

富岳

富岳百景

公開シンポジウム予稿集

成果創出加速プログラムシンポジウム

スーパーコンピュータ「富岳」

「富岳」共用開始一周年記念イベント

「富岳」共用開始一周年記念イベント  
スーパーコンピュータ「富岳」  
成果創出加速プログラムシンポジウム

# 富岳百景 公開シンポジウム予稿集

## 目次

---

●セッション1：防災・減災	.....	P5
●セッション2：ライフ	.....	P29
●セッション3：材料	.....	P59
●セッション4：ものづくり	.....	P69
●セッション5：宇宙・素粒子	.....	P77

講演者一覧(敬称略)

研究分野	課題番号	講演タイトル	講演者名(所属機関)	ページ
防災・減災	hp210166	台風・線状降水帯の新時代の数値予測	佐藤 正樹(東京大学 大気海洋研究所 教授)	5
防災・減災	hp210171	地震を知って震災に備えるために「富岳」を活かす	堀 高峰(海洋研究開発機構 海域地震火山部門 地震津波予測研究開発センター センター長)	19
ライフ	hp210169	脳結合データ解析と機能構造推定に基づくヒトスケール全脳シミュレーション	山崎 匡(電気通信大学 大学院情報理工学研究科 情報・ネットワーク工学専攻 准教授)	29
ライフ	hp210167	がんのはじまりを探る -クローン性造血と白血病-	小川 誠司(京都大学 医学研究科 腫瘍生物学講座 教授 / カロリンスカ研究所 分子血液学 (客員))	43
材料	hp210173	次世代EV開発に向けたバッテリーマテリアル研究on「富岳」	館山 佳尚(物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点 副拠点長)	59
ものづくり	hp210168	スバコン「富岳」で航空機の「ながれ」を科学する ~次世代のシミュレーション科学と航空機開発~	河合 宗司(東北大学 大学院工学研究科 航空宇宙工学専攻 教授)	69
宇宙・素粒子	hp210164	「富岳」で太陽の中身を知る	堀田 英之(千葉大学 理学研究院 宇宙物理学研究室 准教授)	77

チェア一覧(敬称略)

研究分野	チェア(所属機関)
防災・減災	高橋 桂子(「富岳」成果創出加速プログラム 領域総括 / 早稲田大学 総合研究機構グローバル科学知融合研究所 研究院教授)
ライフ	岡田 真里子(大阪大学 蛋白質研究所 教授)
材料	常行 真司(「富岳」成果創出加速プログラム 領域総括 / 東京大学 大学院理学系研究科 教授)
ものづくり	藤井 孝蔵(「富岳」成果創出加速プログラム 領域総括 / 東京理科大学 工学部情報工学科 教授)
宇宙・素粒子	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)

公開シンポジウムプログラム 3/29(火)

時間	プログラム
10:00 10:20	OPENING 「富岳」成果創出加速プログラムについて 藤井 孝蔵(「富岳」成果創出加速プログラム 領域総括 / 東京理科大学 工学部情報工学科 教授)
10:20 11:50	「富岳」FORWARD~Society 5.0のソリューション創出に向けて~ 松岡 聡(理化学研究所 計算科学研究センター センター長) 奥野 恭史(京都大学 / 理化学研究所 教授) 坪倉 誠(神戸大学 / 理化学研究所 教授)
11:50 13:00	昼休憩
	セッション1: 防災・減災
13:00 13:10	趣旨説明 チェア: 高橋 桂子 (「富岳」成果創出加速プログラム 領域総括 / 早稲田大学 総合研究機構グローバル科学知融合研究所 研究院教授)
13:10 13:30	講演1(課題番号: hp210166)「台風・線状降水帯の新時代の数値予測」 佐藤 正樹(東京大学 大気海洋研究所 教授)
13:30 13:50	講演2(課題番号: hp210171)「地震を知って震災に備えるために「富岳」を活かす」 堀 高峰(海洋研究開発機構 海域地震火山部門 地震津波予測研究開発センター センター長)
13:50 13:55	まとめ チェア: 高橋 桂子 (「富岳」成果創出加速プログラム 領域総括 / 早稲田大学 総合研究機構グローバル科学知融合研究所 研究院教授)
	セッション2: ライフ
13:55 14:05	趣旨説明 チェア: 岡田 真里子 (大阪大学 蛋白質研究所 教授)
14:05 14:25	講演3(課題番号: hp210169)「スバコン「富岳」で脳をつくる」 山崎 匡(電気通信大学 大学院情報理工学研究科 情報・ネットワーク工学専攻 准教授)
14:25 14:45	講演4(課題番号: hp210167)「がんのはじまりを探る -クローン性造血と白血病-」 小川 誠司(京都大学 医学研究科 腫瘍生物学講座 教授 / カロリンスカ研究所 分子血液学 (客員))
14:45 14:50	まとめ チェア: 岡田 真里子 (大阪大学 蛋白質研究所 教授)
	セッション3: 材料
14:50 15:00	趣旨説明 チェア: 常行 真司 (「富岳」成果創出加速プログラム 領域総括 / 東京大学 大学院理学系研究科 教授)
15:00 15:20	講演5(課題番号: hp210173)「次世代EV開発に向けたバッテリーマテリアル研究on「富岳」」 館山 佳尚(物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点 副拠点長)
15:20 15:25	まとめ チェア: 常行 真司 (「富岳」成果創出加速プログラム 領域総括 / 東京大学 大学院理学系研究科 教授)
15:25 15:45	休憩
	セッション4: ものづくり
15:45 15:55	趣旨説明 チェア: 藤井 孝蔵 (「富岳」成果創出加速プログラム 領域総括 / 東京理科大学 工学部情報工学科 教授)
15:55 16:15	講演6(課題番号: hp210168)「スバコン「富岳」で航空機の「ながれ」を科学する ~次世代のシミュレーション科学と航空機開発~」 河合 宗司(東北大学 大学院工学研究科 航空宇宙工学専攻 教授)
16:15 16:20	まとめ チェア: 藤井 孝蔵 (「富岳」成果創出加速プログラム 領域総括 / 東京理科大学 工学部情報工学科 教授)
	セッション5: 宇宙・素粒子
16:20 16:30	趣旨説明 チェア: 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)
16:30 16:50	講演7(課題番号: hp210164)「「富岳」で太陽の中身を知る」 堀田 英之(千葉大学 理学研究院 宇宙物理学研究室 准教授)
16:50 16:55	まとめ チェア: 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)
16:55 17:05	CLOSING 朴 泰祐(「富岳」成果創出加速プログラム 領域総括 / 筑波大学 計算科学研究センター センター長)

課題番号:hp210166

防災・減災に資する新時代の大アンサンブル気象・大気環境予測

## 台風・線状降水帯の新時代の数値予測

東京大学 大気海洋研究所 教授

佐藤 正樹

2021年度 HPCI ID: hp210166

1

## 台風・線状降水帯の新時代の数値予測

佐藤正樹

東京大学 大気海洋研究所

「富岳」成果創出加速プログラム  
「防災・減災に資する新時代の大アンサンブル気象・大気環境予測」  
研究開発課題責任者

スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム 「富岳百景」公開シンポジウム  
(2022年3月29日、オンライン)

<https://fugaku100kei.jp/events/kasoku/2021/>



## 研究プロジェクトの目的

- 豪雨や台風などの異常気象に対する防災・減災を実現するため、以下の研究を実施します。
  - 数日～数週間～季節スケールの激甚災害事例を対象とした気象・大気環境予測に関する大規模アンサンブル実験
  - 積乱雲などを忠実に表現する高解像度大アンサンブル実験を実施。
  - 確率予測情報をリードタイム付きで提供できる新時代の予測技術確立する
  - 高精度・高頻度・高密度な観測データ（観測ビッグデータ）と組み合わせた高度な予測技術の開発
- 研究テーマ
  - テーマ1「短時間領域予測」。数日先の大雨など悪天候の確率予報の実現
  - テーマ2「地球規模での予測」。台風などの異常気象の発生確率を1週間から数カ月先まで予測する。
  - テーマ3「大規模データ同化手法の高度化」。気象・大気同化を利用した大規模データ同化手法の開発

## 内容

### テーマ3：大規模データ同化手法の高度化

- ・ゴードン・ベルファイナリスト研究 NICAM 3.5km-1024アンサンブルシミュレーション。「富岳」上でのNICAM-LETKFの性能最適化とスケーラビリティ：八代尚（国立環境研究所）

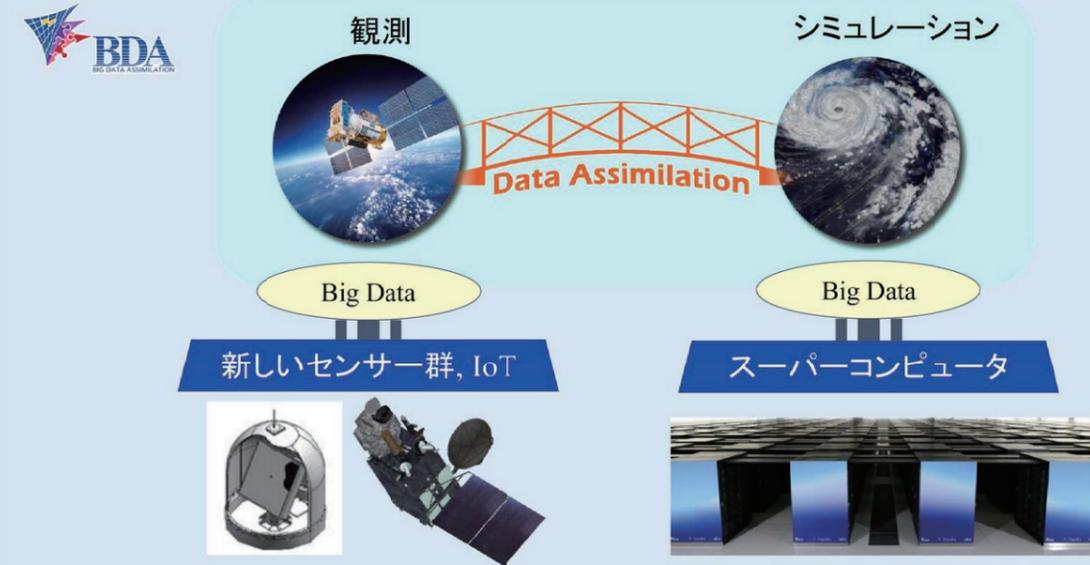
### テーマ1：短時間領域予報

- ・「富岳」を用いた水文モデルによる1000アンサンブルデータ同化・確率予測によるインパクトベース予測 川畑 拓也（気象研究所）
- ・東京2020オリンピック・パラリンピック（2021年8月）における「富岳」を使ったリアルタイムゲリラ豪雨予報 三好建正（R-CCS）

### テーマ2：地球規模での気象予測

- ・14kmメッシュのNICAMを用いた房総半島台風Faxai（2019年）の大アンサンブルシミュレーション。山田洋平（海洋研究開発機構）

## ビッグデータ同化



## ACMゴードンベル賞2020ファイナリスト論文



### The NICAM 3.5km-1024 ensemble simulation: Performance optimization and scalability of NICAM-LETKF on supercomputer Fugaku

Hisashi Yashiro<sup>1,2</sup>, K. Terasaki<sup>2</sup>, Y. Kawai<sup>2</sup>, S. Kudo<sup>2</sup>, T. Miyoshi<sup>2</sup>, T. Imamura<sup>2</sup>, K. Minami<sup>2</sup>, M. Nakano<sup>3</sup>, C. Kodama<sup>3</sup>, M. Satoh<sup>4</sup> and H. Tomita<sup>2</sup>

1) National Institute for Environmental Studies, Tsukuba, Japan  
2) RIKEN Center for Computational Science, Kobe, Japan  
3) Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology, Yokohama, Japan  
4) Atmosphere and Ocean Research Institute, The University of Tokyo, Kashiwa, Japan

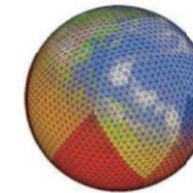
### 「全球気象データ同化システム」 & 「ARM型スーパーコンピュータ」アプリケーションとハードウェアのコードデザイン

富岳（131,072ノード、6,291,456コア）の82%を用いて世界最大のアンサンブルデータ同化実験を実現

## アプリケーション側でのコードデザインへの取り組み

データ同化システムのデータを中心とした設計  
ファイルI/Oと通信スループットを考慮した設計  
(Yashiro et al. 2016)

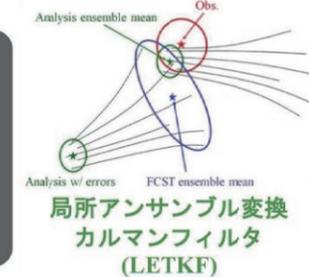
全球雲解像モデルNICAM



単精度浮動小数点の活用  
Nakano et al. (2018)の力学コアテスト

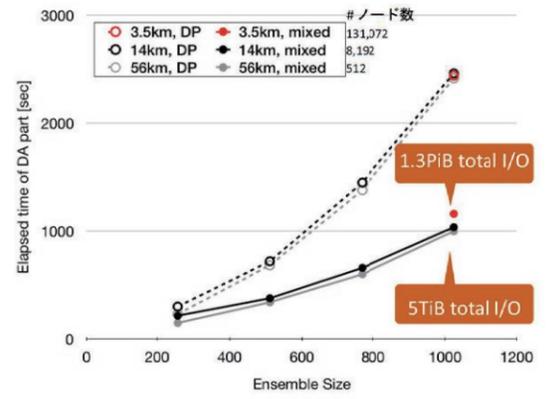
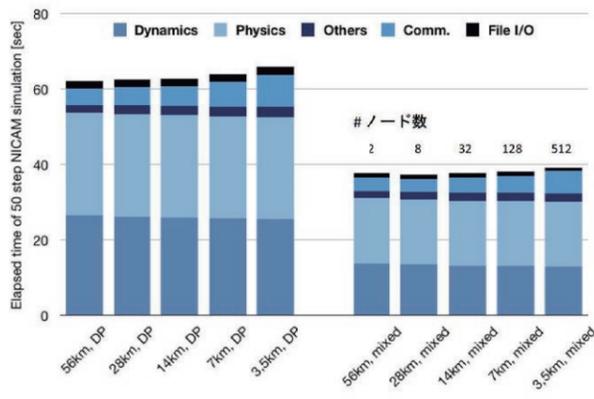
"家計簿"方式  
詳細なプロファイリングとコード中の小さな"time eater"の検出

カーネルレベルの最適化  
・並列性確保とメモリ局所性のトレードオフ  
・レジスタスピルとメモリ局所性のトレードオフ



固有値ソルバーの最適化  
単一プロセスでの小規模(<1000)行列のための専用ライブラリ

## シミュレーション部分、データ同化部分のスケラビリティ試験



- シミュレーション部分 (NICAM) : 良好な弱スケラビリティ
- 混合精度による1.6倍速化

- データ同化部分 (LETKF) : ファイル入出力時間を大幅に短縮
- 単精度で最適化された固有値ソルバーにより、大規模アンサンブルの計算時間が短縮

## NICAM-LETKFの実験

- 世界最大規模のアンサンブル気象データ同化を実現
  - 3.5kmメッシュ、1024メンバー
  - ~4兆グリッドポイント、1.3PByteのデータ転送量
  - 1回の同化サイクルが4時間以内に終了 : 「京」よりも100倍早い
- 将来の高性能気象/気候シミュレーションのための唯一の解決策は存在しない
  - トレードオフを認識し、コデザインを推進する必要性
  - データのトータルスループットと並列性が重要なキーワードとなる

## 「富岳」を用いた水文モデルによる1000メンバーアンサンブルデータ同化と確率予測によるインパクトベース予測

「富岳」による1000アンサンブル1 km格子シミュレーション

目的 : 大雨、浸水、洪水、地滑りに関する緊急避難レベルの確率的予測

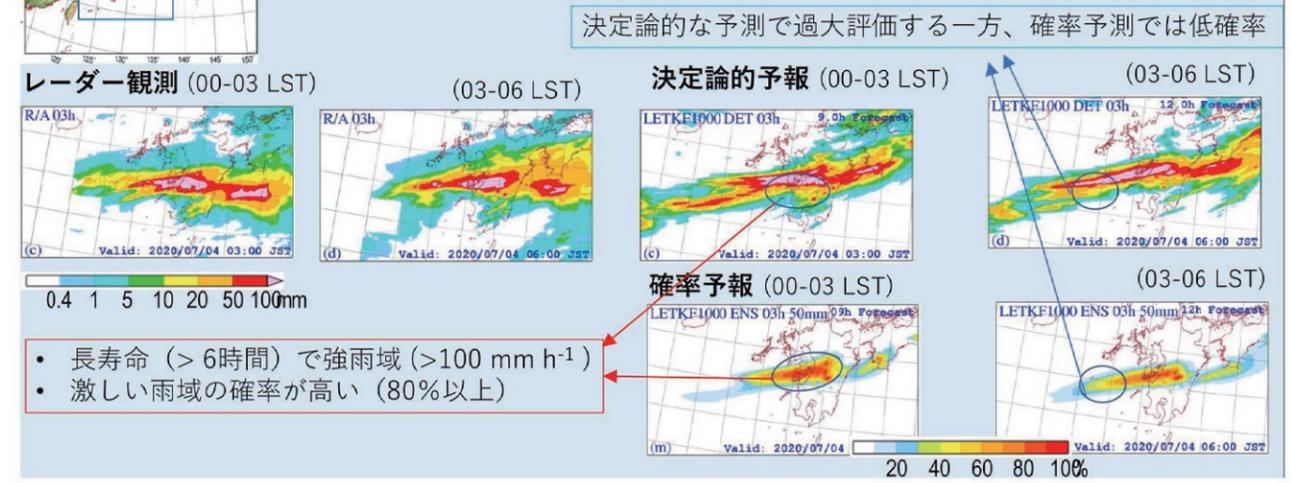
水文災害の発生確率を予測する水文モデルと高解像度気象モデルの結合

## 気象学的アンサンブルシミュレーション

Experimental setting

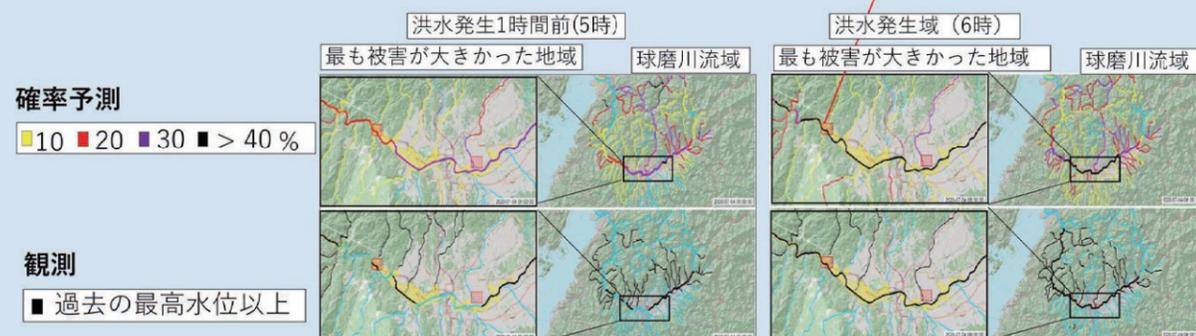
同化 (左図の全領域)  
NHM-LETKF Inner:15km、Outer:5km、6時間毎  
気象庁現業メソスケール同化システムとほぼ同じ観測値を利用

予報 (青枠) : 気象庁NHMの2km格子での1000メンバー  
7月3日 (洪水発生12時間前)



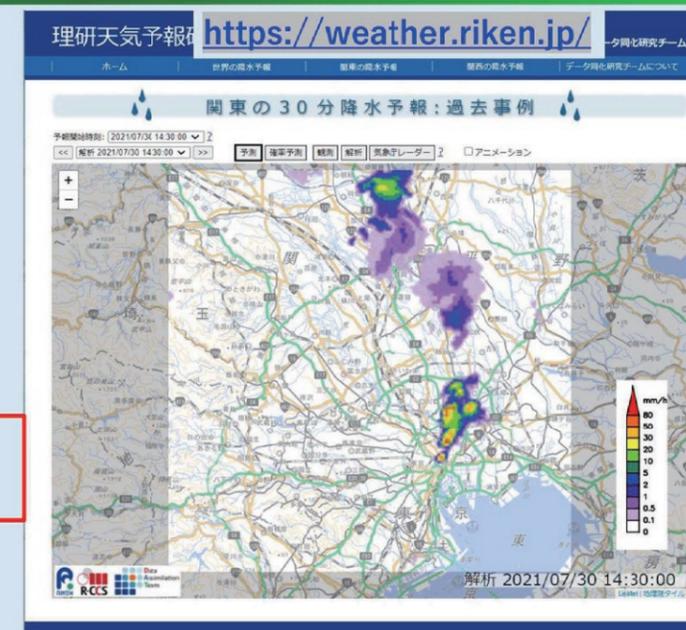
## 水文学的アンサンブルシミュレーション

- \* 1000アンサンブルで球磨川流域の数十本の河川を予測
- \* 球磨川での観測は、5時にほぼ最高値を記録
- \* 最も被害が大きかった地域で、洪水発生を20~30%の確率で予測



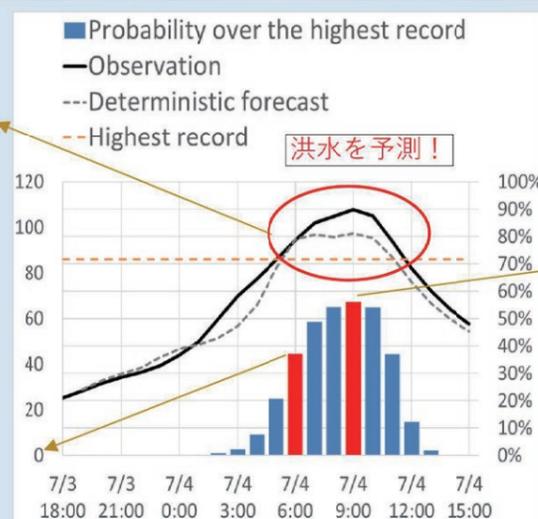
## 「富岳」を使ったリアルタイムゲリラ豪雨予報

- 首都圏でリアルタイム実証実験を実施
- 30秒ごとに予報を更新



## 水文学的アンサンブルシミュレーション

観測値、予報値ともに、洪水時の過去最高水位の記録を超過した



最終的には60%の確率で洪水を予測

洪水時は40%の確率

洪水発生12時間前の予測に成功!

## 「富岳」を使ったリアルタイムゲリラ豪雨予報

### 「富岳」の約9% (約0.5百万コア) を独占使用

	2020年実施	2021年実施
利用したスーパーコンピュータ	Oakforest-PACS (東 京大学)	「富岳」
同化アンサンブルサイズ	50	1000
予測アンサンブルサイズ	1	10
境界条件	米国NCEP GFS	日本気象協会 MSM
多重ネストの数	4	2 (よりシンプルに)

## 新型マルチパラメーターフェーズドアレイ気象レーダーの利用

マルチパラメーターフェーズドアレイ気象レーダー (MP-PAWR) は2014-2018年SIP (省庁横断戦略的イノベーション推進プログラム) において開発されました。



- > 二重偏波
- > 100×100素子アレーアンテナ



### 水蒸気・雲・降水観測による早期予測



MP-PAWR アンテナ

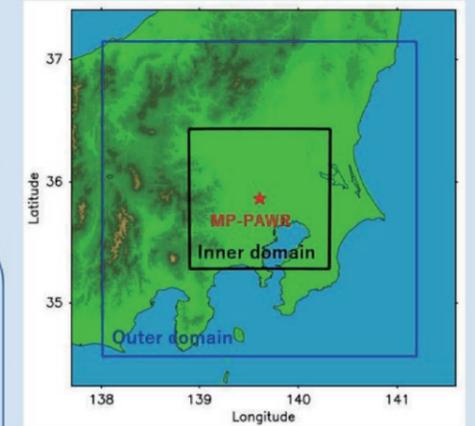
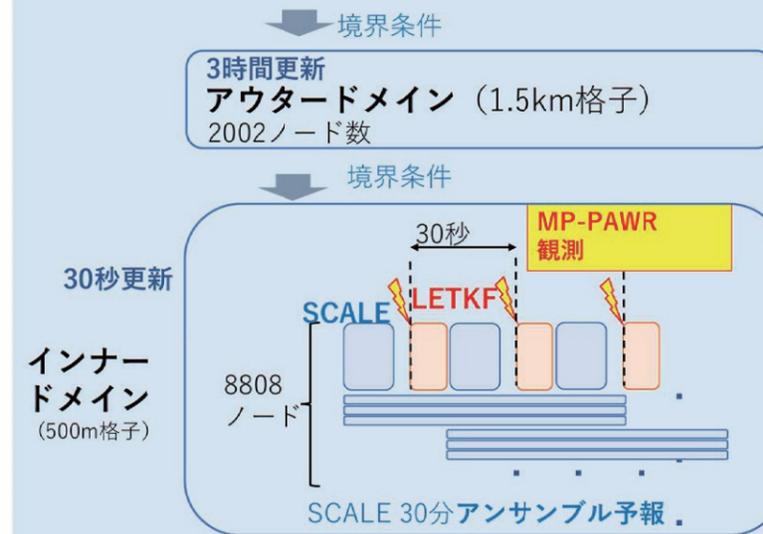


観測エリア

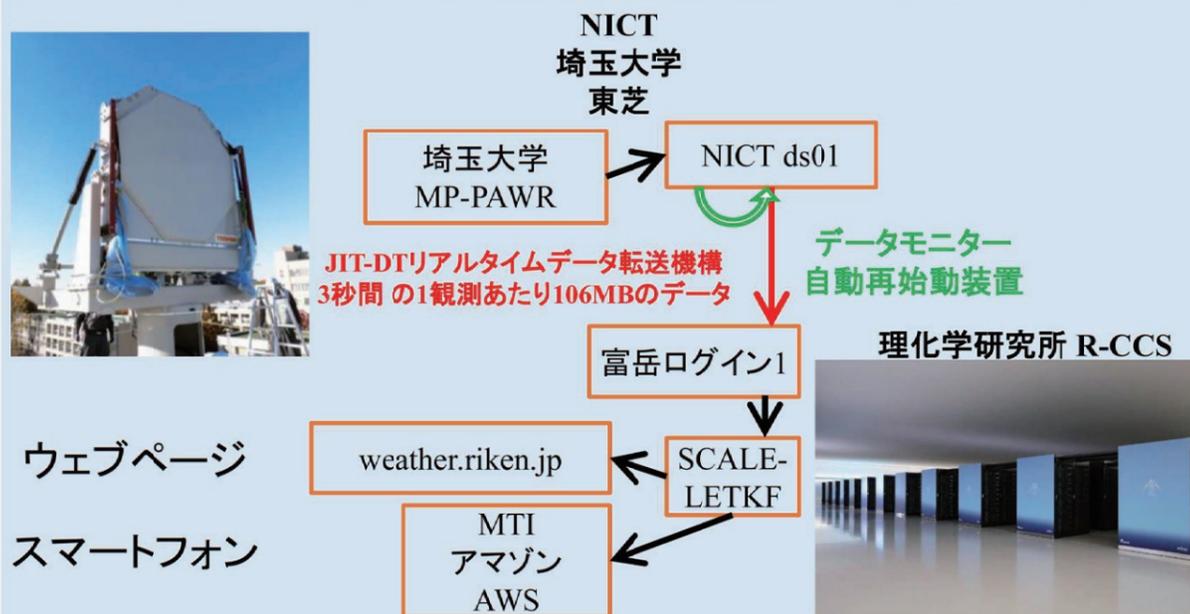
- 2017年11月21日に埼玉大学にMP-PAWRを設置
- 2018年7月より観測を開始

## リアルタイムワークフロー

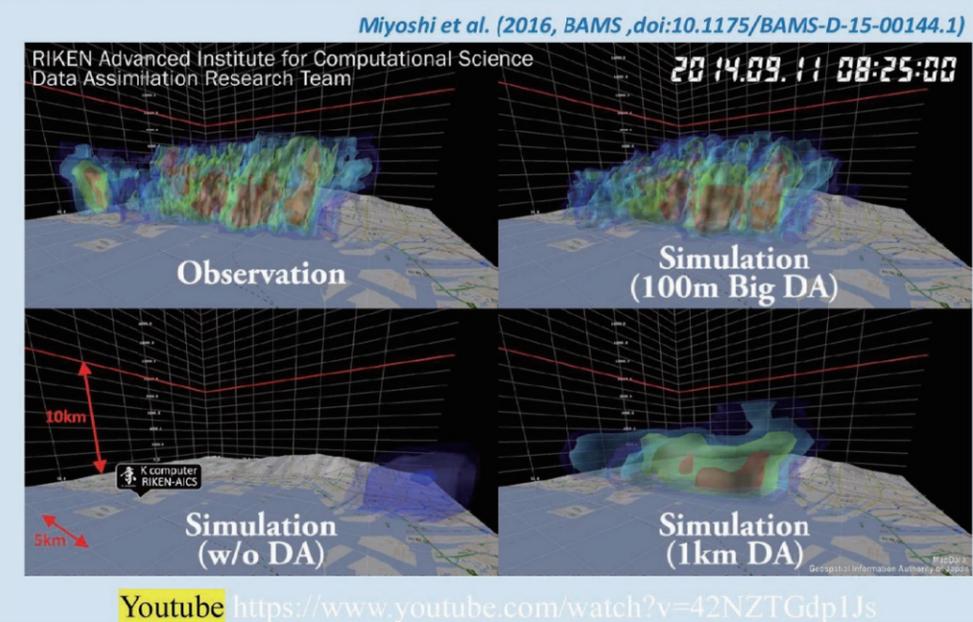
気象庁メソスケールモデル(5km格子)



## リアルタイムデータ転送

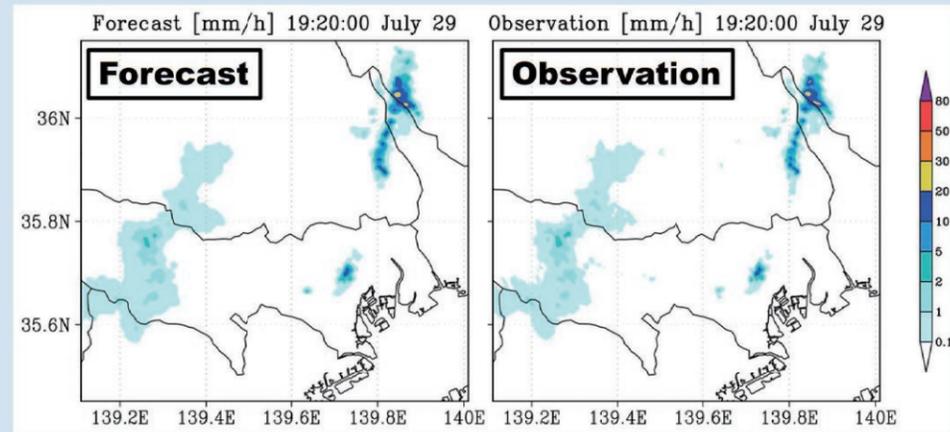


## 30秒毎に更新するビッグデータ同化



Youtube <https://www.youtube.com/watch?v=42NZTGdp1Js>

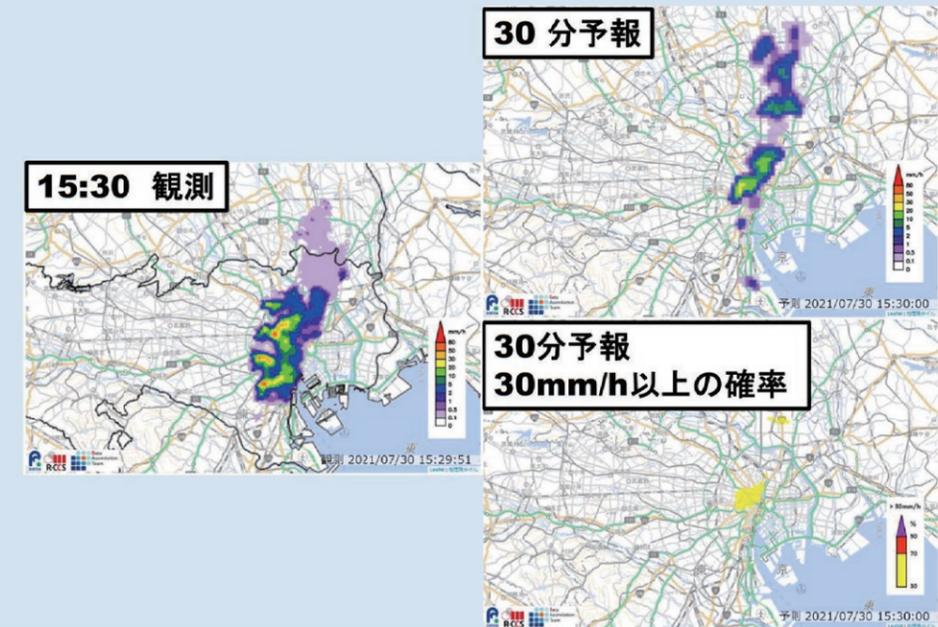
## 2021年7月29日 19時30分頃



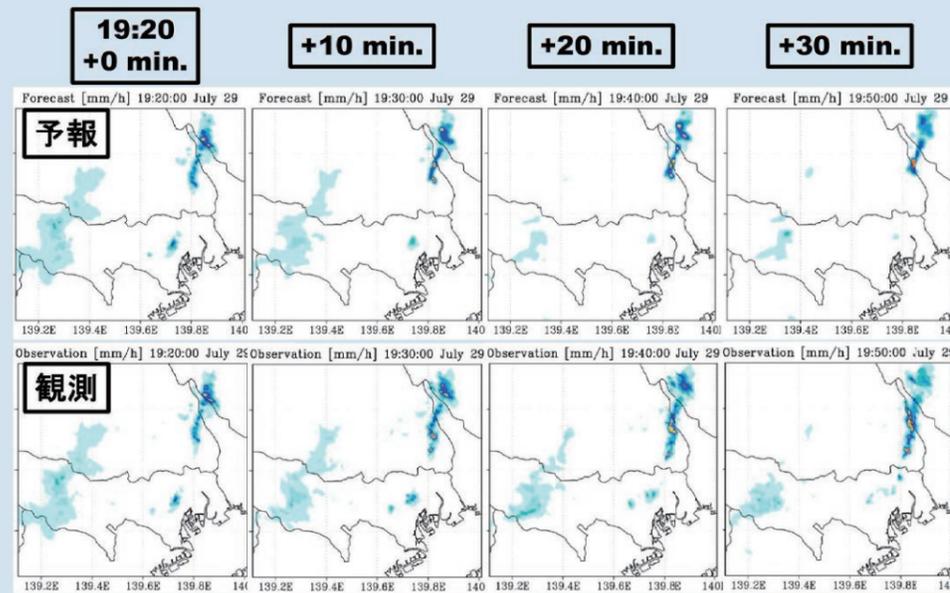
予報

観測

## 2021年7月30日 15時30分頃

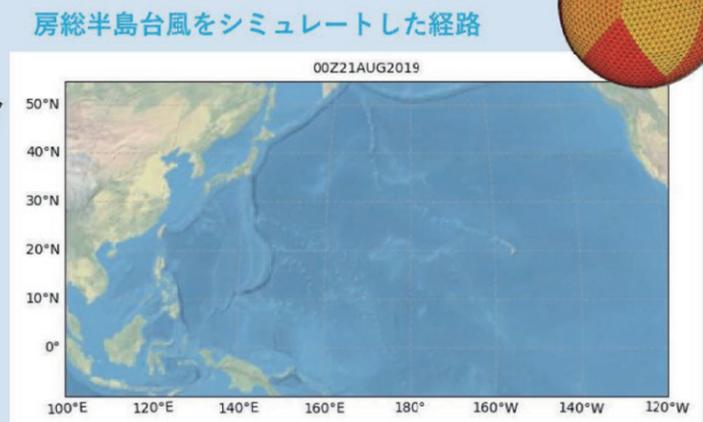
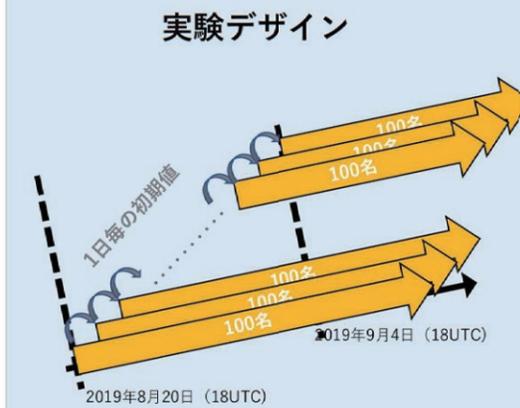


## 2021年7月29日 19時30分頃



## 房総半島台風(2019年9月)の大アンサンブルシミュレーション

14kmメッシュNICAMによる1600メンバーアンサンブル実験



初期時間: 16 (8/20 18UTC~ 9/4 18UTC)  
 # 各初期時刻のアンサンブルメンバー数: 100  
 アンサンブルの総メンバー数 **1600** (100 x 16)  
 積分期間: ~1ヶ月

記号: 位置  
 色: 初期時刻  
 大きさ: 強度(風速)

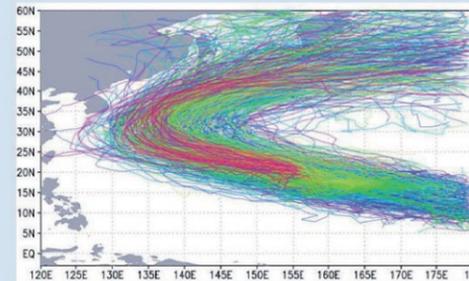
## 房総半島台風(2019年9月) の大アンサンブルシミュレーション

実際の台風を現実的に予測可能なアンサンブルメンバー

### # リードタイムごとの台風数



- 現実に近い台風を予測するメンバー数(674/全1600)
- 70% 程度のメンバーで現実に近い台風を予測 (リードタイム8日)
- 予測確率が増加 (リードタイム11~8日)



## 房総半島台風(2019年9月) の大アンサンブルシミュレーション

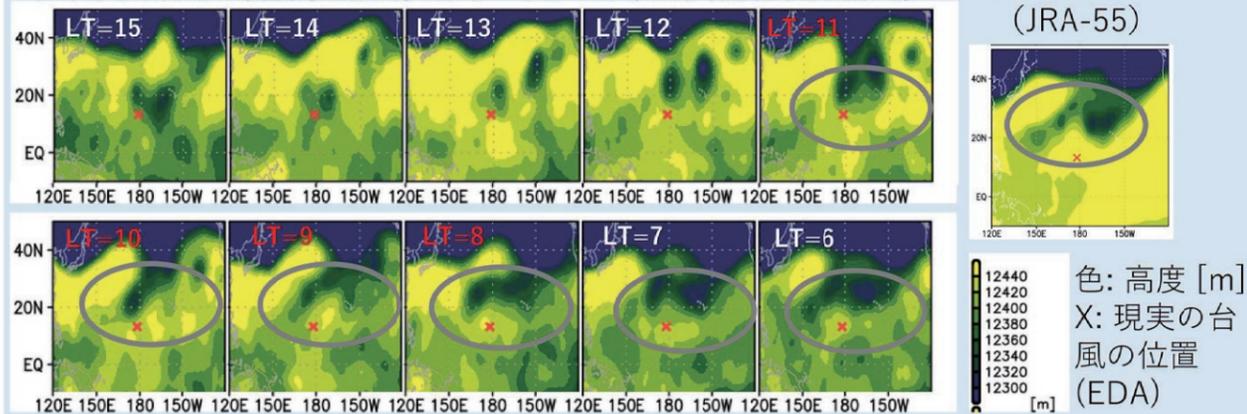
- 「富岳」において、14kmメッシュのNICAMによる房総半島台風(2019年)の1600メンバーアンサンブルシミュレーションに成功しました。
- 現実に近い台風を予測したメンバー数は、リードタイム11日から8日の間で増加した。
- 成功率の増加は、リードタイム11日から8日の間のシミュレーションで対流圏上層のトラフを再現できるようになったことに起因すると考えられる。

## 房総半島台風(2019年9月) の大アンサンブルシミュレーション

リードタイムによる大気環境条件の違い

ジオポテンシャル高度(200hPa) vs. リードタイム(2019年8月30日18UTC)

再解析データ (JRA-55)



初期時刻が遅くなるにつれて、対流圏上層部のトラフの再現性が向上する。

## まとめ

今までに例がない新手法の予測実験を実現

- 超高解像度・超大規模の全球気象アンサンブルシミュレーションを実施
- ペタバイト級の高性能データ解析

- 最先端スーパーコンピュータと実アプリケーションとのコデザインに成功
- エクサスケール時代におけるアプリケーションの「データ中心設計」の重要性

予測精度を向上させた1000アンサンブル予測実験の実例

- 2020年7月の線状降水帯による球磨川の洪水
- 2019年9月の房総半島台風
- 2021年8月の「富岳」を使ったリアルタイムゲリラ豪雨

課題番号:hp210171

大規模数値シミュレーションによる地震発生から  
地震動・地盤増幅評価までの統合的予測システムの構築とその社会実装

## 地震を知って震災に備えるために 「富岳」を活かす

海洋研究開発機構

海域地震火山部門 地震津波予測研究開発センター センター長

堀 高峰

## 地震を知って震災に備える ために「富岳」を活かす

国立研究開発法人海洋研究開発機構

地震津波予測研究開発センター長

堀 高峰



### 自己紹介

#### ・専門：地震発生予測（主に海溝型巨大地震を対象）

##### ・京大理：1989-1999.3

###### ・地震学講座（当時新設）

・私：「地震予知を研究したいのですが」尾池和夫教授：「変わった人が来ましたね」

・「西南日本の地震活動期」地球惑星科学専攻で博士（理学）学位取得

##### ・JAMSTEC：1999.4-現在

###### ・巨大地震の発生パターン変化の研究

・初代地球シミュレータ

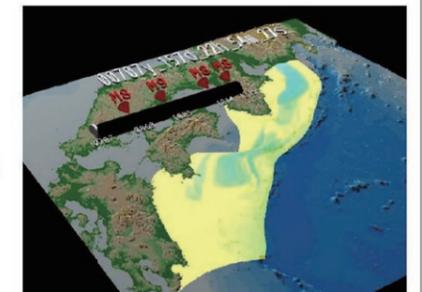
###### ・地震発生予測手法の研究

・「京」

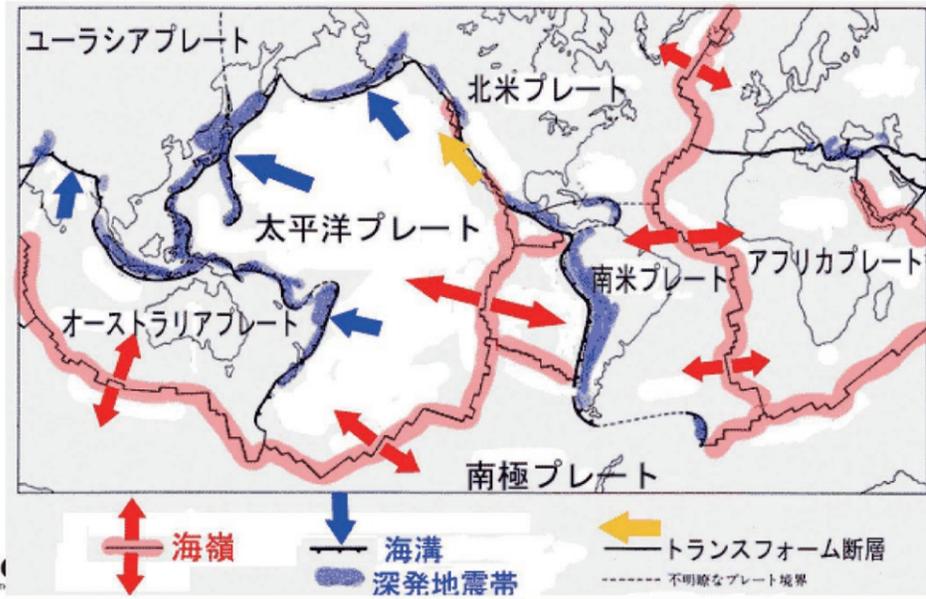
###### ・地震発生から地震動までをつなぐ研究

・「富岳」

###### ・海底でのリアルタイムモニタリング&データ解析による プレートの動きの現状把握と推移予測システムの開発

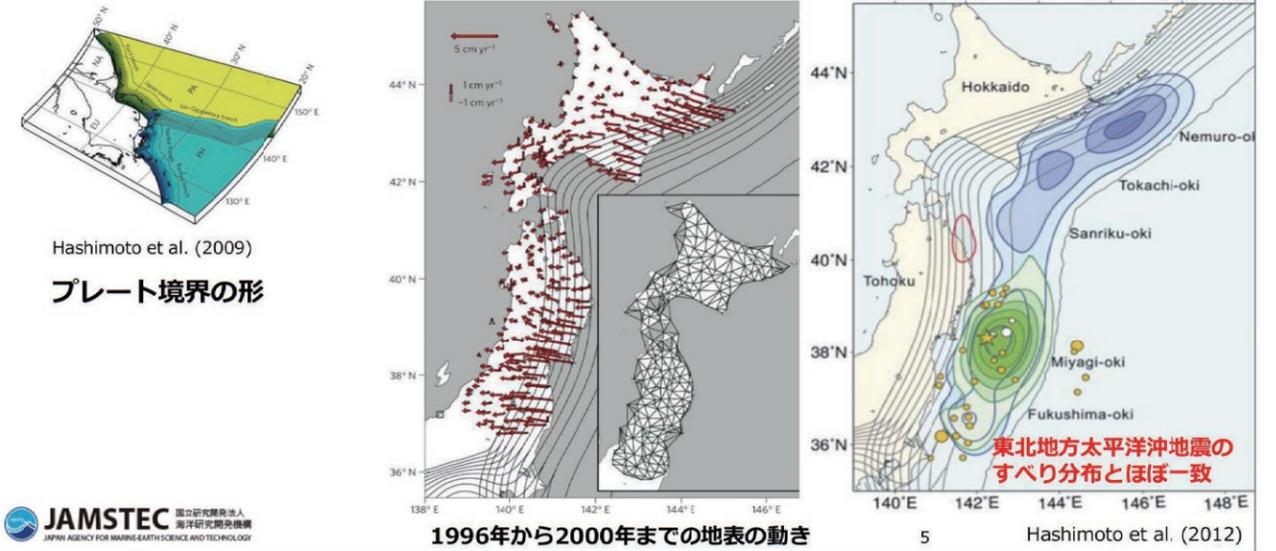


# 地震の原因：プレート運動



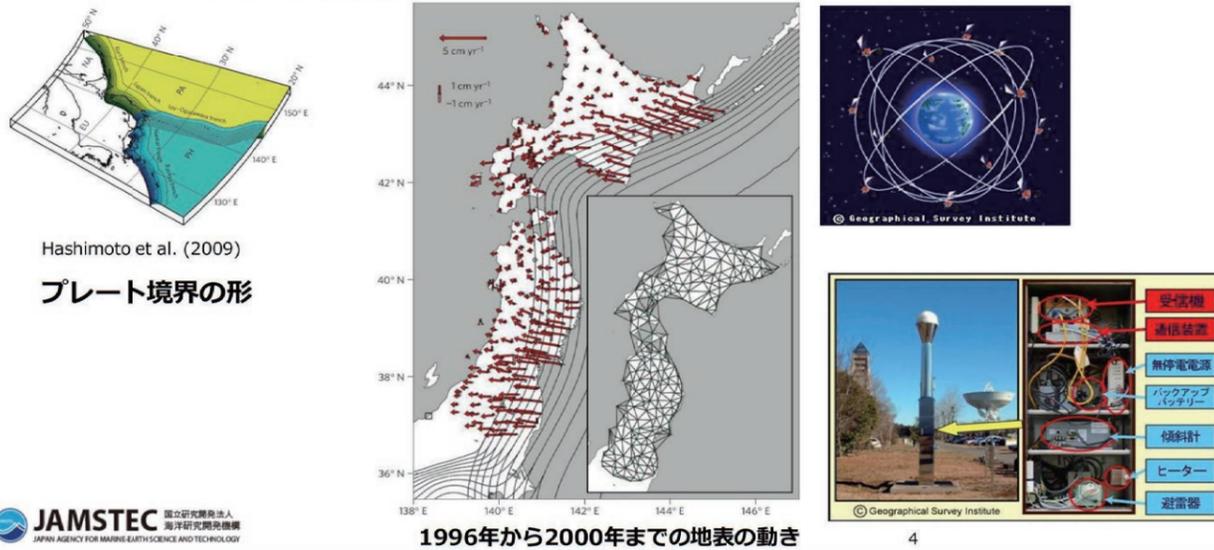
# プレートの境界は本当に固着している？

日本列島のひずみ方を正確に測ることで  
プレート境界のくつき具合がわかる！

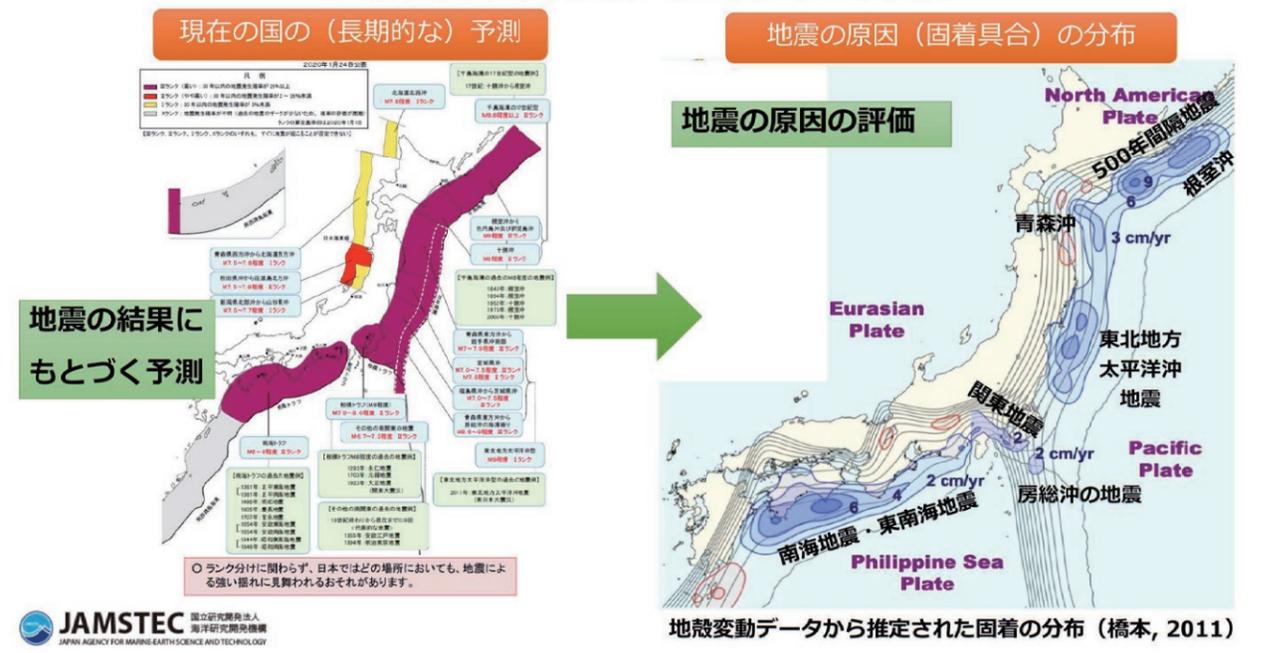


# プレートの境界は本当に固着している？

日本列島のひずみ方を正確に測ることで  
プレート境界のくつき具合がわかる！



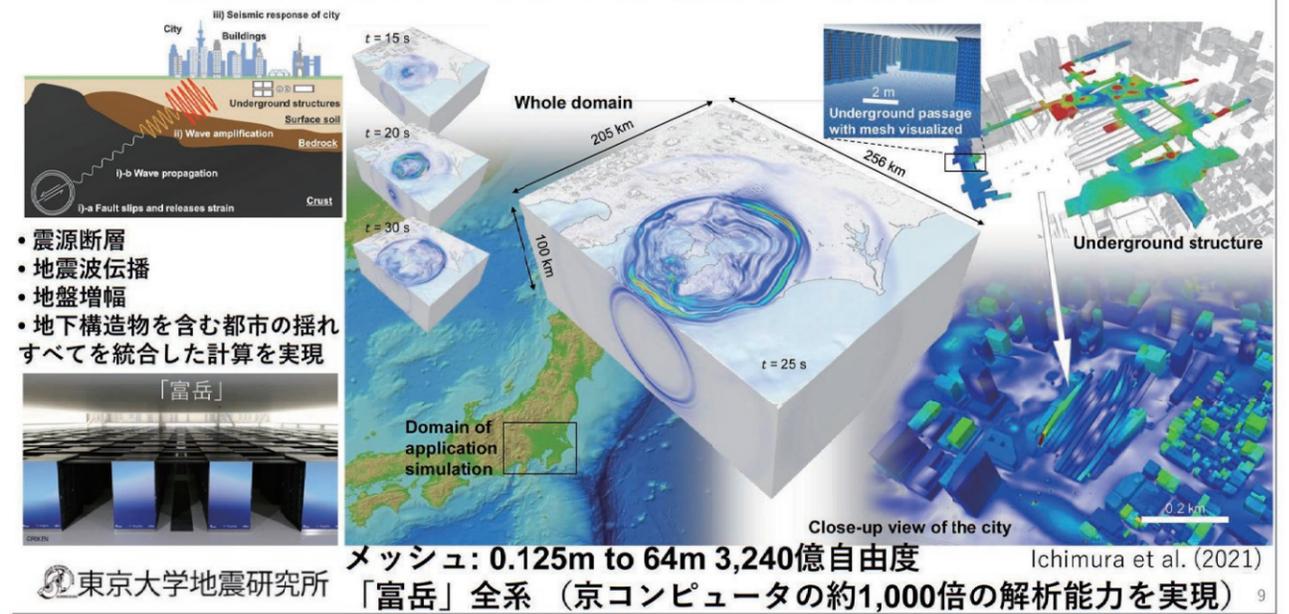
# 結果の評価から原因の評価へ



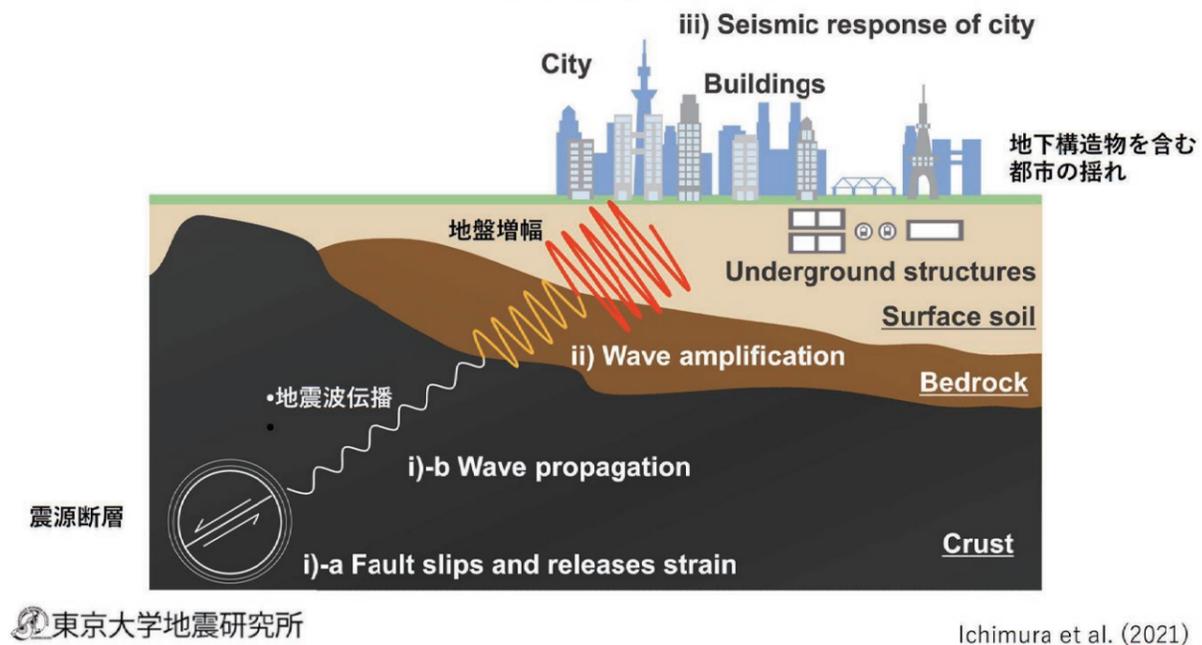
# 結果の評価から原因の評価へ



# 関東平野を含む広域モデルで、地下深部の地震発生から構造物の揺れまでのシームレスな計算を「富岳」で実施

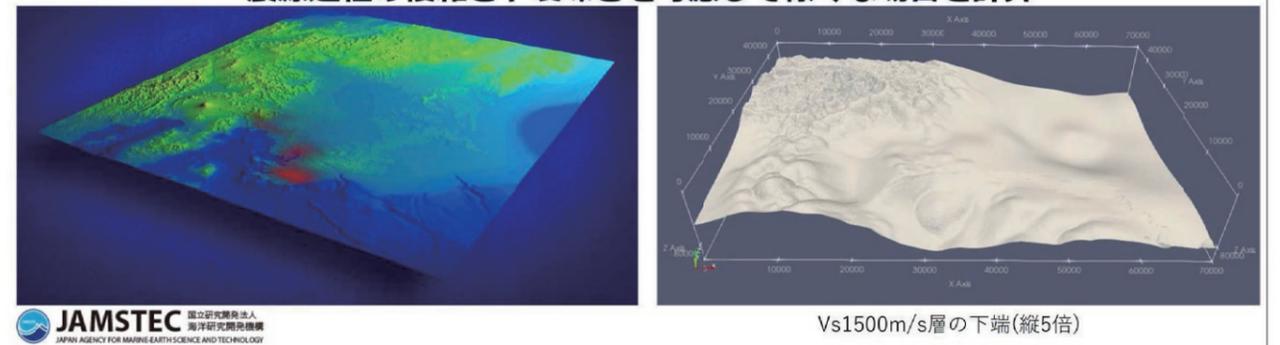


# 「揺れ」に備える

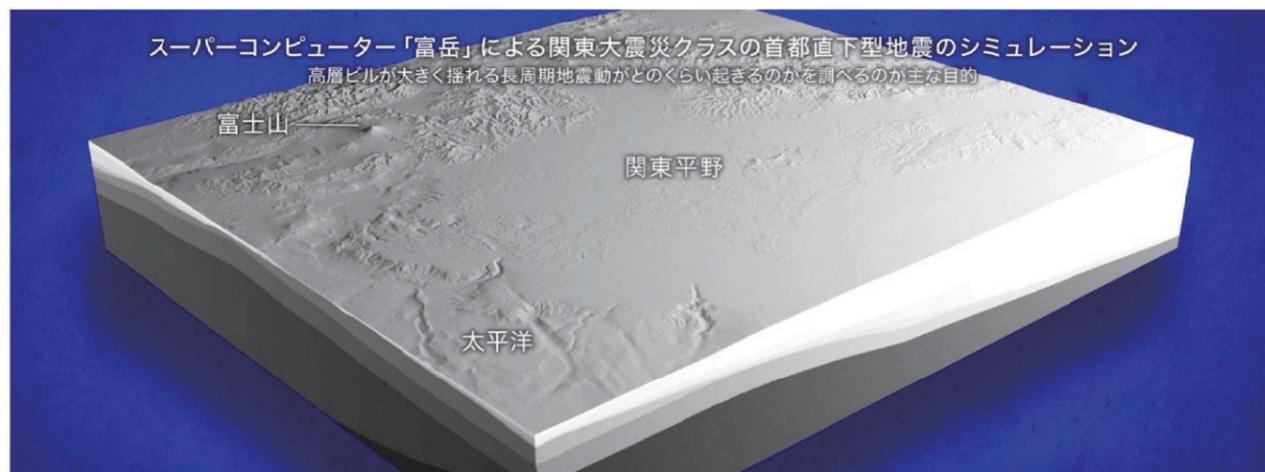


# 相模トラフ沿いの巨大地震に伴う長周期地震動による被害予測の高度化のための「富岳」での実地下構造モデルでの長周期地震動計算

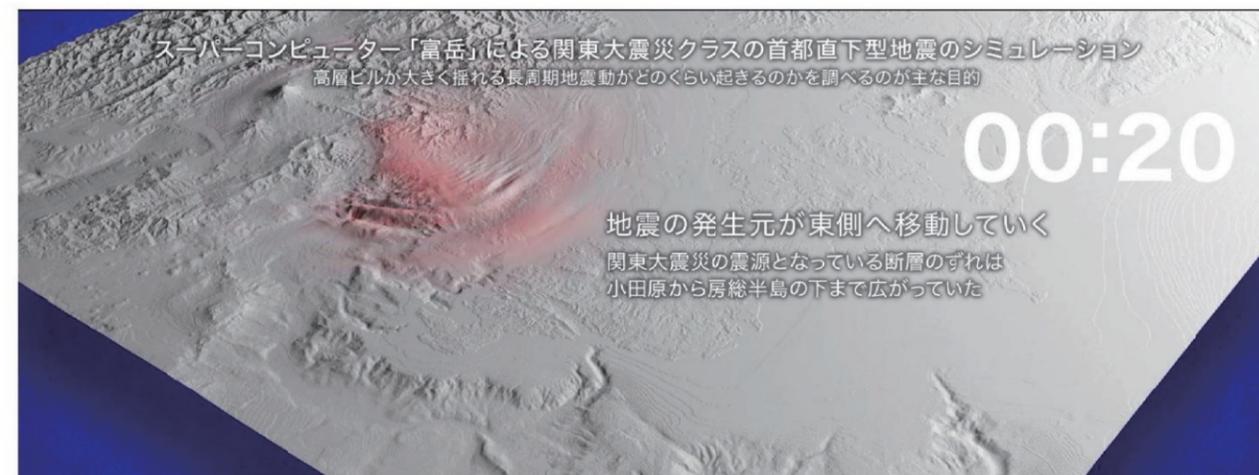
- 関東地方における長周期地震動のシミュレーション
  - 詳細な地形を反映させた計算モデルの構築
    - 現実の問題に適用できる地下構造モデルは周期2秒程度まで
    - 588億自由度、147億個の四面体要素からなる
  - 「富岳」の4096計算ノードを5時間使用
  - 震源過程の複雑さや曖昧さを考慮して様々な場合を計算



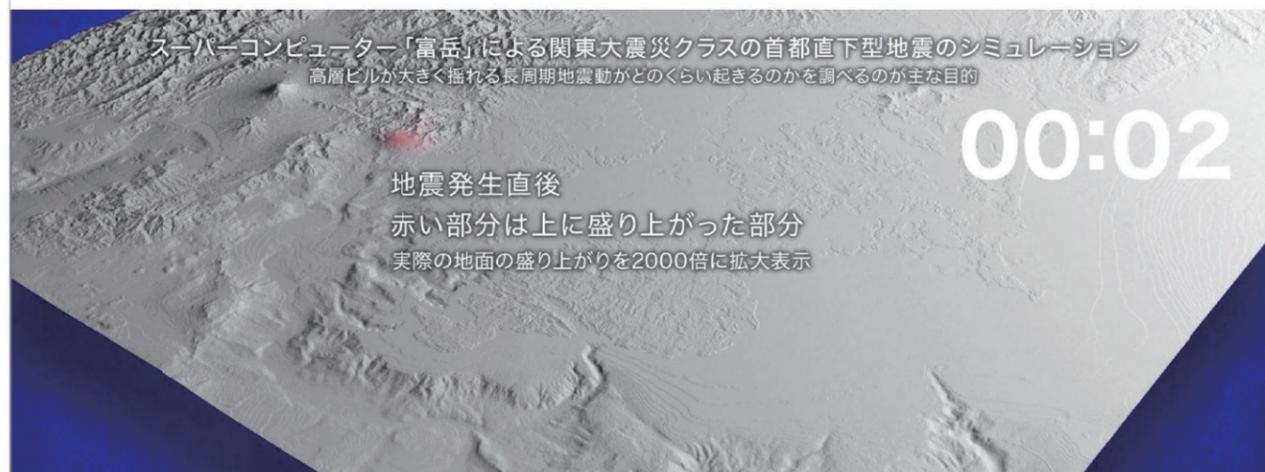
## 相模トラフ沿いの巨大地震に伴う長周期地震動による被害予測の高度化のための「富岳」での実地下構造モデルでの長周期地震動計算



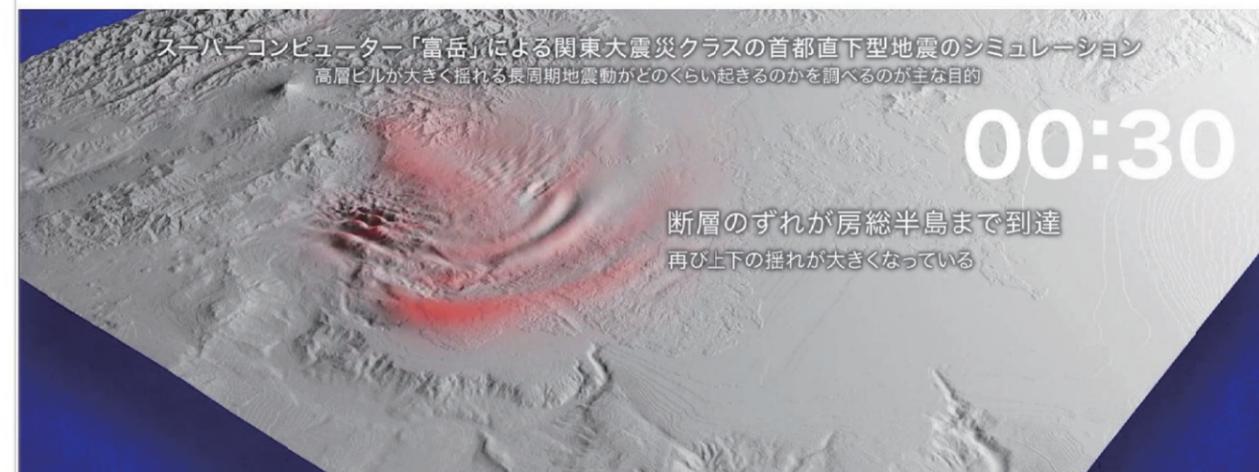
## 相模トラフ沿いの巨大地震に伴う長周期地震動による被害予測の高度化のための「富岳」での実地下構造モデルでの長周期地震動計算



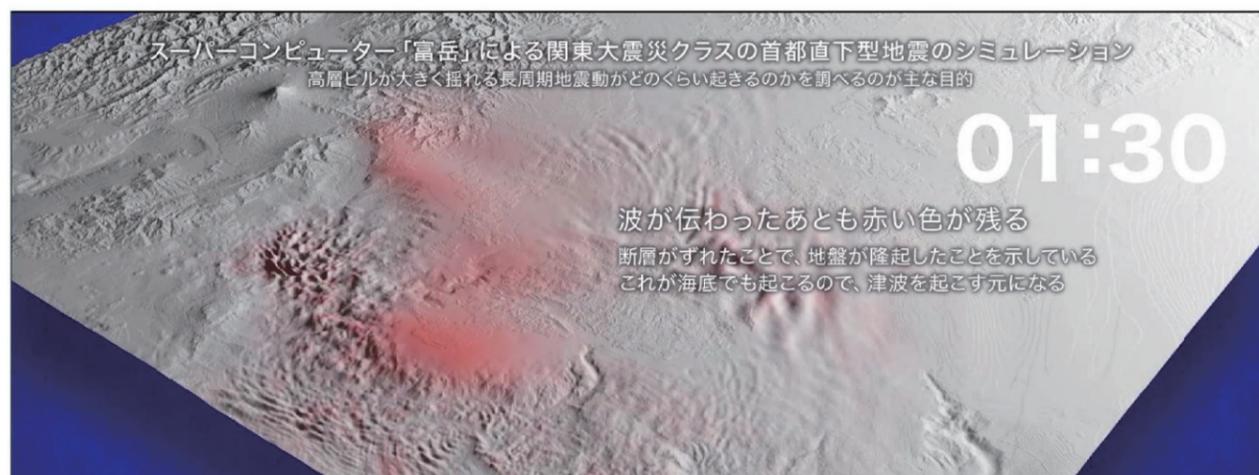
## 相模トラフ沿いの巨大地震に伴う長周期地震動による被害予測の高度化のための「富岳」での実地下構造モデルでの長周期地震動計算



## 相模トラフ沿いの巨大地震に伴う長周期地震動による被害予測の高度化のための「富岳」での実地下構造モデルでの長周期地震動計算



## 相模トラフ沿いの巨大地震に伴う長周期地震動による被害予測の高度化のための「富岳」での実地下構造モデルでの長周期地震動計算



### 地震を知って震災に備えるために「富岳」を活かす

プレートの相対運動を原因とする巨大地震は、いずれ必ず起きる  
どのような地震の規模、起こり方になるか、起きた場合の各場所  
での揺れ方を知り、事前に揺れへの備えをしておくことが大切。  
現実的な構造を取り入れた「富岳」での地震動計算によって、  
揺れの予測をより正確に行い、震災への備えのレベルを高める。

課題番号:hp210169

脳結合データ解析と機能構造推定に基づく  
ヒトスケール全脳シミュレーション

## スパコン「富岳」で脳をつくる

電気通信大学

大学院情報理工学研究科 情報・ネットワーク工学専攻 准教授

山崎 匡

## スパコン「富岳」で脳をつくる

山崎 匡 (電気通信大学)

「富岳」成果創出加速プログラム  
脳結合データ解析と機能構造推定に基づくヒトスケール全脳シミュレーション  
課題代表

PRESENTED TO:  
「富岳」成果創出加速プログラムシンポジウム セッション2:ライブ  
2022年3月29日

### 今日の内容

- シミュレーション神経科学とは何か
- これまでに得られた成果の紹介
- まとめと今後の課題

2021年度ヒアリング資料より

「富岳」成果創出加速プログラム

## 脳結合データ解析と機能構造推定に基づく ヒトスケール全脳シミュレーション

課題代表者: 山崎 匡

代表機関: 電気通信大学

2021年01月19日



1. 研究目的と課題概要

研究目的

脳神経回路を解剖学・生理学データに忠実に再構築することで、神経活動を「再現」し役割や機能を「予測」する

課題概要

- ・齧歯類脳-身体シミュレーション
- ・ヒトスケール全脳シミュレーション
- ・脳型AI開発
- ・各種アプリのチューニング

『富岳』だからできること・『富岳』のためにできることに特にフォーカス

2. 実施体制



Henrik Skibbe  
脳結合データ解析  
理研 R-CBS



五十嵐 潤  
大規模シミュレーション  
理研 R-CCS



高橋 恒一  
脳型人工知能  
理研 R-BDR



銅谷 賢治  
計算神経科学  
沖縄科学技術大学院大学

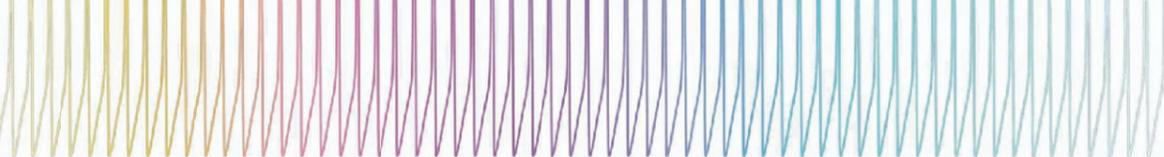


山崎 匡  
シミュレーション神経科学  
電気通信大学



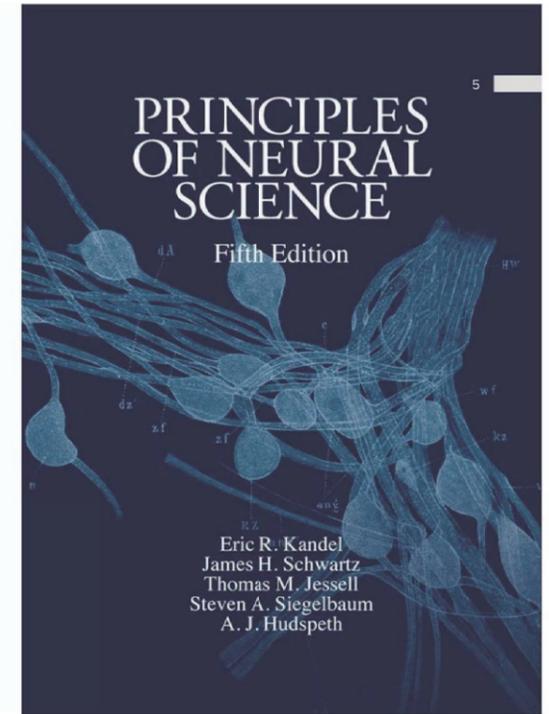
協力機関: Human Brain Project, 「革新脳」, 全脳アーキテクチャイニシアティブ

# シミュレーション神経科学とは何か



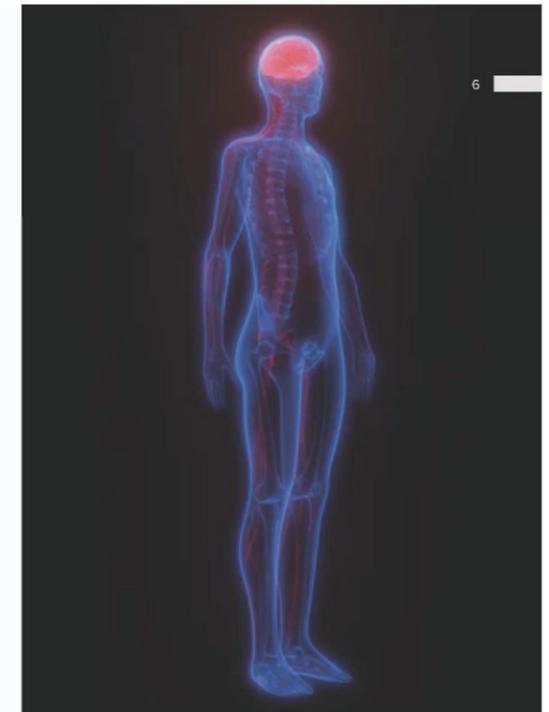
## 神経科学とは何か

- ニューロンとニューロンのネットワークの機能や役割を研究する分野
- 我々がものを見たり聞いたり話したり考えたりするのは我々の脳の働き
- 脳=多数のニューロンからなるネットワーク
- スパイクを伝播して情報処理
- 学際領域：医学・生物学・物理学・情報科学...
  - シミュレーション神経科学はその一分野



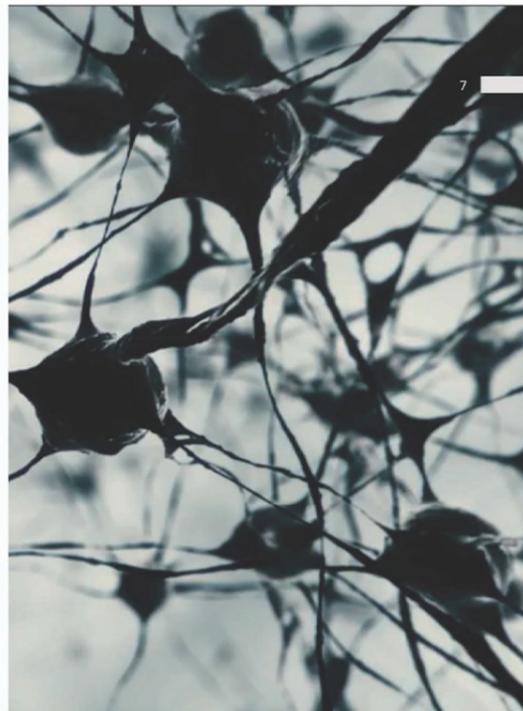
## 神経科学とは何か

- ニューロンとニューロンのネットワークの機能や役割を研究する分野
- 我々がものを見たり聞いたり話したり考えたりするのは我々の脳の働き
- 脳=多数のニューロンからなるネットワーク
- スパイクを伝播して情報処理
- 学際領域：医学・生物学・物理学・情報科学...
  - シミュレーション神経科学はその一分野



# 神経科学とは何か

- ニューロンとニューロンのネットワークの機能や役割を研究する分野
- 我々がものを見たり聞いたり話したり考えたりするのは我々の脳の働き
- **脳=多数のニューロンからなるネットワーク**
- スパイクを伝播して情報処理
- 学際領域：医学・生物学・物理学・情報科学...
  - シミュレーション神経科学はその一分野

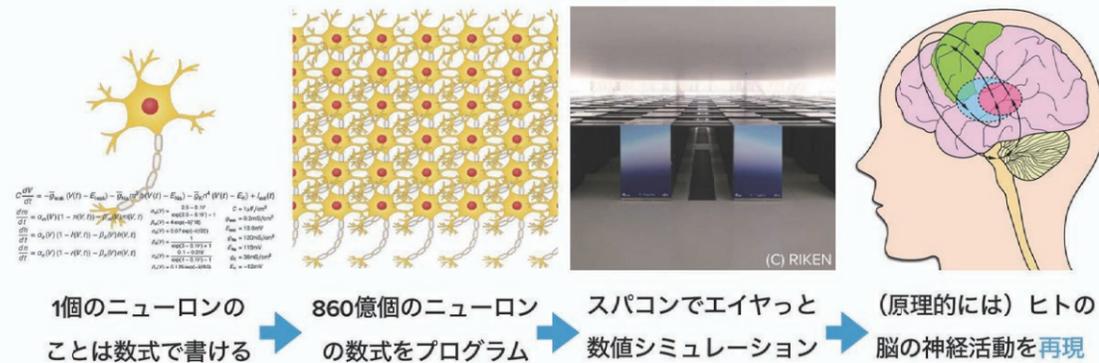


# 神経科学とは何か

- ニューロンとニューロンのネットワークの機能や役割を研究する分野
- 我々がものを見たり聞いたり話したり考えたりするのは我々の脳の働き
- 脳=多数のニューロンからなるネットワーク
- **スパイクを伝播して情報処理**
- 学際領域：医学・生物学・物理学・情報科学...
  - シミュレーション神経科学はその一分野

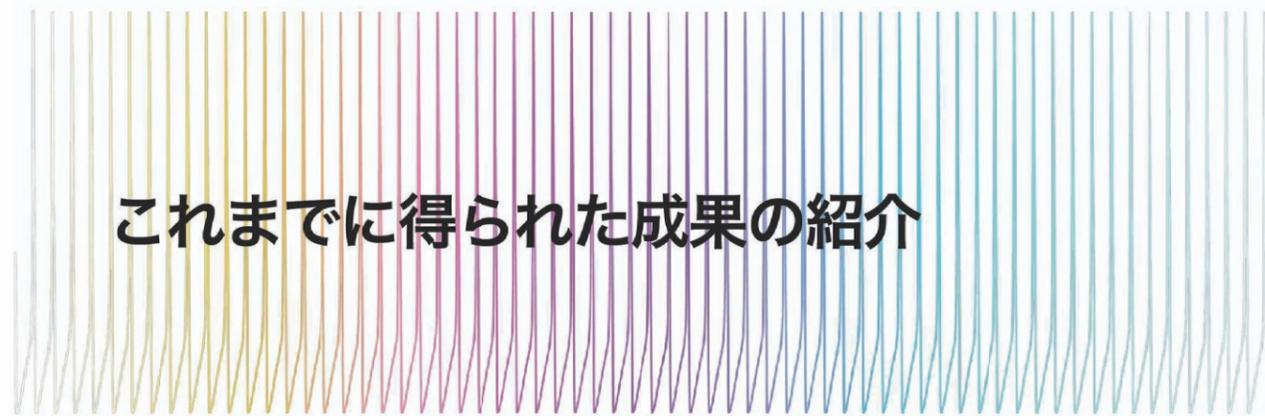


# シミュレーション神経科学とは何か



操作可能な脳のデジタルコピーを作って、神経活動を再現・予測する

# これまでに得られた成果の紹介

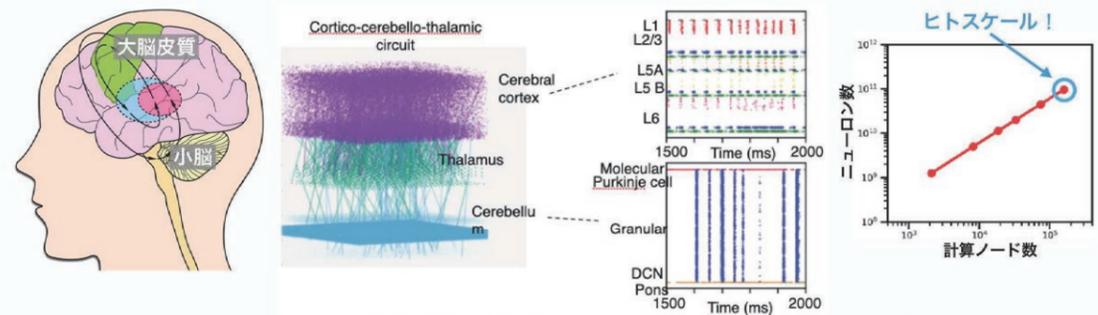


「富岳」成果創出加速プログラムシンポジウム

五十嵐 潤 (理研R-CCS)  
山浦 洋 (ex 電通大)  
山崎 匡 (電通大)

11

### 成果1. ヒトスケール脳シミュレーション



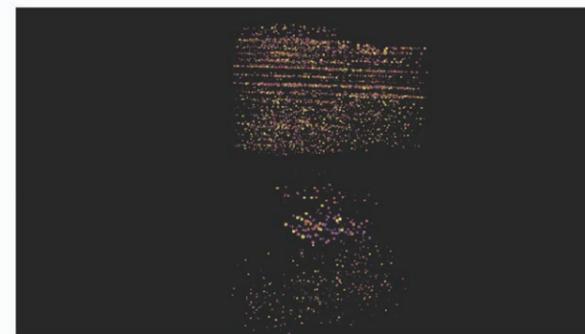
- 950億ニューロン57兆シナプス (世界初ヒト規模)
- $\beta$ 波/ $\gamma$ 波に対応する安静時脳活動を再現

Courtesy of Dr. Jun Igarashi (RIKEN CCS) (Igarashi et al. In Prep)

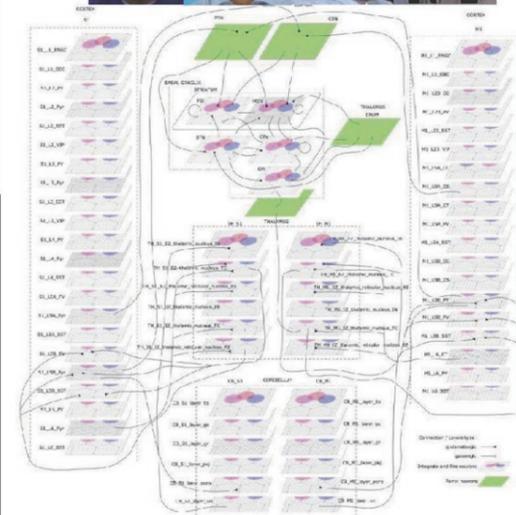
Carlos Gutierrez (OIST)  
Sun Zhe (RIKEN)  
Morteza Heidarinedjad (ex RIKEN)  
山浦 洋 (ex 電通大)

13

### 成果2. マウス全脳モデル



Courtesy of Dr. Carlos Gutierrez (OIST)



(Feldotto et al. Submitted)

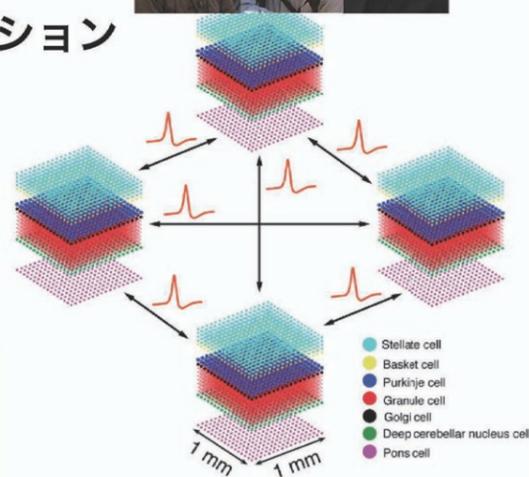
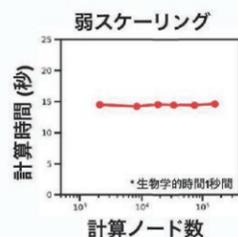
「富岳」成果創出加速プログラムシンポジウム

五十嵐 潤 (理研R-CCS)  
山浦 洋 (ex 電通大)  
山崎 匡 (電通大)

12

### 成果1. ヒトスケール脳シミュレーション

- 「富岳」の性能を引き出すシミュレータ MONETの開発 (Igarashi, Yamaura, Yamazaki 2019)
- タイルベース分割
- 計算と通信の同時実行
- 遠距離結合の非同期通信
- キャッシュブロッキング
- 優れたスケーリング性能

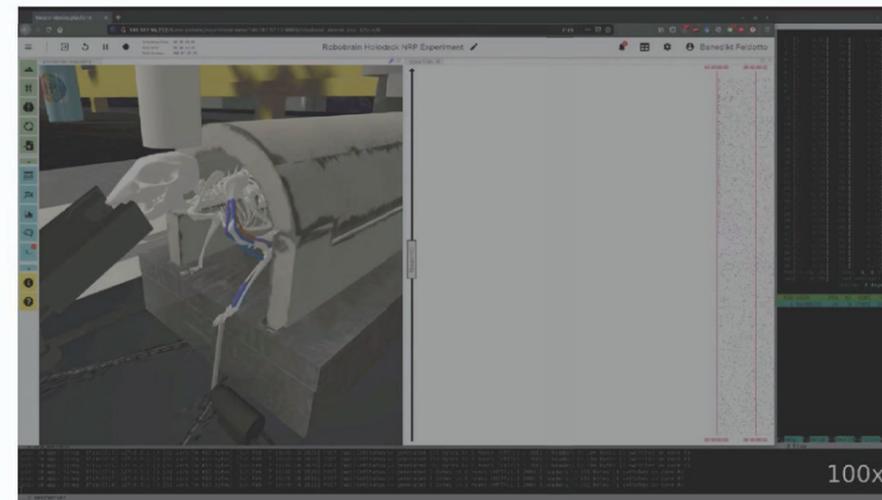


「富岳」成果創出加速プログラムシンポジウム

Carlos Gutierrez (OIST)  
銅谷 賢治 (OIST)  
HBP Neuroinformatics Platform

14

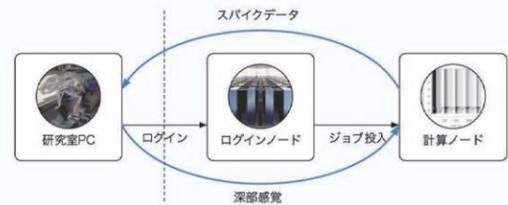
### 成果3. 脳身体シミュレーション



※ 「富岳」での実行はこれから

平山 友駿 (電通大)  
山田 泰輝 (電通大)  
栗山 凜 (電通大)  
山崎 匡 (電通大)

### 成果3. 脳身体シミュレーション

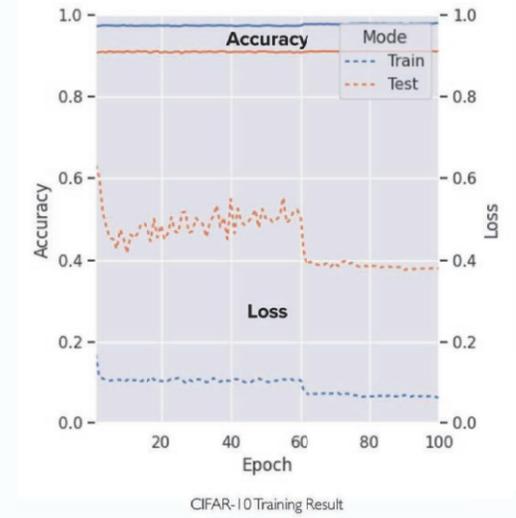
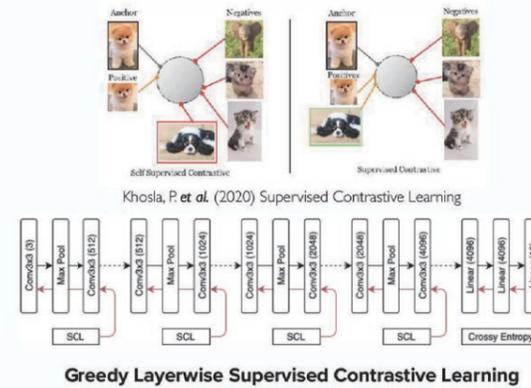


「富岳」の脳モデルから研究室の身体モデルを操作可能であることを確認済み



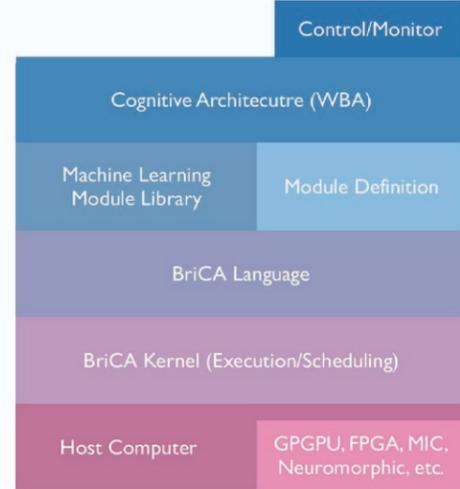
Courtesy of Mr. Tomoya Hirayama (UEC)

### 成果4. AIフレームワークBriCAの移植とチューニング



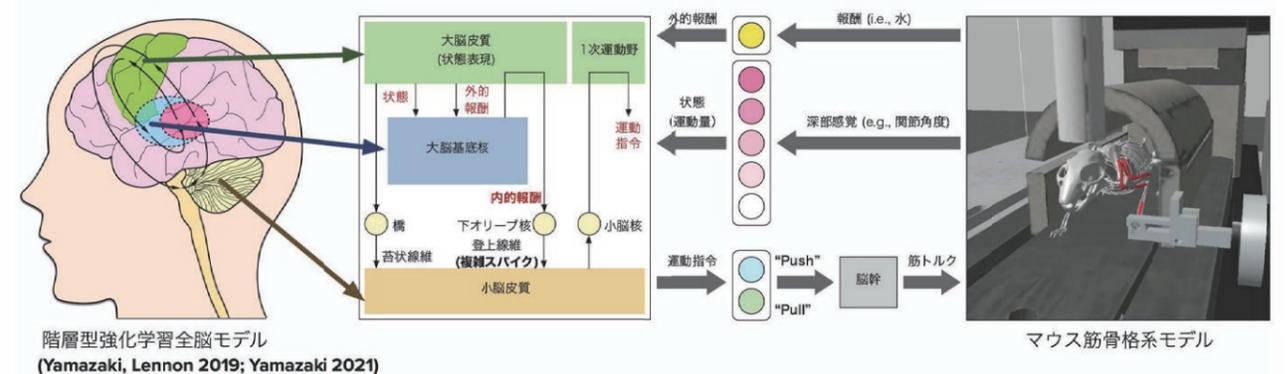
### 成果4. AIフレームワークBriCAの移植とチューニング

- 脳型AI開発のためのフレームワーク
- 全脳モデルから縮約した機能モデルを構築
- 特に大脳皮質の機能モデルを想定
- 誤差逆伝播法をどのようにして回避するか



### 現在進行中

マウス脳身体モデルによる随意運動学習のシミュレーション

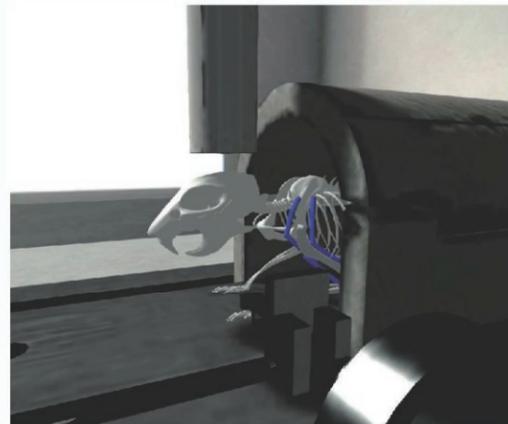


階層型強化学習全脳モデル (Yamazaki, Lennon 2019; Yamazaki 2021)

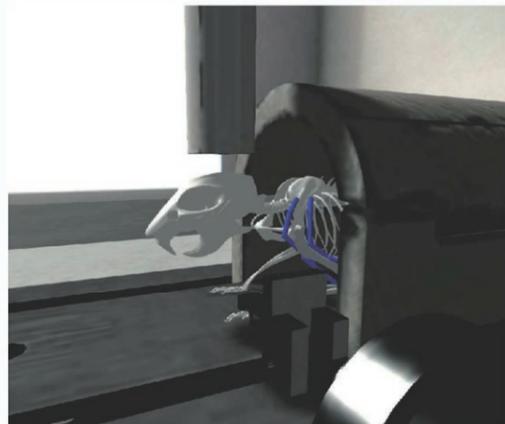
平山 友駿 (電通大)  
山田 泰輝 (電通大)  
栗山 凜 (電通大)  
山崎 匡 (電通大)

## 途中経過

マウス脳身体モデルによる随意運動学習のシミュレーション



学習前



学習後

Courtesy of Mr. Tomoya Hirayama (UEC)

## まとめと今後の課題

## その他の成果: 広報活動

教科書の出版 (森北出版 2021)

今後の関連イベント

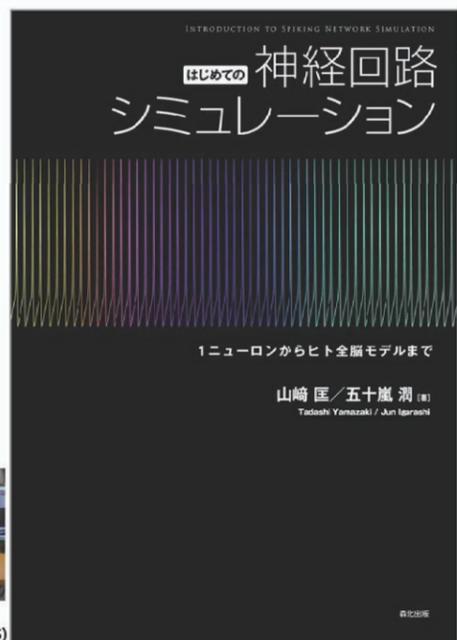
- 2022/5/12 RIST スパコンコロキウム
- 2022/7/2 NEURO2022 教育講演



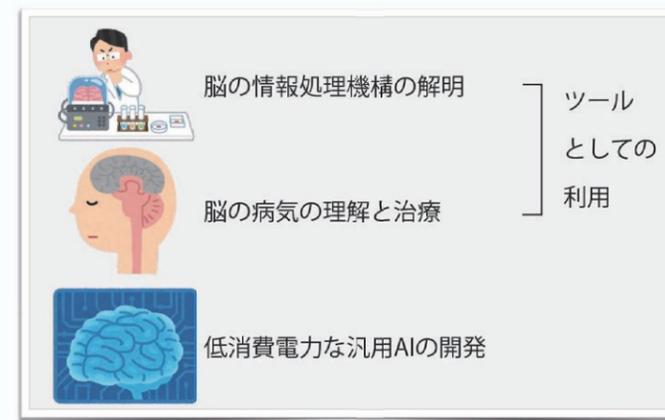
山崎 匡  
(電通大)



五十嵐 潤  
(理研R-CCS)



## シミュレーション神経科学は何の役に立つのか?



第41回日本神経科学大会 ランチョン大討論会 (2018) より修正して掲載

## 課題参加者 & 謝辞

### 理化学研究所 R-CCS

五十嵐潤  
Sun Zhe  
Morteza Heidarinedjad

### 理化学研究所 R-BDR

高橋恒一  
板谷琴音

### 理化学研究所 R-CBS

Henrik Skibbe

### 沖縄科学技術大学院大学

銅谷賢治  
Carlos Gutierrez

### 電気通信大学

山崎匡  
山浦洋  
平山友駿  
山田泰輝  
栗山凜

### Neurorobotics Platform

### NEST Initiative

### Human Brain Project Partnering Program

「富岳」成果創出加速プログラム (hp200139, hp210169)

課題番号:hp210167

大規模データ解析と人工知能技術によるがんの起源と多様性の解明

## がんのはじまりを探る -クローン性造血と白血病-

京都大学 医学研究科 腫瘍生物学講座 教授

カロリンスカ研究所 分子血液学 (客員)

小川 誠司

「富岳百景」シンポジウム  
令和4年3月29日

## がんのはじまりを探る -クローン性造血と白血病-



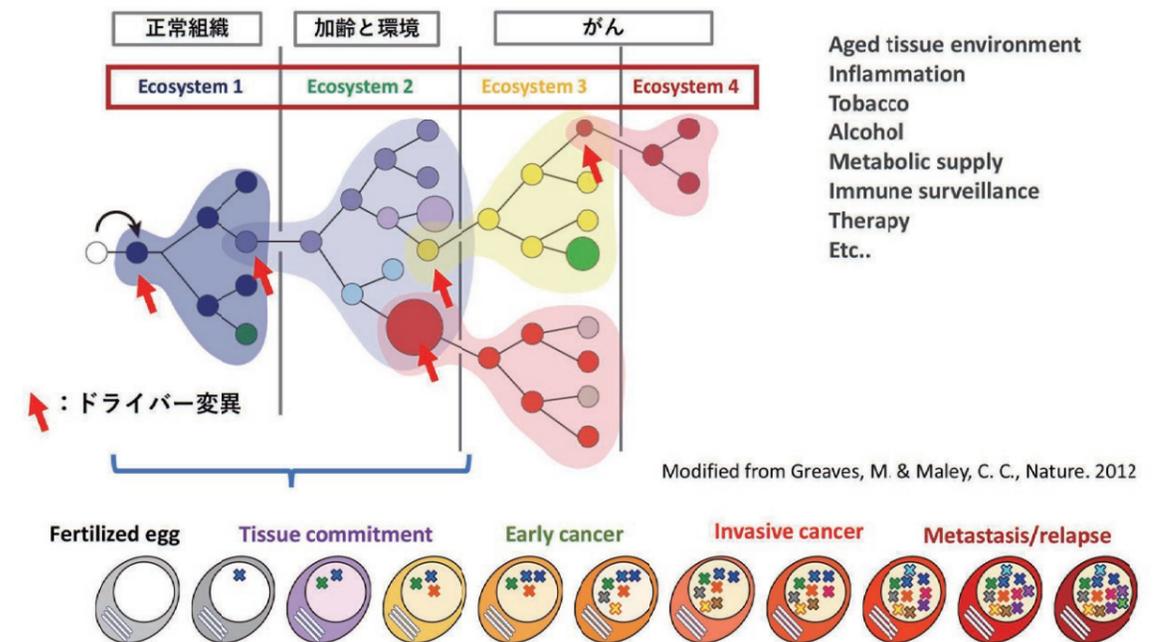
Seishi Ogawa, MD., Ph.D.

Dep. Pathology and Tumor Biology,  
Institute for the Advanced Study of  
Human Biology (WPI-ASHBi),

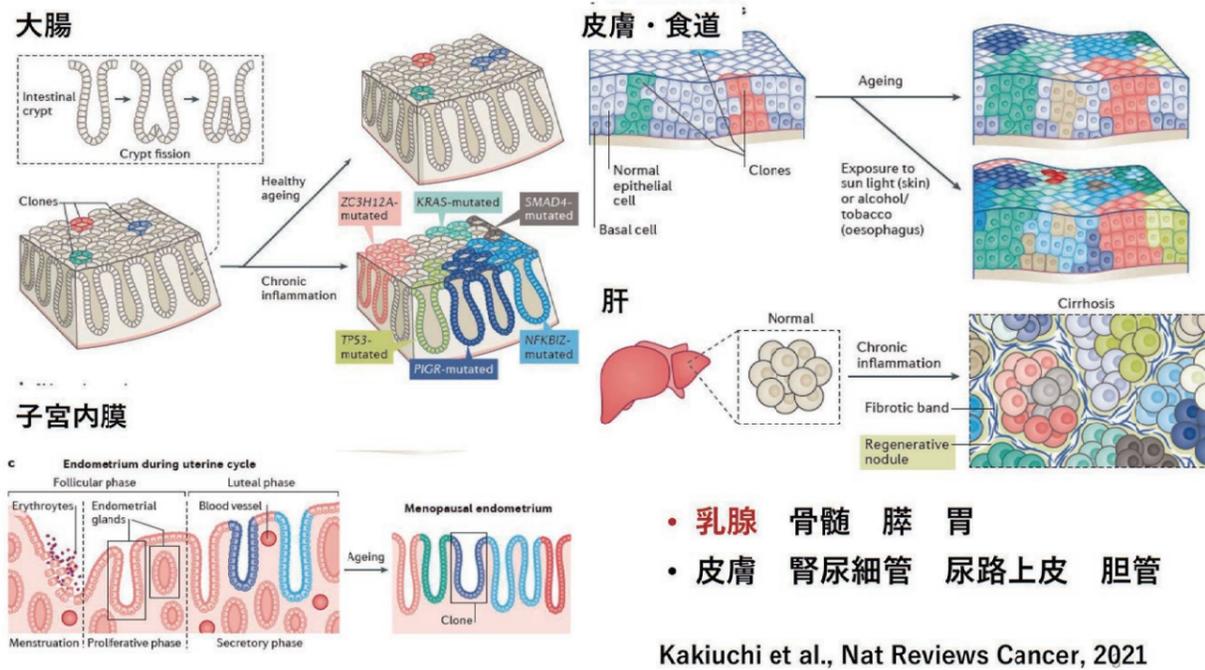
Kyoto University, Kyoto  
Dep. of Molecular Hematology,  
Karolinska Institute, Stockholm



## 発がんの多段階モデル



## 遺伝子変異クローンによる組織の再構築



## スーパーコンピュータが不可欠



宮野 悟 教授



スーパーコンピュータ「富岳」

総ノード数 : 158,976ノード  
 計算能力 : 488ペタフロップス (理論ピーク性能)  
 ストレージ : 150ペタバイト (第二階層)

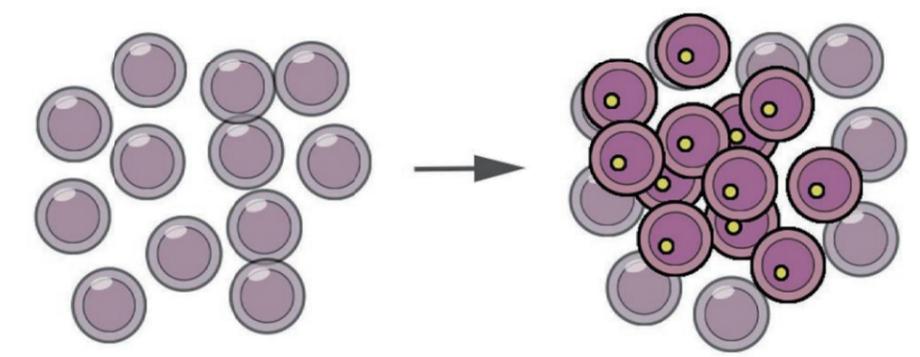
## 2021年度のシーケンス実績

シーケンス種類	サンプル数	サンプル種類
Whole Genome	3,619	<b>悪性腫瘍</b> : 脳腫瘍、消化器癌、乳がん、子宮体癌、卵巣癌、皮膚癌、泌尿器癌、頭頸部癌、内分泌腫瘍、白血病  <b>良性疾患</b> : 肥大型・拡張型心筋症、Diamond Blackfan貧血、発作性夜間ヘモグロビン尿症、多発骨奇形、骨髄不全
Whole Exome	4,904	
Targeted capture	8,144	
Amplicon	183	
RNA	1,079	
Single cell	514	
ATAC and others	568	

19,011 試料  
~835TB

3/31までの予定含む  
外注実施含む

## クローン性造血



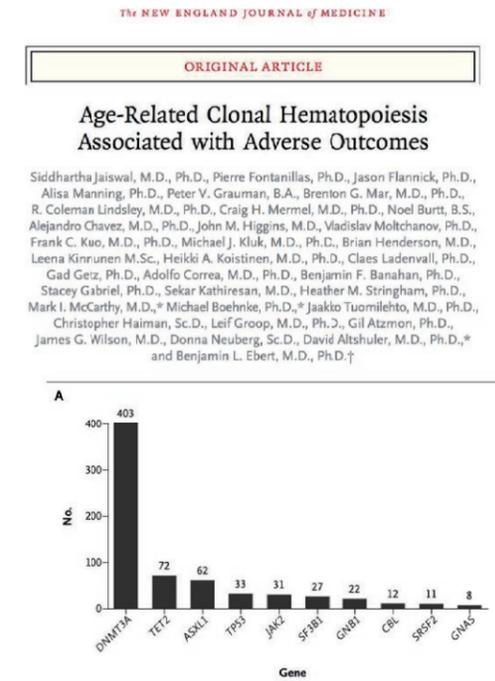
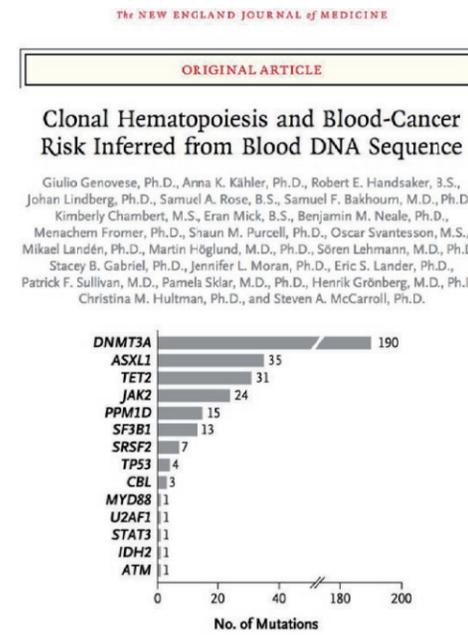
正常の血液細胞

クローン性造血

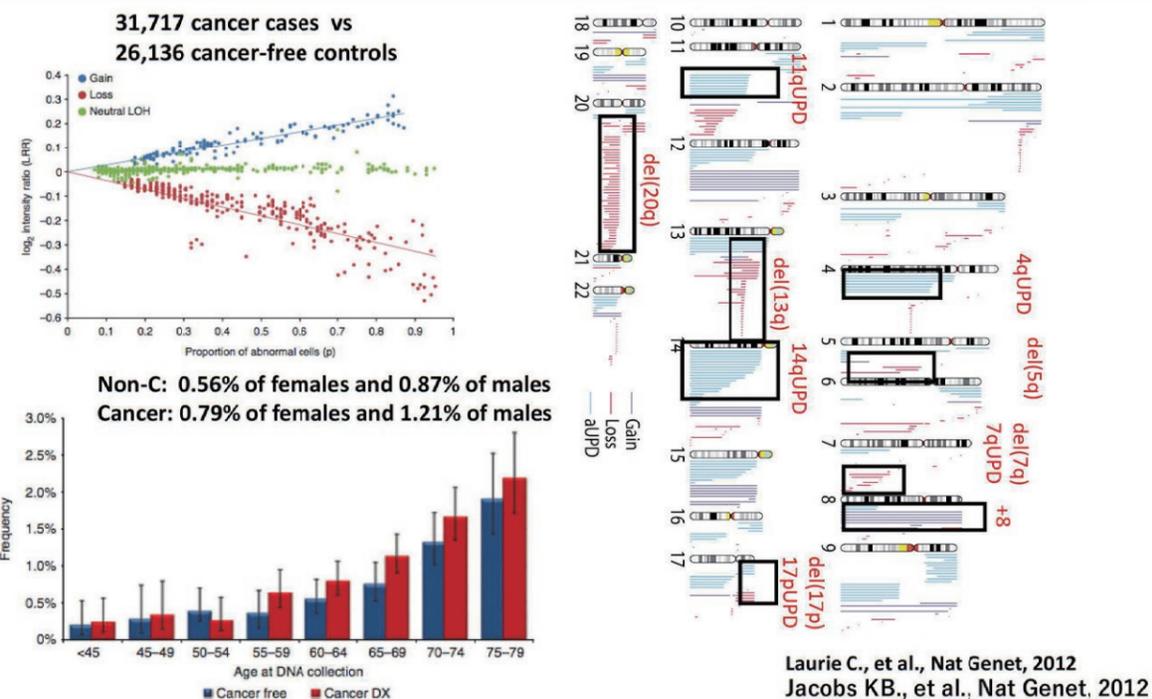
## Early studies on clonal hematopoiesis

- Fearon ER, et al., *N Engl J Med.* 1986;315(1):15-24.
  - Fialkow PJ, et al., *N Engl J Med.* 1987;317(8):468-473.
- 急性骨髄性白血病の完全寛解後にX染色体の不活化に偏りが認められる。
- Busque L, et al.
- Nonrandom X-inactivation patterns in normal females: lyonization ratios vary with age. *Blood.* 1996;88(1):59-65.
- 高齢健常人女性においてもX染色体の不活化に偏りが認められる。

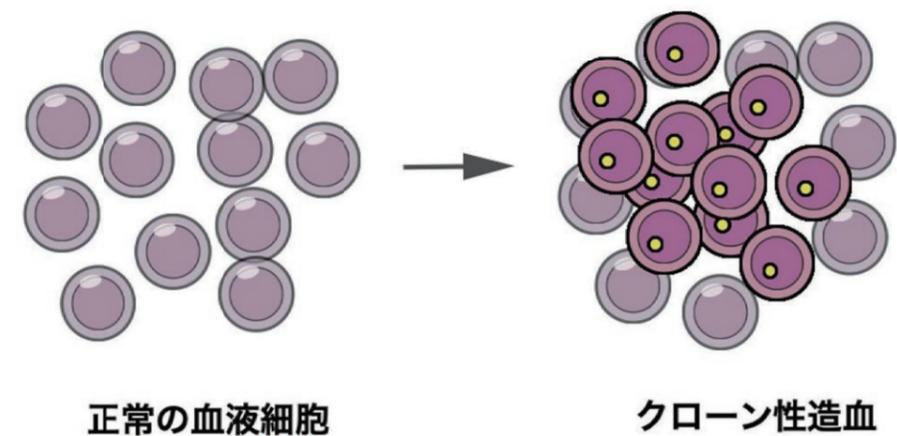
## 遺伝子変異から検出されるクローン性造血



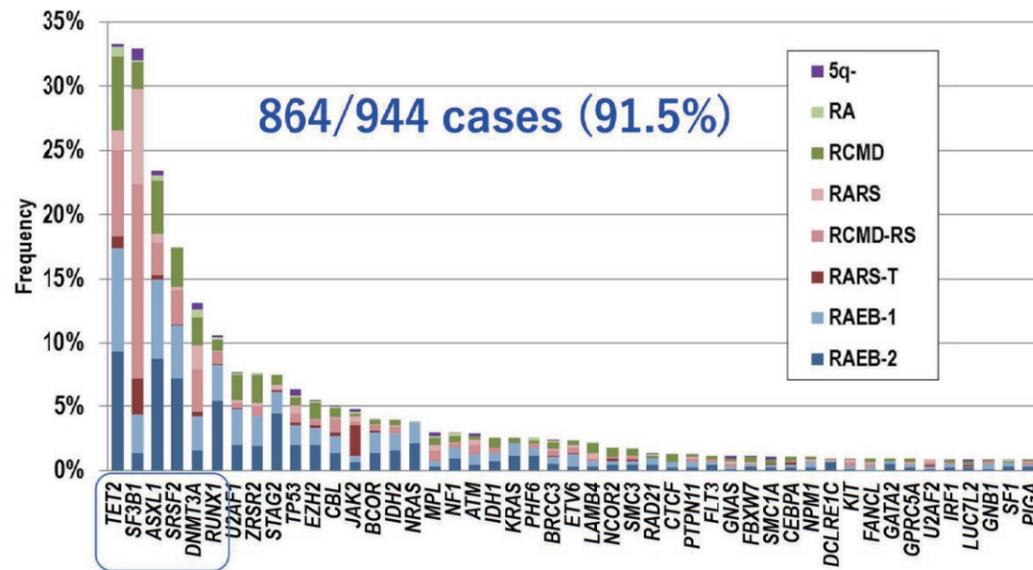
## 染色体コピー数の変化から検出されるクローン性造血



## クローン性造血と白血病



## Mutation profiling of MDS

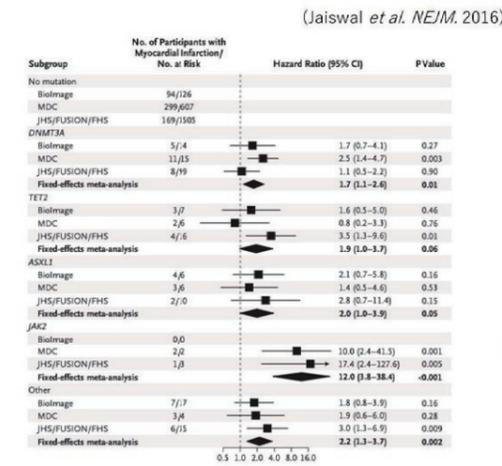


(Haferlach et al., Leukemia, 2014)

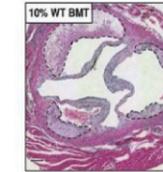
## クローン性造血と心血管疾患の関連

クローン性造血(遺伝子変異)陽性者における心血管疾患のリスク上昇

クローン性造血のモデルマウスにおける大動脈の動脈硬化プラークの肥厚



野生型マウス

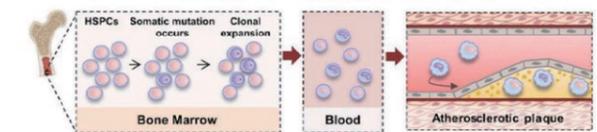


クローン性造血のモデルマウス



(Fuster et al. Science 2017)

クローン性造血による動脈硬化増悪のメカニズム

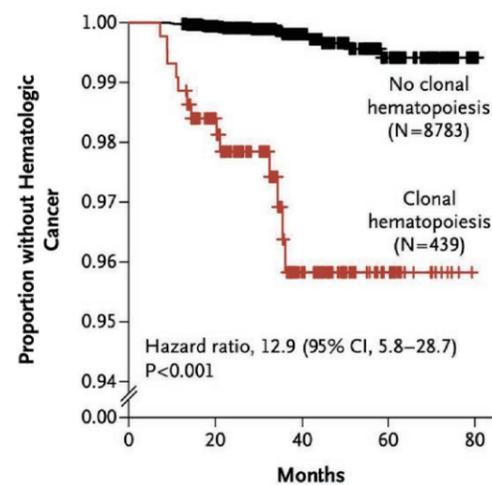


(Amorós-Pérez et al. Atherosclerosis 2020)

- ✓ 遺伝子変異陽性者では心血管疾患のリスクが上昇し、モデルマウスの実験でも遺伝子変異を持った血液細胞が動脈硬化を促進することが示唆されている。

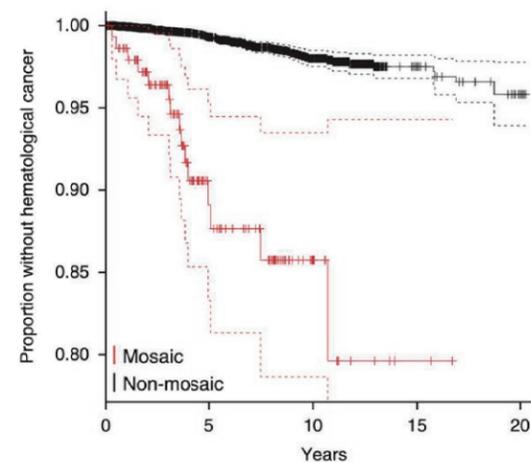
## クローン性造血と造血器腫瘍

遺伝子変異による影響



(Genovese et al. NEJM, 2016)

コピー数異常による影響

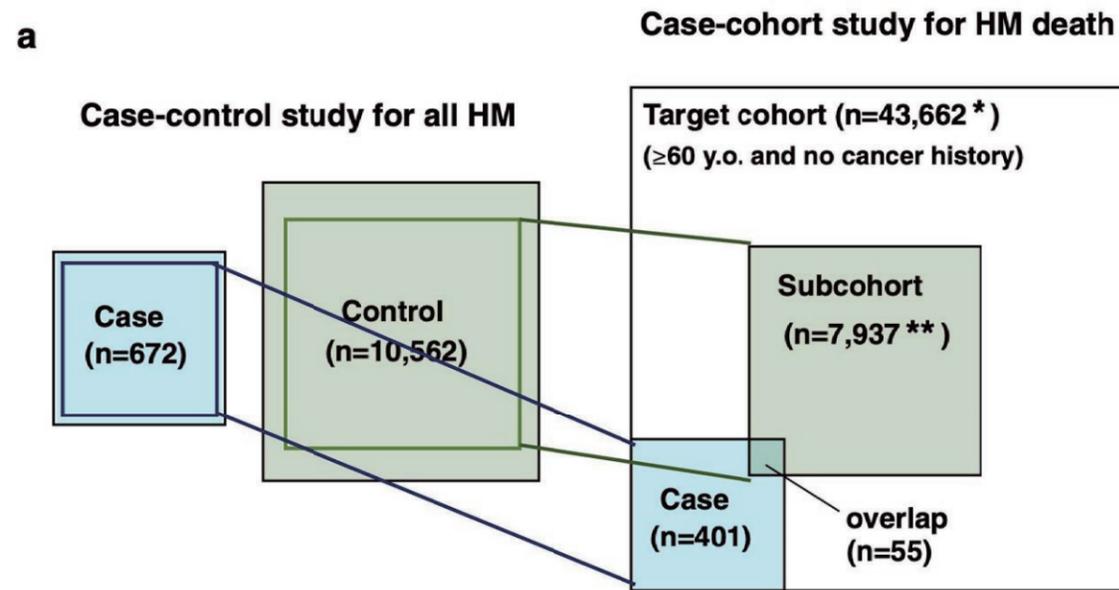


(Laurie et al. Nat. Genetics, 2012)

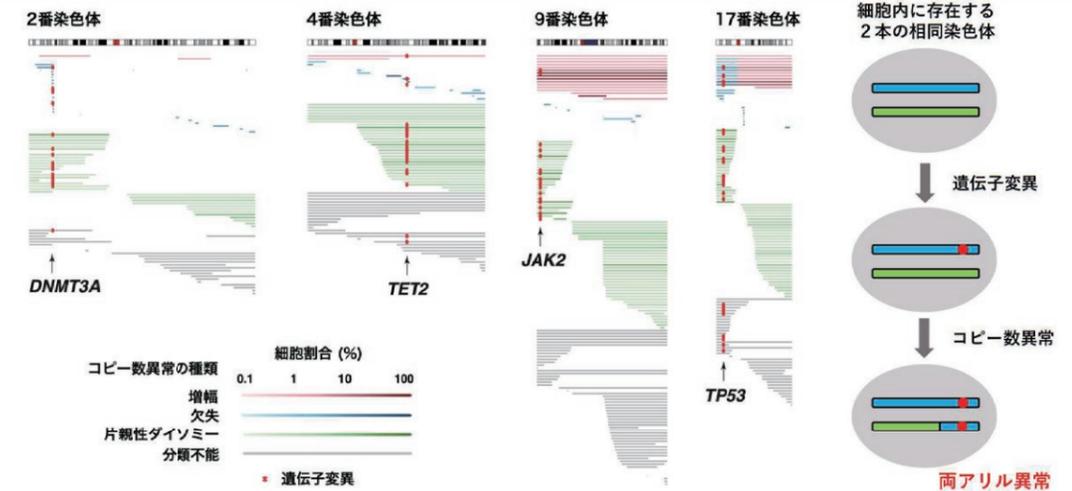
## 未解決の疑問

- ✓ 遺伝子変異とコピー数異常同時に解析した報告はない
- ✓ 既報のコホート研究では血液がんを発症した被験者の数が非常に少なく(16~37例)、クローン性造血による白血病発症のリスクが正確に見積もれていない。
- ✓ クローン性造血では本当に造血は完全に正常なのか?
- ✓ 血液がんは骨髄系腫瘍とリンパ系腫瘍に分類されるが、クローン性造血によるリスク上昇に両者の間で差があるのか、分かっていない。

# 日本人集団におけるクローン性造血の解析

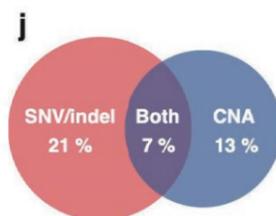
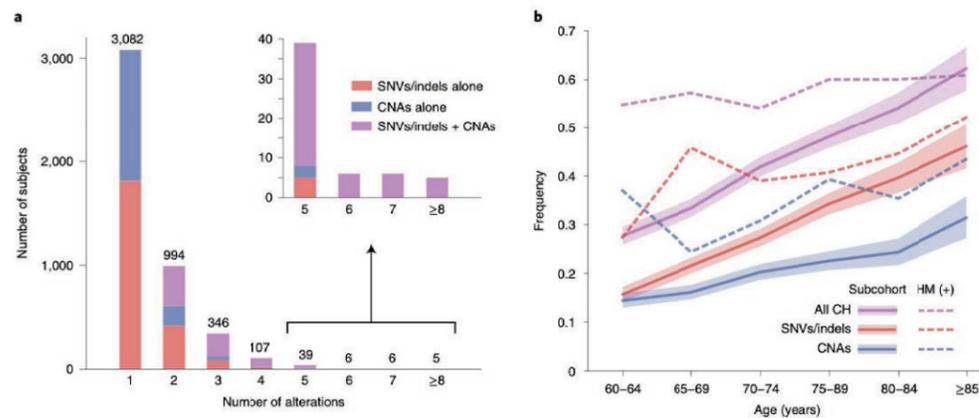


# 遺伝子変異とコピー数異常の共存関係



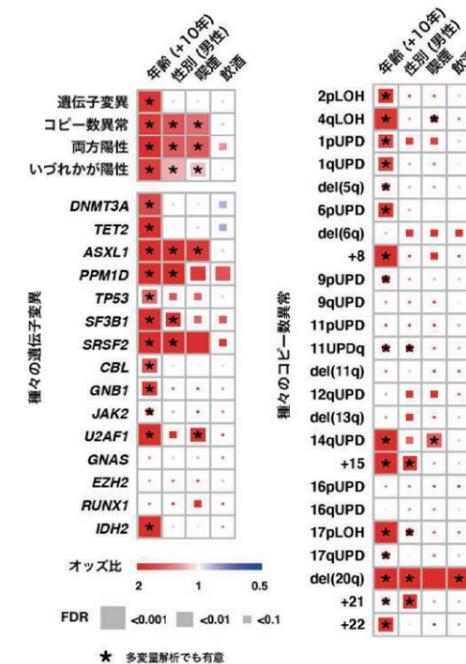
- ✓ 同一の遺伝子(DNMT3A, TET2, JAK2, TP53など)を標的とした遺伝子変異とコピー数異常については、特に強い共存関係を認めた。
- ✓ これら遺伝子変異とコピー数異常は血液腫瘍でも頻繁に認められる組み合わせであり、遺伝子の両アレル異常を起こしていると考えられる。

# 遺伝子変異と染色体コピー数変化からみたクローン性造血



(Saiki et al., Nat Med, 2021)

# クローン性造血のリスク因子

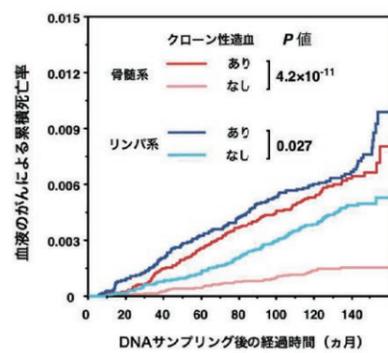
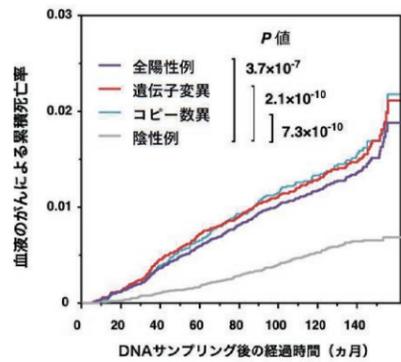
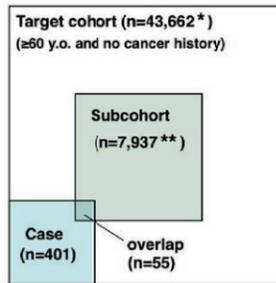


- ✓ 年齢の最も強い効果に加えて、男性であることと喫煙は、コピー数異常の存在と有意に関連した。
- ✓ 性別と喫煙は、いくつかの遺伝子変異・コピー数異常と有意に関連した。(ASXL1, PPM1D, SRSF2, 14qUPD, +15など)
- ✓ 飲酒は、20番染色体の欠失 (del(20q))のみと有意に関連した。

(Saiki et al., Nat Med, 2021)

## 血液腫瘍のリスクに与える影響

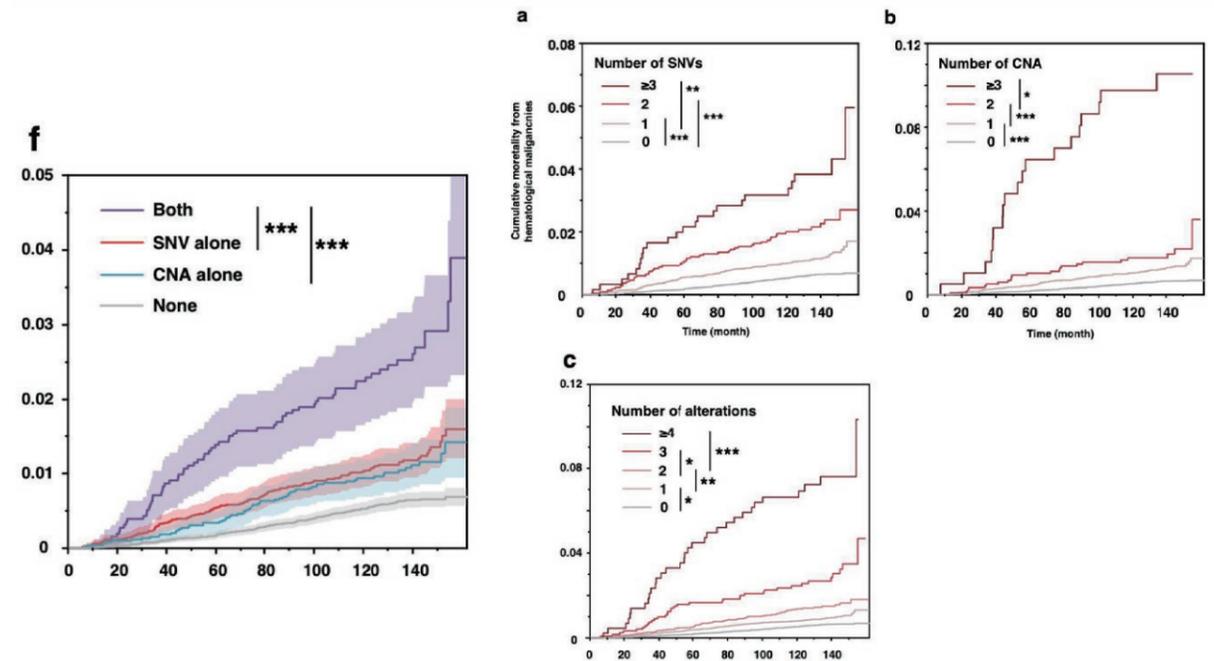
### Case-cohort study for HM death



- ✓ 多数の血液がん発症例を含んだ解析により、遺伝子変異・コピー数異常がもたらすリスク上昇を正確に見積もることができた。(10年間の累積死亡率：約1%)
- ✓ 特に、骨髄系腫瘍(急性骨髄性白血病など)は、リンパ系腫瘍(悪性リンパ腫など)に比べて、リスクの上昇が大きいことが判明した。

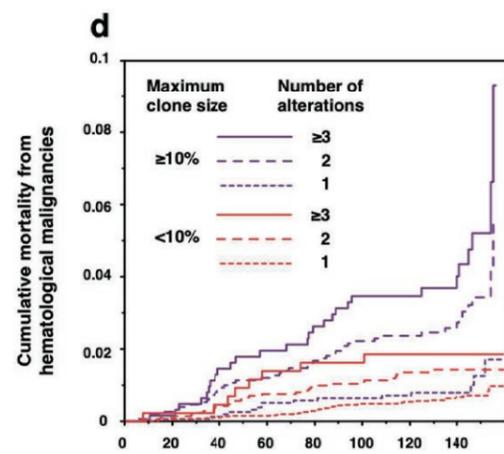
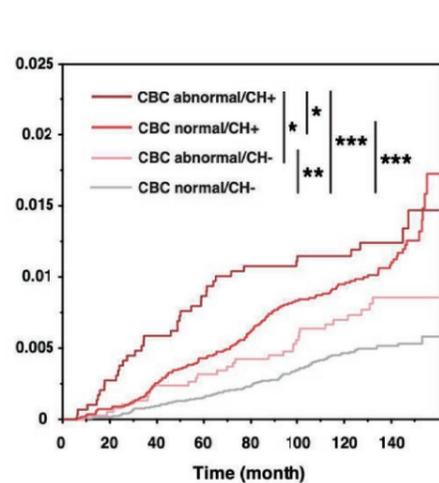
(Saiki et al., Nat Med, 2021)

## 変異とコピー数異常の協調効果



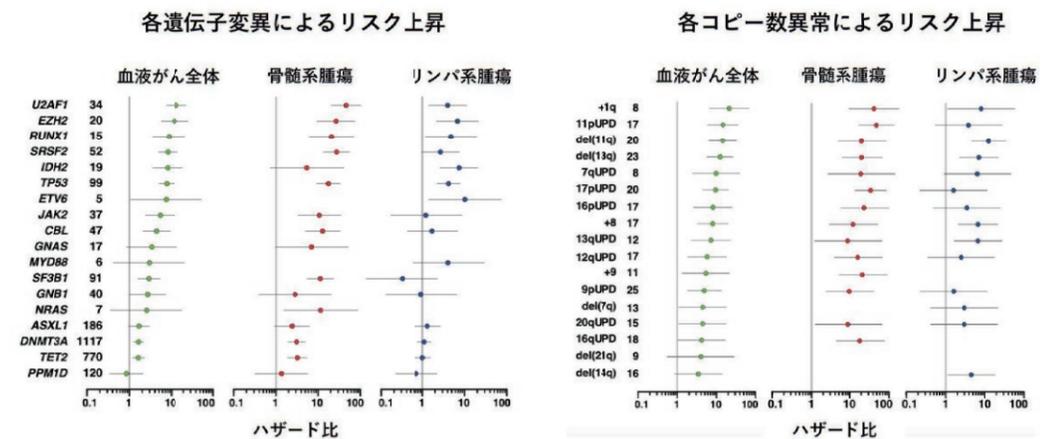
(Saiki et al., Nat Med, 2021)

## 血球異常とクローンサイズの影響



(Saiki et al., Nat Med, 2021)

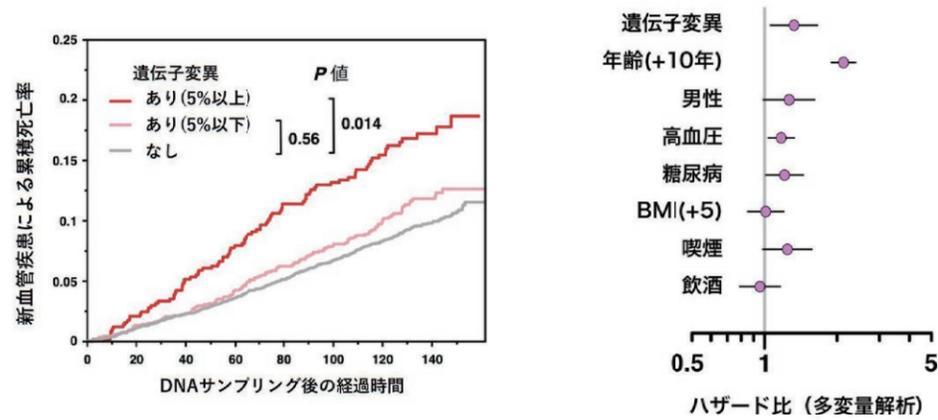
## 血液がんのリスクに与える影響：病変別の解析結果



- ✓ 個々の遺伝子変異・コピー数異常の中では、*U2AF1*, *EZH2*, *RUNX1*の変異や +1q, 11pUPD, del(11q)で、最も強いリスクの上昇を認めた。
- ✓ 全体の結果と同様に、ほとんどの病変についてリンパ系腫瘍よりも骨髄系腫瘍の方が強いリスク上昇を認めた。

(Saiki et al., Nat Med, 2021)

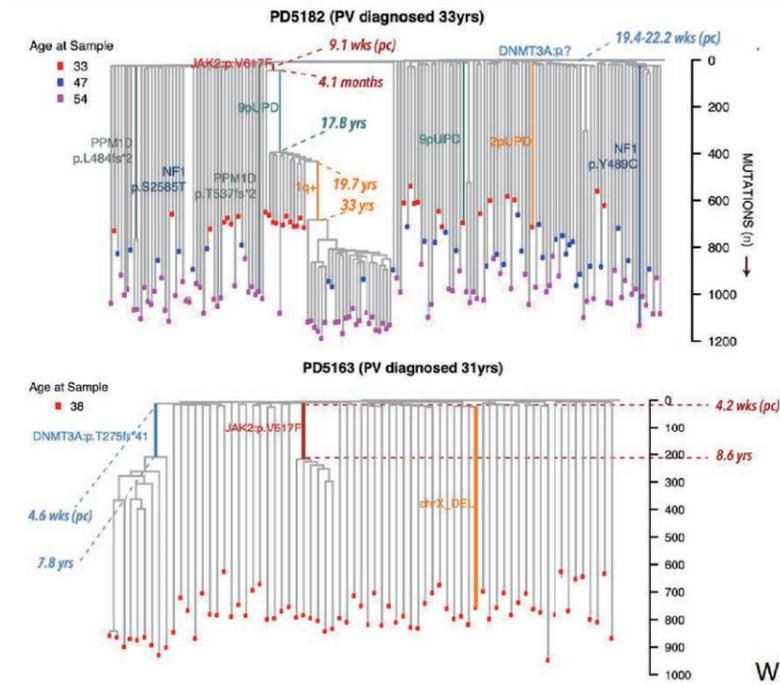
## 心血管疾患のリスクにもたらす影響



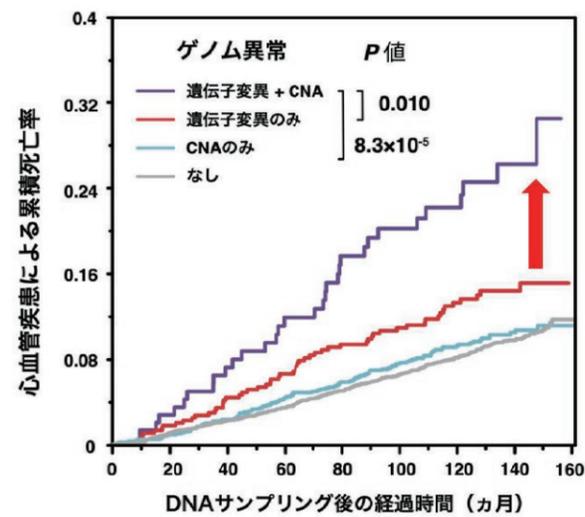
- ✓ 先行研究の結果に一致して、クローン性造血（遺伝子変異）を有する被験者では、心血管疾患のリスクが有意に上昇していた。
- ✓ クローン性造血（遺伝子変異）がもたらすリスク上昇は、高血圧・糖尿病に匹敵するものであった。（ハザード比：1.3倍）

(Saiki et al., Nat Med, 2021)

## クローン性造血の起源



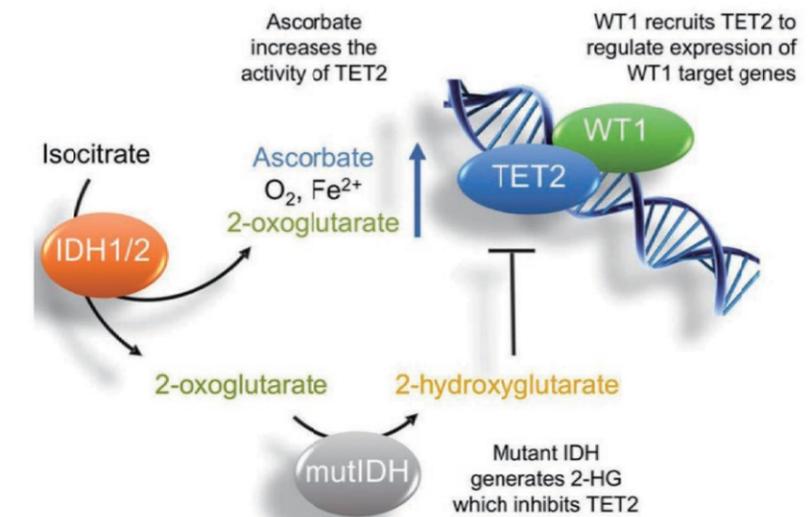
## 心血管疾患のリスクにもたらす影響： 遺伝子変異とコピー数異常の協調効果



- ✓ 遺伝子変異と対照的に、コピー数異常は単独では心血管疾患のリスクと関連しなかった。
- ✓ 遺伝子変異によるクローン性造血に、コピー数異常が加わることで、心血管疾患のリスクがさらに上昇した。

(Saiki et al., Nat Med, 2021)

## Vitamin C restores defective TET2 function



Das et al. Blood Cancer Journal (2019)9:82  
 Cimmino et al., 2017, Cell 170, 1079–1095

## 今後の展望

### 1. 造血器腫瘍の発症予測と早期介入の可能性

- 本研究では、遺伝子変異とコピー数異常の両方に基づく知見が得られ、病変ごとに正確なリスクを見積もることができたため、今後、患者ごとに最適化されたリスク予測を行う上で重要な知見となることが予測される。
- また、病変の組み合わせから特にハイリスクと予測される場合（*TP53*の両アリル異常など）は、将来的には早期介入の有用性も証明されるかもしれない。

### 2. 心血管疾患の予防への応用

- クローン性造血は高血圧や糖尿病に匹敵するリスクファクターであり、介入の対象となるハイリスクの症例を抽出する上で有用な項目であると言える。
- 特に本研究の知見からは、遺伝子変異とコピー数異常を同時に調べることでより精度の高いリスク層別化につながる可能性が示唆される。

## 共同研究者

#### 京都大学

##### 腫瘍生物学

- 佐伯 龍之介
- 南谷 泰仁
- 中川 正宏
- 越智 陽太郎
- 吉里 哲一
- 牧島 秀樹
- 小川 誠司

##### 整形外科

- 黒田 隆
- 松田 秀一

#### 東京大学

##### 医科学研究所

- 新井田 淳司
- 井元 清哉
- 森崎 孝幸
- 村上 善則

##### 新領域創成科学研究科

- 松田 浩一
- 鎌谷 洋一郎

#### 理化学研究所・生命医科学研究センター

##### 基盤技術開発研究チーム

- 桃沢 幸秀

##### ゲノム解析応用研究チーム

- 寺尾 知可史
- 久保 充明

#### 東京医科歯科大学

##### M&Dデータ科学センター 統合解析分野

- 田中 和子
- 宮野 悟

#### 国立研究開発法人国立がん研究センター

##### ゲノム解析基盤開発分野

- 千葉 健一
- 白石 友一

課題番号:hp210173

次世代二次電池・燃料電池開発による  
ET革命に向けた計算・データ材料科学研究

# 次世代EV開発に向けた バッテリーマテリアル研究on「富岳」

物質・材料研究機構  
エネルギー・環境材料研究拠点 副拠点長  
館山 佳尚

「富岳」成果創出加速プログラムシンポジウム「富岳百景」  
@2022/03/29

文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム  
“次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究”  
（「富岳」電池課題）



<https://www.nims.go.jp/fugaku-denchi/>



## “次世代EV開発に向けたバッテリーマテリアル研究on「富岳」”

国立研究開発法人 物質・材料研究機構(NIMS)  
エネルギー・環境材料研究拠点(GREEN)

bZ4X: TOYOTA bZシリーズ



館山 佳尚 (TATEYAMA Yoshitaka)  
<https://www.nims.go.jp/group/cs/>

- ・マテリアルを理解する
- ・マテリアルをデザインする

課題番号:hp210173

出典:トヨタ自動車(株) [https://global.toyota.jp/album/images/36254708/?\\_ga=2.236684358.692546165.1647473406-1305868366.1647473406](https://global.toyota.jp/album/images/36254708/?_ga=2.236684358.692546165.1647473406-1305868366.1647473406) (p.1&3)

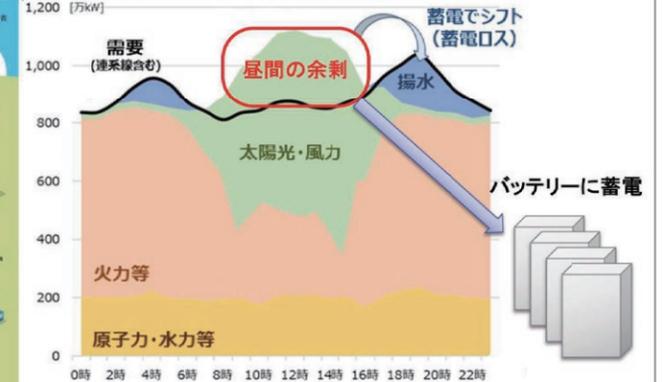


## 背景:カーボンニュートラル実現に不可欠なバッテリー

2050年カーボンニュートラルを宣言



再生可能エネルギー最大限利用



カーボンニュートラルはエネルギー貯蔵が鍵 →  
バッテリー(二次電池・蓄電池)開発・拡大が必要不可欠

昼間の余剰電力をバッテリーに蓄電  
→大量のバッテリー必要

出典:経済産業省ウェブサイト( <https://www.meti.go.jp/press/2020/12/20201225012/20201225012.html> )  
第6次エネルギー基本計画 令和3年10月22日( <https://www.meti.go.jp/press/2021/10/20211022005/20211022005.html> )

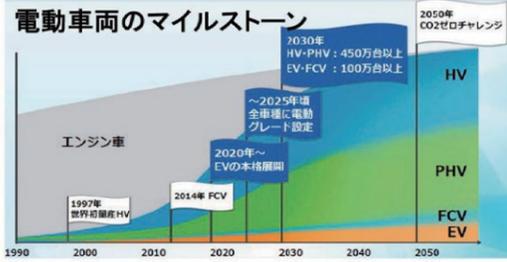


## 電気自動車(Electric Vehicle:EV)動向

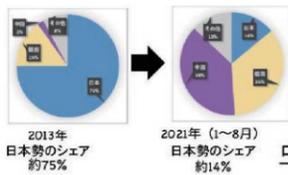
3



bZ4X: TOYOTA bZシリーズ  
画像集から



車載用二次電池の市場シェア



EV/PHVの生産シェア



日本の自動車産業・電池産業は過酷な世界競争下にある。  
これらの競争力強化が我が国の産業の命運を左右する。

→ 全固体電池・革新電池などの安全で高性能なバッテリーのブレークスルーが必要



バッテリーに用いられる  
元素資源偏在



元素資源量の問題もある。

出典: 経済産業省資源エネルギー庁エネルギー情勢懇談会(第6回)(2018.2.19)  
資料: 経済産業省自動車新時代戦略会議(第1回)(2018.4.18)



## 密度汎関数理論(Density Functional Theory:DFT)/第一原理計算

5

マテリアルの組成とイオン(原子)配置=>全エネルギー(安定性)

全エネルギー  $E$

$$E[n(\vec{r}); \vec{R}_I] = \sum_i \langle \phi_i | -\frac{\nabla^2}{2} | \phi_i \rangle + \frac{1}{2} \iint d\vec{r} d\vec{r}' \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + E_{XC}[n(\vec{r})] + \sum_I \int d\vec{r} n(\vec{r}) V_I^{loc}(|\vec{r} - \vec{R}_I|) + \sum_{I < J} \frac{Z_I Z_J}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|}$$

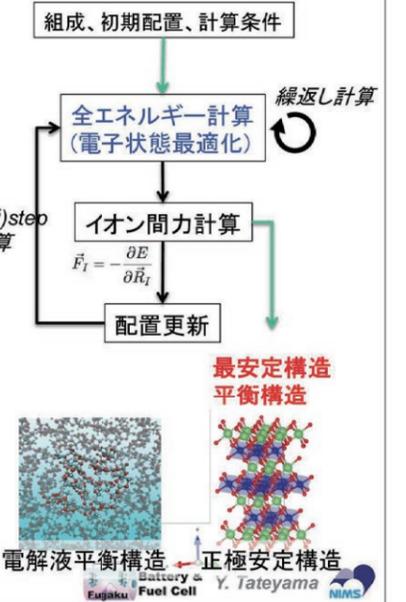
電子密度  $n(\vec{r}) = \sum_i \phi_i^*(\vec{r})\phi_i(\vec{r})$

与えられたイオン配置に対し電子の基底状態エネルギーを与える  
Kohn-Sham 方程式 (全エネルギー  $E$  の変分) KS軌道(1電子軌道)

$$\frac{\delta E}{\delta \phi_i} = 0 \Rightarrow \hat{H}_{KS} \phi_i(\vec{r}) = \left( -\frac{\nabla^2}{2} + V(\vec{r}) \right) \phi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \phi_i(\vec{r})$$

"非線形方程式" (1電子)KS軌道エネルギー  $\epsilon_i$

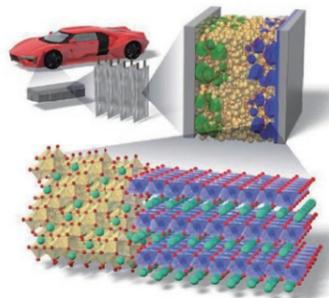
計算フローチャート



1つの組成・イオン配置でも計算時間がかかる。しかし高精度で予言性大

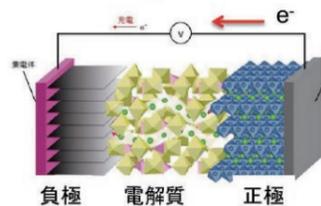
## バッテリーの微視的過程と課題

4



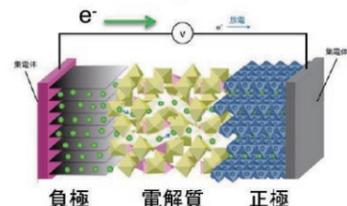
EV → バッテリー → マテリアル

Charge: 充電



負極 電解質 正極  
電気でエネルギーの高い状態へ組み上げ。

Discharge: 放電



負極 電解質 正極  
エネルギーの高い状態から低い状態へ。

バッテリー課題:

- 航続距離 ~容量・エネルギー密度
- 充電時間・加速 ~イオン伝導度
- 安全性 ~電気化学耐性
- 寿命 ~熱的安定性

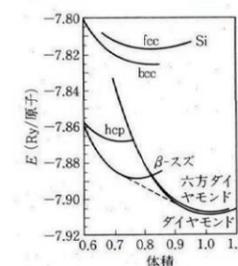
電子とイオンスケール(~"ナノ"スケール)でのバッテリーマテリアルの理解が重要



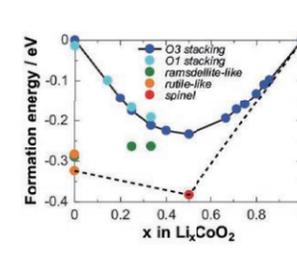
## DFT計算で得られるマテリアル性質事例

6

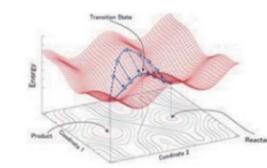
全エネルギー  $E$  構造・安定性・イオンダイナミクス



シリコンの構造安定性

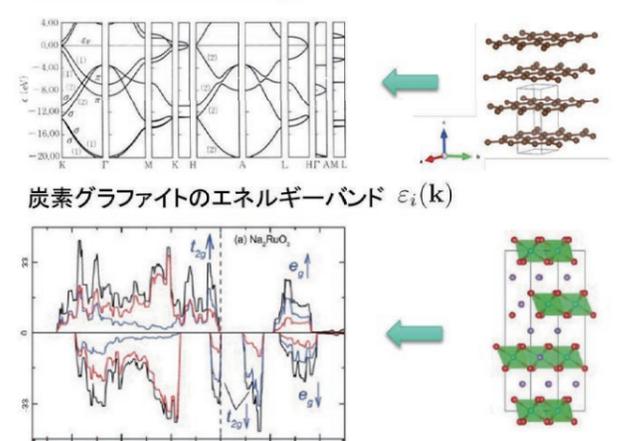


Li<sub>x</sub>CoO<sub>2</sub>正極の充放電時の安定性

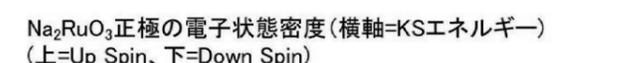


ポテンシャルエネルギー面 (PES)

(1電子)KSエネルギー  $\epsilon_i$  電子状態



炭素グラファイトのエネルギーバンド  $\epsilon_i(k)$



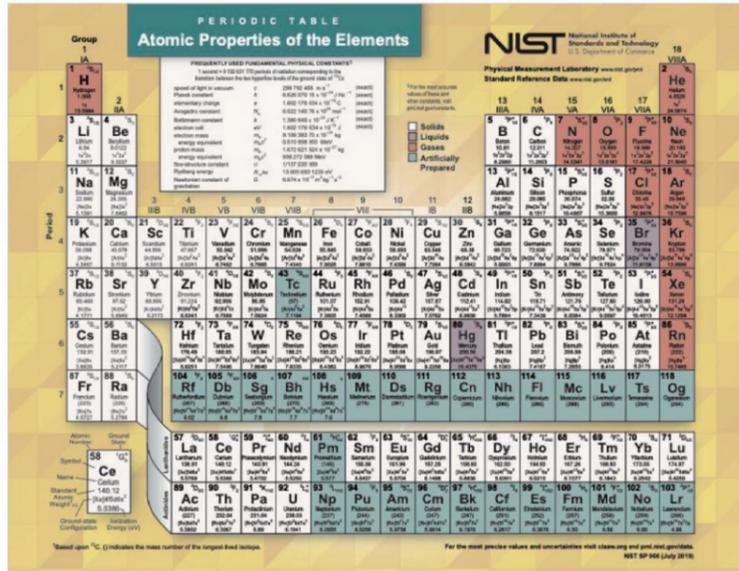
Na<sub>2</sub>RuO<sub>3</sub>正極の電子状態密度(横軸=KSエネルギー) (上=Up Spin、下=Down Spin)

岩波書店 現代の物理学「固体」  
R. Jalem, M. Nakayama et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 14, 13095 (2012).  
M. H. N. Assadi, YT\* et al., J. Mater. Chem. A 6, 3747 (2018).



DFT計算→マテリアル計算の標準形、そしてノーベル化学賞

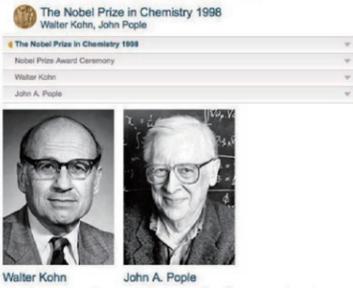
7



あらゆるマテリアル、あらゆるイオン配置の全エネルギー、Kohn-Sham(1電子)軌道エネルギー、様々な性質が妥当な精度で計算可能になった。

※幾つかの計算パッケージ存在: Fortran言語、Python言語

1998年ノーベル化学賞



The Nobel Prize in Chemistry 1998  
Walter Kohn, John Pople

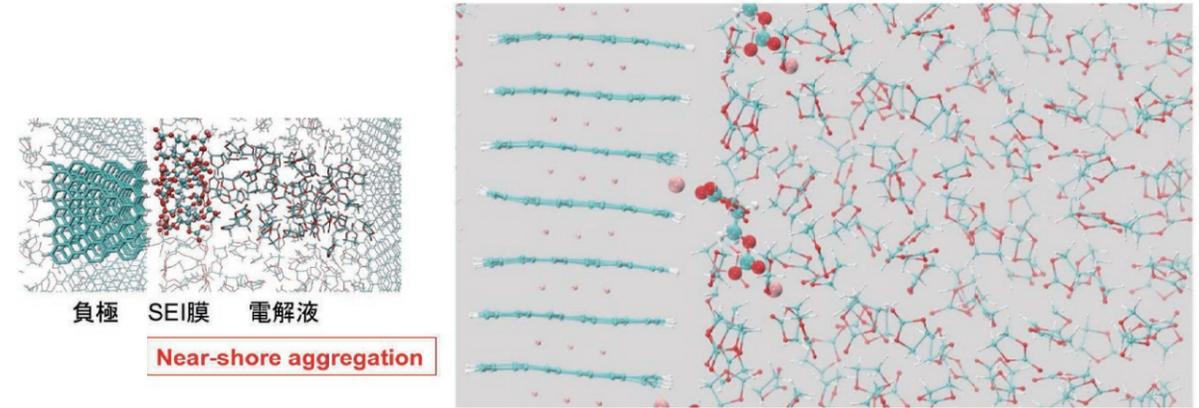
The Nobel Prize in Chemistry 1998 was divided equally between Walter Kohn "for his development of the density-functional theory" and John A. Pople "for his development of computational methods in quantum chemistry".



https://www.nist.gov/pml/periodic-table-elements  
The Nobel Prize https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/1998/summary/

DFT分子動力学計算例:負極-電解液界面SEI膜形成機構 "Near-shore aggregation": 9

いまだに謎が多い、しかし安全上重要となる負極-電解液界面におけるSEI膜形成を高精度計算で予測する。当時、世界初の負極-SEI-電解液界面DFT-MDサンプリング(1000原子以上)



負極 SEI膜 電解液

Near-shore aggregation

分解物の単純な堆積ではない"沖合集積機構"が見える化→ 界面設計指針へ

・マテリアルを理解する

K. Ushirogata, Y. Okuno, YT\* et al., JACS 135, 11967-11974 (2013); JES 162, A2670-A2678 (2015); PCCP 18, 8643-8653 (2016)



マテリアルDFT計算の「富岳」戦略

8

158,976ノード、7,630,848コア

1ノード、数コア

計算ハイスループット化 & 並列化

結晶固体より大きくより多彩にハイスループット

・マテリアルをデザインする

界面とてつもなく大きくより長い時間を大量サンプリング

・マテリアルを理解する

精度

パラメータアンサンブル

一般スパコン

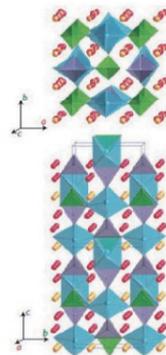
サイズ・時間

Battery & Fuel Cell Y. Tateyama NIMS

次世代電池・全固体電池の主要課題

10

超イオン伝導度固体電解質探索

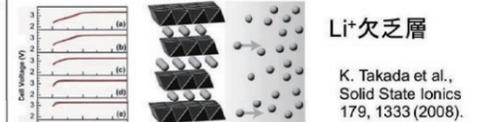
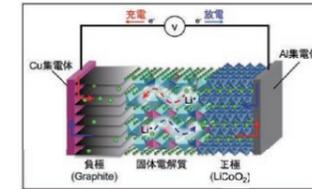


N. Kamaya, R. Kanno et al., Nat. Mater. 10, 682-686 (2011).  
Li<sub>10</sub>GeP<sub>2</sub>S<sub>12</sub>(LGPS)

ハイスループット第一原理計算(配置・構造)+AI・機械学習

・マテリアルをデザインする

界面抵抗の起源理解と軽減設計



Li<sup>+</sup>欠乏層  
K. Takada et al., Solid State Ionics 179, 1333 (2008).

界面反応

A. Sakuda, M. Tatsumisago et al., Chem. Mater. 22, 949-956 (2010).

酸化還元分解

Y. Zhu, Y. Mo et al, ACS Appl. Mater. Interfaces 7, 23685 (2015).

大規模第一原理界面直接計算 界面構造探索→ 界面反応

・マテリアルを理解する

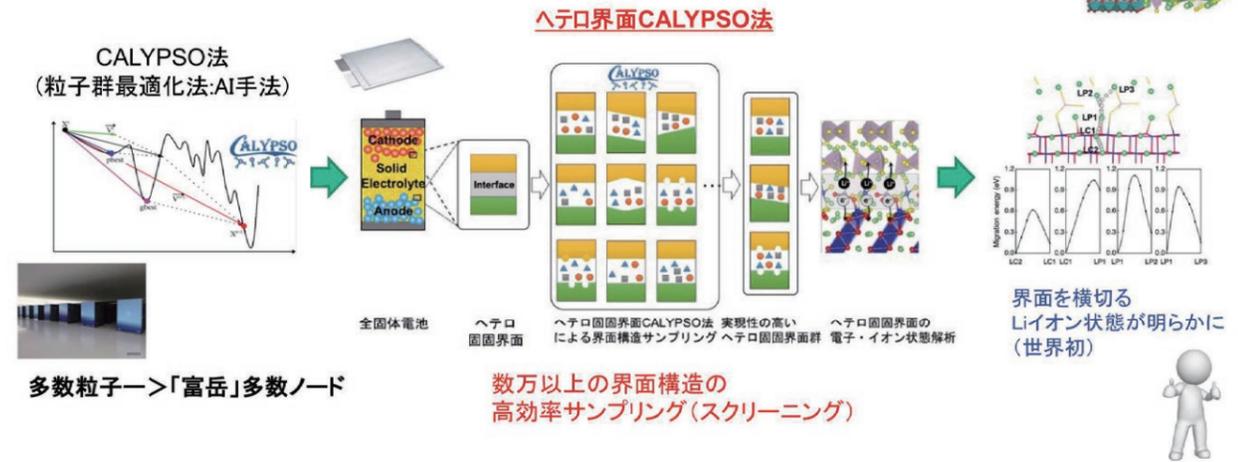


### 挑戦：固体-固体界面の高効率構造探索手法開発

11

全固体電池内“固固界面”の電子・イオン移動を理解するには、実現しやすい界面構造のサンプリングが必須。

→ 一般的なヘテロ界面に対しても有効な構造探索・決定手法開発「ヘテロ界面CALYPSO法」



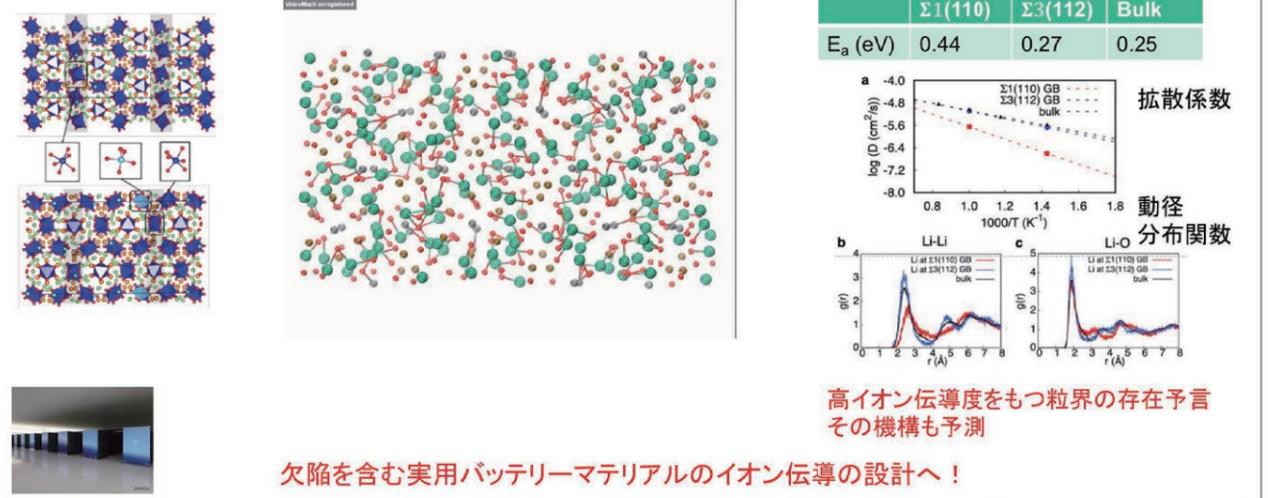
B. Gao, R. Jalem, Y. Ma, YT\*, Chem. Mater. 32, 85-96 (2020).  
プレスリリース・新聞掲載

Battery & Fuel Cell Y. Tateyama NIMS

### ”粒界”欠陥周辺のLiイオン伝導機構：ガーネット型Li<sub>7</sub>La<sub>3</sub>Zr<sub>2</sub>O<sub>12</sub> (LLZO)

13

固体電解質の”粒界”欠陥周辺でLiイオン伝導は本当に遅くなるのか？  
酸化物固体電解質粒界の世界初となるDFT-MDサンプリングLiイオン伝導解析



B. Gao\*, H.-K. Tian, R. Jalem, YT\*, Adv. Energy Mater. 12, 2102151 (2021). \*マテリアルを理解する

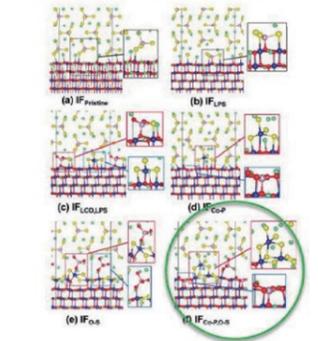
Battery & Fuel Cell Y. Tateyama NIMS

### 有望構造抽出 → 様々な統計解析 → 全固体電池界面プロセス理解の大幅前進

12

β-Li<sub>3</sub>PS<sub>4</sub> (LPS) 固体電解質 / LiCoO<sub>2</sub> (LCO) 正極界面

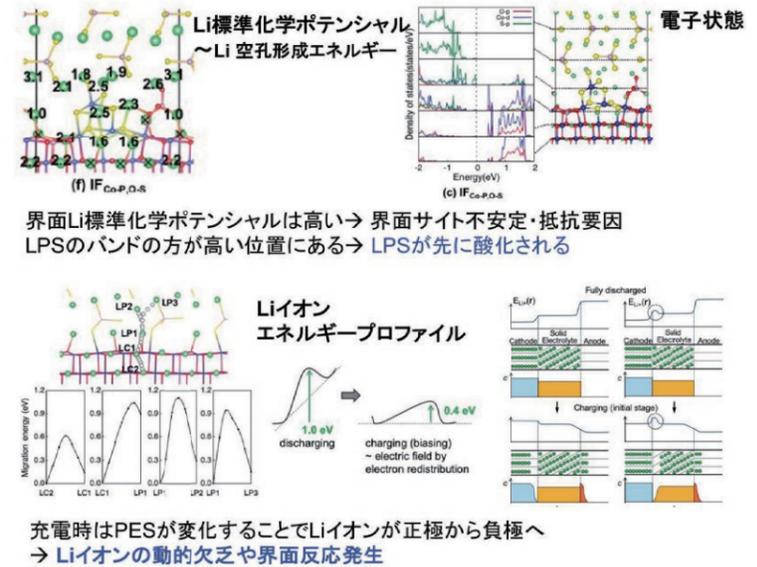
数万候補から有望構造群抽出



PO<sub>4</sub><sup>3-</sup> が PS<sub>4</sub><sup>3-</sup> より安定。  
→ PS<sub>4</sub><sup>3-</sup> ユニットが酸化されやすい。

+ DFT + U calculations (VASP)  
+ CODE: VASP U(Co 3d)=4.9 eV

B. Gao, R. Jalem, Y. Ma, YT\*, Chem. Mater. 32, 85-96 (2020).



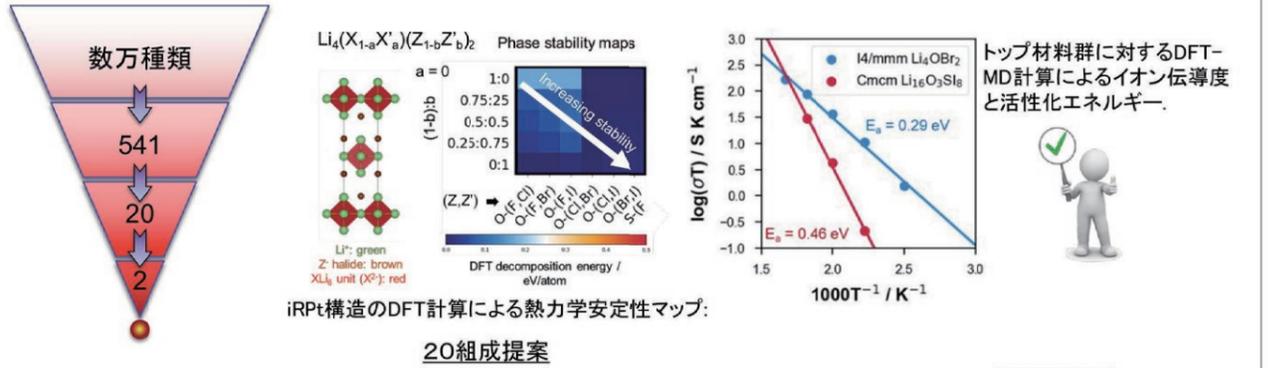
\*マテリアルを理解する

Battery & Fuel Cell Y. Tateyama NIMS

### 固体電解質構造群における高イオン伝導度 & 合成可能な材料探索

14

高イオン伝導度と安定性を兼ね備える全固体電池固体電解質の材料提案が待ち望まれている。  
今回はiRP構造(イオン配置)に絞って、Li<sub>4</sub>(X<sub>1-a</sub>X'<sub>a</sub>Z<sub>1-b</sub>Z'<sub>b</sub>)<sub>2</sub> の組成を振る。(X=カルコゲン、Z=ハロゲン)

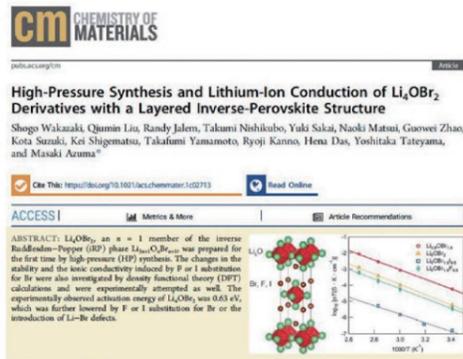


高イオン伝導度をもち、合成可能性の高いトップ材料群を提案

\*マテリアルをデザインする

R. Jalem\*, YT, K. Takada, M. Nakayama, Chem. Mater. 33, 5859-5871 (2021). 2021年5月：特許出願

Battery & Fuel Cell Y. Tateyama NIMS



S. Wakazaki, R. Jalem, YT, M. Azuma\* et al., Chem. Mater. 33, 9194-9201 (2021). 2021年11月

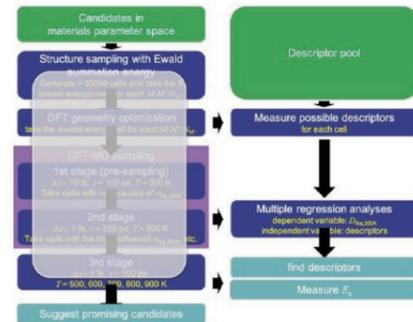
実際に実験合成



・材料をデザインする

R. Jalem\*, YT, K. Takada, M. Nakayama, Chem. Mater. 33, 5859-5871 (2021). 2021年5月: 特許出願

計算科学・データ科学融合～進行中



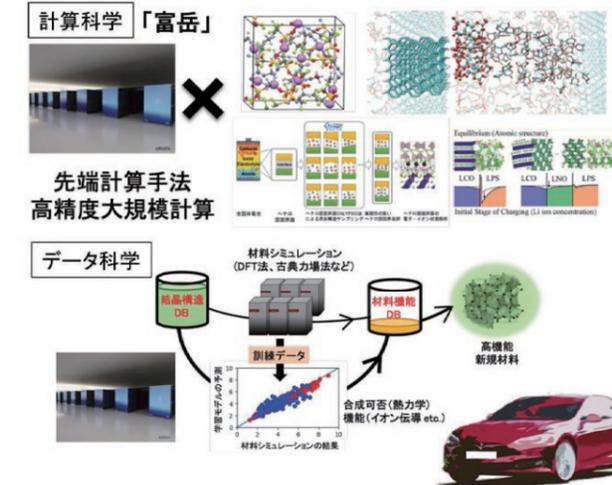
固体電解質探索のハイスループットフロー(計算科学) 硫化物電解質イオン伝導の新しい記述子(データ科学)

文部科学省 データ創出・活用型マテリアル研究開発pj (マテリアルDX) 「再生可能エネルギー最大導入に向けた電気化学材料研究拠点」

”マテリアルDXループ”



・NIMS館山研では、「富岳」を利用したバッテリーマテリアルの計算・データ科学の世界最先端研究を実施し、理論構築・手法開発・メカニズム解明・マテリアル提案で成果を上げてきた。  
・「富岳」のさらなる活用により、バッテリーの基礎科学及び産業競争力へ貢献が益々期待できる。



・材料を理解する

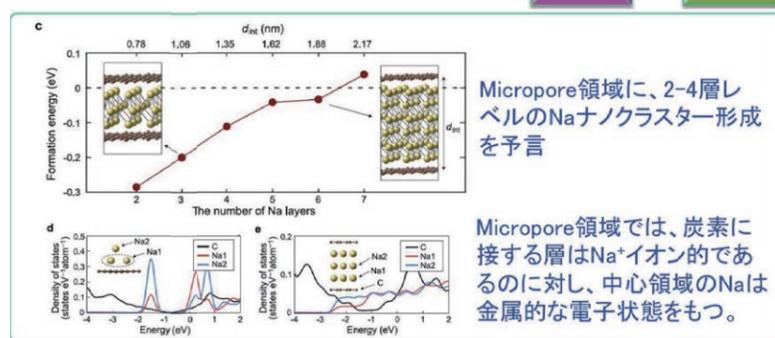
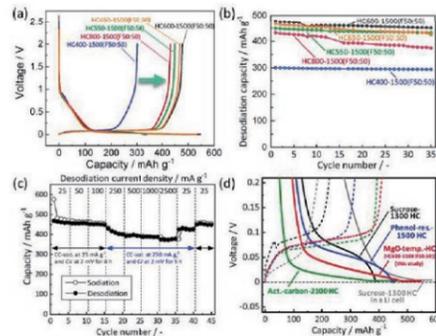
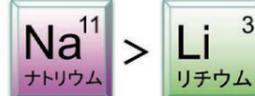
全固体電池電極-電解質界面電子・イオン移動  
固体電解質粒界のイオン伝導

・材料をデザインする

高イオン伝導度固体電解質マテリアル提案→合成  
Naイオン電池実用化の肝となる新型負極の内部状態



Liイオンはレアメタル分類。バッテリー大量導入に向けて地殻中存在度が高いNaなどを用いた革新電池の実用化が不可欠。エネルギー密度の欠点を克服する、Naイオン電池向けの新規ハードカーボン負極が開発された。実用化に向けて負極中でNaイオンがどのように収納されるかを明らかにする必要がある。



Micropore領域に、2-4層レベルのNaナノクラスター形成を予言

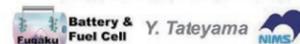
Micropore領域では、炭素に接する層はNa<sup>+</sup>イオンであるのに対し、中心領域のNaは金属的な電子状態をもつ。

NaC<sub>4.6</sub>: 477 mAh/g → 506 Wh/kg.

Naイオン電池実用化へ道が大きく開かれた。

実験: Angew Chem. + プレスリリース, 計算Nature系 journal (npj Comput. Mater.)  
Y. Youn, B. Gao, A. Kamiyama, K. Kubota, S. Komaba, YT\*, npj Comput. Mater. 7, 48 (2021).  
A. Kamiyama, Y. Youn, YT, K. Koubota, S. Komaba\*, Angew. Chem. Int. Ed. 60, 5114 (2021).  
実験論文はプレスリリース。新聞掲載多数。

・材料をデザインする



Tateyama group @NIMS



Web: <https://www.nims.go.jp/group/cs/>  
E-mail: TATEYAMA.Yoshitaka@nims.go.jp

プロジェクト



<https://www.nims.go.jp/fugaku-denchi/>

<https://interface-ionics.jp>



文部科学省: データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト  
再生可能エネルギー最大導入に向けた電気化学材料研究拠点

連携した多くの実験家・企業研究者の皆様



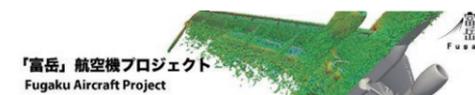
課題番号:hp210168

航空機フライト試験を代替する  
近未来型設計技術の先導的実証研究

# スパコン「富岳」で 航空機の「ながれ」を科学する ～次世代のシミュレーション科学と 航空機開発～

東北大学 大学院工学研究科 航空宇宙工学専攻 教授  
河合 宗司

スーパーコンピュータ「富岳」  
成果創出加速プログラム公開シンポジウム  
2022年3月29日



https://www.klab.mech.tohoku.ac.jp/fugaku/  
課題名: 航空機フライト試験を代替する近未来型設計技術の先導的実証研究

## スパコン「富岳」で航空機の「ながれ」を科学する ～次世代のシミュレーション科学と航空機開発～

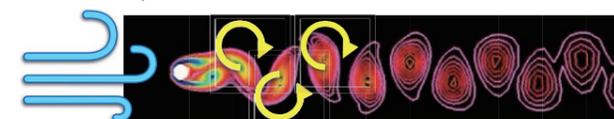
河合宗司 (東北大学)

kawai@tohoku.ac.jp  
http://www.klab.mech.tohoku.ac.jp/



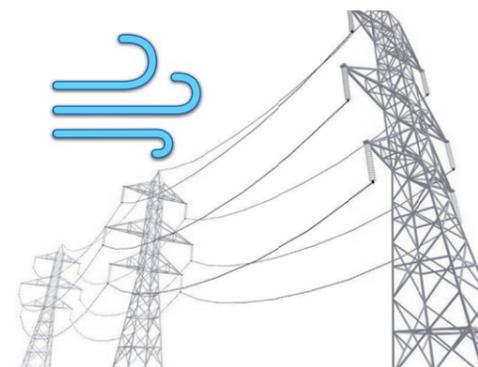
### 「ながれ」って何だろう？

「ながれ」は目に見えないことが多いですが、私たちの生活の至る所に存在し、かつ利用されています  
空気や水の「ながれ」



風の強い日に「ヒュー」という音を聞いたことはない？

「ながれ」の渦が発生

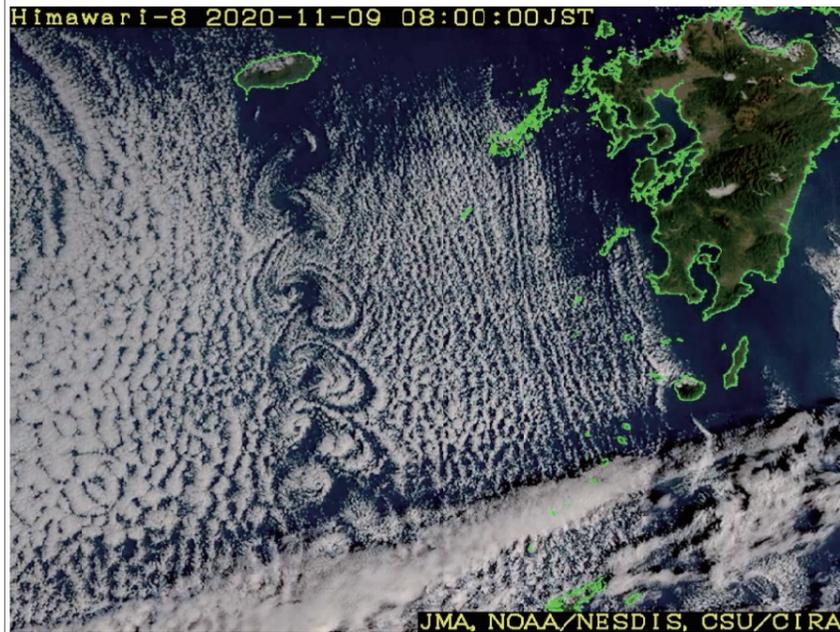


http://blog-imgs-49.fc2.com/d/o/n/donburiroom/111107\_st3\_s.jpg



「ながれ」が作る圧力の波→これが音！

# これも同じ「ながれ」の渦



出典：気象庁ホームページより  
 JMA, NOAA/NESDIS, CSU/CIRA  
[https://www.data.jma.go.jp/sat\\_info/himawari/obsimg/image\\_cloud.html#obs\\_j20201109](https://www.data.jma.go.jp/sat_info/himawari/obsimg/image_cloud.html#obs_j20201109)

# 「ながれ」の渦は航空機の至る所に存在する



三菱航空機（株）提供

# 「ながれ」は利用もされている！

ツルツルとデコボコのボールどっちが飛ぶ？



<http://publib.dainippon.com/sports/0028580>

# 「ながれ」を知る(科学する)：流体力学

「ながれ」を決めている方程式は知っている！

Navier-Stokes方程式 (1845)

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i v_j}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} = 0$$

「ながれ」の時間変化   「ながれ」の影響 (移流の影響)   圧力の影響   粘性の影響

ニュートン力学の運動の第二法則

$$m \frac{dv}{dt} = -mg$$

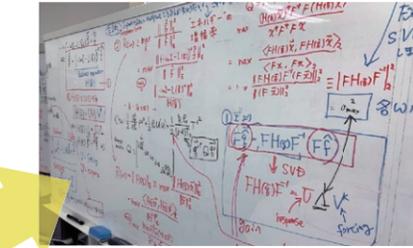
ノートとペンだけでは方程式を解けない

# 「ながれ」を知る（科学する）方法

• 理論（ノートとペン）

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i v_j}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} = 0$$

• 数値シミュレーション/ CFD (スーパーコンピュータ)

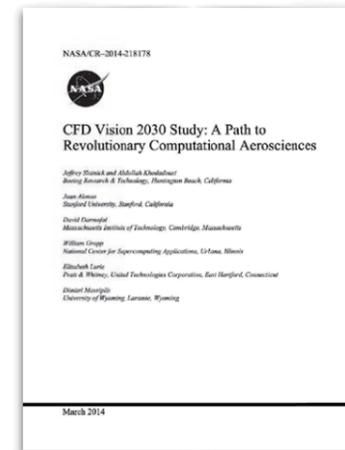


• 実験（風洞）



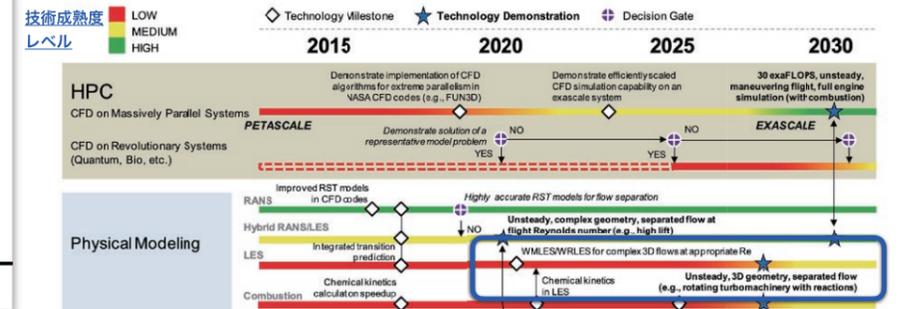
+

# 航空宇宙分野に革新を起こす 次世代のシミュレーション科学



## NASA CFDビジョン2030

### 数値シミュレーション



航空機全機周りの「ながれ」の予測が 6つの国家的プロジェクトの一つにあげられている

# なぜ数値シミュレーションか？

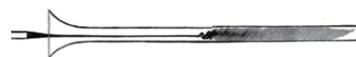
航空機設計における重要なパラメータ

レイノルズ数

$$Re_L = \frac{\rho U L}{\mu} = \frac{\text{「ながれ」の影響}}{\text{粘性の影響}}$$

レイノルズ数大

→ 「ながれ」の渦（乱流）が発生



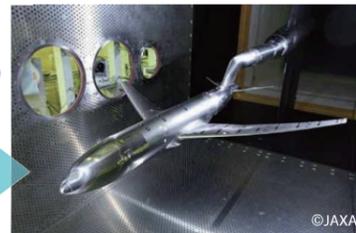
Reynolds (Phil. Trans. R. Soc. Lond. 1883)

$$Re_L \gtrsim 10^7$$



一桁以上のギャップ

$$Re_L \lesssim 10^6$$



現状の航空機設計は、実機フライト試験や過去の知見・経験に大きく依存している

# シミュレーション研究の最前線

文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム

「富岳」航空機プロジェクト  
Fugaku Aircraft Project

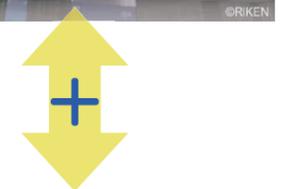
次世代のシミュレーション科学で航空機周りの「ながれ」を予測し、航空機フライト試験をシミュレーションで置き変える 革新的設計開発プロセスを世界に先駆けて実証する

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i v_j}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} = 0$$

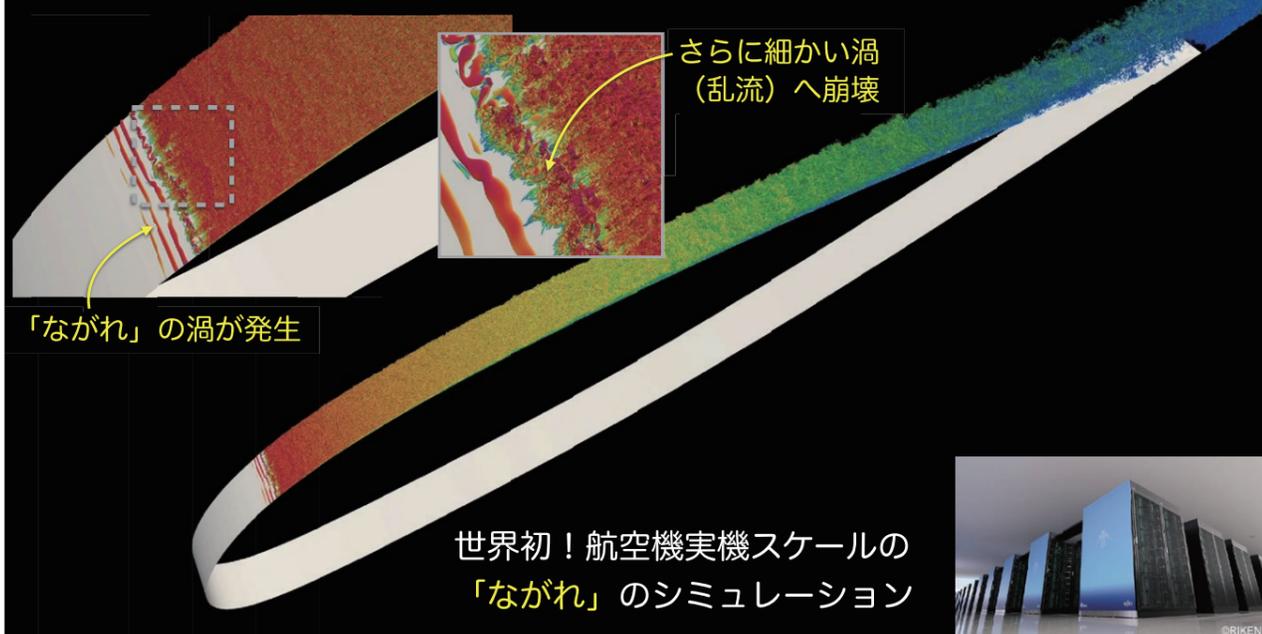


基礎研究

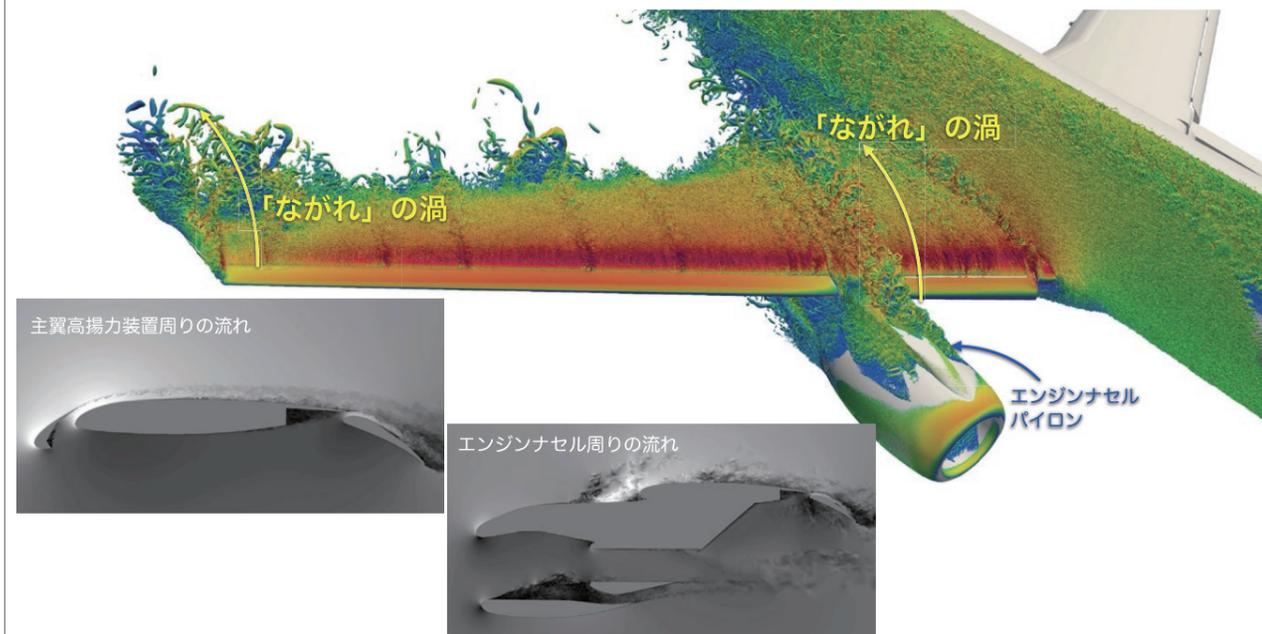
- 「ながれ」方程式を正確に計算できる計算手法
  - 「ながれ」の渦（乱流）を正確に表す物理モデル
- 7つの主要技術の1つに挙げられている



# シミュレーション研究の最前線



# 航空機周りの「ながれ」のシミュレーション



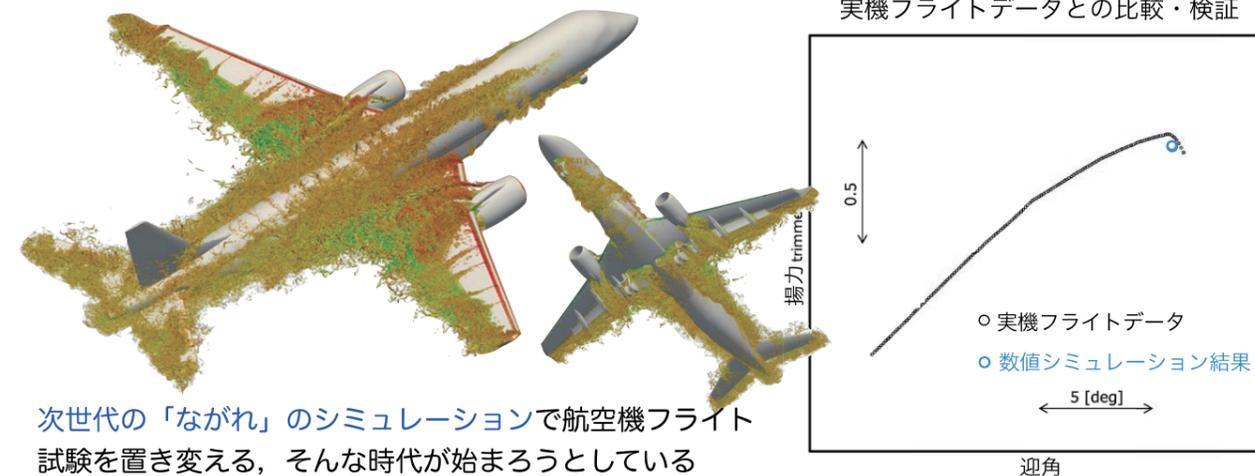
# 三菱重工グループによる民間旅客機解析

三菱重工グループが民間旅客機SpaceJet実機フライト解析に成功

→ 産業界による初の民間旅客機全機シミュレーション



実機フライトデータとの比較・検証



次世代の「ながれ」のシミュレーションで航空機フライト試験を置き変える, そんな時代が始まろうとしている

# こんな未来を創造 (想像?) してみたい

三菱航空機 (株) 提供



大林茂先生(東北大) 提供

課題番号:hp210164

宇宙の構造形成と進化から惑星表層環境変動までの統一的描像の構築

## 「富岳」で太陽の中身を知る

千葉大学 理学研究院 宇宙物理学研究室 准教授

堀田 英之

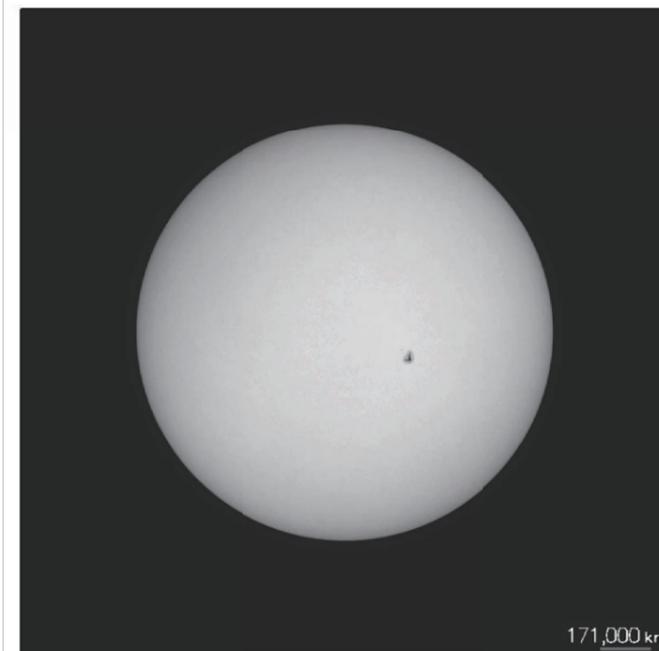
## 富岳で太陽の中身を知る

富岳成果創出加速プログラム  
「宇宙の構造形成と進化から惑星表層環境変動までの統一的描像の構築」  
代表：牧野淳一郎 (神戸大学)

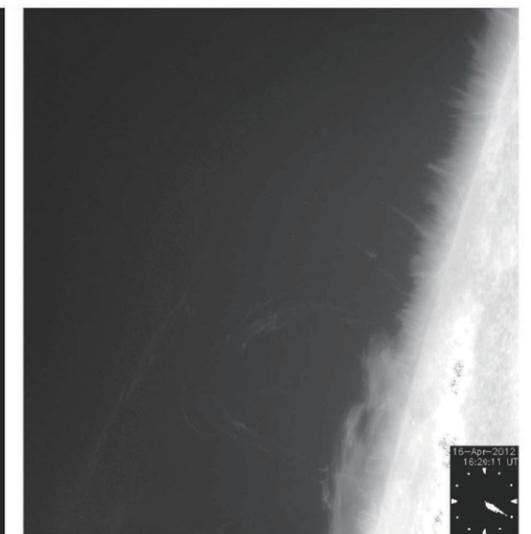
千葉大学 堀田英之

1

## 太陽



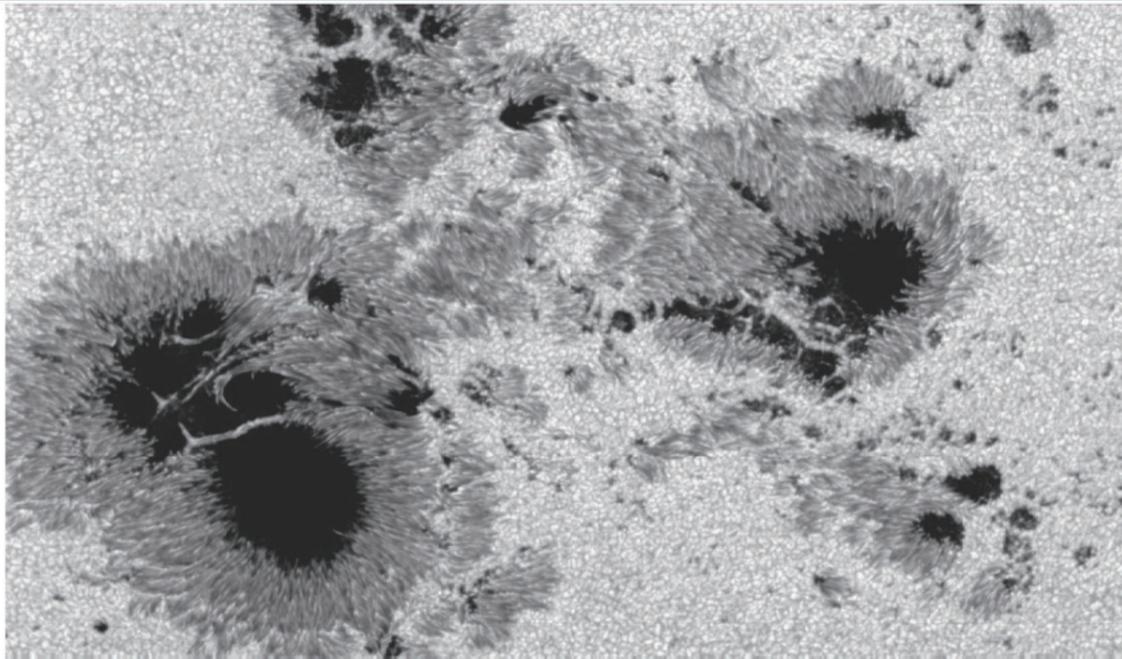
NASA/国立天文台/JAXA



太陽表面は爆発現象で  
満たされている

2

## 太陽黒点=磁場

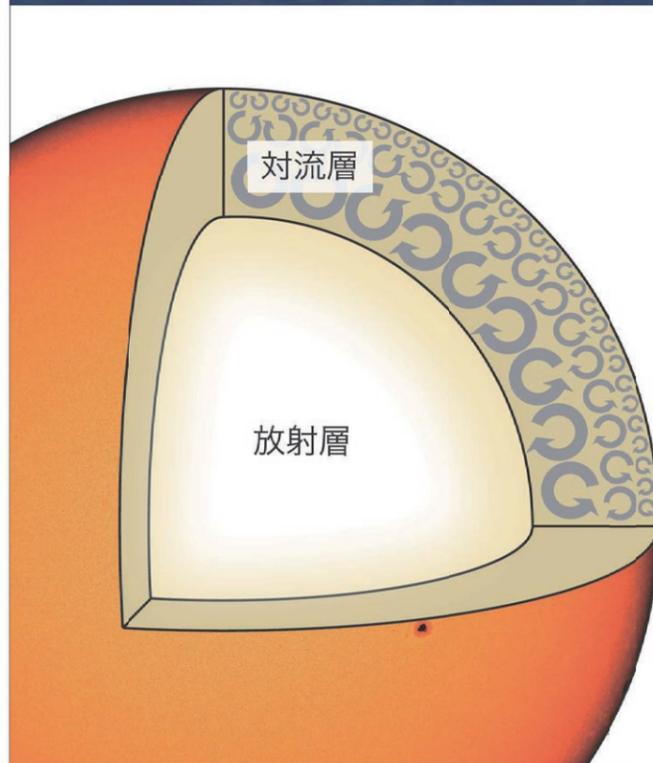


3000 G程度の磁場強度。大きさ3万km程度  
磁場の起源は？→太陽内部

Hinode衛星(国立天文台)

3

## 乱流で埋め尽くされる太陽内部



お味噌汁の熱対流



太陽内部は、「プラズマ」という状態になっているため、磁場と直接やりとりする。

流れと磁場の「ぐちゃぐちゃ」を理論的に理解することにより磁場の生成を理解する  
→数値シミュレーション

4

## 太陽数値シミュレーションの素晴らしいところ1 解くべき方程式がわかっている

磁気流体力学の方程式(流体力学+磁場+α)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{v}) &= -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) - \nabla p + \rho \mathbf{g} \\ &\quad + \frac{1}{4\pi}(\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B} + 2\rho \mathbf{v} \times \boldsymbol{\Omega} \\ \rho T \frac{\partial s}{\partial t} &= -\rho T(\mathbf{v} \cdot \nabla)s + Q_{\text{rad}} \\ \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} &= \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \\ p &= p(\rho, s) \end{aligned}$$

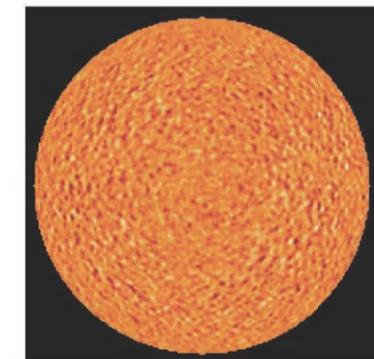
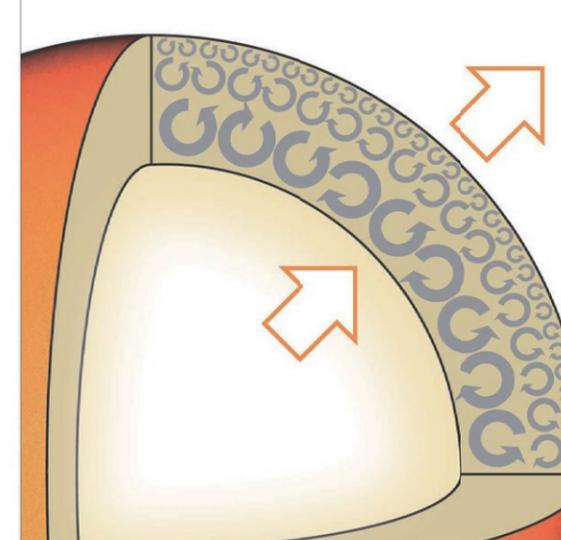
この方程式を精密に解けば、太陽を再現できることはほぼ確実

5

## 太陽数値シミュレーションの素晴らしいところ2 入力すべきパラメタが精密にわかっている

数値シミュレーションをやる上で、必要となるもの

- 太陽がどのくらいの明るさで光っているのか  
→観測で精密に測定可能
- 太陽内部の密度・圧力・温度など  
→理論モデル・日震学で精密に測定可能

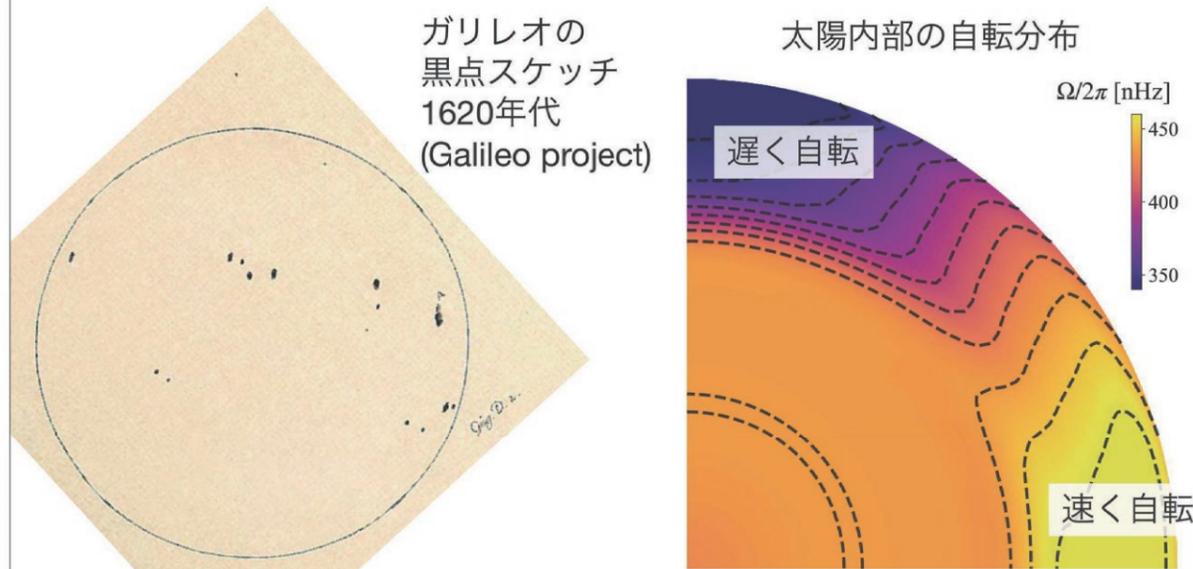


NASA

他の天文学と違いシミュレーションをやる上での不定な要素はほとんどない  
→計算が間違ふとしたら計算がまずい

6

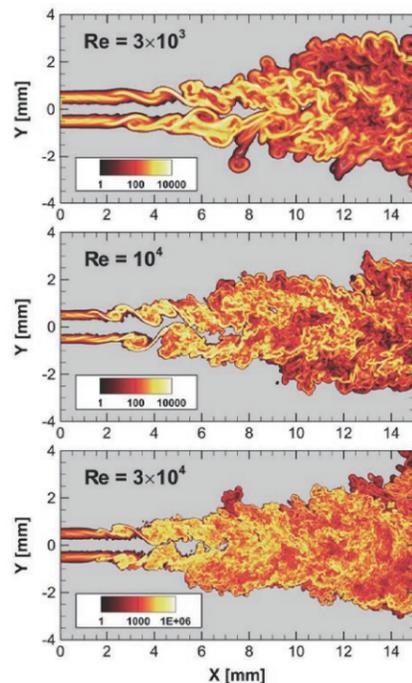
## 太陽数値シミュレーションの素晴らしいところ3 大きな流れ(自転)はよくわかっている



この流れの分布は熱対流によって維持されている  
少なくともこれを再現するような  
数値シミュレーションをしなければいけない

7

## 太陽数値シミュレーションの難しいところ 異常にサラサラ



松山ほか, 2017

レイノルズ数=さらさら度が非常に大きいのでシミュレーションの中で実現するのは困難(ほとんど不可能)

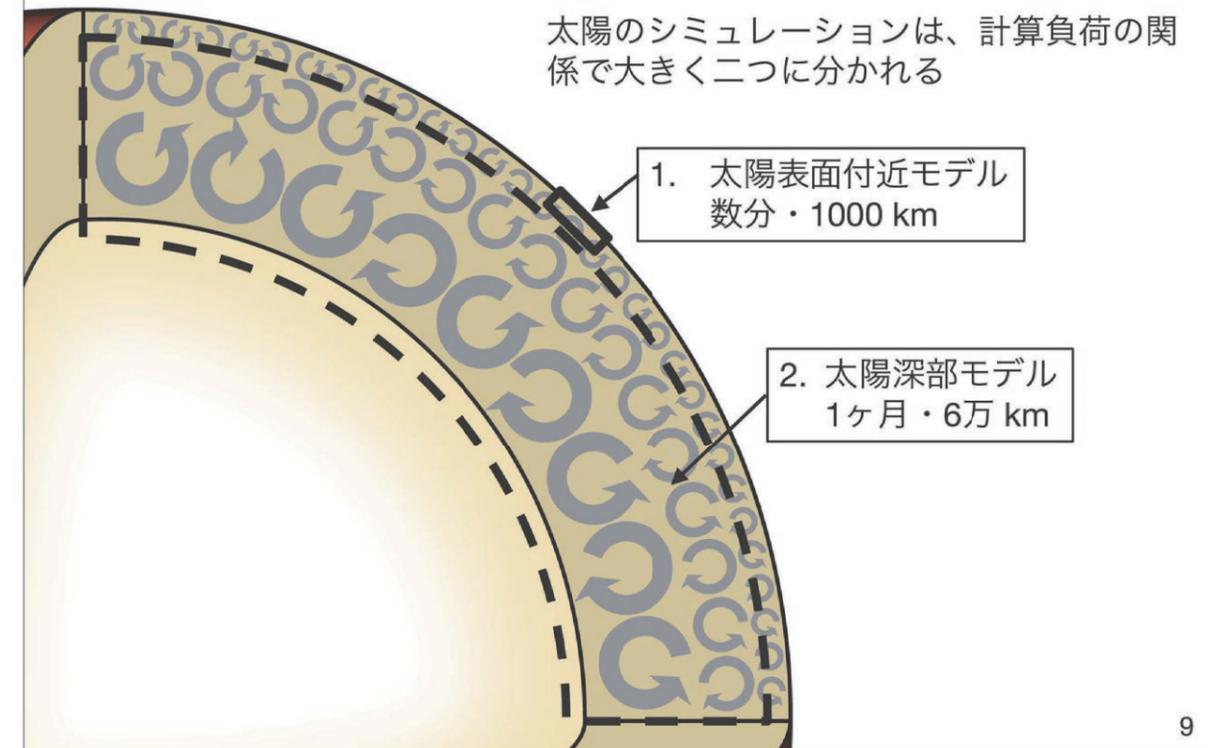
太陽のレイノルズ数は  
 $100000000000000 = 10^{14}$

- レイノルズ数を上げるためには
1. できるだけ小さな渦を分解する
  2. できるだけ多くの格子点を用意する

スーパーコンピュータの資源を注ぎ込んでできるだけ太陽の状況に近くすることが肝要

8

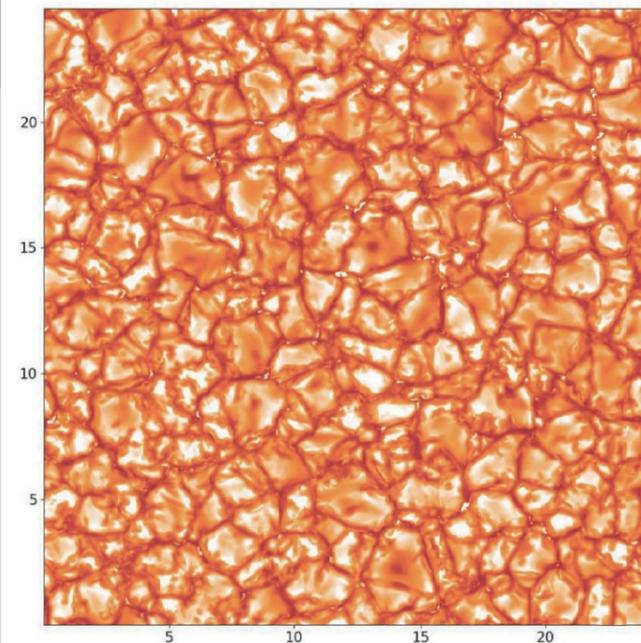
## 太陽の数値シミュレーション



9

## 太陽表面付近モデル

数値シミュレーションで再現した太陽表面



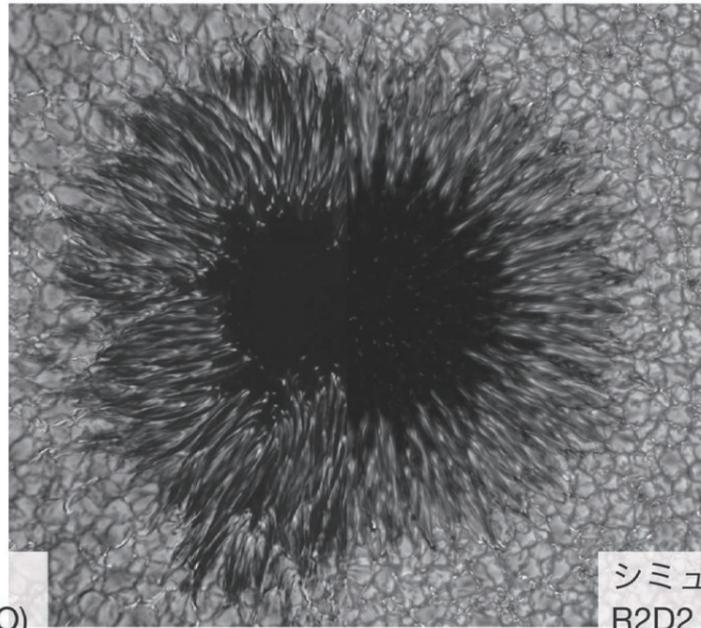
天文学で「最も上手く行っている」数値シミュレーションの一つ

太陽表面で観測される熱対流場がよく再現できている

すごい精度で再現できているので、逆にインプットパラメタのミスプリントを見つけたことも (Spruit, 1997)

10

## どちらが本物の黒点でしょう？

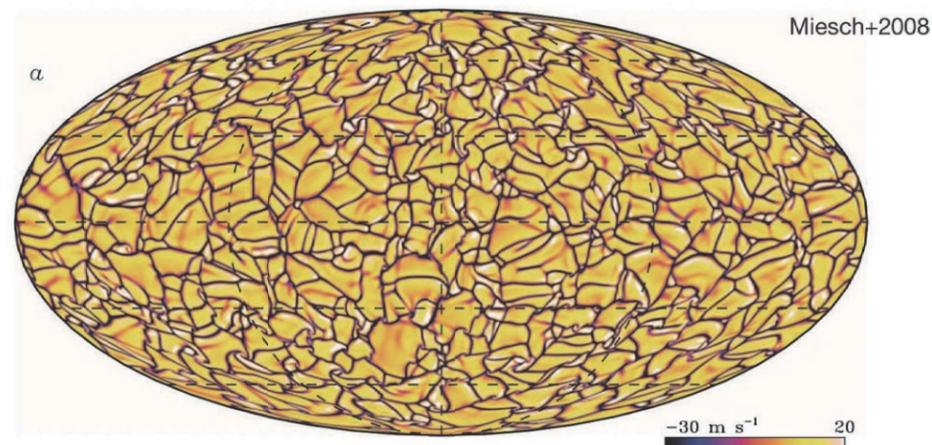


観測  
F. Wöger (NAO)  
Dunn telescope

シミュレーション  
R2D2 code  
24<sup>3</sup> km resolution

11

## 太陽深部モデル



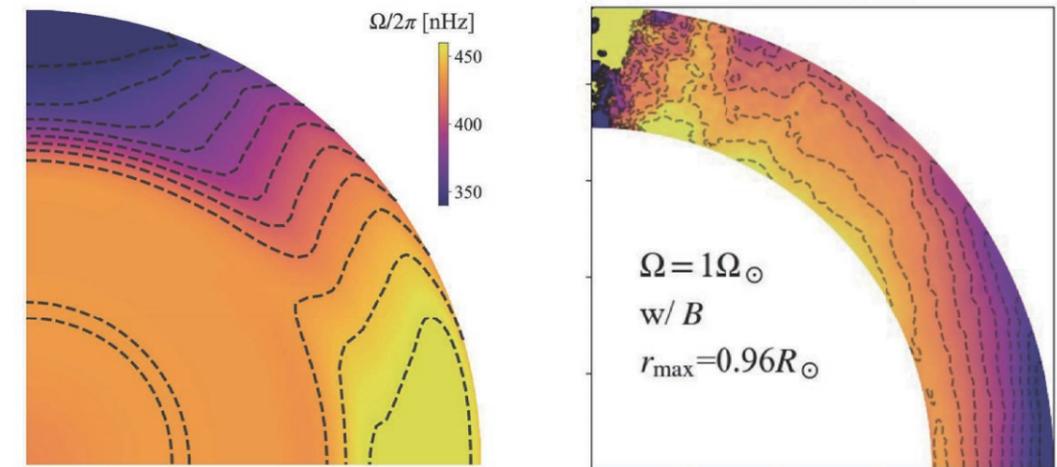
太陽内部の熱対流シミュレーションを実施することで、乱流が自然と太陽の自転分布を作っていく  
→京の時代(2011年ごろ)から様子がおかしくなる  
→高解像度の数値シミュレーションを実施すると実際の太陽の自転が再現できない

12

## 太陽深部モデルはうまくいかない

実際の太陽

富岳以前の高解像度シミュレーション

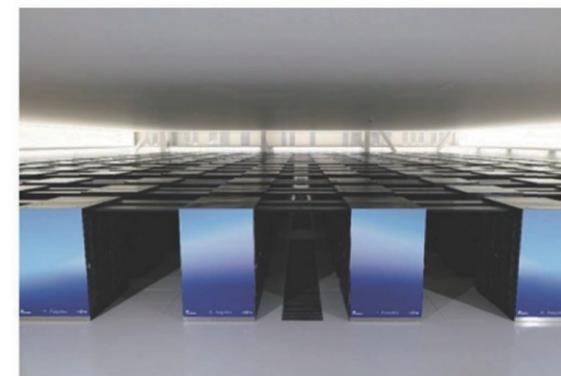


なぜか極地方の自転が速くなってしまふ→何かがおかしい  
熱対流の難問(Convective conundrum)

13

## 富岳でチャレンジ

富岳成果創出加速プログラムに参加  
「宇宙の構造形成と進化から惑星表層環境変動までの統一的描像の構築」  
代表：牧野淳一郎 (神戸大学)



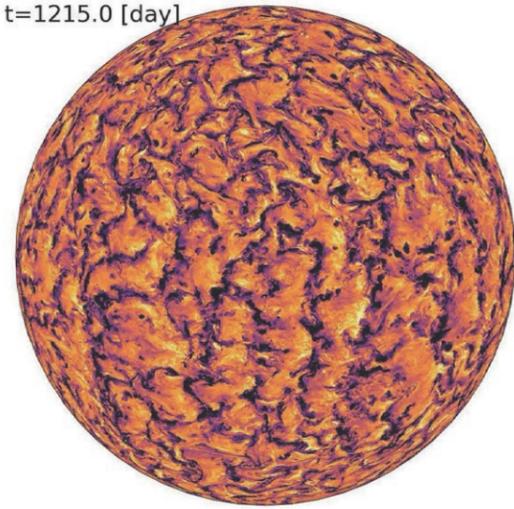
2020年に集中的に富岳にチューニング、11月頃から本格的な計算を  
実行可能に  
→熱対流の難問に挑戦(太陽物理学者としての礼儀)

14

# 熱対流の難問の兆候が見え始める

28日で一周する系で観測

t=1215.0 [day]



-150 -100 -50 0 50 100 150  
v<sub>r</sub> [m/s]

<https://www.youtube.com/watch?v=GXwnlIOJxvY&t=114s> 15

富岳による超巨大計算(54億点)

最初は、赤道が遅く回っており、現実の太陽と違ってしまっていたが時間が経つにつれて、だんだんと観測されるような分布に近づいていった。

→2020年度の数値資源使い切ってしまった。(2020年12月頃)

富岳成果創出加速の他のサブ課題に「すごいことが起きているので、ぜひ計算をやり切りたい」と申し出る

→みなさん早く承諾、資源を分けてくれる

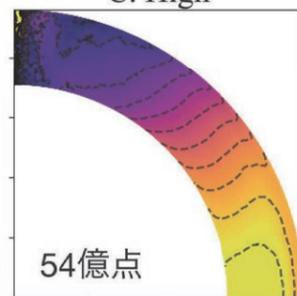
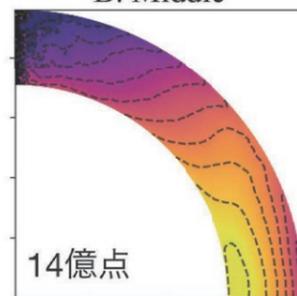
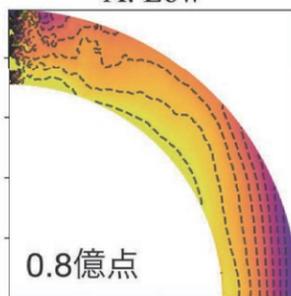
# 熱対流の難問を解決

高解像度化

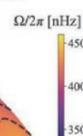
A. Low

B. Middle

C. High



現実の太陽



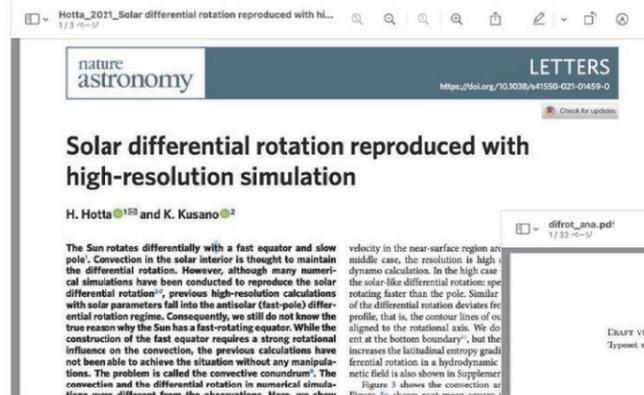
現実の太陽を再現するような分布を富岳でしか達成できない超高解像度計算で実現  
→熱対流の難問の解決

理由を知るためには100 TBになる超巨大データの解析の必要あり

16

# どうして太陽を再現できるようになったのか

Nature Astronomy 3ページ



- 磁場生成
- 赤道加速
- は完全に理解

解析論文 32ページ

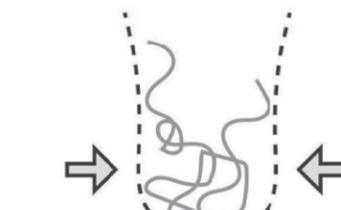
説明には3時間くらいかかります。(実証済み)

高解像度化によって磁場が強くなったことが鍵

# 物理機構の説明

圧縮による運動エネルギーを超える磁場の生成

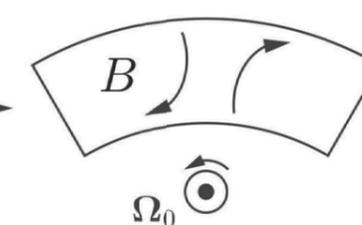
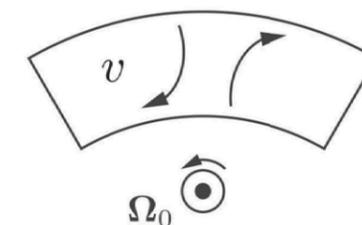
磁場の角運動量輸送に対応する極向き流れ場と質量保存による赤道方向流れ場  
ネットには赤道方向に角運動量輸送



コリオリ力  
→  $\langle v_r' v_\phi' \rangle < 0$

磁場による動径方向外向き方向の角運動量輸送

$\langle B_r B_\phi \rangle < 0$



赤道加速

18

## まとめとこれから

### まとめ

- ✓ 太陽黒点は、強い磁場を持っておりしばしば爆発現象を引き起こす
- ✓ 太陽内部の乱流・磁場を知ることが重要
  
- ✓ 太陽内部はレイノルズ数が大きいため、再現するためには非常に大きなスーパーコンピュータを必要とする
- ✓ 太陽表面はうまく再現できている一方、内部には大きな問題があった
  
- ✓ 富岳を用いた最初の計算で、熱対流の難問を解決することができた

### これから

- ✓ 富岳を用いた太陽対流層計算は始まったところ
- ✓ より大きな計算が進行中、これからも多くの成果が出てきます



主催：高度情報科学技術研究機構（企画：文部科学省・スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム）  
協力：理化学研究所計算科学研究センター、HPCIコンソーシアム

本予稿集に掲載の各講演資料の著作権は資料作成者にあります。無断転載・無断複写はご遠慮ください。