

「京」の最近の成果発表事例

平成28年2月26日 文部科学省
特定高速電子計算機施設（スーパーコンピュータ「京」）に係る評価委員会（第一回）資料より

戦略プログラム分野2の成果

2014年12月24日プレスリリース

鉄系高温超伝導が生じるしくみを「京」を用いて解明

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

【概要】

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

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



超伝導物質が切り拓く新たな未来

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

HPCI戦略プログラム分野2 東京大学 三澤貴宏, 今田正俊
論文発表: T Misawa and M Imada. (2014) *Nature Commun.*,
doi:10.1038/ncomm6738.

【東京大学】

(プレスリリース: http://www.t.u-tokyo.ac.jp/epage/release/2014/141224_1.html)

【図のクレジット】

・東京工業大学HP

http://www.titech.ac.jp/research/stories/hideo_hosono_1.html

・"JR-Maglev-MLX01-2" by Yosemite - 投稿者自身による作品. Licensed under CC 表示-継承 3.0 via ウィキメディア・コモンズ - <http://commons.wikimedia.org/wiki/File:JR-Maglev-MLX01-2.jpg#mediaviewer/File:JR-Maglev-MLX01-2.jpg>

・"Modern 3T MRI" by User:KasugaHuang - Photographed by User:KasugaHuang on Mar 27, 2006 at Tri-Service General Hospital, Taiwan.. Licensed under CC 表示-継承 3.0 via ウィキメディア・コモンズ - http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Modern_3T_MRI.JPG#mediaviewer/File:Modern_3T_MRI.JPG

「京」の最近の成果発表事例

平成28年2月26日 文部科学省
特定高速電子計算機施設（スーパーコンピュータ「京」）に係る評価委員会（第一回）資料より

一般利用課題の成果

2014年12月18日 ニュース掲載

「京」による大規模な気泡生成シミュレーションに成功
～シャンパンの気泡同士に働く力の解明により、さまざまな工業分野への応用に期待！～

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

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

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

「京」一般利用課題 渡辺 宙志 助教(東京大学物性研)、伊藤 伸泰 准教授(東京大学工学部)、稲岡 創 (理研AICS)、鈴木 将 (九州大学)

論文発表: Watanabe H, Suzuki M, Inaoka H, and Ito N. (2014) *J. Chem. Phys.*

141:234703 doi: 10.1063/1.4903811.



気泡生成のシミュレーション

(東京大学物性研究所 渡辺宙志、

理化学研究所計算科学研究機構 稲岡創)

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

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

【関連記事】

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

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

「京」の最近の成果発表事例

平成28年2月26日 文部科学省
特定高速電子計算機施設（スーパーコンピュータ「京」）に係る評価委員会（第一回）資料より

戦略プログラム分野2の成果

2014年12月8日プレスリリース

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

【概要】

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

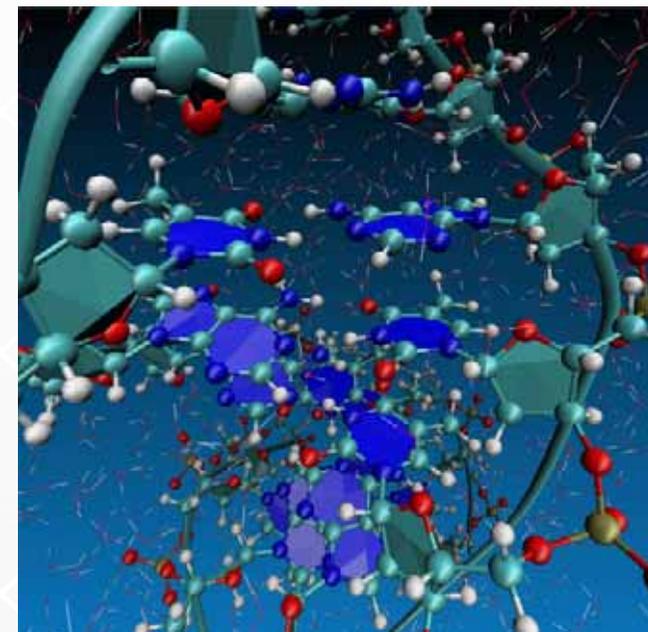
物質・材料研究機構と英国ロンドン大学の研究チームは「京」と東京大学のスパコンFX10※を用いて、原子数が3万個以上においても第一原理計算を可能とする新しい計算手法を開発、高精度のシミュレーションに成功しました。今後は数万～数百万原子から構成される生体分子やナノサイズの構造を持つ物質の原子・電子の振る舞いなどを明らかにすることを目指します。本研究は創薬や次世代デバイスの開発に役立つことが期待されます。

※FX10…「京」をベースにして開発された商用版のスーパーコンピュータ。

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

【独立行政法人 物質・材料研究機構】

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



水中のDNAのシミュレーション

(理研QBiC大塚氏との共同研究、
物質・材料研究機構プレスリリースより)

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

「京」の最近の成果発表事例

平成28年2月26日 文部科学省
特定高速電子計算機施設（スーパーコンピュータ「京」）に係る評価委員会（第一回）資料より

2014年9月1日プレスリリース

戦略プログラム分野5の成果

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

【概要】

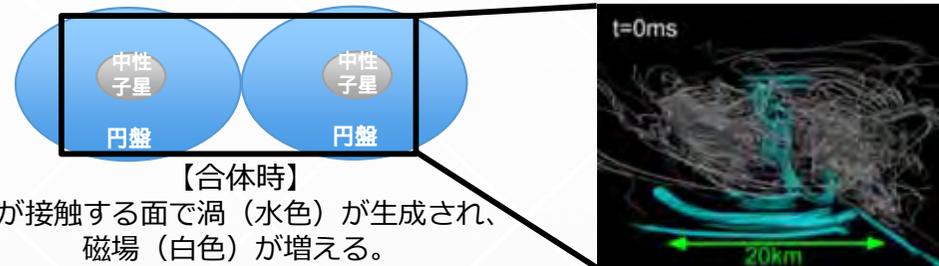
「京」を用いて、2つの中性子星※¹が合体する時の磁気の流れのシミュレーションを世界最高の細かさ(従来の約3倍)で行いました。中性子星は、太陽に比べてとても大きな(約8~30倍の)密度、重力、磁場を持っています。研究チームは、中性子星の合体時に磁場が増える仕組みを明らかにし、合体後の進化の過程を新たに描き出しました。

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

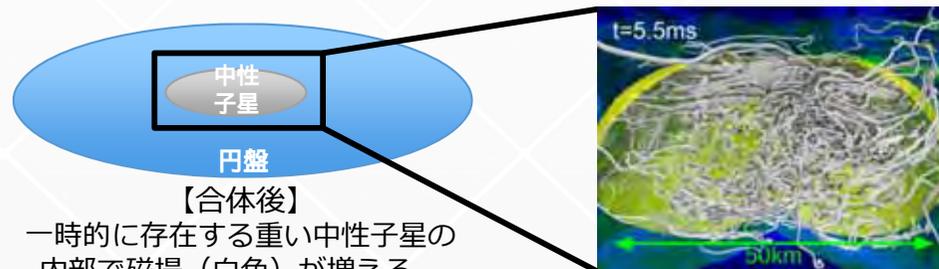
今後は、合体後に形成されるブラックホールが、ガンマ線バースト※²という宇宙最大の爆発現象を引き起こす可能性を追求して行きます。

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

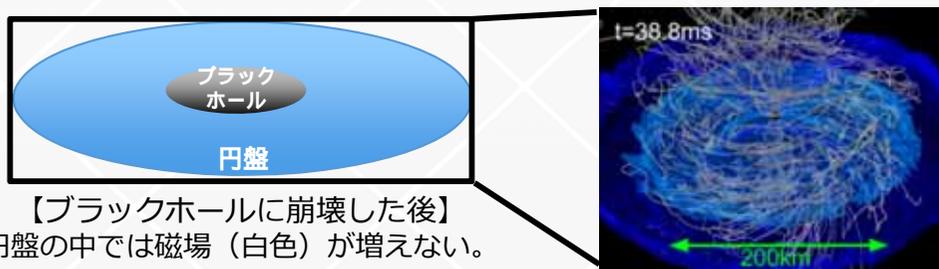
※²ガンマ線バースト…20秒程度の短い時間、エネルギーが数百キロ電子ボルトの電磁波（ガンマ線）が宇宙から降り注いでくる現象。



【合体時】
星が接触する面で渦（水色）が生成され、磁場（白色）が増える。



【合体後】
一時的に存在する重い中性子星の内部で磁場（白色）が増える。



【ブラックホールに崩壊した後】
円盤の中では磁場（白色）が増えない。

2つの中性子星の合体とブラックホールへの進化

(左) 理研AICS広報国際室 作成 (右) 出展: 京都大学プレスリリース

HPCI戦略プログラム分野5 木内建太(京都大学), 柴田大(京都大学), 関口雄一郎(京都大学), 久徳浩太郎(ウィスコンシン大学ミルウォーキー校), 和田智秀(筑波技術大学/国立天文台)

論文発表: K. Kiuchi, K. Kyutoku, Y. Sekiguchi, M. Shibata, T. Wada. (2014) *PHYSICAL REVIEW D*. 90. 041502. doi:10.1103/PhysRevD.90.041502.

「京」の最近の成果発表事例

平成28年2月26日 文部科学省
特定高速電子計算機施設（スーパーコンピュータ「京」）に係る評価委員会（第一回）資料より

戦略プログラム分野3の成果

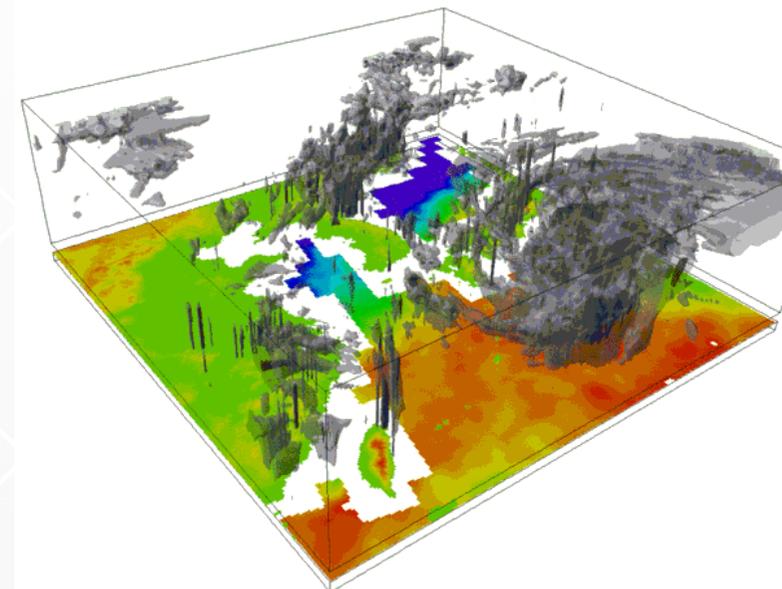
2014年8月29日発表

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

【概要】

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

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



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

HPCI戦略プログラム分野3 伊藤耕介(琉球大学/気象研究所), 齊藤 和雄(気象研究所/海洋研究開発機構)

論文発表: Ito K, Kuroda T, and Saito K, Wada A. (2014) *Wea. Forecasting*. doi:10.1175/WAF-D-14-00034.1.

【気象研究所/海洋研究開発機構】

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

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

「京」の最近の成果発表事例

平成28年2月26日 文部科学省
特定高速電子計算機施設（スーパーコンピュータ「京」）に係る評価委員会（第一回）資料より

戦略プログラム分野3の成果

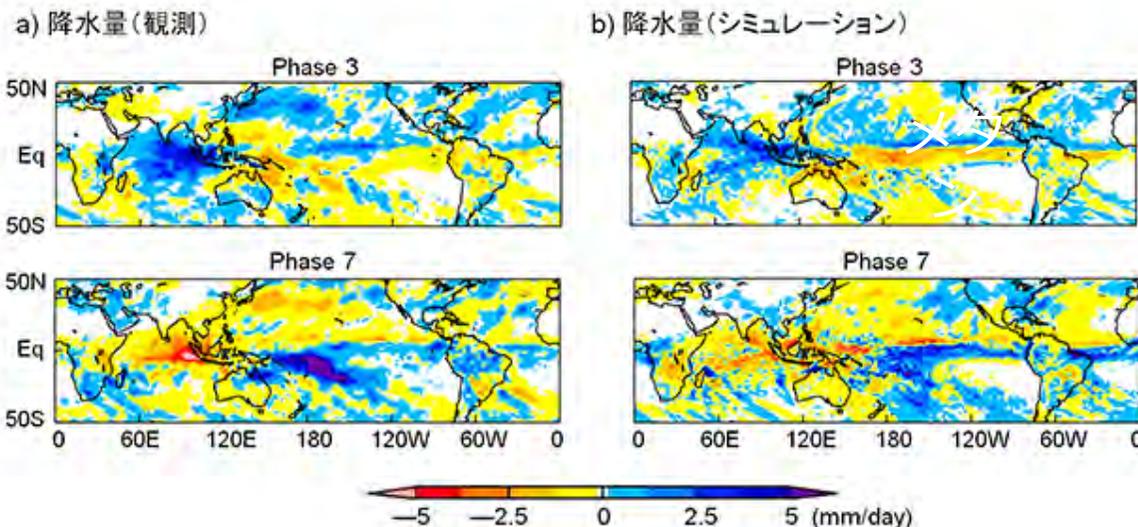
2014年5月7日プレスリリース

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

【概要】

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

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



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

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

HPCI戦略プログラム分野3 海洋研究開発機構、東京大学 大気海洋研究所、東京大学 理学系研究科、理化学研究所 計算科学研究機構

論文発表 : Miyakawa, T., Satoh, M., Miura, H., Tomita, H., Yashiro, H., Noda, A. T., Yamada, Y., Kodama, C., Kimoto, M., Yoneyama, K. (2014) "Madden-Julian oscillation prediction skill of a new-generation global model demonstrated using a supercomputer". *Nature Commun.*, 5, 3769. doi:10.1038/ncomms4769

【関連記事】

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

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

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

「京」の最近の成果発表事例

平成28年2月26日 文部科学省
特定高速電子計算機施設（スーパーコンピュータ「京」）に係る評価委員会（第一回）資料より

戦略プログラム分野5の成果

2014年4月18日ウェブリリース

「京」を用いた計算で超新星爆発のニュートリノ^{※1}加熱説^{※2}が有望に

【概要】

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

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



超新星爆発のイメージ図
(国立天文台プレスリリースより)

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

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



ニュートリノができる反応と
無くなる反応

HPCI戦略プログラム分野5 課題3 滝脇知也 特任助教(国立天文台), 固武 慶 准教授(福岡大学), 諏訪雄大 特定准教授(京都大学)

論文発表: Tomoya Takiwaki *et al.* (2014) *The Astrophysical Journal*. **786**. 83. doi:10.1088/0004-637X/786/2/83.

【関連記事】

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

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

(京都大学プレスリリース: http://www.kyoto-u.ac.jp/ja/research/research_results/2014/140422.2.html)

「京」の最近の成果発表事例

平成28年2月26日 文部科学省
特定高速電子計算機施設（スーパーコンピュータ「京」）に係る評価委員会（第一回）資料より

戦略プログラム分野5の成果

2014年4月11日プレスリリース

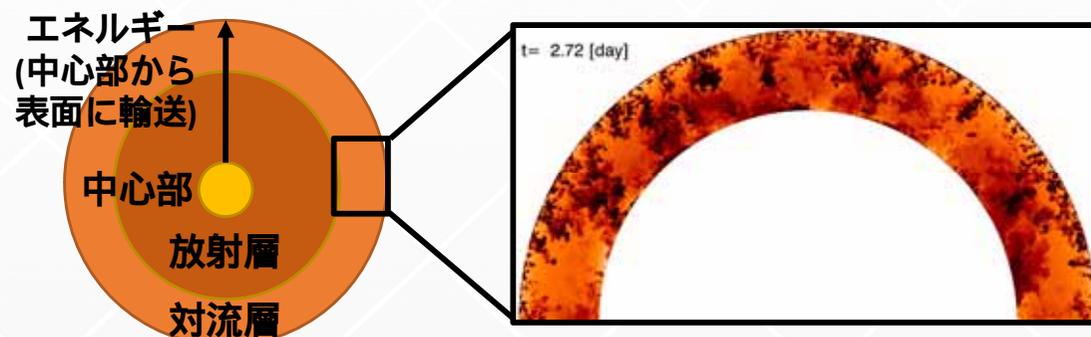
世界最高の解像度で太陽の対流層を計算

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

【概要】

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

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



太陽の構造と対流層のシミュレーション

(左) 理研AICS広報国際室 作成

(右) 出展: 東京大学大学院理学系研究科 堀田英之 博士

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

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

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

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

「京」の最近の成果発表事例

平成28年2月26日 文部科学省
特定高速電子計算機施設（スーパーコンピュータ「京」）に係る評価委員会（第一回）資料より

戦略プログラム分野2の成果

2014年3月24日プレスリリース

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

【概要】

東京大学と京都大学、物質・材料研究機構(NIMS)は、リチウムイオン電池の急速充電、高電圧作動を可能にする電解液を開発し、スーパーコンピュータ「京」を用いて作動メカニズムを解明しました。

この新規な電解液は、超高濃度のリチウムイオンを含む“濃い液体”であり、「高濃度＝反応が遅く電解液に適さない」という通説を覆すものです。また、既存の電解液にはない「高速反応」と「高い分解耐性」という新機能を有します。

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

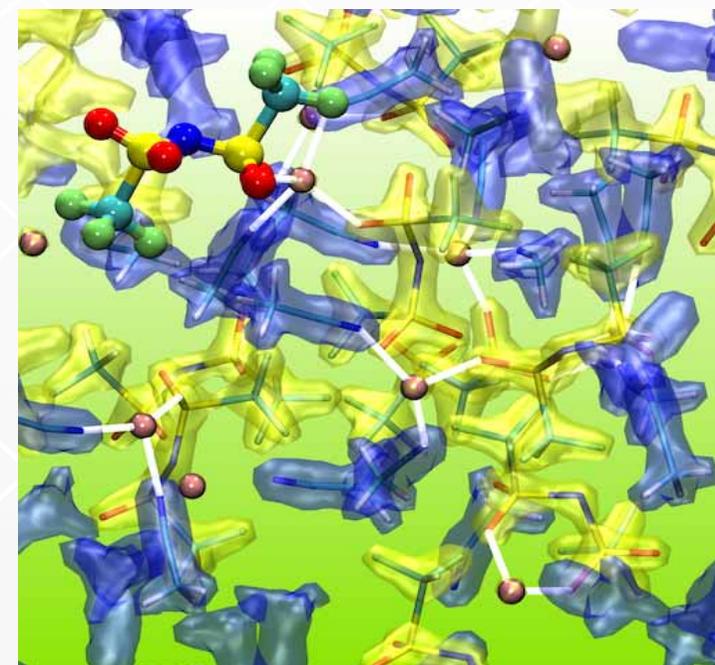
HPCI戦略プログラム分野2 NIMS 館山佳尚、京都大学 袖山慶太郎、東京大学 杉野修

論文発表：J. Am. Chem. Soc. 2014, 136, 5039-5046.

【プレスリリース】

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

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



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

「京」の最近の成果発表事例

平成28年2月26日 文部科学省
特定高速電子計算機施設（スーパーコンピュータ「京」）に係る評価委員会（第一回）資料より

2014年3月6日プレスリリース

戦略プログラム分野2の成果

「京」を用いてメタンハイドレートが分解する仕組みを解明

【概要】

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

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

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

HPCI戦略プログラム分野2 田中秀樹 教授 (岡山大学)

論文発表： T. Yagasaki, M. Matsumoto, Y. Andoh, S. Okazaki, and H. Tanaka, (2013) *J.*

Phys. Chem. B. 118. 1900. doi: 10.1021/jp412692d.

【関連記事】

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



メタンハイドレート分解の様子
(岡山大学プレスリリースより改変)

「京」の最近の成果発表事例

平成28年2月26日 文部科学省
特定高速電子計算機施設（スーパーコンピュータ「京」）に係る評価委員会（第一回）資料より

2013年9月20日プレスリリース

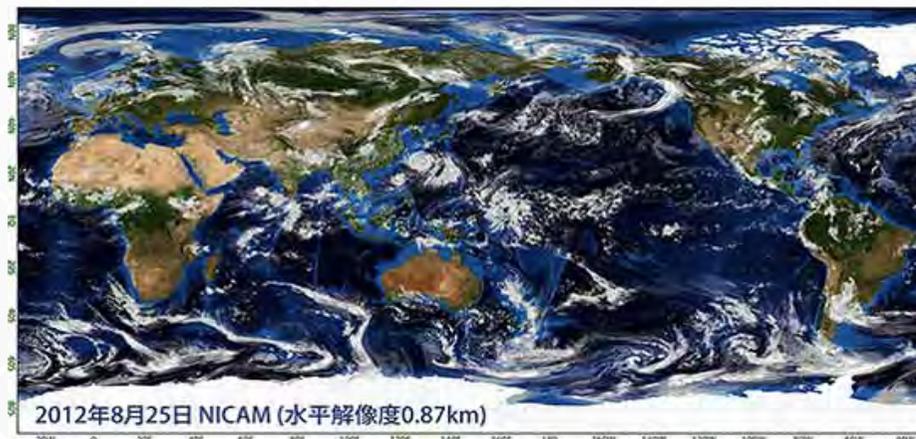
戦略プログラム分野3の成果

「京」を利用した世界初の超高解像度全球大気シミュレーションで積乱雲をリアルに表現
～台風や集中豪雨などの発生メカニズムの解明に寄与～

【概要】

理化学研究所計算科学研究機構、海洋研究開発機構、東京大学大気海洋研究所の共同研究チームは、スーパーコンピュータ「京」を使って水平格子間隔1km未満の超高解像度の全球大気シミュレーションを行うことに世界で初めて成功し、この結果から水平格子2km未満の解像度にするまでこれまででは詳細に表現することが難しかった積乱雲を非常に良く表現できることを明らかにしました。

本研究により、一つ一つの積乱雲から全球規模の積乱雲群との相互の関係をより正確に調べることが可能となり、甚大な被害をもたらす積乱雲群である台風や、集中豪雨などの発生メカニズムの解明、雲の気候への影響の研究などに寄与することが期待できます。



図：2012年8月25日12時(世界標準時)の全球の雲分布

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

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

【理化学研究所】

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

「京」の最近の成果発表事例

平成28年2月26日 文部科学省
特定高速電子計算機施設（スーパーコンピュータ「京」）に係る評価委員会（第一回）資料より

一般利用課題の成果

2013年9月5日プレスリリース

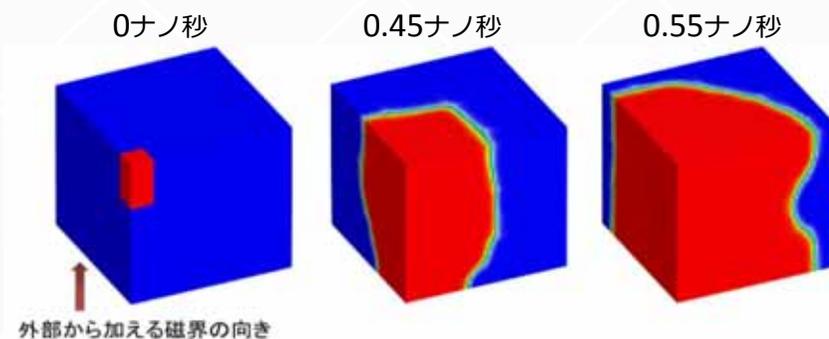
磁性材料の材料設計に活用できる新たなシミュレーション技術を開発
～ジスプロシウムなどの重レアアースを使用しない新規磁石材料の開発に期待～

【概要】

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

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

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



図：多結晶モデルの磁化反転シミュレーション

「京」一般利用課題 富士通, 富士通研究所, 物質・材料研究機構.

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

【富士通】

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

「京」の最近の成果発表事例

平成28年2月26日 文部科学省
特定高速電子計算機施設（スー
パーコンピュータ「京」）に係る評
価委員会（第一回）資料より

戦略プログラム分野3の成果

2013年8月30日プレスリリース

スーパーコンピュータ「京」による平成24年7月九州北部豪雨の予測について

【概要】

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

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

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

HPCI戦略プログラム分野3 気象研究所, 海洋研究開発機構.

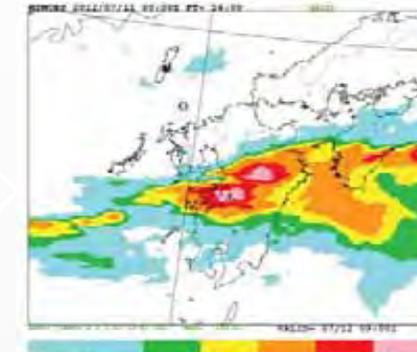
学会発表： 11月21日 日本気象学会2013年度秋季大会, 12月10日 American Geophysical Union (AGU) 2013 Fall Meeting(にて発表.

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

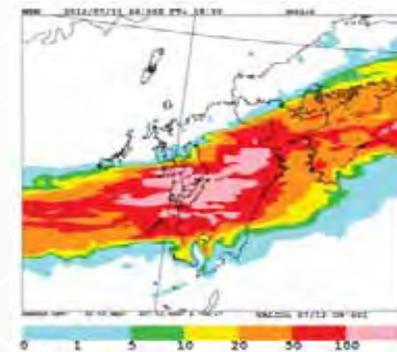
【気象研究所/海洋研究開発機構】

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

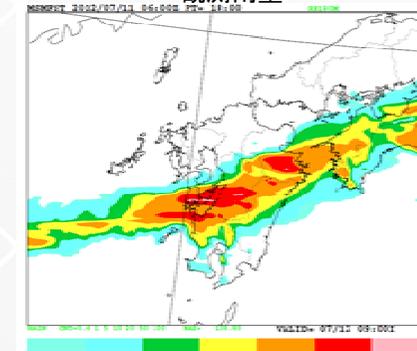
(TBS報道特集で9月7日(土)に全国放送)



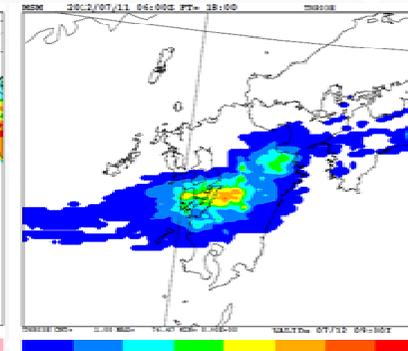
(図1)平成24年7月12日6-9時の観測雨量



(図2)前日15時を初期値とするスーパーコンピュータ京による予測



(図3)アンサンブル予報による最大降水量の分布図



(図4)アンサンブル予報による50mm以上の降水確率分布

「京」の最近の成果発表事例

戦略プログラム分野1の成果

2013年8月2日プレスリリース

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

【概要】

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

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

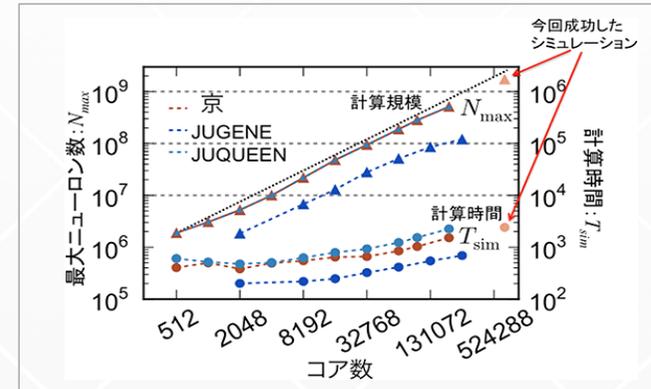


図: JUQUEEN によるNESTと「京」によるNESTのシミュレーション結果の比較

※ユーリッヒ研究所が保有するスパコン「JUGENE」(前システム)、「JUQUEEN」(現システム)と理研が保有するスパコン「京」それぞれによるNESTのシミュレーション結果の比較。青がJUGENE、水色がJUQUEEN、赤が「京」による計算を示す。「京」の方がコアあたりのメモリー量が多いため、大規模なシミュレーションが可能となった。

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

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

【理化学研究所】

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

【OIST（沖縄科学技術大学院大学）】

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

【ユーリッヒ研究所】

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

「京」の最近の成果発表事例

平成28年2月26日 文部科学省
特定高速電子計算機施設（スーパーコンピュータ「京」）に係る評価委員会（第一回）資料より

戦略プログラム分野2の成果

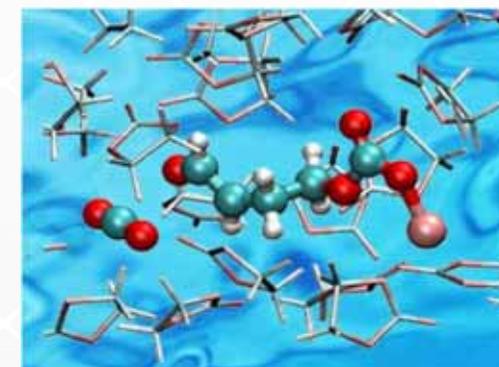
2013年8月1日プレスリリース

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

【概要】

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

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



図：EC溶媒中の重合反応の最終生成物
⇒添加剤導入時のSEI形成の素材となる

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

【物質・材料研究機構、科学技術振興機構】

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

【富士フイルム】

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

「京」の最近の成果発表事例

平成28年2月26日 文部科学省
特定高速電子計算機施設（スー
パーコンピュータ「京」）に係る評
価委員会（第一回）資料より

戦略プログラム分野3の成果

2013年5月16日発表

2012年5月6日のつくば竜巻のアンサンブル予報実験

【概要】

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

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

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

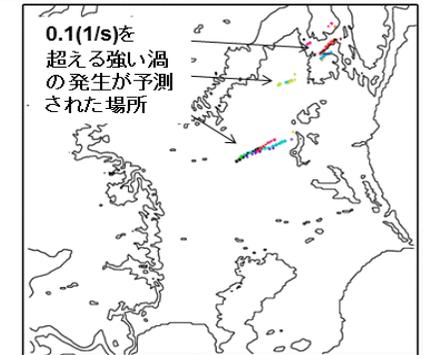


図1. 竜巻の被害範囲(左)と、シミュレーションで0.1(1/s)を超える強い渦度の発生が予測された場所(右)。

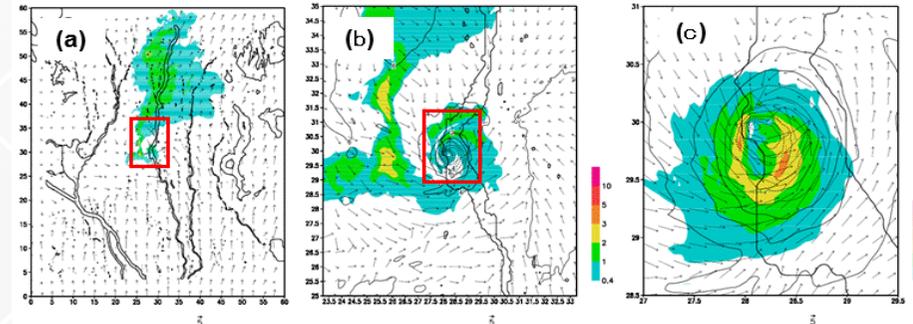


図2. (a)(b)「京」を用いて再現したあるメンバーの高度20mの雨水量(g/kg)と水平風分布、(c)風速(m/s)。数値モデルの水平解像度は50m。(b),(c)それぞれ(a)と(b)の赤枠内の拡大図。

HPCI戦略プログラム分野3 海洋研究開発機構。

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

【気象研究所/海洋研究開発機構】HPCI戦略プログラム(分野3)

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

(時事ドットコムで5月10日(金)に掲載)