

情報基盤研究部

Advanced Computing Center

部長 戎崎 俊一

EBISUZAKI, Toshikazu

当研究部は、世界に突出した能力を持つ計算機ハードウェアとソフトウェアを開発するとともに、これをユーザーに提供し、もって理研の研究業務を牽引することを目的としている。計算科学技術推進室では、分子動力学シミュレーションや量子化学計算用の超高速の専用計算機の開発、スーパーコンピュータ VPP-700E を使った超並列アルゴリズムの開発、およびそれを使った、生体高分子、鉱物などの結晶、流体力学などのシミュレーションによる研究を進めている。イメージ情報技術開発室では、研究対象の計算機上の情報空間への入り口としての量子検出器や信号処理システムの開発を推進しており、特に、対象の空間情報、時間情報、プローブ量子の波長情報、粒子種の拡張といった情報の多次元化を主軸として、超電導放射線検出器、中性子検出器、中性子光学素子などの開発・応用研究を行っている。情報環境室では、スーパーコンピュータおよび計算機ネットワークの管理・運用および運用ソフトウェアの開発を進めるとともに、研究情報の共有や事務処理の合理化なども進めている。

計算科学技術推進室

Computational Science Division

室長 戎崎 俊一

EBISUZAKI, Toshikazu

当室では、いくつかの計算機科学の重要な分野において、計算パワーを飛躍的に増大させることを目的としている。そのために超高速(~100 Tflops)専用計算機と、それを並列型スーパーコンピュータに超高速ネットワーク(~Gbps)で結合したシステムを構築する。当面、分子動力学シミュレーション、行列演算、ダイナミックプログラミング用超高速専用計算機の開発を進める。また、ピックバン以降の宇宙の歴史を明らかにし、第二の地球を見つけるための、口径 10m の宇宙望遠鏡の実現を目指し、宇宙ステーションによる主鏡の組立手法の研究、および 10m 宇宙望遠鏡の天文学に与えるインパクトの評価の研究を進める。高速グラフィクスワークステーションを使ったシミュレーション結果を、リアルタイムで可視化・体感化する技術を開発する。

1. 専用計算機群の開発研究

超高速(~100 Tflops)の専用計算機とスーパーコンピュータを高速(~Gbps)のネットワークで結合した、ヘテロジニアス計算機システムを構築する。超高速専用計算機は、分子動力学シミュレーション、行列演算、量子化学計算について開発を進めた。

(1) 分子動力学シミュレーション専用計算機の開発(戎崎^{*1}, 薄田^{*1}, 成見^{*2}, 末永^{*2}, 古沢^{*1}, 古石^{*1}, 二木^{*2}, 沖本^{*2})

大規模な分子動力学シミュレーションは、タンパク質の三次元構造や機能を解明したり、岩石などの超高压状態に

おける結晶構造や物性を研究する基本的な手段になっている。当研究では、この分子動力学シミュレーション用の超高速計算機を開発し、タンパク質や鉱物の超高压物性の研究の飛躍的な発展を図る。分子動力学シミュレーションでは、クーロン力やファン・デア・ワールス力などの非結合力の計算がその計算時間の大部分を占める。これらの中心力を計算して積算する専用パイプラインを持った LSI を大規模に並列接続し、全体として 75 Tflops の分子動力学専用計算機 Molecular Dynamics Machine (MDM) を完成させた。今後は AMBER や CHARM などの広く使われている分子動力学シミュレーションソフトを移植するとともに、タンパク質などの生体高分子、鉱物の溶解再結晶化、気体からの核生成シミュレーションを実施する。

2. 宇宙ステーションにおける大型天体観測装置組み立ての研究(戎崎, 海老塚^{*1})

天文学をはじめとする宇宙科学においては、口径 10m を超える大きな口径の望遠鏡を重力や地球の大気による吸収や擾乱がない軌道に設置して観測をすることが、次のブレークスルーを生むための必須条件である。一方、ロケットや宇宙シャトルにより、外形寸法が 4m を超える構造物を宇宙に運ぶことは、当面不可能である。この限界を打破して大きな望遠鏡を構築するためには、軌道上で折りたたんだものを展開するか分割した部品を組み立てなければならない。

宇宙ステーションは高精度な光学系を展開・組み立て・試験するのに理想的な環境である。組み立てられた望遠鏡は試験観測で機能が確認されてから、宇宙ステーションの振動や化学的汚染の問題を避ける。独立衛星として本格的な天体観測を行うことを想定している。さらには数年に一度回収して故障の修理や部品交換、観測装置の更新を行うことにより、高価な望遠鏡の科学的な寿命を延長することが可能になる。

当室は欧州宇宙機構 (ESA) とアメリカ航空宇宙局 (NASA) との協力のもと、宇宙ステーションに取り付けて最高エネルギー宇宙線を検出する Extreme Universe Space Observatory (EUSO: 口径約 2.5 m) の開発を行っている。また、国立天文台が提案する位置天文学望遠鏡 (口径 2 m の近赤外望遠鏡)、さらには大型 EUSO (口径約 10 m) や宇宙の歴史を解き明かし、系外惑星の探査を網羅的に行う宇宙すばる望遠鏡 (口径 10 m の可視光広望遠鏡) などについて、宇宙ステーションにおける展開・組み立て・試験を想定した検討を行っている。

3. 高度情報技術を使ったヒューマンインターフェースの研究

(1) リアルタイム可視化 (戒崎, 古石^{*1})

シミュレーション結果についての人間の直感的な理解を助けるため、シミュレーションデータのリアルタイム可視化および体感化できるシステムを構築する。

(2) 情報技術を使ったハンズオン教育研究 (戒崎, 古庄^{*1}, 皆川^{*3})

パーソナルコンピュータやインターネットを駆使したハンズオン教育の研究を進める。まず、米国で始まった科学教育の改革運動ハンズ・オン・ユニバースに参加し、日本ハンズ・オン・ユニバース協会を設立してその日本における推進を計った。また、毎週土曜日の午後に行われる科学技術館ユニバースのライブショーの運営に参加し、そのコンテンツの充実を図った。さらに、可搬型のシステムを開発し、要請に応じてユニバースライブショーを全国の科学館においても行えるように、この活動は広報室と協力して進めている。

^{*1} 協力研究員, ^{*2} 基礎科学特別研究員, ^{*3} 研究協力員

誌上発表 Publications

(原著論文) *印は査読制度がある論文誌

Okimoto N., Tsukui T., Hata M., Hoshino T., and Tsuda M.: "Hydrolysis mechanism of the phenylalanine-proline peptide bond specific to HIV-1 protease: Investigation by the ab initio molecular orbital method", *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 7349–7354 (1999). *

Pichierri F. and Sarai A.: "Elastic properties of the poly-L-glycine α -helix from periodic SCF-LMO calculations", *Chem. Phys. Lett.* **322**, 536–542 (2000). *

Okamoto K., Liou J. G., and Ogasawara Y.: "Petrology of the diamond-grade eclogite in the Kokehetav Massif, northern Kazakhstan", *Isl. Arc* **9**, 379–399 (2000). *

Morishita T.: "Fluctuation formulas in molecular-dynamics simulations with the weak coupling heat

bath", *J. Chem. Phys.* **113**, 2976–2982 (2000). *

Okamoto K., Maruyama S., and Isozaki Y.: "Accretionary complex origin of the Sanbagawa, high P/T metamorphic rocks, Central Shikoku, Japan: Layer-parallel shortening structure and green-stone geochemistry", *J. Geol. Soc. Jpn.* **106**, 70–86 (2000). *

Suenaga A., Yatsu C., Komeiji Y., Uebayasi M., Meguro T., and Yamato I.: "Molecular dynamics simulation of *trp*-repressor/operator complex: Analysis of hydrogen bond patterns of protein-DNA interaction", *J. Mol. Struct.* **526**, 209–218 (2000). *

Iitaka T. and Ebisuzaki T.: "Calculating Feynman diagrams in time domain", *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **138**, 66–71 (2000). *

口頭発表 Oral Presentations

(国際会議等)

Suenaga A., Okimoto N., and Ebisuzaki T.: "Molecular dynamics simulation of protein folding", 3rd East Asian Biophysics Symp. (EABS2000), Kyongju, Korea, May (2000).

Kuo C.-C., Takamasu K., Yamamoto A., Sunouchi K., Wada S., Kase K., and Tashiro H.: "Wavelength scanning interferometer for surface profile measurement: The influence of scanning modes on wide range wavelength scanning", 6th Int. Conf. on Automation Technology, (National Taiwan University of Science and Technology), Taipei, Taiwan, May (2000).

Morishita R. and Ebisuzaki T.: "EMFmodel: A forward model for the thermal evolution of the earth", Spring Meet. 2000, (American Geophysical Union), Washington D.C., USA, May (2000).

Morishita R. and Ebisuzaki T.: "A one-dimensional thermal evolution model of the earth", 2000 Western Pacific Geophysical Meet., (American Geophysical Union), Washington D.C., USA, June (2000).

Masumo Y., Eto H., Nozawa M., and Saijo O.: "Study on natural frequency of floating composite elastic plate", 9th Pacific Congr. on Marine Science and Technology (PACON 2000), (University of Hawaii), Honolulu, USA, June (2000).

Saijo O., Eto H., Masumo Y., Suzuki H., and Maruyoshi K.: "Structural analysis of floating artificial base-buildings interaction", 1st Korea-Japan Symp. on Oceanic Architecture and Coast Utilization, (Korea Maritime University), Pusan, Korea, Aug. (2000).

Yatsuyanagi Y., Ebisuzaki T., Hatori T., and Kato T.: "Filamentation of the current-vortex sheet", Int. Congr. on Plasma Physics/42nd Ann. Meet. of the Division of Plasma Physics of the American Physical Soc., (Hydro-Quebec and Institut National de la Recherche Scientifique), Québec, Canada, Oct. (2000).

Morishita T.: "Structure of liquid phosphorus: Constant-pressure first-principles molecular dynamics simulations", Conf. on Computational Physics 2000

(CCP2000), (IUPAP), Gold Coast, Australia, Dec. (2000).

(国内会議)

郭志徹, 高増潔, 山本明弘, 和田智之, 洲之内啓, 加瀬究, 田代英夫: “波長走査干渉計による表面形状測定 (第1報): 超広帯域波長走査”, 2000年度精密工学会春季大会学術講演会, 東京, 3月(2000).

山本明弘, 洲之内啓, 和田智之, 郭志徹, 山口一郎, 田代英夫: “電子制御式チタンサファイアレーザーを用いた波長走査干渉計”, 第25回光波センシング技術研究会, (応用物理学会), 東京, 6月(2000).

郭志徹, 山本明弘, 洲之内啓, 和田智之, 田代英夫: “電子制御波長可変 Ti:sapphire レーザーを用いた波長走査干渉計による表面形状測定”, 第61回応用物理学会学術講演会, 札幌, 9月(2000).

八柳祐一, 戎崎俊一, 羽鳥尹承, 加藤鞆一: “電流・渦シートのフィラメント化”, 日本物理学会第55回年次大会, 新潟, 9月(2000).

川端哲也, 藤井貢, 浦田裕次, 綾仁一哉, 五百蔵雅之, 河合誠之, 海老塚昇: “ガンマ線バースト即時分光観測システムの開発”, 第2回天網の会, (wideプロジェクト, 天文情報処理研究会), 倉敷, 11月(2000).

川端哲也, 綾仁一哉, 五百蔵雅之, 藤井貢, 浦田裕次, 河合誠之, 海老塚昇: “ガンマ線バースト即時分光観測システムの開発”, 日本天文学会2001年春季年会, 千葉, 3月(2001).

八柳祐一, 戎崎俊一, 羽鳥尹承, 加藤鞆一, 加藤鞆一: “渦・電流シートのフィラメント化”, 日本天文学会2001年春季年会, 千葉, 3月(2001).

Mr. Toshikazu MINAGAWA *2

Dr. Yousuke OHNO *2

Dr. Ryutaro SUSUKITA *2

Dr. Noboru EBIZUKA *2

*1 Special Postdoctoral Researcher

*2 Contract Researcher

Visiting Members

Dr. Tetsuya SHIMIZU

Dr. Buritsitsig BAI

Dr. Ritsuo MORISHITA

Dr. Taku KOMURA

Dr. Fabio PICHIERRI

Dr. Christopher PAKINSON

Dr. Kholmirzo T. KHOLMURODOV

Dr. Tsuyoshi KOMIYA

Dr. Shinobu TANIMURA

Mr. Anh TRAN VE VUET

Mr. Takahiro OOSATO

Mr. Hiroaki ETO

Mr. Hidehiko AGATA (Natl. Astron. Observatory)

Dr. Syuichi HIRONO (Lab. Phys. Chem. Drug Design, Sch. Pharm. Sci., Kitasato Univ.)

Dr. Sigenori MARUYAMA (Dept. Earth Planet. Sci., Tokyo Inst. Technol.)

Dr. Takashi YABE (Dept. Built Environ., Tokyo Inst. Technol.)

Dr. Takafumi HIRATA (Fac. Sci., Tokyo Inst. Technol.)

Dr. Toshiro TANIMOTO (Fac. Sci., Tokyo Inst. Technol.)

Dr. Yukio ISOZAKI (Dept. Gen. Systems Stud., Grad. Sch. Arts Sci., Univ. Tokyo)

Dr. Keiji IWATA (Dept. Earth Planet. Mater. Sci., Fac. Sci., Hokkaido Univ.)

Dr. Yoshiki FUJIWARA (Dept. Earth Planet. Mater. Sci., Fac. Sci., Hokkaido Univ.)

Dr. Sumio MIYASHITA (Dept. Geol., Fac. Sci., Niigata Univ.)

Dr. Akira ISHIWATARI (Fac. Sci., Kanazawa Univ.)

Dr. Teruo WATANABE (Dept. Earth Planet. Mater. Sci., Fac. Sci., Hokkaido Univ.)

Dr. Hiroaki GOUDA (Sch. Pharm. Sci., Kitasato Univ.)

Dr. Noriyuki YAMAOTSU (Sch. Pharm. Sci., Kitasato Univ.)

Dr. David M. BIRD (Dept. Phys., Univ. Bath, UK)

Dr. Shigeru IDA (Dept. Earth Planet. Sci., Tokyo Inst. Technol.)

Dr. D. J. OSQUTHORPE (Molecular Grp., Univ. Bath, UK)

Dr. Philip LINDAN (Daresbury Lab., UK)

Dr. Kenji YASUOKA (Dept. Mech. Eng., Keio Univ.)

Dr. Susumu OKAZAKI (Interdiscip. Grad. Sch. Sci. Eng., Tokyo Inst. Technol.)

Dr. Ivan OLEINIK (Dept. Materials, Univ. Oxford, UK)

Research Subjects and Members of Computational Science Division

1. Development of Peta-FLOPS Special-Purpose Computers
2. Molecular Dynamics Simulation
3. Computational Quantum Chemistry
4. Human Body Simulation
5. Computer Applications for Education

Head

Dr. Toshikazu EBISUZAKI

Members

Dr. Toshiaki IITAKA

Dr. Noriyuki FUTATSUGI *1

Dr. Takahiro KOISHI *1

Dr. Tetsu NARUMI *1

Dr. Noriaki OKIMOTO *1

Dr. Atsushi SUENAGA *1

Dr. Tomoyuki YAMAMOTO *1

Mr. Hideaki FURUSAWA *2

Dr. Reiko FURUSHOU *2

Dr. Katsuyuki KAWAMURA (Interdiscip. Grad. Sch. Sci. Eng., Tokyo Inst. Technol.)
Dr. Masahiro ISHIKAWA (Fac. Ed. Human Sci., Yokohama Natl. Univ.)
Dr. Masaru TERABAYASHI (Fac. Eng., Kagawa Univ.)
Dr. Hiroshi YAMAMOTO (Fac. Sci., Kagoshima Univ.)
Dr. Ryo ANMA (Earth Sci., Univ. Tsukuba)
Dr. Tsutomu OTA (Fac. Sci., Tokyo Inst. Technol.)
Dr. Akira FURUKAWA (Natl. Inst. Radiol. Sci.)
Dr. Hiroshi YAMAGUCHI (Natl. Inst. Radiol. Sci.)
Dr. Tatsuhiko HARA (Build. Res. Inst., Ministry of Construction, Int. Inst. Earthquake Eng. (ISSEE))
Dr. Rendell ALISTAIR (Supercomput. Facility, Australian Natl. Univ., Australia)
Dr. Toshihiro HANDA (Univ. Tokyo)
Dr. Yuuji SUGITA (Theor. Stud., Inst. Mol. Sci. Dept., Okazaki Natl. Res. Inst.)
Dr. Toshio KOBAYASHI (Fac. Eng., Soka Univ.)
Dr. Akira ISHII (Fac. Eng., Tottori Univ.)
Dr. Hitoshi MIURA (Image Dept., Musashino Art Univ.)
Mrs. Minh NGUYEN THI HONG (Vietnam Natl. Univ., Vietnam)
Mr. Naoki MATSUMOTO (Keio High Sch.)
Mr. Masamitsu GOTO (Sugamo Jr. High Sch.)

Mr. Ichiro CHIKAMI (Kagoshima Prefecfural Sch. Handicapped Children)
Dr. Yoshiyuki KANEKO (JST)
Dr. Yoshihide OGASAWARA (Sch. Ed., Waseda Univ.)
Dr. Tatsuki TUJIMORI (Grad. Sch. Natl. Sci. Technol., Kanazawa Univ.)
Dr. Hiroaki OZAWA (Sch. Ed., Naruto Univ. Ed.)
Dr. Eiichi TAKAZAWA (Fac. Sci., Niigata Univ.)
Dr. Xiao FENG (Interdiscip. Grad. Sch. Sci. Eng., Tokyo Inst. Technol.)
Dr. Toshihiro OMODAKA (Fac. Sci., Kagoshima Univ.)
Dr. Kei HIROSE (Fac. Sci., Tokyo Inst. Technol.)
Dr. Hiroshi OHTA (Fac. Sci., Tokyo Inst. Technol.)
Dr. Hikaru IWAMORI (Grad. Sch. Sci., Univ. Tokyo)
Dr. Daiji HIRATA (Kanagawa Prefectural Museum Natural History)
Dr. Yuji ORIHASHI (Earthquake Res. Inst., Univ. Tokyo)
Dr. Keith PRIESTLEY (Earth Sci., Cambridge Univ., UK)
Dr. Tomoyuki MATSUO (Fac. Health Sport Sci., Osaka Univ.)
Dr. Yoshiyuki MOCHIZUKI (Image Processing Group Multimedia Dev. Cen. Matsushita Electric Industrial Co.)

イメージ情報技術開発室 Image Information Division

室長 清水 裕彦
SHIMIZU, Hirohiko M.

科学的研究において、対象を情報化し計算機上で解析するという手法は広く行き渡っている。検出器と総称される装置は計算機上の情報空間への入り口であり、検出器から得られる情報の質や種類は解析方法や解析によって得られる科学的知識を左右する。当室では主に研究対象からの情報の多次元化を主軸として、検出器や信号処理システムの開発を推進している。多次元化として空間的情報、時間的情報の高度化に加えて、プローブの波長情報やプローブ粒子種の拡張を目指して開発研究を行うとともに、その技術が切り拓く新たな研究分野の総合的な研究を行っている。

1. 超伝導体検出器の研究開発(清水, 奥^{*1}, 滝澤^{*1}, 宮坂^{*1}, 大谷^{*2}, 佐藤^{*2}; 渡辺(地震国際フロンティア研究グループ); 池田(原子物理研))

本研究開発は、平成9年度発足の科学技術振興調整費知的基盤整備推進制度の課題「X線極限解析装置の研究開発」の一環として行われている。超伝導X線物性を用いた検出器は極めて優れたエネルギー分解能と半導体検出器とほぼ同等の優れた時間的特性を合わせ持つ次世代型の検出器で

あり、検出対象としても、遠赤外線からガンマ線に及ぶ極めて広い波長範囲の光子、荷電粒子一般、中性原子線、中性分子線からフォノン量子までと極めて高い汎用性が期待されるものである。現在、理研内において素子の作成、信号処理回路の開発から応用実験までを総合的に推進している。

上記研究開発における検出器開発では、主に超伝導トンネル接合素子(STJ)を用いて、keV領域のX線に対するエネルギー分解能が半導体検出器の理論限界より3倍程度優れた検出器を昨年までに実現してきた。本年度はこのSTJ素子の膜構造に改良を加えて軟X線から極端紫外域に有感な検出器を作成し、45 eV~1 keVで一光子分光検出を実現した。このエネルギー帯の光子の分光検出を検出器単体で実現したのは国内初である。特に、極端紫外線域は従来型検出器では分光器を用いない限り分光検出が不可能だった領域であり、光量の限られた対象の精密測定への道を切り拓くものである。その他、光子検出では、より低いエネルギー領域であるサブミリ波の検出器開発も始めている。

また、光子検出器以外への応用として、STJ素子特有の高速スイッチング特性を利用した重イオン検出器を考案し、