

参考資料 9
情報委員会 (第15回)
令和3年2月3日

第45回HPCI計画推進委員会
(R2.12.9) 参考資料4-5

HPCI利用研究課題の成果事例

2020(令和2)年10月28日

登録施設利用促進機関

一般財団法人高度情報科学研究機構(RIST)



HPCI利用研究課題の成果について

- HPCIの運営の第2期事業期間(2017(平成29)～2021(令和3)年度)における本中間評価までの期間において、HPCI利用研究課題を通じ、基礎研究から産業応用まで、多くの優れた成果が創出されている。
- また、これら成果の広がりや、HPCIの多様性を活かし、広範な研究分野に亘っている。

次ページ以降の、「京」以外のHPCI利用研究課題に係る成果事例は、第1期事業期間(2012(平成24)～2016(平成28)年度)における前回中間評価(2015年8月時点)以降の期間(hp15課題～)において、各HPCI計算機において多様な研究分野で利用されており、

- ・画期的な成果
- ・学術利用・産業利用において優れた/一般国民にも分かりやすい/ユニークな成果

を、広範かつ多数の成果の中から一例として挙げたものである。

これらは必ずしも各HPCI計算機資源ごとの代表的な成果であったり、あるいはHPCI利用研究課題関連論文の被引用数等が上位のものからの抽出ではない。

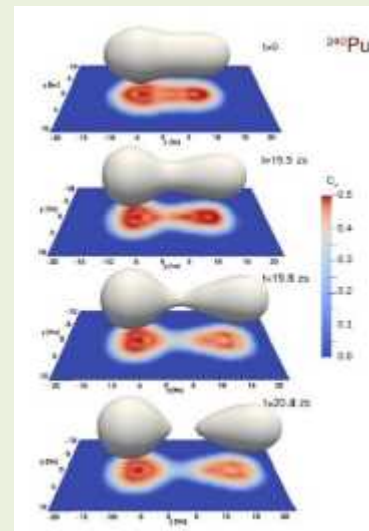
- HPCI利用研究課題の成果情報は以下より閲覧・検索等が可能

- ・HPCI成果発表DB https://www.hpci-office.jp/hpcidatabase/publications/search.html?parent_folder=15
- ・HPCI利用報告書DB <https://www.hpci-office.jp/annex/usrrep/>
- ・HPCI利用研究課題成果事例集 https://www.hpci-office.jp/pages/hpci_booklet?parent_folder=487

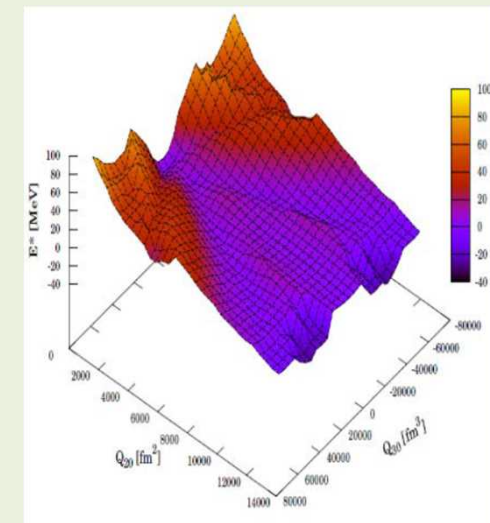
重い原子核の分裂における非対称型の質量分布の微視的機構を理解

- 密度汎関数法及び時間依存密度汎関数法を用いたシミュレーションを実行し、分裂片の変形に伴う殻エネルギーと分裂片間のクーロン力のバランスによって非対称型の分裂過程を説明した。
- 原子核変形の研究を分裂現象まで拡張して、核分裂片の荷電偏極を微視的理論で調べ、原子力工学で扱われている物理量と初めて比較することが出来た。
- 今回の方法は、**原子核物理学、原子力工学、宇宙核物理学**といったスケールの違う学際研究への**貢献が期待**される。

○ 筑波大学COMA (PACS-IX)利用
 ○ hp180041 (H30 HPCI一般課題)
 ○ 筑波大学／橋本幸男講師



プルトニウム ^{240}Pu の非対称分裂のTDHFBシミュレーション

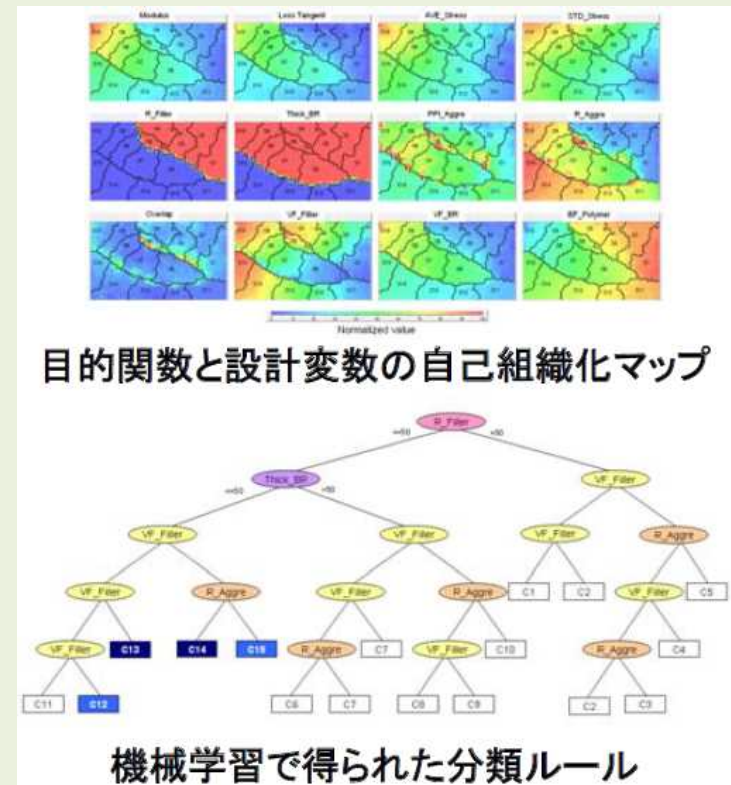


^{236}U の Q_{20} と Q_{30} に関するエネルギー面

当該課題関連論文Nature誌掲載

マテリアルズ・インフォマティクスによるフィラー充填ゴムの微細構造設計

- マルチスケールランダムモデル、FFT ベースのスキーム、進化計算、自己組織化マップ、機械学習からなる多目的設計探索の実証実験を行った。
- 1億3千4 百万要素からなる大規模計算を、6,000 回実施した。
- フィラー半径とバウンドラバー(境界層)厚さが、複数のゴム物性値を同時に改善できる重要なパラメータであることがわかった。
- このような膨大な大規模計算は、HPCIの大規模計算システムで初めて実施可能である。

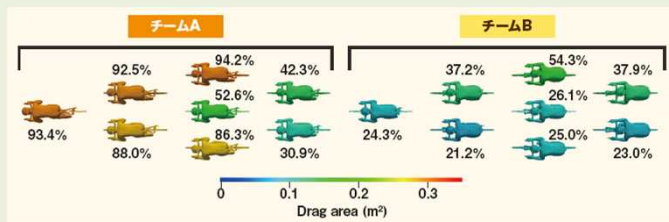


○東京工業大学TSUBAME2.5利用
 ○hp160039(H28 HPCI産業利用(実証利用))
 ○横浜ゴム株式会社/小石正隆氏

物理分野 HPCI一般課題

自転車レースにおける最適な位置取りをシミュレーションで明らかに

- 選手が受ける空気抵抗を効率的に計算できる新たな計算手法を開発し、最大で72名の集団走行という大規模計算を数日という短い計算時間で達成した。
- 8人一列縦隊またはひし形の配置をとった集団と、その集団が2つあった時に各選手が受ける空気抵抗が得られた。これは、実際のレースでの戦略立案に役立つ情報となる。
- このようなシミュレーションは、自転車レース以外へのスポーツへの応用も可能であり、自動車の縦列走行に応用すれば、輸送の省エネ化にもつながることが期待される。



↑ 8人のひし形集団が2つ続く場合のシミュレーション (単独走行の場合の抗力を100%とした場合の結果)

- 東京工業大学 TSUBAME3.0利用
- hp180146 (H30 HPCI一般課題)
- 東京工業大学 / 青木尊之教授

生命科学分野 HPCI一般課題

DNAから遺伝情報を読み取る動的メカニズムを解明

- ヌクレオソームの全ての原子の動きを網羅的に解析することで*、遺伝子の動きに深く関わる2つの隣接するヌクレオソーム間相互作用の正確なシミュレーションを行うことに成功した。
- * 生物の遺伝情報が記されたDNAは、細胞の核内で「ヒストン」と呼ばれるタンパク質に巻き付いた構造をとり、それらがいくつも連なった状態で存在している。このDNAとヒストンから成る構造を「ヌクレオソーム」と呼ぶ。数十パターンにも及ぶ約50万原子の相互作用(合計約3,000万原子)を計算することで、細胞内でダイナミックに動くDNAやヌクレオソームの姿に迫った。
- DNAの遺伝子発現のメカニズムを原子レベルで解明することで、遺伝子発現に異常をきたすガン等の治療薬の開発が期待される。



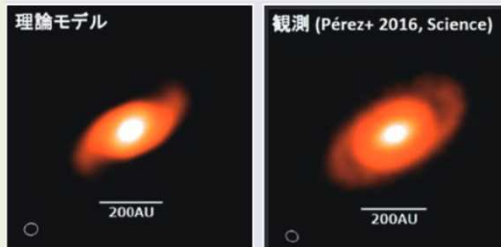
↑ 計算により得られた隣接する2つのヌクレオソームの位置関係(代表的な1例)

- 京都大学 CRAY XC40(システムA)利用
- hp170066 (H29 HPCI一般課題)
- 量子科学技術研究開発機構 / 石田恒氏

宇宙分野 HPCI一般課題

星の成長過程をシミュレーションで解明

- 自己重力により収縮したガスの塊から生まれた星が、どのようにして成長していくのか、そのプロセスを独自開発の計算コードによって高解像度で計算することに成功した。
- 星が成長する過程で、磁場が重要な役割を果たすことを明らかにした(望遠鏡観測では、何故このような形状になるかを知ることはできないが、シミュレーションでは可能)。
- 暗黒星雲から星が生まれ、成長して恒星となる一連のプロセスと、そのプロセスで形成される惑星も含めて解明されることが期待される。



↑ 左: シミュレーションによる原始星と星周円盤
Tomida et al. 2017, ApJ, 835, L11
右: アルマ望遠鏡で観測された原始星と星周円盤
© B. Saxton (NRAO/AUI/NSF); ALMA (ESO/NAOJ/NRAO)

- 東北大学 SX-ACE、大阪大学 SX-ACEおよび海洋研究開発機構 地球シミュレータ(SX-ACE)利用
- hp160079 (H28 HPCI一般課題)
- 九州大学/町田正博准教授

ものづくり分野 HPCI産業利用課題(実証利用)

着雪被害の少ない鉄道車両の開発に向けて

- 積雪した線路を鉄道車両が走行すると、線路上の雪が舞い上げられ、車両に付着して成長する。この着雪が落下すると、車体や地上の設備に被害が生じることがある。
- 着雪しにくい車両形状を提案することを目的に、降雪風洞での実験に基づいて、空気流計算と着雪計算を連成した着雪シミュレータを開発した。
- このシミュレーションの結果は鉄道台車の模型での実験結果とよく一致し、今後は、実際の鉄道車両の設計への応用が期待される。

鉄道車両モデルの形状をコンピュータ内で再現し、着雪シミュレーションを実施。実験の結果と一致

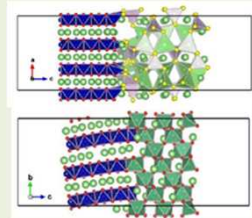


- 名古屋大学 FX100および「京」利用
- hp180014 (H30 HPCI産業利用課題/実証利用)
- hp170067 (H29「京」産業利用課題/実証利用)
- 鉄道総合技術研究所/中出孝次氏

物質・材料・化学分野 HPCI一般課題

次世代二次電池の実用化研究

次世代電池である全固体リチウムイオン二次電池(ASS-LIB)の安定した充放電を妨げる要因を突き止め、実用化に必要な設計指針情報を獲得



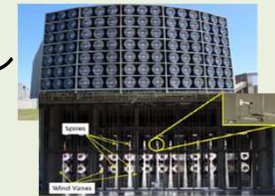
↑ LIBの界面構造

- 九州大学 CX400利用
- hp150055(H27 HPCI一般課題)
- 物質・材料研究機構/木野日織氏

環境・防災・減災分野 HPCI一般課題

次世代実大ストーム実験施設開発への貢献

風水害による建物被害を実大スケールで再現するストーム実験施設の風圧実験の再現計算を行い、実現象の再現や次世代実験施設開発における重要な知見を獲得



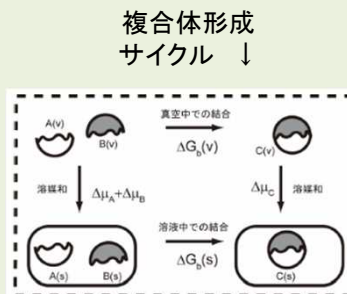
↑ 実大ストーム実験施設
外観、強風発生機構

- 東京工業大学 TSUBAME 2.5、共用ストレージ
- hp150034(H27 HPCI一般課題)
- 京都大学/丸山敬教授

生命科学分野 HPCI一般課題

蛋白質-蛋白質複合体の高精度立体構造予測

数百～数万の候補構造を生成のうえ絞り込む必要がある蛋白質-蛋白質複合体の立体構造予測について、高精度計算を行うことにより予測精度を向上

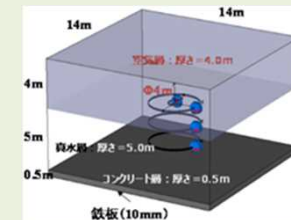


- 東京大学 FX10利用
- hp150049(H27 HPCI一般課題)
- 東京大学/北尾彰朗教授

ものづくり分野 HPCI産業利用課題(実証利用)

長距離ワイヤレス電力伝送技術開発

淡水や海の資源調査やインフラ管理等を効率良く行うため、水中向け探査ロボットへの長距離無線電力伝送の電磁界解析を実施し、その実現可能性を検討



↑ シミュレーションモデル

- 東京工業大学 TSUBAME 2.5
- hp160101(H28 HPCI産業利用課題/実証利用)
- パナソニック/小柳芳雄氏

関連論文被引用数が上位のHPCI利用研究課題

HPCI成果発表データベースに登録された最近(hp15～)のHPCI利用研究課題
に係る関連論文被引用数上位5編

(被引用数は2020.4.21時点のWeb of Scienceデータより)

課題番号	研究分野	課題種	課題名	利用計算機	課題代表者	関連論文	関連論文 累計被引用数
成果例前送 hp150055	物質・材料・化学	H27 HPCI一般課題	第一原理計算を用いたリチウムイオン 全固体電池正極/電解質界面の研究	九州大学 CX400	物質・材料研究機構/木野日織	First-Principles Study of Ion Diffusion in Perovskite Solar Cell Sensitizers, J.Haruyama <i>et. al.</i> Journal of the American Chemical Society 137, 10048-10051 (2015)	276 (Top 1%)
hp150068		H27 HPCI一般課題	色素増感・ペロブスカイト太陽電池界面 の電荷移動機構に関する第一原理 計算解析	東京大学 FX10	大阪大学/濱田幾太郎	Corrosion Prevention Mechanism of Aluminum Metal in Superconcentrated Electrolytes, Y. Yamada <i>et. al.</i> ChemElectroChem. 2, 1687-1694 (2015)	
hp150068	物質・材料・化学	H27 HPCI戦略 プログラム	エネルギー変換の界面科学	HPCI共用ストレージ、「京」	東京大学/杉野修	Time-dependent Hartree-Fock calculations for multinucleon transfer and quasifission processes in the Ni-64+U-238 reaction, K. Sekizawa <i>et. al.</i> PHYSICAL REVIEW C, Vol. 93, 054616	77 (Top 10%)
hp150209		H26 HPCI一般課題	時間依存密度汎関数理論に基づく原子 核ダイナミクスの研究	北海道大学 SR16000/M1	筑波大学/橋本幸男	Molecular dynamics simulations of biological membranes and membrane proteins using enhanced conformational sampling algorithms, T. Mori <i>et. al.</i> Biochimica et Biophysica Acta, 1858, 1635-1651	
hp150081	物理・素粒子・宇宙	H27 HPCI一般課題	拡張アンサンブルシミュレーションによる 膜輸送体の動作原理の解明	東京工業大学 TSUBAME2.5	理化学研究所/森貴治	Enhanced Li-Ion Accessibility in MXene Titanium Carbide by Steric Chloride Termination, S. Kajiyama <i>et. al.</i> ADVANCED ENERGY MATERIALS, 7(2017) 1601873	58 (Top 10%)
hp140010		H26 HPCI一般課題					
hp150060	生命科学	H27 HPCI一般課題	拡張アンサンブルシミュレーションによる 膜輸送体の動作原理の解明	東京工業大学 TSUBAME2.5	理化学研究所/森貴治	Molecular dynamics simulations of biological membranes and membrane proteins using enhanced conformational sampling algorithms, T. Mori <i>et. al.</i> Biochimica et Biophysica Acta, 1858, 1635-1651	56 (Top 10%)
hp160040	物質・材料・化学	H28 HPCI一般課題	第一原理計算を用いたリチウムイオン 電池正極/固体電解質界面の研究	九州大学 CX400	物質・材料研究機構/木野日織	Enhanced Li-Ion Accessibility in MXene Titanium Carbide by Steric Chloride Termination, S. Kajiyama <i>et. al.</i> ADVANCED ENERGY MATERIALS, 7(2017) 1601873	55 (Top 10%)
hp160080		H28 HPCI一般課題	炭素ダイヤモンド電極触媒界面の触媒 反応に関する第一原理計算解析	東京大学 FX10	大阪大学/濱田幾太郎		
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	「京」	物質・材料研究機構/館山佳尚		



関連論文が著名誌に掲載されたHPCI利用研究課題

最近 (hp15~) のHPCI利用研究課題のうち、Nature誌に関連論文が掲載された課題 (Science誌はなし)

課題番号	研究分野	課題種	課題名	利用計算機	課題代表者	掲載誌 関連論文	
成果例前記 hp180041	物理・素粒子・宇宙	H30 HPCI一般課題	時間依存密度汎関数理論に基づく超流動原子核の反応機構の研究	筑波大学 COMA (PACS-IX)	筑波大学 / 橋本幸男	Nature	Impact of pear-shaped fission fragments on mass-asymmetric fission in actinides, G. Scamps <i>et. al.</i> <i>Nature</i> , Vol.564, pp.382-385 (2018)
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	九州大学 CX400	産業技術総合研究所 / 池部仁善		Nature Communications
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	京都大学 CRAY XC30 (システムD)			
hp160223		H28ポスト「京」研究開発枠重点課題	次世代創薬計算技術の開発	「京」		横浜市立大学 / 池口満徳	
hp170011	物理・素粒子・宇宙	H29 HPCI一般課題	相対論レーザー物質相互作用による非平衡輻射プラズマの数値研究	名古屋大学 FX100	広島大学 / 城崎知至	Nature Communications	Magnetized fast isochoric laser heating for efficient creation of ultra-high-energy-density states, S. Sakata <i>et. al.</i> <i>Nature Communications</i> , 9, 3937
hp180093		H30 HPCI一般課題	マルチピコ秒相対論レーザー物質相互作用による非平衡輻射プラズマの数値研究				
hp150177	物質・材料・化学	H27 HPCI一般課題	創薬ターゲットタンパク質の内在性リガンドの合成改変のための立体構造予測	東京工業大学 TSUBAME2.5	東京大学 / 大和田智彦	Nature Communications	Amide nitrogen pyramidalization changes lactam amide spinning, O. Yuko <i>et. al.</i> <i>Nature Communications</i> , Vol.10(2019)
hp170146	生命科学	H29 HPCI一般課題	分子シミュレーションを用いる生体内リガンドの網羅的構造化	東京工業大学 TSUBAME2.5, 同TSUBAME3.0			
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	北海道大学 SR16000/M1	東北大学 / 川添良幸	Nature Communications	A first-principles phase field method for quantitatively predicting multi-composition phase separation without thermodynamic empirical parameter, S. Bhattacharyya <i>et. al.</i> <i>Nature Communications</i> , Vol.10 (2019)
hp180125		H30 HPCI一般課題		北海道大学 SR16000/M1, 同Grand Chariot(グラン・シャリオ: サブシステムA)			
hp170268		H29ポスト「京」研究開発枠重点課題	高信頼性構造材料	「京」	産業技術総合研究所 / 香山正憲		
hp180220		H30ポスト「京」研究開発枠重点課題					



利用報告書ダウンロード数が上位のHPCI利用研究課題

最近 (hp15～) のHPCI利用研究課題のうち、利用報告書ダウンロード数上位5課題
(2020.10.26時点)

課題番号	研究分野	課題種	課題名	利用計算機	課題代表者	ダウンロード 総数
hp150040	生命科学分野	H27 HPCI一般課題	グルコースオキシダーゼ反応機構の理論研究	統計数理研究所 データ同化スーパーコンピュータシステム	東京大学 / 佐藤文俊	3,059
hp150130	工学・ものづくり	H27 HPCI一般課題	大規模直交格子CFDを用いた移動物体問題の解法	東北大学 SX-ACE、東北大学 LX 406Re-2、統計数理研究所 データ同化スーパーコンピュータシステム、HPCI共用ストレージ	金沢工業大学 / 佐々木大輔	704
成果例前述 hp160039	工学・ものづくり	H28 HPCI産業利用 (実証利用)	多目的設計探索によるフィルター充填ゴムの微細構造設計	東京工業大学 TSUBAME2.5	横浜ゴム(株) / 小石正隆	532
hp180016	物質・材料・化学	H30 HPCI一般課題	ReaxFFとUnited AtomモデルのMD計算による高分子材料の破壊挙動の研究	名古屋大学 CX400	防衛大学校 / 萩田克美	449
成果例前述 hp160101	工学・ものづくり	H28 HPCI産業利用 (実証利用)	長距離海中ワイヤレス電力伝送の電磁界シミュレーション検討	東京工業大学 TSUBAME2.5	パナソニック(株) / 小柳芳雄	427