ポスト「京」で重点的に取り組むべき 社会的・科学的課題

重点課題 成果概要

重点課題1

生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築

超高速分子シミュレーションを実現し、副作用因子を含む多数の生体分子について、機能阻害ばかりでなく、機能制御までをも達成することにより、有効性が高く、さらに安全な創薬を実現する。

本課題の主な成果

(サブ課題A: ポスト「京」でのMD高度化とアルゴリズム深化)

- 1. GENESISの非共有結合相互作用計算を最適化、信頼性の高い温度定義を開発、長いステップ幅の長時間計算を実現。(J. Chem. Phys. 誌掲載)
- 2. 生体システムの効率的計算手法を開発、予備計算を通じて、信頼性の高い大規模創薬応用計算の道筋を開拓。(J. Phys. Chem. B誌掲載)
- 3. 実験・バイオインフォマティクスを融合し、タンパク質・DNA相互作用の高精度モデルを構築し、ゲノム創薬への道筋を開拓。(J. Chem. Theory Comput. 誌掲載)

(サブ課題B: 次世代創薬計算技術の開発)

- 4. マルコフ状態遷移モデル(MSM)や拡張アンサンブル、MD-SAXSによって、リガンド結合によるタンパク質動的構造変化のシミュレーションに成功。 (J.Med.Chem.誌掲載、蛋白質科学会若手奨励賞受賞、薬学会構造活性相関部会SAR Presentation Award受賞)
- 5. バイオ医薬品候補の抗体と抗原間結合の分子動力学シミュレーションに成功。(Structure誌、Sci. Rep.誌掲載)
- 6. 細胞内環境を顕わに考慮したバクテリア細胞質などをモデリングし、数千万から1億原子に至る規模のシミュレーションに成功。(eLife誌掲載)
- 7. 核内に存在する巨大なヌクレオソーム(タンパク質・核酸複合体)の構造変化過程のシミュレーションに成功。(PLoS Comp. Biol.誌, J. Phys. Chem. B誌 Biophys. J.雑誌掲載、HPCI システム利用研究課題 優秀成果賞受賞)
- 8. 「京」で800万原子からなるB型肝炎ウイルスカプシド全体系の超巨大分子動力学シミュレーションに成功。(未発表)

(サブ課題C: 創薬ビッグデータ統合システムの開発)

- 9. 創薬ターゲット入力から化合物スクリーニング・リード最適化までをシームレスに行う創薬ビッグデータ統合システムのプロトタイプを構築。(J. Compt. Chem., J. Chem. Phys. J. Chem. Inf. Model. Bioinformatics誌掲載)
- 10. Precision Medicineの予測基盤となるゲノム医療分子シミュレーション計算フローのプロトタイプを開発。
- 11. 創薬計算フローを癌、腎疾患、乾癬、アルツハイマーの治療薬及び機能性食品用味覚成分の探索研究に応用し、シード化合物創出に成功。
- 12. 創薬ビッグデータ統合システム及びゲノム医療分子シミュレーション基盤を活用し、医薬品に関連する生体反応の分子メカニズム解明に成功。(Nat.

Commun. × 2, Clin. Cancer Res., Ebiomedicine, ACS Chem. Neurosci., Mol. Brain 誌掲載)

生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築 サブ課題A: ポスト「京」でのMD高度化とアルゴリズム深化(理化学研究所・杉田有治)

目標

・最終目標:ポスト「京」にて、GENESISのCapacity計算を数十倍から数百倍で実現。様々な創薬応用計算が可能な利便性の高いシステムの構築。

緑:科学的成果 青:実用的成果 成果内容と科学的・社会的意義

成果(1)・・・・・GENESISの非共有結合相互作用計算を最適化、信頼性の高い温度定義を開発、長いステップ幅の長時間計算を実現。 成果(2)・・・・・生体システムの効率的計算手法を開発、予備計算を通じて、信頼性の高い大規模創薬応用計算の道筋を開拓。 成果(3)・・・・・実験・バイオインフォマティクスを融合し、タンパク質・DNA相互作用の高精度モデルを構築し、ゲノム創薬への道筋を開拓。

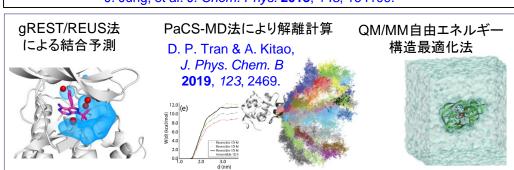
計算を実現できる。これは「コデザイン」のターゲットアプリにおいて最高 のパフォーマンスの向上である。さらに、図に示す2倍長いステップ幅の 利用のできる手法を開発し、2倍の高速化に成功した。これらを組み合わ せると、200倍以上の計算が実現できる見込みである。手法は汎用性が 高く、様々な分子動力学ソフトウェアに導入され分野全体の発展も期待 される。創薬応用計算でよく利用される分子動力学計算の高度化を行う ため、極めて高い利便性がある。

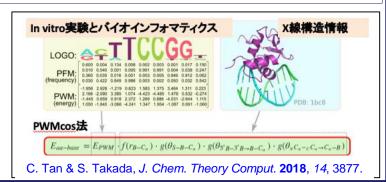
(1)の成果により、「京」と比較して「冨嶽」の利用によって125倍以上の

(2)の成果により、qREST/REUS法やPaCS-MD法などの拡張アンサ ンブル法と量子・古典混合法を用いて、標的タンパク質と薬剤分子結合 のde noveモデリングが可能になった。予備計算を通じて、結合親和性を 高い信頼性で予測し、さらには実験で見えない結合過程の詳細や動力 学パラメータの予測もできることを実証した。タンパク質一薬剤分子の結 合を直接観測するのは未だ難しく、動的なメカニズムの解明の推進力と なる。現在の阻害剤設計は主にX線結晶構造に基づいており、新たな設 計指針の創出が期待される。

(3)の成果により、ヌクレオソームなどタンパク質DNA複合体の粗視化シミュレーションを行う PWMcos法が確立され、次世代シークエンサー等の高スループット実験から得られるタンパク 質・DNA相互作用の膨大な結合親和性データと複合体立体構造データを組合わせた、タンパ ク質一DNA相互作用の高精度モデルが開発された。このモデル(PWMcos法)を適用すること で、ヌクレオソームDNAへの転写因子結合を、高速かつ高い信頼性を持ちながら、系統的に 解析することができる。タンパク質とDNA相互作用の基礎生物学だけでなく、ゲノム創薬に向 けたシミュレーションを効率的に実行できる基盤が構築された。

例: 従来より2倍長いステップ幅の利用 従来 Step=5 Step=6 Step=1 | Step=2 | Step=3 | Step=4 | Step=7 | Step=8 Step=4 Step=2 Step=3 Step=1 観測時間 今回 J. Jung, et al. J. Chem. Phys. 2018, 148, 164109.





生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築 重点課題1 次世代創薬計算技術の開発(横浜市立大学・池口満徳) サブ課題B:

目標

•最終目標

タンパク質動的構造解析、タンパク質間相互作用解析、細胞環境、核内環境、ウイルス環境の計算手法を確立し、次世代創薬計算手法を完成

成果内容と科学的・社会的意義

緑:科学的成果 青:実用的成果

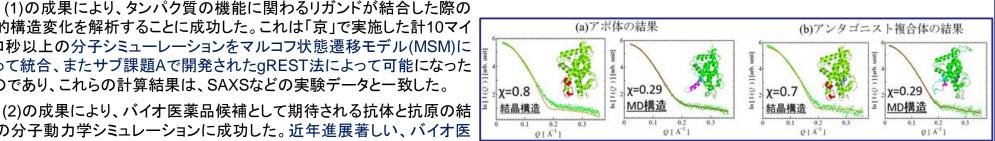
成果(1)・・・・・・マルコフ状態遷移モデル(MSM)や拡張アンサンブル、MD-SAXSによって、リガンド結合によるタンパク質動的構造変化のシミュレーションに成功 成果(2)・・・・・バイオ医薬品候補の抗体と抗原間結合の分子動力学シミュレーションに成功

成果(3)・・・・・・細胞内環境を顕わに考慮したバクテリア細胞質などをモデリングし、数千万から1億原子に至る規模のシミュレーションに成功 成果(4)・・・・・核内に存在する巨大なヌクレオソーム(タンパク質・核酸複合体)の構造変化過程のシミュレーションに成功

成果(5)・・・・・・「京」で800万原子からなるB型肝炎ウイルスカプシド全体系の超巨大分子動力学シミュレーションに成功

- 動的構造変化を解析することに成功した。これは「京」で実施した計10マイ クロ秒以上の分子シミューレーションをマルコフ状態遷移モデル(MSM)に よって統合、またサブ課題Aで開発されたqREST法によって可能になった ものであり、これらの計算結果は、SAXSなどの実験データと一致した。
- (2)の成果により、バイオ医薬品候補として期待される抗体と抗原の結 合の分子動力学シミュレーションに成功した。近年進展著しい、バイオ医 薬品の分野でも、HPCによる分子シミュレーションが重要な役割を果たす ことができることを示した重要な成果である。
- (3)の成果により、バクテリア細胞質に含まれるタンパク質等の細胞質 全原子モデルのシミュレーションに成功した。本成果は、細胞内環境での タンパク質間、あるいはタンパク質代謝物の非特異的相互作用が果たす 役割を解明した、この分野での大きなブレークスルーである。
- (4)の成果により、核内に存在する巨大なヌクレオソームの構造変化の シミュレーションに成功した。ヌクレオソームはゲノム創薬等でも重要な巨 大超分子システムであり、HPCによるシミュレーションの大きな成果である (5)の成果により、水分子も含め800万原子からなるB型肝炎ウイルス カプシド全体系の分子動力学シミュレーションに成功した。B型肝炎ウイル スの抗ウイルス剤の開発に向けて、逆転写酵素阻害剤やカプシド形成阻 害剤の分子動力学シミュレーションと自由エネルギー解析を実施し、ウイ

ルスへの結合の機序を解析することができるようになった。



図、SAXS実験の結果と、タンパク質立体構造から算出した理論散乱カーブの比較。 MD構造が結晶構造と比べ、溶液状態のSAXS実験結果と一致していることがわかる

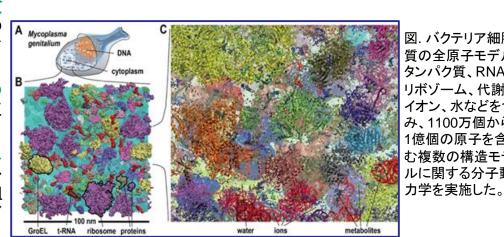


図. バクテリア細胞

質の全原子モデル。 タンパク質、RNA、

リボゾーム、代謝物 イオン、水などを含 み、1100万個から 1億個の原子を含 む複数の構造モデ ルに関する分子動

重点課題1 生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築サブ課題C: 創薬ビッグデータ統合システムの開発(京都大学・奥野恭史)

目標

・最終目標:「富岳」を用いた「創薬ビッグデータ統合システム」の初版を完成。具体的な創薬テーマに適用し、性能評価を実施。

成果内容と科学的・社会的意義

緑:科学的成果 青:実用的成果

成果(1): 創薬ターゲット入力から化合物スクリーニング・リード最適化までをシームレスに行う創薬ビッグデータ統合システムのプロトタイプを構築。 成果(2): Precision Medicineの予測基盤となるゲノム医療分子シミュレーション計算フローのプロトタイプを開発。

成果(4):創薬ビッグデータ統合システム及びゲノム医療分子シミュレーション基盤を活用し、医薬品に関連する生体反応の分子メカニズム解明に成功

- 成果(2)∶Precision Medicineの予測基盤となるケノム医療分子シミュレーション計算プローのプロトダイフを開発。 - 成果(3)∶創薬計算フローを癌、腎疾患、乾癬、アルツハイマーの治療薬及び機能性食品用味覚成分の探索研究に応用し、シード化合物創出に成功。

(1)の成果により、①医薬品シードライブラリの構築に必要な化合物生成手法、②ドッキング計算を用いたバーチャルスクリーニング、③(拡張型)MD計算を用いた化合物結合ポーズおよび結合エネルギーの予測手法、④PPI創薬に必須となるタンパク質複合体構造の高精度予測技術、⑤医薬品結合サイトを予測したタンパク質機能部位データベース、の開発が完了した事で、創薬

分の1に削減する事に成功している。現在、バーチャルスクリーニングの予測精度を上げるための計算フローの検討とともに、本システムに取り込むAI創薬技術や副作用を回避するためのターゲット選択性の予測手法の開発を進めている。

ターゲット入力から化合物スクリーニング・リード最適化までをシームレスに行う創薬基盤が実現

した。更に、最適化アルゴリズムの導入により、高い予測性能を維持しながらMD計算時間を10

- (2)の成果では、患者の遺伝子データ入力から変異タンパク質の構造モデリングまでをシームレスに行うGUIを開発し、高精度分子シミュレーション(MP-CAFEE)によって非共有結合型阻害剤の薬剤応答性を予測する計算基盤が実現した。
- (3)の成果では、これまでに構築した創薬計算フローの評価のために、エピジェネティック型抗がん剤、腎疾患治療薬、乾癬治療薬、機能性食品用味覚成分、アルツハイマーの治療薬の開発研究に本システムを適用し、シード化合物の創出に成功した。
- (4)の成果では、これまでに開発した分子シミュレーション基盤を活用し、既存医薬品・診断薬の結合モード、標的選択性、心毒性の予測に加えて、がんゲノム医療における抗がん剤選択への応用研究を多数行ってきた。その中で、肺がん分子標的RET(S904F)が薬剤耐性を獲得する分子メカニズムの解明等に成功し、Nat. Commun., Clin. Cancer Res., J. Compt. Chem., Ebiomedicine, ACS Chem.. Neurosci., Mol. Brain誌掲載に至っている。本成果は、「富岳」によるゲノム医療分子シミュレーション基盤を活用する事により、Precision Medicineの効率化が十

分期待できる。更に、長期的には、製薬会社やアカデミアが「富嶽」による創薬ビッグデータ統合

システムを用いて創出した薬剤候補が医薬品として製品化されることが期待される。

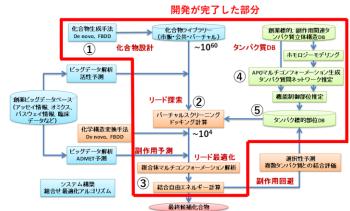
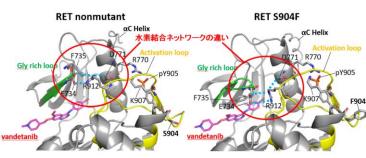


図. 創薬ビッグデータ統合システムの計算フロー (これまでに①-⑤の要素技術・データベースを開発した)



図、RET阻害剤の耐性メカニズム

重点課題2

個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

健康・医療ビッグデータの大規模解析とそれらを用いて得られる最適なモデルによる生体シミュレーション (心臓、脳神経など)により、個々人に適した医療、健康寿命を延ばす予防をめざした医療を支援する。

本課題の主な成果

- 1. 新規がん患者のほぼ全てのがん全ゲノムデータを「富岳」で解析可能なソフトGenomonを開発し、がん免疫・がん発生・進展に関してがんゲノミクス研究の歴史に刻まれる発見をNature等に連発した。膨大な変異解析にはAI技術が活躍した。(Nature 2019 加齢に伴うがん化のメカニズムの解明、Nature 2016 がん細胞が免疫から逃れるメカニズムの解明、NEJM 2015 再生不良性貧血のクローン進化の解明、紫綬褒章、上原賞、他)
- 2. 世界で初めてとなる全脳循環シミュレータを開発し、「富岳」を用いて患者個別の全脳レベルの血流動態を3次元で解析できるようにした。これにより、脳血管障害の個別化医療を支援する新しい計算解析技術を確立した。(第24回計算工学講演会 グラフィックスアワード優秀賞・特別賞)
- 3. 計算科学の歴史上初となる、分子シミュレーションと連成するマルチスケール心臓シミュレーションを「富岳」により実現する技術を開発した。これにより遺伝子、分子構造に基づく新たな臨床医学・創薬データベースが可能となる。(日本計算力学連合JACM Award for Computational Mechanics、日本機械学会計算力学部門功績賞、中谷賞・大賞、文部科学大臣表彰・科学技術賞、他)

重点課題2 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

サブ課題A: 大量シーケンスによるがんの個性と時間的・空間的多様性・起源の解明(東京大学医科学研究所・宮野 悟)

目標

高精度大規模がんオミクスデータ解析システムを構築し、がんゲノミクスで世界トップの成果を排出し、「富岳」による飛躍的なデータ科学へつなぐ

成果内容と科学的・社会的意義

緑:科学的成果 青:実用的成果

- (1) 世界の追随を許さない高精度大規模がんオミクスデータ解析システムGenomon及びVirtual Grid Engineの開発
- (2) 加齢に伴う正常組織の遺伝子異常とがん化のメカニズムの解明(Nature 2019)
- (3) がん細胞が免疫から逃れるメカニズムの解明 免疫チェックポイント阻害剤の効果予測への応用に期待 (Nature 2016)
- (1)の成果は、コデザインを通したGenomon及びVirtual Grid Engine (VGE)の開発である。「富岳」での推定パフォーマンスは当初目 標の1日1000検体の全ケブムシークエンス解析を大きく超え、日本における新規がん患者のほぼ全てに対応できる。Genomon は、がんゲノミクスにおける世界トップレベルの成果を輩出し、その有効性が科学的に実証された。本成果は、革新的にがんのゲ

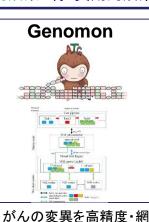
/ム異常の解明を進め、これまで未踏であったがんの分子病態の理解を飛躍的に拡大・加速した。以下の(2)-(3)の成果は

Genomonを用いて大規模ゲリム及びRNAシークエンスデータ解析で得られた代表的なものであるが、他にNature Microbiol 2019 (慢性活動性 EB ウイルス感染症によるがんの発症原因の解明)、Nature Genet (骨髄異形成症候群から急性白血病を起こす クローン進化の遺伝子異常パターン解明)、NEJM 2015 (再生不良性貧血のクローン進化の解明)、他Nature Genet (9報)など70報

以上の成果を出した。VGEは医学・生命科学系のユーザが平易にGenomonを活用できる環境を提供するために開発した。 (2)の研究では、実体顕微鏡を組み入れた0.5mm微小サンプル解析システムを開発し、食道がん及び食道正常上皮組織を 1mmメッシュ間隔で数百箇所のマイクロバイオプシーを行い、ゲノムシークエンスを行った。その成果は、食道がんに頻繁に

見られる遺伝子変異が乳児期から獲得され、加齢とともに増加して70歳以上では全食道面積の40~80%が、がん遺伝子 の変異をもった細胞で置き換わるという衝撃的なものであった。これは、がんがなぜ高齢者に生じ、「飲酒」や「喫煙」によっ て促進されるのかを解明した大きなインパクトをもつ発見となり、がんが生ずる初期のメカニズムの解明の突破口を創った 極めて大きな科学的意義がある。がんの早期診断、予防、がんの死亡率の低減に資する大きな社会的意義を有している。 この成果はNatureに発表したが、この研究成果の意義について解説記事も同時に出たほどに注目された。

(3) の成果に先立ち、「京」によるGenomon解析で成人T細胞白血病リンパ腫49検体の全ゲノム、43検体のRNAシークエンス データからそのゲノム変異の全貌を明らかにしていた(Nature Genetics 2015)。Genomonはショートリードシークエンスデー タの盲点である数十~数百ベースの構造異常の高精度検出を数理的方法で解決しており、その結果PD-L1遺伝子(PD-1 タンパク質と結合することでT細胞を抑制する)の3'非翻訳領域の構造異常が見つかった。同時にこの構造異常をもつ検体 のPD-L1遺伝子が高発現していることも観察された。そこで33の癌腫10.210検体のデータをGenomonで解析すると、複数の



ェア。機械学習などのAI 技術が投入されている。 下図はVGEのワークフロー。

羅的に暴き出すソフトウ

PD-L1のタンパク質をコード

していない領域の構造異 常が原因で、PD-L1タン パク質が異常に作られ、T 細胞の受取ポケットPD-1 に渡され、その結果、が ん細胞を殺さなくなる。

癌腫において同じことが見出され、ゼブラフィッシュを使ったゲノム編集でその機能解析を行い、悪性腫瘍における新たな免 疫回避のメカニズムを解明した。この成果は、ニボルマブなどの免疫チェックポイント阻害剤の選択に有効であるという社会 的意義がある。これは全ゲノムシークエンスとGenomon解析で初めて見出され得るものである。

重点課題2個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

サブ課題B: データ同化生体シミュレーションによる個別化医療支援(大阪大学大学院基礎工学研究科・和田茂生)

目標

ポスト「京」を活用した大規模生体物理シミュレーションと生体計測データとを様々なレベルで同化・融合させることにより、実測データを重視する医療に受け入れられる計算機シミュレータを開発し、シミュレーションで得られる物理情報を活用した個別化医療支援の実現を目指す。

成果内容と科学的・社会的意義

-----成果(1) 患者個別の脳画像に基づく全脳循環シミュレータを開発した。

成果(2) 個別化医療支援のための医用画像計測と計算力学シミュレーションの同化手法を開発した。

成果(3) 脳機能障害に関わる個別化医療支援のための大規模生体シミュレータを開発した。

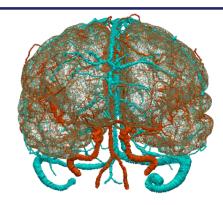
(1)の成果により、医用画像から得られる患者個別の主要脳動静脈血管の形態および解剖学的構造と、脳表血管生成数理アルゴリズムを組み合わせることで、全脳血管モデルを構築できるようになった。また、これまでに開発してきたボクセル型血流シミュレータの大規模化・高速化を図り、格子ボルツマン法および適合サブドメン法を適用することにより、全脳血管モデルに対して約5億ボクセルで60 μ mの空間解像度を達成し、「京」を用いて実時間で6秒間の全脳血流計算が実行可能となった。本成果は、脳全体に分布する血管内の血流や血圧、重力や慣性力によるそれらの変動に対する物理的理解を与えるものであり、現在注目されている脳間質・脊髄液流れと脳血液循環との関係解明や、脳梗塞や脳内出血による障害予測において、これまでにない物理的側面からの情報を提供するものである。シミュレーションで得られた脳内血流動態をMRI

やCTの計測と同様に可視化し、実際の医用画像と比較できるようにすることで、新たな医用画像診断技術

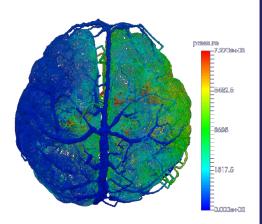
への展開が期待できる。
(2)の成果では、PC-MRI画像から得られる血流速度データとの誤差を最小化するシミュレーション手法を開発した。また、4D-CT画像から抽出した心臓の3次元形状動画像に対して自動的に変形動態を推定するアルゴリズムを開発し、移動境界を伴うボクセル型血流シミュレーターと組み合わせることにより、患者の心内血流動態を再現できるようになった。本成果により、肺葉を削除した場合、心房につながる肺静脈の血流境界条件が変化するだけでなく、左心房全体の動きも変化することが見出された。今後、ポスト「京」を用いれば、心原性脳梗塞と左心房内血流動態との関係解明に向けて、モデル駆動型とデータ駆動型の双方向のアプローチが可能となる。開発した一連の計算解析手法は、4D-CTによる新しい医用画像診断技術として注目されている。

(3)の成果では、脳機能障害が引き起こす運動障害および発話障害の診断および治療を支援するための神経-筋骨格統合シミュレータおよび流体音響発話シミュレータを開発した。これにより、患者個別の計測データに基づくデータ駆動型アプローチと力理論に基づくモデル駆動型アプローチを統合する医療支援プラットフォームを構築することができた。

緑:科学的成果 青:実用的成果



医用画像データと数理モデルを組み 合わせて構築した全脳血管モデル



右中大脳動脈が閉塞した場合の血圧分布。脳梗塞の障害予測につながる。

重点課題2個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

サブ課題C: 心臓シミュレーションと分子シミュレーションの融合による基礎医学と臨床医学の架橋(UT-Heart研究所・久田俊明)

目標

遺伝子から心拍動までを繋ぐマルチスケール心臓シミュレータの開発 ー心不全の解明と新たな治療法開発に向けて ー

成果内容と科学的・社会的意義

計に繋げることができるものと期待される。

緑:科学的成果 青:実用的成果

成果(1) UT-Heart (有限要素モデル)とCafeMol (AICG分子モデル)のと連成手法を確立した。成果(2) 心収縮に関わると考えられるミオシン分子内の残基を明らかにした。

- (1) 本成果により、計算科学の歴史上初となる、分子シミュレーションと連成するマルチスケール心臓シミュレーションを「富岳」により実現する目途を立てることが出来た。心臓の拍動に伴い心筋壁の各所に刻々生じる歪は収縮タンパク分子の運動を大きく修飾し、一方、収縮タンパクの運動は心拍動の力強さを決定する。このようなマクロとミクロの相関は医学的・生理学的核心に迫る本質的現象であるにも拘わらず、(i) 巨視的な連続体の有限要素シミュレーションと微視的な分子シミュレーションが全く異なる体系として発展して来た学術的背景、そして(ii) コンピュータの性能の限界から、両者による連成問題として心拍動のマルチスケールシミュレーションを実現した研究チームはこれまで世界に存在しない。これに対し本成果は、刻々有限要素からの歪のフィードバックを受けつつ揺らぐミオシン分子構造の特徴量を抽出し、その関数として各化学状態を表すCafeMolのポテンシャルを確率的にスイッチすることで首振りサイクルを実現する一方、パワーストロークによりミオシン分子が発生する力を安定に有限要素にフィードバックするマクロ・ミクロ連成解析手法を新たに開発したものであり、その有効性は右図に示されるような内圧を受ける小規模な有限要素リングモデルの収縮運動により検証した。
- (2) 本成果は、ミオシンがアクチンと結合し力を発生する状態とアクチンから乖離している状態について構造解析を行った結果、800以上ある残基の内、少数の残基のみが大きく構造変化していることを発見したものである。そして、それら特定の残基のみについてCafeMolの力場をスイッチすると状態遷移が生じやすくなる傾向のあることがシミュレーションから確認され、これらの部位がミオシンの力発生機構において重要な役割を果たしていることが裏付けられた。更にそれらの残基は、新たなメカニズムに基づく強心薬として最近注目されているOmecamtiv Mecarbilのミオシンへの結合部位と幾つかが一致することが分かった。以上の成果(1)、(2)は、今後「富岳」により心臓シミュレーションを実施することで、アミノ酸の変異に

関係すると考えられている肥大型心筋症の原因究明や治療法の開発と共に、新たな強心薬の設

体循環回路とも連成 0 50 100 mmHg

Strain

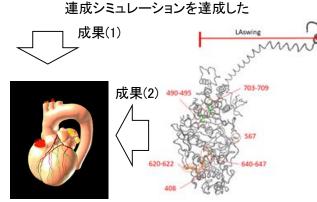
Force
Stiffness

CafeMol

W当なミオシン分子の運動
A

PN

小規模有限要素リングモデルとCafeMol分子モデルの



心臓シミュレーション を富岳にて実現 赤字番号の残基が構造変化 の鍵となることを発見した

重点課題2個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

サブ課題C: 心臓シミュレーションと分子シミュレーションの融合による基礎医学と臨床医学の架橋(UT-Heart研究所・久田俊明)

目標

創薬を加速する心毒性スクリーニングシステムの開発(重点課題1[奥野責任者/寺田分担研究者]との協同)

成果内容と科学的・社会的意義

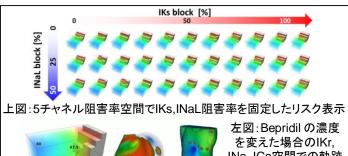
緑:科学的成果 青:実用的成果

(1) 本成果は、(i) 心臓モデルを構成する細胞数理モデルの5種類のイオンチャネルにつき色々な阻害率の組み合わせに対する不整脈発生リスクを「京」コンピュータを用いた網羅的心臓シミュレーションにより求め、その結果をデータベース化(Okada, et al., British. J. Pharmacology. 2018;175(17):3435-52) する一方、(ii) 重点課題1と連携してカリウムチャネル/ナトリウムチャネルと候補化合物とのドッキングシミュレーション並びに結合自由エネルギー計算から阻害率を求めることで、総て計算機上で心毒性を評価できる効率的かつ低コストなスクリーニングシステムのプロトタイプを開発したものである。なお上記(i)で作成された「不整脈データベース」はhttp://ut-heart.com/ECGdata/index.html にて公開されている。薬剤が心筋細胞のイオンチャネルに結合すると通過電流が抑制され不整脈に発展することがあるため、総ての薬は開発段階において心臓への催不整脈作用(心毒性)に関する安全性を調べる必要がある。本成果により、従来の実験的方法に代えて、膨大な候補化合物を効率よくスクリーニングできるシステムを実現できる目途が立った。現在、米国FDAを中心に細胞数理モデルの検討が行われており、これが確定すれば「富岳」によりUT-Heartシミュレーションを実行し直し、精密なデータベースを作成する予定である。また今後、カリウムチャネル、ナトリウムチャネル以外の3種のイオンチャ

成果(1) UT-Heart+分子モデルによる高効率な心毒性評価システムのプロトタイプを開発した。成果(2) 上記システムにより7種の薬剤について不整脈発生リスクを評価し妥当性を検証した。

(2) 本成果は、上記のように開発された心毒性スクリーニングシステム・プロトタイプを用い、実際に右表に示す7種の薬剤について心毒性評価を行い、従来のパッチクランプ実験に基きチャネル阻害率を計測してUT-Heartシミュレーションにより心毒性を評価した結果と比較したものである。カリウムチャネル、ナトリウムチャネル以外のチャネルについての阻害率は実験値を用いた。また同表には過去の実績から評価されたリスクも併記した。不整脈を発生させる薬剤濃度(常用量に対する倍率)で比較すると、dl-Sotalolについては検討の余地があるが、他は2~3倍の範囲の差異に収まり、既往の評価とも矛盾しない。本システムを「富岳」を用いて完成させることにより、我が国の創薬産業の競争力強化に繋げる。

ネルの分子モデルの作成、遺伝子変異モデルの導入等を行う予定である。



を変えた場合のIKr, INa, ICa空間での軌跡 (安全率も把握可能) 重点課題2

重点課題2 不整脈 データベース





自田エネルキー計算							
Drug name	CiPA risk (Gintant et al., 2016)	Redfern risk (Redfern et al., 2003)	CredibleMeds (Woosley et al.)	実験データと データベースによる予測		分子シミュレーションと データベースによる予測	
				不整脈発生 の有無	常用量に対 する倍率	不整脈発生 の有無	常用量に対 する倍率
Dofetilide	High	1	Known Risk of TdP	有	21	有	60.3
dl-Sotalol	High	1	Known Risk of TdP	有	71	有	0.7
Cisapride	Intermediate	2	Known Risk of TdP	有	13	有	25.2
Chlorpromazine	Intermediate	-	Known Risk of TdP	無	-	無	-
Astemizol	Intermediate	2	Known TdP risk	有	182	有	119
Verapamil	Low	5	-	無	-	無	-
Amiodarone	-	1	Known Risk	無	-	有	491

重点課題3

地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築

内閣府・自治体等の防災システムに実装しうる、大規模計算を使った地震・津波による災害・被害シミュレーション の解析手法を開発し、過去の被害経験からでは予測困難な複合災害のための統合的予測手法を構築する。

本課題の主な成果

- 1. 地震と津波が引き起こす複合災害、災害が引き起こす都市の被害、さらにその被害に対する社会の対応(群集避難、交通障害、経済活動復旧)の一連の過程をシミュレーションする統合的予測システムを構築(Ichimura et al., SC15)。
- 2. 複数の地震シナリオを想定し、複合災害・被害・対応に関する 実都市の数値解析モデルを構築し、シミュレーションを実施 (Hori et al., 2018, frontiers in Built Environment)。
- 統合的予測システムを構成する地震波動の数値解析コンポーネントは、極めて高い計算性能を発揮し、計算科学・計算機科学の分野でも評価(SC14・15・18のGordon Bell賞ファイナリスト、SC16・17のBest Poster賞)。

重点課題3 地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築

サブ課題A: 地震・津波の災害被害予測の実用化研究(国立研究開発法人海洋研究開発機構・堀高峰)

目標

クトを持ちうる。

・最終目標:テラ自由度モデルの準備となる500億自由度モデルを使う地震解析で、南海トラフ地震を対象とした50地震シナリオ解析とその結果を用い た地震動と津波の被害予測を実施

成果内容と科学的・社会的意義

成果(2) 大規模有限要素法での大規模地震動分布データを学習したAIによる不確実性を考慮した地震動分布推定手法の開発

成果(1) AI向け演算器とAIの科学計算への活用による、世界最高速の非線形有限要素法の大規模ソルバの開発

成果(3) 自動メッシュ生成手法の高度化による、複雑形状のロバストな有限要素メッシュ自動生成の開発

| るため、非線形有限要素法のソルバが高速化した。これは、近年性能が著しく向上したAI向け低精度演算器を高精度科学計算に活用する精度混合演算、AIを使う非線形マトリクス方程式の解法により実現した。従来とは桁違いの規模・分解能での地震の災害・被害予測が実行可能となったことを意味する。本成果は、本課題の科学技術上の革新的成果である世界最大規模かつ最速の有限要素法の開発をさらに進めたものであり、低精度演算性能も向上させたポスト京の性能を最大限に引き出すことにつながると期待される。また、本課題で開発した大規模高速非線形有限要素法計算コードを用いて国の想定地震・津波の実用計算が「京」で実施され、社会的インパクトが非常に高い。

せたAIを用いることにより、従来は困難であった不確実性を考慮した地震動分布を広域で高速に推定することが可能となった。 本成果は、より合理的な次世代地震動分布予測システムの研究成果であり、その社会的インパクトは高い。 (3)の成果により、複雑形状の地殻構造や地盤構造に対し、ロバストな有限要素メッシュの自動生成が可能となった。

本成果は、プレートが沈み込む複雑な地殻モデルや地盤や構造群から構成される詳細かつ精緻な都市モデルでの大規模非線形有限要素法の適用を可能とし、より合理的な被害予測を実現する高い社会的インパクトを持つ成果である。

(4)の成果により、沈み込み帯の不均質粘弾性構造での大規模地震による現実的な地殻変動の計算が可能となった。また同様の有限要素コードを用いた南海トラフの地震シナリオでの地殻変動・津波計算を実現するとともに、これと整合する南海トラ

様の有限要素コードを用いた南海トラフの地震シナリオでの地殻変動・津波計算を実現するとともに、これと整合する南海トラフ地震の複数シナリオで阪神地域での揺れによる被害予測を統合地震シミュレーションで実施し、社会科学シミュレーションに受け渡した。本成果は、より合理的な地殻変動計算と津波や揺れによる被害予測の実現につながるもので、高い社会的インパ

(5)の成果により、低B/Fマシンでの流体計算の高速化が確認できた。また(4)の成果と組み合わせて高知市を対象とした津波 遡上計算を実施した。本成果は、世界最大規模かつ最速の粒子系の数値解析法の開発という科学技術上の革新的成果をさ らに進めるものであり、津波に対するより合理的な被害予測を実現するという点で社会的インパクトも高い。 非線形有限要素法を使っ

非線形有限要素法を使った た 地下構造物を含む都市の 非線形地盤応答シミュ レーション(Ichimura et al..

SC18ゴードン・ベル賞ファ

イナリスト)

3 x Standard deviation

700

900

900

900

1000

1000

1000

1000

1000

1000

1000

大規模高速有限要素法で計算した大規模データを学習したAIIによる地震動分布の不確実性の推定結果(Ichimura et al., SC17, Best Poster)

重点課題3 地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築

サブ課題B: 統合的予測のための社会科学シミュレーションの開発(国立大学法人神戸大学・井料隆雅)

目標

最終目標:10,000災害被害シナリオに対し、避難(40万徒歩・自動車)・交通障害(総走行量2,000万台km)・被災地域経済活動(人口300万人・15万事業所)シミュレーションを実施

成果内容と科学的・社会的意義

緑:科学的成果 青:実用的成果

- 成果(1) 異常時において自律的な避難行動をとる高度なエージェントを使うマルチエージェントシステムの開発
- 成果(2) 交通流と交通需要の二つの解析を連成したマルチスケール数値解析コンポーネントの開発
- 成果(3) 企業の意思決定を考慮した被災地域経済活動シミュレータの開発
- 成果(4) 「人・モノ・金」に関する先端都市情報の、被害対応の社会科学シミュレーションでの利用
- (1)の成果により、歩行者と自動車が混在する津波避難に対する大都市上での大規模群集避難マルチエージェントシミュレーションが可能となった。このシミュレーションでは1000万人の歩行者の避難を,2048ノードで82%のストロングスケーラビリティによって計算できる。これは「京」コンピュータの性能が必要な最先端のシミュレーションである。
- 本成果は多数の自律的エージェントが実都市モデル上を避難するマルチエージェントシステムの開発という科学技術上の革新的成果である。さまざま事態を想定した津波避難対策推進に有効であり、その社会的インパクトは高い。
- (2)の成果により、地震発生後の被災を前提とした交通需要と交通流のシミュレーションが可能となった。特に交通流シミュレーションでは、30万~40万リンクで構成される首都圏や関西圏の大規模ネットワークが計算可能である。これらの連成は、「京」コンピュータの性能を利用し、多様な被災シナリオを想定した上での交通障害を解析する画期的な手法をもたらす。
- 本成果は交通需要と交通流を連成する大規模交通シミュレーション開発という科学技術上の革新的成果につながる。交通障害の予測精度・信頼度を各段に向上させ、地震発生後の交通障害の対応支援という高い社会的インパクトも期待される。
- (3)の成果により、災害後の生産設備復旧と生産の過程に関する被災地域経済活動シミュレーションが可能となった。このシミュレーションでは、将来の復旧過程を見越して経済合理性に基づいて行う企業の意思決定プロセスが、数十の産業部門間の複雑な相互作用を考慮しつつ計算されるようになっている。
- 本成果は複雑な企業の意思決定を動的計画法で計算する経済活動シミュレータの開発という科学技術上の革新的成果につながる。本シミュレータは緊急融資など災害後の経済施策評価への有用性が期待でき、高い社会的インパクトを持ちうる。
- (4)の成果により、入力情報作成や出力結果検証が容易でない社会科学シミュレーションに対し、それらのためのデータを作成することが可能となった。特に群衆避難や経済シミュレーションで用いるデータについて、ビッグデータを基に、さらにその質や精度を向上させることにより、都市全体を対象とする社会科学シミュレーションの信頼度の正しい評価が期待される。
- 本成果は、先端都市情報を「京」コンピュータで実利用する世界最初の例であり、都市情報と高性能計算の連成という科学技術上の革新的成果となる。社会科学シミュレーションの信頼度評価はその利用促進に繋がり、社会的インパクトも高い。



東京都心での群衆避難シ ミュレーション(黒点の集合 が避難する群衆を示す)



首都圏道路網(約34万リンク)での交通流シミュレータ

重点課題4

観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化

観測ビッグデータを組み入れたモデル計算で、局地的豪雨や竜巻、台風等を高精度に予測し、また、人間活動による環境変化の影響を予測し監視するシステムの基盤を構築する。環境政策や防災、健康対策へ貢献する。

本課題の主な成果

- 1. 観測ビッグデータを活用する同化手法を新たに開発した。この手法を用いることによって、台風や集中豪雨、局地的大雨の予測精度が向上し、「予測から発生までの時間(リードタイム)」を長時間化できることが明らかとなり、より安全な避難施策実現への貢献が可能になった。また、つくば竜巻等の極端気象に対して、新たに開発した乱流解析技術を活用することにより、生活空間スケールでの被災レベルの推定が可能になった。
- 2. 全地球を水平解像度14kmで覆う「高解像度大規模アンサンブル実験」により、一週間以上前から台風や豪雨の日本への影響を予測できる技術を開発した。さらに、水平解像度を高くすることにより、台風が存在しない状態においても台風の発生予報と進路予報の成績が向上することを明確に示した。
- 3. 雲粒数の増加により雲の寿命が延びる効果を導入した高解像度エアロゾルモデル の新たな開発により、雲水応答の衛星観測との整合性が飛躍的に向上し、気候変動 予測の不確実性をより低減できる可能性を示した。

重点課題4 観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化

サブ課題A: 革新的な数値天気予報と被害レベル推定に基づく高度な気象防災(海洋開発研究機構/気象研究所・瀬古弘)

目標

最終目標:ビッグデータを用いた「データ同化を含む数値天気予報システム」を開発し、「メソスケール開発」では本格的な実験を 実施し、高分解能の「積乱雲スケール開発」では初期的な結果を得る。さらにスケールダウンした現象である局地的突風などの極端気象を、乱流解析 技術であるLESモデルを用いて解析し、生活空間スケールの被災レベルを推定する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑:科学的成果 青:実用的成果

成果(1):ひまわり8号の高頻度観測データの同化等により、集中豪雨や台風の予測精度の向上とリードタイムの6時間拡大(関東・東北豪雨など)。 成果(2):フェーズドアレイレーダや偏波レーダ、稠密地上観測データを用いた局地的大雨やつくば竜巻の再現、竜巻発生機構の革新的理解。

成果(3):現実地形と建築物を1mスケールで表現する超高解像度シミュレーションによるつくば竜巻の再現と建築物に働く風圧力の推定。

- (1)の成果により:平成27年関東・東北豪雨や、平成28年台風10号等のメソスケール顕著現象の 事例で、ひまわり8号の大気追跡風や輝度温度の高頻度観測データなどのビッグデータの 同化法を開発し、集中豪雨や台風等の予報精度を向上させるとともに、より長いリードタイムの 確保が可能であることを実証した(右図上)。(目標達成)
- (2)の成果により、局地的大雨や竜巻の親雲等の積乱雲スケールの顕著現象について、 フェーズドアレイレーダや稠密地上観測データ等の同化法を開発し、局地的大雨の降水強度や 竜巻の親雲の位置・発生時刻の予測精度を向上させた。竜巻のアンサンブル予測により、竜巻 発生予測確率分布と発生要因の革新的理解を得ることができた(世界初)。(目標達成)
- (3)の成果により、実際の竜巻を再現した気象モデルの結果を用いて、実地形・実市街地(市街 地:1, 2m 当該建物:0.6m)を表現する高分解能シミュレーションを行い、現実の音巻の再現結
- 果を用いる世界初の建築物への影響評価に成功した(右下図)。(日標達成)
- 科学的意義: 観測ビッグデータの同化法の開発と得られた結果による新しい知見の獲得 新しい科学への開拓:現実に近い再現結果を用いた災害を起こす顕著現気象の機構解明。 (例えば、竜巻発生要因解明(成果)。線状降水帯や夏季異常高温にも適用すべき)。

技術的波及効果: 今後の気象庁等の効率的な数値モデルや同化システムの開発に寄与。

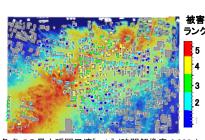
新しい観測ビックデータの測器開発へのフィードバック。予測出力はAIへの入力データに。

社会的意義:予報精度向上・長いリードタイムがもたらす顕著現象の被害軽減と産業革新創出 社会的課題の解決: 顕著現象のより正確な予測情報や確率情報に基づく避難と対策。 実際の竜巻などの再現に基づく、より安全となる建築基準の作成とリスク低減に貢献。

イノベーション創出:予測精度向上と長いリードタイムの確保、確率予測情報や多数予測シナ リオの提供は、防災以外にも、流通や再エネ等の産業に革新をもたらす。(例えば、より 早期からの、より確かな情報に基づく物流の確保、効率的な発雷管理やダム水量管理。)

2016年8月29日00UTCを初期時刻とする33時間予報結果. - July 3 - 10 4 48時間予測による台風の位置の予報態制 予報時間6時間毎の台風進路予報平均誤差を みると6時間分ずれている。 ひまわり8号の高頻度データにより、6時間 長いリートタイムが得られたことがわか

ひまわり8号の高頻度大気 追跡風のデータ同化の効果



各点での最大瞬間風速[m/s] (時間解像度 0.002s)

と計算結果の比較

実被害の基づく推定風速

建物に作用する負圧 (等値面-45hPa)

実データを 用いて再現

した竜巻

30 40 50 60 70 80 90 100 110 120 130

重点課題4 観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化 サブ課題B: シームレス気象・気候変動予測(東京大学大気海洋研究所・佐藤正樹)

目標

・最終目標: 数週間から月・季節から年スケールの水平14-7km格子のアンサンブル実験を実施し、シームレス気象予測を行うための技術基盤を構築する。水平500m格子日本沿岸モデルに基づく海況予測システムを設計し、水平100m格子のパイロット研究を実施する。

成果内容と科学的・社会的意義

禄:科学的成果 青:実用的成果

成果(1):大規模アンサンブル全球高解像モデルによるシームレス予測 成果(2):超高解像度大気海洋結合モデルによるマッデン・ジュリアン振動予測研究

成果(2): 超高解像度入気海洋福音モナルによるマッテン・シ 成果(3): 実運用可能な日本沿岸海況予測システムの開発

以上前より日本への台風や豪雨の影響の可能性を予測する技術を開発した。また、解像度を7kmまで高めることで、日本に上陸した台風について、台風発生前から発生・進路の予報成績が向上することを明確に示した。これは気象庁の現業台風予報に対して将来的

(1)の成果により、100以上の大規模アンサンブル全球14km高解像度実験により、一週間

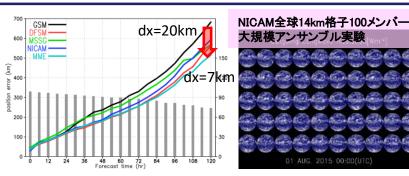
な改良の方向性を示すインパクトのある成果であり、社会的意義は大きい。 本課題によって得られた大規模アンサンブルシミュレーションデータは予測精度の改善

に向けた研究開発のみならず、どの擾乱が台風となるのか、急発達する/しない台風の違いは何か、といった台風の発生・発達に対する科学的理解の進展にもつながる。

- (2)の成果により、超高解像度大気海洋結合モデルの高い性能が明らかになりつつあり、 今後、海水面温度の季節予測や気候変動予測といった幅広い応用だけでなく、熱帯気象 現象の解明といった科学的課題の解決にも大いに利用されることが期待される。
- (3)の成果により、今後この水平解像度の海況予測モデルを構築することで、防災・水産業・海運等への貢献ができると考えられる。例えば、台風接近時における高潮の予測といったことが挙げられる。また、地球温暖化時における沿岸予測にも応用できることから社会的意義が大きい。

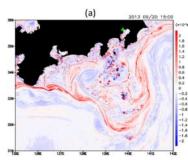
500mという水平解像度は、日本全域の沿岸を扱う海洋大循環モデルとしては現時点で最高解像度であり、日本沿岸の多くの主要な湾等から外洋の海況までシームレスに表現できる。モデル結果の解析を進めることで、沿岸と外洋の相互作用等についての科学的理解が進むことが期待できる。

kmスケールメッシュの高解像度大気海洋モデルは今後の気象・気候変動予測において 重要な役割を果たすことが国際的にも認識されてきた。日本が提唱した国際全球雲解像 モデル比較実験DYAMONDにより、全球雲解像モデルの国際連携が進められている。

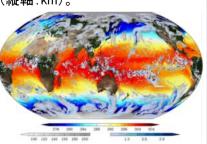


(右)大規模アンサンブル全球14km高解像実験による台風予測。 (左)全球7kmモデル(赤、緑、青線)による、予測時間(横軸:時間)に対する進路予測誤差の向上(縦軸:km)。

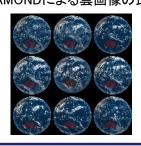
高解像度大気14km海洋1/4度 結合モデルによるマッデンジュリアン振動予測実験。色は海面水温(K)、グレーは外向き長波放射(W/m²)で雲の分布を表す。



500m格子日本沿岸格子モデルによる1m深における相対渦度。



国際全球雲解像モデル比較実験DYAMONDによる雲画像の比較。



重点課題4 観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化 サブ課題C: 総合的な地球環境の監視と予測(海洋開発研究機構・滝川雅之)

目標

最終目標: 精緻化した化学輸送モデルでのパイロットスタディの実施、および次世代人工衛星による観測データも利用可能な同化システムの構築。

成果内容と科学的・社会的意義

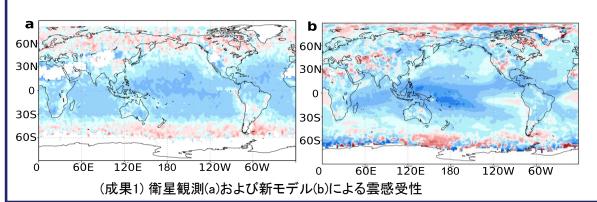
緑:科学的成果 青:実用的成果

成果(1):エアロゾルの雲水応答に関するモデル表現の改善

成果(2):多種・多成分観測による大気環境データを用いた高解像度同化データセットの公開

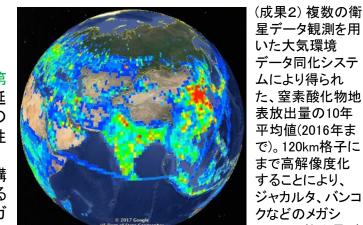
成果(3): 気象庁黄砂予測現業モデルによるひまわり8号エアロゾル同化の検証

- (1)の成果により、現在開発中の高解像度エアロゾルモデルは既存の気候モデルに比較して第 二種間接効果(雲粒数増加による雲粒径の減少が降水効率の低下をもたらして雲の寿命を延 ばす効果)をより適切に表現している可能性を示唆する結果を得た。本成果は現在開発中の エアロゾルモデルがより大気環境変動と気候変動の相互作用をより適切に評価しうる可能性 を示唆するもので、気候変動予測の精緻化につながる可能性がある。
- (2)の成果により、4次元変分法およびアンサンブルカルマンフィルタを用いた同化システムの構 築およびその大型計算機向け最適化を進め、全球120km格子での10年以上の長期にわたる 環境データセットを世界に先駆けて公開した。既存の同種のものに比較して解像度が高くメガ シティを解像でき、全球的な都市大気環境および健康影響の長期変動、および窒素酸化物な どの排出量規制などに資するものである。2019年度はアジアなど各地域における社会活動と 放出量変動の関係について詳しく解析する予定である。
- (3)の成果により、気象庁での新しい現業運用(令和元年度予定)に先駆けて過去事例における 高解像度エアロゾル同化実験を行い、黄砂事例での同化システムの有用性を検証した。



推定可能となっ

(成果3) 衛星観測(左上)および同化前(右上)、同化後(右下) のエアロゾル光学的厚さ。左下は同化によるインクリメント。



いた大気環境 データ同化システ ムにより得られ た、窒素酸化物地 表放出量の10年 平均値(2016年ま で)。120km格子に まで高解像度化 することにより、 ジャカルタ、バンコ クなどのメガシ ティでの放出量が

重点課題4 観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化

コデザイン・基盤技術開発(海洋研究開発機構・高橋桂子)

目標

・最終目標: ターゲットアプリの高速化・機能高度化等を継続しつつ、実行環境を整備する。基盤技術として大規模アンサンブル流体シミュレーション データの圧縮技術を開発する。

成果内容と科学的・社会的意義

成果(1):ターゲットアプリNICAM-LETKFのコード見直しを行い、目標達成が見込める実行性能向上を達成し た。

成果(2): 想定されるアーキテクチャを基にした性能推定を通じてシステム構成やコンパイラ等のシステムソフト ウェアの改善に資する知見を提供した。

成果(3):実行性能向上のために、NICAM力学過程につづき、NICAM物理過程の単精度演算化を含めた

最適化を行った。

成果(4):流体計算のデータファイルの高効率圧縮技術について論文投稿およびサンプルコードの公開、本格

研究実施にむけての整備を行った。

(1)の成果により、重点課題4コデザインの目標とした計算性能に到達し得ることを確認した (現時点では推定値)。

本成果は、ポスト「京」の性能を最大限に引き出し、成果の早期創出及び最大化を実現する観点から重要で ある。

- (2)の成果は、中間目標に掲げたシステム構成、システムソフトウェア要件等の検討を実施したことで得られた。 本成果は、全重点課題およびポスト「京」の利用課題全体に貢献するものであり、波及効果が期待できる。
- (3)の成果は、(1)の成果で述べた重点課題4コデザインの目標とした計算性能の達成に貢献している。 本成果は、従来は倍精度で行われていた演算を単精度で行っても計算結果に科学的な観点での悪影響が 無いケースがあることを示し、また単精度演算を活用する計算機ハードウェアおよびソフトウェアに一定の価 値を加える。(図1)
- (4)の成果は、基盤技術として開発した流体データの効率的な圧縮法について、成果公開および応用展開を 図ったものである。

本成果は、大規模シミュレーション研究実施にむけての基盤技術であり、重点課題4に限らず、流体データ を扱う研究課題への技術的波及効果が期待できる。(図2)

緑:科学的成果 青:実用的成果

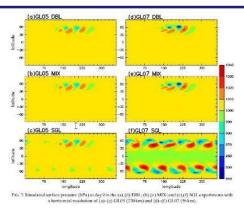


図1:演算精度の相違による 計算結果への影響評価

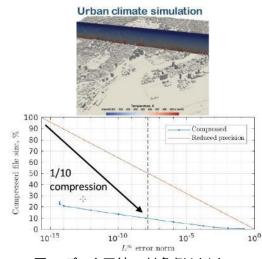


図2:データ圧縮の対象例(上)と 圧縮で生じる数値誤差と圧縮率の関係(下) 18

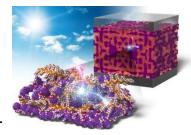
重点課題5

エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発

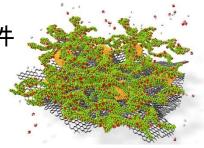
複雑な現実複合系の分子レベルでの全系シミュレーションを行い、高効率なエネルギーの創出、変換・貯蔵、利用の全過程を実験と連携して解明し、エネルギー問題解決のための新規基盤技術を開発する。

本課題の主な成果

- 1. NTChem: 「富岳」での目標性能を達成見込み、1万原子系の励起状態計算 GELLAN: 10²⁰以上の電子配置の超高精度励起状態計算 MODYLAS: 1億原子系の超大規模、1ステップ3msの超高速分子動力学計算
- 2. 絶対に発火しない長寿命電解液を開発(Nature Communications 7, 12032 (2016)、Nature Energy 1, 16129 (2016)、Nature Energy 3, 22-29 (2018)、2017年度「Best Use of HPC in Manufacturing」受賞、日本経済新聞等19件掲載)企業での実用化研究へ進展
- 3. 「京」の第一原理計算とマテリアルズ・インフォマティクス手法でペロブス カイト太陽電池の新材料候補を発見(J. Phys. Chem. Lett. 8, 4826(2017)、 日本経済新聞等11件掲載) 実験研究者との実証実験計画中
- 4. 企業(27件)・国家プロジェクト(18件)・実験研究者(51グループ)との 連携体制構築



有機薄膜太陽電池のドナー・アクセプター界面での電荷分離



燃料電池の電極四相界面









二重ペロブスカイト





リチウムイオン電池の限界性能大幅引き上げ

二次電池電解液

重点課題5 エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発

新エネルギー源の創出・確保 - 太陽光エネルギー(神戸大・天能精一郎)

目標

高効率太陽光エネルギー変換による新エネルギー源の創出を目指す。複雑なスピン状態を含む天然・人工光合成系の素反応から物質設計までを 取り扱える統合的な計算手法を確立し、水分解反応の本質解明と新エネルギー創出に有望な物質探索を行う。また、太陽電池の物質設計とモル フォロジー・界面の制御に貢献できるシミュレーション技術の開発を行い、高効率太陽電池の実現に向けた計算的アプローチを推進することにより次 世代のエネルギー資源の創出に貢献する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑:科学的成果 青:実用的成果

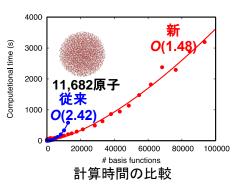
成果(1)

態計算

- > 太陽電池のエネルギー変換要因特定に向けた大規模シミュ レーションの実現
- 人工光合成の反応機構の解明に向け高精度シミュレーション の実現
- ①太陽電池シミュレーションに向けた基盤アプリNTChem:
- **電子状態計算→1万原子系** 励起状態計算 11,682原子, 93,456基底の
- 第一原理計算で20.5%の並列 効率を達成。

当初目標達成見込み

励起状態計算(TDDFT)に 向けて超並列疎行列ライブ ラリ等の高度化中



- ②人工光合成シミュレーションに向けた基盤アプリGELLAN: **量子化学計算→10²⁰以上の電子配置**からなる超高精度励起状
- 1020以上の電子配置を扱える高精度ソルバにより光触媒候補 の遷移金属錯体における高精度計算を実証。「富岳」に向けて更 に高度化中

成果(2)

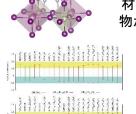
- > 太陽電池の高効率化に向けた電荷分離機構の解明
- ▶ ペロブスカイト太陽電池やペロブスカイト水分解光触媒の新材料候補を提案
- 太陽電池のドナーアクセプター界面における電荷分離機構を解明
 - 有機無機ペロブスカイト太陽電池
 - 有機薄膜太陽電池
- ▶ 第一原理計算を実施し、ハイスループット・スクリーニングにより材料候補を提案
 - ・ 二重ペロブスカイト太陽電池
 - 可視光応答型ペロブスカイト水分解光触媒

日本経済新聞等11件に掲載

プレスリリース:2017/10/05 「京」でペロブスカイト太陽電池の新材料候補を発見

J. Phys. Chem. Lett. 8, 4826 (2017) Energy /eV 電荷分離機構の解明

有機太陽電池の電子と正孔は エントロピー拡散によって分離



二重ペロブスカイト太陽雷池 材料の11.025個の候補化合 物から探索し、51候補を提案

可視光応答型ペロブスカイ ト水分解光触媒材料の 29.160個の候補化合物から 探索し、6候補を提案

APL Mater. 6, 101103 (2018).

重点課題5 エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発 サブ課題B: エネルギーの変換・貯蔵 — 電気化学エネルギー (東大・杉野修)

目標

第一原理電子状態理論に基づく電極反応の計算と分子動力学法に基づく電解質の計算を統合させることにより、均一系の化学・表面物性・粗視化に基づく材料科学的なアプローチでは理解が困難であった二次電池や燃料電池の分子論を構築する。またこの方法を用いて、測定が困難な電極界面を解明しそれを二次電池や燃料電池の電流電圧曲線等の予測につなげ、信頼性の向上に貢献できる手法を確立する。これを用いて次世代・次々世代電池技術の重要問題に挑戦し、蓄電・水素エネルギー社会の実現に貢献する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑:科学的成果 青:実用的成果

成果(1) 基盤アプリMODYLAS、stat-CPMDを活用し二次電池・燃料電池の微視的機構解明に向けた世界最大規模のシミュレーションの実現

①MODYLAS: 分子動力学計算→1~10億原子系超大規模分子動力学計算

新規アルゴリズムにより通信時間を50%削減、FMM計算主要部分の演算量を約6分の1に削減。プロトン移動の組み込み、不均一系の浸透係数の計算手法の開発など、「富岳」に向けて更に高度化中

②stat-CPMD:<mark>第一原理分子動力学→5千原子系</mark> 電極反応

5千原子系の第一原理サンプリング達成。FFT高速化等により速度が17%向上。反応解析の実証およびメモリ削減等の更なる高度化中

上記のアプリをそろえて総合的なシミュレーションを行える体制を構築した例は他所には見られない。 先鋭的な成果を創出すると同時にそこで培ったノウハウをアプリと共に普及させることにより我が国の電池開発技術のレベルアップに大きく貢献する。

成果(2) 二次電池:安全で高性能な電解液を開発

1. 燃えにくく高性能な電解液の開発

2. 水を用いた安全・安価・高性能な電解液の開発

3. 絶対に発火しない長寿命電解液の開発

プレスリリース

Nature系に3報

日本経済新聞等19件に掲載

2016/06/29 燃えにくい電解液を用いた高性能4.6Vリチウムイオン電池

Nature Communications 7, 12032 (2016)

2016/08/27 新たなリチウムイオン伝導性液体の発見 - 水を用いた安全・安価・高性能な超3V動作リチウムイオン電池へ-

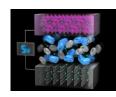
Nature Energy 1, 16129 (2016)

2017/11/28 "火を消す"高性能電解液を開発 - 絶対に発火しない長寿命電池の実現へ

Nature Energy 3, 22-29 (2018)

2017/11/13 SC17「HPCwire」の読者が選ぶ2017年度「Best Use of

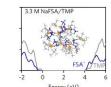
HPC in Manufacturing」を受賞



5 V級Liイオン電池 の作動イメージ 図



2種類のリチウム塩と水 からハイドレートメルトに



計算により得られ た溶媒和構造と対 応する電子状態。



リチウムイオン電池の限界性能大幅引き上げ

元素戦略(触媒・電池)京大、東大との連携により実施

重点課題5 エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発 サブ課題C: エネルギー・資源の有効利用 - 化学エネルギー (岡山大・田中秀樹)

目標

化学エネルギー創成から消費に至る過程において、メタンやCO2の分離・回収、貯蔵、触媒反応によるエネルギー・資源の有効利用に関わる基盤技術を開発し、高効率な分離・回収、貯蔵、相互変換法の実用への橋渡しとするための指針を提供する。そのために、電子状態理論と分子動力学法を基盤とした統合シミュレーション技術を構築し、実用的な物質設計に向け分子レベルからの指針を提供する。ハイドレート分解によるメタン資源の採取方法の効率化、燃料電池非白金系触媒の開発、アミンをはじめ高効率材料を用いたCO2の分離・回収技術の発展に貢献することにより、エネルギー多消費型工業プロセスを革新する。

成果内容と科学的・社会的意義

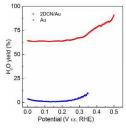
緑:科学的成果 青:実用的成果

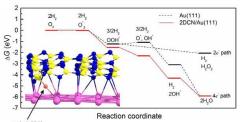
成果(1): 非白金族新規電極触媒の開発に向けた新しい作用原理の発見

日刊産業新聞等 8件掲載

- > 窒化炭素との接合による金触媒の活性化
- > 微量な窒素導入による炭素材料の酸素還元電極触媒化

本成果により、燃料電池普及の重要な課題となっている非白金族電極触媒に対する基礎・応用研究がより活発になることが期待される。





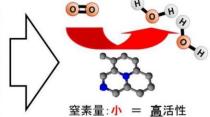
ACS Nano. 11, 1770(2017)

図(上左)水の生成率。 金(青線)では水がほ とんど合成できない が、ヘテロ接合型(赤 線)では合成可能とな る。

図(上右)金表面(黒) とヘテロ接合型触媒

(赤)の反応経路。





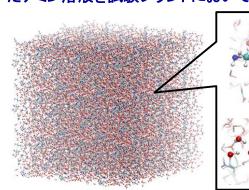
ACS Catal. 8, 8162 (2018)

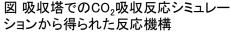
成果(2):CO。分離・回収におけるアミン溶液の反応機構解明

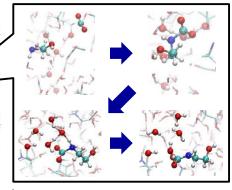
▶ 吸収塔・再生塔でのアミン溶液の反応機構をシミュレーションで 解明

超並列量子分子動力学シミュレーションにより、アミン溶液へのCO₂吸収反応の微視的機構を見出した。また、再生塔で起こる逆反応は図の逆過程とは異なる機構で進行することを突き止めた。本成果により、吸

収塔と再生塔の両方に最適なアミン溶液の設計可能性が示唆された。 A社との共同研究では、シミュレーションによる知見に基づいて開発したアミン溶液を試験プラントにおいて性能試験を実施している。







Chem. Phys. Lett. **647**, 127 (2016) Bull. Chem. Soc. Jpn. **90**, 1230 (2017)

重点課題6

革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

エネルギーシステムの中核をなす複雑な物理現象を第一原理解析により、詳細に予測・解明し、 超高効率・低環境負荷な革新的クリーンエネルギーシステムの実用化を大幅に加速する。

本課題の主な成果

1. 石炭ガス化炉、燃料電池、洋上ウインドファーム、磁気閉じ込め核融合炉のクリーンエネルギーシステムの実機のデジタルツインの実現。 すなわち、4種のシステムの極めて複雑な形状、大規模、連成、「京」、 ポスト「京」での計算、を達成するマルチスケール・マルチフィジクス統 合シミュレーションの世界初の実現。

(日本物理学会賞3件、プラズマ・核融合学会学会賞3件)

(Nature Communications1件、Physical Review Letters3件、ICCES2019 Plenary Lecture、WCCM-ECCOMAS2020 Plenary Lecture)

- 2. ターゲットアプリ(ADVENTURE)、プラズマコード(GT5D等)のコデザインの推進。ADVENTUREは「京」の35倍以上の性能向上。
- 3. 実用的成果への期待としては、各システムのスケールアップ時の定量的予測性が担保可能となる。その結果、途中のスケールの実証テストをスキップできる可能性がある。また、実用化までの開発期間短縮、信頼性向上、開発コスト・運用コスト低減、国際競争力向上がある。

サブ課題A: 高圧燃焼・ガス化を伴うエネルギー変換システム(サブ課題代表者:東京大学・吉村 忍)

目標

ラボスケール(投入熱量0.76MWth)の石炭ガス化炉(電中研炉)やパイロットスケール(50MWth)の超臨界圧CO₂燃焼器を対象に、世界初の炉構造・反応(固気液三相燃焼流)・伝熱と冷却を連成させたマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションを実現し、V&Vを実証する。また、これらのソフトウェア群を用いた設計環境を構築する。さらに、ポスト「京」におけるターゲット問題であるベンチスケール(熱投入量16MWth)石炭ガス化炉(三菱重工実験炉)の解析準備を完了する。

成果内容と科学的・社会的意義

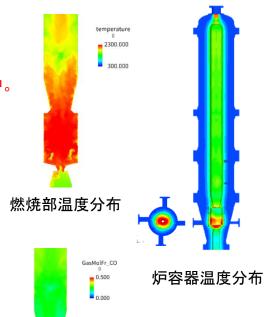
成果(1)ラボスケール石炭ガス化炉(電中研炉)を対象に、世界初の炉構造・反応・冷却マルチスケール・マルチフィジクスシミュレーションを実現した。解析結果と試験結果との比較によるV&Vを遂行中。 成果(2)パイロットスケール超臨界 CO_2 燃焼器を対象に、燃焼解析と計測値との比較によるV&Vを遂行中。 成果(3)ベンチスケール石炭ガス化炉(三菱実験炉)の解析に関してメーカーとNDAを締結しモデル構築を遂行中。

(1)の成果は、灰溶融モデルを組込んだ固気液三相燃焼流(LES)解析コードFFR-Comb(FVM)、冷却管による移流拡散冷却解析機能(DG)を組込んだ熱伝導解析コードADVENTURE_Thermal (FEM)、繰返し弾塑性とクリープ解析、熱ひずみ解析機能を組込んだ構造解析コードADVENTURE_Solid (FEM)を、並列連成カプラーREVOCAP_Couplerを用いて「京」上で大規模並列連成解析を実現することによりはじめて達成される成果であり、計算科学的に特筆すべき成果である。また、ベンチスケール石炭ガス化炉とパイロットスケール超臨界CO2燃焼器の全系シミュレーションの実現は、炉型スケールアップ時の非線形効果の定量的予測性能を高めるとともに、炭種の違いや燃焼方式の違い(空気吹き、酸素吹き、O2/CO2吹き等)に対する適切な炉パラメータ探索の試行錯誤プロセスを大幅に削減し、実用化を大幅に加速できる。大規模燃焼解析については米国ExaCT等のコード開発があるが、燃焼シミュレーションのみに特化しており、灰溶融や冷却挙動、構造健全性評価まで考慮したマルチフィジクス・マルチスケール統合シミュレーションは本研究が世界初である。

(2)の成果は、超高圧(30MPa程度)条件に用いる実在気体モデル及び燃焼モデルの評価・検証を詳細に行った上で、実際のパイロットスケールの超臨界圧 CO_2 ガスタービン燃焼器を対象にしたLES解析を世界で初めで実施したものである。

(3)の成果は、ポスト「京」におけるターゲット問題であるベンチスケール石炭ガス化炉(三菱実験炉)について、メーカーとNDAを締結し、情報の提供を受け、モデル構築を行っているものである。H31年度末までに燃焼部のモデルを構築し、試解析を実施するとともに、冷却管を含む炉容器については、モデルを構築中であり、今後、構築したモデルを用いた熱伝導解析、構造解析の試計算を遂行予定である。

緑:科学的成果 青:実用的成果



0.000

燃焼部CO分布

燃焼部灰溶融

電中研炉のシミュレーション

サブ課題B: 気液二相流及び電極の超大規模解析による燃料電池設計プロセスの高度化(東京大学・鹿園直毅)

目標

に活用できるようになる。

PEFCスタックの高出力密度化・低コスト化(4kW/L以上、Pt使用量0.1g/kW以下)に貢献するセル・電極設計シミュレーション技術を開発する。 SOFC電極の高耐久性実現(15年以上に相当するSOFC耐久性評価)に貢献できる電極3次元シミュレーション技術を開発する。

緑:科学的成果 青:実用的成果

成果内容と科学的・社会的意義

成果(1) オープンソースCFDコードへの高速行列ソルバ導入、10セル積層ショートスタック計算を達成成果(2) 実触媒層構造及び実作製プロセスを対象にした反応輸送連成解析技術の開発

成果(3) フラグメント分子軌道計算と粗視化シミュレーションの連携技術、金属触媒とアイオノマー間の相互作用算出手法を開発

成果(4) SOFC電極の最適設計に貢献できるツール群を開発

世界に先駆けて燃料電池の ナノ〜メゾ、〜マクロ連携マルチス ケールシミュレーションを実現

(1)の成果は、燃料電池ショートスタックのマクロシミュレーション(気液二相流計算)を実現(10セル積層、約14億メッシュ)し、カーボン繊維構造のGDL基材と流路界面の液水挙動も計算可能となり、二相流解析コードの適用範囲を拡大したものである。広範な作動条件における詳細二相流解析によって流路内の二相圧力増倍・気液速度比と全体性能シミュレーションの二相流モデルパラメータとを連結し、JARI評価セルの限界性能を定量的に再現した。この成果により、排水性を向上させるための実機セルの流路設計、GDLと流路構造の組合せなど燃料電池の構造条件や流量などの作動条件の検討

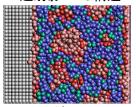
(2)の成果は、作製プロセスを考慮した、電極構造と発電特性の相関評価技術を確立したものである。DLVO理論を基にしたメン゙シミュレー ションにより凝集形状を再現。FIB-SEMによる画像取得、炭素凝集体計算、レベルセット法を基に、実触媒層の3D構造構築を達成し、反応 計算を実施。これにより、経験的だったプロセス操作と電池特性の紐づけ技術支援。マクロシミュレーションへの橋渡し技術を確立。

(3)の成果は、FMOミクロ計算から有効パラメータを非経験的に算定してDPDメゾシミュレーションを行うFMO-DPD法を確立(汎用性と信頼性を確保)したものである。FMO-DPDによりMEA/水クラスターのメゾスケール構造を評価、実験結果と定量的に対応。メゾスケール構造からナノスケール構造への逆射影プロトコルも整備、復元構造でのFMO計算による相互作用解析も実施(右図)。新規の高速DPDコードも開発。これらの成果により、実験計測が困難とされるMEA内のナノ界面構造モデリングと輸送特性との相関を把握できるようになる。

さらに、金属触媒とアイオノマー間の相互作用パラメータを非経験的に算出するミクロ計算手法も開発。粗視化MD解析(メゾス ケール)によりPt/Nafion二相界面の構造モデリングを実施。触媒表面における水ネットワーク構造を解析。この成果により、実験計 測が困難なMEA触媒近傍でのアイオノマー被覆状態、輸送特性の解析技術、メソ解析への材料情報の橋渡し、が可能となる。

の作動条件の検討

逆射影FMO構造



Pt/アイオノマーMD

(4)の成果は、SOFC電極の長時間耐久性の評価に向けた過電圧特性、Ni相焼結挙動の予測、及び最適な電極構造の提案を目的としたツール群を開発したものである。この成果により、実験計測が困難な長時間挙動が予測可能となるだけでなく、最新の製造技術(ナノインプリント等)と組合せることで革新的電極構造の設計が可能となり、電極性能の飛躍的向上が期待できる.

サブ課題C: 高効率風力発電システム構築のための大規模数値解析(豊橋技術科学大学・飯田明由)

目標

洋上ウィンドファームの発電性能予測、構造信頼性評価に注力したマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーション技術を開発 する。具体的には、①大型風車の相互干渉解析手法の確立、②流体構造連成振動解析による風車ブレードの振動応答、応力解、累 積疲労損傷解析技術の開発、③洋上ウィンドファーム全体のシミュレーションの大規模化と多風向同時解析技術の開発、を行う。

成果内容と科学的・社会的意義

成果(1)大型発電用風車の単体発電性能と後流(Wake)影響を定量評価可能なLES流体シミュレーションコードを 開発した。

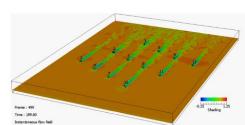
成果(2)洋上ウィンドファームの発電性能評価に必要なマルチスケール流体シミュレーションシステムを開発し

成果(3)洋上ウィンドファームの風車ブレードの累積疲労損傷評価のための、マルチスケール・マルチフィジクス

響評価を、LESベースの詳細CFD解析(FFB)により高精度に評価できるようになったものである。このコード を用いることにより、ウィンドファームにおいて、風車後流が後方配置の風車の発電性能や累積疲労損傷 に与えるの影響を詳細に評価する基盤が確立したことになる。

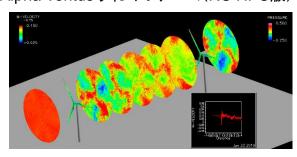
(2)の成果は、RC HPC版がほぼ完成し、洋上ウインドファーム全体シミュレーションと多風向同時解析が可 能となったことにより、ファーム全体の発電性能評価が可能となるものである。さらに、現在、タンデム配置 の2つの大型風車の解析をRC HPC版とFFBを用いて行い、両者の結果を詳細に比較検討することにより、 RC HPC版に組込む工学Wakeモデルの高度化を図ることが可能となり、ひいては洋上ウィンドファーム全 体の発電性能評価の精度向上に大いに役立つ。

(3)の成果は、並列LES解析コードFFB(FEM)(重点課題®のターゲットアプリ)と並列構造解析コード ADVENTURE Solid(FEM)(重点課題⑥のターゲットアプリ)を並列連成カプラーREVOCAP Couplerを介して 連携した流体構造連成振動解析システム(オフライン片方向連成)を構築したものである。さらに、積層複 合材料(積層ソリッド要素)から構成される大型風車ブレードの変形・応力解析を行うのみならず、ブレード 内部に累積する累積疲労損傷分布を定量的に解析評価できるようになった。この成果により、大気境界層 流れ場に含まれる乱流成分や、Wake(後流)がブレードの累積疲労損傷に与える影響を高精度に評価す ることが可能となる。大型発電用風車ブレードを対象とした、このような高精度の累積疲労損傷評価システ ムは、世界的に存在せず、計算科学的にも、材料強度学的にも大きな価値があり、さらに実用的価値も大 変大きい。



緑:科学的成果 青:実用的成果

Alpha Ventusウィンドファーム(RC HPC版)



累積疲労損傷結果 (ADVENTURE)

Wake(後流)解析 (FFB)

サブ課題D: 核融合炉の炉心設計(日本原子力研究開発機構・井戸村泰宏)

目標

国内大型実験プロジェクトと連携した実証研究によりITERの核燃焼プラズマ解析に必要な計算モデルを確立するとともに、 Oakforest-PACS全系規模の強スケーリングを実現する。これにより、世界最先端の計算精度と計算性能をもつ国産核燃焼プラ ズマ解析コードを完成させる。

成果内容と科学的・社会的意義

成果(1)LHD装置の重水素実験開始に先駆けて水素に対する重水素の閉じ込め性能改善を予測し実験を先導。成果(2)JT-60U装置における高エネルギー粒子駆動MHD現象を解析し、長時間スケールのバースト現象を再現。成果(3)メニーコア最適化技術、省通信型行列ソルバを開発し、Oakforest-PACS全系の強スケーリングを達成。成果(4)主要コードをオープンソース化、計算基盤技術の他課題への適用により成果の利活用を促進。

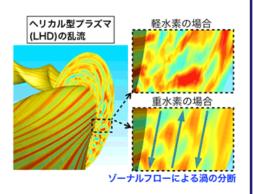
(1)の成果により、多種イオン系乱流輸送に関して、LHD装置の重水素実験で観測された閉込め性能改善をGKVで実験に先駆けて予測し、コードの妥当性を示すとともに、水素と重水素の乱流輸送の違い(水素同位体効果)の解明に世界で初めて成功[Nakata,PRL2017]。本成果により重水素、三重水素等からなるITERの核燃焼プラズマの閉じ込め性能評価に必要な計算モデル検証が大きく前進。引続き、不純物イオンの輸送に関する実証研究を継続中。

(2)の成果により、長時間スケールMHD現象に関して、MEGAで独自開発したマルチ時間スケール計算手法 [Todo,NJP2016]により、高エネルギー粒子駆動MHD現象のバースト現象の再現に世界で初めて成功 [Bierwage,Nat.Comm.2018]。コードの妥当性を定量的に示し、目標を達成。本成果によりITERの α 粒子閉じ込め 性能評価に必要な計算モデルを確立。

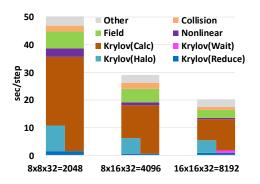
(3)の成果により、GT5Dにおいてメニーコア最適化技術[Asahi,IEEE-TPDS2017]、省通信型行列ソルバ[Idomura, ScalA17@SC17]等の計算技術を開発し、コデザインの技術課題を解決。「京」の10倍以上のノード性能でOakforest-PACS全系(8192ノード)までの強スケーリングを示し、目標を達成。本成果によりポスト「京」のエクサスケール計算基盤技術を確立。

(4)の成果により、開発コードを国内外の実験解析(国内2装置、国外4装置)に活用して国際競争力を向上するとともに、局所的乱流解析コードGKVをオープンソース化し、若手・実験研究者向けの講習会を実施。また、計算基盤技術を他分野(燃料電池電極解析、原子炉熱流動解析等)に適用し、開発技術の汎用性を実証。引続き、開発技術の公開に向けたオープンソース整備を継続中。

緑:科学的成果 青:実用的成果



GKVによるLHD装置の水素同位体 効果の解析[Nakata,PRL2017]



OakforestPACS全系の強スケーリング (GT5D:768x768x64x128x32=1500億) [Idomura,ScalA17@SC17]

重点課題6 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化 全体推進(サブ課題代表者:東京大学・吉村 忍)

成果(6)人材育成の推進(ポスドク雇用、院生教育、講習会実施)

目標

プロジェクト管理、大型計算機資源の確保・サブ課題間調整、に加えて、アプリケーション研究開発における共通的課題を、各サブ 課題や他重点課題と協力して推進する。具体的には、①コデザイン、②マルチフィジクス連成とV&V、③マルチスケール連携とV&V、 ④大規模行列計算とデータ可視化に関する連携、⑤アプリケーション普及活動とV&V、⑥人材育成、を推進する。

成果内容と科学的・社会的意義

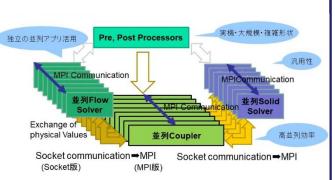
緑:科学的成果 青:実用的成果

成果(1)ADVENTURE(ターゲットアプリ)、プラズマ解析コード等)を中心に、コデザインを推進 成果(2)マルチフィジクスSIM基盤の構築と活用(FFB/FFR-Comb⇔REVOCAP Coupler⇔ADVENTURE Solid. Thermal連成の実現(サブ課題A、Cと協力) 成果(3)マルチスケールSIM連携基盤の構築と活用、普及促進(サブ課題Bと協力、重点⑥⑧連携、重点⑥①連携、重点⑥⑤連携) 成果(4)各アプリケーション(ADVENTURE、FFR-Comb、ABINIT-MP、PHASE/0、REVOCAP Coupler、プラズマコード等)の普及活動とV&V推進 成果(5)大規模行列計算、データ可視化に関するサブ課題間連携の推進(サブ課題D、B連携)

- (1)の成果は、コデザインチューニング成果をADVENTUREへ実装中。適切な時期に実機計測を行う。
- (2)の成果は、Socket版Couplerを石炭ガス化炉、洋上大型風車解析へ適用したものである。(サブ課題
- (3)の成果は、FMO計算(ナノスケール)から得られた有効パラメータ χ を用いるDPD計算(メゾスケール)
- をFMO-DPD法として整備し、燃料電池電解質膜だけでなくタイヤゴム素材、脂質膜、タンパク質へも応 用展開した。さらに、FMO-DPD用の有効パラメータ算定システムをFCEWSとして公開した。また、ジョブ
- の自動投入/回収システムWHEELとFCEWSとの連携(重点課題⑥⑧連携)、凝集性タンパク質のFMO-DPD計算(重点課題⑥①連携)を行った。

A、Cで報告)また、新たに開発したMPI版Couplerを石炭ガス化炉でテスト中である。

- (4)の成果は、各アプリ毎にコンソーシアムやユーザーグループ形成、最新アプリ・最新機能公開、講習 会開催、企業等とNDA締結、実機V&V推進、等を遂行している。また、ABINIT-MP(FMO)の機能向上と 改良を進めると共に、HPCI拠点に公開ライブラリプログラムとして提供し、FMO-DDコンソーシアム (2016年、2017年の「京」利用課題の優秀成果賞)などで利用された。
- (5)の成果は、サブ課題Dで開発した大規模行列計算アルゴリズムを、サブBの電極アプリへの適用準備 を進めている。
- ➡ 今後、マルチスケールSIM&マルチフィジクスSIMのモデル構築、連携法、計算、V&Vに関するノウ ハウ・共有事項を全サブ課題と協力し、最終年度にとりまとめる予定。
- ➡ 各アプリケーションの普及活動の定常化に向けた準備も進める予定。



マルチフィジクス連成基盤 (REVOCAP Coupler)





脂質13%: ベシクル

脂質20%:膜

FMO-DPD法によって計算された ベシクルと膜の構造

重点課題7

次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成

国際競争力の高いエレクトロニクス技術や構造材料、機能化学品等の開発を、大規模超並列計算と計測・実験からのデータやビッグデータ解析との連携によって加速し、次世代の産業を支えるデバイス・材料を創成する。

本課題の主な成果

- 1. パワーデバイス材料SiCの性能劣化原因をRSDFT計算で解明 (Phys Rev Lett, 112, 136403, 2014 / Nano Lett, 17, 6458, 2017 / Jpn J Appl Phys, 57, 125701, 2018 / APEX, 11, 121301, 2018)
- 2. 電磁場と第一原理で物質の光応答を計算する世界唯一のアプリSALMONを開発公開 (M. Noda et.al, Comp. Phys. Comm. 235, 356 (2019) /光工学業績賞(高野榮一賞) / HPCI利用研究課題優秀成果賞)
- 3. 第一原理計算と新手法開発で実験結果に隠れた本質を紐解き、新超伝導機構を提唱 (物理学会若手奨励賞/物理学会論文賞/文部科学大臣表彰科学技術賞(研究部門))
- 4. 磁性材料に有効な記述子を見出し最適な化学組成に効率的に導く機械学習手法開発 (STAM 18, 756(2017) / J. Phys. Soc. Jpn. 87, 113801(2018) / Phys. Rev. Mater. 3, 053807(2019). / 物理学会論文賞)
- 5. 大規模分子動力学計算と大規模フェーズフィールド法の融合で、

金属材料微細組織形成過程の高精度計算を開発

(Adv. Sim. Theo. 1(2018)1800065 / Comp. Mater. Sci. 152(2018)118 / Model. Sim. Mater. Sci. Eng. 27(2019) 054002)

- 6. 水処理やガス透過を規定するポリマーの分離能が分子間相互作用から予測可能に (日本化学会 第36回学術賞 / J. Chem. Phys. 148, 214903 (2018).)
- 7. 界面、欠陥、不純物等を含む大規模非周期系シミュレーションのための、

高効率・高精度分割統治法を開発し、OpenMXに実装

- (J. Phys.Cond. Mat. 30(2018), 295502-1 / Phys. Rev. B 98(2018), 245137-1 / J. Phys. Chem. 122(2018), 27292)
- * 重点課題(7)公開アプリ紹介WEB「MateriApps」関連活動が文部科学大臣表彰科学技術賞(科学技術振興部門)受賞

重点課題7次世代の産業を支える新機能デバイス·高性能材料の創出 サブ課題A:高機能半導体デバイス(サブ課題代表者: 名古屋大学 押山 淳)

目標

持続する未来社会を支える半導体デバイスの演繹的ものづくり(プロセス・インフォーマティクス)に資する、ポスト京アーキテクチャ上での計算物質科学の手法を確立し、パワーエレクトロニクス材料の基礎科学的本質を解明すると同時に、次世代プロセス・デバイスシミュレーション技術を確立する。

成果内容と科学的・社会的意義

ジェクトの社会的重要性の証左となっている。

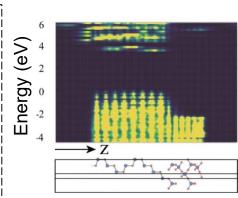
成果(1)・・ポスト京上での物質科学計算に最適な実空間スキーム(RSDFT, RS-CPMDコード。2011年ゴードンベル賞)の高速化・高機能化を達成し、10万原子サブナノ秒量子論シミュレーションを可能にするとともに、デバイスシミュレーション手法との結合により、量子論デバイスシミレータを構築した。成果(2)・・①パワーデバイス材料であるSiCにおけるfloating 状態を計算で発見し、SIC-MOSデバイスでのキャリヤートラップの内因的理由を解明。②同じくパワーデバイ材料であるGaNのエピ成長機構の素過程の解明。③量子論デバイスシミュレータによるSiナノワイヤーFETのIV特性解明

り込み現象が見いだされた。また、数千原子CPMDシミュレーションにより、従来扱うことが難しかったアモルファス材料の原子構造と電子状態の因果関係を解き明かす処方箋が与えられた。「富岳」コンピュータにより、実際のデバイス構造におけるアモルファスの性質解明が期待できる。また量子論デバイスシミュレーションによるSiナノワイヤーFETのIV特性解明は、デバイスデザインへの新たな演繹的アプローチを示している。(2)のfloating state 発見の成果は、固体物理学の教科書の記述変更を促すものであり、計算科学的手法による物性科学分野でのブレークスルーである。さらにこのfloating stateがパワーデバイスであるSiC/SiO2界面での電子トラップを引き起こすという発見(右図)は(その後実験で確認された)、基礎科学とデバイス開発が、コンピューティクスアプローチにより、ともに進んでいくことの重要性を如実に示しており、ポスト「京」」プロ

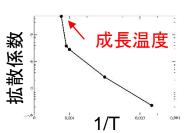
(1)の成果により、数万原子規模の系統的第一原理計算が可能となり、一例として、

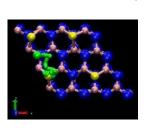
次世代チャネル材料である二層グラフェンにおける積層捻れとディラック電子の速度繰

同じく(2)の成果の一つである、GaNのエピタキシャル成長の機構解明は、量子論にとって未踏領域である結晶成長現象解明へのチャレンジである。激烈化するパワーデバイス開発競争の鍵を握るのは、高品質のエピタキシャル薄膜形成技術であり、ノーベル物理学賞受賞の光エレクトロニクスにおける薄膜形成技術に比して、格段の技術向上が必要である。今般、高精度CPMDシミュレーションにより、GaN成長表面でのGa原子は2次元液体状態となっていることが判明した。すなわちエピ成長は固体上ではなく液体上でのものづくり現象である。「富岳」コンピュータによる、より大規模な動的シミュレーションは、新たな演繹的アプローチのものづくり法の高い可能性を示唆している。



を図説明: SiC/SiO2界面での電子状態密度の空間とエネルギー体が黄色での高い点が黄色である。 たんだい 大側が SiO2サイドであり、右側が SiO2サイドであり、黄色で挟まれた果の領域がバンドギャッ原をしている。 界面での場帯下端が 0.3 eVでかっていることがわかる。





上図説明: GaNエピ成長での成長温度(摂氏1000度)では表面 Ga原子は突如激しい拡散運動を始める(右パネル緑原子の軌跡)。長時間シミュレーションにより、線形応答理論を用いて拡散 係数を求めると、当該温度で急激なジャンプを示す(左パネル)。

重点課題7 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成サブ課題B: 光・電子融合デバイス(サブ課題代表者:筑波大学・矢花一浩)

目標

電子ダイナミクスの第一原理計算に立脚した新しい光科学シミュレーションの方法を確立し、開発した計算コードをオープンソースソフトウェアとして公 開する。それを用いて新奇な光デバイス原理の開拓や光加工技術の確立を、実験グループ、企業とも連携して遂行する。

成果内容と科学的・社会的意義

禄:科学的成果 青:実用的成果

(1)ソフト成果:第一原理計算に基づく光科学汎用の計算コードSALMONを開発し、コード論文を出版するとともに、様々なプロセッサに最適化した。

(2)研究成果: 実験研究者と連携し、シリコンの波数励起や誘電体光応答の超高速変化など、新奇光デバイス原理に関わる知見を得た。

(1)ソフト成果

(内容)

分子・ナノ物質・表面界面・バルク物質など多彩な物質の光応答を、光電磁場・電子・イオンの運動に対する第一原理計算により記述する他に例のない光科学ソフトウェアSALMONを開発し公開した。計算機科学者との密接な連携により、「京」のみならずOakforest-PACSをはじめとする主要スパコ

ンにおいて高効率な超大規模計算を可能にした。 (意義)

先端の光科学研究が対象とする光と物質が強く結合した諸現象に対して有効なソフトウェアを開発し、近接場光励起やアト秒科学、非熱レーザー加工の解明などが可能となった。特に光電磁場と電子の運動を多階層で連結した第一原理計算手法は、他に例がないものである。国際チュートリアル・シンポジウムの開催により、世界標準ソフトウェアとしてSALMONの認知が進んでいる。

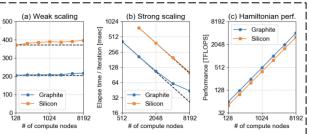
(2)研究成果

(内容)

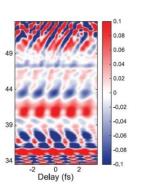
金属ナノ粒子によるシリコンの波数励起過程を、現実的な設定で大規模計算により実証し、実験グループとの連携により波数励起に基づく光デバイスが試作され、その有効性の検証を進めている。 高強度パルス光と誘電体薄膜の相互作用をアト秒実験グループと連携して明らかにし、誘電体の 光学特性がフェムト秒以下の時間スケールで変化することや、薄膜を用いてパルス光の波形を制

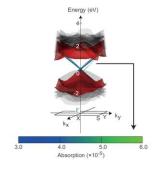
御できることを明らかにした。 (意義)

近接場光励起・アト秒科学・レーザー加工などの先端の光科学研究において、SALMONが第一原理計算に基づき、アト秒・ナノメートルの時空間解像度で現象を解明する精緻なシミュレータとなることを示した。今後「富岳」を利用する大規模計算により、近接場を用いた新奇デバイスやペタヘルツで動作するデバイスの設計、非熱レーザー加工の解明が大きく発展すると期待できる。



KNLクラスタOakforest-PACSでの全系性能評価 Y. Hirokawa et.al, ISC High Performance 2018, pp205.





ダイヤモンドの光学的性質の超高速変化に対する第一原理シミュレーション。 M. Lucchini et.al, Science

353, 916 (2016)

数空間で示す。 M. Noda et.al, Phys.

シリコンの励起を波

Rev. Appl. 11, 044053 (2019)

次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成 サブ課題C: 超伝導・新機能デバイス材料(サブ課題代表者:東京大学 今田正俊)

目標

・最終目標:第一原理計算を基礎に強相関電子物質の電子構造解明に適用できるアルゴリズムの開発・応用と、富岳を活用するための手法開発。 特に、銅酸化物などの高温超伝導機構、トポロジカル機能物質の新概念実証、界面や非平衡への概念適用を富岳で可能にするコード開発と適用。

成果内容と科学的・社会的意義

成果(1)第一原理的に強相関電子系の定量予測と物質設計を可能にする「HΦ」、「mVMC」、「RESPACK」の開発、高度化、公開を進めた。

緑:科学的成果 青:実用的成果

成果(2) 高温超伝導体、トポロジカル物質の第一原理計算を、富岳を有効活用して推進する手法を開発し、「京」での計算で実験の定量再現に成功した。 成果(3) 強相関電子物質の長年の難問題である高温超伝導と量子スピン液体現象の、実験結果に隠れた特徴を抽出し、新超伝導機構等を提唱した。 成果(4) 界面、非平衡での計算手法を開発し、富岳での計算に備えて「京」に適用し、超伝導やトポロジカル機能の増幅、最適化の基礎原理を発見した。 (1)の成果により、RESPACK等を活用して強相関有効ハミルトニアンを導出し、インターフェースを介してΗΦ、 ポスト「京」へ向けたMACE高度化・機能拡張

化と機能拡張も進めた。高度な機能拡張のみならず、実験家も使えるソフトとしても、コード公開と普及活動を進 め、強相関電子系に対する有力手法・一貫シミュレータとしての地位を確立した。本成果は21世紀初頭まで不可 能であった強相関電子系の第一原理的定量的系統計算を行なう手法が開拓され実装されたという意義がある。 次世代機能素子として注目される強相関デバイス、トポロジカルデバイス、機能素子開発の武器となる。第一原 理的に挑戦しうる一貫手法とその公開は世界的にもほとんど例がない。 (2)の成果により、第一原理有効ハミルトニアンを導出して、「京」を活用して解き、銅酸化物での強相関電子系特 有の超伝導と電荷不均一相の激しい競合を明らかにし、電荷不均一相を抑えて超伝導が優越する機構を定量 解明した。スピン液体の候補であるイリジウムやルテニウム化合物で実験を定量再現した。本成果は銅酸化物

超伝導体の30年以上の難問を第一原理的に解き、道を開くなど、富岳でのより系統的な解明の出発点にもな

(3)の成果により、今までの実験では隠れていた超伝導が「高温化」する機構を抽出し、これを検証するために機 械学習を活用して実験研究者と連携する道を開いた。またイリジウム酸化物の磁性の裏にある、スピン液体や 磁壁の持つトポロジカル機能を解明した。本成果は解析の難しい強相関電子系の実験結果に隠れる本質を計 算や機械学習を用いて解明していく先駆例の一つとなり、実験結果の解析で実験研究者と連携が進み、実験とご 計算科学が連携して機能開発、探索していくデータ科学手法の展望を開いた。これらの基礎原理の解明が将

mVMCなどの低エネルギーソルバーを用いて解く一貫スキームを構築した。このスキームにスピン軌道相互作 用、電子格子相互作用、非平衡時間発展を組み込み、ソルバーにテンソルネットワークなどを含める等の高度

> mVMC ポスト「京」で有用な強相関電子系ソフト開発 $U/C_{-}^{f}(A_{1} = 0.75) \square A_{0} = 0.75$ $0.08 - U/t_{hos}^{eff}(A_0 = 1.0)$ $0 A_0 = 1.0$ うす

高温超伝 導が動的 に増幅さ れていくよ

来の産業創出に与える影響は未知であると同時に計り知れない。 (4)の成果により、強相関電子系の界面や非平衡という物性科学のフロンティアを研究する道筋と手法が開拓さ れた。本成果は強相関電子の非平衡状態で超伝導が増幅する機構の一つを見出し、界面で超伝導が最適化 される一般的な機構の発見に寄与した。同時に実験と連携してフロンティア開拓を進め、実験の難しい問題で

スピン液体候補の

超伝導と不均一相の競合 有限温度分光学

重点課題7 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成

サブ課題D: 高性能永久磁石・磁性材料 (国立研究開発法人産業技術総合研究所・三宅隆)

目標

1万原子を含む磁石材料の第一原理計算を可能にするとともに、インフォマティクスを活用した新規磁石の計算探索技術を開発する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑:科学的成果 青:実用的成果

成果(1)・・・・・8500 原子規模のネオジム磁石界面の第一原理計算を可能とするソフトの高度化に成功成果(2)・・・・・磁性材料に有効な記述子とデータ科学的解析法、化学組成を効率的に最適化する機械学習手法を開発

成果(1)

(内容)

- ▶ ネオジム磁石主相(Nd₂Fe₁₄B)に対する定量的な原子論的スピン模型を構築し、有限温度磁性を解析する手法を開発。
- ▶ 第一原理計算により、希土類磁石粒界の原子スケールの磁気物性値を評価する技術を開発。サブ課題Gと協力して OpenMX コードを高度化し、4000 原子規模のネオジム磁石の主相・副相界面の最適構造を決定。8500 原子規模の界面系に対して動作確認。

(意義)

▶ 電動車の駆動モータに用いる高性能磁石には耐熱性が求められ、150℃以上の高温領域における高い保磁力が必要である。保磁力は粒界や材料組織に依存するが、その微視的機構は未だに解明されていない。元素戦略PJ等の最新の実験情報と本シミュレーション技術を組み合わせることにより、磁石実材料の粒界近傍の磁化反転機構の解明が進展すると期待できる。

成果(2)

(内容)

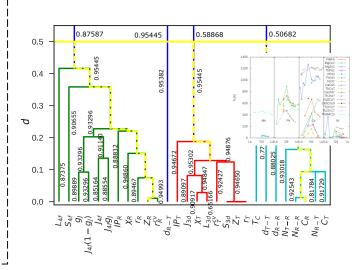
- ▶ 物性値を予測するための汎用的な記述子である軌道場行列を考案。4220種類の遷移金属化合物の生成エネルギーや 658種類の化合物の局所磁気モーメントに対して有効性を検証。
- ▶ 階層クラスタリングを用いて重要な記述子を特定するサブグループ関連性解析を開発。希土類遷移 金属合金のキュリー温度を制御する記述子を特定。
- ▶ ベイズ最適化とデータ同化を用いた効率的な化学組成の最適化手法を開発。RFe₁₂型希土類化合物を対象として有効性を検証。

(意義)

▶ マテリアルズ・インフォマティクスによる材料開発の加速は産業競争力に直結するため注目が大きい。 Nd₂Fe₁₄B を超える磁気特性を有する RFe₁₂型化合物等へ本技術を適用し、新規磁石材料開発を加速することが期待される。



全8463原子からなる、ネオジム磁石界面 (Nd₂Fe₁₄B/アモルファスNd-Fe相) の原子構造



希土類遷移金属合金のキュリー温度のサブグループ関連性

重点課題7 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成

サブ課題E: 高信頼性構造材料

目標 金属系構造材料の性能を支配する微細組織の解明と設計のため、微細組織の構成要素や合金(溶質)元素との相互作用等を大規模第一原理計算で解明し、高精度データとして蓄積する。第一原理計算をメゾ・マクロに繋ぐマルチスケール計算技術を構築し、大規模フェーズフィールド法計算による凝固から粒成長、微細組織形成の高精度シミュレーションを実現する。

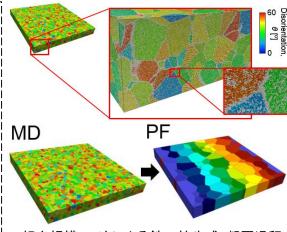
成果内容と科学的・社会的意義

緑:科学的成果 青:実用的成果

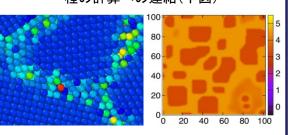
成果(1) 大規模並列計算を駆使した革新手法による大規模MDと大規模PFの融合・連結で、金属材料の微細組織形成過程の高精度計算が可能に。成果(2) 電子が支配する鉄の粒界・転位と合金(溶質)元素の相互作用を解明。第一原理計算をメゾ・マクロに接続する新規計算技術を開発。

(1)の成果 並列計算技術を駆使して、鉄の融体から核生成・凝固・粒成長を経て微細組織に至る過程の超大規模分子動力学(MD)計算を達成。この核生成・凝固の構造をフェーズフィールド(PF)法に連結し、その後の粒成長計算を、同一空間スケールでMDとPFの両法で実行することに成功(世界初)。原子レベル情報が自然にメゾ・マクロの組織形成過程に繋がるとともに「データ同化」により原子レベル物性値をPF法に同時的に高精度に抽出・連結することも可能に。また、大規模PF法による凝固計算(デンドライト成長)で重力による自然対流効果を取り入れる技術開発に成功(世界初)。より現実的な高精度凝固組織計算が可能に。(意義)原子スケール(大規模MD)情報を大きなスケール域(大規模PF法)に高効率・高精度に伝達する技術が開発でき、融体から凝固、微細組織形成までの高精度マルチスケール計算の基幹部分が確立できた。また、自然対流など凝固デンドライト組織を決定する環境因子(温度、流体等)を取り入れることで、実プロセスに近い条件を反映させた計算が可能。「富岳」による超大規模の並列計算でさらに現実的な大規模構造が扱える。融体から微細組織に至る過程は金属系構造材料の性能を支配し、厳密なプロセス設計が必須。高精度マルチスケール計算による現象解明と設計・制御は、技術的・社会的インパクトが極めて大きい。

(2)の成果 電子が支配する鉄の粒界・転位と一連の合金(溶質)元素との相互作用を大規模第一原理計算で高精度に解明、その機構を局所エネルギー法で明らかにした(世界初)。第一原理計算をメゾ・マクロに繋ぐ手法として、局所エネルギー法と機械学習の連携による粒界エネルギー予測技術、さらに、第一原理自由エネルギー計算とPF法の連携による合金の組織予測技術(第一原理PF法)を確立した(世界初)。(意義)粒界・転位と一連の合金(溶質)元素の相互作用とその機構解明は、金属材料の基礎科学の革新である。第一原理計算をメゾ・マクロに繋ぐ手法の確立は、上記の大規模MD・大規模PFの計算技術と組み合わせ、さらなる高精度化を可能にし、また合金や溶質の扱いを可能にする。第一原理PF法による合金組織予測は、「富岳」による並列計算で大規模化でき、多元合金にまで拡張できる。第一原理局所エネルギー法と機械学習の連携においても、より複雑な構造が扱える。金属系構造材料の微細組織計算の一層の高精度化を可能にし、新規材料開発や高性能化に大きく寄与する。



超大規模MD法による鉄の核生成・凝固過程の組織(上図)と大規模PF法による粒成長過程の計算への連結(下図)



第一原理局所エネルギー法と機械学習による鉄の粒界エネルギー予測(左図)、第一原理PF法によるNiAI合金の組織予測(右図)

次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成 サブ課題F: 次世代機能性化学品

目標

トポロジー制御共重合体における小分子(水やガス)の分配挙動を解析し、ポリマーの相溶性を規定する化学ポテンシャルの全原子計算を行うととも に、有機/無機界面の接着強度を自由エネルギーのレベルで定量化し、古典/量子ハイブリッド計算によって接着の劣化機構を明らかにする。

成果内容と科学的・社会的意義

緑:科学的成果 青:実用的成果

成果(1): ポリマーの相溶性と小分子分配の全原子自由エネルギー計算、および、接着強度劣化に関わる反応分子のハイブリッド計算を可能にした 成果(2): 多様なトポロジーにおける共重合体の物質分配機能を評価し、異種界面の接着強度や接着仕事の実験値を再現し劣化の素反応を解明した

定するポリマー内構造要素の同定を可能にし、さらに、ポリマーの繰り返し単位であるモノマーと周囲との相互作用を逐次的 に導入する手法を定式化することで、これまで不可能とされていたポリマー全体の過剰化学ポテンシャルの全原子計算がで きるようになった。有機/無機界面の研究では、1000原子を超える量子領域を含む古典/量子ハイブリッド計算を実用的な 計算時間で遂行することを可能とし、高分子で複雑に装飾された金属表面と液体との接着仕事を簡便に自動計算する手法 を開発した。本成果の意義は、海水淡水化やガスバリア性のようなポリマー材料の主要機能である物質分配、および、熱可 ポリエチレンとポリアク 塑性と耐衝撃性の両立などの要請を満たすポリマーブレンドの調製可能性を原子レベルの相互作用の知見から予測するこ リルアミドのグラフト共 とが可能になったこと、また、自動車などの組立産業におけるさらなる高度化(軽量化、高耐久化など)の鍵を握るとされる異 重合体への水の吸収 種素材間接着への原子レベルのアプローチが可能になったことである。 (2)の成果として、ポリエチレンとポリアクリルアミドの共重合体における吸水自由エネルギーが共重合比によって規定される ことが明らかになり、スルホン酸をもつアイオノマーにおける酸素の吸収性と透過性をポリマーの分岐度やフッ化度を変えて DFT 検討することでポリマー鎖の柔軟性が透過性の制御因子であることが示された。さらに、ポリエチレン、ポリプロピレン、ポリメ (e-den. チルメタクリレートなどの全原子MD計算から、ポリマー相溶性を決定する過剰化学ポテンシャルの主要項は数十モノマー程 度の全原子計算から得られることが見出された。また、実際的で大規模な古典/量子ハイブリッド計算をAI金属とエポキシ樹

脂の接着界面に適用することで、実験結果と合致する接着強度のシミュレーション結果を得ることに成功するとともに、基板 金属と樹脂との接触部に侵入した水分子等によって金属原子、樹脂官能基、水分子の三つ巴で生じる接着劣化の反応素過 程を複数発見し接着強度が半減することを見出した。本成果の意義は、ポリマー構造の複雑化(共重合化、分岐、ヘテロ原

子の導入)に対する小分子(水やガス)の分配挙動の応答が原子レベルの相互作用に基づくMD計算によって予測可能に

なったこと、および、素材産業からの長年の要請であったポリマー相溶性の問題に対する原子レベルからのアプローチが構

築されたことにある。さらに、有機/無機の異素材界面の接着強度や劣化メカニズムが電子・原子レベルで解析可能になっ

たことは、複合化が進む材料開発分野に対する意義深い貢献である。

(1)の成果により、ブロック共重合体やグラフト共重合体への小分子(水やガス)の分配挙動の予測、および、相溶性を規定す るポリマー全体の化学ポテンシャルの全原子計算が可能になるとともに、有機系接着剤と金属の接着強度やその劣化ダイ ナミックスを、劣化要因とされる侵入分子群を丸ごと含めた規模で電子レベルから定量的に解析できるようになった。ポリ マー系の研究では、ポリマー内セグメントの相互作用から溶解自由エネルギーを構成する手法を実装することで溶解性を決

> 接着劣化(AI基板-樹脂)のハイブリッド シミュレーション

AIOx

H₃O

重点課題7 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成

サブ課題G: 共通基盤シミュレーション手法

目標

磁石材料(サブ課題D)、鉄鋼材料(サブ課題E)、機能性化学品(サブ課題F)と連携し、1万原子以上から構成される複雑界面構造や複雑液体の大規模 第一原理電子状態計算を可能とする効率的なオーダーN計算手法を開発し、第一原理ソフトウエアOpenMXに実装・公開する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑:科学的成果 青:実用的成果

成果(1)・・・・・光電子分光スペクトルの高精度計算手法や局在自然軌道を用いた高効率・高精度分割統治法を実装したOpenMXを開発成果(2)・・・・・汎用ソフトウエアOpenMXを活用し、新規二次元材料(シリセン、ボロフェン)及び触媒材料(単分散Pt原子)の構造同定に成功

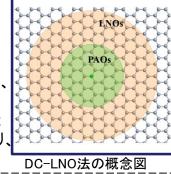
(1)ソフト成果

(内容) 多岐に亘る物質群の材料特性を統一した枠組みで系統的に調べることが可能な汎用第一原理電子状態計算ソフトウェアOpenMXを開発した。特に光電子分光スペクトルの高精度計算手法及び局在自然軌道を用いた高効率・高精度分割統治法: DC-LNO法を新たに開発し(上図)、サブ課題D、サブ課題E、サブ課題Fとの連携を強化した。

(意義) 磁石材料、鉄鋼材料、電池材料などの機能特性は結晶構造や分子構造に加えて、二次構造である界面構造、欠陥 転位、不純物添加などの複合要因により決定されており、その機能と構造の相関を詳細に明らかとするためには本質的に 実デバイス構造を再現した大規模計算が必要である。本成果により、第一原理計算の立場から複雑構造の直接計算が可能

実テハイス構造を再現した大規模計算が必要である。本成果により、第一原理計算の立場から複雑構造の直接計算が可能となり、実験との直接的な比較ができるようになる。開発したOpenMXはGNU-GPLの規約の下で順次、一般公開を進めており、

本重点課題を超えて大学や産業界で広く活用され、計算物質科学のさらなる発展に貢献できる。



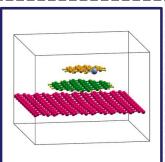
(1)研究成果

(内容) 計算量が原子数に比例するオーダーN第一原理計算手法は1990年代初頭より、活発に研究が進められてきたが、計算精度、数値安定性、汎用性の面から未だ万能な手法は開発されていない。我々は局在自然軌道法と分割統治法を融合することで、従来の手法を超える汎用性の高い計算手法(DC-LNO法)の開発に成功した。本手法により絶縁体のみならず、金属に対しても高精度計算が可能であり、その超並列性から、「富岳」コンピューター上での高い並列効率が期待される。またプロジェクト前半で開発した光電子分光スペクトルの高精度計算手法の適用研究を北海道大学・郷原グループと共同で展開し、グラフェンに単原子分散したPt原子の原子レベルでの担持構造とその電子状態を初めて明らかとした(下図)。(意義) 汎用性の高いオーダーN第一原理計算の適用範囲は極めて広い。磁石材料、鉄鋼材料、電池材料の構造・機能相関

(意義)汎用性の高いオーダーN第一原理計算の適用範囲は極めて広い。磁石材料、鉄鋼材料、電池材料の構造・機能相関の理解、イオン液体の動的振る舞い、地球深部での高温・高圧下での物質の構造予測等への応用展開が期待される。

実材料開発で議論される二次構造(界面構造、欠陥、転位、不純物添加)の直接計算を可能とする第一原理電子状態計算

手法を新たに開発したことにより、「富岳」コンピューター上で本手法による超並列計算を実行することで、現実に即したシミュレーションを実現され第一原理計算の産業応用が加速される。



単原子分散Ptの担持構造

重点課題8

近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

製品コンセプトを初期段階で定量評価し最適化する革新的設計手法、コストを最小化する革新的製造プロセス、およびそれらの核となる超高速統合シミュレーションを研究開発し、付加価値の高いものづくりを実現する。

本課題の主な成果

- 1. コデザインの取組により、ニーズに沿った価値創造と費用対効果の大きいものづくりを実現するためのアプリケーションの高速化を実施し、ターゲットアプリであるFFBはポスト「京」で100倍以上を達成できる見込みを得るとともに、その高速化の成果を他のキラーアプリに展開。
- 2. 開発したアプリにより、自由表面の影響も考慮した船の抵抗試験を実施し、曳航水槽試験のシミュレーションによる代替が可能であることを実証。また、「京」では実現できなかった実機航空機複雑形状の空力解析が、ポスト「京」で実現できることを検証。
- 3. HPCを駆使した多目的最適設計技術の実用化の可能性について、自動車の空力最適化とターボ機械の性能・騒音最適化問題を対象に実証中。

近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

設計を革新する多目的設計探査・高速計算技術の研究開発(宇宙航空研究開発機構・大山聖)

目標

多目的最適設計探査技術について、設計解を見出すまでの時間を飛躍的に短縮するとともに、制約条件が強い場合においても設計解を見出すこと ができるアルゴリズムの研究開発を行う。また、高速計算技術研究開発については、主要なアプリケーションに実装し、その効果を検証する。

成果内容と科学的・社会的意義

成果(1)多目的設計探査について、多目的設計最適化アルゴリズムを開発し、テスト問題で計算時間が

1/3以下になることを確認(図1) 成果(2)高速計算技術・時間並列計算について、オリジナルのコードに比べ、計算速度が2倍から13倍に なることを確認(図2)

多目的設計探査に関しては、「京」を用いることによりその有効性を証明できたが、最適設計解 を見出すまでに要する時間が40日以上掛かったり、制約条件が強い場合は最適設計解(パレー ト最適解)を見出せなかったりする場合があることが判明した。そこで、設計解を見出すまでの時 間を飛躍的に短縮するとともに、制約条件が強い場合においても設計解を見出すことができるア ルゴリズムの開発を行う。また、重点課題⑧で開発する全てのアプリケーションに共通する課題 として解析に要する時間の短縮があるため、多目的設計探査技術の研究開発に加えて、時間短 縮のための共通基盤技術として、高速計算技術を研究開発し、主要なアプリケーションに実装 し、その効果を検証する。

(1)の成果に関しては、実数設計変数の適応的離散化により計算時間を7割削減できることを確 (2)の成果に関しては、パイプライン法の適用によりオリジナルのコードと比較して計算 速度が2倍になること、また、フェーズフィールド法に適用した場合13倍の加速を実現を確認し た。これらを他のサブ課題で開発するアプリケーションに実装することにより、製品コスト低減や 高品質化に貢献できる新設計基盤を整備し、産業競争力強化に貢献できる。現在多目的設計探 査については、他のサブ課題への展開として、重点課題®のサブ課題Bとの連携による、自動車 の空力最適化、および、サブ課題Cとの連携による、ターボ機械の性能・騒音の最適化の実証研 究を開始した。

最終達成目標としては、多目的設計探査に関しては、重点課題®のサブ課題Bまたはサブ課 題Cと連携することより、それぞれ自動車の空力最適化、または、ファンの性能・騒音の最適化に 適用し、また、高速計算技術に関しては、重点課題⑥のサブ課題Bのフェーズフィールド法や重 点課題®のサブ課題Cの流体シミュレーションに適用し、多目的設計探査および高速化の効果を 確認する。

緑:科学的成果 青:実用的成果

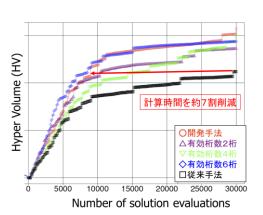
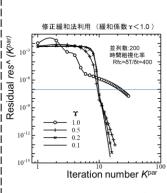


図1 マツダベンチマーク問題を用いた性能比較



Allen-Cahn(AC)方程式(13倍)

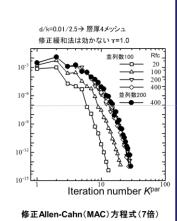


図2 時間並列による高速計算技術をフェーズフィールド法 に適用し、13倍の加速を実現

重点課題8 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発 サブ課題B: リアルタイム・リアルワールド自動車統合設計システムの研究開発(神戸大学大学院・坪倉誠)

目標

となる。

従来の1/10以下の時間で定常空力予測が可能なアプリケーションを開発する。また、設計問題に対する多目的最適設計解を見出すことを可能する ために、構造振動/強度解析機能、圧縮性熱流体解析機能、移動境界解析機能を具備したアプリケーションを開発する。

成果内容と科学的・社会的意義

成果(1)実車空力解析に対してプリ処理・コアカーネル高速化により、約120時間要していた解析ターンアラウンドタイム(TAT) 最短12時間時間以内を実現(図1) 成果(2)空力性能多目的最適化フレームワークを構築しその有用性を実証(図2)

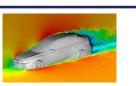
新素材や新たな動力を用いた次世代自動車を早急にかつ高い品質で実現するためには、既存の実験代替を

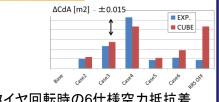
目的としたCAEを活用した設計手法に対して、より高次元でCAEを利用した設計プロセスの革新が必要である。本サブ課題では、「京」で実現した自動車空力連成解析を基盤技術としてHPC環境を活用することで、設計上流側でデザイナと技術者が協調したコンセプトデザインを支援する(リアルタイム)と共に、時々刻々と変化する運転条件変化を考慮した(リアルワールド)シミュレーションを実現することで予測精度・信頼性向上を実現することを目指した。

(1)の成果に関しては、実車フルモデルの複雑な形状を用いた空力解析について、既存の非構造格子系ソルバーに対して、ソルバー部分のみで数十倍の加速を実現し、現状のTATは最短12時間以内を実現した。これにより、自動車の排出ガス・燃費試験法の国際基準WLTP(Worldwide harmonized Light vehicles Test Procedure)認証の取得に向けた解析が可能であることが実証されたと共に、上流設計側でデザイナと技術者が協調してコンセプトデザインを実施することが可能となる。また、(2)の成果として、サブ課題Aと連携して、多目的最適化フレームワークを構築し、ポスト「京」自動車コンソーシアム活動によりその有用性を実証すると共に、(3)の成果として、プリ処理(メッシュ生成)が高速なオイラー型構造解析法を実装、粒子法による薄板構造のモデル化に成功、および5億セル規模の強度解析を実現し、その精度検証を実施した。これにより、設計初期段階において、空力・強度・音・熱・振動などの複数の物理現象が関連した設計問題に対する多目的最適設計解を見出すことが可能

これらの成果により、当初目標として掲げた「TAT12時間での実車空力解析と、実走行状態における多目的設計最適化が可能な、構造解析機能、圧縮性熱流体解析機能、移動境界解析機能を具備したアプリケーションプログラムを開発し、走行燃費と高速走行操縦安定性の両立を目的とした、自動車の多目的最適設計問題を実施し、開発したアプリケーションの性能および効果を確認する」ことを達成する。

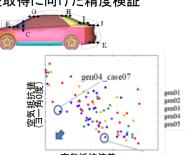
緑:科学的成果 青:実用的成果





▲タイヤ回転時の6仕様空力抵抗差 図1 乗用車の国際燃費基準(WLTP)の

31 乗用単の国際燃質基準() 認証取得に向けた精度検証



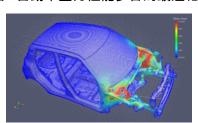


図3 自動車ボディ強度解析

近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

サブ課題C: 準直接計算技術を活用したターボ機械設計・評価システムの開発(東京大学生産技術研究所・加藤千幸)

目標

既存のアプリケーション(FFB)の計算速度の大幅な向上と計算規模や計算機能の拡大、LES解析用の新たな壁面モデルの開発と実装、および、計 算格子の完全自動生成と流体騒音の直接計算が可能な、Lattice Boltzmann法(LBM)に基づく新規アプリケーション(FFX)の開発を行う。

成果内容と科学的・社会的意義

成果(1) FFBについて、ポスト「京」で100倍以上の高速化を達成できる見込みを得(コデザイン成果)、その 効果を船の自航計算等により検証中(図1) 成果(2) FFBに対して圧縮性流れ解析機能を実装したコードの検証を実施。また、LES用壁面モデルを開発

し、その効果を検証中

成果(3) LBMによるプロトタイププログラム(FFX)を開発し、ベンチマークテストを実施(図2)

HPCI戦略プログラム分野4の一つの研究開発課題の成果として、従来十分には解明されていなかった複 雑な非定常流動現象を解明したりすることが可能であることを実証したが、これらの計算には「京」の数千 ノードから数万ノードの計算資源が必要であるため、直ちに企業における実用化には至らなかったなどの問 題点も顕在化した。そのため、計算速度の大幅な向上と計算規模や計算機能の拡大、計算資源量の大幅な 削減を目指したLES解析用の新たな壁面モデルを実装した既存のアプリケーション(FFB)、および、計算格 子の完全自動生成と流体騒音の直接計算が可能な、Lattice Boltzmann法(LBM)に基づく新規アプリケー ション(FFX)の開発を行う。

(1)の成果に関して、これまでに実施したチューニングにより2.1倍、アルゴリズム変更によりコアカーネル ベースで4.9倍(実測)の高速化を達成しており、CPUの性能向上と合わせて、ポスト「京」で100倍以上の高速

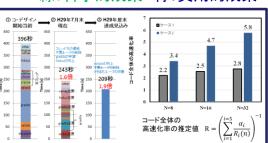
化を達成できる見込みを得、その効果を船の自航試験のベンチマーク計算等により検証している。(2)の成 果に関して、圧縮性流れ解析機能をFFBに実装し、ターボ機械の解析用のオーバーセット機能を検証してお り、また、LES用壁面モデルを開発し、その効果を検証している。これらにより、「京」を用いても解析を実施

および、「京」で実証した現有のアプリケーションではできなかった流体騒音の直接的な予測が可能となる。 (3)の成果に関して、FFXを開発し、計算速度、計算精度の検証を開始し、「京」の6万ノードを用いた2兆格子 の計算を実施し、ピーク性能の6%の計算速度で動作することを確認した。これにより、計算格子の完全自動 生成と流体騒音の直接計算が可能となる。

することができなかった、少なく見積もっても5.000億以上の格子が必要となる多段ポンプや水車のLES解析。

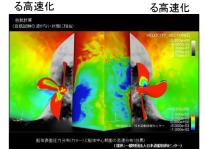
最終達成目標としては、サブ課題Aと連携して、開発されたFFBをファンの性能・騒音の多目的最適設計に 適用して、その効果の予備的な検証を実施する。また、シミュレータによるノード性能の予測から計算速度を 推定するとともに、ネットワーク性能と通信量からアプリケーション全体の性能を評価する。

緑:科学的成果 青:実用的成果



計算アルゴリズム改良によ

る高速化



(提供:一般財団法人日本造船技術センター)

図1 FFBの高速化の状況(上)とその結果を利 用した自航試験のベンチマーク計算(下)

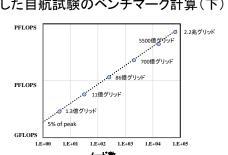


図2 FFXの「京」におけるweak-scaleベンチ

マークテスト

重点課題8 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発 サブ課題D: 航空機の設計・運用革新を実現するコア技術の開発(宇宙航空研究開発機構・高木亮治)

目標

従来の数値解析では評価できなかった設計課題(航空機実機詳細形状に対する離着陸時の最大揚力の予測、遷音速バフェットの予測など)を、精度、 解析時間の両面から設計に使えるレベル評価可能なアプリケーションプログラムを開発する。

成果内容と科学的・社会的意義

成果(1)実機複雑形状に対して、階層型等間隔直交構造格子生成を達成し、試計算を実施(図1) 成果(2)新たな壁面モデルの実装と基礎検証を完了し、遷音速バフェットの再現と後縁失速の予測に 成功(図2)

航空機産業の国内生産額は、過去5年間で1.1兆円から1.8兆円と年率約5%で急成長しており、2030年には3兆円を超えると期待されている。本サブ課題では、ポスト「京」の計算能力をフルに活用することにより、航空機設計の要となる空力設計技術を飛躍的に高度化することを狙っている。

(1)の成果に関しては、着陸装置(脚、タイヤ等)や高揚力装置のついたJSM_CRM_LEGの実機複雑形状(レイヤー格子なし、LES壁モデルなし)に対して、試解析を実施し、問題なく計算ができることを確認した。また、STL形状から格子を自動生成し、数億点規模の格子で細かな構造も再現できることを確認し、基盤ソルバーのレイヤー格子への対応と機能検証として、45億点規模の試計算を実施した。これにより、離着陸時の最大揚力係数の推算が可能となり、その向上を図ることができれば、滑走路長の短い空港にも離着陸が可能となる他、高地空港(空気密度が低い)での運航柔軟性、空港周辺への騒音低減となるため、航空機の商品価値の大幅な向上に繋がる。 (2)の成果に関しては、開発された壁面モデルにより、飛行限界を決める、主翼上面に発生する衝撃波と境界層の干渉によるはく離・振動現象である遷音速バフェット現象の再現や後縁失速の予測に成功し、前者については、その精度の検証およびメカニズムの提案を行った。現在、壁面モデルの研究開発として、LES平衡壁面モデルの開発中のコードFFVHC-ACEへの導入と平板乱流境界層解析での予測精度の検証、非平衡壁面モデルの研究開発を実施している。これにより、従来の解析では不可能であった飛行限界の評価が可能となり、シミュレーションにより飛行試験のリスクを大きく低減させることが可能となるため、航空機の開発期間の大幅な短縮と開発コストの大幅な削減に繋がる。

最終達成目標としては、ポスト「京」で実施する解析対象と同等な実機複雑形状に対して計算格子が作成できることを確認し、また、最大揚力の予測精度および遷音速バフェットの予測精度に関しては単独翼などを対象とした解析結果を、既存の風洞実験値と比較することにより解析精度を確認する。

緑:科学的成果 青:実用的成果

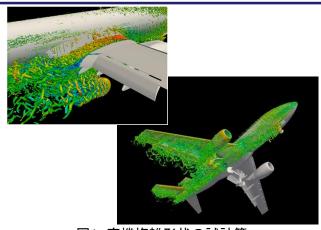
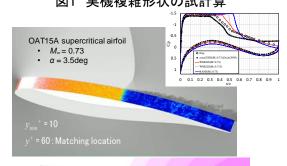


図1 実機複雑形状の試計算



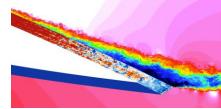


図2 遷音速度バフェットの再現(上)と後縁失速の予 測に成功(下)

重点課題8 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発 サブ課題E: 新材料に対応した高度成形・溶接シミュレータの研究開発(東京大学大学院・奥田洋司)

目標

母材の接触状態を詳細に計算し、溶接による収縮を高精度に予測(従来は実測値に対して数十%であるが、これを数%に)するための、数m規模の解析領域に存在する数mmの溶融部を数μmで解像することが可能なソルバーを開発する。

成果内容と科学的・社会的意義

成果(1)超大規模・高精度強連成解析ソルバーを開発し、数億自由度の接触問題の解析に適用し、効果を実証(図1)。また、これまでの計算規模では予測精度が十分ではなかった大規模望遠鏡の架台部モデルの問題を用いて、予測精度を検証(図2)成果(2)プリ・ポストプロセッサのプロトタイプの作成が完了

日本の基幹産業である自動車を始め、クレーン、圧力容器、タービン、配管、LNGタンクなどの製造には、様々な鋼板の溶接が行われており、この工程は生産時間やコストに大きく影響を与えるものとなっている。本サブ課題では、溶接法の高度化や新材料利用の促進に貢献する、溶接工程における溶接順序探索の高精度化、逆ひずみ量推定の高速化を目的とし、高度成形・溶接シミュレータを開発している。これにより、生産時間の短縮やコストダウン、熟練工によるトライアル&エラー依存からの脱却、溶接法の高度化や新材料利用の促進に貢献する。

(1)の成果に関しては、材料構成則を整備し、接線係数マトリックスの連成成分を導出することによって、熱構造一体型連成手法の構築、コードの動作確認するとともに、数億~数百億自由度規模の問題に対する並列性能の最適化と、部品モデル(~数億自由度) に対する精度をJWRIAN固有ひずみ法コード(阪大接合研)との比較し、良好に一致することを確認した。これにより、超大規模・高精度強連成解析ソルバーを持つシミュレータが完成し、溶接工程における「京」全体規模の永久変形予測を実現できる。(2)の成果に関しては、開発環境Electronを使用してウェブブラウザで動作するプリポストの開発し、溶接解析の機能(溶接線、溶接条件の設定機能、複数パスの設定機能など)を拡張、動作検証を実施した。これにより、プレス成形と溶接の一連の工程を一つのプリポストプロセッサで解析することが可能となり、プレス成形解析から溶接解析に至るワークフローをサポートできる。

最終達成目標としては、超大規模・高精度強連成解析ソルバーとして、数千億自由度規模の問題に対する並列性能の最適化と全体モデル(自動車や重機械フレームなどの〜数十億自由度)に対する実証解析を実施し、また、プリ・ポストプロセッサとして、プレス成形のスプリングバックによる残留応力を溶接の初期条件として渡す機能を実装し、動作検証を行い、溶接工程における適切な溶接順序探索および逆ひずみ量推定が可能となることを確認する。

緑:科学的成果 青:実用的成果

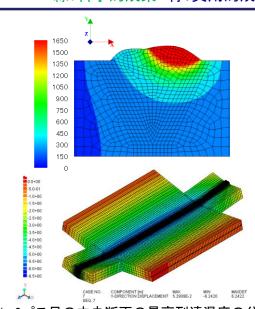


図1 6パス目の中央断面の最高到達温度の分布 (上)と6パス目の垂直方向変位の分布(下)

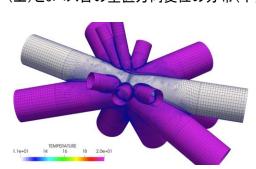


図2 大規模望遠鏡の架台部モデルを用いた実 証計算

重点課題8 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発 サブ課題F: マルチスケール熱可塑CFRP成形シミュレータの研究開発(東京大学生産技術研究所・吉川暢宏)

目標

熱可塑性CFRPの合理的設計を通じたものづくり力強化のための、マルチスケール解析技術を活用した熱可塑成形シミュレーション技術の開発し、成形後の繊維配置を正確に予測し、合理的な強度評価に基づく高度な最適設計を実施可能とする。

成果内容と科学的・社会的意義

成果(1)炭素繊維と樹脂を区分した考慮したモデルによる結果をマルチスケール展開し、高精度の熱可塑CFRP成形シミュレーションが可能なマクロスケール熱可塑成形シミュレータが完成(図1)成果(2)開発したシミュレータの効果の検証として、ジェットエンジンファン部材(Structural Guide Vane)

の成形シミュレーションに適用中(図2)

の成形性の高さから薄さ0.1 mm程度の熱可塑プリプレグシートを積層し加熱成形する手法が有望視されており、プリプレグシートの形状や積層構成を設計変数とする高度な最適設計に期待が寄せられている。本サブ課題では、成形後の繊維配置を正確に予測し、合理的な強度評価に基づく高度な最適設計を実施可能とする、熱可塑成形シミュレーション技術を開発する。これにより、金型修正の手戻り抑止(経費削減:15百万円、工期短縮:45日)、最適成形条件探索の効率化(経費削減:25百万円、工期短縮:75日)を実現し、設計および製造プロセスの合理化による国内メーカーの優位性を確立する。

ジェットエンジンファンブレードや自動車ボディのCFRP(炭素繊維強化プラスチック)化においては、そ

(1)の成果に関しては、炭素繊維と樹脂を明確に区分するミクロモデルから正確なマクロ材料モデルを構築し、熱伝導-構造接触連成解析機能を整備して、精度の高い成形シミュレーションを実施可能とした。CFRP材料の熱可塑変形特性を正確に予測可能であることを、プリプレグシートを8層積層した試験体の成形後のゆがみ予測問題で検証した。(2)の成果に関しては、ジェットエンジンファン部材であるStructural Guide Vane (SGV)のプレス成形シミュレーションを実施し、内部に発生する複雑な応力分布と残留ひずみ発生のメカニズムを明らかにした。実成形品との照合を行いシミュレータの実効性を確認することで、シミュレーション結果を活用した設計及び製造の高度化を推進するとともに、試作回数を激減させ、開発コスト削減に貢献することが可能となる。

最終達成目標としては、実効性を確認したシミュレータを活用し自動車ボディあるいはジェットエンジンの実部品レベルの熱可塑成形シミュレーションを実施し、繊維配向の乱れなどの製造誤差を低減する成形プロセスの策定と設計において勘案すべき製造誤差の見積もりを行い、熱可塑性CFRPのマルチスケール成形シミュレータを活用した最適成形プロセスの策定と合理的設計のための製造誤差を見積もることができることを確認する。

禄:科学的成果 青:実用的成果

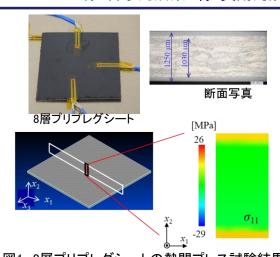


図1 8層プリプレグシートの熱間プレス試験結果とマクロスケールシミュレーション結果との照合

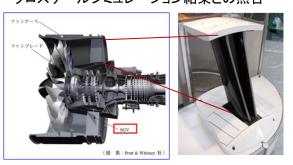


図2 ジェットエンジンファン部材の成形シミュ

レーション

重点課題9

宇宙の基本法則と進化の解明

素粒子から宇宙までの異なるスケールにまたがる現象の超精密計算を実現し、大型実験・観測のデータと組み合わせて、多くの謎が残されている素粒子・原子核・宇宙物理学全体にわたる物質創成史を解明する。

本課題の主な成果

- 1. ポスト「京」(富岳)の時代に本格化する大型実験・観測計画のデータと比較可能な理論 予想のためのシミュレーションコードが整った(MNRAS 482, 4846等)
- 2. B中間子崩壊の計算において、SuperKEKB実験で必要とされる精度の達成に道筋
- 3. バリオン間力の格子QCD計算での系統誤差に関して長年の問題を解決(JHEP 1903, 007)、ストレンジネスを含むバリオン間力を計算し実験的に未発見の状態を予言 (PRL120, 212001)
- 4. 水銀同位体で中性子数とともに繰り返しの量子相転移を発見するなど、ポスト「京」で初めて可能となる質量数200領域原子核の試行計算に成功(Nature Physics 14, 1163)
- 5. 中性子星連星の合体現象を解明(林忠四郎賞、仁科記念賞、木村利栄理論物理学賞、日本物理学会若手奨励賞、日本天文学会研究奨励賞)し、かつ来たる観測結果を解釈する上で必須の計算結果を導出するためのコード群を整備
- 6. 宇宙の構造形成シミュレーションにより大局的および局所的なダークマター分布を解明 (MNRAS 487, 2718)し、主成分解析やガウス過程を実装した「エミュレータ」を開発

重点課題9 宇宙の基本法則と進化の解明

サブ課題A: 究極の自然法則と宇宙開闢の解明(サブ課題代表者:高エネルギー加速器研究機構・橋本省二)

目標

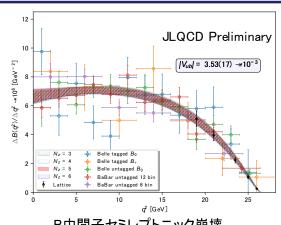
素粒子と初期宇宙のシミュレーション研究により、究極の自然法則と宇宙開闢の解明に貢献する。具体的には、B中間子セミレプトニック崩壊形状因 子の精密計算、有限温度QCD相構造サーベイの予備計算、超弦理論に基づく宇宙開闢のシミュレーションを行う。

成果内容と科学的・社会的意義

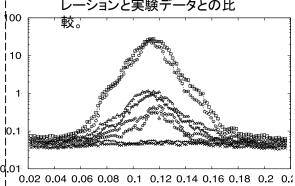
成果(1) B中間子セミレプトニック崩壊形状因子の計算において、SuperKEKBで必要とされる精度の達成に道筋。 成果(2) QCD相転移において新たな対称性の回復現象を発見。QCD相構造の全体像解明に向けた第一歩に。 成果(3) 超弦模型計算における符号問題を扱う新手法を開発し、インフレーションによる空間膨張を再現可能に。

- (1) B中間子のセミレプトニック崩壊 $B \rightarrow \pi l \nu$ を記述する形状因子の格子QCD計算を実行した。格子間隔、 クォーク質量などについての内外挿において系統誤差が制御できることを確認した。これにより、小林 益川行列要素 |Vub| の決定に必要な形状因子を、Bファクトリー実験のデータと同程度の精度で計算 することが可能になった。ポスト京においてさらに高精細かつ高統計の計算を行うことで、2019年から 高エネルギー加速器研究機構(KEK)で本格的に始まったSuperKEKB実験で必要とされる精度を得るこ とが可能になる。素粒子の標準模型の精密検証に向けて、大規模実験プロジェクトとの連携を深める。
- (2) (フレーバー数2の)QCDの有限温度相転移の高温相において、クォーク質量が小さい領域でトポロジ カル感受率および軸性量子異常が消失する現象を観測した。この発見は、有限体積効果の検証、中 間子スペクトルにおける検証を加えて、さらに確実なものになった。カイラル対称性を保つ格子定式化 を採用した計算により従来想定されていた対称性の破れ(およびその回復)のパターンとは異なる結 果が得られたことで、QCD相図の理解に変更が迫られることになる。ストレンジクォークを含む現実的 な(フレーバー数3の)理論について大規模なサーベイを行う準備が整った。
- (3) 超弦理論の定式化の一つであるタイプIIB行列模型に基づく宇宙開闢のシミュレーション研究により、 宇宙初期に時空が急速に膨張する様子を再現することを究極の目標として予備研究を進めた。計算 量を削減する近似による計算では連続的な時空が得られないという問題に直面し、この問題を乗り越 えるためには、分配関数に現れる符号問題を適切に扱う必要があることが明らかになった。符号問題 を扱う手法として、複素ランジュバン法の研究を進め、その適用限界を明らかにするとともに、超弦理 論に適用することで連続的な空間が得られる可能性が出てきた。ポスト京でのより大規模な計算によ り、宇宙開闢の解明に向けた本格的なシミュレーションを開始することができる。

緑:科学的成果 青:実用的成果



B中間子セミレプトニック崩壊 B→πIνの微分崩壊率。シミュ レーションと実験データとの比



超弦理論のシミュレーションによ 時空が一様に広がることを示す

重点課題9 宇宙の基本法則と進化の解明

サブ課題B: 物質創成史の解明と物質変換(サブ課題代表者:京都大学基礎物理学研究所・柴田 大)

目標

- (1) ポスト京に向け、バリオン間力計算の理論手法・アルゴリズム・コードを開発・確立する。
- (2) 重原子核の構造計算を遂行するとともに、原子カエ学など他分野への応用に重要な基礎的なデータを得てポスト京に備える。
- (3) 中性子星連星合体や超新星爆発のメカニズムの理解を可能にするポスト「京」用計算コードの開発。

緑:科学的成果 青:実用的成果

成果内容と科学的・社会的意義

成果(1) バリオン間力の格子QCD計算における手法間の矛盾問題を解決し、HAL法の信頼性を確立した。成果(2) 物理点でのバリオン間力の格子QCD計算を行い、新たなダイバリオン状態の存在を発見した。

成果(3) 炭素12の第一原理計算や、水銀など重い原子核の計算可能な限界に挑戦した計算に成功。

成果(4) 中性子星連星の合体現象を解明し、かつ観測結果との比較が可能な計算コード群が完成。

成果(5) 6次元ニュートリノ輻射輸送を完全に考慮した超新星爆発コードが完成。

(1)の成果により、バリオン間力の格子QCD計算において、直接法と HAL QCD法の二手法間の結果が矛盾するという長年の問題を解決した。直接法では励起状態の混合による系統誤差により誤った結果が得られる一方、HAL 法では系統誤差がコントロールされており信頼性のある計算が可能であることが明らかになった。 (2)の成果により、ストレンジネス|S|=0-6のバリオン間力を物理点で系統的に計算した。新たなダイバリオン状態(QQ状態,NQ状態)が存在することを初めて発見した。これらの状態は重陽子とほぼ同様のユニタリー極

態 (Ω Ω 状態、 $N\Omega$ 状態) が存在することを初めて発見した。これらの状態は重陽子とほぼ同様のユニタリー極限近傍状態であることが分かった(図1)。また格子QCD計算に基づくハイペロン間力を用いて、その中性子星状態方程式への影響を精査した。

(3)の成果により、第一原理計算から炭素12のホイル状態を検証可能とした。散乱実験の結果とつきあわせ検討することにより、原子核におけるクラスター構造の理解を深めた。また、ポスト京で初めて本格計算可能となる質量数200領域原子核の試行計算に成功。水銀同位体で中性子の数とともに繰り返し量子相転移が起こることを、大規模計算により理論的に発見した。錫やサマリウムなどでの構造進化も含め、安定超重核元素の探索や魔法数、中性子過剰エキゾチック核の構造原理解明に寄与し、rプロセス元素合成、核分裂解明など基礎・応用の研究につながる。

(4)の成果により、中性子星連星の合体現象を解明し、かつ来たる観測結果を解釈する上で必須の計算結果を導出するためのコード群が整備された。本成果は、ポスト「京」の時代に本格化する予定の重力波と電磁波のマルチメッセンジャー観測の結果に解釈を与えるのに必須の精度良い理論モデルを導出可能にした。 (5)の成果により、ポスト「京」完成後、超新星爆発の第一原理計算が現実的に可能になった(図2)。

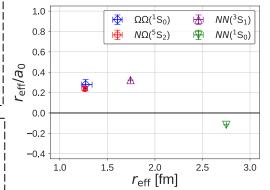


図1 物理点格子QCDで予言したN Ω 、 $\Omega\Omega$ ダイバリオン状態に対する散乱パラメータ

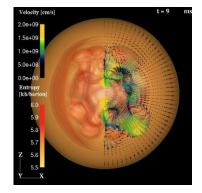


図26次元超新星爆発の計算結果。 エントロピー等値面と速度場を表示

重点課題9 宇宙の基本法則と進化の解明

サブ課題C: 大規模数値計算と広域宇宙観測データの融合による宇宙進化の解明

目標

宇宙のダークマター分布の非線形成長を追い、さらに電磁流体力学や輻射輸送などの、天体形成に関わる基礎物理を取り入れたマルチフィジクスシミュレーションを遂行する。宇宙望遠鏡や地上大型望遠鏡を用いた観測ビッグデータと比較し、宇宙138億年の進化を解明する。

成果内容と科学的・社会的意義

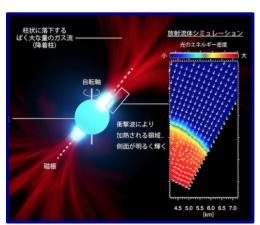
禄:科学的成果 青:実用的成果

成果(1) 宇宙の構造形成シミュレーションにより大局的および局所的なダークマター分布を明らかにした。 成果(2) コンパクト天体降着流の一般相対論的輻射磁気流体シミュレーションを遂行した。 成果(3) ブラソフーポアソン方程式ソルバーを開発し、6次元位相空間内でのニュートリノ分布を明らかにした。

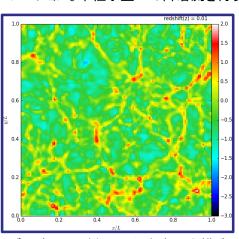
(1)の成果により、86億個の質量粒子を用いた大規模Nシミュレーションを100ラン以上行った。この出力をデータベース化し、主成分解析やガウス過程を実装した「エミュレータ」を開発し、物質分布の2点相関関数など主要統計量の高速計算を可能にした。次に、5500億個の質量粒子を用いた宇宙の構造形成シミュレーションを「京」上で行った。銀河形成の基本要素であるダークマターハローの形成進化のカタログを生成し、天文学の研究者らが使えるように整備した。さらにカタログ上で恒星分布を準解析的にモデル化し、恒星ストリームや銀河古成分系の数値カタログを生成した。特に現在銀河系で観測される恒星ストリームは、母天体が矮小銀河であればそれは 0.5<z<2.5の特徴的な期間に銀河系に取り込まれたことを明らかにした。

(2)の成果により、ブラックホール周囲の光の軌道や、コンプトン散乱などのガスと物質の相互作用を正しく解けることを示した。また、モーメント法に基づく一般相対論的輻射磁気流体コードの最適化を行い、ブラックホールおよび中性子星周りの降着流の計算を行うことができた。本成果により、中性子星への超臨界円盤降着が可能であることを一般相対論シミュレーションで世界で初めて示し、X線望遠鏡により発見されたSS433やULXと呼ばれる時間変動天体の正体が中性子星である可能性を示唆した(右図)。また、高次精度散逸性磁気流体コードCANS+を拡張、最適化し、多くの天体物理学およびプラズマ物理学の研究者が使用できるように整備た。非熱的粒子生成過程を解明するため、3次元プラズマ粒子シミュレーションを実施し、強い天体衝撃波近傍での電場と磁気乱流による電子加速過程を示した。

(3)の成果により、無衝突ボルツマン方程式(ブラソフ方程式)の数値解の正値性・単調性を満たしつつ、空間 7次精度を達成する数値解が得られた。宇宙論的な共動座標系を採用し、宇宙大規模構造形成に応用した (右図)。本成果は広域銀河サーベイにより得られる宇宙の大域的物質分布と比較することができる。特に、 初期宇宙から残存するニュートリノが物質分布に及ぼす影響を正確に測定することができ、その統計解析から ニュートリノの質量和に強い制限を与えることができる。



高輝度X線パルサーの輻射流体シミュレーション。中性子星への降着流を再現



ブラゾフコードを用いた宇宙の大構造 形成シミュレーション。