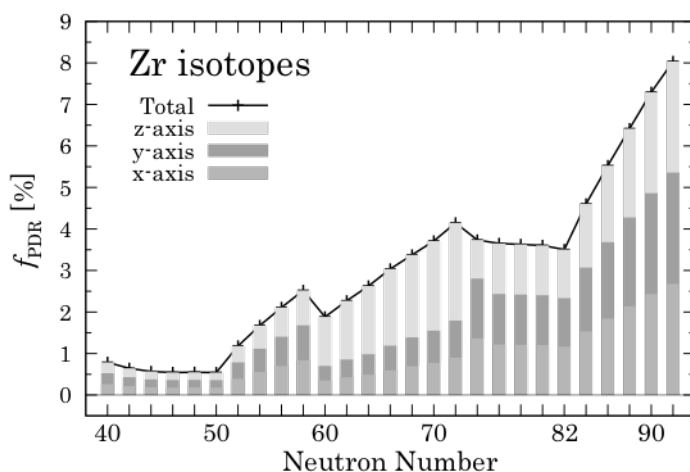


図 1 : Zr アイソトープの低エネルギー E1 強度の割合。
特定の中性子数 $N=50, 60, 72, 82$ で傾きが突然変化する

とを比べると、対相関によって核融合が阻害されるケースがあることが分かった。さらにこの効果を確認するため、研究を続行中である。

【 3 】大振幅集団運動理論を用いた核反応ダイナミクスの記述（温、中務）

線形領域を超える大振幅集団運動を扱う理論として、断熱近似型の理論が提案されているが、そのうちの 하나가、2000 年に提案された断熱自己無撞着集団座標法 (Adiabatic Self-consistent Collective Coordinate Method: ASCC 法) である。この理論では、少数自由度の集団空間 (座標) の自己無撞着な抽出が可能であり、特に、過去の断熱時間依存平均場理論では不可能であった一意的な抽出ができる点が優れている。この理論に基づいて、低エネルギーの多核子反応ダイナミクスを記述することを目指した研究を開始した。まず、テストとして、比較的簡単な BKN 相互作用と呼ばれる有効相互作用を用いて、3 次元座標表示の TDHF を基礎にしたコード開発を行い、2 つのアルファ粒子の散乱・融合のミクロな機構を明らかにすることにした。拘束演算子を局所調和方程式と呼ばれる式から求め、それを拘束条件付き平均場計算に応用する。これを自己無撞着に計算し、核反応の集団運動を支配するポテンシャルと質量パラメータを求める。これまでに、このようにして自己無撞着に決めた質量が遠方で換算質量に一致すること、また 2 つのアルファ粒子が接触した後には換算質量が大きくなり、反応速度が弱められることなどが分かっている。

【 4 】アイソスピン不変なエネルギー汎関数による原子核密度汎関数計算（中務、佐藤（理研）、Dobaczewski（ワルシャワ大）、Satula（ワルシャワ大））

現在主流となっている原子核のエネルギー密度汎関数は、Skyrme 形式、Gogny 形式、共変形式 (相対的) の 3 つに大別されるが、どれも陽子と中性子の密度 (ρ_p, ρ_n) の汎関数としてエネルギーが与えられている。しかし、陽子や中性子はアイソスピンの第 3 成分の固有状態であり、アイソスピン空間における回転に対して不変ではなく、一般にはアイソスピンが任意の方向を向いた状態、すなわち陽子と中性子が混合した状態に拡張する必要がある。これを実行するため、陽子・中性子を区別せずに「核子」として扱う新しい Kohn-Sham 方程式と、それに対応する非対角要素 (ρ_{pn}, ρ_{np}) を含むエネルギー汎関数を構築し、その計算コード開発を実施した。アイソスピン不変に拡張することによる新しいパラメータの導入はなく、これまでのエネルギー汎関数のパラメータセットをそのまま利用することができる。計算コードは、ポーランド・ワルシャワ大学のグループを中心に開発されている HFODD にこの拡張を適用することにした。この研究はワルシャワ大学との共同研究で進められている。

この拡張による大きなメリットとして、荷電類似状態（アイソバリックアナログ状態）と呼ばれる状態が、自然かつ簡便な形で表現できることがあげられる。図には、質量数 $A=54$ のアイソスピン $T=1$ の状態が示されている。左端の点 ($T=-1$) が ^{54}Ni に、右端 ($T=+1$) が ^{54}Fe 、真ん中 ($T=0$) が ^{54}Co に対応する。この真ん中の ^{54}Co の状態は従来の密度汎関数で記述することが困難であった。さらに、パラメータフリーの計算で実験と非常によい一致を得ている。

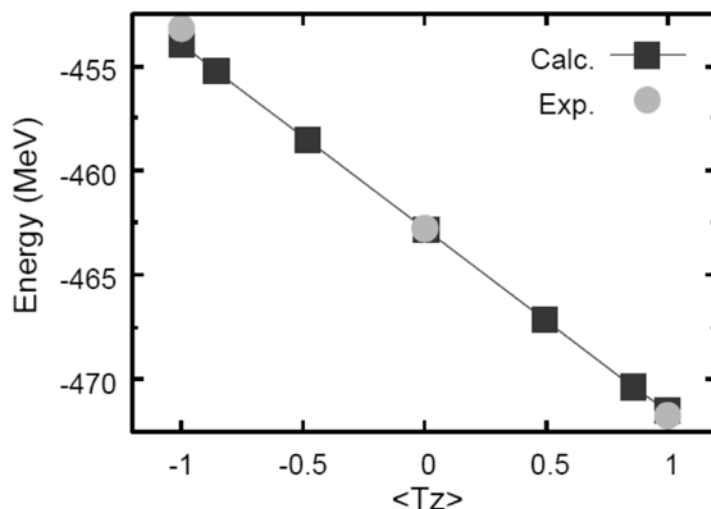


図 2 : $A=54$ の同重体におけるアイソスピン $T=1$ 三重項状態のエネルギー（左から Ni, Co, Fe に対応）。

【 5 】原子核の二重ベータ崩壊の原子核行列要素（寺崎）

寺崎は四年前に赴任して以来ニュートリノレス二重ベータ崩壊の理論的研究を実施している。その中心的内容は、準粒子乱雑位相近似を用いたその崩壊の原子核行列要素の計算である。その崩壊が観測された場合にニュートリノの質量スケールを決定するために必要な原子核行列要素の信頼できる数値を出すことが目標である。2014 年度は、 ^{150}Nd から ^{150}Sm へのニュートリノレス二重ベータ崩壊の原子核行列要素を準粒子乱雑位相近似 (QRPA) を用いて求め、その計算に関する論文を出版した。その計算過程で、始状態と終状態から求めた QRPA 励起状態の重複を求める必要があるが、ここで QRPA 基底状態の規格化因子の積が約 2 であり、原子核行列要素を 1/2 倍する効果があることを初めて見出した。このことは、今まで原子核行列要素を小さくするために用いられていた現象論的相互作用の方法の見直しの必要性を示しており、同じ課題を研究している研究者への影響は大きい。今までより理論的整合性の高い計算を提示したことで、信頼性の高い原子核行列要素を求めるという目標に近づいた。

【 6 】有限振幅法を用いた和則計算（日野原、Kortelainen (Univ. Jyväskylä), Nazarewicz (Michigan State Univ.), Olsen (Michigan State Univ.))

和則は巨大共鳴などの線形応答に対する情報と関連する扱いやすい量であるため、原子核エネルギー密度汎関数の未知の結合定数を決定する際に、ダイナミクスを代表する量として有用であると考えられる。しかしながら乱雑位相近似 (QRPA) を用いて和則を計算すると、大

次元の行列の対角化とそのすべての解が必要となり、さらに計算量による制限のため行列の次元を減らす近似が必須である。全自由度を扱うことが出来る有限振幅法を用い、複素エネルギー平面で励起状態に対応する極をすべて囲む複素積分を行うことによって、和則を効率よく計算する定式化を行った。全自由度が扱える小さな模型空間において QRPA の行列対角化による解と一致することを数値的に確認し、さらに和則を与える Thouless 定理や絶縁定理の密度汎関数理論での有効性を、現実的な場合において数値的に示した。有限振幅法による本定式化はこれらの定理が使えない場合においても有効であり、複素積分の並列化によって和則を効率よく正確に計算することが可能となった。

【 7 】二重ベータ崩壊の核行列要素（陽子-中性子対振幅の量子ゆらぎを取り込んだ核行列要素の計算（日野原、Engel(Univ. North Carolina)）

二重ベータ崩壊の核行列要素はアイソスカラー型の陽子-中性子対相関力によって抑制されることが乱雑位相近似(QRPA)計算によって知られているが、この陽子-中性子対相関力は基底状態に質的な影響を与えないため、その強さについてはよくわかっていない。QRPA 計算は相転移を記述出来ないため、基底状態の四重極変形ゆらぎが大きく変形共存や変形転移状態にある場合や、アイソスカラー対凝縮相への転移状態近傍にある場合は近似が破綻する。この QRPA の問題を回避し核行列要素の相互作用依存性を明らかにするために、四重極変形度と陽子-中性子対振幅を拘束した変分によってこれらの量子ゆらぎの大きい状態も含んだ基底を生成し、量子数射影後に重ねあわせることで、崩壊の始状態と終状態を構築した(生成座標法)。特に陽子-中性子対を自由度に取り込んだ生成座標法はこれまでに行われたことのないユニークなものである。第一の計算例として、二主殻模型空間で $^{76}\text{Ge} \rightarrow ^{76}\text{Se}$ の二重ベータ崩壊の核行列要素を評価した。生成座標法では殻模型計算より広い一粒子模型空間を用いることが出来、さらに二準粒子励起に制限される QRPA よりも豊富な多体相関を取り込むことが出来るため、適切な有効相互作用を用いることで、将来的には殻模型計算と QRPA のどちらにも含まれていない効果を議論することが期待できる。もう一つの将来計画は Skyrme 型の原子核密度汎関数に基づいて陽子-中性子対の自由度を入れた生成座標法計算を行うことで、 β 崩壊などの関連する物理量も含めた荷電交換過程の系統的な計算へと発展させることである。

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

原子核の振る舞いを研究するうえで、時間依存平均場の方法は定性的にも定量的にも極めて有用な枠組みとなっている。原子核の基底状態近傍の状態においては対相関が重要な働きをすることが知られているので、中性子過剰核の性質を理解する目的で、TDHF の枠組みを

拡張して対相関を扱えるようにした時間依存ハートレーフォックボゴリェボフ (TDHFB) の実用的な数値計算が行われるようになってきた。橋本は、調和振動子基底と空間格子としての Lagrange 格子点を組み合わせた基底を利用し、Gogny 力を用いた TDHFB を解く、という数値計算の方法を整備してきた。今年度は、 $^{20}\text{O}+^{20}\text{O}$ の衝突に応用した。ちなみに、TDHF+BCS の形式での原子核衝突の計算は存在するが、TDHFB 方程式を直接解いて原子核衝突を計算する試みは、現時点では極めて少ない。計算に必要な格子空間の選定は初期条件の設定と関係し、そのための試行錯誤に計算時間と労力を割く必要があった。実際の計算は、クーロン障壁頂上付近の軌道を 3 本 (3 個の初期エネルギー) 設定し、2.1 fm 離れた点から計算を開始した。この一連の計算により、① 障壁より上のエネルギーの軌道では融合が起こり、核子の移行量の期待値を計算できた。② 障壁より下の軌道において、対相関の働く中性子側では、陽子側の約 1.0 倍の移行数があり、これは ^{20}O の中性子数・陽子数比である 1.5 よりずっと多いことがわかる。さらに、③ 障壁よりも上のエネルギーを持つ 2 本の軌道から、巨視的な摩擦係数を計算することができた。摩擦係数は、融合の初期に急速に増加することが示された。今後、これらの量の初期エネルギー依存性を系統的に調べていく。

【 9 】 Energy dependence of the nucleus-nucleus potential and the friction parameter in fusion reactions (温、坂田(茨城大)、Li(CIAE)、Wu(CIAE)、Zhang(CIAE)、Zhou(CAS))

Applying a macroscopic reduction procedure to the improved quantum molecular dynamics (ImQMD) model, the energy dependences of the nucleus-nucleus potential, the friction parameter, and the random force characterizing a one-dimensional Langevin-type description of the heavy-ion fusion process are investigated. Systematic calculations with the ImQMD model show that the fluctuation-dissipation relation found in symmetric head-on fusion reactions at energies just above the Coulomb barrier fades out when the incident energy increases. It turns out that this dynamical change with increasing incident energy is caused by a specific behavior of the friction parameter which directly depends on the microscopic dynamical process, i.e., on how the collective energy of the relative motion is transferred into the intrinsic excitation energy. It is shown microscopically that the energy dissipation in the fusion process is governed by two mechanisms: One is caused by the nucleon exchanges between two fusing nuclei, and the other is due to a rearrangement of nucleons in the intrinsic system. The former mechanism monotonically increases the dissipative energy and shows a weak dependence on the incident energy, while the latter depends on both the relative distance between two fusing nuclei and the incident energy. It is shown that the latter mechanism is responsible for the energy dependence of the

fusion potential and explains the fading out of the fluctuation-dissipation relation.

4. 教育

1. 五畠祐希、修士（理学），“Gogny 力を用いた HFB による質量数 $A \leq 50$ 領域における中性子過剰原子核の構造”
2. 関澤一之、博士（理学），“Multinucleon transfer reactions and quasifission processes in time-dependent Hartree-Fock theory”

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 日本物理学会若手奨励賞、江幡修一郎、“Canonical-basis time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov theory and linear response calculations”、2015 年 3 月 21 日
2. 筑波大学数理物質科学研究科長賞、関澤一之、“Multinucleon transfer reactions and quasifission processes in time-dependent Hartree-Fock theory”、2015 年 3 月 25 日
3. The Award for Best Project of the 2014 TALENT Course #5 “Theory for Exploring Nuclear Structure Experiments”、関澤一之、2015 年 12 月
4. 「京」を中核とする HPCI システム利用課題 優秀成果賞、橋本幸男、関澤一之、矢花一浩、2014 年 10 月

外部資金

1. 日本学術振興会科学研究費・基盤研究(B)、中務孝、代表、2013 年より継続、5,500,000 円、「原子核の低エネルギー集団励起と核融合・核分裂機構の解明」
2. 科研費・新学術領域研究（研究領域提案型）、中務孝、分担、2012 年より継続、1,000,000 円、「冷却原子を用いた中性子過剰な低密度核物質の状態方程式」
3. 学振・二国間交流事業（オープンパートナー）、中務孝、代表、2014 年、2,484,000 円、セミナー「計算核物理学の進展と展望」
4. JST ImPACT 「核変換による高レベル放射性廃棄物の大幅な低減・資源化」、中務孝（研究開発責任者）、矢花一浩、橋本幸男（研究開発参加者）、2014 年、3,000,000 円、「核構造計算による核反応モデルの高精度化」
5. 科研費 平成 26 年度基盤研究 C、寺崎順、研究代表者、2014 年度採択、

交付額（直接経費）1,300 千円、課題名 QRPA を用いたニュートリノレス二重ベータ崩壊の原子核行列要素計算

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. K. Sekizawa, K. Yabana, “Particle-number projection method in time-dependent Hartree-Fock theory: Properties of reaction products”, Phys. Rev. C 90, 064614 (2014).
2. T. Inakura, W. Horiuchi, Y. Suzuki, and T. Nakatsukasa, “Mean-field analysis of ground state and low-lying electric dipole strength in ^{22}C ”, Phys. Rev. C 89, 064316 (2014).
3. S. Ebata, T. Nakatsukasa, and T. Inakura, “Systematic investigation of low-lying dipole modes using the canonical-basis time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov theory”, Phys. Rev. C 90, 024303 (2014).
4. M. Matsuo, N. Hinohara, K. Sato, K. Matsuyanagi, T. Nakatsukasa, and K. Yoshida, “Quadrupole shape dynamics from the viewpoint of a theory of large-amplitude collective motion”, Phys. Scr. 89, 054020 (2014).
5. T. Nakatsukasa, “Finite amplitude method in linear response TDDFT calculations”, J. Phys. Conf. Ser. 533, 012054 (2014).
6. J. Sheikh, N. Hinohara, J. Dobaczewski, T. Nakatsukasa, W. Nazarewicz, and K. Sato, “Isospin invariant Skyrme density functional approach with axial symmetry”, Phys. Rev. C 89, 054317 (2014).
7. J. Terasaki, “Many-body correlations of quasiparticle random-phase approximation in nuclear matrix elements of neutrinoless double- β decay”, Phys. Rev. C 91, 034318 (2015).
8. J. Terasaki, “Relation between pairing gaps and transition probabilities in $^{132,136}\text{Te}$ ”, Journal of Physics: Conference Series 533, 012059 (2014).
9. Nobuo Hinohara and Jonathan Engel, “Proton-neutron pairing amplitudes as a generator coordinate for double-beta decay”, Phys. Rev. C 90, 031301(R) (2014).

B) 査読無し論文

1. H.Z.Liang, J. Meng, T. Nakatsukasa, Z. M. Niu, P. Ring, X. Roca-Maza, N. Van Giai, P. W. Zhao, “Nuclear charge-exchange excitations in localized covariant density functional theory”, EPJ Web Conf. 66, 02064 (2014)
2. S.Ebata, T.Nakatsukasa, “Pairing effects in nuclear fusion reaction”, J. Phys. Soc. Conf. Proc. 1, 013038 (2014)
3. K. Sekizawa, K. Yabana, “Strong Orientation Dependence of Multinucleon Transfer Processes in $^{238}\text{U}+^{124}\text{Sn}$ Reaction”, 2nd Conf. on Advances in Radioactive Isotope Science, JPS Conference Proceedings Vol. 6 (in press).
4. K. Sekizawa, K. Yabana, “Time-dependent Hartree-Fock calculations for multi-nucleon transfer processes: Effects of particle evaporation on production cross sections”, VI Int. Conf. Fusion14, EPJ Web of Conference 86, 00043 (2015).

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. K. Yabana, “Imaginary time formalism of triple-alpha reaction”, PKU-CUSTIPEN Nuclear Reaction Workshop “Reactions and Spectroscopy of Unstable Nuclei”, Peking Univ., China, Aug. 11-14, 2014.
2. K. Yabana, “Cluster Structure of Light Nuclei Superposing Multiple Slater Determinants”, Int. Conf. Nuclear Theory in the Supercomputing Era -2014 (NTSE-2014), Pacific National Univ. Khabarovsk, Russia, June 23-27, 2014.
3. T. Nakatsukasa, “Mean-field calculations for IoI”, RIBF Discussion Plus!: Island of Inversion, Wako, Japan, Apr. 25, 2014.
4. T. Nakatsukasa, “Nuclear response and equation of state”, APCTP Workshop on the intersection of cold-atomic and nuclear physics, Pohang, Korea, May 12-13, 2014.
5. T. Nakatsukasa, “Nuclear structure studies with energy density functionals”, International workshop on Progress in nuclear shell-model calculations in CNS-RIKEN collaboration, Wako, Japan, Nov. 26-28, 2014.
6. T. Nakatsukasa, “Isospin invariant energy density functional and isobaric analogue states”, International Symposium on Physics of Unstable Nuclei 2014, Ho Chi Minh City, Vietnam, Nov. 3-8, 2014.

7. T. Nakatsukasa, “Time-dependent density functional calculation of nuclear response functions”, International Conference: Nuclear Theory in the Supercomputing Era – 2014, Khabarovsk, Russia, June 23-27, 2014.
8. T. Nakatsukasa, “Time-dependent approaches to nuclear many-body dynamics”, International Workshop on New Frontier of Numerical Methods for Many-Body Correlations, Tokyo, Japan, Feb. 18-21, 2015.
9. J. Terasaki, “Effects of QRPA correlations on nuclear matrix elements of neutrinoless double-beta decay through overlap matrix”, International Conference on Nuclear Theory in the Supercomputing Era (NTSE2014), Khabarovsk, Russia, June 23-27, 2014.
10. J. Terasaki, “Many-body correlations of QRPA in nuclear matrix elements of $0\nu\beta\beta$ decay”, EMMI Rapid Reaction Task Force on Nuclear Matrix Elements, Darmstadt, Germany, November 10-21, 2014.
11. J. Terasaki, “Many-body correlations of QRPA in nuclear matrix elements of $0\nu\beta\beta$ decay”, Double-beta-decay meeting, Chapel Hill, USA, March 9 and 10, 2015.
12. N. Hinohara, “Finite-amplitude method for low-lying collective modes and QRPA sum rules”, ICNT workshop “Physics of exotic nuclei: Theoretical advances and challenge”, RIKEN, Wako, Japan, Jun. 9-13, 2014.
13. N. Hinohara, “Role of Fluctuations of collective coordinates in nuclear matrix elements”, Mini-collaboration meeting on double-beta decay, Univ. of North Carolina, Chapel Hill, NC, USA, Mar. 9-10, 2015.

B) 一般講演

1. K. Yabana, T. Akahori, Y. Funaki, “Imaginary time approach for reaction rate of triple-alpha process”, Fourth Joint Meeting of the Nuclear Physics Divisions of the American Physical Society and the Physical Society of Japan, Hilton Waikoloa Village, Hawaii, USA, Oct. 7-11, 2014.
2. J. Terasaki, “Effects of QRPA correlations on nuclear matrix elements of neutrinoless double-beta decay through overlap matrix”, Neutrino Nuclear Responses for Neutrino Studies in Nuclei (NNR14), Ibaraki, Japan, November 5-6, 2014.
3. J. Terasaki, “Effect of QRPA correlations on nuclear matrix element of neutrinoless double-beta decay through overlap of QRPA states”, 4th joint

- meeting of the APS division of nuclear physics and the PSJ, Waikoloa, USA, Sep.7-11, 2014.
4. N. Hinohara and J. Engel, “Effect of Fluctuations of Quadrupole Deformation and Neutron-Proton Correlations on Double Beta Decay Nuclear Matrix Element”, 2nd Conference on Advances in Radioactive Isotope Science (ARIS2014), Univ. of Tokyo, Jun. 1-6, 2014.
 5. N. Hinohara, M. Kortelainen, W. Nazarewicz, and E. Olsen, “Low-energy Collective Modes and Sum Rules with the Complex-energy Finite-amplitude Method”, (poster presentation), 2nd Conference on Advances in Radioactive Isotope Science (ARIS2014), Univ. of Tokyo, Jun. 1-6, 2014
 6. N. Hinohara and J. Engel, “Effect of Fluctuations of Quadrupole Deformation and Neutron-Proton Correlations on Double Beta Decay Nuclear Matrix Element”, 2nd Conference on Advances in Radioactive Isotope Science (ARIS2014), Univ. of Tokyo, Jun. 1-6, 2014.
 7. N. Hinohara, “QRPA calculations using the complex-energy finite amplitude method”, NUCLEI SciDAC collaboration meeting, Santa Fe, NM, USA, Jun. 15-19, 2014.
 8. N. Hinohara, M. Kortelainen, W. Nazarewicz, and E. Olsen, “Finite-amplitude method for discrete collective excited states and sum rules”, Fourth Joint Meeting of the Nuclear Physics Divisions of the American Physical Society and The Physical Society of Japan (HAWAII2014), Waikoloa Village, HI, USA, Oct. 7-11, 2014.
 9. T. Akahori, Y. Funaki, K. Yabana, “ $3\alpha \rightarrow ^{12}\text{C}$ reaction rate in imaginary time theory”, 3rd Int. Workshop on “State of the Art in Nuclear Cluster Physics” SOTANCP3, Kanto Gakuin Univ, Yokohama,, May 26-30, 2014.
 10. K. Sekizawa, K. Yabana, “Transfer dynamics in the TDHF theory deduced from particle-number projection method”, ECT* Workshop on “From nuclear structure to particle-transfer reactions and back II”, ECT*, Trento, Italy, Nov. 10-14, 2014.
 11. K. Sekizawa, K. Yabana, “Strong orientation dependence of multinucleon transfer processes in $^{238}\text{U}+^{124}\text{Sn}$ reaction”, The 4th Joint Meeting of the Nuclear Physics Division of the APS and the JPS, Hilton Waikoloa Village, Hawaii, USA, Oct. 7-11, 2014.

12. K. Sekizawa, K. Yabana, “Time-dependent Hartree-Fock Calculation for Multinucleon Transfer Processes”, The 2nd conference on Advances in Radioactive Isotope Science “ARIS2014”, ITO International Research Center, Tokyo, Japan, 1-6 June, 2014

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 矢花一浩、“トリプルアルファ反応率の量子力学計算”、第 27 回理論懇シンポジウム「理論天文学・宇宙物理学と境界領域」、国立天文台三鷹キャンパス、2014 年 12 月 24-26 日
2. 中務 孝、“原子核密度汎関数理論の概要”、サマースクール「クォークから超新星爆発まで」、京都大学基礎物理学研究所、京都、2014 年 7 月 24 日

B) その他の発表

1. 矢花一浩、“量子多体問題と密度汎関数理論の考え方”、サマースクール「クォークから超新星爆まで」-基礎物理の理想への挑戦-、京大基研、京都市左京区、2014 年 7 月 24 日
2. 中務 孝、“核構造計算による核反応モデルの高精度化”、ImPACT 藤田プログラム全体会議、J S T 別館、東京都千代田区、2015 年 3 月 26 日
3. K. Sekizawa, K. Yabana, “Time-dependent Hartree-Fock calculations for multi-nucleon transfer and quasi-fission processes”, A seminar at the ANU, Australian National University, Canberra, Australia, July 21, 2014.
4. K. Sekizawa, K. Yabana, “Time-dependent Hartree-Fock calculations for multinucleon transfer processes”, 262th Sendai Nuclear Science Colloquium, Tohoku University, Sendai, Miyagi, Japan, April 15, 2014.
5. 関澤一之、矢花一浩、“射影演算子を用いた核子移行 TDHF 波動関数の分析 II”、日本物理学会第 70 回年会、早稲田大学、東京都新宿区、2015 年 3 月 21 日-24 日
6. 関澤一之、矢花一浩、“原子核ダイナミクスの微視的シミュレーション”、第 6 回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム -HA-PACS と COMA による計算科学の発展と、分野融合への取り組み-、筑波大学大学会館国際会議室、茨城県つくば市、2014 年 10 月 21 日- 22 日
7. 橋本幸男、“ラグランジュ格子を用いた Gogny-TDHF による $^{20}\text{O}+^{20}\text{O}$ の計算”、日本物理学会第 70 回年次大会、東京都新宿区、2015 年 3 月 21 日-24 日

8. 橋本幸男、矢花一浩、関澤一之、“密度汎関数理論に基づく原子核ダイナミクスの研究”、第 1 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会、コクヨホール、東京都港区、2014 年 10 月 31 日

(4) 著書、解説記事等

1. 日野原伸生、“ノースカロライナ大学チャペルヒル校（海外通信）”、原子核研究、第 59 巻 1 号(2014 年 9 月発行) pp. 14-15.

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

【国際連携】

1. 日本学術振興会二国間交流事業オープンパートナー・セミナー（代表：中務）の支援により、米国ロスアラモス国立研究所の Joe Carlson 氏を中心とする理論核物理研究者等とハワイにおいて共同セミナーを開催した（2014 年 10 月）（中務）。
2. ポーランド・ワルシャワ大学の原子核理論グループと共同で、オープンソースコード HFODD をアイソスピン不変なエネルギー密度汎関数へ適用する拡張に取り組んでいる（中務）。
3. 韓国・APCTP およびイタリア・トレント大学の冷却原子系理論グループと、1 次元周期ポテンシャル中のフェルミ粒子系の超流動状態に関する共同研究を行っている（中務）。
4. 米国ノースカロライナ大学の Engel 教授と二重ベータ崩壊の核行列要素に関する共同研究（日野原）。
5. 米国ミシガン州立大学 Nazarewicz 教授およびフィンランド・ユバスキュラ大学の Kortelainen 研究員と原子核密度汎関数の諸問題に関する共同研究（日野原）

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 国際会議 2nd International Conference on Advances in Radioactive Isotope Science (Tokyo, June 1-6, 2014)の組織委員を務めた（中務）。
2. 国際 ICNT ワークショップ Physics of exotic nuclei: Theoretical advances and challenges (RIKEN, June 9-13, 2014)の組織委員長を務めた（中務）。
3. HPCI 戦略プログラム 5 共催の国際ワークショップ Advances and perspectives in computational nuclear physics (Waikoloa, HI, USA, Oct. 5-7, 2014)の組織委員長を務めた（中務）。
4. 第 13 回国際サマースクール CNSSS14 (RIKEN, Aug. 21-27, 2014) の組織委員を務めた（中務）。

9. 管理・運営

矢花一浩

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

中務 孝

計算科学研究センター 宇宙・原子核物理研究部門

原子核物理分野リーダー

計算科学研究センター 運営委員会委員

計算科学研究センター 共同研究委員会委員

数理物質系物理学域 運営委員会委員

数理物質系物理学域 原子核理論グループ長

数理物質系物理学域 図書委員長

理化学研究所・中務原子核理論研究室 准主任研究員（兼務）

京都大学・基礎物理学研究所 運営協議会委員

核理論委員会委員

日本物理学会 第 67-70 期代議員

理化学研究所 RI ビームファクトリー 国際プログラム諮問委員会 (NP-PAC) 委員

雑誌「原子核研究」編集委員

寺崎 順

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

10. 社会貢献・国際貢献

中務 孝

理化学研究所一般公開 (2014. 4. 19) において講演「量子力学と原子核」

カナダ・TRIUMF 国際プログラム諮問委員会 (SAP-EEC) 委員

Editor for Journal of Physical Society of Japan

Editor for International Journal of Modern Physics E

11. その他

海外長期滞在

- 1) 日野原 伸生, Univ. North Carolina at Chapel Hill, NC, USA, 2014 年 6 月
20 日～2014 年 8 月 25 日
- 2) 日野原 伸生, National Superconducting Cyclotron Laboratory,
Michigan State Univ., East Lansing, MI, USA, 2014 年 8 月 27 日～2015 年
3 月 31 日(次年度に継続)

Ⅲ. 量子物性研究部門

1. メンバー

教授	矢花 一浩
准教授	小野 倫也、小泉 裕康、全 暁民
講師	前島 展也
学生	大学院生 9 名、学類生 3 名
教授	日野 健一(学内共同研究員、物質工学域)

2. 概要

物質中の電子ダイナミクス、伝導特性、銅酸化物高温超伝導体、レーザー照射による原子・分子の状態制御、固体における光誘起相転移等に関する研究を行っている。電子ダイナミクスについては時間依存密度汎関数理論(TDDFT)に基づく第一原理計算を行い、更に巨視的マクスウェル方程式と微視的 TDDFT 計算をマルチスケール手法で結びつけ高強度なパルス光が物質中を伝播する様子を記述する新しいシミュレーション法の開発も行っている。伝導特性については、量子力学の第一原理に基づいて高精度に計算でき、最先端のスーパーコンピュータで大規模計算を実現できる計算手法の開発を行っている。また、開発した第一原理計算コード RSPACE を用いた大規模シミュレーションにより、表面や界面で起こる物理現象の解明と予測を行っている。さらに、発見した物理現象をデバイスに応用する研究にも取り組むとともに、計算科学手法によるデバイスデザイン技術の構築を推進している。銅酸化物高温超伝導体については、銅酸化物高温超伝導体を始めとする、電子の電荷の自由度が電子のスピン自由度及び格子の自由度と密接に結びついた物質についての量子力学的基礎理論およびその応用についての研究を行っている。特に、銅酸化物高温超伝導体の超伝導機構解明を目指した研究を行っている。また、銅酸化物超伝導体にスピン渦誘起ループ電流の存在を预言しており、スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子コンピューターの実現を目指した理論研究も行っている。原子・分子系では、ダイナミクスおよびそれらの電磁場との相互作用により生じる現象について時間依存シュレディンガー方程式の直接解法で解く方法によりシミュレーションを行っている。これは、強レーザー場における原子・分子の非線形過程や反陽子と原子の衝突などにおけるエキゾチック原子の生成、さらに振動磁場などの外場による物理的な過程の制御方法の探索につながる。また、パルスレーザー照射下における半導体(超格子)中の励起子、コヒーレントフォノン状態の解析、光誘起相転移を起こす系における CW レーザー 誘起状態の解析も行なっている。

3. 研究成果

【1】高強度パルス光と誘電体の相互作用の解明

高強度で極めて短いパルスレーザーと物質の相互作用に関する研究は、光科学のフロンティアの一つとして急速に進展している。光の瞬間的な最大強度が 10^{14}W/cm^2 程度を越えると物質は瞬時にプラズマ化され、物質を非熱的に加工する手段として注目されている。一方この光破壊に近い強度では光と物質の相互作用に著しい非線形性が生じる。我々は、このような極限的なパルス光と物質の相互作用を記述する理論と計算法の開発に取り組んでいる。

我々のアプローチの根幹をなすのは、結晶の単位セルに、空間的に一様で時間とともに変化する電場が印加されたときの電子ダイナミクスに対する時間依存密度汎関数理論 (TDDFT) に基づく第一原理計算である。実時間・実空間法を用いて TDDFT の基礎方程式である時間依存コーン・シャム方程式を解くことにより、空間的にはナノメートル以下、時間的にはフェムト秒以下の微視的な解像度で光と物質の相互作用を記述し理解することが可能になる。

この単位セル計算は、与えられた光電場に対して結晶中に生じる電流密度（そして電流密度を時間で積分した分極密度）を得ることができることから、電場と分極を結び付ける数値的な構成方程式とみなすことができる。我々はこの観点から、巨視的マクスウェル方程式と微視的 TDDFT 計算をマルチスケール手法で結びつけ、高強度なパルス光が物質中を伝播する様子を記述する新奇なシミュレーション法 (Maxwell + TDDFT マルチスケールシミュレーション法) の開発に成功している。このシミュレーションは、京コンピュータ程度の今日利用可能な最大規模の計算機を用いてのみ実行可能であり、高強度パルス光と物質の相互作用を自在に記述する手法として注目を集めている。

以下、この課題に関係した今年度の研究の中から特筆すべきものを紹介する。

(1) レーザー光によるシリコン結晶バンドギャップ変化の実時間観測 (M. Schultze 他 (カリフォルニア大)、佐藤 (筑波大院生)、矢花, "Attosecond band-gap dynamics in silicon", *Science* 346, 1348-1352 (2014).)

半導体物質中の電子は光が照射されると、一部の電子が光エネルギーを吸収し、バンドギャップを越えて束縛から解放されることにより、物質中を移動できるようになる。カリフォルニア大の実験グループは、この電子の移動する過程を典型的な半導体物質であるシリコン結晶で、アト秒パルス光を用いた実時間観測することに成功した。実験では非常に短くて強い可視領域のパルス光を照射し電子の励起を引き起こし、続いてさらに短い数十アト秒の X 線パルス光を照射して、可視パルス光によって電子が励起する過程のスナップショットを撮影している。この実験で、シリコンのバンドギャップが光の照射後 450 アト秒以下の極めて短い時間で変化することが明らかになった。我々は、TDDFT による電子ダイナミクスシミュレ

ーションを行うことで、電子励起のメカニズムの解明に取り組み、実験に相当する条件下で量子トンネル過程による励起が主要であることを示した。また、アト秒パルスによる内殻励起を調べるために必要となる波動関数情報を提供した。

(2) 高強度パルス光を照射したガラス表面に生じる超高速電流の第一原理計算 (G. Wachter 他 (ウィーン工科大)、佐藤、矢花、トン (計科セ) "Ab Initio Simulation of Electrical Currents Induced by Ultrafast Laser Excitation of Dielectric Materials", Phys. Rev. Lett. 113, 087401 (5 pages) (2014).)

高強度なパルス光と物質の相互作用は、素過程に対する興味とともに、光の振動数をクロックとして動作する新奇なデバイス原理の開拓という観点から興味が持たれている。我々は、最近マックスプランク量子光学研究所の実験グループが観測した、高強度パルス光を照射したガラスの表面に超高速電流が生成される現象の解明を目指して、 α -SiO₂ 結晶に対して時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理電子ダイナミクス計算を遂行した。

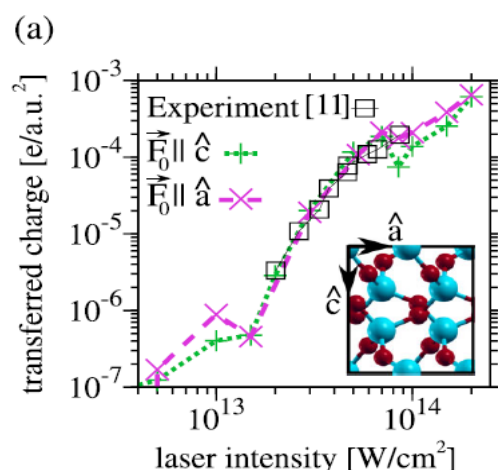


図 1 移動電荷のレーザー強度依存性

図 1 は、パルス光の強度を横軸に、生じた電流により移動した電荷（分極）を縦軸に示している。図の右端は、誘電体に不可逆な壊変をもたらす強度に近いが、その直前の強度のパルス光の照射により、光の強度とともに指数関数的に増大する電流の発生が確かめられ、測定値を良く再現している。計算によれば、移行電荷は結晶軸と光の偏光方向の角度に敏感に依存しており、電流の発生が電子構造の非等方性に強く依存していることを示唆している。また測定値はパルス光の絶対位相に敏感に依存するが、計算においても同様の依存性が確認された。

(3) フェムト秒レーザーによる光破壊の閾値強度とアブレーション深度の第一原理計算 (佐藤、篠原、乙部 (原研)、李 (APRI、韓国)、矢花、G.F. Bertsch (Univ. Washington), "Time-dependent density functional theory of high-intensity, short-pulse laser irradiation on insulators", arXiv: 1412.1445, (2014).)

高強度なパルス光を透明な誘電体に照射すると、ある強度から物質に不可逆な変化が起き、さらに強度を増すと物質表面から原子が飛散するアブレーションが起こる。フェムト秒程度

の非常に短いパルス光を用いると、これらの光ダメージは、レーザの強度を忠実に反映して局所的に進行し、光ダメージに熱拡散の様相が見られないことが知られており、非熱的レーザ加工法として注目されている。

Maxwell+TDDFT マルチスケールシミュレーション法を用いると、高強度パルス光が透明な誘電体に照射した際の、光から電子へのエネルギー移行を第一原理計算により求めることができる。図 2 は、京コンピュータを用い、 α -SiO₂ に対して計算を行った結果であり、横軸が物質表面からの深度、縦軸が 1 原子あたりの電子励起エネルギーを示している。電子励起エネルギーが物質の結合エネルギーを上回れば、アブレーション等の不可逆変化が起こると考えられることから、計算により物質の光破壊が起こる閾値強度やアブレーション深度を見積もることが可能となると考えられる。計算の結果、レーザダメージの閾値強度は 2 倍程度以下の精度で測定値を再現し、アブレーション深度に関しては測定値である 100-150nm の値を高い精度で再現することを確認している。

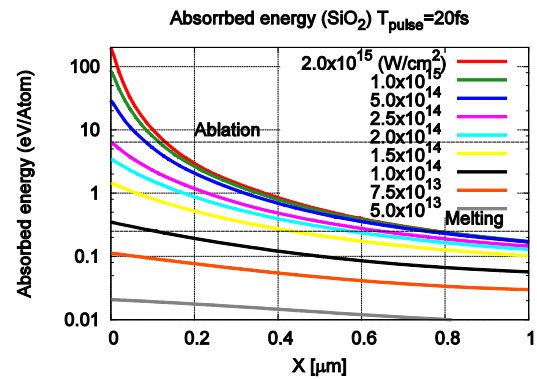


図 2 1 原子あたり電子励起エネルギーの深度依存性

【2】輸送特性計算における高速グリーン関数ソルバーの開発

Overbridging Boundary-Matching(OBM)法や非平衡 Green 関数法により輸送特性を求める際に、半無限電極に挟まれた系の Green 関数を求める必要がある。今、考えるべき Green 関数は

$$G_{ij} = \mathbf{e}_i^T [\varepsilon \mathbf{I} - \mathbf{H}]^{-1} \mathbf{e}_j \quad (i, j = 1, 2, \dots, N_{xy}) \quad (1)$$

である。ここで、 \mathbf{H} は左右電極または散乱領域のハミルトニアン、 ε は入射電子のエネルギー、 \mathbf{I} は単位行列、 \mathbf{e}_i はグリッド上における i 番目の単位ベクトルである。実空間差分法ではハミルトニアンは大規模疎行列となるため LU 分解法などの直接法では、逆行列の計算を実行することは演算量的にもメモリ容量的にも得策ではない。実際の計算の際には(1)式を以下のシフト線形方程式と呼ばれる大規模線形方程式に置き換えて、大規模かつ疎な行列に適した解法である共役勾配法(CG)法を用いて Green 関数の計算を行うのが一般的である。

$$G_{ij}(\varepsilon) = (\mathbf{e}_i, \mathbf{x}), [\varepsilon \mathbf{I} - \mathbf{H}] \mathbf{x} = \mathbf{e}_j \quad (i, j = 1, 2, \dots, N_{xy}). \quad (2)$$

OBM 法や非平衡 Green 関数法では、あるエネルギーを持った電子を入射した際の散乱応答を評価しているため、電子伝導に寄与するフェルミレベル近傍の複数エネルギー点に対して(2)式を解く必要がある。これまで Green 関数の求解に用いていた CG 法では、各エネ

ルギーに対する Green 関数を独立に計算していたため、ここで計算が律速されてしまい大規模な系への輸送特性を評価することは困難であった。この数値解法の 1 つに、対称行列向けの高速解法である Shifted COCG 法がある。この手法は大規模疎行列を扱う実空間法に適していること、線形方程式の解法として広く知られている CG 法の考え方を自然に拡張した形式であり、従来の Green 関数計算コードへの組み込み

が容易である。本研究では名古屋大学張グループ、鳥取大学星グループと協力して Green 関数の計算手法として Shifted COCG 法を我々の開発している RSPACE に組み込んだ。

Shifted COCG 法による計算速度向上の評価モデルとしてナトリウム単原子鎖を用いた。ここで、原子間距離 d はナトリウム結晶中における最近接原子間距離 $d=7.0$ bohr とした。散乱領域の大きさは、 $L_x=L_y=10.0$ bohr, $L_z=d$ である。Kohn-Sham 方程式の運動エネルギーの差分近似には中心差分近似を用い、グリッドの間隔は約 0.5 bohr とした。また、電子間の交換相関作用には密度汎関数理論の局所密度近似を用い、原子核からのクーロン相互作用にはノルム保存型擬ポテンシャルを用いた。

図 3 に CG 法と Shifted COCG 法の計算速度の比較を示す。CG 法では、各エネルギー点に対して独立に方程式を解くため、計算時間は点の数にほぼ比例して増加する傾向にある。一方、Shifted COCG 法では、ほぼ横ばいとなっており、点の数に対する依存性は無視できる程度である。エネルギーサンプルが 50 点のとき、約 22 倍の高速化が達成された。

完成させた計算プログラムを用いて、ピーポッドがカーボンナノチューブ電極に挟まれた系で、キャリア電子が内包されたフラレンによって散乱されることを第一原理計算で明らかにした。このような系は、タイトバインディング法で行われた実績があったが、第一原理計算

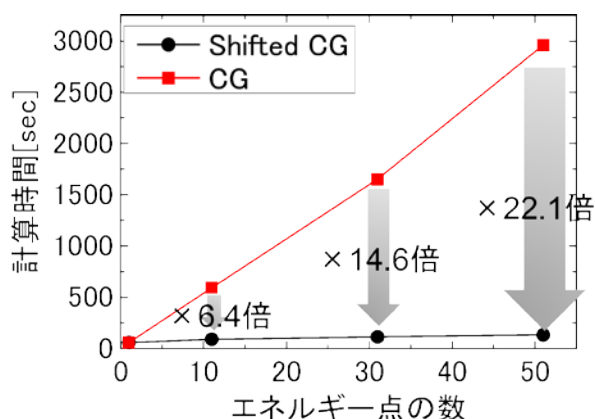


図 3 Shifted CG 法と CG 法の計算時間の比較

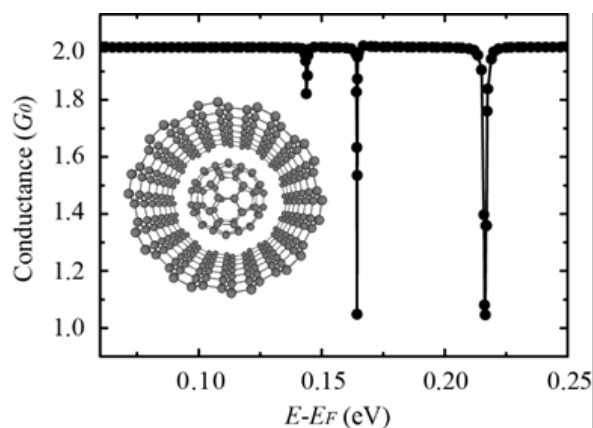


図 4 ピーポッドのコンダクタンス

では計算コストが膨大になるため、扱われた例は私の知る限り皆無である。図 4 に示すように、内包された C_{60} の 3 つある t_{1u} 準位の縮退が解け、それらに入射電子が散乱され、コンダクタンススペクトルに鋭い 3 つのディップが見られる。Shifted CG 法の導入により、多数のエネルギーサンプリングができ、この様にコンダクタンスが急激に変化する部分の詳細な解析が可能になった。

【3】SiC 基板熱酸化機構のシミュレーション

SiC は、Si に比べて高い熱伝導度、高い絶縁破壊電圧、大きなバンドギャップを持つ。これらに加えて、熱酸化により安定な絶縁膜 SiO_2 が得られることから、次世代のパワーデバイス用材料として期待されている。しかし、Si と異なり MOSFET として使用した場合のキャリア移動度が、バルクのキャリア移動度に比べて極端に低いことが SiC-MOSFET の実用化への課題となっている。これは、熱酸化中に生成された界面欠陥によるキャリア散乱が原因であると考えられている。したがって、MOS 構造作成時に生成される界面欠陥の原子構造の理解と制御は、移動度向上に向けた重要な課題となっている。本研究では、密度汎関数理論に基づく第一原理計算により、4H-SiC(001)基板の熱酸化初期と中期での酸化メカニズムの違いを調べた。

密度汎関数理論計算には、本グループで開発している RSPACE を用いた。スーパーセルの界面平行方向のサイズは 4H-SiC(001) の $(6 \times 6\sqrt{3})$ セルとし、基板は、初期酸化モデルで SiC バイレイヤー 6 層分、酸化中期モデルで 4 層分である。基板裏面の C 原子と酸化中期モデルの SiO_2 の未結合手は、水素原子で終端されている。両方のモデルにおいて、SiC の最上面は hexagonal 面である。スーパーセルは、初期酸化モデルで 264 個、酸化中期モデルで 400 個の原子からなる。計算の詳細は、T. Ono and S. Saito, Appl. Phys. Lett. 106 081601 (2015) に記す。

まず、初期酸化モデル表面の SiC 結合の間に一つずつ O 原子を挿入し、酸化エネルギーを

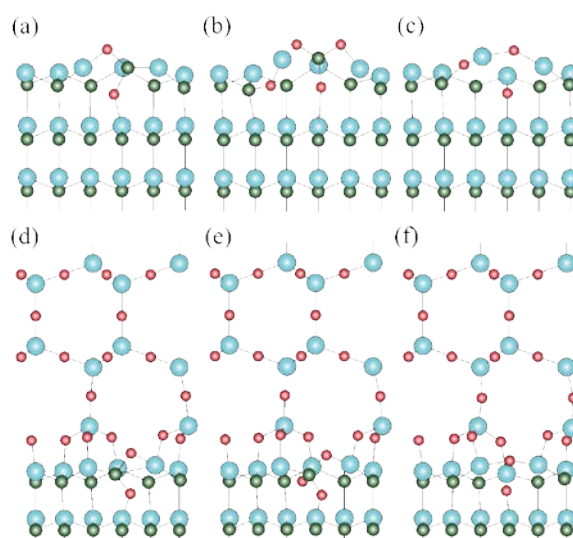


図 5 (上段)4H-SiC(0001)表面モデル。(a) $n=2$ 、(b) $n=4$ 、(c) CO_2 放出前の $n=4$ 。(下段) 4H-SiC(0001)/ β -tridymite SiO_2 界面モデル。(a) $n=2$ 、(b) $n=3$ 、(d) CO 放出前の $n=3$ 。白、緑(大濃灰)、赤(小濃灰)、青(薄灰)の球は、それぞれ H、C、O、Si 原子である。

調べた。図 5 上段に、酸化中に現れる原子構造を示す。また、酸化エネルギーは、 $E_n^{ox} = E_{(n-1)O} + \mu_O - E_{nO}$ と定義した。ここで、 n は挿入した O 原子の数、 E_{nO} は O 原子を n 個挿入したモデルの全エネルギー、 μ_O は真空中の O 分子状態における O 原子の化学ポテンシャルである。挿入した O 原子数に対する酸化エネルギーを図 6 に白棒で示す。

いずれの場合においても、O 原子挿入により安定化されるので、酸化される傾向にある。次に、酸化中に余分な C 原子が放出されるエネルギーを調べた。ここでは、C 原子は CO 分子もしくは CO₂ 分子で放出されるものと仮定し、放出エネルギーを $E_n^{CO_x} = E_{nO}^{w/o C} - E_{(n-x)O}^{w/o C} + E_{CO_x}^{total}$ と定義した。ここで、 $E_{nO}^{w/o C}$ は C 原子放出前の全エネルギー、 $E_{(n-x)O}^{w/o C}$ は C 原子放出後の全エネルギー、 $E_{CO_x}^{total}$ は放出分子の真空中での全エネルギーである。得られた放出エネルギーを図 6 に灰棒、黒棒で示す。

この結果より、初期酸化過程では、O 原子を 4 個挿入した後に CO₂ 分子として放出しやすいことが分かる。

次に、酸化中期過程を模した SiC/SiO₂ 界面の酸化機構を調べた。図 5 の下段に、得られた界面原子構造の例を示す。また、図 7 に酸化エネルギーおよび C 原子放出エネルギーを示す。界面では、O 原子を 3 個挿入した時点で、CO 分子として C 原子を放出する。これは、図 5 (f) に示すように、C 放出によりできた未結合手が、2 個の O 原子によって終端されるからである。一方、表面の場合に優勢であった CO₂ の放出は、最優勢ではない。これは、界面では O 原子が不足している状態であるため、C 原子よりも Si 原子の方が O 原子を引き付けるためである。また、O 原子挿入により反応部分の体積が膨張することが予想できるが、表面の場合は体積膨張によるストレスを表面上方に逃がすことができるのに対し、界面では上部に SiO₂ 層があるため上方に逃がすことができない。したがって、界面の方が体積膨張を抑えるため C 原子を放出するストレスが大きいと、O 原子を 3 つ挿入した時点で、C 原子を CO 分子として放出する。初期酸化と酸化中期で、酸化先端部での C 原子の放出機構(O 原子配位数)や界面ストレスが異なることは、実デバイスで観察されている堆積膜で作成された MOS と熱

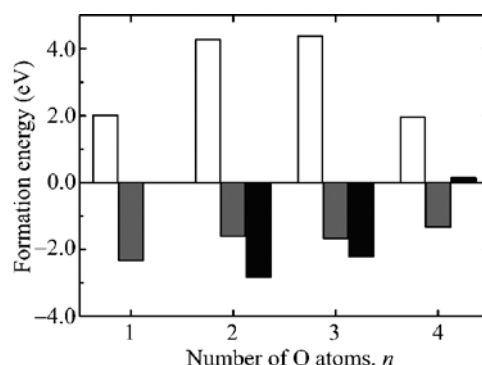


図 6 初期酸化における酸化エネルギー(白)、CO 分子放出エネルギー(灰)、CO₂ 分子放出エネルギー(黒)。

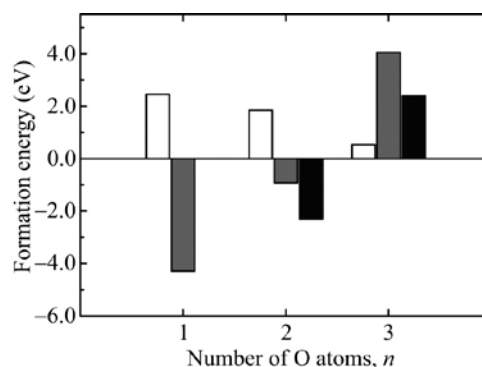


図 7 酸化中期における酸化エネルギー(白)、CO 分子放出エネルギー(灰)、CO₂ 分子放出エネルギー(黒)。

酸化膜で作成された MOS の電気特性の違いを反映しているものであると考えられる。

【4】銅酸化物高温超伝導体の超伝導機構の解明に向けた研究

銅酸化物高温超伝導体の母物質は反強磁性絶縁体であり、そこにホールをドーピングすることにより、超伝導が実現する。ホールは室温では動き回り電流担体となっているが、低温では擬ヤーン・テラー効果による格子変形とそれを中心として発生するスピン渦により、動きが鈍くなっていると考えられる。この状況で、ホールを挟んだ電子間に働く超交換相互作用により、電子は、スピンを回転させながら遍歴運動を起こす。スピンの回転運動の中心は、波動関数のディラックモノポール型の特異点となる。この時、電子波動関数の一価性の要請により全体運動として永久ループ電流をもつ状態が生じる。これが、超伝導状態の高温側に存在する擬ギャップ相であると考えられる。さらに温度を下げると、永久ループ電流がネットワークを作り、巨視的な超伝導電流が流れる状態となる。これが、超伝導相である。このネットワーク形成とそこを超伝導電流が流れる状態に対する波動関数の計算方法を開発した (1. H. Koizumi and A. Okazaki and M. Abou Ghantous, M. Tachiki “Supercurrent flow through the network of spin-vortices in cuprates”, J. Supercond. Nov. Magn. **27**, 2435 (2014))。また、この研究で発見された、“電子がスピンを回転させながら遍歴運動を起こす”ことが超伝導電流の発生メカニズムであるということは、BCS 超伝導体に対しても適応可能である事を示した (2. H. Koizumi, M. Tachiki “Supercurrent Generation by Spin-twisting Itinerant Motion of Electrons: Re-derivation of the ac Josephson Effect Including the Current Flow Through the Leads Connected to Josephson Junction”, J. Supercond. Nov. Magn. **28**, 61 (2015))。以上の研究は、現在受け入れられている粒子数の非保存 (クーパー対の数の揺らぎ) により U(1)ゲージ対称性が起こり、超伝導になるのではなく、“電子がスピンを回転させながら遍歴運動を起こす”ことにより、ディラックモノポール型の特異点が波動関数に生じ、その特異点が U(1)ゲージ対称性を壊し (粒子数は保存される) 超伝導が生じていることを示している。

【5】銅酸化物高温超伝導体を使った量子コンピューター実現に向けた研究

我々がその存在を予言しているスピン渦誘起ループ電流は、右回りと左回りの自由度があり、それを量子ビットとして使うことが可能である。スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子コンピューター実現の為に、制御ビットを実現しなければならないが、その為の量子ビット間のカップラーについて、外部電流を使うことが可能である事を理論的に示した。また、外部電流からの応答電流が、スピン渦誘起ループ電流系の電流分布を識別する為に使える事も示した。これは、量子コンピューターの結果の読み取りに使える可能性がある。

【6】超短パルス強レーザー場における重水素分子非対称解離の制御

超短パルス強レーザー場における重水素分子解離で産出するイオンの量と向きはレーザー電場の位相と電場包絡線の位相の差に依存するということが実験で明らかになっているが、物理的な起因は分かっていなかった。この実験解明のために、我々は大規模な計算で、その起因を以下のように解明した。まず、レーザー場により、重水素分子が電離され、出てくる電子はレーザー場により加速して、親イオンに戻り、親イオンとの衝突により、親イオンを解離させる。解離された産出物の量と向きは電子が戻る時刻によって、異なるということが

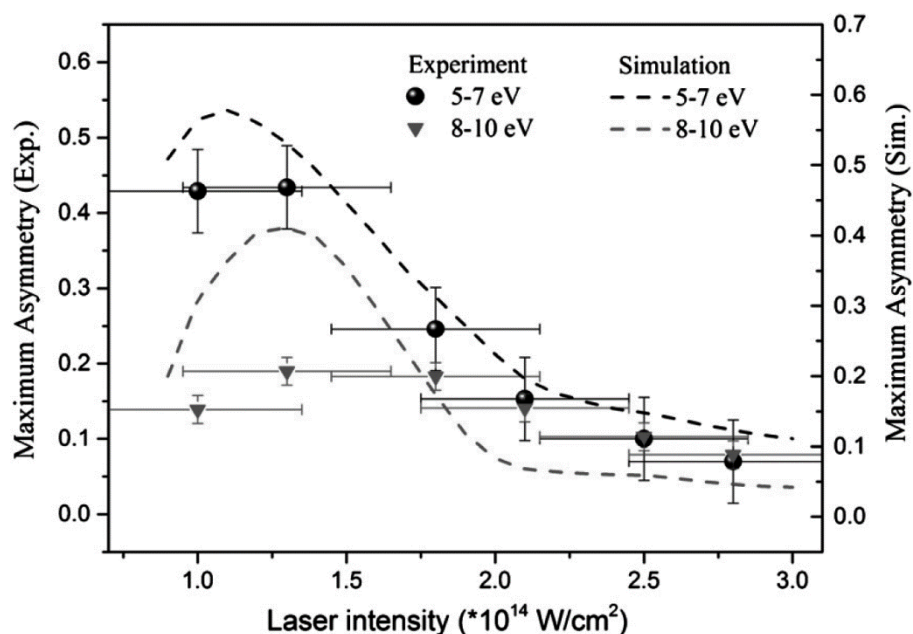


図 8 超短パルス強レーザー場における重水素分子解離の非対称
(右向きと左向きの重水素イオンの差)

明らかになった。この起因に基づいて最大の非対称解離に対応するレーザー強度を見つけた。この計算結果をドイツの実験グループに渡して、図 8 のように、実験と予測した現象が一致した。この研究によって、分子解離過程に対して、有効的な制御が可能になる。共同研究の結果は J. Phys. B に発表された。

【7】中赤外線レーザー場における原子電離過程

中赤外線レーザー場における原子電離について、理論の予測では低エネルギー電離電子の量が極めて少ないが、実験の観測では図 9 のように強い低エネルギー電子が見つかった。その起因はこの分野の研究焦点の一つである。我々はフランスの実験グループとオーストリアの理論グループと共同で、実験と第 1 原理の量子論計算、古典力学の計算を同時に行って、その異常な強い低エネルギー電子の起因を明らかにした。その低エネルギー電子は従来の理論予測で直接電離される電子と異なり、レーザー場で励起される電子が再びレーザー場や静

電場によって 2 次電離された電子である。その電子は励起状態の情報を持っているので、この手法で原子の高い励起状態の分析が可能になった。共同研究結果は Phys. Rev. A に発表された

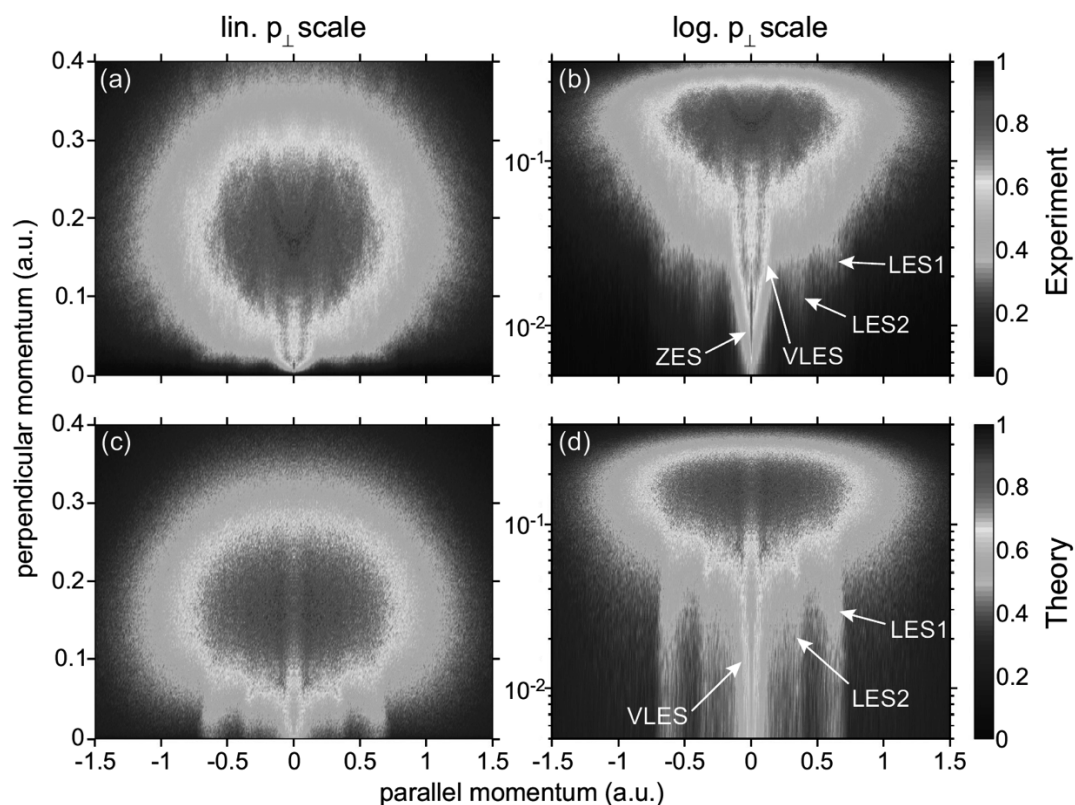


図 9 中赤外線強レーザー場における Ar 原子電子運動量分布 (上: 実験、下: 理論)

【8】半導体・強相関電子系におけるレーザー誘起ダイナミクス

N 型 Si などの半導体にパルスレーザーを照射した場合に発生するコヒーレントフォノンの発現機構についてボゾン化法に基づく解析的・数値的方法により調べた。レーザー照射直後は電子正孔対による連続準位からの寄与によるブロードなピークが光学応答スペクトルに出現するが、時間の経過とともにそれが減少してフォノン起源のピークが明瞭となり、前述の連続準位とフォノン状態の相互作用の種類によっては過渡的なファノ共鳴現象が発現することが分かった。またペロブスカイト型バナジウム酸化物 RVO_3 (R は Y もしくは希土類) における光照射による状態変化を調べるため、 $2 \times 2 \times 2$ クラスタ上での 2 軌道ハバード模型に対する厳密対角化計算を行った。励起光の偏光を z 軸に平行とした場合の計算の結果、基底状態と光励起状態ではスピン構造因子に大きな差異がみられること、そしてその原因が xy 平面内を動く光キャリアの存在にあることが分かった。更に、光誘起相転移を起こす物質として知られる一次元電荷移動錯体 TTF-CA に対して、可視光よりもはるかに低エネルギー

ギーのパルスレーザーを照射した場合のレーザー誘起ダイナミクスを有限系に対する対角化計算などの手法で調べ、光キャリアが発生しない場合でもレーザーが赤外活性なスピン波を励起することで逆スピン・パイエルス転移と呼ばれる光誘起相転移が生じる可能性があることを示した。

4. 教育

修士論文

- 岡崎 智 スピン渦誘起ループ電流の自己無撞着場と相転移温度、外部電流存在下での自発電流
- 大野文隆 フラクショナルな動的 Wannier-Stark Ladder における Floquet 状態の不安定化
- 渡辺陽平 コヒーレントフォノン生成初期時間領域における量子ダイナミクスの理論研究

卒業論文

- 渥美雅俊 銅酸化物超伝導体におけるスピン渦誘起ループ電流の相転移
- 森崎 翼 スピン渦誘起ループ電流を使ったナノのスケール電流素子
- 横井浩太 1次元スピン・パイエルス系におけるレーザー誘起ダイナミクス
- 石島 俊 過渡的着衣プラスモンにおける Landau 様減衰効果

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

1. 日本学術振興会科学研究費、基盤研究（B）、矢花一浩、代表、2014 年度 3250 千円、「固体中のフェムト・アト秒電子ダイナミクスに対する第一原理計算」
2. 日本学術振興会科学研究費、新学術領域研究（研究領域提案型）公募研究、矢花一浩、代表、2014 年度 1950 千円、「光と電子のダイナミクスを記述する第一原理マルチスケールシミュレーション法の開発」
3. 日本学術振興会二国間交流事業オープンパートナーシップ共同研究（アメリカ合衆国）、矢花一浩、代表、2014 年度 2320 千円、「超高速電子ダイナミクスに対する第一原理計算アプローチ」
4. 株式会社 IHI との共同研究、2014 年度研究経費 1000 千円、「時間依存第一原理解析によるフェムト秒レーザと物質との相互作用に関する研究」
5. 科学技術振興機構、戦略的創造研究推進事業・さきがけ、小野倫也、代表、2013 年度より継続、7361 千円、「計算科学的手法による省電力・低損失デバイス用界面のデザイン」
6. 東京大学、委託研究、小野倫也、代表、2012 年度 2360 千円、「実空間手法に基づくナ

ノ構造の電子・スピン輸送特性計算コードの開発」

7. 日本学術振興会科学研究費、新学術領域研究（研究領域提案型）計画研究、小野倫也、分担、2011 年度より継続、1700 千円、「密度汎関数法理論に基づく非平衡ナノスケール電気伝導ダイナミクス」
8. 科学技術振興機構、戦略的創造研究推進事業・CREST、小野倫也、分担、2011 年度より継続、0 円、「ナノとマクロの相界面の物質移動ナノサイクル」
9. 科学技術振興機構、先導的物質変換領域、小野倫也、分担、2012 年度より継続、0 円、「二酸化炭素活性化機構の学理に基づくメタノール室温合成触媒の創成」
10. 文部科学省、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発、小野倫也、分担、2014 年度 0 円、「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」
11. 日本学術振興会科学研究費、基盤研究(C)、全 曉民（トン ショウミン）、代表、2014 年度 650 千円、「赤外線レーザーの付加による原子・分子高速過程の制御の理論研究」
12. 日本学術振興会科学研究費、若手研究(B)、前島 展也、代表、2014 年度 2340 千円、「多自由度強相関電子系における光誘起超高速ダイナミクスの生成と制御」

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. M. Schultze, K. Ramasesha, C.D. Pemmaraju, S.A. Sato, D. Whitmore, A. Gandman, J.S. Prell, L.J. Borja, D. Prendergast, K. Yabana, D.M. Neumark, S.R. Leone, "Attosecond band-gap dynamics in silicon", *Science* **346**, 1348-1352 (2014).
2. S.A. Sato, Y. Shinohara, T. Otobe, K. Yabana, "Dielectric response of laser-excited silicon at finite electron temperature", *Phys. Rev. B* **90**, 174303 (2014).
3. G. Wachter, C. Lemell, J. Burgdoerfer, S.A. Sato, X.-M. Tong, K. Yabana, "Ab Initio Simulation of Electrical Currents Induced by Ultrafast Laser Excitation of Dielectric Materials", *Phys. Rev. Lett.* **113**, 087401 (2014).
4. S.A. Sato, K. Yabana, "Efficient basis expansion for describing linear and nonlinear electron dynamics in crystalline solids", *Phys. Rev. B* **89**, 224305 (2014).
5. M. Noda, K. Ishimura, K. Nobusada, K. Yabana, T. Boku, "Massively-parallel electron dynamics calculations in real-time and real-space: Toward applications to nanostructures of more than ten-nanometers in size", *J. Comput. Phys.* **265**, 145-155 (2014).
6. T. Ono, S. Saito, "First-principles study on the effect of SiO₂ layers during oxidation of 4H-SiC",

- Applied Physics Letters, **106** 081601 1-4 (2015).
7. H. D. Nguyen, T. Ono, “Electron-transport properties of ethyne-bridged diphenyl zinc-porphyrin molecules”, Japanese Journal of Applied Physics, **54** 055201 1-4 (2015).
 8. S. Iwase, T. Hoshi, T. Ono, “Numerical solver for first-principles transport calculation based on real-space finite-difference method”, Phys. Rev. E, accepted.
 9. H. Koizumi and A. Okazaki and M. Abou Ghantous, M. Tachiki, “Supercurrent flow through the network of spin-vortices in cuprates”, J. Supercond. Nov. Magn. **27**, 2435 (2014)
 10. H. Koizumi, M. Tachiki, “Supercurrent Generation by Spin-twisting Itinerant Motion of Electrons: Re-derivation of the ac Josephson Effect Including the Current Flow Through the Leads Connected to Josephson Junction”, J. Supercond. Nov. Magn. **28**, 61 (2015)
 11. C. Mancuso, D.D. Hickstein, P. Grychtol, R. Knut, O. Kfir, X.M. Tong, F. Dollar, D. Zusin, M. Gopalakrishnan, C. Gentry, E. Turgut, J.L. Ellis, M.C. Chen, A. Fleischer, O. Cohen, H.C. Kapteyn, and M.M. Murnane, “Strong-field ionization with two-color circularly polarized laser fields”, Phys. Rev. A **91**, 031402(R) (2015).
 12. B. Wolter, C. Lemell, M. Baudisch, M.G. Pullen, X.M. Tong, M. Hemmer, A. Senftleben, C.D. Schroter, J. Ullrich, R. Moshammer, J. Biegert, and J. Burgdorfer, “Formation of very-low-energy states crossing the ionization threshold of argon atoms in strong mid-infrared fields”, Phys. Rev. A **90**, 063424 (2014).
 13. Z.M. Hu, Y.M. Li, X.Y. Han, D. Kato, X.M. Tong, H. Watanabe and N. Nakamura, “Atomic-number dependence of the magnetic-sublevel population in the autoionization state formed in dielectronic recombination”, Phys. Rev. A **90**, 062702 (2014).
 14. Q.G. Li, X.M. Tong, T. Morishita, C.J. H. Wei and C.D. Lin, “Rydberg states in strong field ionization of hydrogen by 800, 1200 and 1600 nm lasers”, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **47**, 204019 (2014).
 15. G. Wachter, C. Lemell, J. Burgdorfer, S.A. Sato, X.M. Tong and K. Yabana, “Ab initio Simulation of Electrical Currents Induced by Ultrafast Laser Excitation of Dielectric Materials”, Phys. Rev. Lett. **113**, 087401 (2014).
 16. H. Li, A.S. Alnaser, X.M. Tong, K.J. Betsch, M. Kubel, T. Pischke, B. Förg, J. Schötz, F. Sumann, S. Zharebtsov, A. Kessel, S. Trushin, A. Azzeer, and M.F. Kling, “Intensity dependence of the attosecond control of the dissociative ionization of D₂”, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **47**, 124020 (2014).
 17. D.A. Arbo, S. Nagele, X.M. Tong, X.H. Xie and M. Kitzler, J. Burgdorfer, “Interference of electron wave packets in atomic ionization by subcycle sculpted laser pulses”, Phys. Rev. A **89**,

043414 (2014).

18. Y. Matsubara, S. Ogihara, J. Itatani, N. Maeshima, K. Yonemitsu, T. Ishikawa, Y. Okimoto, S. Koshihara, T. Hiramatsu, Y. Nakano, H. Yamochi, G. Saito, and K. Onda, “Coherent dynamics of photoinduced phase formation in a strongly correlated organic crystal”, Phys. Rev. B 89, 161102(R) (2014)

B) 査読無し論文

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. H. Koizumi, “Supercurrent generation in cuprate: spin-vortex model”, XXII International symposium on the Jahn-Teller effect, Institute of Experimental Physics, Technical University of Graz, Graz, Austria, Aug. 18-22, 2014.

B) 一般講演

1. K. Yabana, "Progress in first-principles electron dynamics calculations", LAP Annual Meeting, Sept. 22-26, 2014, Frauenchiemsee, Germany
2. K. Yabana, "Time-resolved dynamical Franz-Keldysh effect", Seminar at Vienna Tech., Sept. 29, 2014, Vinnna, Austria
3. K. Yabana, "Time-dependent density functional theory of high-intensity, short-pulse laser irradiation on dielectrics", Seminar at POSTECH, Nov. 10, 2014, Postech, Korea
4. T. Ono, “First-Principles Simulation for Oxidation Process of 4H-SiC”, The 17th Asian Workshop on First-principles Electronic Structure Calculations, Nov. 3-5, 2014, Seoul, Korea
5. S. Iwase, T. Ono, “Efficient treatment of the surface Green’s function based on real-space finite-difference scheme”, The 17th Asian Workshop on First-principles Electronic Structure Calculations, Nov. 3-5, 2014, Seoul, Korea
6. C. Kirkham, T. Ono, “Effect of SiC Stacking on the Electronic Properties of the SiC/SiO₂ Interface”, The 17th Asian Workshop on First-principles Electronic Structure Calculations, Nov. 3-5, 2014, Seoul, Korea
7. S. Iwase, T. Ono, “Efficient treatment of the Green's function for first-principles transport calculation”, The 2nd International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design, Dec. 1-3, 2014, Tokyo, Japan
8. T. Ono, “DFT calculations for oxidation of SiC”, The 2nd International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design, Dec. 1-3, 2014, Tokyo, Japan
9. C. Kirkham, T. Ono, “Effect of SiC stacking on the electronic properties of the SiC/SiO₂

- interface,” The 2nd International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design, Dec. 1-3, 2014, Tokyo, Japan
10. T. Ono, “Density functional theory study on oxidation of SiC”, Semiconductor Interface Specialists Conference, Dec. 10-13, 2014, San Diego, USA
 11. C. Kirkham, T. Ono, “Interplay between defects and stacking at the SiC/SiO₂ interface”, 17th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods, Jan. 15-17, 2015, Trieste, Italy
 12. T. Ono, “First-Principles Calculation for Thermal Oxidation Process of SiC”, 17th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods, Jan. 15-17, 2015, Trieste, Italy
 13. D. Kieplinski, W.C. Wallace, O. Ghafur, J.E. Calvert, C. Khurmi, D.E. Laban, I.V. Litvinyuk, R.T. Sang, K. Bartschat, D. Moines, A.N. Grum-Grzhimailo, D. Wells, H.M. Quiney, X.M. TONG, “Percent-level accuracy in measuring photoionisation yields and peak intensities for intense few-cycle laser pulses”, 45th Annual Meeting of the APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics, June 2-6, 2014, Madison, Wisconsin, USA
 14. Y. Watanabe, Y. Nemoto, K. Hino, N. Maeshima, “Polaronic Quasiparticle Picture for Coherent Phonon Dynamics in Semiconductors”, ICPS2014, August 10-15, 2014, Austin, Texas, USA

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 矢花一浩、"透明材料におけるアブレーション初期過程の第一原理計算"、第 15 回光量子科学研究シンポジウム、原研関西光科学研究所、2014 年 11 月 13-14 日
2. 矢花一浩、"トリプルアルファ反応率の量子力学計算"、第 27 回理論懇シンポジウム「理論天文学・宇宙物理学と境界領域」、国立天文台三鷹キャンパス、2014 年 12 月 24-26 日
3. 小野倫也、“第一原理計算を用いたナノデバイスの機能予測”、応用物理学会関西支部平成 26 年度第 2 回講演会「シミュレーションが先導するエレクトロニクス・フォトニクス研究 ～関西発イノベーションと若手からの発信～」、神戸、2014 年 11 月 12 日

B) その他の発表

1. 矢花一浩、"光駆動電子ダイナミクスの第一原理計算"、「限界光駆動系のコンセプトとめざす学理」研究会、京大化研、2014 年 8 月 22 日
2. 矢花一浩、"超高速光電子ダイナミクスの第一原理計算"、「先端物質科学と限界光駆動」、京大吉田キャンパス北部構内益川ホール、2015 年 1 月 10-11 日
3. 矢花一浩、"フェムト秒レーザーと物質の相互作用に対する第一原理量子ダイナミクス計算"、京大工学部三浦研セミナー、2015 年 1 月 15 日
4. 岩瀬滋、小野倫也、"第一原理伝道計算によるピーポッドの輸送特性評価"、応用物理学会 2014 年度秋季大会、北海道大学札幌キャンパス、2014 年 9 月 17-20 日
5. 岡崎智、小泉裕康、"スピン渦誘起ループ電流相転移シミュレーション"、日本物理学会 2014 年秋季大会、中部大学春日井キャンパス、2014 年 9 月 7-10 日
6. 小泉裕康、立木昌、"スピン渦超伝導理論による $hc/4e$ 磁束発生の機構"、日本物理学会 2014 年秋季大会、中部大学春日井キャンパス、2014 年 9 月 7-10 日
7. 若浦光、岡崎智、小泉裕康、"スピン渦誘起ループ電流量子ビットにおける最適電流配置"、日本物理学会 2014 年秋季大会、中部大学春日井キャンパス、2014 年 9 月 7-10 日
8. 岡崎智、小泉裕康、若浦光、森崎翼、"スピン渦誘起ループ電流の自己無撞着場計算"、日本物理学会第 70 回年次大会、早稲田大学早稲田キャンパス、2015 年 3 月 21-24 日
9. 小泉裕康、立木昌、"スピン渦誘起ループ電流、交流ジョセフソン効果、電荷に関する超選択則"、日本物理学会第 70 回年次大会、早稲田大学早稲田キャンパス、2015 年 3 月 21-24 日
10. 若浦光、岡崎智、森崎翼、小泉裕康、"スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子コンピューターのアーキテクチャー"、日本物理学会第 70 回年次大会、早稲田大学早稲田キャンパス、2015 年 3 月 21-24 日
11. 森崎翼、岡崎智、若浦光、小泉裕康、"スピン渦誘起ループ電流を使ったナノのスケール電流素子"、日本物理学会第 70 回年次大会、早稲田大学早稲田キャンパス、2015 年 3 月 21-24 日
12. "1 次元拡張イオン性ハバード模型におけるレーザー誘起ダイナミクス"、前島展也、日野健一、日本物理学会、2014 年秋季大会、中央大学、2014 年 9 月 7 日・10 日
13. "ポーラロニック準粒子描像に基づく過渡的ファノ共鳴を伴うコヒーレントフォノンダイナミクス"、渡辺陽平、日野健一、根本裕也、前島展也、長谷宗明、日本物理学会第 70 回年次大会、早稲田大学、2015 年 3 月 21-24 日

(4) 著書、解説記事等

1. K. Yabana, Y. Shinohara, T. Otake, J.-I. Iwata, G.F. Bertsch, "First-Principles Calculations for Laser Induced Electron Dynamics in Solids - Time-Dependent Density-Functional Theory for laser matter interactions", Advances in Multi-Photon Processes and Spectroscopy, Vol. 21, pp. 209-244, Eds. S.H. Lin, A.A. Villaes, Y. Fujimura, World Scientific (2014).
2. 小野倫也、“実空間差分法に基づく第一原理輸送特性計算によるナノ構造体の電子輸送特性”、シミュレーション、**34** 18-22 (2015).

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

異分野間連携

1. 宇宙・原子核物理研究部門との共同研究
矢花は、量子物性部門とともに宇宙・原子核物理研究部門にも所属し、両分野において時間依存密度汎関数理論に基づく実時間・実空間解法を用いた多フェルミオン系ダイナミクスの研究を推進している。
2. 高性能計算システム研究部門との共同研究
矢花は、高性能計算システム研究部門の朴、及び大学院生の廣川と、実時間電子ダイナミクス計算コード ARTED のメニーコアシステムを用いた加速に関して共同研究を行っている。
3. 高速数値計算アルゴリズム開発
小野は、名古屋大学数理グループ及び鳥取大学の物性理論グループと、高速数値計算アルゴリズム開発に関して共同研究を行っている。
4. 界面の電子構造解析に関する共同研究
筑波大学パワーエレクトロニクス研究室矢野裕司准教授と SiC/SiO₂ 界面の原子構造の解析について議論を行っている。

国際連携

1. 日本学術振興会二国間交流事業共同研究（平成 25～27 年度）
米国との間で、超高速電子ダイナミクスに対する第一原理計算アプローチをテーマとする共同研究を平成 25 年度より推進している。米国はバンダービルト大学及びワシントン大学（米国側代表はバンダービルト大学の K. Varga 准教授）、日本側は筑波大学の他、分子科学研究所、日本原子力研究開発機構（日本側代表は矢花）が参加している。

2. アト秒科学に関する国際共同研究

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

3. 時間依存密度汎関数理論に基づく光科学に関する国際共同研究

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

4. 第一原理計算コード国際共同開発

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

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

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

9. 管理・運営

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

10. 社会貢献・国際貢献

11. その他

IV. 生命科学研究部門

生命科学部門は生命機能情報分野、および、分子進化的分野の 2 つの研究分野からなり、それぞれ、第一原理計算に基づく原子レベルでの酵素や DNA の機能解析、真核生物系統間の遺伝情報系統解析を独立に行ってきた。25 年度の終わりに密な共同研究体制を構築し、26 年度は定期的会合を行ってきた。

以下では、それぞれの部門の業績を個別に示す。

IV-1. 生命機能情報分野

1. メンバー

教授	重田	育照 (センター勤務、数理物質系)
助教	庄司	光男 (センター勤務、数理物質系)
博士研究員	原田	隆平 (センター勤務、CREST)
学生	大学院生	2 名、学類生 3 名

2. 概要

生命機能情報分野では、生体内で重要な働きをしている蛋白質と核酸に注目し、その原子レベルでの特異的機能を理論的に解明することを目的としている。平成 26 年度には、光合成酸素発生中心 (PSII-OEC) およびナイロン分解酵素における反応機構の解明を、高精度計算手法である量子/古典混合 (QM/MM) 法により行った。また、全原子分子動力学 (MD) 法により、タンパク質の折り畳み経路解析、トレオニン合成酵素における反応制御機構解明と、ウリジンシチジンキナーゼにおける基質認識機構の解明を行った。これらの研究には膨大な計算を高速に実行する必要があるため、スーパーコンピュータ (HA-PACS, COMA) の効率的利用に取り組んだ。センター内の共同研究として宇宙理論分野、ならびに、高性能計算分野と連携し、それぞれ系外惑星のバイオマーカーおよびアミノ酸生成過程、フラグメント分子動力学法の GPU 化に関する研究を推進した。

3. 研究成果

【1】タンパク質の折り畳みシミュレーション[文献 3, 6, 15]

タンパク質の機能発現に重要な構造変化は、通常の分子動力学で追跡可能な時間より長時間の確率過程において観測される「レアイベント」である。本年度は、効率的なレアイベント探索のため、(1) 構造変化を誘起する可能性が高い初期構造選択と、(2) 短時間 MD による初期構造の構造リサンプリング過程から成る構造サンプリング手法を提案した。本手法で鍵となるのは、構造変化を誘起する可能性が高い初期構造を適切に選択することである。我々は、タンパク質の構造変化を記述する上で反応座標を定義し、それらに射影された高次元空間における「状態分布の端」に注目する。状態分布における密な領域はクラスタと呼ばれ、

準安定状態に対応する。一方、クラスタに属さない状態である「状態分布の端」は遷移状態になりうると仮定し、これらの出現頻度の低い「スパースな分布」をリサンプリングすることで、効率的に構造遷移を誘起できると考えた。クラスタに属さないスパースな分布である「はずれ値」に対応する状態を検出し、短構造リサンプリングを繰り返す “Outlier FLOODing Method (OFLOOD)” と呼ぶ構造サンプリング手法を提案した。

計算効率の検証として、OFLOODを速く折りたたむ典型的なタンパク質である Trp-cage に適用したところ、ナノ秒オーダーの計算時間でフォールディング過程を抽出し、自由エネルギー解析を実行することに成功した。

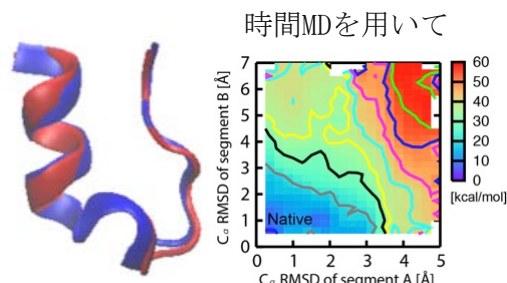


図1 Trp-cage の折りたたみ構造(青:実験、赤:OFLOOD)と得られた自由エネルギー面

【2】ナイロン分解酵素の酵素反応制御機構の解明[文献 4, 7, 13 15]

酵素利用による物質生産や分解は、酵素の基質選択性に由来する高選択性、および、温和な条件下での反応の進行などの特徴から、低環境負荷の手法として期待されている。しかし、酵素の機能や物性は生体内環境に最適化されており、工業化するためには酵素の機能制御が不可欠である。近年分子生物学の発展によって、部位特異的アミノ酸変異実験を中心とした酵素デザインが盛んに行われており、多くのアミノ酸変異のデータが蓄積されている。しかしながら、その手法はランダム変異や結晶から得られた構造情報に基づく経験的なものであり、より効率的な酵素を設計するためにはその機能を詳細に知ることが肝要である。しかし、酵素反応は多段階かつ複雑である上、様々な素過程が存在する。典型的な素過程としては、図2に示すように、(1) ループ部位や基質などの移動により生じる構造変化、(2) 基質を認識する分子認識、(3) 基質に対する化学反応、(4) 反応後のすみやかな脱離である。従来の研究は、基質結合や酵素反応のエナジェティクスを中心に成されているが、酵素の機能改善や設計指針を構築する上で、これら全ての情報を正確に記述することが重要である。本発表では、分子動力学 (MD) 法、QM/MM 分子動力学 (QM/MM MD) 法、ならびに、フラグメント分子軌道 (FMO) 法の各種理論計算手法を用いて、右図に構造を示したナイロンオリゴマー分解酵素 (Ny1B) の機能解析を行ない、アミノ酸残基を置換することによる基質結合・反応における影響を定量的に明らかにした。

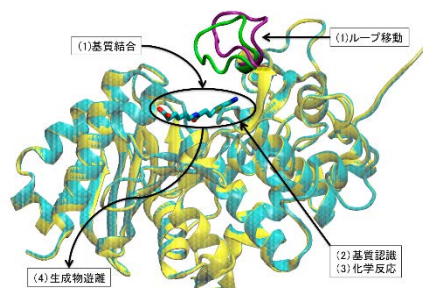


図2 酵素反応の素過程

【3】光合成酸素発生中心の電子状態についての理論的研究 [文献 16, 17]

光合成は光エネルギーを化学エネルギーに変換するシステムであり、生命の持つ重要なシステムの 1 つである。光合成は蛋白質の集合体で構成されており、各蛋白質は光捕集、電子伝達、ATP 生成と糖生成（酸素固定反応）の働きを担っている。電子伝達系を担う光合成システム II では水を分解し酸素発生を発生する反応を行っている。



この反応では水から電子を引き抜くため、本反応は極めて難しく、洗練された化学反応機構が予想される。2011 年に沈教授（岡大）、神谷教授（大阪市大）により原子分解能 (1.9 Å) の X 線構造解析がなされ、初めて活性中心構造とその周りの水分子の立体的配置が明らかとなった。OEC の活性中心は CaMn_4O_5 クラスタが歪んだ椅子型構造になっている。反応中間体におけるプロトン化状態については未だ明らかになっていない。

そのため我々は OEC の反応機構を解明する為、大規模量子古典混合法 (QM/MM) 法を用いて高精度理論解析を行った。OEC 構造における構造変化を EXAFS との結果と比較することで、反応中心 (CaMn_4O_5 クラスタ) の構造特性、水素結合ネットワーク、及びプロトン化状態について考察した。

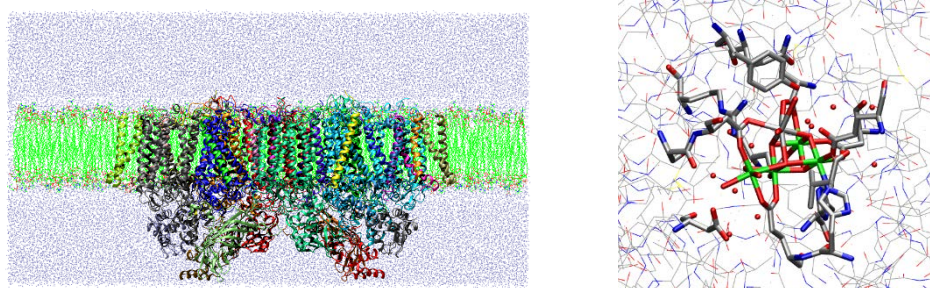


図 3 光合成システム II (左図) と水分解サイト (右図)

【4】再構成ミオグロビンの円偏光二色性吸収特性 [文献 21]

円偏光二色性吸収特性 (CD) は蛋白質の構造解析において古くから調べられており、二次構造を容易に調べられる手法として良く知られている。ミオグロビン (Mb) は補因子としてポルフィリンを持ち、酸素貯蔵を行っている。Mb は Soret 帯にポルフィリン由来の特徴的な CD 吸収を持っている。近年、Woody らの理論解析により、Mb の Soret 帯の CD 吸収はポルフィリンのビニル基の配向により決定される事が示唆された。しかしながら、ビニル基をなくした合成ポルフィリンで再構成された Mb でも CD 吸収が発生する事が長井 (法政大)、長友 (筑波大) らの実験により示された。我々は長井、長友らと連携し、3つの合成ヘムについて理論解析

を行い、ポルフィリンのプロピオン酸残基の配向が CD 吸収に大きく影響する事を理論的に示した。本結果は、これまで定性的かつ指紋領域としてしか用いられていなかった CD 吸収特性が、実はポルフィリンの分子配向を大きく反映することを意味している。CD は X 線構造解析に比べ、測定が容易である。そのため、CD 測定は蛋白質全体の二次構造割合の決定のみならず、補因子の分子配向を解析できる手法になりうると予想される。

【5】宇宙生命計算（宇宙物理分野との共同研究）[文献 22, 23]

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

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

宇宙でのアミノ酸生成過程については様々な反応経路が考えられている。我々は、一般的な生成過程に対して反応物及び中間体の生成エネルギーの安定性を評価することで、宇宙におけるアミノ酸生成の仕組みの解明を試みた。ヒダントインやアミノニトリルを経由する、グリシンの生成過程について、第一原理計算（密度汎関数法）により反応機構を検討することで、宇宙空間でのグリシン生成機構について明らかにした。

4. 教育

＜修士論文＞

- ・ 氏家謙「トレオニン合成酵素における基質特異性決定過程の理論解明：熱力学積分法による自由エネルギー解析」
- ・ 田中弥「ウリジンシチジンキナーゼの基質認識機構についての理論的解明」

＜卒業研究＞

- ・ 張致遠「短時間主成分分析を用いたタンパク質運動モードの粗視化」

- ・ パク・ジョンヒョク 「ヘムの円偏光二色性吸収特性についての理論的計算」
- ・ 田村奈々 「分子動力学法によるアミロイド形成過程の構造サンプリング」

【講義】

1. 重田育照
 - ・ 「計算物理学 2」 (物理学類専門科目、春 ABC)
 - ・ 「計算物理学 3」 (物理学類専門科目、秋 ABC)
2. 庄司光男
 - ・ 「生物物理科学」 (物理学類専門科目、春 ABC)

【集中講義】

1. 重田育照、金沢大学理学部計算科学科 学部学生 集中講義 (1 コマ)
2. 重田育照、大阪大学大学院基礎工学研究科 大学院前期課程 「物性反応量子化学」 (5 コマ)
3. 重田育照、大阪大学基礎工学部 学部 3 回生「化学反応論」 (15 コマ)

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

- 1) 【受賞】 (賞の名称、受賞者名、タイトル、年月日)

なし

- 2) 【外部資金】 (名称、氏名、代表・分担の別、採択年度、金額、課題名)

＜研究代表者＞

1. 新学術領域研究「コンピューティクス」公募研究：重田育照（代表者）（平成 25～26 年度）「Si ナノドットの非線形光学特性変化に対する動力的解析」
2. 新学術領域研究「動的秩序と機能」公募研究：重田育照（代表者）（平成 26 年度）「キユミラント粗視化動力学によるタンパク質動的秩序形成過程の理論研究」
3. 新学術領域研究「複合光応答」計画研究：重田育照（代表者）（平成 26～30 年度）「理論と実験の協奏的アプローチによる多重スピン励起子変換制御」
4. 基盤研究 C：庄司光男（代表者）（平成 26 年度～28 年度）「トレオニン合成酵素の全反応機構の理論的解明」
5. 若手研究 (B)：原田隆平（研究代表者）（平成 26 年～28 年度）「タンパク質構造揺らぎに基づく構造変化予測法の構築」

＜分担研究者＞

1. 特別推進研究：庄司光男（分担者）（代表者：沈建仁）（平成 24 年～28 年度）「光合成系 II における水分解反応の学理解明」

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. K. Okuno, Y. Shigeta, R. Kishi, M. Nakano, “Theoretical design of solvatochromism switching by photochromic reactions using donor-acceptor disubstituted diarylethene derivatives with oxidized thiophene rings”, *Physical Chemistry Chemical Physics* **17**, 6484-6494 (2015). DOI: 10.1039/C4CP05946H
2. M. Kayanuma, K. Hanaoka, M. Shoji, Y. Shigeta, “A QM/MM Study of Initial Steps of Catalytic Mechanism of Nitrile Hydratase”, *Chemical Physics Letters* **623**, 8-13 (2015). DOI:10.1016/j.cplett.2015.01.039
3. R. Harada, Y. Takano, T. Baba, Y. Shigeta, “Simple, Yet Powerful Methodologies for Conformational Sampling of Proteins”, *Physical Chemistry Chemical Physics* (**invited feature article**) **17**, 6155-6173 (2015). DOI: 10.1039/C4CP05262E
4. H. Ando, Y. Shigeta, T. Baba, C. Watanabe, Y. Okiyama, Y. Mochizuki, M. Nakano, “Hydration Effects on Enzyme-Substrate Complex of Nylon Oligomer Hydrolase: Inter-Fragment Interaction Energy Study by the Fragment Molecular Orbital Method”, *Molecular Physics* **113**, 319-326 (2015). DOI: 10.1080/00268976.2014.941311
5. R. Nakamura, Y. Shigeta, K. Okuno, M. Fukushima, M. Hasegawa, S. Suzuki, M. Kozaki, K. Okada, M. Nakano, “Substitution Effects on Optical Properties of Iminonitroxide-substituted Iminonitroxide Diradical”, *Molecular Physics* **113**, 267-273 (2015). DOI: 10.1080/00268976.2014.937777
6. R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, “Enhanced Conformational Sampling Method for Proteins Based on the TaBoo SeArch (TBSA) Algorithm: Application to the Folding of a Mini-protein, Chignolin”, *Journal of Computational Chemistry*, **36**, 763-772 (2015). DOI: 10.1002/jcc.23854
7. T. Baba, M. Boero, K. Kamiya, H. Ando, S. Negoro, M. Nakano, Y. Shigeta, “Unraveling the degradation of artificial amide bonds in nylon oligomer hydrolase: from induced-fit to acylation processes”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **17**, 4492-4504(2015). DOI: 10.1039/C4CP04419C
8. T. Matsui, Y. Kitagawa, M. Okumura, Y. Shigeta, “Accurate Standard Hydrogen Electrode Potential and Applications to the Redox Potentials of Vitamin C and NAD/NADH”, *Journal of Physical Chemistry A*, **119**, 369-376 (2015). DOI: 10.1021/jp508308y

9. Y. Shigeta, R. Harada, M. Kayanuma, M. Shoji, “Quantal cumulant dynamics for real-time simulations of quantum many-body systems”, *International Journal of Quantum Chemistry* (invited review), **115**, 300-308 (2015). DOI: 10.1002/qua.24820
10. R. Harada, T. Nakamura, Y. Takano, Y. Shigeta, “Protein folding pathways extracted by Outlier FLOODing method (OFLOOD)”, *Journal of Computational Chemistry*, **36**, 97-102 (2015). DOI: 10.1002/jcc.23773.
11. T. Baba, T. Matsui, K. Kamiya, M. Nakano, Y. Shigeta, “A density functional study on pKa of small polyprotic molecules”, *International Journal of Quantum Chemistry*, **114**, 1128–1134 (2014). DOI: 10.1002/qua.24631
12. H. Fukui, S. Takamuku, T. Yamada, K. Fukuda, T. Takebayashi, Y. Shigeta, R. Kishi, M. Nakano, “Open-Shell Character and Second Hyperpolarizabilities of One-Dimensional Chromium(II) Chains: Size Dependence and Bond-Length Alternation Effect”, *Inorganic Chemistry*, **53**, 8700-8707 (2014). DOI: 10.1021/ic501334p
13. T. Baba, R. Harada, M. Nakano, Y. Shigeta, “On the induced-fit mechanism of substrate-enzyme binding structures of Nylon-oligomer hydrolase”, *Journal of Computational Chemistry* **35**, 1240-47 (2014). DOI: 10.1002/jcc.23614
14. K. Kamiya, T. Baba, M. Boero, T. Matsui, S. Negoro, Y. Shigeta, “A Nylon-oligomer Hydrolase Promoting Cleavage Reactions in Unnatural Amide Compounds”, *Journal of Physical Chemistry Letters* **5**, 1210-1216 (2014). DOI: 10.1021/jz500323y
15. R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, “Fluctuation Flooding Method (FFM) for accelerating conformational transitions of proteins”, *Journal of Chemical Physics* **140**, 125103 (2014). DOI: 10.1063/1.4869594
16. M. Shoji, H. Isobe, S. Yamanaka, M. Suga, F. Akita, J.-R. Shen, K. Yamaguchi, “On the guiding principles for lucid understanding of the damage-free S₁ Structure of the CaMn₄O₅ cluster in the oxygen evolving complex of photosystem II”, *Chemical Physics Letters* **627**, 44-52 (2015). DOI: 10.1016/j.cplett.2015.03.033
17. M. Shoji, H. Isobe, S. Yamanaka, M. Suga, F. Akita, J.-R. Shen, K. Yamaguchi, “Theoretical studies of the damage-free S₁ structure of the CaMn₄O₅ cluster in oxygen-evolving complex of photosystem II,” *Chemical Physics Letters* **623**, 1-7 (2015). DOI:10.1016/j.cplett.2015.01.030
18. M. Shoji, H. Isobe, S. Yamanaka, Y. Umeda, K. Kawakami, N. Kamiya, J.-R. Shen, T. Nakajima and K. Yamaguchi, “Theoretical modeling of biomolecular systems I. Large-scale QM/MM calculations of hydrogen-bonding networks of the oxygen-evolving complex of

photosystem II”, *Molecular Physics* **113**, 359-384, (2015).

DOI:10.1080/00268976.2014.960021

19. M. Shoji, H. Isobe, S. Yamanaka, Y. Umena, K. Kawakami, N. Kamiya, J.-R. Shen, T. Nakajima, K. Yamaguchi, “Large Scale QM/MM calculations of hydrogen bonding networks for proton transfer and water inlet channels for water oxidation. – Functional Theoretical modelings of the oxygen evolving complex of photosystem II”, *Advanced in Quantum Chemistry* **7**, 325-413 (2014). **DOI:**10.1016/bs.aiq.2014.10.001
20. M. Shoji, Y. Yoshioka, K. Yamaguchi, “An Efficient Initial Guess Formation of Broken-Symmetry Solutions by using Localized Natural Orbitals”, *Chemical Physics Letters* **608**, 50-54 (2014). **DOI:** 10.1016/j.cplett.2014.05.063
21. M. Nagai, C. Kobayashi, Y. Nagai, K. Imai, N. Mizusawa, H. Sakurai, S. Neya, M. Kayanuma, M. Shoji, S. Nagatomo, “Involvement of Propionate Side Chains of the Heme in Circular Dichroism of Myoglobin: Experimental and Theoretical Analyses”, *Journal of Physical Chemistry B* **119**, 1275-1287 (2015). **DOI:** 10.1021/jp5086203
22. Y. Komatsu, M. Kayanuma, M. Shoji, K. Yabana, K. Shiraishi, M. Umemura, “Light absorption and excitation energy transfer calculations in primitive photosynthetic bacteria”, *Molecular Physics* **113**, 1413-1421 (2015).
DOI:10.1080/00268976.2014.998305
23. Y. Komatsu, M. Umemura, M. Shoji, M. Kayanuma, K. Yabana, K. Shiraishi, “Light absorption efficiencies of photosynthetic pigments: the dependence on spectral types of central stars”, *International Journal of Astrobiology*, **14**, 505-510(2014).
DOI:10.1017/S147355041400072X

B) その他執筆

1. 著書分担、4-1 節 (重田育照)、5-1 節 (庄司光男)、金属錯体の量子・計算化学、三共出版株式会社. **ISBN:** 9784782707098
2. 梅田宏明, 塙敏博, 庄司光男, 朴泰祐, 重田育照, “GPGPU クラスタ上での FMO 計算の性能評価”, (日本コンピュータ化学会 2014 秋季年会精選論文特集号) *Journal of Computer Chemistry Japan* (invited letter) **13**, 323-324 (2014) . **DOI:** 10.2477/jccj.2014-0053

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Y. Shigeta, “A Molecular Design of Nonlinear Optical Properties and Conductivity Switches on the Basis of Open-shell Nature”, *2014 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems*

(WINDS), (**Invited**), Nov. 30th-Dec. 5th 2014, Hawaii, USA.

2. Y. Shigeta, “Protein Folding Processes Detected by Enhanced Sampling Techniques”, *19th International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics*, (**Invited**), Nov. 11th-17th 2014, Tamsui, Taiwan.
3. Y. Shigeta, “Towards Theoretical Design of Catalytic Activities of Enzymes”, *The Asia Hub for e-Drug Discovery Symposium 2014*, (**Invited**), Nov. 11th-12th 2014, Sichuan University (SCU), Chengdu, China.
4. Y. Shigeta, “First-principles analysis on enzymatic degradation of nylon”, *2nd World Congress on Petrochemistry and Chemical Engineering*, (**Invited**), Oct. 27th-29th 2014, Las Vegas, USA.
5. Y. Shigeta, “Computational Studies on Redox Potential of Metal Complexes and Model Cofactors”, *International Conference on Synthetic Metals*, (**Invited**), June 30th-July 5th 2014, Turku, Finland.
6. M. Shoji, Y. Ujiie, W. Tanaka, M. Kayanuma, R. Harada, H. Umeda, Y. Shigeta, T. Murakawa, H. Hayashi, “QM/MM study of the L-threonine formation reaction of threonine synthase: mechanism of the product-assisted catalysis”, *Computational Science Workshop 2014*, (**Invited**), August 20th-22nd 2014, Tsukuba.
7. M. Shoji, “A development of the computational biosciences with supercomputers”, *AWEST2014*, (**Invited**), June 17th 2014, Awaji Island.

B) 一般講演

1. M. Kayanuma, M. Shoji, Y. Shigeta, “A QM/MM study of amide formation reaction of Nitrile Hydratase”, *The 53rd Annual meeting of the biophysical Society of Japan*, Oct. 15th 2014, Poster.
2. M. Shoji, H. Isobe, S. Yamanaka, J.-R. Shen, K. Yamaguchi, “Theoretical investigation on the conformation-charge relationship of the photosystem II oxygen evolving complex (PSII-OEC)”, *The 53rd Annual meeting of the biophysical Society of Japan*, Oct. 15th 2014, Poster.
3. M. Shoji, Y. Ujiie, W. Tanaka, M. Kayanuma, R. Harada, H. Umeda, Y. Shigeta, T. Murakawa, H. Hayashib, “QM/MM study on the L-threonine formation reaction of threonine synthase”, *QSCP XIX Taipei*, Poster, Nov. 17th 2014.
4. M. Kayanuma, M. Shoji, Y. Shigeta, “Theoretical study of the reaction mechanism of nitrile hydratase”, *Computational Science Workshop 2014*, Tsukuba, Aug 21st 2014, Poster.
5. Y. Ujiie, W. Tanaka, M. Shoji, R. Harada, M. Kayanuma, Y. Shigeta, T. Murakawa, H. Hayashi, “Free energy calculations of intermediate states of threonine synthase”, *Computational Science Workshop 2014*, Tsukuba, Aug 21st 2014, Poster.

6. W. Tanaka, Y. Ujiie, F. Tomoike, M. Shoji, M. Kayanuma, R. Masui, S. Kuramitsu, Y. Shigeta,
 “A theoretical study on interactions between uridine-cytidine Kinase and its Substrate”,
Computational Science Workshop 2014, Tsukuba, Aug 21st 2014, Poster.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 重田育照、“第一原理計算によるタンパク質の pK_a と構造機能相関”、日本物理学会シンポジウム「プロトネーション イントゥ ダークネス： 生体分子機能理解の為の水素位置情報」、早稲田大学、東京、2015/3/21-24.
2. 重田育照、「高分散分子動力学法によるタンパク質でのレアイベントの検出」、レアイベントの理論科学ワークショップ (招待)、日本原子力研究開発機構システム計算科学センター、千葉、2015/2/16.
3. 重田育照、「理論と実験の協奏的アプローチによる複合スピン励起子変換制御」、新学術領域研究「高次複合光応答」第2回公開シンポジウム (招待)、千里ライフサイエンスセンター、大阪、2015/1/23-24.
4. 重田育照、「酵素活性制御に向けた多階層量子計算手法の応用」、理研シンポジウム「生体分子系量子化学計算の最前線」(招待)、理化学研究所、和光、2015/1/22-23.
5. 重田育照、「宇宙生命連携研究による物質進化過程の探索」27回理論懇シンポジウム (招待)、国立天文台、東京、2015/12/24-26
6. 重田育照、「第一原理計算に基づくタンパク質機能デザイン」、第8回 FMO 研究会 (CBI 学会 2014 年大会) (招待)、タワーホール船堀、東京、2014/10/28-30.
7. 重田育照、「CMD の発想に基づく生命物理の研究」第25回 CMD ワークショップ (招待)、国際高等研究所、京都、2014/9/1-5.
8. 重田育照、“計算化学による pK_a の高精度算出法”、第1回水和ナノ構造研究会 (招待)、奥平温泉、岩手、2014/8/28-29.
9. 庄司光男、“宇宙空間でのアミノ酸生成についての理論的研究”、実験・観測・計算シナジーによる自然界における生体分子の非対称性起源の解明 (招待)、自然科学研究機構、東京、2014/11/29.
10. 庄司光男、“QM/MM 法による酵素反応機構の理論的解明”、CUTE Mini-Workshop, 三重大学 (招待)、三重、2014/5/21.

B) その他の発表

1. 庄司光男、氏家謙、田中弥、栢沼愛、梅田宏明、村川武、林秀行、重田育照、“QM/MM 法によるトレオニン合成酵素の反応制御機構の理論解明”、理論化学討論会、名古屋大学、愛知、口頭、2014/5/22.

2. 庄司光男、氏家謙、田中弥、栢沼愛、梅田宏明、重田育照、村川武志、林秀行、
“トレオニン合成酵素における生成物支援触媒機構解明のための精密自由エネルギー計算”、日本生化学会大会、京都、ポスター、2014/10/15.
3. 田中弥、氏家謙、友池史明、庄司光男、栢沼愛、増井良治、倉光成紀、重田育照、
“ウリジンシチジンキナーゼ中のウリジンのプロトン化状態についての理論的研究”、日本生化学会大会、京都、ポスター、2014/10/15.
4. 氏家謙、田中弥、庄司光男、栢沼愛、重田育照、町田康博、村川武志、林秀行、
“トレオニン合成酵素における反応中間体の自由エネルギー変化についての理論解析”、日本生化学会大会、京都、ポスター、2014/10/15.
5. 栢沼愛、庄司光男、重田育照、“ニトリルヒドラーゼの触媒機構に関する理論的研究”、分子科学討論会、ポスター、広島、2014/9/21.
6. 庄司光男、田中弥、氏家謙、栢沼愛、梅田宏明、重田育照、中野祥吾、片柳克夫、“同化型亜硝酸還元酵素における全化学反応の理論的解明”、分子科学討論会、広島、口頭発表、2014/9/21.
7. 梅田宏明、塙敏博、庄司光男、朴泰祐、重田育照、“GPGPU 化 Fock 行列計算ルーチンの OpenFM0 への組み込み”、分子科学討論会、広島、ポスター、2014/9/21.
8. 田中 弥、氏家 謙、友池 史明、栢沼 愛、増井 良治、倉光 成紀、庄司 光男、
“ウリジンシチジンキナーゼ基質のプロトン化状態についての理論的検討”、第 14 回蛋白質科学会、横浜、ポスター、2014/6/25-27.
9. 氏家 謙、田中 弥、栢沼 愛、町田康博、村川 武志、庄司 光男、“熱力学積分法によるトレオニン合成酵素の基質結合自由エネルギー評価”、第 14 回蛋白質科学会、横浜、ポスター、2014/6/25-27.
10. 庄司 光男、田中 弥、氏家 謙、栢沼 愛、梅田 宏明、中野 祥吾、片柳 克夫、
“同化型亜硝酸還元酵素の反応機構の理論的解明”、第 14 回蛋白質科学会、横浜、ポスター、2014/6/25-27.
11. 原田隆平、鷹野優、重田育照、“蛋白質構造揺らぎを用いた構造変化加速法:FFM”、第 14 回蛋白質科学会、横浜、ポスター、2014/6/25-27.
12. 梅田宏明、庄司光男、塙敏博、朴泰祐、“GPGPU 化した Fock 行列計算ルーチンの OpenFM0 への組み込み”、日本コンピュータ化学会(春)、東工大、東京、2014/5/29-30.

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1) 宇宙・生命・物性分野間連携（宇宙生命）

宇宙空間での L-アミノ酸生成に関する量子化学計算と系外惑星における光合成光捕集の

関係について研究を進展させた。

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

- 1) 「金属タンパク質活性中心の機能における化学的環境の重要性-理論計算からのアプローチ」、講演者：北河康隆、計算生命科学 WG 第 4 回講演会、世話人：庄司光男、計算科学研究センター会議室 A、2014/6/18.
- 2) 「蛋白質構造と機能研究の分子シミュレーション計算アルゴリズム」、講演者：米澤康滋、計算生命科学 WG 第 5 回講演会、世話人：庄司光男、計算科学研究センター会議室 A、2014/11/29.

9. 管理・運営

なし

10. 社会貢献・国際貢献

プレスリリース

1. 「神奈川工科大と阪大、筑波大、兵庫県立大、仏 Strasbourg 大など、人工物質ナイロンオリゴマー分解酵素の反応の仕組みをスパコンで解明」日系バイオテク Online
<https://bio.nikkeibp.co.jp/article/news/20140419/175556/>

11. その他

なし

IV-2. 分子進化的分野

1. メンバー

准教授	稲垣 祐司（センター勤務・生命環境系）
研究員	中山 卓郎
教授	橋本 哲男（共同研究員・生命環境系）
特任助教	谷藤 吾朗（生命環境系）
学生	大学院生 8 名（後期課程在学 3 名、前期課程在学 5 名）、学類生 1 名

2. 概要

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

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

【2】各種トランスクリプトーム・ゲノム解析 ……真核生物の主要グループ間の系統関係を分子系統学的に解明するには、大規模遺伝子データが必須である。そこで系統進化的に興味深い生物種を選び、培養と遺伝子データの取得を進めている。そのデータを基に、大規模配列データ解析を行い正確な真核生物系統の推測を目指す。

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

3. 研究成果

【1】大規模配列データに基づく真核生物大系統の推測

H25 年度末には、我々の研究グループが単離・同定し、正式に記載した *Tsukubamonas globosa* の大規模分子系統解析とミトコンドリアゲノムの完全解読結果を *Genome Biol Evol* 誌に (Kamikawa et al. 2014 *Genome Biol Evol* 6:306-315)、H26 年度初めには *Palpitomoans bilix* の大規模分子系統解析の結果を *Sci Rep* 誌に発表した (Yabuki et al. 2014 *Sci Rep*

4:4641)。H26 年度には、*Microheliella maris*、*Rigifila ramosa*、*Azumiobodo hoyamushi*、新奇真核微生物 PAP020 株のトランスクリプトームデータを基盤にした大規模分子系統解析の準備を行った。*Azumiobodo* と PAP020 株については、大規模分子系統解析まで実施することができた。

(1) *Microheliella maris* の系統的位置の推測

Microheliella は、形態データに基づき系統的に有中心粒太陽虫類と近縁であると示唆されている (Yabuki et al. 2012 *Protist* 163:356-388)。しかし、これまで行われた分子系統解析では、*Microheliella* と有中心粒太陽虫との近縁性は復元されていない。H26 年度までに Illumina Hi-seq2000 により、*Microheliella* と有中心粒太陽虫 SRT127 株、未記載従属栄養性真核微生物 SRT149 株 (通称「ゴニオモドキ」) からのトランスクリプトームデータを取得、大規模分子系統解析用のアライメントデータの作成を行ってきた。残念ながら、H26 年度中にはアライメントデータの準備が終了しなかったため、H27 年度もアライメントデータの作成を引き続き行う。H27 年度中に、大規模分子系統解析を開始する計画である。この研究は、独立行政法人海洋研究開発機構・矢吹彬憲博士との共同研究である。

(2) *Rigifila ramosa* の系統的位置の推測

Rigifila は従属栄養性アメーバ状真核微生物であるが、同じく従属栄養性アメーバ状真核微生物である *Micronuclearia* との近縁性が示された (Yabuki et al. 2013 *Protist* 164:75-88)。しかし、*Rigifila*+*Micronuclearia* クレードが、他の真核生物系統とどのような系統関係にあるのかははっきりしない。我々は *Rigifila* とディフェレリア類 *Diphylleria* sp. SRT116 株から Illumina Hi-seq2000 によるトランスクリプトームデータを取得し、カナダ・Dalhousie 大学 (A. J. Roger & A. G. B. Simpson 博士) とアメリカ・ミシシッピ一州立大 (M. W. Brown 博士) の研究グループが取得したアンキロモナス類 2 種 (*Ancrymonas digmoides* および *Fabomonas tropica*) とマンタモナス類 1 種 (*Mantamonas plastica*) のトランスクリプトームデータと併せ、大規模分子系統解析用データセットを作成した。H26 年度に大規模系統解析を実施したところ、*Rigifila* と *Diphylleria* がクレードを形成し、この関係はブートストラップ (BP) 値 100% で支持された。また *Rigifila*+*Diphylleria* クレードの基部から *Mantamonas* が分岐したが、BP 値によるサポートは低かった (BP = 58%)。H27 年度は、より厳密な系統解析を行うことで、*Rigifila* - *Diphylleria* 間の系統関係、*Rigifila* + *Diphylleria* クレードと *Mantamonas* を含む他の真核生物との系統関係を厳密に検討し、投稿論文作成へ取り掛かる。

(3) *Azumibodo hoyamushi* の系統的位置の推測

キネトプラスチダ類には、寄生種と自由生活種が混在している。しかし、病原性寄生種であるトリパノソーマ目以外の生物種、特に寄生種の分子データは乏しく、キネトプラスチダ類に所属する生物種間の系統関係は未確定である。ホヤの「フニャフニャ病」は、キネトプラスチダに属する *Azumibodo* により引き起こされるが、この病原性寄生種がキネトプラスチダ類中でどのような系統的位置を占めるのかははっきりしない。そこで、*Azumibodo* をはじめ、アメーバ寄生性の *Ichthyobodo*-related organism、魚類寄生性の *Trypanoplasma borreli* から網羅的 mRNA データを取得し、43 遺伝子配列データに基づく分子系統解析を行った。その結果、*Azumibodo* はネオボド目に属することが判り、キネトプラスチダ類の主要系統であるトリパノソーマ目、ユーボド目、パラボド目、ネオボド目、パラキネトプラスチダ目の間での関係を頑健に復元することに成功した。この結果については投稿論文作成中であり、H27 年度中に投稿を目指す。この研究は、独立行政法人水産総合研究センター増養殖研究所・釜石隆博士との共同研究である。

(4) 新奇真核微生物 PAP020 株の系統的位置の推測

新奇真核微生物 PAP020 株は、筑波大・白鳥峻志氏によりパラオ共和国のマングローブ林の底泥から単離された（図 1）。白鳥氏による顕微鏡観察と申請者による小サブユニットリボソーム RNA 配列に基づく系統解析では、PAP020 株と既知の真核生物との間に明らかな近縁性は示唆されなかった。そこで、PAP020 株から Illumina Hi-seq2000 によるトランスクリプトームデータを取得した（H25 年度）。H26 年度には、このトランスクリプトームデータを基盤に 148 遺伝子から構成されるアライメントデータを作成し、予備的な大規模分子系統解析を行った。この予備解析の結果、PAP020 株はディプロモナス類の基部から分岐し、この系統関係は比較的高い BP 値（79%）で支持された。上記結果から、PAP020 株はこれまで報告されていないディプロモナス類の祖先的生物だと考えられる。既にカルペディエモナス様生物群（CLOs）とディプロモナス類との近縁性が判明しているが（Kolisko ら 2010 *Environ Microbiol*）、今回の解析は CLOs を含まない。H27 年度には、昨年度作成した 148 遺伝子アライメントに CLOs の配列データを追加し、大規模分子系統解析をやり直す。この解析により、PAP020 株、CLOs、ディプロモナス類との系統関係（図 2）を検討し、結果について論文作成に取り掛かる。H27 年度に行う PAP020 株の系統的位置の検討は、筑波大学計算科学研究センター学際共同利用プログラム REALPHYL（15a18；代表・稲垣祐司）によりサポートされる。

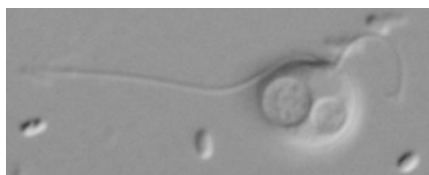


図 1. 嫌気性原生生物 PAP020 株
(写真提供；筑波大・白鳥峻志)



図 2. 考えられるディプロモナス類、カルペディエモナス様生物群 (CLOs)、PAP020 株間での系統関係

【2】各種トランスクリプトーム・ゲノム解析

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

ロパロディア科珪藻は、ミトコンドリアや色素体に加え、独自のシアノバクテリア共生体を保持する(橢円体, spheroid body)。橢円体は窒素固定能力を持ち、窒素化合物を宿主細胞に供給していると考えられてきた。また橢円体は珪藻細胞外では生育できず、珪藻細胞の分裂とともに娘細胞に受け継がれる。しかし、橢円体が珪藻細胞にどの程度統合されているのか詳細は不明であった。中山研究員を中心に、我々はロパロディア科珪藻の一種 *Epithemia turgida* の橢円体ゲノムの全塩基配列を決定し、その結果は H26 年度にアメリカ科学アカデミー紀要 *Proc Nat Acad Sci USA* に掲載された (Nakayama et al. 2014 *Proc Nat Acad Sci USA* 111:11407-11412)。

H26 年度は、主にロパロディア科珪藻の別種 *Rhopalodia gibberula* の橢円体ゲノムを完全解読し、アノテーションを完了した (3.02 M 塩基対)。また、宿主(珪藻)細胞のトランスクリプトームデータ (合計 32 G 塩基対) 解析を行い、58,475 種類のタンパク質遺伝子転写物を同定した。この中に橢円体ゲノムから水平的に転移した遺伝子を探索したが、橢円体ゲノム由来であると断定できる遺伝子は見つからなかった。宿主(珪藻)ゲノムに橢円体由来遺伝子が発見されなかったため、橢円体が「オルガネラ」であるかどうか結論を出すことはできない。H27 年度は、橢円体構造内に珪藻核コードタンパク質が存在するか否かを検討するため、橢円体を精製しプロテオーム解析を行う予定である。また、*E. turgida* と *Rhopalodia gibberula* の橢円体ゲノム間でゲノムサイズ、遺伝子組成、挿入因子の有無に明らかな違いがあった。これはロパロディア科珪藻の種間で橢円体ゲノムに進化的多様性があることを示唆する。そこで、第 3 のロパロディア科珪藻培養株 (*Epithemia* sp.) の橢円体ゲノムを決定する予定である。

(2) 光合成性真核微生物の色素体ゲノム解析

我々は渦鞭毛藻における葉緑体置換、二次的な光合成能の欠失に伴う色素体ゲノム進化に興味を持ち、①元々もっていた祖先型色素体をクロロフィル *a+b* 型色素体と置換した渦鞭毛藻 *Lepidodinium chlorophorum* と、②非光合成性色素体をもつ珪藻 *Nitzschia* sp. NIES-3581 株 (Kamikawa et al. 2015 *Phycol Res* 63:19-28) の色素体ゲノムを解析してきた (京都大学大学院・人間環境学研究科・地球環境学堂・神川龍馬博士との共同研究)。

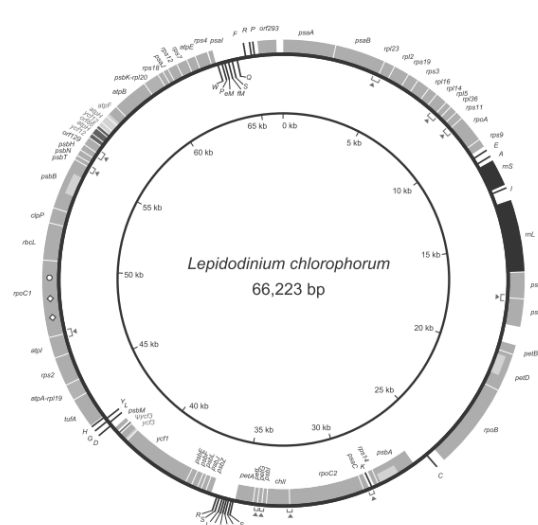


図 3. *Lepidodinium chlorophorum* 色素体ゲノム (Kamikawa et al. 2015 *Genome Biol Evol*)

H26 年度には、それぞれの色素体ゲノムデータを完全に解読し、論文を作成・投稿した (出版された *L. chlorophorum* 色素体ゲノムのみ図 3 に示した)。渦鞭毛藻 *L. chlorophorum* 色素体ゲノムとその配列情報に基づく系統解析により、世界に先駆けてこの色素体はプラシノ藻起源であることを解明した (図 4 ; Kamikawa et al. 2015 *Genome Biol Evol* in press)。 *Nitzschia* sp. NIES-3581 株の色素体ゲノムに関する論文は、2015 年 5 月に *Mol Biol Evol* 誌に受理された。

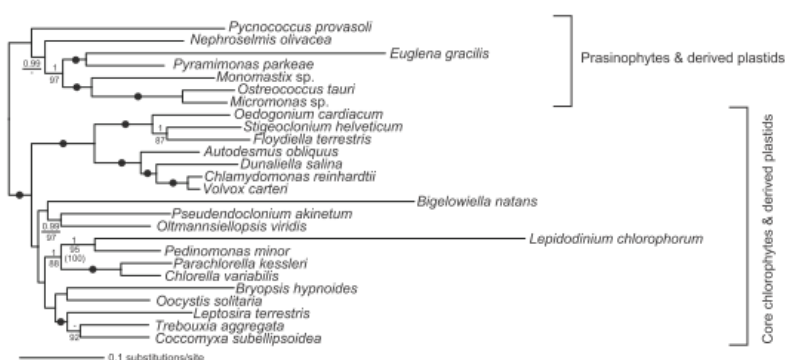


図 4. 52 個の葉緑体遺伝子配列に基づく最尤法による系統解析結果 (Kamikawa et al. 2015 *Genome Biol Evol*)

(3) クロロフィル *a+b* 型葉緑体をもつ未記載渦鞭毛藻 TRD および MRD 株のゲノム・トランスクリプトーム解析

これまで渦鞭毛藻の進化中で緑藻色素体の獲得は、*Lepidodinium* 属の祖先で一回だけ起きたと考えられてきた。しかし我々は東京大学アジア生物資源環境研究センター・岩滝光儀博士の研究グループと共同で、*L. chlorophorum* とは系統的に離れた緑色のクロロフィル *a+b* 型色素体をもつ未記載渦鞭毛藻 TRD 株と MRD 株を発見し（図 5）、一連の研究を進めている。H25 年度

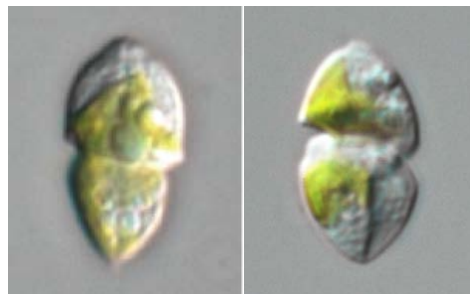


図 5 左、未記載渦鞭毛藻 MRD 株；
右、未記載渦鞭毛藻 TRD 株。
(写真提供；山形大・皿井千裕)

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

H25 年度には、Illumina Hi-seq2000 による TRD 株と MRD 株についてトランスクリプトーム解析とゲノムシーケンス解析が完了していた。H26 年度に、上記 2 株のトランスクリプトームデータを精査したところ、渦鞭毛藻ゲノムにコードされる緑藻由来のタンパク質遺伝子転写物を多数同定することに成功した。渦鞭毛藻ゲノム上の遺伝子からの転写物の 5' 末端には、短い spliced leader 配列が付加される。実際に TRD 株と MRD 株の「緑藻由来」遺伝子転写物の一部が、それらの 5' 末端に spliced leader 配列をもつことを実験的に確認した。これらの結果は、緑藻（共生体）遺伝子が宿主ゲノムに水平的に転移したことを示し、共生した緑藻が TRD 株・MRD 株の細胞中で「葉緑体化」したと強く結論付けることができた。H26 年度には、トランスクリプトームデータの解析とともに、TRD 株および MRD 株の色素体ゲノム解読も行った。MRD および TRD 株からは、H25 年度中に Illumina Hi-seq2000 によるゲノムデータを取得していた。これらのデータを解析したところ、MRD 株の色素体ゲノムは約 100 K 塩基対の環状分子であることが判明した。TRD 株からのデータを解析したところ、55 遺伝子を含む 30 の色素体ゲノム断片（合計 46.3 K 塩基対）の同定に成功したが、色素体ゲノムの完全解読には至らなかった。H27 年度は、完全解読に成功した MRD 株色素体ゲノムに関しては、配列データを精査し遺伝子のアノテーション等を行う。また並行して、TRD 株色素体ゲ

ノムの完全解読をめざし実験を継続する。

(4) 各種真核微生物のミトコンドリアゲノム解析

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

H26 年度はカタブレファリス類 *Roombia* sp. NY0200 株、クリプチスタ生物群の新規メンバーである *Paliptomonas bilix* のミトコンドリアゲノムの解読に取り組んだ。*Roombia* sp. のミトコンドリアゲノム構造は極めて複雑であると考えられ、現在までに 4 つのミトコンドリアゲノム断片 (3.0、6.1、49、118 K 塩基対；合計約 176 K 塩基対) を同定した。これらのゲノム断片には 2 個の rRNA 遺伝子、14 個の tRNA 遺伝子と 34 個のタンパク質遺伝子、12 個の機能未知タンパク質遺伝子及び合計 23 kb 以上の散在反復配列が確認された。現在までに 68 個のイントロンが確認され、これらのイントロン中には 19 個の Intron Encoded Protein (IEP) が同定された。*P. bilix* のミトコンドリアゲノムについては完全解読に成功し、77 K 塩基対の線状ゲノムであることが判明した。興味深いことに、この線状ミトコンドリアゲノムはその両端に約 30 K 塩基対弱の Inverted repeat 構造をもっていることが判った。同様の構造は、系統的に離れた 2 つの生物種 (アルベオラータ生物 *Acavomonas peruviana* およびストラメノパイル生物 *Proteromonas lacerate*) で報告されており、異なる 3 つの真核生物系統のミトコンドリアゲノムが、特異な構造に収斂進化したことを示唆する。H27 年度には、上記 2 つのミトコンドリアゲノムに関する論文を執筆し、英文雑誌に投稿する予定である。

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

ストラメノパイル生物群には PCR 法により海水サンプルから増幅された 18S リボソーム RNA 配列だけから存在が推測されている MAST 系統群が多数知られている。我々は、ブリティッシュコロンビア大 (カナダ)・雪吹直史博士と共同で MAST-13 グループに含まれる嫌気性従属栄養性真核微生物 *Cantina marsupialis* の単離培養に成功し、*C. marsupialis* の詳細な形態データを *J Eukaryot Microbiol* 誌に報告した (Yubuki et al. 2015 *J Eukaryot Microbiol* in press)。H25 年度にこの培養株のトランスクリプトームデータを取得し、独立行政法人海洋研究開発機構・瀧下清貴博士の研究グループと共同でこの生物がもつ退化型ミトコンドリアの代謝機能を推測した。H26 年度には論文を執筆し、

2015 年 5 月現在 *Protist* 誌に投稿中である。

【3】分子系統解析の方法論研究

分子系統解析で広く用いられる“homogeneous”塩基置換モデルでは、遺伝子配列間で塩基組成は大きく異なることを前提としている。しかし現実には、生物種間あるいは同一ゲノムの異なる領域間でも塩基組成が異なることがある。遺伝子配列間の塩基組成が大きく異なる場合、homogeneous 置換モデルを前提とした解析では著しいモデル不整合が生じ、その結果誤った系統樹（アーティファクト）に導かれることが分かっている。この塩基組成の偏りに起因するアーティファクトを防ぐためには、遺伝子配列間の塩基組成の違いを独立したパラメーターとして評価できる“non-homogeneous (NH)”置換モデルによる系統解析プログラムを適応することで解消可能である。一方、この解析法では推定すべきパラメーター数と計算時間が飛躍的に増大するという問題が生じるため、系統解析プログラムの並列化が必須である。

我々は、NH 置換モデルを実装した系統解析プログラム NHML に対し、MPI および OpenMP による並列化を施した（H25 年度）。H26 年度には、テストデータ（15 配列×28,605 塩基座位）を作成し、COMA（PACS-IX）システムにおいて性能評価を行った。その結果、OpenMP/MPI とともに良好な並列化効率

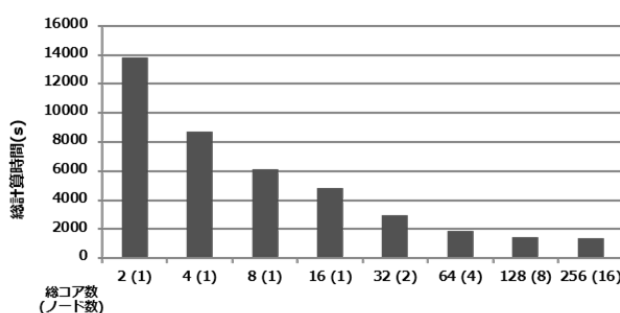


図 6 並列版 NHML の性能評価結果

を示し、128 並列まで効果的な計算時間の短縮が確認された（図 6）。また、真正細菌類の一群である *γ* プロテオバクテリア 24 種のもつ 32 遺伝子配列データ（合計 28,605 塩基座位）に対し、並列版 NHML プログラムを使用して最尤系統樹の探索とブートストラップ解析を行い、homogeneous モデルに基づく解析（Homogeneous 解析）からの結果と比較を行った（図 7 A & B）。Homogeneous 解析では *γ* プロテオバクテリア間の系統関係は高いブートストラップ値で支持されたものの、同じデータを並列版 NHML により解析した結果では大きく異なる樹形が復元された。また、両解析より得られた系統樹の対数尤度差に基づき統計検定を行ったところ、NHML による解析では Homogeneous 解析に比べより適切な系統樹推測が行えていることが示唆された。上記解析は、H26 年度筑波大学計算科学研究センター学際共同利用プログラム NONHOMO（14a14；代表・稲垣祐司）によりサポートされた。

H27 年度は、*γ* プロテオバクテリア間の系統関係のより正確に推測をめざし、69 遺伝子配列データを新たに作成し、並列版 NHML により解析を行う。また、NH モデルを実装した、

アミノ酸配列ベースの系統解析プログラムの作成を開始する。アミノ酸配列に基づく系統解析は、塩基配列ベースの系統解析よりもモデルパラメーター数が飛躍的に増加する。このため、COMA システムの汎用 CPU のみを用いる並列化では十分な高速化が見込めない。そこで、COMA メニーコア部を利用し、系統樹推測のさらなる並列化・高速化を検討する。H27 年度に行う並列版 NHML による解析は、筑波大学計算科学研究センター学際共同利用プログラム NONHOMO (15a24 ; 代表・石川奏太) によりサポートされる。

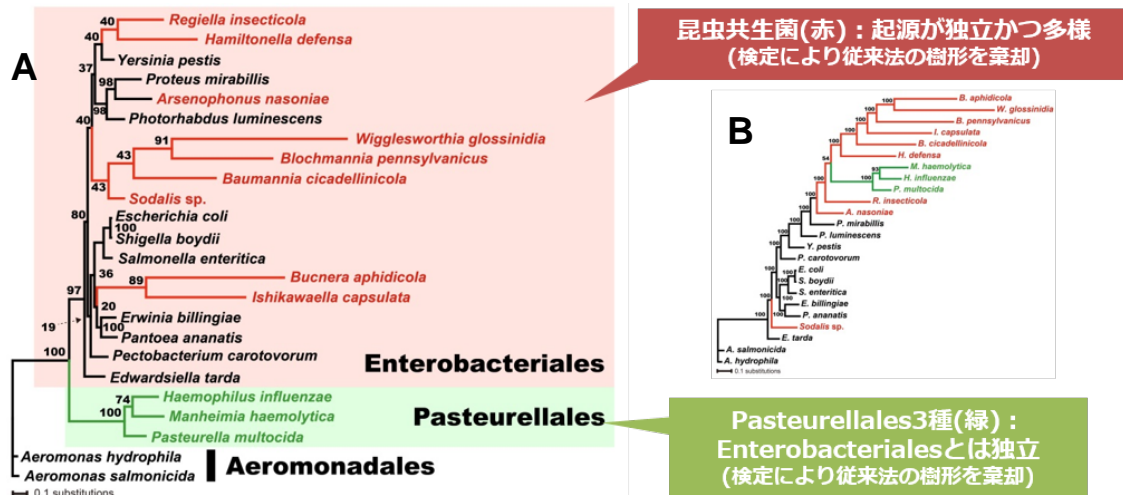


図 7 24 種の γ プロテオバクテリアの系統関係。(A) Non-homogeneous (GG98 + Γ) モデルに基づく系統解析結果 (並列版 NHML を使用)。(B) Homogeneous (GTR + Γ) モデルに基づく系統解析結果。

4. 教育

(1) 博士論文

- A) 石川奏太 “How to Reconstruct Accurate Phylogenetic Trees from Nucleotide Sequence Data with Extraordinary Compositional Bias: Assessment of the Performance of Data-Recoding Methods and Non-Homogeneous Models”

(2) 修士論文

- A) 久米慶太郎 「嫌気性・微好気性真核微生物群フォルニカータにおけるミトコンドリア関連オルガネラの縮退進化」
 B) 平澤輝仁 「カタブレファリス類 *Roombia* sp. NY0200 株のミトコンドリアゲノムにおける大規模なイントロン獲得」
 C) 松尾恵梨子 「緑藻由来葉緑体をもつ渦鞭毛藻における GAPDH 遺伝子の進化」

(3) 卒業論文

- A) 井上貴史 「微好気性鞭毛虫 (*Dysnectes brevis*) と単一バクテリアとの二者培養系の確立」

(4) 集中講義

橋本哲男 : 「核酸・タンパク質配列データにもとづく生物進化の推測」

計算科学リテラシー（日・英）

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

(1) 受賞

- A) 西村祐貴（博士後期課程 2 年）Holtz-Conner Travel Award, Protist2014.
- B) 中山卓郎 日本藻類学会 第 11 回研究奨励賞

(2) 外部資金（名称、氏名、代表・分担の別、採択年度、金額、課題名）

- A) 新学術領域研究（研究領域提案型）「ミトコンドリア・色素体以外の共生オルガネラ成立過程の解明（課題番号 23117006）」，稲垣祐司（代表），研究期間：2011-2015 年度，交付額：直接経費 17,300 千円，間接経費 5,190 千円.
- B) 基盤研究（A）「新型分割イントロン切り出し因子同定に基づく真核生物 mRNA 成熟機構進化の解明（課題番号 23247038）」，橋本哲男（分担；稲垣祐司），研究期間：2011-2014 年，交付額：直接経費 6,200 千円，間接経費 1,860 千円.
- C) 若手研究（B）「ケルコゾア生物における“ミトコンドリア型解糖系”の理解に向けた基礎的研究（課題番号 23247038）」，中山卓郎，研究期間：2014-2015 年，交付額：直接経費 1,400 千円.
- D) 若手研究（B）「非光合成葉緑体の進化と機能多様性探索～比較ゲノムとプロテオームから」，谷藤吾朗，研究期間：2014-2016 年，交付額：直接経費 2,600 千円.

(3) 知的財産権（種別、氏名、課題名、年月日）

なし

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

- ① Kamikawa R, Tanifuji G, Kawachi M, Miyashita H, Hashimoto T, Inagaki Y. Plastid genome-based phylogeny pinpointed the origin of the green-colored plastid in the dinoflagellate *Lepidodinium chlorophorum*. 2015 *Genome Biology and Evolution* in press.
- ② Yubuki N, Pánek T, Yabuki A, Čepička I, Takishita K, Inagaki Y, Leander BS. Morphological identities of two different marine stramenopile environmental sequence clades: *Bicosoeca kenaiensis* (Hilliard 1971) and *Cantina marsupialis* (Larson and Patterson, 1990) gen. nov., comb. nov. 2015 *Journal of Eukaryotic Microbiology* in press.

- ③ Kamikawa R, Yubuki N, Yoshida M, Taira M, Ishida K, Leander BS, Miyashita H, **Hashimoto T**, Mayama S, **Inagaki Y**. Multiple losses of photosynthesis in *Nitzschia* (Bacillariophyceae). 2015 63:19-28.
- ④ **Nakayama T**, **Inagaki Y**. Unique genome evolution in an intracellular N₂-fixing symbiont of a rhopalodiacean diatom. 2014 *Acta Societatis Botanicorum Poloniae* 111:11407-11412.
- ⑤ **Nakayama T**, Kamiawa R, **Tanifuji G**, Kashiyama Y, Ohkouchi N, Archibald JM, **Inagaki Y**. Complete genome of a nonphotosynthetic cyanobacterium in a diatom reveals recent adaptations to an intercellular lifestyle. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 2014 111:11407-11412.
- ⑥ 石川奏太, 中尾昌広, **稲垣祐司**, **橋本哲男**, 佐藤三久. Non-homogeneous 置換モデルに基づく進化系統樹推測の MPI/OpenMP HYBRID 並列化 : 大規模計算システム向けプログラムの開発と性能評価. 2014 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS) 7:13-24.
- ⑦ Kamikawa R, **Inagaki Y**, **Hashimoto T**. Secondary loss of a *cis*-spliced intron after the diversification of *Giardia intestinalis* assemblages. 2014 *BMC Research Notes* 7:413.
- ⑧ Nishimura Y, Kamikawa R, **Hashimoto T**, **Inagaki Y**. An intronic open reading frame was released from one of group II introns in the mitochondrial genome of the haptophyte *Chrysochromulina* sp. NIES-1333. 2014 *Mobile Genetic Elements* 4:e29384.
- ⑨ Yabuki A, Kamikawa R, Ishikawa SA, Kolisko M, Kim E, Tanabe AS, Kume K, Ishida K, **Inagaki Y**. *Palpitomonas bilix* represents a basal cryptist lineage: Insight into the character evolution in Cryptista. 2014 *Scientific Reports* 4:4641.

B) 査読無し論文

なし

(2) 国際会議発表 (発表者には*を付けた)

A) 招待講演

なし

B) 一般講演

- ① *Yuki Nishimura, Mami Nomura, **Takuro Nakayama**, Ken-ichiro Ishida, **Tetsuo Hashimoto**, **Yuji Inagaki**. *Paulinella chromatophora* retains two evolutionarily distinct pathways for tetraphyrrole biosynthesis. 2014 年 8 月 3-8 日 Protist2014. Banff Center, Banff, Canada.

- ② *Eriko Matsuo, Takuro Nakayama, Ryoma Kamikawa, Goro Tanifuji, Chihiro Sarai, Kazuya Takahashi, Mitsunori Iwataki, Yuji Inagaki. Complex evolution of plastid GAPDHs in the dinoflagellate species with green alga-derived plastids. 2014 年 8 月 3-8 日 Protist2014. Banff Center, Banff, Canada.
- ③ *Takuro Nakayama, Goro Tanifuji, Ryoma Kamikawa, Eriko Matsuo, Chihiro Sarai, Kazuya Takahashi, Ken-ichiro Ishida, Mitsunori Iwataki, Yuji Inagaki. "Green genes" in novel green colored dinoflagellates: signs of the nucleomorph genomes. 2014 年 8 月 3-8 日 Protist2014. Banff Center, Banff, Canada.
- ④ *Goro Tanifuji, Chihiro Sarai, Ryoma Kamikawa, Kazuya Takahashi, Takuro Nakayama, Konosuke Morita, Tetsuo Hashimoto, Mitsunori Iwataki, Yuji Inagaki. The discovery of novel nucleomorph-bearing algae. 2014 年 8 月 3-8 日 Protist2014. Banff Center, Banff, Canada.
- ⑤ Ryoma Kamikawa, Eriko Matsuo, Euki Yazaki, Michiru Tahara, Takaya Sakura, Kisaburo Nagamune, *Yuji Inagaki. A snap shot of the gene replacement after endosymbiotic gene transfer: plastid GAPDH genes in the dinoflagellate *Karenia brevis* as a case study. 2014 年 8 月 3-8 日 Protist2014. Banff Center, Banff, Canada.
- ⑥ *Matthew W Brown, Aaron A Heiss, Ryoma Kamikawa, Akinori Yabuki, Takashi Shiratori, Ken-ichiro Ishida, Yuji Inagaki, Alastair GB Simpson, Andrew J Roger. Phylogenomic placement of the orphaned amorphean protists; ancyromonads, mantamonads, collodictyonids, and rigifilids. 2014 年 8 月 3-8 日 Protist2014. Banff Center, Banff, Canada.
- ⑦ Ryoma Kamikawa, Eriko Matsuo, Euki Yazaki, Michiru Tahara, Takaya Sakura, Kisaburo Nagamune, *Yuji Inagaki. Cellular localization of evolutionarily distinctive 'plastid-targeted' GAPDHs in *Karenia brevis* and *K. mikimotoi*. 2014 年 6 月 25-29 日 Integrated Microbial Biodiversity Program meeting, Canadian Institute for Advanced Research. Liblice Castle, Liblice, Czech Republic.
- ⑧ *Takuro Nakayama, Yuji Inagaki. Green dinoflagellates: their origins and implications from transcriptome analyses. 2014 年 6 月 25-29 日 Integrated Microbial Biodiversity Program meeting, Canadian Institute for Advanced Research. Liblice Castle, Liblice, Czech Republic.
- ⑨ *Sohta Ishikawa, Ryoma Kamikawa, Yuji Inagaki. Inter- or intra-genomic gene conversions between peptide-chain release factor paralogs in Bacterioidetes. 2014 年 6 月 20-24 日 Evolution 2014. Raleigh Convention Center, North Carolina, USA.

(3) 国内学会・研究会発表（発表者には*を付けた）

A) 招待講演

- ① *稲垣祐司. 珪藻細胞内の非光合成性シアノバクテリア共生体の起源と進化. 2014 年 10 月 25 日 第 15 回環境微生物系学会合同大会 2014 サテライト研究集会『植物を住处とする微生物の生態』, クラウンパレス浜松, 浜松, 静岡.
- ② *稲垣祐司. 新たな細胞内共生体獲得に伴うゲノムの進化. 2014 年 9 月 17-19 日 日本遺伝学会第 86 回大会, 長浜バイオ大学, 長浜, 滋賀.
- ③ *稲垣祐司, 西村祐貴, 神川龍馬, 谷藤吾朗, 中山卓郎, 橋本哲男. 大規模配列データで解明される新奇真核微生物系統とそのオルガネラゲノム. 2014 年 9 月 12-14 日 日本植物学会第 78 回大会 明治大学生田キャンパス, 川崎, 神奈川.

B) その他の発表

- ① *矢崎裕規, 石川奏太, 久米慶太郎, 谷藤吾朗, 釜石隆, 橋本哲男, 稲垣祐司. 57 遺伝子系統解析により解明されたキネトプラスチダ類における寄生性形質獲得プロセス. 2015 年 3 月 21-22 日 第 84 回日本寄生虫学会大会 杏林大学三鷹キャンパス, 三鷹, 東京.
- ② *高林舜, 谷藤吾朗, 久米慶太郎, 稲垣祐司, 橋本哲男. フォルニカータ生物 *Kipferlia bialata* の二者培養系の確立とゲノム・トランスクリプトーム解析. 2015 年 3 月 21-22 日 第 84 回日本寄生虫学会大会 杏林大学三鷹キャンパス, 三鷹, 東京.
- ③ *森田幸之介, 谷藤吾朗, 中山卓郎, 神川龍馬, 皿井千裕, 高橋和也, 岩滝光儀, 稲垣祐司. 新奇緑色渦鞭毛藻鶴岡株・室蘭株の葉緑体ゲノム比較解析. 2015 年 3 月 20-22 日 日本藻類学会第 39 回大会 九州大学箱崎キャンパス, 福岡, 福岡.
- ④ *中山卓郎, 谷藤吾朗, 神川龍馬, 皿井千裕, 松尾恵梨子, 高橋和也, 岩滝光儀, 稲垣祐司. 新奇緑色渦鞭毛藻類における緑藻遺伝子の網羅的探索 — 新たなヌクレオモルフゲノムへの示唆. 2015 年 3 月 20-22 日 日本藻類学会第 39 回大会 九州大学箱崎キャンパス, 福岡, 福岡.
- ⑤ *野口文哉, 島村繁, 中山卓郎, 矢崎裕規, 橋本哲男, 稲垣祐司, 藤倉克則, 瀧下清貴. 嫌気性ストラメノパイル生物 *Cantina marsupialis* が有するミトコンドリア関連オルガネラの代謝能推定. 2015 年 3 月 20-22 日 日本藻類学会第 39 回大会 九州大学箱崎キャンパス, 福岡, 福岡.

- ⑥ *皿井千裕, 高橋和也, 谷藤吾朗, 中山卓郎, 神川龍馬, 稲垣祐司, 石田健一郎, 岩滝光儀. 山形県鶴岡産緑色渦鞭毛藻 TRD132 株の細胞内微細構造. 2015 年 3 月 20-22 日 日本藻類学会第 39 回大会 九州大学箱崎キャンパス, 福岡, 福岡.
 - ⑦ *潟端篤, 他 16 名 (中山卓郎および稲垣祐司, を含む). 有殻アメーバ *Paulinella chromatophora* のトランスクリプトーム解析. 2014 年 11 月 25-27 日 第 37 回日本分子生物学会. パシフィコ横浜, 横浜, 神奈川.
 - ⑧ *松尾充啓, 他 16 名 (中山卓郎および稲垣祐司, を含む). 有殻アメーバ *Paulinella chromatophora* のゲノム解析. 2014 年 11 月 25-27 日 第 37 回日本分子生物学会. パシフィコ横浜, 横浜, 神奈川.
 - ⑨ *皿井千裕, 谷藤吾朗, 森田幸之助, 中山卓郎, 高橋和也, 岩滝光儀, 石田健一郎, 稲垣祐司. 新奇緑色渦鞭毛藻共生体の微細構造観察: とくに共生体核に注目して. 2014 年 9 月 12-14 日 日本植物学会第 78 回大会 明治大学生田キャンパス, 川崎, 神奈川.
 - ⑩ *矢崎裕規, 石川奏太, 久米慶太郎, 谷藤吾朗, 釜石隆, 橋本哲男, 稲垣祐司. キネトプラスチダ類における寄生性鞭毛虫の系統的位置と寄生性形質獲得プロセスの解明. 2014 年 8 月 21-24 日 日本進化学会第 16 回大会 高槻現代劇場, 高槻, 大阪.
 - ⑪ *松尾恵梨子, 高橋和也, 中山卓郎, 谷藤吾朗, 岩滝光儀, 稲垣祐司. 渦鞭毛藻の葉緑体置換に伴うクロロフィル *a* 生合成系遺伝子の進化. 2014 年 8 月 21-24 日 日本進化学会第 16 回大会 高槻現代劇場, 高槻, 大阪.
 - ⑫ *西村祐貴, 神川龍馬, 谷藤吾朗, 橋本哲男, 稲垣祐司. 真核微生物 *Palpitomonas bilix* におけるミトコンドリアゲノム解析. 2014 年 8 月 21-24 日 日本進化学会第 16 回大会 高槻現代劇場, 高槻, 大阪.
 - ⑬ *谷藤吾朗, Bruce A Curtis, 中山卓郎, 稲垣祐司, 橋本哲男, Julius Lukes, John M Archibald. 寄生性アメーバに細胞内共生するキネトプラスチダ類のゲノム解析. 2014 年 8 月 21-24 日 日本進化学会第 16 回大会 高槻現代劇場, 高槻, 大阪
- (4) 著書、解説記事等
- ① 松尾恵梨子, 稲垣祐司. 細胞進化の証人たち・細胞進化モデル生物図鑑 第 6 回 仁義なき光合成競争奪戦—多重共生系モデル: 渦鞭毛藻 2014 細胞工学 33:452-453.

- ② 稲垣祐司, 中山卓郎. プレスリリース「ミトコンドリア・葉緑体に次ぐ第三の共生オルガネラか? ～“光合成をしない” 光合成細菌のゲノム解読に成功～」

平成 26 年 7 月 22 日

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

(1) 異分野連携

高性能計算システム研究部門との連携による分子系統解析プログラムの並列化

(2) 国際連携

A) A. J. Roger 博士 (Dalhousie 大・カナダ) および A. G. B. Simpson 博士

(Dalhousie 大・カナダ) との共同研究: フォルニカータ生物群における嫌気性ミトコンドリア機能の解析

B) A. J. Roger 博士 (Dalhousie 大・カナダ)、A. G. B. Simpson 博士 (Dalhousie

大・カナダ)、M. W. Brown 博士 (アメリカ・ミシシッピ州立大) との共同研

究: 大規模遺伝子配列データに基づく真核生物大系統の推測

(3) 国際活動

なし

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

- (1) 第 37 回日本分子生物学会ワークショップ 1W18「細胞内共生した生物や環境ウィルスのゲノム進化」 開催場所パシフィコ横浜 (神奈川県横浜市), 2014 年 11 月 25 日, オーガナイザー: 橋本哲男、武村政春

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

9. 管理・運営

なし

10. 社会貢献・国際貢献

なし

11. その他

なし

V. 地球環境研究部門

1. メンバー

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

2. 概要

地球環境学部門における主な活動としては、文部科学省グリーン北極事業の北極温暖化研究プロジェクトに参加し、北極振動と北極温暖化増幅の関係を分析した。2000 年以降に北極温暖化増幅が強化され、同時に負の北極振動が顕在化した。その結果、北極圏が温暖化する一方で、シベリアを中心とする中緯度が寒冷化している。IPCC で報告されている気候モデルは、北極温暖化と平行して地球温暖化が進行すると予測しているが、実際には 1998 年以降は予測に反して既に 16 年も温暖化が停滞している。これは温暖化ハイエイトスと呼ばれている。気候モデルは温暖化で正の北極振動が現れると予測しているが、実際には負の北極振動が顕在化している。この矛盾がハイエイトスの原因のひとつと考えられることから、大気場の主要な自然変動としての北極振動の観点からハイエイトスの原因を究明している。また、線形傾圧モデル(LBM)を用いて北極振動の特異固有解理論を発展させ、北極振動指数(AOI)の正負に伴う傾圧不安定解の構造変化を解析した。

地球環境部門におけるもう一つの主な活動として、都市気象研究と将来の地域気候予測研究がある。都市気象研究については、文部科学省の気候変動適応推進プログラム(RECCA)に参加し、次世代の都市気象モデルを開発している。また、本センターと多治見市の連携協定に基づき、多治見の熱環境の緩和策に資する観測研究を行っている。地域気候の将来予測研究については、環境省の環境研究総合推進費(S-8)の課題代表を務め、地域気候の将来予測を GUI ベースで実行できるアプリケーションの開発を行っている。以下に、それぞれの研究成果の概要を記す。文科省の RECCA プロジェクトでは、前年度開発した建物間放射モデルと樹木モデルを結合させ、建物と樹木が混在する都市街区内における放射・熱環境をシミュレートできるモデルを開発した。夜間の都市熱環境に対する植生の効果を評価するための人工気象室(ポリエチレンチャンバー)を開発した。多治見市との共同プ

プロジェクトでは、多治見駅付近の熱環境を詳細に調査するとともに、人が感じる温度（体感温度）や人体生理測定（皮膚温など）を行い、ドライミスト、ウェットミスト、街路樹、高反射性舗装道路の効果を評価した。環境省の S8 プロジェクトでは、これまで開発してきた「温暖化ダウンスケーラ」をインドネシア気候・気象・地球物理庁（BMKG）に導入した。このソフトウェアの導入により、今後、途上国が独力で地域の温暖化予測ができるようになることが期待される。

3. 研究成果

【1】大気大循環研究

（1）北極低気圧の数値実験（田中）

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

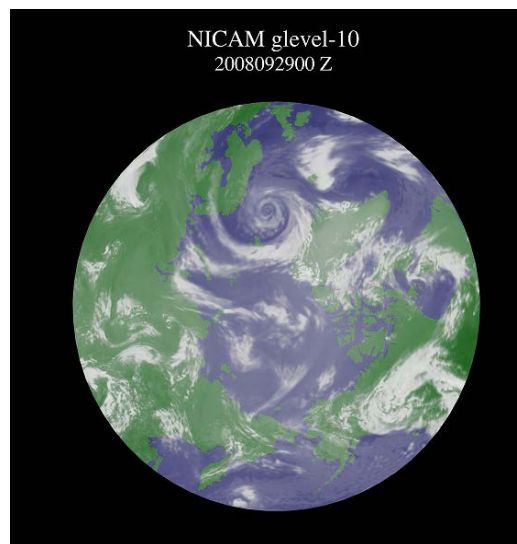


図1 NICAM による北極低気圧の数値実験

図1は雲解像大気大循環モデルNICAMの7km格子モデルで再現された北極低気圧の雲画像である。アイスランドの風下低気圧がトリガーとなって急発達したものであるが、スパイラル状の雲が4重に巻き付いて見ごたえのある映像となっている。発達するにつれて中心付近は寒気核となり、熱帯低気圧やポーラーローとも異なる構造になる。

(2) 熱帯循環と季節内変動の理論的研究 (田中)

熱帯循環に特徴的な季節内振動(MJO)は、東西波数1の大規模な対流域が50日程度の周期で東進する特徴がある。本研究では、3次元スペクトルモデルから線形傾圧モデル(LBM)を導き、東西方向に変化する基本場における方程式の固有解を調べることで、MJOモードの検出を試みた。Tanaka and Seki (2013)による手法で南北鉛直に加えて東西方向に変化する気候値の基本場でプルミティブ方程式系を線形化し、固有振動を安定して求める手法が既に確立されている。中高緯度はポテンシャル渦度(PV)が力学を支配し、ロスビー波の世界となっているが、低緯度では速度ポテンシャル(VP)で表現される発散場が支配的で、重力波の世界となっている。本研究ではその特徴を考慮して、重力波だけで方程式を閉じて固有解を求めた。

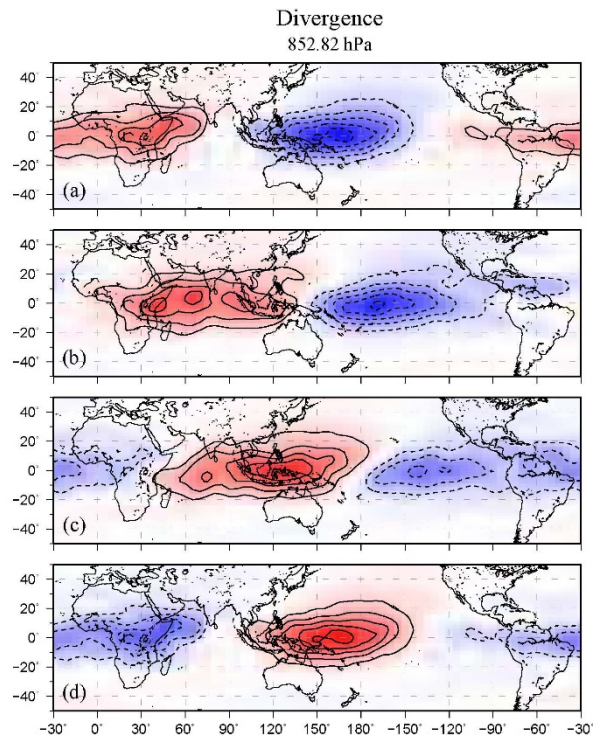


図2 MJOモードの下層発散場のライフサイクル (Yamagami)

図2は方程式の固有解として得られた波数1の構造を持つMJOモードの大気下層の発散場を、ライフサイクルの位相角0度から180度まで描いたものである。したが

って、a 図と d 図は符号が反転した同じ分布となる。周期は 12.5 日と観測される MJ0 より短い、対流圏上層と下層で収束と発散が反転するケルビン波が、地域性を示しながら東進する特徴は MJ0 と類似している。

【2】都市気候の将来予測

(1) 温暖化影響評価研究者のためのダウンスケーリング（日下）

環境省の環境研究総合推進費（S-8）の研究課題である、「温暖化影響評価研究者のためのダウンスケーラシステム（ダウンスケーラ）」の開発を行った。平成 25 年度に開発したユーザ支援システムをベースに、S-8 の影響評価研究者や、自治体の研究者、環境省の研究企画課などより提示された課題と要望をダウンスケーラに反映させ、影響評価研究者と気候研究者の双方にとってより使いやすく有用なシステムとして完成させた。

また、ダウンスケーラの初心者ユーザのための講習会を S-8 の参画者向けに開催した。その後、ダウンスケーラの利用を希望する S-8 の参画機関に、ダウンスケーラの最新版を配布した。これと並行して、S-8 に参画していない自治体（兵庫県）からの要望に応える形で、兵庫県農政環境部温暖化対策課および環境省地球環境局総務課研究調査室に配布した。

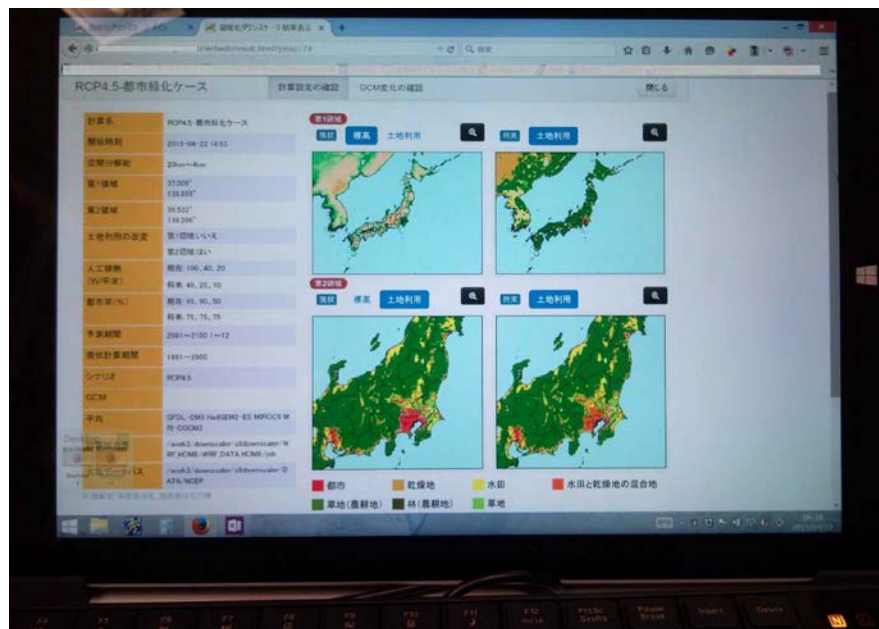


図3 開発したダウンスケーラ



図4 ダウンスケーラ講習会の様子。JAMSTEC 東京事務所にて開催。

(2) 建物解像並列LESモデルの共同開発

本研究課題で開発した街区・建物周辺微気象モデル (Large Eddy Simulation モデル) を用いて、将来の夏の典型日を対象とした名古屋中心街 (栄地区) と多治見中心街 (多治見駅周辺) の暑熱環境 (気温、湿度、放射等) の将来予測を行った。さらに、これらの地域で暑熱環境緩和策・適応策を実施した場合の気温及び暑さ指数への影響を解析・評価した。暑さ指数は熱中症を予防する目的で提案された WBGT (Wet Blue Globe Temperature) を用いた。

暑熱環境緩和策・適応策の 1 つ目は都市緑化 (街路樹設置) のケースで、昨年度開発した植生モデル (樹木 1 本 1 本が表現可能) を用いて高さ 10m、樹冠幅 4m の街路樹を歩道に設置して計算を行った。2 つ目はミスト散布のケースで、高さ 3m、4m 間隔で噴霧量 50ml/分のドライミストを設置して計算を行った。

その結果、街路樹設置は、樹木の蒸散及び日陰による気温低減効果もあるが、それ以上に暑さ指数 (WBGT) の低減効果が大きいことが分かった。一方、ミスト散布は、集中的に配置・散布することで気温低減効果は大きくなるが、WBGT 低減効果は街路樹設置よりも小さいものとなった。

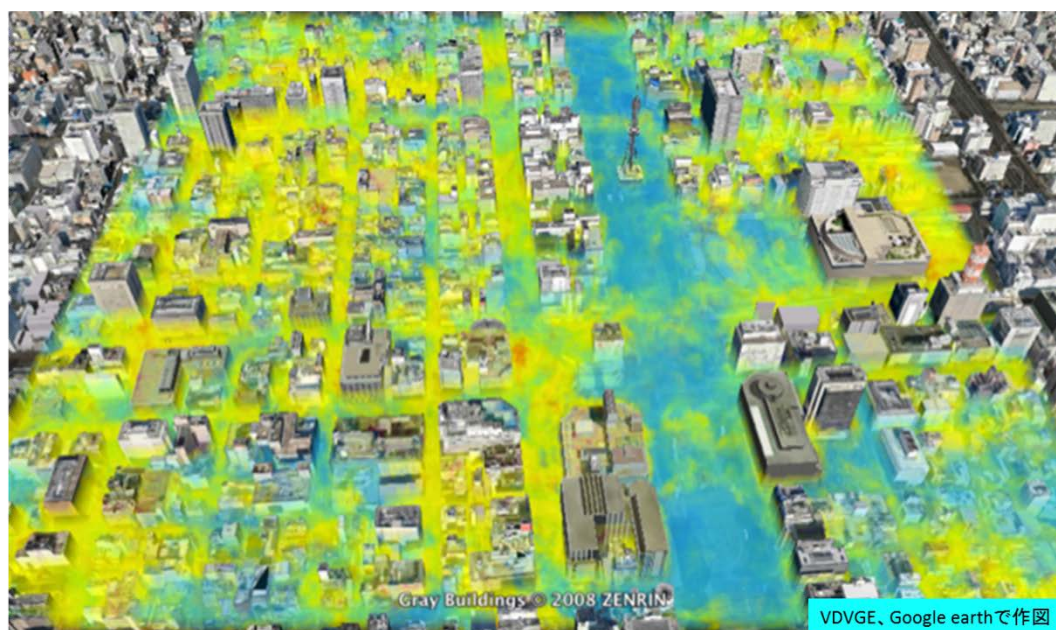


図 5 街区・建物都市気象モデルで計算した名古屋市栄地区の地上気温分布

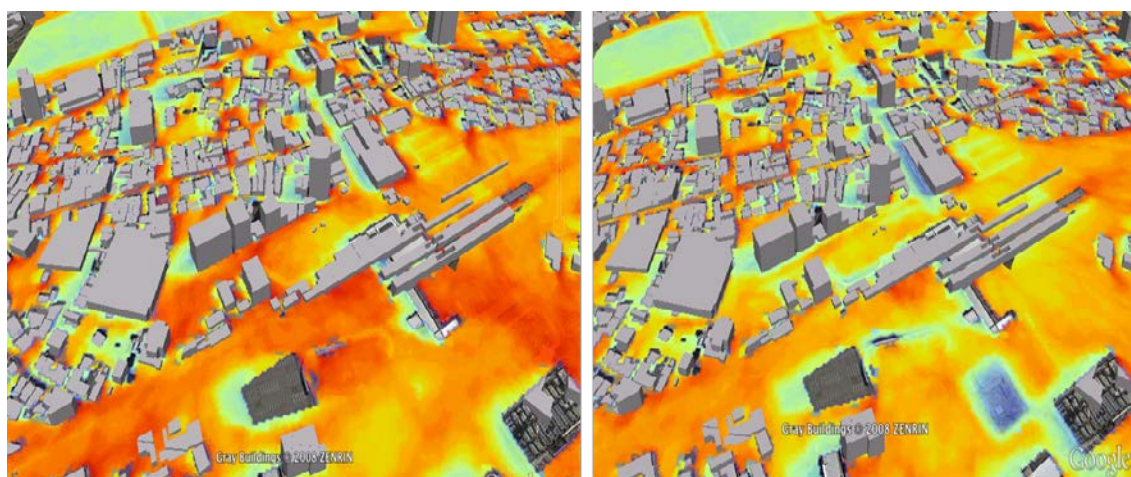


図 6 LES モデルによる多治見駅周りの地上気温分布。左図は、暑さ対策（街路樹設置、ドライミスト散布）なし、右図は暑さ対策ありの実験

4. 教育

指導学生（田中）

D 3（地球）：相澤

D 2（地球）：山上、小柴

M 1（地球）：新井、田村

指導学生（日下）

D 3（地球）：加藤、豊田、ドアン

D 2（地球）：西

M 2（地球）：大高、柿沼、浩、一澤、小堀

（環境）：高橋、渡辺

M 1（地球）：荒井、今井、佐藤、中村

（環境）：小久保、沖、静居、名和、前田、三浦

B 4（地球）：畔上、猪狩、矢部

他大学等での集中講義等

放送大学放送講師・地球科学客員教授（田中）

国立極地研究所客員教授（田中）

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

数値風工学に関する国際シンポジウム 2014 ポスター賞、日下（共同受賞）

“Mechanisms of foehn wind and a recent record-breaking high temperature in the Tokyo metropolitan area using the WRF model”、2014 年 6 月 10 日

外部資金

文科省 気候変動適応推進プログラム、研究課題名「フィードバックパラメタリゼーションを用いた詳細なダウンスケールモデルの開発と都市暑熱環境・集中豪雨適応策への応用」、H22～H26 年度、9,200 千円（H26）、日下

環境省 環境研究総合推進費（S-8）プロジェクト、研究課題名「温暖化ダウンスケールの開発とその実用化」、H22～H26 年度、20,760 千円（H26）、日下

NEDO 電力系統出力変動対応技術研究開発事業、研究課題名「電力系統出力変動対応技術研究開発／風力発電予測・制御高度化」、H26～H30 年度、25,537 千円（H26）、日下

農水省 戦略的イノベーション創造プログラム（SIP）、研究課題名「フェーンの発生実態の解明とリスク情報の創出」、H26～H30 年度、3,000 千円（H26）、日下

JSPS 科研費 基盤研究（A）、研究課題名「東京首都圏における夏季ヒートアイランドと熱的低気圧・局地的豪雨の発生要因解明」、H25～H28 年度、200 千円（H26）、日下

東芝 共同研究、研究課題名「気象シミュレーション技術の産業応用に関する研究（H26

年度)」、2,000 千円 (H26)、日下
ウエザーニューズ 共同研究、研究課題名「首都圏に影響をおよぼす雷雨、降雪、霧等に関する気象現象の解析と予測の改善に関する研究(H26 年度)」、1,100 千円 (H26)、日下
J I C A H26 年度インドネシア国別研修 気候変動対策能力強化プロジェクト「脆弱性評価 (ダウンスケーリング)」、2,092 千円 (H26)、日下
J I C A H26 年度インドネシア国別研修 気候変動対策能力強化プロジェクト「脆弱性評価 (ダウンスケーリング) 2」、2,092 千円 (H26)、日下
J I C A H26 年度インドネシア国別研修 気候変動対策能力強化プロジェクト「脆弱性評価と土地利用計画」、929 千円 (H26)、日下
文科省 GRENE 北極プロジェクト、研究課題名「北極温暖化のメカニズムと全球気候への影響評価」(代表: 浮田甚朗)、分担金、H23~27 年度、493,080 千円、田中
JST/JICA SATREPS 防災プロジェクト、研究課題名「火山噴出物の放出に伴う災害の軽減に関する総合研究」(代表: 井口正人)、分担金、H25~31 年度、1 億円/年、田中

6. 研究業績

研究論文 (査読付き、国際発表、他)

1. Kusaka, H., K. Nawata, A. Suzuki-Parker, Y. Takane, and N. Furuhashi, 2014: Mechanism of precipitation increase with urbanization in Tokyo as revealed by ensemble climate simulations. *J. Appl. Meteor. Clim.*, 53, 824-839.
2. Okada, M., M. Okada, and H. Kusaka, 2014: A Polyethylene Chamber for Use in Physical Modelling of the Heat Exchange on Surfaces Exposed to a Radiation Regime. *Boundary-Layer Meteorology*, 153(2), 305-325.
3. Akimoto, Y., H. Kusaka, 2015: A climatological study of fog in Japan based on event data. *Atmos. Res.*, 151, 200-211.
4. 鈴木パーカー明日香, 日下博幸, 2015: WBGT に基づいた日本の暑熱環境の将来予測. *日本生気象学会雑誌*, 52(1), 59-72.
5. Kusaka, H., A. Suzuki-Parker, T. Aoyagi, S. A. Adachi, and Y. Yamagata, 2014: Urban Climate Projection in Tokyo for the 2050's August: Impact of Urban Planning Scenarios and RCMs. 3rd International Lund Regional-scale climate modeling workshop, 122-123, Lund, Sweden.
6. Suzuki-Parker, A., I. Takayabu, R. Mizuta, H. Kusaka, K. Dairaku, S. Ham, S. A. Adachi, and N. N. Ishizaki, 2014: An overview of the SOUSEI multi GCM/RCM

- dynamical downscaling ensemble. 3rd International Lund Regional-scale climate modeling workshop, 374-375, Lund, Sweden.
7. Suzuki-Parker, A., I. takayabu, H. Kusaka, K. Dairaku, S. Ham, S. Adachi, and N. Noriko, 2014: Muti GCM/RCM ensemble dynamical downscaling experiments for Japan. AOGS 2014, 118, Sapporo, Japan.
 8. Kusaka, H., A. Suzuki-Parker, T. Aoyagi, S. Adachi, and Y. Yamagata, 2014: Urban climate projection in Tokyo for the 2050's August by the 4-km horizontal grid spacing RCMs: Impact of RCM and urban scenario. AOGS 2014, 119, Sapporo, Japan.
 9. Suzuki-Parker, A., H. Kusaka, 2014: Future projection of heat-related indices for Tokyo and Osaka. 20th international congress on biometeorology
 10. 日下博幸, 原政之, 2014: 気象と気候, 気象予測と気候予測の違い. 電力土木, 373(9), 66-70.
 11. 池田亮作, 日下博幸, 2014: 気象の力学モデル. 電力土木, 374(11), 101-105.
 12. 秋本祐子, 日下博幸, 2015: 気象の物理モデル. 電力土木, 375(1), 85-88.
 13. Yamagami, A. and H.L. Tanaka, 2014: Analysis of Unstable Solution with an MJO Structure Using a Three-Dimensional Spectral Linear Baroclinic Model. SOLA, 10, 103-107.
 14. 田中博、2014: 地球温暖化 そのメカニズムと不確実性. 朝倉書店, 日本気象学会地球環境問題委員会編、分担執筆、160 pp.
 15. 田中博、伊賀啓太、2015: はじめての気象学、放送大学教育振興会、NHK 出版、共著、250 pp.
 16. 田中博、2014: 地学基礎、文部科学省検定済教科書高等学校理科用、実教出版、森本、天野、黒田他 9 名分担執筆 (改訂)、192 pp.

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

産学官連携：岐阜県多治見市と連携協定（日下）

AOGS 2014 国際会議 研究発表（日下）

第 2 回 U G E C 国際会議 研究発表（日下）

I S G C 2014 国際会議 研究発表（日下）

J I C A 研修講師（日下）

香港大学訪問、ベトナム国家大学ハノイ自然科学大学訪問、バンドン工科大学訪問、インドネシア気候・気象・地球物理庁訪問、インドネシア公共事業省訪問（日下）

アラスカ大学フェアバンクス校、国際北極圏研究センター(IARC)との大学間協定(田中)

インドネシア気候・気象・地球物理庁との共同研究、SATREPS 火山灰追跡モデル（田中）

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

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

WRF 講習会開催（日下）

気象学会夏季大学開催（田中）

気象学会公開気象講演会（田中）

9. 管理・運営

学生生活支援室長・T-ACT 推進室長、副学長補佐、評議員、紫峰会顧問（田中）

10. 社会貢献・国際貢献

国際都市気候学会（IAUC）理事（日下）

気象庁 気象大学校 非常勤講師（日下）

気象庁 気候変動懇談会検討部会 委員（日下）

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

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

NEDO 発電量予測技術委員会・発電量予測技術研究会 委員（日下）

熱中症予防声かけプロジェクト 実行委員（日下）

日本ヒートアイランド学会理事、気候影響利用研究会幹事（日下）

（公社）日本気象学会理事（田中）

（公社）日本地球惑星科学連合代議員（田中）

IASC（国際北極科学会議）AWG（大気部門）副議長（田中）

気象庁 気象研究所評議委員（田中）

気象予報士 CPD 制度運営委員長（田中）

11. その他

VI. 高性能計算システム研究部門

1. メンバー

教授	朴 泰祐、佐藤 三久、児玉 祐悦、高橋 大介
准教授	建部 修見
講師	川島 英之
助教	多田野 寛人
研究員	田中 昌広、梅田 宏明、松本 和也、Mihamed Amri Jabri
学生	大学院生 21 名、学類生 8 名

2. 概要

本研究部門では、高性能計算システムアーキテクチャ、並列プログラミング環境、GPU利用技術、並列数値処理の高速化研究、広域分散環境におけるデータ共有を中心とするグリッド計算技術等の研究を行っている。

3. 研究成果

【1】演算加速機構・通信機構融合に基づく並列演算加速機構に関する研究（朴、児玉）

JST-CREST 研究「ポストペタスケール時代に向けた演算加速機構・通信機構統合環境の研究開発」において、密結合演算加速装置（Tightly Coupled Accelerators: TCA）提案に基づく PEACH2（PCI Express Adaptive Communication Hub ver.2）FPGA チップを高度化し、そのシステムソフトウェアを充実させると共に、前年度までの point-to-point 通信の基本性能向上に加え、並列アプリケーションで必要となる代表的な collective 通信の実装と評価、さらにこれに基づく典型的な並列 GPU アプリケーションの性能評価を行った。また、PEACH2 の各種応用として、TCA ネットワークと従来の InfiniBand の併用による大規模並列向け通信システムの実装、GPU からの直接ノード間通信ライブラリの開発、Intel Xeon Phi への適用、Verbs API の PEACH2 への実装をそれぞれ行った。

図 6-1 に PEACH2 ボードの写真を示す。ボード中央に放熱フィンと共に FPGA（Altera Stratix-IV）が設置され、DRAM メモリ、他のノードとの外部 PCIe リンク接続のためのポート（計 3 ポート）とマザーボードに接続される PCIe スロットを備えている。ボードの右側 1/3 程度のエリアは安定化電源のためのレギュレータ類である。文部科学省特別経費による超並列 GPU クラスタ HA-PACS/TCA の全 64 台のノードにこの PEACH2 ボードを実装済みであり、このシステムを用いて本研究を継続している。HA-PACS/TCA のノードは、PEACH2 の PCIe 仕様に基づくハードウェア制約により、16 ノードずつ計 4 つのサブシステムに分割されている。

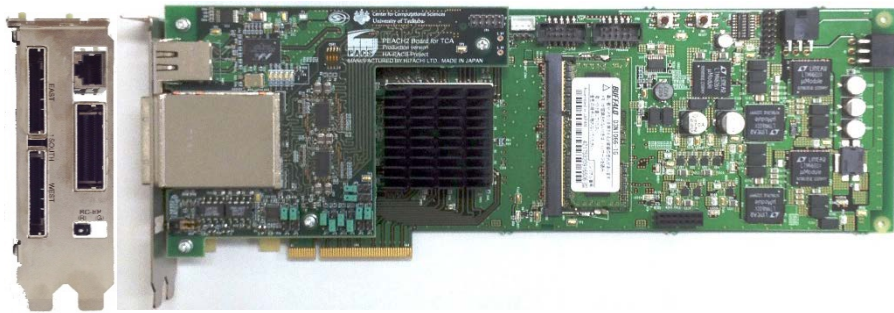


図 6-1 PEACH2 ボード (量産型)

(1) Collective 通信及び CG 法の性能評価

HA-PACS/TCA の 1 サブシステム (16 ノード) を用い、各種アルゴリズムと通信方式の組み合わせによって、Allreduce、Allgather 等の典型的 collective 通信の性能最適化を行った。

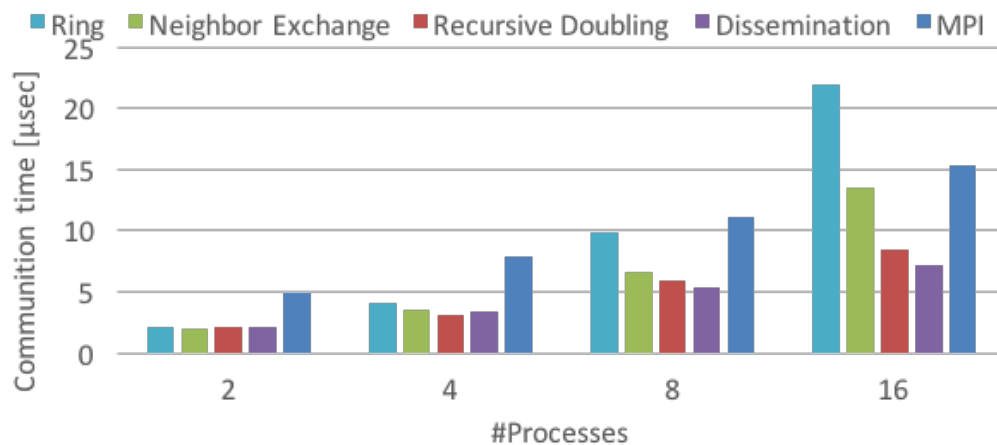


図 6-2 PEACH2 における Allreduce 性能と MPI/InfiniBand との比較

図 6-2 に、並列科学技術計算において多用される、倍精度実数 (8Byte) データの Allreduce の実行時間について、PEACH2 で各種アルゴリズムを用いた場合と、MPI/InfiniBand における実測値との比較を示す。16 ノードの場合、PEACH2 ネットワークで最適化された Dissemination アルゴリズムを用いた場合、通信レイテンシは MPI/InfiniBand の 50%以下に抑えられ、特に strong scaling において重要となる通信レイテンシの大幅短縮が行われている。

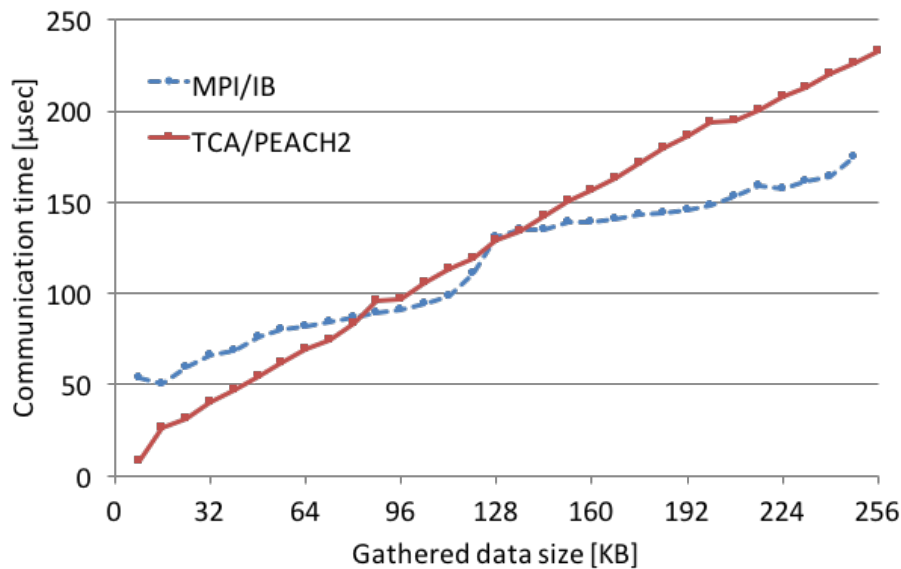


図 6-3 PEACH2 における Allgather 性能と MPI/InfiniBand との比較

図 6-3 に、16 ノードの場合の Allgather 通信の実行時間における PEACH2 と MPI/InfiniBand の比較を示す。ここではメッセージ長が 96KB までと短い場合は PEACH2 が約半分程度のレイテンシで通信できているが、メッセージ長が長くなると性能が逆転する。これは、PEACH2 のネットワークが 2 次元トラスであるのに対し、HA-PACS/TCA における InfiniBand が Fat-Tree ネットワークで無衝突通信可能であることが要因であるが、短メッセージ通信が重要となる strong scaling では PEACH2 が優位であることが示されている。

これらの基本 collective 通信ライブラリに基づき、一般疎行列に対する CG 法を HA-PACS/TCA 上で評価した。最大ノード数が 16 と比較的小さいため、単純な行方向 1 次元分割を行い、標準的な CG 法アルゴリズムを実装した。各ノード内での部分疎行列とベクトルの積 (SpMV) には CUSUPARSE ライブラリで提供されるルーチンをそのまま用いた。結果を図 6-4 に示す。これは中間サイズの行列に対する strong scaling の評価であるが、4~8 ノードにおいて PEACH2 の Allreduce 時間の短さが MPI 性能を上回ることには貢献していることがわかる。しかし、Allgather ではノード数によって性能が逆転し、全体的にこの 2 つの通信の重さによって性能差に影響が出ることがわかる。また、大規模行列の場合、Allgather 通信のデータ長が大きくなるため、PEACH2 と InfiniBand でほぼ性能が互角になることも確認された。これらより、PEACH2 での strong scaling には適切な問題サイズと、Allgather アルゴリズムのさらなる改良が必要であることがわかった。

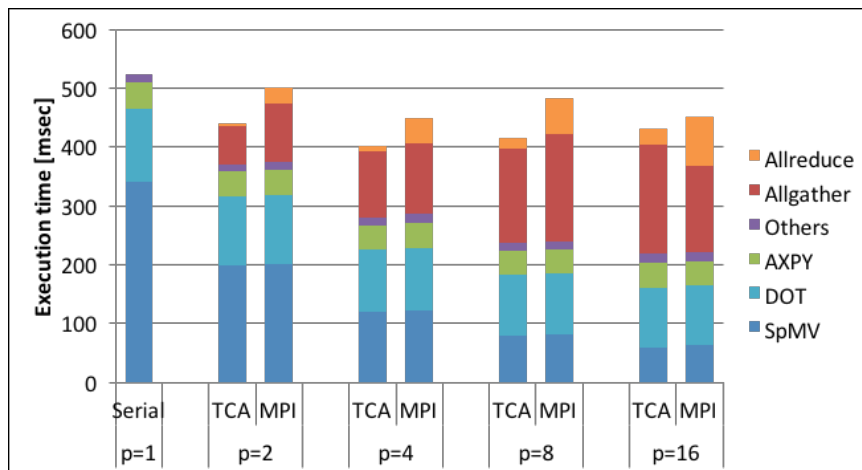


図 6-4 CG 法の 1 反復時間における PEACH2 と MPI/InfiniBand の性能差

(2) PEACH2 と InfiniBand の併用による大規模システム対応

PEACH2 の問題点の一つは、PCI Express による全てのノード、PEACH2、GPU をフラットに接続していることによるシステム規模の限界と、2 次元トラスによる通信距離の制限がある。より大規模なシステムに PEACH2 を適用するためには、従来の InfiniBand を併用した階層型クラスタの構築が必要となる。このため、中継点となるノードでは両ネットワークを併用し、通信の種類や方向に応じてこれらを使いわけ PEACH2/InfiniBand ハイブリッド通信システムを実装した。これを TCA 対応された XcalableACC コンパイラに実装することにより、ユーザ透過な形でハイブリッド通信システムを利用可能にした。

アプリケーション例として、HIMENO ベンチマークを 2 次元分割して 4 ノードにマッピングした例を示す。PEACH2 は block stride 通信に対応しているため、InfiniBand が苦手とする非連続領域の通信を PEACH2 に、連続領域通信を InfiniBand に、それぞれ機能分散的に割り当てることにより、通信の最適化が図れる。図 6-5 にその評価結果を示す。最大 16 ノードまでの分割方法と、MPI/InfiniBand のみ、PEACH2 のみ、ハイブリッドのそれぞれの通信時間を示している。多くの場合、InfiniBand と PEACH2 の単独通信の方が高速であるが、PEACH2 を多用できるいくつかの場合（1x8x1、2x8x1 等）では、ハイブリッド通信によって性能が向上している。これは、PEACH2 が unreachable であるノードと両ネットワークが使えるノードがこのマッピング上で混在した場合、混在ノード上での性能による全体の通信時間を短縮できる見込みがあることを示している。今後、さらにアルゴリズムを改良し、階層型クラスタで実際の性能を評価する予定である。

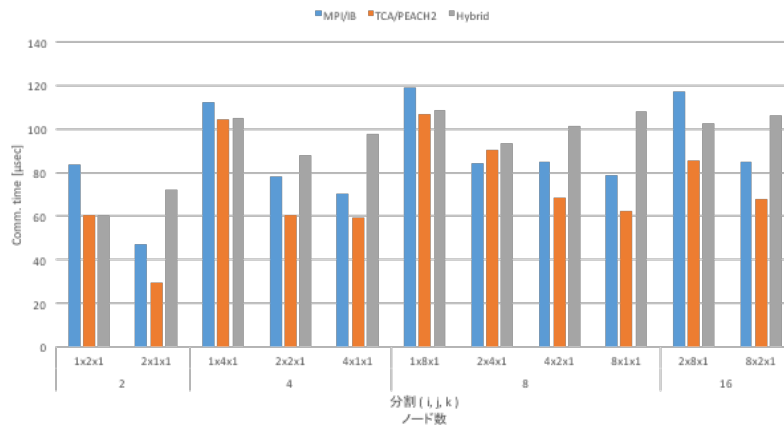


図 6-5 PEACH2 と InfiniBand のハイブリッド通信の性能

(3) GPU 間直接通信ライブラリの開発と PEACH2 への Verbs API の適用

CUDA 等の GPU プログラミングにおいて並列処理を行う場合、ユーザは基本的に通信と計算を切り離し、ホスト CPU からの offloading で GPU カーネルを起動、通信の度にホスト CPU に制御を戻さなければならない。このことは、MPI 化されている既存コードを CUDA に移植する場合の手間を非常に大きくしている。そこで、CUDA 環境で各 GPU 内から直接 MPI 通信を実行する通信システムとして GMPI (GPU direct MPI)を開発した。現実的には GPU から直接 PEACH2 や InfiniBand の通信トランザクションを起動することは困難であるため、ホスト CPU へのリクエストと応答処理でこれを実現し、ホスト CPU 上では通信を司るデーモンスレッドを走らせる。システムが正しく動くことを検証したが、ホスト CPU へのバッファリングと通信イベントのポーリングのオーバーヘッドが大きく、従来の MPI よりも性能が大きく落ちることが確認された。今後、通信方式を改良し、PEACH2 に適用することにより、性能を低下させることなく既存 MPI プログラムをスムーズに CUDA 化するシステムを開発していく。

また、InfiniBand 等で標準的に用いられる Verbs インタフェースを PEACH2 に実装した。これにより、PEACH2 の RDMA 機能の利用のために、ユーザプログラムの通信部分の全面的書き換えが必要な点を改良することと、PEACH2 をより広いシステム及びアプリケーションに適用することが可能になる。実装の結果、MVAPICH2 のような標準的 MPI が Verbs/PEACH2 上できちんと動作し、アプリケーションを実行可能であることが示された。しかし、現在のプロトタイプ実装では、PEACH2 が基本的に DMA write protocol のみを持つため、データ受信時におけるプロキシ通信のオーバーヘッドが大きく、InfiniBand に比べ通信レイテンシが大きくなることがわかった。今後、put/get のような PEACH2 との親和性の高い通信パターンでの性能評価を行い、さらに改良を加えていく。

(4) Intel Xeon Phi への PEACH2 の適用

GPU と並び、Intel Xeon Phi が新しい演算加速装置として注目されている。しかし、現在の Intel の開発環境では、Xeon Phi 間の通信に大きなボトルネックが存在することがわかっている。そこで、InfiniBand の代わりに PEACH2 を用いることにより、strong scaling における並列性能を向上させることが見込まれる。ただし、現在の Xeon Phi 周辺環境である MPSS では、InfiniBand 等の PCI Express デバイスを標準の x86 Linux と同様に見せることが難しい。そこで、MPSS で提供される SCIF インタフェースを用い、ホスト CPU にプロキシ動作をさせることで、PEACH2 を間接的にアクセスするシステムのプロトタイプを Xeon Phi 上に実装した。図 6-6 に SCIF 経由で PEACH2 を起動して通信した場合と、Intel MPI を用いた場合の性能比較を示す。これより、32KB 程度までの短メッセージ長において、Intel MPI を Xeon Phi 上に適用した場合に比べ、PEACH2 による通信が非常に低レイテンシで実現されることがわかる。

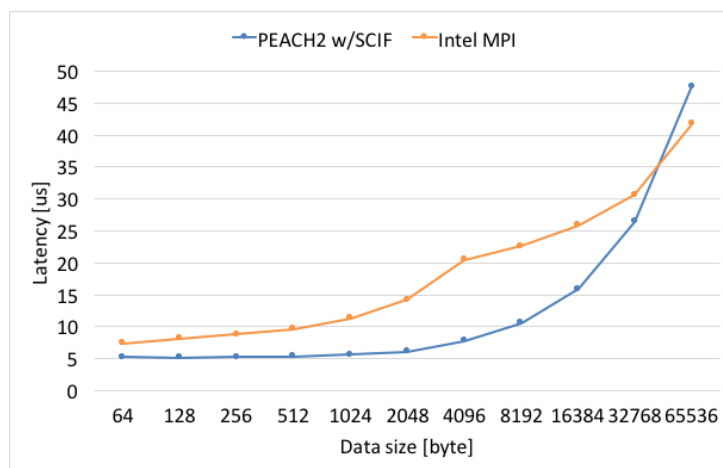


図 6-6 Intel Xeon Phi における SCIF 経由での PEACH2 通信の性能

【2】並列プログラミング言語 XcalableMP による核融合シミュレーションの高度化（朴、佐藤）

プリンストン・プラズマ物理研究所との共同研究に基づき、核融合シミュレーションコード GTC-P を並列記述言語 XcalableMP (XMP) のハイブリッド並列実装例としてコーディングを行った。XMP におけるハイブリッド並列とは、大域配列を全ノードで分割共有する global view と呼ばれるデータ分割と、各ノードのローカル配列を coarray 機能で直接参照する local view と呼ばれるデータ分割を併用する手法である。GTC-P は PIC (Particle In Cell) コードであるので、静的な空間（場）の物理の記述と、電子等の粒子が動的に動き回るという二種

類の振る舞いを記述する必要がある。そこで、前者に global view model を、後者に local view model をそれぞれ適用することにより、ユーザの物理的直感に即した並列プログラミングを実現することが可能となる。

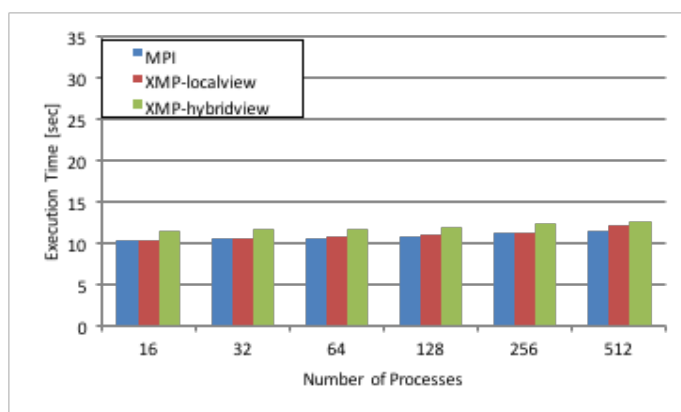


図 6-7 XMP における GTC-P のハイブリッド並列実装の性能評価

図 6-7 にトロイダル方向での並列分割を行った場合の、GTC-P の MPI による native 実装、XMP で local view を MPI 通信の代わりに用いた場合の実装、ハイブリッド並列実装の weak scaling 結果を示す (HA-PACS 上での実測)。XMP 記述によるオーバーヘッドが僅かに見られるが、XMP 実装の性能は概ね native な MPI 実装と遜色ないことがわかる。ユーザが逐次プログラムから並列化を行おうとする場合、MPI によるプログラミングのコストに比べ、XMP の directive 記述のみでのプログラミングは生産性を大きく向上させ、さらにハイブリッド並列では物理イメージをそのまま活かしたプログラミングが可能である。今後、アプリケーションを増やし、検証を進める。

【3】メニーコアプロセッサと CPU のハイブリッド利用による電子ダイナミクスシミュレーションの高速化 (朴)

本センターの量子物性研究部門・矢花グループでは、TDDFT (Time Dependent Density Functional Theory) に基づく電子ダイナミクスシミュレーションコード ARTED (Ab-initio Real Time Electron Dynamics simulator) を開発している。ARTED は標準的な x86 クラスタ及び京コンピュータをターゲットに MPI と OpenMP のハイブリッドプログラミングで実装されている。このコードを本センターの Intel Xeon Phi メニーコアクラスタ COMA、さらに来年度導入が予定されている最先端共同 HPC 基盤施設 (JCAHPC) での超並列メニーコアクラスタで高速化することを目指している。そこで、我々の部門と矢花グループの共同研究として ARTED を Xeon Phi 向けに最適化し、さらに CPU との併用で性能を大幅に向上させる性能チュ

ーニングを行った。

Xeon Phi は x86 アーキテクチャに基づくメニーコアプロセッサであるため、単に OpenMP コードとしてコンパイルしても動作はするが、性能特性が大幅に Xeon CPU とは異なるため、特殊なチューニングが必要である。我々の部門で、i) 配列表現の多次元化、ii) Xeon Phi 向けコンパイラオプションの調査、iii) 間接参照表現の解消等の最適化を行った結果、Xeon Phi の性能は Xeon CPU とほぼ同程度となった。理論ピーク性能比からするとこの性能は非常に低い、この状況でも Xeon Phi と Xeon を同性能のプロセッサとして利用できれば、COMA 上のノード性能を事実上倍増することが可能である（COMA の各ノードには 2 基の Xeon CPU と 2 台の Xeon Phi カードが実装されている）。そこで、COMA で利用可能な Symmetric mode により、ノード当たり 4 つの MPI プロセスを走らせ、Xeon と Xeon Phi に 2 つずつを割り当てることにより、ノード当たり性能がほぼ倍になることを確認した。

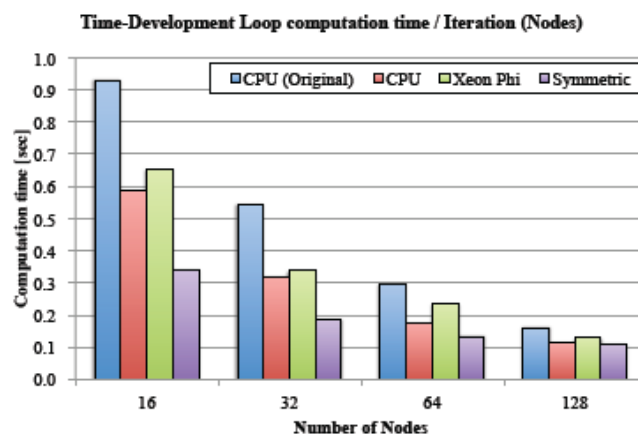


図 6-8 COMA における ARTED コードの Symmetric mode 実行の性能

図 6-8 に COMA における最大 128 ノードまでの strong scaling の性能を示す。“CPU”は Xeon 向けに最適化されたコードを CPU のみで実行させた場合の性能、“Symmetric”はノード上の CPU と Xeon Phi をフルに利用した場合を示す。16 ノードでは Symmetric の性能が CPU のほぼ倍であり、64 ノードまで良好なスケーラビリティを示している。128 ノードでは並列オーバーヘッドと、各プロセスの潜在的並列性が不足することで Xeon Phi 性能が頭打ちとなっている。しかし、両部門の共同研究の結果、ARTED の性能が大幅に加速され、今後の物性研究に供されることになった。

【4】Extreme SIMD 方式に基づく次世代演算加速機構の研究（朴、佐藤、児玉）

昨年度まで、次世代スーパーコンピュータの要素技術研究（Feasibility Study）として概

念設計及び机上性能評価により超並列型演算加速機構の研究を行ってきたが、同機構は文部科学省の次世代スーパーコンピュータには採用されず、同システムは汎用スカラープロセッサのみによるホモジニアス構成とすることが決定された。しかし、次々世代の技術として、超並列型演算加速機構が重要であることは明らかであり、特に電力当たり演算性能を最大限に引き出すためには、プロセッサのダイナミズムを最小限に抑え、電力を演算に傾注することが不可欠である。このため、筑波大学計算科学研究センター、理化学研究所計算科学研究機構、日立製作所の三者により、本演算加速機構のさらなる研究を進めることが合意され、研究を継続している。

同機構は EXACC (Extreme Accelerator) と名付けられ、超並列 SIMD アーキテクチャは Extreme-SIMD と呼ばれる。Extreme-SIMD では最大 4096 台の PE (Processing Element) の SIMD 制御を視野に、SRAM によるローカルストレージ、外部 HBM (High Bandwidth Memory) による大規模ストレージ、チップ内の 4 次元 PE 間メッシュネットワーク、チップ間の 4 次元トラスネットワーク、さらにチップ内の collective 通信を高速化する Broadcast Memory 等の様々な要素を組み込んでいる。

現状ではソフトウェアシミュレータによる性能評価、FPGA による部分モデルの検証、XcalableMP/XcalableACC コンパイラの開発が進められている。今後、詳細設計を進め、次々世代プロセステクノロジーをベースに電力性能の評価、アプリケーション開発と性能評価を進めていく予定である。

【5】メニーコアプロセッサのための並列プログラミングモデルの研究 (佐藤)

現在、筑波大学と東京大学で運営している最先端共同 HPC 基盤施設において検討を進めている Post T2K システムは、インテル Xeon Phi などのメニーコアプロセッサを多数結合したシステムになると想定されている。我々は、これからの大規模並列システムのプログラミングモデルとして、XcalableMP (XMP) の開発を進めており、メニーコア並列システムにどのように XMP を適用するか、そして、それをどのように実装設計するかについて検討した。

XMP は、基本的に分散メモリモデルのためのプログラミングモデルであり、メニーコアを 1 ノードとする並列システムには、XMP の 1 ノードをメニーコアプロセッサに割り当て、メニーコアのノード内の並列記述には OpenMP を適用することが考えられる。XMP と OpenMP の混在の記述方法についてはすでに XcalableMP 1.1 に規定されており、これに従えばよい。Xeon Phi のプログラミングモデルとしては、OpenMP が推奨されており、ノード内は OpenMP、ノード間には XMP で記述することになる。しかし、MPI と OpenMP のハイブリッドプログラミングと同じように、ノード内とノード間の 2 つのプログラミングを行わなくてはならない。

他方、一つの考え方としては、ノード内の記述も XMP で行うことにし、ノード間とノード

内を区別することなく、XMP で記述することが考えられる。XMP の通信モデルは PGAS モデルであり、共有メモリにおいては一方向通信が効率的に行うことができるため、効率的な実行が期待できる。メニーコアプロセッサでは、コアが多数あるために極力データ共有は避けたほうがよく、この点からもメリットが期待できる。但し、ノード内とノード間が均一なモデルを提供するためにステンシル計算にはいいが、ノード内とノード間を区別してプログラミングする必要がある場合には特別な配慮が必要になる。

メニーコアプロセッサのノード内にも XMP を用いるためには、ノード内の通信として、次の選択肢が考えられる。

- (1) MPI を使う。現在の XMP コンパイラが生成するオブジェクトは MPI を用いた実行時ルーチンを利用しており、これをそのまま使えばよい。しかし、ノードにおいてもプロセスで実行する必要があるため、プロセス間通信を MPI で行うため、スケーラビリティ、通信の効率に問題がある。
- (2) mmap による共有メモリの確保を行い、これを通して通信を行う。通信は、共有メモリで直接行うために高速化が期待できる。そのモデルを図 6-9 に示す。
- (3) プログラム変換によりスレッドモデルへトランスレートする。すなわち、共有データは大域変数を用い、XMP のノード内の変数はスレッドプライベートな変数に書き換える。この方法は、PGAS 言語である UPC の共有メモリ実装で行われている。
- (4) PVAS (Partitioned Virtual Address Space) モデルによる実装。PVAS は理研 AICS で開発されているメニーコア向けの新しいプロセスモデルで、一つのアドレス空間上に複数の PVAS プロセスを持つことができる。PVAS プロセスは、通常のプロセスとして用いることができるが、同じアドレス空間にある PVAS プロセス間ではお互いのメモリを直接アクセスすることができる。これを用いて、一方向通信を直接他の PVAS プロセスのデータへのアクセスで実現する。

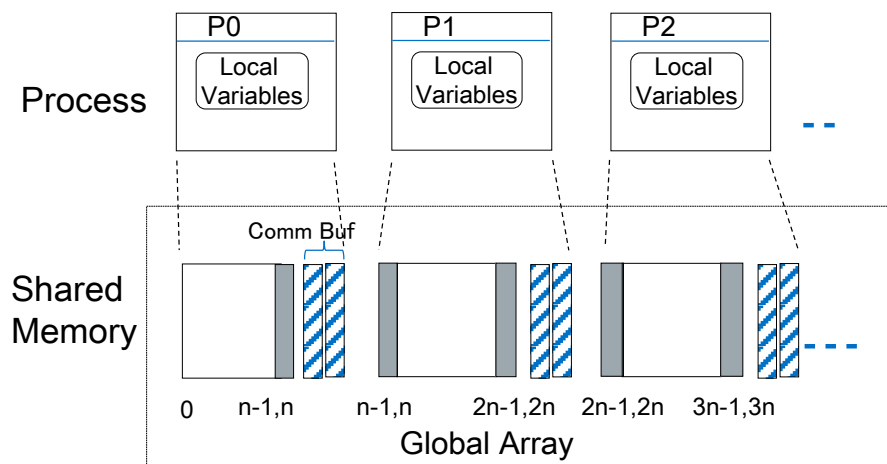


図 6-9 (2)による共有メモリ上での分散配列と局所変数の実装例 (ノード内)

以上の方法について、設計・実装し、評価を行った。(2)の方法を用いて、Himeno ベンチマークを 1 ノードで評価した結果を図 6-10 に示す。HIME_MPI と HIME_OMP は、ノード内の MPI と OpenMP の結果である。HIME_SHM は、今回新たに共有メモリによる(2)の実装の結果である。OpenMP の実装では、外側のループだけの並列化では並列性がうまく取り出せない。内側のループも含めて Collap した結果が HIME_OMP_COL であり、これにより性能を引き出すことができる。今回の実装は、これに匹敵する性能を得ることができた。

今回の実装(2)では、以下の点で性能を得ることができた。

- 共有メモリを用いることにより、メッセージ通信よりもコピー回数を削減できるために、効率化ができた。
- 各コアで XMP プロセスを動作することによって、プロセスのプライベートデータが明確に区別されるために、false share などの影響が少なくなり、プライベートデータがコアのキャッシュにとどまりやすくなり性能が向上することが確認できた。

現在、(3)、(4)についても、実装評価を進めている。

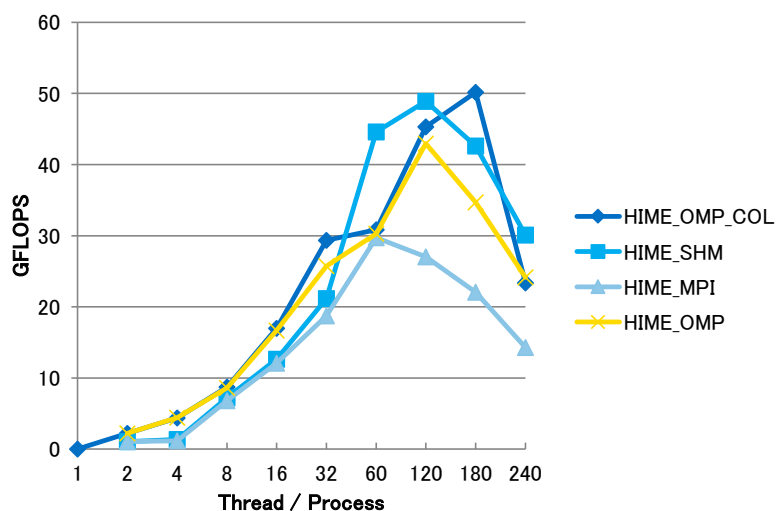


図 6-10 共有メモリを用いた XMP の実装の結果(HIME_SHM)

【6】並列高速フーリエ変換における自動チューニングの研究（高橋）

科学技術計算で広く用いられている並列高速フーリエ変換 (FFT) の性能を改善するために、自動チューニングに関する研究を行った。ポストペタスケール計算環境の一つと考えられる GPU クラスタにおいて並列 FFT を高速化する際に、最適な性能パラメータは GPU のアーキテクチャ、ノード間を結合するネットワーク、そして問題サイズなどに依存するため、これら

のパラメータをその都度手動でチューニングすることは困難になりつつある。そこで、GPU クラスタにおける並列 FFT の性能を向上させるための自動チューニング手法について検討した。GPU クラスタにおいて並列一次元 FFT を行う際には、全対全通信が 3 回行われることから、計算時間の大部分が全対全通信によって占められることになる。また、FFT を計算する際の基底や、行列の転置を行う際のブロックサイズが全体に関わる性能パラメータとなる。

GPU クラスタにおける並列一次元 FFT において、全対全通信方式、基底の組み合わせ、そしてブロックサイズについて自動チューニングを行うことで、性能をさらに向上できることが分かった。

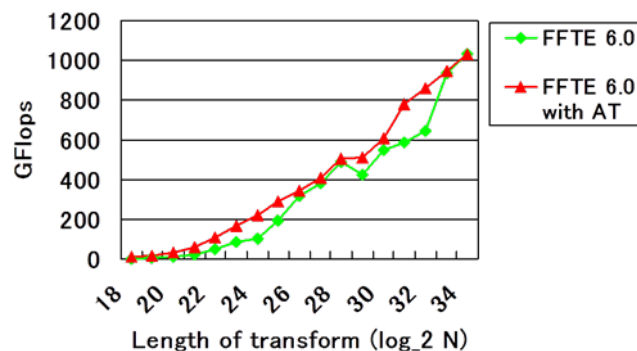


図 6-11 並列一次元 FFT の性能 (HA-PACS ベースクラスタ, 128 ノード, 512MPI プロセス)

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

本研究では分散ファイルシステム、大規模データ処理実行基盤の研究項目を実施することにより、ポストペタスケールデータインテンシブサイエンスのためのシステムソフトウェアの設計プロトタイプ実装と性能評価を行った。以下、項目別に記述する。

・分散ファイルシステム

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

分散ファイルシステムのアクセス性能をスケールアウトさせるために、計算ノードのローカルストレージを利用する場合、計算ノードの障害によりそのノードのローカルストレージに格納されたデータにアクセス不能となってしまう。この問題を解決するためこれまでファイル複製を他ノードのローカルストレージに保持する方法がとられたが、この方法ではストレージ領域が 2 倍以上必要となってしまう、データ転送量が 2 倍以上となってしまうという問題があった。この問題を解決するため、ノード間で冗長符号を用いることが考えられる。

しかしながらこれまではノード間での冗長符号を書き込み時に行うことは冗長符号計算のオーバーヘッドが大きく行われていなかった。そのため、書き込み時は冗長符号化のオーバーヘッドがない複製を作成し、その後、冗長符号に変換する等の方法が用いられていた。この問題を根本的に解決するため、ストレージに冗長符号計算とデータ転送をオフロードしたアクティブストレージを提案した。

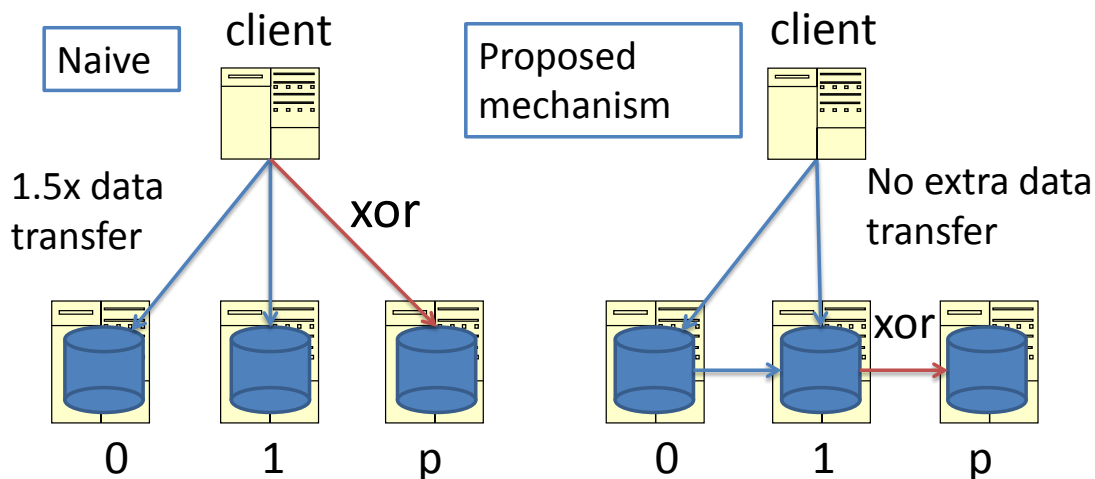


図 6-12 2D1P の RAID-4 のアクティブストレージによるデータ転送と冗長コード計算

アクティブストレージでは、冗長符号に関わる計算と通信をストレージが行うため、書込を行うクライアント側のデータ転送量、冗長符号計算のオーバーヘッドはない。2D1P (2 データディスク、1 パリティディスク) の RAID-4 の場合、図 6-12 に示すように通常の方法だとクライアントからの転送量が 1.5 倍となり、また冗長符号計算としての XOR 計算が必要となってしまう。提案のアクティブストレージの場合は、クライアントからのデータ転送量は変わらず、またクライアント側での XOR 計算は必要なくなる。その代わりに、ストレージ 0 はデータをストレージ 1 に転送し、ストレージ 1 で XOR 計算を行い、ストレージ p に転送する。本提案手法を Infiniband FDRx4 を用いた PC クラスタで初期評価を行ったところ、ほぼネットワーク物理ピーク性能となる 5.4GB/s の書込性能を達成することができた。本成果は、IEEE クラスタコンピューティングに関する国際会議でポスター発表 3)を行った。

・大規模データ処理実行基盤

本研究項目ではデータインテンシブサイエンスのアプリケーションを効率的に実行するため、MPI-I/O、大規模ワークフロー実行、MapReduce 処理、バッチキューイングシステム、データベース管理システムなどの実行環境の研究開発を行う。本研究提案で研究開発する分散ファイルシステムは、全体としてのファイルアクセス性能はスケールアウトさせるように設計、

実装を行っているが、ファイルアクセス性能が非均一である。そのため、効率的に利用するためには、ファイルアクセスの局所性の利用とデータ移動を最小化するプロセススケジューリングが重要となる。さらに、データ移動と計算処理はオーバーラップが可能であり、プロセススケジューリングとデータ移動のスケジューリングを最適化することにより、更に効率的な実行が可能となる。

大規模ワークフロー実行に関する研究では、これまでノード間のデータ移動を最小化するスケジューリング手法を提案し、評価を行ってきた。本年度は、昨年度から研究を行っている、同一ノード内での複数のジョブ実行に関して、バッファキャッシュの再利用率を向上させ、ワークフローのジョブ実行時間を短縮するスケジューリング手法の高速化を行った。昨年度からの提案手法である LIFO+HRF 手法と Rank Overlap+HRF について、天文データ解析のワークフロー Montage を用いてより詳細に評価した。LIFO+HRF、Rank Overlap+HRF の両手法は問題となっていたバッファキャッシュの有効利用が可能であり、最大既存手法と比べ 1.9 倍の高速化を達成した。さらに、末尾タスク問題も解決しており、96 コアのケースでは 12% の高速化を達成した。ノード当たりで処理するデータ量が増えるに従い、バッファキャッシュの有効利用の効果は高くなり、またコア数が増えるに従い末尾タスク問題の影響は大きくなる。今後のより大規模なデータ解析を高速化する重要なスケジューリング手法であることが分かった。

バッチキューイングシステムの研究では、引き続きデータアクセス局所性を高めるためのスケジューリング手法の研究を進めた。昨年度は I/O インテンシブなジョブを想定したスケジューリング手法を提案したが、本年度は CPU インテンシブなジョブについても扱うため、スケジューリング手法の拡張を行った。それぞれのジョブにおける入力ファイルからアクセス局所性の指標を求め、CPU の負荷と併せてパラメータ β によりノード割り当てを行う手法の設計を行った。バッチキューイングシステム Torque を元にしたプロトタイプシステムの実装を行い、BLAST ベンチマークで評価を行った。BLAST ベンチマークでは I/O インテンシブなジョブと CPU インテンシブがミックスしたベンチマークであるが、 β の値を変えることにより効率的なスケジューリングを行うことが可能となることを示した。

【8】エクストリームビッグデータの基盤技術（建部、川島）

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

H26 年度は、H25 年度に行ったローカルオブジェクトストアの設計を元にプロトタイプ実装を行い、設計の改善を行った。flash および不揮発性メモリにおいて可能となる操作をベース

に、OpenNVM を用いてより効率的なデータアクセスが可能となるように設計を行った。基本的な設計方針は H25 年度を踏襲し、設計の最適化をすすめた。まず、オブジェクトを作成するたびにスーパーブロックを更新していたが、 n オブジェクトの作成を予約することにより、スーパーブロックの更新回数を $1/n$ に削減することが可能となる。次に、OpenNVM が提供する複数の IO ベクトルをアトミックに書き込む処理を用い、オブジェクトの初期化を、毎回オブジェクトを作成するたびに行うのではなく、 m オブジェクトを一度の IO ベクトルで一括して先行的に初期化することにより初期化処理を m 倍近く高速化することが可能となる。 $n = 128$ として、 m を変えたときのオブジェクト作成性能を図 6-13 に示す。一番下の線は $n = m = 1$ の最適化をしない昨年度のプロトタイプ実装の結果であるが、これまで 16 スレッドで 190,000 ops/sec であった。これに対し、 $n = 128$, $m = 32$ の時に 747,000 ops/sec まで性能が向上し、ほぼ 4 倍の性能向上を実現した。

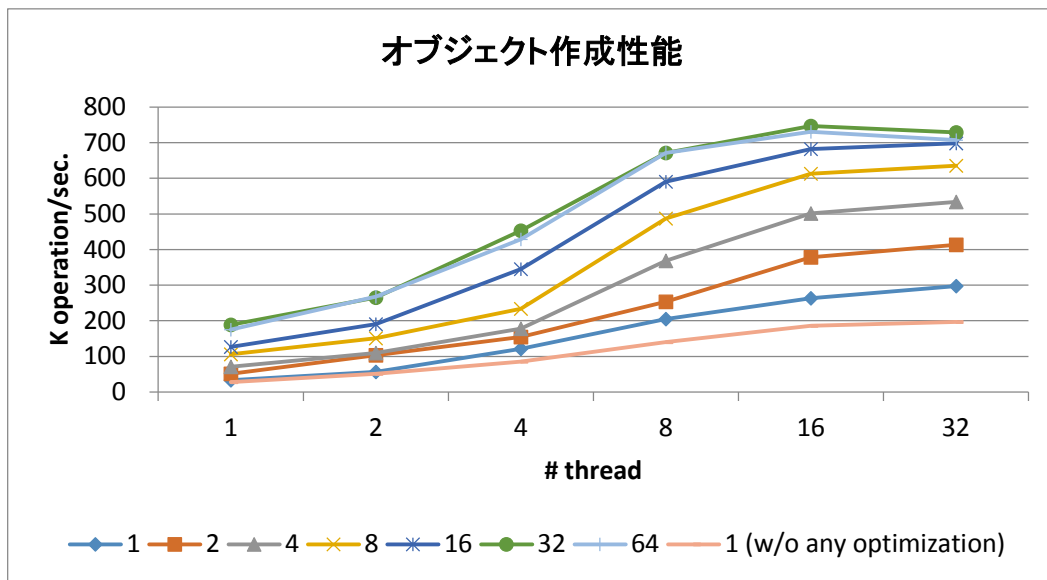


図 6-13 ローカルオブジェクトストアの作成性能の評価

並列問合せの設計においては、配列データのウィンドウパーセントイル処理において、差分計算を用いた最適化を提案した。差分計算により、ウィンドウを移動したときにその差分データについての計算だけで済むため冗長計算の削減が可能となる（図 6-14）。

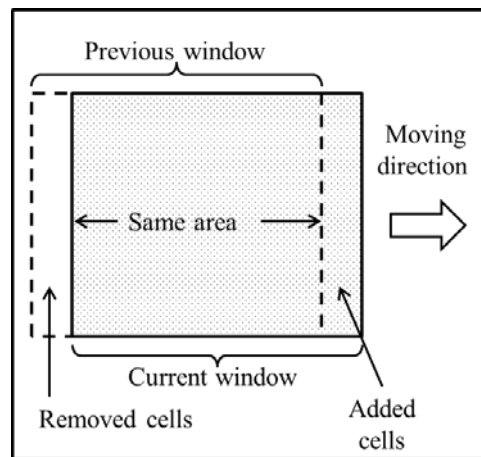


図 6-14 ウインドウアグリゲート処理における差分計算の模式図

パーセンタイル処理に応用するため、データを平衡木で保持する。これにより、気象データを用いた 30 日間のパーセンタイル処理において既存手法に比べ 13 倍の性能向上を実現した。

【9】分散ファイルシステム及びグリッド・クラウド技術に関する研究（建部）

文部科学省が進める革新的ハイパフォーマンスコンピューティングインフラ (HPCI) の HPCI 共用ストレージ、素粒子物理学データ共有システム JLDG のシステムソフトウェアとしても利用される Gfarm ファイルシステムの研究開発を行った。本年度はサイレントデータ破損 (silent data corruption) に対する対策を検討した。サイレントデータ破損とは、書込は正常に終了したものの、実際に書き込まれたデータを読み出すとデータの内容が破損していることで、ディスクコントローラの障害などが原因で引き起こされることがある。サイレントデータ破損の対策として、昨年度は書込時におけるチェックサム計算を導入した。読み込み時のチェックサム計算によりデータ破損を検知、ユーザにエラーを返す。これにより、データ破損の検知と、ユーザが破損データを読み込むことを防ぐことが可能となった。本年度は、さらにそのデータ破損の検知方法の高度化を行った。読込時のデータ破損チェックでは、データを読み込まないとデータ破損の検査を行うことができないため、データ破損の検知が遅くなる可能性がある。このため、ファイル複製作成時のデータ読込、データ書き込みにおいてデータ破損の検出を行うことができるようにプロトコルの改良を行った。Gfarm ファイルシステムでは、ファイル作成時にファイル複製を作成するため、この機構の導入によりファイル作成時のデータ破損検知が可能となる。その他、運用監視システムにおける監視項目の整備、不具合修正、ドキュメントの更新なども行った。この結果として、Gfarm バージョン 2.6.3 をリリースした。

【10】天体望遠鏡データ処理に関する研究（建部、川島）**1. 高性能な解析パイプラインシステムの設計**

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

解析パイプラインシステムを理解するために、IPMU 側との打合せを行い、現在のパイプラインシステムのプログラムならびに入力データをご提供頂いた。その後、プログラムの実行ならびに分析を行った。パイプラインシステムを調査した結果、計算ノードからのストレージアクセスにおいて、現状は Lustre ファイルシステムを介して多数のファイルへ集中的にアクセスしていることが明らかになった。このタスクにおいて生じる集中的なアクセスが I/O ボトルネックを発生させている可能性が示唆された。そこで Gfarm 分散ファイルシステムを用いることにより、並列 I/O を活用して、このボトルネックを解消する方式を検討した。

2. 天文データ処理システムの設計

天文データ処理システムに関する研究として、二つの研究を行った。第一の研究は超新星爆発検出のためのデータ基盤に関する研究であり、第二の研究は天体カタログ上のデータ検索に関する研究である。

2.1. 超新星爆発検出のためのデータ基盤に関する研究

すばる望遠鏡から得られる画像から超新星爆発を高速に検出できるデータ基盤を開発することが本研究の目的である。検出アルゴリズムを効率的に実行できる環境を構築することが本研究の狙いである。天体画像は配列データとして表現されるため、そのデータモデルはリレーショナルデータモデルではなく配列が適切であると判断した。そこで配列データベースである SciDB を利用することにした。天体画像処理で基本となる各種集約演算が実行できることを SciDB で確認した。

また、集約演算の高性能化技法を検討した。インクリメンタル計算（図 6-15）に基づく集約演算の高性能化技法を構築し、SciDB 上に実装を行い、その性能を確かめた。具体的には配列データベースにおけるウィンドウ集約演算（最大、最小、平均、総和、パーセンタイル）を高性能化する手法を提案した。高性能化のためにインクリメンタル計算スキームを適用した。これを成功させるため、総和と平均にはリスト、最大と最小にはヒープ、パーセンタイルには二分木を用いた。提案手法を代表的な配列データベースである SciDB に実装して実験的に

評価した。その結果、提案手法は最大で従来手法に比べて 28 倍高速だった。実験に用いたコードは GitHub に公開し、成果はビッグデータにおける国際会議で報告した。

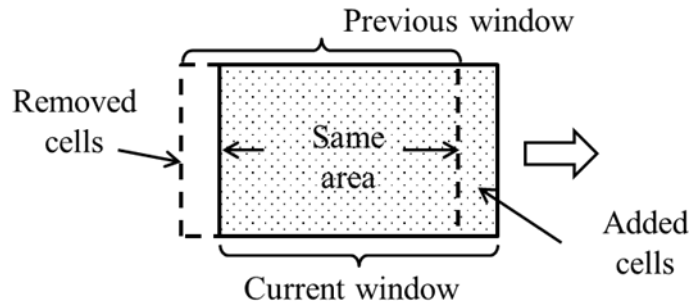


図 6-15 インクリメンタル計算スキーム

2.2. 天体カタログ上のデータ検索に関する研究

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

天体カタログでは様々な問合せ処理が行われる。今年度は IPMU との議論の結果、頻繁に使用されるという近傍検索について取上げることにした。近傍検索とは、ある星の近い星を求めるという問合せに該当する。この問合せは結合演算に帰着される。この演算を高速化するために、本研究では並列分散照合処理と空間索引を組み合わせた。マシン間並列処理について cyclo-join を実装し、マシン内並列処理についてはスレッドレベル並列化と命令レベル並列化（SIMD 演算）を行った。空間索引については R 木を実装した。提案手法を評価するために実験を行った。データサイズは 100 万件とし、マシン台数は 20 とした。マシン間のネットワークには Infiniband を利用し、IPoIB を用いた。提案手法は 35 秒程度であり、ナイーブな手法に比べて、最大（選択率が 1%）で 306 倍程度の性能向上を実現した。なお、既存の著名な RDBMS である PostgreSQL で同様の実験を行ったところ 24 時間でも終了しなかったことを付記する。

【11】複数次元ベクトルをもつ連立一次方程式の数値解法に関する研究（多田野）

複数次元ベクトルをもつ連立一次方程式の数値解法である、Block Krylov 部分空間反復法に関する研究を行った。Block Krylov 部分空間反復法は、右辺ベクトル数が増加すると数値的に不安定な状況に陥り、残差の発散・停滞を引き起こすことがある。また、計算過程で発生する誤差の影響で、最終的に得られる近似解の精度が劣化する可能性がある。本研究では、

Block Krylov 部分空間反復法の 1 つである Block BiCGGR 法、及び Block BiCGSTAB(l) 法に対して性能改善を行った。

Block BiCGGR 法は、反復過程で現れる縦長行列を構成する列ベクトルの線形独立性が失われると数値的に不安定な状況に陥る。本研究ではこの状況を Partial Near Breakdown (PNB) procedure と呼ばれる手法を用いて検知し、線形独立性の低いベクトルを除去することで数値的安定化を図った。図 6-16 に Block BiCGGR 法、及び PNB procedure 付き Block BiCGGR 法の相対残差履歴を示す。テスト問題は数値流体力学計算で現れる連立一次方程式（行列サイズ: 13, 514、非零要素数: 352, 762、右辺ベクトル数: 32）である。ここで、 δ は PNB procedure を制御するパラメータである。Block BiCGGR 法の相対残差は反復序盤に発散したが、PNB procedure を用いることで Block BiCGGR 法の相対残差は収束した。

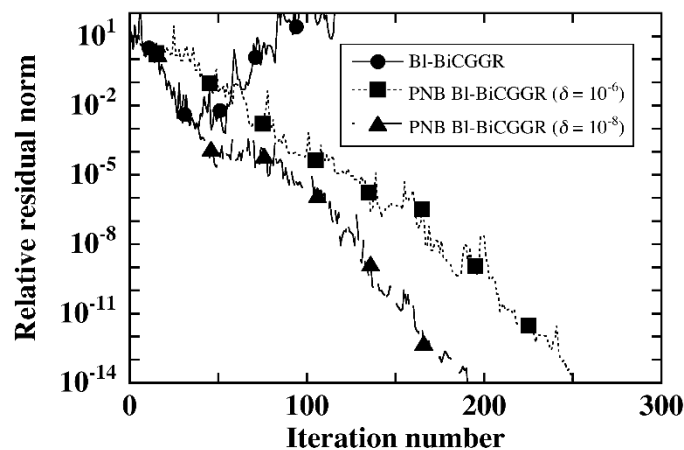


図 6-16 Block BiCGGR 法、及び PNB procedure 付き Block BiCGGR 法の相対残差履歴

Block BiCGSTAB(l) 法においても、反復過程で現れる縦長行列を構成するベクトルの線形独立性が失われると数値的に不安定な状況に陥る。本研究では反復毎に正規直交化を実行することで数値的不安定性を回避した。また同法は反復過程で発生する誤差の影響で最終的に得られる近似解の精度が劣化するが、近似解の精度を保つために行列ベクトル積計算を追加し、高精度化を図った。図 6-17 に Block BiCGSTAB(l) 法、及び同法に正規直交化、高精度化を行ったときの真の相対残差履歴を示す。テスト問題は数値流体力学計算で現れる連立一次方程式（行列サイズ: 23, 560、非零要素数: 460, 598、右辺ベクトル数: 16）である。Block BiCGSTAB(l) 法のパラメータとして $l = 8$ を用いた。Block BiCGSTAB(l) 法を適用した場合は相対残差が発散したが、反復過程で正規直交化を実行することで相対残差が収束した。しかしながら、真の相対残差は 10^{-5} 付近で停滞しており、高精度の近似解は得られていない。一方、正規直交化に加えて高精度化の処理を追加することにより真の相対残差は 10^{-11} 付近まで減少しており、高精度の近似解を生成することができた。

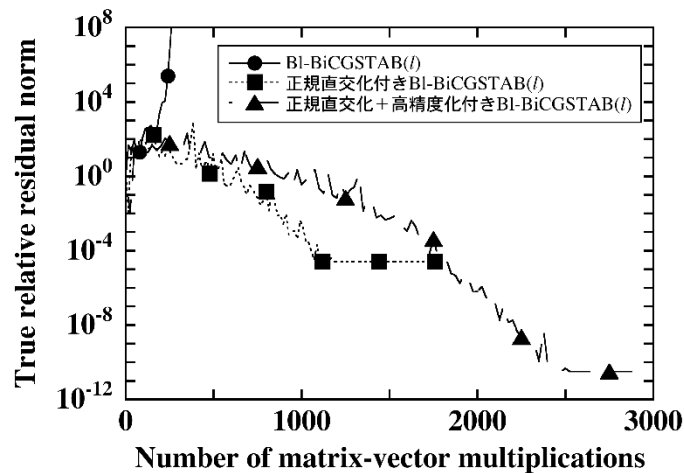


図 6-17 Block BiCGSTAB(l)法、正規直交化付き Block BiCGSTAB(l)法、及び正規直交化+高精度化付き Block BiCGSTAB(l)法の真の相対残差履歴

4. 教育

【学生の指導状況】

1. 藤井久史、修士（工学）、GPU 間直接通信機構に基づく並列アプリケーションの性能評価、筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文、平成 27 年 3 月（指導：朴泰祐）
2. 田渕晶大、修士（工学）、GPU クラスタ向けプログラミングモデル XcalableACC のコンパイラと通信最適化、筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文、平成 27 年 3 月（指導：佐藤三久）
3. 津金佳祐、修士（工学）、PGAS 言語 XcalableMP による並列アプリケーションの実装と評価、筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文、平成 27 年 3 月（指導：佐藤三久）
4. 平櫛貴章、修士（工学）、GPU を用いた並列および分散幅優先探索アルゴリズムの高速化、筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文、平成 27 年 3 月（指導：高橋大介）
5. キョウユ、修士（工学）、分散ファイルシステム Gfarm における MTC アプリケーションの性能予測モデルの構築、筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文、平成 27 年 3 月（指導：建部修見）

【集中講義】

1. 「CCS HPC サマーセミナー」(一般公開、全学共通科目)、2014/9/1～9/2
2. “HPC Autumn Seminar”(全学共通科目) 2014/9/16～9/17

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

【受賞】

1. Best Paper Award in Fifth International Symposium on Highly-Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies (HEART2014), Y. Kodama, T. Hanawa, T. Boku and M. Sato, “PEACH2: An FPGA-based PCIe network device for Tightly Coupled Accelerators”, 2014/6/9.
2. HPC Challenge Class2 Best Performance Award at SC14, Masahiro Nakao, Hitoshi Murai, Hidetoshi Iwashita, Takenori Shimosaka, Akihiro Tabuchi, Taisuke Boku, Mitsuhsa Sato, “XcalableMP and XcalableACC for Productivity and Performance”, 2014/11/18.
3. Best Poster Awards in HPC in Asia Poster Session, ISC2014, T. Hanawa, Y. Kodama, T. Boku, M. Sato, “Proprietary Interconnect with Low Latency for HA-PACS/TCA”, 2014/6/26.
4. 情報科学技術フォーラム(FIT2014) 船井ベストペーパー賞, 丸山裕士, 山口佳樹, 児玉祐悦, 実時間動画像ブレ補正システムにおける補正精度向上に関する研究, 2014 年 9 月 3 日

【外部資金】

1. JST CREST、朴泰祐(研究代表者)、H24～29 年度、22,670 千円(H26 年度)、研究領域「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」、「ポストペタスケール時代に向けた演算加速機構・通信機構統合環境の研究開発」
2. JST CREST、高橋大介(共同研究者)、H24～28 年度、15,132 千円(H26 年度)、研究領域「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」、「数値計算ライブラリによる超並列複合システムの階層的抽象化に関する研究」
3. 科学研究費補助金 新学術領域研究(研究領域提案型)、高橋大介(分担)、H22～26 年度、3,510 千円(H26 年度)、「大規模並列環境における数値計算アルゴリズム」
4. 科学研究費補助金 基盤研究(C)、高橋大介(代表)、H24～26 年度、1,430 千円(H26 年度)、「エクサスケール計算環境に向けた高速フーリエ変換のアルゴリズムに関する研究」
5. JST CREST、建部修見(研究代表者)、H23 年度～H27 年度、36,579 千円(H26 年度)、

研究領域「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」、
「ポストペタスケールデータインテンシブサイエンスのためのシステムソフトウェア」

6. JST CREST、建部修見（共同研究者）、H25～30 年度、5,044 千円（H26 年度）、研究領域「ビッグデータ統合利活用のための次世代基盤技術の創出・体系化」、「EBD：次世代の年ヨッタバイト処理に向けたエクストリームビッグデータの基盤技術」
7. KDDI 研究所共同研究、川島英之（代表）、H26 年度、1,000 千円、「データ仮想化システムにおける大規模データ処理方式に関する研究」
8. JST CREST、川島英之（分担）、H26 年度 1,000 千円、研究領域「科学的発見・社会的課題解決に向けた各分野のビッグデータ利活用推進のための次世代アプリケーション技術の創出・高度化」、「広域撮像探査観測のビッグデータ分析による統計計算宇宙物理学」
9. JST A-STEP、川島英之（代表）、H26 年度 1,000 千円、「暗号化データ処理基盤システムの研究」

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. M. Noda, K. Ishimura, K. Nobusada, K. Yabana, T. Boku: Massively-parallel electron dynamics calculations in real-time and real-space: Toward applications to nanostructures of more than ten-nanometers in size, Journal of Computational Physics, Vol.265, pp.145-155, 2014.
2. Daichi Mukunoki, Toshiyuki Imamura and Daisuke Takahashi: Fast Implementation of General Matrix-Vector Multiplication (GEMV) on Kepler GPUs, Proc. 23rd Euromicro International Conference on Parallel, Distributed and Network-based Processing (PDP 2015), pp. 642--650 (2015).
3. 佐藤佳州, 高橋大介: 対局に基づいた教師データの重要度の学習, 情報処理学会論文誌, Vol. 55, No. 11, pp. 2399-2409 (2014).
4. Yukihiro Hasegawa, Jun-Ichi Iwata, Miwako Tsuji, Daisuke Takahashi, Atsushi Oshiyama, Kazuo Minami, Taisuke Boku, Hikaru Inoue, Yoshito Kitazawa, Ikuo Miyoshi and Mitsuo Yokokawa: Performance evaluation of ultra-large-scale first-principles electronic structure calculation code on the K computer, International

- Journal of High Performance Computing Applications, Vol. 28, No. 3, pp. 335--355 (2014).
5. Yutaka Maruyama, Norio Yoshida, Hiroto Tadano, Daisuke Takahashi, Mitsuhisa Sato and Fumio Hirata: Massively parallel implementation of 3D-RISM calculation with volumetric 3D-FFT, Journal of Computational Chemistry, Vol. 35, No. 18, pp. 1347--1355 (2014).
 6. Satoshi Matsuoka, Hitoshi Sato, Osamu Tatebe, Michihiro Koibuchi, Ikki Fujiwara, Shuji Suzuki, Masanori Kakuta, Takashi Ishida, Yutaka Akiyama, Toyotaro Suzumura, Koji Ueno, Hiroki Kanezashi, Takemasa Miyoshi, "Extreme Big Data (EBD): Next Generation Big Data Infrastructure Technologies Towards Yottabyte/Year", Supercomputing Frontiers and Innovations, Vol. 1, No. 2, pp.89-107, 2014 (DOI: <http://dx.doi.org/10.14529/jsfi140206>)
 7. Yoshihiro Oyama, Shun Ishiguro, Jun Murakami, Shin Sasaki, Ryo Matsumiya, Osamu Tatebe, "Reduction of Operating System Jitter Caused by Page Reclaim", In Proceedings of the 4th International Workshop on Runtime and Operating Systems for Supercomputers (ROSS 2014), Munich, Germany, June 10, 2014. (DOI: 10.1145/2612262.2612270)
 8. Masahiro Tanaka, Osamu Tatebe, "Disk Cache-Aware Task Scheduling For Data-Intensive and Many-Task Workflow", Proceedings of IEEE International Conference on Cluster Computing (Cluster), pp.167-175, 2014 (DOI: 10.1109/CLUSTER.2014.6968774)
 9. Hiroki Ohtsuji, Osamu Tatebe, "POSTER: Preliminary evaluation of optimized transfer method for cluster-wide RAID-4", Proceedings of IEEE International Conference on Cluster Computing (Cluster), pp.284-285, 2014 (DOI: 10.1109/CLUSTER.2014.6968775)
 10. Jiang Li, Hideyuki Kawashima, Osamu Tatebe, "Incremental Window Aggregates over Array Database", Proceedings of IEEE International Conference on Big Data (BigData), short paper, pp.183-188, 2014
 11. Y. Maruyama, N. Yoshida, H. Tadano, D. Takahashi, M. Sato, and F. Hirata, Massively parallel implementation of 3D-RISM calculation with volumetric 3D-FFT.

12. H. Tadano, Y. Ishikawa, A. Imakura, Improvement of the accuracy of the approximate solution of the Block BiCR method, JSIAM Letters, Vol. 6, pp. 61—64, 2014.
13. S. Saito, H. Tadano, and A. Imakura, Development of the Block BiCGSTAB(l) method for solving linear systems with multiple right-hand sides, JSIAM Letters, Vol. 6, pp. 65—68, 2014.

B) 査読無し論文

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Taisuke Boku, “Tightly Coupled Parallel Accelerated Computing for Post-Petascale Computing”, Invited Talk, French Japan Conference, Tokyo, Apr. 14th, 2014.
2. Taisuke Boku, “Towards Reconfigurable High Performance Computing based on Co-Design Concept”, Keynote Talk, Fifth International Symposium on Highly-Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies (HEART2014), 2014/6.
3. Taisuke Boku, “Next Generation Parallel Accelerated Computing with High Productivity”, Keynote Talk, Int. Workshop on Enhancing Parallel Scientific Applications with Accelerated HPC (ESAA 2014) in EuroMPI/Asia 2014, Kyoto, Sept. 9th, 2014.
4. Taisuke Boku, “Accelerator and Communication CoDesign Challenges at Extreme Scale”, Invited Talk, CODESIGN2014, Guangzhou, Nov. 7th, 2014.
5. Taisuke Boku, “Research and Development on Unified Environment of Accelerated Computing and Interconnection for Post-Petascale Era”, Invited Talk, 2014 ATIP Workshop on Japanese Research Toward Next-Generation Extreme Computing (with SC14), New Orleans, Nov. 17th, 2014.
6. Osamu Tatebe, “System Software for Post-Petascale Data-Intensive Science”, Invited Talk, 2014 ATIP Workshop on Japanese Research Toward Next-Generation Extreme Computing (with SC14), New Orleans, Nov. 17th, 2014.
7. Taisuke Boku, “Tightly Coupled Accelerators for Accelerator-oriented Parallel Processing”, Invited Talk, JST/CREST International Symposium on Post Petascale System Software (ISP2S2 2014), Kobe, Dec. 4th, 2014.

8. Osamu Tatebe, “System software for Post-Petascale Data-Intensive Science”,
Invited Talk , JST/CREST International Symposium on Post Petascale System
Software (ISP2S2 2014), Kobe, Dec. 3rd, 2014.

B) 一般講演

1. K. Tsugane, H. Nuga, T. Boku, H. Murai, M. Sato, W. Tang, B. Wang, “Hybrid-view Programming of Nuclear Fusion Simulation Code in the PGAS Parallel Programming Language XcalableMP”, Proc. of ICPADS2014, Hsinchu, 2014.
2. Masahiro Nakao, Hitoshi Murai, Takenori Shimosaka, Akihiro Tabuchi, Toshihiro Hanawa, Yuetsu Kodama, Taisuke Boku, Mitsuhsa Sato.
“XcalableACC: Extension of XcalableMP PGAS Language using OpenACC for Accelerator Clusters”, Workshop on accelerator programming using directives (WACCPD), New Orleans, LA, USA, Nov., 2014.
3. N. Fujita, H. Fujii, T. Hanawa, Y. Kodama, T. Boku, Y. Kuramashi, M. Clark,
“QCD Library for GPU Cluster with Proprietary Interconnect for GPU Direct Communication”, Proc. of HeteroPar 2014 (with EuroPar 2014), Porto, 2014.
4. N. Fujita, H. Nuga, T. Boku, Y. Idomura, “Nuclear Fusion Simulation Code Optimization and Performance Evaluation on GPU Clusters”, Proc. of PDSEC2014 (with IPDPS2014), Phoenix, 2014.
5. Daisuke Takahashi: Automatic Tuning for Parallel FFTs on GPU Clusters, 2015 SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE15), Salt Palace Convention Center, Salt Lake City, Utah, USA, March 18, 2015.
6. Hiroshi Maeda and Daisuke Takahashi: Performance Evaluation of Sparse Matrix-Vector Multiplication Using GPU/MIC Cluster, 2015 SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE15), Salt Palace Convention Center, Salt Lake City, Utah, USA, March 14, 2015.
7. Daisuke Takahashi: Automatic Tuning for Parallel FFTs on GPU Clusters, 2015 Conference on Advanced Topics and Auto Tuning in High-Performance and Scientific Computing (2015 ATAT in HPSC), National Taiwan University, Taipei, Taiwan, February 28, 2015.
8. Y. Kodama, T. Hanawa, T. Boku and M. Sato, “PEACH2: An FPGA-based PCIe network device for Tightly Coupled Accelerators”, Fifth International Symposium

- on Highly-Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies (HEART2014), 2014/6.
9. Yoshihiro Oyama, Shun Ishiguro, Jun Murakami, Shin Sasaki, Ryo Matsumiya, Osamu Tatebe. “Reduction of Operating System Jitter Caused by Page Reclaim”, the 4th International Workshop on Runtime and Operating Systems for Supercomputers (ROSS 2014), Munich, Germany, June 10, 2014
 10. Masahiro Tanaka, Osamu Tatebe, “Disk Cache-Aware Task Scheduling For Data-Intensive and Many-Task Workflow”, IEEE International Conference on Cluster Computing (Cluster), Madrid, Spain, September 24, 2014
 11. Jiang Li, Hideyuki Kawashima, Osamu Tatebe, “Incremental Window Aggregates over Array Database”, IEEE International Conference on Big Data (BigData), Washington D.C., October 30, 2014
 12. Osamu Tatebe, “System Software for Data-Intensive Science”, ICT International Exchange Workshop 2014, Tsukuba, Nov 1, 2014
 13. Osamu Tatebe, “System Software for Post-Petascale Data-Intensive Science”, 2014 ATIP Workshop: Japanese Research Toward Next-Generation Extreme Computing, New Orleans, Nov 17, 2014
 14. Osamu Tatebe, “System software for Post-Petascale Data-Intensive Science”, JST/CREST International Symposium on Post Petascale System Software (ISP2S2 2014), Kobe, Japan, December 3, 2014
 15. Masahiro Tanaka, “Workflow system for data-intensive many-task computing”, JST/CREST International Symposium on Post Petascale System Software (ISP2S2 2014), Kobe, Japan, December 4, 2014
 16. Osamu Tatebe, “System Software for Post-Petascale Data-Intensive Science”, 10th AEARU Workshop on Computer Science and Web Technology, Tsukuba, Feb 27, 2015
 17. H. Tadano, “Stabilization of the Block BiCGGR method by the partial near breakdown procedure”, International Conference on Simulation Technology (JSST2014), Kitakyushu, Japan, Oct. 2014.
 18. H. Jin, Y. Yamaguchi and Y. Kodama, “Efficient shared cache system for ARM-based multi-core processors”, Fifth International Symposium on Highly-Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies (HEART2014), poster, 2014/6

19. T. Hanawa, Y. Kodama, T. Boku, M. Sato, “Tightly Coupled Accelerators Architecture for Low-Latency Inter-node Communication between Accelerators”, SC14 Poster Session, New Orleans, 2014.
20. T. Hanawa, Y. Kodama, T. Boku, M. Sato, “Proprietary Interconnect with Low Latency for HA-PACS/TCA”, HPC in Asia Session (poster) in Int. Supercomputing Conference (ISC) 2014, Leipzig, 2014.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 建部 修見, “不揮発性メモリ向けファイルシステムの設計”, MemoryPlus Workshop, 東京, 2014 年 9 月 17 日
2. 川島英之, “機械学習・データマイニングのツール紹介”, 電子情報通信学会 ASN 研究チュートリアルセッション, 2015 年 3 月 11 日.
3. 齋藤周作, 多田野寛人, 今倉暁, “Block BiCGSTAB(1)法の計算量削減”, 日本応用数理学会 2014 年度年会, 政策研究大学院大学, 2014 年 9 月 3 日-5 日.
4. 朴泰祐, “大学スパコンセンターにおけるシステム導入とその役割”, FIT2014 企画「エクサスケールコンピューティング時代の大学スパコンセンターの役割」, 2014 年 9 月 3 日.
5. 朴泰祐, “高性能計算技術と計算宇宙物理～これまでとこれから～”, 第 27 回理論懇シンポジウム, 2014 年 12 月 25 日.

B) その他の発表

1. 藤井久史, 塙敏博, 児玉祐悦, 朴泰祐, 佐藤三久, “GPU 向け FFT コードの TCA アーキテクチャによる実装と性能評価”, 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング研究会, 2015-HPC-148, 2015.
2. 廣川祐太, 朴泰祐, 佐藤駿丞, 矢花一浩, “実時間実空間密度汎関数理論による電子動力学シミュレーションの Xeon Phi クラスタ向け最適化”, 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング研究会, 2015-HPC-148, 2015.
3. 桑原悠太, 塙敏博, 児玉祐悦, 朴泰祐, “GPU クラスタにおける GPU 間セルフ通信機構に関する提案”, 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング研究会, 2015-HPC-148, 2015.

4. 中尾昌広, 村井均, 岩下英俊, 下坂健則, 朴泰祐, 佐藤三久, “PGAS 言語 XcalableMP を用いた HPC Challenge ベンチマークの実装と評価”, 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスクンピューティング研究会, 2015-HPC-148, 2015.
5. 宇川斉志, 佐藤三久, 朴泰祐, 児玉祐悦, 山口佳樹, 山本淳二, “Extreme SIMD アーキテクチャのプログラミングモデル拡張 C による性能評価”, 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスクンピューティング研究会, 2015-HPC-148, 2015.
6. 松本和也, 塙敏博, 児玉祐悦, 藤井久史, 朴泰祐, “密結合並列演算加速機構 TCA を用いた GPU 間直接通信による Collective 通信の実装と予備評価”, 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスクンピューティング研究会, 2014-HPC-147, 2014.
7. 小田嶋哲哉, 塙敏博, 児玉祐悦, 朴泰祐, 村井均, 中尾昌広, 佐藤三久, “HA-PACS/TCA における TCA および InniBand?ハイブリッド通信”, 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスクンピューティング研究会, 2014-HPC-147, 2014.
8. 藤井久史, 藤田典久, 塙敏博, 児玉祐悦, 朴泰祐, 佐藤三久, 藏増 嘉伸, Mike Clark, “GPU 向け QCD ライブラリ QUDA の TCA アーキテクチャ実装の性能評価”, 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスクンピューティング研究会, 2014-HPC-145, 2014.
9. 津金 佳祐, 奴賀 秀男, 朴 泰祐, 村井 均, 佐藤 三久, William Tang. “並列言語 XcalableMP による核融合シミュレーションコードの実装と評価”, 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスクンピューティング研究会, 2014-HPC-145, 2014.
10. 田渕 晶大, 村井 均, 朴 泰祐, 佐藤 三久, “XcalableMP と OpenACC の統合による GPU クラスタ向け並列プログラミングモデル”, 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスクンピューティング研究会, 2014-HPC-145, 2014.
11. 宮島 敬明, 久原 拓也, 塙 敏博, 児玉 祐悦, 朴 泰祐, 天野 英晴, “PEACH3 の基本転送性能の予備評価”, 情報処理学会研究報告計算機アーキテクチャ研究会, 2014-ARC-203, 2014.
12. 松本和也, 塙敏博, 児玉祐悦, 藤井久史, 朴泰祐, “密結合並列演算加速機構 TCA を用いた GPU 間直接通信による CG 法の実装と予備評価”, 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスクンピューティング研究会, 2014-HPC-144, 2014.
13. 丸山裕士, 山口佳樹, 児玉祐悦, “実時間動画像ブレ補正システムにおける補正精度向上に関する研究”, 情報科学技術フォーラム(FIT2014), RC-004, pp. 23-28, 2014/9

14. 丸山裕士, 李成哲, 山口佳樹, 児玉祐悦, “バレーボール試合映像からの実時間選手追跡システム”, 情報科学技術フォーラム(FIT2014), C-021, pp. 225-226, 2014/9
15. 藤浪健太, 山口佳樹, 児玉祐悦, “FPGA による三次元格子ガスオートマトン法の実装”, 第 28 回数値流体力学シンポジウム, (E07-2), pp. 1-4, 2014/12
16. 伊藤剛浩, 山口佳樹, 児玉祐悦, 山本淳二, 中川八穂子, 朴泰祐, 佐藤三久, “FPGA を用いた ExtremeSIMD アーキテクチャの予備評価”, 電子情報通信学会 2015 年総合大会講演論文集, (D-6-9), 1page, 2015/3
17. 高山尋考, 藤浪健太, 山口佳樹, 児玉祐悦, “マルチ FPGA による流体シミュレーションの拡張”, 電子情報通信学会 2015 年総合大会講演論文集, (D-18-5), 1page, 2015/3
18. 高橋大介: GPU クラスタにおける並列 FFT の自動チューニング, 計算工学講演会論文集, Vol. 19, F-7-3 (2014).
19. 前田広志, 高橋大介: GPU/MIC クラスタにおける疎行列ベクトル積の性能評価, 情報処理学会研究報告, Vol. 2014-HPC-144, No. 4 (2014).
20. Li Jiang, Hideyuki Kawashima, Osamu Tatebe, “Implementing Incremental Aggregate Computation on SciDB”, 情報処理学会システムソフトウェアとオペレーティング・システム (OS) 研究発表会, 朱鷺メッセ, 2014 年 7 月 28 日
21. 川島英之, 建部修見, 分析用データ処理系における効率的なデータ配送機構, 情報処理学会システムソフトウェアとオペレーティング・システム (OS) 研究発表会, 朱鷺メッセ, 2014 年 7 月 29 日
22. 大辻弘貴, 建部修見, Cluster-wide RAID の実装と評価, 情報処理学会ハイパフォーマンส์コンピューティング (HPC) 研究発表会, 朱鷺メッセ, 2014 年 7 月 30 日
23. 鷹津冬将, 建部修見, WebGfarm: 分散ファイルシステム Gfarm の HTTP インタフェース, 情報処理学会ハイパフォーマンส์コンピューティング (HPC) 研究発表会, 朱鷺メッセ, 2014 年 7 月 30 日
24. 大辻弘貴, 建部修見, Cluster-wide RAID 向けの集中型コントローラ, 情報処理学会ハイパフォーマンส์コンピューティング (HPC) 研究発表会, 小樽, 2014 年 12 月 9 日
25. キョウユ, 建部修見, 田中昌宏, 分散ファイルシステム Gfarm における MTC アプリケーションの性能予測モデルの構築, 情報処理学会ハイパフォーマンส์コンピューティング (HPC) 研究発表会, 小樽, 2014 年 12 月 9 日

26. 島貫稔之、川島英之：シーケンス演算子の効率的実装と適応的处理機構，コンピュータセキュリティシンポジウム 2014, Vol. 2014, No. 2, pp. 976-983.

(4) 著書、解説記事等

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

【国際スクール開催】

1. Korea-Japan HPC Joint Winter School, Seoul, Korea, 2015/1/20～1/2

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 第 2 回 XMP ワークショップ：PC クラスタコンソーシアム XcalableMP 分科会（主査：佐藤三久）と JST-CREST 研究課題（研究代表者：朴泰祐）による共催，東京，2015 年 10 月 25 日．

9. 管理・運営

1. 高橋大介：筑波大学情報環境機構学術情報メディアセンター運営委員
2. 朴泰祐：筑波大学情報環境機構企画室委員

10. 社会貢献・国際貢献

1. Taisuke Boku: Organizing Chair, HPC in Asia Session, ISC2015
2. Taisuke Boku: Poster Chair, SC14
3. Taisuke Boku: Progmra Committee, System Software Area, SC14
4. Taisuke Boku: Committee, 2014 ACM Gordon Bell Prize Selection Committee
5. Taisuke Boku: Program Committee, HiPC 2014
6. Taisuke Boku: Program Committee, CCGrid2015
7. Yetsu Kodama: Program Committee, IEEE Symposium on Low-Power and High-Speed Chips (Cool Chips) VXII
8. Yetsu Kodama: Program Committee, International Conference on Parallel Processing 2015
9. Yetsu Kodama: Program Committee, The 2015 4th ICT International Student Project Conference (ICT-ISPC 2015)
10. Yetsu Kodama: Reviewer, IEEE Micro Magazine
11. Osamu Tatebe: Program Committee, 14th IEEE/ACM International Symposium on Cluster, Cloud and Grid Computing (CCGrid) 2014

12. Osamu Tatebe: Program Committee, IEEE International Conference on Cluster Computing (Cluster) 2014
13. Osamu Tatebe: Program Committee, 6th IEEE International Conference on Cloud Computing Technology and Science (CloudCom) 2014
14. Osamu Tatebe: Program Committee, 20th IEEE International Conference on Parallel and Distributed Systems (ICPADS) 2014
15. Osamu Tatebe: Technical Poster Committee, 2014 ACM/IEEE International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC14)
16. Osamu Tatebe: Program Committee, 43rd International Conference on Parallel Processing (ICPP) 2014
17. Osamu Tatebe: Program Committee, 23rd International Conference on Computer Communications and Networks (ICCCN) 2014
18. Osamu Tatebe: Program Committee, International Supercomputing Conference (ISC) 2014
19. Osamu Tatebe: Program Committee, 4th International Workshop on Advances in High-Performance Computational Earth Sciences: Applications & Frameworks (IHPCES) 2014
20. Osamu Tatebe: Scientific Committee, 11th International Meeting on High-Performance Computing for Computational Science (VECPAR) 2014
21. Osamu Tatebe: Program Committee, Architecture, Languages, Compilation and Hardware support for Emerging ManYcore systems (ALCHEMY) Workshop 2015
22. Osamu Tatebe: Program Committee, 3rd Workshop on Big Data Management in Clouds (BigDataCloud) 2014
23. Hideyuki Kawashima: Program Committee, 5th International Workshop on Streaming Media Delivery and Management Systems, In Conjunction with 9th 3PGCIC-2013 Conference

24. Hideyuki Kawashima: Program Committee, The IEEE International Conference on Multimedia Big Data (BigMM).
25. 朴泰祐: 情報処理学会 Annual Meeting on Advanced Computing System and Infrastructure (ACSI) 2015, 組織委員長
26. 児玉祐悦: 情報処理学会 デジタルプラクティス査読委員
27. 児玉祐悦: 電子情報通信学会 論文誌査読委員
28. 児玉祐悦: 電子情報通信学会 論文誌特集号「Low-Power and High-Speed Chips」編集員
29. 児玉祐悦: Annual Meeting on Advanced Computing System and Infrastructure (ACSI) 2015, 広報委員長
30. 高橋大介: 情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会運営委員
31. 高橋大介: 情報処理学会論文誌編集委員会委員
32. 高橋大介: Annual Meeting on Advanced Computing System and Infrastructure (ACSI) 2015 プログラム委員
33. 建部修見: HPCI 連携サービス運営・作業部会委員
34. 建部修見: 理化学研究所客員研究員
35. 建部修見: HPCI 利用研究課題審査委員会レビューアー
36. 建部修見: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN) 課題審査委員
37. 建部修見: 東京工業大学学術国際情報センター共同利用専門委員
38. 建部修見: 特定非営利団体つくば OSS 技術支援センター理事長
39. 建部修見: 情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会運営委員
40. 建部修見: Annual Meeting on Advanced Computing System and Infrastructure (ACSI) 2015 プログラム委員
41. 建部修見: インターネットカンファレンス 2014 プログラム委員
42. 川島英之: 情報処理学会 データベースシステム研究会 幹事
43. 川島英之: 情報処理学会論文誌編集委員会委員
44. 川島英之: 電子情報通信学会 知的環境とセンサネットワーク研究会 運営委員
45. 川島英之: 電子情報通信学会英文論文誌小特集号「Special Section on Emerging Technologies on Ambient Sensor Networks Toward Future Generation」編集委員

- 46. 多田野寛人：日本応用数理学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会
幹事
- 47. 多田野寛人：日本応用数理学会「若手の会」研究部会 運営委員
- 48. 多田野寛人：日本応用数理学会「応用数理」編集委員
- 49. 多田野寛人：日本応用数理学会 JSIAM Letters 編集委員
- 50. 多田野寛人：情報処理学会ハイパフォーマンスコМПユーティングと計算科学シン
ポジウム HPCS2015 実行委員
- 51. 多田野寛人：情報処理学会ハイパフォーマンスコМПユーティングと計算科学シン
ポジウム HPCS2015 プログラム委員
- 52. 多田野寛人：情報処理学会 Annual Meeting on Advanced Computing System and
Infrastructure (ACSI) 2015 組織委員
- 53. 多田野寛人：情報処理学会 Annual Meeting on Advanced Computing System and
Infrastructure (ACSI) 2015 プログラム委員
- 54. 朴泰祐：東京大学情報基盤センター・スーパーコンピュータ部門専門委員
- 55. 朴泰祐：理化学研究所計算科学研究機構・運営諮問委員

11. その他

VII. 計算情報学研究部門

VII-1. データ基盤分野

1. メンバー

教授	北川 博之
准教授	天笠 俊之
研究員	Salman Ahmed Shaikh, Franck Gass
学生	大学院生 28 名、学類生 7 名

2. 概要

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

3. 研究成果

【1】 情報統合基盤技術

(関連研究費：文部科学省受託研究、基盤研究(B)、三菱電機受託研究)

(1) 指定イベント駆動型ストリーム処理

ストリームデータの増加に伴い、データ連携においてストリームデータの扱いが重要な課題となってきた。ストリームデータ処理を行うストリーム処理エンジン (SPE) は、複数のストリーム情報源からデータが到着するたびに、予め指定された問合せを処理し結果を出力する。これまで様々なシステムが研究開発されてきたが、本研究では様々なデータ連携応用の基盤として利活用可能であり、かつ、JSON の半構造データストリームを扱うことが可能なシステム技術の研究開発を行なっている。

ユーザの意図として特定のストリーム情報源からデータが到着した時にのみ問合せ処理を実行したいという状況がある。例えば、あるニュースが発生した際に、関連するツイートを収集するという状況である。本研究では、このようなイベント駆動型ストリーム処理に注目し、イベント駆動型ストリーム処理を効率的に行う問合せ処理手法を開発した。

イベント駆動型ストリーム処理では、対象となるストリーム情報源とイベントの有効期間が指定される。提案処理手法では、対象となるストリーム情報源からデータが到達してから有効期間の間だけ問合せ処理を実行することで、効率的にイベント駆動型ストリーム処理を行う。より具体的には、イベント駆動時に必要なデータだけを保持し、利用するためのスマートウィンドウ方式を提案することで、効率的なイベント駆動型ストリーム処理を実現する。さらに、様々なストリーム処理要求が複数登録された場合でも、それらに共通する部分的処理結果を共有し効率的な処理を行なう手法についても検討を行った。

提案手法の有効性を検証するために、スマートウィンドウ方式を使う場合とそうでない場

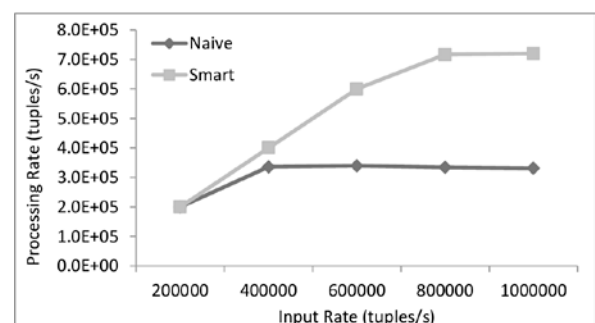


図 1 提案手法の処理性能実験の結果。

合の処理性能の比較を行った。実験では、ストリーム情報源から送信されるデータ数を増加させた時に、どの程度のデータが処理できるかを検証した。実験結果を図 1 に示す。図から従来手法 (Naive) よりも多くのデータを効率的に処理できていることが確認できた。

(2) ストリーム OLAP 基盤

センサデータやマイクロログ等、連続的に生成され、配信されるようなストリームデータが増加している。ストリームデータを処理する基盤としてストリーム処理エンジン (SPE) が多数開発されている。このような SPE には、STREAM, Storm, Borealis などが挙げられる。SPE に SQL のような問合せである CQL で書かれた問合せを登録することで、ストリームデータに対して連続的な問合せを行うことができる。

このストリームデータに対し、より多角的なデータの傾向などを分析したいというニーズが高まっている。そのような多角的なデータ分析の代表例として、OLAP 処理がある。ストリームデータに対して OLAP 処理を行う研究として、例えば Jiawei Han らは Stream Cube と呼ばれるアーキテクチャを提案している。しかし、この手法は SPE の利用を想定しておらず、一部の問合せの結果を返すことができないなどの制約が存在する。

OLAP 処理では、分析対象のデータの次元や次元内の階層の全ての組合せを考える。StreamOLAP を実現する最も単純な方法として、これらすべての組み合わせに対応した CQL の問合せを SPE に連続的な問合せとして登録し、これらの結果から、OLAP 問合せの結果を実体化しておくことが考えられる。しかし一般には、全組み合わせ数は膨大な数になるため、すべての連続的な問合せを SPE に登録することは処理性能上難しい。また、これらの全ての結果を実体化することもメモリ制約から現実的ではない。さらに、必ずしも全ての組み合わせに対応する問合せの結果を実体化する必要はなく、ユーザ要求に応じて導出すれば十分である。

これらの課題を解決するために本研究では、SPE と OLAP エンジンからなるストリームデータに対する OLAP 処理 (以下、StreamOLAP) のためのアーキテクチャを提案した。また、コストモデルに基づいた最適化アルゴリズムを開発した。提案アルゴリズムは、与えられたメモリ制約の範囲内で処理コストの最適化を図るアルゴリズムである。より具体的には、全 OLAP 問合せを、SPE に連続的な問合せとして登録し集約結果を実体化しておく問合せ (Registered query) と、ユーザ要求に応じて実体化した問合せ結果から自身の集約結果を導く問合せ (On-demand Query) の二種類に分類する。

実施した実験について述べる。本実験では StreamOLAP にかかる処理時間の測定を行う。提案アーキテクチャには SPE として商用の uCosminexus Stream Data Platform を使用し、OLAP エンジン是我々が実装した。本実験にはデータベースのベンチマークの一つである TPC-H で用いるデータセットを本実験用に加工したものを用いる。提案手法と以下の二つのベースラインとを比較する。

- Frequency-based: Registered query を各問い合わせの参照頻度が高い順に選ぶ。
- Random: Registered query をランダムに選ぶ。

実験結果を図 2 に示す。x 軸は六通りの参照頻度の与え方を示している。y 軸は処理時間を示している。これらの結果から、提案手法がベースラインより処理時間が短いことが分かる。

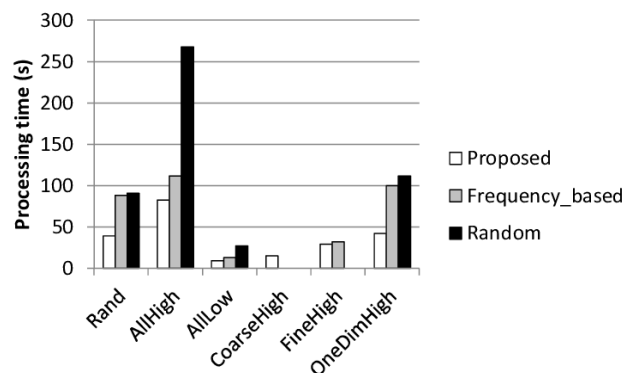


図 2 実験結果。

【2】 データマイニング・知識発見技術

(関連研究費：文部科学省受託研究，産総研基盤研究(A))

(1) Twitter ユーザの居住地推定

ソーシャルメディアを通じて実世界を知ろうとする研究が注目を集めている．例えば，地震や台風などの実世界イベントの検知，インフルエンザなどの感染症の分析，災害の分析などはその代表例である．実世界のどこでこのような現象が起こっているのかを知ることは重要であり，それを知るためにはソーシャルメディアユーザの居住地情報の推定が重要である．

本研究の着眼点は，時間的に変化する「ローカルワード」の存在である．ローカルワードとは，特定の地域に密接に関連する単語のことである．例えば，「筑波山」や「つくばエクスプレス」などはつくば市に強く関連すると考えられるため，ローカルワードである．これらのローカルワードの中には，ある特定の期間においてのみローカルワードたり得るものが存在する．例えば，「地震」という単語は通常時は特定の地域と関連しているとは言えないが，地域 A で地震が発生した際には地域 A におけるローカルワードであるとみなすことができる．本研究で提案した居住地推定手法は，これらの時間的に変化するローカルワードを逐次抽出し，ローカルワードを投稿したユーザはそれに関連する地域に住んでいるという推定を行う．

本実験では Twitter から収集した 201,570 の Twitter ユーザの情報と，それぞれのユーザが投稿した直近 200 の投稿を用いて 6 つの既存手法と比較した．また，ユーザ間の友人関係を表すソーシャルグラフを用いる既存手法を実行するため，ユーザ間の友人関係も合わせて収集した．実験結果を図 3 に示す．横軸は推定結果と実際の居住地との誤差距離を表し，縦軸は誤差距離が対応する x 軸の値以下であるユーザの割合（正解率）を表している．各線がそれぞれの推定手法の結果を表している．OLIM が提案手法である．時間的な要因を考慮しない既存手法と比較して，提案手法がより効果的に居住地の推定をしていることを示している．

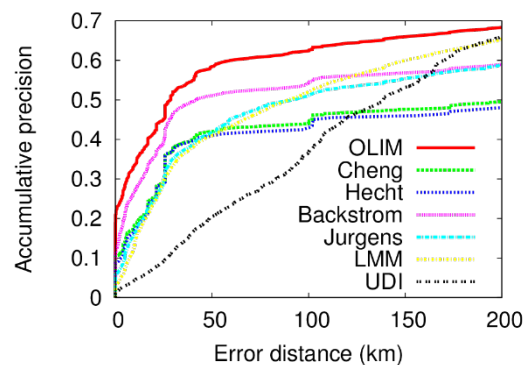


図 3 実験結果.

(2) 一般のネットワークにおけるノード分類

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

ノード分類問題における一つの課題として，ノード間のラベル相関の多様性がある．ラベル相関とは，「隣接ノードは同じラベルを持ちやすい」という傾向や，逆に「隣接ノードは異なるラベルを持ちやすい」というような傾向のことである．例えば，ソーシャルグラフ上において隣接ノード同士は居住地が近い傾向にあると言われているが，Pokec と呼ばれるソーシャルメディア上では隣接ノードは性別が異なる傾向にあることが分かっている．このように，実世界のネットワーク上においてはラベル相関は様々である．

本研究では任意のラベル相関に適用可能であり，かつパラメータの設定を必要としないノード分類アルゴリズムを提案する．これにより，実世界に存在する様々なネットワークにおけるメタデータをシームレスに推定することが可能になる．本研究の着眼点は，個々のノードごとにラベル相関を（自動的に）決定するという点である．あるノード A に着目した時，A の隣接ノード集合の大部分がラベル L を持っていたとする．このとき，A の隣接ノードの

うち、ラベルが付与されていないノードも同様にラベル L を持つ可能性が高いという推定を行う。シンプルな仮定ではあるが、これによりラベル相関に関する事前知識（パラメータ）を必要とせず様々なラベル相関を持つネットワークに適用することが可能となる。

本実験では様々なラベル相関を持つ 5 つのネットワークに対してノード分類を行った。比較した既存アルゴリズムは前述の Label Propagation (LP) と Belief Propagation (BP) である。実験結果を図 4 に示す。5 つのプロットはそれぞれのデータセットに対する結果であり、OMNI-Prop は提案アルゴリズムの名前である。各点は確信度が大きい上位 $p\%$ (x 軸) のノードに対する分類精度 (y 軸) を表している。図によると、ほぼすべての場合において提案手法がもっとも高い精度を示していることが分かる。

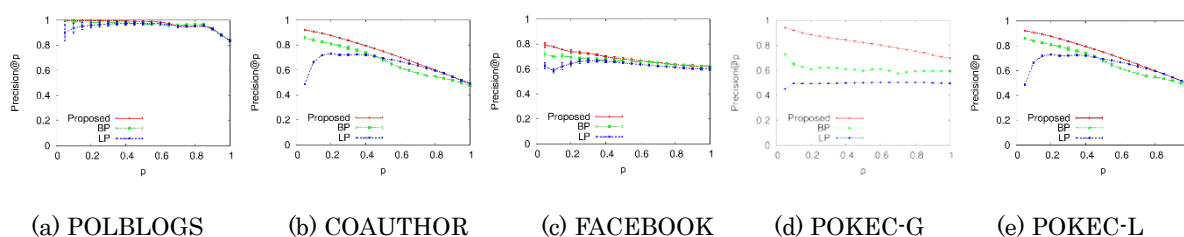


図 4 実験結果。

(3) Twitter におけるフォロー要因推定

Twitter では、ユーザは他のユーザをフォローし、他のユーザの投稿（ツイート）を受信・閲読することができる。一般に、ユーザは他のユーザの投稿内容や、あるいは他のユーザ自身に興味があるため、フォローすると考えられる。したがって、フォロー要因を推定することができればユーザの興味などの推定につながると考えられる。

本研究の着眼点は、ユーザからユーザへのフォローという行動に加えて、ユーザからユーザへのタグ付けという行動を合わせて用いる点である。Twitter ユーザは、リストという機能を用いて他のユーザをタグ付けすることができる。例えば、テニスに興味のあるユーザが「テニス」という名前のリストを作り、テニスに関連する他のユーザを作成したリストに登録することがある。ユーザ間のタグ付け関係を用いることで、あるユーザがなぜ他のユーザをフォローしたかという要因がタグという明示された形で示されるメリットがある。

提案アルゴリズムの概要を図 5 に示す。本研究で提案するアルゴリズムは、ユーザ間のフォロー関係を行列、ユーザ間のタグ付け関係をテンソルとして表現し、テンソル分解を用いて潜在的なフォロー要因を推定する。フォロー関係はフォローするユーザ ID とフォローされるユーザ ID の 2 つ組であり、タグ付け関係はタグ付けをしたユーザ ID、タグ付けをされたユーザ ID、タグ ID の 3 つ組である。図中の行列 F^T は F の転置である。出力はそれぞれの次元に対応した 3 つのベクトルを一組とするベクトル集合の集合である。各ベクトル集合はそれぞれあるトピック（テニスや科学など）に対応しており、ユーザが他のユーザをフォローする要因を表している。ベクトル c の非ゼロ要素は対応するベクトル集合のトピックを表し、ベクトル a および b の非ゼロ要素は対応するトピックを要因としてフォロー関係となっているユーザの ID を表す。

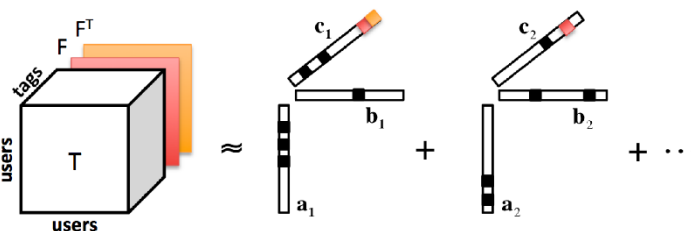


図 5 提案手法の概要。

実験では Twitter から収集した 147,541 ユーザ間のすべてのフォロー関係 1,821,432 およびすべてのタグ付け関係 179,868 を用いた。様々なトピックが見られたが、結果の例として Hockey および Writers の 2 つの

トピックについて述べる。Hockey トピックでは少数の有名ユーザ（プロホッケー選手など）をこのトピックに興味を持つ多数のユーザが単方向的にフォローするという構造になっていた。一方、Writers トピックではこの分野に関心を持つユーザが互いにフォローし合うという構造になっていた。このように実験結果を定性的に評価したところ、提案アルゴリズムはユーザ間のフォロー要因を適当に推定できていることが示された。

（４）異種ソーシャルメディアにおけるユーザ行動分析

多くのソーシャルメディアでは、ユーザは様々なリソース（写真、動画、URL、他のユーザなど）をタグ付けすることができる。例えば、Flickr と呼ばれる写真共有ソーシャルメディアでは、ユーザは自らが投稿した写真や他のユーザの写真に対してタグ付けをすることが可能である。これらのタグはリソースのメタデータであると考えられるため、複数のソーシャルメディアデータを統合利用する際に重要な役割を担う。そこで本研究ではユーザのタグ付け行動を複数のソーシャルメディアにわたって分析し、そこに潜む様々なパターンの抽出を行った。

本研究では主に Twitter における「ユーザがユーザをタグ付けする」という側面に着目する。これは他のソーシャルメディアにはない特徴であるため、ユーザのタグ付け行動についてより深く考察するために重要である。本研究では具体的に以下の３つの質問に答える：（質問１）複数のソーシャルメディア（Flickr, Delicious, Twitter）において、ユーザのタグ付け行動に共通するパターン、もしくは相違点はあるか。（質問２）Twitter ユーザはどの程度相互にタグ付けをするか。（質問３）Twitter においてタグ付けとフォロー関係との間にはどのような違いがあるか。

実施した実験について述べる。本実験では Twitter, Flickr, および Delicious から収集した 1,000 万スケールのタグ付けデータを用いた。得られた結果は以下の通り。

1. Twitter ユーザは他のユーザをカテゴリ分けするためにタグを利用しているが、Flickr および Delicious ではユーザをカテゴリ分けするだけでなく、詳細を記述するためにタグを利用している（質問１）。
2. Delicious および Twitter においては多くのユーザが同一のリソースに対してタグ付けをする傾向にあるが、Flickr ではそれぞれのユーザが異なるリソースに対してタグ付けをする傾向にある（質問１）。
3. Twitter ユーザが他のユーザからタグ付けされた際に、タグ付けを返す確率は、他のユーザからタグ付けをされた回数の対数に比例する（質問２）。
4. Twitter におけるユーザ間のフォロー関係とタグ付け関係は約 6 割重複している（質問３）。
5. Twitter におけるタグはその使用傾向から Subscription タグと Friendship タグの二種類に分けることができる。前者は一般ユーザから有名ユーザへのタグであり、後者は一般ユーザ間、主に友人間（相互フォローしているユーザ間）において利用されるタグである（質問３）。

これらの観察から、ソーシャルメディアにおけるメタデータ推定、および異種ソーシャルメディアデータの統合利用に関する考察が深まるものと考えられる。

【３】 XML・Web プログラミング

（関連研究費：文部科学省受託研究，富士通研究所受託研究）

（１）XML ストリームに対するキーワード検索

本研究では、XML ストリームに対して、指定したキーワードが特定のパス式に含まれるような部分 XML データを検索する手法を開発した。より具体的には、キーワード検索と

XPath に基づく検索を合わせた検索を可能にする．本研究では，非決定性有限オートマトンを基にした手法を拡張して，パス式とキーワードを組み合わせた検索を XML ストリームに適用することを可能にした．

本研究の有効性を示すために，人工データと実データを利用して評価を行った．人工データとしては，XMark データセットを利用した．実データとしては，DBLP の XML データと Mondial を用いた．実験では，検索精度（適合率および再現率）と性能（スループットおよびメモリ使用量）について評価を行った．既存研究の CKStream と本研究を比較した結果を図 6 に示す．精度については，既存手法，提案手法ともに問合せにマッチするべき結果がすべて抽出されている（図 6 (b)）．一方，既存手法の適合率は不要な検索結果も抽出しているのに対し，提案手法では必要な検索結果だけを抽出できていることがわかる（図 6 (a)）．性能評価では，単位時間あたりのデータ処理量（スループット：図 6 (d)）では，既存手法よりも大きいサイズのデータを処理できている．また，メモリ使用量（図 6 (c)）は既存手法よりも少ないメモリ量で検索を実現している．

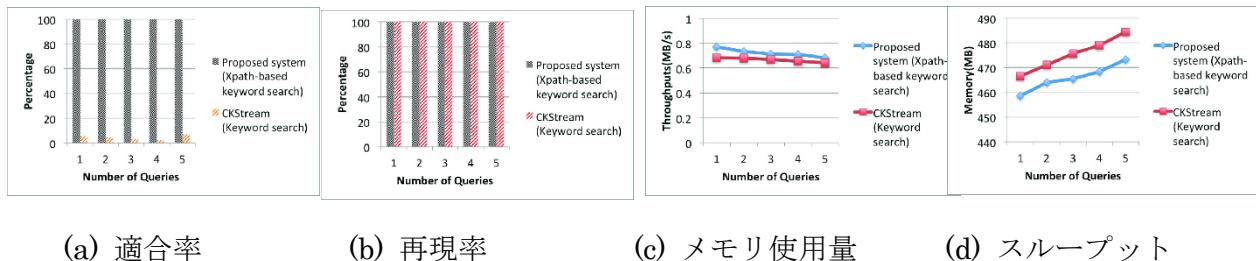


図 6 実験結果（検索精度および性能）．

(2) XML に対するファセット検索

XML に代表される半構造データは複雑な構造を持つため，問合せを正確に記述することは一般に容易ではない．構造が複雑になるほど，検索すべき情報がどこにあるかがユーザからわかりにくくなる．そのために，ユーザは適切な問合せを記述できず，所望する情報を得られない，といった状況に陥ってしまう．

この問題に対し，本研究では探索的検索手法であるファセット検索を適用する手法を開発した．ファセット検索は属性情報付きの実体に対して探索的検索を提供する検索手法である．そのため，本研究の先行研究では，ファセット検索を可能にするフレームワークを提案した．本研究では，このフレームワークを拡張し，より効果的なファセット検索システムを提供する．具体的には，(1)検索対象情報の導出の自動化，と (2)より複雑な XML データに対するファセット検索の適用を行う．まず，(1)では検索対象となりうる部分データを経験則的に判定するアルゴリズムを提案する．次に，(2)では (1)の経験則をネットワーク構造を許すデータに対しても適用する．ここで利用した経験則は次の二点である．一つ目は，頻繁に出現する構造は情報の単位を表し，安定的に頻出する構造ほど適切な情報であるという経験則である．二つ目は，構造の要素は意味的に理解可能な内容であるという経験則である．

提案手法の有効性を検証するために，(1) 自動的に抽出した情報を人手で検証，および (2) 実データへの適用し構築したインターフェースの検証を行った．ここでは，自動抽出した情報の抽出精度の評価結果を図 7 に示す．実験には実際に利用されている XML データを九種類利用した．精度評価には人手で用意した正解情報をどの程度抽出できているかの度合いを表す適合率と再現率を用いた．実験結果から，適切なパラメータを設定することで正確に抽出できることがわかった．

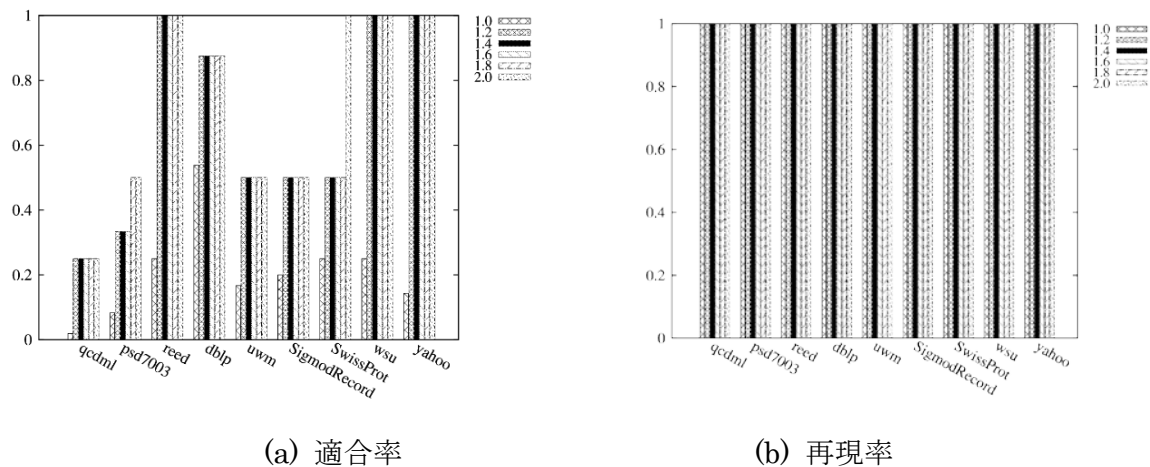


図 7 実験結果.

(3) LOD に対するキーワード検索

Linked Open Data (LOD) とは、相互にリンクされたオープンデータのネットワーク (Web of Open Data) を構築し、機械処理可能なデータを広く公開しようとする試みである。近年のデータ公開の流れと相まって、政府や企業等がデータを公開する手段として注目されている。LOD において、データは Resource Description Framework (RDF) によって記述され、URI により相互に参照される。また利用者は、クエリ言語 SPARQL を利用することで、問合せを行うことができる。今日 LOD は代表的な半構造データ情報源となりつつある。

しかしながら、SPARQL 問合せを記述するために、利用者は SPARQL 言語そのものを習得することが必要である。さらに、問合せ対象となる LOD データそのものの構造を知る必要がある。LOD データは一般に複雑なグラフ構造を持つため、複雑かつ巨大なデータの場合、特に後者は困難である。また、SPARQL の結果はランキングされていないため、重要度の高い結果を判別することが困難である。

この問題に対して、本研究では LOD に対するキーワード検索手法を開発した。関連研究において行われているような、RDF トリプルを単位とする検索ではなく、エンティティをベースとし、ObjectRank によるランキングを行う点に特徴がある。まず、LOD データにおける検索対象となるエンティティを与える。本手法では、システム構築者等によって事前に検索対象となるエンティティが指定されているものとする。検索対象となるエンティティが決まると、次に各エンティティに対応するサブグラフの抽出および特徴抽出を行う。得られたグラフ (エンティティサブグラフ) に対して、ObjectRank を適用することで、各エンティティに対する評価値を計算することができる。これにより、検索結果のランキングを行う。今年度は、DBpedia のデータを対象に、予備的な評価を実施し、提案手法が実際に有効であることを確認した。

今後は、実データによる評価を行うとともに、スキーマグラフにおけるエッジの重みの自動調整について検討する予定である。

(4) LOD に対するビューおよび LINQ による問合せ

一般に、LOD (Linked Open Data) は多様なドメインから構成される複雑なグラフ構造をもつ。さらに、複雑なグラフ構造への問合せを記述するには、RDF データのグラフ構造を把握した上で、SPARQL 問合せ言語による問合せを適切に記述する必要があり、一般の利用者に対して敷居が高いという問題がある。

これに対して、本研究の先行研究では、LINQ によるビューを用いた LOD に対する問合せ

せ手法を提案した。この手法では、まず、公開対象の LOD をよく知る技術者が、それをどのような形式で公開したいかを JSON ビューの形式で記述する。このようにして提供された JSON ビューに対して、ユーザは LINQ 問合せ言語を利用して問合せを記述することで、LINQ 使用者は LOD に対する専門的な知識を必要とせずに LOD への問合せを行うことができる。

提案システムの概要図を図 8 に示す。条件抽出部では、クエリを解釈する。問合せ条件に加え、結合条件、最終的な射影に必要な要素を抽出する必要がある。SPARQL 生成/問合せ部では、問合せ条件とビュー定義から SPARQL クエリを生成し複数の問合せ先に問合せる必要がある。問合せ結果の整形/結合/射影部では、ビュー定義を使用して JSON を整形するだけでなく、条件抽出部で抽出した結合条件、射影に必要な要素を使用して、JSON を結合、最終的に必要な要素のみを射影する。

今年度は、JavaScript 言語上の LINQ 実装である JSINQ を対象に、プロトタイプシステムの実装を行った。今後は結合演算を含む問合せを本手法で行った場合と、直接エンドポイントに対して行った場合と、比較評価を行う予定である。また、コストベースの問合せ最適化についても検討を行う。

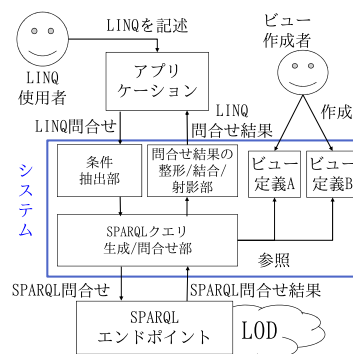


図 8 提案システム概要。

【4】 科学分野におけるデータベース応用

(1) GPV/JMA アーカイブ

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



図 9 GPV/JMA アーカイブ。

(2) 格子 QCD データグリッド ILDG/JLDG

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

(3) X 線天体観測データにおけるアウトバーストの類似検索

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

共同で、X 線天体の観測データを対象に、類似したアウトバーストパターンを検索する手法を研究開発している。

4. 教育

学生の指導状況（学生氏名、学位の種類、論文名）

<博士（工学）>

1. 駒水 孝裕

A Study on Faceted Search for Semi-structured Data

（半構造データに対するファセット検索に関する研究）

2. 塩川 浩昭

Efficient Clustering Algorithms for Large-scale Graphs

（大規模グラフに対するクラスタリングの高速化に関する研究）

<修士（工学）>

1. 片岡 えり

EPUB3.0 に基づくソーシャルリーディングシステムに関する研究

2. 権守 健嗣

クラウドソーシングシステムにおけるヒューリスティクスの動的選択手法

3. 丹治 寛佳

マイクロタスク型クラウドソーシングのための質問文改善に関する研究

4. 中挾 晃介

StreamOLAP における問合せ最適化に関する研究

5. 王 岩

An Efficient Execution Scheme for Designated Event-driven Stream Processing

（指定イベント駆動型ストリーム処理の効率的な実行方式）

6. Silqueira Hickson Cruz, Mateus

GPU Acceleration of Set Similarity Join

（GPU による集合間類似結合の高速化）

7. 黄 峻

GPGPU による不確実時系列データに対する類似検索の高速化

8. 福角 駿

クラウドソーシングシステムのフィードバック記述を対象とした関心の分離

9. 西村 祐貴

次世代シーケンサーデータを用いた系統解析を支援するアライメント管理システム

<修士（工学）：特定課題研究>

1. 天本 涼太

情報通信技術を活用した農作物向け獣害防止システムの開発
ープロジェクトマネジメントと Web アプリケーションの開発ー

2. 顧 毅捷

スライドノートを活用した講演字幕システムの実現
ー通信プロトコルの設計と字幕表示用補助者システムの開発ー

<学士（情報科学，情報工学）>

1. 福田 宏樹

クラス名の文法構造調査に基づくクラス名推薦システムの試作

2. 坂元 沙季

Stream OLAP のためのビューシステムの研究開発

3. 長 裕敏

ストリーム処理とバッチ処理を統合したデータ処理フレームワークの研究開発

4. 伊藤 寛祥

引用情報を利用した文書データベースからのトピック変遷抽出

5. 上田 紗希

時間的関係を考慮したラベル伝搬によるツイート発信地推定の研究

6. 奥村 彩水

Linked Open Data におけるグラフ構造を考慮したキーワード検索に関する研究

7. 篠塚 千愛

クラウド環境における高速な秘匿検索手法

集中講義など

該当なし

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞（賞の名称、受賞者名、タイトル、年月日）

A1. 学生プレゼンテーション賞，大西 誠，（北川 博之，） "オンラインニュースに関連するツイートのリアルタイムな収集",第 7 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2015), A8-4, 2015 年 3 月 2 日～3 月 4 日.

A2. 学生プレゼンテーション賞，熊本 和正，（天笠 俊之，北川 博之，） "LINQ によるビュー

- ーを用いた LOD に対する問合せにおける結合演算のサポート", 第 7 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2015), E3-3, 2015 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- A3. 学生プレゼンテーション賞, 伊藤 寛祥, (天笠 俊之, 北川 博之,) "論文データベースにおけるトピックの変遷の検出", 第 7 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2015), F3-6, 2015 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- A4. 学生奨励賞, 篠塚 千愛, (渡辺 知恵美, 北川 博之,) "クラウド環境におけるプライバシー保護を考慮した検索処理のための軽量の階層索引", 情報処理学会第 77 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2015), 6W-02, 2015 年 3 月 17 日～3 月 19 日.
- A5. 学生奨励賞, 伊藤 寛祥, (天笠 俊之, 北川 博之,) "非負値行列分解を用いた論文データベースにおけるトピック変遷の検出", 情報処理学会第 77 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2015), 5N-03, 2015 年 3 月 17 日～3 月 19 日.

外部資金 (名称、氏名、代表・分担の別、採択年度、金額、課題名)

受託経費：文部科学省 (平成 26 年度～平成 29 年度)

研究課題：実社会ビッグデータ利活用のためのデータ統合・解析技術の研究開発

研究代表者：北川 博之

平成 26 年度配分額：140,925,000 (直接経費 108,403,847：間接経費 32,521,153)

研究種目：基盤研究(B) (平成 26 年度～平成 28 年度)

研究課題：複合型並列計算環境を活用した大規模不均質データの実時間分析基盤

研究代表者：北川 博之

平成 26 年度配分額：6,240,000 (直接経費 4,800,000：間接経費 1,440,000)

研究種目：基盤研究(A) (平成 24 年度～平成 26 年度)

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

研究分担者：北川 博之

平成 26 年度配分額：1,365,000 (直接経費 1,050,000：間接経費 315,000)

研究分担者：天笠 俊之

平成 26 年度配分額：1,365,000 (直接経費 1,050,000：間接経費 315,000)

受託経費：三菱電機株式会社 (平成 26 年度)

研究課題：時系列データベース・分析技術の研究開発

研究代表者：北川 博之・天笠 俊之

平成 26 年度配分額：500,000（直接経費 450,000：間接経費 50,000）

受託経費：株式会社富士通研究所（平成 26 年度）

研究課題：時系列データの分析基盤技術の研究

研究代表者：北川 博之・天笠 俊之

平成 26 年度配分額：2,000,000（直接経費 1,800,000：間接経費 200,000）

研究種目：基盤研究(C)（平成 25 年度～平成 27 年度）

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

研究代表者：天笠 俊之

平成 26 年度配分額：1,560,000（直接経費 1,200,000：間接経費 360,000）

研究種目：基盤研究(A)（平成 25 年度～平成 28 年度）

研究課題：災害後の復旧・復興における共有情報管理のための基盤技術に関する研究
（研究代表者：横田 治夫（東京工業大学））

研究分担者：天笠 俊之

平成 26 年度配分額：1,040,000（直接経費 800,000：間接経費 240,000）

受託経費：CREST（平成 26 年度）

研究課題：オープンデータを利用した医療データの公開・活用促進と分散並列処理による
高速化に関する調査（研究代表者：今中 雄一（京都大学））

研究分担者：天笠 俊之

平成 26 年度配分額：780,000（直接経費 600,000：間接経費 180,000）

知的財産権（種別、氏名、課題名、年月日）

該当なし

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

< 学術雑誌論文 >

- J1. Yusuke Kozawa, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Probabilistic Frequent Itemset Mining on a GPU Cluster," IEICE Transactions on Information and Systems, Vol. E97-D, No. 4, pp. 779-789, April 2014.
- J2. Salman Ahmed Shaikh and Hiroyuki Kitagawa, "Top-k Outlier Detection from Uncertain Data," International Journal of Automation and Computing (IJAC), Vol. 11, No. 2, pp. 128-142, 2014.
- J3. Salman Ahmed Shaikh and Hiroyuki Kitagawa, "Efficient Distance-based Outlier Detection on Uncertain Datasets of Gaussian Distribution," World Wide Web Journal, Vol. 17, No. 4, pp. 511-538, July, 2014.
- J4. 坂倉 悠太, 山口 祐人, 天笠 俊之, 北川 博之, "部分グラフに基づく効率的な PageRank 推定," 日本データベース学会論文誌, Vol. 13-J, No. 1, pp. 32-39, October, 2014.
- J5. 小澤 佑介, 天笠 俊之, 北川 博之, "データ分割と協調的マージに基づく GPU 上の効率的なソートアルゴリズム", 日本データベース学会論文誌, Vol. 13-J, No. 2, pp. 1-6, 2015 年 2 月.
- J6. 林 史尊, 小澤 佑介, 天笠 俊之, 北川 博之, "GPU を用いた Canopy クラスタリングの高速化", 日本データベース学会論文誌, Vol. 13-J, No. 2, pp. 13-18, 2015 年 2 月.
- J7. 早瀬 康裕, 中村 高士, 天笠 俊之, 北川 博之, "トランザクション推定に基づくリポジトリを跨いだロジカルカップリングの検出", 情報処理学会論文誌, Vol.56, No.2, pp. 657-668, 2015 年 2 月.

<査読付き国際会議論文>

- C1. Salman Ahmed Shaikh and Hiroyuki Kitagawa, "Continuous Outlier Detection on Uncertain Data Streams," Proc. IEEE 9th International Conference on Intelligent Sensors, Sensor Networks and Information Processing (ISSNIP 2014), pp. 1-7, Singapore, April 21-24, 2014.
- C2. Takahiro Komamizu, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "A Scheme of Automated Object and Facet Extraction from Graph Data," Proc. 18th International Database Engineering & Applications Symposium (IDEAS 2014), pp. 338-341, Porto, Portugal, July 7-9, 2014.
- C3. Toshiyuki Amagasa, Fan Zhang, Jun Sakuma and Hiroyuki Kitagawa, "A Scheme for Privacy-Preserving Ontology Mapping," Proc. 18th International Database Engineering & Applications Symposium (IDEAS 2014), pp. 87-95, Porto, Portugal, July 7-9, 2014.

- C4. Chongjie Li, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa and Gautam Srivastava, "Label-bag based Graph Anonymization via Edge Addition," Proc. 7th International C* Conference on Computer Science & Software Engineering (C3S2E 2014), pp. 1, Montreal, Canada, August 4-6, 2014.
- C5. Yuta Sakakura, Yuto Yamaguchi, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "An Improved Method for Efficient PageRank Estimation," Proc. 25th International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2014), pp. 208-222, Munich, Germany, September 1-5, 2014.
- C6. Ahmed Shaikh and Hiroyuki Kitagawa, "MOOD: Moving Objects Outlier Detection,"(demo), Proc. 16th Asia-Pacific Web Conference (APWeb2014), pp. 666-669, Changsha, China, September 5-7, 2014.
- C7. Takahiro Komamizu, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "Frequent-Pattern based Facet Extraction from Graph Data," Proc. 17th International Conference on Network-Based Information Systems (NBIS 2014), pp. 318-323, Salerno, Italy, September 10-12, 2014.
- C8. Jun Hwang, Yusuke Kozawa, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "GPU Acceleration of Similarity Search for Uncertain Time Series," Proc. 3rd Workshop on Advances in Data Engineering and Mobile Computing (DEMoC 2014), pp. 627-632, Salerno, Italy, September 10-12, 2014.
- C9. Savong Bou, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "Keyword search with path-based filtering over XML streams," Proc. IEEE 33rd International Symposium on Reliable Distributed Systems (SRDS 2014), pp. 337-338, Nara, Japan, October 6-9, 2014.
- C10. Rina Okada, Chiemi Watanabe and Hiroyuki Kitagawa, "A k-anonymization Algorithm on Social Network Data that Reduces Distances between Nodes," Proc. 1st International Workshop on Future Technologies for Smart Information Systems (FTSIS 2014), pp. 76-81, Nara, Japan, October 6-9, 2014.
- C11. Yuto Yamaguchi, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, and Yohei Ikawa, "Online User Location Inference Exploiting Spatiotemporal Correlations in Social Streams," Proc. 23th ACM International Conference on Information and Knowledge Management (CIKM 2014), pp. 1139-1148, Shanghai, China, November 3-7, 2014.
- C12. Takahiro Komamizu, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "Extracting Facets from Textual Contents for Faceted Search over XML Data," Proc. 16th

International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services (iiWAS 2014), pp.420-429, Hanoi, Vietnam, December 4-6, 2014.

C13. Savong Bou, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "Filtering XML Streams by XPath and Keywords," Proc. 16th International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services (iiWAS 2014), pp. 410-419, Hanoi, Vietnam, December 4-6, 2014.

C14. Yuto Yamaguchi, Christos Faloutsos, and Hiroyuki Kitagawa, "OMNI-Prop: Seamless Node Classification on Arbitrary Label Correlation", Proc. 29th AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI 2015), Austin, USA, January 25-29, 2015.

B) 査読無し論文
該当なし

(2) 国際会議発表

A) 招待講演
該当なし

B) 一般講演

C1. Salman Ahmed Shaikh and Hiroyuki Kitagawa, "Continuous Outlier Detection on Uncertain Data Streams," Proc. IEEE 9th International Conference on Intelligent Sensors, Sensor Networks and Information Processing (ISSNIP 2014), pp. 1-7, Singapore, April 21-24, 2014.

C2. Takahiro Komamizu, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "A Scheme of Automated Object and Facet Extraction from Graph Data," Proc. 18th International Database Engineering & Applications Symposium (IDEAS 2014), pp. 338-341, Porto, Portugal, July 7-9, 2014.

C3. Toshiyuki Amagasa, Fan Zhang, Jun Sakuma and Hiroyuki Kitagawa, "A Scheme for Privacy-Preserving Ontology Mapping," Proc. 18th International Database Engineering & Applications Symposium (IDEAS 2014), pp. 87-95, Porto, Portugal, July 7-9, 2014.

C4. Chongjie Li, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa and Gautam Srivastava, "Label-bag based Graph Anonymization via Edge Addition," Proc. 7th International C* Conference on Computer Science & Software Engineering (C3S2E 2014), pp. 1,

- Montreal, Canada, August 4-6, 2014.
- C5. Yuta Sakakura, Yuto Yamaguchi, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "An Improved Method for Efficient PageRank Estimation," Proc. 25th International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2014), pp. 208-222, Munich, Germany, September 1-5, 2014.
 - C6. Ahmed Shaikh and Hiroyuki Kitagawa, "MOOD: Moving Objects Outlier Detection," (demo), Proc. 16th Asia-Pacific Web Conference (APWeb2014), pp. 666-669, Changsha, China, September 5-7, 2014.
 - C7. Takahiro Komamizu, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "Frequent-Pattern based Facet Extraction from Graph Data," Proc. 17th International Conference on Network-Based Information Systems (NBIS 2014), pp. 318-323, Salerno, Italy, September 10-12, 2014.
 - C8. Jun Hwang, Yusuke Kozawa, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "GPU Acceleration of Similarity Search for Uncertain Time Series," Proc. 3rd Workshop on Advances in Data Engineering and Mobile Computing (DEMoC 2014), pp. 627-632, Salerno, Italy, September 10-12, 2014.
 - C9. Savong Bou, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "Keyword search with path-based filtering over XML streams," Proc. IEEE 33rd International Symposium on Reliable Distributed Systems (SRDS 2014), pp. 337-338, Nara, Japan, October 6-9, 2014.
 - C10. Rina Okada, Chiemi Watanabe and Hiroyuki Kitagawa, "A k-anonymization Algorithm on Social Network Data that Reduces Distances between Nodes," Proc. 1st International Workshop on Future Technologies for Smart Information Systems (FTSIS 2014), pp. 76-81, Nara, Japan, October 6-9, 2014.
 - C11. Yuto Yamaguchi, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, and Yohei Ikawa, "Online User Location Inference Exploiting Spatiotemporal Correlations in Social Streams," Proc. 23th ACM International Conference on Information and Knowledge Management (CIKM 2014), pp. 1139-1148, Shanghai, China, November 3-7, 2014.
 - C12. Takahiro Komamizu, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "Extracting Facets from Textual Contents for Faceted Search over XML Data," Proc. 16th International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services (iiWAS 2014), pp.420-429, Hanoi, Vietnam, December 4-6, 2014.
 - C13. Savong Bou, Toshiyuki Amagasa and Hiroyuki Kitagawa, "Filtering XML Streams

by XPath and Keywords," Proc. 16th International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services (iiWAS 2014), pp. 410-419, Hanoi, Vietnam, December 4-6, 2014.

- C14. Yuto Yamaguchi, Christos Faloutsos, and Hiroyuki Kitagawa, "OMNI-Prop: Seamless Node Classification on Arbitrary Label Correlation", Proc. 29th AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI 2015), Austin, USA, January 25-29, 2015.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

- I1. 北川博之, "ビッグデータ時代のデータ工学研究の展開," 日本ソーシャルデータサイエンス学会 2014 年度秋季シンポジウム (基調講演), 2014 年 11 月 29 日.

B) その他の発表

- P1. 駒水 孝裕, 天笠 俊之, 北川 博之, "XML データに対するファセット検索のためのファセット抽出の自動化," 第 13 回情報科学技術フォーラム (FIT 2014), D-022, 2014 年 9 月 3 日～9 月 5 日.
- P2. 王 岩, 北川 博之, "Design and Evaluation of Designated Event-based Stream Processing," 第 13 回情報科学技術フォーラム (FIT 2014), D-026, 2014 年 9 月 3 日～9 月 5 日.
- P3. 西村 和也, 北川 博之, "差分計算を用いたトランザクショナルストリーム処理の実現," 第 13 回情報科学技術フォーラム (FIT 2014), D-027, 2014 年 9 月 3 日～9 月 5 日.
- P4. 中挾 晃介, 北川 博之, 天笠 俊之, "ストリームデータに対するストリーム処理エンジンを用いた OLAP 処理," 第 13 回情報科学技術フォーラム (FIT 2014), D-028, 2014 年 9 月 3 日～9 月 5 日.
- P5. 小柳 涼介, 天笠 俊之, 北川 博之, "構造情報の再利用による XML データに対する類似検索の高速化," 第 13 回情報科学技術フォーラム (FIT 2014), D-001, 2014 年 9 月 3 日～9 月 5 日.
- P6. 大西 誠, 北川 博之, "ニュース記事のリアルタイムソーシャルアノテーション," 第 13 回情報科学技術フォーラム (FIT 2014), D-011, 2014 年 9 月 3 日～9 月 5 日.
- P7. 福田 宏樹, 早瀬 康裕, 北川 博之, "クラス名の単語列に対する品詞列ごとのクラス名数の定量的調査," 第 13 回情報科学技術フォーラム (FIT 2014), B-011, 2014 年 9 月 3 日～9 月 5 日.
- P8. Savong Bou, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "An Improved Method of

- Keyword Search over Relational Data Streams", 第 7 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2015), A3-2, 2015 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P9. 福角 駿, 森嶋 厚行, 北川 博之, "クラウドソーシングシステム記述での関心の分離によるシステム把握支援", 第 7 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2015), B1-3, 2015 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P10. 片岡 えり, 天笠 俊之, 北川 博之, Franck Gass, "EPUB を対象としたソーシャルリーディングシステムにおけるユーザ分析", 第 7 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2015), D2-2, 2015 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P11. 中挾 晃介, 北川 博之, Salman Ahmed Shaikh, 天笠 俊之, "StreamOLAP における問合せの最適化手法", 第 7 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2015), D6-5, 2015 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P12. 黄 峻, 小澤 佑介, 天笠 俊之, 北川 博之, "GPGPU による不確実時系列データに対する類似検索の高速化", 第 7 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2015), G3-5, 2015 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P13. 王 岩, 北川 博之, Salman Ahmed Shaikh, 渡辺 陽介, "Efficient Execution of Designated Event-driven Stream Processing", 第 7 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2015), E4-4, 2015 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P14. Silqueira Hickson Cruz Mateus, 小澤 佑介, 天笠 俊之, 北川 博之, "Efficient Set Similarity Join on Graphics Processors", 第 7 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2015), G3-1, 2015 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P15. 権守 健嗣, 森嶋 厚行, 歳森 敦, 北川 博之, "クラウドソーシングヒューリスティクス的一般化選択フィルタによるモデル化と動的選択手法", 第 7 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2015), B1-2, 2015 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P16. 丹治 寛佳, 清水 伸幸, 森嶋 厚行, 北川 博之, "マイクロタスク型クラウドソーシングにおける質問文改善の支援手法", 第 7 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2015), C6-1, 2015 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P17. 大西 誠, 北川 博之, "オンラインニュースに関連するツイートのリアルタイムな収集", 第 7 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2015), A8-4, 2015 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P18. 熊本 和正, 天笠 俊之, 北川 博之, "LINQ によるビューを用いた LOD に対する問合せにおける結合演算のサポート", 第 7 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2015), E3-3, 2015 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P19. 篠塚 千愛, 渡辺 知恵美, 北川 博之, "DaaS 環境におけるデータとクエリ双方のプライ

- バシ保護を実現する効率的な秘匿検索", 第 7 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2015), G2-6, 2015 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P20. 伊藤 寛祥, 天笠 俊之, 北川 博之, "論文データベースにおけるトピックの変遷の検出", 第 7 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2015), F3-6, 2015 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P21. 坂元 沙季, 中挾 晃介, 北川 博之, 天笠 俊之, "Stream OLAP のための可視化ユーザインタフェース", 情報処理学会第 77 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2015), 4N-07, 2015 年 3 月 17 日～3 月 19 日.
- P22. 長 裕敏, 王 岩, 北川 博之, 天笠 俊之, "半構造データに対するストリーム処理とバッチ処理の統合フレームワーク", 情報処理学会第 77 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2015), 5M-07, 2015 年 3 月 17 日～3 月 19 日.
- P23. 上田 紗希, 山口祐人, 北川 博之, 天笠 俊之, "時間的關係を考慮したラベル伝搬によるツイート発信地推定", 情報処理学会第 77 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2015), 4N-03, 2015 年 3 月 17 日～3 月 19 日.
- P24. 奥村 彩水, 天笠 俊之, 北川 博之, "Linked Open Data に対するキーワード検索手法の提案", 情報処理学会第 77 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2015), 6N-03, 2015 年 3 月 17 日～3 月 19 日.
- P25. 篠塚 千愛, 渡辺 知恵美, 北川 博之, "クラウド環境におけるプライバシー保護を考慮した検索処理のための軽量の階層索引", 情報処理学会第 77 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2015), 6W-02, 2015 年 3 月 17 日～3 月 19 日.
- P26. 伊藤 寛祥, 天笠 俊之, 北川 博之, "非負値行列分解を用いた論文データベースにおけるトピック変遷の検出", 情報処理学会第 77 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2015), 5N-03, 2015 年 3 月 17 日～3 月 19 日.

(4) 著書、解説記事等

該当なし

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

- 地球環境研究部門との連携：気象庁気象予報データベース「GPV/JMA アーカイブ」(<http://gpvjma.ccs.hpcc.jp>)の開発，管理，運用.
- 素粒子物理研究部門との連携：Japan Lattice Data Grid (JLDG), International Lattice Data Grid (ILDG)の運営.
- 生命科学研究部門との連携：次世代シーケンサーデータを用いた系統解析を支援するアラメント管理システムに関する研究.

- 産業技術総合研究所との連携：大規模・異種の時空間データ統合で生じる矛盾を許容するサイエンスクラウド基盤に関する研究.
- Carnegie Mellon University とのソーシャルメディア分析に関する国際共同研究.

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

- The 1st International Workshop on Future Technologies for Smart Information Systems (FTSIS 2014) in conjunction with the 33rd IEEE Symposium on Reliable Distributed Systems (SRDS 2014) in Nara, Japan, October 6-9, 2014.
- 第7回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM フォーラム 2015), 磐梯熱海ホテル華の湯 (福島県郡山市), 2015 年 3 月 2 日 (月) ~4 日 (水).

9. 管理・運営

北川博之教授

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

天笠俊之准教授

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

10. 社会貢献・国際貢献

北川博之教授

- 国際委員等
 - 国際ジャーナル編集委員：IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, World Wide Web Journal
 - 国際会議運営委員：WAIM Steering Committee Member, DASFAA Steering Committee Member Emeritus

- 国際会議共同パネル委員長：ASONAM2014
- 国際会議プログラム委員会委員：DASFAA2014, MDM2014, PAKDD2014, DEXA2014, IDEAS2014, CoopIS2014, DASFAA2015, ACM SAC2015, IDEAS2015, DEXA2015
- 国際会議アドバイザー委員：SRDS2014
- 国内委員等
 - 日本学術会議連携会員
 - 日本データベース学会会長
 - （独）科学技術振興機構・戦略的創造研究推進事業「ビッグデータ統合利活用のための次世代基盤技術の創出・体系化」領域アドバイザー
 - （独）情報通信研究機構・高度通信・放送研究開発委託研究評価委員会委員
 - FIT2014 第 13 回情報科学技術フォーラム現地実行副委員長

天笠俊之准教授

- 国際委員等
 - 国際学会デモ共同委員長：APWeb2014
 - 国際学会ワークショップ共同委員長：FTSIS2014
 - 国際学会プログラム委員：IDEAS2014, APWeb2014, iiWAS2014, SITIS2014, DSAA2014, DBKDA2015
- 国内委員等
 - 第 7 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム（DEIM フォーラム 2015） 実行委員長
 - 電子情報通信学会論文誌「データ工学と情報マネジメント特集号」編集幹事
 - 日本データベース学会論文誌編集委員
 - 情報科学技術フォーラム（FIT）2014 プログラム委員・現地実行委員

11. その他

該当なし

VII-2. 計算メディア分野

1. メンバー

教授	大田 友一
准教授	亀田 能成, 北原 格
学生	大学院生 20 名, 学類生 7 名

2. 概要

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

純粋なデータ処理の効率や速度が求められる通常のスーパーコンピュータ分野とは違い、人間に纏わる情報を処理対象とする計算科学では、情報処理の時間軸を人間に合わせる事が必須である。グローバルに広がる人間社会とそれを取り巻く環境（生活空間や都市環境など）を対象として、人間の時間軸（すなわち、リアルタイム）に沿って膨大な情報を処理し、実観測データとシミュレーション結果の融合情報を、人間に分かり易い形で提示し人間社会へフィードバックするためには、実世界計算情報学と呼ぶべき新しい枠組みが必要となる。

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

本年度の報告では、下記の 5 件の研究について概要を説明する。

【1】複合現実感を用いた展示物に関する関心の共有：複合現実感技術を用いて、博物館等における展示物の閲覧を支援する手法を提案する。閲覧者の発話内容（関心）を複合現実感を用いて可視化することにより、展示物に関する関心を複数の閲覧者で共有する手法を提案する。展示物に関心を持った閲覧者（発話者）の位置・姿勢を用いて、展示物上の注目箇所に発話内容を 3 次元 CG モデルとして可視化する。後から来た閲覧者は、可視化された発話内容を読むことにより、他者の関心に基づいて、展示物に関する理解をさらに深めることができる。（主な研究費：科研費挑戦的萌芽研究（北原）2010～2012 年度）

【2】多視点画像から復元した 3D モデルを用いた落石シミュレーション：多視点画像から復元した 3D モデルと物理演算エンジンを用いた落石シミュレーション手法を提案する。斜面とその上に存在する岩を各々撮影した多視点画像を解析することにより、岩と斜面の 3D

モデルを復元する．岩のレンダリング画像と斜面を撮影した画像間の対応関係から，二つの 3D モデル間の剛体変換行列を算出し，岩の 3D モデルを斜面の 3D モデル上に位置合わせする．位置合わせした 3D モデルに対して物理演算エンジンを適用することにより，より現実に近い状況下での落石シミュレーションを実現する．（（主な研究費：科研費若手研究 A（北原）2009～2011 年度）

【3】ズーム操作可能な多視点画像の閲覧方式：ズーム操作を行いながら連続的に多視点画像を切り替える映像閲覧方式を提案する．ユーザの注目点と多視点画像の注視点が異なる場合には，ステレオ法を用いて注目点の 3 次元位置を推定し，その点を多視点画像の新しい注視点とする．（主な研究費：科研費基盤研究 B（大田）2012～2016 年度）

【4】歩行者ナビゲーションを目的とした経路映像の画像解析：ある経路に沿って撮影した 1 人称視点映像から，その経路上の位置特定を画像で行うことで，歩行者ナビゲーションをより頑健に実現することを狙う．（主な研究費：科研費基盤研究 B（亀田）2011～2014 年度，科学技術振興機構（亀田）2014 年度）

【5】シースルービジョン時の運動視差と奥行き知覚との関係解析：タブレット端末を用いたシースルービジョンにおいて，ユーザの奥行き知覚に運動視差が与える影響を解析した．シースルービジョンを可搬性の高いタブレット端末で実現した際，不可視物体の奥行き知覚は運動視差によって得られる．本研究はユーザの視点とタブレット端末の移動によって生じる運動視差を考慮し，それぞれがユーザの奥行き知覚に与える影響を解明する．（主な研究費：科研費基盤研究 B（亀田）2011～2014 年度）

3. 研究成果

【1】複合現実感を用いた展示物に関する関心の共有

博物館等の展示会では，閲覧者側が自身の興味に基づき展示物を見て回ることが多いが，その場合，重要な展示物や解説を見逃してしまうことがあるため，展示側が閲覧者に注目箇所を強調する取り組みが行われているが，あらかじめ設定した情報で，来場者の多様な興味をカバーすることは困難である．一方，ある閲覧者が展示物に対して興味を持った情報（関心）は，他の閲覧者も興味を持ちやすいと考えられる．そこで，本研究では，図 1 に示すように，閲覧者が言語情報として発した展示物に関する感想やコメントを記録・提示することにより，複数の閲覧者間で関心を共有する方式を実現する．



図 1 複合現実感を用いた展示物に関する関心共有

図 2 に提案手法の処理の流れを示す．異なる時刻における発話内容を共有するために，発話内容をテキスト情報として獲得・記録する．後から展示物を訪れた閲覧者に，展示物に対する発話内容を伝えるために，テキスト情報から 3 次元 CG モデルを生成し可視化する．提示情報の内容を正確に把握するために，発話者視点映像から，発話者が展示物のどこに注目していたか（注視点）を推定し．そこに発話内容を複合現実の形で提示する．

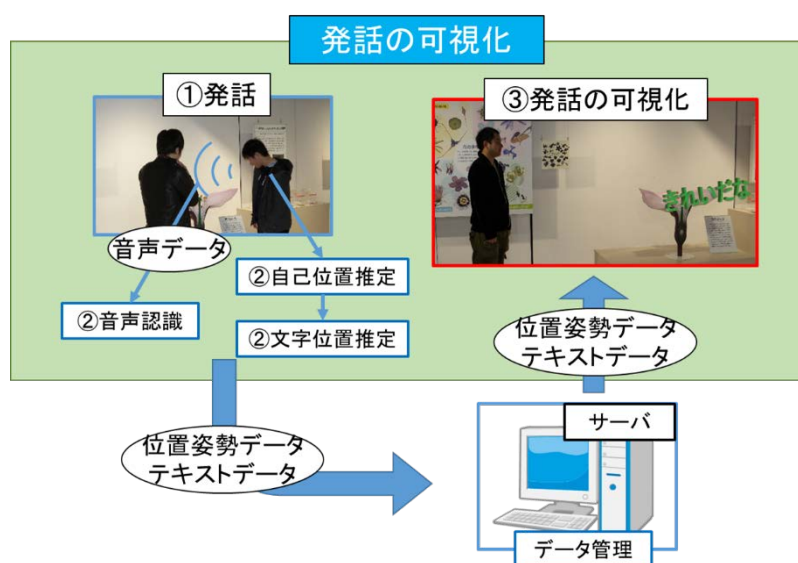


図 2 提案手法を用いた展示物に関する関心共有の流れ

本方式を実装したパイロットシステムを用いて，複合現実感を用いて展示物に関する関心

を共有することにより、重要な展示物や解説の見逃しがどのように変化するのかについて評価実験を実施する。また、注釈付加により、どのように関心共有が支援できるのかに関する検討を行った。実験は大きく分けて三つに分かれる。一つ目の実験では、本システムを用いて付加される注釈の位置の精度を調査し、発話者が思った箇所に注釈の付加が可能かを評価した。その結果、本方式では約 16 cm 程度の精度で注釈を付加可能であり、GPS を用いた方式よりも高精度な注釈付けが可能であることがわかった。二つ目の実験では、通常の展示では見逃しがちな箇所に注釈が付加されるかを評価した。その結果、閲覧があまり行われない箇所にも注釈が付加されることがわかる。付加された内容については、展示物の固有名詞が付けられることが多かったが、中には、特別な知識が必要な内容や展示物の細かな特徴を述べたなど、新たな気づきにつながる内容の情報が存在した。三つ目の実験では、見逃しがちな箇所に注釈が付加されていることで、重要な展示物や解説の見逃しがどのように変化するのかについて評価を行った。その結果、注釈が付加された点全てにおいて、閲覧が行われるようになり、また、付加された内容と、実物を照らし合わせるために、展示をより詳細に見るようになっていることが確認された。

【2】多視点画像から復元した 3D モデルを用いた落石シミュレーション

落石防災対策では、発生源である落石の危険性と共に、落石がどのような経路、跳躍高、及び速度をもって落下するかを推定する必要がある。落石現象は落石の位置エネルギー・大きさ・形状や斜面の物性、斜面角度などによって起こる複雑な現象である。そのため、落下現象を詳細に予測する数値解析（落石シミュレーション）手法は、広い分野において活発な研究が行われている。これらの落石シミュレーション手法の主流は、2 次元でのシミュレーションであるが、そこでは斜面形状を 2 次元断面として用いるため、3 次元的な落石の到達位置、跳躍高、落下時の速度を推定することが困難である。

近年、シミュレーション空間を 3 次元に拡張する試みがなされている。これらのシミュレーションでは、GIS 情報から獲得した斜面形状を用いていることが多いが、GIS 情報では、正確な落石シミュレーションに必要な計測精度の確保が困難なケースが存在する。また、従来の落石シミュレーションでは、落石の形状は球体や立方体などの近似した形状を用いているが、落石形状は地面衝突による跳躍や経路変化を推定するために重要な情報である。レーザレンジセンサを用いることにより斜面形状や岩の形状を高精度に計測する試みもなされているが、レーザレンジセンサは、比較的大掛かりな計測機材であるため、対象となる岩が存在する急斜面での持ち運びや設置が困難であるという問題が存在する。

我々は、多視点画像を用いた 3 次元形状推定手法により観測対象の落石と斜面の形状を復元し、それらの 3 D モデルを用いた落石シミュレーション手法を提案する．図 3 に提案する手法の概要を示す．提案手法は、モバイルカメラを用いて撮影した対象物体の多視点画像群から対象の 3 D モデルの生成するため、レーザレンジセンサに比べ手軽にデータ取得が可能であり、落石調査の現場への適性が高いと考えている．

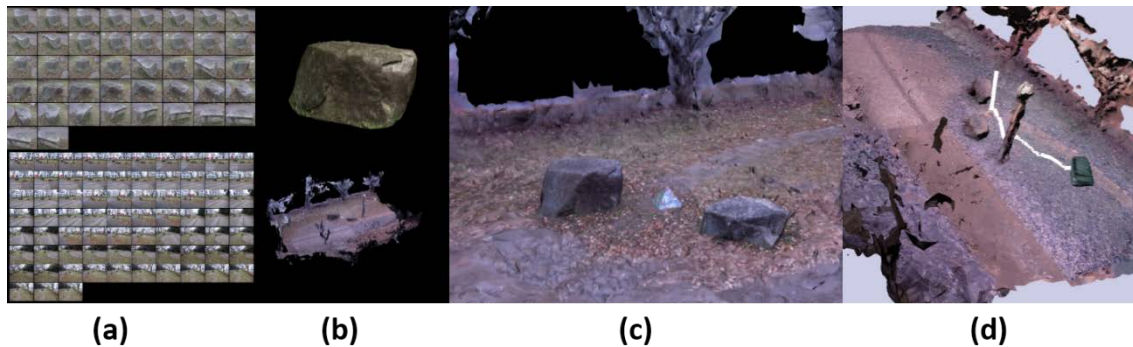


図 3：提案手法の概要 ((a)：落石と斜面の多視点画像の例， (b)：多視点画像から復元した落石と斜面の 3 D モデル， (c)：落石の 3 D モデルと斜面の 3 D モデルの位置合わせ結果， (d)：3 D モデルを用いた落石シミュレーションの例)

本手法は、以下 4 段階の処理で構成される．

- (1) 落石と斜面の多視点画像撮影及び多視点画像を用いた 3 D モデル復元
- (2) 落石の 3 D モデルを斜面の 3 D モデル上に配置するための対応関係の算出
- (3) 対応情報を用いた落石の 3 D モデルと斜面の 3 D モデルの位置合わせ
- (4) 位置合わせ済み 3 D モデルと物理演算エンジンを用いた落石シミュレーション

まず、多視点画像情報による 3 次元形状復元手法を用いて対象の落石と斜面を別々に 3 D モデル化する．次に、落石の 3 D モデルを斜面の 3 D モデル上に配置するための位置合わせを行い、この統合 3 D モデルを用いて物理演算エンジンによる落石シミュレーションを実施する．画像情報を用いることにより、岩や斜面の形状だけでなく、表面のテクスチャ情報を有する 3 D モデルの生成が可能であるため、シミュレーション時の落石形状パラメータが自動的に設定できることに加え、落石が斜面を転がる様子を“視覚的に”提示することが可能であるため、被害の様子を把握する作業を助けることが期待される．

3 D モデル復元から落石シミュレーションまで、開発用 PC (DELL 社 Studio XPS, CPU : 動作周波数 3.07 [GHz] (Intel Core i7), GPU : NVIDIA GeForce GTS 240) で開発を行った．落石シミュレーションの結果を図 4 に示す．落石の軌跡が分かりやうに、落石の重心の軌跡を白い線で描画している．実装の結果、落石の 3 D モデルは斜面の 3 D モデル上で回転運動、すべり運動、飛行・跳躍運動をしていることが確認できた．物理演算エンジンを用いること

で、跳躍・飛行運動、回転運動、すべり運動をモデル化せずにかつ形状パラメータの設定を必要とせずに落石シミュレーションを実現した。

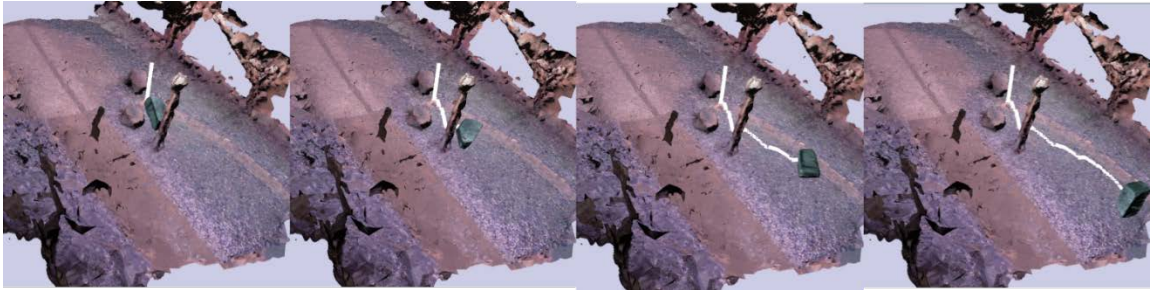


図 4：石シミュレーションの様子

【3】ズーム操作可能な多視点画像の閲覧方式

Bullet-Time は、被写体を取り囲むように配置した複数台のカメラで撮影した画像を切り替えるカメラワークであり、近年は、映画だけでなく他の映像コンテンツにも採用されている。多視点カメラの光軸が 3 次元空間中のある特定の点（注視点）で交わるようにカメラの位置姿勢を設定すれば、後は単純な画像の切り替え操作によって Bullet-Time 効果を実現することができるが、図 5 (a) 中の点線で囲まれた領域にズームイン（拡大表示）した状態で、画像切り替えを行うと、図 5 (b) に示すように、視点の切り替わりに伴い注目物体が画面の外にはみ出してしまいう問題が発生する。この問題は、ユーザの注目点（ズーム中心）と多視点画像の注視点が異なるために発生する。



図 5：単純なズームイン画像と提案手法によるズームイン画像の比較

提案手法では、ユーザの注目点と多視点画像の注視点異なる場合には、ステレオ法を用いて注目点の 3 次元位置を推定し、その点を多視点画像の新しい注視点とすることにより、図 5 (c) に示すように問題を解決する。

【4】歩行者ナビゲーションを目的とした経路映像の画像解析

我々は特定の経路を移動しながら事前撮影した映像を用いて経路上で撮影したスナップショット位置を推定する研究を行っている．我々の想定している経路は人物や移動ロボットが短時間で移動可能な長さでかつ屋内屋外であることを制限しないものである．いくつか具体例を挙げると，駅から店舗までの移動経路や，大学の教室から教室の移動経路である．これにより人物に対する経路に沿ったナビゲーションを可能にすることを考えている．近年警備や搬送などの今まで人間が行っていた作業をロボットに代行させるために自律移動ロボットの研究が行われている．移動ロボットの研究において位置推定は重要であり，屋内屋外を問わずに位置推定が可能な我々の手法は移動ロボットの研究にも利用可能だと考える．GPS の利用が考えられるが，GPS はその特性上屋内での利用できないという問題がある．本研究による画像ベースの定位が可能になれば，相補的に両者を用いることで位置推定やナビゲーションの高度化が可能になる．

画像検索に基づく位置推定では，撮影状況の変化に伴う画像の見かけの違いに対応できるかどうか問題となる．本研究では，そうした環境変動を考慮した環境下で，画像シーン全体を利用した類似画像検索を行った際の局所特徴量の類似度と検索精度について検証した．

本研究での歩行者ナビゲーションとは予め定められた経路を歩行者がその経路を辿るように誘導するものである．予め経路に沿って撮影した事前撮影映像を用意し，経路上で歩行者が撮影したスナップショットと事前撮影映像との類似画像検索を行うことで歩行者の撮影した画像の経路上での撮影位置を推定する．この画像の撮影位置を歩行者位置とすることで経路上での歩行者位置を推定する．

実験は，歩いて数分かかる経路を想定して行った．下記には 2 例挙げる．まず，経路に沿ってあらかじめ撮影を行い，こちらを画像データベースとする (preprocessed images)．図 6 は経路 1，経路 2 の画像データベースから取った 2 枚の画像であり，いずれも屋内外を含む経路となっている．画像データベースへは，30fps の映像を全て分解し，経路ごとに 5000 枚程度の画像を登録した．これに対して，別の機会に同じ経路を歩きながら撮影し，その映像の各フレームを検索とした (query)．歩き方などが同じではないため，preprocessed images には query に対して似ている画像はあるものの，環境変動などもあり，必ずしも見かけ上一致する画像があるとは言えない状況である．そのもとで，提案手法により画像検索をした結果を図 7 に示す．横軸が query フレーム番号を示し，縦軸は preprocessed images のフレーム番号を示す．経路を歩くのに要した時間はほぼ同じであるので，グラフにおいて，query フレーム番号と preprocessed images のフレーム番号が一致した時は，経路上の位置として正確に場所を特に出たことになる．図 7 はいずれも概ねその傾向を示しており，本手法は目的に対して十分であることが示されている．経路 1 ではフレーム番号が正比例していないところに対応結果が出ていることがあり，これは多少誤推定が含まれていることを示している．

しかしながら，こうした誤推定については，画像検索の信頼度が一様に低くなる傾向が出ていることから，その数値を確認することで，誤推定の棄却は容易である．



図 6：経路 1（左）と経路 2（右）

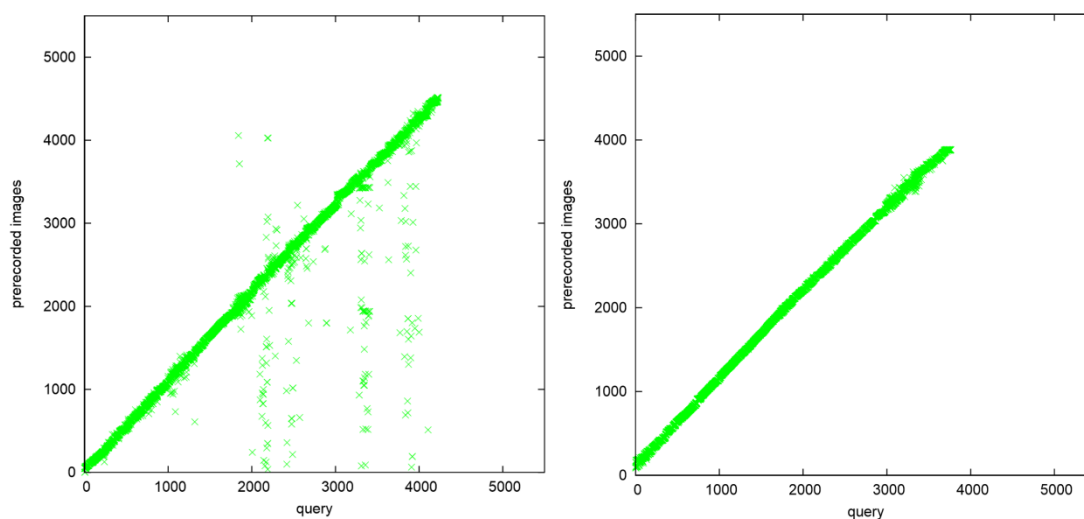


図 7：経路上の query 画像に対する検索結果（左：経路 1，右：経路 2）

【5】シースルービジョン時の運動視差と奥行き知覚との関係解析

シースルービジョン（透視）とはユーザが直視している物体（直視物体）によって視認できない物体（不可視物体）があるとき，不可視物体を複合現実型提示することで視覚支援を行う技術である．シースルービジョンは，データの新しい可視化形態の一つであるが，人間は

もともと透視する能力を持たないため、その実現に際しては、直感的に受け入れられるように注意を払うことが求められている。

本研究では、タブレット端末を用いたシースルービジョンにおいて、ユーザの奥行き知覚に運動視差が与える影響を解析した。シースルービジョンを可搬性の高いタブレット端末で実現した際、不可視物体の奥行き知覚は運動視差によって得られる。本研究はユーザの視点とタブレット端末の移動によって生じる運動視差を考慮し、それぞれがユーザの奥行き知覚に与える影響を解明する。

直視物体の運動視差はユーザの視点と直視物体の位置関係によって変化する。また、不可視物体の運動視差はユーザの視点と不可視物体、不可視物体の映像を提示するタブレット端末のディスプレイの位置関係によって変化する。ここで、ユーザの視点と不可視物体との間の距離は運動視差が十分知覚できる範囲とする。なお、ユーザの視点の移動に伴う運動視差を解析に集中するため、直視物体と不可視物体は静止しているものとする。シースルービジョンの実現に際しては、ユーザの視点位置に応じて幾何学的に整合性のとれた映像を提示する先端的手法がある。本研究ではこの手法を参考にして、直視物体と不可視物体の運動視差がユーザの奥行き知覚に与える影響を解析した。図8は、解析において整理した視点移動とタブレット端末運動との関係である。被験者に対する実験では、この分類に沿って実験を行った。図は被験者とタブレット（長方形）とを上から見下ろして空間的な関係を記述している。いずれも、タブレットの先にシースルーして見る不可視物体が存在する。

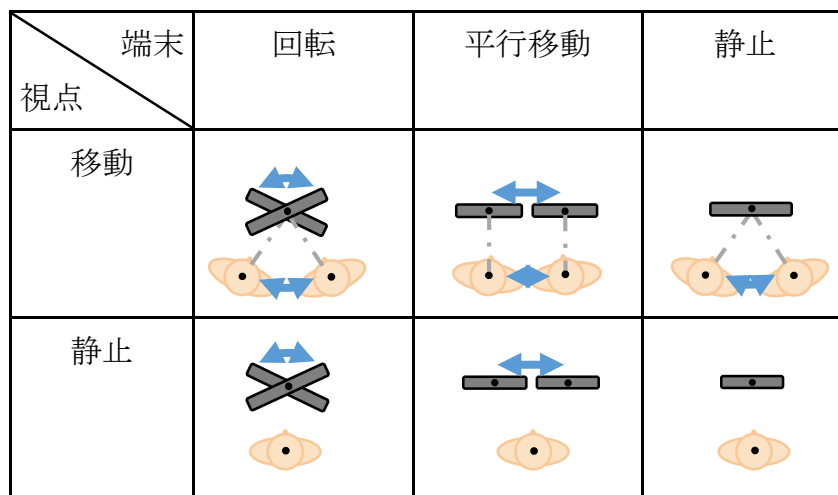


図8：視点移動とタブレット端末運動との関係

図9は被験者実験の様子を示したスナップショットである。被験者視点からの撮影で、スナップショット中の黒い枠の機器がタブレット端末のディスプレイに相当する。その向こうには3本のパイプがあり、この状況では上部が直視できていて、ディスプレイ中にはバーチャルにそのパイプが続けて表示されている。完全にシースルーする場合は、ディスプレイとパイプとの間に壁が入り、被験者はパイプを直視できなくなる。図10は実験の全体を示してい

る。

こうした実験結果の解析から、ユーザに好まれる形態は、ユーザの視点移動に合わせて運動視差をタブレット端末のディスプレイに提示する手法であることが明らかになった。その際にタブレット端末を静止させると、提示映像中の物体の位置が最もわかりやすく、かつユーザの負担を小さくする傾向があることも示された。

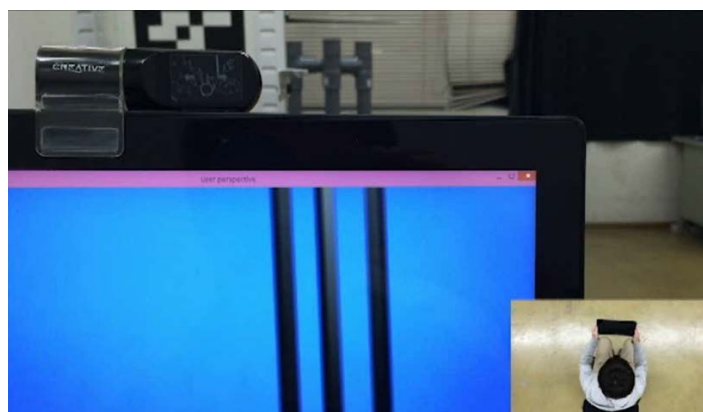


図 9：被験者から見たシースルービジョンの様子

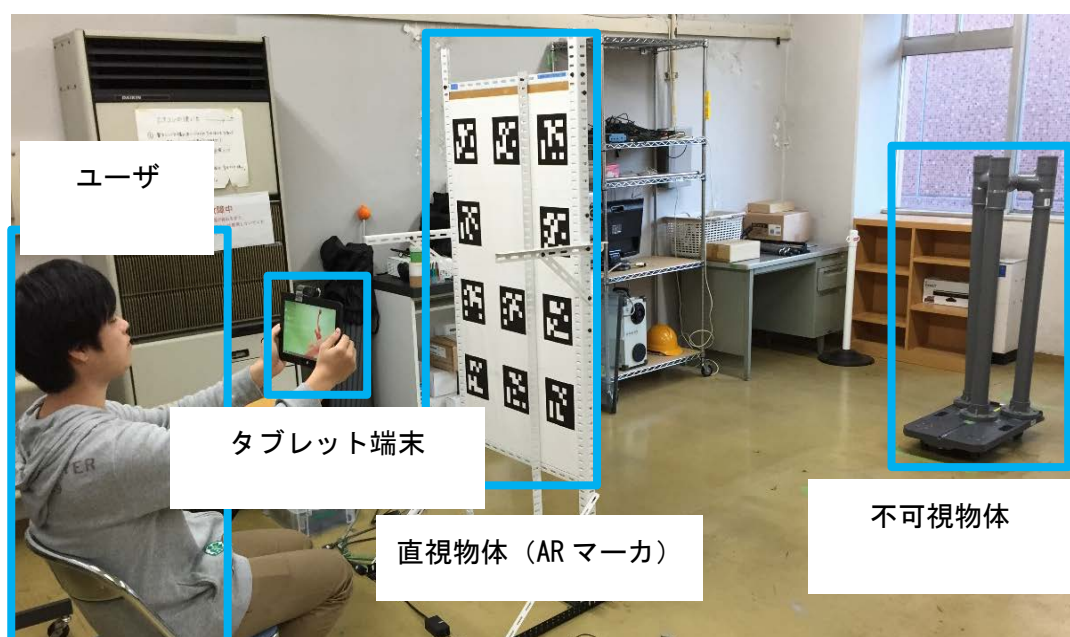


図 10：被験者実験の様子

4. 教育

学生の指導状況（学生氏名、学位の種類、論文名）

明智 那央 修士（工学）注視点を移動可能な多視点映像の多重解像度閲覧方式

厚見 彰吾 修士（工学）多視点画像から復元した三次元モデルを用いた落石

シミュレーション

江夏 寛朗	修士（工学）	環境カメラを用いた屋外空間における歩行者と注視領域の撮影手法
金川 祐貴	修士（工学）	道路監視カメラ映像を用いた走行車両の位置姿勢推定
河内 駿	修士（工学）	タブレット端末を用いたシースルービジョン時の運動視差の影響解析
雫 泰裕	修士（工学）	展示物に対する関心の複合現実感を用いた共有
樽見 佑亮	修士（工学）	歩行者ナビゲーションを目的とした経路上での撮影映像の解析
東井 隼斗	修士（工学）	ドライバの体感速度を変化させるバーチャルパターン
高 博	修士（工学）	複合現実感を用いたライティングコーディネート支援
陽 鵬	修士（工学）	仮想化物体とインタラクション可能な遠隔型複合現実感
李 云	修士（工学）	環境に合わせた人物の AR 再生とのインタラクション
森田 航平	修士（工学）	ウィンドシールドディスプレイを用いた見通しの悪い交差点における進入車両提示方法
鴫 亮輔	学士（工学）	車両の進行方向に対する対称性を利用した外形復元
柚木 玲士	学士（工学）	幾何学的整合性に基づく手持ち撮影 RGB-D 映像からの動的領域切り出し手法
出川 諒	学士（工学）	複合現実型提示を用いた橋梁振動点検方式
山中 一希	学士（工学）	高解像度カメラを用いた高精細な自由視点映像生成
志田 全弘	学士（工学）	簡単に組み立て可能な多視点映像の撮影および閲覧方式
森下 裕介	学士（工学）	生体分子シミュレーションにおける拡張現実感技術の利用

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞（賞の名称、受賞者名、タイトル、年月日）

1. The 7th Korea-Japan Workshop on Mixed Reality (KJMR2014), Best Presentation Award, Shota Sasai, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta “AR Visualization of Driving Vehicle’s Wheel Trajectories by Seeing-Through Dashboard”, 2014. 4. 20.

2. 電子情報通信学会マルチメディア・仮想環境基礎 (MVE) 研究会 2014 年度 1 月研究会 MVE 賞, 小林 直樹, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一, “時空間拘束を利用した車両前照灯の路上反射位置推定”, 2014 年 9 月 10 日
3. 電子情報通信学会マルチメディア・仮想環境基礎 (MVE) 研究会 2014 年度 1 月研究会 MVE 賞, 大川原 友樹, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一, “ユーザの仮想カメラ操作を考慮した位置姿勢補正による自由視点映像の生成”, 2014 年 9 月 10 日
4. 第 13 回情報科学技術フォーラム (FIT2014) FIT 奨励賞, 上山 嵩, “選手動作に基づくバドミントン競技映像の分割手法”, 2014 年 9 月 3 日～5 日 (共著 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一)
5. 第 13 回情報科学技術フォーラム (FIT2014) FIT 奨励賞, 穴戸 英彦, “高速かつ変則的に移動するバドミントンシャトルの軌跡推定法”, 2014 年 9 月 3 日～5 日 (共著 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一)

外部資金 (名称、氏名、代表・分担の別、採択年度、金額、課題名)

知的財産権 (種別、氏名、課題名、年月日)

1. 科学研究費補助金 基盤研究 (B) 課題番号 25280056、大田友一 (研究代表者)、亀田能成、北原格, 2014 年度, 3, 250, 000 円 (2014 年度分)、「大規模空間を対象とする人物ビルボードを用いた任意視点映像生成提示方式の高画質化」
2. 共同研究 (ヤフージャパン株式会社), 北原格 (代表者), 2014 年度, 400, 000 円, 超高解像度多視点画像における視点移動に関する研究
3. 科学研究費補助金 基盤研究 (B) 課題番号 23300064, 亀田能成 (研究代表者), 大田友一, 北原格, 2011 年度, 2, 470, 000 円 (2014 年度分)、「環境カメラ群映像の安心かつ効率的見える化の為の時空間解析と複合現実感的可視化」
4. 科学技術振興機構 「持続可能な多世代共創社会のデザイン」研究開発領域「多世代共創による視覚障害者移動支援システムの開発」, 亀田能成 (研究担当者), 2014 年度, 2, 600, 000 円 (2014 年度分)

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. 上田将司, 北原格, 大田友一, “フリーハンド映像から切り出した壁領域に対する複合現実型壁紙シミュレーション”, 日本バーチャルリアリティ学会論文誌, Vol. 19, No. 2, pp. 87-97, (2014)
2. 糟谷望, 北原格, 亀田能成, 大田友一, “サッカー選手を対象とした一人称視点映像のための仮想カメラ運動モデル”, 電子情報通信学会論文誌 D Vol. J97-D, No. 9, pp. 1385-1393, (2014)
3. 小林直樹, 北原格, 亀田能成, 大田友一, “夜間の道路監視カメラ映像における前照灯に注目した車両の 3 次元位置推定”, 画像電子学会学会誌, Vol. 43, No. 3, pp. 300-308, (2014)
4. 佐藤翔悟, 北原格, 大田友一, “拡張現実感による顔表情操作を用いたビデオ通話方式”, 日本バーチャルリアリティ学会論文誌, Vol. 19, No. 3, (2014)
5. Hisatoshi Toriya, Itaru Kitahara, Yuichi Ohta, "Mobile Camera Localization Using Aerial-View Images", IPSJ Transactions on Computer Vision and Applications (CVA), Vol.6, pp.111-119, (2014)

B) 査読無し論文

(2) 国際会議発表

- A) 招待講演
B) 一般講演

1. Shota Sasai, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, “AR Visualization of Driving Vehicle’ s Wheel Trajectories by Seeing-Through Dashboard, The 7th Korea-Japan Workshop on Mixed Reality (KJMR2014) [Best Presentation Award], 2014.
2. Maria Alejandra Quiros-Ramirez, Senya Polikovsky, Yoshinari Kameda, and Takehisa Onisawa, “A Spontaneous Cross-Cultural Emotion Database: Latin-America Vs. Japan”, Kansei Engineering and Emotion Research (KEER2014), 8 pages, 2014.
3. Ming Zhang, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, “A Projection-Based Mixed-Reality Display for Exterior and Interior of a Building Diorama”, The 20th ACM Symposium on Virtual Reality Software and Technology (VRST2014), 2014.

4. Nao Akechi, Itaru Kitahara, Ryuuki Sakamoto, Yuichi Ohta, “Multi-Resolution Bullet-Time Effect”, ACM SIGGRAPH Asia 2014, 2014.
5. Hidehiko Shishido, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, “Trajectory Estimation of a Fast and Anomalously Moving Badminton Shuttle” , International Workshop on Advanced Image Technology (IWAIT2015), 4pages, 2015.
6. Fumihisa Shibata, Koji Makita, Yoshinari Kameda, and Takeshi Kurata, “Introduction of the Trakmark Activity”, Panel at IEEE ISMAR 2014, 2014.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

北原格, “自由視点映像技術のスポーツ分野への応用”, 2014 年映像情報メディア学会年次大会 シンポジウム 1 『スポーツ映像処理』, 2014.

B) その他の発表

穴戸英彦, 北原格, 亀田能成, 大田友一, “高速かつ変則的に移動するバドミントンシャトルの軌跡推定法”, 第 13 回情報科学技術フォーラム(FIT2014), vol. 3, pp. 69-70, 2014.

笹井翔太, 北原格, 亀田能成, 大田友一, “運転車両のダッシュボード透明化と車輪軌道の複合現実型提示”, 第 13 回情報科学技術フォーラム(FIT2014), vol. 3, pp. 89-90, 2014.

上山嵩, 北原格, 亀田能成, 大田友一, “選手動作に基づくバドミントン競技映像の分割手法”, 第 13 回情報科学技術フォーラム(FIT2014), vol. 3, pp. 113-114, 2014.

及川純耶, 亀田能成, 大田友一, “環境埋め込み型カメラ映像で撮影した人物の等身大透明スクリーンによる AR 提示”, 第 13 回情報科学技術フォーラム(FIT2014), vol. 3, pp. 477-478, 2014.

柚木玲士, 北原格, 大田友一, “3 次元の整合性に基づく手持ち撮影 RGB-D 映像中の動的領域切り出し” 第 13 回情報科学技術フォーラム(FIT2014), vol. 3, pp. 67-68, 2014.

明智那央, 北原格, 大田友一, “ズーム操作可能な多視点画像の閲覧方式” 第 13 回情報科学技術フォーラム (FIT2014) vol. 3, pp. 91-92, 2014.

高博，北原格，大田友一，“複合現実感を用いた照明計画支援システム” 第 19 回日本バーチャリアリティ学会大会論文集 21-B3, 4 pages, 2014.

陽鵬，北原格，大田友一，“仮想化物体とのインタラクションが可能な遠隔型複合現実感” 第 19 回日本バーチャリアリティ学会大会論文集 11E-1, 4 pages, 2014.

李云，亀田能成，大田友一，“AR Replay を通じた作業理解の評価”，電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.114, no.239, pp.7-12, 2014.

雫泰裕，北原格，大田友一，“複合現実感を用いた展示物に関する関心の共有” 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.114, no.239, pp.107-112, 2014.

笹井翔太，北原格，亀田能成，大田友一，“投影型シースルーダッシュボードを用いた車輪軌道の可視化による運転者視覚支援” 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE , vol.114, no.239, pp.25-30, 2014.

森田航平，北原格，亀田能成，大田友一，“ウィンドシールドディスプレイを用いた交差点における進入車両提示方法の評価”，第 12 回 ITS シンポジウム 2014, 6 pages, 2014.

東井隼斗，北原格，亀田能成，大田友一，“ウィンドシールドディスプレイ上での AR 提示がドライバの速度感覚に与える影響の評価”，第 12 回 ITS シンポジウム 2014, 6 pages, 2014.

清水諒，北原格，亀田能成，大田友一，“夜間における景観の複合現実感型提示”，HCG シンポジウム 2014, pp.241-248, 2014.

宍戸英彦，北原格，亀田能成，大田友一，“異なるシャッター速度で撮影した映像を用いたバトミントンシャトルの 3 次元位置推定法”，2014 年映像情報メディア学会冬季大会, 2 pages, 2014.

笹井翔太，北原格，亀田能成，大田友一，神原誠之，浮田宗伯，池田徹志，Morales Yoichi, 萩田紀博，篠沢一彦，“自動走行ストレス：拡張現実提示によるストレス軽減の試み”，電子情報通信学会 技術研究報告 ITS, vol.114, no.369, pp.93-98, 2014.

太田翔平, 神原誠之, 浮田宗伯, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 池田徹志, Morales Yoichi, 篠沢一彦, 萩田紀博, “自動走行ストレス：生理指標を用いた自動走行車両の搭乗者のストレスに関する検討”, 電子情報通信学会 技術研究報告 ITS, vol.114, no.369, pp.87-92, 2014.

厚見彰吾, 北原格, 大田友一, 多視点画像から復元した 3D モデルを用いた落石シミュレーション; 電子情報通信学会 技術研究報告 PRMU 2015, vol.114, no.409, pp.153-158, 2015.

志田全弘, 明智那央, 北原格, 大田友一, 松田壮一郎, 山本淳一, “簡単に組み立て可能な多視点映像撮影・閲覧システム” 電子情報通信学会 技術研究報告 CNR 2015, vol.114, no.455, pp.143-148, 2015.

樽見佑亮, 亀田能成, 大田友一, “歩行者ナビゲーションを目的とした経路映像の画像解析”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.114, no.487, pp.187-192, 2015.

河内駿, 北原格, 亀田能成, 大田友一, “タブレット端末を用いたシースルービジョン時の運動視差が奥行き知覚に与える影響”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.114, no.487, pp.33-80, 2015.

鈴木健嗣, 北原格, “社会性形成を支援するソーシャル・イメージング技術”, 電子情報通信学会 CNR 研究会, 信学技報, vol. 114, no. 351, CNR2014-20, pp. 23-26, 2014.

角田貢, 北原格, 西山哲成, “映像分析と自転車競技 -映像技術の利活用の検討”, 映像情報メディア学会メディア工学研究会 12 月研究会, 2014.

(4) 著書、解説記事等

該当なし

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

9. 管理・運営

大田友一

副学長・理事（企画評価・情報）

情報環境機構長

亀田能成

筑波大学 e ラーニング委員会委員

エンパワーメント情報学プログラム学生委員会委員長

北原格

筑波大学全学計算機委員会委員

10. 社会貢献・国際貢献

大田友一

電子情報通信学会 教科書委員会委員

亀田能成

IEEE and ACM International Symposium on Mixed and Augmented Reality 2014; PC member

電子情報通信学会 パターン認識・メディア理解 研究専門委員会 委員

電子情報通信学会 マルチメディア・仮想環境基礎 研究専門委員会 副委員長

電子情報通信学会 サイバーワールド 時限研究専門委員会 委員

北原格

電子情報通信学会 和文論文誌 D 編集委員

電子情報通信学会 パターン認識・メディア理解 研究専門委員会 委員

日本バーチャルリアリティ学会 論文編集委員

11. その他

なし