

4. 「京」利用研究事例 (調整高度化粋)

44

「京」の最近の成果発表事例

調整高度化粋の成果

2015年11月18日発表

2期連続でスーパーコンピュータ「京」がGraph500で世界第1位を獲得

【概要】

スーパーコンピュータ「京」が2015年7月に引き続きGraph500で1位を獲得しました。この指標は、グラフ解析という解析の性能を競う、新たなスパコンのランキングです。グラフ解析は、サイバーセキュリティー、医療情報、ソーシャルネットワーク等、様々な場面で利用されています。

Graph500では、グラフ※の幅優先探索(1秒間にグラフのたどった枝の数(Traversed Edges Per Second: TEPS))という計算を行う速度で、スパコンの性能が評価されます。「京」は、国際研究グループによりアルゴリズムとプログラムの開発が行われ、2014年6月に17,977GTEPSの性能を達成し第1位を獲得、また「京」のシステム全体を効率良く利用可能にするアルゴリズムの改良が行われて2倍近く性能を向上させ、2015年7月に38,621GTEPSを達成し第1位を獲得しました。そして今回も前回と同スコアにて、世界第1位を2期連続で獲得しました。

本成果は、「京」が汎用性が高く、ビッグデータ解析を含む幅広い分野のアプリケーションに対応できることを実証するものです。

※グラフ・・・”節”と呼ばれる多数の点と点の間を繋ぐ線(”枝”と呼ばれる)から構成される集合。
データ間の関連性を示す様々な分野で使われている。

上野 晃司(東京工業大学/理化学研究所)、鈴木 豊太郎(ユニバーシティ・カレッジ・ダブリン)、
SC15にて発表。Graph 500 (2015年11月)のリストは http://www.graph500.org/results_nov_2015。

【関連記事】

(理化学研究所トピックス: http://www.riken.jp/pr/topics/2015/20151118_1/)

(東京工業大学プレスリリース: <http://www.titech.ac.jp/news/2015/032762.html>)



45

「京」の最近の成果発表事例

調整高度化枠の成果

2015年11月10日プレスリリース

「京」にて現実大気の世界最大規模アンサンブルデータ同化に成功 — 天気予報シミュレーションの精度向上へ —

【概要】

天気予報シミュレーションの高精度化を目指し、「京」を使って、現実大気で世界最大規模となる10,240個の「全球大気アンサンブルデータ同化」に成功しました。

2014年7月23日発表のプレスリリースでは、通常100個程度のアンサンブルを10,240個に飛躍的に向上させることに成功したものの、疑似観測データと低解像度で単純化されたSPEEDYモデル※¹を用いたシミュレーション実験による結果でした。今回、現実大気の観測データと解像度112kmの全球大気モデルNICAM※²を使って、10,240個のアンサンブルデータ同化に成功しました。

その結果、実際の天気予報シミュレーションにおいて数千kmに及ぶ遠方の観測データを活用できる可能性があることが分かりました。全球降水観測GPM※³による衛星観測データなどさまざまな観測データをより効果的に活用して天気予報の改善に役立てられる可能性があります。

理化学研究所 計算科学研究機構 三好 建正 チームリーダー (データ同化研究チーム)
論文発表: Miyoshi T, Kondo K, Terasaki K, (2015) *Computer*, **48**:15-21. doi: 10.1109/MC.2015.33.

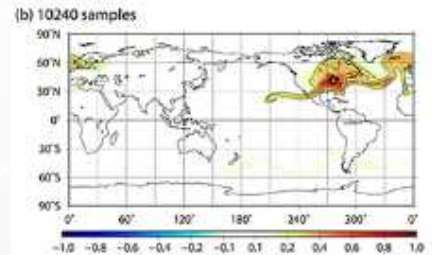
【理化学研究所】

(プレスリリース: http://www.riken.jp/pr/press/2015/20151110_2/)

※SPEEDYモデル・・・2003年にMolteniらによって開発された低解像度で単純化された全球大気シミュレーションモデル。

※NICAM(Nonhydrostatic ICosahedral Atmospheric Model)・・・地球全体で雲の発生・挙動を直接計算することにより高精度の計算を実現した全球気象モデル。

※GPM(Global Precipitation Measurement)計画・・・JAXA、NASAなどによる国際計画で、水循環変動観測衛星「しずく」やGPM主衛星などの人工衛星のさまざまなセンサを使って地球上の降水を観測する。衛星全球降水マップ(GSMaP)では、準リアルタイムで世界中の降水分布を取得できる。



アンサンブルデータ同化による対流圏界面付近での水蒸気量の相関マップ (理化学研究所プレスリリースより)
北アメリカ大陸五大湖付近(図中☆印)の観測データの影響が、はるか数千km遠方まで及ぶ相関パターンを発見した。観測データの湿度が高い場合に、湿度が高くなったり(暖色系)、低くなる(寒色系)ことを示す。

46

「京」の最近の成果発表事例

調整高度化枠の成果

2015年7月14日発表

スーパーコンピュータ「京」がGraph500で1位を奪還

【概要】

スーパーコンピュータ「京」がGraph500で2014年6月以来、再び1位を獲得しました。この指標は、グラフ解析という解析の性能を競う、新たなスパコンのランキングです。グラフ解析は、サイバーセキュリティ、医療情報、ソーシャルネットワーク等、様々な場面で利用されています。

Graph500では、グラフ※の幅優先探索(1秒間にグラフのたどった枝の数(Traversed Edges Per Second; TEPS))という計算を行う速度で、スパコンの性能が評価されます。今回、「京」の82,944個の計算ノードを用いて、1兆個の「節」と16兆個の「枝」からなる大規模なグラフを、わずか0.45秒で探索しました。今回、「京」のシステム全体を効率良く利用可能にするアルゴリズムの改良が行われ、2014年6月の2倍近くの性能向上を達成し、38,621 GTEPS(ギガテップス)というスコアで、「京」が再び1位を獲得しました。

本成果は、「京」が汎用性が高く、ビッグデータ解析を含む幅広い分野のアプリケーションに対応できることを実証するものです。

※グラフ・・・「節」と呼ばれる多数の点と点の間を繋ぐ線(「枝」と呼ばれる)から構成される集合。

データ間の関連性を示す様々な分野で使われている。

上野 晃司(東京工業大学/理化学研究所)、鈴木 豊太郎(ユニバーシティ・カレッジ・ダブリン)
ISC15にて発表。Graph 500(2015年7月)のリストは http://www.graph500.org/results_jul_2015。

【関連記事】

(理化学研究所トピックス: http://www.riken.jp/pr/topics/2015/20150714_1/)

(東京工業大学プレスリリース: <http://www.titech.ac.jp/news/2015/031846.html>)



47

「京」の最近の成果発表事例

調整高度化枠の成果

2015年5月8日プレスリリース

超並列分子動力学計算ソフトウェア「GENESIS」を開発

～「京」を活用し生体分子の運動を1分子レベルから細胞レベルまでの幅広い空間スケールで解析可能に～

【概要】

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ます。従来、タンパク質1分子の計算は可能でしたが、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でした。

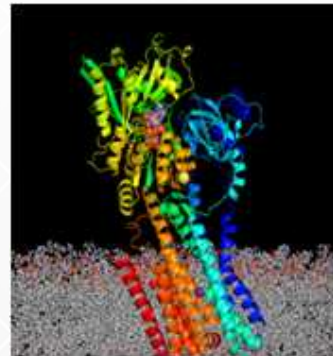
GENESISは、スーパーコンピュータ「京」のアーキテクチャ(基本設計)を考慮に入れた独自の計算アルゴリズムを導入することで、並列計算を高効率化し、細胞環境を想定した1億個の原子で構成されるシステムに対しても高速な分子動力学シミュレーションを実現しました。従来のように生体分子1分子のシミュレーションも可能であり、今後、創薬研究などに幅広く適用されると期待できます。(353文字)

※分子動力学法…粒子同士の力をクーロンの法則などの物理法則に基づいて計算し、ニュートンの運動方程式 $F = ma$ を解くことで分子の動きをコンピュータ内で仮想的に再現する方法。この手法を用いることで、分子集団系のピコ秒～マイクロ秒(1兆分の1秒～100万分の1秒)の時間変化を原子レベルの解像度で観察できる。

理研AICS粒子系生物物理研究チーム 杉田 有治、Jaewoon Jung、小林 千草、松永 康佑
杉田理論分子科学研究室 森 貴治、長浜バイオ大学 依田 隆夫、ミシガン州立大学 Michael Feig
論文発表: J. Jung, T. Mori, C. Kobayashi, Y. Matsunaga, T. Yoda, M. Feig, and Y. Sugita, *WIREs Computational Molecular Science*, doi: 10.1002/wcms.1220.

GENESISホームページ:

<http://www.riken.jp/TMS2012/cbp/en/research/software/genesis/index.html>



GENESISを用いた生体分子シミュレーション
(クレジット: 杉田理論分子科学研究室 森 貴治)
GENESISは、2つの分子動力学プログラム (ATDYNとSPDYN) と解析ツールで構成している。バクテリアの細胞質分子混雑環境を模倣した約1,170万個の原子を含む分子集団系に対して1日あたり17.5 ナノ秒、約1億370万個の原子を含む分子集団系に対しては1日あたり6.5 ナノ秒という性能を、「京」を用いて達成した。

【プレスリリース】

(理化学研究所)

http://www.riken.jp/pr/press/2015/20150508_2/

48

「京」の最近の成果発表事例

調整高度化枠の成果

2014年11月20日発表

「京」が新たなスパコン性能指標「HPCG」で世界トップレベルの高性能を達成
～産業利用など実際のアプリケーションにおける高い性能を証明～

【概要】

世界のスパコン関係者が集まる国際会議SC14で、スパコンの性能を評価する新しい性能指標(ベンチマーク)により、「京」が世界トップレベルの高いスコアを達成しました。この新しい「HPCG」ベンチマークは、いろいろなアプリケーションで良く使われる計算手法(共役勾配法)の処理速度を評価するものです。

今回の結果は「京」が産業利用など実際のアプリケーションにおいても高い性能を発揮できることを意味します。「HPCG」は、世界ランキングTOP500で使用されていた「LINPACK」と並ぶ新しい指標として期待が集まっています。



理化学研究所 計算科学研究機構 南 一生 チームヘッド(ソフトウェア技術チーム)
SC14にて発表。HPCGのリストは <https://software.sandia.gov/hpcg/results.php>

【理化学研究所】

(最新研究成果: <http://www.aics.riken.jp/jp/science/research-highlights/more/hpcg2014.html>)

49

「京」の最近の成果発表事例

調整高度化枠の成果

2014年11月19日発表

スーパーコンピュータ「京」でHPCチャレンジ賞クラス1、2を受賞
—スパコンの総合的な性能と並列プログラミング言語の生産性について高い評価—

【概要】

理研、筑波大学と富士通は、スパコンの総合的な性能を評価するHPCチャレンジベンチマークを「京」で測定した結果により、2014年「HPCチャレンジ賞クラス1」の4部門中2部門で第1位を獲得しました。「京」は「HPCチャレンジ賞クラス1」を2011年から今年2014年まで4年連続第1位を獲得しています。

さらに、理研と筑波大学が共同開発したスパコン用並列プログラミング言語「XcalableMP」と「XcalableACC」が、プログラミング言語の生産性を評価する「HPCチャレンジ賞クラス2パフォーマンス賞」を受賞しました。XcalableMPは2年連続の受賞になります。

本受賞はXcalableMPおよびXcalableACCの持つ高い生産性と性能を実証するものであり、「京」のように大規模な計算環境で動作するHPCアプリケーションの開発に対してこれらの言語が極めて有効であることを示すものです。

理化学研究所 計算科学研究機構 中尾 昌広 研究員(プログラミング環境研究チーム) .
SC14にて発表. HPCチャレンジ賞 (2014年) のリストは

<http://www.hpcchallenge.org/custom/index.html?lid=103&slid=272>

【関連記事】

(理化学研究所トピックス: http://www.riken.jp/pr/topics/2014/20141119_2/)

(筑波大学プレスリリース: <http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/pr/media/hpcc20141119>)



50

「京」の最近の成果発表事例

調整高度化枠の成果

2014年7月23日プレスリリース

「京」を使い1万個の全球大気のアナサンブルデータ同化に成功
～1万km遠方の気象観測データから大気状態を高精度に推定できる可能性も～

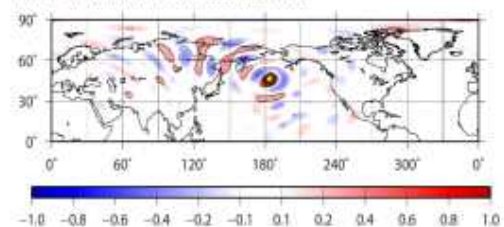
【概要】

10,240個のアナサンブルを使って、全球大気のアナサンブルデータ同化を3週間分行うことに成功しました。必要とされる計算量は、従来の100個程度のアナサンブルを使用する場合に比べて、およそ100万倍になります。

アナサンブルデータ同化システム「LETKF」に、高性能固有値計算ソフトウェア「EigenExa(アイゲンエクサ)」を組み込むことで、アナサンブルデータ同化の計算を、125分から15分へ約8倍高速化して、極めて高い実行効率(理論ピーク性能比 44%超)を達成しました。

これによって、例えば、日本から1万km離れた地点の観測データから、瞬時に日本の大気状態を高い精度で推定できるかもしれません。本成果は、天気予報シミュレーションの改善に貢献することが期待されます。

10240 members w/o localization



アナサンブルデータ同化による18日目の水蒸気量の
相関マップ(理化学研究所プレスリリースより)

10,240個のアナサンブルを使うと、北部太平洋にある黄色い星の場所(図の中心付近)で水蒸気量が多いときに、遠くロシア西部(図の左上)で、水蒸気量が多くなったり(赤)、少なくなったり(青)する傾向があることが分かる。

※データ同化…シミュレーションと現実世界とを結びつける統計数理に基づいた学際的科学。スパコンを用いた天気予報の精度を左右する根幹的な役割を果たす。

※アナサンブルデータ同化…複数のシミュレーションによるアナサンブル予報を用いて、日々変動する誤差を考慮する高度なデータ同化手法。

理化学研究所 計算科学研究機構 三好 建正 チームリーダー(データ同化研究チーム) .

論文発表: T. Miyoshi, K. Kondo, and T. Imamura. (2014) *Geophysical Research Letters*.

doi:10.1002/2014GL060863.

【理化学研究所】

(プレスリリース: http://www.riken.jp/pr/press/2014/20140723_2/)

51

「京」の最近の成果発表事例

調整高度化枠の成果

2014年6月24日発表

スーパーコンピュータ「京」がGraph500で1位を獲得

【概要】

スーパーコンピュータ「京」がGraph500で1位を獲得しました。この指標は、グラフ解析という解析の性能を競う、新たなスパコンのランキングです。グラフ解析は、サイバーセキュリティー、医療情報、ソーシャルネットワーク等、様々な場面で利用されています。

Graph500では、グラフ※の幅優先探索(1秒間にグラフのたどった枝の数(Traversed Edges Per Second; TEPS))という計算を行う速度で、スパコンの性能が評価されます。今回、「京」の約2/3(に相当する)65,536個の計算ノードを用いて、1兆個の「節」と16兆個の「枝」からなる大規模なグラフを、わずか0.98秒で探索しました。その結果、17,977 GTEPS(ギガテップス)というスコアで、「京」は1位を獲得しました。

本成果は、「京」が汎用性が高く、ビッグデータ解析を含む幅広い分野のアプリケーションに対応できることを実証するものです。



※グラフ・・・「節」と呼ばれる多数の点と点の間を繋ぐ線(「枝」と呼ばれる)から構成される集合。データ間の関連性を示す様々な分野で使われている。

上野 晃司(東京工業大学/理化学研究所), 鈴木 豊太郎(ユニバーシティ・カレッジ・ダブリン), ISC14にて発表。Graph 500 (2014年6月)のリストは http://www.graph500.org/results_jun_2014。

【関連記事】

(理化学研究所トピックス: http://www.riken.jp/pr/topics/2014/20140624_1/)

(東京工業大学プレスリリース: <http://www.titech.ac.jp/news/2014/028052.html>)

52

「京」の最近の成果発表事例

調整高度化枠の成果

2013年12月5日プレスリリース

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

【概要】

新開発のソフトウェア、「EigenExa(アイゲンエクサ)」が、「京」のシミュレーションで使用するアプリケーションの計算速度を飛躍的に向上させることを実証しました。実際にこのソフトウェアを「京」で使い、世界最大規模である計算(100万×100万の行列での固有値計算)を行った結果、「京」登場以前は1週間程度かかると考えられてきた計算時間を、わずか1時間に短縮することに成功しました。

今後、半導体のデバイス設計や新材料開発、新薬の探索などを行うための大規模コンピュータシミュレーションに加え、バイオインフォマティクス(※)や社会科学などで用いられるデータの相関関係を解析するスピードアップに期待が寄せられます。この「EigenExa」は一般にも公開されています。

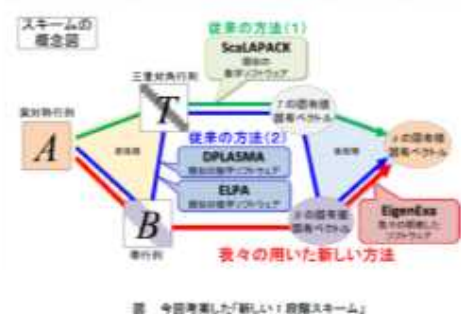
※バイオインフォマティクス・・・生物情報科学ともいい、ゲノムなど生物に関係する膨大なデータをコンピューターで解析する研究分野。

理化学研究所 計算科学研究機構 今村 俊幸 チームリーダー(大規模並列数値計算技術研究チーム)

学会発表: Kazuo MINAMI. "Performance Improvement of Applications on the K computer". 2013年11月20日 The international Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis 2013 (SC13)にて口頭発表。

【理化学研究所】

(プレスリリース: http://www.riken.jp/pr/press/2013/20131205_1/)



53

「京」の最近の成果発表事例

調整高度化枠の成果

2013年11月22日発表

スーパーコンピュータ「京」でHPCチャレンジ賞クラス1、2(初)を受賞
—スパコンの高性能並列言語の実装における生産性(日本初受賞)と総合的な性能が高い評価—

【概要】

理研と筑波大学が共同開発したスーパーコンピュータ用並列言語「XcalableMP」による実装が、「京」で測定した結果により、プログラミング言語の総合的な性能を評価する「HPCチャレンジ賞クラス2」を日本で初めて受賞しました。

また、理研、筑波大学および富士通は、「京」で測定した、スパコンの総合的な性能を評価するHPCチャレンジベンチマークの実測結果により、2013年「HPCチャレンジ賞クラス1」の4部門中3部門で第1位を獲得しました。「京」は「HPCチャレンジ賞クラス1」を2011年より今年2013年まで3年連続第1位を獲得しています。

本受賞はXcalableMPの持つ高生産性と高性能性の両方を実証するものであり、「京」のように大規模な計算環境で動作するHPCアプリケーションの開発に対してXcalableMPが極めて有効であることを示すものです。

理化学研究所 計算科学研究機構 中尾 昌広 研究員(プログラミング環境研究チーム) .
SC13にて発表. HPCチャレンジ賞 (2013年) のリストは
<http://www.hpcchallenge.org/custom/index.html?id=103&slid=263>

【関連記事】

(理化学研究所トピックス: http://www.riken.jp/pr/topics/2013/20131122_1/)

(筑波大学プレスリリース: <http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/pr/media/hpcc20131122/>)



54

5. 「京」利用研究事例 (調整高度化枠以外)

55

「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

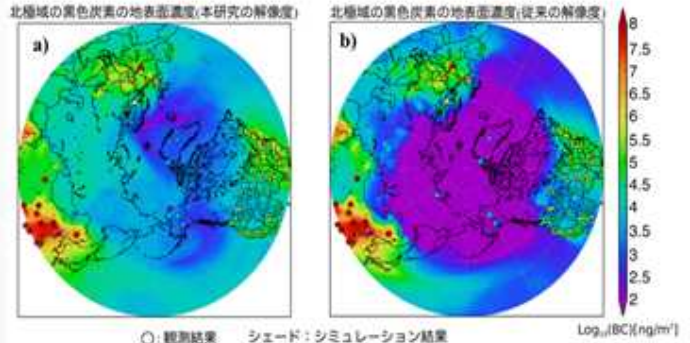
北極域への「すす」の輸送メカニズムを解明 -「京」を用いた超高解像度の全球大気汚染物質シミュレーション-

【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、より不確実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/news/detail.php?i=19020>

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

56

「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

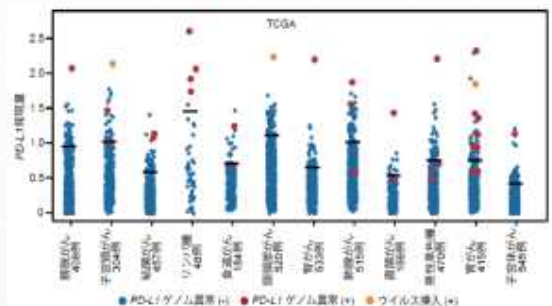
がん細胞が免疫から逃れるメカニズムの解明 -免疫チェックポイント阻害剤の効果予測への応用に期待-

【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

【プレスリリース】

京都大学 http://www.kyoto-u.ac.jp/ja/research/research_results/2016/160524_1.html

57

「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～

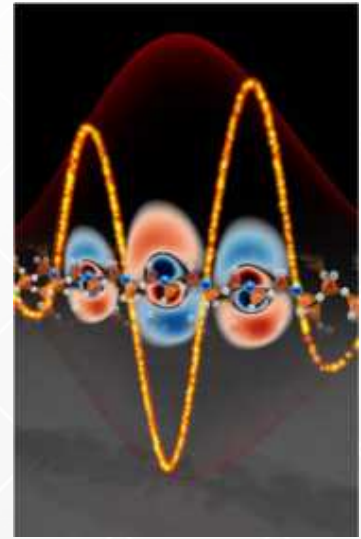
【概要】

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、各原子の周りにいる電子を振動させる。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.mpg.de/5328196/16_05_23

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

58

「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

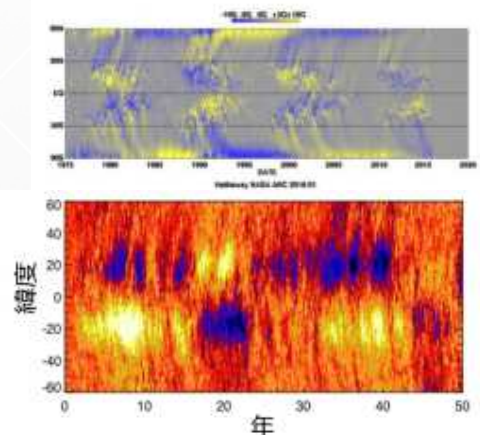
太陽最古の謎 解決に王手 スーパーコンピュータ「京」による世界最高解像度計算で太陽の磁場生成メカニズムを世界で初めて解明

【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）



（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。

HPC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

【プレスリリース】

千葉大学：<http://www.chiba-u.ac.jp/general/publicity/press/files/2015/20160324.pdf>

59

「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】

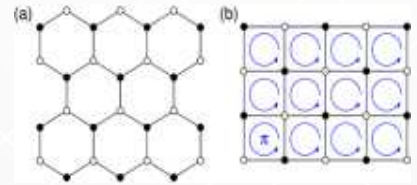
理研の研究チームは、グラフェンなどで見られる質量ゼロの2次元ディラック電子系^{※1}において、電子間の相互作用が引き起こす金属から絶縁体への相転移（金属-絶縁体転移）が普遍的な性質をもつことを、明らかにしました。

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。

^{※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。



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

袖木 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

【プレスリリース】
理化学研究所：http://www.riken.jp/pr/press/2016/20160319_1/

60

「京」の最近の成果発表事例

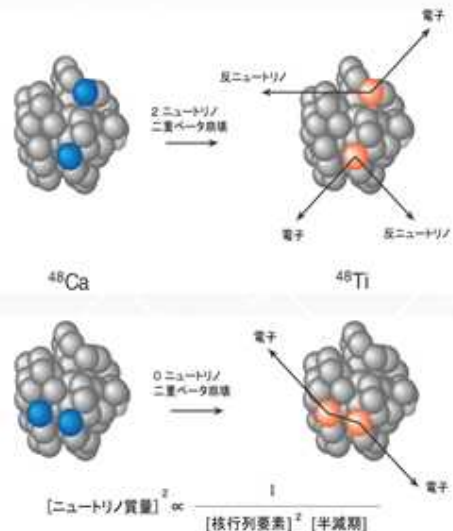
戦略プログラム分野5の成果

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。



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

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/>

61

「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。

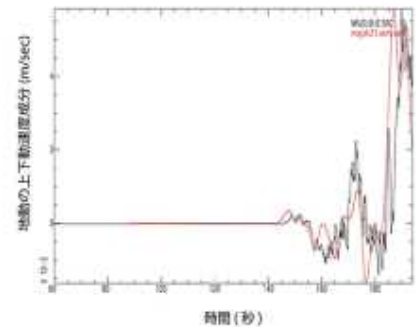
※地球上を伝播する地震波の解析には周期1秒の実体波（P波・S波）が必要であり、大きな目標となっている。2003年には、地球シミュレータによって、現実的な地球モデルに対して地震波形を周期5秒の精度で計算に成功していた。今回の研究では、周期1.2秒の精度でのシミュレーションに成功した。

HPC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

【プレスリリース】

海洋研究開発機構: http://www.jamstec.go.jp/j/about/press_release/20160317/



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。

62

「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。

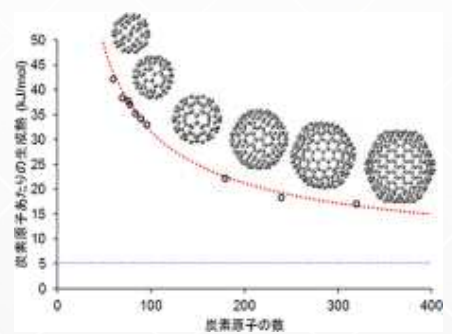
※ C_{70} 、 C_{76} 、 C_{78} 、 C_{84} 、 C_{90} 、 C_{96} 、 C_{180} 、 C_{240} 、 C_{320} 。数字はそれぞれ炭素の数を表す。応用研究の一つに、 C_{60} の中にアルカリ金属を挿入すると超伝導を示すというものが、フラレンの中心にある空洞のサイズが変わる、高次フラレンの研究も盛んにおこなわれている。

※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

【プレスリリース】

理化学研究所: http://www.riken.jp/pr/press/2016/20160316_1/



フラ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。

63

「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。

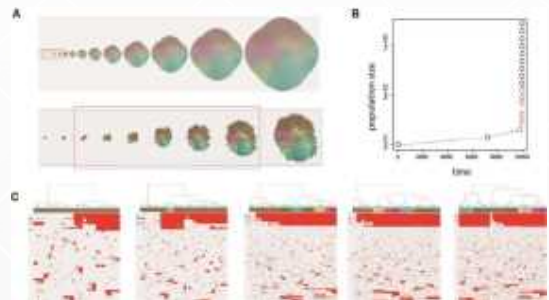


図1：がんの進化のシミュレーションの可視化
(A) 成長するがん (B) 増殖曲線 (C) 遺伝子変異パターン

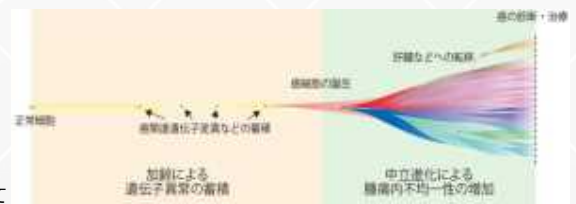


図2：本研究により提唱された大腸がん進化のモデル図

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3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>

【プレスリリース】
九州大学 https://www.kyushu-u.ac.jp/f/5858/2016_02_19_2.pdf

64

「京」の最近の成果発表事例

一般利用課題の成果

2016年1月12日プレスリリース

世界最大規模の磁化反転シミュレーターを開発し、ジスプロシウム不要のネオジム磁石開発の指針を初めて提示

【概要】

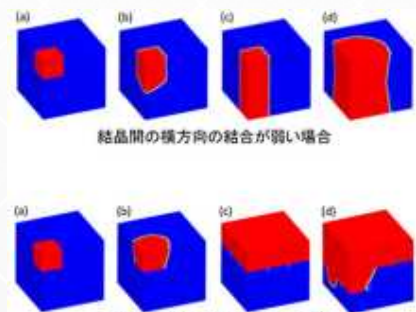
世界最大規模（従来の約60倍、3億メッシュ以上の規模）の磁化反転シミュレーターを開発し、永久磁石であるネオジム磁石の微細構造と磁石の強さの関係性を明らかにする大規模シミュレーションを「京」上で行いました。

その結果、ジスプロシウム*1を使用せずに、従来の2倍以上の抗磁力*2を持つ強力なネオジム磁石の開発指針を示すことに世界で初めて成功しました。

本シミュレーションの結果より、ジスプロシウムを必要としない強力なネオジム磁石の実現に向けた、新たな磁石材料の研究開発の加速化が期待できます。

「京」一般利用課題 合田義弘（東京工業大学）
学会発表：2016年1月12日 13th Joint MMM-Intermag Conferenceにて発表。
Uehara Y, Shimizu K, Ataka T, Tanaka T, Oshima H, Ohkubo T, Hirokawa S, and Hono K. "Micromagnetic Simulation of the Influence of Orientation Dependence of Grain Boundary Properties on Coercivities of Nd-Fe-B Sintered Magnets".

【プレスリリース】
（富士通：<http://pr.fujitsu.com/jp/news/2016/01/12.html>）



多結晶モデルの磁化反転シミュレーション
（富士通プレスリリースより）

ジスプロシウム：希少な希土類元素である重レアアースのひとつ。同じく重レアアースであるテルビウム(Tb)と同様に、ネオジム磁石の抗磁力を高めるのに効果的な元素であるが、地球上の存在比がネオジムの10%程度であるため、使用量の削減が大きな課題となっている。

抗磁力：磁石が、自らの発する磁力に対抗する磁界をかけても磁石としての働きを維持できる力。電気自動車の駆動モーターに使われるネオジム磁石には高い抗磁力が求められるため、資源的に希少なジスプロシウム(Dy)が使われている。

65

「京」の最近の成果発表事例

重点化促進枠利用課題の成果

2015年12月18日報道発表

スーパーコンピュータ「京」による長周期地震動のシミュレーション ～「南海トラフ沿いの巨大地震による長周期地震動」への貢献～

【概要】

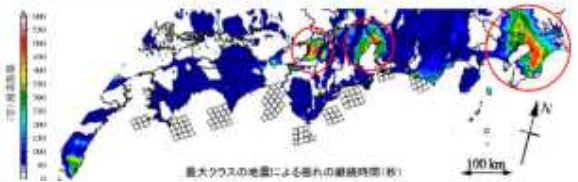
「南海トラフ巨大地震」が発生した場合に、「長周期地震動」の揺れがどのように各地に伝わり、各地でどのような揺れが発生するかを明らかにすることができました。長周期地震動による地表の揺れや超高層建築物の揺れについて、「京」を利用した詳細な計算を行いました。その結果、地表の揺れが継続する時間は3大都市圏で長くなり、超高層建築物の揺れは沿岸や内陸の一部地域で最大250cm/秒になると推定されました。

今後、巨大地震で発生した長周期地震動の伝わり方を予測し、そのデータを防災や建築などの各専門機関が詳細に検討できるようになることで超高層建築物や石油タンクなどの巨大構造物における防災対策や、建造物の性能評価や建築基準に生かされていくと期待されます。

「京」重点化促進枠利用課題 藤山 秀章（内閣府）、名波 義昭（内閣府）

【関連記事】

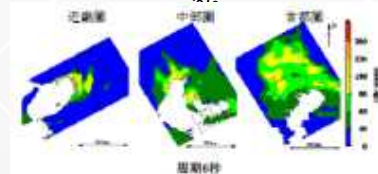
（文部科学省プレスリリース：http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/27/12/1365496.htm）
（内閣府報道発表：http://www.bousai.go.jp/jishin/nankai/nankaitrough_report.html）



地表の揺れの推計結果

（文部科学省プレスリリースより）

地表の揺れの継続時間は3大都市圏で長くなることがわかる。



超高層建築物の揺れの推定と影響評価

（文部科学省プレスリリースより）

沿岸や内陸の一部地域で最大250m/秒になる。

66

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野3の成果

2015年11月30日プレスリリース

地震・津波観測監視システム「DONET」で海底における長周期地震動を観測

【概要】

2013年4月淡路島での中規模地震（M5.8）の発生時における、地震・津波観測監視システム「DONET」※1の海底強震計データの解析を行い、長くゆっくりとした大きな揺れ「長周期地震動」※2が深海底の広い領域で発生していることを明らかにしました。

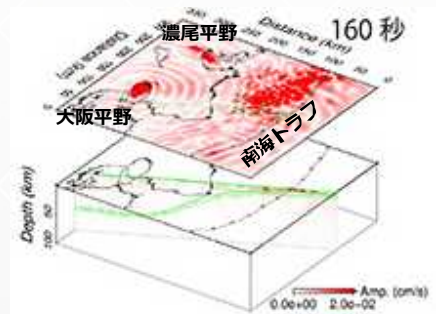
さらに、「京」を使った大規模シミュレーションで海底における長周期地震動の特徴を再現した結果、南海トラフ周辺に広範囲にわたって広がっている軟らかい海洋堆積層の存在が長周期地震動の発達に本質的な影響を与えていることが分かりました。

海底における長周期地震動の特徴を把握し、発達過程を解明することは、陸域における地震動予測の高精度化や地震の規模・メカニズム解析手法の高度化につながり、地震防災・減災のための基礎的な知見となると考えられます。

HPCI戦略プログラム分野3 中村 武史(JAMSTEC)、竹中 博士(岡山大)、岡元 太郎(東京工業大)、大堀道広(福井大)、坪井 誠司(JAMSTEC)、論文発表：Nakamura T, Takenaka H, Okamoto T, Ohori M, Tsuboi S. (2015) *Sci Rep*. 5:16648. doi: 10.1038/srep16648.

【プレスリリース】

(JAMSTEC：http://www.jamstec.go.jp/j/about/press_release/20151130/)
(東京工業大学：<http://www.titech.ac.jp/news/2015/032892.html>)



2013年4月13日に発生した淡路島中規模地震における地震波伝播シミュレーション (JAMSTECプレスリリースより)

DONET：海域で発生する地震・津波を常時観測監視するため、JAMSTECが南海トラフ周辺の深海底に設置している地震・津波観測監視システム。「DONET1」は、紀伊半島沖熊野灘の水深1,900～4,400 mの海底に設置。現在、四国沖室戸海盆周辺の水深1,100～4,400 mの海底に「DONET2」を構築中。

長周期地震動：地震波の伝播に伴う周期2秒程度以上の地震動（地面の揺れ）。震源が浅い場合、地球表層を伝わる表面波が観測されやすい周期帯域である。

67

「京」の最近の成果発表事例

産業利用課題の成果

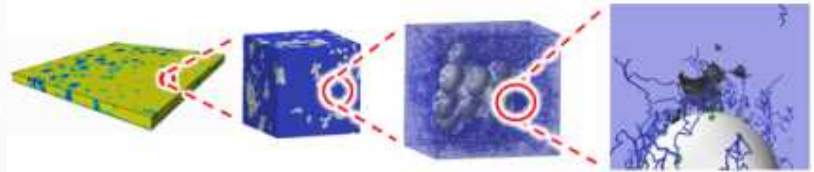
2015年11月12日付 住友ゴム工業プレスリリースより

SPring-8・J-PARC・「京」を連携活用させたタイヤ用新材料開発技術を確立 — 低燃費性能・グリップ性能に加え耐摩耗性能200%のタイヤ —

【概要】

住友ゴム工業は、新材料開発技術「ADVANCED 4D NANO DESIGN」を完成させました。大型放射光施設「SPring-8」・大強度陽子加速器施設「J-PARC」・スーパーコンピュータ「京」を活用した高度なシミュレーション解析により、ゴムの内部構造をナノからミクロンレベルまで連続的かつ鮮明に解析しシミュレーションすることが可能となり、タイヤの背反性能の大幅な向上を期待できます。

新技術を採用したコンセプトタイヤ「耐摩耗マックストレッドゴム搭載タイヤ」のトレッドゴムは、低燃費性能とウエットグリップ性能を維持しながら、耐摩耗性能を200%に向上させることに成功しています。この新技術を活用することで材料開発のスピードをさらに上げ、今後も高性能で経済性と環境性に優れたタイヤの開発が期待されます。



4D-CT技術と大規模シミュレーションによる ゴム破壊のトータル解析技術

(住友ゴム工業プレスリリースより)

左図：4D-CT法で観察したゴム破壊の様子。

右図：濃い青：ポリマー分子。白：ゴムの強度を向上させるために配合する充填材。

直径は約10~20nm。黒：破壊起点部分

「京」産業利用課題 岸本 浩通 (住友ゴム工業株式会社 材料開発本部 材料第三部)

【プレスリリース】

(住友ゴム工業: http://www.srigroup.co.jp/data/open/cnt/3/6433/1/2015_137.pdf)

※SPring-8 … 世界最高性能の放射光を生み出すことができる大型放射光施設(兵庫県佐用郡佐用町)

※J-PARC … 最先端研究を行うための陽子加速器群と実験施設群(茨城県那珂郡東海村)

68

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野1の成果

2015年10月6日プレスリリース

成人T細胞白血病 (ATL) リンパ腫における遺伝子異常の解明

【概要】

成人T細胞白血病 (ATL) はHTLV-1というレトロウイルスによって引き起こされるT細胞の腫瘍ですが、体細胞異常の遺伝学的な仕組みはこれまでほとんど解明されていませんでした。

今回、「京」と東京大学医科学研究所ヒトゲノム解析センターのスパコン「Shirokane」※を用いて、約400例のATL症例の大規模な遺伝子解析を行い、ATLの遺伝子異常の全貌を解明することに成功しました。本研究では、全エクソン解析・全ゲノム解析・トランスクリプトーム解析などの次世代シーケンサーを用いた解析と、マイクロアレイを用いたコピー数異常やDNAメチル化の解析を組み合わせ、さまざまな遺伝子の異常を包括的に明らかにしました。

解析の結果、ATL患者に特有の遺伝子異常を約50個見出し、患者1人当たり8~9個の遺伝子に異常が存在することが明らかとなりました。本成果はATLの発症や悪化の仕組みの解明に大きな進歩をもたらすのみならず、本疾患を克服するための診断や治療への応用が期待されます。

HPCI戦略プログラム分野1 小川誠司 (京都大学)、片岡圭亮 (京都大学)、下田和哉 (宮崎大学)、宮野悟 (東京大学)、柴田龍弘 (国立がん研究センター)。

論文発表: Kataoka K, Nagata Y, Kitanaka A, et al. (2015) *Nature Genetics*. 47: 1304-1315. doi: .

【プレスリリース】

(京都大学: http://www.kyoto-u.ac.jp/ja/research/research_results/2015/151006_1.html)

(宮崎大学: http://www.miyazaki-u.ac.jp/new_s/20151027-2)

(東京大学: <http://www.ims.u-tokyo.ac.jp/imsut/jp/files/151005.pdf>)

(国立がん研究センター: http://www.ncc.go.jp/jp/information/press_release_20151006.html)

(日本医療研究開発機構: http://www.amed.go.jp/new_s/release_20151006-01.html)



ATLにおける遺伝子異常の
全体像(計370例の解析結果)
(京都大学プレスリリースより)

ゲノム: ある生物のもつ全ての遺伝情報、あるいはこれを保持するDNAの全塩基配列である。タンパク質のアミノ酸配列をコードするコーディング(エクソン)領域とそれ以外のノンコーディング領域に大別される。

シーケンサー: DNAを構成するヌクレオチドの塩基配列を決定すること。次世代シーケンサーの登場により、大量の塩基配列を短時間で決定することが可能となり、癌における遺伝子変異の知見が飛躍的に進歩した。

※Shirokaneについて <https://supcom.hgc.jp/shirokane.html>

69

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野3の成果

2015年9月29日発表

「京」によるサイクロン「ナルギス」のアンサンブルカルマンフィルタデータ同化と高潮の再現実験

【概要】

サイクロン「ナルギス」は、2008年5月2日にミャンマー南部に上陸し、10万人を超える死者を出す同国では未曾有とも言える高潮災害を引き起こしました。

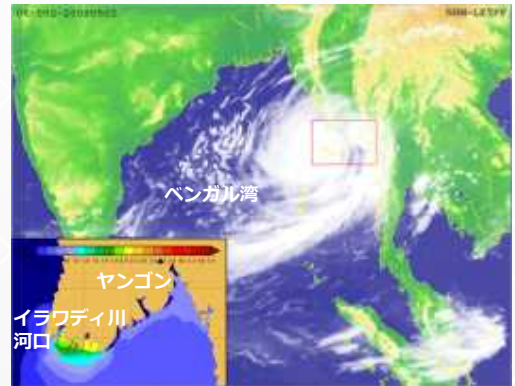
本研究では「京」を用いて、50メンバーの局所アンサンブル変換カルマンフィルタ(LETKF)でベンガル湾の観測データを同化して解析値を作成し、10km解像度の気象庁非静力学モデル(NHM)によるアンサンブル予報実験を行いました。4月30日21時に開始した予報実験で、上陸時刻、位置、中心気圧ともに、これまでの全球解析による予報を大きく改善しました。

高潮の再現実験では、既存研究による高潮予測の結果を大きく改善し、イラワディ川河口付近での最大5mを超える水位上昇や、ヤンゴン付近での最大水位3mを表現しました。本成果は、サイクロンの事前避難につながる予測が可能であったことを示すものです。

HPCI戦略プログラム分野3 Le Duc (海洋研究開発機構/気象研究所), 斉藤 和雄 (気象研究所/海洋研究開発機構)
論文発表: Duc, L., T. Kuroda, K. Saito and T. Fujita. (2015) *Tellus A.* **67**: 25941. doi: 10.3402/tellusa.v67.25941.

【海洋研究開発機構/気象研究所】

(最新研究成果: https://www.jamstec.go.jp/hpci-sp/research_results/nargis.html)



本研究でのシミュレーションによる雲画像、海面水位 (JAMSTECプレスリリースより)

70

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野2の成果

2015年9月17日プレスリリース

メタンハイドレート表面への分子吸着機構を解明

【概要】

メタンハイドレートは、メタンと水からなる結晶で、「燃える氷」として広く知られていますが、天然ガスを輸送するパイプラインを詰まらせるという問題があります。様々な解決法が提案されていますが、その一つに阻害剤を添加する方法があります。

今回、「京」を用いた計算機シミュレーションによって、メタンハイドレートへの阻害剤分子の吸着機構を世界で初めて解明しました。ハイドレート表面への分子の吸着が、エントロピーに由来していることが明らかになりました。

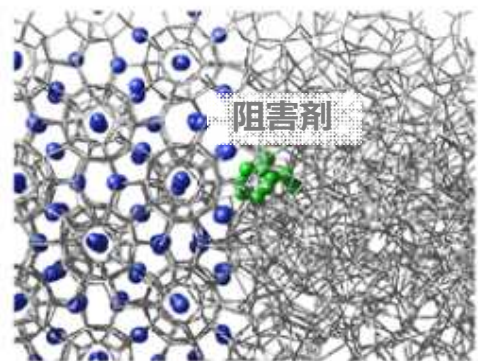
本研究成果によって、メタンハイドレートの生成を抑制する高効率の阻害剤の開発が進めば、天然ガス輸送の効率化につながるかと期待されます。

HPCI戦略プログラム分野2 田中秀樹 教授(岡山大学)
論文発表: T. Yagasaki, M. Matsumoto, and H. Tanaka, (2015). *J. Am. Chem. Soc.* **137**: 12079–12085. doi: 10.1021/jacs.5b07417.

【関連記事】

(岡山大学プレスリリース:

http://www.okayama-u.ac.jp/tp/release/release_id334.html)



メタン
ハイドレート

水

水中のメタンハイドレート 界面に吸着する阻害剤

(岡山大学プレスリリースより)

右半分: 液体の水。乱雑な水素結合ネットワークができています。

左半分: メタンハイドレート中では、水素結合がきれいな籠状構造を作り、それぞれの籠に、メタン分子(青い球)が一つずつ入っている。

緑: 阻害剤の一つであるPVCap (polyvinylcaprolactam)の単量体。阻害剤の疎水的な部分が、ハイドレート界面の開いた籠構造に入り込むことで、大きく安定化する。

71

「京」の最近の成果発表事例

一般利用課題の成果

2015年7月8日プレスリリース

核融合プラズマ中の乱流の相互作用をスーパーコンピュータ「京」で発見

【概要】

「京」を用いた研究によって、核融合プラズマ中に存在する幅広いスケール(イオン～電子)におよぶ乱流の相互作用—「マルチスケール相互作用」の仕組みを明らかにしました。核融合炉は、超伝導コイルが作り出す強力な磁場を利用して、高温・高圧のプラズマを閉じ込めることで核融合反応を引き起こし、そのエネルギーを取り出そうという試みです。

研究グループは「京」の演算性能をフル活用して、核融合プラズマ中でイオンが作る乱流と電子が作る乱流が混在する複雑な振る舞いを正確にシミュレーションすることに初めて成功しました。その結果、イオンが作る乱流と電子が作る乱流がお互いに影響を及ぼし合う「マルチスケール相互作用」の存在を突き止めました。

本成果は、核融合炉におけるプラズマ閉じ込め性能の評価・予測の進展に大きく貢献します。

※1 核融合炉 … 環境にやさしく安全な次世代発電技術として期待されており、国際協力の下で盛んに研究開発が進む。

※2 プラズマ … 高温の気体では、気体原子がイオンと電子に電離して別々に運動する。この電離した気体をプラズマという。

※3 核融合反応 … 2つの原子核が融合し、1つの原子核になる反応。水素のような軽い元素同士の核融合反応では質量がわずかに減少し、エネルギーに変わる。

「京」一般利用課題 井戸村泰宏 (JAEA)、渡邊智彦 (NIFS、現名大)、町田昌彦 (JAEA)、前山伸也 (JAEA、現名大)、仲田資季 (JAEA、現NIFS)、河村拓馬、三木一弘 (JAEA)、石澤明宏 (NIFS)、今村俊幸 (理研)、松岡清吉 (RIST)

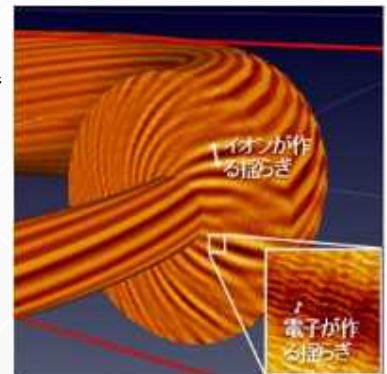
論文発表: S. Maeyama, Y. Idomura, T.-H. Watanabe, M. Nakata, M. Yagi, N. Miyato, A. Ishizawa, and M. Nunami. (2015) *Phys. Rev. Lett.* **114**:255002. doi: 10.1103/PhysRevLett.114.255002.

学会発表: 2013.11.17-22 Supercomputing Conference 2013 (SC13)にてベストポスター賞受賞。
2014.10.15 25th IAEA Fusion Energy Conferenceにて招待講演。

【プレスリリース】

(日本原子力研究開発機構: <http://www.jaea.go.jp/02/press2015/p15070801/>)

(名古屋大学: http://www.nagoya-u.ac.jp/about-nu/public-relations/researchinfo/upload_images/20150708_sci.pdf)



「京」によるシミュレーション結果

(日本原子力研究開発機構プレスリリースより)

円環状に閉じ込められたプラズマの断面図に、乱流による揺らぎを表示している。イオンが作る大きな揺らぎと、電子が作る細かな揺らぎ(拡大図中)が共存している。

72

「京」の最近の成果発表事例

産業利用課題の成果

2015年7月6日付 住友ゴム工業プレスリリースより

「京」など最先端設備を活用した新材料開発技術が2015年中に完成～新たな価値を持つタイヤを生み出す可能性～

【概要】

住友ゴム工業は、新材料開発技術「ADVANCED 4D NANO DESIGN」を開発中です。この技術では、「京」などを活用した高度なシミュレーション解析により、タイヤの背反性能であるグリップ性能、低燃費性能、耐摩耗性能の大幅な向上を期待できます。

大型放射光施設「SPring-8」でゴムの構造解析を、中性子実験施設

「J-PARC」で運動解析を行うことでゴ

ム材料の原子、分子の動きを把握し、スーパーコンピュータ「京」でゴムモデルのリアルなシミュレーションを行います。特に大規模スケールシミュレーションだから実現できるゴム中の分子レベルのミクロな破壊現象からマクロな摩耗現象を可視化することで解析を促進し、ゴムの破壊や摩耗を抑える新素材、新配合の開発が可能となります。

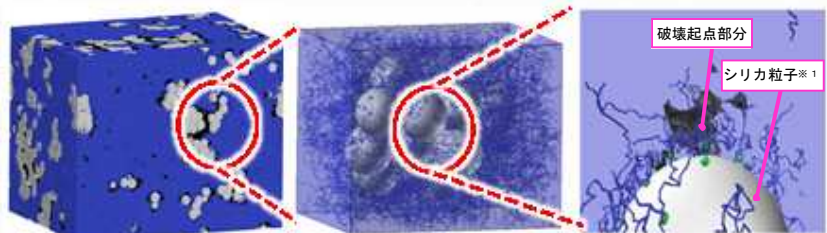
新技術は今年10月の第44回東京モーターショー2015で発表、2016年以降に実際の商品に採用予定です。

「京」産業利用課題 岸本 浩通 (住友ゴム工業株式会社 材料開発本部 材料第三部)

【プレスリリース】

(住友ゴム工業:

http://www.srigroup.co.jp/newsrelease/2015/sri/2015_075.html)



ゴム破壊の大規模シミュレーション画像

(住友ゴム工業プレスリリースより)

濃い青: ポリマー分子。白: ゴムの強度を向上させるために配合する充填材。直径は約10~20nm。黒: 破壊起点部分

※SPring-8 … 世界最高性能の放射光を生み出すことができる大型放射光施設(兵庫県佐用郡佐用町)

※J-PARC … 最先端研究を行うための陽子加速器群と実験施設群(茨城県那珂郡東海村)

73

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野5の成果

2015年5月1日プレスリリース

スーパーコンピュータ「京」と「アテルイ」による、世界最大規模のダークマターシミュレーション
～宇宙初期から現在にいたる約138億年のダークマターの構造形成や進化過程を従来よりも格段に良い精度で明らかに～

【概要】

宇宙には、私たちが直接見ている物質（バリオン※）の他に、ダークマターとよばれる物質が質量で5倍程度存在するといわれており、宇宙の重力的な構造形成、進化の主要な役割を果たしています。ダークマターは重力によりハローという巨大な構造をつかっており、その大きさは、光り輝く銀河の約10倍と考えられます。

研究グループは、宇宙初期から現在にいたる約5500億個ものダークマター粒子の重力進化を計算しました。計算した空間サイズは、一辺の大きさが最大でおよそ54億光年です。これほど大きい空間でのシミュレーションとしては世界最高分解能で、銀河スケールのダークマターの構造形成シミュレーションとして世界最大です。

今後は、私たちが目にする銀河や活動銀河核などの天体観測と直接比較できる天体の疑似カタログを整備し、公開していきます。

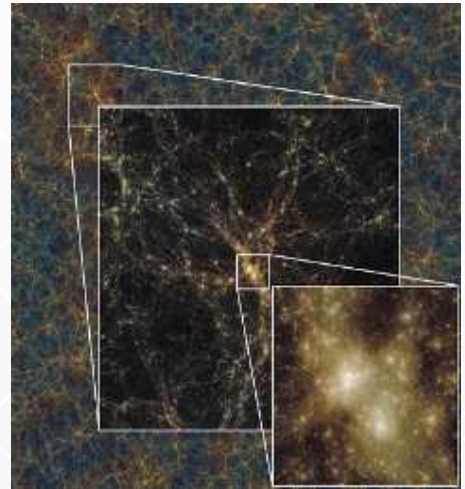
※バリオン … 3つのクォークにより構成される粒子の総称。陽子（アップクォーク2つとダウンクォーク1つからなる）や中性子（アップクォーク1つとダウンクォーク2つからなる）などがある。

HPCI戦略プログラム分野5 石山智明（千葉大学）

論文発表： T. Ishiyama, M. Enoki, M. Kobayashi, R. Makiya, M. Nagashima, and T. Oogi, *Publ Astron Soc Jpn*, doi: 10.1093/pasj/psv021.

【プレスリリース】

（千葉大学: http://www.chiba-u.ac.jp/general/publicity/press/pdf/2015/20150501_1.pdf）
（国立天文台: <http://www.cfca.nao.ac.jp/pr/20150501>）



現在の宇宙でのダークマター分布

（クレジット: 国立天文台プレスリリース）

本シミュレーションで形成した一番大きい銀河団サイズのハロー。一辺の大きさは約54億光年。多くのハローが形成され、その中心には銀河が、さらに銀河中心にはブラックホールが存在していると考えられている。

74

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野3の成果

2015年3月2日Webリリース

局地的大雨や竜巻などの予測精度改善に向けて
～「京」を使った高解像度大気モデルによる大規模データ同化の実行～

【概要】

局地的な大雨や竜巻などの予測は防災上とても重要です。予測精度の向上には、現実の大気の状態を数値天気予報モデル（※1）の初期値（計算に必要な最初の値）に精度よく反映する必要があります。そのための最適な大気の状態を推定する手法の一つが「データ同化」（※2）です。

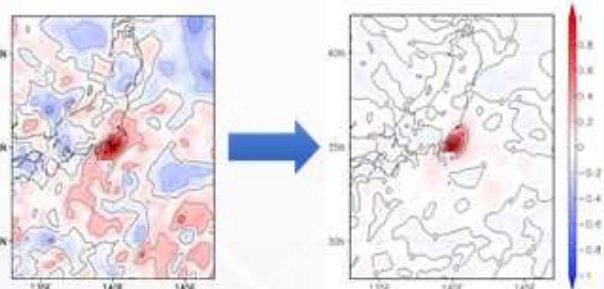
本研究ではデータ同化手法の改善を通じた予測精度改善を目指し、「京」を用いて、実際の天気予報に用いられる高解像度大気モデルに対し、1000サンプルを用いた大規模なデータ同化実験を行いました。その結果、誤差の少ない理想的な初期値を得るためのサンプル数などが明らかになりました（図）。

これは「京」によって世界で初めて可能になった数値実験で、今後の局地的な大雨や竜巻などの予測研究に大きな知見を与えるものです。

HPCI戦略プログラム分野3 国井勝（気象研究所）、斉藤和雄（気象研究所/海洋研究開発機構）
論文発表： Kunii, M., (2014), *J. Meteor. Soc. Japan*, 92:623–633. doi: 10.2151/jmsj.2014-607.

※1数値天気予報モデル：シミュレーションを用いて大気の流れや大気中の現象（降水や雲の生成消滅など）を解析し、予測するためには、数式を使って大気の状態を表す必要がある。天気予報を行うための大気中の現象を表す数式の集まりを「数値天気予報モデル」という。

※2データ同化：シミュレーションと現実世界の「ずれ」を、統計数学に基づく手法で実際の観測データとつぎあわせ、軌道修正すること。本研究で使われているのは、少しバラつきをもたせた初期値からそれぞれシミュレーションを行い、誤差を考慮した観測値とつぎあわせて最も確からしいシミュレーション結果を選ぶ手法。シミュレーションのサンプル数が十分でないと、誤差の影響により精度が落ちてしまうことがわかっているものの、計算機の能力の制限により、50～100サンプル程度で行われることがほとんどであった。



東西風の誤差の分布（高度約5.5キロメートル、気圧500ヘクトパスカル）（JAMSTEC HPより）

赤色や青色が濃いほど予測誤差が大きい。

（左）50個のサンプルを用いた結果。中心点（図中の×）から離れたところでは誤差は大きくなる。（右）1000個のサンプルを用いた結果。中心点から離れた所でも誤差は非常に小さい。ほぼ理想的な結果が得られている。

【関連情報】

（JAMSTEC最新研究成果: http://www.jamstec.go.jp/hpci-sp/research_results/enkf1000.html）

（気象研究所Webリリース: <http://www.mri-jima.go.jp/Topics/H26/270302/270302.html>）

75

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野3の成果

2015年2月27日プレスリリース

スパコンで高解像度の津波モデルを用いてリアルタイムに浸水を解析
～津波警報を高度化し、災害に強い都市づくりに貢献～

【概要】

東日本大震災の際には、地震発生から3分後に出された津波の高さの予報値を実際よりも低く見積もっており、リアルタイムでの推定方法に大きな課題が残りました。また、津波の高さだけではなく浸水範囲などの情報の必要性も指摘されました。

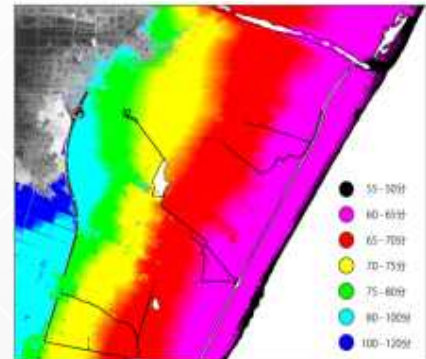
今回、東北大学と富士通研究所の研究チームは、従来よりも解像度の高い(5メートル四方の単位で見分けられる)津波モデルを開発しました。地震発生時の観測データから推定される津波の発生源を入力することで、短時間で津波の浸水状況を予測可能です。このモデルを「京」で実施・検証したところ、従来ワークステーション(研究開発用のコンピュータ)で数日を要した計算が、数分以内に完了できることが分かりました。

本技術を用いると津波の浸水状況をリアルタイムにかつ詳細に予測できるため、より適切な災害対策が期待されます。

※津波モデル…シミュレーションを用いて津波を解析するためには、津波が起こる様子を数式を使って表す必要がある。津波を表すための数式の集まりを「津波モデル」という。

HPCI戦略プログラム分野3 大石 泰之(富士通研究所/東北大学)、今村 文彦(東北大学)、菅原 大助(東北大学)

論文発表: Oishi, Y., Imamura, F., and Sugawara, D. (2015), *Geophys. Res. Lett.*, **42**, doi: 10.1002/2014GL062577.



津波の到達時間の推定値
(JAMSTECプレスリリースより)

【プレスリリース】

(JAMSTEC: http://www.jamstec.go.jp/hpci-sp/research_results/tsunami_n2.html)

(東北大学: <http://www.tohoku.ac.jp/japanese/2015/02/press20150227-01.html>)

(富士通研究所: <http://pr.fujitsu.com/jp/news/2015/02/27-1.html>)

76

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野5の成果

2015年2月27日プレスリリース

「京」を使って超新星爆発などの衝撃波で電子を加速する
仕組みを解明 ～高エネルギー電子をつくる新理論を発表～

【概要】

超新星爆発などから超音速で吐き出されたガスは、星間ガス※と反応して、衝撃波※を形成します。爆発現象は明るく輝いて見えますが、それはほぼ光の速さまで加速された高エネルギーの電子(相対論的エネルギーを持つ電子)がさまざまな波長の電磁波を出すのが原因と考えられています。しかし、この電子がどのように作られるかが謎でした。

研究グループは「京」を使って、ガスを形成するプラズマ※粒子100億個の運動を計算し、これまで探ることができなかった衝撃波の構造を明らかにしました。衝撃波面で一部のプラズマが上流(星の方向)に向かって反射されて、磁場が長く伸びた構造が作られ、その中で磁場の塊ができます。この磁場の塊と電子が繰り返し衝突して、高エネルギーの電子が作られることが分かりました。

本研究により、宇宙物理学の謎の一つである「相対論的エネルギーを持つ電子の存在」の解明に大きく迫ることが期待されます。

※プラズマ: 電荷を帯びたガス。

※星間ガス: 星と星の間の宇宙空間に漂っているガス。

※衝撃波: 超新星爆発やブラックホール周辺から宇宙空間に超音速で放出されたガスは、星間ガスと反応すると、衝撃波という構造を作る。衝撃波は電波や、X線・ガンマ線などさまざまな波長の電磁波で明るく輝いている。

HPCI戦略プログラム分野5 松本洋介(千葉大)

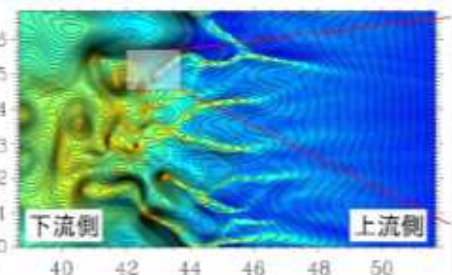
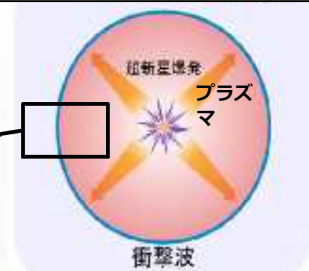
論文発表: Matsumoto Y, Amano T, Kato T. N., Hoshino M. (2015) *Science* **347**:974-978. doi:10.1126/science.1260168.

【プレスリリース】

(千葉大学: <http://www.chiba-u.ac.jp/general/publicity/press/pdf/2015/20150226.pdf>)

(東京大学: <https://www.s.u-tokyo.ac.jp/ja/press/4129/>)

(国立天文台: <http://www.cfca.nao.ac.jp/pr/20150227/>)



超新星爆発の周りにできる衝撃波(上)とシミュレーションで明らかになった衝撃波の構造(下)
(千葉大学プレスリリースより)

(上) 超新星爆発から飛び出したプラズマは、星間ガスと反応して、衝撃波を形成する。

(下) 衝撃波の波面で一部のプラズマが反射されて、磁場が上流(右)側に長く伸びた構造ができています。この中にできる磁場の塊と電子が衝突して、高エネルギーの電子が作られる。

77

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野4の成果

2015年2月6日プレスリリース

スーパーコンピュータ「京」で大型施設の丸ごとシミュレーションに成功
—国内外の耐震性の高いインフラ整備に貢献—

【概要】

石油プラントなどの機器や配管を支える構造体は複数の部材でできています。従来は鋼材となる部品を一本の直線で表現して計算していたため、構造体全体と部品の詳細な動きなどを同時に解析できませんでした。原子力研究開発機構と千代田化工建設㈱の研究チームは、建物の揺れを継手という細かい部品から全体まで総合的に解析する「組立構造解析」技術を開発してきました。

今回、「京」とこの「組立構造解析」技術を用いて、数多くの部品から組立てられたプラントを丸ごとシミュレーションすることに成功しました。この結果、構造体全体の解析と、機器や部品同士のつなぎ目の解析、部品を差し替えて軽量化した場合の耐震性の評価を複数同時に行うことを可能にしました。

今後はこの成果をより安定性の高い施設や機器の開発・設計に活かし、国内外の耐震性の高いインフラ整備に貢献していきます。

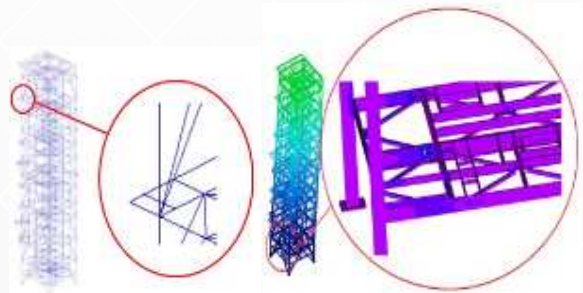
HPCI戦略プログラム分野4 課題5 中島 憲宏(日本原子力研究開発機構)、松川 圭輔(千代田化工建設)

論文発表: Nakajima, N., et al., (2013), *Transactions, SMIRT-22*, San Francisco, California, USA - August 18-23, Division III
Nakajima, N., et al., (2014), *Proceedings of the 2014 22nd International Conference on Nuclear Engineering*, ICONE22, Prague, Czech Republic, July 7-11, doi:10.1115/ICONE22-30251.

【プレスリリース】

(日本原子力研究開発機構: <https://www.jaea.go.jp/02/press2014/p15020601/>)

(千代田化工建設: <https://www.chiyoda-corp.com/news/pressrelease/2015/150206.pdf>)



従来の計算(左)と今回のシミュレーション(右)

(左) プラントの部品となる鋼材を直線で表している。構造物全体と鋼材となる部品を同時に解析することはできない。

(右) プラントを丸ごとシミュレーションした結果。構造物全体にかかる力だけでなく、継手などにかかる力(青色)も、同時に解析できる。

78

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野3の成果

2015年1月20日プレスリリース

「京」を使ったシミュレーションで台風発生約2週間予測が可能となることを実証
—台風発生予測の実用化への扉を開く—

【概要】

2004年8月の8つの台風(11号~18号)について、地球全体の雲の動きを詳細に計算できるモデル「NICAM」を使って、「京」で多数のシミュレーションを行い、約2週間先の台風発生が予測可能となることを示しました。

現在は1日~5日後の台風発生の予測が行われていますが、精度が不十分で予測期間が短い問題があります。シミュレーションの結果、台風の発生と関連がある現象(※)に伴って起こった対流活動をおおむね再現しました(図)。8つのうち、6つの台風発生をよく再現し、特に台風15号~18号については約2週間前から台風発生を再現できました。

今後は、より高精度なデータを使って多数のシミュレーションを実現するために、2020年完成予定の「京」の後継機、ポスト「京」の登場が待ち望まれます。

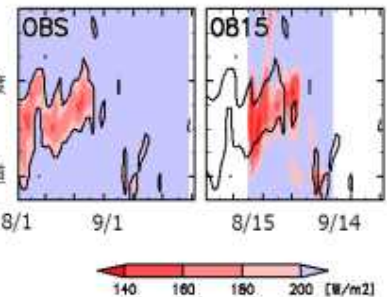
※台風の発生と関連がある現象…インド洋から日本の南の北西太平洋にかけて、数千キロメートルの巨大な積乱雲群が周期的に移動する現象。「北半球夏季季節内振動(BSISO)」とよばれている。

HPCI戦略プログラム分野3 中野 満寿男(海洋研究開発機構)、佐藤 正樹(東京大学大気海洋研究所)

論文発表: Nakano M., Sawada M., Nasuno T., and Satoh M. (2015) *Geophys. Res. Lett.* doi:10.1002/2014GL062479.

【海洋研究開発機構】

(プレスリリース: http://www.jamstec.go.jp/j/about/press_release/20150120/)



2014年台風18号(上図)と

2004年8月~9月のフィリピン東海上の対流活動(下図)
(JAMSTECプレスリリースより)

赤いほど対流活動が強く、青いほど弱いことを表す。

(左) 観測結果。(右) 8月15日に開始したシミュレーションの結果。BSISOの発生に伴って、8月には対流活動が活発になって北進し、9月には対流活動が弱くなったことをおおむね再現した。

【図のクレジット】

"Typhoon 200418 SONGDA" by NASA Original uploader was Tdk at ja.wikipedia - http://eol.jsc.nasa.gov/scripts/sseop/photo.pl?mission=ISS009&roll=E&frame=21526TranSfered_from_ja.wikipedia.Licensed_under_ハブリック・ドメイン_via_ライクメダイア・コモンズ

79

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野2の成果

2014年12月24日プレスリリース

鉄系高温超伝導が生じるしくみを「京」を用いて解明

～電力損失の少ない送電ケーブルや高性能モーターの開発など次世代の工業応用に貢献～

【概要】

超伝導の大きな特徴の一つは、ある温度以下で電気抵抗が0になることです。超伝導を起こす物質は熱を発生することなく電気を流し続けられるため、さまざまな応用が期待されています。しかし、超伝導が起こる温度を高くする仕組みはよく明らかになっていません。

今回の研究では、鉄を含む化合物である鉄系超伝導体について、「京」を用いて解析を行い、世界で初めて計算機の中で鉄系超伝導体の超伝導を再現することに成功、高温超伝導が起こる仕組みを明らかにしました。多くの超伝導は非常に低温(−269～−234℃)で起こる現象ですが、鉄系超伝導体は銅と酸素からなる銅酸化物超伝導体と並んで、それらよりも高温(−220℃以上)で超伝導を起こす高温超伝導体であることが知られています。この成果は、高い温度で超伝導を起こす物質の探索に大きく貢献すると考えられます。

HPCI戦略プログラム分野2 東京大学 三澤貴宏, 今田正俊
論文発表: T Misawa and M Imada. (2014) *Nature Commun.*
doi:10.1038/ncomms6738.

【東京大学】

(プレスリリース: <http://www.t.u-tokyo.ac.jp/epage/release/2014/141224.1.html>)



超伝導物質が切り拓く新たな未来

超伝導物質は、電力損失の少ない送電ケーブルや高性能モーターの開発など様々な工業応用の可能性があります。身近には、病院のMRI(磁力を使って生体内部の断層画像を撮影する診断装置)やリニアモーターカーに超伝導磁石が利用されています。

【図のクレジット】
・東京工業大学HP

http://www.titech.ac.jp/research/stories/hideo_hosono_1.html
・"JR-Maglev-MLX01-2" by Yosemite - 投稿者自身による作品。Licensed under CC 表示継承 3.0 via ウィキメディア・コモンズ - <http://commons.wikimedia.org/wiki/File:JR-Maglev-MLX01-2.jpg#mediaviewer/File:JR-Maglev-MLX01-2.jpg>
・"Modern 3T MRI" by User:KasugaHuang - Photographed by User:KasugaHuang on Mar 27, 2006 at Tri-Service General Hospital, Taiwan. Licensed under CC 表示継承 3.0 via ウィキメディア・コモンズ - http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Modern_3T_MRI.JPG#mediaviewer/File:Modern_3T_MRI.JPG

80

「京」の最近の成果発表事例

一般利用課題の成果

2014年12月18日 ニュース掲載

「京」による大規模な気泡生成シミュレーションに成功

～シャンパンの気泡同士に働く力の解明により、さまざまな工業分野への応用に期待！～

シャンパンや炭酸飲料の栓を空けると、たくさんの泡が出ますが、その後、大きい泡がより大きく、小さい泡がより小さくなる「オストワルド成長」という現象が起きます。

研究チームはこの現象を「京」を用いて7億個の粒子を使って再現し、気泡が発生する最初の過程のミクロな様子を世界で初めて明らかにしました。この結果、時間に伴って気泡の数が変化の様子が、理論による予想と一致することが分かりました。

この結果を用いると、シミュレーションによって気泡の発生や成長、気泡同士に働く力を分子レベルから明らかにすることが可能になり、発電所のタービン※や船舶のスクリューの設計、金属合金の生産など、さまざまな工業分野への応用に貢献すると期待されます。

「京」一般利用課題 渡辺 宙志 助教(東京大学物性研)、伊藤 伸泰 准教授(東京大学工学部)、稲岡 創(理研AICS)、鈴木 将(九州大学)
論文発表: Watanabe H, Suzuki M, Inaoka H, and Ito N. (2014) *J. Chem. Phys.*
141:234703 doi: 10.1063/1.4903811.



気泡生成のシミュレーション

(東京大学物性研究所 渡辺宙志、

理化学研究所計算科学研究機構 稲岡創)

多数の小さな気泡ができた後、気泡同士がつぶしあって、最後に一つの大きな気泡にまとまる。

※ 発電タービンの多くでは、水を蒸気に変えるのにボイラーを使用しています。ボイラーの中では、水から蒸気になるときに沸騰(温度を上げるにより起きる気泡現象)が起きていて、ボイラーやタービンの動作効率に大きな影響を与えます。気泡発生仕組みを調べることで、発電効率の高い発電所の設計につなげることができると期待されます。

【関連記事】

(CMSIニュース: <http://www.cms-initiative.jp/ja/news/incwr>)

(AIPIによるニュース掲載: <http://www.aip.org/publishing/journal-highlights/how-physics-champagne-and-soda-bubbles-may-help-address-worlds-future>)

81

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野2の成果

2014年12月8日プレスリリース

「京」を用いて巨大分子の第一原理シミュレーションを実現 ～創薬や次世代デバイスの開発に期待～

【概要】

物質は多くの原子からなります。その振る舞いは原子同士に働く力や電子によって決まり、「量子力学」によって表すことができます。量子力学に基づく第一原理計算は現象を原子や電子のレベルで明らかにできますが、複雑で大規模な計算が必要となるため、計算可能な原子数が極めて小さい(通常数百原子程度)という問題がありました。

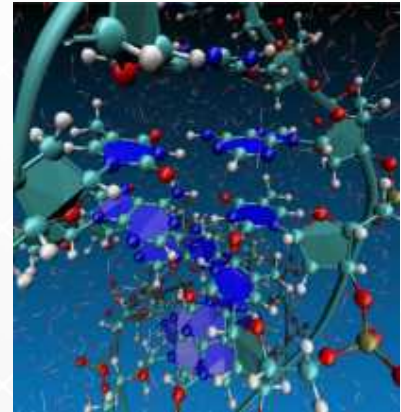
物質・材料研究機構と英国ロンドン大学の研究チームは「京」と東京大学のスパコンFX10※を用いて、原子数が3万個以上においても第一原理計算を可能とする新しい計算手法を開発、高精度のシミュレーションに成功しました。今後は数万～数百万原子から構成される生体分子やナノサイズの構造を持つ物質の原子・電子の振る舞いなどを明らかにすることを目指します。本研究は創薬や次世代デバイスの開発に役立つことが期待されます。

※FX10…「京」をベースにして開発された商用版のスーパーコンピュータ。

HPCI戦略プログラム分野2 宮崎剛 (NIMS), Dr. David Bowler (University College London)
論文発表: Arita M, Bowler D. R., and Miyazaki T. (2014) *J. Chem. Theory Comput.* **10**:5419–5425.
doi: 10.1021/ct500847y.

【独立行政法人 物質・材料研究機構】

(プレスリリース: <http://www.nims.go.jp/news/press/2014/12/201412080.html>)



水中のDNAのシミュレーション

(理研QBiC大塚氏との共同研究、
物質・材料研究機構プレスリリースより)

巨大な生体分子の一つであるDNAに対して、本研究の手法を用いて第一原理シミュレーションを行った。大きな分子の中で動く、原子や電子の振る舞いを正確に再現している。

82

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野5の成果

2014年9月1日プレスリリース

「京」を用いて、2つの中性子星※1の合体とブラックホールへの進化過程で磁場が増える仕組みを解明

【概要】

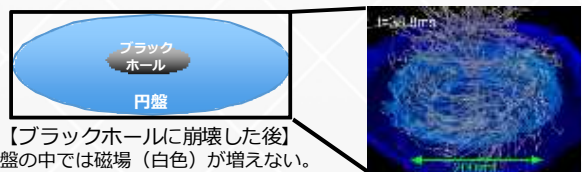
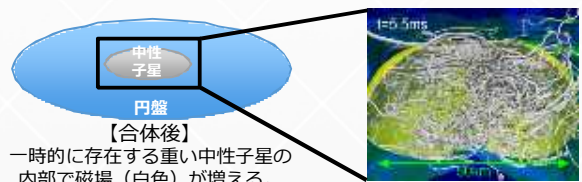
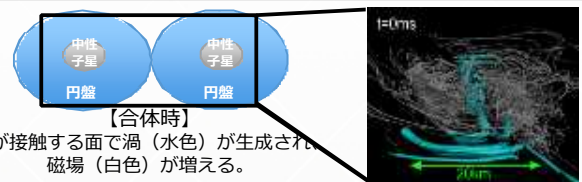
「京」を用いて、2つの中性子星※1が合体する時の磁気の流れのシミュレーションを世界最高の細かさ(従来の約3倍)で行いました。中性子星は、太陽に比べてとても大きな(約8～30倍の)密度、重力、磁場を持っています。研究チームは、中性子星の合体時に磁場が増える仕組みを明らかにし、合体後の進化の過程を新たに描き出しました。

従来は、合体後に形成されるブラックホールの周りのガス円盤の中で磁場が増えるとされてきましたが、ブラックホールの形成前に磁場が増えることが分かったのです。今回のシミュレーションでは、磁場の増幅に関わっている波長の短い電磁波を正確に切り分ける事で、磁場が増える様子を追跡する事に成功しました。

今後は、合体後に形成されるブラックホールが、ガンマ線バースト※2という宇宙最大の爆発現象を引き起こす可能性を追求して行きます。

※1中性子星…超新星爆発に際して、激しく押しつぶされた中心部は、陽子と電子が結合した中性子からなり、1cm³あたり10億トンという超高密度になる。この様な星を、中性子星と呼ぶ。

※2ガンマ線バースト…20秒程度の短い時間、エネルギーが数百キロ電子ボルトの電磁波(ガンマ線)が宇宙から降り注いでくる現象。



2つの中性子星の合体とブラックホールへの進化
(左) 理研AICS広報国際室作成 (右) 出展: 京都大学プレスリリース

HPCI戦略プログラム分野5 木内建太(京都大学), 柴田大(京都大学), 関口雄一郎(京都大学), 久徳浩太郎(ウィスコンシン大学ミルウォーキー校), 和田智秀(筑波技術大学/国立天文台)
論文発表: K. Kiuchi, K. Kyutoku, Y. Sekiguchi, M. Shibata, T. Wada. (2014) *PHYSICAL REVIEW D*. **90**:041502. doi:10.1103/PhysRevD.90.041502.

【関連記事】

(京都大学プレスリリース: http://www.kyoto-u.ac.jp/ja/news_data/h/h1/news6/2014/140901_1.htm)

83

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野3の成果

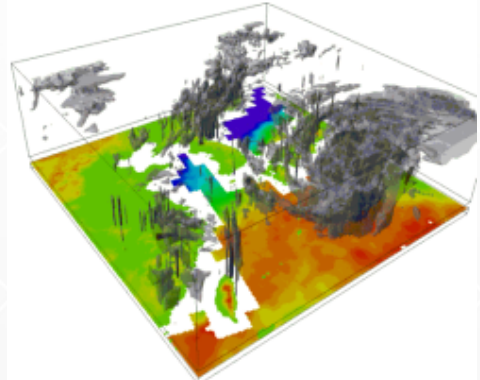
2014年8月29日発表

高解像度大気海洋結合モデルにより台風強度の予測精度が大きく向上することを京コンピュータを用いた大規模実験により実証

【概要】

台風の予報精度を向上させることは防災の観点から非常に重要です。しかし、中心気圧や最大風速で表される台風の強度の予報は、過去20年間であまり改善していません。この問題を解決するには、システムの高解像度化を進め台風中心付近の詳細な構造と海洋内部の変動を正確に予測することが必要と考えられていましたが、計算機資源の問題もあり、信頼できる精度評価は行われてきませんでした。

本研究では、高解像度で大気と海洋の状態を予測するシステムを新たに開発し、京を用いて、281回の予報実験を行いました。その結果、このシステムを用いると従来のシステムに比べて大きく強度予報の誤差が減ることが分かりました。



2012年台風第15号の通過に伴う海面水温の低下 (JAMSTECプレスリリースより)
計算の初期時刻は2012年8月25日21時(日本時間)

HPCI戦略プログラム分野3 伊藤耕介(琉球大学/気象研究所), 齊藤 和雄(気象研究所/海洋研究開発機構)
論文発表: Ito K, Kuroda T, and Saito K, Wada A. (2014) *Wea. Forecasting*. doi:10.1175/WAF-D-14-00034.1.

【気象研究所/海洋研究開発機構】

(最新研究成果: http://www.jamstec.go.jp/hpci-sp/research_results/cmsm.html)

(琉球大学プレスリリース: http://www.u-ryukyu.ac.jp/univ_info/announcement/data/press2014093003.pdf)

84

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野3の成果

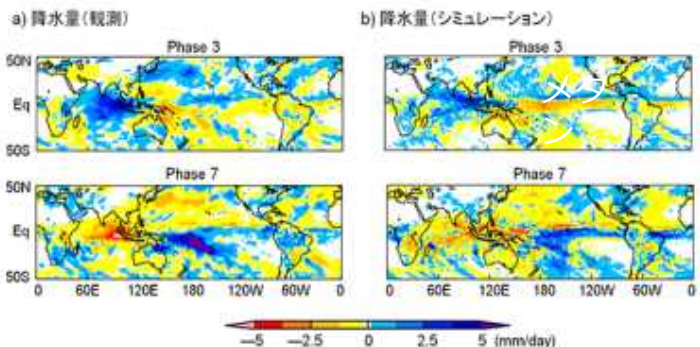
2014年5月7日プレスリリース

熱帯域におけるマッデン・ジュリアン振動の1ヵ月予測が実現可能であることを実証

【概要】

熱帯域における主要な大気変動であり全球に影響を及ぼすマッデン・ジュリアン振動(MJO(※))について、「京」を利用して、地球全体で雲の生成・消滅を詳細に計算できる全球雲システム解像モデル「NICAM(ニッカム)」による数値実験を実施し、約1ヵ月先まで有効な予測が可能であることを実証しました。

本成果によりNICAMの優れたMJO予測精度が初めて実証されたことから、地球規模の大気変動の様子を早期に把握できるようになり、日本付近の季節予報や台風発生予測の精度向上にも貢献することが見込まれます。また、未だ解明されていないMJOのメカニズムについても、観測では捉えきれない部分を本シミュレーションデータが補完することにより、その本格解明に向けて大きく寄与することが期待されます。



MJOの位置(phase)別の降水偏差の合成図 (JAMSTECプレスリリースより)
MJOに伴って起こる降水の増加/減少の水平分布の特徴もよく再現できていることが分かる。(Phase 3は予測開始日から平均で16日後、Phase 7は予測開始日から平均で28日後をそれぞれ表している。)

※マッデン・ジュリアン振動(MJO): 主にインド洋で発生する水平規模が数千kmにも及ぶ巨大な積乱雲群が赤道に沿って東進する、周期が30~60日の大気変動

HPCI戦略プログラム分野3 海洋研究開発機構, 東京大学 大気海洋研究所, 東京大学 理学系研究科, 理化学研究所 計算科学研究機構
論文発表: Miyakawa, T., Satoh, M., Miura, H., Tomita, H., Yashiro, H., Noda, A. T., Yamada, Y., Kodama, C., Kimoto, M., Yoneyama, K. (2014) "Madden-Julian oscillation prediction skill of a new-generation global model demonstrated using a supercomputer". *Nature Commun.*, 5, 3769. doi:10.1038/ncomms4769

【関連記事】

(JAMSTECプレスリリース: http://www.jamstec.go.jp/ia/about/press_release/20140507/)

(東京大学大気海洋研究所プレスリリース: <http://www.aori.u-tokyo.ac.jp/research/news/2014/20140507.html>)

(東京大学理学系研究科プレスリリース: <http://www.s.u-tokyo.ac.jp/ia/press/2014/21.html>)

85

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野5の成果

2014年4月18日ウェブリリース

「京」を用いた計算で超新星爆発のニュートリノ※1加熱説※2が有望に

【概要】

「京」を用いて大規模なシミュレーションを行い、超新星爆発がニュートリノ※1加熱※2によって起こる可能性を示しました。超新星が爆発する仕組みは、複雑な現象が絡みあうため、天文学者が50年も頭を悩ませています。これまでは、星の形を球と仮定するような、現実の超新星爆発とは異なるシミュレーションしか行えなかったため、ニュートリノ加熱説が正しいかどうか議論できませんでした。

今回の研究では、かつてないほど大規模で、より現実に近い超新星爆発の計算を行うことができるようになりました。その結果、自然な仮定の下に超新星が爆発する初めての例を得ることができました。これはニュートリノ加熱説を支持する強い証拠です。今後はより精密で、より大規模なシミュレーションを行い、超新星爆発をさらに詳しく調べていきます。

※1ニュートリノ…物質を分割すると、分子、原子、原子核と電子、…という様に段々小さくなっていき、クォークや電子などの素粒子に行き着く。ニュートリノも素粒子の1つで、様々な反応で発生する。電気を持たない。

※2ニュートリノ加熱…星が崩壊する時には、電子と陽子から中性子とニュートリノができる反応が盛んになり、ニュートリノが熱を持ち去って星の中心部を冷やす(ニュートリノ冷却)。星の中心が中性子で満たされると、ニュートリノが放出されて、一部が中性子などと反応して熱が出る。この熱で、超新星爆発が促進されるという説。

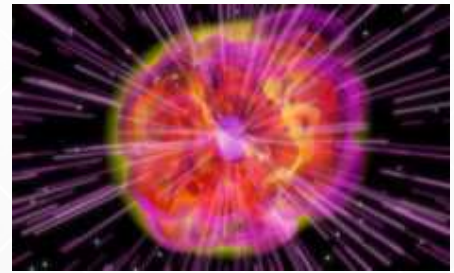
HPCI戦略プログラム分野5 課題3 滝脇知也 特任助教(国立天文台)、固武 慶 准教授(福岡大学)、 諏訪雄大 特定准教授(京都大学)
論文発表: Tomoya Takiwaki et al. (2014) *The Astrophysical Journal*, 786, 83. doi:10.1088/0004-637X/786/2/83.

【関連記事】

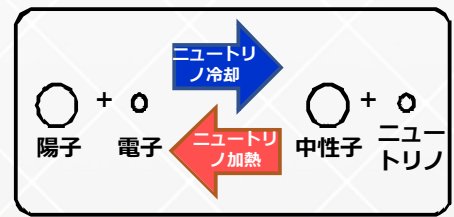
(国立天文台ウェブリリース: <http://www.cfca.nao.ac.jp/pr/20140418>)

(福岡大学プレスリリース: <http://www.fukuoka-u.ac.jp/research/column/14/04/18094500.html>)

(京都大学プレスリリース: http://www.kyoto-u.ac.jp/ja/research/research_results/2014/140422_2.html)



超新星爆発のイメージ図
(国立天文台プレスリリースより)



ニュートリノができる反応と
無くなる反応

86

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野5の成果

2014年4月11日プレスリリース

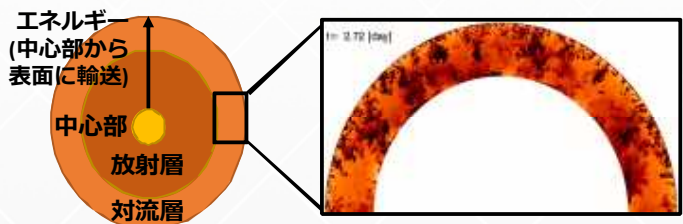
世界最高の解像度で太陽の対流層を計算

～太陽の黒点が生成される仕組みの研究や、太陽活動の変化を予測するために役立つと期待～

【概要】

太陽は地球上の生命にとってなくてはならない存在で、太陽の活動は私たちの生活に大きな影響を与えます。その太陽の中心部では核融合と呼ばれる現象でエネルギーが生成されます。中心に近い層(半径の7割まで)は、光でエネルギーが運ばれ「放射層」と呼ばれます。表面に近い層(半径の7割から表面まで)は、熱対流でエネルギーが運ばれるので「対流層」と呼ばれます。

太陽の対流層では、流れが乱れる現象(乱流)が数多く起きています。太陽で発生しているエネルギーの流れや磁場の生成を理解するためには、乱流をシミュレーションで再現することが重要です。今回「京」を用いて、世界最高(従来の6倍)の解像度で、乱流を含む太陽の熱対流の計算を行う事ができました。これにより、今後は太陽の黒点が生成される仕組みを詳しく調べたり、太陽の活動の変化を予測するために大いに役立つと期待されます。



太陽の構造と対流層のシミュレーション

(左) 理研AICS広報国際室 作成

(右) 出展: 東京大学大学院理学系研究科 堀田英之 博士

太陽の中心部では核融合という現象でエネルギーが発生する。放射層では光でエネルギーが運ばれ、対流層では熱対流という現象でエネルギーが運ばれる。

HPCI戦略プログラム分野5 堀田英之 博士(日本学術振興会/High Altitude Observatory)、横山 央明 准教授(東京大学)
論文発表: H. Hotta, M. Rempel, T. Yokoyama. (2014) *The Astrophysical Journal*, 786, 24. doi:10.1088/0004-637X/786/1/24.

【関連記事】(東京大学理学部プレスリリース: <https://www.s.u-tokyo.ac.jp/ja/press/3372/>)

【参考資料】(東京大学大学院理学系研究科 堀田英之博士 プレスリリース資料: http://www-space.eps.s.u-tokyo.ac.jp/~hotta/movie/conv_spe.html)

87

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野2の成果

2014年3月24日プレスリリース

濃い液体が秘める新機能を発見、新世代の電解液へ
～スーパーコンピュータ「京」により高濃度電解液の動作原理が解明～

【概要】

東京大学と京都大学、物質・材料研究機構(NIMS)は、リチウムイオン電池の急速充電、高電圧作動を可能にする電解液を開発し、スーパーコンピュータ「京」を用いて作動メカニズムを解明しました。この新規な電解液は、超高濃度のリチウムイオンを含む“濃い液体”であり、「高濃度＝反応が遅く電解液に適さない」という通説を覆すものです。また、既存の電解液にはない「高速反応」と「高い分解耐性」という新機能を有します。

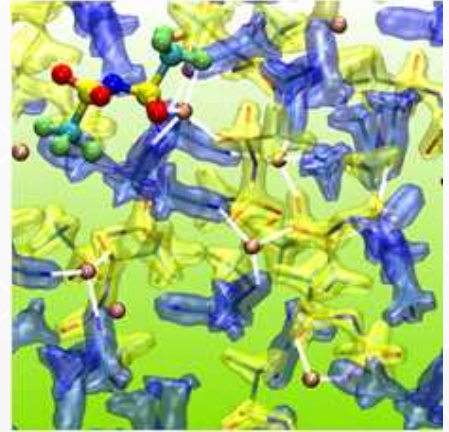
今後、この電解液を応用することで、従来の3分の1以下の時間での急速充電や電気自動車等への実用に耐えうる高電圧で作動するリチウムイオン電池の実現が期待されます。

HPCI戦略プログラム分野2 NIMS 館山佳尚、京都大学 袖山慶太郎、
東京大学 杉野修
論文発表：J. Am. Chem. Soc. 2014, 136, 5039–5046.

【プレスリリース】

(東京大学：<http://www.t.u-tokyo.ac.jp/epage/release/2014/2014032401.html>)

(物質・材料研究機構：<http://www.nims.go.jp/news/press/2014/03/p201403240.html>)



高濃度電解液中の溶媒(青)、陰イオン(黄)、リチウムイオン(ピンク)のネットワーク構造

88

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野2の成果

2014年3月6日プレスリリース

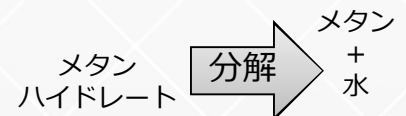
「京」を用いてメタンハイドレートが分解する仕組みを解明

【概要】

世界で初めて、メタンハイドレートが分解してメタンが発生するメカニズムを分子レベルから明らかにしました。

メタンハイドレートは水とメタンからできたシャーベット状の塊です。エネルギー資源として注目されていますが、分解の詳しいメカニズムはわかっていません。

今回の「京」での解析から、ハイドレートが分解する際に過度にメタンが溶け込んだ水ができ、そこから発生したメタンの気泡がハイドレートの分解をさらに促進することがわかりました。これは、気泡の発生をコントロールすることでメタンハイドレートの分解を制御できる可能性を示しており、効率的にメタンを採取する方法の開発に役立つと期待されます。



HPCI戦略プログラム分野2 田中秀樹 教授(岡山大学)
論文発表：T. Yagasaki, M. Matsumoto, Y. Andoh, S. Okazaki, and H. Tanaka,
(2013) J. Phys. Chem. B. 118. 1900. doi: 10.1021/jp412692d.

メタンハイドレート分解の様子
(岡山大学プレスリリースより改変)

【関連記事】

(岡山大学プレスリリース：http://www.okayama-u.ac.jp/tp/release/release_id157.html)

89

「京」の最近の成果発表事例

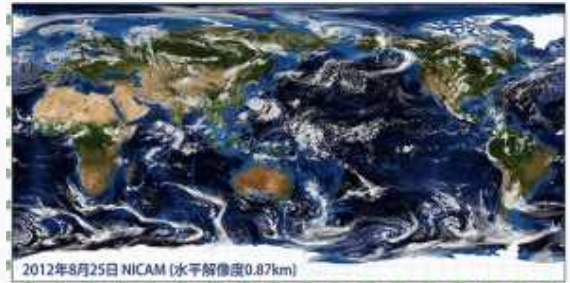
戦略プログラム分野3の成果

2013年9月20日プレスリリース

「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
～台風や集中豪雨などの発生メカニズムの解明に寄与～

【概要】

理化学研究所計算科学研究機構、海洋研究開発機構、東京大学大気海洋研究所の共同研究チームは、スーパーコンピュータ「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2km未満の解像度にするまでにはこれまで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ました。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できます。



図：2012年8月25日12時(世界標準時)の全球の雲分布

HPCI戦略プログラム分野3 富田 浩文 チームリーダー (理化学研究所 計算科学研究機構)、時岡 達志 チームリーダー (海洋研究開発機構)、佐藤 正樹 教授 (東京大学)。

論文発表： Yoshiaki Miyamoto Y, Kajikawa Y, Yoshida R, Yamaura T, Yashiro H, and Tomita H. (2013) *Geophysical Research Letters*. 40. 4922-4926. doi: 10.1002/grl.50944.

【理化学研究所】

(プレスリリース：http://www.riken.jp/pr/topics/2013/20130920_1/)

90

「京」の最近の成果発表事例

一般利用課題の成果

2013年9月5日プレスリリース

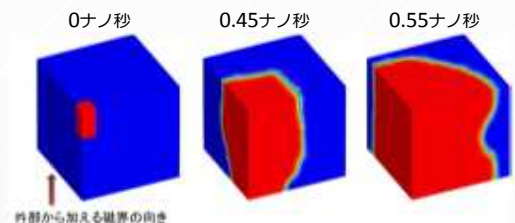
磁性材料の材料設計に活用できる新たなシミュレーション技術を開発
～ジスプロシウムなどの重レアアースを使用しない新規磁石材料の開発に期待～

【概要】

富士通株式会社は、スーパーコンピュータ「京」を用いた大規模磁化反転シミュレーション技術を開発し、永久磁石が磁化反転する過程を大規模にシミュレーションすることに世界で初めて成功しました。

磁性材料における磁化反転の過程は従来から研究されてきましたが、ネオジム磁石の忠実なモデル化は膨大な計算量を要することから、その過程をシミュレーションで再現することが困難でした。今回開発した技術により、従来のシミュレーターでは扱うことができなかった磁性体の微細な磁区構造(図)を解析することができるようになりました。

ハイブリッド電気自動車(HEV)のモーターにはジスプロシウムなどの重レアアースを使用したネオジム磁石が採用されていますが、今後、重レアアースを使用しない強力なネオジム磁石など、新たな磁性材料の研究開発の促進が期待されます。



図：多結晶モデルの磁化反転シミュレーション

「京」一般利用課題 富士通 富士通研究所、物質・材料研究機構。

学会発表： Furuya A, Fujisaki J, Shimizu K, Uehara Y, Oshima H, Okubo T, Hirose S, and Hono K. "Micromagnetic simulation of pinning and nucleation in misaligned hard magnets". 2013年9月5日 第37回日本磁気学会学術講演会にて口頭発表。

【富士通】

(プレスリリース：<http://pr.fujitsu.com/jp/news/2013/09/5-1.html>)

91

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野3の成果

2013年8月30日プレスリリース

スーパーコンピュータ「京」による平成24年7月九州北部豪雨の予測について

【概要】

熊本県、大分県、福岡県などに大きな災害を引き起こした平成24年7月九州北部豪雨による大雨について、発生半日～1日前からの計算で高い確率で予測できる例があることが気象研究所による研究で分かりました。

図2は、大雨前日15時を初期値とする「京」による予測で、図1に示す観測された大雨を良く予測しています。図3と図4はアンサンブル予報による最大降水量と50mm以上の降水が生じる確率の分布を示しています。このような場所や強度を特定した確率的な大雨予測や最大雨量に関する予測が半日～1日前に出来れば、事前に防災対策をとるために大変有用な情報になると期待されます。この計算には、50メンバーの局所アンサンブル変換カルマンフィルタ(LETKF)を用いました。

今回の結果は、気象防災に関する「京」を用いる研究の最初の本格的な成果で、将来的な集中豪雨の予測の改善にもつながるものと期待されます。

HPCI戦略プログラム分野3 気象研究所, 海洋研究開発機構.

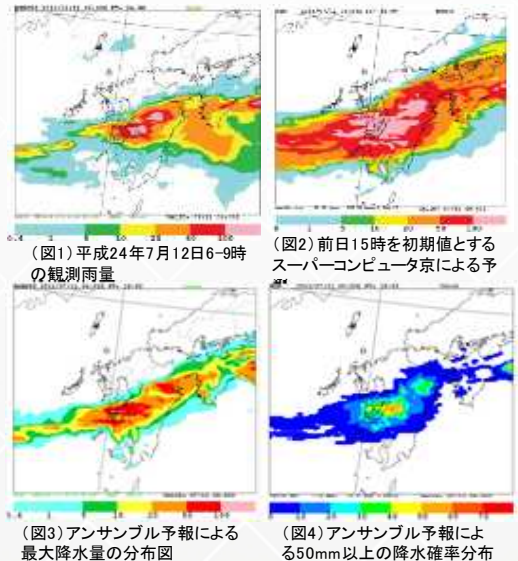
学会発表: 11月21日 日本気象学会2013年度秋季大会, 12月10日 American Geophysical Union (AGU) 2013 Fall Meetingにて発表.

論文発表: Kunii, M. (2013) *Wea. Forecasting*. doi:10.1175/WAF-D-13-00032.1.

【気象研究所/海洋研究開発機構】

(プレスリリース: <http://www.mri-jma.go.jp/Topics/H25/press/20130830/press20130830.html>)

(TBS報道特集で9月7日(土)に全国放送)



92

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野1の成果

2013年8月2日プレスリリース

「京」を使い10兆個の結合の神経回路のシミュレーションに成功
—世界最大の脳神経シミュレーション—

【概要】

「京」を使って世界最大の脳神経シミュレーションに成功しました。(理研、ユーリッヒ研究所(ドイツ)、沖縄科学技術大学院大学の共同チームによる研究) 10兆個の結合の神経回路のシミュレーションは、過去最大の規模です。ただしこれは巨大な人間の脳の神経回路の1%です。

今回の成功では人間の脳全体のシミュレーションに必要なメモリ量と計算速度の比率が分かり、その結果を今後のスパコンの開発やソフトウェアの設計に活かし、脳全体のシミュレーションの研究を進めていくことが期待されています。

HPCI戦略プログラム分野1 姫野龍太郎(理研・情報基盤センター)、五十嵐潤(OIST)、舩本 現(理研・情報基盤センター)、Susanne Kunkel(ユーリッヒ研究所)、Moritz Helias(ユーリッヒ研究所)。

学会発表: Kunkel S, Schmidt M, Eppler JM, Plesser HE, Igarashi J, Masumoto G, Fukai T, Ishii S, Morrison A, Diesmann M, Helias M. "From laptops to supercomputers: a single highly scalable code base for spiking neuronal network simulations". 2013年7月8日 *22nd Annual Computational Neuroscience Meeting (CNS2013)*にて発表.

【理化学研究所】

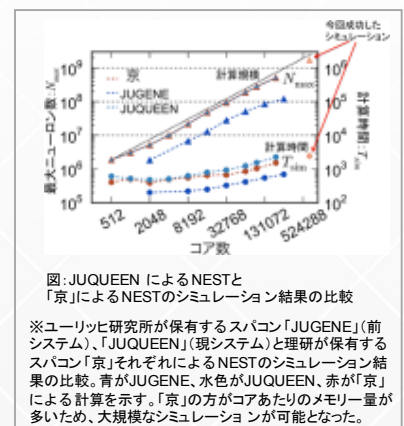
(プレスリリース: http://www.riken.jp/pr/topics/2013/20130802_2/)

【OIST(沖縄科学技術大学院大学)】

(プレスリリース: <http://www.oist.jp/ja/news-center/news/2013/8/8/11615>)

【ユーリッヒ研究所】

(プレスリリース(英語): <http://www.fz-juelich.de/SharedDocs/Pressemitteilungen/UK/EN/2013/13-08-02LargestSimulation.html>)



93

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野2の成果

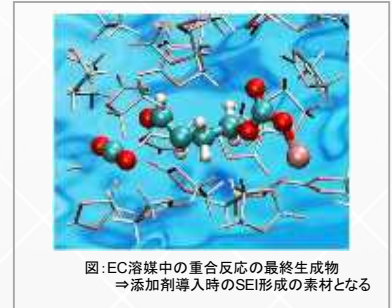
2013年8月1日プレスリリース

スーパーコンピュータ「京」を用いてリチウムイオン電池電解液の還元反応機構を解明
～リチウムイオン電池の性能と安全性向上に向けた計算機材料設計の道を拓く～

【概要】

パソコンやスマホなどに広く普及しているリチウムイオン電池。今後、高容量・高出力が必要な電気自動車や家庭用蓄電装置などの利用が増えていきます。普及には長寿命化や安全性の向上が課題であり、それを左右するのが、電解液が還元反応して電極上に形成される被膜「SEI膜」の性能です。この被膜ができる過程は直接観察することができず、どのようにして被膜ができるのかが、謎のままです。

独立行政法人物質・材料研究機構は、富士フイルム株式会社と共同で、「京」上で化学反応シミュレーションを実行し、リチウムイオン電池の性能と安全性の鍵となる被膜形成につながる電解液の還元分解反応を分子レベルで明らかにすることに成功しました。この成果を長寿命で高い安全性を有するリチウムイオン電池の開発に利用していきます。



HPCI戦略プログラム分野2 NIMS 館山佳尚、奥野幸洋、後瀉敬介、京都大学 袖山慶太郎
論文発表: *J. Am. Chem. Soc.* 2013, 135, 11967–11974.

【物質・材料研究機構、科学技術振興機構】

(プレスリリース: <http://www.nims.go.jp/news/press/2013/08/p201308010.html>)

【富士フイルム】

(プレスリリース: http://www.fujifilm.co.jp/corporate/news/articleffnr_0796.html)

94

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野3の成果

2013年5月16日発表

2012年5月6日のつくば竜巻のアンサンブル予報実験

【概要】

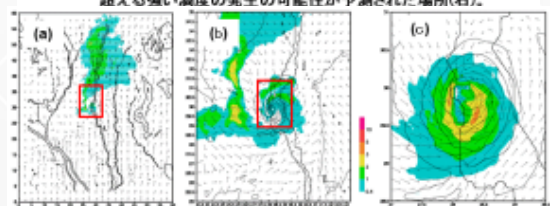
局所アンサンブル変換カルマンフィルタ(LETKF)と呼ばれる最先端のデータ同化手法を用いた双方向ネスティングシステムを開発して領域雲解像数値モデルの初期値を変え、竜巻を予測する試みを行いました。

図1は、2012年5月6日につくば市などで災害をひきおこした国内観測史上最強レベルの竜巻について、LETKFによるアンサンブル予報を行って得た強い渦の発生分布で、解像度350mの数値モデルを用いた結果、12メンバーの内10メンバーで0.1(1/s)という大変強い鉛直渦度をもつ低気圧性循環が、実際の観測に対応して3箇所で見出されました。

スーパーコンピュータ「京」を用いた水平格子間隔50mの超高解像度実験では、50m/sを超える強風もモデルで表現されました(図2)。これらは、将来的な場所を特定した竜巻の確率的予測につながる大変有望な成果と言えます。

HPCI戦略プログラム分野3 海洋研究開発機構。

学会発表: 5月18日 日本気象学会2013年度春季大会, 5月23日 日本地球惑星科学連合大会にて講演。



【気象研究所/海洋研究開発機構】HPCI戦略プログラム(分野3)

(最新研究成果: http://www.jamstec.go.jp/hpci-sp/research_results/tsukuba.html)

(時事ドットコムで5月10日(金)に掲載)

95