

## 講座の概要

- 教授 内山知実 (UCHIYAMA, Tomomi)  
[ エコトピア科学研究所 ]
- 准教授 新美倫子 (NIIMI, Michiko)  
[ 博物館 ]
- 准教授 安田耕二 (YASUDA, Koji)  
[ エコトピア科学研究所 ]

複雑系において非線形な振舞いを示す物理現象や動的相互作用を対象として、大規模な数値計算、高精度な測定・分析を行い、空間的・時間的に遍在する膨大なデータから有用な情報を抽出する複雑系インフォマティクスの構築を目指す。例えば、複雑な振舞いを示す流体現象や化学現象、生態系・環境系と人類の間の相互作用における各種の膨大なデータから、必要な情報を抽出し解明するための、可視化法、発見的及び知的処理法について教育・研究を行う。

## 新美倫子

### 北海道浜頓別町日の出貝塚と 周辺海域の海洋リザーバ効果の状況

縄文文化の北の限界地域である北海道オホーツク海沿岸部には、3つの縄文時代貝塚が知られており、浜頓別町の日の出貝塚はその中でも最北の縄文時代貝塚である。遺跡はオホーツク海から3キロほど内陸に入ったクッチャロ湖東側の台地上に位置しており、百数十軒の擦文時代の住居址と縄文時代の貝塚が確認されている。かつて1958・1959年に大場利夫氏らによって発掘調査が行われたものの調査内容の詳細は報告されておらず、貝塚の形成時期もはっきりしなかった。

○貝塚形成年代の手がかり

1958・1959年の調査で貝層中から出土したシオフキ1点・アカニシ1点について、加速器質量分析法(AMS法)による放射性炭素年代測定を行ったところ、測定値を較正した1σ暦年代範囲はそれぞれ**3519-3272calBC(68.2%)**と**3539-3321calBC(68.2%)**であり、縄文前期末～中期前葉となった(新美他2012)。しかしこの年代は、当時の遺跡周辺海域での海洋リザーバ効果の大きさがわからないため、仮に現代のサハリン南部や千島列島南部のΔR値の平均を用いて算出した暫定的なものであった。貝塚が形成された実年代を明らかにするためには、当時の海洋リザーバ効果の状況を把握する必要がある。

○貝層出土炭化材の測定結果と海洋リザーバ効果の算出

その後、1958年トレンチの位置を推定し、2012年にそのトレンチの再発掘を行った。この調査では旧トレンチの西側の壁を掘出し、この断面で攪乱されていない同一層位から出土したマガキと木炭及びやや上層から出土したマガキについて、AMS法による放射性炭素年代測定を行った(表1)。試料調整と放射性炭素年代測定は株式会社パレオ・ラボに委託した。較正年代は、炭化材はIntCal09、貝類は Marine09の較正曲線に基づき、OxCal4.1を用いて求めた。

表1から日の出貝塚におけるR(海洋リザーバ効果)を計算してみると、炭化材の暦年較正用年代は5013±23で同一層出土のマガキが5356±23なので、**Rは343±33**となり、**ΔRは-32±35**となる。

また、炭化材の測定値を較正した1σ暦年代範囲を見ると、**3911BC(24.7%)3878BC、3804BC(37.9%)3761BC、3725BC(5.6%)3715BC**であり、貝層形成年代は縄文前期後半と考えられる。先に示した暫定的なシオフキ・アカニシの1σ暦年代範囲**3519-3272calBC(68.2%)**と**3539-3321calBC(68.2%)**は、仮にΔR=400±92として較正した値であるが、上記の炭化材の年代範囲と比較すると、明らかに新しすぎる。この年代のズレは海洋リザーバの見積り誤りに起因する。このように、海産試料を用いて年代測定を行う際には、その時代・地域におけるローカルな海洋リザーバ効果の状況を把握することが非常に重要である。

表1 日の出貝塚資料の放射性炭素年代測定および暦年較正の結果

試料(測定番号)	前処理	δ <sup>13</sup> C (‰)	暦年較正用年代 (yrBP±1σ)	<sup>14</sup> C年代 (yrBP±1σ)	<sup>14</sup> C年代を暦年代に較正した年代範囲	
					1σ暦年代範囲	2σ暦年代範囲
炭化材 (PLD-22153)	超音波洗浄 酸・アルカリ・酸洗浄 浄(塩酸:1.2N, 水酸化ナトリウム:1.0N, 塩酸:1.2N)	-25.84±0.18	5013±23	5015±25	3911BC (24.7%) 3878BC 3804BC (37.9%) 3761BC 3725BC (5.6%) 3715BC	3939BC (35.9%) 3871BC 3811BC (59.5%) 3709BC
マガキ左殻 (PLD-22154) ※炭化材と同一層位出土	超音波洗浄 酸エッチング:0.5N	0.63±0.19	5356±23	5355±25	Marine09 (ΔR=-32±35): 3888BC (68.2%) 3757BC	Marine09 (ΔR=-32±35): 3927BC (95.4%) 3699BC
マガキ右殻 (PLD-22155)	超音波洗浄 酸エッチング:0.5N	0.80±0.22	5396±23	5395±25	Marine09 (ΔR=-32±35): 3916BC (68.2%) 3798BC	Marine09 (ΔR=-32±35): 3955BC (95.4%) 3743BC

## 内山知実

### Lagrange型解法による流れのシミュレーション

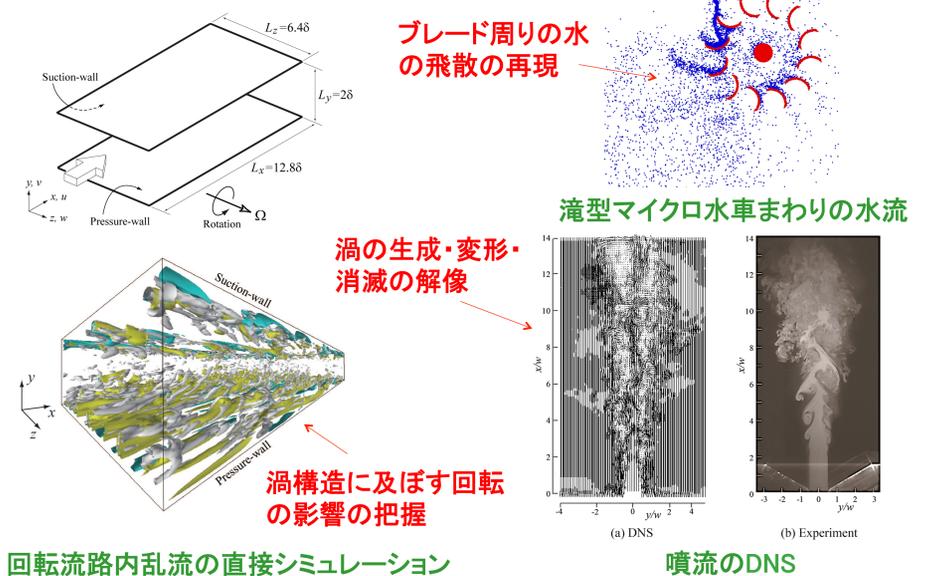
#### キーワード

計算流体力学, 乱流, 混相流, シミュレーション, 可視化

#### 研究目的

- 流体解析のためのLagrange型解法の開発
- 乱流や混相流などの解析と予測
- 高性能機器の開発のための設計指針の獲得

#### シミュレーションの事例



## 安田耕二

### 密度行列を用いた電子相関理論

$$[H(1\cdots N) - E]\Psi(1\cdots N) = 0$$

$$\Psi(N\cdots 1) = -\Psi(1\cdots N)$$

等価

$$R(12|1'2') - ED(12|1'2') = 0$$

N-表現性

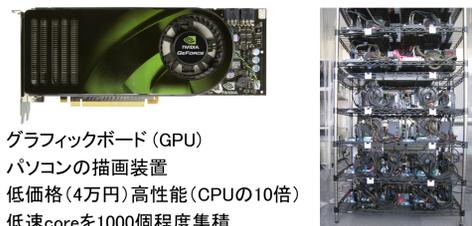
$$R = [v(1) + v(2) + w(1,2)]D + \int [v(3) + w(1,3) + w(2,3)]D^{(3)}d3$$

$$+ \frac{1}{2} \int w(3,4)D^{(4)}d3d4$$

$$D^{(4)} = \left( \frac{N}{4} \right) \int \Psi(1\cdots 45\cdots N) \Psi^*(1'\cdots 4'5'\cdots N) d5\cdots dN$$

密度行列DのN-表現性が未知で解けなかった  
反対称性の近似を提案し、密度方程式を解いた  
有限温度に拡張した

### ゲーム機などを使った科学技術計算



### 密度汎関数法に応用

運動エネルギー

非局所ポテンシャル: 擬ポテンシャル  
やHartree-Fock交換ポテンシャル

$$[-\nabla^2/2 + V_L(r) + \hat{V}_{NL}]\psi_i(r) = \epsilon_i \psi_i(r)$$

波動関数(軌道)

$$V_L(r) = -\sum_c \frac{Z_c}{|r-R_c|} + \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr'$$

原子核と電子からの  
静電ポテンシャル

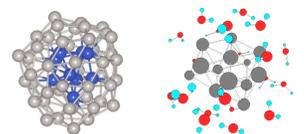
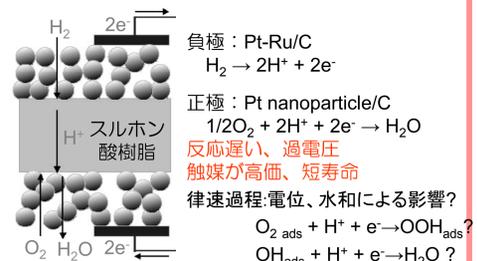
$$+ V_{xc}(r)$$

交換相関ポテンシャル  
電子密度の関数

### 研究目的

シュレーディンガー方程式を解く事で、  
物質の性質を予想する。  
持続可能社会実現に役立つ材料開発。  
それに必要な理論や技術の開発。

### 燃料電池の正極反応解析



### 並列版Gaussian09の加速例

Pt<sub>55</sub> (density fitting) + ゲーム用GPU

