

## 重点課題7

### 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成

国際競争力の高いエレクトロニクス技術や構造材料、機能化学品等の開発を、大規模超並列計算と計測・実験からのデータやビッグデータ解析との連携によって加速し、次世代の産業を支えるデバイス・材料を創成する。

#### 本課題の主な成果

1. パワーデバイス材料SiCの性能劣化原因をRSDFT計算で解明  
(Phys Rev Lett, 112, 136403, 2014 / Nano Lett, 17, 6458, 2017 / Jpn J Appl Phys, 57, 125701, 2018 / APEX, 11, 121301, 2018)
  2. 電磁場と第一原理で物質の光応答を計算する世界唯一のアプリSALMONを開発公開  
(M. Noda et al, Comp. Phys. Comm. 235, 356 (2019) / 光工学業績賞(高野榮一賞) / HPCI利用研究課題優秀成果賞)
  3. 第一原理計算と新手法開発で実験結果に隠れた本質を紐解き、**新超伝導機構**を提唱  
(物理学会若手奨励賞 / 物理学会論文賞 / 文部科学大臣表彰科学技術賞(研究部門))
  4. **磁性材料**に有効な記述子を見出し最適な化学組成に効率的に導く**機械学習手法**開発  
(STAM 18, 756(2017) / J. Phys. Soc. Jpn. 87, 113801(2018) / Phys. Rev. Mater. 3, 053807(2019) / 物理学会論文賞)
  5. 大規模分子動力学計算と大規模フェーズフィールド法の融合で、  
**金属材料微細組織形成過程**の高精度計算を開発  
(Adv. Sim. Theo. 1(2018)1800065 / Comp. Mater. Sci. 152(2018)118 / Model. Sim. Mater. Sci. Eng. 27(2019) 054002)
  6. 水処理やガス透過を規定する**ポリマーの分離能**が分子間相互作用から予測可能に  
(日本化学会 第36回学術賞 / J. Chem. Phys. 148, 214903 (2018).)
  7. **界面、欠陥、不純物**等を含む大規模非周期系シミュレーションのための、  
高効率・高精度分割統治法を開発し、**OpenMX**に実装  
(J. Phys. Cond. Mat. 30(2018), 295502-1 / Phys. Rev. B 98(2018), 245137-1 / J. Phys. Chem. 122(2018), 27292)
- \* 重点課題(7)公開アプリ紹介WEB「MateriApps」関連活動が文部科学大臣表彰科学技術賞(科学技術振興部門)受賞

## 重点課題7 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成

### サブ課題A: 高機能半導体デバイス (サブ課題代表者: 名古屋大学 押山 淳)

#### 目標

持続する未来社会を支える半導体デバイスの演繹的ものづくり(プロセス・インフォーマティクス)に資する、ポスト京アーキテクチャ上での計算物質科学の手法を確立し、パワーエレクトロニクス材料の基礎科学的本質を解明すると同時に、次世代プロセス・デバイスシミュレーション技術を確立する。

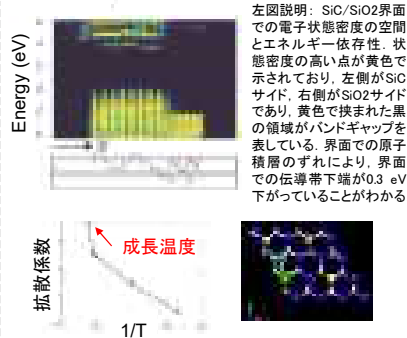
#### 成果内容と科学的・社会的意義

成果(1)・ポスト京上での物質科学計算に最適な実空間スキーム(RSDFT, RS-CPMDコード, 2011年ゴードンベル賞)の高速化・高機能化を達成し、10万原子サブナノ秒量子論シミュレーションを可能にするるとともに、デバイスシミュレーション手法との結合により、量子論デバイスシミュレータを構築した。  
成果(2)・①パワーデバイス材料であるSiCにおけるfloating 状態を計算で発見し、SiC-MOSデバイスでのキャリアトラップの内因的理由を解明。②同じくパワーデバイス材料であるGaNのエピ成長機構の素過程の解明。③量子論デバイスシミュレータによるSiナノワイヤFETのIV特性解明

(1)の成果により、数万原子規模の系統的な第一原理計算が可能となり、一例として、**次世代チャネル材料**である二層グラフェンにおける積層捻れとディラック電子の速度繰り込み現象が見いだされた。また、数千原子CPMDシミュレーションにより、従来抜くことが難しかった**アモルファス材料**の原子構造と電子状態の因果関係を解き明かす処方箋が与えられた。「富岳」コンピュータにより、実際の**デバイス構造におけるアモルファスの性質解明**が期待できる。また量子論デバイスシミュレーションによるSiナノワイヤFETのIV特性解明は、**デバイスデザインへの新たな演繹的アプローチ**を示している。

(2)のfloating state 発見の成果は、固体物理学の**教科書の記述変更**を促すものであり、計算科学的手法による**物性科学分野でのブレークスルー**である。さらにこのfloating stateがパワーデバイスであるSiC/SiO<sub>2</sub>界面での電子トラップを引き起こすという**発見(右図)**は(その後実験で確認された)、**基礎科学とデバイス開発が、コンピュータシミュレーションにより、ともに進んでいくことの重要性を如実に示しており、ポスト「京」プロジェクトの社会的重要性の証**となっている。

同じく(2)の成果の一つである、**GaNのエピタキシャル成長の機構解明**は、量子論にとって未踏領域である**結晶成長現象解明へのチャレンジ**である。激烈化するパワーデバイス開発競争の鍵を握るのは、**高品質のエピタキシャル薄膜形成技術**であり、ノーベル物理学賞受賞の光エレクトロニクスにおける薄膜形成技術に比して、格段の技術向上が必要である。今般、高精度CPMDシミュレーションにより、**GaN成長表面でのGa原子は2次元液体状態**となっていることが判明した。すなわち**エピ成長は固体上ではなく液体上でのものづくり現象**である。「富岳」コンピュータによる、より大規模な動的シミュレーションは、**新たな演繹的アプローチのものづくり法の高い可能性を示唆している。**



左図説明: SiC/SiO<sub>2</sub>界面での電子状態密度の空間とエネルギー依存性。状態密度の高い点が黄色で示されており、左側がSiCサイド、右側がSiO<sub>2</sub>サイドであり、黄色で挟まれた黒の領域がバンドギャップを表している。界面での原子積層のずれにより、界面での伝導帯下端が0.3 eV下がっていることがわかる。

上図説明: GaNエピ成長での成長温度(摂氏1000度)では表面Ga原子は突如激しい拡散運動を始める(右パネル緑原子の軌跡)。長時間シミュレーションにより、線形応答理論を用いて拡散係数を求めると、当該温度で急激なジャンプを示す(左パネル)。

**重点課題7 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成**  
**サブ課題B: 光・電子融合デバイス(サブ課題代表者: 筑波大学・矢花一浩)**

**目標**

電子ダイナミクスの第一原理計算に立脚した新しい光科学シミュレーションの方法を確立し、開発した計算コードをオープンソースソフトウェアとして公開する。それを用いて新奇な光デバイス原理の開拓や光加工技術の確立を、実験グループ、企業とも連携して遂行する。

**成果内容と科学的・社会的意義**

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

- (1)ソフト成果: 第一原理計算に基づく光科学汎用の計算コードSALMONを開発し、コード論文を出版するとともに、様々なプロセッサに最適化した。
- (2)研究成果: 実験研究者と連携し、シリコンの波数励起や誘電体光応答の超高速変化など、新奇光デバイス原理に関わる知見を得た。

(1)ソフト成果

(内容)

分子・ナノ物質・表面界面・バルク物質など多彩な物質の光応答を、光電磁場・電子・イオンの運動に対する第一原理計算により記述する他に例のない光科学ソフトウェアSALMONを開発し公開した。計算機科学者との密接な連携により、「京」のみならずOakforest-PACSをはじめとする主要スーパーコンピュータにおいて高効率な超大規模計算を可能にした。

(意義)

先端の光科学研究が対象とする光と物質が強く結合した諸現象に対して有効なソフトウェアを開発し、近接場光励起やアト秒科学、非熱レーザー加工の解明などが可能となった。特に光電磁場と電子の運動を多階層で連結した第一原理計算手法は、他に例がないものである。国際チュートリアルシンポジウムの開催により、世界標準ソフトウェアとしてSALMONの認知が進んでいる。

(2)研究成果

(内容)

金属ナノ粒子によるシリコンの波数励起過程を、現実的な設定で大規模計算により実証し、実験グループとの連携により波数励起に基づく光デバイスが試作され、その有効性の検証を進めている。高強度パルス光と誘電体薄膜の相互作用をアト秒実験グループと連携して明らかにし、誘電体の光学特性がフェムト秒以下の時間スケールで変化することや、薄膜を用いてパルス光の波形を制御できることを明らかにした。

(意義)

近接場光励起・アト秒科学・レーザー加工などの先端の光科学研究において、SALMONが第一原理計算に基づき、アト秒・ナノメートルの時空間解像度で現象を解明する精緻なシミュレータとなることを示した。今後「富岳」を利用する大規模計算により、近接場を用いた新奇デバイスやペタヘルツで動作するデバイスの設計、非熱レーザー加工の解明が大きく発展すると期待できる。



KNLクラスターOakforest-PACSでの全システム性能評価  
 Y. Hirokawa et al, ISC High Performance 2018, pp.205.



ダイヤモンドの光学的性質の超高速変化に対する第一原理シミュレーション。  
 M. Lucchini et al, Science 353, 916 (2016)  
 シリコンの励起を波数空間で示す。  
 M. Noda et al, Phys. Rev. Appl. 11, 044053 (2019)

**重点課題7 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成**  
**サブ課題C: 超伝導・新機能デバイス材料 (サブ課題代表者: 東京大学 今田正俊)**

**目標**

最終目標: 第一原理計算を基礎に強相関電子物質の電子構造解明に適用できるアルゴリズムの開発・応用と、富岳を活用するための手法開発。特に、銅酸化物などの高温超伝導機構、トポロジカル機能物質の新概念実証、界面や非平衡への概念適用を富岳で可能にするコード開発と適用。

**成果内容と科学的・社会的意義**

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

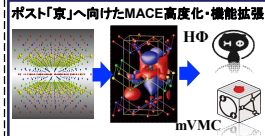
- 成果(1)第一原理的に強相関電子系の定量予測と物質設計を可能にする「HΦ」、「mVMC」、「RESPACK」の開発、高度化、公開を進めた。
- 成果(2) 高温超伝導体、トポロジカル物質の第一原理計算を、富岳を有効活用して推進する手法を開発し、「京」での計算で実験の定量再現に成功した。
- 成果(3) 強相関電子物質の長年の難問である高温超伝導と量子スピン液体現象の、実験結果に隠れた特徴を抽出し、新超伝導機構等を提唱した。
- 成果(4) 界面、非平衡での計算手法を開発し、富岳での計算に備えて「京」に適用し、超伝導やトポロジカル機能の増幅、最適化の基礎原理を発見した。

(1)の成果により、RESPACK等を活用して強相関有効ハミルトニアンを導出し、インターフェースを介してHΦ、mVMCなどの低エネルギーソルバーを用いて解く一貫スキームを構築した。このスキームにスピン軌道相互作用、電子格子相互作用、非平衡時間発展を組み込み、ソルバーにテンソルネットワークなどを含める等の高度化と機能拡張を進めた。高度な機能拡張のみならず、実験家も使えるソフトとしても、コード公開と普及活動を進め、強相関電子系に対する有力手法・一貫シミュレータとしての地位を確立した。本成果は21世紀初頭まで不可能であった強相関電子系の第一原理的定量的系統計算を行う手法が開拓され実装されたという意義がある。次世代機能素子として注目される強相関デバイス、トポロジカルデバイス、機能素子開発の武器となる。第一原理的に挑戦しうる一貫手法とその公開は世界的にもほとんど例がない。

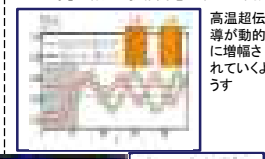
(2)の成果により、第一原理有効ハミルトニアンを導出して、「京」を活用して解き、銅酸化物での強相関電子系特有の超伝導と電荷不均一相の激しい競合を明らかにし、電荷不均一相を抑えて超伝導が優越する機構を定量解明した。スピン液体の候補であるイリジウムやルテニウム化合物で実験を定量再現した。本成果は銅酸化物超伝導体の30年以上の難問を第一原理的に解き、道を開くなど、富岳でのより系統的な解明の出発点にもなる。

(3)の成果により、今までの実験では隠れていた超伝導が「高温化」する機構を抽出し、これを検証するために機械学習を活用して実験研究者と連携する道を開いた。またイリジウム酸化物の磁性の裏にある、スピン液体や磁壁の持つトポロジカル機能を解明した。本成果は解析の難しい強相関電子系の実験結果に隠れる本質を計算や機械学習を用いて解明していく先駆例の一つとなり、実験結果の解析で実験研究者と連携が進み、実験と計算科学が連携して機能開発、探索していくデータ科学手法の展望を開いた。これらの基礎原理の解明が将来の産業創出に与える影響は未知であると同時に計り知れない。

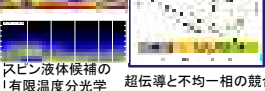
(4)の成果により、強相関電子系の界面や非平衡という物性科学のフロンティアを研究する道筋と手法が開拓された。本成果は強相関電子の非平衡状態で超伝導が増幅する機構の一つを見出し、界面で超伝導が最適化される一般的な機構の発見に寄与した。同時に実験と連携してフロンティア開拓を進め、実験の難しい問題での連携の道を開いた。



ポスト「京」に向けたMACE高度化・機能拡張



ポスト「京」で有用な強相関電子系ソフト開発



スピン液体候補の有限温度分光学 超伝導と不均一相の競合

**重点課題7 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成**  
**サブ課題D: 高性能永久磁石・磁性材料 (国立研究開発法人産業技術総合研究所・三宅隆)**

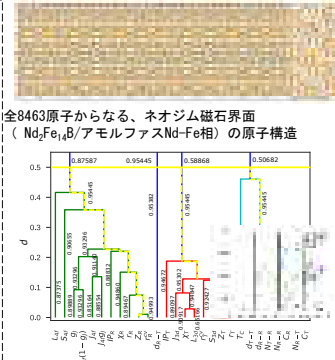
**目標**  
 1万原子を含む磁石材料の第一原理計算を可能にするとともに、インフォマティクスを活用した新規磁石の計算探索技術を開発する。

**成果内容と科学的・社会的意義** 緑: 科学的成果 青: 実用的成果

**成果(1).....8500 原子規模のネオジム磁石界面の第一原理計算を可能とするソフトの高度化に成功**  
**成果(2).....磁性材料に有効な記述子とデータ科学的解析法、化学組成を効率的に最適化する機械学習手法を開発**

**成果(1)**  
 (内容)  
 > **ネオジム磁石主相 (Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B) に対する定量的な原子論的スピン模型を構築し、有限温度磁性を解析する手法を開発。**  
 > **第一原理計算により、希土類磁石粒界の原子スケールの磁気物性値を評価する技術を開発。** サブ課題Gと協力して OpenMX コードを高度化し、4000 原子規模のネオジム磁石の主相・副相界面の最適構造を決定、8500 原子規模の界面系に対して動作確認。  
 (意義)  
 > 電動車の駆動モータに用いる高性能磁石には耐熱性が求められ、150℃以上の高温領域における高い保磁力が必要である。保磁力は粒界や材料組織に依存するが、その微視的機構は未だに解明されていない。元素戦略PJ等の最新の実験情報と本シミュレーション技術を組み合わせることにより、磁石実材料の粒界近傍の磁化反転機構の解明が進展すると期待できる。

**成果(2)**  
 (内容)  
 > 物性値を予測するための**汎用的な記述子である軌道場行列を考案**。4220 種類の遷移金属化合物の生成エネルギーや 658 種類の化合物の局所磁気モーメントに対して有効性を検証。  
 > 階層クラスタリングを用いて**重要な記述子を特定するサブグループ関連性解析を開発**。希土類遷移金属合金のキュリー温度を制御する記述子を特定。  
 > **ベイズ最適化とデータ同化を用いた効率的な化学組成の最適化手法を開発**。RFe<sub>12</sub> 型希土類化合物を対象として有効性を検証。  
 (意義)  
 > **マテリアルズ・インフォマティクスによる材料開発の加速は産業競争力に直結するため注目が大きい**。Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B を超える磁気特性を有する RFe<sub>12</sub> 型化合物等へ本技術を適用し、新規磁石材料開発を加速することが期待される。



全8463原子からなる、ネオジム磁石界面 (Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B/アモルファスNd-Fe相) の原子構造

希土類遷移金属合金のキュリー温度のサブグループ関連性解析

**重点課題7 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成**  
**サブ課題E: 高信頼性構造材料**

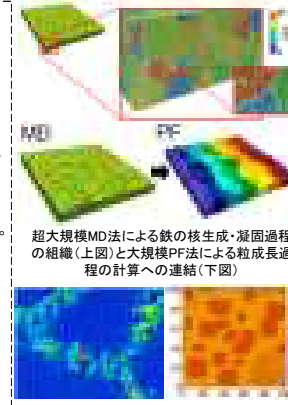
**目標**  
 金属系構造材料の性能を支配する微細組織の解明と設計のため、微細組織の構成要素や合金(溶質)元素との相互作用等を大規模第一原理計算で解明し、高精度データとして蓄積する。第一原理計算をメゾ・マクロに繋ぐマルチスケール計算技術を構築し、大規模フェーズフィールド法計算による凝固から粒成長、微細組織形成の高精度シミュレーションを実現する。

**成果内容と科学的・社会的意義** 緑: 科学的成果 青: 実用的成果

**成果(1) 大規模並列計算を駆使した革新手法による大規模MDと大規模PFの融合・連結で、金属材料の微細組織形成過程の高精度計算が可能に。**  
**成果(2) 電子が支配する鉄の粒界・転位と合金(溶質)元素の相互作用を解明。第一原理計算をメゾ・マクロに接続する新規計算技術を開発。**

(1)の成果 並列計算技術を駆使して、鉄の融体から核生成・凝固・粒成長を経て微細組織に至る過程の**超大規模分子動力学(MD)計算を達成**。この核生成・凝固の構造をフェーズフィールド(PF)法に連結し、その後の粒成長計算を、同一空間スケールでMDとPFの両法で実行することに成功(世界初)。原子レベル情報が自然にメゾ・マクロの組織形成過程に繋がるとともに「データ同化」により原子レベル物性値をPF法に同時に高精度に抽出・連結することも可能に。また、大規模PF法による凝固計算(デンドライト成長)で重力による自然対流効果を取り入れる技術開発に成功(世界初)。より現実的な高精度凝固組織計算が可能に。  
 (意義) 原子スケール(大規模MD)情報を大きなスケール域(大規模PF法)に高効率・高精度に伝達する技術が開発でき、融体から凝固、微細組織形成までの高精度マルチスケール計算の基幹部分が確立できた。また、自然対流など凝固デンドライト組織を決定する環境因子(温度、流体等)を取り入れることで、実プロセスに近い条件を反映させた計算が可能。「富岳」による**超大規模の並列計算**でさらに現実的な大規模構造が扱える。融体から微細組織に至る過程は金属系構造材料の性能を支配し、厳密なプロセス設計が必須。高精度マルチスケール計算による現象解明と設計・制御は、技術的・社会的インパクトが極めて大きい。

(2)の成果 電子が支配する鉄の粒界・転位と一連の合金(溶質)元素との相互作用を大規模第一原理計算で高精度に解明、その機構を局所エネルギー法で明らかにした(世界初)。第一原理計算をメゾ・マクロに繋ぐ手法として、局所エネルギー法と機械学習の連携による粒界エネルギー予測技術、さらに、第一原理自由エネルギー計算とPF法の連携による合金の組織予測技術(第一原理PF法)を確立した(世界初)。  
 (意義) 粒界・転位と一連の合金(溶質)元素の相互作用とその機構解明は、金属材料の基礎科学の革新である。第一原理計算をメゾ・マクロに繋ぐ手法の確立は、上記の大規模MD・大規模PFの計算技術と組み合わせ、さらなる高精度化を可能にし、また合金や溶質の扱いを可能にする。第一原理PF法による合金組織予測は、「富岳」による並列計算で大規模化でき、多元合金にまで拡張できる。第一原理局所エネルギー法と機械学習の連携においても、より複雑な構造が扱える。金属系構造材料の微細組織計算の一層の高精度化を可能にし、新規材料開発や高性能化に大きく寄与する。



超大規模MD法による鉄の核生成・凝固過程の組織(上図)と大規模PF法による粒成長過程の計算への連結(下図)

第一原理局所エネルギー法と機械学習による鉄の粒界エネルギー予測(左図)、第一原理PF法によるNiAl合金の組織予測(右図)



**重点課題7 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成**  
**サブ課題F: 次世代機能性化学品**

**目標**

トポロジー制御共重合体における小分子(水やガス)の分配挙動を解析し、ポリマーの相溶性を規定する化学ポテンシャルの全原子計算を行うとともに、有機/無機界面の接着強度を自由エネルギーのレベルで定量化し、古典/量子ハイブリッド計算によって接着の劣化機構を明らかにする。

**成果内容と科学的・社会的意義**

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

**成果(1):** ポリマーの相溶性と小分子分配の全原子自由エネルギー計算、および、接着強度劣化に関わる反応分子のハイブリッド計算を可能にした  
**成果(2):** 多様なトポロジーにおける共重合体の物質分配機能を評価し、異種界面の接着強度や接着仕事の実験値を再現し劣化の素反応を解明した

(1)の成果により、ブロック共重合体やグラフト共重合体への小分子(水やガス)の分配挙動の予測、および、相溶性を規定するポリマー全体の化学ポテンシャルの全原子計算が可能になるとともに、有機系接着剤と金属の接着強度やその劣化ダイナミクスを、劣化要因とされる侵入分子群を丸ごと含めた規模で電子レベルから定量的に解析できるようになった。ポリマー系の研究では、ポリマー内セグメントの相互作用から溶解自由エネルギーを構成する手法を実装することで**溶解性を決定するポリマー内構造要素の同定**を可能にし、さらに、ポリマーの繰り返し単位であるモノマーと周囲との相互作用を逐次的に導入する手法を定式化することで、これまで不可能とされていたポリマー全体の過剰化学ポテンシャルの全原子計算ができるようになった。有機/無機界面の研究では、1000原子を超える量子領域を含む古典/量子ハイブリッド計算を実用的な計算時間で遂行することを可能とし、**高分子で複雑に装飾された金属表面と液体との接着仕事を簡便に自動計算する手法を開発**した。本成果の意義は、海水淡水化やガスバリア性のようなポリマー材料の主要機能である物質分配、および、熱可塑性と耐衝撃性の両立などの要請を満たす**ポリマー相溶性を原子レベルの相互作用の知見から予測することが可能**になったこと、また、自動車などの組立産業におけるさらなる高度化(軽量化、高耐久化など)の鍵を握るとされる**異種素材間接着への原子レベルのアプローチ**が可能になったことである。



ポリエチレンとポリアクリルアミドのグラフト共重合体への水の吸収

(2)の成果として、ポリエチレンとポリアクリルアミドの**共重合体における吸水自由エネルギーが共重合比によって規定**されることが明らかになり、スルホン酸をもつアイオンマーにおける酸素の吸収性と透過性をポリマーの分岐度やフッ化度を変えて検討することでポリマー鎖の柔軟性が透過性の制御因子であることが示された。さらに、ポリエチレン、ポリプロピレン、ポリメチルメタクリレートなどの全原子MD計算から、ポリマー相溶性を決定する過剰化学ポテンシャルの主要項は数十モノマー程度の全原子計算から得られることが見出された。また、実際ので大規模な古典/量子ハイブリッド計算をAl金属とエポキシ樹脂の接着界面に適用することで、実験結果と合致する接着強度のシミュレーション結果を得ることに成功するとともに、基板金属と樹脂との接触部に侵入した水分子等によって**金属原子、樹脂官能基、水分子の三つ巴で生じる接着劣化の反応素過程を複数発見し接着強度が半減**することを見出した。本成果の意義は、ポリマー構造の複雑化(共重合化、分岐、ヘテロ原子の導入)に対する小分子(水やガス)の分配挙動の応答が原子レベルの相互作用に基づくMD計算によって予測可能になったこと、および、素材産業からの長年の要請であった**ポリマー相溶性の問題に対する原子レベルからのアプローチ**が構築されたことにある。さらに、**有機/無機の異素材界面の接着強度や劣化メカニズムが電子・原子レベルで解析可能**になったことは、複合化が進む材料開発分野に対する意義深い貢献である。



接着劣化(Al基板・樹脂)のハイブリッドシミュレーション

**重点課題7 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成**  
**サブ課題G: 共通基盤シミュレーション手法**

**目標**

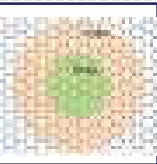
磁石材料(サブ課題D)、鉄鋼材料(サブ課題E)、機能性化学品(サブ課題F)と連携し、1万原子以上から構成される複雑界面構造や複雑液体の大規模第一原理電子状態計算を可能とする効率的なオーダーN計算手法を開発し、第一原理ソフトウェアOpenMXに実装・公開する。

**成果内容と科学的・社会的意義**

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

**成果(1):** ……光電子分光スペクトルの高精度計算手法や局在自然軌道を用いた高効率・高精度分割統治法を実装したOpenMXを開発  
**成果(2):** ……汎用ソフトウェアOpenMXを活用し、新規二次元材料(シリセン、ポロフェン)及び触媒材料(単分散Pt原子)の構造同定に成功

(1)ソフト成果  
 (内容) 多岐に亘る物質群の材料特性を統一した枠組みで系統的に調べることが可能な汎用第一原理電子状態計算ソフトウェアOpenMXを開発した。特に**光電子分光スペクトルの高精度計算手法及び局在自然軌道を用いた高効率・高精度分割統治法: DC-LNO法を新たに開発し(上図)、サブ課題D、サブ課題E、サブ課題Fとの連携を強化**した。  
 (意義) 磁石材料、鉄鋼材料、電池材料などの機能特性は結晶構造や分子構造に加えて、二次構造である界面構造、欠陥、転位、不純物添加などの複合要因により決定されており、その機能と構造の相関を詳細に明らかにするためには本質的に実デバイス構造を再現した大規模計算が必要である。本成果により、第一原理計算の立場から**複雑構造の直接計算が可能となり、実験との直接的な比較ができるようになる**。開発したOpenMXはGNU-GPLの規約の下で順次、一般公開を進めており、本重点課題を超えて**大学や産業界で広く活用され、計算物質科学のさらなる発展に貢献**できる。



DC-LNO法の概念図

(1)研究成果  
 (内容) 計算量が原子数に比例するオーダーN第一原理計算手法は1990年代初頭より、活発に研究が進められてきたが、計算精度、数値安定性、汎用性の面から未だ万能な手法は開発されていない。我々は**局在自然軌道法と分割統治法を融合**することで、従来の手法を超える汎用性の高い計算手法(DC-LNO法)の開発に成功した。本手法により**絶縁体のみならず、金属に対しても高精度計算が可能**であり、その超並列性から、「富岳」コンピュータ上で高い並列効率が期待される。またプロジェクト前半で開発した光電子分光スペクトルの高精度計算手法の適用研究を北海道大学・郷原グループと共同で展開し、**グラフェンに単原子分散したPt原子の原子レベルでの担持構造とその電子状態を初めて明らかとした(下図)**。  
 (意義) 汎用性の高いオーダーN第一原理計算の適用範囲は極めて広い。磁石材料、鉄鋼材料、電池材料の構造・機能相関の理解、イオン液体の動的振る舞い、地球深部での高温・高圧下での物質の構造予測等への応用展開が期待される。実材料開発で議論される二次構造(界面構造、欠陥、転位、不純物添加)の直接計算を可能とする第一原理電子状態計算手法を新たに開発したことにより、「富岳」コンピュータ上で本手法による超並列計算を実行することで、**現実 に即したシミュレーションを実現**され第一原理計算の産業応用が加速される。



単原子分散Ptの担持構造

## 重点課題8

### 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

製品コンセプトを初期段階で定量評価し最適化する革新的設計手法、コストを最小化する革新的製造プロセス、およびそれらの核となる超高速統合シミュレーションを研究開発し、付加価値の高いものづくりを実現する。

#### 本課題の主な成果

1. コデザインの取組により、ニーズに沿った価値創造と費用対効果の大きいものづくりを実現するためのアプリケーションの高速化を実施し、ターゲットアプリであるFFBはポスト「京」で100倍以上を達成できる見込みを得るとともに、その高速化の成果を他のキラーアプリに展開。
2. 開発したアプリにより、自由表面の影響も考慮した船の抵抗試験を実施し、曳航水槽試験のシミュレーションによる代替が可能であることを実証。また、「京」では実現できなかった実機航空機複雑形状の空力解析が、ポスト「京」で実現できることを検証。
3. HPCを駆使した多目的最適設計技術の実用化の可能性について、自動車の空力最適化とターボ機械の性能・騒音最適化問題を対象に実証中。

#### 重点課題8 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

サブ課題A: 設計を革新する多目的設計探査・高速計算技術の研究開発(宇宙航空研究開発機構・大山聖)

##### 目標

多目的最適設計探査技術について、設計解を見出すまでの時間を飛躍的に短縮するとともに、制約条件が強い場合においても設計解を見出すことができるアルゴリズムの研究開発を行う。また、高速計算技術研究開発については、主要なアプリケーションに実装し、その効果を検証する。

##### 成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果(1)多目的設計探査について、多目的設計最適化アルゴリズムを開発し、テスト問題で計算時間が1/3以下になることを確認(図1)

成果(2)高速計算技術・時間並列計算について、オリジナルのコードに比べ、計算速度が2倍から13倍になることを確認(図2)

多目的設計探査に関しては、「京」を用いることによりその有効性を証明できたが、最適設計解を見出すまでに要する時間が40日以上掛かったり、制約条件が強い場合は最適設計解(パレート最適解)を見出せなかったりする場合があることが判明した。そこで、設計解を見出すまでの時間を飛躍的に短縮するとともに、制約条件が強い場合においても設計解を見出すことができるアルゴリズムの開発を行う。また、重点課題⑧で開発する全てのアプリケーションに共通する課題として解析に要する時間の短縮があるため、多目的設計探査技術の研究開発に加えて、時間短縮のための共通基盤技術として、高速計算技術の研究開発し、主要なアプリケーションに実装し、その効果を検証する。

(1)の成果に関しては、実数設計変数の適応的離散化により計算時間を7割削減できることを確認した。(2)の成果に関しては、パイプライン法の適用によりオリジナルのコードと比較して計算速度が2倍になること、また、フェーズフィールド法に適用した場合13倍の加速を実現を確認した。これらを他のサブ課題で開発するアプリケーションに実装することにより、製品コスト低減や高品質化に貢献できる新設計基盤を整備し、産業競争力強化に貢献できる。現在多目的設計探査については、他のサブ課題への展開として、重点課題⑧のサブ課題Bとの連携による、自動車の空力最適化、および、サブ課題Cとの連携による、ターボ機械の性能・騒音の最適化の実証研究を開始した。

最終達成目標としては、多目的設計探査に関しては、重点課題⑧のサブ課題Bまたはサブ課題Cと連携することにより、それぞれ自動車の空力最適化、または、ファンの性能・騒音の最適化に適用し、また、高速計算技術に関しては、重点課題⑥のサブ課題Bのフェーズフィールド法や重点課題⑧のサブ課題Cの流体シミュレーションに適用し、多目的設計探査および高速化の効果をj確認する。

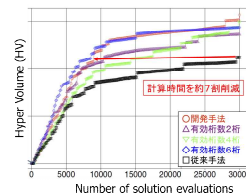


図1 マツダベンチマーク問題をを用いた性能比較

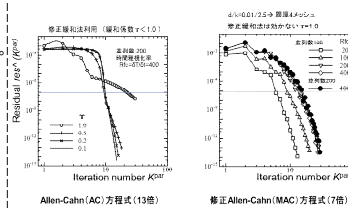


図2 時間並列による高速計算技術フェーズフィールド法に適用し、13倍の加速を実現

**重点課題8 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発**

**サブ課題B: リアルタイム・リアルワールド自動車統合設計システムの研究開発(神戸大学大学院・坪倉誠)**

**目標**

従来の1/10以下の時間で定常空力予測が可能なアプリケーションを開発する。また、設計問題に対する多目的最適設計解を見出すことを可能するために、構造振動/強度解析機能、圧縮性熱流体解析機能、移動境界解析機能を具備したアプリケーションを開発する。

**成果内容と科学的・社会的意義**

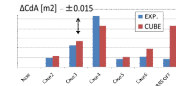
緑: 科学的成果 青: 実用的成果

- 成果(1)実車空力解析に対してプリ処理・コアカーネル高速化により、約120時間要していた解析ターンアラウンドタイム(TAT)最短12時間以内を実現(図1)
- 成果(2)空力性能多目的最適化フレームワークを構築しその有用性を実証(図2)
- 成果(3)オイラー構造解析・圧縮性解析・6自由度移動境界解析の基本プログラムを開発し、ホワイトボディを用いた剛性解析について精度検証を実施(図3)

新素材や新たな動力を用いた次世代自動車を早急にかつ高い品質で実現するためには、既存の実験代替を目的としたCAEを活用した設計手法に対して、より高次元でCAEを利用した設計プロセスの革新が必要である。本サブ課題では、「京」で実現した自動車空力連成解析を基盤技術としてHPC環境を活用することで、設計上流側でデザイナーと技術者が協調したコンセプトデザインを支援する(リアルタイム)と共に、時々刻々と変化する運転条件変化を考慮した(リアルワールド)シミュレーションを実現することで予測精度・信頼性向上を実現することを旨とした。

(1)の成果に関しては、実車フルモデルの複雑な形状を用いた空力解析について、既存の非構造格子系ソルバーに対して、ソルバー部分のみで数十倍の加速を実現し、現状のTATは最短12時間以内を実現した。これにより、自動車の排出ガス・燃費試験法の国際基準WLTP(Worldwide harmonized Light vehicles Test Procedure)認証の取得に向けた解析が可能であることが実証されたと共に、上流設計側でデザイナーと技術者が協調してコンセプトデザインを実施することが可能となる。また、(2)の成果として、サブ課題Aと連携して、多目的最適化フレームワークを構築し、ポスト「京」自動車コンソーシアム活動によりその有用性を実証すると共に、(3)の成果として、プリ処理(メッシュ生成)が高次元オイラー型構造解析法を実装、粒子法による薄板構造のモデル化に成功、および5億セル規模の強度解析を実現し、その精度検証を実施した。これにより、設計初期段階において、空力・強度・音・熱・振動などの複数の物理現象が関連した設計問題に対する多目的最適設計解を見出すことが可能となる。

これらの成果により、当初目標として掲げた「TAT12時間での実車空力解析と、実走行状態における多目的設計最適化が可能、構造解析機能、圧縮性熱流体解析機能、移動境界解析機能を具備したアプリケーションプログラムを開発し、走行燃費と高速走行操縦安定性の両立を目的とした、自動車の多目的最適設計問題を実施し、開発したアプリケーションの性能および効果を確認する」ことを達成する。



▲タイヤ回転時の6仕様空力抵抗差  
図1 乗用車の国際燃費基準(WLTP)の認証取得に向けた精度検証

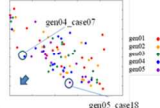
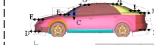


図2 自動車空力性能多目的最適化



図3 自動車ボディ強度解析

**重点課題8 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発**

**サブ課題C: 準直接計算技術を活用したターボ機械設計・評価システムの開発(東京大学生産技術研究所・加藤千幸)**

**目標**

既存のアプリケーション(FFB)の計算速度の大幅な向上と計算規模や計算機能の拡大、LES解析用の新たな壁面モデルの開発と実装、および、計算格子の完全自動生成と流体騒音の直接計算が可能、Lattice Boltzmann法(LBM)に基づく新規アプリケーション(FFX)の開発を行う。

**成果内容と科学的・社会的意義**

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

- 成果(1)FFBについて、ポスト「京」で100倍以上の高速化を達成できる見込みを得(コデザイン成果)、その効果を船の自航計算等により検証中(図1)
- 成果(2)FFBに対して圧縮性流れ解析機能を実装したコードの検証を実施。また、LES用壁面モデルを開発し、その効果を検証中
- 成果(3)LBMによるプロトタイププログラム(FFX)を開発し、ベンチマークテストを実施(図2)

HPCI戦略プログラム分野4の一つの研究開発課題の成果として、従来十分には解明されていなかった複雑な非定常流動現象を解明したりすることが可能であることを実証したが、これらの計算には「京」の数千ノードから数万ノードの計算資源が必要であるため、直ちに企業における実用化には至らなかったなどの問題も顕在化した。そのため、計算速度の大幅な向上と計算規模や計算機能の拡大、計算資源量の大幅な削減を目指したLES解析用の新たな壁面モデルを実装した既存のアプリケーション(FFB)、および、計算格子の完全自動生成と流体騒音の直接計算が可能、Lattice Boltzmann法(LBM)に基づく新規アプリケーション(FFX)の開発を行う。

(1)の成果に関して、これまでに実施したチューニングにより2.1倍、アルゴリズム変更によりコアカーネルベースで4.9倍(実測)の高速化を達成しており、CPUの性能向上と合わせて、ポスト「京」で100倍以上の高速化を達成できる見込みを得、その効果を船の自航試験のベンチマーク計算等により検証している。(2)の成果に関して、圧縮性流れ解析機能をFFBに実装し、ターボ機械の解析用のオーバーセット機能を検証しており、また、LES用壁面モデルを開発し、その効果を検証している。これらにより、「京」を用いても解析を実施することができなかった、少なくとも見積もっても5,000億以上の格子が必要となる多段ポンプや水車のLES解析および、「京」で実証した既存のアプリケーションではできなかった流体騒音の直接的な予測が可能となる。(3)の成果に関して、FFXを開発し、計算速度、計算精度の検証を開始し、「京」の6万ノードを用いた2兆格子の計算を実施し、ピーク性能の6%の計算速度で動作することを確認した。これにより、計算格子の完全自動生成と流体騒音の直接計算が可能となる。

最終達成目標としては、サブ課題Aと連携して、開発されたFFBがファンの性能・騒音の多目的最適設計に適用して、その効果の予備的な検証を実施する。また、シミュレータによるノード性能の予測から計算速度を推定するとともに、ネットワーク性能と通信量からアプリケーション全体の性能を評価する。

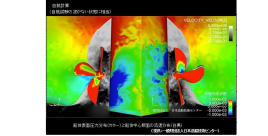
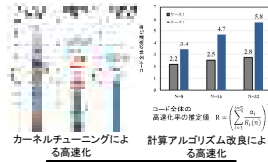


図1 FFBの高速化の状況(上)とその結果を利用した自航試験のベンチマーク計算(下)

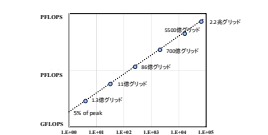


図2 FFXの「京」におけるweak-scaleベンチマークテスト



**重点課題8 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発**  
**サブ課題D: 航空機的设计・運用革新を実現するコア技術の開発(宇宙航空研究開発機構・高木亮治)**

**目標**  
 従来の数値解析では評価できなかった設計課題(航空機実機詳細形状に対する離着陸時の最大揚力の予測、還音速バフェットの予測など)を、精度、解析時間の両面から設計に使えるレベル評価可能なアプリケーションプログラムを開発する。

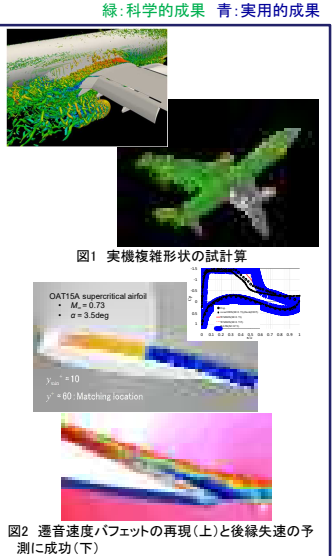
**成果内容と科学的・社会的意義**

成果(1)実機複雑形状に対して、階層型等間隔直交構造格子生成を達成し、試計算を実施(図1)  
 成果(2)新たな壁面モデルの実装と基礎検証を完了し、還音速バフェットの再現と後縁失速の予測に成功(図2)

航空機産業の国内生産額は、過去5年間で1.1兆円から1.8兆円と年率約5%で急成長しており、2030年には3兆円を超えることが期待されている。本サブ課題では、ポスト「京」の計算能力をフルに活用することにより、航空機設計の要となる空力設計技術を飛躍的に高度化することを狙っている。

(1)の成果に関しては、着陸装置(脚、タイヤ等)や高揚力装置のついたJSM、CRM、LEGの実機複雑形状(レイヤー格子なし、LES壁モデルなし)に対して、試解析を実施し、問題なく計算ができることを確認した。また、STL形状から格子を自動生成し、数億点規模の格子で細かな構造も再現できることを確認し、基盤ソルバーのレイヤー格子への対応と機能検証として、45億点規模の試計算を実施した。これにより、離着陸時の最大揚力係数の推算が可能となり、その向上を図ることができれば、滑走路長の短い空港にも離着陸が可能となる他、高地空港(空気密度が低い)での運航柔軟性、空港周辺への騒音低減となるため、航空機の商品価値の大幅な向上に繋がる。(2)の成果に関しては、開発された壁面モデルにより、飛行限界を決める、主翼上面に発生する衝撃波と境界層の干渉による離・振動現象である還音速バフェット現象の再現や後縁失速の予測に成功し、前者については、その精度の検証およびメカニズムの提案を行った。現在、壁面モデルの研究開発として、LES平衡壁面モデルの開発中のコードFFVHC-ACEへの導入と平板乱流境界層解析での予測精度の検証、非平衡壁面モデルの研究開発を実施している。これにより、従来の解析では不可能であった飛行限界の評価が可能となり、シミュレーションにより飛行試験のリスクを大きく低減させることが可能となるため、航空機の開発期間の大幅な短縮と開発コストの大幅な削減に繋がる。

最終達成目標としては、ポスト「京」で実施する解析対象と同等な実機複雑形状に対して計算格子が作成できることを確認し、また、最大揚力の予測精度および還音速バフェットの予測精度に関しては単独翼などを対象とした解析結果を、既存の風洞実験値と比較することにより解析精度を確認する。



**重点課題8 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発**  
**サブ課題E: 新材料に対応した高度成形・溶接シミュレータの研究開発(東京大学大学院・奥田洋司)**

**目標**  
 母材の接触状態を詳細に計算し、溶接による収縮を高精度に予測(従来は実測値に対して数十%であるが、これを数%)にするための、数m規模の解析領域に存在する数mmの溶融部を数μmで解像することが可能なソルバーを開発する。

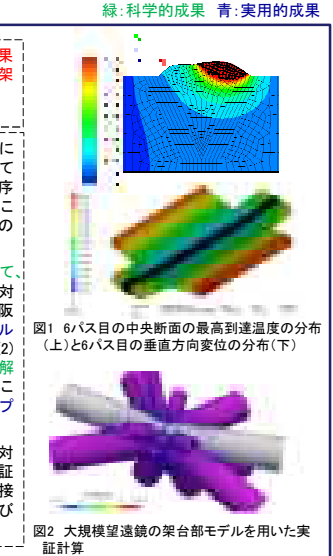
**成果内容と科学的・社会的意義**

成果(1)超大規模・高精度強連成解析ソルバーを開発し、数億自由度の接触問題の解析に適用し、効果を実証(図1)。また、これまでの計算規模では予測精度が十分ではなかった大規模望遠鏡の架台部モデルの問題を用いて、予測精度を検証(図2)  
 成果(2)プリ・ポストプロセッサのプロトタイプが完了

日本の基幹産業である自動車を始め、クレーン、圧力容器、タービン、配管、LNGタンクなどの製造には、様々な鋼板の溶接が行われており、この工程は生産時間やコストに大きく影響を与えるものとなっている。本サブ課題では、溶接法の高度化や新材料利用の促進に貢献する。溶接工程における溶接順序探索の高精度化、逆ひずみ量推定の高速化を目的とし、高度成形・溶接シミュレータを開発している。これにより、生産時間の短縮やコストダウン、熟練工によるトライアル&エラー依存からの脱却、溶接法の高度化や新材料利用の促進に貢献する。

(1)の成果に関しては、材料構成則を整備し、接線係数マトリックスの連成成分を導出することによって、熱構造一体型連成手法の構築、コードの動作確認するとともに、数億~数百億自由度規模の問題に対する並列性能の最適化と、部品モデル(~数億自由度)に対する精度をJWRJAN固有ひずみ法コード(阪大接合研)との比較し、良好に一致することを確認した。これにより、超大規模・高精度強連成解析ソルバーを持つシミュレータが完成し、溶接工程における「京」全体規模の永久変形予測を実現できる。(2)の成果に関しては、開発環境Electronを使用してウェブブラウザで動作するプリポストの開発し、溶接解析の機能(溶接線、溶接条件の設定機能、複数バスの設定機能など)を拡張、動作検証を実施した。これにより、プレス成形と溶接の一連の工程を一つのプリポストプロセッサで解析することが可能となり、プレス成形解析から溶接解析に至るワークフローをサポートできる。

最終達成目標としては、超大規模・高精度強連成解析ソルバーとして、数千億自由度規模の問題に対する並列性能の最適化と全体モデル(自動車や重機械フレームなどの~数十億自由度)に対する実証解析を実施し、また、プリ・ポストプロセッサとして、プレス成形のスプリングバックによる残留応力を溶接の初期条件として渡す機能を実装し、動作検証を行い、溶接工程における適切な溶接順序探索および逆ひずみ量推定が可能となることを確認する。



**重点課題8 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発**  
**サブ課題F: マルチスケール熱可塑性CFRP成形シミュレータの研究開発(東京大学生産技術研究所・吉川暢宏)**

**目標**

熱可塑性CFRPの合理的設計を通じたものづくり強化のための、マルチスケール解析技術を活用した熱可塑性成形シミュレーション技術の開発し、成形後の繊維配置を正確に予測し、合理的な強度評価に基づく高度な最適設計を実施可能とする。

**成果内容と科学的・社会的意義**

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

- 成果(1)炭素繊維と樹脂を区分した考慮したモデルによる結果をマルチスケール展開し、高精度の熱可塑性CFRP成形シミュレーションが可能なマクロスケール熱可塑性成形シミュレータが完成(図1)
- 成果(2)開発したシミュレータの効果の検証として、ジェットエンジンファン部材(Structural Guide Vane)の成形シミュレーションに適用中(図2)

ジェットエンジンファンブレードや自動車ボディのCFRP(炭素繊維強化プラスチック)化においては、その成形性の高さから薄さ0.1 mm程度の熱可塑性プリプレグシートを積層し加熱成形する手法が有望視されており、プリプレグシートの形状や積層構成を設計変数とする高度な最適設計に期待が寄せられている。本サブ課題では、成形後の繊維配置を正確に予測し、合理的な強度評価に基づく高度な最適設計を実施可能とする、熱可塑性成形シミュレーション技術を開発する。これにより、金型修正の手戻り抑止(経費削減:15百万円、工期短縮:45日)、最適成形条件探索の効率化(経費削減:25百万円、工期短縮:75日)を実現し、設計および製造プロセスの合理化による国内メーカーの優位性を確立する。

(1)の成果に関しては、炭素繊維と樹脂を明確に区分するマイクロモデルから正確なマクロ材料モデルを構築し、熱伝導-構造接触連成解析機能を整備して、精度の高い成形シミュレーションを実施可能とした。CFRP材料の熱可塑性変形特性を正確に予測可能であることを、プリプレグシートを8層積層した試験体の成形後のゆがみ予測問題で検証した。(2)の成果に関しては、ジェットエンジンファン部材であるStructural Guide Vane (SGV)のプレス成形シミュレーションを実施し、内部に発生する複雑な応力分布と残留ひずみ発生メカニズムを明らかにした。実成形品との照合を行いシミュレータの実効性を確認することで、シミュレーション結果を活用した設計及び製造の高度化を推進するとともに、試作回数を激減させ、開発コスト削減に貢献することが可能となる。

最終達成目標としては、実効性を確認したシミュレータを活用し自動車ボディあるいはジェットエンジンの実部品レベルの熱可塑性成形シミュレーションを実施し、繊維配向の乱れなどの製造誤差を低減する成形プロセスの策定と設計において勘案すべき製造誤差の見積もりを行い、熱可塑性CFRPのマルチスケール成形シミュレータを活用した最適成形プロセスの策定と合理的設計のための製造誤差を見積もることができることを確認する。

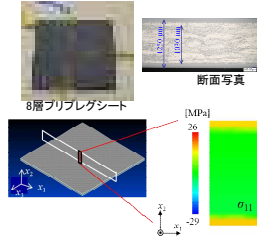


図1 8層プリプレグシートの熱間プレス試験結果とマクロスケールシミュレーション結果との照合

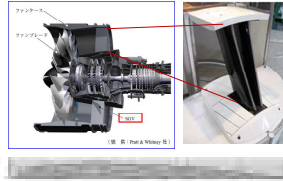


図2 ジェットエンジンファン部材の成形シミュレーション



## 重点課題9

### 宇宙の基本法則と進化の解明

素粒子から宇宙までの異なるスケールにまたがる現象の超精密計算を実現し、大型実験・観測のデータと組み合わせて、多くの謎が残されている素粒子・原子核・宇宙物理学全体にわたる物質創成史を解明する。

#### 本課題の主な成果

1. ポスト「京」(富岳)の時代に本格化する大型実験・観測計画のデータと比較可能な理論予想のためのシミュレーションコードが整った(MNRAS 482, 4846等)
2. B中間子崩壊の計算において、SuperKEKB実験で必要とされる精度の達成に道筋
3. バリオン間力の格子QCD計算での系統誤差に関して長年の問題を解決(JHEP 1903, 007)、ストレンジネスを含むバリオン間力を計算し実験的に未発見の状態を予言(PRL120, 212001)
4. 水銀同位体で中性子数とともに繰り返しの量子相転移を発見するなど、ポスト「京」で初めて可能となる質量数200領域原子核の試行計算に成功(Nature Physics 14, 1163)
5. 中性子星連星の合体現象を解明(林忠二郎賞、仁科記念賞、木村利栄理論物理学賞、日本物理学会若手奨励賞、日本天文学会研究奨励賞)し、かつ来たる観測結果を解釈する上で必須の計算結果を導出するためのコード群を整備
6. 宇宙の構造形成シミュレーションにより大局的および局所的なダークマター分布を解明(MNRAS 487, 2718)し、主成分解析やガウス過程を実装した「エミュレータ」を開発

## 重点課題9 宇宙の基本法則と進化の解明

### サブ課題A: 究極の自然法則と宇宙開闢の解明(サブ課題代表者: 高エネルギー加速器研究機構・橋本省二)

#### 目標

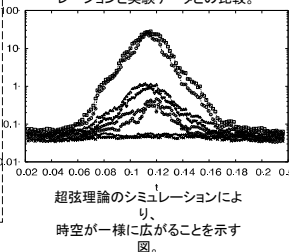
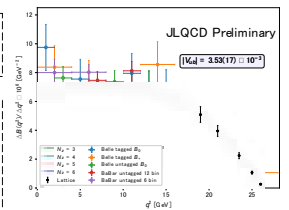
素粒子と初期宇宙のシミュレーション研究により、究極の自然法則と宇宙開闢の解明に貢献する。具体的には、B中間子セミアレプトニック崩壊形状因子の精密計算、有限温度QCD相構造サーベイの予備計算、超弦理論に基づく宇宙開闢のシミュレーションを行う。

#### 成果内容と科学的・社会的意義

成果(1) B中間子セミアレプトニック崩壊形状因子の計算において、SuperKEKBで必要とされる精度の達成に道筋。  
 成果(2) QCD相転移において新たな対称性の回復現象を発見。QCD相構造の全体像解明に向けた第一歩に。  
 成果(3) 超弦模型計算における符号問題を扱う新手法を開発し、インフレーションによる空間膨張を再現可能に。

- (1) B中間子のセミアレプトニック崩壊 $B \rightarrow \pi l \nu$ を記述する形状因子の格子QCD計算を実行した。格子間隔、クォーク質量などについての内外挿において系統誤差が制御できることを確認した。これにより、小林益川行列要素  $|V_{ub}|$  の決定に必要な形状因子を、Bファクトリー実験のデータと同程度の精度で計算することが可能になった。ポスト京においてさらに高精細かつ高統計の計算を行うことで、2019年から高エネルギー加速器研究機構(KEK)で本格的に始まったSuperKEKB実験で必要とされる精度を得ることが可能になる。素粒子の標準模型の精密検証に向けて、大規模実験プロジェクトとの連携を深める。
- (2) (フレーバー数2の)QCDの有限温度相転移の高温相において、クォーク質量が小さい領域でトポロジカル感受率および軸性量子異常が消失する現象を観測した。この発見は、有限体積効果の検証、中間子スペクトルにおける検証を加えて、さらに確実なものになった。カイラル対称性を保つ格子定式化を採用した計算により従来想定されていた対称性の破れ(およびその回復)のパターンとは異なる結果が得られたことで、QCD相図の理解に変更が迫られることになる。ストレンジクォークを含む現実的な(フレーバー数3の)理論について大規模なサーベイを行う準備が整った。
- (3) 超弦理論の定式化の一つであるタイプIIB行列模型に基づく宇宙開闢のシミュレーション研究により、宇宙初期に時空が急速に膨張する様子を再現することを究極の目標として予備研究を進めた。計算量を削減する近似による計算では連続的な時空が得られないという問題に直面し、この問題を乗り越えるためには、分配関数に現れる符号問題を適切に扱う必要があることが明らかになった。符号問題を扱う手法として、複素ランジュバン法の研究を進め、その適用限界を明らかにするとともに、超弦理論に適用することで連続的な時空が得られる可能性が出てきた。ポスト京でのより大規模な計算により、宇宙開闢の解明に向けた本格的なシミュレーションを開始することができる。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果



## 重点課題9 宇宙の基本法則と進化の解明

### サブ課題B: 物質創成史の解明と物質変換(サブ課題代表者: 京都大学基礎物理学研究所・柴田 大)

#### 目標

- (1) ポスト京に向け、バリオン間力計算の理論手法・アルゴリズム・コードを開発・確立する。
- (2) 重原子核の構造計算を遂行するとともに、原子力工学など他分野への応用に重要な基礎的なデータを得てポスト京に備える。
- (3) 中性子星連星合体や超新星爆発のメカニズムの理解を可能にするポスト「京」用計算コードの開発。

#### 成果内容と科学的・社会的意義

- 成果(1) バリオン間力の格子QCD計算における手法間の矛盾問題を解決し、HAL法の信頼性を確立した。
- 成果(2) 物理点でのバリオン間力の格子QCD計算を行い、新たなダイバリオン状態の存在を発見した。
- 成果(3) 炭素12の第一原理計算や、水銀など重い原子核の計算可能な限界に挑戦した計算に成功。
- 成果(4) 中性子星連星の合体現象を解明し、かつ観測結果との比較が可能な計算コード群が完成。
- 成果(5) 6次元ニュートリノ輻射輸送を完全に考慮した超新星爆発コードが完成。

- (1)の成果により、バリオン間力の格子QCD計算において、直接法とHAL QCD法の二手法間の結果が矛盾するという長年の問題を解決した。直接法では励起状態の混合による系統誤差により誤った結果が得られる一方、HAL法では系統誤差がコントロールされており信頼性のある計算が可能であることが明らかになった。
- (2)の成果により、ストレンジネス $|S|=0-6$ のバリオン間力を物理点で系統的に計算した。新たなダイバリオン状態( $\Omega$ 状態、 $N\Omega$ 状態)が存在することを初めて発見した。これらの状態は重陽子とほぼ同様のユニタリー極限近傍状態であることが分かった(図1)。また格子QCD計算に基づくハイペロン間力を用いて、その中性子星状態方程式への影響を精査した。
- (3)の成果により、第一原理計算から炭素12のホイル状態を検証可能とした。散乱実験の結果とつぎあわせ検討することにより、原子核におけるクラスター構造の理解を深めた。また、ポスト京で初めて本格計算可能となる質量数200領域原子核の試行計算に成功。水銀同位体で中性子の数とともに繰り返し量子相転移が起ることを、大規模計算により理論的に発見した。錫やサマリウムなどでの構造進化も含め、安定超重核元素の探索や魔法数、中性子過剰エキゾチック核の構造原理解明に寄与し、rプロセス元素合成、核分裂解明など基礎・応用の研究につながる。
- (4)の成果により、中性子星連星の合体現象を解明し、かつ来る観測結果を解釈する上で必須の計算結果を導出するためのコード群が整備された。本成果は、ポスト「京」の時代に本格化する予定の重力波と電磁波のマルチメッセンジャー観測の結果に解釈を与えるのに必須の精度良い理論モデルを導出可能にした。
- (5)の成果により、ポスト「京」完成後、超新星爆発の第一原理計算が現実的に可能になった(図2)。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

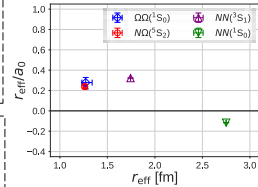


図1 物理点格子QCDで予言した $N\Omega$ ,  $\Omega\Omega$ ダイバリオン状態に対する散乱パラメータ

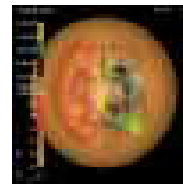


図2 6次元超新星爆発の計算結果。エントロピー等値面と速度場を表示

## 重点課題9 宇宙の基本法則と進化の解明

### サブ課題C: 大規模数値計算と広域宇宙観測データの融合による宇宙進化の解明

#### 目標

宇宙のダークマター分布の非線形成長を追い、さらに電磁流体力学や輻射輸送などの、天体形成に関わる基礎物理を取り入れたマルチフィジクスシミュレーションを遂行する。宇宙望遠鏡や地上大型望遠鏡を用いた観測ビッグデータと比較し、宇宙138億年の進化を解明する。

#### 成果内容と科学的・社会的意義

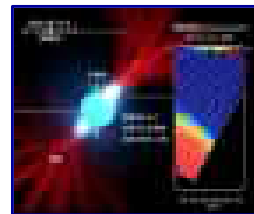
- 成果(1) 宇宙の構造形成シミュレーションにより大局的および局所的なダークマター分布を明らかにした。
- 成果(2) コンパクト天体降着流の一般相対論的輻射磁気流体シミュレーションを遂行した。
- 成果(3) ブラソフ-ポアソン方程式ソルバーを開発し、6次元位相空間内でのニュートリノ分布を明らかにした。

(1)の成果により、86億個の質量粒子を用いた大規模Nシミュレーションを100ラン以上行った。この出力をデータベース化し、主成分解析やガウス過程を実装した「エミュレータ」を開発し、物質分布の2点相関関数など主要統計量の高速計算を可能にした。次に、5500億個の質量粒子を用いた宇宙の構造形成シミュレーションを「京」上で行った。銀河形成の基本要素であるダークマターハローの形成進化のカタログを生成し、天文学の研究者らが使えるように整備した。さらにカタログ上で恒星分布を準解析的にモデル化し、恒星ストリームや銀河古成分系の数値カタログを生成した。特に現在銀河系で観測される恒星ストリームは、母天体が矮小銀河であればそれは  $0.5 < z < 2.5$  の特徴的な期間に銀河系に取り込まれたことを明らかにした。

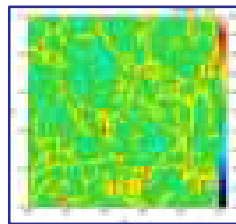
(2)の成果により、ブラックホール周囲の光の軌道や、コンプトン散乱などのガスと物質の相互作用を正しく解けることを示した。また、モーメント法に基づく一般相対論的輻射磁気流体コードの最適化を行い、ブラックホールおよび中性子星周りの降着流の計算を行うことができた。本成果により、中性子星への超臨界円盤降着が可能であることを一般相対論シミュレーションで世界で初めて示し、X線望遠鏡により発見されたSS433やLULXと呼ばれる時間変動天体の正体が中性子星である可能性を示唆した(右図)。また、高精度散逸性磁気流体コードCANS+を拡張、最適化し、多くの天体物理学およびプラズマ物理学の研究者が使用できるように整備した。非熱的粒子生成過程を解明するため、3次元プラズマ粒子シミュレーションを実施し、強い天体衝撃波近傍での電場と磁気乱流による電子加速過程を示した。

(3)の成果により、無衝突ボルツマン方程式(ブラソフ方程式)の数値解の正値性・単調性を満たしつつ、空間7次精度を達成する数値解が得られた。宇宙論的な共動座標系を採用し、宇宙大規模構造形成に応用した(右図)。本成果は広域銀河サーベイにより得られる宇宙の大域的物質分布と比較することができる。特に、初期宇宙から残存するニュートリノが物質分布に及ぼす影響を正確に測定することができる。その統計解析からニュートリノの質量和に強い制限を与えることができる。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果



高精度X線ハルサーの輻射流体シミュレーション。中性子星への降着流を再現



ブラソフコードを用いた宇宙の大規模構造形成シミュレーション。

# 萌芽的課題1-1

## 課題名 基礎科学のフロンティア極限への挑戦(基礎科学の挑戦-複合・マルチスケール問題を通した極限の探求)

極限を探求する基礎科学のフロンティアで、実験・観測や「京」を用いた個別計算科学の成果にもかかわらず答えの出ない難問に、ポスト「京」のみがなし得る新しい科学の共創と学際連携で挑み、解決を目指す。

### 本課題の主な成果

1. 課題全体として、莫大な情報から有用な部分だけを抽出しマルチスケール性を解明する「インフォメーションディステーション」という新分野の端緒を築いた(Comp. Phys. Commun., 236 (2019) 65-71, Atmos. Chem. Phys., 18 (2018) 16619-16630)。
2. 亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食を扱える1億原子分子動力学コードを開発するとともに、地震と材料破壊で共通、相違する統計則の一端を解明した。
3. マルチスケールシミュレーションと超並列分子動力学シミュレーションを用いて、複雑流動の流動特性の再現に成功した(Macromolecules, 52 (2019) 3951-3964)。
4. 極限環境シミュレータを開発し、新含水鉱物を予測・発見、地球表面から最深部に渡る水輸送現象の一端を解明した(Nature, 547 (2017) 205-208)。
5. テンソルネットワーク法等を利用した量子多体問題のソルバを開発し、量子情報処理につながる基本的問題に解答を与えた(プレプリントとして、<https://arxiv.org/abs/1901.05786>を公開済み)。

## 基礎科学のフロンティア極限への挑戦(基礎科学の挑戦-複合・マルチスケール問題を通した極限の探求) サブ課題A 破壊とカタストロフィ (サブ課題代表者: 東北大学金属材料研究所・久保百司)

### 目標

材料破壊および断層破壊現象の階層性とそのメカニズムを解明する。  
材料破壊と地震現象に共通する統計的法則を解明する。

### 成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

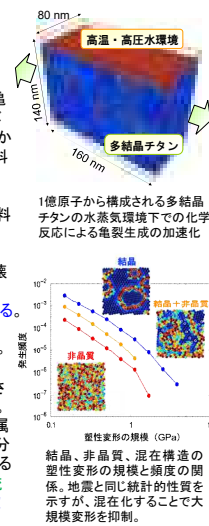
- 成果(1) 亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食・変形を扱える分子動力学法に基づくシミュレーションコードの開発
- 成果(2) 材料のせん断破壊の亀裂成長を支配する物理法則の解明
- 成果(3) 境界積分法断層破壊シミュレーションコードの高速化・高度化と地震波放出過程の再現・予測
- 成果(4) 金属単結晶や金属ガラスの変形・破壊現象と地震現象の統計性に現れる類似性と相違性の発見

(1)の成果は、化学反応を扱うことが可能な分子動力学シミュレーションコードLASKYOを基礎に、亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食・変形を扱えるコードを開発した。さら「京」向けの最適化を行い、1億原子系で亀裂先端の化学反応および亀裂生成現象のシミュレーションを実現した。さらに金属表面が水と化学反応することで亀裂生成が加速されることを明らかにした。本成果は、粒界、転位、歪み等の内部構造を含む大規模系で化学反応を伴う亀裂生成を扱えるようにしたこと科学的意義が高い。さらに、ナノスケールの化学反応が、サブマイクロスケールの亀裂生成・腐食・変形に与えるマルチスケール性が解明可能になったことで、マルチスケールの理解に基づく破壊力学の再構築への貢献が可能になった。

(2)の成果は、加速分子動力学法シミュレーションコードを開発し、「京」上で $10^{17}$ 倍以上の時間加速を可能とした。また、材料のせん断破壊時の亀裂成長を支配する物理が、摩擦の物理と共通であることを解明した。特に亀裂成長時の破壊せん断力が負のせん断速度依存性を示し材料の不安定破壊を導く温度・せん断速度条件があることを明らかにした。本成果は、分子動力学計算の時空間スケール制限をなくし材料亀裂進展過程全貌の解析を可能としたこと、さらに材料のせん断破壊が、断層破壊と同じ摩擦の物理に基づくことを解明し、時空間スケールや対象物質を超えた統一的破壊現象の理解を導いたという科学的意義を持つ。また、地震や破壊現象に共通する根源メカニズムの解明を通じて安全・安心社会に貢献する。

(3)の成果は、境界積分法に基づく断層破壊シミュレーションコードの高速化を行い、計算時間の大幅な短縮(断面メッシュサイズNの3乗に比例を2乗に比例に高速化)を実現し、加えて材料科学で知られている摩擦法則をコードに実装した。このコードを用いH28年4月の熊本地震とH26年の長野県北部地震の再現シミュレーションを行い妥当性を証明した。このコード開発により、大小様々な屈曲構造が入り子状になった複雑形状断層の地震発生シミュレーションが可能になった。さらに、摩擦法則の探求を通じて、従来は全く異なる分野として発展してきた材料科学と地震学の連携研究が可能になった。

(4)の成果は、単結晶材料の亀裂進展量の統計的性質はベキ分布を示さず、ある条件では指数分布を示した。さらに、金属ガラスの応力降下量の統計的性質は低温ではベキ分布に従い、温度上昇に伴いベキ分布から逸脱することを示し、ベキ分布に従う地震との類似性と相違性を明らかにした。加えて、地震と同じ統計的性質を示す結晶相と非晶質相を混在化させると各単相に比べて大規模変形を抑制することを示した。本成果は、材料における組織や構造、環境の因子が地震と同じ統計性を示すために重要であることが明らかになった。また本成果は、材料破壊と地震に共通する統計的法則の理解に基づく破壊メカニズムの解明とさらには大規模な崩壊を抑制した材料開発に基づく安全・安心社会の構築に貢献するものである。



**基礎科学のフロンティア極限への挑戦(基礎科学の挑戦-複合・マルチスケール問題を通した極限の探求)**  
**サブ課題B 相転移と流動 (サブ課題代表者: 東北大学大学院理学研究科・川勝年洋)**

**目標**

MSSPの実装と、マルチスケールシミュレーションによる雲の形成過程、機械内部流動における気泡成長等とマクロ流動との連携。  
 カルマン渦およびナノバブル生成過程に対する超並列分子動力学法とMSSPの比較によるマルチスケール法の検証。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

**成果内容と科学的・社会的意義**

- 成果(1) MSSPおよびマイクロシミュレータの手法の開発とMSSPの作成。
- 成果(2) 高分子流体および相転移流体の流れによる渦および気泡の生成過程の超並列分子動力学法による解析。
- 成果(3) 雲の形成過程および気泡初生のマルチスケールモデルによる解析。

(1)の成果により、流体粒子法を用いたマクロ流動シミュレーションとマイクロモデルを組み合わせたマルチスケールシミュレーションを実現するための汎用プラットフォームであるMSSPを開発し、open MP/MPiハイブリッド並列による大規模計算を実現した。ニュートン流体と粘弾性流体のそれぞれにおけるカルマン渦の実験および超並列分子動力学シミュレーションとの比較を行うことで方法論の定性的/定量的な正確さを証明できた(図1)。さらに、MSSPを弾塑性体へも拡張し、アモルファス固体中でのクラックの進展についてもシミュレーションする方法を開発し、サブ課題Aの弾性破壊との連携に向けての基礎を確立した。本成果は、幅広い混相流動の研究についての定量的な解析ツール群を提供するものであり、本ツール群を混相流動の関与する材料開発に適用することで、開発の加速が期待される。

(2)の成果により、流体中に極微量の高分子や気泡が含まれるときの渦の性質や粘度等の流動特性の大幅な変化を超並列分子動力学シミュレーションで解明することができた。特に、高分子添加によってカルマン渦の周期が長くなるという実験結果の再現および気泡生成における渦の役割について理解できた(図2)。本成果は、極微量の高分子添加による流動抵抗の減少(トムズ効果)や、水中で回転するタービンのまわりでキャビテーションにより発生する気泡の運動など、工学上重要なマルチスケールの問題への解決につながる、応用面でも重要な研究成果であるだけでなく、MSSPの検証のためにも貴重なデータである。

(3)の成果により、雲及び雨滴の形成過程および流体機械内部で生じるキャビテーションのような混相流動に関して、雲粒の形成・合体の過程あるいは気泡初生などのようなマイクロな現象に立脚したマクロ流動を再現することに成功した。その結果、高さ数千メートルにおよぶ広範囲の領域でのエアロゾルおよび雲粒、雨粒を網羅する全雲粒子の運動と成長を初めて再現することに成功し、また、極低温流体(液体酸素など)において分子スケールで生じ得る気泡核の競合的な粗大化(オストワルド成長)による気泡初生速度と、水においてよく観察されるマクロな既存気泡核を起点とした気泡初生速度が、本質的に同一のモデルで表現し得ることなどがわかった。本成果は、マイクロなモデルに立脚したマクロ流動特性の再現方法を実現するものであり、気象予測および流体機械の設計に大きな寄与を与えるものと期待される。

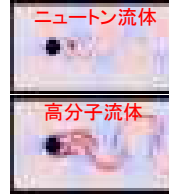


図1: MSSPによる障害物を過ぎる流れにおけるカルマン渦の生成。

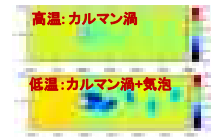


図2: 超並列分子動力学シミュレーションによるカルマン渦とキャビテーションの生成過程。

**基礎科学のフロンティア極限への挑戦(基礎科学の挑戦-複合・マルチスケール問題を通した極限の探求)**  
**サブ課題C 地球惑星深部物質の構造と物性 (サブ課題代表者: 理化学研究所・飯高敏晃)**

**目標**

極限環境下での数万原子・50ピコ秒のオーダーN第一原理分子動力学法を実現する。  
 極限環境統合シミュレータにおいて複数モジュールを利用した複合計算により、地球惑星深部物質に関する重要問題を解明する。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

**成果内容と科学的・社会的意義**

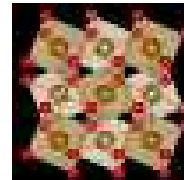
- 成果(1) 極限環境下での定温定圧オーダーN第一原理分子動力学法を実現した。
- 成果(2) 超高压下で安定な水酸化鉄の新しい高压相を理論的に予測し、実験的に発見した。
- 成果(3) 水高压相における核量子効果は高温(270K)でも重要であることを明らかにした。

成果(1)では、オーダーN法第一原理計算プログラムCONQUESTに定温定積分子動力学法 (Hirakawa et al., *J. Phys.: Cond. Mat.* 2017 <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa810d>) および定温定圧分子動力学法を導入した。そのさいに比較的小さな密度行列切断半径でストレス計算が可能であることを示し、定温定圧O(N)法第一原理MD法を確立した。オーダーN法第一原理定温定圧MDを高压下SiO<sub>2</sub>系(約1万原子系まで)に適用した。CONQUESTは計算規模、計算安定性の面で大規模第一原理計算をリードするプログラムであるが、本研究によって、高温・高压下の地球惑星深部物質に対する数万原子規模の大規模第一原理分子動力学にもとづく理論研究が可能になり、多くの新しい知見が得られることが期待される。また、各種材料開発のシミュレーションへの応用も期待される。

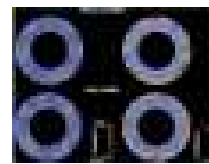
成果(2)では、ダイヤモンドアンビルセルと放射光を用いたX線その場観察実験と、スーパーコンピュータ「京」などを用いた第一原理電子状態計算に基づき、水酸化鉄(FeOOH)が約80万気圧の高压下で新しい高压相(パイライト型構造)に相転移することを初めて明らかにした。(Nishi et al., *Nature*, 547, 205-208 (2017) <https://doi.org/10.1038/nature22823>)。また、含水鉱物高压相を取り入れた地球流体分子動力学シミュレーションにより地球表面から最深部に渡る水輸送現象の一端を解明した(Nakagawa, et al.: *Prog. Earth Planet. Sci.* 5, 51 (2018) <https://doi.org/10.1186/s40645-018-0209-2>)。

地球の表面に海と陸が共存し生命が誕生しうる適度な地表水の量は、膨大な地球深部鉱物に含まれる水(水素)との微妙なバランスの結果であると考えられるが、水の全地球的輸送現象を理解するために必要な地球深部での水の輸送・存在形態を私たちは未だ良く知らない。本成果は地球深部において未解明な水の役割と循環を明らかにする新たな知見となると期待される。

成果(3)では、原子核の運動を量子力学に基づいて取り扱う「経路積分セントロイド分子動力学法」をサポートしたCPMD開発版などの開発を推進した。温度・体積一定条件下での第一原理経路積分セントロイド分子動力学コードを用いて高压水の構造相転移や光学スペクトルに対する核量子効果を定量的に評価し、H<sub>2</sub>O水の高压物性に対する核量子効果の重要性を明らかにした。水素化合物等の材料開発への活用に道筋をつけた。(T. Ikeda, *J. Chem. Phys.* 148, 102332 (2018) <https://doi.org/10.1063/1.5003055>.)



理論的に予測され実験で実証したパイライト型水酸化鉄



含水鉱物高压相を取り入れた地球流体シミュレーション



**基礎科学のフロンティア極限への挑戦(基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通した極限の探求)**  
**サブ課題D 量子力学の基礎と情報 (サブ課題代表者:東京大学物性研究所・川島直輝)**

**目標**

テンソルネットワークなどの計算法を標準的手法として確立しコードを公開する。これを利用し、フラストレート量子多体系、格子ゲージ理論、量子通信デバイスなどの重要課題を解決する。更に行列低ランク近似などデータ圧縮技術をマルチスケール流体計算などの手法として確立する。

**成果内容と科学的・社会的意義**

緑:科学的成果 青:実用的成果

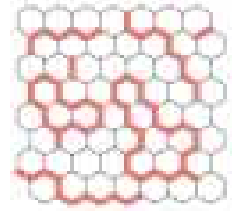
- 成果(1) 物性科学計算コードを開発・性能検証・公開した。テンソル繰り込み群(TRG)法ではスケールリングまで改善し、それを用いてトポジカル量子デバイスの基礎となるKitaevモデルの本質を明らかにした。
- 成果(2) 量子ダイナミクスコードは並列計算可能なものを開発し公開。
- 成果(3) 素粒子物理学研究用に3次元・フェルミ系も扱えるプログラムを開発し実証計算を実施。
- 成果(4) 実験によって、光子から核子への量子テレポーテーション転写に成功。また量子万能操作手法を開発。

成果(1)では、テンソルネットワーク法として基本的な枠組みである2つの手法、TRG法とPEPS法をベースとしてプログラムを開発、github上で公開した。その際に、乱数を使う特異値分解法を応用することによって、並列化に適したテンソルネットワーク法アルゴリズムを開発した。TRG法では従来法よりも計算量のオーダーの低いアルゴリズムを発見した。またKitaev関連モデルへの応用の結果、これまでに得られている最高精度を達成した。これらの成果は、**量子情報デバイスへの応用**も期待される量子多体系の難問であるフラストレート量子系のトポジカルに非自明な基底状態、格子ゲージ理論、など多くの重要問題の解明につながる成果である。また、テンソルネットワークによる機械学習を応用したマルチスケール流体計算手法を開発したが、これは**気象シミュレーション**などに広く応用される可能性がある。

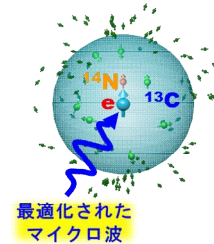
成果(2)では、量子ダイナミクス計算の基礎となる厳密対角化プログラムの開発を行った。また、量子マスター方程式法にもとづくプログラムを作成し、共振器系(Tavis-Cummings 模型)における非平衡状態の性質を解析し、レーザー光と物質との間の相互作用によるヒステリシス現象を解明した。この成果は以下の成果(4)との連携により**量子通信デバイスの設計**につながると期待される。

成果(3)では、TN計算における処理の局所化によりデータの通信量を削減するアルゴリズムを考案し、高次元テンソル繰り込み群のアルゴリズムを実装した。また、**素粒子論研究**のためにグラスマン数を扱うことのできる高次元(3次元以上)向けグラスマン高次テンソル繰り込み群の開発を行った。さらに、3次元格子ゲージ理論への応用では従来のMC法より高精度な結果を得た。これらは**QCD相図の解明**の端緒となる成果である。

成果(4)では、量子もつれネットワークへ向けて量子クラウドメモリーの実験系(ダイヤモンドNV中心系)を準備し、光子から核子への量子テレポーテーション転写に成功しその精度を検証した。また、機械学習によって、**量子操作手法**を開発した。さらに、ダイヤモンドに関して超微細相互作用を解析しNV中心の特性評価を行った。これらは、情報セキュリティを支える**量子通信ネットワークの構築のための量子情報の新技術開発**につながる。



スピン液体状態を表すストリングガスの模式図



最適化されたマイクロ波

ダイヤモンドNV中心系の制御

## 萌芽的課題1-2

### 極限の探究に資する精度保証付き数値計算学の展開と 超高性能計算環境の創成(基礎科学のフロンティア — 極限への挑戦)

極限を探究する基礎科学のフロンティアで、実験・観測や「京」を用いた個別計算科学の成果にもかかわらず答えの出ない難問に、ポスト「京」のみがなし得る新しい科学の共創と学際連携で挑み、解決を目指す。

#### 本課題の主な成果

1. 密行列系では世界初となる100万次元以上の連立一次方程式に対する精度保証を実用的な計算時間で実行することに成功した。従来は、ドイツのヴッパータール大の研究グループによって最大で10万次元程度の問題まで精度保証されていたが、これを大きく上回っている。
2. 大規模な量子物質計算において精度保証付き数値計算が数学的に正しい結果を与えることの有効性を示した。ここでは、電子エネルギーに対応する固有値の存在範囲や順番が重要となる。これまでに、40万次元程度までの実問題に対する精度保証に成功している。

## 極限の探究に資する精度保証付き数値計算学の展開と超高性能計算環境の創成

### 目標

・最終目標: 100万次元規模の量子物質計算を実用的(問題の難しさに応じて、近似解の計算時間の数倍から数十倍程度)に精度保証付きで解くことが可能なアプリケーションを開発する。

### 成果内容と科学的・社会的意義

成果(1)……120万次元までの連立一次方程式に対して、実用的な精度保証が可能となった。  
成果(2)……具体的なアプリケーションに対して、精度保証の適用可能範囲を拡大した。

(1)の成果により、密行列系では世界初となる100万次元以上の連立一次方程式に対する精度保証を実用的な計算時間(近似計算と比較して数倍以内)で実行することに成功した。従来より、問題の大規模化によって、計算誤差の累積が顕著になることが危惧されていた。実際、問題が大規模になるに連れて、数値計算によって得られた解の精度が大きく低下することが確認された(図1)。そこで、本研究グループによって開発されてきた線形計算の高精度保証法及びエラーフリー変換による高精度計算法をスーパーコンピュータ上で駆使することによって、大規模計算に対する精度保証の適用可能範囲を大幅に拡大した。これを実現するため、スーパーコンピュータ上の数値計算ライブラリに対して、ベンダーと共同で精度保証に有用な機能を付加する方法の開発に取り組み、実際に、120万次元の問題に対する精度保証を成功させた(図2)。従来は、ヴッパータール大(ドイツ)の研究グループによって最大で10万次元程度の問題まで精度保証されていたが、これを大きく上回っている。本研究チームのWebページ(<http://www.math.twcu.ac.jp/ogita/post-k/>)において、開発したライブラリの一部を京、FX100、PC向けにオープンソースで無償提供し、成果の活用に努めている。

本成果は、大規模な実アプリケーションに対する精度保証の適用可能性に直接的につながるものである。これは様々なシミュレーションサイエンスへ汎用的に適用可能なものであり、本研究成果の応用範囲は極めて広く、科学技術計算全体の品質向上に貢献するものである。

(2)の成果により、科学的・社会的意義のあるアプリケーションにおいて精度保証の有効性を示すことが可能となった。具体的には、大規模な量子物質計算(図3、高分子の電子状態計算)において精度保証付き数値計算が数学的に正しい結果を与えることの実効性を示した。ここでは、ある種の行列固有値問題を解くことが本質となるが、特に電子エネルギーに対応する固有値の存在範囲や順番が重要となる。一方で、問題の大規模化によって、数値計算によって得られた解の精度がどれくらい正しいのかを知ることが困難となってきた。本研究課題では、成果(1)の直接的なアプリケーションとして研究開発を進め、大規模固有値問題向けの精度保証方式を開発・実装した。これまでに40万次元程度までの実問題に対する精度保証に成功している。

本成果は、有機デバイス材料などの研究開発に資する現在の計算科学に、精度保証(計算結果の正しさ)の観点から数値的な信頼性を与えるものであり、次世代の先進的材料開発に貢献するものである。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果



図1: 連立一次方程式における計算誤差の累積。

次元	精度保証の 計算時間(比)	相対誤差 (最大)
30万	7.09	1.12E-16
60万	6.40	1.12E-16
120万	5.32	1.12E-16

図2: 連立一次方程式の近似解の精度保証結果。

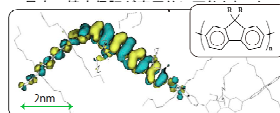


図3: 量子物質計算における高分子のモデル。原子数が非常に多いため大規模固有値問題の計算が必要。

## 萌芽的課題1-3

### 複合相関が織りなす極限マテリアル-原子スケールからのアプローチ (基礎科学のフロンティア-極限への挑戦)

極限を探索する基礎科学のフロンティアで、実験・観測や「京」を用いた個別計算科学の成果にもかかわらず答えの出ない難問に、ポスト「京」のみがなし得る新しい科学の共創と学際連携で挑み、解決を目指す。

#### 本課題の主な成果

1. 固体物理学における3つの難題(高精度基底状態計算・固体固体相変態シミュレーション・非平衡電子ダイナミクス計算)を突破する3つのアプリ(WaveX・AtomREM・ATTOMCSCF(mATTOMCSCF))の基幹部分の開発を終了した。(WaveX関連: J. Chem. Phys. **148**, 204109 (2018), J. Chem. Phys. **148**, 224103 (2018), J. Chem. Phys. **149**, 034106 (2018), J. Chem. Phys. **150**, 114104 (2019). AtomREM関連: J. Phys. Soc. Jpn. **87**, 063801 (2018), Physica A **528**, 121481 (2019). ATTOMCSCF関連: Phys. Rev. A **98**, 023415 (2018), Phys. Rev. A **95**, 043416 (2017).)
2. 固体固体相変態シミュレーション手法の開発において、新たな基礎理論構築を達成し、未知固体相の系統的探索への道を拓いた。(Physica A **528**, 121481 (2019).)
3. 開発アプリの公開を順次開始した。具体的には、WaveXに関してポスト「京」課題関係者への公開開始、AtomREMの一般公開を開始、mATTOMCSCFの一部を公開開始した。

#### 萌芽的課題1-3 複合相関が織りなす極限マテリアル-原子スケールからのアプローチ

サブ課題A: 複合相関マテリアルのための電子状態計算基盤-DFTを超えて超高精度へ(サブ課題代表者: 東京工業大学・松下雄一郎)

##### 目標

・波動関数理論に基づいて電子相関を露に取り込んだ高精度電子状態計算基盤開発を行い、現実周期系へと適用し、実証研究を行う

##### 成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果(1) 周期系に対する波動関数理論計算のアプリ(WaveX)を開発し、アプリをポスト「京」課題関係者へ提供開始  
成果(2) GFCCSD法を孤立原子系へと適用し、準粒子スペクトルにおける電子相関効果の確認  
成果(3) GFCCSD法を現実周期系へと適用し、サテライトピーク・イオン化インパクト等の電子相関効果の記述能力の確認

(1)の成果により、広く開発アプリを使用してもらうと同時に、新たな電子論手法開発のための参照データを提供することが可能となった。

(2)の成果により、孤立原子の準粒子スペクトルを、波動関数理論の1つである連結クラスター理論(CCS)法に基づいた計算により初めて報告した。その際、CCSD法の結果から1粒子グリーン関数を計算(GFCCSD計算)することにより準粒子スペクトルをCCSDの精度で求めた。計算の結果、孤立原子系において電子相関効果により生じるサテライトピークがGFCCSD法で再現されることを確認した。また、特にCr原子において従来の密度汎関数理論(DFT)では定性的にも正しく評価できない軌道エネルギーが、GFCCSD法では正しく再現することを確認した。

本成果は、GFCCSD法の現実物質への初めての適用報告であり、世界に先んじてその結果を報告することができた。また、その計算結果から、DFTでは本質的に取り扱いが困難であったサテライトピークなどの情報をGFCCSD法では再現できることを実証研究により示すことができた。

(3)の成果により、GFCCSD法を1次元LiH鎖、ポリアセチレンへと適用し、その準粒子スペクトルを報告することができた。計算の結果、周期物質における、準粒子の緩和過程であるサテライトピークとイオン化インパクト等が記述できることを示した。これら物理量はDFTでは本質的に記述することの出来ない効果であることを示した。

本成果は、特にデバイス設計などの産業界に取って重要なイオン化インパクト因子の計算が可能となることを示す。これら電子相関効果を露わに考慮する必要のある物理量に関して本手法は有効に働くものと考えられる。今後、GFCCSD法を用いた半導体中の電子相関効果評価のための有効な手法になるものと考えられる。

本成果は、今後益々重要性を増すDFTの近似法開発にとって重要な知見を与えるものである。



1次元LiH鎖のGFCCSD法によって得られたエネルギー一面



1次元LiH鎖のGFCCSD法によって得られた準粒子バンド構造

### 萌芽的課題1-3 複合相関が織りなす極限マテリアル-原子スケールからのアプローチ

サブ課題B: 極限高圧下マテリアルの相変態シミュレーション-室温超伝導に向けて(サブ課題代表者: 東京大学・明石遼介)

#### 目標

- ・固体反応の加速シミュレーション手法プログラムコードの開発・チューニング及び、コードの具体的物質への適用・圧力誘起超伝導の実験提案

#### 成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

- 成果(1) 固体相変態シミュレーションを可能にするアプリ(AtomREM)を開発し、アプリを公開開始
- 成果(2) 反応座標・架空ポテンシャルフリーなサンプリング法の基礎理論の構築
- 成果(3) 新サンプリング法の並列化・クラスター系での効果実証・分子力学コードLAMMPSとの結合

(1)の成果により、広く開発アプリを使用してもえる環境を構築した。

(2)の成果により、従来、物質における化学反応の数値シミュレーションを行う際に必要とされてきた「物質に適した反応座標の設定」および「架空ポテンシャル印加」を必要としないアルゴリズムが構築可能であることが示された。

本課題の最終ターゲットは固体の反応および構造変態のシミュレーションである。この系において、実験などの事前知識がない物質の構造変化をシミュレートする場合、それを実現するための適切な反応座標および印加ポテンシャルの設定は系の自由度の大きさのため極めて難しい。本成果では、系の本来のポテンシャル面において最も反応が起こりやすい(ポテンシャル面の極小から脱出しやすい)方向への構造変化を自動的に起こすサンプリング手法の構成に成功した。

本成果は、化学反応のような稀な事象をシミュレートするためには恣意的な反応座標の設定あるいは人工的なポテンシャル力が必要である、という常識を覆す結果であり、レイイベントシミュレーション手法の新たな展開につながる。また実用面での効用として、シミュレーション対象物質ごとに上記の反応座標および印加ポテンシャルの検討を行う必要がなくなった。これにより今後圧力誘起超伝導の候補物質を探索する効率が大幅に向上する。

(3)の成果により、(2)で構築した手法が、実用的なシステムサイズにおいても適用可能となった。また既に広く使われている分子力学コードと結合することにより、広汎な物質への応用が可能になった。

本成果では、(2)で構築した方法の効率的な並列アルゴリズムを実装し、実証としてアルゴンクラスター系に適用、クラスター表面において起こる支配的な反応過程を事前知識無しにシミュレーションにより生成することに成功した。さらに、様々な物質を記述するポテンシャル関数として分子力学コード「LAMMPS」のパッケージを引用するサブルーチンを実装した。

本成果により、(2)のサンプリング手法がモデルポテンシャルのみならず、実用的な数の原子を含む系についても適用可能であることが示された。また既に応用分野でも広く使われている分子力学コードとの結合により、将来の産業の現場での新規固体反応探索への手法転用への道が開かれる。

[直近の展望]本手法の周期系への拡張は急務である。これが完了すれば、固体反応加速シミュレーション開発においてこれまで直面した問題が全てクリアされ、実際の固体の圧力誘起反応の系統的・効率的探索が可能となる。



モデルポテンシャル平面上に生成された反応経路の例



Ar<sub>36</sub>クラスター表面における欠損・キャップ形成

### 萌芽的課題1-3 複合相関が織りなす極限マテリアル-原子スケールからのアプローチ

サブ課題C: 強光子場中マテリアルの原子論的シミュレーション-波動関数理論から臨む光と物質の相互作用(サブ課題代表者: 東大・篠原康)

#### 目標

- ・固体における時間依存多配置波動関数理論の開発とそのコードへの実装
- ・上記理論とコードを精緻させ、光励起された固体の緩和過程の定量的評価と定性的理解に取り組む

#### 成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

- 成果(1) 固体の多配置波動関数理論を実装したmATOMCSCF/ATOMCSCFを開始し、その一部を公開開始
- 成果(2) 実固体からの高次高調波発生過程のメカニズムの解明
- 成果(3) 固体からの高次高調波発生に表れる多体効果の影響の調査

(1)の成果により、広く開発アプリを使用してもえる環境を構築した。

(2)の成果により、本サブ課題で用いている原子論的シミュレーション法が固体の高次高調波発生過程の実験結果を説明する事に成功、その結果の解析からそのメカニズムを明らかにした。

本課題の目標は、電子間散乱に起因する固体内の緩和過程の理解である。緩和過程がどういった現象に顕著に表れるか、さらに実験結果との整合性がどうなっているかは明らかではない。こうした理解を得るために、密度汎関数理論で評価した独立電子近似に、よく用いられる近似的な緩和を導入した量子ダイナミクスシミュレーションを行った。高次高調波発生と呼ばれる現象について評価して、実験との直接比較を行った。

本成果により、緩和が顕著に表れる条件と物理量を明らかにした。実験との比較を通じて、密度汎関数理論で導かれる独立電子近似により素過程が良く理解されることを示した。また、典型的な緩和の時定数を実験とスペクトルを比較する事で評価した。

(3)の成果により、時間依存Hartree-Fock法に基づくシミュレーションを遂行する事で、固体の高次高調波発生過程において、もっとも基本的な多体効果である電子・正孔相互作用がどのような影響を及ぼしているのか明らかにした。

高次高調波発生に代表される強い電場によって駆動される現象で、電子・正孔相互作用がどういった役割を果たしているのかは系統的に調べられたことはなかった。電子・正孔相互作用が十分に含む時間依存Hartree-Fock法を用いて、一次元模型固体の高次高調波発生シミュレーションを行った。

本成果により、三次元固体での計算遂行における、計算条件や見るべき物理量がどういったものかという知見が得られた。電子・正孔相互作用により、高次高調波発生で得られるスペクトルにどのような兆候が表れるべきかを示した。



成果(2)で得られた、近似的な緩和における緩和の時定数を変えた際に高次高調波発生時のスペクトルが変わっていく様子



成果(3)で得られた、電子・正孔相互作用が無い場合(左)と有る場合(右)の高次高調波スペクトルの比較。



## 萌芽的課題2-1

### 多層マルチ時空間スケール社会・経済シミュレーション技術の研究・開発 (複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究)

複雑かつ急速に変化する現代社会で生じる様々な問題に政策・施策が俊敏に対応するために、交通や経済等、社会活動の個々の要素が互いに影響し合う効果を取り入れて把握・分析・予測するシステムを研究開発する。

#### 本課題の主な成果

1. 社会経済現象の中で、特に重要な交通・経済・人間関係の基本的な諸相についての数理的なモデルを開発し、次世代スーパーコンピュータ用のシミュレーションアプリケーションを開発するとともに、諸相間の連携・接続のモデル・シミュレーションをも開発したことが応用上の主な成果である。具体的には、個々の企業活動に基づくマクロ経済予測([1-6])および地域社会設計([7-12])、証券・金融取引制度のリスク評価([13,14])、MaaS(一体的交通サービス)の制度設計([15])および運用、イベント時および災害時の避難計画([16,17])および経済運営、宣伝・広報の最適化、個々の人・法人・国家の間の協力関係および平和維持のための戦略立案[18]ほかで応用的なシミュレーションを実現した。
2. こうしたシミュレーションの特徴は、莫大な数のシナリオ・パラメータの探索による最適化である([19-21])。そのためにはスーパーコンピュータによる容量型処理(いわゆるキャパシティコンピューティング)が重要で、個々の処理は独立な実行であるが、処理の結果を使って次の処理を決めるという粗な並列実行が必要となる。この実現を確実とする汎用的なアプリケーションを開発した。数百万程度までの実行管理を行うOACIS([22])とそれ以上の数、スーパーコンピュータの性能の限界まで実行管理を行うCARAVANとである。こうした計算科学的な成果を使って、上述の成果、特に人工知能処理を実現した。
3. 9つの社会現象シミュレーション・解析アプリケーションを上述のOACIS・CARAVANで連携することにより多層的で時間・空間スケールの異なる種々の社会現象を相互作用させるフレームワークを開発した([23])。

注釈は次ページ

#### 注釈

- [1] Hazem Krichene, Abhijit Chakraborty, Yoshi Fujiwara, Hiroyasu Inoue, Masaki Terai, "Tie-formation process within the communities of the Japanese production network: application of an exponential random graph model", Applied Network Science 4 (1) p.5 (2019).
- [2] Hiroyasu Inoue and Yasuyuki Todo, "Propagation of negative shocks across nation-wide firm networks", PLoS ONE 14(3): e0213648 (2019).
- [3] Yoshiyuki Arata, "Bankruptcy Propagation on a Customer-supplier Network: An empirical analysis in Japan", RIETI Discussion Paper, 18-E-040 (2018年6月).
- [4] Yoshiyuki Arata, Philipp Mundt, "Topology and Formation of Production Input Interlinkages: Evidence from Japanese microdata", RIETI Discussion Paper, 19-E-027 (2019年4月).
- [5] 受賞: 第2回進化経済学会賞(2018年3月) 井上 寛康 准教授(兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究所) "Analyses of aggregate fluctuations of firm production network based on the self-organized criticality model", Evolutionary and Institutional Economic review, Vol.13, Issue 2, p.383-396 に対する受賞.
- [6] 書籍: Hideaki Aoyama, Yoshi Fujiwara, Yuichi Ikeda, Hiroshi Iyetomi, Wataru Souma and Hiroshi Yoshikawa "Macro-Econophysics: New Studies on Economic Networks and Synchronization" (Cambridge University Press, 2017年4月).
- [7] Jun'ichi Ozaki, Hideki Takayasu, and Misako Takayasu, "Estimation of sales decrease caused by a disaster: Hokkaido blackout after earthquake in 2018", J Comput Soc Sc (2019).
- [8] Yuh Kobayashi, Hideki Takayasu, Shlomo Havlin and Misako Takayasu, "Time evolution of companies towards a stable scaling curve obtained from flow diagrams in three-dimensional phase space", New Journal of Physics 21, 043038 (2019).
- [9] Jun'ichi Ozaki, Koutarou Tamura, Hideki Takayasu, and Misako Takayasu, "Modeling and simulation of Japanese inter-firm network", Artif Life Robotics (2018).
- [10] Koutarou Tamura, Hideki Takayasu, and Misako Takayasu, "Diffusion-localization transition caused by nonlinear transport on complex networks", Scientific Reports vol.8, Article number 5517 (2018).
- [11] Hayato Goto, Eduardo Viegas, Henrik Jeldtoft Jensen, Hideki Takayasu, Misako Takayasu, "Appearance of Unstable Monopoly State Caused by Selective and Concentrative Mergers in Business Networks", Scientific Report vol.7, Article number 5064 (2017).
- [12] Hirokazu Kawamoto, Hideki Takayasu, Misako Takayasu, "Network Anatomy Controlling Abrupt-like Percolation Transition", Scientific Reports vol.7, Article number: 163 (2017).
- [13] Takuma Torii, Kiyoshi Izumi, Kenta Yamada, "Shock transfer by arbitrage trading: analysis using multi-asset artificial market", Evolutionary and Institutional Economics Review, volume 12, number 2, pages 395-412, (2016).
- [14] Takuma Torii, Tomio Kamada, Kiyoshi Izumi, Kenta Yamada, "Platform design for large-scale artificial market simulation and preliminary evaluation on the K computer", Artificial Life and Robotics, vol.22, no. 3, pp. 301-307 (2017).
- [15] Itsuki Noda, "Multi-Agent Social Simulation for Social Service Design", Proc. of International Workshop on Massively Multi-Agent Systems (MMAS2018), invited-4, July, (2018).
- [16] Hiroyasu Matsushima, Itsuki Noda, "Analysis of Trade-off in Evacuation Plan using Evolutionarily Exhaustive Simulation", Proc. of the 23rd International Symposium on Artificial Life and Robotics (AROB 23rd 2018), pp. OS15-4, International Society of Artificial Life and Robotics, Jan., 2018.
- [17] 松島裕康・内種岳詞・辻順平・山下倫央・伊藤伸泰・野田五十樹「実験計画法による実験数削減と有意なパラメータ探索の避難シミュレーション分析への適応」人工知能学会論文誌 vol.31 (2016) No.6 p.AG-E\_1-9.
- [18] Y. Murase and S. K. Baek, J. Theor. Biol. 449 p.94 (2018).
- [19] I. Noda, N. Ito, K. Izumi, T. Yamashita, H. Mizuta, T. Kamada, Y. Murase, S. Yoshihama and H. Hattori, J. Comput. Soc. Sci. vol.1 p.155 (2018).
- [20] Daigo Umemoto and Nobuyasu Ito, "Large-scale parallel execution of urban-scale traffic simulation and its performance on K computer", Journal of Computational Social Science, vol.2, p.97-101 (2019).
- [21] Daigo Umemoto and Nobuyasu Ito, "Power-law distribution in an urban traffic flow simulation", Journal of Computational Social Science vol.1 p.493-500 (2018)
- [22] Y. Murase, T. Uchitane and N. Ito, "An open-source job management framework for parameter-space exploration: OACIS", J. Phys.: Conf. Ser. vol. 921 (2017) 012001.
- [23] Ryo Hamawaki, Kiyoshi Izumi, Hiroki Sakaji, Takashi Shimada, Hiroyasu Matsushima, "Chain Bankruptcy Size in Inter-bank Network: the Effects of Asset Price Volatility and the Network Structure", Journal of Computational Social Science, Volume 2, Issue 1, p.53-66, 2019.

14

萌芽的課題2-1 多層マルチ時空間スケール社会・経済シミュレーション技術の研究・開発  
サブ課題A: マクロ経済シミュレーション

目標

大規模な経済ネットワークの実データを基にして、経済ストレス伝播や景気変動のモデルの構築・実装・高度化を進め、経済危機や大規模災害発生時などの経済システムへの影響についての評価システムを構築する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

- 成果(1): 経済ストレス伝播モデルを開発し、大規模災害発生時の経済活動への定量的なストレス評価手法を確立した。
- 成果(2): 景気変動のメカニズムに関する経済変動の同期的な運動やその伝播を数理的にモデル化した。
- 成果(3): 異質的エージェントのシミュレーション基盤のために、京コンピュータ上にスクリプト言語の実行環境を整備した。

(1)の成果により、経済ネットワーク上でのストレスや供給・需要のショックの伝播に関するモデルを京上に構築し、百万社以上の企業とそれらの間の取引関係からなる生産ネットワークの実データに基づき、ネットワーク上でのダイナミクスを計算するアルゴリズムを実装してシミュレーションを行った。その結果、災害が発生したときに供給が停止する影響が生産の上流から下流へどのように波及するかの計算を可能にした東日本大震災、および今後起こるであろうと予測されている南海トラフ地震において、その被害の波及をシミュレートすることを行った。その結果、  
 ・東日本大震災後の影響を再現して間接的な被害は2週間程度の短い間に全国に広がること  
 ・サプライチェーンネットワークには密な巨大連結成分があり企業のダメージは連鎖し振動すること  
 ・南海トラフ地震の際の直接被害の規模と累積の間接被害を定量的に予測すること  
 を発見ならびに成功した。  
 (2)の成果により、複素ヒルベルト主成分分析、ランダム回転シミュレーション、ホッジ・ヘルムホルツ分解をネットワークに応用した同期ネットワーク構築の方法を開発した。その結果、従来の方法では扱うことができないような、多数のマクロ経済変数の限られた長さの時系列情報から、景気変動を記述するにあたって主要な変数を見出す実用的な方法を構築することができた。  
 (3)の成果により、異質的なエージェント(経済主体)からなるシステムをシミュレーションするために、京コンピュータ上にスクリプト言語系の実行環境を整備した。具体的には、Python2.7本体およびPythonの科学技術計算パッケージNumPy, SciPyの環境を構築した。NumPyについては、富士通が提供する数学ライブラリJiapaackを利用することで、従来のFortranやCなどの行列積と同等の実効性能が得られることを確認した。また、PythonからMPIを利用するためのパッケージmpi4pyについても環境を構築し、マルチプロセス型のジョブにも対応できるようにした。



災害発生時のサプライチェーンの供給停止による生産ネットワークへの影響(横:計算ステップ、縦:GDP)(赤:実データ、青:ランダム)



災害後15日目の様子。左が東日本大震災、右が南海トラフ地震である。15日という極めて短い間に地理的に離れた企業に生産力の低下が伝播している様子

萌芽的課題2-1 多層マルチ時空間スケール社会・経済シミュレーション技術の研究・開発  
サブ課題B: 企業ネットワークシミュレーション

目標

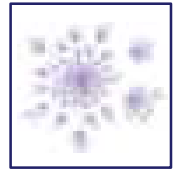
国内約100万社の企業ネットワークの基本モデルの構築、人口減少の経済活動への影響シミュレーションモデルの構築、災害などのゆらぎに対するストレステストとレジリエンスシミュレーションモデルの構築、世界貿易・金融市場との相互作用モデルの構築を完了する。

成果内容と科学的・社会的意義

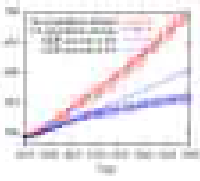
緑: 科学的成果 青: 実用的成果

- 成果(1): 国内約100万社の企業ネットワークの基本モデルを開発し人口の増減に対応したシミュレーションを行った。
- 成果(2): 企業ネットワークにおける地域間結合を詳細に解析し、モデル化を進めた。

(1) 最終成果物である統合的な企業ネットワークシミュレータは、ネットワーク生成モデルであるMTTモデルをベースとした企業ネットワークモデルと、通貨のフローを推定するモデルである重力相互作用モデル(GIMT)が連立可能な形で実装される。前者は様々な状況下におけるネットワークの時間発展をテストすることが可能で、後者はネットワーク上を流れる通貨の流れを任意の場所において推定し、したがって企業活動の総体を計算することが可能である。ベンチマークテストによれば、国内約100万社の企業活動のシミュレーションにかかる時間は1サンプルにつきおよそ1ノード時間程度であり、例えば京コンピュータ1日分の計算で、約200万通りの政策・災害のパターンについてシミュレーションが行える見込みである。  
 また、MTTモデルにより生成された仮想的な企業ネットワーク上において輸送方程式の解を与え、安定性解析を行うことで、集中度パラメータを変化させた際の通貨の流れの大局的な相転移現象が解明された。これは複雑ネットワーク上における輸送方程式の振る舞いを明らかにすることで、本質的に不均質であり、輸送に指向性のある空間における輸送の研究に貢献した。また実社会における企業活動や世界貿易について集中度パラメータの時間変化を推定する事により、その観点から生じる経済のシステミックな不安定化を予測できると期待されている。  
 さらに、企業ネットワークの文脈に人口減少の影響を取り入れることが可能となった。これは複雑ネットワークの非定常な時間発展ダイナミクス、特にノードを間引いていく場合のダイナミクスに相当し、それを現実の例において適用することで、複雑ネットワークの研究に貢献した。実用的には、例えば単純に年率1%の割合で一様に労働人口が減少すると仮定すると、見積られたGDPは2060年ごろ減少に転じると予測された(右上図)。この条件をより現実合うようにし、つまり今後あり得る人口のゆらぎや、政策による増減の結果を取り入れた系のシミュレーションが可能となっている。  
 (2) 今回の成果により、企業のネットワーク上の特性を与える上で非常に重要な要素である、企業の業種・地域などの属性情報をモデルに取り入れることが可能となった。さらに、日本企業の都道府県間の結合ダイナミクスの詳細な解析を行い、企業が他の地域の企業と取引を行うモチベーションにあたる量が、47都道府県間全ての組み合わせにおいて見積もられた(参考: 右下表)。これはまず複雑ネットワークの既存モデルを拡張し、新しい知見を得たという意味で複雑ネットワークの研究に貢献した。また同時に、現在の地域間のパラメータを変化させた場合のシミュレーションにより、例えば災害における地域間の寸断や、交通網の整備による地域間の取引活性化の影響を取り入れたシミュレーションを行うことが期待されている。



生成された企業ネットワーク



人口減少のGDPに与える影響

萌芽的課題2-1 多層マルチ時空間スケール社会・経済シミュレーション技術の研究・開発  
 サブ課題C: 金融シミュレーション

目標

株式市場モデルと銀行間ネットワークモデルの統合、システミックリスク予防のための施策決定支援

成果内容と科学的・社会的意義

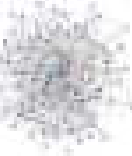
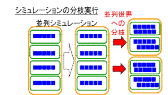
緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果(1): 金融取引・銀行間ネットワークと企業ネットワークの統合モデルの開発 (サブ課題Bとの連携)  
 成果(2): 人工市場エージェントシミュレータへの動的負荷分散の実装  
 成果(3): システミックリスク予防のための施策決定支援手法の開発

(1)の成果により、本サブ課題で構築した金融取引・銀行間ネットワークモデルとサブ課題Bで構築した企業ネットワークモデルを統合したシミュレーションプログラムを構築した。具体的には、100行の大規模銀行から1000社の企業へ貸し出しを行い、各企業が銀行からの借入れと他企業との取引で成長するモデルとした。統合モデルにより企業の成長状況と各銀行の貸出リスクとの相関を分析した。

(2)の成果により、エージェント群の管理をおこなう X10 上の分散コレクションライブラリの効率化および並列世界シミュレーションのための高機能化を進めた。これにより、人工市場Plham のシミュレーションに対するスナップショット取得および分枝実行を可能とした。加えて、Java8 版 Plham の大規模分散環境上での動作実現に向けて、Java8 + APGASライブラリ上での動的負荷分散ライブラリ GLB の実現及びメネコア向けハイブリッド負荷分散アルゴリズムの開発を進めている。

(3)の成果により、TOPIX100構成銘柄等の大型銘柄の金融シミュレーションと百行の銀行の銀行間ネットワークの統合シミュレーションを実行した結果、銀行間ネットワークと金融市場の相互作用、特に大銀行と小銀行の間の貸借リンクの存在確率および倒産を開始する銀行の規模がシステミックリスクに与える影響の存在を確認した。最初に倒産した銀行の規模が大きい場合は、金融市場の価格変動が大きくなるにつれて、倒産数は単調減少した。これは、価格変動の増加により、倒産した大銀行が借入している小銀行が少なく連鎖倒産が起きにくくなっていた。一方、最初に倒産した銀行が小規模の場合は市場変動が大きくなるにつれて、倒産数は単調増加した。これらの「銀行間の貸借関係の非対称性」と「銀行の保有する市場性資産の価格変化」に関する要素のシステミックリスク評価における重要性を明らかにした。



銀行間ネットワークのモデル

分散集合ライブラリの高性能・高機能化



萌芽的課題2-1 多層マルチ時空間スケール社会・経済シミュレーション技術の研究・開発  
サブ課題D: 交通・人流シミュレーション

目標

人流と交通の多層連成シミュレーションのための網羅実行を行い、そのためのデータ同化技術の開発および網羅実行の効率化を実現し、実データでのデータ同化技術を検証する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果(1) 人流のマイクロ・マクロ連成シミュレーションを実現。また、人流・交通間の連成シミュレーションの仕組みづくり開始。  
成果(2) 人流・交通シミュレーションについて、OACIS等による大規模並列による社会システム評価を実施、実応用を展開。

成果(1)により、複数レベルの人流シミュレーション(CrowdWalk, MASH)を遺伝的アルゴリズムを用いた境界条件適合せを実現、地域単位から屋内レベルまでのマルチレベルのシミュレーションを実現、エージェントの思考についてもシミュレーションレベルに応じて多様に記述可能となった。これにより、パシフィコ横浜屋内から市内の避難所までの避難シミュレーションをシームレスに実現。交通・人流連成(CrowdWalk, MATES)においては、イベント(国体)における駐車場からの人流と交通の相互作用および信号運用の評価などを連成シミュレーションにより可能とした。

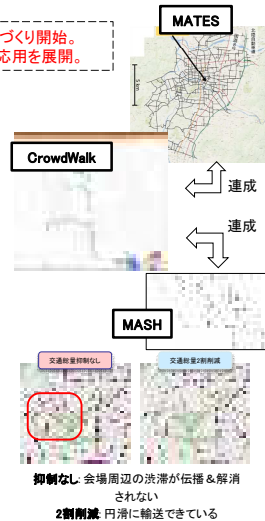
成果(2)では、津波避難の方策について、多様な誘導策および条件設定・実行を本課題で開発したOACISの管理で実現、徳島県など具体的な現場への政策立案への助言等を行う予定。また、国体については、愛媛国体・福井国体について、総量規制会議などへの助言を、OACISなどによる網羅シミュレーション等を行った。この実績を買われ、三重国体などこれからの国体にも助言を求められている。さらには、相乗りタクシーサービスの評価などにおいても、OACISを活用し、実サービスにつながる分析を実施中。

科学技術上の革新性

- 人流・交通という異なるモデル、および異なる抽象化レベルのシミュレーションの連成について、シミュレータごとの利点・自由度を活用しつつ、大規模・複数評価指標のシミュレーション評価を実現。
- 多様な条件での評価を容易に行えることにより、多面的な評価を効率よく実現。従来にない評価項目での分析を可能とした。

社会的インパクト

- 交通・人流を細かい挙動モデルまで含めて連成シミュレーションで同時に行えるため、国体など実際のアプリケーションに直接適用できる技術になっている。
- 自治体(例: 徳島県など)等での防災政策や国体などイベントにおける交通・人流制御など、具体的な応用を展開、社会還元を進めている。



萌芽的課題2-1 多層マルチ時空間スケール社会・経済シミュレーション技術の研究・開発  
サブ課題E: 社会・経済シミュレーションモデルの評価手法の開発

目標

社会・経済シミュレーションのモデルを、近似ベイズ計算と機械学習手法を用いて評価する手法を開発する。さらに実行を管理するシステムを開発し、評価手法を実装する。大規模なシミュレーションモデルにおいて試行・実践する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果(1): ダイナミック・プログラミングを用いた経済モデルの並列化計算、拡張版MCMCの手法の開発、及び評価指標の作成  
成果(2): Boidシミュレーションの高速化および大規模ウェブデータの分析  
成果(3): シミュレーション実行・管理フレームワーク OACIS・CARAVANの開発・応用  
成果(4): ゲーム論のナッシュ均衡解へのスーパーコンピュータの応用

(1)の成果により、有限期間ダイナミック・プログラミング問題の解を、並列計算を用いてエラー・フリーで求められるようになった。さらに、従来のMCMCでは現実的なタイムフレームでは計算の収束が期待できないような複雑な状態空間モデルに対して、並列計算を駆使したアルゴリズムを用い、比較的短時間で計算が収束するようになった(右図)。

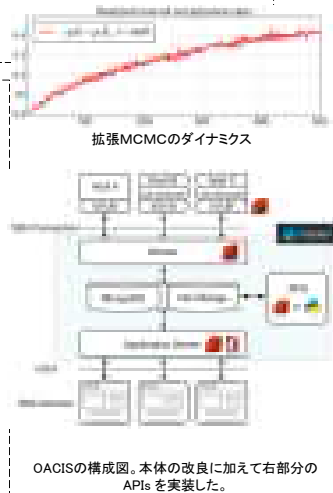
社会科学・経済学の観点から拡張版MCMCの定量的優位性を示すために、サンプル採択率に基づく指標を考案し、並列化の規模とともに優位性が増すことを示した。

(2)京コンピュータで大規模な群れのシミュレーション(Boids Model / 3D空間でのMulti Agents Model)の高速化を行い、計算時間の大幅な削減に成功し、最大1200万個体(12x12x12ノード使用)の大規模シミュレーションを行い、解析した。また複数の大規模なソーシャルメディアに対して文化遺伝子としてのハッシュタグの分析を行った。特にタグの組み合わせが持つ進化特性に着目し、タグ単体の分析からは得られない、組み合わせが持つ新規性の生成や拡散を明らかにした。さらにタグが時間的に変化するセマンティックなクラスター構造を持つ現象を観測した。

さらに、20年ほど前にPeter Gacsによって提案された、どんなノイズに対しても頑強に振る舞うセルオートマトンモデルを、その一部ではあるが、世界で初めてシミュレーションすることに成功した。本成果は、ネットワークの個々のノードにコンピュータを配備し、それがお互いに情報をやり取りする社会モデルの全く新しい数理モデルとして期待できるため、その科学的意義は大きい。

(3)の成果により、大並列計算機を使って数百万以上のシミュレーションを有機的に実行・管理するフレームワーク CARAVANを開発し、応用を進めた。これは、百万程度を実行・管理するOACISを、さらに大きな並列度の計算機用にしたものである。

(4)の成果により、スーパーコンピュータ規模の数え上げがゲーム論および人類の協力・平和戦略への応用が拓かれた。



OACISの構成図。本体の改良に加えて右部分のAPIsを実装した。



## 萌芽的課題2-2

### 堅牢な輸送システムモデルの構築と社会システムにおける最適化の実現 (複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究)

複雑かつ急速に変化する現代社会で生じる様々な問題に政策・施策が俊敏に対応するために、交通や経済等、社会活動の個々の要素が互いに影響し合う効果を取り入れて把握・分析・予測するシステムを研究開発する。

#### 本課題の主な成果

1. (確認した限り)世界ではじめて、国レベルの広い領域を対象とした航空交通流のセルオートマトンモデルを開発、フライト状況を評価する離散化シミュレーションを実施した。
2. 同シミュレーションを利用した多目的最適化により、(例えば)出発時間を数分ずらすだけで大幅な到着遅延減少を実現できることを示した。
3. WSだと350日以上かかる管制方式に関する大規模シナリオのモンテカルロシミュレーションを京コンピュータによって3日以内に短縮した。研究成果は国際民間航空機関(ICAO)による国際基準に反映された。スーパーコンピュータに無縁であった航空管制研究者による成果。
4. 空港内の地上オペレーション(タキシング、スポットアサイン)についても新たなセルオートマトンモデルを開発し、離散化によるシミュレーションを実施した。これも過去に例のない解析である。

## 萌芽的課題2-2 堅牢な輸送システムモデルの構築と社会システムにおける最適化の実現

### 目標

・最終目標:航空交通流の安全性と効率性を両立する全体最適な「究極の時刻表」を議論するプラットフォームとしてシミュレーションツールが一定の検証も含めて完成する。この手法に堅牢性を加味した多目的最適化ツールを適用することで航空交通流管理に関する具体的な提案を提示する。

緑:科学的成果 青:実用的成果

### 成果内容と科学的・社会的意義

成果(1) 航空交通流を記述する現象ベースモデルを構築、シミュレーションに活用。  
 成果(2) 多目的最適化により、出発時間の小変更により大幅な到着遅延減少を提示。  
 成果(3) 数学モデルシミュレーションに京を活用し、航空機運航手法の検討を容易に。

(1)の成果により一定レベルの国内航空交通流のシミュレーションツールが完成した。多目的最適化により、容易に大幅に遅延が解消できる可能性があることを示した。燃料消費と全遅延時間に複雑な関係も明らかになっている。地上航空機移動が遅延に影響することから、新たに空港オペレーションのモデルとシミュレーションツールを開発した。空域内の航空交通流と連携へと発展させる。世界初の試みであり、学術的にもモデルと現象に関係した応用数学面の成果が複数出はじめている。

本成果は、(2)の結果など現状運航施策の検討のみならず、将来の航空交通流管理議論のプラットフォームとなりえる。航空管制の現場での利用の可能性も含めて、国土交通省や欧州の航空管制研究機関Eurocontrolなどとの議論を予定している。

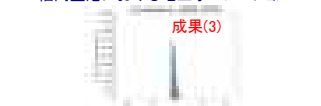
(3)の成果により、3日間を要していた1シナリオの数学モデルシミュレーションを20分程度で実施、350日以上かかる大規模なシナリオも数日以内で評価できた。国が検討する航空管制自動化支援システムの有効性検証など、管制官の負担軽減や安全性向上への手法検討と検証を容易にするもので、スーパーコンピュータと緑の無かった応用へと利用を広げるものとなっている。なお、ここでの成果は実際にICAO(国際民間航空機関)の公式文書であるFIM国際基準案に反映されている。



左は現状を模擬したオリジナル解(緑)、右は最適化による遅延減少解(赤)の飛行状況を示している。



福岡空港における地上オペレーション



国が検討する施策の1つであるFIMを適用、約68%が間隔目標値の±5秒以内に制御可能

## 萌芽的課題3

### 太陽系外惑星(第二の地球)の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明

宇宙、地球・惑星、気象、分子科学分野の計算科学と宇宙観測・実験が連携する学際的な取組により、観測・実験と直接比較可能な大規模計算を実現し、地球型惑星の起源、太陽系環境、星間分子科学を探索する。

#### 本課題の主な成果

- 以下の惑星科学・地球科学・宇宙化学・宇宙生物学分野における研究課題について、「京」、ポスト「京」による大規模数値シミュレーションを可能にする計算アルゴリズムおよび計算コードを開発した。(Ishigaki+2019; Iwasawa+2019; 他)
- 高精度大域的な流体・重力N体シミュレーションを行い、原始惑星系円盤形成過程、構造形成のモデルおよび惑星集積過程の新たなモデルを提案した。(Brasser+2018; Ida+2018; Iwasaki+2019; Kunitomo+2018; Nakajima+2019; Takasao+2018; Ono+2018; Woo+2018; 他)
- 月・地球のマンデル対流の3次元シミュレーションを行った。金星探査機「あかつき」が捉えた下層雲の巨大筋状構造をシミュレーションで再現し形成メカニズムを解明した。(Ishioaka+2018; Kashimura+2019; Miyagoshi+2017, 2018; Ogawa 2016, 2017, 2018; 他)
- 太陽の表面から対流層の底までの一貫した計算による黒点の拡散・形成の再現、太陽面爆発現象の再現、および地球磁気圏と衛星環境を再現した。(Bamba+2017a,b; Darian+2017; Hotta 2017, 2018; Hotta+2019; Iijima+2017; Inoue+2018; Ishiguro & Kusano 2017; Katoh+2018; Kawabata+2017; Muhamad+2017, 2018; Vekstein & Kusano 2017; 他)
- 第一原理分子動力学計算によって星間有機分子の生成機構を解明した。ダストの衝突付着成長シミュレーションによって原始惑星系円盤乱流中の微惑星形成過程を明らかにした。(Ishihara+2018; Kayanuma+2017a,b, 2018, 2019; Sakurai & Ishihara 2018; Sato+2018; Shoji+2018; 他)

## 萌芽的課題3 太陽系外惑星(第二の地球)の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明

### サブ課題A: 惑星の起源の解明(東京工業大学 井田 茂)

#### 目標

原始惑星系円盤の構造と進化、微惑星集積、惑星へのガス集積、円盤との相互作用による軌道移動を融合した大規模計算を行い、一般的な惑星形成過程を明らかにし、「第二の地球」の存在確率や多様性の理論予測を行う。

#### 成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

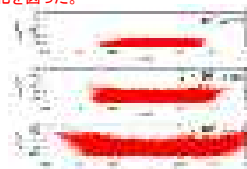
- 成果(1).....系外惑星系・太陽系の起源を統一的理解するための惑星形成理論の課題を整理・明確化した。  
成果(2).....大域的N体シミュレーションコードを開発し、惑星集積過程の大規模計算を行った。  
成果(3).....非理想MHD効果をシミュレーションコードに実装し、高精度スキームへの対応やコードの最適化を図った。

(1) 観測的に見えてきた系外惑星系の力学構造の分布における太陽系の位置づけを考えることで、原始惑星系円盤と惑星との相互作用も微惑星形成のペブル集積過程も円盤の熱的・力学的構造および乱流状態で決まることから非理想MHDシミュレーションが必須であり、軌道移動・ガス惑星の影響を考慮するためにはグローバルなN体計算が必須であり、そして微惑星とペブルの混合系を扱うためには大粒子数のN体計算が必須であることを明確にした。

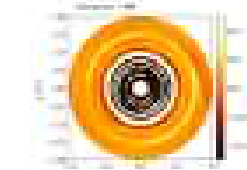
(2) 従来の100倍の粒子数に相当する1億体の大規模計算が可能になった。これに衝突合体・衝突破壊の効果も取り入れた惑星形成過程の暴走成長を、解像度の高いシミュレーションで追跡することができるようになった。特に微惑星が局所的に形成された場合(例えば水凝縮境界付近を想定)、暴走的に成長した微惑星はランダムで大きな動径方向の移動を伴うという、動径一様分布の微惑星からの集積という古典的描像とは大きな違いが出るようになった。

(3) 汎用磁気流体シミュレーションコードAthena++にオーム散逸や両極性拡散といった非理想MHD効果を実装し、高密度かつ低温の原始惑星系円盤を再現する大域的な非理想磁気流体シミュレーションが実現できるようになった。これによって、原始惑星系円盤の乱流は弱いこと、ALMA望遠鏡で観測されているような原始惑星系円盤の軸対称・非軸対称構造が自己組織的に形成されることが明らかとなった。さらに、分子雲から星・円盤形成過程の初期条件を可能な限り第一原理的に明らかにした。

並列計算コード開発においては、大規模並列粒子法シミュレーションコード開発フレームワークFDPS (Framework for Developing Particle Simulator)にP<sup>3</sup>T(particle-particle particle-tree)法を実装し、ポスト「京」のようなノード数が多くノード内のコア数も多いシステムにおいても高い実行効率が維持できるよう最適化を行った。



微惑星が局所的に形成された場合の微惑星集積(少数の微惑星が暴走成長)



原始惑星系円盤の中心面における密度分布 (ALMA望遠鏡で観測されているような軸対称・非軸対称構造が自己組織的に形成)

**萌芽の課題3 太陽系外惑星(第二の地球)の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明**  
**サブ課題B: 惑星内部・表面のダイナミクスと進化(神戸大学 林 祥介)**

**目標**

岩石惑星・衛星の火成活動・マンテル対流、ガス惑星表層と深部の循環、火星全球ダストストームについての高解像度数値計算を実現し、様々なサイズの惑星・衛星の内部・大気の力学的構造とその進化を探索する。

**成果内容と科学的・社会的意義**

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

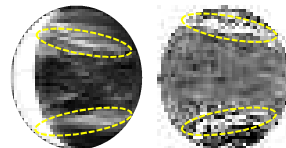
- 成果(1).....月のマグマの生成と重力分離、月内部の熱対流、地球プレートテクトニクスのそれぞれ3次元シミュレーションを行った。
- 成果(2).....ガス惑星シミュレーションの高解像度長時間積分用スペクトル法ライブラリの改良、非弾性球殻対流モデルの開発を行った。
- 成果(3).....非静力学全球火星大気モデルの開発、金星大気シミュレーションによる金星探査機「あかつき」の観測結果の再現を行った。

(1) 対流や火成活動による熱物質輸送や分化によって月のマンテルが45億年でどのように進化するか、その過程における放射性元素の発熱の寄与などの定量的な議論が可能となった。このような3次元形状の効果を取り入れたマンテル対流と火成活動を結合させたシミュレーションに基づいて、観測事実と調和的な月の熱的進化モデルの構築が可能となった。さらに、地球のプレートテクトニクスの3次元モデルの構築に成功し、地球表面に沿って剛体の板として運動するプレートが発達する様子が再現された。プレート運動によるリソスフェアの変形はプレート境界域に集中し、この領域でのみ、過度の鉛直成分が大きな値をとるという現実の地球のプレートテクトニクスで見られる特徴を再現する事に世界で初めて成功した。



プレートテクトニクスの3次元モデル。地球表面(上面)における粘性率の分布とプレートの速度分布(矢印)を示す。手前の鉛直断面は、この面内の温度分布を示す。

(2) ガス惑星大気の大循環・東西平均流と相互作用する渦をシミュレートするための高精度高解像度用スペクトル法ライブラリのMPI並列化の実装を進め、長時間積分が実現できるようになった。さらに深さ方向の密度成層を考慮した非弾性球殻対流モデルを開発した。これらをガス惑星大気モデルに導入することによって、微細対流と全球的構造を両立する大規模並列計算による超高解像度長時間計算の実現が可能となった。



(左) あかつきIR2カメラで観測された金星下層雲。(右) AFES-Venusのシミュレーションによる高度60 kmの鉛直流分布(白が下降流)。惑星規模筋状構造が再現されている。

(3) 正二十面体格子非静力学全球大気モデル(SCALE-GM)に火星大気放射・鉛直拡散・土壌温度変化・地表フラックスの過程を組み込み、火星大気3次元計算が実現した。試験計算の段階であるものの、火星ダストの巻き上げ・輸送に重要な過程の1つと考えられている鉛直対流の表現に成功した。また、金星探査機「あかつき」の赤外線カメラIR2が初めて捉えた「惑星規模筋状構造」を、静力学全球金星大気モデル(AFES-Venus)を用いた高解像度シミュレーションで再現することに成功し、その成因を解明した。

**萌芽の課題3 太陽系外惑星(第二の地球)の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明**  
**サブ課題C: 太陽活動による地球環境変動の解明(名古屋大学 草野 完也)**

**目標**

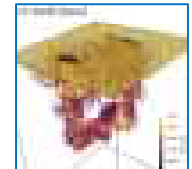
太陽対流層の第一原理的シミュレーションにより黒点、太陽活動の長期変動の起源を明らかにすると共に、さらに太陽磁場から太陽フレア、太陽風とコロナ質量放出が地球電磁気圏および人工衛星システムに与える影響を多階層シミュレーションにより統合的に明らかにする。

**成果内容と科学的・社会的意義**

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

- 成果(1).....対流層深部から光球までの一貫した計算を実現し、対流層深部の磁場が太陽表面で黒点を形成するところを再現した。
- 成果(2).....太陽フレアからコロナ質量放出までを再現するための多層格子電磁流体力学コードを開発しデータ駆動型シミュレーションを実現した。
- 成果(3).....地球磁気圏と衛星環境を再現するMHDシミュレーションとプラズマ粒子シミュレーションの連成計算フレームワークの開発を進めた。

(1) 対流層深部の高解像度の長時間太陽全球計算を行い、効率的に磁場が生成される状況達成した。対流層の底から表面までを一貫した計算を世界で初めて実行し、太陽表面から太陽深部への影響を明らかにした。これらを用いて、対流層深部に存在する磁場が太陽表面で黒点を形成するところまでの計算が実現した。さまざまな初期磁場を試すことで、実際に太陽表面で観測されるような黒点を再現するために必要な太陽深部磁場を明らかにした。



太陽深部から太陽表面までの一貫したシミュレーションによって黒点が形成される様子。太陽表面で黒点が形成される様子を再現した計算結果。

(2) 磁気フラックスロープからコロナ質量放出に至る非線形過程やフレアやコロナ質量放出に伴う磁気リコネクションのダイナミクスを再現した。さらに、太陽対流層計算で得られた光球面磁場を境界条件としたフレアのMHD計算コードの開発を進めた。磁場擾乱が平衡コロナ磁場と相互作用した結果、螺旋状にねじれた磁力線群である「磁気フラックスロープ」が形成され、上空へと放出されていく様子が再現された。これらによって、フレアやコロナ質量放出といった太陽面爆発の発生機構と予測に関するシミュレーションが実現できるようになった。



データ駆動型シミュレーションで再現された太陽フレア爆発における磁気フラックスロープ。

(3) 地球磁気圏シミュレーションによる衛星周辺環境を再現するためのモデル計算の開発が進化した。電磁流体・粒子混成シミュレーションを実行し、コース放射発生時の磁気圏高エネルギー電子環境を明らかにした。人工衛星帯電環境の粒子シミュレーションを実行し、プラズマ波動存在下の衛星帯電現象に関して、波動周期と衛星帯電時定数の比に対する衛星電位変動量の依存性を明らかにした。これらによって、地球電磁気環境変動の詳細な物理描像と、人工衛星システムという社会インフラとの関わりを、経験則によらず物理法則に基づいて評価することが可能となる。

萌芽の課題3 太陽系外惑星(第二の地球)の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明  
サブ課題D: 原始太陽系における物質進化と生命起源の探求(筑波大学 梅村 雅之)

目標

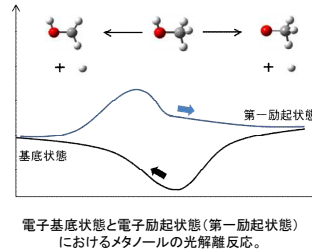
原始惑星系円盤の物質進化のシミュレーション、惑星間ダスト上の有機分子生成の量子化学計算を実施し、原始太陽系における物質進化を解き明かし、地球上の生命起源を探究する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑:科学的成果 青:実用的成果

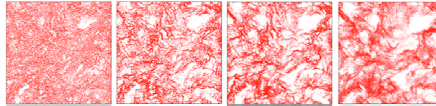
- 成果(1).....星間空間における有機分子の生成・分解機構に関する第一原理計算を行った。  
成果(2).....原始惑星系円盤乱流中のダスト成長について、乱流のナビエ・ストークス方程式の直接数値計算を行った。

(1) 星間空間のような低温環境下での複雑有機分子の生成に重要なラジカルの生成メカニズムを明らかにするため、電子状態間遷移を考慮した量子化学計算を用いて解析し、グリシンが生成する2種類の反応経路を解明した。大規模で複雑な構造を持つ分子では、多くの安定構造(コンフォメーション)が存在するが、これらを解析することは、分子構造の解析や化学反応経路の解析において重要である。そこで、分子のコンフォメーション探索を効率的に行うアルゴリズムを開発し、グリシン等の小規模有機分子において、性能を評価した。ラジカル生成に關与する光解離の機構をメタノールについて解析し、電子基底状態と励起状態で、解離しやすい水素原子が異なることを解明した。また、ダスト表面のモデルとして、グラフェン表面でのラジカル反応を第一原理分子動力学計算で解析し、生成物の解離が起こりやすい状況を解明した。



(2) 原始惑星系円盤乱流中の微惑星形成過程を明らかにするため、原始惑星系円盤乱流中のダストの衝突付着成長シミュレーションコードの開発を行った。これによって、非線形性の強い原始惑星系円盤乱流の性質および乱流中の粒子の運動についての理解が大きく進展した。また、現実的な強乱流場中でもダストの付着確率が大きく下がることはなく、付着成長してきた粒子の付着率が高くなる「暴走的成長」が起こりえることを明らかにした。さらに、ダスト粒子の付着成長シミュレーションを行った結果、強乱流場中において一旦大きくなった粒子が寡占的成長を起こすことを明らかにした。

乱流の直接数値計算によって得られた慣性粒子のクラスタリングの様子(左からストークス数=0.01, 0.06, 0.12, 0.24)





## 萌芽的課題4-1

# 脳のビッグデータ解析、全脳シミュレーションと脳型人工知能アーキテクチャ (思考を実現する神経回路機構の解明と人工知能への応用)

革新技術による脳科学の大量のデータを融合した大規模多階層モデルを構築し、ポスト「京」で大規模シミュレーションにより思考を実現する脳の大規模神経回路を再現し、人工知能への応用を図る。

### 本課題の主な成果

1. 拡散MRIデータに基づく全脳高解像度結合行列を作成し、全脳神経回路モデル構築に活用した(サブ課題ABD)
2. 大脳皮質-基底核-小脳統合モデルを汎用神経回路シミュレータNESTで実装し、「京」での全脳シミュレーションを実現した(サブ課題BCD)
3. 高度並列神経回路シミュレータMONETを開発し、史上最大規模の脳シミュレーション(小脳ではヒト規模の680億ニューロン)を「京」で実現した(サブ課題BC)
4. 言語からの動画像生成と動画像追跡のモデルを開発し、それらを並列実行するためのプラットフォームBriCA2を「京」に実装した(サブ課題DEF)

## 萌芽的課題4-1 脳のビッグデータ解析、全脳シミュレーションと脳型人工知能アーキテクチャ サブ課題A: 脳の構造と活動の大規模データ解析(京都大学・大羽成征)

### 目標

哺乳類の脳を構成する神経回路の構造同定を全脳レベルで行う高度化アルゴリズムを開発し、構造同定の結果を他のサブ課題が実施するネットワークシミュレーションに提供する。

### 成果内容と科学的・社会的意義

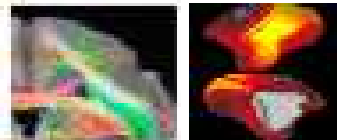
成果(1).....哺乳類脳の拡散MRIコネクティクス同定における複数脳間平均を算出した  
成果(2).....2ステップ・モンテ・カルロ法の実装を行った

(1)の成果により、哺乳類脳において高い解像度と信頼性を持つ全脳規模神経結合が得られ、最終目標においてサブ課題Dで実施される全脳シミュレーションに提供された。哺乳類脳標本の拡散MRI画像から脳白質における軸索走行方向の手がかりが得られる。これを統合した脳領域間の結合強度行列が、全脳シミュレーションのために必要である。本成果は、個体間相違や追跡アルゴリズムの確率的ゆらぎのもとで安定して高い解像度を持つ結果を得た点に意義がある。

(2)の成果により、蛍光トレーサー顕微鏡画像による全脳規模3次元コネクティクス同定計算を並列化できる。2ステップ法の第1ステップで解析対象となる3次元画像領域をモザイク状に分けて計算ノードを割り当て、モンテ・カルロ法による神経配線構造同定を行う。第2ステップでは、再びモンテ・カルロ法を適用してこれらを結合する。ノード間境界をまたぐ配線の切れ目を第2ステップのモンテ・カルロ法で繋ぐ点に工夫があり、これによって矛盾のない大域的ネットワークを得ることができる。

本成果は、脳における神経配線構造同定におけるモンテ・カルロ法の適用範囲を大きく広げた点に意義がある。一般にモンテ・カルロ法は実行するたびに結果が確率的に揺らぐため、領域分割の悪影響が大きいと考えられていた。2ステップ・モンテ・カルロでこの点が解決されたことで、モンテ・カルロによる大型計算全般の潜在的な応用範囲を広げる意義がある。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果



哺乳類脳の拡散MRI画像から、白質線維追跡シミュレーションを行い(左図)これをまとめて、2万ボクセル間の接続強度行列を求める。個体間のばらつき補正つきの平均処理により信頼性の高い標準構造を推定した(左図)。



2ステップ・モンテ・カルロ法により、蛍光トレーサー顕微鏡による全脳規模構造画像に基づくコネクティクス同定計算を、複数計算ノードで計算したのちにマージすることで効率化。

萌芽的課題4-1 脳のビッグデータ解析、全脳シミュレーションと脳型人工知能アーキテクチャ  
サブ課題B: 大脳皮質神経回路のデータ駆動型モデル構築 (理化学研究所・五十嵐潤)

目標

哺乳類の大脳皮質-視床-大脳基底核-小脳神経回路モデルによる情報処理機構の解明

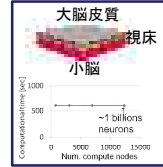
成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

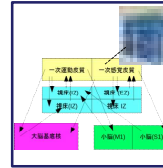
- 成果(1).....ポスト京で全脳シミュレーションを可能にする神経回路シミュレータの開発
- 成果(2).....運動-感覚皮質モデルと大脳皮質-視床-小脳-大脳基底核神経回路モデルの開発

(1) 哺乳類の脳の90%以上の神経細胞は大脳皮質、小脳、大脳基底核に含まれており、これらの領域は密接な相互作用を行いながら情報処理を行っている。しかし、大脳皮質は膨大な数の結合を持ち、小脳は膨大な数の神経細胞を持つため、それらの相互作用を全脳規模のシミュレーションで調べるのはこれまで難しかった。我々は、大脳皮質と小脳の層状シート型回路構造に着目し、タイル分割による並列計算を行う独自開発のシミュレータMONETを開発し、全脳規模のシミュレーションについて、実現可能性を調べた。その結果、サブ課題BとCで共同し、京で10億個の神経細胞からなる大脳皮質-視床-小脳回路のシミュレーションを実現し、計算性能とメモリ消費に関して高いスケール性能が実現できることを示した。さらに、ポスト京での規模拡大による、全脳規模のシミュレーション実現の可能性を示唆した。計算のホットスポットのプログラムに変更を加え、ポスト京CPU用コンパイラによるSVEのSIMD命令の翻訳が行われることを確認した。

さらに、2014年に京で世界最大規模の大脳皮質シミュレーションを行ったNESTシミュレータについて、ユーリッヒ研究所、スウェーデン王立工科大学、理研の共同研究グループで、AlltoAll通信と新規データ構造を導入し、計算性能とメモリ消費を改善した。京やJUQUEEN上での試験で、ポスト京世代スパコンでの全脳シミュレーションの可能性を示唆する結果を得た。これらの成果は、脳全体で協調して行う情報処理機構や、複数脳領域が相互に影響して発生するてんかんやパーキンソン病などの脳疾患の病態について、ポスト京上で脳を丸ごとシミュレーションして調べるための第一歩となる。



3次元モデル構造と弱スケール性能



NESTで構築した全脳モデル構成図

(2) 上述のNESTシミュレータ上で実行する詳細な全脳のモデル開発に向け、層状シート型の一次性感覚皮質、一次、二次運動皮質の神経回路開発を行った。さらに、サブ課題B、C、Dで連携し、一次運動皮質、一次運動皮質、視床、小脳、大脳基底核からなる最小版の全脳モデルを構築し、京上での動作させた。広く利用されるNESTシミュレータ上で全脳モデルを開発することで、他研究者によるモデルの利用を可能とする。今後、脳の主要な領域間の協調について調べることが可能になり、ポスト京による全脳モデルの実行に向けた一歩となる。

萌芽的課題4-1 脳のビッグデータ解析、全脳シミュレーションと脳型人工知能アーキテクチャ  
サブ課題C: ヒト全小脳モデル構築と大脳小脳連関シミュレーション (電気通信大学・山崎匡)

目標

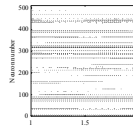
運動制御および認知機能に関係する全脳レベルの神経回路シミュレーションを実施するために、「京」ならびにポスト「京」上で動作するヒト全小脳神経回路モデルを構築し、他のサブ課題で構築する大脳皮質、大脳基底核の神経回路モデルと接続する。

成果内容と科学的・社会的意義

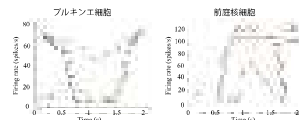
緑: 科学的成果 青: 実用的成果

- 成果(1). 開発した神経回路シミュレータを用い、「京」上で、ヒトスケールの小脳神経回路シミュレーションを実施した。
- 成果(2). 開発および既存の神経回路シミュレータにより構築した小脳神経回路モデルを、サブ課題Bの大脳皮質神経回路モデルと接続した。

(1)の成果により、「京」ならびにポスト「京」上で動作するヒト全小脳神経回路モデルを構築するという目標に対して、「京」の全ノードを使用することにより、ヒト全小脳神経回路モデルの構築を達成した。弱スケール性能を計測し、1024ノードから全ノードまで、良好なスケール性能を得た。構築した小脳神経回路モデルの細胞の応答は、動物実験と定性的に一致した。本成果は、「京」による世界最大規模の神経回路モデルのシミュレーションの実行である。さらに、開発した神経回路シミュレータは、良好な弱スケール性能を得られているので、ポスト「京」でも性能を引き出すことが可能になると期待される。



開発した神経回路シミュレータにより構築した小脳神経回路モデルにおける顆粒細胞の活動。横軸は時間(秒)、縦軸は細胞の番号を示す。点は、スパイクを表す。



神経回路シミュレータNESTにより構築した小脳神経回路モデルの視覚性眼球運動ゲイン適応のシミュレーション結果。

(2)の成果により、他のサブ課題で構築する大脳皮質、大脳基底核の神経回路モデルと接続するという目標に対して、大脳皮質神経回路モデルとの接続を行い、大脳小脳連関ループのシミュレーションの実行を達成した。開発した神経回路シミュレータにより構築した小脳神経回路モデルと大脳皮質神経回路モデルを、「京」上で接続した。加えて、神経回路シミュレータNESTにより構築した小脳神経回路モデルと大脳皮質神経回路モデルを、接続した。本成果は、電気生理学および解剖学データに基づく大規模な神経回路モデルどうしを接続するという世界的に報告されていないものである。最近実験的にも注目されている脳の複合領域間の相互作用による運動および高次脳機能のメカニズムの解明に貢献できると期待される。開発した神経回路シミュレータは良好な弱スケール性能を得られているため、ポスト「京」において、大脳基底核神経回路モデルも含めた全脳レベルのシミュレーションでも性能を引き出すことが可能になると期待される。

萌芽的課題4-1 脳のビッグデータ解析、全脳シミュレーションと脳型人工知能アーキテクチャ  
 サブ課題D: 大脳皮質・基底核・小脳モデル統合による全脳シミュレーション (沖縄科学技術大学院大学・銅谷賢治)

目標

大脳基底核の最新の解剖学・生理学データにもとづいたスパイクング神経回路モデルを構築する。  
 大脳皮質・小脳モデルとの統合による全脳シミュレーションを実現し、思考の機構を明らかにする。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果(1)・・・大脳基底核のスパイクング神経回路モデルで、行動選択と強化学習を実現した。  
 成果(2)・・・大脳皮質、大脳基底核、小脳の統合シミュレーションを実現した。

(1) マカクサルの大脳基底核の神経回路の構造と活動を1/20,000のスケールで忠実に再現したスパイクング神経回路モデルで、大脳皮質からの入力強度に応じた大脳基底核出力の選択パターンを解析、強化学習の基本要素である確率的な行動選択が脳でいかに起こり得るかを明らかにした。  
 さらに、大脳皮質から大脳基底核の入力部である線条体へのシナプス結合に、報酬信号に応じた可塑性(ドーパミン依存性シナプス可塑性)を導入することにより、報酬フィードバックによる強化学習が実現できることを確認した。  
 本成果は、大脳基底核の神経回路の動作原理の解明に貢献するだけでなく、大脳基底核の病変の原因の解明とその治療戦略の探索に有用なツールを提供する。

(2) サブ課題Bの大脳皮質-視床モデル、サブ課題Cの小脳モデル、サブ課題Dの大脳基底核モデルを統合するため、大脳皮質の1mm<sup>2</sup>を単位とした整合性のある空間構造の策定を行った。  
 それをもとにNESTにより実装した各モデルを結合し、「京」の600ノードを使い大脳皮質で50mm<sup>2</sup>スケールの全脳モデルのシミュレーションを実現した。  
 これにより大脳基底核と小脳から視床の異なる部位を経た入力信号の大脳皮質回路における統合機構をシミュレーションにより探索することが可能になる。



大脳基底核のスパイクング神経回路モデルによる行動選択



入力-出力と報酬の連合による強化学習

萌芽的課題4-1 脳のビッグデータ解析、全脳シミュレーションと脳型人工知能アーキテクチャ  
 サブ課題E: 脳型人工知能アーキテクチャの開発 (京都大学・石井信)

目標

脳型人工知能のアーキテクチャとして、内部状態を持つ力学系を多数連結して並列動作させる機構を開発し、不完全観測、動的、少サンプルの課題で適切な推定と制御と学習を行う。

成果内容と科学的・社会的意義

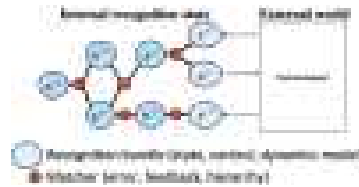
緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果・・・・・・予測符号化を分散型計算で行うアーキテクチャを実装し応用例を示した

この成果は、脳型人工知能の基本アーキテクチャとして我々が提案しているものである。提案型アーキテクチャは内外環境を表現する複数の状態空間モデル(単位モデル)を階層的な接続関係のもとで協調させる仕組みになっている。学習済みの単位モデルを組み合わせることで、最小限の追加学習によって複数タスクに適應する汎用性の発揮が期待される。実装において、課題Fで開発されているフレームワーク BriCA の最新版を用いることで並列化をこれまでで、48CPUノードにおける同期的プロセス並列実行で複数力学系の同時実行ができること、GPUの援用によって各単位モデルに深層神経網による画像処理を行わせることができることを示した。今後非同期動作、スレッド間通信、ノード間通信を実装するとともに、単位モデルの個数を増やした実験を行うべく。

AI技術の応用範囲を広げる意義、ヒトや脳を理解する意義に加え、ヒトの挙動を理解することによるヒト-AI協調を進めてゆく意義がある。

提案型アーキテクチャの応用例として、モーションキャプチャと物理シミュレーションモデルの統合によるアニメーション生成を行った。仮想現実空間で生じる全ての場面を事前にキャプチャしておくことは現実的ではなく、リアルタイムで自然な物理シミュレーションを行うには計算量のみならず事前モデリングのコストが大きい。データとモデルの統合に提案型アーキテクチャを用いることにより、関節単位の局所的制約と全身統合の大域的制約を同時に与えることができる。



複数モジュールを用いた予測符号化に基づく脳型人工知能アーキテクチャは、ダイナミクスを認識する"bundle"と、これらが相互予測する誤差の評価を行う"matcher"からなる。



姿勢のモーションキャプチャ(赤)から、関節トルクを含む仮想力学系(黒)の挙動を復元することで、自然なアニメーションを生成することができる。擾乱への反応も自然である(右図)

**萌芽の課題4-1 脳のビッグデータ解析、全脳シミュレーションと脳型人工知能アーキテクチャ**  
**サブ課題F: 脳型人工知能大規模高性能計算プラットフォームの開発 (理化学研究所・高橋恒一)**

**目標**

全脳に匹敵する規模での非同期並列計算に耐えうる脳型人工知能高性能計算基盤ソフトウェアを開発する

**成果内容と科学的・社会的意義**

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果(1) 非同期並列基盤ソフトウェアBriCAを開発した。課題内連携のほかに課題外でも利用実績を積んだ。  
 成果(2) 新規の非同期学習手法を提案し、「京」を用いて世界で初めて1000並列規模のモデル並列学習に成功した。

(1)の成果により、非同期分散型の脳型認知アーキテクチャを高並列で実行する基盤が整備された。今日広く使われているTensorFlowなどの人工知能エンジンは、GPUでの同期的処理に最適化され、モデル並列実行時の並列性能は著しく制限されている。BriCAの開発により、人工神経回路の数千コアから数万コア規模でのモデル並列学習実行が可能になった。

BriCAを用いて、サブ課題Eで開発するMatcherNetをARMサーバー上で96コア環境で並列実行することに成功した。また新学術領域「脳情報動態」でも大脳新皮質の6層構造を真似たマスターアルゴリズムフレームワーク(MAF)の研究に用いられている。さらに、当課題のほか多数の研究機関・企業が協賛する全脳アーキテクチャ・ハッカソンでも採用され、新皮質＝大脳基底核ループや海馬モデルに基づいた脳型人工知能の研究・開発・さらに教育にも展開されている。この成果は今後サブ課題ABCDの脳神経回路モデルを脳型人工知能に応用する際の基盤ともなる。



Asynchronous Direct Feedback Alignment (ADFA) の一層

(2)の成果では、分散メモリ環境において人工神経回路のモデル並列計算を高効率で実行可能なことを示した。現在主流の誤差逆伝播に基づくend-to-end学習では、ネットワーク全体の同期処理が発生するため分散並列実行に根本的な足枷がある。本研究では、いくつかの生物学的に忠実な (biologically plausible) 学習手法を提案あるいは拡張し、高並列実行に適したアルゴリズムを開発・実装し、性能の検証を行っている。

特に、Direct Feedback Alignment法 (DFA) をベースに新規開発したAsynchronous DFA (ADFA) では「京」を用いて128ノード1024コアで良好なワイークスケーリングを示したが、この規模の性能は文献等で調査する限り世界初である(論文投稿中)。このほかに、Decoupled Neural Interface (DNI) の高並列拡張などにも取り組んでいる。この成果は、今後より大規模な人工神経回路を複合した自律性の高い人工知能アーキテクチャの実現の基礎となる。



ADFAは京128ノード1024コアまでの良好なスケールリングを確認

**萌芽の課題4-1 脳のビッグデータ解析、全脳シミュレーションと脳型人工知能アーキテクチャ**  
**サブ課題G: 脳型人工知能の大規模実問題への応用 (東京大学・原田達也)**

**目標**

大規模動画データ認識と予測を行う人工知能のアルゴリズム開発による脳型人工知能アーキテクチャの有効性の実証

**成果内容と科学的・社会的意義**

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果(1).....自然言語記述から動画画像を生成するモデルの構築

近年、ニューラルネットワークを基盤とした生成モデルを利用した画像生成ならびに動画画像生成に関する研究が広く行われている。一般的な画像生成モデルでは、ガウス分布等からサンプリングされた潜在変数を入力として、学習したデータセットに含まれるデータに近い画像を出力するが、近年では画像に関する自然言語で記述された説明文を入力として目的の画像を出力するようなモデルについても研究が行われている。しかしながら、動画画像生成は、単に画像生成の手法を時系列方向に拡張するだけではなく、フレーム間の連続性なども考慮する必要があるため、問題として画像生成よりかなり困難なため、自然言語で記述された説明文からの生成はほとんど研究されていない。また、画像と比較して動画はデータセットの収集や説明文付与のアノテーションのコストが高く、適切なデータセットが存在しないという点も、文章からの動画生成というタスクの難しさの一因となっている。

そこで本研究では、生成したい動画画像を自然言語記述で与えることで目的の画像が生成されるような、動画生成システムの構築を行った。その際、動画画像が動き情報(フロー)と見た目情報(アピアランス)から構成されることに着目し、一段階目でオプティカルフローを生成し、二段階目でそのオプティカルフローに対してアピアランスを付与するような、二段階の生成モデルを提案した(図1)。さらに、自然言語記述の説明文から動画生成モデルを学習するにあたり、新たに説明文付きの動画データセットを作成し、ベースラインとの比較実験を通して提案手法の有用性を確認した(図2)。

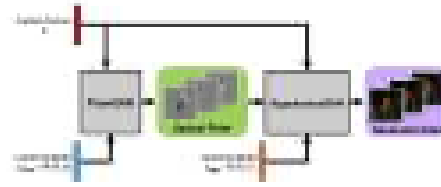


図1: 動画画像生成モデルの概要



"a man with a white shirt, white pants is hitting a ball with a bat at a tennis field"

図2: 自然言語記述から生成された動画像例: 提案手法(上), 比較手法(下)



## 萌芽的課題4-2

### ポトムアップで始原的知能を理解する昆虫全脳シミュレーション

(思考を実現する神経回路機構の解明と人工知能への応用)

革新技術による脳科学の大量のデータを融合した大規模多階層モデルを構築し、ポスト「京」で大規模シミュレーションにより思考を実現する脳の大規模神経回路を再現し、人工知能への応用を図る。

#### 本課題の主な成果

1. ショウジョウバエ全脳ニューロンの非均等ベンチマーク回路の1/4リアルタイム実行とカイコガ10000均等ニューロンベンチマーク回路のリアルタイム実行に成功
2. mp-LM-CMA-ESを実装しMPI並列神経回路シミュレーションを進化的アルゴリズムでの最適化に成功
3. カイコガ規範触角葉マルチコンパートメント神経回路シミュレーションをおこないa)局所介在神経の応答分化b)個々の匂い情報処理経路の分離を観察
4. ショウジョウバエ規範視葉神経回路シミュレーションによる on edge 動き検出回路の生理データの再現

## 萌芽的課題4-2 ポトムアップで始原的知能を理解する昆虫全脳シミュレーション

### 目標

富岳に近い環境上での単体性能5%/ 数百ニューロン神経回路のパラメータ同定/ 一万神経規模のリアルタイムシミュレーション/ 学習を行うシミュレーションの初期実装とそれによる昆虫脳の知能の一部の理解/ 2光子顕微鏡によるシミュレーション用データ取得/ オンライン推定実行/

### 成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

- 成果(1) 京・FX100・TegraX1, Pezy, Xeon Phi等のアーキテクチャーでメモリバンド幅制限に近い性能を達成した。
- 成果(2) mp-LM-CMA-ESを京上で構築実装し副側葉の左右交代的な運動指令パターン生成を達成した。
- 成果(3) 均一細胞1万神経細胞でリアルタイム実行・非均一ショウジョウバエ全脳12000細胞で1/4リアルタイムを達成した
- 成果(4) 拡散近似による神経細胞のStochastic simulationを実装試験し、deterministicモデルとのI-F特性の差を確認した。
- 成果(5) カイコガ規範で機械感覚と匂いを含んだ触角葉のシミュレーションを行い、局所介在神経の反応の分化を観測した
- 成果(6) 一般臭に対する可塑性を含んだシミュレーションを行い、2つの匂いの情報処理の分離に伴う可塑性を観測した。
- 成果(7) ショウジョウバエコネクターム規範の視葉オンエッジ動き検出回路のシミュレーションで方向選択性を再現した。
- 成果(8) オンラインデータ取得にむけての2光子顕微鏡の構築をおこなった。
- 成果(9) カイコガショウジョウバエミツバチの間の神経細胞レベルの類似性を示した。

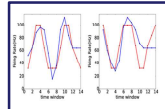
- (1)の成果により、メモリバンド幅程度の性能がでている富士通アーキテクチャーに比肩する実行効率も他でも可能であることがわかった。京でのコア部分では15%弱の実行効率を達成しており、本成果により富岳でも想定される昆虫全脳リアルタイム超に十分な単体性能が期待できる。
- (2)は神経回路のみならずMPIシミュレーションに対してのパラメータ推定が可能になったことを意味する。なお、ほとんどの系ですべての構成神経のすべての活動・計測は知られている系は希少であり、本成果は複雑な出力パターンを生成する神経回路網が推定できるこの方法は神経回路の理解に近づく強力なツールである。
- (3)の成果は富岳上の全脳リアルタイムシミュレーションにむけての重要なマイルストーンであり、この成果のみならず全脳リアルタイムシミュレーションをつかった生理実験とくみあわせた神経回路オンライン推定やロボットをつかった現実世界への応用への足掛かりになる。またこれにより世界最高FLOPSの神経回路シミュレーションが可能となる。
- (4)の成果はまだ初期的であるが知能の根拠にある神経細胞のゆらぎを含めた高精度なシミュレーションの初めてのスパコン上の実装になる。本成果によって決定論的なモデルではとらえきれない高精度な認識や意思のゆらぎのシミュレーションの道が開かれたといえる。
- (5)の成果により精密なマルチコンパートメントモデルによって匂い感覚一次中枢がはじめて再構成できた。また、本成果はしくみが未解明であった局所介在神経の応答分化に説明の一つを与えるものである。
- (6)の成果は(5)により全体の回路の概観ができていた触角葉モデルにSTDPで神経可塑性をあて、交互に匂いを与えた場合の匂い認識の精緻化をもたらし個々の匂い情報処理経路の独立化を観測したもので、本成果は昆虫脳内回路に即したマルチコンパートメントモデルで初めてシナプス可塑性による学習効果を示したものである。
- (7)の成果ではショウジョウバエ電顕コネクタームデータをシナプス強度としてシミュレーションに入れ込み、生理実験の受容野をほぼ再現した。本成果は、おそらく詳細なコネクタームを動き検出という機能再現神経シミュレーションに交換できた世界初の成功例であり、その意味で大きなマイルストーンである。
- (8)の成果では昆虫生理測定を念頭においた2光子顕微鏡システムを構築できた。本成果はシミュレーション結果を検証するツールとして使用することが期待できると同時に、さらに進んだオンラインデータ同定の基盤として開発中である。
- (9)の成果では行動指令を司る下降性神経、報酬などを司るとされるひとつのオクトハミン神経など単一神経レベルで種間の類似性を発見した。本成果は複数種の神経細胞の情報をシミュレーションに入れ込める可能性を下支えする。



ショウジョウバエ全脳12,393ニューロンシミュレーション



触角葉シミュレーション: 構成神経応答例と交代の匂い刺激による受容体-出力細胞のシナプス強度変化



左右交代的な出力応答を目的関数にmp-LM-CMA-ESで生成した32細胞全結合モデルの出力応答