

情報科学技術に関する
研究開発課題の事後評価結果②
(別紙)

H P C I 計画推進委員会 委員

(敬称略、50音順)

伊藤	公平	慶應義塾大学工学部物理情報工学科 教授
伊藤	宏幸	ダイキン工業株式会社・テクノロジー・イノベーションセンター リサーチ・コーディネーター
上田	修功	理化学研究所 革新知能統合研究センター 副センター長／NTT コミュニケーション科学基礎研究所 フェロー・上田特別研究室長
梅谷	浩之	トヨタ自動車株式会社 I T 革新推進室 主幹／株式会社トヨタシステムズ C A E 部 部長
大石	進一	早稲田大学理工学術院 教授
小柳	義夫	東京大学名誉教授／高度情報科学技術研究機構神戸センターサイエンスアドバイザー
喜連川	優	情報・システム研究機構国立情報学研究所 所長
小林	広明	東北大学大学院情報科学研究科 教授／東北大学サイバーサイエンスセンター センター長特別補佐／東北大学総長特別補佐 (ICT 革新担当)
田浦	健次郎	東京大学情報基盤センター センター長
土井	美和子	情報通信研究機構 監事／奈良先端科学技術大学院大学理事
中川	八穂子	株式会社日立製作所研究開発グループデジタルテクノロジーイノベーションセンター シニアプロジェクトマネージャ
○※	藤井 孝藏	東京理科大学工学部情報工学科 教授
◎	安浦 寛人	九州大学 名誉教授

令和2年10月現在

◎ : 主査 ○ : 主査代理 ※ : 利害関係者のため審議には加わらない。

HPCI 計画推進委員会
ポスト「京」重点課題推進ワーキンググループ委員名簿

(平成31年4月18日現在)

- 相原 博昭 東京大学大学院理学系研究科 副学長・教授
- 安達 泰治 京都大学ウイルス・再生医科学研究所 教授
- 宇川 彰 日本学術振興会 世界トップレベル拠点形成推進センター
センター長
- 大石 進一 早稲田大学理工学術院 教授
- ◎小柳 義夫 高度情報科学技術研究機構神戸センター
サイエンスアドバイザー
- 河合 理文 株式会社 I H I 技術開発本部 技師長/
スーパーコンピューティング技術産業応用協議会会員
- 栗原 和枝 東北大学未来科学技術共同研究センター 教授
- 白井 宏樹 アステラス製薬株式会社モダリティ研究所 専任理事
- 住 明正 東京大学未来ビジョンセンター 特任教授
- 福和 伸夫 名古屋大学減災連携研究 センター長・教授
- 松岡 聡 理化学研究所計算科学研究センター センター長

◎ : 主査, ○ : 主査代理

11名
(50音順, 敬称略)

ポスト「京」重点課題推進ワーキンググループ
萌芽的課題サブワーキンググループ 委員名簿

平成31年5月9日現在

- 合原 一幸 東京大学生産技術研究所 教授
- 宇川 彰 日本学術振興会 世界トップレベル拠点形成推進センター
センター長
- ◎大石 進一 早稲田大学理工学術院 教授
- 小柳 義夫 高度情報科学技術研究機構 神戸センター
サイエンスアドバイザー
- 高田 章 ロンドン大学 特任教授／
(元)AGC株式会社先端技術研究所 特任研究員
- 田近 英一 東京大学大学院理学系研究科地球惑星科学専攻 教授
- 常田 佐久 自然科学研究機構 国立天文台 理事／台長
- 中島 秀之 公立大学法人 札幌市立大学 学長
- 中野 純司 統計数理研究所 モデリング研究系 教授

◎：主査，○：主査代理

10名
(50音順，敬称略)

「富岳」成果創出加速レビュー委員会 委員名簿

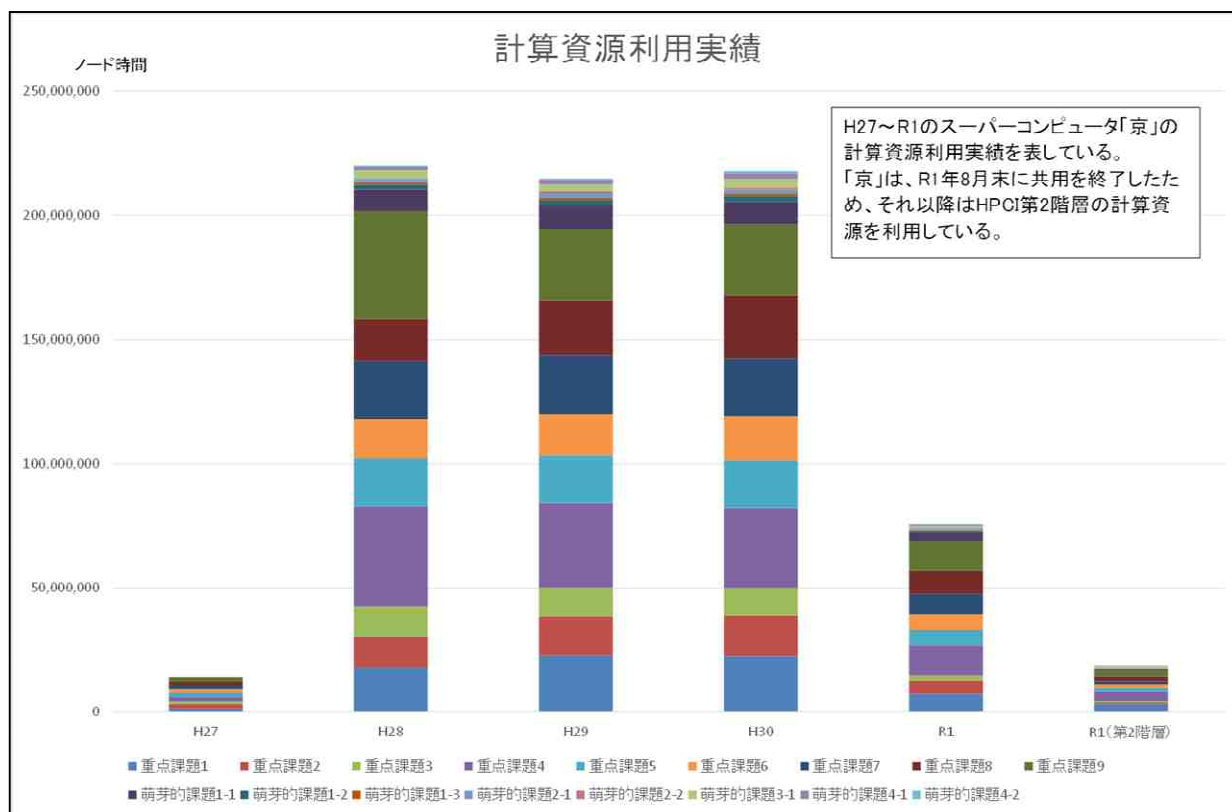
相田 美砂子	広島大学 理事・副学長	★
合原 一幸	東京大学生産技術研究所 教授	
相原 博昭	東京大学 大学院理学系研究科 物理学専攻 教授	
安達 泰治	京都大学ウイルス・再生医科学研究所 教授	★
石田 雅也	住友化学株式会社デジタル革新部 R&A データ科学チーム スペシャリスト/スーパーコンピューティング技術 産業応用協議会	
伊藤 聡	物質・材料研究機構統合型材料開発・情報基盤部門情報 統合型物質・材料研究拠点 拠点長	★
伊藤 宏幸	ダイキン工業株式会社・テクノロジー・イノベーション センター リサーチ・コーディネーター	★
上田 修功	理化学研究所 革新知能統合研究センター 副センター 長/NTT コミュニケーション科学基礎研究所機械学 習・データ科学センタ 代表	★
◎ 宇川 彰	日本学術振興会世界トップレベル拠点形成推進センタ ー センター長	★
大石 進一	早稲田大学理工学術院 教授	★
小柳 義夫	東京大学名誉教授/高度情報科学技術研究機構神戸セ ンター サイエンスアドバイザー	★
河合 理文	株式会社 I H I 技術開発本部 技師長	★
栗原 和枝	東北大学未来科学技術共同研究センター 教授	★
白井 宏樹	アステラス製薬株式会社モダリティ研究所 専任理事	
住 明正	東京大学サステイナビリティ学連携研究機構 特任教 授	★
高田 章	ロンドン大学 University College London / (元) AGC 株式会社	
田近 英一	東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授	

中川 八穂子 株式会社日立製作所研究開発グループデジタルテクノロジーイノベーションセンター シニアプロジェクトマネージャ
樋口 知之 中央大学 理工学部経営システム工学科 教授 ★
松尾 亜紀子 慶應義塾大学理工学部機械工学科 教授

◎ : 主査
★ : ヒアリング参加
50音順

(令和元年 11 月)

計算資源利用実績（京＋第2階層）



推進体制



各課題の成果（各課題作成資料（令和元年度時点）より抜粋）

重点課題1

生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築

超高速分子シミュレーションを実現し、副作用因子を含む多数の生体分子について、機能阻害ばかりでなく、機能制御までも達成することにより、有効性が高く、さらに安全な創薬を実現する。

本課題の主な成果

(サブ課題A: ポスト「京」でのMD高度化とアルゴリズム深化)

1. GENESISの非共有結合相互作用計算を最適化、信頼性の高い温度定義を開発、長いステップ幅の長時間計算を実現。(J. Chem. Phys. 誌掲載)
2. 生体システムの効率的計算手法を開発、予備計算を通じて、信頼性の高い大規模創薬応用計算の道筋を開拓。(J. Phys. Chem. B 誌掲載)
3. 実験・バイオインフォマティクスを融合し、タンパク質・DNA相互作用の高精度モデルを構築し、ゲノム創薬への道筋を開拓。(J. Chem. Theory Comput. 誌掲載)

(サブ課題B: 次世代創薬計算技術の開発)

4. マルコフ状態遷移モデル(MSM)や拡張アンサンブル、MD-SAXSIによって、リガンド結合によるタンパク質動的構造変化のシミュレーションに成功。(J. Med. Chem. 誌掲載、蛋白質科学会若手奨励賞受賞、薬学会構造活性相関部会SAR Presentation Award受賞)
5. バイオ医薬品候補の抗体と抗原間結合の分子動力学シミュレーションに成功。(Structure誌、Sci. Rep. 誌掲載)
6. 細胞内環境を顕微鏡に考慮したバクテリア細胞質などをモデリングし、数千万から1億原子に至る規模のシミュレーションに成功。(eLife誌掲載)
7. 核内に存在する巨大なヌクレオソーム(タンパク質・核酸複合体)の構造変化過程のシミュレーションに成功。(PLoS Comp. Biol. 誌、J. Phys. Chem. B 誌、Biophys. J. 誌掲載、HPCIシステム利用研究課題 優秀成果賞受賞)
8. 「京」で800万原子からなるB型肝炎ウイルスカプシド全体系の超巨大分子動力学シミュレーションに成功。(未発表)

(サブ課題C: 創薬ビッグデータ統合システムの開発)

9. 創薬ターゲット入力から化合物スクリーニング・リード最適化までをシームレスに行う創薬ビッグデータ統合システムのプロトタイプを構築。(J. Comput. Chem., J. Chem. Phys. J. Chem. Inf. Model. Bioinformatics 誌掲載)
10. Precision Medicineの予測基盤となるゲノム医療分子シミュレーション計算フローのプロトタイプを開発。
11. 創薬計算フローを癌、腎疾患、乾癬、アルツハイマーの治療薬及び機能性食品用味覚成分の探索研究に応用し、リード化合物創出に成功。
12. 創薬ビッグデータ統合システム及びゲノム医療分子シミュレーション基盤を活用し、医薬品に関連する生体反応の分子メカニズム解明に成功。(Nat. Commun. x2, Clin. Cancer Res., Ebiomedicine, ACS Chem. Neurosci., Mol. Brain 誌掲載)

重点課題1 生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築

サブ課題A: ポスト「京」でのMD高度化とアルゴリズム深化(理化学研究所・杉田有治)

目標

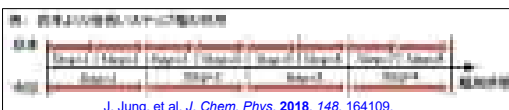
・最終目標: ポスト「京」にて、GENESISのCapacity計算を数十倍から数百倍で実現。様々な創薬応用計算が可能な利便性の高いシステムの構築。

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).....GENESISの非共有結合相互作用計算を最適化、信頼性の高い温度定義を開発、長いステップ幅の長時間計算を実現。
 成果(2).....生体システムの効率的計算手法を開発、予備計算を通じて、信頼性の高い大規模創薬応用計算の道筋を開拓。
 成果(3).....実験・バイオインフォマティクスを融合し、タンパク質・DNA相互作用の高精度モデルを構築し、ゲノム創薬への道筋を開拓。

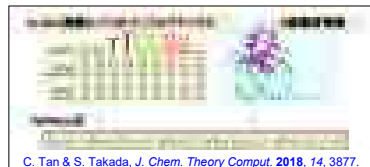
(1)の成果により、「京」と比較して「富嶽」の利用によって125倍以上の計算を実現できる。これは「コデザイン」のターゲットアプリにおいて最高のパフォーマンスの向上である。さらに、図に示す2倍長いステップ幅の利用のできる手法を開発し、2倍の高速化に成功した。これらを組み合わせると、200倍以上の計算が実現できる見込みである。手法は汎用性が高く、様々な分子動力学ソフトウェアに導入され分野全体の発展も期待される。創薬応用計算でよく利用される分子動力学計算の高度化を行うため、極めて高い利便性がある。



(2)の成果により、gREST/REUS法やPaCS-MD法などの拡張アンサンブル法と量子・古典混合法を用いて、標的タンパク質と薬剤分子結合のde novoモデリングが可能になった。予備計算を通じて、結合親和性を高い信頼性で予測し、さらには実験で見えない結合過程の詳細や動力学パラメータの予測もできることを実証した。タンパク質-薬剤分子の結合を直接観測するのは未だ難しく、動的なメカニズムの解明の推進力となる。現在の阻害剤設計は主にX線結晶構造に基づいており、新たな設計指針の創出が期待される。



(3)の成果により、ヌクレオソームなどタンパク質DNA複合体の粗視化シミュレーションを行うPWMCos法が確立され、次世代シーケンサー等の高スループット実験から得られるタンパク質・DNA相互作用の膨大な結合親和性データと複合体立体構造データを組合わせた、タンパク質-DNA相互作用の高精度モデルが開発された。このモデル(PWMCos法)を適用することで、ヌクレオソームDNAへの転写因子結合を、高速かつ高い信頼性を持ちながら、系統的に解析することができる。タンパク質とDNA相互作用の基礎生物学だけでなく、ゲノム創薬に向けたシミュレーションを効率的に実行できる基盤が構築された。



重点課題1 生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築
サブ課題B: 次世代創薬計算技術の開発(横浜市立大学・池口満徳)

目標

・最終目標
 タンパク質動的構造解析、タンパク質間相互作用解析、細胞環境、核内環境、ウイルス環境の計算手法を確立し、次世代創薬計算手法を完成

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).....マルコフ状態遷移モデル(MSM)や拡張アンサンブル、MD-SAXSIによって、リガンド結合によるタンパク質動的構造変化のシミュレーションに成功
- 成果(2).....バイオ医薬品候補の抗体と抗原間結合の分子動力学シミュレーションに成功
- 成果(3).....細胞内環境を顕微鏡に考慮したバクテリア細胞質などをモデリングし、数千万から1億原子に至る規模のシミュレーションに成功
- 成果(4).....核内に存在する巨大なヌクレオソーム(タンパク質・核酸複合体)の構造変化過程のシミュレーションに成功
- 成果(5).....「京」で800万原子からなるB型肝炎ウイルスカプシド全体系の超大分子動力学シミュレーションに成功

(1)の成果により、タンパク質の機能に関わるリガンドが結合した際の動的構造変化を解析することに成功した。これは「京」で実施した計10マイクロ秒以上の分子シミュレーションをマルコフ状態遷移モデル(MSM)によって統合、またサブ課題Aで開発されたgREST法によって可能になったものであり、これらの計算結果は、SAXSなどの実験データと一致した。

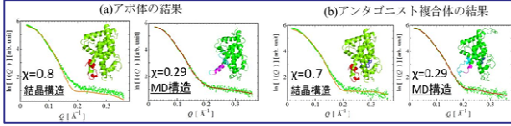


図. SAXS実験の結果と、タンパク質立体構造から算出した理論散乱カーブの比較。MD構造が結晶構造と比べ、溶液状態のSAXS実験結果と一致していることがわかる

(2)の成果により、バイオ医薬品候補として期待される抗体と抗原の結合の分子動力学シミュレーションに成功した。近年進展著しい、バイオ医薬品の分野でも、HPCIによる分子シミュレーションが重要な役割を果たすことができることを示した重要な成果である。

(3)の成果により、バクテリア細胞質に含まれるタンパク質等の細胞質全原子モデルのシミュレーションに成功した。本成果は、細胞内環境でのタンパク質間、あるいはタンパク質代謝物の非特異的相互作用が果たす役割を解明した、この分野での大きなブレイクスルーである。

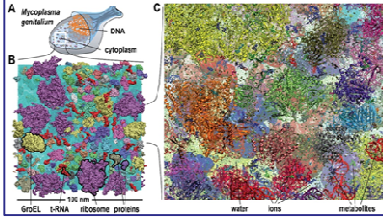


図. バクテリア細胞質の全原子モデル。タンパク質、RNA、リボソーム、代謝物、イオン、水などを含み、1100万個から1億個の原子を含む複数の構造モデルに関する分子動力学を実施した。

(4)の成果により、核内に存在する巨大なヌクレオソームの構造変化のシミュレーションに成功した。ヌクレオソームはゲノム創薬等でも重要な巨大超分子システムであり、HPCIによるシミュレーションの大きな成果である

(5)の成果により、水分子も含め800万原子からなるB型肝炎ウイルスカプシド全体系の分子動力学シミュレーションに成功した。B型肝炎ウイルスの抗ウイルス剤の開発に向けて、逆転写酵素阻害剤やカプシド形成阻害剤の分子動力学シミュレーションと自由エネルギー解析を実施し、ウイルスへの結合の機序を解析することができるようになった。

重点課題1 生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築
サブ課題C: 創薬ビッグデータ統合システムの開発(京都大学・奥野恭史)

目標

・最終目標:「富岳」を用いた「創薬ビッグデータ統合システム」の初版を完成。具体的な創薬テーマに適用し、性能評価を実施。

成果内容と科学的・社会的意義

緑:科学的成果 青:実用的成果

- 成果(1):創薬ターゲット入力から化合物スクリーニング・リード最適化までをシームレスに行う創薬ビッグデータ統合システムのプロトタイプを構築。
- 成果(2):Precision Medicineの予測基盤となるゲノム医療分子シミュレーション計算フローのプロトタイプを開発。
- 成果(3):創薬計算フローを癌、腎疾患、乾癬、アルツハイマーの治療薬及び機能性食品味覚成分の探索研究に応用し、シード化合物創出に成功。
- 成果(4):創薬ビッグデータ統合システム及びゲノム医療分子シミュレーション基盤を活用し、医薬品に関連する生体反応の分子メカニズム解明に成功

(1)の成果により、①医薬品シードライブラリの構築に必要な化合物生成手法、②ドッキング計算を用いたバーチャルスクリーニング、③(拡張型)MD計算を用いた化合物結合ポーズおよび結合エネルギーの予測手法、④PPI創薬に必須となるタンパク質複合体構造の高精度予測技術、⑤医薬品結合サイトを予測したタンパク質機能部位データベース、の開発が完了した事で、創薬ターゲット入力から化合物スクリーニング・リード最適化までをシームレスに行う創薬基盤が実現した。更に、最適化アルゴリズムの導入により、高い予測性能を維持しながらMD計算時間を10分の1に削減する事に成功している。現在、バーチャルスクリーニングの予測精度を上げるための計算フローの検討とともに、本システムに取り込むAI創薬技術や副作用を回避するためのターゲット選択性の予測手法の開発を進めている。

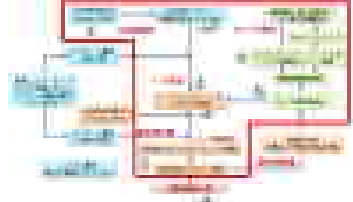


図. 創薬ビッグデータ統合システムの計算フロー(これまでに①-⑤の要素技術・データベースを開発した)

(2)の成果では、患者の遺伝子データ入力から変異タンパク質の構造モデリングまでをシームレスに行うGUIを開発し、高精度分子シミュレーション(MP-CAFE)によって非共有結合型阻害剤の薬剤応答性を予測する計算基盤が実現した。

(3)の成果では、これまでに構築した創薬計算フローの評価のために、エビジェネティック型抗がん剤、腎疾患治療薬、乾癬治療薬、機能性食品味覚成分、アルツハイマーの治療薬の開発研究に本システムを適用し、シード化合物の創出に成功した。

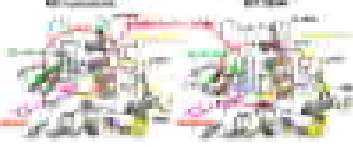


図. RET阻害剤の耐性メカニズム

(4)の成果では、これまでに開発した分子シミュレーション基盤を活用し、既存医薬品・診断薬の結合モード、標的選択性、心毒性の予測に加えて、がんゲノム医療における抗がん剤選択への応用研究を多数行ってきた。その中で、肺がん分子標的RET(S904F)が薬剤耐性を獲得する分子メカニズムの解明等に成功し、Nat. Commun., Clin. Cancer Res., J. Compt. Chem., Ebiomedicine, ACS Chem., Neurosci., Mol. Brain誌掲載に至っている。本成果は、「富岳」によるゲノム医療分子シミュレーション基盤を活用する事により、Precision Medicineの効率化が十分期待できる。更に、長期的には、製薬会社やアカデミアが「富嶽」による創薬ビッグデータ統合システムを用いて創出した薬剤候補が医薬品として製品化されることが期待される。

重点課題2

個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

健康・医療ビッグデータの大規模解析とそれらを用いて得られる最適なモデルによる生体シミュレーション(心臓、脳神経など)により、個々人に適した医療、健康寿命を延ばす予防をめざした医療を支援する。

本課題の主な成果

1. 新規がん患者のほぼ全てのがん全ゲノムデータを「富岳」で解析可能なソフトGenomonを開発し、がん免疫・がん発生・進展に関してがんゲノミクス研究の歴史に刻まれる発見をNature等に連発した。膨大な変異解析にはAI技術が活躍した。(Nature 2019 加齢に伴うがん化のメカニズムの解明、Nature 2016 がん細胞が免疫から逃れるメカニズムの解明、NEJM 2015 再生不良性貧血のクローン進化の解明、紫綬褒章、上原賞、他)
2. 世界で初めてとなる全脳循環シミュレータを開発し、「富岳」を用いて患者個別の全脳レベルの血流動態を3次元で解析できるようにした。これにより、脳血管障害の個別化医療を支援する新しい計算解析技術を確立した。(第24回計算工学講演会 グラフィックスアワード優秀賞・特別賞)
3. 計算科学の歴史上初となる、分子シミュレーションと連成するマルチスケール心臓シミュレーションを「富岳」により実現する技術を開発した。これにより遺伝子、分子構造に基づく新たな臨床医学・創薬データベースが可能となる。(日本計算力学連合JACM Award for Computational Mechanics、日本機械学会計算力学部門功績賞、中谷賞・大賞、文部科学大臣表彰・科学技術賞、他)

重点課題2 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

サブ課題A: 大量シーケンスによるがんの個性と時間的・空間的多様性・起源の解明(東京大学医科学研究所・宮野 悟)

目標

高精度大規模がんオミクスデータ解析システムを構築し、がんゲノミクスで世界トップの成果を排出し、「富岳」による飛躍的なデータ科学へつなぐ

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) 世界の追従を許さない高精度大規模がんオミクスデータ解析システムGenomon及びVirtual Grid Engineの開発
- (2) 加齢に伴う正常組織の遺伝子異常とがん化のメカニズムの解明(Nature 2019)
- (3) 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-(Nature 2016)

(1)の成果は、コテザインを通じたGenomon及びVirtual Grid Engine (VGE)の開発である。「富岳」での推定パフォーマンスは当初目標の1日1000検体の全ゲノムシーケンス解析を大きく超え、日本における新規がん患者のほぼ全てに対応できる。Genomonは、がんゲノミクスにおける世界トップレベルの成果を輩出し、その有効性が科学的に実証された。本成果は、革新的にがんのゲノム異常の解明を進め、これまで未踏であったがんの分子病態の理解を飛躍的に拡大・加速した。以下の(2)-(3)の成果はGenomonを用いて大規模ゲノム及びRNAシーケンスデータ解析で得られた代表的なものであるが、他にNature Microbiol 2019 (慢性活動性EBウイルス感染症によるがんの発症原因の解明)、Nature Genet (骨髄異形成症候群から急性白血病を起こすクローン進化の遺伝子異常ハターン解明)、NEJM 2015 (再生不良性貧血のクローン進化の解明)、他Nature Genet (9報)など70報以上の成果を出した。VGEは医学・生命科学系のユーザが平易にGenomonを活用できる環境を提供するために開発した。

(2)の研究では、実体顕微鏡を組み入れた0.5mm微小サンプル解析システムを開発し、食道がん及び食道正常上皮組織を1mmメッシュ間隔で数百箇所のマイクロバイオプシーを行い、ゲノムシーケンスを行った。その成果は、食道がんが頻繁に見られる遺伝子変異が乳児期から獲得され、加齢とともに増加して70歳以上では全食道面積の40~80%が、がん遺伝子の変異をもった細胞で置き換わるという衝撃的なものであった。これは、がんがなぜ高齢者に生じ、「飲酒」や「喫煙」によって促進されるのかを解明した大きなインパクトをもつ発見となり、がんが生ずる初期のメカニズムの解明の突破口を創った極めて大きな科学的意義がある。がんの早期診断、予防、がんの死亡率の低減に資する大きな社会的意義を有している。この成果はNatureに発表したが、この研究成果の意義について解説記事も同時に出たほどに注目された。

(3)の成果に先立ち、「京」によるGenomon解析で成人T細胞白血病リンパ腫49検体の全ゲノム、43検体のRNAシーケンスデータからそのゲノム変異の全貌を明らかにしていた(Nature Genetics 2015)。Genomonはショートリードシーケンスデータの盲点である数十~数百ベースの構造異常の高精度検出を数理的方法で解決しており、その結果PD-L1遺伝子(PD-1タンパク質と結合することでT細胞を抑制する)の3'非翻訳領域の構造異常が見つかった。同時にこの構造異常をもつ検体のPD-L1遺伝子が高発現していることも観察された。そこで33の癌腫10,210検体のデータをGenomonで解析すると、複数の癌腫において同じことが見出され、ゼブラフィッシュを使ったゲノム編集でその機能解析を行い、悪性腫瘍における新たな免疫回避のメカニズムを解明した。この成果は、ニボルマブなどの免疫チェックポイント阻害剤の選択に有効であるという社会的意義がある。これは全ゲノムシーケンスとGenomon解析で初めて見出され得るものである。

Genomon



がんの変異を高精度・網羅的に暴き出すソフトウェア。機械学習などのAI技術が投入されている。下図はVGEのワークフロー。



PD-L1のタンパク質をコードしていない領域の構造異常が原因で、PD-L1タンパク質が異常に作られ、T細胞の受容体PD-1に濃縮され、その結果、がん細胞を殺さなくなる。

重点課題2 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

サブ課題B: データ同化生体シミュレーションによる個別化医療支援(大阪大学大学院基礎工学研究科・和田茂生)

目標

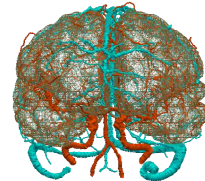
ポスト「京」を活用した大規模生体物理シミュレーションと生体計測データとを様々なレベルで同化・融合させることにより、実測データを重視する医療に受け入れられる計算機シミュレータを開発し、シミュレーションで得られる物理情報を活用した個別化医療支援の実現を目指す。

成果内容と科学的・社会的意義

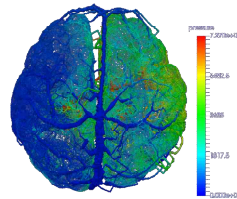
緑: 科学的成果 青: 実用的成果

- 成果(1) 患者個別の脳画像に基づく全脳循環シミュレータを開発した。
- 成果(2) 個別化医療支援のための医用画像計測と計算力学シミュレーションの同化手法を開発した。
- 成果(3) 脳機能障害に関わる個別化医療支援のための大規模生体シミュレータを開発した。

(1)の成果により、医用画像から得られる患者個別の主要脳動静脈血管の形態および解剖学的構造と、脳血管生成数理アルゴリズムを組み合わせて、全脳血管モデルを構築できるようになった。また、これまでに開発してきたボクセル型血流シミュレータの大規模化・高速化を図り、格子ボルツマン法および適合サブメッシュ法を適用することにより、全脳血管モデルに対して約5億ボクセルで60 μmの空間解像度を達成し、「京」を用いて実時間で6秒間の全脳血流計算が実行可能となった。本成果は、脳全体に分布する血管内の血流や血圧、重力や慣性力によるそれらの変動に対する物理的理解を与えるものであり、現在注目されている脳間質・脊髄液流れと脳血液循環との関係解明や、脳梗塞や脳内出血による障害予測において、これまでにない物理的側面からの情報を提供するものである。シミュレーションで得られた脳内血流動態をMRIやCTの計測と同様に可視化し、実際の医用画像と比較できるようにすることで、新たな医用画像診断技術への展開が期待できる。



医用画像データと数値モデルを組み合わせることで構築した全脳血管モデル



右中大脳動脈が閉塞した場合の血圧分布。脳梗塞の障害予測につながる。

(2)の成果では、PC-MRI画像から得られる血流速度データとの誤差を最小化するシミュレーション手法を開発した。また、4D-CT画像から抽出した心臓の3次元形状動画像に対して自動的に変形動態を推定するアルゴリズムを開発し、移動境界を伴うボクセル型血流シミュレータと組み合わせることにより、患者の心内血流動態を再現できるようになった。本成果により、肺葉を削除した場合、心房につながる肺静脈の血流境界条件が変化だけでなく、左心房全体の動きも変化することが見出された。今後、ポスト「京」を用いれば、心原性脳梗塞と左心房内血流動態との関係解明に向けて、モデル駆動型とデータ駆動型の双方のアプローチが可能となる。開発した一連の計算解析手法は、4D-CTによる新しい医用画像診断技術として注目されている。

(3)の成果では、脳機能障害が引き起こす運動障害および発話障害の診断および治療を支援するための神経-筋骨格統合シミュレータおよび流体音響発話シミュレータを開発した。これにより、患者個別の計測データに基づくデータ駆動型アプローチと力理論に基づくモデル駆動型アプローチを統合する医療支援プラットフォームを構築することができた。

重点課題2 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

サブ課題C: 心臓シミュレーションと分子シミュレーションの融合による基礎医学と臨床医学の架橋(UT-Heart研究所・久田俊明)

目標

遺伝子から心拍動までを繋ぐマルチスケール心臓シミュレータの開発 一心不全の解明と新たな治療法開発に向けて

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

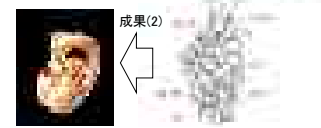
- 成果(1) UT-Heart(有限要素モデル)とCafeMol(AICG分子モデル)の連携手法を確立した。
- 成果(2) 心収縮に関わると考えられるミオシン分子内の残基を明らかにした。

(1) 本成果により、計算科学の歴史上初となる、分子シミュレーションと連成するマルチスケール心臓シミュレーションを「富岳」により実現する目的を立てることが出来た。心臓の拍動に伴い心筋壁の各所に刻々生じる歪は収縮タンパク分子の運動を大きく修飾し、一方、収縮タンパクの運動は心拍動の力強さを決定する。このようなマクロとミクロの相関は医学的・生理学的核心に迫る本質的現象であるにも拘わらず、(i) 巨視的な連続体の有限要素シミュレーションと微視的な分子シミュレーションが全く異なる体系として発展してきた学術的背景、そして (ii) コンピュータの性能の限界から、両者による連成問題として心拍動のマルチスケールシミュレーションを実現した研究チームはこれまで世界に存在しない。これに対し本成果は、刻々有限要素からの歪のフィードバックを受けつつ揺らぐミオシン分子構造の特徴量を抽出し、その関数として各化学状態を表すCafeMolのポテンシャルを確率的にスイッチすることで首振りサイクルを実現する一方、パワーストロークによりミオシン分子が発生する力を安定に有限要素にフィードバックするマクロ・ミクロ連成解析手法を新たに開発したものであり、その有効性は右図に示されるような内圧を受ける小規模な有限要素リングモデルの収縮運動により検証した。



小規模有限要素リングモデルとCafeMol分子モデルの連成シミュレーションを達成した

成果(1)



成果(2)

心臓シミュレーションを富岳にて実現 赤字番号の残基が構造変化の鍵となることを発見した

(2) 本成果は、ミオシンがアクチンと結合力を発生する状態とアクチンから乖離している状態について構造解析を行った結果、800以上ある残基の内、少数の残基のみが大きく構造変化していることを発見したものである。そして、それら特定の残基のみについてCafeMolの力場をスイッチすると状態遷移が生じやすくなる傾向のあることがシミュレーションから確認され、これらの部位がミオシンの力発生機構において重要な役割を果たしていることが裏付けられた。更にこれらの残基は、新たなメカニズムに基づく強心薬として最近注目されているOmecamtiv Mecarbilのミオシンへの結合部位と幾つか一致することが分かった。以上の成果(1)、(2)は、今後「富岳」により心臓シミュレーションを実施することで、アミノ酸の変異に関係すると考えられている肥大型心筋症の原因究明や治療法の開発と共に、新たな強心薬の設計に繋げることができるものと期待される。

重点課題2 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

サブ課題C: 心臓シミュレーションと分子シミュレーションの融合による基礎医学と臨床医学の架橋(UT-Heart研究所・久田俊明)

目標

創薬を加速する心毒性スクリーニングシステムの開発(重点課題1 [奥野責任者/寺田分担研究者] との協同)

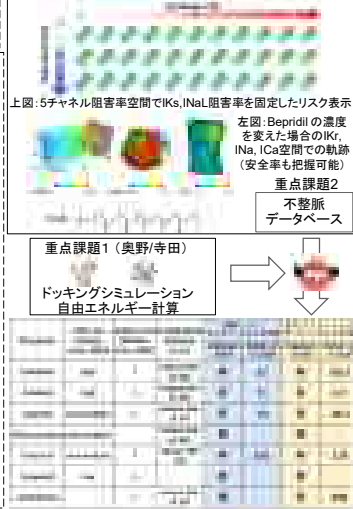
成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果(1) UT-Heart+分子モデルによる高効率な心毒性評価システムのプロトタイプを開発した。
成果(2) 上記システムにより7種の薬剤について不整脈発生リスクを評価し妥当性を検証した。

(1) 本成果は、(i) 心臓モデルを構成する細胞数理モデルの5種類のイオンチャネルにつき色々な阻害率の組み合わせに対する不整脈発生リスクを「京」コンピュータを用いた網羅的心臓シミュレーションにより求め、その結果をデータベース化(Okada, et al., British J. Pharmacology, 2018;175(17):3435-52)する一方、(ii) 重点課題1と連携してカリウムチャネル/ナトリウムチャネルと候補化合物とのドッキングシミュレーション並びに結合自由エネルギー計算から阻害率を求めることで、総て計算機上で心毒性を評価できる効率的かつ低コストなスクリーニングシステムのプロトタイプを開発したものである。なお上記(i)で作成された「不整脈データベース」は <http://ut-heart.com/ECGdata/index.html> にて公開されている。薬剤が心筋細胞のイオンチャネルに結合すると通過電流が抑制され不整脈に発展することがあるため、総ての薬は開発段階において心臓への催不整脈作用(心毒性)に関する安全性を調べる必要がある。本成果により、従来の実験的方法に代えて、膨大な候補化合物を効率よくスクリーニングできるシステムを実現できる目的が立った。現在、米国FDAを中心に細胞数理モデルの検討が行われており、これが確定すれば「富岳」によりUT-Heartシミュレーションを実行し直し、精密なデータベースを作成する予定である。また今後、カリウムチャネル、ナトリウムチャネル以外の3種のイオンチャネルの分子モデルの作成、遺伝子変異モデルの導入等を行う予定である。

(2) 本成果は、上記のように開発された心毒性スクリーニングシステム・プロトタイプを用い、実際に右表に示す7種の薬剤について心毒性評価を行い、従来のパッチクランプ実験に基づきチャネル阻害率を計測してUT-Heartシミュレーションにより心毒性を評価した結果と比較したものである。カリウムチャネル、ナトリウムチャネル以外のチャネルについての阻害率は実験値を用いた。また同表には過去の実績から評価されたリスクも併記した。不整脈を発生させる薬剤濃度(常用量に対する倍率)と比較すると、dl-Sotalololについては検討の余地があるが、他は2~3倍の範囲の差異に収まり、既往の評価とも矛盾しない。本システムを「富岳」を用いて完成させることにより、我が国の創薬産業の競争力強化に繋げる。



重点課題3

地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築

内閣府・自治体等の防災システムに実装しうる、大規模計算を使った地震・津波による災害・被害シミュレーションの解析手法を開発し、過去の被害経験からでは予測困難な複合災害のための統合的予測手法を構築する。

本課題の主な成果

1. 地震と津波が引き起こす複合災害、災害が引き起こす都市の被害、さらにその被害に対する社会の対応（群集避難、交通障害、経済活動復旧）の一連の過程をシミュレーションする統合的予測システムを構築（Ichimura et al., SC15）。
2. 複数の地震シナリオを想定し、複合災害・被害・対応に関する実都市の数値解析モデルを構築し、シミュレーションを実施（Hori et al., 2018, frontiers in Built Environment）。
3. 統合的予測システムを構成する地震波動の数値解析コンポーネントは、極めて高い計算性能を発揮し、計算科学・計算機科学の分野でも評価（SC14・15・18のGordon Bell賞ファイナリスト、SC16・17のBest Poster賞）。

重点課題3 地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築

サブ課題A: 地震・津波の災害被害予測の実用化研究(国立研究開発法人海洋研究開発機構・堀高峰)

目標

・最終目標:テラ自由度モデルの準備となる500億自由度モデルを使う地震解析で、南海トラフ地震を対象とした50地震シナリオ解析とその結果を用いた地震動と津波の被害予測を実施

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) AI向け演算器とAIの科学計算への活用による、世界最速の非線形有限要素法の大規模ソルバの開発
成果(2) 大規模有限要素法での大規模地震動分布データを学習したAIによる不確実性を考慮した地震動分布推定手法の開発
成果(3) 自動メッシュ生成手法の高度化による、複雑形状のロバストな有限要素メッシュ自動生成の開発
成果(4) 非線形有限要素法を使う地震シナリオ計算による東北地方太平洋沖地震後の地殻変動再現と、南海トラフ地震シナリオでの地殻変動・津波計算ならびに南海トラフ地震の複数シナリオでの揺れによる被害予測の実施
成果(5) 低B/Fマシンで有効な、3次元流体計算における短距離力計算アルゴリズムの開発と粒子系津波遊上計算の実施

(1)の成果により、詳細かつ精緻な地殻・地盤の3次元構造解析モデルを使う地震動伝播・地殻変動のシミュレーションを実現するため、非線形有限要素法のソルバが高速化した。これは、近年性能が著しく向上したAI向け低精度演算器を高精度科学計算に活用する精度混合演算、AIを使う非線形マトリクス方程式の解法により実現した。従来とは桁違いの規模・分解能での地震の災害・被害予測が実行可能となったことを意味する。本成果は、本課題の科学技術上の革新的成果である**世界最大規模かつ最速の有限要素法**の開発をさらに進めたものであり、低精度演算性能も向上させたポスト京の性能を最大限に引き出すことにつながると期待される。また、本課題で開発した大規模高速非線形有限要素法計算コードを用いて**国の想定地震・津波の実用計算が「京」で実施され、社会的インパクトが非常に高い**。

(2)の成果により、大規模高速非線形有限要素法計算コードを用いて「京」で計算した大規模地震動分布データを使って学習させたAIを用いることにより、従来は困難であった**不確実性を考慮した地震動分布を広域で高速に推定することが可能となった**。本成果は、より**合理的な次世代地震動分布予測システム**の研究成果であり、その社会的インパクトは高い。

(3)の成果により、**複雑形状の地殻構造や地盤構造に対し、ロバストな有限要素メッシュの自動生成が可能となった**。本成果は、プレートが沈み込む複雑な地殻モデルや地盤や構造群から構成される詳細かつ精緻な都市モデルでの大規模非線形有限要素法の適用を可能とし、より**合理的な被害予測を実現する高い社会的インパクトを持つ成果である**。

(4)の成果により、沈み込み帯の不均質弾性構造での**大規模地震による現実的な地殻変動の計算が可能となった**。また同様の有限要素コードを用いた南海トラフの地震シナリオでの地殻変動・津波計算を実現するとともに、これと整合する南海トラフ地震の複数シナリオで阪神地域での揺れによる被害予測を統合地震シミュレーションで実施し、社会科学シミュレーションに受け渡した。本成果は、より**合理的な地殻変動計算と津波や揺れによる被害予測の実現につながるもので、高い社会的インパクトをもちうる**。

(5)の成果により、低B/Fマシンでの流体計算の高速化が確認できた。また(4)の成果と組み合わせ高知市を対象とした津波遊上計算を実施した。本成果は、**世界最大規模かつ最速の粒子系の数値解析法**の開発という科学技術上の革新的成果をさらに進めるものであり、津波に対するより**合理的な被害予測を実現する**という点で社会的インパクトも高い。



非線形有限要素法を使った地下構造物を含む都市の非線形地盤応答シミュレーション (Ichimura et al., SC18 Gordon Bell賞ファイナリスト)



大規模高速有限要素法で計算した大規模データを学習したAIによる地震動分布の不確実性の推定結果 (Ichimura et al., SC17, Best Poster)

重点課題3 地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築

サブ課題B: 統合的予測のための社会科学シミュレーションの開発(国立大学法人神戸大学・井料隆雅)

目標

最終目標: 10,000災害被害シナリオに対し、避難(40万徒歩・自動車)・交通障害(総走行量2,000万台km)・被災地域経済活動(人口300万人・15万事業所)シミュレーションを実施

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) 異常時において自律的な避難行動をとる高度なエージェントを使うマルチエージェントシステムの開発
- 成果(2) 交通流と交通需要の二つの解析を連成したマルチスケール数値解析コンポーネントの開発
- 成果(3) 企業の意思決定を考慮した被災地域経済活動シミュレータの開発
- 成果(4) 「人・モノ・金」に関する先端都市情報の、被害対応の社会科学シミュレーションでの利用

(1)の成果により、歩行者と自動車が混在する津波避難に対する大都市上での大規模群集避難マルチエージェントシミュレーションが可能となった。このシミュレーションでは1000万人の歩行者の避難を、2048ノードで82%のストロングスケラビリティによって計算できる。これは「京」コンピュータの性能が必要な最先端のシミュレーションである。本成果は多数の自律的エージェントが実都市モデル上を避難するマルチエージェントシステムの開発という科学技術上の革新的成果である。さまざまな事態を想定した津波避難対策推進に有効であり、その社会的インパクトは高い。

(2)の成果により、地震発生後の被災を前提とした交通需要と交通流のシミュレーションが可能となった。特に交通流シミュレーションでは、30万~40万リンクで構成される首都圏や関西圏の大規模ネットワークが計算可能である。これらの連成は、「京」コンピュータの性能を利用し、多様な被災シナリオを想定した上での交通障害を解析する画期的な手法をもたらす。本成果は交通需要と交通流を連成する大規模交通シミュレーション開発という科学技術上の革新的成果につながる。交通障害の予測精度・信頼度を各段に向上させ、地震発生後の交通障害の対応支援という高い社会的インパクトも期待される。

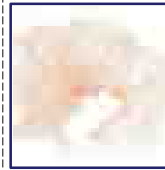
(3)の成果により、災害後の生産設備復旧と生産の過程に関する被災地域経済活動シミュレーションが可能となった。このシミュレーションでは、将来の復旧過程を見越して経済合理性に基づいて行う企業の意思決定プロセスが、数十の産業部門間の複雑な相互作用を考慮しつつ計算されるようになっていく。

本成果は複雑な企業の意思決定を動的計画法で計算する経済活動シミュレータの開発という科学技術上の革新的成果につながる。本シミュレータは緊急融資など災害後の経済施策評価への有用性が期待でき、高い社会的インパクトをもちうる。

(4)の成果により、入力情報作成や出力結果検証が容易でない社会科学シミュレーションに対し、それらのためのデータを作成することが可能となった。特に群集避難や経済シミュレーションで用いるデータについて、ビッグデータを基に、さらにその質や精度を向上させることにより、都市全体を対象とする社会科学シミュレーションの信頼度の正しい評価が期待される。本成果は、先端都市情報を「京」コンピュータで実用する世界最初の例であり、都市情報と高性能計算の連成という科学技術上の革新的成果となる。社会科学シミュレーションの信頼度評価はその利用促進に繋がり、社会的インパクトも高い。



東京都心での群衆避難シミュレーション(黒点の集合が避難する群衆を示す)



首都圏道路網(約34万リンク)での交通流シミュレータ

重点課題4

観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化

観測ビッグデータを組み入れたモデル計算で、局地的豪雨や竜巻、台風等を高精度に予測し、また、人間活動による環境変化の影響を予測し監視するシステムの基盤を構築する。環境政策や防災、健康対策へ貢献する。

本課題の主な成果

1. 観測ビッグデータを活用する同化手法を新たに開発した。この手法を用いることによって、台風や集中豪雨、局地的大雨の予測精度が向上し、「予測から発生までの時間(リードタイム)」を長時間化できることが明らかとなり、より安全な避難施策実現への貢献が可能になった。
2. つくば竜巻等の極端気象に対して、新たに開発した乱流解析技術を活用することにより、生活空間スケールでの被災レベルの推定が可能になった。
3. 全地球を水平解像度14kmで覆う「高解像度大規模アンサンブル実験」により、一週間以上前から台風や豪雨の日本への影響を予測できる技術を開発した。さらに、水平解像度を高くすることにより、台風が存在しない状態においても台風の発生予報と進路予報の成績が向上することを明確に示した。
4. 雲粒数の増加により雲の寿命が延びる効果を導入した高解像度エアロゾルモデルの新たな開発により、雲水応答の衛星観測との整合性が飛躍的に向上し、気候変動予測の不確実性をより低減できる可能性を示した。
5. NICAM-LETKFの計算性能最適化において当初目標を達成するとともに、データの新たな高効率圧縮法を開発した。

(査読論文26本。受賞7件)

【主な成果】に關係するもののみ。

重点課題4 観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化

サブ課題A: 革新的な数値天気予報と被害レベル推定に基づく高度な気象防災(海洋開発研究機構/気象研究所・瀬古弘)

目標

・最終目標: ビッグデータを用いた「データ同化を含む数値天気予報システム」を開発し、「メソスケール開発」では本格的な実験を実施し、高分解能の「積乱雲スケール開発」では初期的な結果を得る。さらにスケールダウンした現象である局地的突風などの極端気象を、乱流解析技術であるLESモデルを用いて解析し、生活空間スケールの被災レベルを推定する。

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): ひまわり8号の高頻度観測データの同化等により、集中豪雨や台風の予測精度の向上とリードタイムの6時間拡大(関東・東北豪雨など)。
成果(2): フェーズドアレレーダや偏波レーダ、稠密地上観測データを用いた局地的大雨やつくば竜巻の再現、竜巻発生機構の革新的理解。
成果(3): 現実地形と建築物を1mスケールで表現する超高解像度シミュレーションによるつくば竜巻の再現と建築物に働く風圧力の推定。

(1)の成果により、平成27年関東・東北豪雨や、平成28年台風10号等のメソスケール顕著現象の事例で、ひまわり8号の大気追跡風や輝度温度の高頻度観測データなどのビッグデータの同化法を開発し、集中豪雨や台風等の予報精度を向上させるとともに、より長いリードタイムの確保が可能であることを実証した(右図上)。(目標達成)

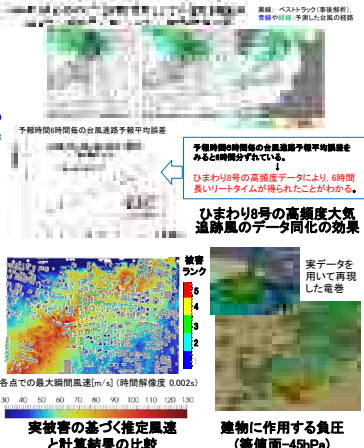
(2)の成果により、局地的大雨や竜巻の親雲等の積乱雲スケールの顕著現象について、フェーズドアレレーダや稠密地上観測データ等の同化法を開発し、局地的大雨の降水強度や竜巻の親雲の位置・発生時刻の予測精度を向上させた。竜巻のアンサンブル予測により、竜巻発生予測確率分布と発生要因の革新的理解を得ることができた(世界初)。(目標達成)

(3)の成果により、実際の竜巻を再現した気象モデルの結果を用いて、実地形・実市街地(市街地: 1.2m, 当該建物: 0.6m)を表現する高分解能シミュレーションを行い、現実の竜巻の再現結果を用いる世界初の建築物への影響評価に成功した(右下図)。(目標達成)

科学的意義: 観測ビッグデータの同化法の開発と得られた結果による新しい知見の獲得
新しい科学への開拓: 現実に近い再現結果を用いた災害を起こす顕著現象の機構解明。(例えば、竜巻発生要因解明(成果)。線状降水帯や夏季異常高温にも適用すべき)。
技術的波及効果: 今後の気象庁等の効率的な数値モデルや同化システムの開発に寄与。新しい観測ビッグデータの測器開発へのフィードバック。予測出力はAIへの入力データに。

社会的意義: 予報精度向上・長いリードタイムがもたらす顕著現象の被害軽減と産業革新創出
社会的課題の解決: 顕著現象のより正確な予測情報や確率情報に基づく避難と対策。実際の竜巻などの再現に基づく、より安全となる建築基準の作成とリスク低減に貢献。

イノベーション創出: 予報精度向上と長いリードタイムの確保、確率予測情報や多数予測シナリオの提供は、防災以外にも、流通や再エネ等の産業に革新をもたらす。(例えば、より早期からの、より確かな情報に基づく物流の確保、効率的な発電管理やダム水量管理。)



重点課題4 観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化
サブ課題B: シームレス気象・気候変動予測 (東京大学大気海洋研究所・佐藤正樹)

目標

・最終目標: 数週間から月・季節から年スケールの水平14-7km格子のアンサンブル実験を実施し、シームレス気象予測を行うための技術基盤を構築する。水平500m格子日本沿岸モデルに基づく海況予測システムを設計し、水平100m格子のパイロット研究を実施する。

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): 大規模アンサンブル全球高解像モデルによるシームレス予測
- 成果(2): 超高解像度大気海洋結合モデルによるマッデン・ジュリアン振動予測研究
- 成果(3): 実運用可能な日本沿岸海況予測システムの開発

(1)の成果により、100以上の大規模アンサンブル全球14km高解像度実験により、一週間以上前より日本への台風や豪雨の影響の可能性を予測する技術を開発した。また、解像度を7kmまで高めることで、日本に上陸した台風について、台風発生前から発生・進路の予報成績が向上することを明確に示した。これは気象庁の現業台風予報に対して将来的な改良の方向性を示すインパクトのある成果であり、社会的意義は大きい。

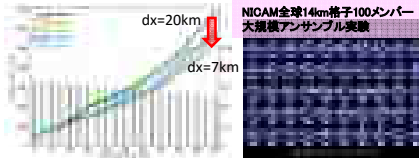
本課題によって得られた大規模アンサンブルシミュレーションデータは予測精度の改善に向けた研究開発のみならず、どの擾乱が台風となるのか、急発達する/しない台風の違いは何か、といった台風の発生・発達に対する科学的理解の進展にもつながる。

(2)の成果により、超高解像度大気海洋結合モデルの高い性能が明らかになりつつあり、今後、海面温度の季節予測や気候変動予測といった幅広い応用だけでなく、熱帯気象現象の解明といった科学的課題の解決にも大いに利用されることが期待される。

(3)の成果により、今後この水平解像度の海況予測モデルを構築することで、防災・水産業・海運等への貢献ができると考えられる。例えば、台風接近時における高潮の予測といったことが挙げられる。また、地球温暖化時における沿岸予測にも応用できることから社会的意義が大きい。

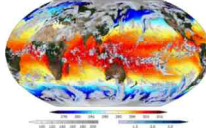
500mという水平解像度は、日本全域の沿岸を扱う海洋大循環モデルとしては現時点で最高解像度であり、日本沿岸の多くの主要な湾等から外洋の海況までシームレスに表現できる。モデル結果の解析を進めることで、沿岸と外洋の相互作用等についての科学的理解が進むことが期待できる。

kmスケールメッシュの高解像度大気海洋モデルは今後の気象・気候変動予測において重要な役割を果たすことが国際的にも認識されてきた。日本が提唱した国際全球雲解像モデル比較実験DYAMONDIにより、全球雲解像モデルの国際連携が進められている。



(右) 大規模アンサンブル全球14km高解像度実験による台風予測。
 (左) 全球7kmモデル(赤、緑、青線)による、予測時間(横軸: 時間)に対する進路予測誤差の向上(縦軸: km)。

高解像度大気14km海洋1/4度結合モデルによるマッデン・ジュリアン振動予測実験。色は海面水温(K)、グレーは外向き長波放射(W/m²)で雲の分布を表す。



500m格子日本沿岸格子モデルによる1m深における相対温度。

国際全球雲解像モデル比較実験DYAMONDIによる雲画像の比較。

重点課題4 観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化
サブ課題C: 総合的な地球環境の監視と予測 (海洋開発研究機構・滝川雅之)

目標

・最終目標: 精緻化した化学輸送モデルでのパイロットスタディの実施、および次世代人工衛星による観測データも利用可能な同化システムの構築。

成果内容と科学的・社会的意義

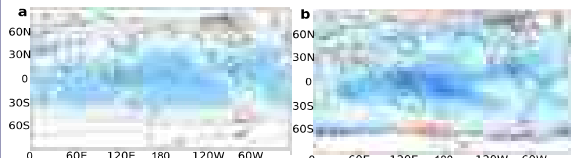
緑: 科学的成果 青: 実用的成果

- 成果(1): エアロゾルの雲水応答に関するモデル表現の改善
- 成果(2): 多種・多成分観測による大気環境データを用いた高解像度同化データセットの公開
- 成果(3): 気象庁黄砂予測現業モデルによるひまわり8号エアロゾル同化の検証

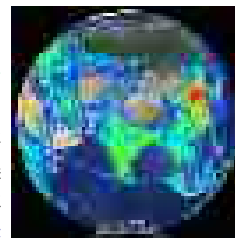
(1)の成果により、現在開発中の高解像度エアロゾルモデルは既存の気候モデルと比較して第二種間接効果(雲粒数増加による雲粒径の減少が降水効率の低下をもたらして雲の寿命を延ばす効果)をより適切に表現している可能性を示唆する結果を得た。本成果は現在開発中のエアロゾルモデルがより大気環境変動と気候変動の相互作用をより適切に評価しうる可能性を示唆するもので、気候変動予測の精緻化につながる可能性がある。

(2)の成果により、4次元変分法およびアンサンブルカルマンフィルタを用いた同化システムの構築およびその大型計算機向け最適化を進め、全球120km格子での10年以上の長期にわたる環境データセットを世界に先駆けて公開した。既存の同種のものに比較して解像度が高くメガシティを解像でき、**全球的な都市大気環境および健康影響の長期変動、および窒素酸化物などの排出量規制などに資するものである**。2019年度はアジアなど各地域における社会活動と放出量変動の関係について詳しく解析する予定である。

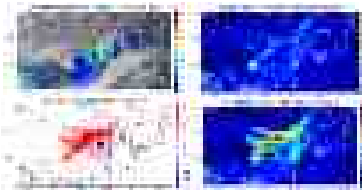
(3)の成果により、気象庁での新しい現業運用(令和元年度予定)に先駆けて過去事例における高解像度エアロゾル同化実験を行い、**黄砂事例での同化システムの有用性を検証した**。



(成果1) 衛星観測(a)および新モデル(b)による雲感受性



(成果2) 複数の衛星データ観測を用いた大気環境データ同化システムにより得られた、窒素酸化物地表放出量の10年平均値(2016年まで)。120km格子にまで高解像度化することにより、ジャカルタ、バンコクなどのメガシティでの放出量が推定可能となった。



(成果3) 衛星観測(左上)および同化前(右上)、同化後(右下)のエアロゾル光学の厚さ。左下は同化によるインクリメント。

重点課題4 観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化 コデザイン・基盤技術開発(海洋研究開発機構・高橋柱子)

目標

・最終目標: ターゲットアプリの高速化・機能高度化等を継続しつつ、実行環境を整備する。基盤技術として大規模アンサンブル流体シミュレーションデータの圧縮技術を開発する。

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): ターゲットアプリNICAM-LETKFのコード見直しを行い、**目標達成が見込める実行性能向上を達成した。**
- 成果(2): 想定されるアーキテクチャを基にした性能推定を通じてシステム構成やコンパイラ等のシステムソフトウェアの改善に資する知見を提供した。
- 成果(3): 実行性能向上のために、NICAM力学過程につづき、NICAM物理過程の単精度演算化を含めた**最適化を行った。**
- 成果(4): 流体計算のデータファイルの高効率圧縮技術について論文投稿およびサンプルコードの公開、本格研究実施にむけての整備を行った。

(1)の成果により、重点課題4コデザインの目標とした計算性能に到達し得ることを確認した(現時点では推定値)。

本成果は、ポスト「京」の性能を最大限に引き出し、**成果の早期創出及び最大化を実現する観点から重要である。**

(2)の成果は、中間目標に掲げたシステム構成、システムソフトウェア要件等の検討を実施したことで得られた。本成果は、**全重点課題およびポスト「京」の利用課題全体に貢献するものであり、波及効果が期待できる。**

(3)の成果は、(1)の成果で述べた重点課題4コデザインの目標とした計算性能の達成に貢献している。本成果は、従来は倍精度で行われていた演算を単精度で行っても計算結果に科学的な観点での悪影響が**無いケースがあることを示し、また単精度演算を活用する計算機ハードウェアおよびソフトウェアに一定の価値を加える。**(図1)

(4)の成果は、基盤技術として開発した流体データの効率的な圧縮法について、成果公開および応用展開を図ったものである。

本成果は、大規模シミュレーション研究実施にむけての基盤技術であり、重点課題4に限らず、**流体データを扱う研究課題への技術的波及効果が期待できる。**(図2)



図1: 演算精度の相違による計算結果への影響評価

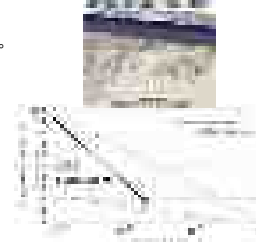


図2: データ圧縮の対象例(上)と圧縮で生じる数値誤差と圧縮率の関係(下)

重点課題5

エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発

複雑な現実複合系の分子レベルでの全系シミュレーションを行い、高効率なエネルギーの創出、変換・貯蔵、利用の全過程を実験と連携して解明し、エネルギー問題解決のための新規基盤技術を開発する。

本課題の主な成果

1. NTChem:「富岳」での目標性能を達成見込み、1万原子系の励起状態計算
GELLAN: 10^{20} 以上の電子配置の超高精度励起状態計算
MODYLAS: 1億原子系の超大規模、1ステップ3msの超高速分子動力学計算
2. 絶対に発火しない長寿命電解液を開発 (Nature Communications 7, 12032 (2016)、Nature Energy 1, 16129 (2016)、Nature Energy 3, 22-29 (2018)、2017年度「Best Use of HPC in Manufacturing」受賞、日本経済新聞等19件掲載) 企業での実用化研究へ進展
3. 「京」の第一原理計算とマテリアルズ・インフォマティクス手法でペロブスカイト太陽電池の新材料候補を発見 (J. Phys. Chem. Lett. 8, 4826 (2017)、日本経済新聞等11件掲載) 実験研究者との実証実験計画中
4. 企業(27件)・国家プロジェクト(18件)・実験研究者(51グループ)との連携体制構築



有機薄膜太陽電池のドナー・アクセプター界面での電荷分離



燃料電池の電極四相界面



二重ペロブスカイト



二次電池電解液

重点課題5 エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発

サブ課題A: 新エネルギー源の創出・確保 — 太陽光エネルギー (神戸大・天能精一郎)

目標

高効率太陽光エネルギー変換による新エネルギー源の創出を目指す。複雑なスピン状態を含む天然・人工光合成系の素反応から物質設計までを取り扱う統合的な計算手法を確立し、水分解反応の本質解明と新エネルギー創出に有望な物質探索を行う。また、太陽電池の物質設計とモルフォロジー・界面の制御に貢献できるシミュレーション技術の開発を行い、高効率太陽電池の実現に向けた計算的アプローチを推進することにより次世代のエネルギー資源の創出に貢献する。

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)

- 太陽電池のエネルギー変換要因特定に向けた大規模シミュレーションの実現
- 人工光合成の反応機構の解明に向け高精度シミュレーションの実現

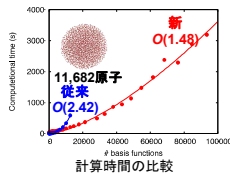
①太陽電池シミュレーションに向けた基盤アプリNTChem:

電子状態計算→1万原子系 励起状態計算

11,682原子, 93,456基底の第一原理計算で20.5%の並列効率を達成。

当初目標達成見込み

励起状態計算(TDDFT)に向けて超並列疎行列ライブラリ等の高度化中



②人工光合成シミュレーションに向けた基盤アプリGELLAN:

量子化学計算→ 10^{20} 以上の電子配置からなる超高精度励起状態計算

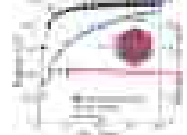
10^{20} 以上の電子配置を扱う高精度ソルバにより光触媒候補の遷移金属錯体における高精度計算を実証。「富岳」に向けて更に高度化中

成果(2)

- 太陽電池の高効率化に向けた電荷分離機構の解明
- ペロブスカイト太陽電池やペロブスカイト水分解光触媒の新材料候補を提案
- 太陽電池のドナーアクセプター界面における電荷分離機構を解明
 - 有機無機ペロブスカイト太陽電池
 - 有機薄膜太陽電池
- 第一原理計算を実施し、ハイスループット・スクリーニングにより材料候補を提案
 - 二重ペロブスカイト太陽電池
 - 可視光応答型ペロブスカイト水分解光触媒

日本経済新聞等11件に掲載

プレスリリース: 2017/10/05 「京」でペロブスカイト太陽電池の新材料候補を発見 J. Phys. Chem. Lett. 8, 4826 (2017)



電荷分離機構の解明
有機太陽電池の電子と正孔はエントロピー拡散によって分離



二重ペロブスカイト太陽電池材料の11,025個の候補化合物から探索し、51候補を提案
可視光応答型ペロブスカイト水分解光触媒材料の29,160個の候補化合物から探索し、6候補を提案

APL Mater. 6, 101103 (2018).

重点課題5 エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発
サブ課題B: エネルギーの変換・貯蔵 — 電気化学エネルギー (東大・杉野修)

目標

第一原理電子状態理論に基づく電極反応の計算と分子動力学法に基づく電解質の計算を統合させることにより、均一系の化学・表面物性・粗視化に基づく材料科学的なアプローチでは理解が困難であった二次電池や燃料電池の分子論を構築する。またこの方法を用いて、測定が困難な電極界面を解明しそれを二次電池や燃料電池の電流電圧曲線の予測につなげ、信頼性の向上に貢献できる手法を確立する。これを用いて次世代・次々世代電池技術の重要問題に挑戦し、蓄電・水素エネルギー社会の実現に貢献する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果(1) 基盤アプリMODYLAS、stat-GPMDを活用し二次電池・燃料電池の微視的機構解明に向けた世界最大規模のシミュレーションの実現

①MODYLAS: 分子動力学計算→1~10億原子系 超大規模分子動力学計算

新規アルゴリズムにより通信時間を50%削減、FMM計算主要部分の演算量を約6分の1に削減。プロトン移動の組み込み、不均一系の浸透係数の計算手法の開発など、「富岳」に向けて更に高度化中

②stat-GPMD: 第一原理分子動力学→5千原子系 電極反応

5千原子系の第一原理サンプリング達成。FFT高速化等により速度が17%向上。反応解析の実証およびメモリ削減等の更なる高度化中

上記のアプリをそろえて総合的なシミュレーションを行える体制を構築した例は他所には見られない。先鋭的な成果を創出すると同時にそこで培ったノウハウをアプリと共に普及させることにより我が国の電池開発技術のレベルアップに大きく貢献する。

成果(2) 二次電池: 安全で高性能な電解液を開発

1. 燃えにくい高性能な電解液の開発
2. 水を用いた安全・安価・高性能な電解液の開発
3. 絶対に発火しない長寿命電解液の開発

プレスリリース

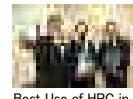
Nature系に3報 日本経済新聞等19件に掲載

2016/06/29 燃えにくい電解液を用いた高性能4.6Vリチウムイオン電池
 Nature Communications 7, 12032 (2016)

2016/08/27 新たなリチウムイオン伝導性液体の発見 — 水を用いた安全・安価・高性能な超3V動作リチウムイオン電池へ
 Nature Energy 1, 16129 (2016)

2017/11/28 “火を消す”高性能電解液を開発 — 絶対に発火しない長寿命電池の実現へ
 Nature Energy 3, 22–29 (2018)

2017/11/13 SC17「HPCwire」の読者が選ぶ2017年度「Best Use of HPC in Manufacturing」を受賞



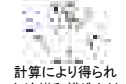
Best Use of HPC in Manufacturing受賞



5 V級Liイオン電池の作動イメージ図



2種類のリチウム塩と水からハイドレートメルトに



計算により得られた溶媒和構造と対応する電子状態。



元素戦略(触媒・電池)京大、東大との連携により実施

重点課題5 エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発
サブ課題C: エネルギー・資源の有効利用 — 化学エネルギー (岡山大・田中秀樹)

目標

化学エネルギー創成から消費に至る過程において、メタンやCO₂の分離・回収、貯蔵、触媒反応によるエネルギー・資源の有効利用に関わる基盤技術を開発し、高効率な分離・回収、貯蔵、相互変換法の実用への橋渡しとするための指針を提供する。そのために、電子状態理論と分子動力学法を基盤とした統合シミュレーション技術を開発し、実用的な物質設計に向け分子レベルからの指針を提供する。ハイドレート分解によるメタン資源の採取方法の効率化、燃料電池非白金系触媒の開発、アミンをはじめ高効率材料を用いたCO₂の分離・回収技術の発展に貢献することにより、エネルギー多消費型工業プロセスを革新する。

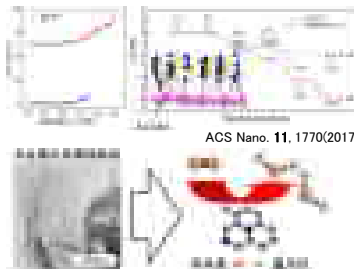
成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果(1): 非白金族新規電極触媒の開発に向けた新しい作用原理の発見

- 窒化炭素との接合による金触媒の活性化
- 微量な窒素導入による炭素材料の酸素還元電極触媒化

本成果により、燃料電池普及の重要な課題となっている非白金族電極触媒に対する基礎・応用研究がより活発になることが期待される。



図(左上)水の生成率。金(青線)では水がほとんど合成できないが、ヘテロ接合型(赤線)では合成可能となる。図(右上)金表面(黒)とヘテロ接合型触媒(赤)の反応経路。

成果(2): CO₂分離・回収におけるアミン溶液の反応機構解明

- 吸収塔・再生塔でのアミン溶液の反応機構をシミュレーションで解明

超並列量子分子動力学シミュレーションにより、アミン溶液へのCO₂吸収反応の微視的機構を見出した。また、再生塔で起こる逆反応は図の逆過程とは異なる機構で進行することを突き止めた。本成果により、吸収塔と再生塔の両方に最適なアミン溶液の設計可能性が示唆された。A社との共同研究では、シミュレーションによる知見に基づいて開発したアミン溶液を試験プラントにおいて性能試験を実施している。

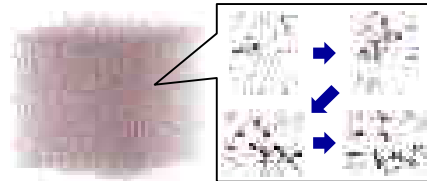


図 吸収塔でのCO₂吸収反応シミュレーションから得られた反応機構 Chem. Phys. Lett. 647, 127 (2016) Bull. Chem. Soc. Jpn. 90, 1230 (2017)

重点課題6

革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

エネルギーシステムの中核をなす複雑な物理現象を第一原理解析により、詳細に予測・解明し、超高効率・低環境負荷な革新的クリーンエネルギーシステムの実用化を大幅に加速する。

本課題の主な成果

1. 石炭ガス化炉、燃料電池、洋上ウインドファーム、磁気閉じ込め核融合炉のクリーンエネルギーシステムの実機のデジタルツインの実現。
すなわち、4種のシステムの極めて複雑な形状、大規模、連成、「京」、ポスト「京」での計算、を達成するマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションの世界初の実現。
(日本物理学会賞3件、プラズマ・核融合学会賞3件)
(Nature Communications1件、Physical Review Letters3件、ICCES2019 Plenary Lecture、WCCM-ECCOMAS2020 Plenary Lecture)
2. ターゲットアプリ(ADVENTURE)、プラズマコード(GT5D等)のコーディングの推進。ADVENTUREは「京」の35倍以上の性能向上。
3. 実用的成果への期待としては、各システムのスケールアップ時の定量的予測性が担保可能となる。その結果、途中のスケールの実証テストをスキップできる可能性がある。また、実用化までの開発期間短縮、信頼性向上、開発コスト・運用コスト低減、国際競争力向上がある。

重点課題6 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

サブ課題A: 高圧燃焼・ガス化を伴うエネルギー変換システム(サブ課題代表者: 東京大学・吉村 忍)

目標

ラボスケール(投入熱量0.76MWth)の石炭ガス化炉(電中研炉)やパイロットスケール(50MWth)の超臨界圧CO₂燃焼器を対象に、世界初の炉構造・反応(固気液三相燃焼流)・伝熱と冷却を連成させたマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションを実現し、V&Vを実証する。また、これらのソフトウェア群を用いた設計環境を構築する。さらに、ポスト「京」におけるターゲット問題であるベンチスケール(熱投入量16MWth)石炭ガス化炉(三菱重工実験炉)の解析準備を完了する。

成果内容と科学的・社会的意義

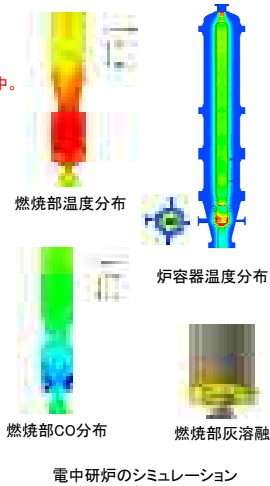
緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果(1)ラボスケール石炭ガス化炉(電中研炉)を対象に、世界初の炉構造・反応・冷却マルチスケール・マルチフィジクスシミュレーションを実現した。解析結果と試験結果との比較によるV&Vを遂行中。
成果(2)パイロットスケール超臨界CO₂燃焼器を対象に、燃焼解析と計測値との比較によるV&Vを遂行中。
成果(3)ベンチスケール石炭ガス化炉(三菱実験炉)の解析に関してメーカーとNDAを締結しモデル構築を遂行中。

(1)の成果は、灰溶融モデルを組み込んだ固気液三相燃焼流(LES)解析コードFFR-Comb(FVM)、冷却管による移流拡散冷却解析機能(DG)を組み込んだ熱伝導解析コードADVENTURE_Thermal(FEM)、繰返し弾塑性とクリープ解析、熱ひずみ解析機能を組み込んだ構造解析コードADVENTURE_Solid(FEM)を、並列連成カプラーREVOCAP_Couplerを用いて「京」上で大規模並列連成解析を実現することによりはじめて達成される成果であり、計算科学的に特筆すべき成果である。また、ベンチスケール石炭ガス化炉とパイロットスケール超臨界CO₂燃焼器の全系シミュレーションの実現は、炉型スケールアップ時の非線形効果の定量的予測性能を高めるとともに、炭種の違いや燃焼方式の違い(空気吹き、酸素吹き、O₂/CO₂吹き等)に対する適切な炉パラメータ探索の試行錯誤プロセスを大幅に削減し、実用化を大幅に加速できる。大規模燃焼解析については米国ExaCT等のコード開発があるが、燃焼シミュレーションのみに特化しており、灰溶融や冷却挙動、構造健全性評価まで考慮したマルチフィジクス・マルチスケール統合シミュレーションは本研究が世界初である。

(2)の成果は、超高压(30MPa程度)条件に用いる実在気体モデル及び燃焼モデルの評価・検証を詳細に行った上で、実際のパイロットスケールの超臨界圧CO₂ガスタービン燃焼器を対象にしたLES解析を世界で初めて実施したものである。

(3)の成果は、ポスト「京」におけるターゲット問題であるベンチスケール石炭ガス化炉(三菱実験炉)について、メーカーとNDAを締結し、情報の提供を受け、モデル構築を行っているものである。H31年度末までに燃焼部のモデルを構築し、試解析を実施するとともに、冷却管を含む炉容器については、モデルを構築中であり、今後、構築したモデルを用いた熱伝導解析、構造解析の試計算を遂行予定である。



重点課題6 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

サブ課題B: 気液二相流及び電極の超大規模解析による燃料電池設計プロセスの高度化(東京大学・鹿園直毅)

目標

PEFCスタックの高出力密度化・低コスト化(4kW/L以上、Pt使用量0.1g/kW以下)に貢献するセル・電極設計シミュレーション技術を開発する。
SOFC電極の高耐久性実現(15年以上に相当するSOFC耐久性評価)に貢献できる電極3次元シミュレーション技術を開発する。

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) オープンソースCFDコードへの高速行列ソルバ導入、10セル積層ショートスタック計算を達成
- 成果(2) 実触媒層構造及び実作製プロセスを対象にした反応輸送連成解析技術の開発
- 成果(3) フラグメント分子軌道計算と粗視化シミュレーションの連携技術、金属触媒とアイオノマー間の相互作用算出手法を開発
- 成果(4) SOFC電極の最適設計に貢献できるツール群を開発

世界に先駆けて燃料電池のナノ~メゾ~マクロ連携マルチスケールシミュレーションを実現

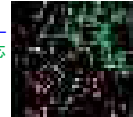
(1)の成果は、燃料電池ショートスタックのマクロシミュレーション(気液二相流計算)を実現(10セル積層、約14億メッシュ)し、カーボン繊維構造のGDL基材と流路界面の液水挙動も計算可能となり、二相流解析コードの適用範囲を拡大したものである。広範な作動条件における詳細二相流解析によって流路内の二相圧力増倍・気液速度比と全体性能シミュレーションの二相流モデルパラメータを連結し、JARI評価セルの限界性能を定量的に再現した。この成果により、排水性を向上させるための実機セルの流路設計、GDLと流路構造の組合せなど燃料電池の構造条件や流量などの作動条件の検討に活用できるようになる。

(2)の成果は、作製プロセスを考慮した、電極構造と発電特性の相関評価技術を確立したものである。DLVO理論を基にしたメゾシミュレーションにより凝集形状を再現、FIB-SEMIによる画像取得、炭素凝集体計算、レベルセット法を基に、実触媒層の3D構造構築を達成し、反応計算を実施。これにより、経験的だったプロセス操作と電池特性の紐づけ技術支援、マクロシミュレーションへの橋渡し技術を確立。

(3)の成果は、FMOミクロ計算から有効パラメータを非経験的に算定してDPDメゾシミュレーションを行うFMO-DPD法を確立(汎用性と信頼性を確保)したものである。FMO-DPDによりMEA/水クラスターのメゾスケール構造を評価、実験結果と定量的に対応。メゾスケール構造からナノスケール構造への逆射影プロトコルも整備、復元構造でのFMO計算による相互作用解析も実施(右図)。新規の高速DPDコードも開発。これらの成果により、実験計測が困難とされるMEA内のナノ界面構造モデリングと輸送特性との相関を把握できるようになる。

さらに、金属触媒とアイオノマー間の相互作用パラメータを非経験的に算出するミクロ計算手法も開発。粗視化MD解析(メゾスケール)によりPV/Nafion二相界面の構造モデリングを実施。触媒表面における水ネットワーク構造を解析。この成果により、実験計測が困難なMEA触媒近傍でのアイオノマー被覆状態、輸送特性の解析技術、メゾ解析への材料情報の橋渡し、が可能となる。

(4)の成果は、SOFC電極の長時間耐久性の評価に向けた過電圧特性、Ni相焼結挙動の予測、及び最適な電極構造の提案を目的としたツール群を開発したものである。この成果により、実験計測が困難な長時間挙動が予測可能となるだけでなく、最新の製造技術(ナノインプリント等)と組み合わせることで革新的電極構造の設計が可能となり、電極性能の飛躍的向上が期待できる。



重点課題6 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

サブ課題C: 高効率風力発電システム構築のための大規模数値解析(豊橋技術科学大学・飯田明由)

目標

洋上ウインドファームの発電性能予測、構造信頼性評価に注力したマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーション技術を開発する。具体的には、①大型風車の相互干渉解析手法の確立、②流体構造連成振動解析による風車ブレードの振動応答、応力解、累積疲労損傷解析技術の開発、③洋上ウインドファーム全体のシミュレーションの大規模化と多風向同時解析技術の開発、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)大型発電用風車の単体発電性能と後流(Wake)影響を定量評価可能なLES流体シミュレーションコードを開発した。
- 成果(2)洋上ウインドファームの発電性能評価に必要なマルチスケール流体シミュレーションシステムを開発した。
- 成果(3)洋上ウインドファームの風車ブレードの累積疲労損傷評価のための、マルチスケール・マルチフィジクスシミュレーションシステムを開発した。

(1)の成果は、ローター直径130mを超える発電用大型風車(NREL5MW)単体の発電性能と後流(Wake)影響評価を、LESベースの詳細CFD解析(FFB)により高精度に評価できるようになったものである。このコードを用いることにより、ウインドファームにおいて、風車後流が後方配置の風車の発電性能や累積疲労損傷に与える影響を詳細に評価する基盤が確立したことになる。

(2)の成果は、RC HPC版がほぼ完成し、洋上ウインドファーム全体シミュレーションと多風向同時解析が可能となったことにより、ファーム全体の発電性能評価が可能となるものである。さらに、現在、タンデム配置の2つの大型風車の解析をRC HPC版とFFBを用いて行い、両者の結果を詳細に比較検討することにより、RC HPC版に組み込む工学Wakeモデルの高度化を図ることが可能となり、ひいては洋上ウインドファーム全体の発電性能評価の精度向上に大いに役立つ。

(3)の成果は、並列LES解析コードFFB(FEM(重点課題⑧のターゲットアプリ)と並列構造解析コードADVENTURE_Solid(FEM)(重点課題⑥のターゲットアプリ)を並列連成コプラナーREVOCAP_Couplerを介して連携した流体構造連成振動解析システム(オフライン片方向連成)を構築したものである。さらに、積層複合材料(積層ソリッド要素)から構成される大型風車ブレードの変形・応力解析を行うのみならず、ブレード内部に累積する累積疲労損傷分布を定量的に解析評価できるようになった。この成果により、大気境界層流れ場に含まれる乱流成分や、Wake(後流)がブレードの累積疲労損傷に与える影響を高精度に評価することが可能となる。大型発電用風車ブレードを対象とした、このような高精度の累積疲労損傷評価システムは、世界的に存在せず、計算科学的にも、材料強度的にも大きな価値があり、さらに実用的価値も大変大きい。



重点課題6 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化
サブ課題D: 核融合炉の炉心設計(日本原子力研究開発機構・井戸村泰宏)

目標 国内大型実験プロジェクトと連携した実証研究によりITERの核燃焼プラズマ解析に必要な計算モデルを確立するとともに、Oakforest-PACS全系規模の強スケーリングを実現する。これにより、世界最先端の計算精度と計算性能をもつ国産核燃焼プラズマ解析コードを完成させる。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

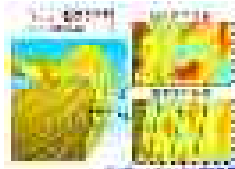
成果(1)LHD装置の重水素実験開始に先駆けて水素に対する重水素の閉じ込め性能改善を予測し実験を先導。
 成果(2)JT-60U装置における高エネルギー粒子駆動MHD現象を解析し、長時間スケールのバースト現象を再現。
 成果(3)メニーコア最適化技術、省通信型行列ソルバを開発し、Oakforest-PACS全系の強スケーリングを達成。
 成果(4)主要コードをオープンソース化、計算基盤技術の他課題への適用により成果の利活用を促進。

(1)の成果により、多種イオン系乱流輸送に関して、LHD装置の重水素実験で観測された閉込め性能改善をGKVで実験に先駆けて予測し、コードの妥当性を示すとともに、水素と重水素の乱流輸送の違い(水素同位体効果)の解明に世界で初めて成功[Nakata,PRL2017]。本成果により重水素、三重水素等からなるITERの核燃焼プラズマの閉じ込め性能評価に必要な計算モデル検証が大きく前進。引続き、不純物イオンの輸送に関する実証研究を継続中。

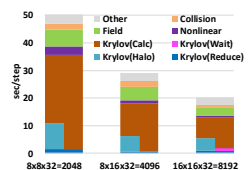
(2)の成果により、長時間スケールMHD現象に関して、MEGAで独自開発したマルチ時間スケール計算手法[Todo,NJP2016]により、高エネルギー粒子駆動MHD現象のバースト現象の再現に世界で初めて成功[Bierwage,Nat.Comm.2018]。コードの妥当性を定量的に示し、目標を達成。本成果によりITERの α 粒子閉じ込め性能評価に必要な計算モデルを確立。

(3)の成果により、GT5Dにおいてメニーコア最適化技術[Asahi,IEEE-TPDS2017]、省通信型行列ソルバ[Idomura, ScaI17@SC17]等の計算技術を開発し、コデザイン技術課題を解決。「京」の10倍以上のノード性能でOakforest-PACS全系(8192ノード)までの強スケーリングを示し、目標を達成。本成果によりポスト「京」のエクサスケール計算基盤技術を確立。

(4)の成果により、開発コードを国内外の実験解析(国内2装置、国外4装置)に活用して国際競争力を向上するとともに、局所的乱流解析コードGKVをオープンソース化し、若手・実験研究者向けの講習会を実施。また、計算基盤技術を他分野(燃料電池電極解析、原子炉熱流動解析等)に適用し、開発技術の汎用性を実証。引続き、開発技術の公開に向けたオープンソース整備を継続中。



GKVIによるLHD装置の水素同位体効果の解析[Nakata,PRL2017]



OakforestPACS全系の強スケーリング (GT5D:768x768x64x128x32=1500億) [Idomura,ScaI17@SC17]

重点課題6 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化
全体推進(サブ課題代表者: 東京大学・吉村 忍)

目標 プロジェクト管理、大型計算機資源の確保・サブ課題間調整、に加えて、アプリケーション研究開発における共通の課題を、各サブ課題や他重点課題と協力して推進する。具体的には、①コデザイン、②マルチフィジクス連成とV&V、③マルチスケール連携とV&V、④大規模行列計算とデータ可視化に関する連携、⑤アプリケーション普及活動とV&V、⑥人材育成、を推進する。

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)ADVENTURE(ターゲットアプリ)、プラズマ解析コード等)を中心に、コデザインを推進
 成果(2)マルチフィジクスSIM基盤の構築と活用(FFB/FFR-Comb⇔REVOCAP_Coupler⇔ADVENTURE.Solid, Thermal)連成の実現(サブ課題A、Cと協力)
 成果(3)マルチスケールSIM連携基盤の構築と活用、普及促進(サブ課題Bと協力、重点⑥⑧連携、重点⑥①連携、重点⑥⑤連携)
 成果(4)各アプリケーション(ADVENTURE、FFR-Comb、ABINIT-MP、PHASE/0、REVOCAP_Coupler、プラズマコード等)の普及活動とV&V推進
 成果(5)大規模行列計算、データ可視化に関するサブ課題間連携の推進(サブ課題D、B連携)
 成果(6)人材育成の推進(ポスドク雇用、院生教育、講習会実施)

(1)の成果は、コデザインチューニング成果をADVENTUREへ実装中。適切な時期に実機計測を行う。

(2)の成果は、Socket版Couplerを石炭ガス化炉、洋上大型風車解析へ適用したものである。(サブ課題A、Cで報告)また、新たに開発したMPI版Couplerを石炭ガス化炉でテスト中である。

(3)の成果は、FMO計算(ナノスケール)から得られた有効パラメータ χ を用いるDPD計算(メソスケール)をFMO-DPD法として整備し、燃料電池電解質膜だけでなくタイヤゴム素材、脂質膜、タンパク質へも応用展開した。さらに、FMO-DPD用の有効パラメータ算定システムをFCEWSとして公開した。また、ジョブの自動投入/回収システムWHEELとFCEWSとの連携(重点課題⑥⑧連携)、凝集性タンパク質のFMO-DPD計算(重点課題⑥①連携)を行った。

(4)の成果は、各アプリ毎にコンソーシアムやユーザーグループ形成、最新アプリ・最新機能公開、講習会開催、企業等とNDA締結、実機V&V推進、等を遂行している。また、ABINIT-MP(FMO)の機能向上と改良を進めると共に、HPCI拠点に公開ライブラリプログラムとして提供し、FMO-DDコンソーシアム(2016年、2017年の「京」利用課題の優秀成果賞)などで利用された。

(5)の成果は、サブ課題Dで開発した大規模行列計算アルゴリズムを、サブBの電極アプリへの適用準備を進めている。
 ● 今後、マルチスケールSIM & マルチフィジクスSIMのモデル構築、連携法、計算、V&Vに関するノウハウ・共有事項を全サブ課題と協力し、最終年度にとりまとめる予定。
 ● 各アプリケーションの普及活動の定常化に向けた準備を進める予定。



マルチフィジクス連成基盤 (REVOCAP_Coupler)



脂質13%・ベシクル 脂質20%・膜

FMO-DPD法によって計算されたベシクルと膜の構造

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。

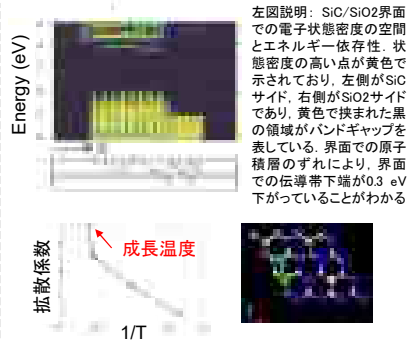
成果内容と科学的・社会的意義

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、従来扱うことが難しかった**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/SiO₂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。



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。

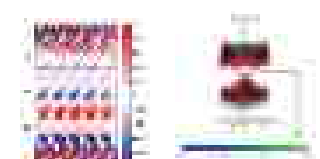


KNLクラスタOakforest-PACSでの全システム評価
 Y. Hirokawa et al, ISC High Performance 2018, pp.205.

(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。



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

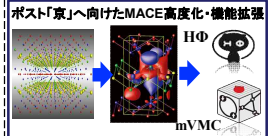
- 成果(1)第一原理的に強相関電子系の定量予測と物質設計を可能にする「HΦ」、「mVMC」、「RESPACK」の開発、高度化、公開を進めた。
- 成果(2) 高温超伝導体、トポロジカル物質の第一原理計算を、富岳を有効活用して推進する手法を開発し、「京」での計算で実験の定量再現に成功した。
- 成果(3) 強相関電子物質の長年の難問である高温超伝導と量子スピン液体現象の、実験結果に隠れた特徴を抽出し、新超伝導機構等を提唱した。
- 成果(4) 界面、非平衡での計算手法を開発し、富岳での計算に備えて「京」に適用し、超伝導やトポロジカル機能の増幅、最適化の基礎原理を発見した。

(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も進めた。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チ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。

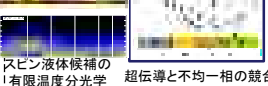
(4)の成果により、強相関電子系の界面や非平衡という物性科学のフロンティアを研究する道筋と手法が開拓された。本成果は強相関電子の非平衡状態で超伝導が増幅する機構の一つを見出し、界面で超伝導が最適化される一般的な機構の発見に寄与した。同時に実験と連携してフロンティア開拓を進め、実験の難しい問題での連携の道を開いた。



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



高温超伝導が動的に増幅されていくようす

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 (Nd₂Fe₁₄B) 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。保磁力は粒子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。RFe₁₂ 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。Nd₂Fe₁₄B を超える磁気特性を有する RFe₁₂ 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 (Nd₂Fe₁₄B/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開発し、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)