



## 筑波大学計算科学研究センター 平成22年度 年次報告書

雑誌名	筑波大学計算科学研究センター 平成22年度 年次報告書
発行年	2011-12
URL	<a href="http://hdl.handle.net/2241/00150221">http://hdl.handle.net/2241/00150221</a>

筑波大学 計算科学研究センター  
平成 22 年度 年次報告書



Center for Computational Sciences  
University of Tsukuba  
**Annual Report FY2010**

## 目次

1	平成 22 年度 重点施策・改善目標.....	3
1-1.	重点施策.....	3
1-2.	改善目標（法人評価、認証評価、外部評価及び監事監査・内部監査の指摘に対する取組等）.....	4
2	平成 22 年度 実績報告.....	5
2-1.	平成 22 年度年度計画並びに改善目標に記載されている事項についての達成状況等.....	5
2-2.	自己評価と課題.....	9
3	各研究部門の報告.....	11
I.	素粒子物理研究部門.....	11
1.	メンバ.....	11
2.	概要.....	11
3.	研究成果.....	11
4.	研究業績.....	17
5.	連携・国際活動・社会貢献、その他.....	22
II.	宇宙・原子核物理研究部門.....	23
II-1.	宇宙分野.....	23
1.	メンバ.....	23
2.	概要.....	23
3.	研究成果.....	23
4.	研究業績.....	33
II-2.	原子核分野.....	41
1.	メンバ.....	41
2.	概要.....	41
3.	研究成果.....	41
4.	研究業績.....	46
5.	連携・国際活動・社会貢献、その他.....	49
III.	量子物性研究部門.....	50
1.	メンバ.....	50
2.	概要.....	50
3.	研究成果.....	51
4.	研究業績.....	62
IV.	生命科学研究部門.....	76
IV-1.	生命機能情報分野.....	76

1. メンバ .....	76
2. 概要 .....	76
3. 研究成果 .....	76
4. 研究業績 .....	80
IV-2. 分子進化分野 .....	83
1. メンバ .....	83
2. 概要 .....	83
3. 研究成果 .....	83
4. 研究業績 .....	86
V. 地球環境研究部門 .....	89
1. メンバ .....	89
2. 概要 .....	89
3. 研究成果 .....	89
4. 研究業績 .....	92
5. 連携・国際活動・社会貢献、その他 .....	98
VI. 高性能計算システム研究部門 .....	99
1. メンバ .....	99
2. 概要 .....	99
3. 研究成果 .....	99
4. 研究業績 .....	102
5. 連携・国際活動・社会貢献、その他 .....	105
VII. 計算情報学研究部門 .....	107
VII-1. データ基盤分野 .....	107
1. メンバ .....	107
2. 概要 .....	107
3. 研究成果 .....	107
4. 研究業績 .....	114
VII-2. 計算メディア分野 .....	120
1. メンバ .....	120
2. 概要 .....	120
3. 研究成果 .....	121
4. 研究業績 .....	129
5. 連携・国際活動・社会貢献、その他 .....	131

## 1 平成 22 年度 重点施策・改善目標

### 1-1.重点施策

「大学全体の年次別実行計画」の記載年次別行動計画については、以下のとおり：

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

平成 22 年度重点施策：各研究科・研究センターにおいて、研究科等の特色を生かした研究戦略及び研究連携策を検討する。

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

**平成 22 年度重点施策：**学際共同研究プログラムを実施し、共同研究を推進するとともに、学際計算科学の最先端を開拓する重点研究開発を計画立案・準備を進める。国際的な研究連携に着手し、次世代スパコンとの連携を検討する。

「部局独自の年次別実行計画」および、その詳細については以下のとおり：

#### 【研究】

- (1) 共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」の活動として、特別経費プロジェクト「先端学際計算科学の開拓・推進・展開事業」とともに、学際共同研究プログラムを実施し、学際計算科学の共同研究を実施することにより、計算科学の研究を推進する。
- (2) 次世代スーパーコンピュータ開発実施主体である理化学研究所と、「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト推進のための連携・協力に関する基本協定」に基づき、完成に向けた具体的な課題について共同研究を推進し、設置予定の「計算科学研究機構」との連携を行う。
- (3) KEK、国立天文台と締結した計算基礎科学連携拠点を運営し、これを中心として計算基礎科学分野の次世代スパコンの戦略プログラムの拠点の研究を推進する。
- (4) 学際計算科学の最先端を開拓するポスト・ペタスケール・システムに向けた研究開発を進める。
- (5) センター全体としては、研究推進事業、大型プロジェクト等を中心に、計算科学の学際的研究の遂行と成果の実現を図る。各部門の目標は次のとおりである。

素粒子物理研究部門： QED の効果、アップクォークとダウンクォークの質量差の効果を取り入れた物理的なクォーク質量での計算を行う。有限温度相転移のクォーク質量依存性を精密に調べる。

宇宙・原子核物理研究部門： 宇宙の初代天体から銀河・銀河団形成に至る宇宙進化を、大規模な輻射流体力学、N体シミュレーションによって探究する。時間依存密度汎関数理論に基づき、原子核物理から原子・分子・固体物理に及ぶ幅広い物質相の研究を展開する。

物質生命研究部門： 大規模並列計算により、ナノ構造体の持つ特徴的物性の解明、次世代半導体技術基盤の創成、等の研究を行う。

生命科学研究部門： 重要な生物機能のしくみを、分子構造および電子構造のレベルで原理的に解明すると共に転写制御システムに対しても、生命情報科学的な解析を進める。真核生物の起源の解明と分類とを目的に、網羅的な遺伝子塩基配列の取得を進めると共に、それらを加えて、真核生物の大規模な系統解析を行う。

地球環境研究部門： 大気大循環モデル NICAM を用いた熱帯低気圧、温帯低気圧、北極低気圧のライフサイクルの研究推進。4次元同化技術の開発。領域気象モデル WRF を用いた都市豪雨の研究推進。

高性能計算システム研究部門：大規模・超高性能計算システムを学際共同利用を中心とする応用プロジェクトでの利用技術の研究及び応用グループへの支援を行う。ポスト・ペタスケール・システムの検討を行う。

計算情報学研究部門： 大規模計算に関わるデータ基盤整備や、実時間実世界データや科学データ等の統合利用のための要素技術の検討。大量の環境情報を提示するインタラクティブな計算メディアの要素技術の検討。

## 【国際】

国際拠点の確立を目指して、国際連携として、エジンバラ大学との連携を進めるとともに、米国のローレンスバークレイ研究所との連携の検討を始める。

## 【教育】

計算科学に関する人材育成への取り組みとして、計算科学に関する大学院共通科目を実施。計算科学のデュアルディグリー・プログラムを研究科とともに実施。また、グローバル 30 の計算科学の講義の英語化も検討を進める。

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

外部評価においては、計算機開発により最先端の計算科学を推進する「学際計算科学」の推進体制の堅持が指摘された。このための計算機システム開発のための予算獲得および開発体制の構築について、センターの最重要事項として取り組む。

## 2 平成 22 年度 実績報告

### 2-1.平成 22 年度年度計画並びに改善目標に記載されている事項についての達成状況等

「大学全体の年次別実行計画」の記載年次別行動計画については、以下のとおり：

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

平成 22 年度重点施策：各研究科・研究センターにおいて、研究科等の特色を生かした研究戦略及び研究連携策を検討する。

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

平成 22 年度重点施策：学際共同研究プログラムを実施し、共同研究を推進するとともに、学際計算科学の最先端を開拓する重点研究開発を計画立案・準備を進める。国際的な研究連携に着手し、次世代スパコンとの連携を検討する。

当該年度においては、特別経費（共同利用・共同実施分）「計算科学による先導的知の創出推進事業」の支援により、超並列クラスタ PACS-CS, スパコン T2K-Tsukuba システム、融合型クラスタ FIRST を利用して、これらの計算資源の共同利用により、計算科学の共同研究を推進する学際共同利用プログラムを実施、素粒子宇宙分野、物質生命分野、地球生物環境分野等における計算科学の研究を推進した。さらに、学際計算科学のアプローチにより、エクサスケール計算の礎となる、計算基盤の能力および機能の飛躍的な向上のための計算技術開発と計算科学の革新に取り組むプロジェクト「エクサスケール計算技術開拓による先端学際計算科学教育研究拠点の充実」（特別経費（国際的に卓越した教育研究拠点機能の充実））を概算要求とした。なお、これについては内示を受け、平成 23 年度より実施予定となった。

#### 〔重点施策の達成状況〕

##### 【研究】

- (1) 共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」の活動として、特別経費プロジェクト「先端学際計算科学の開拓・推進・展開事業」とともに、学際共同研究プログラムを実施し、学際計算科学の共同研究を実施することにより、計算科学の研究を推進した。当該年度においては、23 課題のプロジェクトを採択し、実施した。

- (2) 次世代スーパーコンピュータ開発実施主体である理化学研究所と、「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト推進のための連携・協力に関する基本協定」に基づき、本センターが中心になって開発した実空間汎密度関数法プログラム RS-DFT や格子 QCD などのプログラムを「京」コンピュータで高度利用のための共同研究を推進した。また、「京」コンピュータの運用・研究を行う「計算科学研究機構」については、2 名が研究チームリーダー（佐藤、藏増）に就任し、スパコン戦略プログラム実施のために、機構内に神戸分室を設置するなど、連携を深めた。
- (3) KEK、国立天文台と締結した計算基礎科学連携拠点を運営し、これを中心として計算基礎科学分野の次世代スパコンの戦略プログラムを推進した。当該年度においては、これを実施するための研究員の公募および居室の整備などを行った。
- (4) 学際計算科学の最先端を開拓するポスト・ペタスケール・システムに向けた研究開発を進めた。特に、特別経費プロジェクト「エクサスケール計算技術開拓による先端学際計算科学教育研究拠点の充実」を実施するための概算要求を行い、平成 23 年度からの実施の内示を受けた。
- (5) センター全体としては、研究推進事業、大型プロジェクト等を中心に、計算科学の学際的研究の遂行と成果の実現を図った。当該年度においては、受託研究・共同研究等 13 件、科研費（分担を含む）48 件、補助金 2 件、金額ベースで外部資金 457 百万円（H21 年度 283 百万円）と急増した。

各部門の達成状況は次のとおりである。

素粒子物理研究部門： QED の効果、アップクォークとダウンクォークの効果を取り入れた物理的なクォーク質量での本格計算に向けた試験的な研究を行なった。有限温度相転移のクォーク質量依存性をクォーク質量が重い場合に調べ、質量無限大で 1 次相転移だったものが、質量を軽くしていくとある点で消失することを示した。6 つのクォークの束縛状態である H ダイバリオンの存在を格子 QCD 計算で示した。

宇宙・原子核物理研究部門： 宇宙の第一世代天体形成と連続的星形成， 原始銀河形成， 銀河団進化， 巨大ブラックホールの合体成長， で重要な進展があった。時間依存密度汎関数理論に基づきパルス光が誘起する電子・格子ダイナミクスの解明が進展した。

物質生命研究部門： 実空間密度汎関数に基づく大規模第一原理計算コード (RSDFT)等を用いて、シリコンナノワイヤーの電子構造を計算し、それをもとにシリコンナノワイヤートランジスタの電流電圧特性の理論予測を行った。また、次世代メモリデバイスとして期待されている、MONOS 型メモリの書込／消去によるメモリ機能劣化の原子レベルのメカニズムを明らかにするとともに、書込／消去耐性に優れた次世代メモリデバイスの設計指針を確立した。さらに、光励起による新しい特徴的な量子状態の予言も行った。

生命科学研究部門： 細胞の諸機能を司る酵素や超分子システムについて、それら機能の発現機構を分子および電子構造のレベルから明らかにするための研究を行い、DNA メチル化酵素、ヘモグロビン、シトクロム酸化酵素、光合成反応中心などにおける分子機構を明らかにした。また、転写制御システムに関する生命情報科学的な解析を行い、転写因子が結合・認識するゲノム DNA 配列を自動的に同定するためのシステムを開発した。一方、真核生物の起源と初期進化を解明するために、解析上鍵となる新奇生物種の大量遺伝子配列データを取得して真核生物系統樹の大規模解析を行い、種々の鞭毛虫の系統的位置に関する新知見を得た。

地球環境研究部門： 大気大循環モデル NICAM を用いた熱帯低気圧・温帯低気圧・北極低気圧のライフサイクルの研究を推進した。熱帯低気圧として太平洋の台風と大西洋のハリケーンについて進路と発達予測を行い、NICAM が十分な予測精度を持つ事を確認した。温帯低気圧から延びる寒冷前線に沿って、トラバースラインが発達し、乱気流領域が広がる事を示した。北極低気圧は温帯低気圧と類似した鉛直構造を持ち、極渦とのカップリングで長期間持続する特徴を再現した。領域気象モデル WRF を用いた都市豪雨の研究を推進し、都市の影響によりこの地域で豪雨の頻度が上昇する事を長期ランの結果から示した。

高性能計算システム研究部門： Block Krylov 部分空間法・FFT ライブラリ等の数値計算手法の大規模化・高速化、また MPI 通信プロファイラの開発等、素粒子・物性・地球環境等のアプリケーション高性能化に寄与する研究開発を行い、センターの当該研究部門との共同研究を推進した。また、次世代高性能通信システムや次世代超並列言語の研究開発、大規模並列分散ファイルシステムの効率化、GPU クラスタにおける新しい並列通信機構の検討等を進め、ポストペタスケール時代の並列システム基盤に関する研究を行った。

計算情報学研究部門： 大規模計算に関わるデータ基盤整備や実時間実世界データ・科学データ等の統合利用のための要素技術に関する検討を他部門と連携して推進した。また、大量

センサデータの解析・認識・検索システムの構築、人間の身体特性を利用した情報提示方式、画像センサを用いた人間の動作・心理状態解析の研究開発、実世界計算情報学の基盤形成を他部門と協力して推進した。

### 【国際】

国際連携として、エジンバラ大学については、エジンバラ大学並列処理センター(EPCC)と、つくばにて 2 回目のシンポジウムを行い、具体的な交流計画について議論した。米国のローレンスバークレイ研究所については、先方を訪ね、1 回目のワークショップを行い、どのような連携ができるか、また、連携の進め方について議論した。また、アジア地域の連携については韓国のパコンセンターである KISTI を訪ね、国際連携の可能性について意見交換を行った。今後、連携を進めることを検討する。

### 【教育】

計算科学に関する人材育成への取り組みとして、本年度も計算科学に関する大学院共通科目を実施した。計算科学のデュアルディグリー・プログラムを研究科については、これまでの数理物質研究科に加え、生命環境研究科ともプログラムを実施することとした。今年度末には 2 名が修士課程を修了した。また、計算科学教育の国際化に向けて、グローバル 30 の計算科学の講義の英語化も検討を進めた。なお、平成 23 年度から実施の予定である。

### 〔改善目標の達成状況〕

外部評価においては、計算機開発により最先端の計算科学を推進する「学際計算科学」の推進体制の堅持が指摘された。このための計算機システム開発のための予算獲得および開発体制の構築について、センターの最重要事項として取り組んだ結果、特別経費プロジェクト「エクサスケール計算技術開拓による先端学際計算科学教育研究拠点の充実」を実施するための概算要求を行い、平成 23 年度からの実施の内示を受けた。

### 〔その他特色ある取組の実施状況〕

#### (1) HA-PACS システム（ベースクラスタ）の調達

概算要求プロジェクトで開発する HA-PACS システムのベースクラスタシステムは、PACS-CS システムのフロントエンドシステム(FCS)の予算を流用して調達することとし、この部分を学内負担としている。当該年度においては、このベースクラスタシステム（フロンティア計算機システム:FCS）についての調達作業を開始した。なお、このシステムについては、平成 24 年 1 月の稼働を目標として進めている。

## (2) 分野・部門間の連携研究の推進

当センターでは、科学諸分野と計算機科学・情報科学の連携・協働による「学際計算科学」を中心的なコンセプトとして研究活動を行っている。素粒子分野と超高速計算システム分野、地球環境分野と計算知能分野などが具体的な研究課題についてワーキンググループを設置して定期開催を行い、共同研究を進めている。これからは、概算次期マシン開発に向けて、研究開発体制を強化する。

## (3) 他のスパコンセンタ等、関連組織との連携の推進

これまで、T2K-Tsukuba システムの導入を機会に、東京大学、京都大学との連携を推進している。この取り組みは、グリッド技術を使った連携や、新規のソフトウェア開発プロジェクト(e-science プロジェクト)などに発展している。当該年度においては、この e-science プロジェクトの実用化・加速に向けて、最先端基盤整備事業を実施した。また、スパコンセンター間では HPCI 構築のためのセンター間の共同作業が行われている。

## 2-2. 自己評価と課題

### (1) 自己評価

今年度においては、特別経費プロジェクト「エクサスケール計算技術開拓による先端学際計算科学教育研究拠点の充実」を実施するための概算要求を行い、平成 23 年度からの実施の内示を受け、新規マシン開発を中心とした学際計算科学を推進する体制が整う見込みを得た。また、センターが中心となって、計算基礎科学分野をリードして、次世代スパコン「京」を活用する HPCI 戦略プログラムが、来年度から正式にスタートし、本格化することとなった。

今後国際的な拠点を目指して、エジンバラ大学との連携を本格化させ、ローレンスバークレイ研究所と連携を開始するなど、国内外での拠点の強化に努めていきたい。

### (2) 課題

#### ① 次世代スパコン、全国的な計算科学コミュニティの中の位置づけの確保

これまでと比べて飛躍的な計算能力を持つ次世代スパコンが稼動し、その下に計算科学研究機構の設立が計画されている中で、当センターがこれまで以上に存在感を発揮し、全国の大学の中で唯一の計算科学の共同利用・共同研究拠点として、最先端の計算科学をリードしていく体制と戦略が急務である。このなかで、T2K システムの更新の時期に合わせて、センターの計算資源の確保と革新的な技術開発への戦略を練っていく必要がある。

#### ② 予算面での課題

外部資金の間接経費の配分方式は、全学的な研究システムの整備の中で、研究センターの位置づけに関わる課題として引き続き検討の必要がある。

③ 運営体制の課題

センターの充実、T2K・Tsukuba システムの稼働、連携の拡大、次世代スパコン戦略プログラムの実施に伴い、研究企画・財務・総務広報等のそれぞれの面で検討事項・処理事項と事務量が大幅に増大した。これらに対応して高い研究活動を維持・発展するには、センター長・部門長を中心とするセンターの執行体制の検討が必要である。また厳しい職員教員数流動化が必要とされる中で効率的な事務体制の構築の必要がある。

### 3 各研究部門の報告

#### I. 素粒子物理研究部門

##### 1. メンバ

教授 青木 慎也, 宇川 彰(計算科学研究センターフェロー), 金谷 和至(共同研究員)

准教授 石塚 成人, 蔵増 嘉伸, 吉江 友照

主任研究員 石井 理修

講師 谷口 裕介

研究員 浮田 尚哉, Nguyen Hoang Oanh, 中村 宜文, 滑川 裕介, 山崎 剛

##### 2. 概要

当部門では、本年度も、格子 QCD の大型シミュレーション研究の分野で活発な研究活動が行われた。当部門の研究者の大部分は、2006年7月の計算科学研究センターの次期並列計算機として PACS-CS が導入されたのを契機として新たに立ち上げられた研究グループ PACS-CS Collaboration に参加している。PACS-CS Collaboration では、当センターの PACS-CS や T2K-Tsukuba を主要計算機資源として、QCD に関する近似のない物理的予言を行うことを目的として、3 種類(up, down, strange)の軽いクォークをその物理的質量(物理点)において動的に扱う  $N_f=2+1$  QCD の大規模シミュレーションを進めた。また、up, down 間の質量差や電磁相互作用を取り入れる  $N_f=1+1+1$  QCD の研究や、格子 QCD による He 原子核の研究などにも着手した。これらと並行して、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、や、計算技術開発なども行った。さらに、格子 QCD 配位やその他のデータを共有する為のデータグリッド ILDG/JLDG の構築・整備を推進した。

次世代スーパーコンピュータ「京」を中核とした革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラの構築を主導するために、「High Performance Computing Infrastructure(HPCI)戦略プログラム」が文部科学省により推進されている。HPCI 戦略プログラムの 5 つの戦略分野の 1 つとして、青木が統括責任者を務める、分野 5「物質と宇宙の起源と構造」が採択され、2010 年度にはその準備研究を行った。分野 5 の戦略プログラムを実施する機関は、青木が拠点長を勤める「計算基礎科学連携拠点」(<http://www.jicfus.jp/jp/>)である。分野 5 の活動に関しては、<http://www.jicfus.jp/field5/jp/> を参照のこと。また、「京」を用いて計算機科学と計算科学分野の連携・融合を促す国際的な研究拠点として、神戸に計算科学研究機構(AICS)が設立され、蔵増が計算科学研究機構の主任研究員を兼任することとなった。

##### 3. 研究成果

###### 【1】PACS-CS Collaboration の活動(全員)

当センターでは、平成 17 年度から 3 ヶ年計画で特別教育研究経費(拠点形成)を受けて開発・製作が進められてきた超並列クラスタ計算機 PACS-CS (計算ノード数 2560、ピーク演算性能 14.3Tflops)が平成 18 年 7 月から稼働を開始した。PACS-CS Collaboration は PACS-CS を主要な計算設備として格子 QCD

の研究を行うことを目的とし、筑波大学物理学系メンバ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 polynomial HMC (PHMC) アルゴリズムを組み合わせることによって 3 種類 (up、down、strange) の軽いクォークをその物理的質量 (物理点) において動的に扱うシミュレーションを行い、QCD に関する近似のない物理的予言を行うことである。平成 18、19 年度は物理点へ向けて 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ことが主要課題であった。平成 20 年度より PACS-CS プロジェクトの目標である物理点でのシミュレーションへの取り組みを開始し、平成 21 年度 reweighting 法を用いた物理点直上でのシミュレーションに成功した。

(1) 1+1+1 フレーバーQCD+QED シミュレーションの開発と物理点における体積効果の検証 (蔵増、浮田、中村、滑川)

次のステップとして平成 22 年度は2つの大きなテーマに取り組んだ。一つは 1+1+1 フレーバー QCD+QED シミュレーションの開発である。従来の格子 QCD 計算では、アルゴリズム的理由により up と down クォークの質量は人為的に等しくし (2+1 フレーバー)、電磁相互作用の効果も無視していた。これに対して、1+1+1 フレーバーQCD+QED シミュレーションでは自然界と同じように up、down、strange クォークの質量をすべて独立なものとして扱い、電磁相互作用の効果も同時に評価することを目指している。我々は、基本的戦略として reweighting 法によって電磁相互作用と up-down クォークの質量差を取り入れるを試みている。本年度は、格子上における電磁相互作用の定式化とそれに対する reweighting 法の適用テストを実施し、年度末から本格計算へと移行した。

もう一つのテーマは物理点における体積効果の検証である。このために超並列クラスタ計算機 T2K-Tsukuba (計算ノード数 648、ピーク演算性能 94Tflops、平成 20 年 6 月稼働開始) を利用したより大きな空間サイズのシミュレーションを実行中である。PACS-CS を用いた物理点計算では、格子サイズは  $32^3 \times 64$  であったが、T2K-Tsukuba を利用した計算では、格子サイズは  $64^4$  であり、空間体積は 8 倍になっている。図 1 はハドロン質量および  $\pi$  メソン、K メソン崩壊定数の実験値との比較を表している。up-down クォーク質量、strange クォーク質量、格子間隔を決定するためのインプットは  $\pi$  メソン、K メソン、 $\Omega$  バリオンの質量であり、今後 reweighting 法を用いたクォーク質量の物理点へのチューニングが必要であることがわかる。また、 $\rho$  メソン質量と  $\Delta$  バリオン質量の実験値からのズレが他のハドロンに比べて顕著であるが、それらは実験的には共鳴状態であることが知られており、その効果は図中の結果には取り入れられていない。その他のハドロンに関しては、実験値とのズレは最大で数%程度である。

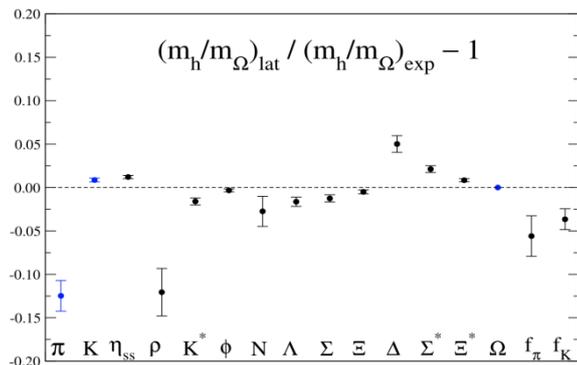


図1 ハドロン質量及び崩壊定数の実験値との比較

$\Omega$  バリオンの質量で規格化されている。青丸は up-down クォーク質量、strange クォーク質量、格子間隔を決めるためのインプットを表す。

## (2) ハドロン共鳴状態の解析 (石塚)

これまで PACS-CS および T2K-Tsukuba を利用して生成された配位を用いて様々な物理量を計算することが可能であるが、特に興味深いものはハドロン共鳴状態の解析である。その深い理解の為には、ハドロン散乱位相を格子上の数値計算により定量的に評価し、実験値と比較することが非常に重要である。この研究では、 $J(PC)=1(-)$  の共鳴状態である  $\rho$  中間子の研究を、2 体  $\pi$  の散乱位相から行った。 $\rho$  中間子の研究はこれまで、動的クォークとして  $u$ ,  $d$  クォークのみを扱った研究しかなかった。この研究では更に  $s$  クォークの効果を取り入れ、より現実に近い状況で研究を行った。数値計算は、PACS-CS グループによって生成されたゲージ配位 ( $a=0.0907$  fm,  $L=2.9$  fm) の中で、クォーク質量 :  $m_\pi=410$  MeV と  $300$  MeV の二つの質量のもとで行った。散乱位相から P-wave の有効長公式を用いて、それぞれの質量での  $\rho\pi\pi$  有効相互作用定数を求めた。我々の得た相互作用定数の結果は、 $m_\pi=410$  MeV では  $g=5.53$  (0.38)、 $300$  MeV では  $g=5.98$ (0.56) である。これらから相互作用定数のクォーク質量依存性が、非常に小さいことがわかった。また、これらの値から実際のクォーク質量 ( $m_\pi=140$  MeV) での  $\rho$  中間子の崩壊幅を評価すると、 $\Gamma=130$  (18) MeV と  $\Gamma=152$ (28) MeV である。これらは実験値  $150$  MeV をよく再現している。これらの研究の暫定的成果は既に論文に掲載されている。また最終研究成果は 2011 年度に論文掲載予定である。

## (3) 格子 QCD による原子核の直接構成 (宇川、蔵増、山崎)

格子 QCD による原子核の直接構成の研究は平成 21 年度にヘリウム原子核の束縛エネルギー計算によって開始されたが、平成 22 年度は 2 核子系の計算を試みた。2 核子系にはスピン三重項チャネル (重陽子) とスピン一重項チャネルが存在するが、前者のみが束縛状態であり、その束縛エネルギーが  $3$  MeV 弱と極めて小さいことが大きな特徴である。そのためヘリウム原子核の直接計算よりも困難であることが予想される。我々は先ず計算コストを抑えるため、クエンチ近似で重いクォーク質量を用いた試験的計

算を行った。散乱状態と束縛状態を識別するためには、2 核子系のエネルギーと 2 個の自由核子エネルギーの差の体積依存性を調べる必要がある。格子の空間サイズ  $L$  を 24 から 96 まで変化させる計算を行った結果、束縛エネルギーは無限体積の極限でも有限の値として存在し、スピン三重項チャンネル(図2左)とスピン一重項チャンネル(図2右)の両者とも束縛状態であるという結論が得られた。もちろん、自然界ではスピン三重項チャンネルのみが束縛状態であり、スピン一重項チャンネルは束縛していないため、我々が見出したスピン一重項チャンネルの束縛状態は、クエンチ近似および重いクォーク質量で計算を行ったことによる効果だと考えている。今後真空偏極効果を取り入れ物理的クォーク質量に近づけていけば、スピン一重項チャンネルの束縛エネルギーは徐々に減少し、最終的には非束縛状態になるのではないかと推測し、現在クォーク質量依存性を調べている。

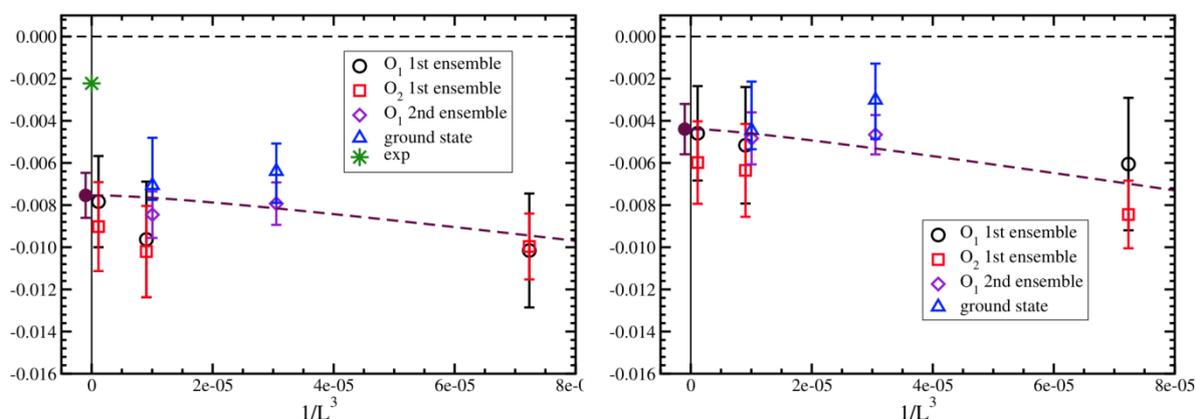


図2 2核子系エネルギーの束縛エネルギーの体積依存性。

破線は空間体積無限大への外挿の様子。左図:スピン三重項(重陽子)、右図:スピン一重項。

## 【2】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、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 により計算する方法を提案し、さまざまな研究を進めている。青木はポテンシャルの近距離での振舞を解析的に調べる方法を提案したが、今年度はその方法を3フレーバーに拡張し、チャンネルによっては斥力ではなく引力になるという結果を得た。また、ポテンシャルのエネルギー依存性及び、角運動量  $L$  依存性を調べ、ポテンシャルのエネルギー及び角運動量依存性が小さいことを示した。

### (1) フレーバーSU(3)極限での H ダイバリオン

HAL QCD Collaboration は、格子 QCD を用いてフレーバーSU(3)対称極限な世界におけるバリオン

間相互作用を調べた。彼らは S 波状態に注目し、最近に開発された方法を用いて、必要十分な6つのポテンシャルを導出した。フレーバー1重項チャンネルが他と異なり短距離で引力であり、H ダイバリオン状態が存在する可能性があるため、さらに研究を進めた。体積を大きくするなどした計算を行なった結果、フレーバーSU(3)対称極限ではHダイバリオンが存在することを示した(図3)。さらに、sクォークがu,dより重くなり、フレーバーSU(3)が破れた場合に、ポテンシャルを計算する方法を検討し、実際に数値計算を実行した。その結果、粒子基底で書いた 3x3 のポテンシャル行列が得られた。

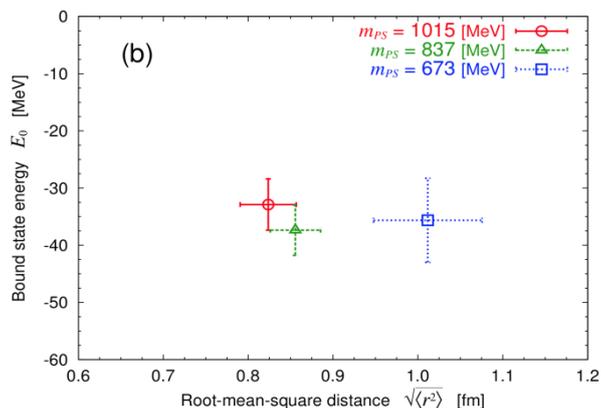


図3:H ダイバリオンの束縛エネルギー(MeV)と2バリオン間の平均距離(fm)。

## (2) バリオン間三体力の研究

近年、原子核や中性子星などの諸性質を理解する上で、三体力の果たす役割の重要性が指摘されている。土井らは、格子 QCD による三体力の決定を目指し、今年度は三体系内での有効二体相互作用に着目した計算を行った。PACS-CS Collaboration によって生成されたパイオン質量が 700 MeV に対応する 2+1 フレーバーゲージ配位を使って、三重水素原子核中の三体相互作用が計算された。ここでは 3 つの核子が直線上に並んだ配位での相互作用を計算している。三体相互作用に近距離での斥力の兆候が見えており、興味深い結果である。

## 【3】有限温度・有限密度 QCD の研究 (青木, 金谷)

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

平成 20 年度に開発した T-integral 法に基づく固定格子間隔アプローチは、様々な温度のシミュレーションを、一つの格子スケールで実行する方法で、計算時間を大幅に抑えつつ、精度の高い有限温度計算を遂行する可能性を拓いている。平成20年度にクエンチ近似による試験研究で方法としての有効性を確認し、平成21年度に現実的な  $N_f = 2 + 1$  でのシミュレーションを、u, dクォーク質量が現実より重い点で開始した。固定格子間隔アプローチでは、既存のゼロ温度配位を活用できるメリットがある。CP-PACS+JLQCD グループによる  $N_f=2+1$  QCD の温度ゼロでの研究結果と公開されているゼロ温度ゲージ配位を利用して、そのシミュレーション・ポイントで有限温度シミュレーションを実行し、ウィルソン型クォークとして初めて、 $N_f = 2 + 1$  の状態方程式の計算に成功した。

## (2) 有効ポテンシャルによる QCD 有限温度・有限密度相転移の研究

QGP 有限温度・有限密度相転移の次数を判定するうえで、観測量のヒストグラムはもともと直感的な情報を含んでいる。我々は、測定が容易なプラケットのヒストグラムから有効ポテンシャルを定義し、その振る舞いから相転移の次数を研究する方法を提案した。そしてその応用として、SU(3)純ゲージ理論のシミュレーションとホッピングパラメータ展開により、クォークが重い領域での QCD の有限温度相構造を研究した。reweighting 法から導かれる有効ポテンシャルの微分の簡単な振る舞いを利用して、様々なゲージ結合定数  $\beta$  におけるシミュレーション結果を組み合わせ、プラケット期待値の広い範囲で有効ポテンシャルの微分を評価した(図4左)。

それに基づき、有効ポテンシャルを計算して、純ゲージ理論の1次相転移が、クォークの効果によりクロスオーバーに変わる臨界点の位置を評価した(図4右)。現在、この研究などに、化学ポテンシャルに関する Taylor 展開の手法を組み合わせ、有限密度における QCD 相構造の研究を進めている。

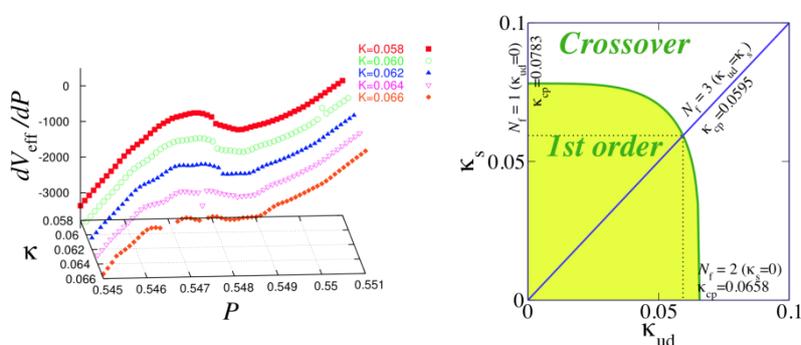


図4: (左) プラケット有効ポテンシャルの微分。(右) 重クォーク領域における  $N_f=2+1$  QCD の有限温度相転移次数のクォーク質量依存性。

## (3) 格子上の中間子スペクトル関数の研究

チャーモニウムなどのスペクトル関数の研究は、クォーク・グルーオン・プラズマ(QGP)の性質を研究する上で重要な情報を与えている。これまで格子上では、最大エントロピー法を用いた計算が主に行われてきたが、仮想モデルの選び方に由来する結果の不定性の問題や、有限の格子上では離散的なはずのスペクトル関数が連続関数になってしまう原理的な欠陥があり、最終的なスペクトル関数の信頼性が問題となっている。我々は、対角化の方法を用いて、離散的なスペクトル関数を評価する方法を開発し、その有効性を検証した。自由 Wilson クォークの場合に、中間子伝搬関数から対角化の方法を使って得られるスペクトル関数と、スペクトル関数の解析解を比較し、対角化の方法で用いる規定の数を十分大きくすることで、解析解が再現されることを確認した。他方、時間方向の格子サイズや数値精度の限界による制限も明らかにした。次に、クエンチ近似QCDを研究し、基底状態に関しては、最大エントロピー法によるスペクトル関数のピークの位置とピーク周りの面積を、対角化の方法でよく再現することを示した。他方、第一励起状態に関しては、対角化の方法の方が実験値に近い結果を導くことを示した。有限温度では、格子サイズの制限により明確な結論は得られなかったが、少なくとも臨界温度の 1.4 倍の温度まで、 $J/\Psi$  など

が消失する兆候は確認できなかった。

#### (4) 重いクォーク間の自由エネルギーと遮蔽質量の研究

ゲージ不変なポリアコフ ラインを時間反転と荷電反転とでそれぞれ偶部分と奇部分に分類し、それらの相関関数から、電氣的遮蔽と磁氣的遮蔽をゲージ不変に定義する方法を提案した。実際に、 $N_f=2$  QCD の場合に相関関数の長距離での遮蔽を調べ、電氣的遮蔽質量と磁氣的遮蔽質量を計算した。電氣的遮蔽質量と磁氣的遮蔽質量の比(スクリーニング比)が有効模型や超対称模型と同様な振る舞いをしていることがわかった。

また、固定格子間隔アプローチで生成された  $N_f=2+1$  QCD の有限温度ゲージ配位上で、重いクォーク間の自由エネルギーを研究した。極めて高温でも、十分短距離では、自由エネルギーが温度ゼロでの重いクォーク間ポテンシャルに一致することを示した。これは、温度効果は長距離のもので、十分短距離では高温相でも温度効果が無いという、理論的予想と一致しているが、従来の研究では、自由エネルギーの原点が温度毎に異なるくりこみを受けるために、この理論的予想を使って、短距離で一致するように手で調整されていた。固定格子間隔アプローチでは、くりこみが温度に依らないためにそうした調整は不要であり、理論的予想を初めて確認することに成功した。また、長距離では、クォークの閉じ込めがやぶれて、自由エネルギーが一定値になる様子も確認された。 $N_f=0$  の結果と比べると、 $N_f=2$  および  $2+1$  の結果は有意に大きく、軽いクォークが大きな影響を持っていることが示された。

### 【3】ILDG/JLDG の構築・運用に係わる活動 (吉江, 浮田)

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 (ILDG) プロジェクトに参画し、システムの構築・改良に携わった。ILDG に投入する配位のメタデータを半自動的に収集するシステムの構築プロジェクト (Metadata Capture Project) をエジンバラ大学と共同で推進した。また、国内の格子 QCD 研究者のデータグリッド Japan Lattice Data Grid (JLDG) の改良に携わった。

## 4. 研究業績

### (1) 研究論文

1. PACS-CS Collaboration: T. Yamazaki, Y. Kuramashi, A. Ukawa, Helium Nuclei in Quenched Lattice QCD, Phys. Rev. D 81, No. 11 (2010) ref. 111504(R), pp.1-4.
2. Yoshinobu Kuramashi, Progress in Lattice QCD, Proceeding of Science (ICHEP 2010) 545.
3. Naruhito Ishizuka for PACS-CS Collaboration, Calculation of  $\rho$  meson decay width from the PACS-CS configurations, Proceeding of Science (LATTICE2010) 108.
4. Takeshi Yamazaki, Calculation of Helium nuclei in quenched lattice QCD, Proceeding of Science (LATTICE2010) 021.
5. Y. Taniguchi for PACS-CS Collaboration, Non-perturbative renormalization of quark mass in  $N_f=2+1$

- QCD with the Schroedinger functional scheme, PoS **LATTICE2010** (2010) 242
6. Y. Taniguchi for PACS-CS collaboration, Non-perturbative renormalization of quark mass in  $N_f=2+1$  QCD with the Schroedinger functional scheme, JHEP **1008** (2010) 101, 1-25
  7. T. Inoue, N. Ishii, S. Aoki, T. Doi, T. Hatsuda, Y. Ikeda, K. Murano, H. Nemura, K. Sasaki (HAL QCD collaboration), Baryon-Baryon Interactions in the Flavor SU(3) Limit from Full QCD Simulations on the Lattice, Prog. Theor. Phys. 124 (2010) 591-603.
  8. Sinya Aoki, Janos Balog, Peter Weisz, Operator product expansion and the short distance behavior of 3-flavor baryon potentials, JHEP09(2010)083.
  9. H. Fukaya, S. Aoki, T.W. Chiu, S. Hashimoto, T. Kaneko, J. Noaki, T. Onogi, N. Yamada (JLQCD and TWQCD collaborations), Determination of the chiral condensate from QCD Dirac spectrum on the lattice, Phys. Rev. D83 (2011) 074501.
  10. Takashi Inoue, Noriyoshi Ishii, Sinya Aoki, Takumi Doi, Tetsuo Hatsuda, Yoichi Ikeda, Keiko Murano, Hidekatsu Nemura, Kenji Sasaki (HAL QCD Collaboration), Bound H-dibaryon in Flavor SU(3) Limit of Lattice QCD, Phys. Rev. Lett. 106(2011) 162002.
  11. S. Aoki (for HAL QCD Collaboration), Baryon Interactions from Lattice QCD, AIP Conference Proceedings Vol. 1235 (2010) 16-22.
  12. S. Aoki (for HAL QCD Collaboration), Baryon-Baryon interactions from lattice QCD, Chinese Physics C 34 No.9 (2010) 1236-1240.
  13. Sinya Aoki, Lattice QCD and Nuclear Physics, to be published in LES HOUCHEs SUMMER SCHOOL: SESSION 93: MODERN PERSPECTIVES IN LATTICE QCD: QUANTUM FIELD THEORY AND HIGH PERFORMANCE COMPUTING, 3-28 Aug 2009, Les Houches, France.
  14. JLQCD Collaboration: Guido Cossu, Sinya Aoki, Shoji Hashimoto, Takashi Kaneko, Hideo Matsufuru, Jun-ichi Noaki, Eigo Shintani, Finite temperature QCD at fixed Q with overlap fermions, PoS (Lattice 2010) 174.
  15. Sinya Aoki, Recent progress on nuclear potentials from lattice QCD, PoS (ICHEP2010) 362.
  16. JLQCD Collaboration: T. Kaneko, S. Aoki, G. Cossu, H. Fukaya, S. Hashimoto, J. Noaki, T. Onogi, Light meson form factors in  $N_f=2+1$  QCD with dynamical overlap quarks, PoS (Lattice2010) 146.
  17. JLQCD Collaboration: K. Takeda, S. Aoki, S. Hashimoto, T. Kaneko, T. Onogi, N. Yamada, Nucleon strange quark content in 2+1-flavor QCD, PoS (Lattice2010) 160.
  18. Keiko Murano, Noriyoshi Ishii, Sinya Aoki, Tetsuo Hatsuda, Non-locality of the nucleon-nucleon potential from Lattice QCD, PoS (Lattice2010) 150.
  19. E. Shintani, S. Aoki, S. Hashimoto, T. Onogi, N. Yamada, Two-photon decay of  $\pi^0$  from two-flavor lattice QCD, PoS(Lattice 2010)159.
  20. Noriyoshi Ishii, Lambda-Nucleon and Nucleon-Nucleon Interactions on the Lattice, Few-Body Systems 49, 269-281 (2011).

21. K. Takeda, S. Aoki, S. Hashimoto, T. Kaneko, T.~Onogi and N.~Yamada [JLQCD collaboration], Nucleon strange quark content in 2+1-flavor QCD, Proceeding of Science (LAT2010) 160.
22. Y. Maezawa, S. Aoki, S. Ejiri, T. Hatsuda, N. Ishii, K. Kanaya, N. Ukita and T. Umeda, Electric and Magnetic Screening Masses at Finite Temperature from Generalized Polyakov-Line Correlations in Two-flavor Lattice QCD, Phys. Rev. D 81, No.9 (2010) ref.091501(R), pp.1-5.
23. Y. Maezawa, S. Aoki, S. Ejiri, T. Hatsuda, K. Kanaya, H. Ohno and T. Umeda, Heavy-quark free energy at finite temperature with 2+1 flavors of improved Wilson quarks in fixed scale approach, PoS (LATTICE 2009) (2010) ref.165, pp.1-7.
24. K. Kanaya, S. Aoki, H. Ohno, T. Umeda, S. Ejiri, T. Hatsuda, N. Ishii, Y. Maezawa, Towards the equation of state in 2+1 flavor QCD with improved Wilson quarks in the fixed scale approach, PoS (LATTICE 2009) (2010) ref.190, pp.1-7.
25. S. Ejiri, Y. Maezawa, N. Ukita, S. Aoki, T. Hatsuda, N. Ishii, K. Kanaya, T. Umeda, Equation of State and Heavy-Quark Free Energy at Finite Temperature and Density in Two Flavor Lattice QCD with Wilson Quark Action, Phys. Rev. D 82, No.1 (2010) ref.014508, pp.1-35.
26. K. Kanaya, S. Aoki, S. Ejiri, T. Hatsuda, N. Ishii, Y. Maezawa, H. Ohno, H. Saito, N. Ukita, T. Umeda, QCD thermodynamics at zero and finite densities with improved Wilson quarks, Progr. Theor. Phys. Suppl., No.186 (2010) 556-562.
27. Kazuyuki Kanaya, Finite Temperature QCD on the Lattice -- Status 2010, PoS (LATTICE 2010) (2011) ref.012, pp.1-21.
28. S. Ejiri, Y. Nakagawa, S. Aoki, K. Kanaya, H. Ohno, H. Saito, T. Hatsuda, Y. Maezawa, T. Umeda, Scaling behavior of chiral phase transition in two-flavor QCD with improved Wilson quarks at finite density, PoS(LATTICE 2010) (2011) ref.181, pp.1-7.
29. H. Ohno, S. Aoki, S. Ejiri, K. Kanaya, Y. Maezawa, H. Saito, T. Umeda, An application of the variational analysis to calculate the meson spectral functions, PoS(LATTICE 2010) (2011) ref.209, pp.1-7.
30. H. Saito, S. Aoki, K. Kanaya, H. Ohno, S. Ejiri, T. Hatsuda, Y. Maezawa, T. Umeda, The order of the deconfinement phase transition in a heavy quark mass region, PoS(LATTICE 2010) (2011) ref.212, pp.1-7.
31. T. Umeda, S. Aoki, K. Kanaya, H. Ohno, S. Ejiri, T. Hatsuda, Y. Maezawa, EOS in 2+1 flavor QCD with improved Wilson quarks by the fixed-scale approach, PoS(LATTICE 2010) (2011) ref.218, pp.1-7.
32. H. Ohno, S. Aoki, S. Ejiri, K. Kanaya, Y. Maezawa, H. Saito and T. Umeda, Charmonium spectral functions with the variational method in zero and finite temperature lattice QCD, Phys. Rev. D submitted.
33. Kazuyuki Kanaya, Lattice results on the phase structure and equation of state in QCD at finite

temperature, AIP Conference Proceedings 1343 (2011) 57-62.

34. Mark G. Beckett, Paul Coddington, Balint Joo, Chris M. Maynard, Dirk Pleiter, Osamu Tatebe, Tomoteru Yoshie, Building the International Lattice Data Grid, Comp. Phys. Comm. 182 (2011) 1208-1214.

## (2) 学会発表

### (A) 招待講演

1. 藏増 嘉伸 「Progress in Lattice QCD」 35th International Conference on High Energy Physics (Palais des Cong`es, Paris, France, July 22-28, 2010)
2. 藏増 嘉伸 「Physical Point Simulation in 2+1 Flavor Lattice QCD」 CERN Theory Institute "Future Directions in Lattice Gauge Theory" (CERN, Geneva, Switzerland, July 19-Aug. 10, 2010)
3. 藏増 嘉伸 「Recent Results from PACS-CS Collaboration」 Japanese-German Seminar 2010 "Lattice QCD confronts experiment" (Mishima, Japan, Nov. 4-6, 2010)
4. 藏増 嘉伸 「Application of Block Krylov Subspace Algorithms to the Wilson-Dirac Equation with Multiple Right-Hand Sides in Lattice QCD」 (招待講演), Sixth Workshop on QCD Numerical Analysis (Boston University, Boston, USA, Sep. 8-10, 2010)
5. 山崎 剛 「Calculation of Helium Nuclei in Quenched Lattice QCD」 (The XXVIII International Symposium on Lattice Field Theory, Lattice 2010. (the Tanka Village Resort, Villasimius, Sardinia, Italy, June 14-19, 2010)
6. 青木 慎也 「Neutron electric dipole moment from lattice QCD」 International Workshop on Particle's EDM and Implications, (Shanghai, China, June 14-16, 2010.)
7. 青木 慎也 「Hadron-Hadron Interactions from lattice QCD」 (Elba XI Workshop ``Electron-Nucleus Scattering XI", (Elba, Italy, June 21-25, 2010.)
8. 青木 慎也 「Recent progress on nuclear potentials from lattice QCD」 35th International Conference on High Energy Physics(ICHEP), (July 22-28, 2010, Paris, France.)
9. 青木 慎也 「Extraction of hadron interactions from lattice QCD」 CERN Theory Institute "Future directions in lattice gauge theory LGT10", (19 July - 13 August, 2010, CERN, Switzerland.)
10. 青木 慎也 「Nuclear Force from lattice QCD and its extensions」 MLL-colloquium, (October 21, 2010, TU, Munich, Germany)
11. 青木 慎也 「Extraction of hadron interactions from lattice QCD」 Japanese-German Seminar 2010 "Lattice QCD confronts experiments" (4-6, November, 2010, Mishima, Japan)
12. 青木 慎也 「From Quarks to Supernovae」 International Symposium "From Quarks to Supernovae", (28-30, November, 2011, Atagawa Heights, Izu, Shizuoka, Japan)
13. 青木 慎也 「 $\alpha_s$  from PACS-CS」 (招待講演), Workshop on Precise Measurement of  $\alpha_s$ , (9-11 February 2011, Max Planck Institut für Physik, Munich, Germany)

14. 石井 理修「NN interaction from the lattice」(招待講演), International conference on the structure of baryons, BARYONS'10, (Dec.7-11, 2010, Osaka, Japan)
15. K. Kanaya 「Finite temperature QCD on the lattice -- status 2010」 The XXVIII International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2010) (Villasimius, Sardinia, Italy, June 14-19, 2010)
16. K. Kanaya 「Status of EOS calculation in 2+1 flavor QCD with improved Wilson quarks by the fixed scale approach」 (International workshop "Extreme QCD 2010" (XQCD 2010) (Physikzentrum Bad Honnef, Germany, June 21-23, 2010)
17. K. Kanaya 「Lattice results on the phase structure and equation of state in QCD at finite temperature」 International conference on "Quark Confinement and the Hadron Spectrum IX" (QCHS9) (Complutense University of Madrid, Madrid, Spain, Aug. 30-Sept. 4, 2010)
18. 吉江 友照 「格子 QCD データグリッド ILDG/JLDG の構築と運用」 第 3 回データ科学ワークショップ (筑波大計算科学研究センター, つくば, 2010 年 11 月 25-26 日)

#### (B) その他の学会発表

1. 石塚 成人「Calculation of rho meson decay width from the PACS-CS configurations」, The XXVIII International Symposium on Lattice Field Theory, Lattice 2010. (the Tanka Village Resort, Villasimius, Sardinia, Italy, June 14-19, 2010)
2. 滑川 裕介「Charm quark system on the physical point in 2+1 flavor lattice QCD」, Japanese-German Seminar 2010 "Lattice QCD confronts experiment" (Mishima, Japan, Nov. 4-6, 2010)
3. Y. Taniguchi 「Non-perturbative renormalization of quark mass in  $N_f=2+1$  QCD with the Schroedinger functional scheme」, The XXVIII International Symposium on Lattice Field Theory, Tanka Village, Villasimius, Sardinia, Italy, June 14-19, 2010
4. Y. Taniguchi 「Non-perturbative renormalization of quark mass in  $N_f=2+1$  QCD with the Schroedinger functional scheme」, 国際シンポジウム「From Quarks to Supernovae」, 静岡県賀茂郡東伊豆町奈良本, Nov. 28-30, 2010
5. 石塚 成人 「Lattice QCD calculation of the rho meson decay width」, 国際シンポジウム「From Quarks to Supernovae」 (熱川ハイツ, 静岡県, 2010 年 11 月 28 日-30 日)
6. K. Kanaya 「QCD thermodynamics with Wilson-type quarks」, Japanese-German Seminar 2010 "Lattice QCD confronts experiments" (Mishima, Japan, Nov. 4-6, 2010)
7. 吉江 友照 「Status Report: JLDG」, The 16th International Lattice Data Grid Workshop (Video workshop hosted by Boston Univ., March 5, 2011)
8. 藏増 嘉伸 「Current Status and Future Perspectives in Lattice Gauge Theories」, 次世代格子ゲージシミュレーション研究会 (理化学研究所, 和光市, 2010 年 9 月 24-26 日)
9. 藏増 嘉伸 「エクサスケールコンピューティングで基礎科学が目指すもの」, 2011 年ハイパ

フォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム (産業技術総合研究所, つくば市, 2011 年 1 月 18-19 日)

10. 石塚 成人 「Calculation of rho meson decay width from the PACS-CS configurations」, 日本物理学会 (九州工業大学戸畑キャンパス, 北九州市, 2010 年 9 月 11-14 日)
11. 滑川 裕介 「Charm quark system on the physical point in 2+1 flavor lattice QCD」, “New Hadrons” Workshop 2010 (理化学研究所, 和光市, 2011 年 2 月 28-3 月 1 日)
12. 谷口 祐介 「 $N_f=2+1$  QCD における Schroedinger functional scheme を用いた非摂動的な繰り込み」, 日本物理学会 2010 年秋季大会, 2010 年 9 月 11-14 日, 九州工業大学
13. 青木 慎也 「次世代スパコンの目指すもの」& 「私から見た次世代スパコン」, シンポジウム『次世代スパコンで展開が期待される素粒子物理学』、北陸信越地区素粒子論グループ合宿研究会、2010 年 5 月 23 日
14. 吉江 友照 「計算素粒子物理学のデータ共有基盤 JLDG の高度化」, 平成 21 年度 CSI 委託事業報告交流会 (学術総合センター, 東京, 2010 年 6 月 21 日)
15. 吉江 友照 「Hepnet-J/sc 報告」, Hepnet-J ユーザー会 (東大宇宙線研究所神岡研究施設, 神岡, 2010 年 10 月 30-31 日)

## 5. 連携・国際活動・社会貢献、その他

1. 青木慎也 他, 科研費新学術領域研究「素核宇宙融合による計算科学に基づいた重層的物質構造の解明」主催国際シンポジウム”From Quarks to Supernovae” (熱川ハイツ, 伊豆, 静岡, 2010 年 11 月 28-30 日)参加者 約 80 名
2. 青木慎也 他, 科研費新学術領域研究「素核宇宙融合による計算科学に基づいた重層的物質構造の解明」レクチャーシリーズの主催 第一回 2010 年 6 月 9-10 日 東京大学 理学部, 東京 第二回 2010 年 12 月 15-16 日 京都大学 基礎物理学研究所, 京都
3. 金谷 和至 他, 日本学術振興会 二国間交流事業 日独セミナー「格子 QCD の新段階 --- 実験の再現から予言へ (Lattice QCD confronts experiment)」 (三島市・三島商工会議所会館, 2010 年 11 月 4-6 日)参加者 44 名 (内、ドイツ 13 名、米国 3 名)
4. 金谷 和至 他, 国際ワークショップ「有限温度有限密度 QCD の非摂動的展望 (Nonperturbative aspects of QCD at finite temperature and density)」 (筑波大学計算科学研究センター, 2010 年 11 月 8-9 日) 参加者 43 名 (内、海外 7 ヶ国 12 名)
5. 金谷 和至 他, Asian School on Lattice Field Theory 2011 (Tata Institute of Fundamental Research, Mumbai, India, 2011 年 3 月 14-25 日) 参加者 約 40 名

## II. 宇宙・原子核物理研究部門

### II-1. 宇宙分野

#### 1. メンバ

教授 梅村 雅之

准教授 森 正夫

講師 吉川 耕司

助教, 主任研究員 岡本 崇 (科研費基盤 S, HPCI 戦略プログラム)

助教 川勝 望 (理数学生応援プロジェクト)

研究員 谷川 衝 (計算科学研究センター), 川口 俊宏 (科研費基盤 A)

大学院生 8 名

4 年生 6 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, これを用いた大質量ブラックホール多体系におけるブラックホールの合体成長, 宇宙論的ライマンアルファ輝線天体モデルの構築, 高赤方偏移銀河のサブミリ波特性の研究を行った。また, 銀河進化標準模型の構築を目的として, **FIRST, T2K-Tsukuba** を用いて, ライマンアルファ輝線天体とライマンブレイク銀河の理論進化模型の構築, 宇宙再電離と銀河形成・進化, 銀河衝突とダークマターハローの構造, 銀河衝突と銀河中心の巨大ブラックホールの活動性, ダークマターハローの力学構造の安定性解析, コールドダークマターハロー中の銀河風の定常解, 超新星爆発と銀河進化の研究を行った。さらに, 宇宙論・銀河形成分野で, 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, 衛星銀河問題の解決, 合体銀河における星団形成, 宇宙論的銀河形成シミュレーションによるライマンアルファ銀河の研究を行った。

また, シミュレーション手法と計算機の開発として, **TREE** 構造で高速化した新たな輻射流体力学コード **START (SPH with Tree-based Accelerated Radiative Transfer)** の開発, **Tree** 法を利用した輻射輸送計算のメッシュ法への応用, **Vlasov-Poisson** 方程式系を用いた自己重力系の数値シミュレーション, **GPGPU** を用いた数値シミュレーションの開拓, **Advanced Vector eXtension** を用いた **N** 体計算の高速化を行った。また, プレ戦略イニシアティブ「アクセラレータによる銀河輻射流体力学の幕開け」(代表者 森正夫) が採択され, 輻射流体力学実現のための演算加速器を搭載した並列計算機システム構築を開始し, プロトタイプ制作を行った。

#### 3. 研究成果

##### 【1】 **FIRST** プロジェクト

##### (1) 宇宙シミュレータ **FIRST**

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。

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, 3 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 3 台で合計 15TB 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 89TB 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。

## (2) 大質量ブラックホール多体系におけるブラックホールの合体成長

多くの銀河中心には 106 から 109 太陽質量の大質量ブラックホール(SMBH) が存在する。銀河はより小さな銀河同士の衝突合体によって形成されたため, その中にあるブラックホールも合体成長した可能性があるが, それらのブラックホールの合体成長過程は明らかになっていない。

SMBH 同士が合体するにはそれぞれの軌道角運動量を抜く必要がある。2 つの SMBH だけで合体することは難しい。SMBH の軌道角運動量を抜く機構の 1 つは銀河の星による力学的摩擦であるが, 2 つの SMBH 間距離が収縮すると, SMBH の間を通る星がなくなるため力学的摩擦が効かなくなり, SMBH 間距離の収縮が止まるからである(Begelman et al.1980; Makino, Funato 2004)。もう 1 つ SMBH が銀河内に存在すると, その SMBH が 2 つの SMBH の軌道角運動量を持ち去るため, 2 つの SMBH は合体できる(Iwasawa et al.2006)。より多くの SMBH が銀河内に存在する場合, いくつかの SMBH は合体することが予想される。

我々は 1 つの銀河の中に取り込まれた複数の SMBH がどのように進化するかを, 高精度 N 体計算によってシミュレートした。その結果, 星との力学的摩擦によってブラックホール 3 体相互作用の効率が増し, 結果としてブラックホールの連続的合体成長により中心に一つの巨大ブラックホールが形成されることを明らかとなった (Tanikawa & Umemura 2011)。

## (3) 宇宙論的ライマンアルファ輝線天体モデルの構築

ライマンアルファ輝線天体 (LAEs) は、活発な星形成を起こしている天体であり、赤方偏移 0 ~7 の広い範囲で観測されている。最近の観測で LAEs はその質量や色等級で多様性を示すことがわかってきた。しかし、それらが銀河進化のどのようなフェーズに対応しているのかは明らかにされていない。そこで我々は、宇宙論的計算と化学進化モデルを組み合わせ、LAE のモデルを構築した。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、スペクトル生成コード 'PEGASE' を用いて SED の計算を行った。ライマンアルファ光度については、ダスト吸収の効果も考慮した。結果として、ライマンアルファ輝線天体には、大きく 2 種類のもので存在することが明らかになった。一つは比較的質量が軽く ( $\approx 10^{10} M_{\odot}$  程度)、銀河進化の極初期の星形成フェーズにある天体であり、もう一つは質量が重く ( $\approx 10^{10-12} M_{\odot}$ )、初期の星形成期を終了した後、ガスが降着して星形成を誘起する天体である。前者を Type 1 LAE、後者を Type 2 LAE と名づけた。また、これら 2 つのタイプで空間相関や予想される色光度を計算した結果、Type 2 LAE は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わかった (Shimizu & Umemura 2010)。

#### (4) 高赤方偏移銀河のサブミリ波特性と ALMA での検出可能性

高赤方偏移の星形成銀河のダスト放射をシミュレーションするために、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て 3 次元輻射輸送計算を行い、ダスト温度の正確な決定とサブミリ波放射強度計算を行った。その結果、ダスト量は時間とともに単調に増加するのに対し、サブミリ波放射強度はライマンアルファ輝線天体の後期でピークとなることがわかった。これは、ライマンアルファ輝線天体の後期では、ダストが星形成領域に集中しダスト温度が高くなるためである。ライマンブレイク銀河期では、ダストは超新星爆発による激しいガスフローによって、星形成領域から遠ざかり、結果としてサブミリ波放射強度が減少する。また、ALMA の検出感度を想定すると、ライマンアルファ輝線天体期、ライマンブレイク銀河期共に 1 時間以内の観測で検出可能であることがわかった。

## 【2】 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ー、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 (A) 「理論と観測の融合による銀河発生学の探究」(平成 21 年度~平成 24 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ー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ー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。さまざまな質量のスケールで化学力学シミュレーションを行った結果、ライマンアルファエミッターとライマンブレイク銀河が原始銀河の進化系列であることを見出すことができた。またライマンアルファエミッターで放射されるライマンアルファエミッションの光度は、原始銀河の質量および星形成率と密接な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に加えて、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) 宇宙再電離と銀河形成・進化

赤方偏移  $z \sim 1100$  で一度中性化を迎えた宇宙は、その後形成される天体からの紫外線光子によって再び電離状態へと引き戻され、現在まで高度に電離した状態を維持している事が分かっている。この宇宙再電離に関しては、近年のクエーサー観測や WMAP による観測によってその電離史に大まかな制限はつけられてきた。しかしながら、宇宙再電離を引き起こした電離源に関しては未だ理論的にも観測的にもまったく分かっていない。これら電離源や電離史の研究では、これまでいつも銀河の電離光子脱出確率の不明瞭さが解析を困難にしていた。この電離光子脱出確率は銀河内の星から放射される全電離光子数のうち銀河間空間へ脱出する割合で、これによって銀河の電離光子放射率、紫外線背景輻射強度は大きく左右される。我々は宇宙論的流体計算により計算された多数の星形成銀河に対して、3次元輻射輸送計算を行う事により、銀河内の電離構造、電離光子脱出確率を見積った。結果として、赤方偏移  $z=3-6$  においては星形成銀河により銀河間ガスを電離する事が可能である事が示された。さらに電離源解明の鍵を握る電離光子脱出確率についての質量依存性やそのメカニズム、電離源を担う銀河の典型的質量について議論した。

## (4) 銀河衝突とダークマターハローの構造

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。近傍銀河 M31 においても、アンドロメダストリームやシェルといった銀河衝突の痕跡が発見されており、ストリームの速度構造が詳細に観測・解析されている。一方、理論的には N 体シミュレーションを用いた研究により、観測されている空間構造を再現することに成功しているが、ストリームの速度構造についてはこれまで調べられてこなかった。そこで我々は、観測されている空間構造を再現でき

る計算結果を用いてストリームの速度構造を観測結果と比較し、多くの観測結果が説明できることを明らかにした。宇宙論的 N 体シミュレーションを用いた構造形成では、ダークマターハローの密度分布がハローの外縁部で半径の-3 乗となることが示唆されており、ダークマターハローの“ユニバーサルプロファイル”として知られている。このプロファイルが現実の銀河でも成り立っていることを検証するためには、星の運動を観測し、これを解析することでダークマターハローの作るポテンシャルを調べ、これと“ユニバーサルプロファイル”の作るポテンシャルを比較することが有力な手段となる。銀河衝突の痕跡は銀河外縁部においても明るく、痕跡を形成している星の運動を観測することが可能であるため、銀河外縁部でのダークマターハローのプロファイルを観測的に調べるために適している。M31 のアンドロメダストリームを用いればそのダークマターハローの外縁部の構造に迫ることができる。我々の N 体シミュレーションでは、M31 のダークマターハローのプロファイルとして半径の-3 乗という密度分布を仮定し、その結果観測されているストリームの速度構造をよく再現できた。これは、半径の-3 乗というダークマターハローの密度分布が実際の銀河でも成り立っていることを示唆する重要な結果である。

#### (5) 銀河衝突と銀河中心の巨大ブラックホールの活動性

これまでの研究では銀河衝突現象の解析を重力多体系として解析してきたが、今後は銀河衝突に対するガスやダストの力学的な応答を調べる必要がある。特に銀河衝突と銀河中心ブラックホールの活動性との物理的な関係は大変興味深い。銀河衝突過程によっては、ブラックホールの活動性を際立たせる場合とその活動性を著しく減衰させる効果が予想される。我々はそのような状況を正確に解析する為、N 体シミュレーションでは取り入れられないガスの効果を取り入れるための銀河衝突の流体モデルの構築に取り組み、HLLC 法を採用した 3 次元並列流体コードの開発を開発した。銀河中心の降着円盤に対する質量供給源として力学的に安定なトーラスを想定し、そのトーラスと銀河衝突によって発生した衝撃波との衝突を様々なパラメータで数値実験を行った。その結果、衝撃波によってトーラスが破壊され、降着円盤への質量供給が抑制されるパラメータ領域を確定することに成功した。

#### (6) ダークマターハローの力学構造の安定性解析

宇宙の構造形成のパラダイムとなっているコールドダークマター(CDM)シナリオは、N 体シミュレーションによるとダークマター(DM)ハロー中心部で質量密度が発散する(カスプ)構造を预言する。DM が力学的に主たる役割を果たし、カスプを持つことが期待される天体として矮小銀河が挙げられる。その観測結果によると、矮小銀河は中心部で密度は発散せず、一定となる(コア)ことが報告されている。この理論と観測の不一致はコア-カスプ問題として知られ、CDM シナリオの未解決問題の一つである。コア-カスプ問題を解決するモデルとして、“かつて矮小銀河で大量の超新星爆発によるバリオン(ガス)の放出が起こり、その結果の重力場変動によりカスプがコア

へと遷移した"というものがある。本研究では、これまで無視されてきた質量放出の起こる時間スケールに注目し、DM ハローの力学応答への依存性を調べた。その結果、他の条件が同じであっても、放出時間が短いほどカスプはより平坦に遷移しやすい事を明らかにした。しかしながら矮小銀河の観測に合うような全く平坦な質量分布を再現することはできなかった。そして、従来言われてきた質量放出仮説のみではコアカスプ問題を解決できないことを指摘した。

#### (7) コールドダークマターハロー中の銀河風の定常解

銀河風は超音速で流れる宇宙流体の1つとして知られている。銀河の中心付近で超新星爆発などにより星間ガスにエネルギーが放出されると星間ガスは銀河の外側に向かって超音速で流出するが、常に超音速で流れる場合だけではなく亜音速から始まって連続的に加速して超音速となって流れる遷音速流も存在する可能性がある。しかし先行研究では遷音速解が見つかっていなかった。本研究ではコールドダークマターハロー中の銀河風の遷音速流を発見することに成功した。銀河風をダークマターハロー中における球対称定常流であると仮定すると、内側では重力の効果が効いているために亜音速流は加速し、外側では膨張の効果が効いているために超音速流が加速するので、膨張の効果と重力の効果が釣りあっている点をちょうど音速で流れる場合は亜音速から超音速への連続的な加速が実現でき、遷音速流となることがわかった。解析の結果、銀河風が遷音速解を持つためには、ダークマターとバリオンを含む銀河の質量分布がダークマターハローのスケール長よりも内側で距離の二乗よりも大きなべきを持つ必要があることを見出した。

#### (8) 超新星爆発と銀河進化

銀河形成・進化過程で爆発的な星形成に伴って発生する多重超新星爆発は、銀河内のガスに多大なエネルギーを供給する。超新星爆発によって生成された衝撃波から高温の銀河ガスを生成し、やがて銀河からのアウトフロー（銀河風を）形成することになる。このような銀河風生成メカニズムの研究は、計算機性能の飛躍的な向上と近年の高精度銀河観測データの蓄積に後押しされながら、現在も精力的に行われているが、未だ明確な答えを我々は持っていない。そこで本研究では、軸対称密度場中での衝撃波の伝播を扱う事ができる、Laumbach-Probstein 法と呼ばれる強力な近似解法を用いて、銀河風生成メカニズムの理論的研究を行った。その結果、銀河風の生成効率と、銀河形状、星形成率との間の関係を明らかにした。

### 【3】 宇宙論・銀河形成

#### (1) 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 T2K-Tsukuba 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）での衝突銀河団の 3 次元数値実験を世界で初めて行った。その結果、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。実際の衝突銀河団における物理状態は、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、代表的な衝突銀河団として知られ、様々な角度から研究されている弾丸銀河団 (Bullet Cluster) についてもその再現シミュレーションを行い、弾丸銀河団においても非平衡電離状態や 2 温度状態が存在することを示した。

## (2) 衛星銀河問題の解決

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は、我々の天の川銀河のような銀河が数百から数千もの衛星銀河を持つことを予言する。一方、現在まで天の川銀河の周囲には 20 程度の衛星銀河しか発見されていない。この理論と観測の矛盾は「衛星銀河問題」と呼ばれ、標準モデルのもつ大問題とされてきた。一方、この問題はダークマターのみを考慮した宇宙論的シミュレーションによって指摘されているものである。そこで我々は、宇宙背景放射や超新星爆発による星間ガス加熱の影響を取り入れた宇宙論的な銀河形成シミュレーションを行い、コールドダークマターモデルが予言する「目に見える」衛星銀河の数やその性質を調べた。その結果、超新星爆発によるガスの加熱が十分に効けば、衛星銀河の光度関数は再現可能であることを示した。このような加熱は衛星銀河の光度-金属量関係も同時に再現することも明らかにした。

一方、シミュレーションで得られた衛星銀河と観測された天の川銀河のそれを光度ごとに比較した場合、シミュレーションによるものの方が力学的な質量が重いことが判明した。これは、(i) 天の川銀河のダークハローが我々が今回候補としたものよりも軽い、(ii) 衛星銀河光度関数は親銀河のダークハロー質量が同じでも様々なばらつきを持ち得る、(iii) シミュレーションでは捉えきれないバリオンの物理過程により、衛星銀河のダークハロー中心部はシミュレーションで得られたそれより密度が下がっている、等の可能性が考えられる。

### (3) 合体銀河における星団形成

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  $nH \approx 0.1 \text{cc}^{-1}$  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  $nH$  が  $100 \text{cc}^{-1}$  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い、銀河の合体時に励起される星団形成について調べた。その結果、合体の最終段階で銀河中心に複数の巨大星団が形成されることが明らかになった。これは赤外線で見られる銀河である ULIRG や LIRG によく見られる multiple-nuclei に酷似しており、multiple-nuclei の起源として従来考えられていた 3 つ以上の銀河の合体よりも自然なシナリオである。

### (4) 宇宙論的銀河形成シミュレーションによるライマンアルファ銀河の研究

ガス冷却や、星形成、超新星爆発等の物理過程を取り入れた宇宙論的な銀河形成シミュレーションを行い、 $z = 3.1$  におけるライマンアルファ銀河の性質を観測と比較した。我々は、星間ガスのクランピネスが親銀河のダークハロー内のサブハローの数に比例するという現象論的モデルを導入し、ライマンアルファ銀河の角度相関・紫外及びライマンアルファ光度関数・ライマンアルファ等価幅分布という 3 つの観測量を初めて同時に再現した。

## 【4】 シミュレーション手法と計算機の開発

### (1) TREE 構造を用いた高速輻射流体スキーム START の開発

輻射は物質との相互作用を通じて、ガスの化学進化や力学進化に影響を与える。このような過程を矛盾無く解く為には、輻射輸送計算と流体力学計算をカップルさせた輻射流体計算が必要となる。そのような輻射流体計算法の一つに Radiation Smoothed Particle Hydrodynamics (RSPH) 法というものがある(Susa 2006)。この手法では、放射源一つにつきおおよそ  $O(N)(N$  は SPH 粒子数)の計算量で輻射輸送計算が可能となる。我々は、この計算法を用いて種族 III 星からの紫外線フィードバックに関する研究を行ってきた(Hasegawa, Umemura and Susa 2009 など)。この RSPH 法を含め多くの輻射輸送計算では輻射性再結合による放射はすぐその場で吸収されるという近似(On the spot 近似)を用い、実際にはそれらの光子の輻射輸送計算を行ってはいない。これは、再結合光子の輻射輸送を計算する事はすべての粒子を放射源として扱う事と同等であり、計算量が  $O(N \times N)$  と膨大となり、実現が非常に困難となる為である。また同様の理由により、星などの放射源の数が多数の場合にも計算を実行することが困難となってしまう。そこで、我々はこれまで使用してきた粒子法流体力学 (SPH 法) をベースにした輻射流体力学コードの輻射輸送部分についてツリー構造によって大幅な加速を実現し、新たな輻射流体力学コード START (SPH with Tree-based Accelerated Radiative Transfer)を開発した。このコードを用いることにより、これまで正確に扱うことのできなかった散乱光子を近似なく扱うことが可能になった。この手法では、放射源の数を  $N_s$  とした場合、1 ステップ当たり  $N \log(N_s)$  のオーダーの計算量で輻射流体計算をする事が可能と

なる。これにより、これまで非常に困難であった散乱光を考慮した輻射流体計算や多数の星からの輻射性フィードバックを同時に取り扱った計算を可能とした。この手法を用いて、光電離に対する散乱光の役割を解析した結果、吸収体の大きさが電離光子の平均自由行程と同程度になる場合、On the spot 近似が適当でないことを明らかにした。

#### (2) Tree 法を利用した輻射輸送計算のメッシュ法への応用

銀河形成において、大質量星が輻射として出すエネルギーは実は超新星爆発として出すエネルギーよりも 2 桁近く大きい。この輻射によるフィードバック効果を銀河形成シミュレーションに取り入れるため、メッシュ流体に対して多数の点光源からの輻射輸送計算を Tree 法を用いて光速に計算する方法を開発した。これは粒子法である Smoothed Particle Hydrodynamic (SPH) 法に対して実装された START コードのメッシュ流体版と言える。メッシュ法の方が一般に SPH 法よりも爆発現象を扱うのに有利であり、輻射性フィードバックと超新星爆発によるフィードバックを同時に適切に扱う上でこの方法が重要な役割を果たすと期待している。

#### (3) Vlasov-Poisson 方程式系を用いた自己重力系の数値シミュレーション

これまでの自己重力系の数値シミュレーションでは、質量分布を粒子分布に置き換えて粒子間の重力相互作用を計算する N 体シミュレーションが広く採用されてきたが、N 体シミュレーションには人工的な二体緩和が起きたり、速度分散が大きな系については速度分散による密度揺らぎの減衰といった効果をうまく再現できなかつたりという弱点があった。我々は無衝突ボルツマン方程式 (Vlasov 方程式) を Poisson 方程式 と組み合わせる自己重力系の数値シミュレーションを実行するシミュレーションコードの開発を世界で初めて行い、様々なテスト計算を行った。その結果から、質量保存やエネルギー保存などを満足できる精度で満たしながら正しく自己重力系のシミュレーションが可能であることを示した。また、宇宙大規模構造でのニュートリノの影響を調べるシミュレーションに適用する為、宇宙論的膨張に沿った共動座標系での Vlasov 方程式を解けるよう拡張を行った。

#### (4) GPGPU を用いた数値シミュレーションの開拓

General Purposed GPU (GPGPU)は次世代の数値シミュレーションにおける重要な技術要素として注目されている。我々は、NVIDIA 社の GPGPU と開発言語 CUDA を用いて自己重力多体系の N 体計算と輻射輸送計算の高速化を行った。N 体計算では、FIRST に搭載されている Blade-GRAPe を凌駕する性能を得ることができたが、ホスト計算機と GPGPU の間の PCI-Express での通信によるオーバーヘッドの為に少ない粒子数では Blade-GRAPe と同様に性能の劣化が見られた。PCI-Express のコントローラが CPU に統合されている Intel の Sandy Bridge アーキテクチャのマシンに GPGPU を搭載した場合には少粒子数でもかなり性能が向上することが分かった。輻射輸送

計算では、long-characteristic 法による輻射輸送計算と化学反応計算の高速化を行い、CPU での計算と比較して輻射輸送計算を 150 倍程度、化学反応計算を 20 倍程度高速化することに成功した。

#### (5) Advanced Vector eXtension を用いた N 体計算の高速化

Intel 社が新しく発表した Sandy Bridge アーキテクチャに基づく CPU に実装されている Advanced Vector eXtension (AVX)命令セットを用いて、衝突系・無衝突系の N 体計算の高速化を行った。従来の Streaming SIMD Extension (SSE)命令を用いた高速化よりも、更に高速化することに成功し、1 コアでの性能は衝突系で 20Gflops、無衝突系で 80Gflops を達成した。これらの性能は GPGPU での最大性能には及ばないが、粒子数に依存せずどのような粒子数でも同じ性能が得られることから、大規模並列計算に適しているといえる。

#### (6) プレ戦略イニシアティブ「アクセラレータによる銀河輻射流体力学の幕開け」

宇宙論的流体力学計算と輻射輸送計算を完全に統合した自己矛盾のない銀河形成の輻射流体模型を世界で初めて構築することを目指している。このような目的のため、本年度は、高速な計算機の開発準備のための GPU による計算加速器を搭載した PC クラスターの試作機を作成した。また、その計算機の上で効率よく計算の行うことができるシミュレーションコードの開発及び最適化を行い、そのパフォーマンスの測定を行った。特に本年度集中的に行った研究は、自己重力多体問題計算コードの開発、輻射輸送コードの開発、高精度流体力学コードの開発である。

### <競争的資金採択状況>

- ・基盤研究 (S) : 梅村 雅之 (代表者) (継続)  
「第一世代天体から原始銀河に至る宇宙暗黒時代の解明」 (1,120 万円)
- ・基盤研究 (A) : 森 正夫 (代表者) (継続)  
「理論と観測の融合による銀河発生学の探求」 (560 万円)
- ・挑戦的萌芽研究 : 吉川 耕司 (代表者) (継続)  
「6次元ボルツマン方程式による自己重力系の数値シミュレーション」 (90 万円)
- ・若手研究 (スタートアップ) : 岡本 崇 (代表者) (継続)  
「三次元輻射流体シミュレーションで探る銀河形成の物理」 (60 万円)
- ・若手研究 (B) : 川口 俊宏 (代表者) (継続)  
「原始活動銀河核のブラックホール・銀河共進化究明と偏光 X線放射予測」 (80 万円)
- ・基盤研究 (C) : 川口 俊宏 (分担者) (代表者: 峰崎 岳夫) (新規)  
「活動銀河核多波長モニターデータベースと活動銀河核変光・放射機構の研究」 (10 万円)
- ・プレ戦略イニシアティブ : 森 正夫 (代表者) (新規)  
「アクセラレータによる銀河輻射流体力学の幕開け」 (450 万円)
- ・研究活動スタート支援 : 川勝 望 (代表者) (新規)  
「多階層連結モデルによる超巨大ブラックホール形成と進化の解明」 (146 万円)

## 4. 研究業績

### <学位論文>

#### 修士論文

1. 扇谷 豪  
超新星爆発のガス加熱による重力場変動のダークマターハロー中心密度分布への影響
2. 中村 繁幸  
銀河風と矮小銀河の形状の関係について
3. 三木 洋平  
銀河衝突による銀河進化と活動銀河中心核への影響に関する理論的研究
4. 横山 貴士  
非軸対称銀河ポテンシャル中における連星ブラックホールの進化

#### 学士論文

1. 嶋田隼人  
宇宙の大規模構造に対するニュートリノの影響
2. 吉次将士  
非熱的電子によるスニヤエフ・ゼルドビッチ効果
3. 八重樫祥治  
中心ブラックホールとダークマターハロー中の定常銀河風
4. 野口岳大  
輻射優勢宇宙における原始ブラックホールの進化
5. 安部牧人  
SWIFT 光度曲線データに基づくガンマー線バースト重力レンズ効果の研究
6. 齋藤祐里子  
漂う巨大ブラックホールとアンドロメダストリーム

### <論文>

#### Refereed Papers

1. Owen, P.H., Eke, V.R., Frenk, C.S., Okamoto, T., 2011, The Baryons in the Milky Way Satellites, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, submitted.
2. Okamoto, T., Yoshikawa, K., Umemura, M., 2011, ARGOT: Accelerated radiative transfer on grids using oct-tree, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, submitted.
3. T. Kawaguchi, and M. Mori, Near-Infrared Reverberation by Dusty Clumpy Tori in Active Galactic Nuclei, Astrophysical Journal, submitted.
4. Tanikawa, A. Yoshikawa, K., Okamoto, T., Nitadori, K., 2011, N-body Simulation for Self-Gravitating Collisional Systems with a New SIMD Instruction Set Extension to the x86 Architecture, Advanced Vector Extensions, New Astronomy, submitted.
5. Shimizu, I., Yoshida, N., Okamoto, T., 2011, Lyman-alpha Emitters in Cosmological Simulations I: Lyman-alpha Escape Fraction and Statistical Properties at  $z=3.1$ , Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, submitted.

6. Matusi, H. Saitoh, T.R., Makino, J., Wada, K., Tomisaka, K., Kokubo, E., Daisaka, H., Okamoto, T., Yoshida, N., 2011, ORIGIN OF MULTIPLE NUCLEI IN ULTRALUMINOUS INFRARED GALAXIES, *Astrophysical Journal*, submitted.
7. Tanikawa, A., Umemura, M., 2011, Successive Mergers of Multiple Massive Black Holes in a Primordial Galaxy, *Astrophysical Journal*, 728, L31-L35.
8. Matsuda, Y.; Yamada, T.; Hayashino, T.; Yamauchi, R.; Nakamura, Y.; Morimoto, N.; Ouchi, M.; Ono, Y.; Kousai, K.; Nakamura, E.; Horie, M.; Fujii, T.; Umemura, M.; Mori, M., 2011, The Subaru Ly $\alpha$  blob survey: a sample of 100-kpc Ly $\alpha$  blobs at  $z = 3$ , *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 410, L13-L17.
9. Hasegawa, K., Umemura, M., 2010, START: Smoothed particle hydrodynamics with tree-based accelerated radiative transfer, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 407, 2632-2644.
10. Shimizu, I., Umemura, M., 2010, Two types of Lyman-alpha emitters envisaged from hierarchical galaxy formation, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 406, 913-921.
11. Kawaguchi, T. and Mori, M., 2010, Orientation Effects on the Inner Region of Dusty Torus of Active Galactic Nuclei, *Astrophysical Journal*, 724, L183-L187.
12. Mori, M., Umemura, M., and Yajima, H., 2010, A Supernova-driven Wind Model for High- $z$  Galaxies, *AIP Conference Proceedings*, 1269, 430-432.
13. Miki, Y., Mori, M., Rich, R. M., 2010, Collision Tomography: the Progenitor of the Andromeda Stellar Stream and the Metallicity Gradient, *AIP Conference Proceedings*, 1269, 400-402.
14. Ogiya, G., Mori, M., 2010, The Core-Cusp Problem in CDM Halos and Supernova Feedback, *AIP Conference Proceedings*, 1269 (Osaka), 421-423.
15. Akahori, T., Yoshikawa, K., 2010, Hydrodynamic Simulations of Merging Galaxy Clusters: Non-Equilibrium Ionization State and Two-Temperature Structure, *Publ. Astron. Soc. Japan*, 62, 335-345.
16. Prokhorov, D.A., Colafrancesco, S., Akahori, T., Yoshikawa, K., Nagataki, S., Seon, K.-I., 2011, Can electron distribution functions be derived through the Sunyaev-Zel'dovich effect?, *Astronomy and Astrophysics*, 529, A39.
17. Okamoto, T., Frenk, C. S., Jenkins, A., Theuns, T., 2010, The properties of satellite galaxies in simulations of galaxy formation, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 406, 208-222.
18. Bett, P., Eke, V., Frenk, C. S., Jenkins, A., Okamoto, T., 2010, The angular momentum of cold dark matter haloes with and without baryons, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 404, 1137-1156.
19. Imanishi, M., Ichikawa, K., Takeuchi, T., Kawakatu, N., Oi, N., Imase, K., 2011, Infrared 3-4 $\mu$ m Spectroscopy of Nearby PG QSOs and AGN-Nuclear Starburst Connections in High-luminosity AGN Populations, *Populations, Publ. Astron. Soc. Japan*, 63 (Subaru special issue), 447-456.
20. Ito, H., Kino, M., Kawakatu, N., Yamada, S., 2011, Evolution of Non-Thermal Emission from Shell Associated with AGN Jets, *The Astrophysical Journal*, 270, 120-131.

21. Tanikawa, A., Fukushige, T., 2010, Mass-Loss Timescale of Star Clusters in an External Tidal Field. II. Effect of Mass Profile of Parent Galaxy, *Publ. Astron. Soc. Japan*, 62, 1215-1230.
22. Nagamine, K., Choi, Jun-Hwan, Yajima, H., 2010, Effects of Ultraviolet Background and Local Stellar Radiation on the H I Column Density Distribution, *Astrophysical Journal Letters*, 725, L219-L222.
23. Yajima, H., Choi, Jun-Hwan, Nagamine, K., 2011, Escape fraction of ionizing photons from high-redshift galaxies in cosmological SPH simulations, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 412, 411-422.
24. Prokhorov, D.A., Dubois, Y., Nagataki, S., Akahori, T., Yoshikawa, K., Unveiling the 3D temperature structure of galaxy clusters by means of the thermal SZ effect, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, accepted.
25. Yoshida, T., Ebisawa, K., Matsushita, K., Tsujimoto, M., Kawaguchi, T., 2010, Long-Term Spectral Variations of Ultraluminous X-ray Sources in the interacting galaxy systems M51 and NGC4490/85, *Astrophysical Journal*, 722, 760-773

#### Non-Refereed Papers

1. Saitoh, T.R., Daisaka, H., Kokubo, E., Makino, J., Okamoto, T., Tomisaka, K., Wada, K., Yoshida, N., 2011, Shock-induced star cluster formation in colliding galaxies, *Computational Star Formation, Proceedings of the International Astronomical Union, IAU Symposium, Volume 270*, 483-486.
2. Yajima, H., Umemura, M., Mori, M., 2010, Ultraviolet and Infrared Radiation from Protogalaxies, *American Institute of Physics Conference Series 1294*, 295-296.
3. Hasegawa, K., Umemura, M., Suwa, T., 2010, The Impact of Ultraviolet Radiation on Secondary Pop III Star Formation, *American Institute of Physics Conference Series 1294*, 262-263.
4. Tanikawa, A., Umemura, M., 2010, Successive Mergers of Multiple Massive Black Holes in a Primordial Galaxy, *American Institute of Physics Conference Series 1294*, 242-245.
5. Umemura, M., 2010, First Stars and GRBs, and their Cosmological Impacts, *American Institute of Physics Conference Series 1279*, 97-102.
6. Mori, M., Umemura, M., Yajima, H., 2010, Metal enrichment in supernova-dominated high-z galaxies, *American Institute of Physics Conference Series 1279*, 52-59.
7. Mori, M., Umemura, M., Yajima, H., 2010, A Supernova-driven Wind Model for High-z Galaxies, *American Institute of Physics Conference Series 1269*, 430-432.
8. Hasegawa, K., Umemura, M., Suwa, T., 2010, Impacts of diffuse UV radiation on the secondary Population III star formation, *American Institute of Physics Conference Series 1238*, 107-110.
9. Umemura, M., Suwa, T., Susa, H., 2010, The Collapse of First Objects driven by Dark Matter Cusps, *American Institute of Physics Conference Series 1238*, 101-106.

10. Mori, M., Umemura, M., and Yajima, H., 2010, Metal enrichment in supernova-dominated high-z galaxies, American Institute of Physics Conference Series 1279, 52-59.
11. Miki, Y., Mori, M., Rich, R. M., 2010, Collision Tomography: the Progenitor of the Andromeda Stellar Stream and the Metallicity Gradient, American Institute of Physics Conference Series 1279, 382-384.
12. Ogiya, G., Mori, M., 2010, The Core-Cusp Problem in Cold Dark Matter Halos and Supernova Feedback, American Institute of Physics Conference Series 1279 (Kyoto), 403-405.
13. Ohashi, T. et al., 2010, DIOS: the diffuse intergalactic oxygen surveyor: status and prospects, Space Telescopes and Instrumentation 2010: Ultraviolet to Gamma Ray, Proceedings of SPIE, 7732, 77321S-77321S-9.
14. Ito, H., Kino, M., Kawakatu, N., Yamada, S., 2010, Nonthermal Emissions from Shocked Shells Driven by Powerful AGN jets, International Journal of Modern Physics D, 19, 893-899.

<解説記事>

1. 川勝 望, 和田 桂一 (2011), 銀河中心における超巨大ブラックホール形成の解明に向けて～多階層モデル構築の重要性～, 日本物理学会誌, 66, 285-289

<研究会開催>

1. 『初代星・初代銀河研究会』2011年 1月26～28日, 愛媛大学, 松山市  
世話人: 長尾透 (愛媛大), 谷口義明 (愛媛大), 梅村雅之 (筑波大), 大向一行 (京大), 須佐元 (甲南大), 冨永望 (甲南大), 森正夫 (筑波大), 吉田直紀 (東大)

<座長>

1. 川勝望  
日本天文学会"活動銀河核"日本天文学会秋季年会, 金沢大学, 2010年9月13～16日

<国際会議発表・海外講演>

1. Umemura, M., First Stars and GRBs, and their Cosmological Impacts, Deciphering the Ancient Universe with Gamma-Ray Bursts (19-23 April 2010, Kyoto, Japan) (Invited)
2. Mori, M., Metal Enrichment in a Supernova-dominated High-z Galaxies, Deciphering the Ancient Universe with Gamma-Ray Bursts (19-23 April 2010, Kyoto, Japan) (Invited)
3. Ogiya, G., and Mori, M., The Core-Cusp Problem in Cold Dark Matter Halos and Supernova Feedback, Deciphering the Ancient Universe with Gamma-Ray Bursts (April 19-23, 2010, Kyoto, Japan)(Poster)
4. Miki, Y., Mori, M., and R. Michael Rich, Deciphering the Ancient Universe with Gamma-Ray Bursts (19-23 April 2010, Kyoto, Japan)
5. T. Yoshida, K. Ebisawa, K. Matsushita, M. Tsujimoto, and T. Kawaguchi, A statistical study of long-term variabilities of ultraluminous X-ray sources, Ultra-Luminous X-ray sources and

- Middle Weight Black Holes (May 23-25, 2010, Madrid)
6. Kawakatu, N., Wada K, What determines AGN activity ?: Important of circumnuclear disk, Central Massive Objects: The Stellar Nuclei-Black Hole Connection (Jun.22-25, 2010, Munich, Germany)
  7. Mori, M., Chemical and dynamical evolution of high-z galaxies, Probing the High Redshift Universe in COSPAR Scientific Assembly (18-25 July 2010, Bremen, Germany)
  8. Mori, M., Chemical and dynamical evolution of Lyman alpha emitters and Lyman break galaxies, 11th Symposium on Nuclei in the Cosmos (19-23 July 2010, Heidelberg, Germany)
  9. Miki, Y., Mori, M., and R. Michael Rich, The 4th Japan-Korea Young Astronomers Meeting 2010 (26-28 August 2010, Kanagawa, Japan)
  10. Umemura, M. Yoshikawa, K., Hasegawa, K. and FIRST Project Team, 6-Dimensional Numerical Astrophysics by Next Generation Supercomputing, 4<sup>th</sup> East Asia Numerical Astrophysics Meeting (Nov 2-5, 2010, Taipei, Taiwan)
  11. Tanikawa, A. and Umemura M., Successive Merger of Multiple Massive Black Holes in a Primordial Galaxy, 4<sup>th</sup> East Asia Numerical Astrophysics Meeting (Nov 2-5, 2010, Taipei, Taiwan)
  12. Ogiya, G., and Mori, M., Dynamical response of CDM halo to mass-loss driven by supernova feedback, 4<sup>th</sup> East Asia Numerical, Astrophysics Meeting (Nov 2-5, 2010, Taipei, Taiwan)
  13. Miki, Y., Mori, M., and R. Michael Rich, The 4th East Asian Numerical Astrophysics Meeting (Nov 2-5, 2010, Taipei, Taiwan)
  14. Umemura, M., Computational Astrophysics with a Hybrid Simulator "FIRST", Collaboration Meeting Lawrence Berkeley National Laboratory and University of Tsukuba, Japan (Feb. 24-25, 2011, Berkeley, USA) (Invited)

#### <国内講演>

##### 招待講演

1. 梅村雅之, 「6次元計算宇宙物理学」, 日本地球惑星科学連合2010年大会 (2010年5月23日～5月28日, 千葉市幕張メッセ国際会議場)
2. 谷川衝, 「球状星団で形成されたコンパクト天体からなる連星の合体率」, 国立天文台理論研究部高エネルギーセミナー (2010年5月27日, 国立天文台, 三鷹市)
3. 川勝望, 「銀河中心に潜む超巨大ブラックホール形成はどこまで分かったのか?」, 第40回天文天体物理若手夏の学校, (2010年8月2日～5日, ホテル日航豊橋, 豊橋市)
4. 川勝望, 「ALMA-AGN サイエンス」, ALMA-近傍AGN観測検討会,(2010年8月23日, 国立天文台, 三鷹)
5. 梅村雅之, 「今後の共進化研究の戦略」, 超広域サーベイで明かす巨大ブラックホールと銀河の共進化: 理論モデルと観測戦略 (2010年9月6日～9月8日, 東北大学, 仙台市)
6. 岡本崇, 「AGN フィードバックと銀河形成」, 超広域サーベイで明かす巨大ブラックホールと銀

河の共進化：理論モデルと観測戦略（2010年9月6日～9月8日，東北大学，仙台市）

7. 梅村雅之，「銀河と巨大ブラックホールの形成史」，ALMA-Subaru Workshop 2010（2010年9月29日～10月1日，国立天文台，三鷹）
8. 川口俊宏，「活動銀河核中心100pc領域に迫る」，"TMTで切り拓く2020年代の新しい天文学"研究会（2010年10月4-5日，国立天文台，三鷹市）
9. 梅村雅之，「ダークマター問題と初代星の誕生」，金沢大学物理教室コロキウム（2010年10月22日，金沢大学，金沢市）
10. 谷川衝，「Successive Merger of Multiple Massive Black Holes in a Primordial Galaxy」，国立天文台光赤外研究部 Galaxy Workshop Subaru (galshop) (2010年10月27日)
11. 梅村雅之，「初代天体・銀河形成論」，2010年度理論懇シンポジウム「林忠四郎先生と天文学・宇宙物理学」（2010年12月20日～22日，京都大学基礎物理学研究所，京都市）
12. 梅村雅之，「初代星形成における輻射流体力学過程」，恒星進化・星形成から探る銀河の形成・進化の研究- 宇宙最初の星から太陽系形成まで（2011年3月2日～4日，北海道大学，札幌市）
13. 岡本崇，「Formation of the Local Groups satellite galaxies」，恒星進化・星形成から探る銀河の形成・進化の研究- 宇宙最初の星から太陽系形成まで（2011年3月2日～4日，北海道大学，札幌市）
14. 川勝望，「ガス降着による超巨大ブラックホール形成理論の現状と今後の課題」，日本天文学会春季年会予稿集（2011年3月15日～19日，筑波大学，つくば市）

#### 一般講演

1. 梅村雅之，「多成分自己重力系の緩和過程」，第一回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム～ポストペタスケールコンピューティングへの学際計算科学の展開～（2010年5月7日，筑波大学計算科学研究センター，つくば市）
2. 川口俊宏，森正夫，「降着円盤の非等方性放射が活動銀河核ダストトーラス内縁構造に与える影響」，Grain Formation Workshop・銀河のダスト研究会（2010年9月2-4日，神戸大学，神戸市）
3. 三木洋平，森正夫，R. Michael Rich，「N体シミュレーションによるアンドロメダ・ストリームの解析:矮小銀河の金属量分布」，日本天文学会秋季年会（2010年9月22日～24日，金沢大学，金沢市）
4. 吉川耕司，吉田直紀，梅村雅之，「6次元位相空間上でのVlasov方程式の直接計算による自己重力系の数値シミュレーション」，日本天文学会秋季年会（2010年9月22日～24日，金沢大学，金沢市）
5. 岡本崇，「ハロー星の性質と起源」，日本天文学会秋季年会（2010年9月22日～24日，金沢大学，金沢市）
6. 扇谷豪，森正夫，「断熱的重力場変動に対するダークマターハローの力学応答」，日本天文学会秋季年会（2010年9月22日～24日，金沢大学，金沢市）
7. 川口俊宏，森正夫，「降着円盤の放射の非等方性がダストトーラス内縁構造に与える影響」日本天

- 文学会秋季年会 (2010 年 9 月 22 日～24 日, 金沢大学, 金沢市)
8. 川勝望, 白川友紀, 本多正尚, 戸田さゆり, 「筑波大学「理数学生応援プロジェクト」における最先端研究体験企画」, 日本天文学会秋季年会 (2010 年 9 月 22 日～24 日, 金沢大学, 金沢市)
  9. 谷川衝, 関口雄一郎, 牧野淳一郎, 「球状星団中で形成された連星中性子星の合体率」, 日本天文学会秋季年会 (2010年9月22日～24日, 金沢大学, 金沢市)
  10. 川勝望, 平下博之, 梅村雅之, 「Blue Compact矮小銀河中心の巨大ブラックホール探査」, ALMA-Subaru Workshop 2010 (2010年9月29日～10月1日, 国立天文台, 三鷹)
  11. 谷川衝, 「恒星の軌道運動の観測による球状星団中心の中間質量ブラックホール検出」, TMTで切り拓く2020年代の新しい天文学 (2010年10月4日～5日, 国立天文台, 三鷹市)
  12. 川口俊宏, 「JASMINEによるCyg X-1の軌道測定」, JASMINEサイエンスワークショップ-10uasで切り拓く天文学新時代-研究会 (2010年12月1日, 国立天文台, 三鷹市)
  13. 谷川衝, 「大質量ブラックホール多体系でのブラックホール合体成長に伴う銀河の構造進化」, JASMINEサイエンスワークショップ-10 $\mu$ asで切り拓く天文学新時代- (2010年12月1日, 国立天文台, 三鷹市)
  14. 川口俊宏, 「活動銀河核の近赤外線放射モデル」, 宇宙科学研究所 コロキウム (2010 年 12 月 3 日, 宇宙科学研究所, 相模原市)
  15. 岡本崇, 吉川耕司, 梅村雅之, 「スーパーメッシュを用いた高速輻射輸送法」, 理論懇シンポジウム (2010年12月20日～22日, 京都大学基礎物理学研究所, 京都市)
  16. 扇谷豪, 森正夫, 「質量放出による重力場変動の DM ハロー中心密度分布への影響」, 第 23 回理論懇シンポジウム, (2010 年 12 月 20 日～22 日, 京都大学, 京都市)
  17. 三木洋平, 森正夫, R. Michael Rich, 「Collision Tomography: the Progenitor of the Andromeda Stellar Stream」, 第 23 回理論懇シンポジウム (2010 年 12 月 20 日～22 日, 京都大学基礎物理学研究所, 京都市)
  18. 川口俊宏, 「活動銀河核の近赤外線放射モデル」, 京都大学宇宙物理学教室 談話会 (2011 年 1 月 7 日, 京都大学, 京都市)
  19. 谷川衝, 「大質量ブラックホール多体系におけるブラックホールの合体成長-相対論的効果の影響-」, 初代星・初代銀河研究会2011 (2011年1月26日～28日, 松山市)
  20. 川口俊宏, 「活動銀河核の近赤外線放射モデル」, 東京大学天文学教育研究センター 談話会 (2011 年, 2 月 10 日, 東京大学, 三鷹市)
  21. 谷川衝, 梅村雅之, 「大質量ブラックホール多体系におけるブラックホールの成長と銀河の進化」, 日本天文学会春季年会予稿集 (2011年3月15日～19日, 筑波大学, つくば市)
  22. 横山貴士, 梅村雅之, 「非軸対称銀河ポテンシャル中における連星ブラックホールの進化」, 日本天文学会春季年会予稿集 (2011年3月15日～19日, 筑波大学, つくば市)
  23. 森正夫, 「アンドロメダ銀河と矮小銀河の衝突シミュレーション」, 日本天文学会春季年会予稿集 (2011年3月15日～19日, 筑波大学, つくば市)
  24. 三木洋平, 森正夫, 川口俊宏, 「銀河衝突による活動銀河中心核への影響」, 日本天文学会春季年会予稿集 (2011年3月15日～19日, 筑波大学, つくば市)

25. 濟藤祐理子, 三木洋平, 川口俊宏, 森正夫, 「Wandering Blackhole and Andromeda Stellar Stream」, 日本天文学会春季年会予稿集 (2011年3月15日~19日, 筑波大学, つくば市)
26. 岡本崇, 吉川耕司, 「スーパーメッシュを用いた輻射輸送計算の加速法」, 日本天文学会春季年会予稿集 (2011年3月15日~19日, 筑波大学, つくば市)
27. 扇谷豪, 森正夫, 「バリオン重力場変動へのダークマターハローの力学応答」, 日本天文学会春季年会予稿集 (2011年3月15日~19日, 筑波大学, つくば市)
28. 川口俊宏, 森正夫, 「活動銀河核からの近赤外線放射の時間変動モデル」, 日本天文学会春季年会予稿集 (2011年3月15日~19日, 筑波大学, つくば市)
29. 諸隈智貴, 峰崎岳夫, 小坂文, 川勝望, 川口俊宏, 長尾透, 松岡健太, 今西昌俊, 美濃和陽典, 大井渚, 今瀬佳介, 「赤方偏移3のSDSSクェーサーで探る超巨大ブラックホール・バルジ関係の宇宙論的進化」, 日本天文学会春季年会予稿集 (2011年3月15日~19日, 筑波大学, つくば市)
30. 土屋聖海, 森正夫, 新田伸也「球対称定常銀河風の解析: 遷音速解の発見とその条件」, 日本天文学会春季年会予稿集 (2011年3月15日~19日, 筑波大学, つくば市)
31. 中村繁幸, 森正夫「銀河風と矮小銀河の形状の関係について」, 日本天文学会春季年会予稿集 (2011年3月15日~19日, 筑波大学, つくば市)
32. 桐原崇亘, 三木洋平, 森正夫「アンドロメダストリームとダークマターハローの構造」, 日本天文学会春季年会予稿集 (2011年3月15日~19日, 筑波大学, つくば市)

< 社会・国民への発信 >

1. 梅村雅之, 「宇宙に生まれる最初の星」, 全国同時七夕講演会 (2010年7月3日, 筑波大学, つくば市)
2. 川口 俊宏, 書評(「巨大ブラックホールが引き起こす AGN 現象のすべて」, 丸善), 天文月報, 2011年1月号
3. 川口 俊宏, 寄稿(「私の研究」), 青山学院大学 総合研究所 News SOKEN, 2010年10月号, Vol.10-1, p15

## II-2. 原子核分野

### 1. メンバ

教授 矢花 一浩

講師 橋本 幸男

### 2. 概要

当グループは、量子多粒子系のダイナミクスに対する計算科学的アプローチを主要な方法論として、原子核物理から物質科学、光科学にわたる広範な分野に対し研究を展開している。

原子核物理学では、陽子と中性子の多体系として捉えた原子核、特に陽子数と中性子数が異なる不安定原子核に対し、量子ダイナミクスの観点から研究を進めている。不安定核の構造と反応は、星の構造や元素の起源を巡り宇宙物理学に密接に関連しており、中長期的に宇宙分野と連携した活動に発展させたいと考えている。

本グループではまた、原子核物理学と共通する方法論を用い、物質科学分野において電子ダイナミクスの量子シミュレーション法に基づく研究を展開している。特に、時間依存密度汎関数理論を用いたシミュレーションに関して多くの経験と実績を有しており、本年はコヒーレントフォノンの生成機構に関する研究及び磁気円二色性に関する研究で成果を挙げるとともに、新たな取り組みとして、高強度パルス光と物質の相互作用を第一原理計算的に記述し非線形電子励起を伴う光伝播を記述することができる、マクスウェル-TDDFT マルチスケール・シミュレーション法の開発に着手した。

### 3. 研究成果

#### 【1】時間依存密度汎関数理論による物質中の電子ダイナミクス計算

(1) 強パルス光の物質中伝播を記述するマルチスケール・シミュレータの開発 (矢花、杉山、篠原、乙部 (原研)、G.F. Bertsch (Univ. Washington))

固体中の光の伝播や、表面での反射などの現象は、通常は屈折率を用いて記述される。しかし、今日の光科学のフロンティアで用いられる高強度・超短パルスレーザーでは、強い光電場に起因する非線形な電子応答がもたらす様々な現象が問題となっている。このような高強度パルス光と物質の相互作用を理解するためには、従来の電磁気学の枠組みを超えたアプローチが必要とされる。

原理的には、高強度パルス光のもたらす電子ダイナミクスは時間依存シュレディンガー方程式で記述され、光電磁場は、電子の密度やカレントをソースとして持つマクスウェル方程式で記述されるため、両者を結合した方程式を解けばよい。しかし、可視光領域の光の波長が  $\mu\text{m}$  程度であるのに対し、光電場が誘起する電子ダイナミクスの空間スケールは、原子サイズと同程度の  $\text{nm}$  程度であり、異なる空間スケールの問題を扱うためマルチスケール・シミュレーション法を開発

することが必要とされる。

我々は、電子ダイナミクスに対して時間依存密度汎関数理論を用い、電子の運動を記述する時間依存コーン・シャム方程式と光電磁場の伝播を記述するマクスウェル方程式に対して、どのようにすればマルチスケール・シミュレーションが可能となるかを検討した。そして、得られた方程式系に対して摂動論を用いると、誘電率を介してマクスウェル方程式と時間依存コーン・シャム方程式が分離されることを確認した。さらに、マルチスケール・シミュレーション法のプログラムを作成し、予備的な計算を遂行し、結晶表面に電子・ホールプラズマが生成されることを確認した。

### (2) 磁気円二色性の実時間計算 (李、矢花、G.F. Bertsch (Univ. Washington))

静磁場中に置かれた原子や分子の右円偏光と左円偏光に対する光吸収の差は、磁気円二色性と呼ばれる。この量に対する計算は古くから行われているが、摂動論で扱う場合は光電場と静磁場に対する2次の量になることから、複雑な計算が必要とされてきた。最近、応答関数理論を用いた枠組みなどにより、様々な量子化学手法に基づく計算が盛んに行われている。

我々はこの磁気円二色性に対し、時間依存コーン・シャム方程式の実時間解法を用いた新たなアプローチを開発した。それは、有限の強度の静磁場中で双極場による摂動を加え、非線形な時間依存コーン・シャム方程式を非線形のまま解くものである。静磁場と双極場の強度を十分弱くとることにより、2次の微小量として磁気円二色性の強度関数を得ることが可能になる。

この枠組みを、いくつかの小さな有機分子と C60 分子に対して適用した。我々の枠組みではノルム保存擬ポテンシャルを用いるが、そのために和則が大きく破れることが見出された。また、実験値との比較では、計算結果は定性的には磁気円二色性の符号などを再現するものの、強度の絶対値に関しては数倍の差異が見出される場合が多いことが見出された。このことから、時間依存密度汎関数理論は、原子や分子の振動子強度に対して定量的に信頼できる結果を与えてきたが、磁気円二色性に対しては、得られた結果の信頼度に関し、慎重に判断することが必要であることが分かった。

### (3) コヒーレントフォノンの生成機構に対する時間依存密度汎関数理論による研究 (篠原、矢花、乙部 (原研)、G.F. Bertsch (Univ. Washington))

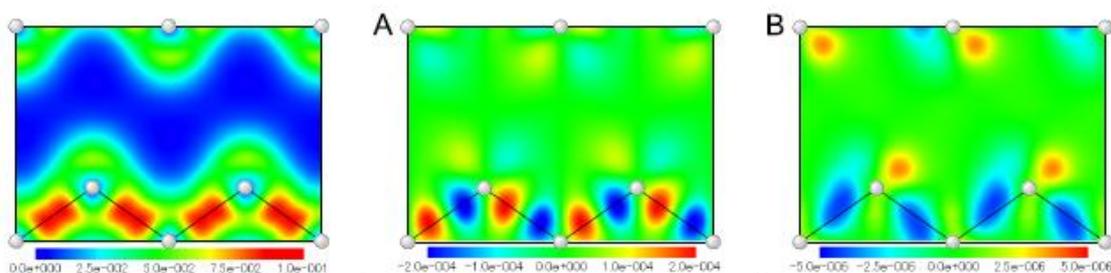
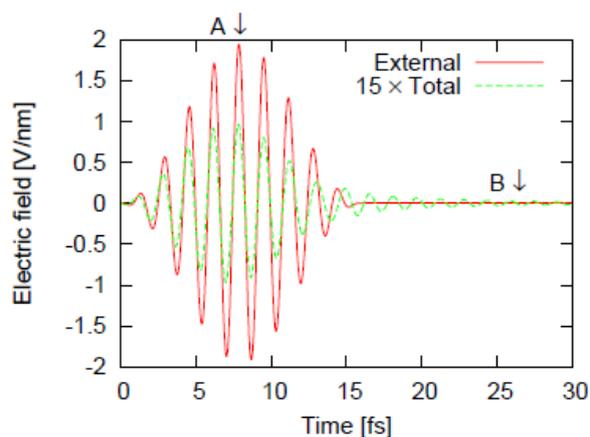
固体中の光学フォノンの振動数に比べてパルス長の短い超短パルスレーザーを照射した際に起こる現象の一つにコヒーレントフォノンがある。これまでその生成メカニズムに関し現象論に基づいて調べられてきており、ISRS (Impulsive Stimulated Raman Scattering) と DECP (Direct Excitation of Coherent Phonon) と呼ばれる2つのメカニズムの存在が議論されてきた。

我々は、時間依存密度汎関数理論に基づき、第一原理からコヒーレントフォノンの生成起源を解明することを試みた。まず、半導体である Si を例に、異なる振動数を持つパルス光を照射した

計算結果を調べることで、時間依存密度汎関数理論が ISRS、DECP の 2 つのメカニズムを含むことが明らかになった。直接バンドギャップよりも小さい振動数のパルス光を照射したところ、パルスの照射中のみだけ起こる電子励起により力が働く ISRS 機構によるコヒーレントフォノンの生成が見出された。一方、直接バンドギャップを越える振動数のパルス光を照射した場合は、パルス照射後に実励起が起こり、パルス光が照射した後も継続して力が働く、DECP 機構によるコヒーレントフォノンの生成が見出された。このように、時間依存密度汎関数理論により第一原理からコヒーレントフォノンの記述が可能であることを初めて明らかにした。

コヒーレントフォノンの実験的測定は、Sb 等の半金属物質に対して数多く行われており、その場合にはフォノンのモードに応じて ISRS 型と DECP 型が混在するなど興味深い現象が報告されている。また、同じく半金属である Bi では極めて大きな振幅を持つコヒーレントフォノンが、その振幅の絶対値を含めて測定されている。これらに対する計算が進行中である。

図 1 : Si 結晶にパルス光を照射した場合の計算結果。右は、外部から加えた電場 (赤線) と分極を含めた全電場 (緑線)。下は電子密度を表し、左は基底状態。中央及び右は、右図の時刻 A 及び B における、基底状態からの密度変化 (赤は電子の増加、青は減少) を表す。A では電場による一時的な励起、B では実励起が見られる。



## 【2】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)

核子多体系である原子核のダイナミクスを微視的に記述する場合、超流動性を考慮した取り扱いが重要になる。超流動性を取り入れた量子ダイナミクス理論として、時間依存 Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) 理論が知られているが、数値的な取り扱いが極めて難しく、3次元実空間差分法を用いたダイナミクスの記述は未だ成功していない。そこで我々は、正準基底表示を用いることにより、BCS 近似に基づく対相関効果を取り入れた枠組みを開発しており、この

枠組みを正準基底表示時間依存 Hartree-Fock-Bogoliubov 理論(Cb-TDHFB)と呼んでいる。昨年度までは現実的な Skyrme 有効相互作用を用いた軽い原子核に対する計算を行い、先行研究との比較を行った。その結果、より現実的に対相関を扱った HFB 理論に基づく研究と非常に近い結果を与えることが明らかになった。今年度は重い核種(172Yb)における計算を行い、Cb-TDHFB は従来に比べ 1000 倍程度小さい計算コストでほぼ同等の結果を与えることが分かった。また、系統的計算を開始し、軽い核の電気双極子振動(E1)モードに対する結果を蓄積しており、対相関の E1 モードにおける対相関の効果を系統的調べている。

## (2) 原子核の三次元的回転運動の理論 (橋本、堀端 (青森大))

原子核の回転運動は、さまざまな原子核集団運動の中でも最も顕著な例である。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り、その背後には、原子核平均場と密度分布が緊密に関係しているという原子核の自己無撞着性 (nuclear self-consistency) がある。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してクラッキング模型に基づいて行われている。一方、理論的な立場からは、より一般的な回転運動の存在が期待されている。たとえば、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。この運動は、ウォブリング(wobbling)と呼ばれ、回転軸が平均場の主軸から離れて才差運動のような振る舞いをする。本研究では、ウォブリング運動を含めた三次元的な回転運動が原子核においてどのように生じるかを微視的に理解することを目的としている。

今年度は昨年度の引き続いてオスミウム 182Os の傾斜角回転 (tilted axis rotation; TAR) モードを含む励起状態について生成座標法 (GCM) を用いて調べた。平均場近似では、オスミウムは prolate 変形 (レモン型) をしているため、主たる回転軸が乗っている“赤道”から見て“北緯”方向と“南緯”方向に対称にクラックハートレーフォックボゴリュボフ (CHF B) 解が存在する。理論的なアイデアは、これらの対称な平均場解の間に量子力学的なトンネル効果のために結合が生じ、北緯領域の解と南緯領域の解で縮退していたものが分離するという点である。われわれは、P.M.Walker らの実験で得られた K 量子数が 8 のバンドにおいて、基底状態のバンドとのバンド交差後の“シグネイチャ・スプリッティング”と呼ばれる現象がこのトンネリングのアイデアで説明できると期待している。GCM 計算で得られるスプリッティングの値は約 150keV から 250keV であるが、GCM 波動関数に期待される対称性の精度が十分ではないという問題点がある。そのために、GCM 計算の基礎となる HFB 波動関数の精度を上げ、また、GCM のコードの大幅な見直しを進めている。

## (3) Gogny 力を用いた時間依存 HFB コードの開発 (橋本、三藤)

我々は、Gogny 力を用いた時間依存HFB (TDHFB) 方程式を数値的に解く方法を開発・展開している。微小振幅の撃力を与えた波動関数を初期条件にした場合にはこの方法は準粒子RPAになる。一方、非線形効果は振幅の増大とともに重要になってくる。昨年度は、球形のチタン (Ti) 52の原子核について、軸対称変形の範囲内で大振幅振動運動の緩和現象を扱った。今年度は、非軸対称な振動も考慮した場合へと拡張したTDHFB計算を実行した。四重極型の非軸対称性振動運動の場合でも、巨大共鳴領域のエネルギーに相当する高い振動数の振動運動をしつつ、その振動中心はゆっくりと緩和して最終的に球形を振動中心とする大振幅の運動へと落ち着いていく。その運動においては、軸対称運動の場合と同じように、 $p3/2$  軌道内での対相関力による占有数の変動を見ると、粒子状態の占有のされ方は断熱的であるように見える。同様な計算を、たとえばチタン44においても行い、緩和を伴う大振幅運動の際に、パリティの異なる  $f7/2$  軌道と  $d3/2$  軌道との間でも対相互作用によって粒子の占有状態の変化が起こることがわかった。その過程は断熱的と見える。一方、対相互作用の働かない変形領域においては、ハートレーフォックの局小点がポケットのようになってその近傍の軌道を一定の領域に閉じ込めることも明らかになった。これらの非線形大振幅運動の内容を、モード間結合の効果という視点から理解していくことが今後の方向である。

#### (4) 多 Slater 行列式の重ね合わせによる軽い原子核の記述 (福岡、船木、矢花、中務 (理研))

非経験的に原子核の性質を理解することは、今日の原子核理論分野における大きな目標となっている。12C 核の基底状態まで生の核力に基づいた記述が可能となっており、励起状態に現れるクラスター状態に対する非経験的な記述が大きな目標となっている。本研究では、核子間相互作用としては、幅広い核種の基底状態や応答関数を平均場模型の範囲で記述する Skyrme 相互作用を用い、乱雑な初期波動関数から虚時間法を用いて多数の Slater 行列式を生成し、それらを重ね合わせることで、与えられたハミルトニアンに対して収束した励起スペクトルの記述を行おうというものである。

12C 核に対する記述を行ったところ、励起スペクトルに関しては概ね満足のいく結果が得られたものの、 $02+$ 状態の半径は従来クラスター模型で記述されたものに比べて小さく、基底状態と大差ない結果となった。このため、本計算に用いている枠組みで、クラスター模型の波動関数を用いた計算を行った。その結果、クラスター模型波動関数では  $02+$ 状態に対して大きな半径を持つ結果が得られた。しかし、クラスター模型波動関数と、乱雑な初期波動関数から生成した波動関数の両方を用いて重ね合わせたところ、 $02+$ 状態にクラスター模型波動関数はほとんど混ざらず、小さい半径となる結果が得られた。実験的には、基底状態から  $02+$ 状態への遷移行列要素が得られているが、それらはクラスター模型による予測と今回の計算との中間にある。

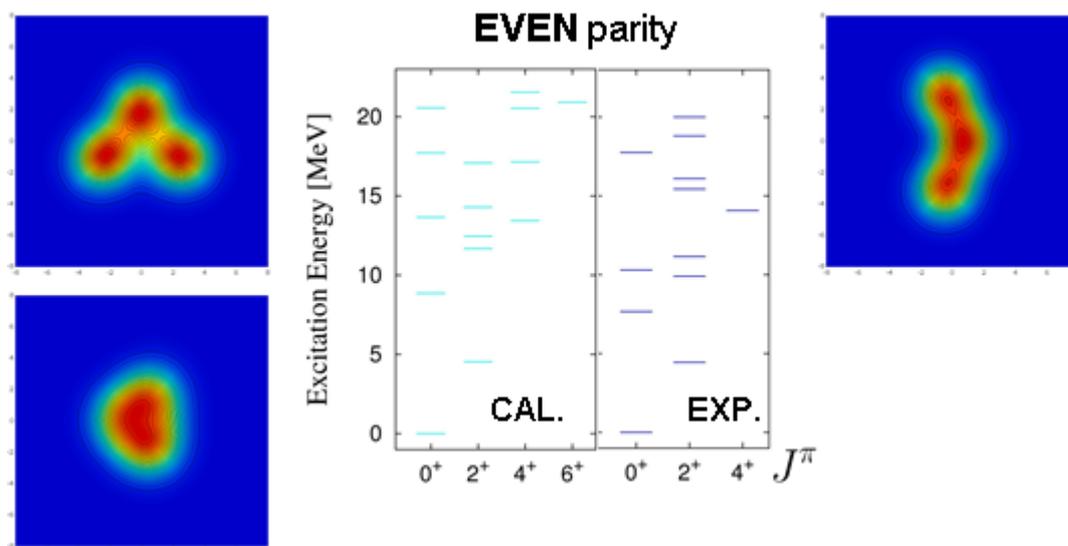


図 2 : 多スレーター行列式の重ね合わせによる  $^{12}\text{C}$  原子核構造の計算。低励起領域のスペクトルが精度よく再現されるとともに、励起構造に現れる様々なクラスター構造が非経験的に記述されている。

## 4. 研究業績

### (1) 研究論文

1. Magnetic Circular Dichroism in Real-time Time-Dependent Density Functional Theory  
K.M. Lee, K. Yabana, G.F. Bertsch  
J. Chem. Phys. 134, 144106 (2011).
2. Coherent phonon generation in time-dependent density functional theory  
Y. Shinohara, K. Yabana, Y. Kawashita, J.-I. Iwata, T. Otobe, G.F. Bertsch  
Phys. Rev. B82, 155110 (2010).
3. First-principles Calculation of Coherent Phonon Generation in Diamond  
Y. Shinohara, Y. Kawashita, J.-I. Iwata, K. Yabana, T. Otobe, G.F. Bertsch,  
J. Phys. Cond. Matter 22, 384212 (2010).
4. A Massively-Parallel Electronic-Structure Calculations Based on Real-Space Density Functional Theory  
J.-I. Iwata, D. Takahashi, A. Oshiyama, T. Boku, K. Shiraishi, S. Okada, K. Yabana  
J. Comp. Phys. 229, 2339-2363 (2010).
5. Canonical-basis time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov theory and linear-response calculations  
S.Ebata, T.Nakatsukasa, T.Inakura, K.Yoshida, Y.Hashimoto, K.Yabana  
Phys. Rev. C 82 (2010), 034306
6. Canonical-basis TDHFB を用いた線形応答計算  
江幡 修一郎, 中務 孝, 稲倉 恒法, 吉田 賢市, 橋本 幸男, 矢花 一浩

素粒子論研究 119 No.1 (電子版)(p.154-161), 大振幅集団運動の微視的理論

7. Linear Response Calculation Using Canonical-Basis TDHFB with a schematic pairing functional  
S.Ebata, T.Nakatsukasa, T.Inakura, Y.Hashimoto, K.Yabana  
Mod. Phys. Lett. A25 (2010), 2001-2002
8. A description of t-band in 182Os within the fully microscopic calculation,  
Y. Hashimoto and T. Horibata,  
INFORMATION Vol. 13, 569-575(2010).
9. Quantum mechanical effects in tilted axis rotations in 182Os,  
Y. Hashimoto and T. Horibata,  
AIP Conference Proceedings Vol. 1235, 91-95 (2010).

## (2)学会発表

### (A)招待講演

1. First-principles theoretical description for many-electron dynamics induced by ultrashort laser pulses  
K. Yabana, Symposium at PACIFICHEM 2010, Honolulu, U.S.A., Dec. 15-20, 2010.
2. Dynamical Role of Halo Nucleons in Nuclear Reactions  
K. Yabana, Halo 2010 Symposium, Shonan Village Center, Japan, Dec. 6-9, 2010.

### (B)その他の学会発表

1. Ab-initio description for laser-induced electron-phonon dynamics in dielectrics  
K. Yabana, 7th Int. Symp. on Ultrashort Surface Dynamics, Brijuni Isrand, Croatia, Aug. 22-26, 2010.
2. Systematic study of E1 mode using Canonical-basis TDHFB  
S. Ebata, T. Nakatsukasa, T. Inakura, K. Yoshida, Y. Hashimoto, K. Yabana, French-Japanese Symposium on Nuclear Structure Problems, RIKEN, Jan.5-8, 2011.
3. The research of E1 mode using Canonical-basis TDHFB  
S. Ebata, T. Nakatsukasa, T. Inakura, K. Yoshida, Y. Hashimoto, K. Yabana, JAPAN-ITALY EFES Workshop on Correlations in Reactions and Continuum, Torino, Sept. 6-8, 2010.
4. Linear Response Calculation using Canonical-basis TDHFB with a schematic pairing functional  
S. Ebata, T. Nakatsukasa, T. Inakura, Y. Hashimoto, K. Yabana, Second EMMI-EFES Workshop on Neutron-Rich Nuclei (EENEN10), RIKEN, June 16-18, 2010.
5. Nonlinear collective oscillations of light nuclei in TDHFB with Gogny force  
Y. Hashimoto, Second EMMI-EFES Workshop on Neutron-Rich Exotic Nuclei (EENEN 10)  
RIKEN, June 16 – 18, 2010.
6. Description of t-band in 182Os with HFB+GCM,  
Y.Hashimoto, University of Aizu-JUSTIPEN-EFES symposium “Cutting-Edge Physics of Unstable Nuclei”,

- U. Aizu, Nov. 10-13, 2010.
7. Theoretical investigation for generation of coherent phonon in bulk Si  
Y. Shinohara, K. Yabana, Y. Kawashita, J.-I. Iwata, T. Otobe, G. F. Bertsch, 7-th International Symposium on Ultrafast Surface Dynamics USD7, Brijuni Islands, Croatia, Aug. 22-26, 2010.
  8. Description of Coherent Phonon Generation in Dielectrics based on Real-Time TDDFT calculation  
Y. Shinohara, K. Yabana, Y. Kawashita, J.-I. Iwata, T. Otobe, G. F. Bertsch, Int. Conf. on Core Research and Engineering Science of Advanced Materials, Osaka Univ. May 30-June 4.
  9. 原子核移行反応・分解反応の視点  
矢花一浩, RCNP 研究会「重イオン蓄積リングの物理」、阪大 RCNP、2010 年 9 月 24-25 日
  10. 時間依存密度汎関数理論による高強度パルス光伝播の記述  
矢花一浩、篠原康、杉山健、G.F. Bertsch, 日本物理学会 2010 年秋季大会、大阪府立大学中百舌鳥キャンパス、2010 年 9 月 24 日
  11. 実時間・実空間 TDDFT 法を用いた磁気円二色性の第一原理計算  
李畊旻、矢花一浩、G.F. Bertsch, 日本物理学会 2010 年秋季大会、大阪大学中百舌鳥キャンパス、2010 年 9 月 24 日
  12. TDHF による多核子移行反応の記述に向けて  
矢花一浩、核反応研究会、阪大 RCNP、2010 年 8 月 2-4 日
  13. Canonical-basis TDHFB を用いた線形応答計算  
江幡 修一郎, 中務 孝, 稲倉 恒法, 吉田 賢市, 橋本 幸男, 矢花 一浩  
「大振幅集団運動の微視的理論」研究会、京大基研、2010 年 10 月 24-26 日
  14. CbTDHFB による A=50 近辺までの E1 モードの研究  
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 2010 年秋季大会、九州工業大学、2010 年 9 月 11-14 日
  15. Gogny-TDHFB による原子核の非線形振動と緩和  
橋本幸男, 「大振幅集団運動の微視的理論」研究会、京大基研、2010 年 10 月 24-26 日
  16. HFB+GCM による指標分離の記述、  
橋本幸男、堀端孝俊、日本物理学会 2010 年秋季大会、九州工業大学、2010 年 9 月 11-14 日
  17. 多スレーター行列式の重ね合わせによる 12C 励起構造の記述  
福岡 佑太, 船木 靖郎, 矢花 一浩, 中務 孝、日本物理学会 第 66 回年次大会、新潟大学、2011 年 3 月 28 日
  18. Skyrme 力を用いた多スレーター行列式による軽い核の励起状態の記述  
福岡 佑太, 船木 靖郎, 矢花 一浩, 中務 孝  
日本物理学会 2010 年秋季大会、九州工業大学、2010 年 9 月 11-14 日
  19. 軸対称調和振動子基底を用いた時間依存密度汎関数による軽い核の線形応答、

三藤竜也、橋本幸男、矢花一浩、日本物理学会 2010 年秋季大会、九州工業大学、2010 年 9 月 11-14 日

20. TDHFB による非軸対称非線形振動の研究

三藤竜也、橋本幸男、矢花一浩、日本物理学会 2011 年年会、新潟大学、2011 年 3 月 25-28 日

21. 高強度超短パルスレーザーに誘起される誘電体の直流電流の絶対位相依存性

篠原康、乙部智仁、矢花一浩、日本物理学会 66 回年次大会、新潟大学 2011 年 3 月 25 日-28 日

22. 高強度短パルスレーザーに誘起される電子-格子ダイナミクスの第一原理計算

篠原康、乙部智仁、岩田潤一、矢花一浩、G.F. Bertsch、物性研・CMSI・次世代ナノ情報 合同研究会「計算物質科学の課題と展望」、東大物性研 2011 年 1 月 5 日-7 日

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

篠原康、矢花一浩、川下洋輔、岩田潤一、乙部智仁、日本物理学会 2010 年秋季大会、大阪府立大学 2010 年 9 月 23 日-26 日

24. 高強度パルス光を伝搬を記述するマルチスケール・シミュレータの開発

矢花一浩、杉山健、篠原康、乙部智仁、G.F. Bertsch

物性研・CMSI・次世代ナノ情報合同研究会「計算物質科学の課題と展望」、東大物性研、2011 年 1 月 5-7 日

25. 高強度パルス光伝搬を記述するマルチスケール第一原理シミュレータの開発

杉山健、篠原康、乙部智仁、矢花一浩、G.F. Bertsch、日本物理学会第 66 回大会、新潟大学、2011 年 3 月 25-28 日

## 5. 連携・国際活動・社会貢献、その他

時間依存密度汎関数理論に基づく研究で、物質科学に関してはワシントン大(Bertsch 教授)、バスク大(Rubio 教授)、分子研(信定准教授)と、原子核物理に関しては理化学研究所(中務准主任研究員)と密接な協力を行っている。

本グループでは、実時間・実空間法に基づく時間依存コーン・シャム方程式の数値解法を主要な方法論として用いている。同様な方法は国内外で開発が進んでいるが、本グループで最近進展させた結晶中の電子ダイナミクスを記述する計算法に関してはまだ例が少なく、計算コードの公開に向けた準備を進めている。

### III. 量子物性研究部門

#### 1. メンバ

教授 白石 賢二、日野 健一

准教授 Xiao-Min Ton、小泉 裕康、岡田 晋

助教 前島 展也、岩田 潤一、神谷 克政

研究員 高木 祥光、小鍋 哲、有川 晃弘

大学院生 5 名 (白石グループ)

#### 2. 概要

##### 日野グループ

当グループは、光と物質の相互作用に起因する量子ダイナミクス・量子制御ならびに分子性結晶の光誘起相転移、遷移金属酸化物における光誘起超高速ダイナミクスを中心に理論研究を行っている。

##### 小泉グループ

銅酸化物高温超伝導体の機構解明、銅酸化物を利用した、量子電流デバイス、量子コンピューター実現の為の理論的研究を行っている。

##### 岡田グループ

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

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

## 白石グループ

半導体ナノ物性グループは本年度はナノ物質・ナノ材料の機能・物性解明、及び、新奇ナノ物質のデザインを目指したナノサイエンスの研究を行った。

## 3. 研究成果

### 日野グループ

#### [1] テラヘルツ光駆動半導体超格子における光着衣電子・正孔系の多体問題

光と電子系が相互作用する際、光子場強度が大きくなるにつれて遷移確率がより減少、消失するというような逆説的な予見が行われている。このような効果は、とりわけ、光媒介トンネリング (PAT) と呼ばれる現象において顕著に現れる。これは、通常のトンネル現象に際して光の吸収・放出が介在することによって、電子トンネリングの確率が変調する現象である。特に、ある特定の条件下でトンネル確率が零になる動的局在 (DL) は PAT の最も特徴的な現象である。PAT や DL の研究は、超伝導 Josephson 接合 (S-I-S 接合) におけるマイクロ波照射下でのクーパ対のトンネル現象や振動磁場下での原子の超微細構造における Landé  $g$ -因子の磁場繰り込み効果に始まる。これらは、近年、半導体超格子 (SL) 系における電気伝導特性や冷却原子系から成る光超格子において実験的に検証されている。ところで、最近の高パワー THz 波光源の技術開発に伴い、THz 波に励起された半導体ナノ構造での量子ダイナミクスの研究が進展してきている。本報では、数 100kV/cm 程度のピーク電場を有する強い THz 領域の光子場に駆動された半導体超格子を対象として、PAT や DL における Floquet 電子 (光着衣電子) 状態や Floquet 励起子 (光着衣励起子) 状態の共鳴構造の安定性を、R 行列 Floquet 理論に基づく多チャンネル散乱理論によって解析する。

#### [光着衣電子における動的Fano共鳴]

ここでは、SLの積層方向に静電場とTHz波 (振幅 $F_1$ および振動数 $\omega$ の単色光) が印加されている系 (動的Wannier-Stark ladder: DWSL) を考察する。ただし、Bloch周波数 $\lambda$ と $\omega$ との比 $\zeta = \Omega / \omega$ は正の整数とする。駆動THz波の強度が大きくなるにつれミニバンド間結合やそれに伴う電子の連続帯ミニバンドへの励起がより重要になってくる。この系では、ミニバンド間結合として、dc電場およびac電場に起因するそれぞれdc-Zenerトンネリング (ZT) およびac-ZTの二つの効果が共存する。ミニバンドのラベルを $b$ 、光子サイドバンド指数を $j$ とすると、当該の光着衣状態は量子数 $(b, j)$ で表される多重項構造を有し、隣接する光子サイドバンドはお互いにac-ZTによって結合する。とりわけ、THz波の強度が大きくなりDLが発現する際、親バンド $(1,0)$ は、隣接するバンド $(b \geq 2, j \leq -1)$ と擬エネルギー $(E)$ 的に縮退し、Fano共鳴 (FR) に類似した現象が引き起こされる。これを「動的FR (DFR)」と呼ぶ。重要なことは、静的な結合に起因する従来のFRとは異なって、DFRを支配するac-ZT結合は、 $F_1$ や $\omega$ によって変調可能であることである。

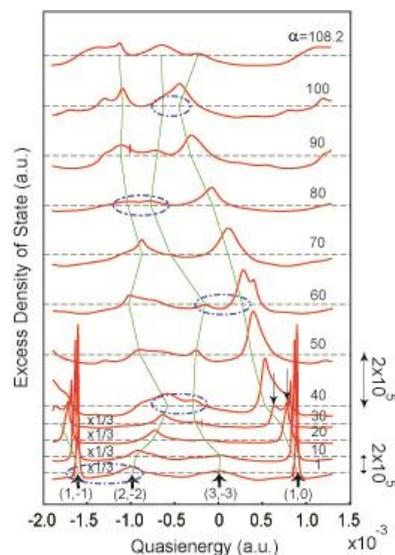


図1.1  $\alpha=1 \sim 108.2$ における擬エネルギー  $E$ に対する過剰状態密度 $\rho^{(ex)}(E)$ 。

この意味において、DFRは、超冷却原子系の強結合Bose-Einstein凝縮体における光Feshbach共鳴と類似した効果とみなせる。図1に、静電場104.5 kV/cm下のSL: 35/11ML-GaAs/Ga<sub>0.75</sub>Al<sub>0.25</sub>Asにおいて、様々なponderomotive半径( $=F_1/m_e \tau^2$ )に対する過剰状態密度  $\rho^{(ex)}(E)$  の計算結果を示す。これは、ある擬エネルギー  $E$  における系の崩壊寿命に対応する物理量である。ここで、 $\langle \tau \rangle$  はTHz電場下での電子の古典的周期運動の軌道半径に対応し、 $m_e$  は電子の有効質量である。DFRによって、従来非常に安定と考えられていたDL状態 [ $\alpha=108.2$  (a.u.)] が不安定化していることが見て取れる。

### [フラクショナルDWSLにおける共鳴構造]

ここでは、 $\zeta$  が有理数の DWSL を考える。単一ミニバンドにおける強束縛模型によると、 $\zeta$  が整数の場合と異なり、この系では隣接する WSL サイト間のエネルギー差  $\Omega$  が、整数個の光子の吸収・放出過程と非共鳴になるため、PAT の効果が抑制される。それゆえ、Floquet 状態にミニバンド構造が形成されたり、DL が発現したりすることはない。しかしながら、その擬エネルギー構造は特徴的なフラクタル性を示すことが知られている。ところで、駆動光子場が強くなるに従い、ac-ZT によって単一ミニバンド模型は破綻する。さらに、強束縛模型では DWSL の共鳴構造を正確には記

述し得ない。そこで、より正確な理論である散乱理論を適用することによって、この系の擬エネルギー構造と寿命を解析した。ここでは、問題の簡単化のため、高周波数近似 ( $\hbar \omega \gg I_p$ , ここで、 $I_p$  はイオン化ポテンシャル) の適用範囲で数値計算を行った。図 2 に、静電場 122 kV/cm SL: 35/7ML-GaAs/Ga<sub>0.75</sub>Al<sub>0.25</sub>As における  $\zeta=2/3$  のときの DWSL の寿命  $\tau(E)$  を示す。 $\langle \tau \rangle$  が大きくなるにつれて、共鳴状態のピーク位置が振動しながら、赤方偏移することが分かる。また、それに付随して DWSL の寿命も短くなることが分かる。上記の特異な振動は、元々の WSL のポテンシャルに光子場を繰り込んだ光着衣ポテンシャルによって理解できる。図 2 の結果は、 $\zeta$  が有理数の DWSL においては、たとえ光子場がさほど強くなくても、従来の単純な模型は破綻し、特徴的なフラクタル性も厳密には成立しないことを示している。

### [光着衣励起子における動的 Fano 共鳴]

光着衣電子・正孔多体系と関連する過渡的量子ダイナミックスの問題を扱う一環として、THz 駆動下の超格子における光着衣励起子の擬エネルギー状態 (擬定常状態) の解析を行う。この系では、第1ミニバンド起因フォトンサイドバンドに形成される励起子離散状態は、ac-ZTおよびクーロン結合を介した動的な結合により、上位のサイドバンドの励起子連続状態と相互作用をし、DFRを発現すると考えられる。この系にR行列Floquet理論を適用し、多チャンネル散乱問題として

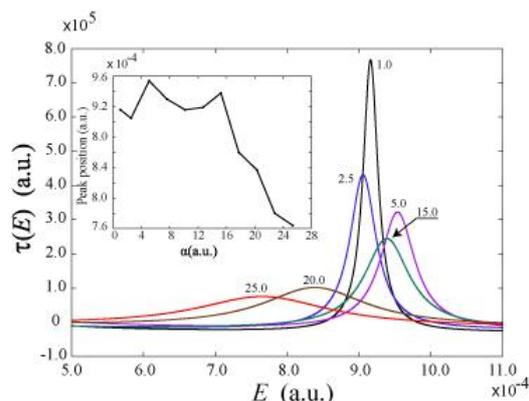


図1.2.  $\alpha = 1 \sim 25$ における擬エネルギー  $E$  に対するDWSLの寿命  $\tau(E)$ . Inset:  $\alpha$  に対する共鳴位置の変化。

数値解析を行う。ピーク電場 $E_{ac}=40$ および $200\text{kV/cm}$ 、 $\Gamma=93\text{meV}$ のレーザーに駆動されたSL:  $35/11\text{ML-GaAs/Ga}_{0.75}\text{Al}_{0.25}\text{As}$ に、さらに弱プローブを照射したときの光着衣励起子の吸収スペクトルの計算結果を図3に示す。 $E_{ac}=200\text{kV/cm}$ において、非対称形状を有する励起子DFRが発現することを示すことができた。

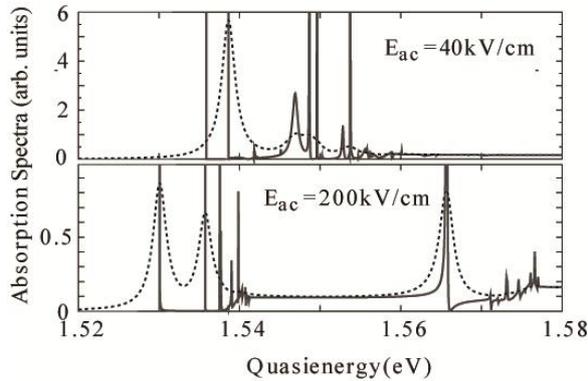
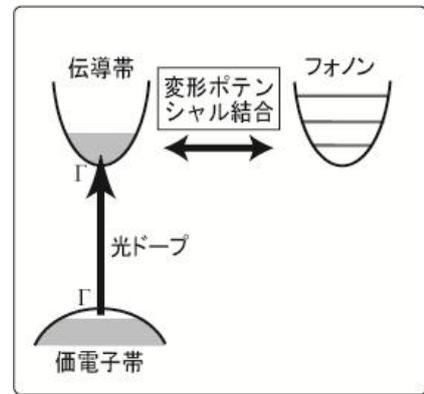


図1.3. 光着衣励起子の吸収スペクトル。実線；自然スペクトル、破線：1meVの均一広がりをつまみ込んだスペクトル。

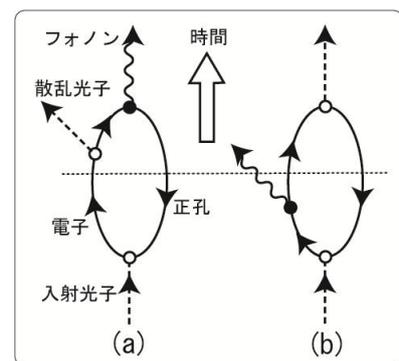
**【2】超短パルス励起半導体における動的ファノ共鳴と過渡的準粒子生成**

高強度超短パルスレーザーによって光ドープされた  $n\text{-Si}$  において、過渡的な Fano 共鳴(FR)が発現することが実験で見出されている。本研究では、この系に誘起されるコヒーレント振動を対象として、その初期過程に発現する過渡的な FR 効果の理論的解明を目的とする。当該の Fano 共鳴を誘起する電子・光学フォノン相互作用は、照射レーザー強度に依存して時間的に変動するので、「動的 Fano 共鳴 (DFR)」というタイプに属する。



1.4 DFR の概念図

この系に多チャンネル共鳴を取り込んだ散乱理論を適用し、「ポーラロニックな過渡的準粒子生成」と「プラズモン-フォノン相互作用」の二つの観点から多体理論を構築し、この系に内在する物理の詳細を明らかにする。当該系の FR は、レーザー照射直後から  $50\text{fs}$  程度までの非常に短い時間スケールで発現する超高速過程であり、現在までのところ  $\text{Si}$  においてのみ観測が報告されている。この系では、図 1.4 のように、光ドープされた電子が変形ポテンシャル結合を介してフォノンと相互作用し、それによって FR が誘起されると考えられる。この



1.5 1フォノン励起ラマン散乱

DFR は、図 1.5 で示すラマン散乱過程によって模式的に理解できる。過程(a)では入射光子によって仮想的な電子・正孔対が生成されるが、一方、過程(b)では更に1フォノン放出を伴って伝導帯内の電子遷移が引き起こされる。両過程は、図 1.5 の水平破線で示される過渡的時間においてエネルギー的に縮退する。このとき、過程(a)の電子・正孔対状態と過程(b)のフォノン励起状態が、

それぞれ閉・開チャンネルとして機能し DFR が発現する。当該の  $n$ -Si の DFR は、正孔ドーブルした  $p$ -Si のラマン散乱において古くから知られている FR 効果と類似している。しかしながら、両者は主として次の観点から明確に区別される。この DFR はコヒーレント振動の初期段階においてのみ発現する過渡的現象であり、数 10fs 幅の高強度パルスレーザー照射による高密度電子励起 ( $10^{19}\text{cm}^{-3}$  程度)によって誘起される。よって、光子・電子およびフォノン・電子相互作用は、図 2 のような摂動としてではなく、実際は非摂動的な強結合である。実験で観測される DFR も「ポーラロニックな過渡的準粒子生成の痕跡」と理解されている。一方、 $p$ -Si における FR は静的結合に起因する定常的な効果であり、少なくとも光子・電子相互作用は摂動として扱うことが可能である。ところで、このような DFR は GaAs では観測されていない。これは、GaAs ではレーザー誘起によるプラズマ振動が支配的になり、プラズモン-フォノン相互作用が DFR 結合より優勢になるためと推察されている。

### 【3】多軌道強相関電子系の光誘起コヒーレント振動現象の解析

光照射によって物性を制御しようとする実験的試みが様々な物質群に対してなされており、特に近年は強相関電子系に対する光照射実験が活発に行われている。強相関電子系では伝導性や磁性の異なる相が競合していることが多いために、光照射などの外部からの刺激によって電子状態を大きく変化させることが期待されている。その典型的な例として知られるのが遷移金属酸化物であり、これまでに行われた光照射による物性制御の試みとしてはペロフスカイト構造を有するマンガン酸化物やバナジウム酸化物に対する実験がある。両者ともに、光照射直後に現れた金属化の兆候がピコ秒オーダーで消失し、元の絶縁体状態に戻る様子が観測されている。最近では光照射に付随して生じる光誘起超高速ダイナミクスが主要なトピックの一つに挙げられている。本研究においては、軌道縮退を有する 1 次元強相関電子系における光誘起ダイナミクスの理論的解析を行い、照射光強度が比較的弱い状況では光学応答スペクトルに図 1.6 のようなコヒーレント振動が見られること、そしてその振動の原因が、光励起状態間の量子干渉であることを見出した。特に図 1.6(a)に見られるコヒーレント振動現象は、図 1.7 にある軌道波(orbiton)と呼ばれる軌道縮退系特有の素励起を起源に持つことを示し、実験による観測可能性について議論を行った。

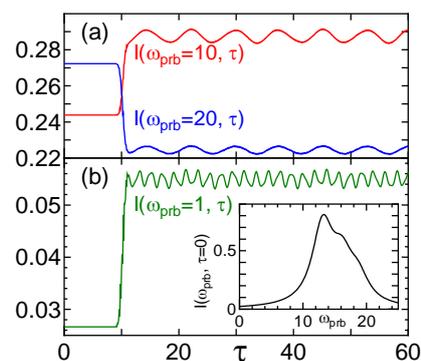


図 1.6 光学応答スペクトルの時間発展

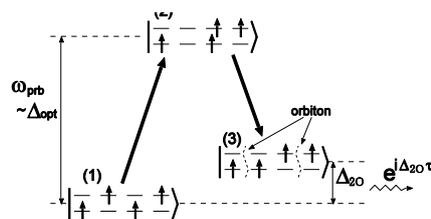


図 1.7 コヒーレント振動に寄与する状態の模式図

## 【4】 強レーザーによるオージェ崩壊過程の制御

図 1.8 はオージェ崩壊率と加えたレーザー強度の関係である。オージェ崩壊できない原子にレーザーを加えることによって、オージェ崩壊させる。レーザー強度と到着時刻によって、何時、どの程度崩壊させるかを制御できるその発見によって、将来分子に対して特定な場所で解離させることが可能になる。その研究結果は *Physical Review Letters* に掲載された。

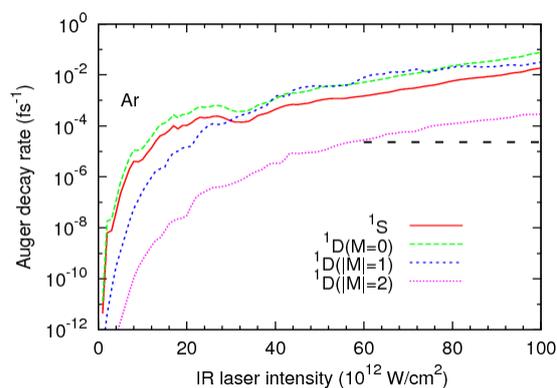


図 1.8 オージェ崩壊率とレーザー強度の関係

## 【5】 赤外線による光吸収過程の制御

赤外線による光吸収過程に対して、新メカニズムを提案し、そのメカニズムによって、さまざまな赤外線におけるアト秒レーザーの実験結果を解明し、赤外線による、物質の透光性を短い時間(フェト秒)で制御方法と提案した。その研究結果は三つ *Physical Review A* 論文に纏められた。

## 小泉グループ

## 【1】 砂時計型磁気励起スペクトル

銅酸化物超伝導体のスピン構造を調べるために中性子散乱による磁気励起スペクトルが観測されている。この磁気励起スペクトルをドーブしたホールを中心にスピン渦ができるとするモデルで考察して来た。これまで、磁気励起をスピン波近似で取り扱ってきたが、厳密対角化による方法で低エネルギー側の解析が精密化できることが分かった。今後、スピン波の方法と厳密対角化による方法を併用し、実験との詳細な比較を目指していく。

## 【2】 スピン渦誘起ループ電流

磁気励起スペクトルの解析より、スピン渦の存在がかなり確実であるが、このようなスピン渦が存在するとループ電流が誘起されることが示されている。このループ電流をつかい、銅酸化物で観測されている、異常金属状態の解明を進めている。x=1/8状態での超伝導の抑制が説明を行った。

## 【3】 スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子コンピューター

スピン渦誘起ループ電流は右回り、左回りの自由度がある。この自由度を量子ビットとした量子コンピューターを提案した。量子ビット状態の初期化、変換による演算、結果の読み取りについての理論的シミュレーションを行っている。

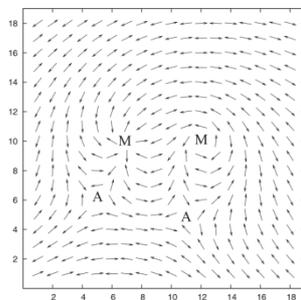


図 2.1 4つのスピンの渦の例。4量子ビットを形成する。

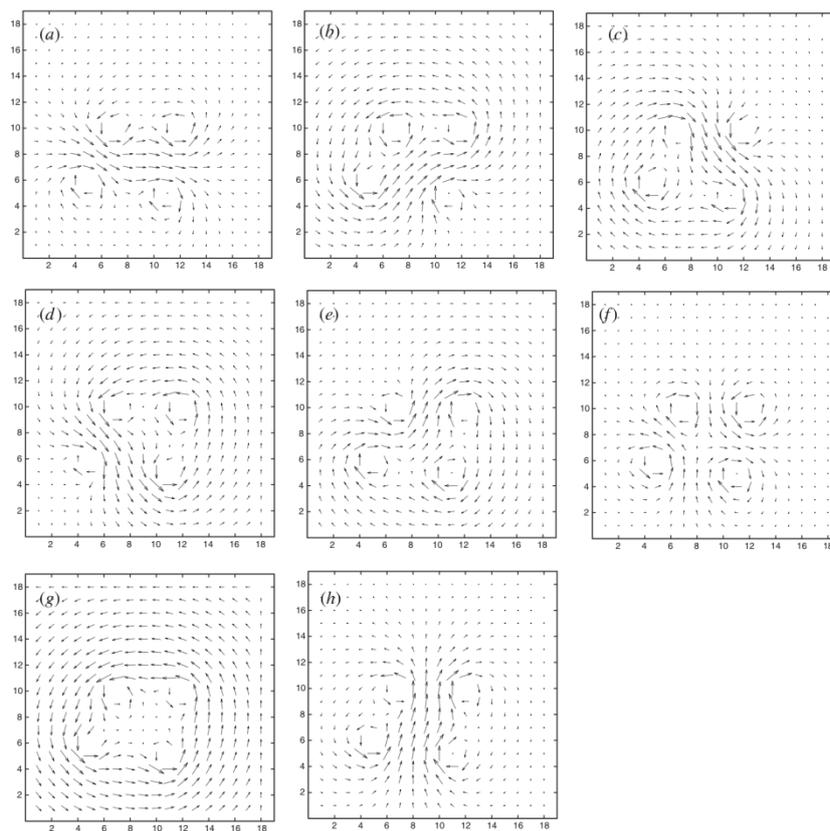


図 2.2 図 2.1 のスピンの渦で可能となる16の電流パターンのうちの8つ。残りの8つは上の電流をそれぞれ逆向きにしたものである。

## 岡田グループ

## 複合構造構築による六方晶窒化ホウ素の電子状態制御[論文 3,15,18]

六方晶窒化ホウ素(h-BN)は、ホウ素と窒素からなる蜂の巣格子状ネットワークを有する層状物質であり、数 eV のバンドギャップを有する絶縁体である。すなわち、グラファイト/グラフェンの絶縁体版である。ここでは、この h-BN の層間へのアルカリ原子導入、h-BN スラブへの外部電界印加により、h-BN が容易に金属化することを示した。また、その電子状態の詳細な解析から、伝導に寄与する電子系は、h-BN の層間に分布を有する自由電子的状态であることがあきらかになり、そのフェルミ面の形状はグラファイト層間化合物のそれと定性的に一致することを示した。この結果から、h-BN/アルカリ金属複合体、h-BN/電界複合体が、全く新たな超伝導材料の候補になり得ることを予言した。他方、電子の有効質量の解析から、キャリアの移動度は高々自由電子程度であり、高速動作を要求される半導体材料の伝導チャンネルとなり得ないことが明らかになった。

## 菱面体相グラファイト薄膜の磁性状態の電界制御[論文 4]

菱面体相グラファイト(ABCABC..積層グラファイト)薄膜はその(0001)表面において、フェリ磁性的な磁気秩序を有することが我々の計算から明らかになっている[図 3.1(a)]。その磁性状態の起源はフェルミレベル近傍かつ波数空間端に発現する平坦バンドによるものである。ここでは、その磁性状態を面鉛直方向の電場により制御し、新たな磁性状態への相転移が起こりえることを理論的に予言した。

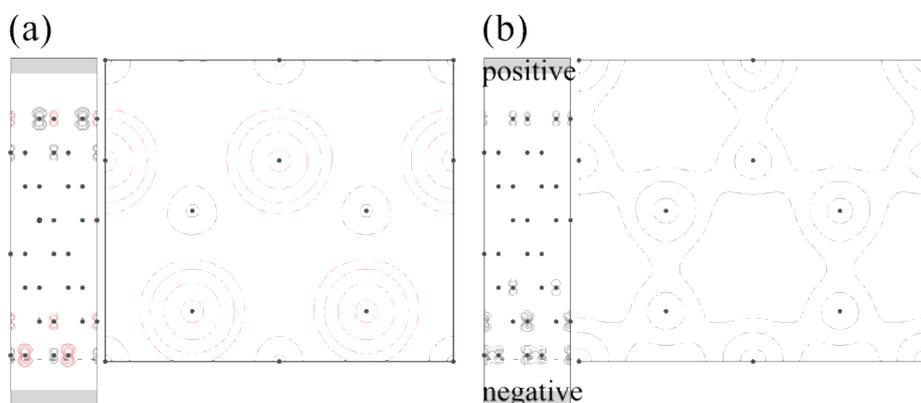


図 3.1 : (a)電界非印加時の菱面体グラファイト薄膜のスピン密度分布。(b) 電界印加時(2.6V/nm) の菱面体グラファイト薄膜のスピン密度分布。

すなわち、電界下において菱面体相グラファイト薄膜はその負電極に面した表面において、強磁性的な次期秩序を有する[図 3.1(b)]。この結果は、グラファイト薄膜の磁性材料応用の可能性を提案したものである。

絶縁体基板によるグラフェン電子構造変調[文献 15]

今日の半導体工学において広く用いられている、酸化シリコン基板上に吸着された、グラフェンの基礎物性の解明を行った。本研究では、酸化シリコン基板の構造モデルとして、 $\alpha$  クォーツの(0001)面を考え、その上にグラフェンシート、2層グラフェンが吸着された、構造のエネルギー論と電子状態の探索を行った。その結果、グラフェン吸着によるエネルギー利得は炭素原子一原子あたり凡そ数十 meV と、典型的な物理吸着系であることが明らかになった。一方、電子状態は相互作用が非常に弱い吸着系であるにも関わらず、顕著な変調を受けることが明らかになった。すなわち、基板上においては、本来金属であるグラフェンは、基板の作り出す静電的なポテンシャル変調の影響を受けて、数十 meV のバンドギャップを有する半導体となる。

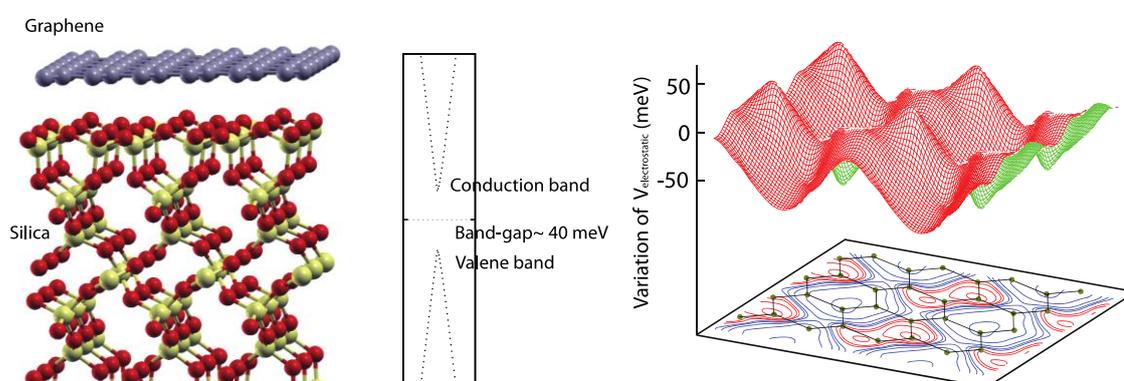


図 3.2: 酸化シリコン上のグラフェンの構造、バンドギャップ、静電ポテンシャルの空間変調。

吸着原子がグラファイト電子状態に及ぼす影響[文献 13]

次に、原子吸着によるグラファイト表面電子物性変調を明らかにするため、Pt を真空蒸着した高配向性熱分解グラファイト (HOPG) 表面の電子状態を、極低温走査トンネル顕微鏡 (STM) を用いた走査トンネル分光 (STS) 計測により詳細に調べた。この結果、白金微粒子は 2~4 nm 程度の幅を持つ 1~2 原子層程度の高さのクラスターとしてグラファイト表面上に堆積しており、白金微粒子の極近傍の炭素上において、通常のグラファイト表面では現れない鋭い電子状態密度ピークがフェルミエネルギー近傍に観測された。非弾性トンネル分光による局所フォノン構造計測や第一原理計算結果より、この電子状態密度ピークは Pt が炭素と混成軌道を形成したことで現れた炭素の非結合  $\pi$  電子準位であると帰属した。即ち、Pt が炭素と結合したことでグラファイトの  $\pi$  共役系が崩れ炭素の非結合  $\pi$  電子準位がフェルミエネルギー近傍に現れたものと考えられる。この結果は、ある種の金属原子、クラスター吸着によりグラフェンのフェルミレベル近傍の電子状態の制御が可能であることを示したものである。

金属表面上のカーボンナノチューブ[文献 16]

金表面とパラジウム表面に吸着した半導体型単層カーボンナノチューブの電子状態を第一原理

計算によって調べた。これらの計算により、金属の上に吸着した単層カーボンナノチューブの電子状態は金属種に依存した変更を受けることが明らかになった。金表面上の単層カーボンナノチューブの電子状態は、孤立した単層カーボンナノチューブの電子状態とあまり変わらないが、金属表面に面した炭素原子上には、カーボンナノチューブのバンドギャップ内に有限の状態密度が存在する。一方、パラジウム表面上の単層カーボンナノチューブの電子状態は、パラジウム表面の  $d$  軌道とカーボンナノチューブの  $\pi$  軌道の強い混成により、孤立した単層カーボンナノチューブの電子状態とは大きく異なる。パラジウム表面上の単層カーボンナノチューブにおいては金属表面に面する側、その反対側ともバンドギャップは存在しない。また、電子の分布からも、金表面上の単層カーボンナノチューブは金表面とはあまり結合を起こさないが、パラジウム表面とは強く混成していることがわかる。これらの計算結果は単層カーボンナノチューブを用いた電子デバイスの作製には電極に用いる金属の影響を考慮しなければならないことを示唆している。

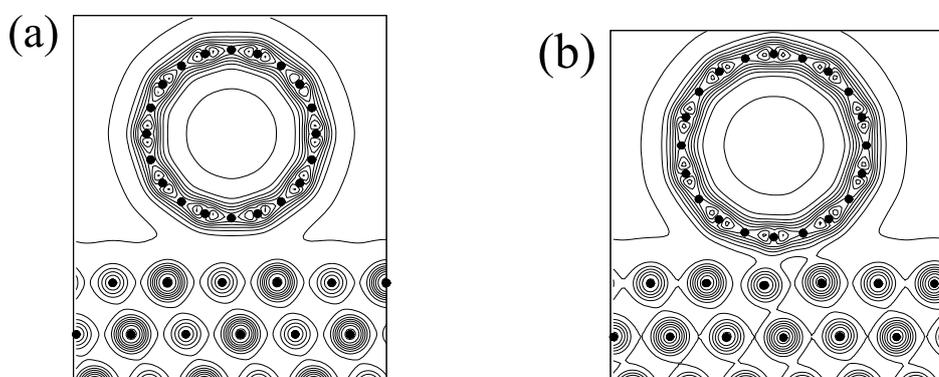
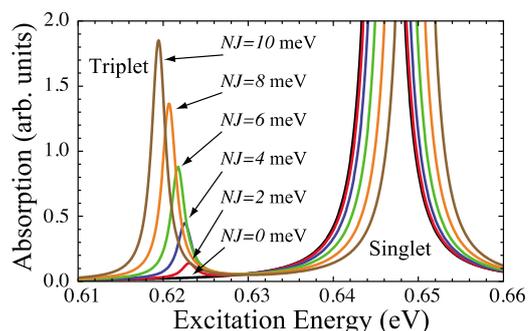


図 3.3 : 金属上に吸着された CNT の電荷密度(a)金表面と(b)パラジウム表面

#### 原子吸着によるカーボンナノチューブ光学特性の変調[文献 1,21]

水素原子が吸着したカーボンナノチューブの光吸収を調べた。水素原子吸着によりスピン軌道相互作用が有効的に増大することに注目し、その効果をベーテ・サルピータ方程式に取り入れ励起子状態を計算した。さらに、得られた励起子状態を用いて光吸収スペクトルを計算した。その結果、吸着水素原子数の増加に伴い一重項励起子と三重項励起子の混成がおき、本来光学禁制である三重項励起子による光吸収がおきることを示した。さらに、実験グループとの共同研究により、水素原子吸着カーボンナノチューブの光学特性を調べ、蛍光スペクトルに現れる三重項励起子による発光ピークの微視的機構を明らかにした。特に、水素原子吸着による一重項励起子と三重項励起子の項間交差効率を計算し、その吸着水素原子密度依存性を明らかにした。



3.4 励起スペクトル

### 磁性原子内包ナノチューブに於ける光学特性の変調

磁性物質を内包したカーボンナノチューブの光学特性を調べた。カーボンナノチューブの光励起状態である励起子はベーテ・サルピータ方程式を強束縛近似のもとで解くことで求まる。本論文では、電子・正孔のスピンと内包磁性物質の局在スピンとの交換相互作用をベーテ・サルピータ方程式に加えて解くことにより、内包磁性物質の状態を反映した光学スペクトルを求めた。その結果、吸収スペクトルに本来光学禁制であるスピン三重項励起子による吸収ピークが現れることがわかった(図 3.4)。この結果は内包磁性物質の磁性状態を調べる手段として光学的手法が有効であることを示している。

### まとめ

我々は量子論に立脚した計算科学の手法を基に、種々のナノカーボン物質、さらに、それらから構築される複合構造体の物性の解明を行った。特に、グラフェン、カーボンナノチューブにおいては、欠陥、原子吸着等も含んだ広義複合構造形成により、その基礎物性が劇的に変調されることを見いだした。この結果は、これらナノカーボン物質を用いた、ナノスケールデバイス実現、設計においては、ナノカーボン物質自身の物性のみならず、複合構造を考慮にいたった統合的な物質設計が必須であることを意味している。また、同時に、複合構造に依る物性変調を積極的に取り込んだ、新奇機能性材料実現の可能性も提示したものである。

### 白石グループ

#### 【1】書き込み／消去耐性が強い MONOS 型メモリの設計指針の提案

MONOS型メモリでは、原子レベルの空間である窒化シリコン膜中の欠陥に電荷を注入することによってメモリ機能を発現させているため、その小型化・高速化が可能となることから、次世代メモリの候補として期待されている。しかし、原子レベルの欠陥に電荷(データ)を充電(放電)してデータの書込(消去)を行う際に窒化シリコン膜中の欠陥がどのような振る舞いをするかは全く不明であった。上述の問題を解決するために、第一原理計算を用いて原子レベルでMONOS型メモリにおける窒化シリコン中の欠陥がデータの書込・消去(電荷の充電と放電)に対してどのように振る舞うかを原子レベルで詳細に明らかにした(K. Yamaguchi 他 IEDM 2010)。得られた結果は以下の通りである。①窒化シリコン中に酸素が混入することによって生じた欠陥はデータの書込・消去によって構造が元に戻らなくなる傾向があること(不可逆的構造変化を起こす傾向があること)を示す(図4.1)。②一方、窒化シリコン中の窒素空孔を起因とする欠陥はデータの書込・消去を行っても構造が元に戻る。これは、①酸素混入欠陥はメモリ機能の劣化を引き起こすのに対し、②窒素空孔欠陥はメモリ機能の劣化を引き起こさないことを意味する。さらに、窒素空孔欠陥がデータの書込・消去によって引き起こす構造変化はヤン・テラー効果に伴う自発的対称性の破れであるため、原理的に可逆的であることも示した。

さらに、書き込み／消去に強いMONOS型メモリの実現にはSiN膜中への酸素混入を抑制することが

キーポイントであることを明らかにし、その具体的な処方箋としてSiN直下に極薄シリコン膜を挿入することによって酸素の化学ポテンシャルを大きく下げること、SiN中への酸素混入を防げることを示した。当該手法は、東芝から報告されている、SiN膜直下にナノドット列を配置するプロセスでMONOSの特性が向上することと合致している。

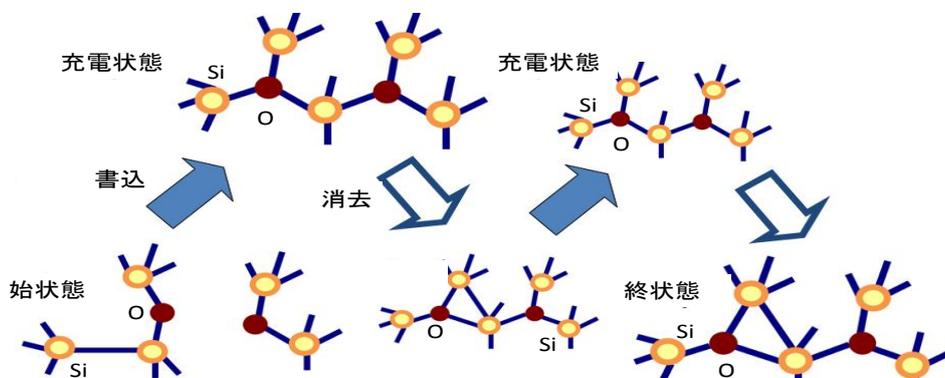


図 4.1: SiN 中欠陥の書込／消去による大きな構造変化。

## 【2】窒化物半導体における擬立方晶近似の妥当性の理論的研究

窒化物半導体をベースにした光デバイスは擬立方結晶近似を用いて設計されることが多い。本研究では第一原理量子論によって擬立方晶近似の妥当性について議論した。その結果、ウルツ鉱構造の窒化物半導体においては擬立方晶近似が大きく破綻することが示された。これは歪み印加の際に生じる内部パラメータの大きな変化、第三近接相互作用の物理的起源があることを明らかにした。さらに内部パラメータが大きく変位するAlNでは、特に擬立方晶近似の破綻が顕著となることも明らかにした。

## 【3】オーミック接触の新しい物理モデルの提案

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ギング現象が起こるため、ショットキー障壁高さの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ギング現象との矛盾を含んでいると考えられる。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ギ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 4.2)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。

今年度はさらに欠陥密度分布数が不十分であったり、欠陥密度分布が非一様である場合には、オーミック接触の様相を示さなくなることも明らかにし、実験でオーミック接触形成に失敗したサンプル特性も再現できることを明らかにした。後は本モデルをさらに高精度化してゆく予定である。

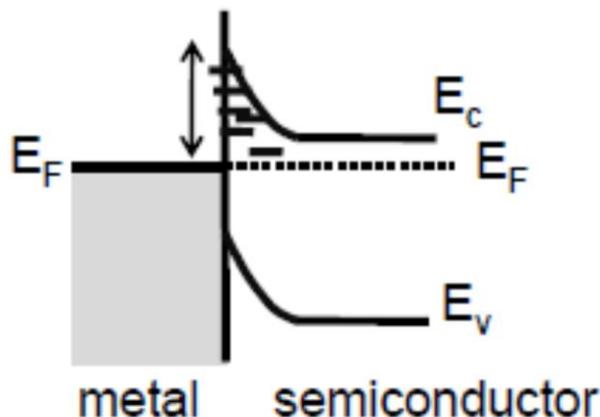


図 4.2 : 本研究で提案した新たなオーミック接触のモデル

#### 【4】大規模第一原理計算によるシリコンナノワイヤーの研究

岩田を中心として大規模第一原理計算手法を開発を行い、当該手法を用いてシリコンナノワイヤーFETのバンド構造を解析し、その有効質量からのずれを明らかにした。また、当該バンド構造を用いてシリコンナノワイヤーFETのデバイス特性の解析も行った。

## 4. 研究業績

### 日野グループ

#### (1) 研究論文

1. Instability of dynamic localization in the intense terahertz-driven semiconductor Wannier-Stark ladder due to the dynamic Fano resonance: Atsushi Kukuu, Tomohiro Amano, Tomohiro Karasawa, Nobuya Maeshima, and Ken-ichi Hino, *Phys. Rev. B* **82**, 115315 (2010)
2. Photoinduced coherent oscillations in the one-dimensional two-orbital Hubbard model: N. Maeshima, K. Hino, and K. Yonemitsu, *Phys. Rev. B* **82**, 161105(R) (2010)
3. Exciton Fano Resonance in Semiconductor Heterostructures and its Related Phenomena: Ken-ichi Hino, Muneaki Hase, and Nobuya Maeshima, in "Exciton Quasiparticles: Theory, Dynamics and Applications" (Nova Science Publishers), p. 303 (Chapter 9)
4. Resonance Structure of Dynamic Fractional Stark Ladders in Laser-Driven Biased Superlattices: Tomohiro Karasawa, Nobuya Maeshima, and Ken-ichi Hino, *Solid State Communications* **151**, 392 (2011)
5. Photoinduced dynamics of the multi-orbital Hubbard model: N. Maeshima, K. Hino, and K. Yonemitsu,

- Physica Status Solidi (c) **8**, 213 (2011)
6. Resonance structure and stability of intense terahertz-driven semiconductor Wannier-Stark ladder: T. Karasawa, T. Amano, A. Kukuu, N. Maeshima, and K. Hino, Physica Status Solidi (c) **8**, 217 (2011)
  7. Parallelization of the R-matrix propagation method for the study of intense-laser-driven semiconductor superlattices: Nobuya Maeshima and Ken-ichi Hino, to be published in Computer Physics Communications
  8. Instability of Dynamic Localization in the Intense THz-Driven Semiconductor Wannier-Stark Ladder due to the Dynamic Fano Resonance: T. Karasawa, T. Amano, A. Kukuu, N. Maeshima, and K. Hino, to be published in AIP Conference Proceedings Volume 1399 (Proceedings of 30th International Conference on the Physics of Semiconductors)
  9. R. Ranitovic, X. M. Tong, C. W. Hogle, X. Zhou, Y. Liu, N. Toshima, M. M. Murnane, and H. C. Kapteyn, “Laser Enabled Auger Decay in Rare Gas Atoms”, Physical Review Letters 106 (2011) 053002:1-4.
  10. T. Ishikawa, X. M. Tong, and N. Toshima, “Double ionization of He in an intense laser field via rescattering process”, Physical Review A 82 (2010) 033411:1-5.
  11. X. M. Tong and N. Toshima, “Controlling atomic structures and photoabsorption processes by an infrared laser”, Physical Review A 81 (2010) 063403:1-4.
  12. X. M. Tong and N. Toshima, “Infrared laser assisted photoionization of helium by a coherent extreme ultraviolet light”, Physical Review A 81 (2010) 043429:1-6.
  13. X. M. Tong, P. Ranitovic, C. L. Cocke, and N. Toshima, “Mechanisms of Infrared Laser Assisted Atomic Ionization by Attosecond Pulses”, Physical Review A 81 (2010) 021404(R):1-4.
  14. P. Ranitovic, X. M. Tong, B. Gramkow, S. De, B. DePaola, K. P. Singh, W. Cao, M. Magrakvelidze, D. Ray, I. Bocharova, H. Mashiko, A. Sandhu, E. Gagnon, M. M. Murnane, H. C. Kapteyn, I. Litvinyuk, and C.L. Cocke, “IR-Assisted Ionization of Helium by Attosecond XUV Radiation”, New Journal of Physics 12 (2010) 013008:1-12.
  15. Y. J. Jin, X. M. Tong, and N. Toshima, “Enhanced ionization of hydrogen molecular ions in an intense laser field via a multiphoton resonance”, Physical Review A 81 (2010) 013408:1-6.
  16. J. Jin, X. M. Tong, and N. Toshima, “Ionization of hydrogen molecular ions in an intense laser field via a resonant state”, Computer Physics Communications 182 (2011) 146-148.
  17. X. M. Tong and N. Toshima, “Time-dependent method in the laser-atom interactions”, Computer Physics Communications 182 (2011) 21-23.
  18. N. Nakamura, F. J. Currell, Z. Hu, D. Kato, A. Komatsu, Y. Li, I. Murakami, H. Ohashi, S. Ohtani, H. A. Sakaue, M. Sakurai, M. Tona, X. M. Tong, H. Watanabe, T. Watanabe, T. Watanabe, C. Yamada, N. Yamamoto, and A. Yamazaki, “Activities at the Tokyo EBIT 2010”, Journal of Instrumentation 5 (2010) C08007:1-6.

## (2) 学会発表

1. テラヘルツ光駆動半導体超格子における動的ファノ共鳴: 前島展也、日野健一, 第1回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム (筑波大学, 2010 年 5 月 6 日)
2. Dynamic Wannier-Stark Ladder における動的局在状態の安定性: 天野智広、久々宇篤志、柄澤朋宏、前島展也、日野健一, 特定領域研究「光-分子強結合反応場の創成」および新学術領域研究「半導体における動的相関電子系の光科学」合同シンポジウム (日本科学未来館, 2010 年 5 月 27 日)
3. Dynamic Fano resonance of Floquet exciton states in terahertz-driven semiconductor superlattices: D. Misaki, N. Maeshima, and K. Hino, EXCON'10 (Brisbane, Australia, 2010 年 7 月 11 日)
4. Resonance structure and stability of intense terahertz-driven semiconductor Wannier-Stark ladder: T. Karasawa, T. Amano, A. Kukuu, N. Maeshima, and K. Hino, EXCON'10 (Brisbane, Australia, 2010 年 7 月 11 日)
5. Photoinduced dynamics of the multi-orbital Hubbard model: N. Maeshima, K. Hino, and K. Yonemitsu, EXCON'10 (Brisbane, Australia, 2010 年 7 月 11 日)
6. Instability of dynamic localization in the intense THz-driven semiconductor Wannier-Stark ladder due to the dynamic Fano resonance: T. Karasawa, T. Amano, A. Kukuu, N. Maeshima, and K. Hino, The International Conference on Physics of Semiconductors (ICPS2010) (Seoul, Korea, 2010 年 7 月 25 日)
7. THz 波駆動半導体 Wannier-Stark 階段構造における共鳴構造と安定性: 日野健一、前島展也, 科研費新学術領域研究 DYCE 理論ワークショップ (大阪大学, 2010 年 8 月 9 日)
8. テラヘルツ光駆動半導体超格子における光着衣励起子のスペクトル特異性 III: 前島展也, 見崎大地, 日野健一, 八島健太, 日本物理学会 2010 年秋季大会 (大阪府立大学, 2010 年 9 月 23 日)
9. フラクタル動的 Wannier-Stark ladder における光着衣電子の共鳴構造の解析: 柄澤朋宏, 前島展也, 日野健一, 日本物理学会 2010 年秋季大会 (大阪府立大学, 2010 年 9 月 23 日)
10. 多軌道ハバード模型における光励起状態のダイナミクス: 前島展也, 日野健一、米満賢治, 日本物理学会 2010 年秋季大会 (大阪府立大学, 2010 年 9 月 23 日)
11. テラヘルツ光駆動半導体超格子における光着衣電子・正孔系の多体問題: 日野 健一、第 4 回 DYCE シンポジウム (京都大学, 2011 年 1 月 6 日)
12. <招待講演> IR Laser Assisted Photoabsorption of Atoms, X. M. Tong, and N. Toshima, International Conference on Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters and Surfaces, 2010, Sept. 4-7, Sendai, Japan

## 小泉グループ

### (1) 研究論文

1. Spin-vortices in cuprates: magnetic excitations, optical conductivity, enhanced Nernst signal, and a persistent current generation: Hiroyasu Koizumi, *Physica C: Superconductivity and its applications*, **S118-S120**, 470 (2010)
2. Persistent current generation by a Berry Phase: Hiroyasu Koizumi, *J. Phys. A* **43**, 354009 (2010)

### (2) 学会発表

#### (A) 招待講演

1. Local lattice distortion and spin-vortices in cuprates: how to interpret ARPES, EXAFS, and neutron scattering results: H. Koizumi, XXth International Symposium on the Jahn-Teller Effect (August 17, 2010, Fribourg, Switzerland)

#### (B) その他の学会発表

1. Magnetic excitation spectra from spin-vortices and spin-vortex-induced loop currents: H. Koizumi, 強相関電子系への中性子の応用についての国際会議 2011 (東海村、2011 年 2 月 23 日)
2. スピン渦誘起ループ電流: 小泉裕康、第18回渦糸物理国内会議(東京、2010 年 12 月 2 日)
3. ARPES, EXAFS, 中性子散乱データからみた銅酸化物におけるスモールポーラロン形成: 小泉裕康、日本物理学会 2010 年秋季大会、(大阪府立大学、2010 年 9 月 24 日)
4. ドープしたホールを挟んだ反強磁性相関によるスピン渦とループ電流の生成: 秀方遼、小泉裕康、日本物理学会 2010 年秋季大会、(大阪府立大学、2010 年 9 月 23 日)
5. 銅酸化物超伝導体における砂時計型磁気励起スペクトルの起源 II: 佐川英弥、秀方遼、小泉裕康、日本物理学会 2010 年秋季大会、(大阪府立大学、2010 年 9 月 23 日)

## 岡田グループ

### 発表論文

1. K. Nagatsu, S. Chiashi, S. Konabe, and Y. Homma, "Brightening of Triplet Dark Exciton by Atomic Hydrogen Adsorption in Single-Walled Carbon Nanotubes Observed by Photoluminescence Spectroscopy", *Physical Review Letters* **105**, 157403 (2010).
2. Satoru Konabe, Nobuhito Onoda, and Kazuyuki Watanabe, "Auger Ionization in Armchair-Edged Graphene Nanoribbons", *Physical Review B* **82**, 073402 (2010).
3. Susumu Okada and Minoru Otani, "Stability and electronic structure of potassium-intercalated hexagonal boron nitride from density functional calculations", *Physical Review B* **81**, 233401 (2010).
4. Minoru Otani, Yoshiteru Takagi, Mikito Koshino, and Susumu Okada, "Phase Control on Magnetic

- State of Graphite Thin Films by Electric Field", *Applied Physics Letters*, **96**, 242504 (2010).
5. Susumu Okada, "Energetics of ultimate silicon nanowire confined in nanospace", *Japanese Journal of Applied Physics*, **49**, 065001 (2010).
  6. Satoru Konabe, Takahiro Yamamoto, and Kazuyuki Watanabe, "Photocurrents in Carbon Nanotubes with Various Diameters under High-Intensity Laser Irradiation", *Japanese Journal of Applied Physics* **49**, 02BD06 (2010)
  7. Minoru Otani and Susumu Okada, "Field-Induced Free Electron Carriers on Graphite", *Journal of Physical Society of Japan*, **79**, 073701 (2010).
  8. Soon-Kil Joung, Toshiya Okazaki, Susumu Okada, and Sumio Iijima, "Intermolecular Interaction between Single-Wall Carbon Nanotubes and Encapsulated C<sub>60</sub> Probed by Resonance Raman Spectroscopy", *Physical Chemistry Chemical Physics*, **12**, 8118 - 8122 (2010).
  9. Tasuku Chiba and Susumu Okada, "Energetics and Electronic Structures of Na-Doped C<sub>60</sub> Polymers", *Journal of Physical Society of Japan*. **79**, 084702 (2010).
  10. Yoshifumi Izu, Junichiro Shiomi, Yoshiteru Takagi, Susumu Okada, and Shigeo Maruyama, "Growth mechanism of single-walled carbon nanotube from catalytic reaction inside carbon nanotube template", *ACS NANO*, **4**, 4769 - 4775 (2010).
  11. Shingo Okubo, Toshiya Okazaki, Kaori Hirose, Kazu Suenaga, Susumu Okada, Shunji Bandow, and Sumio Iijima, "Electronic Structures of Single-Wall Carbon Nanotubes Encapsulating Ellipsoidal C<sub>70</sub>", *Journal of American Chemical Society*, **132**, 15252-15258 (2010).
  12. Hisao Miyazaki, Kazuhito Tsukagoshi, Akinobu Kanda, Minoru Otani, Susumu Okada, "Influence of Disorder on Conductance in Bilayer Graphene under Perpendicular Electric Field", *Nano Letters*, **10**, 3888-3892 (2010).
  13. Soon-Kil Joung, Toshiya Okazaki, Susumu Okada, and Sumio Iijima, "Host-guest interaction between single-wall carbon nanotubes and encapsulated C<sub>60</sub> probed by resonance Raman spectroscopy", *physica status solidi (B)*, **247**, 2700-2702 (2010).
  14. Susumu Okada, Takazumi Kawai, and Kyoko Nakada, "Electronic Structure of Graphene with Topologica Line Defect", *Journal of the Physical Society of Japan*, **80**, 013709 (2011)
  15. Susumu Okada and Minoru Otani, "Electron-state Control of Hexagonal Boron Nitride: Carrier Injection into Inter-layer Band", *physica status solidi (C)*, **8**, 500-502 (2011).
  16. Yoshiteru Takagi and Susumu Okada, "Electronic-state Modulation on Single-Walled Carbon Nanotube Adsorbed on Metal Surfaces", *physica status solidi (C)*, **8**, 564-566 (2011).
  17. Satoru Konabe and Susumu Okada, "Method for probing the magnetic state of nanomaterials encapsulated in carbon nanotubes" *Applied Physics Letters*, **98**, 073109 (2011).
  18. Minoru Otani and Susumu Okada, "Gate-Controlled Carrier Injection into Hexagonal Boron Nitride", *Physical Review B* **83**, 073405 (2011).

19. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada, "Semiconducting Electronic Property of Graphene Adsorbed on (0001) Surfaces of SiO<sub>2</sub>", *Physical Review Letters*, **106**, 106801 (2011).
20. Nobuhito Onoda, Satoru Konabe, Takahiro Yamamoto, and Kazuyuki Watanabe, "Auger ionization in carbon nanotubes and graphene nanoribbons under laser irradiation", *physica status solidi (c)* **8**, 570 (2011)
21. Satoru Konabe and Kazuyuki Watanabe, "Mechanism for the optical activation of dark spin-triplet excitons in hydrogenated single-walled carbon nanotubes", *Physical Review B* **83**, 045407 (2011)

## 新聞発表

日刊工業新聞 2011 年 3 月 4 日 : グラフェンが半導体に~絶縁体基板使い”変身”

### 白石グループ

<発表論文>

1. Iwai H, Natori K, Shiraishi K, Iwata J, Oshiyama A, Yamada K, Ohmori K, Kakushima K, Ahmet P, "Si nanowire FET and its modeling", *SCIENCE CHINA-INFORMATION SCIENCES*, 54, 1004-1011 (2011)
2. Muraguchi M, Sakurai Y, Takada Y, Shigeta Y, Ikeda M, Makihara K, Miyazaki S, Nomura S, Shiraishi K, Endoh T, "Collective Tunneling Model in Charge-Trap-Type Nonvolatile Memory Cell", *JAPANESE JOURNAL OF APPLIED PHYSICS*, 50, 04DD04 (2011)
3. Yamaguchi K, Otake A, Kamiya K, Shigeta Y, Shiraishi K, "Atomistic Design of Guiding Principles for High Quality Metal-Oxide-Nitride-Oxide-Semiconductor Memories: First Principles Study of H and O Incorporation Effects for N Vacancies in SiN Charge Trap Layers", *JAPANESE JOURNAL OF APPLIED PHYSICS*, 50, 04DD05 (2011)
4. Yamaguchi K, Otake A, Kamiya K, Shigeta Y, Shiraishi K, "Universal Guiding Principle for the Fabrication of Highly Scalable MONOS-Type Memory -Atomistic Recipes Based on Designing Interface Oxygen Chemical Potential-", *TECHNICAL DIGEST OF 2010 INTERNATIONAL ELECTRON DEVICES MEETING* p.122-p.125 (2010)
5. Nakayama T, Kakushima K, Nakatsuka O, Machida Y, Sotome S, Matsuki T, Ohmori K, Iwai H, Zaima S, Chikyow T, Shiraishi K, Yamada K, "Theory of Workfunction Control of Silicides by Doping for Future Si-Nano-Devices based on Fundamental Physics of Why Silicides Exist in Nature", *TECHNICAL DIGEST OF 2010 INTERNATIONAL ELECTRON DEVICES MEETING* p.375-p.378 (2010)
6. Hosoi T, Saeki M, Oku Y, Arimura H, Kitano N, Shiraishi K, Yamada K, Shimura T, Watanabe H, "Comprehensive Study and Control of Oxygen Vacancy Induced Effective Work Function Modulation in Gate-First High-k/Metal Inserted Poly-Si Stacks", *TECHNICAL DIGEST OF 2010 SYMPOSIUM*

- ON VLSI TECHNOLOGY, p.179-p.180 (2010)
7. Morooka T, Sato M, Matsuki T, Suzuki T, Shiraishi K, Uedono A, Miyazaki S, Ohmori K, Yamada K, Nabatame T, Chikyow T, Yugami J, Ikeda K, Ohji Y, “Suppression of Anomalous Threshold Voltage Increase with Area Scaling for Mg- or La-incorporated High-k/Metal Gate nMISFETs in Deeply Scaled Region”, TECHNICAL DIGEST O 2010 SYMPOSIUM ON VLSI TECHNOLOGY, p.33-p.34 (2010)
  8. Umezawa N, Shiraishi K, “Origin of high solubility of silicon in La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: A first-principles study”, APPLIED PHYSICS LETTERS, 97, 202906 (2010).
  9. Muraguchi M, Endoh T, Takada Y, Sakurai Y, Nomura S, Shiraishi K, Ikeda M, Makihara K, Miyazaki S, Shigeta, “Importance of electronic state of two-dimensional electron gas for electron injection process in nano-electronic devices”, PHYSICA E-LOW-DIMENSIONAL SYSTEMS & NANOSTRUCTURES, 42, 2602-2605 (2010).
  10. Takada Y, Muraguchi M, Endoh T, Nomura S, Shiraishi K, “Proposal of a new physical model for Ohmic contacts”, PHYSICA E-LOW-DIMENSIONAL SYSTEMS & NANOSTRUCTURES, 42, 2837-2840 (2010)
  11. Iwai H, Natori K, Kakushima K, Ahmet P, Shiraishi K, Iwata J, Oshiyama A, Yamada K, Ohmori K, “Si Nanowire Device and its Modeling”, PROCEEDING OF 15TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON SIMULATION OF SEMICONDUCTOR PROCESSES AND DEVICES, p.63-p.66 (2010)
  12. Muraguchi M, Takada Y, Nomura S, Endoh T, Shiraishi K, “Importance of the Electronic State on the Electrode in Electron Tunneling Processes between the Electrode and the Quantum Dot”, IEICE TRANSACTIONS ON ELECTRONICS, E93C, 563-568 (2010)
  13. Lee Y, Kakushima K, Shiraishi K, Natori K, Iwai H, “Trade-off between density of states and gate capacitance in size-dependent injection velocity of ballistic n-channel silicon nanowire transistors”, APPLIED PHYSICS LETTERS, 97, 032101 (2010)
  14. Lee Y, Kakushima K, Shiraishi K, Natori K, Iwai H, “Size-dependent properties of ballistic silicon nanowire field effect transistors”, JOURNAL OF APPLIED PHYSICS, 107, 113705 (2010)
  15. Kamiya K, Boero M, Shiraishi K, Oshiyama A, Shigeta Y, “Energy Compensation Mechanism for Charge-Separated Protonation States in Aspartate-Histidine Amino Acid Residue Pairs”, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 114, 6567-6578 (2010)
  16. Y. Shinohara, K. Yabana, Y. Kwashita, J.-I. Iwata, T. Otobe, G. F. Bertsch, "Coherent phonon generation in time-dependent density functional theory", Phys. Rev. B 82, 155110 (2010)
  17. Takahiro Yamamoto, Kenji Sasaoka, and Satoshi Watanabe, “Universal Transition between Inductive and Capacitive Admittance of Metallic Single-Walled Carbon Nanotubes”, Phys. Rev. B 82, 205404 (2010).
  18. Kenji Sasaoka, Takahiro Yamamoto, and Satoshi Watanabe, “A Numerical Approach to Transient

- Currents in a Quantum Dot Connected to a Single Electrode”, ECS Trans. 33, 85 (2010).
19. Isao Maruyama, Sho Tanaya, Mitsuhiro Arikawa, Yasuhiro Hatsugai, “Z<sub>2</sub> topological number of local quantum clusters in the orthogonal dimer model”, Proceedings of the International Conference on Frustration in Condensed Matter (ICFCM) 2011:J. Phys.: Conf. Ser. 200 (2010) 022075
  20. “Guiding principles for charge trap memories -A theoretical approach-”, Kenji Shiraishi, Keita Yamaguchi, Akira Otake, Katsumasa Kamiya, Yasuteru Shigeta, Proceeding of Solid-State and Integrated Circuit Technology (ICSICT) 2010 - Shanghai, China, p1096 (2010).
  21. Kenji Shiraishi, Takuji Hosoi, Heiji Watanabe, and Keisaku Yamada, “Control of Gate Metal Effective Work Functions and Interface Layer Thickness by Designing Interface Thermodynamics Based on Heteroatom Incorporation into High-k HfO<sub>2</sub> Gate Dielectrics”, ECS Trans. **33** (6), 479-486 (2010)
  22. Keita Yamaguchi, Akira Otake, and Kenji Shiraishi, “Effect of Heteroatom for Nitrogen Vacancy in SiN/SiO<sub>2</sub> Interface Layer in MONOS-Type Memories”, ECS Trans. **33** (6), 243-251 (2010)
  23. Keita Yamaguchi, Kenji Shiraishi, Akira Otake, and Kenji Kobayashi, “Atomistic Guideline for MONOS-Type Memories with High Program/Erase Cycle Endurance”, ECS Trans. **28** (2), 403-410 (2010)
  24. R. Hasunuma, C. Tamura, T. Nomura, Y. Kikuchi, K. Ohmori, M. Sato, A. Uedono, T. Chikyow, K. Shiraishi, K. Yamada and K. Yamabe, “Degradation in HfSiON film induced by electrical stress application”, ECS Trans. **28** (2), 263-272 (2010)
  25. Yukihiro Takada, Masakazu Muraguchi, Tetsuo Endoh, Shintaro Nomura, and Kenji Shiraishi, “Investigation of the New Physical Model of Ohmic Contact for Future Nanoscale Contacts”, ECS Trans. **28** (1), 73-79 (2010)
  26. Y. Sakurai, S. Nomura, Y. Takada, K. Shiraishi, M. Muraguchi, T. Endoh, M. Ikeda, K. Makihara and S. Miyazaki, “Electron Tunneling Between Si Quantum Dots and Two Dimensional Electron Gas under Optical Excitation at Low Temperatures”, ECS Trans. **28** (1), 369-374 (2010)
  27. Akira Otake, Keita Yamaguchi, Katsumasa Kamiya, Yasuteru Shigeta, Kenji Shiraishi, “An atomistic study on hydrogenation effects toward quality improvement of program/erase cycle of MONOS- type memory”, IEICE Transactions, Vol.E94-C,No.5, (2011). in press.
  28. Y. Ebihara, K. Kamioya, A.A. Ymaguchi, and K. Shiraishi, “Intrinsic origin of the breakdown of quasi-cubic approximation in nitride semiconductors”, Phys. Status Solidi C, 1&#8211;3 (2011) / DOI 10.1002/pssc.201001085,
  29. “酸素の化学ポテンシャルデザインに基づく MONOS 型メモリーの原子レベルの設計指針”, 山口慶太、大竹朗、神谷克政、重田育照、白石賢二, IEDM 特集(先端 CMOS デバイス・プロセス技術) 予稿集 - 東京, p25 (2011).
  30. “第一原理計算に基づいた MONOS 型メモリ動作機構の理解”, 白石賢二, 山口慶太, 応用物理

79 巻 p1098 (2010).

<学術講演>

<国際会議招待講演>

1. K. Ohmori, T. Matsuki, Y. Ohkura, J. Yugami, K. Ikeda, Y. Ohji, Y. Yasuda, T. Endoh, K. Shiraishi, K. Yamada, "Effect of carrier scattering phenomena on drain current variability in Si MOSFET" 217th Electrochemical Society Meeting, Vancouver, Canada, Apr. 25-30th, 2010.
2. Ryu Hasunuma, Chihiro Tamura, Tsuyoshi Nomura, Yuuki Kikuchi, Kenji Ohmori, Motoyuki Sato, Akira Uedono, Toyohiro Chikyow, Kenji Shiraishi, Keisaku Yamada, Kikuo Yamabe, "Degradation in HfSiON film induced by electrical stress application", 217th Electrochemical Society Meeting, Vancouver, Canada, Apr. 25-30, 2010.
3. K. Ohmori, T. Matsuki, Y. Ohkura, J. Yugami, K. Ikeda, Y. Ohji, Y. Yasuda, T. Endoh, K. Shiraishi, K. Yamada, "Influence of carrier transport phenomena on drain-current variability of MOSFETs" International Conference on Solid-State and Integrated Circuit Technology (ICSICT), Shanghai, China, Nov. 1-4, 2010.
4. K. Shiraishi, K. Yamaguchi, A. Otake and K. Kobayashi, "Atomistic Guideline for MONOS-Type Memories with High Program/Erase Cycle Endurance", 217th Meeting of Electrochemical Society, April 25-30, Vancouver, BC, Canada
5. K. Shiraishi, K. Yamaguchi, A. Otake, K. Kamiya, and Y. Shigeta, "Guiding Principles for Charge Trap Memories -A Theoretical Approach-", International Conference on Solid-State and Integrated Circuit Technology, November 1-4, 2010, Shanghai, China
6. Kenji Shiraishi, "Crucial Contribution of First Principles Calculations for Modern Nano-Scale Semiconductor Devices", The 13th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, November 1-3, 2010, POSTECH, Pohang, Korea
7. H. Iwai, K. Natori, K. Kakushima, P. Ahmet, K. Shiraishi, J. Iwata, A. Oshiyama, K. Yamada, K. Ohmori, "Si Nanowire Device and its Modeling", The International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices 2010 (SISPAD), Sep.6-8, Bologna, Ital

<国内学会招待講演>

1. 中山隆史、角嶋邦之、中塚理、町田義明、五月女真一、松木武雄、大毛利健治、岩井洋、財満鎮明、知京豊裕、白石賢二、山田啓作、「ドーピングによるシリサイドの仕事関数の変調:シリサイドの物理に基づく理論」、SDM 研究会「IEDM 特集(先端 CMOS デバイス・プロセス)技術」(2011 年 1 月 31 日、東京)
2. 白石賢二、「CMOS の限界と将来の Beyond CMOS への課題」、2010 年秋季第 71 回応用物理学会学術講演会シンポジウム「シリコンテクノロジーの未来像を徹底的に考える-Never Ending Silicon

Technology-」、2010 年 9 月 14 日-17 日、長崎大学、長崎

3. 山口慶太、大竹朗、神谷克政、重田育照、白石賢二、応用物理学会シリコンテクノロジー分科会 IEDM 特集(先端 CMOS デバイスプロセス技術)、“酸素の化学ポテンシャルデザインに基づく MONOS 型メモリーの原子レベルの設計指針”, 2011 年 1 月 31 日、機械興会館、東京

<一般講演>

1. "Large-scale first-principles electronic structure calculations for silicon nanostructures", J.-I. Iwata, A. Oshiyama, K. Shiraishi, 30th International Conference on the Physics of Semiconductors(ICPS30), July 25-30, 2010, Seoul, Korea
2. 「時間依存密度汎関数理論による半導体コヒーレントフォノン生成の振動数依存性の分析」篠原康、矢花一浩、川下洋輔、岩田潤一、乙部智仁、G.F. Bertsch, 日本物理学会 2010 年秋季大会, 2010 年 9 月 23 日 - 26 日、大阪府立大学
3. 「独立並列計算による行列固有値分布の確率的推定法」、二村保徳、多田野寛人、櫻井鉄也、岩田潤一(筑波大学)、金沢市文化ホール、2010 年 8 月 3 日 - 8 月 5 日
4. CMSI・次世代ナノ情報合同研究会、「高強度短パルスレーザーに誘起される電子-格子ダイナミクス of the first-principles calculation」、篠原康、乙部智仁、岩田潤一、矢花一浩、G.F. Bertsch、東京大学物性研究所、2011 年 1 月 5 日～1 月 7 日
5. 「実空間密度汎関数理論に基づく Car-Parrinello 分子動力学法の実装」、重田育照、小泉健一、神谷克政、岩田潤一、押山淳、大阪大学豊中キャンパス、2010 年 9 月 14 日 - 17 日
6. "Structural stability and energy bands of Si nanowires along [110] direction", Dongchul Sung, J.-I. Iwata, A. Oshiyama, 30th International Conference on the Physics of Semiconductors(ICPS30), July 25-30, 2010, Seoul, Korea
7. "Breakdown of the quasicubic approximation in GaN and InN -A Theoretical Approach-", Y.Ebihara, K. Shiraishi and A.A. Yamaguchi 第 29 回電子材料シンポジウム, Izu, July, 14-16 (2010), Th2-2
8. "Theoretical Studies on Deformation Potentials of Strained Nitride Semiconductor Films", Y.Ebihara, K. Shiraishi and A.A. Yamaguchi, 4th AEARU Workshop, Tsukuba, August.29-September.3 (2010), P-42.
9. 「擬立方晶近似の妥当性についての理論的考察」、海老原康裕、白石賢二、山口敦史、第 71 回応用物理学会学術講演会, Nagasaki, September.14-17 (2010), 15p-B-3
10. "Intrinsic Origin of the Breakdown of Quasi-Cubic Approximation in Nitride Semiconductors", Y.Ebihara, K. Shiraishi and A. A. Yamaguchi, IWN2010, Tampa, September.19-24 (2010), F2.6,
11. 「第一原理計算を用いた窒化物半導体の変形ポテンシャルの算出」、海老原康裕、神谷克政、白石賢二、山口敦史、第 58 回応用物理学関係連合会, Atsugi, March.24-27 (2011), 26p-BY - 8
12. 「量子ポイントコンタクトにおける交流応答の形状効果」、笹岡健二〇、山本貴博、渡邊聡、白石賢二、

日本物理学会, 2011 年年次大会, 新潟大学

13. “Transient and AC Electric Transport in Mesoscopic Devices”, Kenji Sasaoka, Takahiro Yamamoto, Satoshi Watanabe, and Kenji Shiraishi, Workshop in Simulation and Modeling of Emerging Electronics (SMEE), Hong Kong
14. “A Numerical Approach to Transient Currents in a Quantum Dot Connected to a Single Electrode”, Kenji Sasaoka, Takahiro Yamamoto, Satoshi Watanabe, and Kenji Shiraishi, 218th ECS Meeting - Las Vegas, USA.
15. “Analysis of Single Electron Emission from a Quantum Dot by Non-Equilibrium Green's Function Method in Time Domain”, Kenji Sasaoka, Takahiro Yamamoto, and Satoshi Watanabe 30th International Conference of the Physics of Semiconductors (ICPS) 2010, Seoul.
16. “Real time analysis of single electron emission from a quantum dot into an electrode by non-equilibrium Green's function technique”, Kenji Sasaoka, Takahiro Yamamoto, and Satoshi Watanabe International Symposium on Technology Evolution for Silicon Nano-Electronics (ISTESNE) 2010, Tokyo (Poster)
17. “Edge States of Graphene in Magnetic Fields: Effects of Second-Neighbor Hopping”, M. Arikawa, Y.Hatsugai, H. Aoki, International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals 2010, 2010/07/07 京都国際会議会館
18. “ $Z_2$  Berry phase in 2D orthogonal dimer model”, Sho Tanaya, Isao Maruyama, Mitsuhiro Arikawa, Yasuhiro Hatsugai, XXIV IUPAP International Conference on Statistical Physics (StatPhys24), 2010/07/20, Convention Centre, Cairns, Queensland, Australia
19. “Equivalence of different expressions on the density matrix of Gutzwiller wave function”, Mitsuhiro Arikawa, XXIV IUPAP International Conference on Statistical Physics (StatPhys24), 2010/07/20, Convention Centre, Cairns, Queensland, Australia
20. “Dynamics of the  $S = 1/2$  spin chains with Ising anisotropy”, XXIV IUPAP International Conference on Statistical Physics (StatPhys24), Jun Sato, Mitsuhiro Arikawa, Yasuhiro Saiga, 2010/07/23, Convention Centre, Cairns, Queensland, Australia
21. “Robustness of the edge states in graphene quantum Hall system: does the chiral symmetry degraded by  $t'$  matter?”, Mitsuhiro Arikawa, Hideo Aoki, Yasuhiro Hatsugai, 30th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS 2010), 2010/07/27, COEX, Seoul, Korea
22. “Entanglement entropy of the bond order phase in graphene in magnetic fields”, Mitsuhiro Arikawa, Hideo Aoki, Yasuhiro Hatsugai, 30th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS 2010), 2010/07/29, COEX, Seoul, Korea
23. “Edge states in graphene quantum Hall system with bond vs potential disorder”, Mitsuhiro Arikawa, Hideo Aoki, Yasuhiro Hatsugai, The 19th International Conference on the Application of High Magnetic Fields in Semiconductor Physics and Nanotechnology (HMF-19), 2010/08/03, Fukuoka

## International Congress Center

24. “Topological characterization of 2D orthogonal dimer model”, Sho Tanaya, Isao Maruyama, Mitsuhiro Arikawa, Yasuhiro Hatsugai, The international conference Highly Frustrated Magnetism 2010 (HFM 2010), 2010/08/03, The Homewood campus of the Johns Hopkins University, USA
25. 「 $S=1/2$  2次元パイロクロア格子における  $Z_2$  ベリー位相」、棚谷翔, 有川晃弘, 丸山勲, 初貝安弘、日本物理学会 2010 年秋季大会 (25aTE-12) 2010/09/25、大阪府立大学
26. 「グラフェン端状態のカイラル対称性の破れに対する安定性」、有川晃弘, 青木秀夫, 初貝安弘、日本物理学会 2010 年秋季大会 (23aXA-7), 2010/09/23、大阪府立大学
27. 「二次元パイロクロア格子上の  $S=1/2$  ハイゼンベルグ模型に対する  $Z_2$  ベリー位相を用いた相同定」、棚谷翔、有川 晃弘、丸山勲、初貝安弘、第 4 回 物性科学領域横断研究会、2010/11/13、東京大学武田先端知ビル 5F 武田ホール
28. 「Calogero-Sutherland 模型の動力学」、有川晃弘、第6回 数理物理・物性基礎論セミナー、2010/12/04、お茶の水女子大学 理学部
29. “Wave packet dynamics in the spin torque transfer”, 有川晃弘, 初貝安弘, 白石賢二、第 15 回 半導体スピン工学の基礎と応用 PASPS-15、2010/12/21、筑波大学計算科学センター
30. “ $Z_2$  topological number of local quantum clusters in the orthogonal dimer model”, Isao Maruyama, Sho Tanaya, Mitsuhiro Arikawa, Yasuhiro Hatsugai, International Conference on Frustration in Condensed Matter (ICFCM), 2011/01/11, Sendai International Center, Sendai, Japan
31. “Electron wave packet dynamics in the spin torque transfer”, Mitsuhiro Arikawa, Yasuhiro Hatsugai, Kenji Shiraishi, The 1st CSIS International Symposium on Spintronics-based VLSIs and The 7th RIEC International Workshop on Spintronics, 2011/02/03, Laboratory for Nanoelectronics and Spintronics, Tohoku University
32. 「波束ダイナミクスにおけるスピントランスファートルク」、有川晃弘、岩田潤一、初貝安弘、白石賢二、日本物理学会第66回年会、2011/03/26、震災により Web 公開
33. “Theoretical Study of the Hydrogen Effect on the Program/Erase Cycle of MONOS-Type Memories”, Akira Otake, Keita Yamaguchi, Katsumasa Kamiya, Yasuteru Shigeta, Kenji Shiraishi, 2010 Asia-Pacific Workshop on Fundamentals and Applications of Advanced Semiconductor Devices , 東京工業大学, 2010 年 6 月. 口頭発表
34. “Atomistic Design of Guiding Principles for High Quality MONOS Memories-First Principles Study of H and O Incorporation Effects for N Vacancies in SiN Charge Trap Layers”, Keita Yamaguchi, Akira Otake, Katsumasa Kamiya, Yasuteru Shigeta, Kenji Shiraishi, 2011 International Conference on Solid State Devices and Materials , 東京大学, 2010 年 9 月. 口頭発表
35. “Effect of Heteroatom to a Nitrogen Vacancy in a SiN/SiO<sub>2</sub> Interface Region in MONOS-Type Memories”, Keita Yamaguchi, Akira Otake, Katsumasa Kamiya, Yasuteru Shigeta, Kenji Shiraishi,

218th ECS Meeting, Las Vegas, NV, 2010 年 10 月. ポスター発表

36. “Atomistic Design of Interface Layer for MONOS-Type Memories with High Program/Erase Cycle Endurance”, Keita Yamaguchi, Akira Otake, Katsumasa Kamiya, Yasuteru Shigeta, Kenji Shiraishi, 41st IEEE Semiconductor Interface Specialists Conference, San Diego, CA, 2010 年 12 月. 口頭発表
37. “Universal Guiding Principle for the Fabrication of Highly Scalable MONOS-Type Memory -Atomistic Recipes Based on Designing Interface Oxygen Chemical Potential-“, Keita Yamaguchi, Akira Otake, Katsumasa Kamiya, Yasuteru Shigeta, Kenji Shiraishi, 2010 International Electron Devices Meeting, San Francisco, 2010 年 12 月. 口頭発表
38. “界面酸素の化学ポテンシャルデザインに基づく極微細 MONOS 型メモリーの原子レベルの設計指針”, Keita Yamaguchi, Akira Otake, Katsumasa Kamiya, Yasuteru Shigeta, Kenji Shiraishi, 春期第 58 回応用物理学会, 神奈川工科大学, 2011 年 3 月. 口頭発表
39. 「EMC-MD シミュレーションによる電流揺らぎのチャンネル幅依存性評価」、神岡武文、大毛利健治、白石賢二、鎌倉良成、渡邊孝信、2010 年 秋季 第 71 回応用物理学会学術講演会(2010 年 9 月 14-17 日)
40. 「微細 MOSFET ドレイン電流ばらつきのゲート/ドレイン電圧依存性」、大毛利健治、白石賢二、山田啓作、2010 年 秋季 第 71 回応用物理学会学術講演会(2010 年 9 月 14-17 日)
41. 「Poly-Si/TiN/HfO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub> ゲートスタック MOSFET の低周波ノイズ特性に対するゲートファーストプロセスの影響」、松木武雄、ランガ ヘッティアーラッチ、フェン ウェイ、白石賢二、山田啓作、大毛利健治、ゲートスタック研究会 —材料・プロセス・評価の物理—(第16回研究会)(2011 年 1 月 21 日~23 日、東京工業大学)
42. 「低温における Si ナノワイヤーの発光特性」、櫻井蓉子、大毛利健治、山田啓作、角嶋邦之、岩井洋、白石賢二、野村晋太郎、日本物理学会 第 66 回年次大会(2011 年 3 月 25-28 日)
43. 「デバイス評価に向けた Si ナノワイヤーの発光測定」、櫻井蓉子、大毛利健治、山田啓作、角嶋邦之、岩井洋、白石賢二、野村晋太郎、2011 年春季第 58 回応用物理学関係連合講演会(2011 年 3 月 24-27 日、神奈川工科大学)
44. 「EMC-MD シミュレーションによる電流揺らぎのチャンネル幅依存性評価」、神岡武文、大毛利健治、白石賢二、鎌倉良成、渡邊孝信、第 71 回応用物理学会学術講演会、14a-ZE-6、長崎大学、2010 年 9 月 14 日.
45. 「EMC-MD シミュレーションによる電流揺らぎのチャンネル幅依存性評価(II)」、神岡武文、大毛利健治、白石賢二、鎌倉良成、渡邊孝信、2011 年春季第 58 回応用物理学関係連合講演会(2011 年 3 月 24-27 日、神奈川工科大学)
46. “Proposal of a new electronic structure model of Ohmic contacts for the future metallic source and drain”, Yukihiro Takada, Masakazu Muraguchi, Tetsuo Endoh, Shintaro Nomura, Kenji Shiraishi, 10th International Workshop on Junction Technology, May 10 - 11, 2010 Shanghai, China

<受賞>

1. 白石賢二、表面科学会フェロー 2010 年 5 月

山口慶太、IEEE Japan Chapter Student Award 2011 年 1 月

## IV. 生命科学研究部門

### IV-1. 生命機能情報分野

#### 1. メンバ

教授 舘野 賢

助教 庄司 光男

#### 2. 概要

当グループでは生命の本質を理解するために、生体内酵素反応の解明、生体高分子間に働く相互作用の解析、情報統計学に基づくバイオインフォマティクスの研究を行っている。これらは全く新しいドラッグの開発や生体進化にとって非常に重要である。また、さらなる生命現象の解明には、これまでの計算手法を活用するのみならず、新規方法論の開発や超並列計算等の様々な新技術を取り入れることで、さらなる生命科学の新展開を行っている。

#### 3. 研究成果

##### 【1】 RNA・タンパク質複合体系（アミノアシル tRNA 合成酵素、DNA メチル化酵素）

アミノアシル tRNA 合成酵素(aaRS)は実際の生命の持つ酵素であり、タンパク質生合成の過程で重要な役割を果たす。しかしながらその完全な立体構造は未だ解かれておらず、酵素反応機構も未だ明らかにされていない。われわれは aaRS の中でもアミノ酸の一種であるイソロイシンに特異的に反応活性を持つイソロイシル tRNA 合成酵素 (IleRS) に注目し、これまで立体構造が解かれていた低分解能全体構造と反応活性を持つドメインのみの高分解能立体構造を理論的に組み合わせ、IleRS 全体の全原子立体構造を構築することを試みた。

ホモロジーモデリングを行い、全体の立体構造に対してドメイン部分の立体構造を当てはめることでタンパク質の立体構造予測を行った。次に、その構造に対して分子動力学計算を行い、より適切な構造を構築した。

それにより IleRS におけるイソロイシン基質の分子認識機構を明らかにした。とくにこの酵素はアミノ酸の中からイソロイシン基質だけを認識する過程を担っており、この過程を解明できたことはタンパク質合成過程においてきわめて重要である。また、この立体構造を理論的に構築できたことで、より高精度な計算手法 (QM/MM 法等) を適用することがはじめて可能となり、より詳細な化学反応過程を探求できるようになったことも極めて大きな進展である。

一方、DNA メチル化酵素は DNA 分子内のシトシンやアデノシンをメチル化する酵素であり、バクテリアから哺乳類まで広く存在し、細胞分化や遺伝子制御などにおいて重要な役割を果たしている。Haemophilus haemolyticus が有する M.HhaI は、塩基配列 5'-GCGC-3'を特異的に認識し、5'側のシトシンの C5 炭素原子にメチル基を付加する。Bruce らによる理論的解析によれば、Glu119 からこのシトシンの N3 原子へのプロトン移動については、エネルギー障壁 (2.2 kcal/mol) および

プロトン移動前後のエネルギー変化 (-0.7kcal/mol) が低く見積もられ、Glu119 は反応に寄与しないと報告された。ところが速度論的測定によれば、Glu119 の変異体の活性は著しく低下し、重要なアミノ酸残基であることが示唆されている。われわれは、これらの矛盾を解決するために QM/MM 分子動力学計算を用い、Glu119 の機能的な役割を解析した。その結果、前述のプロトン移動における活性化エネルギー(8.1kcal/mol) と移動前後のエネルギー変化 (-2.2kcal/mol) は Bruce らの結果と著しく異なり、実験結果とよい一致をみた。HhaI DNA メチル化酵素特有の反応機構の詳細について解明を行った。

## 【2】タンパク質の DNA 認識とその電子構造の制御機構

生体内においては一般に、DNA の周囲に溶媒 (水分子) が存在するが、転写因子 (タンパク質) が DNA に結合すると、DNA の一部の塩基は、転写因子によって溶媒 (水) からマスクされる。溶媒が離れた (タンパク質が結合した) 塩基の分子軌道は、エネルギー順位が変化し、一般により不安定になることを見出した (その塩基内の分子軌道のエネルギーが上昇する)。そこでさらに、DNA の表面が溶媒に露出している面積 Solvent Accessible Surface Area (ASA) を計算し、溶媒と DNA との相互作用を定量化した結果、上記の分子軌道エネルギー順位の上昇との間に、密接な相関 (線形性) が存在することを初めて導いた。これは、DNA をリガンドとする酵素などの反応・機能のしくみを解析するなどの目的にも、新しい視点を提供するものである。

以上は、DNA-タンパク質複合体の全体を、ハイブリッド QM/MM 計算によって取り扱うことで初めて可能となった (同じ対象を、複数の異なる QM/MM スキームによって計算し、それらの電子構造を比較)。これらの解析は複合体全体の FullQM 計算や、一部分を取り出した QM 計算では不可能である。

## 【3】カチオン (プラスイオン) と $\Pi$ 電子との相互作用

阪大のグループによって、2009 年タンパク質構造内部に、 $\Pi$  電子と  $\text{Na}^+$  イオンとの結合が初めて見出されたが、( $\text{Na}^+$  イオンではなく) 水分子の結合である可能性が否定できなかった。我々は、阪大の研究者と共同で、見出された電子密度が  $\text{Na}^+$  イオンであることを示した。その後さらに、 $\text{Na}^+$  イオンを水に置き換えると、タンパク質構造が不安定になることも示し、その原因についても解明した。

このようなカチオン・ $\Pi$  電子相互作用は、医薬品がタンパク質に結合する際など、一般に広く見られると考えられ、きわめて重要な相互作用である。しかしながら、その立体構造や相互作用についてはこれまで明らかにされていなかった。本研究ではその存在の証明と、新しい機能単位の発見、さらにその機能的な役割と仕組みについて解明できた為、極めて重要であると考えられる。

**【4】ヘモグロビンの立体構造および水和構造の変化による酸素親和調節機構**

ヘモグロビンは酸素濃度が高く CO<sub>2</sub> 濃度が低い肺(酸素の吸着)から、逆に、酸素濃度が低く CO<sub>2</sub> 濃度が高い組織(酸素の放出)へと酸素を運搬するタンパク質である。酸素の吸着と放出という異なる機能を一つのタンパク質で実現するためにヘモグロビンには酸素親和調節機能が備わっている。ヘモグロビンは4つのタンパク質(サブユニット)が会合した構造をとるが、このサブユニット間のコミュニケーションが酸素親和調節に重要であることが知られている。

タンパク質の構造と機能の研究の歴史の初期の段階におけるもっとも重要な研究は M. F. ペルツによるヘモグロビンの結晶構造の解明 (1962 年ノーベル化学賞) である。さらにペルツは酸素結合型と酸素非結合型ヘモグロビンの立体構造の違いから酸素親和調節機構を説明した(ペルツの機構,1971 年)。これはタンパク質の構造と機能の関係の最も代表的な例として浸透しており、生化学の教科書で必ず触れられるテーマでもある。

しかし、近年の実験でペルツの機構だけでは説明のつかない酸素親和調節が観測されるようになった。我々の研究の最終的な目的はヘモグロビンの酸素親和調節機構の謎を解明することである。

我々は古典力場による分子動力学計算を用いてこの問題にアプローチした。近年の計算機の性能の進歩は、より規模の大きい長時間のシミュレーションを可能にしたが、その一方で計算の精度はないがしろにされてきた。実際に、ヘモグロビンに対して行われた分子動力学計算では酸素非結合型が酸素結合型の構造に遷移するという多くの実験と矛盾する結果が報告されている。一方で、我々の計算の特徴は計算精度の向上を目指した点にある。

まず我々が行ったのは計算初期の水和構造の最適化である。タンパク質の分子動力学計算では通常、一分子を直方体の溶媒ボックスの中に埋めて、これを周期的境界条件でつなぐことで、実際の溶液中に近い状態を実現している。しかし、一般的な手法で溶媒水を配置するとヘモグロビンの場合、サブユニット間の空孔に十分な溶媒が配置されず結果として直方体の溶媒ボックスが欠けてしまうという問題があることが分かった。我々は初期の水和構造を最適化することによりこれを解決した。

また、分子動力学計算に用いる力場の評価を行い、ヘモグロビンの分子動力学計算に最も適切な力場を検証した。同時に従来いくつかの力場ではタンパク質中に一般に存在するグリシンのコンフォメーションを再現することが困難であることを示した。

こうした計算の精密化は我々に非常に重要な結果をもたらした。我々はヘモグロビンの水和構造の精密な解析を行い、結果としてサブユニット間の水を含んだ相互作用ネットワークを発見し、これに基づき全く新しい酸素親和調節機構を提案した。これは酸素の結合により一つのサブユニットに起きた変化が少しの構造の変化と上記のネットワークを介して全てのサブユニットに伝搬し酸素親和性を変化させるというもので、現状報告されているモデルと実験の矛盾を説明する唯一の分子機構である。

さらに、ここまでの研究で確立したヘモグロビンの分子動力学計算のスキームを用いて酸素結合型、酸素非結合型のヘモグロビンに対して長時間の分子動力学計算を行った。剛体モデルを用いた解析によると確かに酸素非結合型のサブユニットの配置は酸素結合型に近づくが、一方で溶液中の実験的で報告されている酸素非結合型の相互作用をよく保存していることが分かった。これは、上記の変化が、初期構造として用いた結晶構造が溶液構造へと緩和する遷移である可能性を示唆している。

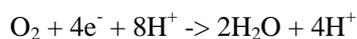
しかし、この構造が最終的な溶液構造なのか、あるいはまだ緩和の途中にあるのかは上記の計算から判断することは困難であり、さらなる大規模なサンプリングが必要である。この点を改善したうえで我々の提案する酸素親和調節機構はさらに検証されなければならない。そのためにはより精度の高い力場が必要になる。現状の生体高分子の力場はファンデルワールス相互作用、特に  $\pi$  スタッキングの再現に問題を抱えている。これは二重らせん DNA の塩基の積み重なり等に見られる相互作用で DNA やタンパク質の安定性に寄与している相互作用である。

上記の問題を解決した上で大規模なサンプリングを行うための基礎として、より分子量が小さくサンプリング空間が限られた蛋白質 **Trp-cage** に対して折り畳みシミュレーションを行った。タンパク質の折り畳みとは、特定の立体構造を持たない一本のペリペプチド鎖を溶液中で存在する構造へと折り畳むことであり、最も再現が困難なシミュレーションの一つである。この計算では我々が開発したスタッキング相互作用の改良力場とレプリカ交換分子動力学法とを組み合わせで用いた。

結果として我々の手法により、従来の方場よりも高い精度で溶液構造を再現することに成功した。これはヘモグロビンも含めた他のタンパク質にも応用可能な手法であり、さらなる研究の発展が可能となった。

#### 【5】タンパク質と遷移金属の複合体の有効ポテンシャル場の開発と応用

シトクロム c 酸化酵素(COX)は生体内で呼吸(Respiration)に関連し、ミトコンドリアで酸素を水に還元する反応を担っている。この反応は



であり、電子移動とプロトン移動がカップルする反応である。反応には8プロトンが関わっており、化学反応に4プロトンが消費され、内膜への輸送に4プロトンが用いられる。生成される内膜のプロトン濃度勾配は生体内エネルギー源として用いられる ATP の合成(ATPase)に使われる。一方で、電子移動について、COX は Cytochrome c から電子(e<sup>-</sup>)をもらい、金属中心(CuA, heme a)を伝わって、反応中心である heme a<sub>3</sub>-CuB に移動する。

COX における反応機構を解明するには QM/MM 分子動力学法を行うことが必要であるが、そのためにはまずその分子力場を作成することが必要である。構成アミノ酸については既に汎用力場が存在するが、金属中心についての力場は存在しない。そのため、金属中心 (CuA) に対する力

場生成を行う事から研究を始めた。

密度汎関数法(DFT)による CuA のポテンシャル曲面と一致するように以下のポテンシャル関数のパラメータを決定した。

$$U = \sum^{bonds} K_b (r - r_0)^n + \sum^{angles} K_a (\theta - \theta_0)^2 + \sum^{torsion} \frac{V_n}{2} [1 + \text{Cos}(n\phi - \gamma)] \\ + \sum^{L-J} \epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{R_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left( \frac{R_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \sum^{Coulomb} \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$

通常の MD 計算では n=2 が使われるが、n=4 の自由度も必要となることが分かった。これにより力場の精度を著しく向上させることが出来た。本研究を用いれば、高精度な QM/MM 計算が可能となる為、プロトン移動過程や、酸素還元過程が解明できる。現在研究を進展させている。

#### 【6】細胞のシグナル情報伝達の数学的モデル (分子数理モデル)

生体内の化学反応ネットワークシステムは Stiffness が厳しく、微分方程式を数値的に解くこと自体が困難である場合も多い。ましてや、その解の安定性の解析は極めて困難である。しかし、生物学的に重要であるのは、(その時間発展よりも) 定常状態である場合が多くある。そこで、微分方程式を(定常状態の)代数方程式に変換することによって、その安定性を詳細に解析するための、新しい手法を提案した。これを応用することによって、フィードバック・ループを含むシグナル情報伝達ネットワークを解析し、ガン化などに至る、生物機能の新しい分子機構を提案した。

#### 【7】バイオ・インフォマティクス技術の開発と応用

現在、生命科学では、個々の遺伝子ごとではなく、「ゲノム全体の遺伝子機能情報を一度に解析する」実験手法が、飛躍的に発展中である。例えば、iPS 細胞の諸々の問題は、遺伝子発現ネットワークにその根源があり、実用化に向けた課題の解決が不可欠である。同様に、生命科学上の様々な課題に、こうした実験手法が応用されつつある。このような最先端の技術の解析には、情報科学(多変量解析)が必須であり、生命科学との融合が不可欠となっている。

我々は転写因子が認識する DNA 塩基配列を、自動的かつ高精度に予測するパターン認識システム(塩基配列モチーフの同定システム)を開発することに成功した。本方法は発がん機構や iPS 細胞、再生医療技術へ応用することができるため、新たな統合的生命科学を拓けると考えている。

## 4. 研究業績

### (1) 研究論文

1. Hagiwara Y, Kino H, Tateno M.: Modulation of electronic structures of bases through DNA recognition of protein. J Phys Condens Matter. 22(15), 152101(2010).

- Hagiwara Y, Tateno M.: Recent advances in jointed quantum mechanics and molecular mechanics calculations of biological macromolecules: schemes and applications coupled to ab initio calculations. *J Phys Condens Matter*. 22(41), 413101(2010).

(2)学会発表

- Masaru Tateno, A Computational Study of Catalytic Mechanisms of a Protein-RNA Hybrid Enzyme, April 22-24, 2010 Shanghai, China.
- 舘野 賢, タンパク質機能の理論解析,蛋白質の機能—構造相関解明のための精密構造解析とその方法 ~水素原子から細胞まで, 2010/10/6-7, 大阪大学蛋白質研究所
- Tatsunori Nishimura, Theoretical characterization of elementary reaction cycles exploiting the steepness of the stimulus/response curve, International Conference on Computational and Systems Biology: ICCSB, Hangzhou, China, 2010/10/22-24.
- Masaru Tateno, Development and application of hybrid quantum mechanics (QM)/molecular mechanics (MM) molecular dynamics calculation system implemented on massively-parallel supercomputers by interfacing QM and MM engines International Conference on Computational and Systems Biology: ICCSB, Hangzhou, China, 2010/10/22-24.
- Masaru Tateno, Investigation of Functional Mechanisms of Biological Nano-machines Exploiting Computer Simulations from Dynamical Electronic Structure to Reaction Network System, Annual World Congress of Nanomedicine 2010, Oct 23-25, Beijing, China
- MoonYoung Yang, Masaru Tateno, Computational investigation of catalytic mechanisms of HhaI DNA methyltransferase, BMB2010 (第 33 回日本分子生物学会年会 第 83 回日本生化学会大会 合同大会), 2010 年 12 月 7 日-12 月 10 日, 神戸.

<ポスター発表>

- 花岡 恭平、舘野 賢、ヘモグロビンの溶媒構造の同定を目指した計算科学的解析、第 10 回日本蛋白質科学会年会, 2010 6/16, 札幌.
- 佐藤 皓允、萩原 陽介、舘野 賢、イソロイシル tRNA 合成酵素 によるエディティング反応機構の計算科学的解析、第 10 回日本蛋白質科学会年会, 2010 6/16, 札幌.
- 舘野 賢、松村 浩由、○萩原 陽介, The grid-based energy representation: a novel description of the potential field involving  $\text{Na}^+ - \pi$  interaction、第 10 回日本蛋白質科学会年会, 2010 6/16, 札幌.
- 萩原 陽介、Martin J. Field、濡木 理、○舘野 賢、A hybrid ribozyme/protein catalyst : a computational investigation of editing mechanism of aminoacyl-tRNA synthetases、第 10 回日本蛋白質科学会年会, 2010 6/16, 札幌.
- 梁 文榮、萩原 陽介、舘野 賢、HhaI DNA メチル化酵素の反応機構の計算科学的解析、第 10 回日

本蛋白質科学会年会, 2010 6/16, 札幌.

6. ○カン ジョン、太田 雄大、萩原 陽介、西川 佳吾、山本 哲徳、長尾 秀実、舘野 賢、タンパク質の遷移金属結合活性サイトにおける電子構造：QM/MM 計算による解析、第 10 回日本蛋白質科学会年会, 2010 6/16, 札幌.
7. ○MoonYoung Yang and Masaru Tateno, Computational investigation of catalytic mechanisms of HhaI DNA methyltransferase, HhaI DNA メチル化酵素 の反応機構の計算科学的研究, 第 33 回日本分子生物学会年会 第 83 回日本生化学学会大会 合同大会, 2010 年 12 月 7 日-10 日, 神戸.
8. ○MoonYoung Yang, Yohsuke Hagiwara, Masaru Tateno, Computational analysis of reaction mechanisms of HhaI DNA methyltransferase, HhaI DNA メチル化酵素 の反応機構の計算科学的解析, 第 48 回日本生物物理学会年会, 2010 年 9 月 20 日-22 日, 東北大学.
9. ○A. Sato, Y. Hagiwara, M. Tateno: “Computational Investigation of Catalytic Mechanisms of Editing by isoleucyl-tRNA Synthetase”, 第 48 回日本生物物理学会年会、2010 年 9 月 20 日-22 日、東北大学.
10. ○Kyohei Hanaoka, Jiyoung Kang, Takashi Yonetani, and Masaru Tateno, Computational analysis of dynamical structures of Human adult hemoglobin, ヒトヘモグロビンにおける動的構造の計算科学的解析, 第 48 回日本生物物理学会年会, 2010 年 9 月 20 日-22 日, 東北大学.
11. ○Ryoh Nakaki, A novel computational system for identification of transcriptional regulation motifs in genome DNA base sequences, International Conference on Computational and Systems Biology: ICCSB, Hangzhou, China, 10/22-24.
12. ○Jiyoung Kang, Computational explorations of electronic and geometrical structure of heme a and heme a3 in the bovine cytochrome c oxidase, International Conference on Computational and Systems Biology: ICCSB, Hangzhou, China, 10/22-24.
13. ○Masaru Tateno, Evaluation of efficiency of a novel algorithm for accurate estimation of metal-p interaction energy International Conference on Computational and Systems Biology: ICCSB, Hangzhou, China, 10/22-24.
14. ○Kyohei Hanaoka, Jiyoung Kang, Takashi Yonetani, and Masaru Tateno, Molecular dynamics simulation of human adult hemoglobin, ヒトヘモグロビンの分子動力学計算, 第 33 回日本分子生物学会年会 第 83 回日本生化学学会大会 合同大会, 2010 年 12 月 7 日-10 日, 神戸.
15. ○A. Sato, M. Tateno: “Computational Exploration of Mechanisms of Editing Reaction by isoleucyl-tRNA Synthetase”, BMB2010(第 33 回日本分子生物学会年会 第 83 回日本生化学学会大会 合同大会), 2010 年 12 月 7 日-10 日, 神戸.

## IV-2. 分子進化分野

### 1. メンバ

准教授	稲垣祐司	(生命環境科学研究科)
教授	橋本哲男	(共同研究員・生命環境科学研究科)
準研究員	田邊晶史	(生命環境科学研究科)
学振特別研究員 PD	神川龍馬	(生命環境科学研究科)

### 2. 概要

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

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

##### (1) 新奇真核生物種 *Palpitomonas bilix*

パラオ共和国の海水サンプルから単離した新奇従属栄養性真核生物 *Palpitomonas bilix* の系統的位置は、顕微鏡観察および6遺伝子配列を用いた分子系統解析からは確定することができなかった (Yabuki, Inagaki, Ishida 2010)。我々は科研費基盤研究 (B)「ハプト・クリプト藻類を含む新奇巨大生物群の提唱とクロムアルベオラータ仮説の検証」(代表・稲垣; 課題番号 21370031) の支

援を受け、*P. bilix* の網羅的発現遺伝子 (expressed sequence tag/EST) 解析を行った。EST 解析には次世代シーケンサーを用い、約 100 万リード・合計配列長 3.2 メガ塩基対の配列データを取得した。この EST 解析データに基づき、159 遺伝子配列にもとづく大規模分子系統解析を行っている。予備的解析では、*P. bilix* はクリプと藻類との近縁性を示し、この系統関係はきわめて高いサポート値により支持された。

## (2) 新奇真核生物種 *Tsukubamonas globosa*

筑波大学構内の兵太郎池から単離された新奇従属栄養性真核生物 TKB055 株は、電子顕微鏡観察によりエクスカバータ生物群に特徴的な細胞内微細構造をもつことが判明した。また、TKB055 株の系統的位置を核ゲノムにコードされた 5 遺伝子の配列に基づき解析したところ、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。これらの結果をまとめ TKB055 株を *Tsukubamonas globosa* として正式に記載した論文を発表した (Yabuki et al. 2011 58:319-331)。また論文執筆と平行し、カナダ・Dalhousie 大学の Andrew Roger 博士との共同研究として *T. globosa* の EST 解析を行った。今後 EST 解析から得た大量遺伝子配列データを用い、大規模系統解析の準備を行う。

一般の真核生物ミトコンドリアにくらべ、*Discoba* 生物群のサブグループの 1 つヤコバ類のミトコンドリアゲノムはより多くの遺伝子をコードしており、ミトコンドリアゲノム進化を考察する上で極めて重要である。我々の行った核コードの 5 遺伝子系統解析では *T. globosa* は *Discoba* 生物群のメンバーであることが判明し、ヤコバ類との近縁性も示唆された。そこでヤコバ類のミトコンドリアゲノムとの比較を行うために、*T. globosa* のミトコンドリアゲノムの完全解読を目指し、科研費挑戦的萌芽研究「原始真核生物を求めて：新奇真核微生物の形態・発現遺伝子・ミトコンドリアゲノム解析」(代表・稲垣；課題番号 22657025) の支援のもと実験を進めた。またこの研究は新学術領域研究「生命科学系 3 分野支援活動」の 2010 年度支援課題に選出され、ミトコンドリアの部分ゲノム配列 (合計 40 キロ塩基対) を決定した。今回配列を取得したミトコンドリアゲノム断片には、これまでヤコバ類 *Reclinomonas americana* のミトコンドリアゲノムにしか発見されていない翻訳伸長因子 EF-Tu がコードされていた。また *T. globosa* ミトコンドリアゲノム断片と考えられるコンティグの 1 つには、*R. americana* を含めこれまで解析されたいかなるミトコンドリアゲノムにも見つかっていない転写制御因子やシキミ酸合成経路にかかわる酵素をコードする遺伝子も発見された。今後、*T. globosa* ミトコンドリアゲノムを完全決定するため、さらに実験を進める予定である。

## 【2】新奇真核生物の発見 (稲垣・神川)

### (1) 新奇自由生活性 *Parabasalia* 属メンバー NY0170 株

沖縄県石垣島のマングローブ林底泥から新規従属栄養性真核生物 NY0170 株は、顕微鏡と小サブ

ユニットリボソームRNA 遺伝子配列の系統解析から自由生活性の *Parabasalium* 属メンバーであることが判明した。NY0170 株を *Pseudotrichomonas keilini* として正式記載した論文を発表した (Yubuki et al. 2010 ; 研究業績 2)。

## (2) その他

海水、淡水、汽水サンプル、底泥サンプル等から新奇真核微生物の単離を試みているが、これまでのところ新奇な生物種の発見、単離には至っていない。

### 【3】分子系統解析の方法論研究 (田邊・稲垣・橋本/辻・佐藤 (高性能計算システム研究部門))

#### (1) 系統樹探索のための最適化アルゴリズムの構築

遺伝的アルゴリズムは工学・生物学など広範囲で利用されている最適化アルゴリズムである。この研究では、遺伝的アルゴリズムを用いて進化系統樹を最適化することを模索した。系統樹の探索は樹の尤度の最大化問題として定式化されるが、探索の効率増進をかんがみ一般的な探索では得られにくい部分解をあらかじめビルディングブロックとして与えることを考えた。この操作により通常手法の探索手法で局所解におちいる等、探索困難な場合でも最適解を得ることが期待できる。我々の開発した樹形探索アルゴリズムの性能を評価するため、10 配列をふくむアミノ酸配列データに対する網羅的探索によりえた最適解と、遺伝的アルゴリズムをふくむ各種アルゴリズムが与えた「最良解」の比較を行った。今後、テストに用いるデータの種類、サイズ等のバリエーションを増やし、開発した系統樹探索法のチューニングを行う。

#### (2) 最尤系統樹の信頼性評価バイアスの定量

通常ブートストラップリサンプリングデータに基づき系統樹推定を繰り返し、得られたブートストラップ系統樹群から多数決合意樹や各分岐の出現確率を算出し、系統推定の信頼性・不確実性を評価する (いわゆるブートストラップ解析)。最尤系統推定の場合、各反復の発見的探索における初期樹形が元データの最尤系統樹から遠い場合、ブートストラップ解析による信頼性は過小評価されると予想される。反対に、元データの最尤系統樹を初期樹形にした場合、信頼性は過大評価されると予想できる。この研究では、ブートストラップ解析において、初期樹形と発見的樹形探索法が、バイアスの直接的原因となると考え、様々な状況のモデルにより生成したシミュレーションデータセットをブートストラップ解析に供し、信頼性評価値に対するバイアスの定量化を試みた。解析には T2K スーパーコンピュータを使用し研究を進めた。これまでに信頼性評価値のバイアスに関し、前述の予想をほぼ確認した。今後論文作成に向け、さらに解析を進める予定である。

#### 4. 研究業績

##### (1) 研究論文

1. Ishida K\*, Inagaki Y\*, Sakaguchi M, Oiwa A, Kai A, Suzuki M, Nakayama T, Chikuni T, Yabuki A, Yamaguchi H, Yubuki N, Yoshida M, Nakayama T, Inouye I, Hashimoto T. Comprehensive SSU rRNA phylogeny of Eukaryota. \*Joint 1st authors 2010 **Journal of Endocytobiosis and Cell Research** 20:81-88.
2. Yubuki N, Ceza V, Cepicka I, Yabuki A, Inagaki Y, Nakayama T, Inouye I, Leander BS. Cryptic diversity of free-living parabasalids, *Pseudotrichomonas keilini* and *Lacusteria cypriaca* n. gen. et sp., as inferred from SSU rDNA sequences. 2010 **Journal of Eukaryotic Microbiology** 57:554-561.
3. Minge MA, Shalchian-Tabrizi K, Torresen OK, Takishita K, Probert I, Inagaki Y, Klaveness D, Jakobsen KS. A phylogenetic mosaic plastid proteome and unusual plastid-targeting signals in the green-colored dinoflagellate *Lepidodinium chlorophorum*. 2010 **BMC Evolutionary Biology** 10:191.
4. Kamikawa R, Sakaguchi M, Matsumoto T, Hashimoto T, Inagaki Y. Rooting for the root of elongation factor-like protein phylogeny. 2010 **Molecular Phylogenetics and Evolution** 56:1082-1088.
5. Kolisko M, Silberman JD, Cepicka I, Yubuki N, Takishita K, Yabuki A, Leander BS, Inouye I, Inagaki Y, Roger AJ, Simpson AGB. A wide diversity of previously undetected relatives of diplomonads isolated from marine/saline habitats. 2010 **Environmental Microbiology** 12:2700-2710.
6. Yabuki A, Inagaki Y, Ishida K. *Palpitomonas bilix* gen. et sp. nov.: A novel deep-branching heterotroph possibly related to Archaeplastida or Hacrobia. 2010 **Protist** 210:523-538.
7. Mitsui H, Arisue N, Sakihama N, Inagaki Y, Horii T, Hasegawa M, Tanabe K, Hashimoto T. Phylogeny of Asian primate malaria parasites inferred from apicoplast genome-encoded genes with special emphasis on the positions of *Plasmodium vivax* and *P. fragile*. 2010 **Gene** 450:32-38.

##### (2) 学会発表(発表者は太字)

###### (A) 招待講演

1. 稲垣祐司. Residual nuclear genome of the green algal endosymbiont in the dinoflagellate *Lepidodinium chlorophorum*. 2010 年 12 月 9 日 第 33 回日本分子生物学会年会・第 83 回日本生化学会年会合同大会・ワークショップ 3W21-p 『細胞内共生オルガネラが駆動する生物進化と多様性』

###### (B) その他の学会発表

1. *Trans*-splicing in the intron-poor eukaryotic parasite *Giardia intestinalis*. (Poster) **Ryoma Kamikawa**, Yuji Inagaki, Masaharu Tokoro, Andrew J. Roger, Tetsuo Hashimoto. 12 月 7-8 日 第 26 回国際生物学賞記念シンポジウム (茨城・つくば・つくば国際会議場)
2. Molecular evidence for the residual nuclear genome of the green algal endosymbiont in the dinoflagellate *Lepidodinium chlorophorum*. (Poster) **Takuya Matsumoto**, Ryoma Kamikawa, Tetsuo Hashimoto, Yuji

- Inagaki. 12 月 7-8 日 第 26 回国際生物学賞記念シンポジウム (茨城・つくば・つくば国際会議場)
3. *Giardia intestinalis* ゲノム中の「分割」イントロン群 (Oral) 神川龍馬、稲垣祐司、所正治、Andrew J Roger、橋本哲男. 第 9 回分子寄生虫・マラリア研究フォーラム 10 月 7-9 日 (長崎・長崎・長崎大坂本キャンパス)
  4. Molecular evidence for the residual nuclear genome of the green algal endosymbiont in the dinoflagellate *Lepidodinium chlorophorum*. (Oral) **Takuya Matsumoto**, Ryoma Kamikawa, Yuji Inagaki. 8 月 29 日 -9 月 2 日 (Universitetet i Tromso, Tromso, Norway) ISE 2010 (XI<sup>th</sup> International Colloquium on Endocytobiology and Symbiosis)
  5. Evolutionary characteristics of the green-colored plastid in the dinoflagellate *Lepidodinium chlorophorum*. (Poster) **Yuji Inagaki**, Takuya Matsumoto, Masanobu Kawachi, Tetsuo Hashimoto. 8 月 29 日 -9 月 2 日 (Universitetet i Tromso, Tromso, Norway) ISE 2010 (XI<sup>th</sup> International Colloquium on Endocytobiology and Symbiosis)
  6. Spliceosome-mediated *trans*-splicing produces the complete mRNA for heat shock protein 90 in *Giardia intestinalis*. (Oral) **Ryoma Kamikawa**, Yuji Inagaki, Masaharu Tokoro, Andrew J Roger, Tetsuo Hashimoto. 7 月 2-7 日 (石川・金沢・金沢県立美術館) ISEP XVIII
  7. Mitochondrial genome of the katablepharid *Leucocryptos marina*. (Poster) **Yuki Nishimura**, Ryoma Kamikawa, Takuya Matsumoto, Yuji Inagaki, Tetsuo Hashimoto. 7 月 2-7 日 (石川・金沢・金沢県立美術館) ISEP XVIII (18<sup>th</sup> meeting of International Society for Evolutionary Protistology)
  8. Transcriptional difference between two nucleus-encoded plastid-targeted GAPDH genes in the dinoflagellate *Lepidodinium chlorophorum*. (Poster) **Yuki Yazaki**, Ryoma Kamikawa, Takuya Matsumoto, Yuji Inagaki, Tetsuo Hashimoto. 7 月 2-7 日 (石川・金沢・金沢県立美術館) ISEP XVIII
  9. A simulation study for assessing phylogenetic inference attracted by inclusion of sequences with compositional bias and extraordinary substitution rate. (Poster) **Sohta Ishikawa**, Yuji Inagaki, Akifumi S.Tanabe, Ryoma Kamikawa, Tetsuo Hashimoto. 7 月 2-7 日 (石川・金沢・金沢県立美術館) ISEP XVIII
  10. Green-colored plastids in the dinoflagellate genus *Lepidodinium* are of core chlorophyte origin. (Oral) **Takuya Matsumoto**, Fumihiko Shinozaki, Tomoko Chikuni, Akinori Yabuki, Kiyotaka Takishita, Masanobu Kawachi, Takeshi Nakayama, Isao Inouye, Tetsuo Hashimoto, Yuji Inagaki. 7 月 2-7 日 (石川・金沢・金沢県立美術館) ISEP XVIII
  11. *Tsukubamonas globosa* gen. et sp. nov.; a novel excavate flagellate possibly hold a key for the early evolution in "Discoba". (Poster) **Akinori Yabuki**, Takeshi Nakayama, Naoji Yubuki, Tetsuo Hashimoto, Ken-ichiro Ishida, Yuji Inagaki. 7 月 2-7 日 (石川・金沢・金沢県立美術館) ISEP XVIII
  12. Multigene phylogenies of diverse *Carpediemonas*-like organisms identify the closest relatives of 'amitochondriate' diplomonads and retortamonads. (Oral) **Kiyotaka Takishita**, Martin Kolisko, Hiroshi Komatsuzaki, Akinori Yabuki, Ivan Cepicka, P. Smejkalova, Jeffrey D. Silberman, Yuji Inagaki, Tetsuo

Hashimoto, Andrew J Roger, Alastair GB Simpson. 7 月 2-7 日 (石川・金沢・金沢県立美術館) ISEP XVIII

13. ストラメノパイル類における翻訳伸長因子遺伝子の進化 (Oral) **神川龍馬**、橋本哲男、稲垣祐司 3 月 19-22 日 (茨城・つくば・筑波大) 第 34 回 日本藻類学会
14. 配列組成の極端な変化によるモデル不整合が分子系統解析に与える影響について (Oral) 石川**奏太**、稲垣祐司、**神川龍馬**、**田辺晶史**、橋本哲男 3 月 19-22 日 (茨城・つくば・筑波大) 第 34 回 日本藻類学会
15. クロロフィル *a, b* を持つ緑色渦鞭毛藻類 *Lepidodinium chlorophorum* の葉緑体起源 (Oral) **松本拓也**、**瀧下清貴**、**篠崎文彦**、**千國友子**、**Marianne Aastebol Minge**、**Kamran Shalchian-Tabrizi**、**河地正伸**、**渡邊信**、**井上勲**、橋本哲男、稲垣祐司 3 月 19-22 日 (茨城・つくば・筑波大) 第 34 回 日本藻類学会

## V. 地球環境研究部門

### 1. メンバ

教授 田中博 (センター勤務)、木村富士男 (学外共同研究員 JAMSTEC)、  
鬼頭昭雄 (学外共同研究員 気象研究所)  
准教授 日下博幸 (センター勤務)、植田宏昭 (学内共同研究員)  
助教 若月泰孝 (学内共同研究員)

### 2. 概要

地球環境学部門における主な成果として、これまで地球シミュレータでしか走らないとされた全球雲解像モデル NICAM (G1=10) の 7km 解像度モデルが筑波大学の計算機システムで実行可能となり、2008 年 9 月を初期値とした 2 週間ランと 2009 年 1 月を初期値とした 2 週間ランの夏冬の事例の数値実験を行った。このデータを用いて北極振動、北極低気圧、温帯低気圧、ブロッキング、熱帯低気圧などの具体的な研究が開始された。特に成層圏突然昇温の予測実験を行い、成層圏重力波の研究を行った。南極成層圏には極成層圏雲が解析された。大気大循環の 3D スペクトルエネルギー解析を行い、新たな知見の研究成果が得られている。大気大循環研究と並んで領域気象モデル WRF を用いた都市気候シミュレーションが行われ、都市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研究論文 24 編、招待講演 3 件、学会発表等 53 件が行なわれた。

### 3. 研究成果

#### 【1】都市気候の将来予測

##### (1) 複数 GCM からの談スケーリング (日下)

IPCCA1bシナリオ下での地球温暖化予測データを用いて、2070 年代 8 月の日本の三大都市圏の詳細な気候予測計算を実施した。温暖化予測データには、3つの異なる GCM(日本の気象研究所のモデル、東京大学・国立環境研究所・海洋研究開発機構のモデル、オーストラリア連邦科学産業研究機構のモデル)による予測実験結果を用いた。その結果、東京・名古屋・大阪の 2070 年代の 8 月平均気温は観測史上最大の猛暑年となった 010 年 8 月と同程度以上になる可能性があることがわかった。

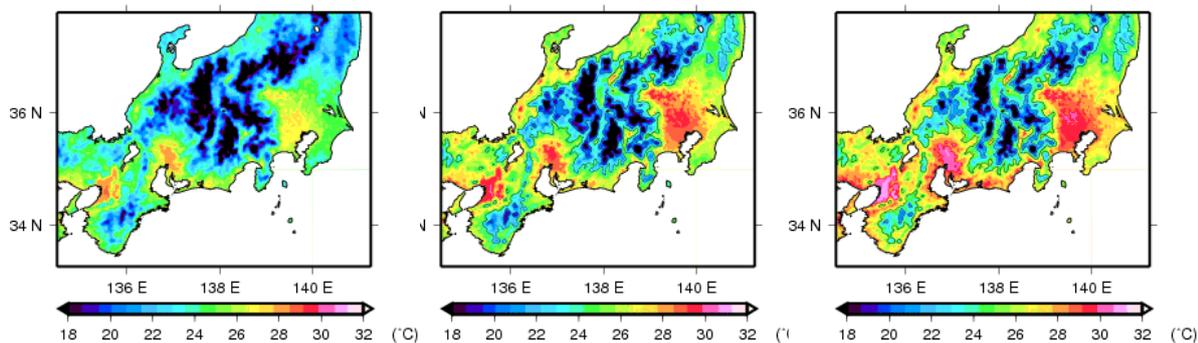


図 1 領域気候モデル WRF によって予測された 8 月平均気温。左図は 2010 年代の平均、中央図は 2010 年、右図は 2070 年代の平均。

**【2】 NICAM を用いた突然昇温の数値実験と成層圏重力波の解析 (田中、寺崎)**

NICAM を用いて 2009 年 1 月 15 日の気象庁 20km 解析値を初期値に成層圏突然常温(緑)の数値実験を行った。その結果、波数 2 タイプの突然昇温(赤)が再現されたが、気象庁 GSM による予測(青)と比べると昇温の程度が小さかった。ただし、極渦の西風減速という点では気象庁 GSM よりも NICAM の方が観測に近い結果となった。興味深い結果として、NICAM の成層圏には滑らかな波数 2 のプラネタリー波に非常に細かいスケールの重力波が重なっていることが分かった。静力学モデルの気象庁 GSM では、成層圏の重力波は重力波抵抗としてパラメタライズされてきたが、非静力モデルの NICAM においては重力波が顕わに出現する。これが事実とすれば、成層圏力学の新たな知見であり、重力波抵抗の具体的な評価が可能となる。

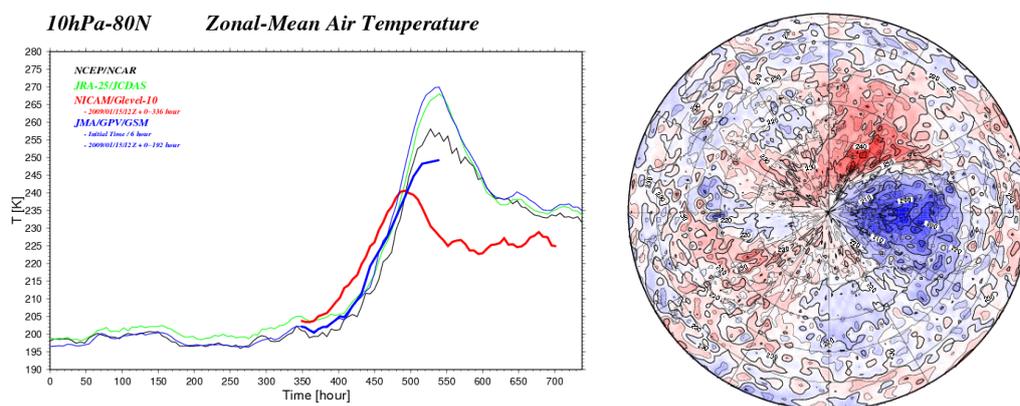


図 2 2009 年 1 月の成層圏突然昇温(緑)の NICAM による数値実験(赤)と気象庁 GSM による予測(青) (左)。昇温ピーク時の 10hPa レベルの温度場に見られる波数 2 タイプのプラネタリー波と、それに重なる細かいスケールの重力波(右)。

**【3】 3D ノーマルモードエネルギー解析 (田中、寺崎)**

大気大循環のエネルギーを3次元ノーマルモードエネルギー解析を、全球 7km格子 NICAM と 20km 格子の気象庁解析データに応用した。その結果、NICAM 大気の東西風と南北風については、東西波数空間の運動エネルギースペクトルが $-3$  乗則から $-5/3$  乗則にシフトするという Nastrom-Gage スペクトルとして知られる分布となる事を確認した。さらに、鉛直流の同スペクトルは白色スペクトルとなる事を新たに見出した。これはメソスケールから大気大循環に至るすべてのスケールの鉛直流の強度は一定であるという新たな事実の発見といえる。今後、雲の空間スペクトルの研究などに応用される。さらに、運動エネルギーをロスビー波と重力波に分離してスペクトルを解析した結果、ロスビー波は $-3$  乗則に従い、重力波は $-5/3$  乗則に従い、両者が 400 km 程度のスケールで交差することで、Nastrom-Gage スペクトルが説明出来る事を新たな知見として見出した。大気大循環のエネルギースペクトルに関する 2つの新たな新事実が本研究により明らかとなった。

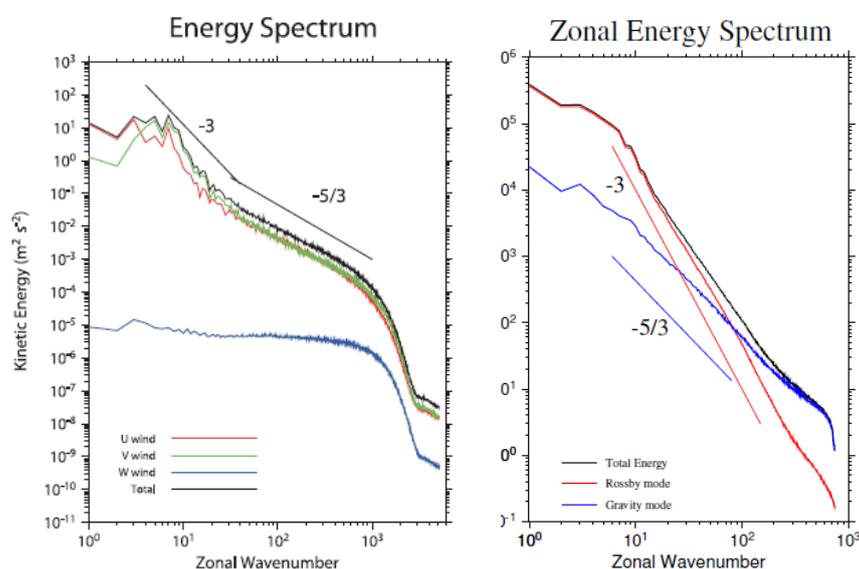


図3 NICAM 大気に見られる運動エネルギーの Nastrom-Gage スペクトルと鉛直流の白色スペクトル (左)。気象庁解析データにみられるロスビー波の $-3$  乗則と重力波の $-5/3$  乗則。Nastrom-Gage スペクトルは両者が 400km スケールでクロスすることで説明される(右)。

#### 【4】 気象研究所全球大気海洋大循環モデルを用いた地球環境変動研究 (植田宏昭)

地球温暖化をはじめとした気候変動リスクのより詳細な情報を提供するためには、将来および現在までに至る多様な条件下における気候システムの変動メカニズムの解明を進める必要がある。本研究では特に過去の気候、中でも約 300 万年前に存在した温暖な鮮新世中期における気候システムを、気象研究所全球大気海洋大循環モデルを用いて再現し、その特徴を調べた。当時の大気大循環は南北のハドレー循環、東西のウォーカー循環ともに弱体化しており、地上気温の上昇が顕著な中高緯度だけでなく、低緯度においても乾燥・湿潤の気候パターンが大きく変化していたことが示された。この結果は陸上の植生分布を示す当時の花粉記録とも一致する傾向を示した。

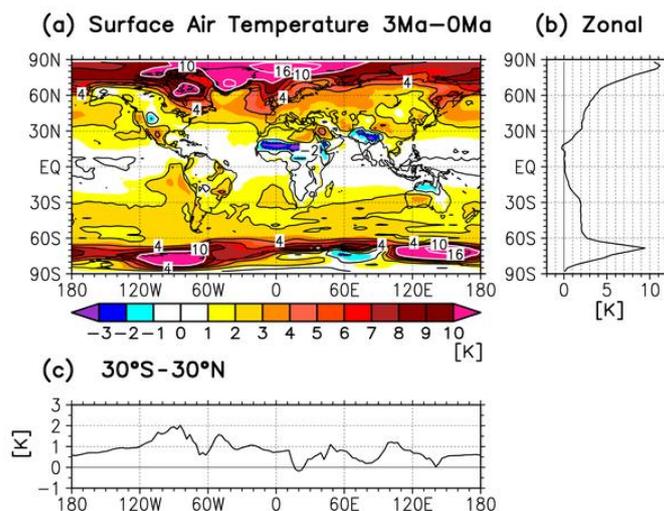


図4 鮮新世中期における年平均気温偏差の再現結果

## 4. 研究業績

### (1) 研究論文

1. The integrated WRF/urban modeling system: development, evaluation, and applications to urban environmental problems: Chen, F., Kusaka, H., Bornstein, R., Ching, J., Grimmond, C. S. B., Grossman-Clarke, S., Loridan, T., Manning, K. W., Martilli, A., Miao, S., Sailor, D., Salamanca, F. P., Taha, H., Tewari, M., Wang, X., Wyszogrodzki, A. A., and Zhang, C., *International Journal of Climatology*, 31(2), 479-492 (2010). (査読付)
2. 気候変動が首都圏の都市気候に及ぼす影響 - 冬季を対象として - : 原 政之, 日下 博幸, 木村 富士男, 若月 泰孝, ながれ (日本流体力学会誌), 29(5), 353-361 (2010). (査読付)
3. GPS 可降水量に着目した局地豪雨の事例解析 - 2000 年 7 月 4 日に東京で観測された事例 - : 日下 博幸, 羽入 拓郎, 縄田 恵子, 地理学評論, 83(5), 479-492 (2010). (査読付)
4. Reproducibility of regional climate in central Japan using the 4-km resolution WRF model: Kusaka, H., Takata, T., and Takane, Y., *SOLA*, 6, 113-116 (2010). (査読付)
5. Influence of differences in urban structure and electric power demand on atmospheric thermal environment in Osaka urban area: Ohashi, Y., Kuroyanagi, H., Kikegawa, Y., Oka, K., Shigeta, Y., Hirano, Y., Kusaka, H., and Chen, F., *Journal of Hydrosience and Hydraulic Engineering*, 28(1), 87-102 (2010). (査読付)
6. 東京で観測された局地豪雨の実態調査:2002 年 8 月 2 日および 2004 年 8 月 10 日の事例の比較解析: 日下 博幸, 羽入 拓郎, 縄田 恵子, 古橋 奈々, 横山 仁, ヒートアイランド学会論文集, 5, 1-10 (2010). (査読付)
7. Trade-offs and responsiveness of the single-layer urban canopy parameterization in WRF: an offline evaluation using the MOSCEM optimization algorithm and field observations: Loridan, T., Grimmond, C.S.B., Grossman-Clarke, S., Chen, F., Tewari, M., Manning, K., Martilli, A., Kusaka, H., and Best, M.,

- International Journal of Climatology.*, 136(1), 997-1019 (2010). (査読付)
8. Proposing the simplification of the multilayer urban canopy model: Intercomparison study of four models: Ikeda, R., and Kusaka, H., *Appl. Meteor. Climatol.*, 49, 902-919 (2010). (査読付)
  9. 入力データおよび地表面パラメータの変化に対する領域気象モデル WRF の感度実験 - 夏季晴天日の関東平野を対象として - : 秋本 祐子, 日下 博幸, *地理学評論*, 83(3), 324-340 (2010). (査読付)
  10. WRF-3DVAR を用いたリアルタイム GPS 可降水量の同化実験: 田中 創, 守屋 岳, 岩淵 哲也, 日下 博幸, *天気*, 57(4), 213-228 (2010). (査読付)
  11. Impact of coupling a microscale computational fluid dynamics model with a mesoscale model on urban scale contaminant transport and dispersion: Tewari, M., Kusaka, H., Chen, F., Coirier, W. J., Kim, S., Wyszogrodzki, A. A., and Warner, T. T., *Atmospheric Research.*, 96, 656-664 (2010). (査読付)
  12. Ohashi, M. and H. L. Tanaka, 2010: Data analysis of warming pattern in the Arctic. *SOLA*, 6A, 1-4.
  13. 田中博・朴泰祐・佐藤正樹, 他 4 名, 2010: 大気大循環モデル力学コアの変遷について、「ながれ」(*Journal of Japan Society of Fluid Mechanics*), 29, 27-32.
  14. 田中博, 2010: 偏西風の気象学、「Pilot」日本航空機操縦士協会、2010 No.2, 8-12.
  15. 田中博, 2010: 北極振動の特異固有解理論の検証と考察 一固有値ゼロのノーマルモードにエネルギーが溜まるわけ一、理論応用力学会、2010
  16. 田中博, 2010 北極振動と地球温暖化: 地球温暖化が示す不都合な真実 (上) . 「てんきすと」, 第 66 号, 2010 年 9 月, 1-3.
  17. 田中博, 2010: 北極振動と地球温暖化: 地球温暖化が示す不都合な真実 (下) . 「てんきすと」, 第 67 号, 2010 年 11 月, 2-4.
  18. Terasaki, K., H. L. Tanaka, and N. Zagar 2011: Energy spectra of Rossby and gravity waves. *SOLA*, 7, 45-48.
  19. Hirata, Y., Y. Shimo, H. L. Tanaka, and K. Aihara 2011: Chaotic properties of the Arctic Oscillation index. *SOLA*, 7, 33-36.
  20. 下悠子・田中博, 2010: 記録的な 2009/2010 年の寒波と北極振動の関係について、気象庁異常気象分析検討会資料.
  21. Seki, S., H. L. Tanaka, and F. Fujiwara 2011: Modification of the baroclinic instability associated with positive and negative Arctic Oscillation index: A theoretical proof of the positive feedback. *SOLA*, 7, 53-56.
  22. Mio Matsueda, Masayuki Kyouda, Zoltan Toth, H. L. Tanaka and Tadashi Tsuyuki, 2011. On the predictability of an atmospheric blocking occurred on 15th December 2005. *Mon. Wea. Rev.*, 139, 2455-2470.
  23. Ueda, H., H. Kuroki, M. Ohba, and Y. Kamae, 2011: Seasonally asymmetric transition of the Asian monsoon in response to ice age boundary conditions. *Clim. Dyn.*, in press, doi:10.1007/s00382-010-0975-z.

(査読付)

24. Kamae, Y., H. Ueda, and A. Kitoh, 2011: Hadley and Walker circulations in the mid-Pliocene warm period simulated by an atmospheric general circulation model. J. Meteor. Soc. Japan, in press, doi:10.2151/jmsj.2011-505. (査読付)

## (2)学会発表

### (A)招待講演

1. 田中博, 2010: 偏西風の気象学、日本航空機操縦士協会総会
2. 田中博, 2010 北極振動と地球温暖化：地球温暖化が示す不都合な真実. 日本気象予報士会総会
3. Tanaka, H.L. 2010: Arctic Oscillation or Ice-Albedo Feedback? A Discrepancy in the Warming Pattern of the IPCC Model Projection. Keynote Speech, Second International Symposium on the Arctic Research, Dec. 7-9, 2010, Hitotsubashi Memorial Hall, Tokyo, Japan.

### (B)その他の学会発表

4. Development of a sophisticated downscaling model using feedback parameterizations: Iizuka, S., A. Inagaki, A., Ihara, T., Kanda, M., Kusaka, H., Kondo, H., Tsugawa, M., and Yoshikane, T., 5th International symposium on wind effects on buildings and urban environment (ISWE5), Tokyo, 2011.3.7.
5. Development of Local Meteorological Model based on CFD Model: Ikeda, R., Kusaka, H., Iizuka, S., and Boku, T., 5th International symposium on wind effects on buildings and urban environment (ISWE5), Tokyo, 2011.3.7.
6. Formation Mechanisms of the Extreme High Surface Air Temperature of 40.9 deg.C Observed in the Tokyo Metropolitan Area: Takane, Y., and Kusaka, H., First International Workshop on Nonhydrostatic Numerical Models, Kyoto, 2010.9.29~30.
7. Determining urban effects on precipitation patterns utilizing ensemble climate experiment approach: Kusaka, H., Nawata, K., and Kimura, F., First International Workshop on Nonhydrostatic Numerical Models, Kyoto, 2010.10.1.
8. Sensitivity experiments in determining urban effects on precipitation patterns: Kusaka, H., Nawata K., and Kimura, F., 9th Symposium on the Urban Environment, Keystone, 2010.8.3.
9. Urban climate prediction in 2070's by the WRF model with 3-km horizontal resolution: The three major metropolitan areas in Japan: Kusaka, H., Takata, T., Adachi, S. A., Hara, M., Chen, F., Tewari, M., Dudhia, J., and Kimura, F., 9th Symposium on the Urban Environment, Keystone, 2010.8.4.
10. Comparison between impacts of global climate change and urbanization on local climate in Tokyo metropolitan area, Japan : Adachi, S. A., Kimura, F., Kusaka, H., Ueda, H., and Inoue, T., 9th Symposium on the Urban Environment, Keystone, 2010.8.2.
11. Projection of change in urban heat island intensity of Tokyo metropolitan area during winter: Hara, M.,

- Kusaka, H., Kimura, F., and Wakazuki, Y., 9th Symposium on the Urban Environment, Keystone, 2010.8.2.
12. Interactions between city and mesoscale sea-breeze circulations in the greater houston area: A study with the coupled WRF-urban model: Chen, F., Miao, S. G., Tewari, M., and Kusaka, H., 9th Symposium on the Urban Environment, Keystone, 2010.8.5.
  13. The single-layer urban canopy model in WRF V3.2: recent amendments and offline evaluation using the MOSCEM optimization algorithm with field observations: Loridan, T., Grimmond, S., Grossman-Clarke, S., Chen, F., Tewari, M., Manning, K. W., Martilli, A., Kusaka, H., and Best, M., 9th Symposium on the Urban Environment, Keystone, 2010.8.5.
  14. Projection of change in urban heat island intensity of Tokyo metropolitan area during winter : Hara, M., Kusaka, H., Kimura, F., and Wakazuki, Y., International Workshop on Urban Climate Projection for better Adaptation Plan, Tsukuba, 2010.6.2～3.
  15. Comparison of Impacts between Global Climate Change and Urbanization on Future Urban Climate in Tokyo Metropolitan Area: Adachi, S. A., Kimura, F., Kusaka, H., Inoue, T., and Ueda, H., International Workshop on Urban Climate Projection for better Adaptation Plan, Tsukuba, 2010.6.2.
  16. Formation mechanisms of the extremely high surface air temperature of 40.9°C observed in the Tokyo metropolitan area: Takane, Y., and Kusaka, H., International Workshop on Urban Climate Projection for better Adaptation Plan, Tsukuba, 2010.6.2～3.
  17. Determining urban effects on precipitation patterns utilizing ensemble climate experiment approach: Kusaka, H., Nawata, K., and Kimura, F., International Workshop on Urban Climate Projection for better Adaptation Plan, Tsukuba, 2010.6.2～3.
  18. Sensitivity of WRF model to input-datasets and surface parameters for heat island simulation: Akimoto, Y., and Kusaka, H., International Workshop on Urban Climate Projection for better Adaptation Plan, Tsukuba, 2010.6.2～3.
  19. Developing multi-layer and single-layer urban canopy models and urban climate simulation by WRF with UCM: Kusaka, H., Ikeda, R., Takata, T., Hara, M., Adachi, S. A., Chen, F., Tewari, M., and Dudhia, J., International Workshop on Urban Climate Projection for better Adaptation Plan, Tsukuba, 2010.6.3.
  20. 夏季日中における小規模緑地が周囲街区の気温に与える影響：岡田 牧, 木村 富士男, 日下 博幸, 日本農業気象学会 2011 年度全国大会, 鹿児島, 2011.3.17.
  21. 二つ玉低気圧に対する日本列島の影響：日下 博幸, 北畑 明華, 日本地理学会 2011 年春季学術大会, 東京, 2011.3.29.
  22. 京阪奈地域における夏季高温の実態調査と形成要因の分析：地上気象観測と領域気象モデル WRF を用いた数値シミュレーション：高根 雄也, 大橋 唯太, 日下 博幸, 重田 祥範, 亀卦川 幸浩, 日本地理学会 2011 年春季学術大会, 東京, 2011.3.29.
  23. 一般曲線座標系による並列 LES モデルの開発：池田 亮作, 日下 博幸, 飯塚 悟, 朴 泰祐, 日本

- 地理学会 2011 年春季学術大会, 東京, 2011.3.29.
24. 2010 年 1・8 月におけるつくば市の気温分布の実態: 日下 博幸, 小松 美智, 中村 美紀, 酒井 敏, 日本地理学会 2011 年春季学術大会, 東京, 2011.3.29~30.
  25. 公園規模と WBGT との関係に関する観測研究: 高木 美彩, 日下 博幸, 田中 博, 中村 美紀, 酒井 敏, 日本地理学会 2011 年春季学術大会, 東京, 2011.3.30.
  26. 多治見市における夏季の気温分布の実態調査 (その 1): 阿部 紫織, 日下 博幸, 高木 美彩, 岡田 牧, 高根 雄也, 富士 友紀乃, 永井 徹, 日本地理学会 2011 年春季学術大会, 東京, 2011.3.29.
  27. 二つ玉低気圧通過に伴う降雨・降雪の気候学的研究: 平田 航, 日下 博幸, 日本地理学会 2011 年春季学術大会, 東京, 2011.3.29.
  28. 三大都市圏を対象とした夏季気候の再現計算と将来予測 (その 2) GCM アンサンブルデータを用いた疑似温暖化実験: 日下 博幸, 足立 幸穂, 高田 智行, 高根 雄也, 原 政之, 木村 富士男, 日本気象学会 2010 年度秋季大会, 京都, 2010.10.28.
  29. WRF を用いた首都圏の降水シミュレーション - 都市の降水へのインパクト調査 - : 縄田 恵子, 日下 博幸, 日本気象学会 2010 年度秋季大会, 京都, 2010.10.27.
  30. 都市が降水に及ぼす影響調査 - アンサンブル感度実験 - : 日下 博幸, 縄田 恵子, 日本地理学会 2010 年秋季学術大会, 愛知, 2010.10.2.
  31. 日本の首都圏で日最高気温 40.9°C を記録した極端な猛暑の形成メカニズム: 高根 雄也, 日下 博幸, 日本ヒートアイランド学会第 5 回全国大会, 兵庫, 2010.7.17.
  32. 首都圏における都市と降水の関係 - 領域気候モデル WRF を用いたアンサンブル気候実験 - : 日下 博幸, 縄田 恵子, 日本ヒートアイランド学会第 5 回全国大会, 兵庫, 2010.7.17.
  33. 日本の三大都市における過去 20 年間の猛暑の実態調査: 宮 由可子, 日下 博幸, 日本気象学会 2010 年度春季大会, 東京, 2010.5.24.
  34. 関東平野内陸域における夏季高温現象の数値実験: 高根 雄也, 日下 博幸, 日本気象学会 2010 年度春季大会, 東京, 2010.5.25.
  35. 関東平野内陸域における夏季高温現象の統計解析: 高根 雄也, 日下 博幸, 日本気象学会 2010 年度春季大会, 東京, 2010.5.24.
  36. 2070 年代における首都圏夏季の将来都市気候予測: 足立 幸穂, 木村 富士男, 日下 博幸, 植田 宏昭, 井上 知栄, 日本気象学会 2010 年度春季大会, 東京, 2010.5.26.
  37. 複雑地形・都市を対象とした並列 LES モデルの開発: 池田 亮作, 日下 博幸, 飯塚 悟, 朴 泰祐, 日本気象学会 2010 年度春季大会, 東京, 2010.5.26.
  38. WRF を用いた首都圏の降水シミュレーション - 都市の降水へのインパクト調査 - : 縄田 恵子, 日下 博幸, 木村 富士男, 日本気象学会 2010 年度春季大会, 東京, 2010.5.25.
  39. 三大都市圏を対象とした夏季気候の再現計算と将来予測: 日下 博幸, 高田 智行, 原 政之, 足立 幸穂, 日本気象学会 2010 年度春季大会, 東京, 2010.5.26.

40. 冬季低気圧通過時に見られる冷氣層の成因の解明：川村 拓也，日下 博幸，日本気象学会 2010 年度春季大会，東京，2010.5.24.
41. 真夏日の午後に東京 23 区で観測された短時間強雨の実態調査：古橋 奈々，日下 博幸，日本気象学会 2010 年度春季大会，東京，2010.5.25.
42. 二つ玉低気圧（2004 年 1 月 18 日の事例）の形成に対する日本列島の影響：北畑 明華，日下 博幸，日本気象学会 2010 年度春季大会，東京，2010.5.25.
43. 二つ玉低気圧の気候学的調査：北畑 明華，日下 博幸，日本気象学会 2010 年度春季大会，東京，2010.5.25.
44. 日本の霧・濃霧の出現特性：秋本 祐子，日下 博幸，日本気象学会 2010 年度春季大会，東京，2010.5.23.
45. 会津盆地で発生する霧の予測手法の開発：石川 真奈美，日下 博幸，日本気象学会 2010 年度春季大会，東京，2010.5.23.
46. つくば市における夏季の気温分布の特徴 - 2009 年 8 月の観測結果 -：小松 美智，日下 博幸，高根 雄也，重田 祥範，大橋 唯太，日本気象学会 2010 年度春季大会，東京，2010.5.26.
47. S5-3 都市モデルグループ 2010 年度の成果報告：日下 博幸，環境省 S5 プロジェクトアドバイザー会合，東京，2011.3.7.
48. S8-1(2) 温暖化ダウンスケーラの開発とその実用化：日下 博幸，環境省 S8 プロジェクトアドバイザー会合，東京，2011.2.23.
49. 釜江陽一，植田宏昭，鬼頭昭雄：鮮新世中期における熱帯大気循環の弱化. 日本気象学会春季大会，東京，2010.5.24.
50. 釜江陽一，植田宏昭，鬼頭昭雄：鮮新世中期における熱帯大気循環の弱化. 日本地球惑星科学連合 2010 年大会，千葉，2010.5.27.
51. Kamae, Y., H. Ueda, A. Kitoh: Weakening of tropical atmospheric circulation in the Middle Pliocene. 2010 PAGES Regional Workshop in Japan, Nagoya, 2010.6.5.
52. Kamae, Y., H. Ueda, A. Kitoh: Wetter subtropics and Hadley/Walker circulation in mid-Pliocene simulated by an atmospheric general circulation model. PMIP3 Kyoto workshop, Kyoto, 2010.12.8.
53. 釜江陽一，植田宏昭，鬼頭昭雄. 大気大循環モデルを用いた古気候再現と地質記録の比較 -鮮新世中期を例に-. 中部山岳 3 大学連携年次研究報告会. つくば，2010.12.17.
54. 釜江陽一，植田宏昭，鬼頭昭雄：温暖な鮮新世中期における北極域の気候-氷床-植生相互作用系. 日本地球惑星科学連合 2011 年大会，千葉，2011.5.25.
55. Kamae, Y., H. Ueda, and A. Kitoh: Preliminary results of PlioMIP experiments conducted by MRI and Univ. of Tsukuba group. PlioMIP Workshop, Reston, Virginia, USA, 2011.8.2.
56. Kamae, Y., H. Ueda, and A. Kitoh: Wetter climate and biomes in subtropics during mid-Pliocene warm period simulated by AGCM and BIMOE4: comparison with PRISM3 vegetation reconstruction. PlioMIP Workshop, Reston, Virginia, USA, 2011.8.3.

## 5. 連携・国際活動・社会貢献、その他

センター内連携： LES-GPU グループ発足

産学官連携： 岐阜県多治見市と連携協定

国際活動： 米国大気研究センター訪問

アラスカ大学との大学間協定

北極環境研究コンソーシアム

## VI. 高性能計算システム研究部門

### 1. メンバ

教授 佐藤 三久, 朴 泰祐, 児玉 祐悦  
准教授 建部 修見, 高橋 大介, 埴 敏博  
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。

### 3. 研究成果

- 戦略的国際科学技術協力推進事業(日仏共同研究)「ポストペタスケールコンピューティングのためのフレームワークとプログラミング」を開始(佐藤)

#### 【省電力／高性能／ディペンダブル並列システムに関する研究】

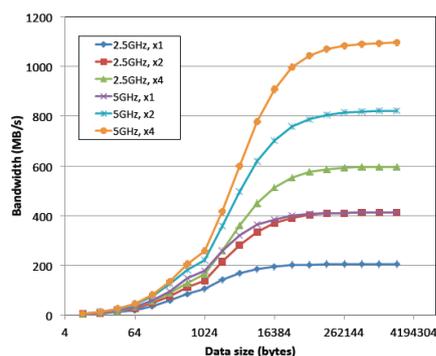
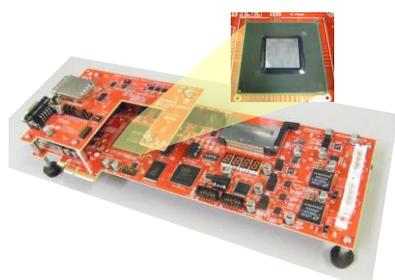
JST-CREST 研究領域「実用化を目指した組込みシステム用ディペンダブル・オペレーティングシステム」における研究課題「省電力高信頼組込み並列プラットフォーム」として、以下の研究を行った。

#### (1) クラウド技術を用いた高信頼並列ソフトウェアのテスト環境 D-Cloud の開発 (佐藤, 埴)

クラウドコンピューティングシステムを用いての計算資源の管理をベースとして、テストシステムの構築、フォルトインジェクションによるハードウェア故障エミュレーション、様々なテストケース・シナリオの自動化機能を提供するクラウドコンピューティングシステム D-Cloud のプロトタイプを開発し、デモンストレーションシステムを通じてその有効性を示した。D-Cloud を用いることにより短期間で効率的なプログラムテストが可能となった。これに関連し、SpecC によるハードウェアモデルと仮想マシンを統合したフォルトインジェクションツール FaultVM-SpecC を開発し、D-Cloud 環境への対応を行った。

#### (2) 高性能・省電力・耐故障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社との共同研究により、PCI-Express gen.2 テクノロジーに基づく並列システム向け相互結合網リンク PEARL の開発を行った。これを実現する通信スイッチチップのプロトタイプである PEACH チップの実装と実際に PC サーバ等に適用可能な PCI-Express 仕様のテストボードの開発と量産を行った。これにより、過去 4 年間に渡り研究開発を行ってきた PEACH チップに基づく PEARL ネットワークの基本通信部分が完成した。



完成したテストボード（PEACH チップ搭載）と基本通信性能評価

### (3) 不均質な Ethernet トランクによる高性能・耐故障ネットワーク（朴，埴）

Gigabit Ethernet を複数本束ねることにより高性能・耐故障性を持つ汎用仮想ネットワークを構築する技術について、特にノード間接続のトランク本数が不均一な場合におけるトラフィックの偏りを自動的に検出し、常に最適なトラフィックバランスを保つフィードバック機能を持つネットワークシステムを開発した。従来のネットワークは均質な構造を想定していたが、コストパフォーマンスの観点からクライアントノードは少数リンクで、サーバノードは多数リンクで構築するのが自然である。このような状況ではトラフィックに空間的・時間的なばらつきが生じるが、本システムはこれを動的に検出し最適化し、常にバランスの取れた性能を実現する。

#### 【次世代並列処理言語 XcalableMP の研究開発】（佐藤，朴）

E-Science プロジェクト「並列プログラミング言語に関する研究開発」において、分散メモリ構成を基本とする大規模並列処理システムにおける並列 HPC アプリケーションのため、並列プログラミング言語 XcalableMP (XMP) の開発を行った。言語仕様の基本部分の完成と、PC クラスタを対象としたプロトタイプ実装を行った。XMP を用いた各種アプリケーションカーネルのコードについて性能及びスケーラビリティを評価し、現在の言語仕様の下で典型的な大規模科学技術コードの性能可搬性を持つ記述が可能であることを確認した。C 言語版の XMP コンパイラ 0.5 をリリースし、国際会議 SC10 における HPC Challenge Class2 において Honorable Mention を受賞した。

#### 【仮想マシン環境における省電力化技術の研究とデータセンター電力ベンチマーク】（佐藤）

NEDO グリーン IT「エネルギー利用最適化データセンタ基盤技術の研究開発／データセンタのモデル設計と総合評価」において、データセンター電力ベンチマークの検討を行うとともに、現在、データセンターの運用で注目されている仮想マシン環境において、省電力化を行うための研究を進めた。

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

## (1) 大規模環境における広域ファイルシステムの評価 (建部)

オープンソースで研究開発を進めている Gfarm ファイルシステムの大規模広域環境における性能評価を行った。全国主要大学機関を結ぶネットワーク上での実証実験を行い、その有効性を示した。また、Gfarm ファイルシステム上で自動ファイル複製政策、更新型複製間一貫性制御機能を実現した。これにより、広域分散環境における一層の性能向上と信頼性の向上が実現される。また、ファイルデータのアクセス及び維持に関する信頼性向上を図り、システムの実用性を高めた。

## (2) JLDG におけるグループ内広域ファイル共有の実現 (建部, 佐藤)

素粒子物理研究グループとの共同研究により、国内の素粒子物理学研究者における大規模データ共有基盤 JLDG の構築、運用を行っている。前年度より開始された KEK, 金沢大, 京大, 阪大, 広島大の各拠点との共同運用の下、ファイル共有の実運用を開始した。また、今後より大規模な広域分散環境における運用を見据え、特に HPCI におけるファイル共有のプロトタイプとしての検討を行った。

## 【高性能並列数値計算に関する研究】

## (1) 並列高速フーリエ変換 (FFT) の自動チューニング手法に関する研究 (高橋)

科学技術計算で広く用いられている並列 FFT の性能を改善するために、自動チューニング手法の研究を行った。並列三次元 FFT において、二次元分割により通信時間を削減すると共に、演算と通信をオーバーラップさせることで、従来の実装に比べてさらに性能を改善した。また、理化学研究所計算科学研究機構で運用開始予定の「京」コンピュータでの実用に向けた FFT アルゴリズムのチューニングを開始した。他方、FFT 性能に重要な影響を与える並列全対全通信に着目し、二段階処理による全対全通信の開発と自動チューニングを導入し、MPI コミュニケータプロセス数の自動調整による高速化を達成した。

## (3) Block Krylov 部分空間反復法に関する研究 (多田野)

複数本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式を高速・高精度で解くための Block Krylov 部分空間反復法の研究を行った。これまで開発した Block BiCGGR 法は高精度近似解が生成できる一方で、右辺ベクトル数が多い場合は残差が発散することがあった。同法よりも高い収束性を持ち、かつ高精度近似解を生成する新たな方法を開発し、数値実験を通して解法の頑健性を示した。日本応用数学会 2010 年度年会においてこの解法を発表し、同学会第 7 回若手優秀講演賞を受賞した。

## 4. 研究業績

### (1) 研究論文

1. D. Takahashi: Parallel implementation of multiple-precision arithmetic and 2,576,980,370,000 decimal digits of  $\pi$  calculation, *Parallel Computing*, Vol.36, No.8, pp.439-448, 2010.
2. Y. Sato, D. Takahashi and R. Grimbergen: A Shogi Program Based on Monte-Carlo Tree Search, *ICGA Journal*, Vol.33, No.2, pp.80-92, 2010.
3. 佐藤佳州, 高橋大介: 探索結果を利用した実現確立探索, *情報処理学会論文誌*, Vol.51, No.11, pp.2021-2030, 2010.
4. J. Iwata, D. Takahashi, A. Oshiyama, T. Boku, K. Shiraishi, S. Okada and K. Yabana: A massively-parallel electronic-structure calculations based on real-space density functional theory, *Journal of Computational Physics*, Vol. 229, No. 6, pp. 2339-2363, 2010.
5. I. Yamazaki, H. Tadano, T. Sakurai, and K. Teranishi. A Convergence Improvement of the BSAIC Preconditioner by Deflation. *JSIAM Letters*, Vol. 3, pp. 5-8, 2011.
6. Y. Futamura, H. Tadano, and T. Sakurai. Parallel Stochastic Estimation Method of Eigenvalue Distribution. *JSIAM Letters*, Vol. 2, pp. 127-130, 2010.
7. H. Ohno, Y. Kuramashi, T. Sakurai, and H. Tadano. A Quadrature-Based Eigensolver with a Krylov Subspace Method for Shifted Linear Systems for Hermitian Eigenproblems in Lattice QCD. *JSIAM Letters*, Vol. 2, pp. 115-118, 2010.
8. J. Asakura, T. Sakurai, H. Tadano, T. Ikegami, and K. Kimura. A Numerical Method for Polynomial Eigenvalue Problems Using Contour Integral. *Japan J. Indust. Appl. Math.*, Vol. 27, Iss. 1, pp. 73-90, 2010.
9. I. Yamazaki, M. Okada, H. Tadano, T. Sakurai, and K. Teranishi. A Block Sparse Approximate Inverse with Cutoff Preconditioner for Semi-Sparse Linear Systems Derived from Molecular Orbital Calculations. *JSIAM Letters*, Vol. 2, pp. 41-44, 2010.
10. H. Umeda, Y. Inadomi, Y. Watanabe, T. Yagi, T. Ishimoto, T. Ikegami, H. Tadano, T. Sakurai, and U. Nagashima. Parallel Fock Matrix Construction with Distributed Shared Memory Model for the FMO-MO Method. *J. Comput. Chem.*, Vol. 31, Iss. 13, pp. 2381-2388, 2010.
11. H. Tadano, Y. Kuramashi, and T. Sakurai. Application of Preconditioned Block BiCGGR to the Wilson-Dirac Equation with Multiple Right-Hand Sides in Lattice QCD. *Comput. Phys. Comm.*, Vol. 181, pp. 883-886, 2010.
12. 米元大我, 埴敏博, 三浦信一, 朴泰祐, 佐藤三久, "トラフィック量に適應する非対称マルチリンク Ethernet トランッキング", *情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム*, Vol.3, No.1, pp.25-37, 2010.
13. 鈴木克典, 建部修見, "PC クラスタ間ファイル複製スケジューリング", *論文誌 コンピューティングシステム (ACS)*, *情報処理学会*, Vol.3, No.3, pp.113-125, 2010.

14. O. Tatebe, K. Hiraga, N. Soda, "Gfarm Grid File System", New Generation Computing, Ohmsha, Ltd. and Springer, Vol.28, No.3, pp.257-275, 2010.
15. V.-T. Tran, G. Antoniu, B. Nicolae, L. Bougé and O. Tatebe, "Towards a Grid File System Based on a Large-Scale BLOB Management Service", Grids, P2P and Services Computing, Springer, pp.7-19, 2010.

## (2) 学会発表

### (A) 招待講演

1. M. Sato: Trends in Post-petascale computing -- from Japanese NGS project "The K computer" to Exascale computing, The 13th IEEE International Conference on Computational Science and Engineering (CSE-2010), Hong-Kong, 2010.

### (B) その他の学会発表

1. D. Mukunoki and D. Takahashi: Implementation and Evaluation of Quadruple Precision BLAS Functions on GPU, Proc. Workshop on State of the Art in Scientific and Parallel Computing (PARA2010), LNCS, Springer-Verlag, 2010.
2. 椋木大地, 高橋大介: GPU による 4 倍・8 倍精度 BLAS の実装と評価, 2010 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム HPCS2011 論文週, pp.148-156, 2010.
3. T. Sakurai, H. Tadano, T. Ikegami. A Hierarchical Parallel Eigenvalue Solver: Parallelism on Top of Multicore Linear Solvers. 6th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications (PMAA'10), Switzerland, Jun. 2010.
4. Y. Futamura, H. Tadano, T. Sakurai. Parallel Stochastic Estimation Method for Matrix Eigenvalue Distribution. 6th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications (PMAA'10), Switzerland, Jun. 2010.
5. S. Otani, H. Kondo, I. Nonomura, A. Ikeya, M. Uemura, Y. Hayakawa, T. Oshita, S. Kaneko, K. Asahina, K. Arimoto, S. Miura, T. Hanawa, T. Boku, M. Sato, "An 80Gb/s Dependable Communication SoC with PCI Express I/F and 8 CPUs", Proc. of ISSCC2011, San Francisco, CD-ROM, 2011.
6. T. Hanawa, T. Boku, S. Miura, M. Sato, K. Arimoto, "PEARL: Power-aware, Dependable, and High-Performance Communication Link Using PCI Express", Proc. of IEEE/ACM International Conference on Green Computing and Communitations (GreenCom2010), pp. 284-291, Hangzhou, 2010.
7. T. Hanawa, T. Boku, S. Miura, M. Sato, and K. Arimoto, "Power-aware, Dependable, and High-Performance Communication Link Using PCI Express: PEARL," Proc. of IEEE International Conference on Cluster Computing (Cluster2010), poster, 4 pages, Creta Island, Sep. 2010.
8. M. Nakao, J. Lee, T. Boku, M. Sato, "XcalableMP Implementation and Performance of NAS Parallel Benchmarks", Proc. of PGAS10, New York, 2010.
9. J. Lee, M. Nakao, M. Sato. SC10 HPC Challenge Submission for XcalableMP (selected as a finalist of

- HPCC Class2), SC10, New Orleans, Louisiana, USA, Nov., 2010.
10. H. Kimura, T. Imada and M. Sato: Runtime Energy Adaptation with Low-Impact Instrumented Code in a Power-scalable Cluster System 10th IEEE/ACM International Symposium on Cluster, Cloud and Grid Computing (CCGRID2010), pp. 378-387, 2010
  11. T. Hanawa, T. Banzai, H. Koizumi, R. Kanbayashi, T. Imada, and M. Sato, "Large-Scale Software Testing Environment Using Cloud Computing Technology for Dependable Parallel and Distributed Systems," the 2nd International Workshop on Software Testing in the Cloud (STITC2010), co-located with the 3rd IEEE International Conference on Software Testing, Verification, and Validation (ICST 2010), pp. 428-433, Apr. 2010.
  12. T. Banzai, H. Koizumi, R. Kanbayashi, T. Imada, T. Hanawa, and M. Sato, "D-Cloud: Design of a Software Testing Environment for Reliable Distributed Systems Using Cloud Computing Technology", the 2nd International Symposium on Cloud Computing (Cloud 2010) in conjunction with the 10th IEEE/ACM International Conference on Cluster, Cloud and Grid Computing (CCGrid 2010), pp. 631-636, May 2010.
  13. T. Hanawa, H. Koizumi, T. Banzai, M. Sato, and S. Miura, "Customizing Virtual Machine with Fault Injector by Integrating with SpecC Device Model for a software testing environment D-Cloud," the 16th IEEE Pacific Rim International Symposium on Dependable Computing (PRDC'10), pp. 47-54, Dec. 2010.
  14. T. Hanawa, T. Boku, S. Miura, M. Sato and K. Arimoto, "PEARL: Power-aware, Dependable, and High-Performance Communication Link Using PCI Express", IEEE/ACM International Conference on Green Computing and Communications (GreenCom2010), pp. 284-291, Dec. 2010.
  15. S. Otani, H. Kondo, I. Nonomura, A. Ikeya, M. Uemura, K. Asahina, K. Arimoto, S. Miura, T. Hanawa, T. Boku, M. Sato, "An 80Gb/s Dependable multicore Communication SoC with PCI Express I/F and Intelligent Interrupt Controller," IEEE Symposium on Low-Power and High-Speed Chips (COOL Chips XIV), 3 pages (regular), CD-ROM, 2011.
  16. T. Amagasa, N. Ishii, T. Yoshie, O. Tatebe, M. Sato, H. Kitagawa: A Faceted-Navigation System for QCDml Ensemble XML Data. 3PGCIC 2010: pp.132-139, 2010.
  17. T. Hanawa, T. Boku, S. Miura, M. Sato and K. Arimoto, "Power-aware, Dependable, and High-Performance Communication Link Using PCI Express: PEARL," IEEE International Conference on Cluster Computing (Cluster2010), poster, 4 pages, Sep. 2010.
  18. Adnan and M. Sato: Flexible Fine Grain Threads Management By StackThreads/Mp Library for OpenMP Task Implementation, International Workshop on OpenMP2010 (IWOMP2010, poster session), 2010.
  19. 鈴木克典, 建部修見, 「クラスタ間並列複製作成のためのファイル分割を許さないスケジューリング」, ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム HPCS2011 論文集, 情報処理学会, pp.10-19, 2011.
  20. M. Tanaka, O. Tatebe, "Pwrake: A parallel and distributed flexible workflow management tool for wide-area data intensive computing", Proc. of ACM International Symposium on High Performance Distributed

Computing (HPDC), pp.356-359, 2010.

21. 田中昌宏, 建部修見, “グラフ分割による広域分散並列ワークフローの効率的な実行”, 先進的計算基盤システムシンポジウム SACSIS 2010 論文集, 情報処理学会, 電子情報通信学会, pp.63-70, 2010.
22. 鈴木克典, 建部修見, “PC クラスタ間ファイル複製スケジューリング”, 先進的計算基盤システムシンポジウム SACSIS 2010 論文集, 情報処理学会, 電子情報通信学会, pp.71-78, 2010.

## 5. 連携・国際活動・社会貢献、その他

1. 戦略的国際科学技術協力推進事業 (日仏共同研究) 「ポストペタスケールコンピューティングのためのフレームワークとプログラミング」を開始 (佐藤)
2. 国際会議 International Conference on Supercomputing 2010 (ICS2010), Tsukuba, Jun. 2010 を開催, Conference General Chair (朴)
3. 国際会議 International Workshop on OpenMP 2010 (IWOMP2010), Tsukuba, Jun. 2010 を開催, Workshop General Chair (佐藤)



## VII. 計算情報学研究部門

### VII-1. データ基盤分野

#### 1. メンバ

教授 北川 博之

准教授 天笠 俊之

講師 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データ基盤分野は、データ工学関連分野の研究開発を担当している。具体的には、異種データベースや多様な情報源を統合的に扱うための情報統合基盤技術、データ中に埋もれた知識や規則を発見するためのデータマイニング・知識発見技術、インターネット環境において様々なデータを統一的に扱うための XML 関連技術、プライバシー技術等の基盤技術の研究を継続して行った。また、センター内の地球環境研究部門や素粒子物理研究部門や産業技術総合研究所と連携して、計算科学の各分野における応用的な研究を推進した。

また、本分野のメンバが中心となって、データベース分野の主要な国際会議の一つである、The 15th International Conference on Database Systems for Advanced Applications (DASFAA 2010)を本学において開催し、国際的なデータ工学研究の振興に貢献した。[C1, C2]

#### 3. 研究成果

2010 年度の主要な研究成果について説明する。

##### 【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, 科研費若手研究 (B) )

分散した異種情報源を統合的に扱うための基盤技術・システム・応用の研究開発を行った。特に、従来型のデータベースや Web 等のみではなく、センサ、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対象とすることができるストリーム処理基盤システムや P2P におけるデータ処理技術を中心に研究開発を行った。[I1, E1]

##### (1) 高信頼化ストリーム処理 (北川, 川島) [J1, C4, P11, A4]

近年、センサデータなどのストリームデータに対する問合せ要求が増大し、それらを実現するストリーム処理システムが研究開発されている。また、地理的に離れた情報源の統合や負荷分散を実現するために、ストリーム処理システムを分散配置した上で協調動作させる分散ストリーム処理環境が注目されている。そのような分散環境では、中継ノードが停止することでシステム全体が停止してしまうという問題がある。この問題に対して、分散環境において高信頼化を実現す

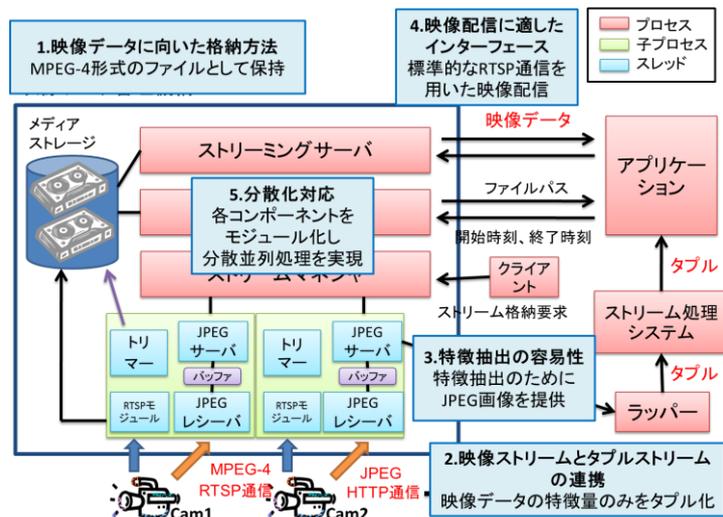
る Semi-Active Standby 方式を提案した。これは、各分散ノード間の通信にバッチ処理を導入することで、既存手法である Active Standby 方式、Upstream Backup 方式を一般化し、リカバリ時間とバンド幅オーバーヘッドを適用環境に合わせて調節することを可能とする。さらに、Semi-Active Standby 方式におけるパラメタ調整を自動化する方式についても検討を行った。本研究では、提案手法の評価実験を行い、本方式の動作特性を検証した。

**(2) ストリームデータの永続化手法 (川島, 北川) [P2, P7]**

本研究では各種デバイスから自律的、かつ継続的に発信されるストリームデータを永続化する手法を検討した。永続化とは、停止故障が生じてデータも失わないデバイスである永続的デバイスへデータを書き込むことによって、ストリームデータを永続的に保存する技術である。高頻度で配信されるストリームデータを永続化するには、ディスクへの書き込み処理がボトルネックになる。この問題を解決するための永続化手法を検討した。第一の提案は、問合せ処理中に出現する複数の選択演算子を併合することである。これにより永続化の対象となるデータ量を削減することが可能になる。第二の提案は、問合せ処理木の途中で、ストリームデータを中間領域と呼ばれるファイルへ一時的にシーケンシャルに書き込む事である。処理木とは、問合せの代数的表現であり、ストリーム処理システム内部でデータ処理を記述するために使用される構造である。この提案によりランダムアクセスを無くし、書き込み性能を向上させる。ただし中間領域のデータはユーザからアクセス不能である為、中間領域のデータをユーザからアクセス可能にするため、それらを遅延して読み出し、データ領域へ書き込むことが必要になる。第三の提案は、中間領域からの読み出しが書き込みに干渉しないように、データ領域への書き込み処理を制御することである。提案手法によりストリームデータの永続化が効率化されることを実験的に示した。さらに、本研究では複数台のマシンを用いて中間領域を分散させることで性能を改善することについても検討を行った。

**(3) 映像ストリームとタプルストリーム処理の統合 (川島, 北川) [P12]**

近年、ネットワーク環境の発達やカメラの低価格化などにより、映像ストリームの配信、取得、蓄積が容易となってきた。そのため、小規模なものではペットの留守番監視システムや家の防犯システム、大規模なものでは、ロンドンの監視カメラネットワークである Ring



of Steel などが実際に利用されている。

一方、一般的なストリームデータ処理のための、ストリーム処理システムが開発されているが、多くのシステムは、関係演算体系を処理のベースとしており、ストリームデータはタプル形式で表現される。このため、ストリーム処理システムにおいては、MPEG 形式の様なフレーム間予測を用いた映像ストリームを扱う際に問題が生じる。なぜならタプルの生成間隔が I フレームの生成間隔と合わない場合、展開不可能な P フレーム、B フレームが別のタプルに含まれる可能性があるからである。そこで、本研究では映像ストリームとタプルストリームのそれぞれの特性にあった処理を行いつつ、相互に連携した利用を可能とする映像データ管理機構を提案した。提案機構を利用することにより、RTSP 通信を使った柔軟な映像データ取得を可能とし、映像データの特徴量のみをタプルに格納することにより、関係演算処理を実現した。具体的には、タプルストリームとして配信される数値センサや位置情報等と、映像ストリームを融合した応用システムの構築等を支援することができる。

#### (4) P2P ネットワーク基盤技術 (北川, 天笠) [P4]

P2P システムにおける多次元データ管理を目的としたフレームワークである Multi-Ring Content Addressable Network (RCAN)の研究を引き続き行うと共に、P2P 環境における効率的集約処理を目的とした Application Level Aggregation and Multicast (ALAM)の提案を行った。

RCAN では、多次元データ空間を空間分割し、各ピアがそれぞれの領域に対応するデータを管理する方式をとる。RCAN の特徴は、データ自身のもつ特徴空間で領域分割を行うことと、 $O(\log N)$ 本 (ただし、 $N$  はピア数) の遠方のピアに対する Long Link を有する点にある。データ自身のもつ特徴空間で領域分割を行うことによりデータの局所性が維持されることと、問合せ処理に Long Link を利用することにより、多次元データに対する範囲検索や近傍検索等の空間問合せを効率的に実行することができる。また、新たなノードの追加の際に Long Link を利用して過負荷となっているピアを探索することで、ピア間での負荷分散を行うことが可能となっている。ピア数  $N$  に応じてピアの持つ Long Link の本数が動的に調整されるため、高いスケーラビリティをもってこれらの特徴が維持される。シミュレーション実験により、ルーティング処理コスト、メンテナンスオーバーヘッド、各ピアの処理負荷、問合せ処理効率等を評価することで、本提案の有効性が示した。

ALAM は、全ピアからデータを受け取るような集約問合せを対象とするもので、集約問合せ元となるピアを根とし全ピアから構成される A 木と V 木という 2 つの全域木を組み合わせることが基本アイデアである。A 木を用いて全ピアに集約問合せを伝播し、V 木を用いてデータ収集を行うことで、単一の全域木のみを用いて集約問合せ処理を行う従来方式に比べて、問合せ処理時間の短縮と各ピアの処理負荷の均衡化を図ることが可能となる。シミュレーション実験や処理効率の分析を通じて、本提案の有効性が示した。

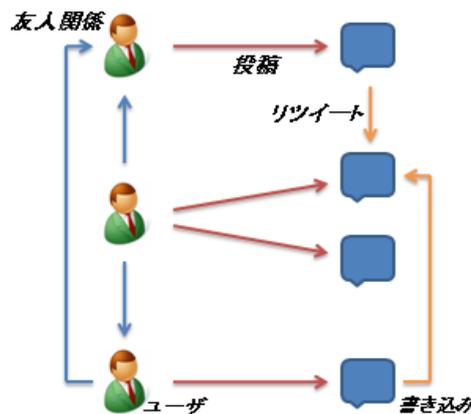
## 【2】データマイニング・知識発見技術

(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))

多様な情報源に対する外れ値検出，ソーシャルネットワーク分析，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) ソーシャルメディアの分析 (北川，天笠) [J2, J5, C10, C13, P14, P15]

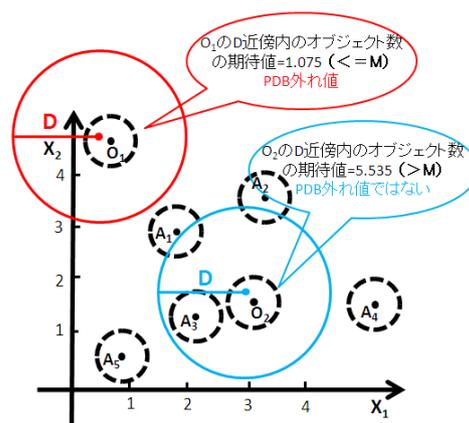
近年，Twitter と呼ばれるマイクロブログサービスが爆発的に普及している。多様な情報が時々刻々と発信される Twitter は，新しい情報源として注目を集めている。Twitter 上には様々なユーザが存在し，それぞれが自らの興味や嗜好に基づいた情報発信を行っている。なかには有用な情報を多く発信し，他のユーザへ大きな影響を与えるようなユーザも存在する。そのようなユーザの発見は，有用な情報の発見やマーケティングなどの様々な目的に必要とされ，さかんに研究されている。Twitter では，有用な情報はリツイートと呼ばれる他の情報を引用する機能によってユーザ間を広く伝搬していく。よって，より広く伝搬する情報を発信するユーザは有用である可能性が高い。しかし，従来のユーザランキング手法は，ユーザ間の関係を表すソーシャルグラフのみを解析しており，リツイートを考慮していない。本研究では，ソーシャルグラフにリツイートによる情報伝搬を取り入れたグラフを提案し，また，そのグラフに対して PageRank に代表されるリンク構造解析を適用することで，ユーザの評価を行う手法 TURank を提案した。この他，ソーシャルブックマークや Web 動画コンテンツ等に関する研究も推進した。



### (2) 外れ値検出 (北川，天笠) [P8]

外れ値とは通常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。一方，現実のデータでは様々な不確実性が存在するため，それを考慮に入れた処理手法の開発が重要である。

本研究は不確実性を有するデータ集合に対して外れ値検出を行う手法を提案した。具体的には既存の基本的な外れ値検出手法である，距離に基づく外れ値検出 (Distance-based outlier, DB 外れ値) をデータの不確実性がある場合に拡張し，PDB 外れ値 (Probabilistic distance-based outlier) の概念を定式化すると共に，セル構造を用いた効率的な PDB 外れ値の検出手法を提案した。

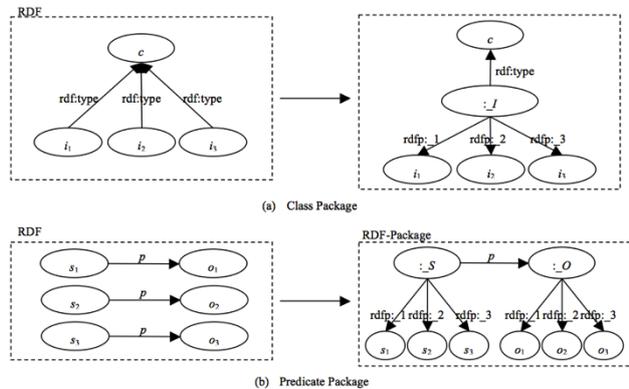




た。この内容が高く評価され、情報処理学会平成 22 年度山下記念研究賞を受賞した。

## (2) 効率的な推論を可能にする RDF フォーマットに関する研究 (天笠, 北川) [C12, A3]

RDF の処理は、事前に RDF スキーマによる推論処理 (RDFS エンティールメント) を行う必要があるが、これにより多数のトリプルが導出されることが処理効率上の問題となることが知られている。この問題に対し、我々は同じ RDF データを表現しながら、効率的な RDFS エンティールメントを可能にする RDF Packages を提案した。基本的なアイデア



は、同じ述語を共有するトリプルをパッケージとしてまとめて表現するものである。RDF の仕様に注意深く従っているため、既存の推論ルールを一切変更することなく効率的な推論が可能になるだけでなく、既存の推論エンジンをそのまま利用することが可能である。RDF に対する問合せは、元となる問合せを RDF Packages 向けに書き換えすることで、元データに復元することなく処理が可能である。この成果が高く評価され、iiWAS2010 において Best Paper Award を受賞した。

## (3) プライバシー保護検索技術 (天笠, 北川) [J3, C7, P3, P5, A2]

クラウド環境の一般化に伴い、クラウド上にデータベースをサービスとして委託する DAS (Database as a Service) が一般的になりつつある。この環境では、データベースの内容をクラウドに外部委託するため、機密情報などは暗号化する必要がある。しかしながら、データベースを暗号化してしまうと、クラウド上の計算資源を利用した検索を行うことができないため、そのメリットを享受することができない。このため、データの機密を保持したままデータベースを検索する、プライバシー保護検索に関する技術が注目されている。本研究では、プライバシー保護検索技術の一種である、OPES (順序保存暗号化法, Order-Preserving Encryption Scheme) を拡張し、ある平文に対し、複数の暗号文を割り当てる、MV-OPES (Multi-valued OPES) を提案した。これにより、オリジナルの OPES よりも安全性が増すとともに、結合演算を含む多くの関係演算をクラウド上のサーバで実行することが可能となった。さらに、平文の定義域をいくつかの部分区間に分割し、それらをシャッフルすることでさらに安全性を向上した手法を提案した。この内容が高く評価され、KIMS2010 において Best Student Paper Award を受賞した。

## 【4】科学分野におけるデータベース応用

(主な研究費：科研費特定領域研究, 科研費挑戦的萌芽研究, 科研費若手研究 (B))

### (1) GPV/JMA アーカイブ (天笠, 北川) [P18]

地球環境研究部門と共同で、気象庁気象予報データベース「GPV/JMA アーカイブ」(<http://gpvjma.ccs.hpcc.jp>)の開発、および管理、運用を行っている。GPV/JMA アーカイブは、気象庁が公開している気象予報グリッドデータ（GPV データ）を蓄積するとともに、外部登録ユーザー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。

## (2) 大規模衛星センサデータからのイベント検出 (川島, 北川, 天笠) [C3, P21]

産業技術総合研究所の GEO Grid プロジェクトでは、グリッド技術を用いた地球観測データの大规模アーカイブシステムの開発を行っている。同プロジェクトが扱うデータには DEM (Digital Elevation Model) と呼ばれる地表面高度に関する画像データがある。このデータの主たる使用目的は、崖崩れ、地震などの自然災害が発生した地域の観測である。一方、DEM 画像は豊富な情報を有するコンテンツである点に着目すると、DEM 画像は他目的に活用できる可能性があると考えられる。この観点に基づき、我々はこれまで、一定期間内における都市における建造物の建築を検出するシステムの開発に取り組んできた。

2010 年度は、これまでの我々の取り組みをさらに発展させ、垂直オフセット補正を改善することにより、建造物検出精度を高めた。提案する垂直オフセット手法では、2 枚の DEM 画像について、局所的な平均標高差を垂直補正值とする。この詳細を下記に述べる。提案する垂直オフセット補正局所的に平均標高差を垂直補正值として算出する。局所化の単位は、行、列、とした。行単位補正の場合、重複領域内の各行の平均標高差を、該当行に含まれるピクセルの垂直補正值とする。列単位補正の場合、重複領域内の各列の平均標高差を、該当列に含まれるピクセルの垂直補正值とする。

経済産業省が所有する ASTER データより、産総研 GEO Grid で処理された ASTER データ  $\beta$  を用いて提案手法を実験的に評価した。その結果、提案手法は従来手法より 1.5~2 倍程度の適合



2000.10.07 ~ 2009.02.02

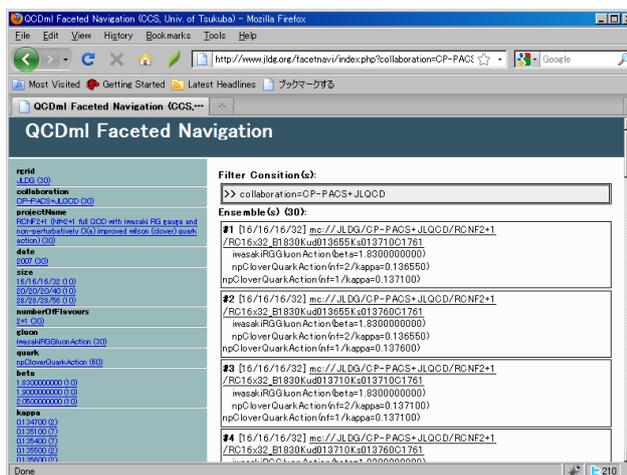


率向上を示した。

### (3) 格子 QCD アンサンブル XML のファセット検索 (天笠, 北川) [C8]

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 は半構構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

### (1) 学術雑誌論文

- J1. 塩川 浩昭, 北川 博之, 川島 英之, 渡辺 陽介, "分散ストリーム処理システムにおける高信頼化方式の提案" 電子情報通信学会論, Vol.J93-D, No.6, Jun. 2010.
- J2. Tsubasa Takahashi, Hiroyuki Kitagawa, and Keita Watanabe, "Social Bookmarking Induced Active Page Ranking", IEICE Transactions Vol.E93-D, No.6, pp.1403-1413, Jun. 2010.
- J3. Hasan Kadhemi, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "MV-OPES: Multivalued-Order Preserving Encryption Scheme: A Novel Scheme for Encrypting Integer Value to Many Different Values," IEICE Trans. Info. & Syst., Vol. E93-D, No. 9, pp.2520-2533, Sept. 2010.
- J4. Imam Machdi, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Parallel Holistic Twig Joins on a Multi-core System," International Journal of Web Information Systems (IJWIS), Vol. 6, No. 2, pp. 149-177, 2010.
- J5. 山口祐人, 天笠俊之, 高橋翼, 北川博之, "情報伝搬を考慮したグラフ分析による Twitter ユーザランキング手法", 情報処理学会論文誌データベース, Vol. 4, No. 2 (TOD50), pp. 142-157, 2011.

### (2) 国際会議論文

- C1. Hiroyuki Kitagawa, Yoshiharu Ishikawa, Qing Li, and Chiemi Watanabe (eds.), Database Systems for

- Advanced Applications (Proc. 15th International Conference on Database Systems for Advanced Applications (DASFAA 2010)), Part I, April 2010.
- C2. Hiroyuki Kitagawa, Yoshiharu Ishikawa, Qing Li, and Chiemi Watanabe (eds.), Database Systems for Advanced Applications (Proc. 15th International Conference on Database Systems for Advanced Applications (DASFAA 2010)), Part II, April 2010.
- C3. Takashi Takagi, Hideyuki Kawashima, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Providing Constructed Buildings Information by ASTER Satellite DEM Images and Web Contents", Proc. Data Intensive eScience Workshop (DIEW 2010) (DASFAA2010 Workshop), LNCS 6193, pp. 81-92, April 2010.
- C4. Hiroaki Shiokawa, Hiroyuki Kitagawa, and Hideyuki Kawashima, "A-SAS: An Adaptive High-Availability Scheme for Distributed Stream Processing Systems", Proc. 3rd. International Workshop on Sensor Network Technologies for Information Explosion Era (SeNTIE 2010), Kansas City, Missouri, USA, pp. 413-418, May 23-26, 2010.
- C5. Jianquan Liu, Hanxiong Chen, Kazutaka Furuse, and Hiroyuki Kitagawa, "An Efficient Algorithm for Reverse Furthest Neighbors Query with Metric Index", Proc. 21st International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA2010), Bilbao, Spain, August 30-September 3 2010.
- C6. Hang Shi, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Fast Detection of Functional Dependencies in XML Data", Proc. 7th International XML Database Symposium (XSym2010), Singapore, pp. 113-127, September 13-17, 2010.
- C7. Hasan Kadhem, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa "A Secure and Efficient Order Preserving Encryption Scheme for Relational Databases," Proc. International Conference on Knowledge Management and Information Sharing (KMIS 2010), Valencia, Spain, October 25-28, 2010.
- C8. Toshiyuki Amagasa, Noriyoshi Ishii, Tomoteru Yoshie, Osamu Tatebe, Mitsuhsa Sato, and Hiroyuki Kitagawa, "A Faceted-Navigation System for QCDml Ensemble XML Data", Proc. International Conference on P2P, Parallel, Grid, Cloud and Internet Computing (3PGCIC), Nov. 2010, pp.132-139.
- C9. Hideyuki Kawashima, Hiroyuki Kitagawa, and Xin Li, "Complex Event Processing over Uncertain Data Streams", Proc. International Conference on P2P, Parallel, Grid, Cloud and Internet Computing (3PGCIC), Nov. 2010, pp.521-526.
- C10. Mariko Kamie, Takako Hashimoto, Hiroyuki Kitagawa, "Topic-Based Awareness Computing Model for Video-Sharing Service", ISAC 2010-2nd International Symposium on Aware Computing, National Cheng Kung University, Tainan, Taiwan, November 1-4, 2010.
- C11. Ngo Sy Viet Phu, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Extracting XML Data from the Web", Proc. 12th International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services (iiWAS2010), Paris - France November 8-10, 2010.
- C12. Shohei Ohsawa, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "RDF Packages: A Scheme for Efficient

Reasoning and Querying over Large-Scale RDF Data", Proc. 12th International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services (iiWAS2010), Paris - France November 8-10, 2010.

- C13. Yuto Yamaguchi, Tsubasa Takahashi, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "TURank: Twitter User Ranking based on User-Tweet Graph Analysis", Proc. 11th International Conference on Web Information Systems Engineering (WISE 2010), pp.240-253, Hong Kong, December 12-14, 2010.

### (3) 学会発表

#### (A) 招待講演

- I1. 北川博之, 「ユビキタス・センサネットワークを支えるデータストリーム処理」, 情報処理学会ユビキタスコンピューティングシステム研究会(UBI)第 27 回研究発表会, 筑波大学 計算科学研究センター, 2010 年 7 月 15 日~7 月 16 日

#### (B) その他学会発表

- P1. 川島英之, 北川博之, 佐藤 亮, 「確率推論を有する関係データストリーム処理エンジンの設計」, 情報処理学会ユビキタスコンピューティングシステム研究会(UBI)第 27 回研究発表会, 筑波大学 計算科学研究センター, 2010 年 7 月 15 日~7 月 16 日
- P2. 阿部泰芽, 川島英之, 北川博之, 「データストリーム永続化処理の適応的最適化」, 情報処理学会ユビキタスコンピューティングシステム研究会(UBI)第 27 回研究発表会, 筑波大学 計算科学研究センター, 2010 年 7 月 15 日~7 月 16 日.
- P3. Hasan Kadhém, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa "A Secure and Efficient Order Preserving Encryption Scheme for Relational Databases," The 2nd International Workshop with Mentors on Databases, Web and Information Management (iDB Workshop 2010), pp.90-99, Tokyo, Japan, August 2-4, 2010.
- P4. Djelloul BOUKHELEF and Hiroyuki KITAGAWA, "Application Level Aggregation and Multicast in Peer-to-Peer Systems" 第 3 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2011), 2011 年 2 月 27 日~3 月 1 日
- P5. Hasan KADHEM, Toshiyuki AMAGASA, Hiroyuki KITAGAWA, "Optimization Techniques for Range Queries in the Multivalued-Partial Order Preserving Encryption Scheme" 第 3 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2011), 2011 年 2 月 27 日~3 月 1 日.
- P6. 劉健全, 陳漢雄, 古瀬一隆, 北川博之, "任意位置クエリに適用可能な効率の逆最遠傍検索" 第 3 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2011), 2011 年 2 月 27 日~3 月 1 日.
- P7. 阿部泰芽, 川島英之, 北川博之, "書込み処理の遅延化と動的制御によるストリームデータの

- 永続化" 第 3 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2011), 2011 年 2 月 27 日～3 月 1 日.
- P8. 郭楽, 北川博之, 天笠俊之, "不確実データ集合に対する距離に基づく外れ値検出" 第 3 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2011), 2011 年 2 月 27 日～3 月 1 日.
- P9. KOUASSI Koffi Eli, Toshiyuki AMAGASA, Hiroyuki KITAGAWA, "An Efficient Probabilistic Latent Semantic Indexing using GPGPU" 第 3 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2011), 2011 年 2 月 27 日～3 月 1 日.
- P10. 駒水孝裕, 天笠俊之, 北川博之, "キーワード検索が可能な XML データに対するファセット探索" 第 3 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2011), 2011 年 2 月 27 日～3 月 1 日.
- P11. 塩川浩昭, 北川博之, 川島英之, "高信頼化を考慮した分散ストリーム処理の問合せ最適化方式" 第 3 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2011), 2011 年 2 月 27 日～3 月 1 日.
- P12. 高橋翼, 川島英之, 北川博之, "ストリーム処理システムにおける映像データ管理機構" 第 3 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2011), 2011 年 2 月 27 日～3 月 1 日.
- P13. 寺島慎太郎, 天笠俊之, 北川博之, "XML データにおける類似極大部分木の効率的な探索" 第 3 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2011), 2011 年 2 月 27 日～3 月 1 日.
- P14. 渡邊桂太, 天笠俊之, 北川博之, "ソーシャルブックマークにおける時系列分析とグラフ構造解析を用いたスパマー検出" 第 3 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2011), 2011 年 2 月 27 日～3 月 1 日.
- P15. 山口祐人, 天笠俊之, 北川博之, "リストを用いた Twitter ユーザのタグ付け手法" 第 3 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2011), 2011 年 2 月 27 日～3 月 1 日.
- P16. 金子静花(お茶大), 渡辺知恵美(お茶大), 天笠俊之, "Semi-ShuffledBF:ブルームフィルタを用いた安全かつより高速なプライバシー保護検索手法の提案" 第 3 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2011), 2011 年 2 月 27 日～3 月 1 日.
- P17. 太田壮祐, 森嶋厚行, 天笠俊之, "関数従属性と包含従属性を用いた XML-RDB マッピング" 第 3 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2011), 2011 年 2 月 27 日～3 月 1 日.
- P18. 宇井敬一郎, 天笠俊之, 北川博之, "単語の専門性に着目した気象学論文データベースからの専門語抽出" 情報処理学会 第 73 回全国大会, 2011 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P19. 于美麗, 天笠俊之, 北川博之, "レコード間の相関を用いた Web 情報統合方式の評価" 情報処理学会 第 73 回全国大会, 2011 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P20. 駒水孝裕, 天笠俊之, 北川博之, "XML データに対するファセット検索のユーザビリティ評価

- " 情報処理学会 第 73 回全国大会, 2011 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P21. 王春永, 川島英之, 北川博之, "地球観測衛星データと Web コンテンツの統合による新築建造物および地形変化の検出" 情報処理学会 第 73 回全国大会, 2011 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P22. 張帆, 天笠俊之, 北川博之, "プライバシーを保護したオントロジーマッピング手法" 情報処理学会 第 73 回全国大会, 2011 年 3 月 2 日～3 月 4 日
- P23. 小山田昌史, 川島英之, 北川博之, "ストリーム処理エンジンと主記憶 DBMS の統合利用方式" 情報処理学会 第 73 回全国大会, 2011 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P24. 小澤佑介, 天笠俊之, 北川博之, "GPGPU を用いた不確定データベースからの高速な頻出アイテムセット抽出" 情報処理学会 第 73 回全国大会, 2011 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P25. 添野隆之, 天笠俊之, 北川博之, "確率的スキーママッチングによる複数 XML データに対する問合せ" 情報処理学会 第 73 回全国大会, 2011 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P26. 高橋毅, 天笠俊之, 北川博之, "相関ルールに基づく外れ値検出手法を用いたユーザレビュー情報の分析".情報処理学会 第 73 回全国大会, 2011 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P27. 富山克裕, 川島英之, 北川博之, "移動軌跡ストリームに対する連続的 k-匿名化技法" 情報処理学会 第 73 回全国大会, 2011 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P28. Qiu Qianru, Hideyuki Kawashima, Hiroyuki Kitagawa, "Parallel Distance Based Outlier Detection in Very Large Datasets" 情報処理学会 第 73 回全国大会, 2011 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- P29. 小山田昌史, 川島英之, 北川博之, "ストリームに起因する連続的トランザクション呼び出しの効率化", 信学技報, vol. 111, no. 76, DE2011-2, pp. 7-12, 2011 年 6 月.
- P30. 小澤佑介, 天笠俊之, 北川博之, "GPGPU を用いた不確定データベースからの高速な頻出アイテム集合マイニング", 信学技報, vol. 111, no. 76, DE2011-9, pp. 49-54, 2011 年 6 月.

#### (4) 受賞

- A1. 平成 22 年度山下記念研究賞受賞：駒水孝裕, 「異種 X データに対するファセット検索手法の提案」情報処理学会デジタルドキュメント研究会.
- A2. Best Student Paper Award : Hasan Kadhem, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "A Secure and Efficient Order Preserving Encryption Scheme for Relational Databases," Proc. International Conference on Knowledge Management and Information Sharing (KMIS 2010), Valencia, Spain, October 25-28, 2010.
- A3. Best Paper Award : Shohei Ohsawa, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "RDF Packages: A Scheme for Efficient Reasoning and Querying over Large-Scale RDF Data", Proc. 12th International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services (iiWAS2010), Paris - France November 8-10, 2010.
- A4. 最優秀インタラクティブ賞：塩川浩昭, 北川博之, 川島英之, "高信頼化を考慮した分散ストリ

ーム処理の問合せ最適化方式" 第 3 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2011), 2011 年 2 月 27 日～3 月 1 日..

- A5. 学生奨励賞：駒水 孝裕, 天笠 俊之, 北川 博之, "XML データに対するファセット検索のユーザビリティ評価"情報処理学会 第 73 回全国大会, 2011 年 3 月 2 日～3 月 4 日.
- A6. 学生奨励賞：富山克裕, 川島英之, 北川博之, "移動軌跡ストリームに対する連続的 k-匿名化技法" 情報処理学会 第 73 回全国大会, 2011 年 3 月 2 日～3 月 4 日.

**(5) その他成果デモ展示**

- E1. イノベーション・ジャパン 2010 (主催：JST, NEDO) : 「ストリームクラウド基盤のための大規模センサデータ処理

## VII-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-大学見本市において、2005 年から 2010 年まで連続で出展や技術説明会を開催するなど、広報活動にも努めてきた。

**【1】** 自由視点映像の生成と提示：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（大田）2006～2008 年度、共同研究経費（大田）2007～2009 年度、科研費若手研究 A（北原） 2009～2011 年度）

**【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(大田)2005～2009 年度）

**【3】** 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）2006～2008 年度、科研費挑戦的萌芽研究（北原）2010～2012 年度）

【4】環境カメラ映像からの複数動作分類：日常空間内に配置した環境カメラを用いて、対象空間内の物体行動を自動認識させる研究を進めている。その一環として、環境カメラ映像に適した画像特徴量である CHLAC 特徴量を用いることで、様々な物体の複数動作を一括して認識する方法の実現を目標としている。（主な研究費：科研費若手研究A（亀田）2004～2006年度）

【5】モバイルカメラと環境カメラを補間的に利用する映像監視技術：環境カメラ映像とモバイルカメラ映像の特長を統合した次世代の監視映像技術に関する研究開発。（主な研究費：科研費若手研究A（北原）2006～2008年度）

【6】インタビュー対象者の心理的変動を計測するための顔画像解析：質問者が被験者に対して直接問いかけを行っている状況において、そのインタビュー中に示される被験者の僅かな動きからその心理的変動を計測するのが本研究の大きな目標である。このための、顔表情動作の観測によって、対象人物の意図を認識する研究を現在進めている。

【7】歩行者ナビゲーションのための屋内外映像からの定位法：歩行者に装着したカメラのみを用いて、屋内外を問わない可用性の高い歩行位置定位技術の開発を目標とする。本技術は、例えばGPS等が利用できない環境でも利用可能である。（主な研究費：厚生労働省 障害者保健福祉推進事業（障害者自立支援機器等研究開発プロジェクト）「画像・GPS等のセンサ統合による日常利用可能な屋内外視覚障害者歩行支援システムの開発」（研究代表者 静岡県立大学 石川准、研究分担者 亀田）2009年度）

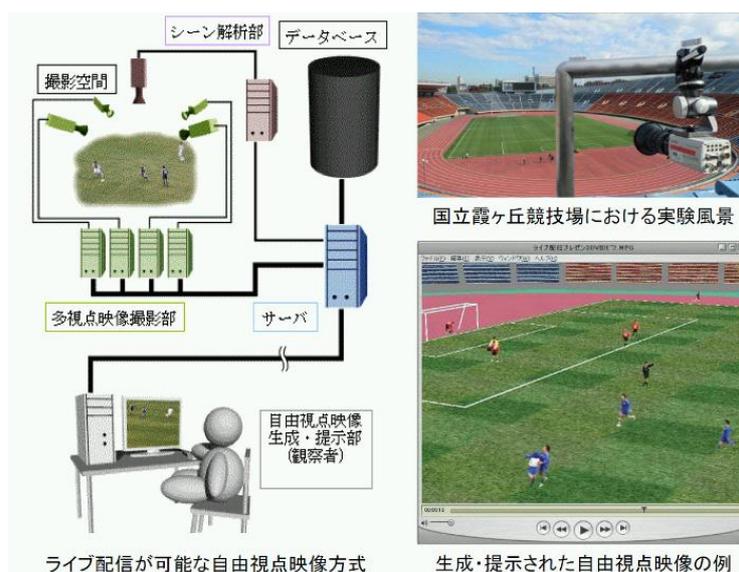
【8】自動車運転支援のための運転者前面への道路鏡像投影：自動車運転者に対して、走行している先の道路形状を安全かつ認識しやすい形で提供する手段として、フロントガラス上に、道路形状を鏡像として見せる提示手法を提案する。運転風景中の道路の上に直接道路形状の輪郭線を重畳するのではなく、視界上部の領域に重畳することで、道路上の物体と重複しない提示を実現する。

### 3. 研究成果

#### 【1】自由視点映像の生成と提示（大田, 亀田, 北原）

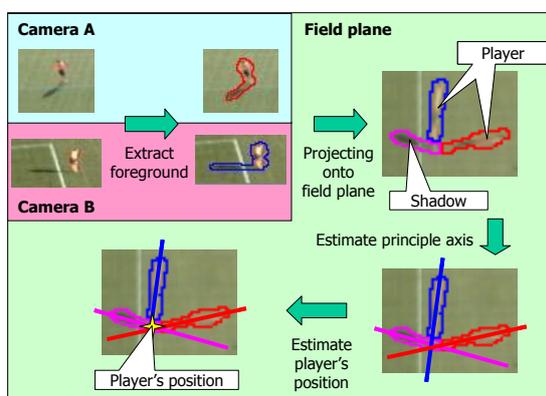
国立スポーツ科学センターとの共同研究として、総務省戦略的情報通信研究開発推進制度(SCOPE)による特定領域重点型研究開発「ネットワークによる自由視点映像のライブ配信とインタラクティブ提示」(研究代表者 大田友一)を2004年度から2006年度の3年間に渡り実施した。以降も、日本電気株式会社との共同研究や、2009年度からは科研費若手研究A「閲覧者中心型自由視点映像コンテンツ生成技術」として、研究開発を継続している。

この研究は、複数の視聴者が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や、直感的な自由視点映像の撮影・提示手法の開発、及び、提示映像の高品質化により、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。

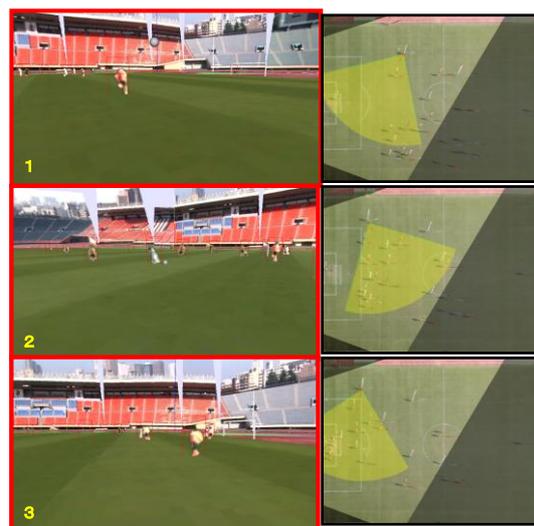


撮影物体を1枚の板(ポリゴン)とその表面に貼り付けるテクスチャ情報で表現する“人物ビルボード”という手法を開発することにより、多視点映像の撮影・加工・伝送から自由視点映像の生成・提示までの全ての処理をビデオレートで処理する世界初の自由視点映像のライブ配信を実現した。さらに、自由視点映像技術を実験室やスタジオから開放することを目指し、国立競技場や代々木体育館における実証実験において、システム全体の有用性・汎用性・ロバスト性の向上を目的とした技術開発を推進することにより、世界でも他に例を見ない、大規模空間で実施されるイベントを対象とした自由視点映像ライブ配信の実現に成功した。

2010年度に顕著な進歩があったと認められる研究課題としては、直感的な自由視点映像の撮影・提示方式が挙げられる。サッカー映像から自動的に推定した選手の3次元位置を用いて、選手の視点から見た一人称視点映像を生成・提示する手法を提案した。フィールド上に降り立った視点からの映像は、フィールドを斜め上から俯瞰したテレビ放送映像と比べ臨場感が高く、トッププレイヤーが見ていた情景を追体験することにより競技技術の向上に役立つことも期待される。視点を移動させながら撮影した映像のため、映像酔いが引き起こされることが懸念されるが、一人称視点映像の特徴であるエゴモーションを損なわず、かつ快適に視聴可能な仮想カメラ操作法について、主観評価実験を交えた検討を進めている。撮影映像機器の高性能化と、それに伴う生成映像の高画質化については、今後、研究を推進する必要があるが、並列計算処理を活用した映像の実時間生成・提示など、基礎的な開発はほぼ完了している。



2 視点映像を用いた選手位置推定手法



選手視点映像の生成・提示

## 【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）

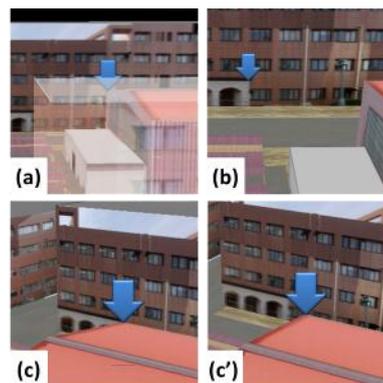
2006 年度から 2009 年度の 4 年間の計画で、科学研究費補助金・基盤研究(A)「シースルービジョン：監視カメラ映像を活用する歩行者のための視覚支援方式の開発」(研究代表者 大田友一)を実施した。

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している。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、歩行者が手にする携帯型情報端末に監視カメラ映像を適切に加工して提示し、自分の眼では直接見ることができない視覚情報を提供する「シースルービジョン」を提案した。

2010 年度は、屋外環境における共同作業を想定し、他者と注目位置を共有する作業の視覚的支援に取り組んだ。複合現実感技術を用いて観察シーンのジオラマ模型を携帯端末上で再現することにより、直感的な指示共有が可能なバーチャルジオラマインタフェースを提案した。ユーザは、携帯端末の画面を介して、屋外環境のジオラマ模型が目前に存在しているような状態で観察が可能である。このジオラマモデル上に矢印などのアイコンを用いて注目位置を指し示すことにより、屋外環境中のユーザ同士で指示共有を実現する。



バーチャルジオラマインタフェース



バーチャルジオラマモデル上での注目位置の共有例

これらの基盤技術の上で、屋外作業における効果的な指示共有の検討を進めている。屋外環境では、情報端末の画面サイズ、ネットワーク速度などの制約により操作が制限されてしまうため、ユーザインタフェースは注意深く設計される必要があり、2011 年度以降継続的に研究を進める予定である。

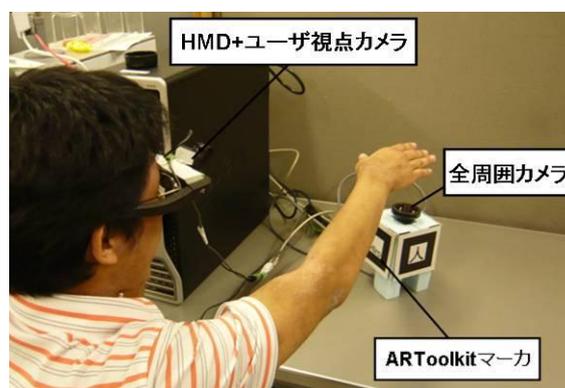
### 【3】複合現実感を用いたコミュニケーション支援メディア技術 (大田、北原)

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、遠隔地に居るユーザによって共有可能な遠隔コミュニケーションシステムの開発を進めている。

2010 年度は、ユーザが手を用いて仮想物体と円滑にインタラクション可能なMR方式の実現を目的に、手と仮想物体の違和感の少ない隠蔽関係の表現手法に関する研究に取り組んだ。人が物を操作する際に最も良く使う“道具”は、直感的で操作性が高い“手”であるため、近年、手をインタフェースとしてインタラクティブなMR空間を実現する方法に注目が集まりつつあるが、手の形状は時間と共に変形するため隠蔽関係の表現や接触判定の問題を解決する必要があるがあった。手と仮想物体の隠蔽関係を違和感なく表現するためには、従来、高精度な奥行き情報を推定する必要があると考えられていたが、推定精度と処理時間との間にはトレードオフが存在することが知られている。そこで、ユーザに違和感を与える要因が“隠れ境界における画質差”であるという考え方に注目し、マッティング処理やブレンディング処理といった画像処理技術を適用することにより、それを軽減させ、隠蔽表現の高品質化を実現する手法を提案した。



手と仮想物体の違和感の少ない隠蔽表現



隠蔽表現の高品質化を目的とした MR 方式

今後は、肌色抽出と前後判定の安定化・高速化や、魚眼カメラによって撮影される光源などの環境情報を反映させ、実物体と仮想物体各々の影の描画などを行うことでより違和感なくユーザが仮想物体とインタラクションが行えるシステムの構築することを考えている。

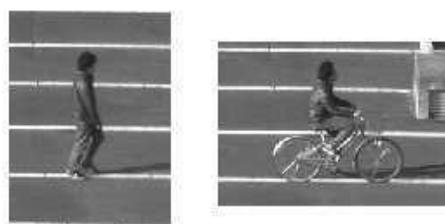
#### 【4】環境カメラ映像からの複数動作分類（亀田、大田）

本研究グループでは、日常空間内に配置した環境カメラを用いて、対象空間内の物体行動を自動認識させる研究を進めている。本年度は、環境カメラに映る様々な物体の動作を、映像に対するコンパクトな特徴量表現として現在注目されている CHLAC 特徴量をもとに分類する方法を提案した。本手法は、入力として、複数の物体がそれぞれ別の動作をしているような状況でも対応可能である。位置不変で加算可能な CHLAC は、映像解析における有力な画像特徴量の一つと考えられ、複数の対象の異なる動作をまとめて表現することができる。本取り組みでは CHLAC 特徴量と相性の良い錐制約部分空間により動作を表現し、それにより単独で発生する動作と複数で発生する動作の分類を効率的に行えることを示した。実際に、人間の歩行、自転車による移動、歩行中の拾得動作を含む 6 種類の動作を組み合わせた動作に対する実験を通して、提案した単独の動作が発生している場合と複数種類の動作が発生している場合の分類器の性能評価を行い、提案手法の有効性を確認することができた。

CHLAC 特徴量は日本発の映像特徴量であり、その表現力と簡潔さから注目を集めているが、これまでは異常検知や単純動作の認識等に用いられるだけであり、多クラスの行動認識に応用する方法は示されていなかった。本取り組みは、複数動作を CHLAC 特徴量の加算で表現し、かつそれが部分空間に基づく認識器で識別できることを示した世界初の研究である。



環境カメラからの入力映像例



認識動作の例(拡大)

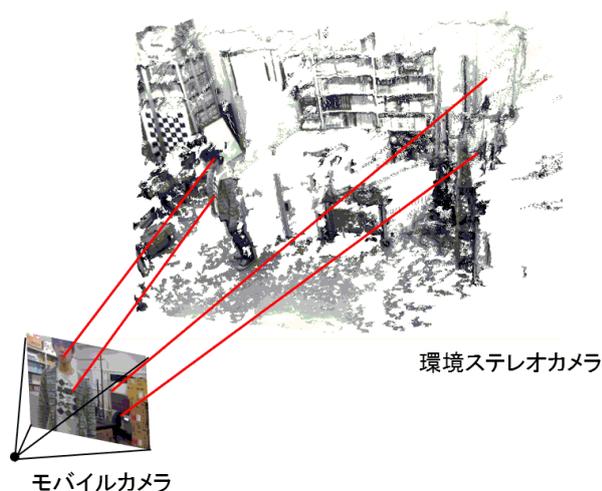
#### 【5】モバイルカメラと環境カメラを補間的に利用する映像監視技術(北原、大田)

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)を実施した。以降も、科研費若手研究 A「閲覧者中心型自由視点映像コンテンツ生成技術」の基盤技術の一部として、研究開発を継続している。

この研究では、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。

2010 年度は、人物等の移動物体が存在する動的なシーンにおいて、環境中に設置したステレオカメラで獲得した視覚と奥行きの情報を用いて、モバイルカメラの位置・姿勢を推定する研究に取り組んだ。撮影シーンを前景と背景に分割して対応点探索を行うことにより、従来利用が困難とされていた前景領域上の画像特徴点を推定処理に活用し、位置・姿勢の推定精度向上が実現されている。3次元センサやビジュアルマーカを用いることなく、モバイルカメラの位置・姿勢推定を行うことが可能となるため、複合現実感への応用などが期待される。



環境ステレオカメラを用いた  
モバイルカメラの位置・姿勢推定



対応点探索結果(従来手法:SIFT)



対応点探索結果(提案手法)  
前景領域上の点で対応関係が求まっている

今後は、実環境に設置した複数の環境カメラを用いた実証実験により、提案手法の有効性の評価を行うことと、複合現実感(MR)を用いたMR記念撮影システムの開発を行う予定である。大学キャンパスへの環境カメラや映像を伝送するネットワークの設置は概ね完了し、直ちに実験に取り掛かれる状況である。

### 【6】インタビュー対象者の心理的変動を計測するための顔画像解析（亀田、大田）

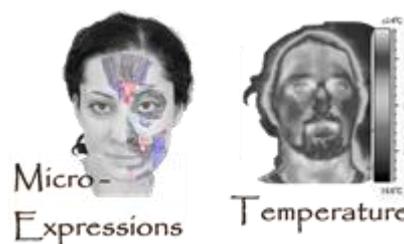
本研究でいうインタビューとは、質問者が被験者に対して直接問いかけを行っている状況を指し、そのインタビュー中に示される被験者の僅かな動きからその心理的変動を計測するのが本研究の大きな目標である。このための、顔表情動作の観測によって、対象人物の意図を認識する研究を2009年度から本格的に開始した。研究上の最終目標は、対象人物が悪意(害意)を潜在的に有しているかどうかを判定することであり、世界的にも成功例が未だに報告されていない野心的な挑戦である。本研究で成果を挙げることができれば、テロ犯罪防止・抑制が容易になり、安心安全な社会の構築に貢献できる。

2010年度は、2009年度に引き続き、Micro Expression という非常に短時間かつ僅かな顔の動きを、高速度撮影カメラを用いた観測により顔の筋肉モデルの運動拘束を元に数値化することで検出できる手法の検証を行った。また、高速度撮影カメラだけでは被験者の僅かな変化を全て捉えることが難しいと予想されているので、サーマルカメラやステレオカメラを精密に同期させ、センサヒュージョンによる解析を可能とする新しいシステム構築をおこなってきた。

なお、本研究に関しては、2010年度は本学と米国 University of Arizona と Rutgers University とで共同研究を実施している。このための予算を、共同で米国政府外郭団体から獲得した。また、本研究に付随して2011/2月～3月に渡って長期のセミナーをアリゾナで共同開催し、さらなる研究の進展を図った。



想定するインタビュー状況



画像解析の概念

(左:Micro Expression, 右:サーマル画像)

### 【7】歩行者ナビゲーションのための屋内外映像からの定位法（亀田、大田）

精度のよい歩行者ナビゲーションは、街を往く通常の歩行者のみならず、視覚障害者にとって、介助者や介助犬による補助なしで自由に外出したいという希望を叶えるために必要な技術である。現在広く用いられているGPSベースの定位だけでは、その精度からも可用性からも不十分である。

これは、歩行者としては1m程度の精度が必要であり、かつ屋内等 GPS のための電波が得られない状況でも稼働できることが求められるからである。

本取り組みでは、2009 年度に行われた厚生労働省の障害者保健福祉推進事業(障害者自立支援機器等研究開発プロジェクト)「画像・GPS 等のセンサ統合による日常利用可能な屋内外視覚障害者歩行支援システムの開発」(研究代表者:静岡県立大学 石川准)で我々が提案した画像による屋内外空間での定位法について、実地実証実験と公開ヒアリングによる評価の確認を行った。実験から、下図左に示すような、カメラの揺動が大きく、かつ他の歩行者が撮影中にカメラの前にいるような歩行状況であっても、視覚障害者の歩行支援を実現できるだけの性能が得られることが示された。



実証実験の様子(東京駅近郊)



映像入力の場合(ロバスト性が強く求められる)

### 【8】自動車運転支援のための運転者前面への道路鏡像投影 (大田、亀田、北原)

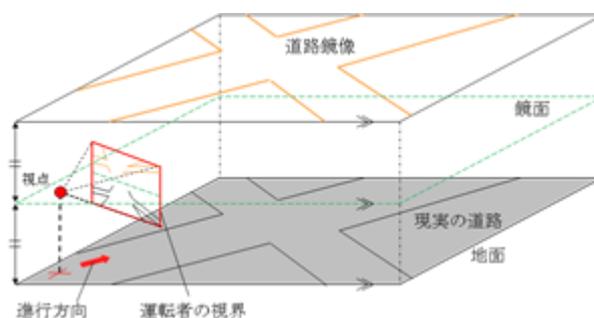
高度交通システムの研究において、我々の研究グループは運転者への視覚支援を実現するべく研究を進めている。運転中に重要な情報の一つが、走行している先の道路形状の把握である。その情報を安全かつ認識しやすい形で提供する手段として、本研究では、自動車を運転中そのフロントガラス上に、道路形状を鏡像として見せる提示手法を提案する。運転風景中の道路の上に直接道路形状の輪郭線を重畳するのではなく、視界上部の領域に重畳することで、道路上の物体と重複しない提示を実現する。本手法のよい点は、鏡像の性質から運転者は道路形状の輪郭線と現実の道路の対応関係を容易に理解することができることである。この、道路形状を表す輪郭線を鏡像にして空中に提示したものを道路鏡像と呼ぶ。

鏡像として容易に理解できるという性質は、現実の道路とその上方に仮想的に描かれる道路鏡像との間の幾何整合性が厳密には確保されない環境でもある程度の効果を期待できるが、運転支援応用という観点から、その効果の度合いを厳密に定量化することが求められる。そこで本研究では、鏡像としての理解しやすさを損ねないように道路鏡像の表示位置を調整できる範囲を調査し、工学的に道路形状の情報がわかりやすく提示することが可能であることを示した。このために、本取り組みでは幾種類かの幾何パラメータを定義し、それを変更した複数種類の提示をシミュレーション映像で比較する主観評価実験を行った。また、検討した提示の変更が実際に有効であることを

確認するため実車上のシステムを構築し、そこでも主観評価実験を行った。



道路鏡像提示の様子(本学路上の左カーブ)



道路鏡像の概念

#### 4. 研究業績

##### (1) 研究論文

1. Real-Time Soccer Player Tracking Method by Utilizing Shadow Regions ; Nozomu Kasuya, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, Proceedings of ACM Multimedia 2010, pp.1319-1322 (2010.10)
2. Image Retrieval of First-Person Vision for Pedestrian Navigation in Urban Area; Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, Proceedings of IAPR 20th International Conference on Pattern Recognition (ICPR2010), pp.364-367 (2010.8)
3. See-Through Vision: A Visual Augmentation Method for Sensing-Web; Yuichi Ohta, Yoshinari Kameda, Itaru Kitahara, Masayuki Hayashi, Shinya Yamazaki, International Conference on Information Processing and Management of Uncertainty in Knowledge-Based Systems (IPMU2010), 10 pages, (2010. 6)
4. 3D Free-Viewpoint Video Capturing Interface By Using Bimanual Operation; Tetsuya Watanabe, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, Proceedings of 3DTV Conference 2010, 4 pages (2010.6)
5. A Comparison Between Two 3D Free-Viewpoint Generation Methods - Player-Billboard AND 3D Reconstruction -; Tetsuya Shin, Nozomu Kasuya, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, Proceedings of 3DTV Conference 2010, 4 pages (2010.6)
6. An Installation of Privacy-Safe See-Through Vision; Masayuki Hayashi, Ryo Yoshida, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, ELSEVIER, Procedia - Social and Behavioral Sciences, 2, 1, pp.125-128 (2010.4)

##### (2) 学会発表

##### (A) 招待講演

1. Perceptually Correct と Physically Correct -自由視点映像・複合現実感におけるモデル表現-;大田

友一, 第 13 回 画像の認識・理解シンポジウム(MIRU2010)プログラム, 釧路, (2010.7)

2. 「新たな飛躍に向けて、いま何をすべきか? ~SIG-MR, ISMAR の 10 余年を振り返って」; 竹村治雄, 大田友一, 田村秀行, 横矢直和, 日本バーチャルリアリティ学会誌, 15, 2, pp.8-15 (2010.6)

(B)その他の学会発表

1. 影を用いた選手位置推定法の高さ情報を用いた改善; 糟谷望, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 2011 年総合大会講演論文集, 2, p.105 (2011.3)
2. MR-Mirror における両眼視差による立体映像提示の検討; 佐藤秀昭, 北原格, 大田友一, 電子情報通信学会 2011 年総合大会講演論文集, 2, p.120 (2011.3)
3. 屋外における複合現実型ジオラマモデルの位置操作・表示方式; 林将之, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 2011 年総合大会講演論文集, 2, p.117 (2011.3)
4. Infrared and Visible Spectrum Camera Calibration; Senya Polikovsky, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, 電子情報通信学会 2011 年総合大会講演論文集, 2, p.104 (2011.3)
5. 複合現実感技術を用いた3次元描画方式の検討; 佐々川雄貴, 北原格, 大田友一, 電子情報通信学会 2011 年総合大会講演論文集, 2, p.128 (2011.3)
6. 環境ステレオカメラ画像とモバイルカメラ画像の対応点探索手法; 水流 弘達, 北原格, 大田友一, 電子情報通信学会 2011 年総合大会講演論文集, 2, p.116 (2011.3)
7. 複合現実感型試着システムのための色合わせ法; 出嶋 康之, 大田友一, 北原格, 電子情報通信学会 2011 年総合大会講演論文集, 2, p.118 (2011.3)
8. 仮想環境を用いた照明計画支援システム; 徳本晋之介, 北原格, 大田友一, 電子情報通信学会 2011 年総合大会講演論文集, 2, p.121 (2011.3)
9. 記録された歩行者の様子の複合現実型圧縮提示; 長島 正典, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 2011 年総合大会講演論文集, 2, p.108 (2011.3)
10. カメラと人物との間の距離に依存しないグラフ構造特徴量の一検討; 並木重哲, 亀田能成, 大田友一, 電子情報通信学会 2011 年総合大会講演論文集, 2, p.184 (2011.3)
11. 遠隔協調型複合現実感における距離画像を用いた物体の立体提示; 王ジン, 北原格, 大田友一, 電子情報通信学会 2011 年総合大会講演論文集, 2, p.119 (2011.3)
12. 動的シーンにおける環境ステレオカメラ画像を用いたモバイルカメラの位置・姿勢推定; 水流弘達, 北原格, 大田友一, 動的画像処理実利用化ワークショップ DIA2011, 4 pages (2011.3)
13. MR-Mirror : 鏡像を用いた仮想世界と現実世界の融合提示; 佐藤秀昭, 北原格, 大田友一, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, 110, 381, pp.341-346 (2011.1)
14. 直感的で正確な自由視点映像撮影インタフェースの開発; 渡邊哲哉, 北原格, 亀田能成, 大田友一, 第 18 回インタラクティブシステムとソフトウェア利用に関するワークショップ(WISS2010), 2 pages (2010.12)

15. 運動視差を再現した鏡の中の仮想世界と現実世界の融合提示; 佐藤秀昭, 北原格, 大田友一, 第 18 回インタラクティブシステムとソフトウェア利用に関するワークショップ(WISS2010), 3 pages (2010.12)
16. 街中での歩行者カメラによるオンライン位置推定のための検討; 亀田能成, 大田友一, 画像の認識・理解シンポジウム 2010 論文集(MIRU2010), 6 pages (2010.7)
17. 見え方の時間的な変化を考慮した環境カメラ画像群の色合わせ手法; 宇津野雄亮, 北原格, 大田友一, 画像の認識・理解シンポジウム 2010 論文集(MIRU2010), pp.1815-1820 (2010.7)
18. Detection and Measurement of Facial Micro-Expression Characteristics for Psychological Analysis; Senya Semion Polikovskiy, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, 信学技報 IEICE Technical Report PRMU, 110, 97, pp.57-64 (2010.6)
19. 歩行者視点カメラによる歩行者位置オンライン推定の取り組み; 亀田能成, 大田友一, 信学技報 IEICE Technical Report PRMU, 110, 27, pp.67-72 (2010.5)
20. Maneuvering of Virtual Diorama for Finding Attention in Wide Area Outdoor Workspace ; Masayuki Hayashi, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, Yuichi Ohta, Proceedings of the 3rd Korea-Japan Workshop on Mixed Reality (KJMR2010), pp.71-80 (2010.4)
21. MR-Mirror:A Method to Merge Real and Virtual World by Using Mirror Metaphor; Hideaki Satoh, Itaru Kitahara, Yuichi Ohta, Proceedings of the 3rd Korea-Japan Workshop on Mixed Reality (KJMR2010), pp.81-93 (2010.4)

## 5. 連携・国際活動・社会貢献、その他

2009 年度は下記のイベント・展示会に参加し、広く社会に研究成果を広報した。  
また、2010 年度も引き続き(株)日本電気と共同研究を実施した。

### 大学院専攻研究公開(展示)

日時:2010.5.8, 2010.6.5 (いずれも 10:00-16:00)

会場:筑波大学第三エリア

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

### イノベーション・ジャパン 2010(新技術説明会)

開催日:2010.9.29

会場:東京国際フォーラム

・説明会番号 PI-05

・テーマ名: 直感的閲覧が可能な 3 次元自由視点映像ブラウザ