

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（～1 Pflops）専用計算機を構築する。分子動力学シミュレーション、行列演算、類似度検索計算用超高速専用計算機の開発を進めた。FPGAなどの再構成可能な論理デバイスを用いた、演算加速ボードとその利用技術の開発を推進した。また、口径10mと可視光と宇宙線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に必要なソフトウェア、ハードウェア技術の開発を推進した。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した。

1. 専用計算機群の開発研究（戎崎、沖本^{*1}、川井（敦）^{*1}、古石^{*1}、薄田^{*2}、平野^{*2}、高橋^{*2}、泰岡^{*3}；二木（ゲノム解析用コンピュータ研究開発チーム））

超高速（1pflops）の専用計算機を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。

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、結晶構造や物性を研究する基本的な手段になっている。本研究では、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、タンパク質や核生成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78 T.FLOPSの分子動力学専用計算機 Molecular Dynamics Machine (MDM) が2000年に完成した。MDMを用いて、狂牛病の原因とされるプリオンタンパク質のシミュレーションを行った。遺伝性プリオン病の原因となるアミノ酸変異を持つプリオンタンパク質は、時間の経過とともに β シート構造が増加することを確かめた。また、MDMへの境界要素法の移植を進めた。

2. 宇宙ステーションにおける大型天体観測装置組立ての研究（戎崎；海老塚（VCAD用高速計算デバイス開発チーム））

天文学をはじめとする宇宙科学においては口径10メートル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ぬ。そこで宇宙における組立て技術の確立に必須の変化シミュレーションコードやツールとして、微量重力環境で使う組立てや展開、その形状試作と鏡の超軽量を取り扱うマルチボディシミュレーションを、「ものづくり情報技術統合化研究プログラム」との連携の基に開発を推進した。

また宇宙ステーションに取り付ける超高エネルギー宇宙線望遠鏡EUSOの光学系製作技術、および焦点面検出器の開発を素形材研究室、イメージ情報技術開発室と共同で推進した。

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（戎崎、高幣^{*4}）

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した。今後それをPCなどに移植し、理科教育・科学技術普及活動に供する予定である。

(2) 情報技術を使ったハンズオン教育研究（戎崎、川井（和）^{*4}、皆川^{*4}、金子^{*4}、木村^{*4}）

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ている。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図った。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} 基礎科学特別研究員、^{*2} 協力研究員、^{*3} 共同研究員、^{*4} 研究協力員

Computational Science Division aims at developing special-purpose computers (1 Pflops) for molecular dynamics simulation, quantum chemistry, matrix operation, Homology search calculations. We also evaluate the impact of 10 m sized space-telescope on astronomy and develops assembly method of its main mirror. This division also develops a real-time visualization system for simulation results aiming at the use of scientific education and outreach activity in formal and in formal education.

1. Development of the special-purpose computers

We developed the heterogeneous computer system which is combined the ultra high-speed special-purpose

computer (~ 1 pflops). This system is for a molecular dynamics (MD) simulation, a matrix calculation and a quantum chemistry simulation.

Large scale MD simulation is a fundamental technique to investigate the protein structures and their functions and to study the crystal structures and physical properties of materials. In this work, we developed the ultra high-speed computer for MD simulation and exponentially evolved the investigation of proteins.

The calculation of the non-bonding forces, such as the Coulomb force and the van der Waals force, have a high proportion of simulation time in MD simulation. Molecular Dynamics Machine (MDM) whose peak performance was 78 Tflops was completed in 2001. LSIs which have the special-pipe-lines for calculation of non-bonding forces are massively parallelized in MDM.

We carried out the simulation of prion protein, which causes BSE. We found that β -sheet structures increases in a mutant prion protein. We also implement Boundary Element Method to MDM.

2. Study for construction of large telescope on board the International Space Station

There is a general agreement that a breakthrough in the field of space science will be provided by space telescopes which enable astronomical observations without any absorption and disturbance due to the earth atmosphere. Shorter wavelength has advantage for direct imaging of structure near by black holes or extra solar planets because the ideal angular resolution of a telescope is proportional to wavelength. For example, it is evaluated that an earth like planet of extra solar system distant from 30 light years would be observed at 600 nm by a telescope of 20 to 30 m in diameter. On the other hand, the planet would be observed at 200 nm by a telescope of 7 to 30 m in diameter. However ultraviolet below 300 nm could not propagate onto the ground by means of ozone absorption and air sol scattering. The latest rocket and space shuttle could not carry a payload exceeding 4 m in diameter. Expansion of a folding structure or assembling of divided parts is necessary for construction of a large space telescope, which overcomes the limitation of the size. We develop the multi-body simulation, based on collaboration with Integrated Volume-CAD System Research Program, for the expansion and assembling of a space telescope with lightweight mirror in the micro gravity environment. We also developed optical module and focal surface detector of EUSO, that explores the ultra-high energy cosmic-rays in collaboration with Materials Fabrication Laboratory and Image Information Division.

3. Advanced Human Interface with IT technology

(1) Real-time visualization technique

Real-time visualization technique has been developed for intuitive understanding of phenomena in simulation.

(2) The research of "Hands-on" for education using information technology

We are going on with a research of "Hand-on" for education that uses excellent commands of the personal computers and the Internet. First, we participated in reform movement of science education "Hands-on Universe" in the United States. Then "Japan Association Hands on Universe" was established, and is promoting this activity into Japan. And we participate in the management of a science live show "UNIVERSE" on every Saturday afternoon at the Science Museum, Tokyo, and offered those contents.

Furthermore, we developed a portable system, and are going to provide "UNIVERSE Liveshow" to the requests by the Science Museum in the whole country of Japan according. This activity is in cooperation with the public relations office.

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. Masafumi IKEDA^{*1}
Dr. Yasuhiro ISHIMINE^{*1}
Dr. Atsushi KAWAI^{*1}
Dr. Takahiro KOISHI^{*1}
Dr. Tetsuya MORISHITA^{*1}
Dr. Noriaki OKIMOTO^{*1}
Dr. Tomoyoshi SHIMOBABA^{*1}
Dr. Hisaaki SHINKAI^{*1}
Dr. Masanori TACHIKAWA^{*1}
Dr. Tomoyuki YAMAMOTO^{*1}
Dr. Yuichi YATSUYANAGI^{*1}
Dr. Nguyen Hai CHAU^{*2}
Mr. Hideaki FURUSAWA^{*2}
Mr. Daiki HAYASHI^{*2}
Dr. Yoshinori HIRANO^{*2}
Ms. Iriko KANEKO^{*2}
Mr. Kazuhiko KAWAI^{*2}
Dr. Kholmirzo T. KHOLMURODOV^{*2}
Ms. Kaoru KIMURA^{*2}
Dr. Tomoyuki KINJYOU^{*2}
Mr. Toshikazu MINAGAWA^{*2}
Dr. Ryutaro SUSUKITA^{*2}
Dr. Toru TAKAHASHI^{*2}
Mr. Toshiyuki TAKAHEI^{*2}
Dr. Taihei YANO^{*2}

^{*1} Special Postdoctoral Researcher

^{*2} Contract Researcher

in collaboration with

Dr. Noboru EBIZUKA (V-CAD High Speed Computer System Team)

Dr. Noriyuki FUTATSUGI (High Performance Biocom-

puting Research Team, GSC)

Visiting Members

Mr. Hidehiko AGATA (Natl. Astro. Obs.)
Dr. Rendell ALISTAIR (Supercomput. Facility Australian Natl. Univ., Australia)
Dr. Buritsitsig BAI (CFD Technol. Cen., Natl. Aerosp. Lab. Jpn.)
Dr. David M. BIRD (Dept. Phys. Univ. Bath, UK)
Mr. Ichiro CHIKAMI (Kagoshima Pref. Sch. Handicapped Children)
Dr. Xiao FENG (Interdiscip. Grad. Sch. Sci. Eng., Tokyo Inst. Technol.)
Dr. Akira FURUKAWA (Natl. Inst. Radiol. Sci.)
Mr. Masamitsu GOTO (Sugamo Jr. High Sch.)
Dr. Hiroaki GOUDA (Sch. Pharm. Technol., Kitasato Univ.)
Dr. Jill GREADY (John Curtin Sch. Med. Res., Australian Univ., Australia)
Dr. Toshihiro HANDA (Univ. Tokyo)
Dr. Syuichi HIRONO (Dept. Phys. Chem. Drug Design, Sch. Pharm. Sci., Kitasato Univ.)
Dr. Kei HIROSE (Fac. Sci., Tokyo Inst. Technol.)
Mr. Satoru HOSONO (Dept. Electro. Mech. Eng., Chiba Univ.)
Dr. Shigeru IDA (Dept. Earth Planet. Sci., Tokyo Inst. Technol.)
Dr. Noya INOUE (Fac. Sci., Saitama Univ.)
Dr. Akira ISHII (Fac. Eng., Tottori Univ.)
Dr. Akira ISHIWATARI (Fac. Sci., Kanazawa Univ.)
Dr. Tomoyoshi ITO (Dept. Electro. Mech. Eng., Chiba Univ.)
Dr. Keiji IWATA (Dept. Earth Planet. Mater. Sci., Fac. Sci., Hokkaido Univ.)
Dr. Yoshiyuki KANEKO (JST)
Dr. Isao KAWADA (Univ. Sherbrooke, Canada)
Dr. Katsuyuki KAWAMURA (Interdiscip. Grad. Sch. Sci. Eng., Tokyo Inst. Technol.)
Dr. Tadashi KIFUNE (Fac. Eng., Shinshu Univ.)
Dr. Toshio KOBAYASHI (Fac. Eng., Soka Univ.)
Dr. Yukio KOBAYASHI (Fac. Eng., Soka Univ.)
Mr. Yoshio KUSHIDA (Yatsugatake South Base Obs.)
Dr. Philip LINDAN (Daresbury Lab., UK)
Dr. Sigenori MARUYAMA (Dept. Earth Planet. Sci., Tokyo Inst. Technol.)
Dr. Sigeo MARUYAMA (Sch. Eng., Univ. Tokyo)
Mr. Tatsushi MATSUBAYASHI (Tokyo Inst. Technol.)
Mr. Naoki MATSUMOTO (Keio High Sch.)
Dr. Tomoyuki MATSUO (Fac. Health Sport Sci., Osaka Univ.)
Dr. Hitoshi MIURA (Image Dept., Musashino Art Univ.)
Dr. Yoshiyuki MOCHIZUKI (Image Processing Group, Multimedia Dev. Cen., Matsushita Electric Ind. Co., Ltd.)

Dr. Unpei NAGASHIMA (Natl. Inst. Mat. Chem. Res.)
Dr. Osamu NISHIMURA (Nagano Tech. Coll., Tohoku Univ.)
Dr. Yoshihide OGASAWARA (Sch. Edu., Waseda Univ.)
Dr. Tadashi OGITSU (Inst. Solid State Phys., Univ. Tokyo)
Ms. Keiko OKA (Jpn. Women's Univ.)
Dr. Susumu OKAZAKI (Interdiscip. Grad. Sch. Sci. Eng., Tokyo Inst. Technol.)
Dr. Ivan OLEINIK (Dept. Mater., Univ. Oxford, UK)
Dr. Toshihiro OMODAKA (Fac. Sci., Kagoshima Univ.)
Dr. Yuji ORIHASHI (Earthquake Res. Inst., Univ. Tokyo)
Mr. Osamu OSHIMA (Kamogata High Sch.)
Dr. Hiroaki OZAWA (Sch. Edu., Naruto Univ. Edu.)
Dr. Keith PRIESTLEY (Earth Sci., Cambridge Univ., UK)
Dr. Larsen SHAWN (Lawrence Livermore Natl. Lab., USA)
Dr. Astushi SUENAGA (Comput. Biol. Res. Cen., Natl. Inst. Adv. Ind. Sci. Technol.)
Dr. Masatoshi SUGIMOTO (Pressure Sensitive and Laminating Adhesives Res. Dev. Div., Nippon NSC Ltd.)
Dr. Yuuji SUGITA (Theor. Stud. Inst. Mol. Sci. Dept. Okazaki Natl. Res. Inst.)
Dr. Eiichi TAKAZAWA (Fac. Sci., Niigata Univ.)
Mrs. Minh NGUYEN THI HONG (Vietnam Natl. Univ., Vietnam)
Dr. Masaru TOMITA (Inst. Adv. Biosci., Keio Univ.)
Dr. Shinji TSUNUYUKI (Inst. Solid State Phys., Univ. Tokyo)
Dr. Tatsuki TUJIMORI (Grad. Sch. Natl. Sci. Technol., Kanazawa Univ.)
Dr. Gentarou WATANABE (Univ. Tokyo)
Dr. Takashi YABE (Dept. Built Environ., Tokyo Inst. Technol.)
Dr. Hiroshi YAMAGUCHI (Natl. Inst. Radiol. Sci.)
Dr. Noriyuki YAMAOTSU (Sch. Pharm. Technol., Kitasato Univ.)
Dr. Kenji YASUOKA (Dept. Mech. Eng., Keio Univ.)

誌 上 発 表 Publications

[雑誌]

(原著論文) * 印は査読制度がある論文

Ebisuzaki T., Takahashi Y., and Pennypacker C.: "Space Hands-On Universe Telescope (SHOUT) to be built on JEM exposure facility of the International Space Station", *Frontiers Science Ser. No. 27: Astronomical Education with the Internet*, pp. 181-185 (1998). *

Pennypacker C., Ebisuzaki T., Handa T., Nugent P., Fruchter A., Pain R., Aldering G., Hammer F., Groom D., Takahashi Y., Hadaway J., Goobar A., Nomoto K.,

- Issac M., Goldhaber G., Perlmutter S., MacKenty J., Branch D., Tsiopa O., Gnedin Y., and Jochum J.: “A one-meter aperture wide-field camera for the Japanese Exposure Module on Space Station”, AIP Conf. Proc. **458**, 176–182 (1999). *
- Takahashi Y., Ebisuzaki T., and Pennypacker C.: “Space Hands-On Universe Telescope and orbiting Wide-angle Light-collector telescope to be built on the Japanese Experiment Module Exposure Facility of the International Space Station”, AIP Conf. Proc. **458**, 183–186 (1999). *
- Kholmurodov K. T., Smith W., Yasuoka K., and Ebisuzaki T.: “A highly vectorised “link-cell” FORTRAN code for the DL-POLY molecular dynamics simulation package”, Comput. Phys. Commun. **125**, 167–192 (2000). *
- Kholmurodov K. T., Smith W., Yasuoka K., Dardon T., and Ebisuzaki T.: “A smooth-particle mesh Ewald method for DL-POLY molecular dynamics simulation package on the Fujitsu VPP700”, J. Comput. Chem. **21**, 1187–1191 (2000). *
- Ikeda M., Oka T., Tatematsu K., Sekimoto Y., and Yamamoto S.: “The distribution of atomic carbon in the Orion giant molecular cloud 1”, Astrophys. J. Suppl. Ser. **139**, 467–485 (2002). *
- Okimoto N., Yamanaka K., Suenaga A., Hata M., and Hoshino C.: “Computational studies on prion proteins: Effect of Ala¹¹⁷→Val mutation”, Biophys. J. **82**, 2746–2757 (2002). *
- Ozawa Y., Hanaoka S., Saito R., Washio T., Nakano S., Shinagawa A., Ito M., Shibata K., Carninci P., Konno H., Kawai J., Hayashizaki Y., and Tomita M.: “Comprehensive sequence analysis of translation termination sites in various eukaryotes”, Gene **300**, 79–87 (2002). *
- Sakurai A., Fujimori S., Kochiwa H., Kitamura-Abe S., Washio T., Saito R., The RIKEN Genome Exploration Research Group Phase II Team, Carninci P., Hayashizaki Y., and Tomita M.: “On biased distribution of introns in various eukaryotes”, Gene **300**, 89–95 (2002). *
- Kochiwa H., Suzuki R., Washio T., Saito R., Kawai J., Shinagawa A., Shibata K., Yoshino M., Ito M., Ishii Y., Arakawa T., Hara A., Fukunishi Y., Konno H., Adachi J., Fukuda S., Aizawa K., Izawa M., Nishi K., Kiyosawa H., Kondo S., Yamanaka I., Saito T., Bono H., Carninci P., Okazaki Y., Miki R., Hayashizaki Y., and Tomita M.: “Inferring alternative splicing patterns in mouse from a full-length cDNA library and microarray data”, Genome Res. **12**, 1286–1293 (2002). *
- Koishi T., Kawase S., and Tamaki S.: “A theory of electrical conductivity of molten salt”, J. Chem. Phys. **116**, 3018–3026 (2002). *
- Morishita T.: “Phase transitions of liquid phosphorus: constant-pressure first-principles molecular dynamics simulations”, J. Non-Cryst. Solids **312/314**, 22–25 (2002). *
- Koishi T., Yasuoka K., Narumi T., Susukita R., Furusawa H., and Ebisuzaki T.: “Molecular dynamics study of the solidification process in alkali halide cluster”, J. Non-Cryst. Solids **312/314**, 332–336 (2002). *
- Okazaki Y., Furuno M., Kasukawa T., Adachi J., Bono H., Kondo S., Nikaido I., Osato N., Saito R., Suzuki H., Yamanaka I., Kiyosawa H., Yagi K., Tomaru Y., Hasegawa Y., Nogami A., Schonbach C., Konagaya A., Kurochkin I. V., Nagashima T., Tomita M., Carninci P., Hayatsu N., Hirozane T., Konno H., Nakamura M., Sakazume N., Sato K., Siraki T., Waki K., Kawai J., Aizawa K., Arakawa T., Fukuda S., Hashidume W., Imotani K., Ishii Y., Ito M., Kagawa I., Miyazaki A., Sasaki D., Shibata K., Yasunishi A., Hayashizaki Y., Hara A., Sakai K., Shinagawa A., and Yoshino M.: “Analysis of the mouse transcriptome based on functional annotation of 60,770 full-length cDNAs”, Nature **420**, 563–573 (2002). *
- Tachikawa M., Shimamura I., Bunker R., and Kimura M.: “Positron binding by molecules”, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B **192**, 40–41 (2002). *
- Fujii S., Okimoto N., Ebisuzaki T., Nojima T., Takagi M., and Takenaka S.: “Molecular dynamics investigation of the double stranded oligonucleotide d(AT)₆d(AT)₆”, Nucleic Acids Res. Suppl., No. 2, pp. 175–176 (2002). *
- Morishita T.: “Polymeric liquid of phosphorus at high pressure: First-principles molecular-dynamics simulations”, Phys. Rev. B **66**, 054204-1–054204-7 (2002). *
- Watanabe G., Sato K., Yasuoka K., and Ebisuzaki T.: “Microscopic study of slablike and rodlike nuclei: Quantum molecular dynamics approach”, Phys. Rev. C **66**, 012801(R)-1–012801(R)-5 (2002). *
- Shinkai H. and Hayward S. A.: “Fate of the first traversible wormhole: Black-hole collapse or inflationary expansion”, Phys. Rev. D **66**, 044005-1–044005-9 (2002). *
- Yoneda G. and Shinkai H.: “Advantages of a modified ADM formulation: Constraint propagation analysis of the Baumgarte-Shapiro-Shibata-Nakamura system”, Phys. Rev. D **66**, 124003-1–124003-10 (2002). *
- Ikeda T., Nakai Y., Otani C., Sato H., Oyama H., Kanai Y., Takizawa Y., Iwai Y., Morishita Y., Oku T., Ohshima N., Watanabe H., Miyasaka H., Kawai K., Kato H., Shimizu H. M., and Yamazaki Y.: “X-ray spectroscopy in atomic collision experiment using superconducting tunnel junctions”, Physica C **372/376**, 391–394 (2002). *
- Otani C., Takizawa Y., Sato H., Ikeda K., Ikeda T., Kawai K., Miyasaka H., Morishita T., Oku T., Shiki S., Shimizu H. M., and Watanabe H.: “Development of superconducting tunnel junctions as an energy-dispersive detector for UV and visible photons”, Physica C **372/376**, 399–402 (2002). *
- Yoneda G. and Shinkai H.: “Diagonalizability of constraint propagation matrices”, Classical Quantum Gravity **20**, L31–L36 (2003). *

Iitaka T. and Ebisuzaki T.: “Algorithm for linear response functions at finite temperatures: Application to ESR spectrum of $s=\frac{1}{2}$ antiferromagnet Cu benzoate”, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 047203-1–047203-4 (2003). *

(総説)

Iida K., Watanabe G., and Sato K.: “Formation of nuclear “pasta” in cold neutron star matter”, *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, No. 146, pp. 514–519 (2002).

清水宏晏, 飯高敏晃: “超高圧固体アルゴンの弾性定数とその第一原理計算”, *日本物理学会誌* **57**, 583–587 (2002).

(その他)

Iitaka T. and Ebisuzaki T.: “First-principles calculation of elastic properties of solid argon at high pressures”, *RIKEN Rev.*, No. 48, pp. 12–15 (2002).

[単行本・Proc.]

(原著論文) *印は査読制度がある論文

Ohno Y., Taiji M., Konagaya A., and Ebisuzaki T.: “MACE: Matrix calculation engine”, *Proc. 6th World Multiconference on Systemics, Cybernetics and Informatics (SCI 2002)*, Vol. 16: Computer Science 3, Orlando, USA, 2002–7, edited by Callaos N., Ebisuzaki T., and others, IIS, Orlando, pp. 514–517 (2002). *

成見哲, 薄田竜太郎, 川井敦, 古沢秀明, 古石貴裕, 泰岡顕治, 戎崎俊一, 小長谷明彦: “78Tflopsの分子動力学シミュレーション専用計算機MDM”, 並列処理シンポジウム論文集(情報処理学会シンポジウムシリーズ, Vol. 2002, No. 8), つくば, 2002–5, 情報処理学会, 東京, pp. 51–54 (2002). *

(総説)

斎藤輪太郎, 鈴木治和, 富田勝: “信頼性の高いタンパク質間相互作用ネットワークの構築とマイニング”, *実験医学別冊: 注目のプロテオミクスの全貌を知る!*, 磯辺俊明, 高橋信弘(編), 羊土社, 東京, pp. 135–142 (2003).

(その他)

Wada T., Ueno M., Ebisuzaki T., and Ohno Y.: “A near infrared survey of the LMC”, *Galaxy Interactions at Low and High Redshift (International Astronomical Union Symposium, No. 186)*, edited by Barnes J. E. and Sanders D. B., Kluwer, Dordrecht, p. 59 (1999).

Iitaka T. and Ebisuzaki T.: “First principles calculation of elastic properties of solid argon at high pressures”, *Proc. 4th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations*, Taipei, Taiwan, 2001–10, edited by Guo G. Y., National Center for Theoretical Sciences, Taipei, pp. 166–169 (2001).

Iitaka T.: “First principles calculation of elastic properties of solid argon at high pressures”, *Activity Report 2001, Materials Design and Characterization Laboratory, Supercomputer Center, Institute for Solid State Physics, University of Tokyo*, Tokyo, pp. 49–50 (2002).

口頭発表 Oral Presentations

(国際会議等)

Oka K., Klaus W., Fujino M., and Kodate K.: “Analysis of Talbot array illuminators with high compression ra-

tios using rigorous diffraction theory”, *Diffraction Optics 2001*, (European Optical Society), Budapest, Hungary, Oct. (2001).

Iitaka T. and Ebisuzaki T.: “First principles calculation of elastic properties of solid argon at high pressures”, *4th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations*, (National Center for Theoretical Sciences), Taipei, Taiwan, Oct. (2001).

Nakayama Y., Yugi K., Yamada Y., and Tomita M.: “Modeling environment for large-scale models using the E-CELL system”, *12th Int. Conf. on Genome Informatics (GIW 2001)*, Tokyo, Dec. (2001).

Shinkai H.: “Systematic understanding of asymptotical stability via constraint propagation analysis”, “Apples with Apples no Oranges” *Workshop on Formulations of Einstein Equations for Numerical Relativity*, (Miguel Alcubierre (ICN-UNAM) and Others), Mexico City, Mexico, May (2002).

Kochiwa H., Suzuki R., Washio T., Saito R., The RIKEN Genome Exploration Research Group Phase II Team, Bono H., Carninci P., Miki R., Okazaki Y., Hayashizaki Y., and Tomita M.: “Inferring alternative splicing patterns in mouse from a full-length cDNA library and micro-array data”, *7th Ann. Meet. of the RNA Soc.*, Madison, USA, May–June (2002).

Sakurai A., Fujimori S., Kochiwa H., Kitamura-Abe S., Washio T., Saito R., The RIKEN Genome Exploration Research Group Phase II Team, Carninci P., Hayashizaki Y., and Tomita M.: “On biased distribution of introns in various eukaryotes”, *7th Ann. Meet. of the RNA Soc.*, Madison, USA, May–June (2002).

Shinkai H.: “Re-formulate Einstein equations for stable numerical simulations”, *Int. Conf. on Theoretical Physics (TH-2002)*, Paris, France, July (2002).

Ebizuka N., Tai G., Eto H., Lin W., Ebisuzaki T., Ohmori H., Handa T., Takami H., and Takahashi Y.: “Development of SiC ultra-light mirror for large space telescope and for extremely huge ground-based telescope”, *Int. Symp. on Astronomical Telescopes and Instrumentation 2002*, (SPIE), Waikoloa, USA, Aug. (2002).

Morishita T.: “Liquid-liquid and liquid-solid phase transitions of phosphorus”, *5th Liquid Matter Conf. of the European Physical Soc.*, Konstanz, Germany, Sept. (2002).

Iitaka T.: “Quantum spin dynamics”, *JST Int. Symp. on Control of Molecules in Intense Laser Fields*, Tokyo, Sept. (2002).

Shinkai H.: “Re-formulating of the Einstein equations for stable numerical simulations”, *12th Workshop on General Relativity and Gravitation*, Tokyo, Nov. (2002).

Iitaka T.: “Computational quantum spin dynamics”, *Waseda Int. Symp. on Fundamental Physics: New Perspectives in Quantum Physics*, (Department of Physics, Waseda University), Tokyo, Nov. (2002).

Shinkai H. and Hayward S. A.: “Fate of the traversible wormholes: Black-hole collapse or inflationary expan-

- sion”, Waseda Int. Symp. on Fundamental Physics: New Perspectives in Quantum Physics, Tokyo, Nov. (2002).
- Saito R., Tomita M., Suzuki H., and Hayashizaki Y.: “Interaction generality, a measurement to assess the reliability of a protein-protein interaction”, 13th Int. Conf. on Genome Informatics (GIW 2002), Tokyo, Dec. (2002).
- Shinkai H.: “Basics to numerical relativity”, APCTP Winter School on Gravitation and Cosmology, (Asia Pacific Center for Theoretical Physics, Korea), Seoul, Korea, Jan. (2003).
- Suenaga A., Okimoto N., Futatsugi N., Hirano Y., Narumi T., Taiji M., and Konagaya A.: “Large scale molecular dynamics simulation of a biomolecule using MDGRAPE-2”, 8th Int. Symp. on Simulation Science, (The Graduate University for Advanced Studies), Hayama, Mar. (2003).
- Takada N., Futatsugi N., Suenaga A., Okimoto N., Hirano Y., Narumi T., Kawai A., Yasuoka K., Taiji M., Ebisuzaki T., and Konagaya A.: “Molecular dynamics simulation of a biomolecule with high accuracy and speed using MDGRAPE-2: benchmarks and parallelization”, 8th Int. Symp. on Simulation Science, (The Graduate University for Advanced Studies), Hayama, Mar. (2003).
- Iitaka T., Ebisuzaki T., Tse J. S., Sasaki S., and Shimizu H.: “Structure and spectroscopic properties of gas hydrates under high pressure: A density functional study”, Study of Matter at Extreme Conditions Conf. (SMEC2003), (Florida International University), Miami, USA, Mar. (2003).
- (国内会議)
- 川井敦, 牧野淳一郎: “P2M2 による高精度ツリーコードの実現”, 日本天文学会 2000 年春季年会, 東京, 4 月 (2000).
- 川井敦, 古石貴裕, 戎崎俊一: “分子動力学専用計算機 MDGRAPE-2 上のツリアルゴリズム”, 第 14 回分子シミュレーション討論会, 名古屋, 1 月 (2001).
- 岡恵子, Werner K., 藤野誠, 小館香椎子: “Rigorous Coupled-Wave Analysis (RCWA) を用いた高圧縮 Talbot Array Illuminator (TAIL) の評価”, 第 48 回応用物理学会関係連合講演会, 八王子, 3 月 (2001).
- 川井敦, 戎崎俊一: “MDGRAPE-2 クラスタ上の並列ツリーコード”, 日本天文学会 2001 年秋季年会, 姫路, 10 月 (2001).
- 岡恵子, Werner K., 藤野誠, 小館香椎子: “サブ波長構造をもつ高圧縮 Talbot array illuminator (TAIL) の解析”, Optics Japan 2001, (日本光学会), 東京, 11 月 (2001).
- 川井敦: “分子動力学専用計算機 MDM: 動作原理, ハードウェア構成, アプリケーション”, 第 5 回シミュレーション・サイエンス・シンポジウム, 岐阜, 12 月 (2001).
- 川井和彦, 木村薫, 奥野光, 山本泰士, 小池邦昭, 内藤誠一郎, 田代英俊, 縣秀彦, 戎崎俊一: “「北の丸望遠鏡」を用いた教育活動: 教育用リモート望遠鏡による画像配信の試み”, 日本天文学会 2002 年春季年会, 水戸, 3 月 (2002).
- 佐藤浩二, 小島恵一, 大根田英祐, 矢作渡, 鈴木宏史, 大里直樹, 河合純, Carninci P., 林崎良英, 大友泰裕, 村上和雄, 松原謙一, 山下智也, 東憲児, 鹿島剛輝, 鷲尾尊規, 富田勝, 菊池尚志: “イネの遺伝子と 3'-UTR の多様性との関係”, 第 102 回日本育種学会, 帯広, 8 月 (2002).
- 米田元, 真貝寿明: “安定な数値シミュレーションを行うための Einstein 方程式の定式化 2”, 日本物理学会 2002 年秋季大会, 東京, 9 月 (2002).
- 手嶋政廣, 川崎賀也, 清水裕彦, 宮坂浩正, 滝澤慶之, 竹田成宏, 榊直人, 川井和彦, 大森整, 森田晋也, 上原嘉宏, 山形豊, 鈴木亨, 林偉民, 上野嘉之, 高橋義幸, 永野元彦, 宮崎芳郎, 千川道幸, 村上敏夫, 井上直也, 福島雄也, 吉田滋, 栗原良将, 石川正, 金子敏明, 藤本順平, 木舟正, 北本俊二, 水本好彦, 梶野敏貴, 政池明, 近匡, 吉田篤正, 佐藤文隆, 戎崎俊一: “EUSO (Extreme Universe Space Observatory) 計画 (6): EUSO のめざす物理”, 日本物理学会 2002 年秋季大会, 東京, 9 月 (2002).
- 戎崎俊一, 清水裕彦, 川崎賀也, 滝澤慶之, 梶野敏貴, 高橋義幸, 守安精, 竹田成宏, 森田晋也, 佐藤文隆, 佐藤広海, 木舟正, 森嶋隆裕, 吉田滋, 宮崎芳郎, 永野元彦, 吉田篤正, 政池明, 村上敏夫, 栗原良将, 金子敏明, 北本俊二, 手嶋政廣, 田島俊樹, 近匡, 千川道幸, 上原嘉宏, 宮坂浩正, 川井和彦, 大谷知行, 林偉民, 山形豊, 大森整, 鈴木亨, 榊直人, 水本好彦, 石川正, 藤本順平, 上野嘉之, 井上直也, 福島雄也: “EUSO (Extreme Universe Space Observatory) 計画 (7): 現状報告及び全体計画”, 日本物理学会 2002 年秋季大会, 東京, 9 月 (2002).
- 戎崎俊一, 清水裕彦, 川崎賀也, 宮坂浩正, 滝澤慶之, 竹田成宏, 榊直人, 大谷知行, 佐藤広海, 森嶋隆裕, 川井和彦, 大森整, 森田晋也, 守安精, 上原嘉宏, 山形豊, 鈴木亨, 林偉民, 上野嘉之, 高橋義幸, 手嶋政廣, 永野元彦, 宮崎芳郎, 千川道幸, 村上敏夫, 井上直也, 福島雄也, 吉田滋, 栗原良将, 石川正, 金子敏明, 藤本順平, 木舟正, 北本俊二, 水本好彦, 梶野敏貴, 政池明, 近匡, 吉田篤正, 佐藤文隆, 田島俊樹: “EUSO (Extreme Universe Space Observatory) 計画 (8): 日本グループの状況”, 日本物理学会 2002 年秋季大会, 東京, 9 月 (2002).
- 川崎賀也, 戎崎俊一, 清水裕彦, 宮坂浩正, 滝澤慶之, 竹田成宏, 榊直人, 大谷知行, 佐藤広海, 森嶋隆裕, 川井和彦, 大森整, 森田晋也, 守安精, 上原嘉宏, 山形豊, 鈴木亨, 林偉民, 上野嘉之, 高橋義幸, 手嶋政廣, 永野元彦, 宮崎芳郎, 千川道幸, 村上敏夫, 井上直也, 福島雄也, 吉田滋, 栗原良将, 石川正, 金子敏明, 藤本順平, 木舟正, 北本俊二, 水本好彦, 梶野敏貴, 政池明, 近匡, 吉田篤正, 佐藤文隆, 田島俊樹: “EUSO (Extreme Universe Space Observatory) 計画 (9): PMT 開発”, 日本物理学会 2002 年秋季大会, 東京, 9 月 (2002).
- 真貝寿明, Hayward S. A.: “Fate of the traversible wormholes”, 日本物理学会 2002 年秋季大会, 東京, 9 月 (2002).
- 八柳祐一, 戎崎俊一, 際本泰士, 三瓶明希夫, 伊藤清一, 羽鳥尹承, 加藤鞆一: “MDGRAPE-2 を用いたディオコトロン不安定性の解析 2”, 日本物理学会 2002 年秋季大会, 春日井, 9 月 (2002).
- 飯高敏晃, 戎崎俊一: “ガスハイドレートの高圧物性の第一原理計算 2”, 日本物理学会 2002 年秋季大会, 春日井, 9 月 (2002).
- 平野秀典, 畑晶之, 星野忠次, 津田穰: “アセチルコリンエス

- テラーゼの脱アシル化反応機構”, 情報計算化学生物学会 (CBI 学会), 東京, 9 月 (2002).
- 沖本憲明, 二木紀行, 末永敦, 平野秀典: “プリオンタンパク質の分子動力学シミュレーション”, 情報計算化学生物学会 (CBI 学会), 東京, 9 月 (2002).
- 大野洋介, 戎崎俊一, 泰地真弘人, 小長谷明彦: “行列専用計算機 MACE (MAtrix Computation Engine) の実効性能”, 理研シンポジウム「第 2 回ものづくり情報技術統合化研究」, 和光, 9 月 (2002).
- 飯高敏晃: “多項式展開法によるオーダー N 計算法”, 日本応用数学会 2002 年度年会, 横浜, 9 月 (2002).
- 駒井友紀, 岡恵子, Werner K., 渡辺紘子, 小館香椎子: “高 NA 微小ハイブリッドマルチレベルゾーンプレートの照射効率向上に関する検討”, 2002 年応用物理学会関係連合講演会, 仙台, 9 月 (2002).
- 末永敦, 沖本憲明, 二木紀行, 平野秀典, 成見哲, 泰地真弘人, 小長谷明彦: “RNA ポリメラーゼの分子動力学シミュレーション”, CBI 学会第 3 回大会 (2002 年大会), 東京, 9 月 (2002).
- 八柳祐一: “MDGRAPE-2 を用いたデオコトロン不安定性の解析”, 2002 年「プラズマ科学のフロンティア」研究会, 土岐, 10 月 (2002).
- 海老塚昇, 清水裕彦, 戎崎俊一, 大森整, 高橋義幸: “次世代宇宙望遠鏡用超軽量大型ミラー, 光学素子および観測装置の開発”, 第 46 回宇宙科学技術連合講演会, (日本航空宇宙学会), 小金井, 10 月 (2002).
- 高橋徹, 戎崎俊一: “分子動力学専用計算機による境界要素法の高速度計算”, 日本機械学会第 15 回計算力学講演会, 鹿児島, 11 月 (2002).
- 飯高敏晃, 戎崎俊一: “アルゴン結晶の第一原理分子動力学計算”, 第 43 回高压討論会, 松山, 11 月 (2002).
- 飯高敏晃, 戎崎俊一: “ガスハイドレートの第一原理分子動力学計算”, 第 43 回高压討論会, 松山, 11 月 (2002).
- 恵藤浩朗, 戴玉堂, 海老塚昇, 戎崎俊一, 林偉民, 大森整, 牧野内昭武: “超精密ロータリー研削盤 “RG-800” による Si ウェハの ELID 研削加工”, 日本機械学会第 4 回生産加工・工作機械部門講演会, 犬山, 11 月 (2002).
- 真貝寿明: “安定な数値シミュレーションを行うための Einstein 方程式の定式化とその検証”, 第 15 回理論天文学懇談会シンポジウム, 三鷹, 12 月 (2002).
- 北川統之, 東憲児, 鷲尾尊規, 肥後健一, 大友泰裕, 村上和雄, 松原謙一, 河合純, Carninci P., 林崎良英, 菊池尚志, 富田勝: “イネ 5' 端読み EST とゲノム配列を用いた Alternative first exon の解析”, 第 25 回日本分子生物学会年会, 横浜, 12 月 (2002).
- 佐藤浩二, 小島恵一, 大根田英祐, 矢作渡, 鈴木宏史, 大里直樹, 河合純, Carninci P., 林崎良英, 大友泰裕, 村上和雄, 松原謙一, 山下智也, 東憲児, 鹿島剛輝, 鷲尾尊規, 富田勝, 菊池尚志: “イネ (*Oryza sativa*) mRNA の polyA site の多様性”, 第 25 回日本分子生物学会年会, 横浜, 12 月 (2002).
- 東憲児, 鷲尾尊規, 肥後健一, 大友泰裕, 村上和雄, 松原謙一, 河合純, Carninci P., 林崎良英, 菊池尚志, 富田勝: “イネにおける転写開始の揺らぎは TATA ボックス下流 28bp に特異的な “CA” の有無に起因する”, 第 25 回日本分子生物学会年会, 横浜, 12 月 (2002).
- 藤森茂雄, 鷲尾尊規, 千田慶太郎, 肥後健一, 大友泰裕, 村上和雄, 松原謙一, 河合純, Carninci P., 林崎良英, 菊池尚志, 富田勝: “植物の転写領域及び転写開始点上流における SSRs (Simple Sequence Repeats) の解析”, 第 25 回日本分子生物学会年会, 横浜, 12 月 (2002).
- 平野秀典, 沖本憲明, 二木紀行, 末永敦: “分子動力学専用計算機 MDM を用いた生体高分子に関する研究”, 第 16 回分子シミュレーション討論会, 新潟, 12 月 (2002).
- 末永敦, 沖本憲明, 二木紀行, 平野秀典, 成見哲, 泰地真弘人, 小長谷明彦: “大規模系生体高分子の分子動力学シミュレーション”, 第 16 回分子シミュレーション討論会, 新潟, 12 月 (2002).
- 二木紀行, 沖本憲明, 末永敦, 泰地真弘人, 小長谷明彦: “変異 Ras p21 における動的阻害について”, 第 16 回分子シミュレーション討論会, 新潟, 12 月 (2002).
- 山中重樹, 安藤嘉倫, 泰岡顕治, 末永敦, 戎崎俊一: “冷却時の氷タンパク質表面における水分子挙動”, 第 16 回分子シミュレーション討論会, 新潟, 12 月 (2002).
- 川井和彦, 高幣俊之, 戎崎俊一, 高沖英二, 町田聡: “デジタルコンテンツ用共通プラットフォームの提案”, 第 67 回コンピュータと教育研究発表会, (情報処理学会コンピュータと教育研究会), 東京, 12 月 (2002).
- 飯高敏晃: “ガスハイドレートの高圧物性の第一原理計算”, 平成 14 年度低温科学研究所共同利用研究集会「水, 水およびクラスレート水和物の物性に関する研究集会」, 札幌, 12 月 (2002).
- 真貝寿明: “数値相対論における定式化問題: 数値計算報告”, 重力波物理学研究会, (京都大学基礎物理学研究所), 京都, 1 月 (2003).
- 真貝寿明: “Problem solving environment としての cactus コード”, グリッドコンピューティングワーキンググループ第 2 回会合, (サイエンティフィックシステム研究会), 東京, 1 月 (2003).
- 川井和彦, 高幣俊之, 戎崎俊一, 高沖英二, 町田聡: “デジタルコンテンツの共通プラットフォームについて”, 天文情報処理研究会第 49 回会合, 東京, 2 月 (2003).
- 平野秀典, 沖本憲明, 二木紀行, 末永敦, 成見哲, 泰岡顕治, 古石貴裕, 薄田竜太郎, 古沢秀明, 川井敦, 戎崎俊一: “専用計算機 MDM を用いた生体高分子に関する研究”, 日本薬学会第 123 年会, 長崎, 3 月 (2003).
- 永野元彦, 戎崎俊一, 清水裕彦, 川崎賀也, 宮坂浩正, 滝澤慶之, 竹田成宏, 榊直人, 大谷知行, 川井和彦, 大森整, 森田晋也, 守安精, 上原嘉宏, 山形豊, 鈴木亨, 林偉民, 上野嘉之, 高橋義幸, 手嶋政廣, 林田直明, 間瀬圭一, 篠崎健児, 宮崎芳郎, 千川道幸, 村上敏夫, 井上直也, 福島雄也, 吉田滋, 栗原良将, 石川正, 金子敏明, 藤本順平, 清水韶光, 木舟正, 北本俊二, 水本好彦, 梶野敏貴, 政池明, 近匡, 吉田篤正, 柴田徹, 佐藤文隆, 田島俊樹, 本田建, 吉井尚, 溝渕智子, 内堀幸夫, 門多顯司, 川上三郎: “EUSO (Extreme Universe Space Observatory) ミッション (10) : 100EeV 宇宙線は存在する”, 日本物理学会第 58 回年次大会, 仙台, 3 月 (2003).
- 戎崎俊一, 清水裕彦, 川崎賀也, 宮坂浩正, 滝澤慶之, 竹田成宏, 榊直人, 大谷知行, 川井和彦, 大森整, 森田晋也, 守安

精, 上原嘉宏, 山形豊, 鈴木亨, 林偉民, 上野嘉之, 高橋義幸, 手嶋政廣, 林田直明, 間瀬圭一, 篠崎健児, 永野元彦, 宮崎芳郎, 千川道幸, 村上敏夫, 井上直也, 福島雄也, 吉田滋, 栗原良将, 石川正, 金子敏明, 藤本順平, 清水韶光, 木舟正, 北本俊二, 水本好彦, 梶野敏貴, 政池明, 近匡, 吉田篤正, 柴田徹, 佐藤文隆, 田島俊樹, 本田建, 吉井尚, 溝淵智子, 内堀幸夫, 門多顯司, 川上三郎: “EUSO (Extreme Universe Space Observatory) ミッション (11): 全体説明・現状報告”, 日本物理学会第 58 回年次大会, 仙台, 3 月 (2003).

川崎賀也, 戎崎俊一, 清水裕彦, 宮坂浩正, 滝澤慶之, 竹田成宏, 榊直人, 大谷知行, 川井和彦, 大森整, 森田晋也, 守安精, 上原嘉宏, 山形豊, 鈴木亨, 林偉民, 上野嘉之, 高橋義幸, 手嶋政廣, 林田直明, 間瀬圭一, 篠崎健児, 永野元彦, 宮崎芳郎, 千川道幸, 村上敏夫, 井上直也, 福島雄也, 吉田滋, 栗原良将, 石川正, 金子敏明, 藤本順平, 清水韶光, 木舟正, 北本俊二, 水本好彦, 梶野敏貴, 政池明, 近匡, 吉田篤正, 柴田徹, 佐藤文隆, 田島俊樹, 本田建, 吉井尚, 溝淵智子, 内堀幸夫, 門多顯司, 川上三郎: “EUSO (Extreme Universe Space Observatory) ミッション (12): 焦点面検出器開発”, 日本物理学会第 58 回年次大会, 仙台, 3 月 (2003).

井上直也, 戎崎俊一, 清水裕彦, 川崎賀也, 宮坂浩正, 滝澤慶之, 竹田成宏, 榊直人, 大谷知行, 川井和彦, 大森整, 森田晋也, 守安精, 上原嘉宏, 山形豊, 鈴木亨, 林偉民, 上野

嘉之, 高橋義幸, 手嶋政廣, 林田直明, 間瀬圭一, 篠崎健児, 永野元彦, 宮崎芳郎, 千川道幸, 村上敏夫, 福島雄也, 吉田滋, 栗原良将, 石川正, 金子敏明, 藤本順平, 清水韶光, 木舟正, 北本俊二, 水本好彦, 梶野敏貴, 政池明, 近匡, 吉田篤正, 柴田徹, 佐藤文隆, 田島俊樹, 本田建, 吉井尚, 溝淵智子, 内堀幸夫, 門多顯司, 川上三郎: “EUSO (Extreme Universe Space Observatory) ミッション (13): シミュレーション”, 日本物理学会第 58 回年次大会, 仙台, 3 月 (2003).

大森整, 戎崎俊一, 清水裕彦, 川崎賀也, 宮坂浩正, 滝澤慶之, 竹田成宏, 榊直人, 大谷知行, 川井和彦, 森田晋也, 守安精, 上原嘉宏, 山形豊, 鈴木亨, 林偉民, 上野嘉之, 高橋義幸, 手嶋政廣, 林田直明, 間瀬圭一, 篠崎健児, 永野元彦, 宮崎芳郎, 千川道幸, 村上敏夫, 井上直也, 福島雄也, 吉田滋, 栗原良将, 石川正, 金子敏明, 藤本順平, 清水韶光, 木舟正, 北本俊二, 水本好彦, 梶野敏貴, 政池明, 近匡, 吉田篤正, 柴田徹, 佐藤文隆, 田島俊樹, 本田建, 吉井尚, 溝淵智子, 内堀幸夫, 門多顯司, 川上三郎: “EUSO (Extreme Universe Space Observatory) ミッション (14): 光学素子製作”, 日本物理学会第 58 回年次大会, 仙台, 3 月 (2003).

真貝寿明, 米田元: “安定な数値シミュレーションを行うための Einstein 方程式の定式化 3”, 日本物理学会第 58 回年次大会, 東北大学, 3 月 (2003).

沖本憲明: “プリオンタンパク質の分子動力学シミュレーション: Ala117→Val アミノ酸変異による蛋白質構造の変化”, 平成 14 年度生理研研究会, 愛知, 3 月 (2003).