

# 「京」の成果及び人材育成事例

2020(令和2)年12月8日

国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究センター(R-CCS)  
登録施設利用促進機関 一般財団法人高度情報科学技術研究機構(RIST)

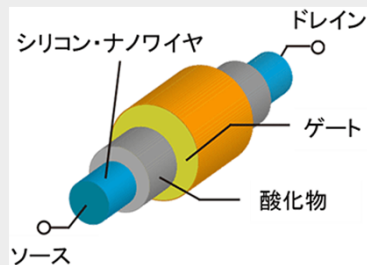


# 「京」の成果事例について

- 理化学研究所は、スーパーコンピュータ「京」において、プロセッサ規模の超並列に耐えられるネットワーク設計を開発・搭載したことにより高性能・高信頼性・高可用性を備えたシステムを実現した。
- 加えてアプリケーション開発においても、高い並列処理を踏まえた設計を行うとともに、運用面での様々な工夫により「京」の性能を最大限発揮することができた。
- 「京」による大規模超並列計算により、次頁以降に示すような学術的意義の大きい研究成果の創出、新たな学術分野の開拓に貢献した。

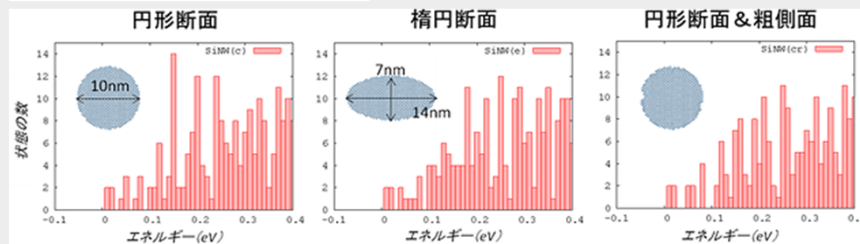
## 100,000原子シリコン・ナノワイヤの 第一原理シミュレーション

- 次世代半導体の基幹材料として注目されているシリコン・ナノワイヤ材料のシミュレーションはこれまで、2,000原子程度までしか計算できなかった。
- 「京」を利用し、**10万原子規模**の電子状態について量子力学的計算を行い、**実効性能3.08ペタフ ロップスを達成**した。
- また、約10,000個から40,000個のシリコン原子からなる、円、楕円、ダンベルなどさまざまな断面形状を持つ長さ**約10ナノメートルのナノワイヤの電子状態を解明し、電子輸送の特性がナノスケールの形状に大きく依存することを初めて明らかにした。**
- 本研究により、次世代デバイスのサイズである**ナノレベルの高精度シミュレーションが可能**となることを示した。



### 2011年 ゴードン・ベル賞受賞

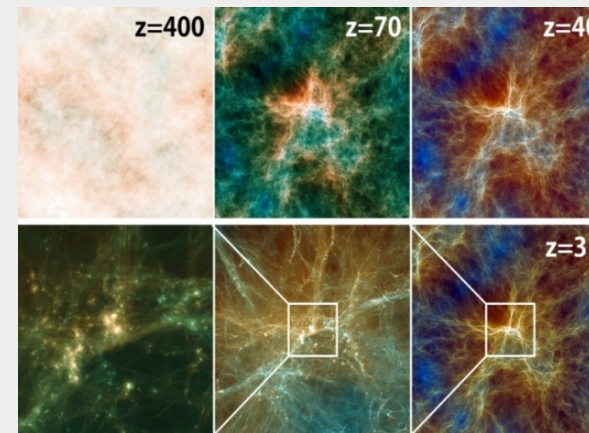
左:シリコン・ナノワイヤ材を用いた電界効果トランジスタのイメージ  
下:シリコン・ナノワイヤの伝導電子の状態数とエネルギーの関係



- HPCI戦略プログラム(分野2)課題
- 東京大学/押山淳教授

## 世界最大規模のダークマターシミュレーション

- 宇宙の構造形成にはダークマターの存在が不可欠であることが理論的には明らかになってきたが、宇宙という広大な空間、137億年という時間スケール、目に見えない粒子の振る舞いを実験で検証することは不可能。
- 数兆個のダークマター粒子による重力進化のシミュレーションを現実的な時間内で終わらせるために、「京」の性能をフルに引き出せるよう、シミュレーションアプリケーションを改良しました。その結果、**2兆粒子のダークマターシミュレーションで、実効性能5.67ペタフ ロップスを達成**した。
- 「京」によるシミュレーションは**宇宙構造形成理論に寄与するだけではなく、実際のダークマター粒子の発見にも貢献**



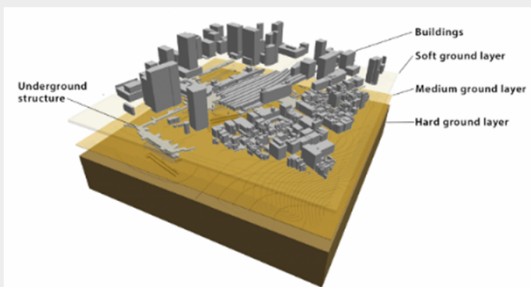
### 2012年 ゴードン・ベル賞 受賞

↑ 宇宙初期のダークマター密度分布

- HPCI戦略プログラム(分野5)課題
- 理化学研究所/牧野淳一郎チームリーダー

## 超高分解能の都市の地震被害予測

- 非線形三次元有限要素法による地震波伝播解析コード「GAMERA」を使用して「京」上で東京地方における13,275の建造物を含む大規模地震応答解析を実施。(2014)
- 非線形三次元有限要素法による地震波伝播解析とエージェントモデルによる避難解析を組み合わせた総合的な地震シミュレーションを「京」上で実施。(2015)
- 「京」の全系を用いて計算した地震動分布データにより学習させた人工知能を使うことで、従来では不可能であった不確実性を考慮した地震動分布を広域において高速に推定することが可能となった。従来よりも高速かつ精緻な地震被害予測が期待される。
- 本研究をさらに発展させ、「Summit」を用いた研究ではあるが、大規模シミュレーションに、人工知能、変動精度演算など最新の計算技術を活用した次世代超高分解能都市地震シミュレータに関する研究を実施。(2018)



東京駅周辺の建築物、地下構造物、二重地盤のモデル化(提供:東京大学)

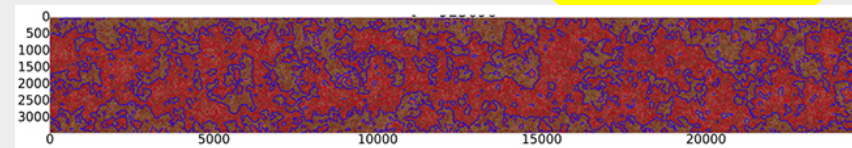
- HPCI戦略プログラム(分野3)課題
- 東京大学/堀宗朗教授

2014年、2015年、  
2018年  
ゴードン・ベル  
ファイナリスト

## 式が書ければ「京」が使える新言語を開発

- プログラミングはシミュレーションとコンピュータ双方に深い知識が必要となる非常に高度な作業であり、多数の計算機を協調して動作させるスーパーコンピュータの性能を引き出す高度なプログラムを、自動かつ汎用的に生成することは不可能だった。
- 新しいプログラミング言語「Formura」を開発し、スパコンの計算に必要な高性能プログラムの自動生成に初めて成功。数式のような簡潔な指示だけで計算が可能となった。
- Formuraをもちいて記述したプログラムで、地下に伸びる菌類の複雑な挙動をシミュレーションすることに成功。
- 気象、地震、宇宙、生態ネットワークの研究など規則格子シミュレーションを用いる分野において、シミュレーション研究の加速が期待できる。

2016年  
ゴードン・ベル  
ファイナリスト

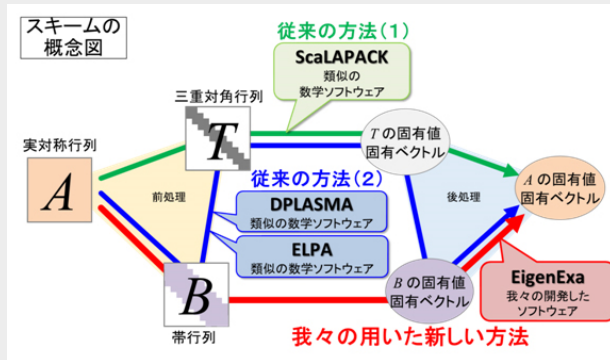


Formuraで地下に伸びる菌類の挙動シミュレーション。  
20行あまり、はがき一枚に収まる程度のプログラムで、3万行以上のプログラムを4万通り以上も自動生成。

- 調整高度化枠
- 理化学研究所/村主崇行特別研究員

## 「京」の計算能力を引き出すソフトウェア 「EigenExa(アイゲンエクサ)」を開発

- 行列の固有値計算は、その計算量が行列の次元の3乗に比例して増加するため、これまでのコンピュータでは能力不足だった。「京」の登場によりコンピュータの能力不足の面は大幅に改善されたが、「京」の能力を生かし切る固有値計算用の数学ソフトウェアは存在せず、大規模な固有値問題は非常に難しい問題のひとつであった。
- 大規模コンピュータシミュレーションや、ビッグデータにおけるデータ相関関係の解析などに必要な行列の固有値を高速で計算できるソフトウェア「EigenExa(アイゲンエクサ)」を開発。
- 「京」で100万×100万の行列での固有値計算を行った結果、これまで1週間程度必要だと考えられていた計算を、わずか1時間で計算することに成功。
- 多くのシミュレーションの規模を大幅に拡大することが可能となり、半導体デバイス設計や新材料開発、新薬設計への貢献が期待される。



↑ 考案した「新しい」段階スキーム

- 調整高度化枠
- 理化学研究所／今村俊幸チームリーダー

## スーパーコンピュータ用並列プログラミング言語 「XcalableMP」を開発

- 数十万ものプロセッサを持つ「京」を使いこなして計算科学の研究を行うには、それぞれのプロセッサを協調させて計算を行うための並列プログラミングが必須。
- プログラミング言語「XcalableMP」を設計し、従来のプログラム(C やFortran)に指示文と呼ばれる並列実行に関する指示文を加えることで、なるべく少ない手間で並列プログラムを作成することに成功。
- SC13において、HPC チャレンジ・クラス2(プログラミング言語の性能および生産性を競う)部門において日本で初めて受賞した。引き続き、SC14においても同賞のパフォーマンス賞を連続して受賞した。
- 日仏のポストペタスケール・コンピューティングのためのプログラミングについてのプロジェクトや演算加速機構を持つクラスタへの言語拡張であるXcalableACC、タスク並列プログラミングなど、次世代のプログラミング・モデルの研究につながっている。

```
double u[XSIZE][YSIZE], uu[XSIZE][YSIZE];
#pragma xmp nodes p(x, y)
#pragma xmp template t(0:YSIZE-1, 0:XSIZE-1)
#pragma xmp distribute t(block, block) onto p
#pragma xmp align [][] with t(i, j) :: u, uu
#pragma xmp shadow uu[1:1][1:1]

#pragma acc data copy(u) copyin(uu)
{
  for(k=0; k<MAX_ITER; k++){
    #pragma xmp loop (y,x) on t(y,x)
    #pragma acc parallel loop collapse(2)
    for(x=1; x<XSIZE-1; x++)
      for(y=1; y<YSIZE-1; y++)
        uu[x][y] = u[x][y];
  }

  #pragma xmp reflect (uu) acc

  #pragma xmp loop (y,x) on t(y,x)
  #pragma acc parallel loop collapse(2)
  for(x=1; x<XSIZE-1; x++)
    for(y=1; y<YSIZE-1; y++)
      u[x][y] = (uu[x-1][y]+uu[x+1][y]+
                uu[x][y-1]+uu[x][y+1])/4.0;
  } // end k
} // end data
```

Laplace's equation

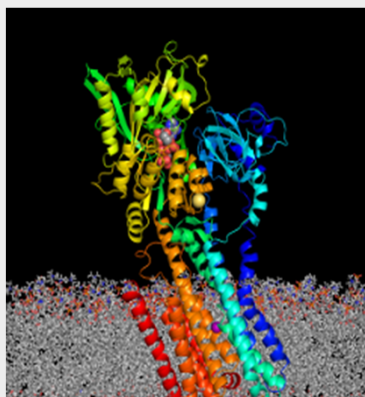
- Data Distribution and Halo
- Transfer XMP distributed arrays to accelerator
- OpenACC directive parallelizes the loop statement parallelized by XMP directive
- Exchange halo region of uu[[]]
- When "acc" clause is specified in XMP communication directive, data on accelerator is transferred.

左: ラプラス方程式の逐次プログラムに対して、XcalableMPの記述(赤)、OpenACCの記述(青)を加えることでGPUクラスタに対応ができる。

- 調整高度化枠
- 理化学研究所／佐藤三久チームリーダー

## 超並列分子動力学計算ソフトウェア 「GENESIS」を開発

- 生命科学では分子動力学法(※)と呼ばれるシミュレーション技法が、タンパク質の立体構造予測や、酵素反応のメカニズムの解明、薬の理論設計などに広く応用されている。従来、タンパク質1分子の計算は可能だったが、細胞の中のようにタンパク質や核酸(DNAやRNA)など多数の生体分子や、水、イオンが混在するシステムを、高速に計算することは困難だった。
- 「京」のアーキテクチャ(基本設計)を考慮に入れた独自の計算アルゴリズムを導入し、「GENESIS」を開発。並列計算を高効率化し、細胞環境を想定した1億個の原子で構成されるシステムに対しても高速な分子動力学シミュレーションを実現した。
- 分子動力学シミュレーションを行うためのソフトウェアとして、開発グループのみならず、大学や研究機関、企業などで幅広く利用されることで、生命科学の基礎研究や創薬応用の現場で役立つと期待される。

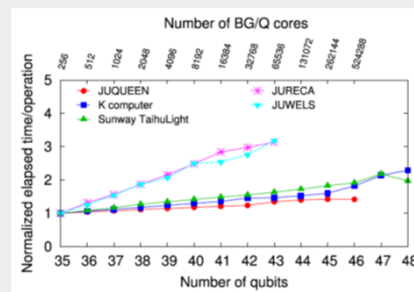


GENESISを用いた生体分子シミュレーション

- 調整高度化枠
- 理化学研究所／杉田有治チームリーダー

## 量子コンピュータシミュレーション

- 量子コンピュータ開発はIBM やGoogle 等の巨大企業が巨額を投じ世界的に競って行われており、量子計算シミュレータの開発は、量子アルゴリズムの開発や量子超越性の検証、また加速度的な実機開発を実現するためにも極めて有用である。
- スーパーコンピュータを駆使したゲート型量子計算の数値的厳密シミュレータを開発し、当時世界最大規模の65,536ノード並列、45qubitまでの量子コンピュータシミュレーションを高速に行うことを確認。さらに、1バイト精度の複素数に対しては最大で48qubitまでのシミュレーションが可能となった。
- 本研究は、「京」のTofu インターコネクトを考慮した大規模並列計算により可能となったものであり、2019年にGoogleより発表された「量子超越の検証」研究にも活用された。
- 大並列計算機に量子ビットを実装する際に有効な、データ分散の方法と処理のアルゴリズムの研究やデータ転送コストを極小化する最適化手法の研究の発展に貢献することが期待される。

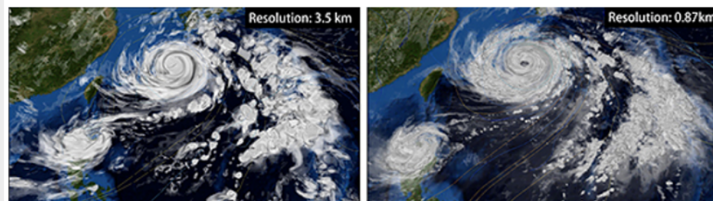


左:「京」を含む様々なスーパーコンピュータにおけるベンチマーク

- 調整高度化枠
- 理化学研究所／伊藤伸泰チームリーダー

## 「京」を利用した世界初の超高解像度全球大気シミュレーションで積乱雲をリアルに表現

- 天気予報は、地球全体を細かな水平格子に切り分け、その格子ごとの大気の状態(風速・風向・気温、気圧、湿度など)を予測する方法が取られており、各格子を小さく、数多くすることで予報精度を上げてきたが、これまでの全球大気のシミュレーションでは水平格子間隔3.5kmが最高解像度であり、より高い解像度で正確に大気の状態を分析できる手法の開発が待たれていた。
- 「京」を使って水平格子間隔1km未満の超高解像度の全球大気シミュレーションを行うことに世界で初めて成功し、この結果から水平格子1km未満の解像度にするまでこれまででは詳細に表現することが難しかった積乱雲を非常に良く表現できることを明らかにした。
- 本研究により、一つ一つの積乱雲から全球規模の積乱雲群との相互の関係をより正確に調べることが可能となり、甚大な被害をもたらす積乱雲群である台風や、集中豪雨などの発生メカニズムの解明、雲の気候への影響の研究などに寄与することが期待される。

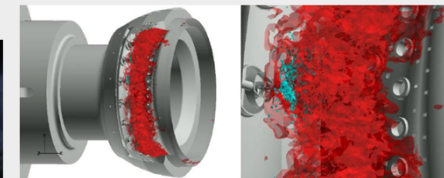


↑ 左: 従来の最高解像度(水平格子3.5km)での台風  
右: 今回行った1km未満の格子間隔のシミュレートされた台風

○H24~27 HPCI戦略プログラム(分野3)課題  
○東京大学大気海洋研究所/木本昌秀教授

## 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

- ① 自動車が走行する際、車体回りには複雑な空気の流れが発生している。「京」を用いた流体シミュレーションにより、世界で初めて、その空気の流れを忠実に再現し、風洞実験をシミュレーションで代替できることを実証した。具体的には、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することで、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した。
- ② 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、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。具体的には、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)する精度を実証した。
- 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した。



↑ ③ JAXA航空エンジン用アニュラ燃焼器(噴霧燃焼) (提供: 京大、JAXA)

↑ ① 高精度空力解析 (提供: 理研、ホンダ、神戸大、北大)

○H24~27 HPCI戦略プログラム(分野4)課題  
○東京大学生産技術研究所/加藤千幸教授

## 粒子線治療における2次発がんリスク評価 のための全身線量計算

- がんの粒子線治療とは、線量集中性の高い粒子線を病巣に照射することで、非侵襲にがんを治療する方法。これまでそれほど問題にされてこなかった核破碎生成物による被ばくが原因で治療後年月を経て発病する2次発がんのリスクに関する関心が、小児がんを中心に高まっており、中でも核破碎2次中性子の飛程は数十cmにも及び、治療部位から離れた臓器にも線量を与える。
- 「京」の能力を生かし、モンテカルロ法で治療部位のみならず全身の線量を正確かつ詳細に計算することで、粒子線治療における2次発がんのリスク評価が可能である。

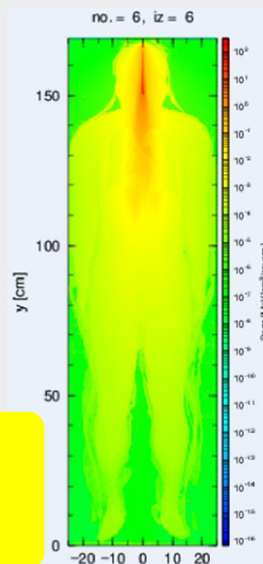
- 「京」の大規模並列計算を用いることで、これまでほとんど行われてこなかった全身線量計算のような治療部位に限らない、広い領域の線量計算が現実的な計算時間で可能であることを示した。

また、治療部位に限れば、これまでモンテカルロ法による治療計画シミュレーションの実現の障害となってきた長時間の計算時間を大規模並列計算で短縮する道筋をつけることができた。

HPCI成果発表データベースに登録された査読付き論文のうち、**被引用数トップ(414)[Top 0.1%]** 2020.6.30時点 InCitesデータ

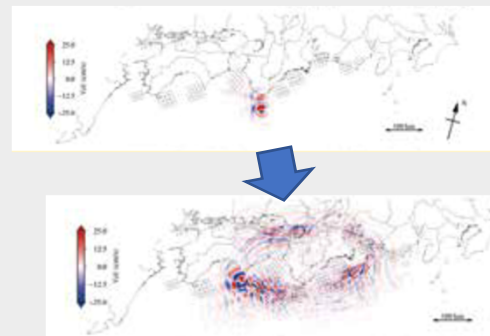
- hp120091 H24「京」一般利用課題
- 日本原子力研究開発機構／古田琢哉氏

「京」上で計算された線量分布 ↓



## 南海トラフ巨大地震による被害予測の高度化 (長周期地震動)

- 内閣府では、「南海トラフ沿いの巨大地震」が発生した際の長周期地震動を正確に想定するため、地盤構造モデルを最小140mほどの細かな格子の集合体モデルとして置き換え、格子ごとに運動方程式を使って計算を行う三次元差分法という計算法によるシミュレーションを行った。
- 長周期地震動の影響が広範囲に及ぶため計算を行う地盤モデルの格子数が膨大になること、さらに、破壊の伝わる速度や滑り量の揺らぎを評価することから、膨大な計算資源が求められ、また、より適切な計算結果が得られる条件を設定するためには、多くのパターンを用いて計算を行う必要があった。
- 政策的、重要かつ緊急な課題を優先的に実施する「京」の利用枠である重点化促進枠を利用することにより、計算のスピードを高めることで速やかな検討が実現し、「南海トラフ沿いの巨大地震」が発生した場合に、長周期地震動の揺れがどのように各地に伝わり、各地でどのような揺れが発生するかを明らかにすることができた。



← 上: 地震発生 10 秒後。  
紀伊半島沖で地震発生

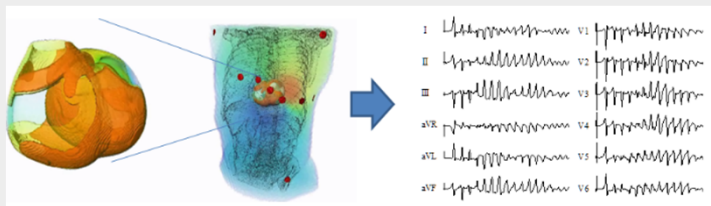
下: 地震発生約1分後。  
南海トラフに沿って地震  
の揺れが広がり長周期地  
震動の揺れが近畿圏か  
ら中部圏に拡大

- hp140252 H26「京」重点化促進枠課題
- 内閣府政策統括官(防災担当)、応用地質(株)



## 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

- ① 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、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。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。
  - 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。具体的には、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。
- ①②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、新たな強心薬の設計に繋げることができるものと期待される。

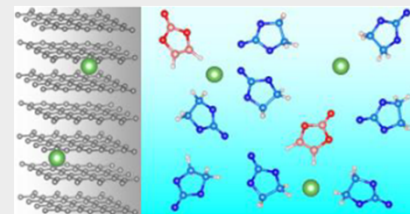


↑ UT-Heart心臓シミュレータ

○H27～R1 ポスト「京」重点課題2  
○株式会社UT-Heart研究所／久田俊明氏

## 第一原理計算によるLi電池内の正極・電解液界面での化学反応解析

- リチウムイオン電池の電極周辺で起きる電解液の還元分解とその分解物を素材として電極界面(相界面)に形成される被膜(SolidElectrolyteInterphase:SEI膜)は、電池性能と安全性の鍵となり、電解質に対して微量の添加剤を導入する事によってSEIを高機能化することでリチウムイオン電池は実用化されている。
- 本研究ではリチウムイオン電池内部で起こる化学反応と各種添加剤によって生成されるSEIの機能を明らかにすることを目標とした。
- 広く実用化されている添加剤ビニレンカーボネート(VC)のリチウムイオン界面における化学反応機構を明らかにする事ができ、そこでは従来考えられていた添加剤同士が重合するというVC添加剤の役割とは異なる新しい機構が、VC添加剤のリチウムイオン電池内での中心的な役割である新しい事実を見出す事ができた。VC添加剤から出来たSEIの性質なども電子論的に計算しており、多数の分子、電極界面を含め量子計算によって反応や物性を調べる事ができたのは「京」に依るところが大きい。



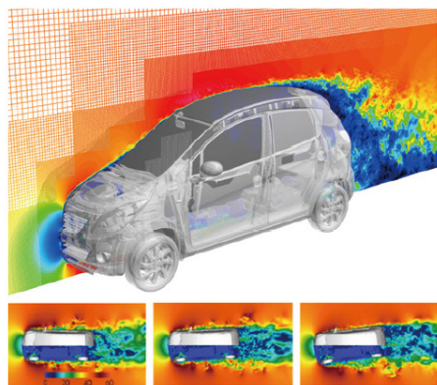
↑ 電極+電解液・添加剤系の概念図(計算対象)

「京」の全ての  
利用報告書のうち  
**ダウンロード数  
トップ(1,719)**  
2020.11.16時点

○hp150090 H27「京」産業利用課題(実証利用)  
○富士フイルム株式会社／奥野幸洋氏

## 理研コンソーシアムを活用した 研究成果の産業展開

- 「理研コンソーシアム」は、産学官連携により研究所の研究成果の利用促進を図ることを目的に、特定の分野または課題を設定し、産学官における研究情報等の交換、社会・産業ニーズや技術シーズ等の課題の共有および課題解決に向けた連携内容の検討等を行う制度。
- 研究センターは、次世代の自動車ものづくりに関する「自動車用次世代CAE コンソーシアム」及び次世代の燃焼器ものづくり「燃焼システム用次世代CAE コンソーシアム」に中核機関として参画。
- 統一的数据構造に基づく統合シミュレーションフレームワーク「CUBE」や、複雑な形状を効率よく表現できる非構造格子を用いて熱・流れの方程式を解くソフトウェア「FrontFlow/red-HPC」が、コンソーシアムを通じて産業界等で広く活用されている。



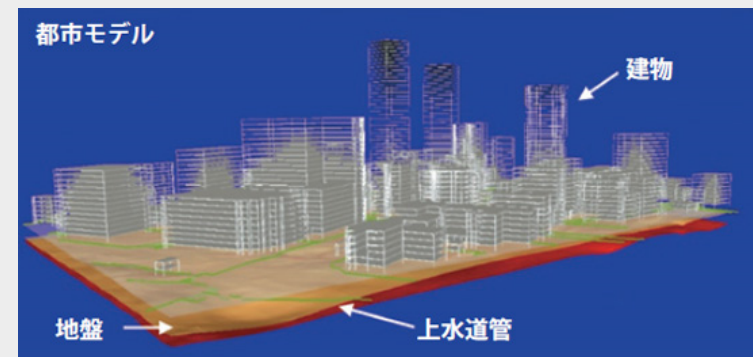
↑ CUBEを用いた空力・車両運動連成シミュレーション

コンソーシアムで活用されているソフトウェア「CUBE」は、新型コロナウイルス対策研究に応用され、社会の感染対策に貢献

○理化学研究所／坪倉誠チームリーダー

## 「都市丸ごとのシミュレーション技術研究組合」 への参画

- 地震災害・被害予測は、過去の災害・被害データを基にした経験式が利用されるが、精度は決して高いものではなかった。また、津波予測は、簡単な解析モデルを使った沖合での津波高さが対象で、津波の侵入や防潮堤の効果を正確に評価することはできなかった。
- 研究センターでは、先端的都市モデルを自動構築するプログラム「Data Processing Platform (DPP)」を開発。市販の都市情報、研究機関や行政機関が有する公開可能な都市情報を使って、地盤、地上構造物、地下構造物)のモデルを自動構築することが可能となった。
- さらに、国土交通省データプラットフォームを構築するための「都市丸ごとのシミュレーション技術研究組合」にオブザーバーとして参画。開発したDPP技術を提供し、建設コンサルティング会社の主要ツールとしての利用者拡大・普及促進活動を行うほか、業界主要企業と社会実装システムの開発を推進している。



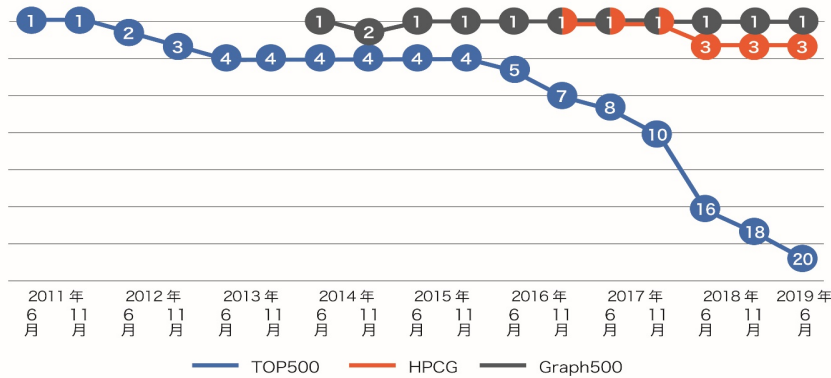
↑ 数値構造モデル

○理化学研究所／大石哲チームリーダー

# 新たな学術分野の開拓

## スーパーコンピュータを利用した大規模グラフ処理

- 実社会における複雑な現象は、大規模なグラフ(頂点と枝によりデータ間の関連性を示したもの)として表現される場合が多いため、コンピュータによる高速なグラフ解析が必要とされている。
- Society 5.0に向けた取り組みにおいては、IoT(Internet of Things)などの技術で取得された大量のデータをグラフに変換して計算機で高速処理することによって新しい価値を産み出す新規ビジネスの開拓が推進されている。
- 研究センターでは、超大規模グラフの探索能力を評価する指標「Graph500」において2014年6月から運用終了直前の2019年6月まで9期連続(通算10期)で1位を獲得。



↑ スーパーコンピュータの性能に関する主要ランキング推移

## 新型コロナウイルス対策研究

- 国難ともいえる新型コロナウイルスによる被害を軽減する方策を検討するため、文部科学省と連携し2020年4月7日より開始。被害軽減への貢献が期待でき、かつ、速やかに着手できる研究開発に対して「富岳」利用を提供している。
- 2020年11月現在、5つの研究課題を実施しており、ガイドライン等への研究成果の反映や、既存薬からの治療薬候補同定など、社会における感染対策に貢献している。
- コロナ対策研究に活用されているアプリケーションが「京」を用いた研究において開発または高度化・最適化されていたからこそ、「富岳」において早期に成果を創出することができたといえる。

### 新型コロナウイルス対策に関する貢献

#### 医学的側面からの研究

**「富岳」による新型コロナウイルスの治療薬候補同定**

分子動力学計算により、約2000種の既存医薬品の中から、新型コロナウイルスの機能的タンパク質に高い親和性を示す治療薬候補を探索・同定する。

(課題代表者; 理化学研究所/京都大学 奥野 恭史)

#### 社会的側面からの研究

**室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策**

通勤列車内、オフィス、教室、病室といった室内環境において、新型コロナウイルスの特性を考慮した飛沫の飛散シミュレーションを行い、感染リスク評価を行った上で、感染リスク低減対策の提議を行う。

(課題代表者; 理化学研究所/神戸大学 坪倉 誠)

#### 医学的側面からの研究

**「富岳」を用いた新型コロナウイルス表面のタンパク質動的構造予測**

クライオ電子顕微鏡によって解かれたウイルス表面タンパク質の立体構造を初期モデルとして、その立体構造の動きを「富岳」を用いた分子動力学計算で予測する。

(課題代表者; 理化学研究所 杉田 有治)

#### 社会的側面からの研究

**パンデミック現象および対策のシミュレーション解析**

今後生じうる社会経済活動への影響を評価し、収束シナリオとその実現方法を探る。あわせてウイルスの変異などにより感染・発病の経過が変化した場合に起こりうる事象への対応を立案する。

(課題代表者; 理化学研究所 伊藤 伸泰)

#### 医学的側面からの研究

**新型コロナウイルス関連タンパク質に対するフラグメント分子軌道計算**

新型コロナウイルス関連タンパク質に対するフラグメント分子軌道計算を系統的に実施し、詳細な相互作用解析を行う。

(課題代表者; 立教大学 望月 祐志)

理化学研究所 計算科学研究センターは、スーパーコンピュータを用いた新型コロナウイルス対策研究のため本年3月に米國にて設立されたコンソーシアム (COVID-19 High Performance Computing Consortium)に参加。

# 「京」の成果／論文等データについて

- 主に学術的な成果である査読付き論文においては、
  - ・ 累計の被引用数が100を超える論文が20編以上、うち、200を超える論文が7編 \*、また、累計被引用数1位の論文の被引用数が414に及ぶ
  - ・ 著名誌 (Nature、Science) に計36編の論文が掲載されるなど、注目度の高い論文が創出されている。

\* 被引用200を超える論文について、自己点検結果報告書(2020.6.30時点データ)には6編と記載。その後登録情報に修正すべき箇所が判明し、本2020.11.16時点では上記のとおり全7編となっている。

- 一方、一般に必ずしも論文が主要成果とは言えない産業利用においては、その注目度の確認方法の1つとして、利用終了後に提出・閲読を経てWeb公開される各利用研究課題ごとの「利用報告書」のダウンロード数がある。累計DL数上位はほぼ産業利用課題が占めており、また、同ダウンロード数1,000を超える利用報告書が4報(2020.11.16時点)あるなど、産業界等へのインパクトが大きい成果が創出されている。

# HPCI成果発表データベースに登録された「京」利用研究課題関連論文被引用数上位10編

(被引用数は2020.6.30時点のIn Citesデータより)

成果事例

課題番号	研究分野	課題種	課題名	課題代表者	関連論文	関連論文 累計被引用数
hp120091	バイオ・ライフ	H24「京」一般課題	粒子線治療における2次発がんリスク評価のための全身線量計算	日本原子力研究開発機構／古田琢哉	Particle and Heavy Ion Transport code System, PHITS, version 2.52 Tatsuhiko Sato <i>et. al.</i> Journal of Nuclear Science and Technology, 50, 913-923	<b>414</b> (Top 0.1%)
hp130021	物質・材料・化学	H25 HPCI戦略プログラム(分野2)	エネルギー変換の界面科学	東京大学／杉野修	Unusual Stability of Acetonitrile-Based Superconcentrated Electrolytes for Fast-Charging Lithium-Ion Batteries Y. Yamada <i>et. al.</i> J. Am. Chem. Soc. 136 (2014) 14091-14097	<b>354</b> (Top 1%)
hp140232	物質・材料・化学	H26 HPCI戦略プログラム(分野2)	エネルギー変換の界面科学	東京大学／杉野修		
hp120301	物質・材料・化学	H24 HPCI戦略プログラム(分野2)	密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究	名古屋大学／押山淳	O(N) methods in electronic structure calculations D. R. Bowler <i>et. al.</i> Reports on Progress in Physics	<b>253</b> (Top 10%)
hp150232	バイオ・ライフ	H27 HPCI戦略プログラム(分野1)	大規模生命データ解析	東京大学／宮野悟	Integrated molecular analysis of adult T cell leukemia/lymphoma Kataoka K <i>et. al.</i> Nature Genetics, 47(11), 1304-1315, 2015.	<b>246</b> (Top 1%)
hp140230	バイオ・ライフ	H26 HPCI戦略プログラム(分野1)	大規模生命データ解析	東京大学／宮野悟	Aberrant PD-L1 expression through 3'-UTR disruption in multiple cancers Kataoka K <i>et. al.</i> Nature. 534(7607):402-406, 2016. doi: 10.1038/nature18294.	<b>231</b> (Top 1%)
hp160219	バイオ・ライフ	H28ポスト「京」重点課題(重点2)	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／宮野悟		
hp160075	物質・材料・化学	H28「京」一般課題	ポストリチウムイオン電池開発に向けた電解質界面被膜の物性解明と材料設計	物質・材料研究機構／館山佳尚	Superconcentrated electrolytes for a high-voltage lithium-ion battery Jianhui Wang <i>et. al.</i> Nat. Commun. 7, 12032 (2016)	<b>219</b> (Top 0.1%)
hp160225	物質・材料・化学	H28ポスト「京」重点課題(重点5)	エネルギーの変換・貯蔵-電気エネルギー	東京大学／杉野修		
hp150275	物質・材料・化学	H27ポスト「京」重点課題(重点5)	エネルギーの変換・貯蔵-電気エネルギー	東京大学／杉野修	Hydrate-melt electrolytes for high-energy-density aqueous batteries Yuki Yamada <i>et. al.</i> Nat. Energy 1, 16129 (2016)	<b>210</b> (Top 1%)
hp160075	物質・材料・化学	H28「京」一般課題	ポストリチウムイオン電池開発に向けた電解質界面被膜の物性解明と材料設計	物質・材料研究機構／館山佳尚		
hp150262	物理・素粒子・宇宙	H27ポスト「京」重点課題(重点9)	物質創成史の解明と物質変換	京都大学／柴田大	Modeling GW170817 based on numerical relativity and its implications Masaru Shibata <i>et. al.</i> Physical Review D, Vol.96, 12 (2017)	<b>163</b> (Top 0.1%)
hp170230	物理・素粒子・宇宙	H29ポスト「京」重点課題(重点9)	物質創成史の解明と物質変換	京都大学／柴田大		
hp130004	物質・材料・化学	H25 HPCI戦略プログラム(分野2)	密度汎関数理論によるナノ構造の電子機能予測に関する研究	名古屋大学／押山淳	Absence and Presence of Dirac Electrons in Silicene on Substrates Z.-X. Guo <i>et. al.</i> Phys. Rev. B, 87	<b>161</b> (Top 10%)
hp140232	物質・材料・化学	H26 HPCI戦略プログラム(分野2)	エネルギー変換の界面科学	東京大学／杉野修	Space-Charge Layer Effect at Interface between Oxide Cathode and Sulfide Electrolyte in All-Solid-State Lithium-Ion Battery Jun Haruyama <i>et. al.</i> Chemistry of materials, 2014, 26 (14), pp 4248-4255	<b>155</b> (Top 10%)
hp140110	物質・材料・化学	H26 HPCI一般課題	第一原理計算を用いたリチウムイオン二次電池正極/電解質界面の研究	物質・材料研究機構／木野日織		

# 関連論文が著名誌(Nature、Science)に掲載された「京」利用研究課題関連論文

Nature / Nature Communications / Nature Genetics / Nature Physics / Nature Energy 計28編

課題番号	研究分野	課題種	課題名	掲載誌 関連論文			
hp140230	生命科学	H26 HPCI戦略プログラム (分野1)	大規模生命データ解析	Nature	Aberrant PD-L1 expression through 3'-UTR disruption in multiple cancers, Kataoka K <i>et. al.</i> <i>Nature</i> . 534(7607):402-406(2016)		
hp150232		H27 HPCI戦略プログラム (分野1)					
hp160219		H28 ポスト「京」重点課題 (重点2)	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				
hp140103	物質・材料・化学	H26「京」一般課題	極限的パルス光と物質の相互作用を記述するマルチスケール第一原理計算		Nature	Attosecond nonlinear polarization and light-matter energy transfer in solids, A. Sommer <i>et. al.</i> <i>Nature</i> . 534, pp.86-90(2016)	
hp140224		H26 HPCI戦略プログラム (分野2)	密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現				
hp170220	物質・材料・化学	H29 ポスト「京」重点課題 (萌芽1)	地球惑星深部物質の構造と物性			The pyrite-type high-pressure form of FeOOH, Masayuki Nishi <i>et. al.</i> <i>Nature</i> . Vol.547, pp.205-208	
hp160211	物理・素粒子・宇宙	H28 ポスト「京」重点課題 (重点9)	物質創成史の解明と物質変換			Nature	Ni-78 revealed as a doubly magic stronghold against nuclear deformation, R. Taniuchi <i>et. al.</i> <i>Nature</i> , 569, 53 (2019)
hp170230		H29 ポスト「京」重点課題 (重点9)					
hp180179		H29 ポスト「京」重点課題 (重点9)					
hp160219	生命科学	H28 ポスト「京」重点課題 (重点2)	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	Nature			Frequent mutations that converge on the NFKBIZ pathway in ulcerative colitis, Nobuyuki Kakiuchi <i>et. al.</i> <i>Nature</i> , Vol.577, pp.260-265 (2019)
hp170227		H29 ポスト「京」重点課題 (重点2)					
hp180198		H30 ポスト「京」重点課題 (重点2)					
hp190158		H31 ポスト「京」重点課題 (重点2)					
hp150272	生命科学	H27 ポスト「京」重点課題 (重点1)	創薬ビッグデータ統合システムの開発		Nature Communications		Brigatinib combined with anti-EGFR antibody overcomes osimertinib resistance in EGFR-mutated non-small-cell lung cancer, Ken Uchibori <i>et. al.</i> <i>Nature Communications</i> , Vol.8, pp.14768 (2017)
hp160213		H28 ポスト「京」重点課題 (重点1)					
hp120313	環境・防災・減災	H24 HPCI戦略プログラム (分野3)	全球雲解像モデルによる延長予測可能性の研究			Madden-Julian Oscillation prediction skill of a new-generation global model demonstrated using a supercomputer, Tomoki Miyakawa <i>et. al.</i> <i>Nature Communications</i> , 5, Article number: 3769	
hp130010		H25 HPCI戦略プログラム (分野3)	地球規模の気候・環境変動予測に関する研究				
hp120174	物質・材料・化学	H24「京」一般課題	強相関高温超伝導体に対する第一原理量子モンテカルロシミュレーション			Nature Communications	Unexpectedly high pressure for molecular dissociation in liquid hydrogen by electronic simulation, Guglielmo Mazzola <i>et. al.</i> <i>Nature Communications</i> , 5, 3487/1-6 (2014)
hp120043	物質・材料・化学	H24「京」一般課題	第一原理電子状態計算法を用いた高温超伝導の機構解明	Superconductivity and its mechanism in an ab initio model for electron-doped LaFeAsO, Takahiro Misawa <i>et. al.</i> <i>Nature Communications</i> , 5, 5738 (1-11), (2014)			
hp120283		H24 HPCI戦略プログラム (分野2)					
hp130007		H25 HPCI戦略プログラム (分野2)	相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明				
hp140215		H26 HPCI戦略プログラム (分野2)					

課題番号	研究分野	課題種	課題名	掲載誌 関連論文			
hp150156	環境・防災・減災	H27「京」一般課題	「次世代型大気汚染物質輸送モデルの精緻化と排出量の推定」	Aerosol effects on cloud water amounts were successfully simulated by a global cloud-system resolving model, Sato, Y. <i>et al. Nature Communications</i> , Vol. 9, Article number: 985	10		
hp160004		H28「京」一般課題	次世代型物質輸送モデルによる大気汚染の気候・環境影響評価				
hp170017		H29「京」一般課題	全球雲解像モデルを用いた大気汚染排出削減パスによる気候・環境影響評価				
hp160231		H28 ポスト「京」重点課題(重点4)	総合的な地球環境の監視と予測				
hp170232		H29 ポスト「京」重点課題(重点4)					
hp160219	生命科学	H28 ポスト「京」重点課題(重点2)	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	Aberrant splicing and defective mRNA production induced by somatic spliceosome mutations in myelodysplasia, Shiozawa, Yusuke <i>et al. Nature Communications</i> , Vol.9(2018)	11		
hp180198		H30 ポスト「京」重点課題(重点2)					
hp170079	物質・材料・化学	H29「京」一般課題	第一原理量子モンテカルロシミュレーションによるキャリア注入したグラフェンにおけるトポロジカル超伝導の探求	Carbon nanotubes as excitonic insulators, Daniele Varsano <i>et al. Nature Communications</i> , 8, 1461 (2017)	12		
hp120302	生命科学	H24 HPCI戦略プログラム(分野1)	心疾患のマルチスケールマルチフィジックスシミュレーション	<p style="text-align: center;"><b>Nature Communications</b></p> Coordinated force generation of skeletal myosins in myofilaments through motor coupling, Motoshi Kaya <i>et al. Nature Communications</i> , Vol.8 (2017)	13		
hp150260	その他	H27 ポスト「京」重点課題(重点2)	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				
hp160209		H28 ポスト「京」重点課題(重点2)					
hp170233		H29 ポスト「京」重点課題(重点2)					
hp120306	生命科学	H24 HPCI戦略プログラム(分野1)	予測医療に向けた階層統合シミュレーション				
hp130019		H25 HPCI戦略プログラム(分野1)					
hp140234		H26 HPCI戦略プログラム(分野1)					
hp150236		H27 HPCI戦略プログラム(分野1)					
hp150272	生命科学	H27 ポスト「京」重点課題(重点1)	創薬ビッグデータ統合システムの開発			A secondary RET mutation in the activation loop conferring resistance to vandetanib, Takashi Nakaoku <i>et al. Nature Communications</i> , Vol.9 (2018)	14
hp160213		H28 ポスト「京」重点課題(重点1)					
hp130007	物質・材料・化学	H25 HPCI戦略プログラム(分野2)	相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明			Volume-wise destruction of the antiferromagnetic Mott insulating state through quantum tuning, Frandsen, Benjamin A. <i>et al. Nature Communications</i> , Vol.7,12519	15
hp140215		H26 HPCI戦略プログラム(分野2)					
hp150211		H27 HPCI戦略プログラム(分野2)					
hp160221	環境・防災・減災	H28 ポスト「京」重点課題(重点3)	地震・津波の災害被害予測の実用化研究	Rapid mantle flow with power-law creep explains deformation after the 2011 Tohoku mega-quake, Agata, Ryoichiro <i>et al. Nature Communications</i> , Vol.10(1), 1385 (2019)	16		
hp170249		H29 ポスト「京」重点課題(重点3)					
hp180207		H30 ポスト「京」重点課題(重点3)					

課題番号	研究分野	課題種	課題名	掲載誌 関連論文
hp160117	エネルギー	H28 「京」一般課題	核融合プラズマにおける高エネルギー粒子駆動乱流と同位体効果に関する予測シミュレーション 核融合炉の炉心設計	Simulations tackle abrupt massive migrations of energetic beam ions in a tokamak plasma, A. Bierwage <i>et. al.</i> <b>Nature Communications</b> , 9, Article number: 3282 (2018)
hp170260		H29 ポスト「京」重点課題 (重点6)		
hp180200		H30 ポスト「京」重点課題 (重点6)		
hp140005	生命科学	H26 HPCI一般課題	Adaptive lambda square dynamics 法による化学修飾されたヒストンテイルの構造探索	Accessibility of the histone H3 tail in the nucleosome for binding of paired readers, Jovylyn Gatchalian <i>et. al.</i> <b>Nature Communications</b> , Vol.8, 1489(2017)
hp150003		H27 HPCI一般課題	Adaptive lambda square dynamics シミュレーションによるアセチル化されたヒストンテイルの構造探索	
hp160223		H28 ポスト「京」重点課題 (重点1)	次世代創薬計算技術の開発	
hp170190	物質・材料・化学	H29 HPCI一般課題	グラフェンの先の炭素ナノ物質の構造と物性に関するシミュレーション研究 高信頼性構造材料	A first-principles phase field method for quantitatively predicting multi-composition phase separation without thermodynamic empirical parameter, Swastibrata Bhattacharyya <i>et. al.</i> <b>Nature Communications</b> , Vol.10 (2019)
hp180125		H30 HPCI一般課題		
hp170268		H29 ポスト「京」重点課題 (重点7)		
hp180220	H30 ポスト「京」重点課題 (重点7)			
hp180201	生命科学	H30 ポスト「京」重点課題 (重点1)	ポスト「京」でのMD高度化とアルゴリズム深化	Phagocytosis is mediated by two-dimensional assemblies of the F-BAR protein GAS7, Kyoko Hanawa-Suetsugu <i>et. al.</i> <b>Nature Communications</b> , 10, 4763 (2019)
hp160075	物質・材料・化学	H28 「京」一般課題	ポストリチウムイオン電池開発に向けた電解質界面被膜の物性解明と材料設計	Superconcentrated electrolytes for a high-voltage lithium-ion battery, Jianhui Wang <i>et. al.</i> <b>Nature Communications</b> , 7, 12032 (2016)
hp160225		H28 ポスト「京」重点課題 (重点5)	エネルギーの変換・貯蔵－電気エネルギー	
hp150232	生命科学	H27 HPCI戦略プログラム (分野1)	大規模生命データ解析	Integrated molecular analysis of adult T cell leukemia/lymphoma, Kataoka K. <i>et. al.</i> <b>Nature Genetics</b> , 47(11), 1304–1315, 2015
hp160219	生命科学	H28 ポスト「京」重点課題 (重点2)	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	Dynamics of clonal evolution in myelodysplastic syndromes, Hideki Makishima <i>et. al.</i> <b>Nature Genetics</b> , (2016). doi:10.1038/ng.3742
hp160219	生命科学	H28 ポスト「京」重点課題 (重点2)	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	Recurrent SPI1 (PU.1) fusions in high-risk pediatric T cell acute lymphoblastic leukemia, Seki M <i>et. al.</i> <b>Nature Genetics</b> , 49(8):1274–81
hp170227		H29 ポスト「京」重点課題 (重点2)		
hp160211	物理・素粒子・宇宙	H28 ポスト「京」重点課題 (重点9)	物質創成史の解明と物質変換	Characterization of the shape-staggering effect in mercury nuclei, B. A. Marsh <i>et. al.</i> <b>Nature Physics</b> 14, 1163–1167 (2018)
hp170230		H29 ポスト「京」重点課題 (重点9)		
hp140210	物理・素粒子・宇宙	H26 HPCI戦略プログラム (分野5)	大規模量子多体計算による核物性解明とその応用 物質創成史の解明と物質変換	Interplay between nuclear shell evolution and shape deformation revealed by the magnetic moment of Cu-75, <i>et. al.</i> Y. Ichikawa <b>Nature Physics</b> , 15, 321 (2019)
hp150224		H27 HPCI戦略プログラム (分野5)		
hp160211		H28 ポスト「京」重点課題 (重点9)		
hp170230		H29 ポスト「京」重点課題 (重点9)		

次頁へつづく



課題番号	研究分野	課題種	課題名	掲載誌 関連論文		
hp150275	物質・材料・化学	H27 ポスト「京」重点課題 (重点5)	エネルギーの変換・貯蔵－電気エネルギー	<b>Nature Energy</b>	Hydrate-melt electrolytes for high-energy-density aqueous batteries, Yuki Yamada <i>et. al.</i> <b>Nature Energy</b> , 1, 16129 (2016)	27
hp160225		H28 ポスト「京」重点課題 (重点5)				
hp160075		H28 「京」一般課題	ポストリチウムイオン電池開発に向けた電解質界面被膜の物性解明と材料設計			
hp160075	物質・材料・化学	H28 「京」一般課題	ポストリチウムイオン電池開発に向けた電解質界面被膜の物性解明と材料設計		Fire-extinguishing organic electrolytes for safe batteries, Jianhui Wang <i>et. al.</i> <b>Nature Energy</b> , 3, 22-29 (2018)	28
hp160225		H28 ポスト「京」重点課題 (重点5)	エネルギーの変換・貯蔵－電気エネルギー			

Science / Science Advances 計8編

課題番号	研究分野	課題種	課題名	掲載誌 関連論文		
hp150101	物質・材料・化学	H27「京」一般課題	極限的パルス光と物質の相互作用を記述するマルチスケール第一原理計算	Science	Attosecond dynamical Franz-Keldysh effect in polycrystalline diamond, M. Lucchini <i>et al.</i> <i>Science</i> , 353 pp.916-919	
hp150218		H27 HPCI戦略プログラム (分野2)	密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現			
hp120222	物理・素粒子・宇宙	H24「京」一般課題	電磁プラズマ粒子コードを用いた超新星残骸衝撃波における電子加速の研究			Stochastic electron acceleration during spontaneous turbulent reconnection in a strong shock wave, Y. Matsumoto <i>et al.</i> <i>Science</i> , 347, 974-978
hp140127		H26「京」若手人材育成	超新星残骸衝撃波における宇宙線加速機構の解明に向けた1兆個粒子シミュレーション			
hp120287		H24 HPCI戦略プログラム (分野5)	計算科学推進体制構築 研究支援体制による高度化支援利用			
hp130027		H25 HPCI戦略プログラム (分野5)				
hp140213		H26 HPCI戦略プログラム (分野5)				
hp140212		H26 HPCI戦略プログラム (分野5)				
hp150226	H27 HPCI戦略プログラム (分野5)	ダークマター密度ゆらぎから生まれる第1世代天体形成	Large-scale magnetic fields at high Reynolds numbers in magnetohydrodynamic simulations, Hotta, H. <i>et al.</i> <i>Science</i> , Vol.351, pp.1427-1430(2016)			
hp120302	生命科学	H24 HPCI戦略プログラム (分野1)	心疾患のマルチスケールマルチフィジックスシミュレーション			Science Advances
hp120306		H24 HPCI戦略プログラム (分野1)	予測医療に向けた階層統合シミュレーション			
hp130019		H25 HPCI戦略プログラム (分野1)				
hp140234		H26 HPCI戦略プログラム (分野1)				
hp150236		H27 HPCI戦略プログラム (分野1)				
hp130007	物質・材料・化学	H25 HPCI戦略プログラム (分野2)	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	Science Advances	Correlation-induced superconductivity dynamically stabilized and enhanced by laser irradiation, Ido, Kota <i>et al.</i> <i>Science Advances</i> , Vol.3, e1700718	
hp140215		H26 HPCI戦略プログラム (分野2)				
hp150211		H27 HPCI戦略プログラム (分野2)				
hp160201		H28 ポスト「京」重点課題 (重点7)				超伝導・新機能デバイス材料
hp150173	物理・素粒子・宇宙	H27「京」一般課題	高精度量子多体数値計算を用いた銅酸化物薄膜における高温超伝導の制御パラメータの抽出	Science Advances	Self-optimized superconductivity attainable by interlayer phase separation at cuprate interfaces, Takahiro Misawa <i>et al.</i> <i>Science Advances</i> , Vol. 2, no.7, pp1-8	
hp140215	物質・材料・化学	H26 HPCI戦略プログラム (分野2)	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			
hp150211		H27 HPCI戦略プログラム (分野2)				
hp160201		H28 ポスト「京」重点課題 (重点7)				超伝導・新機能デバイス材料
hp170239	物理・素粒子・宇宙	H29 ポスト「京」重点課題 (萌芽3)	太陽活動による地球環境変動の解明	Science Advances	Weak influence of near-surface layer on solar deep convection zone revealed by comprehensive simulation from base to surface, Hideyuki Hotta <i>et al.</i> <i>Science Advances</i> , 5:eaa02307	
hp140128	物質・材料・化学	H26 HPCI一般課題	密度行列繰り込み群法による二次元三角格子ハバード模型の解析		Two-dimensional ground-state mapping of a Mott-Hubbard system in a flexible field-effect device, Yoshitaka Kawasaki <i>et al.</i> <i>Science Advances</i> , Vol.5, pp.eaav7282 (2019)	
hp150112		H27「京」一般課題	密度行列繰り込み群法による二次元三角格子ハバード模型のスピン液体状態の研究			

# 「京」I利用研究課題利用報告書のうちダウンロード数上位10課題 (2020.11.16時点)

成果事例

	課題番号	研究分野	課題種	課題名	課題代表者	ダウンロード総数
1	hp150090	物質・材料・化学	H27「京」産業利用課題 (実証利用)	第一原理計算によるLi電池内の正極・電解液界面での化学反応解析	富士フイルム(株)／奥野幸洋	1,719
2	hp130056	物質・材料・化学	H25「京」産業利用課題 (実証利用)	マイクロ相分離構造を有する高分子材料の物理的性質の解明	日本ゼオン(株)／本田隆	1,513
3	hp150029	物質・材料・化学	H27「京」産業利用課題 (実証利用)	スラリー塗工プロセスのComputational Process Material Designシミュレーション	トヨタ自動車(株)／諸星圭	1,193
4	hp120219	工学・ものづくり	H24「京」産業利用課題 (実証利用)	数値流体力学の工業利用における標準解の整備に関わる研究	トヨタ自動車(株)／沢田龍作	1,050
5	hp160038	工学・ものづくり	H28「京」産業利用課題 (実証利用)	空気抵抗を大幅に低減する新しい車両形状の開発	トヨタ自動車(株)／前田和宏	954
6	hp120046	物質・材料・化学	H24「京」産業利用課題 (実証利用)	高分子材料の特性予測技術の開発	トヨタテクニカルディベロップメント(株)／木村陽介	860
7	hp140230	バイオ・ライフ	H26 HPCI戦略プログラム(分野1)	大規模生命データ解析	東京大学／宮野悟	839
8	hp120181	物質・材料・化学	H24「京」産業利用課題 (実証利用)	第一原理計算によるLi電池SEI形成に果たす添加剤の機能解析	富士フイルム(株)／奥野幸洋	836
9	hp130114	工学・ものづくり	H25「京」産業利用課題 (実証利用)	ガスタービン燃焼器における過渡的挙動に付随する問題の原因究明	川崎重工業(株)／平野昂志	775
10	hp140192	物質・材料・化学	H26「京」産業利用課題 (実証利用)	マイクロ相分離構造を有する高分子材料の物理的性質の解明	日本ゼオン(株)／本田隆	731

## 人材育成への貢献について

- 「京」の登場は、我が国を代表する計算科学拠点の形成につながった。研究センターでは、計算科学に関する国際的な研究拠点の一角を担うとともに、計算機科学・計算科学の推進に必要な人材の育成等に取り組んできた。

具体的には、国内の大学をはじめとする研究機関等とMOUを締結したほか、インターンシップによる国内外の学生を積極的に受け入れるとともに、連携講座の設置や若手研究者・企業研究者育成を目的としたスクーリング事業を実施した。

- 「京」利用初級者から上級者までを対象に、幅広い利用技術のレベルやニーズに応える講習会・ワークショップ等の実施による受講者のスキルアップを通じて、人材の育成に貢献した。

また、「京」公募利用制度（「京」若手人材育成課題）を設定するなど、将来の計算科学研究を担う若手人材育成に取り組んだ。これらにより、「京」利用研究課題を通じた学位（博士）の取得や、若手研究者を対象とした多数の各種受賞につながった。

# HPCI成果発表データベースに登録された「京」利用研究課題関連博士学位論文 (2020.11.16時点)

	関連「京」利用研究課題番号	研究分野	論文タイトル、著者、掲載誌等
1	hp120263、hp140151、hp160187、 hp160269、hp170256	バイオ・ライフ	次世代スーパーコンピュータ環境における 効率的かつ大規模な 詳細神経回路シミュレーション手法に関する研究 宮本 大輔(東京大学 大学院工学系研究科 先端学際工学専攻), 博士論文
2	hp120131	バイオ・ライフ	Protein-protein interaction network prediction based on tertiary structure data. Masahito Ohue(Tokyo Institute of Technology), Ph. D. thesis, Tokyo Institute of Technology, FY2013
3	hp120302	バイオ・ライフ	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に関する研究 -サルコメア力学から心筋細胞構造を経て心拍動に至る解析手法の開発と応用- 鷲尾巧(東京大学大学院新領域創成科学研究科人間環境学専攻), 東京大学
4	hp160176	工学・ものづくり	A Study on Effective Control Mechanisms for Dynamic Flowfields around a Pitching Airfoil Using a DBD Plasma Actuator Hiroaki Fukumoto(The University of Tokyo), Ph. D thesis, The University of Tokyo
5	hp170069	工学・ものづくり	大規模LES計算による船用プロペラ周りの流場推定に関する研究 藤澤 竹春(ジャパン マリンユナイテッド株式会社), 神戸大学、学位論文
6	hp120084	工学・ものづくり	Study on Propulsive Characteristics of Magnetic Sail and Magneto Plasma Sail by Plasma Particle Simulations Yasumasa Ashida(Kyoto University), Kyoto University
7	hp140097、hp150096、hp160089	物質・材料・化学	Structure-Property Relationships in Crosslinked Phenolic Resins Investigated by Scattering Experiments and Computer Simulation Yasuyuki Shudo(The University of Tokyo), 東京大学大学院 博士論文
8	hp150281、hp150144、hp160066、 hp160222	物質・材料・化学	Numerical methods for large-scale quantum material simulations Hiroto Imachi(Tottori University), D. Thesis, Tottori University
9	hp120284、hp130024、hp140210	物理・素粒子・宇宙	Structure of medium-mass nuclei studied by Monte Carlo Shell-Model calculations Yusuke Tsunoda(Department of Physics, University of Tokyo), Ph. D. thesis, University of Tokyo, 2015
10	hp170239	物理・素粒子・宇宙	Magnetohydrodynamics Simulation Study on Fast Magnetic Reconnection Takuya Shibayama(Institute for Space-Earth Environmental Research, Nagoya University), Ph.D. Thesis (Nagoya University)

注: 自己点検結果報告書(2020.3.31時点データ)には全9編と記載。

本2020.11.16時点では、同年8月に新たに1編が登録されたため、上記のとおり全10編となっている。

## HPCI受賞一覧に登録された受賞(全213件)のうち 「京」利用研究課題関連 若手研究者対象受賞リスト(全32件) (2020.11.16時点)

受賞年月日順

	関連「京」利用研究課題番号	受賞日	受賞名称	主催団体	タイトル
1	hp120278	2013年5月21日	平成24年度日本地震学会 若手学術奨励賞	日本地震学会	広帯域地震波・津波のモニタリングとシミュレーションの融合研究
2	hp120142、hp130027	2014年3月26日	第8回 物理学会若手奨励賞 理論核物理領域	日本物理学会	Wilson Fermion Determinant in Lattice QCD
3	hp130007、hp130022	2014年3月27日	日本物理学会若手奨励賞	日本物理学会	フラストレート磁性体におけるトポロジカル相転移と多重Q秩序の研究
4	hp130008	2014年3月28日	第8回若手奨励賞	日本物理学会	“On Physics of Stimulated L→H Transitions”他
5	hp120286、hp130026	2014年4月7日	平成26年度 科学技術分野の 文部科学大臣表彰 若手科学者賞	文部科学省	高精度大規模計算によるダークマター微細構造の研究
6	hp120278、hp130013、hp140221	2014年4月7日	平成26年度 科学技術分野の 文部科学大臣表彰 若手科学者賞	文部科学省	地震波と津波のモニタリングとシミュレーションの融合研究
7	ra000015	2014年4月15日	平成26年度 科学技術分野の 文部科学大臣表彰 若手科学者賞	文部科学省	地球環境シミュレーションにおけるデータ同化の研究
8	hp120011、hp130008	2014年6月20日	第10回核融合エネルギー連合講演会 若手優秀発表賞	核融合エネルギー連合講演会	電子／イオン系マルチスケール乱流シミュレーションによる電子熱輸送解析
9	hp140053、hp140227	2014年6月20日	第10回核融合エネルギー連合講演会 若手優秀発表賞	核融合エネルギー連合講演会	ITER/DEMOを見据えた実平衡トカマクプラズマの第一原理乱流輸送シミュレーション
10	hp120011、hp140227	2014年11月21日	Plasma 2014 若手優秀発表賞	プラズマ・核融合学会	Multi-scale interactions between electron- and ion-scale turbulence and their effects on turbulent transport
11	hp120092	2015年4月15日	平成27年度 科学技術分野の 文部科学大臣表彰 若手科学者賞	文部科学省	先端的宇宙プラズマ計算機シミュレーション手法の研究
12	hp120138、hp150279	2016年3月1日	第10回(2016年)日本物理学会 若手奨励賞	日本物理学会	3次元プラズマ乱流輸送の大規模シミュレーションと定量的な予測に関する研究
13	hp160022	2016年6月8日	若手奨励賞優秀賞	一般社団法人日本蛋白質科学会	1分子 FRET データと分子動力学シミュレーションによるタンパク質ダイナミクス解析
14	hp160208	2016年7月1日	第11回核融合エネルギー連合講演会 若手優秀発表賞	プラズマ・核融合学会 日本原子力学会核融合工学部会	JT-60UIにおける慣性力を通じた回転分布の熱輸送への影響
15	hp160251	2017年3月18日	第11回(2017年)日本物理学会 若手奨励賞	日本物理学会	高圧極限環境下における物質の結晶構造と超伝導性に関する第一原理的研究

次頁へつづく

	関連「京」利用研究課題番号	受賞日	受賞名称	主催団体	タイトル
16	hp120284、hp130024、hp140210、hp150224、hp160211	2017年3月18日	第11回(2017年)日本物理学会若手奨励賞	日本物理学会	Ni同位体における新奇な変形共存現象と核子配位に依存した殻進化の研究
17	hp120283、hp130007	2017年3月20日	第11回(2017年)日本物理学会若手奨励賞	日本物理学会	Metallic Interface Emerging at Magnetic Domain Wall of Antiferromagnetic Insulator: Fate of Extinct Weyl Electrons
18	hp160117、hp160208	2017年3月20日	第11回(2017年)日本物理学会若手奨励賞	日本物理学会	高エネルギー粒子駆動測地的音響モードのシミュレーション研究
19	hp170227	2017年4月19日	平成29年度 科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞	文部科学省	成人T細胞白血病リンパ腫における遺伝子異常の研究
20	hp170254	2017年6月21日	第17回日本蛋白質科学会年会若手奨励賞	日本蛋白質科学会	Near-atomic structural model for bacterial DNA replication initiation complex and its functional insights
21	hp150269、hp160223、hp170255	2017年6月21日	若手奨励賞	日本蛋白質科学会	Apo- and antagonist-binding structures of vitamin D receptor ligand-binding domain in solution revealed by MD and SAXS hybrid approach
22	hp180179	2017年10月2日	日本物理学会理論核物理領域若手奨励賞	日本物理学会	現実的核力に基づく多殻空間有効相互作用の構築と中性子過剰核への適用
23	hp170316	2017年12月1日	学生優秀発表賞	分子シミュレーション研究会	分割統治型励起状態密度汎関数強束縛法を用いた光活性イェロタンパク質に関する理論的研究
24	hp170147	2017年12月1日	第31回分子シミュレーション討論会学生優秀発表賞	分子シミュレーション研究会	データ科学と大規模電子状態計算による有機高分子探索
25	hp170230	2018年3月1日	the FAIR GENCO Award for young scientists	the FAIR-GSI Exotic Nuclei Community (GENCO)	the invention of the so-called T-Plot method
26	hp120011、hp150220、hp170075	2018年3月23日	第12回(2018年)日本物理学会若手奨励賞	日本物理学会	電子・イオンスケール乱流間のマルチスケール相互作用に関する研究
27	hp180258	2018年11月29日	学生優秀発表賞	分子シミュレーション学会	バクテリオロドプシンの長距離プロトン移動過程に対するDC-DFTB-MDシミュレーション
28	hp180191	2018年11月29日	第32回分子シミュレーション討論会学生優秀発表賞	分子シミュレーション研究会	PEG修飾脂質が膜物性に与える影響:粗視化分子シミュレーション
29	hp150269、hp160223、hp170255、hp180191、hp190171	2019年9月26日	学生発表賞	日本生物物理学会	Regulation mechanism of agonistic/antagonistic activities of vitamin D receptor studied by generalized ensemble method
30	hp190190	2020年3月16日	第14回(2020年)日本物理学会若手奨励賞	日本物理学会	磁場閉じ込めプラズマの乱流・輸送および同位体質量効果に関する研究
31	hp170041、hp180024	2020年4月14日	文部科学大臣表彰若手科学者賞	文部科学省	大気再突入宇宙機の高速気流とマルチフィジクスの研究
32	hp160207、hp170254、hp180201、hp180274、hp190181	2020年7月28日	若手奨励賞優秀賞	日本蛋白質科学会	Developments and applications of generalized-ensemble methods for free-energy analysis of protein-ligand binding