

平成25年総合科学技術会議  
第1回評価検討会資料

### ターゲットアプリケーション(21本)

(このうち6本のアプリケーションを選び性能を評価)

分野	名称	プログラム名	重点アプリケーション(6本)
ライフ	巨大タンパク質系の第一原理分子動力学計算	ProteinDF	
	タンパク質立体構造の予測	SimFold	
	血流解析シミュレーション	MC-Bflow	
	オーダーメイド医療実現のための統計的有意差の検証	MLTest	
	遺伝子発現実験データからの遺伝子ネットワークの推定	GNISC	
	タンパク質-薬物ドッキング計算	Sievgene/myPresto	
ナノ	分子動力学計算	Modylas	
	FMO分子軌道法計算	GAMESS	
	疎視化分子動力学計算	Octa	
	実空間第一原理分子動力学計算	RSDFT	○
	平面波展開第一原理分子動力学計算	PHASE	○
	溶液中の電子状態の統計力学的解析	RISM/3D-RISM	
物理・天文	天体の起源を探る超大規模重力多体シミュレーション	NINJA/ASURA	
	格子QCDシミュレーションによる素粒子・原子核研究	LatticeQCD	○
地球科学	地震波伝播・強振動シミュレーションモデル	Seism3D	○
	全球雲解像大気大循環モデル	NICAM	○
工学	超高解像度海洋大循環モデル	COCO	
	有限要素法による構造計算	FrontSTR	
	有限差分法によるキャビテーション流れの非定常計算	Cavitation	
	航空機解析における圧縮性流体計算	LANS	
	Large Eddy Simulation (LES)に基づく非定常流体解析	FrontFlow/Blue	○

### ペタスケールが確認されたアプリケーション(9本)

Modylas  
cppmd  
UT-Heart  
ZZ-EFSI  
GREEM  
Seism3D  
PHASE  
RSDFT  
LatticeQCD

左記21本のアプリケーションに加えて、戦略プログラムやグランドチャレンジ等その後のアプリケーションも含めて、ペタスケールが確認されたアプリケーション

# ポスト「京」のターゲットアプリケーション

平成27年度総合科学技術会議  
評価専門調査会資料

## <ターゲットアプリケーションの特徴>

- 1) 各重点課題の要となる計算手法を有するアプリケーションであること  
(補足) 各重点課題のアプリケーションはサブ課題に対応して複数から構成されると想定されるが、戦略的かつ効率的にコデザインを進めるため、重点課題ごとに要となるアプリケーションを一つずつ選定する。
- 2) アプリケーションの開発体制やライセンス形態が、コデザインできるものであること  
(補足) 早期の成果最大化のため、コデザインに責任を持つポスト「京」開発主体とアプリケーション開発元が一体となって、システムとアプリケーションのコデザインに取り組み、コデザインにより得られたノウハウを展開できるようにする。
- 3) 全ターゲットアプリケーション群は、計算科学的手法の網羅性を有しており、コデザインおよびチューニングのノウハウのドキュメント化ができること  
(補足) 幅広い分野でのアプリケーションをカバーし、コデザインにより得られたノウハウを効率的に展開する。

重点課題	主な計算手法	Co-design観点 (重要なアーキテクチャパラメータ)	ターゲットアプリ 候補名称
①	分子動力学法	局所および集団通信レイテンシ、 演算性能	GENESIS
②	大容量データ解析	整数演算、入出力	Genomon
③	非構造・構造格子ステンシル複合の有限要素法	通信・メモリバンド幅	GAMERA
④	構造格子ステンシル有限体積法+局所アンサンブル 変換カルマンフィルター法	通信・メモリバンド幅、 入出力、SIMD幅	NICAM +LETKF
⑤	高精度分子軌道法 (疎+密行列計算)	演算性能/SIMD幅/集団通信レイテンシ	NTChem
⑥	非構造格子・有限要素法	通信・メモリバンド幅SIMD幅	Adventure
⑦	密度汎関数法 (密行列計算)	演算性能/集団通信レイテンシ	RSDFT
⑧	非構造格子・有限要素法	通信・メモリバンド幅、SIMD幅	FFB
⑨	構造格子経路積分モンテカルロ法	通信・メモリバンド幅、局所および集団通信レイテンシ	CCS-QCD

平成28年文部科学省研究振興局HPCI戦略プログラム推進委員会  
HPCI戦略プログラムの事後評価に係る点検結果報告書 参考資料

# HPCI戦略プログラム 25課題の成果概要

# 分野1 研究開発課題1: 細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション(課題代表者:理化学研究所・杉田有治)

## 達成目標

「京」を活用した大規模な分子動力学シミュレーション、粗視化ダイナミクス、一分子粒度シミュレーションを可能とし、細胞環境を露わに考慮した生体分子の動力学(細胞内分子ダイナミクス)を実施する。それにより、細胞質での分子混雑環境がタンパク質構造や信号伝達に及ぼす影響や、核内でのヌクレオソームやクロマチンなどの機能発現の分子機構について、X線結晶構造解析だけでは不可能な動力学的理解と予測を実現する。

## 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

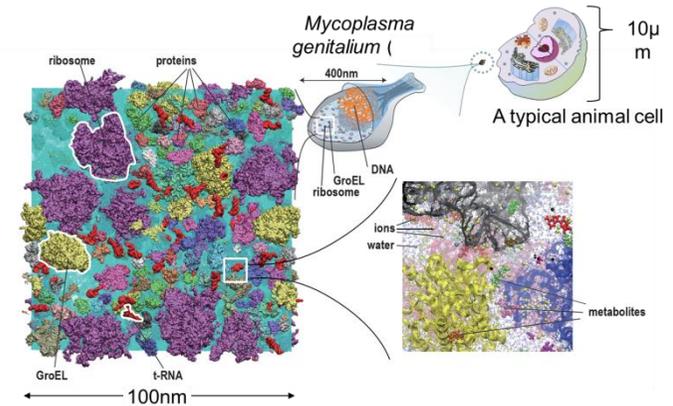
- 成果①細胞内の分子混雑環境に関する世界最大級の1億原子系全原子分子動力学シミュレーションに成功。
- 成果②ヌクレオソーム、クロマチンの機能発現機構に関するマルチスケールシミュレーションに成功。

①の成果は、細胞環境の重要な要素の一つである分子混雑に注目し、分子混雑環境がタンパク質のダイナミクス、安定性、水和、分子認識などに与える影響を明らかにすることを目的にして、**バクテリアの細胞質の約10%を約1億個の原子で表現した全原子モデル**を構築した。自主開発した分子動力学プログラムGENESIS高度に並列化し、世界最大級の分子動力学シミュレーションを実現した。タンパク質と代謝物の相互作用、タンパク質間相互作用などを網羅的に解析し、**複数の分子のかかわる詳細な分子間相互作用が細胞内環境でのタンパク質の構造・機能・ダイナミクスを決定していることを示した**(ソフトウェア: GENESIS, WIREs computational molecular science 2015)。

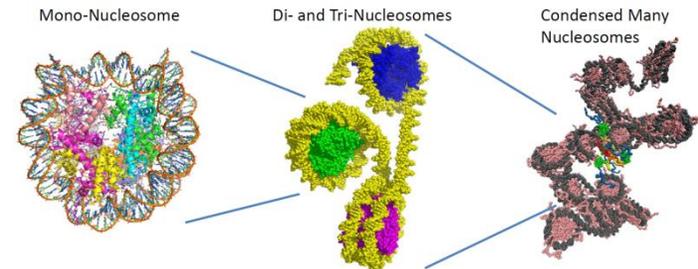
本成果によりはじめて、細胞内の分子拡散を含めた原子レベルの細胞質ダイナミクスの実像を理解する道が拓かれた。細胞内での低分子化合物の移動や分布なども計算されており、今後さらに研究を進めることで創薬分野での活用につながる成果である。

②の成果は、遺伝情報の読み出し(転写)を制御するDNAとヒストンタンパク質からなるヌクレオソームとその複合体であるクロマチンの構造とダイナミクスについて、粗視化分子モデルと全原子分子モデルとを用いたマルチスケールシミュレーションを実施することで得られた。自主開発した高度に並列化された分子動力学プログラムSCUBA、MARBLE、粗視化モデル計算プログラムCafeMolを用いた。計算結果は対応する実験、X線結晶構造解析、溶液X線小角散乱、電子顕微鏡などとの整合的な計算結果を得ており、**転写制御という重要な細胞機能に関する多くの知見を得た**(Accounts of Chemical Research 2015)。

本成果は、エピジェネティクス(DNAの配列変化によらない遺伝子発現を制御・伝達するシステム)に関して、スーパーコンピュータにより原子、分子レベルからの機構解明を行うものであり、将来は創薬や再生医療にもつながる成果である。



バクテリア細胞質の約10%を表現する全原子モデルに基づく分子動力学計算を実施



真核生物のヌクレオソームを全原子分子動力学で計算し、粗視化モデルでヌクレオソーム複合体の長時間ダイナミクスを計算した。

# 分野1 研究開発課題2:

## 創薬応用シミュレーション(課題代表者:東京大学 先端科学技術研究センター・藤谷秀章)

### 達成目標

疾患治療標的タンパク質と薬候補化合物の結合定数を、「京」で高速かつ高精度に評価する方法を実現して新規薬剤開発のパラダイムを確立する。(結合自由エネルギーシミュレーションの計算誤差を従来の5kcal/molから1kcal/mol以下に)

「京」を使って設計した候補化合物を、実際の化合物合成とウェットアッセイで検証してスーパーコンピュータ創薬設計の有効性を実証する。

### 成果内容と科学的・社会的意義

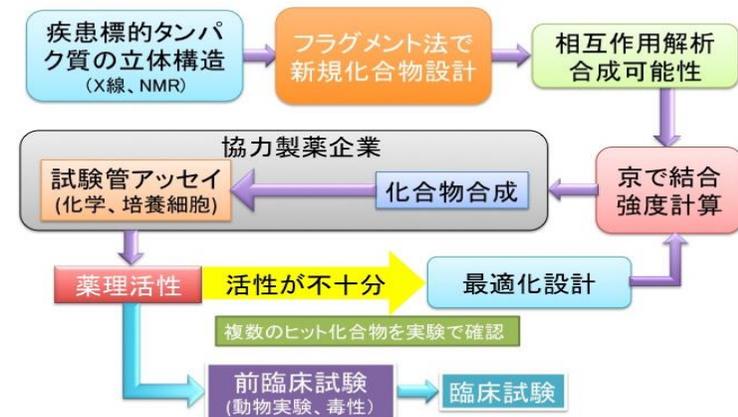
緑:科学的成果 青:実用的成果

#### 成果①創薬応用シミュレーションの高速化・高精度化を実現してスーパーコンピュータ創薬設計の有効性を実証

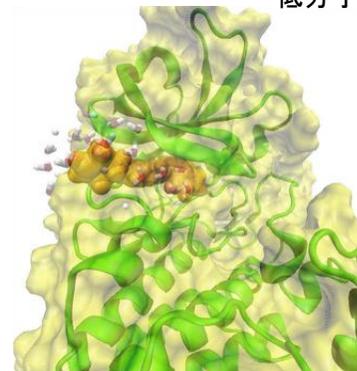
「京」のSPARC-HPC-ACEアーキテクチャに対するSIMD intrinsic accelerated kernelを開発してGROMACSの正式リリース版で平成25年に一般公開した。これにより「京」上の分子動力学計算を高速化して効率的な超並列結合自由エネルギー計算(MP-CAFEE)を実現した。疾患治療標的タンパク質のX線立体構造に基づいて薬候補化合物をフラグメント最適化法を用いて合成可能性を考慮した設計を行い、分子動力学でタンパク質との相互作用解析や結合構造の安定性を精査して有望と推測される新規化合物に対してMP-CAFEE計算で結合自由エネルギーを求めた。この計算データから新薬として市場価値がありそうな新規化合物を選択して化合物合成を行いウェット実験で薬理活性を測定した。その結果、**計算値と実験値の誤差が1kcal/mol以内**に収まる事を確認すると共に、**ガン治療標的キナーゼで薬理活性が高い化合物を発見**した。平成26年10月より連携する製薬企業でこの化合物に対する**動物実験**を進めている (Chem. Pharm. Bull. 2014, 2015)。

バイオ医薬品ではマウス抗体のヒト型化と結合力を増強する為のアミノ酸置換を設計し、平成26年末より**先端研で動物実験**を進めている。応用面だけではなく、抗原に抗体が結合する時に**CDRループが大きな構造変化を起こすメカニズム**や、抗原抗体反応で測定される**エントロピーとエンタルピーの変化の起源**を突き止めて、どの様な要素が抗原と抗体の結合強度に影響しているかを明らかにした (J. Biol. Chem. 2016)。

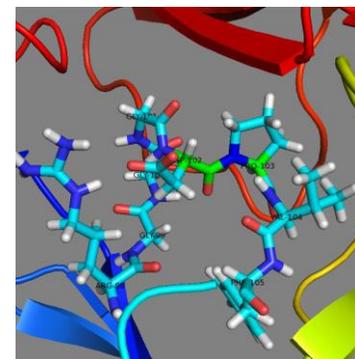
本成果は、「京」によって薬剤候補化合物の高精度評価を高速に数多くの化合物に対して行うことによって、創薬のプロセスを大幅に加速することができ、その結果、低分子化合物医薬品と抗体医薬品の二つの薬剤候補が前臨床試験に到達するなど、**計算による創薬設計手法の有用性を実証し、新規薬剤開発のパラダイムを確立**するものである。



低分子薬の開発フロー



ガン治療標的タンパク質 (低分子化合物)



結合による構造変化 (バイオ医薬)

# 分野1 研究開発課題3: 予測医療に向けた階層統合シミュレーション(課題代表者:東京大学・高木周)

## 達成目標

分子、細胞、臓器、脳神経系、筋骨格系などを連成した階層統合シミュレータを構築することにより、複雑な生命現象の理解や医療への応用を行う。具体的には、分子、細胞レベルからの心臓シミュレーションの実現と医療への貢献、全身筋骨格-神経系統統合シミュレーションの実現と神経疾患による運動機能障害の検証 等を行う。

## 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疾患の治療法・薬効評価のためのマルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレーションの実現と医療応用

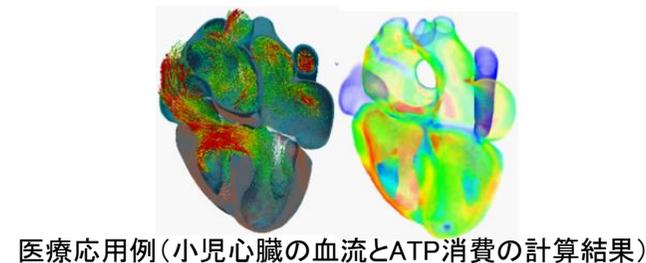
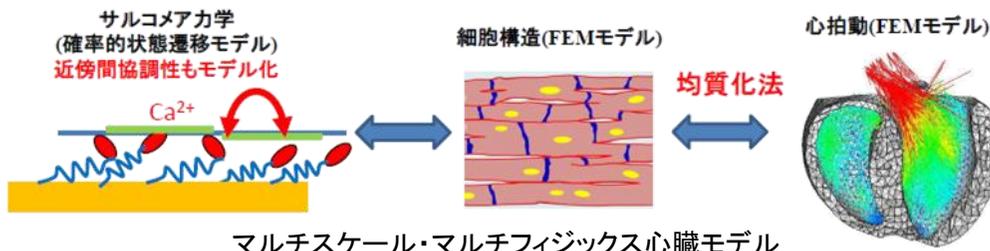
成果②神経疾患による運動機能障害解明のための全身筋骨格-神経系統統合シミュレーションの実現と症例の検証

成果①: マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータUT-Heartは、サルコメア分子のレベルから心筋細胞、心臓全体までの3階層統合シミュレーションに世界で初めて成功(SIAM MMS 2013)し、計算科学の分野に大きなインパクトを与えた。すでに医療分野での応用に向けた医療機関等との共同研究が複数進められている。具体的には、分子レベルの変異がもたらす肥大型心筋症のシミュレーション、心臓の形質異常を持つ小児先天性心疾患に対する手術の術後予測のシミュレーション、薬剤の心毒性の予測シミュレーション等(Science Advances 2015)に及び、臨床現場での利用に向け、薬事承認を目指して研究開発が進められている。また、計算結果を基に制作したビデオは国際学会SIGGRAPH(2015)でBEST VISUALIZATION OR SIMULATION賞を受賞し、全世界で29万人に視聴されている。

本成果は、世界で最も精密な心臓シミュレーションを可能としたものであり、今後さらに心臓に関する様々な面での医療応用が期待されている。

成果②: パーキンソン病は、大脳基底核におけるドーパミン欠損により、手足のふるえ(振戦)、筋固縮、動作緩慢、歩行障害などの運動障害を示す神経変性疾患の一つである。その病態の再現のために、世界最大級の細胞数の脳神経系シミュレーションに成功したNESTと、筋線維の集合体として筋肉の振る舞いを再現するHi-MUSCLE(JBSE 2014)、全身筋骨格シミュレータK-Bodyを、Musicによって統合して行った(IEEE TNSRE 2015)。ドーパミンの不足から生じる大脳基底核での約15ヘルツの振動を再現することに成功し、そのシグナルが視床で約半分の周波数になり、大脳皮質、脊髄から筋線維へと伝わり、パーキンソン病特有の手の震えを起こすことを見出すことに成功した。

本成果は、国立病院機構 刀根山病院の協力により、シミュレーションの結果に関する検証を実施している。今後さらに研究を進めることで、パーキンソン病のメカニズムの解明、投薬と電気刺激のコンビネーションなど最適な処方などの治療法の検討に役立てることができる。



# 分野1 研究開発課題4: 大規模生命データ解析(課題代表者:東京大学医科学研究所・宮野悟)

## 達成目標

大規模生命データ解析を行う基盤を構築する。そして、がんの遺伝子発現データに関する世界最大規模の遺伝子ネットワーク解析、知見の少ない重要ながん腫について多数の臨床データに基づく解析、ヒトメタゲノムの全ゲノム解析を実施し、医療、創薬に貢献する知見を得る。また、大規模ネットワーク解析により、白色脂肪細胞が、寒冷刺激により大量の熱を産生するアンチメタボ細胞に転換するメカニズムに関する知見を得る。

## 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大規模データ解析によるがんのシステム異常の網羅的解析と医療に向けた応用
- 成果②大規模生体分子ネットワーク解析による脂肪細胞の刺激応答の網羅的解析とその応用

成果①: 600以上の様々ながんの遺伝子発現データと100以上の薬剤に対する感受性・耐性データから、**世界最大規模の遺伝子ネットワーク解析**(ソフトウェア: SiGN-L1)を実施し、**世界最高精度の個別化抗がん剤投薬基盤を構築した**(PLoS One 2014, 2015)。これにより**個人ごとの遺伝子発現プロファイルデータからの最適な抗がん剤の予測が可能となった**。

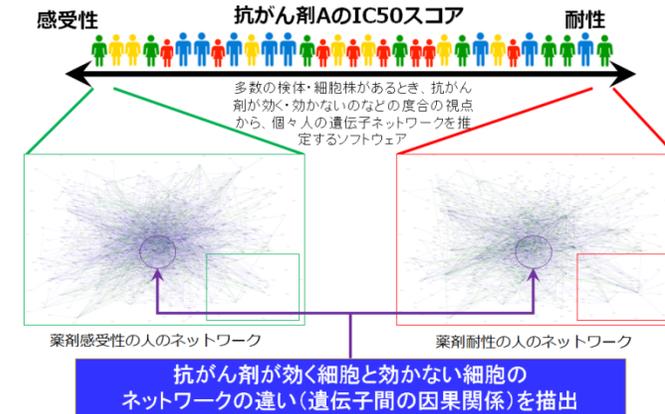
また、過去最大規模の成人T細胞白血病・リンパ腫(ATL)症例(426例)を用いて、**大規模オミクスデータ解析**(ソフトウェア: Genomon)を行い、**ATLのシステム異常の全容を解明するとともに新規治療薬剤の開発に向けた標的候補を発見した**(Nature Genetics 2015)。これは**がんという極めて複雑なシステム異常を背景とする病気に対する新たな薬剤開発、最適な薬剤処方につながる極めて重要な成果**である。

この成果は、薬効、薬剤耐性遺伝子や創薬ターゲット探索などにブレークスルーを喚起し、個別化医療の基礎となる診断技術、オーダーメイド投薬、予後予測などの応用に貢献するものである。

成果②: 白色脂肪細胞が、寒冷刺激により大量の熱を産生するベージュ脂肪細胞に転換する過程で働く約1万個の遺伝子の制御ネットワークを「京」を使って解析した(ソフトウェア: BENIGN)。ネットワーク解析により、マクロファージが分泌する生理活性物質IL-1 $\beta$ が熱産生を行うベージュ細胞への転換を抑制することを初めて発見した(Cytokine 2016)。

本成果は、「京」による大規模遺伝子ネットワーク解析により、IL-1 $\beta$ という炎症に関与する生理活性物質と熱産生のメカニズムが初めてつながり、白色脂肪細胞がアンチメタボ細胞へ変身する分子メカニズムの全容を解明するという、生命プログラムの解明に方法論も含めたブレークスルーを起こした。

本成果は、脂肪細胞の肥大化を抑制し、糖尿病など生活習慣病を削減につながる成果である。



個人ごとの遺伝子発現プロファイルデータからの  
最適な抗がん剤の予測

# 分野2 研究開発課題1:

## 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明(課題代表者:東京大学・今田正俊)

### 達成目標

高温超伝導、スピン液体やトポロジカル相等の未知の量子相や、従来の枠組みを超える相転移、強い非平衡が生む高励起ダイナミクスなど、強相関電子系の基礎科学を発展させる。特に電子相関が生む創発的新原理の発見、新現象の解明を行い、これに基づく予言と実験検証との間のサイクルで進展を図る。得られた知見をもとに将来の応用に繋がりうる、電荷・スピン伝導における高機能の発見や物質設計を推進する。強相関量子系物性の第一原理予測を可能にする手法開発により研究を加速し、同時に世界の強相関学理・エレクトロニクス研究に資する汎用手法を提供する。

### 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既存高温超伝導体である鉄系および銅酸化物超伝導体に共通する超伝導の基本発現機構を抽出し普遍性を解明
- 成果②高機能・可動トポロジカル界面の存在を予言し、予言と合致する実証で、実験とのサイクルと高機能化への研究加速
- 成果③強相関電子系の第一原理的な物性解明・予測を可能にする汎用手法の開発と改良およびその精度検証

①の成果により、1. 鉄系高温超伝導体の超伝導を含む実験相図を第一原理計算で再現することに初めて成功した。2. さらに鉄系超伝導が密度ゆらぎと相分離を伴う超伝導であることを示し、強相関特有の発現機構を特定した。3. 銅酸化物でも超伝導機構を特定し、鉄系超伝導体との共通性から、強相関高温超伝導の普遍的機構を抽出した。4. 銅酸化物が高温超伝導となる主因である、隠れたフェルミオンが存在するという全く新しい機構を導き、実験的な予言検証を提案し、3.の機構との関連も明らかにした。5. さらに銅酸化物界面に予想外に優れた超伝導特性が見られるという謎が、3.で解明した普遍的な機構に由来する「層間相分離メカニズム」によって説明できることを明らかにした。この結果は、界面がバルクの持つ欠点を克服し、超伝導を増幅・安定化させる理想的なツールを提供することを示しており、今後のデバイス設計指針を与えた。

本成果は30年来の難問である、強相関電子系の高温度超伝導の機構の理解を大きく前進させ[1]、それに基づいて超伝導増幅指針を抽出し超伝導研究の展望を切り開いた。

②の成果により、バルク中の磁壁が金属的となってトポロジカルな伝導を担い得ることを初めて予言し、イリジウム酸化物の例で詳細に予測した[2]。トポロジカル絶縁体は、表面のみが頑強で金属的な電気・スピン伝導を持つことからデバイス応用への期待が高まっているが、一方で表面は制御が難しいという問題があったが、その後この予測と一致する結果が実験で実証され、さらにヘリカル金属としての円二色性などの機能特性予言へと発展して計算・実験のサイクルを生み出した。

本成果は、従来のトポロジカル絶縁体表面と異なり、磁場、温度、圧力などで磁壁を動かしたり、存在を制御できることから、新しい機能を持つ伝導・スピントロニクス・記憶素子への展望を与えている。

③の成果により、強相関電子系の第一原理計算の汎用手法(MACE)を提案、改良、普及し、実験家・産業界も使えるアプリケーションをめざして整備と順次公開を始めた。①、②の成果はこの手法開発によって可能になった。さらに非平衡や薄膜・界面の高機能性・優位性解明・物質設計へと展望が開かれつつある。

他に、量子計算につながる量子スピン液体の候補物質の第一原理計算を行ない、スピン液体実現の指針を明らかにした成果、太陽電池高効率化のための散逸利用による常識と異なる探索指針の提案、従来の相転移の常識を変える機構の検証などを含め、基礎科学的に常識を打ち破る成果が新しい潮流を生み、J-PARCや放射光施設の実験との連携も加速した。

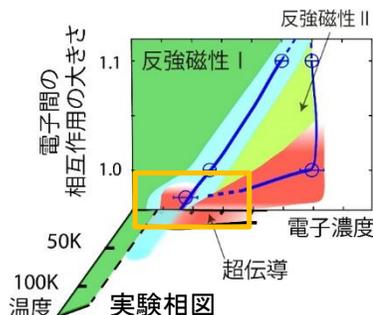


図1: 鉄系超伝導体で得られた計算相図(側面)とこれに一致する実験相図(下面)。

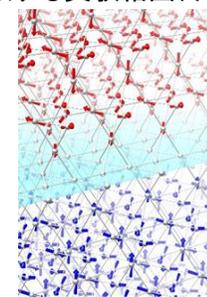


図2: イリジウム酸化物の磁壁。この磁壁に初の金属的可動トポロジカル界面が実現されることを予言し、その後実験で実証された。

関連受賞7件  
国際会議開催4件  
査読付き成果論文 123編  
国際会議基調・招待講演66件

[1] T. Misawa *et al.* Nat. Commun. 5 (2014) 5738 ; Phys. Rev. B 90 (2014) 115137, S. Sakai *et al.* Phys. Rev. Lett. 116 (2016) 057003.

[2] Y. Yamaji *et al.* Phys. Rev. X 4 (2014) 021035.

### 達成目標

斬新な計算手法の発展と超並列計算環境の援用により、高精度ポストハートリー・フォック計算によるナノスケールの材料設計を可能とし、炭素材料分子やかさ高い官能基による新規な物質の発現原理の解明と設計を行う。新規電子相関理論と複数の物理原理が協働した実在系分子理論により、有機太陽電池や光合成活性中心の機構解明へと発展させる。

### 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高精度F12電子状態理論でナノ有機電子材料や分子ベアリングの回転運動の定量的計算を可能にした。  
 成果②フラグメント分子軌道と新規の強相関理論によりマンガクラスタに対するリガンドとスピン混入効果を明らかにした。

①の成果は、完全基底関数極限を与えるポストハートリー・フォック法であるF12電子状態理論を利用した、ナノスケールの高精度物質計算を可能とした[1]。二次摂動F12法では、無触媒で合成が可能なルイス塩基-フラレン複合体への応用を行い、電子材料として有望な有機物質の候補を幾つか見出した。更に、分子ベアリング(図1)の二種類の回転運動のエネルギー障壁の高精度計算を行い、実験研究者と連携してNMRの温度依存性と回転運動のメカニズムを解明した。グリーン関数F12法の超並列実装では、種々の有機分子のイオン化ポテンシャルを従来の一電子描像よりもはるかに高精度に計算可能となり、重要な電子的性質の一つを大規模分子系においても定量的に算出することを可能にした。

本成果は、分子同士の配向や分子間の距離が重要となる有機薄膜太陽電池や微妙なエネルギー差が分子機械・分子スイッチなどの微視的な構造を決定しているシステムや、物質の安定性や活性の指標であるイオン化ポテンシャルを利用したナノ電子材料分子の設計に有用な高精度計算からの研究指針を与えたという意義がある。

②の成果は、光化学系IIの光合成酸素発生中心(OEC)であるマンガクラスタの電子状態に与えるリガンドとスピン混入の効果を明らかにした。「京」でスピン射影を施したハートリー・フォック(PHF)法を開発し、マンガクラスタの厳密なスピン固有状態での最適化構造を得ることに成功した。これに基づく超微細構造定数は、ENDORスペクトルによる実験値を定量的に再現し、ESRの評価におけるスピン状態の取り扱いの重要性を数値的に示した。又、フラグメント分子軌道法を使用することによってリガンドタンパク質から活性中心への電子移動量とその部位を特定し、定量的な議論に必要なリガンドの領域を明らかにした。更に、従来の量子モンテカルロ法では困難な電子相関の強い物質の励起状態の取り扱いを可能にしたモデル空間量子モンテカルロ(MSQMC)法の開発にも成功した。

本成果は、天然の光合成系における酸素発生の理解のみならず、高効率な光エネルギー変換を目指した物質設計と反応機構に対する計算手段と指針を与えたという意義がある。PHF法とMSQMC法は強相関電子系ソルバとして有用であり、人工光合成における光触媒の候補物質として検討されている多核遷移金属錯体や金属を担持した半導体光触媒の理論設計に繋がると期待できる。

[1] S. Ten-no(Kobe University), J. Noga(Comenius University), Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science, 2 114-125

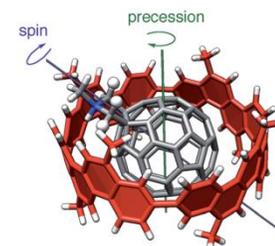


図1: 分子ベアリングの二種類の回転運動

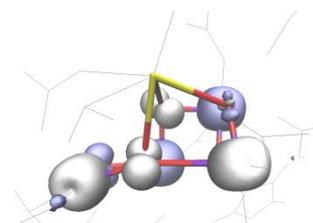


図2: PSIIマンガクラスタ: S<sub>2</sub>基底状態スピン密度

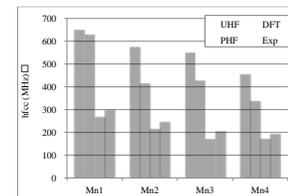


図3: 超微細構造定数(S<sub>2</sub>)

## 分野2 研究開発課題3:

### 密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測(課題代表者:東京大学・押山淳)

#### 達成目標

次世代テクノロジーを支えるナノ材料・構造体に対する、量子論に立脚した大規模・高速電子構造計算を可能にするHigh Performance Computing (HPC) 技術を京コンピュータ上で確立する。それにより、さらなる微細化に突入したCMOS技術およびbeyond-CMOS技術、さらには持続する社会を支えるパワーエレクトロニクス技術の根幹となる材料・構造群、すなわちSi/Geナノ構造、広バンドギャップナノ界面、ナノ原子層材料等での、原子構造と電子機能の相関を解明し、物質科学の先端を切り開くと同時に、次世代テクノロジーの技術基盤の形成に資する。

#### 成果内容と科学的・社会的意義

- 成果① 京のアーキテクチャに最適な実空間手法の高度化により、10万原子群量子論電子構造計算に成功
- 成果② 実空間量子論計算により、SiC表面界面、グラフェン原子層でのナノ形状による新機能の予測に成功

①の成果は、物質科学分野とコンピュータ(情報)科学分野の共同により達成された。マルチコア・超並列アーキテクチャに最適な実空間手法(コード名:RSDFT)に、新たなアルゴリズムを組み込み、行列積計算のBLAS3の活用により、107,292原子から構成されるSiナノワイヤの第一原理計算に成功し、次世代FETチャネル構造であるナノワイヤの形状と電気的特性を解明した(図1)[1]。従来の第一原理計算が、高々1000原子系をターゲットとしていたことに比べると前人未達の成果であり、ナノ構造の電子機能の量子論的解明の道を拓いた。RSDFTコードは、github およびMateriAppsでソースコードが公開されている。また、本成果の核である、物質科学と情報科学の学融合は、新たな学術分野「コンピューティクス」として発展している[2]。

②の成果は、①のHPC技術開発の果実を物質科学分野に適用し、従来は不可能であった大規模な電子構造計算によって得られた[3]。以下に二例を示す。(i) 次世代チャネルあるいは配線材料として期待されている原子層グラフェンは、相対論的方程式に従うディラック電子の存在により、科学的にも注目を集めている。現実的な二層グラフェンの積層捩れにより、このディラック電子が局在化することを発見。これにより、僅かな構造的ねじれを制御することにより、電子機能のスイッチが可能になることを予測。(ii) SiCは堅牢な広ギャップ半導体であり、次世代パワーデバイス材料として有望視。このSiC表面では、ナノファセット構造が自己組織化されるが、その組織化の機構を計算で解明。さらに、ナノファセット構造の端にそった電子雲が出現し、これが磁性を担うことが明らかとなった(図2)。

[1] 2011年度IEEEゴードンベル賞(最高性能賞)を受賞。現在では82,944ノードを用いた10万原子計算で、実行性能5.48PFLOPS(実効効率51.7%)を記録。10,000原子第一原理計算は、京の1%のリソースで数十時間で実行可能。

[2] 文科省新学術領域研究「コンピューティクス」 <http://computics-material.jp/>

[3] 実空間手法による物質科学計算は、多数の学術誌での原書論文、国際会議基調および招待講演として公表。

緑:科学的成果 青:実用的成果

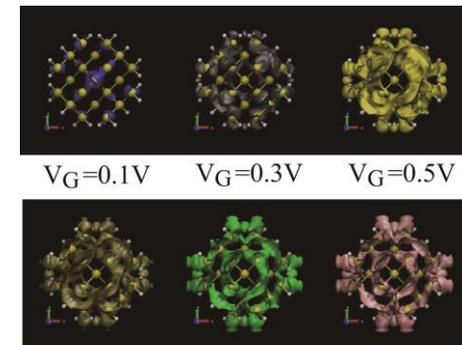


図1 SiナノワイヤFETでのチャネルを流れる電流密度のチャネル断面での分布。ゲート電圧変化により、界面の影響が異なる。

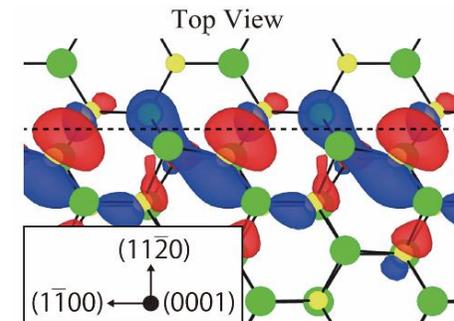


図2 SiC表面ナノステップ端でのスピン新機能を発現する電子状態雲。赤く示した炭素ダンダリングボンド雲が磁性を担う。

## 分野2 研究開発課題4:

# 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開(課題代表者:名古屋大学・岡崎 進)

### 達成目標

ウイルスの全原子シミュレーションやウイルスタンパク質の全電子計算等を実行することにより、感染機構や免疫機構、また抗ウイルス剤との相互作用などを自由エネルギーレベルで明らかにし、計算科学によるウイルスの分子科学を世界に先駆けて確立する。このため、高並列汎用分子動力学シミュレーションの高度化を完成させ、またFMO法による大規模電子状態計算を完成させる。これにより、分子動力学計算を1,000万原子系で可能とし、また全電子計算を10万原子系で実現する。

### 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 丸ごと計算により、ウイルスの安定性の分子論的起源や感染初期過程におけるレセプターとの相互作用を解明**  
**成果② 抗ウイルス剤開発に貢献できる開発基盤を確立。1,000万原子系に対する効率的な自由エネルギー計算を可能に**

①の成果により、カプシドの内部と外部での水の高速な交換とウイルスの圧力耐性、乾燥に対する不活化の関係を解明した。また、カプシド内の電解液圧力は負の値を示し、empty capsidの不安定性の一因を明らかにした。さらに、感染の初期過程であるレセプターとウイルスの結合において、空気中であれば斥力になるはずの両者間の相互作用が、生理学的な電解液中では引力として作用していることを証明した。この力は弱く、レセプターがウイルスを認識し接近するには確率論的な過程が含まれていることを見出した。

本成果は、**人類にとって重要なウイルス研究を分子科学として分子論的に展開することに成功**しており、これは世界的にも本研究のみである。

②の成果により、1,000万原子系に対する効率的な分子動力学計算やそれに基づいた自由エネルギー計算、また2万4千原子系の全電子計算を、任意の分子系に対して可能とした。計算の実行は、本課題において開発したMODYLASならびにFMOによってのみ可能である。この技術により、**抗ウイルス剤開発の開発基盤が確立され**、これまでに、たとえばAMEDプロジェクト「B型肝炎創薬実用化等研究事業」と連携して、B型肝炎ウイルスの逆転写酵素阻害剤のウイルスカプシド内部への薬剤送達の研究へと展開され、抗ウイルス剤開発への貢献が見込まれる。さらに、本技術はウイルスに限ることなく、**高分子、界面活性剤など産業的に重要な様々な物質系のシミュレーション基盤としても活用でき**、たとえば、ImPACTプロジェクト「しなやかタフポリマー」と連携して、高分子の破壊機構の分子論的解明に向けた研究を展開中である。

その他、企業との共同研究8件。

[1] MODYLAS: A Highly Parallelized General-Purpose Molecular Dynamics Simulation Program for Large-Scale Systems with Long-Range Forces Calculated by Fast Multipole Method (FMM) and Highly Scalable Fine-Grained New Parallel Processing Algorithms, Y. Andoh et al. *J. Chem. Theory Comput.*, **9**, 3201(2013).

[2] All-atom molecular dynamics calculation study of entire poliovirus empty capsids in solution, Y. Andoh et al. *J. Chem. Phys.* **141**, 165101(2014). 論文誌表紙、featured article, JCP 2015 most read articles in Biological Molecules and Networks, 米国一般誌 *Physics Today* に紹介記事 2014

[3] 日経など新聞報道6件

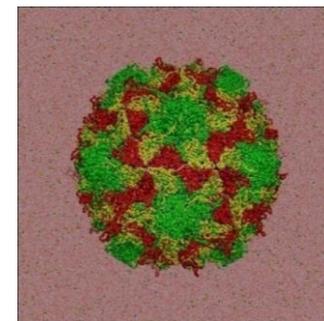


図1 電解液中における小児マヒウイルスの全原子分子動力学計算

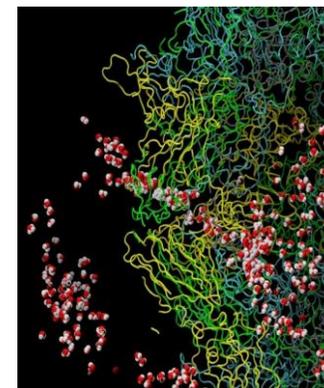


図2 小児マヒウイルスカプシドを横切る水分子の軌跡

達成目標

二次電池や燃料電池等の再生エネルギー・デバイスの開発に資する科学を創出する。この目的のために、電極界面における化学エネルギーと電気エネルギーの間の変換にかかわる物質科学過程を、先進のシミュレーション技術を用いて解明する。このことにより、これまで理解が進んでいなかった電極反応と材料物性の関連を明らかにし、その知見を用いて次世代電池の開発に資する材料設計指針を提示する。特に、実験や開発企業と連携したシミュレーション研究体制を構築して、我が国の技術開発の向上に貢献する。

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①二次電池におけるイオン輸送・酸化還元反応・界面保護膜形成の解明とそれを用いた次世代電池機能の示唆
- 成果②燃料電池における酸化還元反応の微視的説明とそれを可能にした先進シミュレーション技術の開発

①の成果により、Liイオン二次電池における、電極・電解液界面を通したLiイオンの輸送過程、電解液の還元分解過程、還元分解における添加物の影響(耐久性向上への貢献)、還元分解後の界面保護膜の形成過程が明らかになった。

本成果は実験グループとの共同研究を促し、それが**充放電の高速化が可能な電解液の開発につながった**[1]。また、計算技術を発展させて第一原理計算と古典分子動力学計算をつなげたシミュレーションを可能にし、それを用いることにより、次世代二次電池の一つであるLi空気電池における電解液の物性と電池機能(充放電速度や劣化反応速度)に関する計算予測をおこなった。さらに、全固体電池における界面抵抗の発現機構の提案なども行った。

②の成果により、白金電極と水溶液界面(モデル触媒界面)における燃料電池反応機構が明らかになった。この研究を可能にするために、**電極界面に電位差を印可しそれを制御するためのシミュレーション技術を世界に先駆けて開発**し[2]、第一原理計算と反応速度論を組み合わせた先進的研究を展開した。

本成果は、電極界面の科学の発展を目指した実験グループとの連携ならびに、白金代替電極触媒の開発を目指した企業等との連携を促した。また、開発したアプリケーションソフトウェアは、**電気化学コンソーシアム(主宰:大谷実)を設立して広く実験・企業研究者に普及させるための体制を構築**した。連携研究から、白金電極の面方位と反応活性の関連や、白金代替電極触媒(ジルコニア)におけるドーパントと活性の関連を明らかにし、燃料電池活性向上に資する材料開発に資する知見を得た。

[1] ゴットフリード・ワグネル賞(エネルギーとインダストリー分野)「スパコンの高効率利用によるリチウムイオン電池電解質界面反応の理論的機構解明」が技術革新を重視するドイツ企業と在日ドイツ商工会議所により2008年に創設された財団から与えられた。

[2] First-Principles Molecular Dynamics at a Constant Electrode Potential, N. Bonnet, T. Morishita, O. Sugino, and M. Otani, Phys. Rev. Lett. 109, 266101 (2012)等の先進的手法が開発され世界的に注目されている。

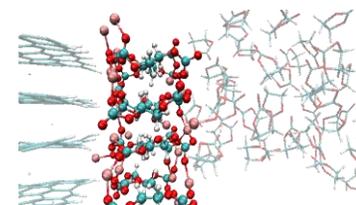


図1:Liイオン二次電池負極界面における界面保護膜(中央部)形成のシミュレーション。左側は炭素電極、右側は電解液。

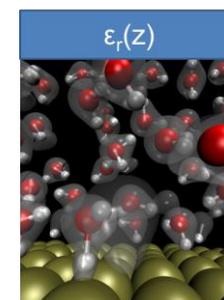


図2:燃料電池負極界面における水素酸化のシミュレーション。下側は白金電極、中央部は酸性水溶液、上側は電位制御のために導入された連続体。

## 達成目標

分子動力学法を用いたハイドレートシミュレーションを高精度化し、メタンハイドレートや水素ハイドレートの制御に関する知見を得る。これにより、効率的なメタン採取法の探索や水素の安全で安価な貯蔵法としてのハイドレート利用に関する指針を得る。

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 メタン、水素ハイドレートに関する、これまで未解決であった様々な統計熱力学的問題を解決

成果② 大規模長時間シミュレーションに基づいた、ハイドレート生成融解機構解明によるメタン採取貯蔵実用化への橋渡し

①の成果により、水素やメタンハイドレートの物性を予測するための統計熱力学理論の発展がなされ、実験・測定が困難である高圧で生成する水素やメタンハイドレートの熱力学的安定性の計算、籠の中の分子の量子力学的な扱いや多重占有の記述、並びにハイドレートやfilled iceの物性予測が可能となった。

②の成果により、水およびハイドレートの熱力学的生成阻害剤であるアルコールや塩を溶質とする水溶液中での「京」を用いたメタンハイドレート分解過程の大規模長時間シミュレーション、ハイドレート分解における速度論的阻害剤存在下のシミュレーションを実施して、以下の3点の成果が得られた。

- 1)メタン泡生成に至る融解の速度に対する様々な分子レベルの機構を解明 [1]
- 2)熱力学的阻害分子による大きな溶質効果の存在を明らかにして、分解の各過程の自由エネルギーに基づく明確な機構を提示
- 3)速度論的阻害機構を包括的に解析することにより、阻害がエントロピー的引力による吸着に起因することの発見[2]

これらの成果は、海底からのハイドレート採掘や、ガスの貯蔵・輸送過程におけるハイドレート分解の巨視的なモデル作成、阻害機構における官能基の役割の分子論的な理解に基づいた、より自由な発想の阻害剤の設計に資する。

[1] T. Yagasaki, M. Matsumoto, Y. Andoh, S. Okazaki, and H. Tanaka, *J. Phys. Chem. B*, **118**, 1900 (2014)

\* 上記の成果は同年4月16日の朝日新聞(全国版)に紹介された。

[2] T. Yagasaki, M. Matsumoto, H. Tanaka *J. Amer. Chem. Soc.*, **137**, 12079 (2015))

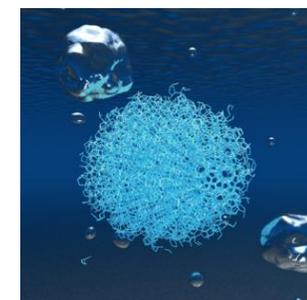


図1 メタンハイドレートが水中で分解する様子

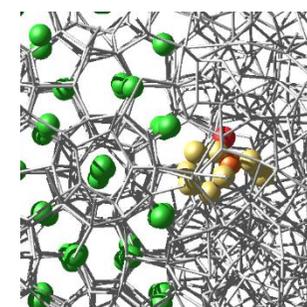


図2 ハイドレート表面に吸着する速度論的阻害剤

# 分野2 研究開発課題7:

## 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発(課題代表者:産業技術総合研究所・香山正憲)

### 達成目標

金属系構造材料は、産業や社会基盤を支える材料である。飛躍的な高性能化のためには、性能を支配する微細組織(異相界面、転位、粒界、合金元素etc.)を原子・電子まで掘り下げて解明することが必要である。大規模第一原理計算(オーダーN法)を用いて、金属材料中の異相界面や結晶粒界、転位の安定構造やエネルギー、それらへの合金元素の効果を電子・原子挙動から解明する。さらにフェーズフィールド法とも組み合わせることで微細組織の構造や性質を明らかにし、優れた構造材料の設計や開発、希少元素代替の研究に貢献する。

### 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 Fe/TiC界面の整合構造→部分整合構造の遷移の臨界粒子サイズを大規模第一原理計算から初めて解明。析出強化機構の解明と設計に貢献。  
成果② Fe中の転位と各種固溶原子との相互作用エネルギーを大規模第一原理計算から定量的に解明。固溶強化機構の解明と設計に貢献。

①の成果により、鉄鋼材料では、TiC等遷移金属炭化物・窒化物の粒子を析出させ、転位移動の障害にして強化する(析出強化)。析出初期には、Fe/TiC界面は整合界面だが、析出粒子が成長するとmisfit歪のため界面周囲の歪エネルギーが増加し、部分整合界面に遷移する。遷移の臨界サイズが強度設計上重要。部分整合界面の大規模構造(4319原子/セル)の第一原理計算をOpenMXで実現し、界面エネルギーと歪エネルギーの和を整合界面、部分整合界面で比較することで、遷移する析出粒子の臨界サイズの高精度計算に成功した。

Fe/析出物界面は微細組織の主要構成要素で、格子misfitから大規模構造を扱わねばならない。OpenMXは、金属的な系のオーダーN計算を実現させる唯一のコードで、「京」で高度の並列計算を実現することで、金属系の大規模構造の第一原理計算が可能となった。金属系構造材料の微細組織の大規模構造を高精度に解明する道が開けた。フェーズフィールド法等に繋げることでマルチスケール設計技術を確立することが期待できる。

②の成果により、鉄鋼材料では、異種原子を固溶させ、転位移動の障害にして強化する(固溶強化)。Feの転位(らせん転位)と一連の遷移金属や典型元素などの添加原子との相互作用エネルギーをOpenMXによる大規模第一原理計算で定量的に求めた。引力の働く元素についてFeの固溶強化能の実験と合致する。また、元素によっては、低温で変形しやすくする効果(キンク形成を促進)も持つことが分かった。

Feの転位の動き易さへの添加原子の効果を電子構造から解明した価値は極めて大きい。相互作用が添加元素の周期表の位置に依存する傾向も見いだされ、相互作用を電子挙動から統一的に理解できる可能性を示唆する。材料科学を新たなステージに引き上げる成果である。合金設計や希少元素代替の有効な添加元素を見つけることへの貢献も期待できる。

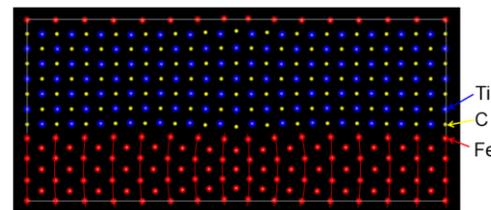


図1 Fe/TiC部分整合界面の安定原子配列

整合界面(赤)と部分整合界面(青)の比較による臨界サイズの決定。横軸:粒子サイズ、縦軸:界面エネルギー+歪エネルギー

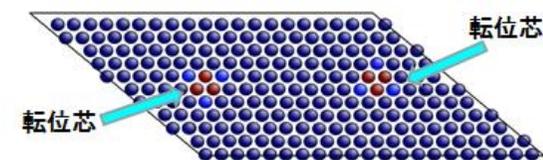
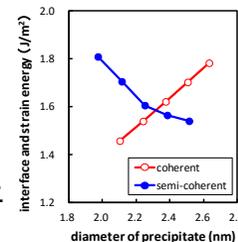
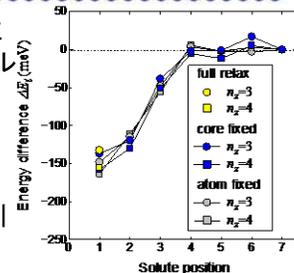


図2 Fe中らせん転位芯計算用スーパーセル

Si原子と転位芯の相互作用を転位芯からの距離の関数で示す。Siの場合、強い引力が働くことがわかる。



[1] H. Sawada, S. Taniguchi, K. Kawakami and T. Ozaki, Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering, 21, 045012 (2013)

# 分野3 研究開発課題1:

## 地球規模の気候・環境変動予測に関する研究(課題代表者:東京大学大気海洋研究所・木本昌秀)

### 達成目標

全球雲解像モデルを用いたシミュレーションの高度化により、地球温暖化による台風への影響に関する知見を得る。また、同じモデルにより、2週間以上の延長予測可能性について検討する。少数例について地球シミュレータで得られた萌芽的結果を、例数を増やし、科学的知見へと引き上げることを目標とする。

### 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 全球雲解像モデル(NICAM)の長期積分により、温暖化時には、強い台風で強風域が拡大することを示した。

成果② 熱帯季節内変動の1ヵ月先、台風発生時の2週間先までの延長予測可能性を示した。

① 地球温暖化による台風の変化について、発生数の減少、強い台風の発生数の増加、台風強度の増加、台風に伴う降水の増加という既存の知見を高解像度モデルで再確認するとともに、台風内部の構造変化について、強い台風(中心気圧が980 hPa以下)で強風域が拡大することを見出した。

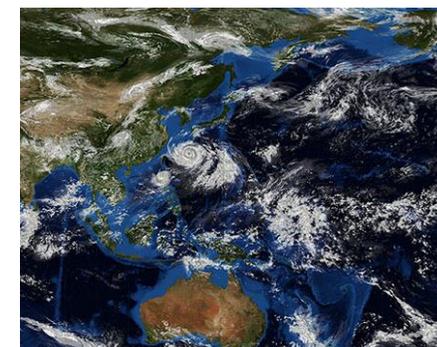
台風の重要な構成要素である積乱雲を直接計算できる高解像度モデルの長期積分により、温暖化時の変化について、台風の強度別に統計的に有意な結論を得た。積乱雲を直接計算する今回の計算で、従来型の気候モデルの結果と同様の傾向が予測されたことは科学的に大きな進歩である。また、台風の構造変化については、今回の計算で初めて見出された。強風域の拡大をもたらすメカニズムについても提案した。また、同モデルを用いて、短期間ながら世界初となる1 km以下の格子の超高解像度の全球大気シミュレーションを行い、個々の雲の表現に必要な解像度や、気象擾乱ごとの雲の形態の違いを明らかにし、世界の気象学界に大きなインパクトを与えた。

本成果は、社会・経済に重大な影響を持つ台風の今後の地球温暖化適応策への貢献が見込まれる。

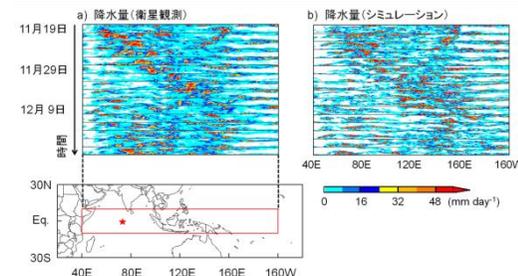
② 2週間以上の延長天気予測について、全球雲解像モデルを用いた多数事例の実験により、熱帯季節内振動またはマッデン・ジュリアン振動(MJO)と呼ばれる熱帯域の巨大雲塊の変動については1ヵ月先まで、西太平洋での台風発生については2週間先まで予測が可能であることが明らかになった。

主に14 km格子の全球雲解像モデルを用いて、2003年以降の約20のMJO事例と、2004年と2007-2012年の約20の台風発生事例について、様々な初期時刻から多数の計算を行った。その結果、MJOについては約1ヵ月先、台風発生については約2週間先まで予測可能であることを実証した。これらの予測スキルは世界最高レベルである。「京」により、多数例の実験が可能になったことで、科学的に有意な結論を得ることができた。

本成果は、熱帯とその影響を受ける中緯度地域での延長予測の可能性を示すものであり、今後、気象庁の予報改善への貢献が見込まれる。



全球雲解像モデルで計算された雲と台風



MJO予測の検証例  
赤道上の降水量  
経度(横軸)ー時間(縦軸)断面図  
(左)観測 (右)シミュレーション

### 達成目標

- ① 4次元同化技術を雲解像モデルに適用し、雲スケールの詳細な観測データを同化して顕著気象現象の力学的な直前予測の可能性を実証する。
- ② データ同化技術とアンサンブル予測手法を適用した雲解像解析予報システムを開発し、顕著気象現象の定量的な確率予測の可能性を実証する。
- ③ 雲解像モデルに用いられている各種物理過程のパラメタ化に伴う誤差を評価するとともに、顕著気象現象の構造・発達過程を詳しく調べる。

### 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 雲スケールの詳細な観測データを同化し2012年のつくば竜巻を伴ったメソ対流系の力学的短時間予測に成功した。

成果② アンサンブル解析予測システムにより2012年の九州北部豪雨の定量的確率予測が可能であることを実証した。

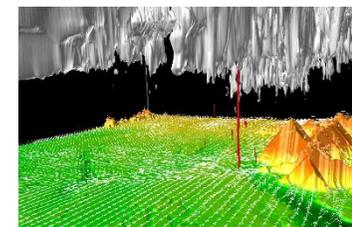
成果③ 世界に類を見ない超高解像度での数値実験を行い、台風境界層内のロール構造や竜巻の詳細構造を解析した。

台風・集中豪雨・竜巻などの顕著気象現象の予測は、防災・減災上きわめて重要であるが、現在の数値予報の予測精度は十分ではない。これらの問題を克服するには、高精度の雲解像モデルの開発と、データ同化を用いた初期値の高精度化が非常に重要である。また十分なリードタイムを確保した予測には、初期値や数値モデルの誤差を考慮したアンサンブル予報が欠かせない。

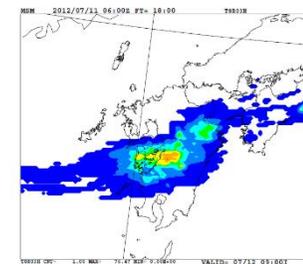
① 通常の観測データに加え、二重偏波ドップラーレーダのデータと稠密な地上観測データを、水平格子間隔350 mで、雲解像アンサンブルカルマンフィルタを用いて高頻度で同化し、2012年5月のつくば竜巻をもたらしたメソスケール対流系の再現に成功した。これらのデータを用いることにより、竜巻に対応するメソサイクロンの位置が改善することを示した。水平格子間隔50 mのダウンスケール実験では竜巻と言ってよい強い渦も表現された。このレベルで観測データを同化して、実際に被害を出した竜巻を再現したのはおそらく世界初であり、将来の、局地豪雨に関する現業的な力学的短時間予測に向けた画期的な成果である。この目標では、将来の実用化も見据えた先端的なデータ同化技術についての開発も大きく進展した。

② 非静力学モデルと局所アンサンブル変換カルマンフィルタに基づく領域解析予測システムを開発し、豪雨事例に適用した。平成24年7月九州北部豪雨の例を対象に、アンサンブル予報に基づいて3時間降水量が50 mmを超える確率分布を求めた。24時間予報で50%程度の確率で豪雨が捕捉され、リードタイムを持った顕著気象現象の確率予測の可能性を実証した。顕著気象現象の確率予測は遠くない将来、気象庁の現業予報に必要となることが確実な技術であり、実用上も大きな成果である。この目標では、台風強度予報の改善のための技術開発と数値モデルによる検証、2013年の伊豆大島や2014年の広島での豪雨事例を対象とする超高解像度の数値予報も行い成果を挙げている。洪水や土石流についての水文モデルの開発なども大きく進展した。

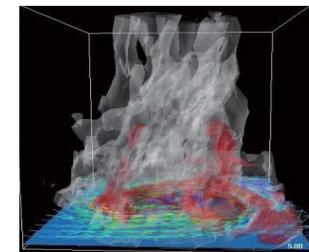
③ 2012年5月6日に発生したつくば竜巻の事例について、水平格子間隔10 mでの再現実験を行った。現実の竜巻事例に関する世界最高解像度の実験であり、竜巻渦の多重渦への変化や詳細構造について多くの知見を得た。この目標では、台風全域を対象とするLES実験も行い、境界層内のロール構造などについての知見を得た。ビン法雲物理過程モデルの開発なども大きく進展した。



雲解像データ同化によるメソ対流系の直前予測



九州北部豪雨についての大雨確率予測分布図



格子間隔10 mの超高解像度実験による竜巻の詳細構造

## 分野3 研究開発課題3:

# 地震の予測精度の高度化に関する研究(課題代表者:東京大学地震研究所・古村孝志)

### 達成目標

地震・地殻変動観測データと、「京」を最大限に活用して、日本周辺で起こる大地震の緊迫度・発生確率と、地震の多様な発生・連動パターンを詳しく評価するとともに、大地震発生直後に、次の地震の連動・誘発が起こる過程を、観測データのモニタリングに基づき予測する防災シミュレーション技術を開発する。海溝型巨大地震に伴う、短周期から長周期までの強震動と地殻変動、津波の発生を時間を追って予測し、多様な構造物を有する現代社会の複合災害を的確に評価して、現実的で費用対効果の高い防災対策に役立つシミュレーション技術を確立する。

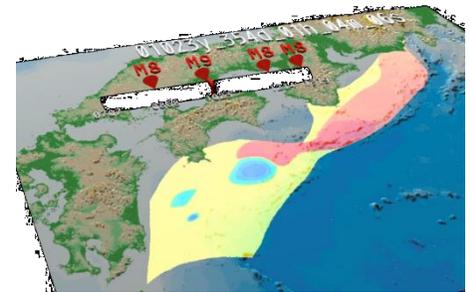
### 成果内容と科学的・社会的意義

緑:科学的成果 青:実用的成果

**成果①** 南海トラフで起こりうる地震シナリオの詳細評価と、海・陸地殻変動観測に基づく地震緊迫度、次の地震の誘発・推移の予測可能性を提示した。  
**成果②** 有効かつ費用対効果の高い防災施策に貢献できる、巨大地震発生に伴う広帯域強震動・地殻変動・津波の同時予測手法を確立した。

①の成果により、30年以内の発生確率が70%と緊迫度が高く、かつ人的・経済的影響がきわめて大きい南海トラフ巨大地震について、その多様な連動発生パターンの可能性を、高度な地震・測地学に基づくシミュレーションから推測することに成功した。日本が世界に誇る海・陸の地震・地殻変動観測網のリアルタイムデータを用いてプレート境界の状態をモニタリングすることで、巨大地震の緊迫度の予測と、地震後の地殻変動(余効変動)データを同化して推移予測を行うシミュレーション技法を開発し、誘発地震・連動地震への推移予測の可能性を提示した。本成果により、これまでの、史料や地質データなどの限られた経験に基づく地震発生予測に代わる、シミュレーションに基づく大地震発生予測の方法を提示した。さらに、地震発生の多様性の知見が格段に高まったことや、多数の地震シミュレーションに基づいて、地震発生とその連動条件を、確率という指標を導入して適切に評価できるようになるなど、日本の高精度地震観測と大規模シミュレーションに基づく独自の地震発生予測の方向性を導いた。

②の成果により、海溝型巨大地震に伴って発生する、短周期から長周期までの強震動と地殻変動、津波を一つのシミュレーションで同時に評価する手法を世界に先駆けて開発したことで、巨大地震に伴う諸現象が複雑に相互関連した、現実的な複合災害の予測を可能にした。本成果は、南海トラフと日本海溝沿いに現在敷設中の海底ケーブル地震・津波計で捉えられるリアルタイム観測データを活用した防災システムの事前検証に役立てられた。さらに東北地方太平洋沖地震の再現シミュレーションを通じて、海溝付近の浅部断層運動による巨大津波の発生原因の解明に大きく貢献した。同時に実施した地下構造モデル推定シミュレーションの結果と、上記①の成果を合わせることで、南海トラフ地震の多様な地震発生シナリオに対する地震・津波被害の可能性について、地震の不確実性に伴うバラツキを含めた評価が可能になった。本成果は、地震防災に向けた建物の耐震化や避難計画において、不確実性が大きいことによる過度な想定を回避し、費用対効果が高く確実な防災対応につながる適切な想定の設定に貢献するものと期待される。



「京」で予測された、南海トラフ巨大地震の発生シナリオ



予測地震シナリオに基づく、強震動・地殻変動・津波の同時シミュレーション

### 達成目標

津波の波力を考慮した津波ハザード予測法を開発するとともに、漂流物・土砂移動・海面変動など複合的な津波被害の予測手法を開発し、複合的な影響を考慮した津波被害予測を可能とする。さらに、津波被害の軽減対策のための基礎データを作成し、津波予・警報システムの改善および津波災害の軽減戦略の策定に資する。

### 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

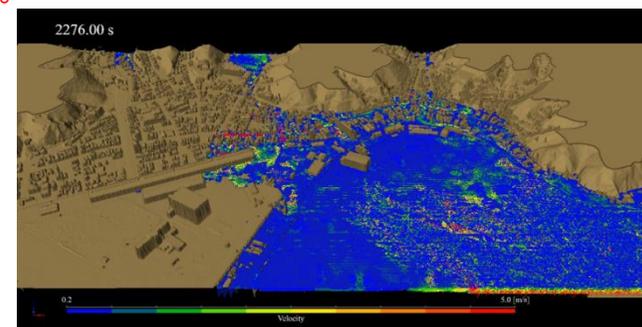
- 成果① 詳細な陸上地形を用いた遡上および波力などの評価を含む津波ハザードの高精度モデルを提案した。
- 成果② 津波氾濫・漂流物移動・土砂移動を複合的に予測・評価する津波統合モデルを開発した。

① 従来の津波氾濫計算モデルであるTUNAMI-N2の「京」への移植・最適化により、27.3%の実行効率を達成した。適用事例として、仙台平野を5 m格子でモデル化した2時間分の津波浸水解析が2分以内で計算できることを示した。また、階層型津波シミュレータ(STOC-CADMAS)およびSPH法による3次元流体計算の大規模並列の効率化(動的負荷分散)に成功するとともに、構造・流体連成解析プログラムと避難シミュレーションの連成解析手法を開発した。

以上の成果により、津波の遡上や建物毎に作用する津波波力を従来よりも格段に高精度に評価することが可能となった。これによって、様々な状況における被害の最適な予防・低減、避難計画を検討できるシステムが構築され、人的・物的被害を最小限に食い止めるための具体的で詳細な対策を支援できると期待される。

② 津波による複合的な被害への対応としては、津波による漂流物の移動や衝突、土砂移動による浸食・堆積に伴う地形変動などを高精度に予測する手法(統合モデル)を世界で初めて開発した。さらに、現地被害(気仙沼)の再現計算に成功したことにより、複合的な影響を考慮した津波被害予測の可能性が大いに高まった。

これにより、瓦礫などの漂着物の分布、津波堆積物の発生量の推定が可能となり、複合被害の予防措置や事後の対応計画の策定に貢献するデータを提供できる。さらに、津波複合被害に対するハザード・防災マップの作成を支援するとともに、リスクコミュニケーション・防災啓発・教育へも活用できる。現在、被災地である気仙沼市において、一般参加型のワークショップを企画中であり、その中で、リスクコミュニケーション・防災啓発を図るために、統合モデルのコンピュータグラフィックス(右図)を活用する予定である。



2011年東北地方太平洋沖地震による津波の釜石市の再現計算(高解像度3D計算により津波波力を高精度に評価する)



2011年東北地方太平洋沖地震による津波の気仙沼市の再現計算(複合的な被害である津波土砂移動と船舶漂流の連成解析)

## 分野3 研究開発課題5:

# 都市全域の地震等自然災害シミュレーションに関する研究 (課題代表者: 東京大学地震研究所・堀宗朗)

### 達成目標

地震による都市災害シミュレーション、都市内全建造物の応答に基づく被害シミュレーション、そしてその結果を受ける避難シミュレーションのプログラムをそれぞれ「京」用に開発する。さらに、開発したソフトを結合し、実際の都市を対象としたシミュレーションを実施し、これまで不可能であった、シミュレーションに基づく地震ハザードマップの構築に必要な基盤技術を開発する。

### 成果内容と科学的・社会的意義

- 成果① 超大規模解析モデルと「京」を使うことで、E-ディフェンスでの耐震実験の再現に成功した。
- 成果② 「京」の全系までスケーリングする、都市全域の地震動を計算する数値解析手法を開発した。

①の成果により、1,000万超のソリッド要素を使う解析モデルの非線形地震応答解析が実行可能であること、実験との比較により解析が有効であることを示した。「京」で初めて可能となった、詳細な解析モデルを使う大規模数値計算によって、建造物の耐震性を高い時・空間分解能で評価できることは、地震工学にとって大きな意義を持つ。

科学技術上の革新性: 材料・幾何非線形に対応する動的有限要素法を開発した。E-ディフェンス (大型震動台) を使った実験との比較などから、開発した有限要素法の有用性を示した。

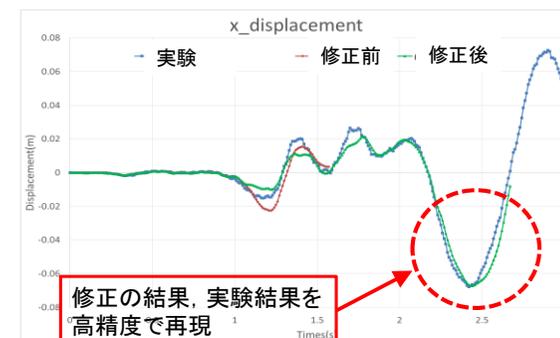
社会的インパクト: 原子力発電所建屋のような重要建造物の耐震性の評価に関して、「高性能計算による地震応答解析」を適用していくという、実用に向けた取組みに繋がっている。

②の成果により、物理過程などのシミュレーションに基づく地震ハザードマップの構築に必要な基盤技術を開発した。従来の経験式に代わる、科学的合理性の高いシミュレーションに基づく手法は、都市全域の地震動・被害推定を一新することが期待される。

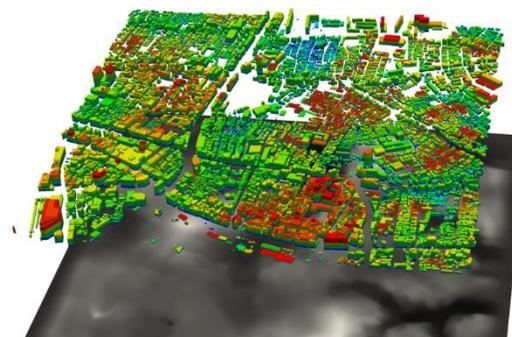
科学技術上の革新性: 東京23区内の10 km四方の領域を対象とした計算に成功し、10 Hzと1 mという高い時・空間分解能の地震災害・被害の評価を例示した。大規模数値計算による物理過程などのシミュレーションに基づく災害・被害評価手法の潜在的有効性を示した。「京」の全系を使う優れた計算性能は計算科学の分野でも高く評価された (SC14とSC15で、2年連続してゴードン・ベル賞の最終候補となった)。このため、ポスト「京」に向けた実用化を目指す研究が開始された。

社会的インパクト: 実際の都市に対し、物理過程などのシミュレーションに基づく地震ハザードマップは、首都直下地震や南海トラフ地震への備えが必要な日本にとって、より合理的な地震防災・減災に繋がることが期待される。また、群集避難が象徴する地震被害への対応に関する社会科学のシミュレーションの有用性が示されたことも重要である。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果



E-ディフェンス実験で計測された建造物の地震応答の再現



0 0.7 100 300  
建造物変位 (m) 地震動 (SI値) (cm/s)

東京を対象とした地震動と建物地震応答の連成シミュレーション

# 分野4 研究開発課題1:

輸送機器・流体機器の流体制御による革新的高効率・低騒音化に関する研究開発(課題代表者:東京理科大学・藤井孝蔵)

## 達成目標

マイクロデバイスによる流体制御を「新たな流体機器設計の概念」として提案, 数値シミュレーションによって高い有効性を実証することで, 流体制御技術を確立し, 将来の機器設計の指針を示すとともに実用化に向けた道を示す。

## 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概念・初期設計段階におけるHPC利用による高度な数値シミュレーションの必要性を実証した。
- 成果②流れ制御の鍵となるメカニズムを世界で初めて明らかに、条件に応じたデバイス実利用の指針を提供した。
- 成果③ 産業界と連携した実利用展開を通じて、本技術が流体機器設計変革のポテンシャルを有することを示した。

### ①の成果

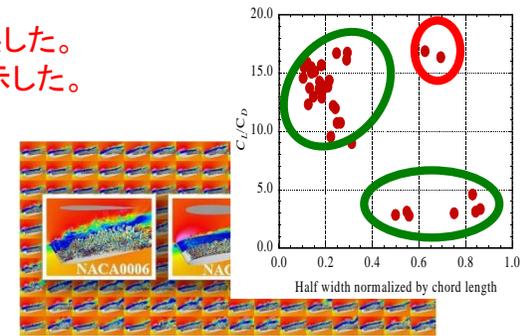
京を利用したシミュレーションにより、既存の手法では正しく評価できなかった流れメカニズムを明らかにした。本研究課題の対象であるマイクロデバイスが高い流れ制御性能を発揮するのは、流体の持つ非線形性を上手に利用していることに起因している。企業等に広く普及している乱流モデルを利用した解析ではその効果を正しく評価できない。一連のシミュレーションを通じて、このような将来型デバイスに関しては、**概念・初期設計段階においても、簡易モデルではなく「HPC等を利用する高度な数値シミュレーション」が必要であることを示した。**(Philosophical Transaction A(2014) など)

### ②の成果

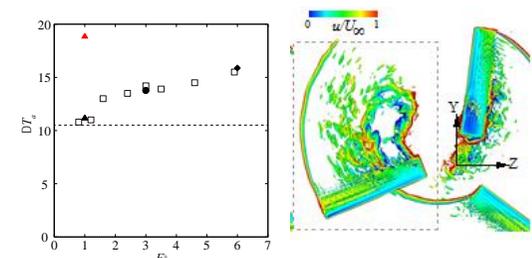
実形状を対象とした圧倒的な空間高解像度手法(世界中で数カ所のみが有する技術)を利用し、京による大規模かつ多数のパラメトリックスタディを行った。これまで見えなかった制御パターンの存在が明らかになることで、**3つの流れメカニズムが存在し、それが本マイクロデバイスが高い制御能力を発揮する背景にあることをはじめて明らかにした。**さらに、その知見を元にして、**世界ではじめて流れと形状に応じた制御デバイス設定指針を明示、産業界における本デバイスの利用ガイダンスとした。**(5件の国際会議基調講演、海外先端研究者3名による国際レビュー、Fluid Science Award、APACOM Senior Scientist Awardなど)

### ③の成果

企業と連携して、当該デバイスを利用した各種流体機器の実利用シミュレーションを実施した。**航空機の翼型の失速時性能向上(小型においてデバイス不利用時の5倍以上, 大型において2倍程度) 風力発電機器の性能向上(小型実験機器で20%程度)、小型ファンの性能向上などの効果があることを示した。**流路損失の低下, 自動車への適用なども示しつつある。上記の知見が活かして、応用先となる各企業との共同研究(別途実施)の元で、現在試験や実験が進行中である。(TBS番組「夢の扉」など)



実験による予測の実証(緑枠内)に加え、別の現象(赤枠内)が当該デバイスの制御効果を高めていたことが多数大規模シミュレーションによってはじめて明らかになった。



小型回転機器への適用: 実験データを再現するとともに成果②を活用した特定パラメータを利用することで大幅な性能改善が見られた。

達成目標

非シリコン系新規材料の次世代ナノデバイス応用への計算科学的評価とナノ界面構造・形成プロセスの最適化指針を構築することを目指す。また新規ナノ材料探索に関する解析手法、方法論等の知識基盤を構築し産業界が使える形で提供することを図る。

成果内容と科学的・社会的意義

- 成果① 次世代ナノデバイス材料のプロセス最適化における実温度ダイナミクス解析の重要性を実証した。
- 成果② SiC酸化膜界面構造を初めて明らかにし、SiCパワーデバイス界面構造の最適化指針を提供した。

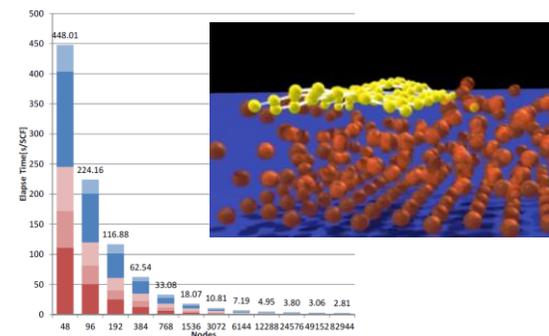
①の成果

第一原理分子動力学プログラムを「京」計算機に対して最適化して、全82,944ノード利用で2.25 PFLOPS (効率21.6%)の高い実行性能と全ノードまでの強スケーリング性を実現し、高効率な大規模ダイナミクス解析を可能とした。最適化したプログラムを用いて、グラフェンの成膜プロセス(金属表面でのCVD成長法、SiC基板の熱分解法など)の実成長温度でのダイナミクス解析を実施し、従来型の絶対零度での静的な解析とは大きく異なるプロセス特性を明らかにした。この成果は、グラフェンをはじめ、次世代ナノデバイス材料のプロセス最適化のためには実温度でのダイナミクス解析が重要であること、また解析ソフトウェアが有効であることを示したものである。解析ソフトウェアPHASE/0は、プログラム公開、利用講習会開催、などの普及活動を通して、「京」産業利用枠での利用をはじめ、産業界、大学、研究機関などでの利用が進んでおり、デバイス開発現場でのシミュレーション活用を促進するものと期待される。(Japanese Journal of Applied Physics (2014) など)

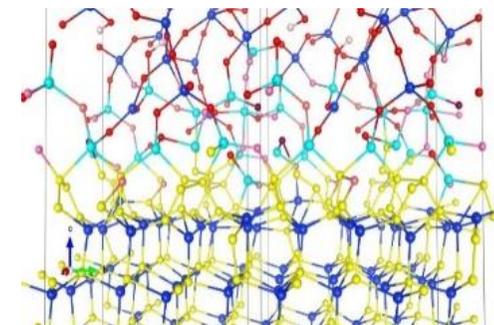
②の成果

東芝研究開発センターとの共同研究のもとで、SiCパワーデバイスにおけるSiC酸化膜形成プロセスに対する実プロセス温度での大規模・高精度な第一原理ダイナミクス解析を実施した。その結果、SiC酸化膜界面に関して従来想定されていなかった新規な欠陥構造及び酸化プロセスを見出し、SiCのデバイス応用に資する有益な知見を得ることに成功した。SiCパワーデバイスは、電気自動車、太陽電池などあらゆる電力機器の電力変換器に利用し、電力損失を大幅に低減することが期待されている。この成果により、SiCパワーデバイスの開発における重要な技術課題である欠陥の少ない良好なSiC酸化膜界面を作製する指針を提供し、SiC酸化膜に関する特許出願に繋げることができ、SiCパワーデバイス開発の加速に貢献した。(特許出願2015年7月29日、他に特許出願手続き中、日刊工業新聞2015年4月20日号に掲載 など)

緑: 科学的成果 青: 実用的成果



第一原理プログラムPHASE/0は「京」全ノードまでの優れた並列性能を示し、グラフェン成膜プロセスの実温度でのダイナミクス解析により静的計算では獲得できない特性を明確にした。



実温度によるダイナミクス解析により、SiC酸化膜界面における従来想定されていなかった欠陥構造をはじめて明らかにし、層状酸化による欠陥低減の可能性を提示した。

# 分野4 研究開発課題3:

## 乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発 (課題代表者:東京大学生産技術研究所・加藤千幸)

### 達成目標

最大1000億グリッドの計算格子を用いて、複雑な形状を有する機器まわりの乱流の直接計算を実現する。これにより、計測(風洞試験・水槽試験等)と同程度以上の精度で製品の性能や信頼性を予測する。

### 成果内容と科学的・社会的意義

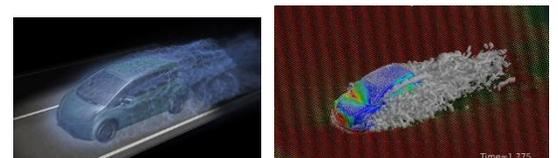
緑: 科学的成果 青: 実用的成果

- 成果① 自動車の空気抵抗を対風洞実験値に対して誤差2%以内で予測する技術、並びに実走行状態を模擬できる車両運動連成解析システムを構築
- 成果② 船体まわりの乱流の直接計算により水槽に匹敵(誤差1%以内)の船体推進抵抗予測技術を確立
- 成果③ 実機燃焼器の出口における温度およびNOx濃度をそれぞれ10%、30%程度以下の精度で予測可能な数値解析技術を確立

#### ①の成果

非構造格子に基づく大規模非定常乱流シミュレーション技術を確立し、自動車運動との連成解析システムを開発した。これにより実車複雑形状に対して数十億セル規模の空力解析を実現し、対風洞実験値に対して誤差2%以内で空気抵抗を予測することに成功。また車両運動と空力解析を連成させるとで、従来の風洞実験では難しかった横風時の安全性や操縦安定性予測を可能とした。(米自動車学会論文集2編(2014年4月))

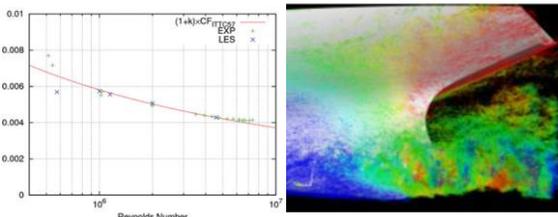
現在、自動車OEM、サプライヤー14社で構成するコンソーシアムで、実用化を目指した検証が進められている。(2014.2.3 産経新聞朝刊 空気の力予測 新車開発、2015.10.4 サイエンスZERO(NHK Eテレ)など)



高精度空力解析 提供: 理研、ホンダ、神戸大、北大  
横風運動挙動解析 提供: 日産、神戸大、北大

#### ②の成果

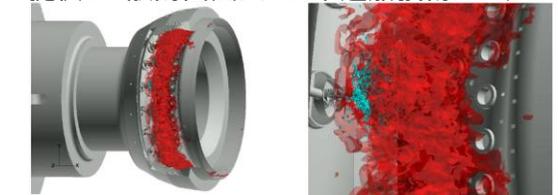
従来の船体の推進抵抗の予測では船体タイプ毎に乱流モデルのチューニングが必要であったが、本研究では船体まわりの渦を直接計算することによりモデルチューニングの必要のない抵抗予測技術を開発した。300億グリッド(世界最大規模)の計算により船体抵抗を予測し水槽試験に匹敵(予測誤差1%以内)する精度を実証。(Comptit Award 2015の受賞) 一般財団法人日本造船技術センターを中心に水槽の一部代替を目指した実用化のための検証も同時に進められている。(2015.2.2日刊工業5面もの乱流「京」で計算)



推進抵抗の比較 提供: 一般財団法人  
船体まわりの渦構造 提供: 日本造船技術センター

#### ③の成果

実機、実圧のガス燃焼、噴霧燃焼、および石炭燃焼の燃焼器を対象に、温度、NOx濃度、およびすす濃度を高精度で予測可能な数値解析技術を開発した。燃焼器の出口における温度およびNOx濃度をそれぞれ10%、30%程度以下の精度で予測可能であることを実証。(日本燃焼学会論文賞やコージェネレーション・エネルギー高度利用センター コーエネ大賞 特別賞(技術開発部門)の受賞) 日本燃焼学会において、産学連携研究事業の燃焼解析プラットフォームとしての検討が進められている。(ASME Turbo Expo 2015など)



JAXA航空エンジン用アニュラ燃焼器(噴霧燃焼) 提供: 京大, JAXA

## 分野4 研究開発課題4:

# 多目的設計探査による設計手法の革新に関する研究開発(課題代表者:宇宙航空研究開発機構・大山聖)

### 達成目標

大規模多目的設計最適化問題のための多目的設計探査手法を開発するとともに、京を用いた大規模多目的設計探査が実問題において設計開発を革新できることを実証する

### 成果内容と科学的・社会的意義

成果①……大規模多目的設計最適化問題のための多目的設計探査手法を開発

成果②……開発した多目的設計探査手法を用いて、実問題において京を用いた多目的設計探査の有効性を実証

① 大規模並列計算可能な世界初の多目的設計最適化アルゴリズムCheetahなどを開発。現在世界で最も性能が良いと言われている手法の1つであるMOEA/Dよりも性能がよいことを実証。(進化計算学会誌2015、国際会議ALALCI2016で基調講演)HPC/PFとして一般にも公開。新しい概念を用いて大規模データを効率的に分析するアプリSPMを開発。現在18社9大学で利用されている。また多数目的設計最適化問題を応答曲面法を用いて効率的に解くための新しい探査指標を開発。(Mathematical Problems in Engineering 2015)

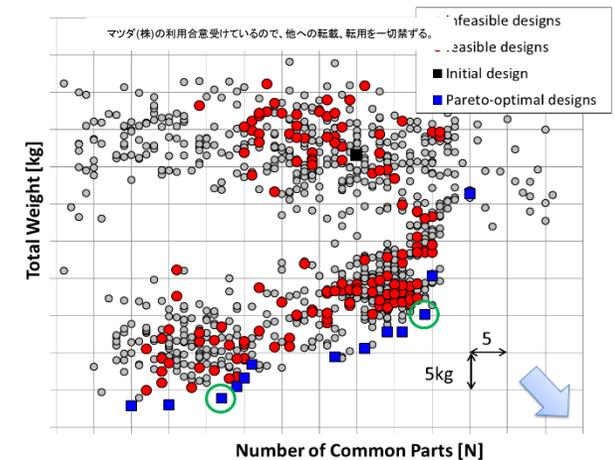
②においては、宇宙航空研究開発機構が抱える実設計問題(ロケット射点形状空力音響設計および深宇宙探査機DESTINYの軌道設計)、マイクロデバイスの代表であるプラズマアクチュエータ設計、産業界における実設計問題において京を用いた多目的設計探査が設計開発を革新できることを実証した。産業界における実設計問題での成果を下記に示す。

(1)マツダとの共同研究として、車両構造の多目的設計探査を実施。従来よりも短期間で優れた設計が多数発見され、車両構造重量最小化と共通部品点数最大化の間のトレードオフ関係が初めて明らかにされた。また、得られた知見により、大幅な開発・製造コストの削減と、重量を削減したことによる燃費の向上及びCO2排出量の削減が見込まれている。(2015.2.16 日刊工業新聞5面最適解を「京」で分析)

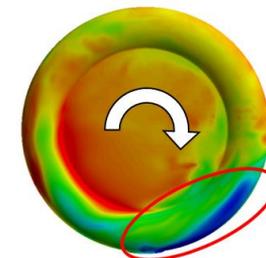
(2)東海旅客鉄道との共同研究として、現在開発中の超電導リニアの空力音響多目的設計探査を実施。得られた知見により、車内騒音を低減しつつ、0.1%程度の空気抵抗を削減できることが期待され、これにより超電導リニアの運航経費の削減が見込まれる。(神戸産業メッセ2015で発表)

(3)横浜ゴムとの共同研究として、自動車用タイヤ空力形状の多目的設計探査を実施。その結果、抵抗と同時に揚力も低減できる形状に関する革新的な知見を得ることに成功。これにより自動車の燃費の向上及びCO2排出量の削減が見込まれている。(横浜ゴムからニュースリリース(2015.10.15)とともに試作品が2015年の東京モーターショーで公開)

緑:科学的成果 青:実用的成果



自動車車両構造設計:従来設計よりも優れた設計を多数発見するとともに、共通部品点数最大化と重量最小化の間のトレードオフを示すことにはじめて成功



自動車用タイヤ空力形状設計:空気抵抗と揚力を同時に低減できる画期的な形状を発見。右図は東京モーターショー2015で展示された試作品

# 分野4 研究開発課題5: 原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発(課題代表者:日本原子力研究開発機構・中島憲宏)

## 達成目標

強固な産学官連携体制の下、大型プラントのものづくりで必要とされる、実験では不可能な詳細かつ一体的な耐震シミュレーション技術(丸ごとシミュレーション技術)を研究開発し、開発した技術の機能確認と動作検証及び具体事例での適用実証を行う。

## 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 詳細かつ一体的な耐震シミュレーション技術(丸ごとシミュレーション技術)を組立構造解析技術により実現
- 成果② プラント全体での俯瞰的な耐震裕度評価、各部ごとの詳細な評価技術を実現し、観測値と計算解を具体的に照合

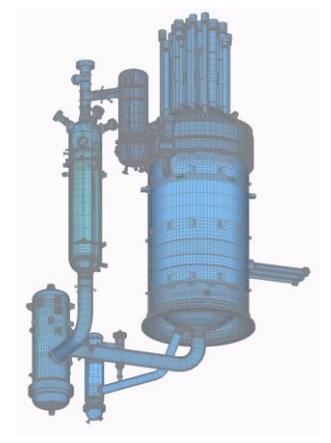
①の成果により、従来ボトルネックとされた大規模構造物の入力データ準備過程を、部品ごとに集積し解析する技術[1]により簡略化するとともに、従来はプラント規模を扱う場合、周波数領域で計算した結果を時刻歴に変換して観測値と比較する術しかなかった方法論を、京を用いることにより時刻歴における観測記録との照合を直接的にできるように、初めて可能とした[2]。  
②の成果により、従来の保守的な解析結果に加えて、安全性や健全性を具体的かつ合理的に説明可能になった[3]。

本成果の意義は、従来の保守的な解析に加えて、一層合理的な俯瞰的かつ詳細な解析が有効であることを示せたことにあり、本成果によって従来の計算結果の信憑性を高めるための有効な手段となったことにもある。当該成果である①と②から、詳細な計算結果は、高温工学試験研究炉の安全審査申請活動等の補助資料として活用されたことから、事業上有意義と認知されたとともに、その技術的意義や安全分析/評価上の技術的意義も示せた。

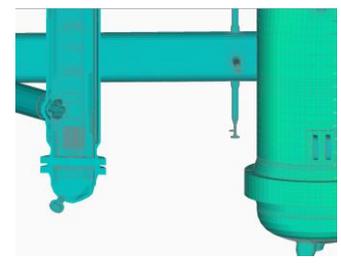
本技術は、原子力分野で実践する前に、一般社会インフラ・プラントの機器や石油化学プラントにおいて技術的実践を行い、その具体的な設計案において検証するとともに、有効性を確認した[3, 4]。今後もこのような産業界との連携を継続し、更なる波及効果として国際競争力強化につなげられるような共同研究等を新たに立ち上げていく。

高温工学試験研究炉が今後、再稼動していくことになれば、その過程で補助的に示してきた計算の成果の有効性が一層、認知されることになり、その安全性や健全性分析における社会的インパクトは大きく、原子力施設の抱える社会的課題解決への貢献の一助となっていくと考えられる。

[1] Structural analysis for assembly by integrating parts, ICONE-22, 30251, 2014  
[2] Time domain response analysis for assembly by integrating components, Transactions of SMiRT-23, 377, 2015  
[3] Numerical modeling assistance system in finite element analysis for the structure of an assembly, ICONE-23, 1136, 2015  
[4] 2015年2月10日化学日報(一面)、2015年2月12日日刊工業新聞朝刊13面



高温工学試験研究炉の時刻歴応答解析結果



高温工学試験研究炉の機器内の挙動可視化

# 分野5 研究開発課題1:

## 格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定(課題代表者:理化学研究所・初田哲男)

### 達成目標

平成27年度末には、格子QCDシミュレーションによるハドロン質量の計算精度を1%に引き上げる。  
さらに、バリオン間の中心力やテンソル力の決定、エキゾチックバリオンに対する予言を行う。

### 成果内容と科学的・社会的意義

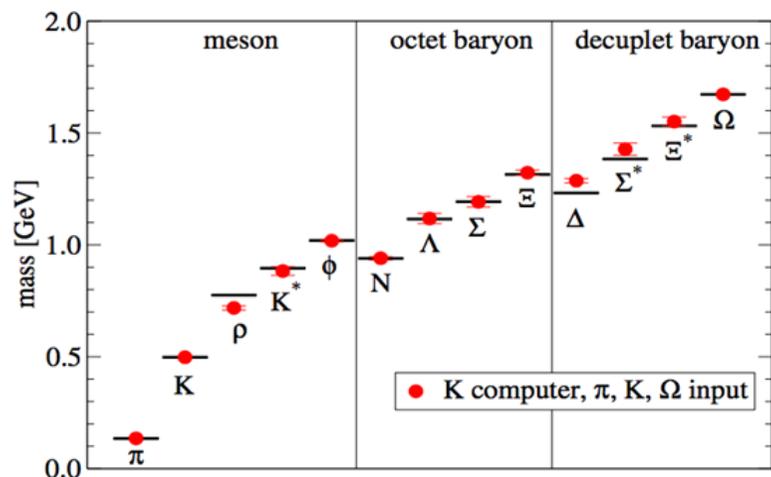
緑:科学的成果 青:実用的成果

成果① 世界最大級の物理体積でゲージ配位を生成し、ハドロン質量の精密決定(計算制度1%)に成功。

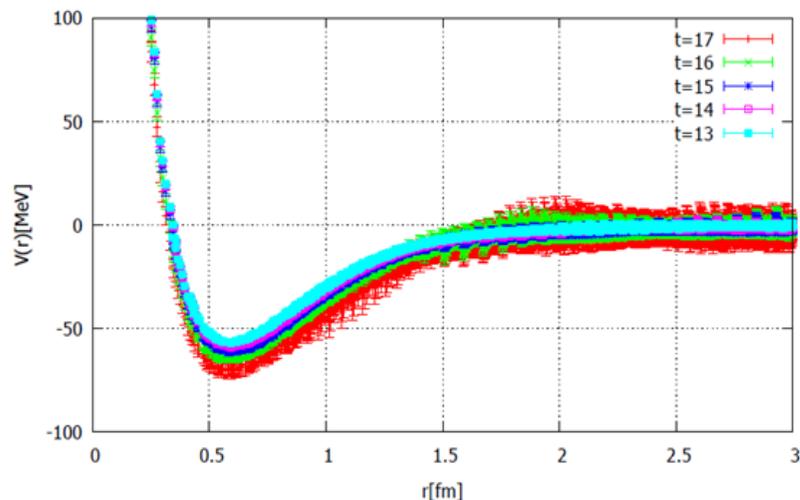
成果② 世界最大級の物理体積でバリオン間の中心力・テンソル力の計算による決定、エキゾチックバリオンの予言にはじめて成功。

①の成果により、世界最大級の物理体積(一辺が8.2fm)かつ物理点近傍(パイ中間子質量146MeV)でのQCDゲージ配位が生成され、ハドロン質量について1%の精度での定量的予言が可能になった。本成果は、京を用いて初めて可能になった大規模計算であり、生成されたゲージ配位は、ハドロン質量だけでなく、ハドロンの電磁的性質やハドロン間相互作用を定量的に計算する上での基礎データとなっている。

②の成果により、世界最大級の物理体積かつ物理点近傍でのバリオン間相互作用が世界で初めて求められた。核力・ハイペロン力については、その中心力とテンソル力成分が統計誤差の範囲で有意に導かれたと同時に、最も多くストレンジネスを含むダイバリオンである $\Omega\Omega$ 系に束縛状態があることが示された。本成果は、京を用いて世界で初めて可能になった計算であり、原子核物理学・ハイパー核物理学の基礎を与えるだけでなく、国内外の加速器実験に対して有用な予言を与えている。



① 京を用いたハドロン質量の計算値(赤)が実験値(黒)を完全に再現



② 京を用いて精密決定された $\Omega\Omega$ 相互作用と $\Omega\Omega$ 束縛状態の予言

# 分野5 研究開発課題2: 大規模量子多体計算による核物性解明とその応用(課題代表者:東京大学理学系研究科・大塚孝治)

## 達成目標

京に向けた大規模量子多体計算コードを開発し、大規模量子多体計算によって、中性子過剰なエキゾチック原子核の量子構造の進化を明らかにする。元素合成過程の解明、長寿命核分裂生成物、二重ベータ崩壊核、という応用につなげる。さらに、いまだ未開拓な3体核力の姿を明らかにする。軽い原子核の第一原理計算においては、20個程度の核種の計算を、より困難なものを加え40個程度へ広げる。

## 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

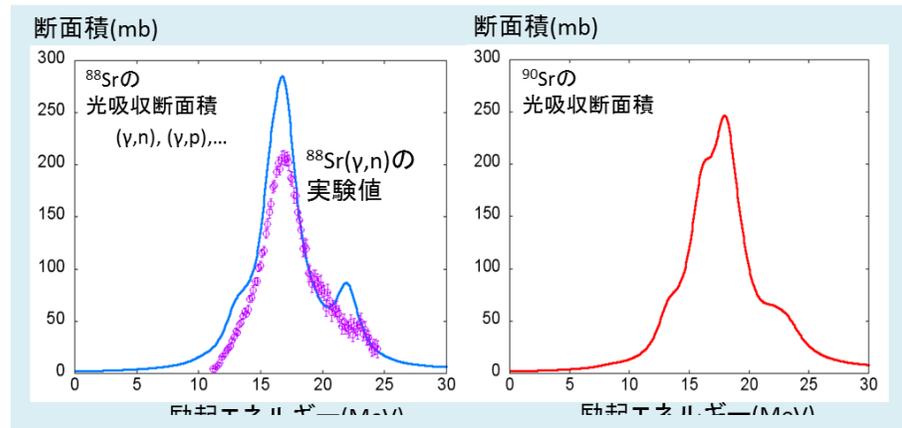
- 成果① 核廃棄物処理に問題となる長寿命核分裂生成物核種の基礎データ計算・原理実証研究に成功。
- 成果② 中性子過剰なエキゾチック原子核の量子構造とその発現メカニズムを解明し、核力中のテンソル力成分や3体力の役割を明らかにした。
- 成果③ 軽い原子核の第一原理的な構造計算の適用領域を拡大、クラスター構造の発現・消滅メカニズムを解明。

成果①においては、長寿命核分裂生成物( $^{79}\text{Se}$ ,  $^{90}\text{Sr}$ ,  $^{93}\text{Zr}$ )の電気的雙極子励起モードによる高い励起エネルギーへの光吸収過程の断面積の計算に成功した。当初計画ではエネルギーの低い状態の計算のみが考えられていたが、全く新しい方法を見出して、高いエネルギーの連続状態に対応する励起スペクトラムの計算ができるようになったのは、当初計画になかった成果である。  
本成果は、将来的には、得られた基礎データの提供により、核変換研究の様々な局面に貢献が期待される。

成果②においては、中性子過剰ニッケル同位体などの構造計算に成功し、三つの原子核の形が同時に低エネルギー領域に現れる「形の共存」現象と、それを引き起こすメカニズムを解明した(Physical Review C 2014)。核力中のテンソル力成分が主要な役割を果たしていることを示し、「第2種殻進化」という概念を提唱した。また、カルシウム48のゼロニュートリノ二重ベータ崩壊の核行列要素を求めた(Physical Review Letters 2016 印刷中)。さらに、新しい多体摂動計算手法により、3体力効果も含めて有効相互作用を第一原理的に計算する新しいアプローチを確立し、中性子数20近傍の中性子過剰核の「反転の島」の記述に成功した。

以上の成果は、中性子過剰核の元素合成「r過程」の解明につながるものである。また、ゼロニュートリノ二重ベータ崩壊の核行列要素を得たことは、ニュートリノの質量決定、マヨラナ粒子性の解明につながる。

成果③においては、現時点でネオン20までの41個の核種についての計算を完了した。当初目標では、6主殻模型空間までの計算だったが、一部7主殻模型空間までの計算に届いた。有限サイズの模型空間から無限に広い空間でのエネルギー期待値の推定を可能とする方法を得た。これらの計算を用いて、ベリリウム同位体のクラスター構造解明をおこなった。



上図は光吸収断面積の計算例(原理実証研究の成果)  
右側にあるストロンチウム-90は長寿命核分裂生成物の一つ

達成目標

- (1) ニュートリノ加熱機構を考慮した空間3次元のニュートリノ輻射流体計算によって、これまで再現されていない重力崩壊型超新星爆発過程を解明する。
- (2) 一般相対論的な磁気流体計算や輻射流体計算により中性子星連星の合体過程を解き明かし、近い将来の観測研究に資する。

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: 世界初の空間3次元のニュートリノ輻射流体計算により、ニュートリノ加熱機構による超新星爆発機構の有効性を示した。
- 成果②: 世界初の一般相対論的なニュートリノ輻射流体計算により、中性子星合体が重元素合成の有力機構であることを示した。

①の成果により、重力崩壊型超新星爆発は、基本的にはニュートリノ加熱機構により駆動されることが示された (Astrophysical Journal 2014)。

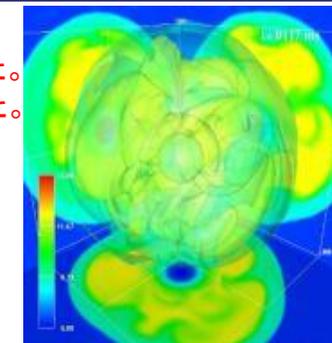
太陽の8倍を超える質量を持つ恒星は進化の最後に重力崩壊型超新星爆発を起こすとされている。しかし、重力崩壊型超新星の爆発機構の解明は長年の課題であった。そこで本研究では、空間的な対称性を仮定しない一般的な問題設定のもとで、ニュートリノ加熱機構に基づく超新星爆発の可能性を、ニュートリノ輻射流体シミュレーションを実行して検証した。これ以前の超新星爆発研究では、計算機資源の不足のため、軸対称性を課す必要があり、現実とは異なった理想化された設定でシミュレーションが限定的に実行されてきた。そのため、得られた結果に疑問があった。しかし、京コンピュータのおかげで、扱える空間次元、空間自由度が飛躍的に増したため、対称性を過程しない高解像度計算が初めて可能になった。そして、この現実的な設定のもとで爆発に至る信頼できるモデルを構築することに成功した。

本成果により、ニュートリノ加熱機構が重力崩壊型超新星爆発の基本的機構であることが理解されることになり、50年来の謎である超新星爆発機構に対する理解が一段階進んだ。

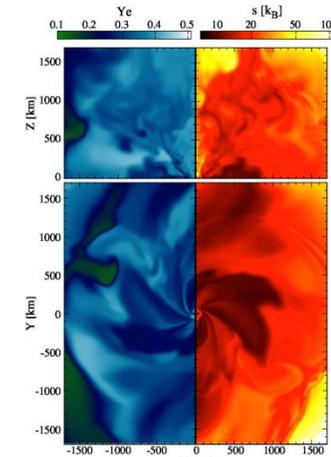
②の成果により、中性子星同士の合体が、速い中性子捕獲を経て生成された元素の起源天体である可能性が示された (Physical Review D 2015)。

中性子星連星の合体は、現在稼働中の重力波望遠鏡の最も有望な重力波源の1つであり、合体現象の予言が喫緊の課題である。そこで世界初の一般相対論的ニュートリノ輻射流体計算を行い、連星中性子星の合体過程やその際に放出・放射される物質、ニュートリノ、重力波の特徴を明らかにした。特に合体時に放出される中性子過剰物質は、放出後に速い中性子捕獲反応による不安定重元素合成を起こすと推測されてきたが、実際にこれが正しいことを示すのに成功した。また生成される不安定重元素は放射性崩壊過程を通じて光度の高い突発的天体現象を引き起こし、重力波の対応光源になることが予想されるが、その仮説を支持する結果を得た。

本成果により、速い中性子捕獲による重元素合成に対する有力仮説を支持する根拠を得た。また中性子星連星の合体とそれに伴って起こる現象に対する標準的なシナリオが構築できた。今後は、重力波望遠鏡や光学望遠鏡により、この現象の観測的検証が進むと予想されるが、それに対する予言を与えることになった。



ニュートリノ加熱機構により超新星爆発が進む様子。エントロピーを表示。



中性子星の合体後に物質が飛び散る様子。左が電子の豊富さを、右がエントロピーをあらわす

## 分野5 研究開発課題4:

# ダークマターの密度ゆらぎから生まれる第一世代天体形成( 課題代表者:理化学研究所・牧野淳一郎)

### 達成目標

宇宙構造形成の骨組を作るダークマターによる構造形成について、現在の世界レベルに比べて2桁大きな粒子数でシミュレーションを行うことで、世界で初めて最小質量から銀河団スケールまで適用可能な理論モデルを構築する。さらに、このモデルをベースにして第一世代天体形成、銀河形成の過程をシミュレーションによって明らかにする。

### 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 ダークマターハローのシミュレーションコード開発は、目標以上の実行効率50%以上を実現した。

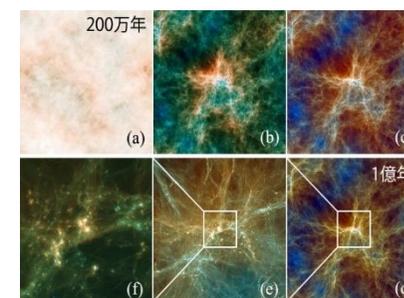
成果② 当初計画になかった太陽対流圏シミュレーションでは世界をリードする極めて大きな成果をあげた。

①の成果により、「京」を用いた宇宙論的多体計算で、米国の「セコイア」システムの3倍相当の速度を実現した(ゴードン・ベル賞 2012)。また、この高い実行効率により、**従来不可能であった 8192<sup>3</sup>の粒子数でのハロー統計を得ることができた**。この結果はデータベース化され、観測計画の作成他様々な研究に利用されている。

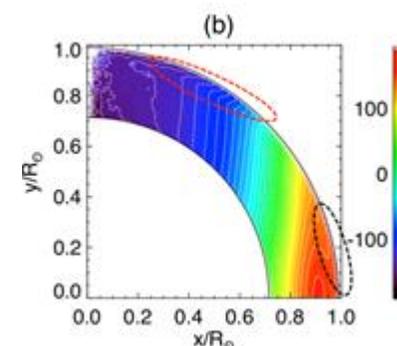
本成果は、科学的に有用であるだけでなく、「京」のような大規模並列計算機で極めて高い計算効率(50%を超える)を実用計算で初めて実現した、という点でも意義深い。本課題で高効率を実現したアプローチは宇宙物理以外の様々な分野に適用可能であり、本課題の成果に基づいてそのような多目的のアプリケーション開発フレームワークを開発した。これは**様々な分野でのシミュレーションの効率化に貢献すると期待できる**。

②の成果により、太陽全体の対流層のシミュレーションを従来の5倍の空間分解能で行うことに世界で初めて成功した(Astrophysical Journal 2014)。これにより、世界で初めて、小スケールでダイナモが卓越する効果を正しく取り入れて大規模計算を行うことが可能になり、**太陽表面付近での回転角速度の急激な変化を初めて再現した**。これにより、(緑 磁場構造、黒点数の変化や、より長周期の太陽活動の変化を理解する糸口がえられた)。

本成果は、従来対流計算で標準的であった陰解法を、新規に開発した音速抑制法による陽解法で置き換えることで可能になったものである。この新しい方法により、「京」で高い実行効率を実現できた。本成果は、科学的に重要というだけでなく、**人類の社会経済活動に対して大きなインパクトをもつ太陽活動の変動を理解するための重要な一歩**である。



最小質量ハローの形成過程



シミュレーションで得られた太陽の回転速度分布。楕円で囲んだ領域で回転速度が急激に変化している。