



平成20年度 計算科学研究センター研究報告

雑誌名	平成20年度 計算科学研究センター研究報告
発行年	2009-07
URL	http://hdl.handle.net/2241/00150219

I 素粒子宇宙研究部門

I-1 素粒子分野

1. メンバ

教授 宇川 彰, 青木 慎也(共同研究員), 金谷 和至(共同研究員)

准教授 石塚 成人, 蔵増 嘉伸, 吉江 友照

助教 谷口 裕介

研究員 石井 理修, 浮田 尚哉, 加堂 大輔, 滑川 祐介, 山崎 剛

2. 概要

素粒子分野においては、本年度も、格子場の理論の研究を柱に活発な研究活動が行なわれ、数理物質科学研究科と密接な連携のもと、格子 QCD の大型数値シミュレーションが推進された。

筑波大学の格子ゲージ理論の研究者は、2006年7月に計算科学研究センターの次期並列計算機として PACS-CS が導入されたのを契機として新たな研究グループとして立ち上げられた PACS-CS Collaboration に参加している。PACS-CS Collaboration では、物理的な u, d クォーク質量での $N_f=2+1$ QCD の大規模シミュレーションを目標にゲージ配位の生成を行ない、第1段階の計算を終了し、その研究成果の一部を発表した。また、物理的な u, d クォーク質量での $N_f=2+1$ QCD の大規模シミュレーションを開始し、ゲージ配位生成を継続中である。一方、一部の研究者は、高エネルギー加速器研究機構(KEK)の IBM BlueGene/L と日立 SR-11000 を用いて研究を進める JLQCD Collaboration に参加し、格子上での厳密なカイラルを持つオーバーラップ・フェルミオン作用を用いた力学的クォークの数値シミュレーションによる研究を展開した。

また、これらの大規模な研究と並行して、核子間ポテンシャルの研究、ハドロン間相互作用の研究、核子形状因子の研究、有限温度・有限密度 QCD の研究、QCD の結合定数のスケール依存性の研究、繰り込み定数の非摂動的計算、カイラル摂動論を用いた研究、なども行われた。

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 の構築に参画した。

3. 研究成果

【1】PACS-CS Collaboration の活動(全員)

計算科学研究センターでは、平成 17 年度から 3 ヶ年計画で特別教育研究経費(拠点形成)を受けて開発・製作が進められてきた超並列クラスタ計算機 PACS-CS(計算ノード数 2560、ピーク演算性能 14.3Tflops)が平成 18 年 7 月から稼働を開始した。PACS-CS Collaboration は PACS-CS を主要な計算設備として格子 QCD の研究を行うことを目的とし、筑波大学物理学系メンバーを中心として組織されている。その目標は、domain-decomposed HMC (DDHMC) アルゴリズムと polynomialHMC (PHMC) アルゴリズムを組み合わせることによって 3 種類(u, d, s)の軽いクォークをその物理的質量(物理点)において動的に扱うシミュレーションを行い、QCD に関する近似のない物理的予言を行うことを目標としている。平成 18 年度は、PACS-CS 稼働開始に伴うプログラム開発と比較的重い $u-d$ クォーク質量でのシミュレーションを実行し、平成 19 年

度は、物理点へ向けて up-down クォーク質量を段階的に軽くすることによって物理量のクォーク質量依存性を調べる事が主要課題であった。平成 20 年度は、これまでの課題を継続するとともに、いよいよ PACS-CS プロジェクトの目標である物理点でのシミュレーションに取り組んだ。また、平成 20 年 6 月からは新たな超並列クラスタ計算機 T2K-Tsukuba(計算ノード数 648、ピーク演算性能 94.Tflops)が稼動を開始するとともに、それを利用した計算も始まった。以下に平成 20 年度における進展を述べる。

昨年度に引き続き、非摂動的に O(a)改良された Wilson クォーク作用と Iwasaki ゲージ作用を用いて、格子サイズ $32^3 \times 64$ 、格子間隔 $a = 0.09\text{fm}$ のシミュレーションを行った。up-down クォーク質量に関しては、カイラル摂動論からの予言を検証するために $m_{ud} = 61, 41, 22, 19, 11, 3 \text{ MeV}$ という広範な値を採用した。strange クォーク質量に関しては過去の計算によって推定された物理的質量に固定したが、 $m_{ud} = 19 \text{ MeV}$ の点においては 20%程度軽い値も採用し、strange クォーク質量依存性を調べた。物理量のクォーク質量依存性としてパイ中間子質量の 2 乗を裸のクォーク質量で割ったものを図 1 に示した。赤丸は今回 PACS-CS 機において計算したものであり、黒丸は PACS-CS 機の前身である CP-PACS 機等を用いて計算したものである。物理的な up-down クォーク質量に近付くにつれて下に凸な曲率を確認することができるが、これはカイラル摂動論において予言される振舞いと一致している。このことは物理点あるいはそれに非常に近いクォーク質量でのシミュレーションが本質的に重要であることを示している。また、同じ配位を用いたハドロン質量の計算によって、物理点におけるハドロン質量が数%の範囲内で実験と一致していることを見出した(図2)。以上の結果は論文 1 としてまとめ、すでに出版済みである。

図1: m_{π}^2/m_{ud} を m_{ud} の関数としてプロットしたもの。但し、両者は格子単位で与えられている。赤丸は PACS-CS 機を用いて得られた結果を表し、黒丸は CP-PACS 機等を用いて得られた以前の結果を表す。赤の垂直破線は物理的な up-down クォーク質量の位置を示している。黒線はクォーク質量依存性を明瞭にするために引いた直線である。

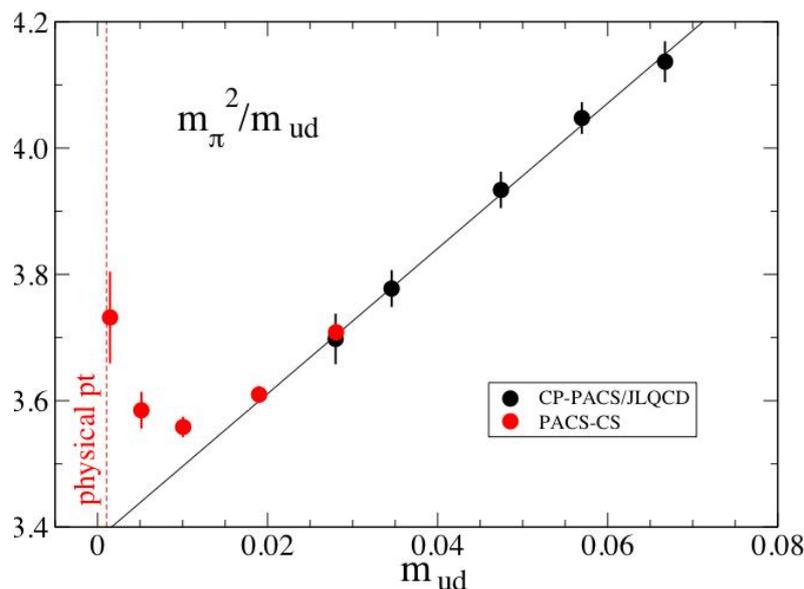
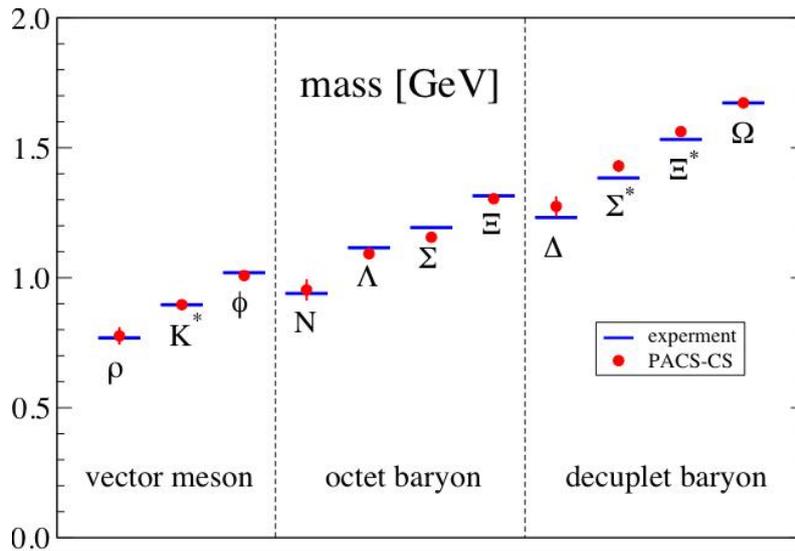


図2: ハドロン質量の実験値との比較。横棒は実験値を表す。



平成 20 年度は新たに PACS-CS プロジェクトの目標である物理点直上におけるシミュレーションに取り組んだ (論文 2,3)。格子サイズおよび格子間隔はこれまで行ってきた重いクォーク質量でのシミュレーションと同じものを採用し、up-down および strange クォーク質量に関する物理点は、これまでの計算結果を外挿することによって推定した。シミュレーションの結果わかったことは、計算コストおよびアルゴリズムの安定性に関しては問題はないが、up-down クォーク質量および strange クォーク質量の物理点への微調整という課題を解決する必要があるということである。現在我々は Reweighting と呼ばれる方法による物理点への微調整が可能か否か調べている段階である。微調整の問題は別にして、アルゴリズム的に物理点直上のシミュレーションが可能になったことは疑いの余地がない。我々は物理点における体積効果を調べるために T2K-Tsukuba を用いて格子サイズ 64^4 、格子間隔 $a=0.09$ fm のシミュレーションを開始した。この計算は平成 21 年度も継続実行の予定である。

【2】有限温度・有限密度QCDの研究(青木、金谷、石井、浮田)

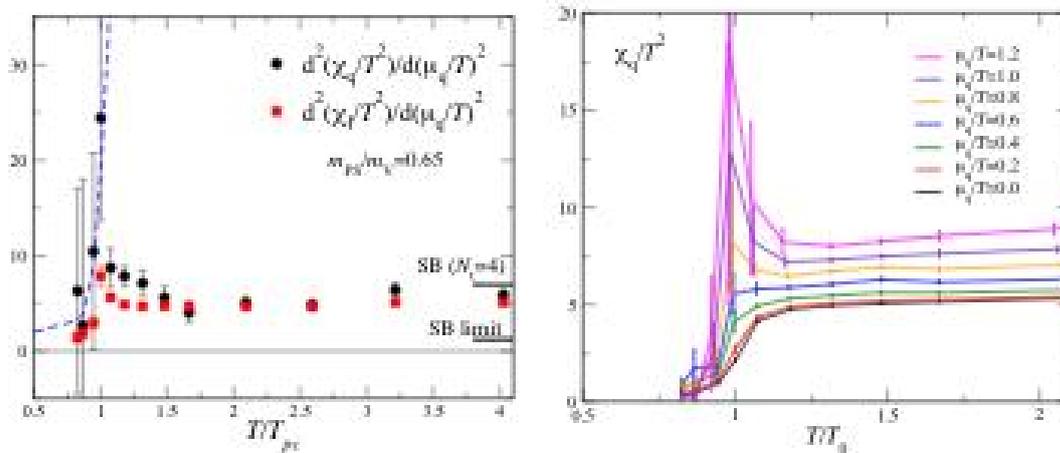
我々は、Wilson クォークによる有限温度・密度QCDの研究を推進している。Wilson クォークによる計算は世界的に見ても筑波の cp-pacs グループ以降ほとんど行われていなかった。そのため、まずは有限温度の相図が既に詳細に調べられている $N_f=2$ QCD の場合について、Wilson クォークとして最初の有限密度QCD研究を実行した。有限密度に関しては、化学ポテンシャルに関する Taylor 展開の手法を用いた。従来の方法に加えて有限密度の複素位相部分をガウス関数で近似して reweighting 法を用いる新しい手法による状態方程式の有限密度効果の計算や、クォーク数密度揺らぎの計算なども行った。これらの計算で、従来の Staggered クォークの計算で見つけていた有限密度領域でクォーク数密度の揺らぎが増大する兆候が Wilson クォークによっても確認できた(図 3 参照)。

また、 $N_f=2$ QCD の配位上での magnetic および electric デバイ遮蔽の詳細に関する研究を行った。Euclid 時間反転 と 荷電共役 の対称性を考えることによってあるゲージ固定条件のもとで、Polyakov loop

相関を対称性に応じて分類し、それぞれの遮蔽質量を導出する事ができる。その結果、有限温度摂動論からの予想の通り、magnetic 遮蔽質量 (m_M) は electric 遮蔽質量 (m_E) よりも大きくなる事などを示した。さらに両者の質量比 (m_E/m_M) が AdS/CFT 対応より求められる値に良く一致する事などを議論した。

これらの計算に関しては国際会議などで発表を行った。また現在投稿論文を準備中である(論文9、10)。

図3: Wilson クォークによる有限温度・有限密度QCDの研究。左図: $N_f=2$ QCD における、クォーク数密度揺らぎ(黒)とアイソスピン数密度揺らぎ(赤)の化学ポテンシャルに関する2階微分。 $m_{PS}/m_V=0.65$, $\mu_q=0$ での結果。前者が相転移点で特異的なのに対し、後者は強い特異性を示さない。右図: テーラー展開法と、近似的改良を組み合わせた、 μ_q ゼロでない時のクォーク数密度揺らぎの温度依存性。



【3】有限温度・有限密度状態方程式の計算方法開発(T-integral 法)(青木, 金谷, 石井, 浮田)

最終目標である $N_f=2+1$ QCD での有限温度・有限密度研究は、極めて多くの計算時間を要求する。従来の固定格子数(N_t)で integral 法を用いる計算方法では、ゼロ温度格子のシミュレーションを大量に要し、それが全体の計算コストの大きな部分を占めている。それを大きく削減する方法として、固定格子間隔アプローチを提案した。この方法では従来の熱力学量の計算と異なり、ゲージ結合定数ではなく、時間方向の格子サイズによって温度を変えるという手法での有限温度の研究を行う。

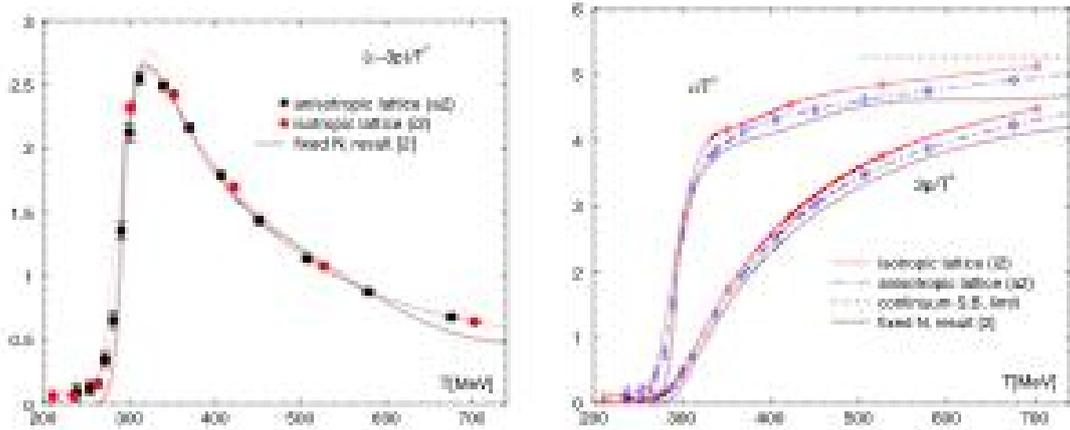
我々は、固定格子間隔アプローチで状態方程式を計算するために、状態方程式の新しい非摂動的評価法 T-integral 法を開発した。従来の非摂動的評価法 integral 法は固定格子間隔では用いることは出来ないが、ある熱力学関係式を元に、状態方程式(圧力)をトレースアノマリーの温度積分としてあらわすと、固定格子間隔でも状態方程式の計算が可能になる。このアイデアをまずクエンチ近似 QCD の場合でテストして、従来の方法で求めた状態方程式の結果と遜色の無い結果を再現した。

この研究では、等方格子と非等方格子の場合について計算を行った。非等方格子では空間方向に比べ時間方向の格子間隔のみを細かくできるので、固定格子間隔アプローチでも温度を細かくコントロールできる。図4(左)の結果は新しいアプローチで計算した等方、非等方格子でのトレースアノマリーの値と、従来の手法による結果との比較を行っている。図4(右)ではトレースアノマリーの温度積分で求められる状態方程式の結果である。これらは、ほぼ従来の大規模計算の結果を再現して、新しいアプローチの有効性を示した。T-integral 法

は、従来の integral 法と相補的で、特に従来の方法で格子化誤差が出やすい相転移点近傍で精度の良い計算を行える可能性がある(論文7,8)。

現在、固定格子間隔で $N_f=2+1$ QCD の有限温度配位を生成しており、その成果の一部は国際会議でも発表した。

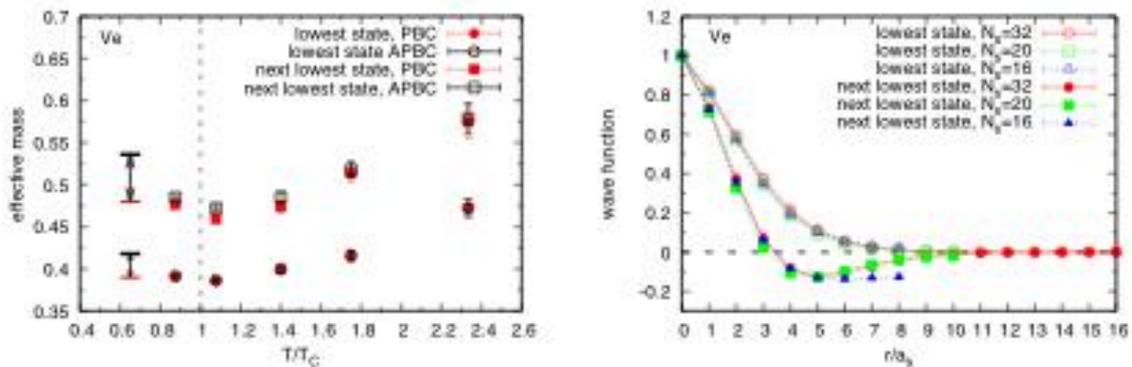
図4:固定格子間隔アプローチと T-integral 法による有限温度・有限密度QCDの状態方程式の研究。クエンチ近似でのトレスアノマリー(左図)と状態方程式(右図)の結果。



【4】クォーク・グルオン・プラズマ相におけるチャーモニウム消失の(青木, 金谷, 石井, 浮田)

チャームクォークと反チャームクォークの束縛状態であるチャーモニウム(特に J/ψ , χ_c , ϕ' 状態など)がクォーク・グルオン・プラズマ(QGP)相中で消失する温度や特性を格子QCDによる第一原理計算で研究した。これは、重イオン衝突実験でQGP生成を示す重要なシグナルの一つである「 J/ψ 抑制」を判断する上で本質的な情報となる。先行研究では、最大エントロピー法により計算されたスペクトル関数を用いた解析が主流であったが、この方法には不定性があるため、異なる解析手法による検証が必要である。我々は、対角化の方法を用いて S 状態と P 状態の基底状態と励起状態に対する有効質量及び波動関数を計算し、有効質量の空間方向境界条件依存性及び波動関数の空間分布を調べることでチャーモニウムの消失の有無を確かめた。また、特に P 状態には不必要な定数モードの効果が大きく寄与していることが指摘されており、我々はこの影響を取り除いた解析も行った。シミュレーションは $O(a)$ 改良されたウィルソンクォーク作用とプラケットゲージ作用を使用し、クエンチ近似を用いて行った。その結果(図 [ohno_fig](#) 参照)、少なくとも臨界温度の 2.3 倍の温度まで 1S, 2S, 1P, 2P 状態のチャーモニウムが消失することは確認できなかった(論文6,11,12,13)。図 5参照。

図5: チャーモニウム消失の研究。ベクターチャンネルに対する結果。左図は有効質量の温度変化を表しており、色の違いは空間方向の境界条件の違いを表している。散乱状態の場合には矢印で表わされる程度の違いみられるはずだが、そのような違いはみられない。一方、右図は臨界温度の 2.3 倍の温度における波動関数の空間分布を表しており、色の違いは空間方向の格子サイズの違いを表している。明らかに波動関数は空間的に局在していることがわかる。これらの結果は、束縛状態がまだ存在していることを示している。



【5】ILDG・JLDG の構築(宇川, 吉江, 石井)

格子 QCD シミュレーションの基礎データである配位を国際規模で共有する International Lattice Data Grid プロジェクトに参加し、システムの改良に携わった。また、システム概要と利用状況を国際会議にて報告した(論文14)。

【6】格子 QCD によるバリオン間力の研究(青木, 石井)

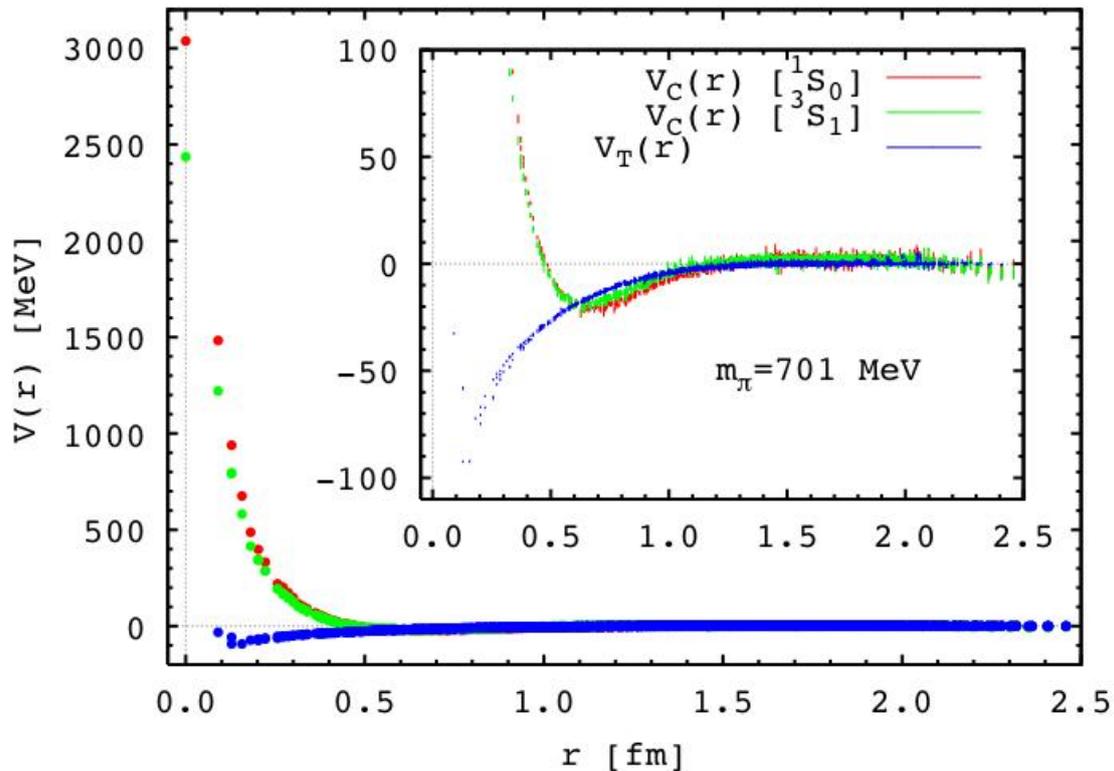
2 つの核子の間に働く力、核力は、中遠距離では引力、近距離では強い斥力になることが実験的に知られているが、この核力の性質、特に近距離での斥力(斥力芯と呼ばれている)を理論的に導くことは、素粒子原子核物理に残された大問題の 1 つである。青木、石井らは昨年度、東京大学の初田との共同研究で、二核子系の波動関数から核子間のポテンシャルを導き出すという方法を用いて格子 QCD により計算したが、その方法のまとめを論文23として発表した。

今年度は、中心力以外の成分としてポテンシャルのテンソル力の計算を行った(論文36)。さらに、力学的クォークの寄与を含むゲージ配位での計算も行った(論文36)。図6は、 π 中間子の質量が 700MeV に対応する PACS-CSCollaboration によって生成された 2+1 フレーバーの格子 QCD のゲージ配位を使って計算された核力ポテンシャルである。スピン一重項の中心力と、スピン三重項の中心力およびテンソル力の結果を示している。どちらの中心力も斥力芯を持っているが、テンソル力には中心力がないことが見てとれる。また、この研究を進展させ、ストレンジ・クォークを含むバリオンであるハイペロンと核子のポテンシャルの計算も行った(論文26,35)。

波動関数からポテンシャルを定義する方法では、波動関数のエネルギーに対するポテンシャルの依存性が問題となる。今年度は、エネルギーを変えた波動関数からポテンシャルを計算し、そのエネルギー依存性を評価した(論文34)。また、2 次元の解けるモデルを使って、波動関数から定義されるポテンシャルの一般的性質

を研究した(論文24)。

図6:2+1 フレーバー格子 QCD の計算で得られた2核子間のポテンシャル。 π 中間子の質量は約 700MeV である。赤がスピン一重項の中心力、緑がスピン三重項の中心力、青がスピン三重項のテンソル力である。



【7】厳密なカイラル対称性を持つクォーク作用を用いた研究(青木)

JLQCD Collaboration は、格子上で厳密なカイラル対称性を持つオーバーラップ・フェルミオンを力学的クォーク作用に用いた $N_f=2$ 格子 QCD(論文22)と $N_f=2+1$ 格子 QCD でゲージ配位を生成し、それを用いた研究を行った。

ゲージ場のトポロジーを固定した計算から理論的考察を用いてトポロジカル電荷の帯磁率を計算した(論文11)。 ϵ 領域での有限体積の計算で、中間子の相関関数からカイラル摂動論のパラメタを決定し(論文19)、また、中間子の質量や崩壊定数のクォーク質量依存性を詳細に調べた(論文25)。さらに、K 中間子の B パラメタの決定(論文20)や QCD の結合定数の決定(論文27)なども行った。

【8】 $\pi\pi$ 散乱の位相差の計算(石塚)

格子 QCD のクエンチ近似の計算で $\pi\pi$ 散乱の位相差を、ゼロで無い相対運動量を持つ 2π 中間子系の波動関数から求めた(論文15)。

【9】格子 QCD による中性 K 中間子の B パラメタの非摂動的繰り込み定数の計算(青木、谷口、吉江)

orbifolding を用いた格子上の Schrödinger functional の定式化を domain-wall fermion に適用し、その具体

的な応用として Kaon B-parameter 及び u, d, s quark 質量の非摂動論的な繰り込みを行った。(論文16)。

【10】CD の結合定数のスケール依存性の研究(青木、谷口、山崎)

$N_f=2+1$ QCD の結合定数を Schrödinger functional formalism を用いて格子上の数値計算から非摂動論的に求めた(論文17,その他の学会発表15、28)。

結合定数が低エネルギー領域でエネルギースケールに依存しなくなる非自明赤外固定点探索のため、既存の方法よりも有限格子間隔に起因する系統誤差が小さなウィルソンループを用いたスキームを提案し、クエンチ近似 QCD を用いて試験的な計算を行なった(論文40)。

村野らは、動的 u,d クォークの効果を取り入れた QCD の非摂動的な結合定数のスケール依存性をシュレディンガー汎関数法を用いて計算した。特に、格子間隔依存性をプラケットゲージ作用と岩崎ゲージ作用で比較した(論文42)。

【11】格子 QCD による核子形状因子の計算(山崎)

格子上で良いカイラル対称性を持つドメインウォールクォーク作用を用いて u,d,s クォーク動的効果を含んだ核子形状因子を計算した。他グループのこれまでの結果との比較から、ベクトル流に関する形状因子に比べ、軸性ベクトル流に関する形状因子には非常に大きな有限体積効果が含まれる事を示した(論文41)。

【12】カイラル摂動論に対する有限格子間隔の影響の研究(青木)

Wilson fermion の場合に、 $\pi\pi$ 散乱に対する有限格子間隔の影響をカイラル摂動論を用いて研究した(論文28)。また、twisted mass 格子 QCD の π 中間子の崩壊定数をカイラル摂動論の1ループで計算し、有限格子間隔の影響を評価した(その他の学会発表21)。

4. 研究業績

<研究論文>

1. PACS-CS Collaboration: S. Aoki, N. Ishii, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, T. Izubuchi, D. Kadoh, K. Kanaya, Y. Kuramashi, Y. Namekawa, M. Okawa, Y. Taniguchi, A. Ukawa, N. Ukita, T. Yoshiwase, 2+1 flavor lattice QCD toward the physical point, Phys. Rev. D 79, No. 3 (2009) ref. 034503, pp.1-33.
2. Yoshinobu Kuramashi for the PACS-CS Collaboration, PACS-CS results for 2+1 flavor lattice QCD simulation on and off the physical point, Proceeding of Science (Lattice 2008) 018.
3. PACS-CS Collaboration: N. Ukita, S. Aoki, N. Ishii, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, T. Izubuchi, D. Kadoh, K. Kanaya, Y. Kuramashi, Y. Namekawa, M. Okawa, Y. Taniguchi, A. Ukawa, T. Yoshiwase, 2+1 flavor lattice QCD simulation with $O(a)$ -improved Wilson quarks, PoS Lattice 2008 097.
4. PACS-CS Collaboration: D. Kadoh, S. Aoki, N. Ishii, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, T. Izubuchi, K. Kanaya, Y. Kuramashi, Y. Namekawa, M. Okawa, Y. Taniguchi, A. Ukawa, N. Ukita, T. Yoshiwase, SU(2) and SU(3) chiral perturbation theory analyses on meson and baryon masses in 2+1 flavor lattice QCD, PoS Lattice 2008 092.

5. PACS-CS Collaboration: Y. Namekawa, S. Aoki, N. Ishii, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, T. Izubuchi, D. Kadoh, K. Kanaya, Y. Kuramashi, M. Okawa, K. Sasaki, Y. Taniguchi, A. Ukawa, N. Ukita, T. Yoshiy'e, Charm quark system in 2+1 flavor lattice QCD using the PACS-CS configurations, PoS Lattice 2008 121.
6. WHOT-QCD Collaboration: T. Umeda, H. Ohno, and K. Kanaya, Charmonium dissociation temperatures in lattice QCD with a finite volume technique, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 35 (2008) ref.104157, pp.1-5.
7. WHOT-QCD Collaboration: T. Umeda, S. Ejiri, S. Aoki, T. Hatsuda, K. Kanaya, Y. Maezawa, H. Ohno, Fixed Scale Approach to Equation of State in Lattice QCD, Phys. Rev. D 79, No.5 (2009) ref.051501(R), pp.1-5.
8. WHOT-QCD Collaboration: T. Umeda, S. Ejiri, S. Aoki, T. Hatsuda, K. Kanaya, Y. Maezawa, H. Ohno, Thermodynamics of SU(3) gauge theory at fixed lattice spacing, PoS(LATTICE 2008) (2009) ref.174, pp.1-7.
9. WHOT-QCD Collaboration: S. Aoki, S. Ejiri, T. Hatsuda, N. Ishii, K. Kanaya, Y. Maezawa, N. Ukita, T. Umeda, Equation of state at finite density in two-flavor QCD with improved Wilson quarks, PoS(LATTICE 2008) (2009) ref.189, pp.1-7.
10. WHOT-QCD Collaboration: Y. Maezawa, S. Aoki, S. Ejiri, T. Hatsuda, N. Ishii, K. Kanaya, N. Ukita, T. Umeda, Magnetic and electric screening masses from Polyakov-loop correlations, PoS(LATTICE 2008) (2009) ref.194, pp.1-7.
11. WHOT-QCD Collaboration: H. Ohno, T. Umeda, K. Kanaya, Search for the Charmonium Dissociation Temperature with Variational Analysis in Lattice QCD, PoS(LATTICE 2008) (2009) ref.203, pp.1-7.
12. 大野浩史、梅田貴士、金谷和至 for WHOT-QCD Collaboration, 有限温度格子 QCD における対角化の方法を用いたチャーモニウムの解析, 素粒子論研究 116 No. 6 (2009) ref. 732, pp30-32.
13. H. Ohno, T. Umeda and K. Kanaya (WHOT-QCD Collaboration), Search for the Charmonia Dissociation in Lattice QCD, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 36 (2009) ref. 064027. $\text{\label{paper:ft8}}$
14. T. Yoshie, Making use of the International Lattice Data Grid, Proceeding of Science (Lattice 2008) 019.
15. K. Sasaki and N. Ishizuka, I=2 Two-Pion Wave Function and Scattering Phase Shift, Phys. Rev. D78 :014511, 2008.
16. Y. Nakamura, S. Aoki, Y. Taniguchi and T. Yoshie [CP-PACS Collaboration], Precise determination of B_K and right quark masses in quenched domain-wall QCD, Phys. Rev. D **78**, 034502-1-29 (2008).
17. Y. Taniguchi [for PACS-CS collaboration], Non-perturbative renormalization of Nf=2+1 QCD with Schroedinger functional scheme, PoS **LATTICE** (2008) 229, 1-7.

18. JLQCD Collaboration and TWQCD Collaboration: S. Aoki, T.W. Chiu, H. Fukaya, S. Hashimoto, T.H. Hsieh, T. Kaneko, H. Matsufuru, J. Noaki, K. Ogawa, T. Onogi, N. Yamada, Topological susceptibility in two-flavor lattice QCD with exact chiral symmetry, *Physics Letters B* 665 (2008) 294.
19. JLQCD Collaboration: H. Fukaya, S. Aoki, S. Hashimoto, T. Kaneko, H. Matsufuru, J. Noaki, K. Ogawa, T. Onogi, N. Yamada, Lattice study of meson correlators in the epsilon-regime of two-flavor QCD, *Physical Review D* 77 (2008) 074503.
20. S. Aoki, H. Fukaya, S. Hashimoto, J. Noaki, T. Kaneko, H. Matsufuru, T. Onogi, N. Yamada, for the JLQCD Collaboration, B_K with two flavors of dynamical overlap fermions, *Physical Review D* 77 (2008) 094503.
21. E. Shintani, S. Aoki and Y. Kuramashi, Full QCD calculation of neutron electric dipole moment with the external field method, *Physical Review D* 78 (2008) 014503.
22. JLQCD Collaboration: S.Aoki, H.Fukaya, S.Hashimoto, K-I.Ishikawa, K.Kanaya, T.Kaneko, H.Matsufuru, M.Okamoto, M.Okawa, T.Onogi, A.Ukawa, N.Yamada, T.Yoshie, Two-flavor QCD simulation with exact chiral symmetry, *Physical Review D* 78 (2008) 014508.
23. S. Aoki, T. Hatsuda, N. Ishii, The Nuclear Force from Monte Carlo Simulations of Lattice Quantum Chromodynamics, *Comput. Sci. Disc.* 1 (2008) 015009.
24. S. Aoki, J. Balog and P. Weisz, Bethe--Salpeter wave functions in integrable models, *Progress of Theoretical Physics* 121 (2009) 0812015.
25. J. Noaki, S. Aoki, T.W. Chiu, H. Fukaya, S. Hashimoto, T.H. Hsieh, T. Kaneko, H. Matsufuru, T. Onogi, E. Shintani, N. Yamada, for the JLQCD, TWQCD Collaborations, Convergence of the chiral expansion in two-flavor lattice QCD, *Physical Review Letters* 101 (2008) 202004.
26. H. Nemura, N. Ishii, S. Aoki, T. Hatsuda, Hyperon-nucleon force from lattice QCD, *Physics Letters B* 673 (2009) 136-141.
27. E. Shintani, S. Aoki, H. Fukaya, S. Hashimoto, T. Kaneko H. Matsufuru, T. Onogi, N. Yamada, S-parameter and pseudo-Nambu-Goldstone boson mass from lattice QCD, *Physical Review Letters* 101 (2008) 242001.
28. S. Aoki, O. Bär, B. Biedermann, Pion scattering in Wilson ChPT, *Physical Review D* 78 (2008) 114501.
29. E. Shintani, S. Aoki, T. W. Chiu, S. Hashimoto, T. H. Hsieh, T. Kaneko, H. Matsufuru, J. Noaki, T. Onogi, N. Yamada, for the JLQCD, TWQCD Collaboration, Lattice calculation of strong coupling constant from vacuum polarization functions, (arXiv:0807.0556[hep-lat]).
30. Sinya Aoki, Oliver Bar, Benedikt Biedermann, Pion Scattering in Wilson Chiral Perturbation Theory, *PoS LAT2008* (2008).
31. T.W. Chiu, S. Aoki, S. Hashimoto, T.H. Hsieh, T. Kaneko, H. Matsufuru, J. Noaki, T. Onogi, N. Yamada (for JLQCD and TWQCD Collaborations), Topological susceptibility in (2+1)-flavor lattice

- QCD with overlap fermion, PoS LAT2008 (2008) 072.
32. J.Noaki, S.Aoki, T.W.Chui, H.Fukaya, S.Hashimoto, T.H.Hsieh, T.Kaneko, H.Matsufuru, T.Onogi, E.Shintani, N.Yamada, Light meson spectrum with $N_f=2+1$ dynamical overlap fermions, PoS LAT2008 (2008).
 33. T.Kaneko, S.Aoki, T.W.Chui, H.Fukaya, S.Hashimoto, T.H.Hsieh H.Matsufuru, J.Noaki, T.Onogi, E.Shintani, N.Yamada (JLQCD, TWQCD collaborations), Pion vector and scalar form factors with dynamical overlap quarks, PoS LAT2008 (2008) 158.
 34. Sinya Aoki, Janos Balog, Tetsuo Hatsuda, Noriyoshi Ishii, Murano, Hidekatsu Nemura, Peter Weisz, Energy dependence of nucleon–nucleon potentials, PoS LAT2008 (2008) 152.
 35. H. Nemura, N. Ishii, S. Aoki, T. Hatsuda, for PACS–CS Collaboration, Lambda–nucleon force from lattice QCD, PoS LAT2008 (2008) 156.
 36. N. Ishii, S. Aoki, T. Hatsuda, for PACS–CS Collaboration, Nuclear forces from quenched and $N_f=2+1$ full QCD using the PACS–CS gauge configurations, PoS LAT2008 (2008) 155.
 37. T. Hatsuda, N. Ishii, S. Aoki, H. Nemura, From lattice QCD to nuclear force. Mod.Phys.Lett.A23:2265–2272,2008.
 38. N. Ishii, S. Aoki, T. Hatsuda, Lattice QCD calculation of nuclear forces, Mod.Phys.Lett.A23:2281–2284,2008.
 39. H. Nemura, N. Ishii, S. Aoki, T. Hatsuda, Lattice QCD simulation of hyperon–nucleon potential. Mod.Phys.Lett.A23:2285–2288,2008.
 40. E. Bilgici, A. Flachi, E. Itou, M. Kurachi, C.–J D. Lin, H. Matsufuru, H. Ohki, T. Onogi, and T. Yamazaki, A new scheme for the running coupling constant in gauge theories using Wilson loops, Phys. Rev. D, submitted (arXiv:0902.3768[hep-lat]) .
 41. T. Yamazaki, Y. Aoki, T. Blum, H. W. Lin, S. Ohta, S. Sasaki, R. J. Tweedie, and J. M. Zanotti (RBC and UKQCD Collaborations), Nucleon form factors with 2+1 flavor dynamical domain–wall fermions, Phys. Rev. D, submitted (arXiv:0904.2039[hep-lat]) .
 42. K.Murano, S.Aoki, Y.Taniguchi and S.Takeda, Universality of the $N_f=2$ Running Coupling, Proceeding of Science (Lattice 2008) 228.

<学会発表>

(A)招待講演

1. 藏増 嘉伸「Current status toward the proton mass calculation」, Rencontres de Moriond, (La Thuile, Italy, Mar 14–21, 2009).
2. 藏増 嘉伸「2+1 flavor lattice QCD simulations toward the physical point」, Workshop on Perspectives and challenges for full QCD lattice calculations, (Villazzano, Italy, May 5–9, 2008).
3. 藏増 嘉伸「PACS–CS results for 2+1 flavor lattice QCD simulation on and off the physical point」, The XXVI International Symposium on Lattice Field Theory, (Williamsburg, Virginia, Jul 14–20, 2008).

4. 大野浩史「Search for the Charmonia Dissociation in Lattice QCD」、International Conference on Strangeness in Quark Matter 2008 (Beijing, China, October 6-10, 2008).
5. 青木 慎也「Lattice QCD」、`The International Conference on Particle and Nuclei (PANIC08)`、(Eilat, Israel, November 9-14, 2008).
6. 青木 慎也「Neutron EDM, muon $g-2$, E \times M effect」、`Scientific Challenges for Understanding the Quantum Universe and the Role of Computing at Extreme Scale` (Menlo Park, CA, USA, December 9-11, 2008).
7. 青木 慎也「Some Topics on Chiral Perturbation Theories in Lattice QCD」、`International Workshop on Frontier Problems in Strong Interaction Physics`、(Poornaprajna Institute of Scientific Research, Bidalur, Bangalore, India, January 12-17, 2009).
8. 青木 慎也「Fundamental challenge of QCD」、47. Internationale Universitätswochen für Theoretische Physik Schladming, Stria, Austria, 28 February - 7 March, 2009.
9. 石井 理修 「Nuclear forces from lattice QCD」(keynote talk), Korean Physical Society Meeting, (Gwangju, South Korea, Oct. 23-24, 2008).
10. 藏増 嘉伸「PACS-CS および T2K オープンスパコン ー格子 QCD からの視点ー」、第八回 PC クラスタ シンポジウム、(秋葉原コンベンションホール、秋葉原、2008年12月11-12日)。
11. 藏増 嘉伸「格子 QCD の今後に向けて」、次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム2008、(丸の内 MY PLAZA ホールおよび MY PLAZA 会議室、千代田区、2008年9月16-17日)。
12. 藏増 嘉伸「T2K アプリケーション(格子 QCD)」、T2K シンポジウム2008、(筑波大学計算科学研究センター、つくば市、2008年4月24-25日)。
13. 青木 慎也パネルディスカッション「シミュレーションによる素粒子・原子核・宇宙物理の新展開」コーディネータ、計算基礎科学シンポジウム「シミュレーションでせまる宇宙の成り立ちー素粒子・原子核・宇宙物理の展望」(東京ステーションコンファレンス、東京、2008年6月16日)。
14. 青木 慎也 分科会 E 素粒子・原子核・天文学「次世代スパコンで物質と宇宙の進化を探る」モデレーターおよびパネルディスカッション「計算基礎科学における人材育成の現状と課題」コーディネーターおよび 全体討議「次世を担う世界水準の人材育成に向けて」次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム 2008一次代を担う世界水準の人材育成に向けてー (MY PLAZA、東京、2008年9月16、17日)。
15. 青木 慎也 「本領域の基本方針」、ワークショップ「計算科学による素粒子・原子核・宇宙の融合」(筑波大学計算科学研究センター、2008年12月1日-2日)。
16. 青木 慎也 「計算基礎科学連携拠点」、シンポジウム「大規模計算が切り拓く基礎科学の将来」(つくば国際会議場 中ホール 300、2009年2月23日)。
17. 石井 理修 「Multi-Quarks and Nuclear Force in Lattice QCD」、RCNP Workshop 「Challenge to New Exotic Hadrons」(RCNP, Osaka, Japan, July 30-31, 2008).
18. 石井 理修 「格子 QCD からみた J-PARC」、KEK 研究会「J-PARC の物理:ハドロン・原子核研究の新し

- い局面」(KEK, 2008年8月7日～9日).
19. 石井 理修「格子 QCD と J-PARC 一核力プロジェクトの近未来の拡張形(私見)ー」(パネルディスカッション), RIKEN 研究会「J-PARC でのハドロン物理を考える研究会」(理化学研究所、2008年9月1～2日).
 20. 山崎 剛「格子上での散乱・共鳴・束縛状態」「ストレンジネスを含むクォーク多体系分野の理論的将来を考える」研究会 (KKRホテル熱海、熱海、2009年2月27～28日)

(B)その他の学会発表

1. 藏増 嘉伸「PACS-CS results for light quark physics in 2+1 flavor lattice QCD」, CCS Workshop on Perspectives on Light Quark Simulations through Machine, Algorithm and ILDG, (Tsukuba, Japan, Mar 10-12, 2009).
2. 滑川 裕介「Charmonium in 2+1 flavor lattice QCD」, International Workshop on Heavy Quarkonia 2008 (Nara, Japan, Dec. 2-5, 2008).
3. 浮田 尚哉「2+1 flavor lattice QCD simulation with $O(a)$ -improved Wilson quarks」, The XXVI International Symposium on Lattice Field Theory, (Williamsburg, Virginia, Jul 14-20, 2008),
4. 加堂 大輔「SU(2) and SU(3) chiral perturbation theory analyses on meson and baryon masses in 2+1 flavor lattice QCD」, The XXVI International Symposium on Lattice Field Theory, (Williamsburg, Virginia, Jul 14-20, 2008).
5. 滑川 裕介「Charm quark system in 2+1 flavor lattice QCD using the PACS-CS configurations」, The XXVI International Symposium on Lattice Field Theory, (Williamsburg, Virginia, Jul 14-20, 2008).
6. 梅田貴士「Charmonium Wave Functions at Finite Temperature from Lattice QCD Calculations」, RIKEN BNL Research Center Workshop on "Understanding QGP through Spectral Functions and Euclidean Correlators" (BNL, Upton, USA, Apr.23-25, 2008),
7. 梅田貴士「Thermodynamics of SU(3) gauge theory at fixed lattice spacing」, The XXVI International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2008) (Williamsburg, Virginia, USA, July 14-19, 2008),
8. 大野浩史「Search for the Charmonium Dissociation Temperature with Variational Analysis in Lattice QCD」, The XXVI International Symposium on Lattice Field Theory (Williamsburg, Virginia, USA, July 14-19, 2008).
9. 金谷和至「Equation of state at finite Density in two-flavor QCD with improved Wilson quarks」, The XXVI International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2008) (Williamsburg, Virginia, USA, July 14-19, 2008).
10. 梅田貴士「QCD Thermodynamics at fixed lattice scale」, The 2nd Asian Triangle Heavy Ion Conference (ATHIC 2008) (Tsukuba, Japan, Oct. 13-15, 2008).
11. 金谷和至「Lattice studies of QCD at finite temperature and finite density」, The 2nd Asian Triangle Heavy Ion Conference (ATHIC 2008) (Tsukuba, Japan, Oct. 13-15, 2008).

12. 金谷和至 「Fixed scale approach to the equation of state on the lattice」, The 21st International Conference on Ultrarelativistic Nucleus-Nucleus Collisions (Quark Matter 2009) (Knoxville, TN, USA, Mar.30-Apr.4, 2009).
13. 吉江 友照 「Updates to the QCDml and sharing quark propagators」, The 12th International Lattice Data Grid Workshop (TV workshop hosted by EPCC, Edinburgh, UK, May 23, 2008)。
14. 吉江 友照 「Making use of the International Lattice Data Grid」(plenary), The XXVI International Symposium on Lattice Field Theory (Williamsburg, Virginia, USA, July 14-19, 2008).
15. 谷口 裕介 「Non-perturbative renormalization of $N_f=2+1$ QCD with Schroedinger functional scheme」, The XXVI International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice2008), (College of William and Mary, Williamsburg, Virginia, USA).
16. 青木 慎也 「Energy dependence of nucleon-nucleon potentials」, ``The XXVIth International Symposium on Lattice Field Theory'', (Williamsburg, Virginia, USA, July 14-19, 2008).
17. 石井 理修 「Nuclear from quenched and $N_f=2+1$ full lattice QCD using the PACS-CS gauge configurations」, The XXVI International Symposium on Lattice Field Theory, LATTICE2008 (Williamsburg, Virginia, USA, July 14-19, 2008).
18. 石井 理修 「Lattice QCD calculation of the nuclear force」, The 3rd LACM-EFES-JUSTIPEN Workshop, Joint Institute for Heavy Ion Research, (Oak ridge National Laboratory, Feb. 23-25, 2009).
19. 山崎 剛 「Non-perturbative determination of running coupling constant with twisted Polyakov loop」 16th YKIS Conference, Progress in Particles Physics 2008 (Kyoto, Japan, Feb. 16-19, 2009)
20. 村野啓子 「Universality of the $N_f=2$ Running Coupling」The XXVI International Symposium on Lattice Field Theory (Williamsburg, Virginia, USA, July.14-19,2008).
21. 上田悟 「Wilson Chiral Perturbation Theory for twisted mass QCD at NLO」The XXVI International Symposium on Lattice Field Theory (Williamsburg, Virginia, USA, 2008 July 14-19).
22. 浮田 尚哉 「現実的なクォーク質量での $N_f = 2 + 1$ 格子 QCD 計算」, 日本物理学会年会 (山形大学、山形、2008年9月20-23日)
23. 浮田 尚哉 「PACS-CS の取り組み」, ストレンジネスを含むクォーク多体系分野の理論的将来を考える」研究会 (KKR ホテル熱海、熱海、2009年2月27-28日)。
24. 滑川 裕介 「Charm quark system in $2+1$ flavor lattice QCD」, 日本物理学会年会 (山形大学、2008年9月20-23日)。
25. 大野浩史 「有限温度格子 QCD における対角化の方法を用いたチャーモニウムの研究」, 基研研究会 「熱場の量子論とその応用」(京都大学基礎物理学研究所、京都、2008年9月3日-5日)
26. 大野浩史 「有限温度格子 QCD における対角化の方法を用いたチャーモニウムの解析」, 日本物理学会秋季大会 (山形大学、山形, Sept. 20-23, 2008).
27. 梅田貴士 「Thermodynamics at fixed lattice spacing」, 日本物理学会秋季大会 (山形大学、山形, Sept. 20-23, 2008).

28. 谷口裕介「 $N_f=2+1$ 格子 QCD における非摂動的な繰り込み」、日本物理学会 2008 年秋季大会（山形大学）.
29. 石井 理修「格子 QCD による核力」、基研研究会「原子核の分子的構造と低エネルギー核反応—束縛系から散乱系へ—」(京都大学基礎物理学研究所、2008 年 7 月 2 日～4 日).
30. 石井 理修「格子 QCD による核力(III)—クエンチ QCD によるテンソル力と PACS-CS ゲージ配位を使ったフル QCD による核力」、日本物理学会 2008 年秋季大会（山形大学、2008 年 9 月 20～23 日）.
31. 石井 理修「格子 QCD からハドロン相互作用へ」、ワークショップ「計算科学による素粒子・原子核・宇宙の融合」(筑波大学計算科学研究センター、2008 年 12 月 1～2 日).
32. 石井 理修 「Nuclear force from 2+1 flavor lattice QCD using PACS-CS gauge configurations」、日本物理学会 第 64 回年次大会（立教大学、2009 年 3 月 27～30 日）.
33. 山崎 剛「Two-particle wave function with lattice scalar QED」日本物理学会年会(立教大学、東京、2009年3月27～30日).
34. 村野啓子「Universality study of Step Scaling Function in QCD with two dynamical quarks」日本物理学会年会(近畿大学、大阪、2008 年 3 月 22-26 日).
35. 村野啓子「格子 QCD から計算された核力ポテンシャルのエネルギー依存性」日本物理学会 秋季大会（山形大学、山形、2008 年 9 月 20-23 日）.
36. 村野啓子「格子 QCD から計算された核力ポテンシャルのエネルギー依存性(2)」日本物理学会年会（立教大学、東京、2009 年 3 月 27-30 日）.

5. シンポジウムの開催

1. 「CCS Workshop on Perspectives on Light Quark Simulations through Machine, Algorithm and ILDG」、筑波大学計算科学研究センター、つくば市、2009年3月10～12日、参加国数:5ヶ国、参加者数:36人。
主催者:吉江友照、藏増嘉伸

I-2 宇宙物理グループ

1. メンバ

教授 梅村 雅之

准教授 森 正夫

講師 吉川 耕司

助教 岡本 崇

研究員 諏訪 多聞, 赤堀 卓也, 清水 一紘, 長谷川 賢二

大学院生 4名

4年生 5名

2. 概要

本年度, 当グループスタッフは, FIRST プロジェクトを推し進めると共に, これを用いた宇宙第一世代天体, 銀河形成・進化, 銀河団の研究を行った。また, 宇宙構造形成, 宇宙再電離, 銀河形成, 銀河進化, 銀河中心核, 並びに星・惑星系形成の研究を展開した。

3. 研究成果

【1】FIRST プロジェクト

(1) 概要

文部科学省科学研究費補助金 基盤研究(S)「第一世代天体から原始銀河に至る宇宙暗黒時代の解明」(平成 20 年度～平成 24 年度, 代表 梅村雅之)に基づき, 宇宙第一世代天体および原始銀河形成に関する大規模なシミュレーションを実行するプロジェクト(FIRST プロジェクト)を推進した。

(2) 宇宙シミュレータ FIRST

宇宙第一世代天体の形成過程について大規模な輻射流体力学シミュレーションを行うためには, 物質と光の作用および重力相互作用を極めて高速に計算する必要がある。目的とするシミュレーションのためには, 物質・光の計算性能が数 Tflops, 重力計算性能が数 10Tflops の計算機を必要とする。我々は, これを実現するために, PC クラスタに新規開発したサーバ組み込み型の**重力計算専用ボード Blade-GRAPE**を埋め込んだ**宇宙シミュレータ FIRST** を完成させた。

FIRST は, 256 の計算ノード, 2 つの管理ノード, 2 つのファイルサーバ, および Gfarm ファイルシステムからなる。計算ノードのうち, 16 ノードは 32 ビット型 Blade-GRAPE を有し, 224 ノードは 64 ビット型 Blade-GRAPE X64 を有する。ファイルサーバは 2 台で合計 4.5TB の容量をもつ。Gfarm ファイルシステムは, ネットワーク共有ファイルシステムであり, 分散したローカルディスクから一つの共有ファイルシステムをつくる機構である。これにより, 総計 22TB の共有ファイルシステムが構築されている。FIRST の総演算性能は, 36.1TFLOPS であり,

内ホスト部分 3.1TFLOPS, Blade-GRAPE 部分 33TFLOPS である。また、主記憶容量は総計 1.6TB である。

(3) ダークマター・カスプが第一世代天体形成に与える影響

宇宙で最初に生まれた天体(第一世代天体)は重元素を含まないガス雲から生まれる。従来の計算では $\sim 10^6 M_{\odot}$ のダークマターハローに $\sim 10^5 M_{\odot}$ 程度のバリオンガスが蓄積された後、重力不安定を起し、その中に第一世代星が形成されるとされてきた。

しかしながら、従来の研究では、ダークマターの小スケールでの振る舞い、特にダークマター・カスプの成長についてはあまり注目されてこなかった。そこで、我々は計算領域の全体を可能な限り高解像度にした数値計算で、ダークマター・カスプの成長を分解できるようにし、第一世代天体の形成と進化を調べた。計算には宇宙シミュレータ FIRST を用い、N 体/流体粒子(SPH)法によって第一世代天体形成過程の超高分解能シミュレーションを行った。この計算では、ダークマターと流体粒子をそれぞれ約 1 億体(512^3 体)使い、計算領域の全体にわたってバリオンとダークマター質量解像度としてそれぞれ $0.046 M_{\odot}$ と $0.22 M_{\odot}$ を実現した。その結果、第一世代天体の形成に対してダークマター・カスプが影響を与えている可能性があることがわかった。

宇宙初期の密度揺らぎが成長して生まれるダークハローの中心部では、密度が半径の -1.5 乗程度に比例するカスプが形成される。計算分解能が上がるほど、カスプの成長は中心部での重力場を発散に向かわせる。その結果ダークマターハロー中心近くに存在するバリオンガスが強く中心部に引かれることになり、そこで密度が早く上昇する。カスプはダークマターハローの最中心部で密度一定のコア構造に切り替わるため、ガス密度の上昇はカスプとコアの切り替わるスケールに依存することになる。このことから、ダークハロー中心部における小スケールの構造を正しく解くことが第一世代天体形成過程において重要であることが明らかになった。

(4) 第一世代星紫外線フィードバックの星質量依存性

第一世代星は非常に大質量であったと考えられており、強い紫外線を放射する。そのため、第一世代星近傍のガスは光電離や水素分子の光解離などの紫外線フィードバックがかかる事が期待される。Susa & Umemura (2006)は、輻射流体シミュレーションを行う事で第一世代星近傍でのさらなる星形成可能性について調べた。その結果、電離波面後方に水素分子のシェルが形成され、そのシェルが解離光子を遮蔽することで近傍星形成の阻害を緩和する事を見いだした。しかし、このシミュレーションは第一世代星質量が 120 太陽質量の場合のみの計算であり、星質量依存性については調べられていなかった。

そこで我々は、輻射流体シミュレーションを行う事で、フィードバックの星質量依存性を調査し、星質量が 25-40 太陽質量以下では、電離光子が解離光子による星形成阻害を緩和できない事を明らかにした。この結果は、低質量星は大質量星に比べて電離光子数の解離光子数に対する割合が小さいという事実から定性的には説明可能であるが、これらの違いはたかだか二倍以下でしかなく、なぜこの程度の違いによって、光解離の負のフィードバックを緩和できるかどうかが変わるかは明らかでなかった。

我々は解析的見積もりと輻射流体シミュレーションの結果を用いる事で、上で述べた結果のより定量的な理解を試みた。その結果、電離波面前方に形成されるシェルの水素分子柱密度が、電離光子数と解離光子数の比に強く依存する事を見いだした。さらに、この解析的見積もりにより第一世代星近傍で星形成が可能となる臨界距離を定式化した。

(5) Ly α 輝線天体と他波長観測天体との対応関係について

近年 Ly α 輝線で非常に明るい Ly α 輝線天体 (LAEs) と呼ばれる原始天体が様々な赤方偏移で観測されている。LAEs の正体は良く分っていないが、最近になって銀河進化の非常に極初期のフェーズの天体である事が分かってきた (Mori & Umemura 2006, Shimizu et al. 2007)。しかしながら LAEs は Ly α 輝線の放射機構など依然として良く分っていない天体である。

現在様々な領域において、narrow band survey による Ly α 輝線天体観測の他、光学、赤外、Sub-mm といった波長による遠方銀河観測が盛んに行われている。しかしながら、LAEs と様々な波長帯で観測される銀河がどのように関係しているのかはよくわかっていない。

そこで我々は、宇宙論的 N 体計算と化学進化モデルを組み合わせ、LAE となる天体と他の波長帯で観測される銀河との関係を調べた。特に、銀河内の各サブストラクチャーの星形成史・化学進化を独立な事象として扱い、evolutionary spectral synthesis code 'PEGASE'を用いて SED の計算を行った。Ly α 光度については、ダスト吸収の効果も考慮した。

結果として、LAEs は銀河進化の極初期のフェーズにあるような天体だけでなく、一度 LAEs としての寿命を終えたものにガスが降着して星形成を誘起するような天体も LAEs として観測される可能性がある事が分かった。そして、前者を Type 1 LAE、後者を Type 2 LAE と名づけた。さらに、Type 2 LAE は MOIRCS 等近赤外の波長で観測される天体と空間相関がよく一致する事が分かった。

(6) ライマンアルファエミッタの光学的特性と宇宙再電離との関係

近年 WMAP の観測等により、宇宙再電離史への大きな制限が与えられた。しかし、宇宙再電離を引き起こした電離源については依然謎のままである。ライマンアルファエミッタやライマンブレイク銀河はその電離源の有力な候補である。我々はこれまで Mori & Umemura(2006)の高精度流体計算による銀河進化のシミュレーション結果に対し、3次元輻射輸送計算を行うことによりこれらの高赤方偏移天体の光学的特性について理論的に調べ、銀河内の電離構造、電離光子脱出確率を見積もった。さらに、この結果と観測により得られている星形成密度を用いて、ライマンアルファエミッタやライマンブレイク銀河の銀河間ガスの電離への寄与を見積もった。結果としてライマンアルファエミッタは銀河間ガスの電離にはほとんど寄与せず、ライマンブレイク銀河は $z=3-5$ において主要な電離源である可能性を指摘した。また、現在までに観測されているライマンアルファエミッタやライマンブレイク銀河のみでは $z>6$ において銀河間ガスを電離することが困難であることが分かった。

(7) 衝突銀河団における重元素の電離状態と電子・イオン温度の研究

銀河団の銀河は銀河団が銀河や銀河群の度重なる衝突合体で成長するときに力学的・熱的影響を強く受け形成・形態進化を遂げ、その過程で銀河団ガスに重元素を供給してきた。重元素の量と分布はこれらの形成進化をひもとく鍵であり、それは数千万度の温度にある銀河団ガスから放射される X 線を分光し、輝線を調べることで分かる。これまでに多くの銀河団で重元素の組成や量、空間分布が X 線観測の研究によって調べられてきた。これらの研究においては重元素は衝突電離平衡にあり電子・イオンは温度平衡にあると仮定されるが、これは銀河団中心部ではこれらの平衡状態に達する時間スケールが十分短いと考えられるだけガスの

密度が高いからである。しかしながら、ピリアル半径にせまる希薄な周縁領域や衝突加熱領域では平衡状態に達していない可能性を我々は注目している。もしそうであれば、平衡を仮定した解析結果は誤った重元素量を推定しかねない。そこで我々は FIRST シミュレータを用いて鉄などの主要な重元素の衝突電離平衡と電子・イオンの温度平衡を仮定せず時間進化を解くダークマターとガスを含めた衝突銀河団の 3 次元数値実験を世界で初めて行った。その結果、最近すぐく衛星で観測された Abell 399/401 連銀河団の連結領域においては、24 階電離鉄の割合が平衡値より 10-20% 多いことや電子温度がガスの平均温度より数%低いことを明らかにした。また観測される X 線のスペクトルを計算し、鉄の K 輝線の強度が数%増強されていることも示した。更に、連結領域の周縁部においてマッハ数が 1.5 程度の衝撃波が存在することが予想された。この領域では電子・イオンの 2 温度構造や鉄イオンの電離状態の電離平衡からのずれが大きいことが予想され、将来の X 線観測衛星でその詳細が明らかになることが期待される。

また、様々な衝突条件下(質量比・インパクトパラメータ)での衝突銀河団ガスの非平衡電離状態・2 温度プラズマのシミュレーションを行い、銀河団外縁部と銀河団中心部でそれぞれ特徴的な衝撃波が非平衡電離状態・2 温度状態を伴って形成されることが分かった。更に、観測時の衝撃波面に対する角度によって非平衡電離状態や 2 温度状態の観測可能性が大きく変わることもわかった。

【2】宇宙論・銀河形成

(1) Baryon Acoustic Oscillation の非線形成長

Baryon Acoustic Oscillation (BAO) は宇宙晴れ上がり以前のバリオン・光子混合流体の音波振動が、晴れ上がり以後にバリオンとダークマターの重力相互作用によって現在の宇宙大規模構造に伝搬したものである。この BAO の振動スケールは宇宙晴れ上がり時のサウンドホライズンの大きさで決まるため理論的に計算可能である。従って、宇宙の大規模構造の観測によって BAO の振動スケールを観測することができれば、それを物差しとして大規模構造のスケールを測定することが可能になる。また、様々な赤方偏移での BAO の観測から宇宙の膨張の履歴を測定することが可能になり、宇宙論パラメータ、特に暗黒エネルギーの状態方程式への制限が可能になると考えられている。

BAO の振動スケールは $100h^{-1}\text{Mpc}$ 程度であるので、その時間的な成長は線形理論が適用可能な範囲ではあるが、宇宙論パラメータや暗黒エネルギーの状態方程式のパラメータを高い精度で決定するためには、非線形な効果を探り入れたモデル化が必要となる。一般に、摂動論による弱非線形成長の取扱いが行われるがその適用範囲については必ずしも明らかでは無かった。我々は宇宙論的な N 体シミュレーションを用いて BAO の非線形成長のシミュレーションを行い、様々な摂動論的な取扱いの適用可能範囲を明らかにした。

(2) 銀河の角運動量問題の物理的起源

構造形成の標準的な理論となっているコールドダークマターモデルの下で、銀河形成シミュレーションを行うと殆どの銀河がバルジ成分が卓越した銀河となり、我々の天の川銀河のような渦巻き銀河が形成されないことが知られている(角運動量問題)。この原因を探るため、星形成等の仮定を変更した宇宙論的シミュレーションを行うことにより、同一の初期条件から渦巻き銀河と楕円銀河を形成することに成功した。この二つのシミュレーションを解析することにより、角運動量問題の原因は、小さなダークマターハローがまず形成され、それらが合体しながらより大きなダークマターハローへと成長していくというコールドダークマターモデルの特徴そのもの

にあること、観測されるような渦巻き銀河が存在するためには、宇宙の初期において超新星爆発によるエネルギー供給等によってガスの分布がダークマターハローのそれよりもずっと広がったものにならなければならないことを明らかにした。

(3) 紫外背景放射が銀河形成に与える影響の定量的評価法

準解析的モデル等で紫外背景放射の銀河形成への影響を評価するために長い間 Gnedin (2000) によるフィルタリング質量が使われてきた。我々は高解像度の宇宙論的シミュレーションを行うことにより、このフィルタリング質量が紫外背景放射による銀河形成阻害の影響を一桁ほど大きく見積もることを明らかにした。また、簡単な準解析的モデルを構築することにより、紫外背景放射は主に、ダークマターハローへと降着してくるガスの温度を上昇させることによりその温度よりも低いビリアル温度を持つダークマターハローへのガスの降着を禁ずることにより銀河形成を抑制することを明らかにし、この影響を準解析的モデルで正しく取り扱う方法を提示した。

(4) 高分解能シミュレーションによる、銀河内での星形成シミュレーション

従来の銀河形成シミュレーションは数値的分解能が足りないため、銀河内での星形成領域を直接取り扱うことは出来ず、温度 10^4 度、密度 $n_H \approx 0.1 \text{ cc}^{-1}$ 程度の温かいガスで星形成が起こると仮定していた。そこで、 100 度以下、密度 n_H が 100 cc^{-1} 以上の低温高密度ガスを扱える高分解能シミュレーションを行った。その結果、このようなシミュレーションでは観測的に知られるガスの表面密度と星形成率密度の関係が自動的に再現されること、それはガスが低温高密度の星形成領域へと供給されるタイムスケールが、どの密度のガスでも力学的時間の約 5 倍になっているためであることが原因であることを明らかにした。

また、銀河合体の高解像シミュレーションを行うことにより、このような低温高密度ガスでの星形成を仮定すると、従来のシミュレーションでは再現されなかった、銀河と銀河の衝突面での爆発的星形成が自然に生じることが分かった。この爆発的星形成ではダークマターハローを持たない星団も多数形成されることが明らかになった。

【3】 銀河進化標準モデルの構築

(1) 概要

飛躍的な観測技術や検出装置の進歩により、それまでは全く知り得なかった宇宙の深遠部で、活発な星形成の兆候を示すライマンアルファエミッタ、ライマンブレイク銀河、サブミリ銀河等、莫大な数の銀河が観測されている。しかしながら、そういった天体が、我々の住む現在の宇宙に存在し、ハッブル系列などで分類され研究されてきた近傍銀河とどのように関連しあっているのか？これらは非常に基本的な問いかけにもかかわらず、明確な答えを我々はもっていない。文部科学省科学研究費補助金 基盤研究(C)「高精度ハイブリッドシミュレーションで探る銀河の発生学」(平成 18 年度～平成 20 年度、代表 森正夫)に基づき、銀河の標準進化モデルを構築すべく銀河形成・進化の理論研究を推進している。

(2) ライマンアルファエミッタとライマンブレイク銀河の理論進化モデルの構築

本研究では、”ライマンアルファエミッタやライマンブレイク銀河に代表される高赤方偏移で発見されている天体が、近傍宇宙のハッブル系列を構成する銀河の進化経路の一側面を見ているに過ぎない”という仮説を掲げ、銀河の化学力学モデルを駆使して、銀河の発生について詳細な理論モデルを構築している。その研究成果の一部としてライマンアルファエミッタが数億年の時間尺度でライマンブレイク銀河へ進化し、最終的には近傍の楕円銀河へ進化する様を理論的に示した。また、ライマンアルファエミッタで放射されるランマンアルファエミッションの光度は、原始銀河の質量と生の相関があることを示した。さらにその放射の物理的な起源として従来から考えられてきたメカニズム以外に、衝撃波で加熱されたガスの放射冷却に起因するものが大きな影響を及ぼすことが分かった。

(3)ライマンアルファエミッタとサブミリ銀河との関係

近年、ライマンアルファエミッタやライマンブレイク銀河の観測研究の分野では、従来からの可視光波長のみならず X 線、サブミリ等の多波長観測が行われはじめている。我々は Mori & Umemura(2006)における銀河風によるライマンアルファエミッタの理論モデルが現実的であるか検証するべく、星間ダストによる紫外線の吸収を詳細に扱うことで、赤外線特性を調べた。その結果、銀河進化と共にダストの温度分布、赤外線分布、赤外線光度の時間的変化が分かった。この結果を用いて、ALMA 等に代表される将来の大型観測装置による高赤方偏移天体のサブミリ波観測に対する理論的な示唆を与えた。

(4)銀河衝突における銀河構造の力学進化

現在の標準的な宇宙構造形成論では、小質量銀河が衝突合体を繰返しながら成長し階層的に構造形成をおこなうことにより、現在の銀河の姿を構築したと考えられている。そこで最も基本的な力学過程である小質量銀河が大質量銀河に衝突合体していく過程を、これまでにない高精度シミュレーションにより調べた。特に最近の宇宙望遠鏡や大望遠鏡による高精度観測により、アンドロメダ銀河のハロー部分に存在する大規模な星構造(アンドロメダストリーム)や、貝殻状の恒星の空間分布といった謎の大規模構造がぞくぞくと発見され始めている。アンドロメダを取り囲むこのような大規模構造はどのようにして出来上がったのか？ 2008年6月から運用が開始された新しいスーパーコンピュータ “T2K-TSUKUBA”を用いて、この大規模構造に関する大規模数値シミュレーション解析を行った。今から 10 億年前にアンドロメダの 1/400 程度の質量しかない小さな銀河が、アンドロメダの強い重力に捕まり、バラバラに引き裂かれる様子がシミュレーションされた。この銀河の残骸は約 40 万光年にも渡って夜空を流れる”アンドロメダの涙”を作り上げ、幾重にも重なる貝殻状の星の群れを産みだすことになった。さらに、遡ること 10 億年前にも同程度の質量をもつ別の矮小銀河が、同様にアンドロメダと衝突していた可能性を見出した。アンドロメダとその彼方に位置する M33 との間の広大な銀河間空間には、その衝突によって出来上がった矮小銀河の残骸が周期的なシェル構造を作り上げていることを示した。近傍銀河ではこのような矮小銀河の衝突過程が詳細に観測でき、原始銀河の衝突合体過程を理解する上で有意義なものとなった。

(5)銀河系中心部の高速分子雲の衝撃波模型

銀河系中心部の分子ガスが集中している領域に、他には見られない非常に大きな速度幅を持つコンパクトな分子雲(HVCC)が電波の大規模サーベイ観測より大量に発見されている。詳細な観測データの解析から、

HVCC が膨張するガスの殻構造を持つことが示唆され、その膨張エネルギーは 10^{49} - 10^{52} erg にも及ぶ大きな運動エネルギーを持つことが報告されている。しかしながら、そのエネルギー源に関する詳細な理論モデルは未だ報告されておらず、その起源が謎のままとなっている。本研究では、HVCC の特性とその内部で誕生した星団の活動性が密接に関係していると考え、星団からの質量放出過程と HVCC との流体力学的相互作用について調べた。HVCC の中心に星団が形成され、その星団にある複数の OB 型星から放出される恒星風と II 型超新星爆発によって発生する衝撃波によって、HVCC 内の星間ガスがかき集められ、圧縮・加熱されて膨張する殻を生成することを見出した。

(6) ブラックホール降着・噴出流の大局的2次元輻射磁気流体シミュレーション

ブラックホールへのガス降着流の理解は、1970年代に登場した標準円盤モデルと、それに引き続き提案されたスリム円盤モデル、ADAF(RIAF)モデルといった1次元モデルを中心に大きく発展してきた。これらのモデルでは、肝心のエネルギーおよび粘性の起源を現象論的モデル(所謂 α モデル)で扱っている。近年、それらが磁場起源であることがわかり、MHD 計算で詳細な研究が行われるようになった。しかしながら、より現時的な描像を得るためには、輻射冷却や輻射圧も考慮する必要がある。即ち、MHD 計算に輻射輸送を取り入れた輻射磁気流体(RMHD)計算を行わなければならない。

そこで我々は、ブラックホール降着流の大局的2次元 RMHD シミュレーションを実行した。その結果、スリム円盤、標準円盤、RIAF に対応する3種の降着流を再現することに成功した。質量降着率が臨界値以上の場合、輻射圧優勢で分厚い円盤が形成され、輻射圧加速型のアウトフローが発生することがわかった(Model A)。質量降着率が臨界値の1%程度のときには輻射冷却の効いた薄い円盤(Model B)が、0.01%程度の場合には輻射冷却が効かず、高温プラズマから成る分厚い円盤(Model C)が形成されることがわかった。Model B と C の円盤からは、磁気圧で加速されたアウトフローが発生する。磁場のエネルギーはガスのエネルギーの2倍(Model A)、30%(Model B)、20%(Model C)まで増幅される。また、粘性トルクがおおよそ圧力に比例することがわかった。このようなブラックホール降着流の基礎物理過程の詳細を調べることは、銀河中心の巨大ブラックホールと銀河バルジの共進化を考える上で、重要な示唆を与えることになる。

【4】星・惑星系形成過程の研究

(1) 複合コンドリュール形成

コンドリュールはコンドライト隕石に含まれる1mm程度の球形のシリケート構成物であり、原始太陽系星雲中で急激な加熱を受け、熔融し、急冷することで形成されたと考えられており、原始太陽系星雲の物理的、化学的情報を保持していると期待されている。多くのコンドリュールは単体で含まれているが、2つ以上のコンドリュールが付着した、複合コンドリュールが全体の5%程度存在する。多くの複合コンドリュールは独立なコンドリュールが熔融中に衝突することにより形成されたと考えられているが、原始太陽系最小質量モデルでダスト同士の衝突確率を見積ると、複合コンドリュールの存在割合に遠く及ばず、これまで理論的な説明はなされていなかった。

本研究では、2つのフォルステライト(Mg_2SiO_4)液滴の衝突を様々なパラメータ(衝突速度、衝突角度、液滴の粘性、液滴の直径)のもとで、3次元流体シミュレーションにより模擬し、複合コンドリュール形成のための衝突条件を定量的に調べた。様々なパラメータで計算を行った結果、衝突後に2つの液滴が付着する「合体」、

衝突角度が大きく、いったん付着するが、最終的には二つの液滴に分離する「伸張分離」、衝突速度が速く最終的に多くの液滴に分裂する「破壊」の3つのカテゴリーに分類できる事がわかった。そして、複合コンドリュール形成の有力なモデルの一つである分裂・衝突モデルの検証を衝突条件の観点から行った。コンドリュール形成の有力なモデルの一つである衝撃波加熱モデルでは、ダストはガス摩擦加熱を受けるため、ダスト表面から溶融し始める。溶融部分は高速のガス流にさらされるため、その動圧で溶融部は分裂する。この分裂片同士の衝突を考えたのが、分裂・衝突モデル(Miura et al. 2008)である。分裂片同士の衝突のパラメータを求めため、部分的に溶融したダストの溶融部の分裂現象と分裂片の運動を3次元流体シミュレーションにより調べた。数値計算の結果、32個の分裂片を同定し、12回の衝突を確認した。さらに分裂片の位置、速度、サイズの時間進化を追うことで、12回の衝突の衝突パラメータを調べ、衝突条件を満たすかどうか調べた。その結果、11回の衝突に関しては合体条件をクリアする。しかし、これらの衝突での液滴の変形は動圧支配であり、形状保持条件を満たさない。これは、分裂、衝突の時間スケールに比べて、冷却の時間スケールが長いこと、粘性の低い状態で衝突するためである。したがって、Miura et al. (2008)で考えられていたような、分裂直後の分裂片同士の衝突では、複合コンドリュールの形成は難しいことがわかった。一方、異なる分裂現象(複数回の分裂現象)による分裂片同士の衝突によって形成されるというシナリオでは、分裂片が十分に冷却されてから衝突するため、有力なモデルとなることがわかった。

(2) 輻射輸送計算を用いた大質量星周円盤のスペクトル・エネルギー分布の研究

大質量星の形成メカニズムは、宇宙物理学における重要な未解決問題の一つになっている。最近の観測で、大質量星の周りに円盤状の構造の証拠が見つかってきており、これは大質量星が小質量星と同様にガス円盤からの降着によって形成されたことを示唆している。よって、ガス円盤が大質量星周りでどのような構造となっているかを知ることは、大質量星の形成メカニズムを解明する上で、極めて重要である。

本研究では、大質量星周円盤の構造を理論解析によって求め、これを使って輻射輸送計算を行うことで、ガス円盤のエネルギー・スペクトル分布から円盤についてどのような物理情報を引き出すことができるかについて解析した。この解析では、大質量星からの輻射伝播について、輻射流速制限拡散近似法を採用し、2次元軸対称の輻射輸送を解くことによって星周ガス円盤の静水圧平衡密度分布と温度を決定した。そして、求められたガス円盤の密度分布と温度分布を用いて、光の伝播をレートレーシングし、ガス円盤からのエネルギー・スペクトル分布を求めた。その結果、輻射の大部分は円盤表面から逃げ出し、円盤内部の高密度領域が、短波長の輻射を吸収して、赤外線放射として再放出することがわかった。また、星周円盤の半径の大きい所では、遮蔽効果が効いて低温になることがわかった。

上記の計算を、現実的にとりうる様々なパラメータについて計算した結果、中心星の光度は、エネルギー・スペクトル分布におけるピーク光度と10ミクロンでのシリケート光度の比で決定できることがわかった。これは、中心星の光度が高いほど、星周円盤の多くの領域が高温に加熱されることになり、その結果エネルギー・スペクトル分布のピーク値が高くなるからである。また、表面密度分布が変わると、波長毎の光学的厚さの半径依存性が変わり、各波長でのエネルギー・スペクトル分布が変わる。計算の結果、特に300ミクロンの光度は、表面密度分布の勾配に敏感であり、300ミクロン光度によって表面密度勾配をよく決定できることがわかった。結論として、エネルギー・スペクトル分布を見ることにより、大質量星形成の物理状態について、多くの重要な情報を得ることができると明らかとなった。

4. 研究業績

<受賞>

1. 保田 誠司
数理物質科学研究科長博士論文表彰, 2009年3月
Theoretical Study on Compound Chondrule Formation
(複合コンドリュール形成に関する理論的研究)

<科研費採択状況>

1. 基盤研究(S):梅村 雅之(代表者)(新規)
「第一世代天体から原始銀河に至る宇宙暗黒時代の解明」(1,090万円)
2. 基盤研究(C):森 正夫(代表者)(継続)
「高精度ハイブリッドシミュレーションで探る銀河の発生学」(104万円)
3. 若手研究(スタートアップ):吉川 耕司(代表者)(継続)
「宇宙論的バリオン進化の理論的研究」(135万円)
4. 基盤研究(B):吉川 耕司(研究分担者)(新規)
「バリオン宇宙の理論的探求と次世代X線衛星」(研究代表者:須藤靖)(50万円)
5. 日本学術振興会特別研究員奨励費:秋月 千鶴(代表者)(継続)
「相対論的輻射輸送から探る活動天体と宇宙ジェットの構造」(90万円)
6. 日本学術振興会特別研究員奨励費:小泉 貴之(代表者)(新規)
「相対論的輻射流体力学によるブラックホール降着円盤とアウトフローの研究」(90万円)

<非常勤講師(集中講義)>

1. 梅村 雅之:東京工業大学,
「宇宙輻射流体力学」,2008年7月16日~17日
2. 森 正夫:千葉大学,
「計算物理学IV」,2008年12月22日

<学位論文>

(A) 博士論文

1. 保田 誠司
Theoretical Study on Compound Chondrule Formation

(複合コンドリュール形成に関する理論的研究)

2. Rogel Mari Dionisio Sese

The Study on Spectral Energy Distribution of Massive Circumstellar Disks

Using Radiative Transfer Calculations

(輻射輸送計算を用いた大質量星周円盤のスペクトル・エネルギー分布の研究)

(B)修士論文

1. 市川 知宏

銀河の遠赤外放射輸送モデルの構築と星形成矮小銀河への応用

2. 成田 亮太

銀河団を用いたバリオン音響振動検出の可能性

3. 和田 崇之

大質量星周りのダストガス円盤の電離構造

(C)学士論文

1. 石崎 友規

初期宇宙の水素分子形成と初代星の誕生

2. 井上 源基

銀河系中心で発見された High Velocity Compact Cloud の衝撃波模型

3. 中村 繁幸

非一様密度場中における衝撃波の伝播過程の解析

4. 三木 洋平

銀河衝突の数値実験によるアンドロメダストリーム形成過程の探究

5. 柳沼 えり

無衝突ボルツマン方程式による自己重力系の数値計算

<論文>

(A)Refereed Papers

1. Hasegawa, K., Umemura, M., Kitayama, T., 2009, Formation of globular clusters induced by external ultraviolet radiation, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, in press.

2. Yajima, H., Umemura, M., Mori, M., Nakamoto, T., 2009, The escape of ionizing photons from supernova-dominated primordial galaxies, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, in press.

3. Ohsuga, K., Mineshige, S., Mori, M., Kato, Y., 2009, Global Radiation–Magnetohydrodynamic Simulations of Black Hole Accretion Flow and Outflow: Unified Model of Three States, Publications of the Astronomical Society of Japan, in press
4. Nishimichi, T., Shirata, A., Taruya, A., Yahata, K., Saito, S., Suto, Y., Takahashi, R., Yoshida, N., Matsubara, T., Sugiyama, N., Kayo, I., Jing, Y.P., Yoshikawa, K., 2009, Modeling Nonlinear Evolution of Baryon Acoustic Oscillations: Convergence Regime of N-body Simulations and Analytic Models, Publications of the Astronomical Society of Japan, in press.
5. Saitoh, T. R., Daisaka, H., Kokubo, E., Makino, J., Okamoto, T., Tomisaka, K., Wada, K., Yoshida, N., 2008, Toward First-Principle Simulations of Galaxy Formation: II. Shock-Induced Starburst at a Collision Interface During the First Encounter of Interacting Galaxies, Publications of the Astronomical Society of Japan, in press.
6. Sakuma, M., Susa, H., 2009, Feedback Effects of First Supernovae on the Neighboring Dark Matter Halos, Astrophysical Journal, in press.
7. Kato, Y., Umemura, M., Ohsuga, K., 2009, Three-dimensional Radiative Properties of Hot Accretion Flows onto the Galactic Centre Black Hole, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, submitted.
8. Iliiev, Ilian T., Whalen, Daniel, Mellema, Garrelt, Ahn, Kyungjin, Baek, Sunghye, Gnedin, Nickolay Y., Kravtsov, Andrey V., Norman, Michael, Raicevic, Milan, Reynolds, Daniel R., Sato, Daisuke, Shapiro, Paul R., Semelin, Benoit, Smidt, Joseph, Susa, Hajime, Theuns, Tom, Umemura, Masayuki, 2009, Cosmological Radiative Transfer Comparison Project II: The Radiation–Hydrodynamic Tests, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, submitted.
9. Susa, H., Umemura, M., Hasegawa, K., 2009, Formation Criteria and the Mass of Secondary Population III Stars, Astrophysical Journal, submitted.
10. Kawata, D., Okamoto, T. Cen, R., Gibson, B. K., 2008, Non-Radiative Test of a New SPH Scheme, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, submitted.
11. Suwa, T., Hirashita, H., Tamura, Y., 2009, A Simple Understanding of the High-Redshift Luminous Infrared Populations, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, submitted.
12. Hasegawa, K., Umemura, M., Susa, H., 2009, Radiative regulation of Population III star formation, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 395, 1280–1286.
13. Sato, J., Umemura, M., Sawada, K., 2008, The impact of a supernova explosion in a very massive binary, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 387, 1517–1524.
14. Koch, A., Rich, R. M., Reitzel, David B., Martin, Nicolas F., Ibata, Rodrigo A., Chapman, Scott C., Majewski, Steven R., Mori, M., Loh, Yeong-Shang, Ostheimer, James C., Tanaka, M., 2008, Kinematic and Chemical Constraints on the Formation of M31’s Inner and Outer Halo, Astrophysical Journal, 689, 958–982.
15. Mori, M., Rich, R. M., 2008, The Once and Future Andromeda Stream, Astrophysical Journal, 674,

L77–L80.

16. Akahori, T., Yoshikawa, K., 2008, Non-Equilibrium Ionization State and Two-Temperature Structure in the Linked Region of Abell 399/401, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 60, L19–L22
17. Ota, N., Murase, K., Kitayama, T., Komatsu, E., Hattori, M., Matsuo, H., Oshima, T., Suto, Y., Yoshikawa, K., 2008, Suzaku broad-band spectroscopy of RX J1347.5–1145: constraints on the extremely hot gas and non-thermal emission, *Astronomy & Astrophysics*, 491, 363–377
18. Okamoto, T., Gao, L., Theuns, T., 2008, Mass loss of galaxies due to an ultraviolet background, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 390, 920–928.
19. Saitoh, T. R., Daisaka, H., Kokubo, E., Makino, J., Okamoto, T., Tomisaka, K., Wada, K., Yoshida, N., 2008, Toward First-Principle Simulations of Galaxy Formation: I. How Should We Choose Star-Formation Criteria in High-Resolution Simulations of Disk Galaxies?, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 60, 667.
20. Zavala, J., Okamoto, T., Frenk, C. S., 2008, Bulges versus discs: the evolution of angular momentum in cosmological simulations of galaxy formation, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 387, 364–370.
21. Okamoto, T., Nemmen, R. S., Bower, R. G., 2008, The impact of radio feedback from active galactic nuclei in cosmological simulations: formation of disc galaxies, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 385, 161–180.
22. Miura, H., Yasuda, S., Nakamoto, T., 2008, Fragment-collision model for compound chondrule formation: Estimation of collision probability, *Icarus*, 194, 811–821.
23. Akizuki, C., Fukue, J., 2008, Spherical Relativistic Radiation Flows with Variable Eddington Factor *Publ. Astron. Soc. Japan*, 60, 337–343

(B)Non-Refereed Papers

1. Umemura, M., 2008, Coevolution and Downsizing of Supermassive Black Holes and Galactic Bulges, *Mapping the Galaxy and Nearby Galaxies*, 283–289.
2. Watabe, Y., Umemura, M., 2008, Beyond the Unified Theory: Evolution of Active Galactic Nuclei Driven by Starburst Events, *Mapping the Galaxy and Nearby Galaxies*, 384.
3. Saitoh, T. R., Koda, J., Okamoto, T., Wada, K., Habe, A., 2008, Tidal Disruption of Dark Matter Halos Around Proto-globular Cluster, *Mapping the Galaxy and Nearby Galaxies*, 373.
4. Okamoto, T., 2008, Simulations of Coevolving Galaxies and Supermassive Black Holes, *Mapping the Galaxy and Nearby Galaxies*, 367.
5. Umemura, M., Susa, H., Suwa, T., Sato, D., 2008, FIRST Project: Formation and Feedback of the First Stars, *First Stars III*, 990, 386–389.
6. Suwa, T., Umemura, M., Sato, D., Susa, H., 2008, High Resolution P³M–GRAPE–SPH Simulations of PopIII

Star Formation, First Stars III, 990, 390–392.

7. Sato, D., Umemura, M., Susa, H., Suwa, T., 2008, Radiative Transfer SPH Simulations of UV Feedback on Pop III Star Formation, First Stars III, 990, 393–394.
8. Mori, M., Umemura, M., 2008, Evolution of Lyman- α Emitters, Lyman-break Galaxies and Elliptical Galaxies, Astronomical Society of the Pacific Conference Series, 399, 288.
9. Nakamura, Y., Hayashino, T., Yamada, T., Matsuda, Y., Yamauchi, R., Kousai, K., Morimoto, N., Umemura, M., 2008, Large Scale Structure of Lyman-Alpha Absorbers in the SSA22 Region at $z=3.1$, Astronomical Society of the Pacific Conference Series, 399, 135.
10. Shimizu, I., Umemura, M., 2008, Novel Picture for Lyman-Alpha Emitters, Astronomical Society of the Pacific Conference Series, 399, 129.
11. Yajima, H., Umemura, M., Mori, M., Nakamoto, T., 2008, Escape Fraction of Ionizing Photons from High- z Proto-Galaxy, Astronomical Society of the Pacific Conference Series, 399, 70.
12. Nagashima, M., Okamoto, T., 2008, Chemical Abundance Patterns in the Local Dwarf Galaxies in the CDM Universe, Astronomical Society of the Pacific Conference Series, 399, 475.
13. Okamoto, T., 2008, Galaxy Formation, New Horizons in Astronomy, 393, 111.
14. Yasuda, S., Nakamoto, T., 2008, Conditions for Compound Chondrule Formation, Meteoritics and Planetary Science Supplement 43, 5145.
15. Miura, H., Yasuda, S., Nakamoto, T., 2008, Fragment-Collision Model for Compound Chondrule Formation: Size Ratio of Secondary to Primary, Lunar and Planetary Institute Science Conference Abstracts 39, 1215.

<解説記事>

1. 国際研究会「East Asian Young Astronomers Meeting 2008」報告
赤堀 卓也, 花山 秀和, 日本天文学会 天文月報 2009年1月号

<研究会開催>

1. 初代星・銀河形成研究会
2008年, 9月8日~10日, 甲南大学, 神戸
世話人: 梅村 雅之, 大向 一行, 須佐 元, 森 正夫, 吉田 直紀
2. Japan-Italy Mini-Workshop on First Stars and First Galaxies
Jan. 14-16, 2009, Univ. of Tsukuba, Tsukuba
世話人: 梅村 雅之, 大向 一行

<座長>

1. 梅村 雅之

日本天文学会秋季年会,「銀河」セッション,2008年9月13日,岡山理科大学,岡山

<国際会議発表・海外講演>

1. Umemura, M., Suwa, T., Susa, H., First Star Simulations down to CDM Damping Scales IAU Symposium 255: Low-Metallicity Star Formation: From the First Stars to Dwarf Galaxies (June 16–20, 2008, Rapallo, Genova – Liguria, Italy)
2. Hasegawa, K., Umemura, M., Susa, H., Secondary star formation in a Pop III object: Dependence of UV feedback on the mass of source star IAU Symposium 255: Low-Metallicity Star Formation: From the First Stars to Dwarf Galaxies (June 16–20, 2008, Rapallo, Genova – Liguria, Italy)
3. Yasuda, S., Nakamoto, T., Collision Condition for Compound Chondrule and Compound Cosmic Spherule Formation I : Condition for Coalescence 5th Annual Meeting AOGS (June 16–20, 2008, Busan, Korea)
4. Okamoto, T., Modelling the suppression of galaxy formation due to a UV-background The 11th Nottingham–Birmingham Extragalactic Workshop: Semi-analytic models – Are we kidding ourselves? (June 24–25, 2008, Birmingham, UK)
5. Yasuda, S., Nakamoto, T., Conditions for Compound Chondrule Formation, 71st Annual Meeting of the Meteoritical Society (July 26–27, 2008, Kunibiki Messe, Matsue, Japan)
6. Akahori, T., Yoshikawa, K., Non-Equilibrium Ionization State and Two-Temperature Structure in the Linked Region of Abell 399/401, The East Asian Young Astronomers Meeting 2008 (EAYAM2008) (July 27–Aug. 1, 2008, Jiayuguan, China)
7. Sese, R. M., Nakamoto, T., Umemura, M., Radiative Transfer in Massive Circumstellar Disks, The East Asian Young Astronomers Meeting 2008 (EAYAM2008) (July 27–Aug. 1, 2008, Jiayuguan, China)
8. Umemura, M., Computational Astrophysics with a Novel Hybrid Simulator “FIRST” (Invited) International Workshop on Hybrid Architecture Computing 2008 (Oct 1, 2008, Tsukuba, Japan)
9. Mori, M., Evolution in Lyman-alpha Emitters and Lyman-Break Galaxies Understanding Lyman-alpha Emitters (Oct. 6–10, 2008, MPIA, Heidelberg, Germany)
10. Shimizu, I., Umemura, M., Theoretical Model of Lyman alpha Emitters and the Relation to Multi-Wavelength Observations Understanding Lyman-alpha Emitters (Oct. 6–10, 2008, MPIA, Heidelberg, Germany)
11. Yajima, H., Umemura, M., Mori, M., Nakamoto, T., Escape fraction of ionizing photons from high-z Lyman alpha emitters and Lyman break galaxies Understanding Lyman-alpha Emitters (Oct. 6–10, 2008, MPIA, Heidelberg, Germany)
12. Yoshikawa, Y., Warm-Hot Intergalactic Medium The third East-Asia Numerical Astrophysics Meeting (EANAM2008) (Nov. 10–13, 2008, Nanjing, China)

13. Akahori, T., Yoshikawa, K., Non-Equilibrium Ionization State and Two-Temperature Structure in Merging Galaxy Clusters, The third East-Asia Numerical Astrophysics Meeting (EANAM2008) (Nov. 10-13, 2008, Nanjing, China)
14. Hasegawa, K., Umemura, M., Susa, H., Secondary star formation in a PopIII object: Dependence of UV feedback on the mass of source star, The third East-Asia Numerical Astrophysics Meeting (EANAM2008) (Nov. 10-13, 2008, Nanjing, China)
15. Yajima, H., Umemura, M., Mori, M., Nakamoto, T., Escape fraction of ionizing photons from a LAE and LBG, The third East-Asia Numerical Astrophysics Meeting (EANAM2008) (Nov. 10-13, 2008, Nanjing, China)
16. Yasuda, S., Nakamoto, T., Collision condition for Compound Chondrule Formation Crystallization in The Early Solar Nebula 4.6 Billion Years Ago (Nov. 19-20, 2008, Tohoku University, Miyagi, Japan)
17. Umemura, M., Computational Astrophysics with a Hybrid Simulator "FIRST" (Invited), Special Astronomy Colloquium, The Third Cosmological Radiative Transfer Comparison Project Workshop (Dec. 8-10, 2008, Austin, USA)
18. Hasegawa, K., Umemura, M., Susa, H., Application of 3D-RSPH Scheme to the Radiative Feedback by Population III Stars, The Third Cosmological Radiative Transfer Comparison Project Workshop (Dec. 8-10, 2008, Austin, USA)
19. Yajima, H., Umemura, M., Mori, M., Nakamoto, T., 3D RT Calculation on the Escape of Ionizing Photons from Forming Galaxies, The Third Cosmological Radiative Transfer Comparison Project Workshop (Dec. 8-10, 2008, Austin, USA)
20. Sato, D., Umemura, M., Chiba, M., The Effect of Partial Redistribution on Lyman alpha Photons Escaping from a Primordial Galaxy The Third Cosmological Radiative Transfer Comparison Project Workshop (Dec. 8-10, 2008, Austin, USA)
21. Akizuki, C., Umemura, M., Kato, Y., Three-Dimensional Radiation Transfer Calculation for Magnetic Jets, The Third Cosmological Radiative Transfer Comparison Project Workshop (Dec. 8-10, 2008, Austin, USA)
22. Umemura, M., Suwa, T., Susa, H., "The Collapse of First Objects driven by Dark Matter Cusps" Astrophysics Colloquium, Univ. of Texas, Austin (Dec. 11, 2008, Austin, USA)
23. Mori, M., Evolution in Lyman-alpha Emitters and Lyman break galaxies, Japan-Italy Mini-Workshop on First Stars and First Galaxies (Jan. 14-16, 2009, University of Tsukuba, Japan)
24. Okamoto, T., The baryon fraction of Λ CDM halos in reionized universe, Japan-Italy Mini-Workshop on First Stars and First Galaxies (Jan. 14-16, 2009, University of Tsukuba, Japan)
25. Hasegawa, K., Umemura, M., Susa, H., Radiative Regulation of Population III Star Formation, Japan-Italy Mini-Workshop on First Stars and First Galaxies (Jan. 14-16, 2009, University of Tsukuba, Japan)
26. Yajima, H., Umemura, M., Mori, M., Nakamoto, T., The Contribution of Lyman alpha Emitters and Lyman Break Galaxies to the IGM Ionization at High Redshifts, Japan-Italy Mini-Workshop on First Stars and

First Galaxies (Jan. 14-16, 2009, University of Tsukuba, Japan)

27. Shimizu, I., Umemura, M., Theoretical Model of Lyman Alpha Emitters and the Relation to Multi-Wavelength Observations, Japan-Italy Mini-Workshop on First Stars and First Galaxies (Jan. 14-16, 2009, University of Tsukuba, Japan)
28. Akahori, T., Yoshikawa, K., Merging Galaxy Clusters Abell 399/401: Dynamical, Thermal, and Chemical Properties, Japan-Italy Mini-Workshop on First Stars and First Galaxies (Jan. 14-16, 2009, University of Tsukuba, Japan)
29. Umemura, M., Suwa, T., Susa, H., The Collapse of First Objects driven by Dark Matter Cusps, Japan-Italy Mini-Workshop on First Stars and First Galaxies (Jan. 14-16, 2009, University of Tsukuba, Japan)
30. Mori, M., Chemodynamic simulations of galaxy formation and evolution – Model of Lyman alpha emitters –, University Observatory Munich Colloquium, (Jan. 20, 2009, Universitäts-Sternwarte Munchen, Ludwig Maximilians Universitat, Germany)
31. Mori, M., Theoretical model of Lyman alpha emitters, Carnegie observatory morning seminar (March 16, 2009, Carnegie observatory, USA)
32. Yajima, H., Umemura, M., Mori, M., Nakamoto, T., The Contribution of Lyman alpha Emitters and Lyman Break Galaxies to the IGM Ionization at High Redshifts, The Cosmic Evolution of Helium and Hydrogen (March 24-27, 2009, Ringberg Castle, Germany)

<国内講演>

(A)招待講演

1. 梅村 雅之
「宇宙最初の星」
科研費特定領域研究「ガンマ線バーストで読み解く太古の宇宙」
第二回領域シンポジウム
(2008年11月27日～29日, 国立天文台, 三鷹)
2. 梅村 雅之
「次世代計算宇宙物理学」
第21回理論懇シンポジウム「理論天文学の将来」
(2008年12月15日～17日, 国立天文台, 三鷹)
3. Umemura, M.
“Cosmic Voyage --- The latest picture of the Universe ---”
80th Ninomiya House, Evening Forum (Nov. 21, Tsukuba)
4. 梅村 雅之
「宇宙の旅をして宇宙の大きさを知ろう」
竹園東小学校講演会(2008年12月2日, 竹園東小学校, つくば)
5. 梅村 雅之

「銀河の形成と進化」

研究会「R プロセス元素組成の統合的理解—宇宙の中の不安定核物理—」

(2009年3月9日～10日, 筑波大学, つくば)

6. 森 正夫

「ALMA への期待: 銀河の形成」

日本天文学会 2009 年春季年会「ALMA 特別セッション」

(2009年3月26日, 大阪府立大学, 大阪)

(B)一般講演

1. 梅村 雅之

「FIRST プロジェクトによる計算宇宙物理学の展開」

第 4 回「計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム—PACS-CS システムと計算科学—

(2008年4月24日～25日, 筑波大学計算科学研究センター, つくば)

2. 保田 誠司, 中本 泰史

「複合コンドリュール形成のための衝突条件」

地球惑星科学連合大会 (2008年5月25日～30日, 幕張メッセ, 千葉)

3. 保田 誠司, 中本 泰史

「複合コンドリュール形成のための溶融ダスト衝突条件」

第三回コンドリュール研究会「実験と理論の融合」

(7月14日～15日, 東北大学, 宮城)

4. 梅村 雅之

「FIRST プロジェクトによる計算宇宙物理学の展開」

先駆的科学計算に関するフォーラム 2008～天文科学～

(2008年7月21日～22日, 九州大学情報基盤研究開発センター, 福岡)

5. 森 正夫, Rich, R. M.

「アンドロメダの涙」

先駆的科学計算に関するフォーラム 2008～天文科学～

(2008年7月21日～22日, 九州大学情報基盤研究開発センター, 福岡)

6. 諏訪 多聞, 梅村 雅之, 須佐 元, 他 FIRST プロジェクトチーム

「ダークマター・カスプが第一世代天体形成に与える影響」

初代星・銀河形成研究会

(2008年, 9月8日～10日, 甲南大学, 神戸)

7. 長谷川 賢二, 梅村 雅之, 須佐 元, 他 FIRST プロジェクトチーム

「初代星からの紫外線フィードバックについて」

初代星・銀河形成研究会

(2008年, 9月8日～10日, 甲南大学, 神戸)

8. 森 正夫

「原始銀河の進化とライマンアルファエミッターの関係」

- 初代星・銀河形成研究会
(2008年, 9月8日～10日, 甲南大学, 神戸)
9. 清水 一紘, 梅村 雅之
「Lyman alpha 輝線天体と他波長観測天体との対応関係について」
初代星・銀河形成研究会
(2008年, 9月8日～10日, 甲南大学, 神戸)
7. 矢島 秀伸, 梅村 雅之, 森 正夫, 中本 泰史
「ライマンアルファ・ブロッブの電離光子脱出確率と赤外線の性質」
初代星・銀河形成研究会
(2008年, 9月8日～10日, 甲南大学, 神戸)
8. 斎藤 貴之, 馬場 淳一, 松井 秀典, 小久保 英一郎, 和田 桂一, 牧野 淳一郎,
富阪 幸治, 台坂 博, 吉田 直紀, 岡本 崇
「相互作用銀河の初期遭遇時におけるスターバーストと星団形成」
初代星・銀河形成研究会
(2008年, 9月8日～10日, 甲南大学, 神戸)
9. 梅村 雅之
Summary 講演
初代星・銀河形成研究会
(2008年, 9月8日～10日, 甲南大学, 神戸)
10. 森 正夫, Michael Rich
「アンドロメダの涙, その昔」
日本天文学会秋季年会(2008年9月11日～13日, 岡山理科大学, 岡山)
11. 森 正夫, 矢島 秀伸, 梅村 雅之
「原始銀河の進化とライマンアルファエミッターの関係」
日本天文学会秋季年会(2008年9月11日～13日, 岡山理科大学, 岡山)
12. 諏訪 多聞, 梅村 雅之, 須佐 元, 他 FIRST プロジェクトチーム
「ダークマター・カスプが第一世代天体形成に与える影響」
日本天文学会秋季年会(2008年9月11日～13日, 岡山理科大学, 岡山)
13. 赤堀 卓也, 吉川 耕司
「Suzaku 衛星で探る衝突銀河団の非平衡電離・2温度プラズマ状態」
日本天文学会秋季年会(2008年9月11日～13日, 岡山理科大学, 岡山)
14. 清水 一紘, 梅村 雅之
「Ly α 輝線天体と他波長観測天体との対応関係について」
日本天文学会秋季年会(2008年9月11日～13日, 岡山理科大学, 岡山)
15. 矢島 秀伸, 梅村 雅之, 森 正夫, 中本 泰史
「ライマンアルファ・ブロッブの赤外線の性質」
日本天文学会秋季年会(2008年9月11日～13日, 岡山理科大学, 岡山)
16. 大須賀 健, 加藤 成晃, 森 正夫, 嶺重慎

- 「ブラックホール降着・噴出流の大局的2次元輻射磁気流体シミュレーション」
日本天文学会秋季年会(2008年9月11日～13日,岡山理科大学,岡山)
17. 加藤 成晃, 大須賀 健, 梅村 雅之, 嶺重 慎
「磁気降着円盤の多波長偏波特性とその観測的検証の可能性」
日本天文学会秋季年会(2008年9月11日～13日,岡山理科大学,岡山)
18. 秋月 千鶴, 福江 純
「輻射圧優勢ブラックホール風の球対称定常解」
日本天文学会秋季年会(2008年9月11日～13日,岡山理科大学,岡山)
19. 香西 克紀, 林野 友紀, 中村 有希, 森本 奈々, 中村 江里, 堀江 光典,
山田 亨, 松田 有一, 梅村 雅之
「VIMOSによるSSA22z~3 LBG分光探査」
日本天文学会秋季年会(2008年9月11日～13日,岡山理科大学,岡山)
20. 森本 奈々, 林野 友紀, 中村 有希, 香西 克紀, 中村 江里, 堀江 光典,
山田 亨, 松田 有一, 梅村 雅之
「SSA22 z~3 における形成期銀河の変光探査 II」
日本天文学会秋季年会(2008年9月11日～13日,岡山理科大学,岡山)
21. 斎藤 貴之, 小久保 英一郎, 和田 桂一, 牧野 淳一郎, 富阪 幸治,
岡本 崇, 台坂 博, 吉田 直紀
「相互作用銀河の初期遭遇時におけるスターバーストと星団形成」
日本天文学会秋季年会(2008年9月11日～13日,岡山理科大学,岡山)
22. 保田 誠司, 中本 泰史
「複合コンドリュール形成のための衝突条件 II: 形状保持条件」
日本惑星科学会(2008年11月1～3日,九州大学,福岡)
23. 長谷川 賢二, 梅村 雅之, 須佐 元
「Radiative Regulation of Population III star formation」
第21回理論懇シンポジウム「理論天文学の将来」
(2008年12月15日～17日,国立天文台,三鷹)
24. 赤堀 卓也, 吉川 耕司
「衝突銀河団の非平衡電離・2温度プラズマ状態」
第21回理論懇シンポジウム「理論天文学の将来」
(2008年12月15日～17日,国立天文台,三鷹)
25. 矢島 秀伸, 梅村 雅之, 森 正夫, 中本 泰史
「ライマンアルファブロップの赤外線特性」
第21回理論懇シンポジウム「理論天文学の将来」
(2008年12月15日～17日,国立天文台,三鷹)
26. 諏訪 多聞, 梅村 雅之, 須佐 元, 他 FIRST プロジェクトチーム
「ダークマター・カスプが第一世代天体形成に与える影響」
第21回理論懇シンポジウム「理論天文学の将来」

- (2008年12月15日～17日, 国立天文台, 三鷹)
27. 加藤 成晃, 大須賀 健, 梅村 雅之, 嶺重 慎
「多波長偏波特性の輻射輸送計算による磁気流体降着円盤の検証」
第21回理論懇シンポジウム「理論天文学の将来」
(2008年12月15日～17日, 国立天文台, 三鷹)
 28. 梅村 雅之
「銀河と巨大ブラックホールの共進化: Overview」
研究会「巨大ブラックホール天文学: 最新の動向と課題」
(2009年1月20日～22日, 京都大学基礎物理研究所, 京都)
 29. 岡本 崇
「The cosmological simulations of co-evolving supermassive
black holes and galaxies」
研究会「巨大ブラックホール天文学: 最新の動向と課題」
(2009年1月20日～22日, 京都大学基礎物理研究所, 京都)
 30. 森 正夫, 矢島 秀伸, 梅村 雅之
「ライマンアルファエミッターの化学力学進化モデル」
日本天文学会春季年会(2009年3月24日～27日, 大阪府立大学, 大阪)
 31. 岡本 崇
「紫外背景放射が銀河形成に与える影響の定量的評価」
日本天文学会春季年会(2009年3月24日～27日, 大阪府立大学, 大阪)
 32. 斎藤 貴之, 馬場 淳一, 松井 秀典, 小久保 英一郎, 和田 桂一, 牧野 淳一郎,
富阪 幸治, 台坂 博, 吉田 直紀, 岡本 崇
「ASURA による銀河シミュレーション」
日本天文学会春季年会(2009年3月24日～27日, 大阪府立大学, 大阪)
 33. 赤堀 卓也, 吉川 耕司
「衝突銀河団 1E0657-56 における非平衡電離・2温度状態の数値実験」
日本天文学会春季年会(2009年3月24日～27日, 大阪府立大学, 大阪)
 34. 長谷川 賢二, 梅村 雅之, 須佐 元, 他 FIRST プロジェクトチーム
「第一世代星紫外線フィードバックの星質量依存性 II」
日本天文学会春季年会(2009年3月24日～27日, 大阪府立大学, 大阪)
 35. 矢島 秀伸, 梅村 雅之, 森 正夫
「ライマンアルファエミッターの光学的特性と宇宙再電離との関係」
日本天文学会春季年会(2009年3月24日～27日, 大阪府立大学, 大阪)
 36. 三木 洋平, 森 正夫
「アンドロメダ・ストリーム」
日本天文学会春季年会(2009年3月24日～27日, 大阪府立大学, 大阪)
 37. 大須賀 健, 嶺重慎, 森 正夫, 加藤 成晃
「大局的輻射磁気流体計算によるブラックホール降着・噴出流の構造の解明」

日本天文学会春季年会(2009年3月24日~27日,大阪府立大学,大阪)

II 物質生命研究部門

II-1 計算物性分野

1. メンバ

教授	白石賢二
准教授	岡田晋
客員教授	押山淳
博士研究員	岩田潤一、高木祥光、村口正和
大学院生	7名

2. 概要

計算物性グループは本年度は大きくわけて2つの大きなテーマを中心に研究を推進した。第1のテーマは新しい計算手法の開発、第2のテーマはナノ物質・ナノ材料の機能・物性解明、及び、新奇ナノ物質のデザインを目指したナノサイエンスの研究である。

本報告書は計算物性研究室で行っているテーマを上記2つの大きなテーマに分類し、各々のテーマについての20年度の成果を報告する。

3. 研究成果

【1】新しい計算手法の開発

(1) 超高速並列計算機 PACS-CS 上での実空間密度汎関数法プログラムの開発とその応用

〔国内会議 [1-5]〕

密度汎関数法に基づく第一原理計算は物理・化学のみならず、材料開発の現場においても非常に重要なツールとなっている。本研究は次世代超並列計算機を有効活用し、大規模なナノスケールシstemを扱える実空間密度汎関数コード(RSDFT)の開発を行う。コード開発と平行して、実際に 10000 原子を越えるSi量子ドット系に対する応用計算、計算科学者との連携によるアルゴリズムの見直しおよびチューニング、性能測定など、様々な角度から研究を進めている。また通常の基底状態に対する応用に留まらず、時間依存密度汎関数法に基づく電子励起状態、電子ダイナミクスに対する大規模計算への応用も目指し、コード開発・応用計算を進めている。

【2】ナノ物質・ナノ材料の機能・物性解明、及び新奇ナノ物質のデザイン

(1) C₆₀ 内包ナノチューブのエネルギー論 [論文[8]]

C₆₀ や種々のフラーレンを内包したナノチューブは、炭素ピーポッドと呼ばれ、異なる次元性を有する sp² 炭素ナノ複合構造体として98年の発見以降、ナノスケール炭素物質科学の分野で注目を集めている。特に、次元性の違いが誘起する電子構造の差異に起因する、種々の興味深い物性発現が予言、報告なされている。例えば、C₆₀ を内包した金属ナノチューブでは、全炭素系にも関わらず、CNT からフラーレンへの電荷移動が生じる事が我々によって示されている。

ここでは、直径の大きなナノチューブに着目し、そこへの C₆₀ 内包のエネルギー論を調べた。特に、内包によるナノチューブの変形の可能性を調べた。図に変形、非変形のピーポッドの最適化構造を示す。

(12,12)から(20,20)までの全てのナノチューブに対して、変形、非変形構造時の内包エネルギー利得の見積を行った。その結果、内包によるエネルギー利得は変形ナノチューブの方が常に大きく、チューブ径によらず、ほぼ C_{60} あたり 1eV 程度となった(図1)。他方、非変形ピーポッドでは、チューブ径の増加に伴い内包エネルギーは減少し $0.2\text{eV}/C_{60}$ に漸近していく。この違いは、変形チューブでは C_{60} を囲む構造が、 C_{60} と 3.3\AA の壁間距離領域を大きく有している事によるものであり、また、この C_{60} 近傍の構造がチューブ径増加で変化しない事に起因している。一方、非変形では、チューブ径増加にともなうチューブ曲率の減少により、 C_{60} 近傍の局所構造はグラファイトに漸近していく、故に、 C_{60} のグラファイト上の吸着エネルギー 0.2eV となる。

次に、(10,10)ナノチューブ中に内包された C_{60} 分子の長周期の構造変調の可能性を調べた。ここでは、ユニットセルに2個の C_{60} を含んだピーポッドを考えて、その安定構造の探索をおこなった。さらに、実験的に報告がなされている、電子線照射等による C_{60} の重合化の活性障壁の見積をおこなった。まず、2倍周期の範囲での長周期の構造変調は存在し得ない事をあきらかにした。すなわち、ナノチューブ中において C_{60} は等間隔に配置されているのがエネルギー的に最安定である事があきらかになった。次に、内包 C_{60} 間に[2+2]結合有するダイマー形成のエネルギー論を調べた。その結果、重合化の活性障壁は 1.4eV 程度と見積もられ、ピーポッド構造において、自発的な重合化は起こり得ず、電子線、熱等の何らかの外的要因が重合化を引き起こしている事が示された。

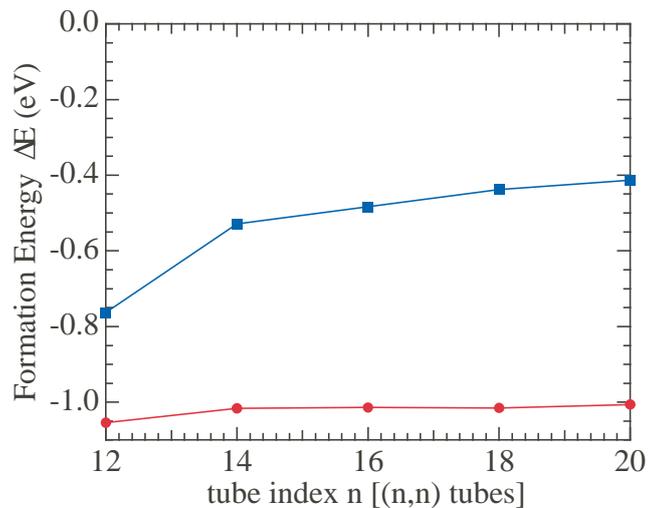


図1 : Reaction energies per C_{60} in the encapsulation reaction for the (12,12), (14,14), (16,16), (18,18) and (20,20) armchair nanotubes with circular (blue squares) and elliptical (red circles) cross-sections.

(2) ピーポッドにおける電子状態変調 [論文[6]]

我々はこれまでに、ナノチューブにフラレンを挿入することにより得られるピーポッドにおいて、その電子物性が構成単位であるフラレン、ナノチューブの単純な足し合わせではないことを示してきた。すなわち、空隙に存在する電子状態を介して、両者の電子構造の間の混成が生じ、空隙の大きさに依存した電子構造の変調が生じる。この事は、ホストであるチューブ固有の物性にたいしても何らかの影響を及ぼしていることが予想される。そこで、我々は、 C_{60} を内包したアームチェアナノチューブにおいて、その動径収縮モードの内包前後での変調を調べた。その結果、(10,10)チューブでは、RBM 振動数のハードニングが起こることがあきらかになった。これは、内包 C_{60} が(10,10)チューブに対して、その動径方向の構造変化に対して障害物として働くためである。それに対して、太いチューブにおいては、その

RBMシフトは僅かにソフト化することが明らかになった。これは、 C_{60} とチューブの間の波動関数混成により、空隙領域での電荷分布の増加し、その結果としてCNTの π 電子密度が有効的に減少したことに起因するものである。さらに、ジグザグ螺旋度を有するナノチューブに対しても RBM シフトの解析を行い、そのシフトがアームチェアと同様に、太いチューブでは低波数側、細いチューブでは高波数側にシフトする事があきらかになった。この結果を元に、実験による測定の理論解析を行い、実験結果に対する理論的解釈を与えた。

(3) シリコン表面に於けるエッジ状態 [論文[7]]

ジグザグ型の端を持つグラフェンリボンでは特異な端局在状態、すなわちエッジ状態の発現が知られている。エッジ状態は、波数空間の限られた領域においてのみ、平坦なバンドを伴う端局在性を示し、その発現条件は解析的に示されている。ここでは、グラフェンにおけるエッジ状態が、シリコン表面に於いても発現する事を密度汎関数理論に基づく計算からあきらかにした。すなわち、シリコンの(111)表面において、フェルミレベル下 $4eV \sim 5eV$ の限られた波数領域において平坦なバンドを形成し、その分布はグラフェンにおけるエッジ状態と同様に、限られた波数において表面に完全に局在し、それ以外の波数空間では広がったふるまいを示す。解析計算の結果、この状態がグラフェンのエッジ状態と同様に電子のサイト間遷移のバランスによる表面局在状態である事があきらかになった。

(4) グラフェンの端のエネルギー論 [論文[5]]

グラファイト、CNT 等の sp^2 炭素ネットワーク物質の端に対するエネルギー論はこれまでまったくなされていない。しかしながら、CNT やグラファイトをデバイスとして用いる際、その端の存在、さらには端と異種物質との複合界面の存在は本質である。例えば、シリコン等の半導体に対しては、その表面の生成エネルギー等が詳細に調べられている。そこで、我々は sp^2 炭素ネットワークの端(1次元表面)生成のエネルギー論

の解明を行った。ここでは、グラファイトリボンに対して、その端の生成エネルギーの計算を行った。その結果、清浄、水素化端両者に対して、アームチェア型と呼ばれる端形状がより安定であることが明

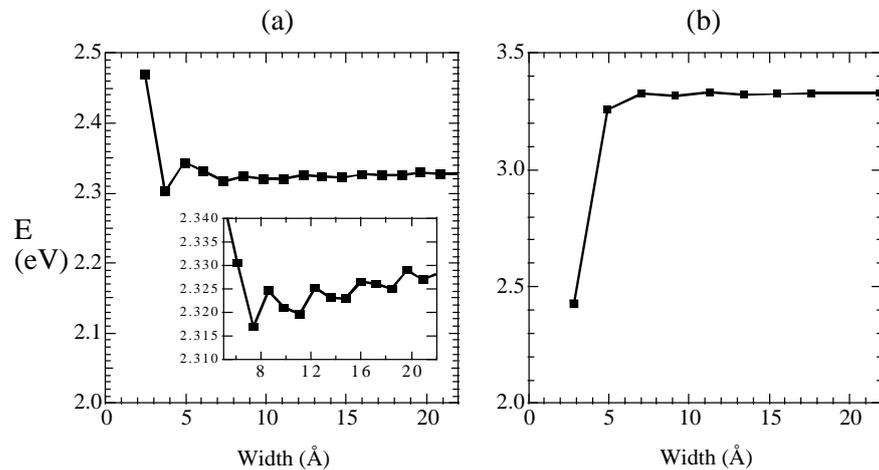


図2: グラファイトリボンにおける端の生成エネルギー(a)アームチェア端、(b)ジグザグ端

らかになった。清浄端の生成エネルギーは、アームチェアで $2.3eV/bond$ 、ジグザグで $3.3eV/bond$ であり、水素終端により、このエネルギーは著しく減少し、アームチェアでは $0.1eV/bond$ 、ジグザグでは $0.3eV/bond$ となる。清浄端におけるアームチェアの高い安定性は、端における2配位サイトの構造緩和

によるものである。すなわち、端の2つの2配位サイトが強くダイマー化し、三重結合を形成し安定化する。これに対して、ジグザグ端ではそのような構造緩和ができない。水素化端における、ジグザグ端の高い生成エネルギーの起源は、グラファイトジグザグ端において本質である、フェルミレベルに発現する平坦バンド状態によるものである。また、ジグザグ端の生成エネルギーが比較的リボン幅に依存しないのに対して、アームチェアのそれは明らかなリボン幅依存性を示す。これは、アームチェア端を持つリボンにおいて、その幅の3倍周期で、金属(スモールギャップ半導体)、ラージギャップ半導体と電子状態の特徴を反映している。すなわち、 sp^2 炭素ネットワークにおける端形成においては、その電子状態が端安定性と密接に関係している。

(5) オーミック接触の新しい物理モデルの提案 [論文[19]、国際会議[27,40]、修士論文[2]]

金属と半導体のオーミック接触作製は、様々なデバイスや量子ホール効果等の物性実験において欠かせない技術である。特に、将来のLSIに導入が期待されている金属ソース/ドレインの作製のためには金属とシリコンの界面にナノスケールのオーミック接触を作る必要があり、このとき仕事関数の制御が次の技術的な難題である。これまでオーミック接触は、ショットキー障壁高さを制御することによって達成されていると考えられてきた。しかしながら、これまでの界面物理の知見は、金属と半導体の界面でフェルミレベルピンング現象が起こるため、ショットキー障壁高さを制御が困難であることを示している。そのため、従来のオーミック接触のバンドダイアグラムはフェルミレベルピンング現象との矛盾を含んでいると考えられる。

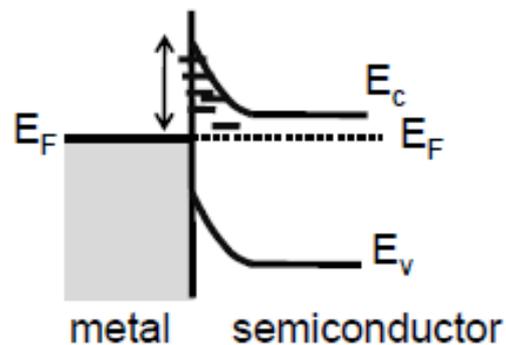


図3：本研究で提案した新たなオーミック接触のモデル

このような観点から、本研究では実験で得られるオーミック接触と第一原理計算で考察した金属/半導体界面のフェルミレベルピンング現象の双方に矛盾のない、新たなオーミック接触のモデル(図3)を提案した。このモデルでは、ショットキー障壁の広い範囲のエネルギー領域に多数の欠陥レベルが存在しており、電子はこの欠陥レベルを介した共鳴トンネルによる伝導によってオーミック接触が達成されていると考えている。さらに詳細について、今後の研究で本モデルの真偽も含めて検討してゆく予定である。

(6) MONOS型メモリの電荷蓄積機構の研究 [国内会議[43,44]]

MONOS型メモリの電荷蓄積層であるSiN絶縁膜の電荷蓄積機構を第一原理計算で検討した。MONOS型メモリはSiN/SiO₂の界面をその構成要素としているため、界面付近での原子の相互拡散がどのようにメモリ動作に影響するかを考察することは科学的そして産業的に極めて重要となる。計算の結果、SiN絶縁膜の堅固さと柔軟さが電荷トラップ機構に密接に関係することを明らかにした。具体的には、SiN膜中に酸素原子が混入されると、メモリの書き込み/消去動作の基本である電子及びホール注入による荷電状態の変化による混入してO原子が2配位にも3配位にもなりうることを明らかにした。こ

これは書き込み／消去動作によってOが混入したSiN膜の構造が崩壊する可能性を示している。このことは、実用的にOが多く混入しているSiNを実用的に使いこなすのは困難が伴うことを示唆しており、産業上も重要な結果である。これに対し、N空孔のみを有するSiN膜に対して書き込み／消去を行ってもヤン・テラー効果に対応したN空孔周辺の構造変化が生じるのみで、構造が大きく崩れることはなかった。このことは、N空孔にキャリアを注入する方式でMONOS型メモリを作製すれば、メモリ動作を多数回行ってもその特性は維持できることを示しており、理想的なMONOS型メモリが実現できることを示唆している。しかしながら、Oを混入しないとSiN膜中にN空孔等の欠陥の数が十分に形成されないことが実験的に示唆されていることを考慮すると、最適なO混入量が存在することを示唆している。

(7) サファイア表面の第一原理計算 [博士論文[2]]

サファイア表面を第一原理計算で行い、イオン性と共有結合性の競合によってサファイア表面は大きな構造緩和を起こすことが分かった。こうした大きな構造緩和がストイキオメトリック表面の安定性やサファイア表面が化学的に不活性であることと密接に関連していることを体系的に明らかにした。

(8) 歪んだGeチャネルのホールキャリアの起源 [博士論文[1]、論文[24]、国際会議[19,20]]

歪んだGeチャネルに空孔が生じると特に一軸性の圧縮歪みにおいてGe空孔レベルが価電子帯の直上に出現しアクセプタ準位となることを示した。この結果は、実験で観測されているGeチャネルのホールキャリアの起源に示唆を与えるものである。

(9) バイオ物質におけるプロトン親和性の再考 [国内会議[32]、修士論文[1]]

バイオ物質におけるプロトン親和性に対して、統計力学と第一原理計算による考察を行った。その結果、注目する部位が外界の水溶液と繋がっているか否かで配置のエントロピー効果が大きく異なるため、プロトン親和性が劇的に(3ケタから5ケタ程度)変調されることを明らかにした。本計算は第一原理計算でプロトン親和性を求めることの難しさを如術に示すものである。

4. 研究業績

<論文>

1. T. Otobe, M. Yamagiwa, J.-I. Iwata, K. Yabana, T. Nakatsukasa, G. F. Bertsch, "First-principles electron dynamics simulation for optical breakdown of dielectrics under an intense laser field", *Physical Review B* 77, 165104 (2008).
2. T. Otobe, K. Yabana, J.-I. Iwata, "First-principle calculation of the electron dynamics in crystalline SiO₂", *Journal of Physics Condensed Matter* 21, 064224 (2008).
3. T. Otobe, K. Yabana, J.-I. Iwata, "First-principle electron dynamics simulation for optical breakdown of dielectrics under an intense laser field", *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, in press.
4. T. Obata, J.-I. Iwata, K. Shiraishi, A. Oshiyama, "First-principles studies on In-related nitride semiconductors", *Journal of Crystal Growth* 311, 2772 (2009).
5. Susumu Okada, "Energetics of nanoscale graphene ribbons: Edge geometries and electronic

- structures” *Physical Review B*, Vol. 77, art. no. 041408(R) (2008).
6. Toshiya Okazaki, Shingo Okubo, Takeshi Nakanishi, Takeshi Saito, Minoru Otani, Susumu Okada, Shunji Bandow, and Sumio Iijima, “Optical Bandgap Modulation of Single-Walled Carbon Nanotubes by Encapsulated Fullerenes” *Journal of the American Chemical Society*, Vol. 130, 4122 -- 4128 (2008).
 7. Yohiteru Takagi and Susumu Okada “Topologically Induced Surface Electron State on Si(111) Surfaces” *Surface Science*, Vol. 602, 2876--2879 (2008).
 8. Susumu Okada, “Energetics of carbon peapods: Elliptical deformation of nanotubes and aggregation of encapsulated C_{60} ” *Physical Review B*, Vol. 77, art. no. 235419 (2008).
 9. M. Kadoshima, T. Matsuki, S. Miyazaki, K. Shiraishi, T. Chikyo, K. Yamada, T. Aoyama, Y. Nara, and Y. Ohji, “Effective-Work-Function Control by Varying the TiN Thickness in Poly-Si/TiN Gate Electrodes for Scaled High-k CMOSFETs”, *IEEE ELECTRON DEVICE LETTERS*, Vol 30, 466-468 (2009)
 10. Y. Kita, S. Yoshida, T. Hosoi, T. Shimura, K. Shiraishi, Y. Nara, K. Yamada, and H. Watanabe, “Systematic study on work-function-shift in metal/Hf-based high-k gate stacks”, *APPLIED PHYSICS LETTERS*, Vol 94, Art. No. 122905 (2009)
 11. M. Muraguchi, K. Shiraishi, T. Okunishi, K. Takeda, “Theoretical study of the time-dependent phenomenon of photon-assisted tunneling through a charged quantum dot”, *JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER*, Vol 21, Art. No. 064230 (2009).
 12. N. Umezawa, M. Sato, K. Shiraishi, “Reduction in charged defects associated with oxygen vacancies in hafnia by magnesium incorporation: First-principles study”, *APPLIED PHYSICS LETTERS*, Vol 93, Art. No. 223104 (2008).
 13. M. Muraguchi, Y. Takada, S. Nomura, and K. Shiraishi, “Theoretical Study of the Time-Dependent Phenomena on a Two-Dimensional Electron Gas Weakly Coupled with a Discrete Level”, *JAPANESE JOURNAL OF APPLIED PHYSICS*, Vol 47, 7807-7811 (2008)
 14. M. Sato, C. Tamura, K. Yamabe, K. Shiraishi, S. Miyazaki, K. Yamada, R. Hasunuma, T. Aoyama, Y. Nara, and Y. Ohji, “Cathode Electron Injection Breakdown Model and Time Dependent Dielectric Breakdown Lifetime Prediction in High-k/Metal Gate Stack p-Type Metal-Oxide-Silicon Field Effect Transistors”, *JAPANESE JOURNAL OF APPLIED PHYSICS*, Vol 47, 3326-3331 (2008)
 15. Y. Takada, M. Muraguchi, and K. Shiraishi, “Quantum cascade multi-electron injection into Si-quantum-dot floating gates embedded in SiO₂ matrices”, *APPLIED SURFACE SCIENCE*, Vol 254, 6199-6202 (2008)
 16. N. Umezawa, K. Shiraishi, Y. Akasaka, A. Oshiyama, S. Inumiya, S. Miyazaki, K. Ohmori, T. Chikyow, T. Ohno, K. Yamabe, Y. Nara, and K. Yamada, “Chemical controllability of charge states of nitrogen-related defects in HfO_xN_y:First-principles calculations”, *PHYSICAL REVIEW B*, Vol 77m Art. No. 165130 (2008)
 17. M. Sato, K. Yamabe, K. Shiraishi, S. Miyazaki, K. Yamada, C. Tamura, R. Hasunuma, S. Inumiya, T. Aoyama, Y. Nara, and Y. Ohji, “Comprehensive analysis of positive and negative bias temperature

- instabilities in high-k/metal gate stack metal-oxide-silicon field effect transistors with equivalent oxide thickness scaling to sub-1 nm”, JAPANESE JOURNAL OF APPLIED PHYSICS, Vol 47, 2354–2359 (2008)
18. Y Sakurai, S Nomura, K Shiraishi, M Ikeda, K Makihara and S Miyazaki, “Temperature dependence of capacitance of Si quantum dot floating gate MOS capacitor”, J. Phys.: Conf. Ser. Vol, 50, 022071 (2009)
 19. Y Takada, M Muraguchi, S Nomura and K Shiraishi, “Theoretical studies of coupled quantum dot system with a two-dimensional electron gas in the magnetic fields”, J. Phys.: Conf. Ser. Vol, 150, 022083 (2009)
 20. M. Muraguchi, Y. Takada, S. Nomura and K. Shiraishi, “Theoretical study of the electron dynamics of a quantum wire coupled with the quantum dots”, J. Phys.: Conf. Ser. Vol. 150, 022061 (2009)
 21. Yeonghun Lee, Takahiro Nagata, Kuniyuki Kakushima, Kenji Shiraishi, and H. Iwai, “Electronic Structure Analysis of Silicon Nanowires for High Conductivity in n- and p-channel Nanowire-FET”, ECS Trans. 16 (40), 1 (2009)
 22. Kikuo Yamabe, Kouichi Murata, Tomohiro Hayashi and T.C. Tamura, Motoyuki Sato, Akira Uedono, Kenji Shiraishi, Naoto Umezawa, Toyohiro Chikyow, Heiji Watanabe, Yasuo Nara, Yuzuru Ohji, S. Miyazaki, Keisaku Yamada, and Ryu Hasunuma, “Effect of Annealing on Electronic Characteristics of HfSiON Films fabricated by Damascene Gate Process”, ECS Trans. **16** (5), 521 (2008)
 23. Heiji Watanabe, Shinichi Yoshida, Yuki Kita, Takuji Hosoi, Takayoshi Shimura, Kenji Shiraishi, Yasuo Nara, and Keisaku Yamada, “Fundamental Aspects of Effective Work Function Instability of Metal/Hf-based High-k Gate Stacks”, ECS Trans. **16** (5), 27 (2008)
 24. Kentaro Takai, Kenji Shiraishi, and Atsushi Oshiyama, “Generation of Acceptor Levels in Ge by the Uniaxial Strain – A Theoretical Approach”, ECS Trans. 16 (10), 261 (2008)
 25. Seiichi Miyazaki, Hiromichi Yoshinaga, Akio Ohta, Yasushi Akasaka, Kenji Shiraishi, Keisaku Yamada, Seiji Inumiya, Masaru Kadoshima, and Yasuo Nara, “Photoemission Study of Metal/HfSiON Gate Stack”. ECS Trans. 13 (2), 67 (2008)
 26. Kenji Shiraishi, Takashi Nakayama, Takashi Nakaoka, Akio Ohta, and Seiichi Miyazaki, “Theory of Metal/Dielectric Interfaces –Breakdown of Schottky Barrier Limits–”, ECS Trans. 13 (2), 21 (2008)
 27. Kenji Ohmori et al., “Control of Crystalline Microstructures in Metal Gate Electrodes for Nano CMOS Devices”, ECS Trans. 13 (2), 201 (2008)
 28. Naoto Umezawa, Kenji Shiraishi, Kuniyuki Kakushima, Hiroshi Iwai, Kenji Ohmori, Keisaku Yamada, and T. Chikyow, “Relation between Solubility of Silicon in High-k Oxides and the Effect of Fermi Level Pinning”, ECS Trans. 13 (2), 15 (2008).
 29. K. Ohmori, T. Matsuki, D. Ishikawa, T. Morooka, T. Aminaka, Y. Sugita, T. Chikyow, K. Shiraishi, Y. Nara, K. Yamada, “Impact of additional factors in threshold voltage variability of metal/high-k gate stacks and its reduction by controlling crystalline structure and grain size in the

- metal gates”, Tech. Digest 2008 IEEE Electron Devices Meeting, p.409–412, 2008.
30. M. Sato, N. Umezawa, J. Shimokawa, H. Arimura, S. Sugino, A. Tachibana, M. Nakamura, N. Mise, S. Kamiyama, T. Morooka, T. Eimori, K. Shiraishi, K. Yamabe, H. Watanabe, K. Yamada, T. Aoyama, T. Nabatame, Y. Nara, Y. Ohji, ”Physical model of the PBTI and TDDB of Ia incorporated HfSiON gate dielectrics with pre-existing and stress-induced defects”, Tech. Digest 2008 IEEE Electron Devices Meeting, p. 119–122, 2008.
 31. M. Sato, N. Umezawa, N. Mise, S. Kamiyama, M. Kadoshima, T. Morooka, T. Adachi, T. Chikyow, K. Yamabe, K. Shiraishi, S. Miyazaki, A. Uedono, K. Yamada, T. Aoyama, T. Eimori, Y. Nara, Y. Ohji, ”Physical understanding of the reliability improvement of dual high-k CMOSFETs with the fifth element incorporation into HfSiON gate dielectrics”, Tech. Digest 2008 Symposium on VLSI Technology, p.66–67, 2008.
 32. Kadoshima, M.; Matsuki, T.; Mise, N.; Sato, M.; Hayashi, M.; Aminaka, T.; Kurosawa, E.; Kitajima, M.; Miyazaki, S.; Shiraishi, K.; Chikyo, T.; Yamada, K.; Aoyama, T.; Nara, Y.; Ohji, Y. “Improved FET characteristics by laminate design optimization of metal gates –Guidelines for optimizing metal gate stack structure–”, Tech. Digest 2008 Symposium on VLSI Technology, p.48–49, 2008.
 33. Y. Kangawa, T. Akiyama, T. Ito, K. Shiraishi, K. Kakimoto, “Theoretical approach to structural stability of GaN: How to grow cubic GaN”, Journal of Crystal Growth 311, 3106–3109 (2009)
 34. Keita Yamaguchi, Akira Otake, Kenji Kobayashi, Kenji Shiraishi, ”Atomistic origin of high-quality “novel SiON gate dielectrics”, Microelectronic Engineering, 86, 1680–1682 (2009).
 35. <招待論文> Kenji Shiraishi, ”Theoretical models for work function control”, Microelectronic Engineering, 86, 1733–1736 (2009).
 36. Naoto Umezawa, Kenji Shiraishi, Toyohiro Chikyow, ”Stability of Si impurity in high- ϵ oxides” Microelectronic Engineering, 86, 1780–1781 (2009).
 37. Akira Otake, Keita Yamaguchi, Kenji Kobayashi, Kenji Shiraishi, ”Theoretical studies on the charge trap mechanism of MONOS type memories – Relationship between atomistic information and program/erase actions”, Microelectronic Engineering, 86, 1849–1851 (2009).

<講演>

国際会議

1. <招待講演> A. Oshiyama, J.-I. Iwata, K. Shiraishi, ”Large-Scale Density Functional Calculations Using Real-Space Parallel-Computation Techniques”, The 1st international conference of the Grand Challenge to Next-Generation Integrated Nanoscience, Tokyo, June 3–7, 2008.
2. J.-I. Iwata, Y. Kawashita, K. Yabana, ”Real-Space and Real-Time Method for Linear and Nonlinear Optical Properties of Fullerene-based Materials”, International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering, Crete, Greece, Sep. 25–30, 2008
3. J.-I. Iwata, T. Obata, K. Shiraishi, A. Oshiyama, ”Hidden Metallic Nature of In-containing Nitride semiconductors”, International Workshop on Nitride semiconductors, Montreux, Switzerland, Oct. 6–10, 2008

4. Susumu Okada, "Energetics of Nanographite: Edge Geometries and Electronic Structure" 9th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT08), June 29 -- July 4, 2008, Montpellier.
5. Takazumi Kawai, Susumu Okada, and Yoshiyuki Miyamoto, "Mechanical-Tearing Simulations of Graphene for the Validation of Favorable Atomic Edge Structures" 9th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT08), June 29 -- July 4, 2008, Montpellier.
6. Minoru Otani and Susumu Okada. "Electric-field induced semiconductor-metal transition of bilayer graphene", 9th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT08), June 29 -- July 4, 2008, Montpellier.
7. K. Yanagi, Y. Miyata, Z. Liu, K. Suenaga, S. Okada, and H. Kataura, "Optical properties of metallic and semiconducting single-wall carbon nanotubes with encapsulated molecules" 9th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT08), June 29 -- July 4, 2008, Montpellier.
8. <招待講演>Susumu Okada, "Energetics of Nanographite Ribbons", Okazaki Conference 2009: From Aromatic Molecules to Graphene: Chemistry, Physics and Device Applications, February 21 - 23, 2009, Okazaki Conference Center, Okazaki.
9. <招待講演>K. Shiraishi, T. Nakayama, S. Miyazaki, A. Ohta, Y. Akasaka, H. Watanabe, Y. Nara and K. Yamada, "Theoretical investigations on metal/high-k interfaces", 2008 International Conference on Solid-State and Integrated-Circuit Technology, Beijing, China (Oct. 20-23, 2008).
10. <招待講演>K. Shiraishi, T. Nakayama, T. Nakaoka, A. Ohta and S. Miyazaki, "Theoretical Investigation of Metal/Dielectric Interfaces -Breakdown of Schottky Barrier Limits-", 214th Meeting of Electrochemical Society, Phoenix, AZ., USA, (May., 2008).
11. <招待講演>K. Shiraishi, "What happens at nano-scale interfaces?", The 5th International Symposium on Surface Science and Nanotechnology, (November 9-13, 2008, Tokyo)
12. <招待講演>N. Umezawa, K. Shiraishi, K. Kakushima, H. Iwai, K. Ohmori, K. Yamada and T. Chikyow, "Relation Between Solubility of Silicon in High-k Oxides and the Effect of Fermi Level Pinning", 214th Meeting of Electrochemical Society, Phoenix, AZ., USA, (May., 2008)
13. <招待講演>S. Miyazaki, H. Yoshinaga, A. Ohta, Y. Akasaka, K. Shiraishi, K. Yamada, S. Inumiya, M. Kadoshima and Y. Nara, "Photoemission Study of Metal/HfSiON Gate Stack", 214th Meeting of Electrochemical Society, Phoenix, AZ., USA, (May., 2008)
14. <招待講演>K. Ohmori, T. Chikyow, T. Hosoi, H. Watanabe, K. Nakajima, T. Adachi, A. Ishikawa, Y. Sugita, Y. Nara, Y. Ohji, K. Shiraishi, K. Yamabe and K. Yamada, "Control of Crystalline Microstructures in Metal Gate Electrodes for Nano CMOS Devices", 214th Meeting of Electrochemical Society, Phoenix, AZ., USA, (May., 2008)
15. <招待講演>H. Watanabe, S. Yoshida, Y. Kita, T. Hosoi, T. Shimura, K. Shiraishi, Y. Nara, and K. Yamada, "Fundamental Aspects of Effective Work Function Instability of Metal/Hf-based High-k Gate Stacks", 215th Meeting of Electrochemical Society, Honolulu, HI., USA, (October, 2008).
16. <招待講演>K. Yamabe, T. Hayashi, T. C. Tamura, A. Uedono, K. Shiraishi, N. Umezawa, T.

- Chikyow, H. Watanabe, Y. Nara, Y. Ohji, S. Miyazaki, K. Yamada and R. Hasunuma, "Annealing Effect on Electronic Characteristics of HfSiON Films fabricated by Damascene Gate Process", 215h Meeting of Electrochemical Society, Honolulu, HI., USA, (October, 2008)
17. T. Obata, K. Shiraishi and A. Oshiyama, "First-principles studies on In-related nitride semiconductors", International Symposium on Growth of III-Nitrides, Izu, Shizuoka, Japan (July 6-9, 2008)
 18. Y. Kangawa, T. Akiyama, T. Ito, K. Shiraishi, and K. Kakimoto, "Theoretical approach to structural stability of GaN: How to grow cubic GaN", International Symposium on Growth of III-Nitrides, Izu, Shizuoka, Japan (July 6-9, 2008)
 19. K. Takai, K. Shiraishi, and A. Oshiyama, "Theoretical Investigation on Ge Vacancies under Uniaxial Strain -Generation of Acceptor Level Induced by Uniaxial Strain-" The 4th International SiGe Technology and Device Meeting, Hsinchu, Taiwan, May 11-14, 2008.
 20. Kentaro Takai, Kenji Shiraishi, and Atsushi Oshiyama, "Generation of Acceptor Levels in Ge by the Uniaxial Strain -A Theoretical Approach", Pacific Rim Meeting on Electrochemical and Solid State Science, Honolulu, Hawaii, USA, October 13-17, 2008.
 21. Yeonghun Lee, Takahiro Nagata, Kuniyuki Kakushima, Kenji Shiraishi, and H. Iwai, "Electronic Structure Analysis of Silicon Nanowires for High Conductivity in n- and p-channel Nanowire-FET", Pacific Rim Meeting on Electrochemical and Solid State Science, Honolulu, Hawaii, USA, October 13-17, 2008.
 22. Motoyuki Sato, Chihiro Tamura, Kikuo Yamabe, Kenji Shiraishi, Seiichi Miyazaki, Keisaku Yamada, Ryu Hasunuma, Takayuki Aoyama, Yasuo Nara and Yuzuru Ohji, "Impact of nitrogen in HfSiON and of activation annealing on hole trapping and applicable of a technique to separate hole trap effects from interface state degradation in NBTI of HfSiON/TiN", IEEE International Reliability Physics Symposium, Phoenix, AZ, USA, April 28 - 30, 2008.
 23. T. Ishida, N. Tega, Y. Mori, H. Miki, T. Mine, H. Kume, M. Muraguchi*, Y. Takada*, K. Shiraishi* and R. Yamada, "A New Insight into the Dynamic Fluctuation Mechanism of Stress-Induced Leakage Current", IEEE International Reliability Physics Symposium, Phoenix, AZ, USA, April 28 - 30, 2008.
 24. Yukihiro Takada, Masakazu Muraguchi, Shintaro Nomura and Kenji Shiraishi, "Tunable interaction between the two-dimensional electron gas and an isolated level by the magnetic field", International Conference on Physics of Semiconductor, Rio de Janeiro, Brazil, July 27-August 1 2008.
 25. Masakazu Muraguchi, Yukihiro Takada, Shintaro Nomura and Kenji Shiraishi, "Theoretical Study on Electron Dynamics for a Two-Dimensional Electron Gas Coupled with a Quantum Dot", International Conference on Physics of Semiconductor, Rio de Janeiro, Brazil, July 27-August 1 2008.
 26. Y Sakurai, S Nomura, K Shiraishi, M Ikeda, K Makihara and S Miyazaki, "Temperature dependence of capacitance of Si quantum dot floating gate MOS capacitor", 25th International Conference on

Low Temperature Physics (LT25), Amsterdam, The Netherlands, 6–13 August 2008

27. Y Takada, M Muraguchi, S Nomura and K Shiraishi, “Theoretical studies of coupled quantum dot system with a two-dimensional electron gas in the magnetic fields”, 25th International Conference on Low Temperature Physics (LT25), Amsterdam, The Netherlands, 6–13 August 2008
28. M. Muraguchi, Y. Takada, S. Nomura and K. Shiraishi, “Theoretical study of the electron dynamics of a quantum wire coupled with the quantum dots”, 25th International Conference on Low Temperature Physics (LT25), Amsterdam, The Netherlands, 6–13 August 2008
29. Yoko Sakurai, Shintaro Nomura, Yukihiro Takada, Kenji Shiraishi, Masakazu Muraguchi¹, Tetsuo Endoh, Mitsuhsa Ikeda, Katsunori Makihara, Seiichi Miyazaki, “Temperature Dependence of Electron Transport between Quantum Dots and Electron Gas”, International Symposium on Nanoscale Transport and Technology (*ISNTT2009*), Atsugi, Kanagawa, Japan, January 20–23, 2009
30. Y. Sakurai, S. Nomura, Y. Takada, K. Shiraishi, M. Muraguchi, T. Endoh, M. Ikeda, K. Makihara, S. Miyazaki, “Temperature Dependence of Electron Tunneling between Quantum Dots and Electron Gas”, American Physical Society March Meeting 2009, Pittsburgh, USA, Mar. 15–19 2009
31. Masakazu Muraguchi, Tetsuo Endoh, Yoko Sakurai¹, Shintaro Nomura¹, Yukihiro Takada¹, Kenji Shiraishi¹, Mitsuhsa Ikeda², Katsunori Makihara², Seiichi Miyazaki², Yasuteru Shigeta, “New insight into Tunneling Process between Quantum Dot and Electron Gas”, American Physical Society March Meeting 2009, Pittsburgh, USA, Mar. 15–19 2009
32. K. Ohmori, T. Matsuki, D. Ishikawa, T. Morooka, T. Aminaka, Y. Sugita, T. Chikyow, K. Shiraishi, Y. Nara, K. Yamada, “Impact of additional factors in threshold voltage variability of metal/high-k gate stacks and its reduction by controlling crystalline structure and grain size in the metal gates”, 2008 IEEE Electron Devices Meeting, San Francisco, CA, USA, Dec. 15–17, 2008.
33. M. Sato, N. Umezawa, J. Shimokawa, H. Arimura, S. Sugino, A. Tachibana, M. Nakamura, N. Mise, S. Kamiyama, T. Morooka, T. Eimori, K. Shiraishi, K. Yamabe, H. Watanabe, K. Yamada, T. Aoyama, T. Nabatame, Y. Nara, Y. Ohji, “Physical model of the PBTi and TDDB of Ia incorporated HfSiON gate dielectrics with pre-existing and stress-induced defects”, Tech. Digest 2008 IEEE Electron Devices Meeting, San Francisco, CA, USA, Dec. 15–17, 2008.
34. M. Sato, N. Umezawa, N. Mise, S. Kamiyama, M. Kadoshima, T. Morooka, T. Adachi, T. Chikyow, K. Yamabe, K. Shiraishi, S. Miyazaki, A. Uedono, K. Yamada, T. Aoyama, T. Eimori, Y. Nara, Y. Ohji, “Physical understanding of the reliability improvement of dual high-k CMOSFETs with the fifth element incorporation into HfSiON gate dielectrics”, 2008 Symposium on VLSI Technology, Honolulu, HI, USA, June 15–17, 2008.
35. Kadoshima, M.; Matsuki, T.; Mise, N.; Sato, M.; Hayashi, M.; Aminaka, T.; Kurosawa, E.; Kitajima, M.; Miyazaki, S.; Shiraishi, K.; Chikyo, T.; Yamada, K.; Aoyama, T.; Nara, Y.; Ohji, Y. “Improved FET characteristics by laminate design optimization of metal gates –Guidelines for optimizing metal gate stack structure–”, 2008 Symposium on VLSI Technology, Honolulu, HI, USA, June 15–17, 2008.

36. Masakazu Muraguchi, Yukihiro Takada, Yoko Sakurai, Tetsuo Endoh, Shintaro Nomura, Mitsuhisa Ikeda, Katsunori Makihara, Seiichi Miyazaki, and Kenji Shiraishi "Theoretical investigation of quantum dot coupled to a two-dimensional electron system", 13th Advanced Heterostructures and Nanostructures Workshop, Hapuna Beach, HI, December 7-12, 2008
37. Shintaro Nomura, Yoko Sakurai, Yukihiro Takada, Masakazu Muraguchi, Tetsuo Endoh, Mitsuhisa Ikeda, Katsunori Makihara, Seiichi Miyazaki, and Kenji Shiraishi, "Capacitance measurements on quantum dots coupled to a two-dimensional electron system", 13th Advanced Heterostructures and Nanostructures Workshop, Hapuna Beach, HI, December 7-12, 2008
38. Yoko Sakurai, Shintaro Nomura, Yukihiro Takada, Kenji Shiraishi, Masakazu Muraguchi, Tetsuo Endoh, Mitsuhisa Ikeda, Katsunori Makihara, and Seiichi Miyazaki, "Temperature Dependence of Electron Tunneling from Two Dimensional Electron Gas to Quantum Dots", The Second International Symposium on Interdisciplinary Materials Science (ISIMS-2009), Tsukuba, Japan, March 9-10, 2009.
39. Yeonghun Lee, Takahiro Nagata, Kuniyuki Kakushima, Kenji Shiraishi, Hiroshi Iwai, "A Study on Electronic Structure of Silicon Nanowires with Diverse Diameters and Orientations for High Performance FET", 2008 International Workshop on DIELECTRIC THIN FILMS FOR FUTURE ULSI DEVICES: SCIENCE AND TECHNOLOGY. Tokyo, Japan, November 5-7, 2008
40. Yukihiro Takada, Masakazu Muraguchi, Shintaro Nomura, Kenji Shiraishi, "Theoretical studies on the magnetic field effect of the two-dimensional tight-binding lattice coupled to a discrete level", The Sixth Conference on Physical Phenomena in High Magnetic Fields (PPHMF-VI), Tallin, Estonia, August 1-5, 2008
41. M. Muraguchi, T. Okunishi, K. Shiraishi and K. Takeda, "Theoretical Study on Time-dependent Phenomena of Photon-Assisted Tunneling through Charged Quantum Dot", International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD) 2008, Tokyo, Japan, May 31-June 3, 2008
42. H. Watanabe, T. Hosoi, Y. Kita, T. Shimura, K. Shiraishi, Y. Nara, and K. Yamada, "Origins of interface dipoles at p-metal/Hf-based high-k gate stacks", International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD) 2008, Tokyo, Japan, May 31-June 3, 2008
43. Katsumasa Kamiya, Mauro Boero, Masaru Tateno, Kenji Shiraishi and Atsushi Oshiyama, "POSSIBLE MECHANISM OF PROTON TRANSFER THROUGH PEPTIDE GROUPS IN THE H-PATHWAY OF THE BOVINE CYTOCHROME C OXIDASE", 15th European Bioenergetics Conference 2008, Dublin, Ireland, July 19-24, 2008.
44. <招待講演> K. Shiraishi, "Study of nanowire band structure for the analysis of its conduction", IEEE EDS Mini-colloquium for Nano CMOS and Nanowire, Yokohama, Feb. 21, 2009

国内会議

1. 岩田潤一, 「Ral-Space Density-Functional Theory code for large-scale electronic structure calculations」, 計算量子科学によるナノアーキテクチャの構築, 東京大学, 2008年6月24日
2. 岩田潤一, 白石賢二, 押山淳, 「数 nm サイズ Si 量子ドットの大規模第一原理計算」、日本物理

学会 2008 秋季大会 2008 年 9 月 20 日～23 日、盛岡

3. 岩田潤一,「実空間第一原理ナノ物質シミュレータ」,次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア説明会,学士会館,東京,2009年3月11日
4. 岩田潤一,「超並列機向け実空間DFTコード(RSDFT)-現状と今後-」,TDDFT:光応答計算の基礎、応用と展開,キャンパスイノベーションセンター,東京,2009年3月18日
5. 辻美和子,押山淳,佐藤三久,岩田潤一,「RSDFT コードの OpenMP/MPI ハイブリッド並列化と性能評価」,次世代スーパーコンピュータ開発プロジェクト・次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア第3回公開シンポジウム,自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター,2009年3月4日～5日
6. 二村保徳,櫻井鉄也,多田野寛人,岩田潤一,「密度汎関数法で考慮する電子状態数の収束性への影響評価」,日本応用数理学会,京都大学理学部6号館,2008年3月7日～8日
7. 高木祥光,大野隆央,岡田 晋 ``カーボンナノチューブを擦ることによるカーボンナノチューブの回転運動” フラーレン・ナノチューブ学会,第35回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(東京,東京工業大学),2008年8月27日--29日
8. S.-K Jeong, 岡崎俊也,岸直希,中西毅,岡田 晋,坂東俊治,飯島澄男, ``単層カーボンナノチューブのブリージングモードに対するフラーレン内包の影響”フラーレン・ナノチューブ学会,第35回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(東京,東京工業大学),2008年8月27日--29日
9. 河合孝純,岡田 晋,宮本良之,日浦英文, ``グラフェンシートと引き裂きの MD シミュレーション:端の原子構造”フラーレン・ナノチューブ学会,第35回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(東京,東京工業大学),2008年8月27日--29日
10. 岡田 晋, ``SiO₂ 上に吸着された半導体ナノチューブの電子構造とエネルギー論”フラーレン・ナノチューブ学会,第35回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(東京,東京工業大学),2008年8月27日--29日
11. 岡崎俊也,大窪清吾,岸直希,中西毅,岡田 晋,飯島澄男, ``フラーレン内包による単層カーボンナノチューブの直径に依存したバンドギャップ変化”フラーレン・ナノチューブ学会,第35回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(東京,東京工業大学),2008年8月27日--29日
12. 岡田晋 ``SiO₂ 上に吸着された半導体ナノチューブの電子構造とエネルギー論” 日本物理学会第2008年秋季大会(盛岡市,岩手大学)2008年9月20--23日
13. 岡田晋,柳和宏,片浦弘道 ``β カロテン内包ナノチューブの電子構造”日本物理学会2008年秋季大会(盛岡市,岩手大学)2008年9月20--23日
14. 河合孝純,岡田晋,宮本良之,日浦英文 ``グラフェン引き裂きにおける原子スケール端構造の安定性:分子動力学シミュレーション”日本物理学会2008年秋季大会(盛岡市,岩手大学)2008年9月20--23日
15. 大谷実,岡田晋 ``電圧印加による2層グラフェンの再金属化”日本物理学会2008年秋季大会(盛岡市,岩手大学)2008年9月20--23日
16. <招待講演>岡田 晋 ``カーボン系構造変化の第一原理シミュレーション”第4回励起ナノプロセス研究会(応用物理学会),(和歌山市,和歌山大学サテライト),2008年11月21日,22日
17. 高木祥光,岡田晋 ``紫外領域における単層カーボンナノチューブの光学的性質”フラーレン・ナノ

- チューブ学会, 第 36 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(名古屋,名城大学),2009 年 3 月 2 日--4 日
18. 大谷実、岡田晋`非開口ナノチューブにおける自発分極`フラーレン・ナノチューブ学会, 第 36 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(名古屋,名城大学),2009 年 3 月 2 日--4 日
 19. 岡田晋`炭素ナノワイヤのエネルギー論と電子構造`フラーレン・ナノチューブ学会, 第 36 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(名古屋,名城大学),2009 年 3 月 2 日--4 日
 20. 田中倫子、河合孝純、岡田晋`半金属分子ナノワイヤ: 酸素分子内包カーボンナノチューブ`フラーレン・ナノチューブ学会, 第 36 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(名古屋,名城大学),2009 年 3 月 2 日--4 日
 21. 斎藤峯雄, 澤田啓介, 石井史之, 岡田晋, 河合孝純`グラフェンナノリボンのキャリアドーピングによる磁性制御`日本物理学会第 64 回年次大会 (東京,立教学院),2009 年 3 月 27 日--30 日
 22. 高木祥光, 岡田晋 `紫外線領域に於ける単層カーボンナノチューブのバンド間遷移`日本物理学会第 64 回年次大会 (東京,立教学院),2009 年 3 月 27 日--30 日
 23. 岡田晋`炭素ナノワイヤのエネルギー論`日本物理学会第 64 回年次大会 (東京,立教学院),2009 年 3 月 27 日--30 日
 24. <招待講演>石田 猛, 手賀直樹, 毛利友紀, 三木浩史, 峰利之, 久米均, 鳥居和功, 村口正和, 高田幸宏, 白石賢二, 山田廉一、”可変ストレス誘起リーク電流(V-SILC)の機構解析”、第 55 回応用物理学関係連合講演会シンポジウム「ユビキタス世界を支える LSI デバイスの信頼性物理—信頼性を損なうのはだれだ? なぜか?—」(中部大学 2008 年 9 月)
 25. <招待講演>村口正和, 白石賢二、”信頼性を支配するトンネル現象に対する新しい理解”、第 55 回応用物理学関係連合講演会シンポジウム「ユビキタス世界を支える LSI デバイスの信頼性物理—信頼性を損なうのはだれだ? なぜか?—」(中部大学 2008 年 9 月)
 26. <招待講演>白石賢二、”量子効果が生み出すナノ材料の新物性とナノ界面科学”、第 55 回応用物理学関係連合講演会シンポジウム「シリコンナノエレクトロニクス新展開— 新材料導入によるシリコンプラットフォームの超機能化 —」(中部大学 2008 年 9 月)
 27. <招待講演>白石賢二、”埋もれた界面に関する理論および計算科学研究の最前線”、第 56 回応用物理学関係連合講演会シンポジウム「X線・中性子による埋もれた界面研究の最前線」、(筑波大学 2009 年 3 月)
 28. <招待講演>岩井洋, 名取研二, 白石賢二, 山田啓作, 大毛利健治, 筒井一生, 角嶋邦之, パールハット アヘト、”シリコンナノワイヤ FET 研究の現状とロードマップ作成の考え方”、第 56 回応用物理学関係連合講演会シンポジウム「ナノ CMOS への新展開-高機能化・高性能化を図る新材料・新構造技術」、(筑波大学 2009 年 3 月)
 29. <招待講演>野村晋太郎, 櫻井蓉子, 高田幸宏, 白石賢二, 村口正和, 遠藤哲郎, 池田弥央, 牧原克典, 宮崎誠一、 “電子励起状態を介した量子ドットへのトンネル現象の変調”、第 56 回応用物理学関係連合講演会シンポジウム「Si系およびC系ナノ構造と励起プロセス」、(筑波大学 2009 年 3 月)
 30. <招待講演>白石賢二、”ポストスケーリング時代にデバイス・物性物理は何をなすべきか?”、第 56 回応用物理学関係連合講演会シンポジウム「ポストスケーリング時代をデバイス・物性物理から斬る

-これが半導体デバイスの未来像だ-、(筑波大学 2009 年 3 月)

31. <招待講演>村口正和, 遠藤哲郎, 牧原克典, 池田弥央, 宮崎誠一, 櫻井蓉子, 高田幸宏, 野村晋太郎, 白石賢二, ”少数電子で動く未来デバイスの姿 量子電子ダイナミクスからのメッセージ” 第 56 回応用物理学関係連合講演会シンポジウム「ポストスケール時代をデバイス・物性物理から斬る -これが半導体デバイスの未来像だ-」、(筑波大学 2009 年 3 月)
32. T. Tanaka, K. Kamiya, Y. Shigeta and K. Shiraishi, “Theoretical proposal of a new pKa concept applicable in protein environment by the first principles calculations”、日本生物物理学会第46回年会、2008 年 12 月 3 日-5 日、福岡
33. 神谷克政, 重田育照, マウロボエロ, 白石賢二, 押山淳, 「蛋白質の立体構造・電子状態・生物機能の間の相関関係の研究」、日本物理学会 第 64 回年次大会、東京、2009 年 3 月 27 日-3 月 30 日
34. 高田幸宏, 櫻井蓉子, 村口正和, 池田弥央, 牧原克典, 宮崎誠一, 遠藤哲郎, 野村晋太郎, 白石賢二, 「電子ガス-量子ドット結合系における電子構造 II」、日本物理学会 第 64 回年次大会、東京、2009 年 3 月 27 日-3 月 30 日
35. 櫻井蓉子, 野村晋太郎, 高田幸宏, 白石賢二, 村口正和, 遠藤哲郎, 池田弥央, 牧原克典, 宮崎誠一, 「電子ガス-量子ドット結合系における C-V 特性および I-V 特性の Sweep Rate 依存性」、日本物理学会 第 64 回年次大会、東京、2009 年 3 月 27 日-3 月 30 日
36. 村口正和, 遠藤哲郎, 櫻井蓉子, 野村晋太郎, 高田幸宏, 白石賢二, 池田弥央, 牧原克典, 宮崎誠一, 斎藤慎一, 「電子ガス-量子ドット結合系における電子ダイナミクス II」、日本物理学会 第 64 回年次大会、東京、2009 年 3 月 27 日-3 月 30 日
37. 高田幸宏, 村口正和, 野村晋太郎, 白石賢二, 「電子ガス・量子ドット結合系における電子状態」、日本物理学会 2008 年秋季大会、盛岡、岩手、2008 年 9 月 20 日-23 日
38. 村口正和, 高田幸宏, 櫻井蓉子, 野村晋太郎, 斎藤慎一, 白石賢二, 「電子ガス-量子ドット結合系における電子ダイナミクス」、日本物理学会 2008 年秋季大会、盛岡、岩手、2008 年 9 月 20 日-23 日
39. 櫻井蓉子, 野村晋太郎, 白石賢二, 池田弥央, 牧原克典, 宮崎誠一, 「電子ガス-量子ドット結合系における C-V 特性」、日本物理学会 2008 年秋季大会、盛岡、岩手、2008 年 9 月 20 日-23 日
40. 高田幸宏, 村口正和, 櫻井蓉子, 野村晋太郎, 池田弥央, 牧原克典, 宮崎誠一, 白石賢二, 「シリコン量子ドットフローティングゲート型メモリの理論的考察」、2008 年秋季第69回応用物理学学会学術講演会、春日井、愛知、2008 年 9 月 2 日-5 日。
41. 櫻井蓉子, 野村晋太郎, 白石賢二, 池田弥央, 牧原克典, 宮崎誠一, 「量子ドットフローティングメモリの低温における C-V 特性」、2008 年秋季第69回応用物理学学会学術講演会、春日井、愛知、2008 年 9 月 2 日-5 日。
42. 李 映勲, 永田貴弘, 白石賢二, 角嶋邦之, 岩井 洋, 「第一原理計算によるシリコンナノワイヤの電子構造解析」、2008 年秋季第69回応用物理学学会学術講演会、春日井、愛知、2008 年 9 月 2 日-5 日。
43. 山口慶太, 大竹 朗, 小林賢司, 白石賢二, 「MONOS 型メモリにおける SiN 層の N 空孔型欠陥の原子構造と電子構造」、2009 年春季第 56 回応用物理学関連講演会、つくば、茨城、2009 年 3 月

30日-4月2日

44. 大竹 朗, 山口慶太, 小林賢司, 白石賢二、「MONOS 型メモリにおける SiN 層への O 混入の効果の理論的検討」、2009 年春季第 56 回応用物理学関連講演会、つくば、茨城、2009 年 3 月 30 日-4 月 2 日
45. 李 映勲, 永田貴弘, 角嶋邦之, 白石賢二, 名取研二, 岩井 洋、「引っぱり歪み Si ナノワイヤの電子構造とバリスティック伝導」、2009 年春季第 56 回応用物理学関連講演会、つくば、茨城、2009 年 3 月 30 日-4 月 2 日
46. 櫻井蓉子, 野村晋太郎, 白石賢二, 村口正和, 遠藤哲郎, 池田弥央, 牧原克典, 宮崎誠一、「Si 量子ドットフローティングゲート MOS キャパシタにおける過渡電流特性」、2009 年春季第 56 回応用物理学関連講演会、つくば、茨城、2009 年 3 月 30 日-4 月 2 日
47. <招待講演> 白石賢二、「LSI 開発の効率化ー計算科学的手法による次世代デバイスの高効率製造ー」、08 秋季 半導体プロセスシンポジウム、「32/22nm 以降を見据えたプロセス技術ー要素技術開発の現状と今後の課題を徹底検証ー」、東京、2008 年 10 月 3 日。
48. 白石賢二、小林賢司、石田 猛、奥山 裕、山田廉一、「MONOS 型メモリの電荷蓄積機構の理論的研究」、応用物理学会、シリコンテクノロジー分科会、第 101 回研究集会「ゲートスタック構造の新展開:高移動度チャネル技術を中心に」、東京、2008 年 6 月 9 日-10 日
49. 幸田みゆき、梅澤直人、角嶋邦之、Parhat Ahmet、白石賢二、知京豊祐、山田啓作、服部健雄、岩井洋、「価電子揺動 Ce 酸化物を利用した High-k 膜中の固定電荷の抑制」、ゲートスタック研究会 ー材料・プロセス・評価の物理ー、第 14 回特別研究会、三島、静岡、2009 年 1 月 23 日-24 日
50. 大竹朗、山口慶太、小林賢司、白石賢二、「MONOS 型メモリの電荷蓄積機構の第一原理計算による考察」、ゲートスタック研究会 ー材料・プロセス・評価の物理ー、第 14 回特別研究会、三島、静岡、2009 年 1 月 23 日-24 日
51. 大毛利健治、松木武雄、石川大、諸岡哲、網中敏夫、杉田義博、知京豊裕、白石賢二、奈良安雄、山田啓作、「金属/high-k 絶縁膜構造トランジスタにおいて金属結晶が閾値電圧ばらつきに及ぼす影響とその抑制」、ゲートスタック研究会 ー材料・プロセス・評価の物理ー、第 14 回特別研究会、三島、静岡、2009 年 1 月 23 日-24 日
52. 石田猛、手賀直樹、毛利友紀、三木浩史、峰利之、久米均、鳥居和功、村口正和、高田幸宏、白石賢二、山田廉一、「可変ストレス誘起リーク電流(V-SILC)の機構解析」、ゲートスタック研究会 ー材料・プロセス・評価の物理ー、第 14 回特別研究会、三島、静岡、2009 年 1 月 23 日-24 日
53. <招待講演> 寒川義裕、秋山 亨、伊藤智徳、白石賢二、柿本浩一、「立法晶 GaN エピ成長における成長形の制御」、第 38 回結晶成長国内会議、仙台、2008 年 11 月 4 日-6 日
54. <招待講演> 白石賢二、「チトクローム酸化酵素プロトン輸送の理論計算」、菅野シンポジウム、「配位子場の科学に基づく融合科学の創成のために」、つくば、2009 年 3 月 7 日
55. Yoshihiro Kangawa, Toru Akiyama, Tomonori Ito, Kenji Shiraiishi, Koichi Kakimoto, "Theoretical study of growth condition of cubic GaN", 第 27 回電子材料シンポジウム、修善寺、静岡、2008 年 7 月 9 日~11 日
56. <招待講演> 渡部平司、喜多祐起、細井卓治、志村考功、白石賢二、奈良安雄、山田啓作、「金属電極と Hf 系高誘電率絶縁膜界面の実効仕事関数変調機構」、第 72 回半導体・集積回路技術シ

ンポジウム、小金井、東京、2008年7月10日-11日

<学位論文（修士）>

- 1) 田中朝紀 「たんぱく質環境下でのプロトン親和性の理論的考察」
- 2) 高田幸宏 「2次元電子ガスー量子ドット結合系の電子構造」

<学位論文（博士）>

- 1) 高井健太郎 「Theoretical Study on the Electronic Structure of the Vacancies in Compressively Strained Ge」
- 2) 栗田貴宏 「Theoretical Investigation into Atomic and Electronic Structures of Sapphire Surfaces」

II-2 量子多体分野原子核理論分野

1. メンバ

教授 矢花一浩

講師 橋本幸男

2. 概要

TDDFT(時間依存密度汎関数理論)によるフェルミオン多粒子系の量子ダイナミクスに関する研究を進めた。基礎方程式である時間依存コーン・シャム方程式に対する実時間・実空間計算法を発展させ、強い相互作用により束縛した物質である原子核、クーロン力で束縛した電子多体系である分子や固体など様々なフェルミ粒子多体系に対して、光と物質の相互作用に対する第一原理計算を行った。

3. 研究成果

【1】原子核集団運動の理論、不安定核の構造

(1)BCS 形式による時間依存密度汎関数理論の拡張

(江幡、中務(理研)、稲倉、橋本、矢花)

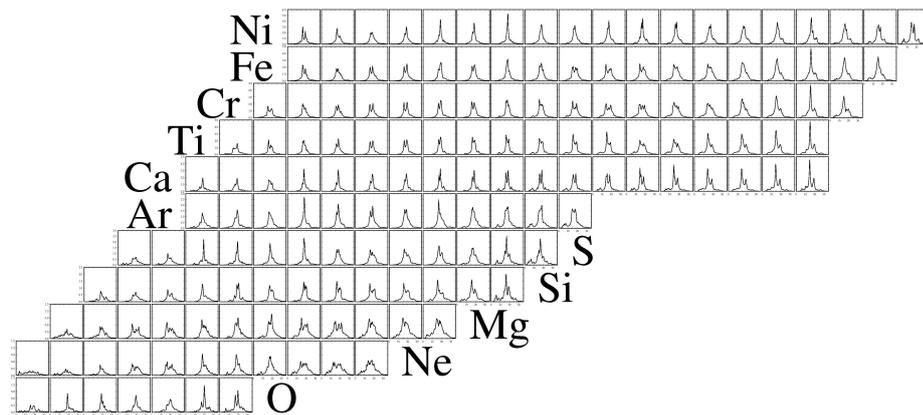
原子核を系統的に計算する為には、対相関と変形の効果を取り入れる事が重要である。我々は超伝導の理論としてよく知られたBCS(Bardeen-Cooper-Schrieffer)理論を時間依存の方法へ拡張し、三次元座標空間のメッシュ表示を用いた実時間発展のプログラム開発を行なった。重い原子核に重要な核子超流動性を取り入れた記述を可能にし、線形応答の実時間計算や重イオン反応計算などに利用する事を目的とする。昨年度には簡単なエネルギー汎関数によるテスト計算を実行したが、今年度は現実的なSkyrme有効相互作用を導入し、そのプログラムがほぼ完成した。Z=10~20の安定核のアイソベクター型双極子の強度分布関数をそのテストとして計算し、対相関の効果などを確かめた。現在はより重い核種の計算を可能とし、本格的な系統的計算への準備を行なっている。

(2)時間依存密度汎関数理論による原子核の応答関数の系統的計算

(稲倉、中務(理研)、矢花)

安定核、不安定核を分け隔てる事なく広範囲に亘って原子核の光核反応の断面積を求める系統的計算を質量数100領域まで進めた。光核反応は、元素組成が起きていると考えられている超新星爆発のr課程に深く関係しており、また放射性廃棄物をクリーンな核に効果的に変換するのに重要な役割を果たす物理量である。微視的な観点から見ると、光核反応は電気双極子モードと呼ばれる、最も単純な集団励起モードで表現される。最も単純な集団励起モードなので、このモードから多くの原子核の性質が引き出せるのだが、実験で観測されているのは安定核の一部だけであり、不安定核では皆無である。このモードを系統的に計算する事で、今後の実験の指針を与えるだけでなく、まだよく分かっていない核力の解明にフィードバックを提供する事も、この計算の目的である。これまでの計算で、幾つかの興味深い結果が得られた。以下にその幾つかを列挙す

る。不安定核では、巨大共鳴のピークエネルギーが 安定核の実験から得られた半経験則からずれ、そのズレには特定の一粒子軌道が関係している事が分かった。また、原子核が変形すると振動方向が長軸方向と短軸方向の二つに分かれるのだが、それぞれの巨大共鳴のピークエネルギーの差が、基底状態の変形度と深く関係している。これは過去に簡単なモデルで、示されていた事であるが、微視的な理論計算で、この事を確認した。現在、この系統的計算を実行している計算コードに、超流動性(対相関)の効果を取り入れるべく、計算コードを拡張している。



(3)原子核の三次元的回転運動の理論

(橋本、堀端(青森大))

有限量子系である原子核は様々な集団運動のモードを持っている。回転運動は、その中でも最も顕著な集団運動の例である。原子核平均場は密度分布と緊密に関係している (nuclear self-consistency) ので、原子核平均場の回転運動は内部核子によるコヒーレントな運動の現れである。原子核の回転運動の研究は主に軸対称変形をした核の主軸まわりの定常回転を対象に行われてきた。クランキング模型に基づくこの考え方は、原子核の回転スペクトルの構造とその背景にある力学について説明する上で、定性的にも定量的にも成功してきた。一方、理論的な立場からは、主軸のまわりの回転運動だけではなく、より一般的な回転運動の存在が期待されている。原子核が軸対称から離れ、三軸非対称変形をすると、“主軸まわりの定常的な回転”という基礎の上に一種のフォノンが生じたような運動モードが起こることが Bohr と Mottelson の教科書でも指摘されている。ウォブリング(wobbling)と呼ばれるこの揺動運動は回転軸が平均場の主軸から離れて才差運動のように動き出すことを意味している。本研究では、ウォブリング運動のような三次元的な回転運動が原子核において生じる力学的機構を微視的に理解することを目的としている。

今年度は特にオスミウム ^{182}Os の傾斜角回転 (tilted axis rotation; TAR) と呼ばれるモードを中心に一粒子構造を調べた。角運動量を $J=12$ から $J=30$ までの範囲で TAR モードの系統性を確認し、P.M.Walker らの実験で得られた K 量子数が 8 のバンドに相当するモードであると期待される。この TAR モードは、主軸回転運動を仮定した計算では出てこないモードであり、主軸 (x 軸) まわりの回転運動に対応するイラスト線に対して、新しいタイプのイラスト線になっている。

一粒子構造では、我々の現在のモデルでは陽子の負パリティに属する準粒子が主として TAR モードに寄与

していると考えられるが、P.M.Walker らのモデルでは主たる寄与は中性子側から来ていることになる。この相違点は、モデルの refinement を今後行う中で明らかにしていく。一方、対称軸(z軸)まわりの励起モードである歳差運動では、TAR モードと異なり、中性子側の準粒子が支配的な寄与をすることになる。今後、チルト角に対する一連の内部構造の変化をまとめていく。

(4)Gogny 力を用いた時間依存 HFB コードの開発

(橋本、笹倉)

我々は、Gogny 力を用いた時間依存HFB(TDHFB)方程式を微小振幅の場合に解くことにより、QRPAに相当する計算を行うコードを開発している。目的は、Skyrme 力+ゼロレンジ対相関の計算と比較しつつ軽い不安定核から始めて不安定核の系統的な励起状態の情報を蓄積することである。酸素などの球形核の場合から始め、今年度はマグネシウムの同位体について四重極型および双極型振動運動を対象にTDHFB方程式を解いて強度関数などを求めた。Gogny 力を用いた場合、マグネシウムは質量数 $A=34$ より大きい場合はプロレート型に変形するので、今回の計算は変形状態の上でQRPAに相当する。四重極型振動(2+)の場合、低励起エネルギー部分のピークは0.9MeVに現れる。一方、実験値は0.685MeVであり、計算値は若干大きく出ている。他の同位体についても同様な傾向があり、これは基底状態の空間が狭いままであることからきていると思われる。数値的に重くなるクーロン力の適切な取り扱いとともに、基底状態の空間を広げた効率の良いコードに改良を行っている。また、今までは考慮していなかった変形核の回転運動の影響を取り入れられるように枠組みを広げる方向を検討している。

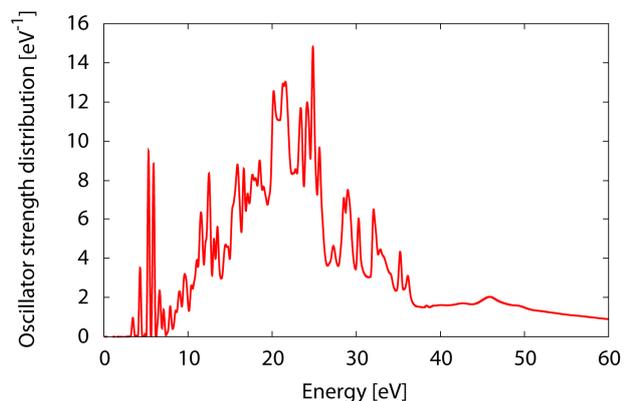
【2】時間依存密度汎関数理論による物質の光応答

(1)フラーレンの光応答計算

(川下、矢花、中務(理研)、野田(分子研)、 信定(分子研))

原子から固体に至る中間相とみなせる物質である C_{60} に対して、時間依存密度汎関数理論による振動子強度計算を行った。超並列計算機を用い、広大な空間領域で応答を計算することにより、可視から軟 X 線領域に至る振動子強度の全体像を明らかにした。その結果、原子の位置を固定した計算では 35eV 程度の高い励起エネルギー領

域まで幅の狭い共鳴状態が現れることが明らかになった。分子振動に関する平均化を考慮するものとして、得られたスペクトルをエネルギーについて平滑化することにより、実験で測定されている振動子強度分布を高い精度で再現することを示した。



(2) 強レーザー場中で起こる分子のクーロン爆発

(川下、矢花、中務(理研))

これまで調べてきた N_2 分子に加え、 H_2S 分子、及びフラーレン C_{60} 分子に対するクーロン爆発を調べた。 H_2S 分子のクーロン爆発過程に対する実験研究では、分解後のイオンの運動量と運動エネルギーの分布から、クーロン爆発メカニズムに関する情報が得られている。この分子に対して、時間依存密度汎関数理論に基づく計算を行った。実験では、ある強度のパルスレーザーを照射した場合の分解の様子を調べているが、計算では同じ強度のパルスレーザーを照射した場合、分子軸とレーザーの偏光方向によって、異なる個数の電子が放出されてしまう。このため、我々の計算では、分子軸と、イオン化の荷数、例えば3個の電子が放出する場合を考え、そのような終状態となるようレーザー強度を固定し、その上でイオンの運動量や運動エネルギーを調べ、実験との比較を行った。その結果、分子軸とイオン化の起こりやすさの関係については、計算と測定結果は良い相関を示した。また、爆発後のイオンの運動エネルギーと分子軸の角度についても計算と測定結果は良い相関を示している。しかし、爆発後の分子軸の角度と、レーザーの偏光方向の相関については、実験と逆の相関を持つことがわかり、今後さらに検討が必要である。

高強度超短パルスレーザーによる C_{60} 分子のクーロン爆発に至るダイナミクスについても、予備的な計算を行った。実験研究から分子振動の四重極モードの重要性が指摘されていたが、計算によれば四重極モードに加え、1重、2重結合の原子間距離が振動するモードも強く励起されることが見出された。

(3) コヒーレントフォノン生成メカニズムの解明

(篠原、川下、岩田、矢花)

結晶と高強度超短パルスレーザーの相互作用で起こる現象の一つに、コヒーレントフォノンがある。これは、光の波長程度の空間領域にわたりイオンが位相をそろえて振動をする現象である。我々は時間依存密度汎関数理論を用い、電子とイオンのダイナミクスを同時に記述し、このコヒーレントフォノン生成メカニズムに関する第一原理計算による記述を試みた。最初の例として、ダイヤモンドをとり計算を行った。実験では、結晶軸とレーザーの偏光方向について、ラマン散乱と同じ選択則が現れることが知られており、計算でも同様の選択則が得られることを確認した。また、計算では、レーザーパルスの照射中に限りイオンに力が働く瞬間誘導ラマン散乱のメカニズムを示しており、これは実験で得られているコヒーレントフォノンの位相の情報と一致している。さらに計算から得られる情報に、加えたレーザーパルスに対するコヒーレントフォノンの振幅の絶対値、レーザーから電子へのエネルギー移行(これは最終的に多くが熱的なフォノンのエネルギーとなると考えられる)と、コヒーレントフォノンへのエネルギー移行の割合などがある。後者に関しては、計算値は1:2000という結果であった。

今後の課題として、今回の計算が対象とした瞬間誘導ラマン散乱のメカニズムに加え、電子の実励起を伴う生成メカニズムを調べること、コヒーレントフォノンの振幅の絶対値が測定されている物質で、計算値を比較することなどを行う予定である。

4. 研究業績

<研究論文>

1. Oscillator strength distribution of C60 in the time-dependent density functional theory
Y. Kawashita, K. Yabana, M. Noda, K. Nobusada, T. Nakatsukasa
J. Mol. Struct. THEOCHEM, in press
2. Time-dependent density-functional theory simulation for electron-ion dynamics in molecules under intense laser pulses
Y. Kawashita, T. Nakatsukasa, K. Yabana
J. Phys. Cond. Matter 21 (6) 064222 (2009/Feb/11)
3. First-principles calculation of the electron dynamics in crystalline SiO₂
T. Otobe, K. Yabana, J.-I. Iwata
J. Phys. Cond. Matter 21 (6) 064224 (2009/Feb/11)
4. Time-dependent description for nuclear reaction dynamics in the continuum
K. Yabana, T. Nakatsukasa, M. Ito
Few-Body Systems 43 (1-4) 247-253 (2008/Dec)
5. First-principles electron dynamics simulation for optical breakdown of dielectrics under and intense laser field
T. Otobe, M. Yamagiwa, J.-I. Iwata, K. Yabana, T. Nakatsukasa, G.F. Bertsch
Phys. Rev. B77 (16) 165104 (2008/Apr)
6. Time-dependent approaches for reaction and response in unstable nuclei
T.Nakatsukasa, K.Yabana, and M.Ito,
Eur. Phys. J. Special Topics 156 (2008) 249-256.
7. TDDFT approach to photoabsorption in even-even nuclei
T.Nakatsukasa, T.Inakura, and K.Yabana,
Int. J. Mod. Phys. A24, 2159-2167 (2009).
8. Stochastic approach to correlation beyond the mean field with the Skyrme interaction
T.Nakatsukasa, S.Shinohara, H.Ohta, and K.Yabana,
Proceedings of the international nuclear physics conference (INPC2007);
Nucl. Phys. A805, 347-349 (2008).
9. Systematic Study of Electric Dipole Excitations with Fully Self-consistent HF plus RPA from Light to Medium-Mass Deformed Nuclei
T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana
proceedings of the Fifth International Conference on Exotic Nuclei and Atom Masses (EANM08), to be published in Eur. Phys. J. A

<学会発表>

(A)国際会議発表

1. TDDFT for fermionic dynamics: Coulomb vs nuclear systems
K.Yabana
JUSTIPEN-EFES-Hokudai-UNEDF meeting, July 21-25, 2008, Onuma, Japan.
2. Dynamics in dielectrics induced by ultrashort laser pulses
K. Yabana
Time-dependent density-functional theory: prospects and applications,
Benasque, Spain, Aug. 31-Sept. 15, 2008.
3. Time-dependent mean-field theory in nuclear and electronic systems
K. Yabana
6th Japan-Italy Symposium on Heavy-Ion Physics, Nov. 11-14, 2008, Tokai, Japan.
4. First-principles simulation for electron-ion dynamics in molecules and dielectrics under an Intense laser pulse
K. Yabana
COAST/CORAL Symposium on Ultrafast Intense Laser Science in Karuizawa, March 12-14, 2009, Karuizawa, Japan.
5. TDDFT simulation for electron-ion dynamics in molecules under intense laser pulse
Y. Kawashita, T. Nakatsukasa, K. Yabana
International Conference on Quantum Simulators and Design 2008, May 31 - June 3, 2008 National Museum of Emerging Science and Innovation (Miraikan), Tokyo
6. Response functions in the continuum of deformed nuclei studied with the time-dependent density-functional calculations
T.Nakatsukasa, T.Inakura, K.Yabana
Talk at Franco-Japanese Symposium "New Paradigms of Nuclear Physics"
(Paris, France, September 29-October 2, 2008).
7. Finite amplitude method and systematic studies of photoresponse in deformed nuclei
T.Nakatsukasa, T.Inakura, K.Yabana
Talk at Arctic FIDIPRO-EFES Workshop: Future Prospects of Nuclear Structure Physics
(Saariselka, Finland, April 20-24, 2009).
8. Finite amplitude method and systematic studies of photoresponse in deformed nuclei
T.Nakatsukasa, T.Inakura, K.Yabana
Talk at International Conference on "Nuclear Structure and Dynamics"
(Dubrovnik, Croatia, May 4-8, 2009).

9. Systematic study of electric dipole responses from Oxygen to Nickel isotopes with self-consistent Skyrme-HF plus RPA
T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana
Hokudai-TORIJJIN-JUSTIPEN-EFES workshop and JUSTIPEN-EFES-Hokudai UNEDF meeting (Onuma Park, Hokkaido, 2008. 7. 21-25)
10. Systematic Study of Electric Dipole Excitations with Fully Self-consistent HF plus RPA from Light to Medium-Mass Deformed Nuclei
T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana
ENAM08, The Fifth International Conference on Exotic Nuclei and Atom Masses (Ryn, Poland, 2008. 9. 7-13)
11. Systematic Study of Electric Dipole Excitations with Fully Self-Consistent Skyrme HF plus RPA from Light to Medium-Mass Deformed Nuclei
T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana
CNS-RIKEN Joint International Symposium on "Frontier of gamma-ray spectroscopy and Perspectives for Nuclear Structure Studies (gamma08)" (RIKEN, 2008. 4. 3-5)
12. Systematic Study of Electric Dipole Excitations with Fully Self-Consistent Skyrme HF+RPA from Light to Medium-Mass Deformed Nuclei
T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana
Nuclear Structure 2008 (MSU, Michigan, USA, 2008. 6. 3-6)
13. Nuclear mean-field dynamics and three-dimensional nuclear rotation
Y. Hashimoto,
The sixth China-Japan Crossover Science Symposium (中国鄭州, Oct. 24-28)
14. GCM description of rotational motions in 182Os (poster),
Y.Hashimoto and T. Horibata,
Nuclear structure 2008 (Jun. 3-6, Michigan state university, USA)
15. Some noticeable aspects of tilted axis rotation in 182Os (poster),
Y. Hashimoto and T. Horibata,
The fifth international conference on exotic nuclei and atomic masses(ENAM)(Sept. 7-13, 2008, Ryn, Poland)

(B)国内研究会・学会等

1. 密度汎関数理論の多彩なフロンティア
矢花一浩
「原子核物理学の展望」研究会、2008年11月26-27日、理研
2. フェムト・アト秒ダイナミクスの計算科学

矢花一浩

第2回極限コヒーレント光科学ワークショップ「極限波長 領域における光科学の新展開」、
2009年3月2-3日、東大物性研

3. TDDFT: 電子の動きを記述する量子シミュレータ

矢花一浩

ナノ統合拠点物性科学 WG 連続研究会「TDDFT: 光応答計算の基礎、応用と展開」、
2009年3月18日キャンパスイノベーションセンター東京

4. 光に起因する電子・イオンダイナミクスに対する実時間シミュレーション法の開発

矢花一浩

特定領域研究「次世代量子シミュレータ・量子デザイン手法の開発と応用」
平成20年度成果報告会、2009年3月23-25日、大阪大学銀杏会館

5. フェルミ粒子系ダイナミクスの量子シミュレーション

—時間依存密度汎関数理論の最近の発展—

矢花一浩

早稲田大学武田研究室セミナー、2008年10月31日

6. フェルミ粒子系ダイナミクスの量子シミュレーション

矢花一浩

東京理科大学鈴木研究室セミナー、2008年10月8日

7. 時間依存密度汎関数理論による光応答計算

矢花一浩

第4回「計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム「PACS-CS システムと計算科学」2008
年4月24-25日、筑波大学計算科学研究センター

8. Electron dynamics simulation in dielectrics induced by intense and ultrashort laser pulses

K. Yabana

次世代ナノ情報機能・材料グループ成果発表会、2008年12月10-11日、
東北大学金属材料研究所

9. 時間依存密度汎関数法によるクーロン爆発過程の第一原理シミュレーション

川下洋輔、中務孝、矢花一浩

第2回分子科学討論会2008 福岡、福岡国際会議場 2008.9.24-27

10. 強レーザーパルスによる分子のクーロン爆発過程に対する第一原理シミュレーション

川下洋輔、中務孝、矢花一浩

日本物理学会第64回年次大会 立教大学、立教池袋中学・高校 2009.3.27-30

11. 実時間-実空間法による分子ダイナミクスの第一原理シミュレーション

—大規模並列計算へ向けてのアプローチ—

川下洋輔、中務孝、矢花一浩

次世代スーパーコンピューティングシンポジウム2008 MY PLAZA ホール 2008.9.16-17

12. 時間依存密度汎関数理論によるコヒーレントフォノン生成の記述
篠原康 矢花一浩 川下洋輔 岩田潤一 乙部智仁
日本物理学会第64回年次大会 (立教大学、立教池袋中学・高校 2009.3.27 - 3.30)
13. 時間依存密度汎関数理論によるコヒーレントフォノン生成の記述
篠原康 矢花一浩 川下洋輔 岩田潤一 乙部智仁
第56回応用物理学関係連合講演会 (筑波大学 2009.3.30 - 4.2)
14. Systematic study of electric dipole strength with self-consistent Skyrme-RPA calculation
稲倉恒法, 中務孝, 矢花一浩 (日本物理学会、山形大学、2008.9.20-23)
15. Gogny 力を用いた TDHFB 法による軽い核の微小振幅応答
橋本幸男
千葉大学理学部原子核理論研究室セミナー 2008年7月16日
16. ^{182}Os における傾斜角回転状態の一粒子構造
橋本幸男、堀端孝俊(日本物理学会、山形大学、2008.9.20-23)
17. ^{182}Os における TAR 状態と t バンド
橋本幸男、堀端孝俊(日本物理学会、立教大学、2009.3.27 - 3.30)
18. 軽い核における回転運動を含めた時間依存HFB計算
笹倉啓介、橋本幸男、稲倉恒法、矢花一浩 (日本物理学会、立教大学、2009.3.27 - 3.30)
19. TDHF+"BCS" approach to response functions in deformed nuclei
江幡 修一郎, 中務 孝, 稲倉 恒法, 橋本 幸男, 矢花 一浩
JUSTIPEN Presymposium (北海道大学 ,2008.07.18 - 07.25)
20. TDHF+"BCS" を用いた線形応答計算
江幡 修一郎, 中務 孝, 稲倉 恒法, 橋本 幸男, 矢花 一浩
原子核三者若手夏の学校 (国立オリンピック記念青少年総合センター 2008.08.19 - 08.24)
21. TDHF+"BCS" approach to response functions in deformed nuclei
江幡 修一郎, 中務 孝, 稲倉 恒法, 橋本 幸男, 矢花 一浩
CNS International Summer School (理研 仁科ホール,2008.8.26 - 9.1)
22. Skyrme-TDHF+BCS を用いた線形応答計算]
江幡 修一郎, 中務 孝, 稲倉 恒法, 橋本 幸男, 矢花 一浩
日本物理学会 2008 年秋季大会 (山形大学, 2008.9.20 - 9.23)
23. Skyrme-TDHF+BCS を用いた線形応答計算 II
江幡 修一郎, 中務 孝, 稲倉 恒法, 橋本 幸男, 矢花 一浩
日本物理学会 第 64 回年次大会 (立教大学, 2009.3.27 - 3.30)

II-3 生命科学分野

1. メンバ

准教授 舘野 賢

准教授 Mauro Boero (~H20 年 11 月)

大学院生(6名)

2. 概要

当グループは、「生体機能情報分子システムによる重要な生体反応の分子・電子ダイナミクスの解明」を目的として、研究を推進している。そのために、物理学における基本原理に基づき、生体機能分子システムの電子構造・分子構造を正確に記述し、生物学的に重要な反応機構を解析する。こうした研究を高精度に実現するためには、解析対象を省略することなく、高度に複雑かつ巨大な生体分子システムをリアルなまま、「まるごと」理論的に解析することが最も重要である。

そのためには、量子力学計算などを表面的に適用するのではなく、構造生物学理論や情報科学理論の応用 (Structural Bioinformatics) もまた不可欠となる。その際には、大規模計算 (計算科学) が必要となる場面も多く、計算科学研究センタの超高速・超並列コンピュータを駆使して、それらの課題に取り組む。

こうした様々な解析技術を集中的に駆使することによって、重要な生物機能を担う生体機能分子システムのダイナミクスを解明し、以って生物機能の実体を原理的に明らかにすることが、当研究グループの基本方針である。それらによって、ひいては複雑な生体システムに内在する物理的法則性を解明し、生命科学におけるゲノムワイドな現実の諸課題へと、広くそれらの知見を応用することを目指して研究を推進している。

特に本年度は、超並列コンピュータに適した高精度な計算システムの開発も新たに推進した。これは、量子理論 (全電子 QM 計算) と古典理論 (MM 計算) を同時に用いることで、高精度な計算を高効率に行うための QM/MM ハイブリッド計算システムであり、そのために QM/MM インターフェース・プログラムを新たに開発して、大規模かつ高精度な QM/MM ハイブリッド分子動力学 (MD) 計算システムを実現した。さらにこれを用いて、タンパク質酵素・RNA 酵素 (リボザイム) や、シトクローム酸化酵素・アズリンなどの遷移金属結合タンパク質 (電子移動・プロトン移動などを担う) 等に応用し、まったく新しい反応機構を見出すなどに成功した。

これらの成果は、量子シミュレーションを単に形式的に適用するだけでは到底得られないものである。バイオインフォマティクス解析技術の開発、構造生物学 (理論) の応用、さらに計算物理化学などに渡る、多くの関連領域を生体高分子の機能と構造の構築原理の解明のために、統合・融合することによって初めて成し遂げられた成果である。今後の理論生命科学自体の方向性を明示するものでもあり、我々はこれを「量子構造生物学」の創出として、広く提唱しているところである。またその結果として、現在、

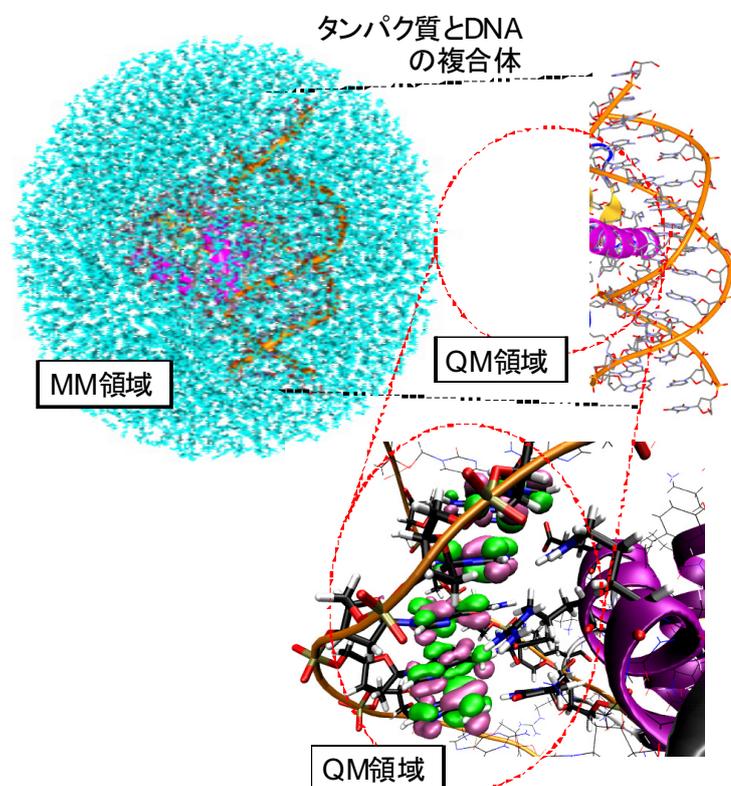
多くの重要な共同研究へと発展しつつある。

3. 研究成果

【1】高精度かつ高効率な QM/MM ハイブリッド分子動力学計算システムの開発 [文献 3, 10]

タンパク質などの生体機能高分子の場合には、そのサイズが巨大であることから、その化学反応(酵素反応や電子・プロトン移動など)を正確に解析するためには大規模な計算が必要となる。そのため、生体分子をふたつの領域に分けて計算する方法(下図)が、現在、最先端の手法として脚光を浴びている。すなわち、

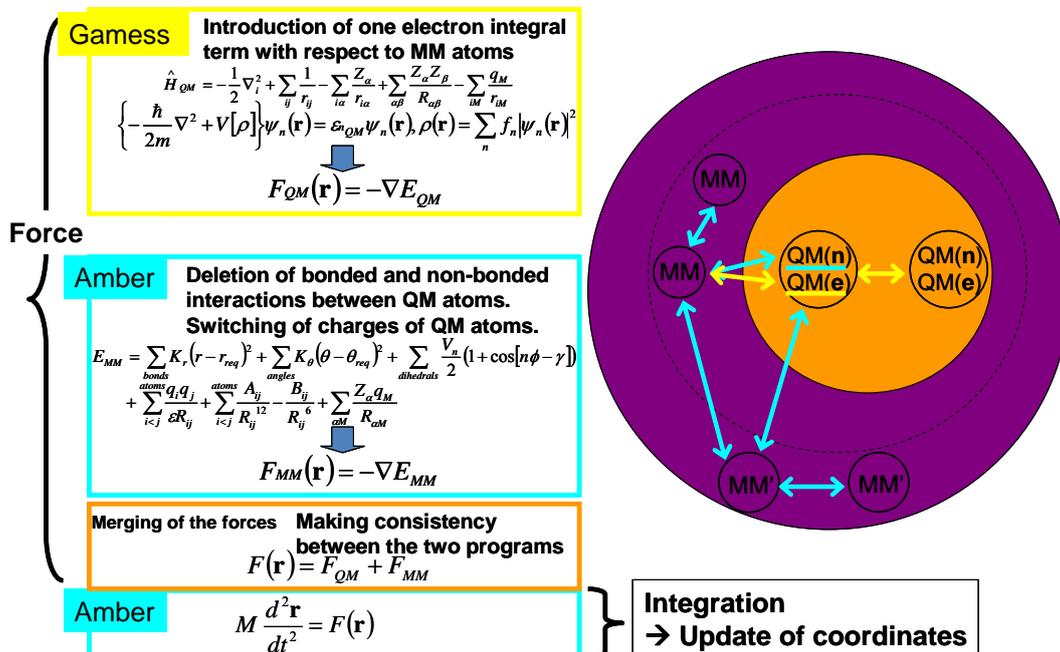
- 1) 電子を含めて化学反応を正確に取り扱う量子力学(QM)計算:
非常に大きな計算のため、小さな領域をカバー
- 2) 化学反応に直接には関係しない領域に適用する古典力学(MM)計算:
比較的小さな計算のため広い領域をカバー



とに分けることで、大きな生体分子も効率よく計算することを目的とした方法である。これは一般に、QM/MM 計算と呼ばれている。本課題においては、従来よりも高精度で、かつさらに効率よく計算することの可能な QM/MM ハイブリッド・インターフェースプログラムを新たに開発し、これを PACS-CS などで稼働させることにより、新しい QM/MM ハイブリッド分子動力学計算システムを構築した。さらに、このシステムを用いて、金属(銅イオン)と結合したタンパク質などの機能のしくみを調べた結果、従来は正確な立体構造さえ得ることのできなかった生体分子についても、非常に高い精度の計算結果が得られることを実証した。

以上の開発・応用は、21 年 1 月にプレスリリースを実施し、全国紙などにおいて、その成果が紹介された。

Games ... QM calculation (all electron based HF/DFT hybrid method)
Amber ... MM & MD calculation



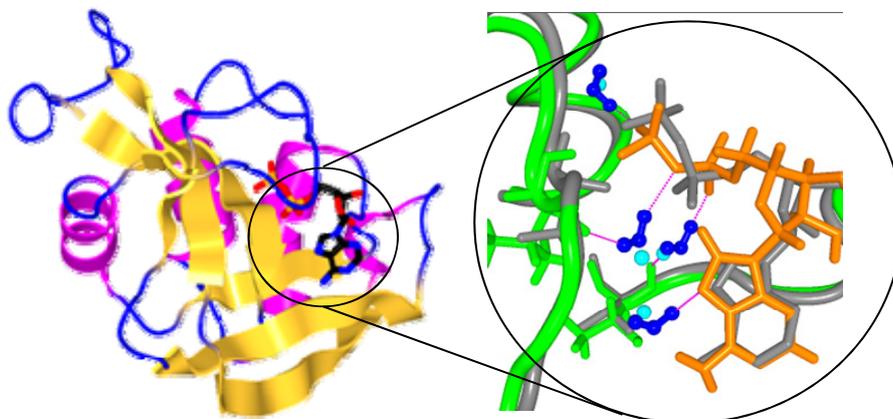
QM/MM ハイブリッド・インターフェースプログラムの役割

【2】ダイナミカルな分子ドッキング計算技術の開発：FSDD 法の開発 [文献 6]

量子シミュレーションを実行するためには、高精度の計算モデルが不可欠である。X 線結晶構造解析などによって実験的に得られた生体高分子の立体構造には、反応に必須の分子種に関する情報が欠如している場合や、技術的な制限により立体構造に誤謬を含む場合もある。例えば、水分子自体が反応に寄与する系では、溶媒水分子の位置が実験的に観測できない場合、その配置情報を理論的に予測することが必須となる。また、触媒反応の対象となる分子(基質とよばれる)を酵素と混ぜた場合には、実際に反応が生じてしまうわけであるから、酵素・基質複合体の結晶を実験によって得ることはできない。仮に基質を含む結晶を何らかの方法によって得ることができたとしても(酵素単体で結晶を作成した後に、基質を結晶にしみこませるなど)、結晶内部での酵素反応によって実験データの質が深刻に低下する場合も多い。したがって、反応の対象となる基質と酵素との複合体の立体構造を得ることは、原理的に極めて困難な場合が多い(そこで、本来の基質の代わりに、反応は起こさずに結合のみ生じる阻害剤を使用して、結晶構造解析を行う場合が多い)。

このように生体高分子の反応機構を解明するためには、実験上の様々な技術的限界が、現在もなお数多く存在するのが実情である。そこで本課題においては、生命科学的に重要な系でありながら、こうした実験的な技術上の困難を回避することのできない系に対しても、その限界を理論的に補い、生体分

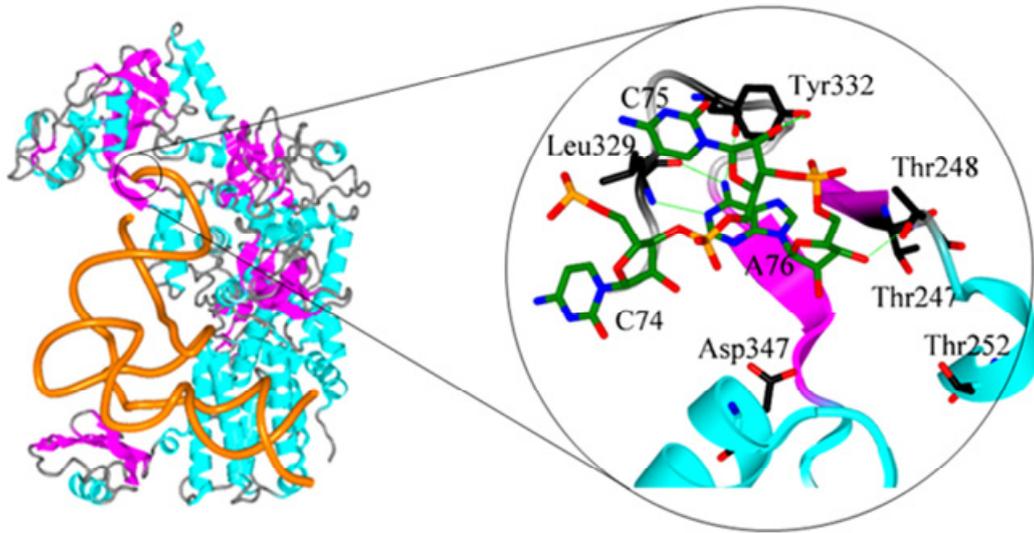
子の立体構造を計算科学的に高精度に再構築するための理論手法の開発を試みた。そのために、基質と酵素との分子間ドッキング・アルゴリズムを新たに開発し(下図), これを用いて研究の対象となる複合体の計算モデルを構築した。



従来の分子ドッキング・アルゴリズムは溶媒水分子を含めずに、しかも酵素の立体構造を固定して計算するのが通常であったが、我々はそれらの制約をすべて解き放ち、溶媒中のタンパク質に対して、そのダイナミカルな立体構造変化を導入した上で、分子ドッキングを初めて実現した。これを FSDD (Fully Solvated Dynamical Docking) 法と呼ぶ。こうした計算手法は、医薬分子設計の領域ではしのぎを削って開発が行われている課題であり、今後はそうした分野のみならず、本研究におけるような「量子デザイン」(後述)のステップにおいても広く応用が期待される、重要な解析手法である。

【3】すべての生物において、遺伝情報の変換を担う酵素反応の動的機構 [文献 8]

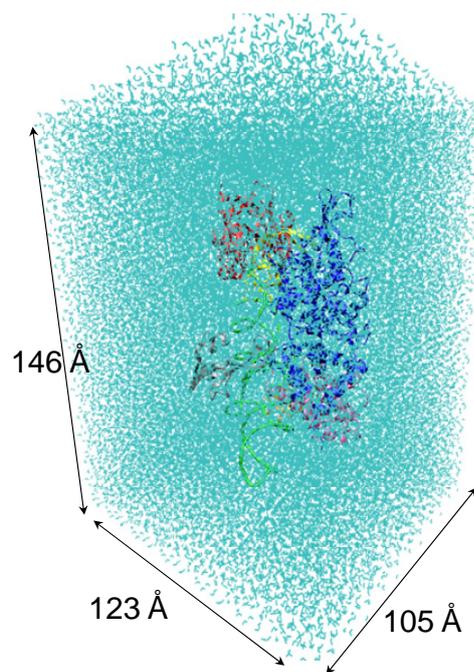
以上のようにして構築した精密な計算モデルは、ロイシル tRNA 合成酵素 (LeuRS; 次ページの図を参照。これはアミノシル tRNA 合成酵素 aaRS のメンバ) と、その基質として作用する tRNA^{Leu}, およびその tRNA^{Leu} に結合されているアミノ酸とからなる。ここで LeuRS (分子量[~]120,000) は、tRNA (分子量[~]15,000) と複合体を形成し、本来はその 3'-末端に特定のアミノ酸分子を正確に結合させる生物機能を有する酵素である。しかし、互いによく似たアミノ酸分子を認識する際には、その識別が誤る場合もあり、LeuRS 自身がそれを校正・編集する(=誤ったアミノ酸分子を加水分解する)機能をも有している。これは校正反応(エディティング反応; Editing Reaction)とよばれ、あらゆる生物において遺伝情報の発現-----すなわち、すべてのタンパク質の生合成-----に不可欠な反応であり、生命科学において極めて重要な系といえる。



そこで、LeuRS による校正反応(エディティング反応)の機構を解明するために、前記の計算モデル(原子数~165,000 個)に対して QM/MM ハイブリッド計算(まずは静的な計算)を適用し解析した。その結果、攻撃を受けるカルボニル基(C=O)の炭素原子の近傍(2.4 Å)にまで接近し得る水分子を同定することに成功した。この水分子は、これまで実験的には観測できていないものである。この点は、LeuRS によるエディティング反応の開始が、水分子による攻撃によって開始されると考えられていた従来の研究結果と一致している。

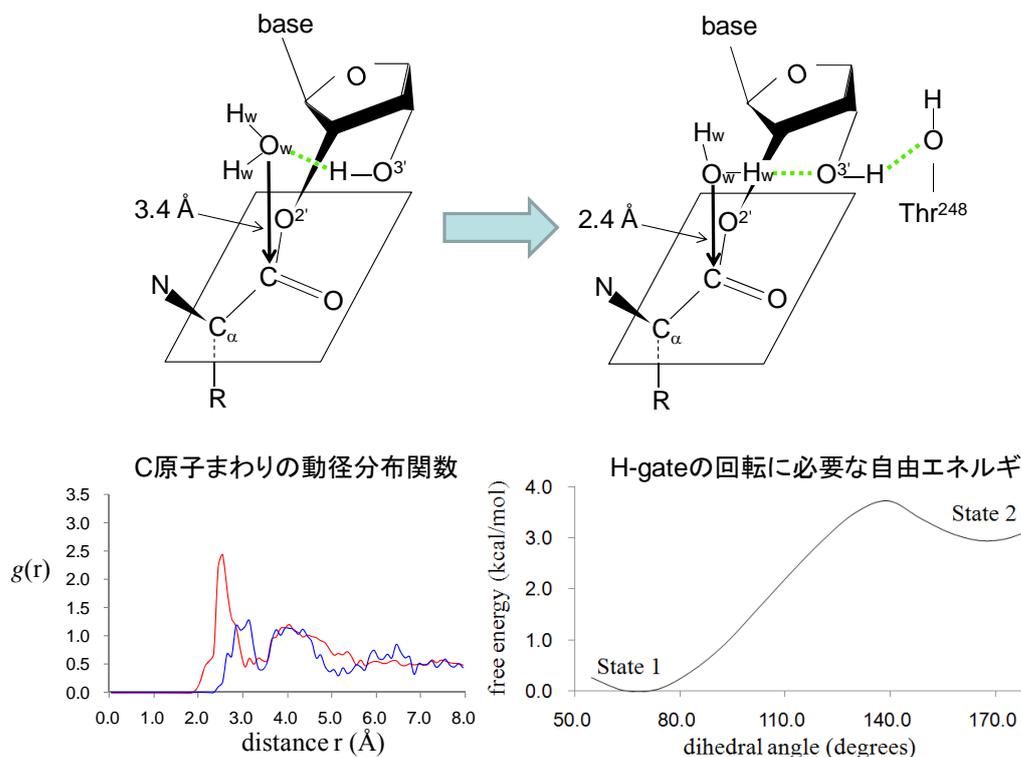
実際、結晶構造解析においても、反応部位から 4 Å にまで接近した水分子が、阻害剤との複合体においてのみ(tRNA^{Leu} は含まれない結晶構造)、これまでも見出されていた。ところが、この阻害剤との複合体構造においては、求核性の水分子が存在する位置は、攻撃されるカルボニル基から遠いばかりではなく、 π 電子を攻撃し得る向きとは正反対に位置しており、そのままでは水分子の攻撃は不可能な位置であった。そのため、想定されている反応機構に対して異をとる研究者もあり、意見が分かれる原因となっていた。

こうした状況にあった LeuRS の反応機構の研究において、本研究により初めて、求核剤として基質を攻撃し得る溶媒水分子の存在と、その配置とが明らかになった(次ページの図参照)。計算結果によると、反応の前には、この求核性の水分子は基質の一部と水素結合を形成することにより、その位置が安定化されている。ここで、水分子が水素結合しているのは、基質であるtRNA^{Leu} の 3'-HO 原子である。ところが、この 3'-HO 原子が動いて、この水分子との水素結合が切断されると、水分子がカ

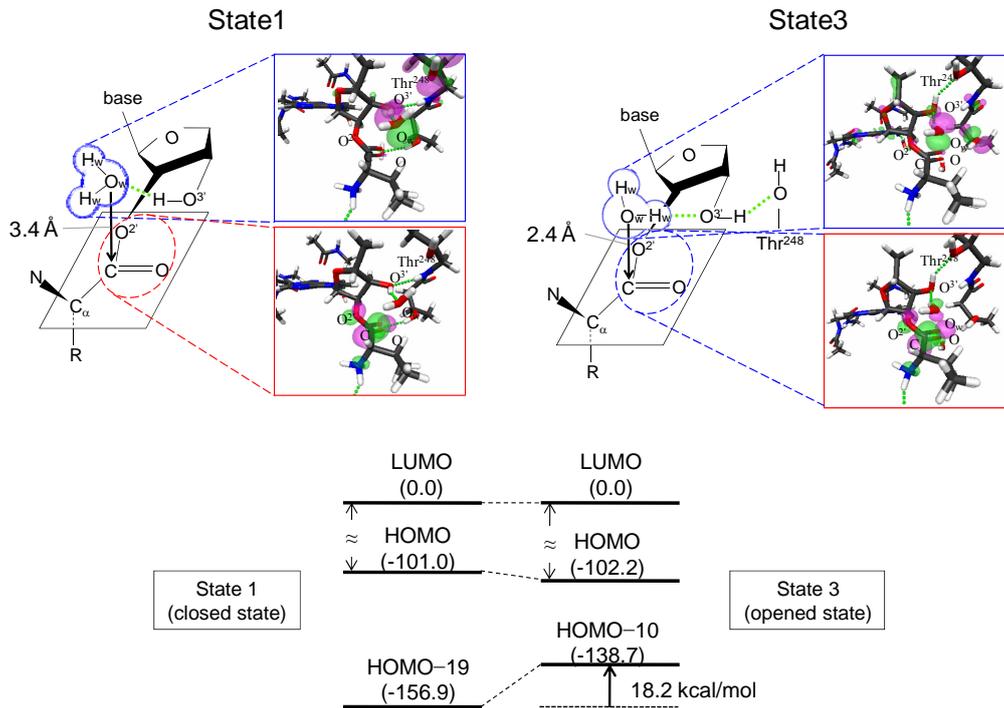


ルボニル基に接近することが可能となる。その場合、水分子には著しい電子状態の変化が誘起されることが明らかになった(後述)。そこで本研究では、tRNA^{Leu}におけるこの3'-HO原子をH-gateと名付け、LeuRS-tRNA^{Leu}を活性化するためのスイッチ機能をもつ装置として、同定することに成功した(次ページの図を参照)。

このように水素原子1個が、巨大な生体高分子の反応を高度に制御している事実を見出したのは、我々の知る限り、本研究が最初である。これは、極めて精巧な生体システムの機能制御機構の発見と考えられる。ここで、基質分子のLUMOは、一貫してカルボニル基に存在することから、水分子の孤立電子対がこのLUMOを攻撃することを強く示唆している(次ページの図)。その際に、水分子のp電子の軌道は、最初HOMO-19のエネルギーレベルにある一方で、求核剤である水分子の接近によってそのエネルギーレベルが上昇し、HOMOに急速に近づくことも、同時に明らかになった。これは、この水分子が求核剤として作用するための準備と考えられ、いわば酵素反応の準備段階、すなわち電子状態が活性化される一過程と考えることができる。



水分子の接近に伴う電子状態の変化



【4】TARA プロジェクト [文献 1, 4, 5, 7, 9 など]

「電子ダイナミクスに基づく生体物質の機能構造と反応機構の解析」(研究代表者: 舘野 賢)

当グループを中心としたメンバにより、上記の学内プロジェクトを推進している(最終年度)。本研究課題は、生体高分子のナノスケールの構造と機能発現のメカニズムを、量子理論に基づく計算科学的手法により解明することを目的とし推進した。そのために、既存の解析システムを駆使するだけでなく、超並列コンピュータに適した、さらに高精度な計算システムの開発も新たに行った(前述の計算解析システムの開発)。この計算システムを用いて、タンパク質酵素・RNA 酵素や、シトクローム酸化酵素・アズリンなどの遷移金属結合タンパク質(これらは電子移動・プロトン移動などを担う)等に応用し(前述)、まったく新しい反応機構を見出すなど、当初の予想をはるかに超える研究成果を、3年の短期間で創出することに成功した(投稿中の研究成果を含む)。

一般に、極めて複雑な立体構造を有する生体機能分子においては、実験データを鵜呑みにしたシミュレーションは、根本的な誤りを導く原因となる。これは、現実にこれまでの実例が示す事実である。実験によって得られたタンパク質構造に内在する誤りを、むしろ理論的に見出し正すことによって、精密な原子座標を生成して、これを計算に用いることにより QM/MM 分子動力学シミュレーションを実行する、この一連のワークフローが、次世代の生物物理学において極めて重要なストラテジの第一歩である。量子シミュレーションなどの計算技術の枠を超え、他領域に渡る複数の解析技術をひとつの研究対象に対して統合的に適用することが、次代の新しい生物物理学を開拓する試金石となる。本課題においては、まさにこのストラテジを実際の生命科学の重要問題に対して適用し、その解決を実現することに成

功した点に、大きな意義があったと考えるものである。

以上が、本研究課題における元々の基本コンセプトであった。これに基づいて得られた前述の成果は、これまでにない新規の生体反応機構の発見などに結びつき(投稿中)、しかもその一般性がさらに明らかになりつつある。これらを基盤にしてさらに、Systems Biology や Structural Informatics などの新しい研究領域との本質的な融合など、新しい計算技術を一層飛躍的に発展させることが、次の研究課題となる。これは、次世代のまったく新しい生物物理学分野を創出するものと期待される。その基盤となる技術開発およびニューコンセプトの創出を目指した研究を、今後とも推進する考えである。

4. 研究業績

<研究論文>

1. Yamasaki, K., Kigawa, T., Inoue, M., Watanabe, S., Tateno, M., et al., Structures and evolutionary origins of plant-specific transcription factor DNA binding domains, *Plant. Physiol. Biochem.* 46 (2008), 394-401.
2. Scipioni, R., Boero, M., A First Principles Investigation of Water Dipole Moment in a Defective Continuous Hydrogen Bond Network, *J. Chem. Phys.*, 130 (2009), 024502.
3. Hagiwara, Y., and Tateno, M., QM/MM hybrid calculation of biological macromolecules using new interface program connecting QM and MM engines, *J. Phys. Cond. Mat.*, 21 (2009), 064234.
4. Kang, J., Ohta, T., Hagiwara, Y., Nishikawa, K., Yamamoto, T., Nagao, H., and Tateno, M., Electronic and geometric structures of the blue copper site of azurin investigated by QM/MM hybrid calculations, *J. Phys. Cond. Mat.*, 21 (2009), 064235.
5. Tateno, M. and Hagiwara, Y., Evaluation of stabilization energies in $\pi-\pi$ and cation- π interactions involved in biological macromolecules by ab initio calculations, *J. Phys. Cond. Mat.*, 21 (2009), 064243.
6. Hagiwara, Y., Nureki, O., and Tateno, M., Structural modelling of the complex of leucyl-tRNA synthetase and mis-aminoacylated tRNA^{Leu}: *FEBS Letters*, 583 (2009) 825-830.
7. Hagiwara, Y. and Tateno, M., A novel computational scheme for accurate and efficient evaluation of $\pi-\pi$ and $\pi-\sigma$ stacking: *J. Phys.: Cond. Mat.*, 21 (2009), 064243.
8. Hagiwara, Y., Nureki, O., and Tateno, M., Identification of the nucleophilic factors and the productive complex for the editing reaction by leucyl-tRNA synthetase, *FEBS Letters*, in press. (Cover)
9. Boero, M., Kang, J., Tokumoto, S., and Tateno, M., A First-Principle Exploration of Heme a and Heme a₃ of the Bovine Cytochrome c Oxidase in Reduced and Oxidized Charge States, *J. Comp. Theor. Nanosci.*, in press.

10. Ohta, T., Hagiwara, Y., Kang, J., Nishikawa, K., Yamamoto, Y., Nagao, N., and Tateno, M., Evaluation of Electronic and Geometrical Properties of the Blue Copper Site in Fully Solvated Azurin by QM/MM Hybrid Calculations Using a New Interface Program Connecting QM and MM Engine, *J. Comp. Theor. Nanosci.*, in press. (Cover Image)
11. 舘野 賢, ボエロ マウロ: 第一原理計算が明らかにする生体反応の精巧な仕組み, *生物物理(日本生物物理学会)*, 48, 216-220 (2008).

<学会発表(主たるもの)>

1. Takehiro Ohta, JiYoung Kang, Yohsuke Hagiwara, and Masaru Tateno. Computational study of metal binding sites of biological macromolecules by using QM/MM calculations. International Conference on Quantum Simulators and Design 2008., Tokyo, Japan (2008).
2. Masaru Tateno, Osamu Nureki, and Yohsuke Hagiwara. Computational investigations of mechanisms of enzymatic reaction by using QM/MM molecular dynamics simulations. International Conference on Quantum Simulators and Design 2008. Tokyo, Japan (2008).
3. Yohsuke Hagiwara and Masaru Tateno. Development of QM/MM molecular dynamics scheme enabling to accurately and effectively evaluate van der Waals interactions. International Conference on Quantum Simulators and Design 2008, Tokyo, Japan (2008).
4. Kang Jiyoung, ボエロ マウロ, 舘野 賢, シトクロム c 酸化酵素におけるヘムの立体構造に依存した非対称な分極と電子構造の理論的解析, 特定領域研究「生体超分子構造」第4回ワークショップ, 淡路, 2008年6月.
5. 太田雄大, 萩原陽介, Kang JiYoung, 舘野 賢. QM/MM 計算による CuA サイトの電子構造および立体構造の理論的解析, 科学研究費補助金特定領域研究「生体超分子の構造形成と機能制御の原子機構」第4回ワークショップ, 淡路, 2008年6月.
6. Yohsuke Hagiwara, Osamu Nureki, and Masaru Tateno. Modeling of complex of LeuRS and mis-aminoacylated tRNA^{Leu} for which 3'-terminal is bound to the active site of editing. International conference on aminoacyl-tRNA synthetases (aaRS's), From basic mechanisms to systems biology (aaRS2008), Annecy, France (2008).
7. Yohsuke Hagiwara, Osamu Nureki, and Masaru Tateno. Computational investigations of mechanisms of enzymatic reaction by using QM/MM molecular dynamics simulations. World association of theoretical and computational chemists., Sydney, Australia (2008)
8. Takehiro Ohta, Yohsuke Hagiwara, and Masaru Tateno. Electronic state of blue Cu protein revealed by using QM/MM calculations, World association of theoretical and computational chemists. Sydney, Australia (2008).
9. Sundaram Arulmozhiraja, Yohsuke Hagiwara, Masaru Tateno, and Takahisa Ohno. Structural modelling, docking, and QM/MM study of ligand-binding upon human AhR. World association

- of theoretical and computational chemists. Sydney, Australia (2008).
10. Tatsunori Nishimura, Thomas Maiwald, Jens Timmer and Masaru Tateno. Computer simulation and theoretical formulation of stimulus/response relationships of intracellular signaling network cascades. 日本生物物理学会第 46 回年会, 福岡, 2008 年 12 月.
 11. Sundaram Arulmozhiraja, Yohsuke Hagiwara, Masaru Tateno, and Takahisa Ohno. Structural modelling, docking, and QM/MM study of ligand-binding upon human AhR. 日本生物物理学会第 46 回年会, 福岡, 2008 年 12 月.
 12. JiYoung Kang, Takehiro Ohta, Yohsuke Hagiwara, Keigo Nishikawa, Tetsunori Yamamoto, Hidemi Nagao, and Masaru Tateno. 金属蛋白質の QM/MM 計算における遠距離静電相互作用の影響. 日本生物物理学会第 46 回年会, 福岡, 2008 年 12 月.
 13. Shigehide Kuroyanagi, Yohsuke Hagiwara, Masaru Tateno. 分子動力学計算により明らかになった GatCAB におけるアンモニアを輸送する新しいチャネル. 日本生物物理学会第 46 回年会, 福岡, 2008 年 12 月.
 14. Yohsuke Hagiwara, Osamu Nureki, and Masaru Tateno. 分子ドッキングおよび QM/MM 分子動力学シミュレーションによる酵素反応機構の理論的解析. 日本生物物理学会第 46 回年会, 福岡, 2008 年 12 月.
 15. Masaru Tateno and Yohsuke Hagiwara. 高速かつ高精度な van der Waals 相互作用計算スキームを含む QM/MM-MD 計算プログラムの開発. 日本生物物理学会第 46 回年会, 福岡, 2008 年 12 月.
 16. Shigehide Kuroyanagi, Yohsuke Hagiwara, Masaru Tateno, Novel channel of glutamine amidotransferase CAB for ammonia transport revealed by molecular dynamics simulations. 第 31 回日本分子生物学会年会 第 81 回日本生化学大会合同大会, 神戸, 2008 年 12 月.
 17. Jiyoung Kang, Takehiro Ohta, Yohsuke Hagiwara, Keigo Nishikawa, Tetsunori Yamamoto, Hidemi Nagao, and Masaru Tateno. 金属結合タンパク質の活性部位に対する遠距離静電相互作用が与える影響に関する計算科学的解析. 第 31 回日本分子生物学会年会 第 81 回日本生化学大会合同大会, 神戸, 2008 年 12 月.
 18. Tatsunori Nishimura, Thomas Maiwald, Jens Timmer and Masaru Tateno. Novel mathematical formulation to describe steady state reactions in intracellular signaling network cascade. 第 31 回日本分子生物学会年会 第 81 回日本生化学大会合同大会, 神戸, 2008 年 12 月.
 19. Yohsuke Hagiwara, Osamu Nureki, and Masaru Tateno. Computational analyses of enzymatic reaction mechanism by molecular docking and QM/MM-MD simulations. 第 31 回日本分子生物学会年会 第 81 回日本生化学大会合同大会, 神戸, 2008 年 12 月.
 20. Masaru Tateno and Yohsuke Hagiwara. Development of QM/MM molecular dynamics program including an accurate and effective description of van der Waals interactions. 第 31 回日本分子生物学会年会 第 81 回日本生化学大会合同大会, 神戸, 2008 年 12 月.

21. Yohsuke Hagiwara and Masaru Tateno. Computational study of signal propagation in the complex of *Thermus thermophilus* leucyl-tRNA synthetase (LeuRS) and its cognate tRNA. Biophysical Society 53rd Annual meeting. Boston, US (2009).
22. Masaru Tateno, Osamu Nureki, and Yohsuke Hagiwara. Reaction Mechanisms of Editing (Proofreading) by Leucyl-tRNA Synthetase Revealed by QM/MM Molecular Dynamics Simulations. Biophysical Society 53rd Annual meeting. Boston, US (2009).

<その他の発表>

1. プレスリリース

2009年1月

生命のしくみを電子のレベルで解明するために高精度かつ高速な
コンピュータ・プログラムを開発

— タンパク質や遺伝子 DNA の研究に応用 —

日経産業(全国版), 日経 BP オンライン版, 茨城新聞など

学内サイト <http://www.tsukuba.ac.jp/public/pressreport.html>

2. TARA News, No. 37 (Jan 2009), 12-17.

舘野 賢 「電子ダイナミクスに基づく生体物質の機能構造および反応機構の構築原理」

生命のしくみを電子のレベルで解明するために高精度かつ高速な

コンピュータ・プログラム開発

III 地球生物環境研究部門

III-1 地球環境学分野

1. メンバ

教授 田中博、木村富士男(学内共同研究員)、鬼頭昭雄(学外共同研究員)

講師 日下博幸

2. 概要

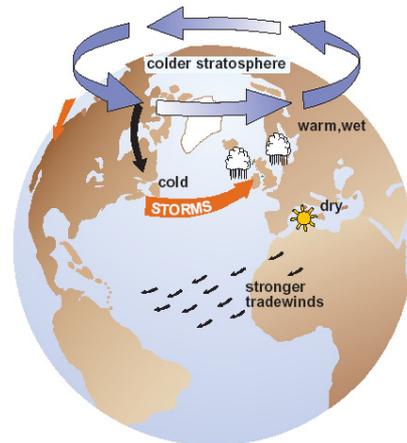
地球環境学分野における主な成果として、これまでESでしか走らないとされた全球雲解像モデルNICAMの7km解像度(GI=10)モデルが筑波大学の計算機システムで実行可能となった。北極振動、北極低気圧、ブロッキング、熱帯低気圧などの具体的な研究が開始され、NICAM-LETKFを開発した。また、国際会議 ISAR-1を開催した。大気大循環研究と並んで領域気象モデルWRFを用いたメソ気象シミュレーションが行われ、都市が降水に及ぼす影響評価、首都圏の気候再現計算、都市キャノピーモデルの開発などが行われた。さらには、つくば市のヒートアイランド観測を実施した。地球環境学分野として査読付き原著論文 8 編、報告書類 20 編、招待講演 3 件、学会発表等 32 件が行われた。

3. 研究成果

【1】北極振動とブロッキング高気圧の力学的成因と将来予測に関する研究(田中博)

(1) 北極振動研究

北極振動(Arctic Oscillation: AO)とは、ワシントン大学のThompson and Wallace (1998) により1998年提唱された現象で、北緯約60度を挟んで南北に海面更正気圧場が逆相関を持つというものである。本研究では、大気力学方程式系の固有解の中から位相速度がゼロとなり、減衰率が最もゼロに近い固有解についての構造を調べた。理論的に得られた固有解の構造は、北極圏で低圧偏差の時に中緯度で高圧偏差となり、しかもその高圧偏差の中心は太平洋と大西洋の二箇所に現れる。この構造を観測値から統計的に得られる北極振動パターンと比較すると、両者はほぼ完全に一致する。このことから、これが北極振動に対応する固有解であると判断できた(北極振動の特異固有解理論)。



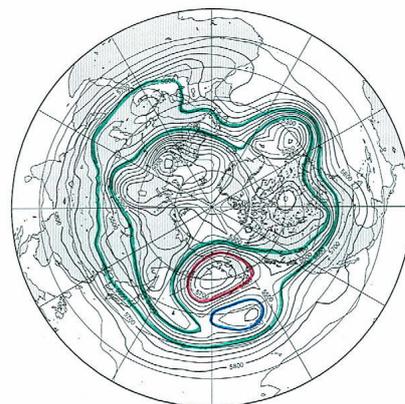
(2) ブロッキングの研究

ブロッキング高気圧とは、中高緯度対流圏にしばしば形成される背の高い高気圧のことである。高度場の順圧成分を取り出してその分布を調べてみると分かるように、ブロッキング高気圧の構造は、基本的に大気の高気圧成分に含まれている。ブロッキング高気圧は、ひとたび出現すると長い時には1カ月近く同じ場所に停滞し続

ける特徴がある。ジェット気流に流されて通常西から東に移動する大気下層の高低気圧や前線が、この背の高い高気圧の出現により東進をブロックされることから、この高気圧はブロッキング高気圧(または単にブロッキング)と呼ばれている。本研究では、筑波大学で開発された順圧大気大循環モデル(順圧Sモデル)を用いて、ブロッキングの再現実験を行い、その成因について研究した。

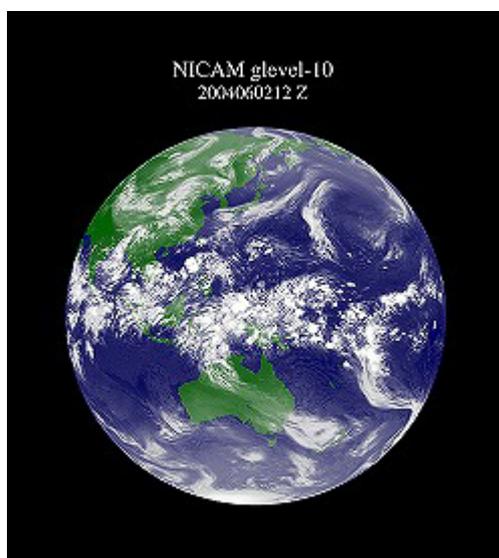
500 hPa Height

JMA GPV 97031412+00



【2】次世代型全球雲解像モデル NICAM の移植と開発(田中博)

東京大学気候システム研究センター(CCSR)と地球環境フロンティア研究センターでは、次世代大気大循環モデルと期待されている、非静



力正 20 面体大気モデル NICAM (Nonhydrostatic ICosahedral Atmospheric Model)を開発している。NICAM は超並列計算機対応で開発されており、筑波大学の超並列計算機 PACS-CS(2560-node, 14.3TF)への移植が進められている。NICAMは雲微物理過程を実装しているため、全球雲解像モデルとして、温暖化に対する雲応答について、より信頼に足る結果が得られると期待されている。ただし、NICAM の物理過程は開発途上のため、モデルの欠点を把握し改善するための基礎的なデータ解析が必要である。本研究では、NICAM の出力を解析し、観測や他の全球予報モデルと比較することで、現時点でのその予報精度を評価した。

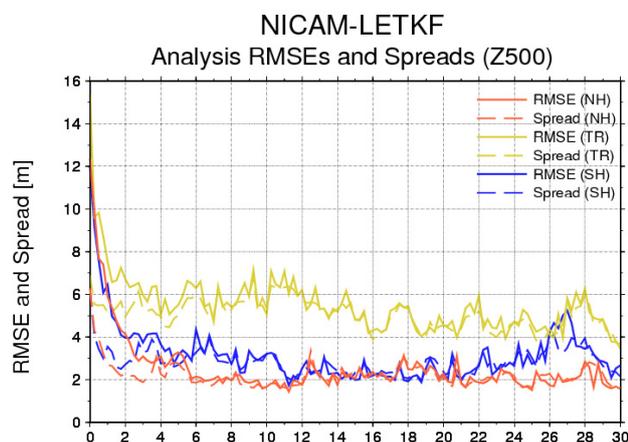
【3】アンサンブルカルマンフィルタによる 4 次元同化の開発 (田中博)

(1) 順圧大気大循環モデル(順圧Sモデル)による LETKF の開発

アンサンブル予報を用いた最新のよ次元同化技術である LETKF を筑波大学で開発した順圧Sモデルに応用し、そのアルゴリズム開発と収束性の検証実験を行った。

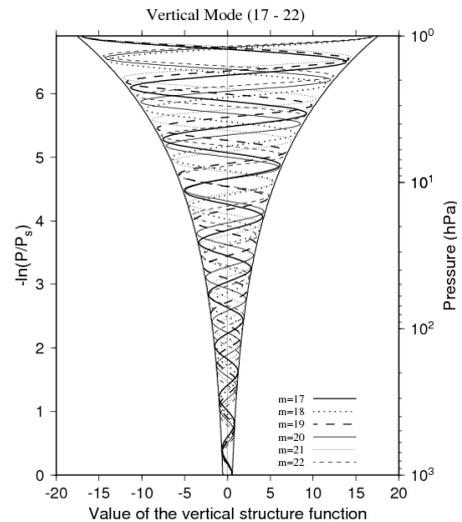
(2) 全球雲解像モデル NICAM による LETKF の開発

順圧Sモデルを用いた LETKF の検証実験を基礎として、全球雲解像モデル NICAM に LETKF を応用し、解析値が予報-解析サイクルを繰り返すうちに、次第に収束することを確認した。

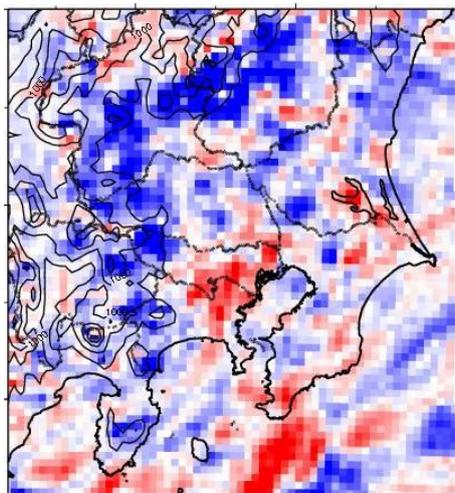


【4】大気大循環の3次元ノーマルモードエネルギー論の展開（田中博）

大気現象の卓越スケールの定量化には3次元ノーマルモード関数展開によるスペクトル解析が有用である。鉛直ノーマルモード関数展開において、これまで数値解を用いて行われた鉛直スペクトル解析を、本研究では静的安定度を定数と仮定して得られる解析解を用いて再検討した。その結果、水平波数スペクトルでこれまでに知られていた波数の-3乗則が鉛直波数スペクトルにおいても見られる事を明らかにした。



【5】都市が降水におよぼす影響評価（日下博幸）



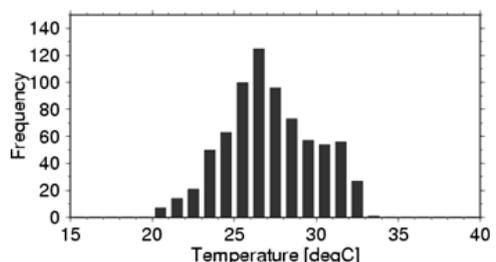
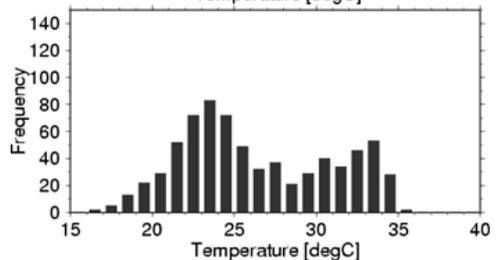
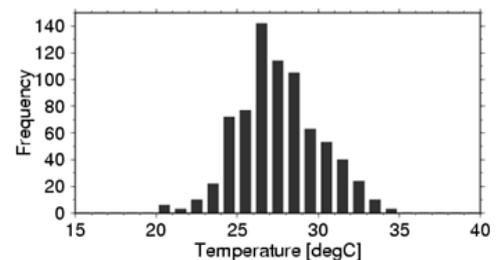
東京で発生もしくは発達した複数の降水事例に対して都市の感度実験を行った。

その結果、いくつかの事例では都市の存在が降水量を増加させるという結果を得たが、計算条件や対象事例によっては異なる結果も得られた。これは、シミュレーションに対する都市の有無の影響が、他の物理素過程モデルや初期値に用いるデータの影響に比べて相対的に小さいことや、結果にカオス性が明瞭に現れたためだと考えられる。この結果は、都市の感度実験が都

市降水の研究に対して。従来の決定論的な感度実験を行う際は細心の注意を払う必要があることがわかった。

【6】首都圏の気候再現計算の精度検証: 将来予測に向けて（日下博幸）

WRFモデルを用いて、8月の1か月シミュレーションを過去5年分(2002年~2007年)行った。従来の短期間シミュレーションで用いられてきた平板都市モデルを用いた場合は、気温の出現頻度、日変化とも再現性はあまりよくなかったが、都市気候用に開発された都市キャノピーモデルを用いた場合、将来の気候予測に使えるレベルの結果が得られることを確認した。



【7】都市キャノピーモデルの開発（日下博幸）

建物付近の地上気温をより精度良く求めるために、多層都市キャノピーモデルを開発した。東京都の神田および日本橋内約15カ所で観測された気温を用いてモデルの検証を行った結果、

測器の誤差と同程度(0.5°C)の誤差で街区内の気温を計算できることがわかった。

【8】つくば市のヒートアイランドの実態調査(日下博幸)

茨城県つくば市は東京とつくば市を結ぶつくばエクスプレスの開通により近年第二の発展を遂げている。そこで、つくば市内の公園や学校など 40 カ所に温度計を設置し、つくば市のヒートアイランドの実態調査を行った。その結果、冬季晴天日ではつくば駅付近は郊外に比べて 5°C 程度気温が高くなる傾向があることがわかった。

4. 研究業績

〈研究論文〉

1. Watarai, Y. and H.L. Tanaka 2008: Characteristics of the JRA-25 dataset from the viewpoint of global energetics. International Conf. on Reanalysis. February 2008, Tokyo Japan.
2. 田中博 2008: 異常気象をもたらす北極振動の解明とその予測(第3報). アサヒビール学術振興財団研究紀要、地球環境科学.
3. 田中博 2008: 地球温暖化予測のための気象シミュレーション:気象モデルへの逆問題の応用. 統計数理研究所、21 世紀の診断工学とその周辺(6), 99-112.
4. Byun, H.R., H. L. Tanaka, H. Michalopoulou, R.P. Pandey and D. Azzaya 2008: A study on ice control for the production of 5th-generation water resources and the arrest of global warming. Asia-Pacific J. Atmos. Sci., 44, 137-146.
5. 田中博 2001: カオスの壁を越える天気予報への挑戦. 数理解析研究講究録 1209, 10-17.
6. Matsueda, M. and H. L. Tanaka, 2008: Can MCGE Outperform the ECMWF Ensemble? SOLA, 4, 77-80.
7. 田中博 2008: ロスビー波の砕波と飽和理論によるブロッキングと北極振動の励起メカニズム. 日本流体力学会年会 2008 .
8. Tanaka, H.L., 2008: The First International Symposium on the Arctic Research: Drastic Change under the Global Warming, Preface. Proc. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan. 1-2.
9. Tanaka, H.L., and M. Ohhashi, 2008: Mechanism of the Decadal-Scale Variation of the Arctic Oscillation Index. Proc. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan. 20-23.
10. Ohhashi, M. and H.L. Tanaka, H.L., 2008: Analysis of Arctic Oscillation Simulated by Global Warming Prediction Models. Proc. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan. 222-225.
11. Terasaki, K. and H.L. Tanaka, H.L., 2008: Spectral energetics analysis of the general circulation of the atmosphere in the vertical wavenumber domain. Proc. First International Symposium on the Arctic

- Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan. 230-233.
12. Seta, M. and H.L. Tanaka, H.L., 2008: Research of forcing sources causing the blocking high related to the Okhotsk high. Proc. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan. 249-252.
 13. Kondo, K. and H.L. Tanaka, H.L., 2008: Influence of local ensemble transform Kalman filter with the NICAM on high latitudes. Proc. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan. 226-229.
 14. Kato, S. and H.L. Tanaka, H.L., 2008: Prediction experiments of the Arctic Oscillation index using a barotropic general circulation model. Proc. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan. 241-244.
 15. Ikeda, M. and H.L. Tanaka, H.L., 2008: Positive feedback between polar jet and polar mode of baroclinic instability. Proc. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan. 210-213.
 16. Fujiwara, F. and H.L. Tanaka, H.L., 2008: Interaction between the baroclinically unstable wave and the subtropical and polar-frontal jets. Proc. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan. 234-237.
 17. Takahashi, S. and H.L. Tanaka, H.L., 2008: Dynamics and statistics of cyclones over the Arctic Ocean compared with extra-tropical cyclones. Proc. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan. 214-217.
 18. 田中博, 2008: 日本の異常気象と北極振動の関係. 2008 年度雪氷防災研究講演会報文集、防災科学技術研究所、雪氷防災研究センター. 1-6
 19. 田中博, 2009: 異常気象をもたらすと北極振動の力学. 「てんきすと」, 第 56 号, 2009 年 1 月, 1-3.
 20. Kondo, K. and H. L. Tanaka 2009: Comparison of the extended Kalman filter and the ensemble Kalman filter using the barotropic general circulation model. J. Meteor. Soc. Japan, 87, 347-359.
 21. Kusaka, H., (2008) Recent progress on urban climate study in Japan: *Geograph. Rev. Japan*, 81, 361-374.
 22. Ohashi, Y., T. Kawabe, Y. Shigeta, Y. Hirano, H. Kusaka, H. Fudeyashu, and K. Fukao (2008) Thermal Environments in Commercial and Residential Spaces in Okayama City, Japan, Using the Wet-Bulb Globe Temperature Index. Evaluation of Urban. *Theoretical and Applied Climatology*, 95, 279-289..
 23. Suga, M., R. Oda, H. Kusaka, and M. Kanda (2009) Impacts of anthropogenic energy and urban canopy model on urban atmosphere, Annual Journal of Hydraulic Engineering, JSCE, 53. 283-288.
 24. 日下博幸・大庭雅道・鈴木智恵子・林陽生・水谷千亜紀 (2009) 冬季晴天日におけるつくば市のヒートアイランド: 予備観測の結果. 日本ヒートアイランド学会論文集, 4, 10-14.
 25. 畔柳秀匡・大橋唯太・亀卦川幸浩・岡和孝・重田祥範・平野勇二郎・日下博幸・Fei Chen (2009) 街区構造と電力需要の違いが都市熱環境に及ぼす影響—大阪市街地を対象にした解析—. 水工学論文集, 53, 289-294.

26. 日下博幸(2008) ヒートアイランド気象学事始め(2). 日本ヒートアイランド学会誌, 3, 36-39.
27. 日下博幸(2009) 領域気象モデル WRF について. ながれ, 28, 3-12.
28. 井上君夫・木村富士男・日下博幸・吉川実・後藤伸寿・菅野洋光・佐々木華織・大原源二・中園江(2009) 気候緩和評価モデルの開発と PC シミュレーション. 12, 1-25.

〈学会発表〉

(A)招待講演

1. 田中博, 2008: 日本の異常気象と北極振動の関係. 2008 年度雪氷防災研究講演会、防災科学技術研究所.
2. 田中博, 2008: 気象学とカオス、日本気象学会秋季大会、大気象サイエンスカフェ
3. Tanaka, H.L., and M. Ohhashi, 2008: Mechanism of the Decadal-Scale Variation of the Arctic Oscillation Index. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan.

(B)その他の学会発表

1. 田中博 2008: ロスビー波の碎波と飽和理論によるブロッキングと北極振動の励起メカニズム. 日本流体力学会年会.
2. Tanaka, H.L., 2008: The First International Symposium on the Arctic Research: Drastic Change under the Global Warming, Opening Address. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan.
3. Ohhashi, M. and H.L. Tanaka, H.L., 2008: Analysis of Arctic Oscillation Simulated by Global Warming Prediction Models. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan.
4. Terasaki, K. and H.L. Tanaka, H.L., 2008: Spectral energetics analysis of the general circulation of the atmosphere in the vertical wavenumber domain. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan.
5. Seta, M. and H.L. Tanaka, H.L., 2008: Research of forcing sources causing the blocking high related to the Okhotsk high. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan.
6. Kondo, K. and H.L. Tanaka, H.L., 2008: Influence of local ensemble transform Kalman filter with the NICAM on high latitudes. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan.
7. Kato, S. and H.L. Tanaka, H.L., 2008: Prediction experiments of the Arctic Oscillation index using a barotropic general circulation model. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan.

8. Ikeda, M. and H.L. Tanaka, H.L., 2008: Positive feedback between polar jet and polar mode of baroclinic instability. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan.
9. Fujiwara, F. and H.L. Tanaka, H.L., 2008: Interaction between the baroclinically unstable wave and the subtropical and polar-frontal jets. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan.
10. Takahashi, S. and H.L. Tanaka, H.L., 2008: Dynamics and statistics of cyclones over the Arctic Ocean compared with extra-tropical cyclones. First International Symposium on the Arctic Research, Nov. 4-6, 2008, Miraikan, Tokyo, Japan.
11. 日下博幸・足立幸穂・木村富士男・原政之・羽入拓朗(2008)領域気候モデルを用いた将来の都市気候予測. 日本地理学会秋季大会.
12. 日下博幸・北畑明華(2008)寒冷前線通過時の降水パターンのメカニズムの解明. 日本地理学会秋季大会
13. 日下博幸・秋本祐子(2008)2007年8月16日多治見猛暑の数値シミュレーション. 日本ヒートアイランド学会全国大会.
14. 日下博幸・大庭雅道・鈴木智恵子・林陽生(2008)冬季晴天日におけるつくば市のヒートアイランド現象ー予備観測の結果ー. 日本ヒートアイランド学会全国大会.
15. 日下博幸・秋本祐子(2008)スカイスポーツのための局地気象研究:筑波山フライトエリアで発生するアーベントテルミックの要因解明. 日本気象学会春季大会.
16. 局地風の数値シミュレーションの現状と課題.第 49 回気候影響・利用研究会シンポジウム.
17. 高根雄也・大橋雄太・亀卦川幸浩・岡和孝・重田祥範・平野勇二郎・日下博幸・Fei Chen・Mukul Tewari・Shiguang Miao (2008) 夏季に大阪平野で発達する局地循環と都市化が地域の気候場の形成に及ぼす影響-大気境界層の熱・水収支の解析-. 日本ヒートアイランド学会全国大会.
18. 高根雄也・日下博幸・原政之・足立幸穂・木村富士男(2008)熊谷猛暑の形成メカニズムー2007年8月16日の事例解析. 日本ヒートアイランド学会全国大会.
19. 高根雄也, 大橋唯太, 亀卦川幸浩, 岡和孝, 平野勇二郎, 日下博幸, Fei CHEN, Mukul TEWARI, Shiguang MIAO, 2008:夏季に大阪平野で発達する局地循環と 都市化が地域の気候形成に及ぼす影響-大気境界層の熱・水収支解析, 日本気象学会 2008 年度秋季大会.
20. 高根雄也(2008)2007年8月16日に発生した熊谷猛暑の形成メカニズム. 第49回気候影響・利用研究会シンポジウム.
21. 高根雄也, 日下博幸, 原政之, 秋本祐子, 木村富士男, 足立幸穂, 2008: 2007年8月16日に発生した熊谷猛暑の形成メカニズム-WRFモデルを用いた熱収支解析, 日本気象学会 2008 年度秋季大会.
22. 池田亮作・日下博幸(2008)簡略化した多層都市キャンピーモデルの開発. 日本ヒートアイランド学会全国大会.
23. 宮由可子・日下博幸(2008)鉛直構造に着目した空っ風の気候学的研究.第49回気候影響・利用研究会

シンポジウム.

5. シンポジウムの開催

第1回国際北極研究シンポジウム(ISAR-1)の開催(実行委員長)。参加者は総勢190名、(海外11カ国から59名、日本人131名)で、北極海の海氷激減に関するシンポジウムステートメントを発表。

III-2 生物分野

1. メンバー

教授 橋本哲男

准教授 稲垣祐司

2. 概要

生物分野では、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り、これまでの研究により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生物を単離・培養株化しすることを目指している。

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

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。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定を目指し、方法論的研究を行っている。

3. 研究成果

【1】大規模配列データ解析

(1)有中心粒太陽虫とテロネマ類の系統関係の検討 (稲垣, 橋本)

2つの生物群、有中心粒太陽虫とテロネマ類は、その系統的所属がいまだに分からない。我々は有中心粒太陽虫 *Raphidiophrys contractilis* とテロネマ類 *Telonema subtilis* の網羅的発現遺伝子解析を、パイロシーケンシング技術を用いて行った。*R. contractilis* からは約36万リード、*T. subtilis* からは約21万リードを解析し、127遺伝子データ(合計約3万アミノ酸残基)に基づく系統解析を行った。興味深いことに、*R. contractilis*、*T. subtilis* とともにハプト藻類・クリプト藻類と単系統を形成した。この結果は、2種の生物群が真核生物大系統中でどのような位置を占めるかという長年の疑問に対し、初めて具体的な示唆を与える結果となった。一連の研究は、スイス・ジュネーブ大(F. Burki, J. Pawlowski)、ノルウェー・オスロ大(K. Shalchian-Tablizi, K. Jakobsen)、カナダ・ダルハウジー大(J. Archibald)、カナダ・ブリティッシュコロンビア大(P. Keeling)、イギリス・オックスフォード大(T. Cavalier-Smith)との共同で行った。現在結果を *Genome Biology and Evolution* 誌に投稿中である。

【2】新奇真核生物の発見 (稲垣・橋本)

(1) YPF602 株の解析

パラオ共和国の海水サンプルから新規従属栄養性真核生物を単離した。光学顕微鏡・電子顕微鏡観察からこの YPF602 株は、これまで知られている何れの単細胞真核生物にも類似していないことが分かった。この生物から 6 種類の遺伝子配列を決定し、系統解析を行った。これまでの解析で YPF602 株の系統的位は決定できていないが、クリプト藻類に近縁である可能性が示唆された。現在顕微鏡観察結果と 6 遺伝子配列に基づく系統解析の結果をまとめた論文を執筆中である。

(2) TKB055 株の解析

TKB055 株は筑波大学構内の評太郎池から単離された新規従属栄養性真核生物である。これまでの光学顕微鏡観察では、TKB055 株はこれまで知られている何れの単細胞真核生物とも類似性は見られなかった。しかし、この生物から複数遺伝子を単離し系統解析を行ったところ、エクスカバータ生物群の Discoba と呼ばれるグループとの近縁性が示唆された。電子顕微鏡観察による詳細な細胞内構造の観察結果を行ったが、エクスカバータ生物群に特徴的な細胞構造が観察された。現在顕微鏡観察結果と系統解析の結果をまとめ、論文執筆の準備を行っている。

【3】分子系統解析の方法論研究 (稲垣・橋本)

(1) 発見的樹形探索法の効率評価

最尤法をもちいる分子系統解析では、データ中に含まれる配列数から生成可能なすべての樹形の尤度を計算し、その尤度が最も大きい系統樹を「最尤系統樹」として選び出す(網羅的樹形探索)。しかし、配列数が増えるにつれ検証すべき樹形数は指数関数的に上昇し、実際の系統解析において網羅的樹形探索を行うことは事実上不可能である。この計算コストの高い網羅的樹形探索法のかわりに、任意に設定した「スタート系統樹」から最尤系統樹をヒューリスティック(発見的)に探索する方法が開発されてきた。ヒューリスティック探索は、可能な樹形をすべて探索しないため計算コストは極めて低く、実データ解析に広く使用されている。しかしこの探索法の最大の問題点は、結果の樹形が必ずしも最尤系統樹である保証がないことである。

我々は、300 個の 10 配列データから生成可能な 2,027,025 樹形に対して網羅的探索を行った。この解析には PACS-CS およびグリッドコンピューターを用いた。次に、網羅的探索から得られた最尤系統樹と、ヒューリスティック探索から得られた樹形を比較した。その結果、ヒューリスティック探索が最尤系統樹を選び出す効率は、(配列データの特性にも依存するが)これまで考えられてきたよりも低い(~20%)ことが判明した。興味深いことに、複数の樹形からヒューリスティック探索を開始することにより、探索効率を改善することが可能であることが判明した。

(2) 遺伝子サンプリングが連結データ解析結果にもたらす影響 (稲垣, 橋本)

我々は 10,000 ポジション以上をふくむに 27 遺伝子データを生成し、この中から遺伝子をランダムにサンプリ

ングし、系統解析を行った。ノリの仲間である紅藻類と、クロレラなどを含む緑藻類や陸上植物をふくむ「緑色植物」は単系統であると考えられている。実際 30,000 アライメントポジション以上を含む巨大配列データ解析においては、紅藻類・緑色植物間の近縁性は強く復元されている。この紅藻類・緑色植物間の近縁性をマーカーにし、遺伝子サンプリングがどのように連結データ解析結果に影響をもたらすかを精査した。我々の行った解析により、紅藻類・緑色植物間の近縁性に対するサポートが、データサイズよりも遺伝子サンプリングにより大きく変動することが判明した。この結果は *Molecular Biology and Evolution* 誌 (2008 年 IP=7.280) に掲載された。

4. 研究業績

<研究論文>

1. Takishita K, Yamaguchi H, Maruyama T, Inagaki Y. A hypothesis for the evolution of nuclear-encoded, plastid-targeted glyceraldehyde-3-phosphate dehydrogenase genes in "chromalveolate" members. 2009 PLoS ONE 4(3) e4737.
2. Sakaguchi M, Takishita K, Matsumoto T, Hashimoto T, Inagaki Y. Tracing back the EFL evolution in the cryptomonads-haptophytes assemblage: Separate origins of EFL genes in haptophytes, photosynthetic cryptomonads, and goniomonads. 2009 *Gene* 441(1-2): 126-131 (Published on-line on Jun. 26, 2008).
3. Takishita K, Inagaki Y. Eukaryotic origin of glyceraldehydes-3-phosphate dehydrogenase genes in *Clostridium thermocellum* and *Clostridium cellulolyticum* genomes and putative fates of the exogenous gene in the subsequent genome evolution. 2009 *Gene* 441(1-2): 22-27 (Published on-line on Mar. 10, 2008).
4. Kamikawa R, Inagaki Y, Sako Y. Direct phylogenetic evidence for lateral transfer of elongation factor-like gene. 2008 *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 105:6965-6969.
5. Ohama T, Inagaki Y, Bessho Y, Osawa S. Evolving genetic code. 2008 *Proceeding of the Japan Academy Series B* 84:58-74.
6. Nishimoto Y, Arisue N, Kawai S, Escalante AA, Hori T, Tanabe K, Hashimoto T. Evolution and phylogeny of the heterogeneous cytosolic SSU rRNA genes in the genus *Plasmodium*. 2008 *Molecular Phylogenetics and Evolution* 47:45-53.

<学会発表>

(A)招待講演

1. Akinori Yabuki, Takeshi Nakayama, Ken-ichiro Ishida, Tetsuo Hashimoto, Yuji Inagaki. TKB055 as a novel member of "Discoba". 2008 年 11 月 8-9 日(筑波大学) International Symposium on Protistology: Evolution and Diversity.

2. Yuji Inagaki, Kiyotaka Takishita, Tadashi Maruyama, Akinori Yabuki, Ken Ichiro Ishida, Naoji Yubuki, Isao Inouye, Miako Sakaguchi, Tetsuo Hashimoto. Protist EST program in Tsukuba (PETIT): Similar to but smaller than PEP by Genome Canada/Genome Atlantic. PROTIST 2008 (ISOP59/ISEPXVII) 2008年7月21-26日PROTIST 2008 (ISOP59/ISEPXVII) (カナダ・ダルハウジー大学)

(B)その他の学会発表

1. 橋本哲男、坂口美亜子、稲垣祐司. 真核生物の系統進化:有中心粒太陽虫の位置づけを中心に. 2008年12月9-12日第31回日本分子生物学会年会・第81回日本生化学会大会合同大会(兵庫・神戸・神戸ポートアイランド)
2. Akinori Yabuki, Yuji Inagaki, Ken-ichiro Ishida. *Palpitomonas bilix* n. gen., n. sp., a missing-link protist between green algae and cryptophytes? 2008年11月8-9日(筑波大学) International Symposium on Protistology: Evolution and Diversity.
3. Takuya Matsumoto, Miako Sakaguchi, Akinori Yabuki, Tetsuo Hashimoto, Yuji Inagaki. Katablepharid EFL possesses the evolutionary affinity to the homologues of chlorarachniophytes, foraminiferans, and diatoms. 2008年7月21-26日PROTIST 2008 (ISOP59/ISEPXVII) (カナダ・ダルハウジー大学)
4. Miako Sakaguchi, Kiyotaka Takishita, Takuya Matsumoto, Tetsuo Hashimoto, Yuji Inagaki. Updating the distribution of elongation factor-like genes in eukaryotes. PROTIST 2008 (ISOP59/ISEPXVII) 2008年7月21-26日PROTIST 2008 (ISOP59/ISEPXVII) (カナダ・ダルハウジー大学)

5. シンポジウムの開催

1. 2008年11月8-9日 国際シンポジウム「International Symposium on Protistology: Evolution and Diversity」主催:平成19年度筑波大学プレ戦略イニシアチブプログラム「地球—生命—人類の持続的共存のための新プロティストロジー創出へ向けた教育研究拠点形成(代表:井上勲)」講演者(国外8名・国内10名)

IV 超高速計算システム研究部門

IV-1 計算機アーキテクチャ分野

1. メンバ

教授	佐藤 三久
教授	朴 泰祐
准教授	建部 修見
准教授	高橋 大介
准教授	埴 敏弘
助教	多田野 寛人

2. 概要

本研究グループは、高性能計算システムアーキテクチャ、省電力システムアーキテクチャ、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。研究分野は計算機アーキテクチャ研究グループとグリッド研究グループに分かれるが、常に両グループ間で共同研究を行っているため、以下の報告では両者を区別せずまとめて記述する。

3. 研究成果

【1】高性能省電力計算システムアーキテクチャに関する研究

(1) 省電力ディペンダブルサーバに関する研究(佐藤)

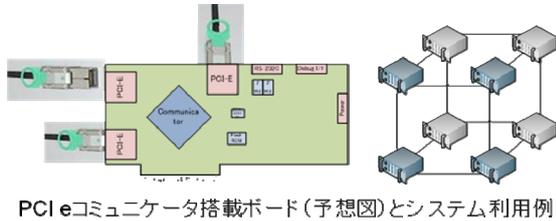
分散 web サーバの省電力化及び高信頼 DSM の開発を行った。分散 web サーバ省電力化においては、複数台の web サーバに対するアクセス頻度や負荷に応じ、適宜サーバの電力制御(DVFS 等)を行い、全体の電力性能最適化を行う。高信頼 DSM では、相互結合網で結合されたノード間で、リモートページングと同じ技術を用いたメモリページのコピーを行い、他のノード上にチェックポイントデータを作成する。これを自動的に行うことにより、HDD を持たない組み込み機器等の省電力並列システム上で信頼性の高い DSM の構築を行う。これらの基本システム的设计・実装を行った。

(2) 高性能・耐故障・省電力並列システムリンクに関する研究(朴, 埴)

ルネサステクノロジとの共同研究により、PCI-e gen2 の仕様をベースに、並列ノード間の短距離結合網の開発を行った。同リンクは PEARL と呼ばれ、PCI-e gen2 の multi-lane (最大4)と、拡張された PCI-e 通信プロトコルを用いることにより、リンク故障対応と省電力制御を可能とする。PEARL の実装として、各並列ノードに PEACH と呼ばれる通信リンク制御チップ(ルータ)を設け、これらの間を相互に結合する。今年度は PEACH の試作版として、PEARL の PHY 部分とトランスポートレイヤ制御部分を FPGA 化したテストボードを実装し、この上で基本的な通信アルゴリズム、耐故障アルゴリズムの研究開発を行った。

PEARL を用いたノード間は、通信レーン故障に対応し、さらに現在開発中の4チャンネルの PEACH を用い、複数経路を持つ相互結合網を構築すれば、小規模システムにおけるマルチパス(複数経路)が実現でき、う回路

を利用した通信性の確保も実現可能である。さらに、1つのノード上の PEARL に slave device を接続することにより、ノード故障時にそのノードに結合されている PEACH 間結合でメッシュやキューブ系ネットワークが構築可能である。



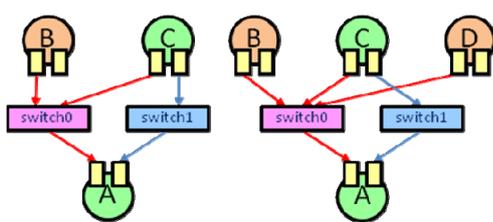
PCI e コミュニケータ搭載ボード (予想図) とシステム利用例



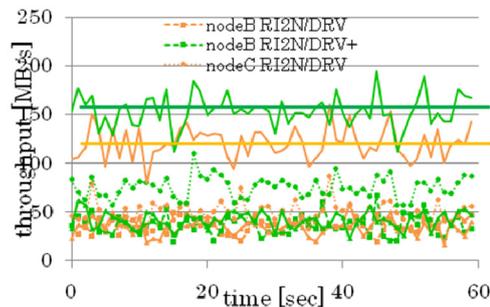
PCI-e に基づく PEARL リンクの試作 FPGA ボード

(3) HPC クラスタ向け耐故障・高性能コモディティネットワーク(朴, 塙)

研究室や小規模 HPC 向け PC クラスタでは、高価な SAN ではなく GbE が多用されている。これらのシステムでは、相互結合網の費用が安価ではあるが、絶対的バンド幅の不足が問題となり、また GbE の持つ性能的不安定性や一時故障を含む故障率の高さが問題となる。複数の GbE リンクを束ねてこれを解決する RI2N (Redundant Interconnection with Inexpensive Network) に対し、完全対称型でなく一部に非対称性を含むマルチリンク GbE 結合に関する改良を行った。改良型 RI2N では、相互結合網の一部が単一リンクで構成され、残りが複数リンクの場合でも、その非対称性を検出し、動的なパケット振り分けに基づく最適化を行った。結果として、従来の RI2N に比べ、対称結合の場合は全く性能は変わらないのに対し、非対称結合の場合は最大で 30% 以上の性能を向上するシステムを開発した。



非対称マルチリンク結合の例



右側のネットワーク構成におけるパケット分布とリンク毎バンド幅

【2】並列処理言語, 並列処理システム性能評価に関する研究

(1) 次世代向け超並列処理言語の研究開発(佐藤, 朴)

分散メモリ構成を基本とする大規模並列処理システムにおける並列 HPC アプリケーションのため、XcalableMP (XMP) と名付けられた言語の開発を行っている。XMP は OpenMP のようなディレクティブベースの言語であるが、実装系では共有メモリではなく MPI におけるメッセージパッシングの呼び出しを想定する。しかし、PGAS 的な概念に基づき、並列ノード集合としてはグローバルビューに基づく変数インデキシング、MPI 的な通信においてはローカルビューに基づくノード内メモリ参照の両方を許し、基本的にはディレクティブに依存する並列化を支援しつつ、性能チューニングを行う上級者向け、ライブラリ開発者向けには MPI 通信が間接的

に見えるような形でのプログラム最適化手段を提供する。XMP は分散メモリに基づく通信コスト削減と高いプログラマビリティを基本とし、様々なレベルでの並列化支援を行う。本年度は言語のプロトタイプ開発を行った。

```
#pragma xmp template T[10]
#pragma xmp distributed T[block]

int array[10][10];
#pragma xmp aligned array[i][*] to T[i]

main(){
  int i, j, res;
  res = 0;
  #pragma xmp loop on T[i] reduction(+:res)
  for(i = 0; i < 10; i++){
    for(j = 0; j < 10; j++){
      array[i][j] = func(i, j);
      res += array[i][j];
    }
  }
}
```

data distribution

add to the serial code :
incremental parallelization

work sharing and data
synchronization

```
int array[YMAX][XMAX];

main(int argc, char**argv){
  int i,j,res,temp_res, dx,llimit,ulimit,size,rank;

  MPI_Init(argc, argv);
  MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
  MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);
  dx = YMAX/size;
  llimit = rank * dx;
  if(rank != (size - 1)) ulimit = llimit + dx;
  else ulimit = YMAX;

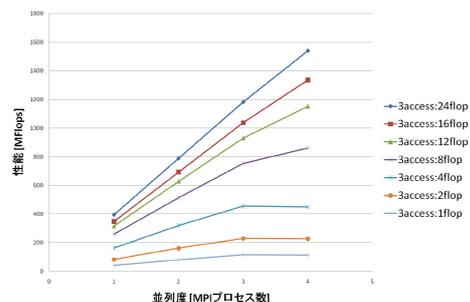
  temp_res = 0;
  for(i = llimit; i < ulimit; i++){
    for(j = 0; j < 10; j++){
      array[i][j] = func(i, j);
      temp_res += array[i][j];
    }
  }

  MPI_Allreduce(&temp_res, &res, 1, MPI_INT, MPI_SUM, MPI_COMM_WORLD);
  MPI_Finalize();
}
```

XMP プロトタイプで記述されたディレクティブベース言語(左)と MPI 関数を用いて変換された例(右)

(2) マルチコア・マルチソケット・マルチレーン構成クラスタの性能解析(朴)

T2K-Tsukuba のような現在の主流 HPC クラスタは、マルチコア/マルチソケット構成によりノード内に十数程度までのコアを持つようになり、メモリ性能及びネットワーク性能を圧迫している。このようなシステムでは、マルチレーン化によるノード間通信性能はある程度向上しているが、ノード内のメモリ性能がボトルネックとなる可能性が高く、ノード内コアの演算以外への有効利用手法を模索している。基本的研究として、numactl によるスレッドとコアのマッピング及び byte/FLOP 値を人工的に設定した仮想ベンチマークでのメモリ性能が全体並列性能に与える影響を調べ、通信処理の隠蔽にマルチコアを利用し、必ずしも全コアを演算に割り当てない方法における性能解析を行った。

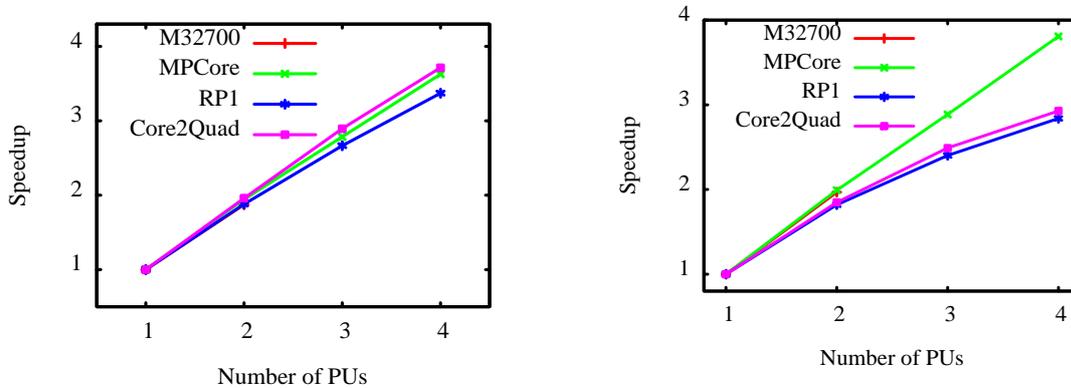


numactl による各種コアマッピング(左)と、コア当たりの byte/FLOP 値を変化させた場合の並列処理性能向上の saturation の様子(右)

(3) 組み込み向けマルチコアプロセッサの性能評価(佐藤, 塙)

近年の CPU のマルチコア化は組み込みプロセッサでも進んでおり、その性能評価と高性能システムへの適用は重要な課題である。本研究ではルネサスの M32R, ARM/NEC エレクトロニクス社の MPCore, ルネサスの RP1, インテルの Core3 Duo 等の省電力マルチコアプロセッサを比較し、それらのスケーラビリティや並列適応性等を、各種ベンチマークの本システムへの適用を行い、性能を評価した。結果として、極端に memory

intensive なアプリケーションでなければ使用コア数と共に性能も向上すること、ロック機構の違いが消費電力に以外に反映されることがわかった。

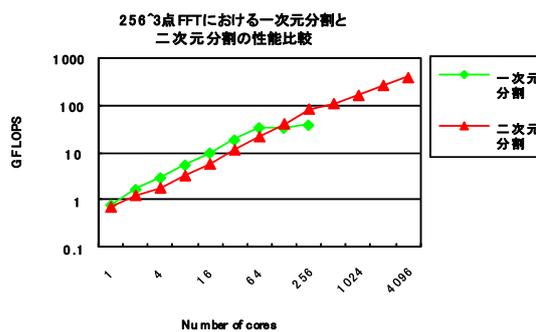


組み込み向けマルチコアプロセッサにおける Susan Smoothing(左)及び NAS-PB CG (右)のスケラビリティ

【3】大規模高性能並列システムにおける高速並列数値処理

(1) 次世代スーパーコンピュータに向けた高速フーリエ変換アルゴリズム(高橋)

文科省が推進している次世代スーパーコンピュータ(NGS)におけるナノ分野グランドチャレンジアプリケーションの一つである3D-RISMにおけるFFT性能の改善に関する研究を行った。同応用では、対象となるFFT問題の規模が小さく、strong scalingな問題となることがわかっている。本研究では並列三次元FFTを二次元分割化し、通信時間を削減することでMPIプロセスが多い場合にも対応するようにした。その結果、4096コアを用いるT2K-Tsukubaシステムにおいても、 $N=256^3$ 点FFTにおいて最大401GFLOPSを超える性能が得られた。

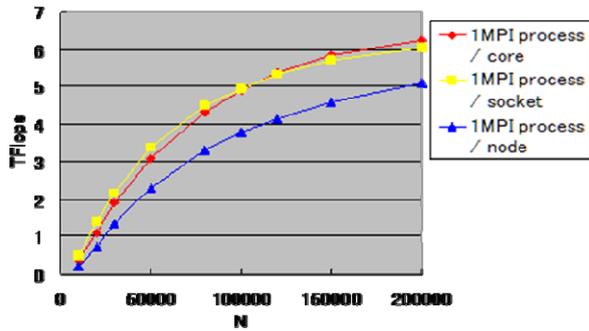


(2) T2K-TsukubaにおけるLinpack性能チューニング(高橋)

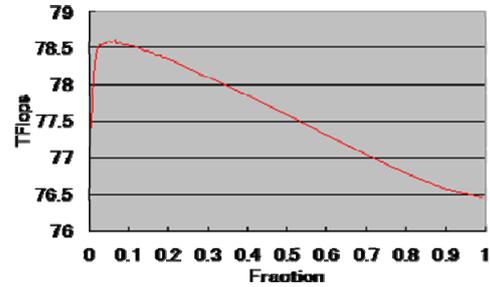
平成20年6月に導入されたT2K-Tsukubaシステムにおいて、625ノードを用いたLinpack性能評価を行った。大規模密行列の連立一次方程式の求解を通じ、fat-node構成とマルチレール構成を併せ持つT2K-Tsukubaのようなシステムの特徴を調べ、High Performance Linpackにおいて $N=1,508,000$ の場合に76.46TFLOPSの性能が得られた。これは、ピーク性能値の83.1%に当たり、IA-32ベースのシステムとしてほぼ

世界最高の実効効率を引き出している。

64ノード、1,024コアを用いた場合の
HPL実行方法の比較(NB=232)



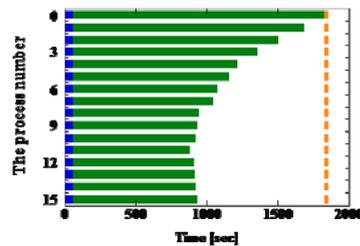
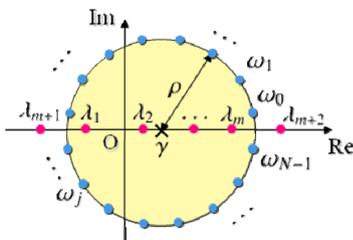
625ノード、10,000コアを用いたHPL実行にお
けるTFlops値の推移(N=1,508,000)



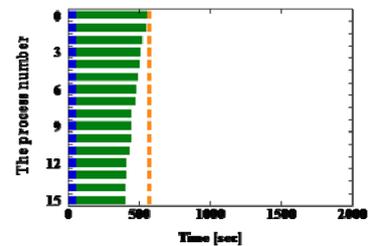
HPL のプロセスとコアのマッピングの違い(左)と, T2K-Tsukuba における実効性能(右)

(3) Block Krylov 部分空間法に関する研究(多田野)

Block Krylov 部分空間法の応用と高速化について, これを適用した周回積分を用いた固有値解法の高速化を行った. 一般化固有値問題 $Ax = \lambda Bx$ を互いに独立な連立一次方程式群 $(\omega_j B - A)Y_j = V, j = 0, 1, \dots, N-1$ に変換し, 小規模固有値問題に帰着させる. この求解において, 各固有値の値と ω の値に着目し, 円領域と接点の配置に注目し, 計算時間・通信時間を短縮させる. 結果として, 元の連立一次法定期的の求会が大幅に高速化された.



(a) COCG法.



(b) Block COCG法.

■: データ転送, ■: 前処理, ■: 連立一次方程式の求解, ■: 固有対の計算.

円領域と接点の配置(左), T2K-Tsukuba におけるオリジナル処理(中), 改良後の時間短縮の様子(右)

【4】グリッド技術に関する研究

(1) Gfarm 広域ファイルシステムに関する研究(建部)

オープンソースで開発を継続している Gfarm 広域分散ファイルシステムに関する研究を継続している. 本年度は, 科研費「情報爆発」における研究開発用分散プラットフォームである InTrigger 上で全国 239 ノード, 147TByte に及ぶ実験環境を構築し, バンド幅測定等の実験を行った.

(2) JLDG におけるグループ内広域ファイル共有の実現(建部)

素粒子物理研究グループとの共同研究により、JLDG 内における分散ファイル共有環境を構築した。研究は筑波大を中心とし、KEK、金沢大、京大、阪大、広島大により構築された SINET3 専用線で相互結合されたファイルシステム上で JLDG データベースの実運用を行った。標準プロトコルである GridFTP による単一認証アクセスを実現したが、拠点間ファイル複製作成は 50~70MB/ノードと落ち込んだ。



JLDG のための分散広域ファイルシステムと仮想組織管理サーバによる管理

(3) 国内大学間連携のためのグリッド環境構築(建部, 佐藤)

筑波大・東大・京大の3大学における T2K システム間の連携をはかるため、筑波大 CCS 認証局の運用、簡単な手順での証明書発行を実現し、単一認証によるログイン、ファイル転送、広域分散ファイルシステム運用を可能とした。

また、9大学のスパコンセンター間を相互乗り入れする支援環境として、T2K-Tsukuba 上に「グリッドパック」の導入を行い、相互のアカウント利用運用を開始した。さらに、T2K の3大学間連携のための NAREGI を始めとする各種環境の実装と運用を行った。

4. 研究業績

<学術雑誌論文>

1. 今田 貴之, 佐藤 三久, 堀田 義彦, 木村 英明: 分散型 Web サーバにおけるノード状態制御による省電力化の検討, 情報処理学会トランザクション ACS
2. 高橋 睦史, 佐藤 三久, 高橋 大介, 朴 泰祐, 宇川 彰, 中村 宏, 青木 秀貴, 澤本 英雄, 助川 直伸: 演算加速機構を持つオンチップメモリプロセッサの電力性能評価, 情報処理学会トランザクション ACS
3. Y. Nakajima, M. Sato, Y. Aida, T. Boku, F. Cappello: Integrating Computing Resources on Multiple Grid-Enabled Job Scheduling Systems Through a Grid RPC System. J. Grid Comput. 6(2): 141-157 (2008)
4. T. Sakurai, Y. Kodaki, H. Tadano, D. Takahashi, M. Sato, U. Nagashima: A parallel method for large sparse generalized eigenvalue problems using a GridRPC system. Future Generation Comp. Syst. 24(6): 613-619 (2008)
5. 横澤 拓弥, 高橋 大介, 朴 泰祐, 佐藤 三久, "行列積を用いた古典 Gram-Schmidt 直交化法の並列化", 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, Vol.1, No.1, pp.61-72, 2008

6. 岡本 高幸, 三浦 信一, 朴 泰祐, 塙 敏博, 佐藤 三久, “ユーザ透過に利用可能な高性能・耐故障マルチリンク Ethernet 結合システム”, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, Vol.1, No.1, pp.12-27, 2008
7. G. Antoniu, L. Cudennec, M. Ghareeb, O. Tatebe: “Building Hierarchical Grid Storage Using the GFARM Global File System and the JUXMEM Grid Data-Sharing Service”, Lecture Notes In Computer Science, Springer, Vol. 5168, pp.456-465, 2008

〈国際会議論文〉

1. H. Kimura, M. Sato, T. Imada and Y. Hotta: Runtime DVFS Control with instrumented code in Power-scalable Cluster System, Proc. 10th IEEE International Conference on Cluster Computing (CLUSTER 2008), pp.354-359
2. H. Midorikawa, M. Kurokawa, R. Himeno, M. Sato: DLM: A Distributed Large Memory System using Remote Memory Swapping over Cluster Nodes, Proc. 10th IEEE International Conference on Cluster Computing (CLUSTER 2008), pp.268-273
3. T. Imada, M. Sato, Y. Hotta, H. Kimura: Power management of distributed web servers by controlling server power state and traffic prediction for QoS. HP-PAC2008 (with IPDPS 2008): 1-8.
4. Y. Nakajima, Y. Aida, M. Sato, O. Tatebe: Performance Evaluation of Data Management Layer by Data Sharing Patterns for Grid RPC Applications. Euro-Par 2008: 554-564
5. J. Lee, M. Sato, T. Boku, “*OpenMPD: A Directive-Based Data Parallel Language Extensions for Distributed Memory Systems*”, First International Workshop on Parallel Programming Models and Systems Software for High-End Computing (P2S2), 2008.
6. R. Kanbayashi, M. Sato, A Distributed Architecture of Sensing Web for Sharing Open Sensor Nodes, GPC 2009
7. S. miura, T. Okamoto, T. Boku, T. Hanawa, M. Sato, “RI2N: High-bandwidth and Fault-tolerant Network with Multi-link Ethernet for PC Clusters”, Proc. Of Cluster2008, CD-ROM, Tsukuba, 2008.
8. S. Miura, T. Boku, T. Okamoto, T. Hanawa, “A Dynamic Routing Control System for High-Performance PC Cluster with Multi-path Ethernet Connection”, Proc. of CAC2008, CD-ROM, Miami, 2008
9. S. Nishida, N. Katayama, I. Adachi, O. Tatebe, M. Sato, T. Boku, A. Ukawa: “High Performance Data Analysis for Particle Physics using the Gfarm file system”, Journal of Physics: Conference Series, Vol. 119, No. 062039, 2008.
10. D. Takahashi: A Volumetric 3-D FFT on Clusters of Multi-Core Processors, 2009 SIAM Conference on Computational Science and Engineering, Miami Hilton Downtown, Miami, Florida, USA, March 5, 2009
11. T. Yokozawa, D. Takahashi, T. Boku, M. Sato: Parallel Implementation of a Recursive Blocked Algorithm for Classical Gram-Schmidt Orthogonalization, Workshop on State-of-the-Art in Scientific and Parallel Computing (PARA 2008), NTNU, Trondheim, Norway, May 15, 2008.

12. Y. Ishikawa, H. Fujita, T. Maeda, M. Matsuda, M. Sugaya, M. Sato, T. Hanawa, S. Miura, T. Boku, Y. Kinebuchi, L. Sun, T. Nakajima, J. Nakazawa, and H. Tokuda, "Towards an Open Dependable Operating System," Proc. of 12th IEEE International Symposium on Object / component / service-oriented Real-time distributed Computing (ISORC2009)
13. H. Tadano, T. Sakurai. A performance evaluation of block Krylov subspace methods for the contour integral method. International Symposium on Frontiers of Computational Science 2008, Nagoya, Japan, Nov. 2008
14. T. Sakurai, H. Tadano, An Inner/Outer Loop Free Parallel Method for Interior Eigenvalue Problems. 7th International Workshop on Accurate Solution of Eigenvalue Problems, Dubrovnik, Croatia, June. 2008.
15. J. Asakura, T. Sakurai, H. Tadano, T. Ikegami and K. Kimura. A Linearization Method for Polynomial Eigenvalue Problems Using a Contour Integral. 7th International Workshop on Accurate Solution of Eigenvalue Problems, Dubrovnik, Croatia, June. 2008.

<招待講演>

1. T. Boku, "Supercomputing Driven by Cluster Technology -It's Light and Shadow-", Supercomputing & KREONET/GLORIAD Symposium, Jeju, 2008 (Keynote Speech)
2. 朴 泰祐, "高性能計算環境の動向と今後の展望", 大阪大学シグマ講演会(招待講演)
3. 建部修見: "クラウドコンピューティングを高度化するストレージ技術(招待講演)", WebDB Forum 2008, 招待講演, 2008.
4. 高橋大介: 高速フーリエ変換の超並列計算に向けて, スーパーコンピューターワークショップ 2009, 自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター, 岡崎市, 2009年1月20日

V 計算情報学研究部門

V-1 計算知能分野

1. メンバ

教授 北川博之

講師 天笠俊之, 川島英之

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計算知能分野は、データ工学関連分野の研究開発を担当している。具体的には、異種データベースや多様な情報源を統合的に扱うための情報統合基盤技術、データ中に埋もれた知識や規則を発見するためのデータマイニング・知識発見技術、インターネット環境において様々なデータを統一的に扱うための XML 関連技術等の基盤技術の研究を行った。また、地球生物環境研究部門や素粒子宇宙研究部門と連携して、計算科学の各分野における応用的な研究を推進した。

3. 研究成果

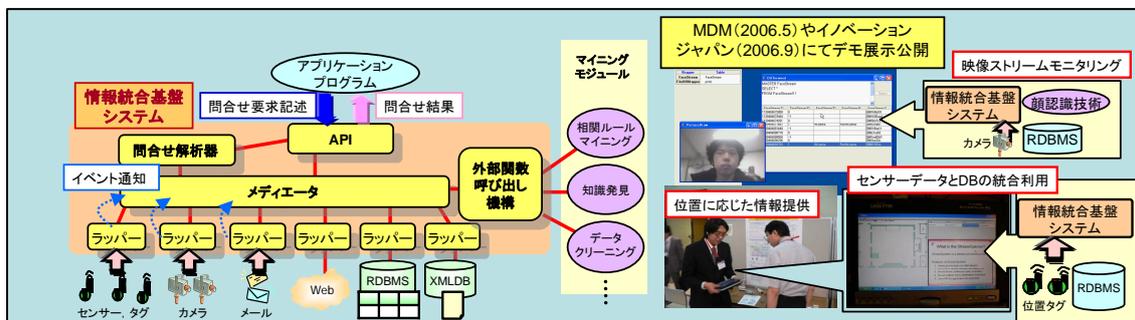
【1】情報統合基盤技術

(主な研究費: 科研費基盤研究 A, 科研費特定領域研究, JST CREST, 科研費若手研究 B)

(1) 情報統合基盤システム(北川, 天笠, 川島)

異種の分散したデータベースや情報源を統合的に扱うための基盤技術・システム・応用の研究開発を行った。特に、従来型のデータベースや Web 等のみではなく、センサー、位置情報源等の連続的に情報を提供するストリーム情報源をも統合対象とすることができる基盤システム **StreamSpinner** を研究開発した。StreamSpinner は、リレーショナルモデルをベースとした情報統合処理機能を有するが、ビデオや音声等の連続メディアの統合処理にも適用可能である。また、あらかじめ提供される基本演算子に加えて、応用目的向けのプログラムを外部関数として問合せから呼び出す機能を実現している。これによって、時系列データの類似検索や、カメラ映像ストリームに対して解析機能を組み合わせた情報統合等が可能である。

さらに、複数ノード上で StreamSpinner を協調動作させることにより、分散環境におけるストリーム処理を実現することができる。また、ノード障害が発生した場合でも持続的に統合処理を実現するための機



能の研究も推進した。

(2) センシングデータベース基盤(川島, 北川)

実世界監視データ等の時系列データを DBMS で管理する需要が増加しているが、このような要求に

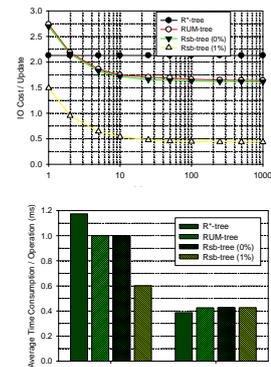
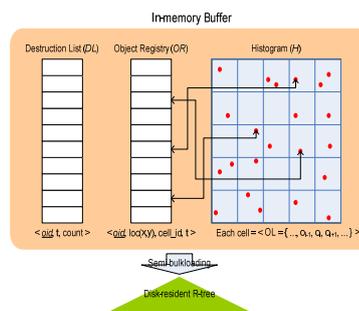
対応するための DBMS には、高速データ挿入機能、データ解析機能、連続的問合せ機能等が要求される。これらの機能を実現するセンシングデータベース基盤として KRAFT を開発した。UPS 付きマシン
のメモリを永続的記憶装置とみなすことで実現する高速データ挿入機能、時系列データに対する類似
検索関数、FFT 関数、集約関数等の解析機能が特徴である。

(3) 確率的ストリーム処理技術(川島, 北川)

実世界で生起する事象は不確定であり、確率的に表現され得る。そのような確率的データストリーム
を処理するために、Lineage を用いる手法を提案した。同手法により、複合事象の確率を安全かつ効率的
に計算される。処理過程において確率値はブール式により保持される。最終段階に残されたデータ
についてのみ Lineage を用いた確率計算が実行される。また、確率推論の一技法であるベイジアンネ
ットワークをリレーショナルデータストリーム処理システムと統合する研究も行った。確率的データを生ずる
ベイジアンネットワークをリレーショナルデータベースの枠組みの中で扱うため、ベイジアンネットワ
ークをオブジェクトとして実現し、それを操作するための演算子を定義している。

(4) 多次元ストリーム用高性能索引機構(北川)

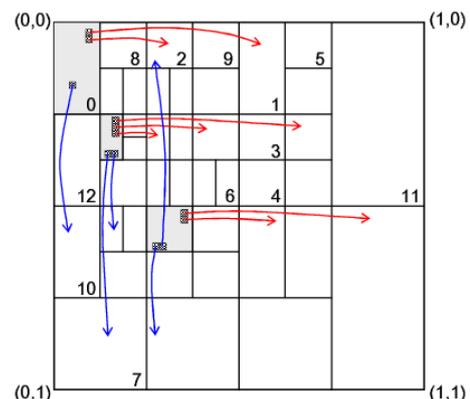
ストリームデータの中には、移動体の位置
情報等、多次元データが存在する。多次元
データでは、空間的検索を支援する必要がある。例えば、距離検索や近傍検索等である。多次元データに対する索引機構としては、R
木等の空間索引が従来用いられてきたが、
従来の空間索引は静的なデータを対象とし
ており、オブジェクトの現在値が頻繁に変化
する動的な環境下では、極めて性能が劣化
することが知られている。本研究では、R 木を元に、主記憶と二次記憶を有機的に利用することで、この
問題に対応するための新たな索引機構 Rsb 木(R-tree with Semi-Bulkloading)を開発した。



(5) P2P ネットワーク基盤技術(北川)

インターネットを基盤としたデータの相互運用がグローバル化する一方で、インターネット上に特定の
組織やグループに閉じた専用のネットワークを構築したいという要求は、情報保全や情報流通の効率
化の観点から急速に高まっている。ピアツーピアネットワーク(P2P)は、特定の応用向きのネットワークを
柔軟に構築できる「オーバーレイネットワーク」の基盤技術とし
て近年注目されている。

我々は分散ハッシュ表(DHT; Distributed Hash Table)と呼
ばれる P2P に着目し、その効率化に取り組んでいる。具体的には、CAN (Content Addressable Network)と呼ばれるプ
ロトコルを取り上げ、その負荷分散やアクセス効率化を図った。従来の CAN では、特定のエン
トリポイントに対してピアの加入・離脱が頻発すると、ピア間の負荷分散に偏りが発生し、それに
伴い検索効率が低下することが知られていた。



この問題に対処するために、分散かつ自律的な負荷分散機構を取り入れるとともに、検索処理の効率化のための長距離リンクを加えた RCAN を提案した。これにより、上記の問題が解消されることを実験によるシミュレーションで示した。

【2】データマイニング・知識発見技術

(主な研究費: 科研費特定領域研究, 科研費基盤研究 A, 科研費若手研究 B, JST CREST)

多様な情報源に対する外れ値検出, 時系列文書クラスタリング, 文書のトピック分析, 移動体オブジェクトに対する移動統計量抽出等の種々のデータマイニング・知識発見技術の研究開発を進めた。以下では、主なものについて述べる。

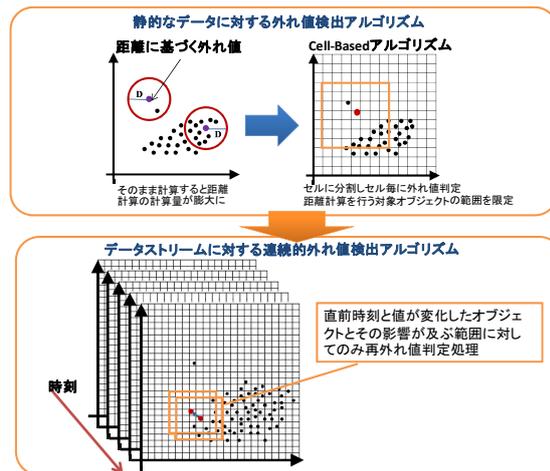
(1) 外れ値検出(北川)

外れ値とは通常のデータから大きく例外的なデータのことであり、異常検出や興味あるデータの発見等に有用である。実世界には多様な情報源が存在するため、それぞれの情報源に対して固有の特徴を考慮した外れ値を定義し検出を行うことが重要である。

多くの外れ値検出技術は、数値属性値を主体としたデータを対象としており、トランザクションデータからの外れ値検出については既存の研究は極めて少ない。POS データで知られるトランザクションデータから、他とは逸脱した動きを見せるトランザクションを検出出来れば、データ解析上、大きな助けとなることが期待できる。そこで我々は、トランザクションデータにおけるアイテム間の相関性に着目し、本来ならばトランザクション中のアイテム集合と共起するはずのアイテムが、数多く出現していないトランザクションを、外れ値として検出する手法を開発した。外れ値度は、高い確信度を持つ相関ルールを利用して計算される設計となっている。WAIM2008 国際会議における本研究発表で、成田和世氏が Hongjun Lu Best Student Paper Award を受賞した。

一方、データストリームとして提供されるデータ量の増加により、データストリームに対するデータマイニングが重要となっている。データストリームに対する処理では、時々刻々と到着するデータに対して連続的にモニタリングすることが求められる。そこで本研究ではデータストリームに対する連続的な外れ値検出手法を開発した。

本研究では、各時刻におけるデータ分布が直前の時刻のものと同様であることが多いというデータストリームの特徴に着目して、差分処理を行い効率的な外れ値検出を行う。提案アルゴリズムでは、連続的に外れ値検出を行う際に、処理を最小限に抑えるため、直前時刻と比較して変化が生じたオブジェクトとそのオブジェクトが外れ値の判定に影響を与える範囲に限定して処理を行う。これにより無駄な処理を省き、効率化を図った。実データ、人工データを用いた実験により、既存の Cell-Based アルゴリズムをスナップショット毎に適用する手法より効率的であることを確認した。この研究成果により、北川教授および石田梢氏が DEWS2008 において優秀論文賞を受賞した。



(5) 時系列文書クラスタリング(北川)

文書クラスタリングは、文書集合からのトピック抽出や文書分類など、さまざまな応用が考えられている。しかしながら、文書の時間的な変化を考慮したクラスタリングおよびその結果の提示方法については、今後の研究の進展が期待されている。本研究では、大量のクラスタのストリームにおけるトピックの進展について問合せする枠組みを構築した。特に、時系列文書のクラスタリング結果に対する変遷パターンを問い合わせることができる問合せ言語を提案するとともに、その処理方式について検討した。

【3】XML・Web プログラミング

(主な研究費: 科研費特定領域研究, JST CREST, 科研費若手研究 B)

XML (Extensible Markup Language) は、データ記述のためのメタ言語であり、クリアテキストによって複雑なデータ構造を記述することができる。XML はネットワーク環境におけるデータ相互利用のための標準的なデータ記述フォーマットとして広く認知され、多くの分野で利用されている。XML 形式で生成、蓄積されるデータ量は爆発的に増加しており、今後もその傾向は継続することが予想される。このため、XML 形式で記述された大量の情報資源の効率的な蓄積および利活用を目的として、種々の研究を行った。

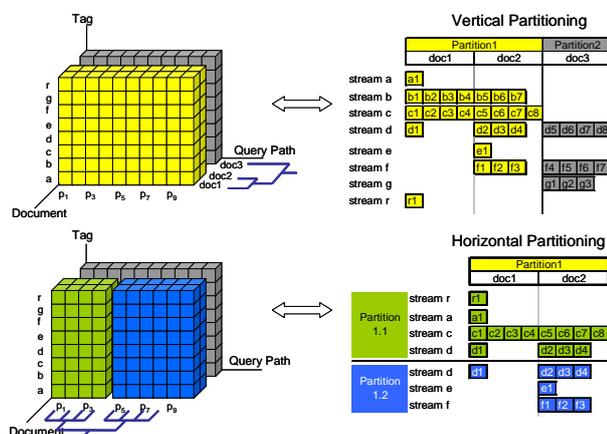
(1) XML データに対する OLAP(天笠, 北川)

XML データに対して必要な情報を獲得するための処理としては、検索が一般的である。しかしながら、XML の応用範囲が広がるにつれ、検索処理だけではなく、より複雑な分析処理と知識発見を可能にする対話的分析処理(OLAP; Online Analytical Processing)のサポートが重要になる。我々は、XML データの分析処理を可能にする XML-OLAP 技術の研究開発を行っている。OLAP では、データを多数の属性からなる仮想的な多次元キューブととらえ、キューブに対して演算を適用することによって分析を行う。今年度は、XML-OLAP において重要な役割を持つ TOPOLOGICAL ROLLUP 演算に着目した。これは、XML の特徴である木構造を利用し、葉ノードから根ノードに向かって集約計算を繰り返す行う演算であり、XML の木構造におけるさまざまなレベルでの集約値を使った解析を可能とする。TOPOLOGICAL ROLLUP 演算を高速に実行するためのいくつかのアルゴリズムを考案し、その特質を実験により評価した。この研究により、Chantola Kit 氏が「日本データベース学会・情報処理学会データベースシステム研究会・電子情報通信学会データ工学研究会優秀若手研究者賞」を受賞した。また、Chantola Kit 氏、天笠講師、北川教授が、iiWAS2008 Best Student Paper Award を受賞した。

(2) 大規模 XML 検索の並列処理(天笠, 北川)

XML データの大規模化に伴い、数百ギガバイト、あるいは数テラバイトの XML データを効率的に扱うための手法も今後必要となる。しかしながら、

XML は本質的に木構造であるため、その処理には多大なコストを要することが問題となる。これを背景に、PC クラスタを用いた大規模 XML データの並列処理方式について研究を進めている。本年度は、XML 問合せ処理における重要なアルゴリズムである“Holistic Twig Join”に着目し、これを PC クラスタ上で分散・並列実行する手法をそれぞれ検討した。Holistic Twig Join の分散



処理のため、XML データおよび問合せワークロードから得られる情報に基づき XML を分割する。これをクラスタノードに配置し、問合せを実行する。特定のノードに処理が集中するなど、処理負荷が不均衡になった場合には、過負荷のノードが実行している処理を、他ノードに分散することで、システム全体の性能を保つことができる。この研究発表により、Machdi Imam 氏、天笠講師、北川教授は iDB2008 Excelent Paper Award および iiWAS2008 Best Student Paper Award を受賞した。

(3) P2P ネットワークにおける XML 探索(天笠, 北川)

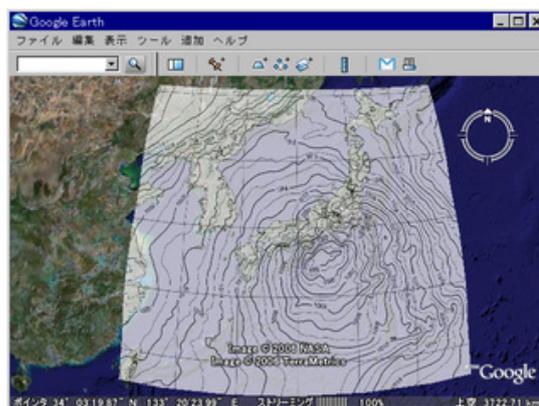
XML の普及に伴い、P2P ネットワークによって構築されたオーバーレイネットワークにおいても、XML 形式で記述されたデータあるいはメタデータが今後増えることが予想される。このため、我々は P2P ネットワーク、特に分散ハッシュ表(DHT)における XML データの格納と検索手法について研究を進めている。本年度は、昨年度までの研究成果を受け、分散ハッシュ表(DHT)において、XPath とキーワードの組み合わせによる検索を可能にするための手法を開発した。

【4】科学分野におけるデータベース応用

(主な研究費: 科研費若手研究 B)

(1) GPV/JMA アーカイブ(天笠, 北川)

地球生物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。さらに、これらのグリッドデータに加えて、数値データを元に作図した天気図を公開するとともに、天気図の閲覧性の向上するため、GoogleEarth 上に天気図をマップするための KML ファイルの公開サービスも行っている(エラー! 参照元が見つかりません。).



(2) 遠隔科学データベースアクセスツール MDFS(天笠, 北川)

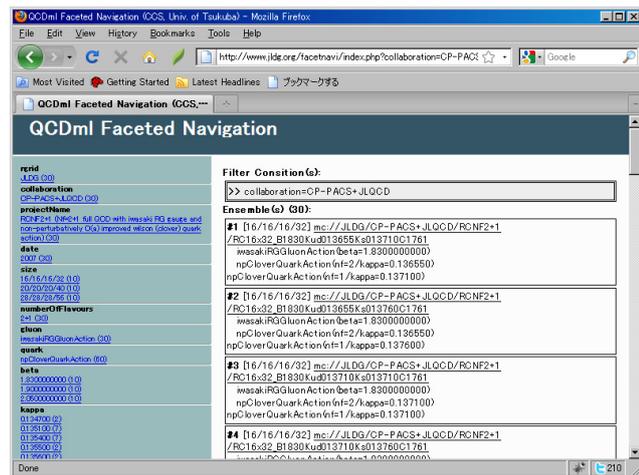
今日、膨大な科学データがインターネット上に公開されるようになった。各科学分野において、それらの情報資源を活用することは、研究を遂行する上で欠かすことができない。しかしながら、それらの多くは Web ブラウザによる対話操作による検索およびデータのダウンロードを必要としているため、研究者の負担となっている。本研究では、インターネット上に公開されているデータ(Web データベース)へのアクセスを容易にするため、MDFS なるシステムを開発した。MDFS は、Linux のカーネルモジュールである FUSE を利用し、Web データベースを、それがあたかもローカルなストレージに格納されているかのように扱うことを可能にする。科学者は、通常の研究業務に利用しているプログラムを一切変更することなく、ネットワーク越しにデータを直接操作することができる。

(3) 気圧配置図の自動分類(川島, 北川)

気圧配置は気象学において 15 種類に分類されている。気象学研究者は、西高東低冬型や南高北低夏型などの、ある特徴をもつ気圧配置の事例を多数必要とすることがある。過去の気圧配置データは膨大に蓄積されているが、各データが研究者にとって必要な気圧配置であるかを判別するには、目視以外の手法は存在しないのが現状である。我々は地球生物環境研究部門と共同で、この気圧配置の一つである西高東低冬型を Support Vector Machine(SVM) を用いて分類する手法を開発した。

(4) 格子 QCD アンサンブル XML のファセット検索(天笠, 北川)

ILDG (International Lattice Data Grid)では、格子 QCD 配意データのメタデータとして XML が用いられている。世界中の地域グリッドで公開されている配意データを検索するため、利用性の高いインタフェースの開発が望まれていた。このため我々は、QCDml のためのファセット検索インタフェースを設計、実装を行った。ファセット検索とは、検索対象オブジェクトの集合を効率よく探索するための手法である。オブジェクトは、あらかじめファセットと呼ばれるいくつかの独立した



カテゴリ毎に分類されている。各カテゴリ(ファセット)において、オブジェクトは着目する属性の値毎にグルーピングされており、その値がリスト表示されている。利用者はファセットに含まれる具体的な値を選択することで、オブジェクトの絞り込みを行い、探索を行う。XML データに対してファセット検索を適用するため、XML は半構造化性を考慮したファセットの抽出および QCDml におけるファセットの検討を行い、実際にシステムを構築した。

4. 研究業績

<学術雑誌論文>

1. Imam Machdi, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Cube-Based Analysis for Maintaining XML Data Partition for Holistic Twig Joins", 日本データベース学会論文誌, Vol. 7, No. 1, pp. 121-126, June 2008.
2. 佐藤亮, 川島英之, 北川博之, "ベイジアンネットワークを用いた確率的データストリーム処理システムの提案", 日本データベース学会論文誌, Vol. 7, No. 1, pp. 157-162, June 2008.
3. 澤菜津美, 森嶋厚行, 杉本重雄, 北川博之, "HTML ラッパ自動構築手法の提案", 日本データベース学会論文誌, Vol. 7, No. 1, pp. 263-268, June 2008.
4. 成田和世, 北川博之, "カテゴリ型レコードデータからの属性値間の相関性を利用した外れ値検出手法", 情報処理学会論文誌:データベース, (TOD39). Vol. 1, No. 2, pp. 38--53. September, 2008.
5. Sophoin Khy, Yoshiharu Ishikawa, and Hiroyuki Kitagawa, "Querying Topic Evolution in Time Series Document Clusters", 日本データベース学会論文誌, Vol. 7, No. 3, pp. 7-12, December 2008.

6. Djelloul Boukhelef and Hiroyuki Kitagawa, "Efficient Routing in Multi-ring Content Addressable Network", 日本データベース学会論文誌, Vol. 7, No. 3, pp. 19-24, December 2008.
7. 李曉晨, 天笠俊之, 北川博之, "HTML 構造型 P2P ネットワークにおけるキーワードを含む XPath による XML 文書検索", 日本データベース学会論文誌, Vol. 7, No. 3, pp. 67-72, December 2008.
8. 高橋公海, 森嶋厚行, 松本亜季子, 杉本重雄, 北川博之, "Web コンテンツ管理のための一貫性制約発見支援", 日本データベース学会論文誌, Vol. 7, No. 3, pp. 25-30, December 2008.
9. MoonBae Song and Hiroyuki Kitagawa, "Managing Frequent Updates in R-trees for Update-intensive Applications", IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, Vol. 99, No. 1. DOI#10.1109/TKDE.2008.225.
10. Hiroki Kimura, Hideyuki Kawashima, Hiroyuki Kusaka and Hiroyuki Kitagawa, "Applying a Machine Learning Technique to Classification of Japanese Pressure Patterns", Data Science Journal, Vol. 8, S59-S67, March 2009.

<国際会議発表論文>

1. Atsuyuki Morishima, Akiyoshi Nakamizo, Toshinari Iida, Shigeo Sugimoto, Hiroyuki Kitagawa, "PageChaser: A Tool for the Automatic Correction of Broken Web Links", The 24th International Conference on Data Engineering (ICDE 2008), pp. 1486-1488, Cancun, Mexico, April 7-12, 2008.
2. Kazuyo Narita and Hiroyuki Kitagawa, "Detecting Outliers in Categorical Record Databases Based on Attribute Associations", Proc. 10th Asia-Pacific Web Conference International Conference (APWeb 2008), LNCS 4976, pp. 111-123, Shenyang, China, April 26-28 2008.
3. Jiajun Gu and Hiroyuki Kitagawa, "Extending Keyword Search to Metadata on Relational Databases", Proc. The first International Workshop on Information-explosion and Next Generation Search (INGS 2008), pp. 97-103, Shenyang, China, April 26-27 2008.
4. Ryo Sato, Hideyuki Kawashima and Hiroyuki Kitagawa, "The Integration of Data Streams with Probabilities and a Relational Database using Bayesian Networks", Proc. International Workshop on Sensor Network Technologies for Information Explosion Era (SeNTIE 2008), pp. 114-121, Beijing, China, April 27, 2008.
5. Zhitao Shen, Hideyuki Kawashima and Hiroyuki Kitagawa, "Lineage-based Probabilistic Event Stream Processing", Proc. International Workshop on Sensor Network Technologies for Information Explosion Era (SeNTIE 2008), pp. 106-113, Beijing, China, April 27, 2008.
6. Koichi Inoue, Dai Akashi, Michihiro Koibuchi, Hideyuki Kawashima and Hiroaki Nishi, "Semantic router using data stream to enrich services", Proc. International Conference on Future Internet Technologies (CFI08), Seoul, Korea, June 18-20, 2008. pp. 20-23.
7. Keiichirou Ui, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa "A FUSE-Based Tool for Accessing Meteorological Data in Remote Servers." 20th International Conference on Scientific and Statistical Database Management (SSDBM'08), pp.592-597, Hong Kong, China, July 9-11,

- 2008.
8. Kazuyo Narita and Hiroyuki Kitagawa, "Outlier Detection for Transaction Databases using Association Rules", Proc. 9th International Conference On Web-Age Information Management (WAIM 2008), pp. 373-380, Zhangjiajie, China, July 20-22 2008.
 9. Tsubasa Takahashi and Hiroyuki Kitagawa, "S-BITS: Social-Bookmarking Induced Topic Search", Proc. 9th International Conference On Web-Age Information Management (WAIM 2008), pp. 25-30, Zhangjiajie, China, July 20-22 2008.
 10. Hideyuki Kawashima, Ryo Sato and Hiroyuki Kitagawa, "Models and Issues on Probabilistic Data Stream Systems with Bayesian Networks", Proc. 2nd International Workshop on SensorWebs, Databases and Mining in Networked Sensing Systems (SWDMNSS 2008), pp. 157-160, Turku, Finland, July 28 - August 1, 2008.
 11. Xiaochen Li, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Searching XML Documents by Keywords in Structured P2P Networks", 3rd International Workshop on XML Data Management Tools and Techniques (XANTEC 2008), pp. 274-278, Turin, Italy, Sept 1 - 5, 2008.
 12. Kozue Ishida and Hiroyuki Kitagawa, "Detecting Current Outliers: Continuous Outlier Detection over Time-Series Data Streams", 19th International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2008), pp. 255-268, Turin, Italy, Sept 1 - 5, 2008.
 13. Kosuke Ohki, Yousuke Watanabe, and Hiroyuki Kitagawa, "Dynamic Source Selection to Handle Changes of User's Interest in Continuous Query", 16th International Conference on COOPERATIVE INFORMATION SYSTEMS, LNCS 5333, pp. 6-7 Monterrey, Mexico, Nov 12 - 14, 2008.
 14. Boukhelef Djelloul and Hiroyuki Kitagawa, "Multi-ring infrastructure for Content Addressable Networks", 16th International Conference on COOPERATIVE INFORMATION SYSTEMS (CoopIS 2008), pp. 193-211, Monterrey, Mexico, Nov 12 - 14, 2008. LNCS 5331 Springer 2008.
 15. Imam Machdi, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "GMX: An XML Data Partitioning Scheme for Holistic Twig Joins", Proc. 10th International Conference on Information Integration and Web-based Applications and Services (iiWAS 2008), pp. 137-146. Linz, Austria, Nov 24 - 26, 2008.
 16. Chantola Kit, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Algorithms for Efficient Structure-based Grouping in XML-OLAP", Proc. 10th International Conference on Information Integration and Web-based Applications and Services (iiWAS 2008), pp. 170-177, Linz, Austria, Nov 24 - 26, 2008.
 17. Sophoin Khy, Yoshiharu Ishikawa, and Hiroyuki Kitagawa, "A Query Language and Its Processing for Time-Series Document Clusters", Proc. 11th International Conference on Asia-Pacific Digital Library (ICADL 2008), pp. 82-92, Bali, Indonesia, Dec 2 - 5, 2008.
 18. Imam Machdi, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "XML Data Partitioning Strategies to Improve Parallelism in Parallel Holistic Twig Joins", Proc. 3rd International Conference on Ubiquitous Information Management and Communication (ICUIMC-09), pp. 501-510, Suwon,

- Korea, Jan 15 - 16, 2009.
19. Djelloul Boukhelef and Hiroyuki Kitagawa, "Dynamic Load Balancing in RCAN Content Addressable Network", Proc. 3rd International Conference on Ubiquitous Information Management and Communication (ICUIMC-09), pp. 98-106, Suwon, Korea, Jan 15 - 16, 2009.
 20. Kosuke Ohki, Yousuke Watanabe, and Hiroyuki Kitagawa, "Evaluation of a Framework for Dynamic Source Selection in Stream Processing", Proc. International Workshop on Data Management for Information Explosion in Wireless Networks (DMIEW 2009), pp. 1106-1111, Fukuoka, Japan, March 16 - 19, 2009.
 21. Kenshiro Hirose, Hideyuki Kawashima, Satoru Satake and Michita Imai, "Sharing Gesture Contents among Heterogeneous Robots", Proc. International Workshop on Data Management for Information Explosion in Wireless Networks (DMIEW 2009), pp. 1076-1081, Fukuoka, Japan, March 16 - 19, 2009.

<学会発表>

(A)招待講演

1. Hiroyuki Kitagawa, "StreamSpinner Project: Stream-based Real World Data Management", 基調講演, The 4th Korea-Japan Database Workshop (KJDB 2008), Fukushima, Japan, Sept. 19-21, 2008.

(B)その他学会発表

1. Chantola Kit, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "Algorithms for Efficient Structure-based Grouping in XML-OLAP", 情報処理学会研究報告 Vol.2008, No.56, pp.137-137. (jDB08), 2008年6月19日~20日.
2. 李曉晨, 天笠俊之, 北川博之, "構造型 P2P ネットワークにおけるキーワードを含む XPath による XML 文書検索", iDB フォーラム 2008. 2008年9月21日~23日, 情報処理学会研究報告 Vol. 2008, No. 88, pp. 295-300.
3. Sophoin Khy, Yoshiharu Ishikawa, and Hiroyuki Kitagawa, "Querying Time-Series Document Clusters", iDB フォーラム 2008, 2008年9月21日~23日, 情報処理学会研究報告 Vol. 2008, No. 88, pp. 61-66.
4. 柿木 健, 北川博之, 天笠俊之, "レコードデータに対するリッジ問合せ", iDB フォーラム 2008. 2008年9月21日~23日, 情報処理学会研究報告 Vol. 2008, No. 88, pp. 271-276.
5. 高橋公海, 森嶋厚行, 杉本重雄, 北川博之, "Web コンテンツ一貫性管理のための制約発見支援", iDB フォーラム 2008. 2008年9月21日~23日, 情報処理学会研究報告 Vol. 2008, No. 88, pp. 127-132.
6. Imam Machdi, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "An Algorithm for Parallel Holistic Twig Joins on a PC Cluster", iDB フォーラム 2008, 2008年9月21日~23日, 情報処理学会研究報告 Vol. 2008, No. 88, pp. 1-6.
7. Djelloul Boukhelef and Hiroyuki Kitagawa, "RCAN : A Multi-ring Content Addressable Network", iDB フォーラム 2008, 2008年9月21日~23日, 情報処理学会研究報告 Vol. 2008, No. 88, pp. 91-96.
8. 大喜恒甫, 渡辺陽介, 秋山亮, 北川博之, 天笠俊之, 川島英之, "対象情報源の動的変化を

- 考慮した分散ストリーム処理最適化手法の提案”, iDB フォーラム 2008. 2008 年 9 月 21 日～23 日, 情報処理学会研究報告 Vol. 2008, No. 88, pp. 265-270.
9. Chantola Kit, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, “Evaluating Algorithms for TOPOLOGICAL ROLLUP in XML-OLAP”, iDB フォーラム 2008, 2008 年 9 月 21 日～23 日, 電子情報通信学会技術研究報告, Vol. 108, No. 211, pp. 17-18.
 10. Yi Wang, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, “Ontology-based Integration for Heterogeneous River Data”, iDB フォーラム 2008, 2008 年 9 月 21 日～23 日, 電子情報通信学会技術研究報告, Vol. 108, No. 211, pp. 21-22.
 11. Hiroki Kimura, Hideyuki Kawashima, Hiroyuki Kusaka, and Hiroyuki Kitagawa, “Detection of a Specific Pressure Pattern around Japan by Support Vector Machine”, Fifty Years after IGY -Modern Information Technologies and Earth and Solar Sciences-, Tsukuba, Japan, November 11-13, 2008.
 12. Keiichiro Ui, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa and Takeshi Horinouchi “A FUSE-based access tool for scientific data on the Web”, Fifty Years after IGY -Modern Information Technologies and Earth and Solar Sciences-, Tsukuba, Japan, November 11-13, 2008.
 13. 大喜恒甫, 山口卓郎, 渡辺陽介, 北川博之, 川島英之, 塩川浩昭, “異種データストリーム統合基盤:StreamSpinner”, Web とデータベースに関するフォーラム(WebDB Forum 2008), 2008 年 12 月 1 日～2 日, 電子情報通信学会技術研究報告, Vol. 108, No. 329, DE2008-75, p. 55.
 14. 川島英之, 北川博之, 寺島裕貴, “ストリーム処理エンジンにおける効率的な来歴管理”, 第 1 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2009), 2009 年 3 月 8 日～10 日.
 15. 永元芳幸, 天笠俊之, 北川博之, “注釈を利用した XML データのためのトレーサビリティ機構の提案”, 第 1 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2009), 2009 年 3 月 8 日～10 日.
 16. 大喜恒甫, 渡辺陽介, 北川博之, 川島英之, “分散ストリーム処理における対象情報源の動的変化を考慮した問合せ最適化手法の評価”, 第 1 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2009), 2009 年 3 月 8 日～10 日.
 17. 柿木健, 北川博之, 天笠俊之, “レコードデータに対するリッジ問合せの性能評価”, 第 1 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2009), 2009 年 3 月 8 日～10 日.
 18. Jiajun Gu, Hiroyuki Kitagawa, “Metadata-aware Keyword Search in Relational Databases”, 第 1 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2009), 2009 年 3 月 8 日～10 日.
 19. Zhitao Shen, Xin Li, Hideyuki Kawashima and Hiroyuki Kitagawa, “Pattern-based Window: A Novel Window Operator to Support Event Detection for Data Stream Processing”, 第 1 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2009), 2009 年 3 月 8 日～10 日.
 20. 李曉晨, 天笠俊之, 北川博之, “DHT における XPath に基づく XML キーワード検索の性能評価”, 第 1 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2009), 2009 年 3 月 8 日～10 日.
 21. 佐藤亮, 川島英之, 北川博之, “データストリーム処理へのベイジアンネットワークの導入”, 第 1 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2009), 2009 年 3 月 8 日～10 日.
 22. 木村広希, 川島英之, 北川博之, “サポートベクターマシンを用いた気圧配置の自動分類”, 第 1 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2009), 2009 年 3 月 8 日～10 日.

- 日.
23. 高木崇, 川島英之, 天笠俊之, 北川博之, “イベント検知に基づく衛星画像とコンテンツの統合”, 第1回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2009), 2009年3月8日～10日.
 24. 高橋翼, 北川博之, “ソーシャルブックマークにおける情報の活性度を考慮したWebページのランキング”, 第1回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2009), 2009年3月8日～10日.
 25. 山口卓郎, 渡辺陽介, 北川博之, “センサノード上で動作する汎用データ管理基盤の開発”, 第1回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2009), 2009年3月8日～10日.
 26. 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ナビゲーションのためのフレームワークFoXの提案”, 第1回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2009), 2009年3月8日～10日.
 27. 塩川浩昭, 渡辺陽介, 北川博之, 川島英之, “分散ストリーム処理システムにおける高信頼化手法の提案”, 第1回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2009), 2009年3月8日～10日.
 28. 寺島慎太郎, 天笠俊之, 北川博之, “木直列化に基づくXMLデータにおける木構造の統合”, 第1回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2009), 2009年3月8日～10日.
 29. 渡邊桂太, 高橋翼, 北川博之, “ソーシャルブックマークにおけるユーザ間の類似度を考慮したスパマー検出”, 第1回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2009), 2009年3月8日～10日.
 30. 高橋公海, 森嶋厚行, 杉本重雄, 北川博之, “Webページを対象とした包含従属性の効率的な発見手法”, 第1回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2009), 2009年3月8日～10日.
 31. 渡辺知恵美, 新井裕子(お茶の水女子大), 天笠俊之, “ブルームフィルタを用いたプライバシー保護検索における攻撃モデルとデータ攪乱法の一検討”, 第1回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2009), 2009年3月8日～10日.

<受賞>

1. WAIM2008 (The 9th International Conference on Web-Age Information Management) 最優秀学生論文賞 (Honjun Lu Best Student Paper Award): Kazuyo Narita and Hiroyuki Kitagawa, “Outlier Detection for Transaction Databases using Association Rules”, Proc. 9th International Conference on Web-Age Information Management (WAIM 2008), pp. 373-380, Zhangjiajie, China, July 20-22 2008.
2. 日本データベース学会・情報処理学会データベースシステム研究会・電子情報通信学会データ工学研究会優秀若手研究者賞: Chantola Kit, 「Algorithms for Efficient Structure-based Grouping in XML-OLAP」
3. iDB フォーラム 2008 優秀論文賞:

- A) Imam Machdi, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, 「An Algorithm for Parallel Holistic Twig Joins on a PC Cluster」
- B) Djelloul Boukhelef and Hiroyuki Kitagawa, 「RCAN: A Multi-ring Content Addressable Network」
- 4. iDB フォーラム 2008 学生奨励賞:
 - A) 李曉晨, 天笠俊之, 北川博之, 「構造型 P2P ネットワークにおけるキーワードを含む XPath による XML 文書検索」
 - B) 高橋公海, 森嶋厚行, 杉本重雄, 北川博之, 「Web コンテンツ一貫性管理のための制約発見支援」
- 5. iiWAS2008 最優秀学生論文賞 (iiWAS2008 Best Student Paper Award)
 - A) Imam Machdi, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "GMX: An XML Data Partitioning Scheme for Holistic Twig Joins", Proc. 10th International Conference on Information Integration and Web-based Applications and Services (iiWAS 2008), pp. 137-146. Linz, Austria, Nov 24 - 26, 2008.
 - B) Chantola Kit, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Algorithms for Efficient Structure-based Grouping in XML-OLAP", Proc. 10th International Conference on Information Integration and Web-based Applications and Services (iiWAS 2008), pp. 170-177, Linz, Austria, Nov 24 - 26, 2008.
- 6. DEIM フォーラム 2009 優秀インタラクティブ賞: 高橋公海, 森嶋厚行, 杉本重雄, 北川博之, 「Web ページを対象とした包含従属性の効率的な発見手法」, 第 1 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2009), 2009 年 3 月 8 日~10 日.

5. その他成果デモ展示

- 1. イノベーションジャパン 2008 (主催: JST, NEDO): 「大規模センサーデータ処理のためのデータストリーム管理基盤」, 2008 年 9 月 16~18 日, 東京国際フォーラム.

V-2 計算メディア分野

1. メンバ

教授 大田 友一

准教授 亀田 能成、北原 格

2. 概要

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

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

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

研究成果は、研究論文や学会発表だけでなく、イノベーション・ジャパン-大学見本市に 2005 年から 2008 年まで連続で出展するなど、広報活動にも努めてきた。

競争的外部資金等により計算メディア分野で進めてきた主な研究開発を以下に挙げる。

1) 自由視点映像の生成と提示: 複数の視聴者が、それぞれ自由に視点を選びながら、スタジアムや体育館で行われるスポーツイベントのライブ中継を、ネットワーク経由で観ることができる技術を開発。(主な研究費: 総務省 SCOPE、共同研究経費)

2) 監視カメラ映像を活用した歩行者のための視覚支援: 監視カメラ設置数の増大は避けられないであろうことを前提に、一般市民が監視カメラから得るメリットとして、眼に見えて便利さを実感できる新しい付加価値の在り方を提案し、それを実現する基盤技術を創成。(主な研究費: 科研費基盤研究A)

3) センサ情報の社会利用のためのコンテンツ化(センシング WEB): 監視カメラなどのセンサ情報を、WEB のコンテンツを利用するように、一般ユーザがオープンに活用するための基盤技術を創成。(主な研究費: 科学技術振興調整費)

4) ITSにおける運転者への視覚増強技術: 自動車事故の低減を目指した予防安全型技術として、道路監視カメラ映像を画像処理によって加工し、運転者が直感的に受け入れやすい視覚情報として提示する技術を

開発。(主な研究費:科学技術振興調整費)

5)非校正カメラ群による多視点同時観測技術:大規模センサデータの管理・統合を目的とし、事象の多発場所の検出、複数視点からの同一事象観測、事象の頻度解析などにより、カメラ群とその映像を利用者に見やすい形に組織化。(主な研究費:科研費若手研究A(亀田))

6)モバイルカメラによる高自由度映像監視技術:環境カメラ映像とモバイルカメラ映像を統合することにより、観測の自由度が大きく死角の少ない、高解像度な監視映像獲得技術を開発。(主な研究費:科研費若手研究A(北原))

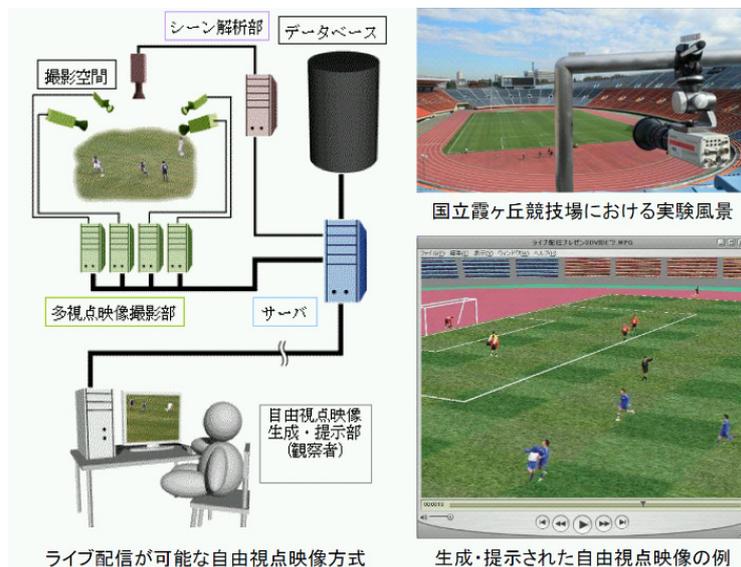
7)複合現実感を用いたコミュニケーション支援メディア技術:複合現実提示技術を用いて、空間・視覚情報を共有することにより、円滑なコミュニケーションを実現する技術を開発。(主な研究費:科研費萌芽研究(北原))

3. 研究成果

【1】自由視点映像の生成と提示(大田、亀田、北原)

国立スポーツ科学センターとの共同研究として、総務省戦略的情報通信研究開発推進制度(SCOPE)による特定領域重点型研究開発「ネットワークによる自由視点映像のライブ配信とインタラクティブ提示」(研究代表者 大田友一)を2004年度から2006年度の3年間に渡り実施し、以降も研究開発を継続している。

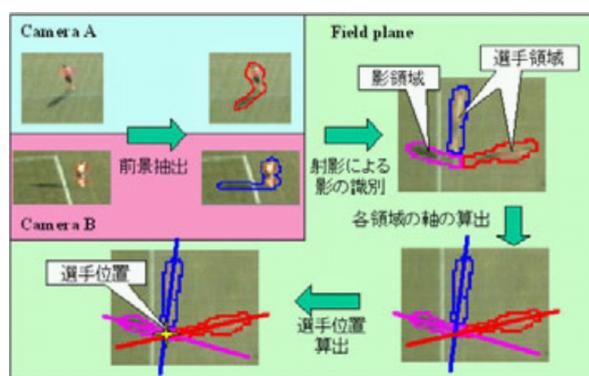
この研究は、複数の視聴者が、それぞれ自由に視点を選びながら、スタジアムや体育館で行われるスポーツイベントのライブ中継をネットワーク経由で観ることができる技術の開発と、素人でも使いやすいインタラクティブな自由視点映像提示手法を開発し、蓄積・再生型の次世代コンテンツ技術を創出することを目的としている。



撮影物体を1枚の板(ポリゴン)とその表面に貼り付けるテクスチャ情報で表現する“人物ビルボード”という手法を開発することにより、多視点映像の撮影・加工・伝送から自由視点映像の生成・提示までの全ての処理をビデオレートで処理する世界初の自由視点映像のライブ配信を実現した。さらに、自由視点映像技術を実験室やスタジオから開放することを目指し、国立競技場や代々木体育館における実証実験において、システム全体の実用性・汎用性・ロバスト性の向上を目的とした技術開発を推進することにより、世界でも他に例を見ない、

大規模空間で実施されるイベントを対象とした自由視点映像ライブ配信の実現に成功した。

2008 年度における主要な成果としては、選手のオンライン移動軌跡推定技術の開発が挙げられる。サッカースタジアムのような屋外の大規模空間を撮影対象とする場合、映像上で観測される個々の選手のサイズは小さく、しかも太陽光によって強い影が発生するため、これまではオンラインでの自動推定が困難であった。これに対して、複数視点において同期撮影した映像情報を、2次元射影変換を用いてサッカーフィールド上で統合し選手の足元位置を推定する処理と、着衣の色情報を活用したフレーム間での対応付け処理を組み合わせるにより、オンラインでの移動軌跡の推定を可能にした。この際、選手の影領域がフィールド平面上に発生する特性を利用することにより、従来の推定処理では推定誤差の原因となっていた影領域の情報を、逆に活用して推定精度を向上させることに成功している。



オンライン選手移動軌跡推定手法



推定した選手軌跡の例

【2】監視カメラ映像を活用する視覚支援方式（大田、亀田、北原）

（1）シースルービジョン（大田、亀田、北原）

2006 年度から 2009 年度の 4 年間の計画で、科学研究費補助金・基盤研究(A)「シースルービジョン:監視カメラ映像を活用する歩行者のための視覚支援方式の開発」(研究代表者 大田友一)を実施している。

本研究は、公共空間における監視カメラ設置数の増大は避けられないであろうことを前提に、一般市民が、自らのプライバシーと引き替えに監視カメラから得られるメリットとして、「安全」という重要だが眼に見えにくい価値の他に、眼に見えて便利さを実感できる新しい付加価値の在り方を提案し、それを実現する基盤技術を創成することを目的とする。新しい付加価値の在り方として、具体的には、従来、カメラの設置者のみが利用していた監視カメラ映像を、被写体である一般市民も利用可能とすることを前提に、歩行者が持つ PDA などの携帯型情報端末に監視カメラ映像を適切に加工した映像情報を提示し、自分の眼では直接見ることが出来ない視覚情報を歩行者に提供する「シースルービジョン」を提案した。シースルービジョンとは、スーパーマンが持っている、物体の透視能力を備えた眼を意味し、歩行者が目の前のビルなどの遮蔽物を透視して遠方を見ることが出来る機能を表現する。

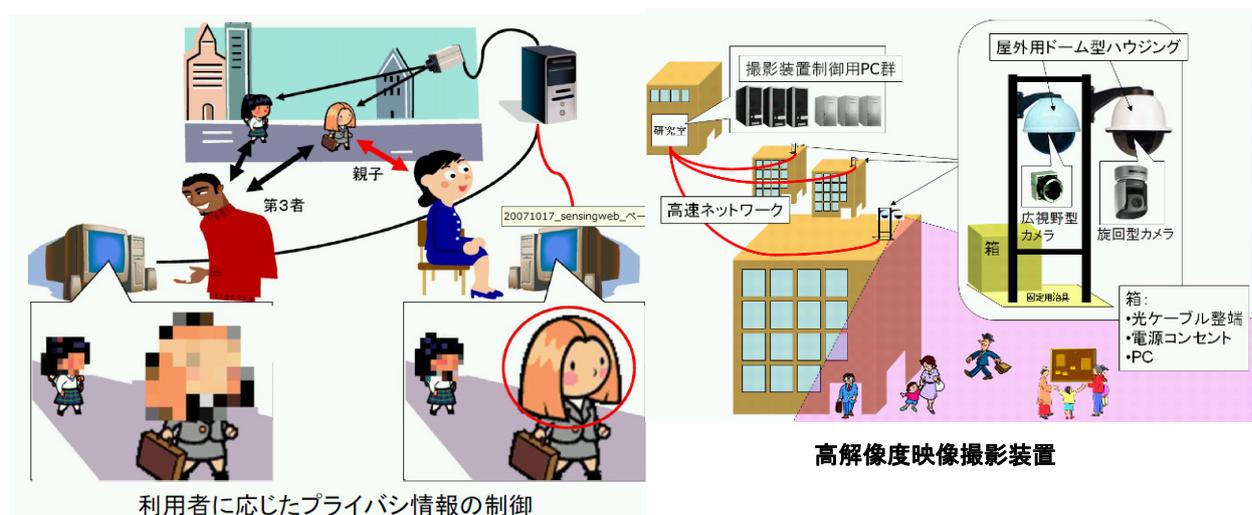
要素技術としても、監視カメラ映像を援用した屋外ランドマークによる位置合わせ技術、シースルー映像の重畳方式や視点間のナビゲーション技術、歩行者が視点位置を仮想的に移動させて周囲の安全を確認する技術、監視カメラ映像中の人物像にモザイク処理を施すプライバシー保護技術など、独創的な発想に基づく特色ある技術の開発を進めている。



(2) センシングWEB (大田、北原、亀田)

2007年度から2009年度の3年間に渡り、科学技術振興調整費・科学技術連携施策群の効果的・効率的な推進「センサ情報の社会利用のためのコンテンツ化」(研究代表者 美濃導彦)の研究課題において、「画像情報に対するプライバシー情報管理」(研究代表者 大田友一)を実施している。

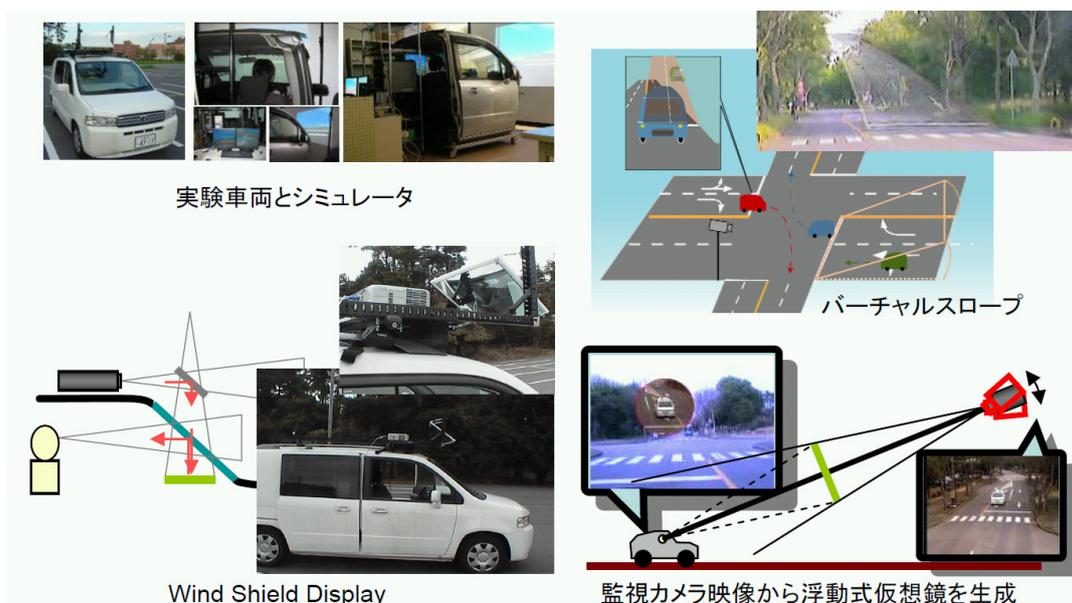
本研究は、多種多様な画像センサ情報に含まれるプライバシー情報をフィルタリングするための基礎的技術を研究開発することを目指している。画像情報の中に含まれる被写体のプライバシー情報を分類して構造化することによって、利用者に応じて段階的かつ選択的にプライバシー情報を取り除いて提供するための技術を開発するとともに、開発した技術の有効性を検証するために、公共環境での実証実験を実施する。2008年度は、大学キャンパスに、高解像度映像の取得可能な撮影装置を導入・常時稼働を開始し、プライバシー情報構造化のためのデータ収集を推進した。



(3) NaviView: 監視カメラ映像を活用した運転者への視覚支援 (大田、亀田、北原)

本研究では、走行中や交差点進入時の運転者の死角を解消するような視覚増強技術を、道路監視カメラを用いた動的環境センシングによって実現することを目標に掲げた。特に、対向車線、見通しの悪い交差点、走行中の自車両の周囲の死角を解消し、もって事故の予防を図り、運転者が遭遇する可能性のあるリスクの軽減を実現することを具体的な目標とした。2004年度から2006年度の3年間に渡り、科学技術振興調整費・重要課題解決型研究「状況・意図理解によるリスクの発見と回避」(研究代表者 稲垣敏之)の研究課題において、「動的環境センシングによる視覚増強技術」(研究代表者 大田友一)を実施した成果を発展させる形で、今年度も継続して研究を推進した。

視覚増強技術による死角解消方法としては、まずウィンドシールドディスプレイを試作し、運転者が運転しながら視覚情報を見ることができるようにした。その上で、交差点での右折時の対向車直進車両との衝突事故を防ぐバーチャルスロープ、見通しの悪い交差点進入時の左右の道路の確認を安全に行えるバーチャルコーナーミラー、それに走行中に自車両の周囲から後方にかけての領域を広く可視化して左右折時の巻き込み事故を防ぐ浮動式仮想鏡、運転者の視界の妨げにならずかつ理解しやすい状態で地図情報を提示する技術の四つの視覚増強技術を開発した。

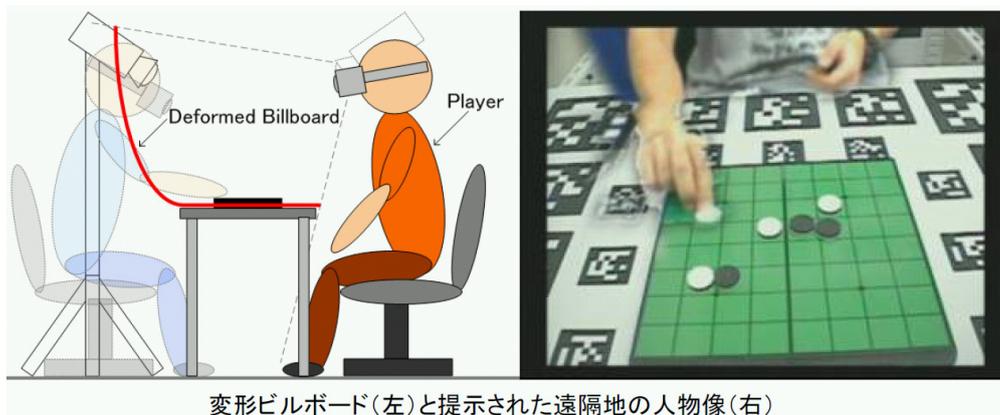


【3】複合現実感技術 (大田、北原、亀田)

(1) 複合現実空間の遠隔共有 (大田、北原、亀田)

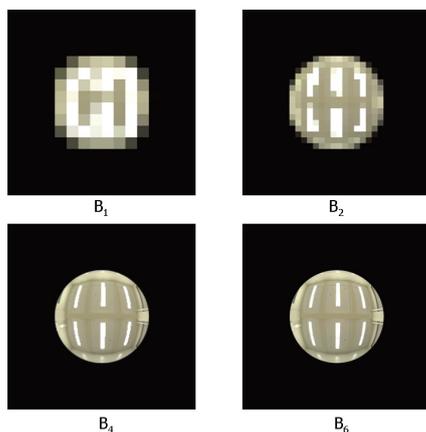
複合現実感(Mixed Reality)とは、コンピュータグラフィックスによって描かれた仮想世界を、現実世界にシームレスに融合した映像を提示する技術である。本研究では、複合現実感技術によって生成される空間を、遠隔地に居る複数のユーザが共有できる遠隔コミュニケーションシステムの開発を進めている。2次元映像として撮影し伝送された遠隔地のユーザの人物像を、作業空間としての卓上と人物の位置に沿って継ぎ目無く設置された変形ビルボード上に表示することによって、遠隔地の人物の頭部や胴体と卓上に伸ばした腕を、目の前の現実世界に融合して提示することができる。オセロゲームを題材として、卓上に置かれた実物のオセロ駒と、遠隔地のオセロ駒を再現した仮想のオセロ駒が、実物のオセロ盤上に混在する複合現実空間を、変形ビルボ

ード上に表示された遠隔地の人物と対面しながら共有するシステムを構築した。

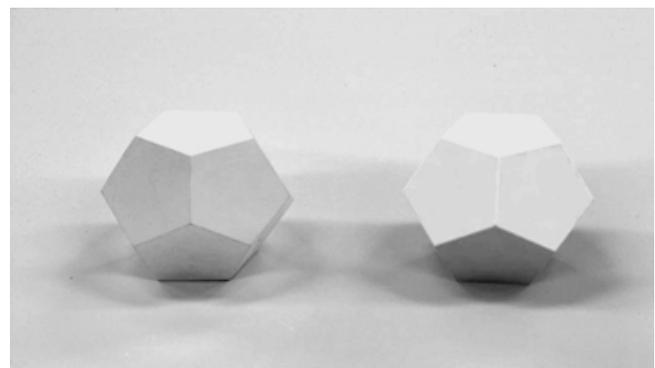


(2) 感覚的に正しい(perceptually correct)複合現実感技術 (大田、北原)

複合現実感では、現実世界と仮想世界を見分けがつかない程に上手く融合して提示することが重要である。そのためには、コンピュータグラフィックスで描く仮想世界を、可能な限り「物理的に正しい(physically correct)」映像として描くことが追究されてきた。これに対して、我々のグループでは、描かれた仮想世界の映像が物理的に正しくなくても、観察する人間にとって正しく見えればよい、すなわち、「感覚的に正しい(perceptually correct)」という概念を提唱し、感覚的に正しい仮想世界を生成し、現実世界と融合する研究を進めている。2008 年度は、光学的整合性(現実物体と仮想物体の見え方の整合性)に着目し、実際の照明(Physically Correct) と高速計算が可能な近似照明モデル(Perceptually Correct)の比較実験を行った。



近似照明モデル



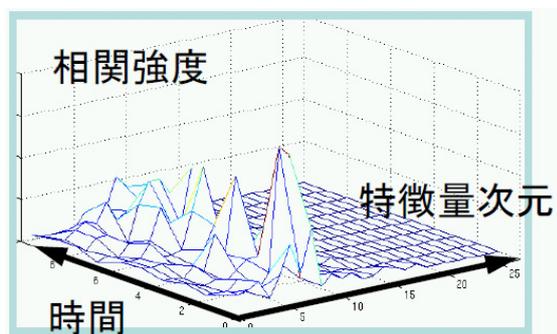
評価画像の例: 現実物体(左)、仮想物体(右)

【4】ネットワーク結合型マルチメディアセンサアレイ群の自動協調 (亀田、大田)

2004年度から2006年度の3年間に渡り、科学研究費補助金・若手研究A「ネットワーク結合型マルチメディアセンサアレイ群の自動協調」(研究代表者 亀田能成)を実施した内容を発展させる形で、今年度も継続して研究を推進した。

本研究では、人間の生活空間内に設置された映像センサ(ビデオカメラ)・音像センサ(マイク)というマルチメ

ディアパッシブセンサを中心に、大量のセンサが非均一非校正に設置された状態から、ネットワークを介した互いのセンサの同定・通信・協調を通じて観測一貫性の保持とそれに基づく認識手法の提案を行った。この認識手法を用いると、例えば、研究室内外に分散設置された35台のカメラ群について、各カメラの位置を測定したりする必要なく、1つの動作に関連した多視点映像シーケンスを自動的に組織化して提示することができる。



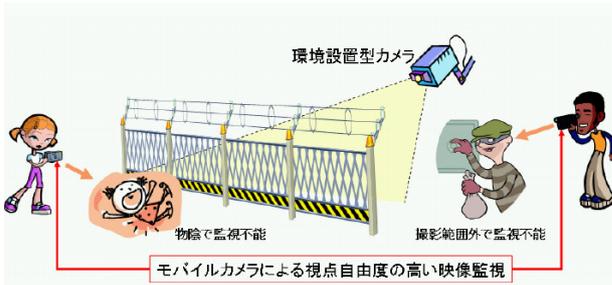
さらに、マイクロフォン群を用いることで、1つの動作に対する認識効率を上げ、音と映像との両方からその動作を観測することも可能になる(左図は、マイク群による観測中で有意な動作部分を推定している過程を示す)。

【5】プライバシーを考慮したモバイルカメラによる高自由度映像監視技術（北原、大田）

2006年度から2008年度の3年間の計画で、科学研究費補助金・若手研究A「被写体のプライバシーを考慮したモバイルカメラによる高自由度映像監視技術に関する研究」(研究代表者 北原格)を実施している。

この研究では、モバイルカメラと環境設置型カメラを連動させた自由度の高い映像監視システムと、プライバシーを考慮しつつ適切な撮影・記録・提示を行う映像メディアの基盤技術の開発を目的としている。環境に設置された多視点カメラとモバイルカメラを連動させることにより、互いの長所を融合した撮影システムを構築し、モバイルカメラのキャリブレーション技術や、モバイルカメラによって収集された映像情報を用いて環境設置型カメラの監視エリアを拡大する技術の研究開発を行っている。

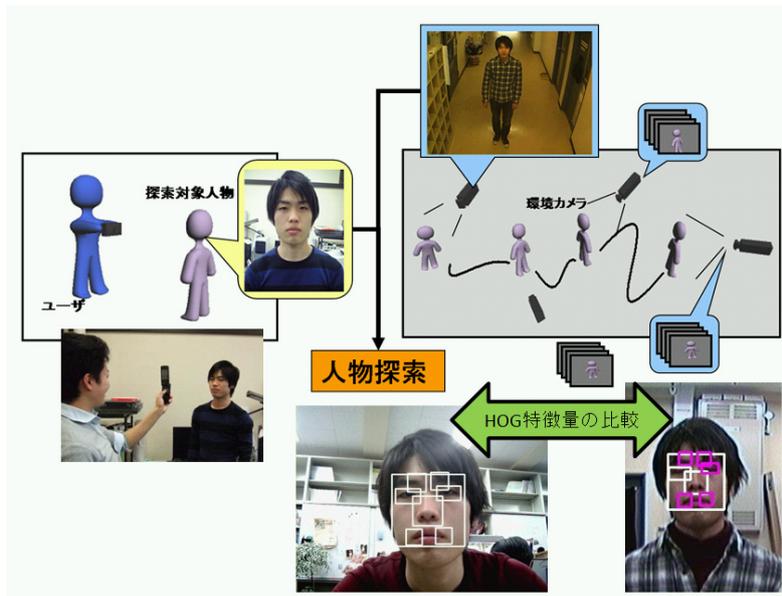
2008年度は、モバイルカメラの撮影範囲を屋外などに拡張する取り組みや、モバイルカメラで撮影した映像情報を用いて環境設置型カメラ映像群から人物を探索する方式に関する研究を実施した。



モバイルカメラと環境設置型カメラを連携させた自由度の高い映像監視システム



モバイルカメラのキャリブレーション方式を応用した複合現実型情報提示の例



モバイルカメラで撮影した映像情報を用いた環境設置型カメラ映像群からの人物探索方式

4. 研究業績

<研究論文>

1. 全方位カメラによる会議撮影システムが意思決定の非同期的伝達に及ぼす影響の評価; 坂本竜基, 金韓成, 伊藤禎宣, 鳥山朋二, 北原格, 小暮潔, 情報処理学会論文誌, Vol.50, No.1, pp.289-301, (2009.1)
2. Compensated Visual Hull with GPU-Based Optimization ; Hansung Kim, Ryuuki Sakamoto, Itaru Kitahara, Tomoji Toriyama, Kiyoshi Kogure, Pacific-Rim Conference on Multimedia (PCM2008), pp.573-582, (2008.12)
3. Robust Trajectory Estimation of Soccer Players by Using Two Cameras ; Nozomu Kasuya, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, The 19th International Conference on Pattern Recognition (ICPR2008), CDROM Proceedings 6 pages, (2008.12)
4. Interactive Video Surveillance by Using Environmental and Mobile Cameras; Itaru Kitahara, International Forum on Multimedia and Image Processing (IFMIP2008), CDROM Proceedings 6 pages, (2008.10)

5. Generating Perceptually-Correct Shadows for Mixed Reality; Gaku Nakano, Itaru Kitahara and Yuichi Ohta, 7th International Symposium on Mixed Reality and Augmented Reality (ISMAR2008), pp.173-174 , (2008.9)
6. 変型ビルボードを用いた人物像の提示による複合現実感卓上作業の遠隔共有; 南谷真哉, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 日本バーチャルリアリティ学会論文誌, Vol.13, No.3, pp.363-373, (2008.9)

〈学会発表〉

(A)招待講演

(B)その他の学会発表

1. 自由視点映像技術を用いたサッカーシーンの選手視点映像生成; 糟谷望, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 2009 年総合大会講演論文集(情報・システム講演論文集 2), pp.215, (2009.3)
2. モバイル端末画像を用いたクライアント・サーバ型の PTAM 処理; 林将之, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 2009 年総合大会講演論文集(情報・システム講演論文集 2), pp.163, (2009.3)
3. SIFT key 追跡に基づく固定カメラ群に対する移動カメラの撮影対象空間の重複度合定量化; 住谷司, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 2009 年総合大会講演論文集(情報・システム講演論文集 2), pp.176, (2009.3)
4. 自由視点映像提示における人物ビルボード方式と3次元復元方式との比較; 秦哲也, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 2009 年総合大会講演論文集(情報・システム講演論文集 2), pp.189, (2009.3)
5. ウインドシールドディスプレイを用いた道路鏡像の空中提示法の視覚評価; 川俣貴也, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 2009 年総合大会講演論文集(情報・システム講演論文集 2), pp.190, (2009.3)
6. 遠隔協調型複合現実感における目領域映像の重畳提示; 岡本祐樹・北原格・大田友一, 電子情報通信学会 2009 年総合大会講演論文集(情報・システム講演論文集 2), pp.191, (2009.3)
7. モバイルカメラ画像を用いた環境カメラ画像からの顔パーツ検出法; 坏直輝, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 2009 年総合大会講演論文集(情報・システム講演論文集 2), pp.196, (2009.3)
8. MR ミラーにおける視点位置推定のための顔領域検出手法; 佐藤秀昭・北原格・大田友一, 電子情報通信学会 2009 年総合大会講演論文集(情報・システム講演論文集 2), pp.197, (2009.3)
9. Hostile Intent Detection by Using Video Signal; Polikovskiy Semion Senya, Kameda Yoshinari, Ohta Yuichi, 電子情報通信学会 2009 年総合大会講演論文集(情報・システム講演論文集 2), pp.202, (2009.3)
10. 複合現実感における手と仮想物体の重畳手法の検討; 田中康宏・北原格・大田友一, 電子情報通信学会 2009 年総合大会講演論文集(情報・システム講演論文集 2), pp.236, (2009.3)
11. SIFT key 追跡に基づく撮影対象空間の重複度合定量化への試み; 住谷司, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 技術研究報告 PRMU, vol.108, no.363, pp.81-86, (2008.12)
12. Visual Augmentation Methods for Surveillance Cameras by Using Mixed Reality ; Itaru Kitahara, Shinya

Yamazaki, Takahiro Tsuda, Yoshinari Kameda, and Yuichi Ohta, International Workshop on "Sensing Web", 8 pages, (2008.12)

13. 環境カメラを用いた複合現実感のためのモバイルカメラの位置・姿勢推定; 濱田修平, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 技術研究報告 PRMU, vol.108, no.327, pp.109-116, (2008.11)
14. MR ミラー: 仮想鏡像を用いた複合現実感提示方式の実現; 佐藤秀昭, 北原格, 大田友一, 日本バーチャルリアリティ学会第 13 回大会論文集, 4 pages, (2008.9)
15. 仮想俯瞰模型を用いた 3 次元空間の指示・共有システム; 林将之, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 日本バーチャルリアリティ学会第 13 回大会論文集, 4 pages, (2008.9)
16. 仮想視点移動が可能な広範囲でのシースルービジョン; 山崎真也, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 日本バーチャルリアリティ学会第 13 回大会論文集, 4 pages, (2008.9)
17. サッカーシーンの選手視点映像提示に向けた2台のカメラによる選手軌跡獲得; 糟谷望, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 画像の認識・理解シンポジウム 2008 論文集(MIRU2008), pp.1578-1585, (2008.7)
18. 領域を限定した SIFT 特徴の抽出; 古畑俊一郎, 亀田能成, 大田友一, 画像の認識・理解シンポジウム 2008 論文集(MIRU2008), pp.1330-1335, (2008.7)
19. 仮想視点移動が可能な広範囲でのシースルービジョン; 山崎真也, 北原格, 亀田能成, 大田友一, The First Korea-Japan Workshop on Mixed Reality (KJMR08), 4 pages, (2008.6)
20. 仮想俯瞰模型を用いた 3 次元空間の指示・共有システム; 林将之, 北原格, 亀田能成, 大田友一, The First Korea-Japan Workshop on Mixed Reality (KJMR08), 6 pages, (2008.6)
21. ウィンドシールドディスプレイを用いた道路鏡像の空中提示; 川俣貴也, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 第4回デジタルコンテンツシンポジウム (DCS2008), 6 pages, (2008.6).

5. シンポジウムの開催

1. 第 2 回実世界計算情報学シンポジウム日程:

2009 年 3 月 23 日(月)

場所: 筑波大学計算科学研究センター国際ワークショップ室

主催: 筑波大学プレ戦略イニシアティブ「実世界計算情報学の基盤創成拠点」