

## [パネルディスカッション]

- 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  
奥野 恭史 (京都大学)
- 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学  
久田 俊明 ((株)UT-Heart 研究所)
- 地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築  
堀 高峰 (海洋研究開発機構)
- 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  
岡崎 進 (名古屋大学)
- 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化  
飯田 明由 (豊橋技術科学大学)
- 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  
常行 真司 (東京大学)
- 宇宙の基本法則と進化の解明  
青木 慎也 (京都大学)

H	P	C	フ	ォ		ラ	ム		選	出
SS 研 HPC フォーラム 2016 より										

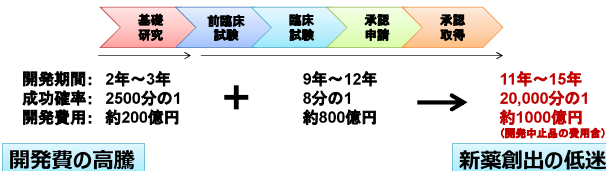
**生体分子システムの機能制御による  
革新的創薬基盤の構築**

奥野 恭史  
(京都大学)

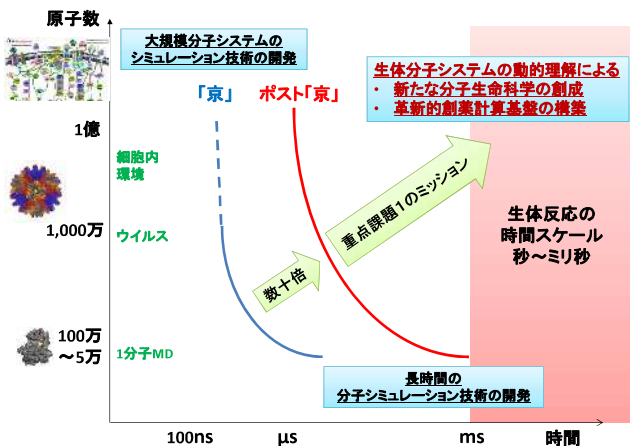
# 重点課題1 生体分子システムの機能制御による 革新的創薬基盤の構築

理化学研究所 生命システム研究センター  
京都大学 大学院医学研究科  
奥野恭史

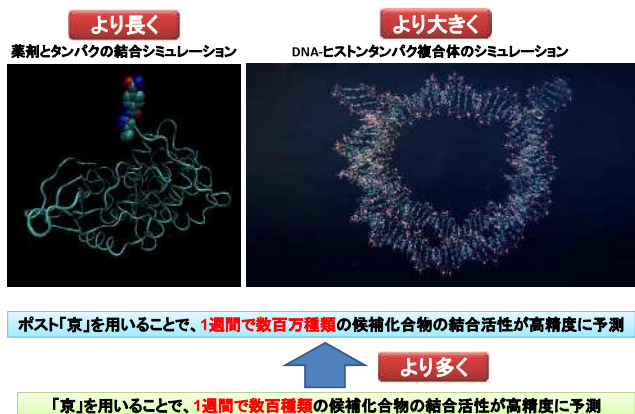
## 重点課題1で挑戦する医薬業界が抱える問題



## ポスト「京」で目指す「創薬イノベーション」と「新たな分子生命科学」



## ポスト「京」による世界最高峰の計算創薬



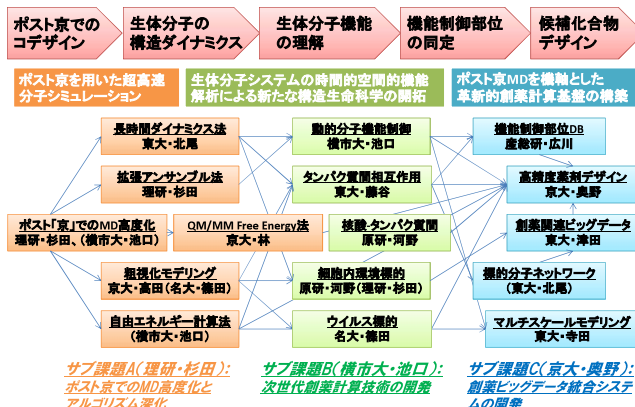
## ポスト「京」で目指す医薬業界の社会的・経済的効果

- 社会的な観点 - 医薬品開発の革新
  - ポスト「京」により、がん、認知症、精神疾患、希少疾患など今まで困難であった薬の開発に新たな道を拓く。さらに、薬の副作用を予測したり、個人個人の体質に最適な薬を選択することが可能になる。
- 経済的な観点 - 新薬開発による日本経済の牽引
  - 医薬品開発の期間短縮（約2年間短縮）と費用削減（一品目当たり約200億円削減）



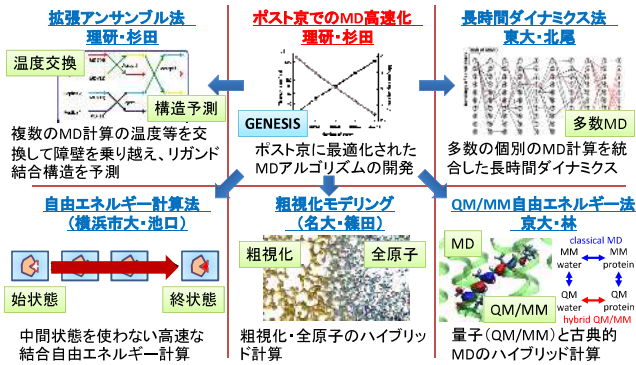
## ポスト「京」のパワーを創薬に直結する研究体制

創薬は総合力が勝負。総合力で世界に勝つ!



### サブ課題A:ポスト京でのMD高度化とアルゴリズム深化

コデザインによって分子動力学計算(MD計算)を超高速化するとともに、高精度かつ超高速の創薬計算基盤を実現する新しい方法論開発を行う。



### サブ課題B:次世代創薬計算技術の開発

生体分子システムの動的な機能発現や、巨大な生体分子システムの機能解析に資する新たな計算生命科学を開拓することで、次世代の創薬アプローチを切り拓く計算技術の開発を目指す。

**動的分子機能制御** 横浜大・池口

長時間ダイナミクス計算により、タンパク質の動的構造変化機構を解明し、その薬物制御方法を開発



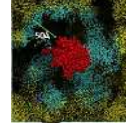
**タンパク質間相互作用** 京大・藤谷  
検証・タンパク質間相互作用 原研・河野

複数の生体分子間相互作用を制御する創薬設計法の開発  
タンパク質間相互作用(PPI)を制御する疾患治療薬の開発



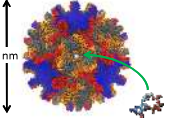
**細胞内環境模倣** 原研・河野(理研・杉田)

細胞環境中でのタンパク質動態の違いや複数のタンパク質の基質結合の競合などによる影響を解析



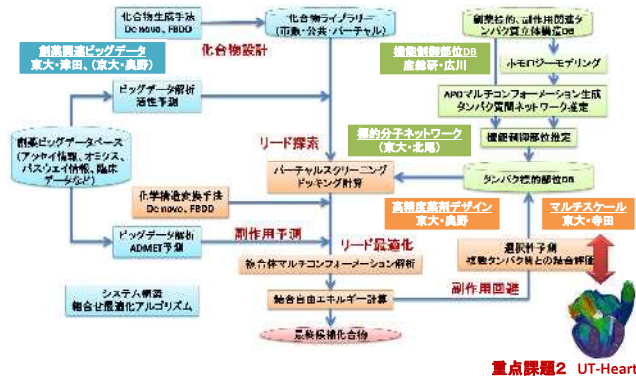
**ウイルス模倣** 名大・篠田

ウイルスによる感染症を対象とした創薬計算技術の開発  
B型肝炎ウイルスカプシドを例に薬剤吸収評価技術を開発

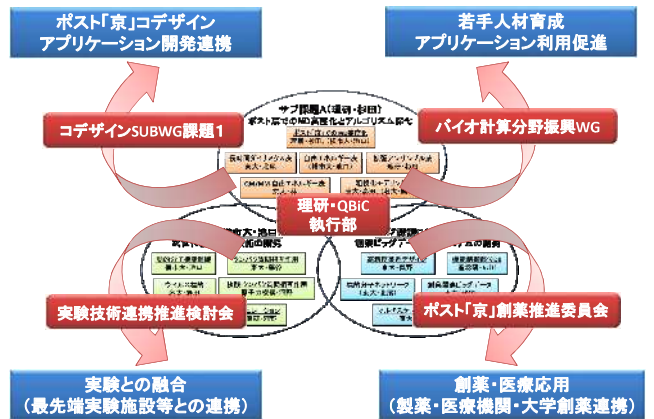


### サブ課題C:創薬ビッグデータ統合システムの開発

サブ課題AとBで開発されたMD計算ソフトおよび創薬計算手法を、創薬計算フローにそって連結した統合システムを開発し、製薬会社が現場利用できる創薬計算基盤を構築する。



### 外部機関、研究者との協力体制



### ポスト「京」への期待

#### 1 性能・機能的な観点

- ・アプリに対する実行性能が高いこと
- ・コンパイラの充実(うまくSIMD化してくれるように)
- ・チューニング支援
- ・単精度の計算も、倍精度に比べてかなり速いこと。(単精度の計算でも精度的に十分な箇所もある)
- ・(「京」では単精度と倍精度は同じような速度。インテルやGPUでは単精度は倍精度よりかなり速い)

#### 2 運用的な観点

- ・柔軟なジョブシステム。(投入可能ジョブ数制限の緩和など;生命系では沢山のジョブを必要とする傾向あり)
- ・ステー징など、ジョブの前後処理にかかる時間の低減
- ・システムの安定性、ファイルシステムの安定性

H	P	C	フ	ォ		ラ	ム		選	出
SS 研 HPC フォーラム 2016 より										

個別化・予防医療を支援する  
統合計算生命科学

久田 俊明  
((株)UT-Heart 研究所)

**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**

**3つのサブ課題**

**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**

**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**

**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**



A 東大医科研 宮野 悟



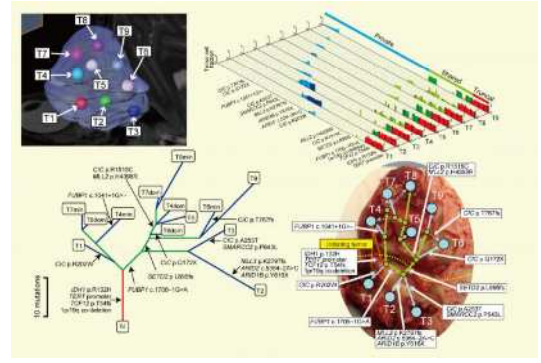
B 阪大基礎工 和田成生



C (株)UT-Heart研 久田俊明

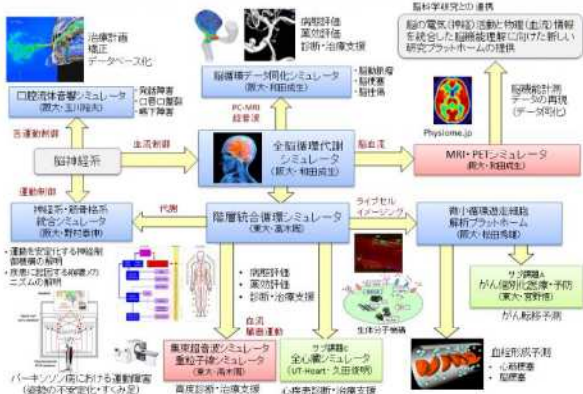
病気は、臓器群の変調という現象として現れるが、その背景には生命の設計図とも呼ばれるゲノムがあり、オミクスとよばれるエピゲノム、RNA、タンパク質など多彩な分子が細胞を制御・構成しています。また、細胞には環境や加齢により長い時間をかけて変化していく個々人で異なる細胞コンテキストがあり、そのもとで構成されている臓器の状態も多様です。さらに、その繋がりは人智を超えた複雑さを有しています。その理解には、画像や生理データなどを含む高精度臨床データとともに環境・生体時間的にゲノムから全身を捉える必要があります。現在、ゲノム解析技術の劇的な革新と高精度計測機器の急速な発展は、健康・医療ビッグデータを生みだそうとしており、この傾向は急激に加速しています。こうした背景のもと、本研究の目的は、ポスト「京」によって初めて実現できる「情報の技術」と「物理の原理」の融合により、がんをはじめとして全脳・循環・代謝系など、全身の疾患に対して、ビッグデータを活用し、高度の生体階層統合シミュレーションに個体データを同化させる技術、並びに、ライフサイエンスにおいてかつてない大規模なデータ解析技術を開発・応用することにより、また、大規模データに基づくアプローチと並行して、分子細胞レベルの研究と臓器個体レベルの研究を融合させ、ミクロとマクロのメカニクスとを関連させて定量的とらえたシミュレーションモデルを構築することにより、病態の理解と効果的な治療法の探索を行い、その成果を個別化・予防医療へ返す基盤となる統合計算生命科学を確立することを目的とします。

**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**  
東大医科研 宮野 悟



ライフサイエンスにおいてかつてない規模の大規模データを解析する

**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**  
阪大基礎工 和田成生



高度の生体階層統合シミュレーションに個体データを同化させる技術を開発する

**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**  
(株)UT-Heart研 久田俊明

サルコメア内の分子モデルをアミ/酸レベルの分解能で作成。分子レベルの異変と心臓のマクロなポンプ機能をマルチスケールシミュレーション技術で結び付けることにより、心不全で働かされていない分子の構造変化と病態の関係を解明し新たな治療法に繋げる。

UT-Heart

不整脈に関与する主要なイオンチャネルは46種。分子シミュレーションに基づき開閉の遷移確率を定めた細胞モデルを実装したUT-Heartと薬剤ごとの結合・解離の分子シミュレーションを組み合わせることでより精緻化合物の心臓への副作用を予測する。

京都大学・高田彰二  
サルコメア分子モデル

東工大・寺田 蓮  
イオンチャネル分子モデル

分子細胞レベルの研究と臓器個体レベルの研究を融合させたマルチスケールシミュレーションの研究開発を行う

H	P	C	フ	ォ		ラ	ム		選	出
SS 研 HPC フォーラム 2016 より										

**地震・津波による複合災害の  
統合的予測システムの構築**

堀 高峰  
(海洋研究開発機構)

# 防災・環境問題 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

重点課題③代表 堀宗朗(東京大学)  
サブ課題A 堀 高峰(海洋研究開発機構)\*  
サブ課題B 井料 隆雅(神戸大学)



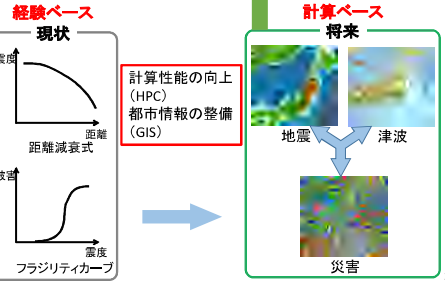
地震・津波の複合災害の大規模シミュレーション \*発表

## 地震・津波の予測



将来:  
地震・津波の物理過程のシミュレーションと構造物一棟一棟の応答シミュレーションから、災害・被害を予測する。  
予測精度が向上されることが期待される。  
計算科学の進歩を最大限利用した計算ベースの予測は高い科学的合理性を持つ。  
→都市のさまざまな変化に追従可能

現状:  
都市を数百m四方の領域に分け、過去のデータの統計解析を基に、各領域での地震動と被害を計算する。  
計算は経験ベースであり、精度は高くはない(100倍程度、過大評価した例あり)、他に代替がなく、経験ベースの予測に頼らざるを得なかった。



## 南海トラフ地震の連動性

理学(地球科学)の視点

- 東海・東南海・南海地震というプレート境界地震の日～年の時間差発生？
- 大規模プレート境界地震がM7クラスの大規模内陸直下地震を誘発？

1st 東南海



2nd 南海



・「滑り」の観測データに基づく、「滑り残り」が起こりうる地震動と津波の算定  
・海陸観測データの逐次同化による「滑り」の推移予測

工学(地震工学)の視点

- 都市(建物・社会基盤施設)が二度の地震動に耐えられるか？

1st 東南海



2nd 南海



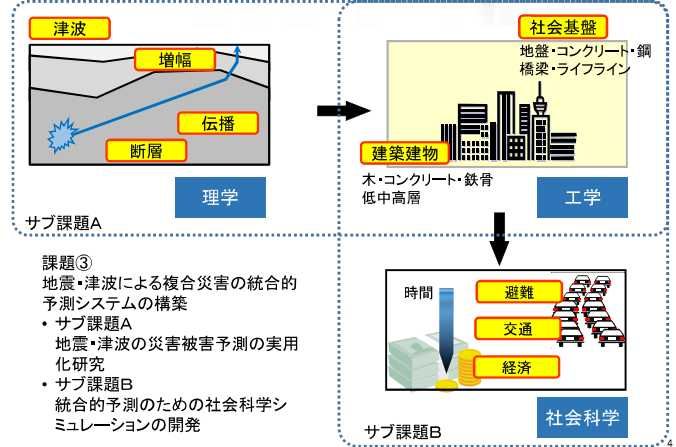
・残余耐力の評価に基づく、次の地震に対する耐震性の算定  
・長周期卓越のプレート境界地震  
・短周期卓越の内陸直下地震

社会科学の視点

- 交通ネットワークや地域経済が二度の地震動に耐えられるか？

データと計算を使う、「次の地震・津波」の統合的予測

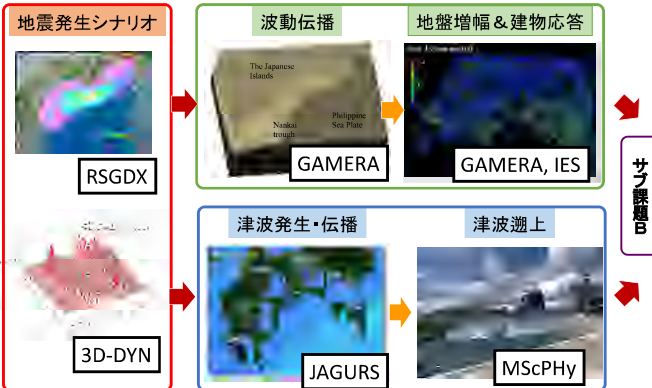
## 統合的予測システム



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  
・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

## 地震・津波の災害被害予測

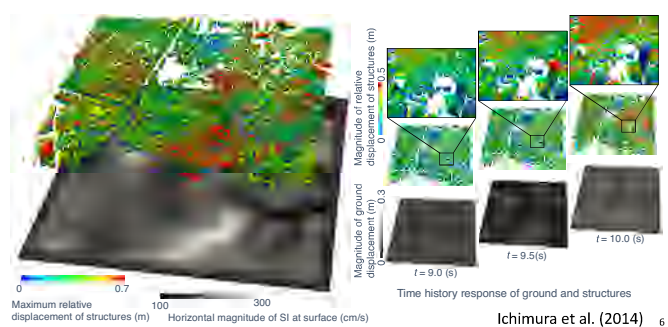
不確実さを考慮した多数のシナリオにもとづく強震動・津波による被害予測のための数値解析コンポーネントの高度化・増強



## 非線形有限要素と都市シミュレーション

SC14・SC15のゴードンベル・ファイナリストの、全京までスケールアップする、動的非線形有限要素法GAMERAは、ポスト「京」の統合災害予測システムの中核

### テラ自由度モデルの数値解法

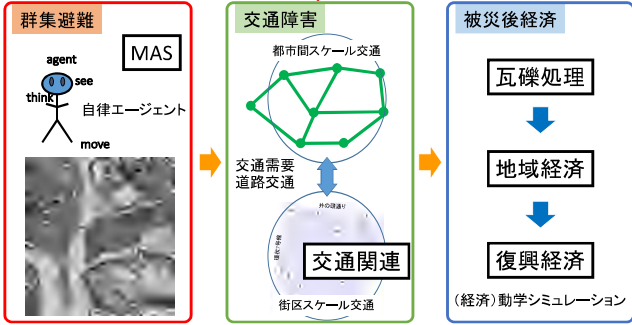




# 社会科学シミュレーション

不確実さを考慮し、多数の災害シナリオ・社会状態を設定した、群集避難・交通障害・被災後経済のシミュレーションの開発

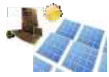
## サブ課題A



H	P	C	フ	ォ		ラ	ム		選	出
SS 研 HPC フォーラム 2016 より										

**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**

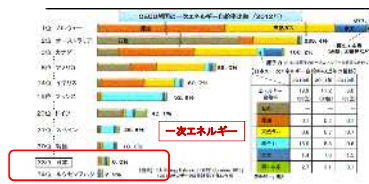
岡崎 進  
(名古屋大学)



ポスト「京」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」について

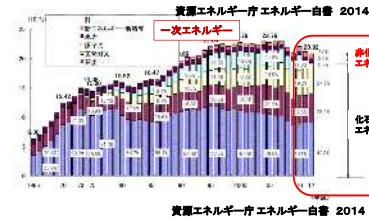
2016年8月26日  
岡崎 進  
自然科学研究機構 分子科学研究所  
名古屋大学大学院工学研究科

エネルギー問題は我が国喫緊の課題



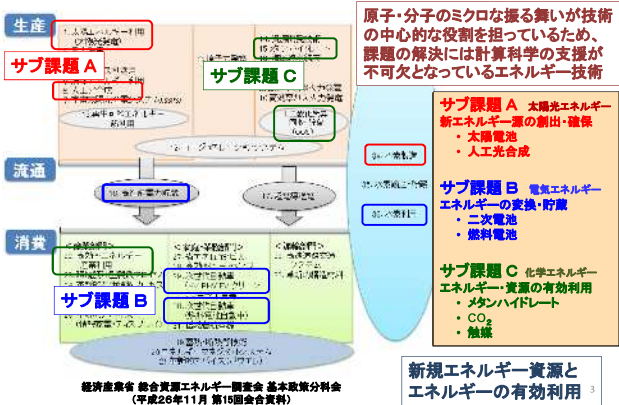
低いエネルギー自給率と  
高い化石エネルギー依存率

2012年  
エネルギー自給率 6.0%  
(一次エネルギー)



2012年  
再生可能エネルギー 7.2%  
(一次エネルギー)

我が国のエネルギー主要技術課題



全体目標

社会的意義

ポスト「京」を駆使することにより、太陽光エネルギー、電気エネルギーや化学エネルギーにおいて中心的な役割を担う複雑で複合的な分子・物質過程に対する電子・分子レベルでの全系シミュレーションを行い、実験研究者、産業界と連携して、高効率、低コスト、また環境に優しく持続可能なエネルギー新規基盤技術を確立する。

科学的意義

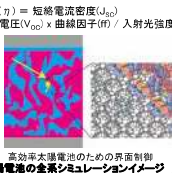
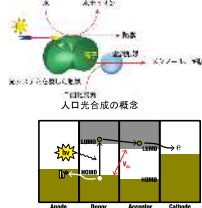
同時に、これまで計算機資源の不足により制限されていた孤立系や部分系における単一現象の科学から脱却し、現実系である界面、不均一性を有する電子、分子の複合現象を統合的に捉え得る新しい学術的視点を確立し、科学的なブレークスルーを達成する。

- 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  
太陽電池、人工光合成
- サブ課題B エネルギーの交換・貯蔵 — 電気エネルギー  
燃料電池、二次電池
- サブ課題C エネルギー資源の有効利用 — 化学エネルギー  
メタンハイドレート、CO<sub>2</sub>、高効率触媒



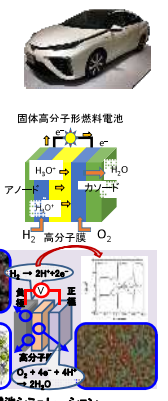
サブ課題A 新エネルギー源の創出・確保 — 太陽光エネルギー  
太陽電池と人工光合成は重要な低炭素の国産エネルギー源

- 技術的課題
    - 高性能太陽電池
      - 低コスト化、高変換効率、長寿命
      - 高効率水素発生光触媒、高効率CO<sub>2</sub>固定触媒
  - 課題解決のために計算に求められていること (本課題研究において実施)
    - 太陽電池のエネルギー変換効率要因の特定  
短絡電流密度、開放電圧、曲線因子の計算、非面・モルフォロジー制御
    - 理論限界を超える、太陽電池の新機構提案  
アップコンバージョン、ポルカキャパ等
    - 金属錯体や半導体光触媒での水素発生機構解明と設計  
CO<sub>2</sub>固定法の指針開発 (サブ課題Cとの連携)
  - 開発アプリケーション
    - 太陽電池シミュレータ  
主としてNTChemをベース  
1万原子系の大規模TDDFT、QM/MM分子動力学、非断熱遷移動力学
    - 人工光合成シミュレータ  
主としてQELANをベース  
10<sup>20</sup>の電子配置光なる励起状態計算 構造最適化、物性計算
- 変換効率(η) = 短絡電流密度(j<sub>sc</sub>) × 開放電圧(V<sub>oc</sub>) × 曲線因子(FF) / 入射光強度
- 高効率太陽電池のための界面制御  
太陽電池の全系シミュレーションイメージ



サブ課題B エネルギーの交換・貯蔵 — 電気エネルギー

- 技術的課題
    - 低コスト化、高信頼性、高耐久性、汎用元素の利用
    - 高エネルギー密度、高出力密度、高速充放電
    - 次世代、次々世代電池の構築
  - 課題解決のために計算科学に求められていること (本課題研究において実施) 各電池共通の課題
    - 電極・電極被膜・電解質膜・電解液界面挙動の解明  
界面における電極反応、電極被膜生成、イオン輸送
    - 各電池部材の最適材料設計・探索
      - 高電圧・高エネルギー密度につながる正確・負極
      - 高いイオン伝導度、高耐久性をもつ電解液・電解質膜
      - 白金代替触媒、短絡を防ぐセパレーター材
  - 開発アプリケーション
    - 全電池シミュレータ
      - 電極反応、電極被膜、電極界面  
主としてState-CFMDをベース  
6,000原子系の電位一定の第一原理分子動力学計算
      - 電解質膜、セパレーター、電極被膜、電解液と界面  
主としてCMODASをベース  
数億原子系の古典分子動力学計算
      - 電流電圧曲線  
電極界面の反応抵抗、輸送抵抗、電気二重層  
information transfer による全電池過程の統合的理解
- 電池が電気自動車実現の成否の鍵  
高度な信頼性確保
- 電池共通基盤技術
- 各要素、電池プロセスのミクロな理解
- 電池性能のマクロな理解
- 全電池シミュレーション



## サブ課題C エネルギー・資源の有効利用 — 化学エネルギー

メタンやCO<sub>2</sub>等の分離・回収・貯蔵・変換、資源化 → ハイドレート利用、触媒開発、CO<sub>2</sub>吸収材開発

### ■ 技術的課題

- ハイドレートからのメタンの効率的採取技術
- 元素戦略に立脚した高性能触媒の開発
- CO<sub>2</sub>の低コスト分離・回収、廃棄、資源化

### ■ 課題解決のために計算に求められていること (本課題研究において実施)

- メゾスコピック系での相転移と安定・不安定性の解明
  - ・ ハイドレートの分解の律速過程の解明とその解消法の提案、
  - ・ メタン/CO<sub>2</sub>の高効率変換 (CO<sub>2</sub>の廃棄)の可能性の検証
- 触媒反応経路の全面探索技術の確立
  - ・ CO<sub>2</sub>還元を実現する高機能触媒探索
- 低コストCO<sub>2</sub>回収を実現するMOFの設計

### ■ 開発アプリケーション

#### ■ 多相共存MD シミュレータ

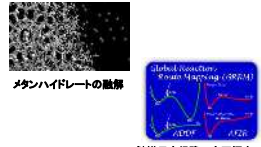
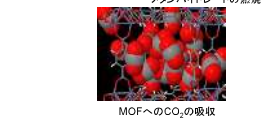
- 主としてMODYLASをベース
- 固相、液相、気相と界面を含む1,000万分子、1 μsの分子動力学計算

#### ■ 触媒反応経路探索シミュレータ

- NTChem+GRFM
- 1,000原子の電子状態計算に基づく系統的経路探索

#### ■ 凝縮相内化学反応シミュレータ

- DC-DFTB-K
- 10万分子、サブナノ秒の全電子分子動力学計算



## 基盤アプリ設計開発

「京」で実績のあるグループが、その世界最高水準のアプリケーションをベースに開発

### 成果の利活用

- ・ 公開する。産業界と密接に連絡を取りながら、完成後の産業界への展開を前提に開発。
- ・ エネルギー以外の広範な分野にも大きな波及効果

ソフトウェア名(開発者)・詳細	ターゲットアプリ	京での性能実績	ポスト「京」計算例
<b>NTChem(中嶋)</b> 汎用第一原理電子状態計算ソフト 化学反応計算	量子化学	9,840原子軌道71,288ノード 実効効率 32% 世界最高レベルの題並列	<b>太陽電池シミュレータ</b> <b>凝縮相内化学反応シミュレータ</b> 5千~1万原子系の基底状態DFT計算
<b>GELLAN(天能)</b> 階層的量子化学計算ソフト 高精度電子状態計算、QM/MM分子動力学	量子化学	5,520原子軌道21,672ノード 実効効率 32% 世界最高水準の 高精度計算	<b>人工光合成シミュレータ</b> 10 <sup>10</sup> 以上の電子配置からなる 超高精度基底状態計算と 構造最適化
<b>MODYLAS(岡崎)</b> 汎用分子動力学計算ソフト 自由エネルギー計算 多相共存系	分子動力学	8,000万原子系65,536ノード 実効効率 41% 世界最高クラスの高圧計算	<b>電池シミュレータ</b> <b>多相共存系シミュレータ</b> 1-10億原子系
<b>stat-CPMD(館山)</b> 第一原理分子動力学 反応自由エネルギー計算	固体電子論	2,400原子系 3,840ノード 実効効率 29%	<b>電池シミュレータ</b> 反応スクリーニング 5千規模の原子系多量化学反応

## 実施体制

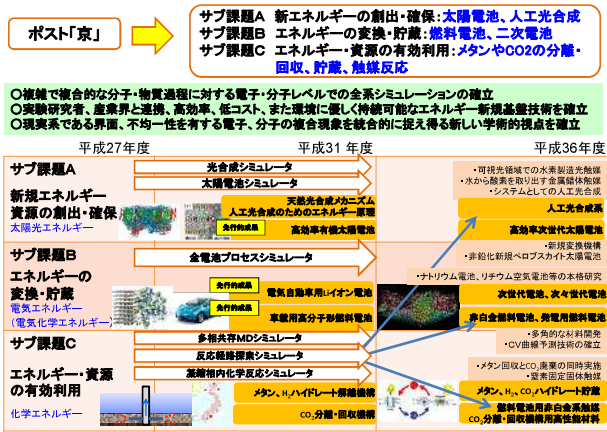
実験、産業界と連携したオールジャパンで研究を推進

実験、産業界と強力な連携体制を構築、一方で実施者は厳しく絞り込み(11名)



## まとめ

全体目標と期待される成果



H	P	C	フ	ォ		ラ	ム		選	出
SS 研 HPC フォーラム 2016 より										

革新的クリーンエネルギーシステム  
の実用化

飯田 明由  
(豊橋技術科学大学)

サイエンティフィック・システム研究会2016年8月26日

パネルディスカッション『ポスト「京」重点9分野がめざすもの』

## 「革新的クリーンエネルギーシステムの実用化」

～サブ課題 6-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～

飯田 明由

豊橋技術科学大学 大学院機械工学系

アブストラクト

我が国の自然エネルギー利用を推進するため、2030年には400万kwのウィンドファームの開発が計画されています。ウィンドファームの性能を向上させるためには、風車そのものの性能向上に加え、風車の相互干渉による発電量の低減、翼の疲労破壊、年間発電量の予測に基づく最適配置方法の検討が必要となります。本サブ課題では、従来の計算機環境では実現が不可能であったウィンドファームの全体解析、空力・構造解析による翼の寿命・安全性評価、風車性能向上のための流体制御技術を開発することを目標とします。

キーワード

風力発電、風車、自然エネルギー、流体・構造振動連成解析、流体制御

### 1. はじめに

環境を考慮した持続的なエネルギーの供給を可能にするには、様々なエネルギー供給システムを開発する必要があります。課題⑥では、自然エネルギーだけでなく、火力、原子力、燃料電池など様々な課題に取り組んでいます。本報告では、自然エネルギー利用技術としてもっともなじみの深い風力発電を例にとり課題⑥の取り組みを報告します。

我が国の自然エネルギー利用を推進するため、2020年代には洋上ウィンドファームが複数機建設される見通しです。サブ課題 C では、大規模数値解析技術を用いて、ウィンドファームの高効率化を実現するための研究を進めています。

大規模なウィンドファームが実際に運用されるようになるためには、たくさん問題があります。風車そのものの性能を向上させること、風車同士の相互干渉による発電量の減少を防ぐこと、翼の疲労破壊を防ぐこと、期待通りの発電量を得るために最適な風車の配置方法を探ることなど様々な課題があります。これらの問題は、実際に建設してからでは対応することができない問題が多くあります。

これらを設計段階で解決するためのさまざまなシミュレーションは、従来の計算機環境で行うことは不可能でした。このシミュレーションをポスト「京」で実現するため、連成解析、風況解析、流体制御の技術を開発しています。

## 2. これまでの取り組み（解析手法）

ウィンドファームに設置された風車周りの流れは大小さまざまなスケールが混在するマルチスケールの現象です。従来の計算技術ではこれらすべてのスケールの減少を計算に取り込むことは不可能であり、風車の干渉効果を予測しようとするれば計測や経験に基づく簡易的なモデル式に頼らざるを得ませんでした。ポスト「京」を活用してこれらすべてのスケールの効果を取り込んだ大規模かつ超精密な計算を実現することは、数値流体力学分野において学術的観点からも飛躍的な進歩をもたらすといえます。洋上風車の大規模数値解析を行うための解析規模について、風車翼周りの渦スケール、後流の渦スケール、気象等を考慮して分析を進めています。これまでの検討結果から、次年度以降に実施する洋上風車の解析規模では、流れ場によってDES、LESを使い分ける必要があることが明らかとなりました。現在、それらの予備解析、コードの開発を進めています。

また、構造との連成解析では風車内部の構造、解析のためのデータベースの構築方法について検討しています。さらに、アクチュエータモデルを用いた風力発電量の予測解析の大規模化、気象データの取り込み方法について検討を行っています。また、高度流体制御技術により翼周りの流れの動的制御を実施し、プラズマアクチュエータによる翼性能の向上に取り組んでいます。

## 3. まとめ

洋上風車の最適化を目標とした大規模解析技術の開発を進めています。ポスト京の技術を活用することにより自然エネルギーの有効利用を進めるための基礎技術を開発し、エネルギー問題の解決に貢献していきたいと思っております。

## 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 ～高効率風力発電システム構築のための大規模数値解析～

東日本大震災後のエネルギー問題に対する国民の意識\*

- ・低炭素社会の実現を目標とした原子力に依存しない安全で持続的な社会の構築
- ・今後増やすべき発電用エネルギー源：自然エネルギー 70% (NHK世論調査)

\*1 独立行政法人 経済産業研究所: [http://www.rieti.go.jp/jp/projects/research\\_activity/energy/](http://www.rieti.go.jp/jp/projects/research_activity/energy/)

→日本沿岸の潜在的エネルギー源を活用した大規模洋上ウインドファームの開発が不可欠



風車の大形化(直径200m:20MW) 洋上風車(2015年) 大規模洋上ウインドファーム  
日本経済新聞電子版2013年7月18日 三菱重工エクスプレス No. 5427号 K.S. Hansen, EERA DeepWind 2014, 2014

解決すべき課題:

- ・ウインドファームでは下流にある風車の発電量低下、翼の疲労破壊が問題
- ・気象変動の影響を考慮した発電量予測が困難
- ・直径(200m)の大規模風車の試作実験や発電量を実験だけで予測するのは困難
- 大規模数値解析によりウインドファームの発電量の予測や寿命解析を行い、自然エネルギーを安定に利用する技術を確認

## ポスト京が拓く「ウインドファームの高効率化」

ポスト京を活用した1兆規模の流体構造連成解析によりウインドファームの発電量を予測

- ・流れ場の大きさと時間規模: 気象(10km:年), 構造物(100m:分), 翼周り(0.1mm/0.001秒)
- ・考慮すべき物理現象: 気流変動, 翼の疲労破壊, 流体制御, 発電量制御

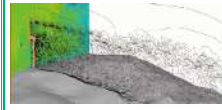
ウインドファーム発電量: 400kw(2030年)実現への設計支援

洋上ウインドファーム発電コストの改善(現状: 陸上風車の2倍→ポスト京: 36円/kWh以下)

- (1) 最適配置による性能向上, 稼働率改善, (2) 先端流体制御による性能改善(風車単体10%)
- (3) ブレードの寿命評価によるメンテナンスコスト削減

京時代(現在)

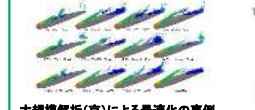
風車単体の大規模な非定常解析が可能となり、さらに空力・構造連成解析による風車の構造解析も可能となった。風車の後流の影響や地形の影響を考慮した非定常解析が可能となった。しかし、ウインドファームのような風車群の流れ解析最適設計のための解析は実現できていない。



地形を考慮した風車解析

ポスト京時代(将来)

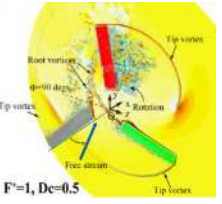
大気境界層、地形を考慮した大規模ウインドファームにおける風車間の流れの相互干渉を解析することにより、発電量の向上、ブレードの寿命改善、低コスト化が可能となる。これらの技術によって環境に優しい安定した電力供給を実現すると共に我が国の風力発電産業の競争力向上に貢献する。



大規模解析(京)による最適化の事例  
ポスト京では風車配置の最適化に適用予定 先端流体制御による発電量の改善

・解析アプリケーション

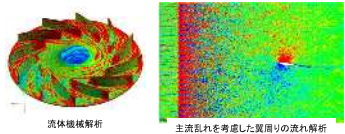
- FrontFlow/blue(大規模流体解析)
- Adventure(大規模構造連成解析)
- LANS3D(先進流体制御解析)
- RIAM-COMPACT(数値風況解析)
- REVOCAP(マルチスケール解析)



## アプリの準備状況(京時代)

FFB

- ・大規模乱流解析による流体機械・自動車等の高精度予測
- 自動車・船舶・流体機械等において100億メッシュ規模の大規模乱流解析を実現(産業利用における実績)
- 気流の乱れを考慮した翼周りの流れ解析

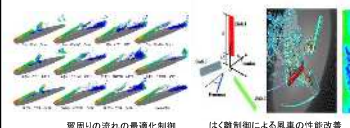


流体機械解析

主流乱れを考慮した翼周りの流れ解析

LANS3D

- ・先進流体制御による翼性能の改善, 風車性能改善技術の提案
- ・高精度流体解析による翼の最適制御方法の検討(数百ケース)
- ・流れの制御による風車の性能改善(10%)

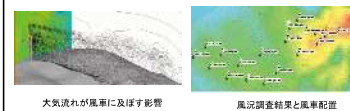


翼周りの流れの最適化制御

はく離制御による風車の性能改善

RIAM-Compact

- ・複雑地形を考慮した風車性能の予測
- ・複雑地形によって生じる流れ場を予測し、風力発電の設置に適切かどうかの判定が可能
- 風況マップの作成による風車配置の最適化

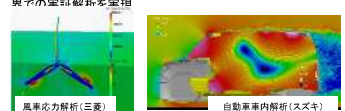


大気流れが風車に及ぼす影響

風況調査結果と風車配置

- ・FFB-FISTARによる風車ブレードの応力解析
- ・FFB-ADVENTUREによる自動車車内音連成解析

- ・流れ場と構造振動・音までの連成解析システムを構築し、産業界での実証解析を実施



風車応力解析(三菱)

自動車車内解析(スズキ)

## ポスト京で開発するアプリの概要

WindFarm

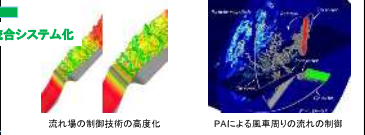
- ・FFB-ADVENTURE, RIAM-COMPACT, LANS3Dの特色を活かした大規模空力連成システムによるマルチスケール解析ソフトの開発



ウインドファームの流れを再現

LANS3D

- ・プラズマアクチュエータ等の先進流体制御技術を組み込んだ大規模乱流解析
- ・高速ソルバーを利用した最適化解析



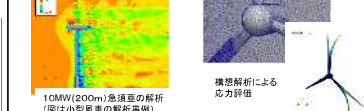
統合システム化

流れ場の制御技術の高効率化

PAIによる風車周りの流れの制御

FFB, FFB-ADVENTURE

- ・FFBによる1000億規模大規模乱流解析
- ・FFB-ADVENTUREによる空力構造連成解析(寿命評価)

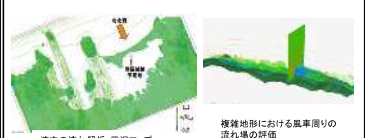


10MW(200m)急流直下の解析(図は小型風車の解析事例)

構造解析による応力評価

RIAM-Compact (HPC)

- ・洋上流れ解析及び洋上風況マップの作成
- ・風車群解析のためのモデル化及び最適化

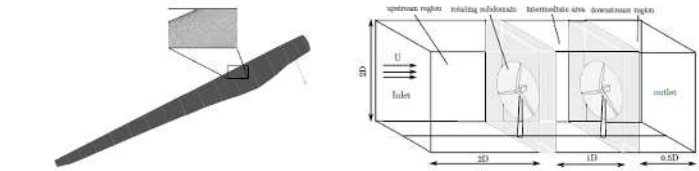


湾内の流れ解析: 風況マップ

複雑地形における風車周りの流れ場の評価

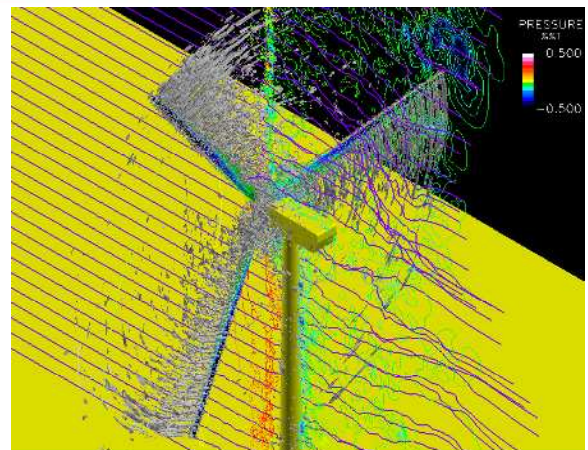
## 解析事例(NREL Offshore 5-MW Baseline Wind Turbine)

Parameter	Specification
Rating	5MW
Rotor Orientation, Configuration	Upwind, 3 Blades
Control	Variable Speed, Collective Pitch
Drivetrain	High Speed, Multiple-Stage Gearbox
Rotor, Hub Diameter	126 m, 3 m
Hub Height	90 m
Cut-In, Rated, Cut-Out Wind Speed	3 m/s, 11.4 m/s, 25 m/s
Cut-In, Rated Rotor Speed	6.9 rpm, 12.1 rpm
Rated Tip Speed	80 m/s
Overhang, Shaft Tilt, Precone	5 m, 5°, 2.5°
Rotor Mass	110E+3 kg
Nacelle Mass	240E+3 Kg
Tower Mass	347.46E+3 kg
Coordinate Location of Overall CM	(-0.2 m, 0.0 m, 64.0 m)



1億7000万要素(富士通FX10 180時間)

## 風車周りの流れ



PRESSURE (高圧)

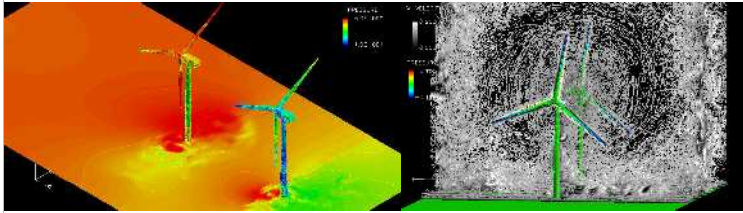
0.500

0

-0.500

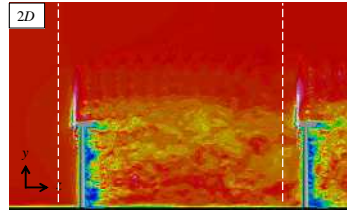
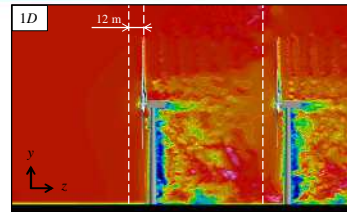


## タンデム解析



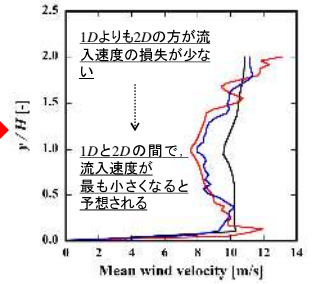
		L/D 0.0	L/D 0.5	L/D 1.0	L/D 1.5	L/D 2.0	L/D 2.5	L/D 3.0
Rotor diameter	[m]	1	1	1	1	1	1	1
Tip speed	[r/s]	7.1	7.1	7.1	7.1	7.1	7.1	7.1
U <sub>ref</sub> (period of one rotation)	[m/s]	5	1.15	5	1.15	5	1.15	5
Distance between turbines	[m]	0	0.5	1	1.5	2	2.5	3
Inflow velocity	[m/s]	10	7	10	7	10	7	10
Elapsed time to pass between turbines	[sec]	5	10	20	11.7	7	20	52.5
Ratio of Elapsed time to U <sub>ref</sub> period	[s/T]	1.17	1.17	55	57.5	71570	71570	7.07
Ti (step)	[dt sec]	0.00	1	0.0015	0.00	1	0.0015	0.00
No. of steps of Ti (one U <sub>ref</sub> unit)	NT ME top	0	15	1	7	5	57.75	1
	NT ME* top	10000	10000	10000	10000	0000	0000	0000
No. of steps for one rotation	N <sub>rot</sub>	0	0	0	0	0	0	0
Elapsed time of one step	T <sub>step</sub> [sec]	0	0	0	0	1	0	0
Number of Nodes	M OM							
Elapsed time of one putation	ME [hour]	0	150	150	150	150	00	00
	Ti [hour]			1.7		00		55

## 後流による干渉



風車10回転目における流れ場

- 上流側の風車
- 風車間隔1Dにおける下流側の風車
- 風車間隔2Dにおける下流側の風車

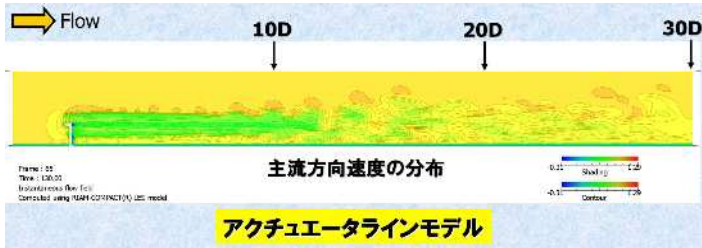


風車12m手前の平均風速分布  
下流側の風車に流入する前に平均風速が減少

## ~ M M を用いた分析

### 開発目標・開発項目

- ・アクチュエータディスク、アクチュエータラインモデルを用いた風車ウエイクの再現
- ・大規模計算のための風車ウエイクモデルの開発と実装



アクチュエータラインモデル

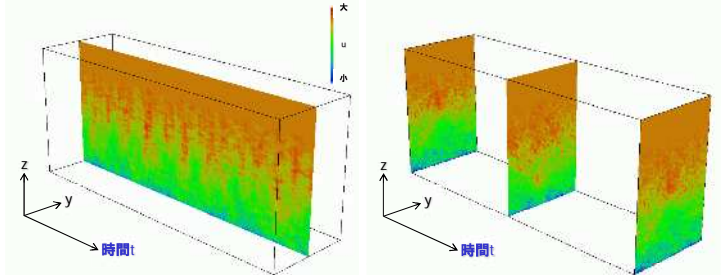
### 研究成果と課題:

- ・風車単体における風車ウエイクの再現に成功
- ・大型風車への適用と簡易ウエイクモデルの開発と実装
- ・実機風車による実スケールデータ(実測データ)による検証

## 大気の流れの影響評価

### 開発目標・開発項目

- ・ポスト「京」で実行可能な計算コードの改良
- ・大規模ウィンドファームに適用可能な簡易風車ウエイクモデルの開発と実装
- ・流入変動気流の作成と検証



LESのためお流入変動気流の作成例:  
主流方向(x)の速度成分の分布

H	P	C	フ	ォ		ラ	ム		選	出
SS 研 HPC フォーラム 2016 より										

革新的クリーンエネルギーシステム  
の実用化

飯田 明由  
(豊橋技術科学大学)

サイエンティフィック・システム研究会2016年8月26日

パネルディスカッション『ポスト「京」重点9分野がめざすもの』

## 「革新的クリーンエネルギーシステムの実用化」

～サブ課題 6-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～

飯田 明由

豊橋技術科学大学 大学院機械工学系

アブストラクト

我が国の自然エネルギー利用を推進するため、2030年には400万kwのウィンドファームの開発が計画されています。ウィンドファームの性能を向上させるためには、風車そのものの性能向上に加え、風車の相互干渉による発電量の低減、翼の疲労破壊、年間発電量の予測に基づく最適配置方法の検討が必要となります。本サブ課題では、従来の計算機環境では実現が不可能であったウィンドファームの全体解析、空力・構造解析による翼の寿命・安全性評価、風車性能向上のための流体制御技術を開発することを目標とします。

キーワード

風力発電、風車、自然エネルギー、流体・構造振動連成解析、流体制御

### 1. はじめに

環境を考慮した持続的なエネルギーの供給を可能にするには、様々なエネルギー供給システムを開発する必要があります。課題⑥では、自然エネルギーだけでなく、火力、原子力、燃料電池など様々な課題に取り組んでいます。本報告では、自然エネルギー利用技術としてもっともなじみの深い風力発電を例にとり課題⑥の取り組みを報告します。

我が国の自然エネルギー利用を推進するため、2020年代には洋上ウィンドファームが複数機建設される見通しです。サブ課題 C では、大規模数値解析技術を用いて、ウィンドファームの高効率化を実現するための研究を進めています。

大規模なウィンドファームが実際に運用されるようになるためには、たくさん問題があります。風車そのものの性能を向上させること、風車同士の相互干渉による発電量の減少を防ぐこと、翼の疲労破壊を防ぐこと、期待通りの発電量を得るために最適な風車の配置方法を探ることなど様々な課題があります。これらの問題は、実際に建設してからでは対応することができない問題が多くあります。

これらを設計段階で解決するためのさまざまなシミュレーションは、従来の計算機環境で行うことは不可能でした。このシミュレーションをポスト「京」で実現するため、連成解析、風況解析、流体制御の技術を開発しています。

## 2. これまでの取り組み（解析手法）

ウィンドファームに設置された風車周りの流れは大小さまざまなスケールが混在するマルチスケールの現象です。従来の計算技術ではこれらすべてのスケールの減少を計算に取り込むことは不可能であり、風車の干渉効果を予測しようとするれば計測や経験に基づく簡易的なモデル式に頼らざるを得ませんでした。ポスト「京」を活用してこれらすべてのスケールの効果を取り込んだ大規模かつ超精密な計算を実現することは、数値流体力学分野において学術的観点からも飛躍的な進歩をもたらすといえます。洋上風車の大規模数値解析を行うための解析規模について、風車翼周りの渦スケール、後流の渦スケール、気象等を考慮して分析を進めています。これまでの検討結果から、次年度以降に実施する洋上風車の解析規模では、流れ場によってDES、LESを使い分ける必要があることが明らかとなりました。現在、それらの予備解析、コードの開発を進めています。

また、構造との連成解析では風車内部の構造、解析のためのデータベースの構築方法について検討しています。さらに、アクチュエータモデルを用いた風力発電量の予測解析の大規模化、気象データの取り込み方法について検討を行っています。また、高度流体制御技術により翼周りの流れの動的制御を実施し、プラズマアクチュエータによる翼性能の向上に取り組んでいます。

## 3. まとめ

洋上風車の最適化を目標とした大規模解析技術の開発を進めています。ポスト京の技術を活用することにより自然エネルギーの有効利用を進めるための基礎技術を開発し、エネルギー問題の解決に貢献していきたいと思っております。

## 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 ～高効率風力発電システム構築のための大規模数値解析～

東日本大震災後のエネルギー問題に対する国民の意識<sup>1)</sup>

- ・低炭素社会の実現を目標とした原子力に依存しない安全で持続的な社会の構築
- ・今後増やすべき発電用エネルギー源：自然エネルギー 70% (NHK世論調査)

<sup>1)</sup> 独立行政法人 経済産業研究所: [http://www.rieti.go.jp/jp/projects/research\\_activity/energy/](http://www.rieti.go.jp/jp/projects/research_activity/energy/)

→日本沿岸の潜在的エネルギー源を活用した大規模洋上ウインドファームの開発が不可欠



風車の大形化 (直径200m : 20MW) 洋上風車 (2015年) 大規模洋上ウインドファーム  
日本経済新聞電子版2013年7月18日 三重工エクスプレス 第 5427号 K.S. Hansen, EERA DeepWind 2014, 2014

解決すべき課題:

- ・ウインドファームでは下流にある風車の発電量低下、翼の疲労破壊が問題
- ・気象変動の影響を考慮した発電量予測が困難
- ・直径(200m)の大規模風車の試作実験や発電量を実験だけで予測するのは困難
- 大規模数値解析によりウインドファームの発電量の予測や寿命解析を行い、自然エネルギーを安定に利用する技術を確認

## ポスト京が拓く「ウインドファームの高効率化」

ポスト京を活用した1兆規模の流体構造連成解析によりウインドファームの発電量を予測

- ・流れ場の大きさと時間規模: 気象(10km : 年), 構造物(100m:分), 翼周り(0.1mm/0.001秒)
- ・考慮すべき物理現象: 気流変動, 翼の疲労破壊, 流体制御, 発電量制御

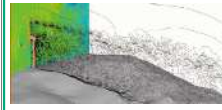
ウインドファーム発電量: 400kw (2030年) 実現への設計支援

洋上ウインドファーム発電コストの改善 (現状: 陸上風車の2倍 → ポスト京: 36円/kWh以下)

- (1) 最適配置による性能向上, 稼働率改善, (2) 先端流体制御による性能改善 (風車単体10%)
- (3) ブレードの寿命評価によるメンテナンスコスト削減

### 京時代 (現在)

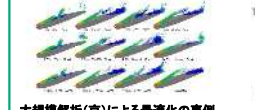
風車単体の大規模な非定常解析が可能となり、さらに空力・構造連成解析による風車の構造解析も可能となった。風車の後流の影響や地形の影響を考慮した非定常解析が可能となった。しかし、ウインドファームのような風車群の流れ解析最適設計のための解析は実現できていない。



地形を考慮した風車解析

### ポスト京時代 (将来)

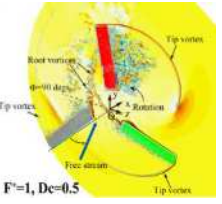
大気境界層、地形を考慮した大規模ウインドファームにおける風車間の流れの相互干渉を解析することにより、発電量の向上、ブレードの寿命改善、低コスト化が可能となる。これらの技術によって環境に優しい安定した電力供給を実現すると共に我が国の風力発電産業の競争力向上に貢献する。



大規模解析 (京) による最適化の事例  
ポスト京では風車配置の最適化に適用予定 先端流体制御による発電量の改善

### 解析アプリケーション

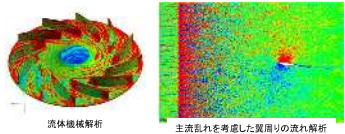
- FrontFlow/blue (大規模流体解析)
- Adventure (大規模構造連成解析)
- LANS3D (先進流体制御解析)
- RIAM-COMPACT (数値風況解析)
- REVOCAP (マルチスケール解析)



## アプリの準備状況(京時代)

### FFB

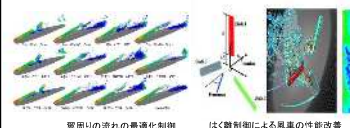
- ・大規模乱流解析による流体機械・自動車等の高精度予測
- 自動車・船舶・流体機械等において100億メッシュ規模の大規模乱流解析を実現 (産業利用における実績)
- 気流の流れを考慮した翼周りの流れ解析



流体機械解析 主翼流れを考慮した翼周りの流れ解析

### LANS3D

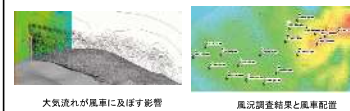
- ・先進流体制御による翼性能の改善, 風車性能改善技術の提案
- ・高精度流体解析による翼の最適制御方法の検討 (数百ケース)
- ・流れの制御による風車の性能改善 (10%)



翼周りの流れの最適化制御 先端流体制御による風車の性能改善

### RIAM-Compact

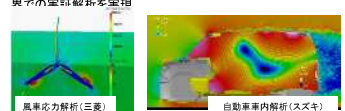
- ・複雑地形を考慮した風車性能の予測
- ・複雑地形によって生じる流れ場を予測し、風力発電の設置に適切かどうかの判定が可能
- 風況マップの作成による風車配置の最適化



大気流れが風車に及ぼす影響 風況調査結果と風車配置

- ・FFB-FISTARによる風車ブレードの応力解析
- ・FFB-ADVENTUREによる自動車車内音連成解析

- ・流れ場と構造振動・音までの連成解析システムを構築し、産業界での実証解析を実施

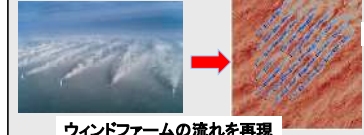


風車応力解析 (三菱) 自動車車内解析 (スズキ)

## ポスト京で開発するアプリの概要

### WindFarm

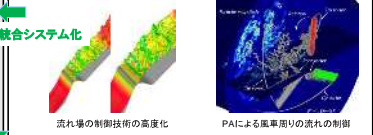
- ・FFB-ADVENTURE, RIAM-COMPACT, LANS3Dの特色を活かした大規模空力連成システムによるマルチスケール解析ソフトの開発



ウインドファームの流れを再現

### LANS3D

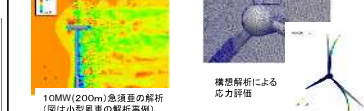
- ・プラズマアクチュエータ等の先進流体制御技術を組み込んだ大規模乱流解析
- ・高速ソルバーを利用した最適化解析



流れ場の制御技術の高度化 PAIによる風車周りの流れの制御

### FFB, FFB-ADVENTURE

- ・FFBによる1000億規模大規模乱流解析
- ・FFB-ADVENTUREによる空力構造連成解析 (寿命評価)



10MW (200m) 急流直下の解析 (図は小型風車の解析事例) 構造解析による応力評価

### RIAM-Compact (HPC)

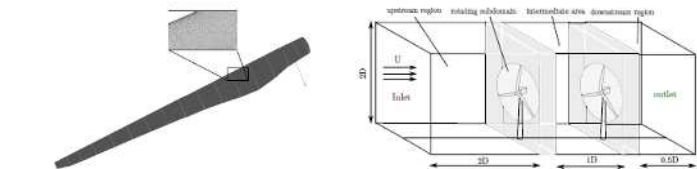
- ・洋上流れ解析及び洋上風況マップの作成
- ・風車群解析のためのモデル化及び最適化



湾内の流れ解析: 風況マップ 複雑地形における風車周りの流れ場の評価

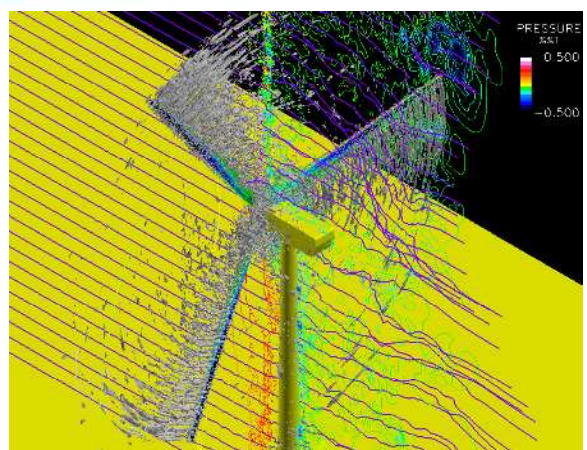
## 解析事例(NREL Offshore 5-MW Baseline Wind Turbine)

Parameter	Specification
Rating	5MW
Rotor Orientation, Configuration	Upwind, 3 Blades
Control	Variable Speed, Collective Pitch
Drivetrain	High Speed, Multiple-Stage Gearbox
Rotor, Hub Diameter	126 m, 3 m
Hub Height	90 m
Cut-In, Rated, Cut-Out Wind Speed	3 m/s, 11.4 m/s, 25 m/s
Cut-In, Rated Rotor Speed	6.9 rpm, 12.1 rpm
Rated Tip Speed	80 m/s
Overhang, Shaft Tilt, Precone	5 m, 5°, 2.5°
Rotor Mass	110E+3 kg
Nacelle Mass	240E+3 Kg
Tower Mass	347.46E+3 kg
Coordinate Location of Overall CM	(-0.2 m, 0.0 m, 64.0 m)



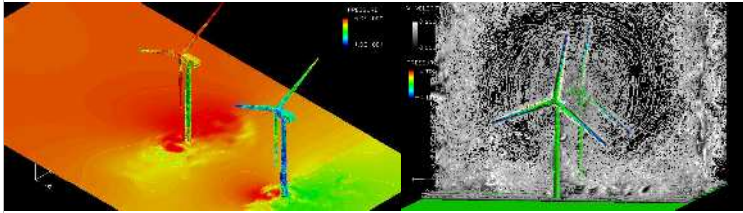
1億7000万要素 (富士通FX10 180時間)

## 風車周りの流れ



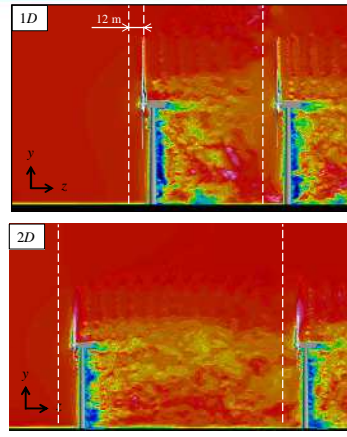
PRESSURE (kPa) 0.500 -0.500

## タンデム解析

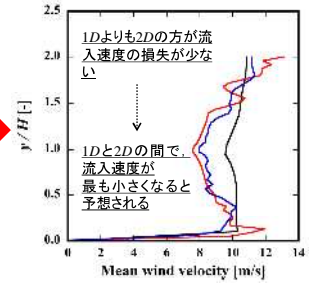


		L/D 0.0	L/D 0.5	L/D 1.0	L/D 1.5	L/D 2.0	L/D 2.5	L/D 3.0
Rotor diameter	[m]	1	1	1	1	1	1	1
Tip speed	[r/s]	7.1	7.1	7.1	7.1	7.1	7.1	7.1
Tip speed ratio		5	5	5	5	5	5	5
Tip speed ratio		10	10	10	10	10	10	10
Tip speed ratio		15	15	15	15	15	15	15
Tip speed ratio		20	20	20	20	20	20	20
Tip speed ratio		25	25	25	25	25	25	25
Tip speed ratio		30	30	30	30	30	30	30
Tip speed ratio		35	35	35	35	35	35	35
Tip speed ratio		40	40	40	40	40	40	40
Tip speed ratio		45	45	45	45	45	45	45
Tip speed ratio		50	50	50	50	50	50	50
Tip speed ratio		55	55	55	55	55	55	55
Tip speed ratio		60	60	60	60	60	60	60
Tip speed ratio		65	65	65	65	65	65	65
Tip speed ratio		70	70	70	70	70	70	70
Tip speed ratio		75	75	75	75	75	75	75
Tip speed ratio		80	80	80	80	80	80	80
Tip speed ratio		85	85	85	85	85	85	85
Tip speed ratio		90	90	90	90	90	90	90
Tip speed ratio		95	95	95	95	95	95	95
Tip speed ratio		100	100	100	100	100	100	100
Tip speed ratio		105	105	105	105	105	105	105
Tip speed ratio		110	110	110	110	110	110	110
Tip speed ratio		115	115	115	115	115	115	115
Tip speed ratio		120	120	120	120	120	120	120
Tip speed ratio		125	125	125	125	125	125	125
Tip speed ratio		130	130	130	130	130	130	130
Tip speed ratio		135	135	135	135	135	135	135
Tip speed ratio		140	140	140	140	140	140	140
Tip speed ratio		145	145	145	145	145	145	145
Tip speed ratio		150	150	150	150	150	150	150
Tip speed ratio		155	155	155	155	155	155	155
Tip speed ratio		160	160	160	160	160	160	160
Tip speed ratio		165	165	165	165	165	165	165
Tip speed ratio		170	170	170	170	170	170	170
Tip speed ratio		175	175	175	175	175	175	175
Tip speed ratio		180	180	180	180	180	180	180
Tip speed ratio		185	185	185	185	185	185	185
Tip speed ratio		190	190	190	190	190	190	190
Tip speed ratio		195	195	195	195	195	195	195
Tip speed ratio		200	200	200	200	200	200	200

## 後流による干渉



- 上流側の風車
- 風車間隔1Dにおける下流側の風車
- 風車間隔2Dにおける下流側の風車

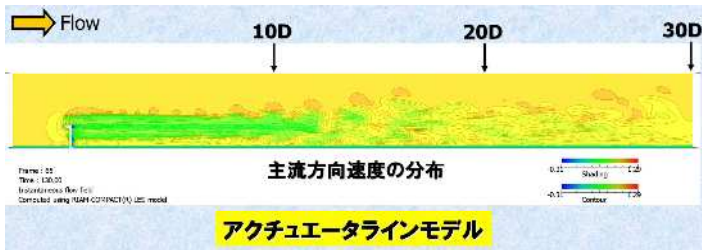


風車12m手前の平均風速分布  
下流側の風車に流入する前に  
平均風速が減少

## ~ M M を用いた分析

### 開発目標・開発項目

- ・アクチュエータディスク、アクチュエータラインモデルを用いた風車ウエイクの再現
- ・大規模計算のための風車ウエイクモデルの開発と実装



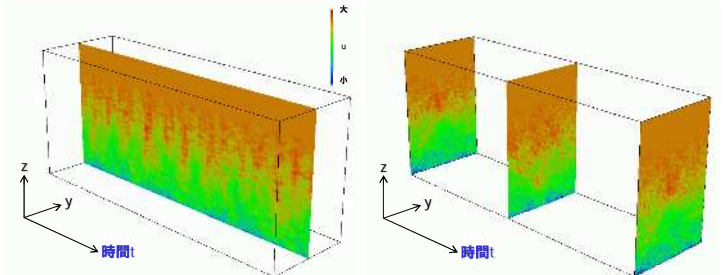
### 研究成果と課題:

- ・風車単体における風車ウエイクの再現に成功
- ・大型風車への適用と簡易ウエイクモデルの開発と実装
- ・実機風車による実スケールデータ(実測データ)による検証

## 大気の流れの影響評価

### 開発目標・開発項目

- ・ポスト「京」で実行可能な計算コードの改良
- ・大規模ウィンドファームに適用可能な簡易風車ウエイクモデルの開発と実装
- ・流入変動気流の作成と検証



LESのためお流入変動気流の作成例:  
主流方向(x)の速度成分の分布

H	P	C	フ	ォ		ラ	ム		選	出
SS 研 HPC フォーラム 2016 より										

**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**

常行 真司  
(東京大学)

# ポスト「京」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」

常行真司  
(東大・理/東大・物性研)

8/26/2016 SS研

## マイクロからの理解による材料・デバイス設計

### 原子・電子の基礎方程式

#### ◆電子状態方程式

$$\left[ -\frac{1}{2} \nabla^2 + V(r,t) \right] \varphi(r,t) = \varepsilon_i(t) \varphi(r,t)$$

#### ◆原子運動方程式

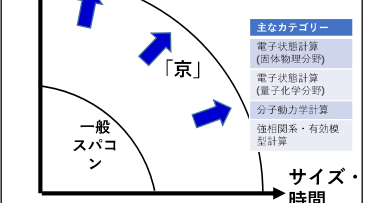
$$M \frac{d^2}{dt^2} R(t) = -\nabla E(R(t))$$

第一原理計算手法は材料特性を理論的に予言可能

### 「京」による物質科学計算

- ◆精度と規模の計算領域を広げた
- ◆大規模超並列プログラムを開発  
⇒平面的な広がり

(戦プロ分野2)  
広範な物理をカバーする  
物質科学計算アプリ群を開発



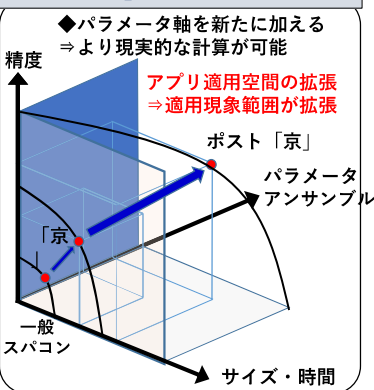
## ポスト「京」の必要性

- ◆US国家PJで日本の「元素戦略PJ」に対抗  
⇒材料特許総取りの目論み
- ◆Materials Genome Initiative;  
110M \$/年 2012年開始(NSTG)
- ◆Critical Materials Strategy;  
120M \$/5年 2012年開始(DOE)

- ◆「京」は1課題約1000万(ノード・時間)提供  
⇒世界でも類を見ない計算資源量  
⇒大規模並列計算分野で日本リード

材料・デバイス研究で常に優位に立つには計算資源量の増強が必須！  
⇒発想空間を広げる

### ポスト「京」による物質科学計算



## 重点課題(7)のサブ課題

大規模系電子状態計算を基幹技術とした新デバイス開発      マルチスケール手法・インフォマティクスを用いた材料開発

- (a) 高機能半導体デバイス (東大: 押山)
- (b) 光・電子融合デバイス (分子研: 信定)
- (c) 超伝導・新機能デバイス材料 (東大: 今田)
- (d) 高性能永久磁石・磁性材料 (産総研: 三宅)
- (e) 高信頼性構造材料 (産総研: 香山)
- (f) 次世代機能性化学品 (阪大: 松林)
- (g) 共通基盤シミュレーション手法 (東大: 尾崎)

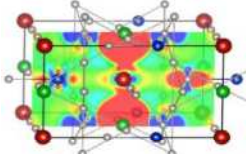
構造シミュレーション手法や数理科学的手法の開発

界面・薄膜のサイエンス      マテリアルズインフォマティクス

## ポスト「京」での研究テーマ例

### 磁石材料

- ◆電子論とデータ科学手法を利用した磁石材料探索

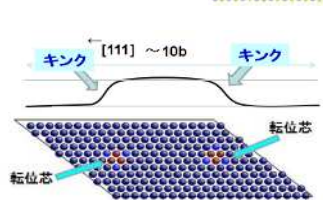
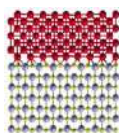


- ◆磁石の主相・粒界相界面の電子状態・構造計算



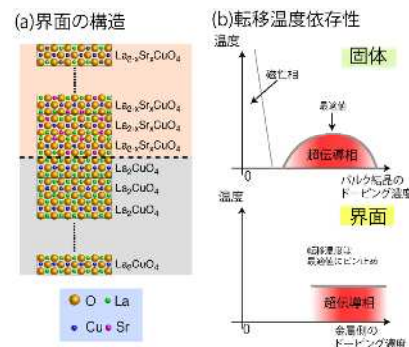
### 構造材料

- ◆高温高圧下を含めた構造材料微細組織の安定構造や挙動のマルチスケール計算



Science Advances 29 Jul 2016; Vol. 2, no. 7, e1600664  
最近の成果 Takahiro Misawa Yusuke Nomura, Silke Biermann and Masatoshi Imada

東大、銅酸化物高温超電導体間の界面で転移温度が自動的に最適化されることを理論計算 (日刊工業新聞 2016.8.5) 「・・・スーパーコンピューター「京(けい)」を使った大規模な数値計算で実験結果を再現・・・」



図はプレスリリース資料より



H	P	C	フ	ォ		ラ	ム		選	出
SS 研 HPC フォーラム 2016 より										

# 宇宙の基本法則と進化の解明

青木 慎也  
(京都大学)

### 重点課題9「宇宙の基本法則と進化の解明」の狙いとポスト京への期待

青木 慎也  
京都大学基礎物理学研究所

#### 「アブストラクト」

重点課題9「宇宙の基本法則と進化の解明」が目指すことは、素粒子から宇宙までの幅広いスケールにわたる様々な現象を精密に計算し、大型実験・観測と組み合わせ、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ことである。その目的を実現するために必要なポスト京に対する期待や要望も述べていきたい。

#### 「キーワード」

究極の物理法則、宇宙開闢、物質創成史、物質変換、宇宙進化、広域宇宙観測データ

#### 1. はじめに

我々は、HPCI戦略分野5「物質と宇宙の起源と構造」の活動において、京を用いて、バリオン間相互作用の決定、核物性解明、超新星爆発の解明などに取り組んできた。そこでの知見をもとにして、それをさらに拡大発展させるために、重点課題9「宇宙の基本法則と進化の解明」による活動を通して、ポスト京の有効活用を目指している。ここでは、その活動の狙いと、ポスト京への期待を述べていきたい。

#### 2. 重点課題9の狙い

重点課題9の目的は、素粒子から宇宙までの幅広いスケールにわたる様々な現象を精密に計算し、大型実験・観測と組み合わせ、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ことである。その活動は、サブ課題A「究極の自然法則と宇宙開闢の解明」、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」という3つのサブ課題を通して行われる。

#### 3. ポスト「京」への期待

戦略分野5で京を使って研究活動をしてきた経験から、ポスト京へ期待することや要望は幾つかある。まず、ピーク性能が高だけでなく、実際に研究に使われるアプリの実行性能が高いことを期待している。そのためには、開発者と我々ユーザーがコデザインを通して、実行性能が出るように可能な限りの工夫を必要とする必要がある。また、チューニング支援の充実やユーザーによる最適化の容易さも必要である。実行性能が高だけでなく、実際の運用も効率的に行い、ジョブの実行時間が短縮できることも期待したい。このためにも、開発者とユーザーが協力して、実際のジョブの実行イメージをもとに、運用システムを作り上げていくことが重要である。

## 重点課題9「宇宙の基本法則と進化の解明」の狙いとポスト京への期待

青木 慎也  
京都大学 基礎物理学研究所

SS研HPCフォーラム2016、2016年8月26日（金）、  
汐留シーセンター24階 富士通（株）大会議室、東京

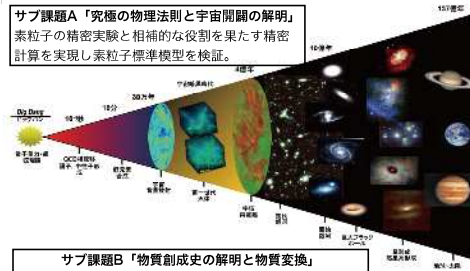
### 重点課題9「宇宙の基本法則と進化の解明」の狙い

**目的：**素粒子から宇宙までの幅広いスケールにわたる現象を精密に計算し、大型実験・観測と組み合わせ、素粒子・原子核・宇宙に関する物質創成史の解明を目指す。

**目標：**①ポスト京で実行するアプリの計算手法を確立する。②アプリの本格的な最適化を実施し、ポスト京での実行のための準備を完了する。

**活動内容：**①ポスト京で実行するために、計算規模・時間の検討、コードの開発・最適化、などを実施する。②ポスト京時代に備えて、各研究分野における最先端の研究を継続する。

**サブ課題A「究極の物理法則と宇宙開闢の解明」**  
素粒子の精密実験と相補的な役割を果たす精密計算を実現し素粒子標準模型を検証。



**サブ課題B「物質創成史の解明と物質変換」**  
バリオン間相互作用、原子核の構造と反応、超新星爆発・中性子星連星合体という素粒子から天体現象までをシミュレーションで関連させ、物質創成・変換過程を理解。

**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」**  
宇宙の階層的構造形成と銀河形成、ブラックホール進化を融合した大規模計算を行い、広域サーベイ観測データの統計解析により宇宙の進化史を解明。

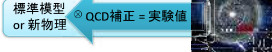
### サブ課題A：究極の物理法則と宇宙開闢の解明

**概要：**SuperKEKBやJ-PARCで行われる素粒子の精密実験と相補的な役割を果たす精密計算を実現し、素粒子標準模型を検証する。そのために、格子量子色力学(QCD)の大規模シミュレーションにより素粒子反応における標準模型からの寄与を精密に求めることが鍵になる。標準模型からのズレが見つかれば、新しい物理法則発見への手がかりとなる。また、究極理論の候補とされる超弦理論のシミュレーションにより、宇宙開闢の謎に迫る。

#### ポスト京で目指すもの

##### 「素粒子現象論」

小さな格子間隔での格子QCDシミュレーションにより、重いボトムクォークの直接計算が可能になり、B中間子崩壊などに対する素粒子標準模型からの寄与が精密に計算できる。格子QCDは精密科学と呼べる段階に入り、新物理法則探索においてSuperKEKB実験やJ-PARC実験と相補的な役割を果たす。



##### 「QCD相転移」

カイラル対称性を厳密に扱った計算で軽いクォーク領域での相転移の次数を確定させる。

##### 「超弦理論」

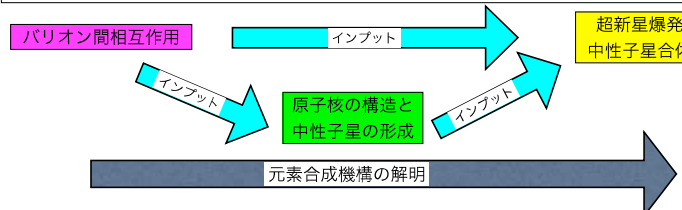
ゲージ重力対応の検証をさらに進め、ゲージ理論を通じた量子重力の非摂動的計算を実現する。行列模型のシミュレーションにより、空間3次元の宇宙創成とインフレーションに対する理解を進める。

### サブ課題B：物質創成史と物質変換

**概要：**水素からウランに至る元素は物質を構成する要素であるが、138億年の宇宙史に於けるその創成の過程は大きな謎である。最近では、従来の常識を覆して、中性子星の合体で重元素が創成されるのでは、ということが指摘されている。この物質創成の過程を素粒子・原子核・宇宙天文学の連携で、マイクロな力とそれが作る多体系、宇宙におけるそのマクロな現れを、俯瞰的な視野と確かな基礎に立って調べる。同時に、そのような計算による放射性物質の核変換などの理解にも取り組む。

#### ポスト京で目指すもの

物質創成の歴史の解明を大目標に、素粒子・原子核・宇宙天文学分野の連携により、基礎物理学における階層をまたいだ未解決問題の定量的理解を目指す。J-PARC、RIBF、KAGRA、SUBARUなどの関連大型設備との連携を深めることで、研究成果の還元やより一層の発展を図る。



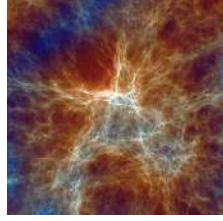
## サブ課題C：大規模数値計算と広域宇宙観測データの融合による宇宙進化の解明

概要：宇宙誕生から現在までの宇宙進化を解明するためには、現代物理学を駆使したアプローチが必要である。本課題では、現実的な宇宙論的設定のもとでダークマターの密度揺らぎの非線形成長を追い、さらに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ックスシミュレーションを遂行する。また、世界中で進められている広域撮像観測により得られた天文ビッグデータと大規模計算を融合したビッグデータ宇宙論を展開する。

### ポスト京で目指すもの

星、銀河、巨大ブラックホールといった諸階層をつなぐシミュレーションを実現し、宇宙初期から現在までの宇宙進化の包括的理解を目指す。

宇宙大規模構造の粒子1兆個級の計算



- 可能な限りダイナミカルレンジの大きな計算を実現し、諸階層をつなぐ理論を構築する。
- 輻射、ニュートリノ輸送、磁場を忠実に再現することを目指す。
- 最先端観測（すばる望遠鏡、ALMA望遠鏡、TMT計画など）との直接比較が可能なレベルのアウトプットを生成する。
- 情報科学者と統計学者と協同し、大規模サーベイ観測のデータ解析のために必要な統計量を導く。

## ポスト京への期待（要望）

- アプリに対する実行性能が高いこと
  - コデザインによる最適化、高性能化、シミュレータ
  - 高速なメモリ（キャッシュの活用?）
  - チューニング支援（リスポンス時間の短縮、丸投げではない共同作業）
  - ユーザーによるチューニングの容易さ（情報開示、ノウハウの共有）
- 効率的な運用
  - 具体的なジョブをイメージした運用システムの構築（コデザイン?）
  - 効率的な大規模ファイル入出力によるジョブ実行時間の短縮
  - 無駄のないジョブ運用、様々なジョブ形態に適応したジョブクラスの設定
  - 待ち時間の短縮、待ち時間の公平性
  - システムの安定性、ファイルシステムの安定性

## ポスト京への期待（要望）

- 以下は可能な範囲での要望
  - 高速で大容量のファイルシステム
  - 1 CPUあたりの十分なメモリ
  - 低消費電力
  - 低価格化による同システムの普及
  - 京アプリの移植の容易さ
  - ユーザ支援の充実