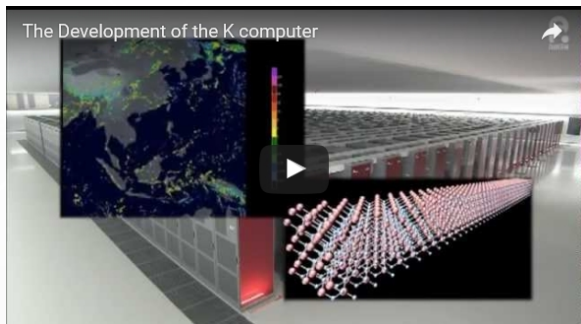


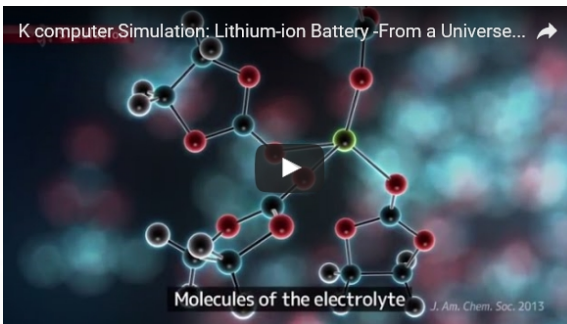
国際発信について（英語版ホームページ）

参考資料 1

「京」の開発や、成果に関する英語版の動画を英語版ホームページで公開。
(<http://www.aics.riken.jp/en/outreach/video-gallery/>)



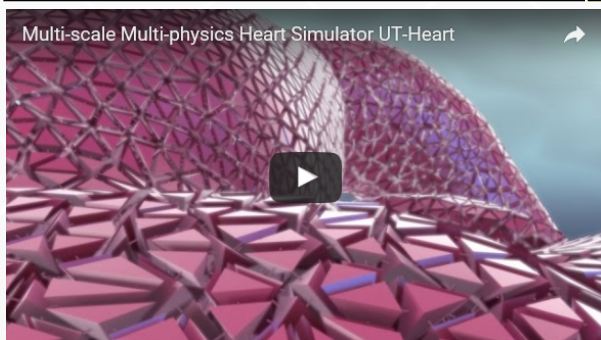
「京」開発
ウェブ公開：約3年8か月 閲覧数：10,530回



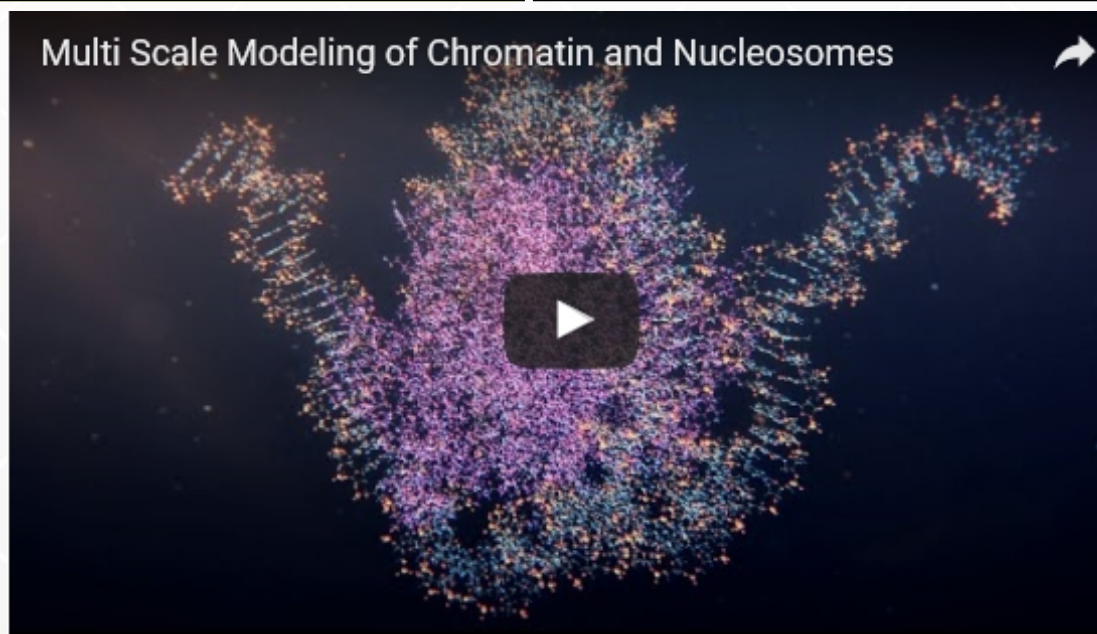
リチウムイオン
ウェブ公開：約7か月 閲覧数：820回



自動車空力(短縮版)
ウェブ公開：約7か月 閲覧数：580回



UT-Heart(戦略分野1制作)
※SIGGRAPH 受賞作品(2015年6月)
ウェブ公開：約1年8か月 閲覧数：270,000回



クロマチン構造
ウェブ公開：約4ヶ月 閲覧数：130,380回

「京」の最近の成果発表事例

一般利用課題の成果

2016年5月24日プレスリリース

北極域への「すす」の輸送メカニズムを解明

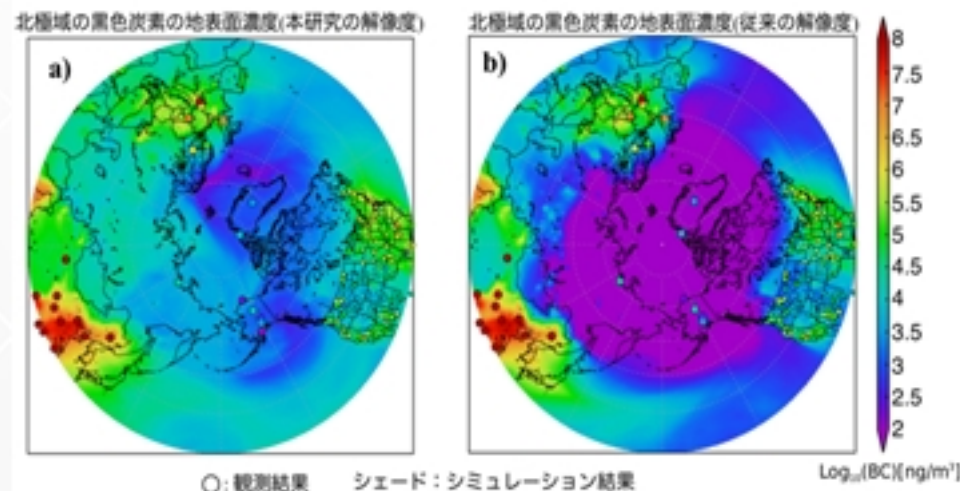
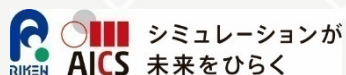
－「京」を用いた超高解像度の全球大気汚染物質シミュレーション－

【概要】

大気中を漂う小さな塵、エアロゾルは大気汚染や気候変動の重要な要因です。中でも「すす（黒色炭素）」は氷の上に降り積もって融けやすくさせるなど、気候変動への影響が大きいと考えられています。しかし輸送量などの正確な推定は困難で、気候変動予測における不確かさの一因でもあります。

今回「京」で従来にない高解像度のシミュレーションを行い、これまで捉えきれなかった低気圧や前線の微細な構造が、「すす」の輸送に大きな役割を果たしていることがわかりました。今後、より高性能なスーパーコンピュータを最大限駆使しエアロゾルの輸送メカニズムを明らかにできれば、より不確か性を減らした気候変動予測が可能になると期待できます。

HPCI一般課題:佐藤陽祐(理化学研究所計算科学研究機構複合系気候科学研究チーム)、富田浩文(同チーム チームリーダー)、
論文発表: Yousuke Sato, Hiroaki Miura, Hisashi Yashiro, Daisuke Goto, Toshihiko Takemura, Hirofumi Tomita, and Teruyuki Nakajima, "Unrealistically pristine air in the Arctic produced by current global scale models", *Scientific Reports* (2016), doi:10.1038/srep26561



北極域の地表での黒色炭素の質量と観測との比較 (当該論文の図を用いて作成)

a)は本研究で実現した水平格子間隔3.5kmの結果。b)は従来の水平格子間隔56kmの結果。シェードが数値シミュレーション、○が観測結果を示す。シミュレーションの期間内に北極域に流入した黒色炭素の総量について、3.5km格子解像度では56km格子解像度に比べておよそ4倍もの流入量が見積られた。

【プレスリリース】

理化学研究所 http://www.riken.jp/pr/press/2016/20160525_1/

東京大学 <http://www.s.u-tokyo.ac.jp/ja/press/2016/4691/>

国立環境研究所 <http://tenbou.nies.go.jp/news/jnews/detail.php?i=19020>

九州大学 http://www.kyushu-u.ac.jp/f/28024/16_05_25_2.pdf

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野1の成果

2016年5月24日プレスリリース

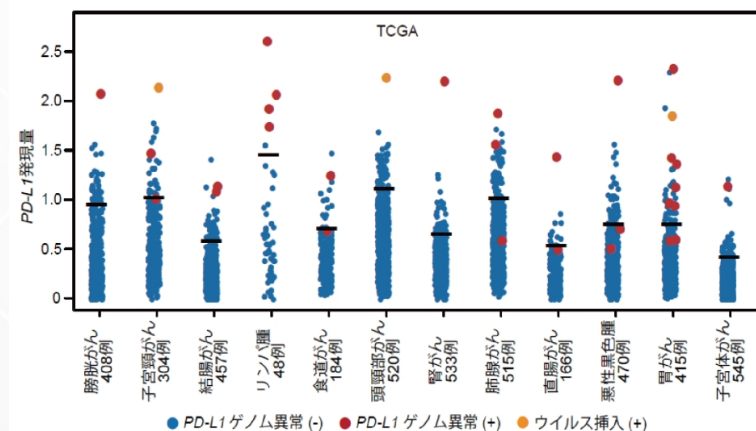
がん細胞が免疫から逃れるメカニズムの解明
-免疫チェックポイント阻害剤の効果予測への応用に期待-

【概要】

生体には本来、がん化した細胞を排除する免疫の仕組みが備わっていますが、この仕組みの破たんががん発症への大きな役割を担っていると言われていました。

今回、研究チームは、33種類の主要ながん種を含む1万例を超えるがん試料のゲノム解析データについて、東京大学医科学研究所ヒトゲノム解析センターのスーパーコンピュータと「京」を用いた大規模な遺伝子解析を通じ、がん細胞が免疫から逃れる新たなメカニズムを解明することに成功しました※。この成果は、免疫回避の仕組みの理解に大きく貢献するほか、免疫チェックポイント阻害が治療上特に有用と思われる患者さんを見出す有用なマーカーとしてゲノム異常を応用できる可能性が期待されます。(5/23付Nature 電子版掲載)

※成人T細胞白血病をはじめとするさまざまな種類のがんで共通に認められる3'非翻訳領域の異常によって、免疫チェックポイント分子であるPD-L1の発現異常が生ずる結果、がん細胞が生体に本来備わっているがんに対する免疫監視を回避して、がんの発症に関わることを世界で初めて明らかにした。



さまざまな悪性腫瘍におけるPD-L1ゲノム異常

米国のがんゲノムアトラス (TCGA) に登録されている、33種類の悪性腫瘍からなる10,210例のがん試料の遺伝子解析データを用いてPD-L1遺伝子の3'非翻訳領域の異常の探索を行い、12種類のがん種を含む、計32症例において、PD-L1遺伝子の3'非翻訳領域の異常が同定された。

※ PD-L1遺伝子: がん細胞を排除する免疫チェックポイント分子の一つ。
※ 3'非翻訳領域: ゲノム上のタンパク質に変換されない非コード領域の一つであり、遺伝子のコード領域の下流に存在する。遺伝子の発現の調節に関わる。

HPCI戦略プログラム分野1、文部科学省ポスト「京」重点課題(2): 小川誠司 (京都大学大学院医学研究科 教授)、片岡圭亮 (京都大学大学院医学研究科 特定助教)、宮野悟 (東京大学医科学研究所附属ヒトゲノム解析センター 教授)、白石友一 (東京大学医科学研究所附属ヒトゲノム解析センター 助教)、他の共同研究者40名
論文発表: Kataoka et al., "Aberrant PD-L1 expression through 3'-UTR disruption in multiple cancers", Nature (2016), doi:10.1038/nature18294

「京」の最近の成果発表事例

一般利用課題の成果

2016年5月20日プレスリリース

パルス光からガラスへのエネルギー移行をアト秒の時間精度で測定することに成功
～光波で駆動する未来のエレクトロニクス実現に期待～

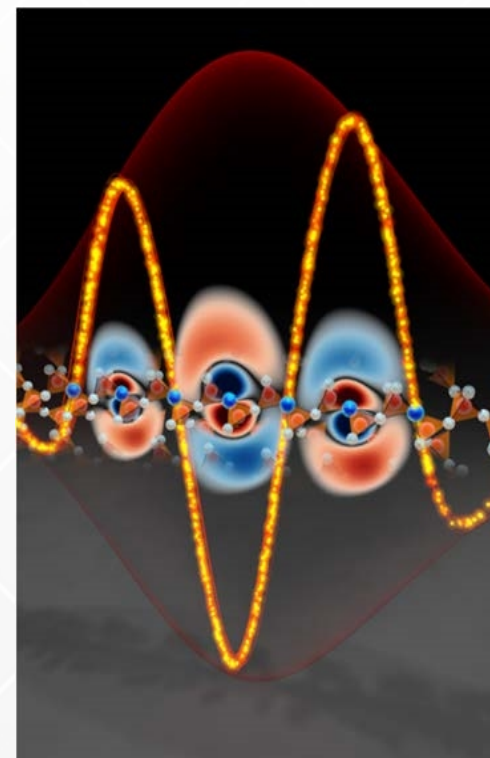
【概要】

筑波大学などの国際共同研究チームは、光が物質に照射されたときに非常に短い時間で起こる、光から電子へのエネルギー移行を、アト秒（10の18乗分の1秒）という時間精度で計測することに世界で初めて成功しました。

この研究で筑波大学の矢花教授らは、「京」を用いて実験に対応する大規模シミュレーションを前例のない高い精度で行い、光と物質の間でのエネルギー交換のメカニズムを原子スケールで明らかにしました。

この研究は、光による電子駆動をスイッチ動作に用いる未来のエレクトロニクス技術に向けた基盤となり、信号・データ処理を極限まで高速化する道を拓くものと期待されます。（5/24付Nature 電子版掲載）

図：左から来る黄色い光が二酸化ケイ素の原子に照射し、各原子の周りには電子を振動させる。この電子の動きが光波のエネルギーを吸収する。パルス光の終わりで、電子による吸収されたエネルギーは再び光波に戻る。この物質を通過した後の光波の時間波形を正確に測定し、アト秒の速さで変化する固体の電子の運動を、実時間観測することが可能になった。



HPCI一般課題、戦略プログラム分野2：矢花一浩（筑波大学 計算科学研究センター 教授）

論文発表：A. Sommer, E. M. Bothschafter, S. A. Sato, C. Jakubeit, T. Latka, O. Razskazovskaya, H. Fattahi, M. Jobst, W. Schweinberger, V. Shirvanyan, V. S. Yakovlev, R. Kienberger, K. Yabana, N. Karpowicz, M. Schultze & F. Krausz, “Attosecond nonlinear polarization and light-matter energy transfer in solids”, *Nature* 534, 86-90 (2016), doi:10.1038/nature17650

【プレスリリース】

筑波大学 http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/press_20160524

Max Planck Institute of Quantum Optics http://www.mpg.de/5328196/16_05_23

Ludwig-Maximilians University https://www.en.uni-muenchen.de/news/newsarchiv/2016/krausz_lightwaveelectronics.html

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野5の成果

2016年3月25日プレスリリース

太陽最古の謎 解決に王手 スーパーコンピュータ「京」による世界最高解像度計算で太陽の磁場生成メカニズムを世界で初めて解明

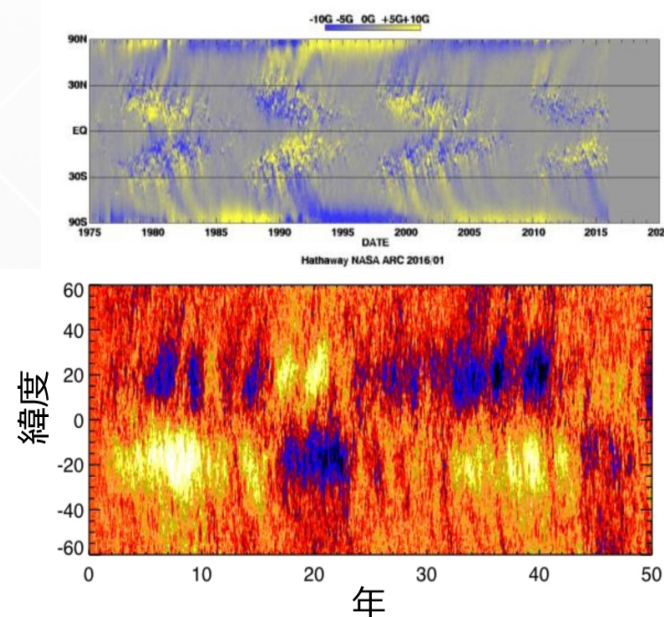
【概要】

太陽には黒点と呼ばれる磁場が強い領域があります。黒点は11年周期で増えたり減ったりすることがわかっていますが、そのメカニズムは明らかになっておらず、「太陽最古の謎」と言われています。

研究チームは「京」を使い、独自に開発した計算手法「音速抑制法」による超高解像度計算を行いました。その結果、太陽内部に存在するカオス的運動をする小さなスケールの乱流の中から、10年スケールの磁場活動の周期を再現することに成功しました。この新たな理論から、太陽活動11年周期をつくると考えられている磁場生成メカニズムの基本的かつ重要な機構を明らかにしました。今後は、人工衛星などの観測データから新しい理論の詳細を確かめ、太陽最古の謎の本格解明を目指します。

(3/25付Science電子版に掲載)

HPCI戦略プログラム分野5 堀田英之(千葉大学 大学院理学研究科特任助教)、Matthias Rempel(米国HAO/NCAR Senior Scientist)、横山央明(東京大学 大学院理学系研究科 准教授)
論文発表: H. Hotta, M. Rempel, T. Yokoyama, "Large-scale magnetic fields at high Reynolds numbers in magnetohydrodynamic simulations", *Science*, doi:10.1126/science.aad1893



(上) 実際の太陽表面で観測される磁場の様子

NASA webサイト

<http://solarscience.msfc.nasa.gov/images/magbfly.jpg>

(下) 高解像度計算で明らかになった太陽内部の磁場の様子
全球スケールの磁場が周期を持っていることがわかる。

【プレスリリース】

千葉大学: <http://www.chiba-u.ac.jp/general/publicity/press/files/20160324.pdf>

「京」の最近の成果発表事例

一般利用課題の成果

2016年3月19日プレスリリース

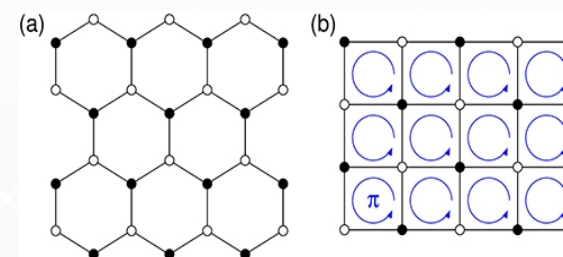
ディラック電子系に潜む普遍性を実証

－世界最大規模のシミュレーションで金属-絶縁体転移の臨界指数を決定－

【概要】

理研の研究チームは、グラフェンなどで見られる質量ゼロの2次元ディラック電子系^{※1}において、電子間の相互作用が引き起こす金属から絶縁体への相転移（金属-絶縁体転移）が普遍的な性質をもつことを、明らかにしました。

研究チームは、ディラック電子系を構成する2つの異なるモデルに対し、独自に開発した量子モンテカルロ法^{※2}によるシミュレーションを「京」で実行。その結果、2つのモデルの臨界指数（相転移点で物理量が示す特徴的な指数）が一致し、普遍性をもつことが示されました。この計算は、先行研究のおよそ100倍という世界最大規模のシミュレーションです。今回の成果は、物性物理から素粒子物理まで、スケールを超えた臨界現象の理解につながるほか、銅酸化物高温超伝導体の金属-絶縁体転移のメカニズムを解明する手がかりとしても期待されています。



ハニカム格子および π フラックスを持つ正方格子の格子構造

(a) ハニカム格子。正六角形を隙間なく並べた蜂の巣（ハニカム）のような構造を指す
(b) π フラックスを持つ正方格子。正方格子の各単位格子あたりに量子化磁束の半分がかかっている状態を青線で示している

※1 量子力学に相対論的効果を取り込んだ運動方程式（ディラック方程式）に従う電子。相対論的効果は通常粒子が光速に近い速さで運動している時に問題となるが、グラフェン中の電子は、炭素原子のネットワークがハニカム構造であることから、速度が光速の1/300程度であるにもかかわらず有効的に質量がゼロのディラック電子として振る舞う。

※2 量子力学に従う多粒子系の物理量を計算する手法。多自由度の積分計算を、サンプリングで統計的に評価を行う。

柚木 清司（理化学研究所計算科学研究機構 量子系物質科学研究チーム チームリーダー）、大塚 雄一（同チーム 研究員）、サンドロ・ソレラ（同チーム 客員主管研究員）

論文発表：Yuichi Otsuka, Seiji Yunoki, and Sandro Sorella, "Universal quantum criticality in the metal-insulator transition of two-dimensional interacting Dirac electrons", *Physical Review X*, doi: 10.1103/PhysRevX.6.011029

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野5の成果

2016年3月17日プレスリリース

ニュートリノ質量決定に不可欠なデータをスーパーコンピュータ「京」で計算

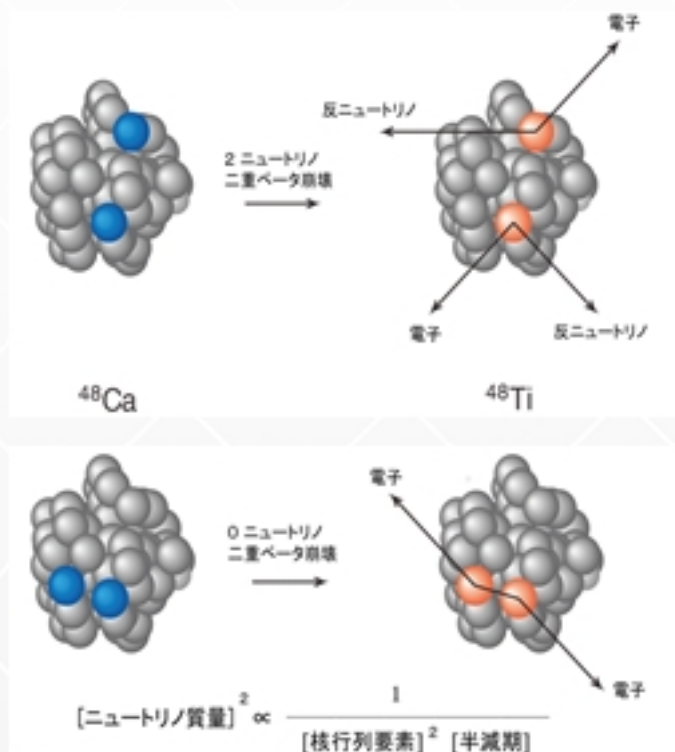
【概要】

ニュートリノに質量があることはわかっていますが、その値はわかっていません。ニュートリノ質量は実験で直接測られるのではなく、ある崩壊現象（ゼロニュートリノ二重ベータ崩壊）の半減期の測定データに係数をかけて求めます。核行列要素とよばれるこの係数は計算でしか求めることができず、「京」を用いました。研究チームは、「京」などを用いた大規模な数値シミュレーションにより、20億次元の行列の対角化を最高精度で行いました。その結果、これまで精確さに欠けていた効果が扱われるようになり、各行列要素の信頼度を大幅に向上させることに成功しました。ニュートリノの質量測定を目的として世界中で先端大型実験装置が建設されています。本研究結果により、それらの実験意義を高めることが期待されます。

HPCI戦略プログラム分野5：大塚孝治（東京大学大学院理学系研究科 教授・同研究科付属原子核科学研究センター センター長）、清水則孝（同センター 特任准教授）、岩田順敬（同センター 特任助教）、宇津野穰（日本原子力研究開発機構 研究主幹）
論文発表：Y. Iwata, N. Shimizu, T. Otsuka, Y. Utsuno, J. Menendez, M. Honma, T. Abe, "Large-scale shell-model analysis of the neutrinoless $\beta\beta$ decay of ^{48}Ca ", *Physical Review Letters* (2016), 116, 112502, doi: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.112502>

【プレスリリース】

東京大学 <http://www.s.u-tokyo.ac.jp/ja/info/4610/#a7b>
日本原子力研究開発機構 <https://www.jaea.go.jp/02/press2015/p16031701/>
HPCI戦略プログラム分野5 <http://www.jicfus.jp/field5/jp/160317pressrelease/>



二重ベータ崩壊の模式図

- (上) 2ニュートリノ二重ベータ崩壊
- (下) ゼロニュートリノ二重ベータ崩壊

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野3の成果

2016年3月17日プレスリリース

世界最高精度での全球地震波伝播シミュレーションに成功 ～理論地震波形を用いた地球内部構造研究が大きく進展～

【概要】

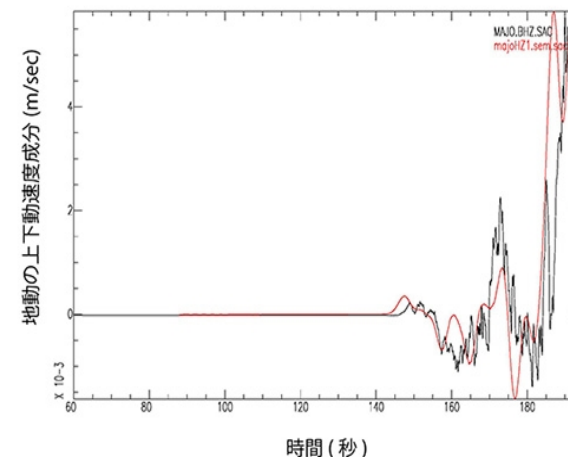
深さ6,000km以上におよぶ地球の内部構造を明らかにするには、地震で発生した地震波が地球全体に伝わるようすから、構造を推測する手段が有効です。地球が完全な球であれば地震波を理論的に表すことが可能ですが、実際にはわずかにずれがあるため、コンピュータを用いて近似的に計算する方法がとられており、地球内部構造を明らかにするための、より高精度なシミュレーション※が求められています。

研究チームは、「京」を用い、計算プログラムを最適化することで、世界最高精度での全球地震波伝播シミュレーションに成功しました。この成果は、地球内部構造の精密な決定に向けた可能性を示し、地震発生メカニズム解明などへの大きな貢献が期待されます。

※地球上を伝播する地震波の解析には周期1秒の実体波（P波・S波）が必要であり、大きな目標となっている。2003年には、地球シミュレータによって、現実的な地球モデルに対して地震波形を周期5秒の精度で計算に成功していた。今回の研究では、周期1.2秒の精度でのシミュレーションに成功した。

HPCI戦略プログラム分野3:坪井誠司 (JAMSTEC 地球情報基盤センター)

論文発表:坪井誠司,安藤和人,三好崇之, Daniel Peter, Dimitri Komatitsch, Jeroen Tromp, "A 1.8 trillion degrees-of-freedom, 1.24 petaflops global seismic wave simulation on the K computer", *International Journal of High Performance Computing Applications* (2016), doi:10.1177/1094342016632596



長野県松代の地震観測点で観測された2011年東北地方太平洋沖地震の発生により生じた地震波と理論地震波形記録シミュレーションの比較

黒線が観測波形、赤線が理論地震波形を示す。波形は地動の上下動速度成分(単位はm/sec)を示し、地震発生時から約3分間の記録を示している。地震の破壊過程を反映した観測波形の山と谷の様子が周期1.2秒の精度で再現されている。

「京」の最近の成果発表事例

若手人材育成課題の成果

2016年3月16日プレスリリース

スーパーコンピュータでフラーレンの性質を探る －世界最大規模の電子状態計算で生成熱の正しい値を予測－

【概要】

研究グループは「京」を用いて、 C_{60} フラーレン分子（炭素数60個）および、炭素の数がより多い高次フラーレン分子※1合計10種類について、物性の指標となる生成熱※2を高精度で算出することに成功しました。また、炭素原子だけで構成されている同素体のグラフェンとフラーレン分子の物性が大きく異なる原因を推定しました。さらに、フラーレン分子を大きくすることによる物性の変化を実験に先んじて理論予測することに成功し、新材料として利用するための計算基盤を作りました。

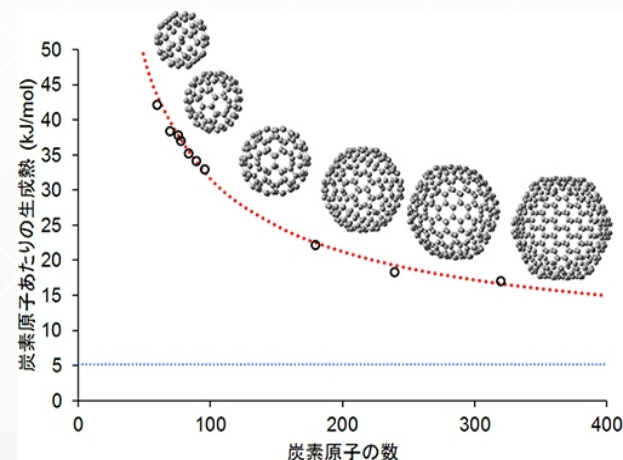
フラーレン分子は、薬剤、化粧品、半導体材料などさまざまな分野への応用が進められています。今後の新材料設計の指針を計算科学の立場から立案することが期待出来ます。

※ C_{70} 、 C_{76} 、 C_{78} 、 C_{84} 、 C_{90} 、 C_{96} 、 C_{180} 、 C_{240} 、 C_{320} 。数字はそれぞれ炭素の数を表す。応用研究の一つに、 C_{60} の中にアルカリ金属を挿入すると超伝導を示すというものがあり、フラーレンの中心にある空洞のサイズが変わる、高次フラーレンの研究も盛んにおこなわれている。

※単体から化合物 1 モルを合成するときの反応熱

「京」若手人材育成利用枠： ブン・チャン（シドニー大学化学科 リサーチフェロー）、平尾公彦（計算科学研究機構平尾計算化学研究ユニットユニットリーダー）、川島雪生（同ユニット研究員）、中嶋隆人（理化学研究所 計算科学研究機構 量子系分子科学研究チーム チームリーダー）、河東田道夫（同チーム 研究員）

論文発表：B. Chan, Y. Kawashima, M. Katouda, T. Nakajima, K. Hirao, "From C_{60} to Infinity: Large Scale Quantum Chemistry Calculations of the Heats of Formation of Higher Fullerenes", *J. Am. Chem. Soc.*, 138 (4), pp 1420-1429 (2016), doi: 10.1021/jacs.5b12518



フラーレン分子の炭素原子1個あたりの生成熱と炭素原子数の関係

縦軸は、フラーレン分子の炭素原子1個あたりの生成熱。黒丸印は10種類のフラーレン分子の今回の大規模計算結果、赤の点線は本研究で得られた「より大きなフラーレン分子の生成熱を算出するための一般的な理論式」から得られる生成熱、青色の点線は、過去の実験で測定されたグラフェンの生成熱を示す。

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野1の成果

2016年2月19日プレスリリース

大腸がんの進化原理を解明！がんに対する予防と新しい治療法へ期待

【概要】

大腸がんは一つの正常な細胞が遺伝子変異を蓄積しながら進化し、異常増殖することで発生すると考えられています。

研究グループは、大規模遺伝子変異解析および「京」などのスーパーコンピュータを用いたシミュレーションから、大腸がんのさまざまなタイプの遺伝子変異について高い腫瘍内不均一性*が存在すること、また、がん細胞の生存とは関係のない遺伝子変異が蓄積されて進化する「中立進化」によって腫瘍内不均一性が生まれることを明らかにしました。

今回の研究から、スーパーコンピュータを用いてがん進化のメカニズムを理解することが可能であることが示されました（図2）。今後の新しい治療法や治療戦略を考える重要な基盤になると期待されます。

※腫瘍内不均一性：一つの腫瘍は億を超える非常に多くの細胞によって構成されている。これらの細胞はもともと一つのがん細胞から生まれているため、共通する遺伝子変異を持っている。一方、細胞ごとにそれぞれ異なる遺伝子変異を持っていることも確認されており、これががんの化学療法における治療不能性や耐性化の原因と考えられている。

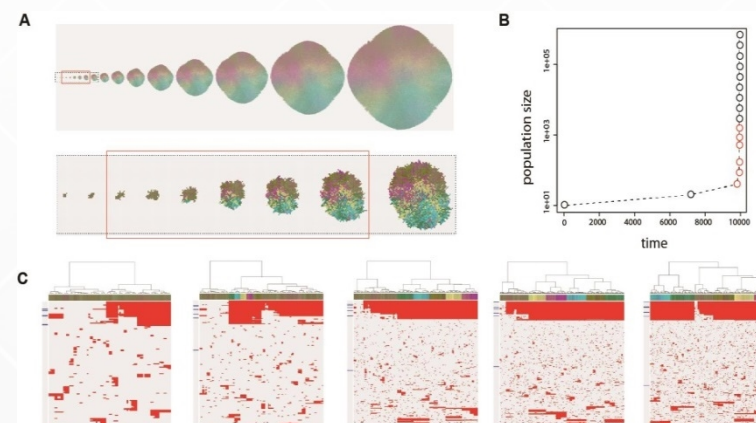


図1：がんの進化のシミュレーションの可視化
(A) 成長するがん (B) 増殖曲線 (C) 遺伝子変異パターン

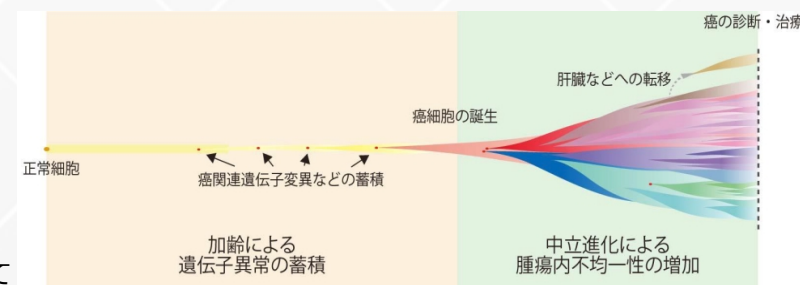


図2：本研究により提唱された大腸がん進化のモデル図

HPCI戦略プログラム分野1：三森功士（九州大学病院別府病院）、宮野悟（東京大学医科学研究所 教授）、新井田厚司（同研究所 助教）、他の共同研究者38名
論文発表：Uchi et al., “Integrated Multiregional Analysis Proposing a New Model of Colorectal Cancer Evolution”, *PLOS Genetics* (2016),
doi:<http://dx.doi.org/10.1371/journal.pgen.1005778>